



# (12) 发明专利申请

(10) 申请公布号 CN 117859413 A

(43) 申请公布日 2024. 04. 09

(21) 申请号 202280056158.3

埃莱娜·嘉兰加西亚

(22) 申请日 2022.08.24

(74) 专利代理机构 中原信达知识产权代理有限  
责任公司 11219

(30) 优先权数据

21192820.5 2021.08.24 EP

专利代理师 王潜 郭国清

(85) PCT国际申请进入国家阶段日

2024.02.18

(51) Int. Cl.

H10K 50/16 (2023.01)

H10K 85/60 (2023.01)

(86) PCT国际申请的申请数据

PCT/EP2022/073559 2022.08.24

C07D 239/74 (2006.01)

C07D 239/70 (2006.01)

(87) PCT国际申请的公布数据

W02023/025839 EN 2023.03.02

C07D 239/26 (2006.01)

C07D 403/10 (2006.01)

(71) 申请人 诺瓦尔德股份有限公司

地址 德国德累斯顿

C07D 405/10 (2006.01)

C07D 241/12 (2006.01)

C07D 221/18 (2006.01)

(72) 发明人 杰罗姆·加尼耶

多玛果伊·帕维奇科

安斯加尔·维尔纳

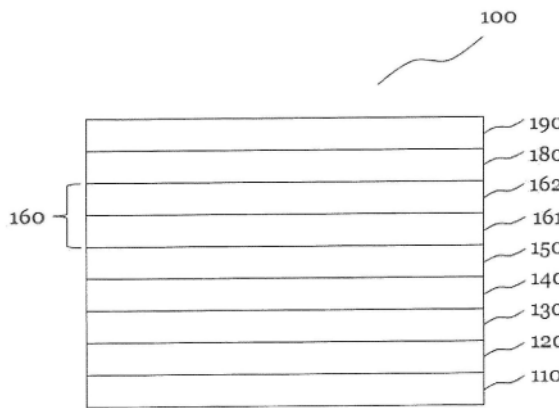
权利要求书9页 说明书89页 附图1页

(54) 发明名称

有机发光二极管和用于其中的化合物

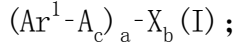
(57) 摘要

本发明涉及一种有机发光二极管和包含其的显示装置或照明装置,所述有机发光二极管包含不透明衬底、阳极、阴极、发光层、电子注入层和电子传输层叠层。



1. 一种有机发光二极管,所述有机发光二极管包含不透明衬底、阳极、阴极、发光层、电子注入层和电子传输层叠层;其中

- 所述电子传输层叠层布置在所述发光层与所述电子注入层之间;
- 所述电子传输层叠层包含第一电子传输层和第二电子传输层;
- 所述第一电子传输层包含式(I)化合物,



- a和b独立地为1或2;

- c独立地为0或1;

- Ar<sup>1</sup>独立地选自C<sub>6</sub>至C<sub>60</sub>芳基或C<sub>2</sub>至C<sub>42</sub>杂芳基,

-其中每个Ar<sup>1</sup>可被一个至三个取代基取代,所述一个至三个取代基独立地选自:C<sub>6</sub>至C<sub>12</sub>芳基、C<sub>3</sub>至C<sub>11</sub>杂芳基和C<sub>1</sub>至C<sub>6</sub>烷基、D、C<sub>1</sub>至C<sub>6</sub>烷氧基、C<sub>3</sub>至C<sub>6</sub>支化的烷基、C<sub>3</sub>至C<sub>6</sub>环状烷基、C<sub>3</sub>至C<sub>6</sub>支化的烷氧基、C<sub>3</sub>至C<sub>6</sub>环状烷氧基、部分或全氟化的C<sub>1</sub>至C<sub>6</sub>烷基、部分或全氟化的C<sub>1</sub>至C<sub>6</sub>烷氧基、部分或全氘化的C<sub>1</sub>至C<sub>6</sub>烷基、部分或全氘化的C<sub>1</sub>至C<sub>6</sub>烷氧基、卤素、CN或PY(R<sup>10</sup>)<sub>2</sub>,其中Y选自O、S或Se,优选为O,并且R<sup>10</sup>独立地选自C<sub>6</sub>至C<sub>12</sub>芳基、C<sub>3</sub>至C<sub>12</sub>杂芳基、C<sub>1</sub>至C<sub>6</sub>烷基、C<sub>1</sub>至C<sub>6</sub>烷氧基、部分或全氟化的C<sub>1</sub>至C<sub>6</sub>烷基、部分或全氟化的C<sub>1</sub>至C<sub>6</sub>烷氧基、部分或全氘化的C<sub>1</sub>至C<sub>6</sub>烷基、部分或全氘化的C<sub>1</sub>至C<sub>6</sub>烷氧基;

-其中Ar<sup>1</sup>上的每个C<sub>6</sub>至C<sub>12</sub>芳基取代基和Ar<sup>1</sup>上的每个C<sub>3</sub>至C<sub>11</sub>杂芳基取代基可被C<sub>1</sub>至C<sub>4</sub>烷基或卤素取代;

- A独立地选自C<sub>6</sub>至C<sub>30</sub>芳基,

-其中每个A可被一个或两个取代基取代,所述一个或两个取代基独立地选自:C<sub>6</sub>至C<sub>12</sub>芳基和C<sub>1</sub>至C<sub>6</sub>烷基、D、C<sub>1</sub>至C<sub>6</sub>烷氧基、C<sub>3</sub>至C<sub>6</sub>支化的烷基、C<sub>3</sub>至C<sub>6</sub>环状烷基、C<sub>3</sub>至C<sub>6</sub>支化的烷氧基、C<sub>3</sub>至C<sub>6</sub>环状烷氧基、部分或全氟化的C<sub>1</sub>至C<sub>6</sub>烷基、部分或全氟化的C<sub>1</sub>至C<sub>6</sub>烷氧基、部分或全氘化的C<sub>1</sub>至C<sub>6</sub>烷基、部分或全氘化的C<sub>1</sub>至C<sub>6</sub>烷氧基、卤素、CN或PY(R<sup>10</sup>)<sub>2</sub>,其中Y选自O、S或Se,优选为O,并且R<sup>10</sup>独立地选自C<sub>6</sub>至C<sub>12</sub>芳基、C<sub>3</sub>至C<sub>12</sub>杂芳基、C<sub>1</sub>至C<sub>6</sub>烷基、C<sub>1</sub>至C<sub>6</sub>烷氧基、部分或全氟化的C<sub>1</sub>至C<sub>6</sub>烷基、部分或全氟化的C<sub>1</sub>至C<sub>6</sub>烷氧基、部分或全氘化的C<sub>1</sub>至C<sub>6</sub>烷基、部分或全氘化的C<sub>1</sub>至C<sub>6</sub>烷氧基;

- 其中A上的每个C<sub>6</sub>至C<sub>12</sub>芳基取代基可被C<sub>1</sub>至C<sub>4</sub>烷基或卤素取代;

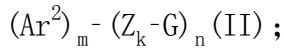
- X独立地选自C<sub>2</sub>至C<sub>42</sub>杂芳基,

-其中每个X可被一个或两个取代基取代,所述一个或两个取代基独立地选自:C<sub>6</sub>至C<sub>12</sub>芳基、C<sub>3</sub>至C<sub>11</sub>杂芳基和C<sub>1</sub>至C<sub>6</sub>烷基、D、C<sub>1</sub>至C<sub>6</sub>烷氧基、C<sub>3</sub>至C<sub>6</sub>支化的烷基、C<sub>3</sub>至C<sub>6</sub>环状烷基、C<sub>3</sub>至C<sub>6</sub>支化的烷氧基、C<sub>3</sub>至C<sub>6</sub>环状烷氧基、部分或全氟化的C<sub>1</sub>至C<sub>6</sub>烷基、部分或全氟化的C<sub>1</sub>至C<sub>6</sub>烷氧基、部分或全氘化的C<sub>1</sub>至C<sub>6</sub>烷基、部分或全氘化的C<sub>1</sub>至C<sub>6</sub>烷氧基、卤素、CN或PY(R<sup>10</sup>)<sub>2</sub>,其中Y选自O、S或Se,优选为O,并且R<sup>10</sup>独立地选自C<sub>6</sub>至C<sub>12</sub>芳基、C<sub>3</sub>至C<sub>12</sub>杂芳基、C<sub>1</sub>至C<sub>6</sub>烷基、C<sub>1</sub>至C<sub>6</sub>烷氧基、部分或全氟化的C<sub>1</sub>至C<sub>6</sub>烷基、部分或全氟化的C<sub>1</sub>至C<sub>6</sub>烷氧基、部分或全氘化的C<sub>1</sub>至C<sub>6</sub>烷基、部分或全氘化的C<sub>1</sub>至C<sub>6</sub>烷氧基;

-其中X上的每个C<sub>6</sub>至C<sub>12</sub>芳基取代基和X上的每个C<sub>3</sub>至C<sub>11</sub>杂芳基取代基可被C<sub>1</sub>至C<sub>4</sub>烷基或卤素取代;

- 所述式(I)化合物的分子偶极矩 $\geq 0\text{D}$ 且 $\leq 4\text{D}$ ;

- 所述第二电子传输层包含式(II)化合物,



-m和n独立地为1或2;

-k独立地为0、1或2;

-Ar<sup>2</sup>独立地选自C<sub>2</sub>至C<sub>42</sub>杂芳基和C<sub>6</sub>至C<sub>60</sub>芳基,

-其中每个Ar<sup>2</sup>可被一个或两个取代基取代,所述一个或两个取代基独立地选自:C<sub>6</sub>至C<sub>12</sub>芳基、C<sub>3</sub>至C<sub>11</sub>杂芳基和C<sub>1</sub>至C<sub>6</sub>烷基、D、C<sub>1</sub>至C<sub>6</sub>烷氧基、C<sub>3</sub>至C<sub>6</sub>支化的烷基、C<sub>3</sub>至C<sub>6</sub>环状烷基、C<sub>3</sub>至C<sub>6</sub>支化的烷氧基、C<sub>3</sub>至C<sub>6</sub>环状烷氧基、部分或全氟化的C<sub>1</sub>至C<sub>6</sub>烷基、部分或全氟化的C<sub>1</sub>至C<sub>6</sub>烷氧基、部分或全氘化的C<sub>1</sub>至C<sub>6</sub>烷基、部分或全氘化的C<sub>1</sub>至C<sub>6</sub>烷氧基、卤素、CN或PY(R<sup>10</sup>)<sub>2</sub>,其中Y选自O、S或Se,优选为O,并且R<sup>10</sup>独立地选自C<sub>6</sub>至C<sub>12</sub>芳基、C<sub>3</sub>至C<sub>12</sub>杂芳基、C<sub>1</sub>至C<sub>6</sub>烷基、C<sub>1</sub>至C<sub>6</sub>烷氧基、部分或全氟化的C<sub>1</sub>至C<sub>6</sub>烷基、部分或全氟化的C<sub>1</sub>至C<sub>6</sub>烷氧基、部分或全氘化的C<sub>1</sub>至C<sub>6</sub>烷基、部分或全氘化的C<sub>1</sub>至C<sub>6</sub>烷氧基;

-其中Ar<sup>2</sup>上的每个C<sub>6</sub>至C<sub>12</sub>芳基取代基和Ar<sup>2</sup>上的每个C<sub>3</sub>至C<sub>11</sub>杂芳基取代基可被C<sub>1</sub>至C<sub>4</sub>烷基或卤素取代;

-Z独立地选自C<sub>6</sub>至C<sub>30</sub>芳基,

-其中每个Z可被一个或两个取代基取代,所述一个或两个取代基独立地选自:C<sub>6</sub>至C<sub>12</sub>芳基和C<sub>1</sub>至C<sub>6</sub>烷基、D、C<sub>1</sub>至C<sub>6</sub>烷氧基、C<sub>3</sub>至C<sub>6</sub>支化的烷基、C<sub>3</sub>至C<sub>6</sub>环状烷基、C<sub>3</sub>至C<sub>6</sub>支化的烷氧基、C<sub>3</sub>至C<sub>6</sub>环状烷氧基、部分或全氟化的C<sub>1</sub>至C<sub>6</sub>烷基、部分或全氟化的C<sub>1</sub>至C<sub>6</sub>烷氧基、部分或全氘化的C<sub>1</sub>至C<sub>6</sub>烷基、部分或全氘化的C<sub>1</sub>至C<sub>6</sub>烷氧基、卤素、CN或PY(R<sup>10</sup>)<sub>2</sub>,其中Y选自O、S或Se,优选为O,并且R<sup>10</sup>独立地选自C<sub>6</sub>至C<sub>12</sub>芳基、C<sub>3</sub>至C<sub>12</sub>杂芳基、C<sub>1</sub>至C<sub>6</sub>烷基、C<sub>1</sub>至C<sub>6</sub>烷氧基、部分或全氟化的C<sub>1</sub>至C<sub>6</sub>烷基、部分或全氟化的C<sub>1</sub>至C<sub>6</sub>烷氧基、部分或全氘化的C<sub>1</sub>至C<sub>6</sub>烷基、部分或全氘化的C<sub>1</sub>至C<sub>6</sub>烷氧基;

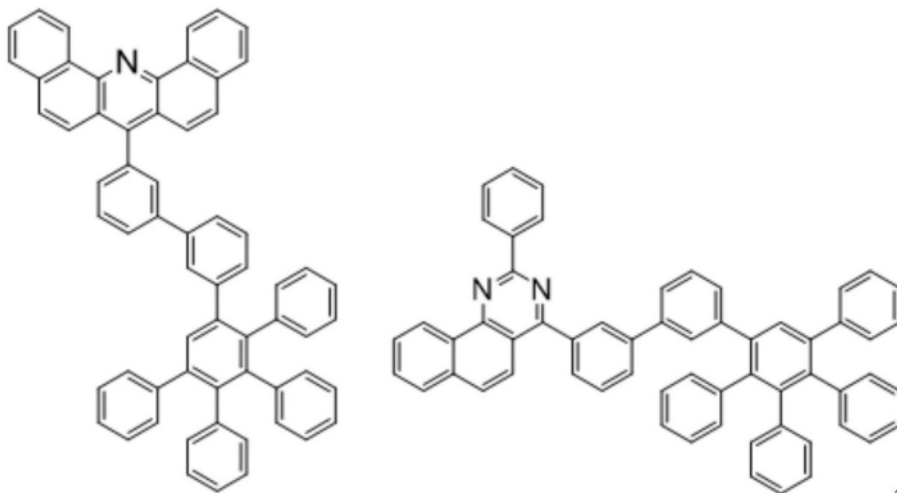
-其中Z上的每个C<sub>6</sub>至C<sub>12</sub>芳基取代基可被C<sub>1</sub>至C<sub>4</sub>烷基或卤素取代;

-G选择为使化合物G-苯基的偶极矩≥1D且≤7D;

-所述第一电子传输层和所述第二电子传输层不含电掺杂剂;并且

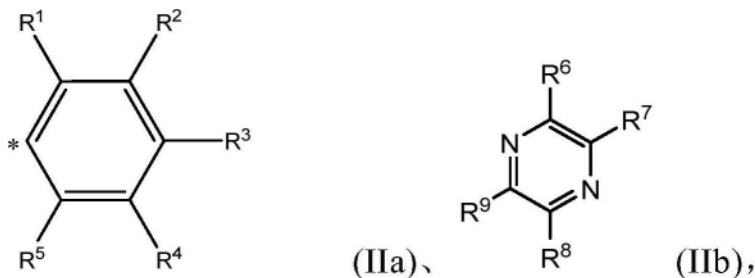
-所述式(I)化合物不含1,3,5-三嗪;

其中如下化合物不包括在式(I)中:



2. 根据权利要求1所述的有机发光二极管,其中Ar<sup>1</sup>独立地选自苯基、萘基、蒽基、荧蒽基、咕吨基、二苯并呋喃基、嘧啶基、吡嗪基、螺-咕吨基、茚基、螺茚基、三苯基甲硅烷基、四

苯基甲硅烷基、或具有式 (IIa) 或 (IIb) 的基团,

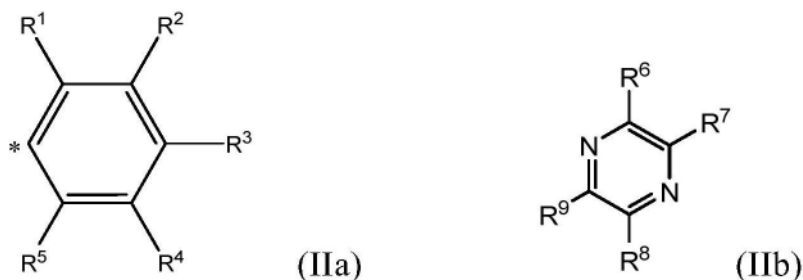


其中

-星号“\*”表示将式 (IIa) 的基团结合到A的结合位置;并且

-R<sup>1</sup>至R<sup>9</sup>独立地选自H、C<sub>6</sub>至C<sub>12</sub>芳基和C<sub>4</sub>至C<sub>10</sub>杂芳基。

3. 根据权利要求1所述的有机发光二极管,其中Ar<sup>1</sup>独立地选自荧蒹基、二苯并咪喃基、嘧啶基、吡嗪基、9,9-二甲基芴基、具有式 (IIa) 的基团、具有式 (IIb) 的基团,



其中

-星号“\*”表示将式 (IIa) 的基团结合到A的结合位置;并且

-R<sup>1</sup>为H,并且R<sup>2</sup>至R<sup>5</sup>独立地为苯基;或

-R<sup>1</sup>和R<sup>3</sup>为苯基,并且R<sup>2</sup>、R<sup>4</sup>和R<sup>5</sup>为H;或

-R<sup>6</sup>至R<sup>9</sup>为苯基。

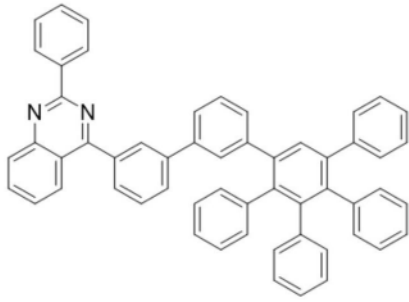
4. 根据上述权利要求中任一项所述的有机发光二极管,其中A选自可分别被取代或未被取代的亚苯基、亚萘基、亚联苯基和亚三联苯基。

5. 根据上述权利要求中任一项所述的有机发光二极管,其中X独立地选自可分别被取代或未被取代的哒嗪基、嘧啶基、吡嗪基、喹唑啉基、苯并喹唑啉基、苯并咪唑基、喹啉基、苯并吡啶基、二苯并吡啶基、菲咯啉基和二萘并咪喃基。

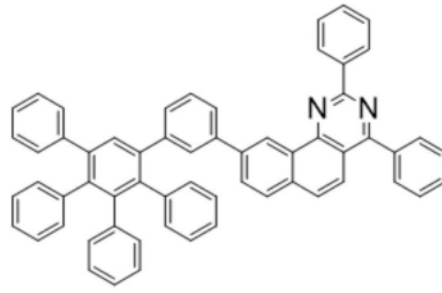
6. 根据上述权利要求中任一项所述的有机发光二极管,其中X独立地选自可分别被取代或未被取代的嘧啶基、吡嗪基、喹唑啉基、苯并喹唑啉基、苯并吡啶基、二苯并吡啶基。

7. 根据上述权利要求中任一项所述的有机发光二极管,其中所述式 (I) 化合物具有 $\geq -1.81\text{eV}$ 的LUMO能级,其中所述LUMO能级是在将真空能级作为零的绝对刻度中确定的,并且是通过TURBOMOLE V6.5程序包使用混合泛函B3LYP和Gaussian 6-31G\*基础设置计算的。

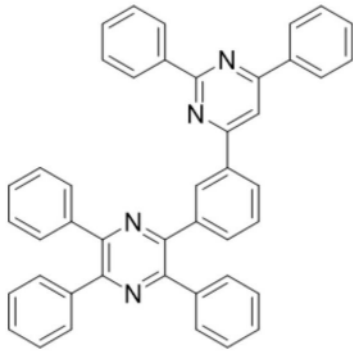
8. 根据上述权利要求中任一项所述的有机发光二极管,其中所述式 (I) 化合物选自A-1至A-14,



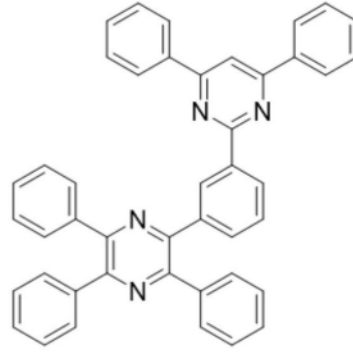
A-1



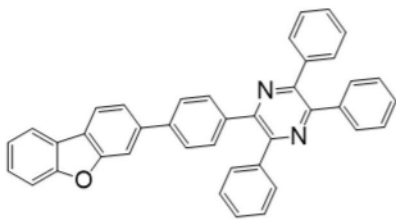
A-2



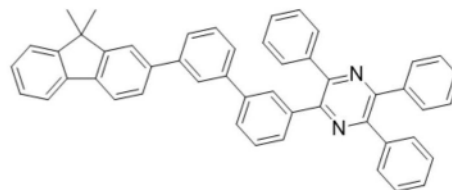
A-3



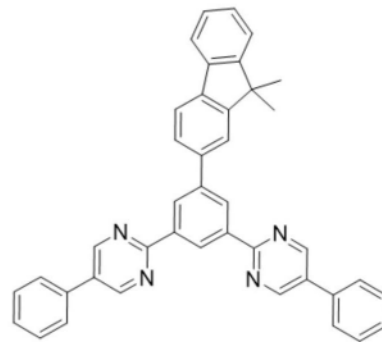
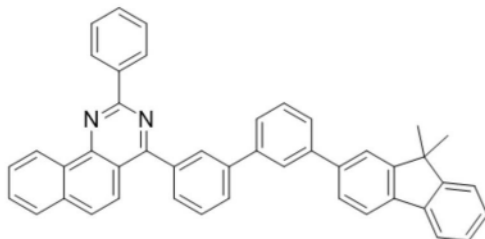
A-4



