



## (12) 发明专利

(10) 授权公告号 CN 109956910 B

(45) 授权公告日 2025.01.21

(21) 申请号 201811561616.0

C07D 409/14 (2006.01)

(22) 申请日 2018.12.20

C07D 413/10 (2006.01)

(65) 同一申请的已公布的文献号

C07D 413/14 (2006.01)

申请公布号 CN 109956910 A

C07D 417/10 (2006.01)

(43) 申请公布日 2019.07.02

C07D 417/14 (2006.01)

(30) 优先权数据

C07D 471/04 (2006.01)

10-2017-0178632 2017.12.22 KR

C07D 471/14 (2006.01)

(73) 专利权人 三星显示有限公司

C07D 487/04 (2006.01)

地址 韩国京畿道

C07F 5/02 (2006.01)

(72) 发明人 山谷昭德

C07F 7/08 (2006.01)

(74) 专利代理机构 北京德琦知识产权代理有限公司 11018

C07F 9/6558 (2006.01)

专利代理人 周丹 朴圣洁

H10K 85/60 (2023.01)

(51) Int.Cl.

## (56) 对比文件

C07D 249/18 (2006.01)

TW 201533039 A, 2015.09.01

C07D 401/14 (2006.01)

ACS, STN Registry数据库. RN: 1027938-27-

C07D 403/10 (2006.01)

7.《ACS, STN Registry数据库》.2008,

C07D 403/14 (2006.01)

ACS, STN Registry数据库. RN: 460326-53-

C07D 405/14 (2006.01)

8.《ACS, STN Registry数据库》.2002,

审查员 李小宏

## (54) 发明名称

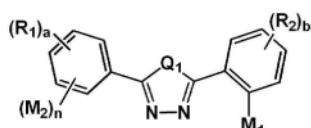
权利要求书3页 说明书23页 附图3页

含氮化合物和包括该含氮化合物的有机电致发光装置

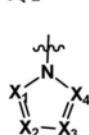
## (57) 摘要

本发明提供了含氮化合物和包括该含氮化合物的有机电致发光装置。根据本公开实施方式的含氮化合物由式1表示。式1中，“n”为0或1，且M<sub>1</sub>和M<sub>2</sub>各自独立地由式2或式3表示：

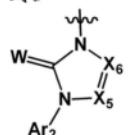
式 1



式 2

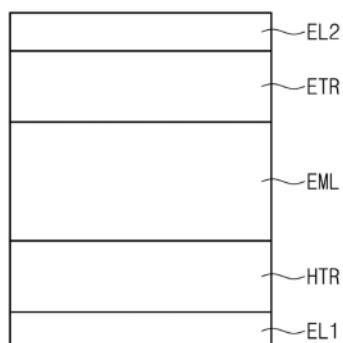


式 3



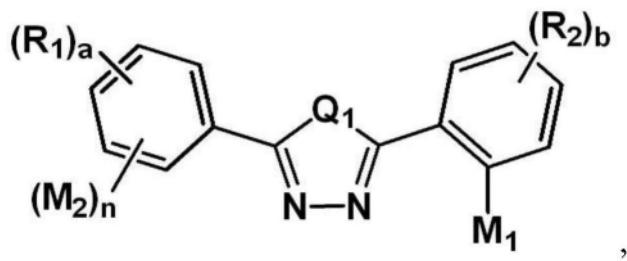
CN 109956910 B

10



1. 一种由式1表示的含氮化合物：

式1



其中，式1中，

$Q_1$ 为 $NAr_1$ 、0或S，

$Ar_1$ 为未取代的具有6至30个用于成环的碳原子的芳基，

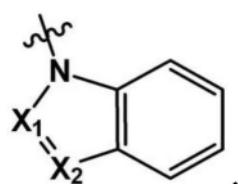
$R_1$ 和 $R_2$ 各自独立地为氢原子或氘原子，

“a”和“b”各自独立地为0至4的整数，

“n”为0或1，且

$M_1$ 和 $M_2$ 各自独立地由式2-1或者式3-2表示：

式2-1



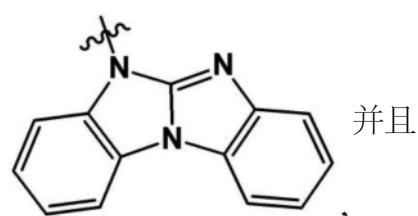
其中，式2-1中，

$X_1$ 为 $CR_3$ ，

$X_2$ 为N，

$R$ 为氢原子或者取代或未取代的具有6至30个用于成环的碳原子的芳基，

式3-2

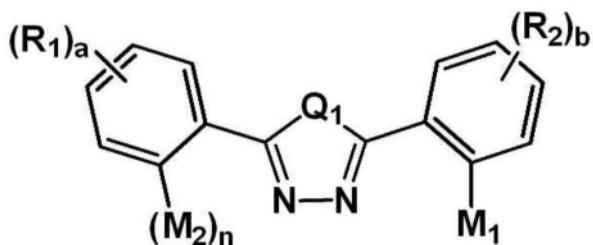


并且

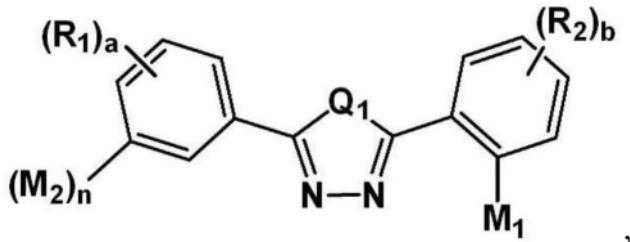
取代或未取代的指未被取代的基团或被选自下述中的至少一个取代基取代的基团：氘原子、烷基和芳基，其中，烷基的碳数为1至30，并且芳基中用于成环的碳数为6至30。

2. 如权利要求1所述的含氮化合物，其中，式1由式1-1或式1-2表示：

式1-1



式1-2



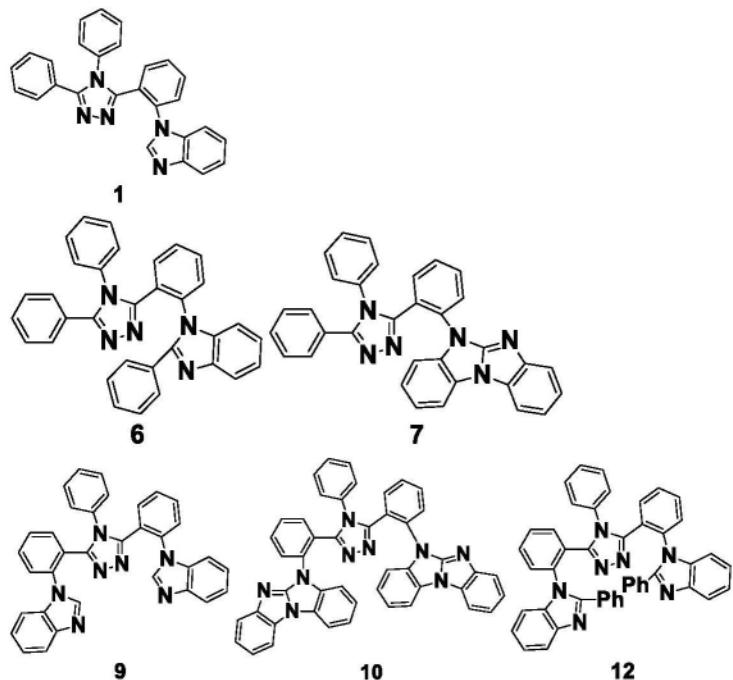
其中，式1-1和式1-2中，

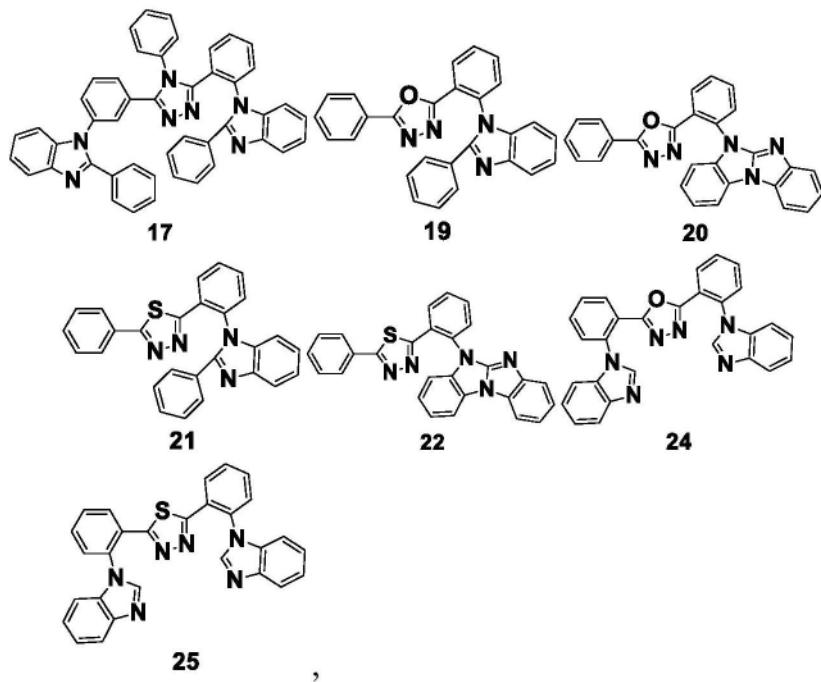
$Q_1$ 、 $R_1$ 、 $R_2$ 、 $M_1$ 、 $M_2$ 、“n”、“a”和“b”与式1中定义的相同。

3. 如权利要求1所述的含氮化合物，其中，所述含氮化合物具有3.0eV或更大的最低三线态能级。

4. 如权利要求1所述的含氮化合物，其中，由式1表示的所述含氮化合物为选自下述化合物组1中表示的化合物中的至少一种：

#### 化合物组1





其中Ph指苯基。

5. 一种有机电致发光装置,其包括:

第一电极;

所述第一电极上的空穴传输区;

所述空穴传输区上的发射层,并且所述发射层包括根据权利要求1至4中任一项所述的含氮化合物;

所述发射层上的电子传输区;和

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为透射电极、半反射电极或反射电极,并且其中:

所述透射电极包括选自氧化铟锡、氧化铟锌、氧化锌和氧化铟锡锌中的至少一种;并且

所述半透射电极和所述反射电极各自独立地包括:选自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。

6. 如权利要求5所述的有机电致发光装置,其中,

所述发射层包括主体和掺杂剂,且

所述主体包括根据权利要求1至4中任一项所述的含氮化合物。

7. 如权利要求6所述的有机电致发光装置,其中,所述掺杂剂为磷光掺杂剂。

## 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] 本申请要求于2017年12月22日提交的韩国专利申请号10-2017-0178632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] 本公开的一个或多个实施方式涉及有机电致发光装置和用于有机电致发光装置的含氮化合物。

### 背景技术

[0004] 近来,正在积极进行作为图像显示器装置的有机电致发光装置的开发。与液晶显示器装置不同,有机电致发光显示器装置是自发光显示器装置,其中由第一电极和第二电极注入的空穴和电子在发射层中复合,并且发射层中包括有机化合物的发光材料发射光以实现显示(例如,实现图像的显示)。

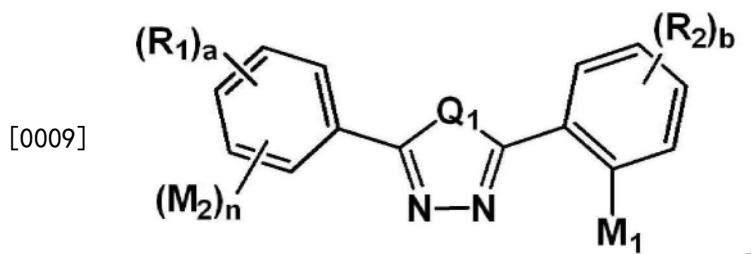
[0005] 在将有机电致发光装置应用于显示器装置时,期望降低驱动电压并提高发射效率和延长寿命,并且持续期望开发用于稳定实现有机电致发光装置的改善特性的材料。

### 发明内容

[0006] 本公开的一个或多个实施方式涉及有机电致发光装置和用于有机电致发光装置的含氮化合物。

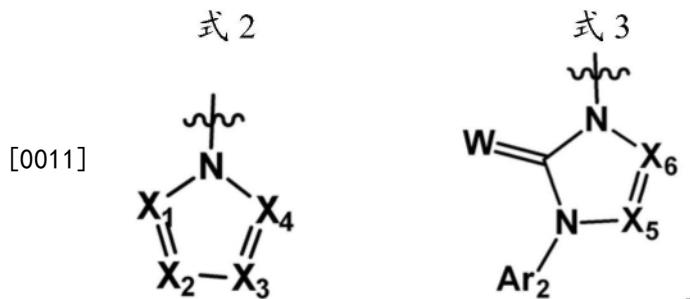
[0007] 本公开的实施方式提供了有机电致发光装置,其包括第一电极、第一电极上的空穴传输区、空穴传输区上的发射层、发射层上的电子传输区和电子传输区上的第二电极,其中发射层包括由下述式1表示的含氮化合物:

[0008] 式1



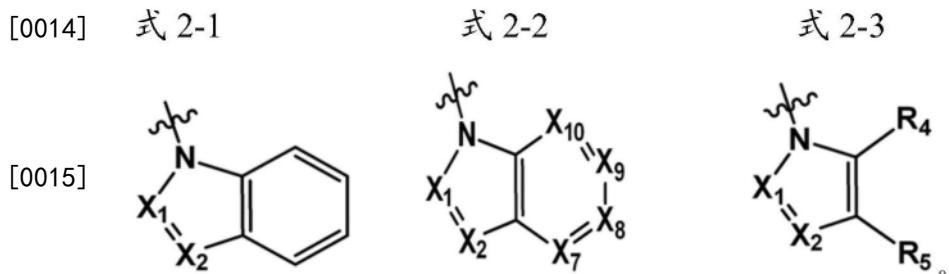
[0010] 式1中, $Q_1$ 为 $NAr_1$ 、0或S, $Ar_1$ 为氢原子、氘原子、取代或未取代的具有6至30个用于成环的碳原子的芳基,或取代或未取代的具有2至30个用于成环的碳原子的杂芳基, $R_1$ 和 $R_2$ 各自独立地为氢原子、氘原子、卤素原子、取代或未取代的氨基、取代或未取代的甲硅烷基、取代或未取代的硼基、取代或未取代的具有1至10个碳原子的烷基、取代或未取代的具有6至30个碳原子的芳烷基、取代或未取代的具有1至10个碳原子的卤代烷基、取代或未取代的具有6至30个碳原子的芳氧基、取代或未取代的具有6至30个碳原子的芳硫基、取代或未取代的膦氧基、取代或未取代的膦硫基、取代或未取代的具有6至30个用于成环的碳原子的芳

基,或取代或未取代的具有2至30个用于成环的碳原子的杂芳基,其中相邻的R<sub>1</sub>和R<sub>2</sub>可各自独立地与相邻的基团结合而成环,“a”和“b”各自独立地为0至4的整数,“n”为0或1,且M<sub>1</sub>和M<sub>2</sub>各自独立地由下述式2或式3表示:



[0012] 式2和式3中,X<sub>1</sub>至X<sub>6</sub>各自独立地为CR<sub>3</sub>或N,X<sub>1</sub>至X<sub>4</sub>中的至少一个为N,R<sub>3</sub>为氢原子、氘原子、取代或未取代的具有1至10个碳原子的烷基、取代或未取代的具有6至30个用于成环的碳原子的芳基,或取代或未取代的具有2至30个用于成环的碳原子的杂芳基,且R<sub>3</sub>中的一个或多个可与相邻基团结合而成环,W为0、NAr<sub>3</sub>或CAr<sub>4</sub>Ar<sub>5</sub>,Ar<sub>2</sub>至Ar<sub>5</sub>各自独立地为氢原子、氘原子、取代或未取代的具有1至10个碳原子的烷基、取代或未取代的具有6至30个用于成环的碳原子的芳烷基、取代或未取代的具有6至30个用于成环的碳原子的芳基,或取代或未取代的具有2至30个用于成环的碳原子的杂芳基,且Ar<sub>2</sub>至Ar<sub>5</sub>可各自独立地与相邻基团结合而成环。

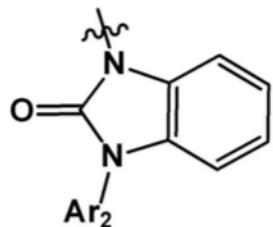
[0013] 在一个实施方式中,式2可由下述式2-1至式2-3中的一个表示:



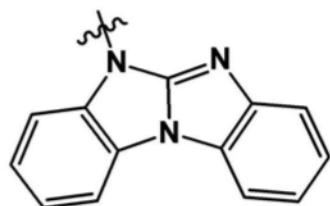
[0016] 式2-1至式2-3中,X<sub>1</sub>和X<sub>2</sub>各自独立地为CR<sub>3</sub>或N,其中X<sub>1</sub>或X<sub>2</sub>中的至少一个为N,X<sub>7</sub>至X<sub>10</sub>各自独立地为CR<sub>6</sub>或N,其中X<sub>7</sub>至X<sub>10</sub>中的至少一个为N,且R<sub>3</sub>至R<sub>6</sub>各自独立地为氢原子、取代或未取代的具有6至30个用于成环的碳原子的芳基,或取代或未取代的具有2至30个用于成环的碳原子的杂芳基。

[0017] 在一个实施方式中,式3可由下述式3-1至式3-4中的一个表示:

式 3-1

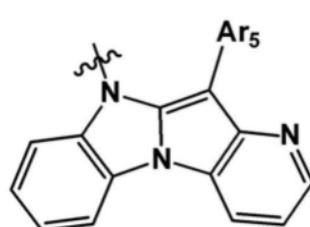


式 3-2

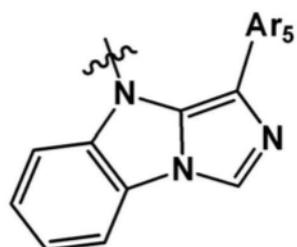


[0018]

式 3-3



式 3-4



。

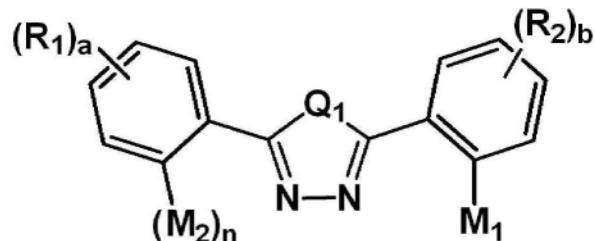
[0019] 式3-1、3-3和3-4中,Ar<sub>2</sub>和Ar<sub>5</sub>各自独立地为取代或未取代的具有6至30个用于成环的碳原子的芳基,或取代或未取代的具有2至30个用于成环的碳原子的杂芳基。

[0020] 在一个实施方式中,Q<sub>1</sub>可为NAr<sub>1</sub>,且Ar<sub>1</sub>可为取代或未取代的苯基。

[0021] 在一个实施方式中,式1可由下述式1-1或式1-2表示:

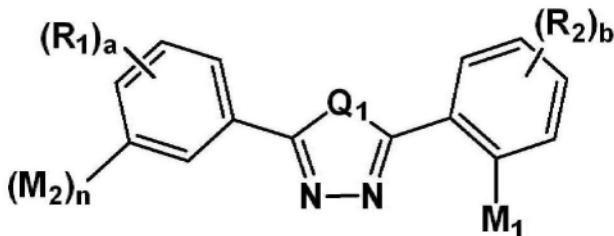
式 1-1

[0022]



式 1-2

[0023]



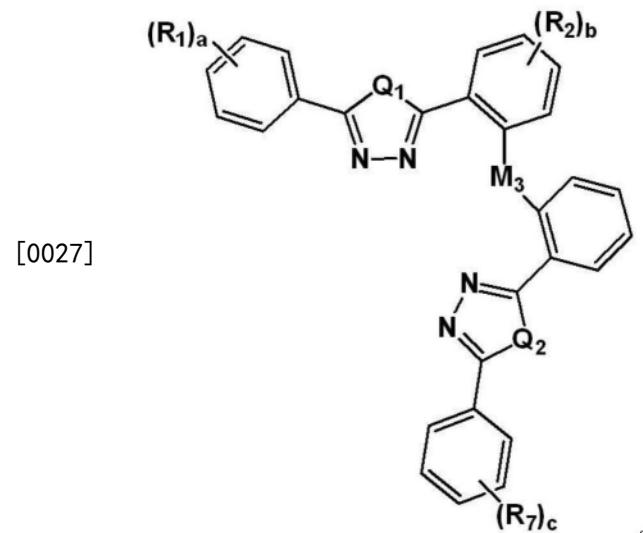
。

[0024] 式1-1和1-2中,Q<sub>1</sub>、R<sub>1</sub>、R<sub>2</sub>、M<sub>1</sub>、M<sub>2</sub>、“n”、“a”和“b”与上述定义的相同。

[0025] 在一个实施方式中,“a”可为0。

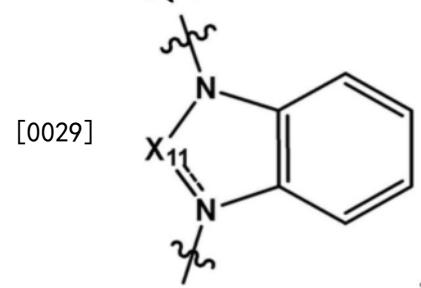
[0026] 在一个实施方式中,式1可由下述式1-3表示:

式 1-3



[0028] 式1-3中,  $Q_1$ 、 $R_1$ 、 $R_2$ 、“a”和“b”与上述定义的相同,  $Q_2$ 的定义与 $Q_1$ 的定义相同,  $Q_1$ 和 $Q_2$ 可相同或不同,  $R_7$ 为氢原子、氘原子、取代或未取代的具有1至10个碳原子的烷基、取代或未取代的具有6至30个用于成环的碳原子的芳基,或取代或未取代的具有2至30个用于成环的碳原子的杂芳基, “c”为0至5的整数,且 $M_3$ 由下述式4表示:

式 4



[0030] 式4中,  $X_{11}$ 为C=O或CR<sub>8</sub>,且R<sub>8</sub>为氢原子、氘原子、取代或未取代的具有1至10个碳原子的烷基、取代或未取代的具有6至30个用于成环的碳原子的芳基,或取代或未取代的具有2至30个用于成环的碳原子的杂芳基。

[0031] 在一个实施方式中,“b”可为0或1,并且如果“b”为1,则 $R_2$ 可与 $M_1$ 相同。

[0032] 在一个实施方式中,由式1表示的含氮化合物可具有约3.0eV或更大的最低三线态能级。

[0033] 在一个实施方式中,发射层可包括主体和掺杂剂,并且主体可包括由上述式1表示的含氮化合物。

[0034] 在一个实施方式中,掺杂剂可为磷光掺杂剂。

[0035] 本公开的实施方式提供了由式1表示的含氮化合物。

## 附图说明

[0036] 包括附图以提供对本公开的进一步理解,并且附图并入说明书且构成说明书的一部分。附图与说明书一起阐释了本公开的示例性实施方式,用于阐释本公开的原理。附图中:

- [0037] 图1为示意性阐释了根据本公开实施方式的有机电致发光装置的截面图；
- [0038] 图2为示意性阐释了根据本公开实施方式的有机电致发光装置的截面图；且
- [0039] 图3为示意性阐释了根据本公开实施方式的有机电致发光装置的截面图。

## 具体实施方式

[0040] 参考附图，根据示例性实施方式将容易理解本公开的上述目的、其他目的、特征和优势。然而，本公开可具体化为不同的形式，并且不应阐释为限于本文所阐述的实施方式。相反，提供示例性实施方式使得本文公开的内容是通透和完整的，并且本领域的技术人员充分理解本公开的精神。

[0041] 相同的参考数值是指示相同的要素以阐释每个附图。附图中，为了使本公开清楚，可放大要素的尺寸。应理解，尽管术语第一、第二等可在本文中用来描述各种要素，但这些要素不应被这些术语限制。这些术语仅用来区别一个要素与另一要素。例如，下面讨论的第一要素可以被称为第二要素，并且类似地，第二要素也可以被称为第一要素。如本文使用的，单数形式也意在包括复数形式，除非上下文另外明确指出。

[0042] 还将进一步理解，术语“包含”或“包括”在本说明书中使用时，指存在所叙述的特征、数值、步骤、操作、要素、部件或它们的组合，但不排除存在或增加一个或多个其他特征、数值、步骤、操作、要素、部件或它们的组合。还应理解，当层、膜、区、板等被称为在另一部件“上”时，它可以“直接”在另一部件“上”，或也可以存在中间部件。此外，当层、膜、区、板等被称为在另一部件“下”时，它可以“直接”在另一部件“下”，也可以存在中间部件。

[0043] 诸如“……中的至少一个”、“……中的一个”和“选自……”的表述，在一列元件之前时，修饰整列要素而不是修改该列中的单个要素。此外，在描述本发明的实施方式时，使用“可”指“本发明的一个或多个实施方式”。