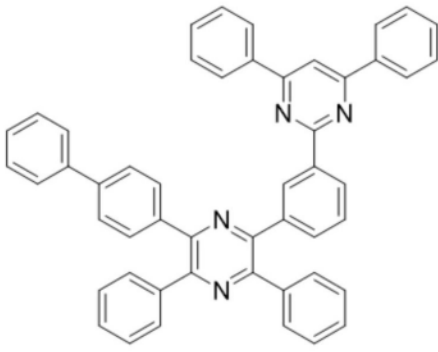
A-5



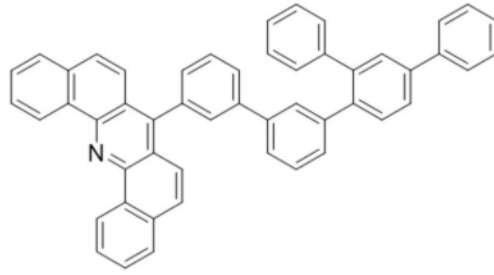
A-6



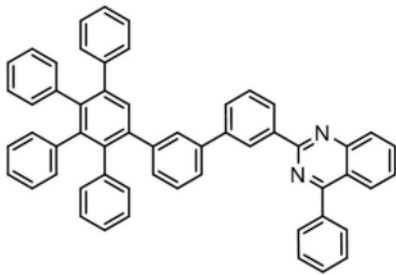
A-7



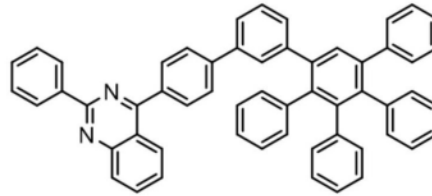
A-8



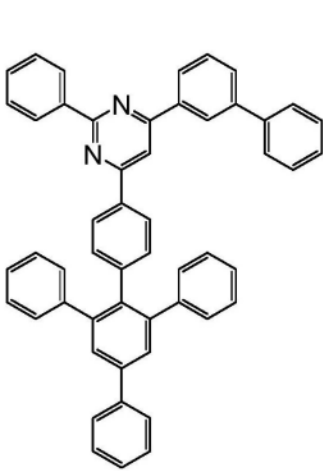
A-9



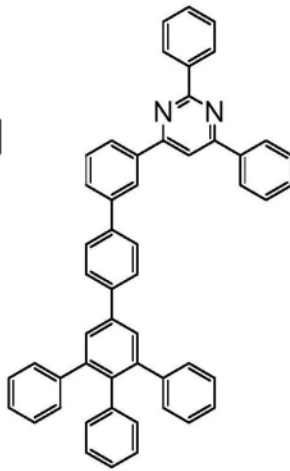
A-10



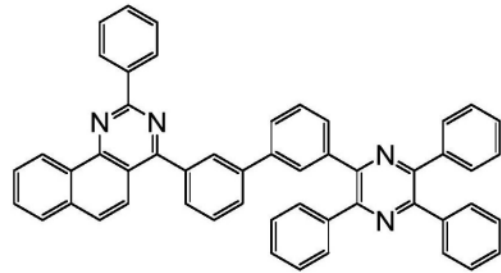
A-11



A-12

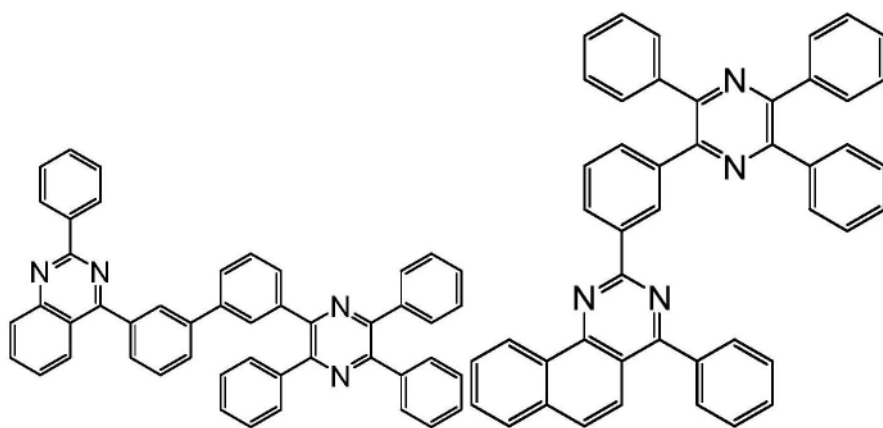


A-13



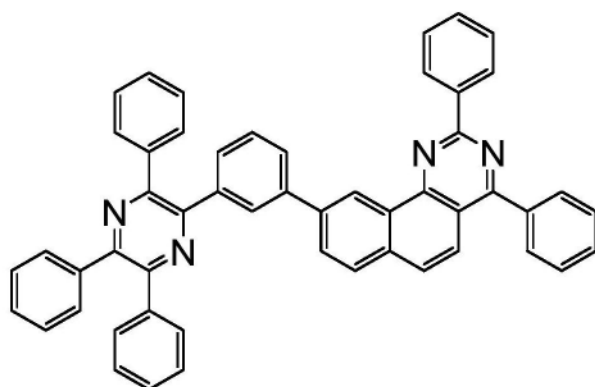
A14

A-15



A-16

A-17

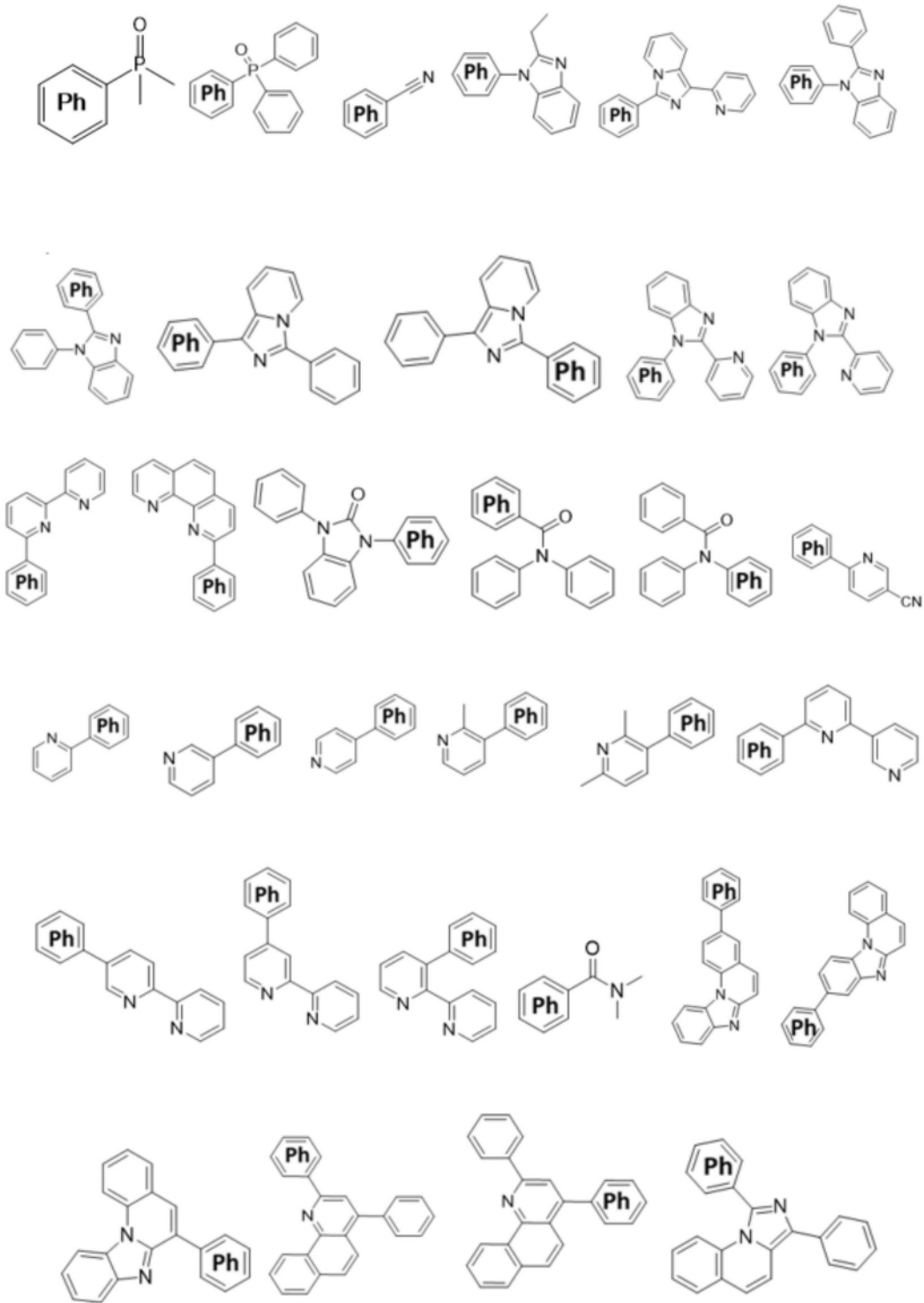


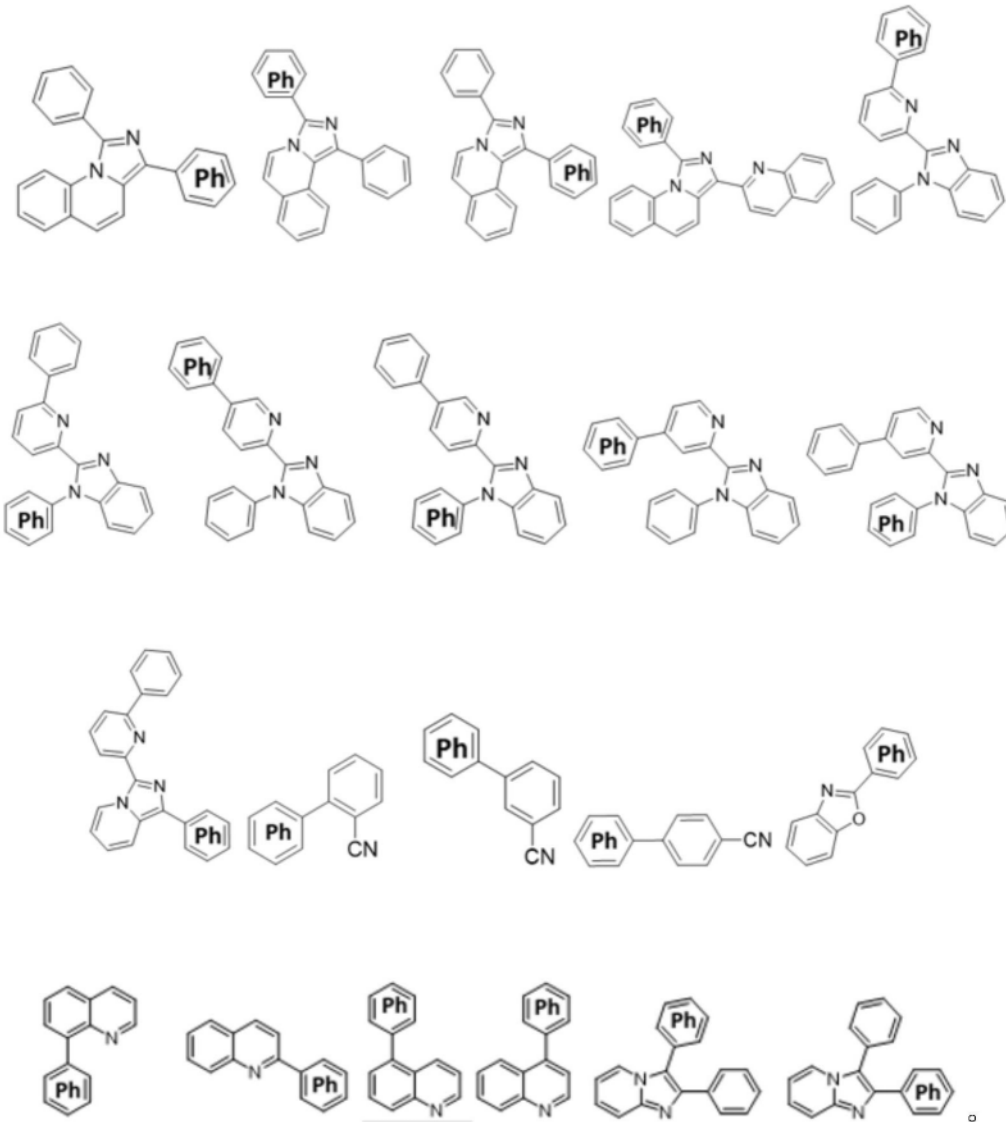
A-18。

9. 根据上述权利要求中任一项所述的有机发光二极管,其中 $Ar^2$ 独立地选自可分别被取代或未被取代的吡啶基、三嗪基、1,2-二嗪基、1,3-二嗪基、1,4-二嗪基、喹啉基、苯并喹啉基、苯并咪唑基、喹啉基、苯并喹啉基、苯并吡啶基、二苯并吡啶基、茚基、萘基、联三苯叉基、菲咯啉基和二萘并呋喃基。

10. 根据上述权利要求中任一项所述的有机发光二极管,其中G独立地选自:二甲基氧磷基、二苯基氧磷基、2-苯基-1H-苯并[d]咪唑基、2-乙基-1H-苯并[d]咪唑基、2-苯基苯并[h]喹啉基、吡啶基、2,2'-联吡啶基、5-苯基苯并[4,5]咪唑并[1,2-a]喹啉基、9-苯基-1,10-菲咯啉基和(吡啶-2-基)咪唑并[1,5-a]吡啶基。

11. 根据上述权利要求中任一项所述的有机发光二极管,其中以使得化合物G-苯基由如下结构之一表示的方式来选择G,



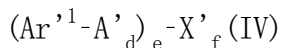


12. 根据上述权利要求中任一项所述的有机发光二极管,其中所述第二电子传输层还包含化合物(III),其中所述化合物(III)不同于式(II)化合物且包含8至13个芳族或杂芳族环。

13. 根据上述权利要求中任一项所述的有机发光二极管,其中所述第一电子传输层与所述第二电子传输层彼此直接接触。

14. 根据上述权利要求中任一项所述的有机发光二极管,其中所述第二电子传输层与所述电子注入层直接接触。

15. 一种下式(IV)的化合物,

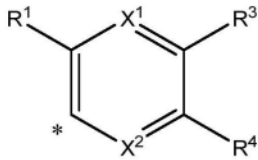


其中

-e和f独立地为1或2;

-d独立地为0或1;

-Ar'<sup>1</sup>独立地选自具有式(IVa)的基团和具有式(IVb)的基团,



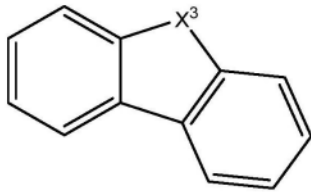
(IVa)

其中在 (IVa) 中,

-星号“\*”表示将式 (IVa) 的基团结合到A'的结合位置或在d=0的情况下结合到X的结合位置;

-X<sup>1</sup>和X<sup>2</sup>均为N;或X<sup>1</sup>为CR<sup>2</sup>且X<sup>2</sup>为CR<sup>5</sup>;并且

-R<sup>1</sup>和R<sup>5</sup>中的至少一个为苯基;和/或R<sup>1</sup>和R<sup>2</sup>均为苯基;和/或R<sup>2</sup>和R<sup>3</sup>均为苯基;和/或R<sup>3</sup>和R<sup>4</sup>均为苯基;和/或R<sup>4</sup>和R<sup>5</sup>均为苯基;



(IVb)

其中在 (IVb) 中,

-星号“\*”表示将式 (IVb) 的基团结合到A'的结合位置;并且

-X<sup>3</sup>选自C(CH<sub>3</sub>)<sub>2</sub>、O或S;

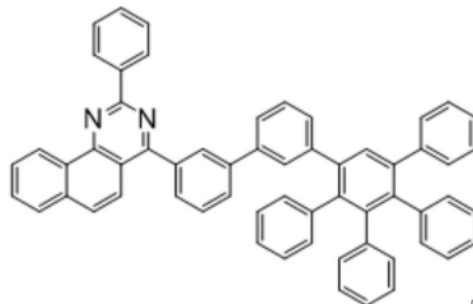
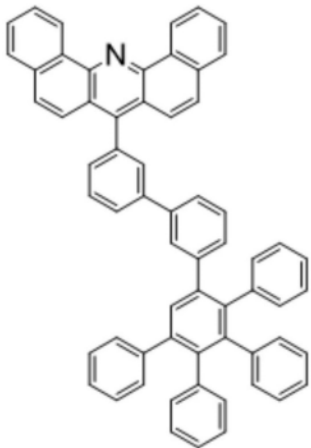
-其中每个Ar<sup>1</sup>可被一个或两个苯基,优选一个苯基取代;

-A'独立地选自亚苯基或亚联苯基;

-X'独立地选自嘧啶基、吡嗪基、喹唑啉基、苯并喹唑啉基、苯并吡啶基和二苯并吡啶基;

其中每个嘧啶基、吡嗪基、喹唑啉基和苯并喹唑啉基可独立地被一个或多个苯基取代,优选被一个或两个苯基取代;

其中如下化合物不包括在式 (IV) 中:



## 有机发光二极管和用于其中的化合物

[0001] 本发明涉及一种有机发光二极管和一种可用于所述有机发光二极管中的化合物。

[0002] 作为自发光器件的有机发光二极管 (OLED) 具有宽视角、优异的对对比度、快速响应、高亮度、优异的驱动电压特性和色彩再现。典型的 OLED 包含阳极、空穴传输层 (HTL)、发光层 (EML)、电子传输层 (ETL) 和阴极, 它们顺序层叠在衬底上。在这方面, HTL、EML 和 ETL 是由有机和/或有机金属化合物形成的薄膜。

[0003] 当将电压施加到阳极和阴极时, 从阳极电极注入的空穴通过 HTL 移动到 EML, 并且从阴极电极注入的电子通过 ETL 移动到 EML。空穴和电子在 EML 中重组以产生激子。当激子从激发态下降到基态时, 发光。空穴和电子的注入和流动应当平衡, 使得具有上述结构的 OLED 具有优异的效率。

[0004] 包含不同电子传输材料的多种有机电子二极管在本领域中是众所周知的。然而, 仍然需要改善此类器件的性能, 特别是改善单发光层顶部发光 OLED 的性能, 特别是在效率和电压方面进行改善。

[0005] 因此, 本发明的目的是提供一种克服现有技术的缺陷的有机发光二极管, 特别是具有改善的性能、特别是具有改善的效率、更特别是在保持良好的驱动电压和/或稳定的真空加工性的同时具有改善的效率的单发光层顶部发光 OLED。

### 发明内容

[0006] 所述目的通过包含不透明衬底、阳极、阴极、发光层、电子注入层和电子传输层叠层的有机发光二极管来实现; 其中

[0007] - 电子传输层叠层布置在发光层与电子注入层之间;

[0008] - 电子传输层叠层包含第一电子传输层和第二电子传输层;

[0009] - 第一电子传输层包含式 (I) 化合物,

[0010]  $(Ar^1-A_c)_a-X_b$  (I);

[0011] - a 和 b 独立地为 1 或 2;

[0012] - c 独立地为 0 或 1;

[0013] -  $Ar^1$  独立地选自  $C_6$  至  $C_{60}$  芳基或  $C_2$  至  $C_{42}$  杂芳基,

[0014] - 其中每个  $Ar^1$  可被独立地选自如下中的一个至三个取代基取代:  $C_6$  至  $C_{12}$  芳基、 $C_3$  至  $C_{11}$  杂芳基和  $C_1$  至  $C_6$  烷基、D、 $C_1$  至  $C_6$  烷氧基、 $C_3$  至  $C_6$  支化的烷基、 $C_3$  至  $C_6$  环状烷基、 $C_3$  至  $C_6$  支化的烷氧基、 $C_3$  至  $C_6$  环状烷氧基、部分或全氟化的  $C_1$  至  $C_6$  烷基、部分或全氟化的  $C_1$  至  $C_6$  烷氧基、部分或全氘化的  $C_1$  至  $C_6$  烷基、部分或全氘化的  $C_1$  至  $C_6$  烷氧基、卤素、CN 或  $PY(R^{10})_2$ , 其中 Y 选自 O、S 或 Se, 优选为 O, 并且  $R^{10}$  独立地选自  $C_6$  至  $C_{12}$  芳基、 $C_3$  至  $C_{12}$  杂芳基、 $C_1$  至  $C_6$  烷基、 $C_1$  至  $C_6$  烷氧基、部分或全氟化的  $C_1$  至  $C_6$  烷基、部分或全氟化的  $C_1$  至  $C_6$  烷氧基、部分或全氘化的  $C_1$  至  $C_6$  烷基、部分或全氘化的  $C_1$  至  $C_6$  烷氧基;

[0015] - 其中  $Ar^1$  上的每个  $C_6$  至  $C_{12}$  芳基取代基和  $Ar^1$  上的每个  $C_3$  至  $C_{11}$  杂芳基取代基可被  $C_1$  至  $C_4$  烷基或卤素取代;

[0016] - A 独立地选自  $C_6$  至  $C_{30}$  芳基,

[0017] -其中每个A可被独立地选自如下中的一个或两个取代基取代： $C_6$ 至 $C_{12}$ 芳基和 $C_1$ 至 $C_6$ 烷基、D、 $C_1$ 至 $C_6$ 烷氧基、 $C_3$ 至 $C_6$ 支化的烷基、 $C_3$ 至 $C_6$ 环状烷基、 $C_3$ 至 $C_6$ 支化的烷氧基、 $C_3$ 至 $C_6$ 环状烷氧基、部分或全氟化的 $C_1$ 至 $C_6$ 烷基、部分或全氟化的 $C_1$ 至 $C_6$ 烷氧基、部分或全氙化的 $C_1$ 至 $C_6$ 烷基、部分或全氙化的 $C_1$ 至 $C_6$ 烷氧基、卤素、CN或 $PY(R^{10})_2$ ，其中Y选自O、S或Se，优选为O，并且 $R^{10}$ 独立地选自 $C_6$ 至 $C_{12}$ 芳基、 $C_3$ 至 $C_{12}$ 杂芳基、 $C_1$ 至 $C_6$ 烷基、 $C_1$ 至 $C_6$ 烷氧基、部分或全氟化的 $C_1$ 至 $C_6$ 烷基、部分或全氟化的 $C_1$ 至 $C_6$ 烷氧基、部分或全氙化的 $C_1$ 至 $C_6$ 烷基、部分或全氙化的 $C_1$ 至 $C_6$ 烷氧基；

[0018] -其中A上的每个 $C_6$ 至 $C_{12}$ 芳基取代基可被 $C_1$ 至 $C_4$ 烷基或卤素取代；

[0019] -X独立地选自 $C_2$ 至 $C_{42}$ 杂芳基，

[0020] -其中每个X可被独立地选自如下中的一个或两个取代基取代： $C_6$ 至 $C_{12}$ 芳基、 $C_3$ 至 $C_{11}$ 杂芳基和 $C_1$ 至 $C_6$ 烷基、D、 $C_1$ 至 $C_6$ 烷氧基、 $C_3$ 至 $C_6$ 支化的烷基、 $C_3$ 至 $C_6$ 环状烷基、 $C_3$ 至 $C_6$ 支化的烷氧基、 $C_3$ 至 $C_6$ 环状烷氧基、部分或全氟化的 $C_1$ 至 $C_6$ 烷基、部分或全氟化的 $C_1$ 至 $C_6$ 烷氧基、部分或全氙化的 $C_1$ 至 $C_6$ 烷基、部分或全氙化的 $C_1$ 至 $C_6$ 烷氧基、卤素、CN或 $PY(R^{10})_2$ ，其中Y选自O、S或Se，优选为O，并且 $R^{10}$ 独立地选自 $C_6$ 至 $C_{12}$ 芳基、 $C_3$ 至 $C_{12}$ 杂芳基、 $C_1$ 至 $C_6$ 烷基、 $C_1$ 至 $C_6$ 烷氧基、部分或全氟化的 $C_1$ 至 $C_6$ 烷基、部分或全氟化的 $C_1$ 至 $C_6$ 烷氧基、部分或全氙化的 $C_1$ 至 $C_6$ 烷基、部分或全氙化的 $C_1$ 至 $C_6$ 烷氧基；

[0021] -其中X上的每个 $C_6$ 至 $C_{12}$ 芳基取代基和X上的每个 $C_3$ 至 $C_{11}$ 杂芳基取代基可被 $C_1$ 至 $C_4$ 烷基或卤素取代；

[0022] -式(I)化合物的分子偶极矩 $\geq 0D$ 且 $\leq 4D$ ；

[0023] -第二电子传输层包含式(II)化合物，

[0024]  $(Ar^2)_m - (Z_k - G)_n$  (II)；

[0025] -m和n独立地为1或2；

[0026] -k独立地为0、1或2；

[0027] - $Ar^2$ 独立地选自 $C_2$ 至 $C_{42}$ 杂芳基和 $C_6$ 至 $C_{60}$ 芳基，

[0028] -其中每个 $Ar^2$ 可被独立地选自如下中的一个或两个取代基取代： $C_6$ 至 $C_{12}$ 芳基、 $C_3$ 至 $C_{11}$ 杂芳基和 $C_1$ 至 $C_6$ 烷基、D、 $C_1$ 至 $C_6$ 烷氧基、 $C_3$ 至 $C_6$ 支化的烷基、 $C_3$ 至 $C_6$ 环状烷基、 $C_3$ 至 $C_6$ 支化的烷氧基、 $C_3$ 至 $C_6$ 环状烷氧基、部分或全氟化的 $C_1$ 至 $C_6$ 烷基、部分或全氟化的 $C_1$ 至 $C_6$ 烷氧基、部分或全氙化的 $C_1$ 至 $C_6$ 烷基、部分或全氙化的 $C_1$ 至 $C_6$ 烷氧基、卤素、CN或 $PY(R^{10})_2$ ，其中Y选自O、S或Se，优选为O，并且 $R^{10}$ 独立地选自 $C_6$ 至 $C_{12}$ 芳基、 $C_3$ 至 $C_{12}$ 杂芳基、 $C_1$ 至 $C_6$ 烷基、 $C_1$ 至 $C_6$ 烷氧基、部分或全氟化的 $C_1$ 至 $C_6$ 烷基、部分或全氟化的 $C_1$ 至 $C_6$ 烷氧基、部分或全氙化的 $C_1$ 至 $C_6$ 烷基、部分或全氙化的 $C_1$ 至 $C_6$ 烷氧基；