[0044] 首先，将参考图1至图3阐释根据本公开的示例性实施方式的有机电致发光装置。

[0045] 图1为示意性阐释了根据本公开实施方式的有机电致发光装置的截面图。图2为示意性阐释了根据本公开实施方式的有机电致发光装置的截面图。图3为示意性阐释了根据本公开实施方式的有机电致发光装置的截面图。

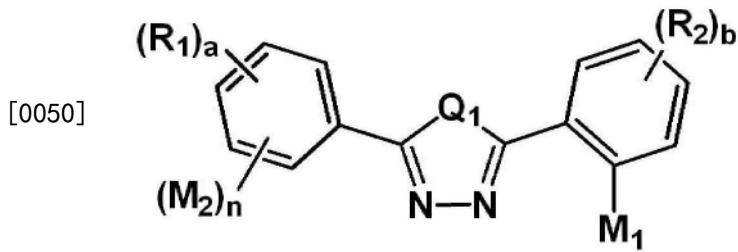
[0046] 参考图1至图3，根据本公开的示例性实施方式的有机电致发光装置可包括第一电极EL1、空穴传输区HTR、发射层EML、电子传输区ETR和第二电极EL2。

[0047] 发射层EML可包括根据本公开实施方式的含氮化合物。然而，本公开的实施方式不限于此。设置（例如，放置）在第一电极EL1和第二电极EL2之间的一个或多个有机层中的至少一层可包括根据本公开实施方式的含氮化合物。例如，空穴传输区HTR可包括根据本公开实施方式的含氮化合物。

[0048] 下文，将更详细地阐释根据本公开实施方式的含氮化合物，然后，将阐释有机电致发光装置10的每个层。

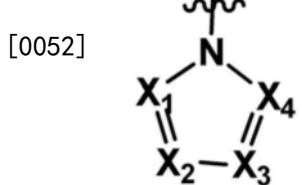
[0049] 根据本公开实施方式的含氮化合物可由下述式1表示：

式 1

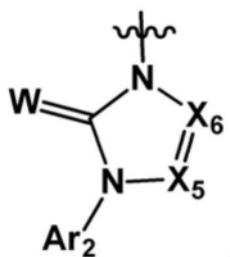


[0051] 式1中,  $Q_1$  可为  $NAr_1$ 、0或S,  $Ar_1$  可为氢原子、氘原子、取代或未取代的具有6至30个用于成环的碳原子的芳基, 或取代或未取代的具有2至30个用于成环的碳原子的杂芳基,  $R_1$  和  $R_2$  可各自独立地为氢原子、氘原子、卤素原子、取代或未取代的氨基、取代或未取代的甲硅烷基、取代或未取代的硼基、取代或未取代的具有1至10个碳原子的烷基、取代或未取代的具有6至30个碳原子的芳烷基、取代或未取代的具有1至10个碳原子的卤代烷基、取代或未取代的具有6至30个碳原子的芳氧基、取代或未取代的具有6至30个碳原子的芳硫基、取代或未取代的具有6至30个用于成环的碳原子的芳基, 或取代或未取代的具有2至30个用于成环的碳原子的杂芳基, 其中  $R_1$  和  $R_2$  可各自独立地与相邻基团结合而成环, “a”和“b”可各自独立地为0至4的整数, “n”为0或1, 且  $M_1$  和  $M_2$  可各自独立地由下述式2或式3表示:

式 2



式 3



[0053] 式2中,  $X_1$  至  $X_4$  可各自独立地为  $CR_3$  或N, 其中  $X_1$  至  $X_4$  中的至少一个可为N,  $R_3$  可为氢原子、氘原子、取代或未取代的具有1至10个碳原子的烷基、取代或未取代的具有6至30个用于成环的碳原子的芳基, 或取代或未取代的具有2至30个用于成环的碳原子的杂芳基, 且  $R_3$  可与相邻基团结合而成环。

[0054] 式3中,  $X_5$  和  $X_6$  可各自独立地为  $CR_3$  或N,  $R_3$  可为氢原子、氘原子、取代或未取代的具有1至10个碳原子的烷基、取代或未取代的具有6至30个用于成环的碳原子的芳基, 或取代或未取代的具有2至30个用于成环的碳原子的杂芳基, 且  $R_3$  可与相邻基团结合而成环,  $W$  可为0、 $NAr_3$  或  $CAr_4Ar_5$ ,  $Ar_2$  至  $Ar_5$  可各自独立地为氢原子、氘原子、取代或未取代的具有1至10个碳原子的烷基、取代或未取代的具有6至30个碳原子的芳烷基、取代或未取代的具有6至30个用于成环的碳原子的芳基, 或取代或未取代的具有2至30个用于成环的碳原子的杂芳基, 且  $Ar_2$  至  $Ar_5$  可各自独立地与相邻基团结合而成环。

[0055] 本公开中, 可指待连接的部分(例如,结合位点)。

[0056] 本公开中, “取代或未取代的”可指未被取代的基团或被选自下述中的至少一个取代基取代的基团: 氘原子、卤代基、氰基、硝基、氨基、甲硅烷基、氨基、硫基、亚硫酰基、磺酰

基、羰基、硼基、芳胺基、氧化膦基、膦硫基、烷基、烯基、芳基和杂环基。此外，上述说明的取代基中的每个可为取代或未取代的。例如，联苯基可被描述为被苯基取代的芳基或苯基。

[0057] 本公开中，术语“通过与相邻基团结合而成环”可指通过一个基团与相邻基团结合而形成取代或未取代的烃环，或形成取代或未取代的杂环。烃环可包括脂肪族烃环和芳族烃环。杂环可包括脂肪族杂环和芳族杂环。烃环和杂环可各自独立地为单环或多环。此外，通过与相邻基团结合而形成的环可与其他环结合而形成螺结构。

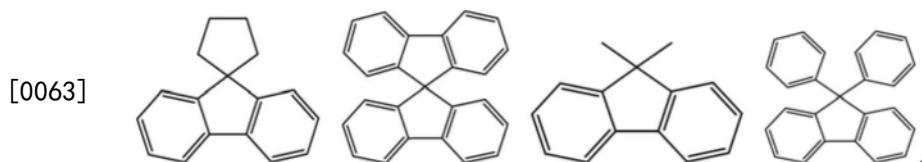
[0058] 本公开中，术语“相邻基团”可指这样一对取代基团：其中第一取代基连接至一原子，该原子直接连接至被第二取代基取代的另一原子，可指连接至相同原子的一对取代基团，或可指这样一对取代基团：其中第一取代基在空间上位于离第二取代基最近的位置。例如，在1,2-二甲苯中，两个甲基可解释为彼此的“相邻基团”，且在1,1-二乙基环戊烯中，两个乙基可被阐释为彼此的“相邻基团”。

[0059] 本公开中，卤素原子可包括氟原子、氯原子、溴原子和/或碘原子，但不限于此。

[0060] 本公开中，烷基可为直链的、支链的或环状的基团。烷基的碳数可为1至30、1至20、1至10或1至4。烷基可非限制性地包括甲基、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。

[0061] 本公开中，芳基可指衍生自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可为6至30、6至20或6至15。芳基的非限制性例子可包括苯基、萘基、芴基、蒽基、菲基、联苯基、三联苯基、四联苯基、五联苯基、六联苯基、亚联苯基(biphenylenyl)、苯并菲基、芘基、苯并荧蒽基、䓛基等。

[0062] 本公开中，芴基可为取代的，并且两个取代基可彼此结合而形成螺结构。取代的芴基的非限制例子如下所示。然而，本公开的实施方式不限于此：



[0064] 本公开中，卤代烷基、烷氧基、芳烷基和烷硫基中的烷基可与上述的烷基相同。

[0065] 本公开中，芳氧基、芳烷基和芳硫基中的芳基可与上述的芳基相同。

[0066] 本公开中，杂芳基可为包括O、N、P、Si或S中的至少一个作为杂原子的杂芳基(例如，环芳族基团)。如果杂芳基包括两个杂原子，则两个杂原子可相同或不同。用于形成杂芳

基的环的碳数可为2至30或2至20。杂芳基可为单环杂芳基或多环杂芳基。多环杂芳基的例子可具有两环结构或三环结构。杂芳基的非限制例子可包括噻吩基、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、吖啶基、哒嗪基、吡嗪基、喹啉基、喹唑啉基、喹喔啉基、吩噁嗪基、酞嗪基、吡啶并嘧啶基、吡啶并吡嗪基、吡唑并吡嗪基、异喹啉基、吲哚基、咔唑基、N-芳基咔唑基、N-杂芳基咔唑基、N-烷基咔唑基、苯并噁唑基、苯并咪唑基、苯并噻唑基、苯并咔唑基、苯并噁吩基、二苯并噁吩基、噻吩并噁吩基、苯并呋喃基、菲咯啉基、异噁唑基、噁二唑基、吩噁唑基、二苯并噁咯基、二苯并呋喃基等。

[0067] 本公开中，甲硅烷基可非限制性地包括烷基甲硅烷基和芳基甲硅烷基。甲硅烷基的例子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。然而，本公开的实施方式不限于此。

[0068] 本公开中，硼基(硼基基团)可非限制性地包括烷基硼基和芳基硼基。硼基的非限制性例子可包括三甲基硼基、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。

[0069] 本公开中，烯基可具有直链或支链。烯基的碳数没有具体限制并且可为2至30、2至20或2至10。烯基的非限制性例子可包括乙烯基、1-丁烯基、1-戊烯基、1,3-丁二烯基芳基、苯乙烯基、苯乙烯基乙烯基等。

[0070] 本公开中，氨基的碳数没有具体限制，但可为1至30。氨基可非限制性地包括烷基氨基和芳基氨基。氨基的非限制性例子可包括甲基氨基、二甲基氨基、苯基氨基、二苯基氨基、萘基氨基、9-甲基-蒽基氨基、三苯基氨基等。

[0071] 本公开中，膦氧基(例如，氧化膦基团)可例如被烷基或芳基中的至少一种取代。

[0072] 本公开中，膦硫基可例如被烷基或芳基中的至少一种取代。

[0073] 式1中，如果“a”为1，则R<sub>1</sub>可不为氢原子，而如果“b”为1，则R<sub>2</sub>可不为氢原子。如果“a”为2或更大，则多个R<sub>1</sub>基团可相同或不同，而如果“b”为2或更大，则多个R<sub>2</sub>基团可相同或不同。

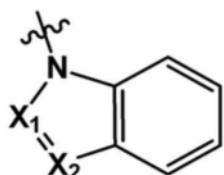
[0074] 式1中，如果R<sub>1</sub>基团为多个(例如，如果存在两个或更多个R<sub>1</sub>基团)，则相邻的两个R<sub>1</sub>基团可彼此结合而成环，例如，杂环。

[0075] 式2和式3中，如果R<sub>3</sub>基团为多个，则相邻的两个R<sub>3</sub>基团可彼此结合而成环。

[0076] 式2中，X<sub>1</sub>至X<sub>4</sub>中N的数目可为1、2或3(例如，X<sub>1</sub>至X<sub>4</sub>中的1个、2个或3个可为氮)。

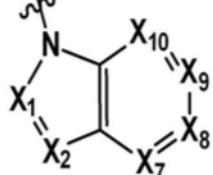
[0077] 式2可由下述式2-1至式2-3中的一个表示：

式 2-1

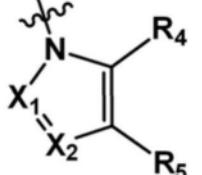


[0078]

式 2-2



式 2-3



[0079] 式2-1中，X<sub>1</sub>和X<sub>2</sub>可各自独立地为CR<sub>3</sub>或N，且X<sub>1</sub>或X<sub>2</sub>中的至少一个可为N，且R<sub>3</sub>可为氢原子、取代或未取代的具有6至30个用于成环的碳原子的芳基，或取代或未取代的具有2至

30个用于成环的碳原子的杂芳基。

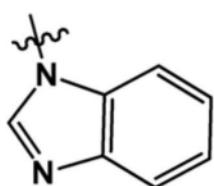
[0080] 式2-1中, R<sub>3</sub>可为氢原子、取代或未取代的苯基、含氮的取代或未取代的杂芳基。含氮的杂芳基可非限制性地为,例如,取代或未取代的吡啶基或取代或未取代的嘧啶基。

[0081] 式2-2中, X<sub>1</sub>和X<sub>2</sub>可各自独立地为CR<sub>3</sub>或N,且X<sub>1</sub>或X<sub>2</sub>中的至少一个可为N,X<sub>7</sub>至X<sub>10</sub>可各自独立地为CR<sub>6</sub>或N,且X<sub>7</sub>至X<sub>10</sub>中的至少一个可为N,且R<sub>3</sub>和R<sub>6</sub>可各自独立地为氢原子、取代或未取代的具有6至30个用于成环的碳原子的芳基,或取代或未取代的具有2至30个用于成环的碳原子的杂芳基。

[0082] 式2-3中,X<sub>1</sub>和X<sub>2</sub>可各自独立地为CR<sub>3</sub>或N,且X<sub>1</sub>或X<sub>2</sub>中的至少一个可为N,且R<sub>3</sub>至R<sub>5</sub>可各自独立地为氢原子、取代或未取代的具有6至30个用于成环的碳原子的芳基,或取代或未取代的具有2至30个用于成环的碳原子的杂芳基。

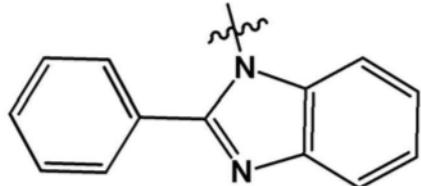
[0083] 式2-1可由下述式2-1-1至式2-1-3中的一个表示:

式 2-1-1



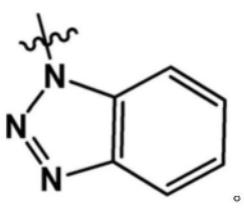
[0084]

式 2-1-2



式 2-1-3

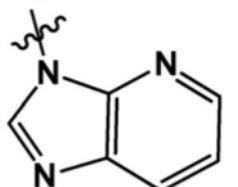
[0085]



[0086] 式2-2可由例如下述式2-2-1表示:

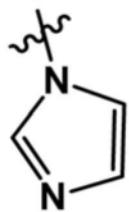
式 2-2-1

[0087]

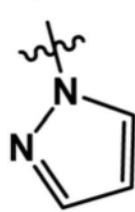


[0088] 式2-3可由下述式2-3-1至式2-3-4中的一个表示:

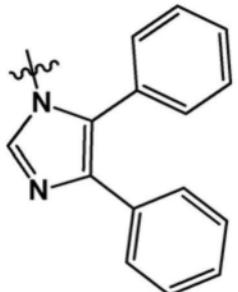
式 2-3-1



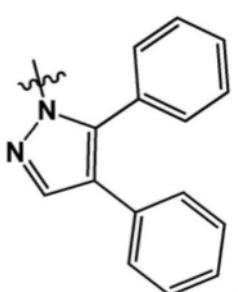
式 2-3-2



[0089] 式 2-3-3



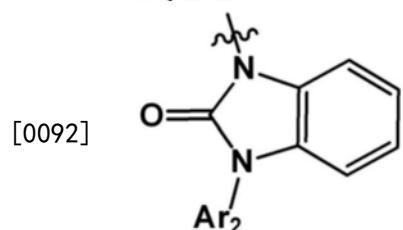
式 2-3-4



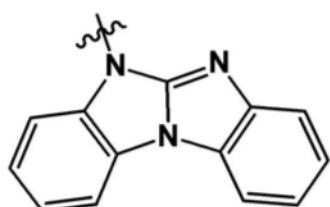
[0090] 式3中,W可为0。然而,本公开的实施方式不限于此,W可为 $NAr_3$ ,且 $Ar_3$ 可与 $Ar_2$ 结合而成环。在另一个实施方式中,式2中,W可为 $CAr_4Ar_5$ ,且 $Ar_4$ 和 $Ar_5$ 中的一个可与 $Ar_2$ 结合而成环。

[0091] 式3可由下述式3-1至式3-4中的一个表示:

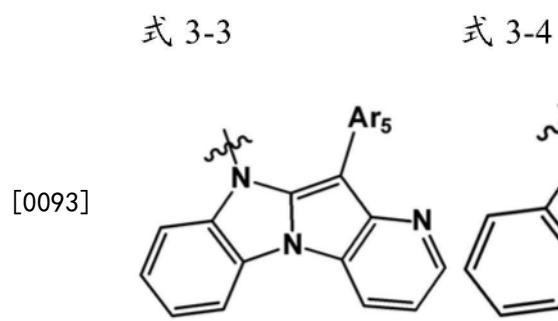
式 3-1



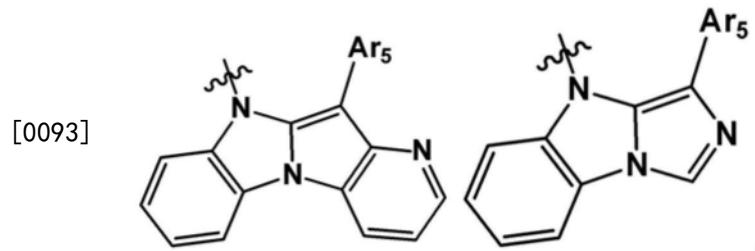
式 3-2



式 3-3



式 3-4



[0094] 式3-1中, $Ar_2$ 可为取代或未取代的具有6至30个用于成环的碳原子的芳基,或取代或未取代的具有2至30个用于成环的碳原子的杂芳基。式3-1中, $Ar_2$ 可为例如取代或未取代的苯基。

[0095] 式3-3中, $Ar_5$ 可为取代或未取代的具有6至30个用于成环的碳原子的芳基,或取代或未取代的具有2至30个用于成环的碳原子的杂芳基。式3-3中, $Ar_5$ 可为例如取代或未取代的苯基。

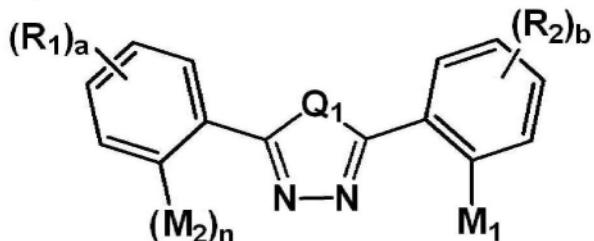
[0096] 式3-4中, $Ar_5$ 可为取代或未取代的具有6至30个用于成环的碳原子的芳基,或取代或未取代的具有2至30个用于成环的碳原子的杂芳基。式3-4中, $Ar_5$ 可为例如取代或未取代

的苯基。

[0097] 式1中,  $Q_1$  可为  $NAr_1$ , 且  $Ar_1$  可为取代或未取代的苯基。例如,  $Q_1$  可为  $NAr_1$ , 且  $Ar_1$  可为被甲硅烷基取代的苯基或未取代的苯基。例如,  $Q_1$  可为  $NAr_1$ , 且  $Ar_1$  可为被三苯基甲硅烷基取代的苯基或未取代的苯基。然而, 本公开的实施方式不限于此。式1中,  $Q_1$  可为0或S。

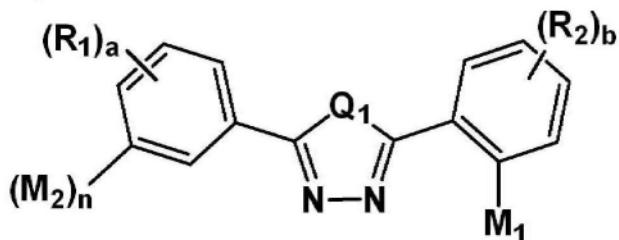
[0098] 式1可由例如下述式1-1或式1-2表示:

式 1-1



[0099]

式 1-2



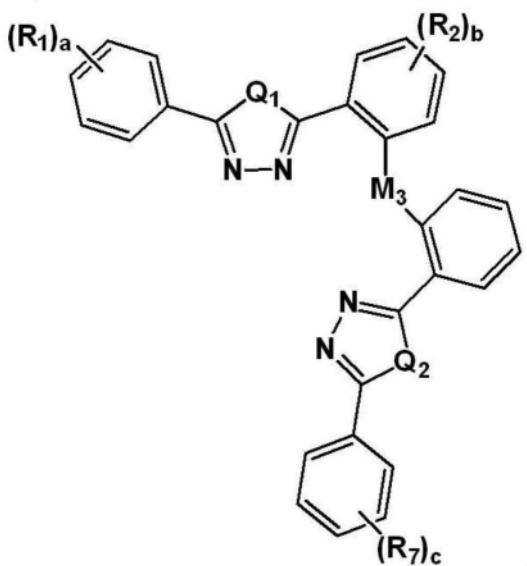
[0100] 式1-1和式1-2中,  $Q_1$ 、 $R_1$ 、 $R_2$ 、 $M_1$ 、 $M_2$ 、“n”、“a”和“b”与上述定义的相同。

[0101] 式1-1和式1-2中, 如果“n”为1, 则  $M_1$  和  $M_2$  可相同。然而, 本公开的实施方式不限于此。

[0102] 例如, “n”可为1, 且  $M_1$  和  $M_2$  可由上述式2-2-1表示。在另一个实施方式中, “n”可为1, 且  $M_1$  和  $M_2$  可由上述式3-2表示。

[0103] 式1可由例如下述式1-3表示:

式 1-3



[0104]

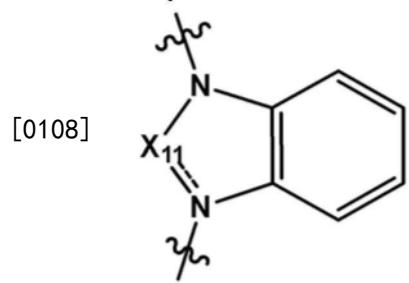
[0105] 式1-3中,  $Q_1$ 、 $R_1$ 、 $R_2$ 、“a”和“b”与上述定义的相同,  $Q_2$  的定义与  $Q_1$  的定义相同,  $Q_1$  和  $Q_2$  可相同或不同,  $R_7$  可为氢原子、氘原子、取代或未取代的具有1至10个碳原子的烷基、取代或

未取代的具有6至30个用于成环的碳原子的芳基,或取代或未取代的具有2至30个用于成环的碳原子的杂芳基,且“c”为0至5的整数。

[0106] 式1-3中,如果“c”为1,则R<sub>7</sub>可不为氢原子,并且如果“c”为2或更大,则多个R<sub>7</sub>基团可相同或不同。“c”可为0,但本公开的实施方式不限于此。

[0107] 式1-3中,M<sub>3</sub>可由下述式4表示:

式 4



[0109] 式4中,X<sub>11</sub>可为C=O或CR<sub>8</sub>,且R<sub>8</sub>可为氢原子、氘原子、取代或未取代的具有1至10个碳原子的烷基、取代或未取代的具有6至30个用于成环的碳原子的芳基,或取代或未取代的具有2至30个用于成环的碳原子的杂芳基。

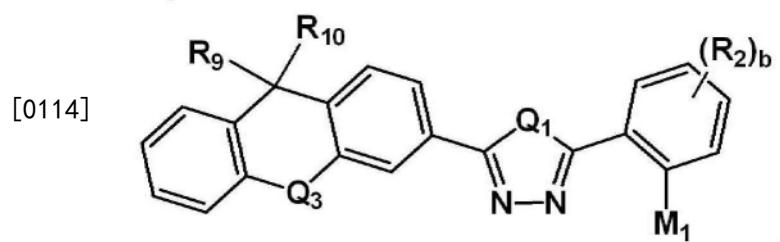
[0110] 式4中,如果X<sub>11</sub>为C=O,则X<sub>11</sub>和两个N原子通过单键连接,并且如果X<sub>11</sub>为CR<sub>8</sub>,则两个N原子中的一个通过双键与CR<sub>8</sub>连接。

[0111] 式4中,R<sub>8</sub>可为氢原子或取代或未取代的苯基。

[0112] 式1中,“a”可为0。例如,可被M<sub>2</sub>取代的苯环可为被M<sub>2</sub>单取代的或未取代的。“a”可为1或更大,且R<sub>1</sub>可为取代基而不是氢原子。然而,本公开的实施方式不限于此。例如,R<sub>1</sub>可非限制性地为芳胺基、芳基甲硅烷基、膦氧基、膦硫基、芳基硼基、卤素原子和/或卤代烷基。

[0113] 式1可由下述式1-4表示:

式 1-4



[0115] 式1-4中,Q<sub>3</sub>可为0、S或NR<sub>11</sub>,R<sub>9</sub>至R<sub>11</sub>可各自独立地为氢原子、氘原子、取代或未取代的具有1至10个碳原子的烷基,或取代或未取代的具有6至30个用于成环的碳原子的芳基,且Q<sub>1</sub>、M<sub>1</sub>、R<sub>2</sub>和“b”与上述相同。

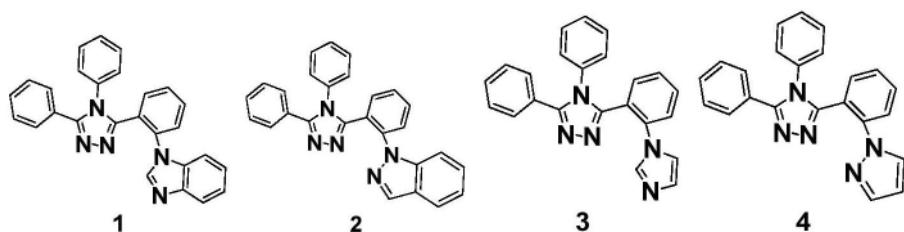
[0116] 式1中,“b”可为0。“b”可为1,但本公开的实施方式不限于此。如果“b”为1,则R<sub>2</sub>和M<sub>1</sub>可相同。例如,“b”可为1,且R<sub>2</sub>和M<sub>1</sub>可由式2-2-1表示。在另一个实施方式中,“b”可为1,且R<sub>2</sub>和M<sub>1</sub>可由式3-2表示。