[0029] -其中 $Ar^2$ 上的每个 $C_6$ 至 $C_{12}$ 芳基取代基和 $Ar^2$ 上的每个 $C_3$ 至 $C_{11}$ 杂芳基取代基可被 $C_1$ 至 $C_4$ 烷基或卤素取代；

[0030] -Z独立地选自 $C_6$ 至 $C_{30}$ 芳基，

[0031] -其中每个Z可被独立地选自如下中的一个或两个取代基取代： $C_6$ 至 $C_{12}$ 芳基和 $C_1$ 至 $C_6$ 烷基、D、 $C_1$ 至 $C_6$ 烷氧基、 $C_3$ 至 $C_6$ 支化的烷基、 $C_3$ 至 $C_6$ 环状烷基、 $C_3$ 至 $C_6$ 支化的烷氧基、 $C_3$ 至 $C_6$ 环状烷氧基、部分或全氟化的 $C_1$ 至 $C_6$ 烷基、部分或全氟化的 $C_1$ 至 $C_6$ 烷氧基、部分或全氙化的 $C_1$ 至 $C_6$ 烷基、部分或全氙化的 $C_1$ 至 $C_6$ 烷氧基、卤素、CN或 $PY(R^{10})_2$ ，其中Y选自O、S或Se，优选为O，并且 $R^{10}$ 独立地选自 $C_6$ 至 $C_{12}$ 芳基、 $C_3$ 至 $C_{12}$ 杂芳基、 $C_1$ 至 $C_6$ 烷基、 $C_1$ 至 $C_6$ 烷氧基、部分或全氟化的 $C_1$

至C<sub>6</sub>烷基、部分或全氟化的C<sub>1</sub>至C<sub>6</sub>烷氧基、部分或全氟化的C<sub>1</sub>至C<sub>6</sub>烷基、部分或全氟化的C<sub>1</sub>至C<sub>6</sub>烷氧基；

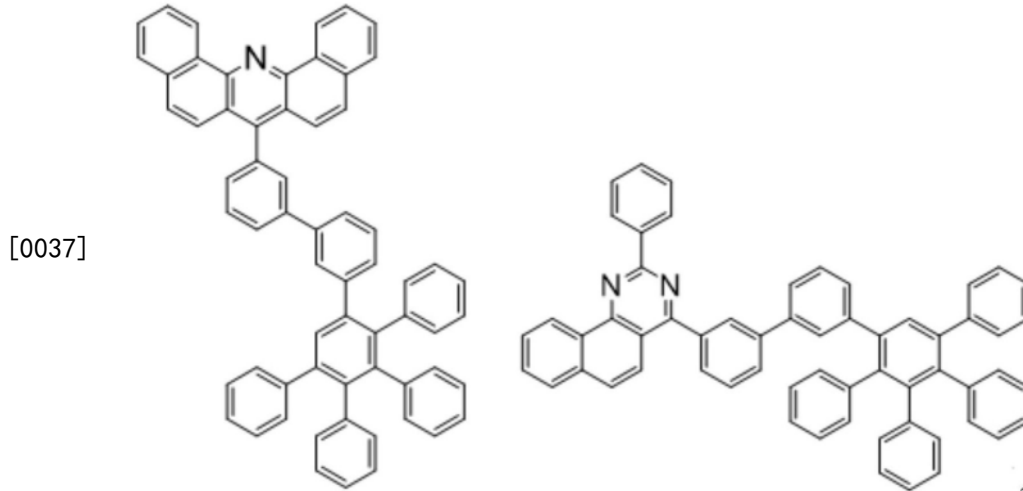
[0032] -其中Z上的每个C<sub>6</sub>至C<sub>12</sub>芳基取代基可被C<sub>1</sub>至C<sub>4</sub>烷基或卤素取代；

[0033] -G选择为使化合物G-苯基的偶极矩≥1D且≤7D；

[0034] -第一电子传输层和第二电子传输层不含电掺杂剂；并且

[0035] -式(I)化合物不含1,3,5-三嗪；

[0036] 其中如下化合物不包括在式(I)中：



[0038] 所述目的还通过下式(IV)的化合物来实现，

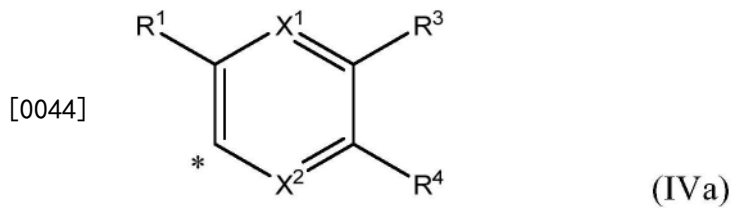
[0039]  $(Ar'^1 - A'_d)_e - X'_f$  (IV)

[0040] 其中

[0041] -e和f独立地为1或2；

[0042] -d独立地为0或1；

[0043] -Ar'<sup>1</sup>独立地选自具有式(IVa)的基团和具有式(IVb)的基团，

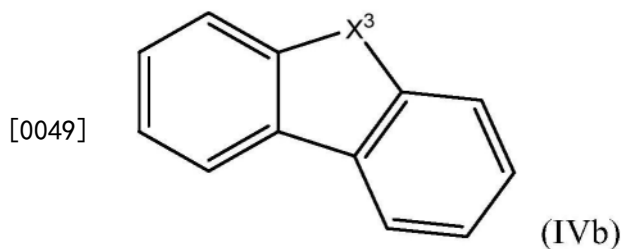


[0045] 其中在(IVa)中，

[0046] -星号“\*”表示用于将式(IVa)的基团结合到A'的结合位置；

[0047] -X<sup>1</sup>和X<sup>2</sup>均为N；或X<sup>1</sup>为CR<sup>2</sup>并且X<sup>2</sup>为CR<sup>5</sup>；并且

[0048] -R<sup>1</sup>和R<sup>5</sup>中的至少一个为苯基；和/或R<sup>1</sup>和R<sup>2</sup>均为苯基；和/或R<sup>2</sup>和R<sup>3</sup>均为苯基；和/或R<sup>3</sup>和R<sup>4</sup>均为苯基；和/或R<sup>4</sup>和R<sup>5</sup>均为苯基；



[0050] 其中在 (IVb) 中,

[0051] -星号“\*”表示用于将式 (IVb) 的基团结合到A’的结合位置;并且

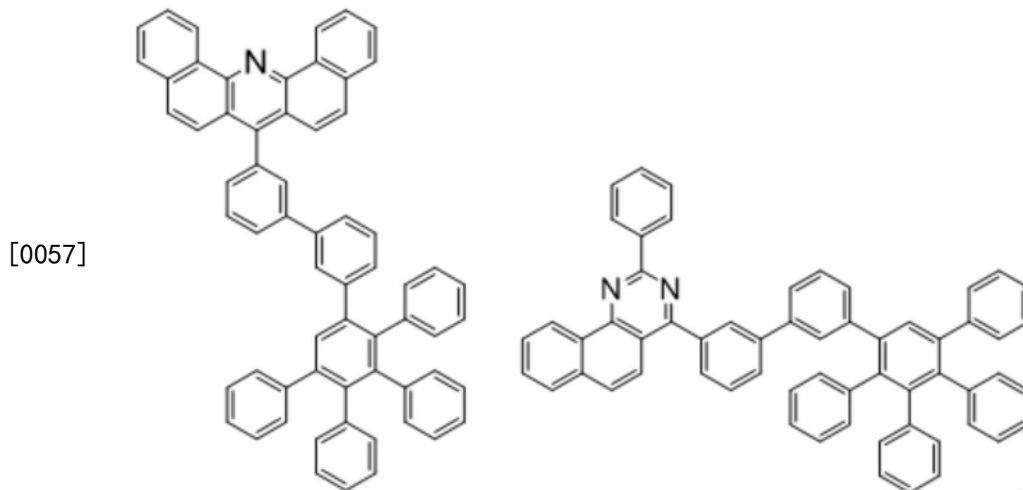
[0052] -X<sup>3</sup>选自C(CH<sub>3</sub>)<sub>2</sub>、O或S;

[0053] -A’独立地选自亚苯基或亚联苯基;

[0054] -X’独立地选自嘧啶基、吡嗪基、喹唑啉基、苯并喹唑啉基、苯并吡啶基和二苯并吡啶基;

[0055] 其中每个嘧啶基、吡嗪基、喹唑啉基和苯并喹唑啉基可独立地被一个或多个苯基、优选一个或两个苯基取代;

[0056] 其中如下化合物不包括在式 (IV) 中:



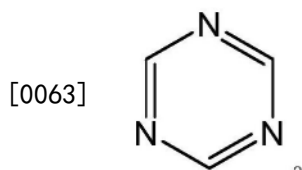
[0058] 最后,通过包含本发明的有机发光二极管和/或化合物的装置来实现该目的,其中所述器件是显示装置或照明装置。

[0059] 第一电子传输层

[0060] 第一电子传输层包含式 (I) 化合物,

[0061]  $(Ar^1-A_c)_a-X_b$  (I)。

[0062] 本发明的一个基本特征是式 (I) 化合物不含1,3,5-三嗪。这意味着,式 (I) 化合物不含(既不在化合物的末端,也不作为其中心部分)具有如下结构的结构部分,



[0064] 第一电子传输层可由式 (I) 化合物构成。或者,第一电子传输层可由式 (I) 化合物和一种或多种其它化合物的混合物构成,前提是其它化合物都不是电掺杂剂。第一电子传输层可包含多于一种的式 (I) 化合物。特别地,第一电子传输层可由式 (I) 化合物和本领域中已知为电子传输基质化合物的其它化合物的混合物构成。下面公开了可包含的示例性其它电子传输基质化合物。

[0065] 在式 (I) 化合物中,基团“A”是连接(如果存在,即在c>1的情况下)基团Ar<sup>1</sup>和X的间隔基部分。在式 (I) 化合物包含多于一个的基团(Ar<sup>1</sup>-A<sub>c</sub>)的情况下,该基团可或可不独立地包含间隔基A。

[0066] 在式(I)化合物中,a和b独立地为1或2。或者,a和b都可以是1。

[0067] 在式(I)化合物中,c独立地为0或1。

[0068]  $Ar^1$ 独立地选自 $C_6$ 至 $C_{60}$ 芳基或 $C_2$ 至 $C_{42}$ 杂芳基(其中不包括1,3,5-三嗪)、或者 $C_6$ 至 $C_{54}$ 芳基或 $C_2$ 至 $C_{39}$ 杂芳基(其中不包括1,3,5-三嗪)、或者 $C_6$ 至 $C_{48}$ 芳基或 $C_2$ 至 $C_{36}$ 杂芳基(其中不包括1,3,5-三嗪)、或者 $C_6$ 至 $C_{42}$ 芳基或 $C_2$ 至 $C_{36}$ 杂芳基(其中不包括1,3,5-三嗪)、或者 $C_6$ 至 $C_{36}$ 芳基或 $C_2$ 至 $C_{30}$ 杂芳基(其中不包括1,3,5-三嗪)、或者 $C_6$ 至 $C_{30}$ 芳基或 $C_2$ 至 $C_{24}$ 杂芳基(其中不包括1,3,5-三嗪)。

[0069]  $Ar^1$ 可独立地为 $C_6$ 至 $C_{54}$ 芳基,任选地为 $C_6$ 至 $C_{48}$ 芳基,任选地为 $C_6$ 至 $C_{42}$ 芳基,任选地为 $C_6$ 至 $C_{36}$ 芳基,任选地为 $C_6$ 至 $C_{30}$ 芳基并且任选地为 $C_6$ 至 $C_{24}$ 芳基。

[0070]  $Ar^1$ 可独立地为 $C_2$ 至 $C_{42}$ 杂芳基(其中不包括1,3,5-三嗪),任选地为 $C_2$ 至 $C_{40}$ 杂芳基(其中不包括1,3,5-三嗪),任选地为 $C_2$ 至 $C_{36}$ 杂芳基地为(其中不包括1,3,5-三嗪),任选地为 $C_2$ 至 $C_{30}$ 杂芳基(其中不包括1,3,5-三嗪),并且任选地为 $C_2$ 至 $C_{24}$ 杂芳基(其中不包括1,3,5-三嗪)。

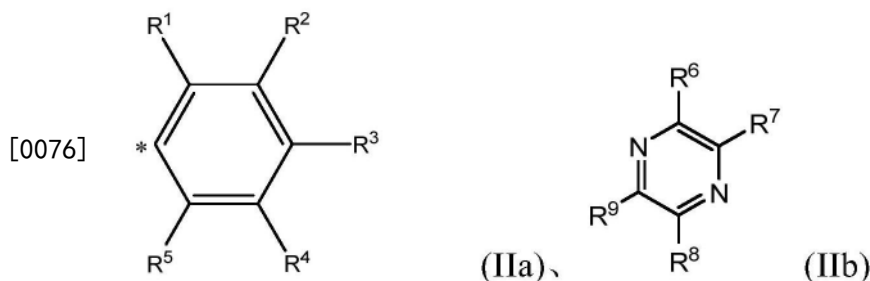
[0071] 在一个实施方案中, $Ar^1$ 不同于X。

[0072]  $Ar^1$ 可包含两个以上稠合芳族环、优选三个以上稠合芳族环的体系。

[0073]  $Ar^1$ 可包含至少一个 $sp^3$ -杂化碳原子。

[0074]  $Ar^1$ 可包含未集成到芳族环结构中的至少一个碳-碳 $sp^2$ 烯烃键。在 $Ar^1$ 独立地选自未取代的 $C_2$ 至 $C_{42}$ 杂芳基的实施方案中,杂原子可通过单键结合到 $Ar^1$ 的分子结构中。

[0075]  $Ar^1$ 可独立地选自苯基、萘基、蒽基、荧蒽基、咕吨基、二苯并呋喃基、二苯并噻吩基、嘧啶基、吡嗪基、螺-咕吨基、茚基、螺茚基、三苯基甲硅烷基、四苯基甲硅烷基、具有式(IIa)的基团和具有式(IIb)的基团,



[0077] 其中

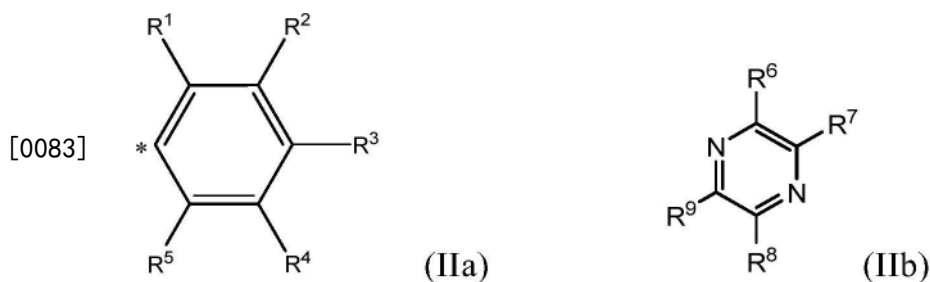
[0078] -星号“\*”表示将式(IIa)的基团结合到A的结合位置;并且

[0079] - $R^1$ 至 $R^9$ 独立地选自H、 $C_6$ 至 $C_{12}$ 芳基和 $C_4$ 至 $C_{10}$ 杂芳基。

[0080] 在式(IIb)的基团中, $R^6$ 和 $R^7$ 均可为苯基;和/或 $R^8$ 和 $R^9$ 两者可都是苯基。

[0081] 如果 $Ar^1$ 是具有式(IIb)的基团,则将具有式(IIb)的基团结合到A(或如果在 $c=0$ 的情况下A不存在)至X可经由基团 $R^6$ 至 $R^9$ 中的任一基团来实现,其中(形式上)A(分别为X)置换相应 $R^6$ 至 $R^9$ 的末端氢原子。

[0082]  $Ar^1$ 可独立地选自:荧蒽基、二苯并呋喃基、嘧啶基、吡嗪基、9,9-二甲基茚基、具有式(IIa)的基团、具有式(IIb)的基团,



[0084] 其中

[0085] -星号“\*”表示将式(IIa)的基团结合到A的结合位置;并且

[0086] -R<sup>1</sup>为H,并且R<sup>2</sup>至R<sup>5</sup>独立地为苯基;或

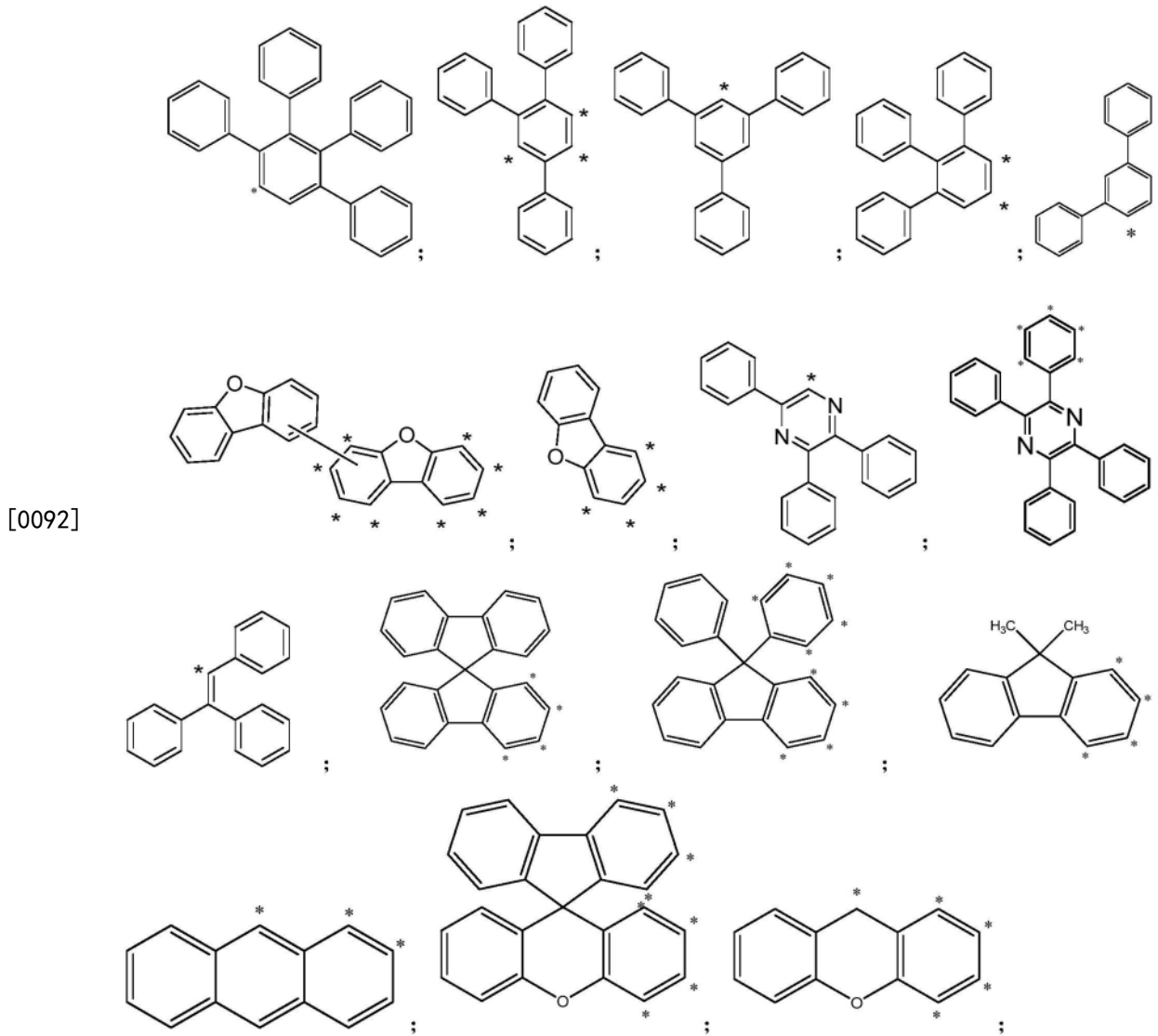
[0087] -R<sup>1</sup>和R<sup>3</sup>为苯基,并且R<sup>2</sup>、R<sup>4</sup>和R<sup>5</sup>为H;或

[0088] -R<sup>6</sup>至R<sup>9</sup>为苯基。

[0089] 如果Ar<sup>1</sup>是具有式(IIb)的基团,则将具有式(IIb)的基团结合到A(或如果在c=0的情况下A不存在)至X可经由基团R<sup>6</sup>至R<sup>9</sup>中的任一基团来实现,其中(形式上)A(分别为X)置换相应R<sup>6</sup>至R<sup>9</sup>的末端氢原子。

[0090] 在式(IIa)的基团中,R<sup>1</sup>至R<sup>5</sup>中不是H的至少两个可彼此处于邻位。R<sup>1</sup>至R<sup>5</sup>中不是H的至少一个可处于\*位置的邻位。在这方面,如果两个基团分别结合到式(IIa)中的苯环的相邻碳原子,则所述两个基团彼此处于邻位。换言之,R<sup>1</sup>和R<sup>5</sup>中的至少一个可以是苯基;和/或R<sup>1</sup>和R<sup>2</sup>均可为苯基;和/或R<sup>2</sup>和R<sup>3</sup>均可为苯基;和/或R<sup>3</sup>和R<sup>4</sup>均可为苯基;和/或R<sup>4</sup>和R<sup>5</sup>均可为苯基。

[0091] Ar<sup>1</sup>可独立地选自一个如下基团,

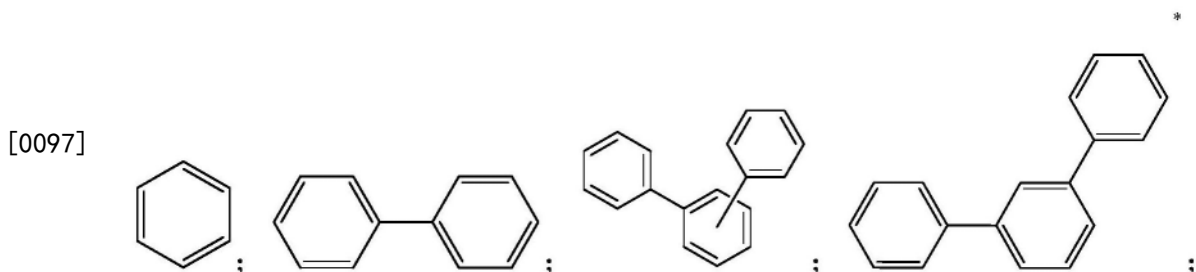


[0093] 其中星号“\*”分别表示用于结合到A的结合位置,并且可分别被取代或未被取代。

[0094] 在Ar<sup>1</sup>被取代的情况下,每个取代基可独立地选自:苯基、萘基、联苯基、吡啶基、甲代吡啶基、二苯并呋喃基、二苯并噻吩基和苯并噻吩基。