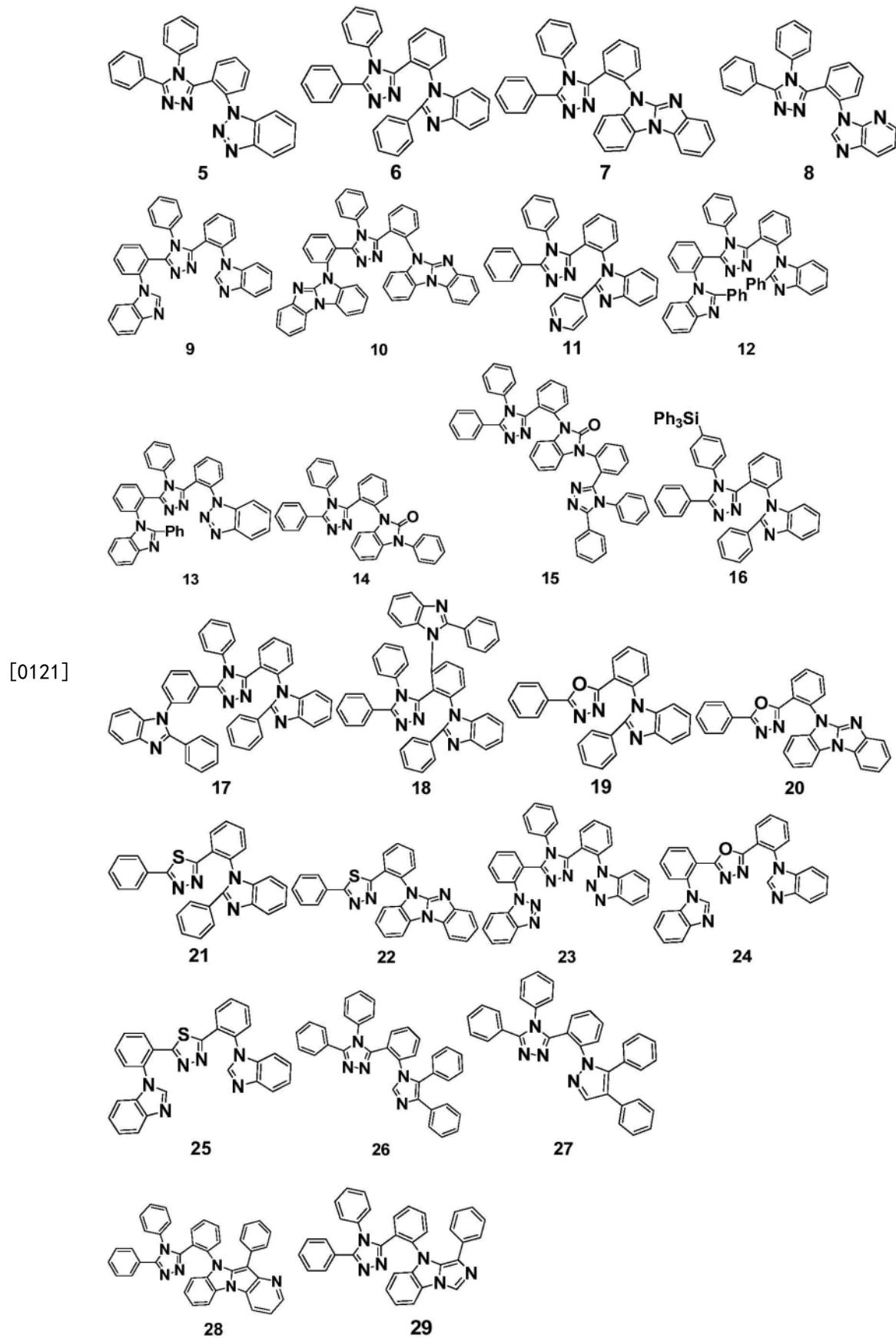
[0117] 在另一个实施方式中,“b”可为1或更大,且R<sub>2</sub>可为取代基而不是氢原子。例如,R<sub>1</sub>可非限制性地为芳胺基、芳基甲硅烷基、膦氧基、膦硫基、芳基硼基、卤素原子和/或卤代烷基。

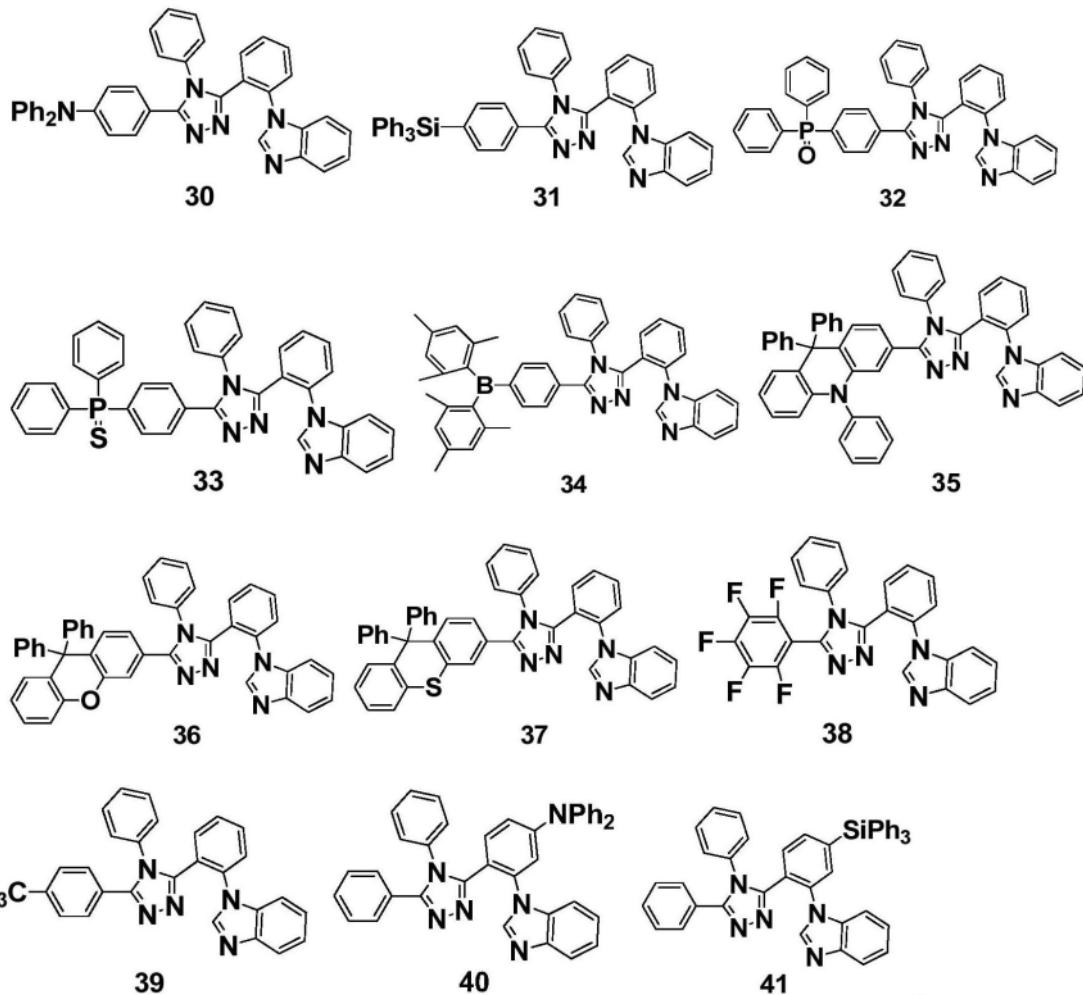
[0118] 由式1表示的含氮化合物可为选自化合物组1中表示的化合物中的至少一种。然而,本公开的实施方式不限于此。

## [0119] 化合物组1

[0120]







[0122]

[0123] 在上述结构中,Ph可指苯基。

[0124] 根据本公开实施方式的含氮化合物具有三唑、噁二唑或噻二唑骨架(例如,部分),并且具有这样的结构:其中吸电子取代基与该骨架(例如,上述的部分)被取代的位置在苯环上为邻位。通过取代在苯环上邻位的两类含氮的五元环,所得分子结构可被扭曲且可提高最低三线态能级。因此,根据本公开实施方式的含氮化合物可容易作为磷光主体材料应用。如果根据本公开实施方式的含氮化合物被用作磷光主体材料,则可获得高的电荷迁移率,并且同时,掺杂剂的最低三线态能级的捕获则可能。

[0125] 根据本公开实施方式的含氮化合物可具有约3.0eV或更大的最低三线态能级(T1)。

[0126] 再次参考图1至图3,将阐释根据本公开实施方式的有机电致发光装置。

[0127] 下文,将主要针对不同特征阐释上述根据本公开实施方式的含氮化合物,并且未阐释的部分将遵循上面结合根据本公开实施方式的含氮化合物的阐释。

[0128] 第一电极EL1具有导电性。第一电极EL1可为像素电极或阳极。第一电极EL1可为透射电极、半透射电极或反射电极。如果第一电极EL1为透射电极时,则第一电极EL1可使用透明金属氧化物,比如氧化铟锡(ITO)、氧化铟锌(IZO)、氧化锌(ZnO)和/或氧化铟锡锌(ITZO)形成。如果第一电极EL1为半透射电极或反射电极时,则第一电极EL1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)。而且,第一电极EL1可包括多个层,其包括使用任意上述材料形成的反射层和/或半透射层,或使用ITO、IZO、ZnO和/或ITZO形成的透明层。例如,第一电极EL1可具有ITO/Ag/ITO的三层结构,但本公开的实施方式不限于此。

[0129] 第一电极EL1的厚度可为约1,000 Å至约10,000 Å,或,例如,约1,000 Å至约3,000 Å。

[0130] 在第一电极EL1上提供空穴传输区HTR。空穴传输区HTR可包括空穴注入层HIL、空穴传输层HTL、空穴缓冲层或电子阻挡层中的至少一个。

[0131] 空穴传输区HTR可具有使用单种材料形成的单层、使用多种不同材料形成的单层或包括使用多种不同材料形成的多个层的多层结构。

[0132] 例如,空穴传输区HTR可具有诸如空穴注入层HIL或空穴传输层HTL的单层结构,并且可具有使用空穴注入材料和空穴传输材料形成的单层结构。在一个实施方式中,空穴传输区HTR可非限制性地具有使用多种不同材料形成的单层结构,或从第一电极EL1起层压的下述结构: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。

[0133] 可使用各种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)法形成空穴传输区HTR。

[0134] 空穴注入层HIL可非限制性地包括,例如,酞菁化合物(比如铜酞菁);N,N'-二苯基-N,N'-双-[4-(苯基-间甲苯基-氨基)-苯基]-联苯基-4,4'-二胺(DNTPD)、4,4',4"-三(3-甲基苯基苯基氨基)三苯胺(m-MTDA)、4,4',4"-三(N,N'-二苯基氨基)三苯胺(TDATA)、4,4',4"-三{N-(2-萘基)-N-苯基氨基}-三苯胺(2-TNATA)、聚(3,4-乙撑二氧噻吩)/聚(4-苯乙烯磺酸酯)(PEDOT/PSS)、聚苯胺/十二烷基苯磺酸(PANI/DBSA)、聚苯胺/樟脑磺酸(PANI/CSA)、聚苯胺/聚(4-苯乙烯磺酸酯)(PANI/PSS)、N,N'-二(萘-1-基)-N,N'-二苯基-联苯胺(NPD)、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)硼酸酯、四(五氟苯基)硼酸酯、1,4,5,8,9,12-六氮杂苯并菲六腈(HAT-CN)等。

[0135] 空穴传输层HTL可非限制性地包括,例如,咔唑衍生物(比如N-苯基咔唑和/或聚乙烯基咔唑)、氟类衍生物、N,N'-双(3-甲基苯基)-N,N'-二苯基-[1,1-联苯基]-4,4'-二胺(TPD)、三苯胺类衍生物(比如4,4',4"-三(N-咔唑基)三苯胺(TCTA))、N,N'-二(1-萘-1-基)-N,N'-二苯基联苯胺(NPB)、4,4'-亚环己基双[N,N-双(4-甲基苯基)苯胺](TAPC)、4,4'-双[N,N'-(3-甲苯基)氨基]-3,3'-二甲基联苯(HMTPD)等。