[0095] A可独立地选自可分别被取代或未被取代的如下基团:亚苯基、亚萘基、亚联苯基和亚三联苯基。

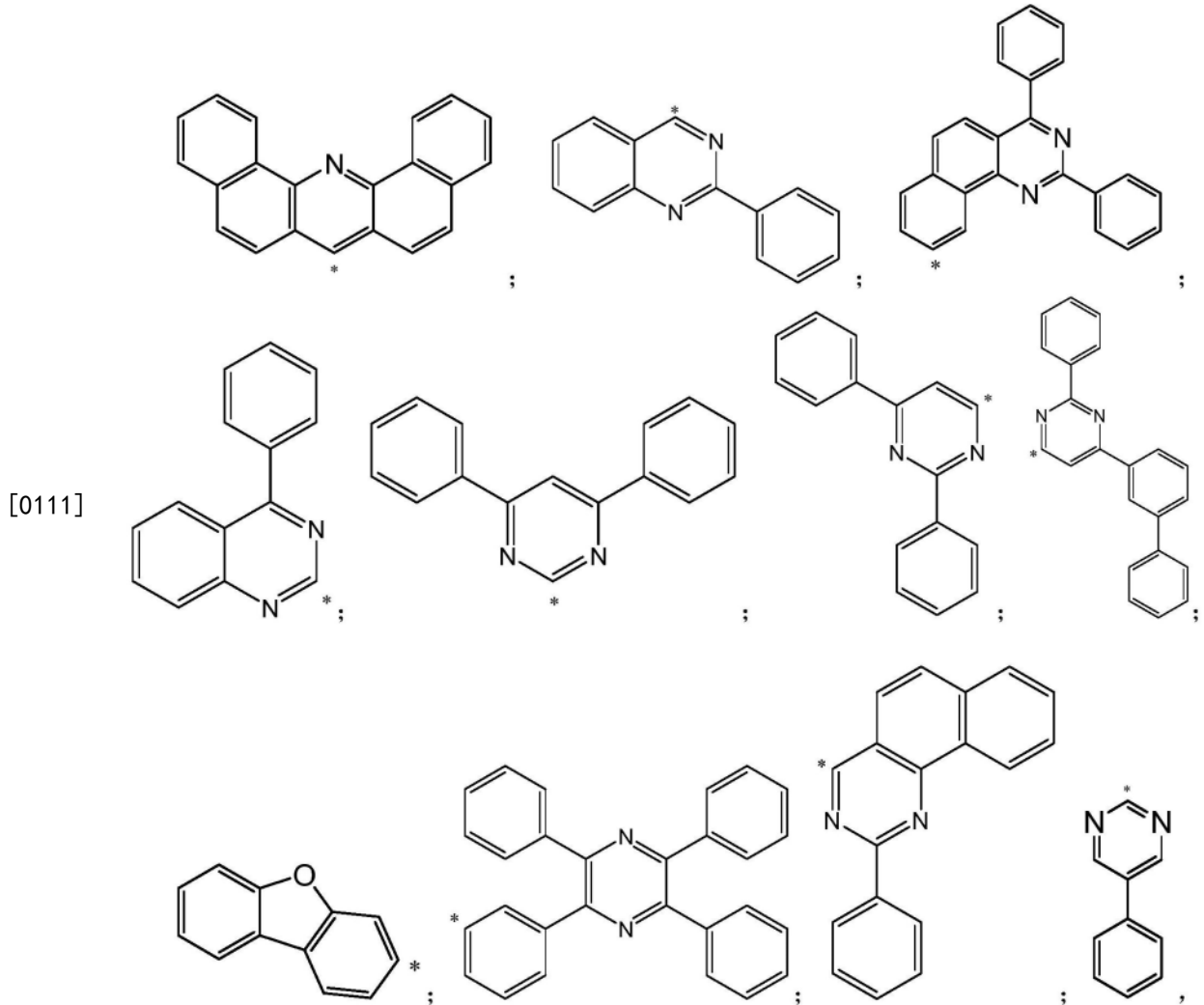
[0096] A可独立地选自一个如下基团或其组合,



[0098] 其中用于结合到Ar<sup>1</sup>和X的结合位置可自由选择,优选地



[0110] X可独立地选自一个如下基团，

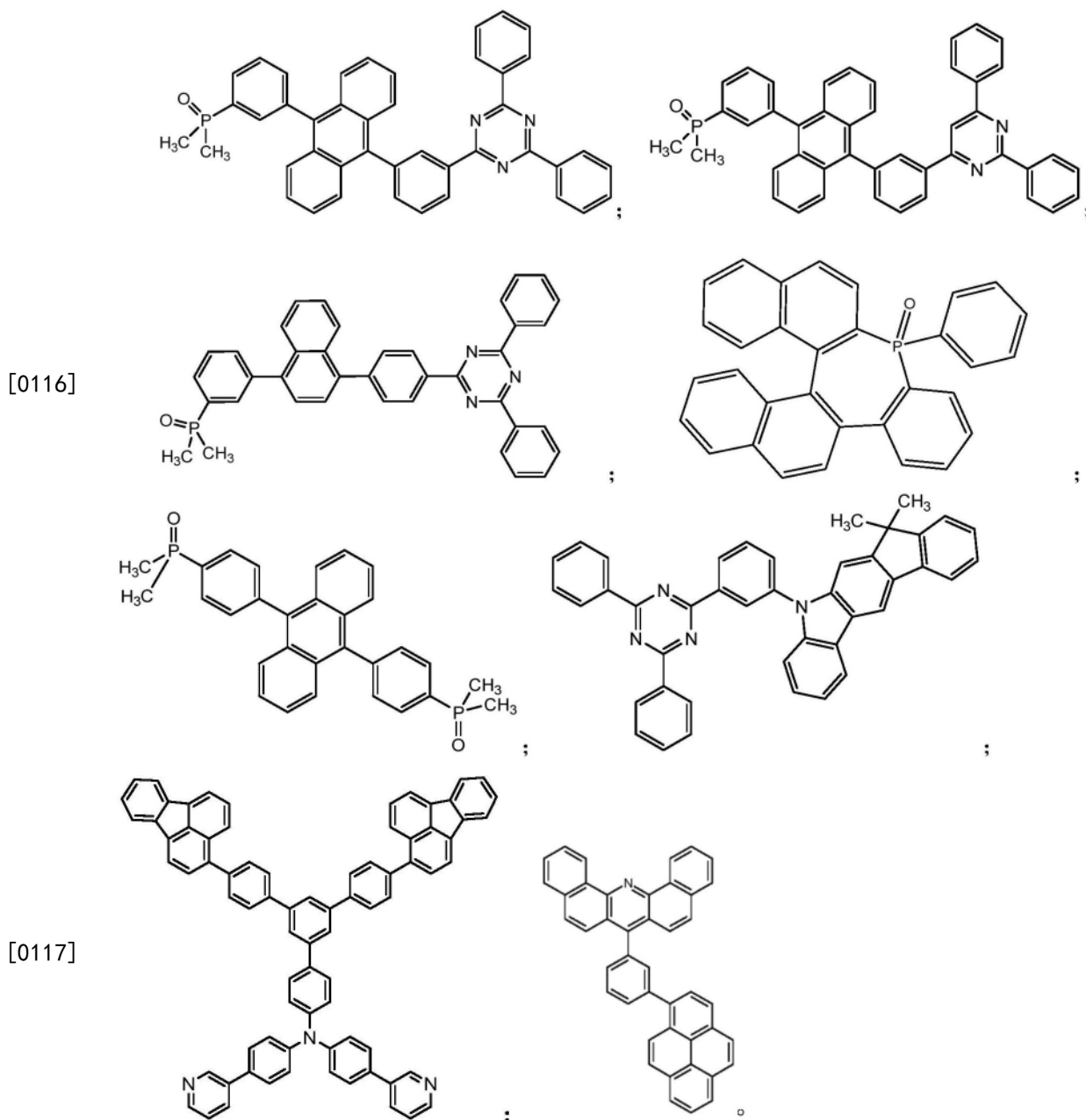


[0112] 其中星号“\*”表示结合到A和在c=0的情况下结合到Ar<sup>1</sup>的结合位置。

[0113] 式(I)化合物可不包括P=O部分。式(I)化合物可不含P(=O)芳基<sub>2</sub>。式(I)化合物可不含P(=O)烷基<sub>2</sub>。可规定,式(I)化合物可不含P(=O)Ph<sub>2</sub>。式(I)化合物可不含P(=O)(CH<sub>3</sub>)<sub>2</sub>。式(I)化合物可不含R'P(=O)R",其中R'和R"相互连接以形成环,即不含环氧化膦。式(I)化合物可不含R'P(=O)R",其中R'和R"相互连接以形成7元环。

[0114] 式(I)化合物可不含两个P=O部分。式(I)化合物可不含两个P(=O)芳基<sub>2</sub>。式(I)化合物可不含两个P(=O)烷基<sub>2</sub>。式(I)化合物可不含两个P(=O)Ph<sub>2</sub>。式(I)化合物可不含两个P(=O)(CH<sub>3</sub>)<sub>2</sub>。式(I)化合物可不含CN。

[0115] 下式中的一种或多种可不包括在式(I)化合物的范围内,



[0118] 式(I)化合物可包含6至14个芳族或杂芳族环、任选地7至13个芳族或杂芳族环、任选地8至12个芳族或杂芳族环。在这点上,芳族环、相应地杂芳族环是单个芳族环,例如:6元芳族环如苯基;6元杂芳族环,实例是吡啶基;5元杂芳族环,实例是吡咯基等。在缩合(杂)芳族环系中,每个环在这点上被认为是一个单环。例如,萘包含两个芳族环。

[0119] 式(I)化合物可具有 $\geq -1.81\text{eV}$ 的LUMO能级,其中所述LUMO能级是在将真空能级作为零的绝对刻度中确定的,并且是通过TURBOMOLE V6.5程序包使用混合泛函B3LYP和Gaussian 6-31G\*基础设置计算的。

[0120] 式(I)化合物可具有 $\geq -1.81\text{eV}$ 且 $\leq -1.47\text{eV}$ 的LUMO能级,其中所述LUMO能级是在将真空能级作为零的绝对刻度中确定的,并且是通过TURBOMOLE V6.5程序包使用混合泛函B3LYP和Gaussian6-31G\*基础设置计算的。

[0121] 式(I)化合物的分子偶极矩可 $\geq 0\text{D}$ 且 $\leq 4\text{D}$ ;或者 $\geq 0.2\text{D}$ 且 $\leq 3.5\text{D}$ ;或者 $\geq 0.4\text{D}$ 且 $\leq 3.2\text{D}$ ;或者 $\geq 0.8\text{D}$ 且 $\leq 3.1\text{D}$ ,所述偶极矩通过TURBOMOLE V6.5程序包使用混合泛函B3LYP和

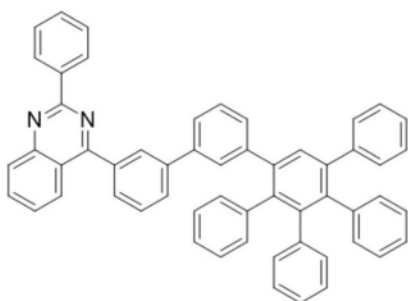
Gaussian 6-31G\*基础设置来计算。在这方面,含有N原子的分子的偶极矩 $|\vec{\mu}|$ 由下式给出:

$$[0122] \quad \vec{\mu} = \sum_i^N q_i \vec{r}_i$$

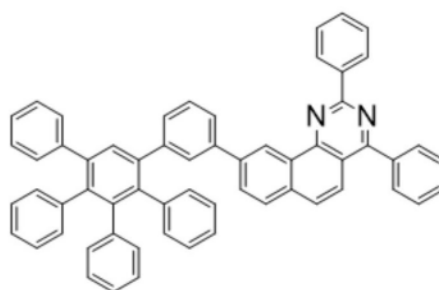
$$[0123] \quad |\vec{\mu}| = \sqrt{\mu_x^2 + \mu_y^2 + \mu_z^2}$$

[0124] 其中 $q_i$ 和 $\vec{r}_i$ 是分子中的原子i的部分电荷和位置。偶极矩由半经验分子轨道法来确定。如程序包TURBOMOLE V6.5 (TURBOMOLE GmbH, Litzenhardtstrasse 19, 76135 Karlsruhe, Germany)中所实现的在气相中使用具有6-31G\*基础设置的混合泛函B3LYP对分子结构的几何形状进行优化。如果超过一种的构象是可行的,则选择具有最低总能量的构象以确定分子的键长。

[0125] 式(I)化合物可选自化合物A-1至A-18,

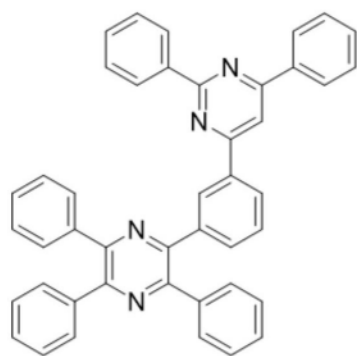


A-1

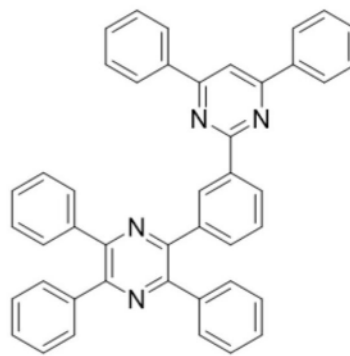


A-2

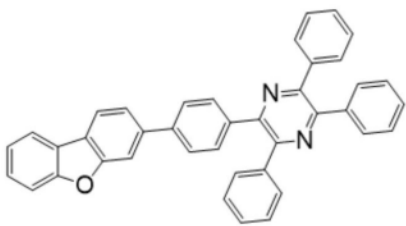
[0126]



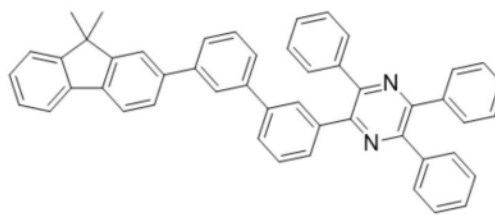
A-3



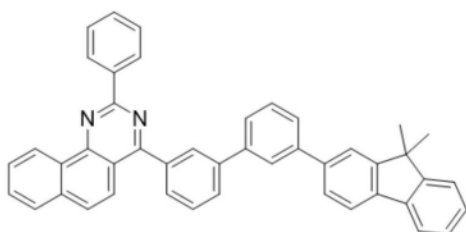
A-4



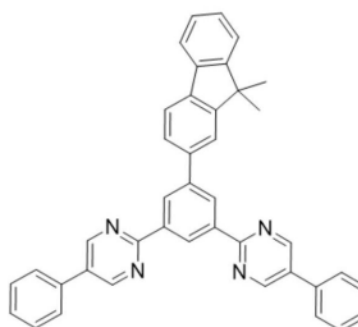
A-5



A-6

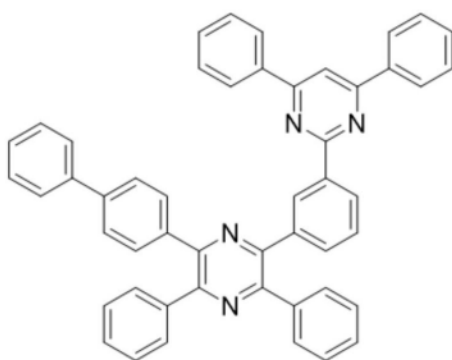


A-7

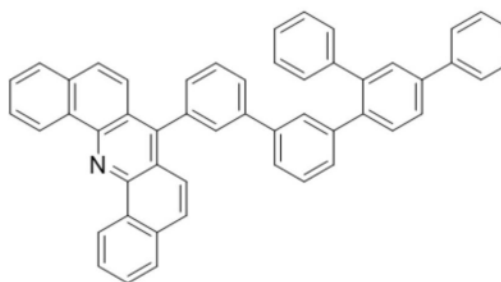


A-8

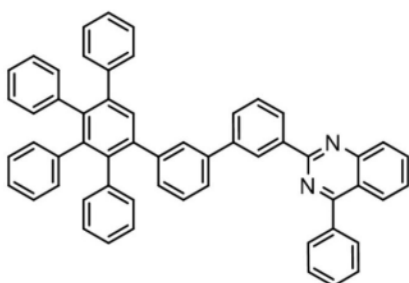
[0127]



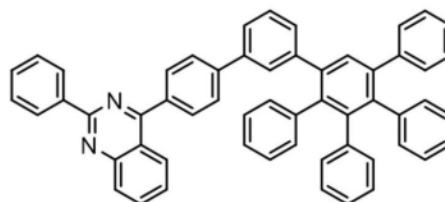
A-9



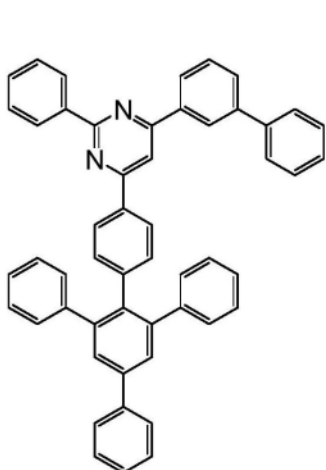
A-10



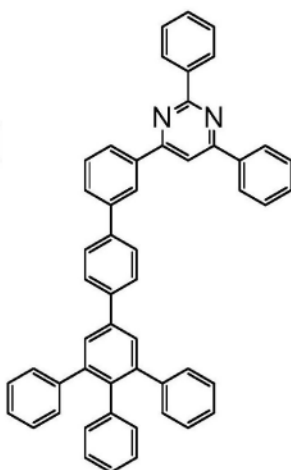
A-11



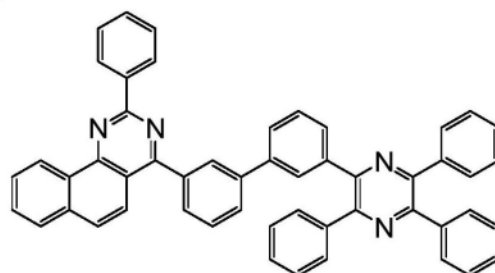
A-12



A-13

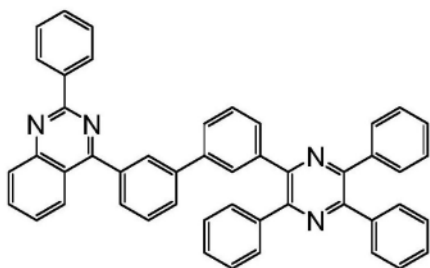


A-14

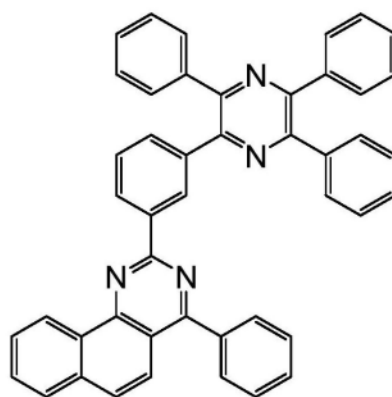


A-15

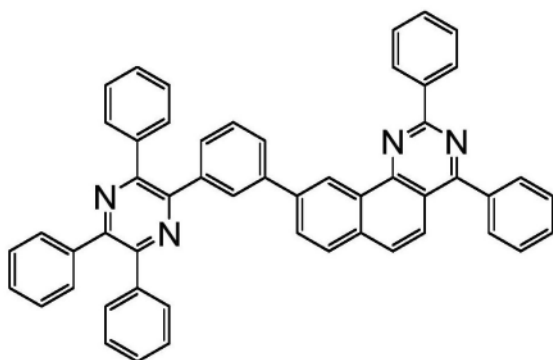
[0128]



A-16



A-17



A-18.

[0129] 式(I)化合物可选自A-1至A-4、A-7、A-9、A-11至A-18。

[0130] 第一电子传输层可布置在发光层与第二电子传输层之间。第一电子传输层可布置为与发光层直接接触。第一电子传输层可布置为“接触式夹在”发光层与第二电子传输层之间。

[0131] 第一电子传输层可具有<50nm、任选地1~30nm、任选地1~10nm、任选地1~5nm的厚度。

[0132] 第二电子传输层

[0133] 第二电子传输层包含式 (II) 化合物,

[0134]  $(Ar^2)_m - (Z_k - G)_n$  (II)。

[0135] 第二电子传输层可由式 (II) 化合物构成。或者,第二电子传输层可由式 (II) 化合物和一种或多种其它化合物的混合物构成,前提是其它化合物都不是电掺杂剂。第一电子传输层可包含超过一种的式 (II) 化合物。第二电子传输层可由式 (II) 化合物和本领域中已知为电子传输基质化合物的其它化合物的混合物构成。下文中公开了可包含的示例性其它电子传输基质化合物。

[0136] 在式 (II) 化合物中,基团“Z”是连接(如果存在,即在 $k > 1$ 的情况下)基团 $Ar^2$ 和G的间隔基部分。在式 (II) 化合物包含超过一个的基团 $(Z_k - G)$ 的情况下,所述基团可或可不独立地包含间隔基Z。

[0137] 在式 (II) 中,m和n独立地为1或2。在式 (II) 中,m和n可以是1。

[0138] 在式 (II) 中,k独立地为0、1或2。在式 (II) 中,k可独立地为1或2。

[0139]  $Ar^2$ 可独立地选自 $C_2$ 至 $C_{39}$ 杂芳基和 $C_6$ 至 $C_{54}$ 芳基、任选地 $C_2$ 至 $C_{36}$ 杂芳基和 $C_6$ 至 $C_{48}$ 芳基、任选地 $C_3$ 至 $C_{30}$ 杂芳基和 $C_6$ 至 $C_{42}$ 芳基、任选地 $C_3$ 至 $C_{27}$ 杂芳基和 $C_6$ 至 $C_{36}$ 芳基、任选地 $C_3$ 至 $C_{24}$ 杂芳基和 $C_6$ 至 $C_{30}$ 芳基和任选地 $C_3$ 至 $C_{21}$ 杂芳基和 $C_6$ 至 $C_{24}$ 芳基。

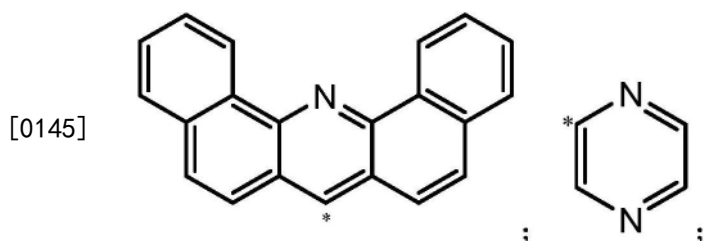
[0140]  $Ar^2$ 可独立地选自 $C_2$ 至 $C_{39}$ 含N杂芳基和 $C_6$ 至 $C_{54}$ 芳基、任选地 $C_2$ 至 $C_{36}$ 含N杂芳基和 $C_6$ 至 $C_{48}$ 芳基、任选地 $C_3$ 至 $C_{30}$ 含N杂芳基和 $C_6$ 至 $C_{42}$ 芳基、任选地 $C_3$ 至 $C_{27}$ 含N杂芳基和 $C_6$ 至 $C_{36}$ 芳基、任选地 $C_3$ 至 $C_{24}$ 含N杂芳基和 $C_6$ 至 $C_{30}$ 芳基和任选地 $C_3$ 至 $C_{21}$ 含N杂芳基和 $C_6$ 至 $C_{24}$ 芳基。在这点上,各含N杂芳基可包含一个或多个N原子以作为仅有的一个或多个杂原子。

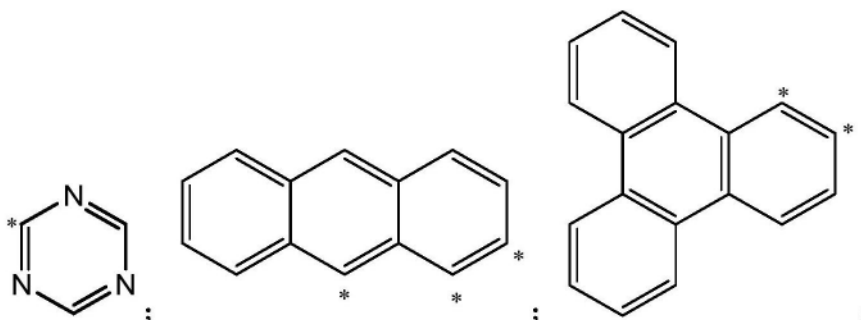
[0141]  $Ar^2$ 可包含至少两个稠合的5-或6-元环。

[0142]  $Ar^2$ 可独立地选自:吡啶基、三嗪基、1,2-二嗪基、1,3-二嗪基、1,4-二嗪基、喹啉基、苯并喹啉基、苯并咪唑基、喹啉基、苯并喹啉基、苯并吡啶基、二苯并吡啶基、茛葱基、葱基、萘基、联三苯叉基、菲咯啉基和二萘并呋喃基,其可分别被取代或未被取代。