[0136] 电子阻挡层EBL可包括,例如本领域周知的材料。电子阻挡层EBL可非限制性地包括,例如,咔唑衍生物(比如N-苯基咔唑和/或聚乙烯基咔唑)、氟类衍生物、N,N'-双(3-甲基苯基)-N,N'-二苯基-[1,1-联苯基]-4,4'-二胺(TPD)、三苯胺类衍生物(比如4,4',4"-三(N-咔唑基)三苯胺(TCTA))、N,N'-二(1-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-甲苯基)氨基]-3,3'-二甲基联苯(HMTPD)、mCP等。此外,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。

[0137] 空穴传输区HTR的厚度可为约100 Å至约10,000 Å,或,例如,约100 Å至约

5,000 Å。空穴注入层HIL的厚度可为约 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。例如，电子阻挡层EBL的厚度可为约 10 Å 至约 1,000 Å。如果空穴传输区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，可在不显著增加驱动电压的情况下，获得令人满意的(或合适的)空穴传输性质。

[0138] 除了上述材料之外，空穴传输区HTR可进一步包括电荷产生材料以提高导电性。电荷产生材料可均匀地或非均匀地分散在空穴传输区HTR中。电荷产生材料可为，例如，p型掺杂剂。p型掺杂剂可非限制性地为醌衍生物、金属氧化物或含氰基的化合物中的一种。p型掺杂剂的非限制例子可包括醌衍生物(比如四氰醌二甲烷(TCNQ)和/或2,3,5,6-四氟-7,7,8,8-四氰醌二甲烷(F4-TCNQ))、金属氧化物(比如钨氧化物和/或钼氧化物)。

[0139] 如上所述，空穴传输区HTR可进一步包括空穴缓冲层或电子阻挡层中的至少一层。空穴缓冲层可根据由发射层EML发射的光的波长补偿共振距离并可提高发射效率。空穴传输区HTR中包括的任何材料可用作空穴缓冲层中包括的材料。电子阻挡层为防止(或减少)从电子传输区ETR到空穴传输区HTR的电子注入的层。

[0140] 发射层EML可提供在空穴传输区HTR上。发射层EML可具有，例如，约 100 Å 至约 1,000 Å，或约 100 Å 至约 300 Å 的厚度。发射层EML可具有使用单种材料形成的单层、使用多种不同材料形成的单层或具有使用多种不同材料形成的多个层的多层结构。

[0141] 发射层EML可包括根据本公开实施方式的含氮化合物。

[0142] 发射层EML可包括一种、两种或更多种由式1表示的含氮化合物。除了由式1表示的含氮化合物以外，发射层EML可进一步包括已知的材料。例如，发射层EML可进一步包括包含选自下述任一种的材料：螺-DPVBi、2,2',7,7'-四(联苯-4-基)-9,9'-螺二芴(螺-六苯)(螺-6P)、二苯乙烯基-苯(DSB)、二苯乙烯基-芳烃(DSA)、聚芴(PFO)类聚合物和聚(对苯乙炔)(PPV)类聚合物。然而，本公开的实施方式不限于此。

[0143] 发射层EML可包括主体和掺杂剂。主体可包括根据本公开实施方式的含氮化合物，并且掺杂剂可为磷光掺杂剂。例如，根据本公开实施方式的含氮化合物可用作磷光主体材料。然而，本公开的实施方式不限于此。例如，根据本公开实施方式的含氮化合物可用作用于热激活延迟荧光的材料。

[0144] 发射层EML可为，例如，发射蓝光的蓝色发射层。然而，本公开的实施方式不限于此，并且EML可为发射红光或绿光的层。

[0145] 除了根据本公开实施方式的含氮化合物以外，主体可进一步包括本领域已知的主体材料。例如，可进一步非限制性地包括三(8-羟基喹啉)铝(Alq<sub>3</sub>)、4,4'-双(N-咔唑基)-1,1'-联苯(CBP)、聚(N-乙烯基咔唑)(PVK)、9,10-二(萘-2-基)蒽(AND)、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-叔丁基-9,10-二(萘-2-基)蒽(TBADN)、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)、双[2-(二苯基膦)苯基]醚氧化物(DPEPO)、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(DPSiO<sub>3</sub>)、八苯基环四硅氧烷(DPSiO<sub>4</sub>)、2,8-双(二苯基磷酰基)二苯并呋喃(PPF)等。

[0146] 掺杂剂可包括本领域已知的材料。例如，可包括金属络合物，其包括铱(Ir)、铂(Pt)、钯(Pd)、锇(0s)、钛(Ti)、锆(Zr)、铪(Hf)、铕(Eu)、铽(Tb)、铑(Rh)或铥(Tm)中的至少

一种。例如,可包括双[2-(4,6-二氟代苯基)吡啶合-C2,N] (吡啶甲酸根合) 铷(III) (FIrpic)。掺杂剂可为荧光掺杂剂。荧光掺杂剂可包括,例如,芳基胺化合物或苯乙烯基胺化合物。

[0147] 电子传输区ETR可提供在发射层EML上。电子传输区ETR可非限制性地包括空穴阻挡层HBL、电子传输层ETL或电子注入层EIL中的至少一种。

[0148] 电子传输区ETR可具有使用单种材料形成的单层、使用多种不同材料形成的单层或具有使用多种不同材料形成的多个层的多层结构。

[0149] 例如,电子传输区ETR可具有电子注入层EIL或电子传输层ETL的单层结构,或使用电子注入材料和电子传输材料形成的单层结构。进一步,电子传输区ETR可非限制性地具有单层结构,其具有多种不同的材料,或具有从发射层EML起层压下述结构:电子传输层ETL/电子注入层EIL或空穴阻挡层HBL/电子传输层ETL/电子注入层EIL。电子传输区ETR的厚度可为,例如,约1,000 Å 至约1,500 Å。

[0150] 电子传输区ETR可使用各种方法形成,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。

[0151] 如果电子传输区ETR包括电子传输层ETL,则电子传输区ETR可包括三(8-羟基喹啉)铝(Alq<sub>3</sub>)、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、双[2-(二苯基膦)苯基]醚氧化物(DPEPO)、2-(4-(N-苯基苯并咪唑-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-4-羟基)铝(BAlq)、双(苯并喹啉-10-羟基)铍(BeBq<sub>2</sub>)、9,10-二(萘-2-基)蒽(ADN)或它们的混合物。然而,本公开的实施方式不限于此。电子传输层ETL的厚度可以为约100 Å 至约1,000 Å,例如,约150 Å 至约500 Å。如果电子传输层ETL的厚度满足上述范围,可在不显著增加驱动电压的情况下,获得令人满意的(或合适的)电子传输特性。

[0152] 如果电子传输区ETR包括电子注入层EIL,则电子传输区ETR可使用LiF、8-羟基喹啉锂(LiQ)、Li<sub>2</sub>O、BaO、NaCl、CsF、镧系金属(比如Yb)或金属卤化物(比如RbCl和/或RbI)。然而,本公开的实施方式不限于此。电子注入层EIL还可使用电子传输材料和绝缘有机金属盐的混合物材料形成。有机金属盐可以为具有约4eV或更大的能带隙的材料。例如,有机金属盐可以包括金属乙酸盐、金属苯酸盐、金属乙酰乙酸盐、金属乙酰丙酮化物和/或金属硬脂酸盐。电子注入层EIL的厚度可以为约1 Å 至约100 Å,约3 Å 至约90 Å。如果电子注入层EIL的厚度满足上述范围,可在不显著增加驱动电压的情况下,获得令人满意的(或合适的)电子传输特性。

[0153] 电子传输区ETR可包括空穴阻挡层HBL,如上所述。例如,空穴阻挡层HBL可包括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)和/或双[2-(二苯基膦)苯基]醚氧化物(DPEPO)。然而,本公开的实施方式不限于此。

[0154] 第二电极EL2可提供在电子传输区ETR上。第二电极EL2可以为共用电极或阴极。第二电极EL2可以是透射电极、半透射电极或反射电极。如果第二电极EL2为透射电极,则第二

电极EL2可非限制性地包括透明金属氧化物,例如,ITO、IZO、ZnO、ITZO等。

[0155] 如果第二电极EL2为半透射电极或反射电极,则第二电极EL2可以包括,例如,Ag、Mg、Cu、Al、Pt、Pd、Au、Ni、Nd、Ir、Cr、Li、Ca、LiF/Ca、LiF/Al、Mo、Ti、包含它们的化合物或它们的混合物(例如,Ag和Mg的混合物)。第二电极EL2可以具有多层的结构,其包括使用任意上述材料形成的反射层或半透射层以及使用ITO、IZO、ZnO、ITZO等形成的透明导电层。

[0156] 尽管未显示,但第二电极EL2可连接辅助电极。如果第二电极EL2连接辅助电极,则第二电极EL2的电阻可降低。

[0157] 在有机电致发光装置10中,根据施加至第一电极EL1和第二电极EL2中的每个的电压,由第一电极EL1注入的空穴可以经由空穴传输区HTR向发射层EML移动,并且由第二电极EL2注入的电子可以经由电子传输区ETR向发射层EML移动。电子和空穴在发射层EML中复合以产生激子,并且激子可通过从激发态向基态的跃迁而发射光。

[0158] 如果有机电致发光装置10为顶部发射装置,则第一电极EL1可为反射电极,并且第二电极EL2可为透射电极或半透射电极。如果有机电致发光装置10为底部发射装置,则第一电极EL1可为透射电极或半透射电极,并且第二电极EL2可以为反射电极。

[0159] 当根据本公开的实施方式的有机电致发光装置10包括由式1表示的含氮化合物时,可实现高的发射效率。

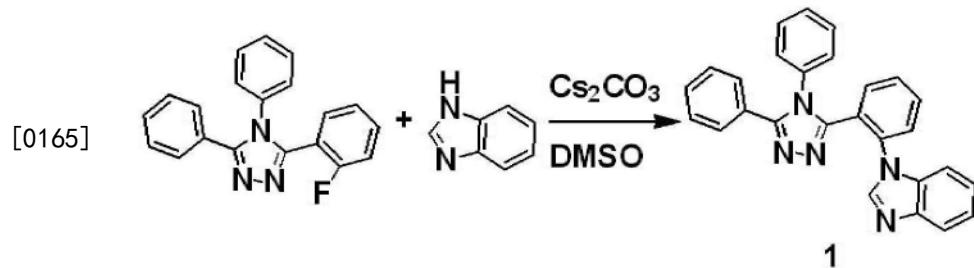
[0160] 下文,将参考具体的制备方法、实施方式和对比实施方式更详细地阐释本公开。下述实施方式仅为说明性的,以帮助理解本公开,而本公开的范围不限于此。

[0161] (合成例)

[0162] 例如,根据本公开的示例性实施方式的含氮化合物可按如下方式合成。然而,本公开的实施方式不限于此。

[0163] 1. 合成化合物1

[0164] 例如,可通过下述反应合成根据本公开实施方式的含氮化合物,化合物1。

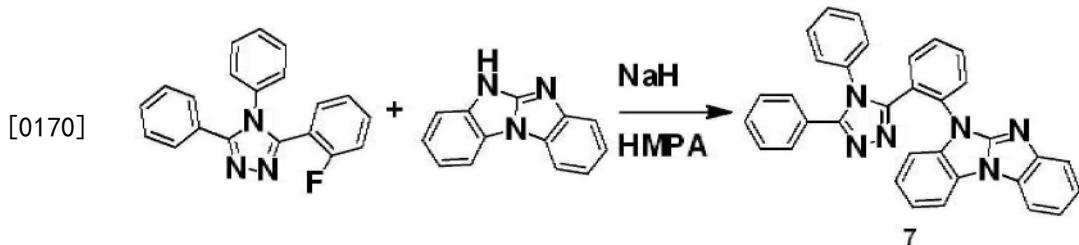


[0166] 在氩(Ar)气氛下,向200m1的三颈烧瓶中添加4.62g (14.6mmol) 的3-(2-氟代苯基)-4,5-二苯基-4H-1,2,4-三唑、1.73g (14.6mmol) 的苯并咪唑、9.54g (29.3mmol) 的Cs<sub>2</sub>CO<sub>3</sub>和44m1的二甲亚砜(DMSO)并在约160°C下搅拌约2小时。在空气中冷却所得混合物之后,向其中添加水,并且过滤和提取由此产生的白色沉淀。通过硅胶柱层析法分离由此得到的粗产物,得到5.36g (产率89%) 作为白色固体的化合物1。