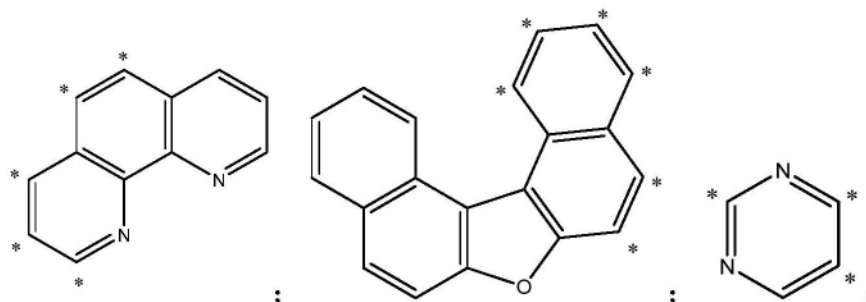
[0143]  $Ar^2$ 可独立地选自:二苯并吡啶基、1,3-二嗪基、1,4-二嗪基、葱基、三嗪基、菲咯啉基、联三苯叉基、吡啶基、二萘并呋喃基。

[0144]  $Ar^2$ 可独立地选自如下基团中的一种,





[0146]

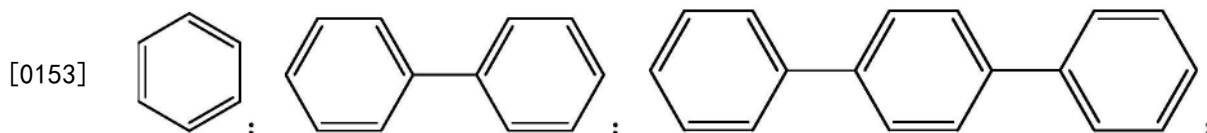


[0147] 其中星号“\*”分别表示用于结合到Z的结合位置。

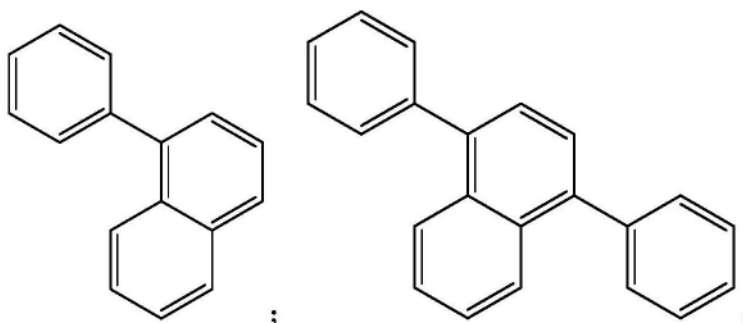
[0148] 在Ar<sup>2</sup>被取代的情况下,Ar<sup>2</sup>上的每个取代基可独立地选自苯基、萘基、任选的β-萘基、吡啶基和联苯基,其可分别被取代或未被取代。[0149] 在Ar<sup>2</sup>被取代的情况下,Ar<sup>2</sup>上的每个取代基可独立地选自苯基、吡啶基和联苯基,任选地对联苯基。[0150] Z可独立地选自C<sub>6</sub>至C<sub>24</sub>芳基、或C<sub>6</sub>至C<sub>18</sub>芳基、或C<sub>6</sub>至C<sub>12</sub>芳基,其可被取代或未被取代。

[0151] Z可选自亚苯基、亚萘基、亚苯基-亚萘基、亚联苯基和亚三联苯基,其可分别被取代或未被取代。

[0152] Z可独立地选自如下基团中的一种,



[0153]



[0154]

[0155] 其中,用于结合到Ar<sup>2</sup>和G的结合位置可自由选择。[0156] 在Z被取代的情况下,Z上的每个取代基可独立地选自苯基和C<sub>1</sub>至C<sub>4</sub>烷基。

[0157] 以使得化合物G-苯基的偶极矩≥1D且≤7D的方式来选择G,所述偶极矩通过TURBOMOLE V6.5程序包使用混合泛函B3LYP和Gaussian 6-31G\*基础设置来计算。偶极矩的

单位“Debye”缩写为符号“D”。发明人已经发现,如果式(II)化合物包含具有特定极性的基团即在上述范围或下述范围内的特定偶极矩是有利的。还发现,如果式(II)化合物另外包含其它极性基团(第二极性基团),则式(II)化合物包含这类极性基团(第一极性基团)仍是有利的,第二极性基团适合于以式(II)化合物的总偶极矩较低的方式来平衡第一极性基团的偶极矩,例如在所述化合物为包含相同的第一极性基团和第二极性基团的对称分子时,偶极矩可为0Debye。因此,式(II)化合物不能表征为是指所述化合物的总偶极矩。因此,相反是指包含极性基团“G”和非极性基团“苯基”的模拟化合物。在这方面,含有N原子的化合物的偶极矩 $|\vec{\mu}|$ 由下式给出:

$$[0158] \quad \vec{\mu} = \sum_i^N q_i \vec{r}_i$$

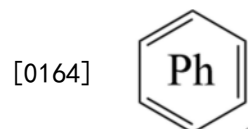
$$[0159] \quad |\vec{\mu}| = \sqrt{\mu_x^2 + \mu_y^2 + \mu_z^2}$$

[0160] 其中 $q_i$ 和 $\vec{r}_i$ 是分子中的原子i的部分电荷和位置。偶极矩由半经验分子轨道法来确定。如程序包TURBOMOLE V6.5 (TURBOMOLE GmbH, Litzenhardtstrasse 19, 76135 Karlsruhe, Germany)中所实现的在气相中使用具有6-31G\*基础设置的混合泛函B3LYP对分子结构的几何形状进行优化。如果超过一种的构象是可行的,则选择具有最低总能量的构象以确定分子的键长。在这方面,整个部分G涵盖可被包含的所有可行的取代基。

[0161] G可选择为使化合物G-苯基的偶极矩为: $>1D$ , 任选地 $\geq 2D$ , 任选地 $\geq 2.5D$ , 任选地 $\geq 2.5D$ , 任选地 $\geq 3D$ , 并且任选地 $\geq 3.5D$ 。G可选择为使化合物G-苯基的偶极矩 $\leq 7D$ , 任选地 $\leq 6.5D$ , 任选地 $\leq 6D$ , 任选地 $\leq 5.5D$ , 任选地 $\leq 5D$ 。如果化合物G-苯基的多于一种的构象异构体是可行的,则选择G-苯基构象异构体的偶极矩的平均值在该范围内。构象异构是立体异构的一种形式,其中异构体可仅通过形式上单键的旋转来相互转化。

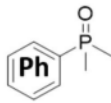
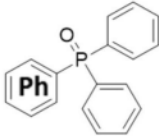

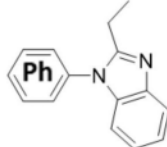
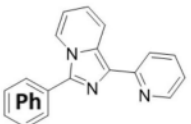
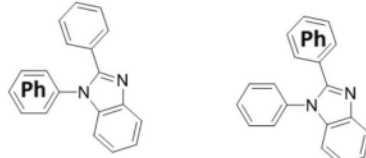
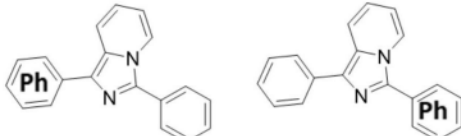
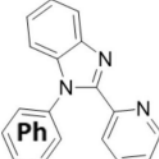
[0162] 通过选择G使得化合物G-苯基的偶极矩位于上述范围内,可改善源自相邻的不同的电子注入层(EIL)的电子注入并且降低OLED器件的电压,并且提高了OLED器件的cd/A效率。

[0163] 将示例性化合物“G-苯基”列于下表1中,其中在相应化合物中的如下部分指定“G-苯基”中的“苯基”部分,

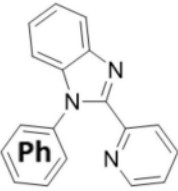
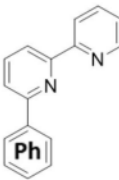
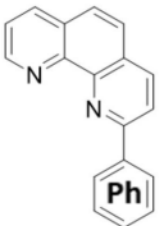
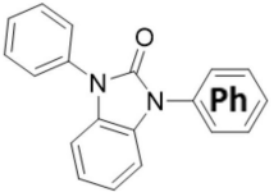
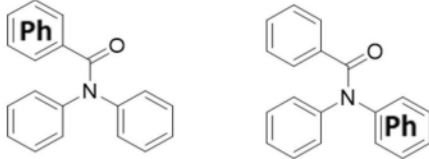
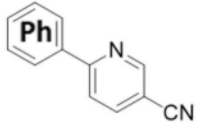
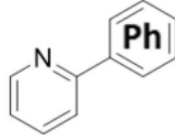
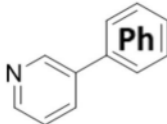


[0165] 表1:

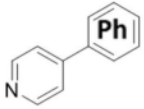
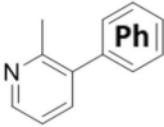
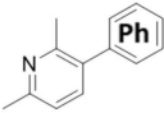
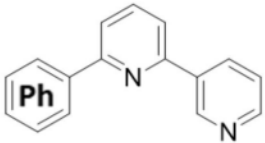
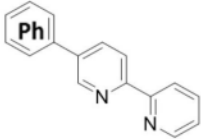
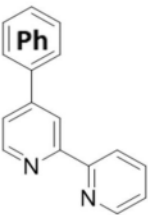
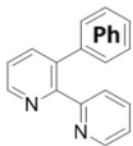
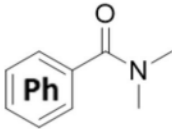
[0166]

	G-苯基的结构	HOMO [eV]	LUMO [eV]	偶极矩 [D]
G-苯基-1		-6.88	-0.62	<b>4.16</b>
G-苯基-2		-6.74	-0.86	<b>4.19</b>
G-苯基-3		-8.97	1.00	<b>4.56</b>
G-苯基-4		-5.82	-0.62	<b>3.97</b>
G-苯基-5		-5.04	-1.18	<b>3.86</b>
G-苯基-6		-5.70	-1.02	<b>3.70</b>
G-苯基-7		-4.92	-1.11	<b>3.11</b>
G-苯基-8		-5.86	-1.19	<b>5.14</b>

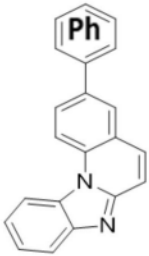
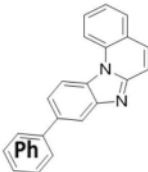
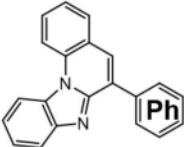
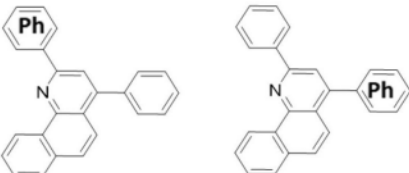
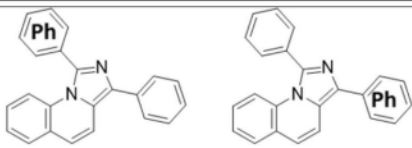
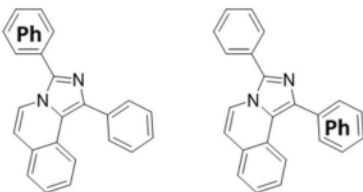
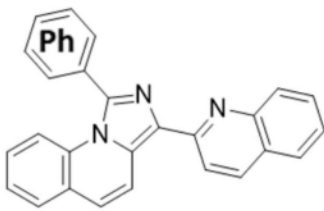
[0167]

G-苯基-9		-5.76	-1.33	<b>2.61</b>
G-苯基-10		-5.96	-1.35	<b>2.69</b>
G-苯基-11		-5.83	-1.59	<b>2.67</b>
G-苯基-12		-5.54	-0.48	<b>2.12</b>
G-苯基-13		-5.79	-1.06	<b>3.33</b>
G-苯基-14		-6.59	-2.08	<b>4.79</b>
G-苯基-15		-6.12	-1.13	<b>1.71</b>
G-苯基-16		-6.32	-0.98	<b>2.31</b>

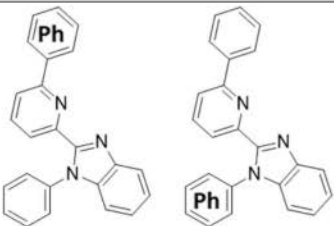
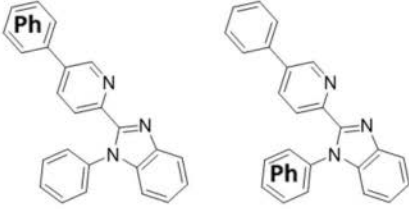
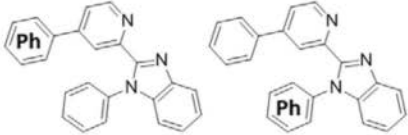
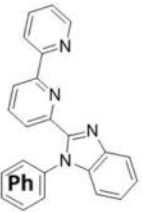
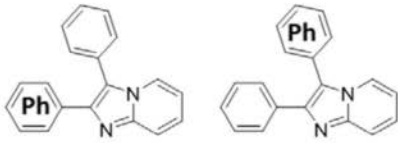
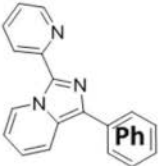
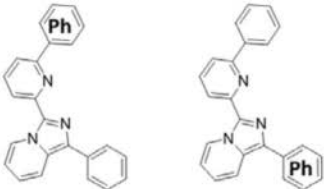
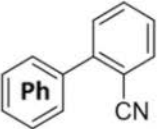
[0168]

G-苯基-17		-6.57	-1.19	<b>2.75</b>
G-苯基-18		-6.28	-0.77	<b>2.00</b>
G-苯基-19		-6.12	-0.69	<b>1.50</b>
G-苯基-20		-6.10	-1.41	<b>3.51</b>
G-苯基-21		-6.10	-1.38	<b>2.98</b>
G-苯基-22		-6.47	-1.31	<b>3.46</b>
G-苯基-23		-6.19	-1.03	<b>3.02</b>
G-苯基-24		-6.35	-0.17	<b>3.62</b>

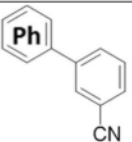
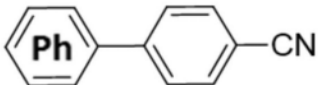
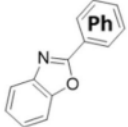
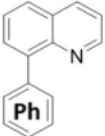
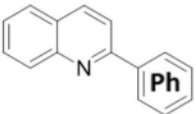
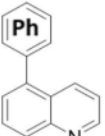

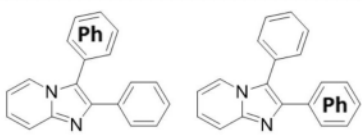
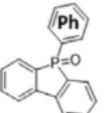
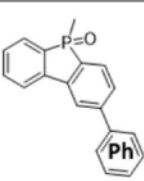
[0169]

G-苯基-25		-5.54	-1.58	<b>3.49</b>
G-苯基-26		-5.60	-1.61	<b>3.39</b>
G-苯基-27		-5.48	-1.67	<b>2.76</b>
G-苯基-28		-5.63	-1.56	<b>1.84</b>
G-苯基-29		-5.02	-1.39	<b>2.96</b>
G-苯基-30		-5.08	-1.13	<b>2.70</b>
G-苯基-31		-5.07	-1.58	<b>2.29</b>

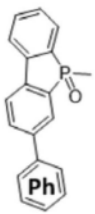
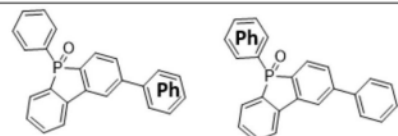
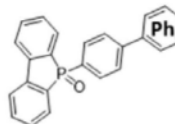
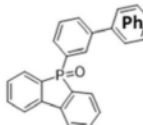
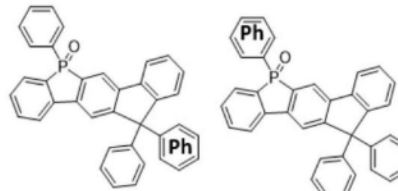
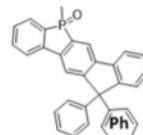
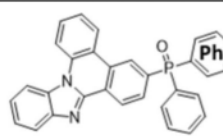
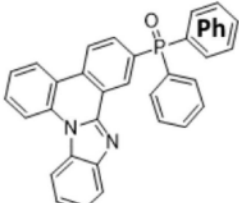
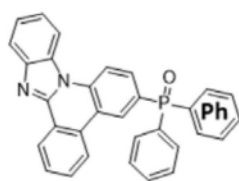
[0170]

G-苯基-32		-5.81	-1.19	<b>4.61</b>
G-苯基-33		-5.78	-1.42	<b>5.20</b>
G-苯基-34		-5.84	-1.38	<b>5.63</b>
G-苯基-35		-5.83	-1.35	<b>3.37</b>
G-苯基-36		-5.37	-0.98	<b>3.32</b>
G-苯基-37		-4.94	-1.15	<b>1.81</b>
G-苯基-38		-4.94	-1.16	<b>2.12</b>
G-苯基-39		-6.52	-1.47	<b>4.17</b>

[0171]

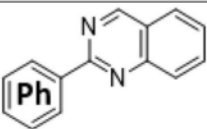
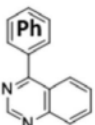
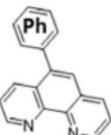
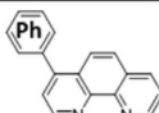
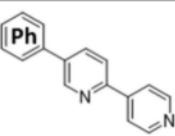
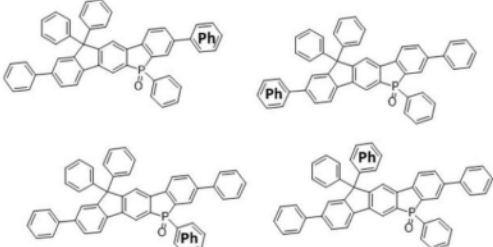
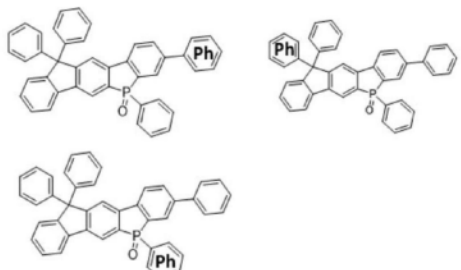
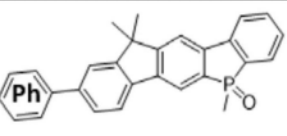
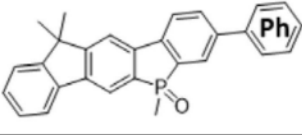
G-苯基-40		-6.56	-1.46	<b>4.85</b>
G-苯基-41		-6.53	-1.67	<b>5.27</b>
G-苯基-42		-6.00	-1.43	<b>1.14</b>
G-苯基-43		-5.84	-1.47	<b>1.94</b>
G-苯基-44		-5.97	-1.56	<b>1.53</b>
G-苯基-45		-6.01	-1.42	<b>2.31</b>
G-苯基-46		-6.09	-1.47	<b>2.57</b>
G-苯基-47		-5.37	-0.98	<b>3.32</b>
G-苯基-48		-6.22	-1.47	<b>4.49</b>
G-苯基-49		-6.15	-1.55	<b>4.79</b>

[0172]

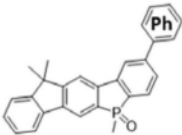
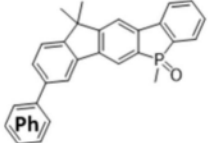
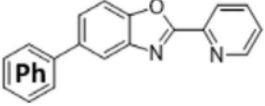
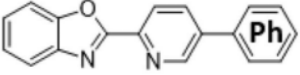
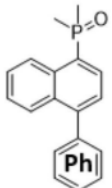
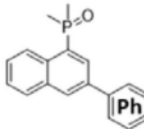
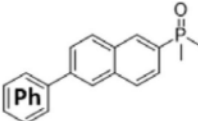
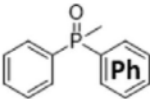
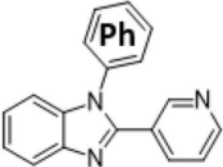
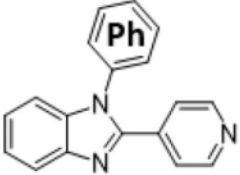
G-苯基-50		-5.95	-1.58	<b>4.45</b>
G-苯基-51		-6.10	-1.57	<b>4.65</b>
G-苯基-52		-6.14	-1.47	<b>4.59</b>
G-苯基-53		-6.12	-1.48	<b>4.26</b>
G-苯基-54		-5.71	-1.60	<b>4.55</b>
G-苯基-55		-5.74	-1.60	<b>4.73</b>
G-苯基-56		-5.75	-1.62	<b>-6.70</b>
G-苯基-57		-5.68	-1.61	<b>6.58</b>
G-苯基-58		-5.71	-1.45	<b>4.34</b>

[0173]

G-苯基-59		-5.42	-1.34	<b>4.33</b>
G-苯基-60		-6.89	-1.25	<b>3.44</b>
G-苯基-61		-6.32	-1.28	<b>3.20</b>
G-苯基-62		-5.96	-1.24	<b>4.42</b>
G-苯基-63		-5.63	-0.96	<b>4.10</b>
G-苯基-64		-5.64	-1.05	<b>4.23</b>
G-苯基-65		-6.00	-1.88	<b>2.46</b>

G-苯基-66		-6.12	-1.82	<b>2.22</b>
G-苯基-67		-6.36	-1.87	<b>3.04</b>
G-苯基-68		-6.03	-1.46	<b>3.58</b>
G-苯基-69		-6.09	-1.46	<b>3.67</b>
G-苯基-70		-6.17	-1.85	<b>4.56</b>
[0174] G-苯基-71		-5.50	-1.74	<b>4.45</b>
G-苯基-72		-5.55	-1.76	<b>4.44</b>
G-苯基-73		-5.58	-1.64	<b>4.98</b>
G-苯基-74		-5.60	-1.66	<b>4.81</b>

[0175]

G-苯基-75		-5.70	-1.60	<b>5.11</b>
G-苯基-76		-5.66	-1.58	<b>4.90</b>
G-苯基-77		-5.95	-1.70	<b>1.25</b>
G-苯基-78		-5.92	-1.91	<b>1.83</b>
G-苯基-79		-5.84	-1.41	<b>4.28</b>
G-苯基-80		-5.81	-1.40	<b>3.98</b>
G-苯基-81		-5.84	-1.61	<b>4.50</b>
G-苯基-82		-6.85	-0.85	<b>4.00</b>
G-苯基-83		-5.88	-1.27	<b>2.59</b>
G-苯基-84		-6.02	-1.48	<b>4.35</b>

[0176] G可选自：二烷基氧磷基、二芳基氧磷基、烷基芳基氧磷基、二杂芳基氧磷基、芳基杂芳基氧磷基、环状二芳基氧磷基、氧化磷、含芳基氧化磷、含杂芳基氧化磷、环状芳基杂芳基氧磷基、环状含杂芳基氧化磷、腈、苯甲腈、烟腈、酰胺、脲基和 $C_2$ 至 $C_{42}$ 杂芳基；其中G可包含连接到所述基团的一个或多个取代基，其中所述一个或多个取代基选自 $C_6$ 至 $C_{18}$ 芳基、 $C_1$ 至 $C_{10}$ 烷基、 $C_2$ 至 $C_{14}$ 杂芳基。在这点上，“环状”是指氧磷基、相应的氧化磷的“P=O”是由所述

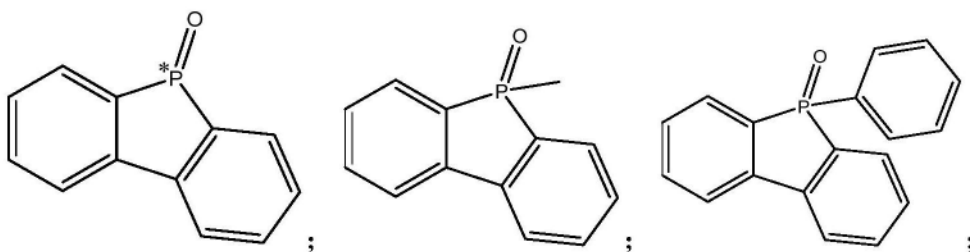
基团的其它部分形成的环的一部分。

[0177] G可选自：二-C<sub>1</sub>至C<sub>10</sub>烷基氧磷基、二-C<sub>6</sub>至C<sub>10</sub>芳基氧磷基、C<sub>10</sub>-C<sub>42</sub>二杂芳基氧磷基、C<sub>7</sub>-C<sub>42</sub>芳基杂芳基氧磷基、C<sub>8</sub>-C<sub>42</sub>氧化磷、含C<sub>8</sub>-C<sub>42</sub>芳基的氧化磷、含C<sub>8</sub>-C<sub>63</sub>杂芳基的氧化磷、C<sub>12</sub>-C<sub>63</sub>环状芳基氧磷基、C<sub>7</sub>-C<sub>42</sub>环状芳基杂芳基氧磷基、C<sub>7</sub>-C<sub>42</sub>环状含杂芳基的氧化磷；和C<sub>2</sub>至C<sub>39</sub>杂芳基，任选地C<sub>2</sub>至C<sub>35</sub>杂芳基，任选地C<sub>2</sub>至C<sub>32</sub>杂芳基，任选地C<sub>2</sub>至C<sub>29</sub>杂芳基，任选地C<sub>2</sub>至C<sub>25</sub>杂芳基；G可包含连接到所述基团的一个或多个取代基，其中所述一个或多个取代基选自C<sub>6</sub>至C<sub>12</sub>芳基、C<sub>1</sub>至C<sub>6</sub>烷基、C<sub>2</sub>至C<sub>11</sub>杂芳基。

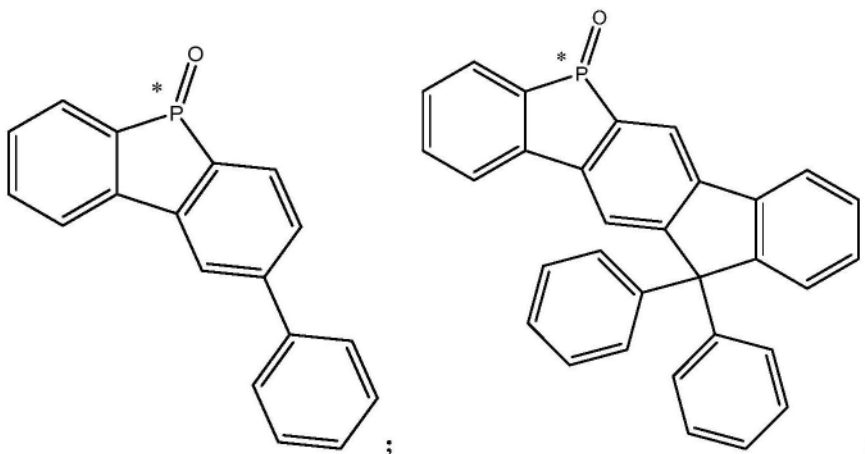
[0178] G可选自：二-C<sub>1</sub>至C<sub>4</sub>烷基氧磷基、二-C<sub>6</sub>至C<sub>10</sub>芳基氧磷基、C<sub>10</sub>二杂芳基氧磷基、C<sub>7</sub>-C<sub>25</sub>芳基杂芳基氧磷基、C<sub>8</sub>-C<sub>42</sub>氧化磷、含C<sub>8</sub>-C<sub>42</sub>芳基的氧化磷、含C<sub>8</sub>-C<sub>24</sub>杂芳基的氧化磷、C<sub>12</sub>-C<sub>42</sub>环状芳基氧磷基、C<sub>7</sub>-C<sub>25</sub>环状芳基杂芳基氧磷基、C<sub>7</sub>-C<sub>25</sub>含杂芳基的氧化磷和C<sub>2</sub>-C<sub>25</sub>杂环芳基；其中相应的G可包含连接到所述基团的一个或多个取代基，其中所述一个或多个取代基选自C<sub>6</sub>至C<sub>10</sub>芳基、C<sub>1</sub>至C<sub>4</sub>烷基、C<sub>2</sub>至C<sub>5</sub>杂芳基。

[0179] G选自：二烷基氧磷基、二芳基氧磷基、烷基芳基氧磷基、二杂芳基氧磷基、芳基杂芳基氧磷基、环状二芳基氧磷基、氧化磷、含芳基的氧化磷、含杂芳基的氧化磷、环状芳基杂芳基氧磷基、环状含杂芳基的氧化磷、腈、苯甲腈、烟腈、酰胺基、脲基和C<sub>2</sub>至C<sub>17</sub>杂芳基；其中，相应的G可包含连接到所述基团的一个或多个取代基，其中所述一个或多个取代基选自苯基、甲基、乙基和吡啶基。

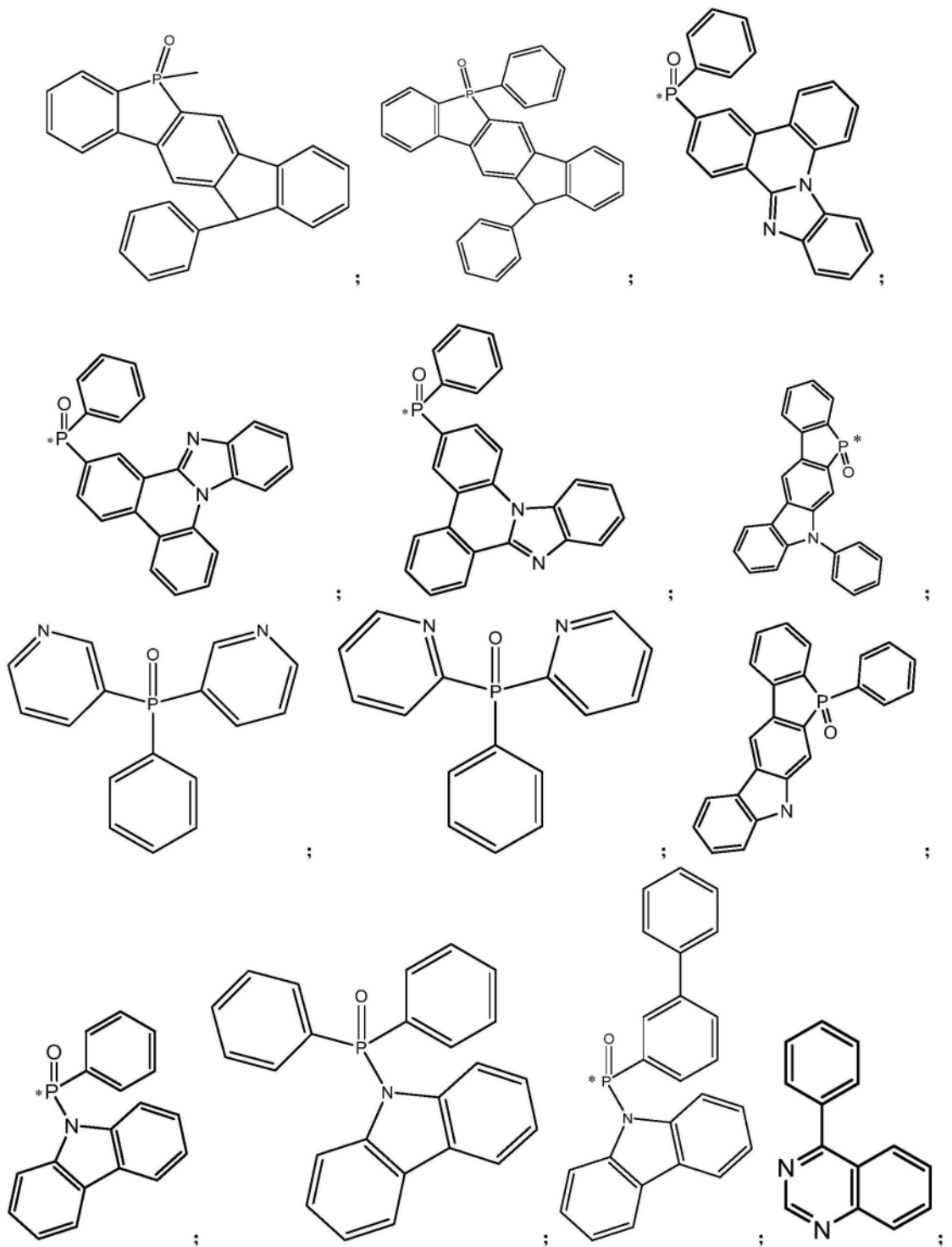
[0180] G可独立地选自：二甲基氧磷基、二苯基氧磷基、腈、苯甲腈、烟腈、二氢-苯并咪唑酮基、二苯基丙烷基、N,N-二甲基乙酰胺、酰胺、脲基、咪唑基、苯基苯并咪唑基、乙基苯并咪唑基、苯基苯并喹啉基、苯基苯并咪唑并喹啉基、吡啶基、联吡啶基、甲代吡啶基、二甲基吡啶基、哒嗪基、嘧啶基、吡嗪基、三苯基吡嗪基、苯并喹啉基、菲咯啉基、苯基菲咯啉基、喹啉基、苯并咪唑基、苯并咪唑基、吡啶基-咪唑并吡啶基；



[0181]



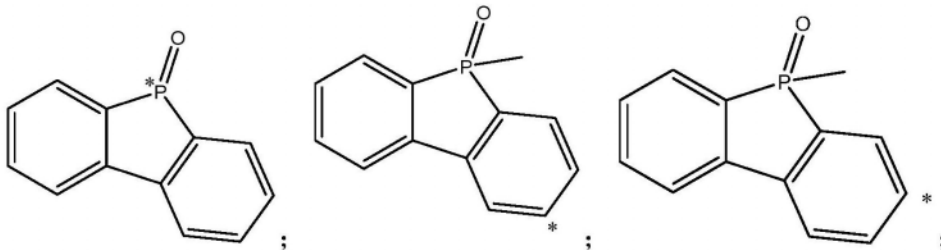
[0182]



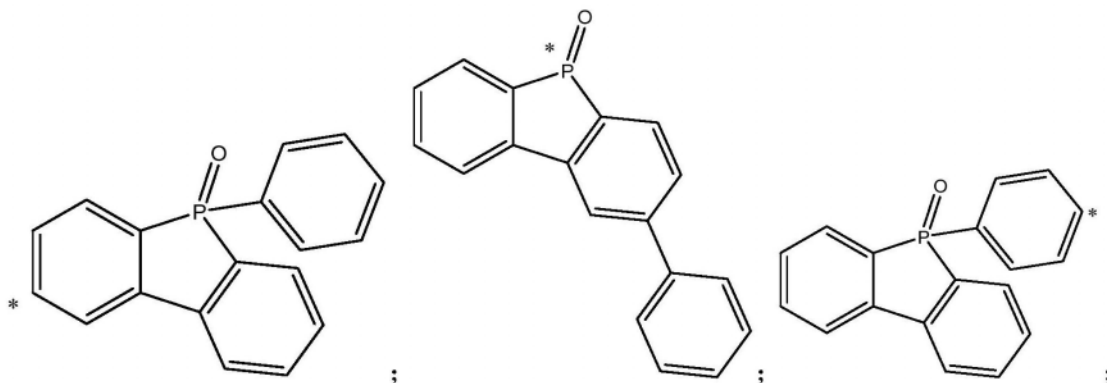


[0185] 其中星号“\*”表示结合位置。

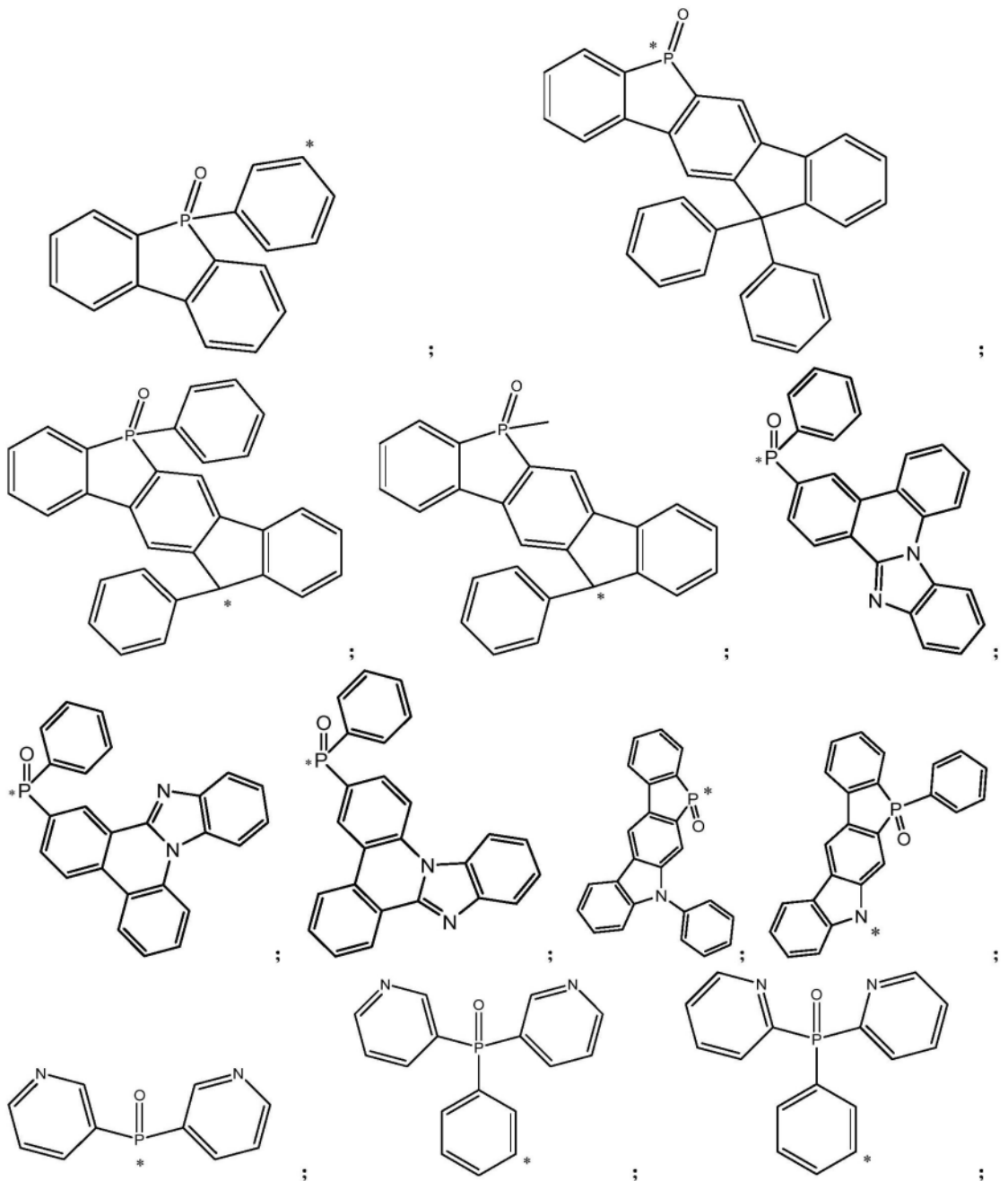
[0186] G可独立地选自：二甲基氧磷基、二苯基氧磷基、2-苯基-1H-苯并[d]咪唑基、2-乙基-1H-苯并[d]咪唑基、2-苯基苯并[h]喹啉基、吡啶基、2,2'-联吡啶基、5-苯基苯并[4,5]咪唑并[1,2-a]喹啉基、9-苯基-1,10-菲咯啉基、2-喹啉基、4-喹啉基、4-苯基-2-喹啉基和(吡啶-2-基)咪唑并[1,5-a]吡啶基；



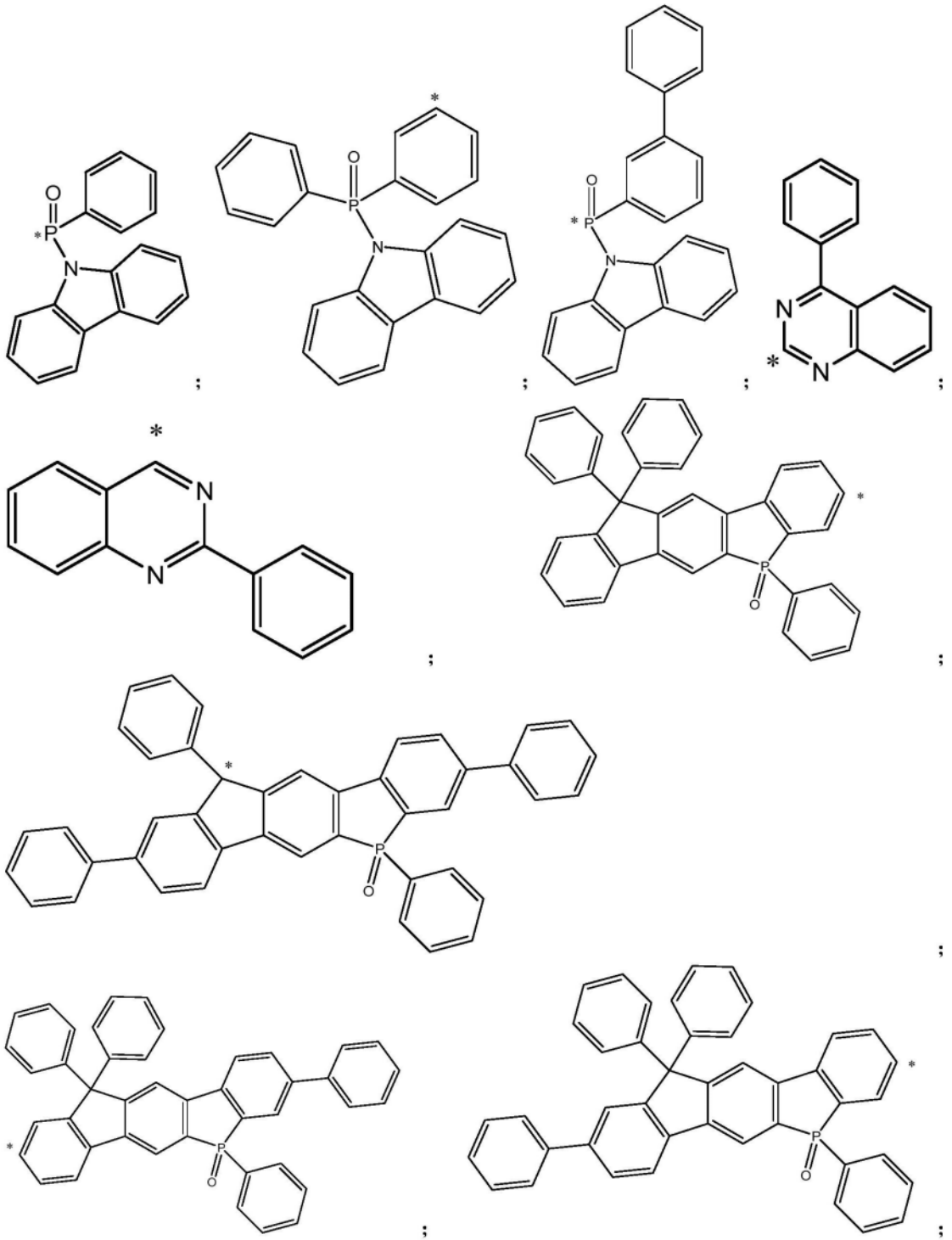
[0187]

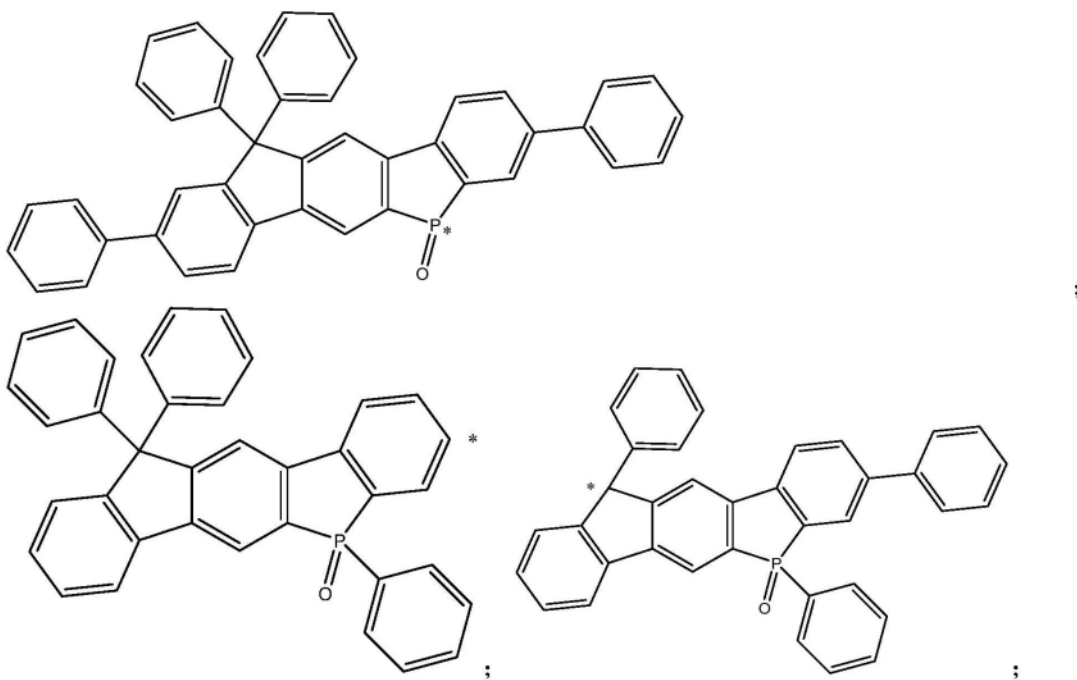


[0188]