[0167] 通过快速原子轰击质谱(FAB-MS)测得化合物1的分子量为413。由<sup>1</sup>H-NMR(CDCl<sub>3</sub>)测量的化合物1的化学位移( $\delta$ )值为8.04 (1H), 7.70-7.60 (3H), 7.48 (1H), 7.38 (1H), 7.29 (1H), 7.23-7.16 (5H), 7.06 (1H), 6.97 (1H), 6.82-6.73 (3H), 6.19 (2H)。

[0168] 2. 合成化合物7

[0169] 例如,可通过下述反应合成根据本公开实施方式的含氮化合物,化合物7。

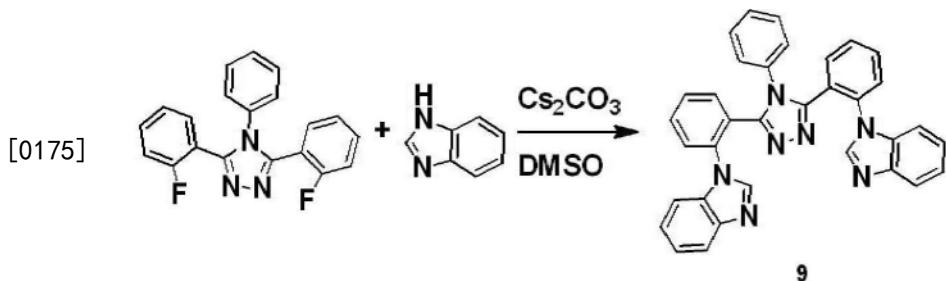


[0171] 在氩(Ar)气氛下,向200ml的三颈烧瓶中添加3.64g (11.5mmol)的3-(2-氟代苯基)-4,5-二苯基-4H-1,2,4-三唑、2.38g (11.5mmol)的5H-苯并咪唑并[1,2-a]苯并咪唑、0.703g (29.3mmol)的NaH和58ml的N-(2-羟丙基)甲基丙烯酰胺(HPMA),并在约200°C下搅拌约12小时。在空气中冷却所得混合物之后,向其中添加水,并且过滤和提取由此产生的白色沉淀。通过硅胶柱层析法分离由此得到的粗产物,得到2.83g (产率49%)作为白色固体的化合物7。

[0172] 通过FAB-MS测得化合物7的分子量为502。由<sup>1</sup>H-NMR (CDCl<sub>3</sub>) 测量的化合物7的化学位移( $\delta$ )值为8.58-8.54 (3H), 8.28 (2H), 7.82-7.75 (2H), 7.68-7.46 (9H), 7.38 (2H), 7.30-7.19 (4H)。

### 3. 合成化合物9

[0174] 例如,可通过下述反应合成根据本公开实施方式的含氮化合物,化合物9。

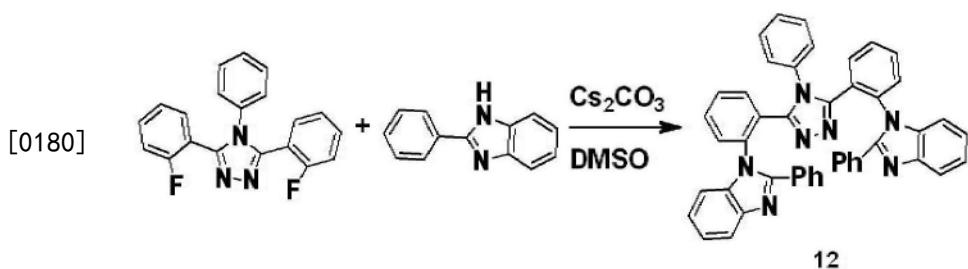


[0176] 在氩(Ar)气氛下,向200ml的三颈烧瓶中添加3.34g (10.0mmol)的3,5-双(2-氟代苯基)-4-苯基-4H-1,2,4-三唑、2.36g (20.0mmol)的苯并咪唑、13.03g (40.0mmol)的Cs<sub>2</sub>CO<sub>3</sub>和60ml的DMSO,并且在约160°C下搅拌约2小时。在空气中冷却所得混合物之后,向其中添加水,并且由此产生的白色沉淀。通过硅胶柱层析法分离由此得到的粗产物,得到4.29g (产率81%)作为白色固体的化合物9。

[0177] 通过FAB-MS测得化合物9的分子量为529。由<sup>1</sup>H-NMR (CDCl<sub>3</sub>) 测量的化合物9的化学位移( $\delta$ )值为8.56 (2H), 8.08 (2H), 7.82-7.75 (4H), 7.68-7.19 (15H)。

### 4. 合成化合物12

[0179] 例如,可通过下述反应合成根据本公开实施方式的含氮化合物,化合物12。



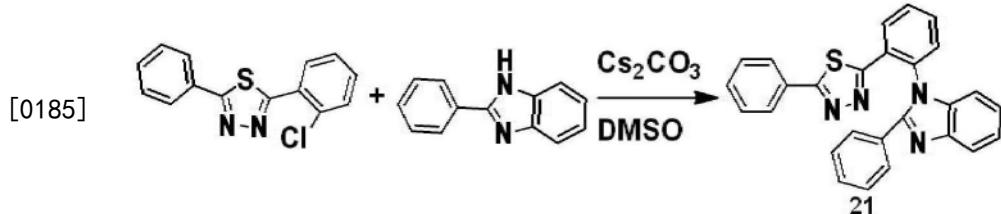
[0181] 在氩(Ar)气氛下,向200ml的三颈烧瓶中添加3.34g (10.0mmol)的3,5-双(2-氟代

苯基)-4-苯基-4H-1,2,4-三唑、3.88g (20.0mmol) 的2-苯基苯并咪唑、13.03g (40.0mmol) 的Cs<sub>2</sub>CO<sub>3</sub>和60ml的DMSO,并且在约160°C下搅拌约2小时。在空气中冷却所得混合物之后,向其中添加水,并且过滤和提取由此产生的白色沉淀。通过硅胶柱层析法分离由此得到的粗产物,得到6.27g (产率92%) 作为白色固体的化合物12。

[0182] 通过FAB-MS测得化合物12的分子量为681。由<sup>1</sup>H-NMR (CDCl<sub>3</sub>) 测量的化合物12的化学位移 ( $\delta$ ) 值为8.56 (2H), 8.28 (4H), 7.83-7.75 (6H), 7.68-7.46 (15H), 7.38 (2H), 7.28 (2H)。

[0183] 5. 合成化合物21

[0184] 例如,可通过下述反应合成根据本公开实施方式的含氮化合物,化合物21。



[0186] 在氩 (Ar) 气氛下,向200ml的三颈烧瓶中添加3.11g (11.4mmol) 的2- (2-氯代苯基)-5-苯基-1,3,4-噻二唑、2.21g (11.4mmol) 的2-苯基苯并咪唑、7.43g (22.8mmol) 的Cs<sub>2</sub>CO<sub>3</sub>和23ml的DMSO,并且在约180°C下搅拌约12小时。在空气中冷却所得混合物之后,向其中添加水,并且过滤和提取由此产生的白色沉淀。通过硅胶柱层析法分离由此得到的粗产物,得到3.53g (产率72%) 作为白色固体的化合物21。

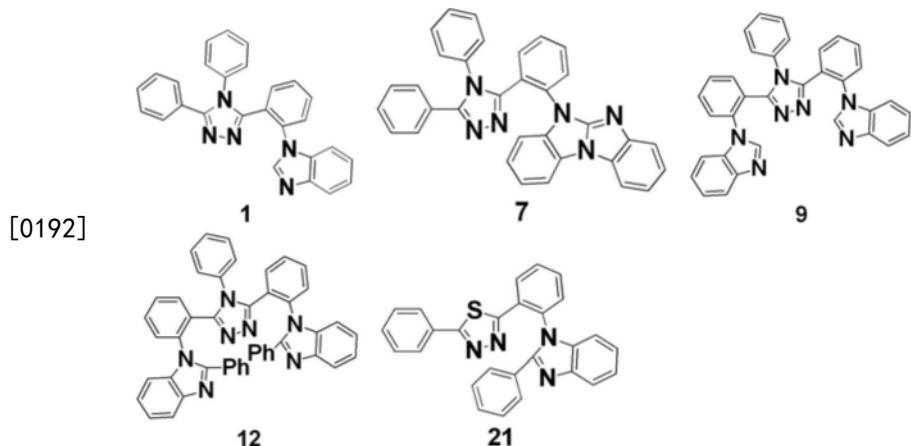
[0187] 通过FAB-MS测得化合物21的分子量为430。由<sup>1</sup>H-NMR (CDCl<sub>3</sub>) 测量的化合物21的化学位移 ( $\delta$ ) 值为8.56 (1H), 8.28 (2H), 8.03 (2H), 7.83-7.75 (3H), 7.66 (1H), 7.55-7.48 (8H), 7.28 (1H)。

[0188] 上述合成实施例为示例性实施方式,并且反应条件可根据需要而改变。此外,可使用已知方法和材料合成根据本公开实施方式的化合物以便具有各种取代基。通过向由式1表示的核心结构引入各种取代基,可获得有机电致发光装置的合适的特性。

[0189] (装置制造实施例)

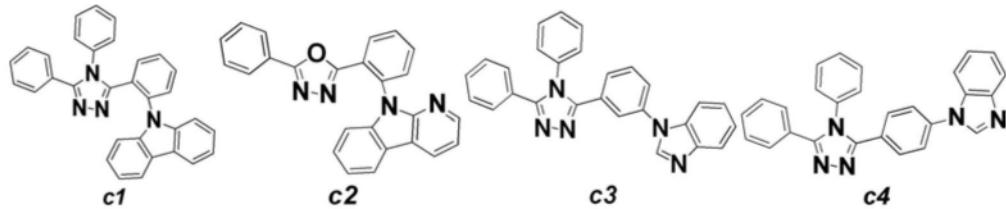
[0190] 使用化合物1、7、9、12和21中的每个作为发射层的主体材料制造实施例1至5的有机电致发光装置。

[0191] 实施例化合物

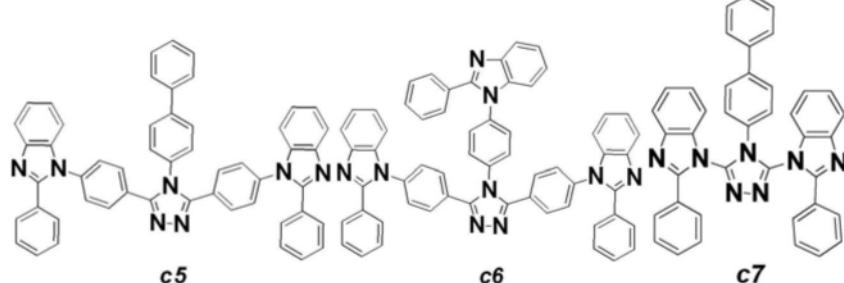


[0193] 使用对比化合物c1至c7中的每个作为发射层的主体材料制造对比例1至7的有机电致发光装置。

[0194] 对比化合物



[0195]



[0196] 如下制造根据实施例1至5和对比例1至7的有机电致发光装置：使用ITO形成厚度为约150nm的第一电极，使用HAT-CN形成厚度为约10nm的空穴注入层，使用NPB形成厚度为约40nm的空穴传输层，使用mCP形成厚度为约10nm的电子阻挡层，使用掺杂有8%FIrpic的各实施例化合物或对比化合物形成厚度为约20nm的发射层，使用DPEPO形成厚度为约10nm的空穴阻挡层，使用TPBi形成厚度为约30nm的电子传输层，使用LiF形成厚度为约2nm的电子注入层，使用Al形成厚度为约120nm的第二电极。每层由真空下的沉积法形成。

[0197] 表1

[0198]

	发射层的主体材料	最大发射效率
实施例1	实施例化合物1	130%
实施例2	实施例化合物7	120%
实施例3	实施例化合物9	130%
实施例4	实施例化合物12	110%
实施例5	实施例化合物21	110%
对比例1	对比化合物c1	100%
对比例2	对比化合物c2	105%
对比例3	对比化合物c3	80%
对比例4	对比化合物c4	70%
对比例5	对比化合物c5	50%
对比例6	对比化合物c6	80%
对比例7	对比化合物c7	60%

[0199] 最大发射效率基于对比例1，以%来表示。

[0200] 参考表1，实施例1至5在与对比例1至7比较时具有提高的发射效率。在对比例1和2中，由于咔唑或咔啉在被三唑或噁二唑取代的苯基的邻位被取代，因此最低三线态能级降低，并且发射效率降低。此外，在对比例3至6中，由于苯并咪唑的取代位是间位或对位，因此分子的扭曲减少，并且三线态能级降低且发射效率降低。同时，在对比例5和7中，分子中包