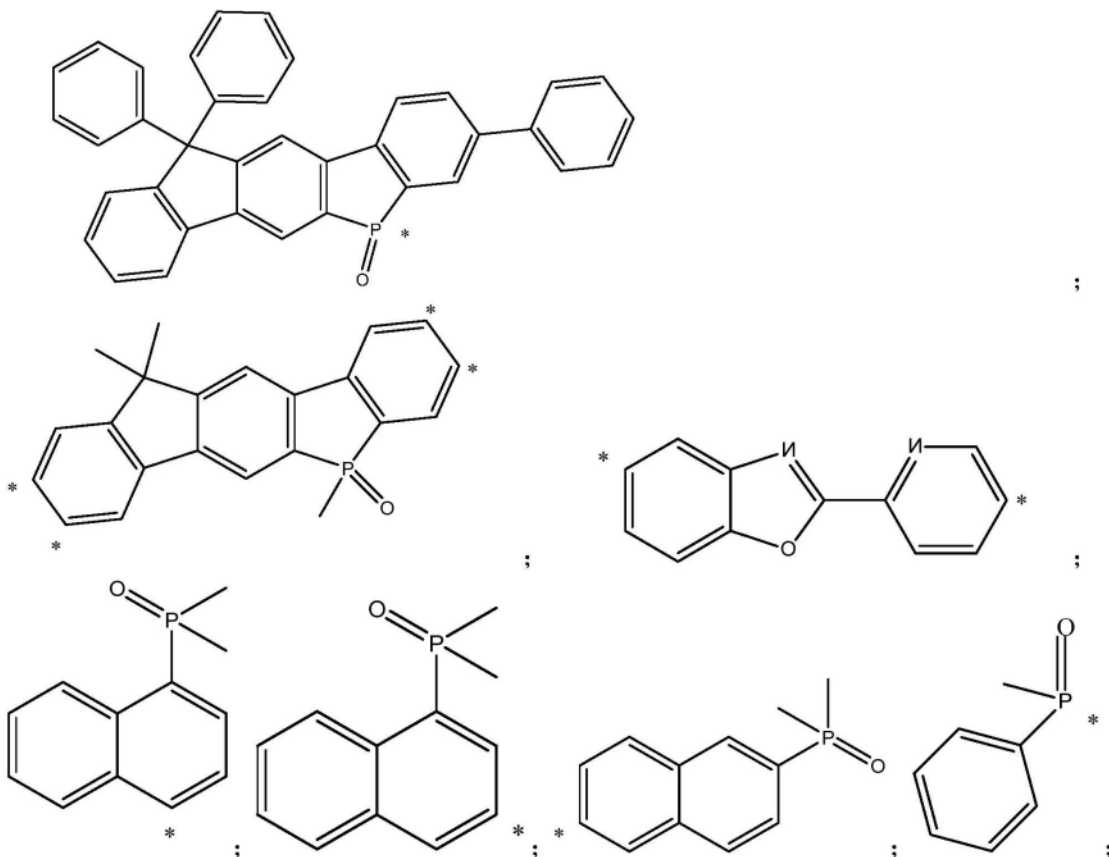


[0189]

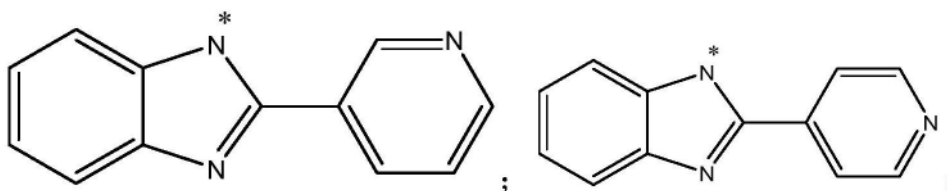




[0190]



[0191]

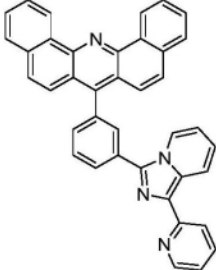
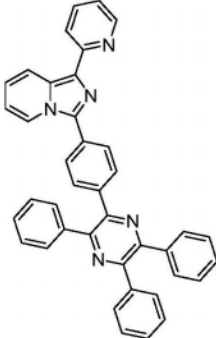
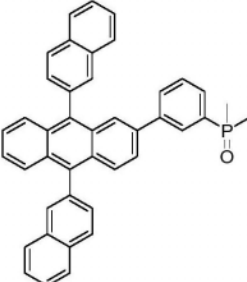


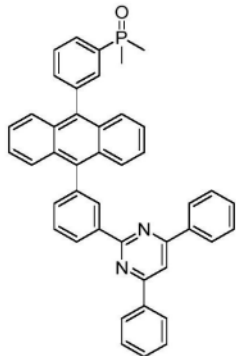
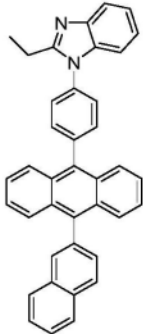
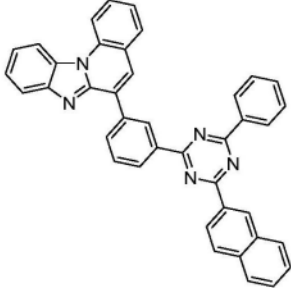
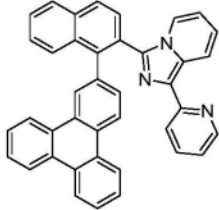
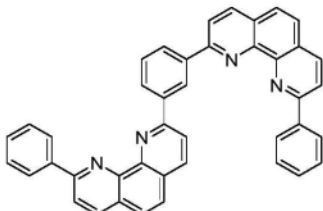
[0192] 其中星号“\*”表示结合位置。

[0193] 式(II)化合物可选自下表2中的化合物B-1至B-26。

[0194] 表2:

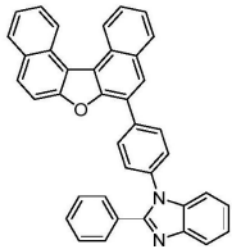
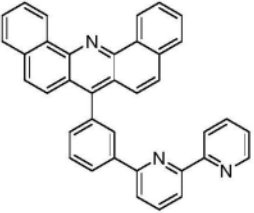
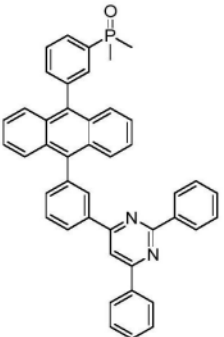
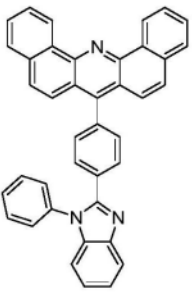
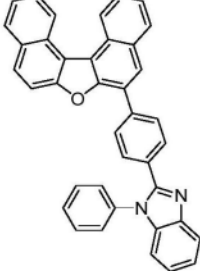
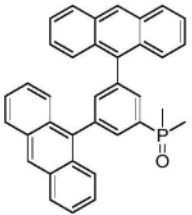
[0195]

名称	结构	HOMO [eV]	LUMO [eV]	偶极矩 [D]
B-1		-5.03	-1.81	0.98
B-2		-4.94	-1.61	1.77
B-3		-5.11	-1.75	3.78

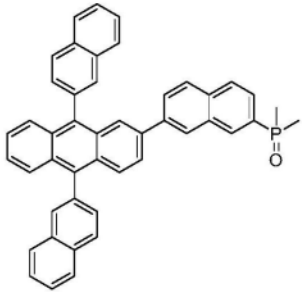
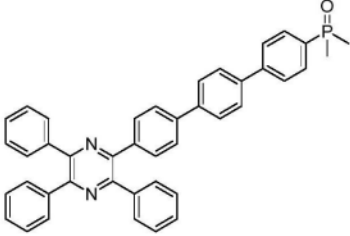
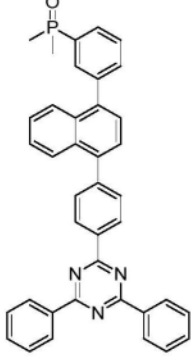
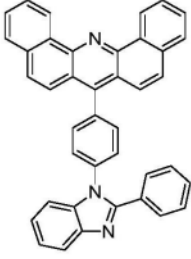
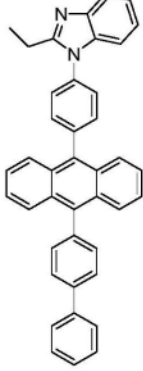
B-4		-5.20	-1.75	6.15
B-5		-5.26	-1.81	4.32
B-6		-5.56	-1.85	3.39
B-7		-5.11	-1.28	3.89
B-8		-5.62	-1.75	2.66

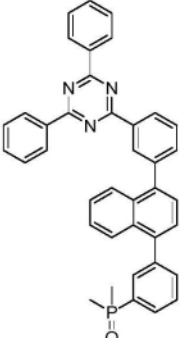
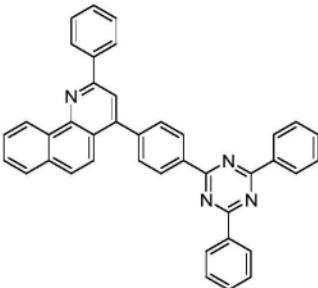
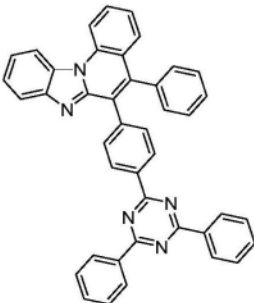
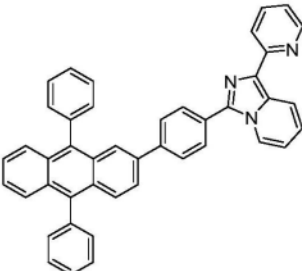
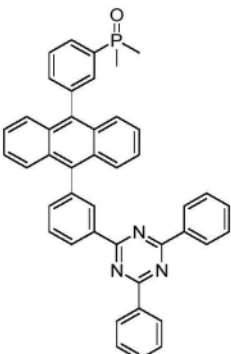
[0196]

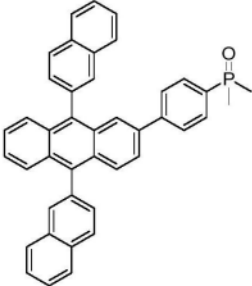
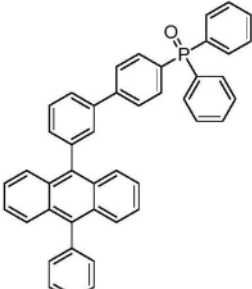
[0197]

B-9		-5.48	-1.69	4.58
B-10		-5.48	-1.59	4.68
B-11		-5.34	-1.86	2.59
B-12		-5.61	-1.79	3.80
B-13		-5.33	-1.61	3.86
B-14		-5.19	-1.81	4.11

[0198]

B-15		-5.11	-1.80	3.84
B-16		-5.69	-1.67	4.37
B-17		-5.76	-1.97	4.27
B-18		-5.77	-1.91	2.15
B-19		-5.29	-1.80	4.46

B-20		-5.73	-1.90	4.49
B-21		-5.67	-2.04	1.82
[0199] B-22		-5.49	-1.89	3.36
B-23		-4.86	-1.77	2.03
B-24		-5.28	-1.90	4.47

B-25		-5.17	-1.84	4.22
B-26		-5.16	-1.67	4.13

[0201] 在一种实施方案中,式(II)化合物的LUMO能级可在-2.30eV至-1.20eV范围内,优选在-2.10eV至-1.28eV范围内,所述LUMO能级是在将真空能级作为零的绝对刻度中确定的,并且是通过TURBOMOLE V6.5程序包使用混合泛函B3LYP和Gaussian 6-31G\*基础设置计算的。

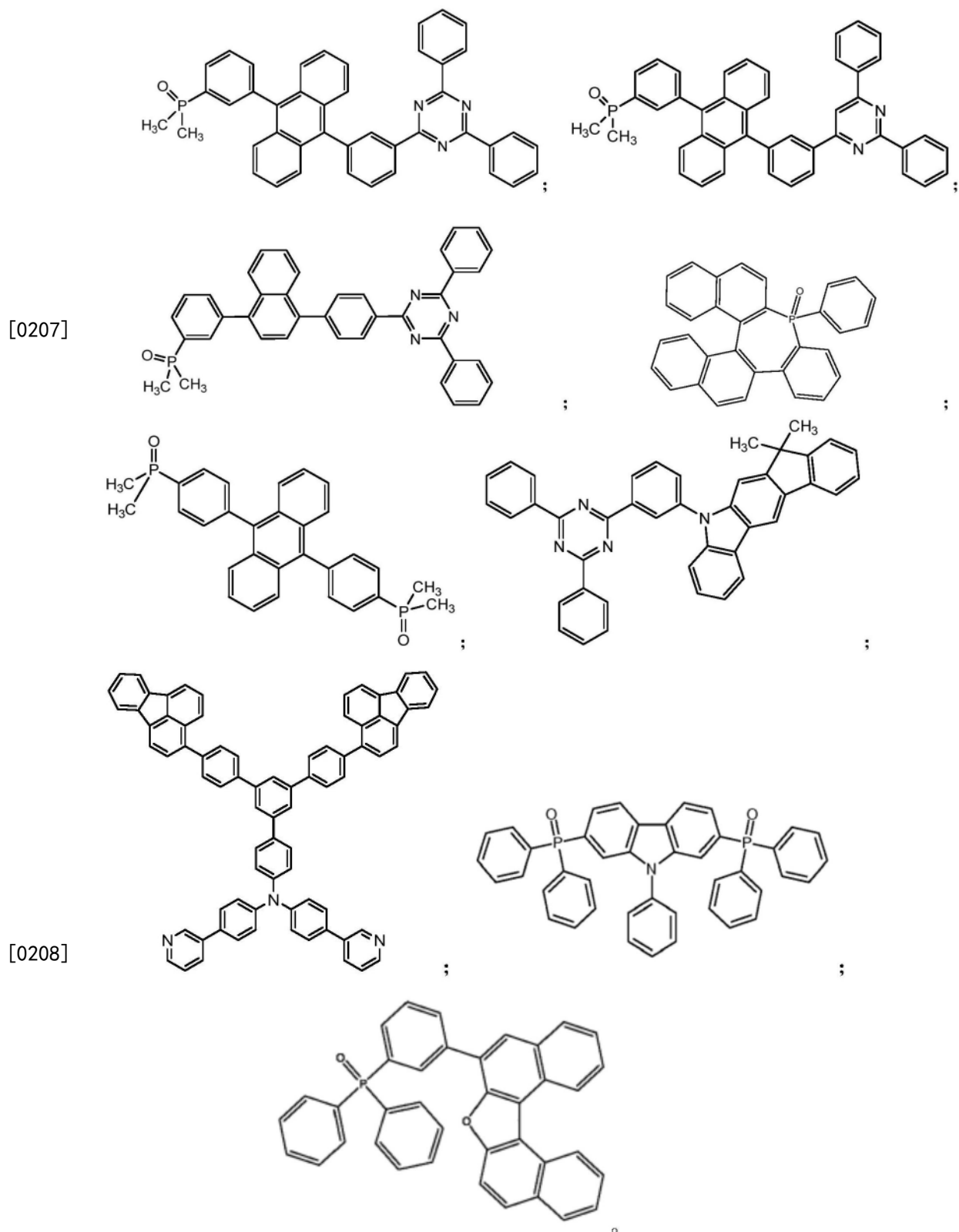
[0202] 在一种实施方案中,式(II)化合物包含一个极性基团“G”。

[0203] 式(II)化合物可包含6至12个芳族或杂芳族环,任选地6至11个芳族或杂芳族环,任选地7至10个芳族或杂芳族环,任选地7至9个芳族或杂芳族环。在这点上,芳族环、相应地杂芳族环是单个芳族环,例如:6元芳族环如苯基;6元杂芳族环,实例是吡啶基;5元杂芳族环,实例是吡咯基等。在缩合(杂)芳族环系中,每个环在这点上被认为是一个单环。例如,萘包含两个芳族环。

[0204] 式(II)化合物可不包括P=O部分。式(II)化合物可不含P(=O)芳基<sub>2</sub>。式(II)化合物可不含P(=O)烷基<sub>2</sub>。式(II)化合物可不含P(=O)Ph<sub>2</sub>。式(II)化合物可不含P(=O)(CH<sub>3</sub>)<sub>2</sub>。式(II)化合物可不含R'P(=O)R”,其中R'和R”相互连接以形成环,即不含环氧化膦。式(II)化合物可不含R'P(=O)R”,其中R'和R”相互连接以形成7元环。

[0205] 式(II)化合物可不含两个P=O部分。式(II)化合物可不含两个P(=O)芳基<sub>2</sub>。式(II)化合物可不含两个P(=O)烷基<sub>2</sub>。式(II)化合物可不含两个P(=O)Ph<sub>2</sub>。式(II)化合物可不含两个P(=O)(CH<sub>3</sub>)<sub>2</sub>。式(II)化合物可不含CN。

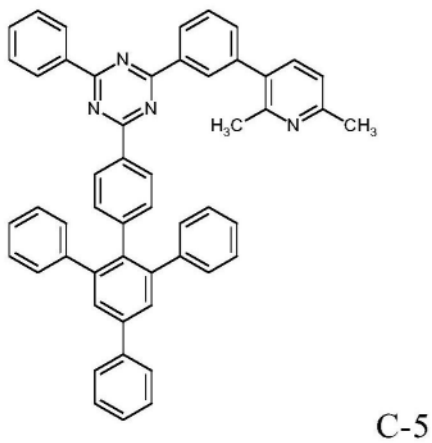
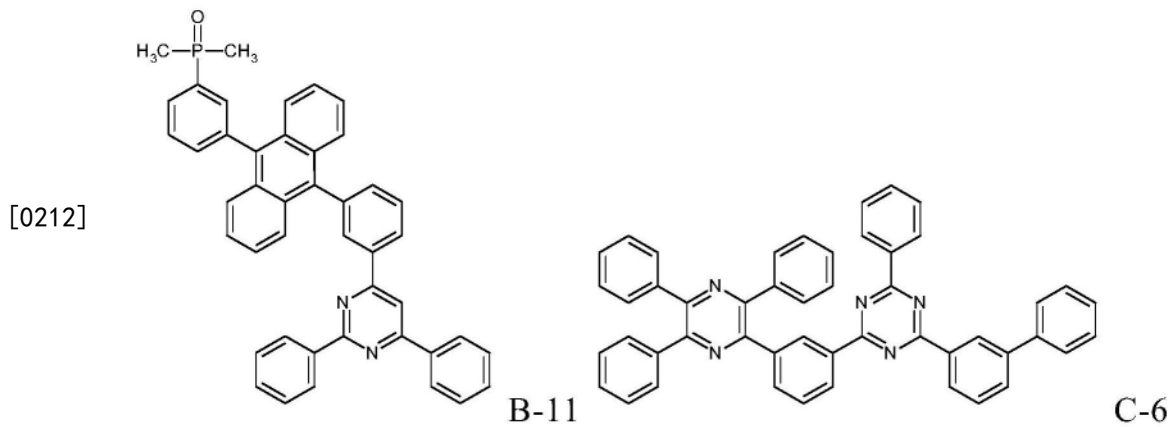
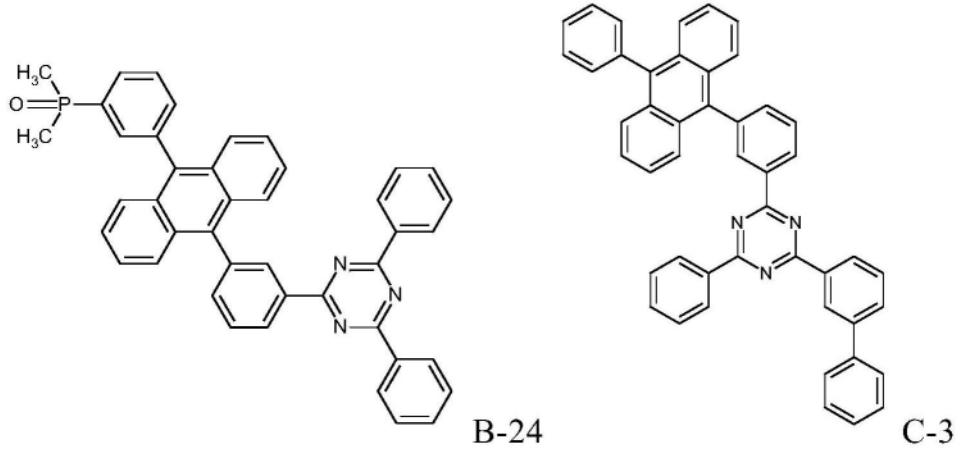
[0206] 下式中的一种或多种可不包括在式(II)化合物的范围内,



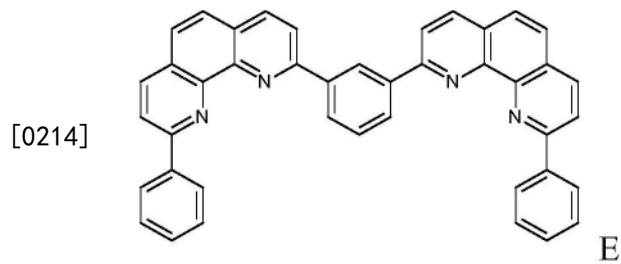
[0209] 如果第二电子传输层包含式(II)化合物和式(III)化合物,则可不包括规定量的如下化合物组合(参考表3和4):

	B-24:C-3	30:70	体积:体积;
	C-3:B-11	30:70	体积:体积;
[0210]	B-24:C-5	30:70	体积:体积;
	B-11:C-5	30:70	体积:体积;
	B-24:C-6	30:70	体积:体积;
	B-11:C-6	30:70	体积:体积。

[0211] 可排除包含如下化合物的如下有机发光二极管a)和b):



[0213] a) 串联OLED,其中所述电子传输层布置成与在E:Li的重量比为98:2的条件下由化合物E和锂金属制成的n掺杂电荷产生层相邻并直接接触,



[0215] 所述电子传输层的组成选自:B-24:C-3、B-10:C-3、B-24:C-5、B-11:C-5、B-24:C-6、B-11:C-6;其中在这些组合中各自的第一组分和第二组分的重量比为30:70;

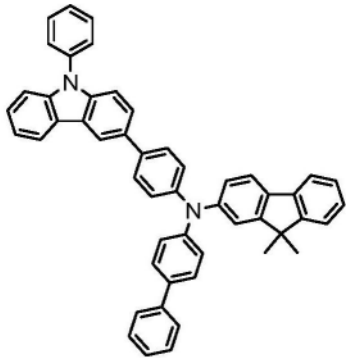
[0216] b) 具有如下结构的顶发光蓝色OLED

层	材料	d [nm]
阳极	Ag	100
HIL	HT-3:D-1 (92:8 体积/体积)	10
HTL	HT-3	118
EBL	F2	5
EML	H09:BD200 (97:3 体积/体积)	20
[0217] HBL	C-1	5
ETL	B-24:C-3 (30:70 体积/体积)	31
EIL	Yb	2
阴极	Ag:Mg (90:10)	13
包覆层	HT-3	70

[0218] 其中

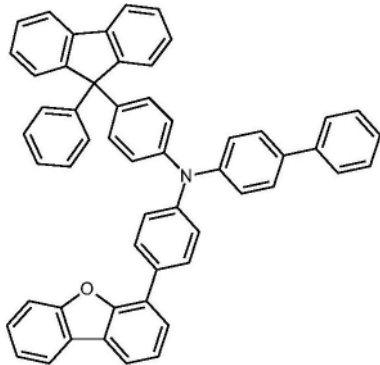
[0219] HT-3为

[0220]



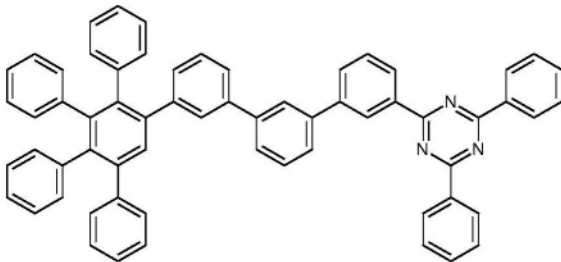
[0221] F2为

[0222]



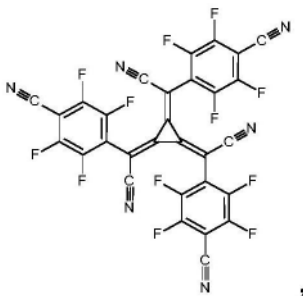
[0223] C-1为

[0224]



[0225] D-1为

[0226]



[0227] H09是商用蓝色发光体主体并且BD200是商用蓝色发光体,两者均由韩国SFC提供。

[0228] 第二电子传输层还可包含化合物(III),其中化合物(III)包含8至13个芳族或杂芳族环、任选地8至11个芳族或杂芳族环、任选地9至11个芳族或杂芳族环以及任选地9个芳族或杂芳族环,其中一个或多个芳族或杂芳族环可被 $C_1$ 至 $C_4$ 烷基取代。在这点上,芳族环、相应地杂芳族环是单个芳族环,例如:6元芳族环如苯基;6元杂芳族环,实例是吡啶基;5-元杂芳族环,实例是吡咯基等。在缩合(杂)芳族环系中,每个环在这点上被认为是一个单环。例如,萘包含两个芳族环。