括联苯基，并且最低三线态能级降低，结果，发射效率降低。

[0201] 根据本公开实施方式的含氮化合物可在发射层中使用，并且可改善有机电致发光装置的发射效率。

[0202] 根据本公开实施方式的含氮化合物可在发射层中使用，并且可提高有机电致发光装置的寿命。

[0203] 根据本公开实施方式的有机电致发光装置具有优异的发射效率。

[0204] 根据本公开实施方式的含氮化合物可应用于有机电致发光装置，并且可有助于发射效率的提高。

[0205] 如本文使用的，术语“基本上”、“约”和类似的术语被用作近似的术语而不是用作程度的术语，并且意在考虑本领域普通技术人员认识到的测量值或计算值中的固有偏差。

[0206] 而且，本文所述的任何数值范围意在包括所述范围内涵盖的相同数值精度的所有子范围。例如，“1.0至10.0”的范围意在包括所述最小值1.0和所述最大值10.0之间（并包括所述最小值1.0和所述最大值10.0）所有子范围，也就是，具有大于等于1.0的最小值和小于等于10.0的最大值，比如，例如，2.4至7.6。本文所述的任何最大数值限度意在包括本文涵盖的所有较小的数值限度，并且本说明书中所述的任何最小数值限度意在包括本文涵盖的所有较大的数值限度。因此，申请人保留修改本说明书包括权利要求书的权利，以明确地叙述本文明确叙述的范围内涵盖的任何子范围。

[0207] 尽管已经描述了本发明的示例性实施方式，但是应理解本发明不应限于这些示例性实施方式，而是本领域的普通技术人员可以在由权利要求书及其等同方式所限定的本发明的精神和范围内作出各种改变和修饰。

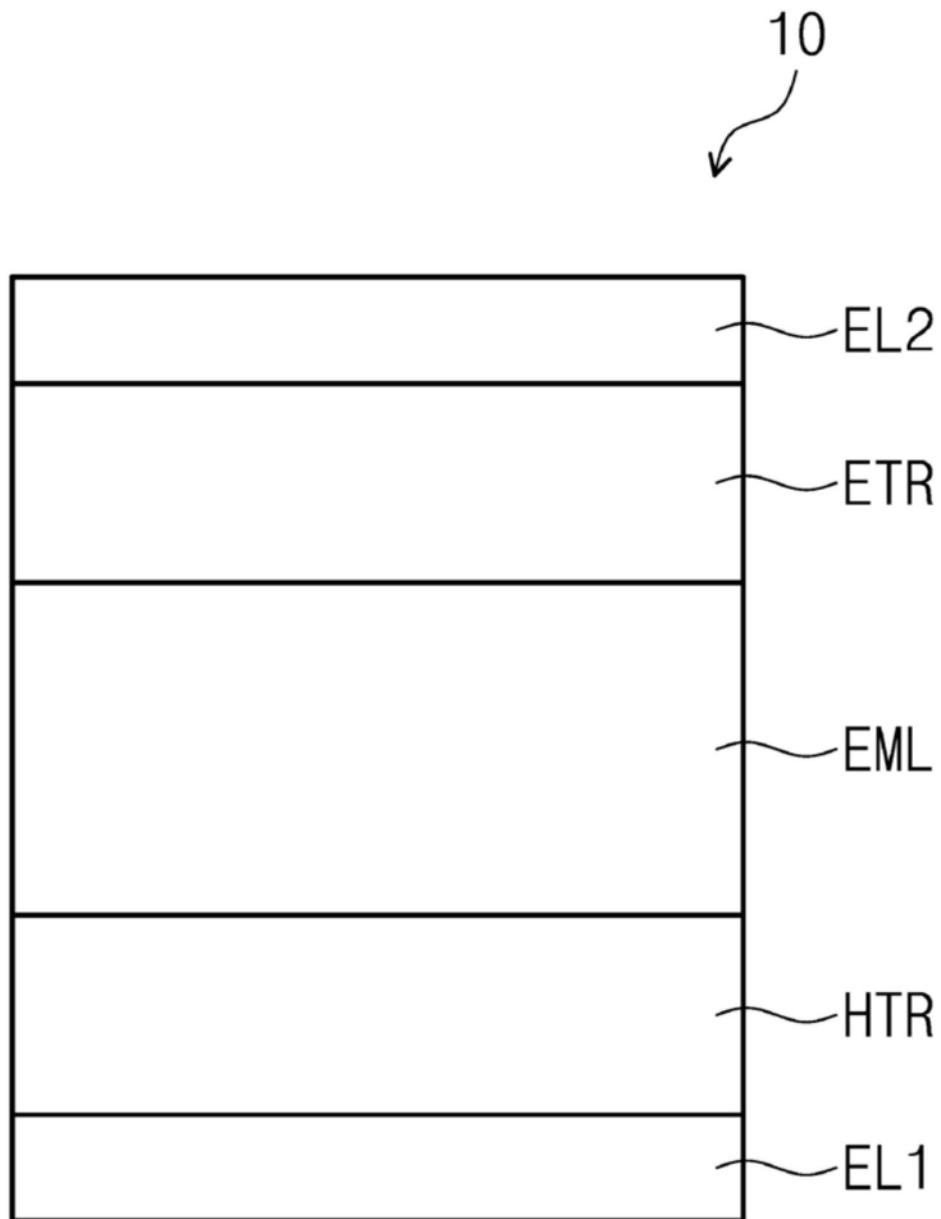


图1

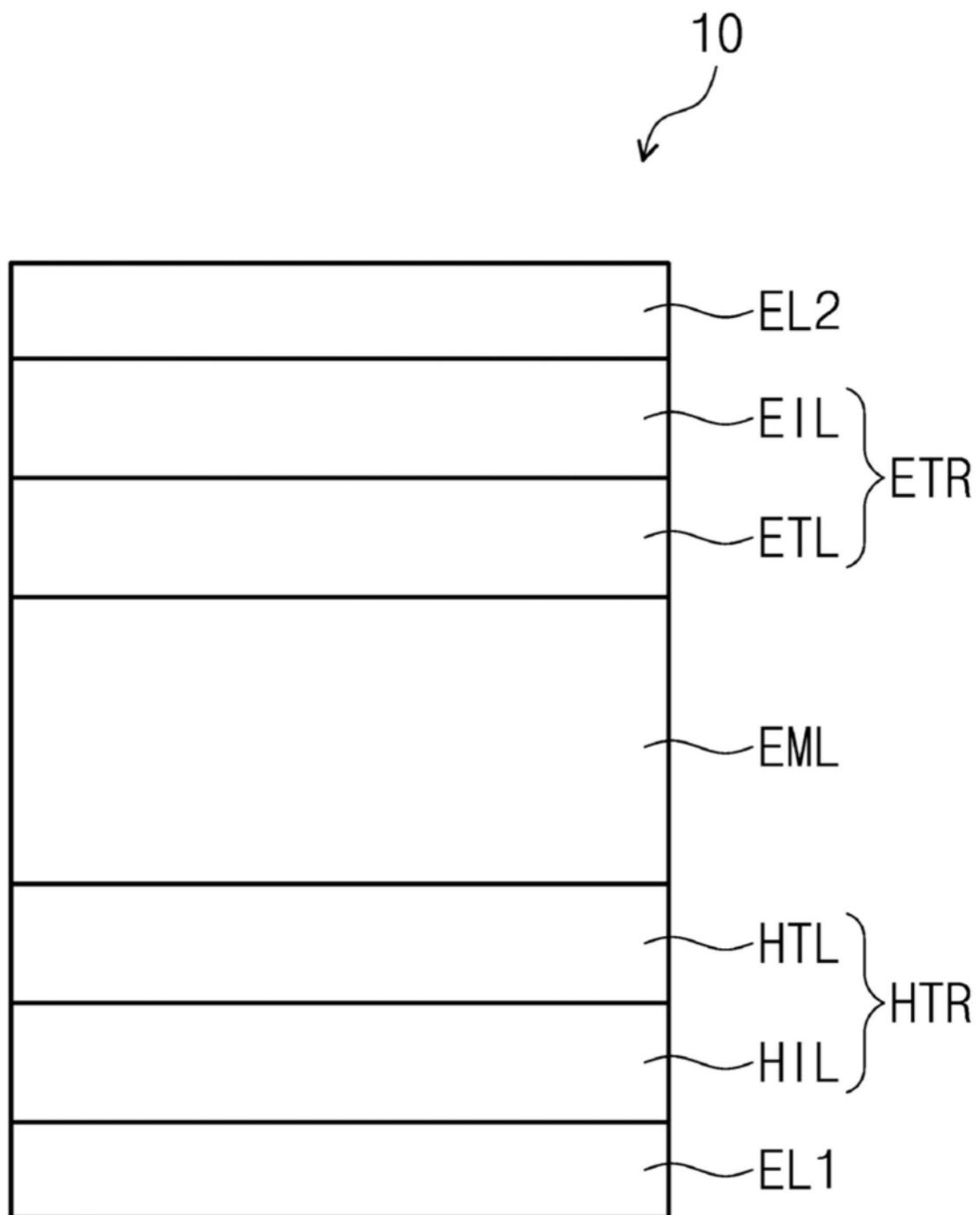


图2

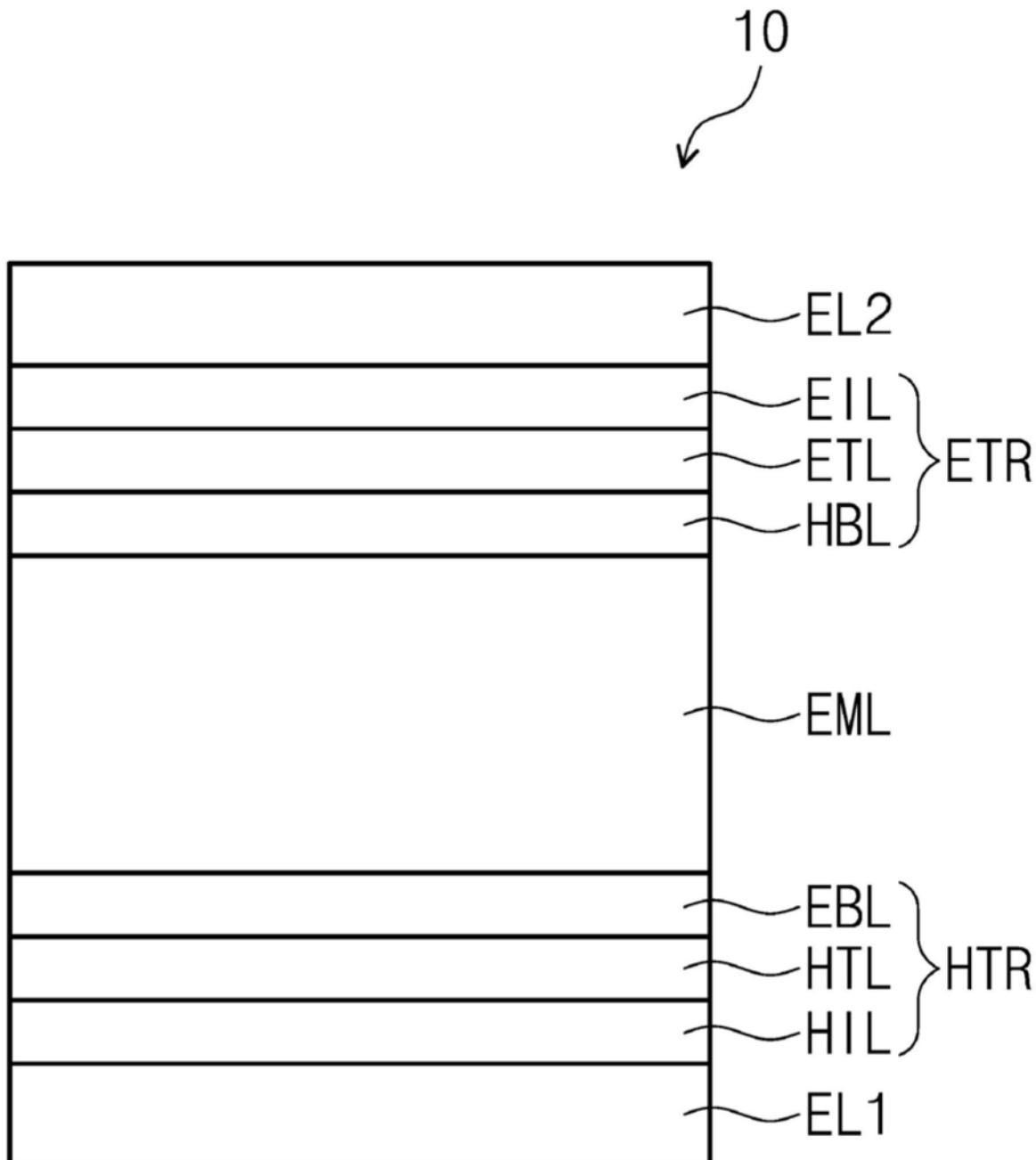


图3