[0229] 化合物(III)可包含至少一个杂芳族环、任选1至5个杂芳族环、任选1至4个杂芳族环、任选1至3个杂芳族环和任选1或2个杂芳族环。

[0230] 化合物(III)的芳族或杂芳族环可以是6元环。

[0231] 化合物(III)的杂芳族环可任选地为含N杂芳族环,任选地,全部杂芳族环是含N的杂芳族环,任选地,全部杂芳族环都含有N以作为唯一类型的杂原子。

[0232] 化合物(III)可包含至少一个在每个杂芳族环中含有1至3个N原子的6元杂芳族环,任选地1到3个在每个杂芳族环中分别含有1至3个N原子的六元杂芳族环。

[0233] 包含在化合物(III)中的至少一个6元杂芳族环可以是吡嗪。包含在化合物(III)中的至少一个6元杂芳族环可以是三嗪、二嗪、吡嗪。

[0234] 如果化合物(III)包含两个以上杂芳族环,则杂芳族环可通过不含杂原子的至少一个芳族环彼此隔开。

[0235] 在一个实施方案中,化合物(III)的杂芳族环中的杂原子通过至少一个双键结合到化合物(III)的分子结构中。

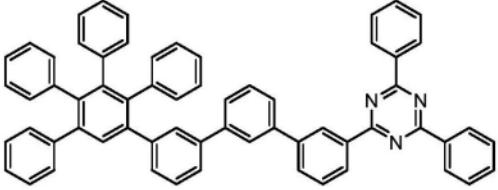
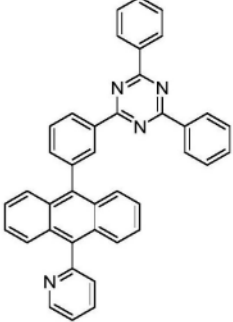
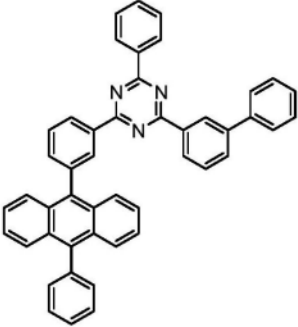
[0236] 式(III)化合物的分子偶极矩可为 $\geq 0D$ 且 $\leq 4D$ ;或者 $\geq 0.1D$ 且 $\leq 3.9D$ ;或者 $\geq 0.2D$ 且 $\leq 3.7D$ ;或者 $\geq 0.3D$ 且 $\leq 3.5D$ ,所述偶极矩通过TURBOMOLE V6.5程序包使用混合泛函B3LYP和Gaussian 6-31G\*基础设置来计算。

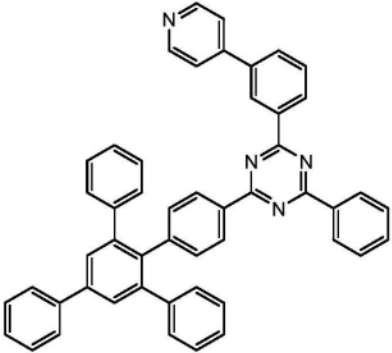
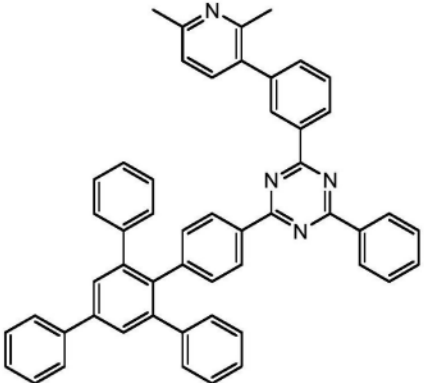
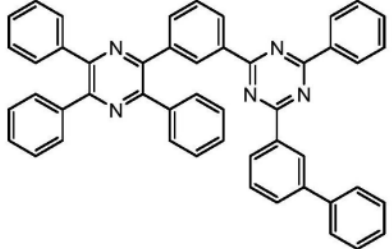
[0237] 通过选择根据这些实施方案的化合物(III),第二电子传输层的迁移率可进一步改善,OLED器件的电压可下降,并且OLED器件的cd/A效率可提高。

[0238] 在一个实施方案中,化合物(III)不是式(II)化合物。式(III)化合物可选自下表3中的化合物C-1至C-6。

[0239] 表3:

[0240]

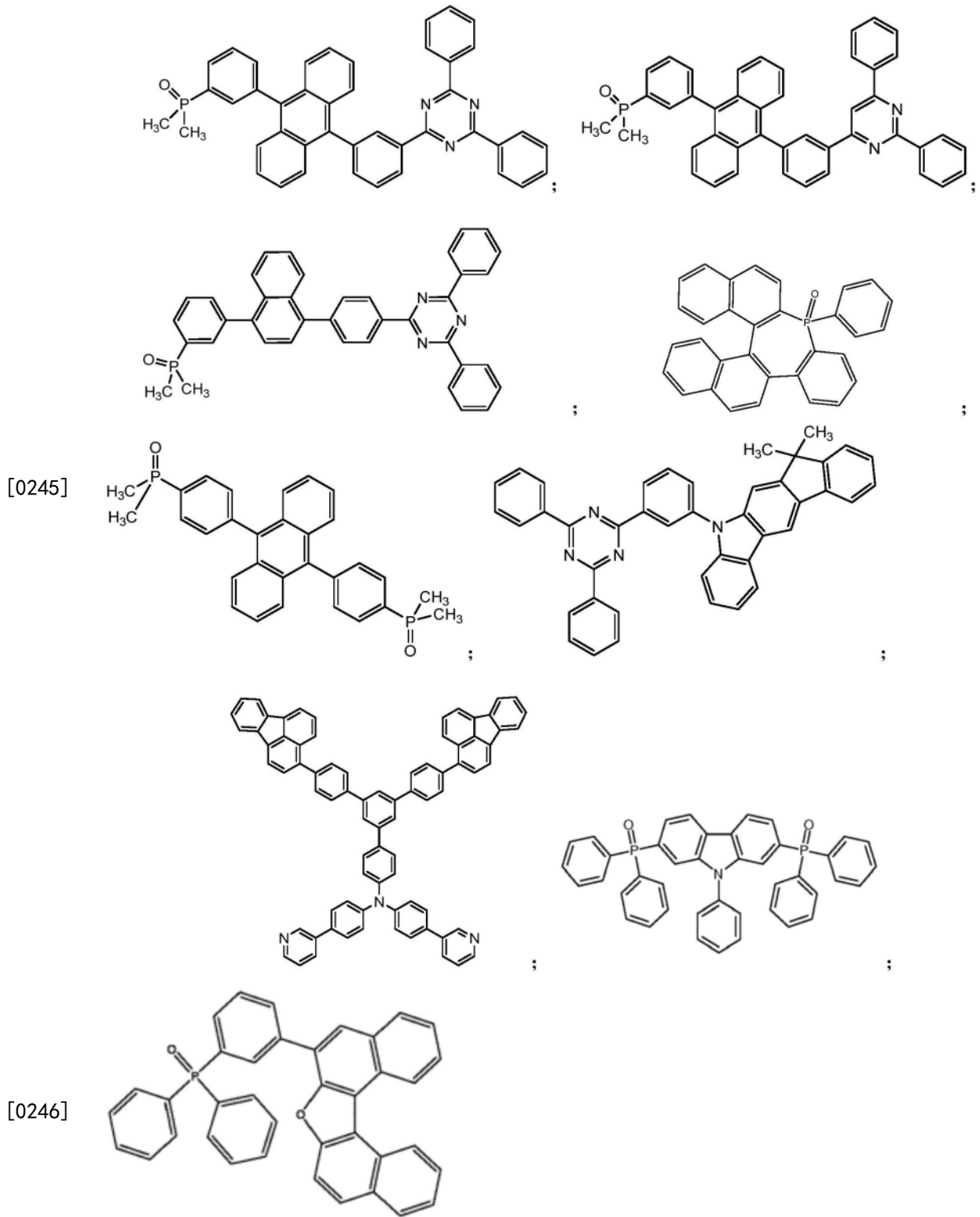
名称	结构	HOMO [eV]	LUMO [eV]	偶极矩 [D]
C-1		-5.72	-1.82	0.30
C-2		-5.11	-1.83	1.98
C-3		-5.19	-1.84	0.37

C-4		-5.87	-1.94	3.24
[0241] C-5		-5.83	-1.86	1.61
C-6		-5.67	-1.85	0.40

[0242] 式(III)化合物可不包括P=O部分。式(III)化合物可不含P(=O)芳基<sub>2</sub>。式(III)化合物可不含P(=O)烷基<sub>2</sub>。式(III)化合物可不含P(=O)Ph<sub>2</sub>。式(III)化合物可不含P(=O)(CH<sub>3</sub>)<sub>2</sub>。式(III)化合物可不含R'P(=O)R",其中R'和R"相互连接以形成环,即不含环氧化膦。式(III)化合物可不含R'P(=O)R",其中R'和R"相互连接以形成7元环。

[0243] 式(III)化合物可不含两个P=O部分。式(III)化合物可不含两个P(=O)芳基<sub>2</sub>。式(III)化合物可不含两个P(=O)烷基<sub>2</sub>。式(III)化合物可不含两个P(=O)Ph<sub>2</sub>。式(III)化合物可不含两个P(=O)(CH<sub>3</sub>)<sub>2</sub>。式(III)化合物可不含CN。

[0244] 下式中的一种或多种可不包括在式(III)化合物的范围内,



[0247] 在第二电子传输层包含式(II)化合物和化合物(III)两者的情况下,式(II)化合物对化合物(III)的重量比可为1:99至99:1,或10:90至60:40,或20:80至50:50,或25:75至40:60,或约30:70。

[0248] 在一个实施方案中,式(III)化合物的LUMO能级在-2.00eV至-1.70eV的范围内,优选在-1.95eV至-1.80eV的范围内,所述LUMO能级是在将真空能级作为零的绝对刻度中确定的,并且是通过TURBOMOLE V6.5程序包使用混合泛函B3LYP和Gaussian 6-31G\*基础设置计

算的。

[0249] 在一个实施方案中,化合物(III)包含一个含氮六元环。

[0250] 在另一个实施方案中,化合物(III)包含两个含氮六元环。

[0251] 在一个实施方案中,式(I)化合物不是式(II)化合物。在其它实施方案中,式(II)化合物不是化合物(III)。在另一个实施方案中,式(I)化合物不是化合物(III)。在本发明的其它实施方案中,所有三种化合物,即式(I)化合物、式(II)化合物和化合物(III)彼此不同,因为它们具有不同的分子结构式。

[0252] 第二电子传输层可布置在第一电子传输层与电子注入层之间。第二电子传输层可布置成与第一电子传输层直接接触。所述第二电子传输层可布置成“接触式夹在”所述第一电子传输层与所述电子注入层之间,其中所述第一电子传输层、所述第二电子传输层和所述电子注入层各自彼此不同。

[0253] 第二电子传输层可具有<100nm、任选地10~90nm、任选地10~60nm、任选地10~50nm的厚度。

[0254] OLED可具有的其它特性

[0255] 就本发明而言,层叠层是两个以上不同层的布置。层叠层的层可通过包含在每个层中的材料的化学性质彼此区分,即,可由不同的化合物制成。根据本发明的电子传输层叠层包含分别由电子传输材料制成的至少两个不同的层。

[0256] 式(I)化合物和式(II)化合物可彼此不同。即,式(I)化合物和式(II)化合物可彼此在至少一个结构方面彼此不同,特别是可有至少一个原子和/或基团彼此不同。

[0257] 第一电子传输层和第二电子传输层不含电掺杂剂。在这点上,“不含”是指相应的化合物(电掺杂剂)仅包含在相应的层中,这是在相应的层的制备过程中通过标准的提纯方法和常用的技术手段无法避免的。在这点上,电掺杂剂特别是但不限于n型电掺杂剂。n型电掺杂剂可选自:金属或者碱金属;金属盐或者碱土金属盐和/或稀土金属盐;或有机碱金属络合物或者碱金属络合物;或者LiF、LiCl、LiBr、LiI、LiQ、金属硼酸盐;或其混合物。特别地,第一电子传输层和第二电子传输层可不含n型电掺杂剂。n型电掺杂剂可为包含至少一种金属阳离子和至少一种阴离子的金属盐。金属盐的金属阳离子可选自碱金属、碱土金属和稀土金属;或者选自Li、Na、K、Rb、Cs、Mg、Ca、Sr和Ba;或者选自Li、Mg、Ca和Sr。金属盐的阴离子可选自喹啉阴离子、氧化膦阴离子和硼酸阴离子。

[0258] 在这方面,n型电掺杂剂特别是但不限于:元素金属,或者选自碱金属、碱土金属、稀土金属和过渡金属中的正电金属,过渡金属;金属盐,或者碱金属盐、碱土金属盐和/或稀土金属盐;或金属络合物,或者碱金属络合物、碱土金属络合物、过渡金属络合物和/或稀土金属络合物。n型掺杂金属盐的实例可为LiF、LiCl、LiBr、LiI、金属硼酸盐、金属喹啉盐或其混合物。n型电掺杂剂的其它实例是强化学还原剂。这类“氧化还原”n型掺杂剂的特征一般在于,最高占据分子轨道(HOMO)的能级与相应电子传输基质的最低未被占据分子轨道能级大致相当,其在普通OLED传输材料中为约-3.0eV以下。应理解,术语“约-3.0eV以下”是指没有-3.0eV那么负的值,例如-2.8eV、-2.5eV、-2.3eV、-2.1eV或没有-2.0eV那么负的值。

[0259] n型电掺杂剂可以是如EP1837926A1、W007107306A1或W007107356A1中公开的有机化合物。

[0260] 电掺杂剂可基本上是非发光性的。

- [0261] 第一电子传输层和第二电子传输层可彼此直接接触。
- [0262] 电子传输层叠层可由第一电子传输层和第二电子传输层构成。
- [0263] 第二电子传输层可与电子注入层直接接触。
- [0264] 电子注入层可由多个单独的电子注入子层构成。
- [0265] 电子注入层可包含：金属或碱金属；金属盐或碱土金属盐和/或稀土金属盐；或有机碱金属络合物或碱金属络合物；或LiF、LiCl、LiBr、LiI、LiQ、金属硼酸盐；或其混合物。
- [0266] 电子注入层可由如下构成：金属或碱金属；金属盐或碱土金属盐和/或稀土金属盐；或有机碱金属络合物或碱金属络合物；或LiF、LiCl、LiBr、LiI、LiQ、金属硼酸盐；或其混合物。
- [0267] 式(II)化合物可不包含在电子注入层中。式(I)化合物可不包含在电子注入层中。化合物(III)可不包含在电子注入层中。
- [0268] 式(I)化合物、式(II)化合物和化合物(III)可彼此不同和/或可分别不包含在电子注入层中。
- [0269] 示例性实施方案
- [0270] 根据一个实施方案，提供一种有机发光二极管，所述有机发光二极管包含不透明衬底、阳极、阴极、发光层、电子注入层和电子传输层叠层；其中
- [0271] -电子传输层叠层布置在发光层与电子注入层之间；
- [0272] -电子传输层叠层包含第一电子传输层和第二电子传输层；
- [0273] -第一电子传输层包含式(I)化合物，
- [0274]  $(Ar^1-A_c)_a-X_b$  (I)；
- [0275] -a和b独立地为1或2；
- [0276] -c独立地为0或1；
- [0277] -Ar<sup>1</sup>独立地选自C<sub>6</sub>至C<sub>30</sub>芳基或C<sub>2</sub>至C<sub>24</sub>杂芳基，
- [0278] -其中每个Ar<sup>1</sup>可被独立地选自如下中的一个或两个取代基取代：C<sub>6</sub>至C<sub>12</sub>芳基、C<sub>3</sub>至C<sub>11</sub>杂芳基和C<sub>1</sub>至C<sub>6</sub>烷基、D、C<sub>1</sub>至C<sub>6</sub>烷氧基、C<sub>3</sub>至C<sub>6</sub>支化的烷基、C<sub>3</sub>至C<sub>6</sub>环状烷基、C<sub>3</sub>至C<sub>6</sub>支化的烷氧基、C<sub>3</sub>至C<sub>6</sub>环状烷氧基、部分或全氟化的C<sub>1</sub>至C<sub>6</sub>烷基、部分或全氟化的C<sub>1</sub>至C<sub>6</sub>烷氧基、部分或全氘化的C<sub>1</sub>至C<sub>6</sub>烷基、部分或全氘化的C<sub>1</sub>至C<sub>6</sub>烷氧基、卤素、CN或PY(R<sup>10</sup>)<sub>2</sub>，其中Y选自O、S或Se，优选为O，并且R<sup>10</sup>独立地选自C<sub>6</sub>至C<sub>12</sub>芳基、C<sub>3</sub>至C<sub>12</sub>杂芳基、C<sub>1</sub>至C<sub>6</sub>烷基、C<sub>1</sub>至C<sub>6</sub>烷氧基、部分或全氟化的C<sub>1</sub>至C<sub>6</sub>烷基、部分或全氟化的C<sub>1</sub>至C<sub>6</sub>烷氧基、部分或全氘化的C<sub>1</sub>至C<sub>6</sub>烷基、部分或全氘化的C<sub>1</sub>至C<sub>6</sub>烷氧基；
- [0279] -其中Ar<sup>1</sup>上的每个C<sub>6</sub>至C<sub>12</sub>芳基取代基和Ar<sup>1</sup>上的每个C<sub>3</sub>至C<sub>11</sub>杂芳基取代基可被C<sub>1</sub>至C<sub>4</sub>烷基或卤素取代；
- [0280] -A独立地选自C<sub>6</sub>至C<sub>18</sub>芳基，
- [0281] -其中每个A可被独立地选自如下中的一个或两个取代基取代：C<sub>6</sub>至C<sub>12</sub>芳基和C<sub>1</sub>至C<sub>6</sub>烷基、D、C<sub>1</sub>至C<sub>6</sub>烷氧基、C<sub>3</sub>至C<sub>6</sub>支化的烷基、C<sub>3</sub>至C<sub>6</sub>环状烷基、C<sub>3</sub>至C<sub>6</sub>支化的烷氧基、C<sub>3</sub>至C<sub>6</sub>环状烷氧基、部分或全氟化的C<sub>1</sub>至C<sub>6</sub>烷基、部分或全氟化的C<sub>1</sub>至C<sub>6</sub>烷氧基、部分或全氘化的C<sub>1</sub>至C<sub>6</sub>烷基、部分或全氘化的C<sub>1</sub>至C<sub>6</sub>烷氧基、卤素、CN或PY(R<sup>10</sup>)<sub>2</sub>，其中Y选自O、S或Se，优选为O，并且R<sup>10</sup>独立地选自C<sub>6</sub>至C<sub>12</sub>芳基、C<sub>3</sub>至C<sub>12</sub>杂芳基、C<sub>1</sub>至C<sub>6</sub>烷基、C<sub>1</sub>至C<sub>6</sub>烷氧基、部分或全氟化的C<sub>1</sub>至C<sub>6</sub>烷基、部分或全氟化的C<sub>1</sub>至C<sub>6</sub>烷氧基、部分或全氘化的C<sub>1</sub>至C<sub>6</sub>烷基、部分或全氘化的C<sub>1</sub>至C<sub>6</sub>烷氧基；

C<sub>6</sub>烷氧基;

[0282] -其中A上的每个C<sub>6</sub>至C<sub>12</sub>芳基取代基可被C<sub>1</sub>至C<sub>4</sub>烷基或卤素取代;

[0283] -X独立地选自C<sub>3</sub>至C<sub>21</sub>杂芳基,

[0284] -其中每个X可被独立地选自如下中的一个或两个取代基取代:C<sub>6</sub>至C<sub>12</sub>芳基、C<sub>3</sub>至C<sub>11</sub>杂芳基和C<sub>1</sub>至C<sub>6</sub>烷基、D、C<sub>1</sub>至C<sub>6</sub>烷氧基、C<sub>3</sub>至C<sub>6</sub>支化的烷基、C<sub>3</sub>至C<sub>6</sub>环状烷基、C<sub>3</sub>至C<sub>6</sub>支化的烷氧基、C<sub>3</sub>至C<sub>6</sub>环状烷氧基、部分或全氟化的C<sub>1</sub>至C<sub>6</sub>烷基、部分或全氟化的C<sub>1</sub>至C<sub>6</sub>烷氧基、部分或全氘化的C<sub>1</sub>至C<sub>6</sub>烷基、部分或全氘化的C<sub>1</sub>至C<sub>6</sub>烷氧基、卤素、CN或PY(R<sup>10</sup>)<sub>2</sub>,其中Y选自O、S或Se,优选为O,并且R<sup>10</sup>独立地选自C<sub>6</sub>至C<sub>12</sub>芳基、C<sub>3</sub>至C<sub>12</sub>杂芳基、C<sub>1</sub>至C<sub>6</sub>烷基、C<sub>1</sub>至C<sub>6</sub>烷氧基、部分或全氟化的C<sub>1</sub>至C<sub>6</sub>烷基、部分或全氟化的C<sub>1</sub>至C<sub>6</sub>烷氧基、部分或全氘化的C<sub>1</sub>至C<sub>6</sub>烷基、部分或全氘化的C<sub>1</sub>至C<sub>6</sub>烷氧基;

[0285] -其中X上的每个C<sub>6</sub>至C<sub>12</sub>芳基取代基和X上的每个C<sub>3</sub>至C<sub>11</sub>杂芳基取代基可被C<sub>1</sub>至C<sub>4</sub>烷基或卤素取代;

[0286] -式(I)化合物的分子偶极矩 $\geq 0D$ 且 $\leq 3.5D$ ;

[0287] -第二电子传输层包含式(II)化合物,

[0288] (Ar<sup>2</sup>)<sub>m</sub> - (Z<sub>k</sub>-G)<sub>n</sub> (II);

[0289] -m和n独立地为1或2;

[0290] -k独立地为0、1或2;

[0291] -Ar<sup>2</sup>独立地选自C<sub>2</sub>至C<sub>30</sub>杂芳基和C<sub>6</sub>至C<sub>42</sub>芳基,

[0292] -其中每个Ar<sup>2</sup>可被独立地选自如下中的一个或两个取代基取代:C<sub>6</sub>至C<sub>12</sub>芳基、C<sub>3</sub>至C<sub>11</sub>杂芳基和C<sub>1</sub>至C<sub>6</sub>烷基、D、C<sub>1</sub>至C<sub>6</sub>烷氧基、C<sub>3</sub>至C<sub>6</sub>支化的烷基、C<sub>3</sub>至C<sub>6</sub>环状烷基、C<sub>3</sub>至C<sub>6</sub>支化的烷氧基、C<sub>3</sub>至C<sub>6</sub>环状烷氧基、部分或全氟化的C<sub>1</sub>至C<sub>6</sub>烷基、部分或全氟化的C<sub>1</sub>至C<sub>6</sub>烷氧基、部分或全氘化的C<sub>1</sub>至C<sub>6</sub>烷基、部分或全氘化的C<sub>1</sub>至C<sub>6</sub>烷氧基、卤素、CN或PY(R<sup>10</sup>)<sub>2</sub>,其中Y选自O、S或Se,优选为O,并且R<sup>10</sup>独立地选自C<sub>6</sub>至C<sub>12</sub>芳基、C<sub>3</sub>至C<sub>12</sub>杂芳基、C<sub>1</sub>至C<sub>6</sub>烷基、C<sub>1</sub>至C<sub>6</sub>烷氧基、部分或全氟化的C<sub>1</sub>至C<sub>6</sub>烷基、部分或全氟化的C<sub>1</sub>至C<sub>6</sub>烷氧基、部分或全氘化的C<sub>1</sub>至C<sub>6</sub>烷基、部分或全氘化的C<sub>1</sub>至C<sub>6</sub>烷氧基;

[0293] -其中Ar<sup>2</sup>上的每个C<sub>6</sub>至C<sub>12</sub>芳基取代基和Ar<sup>2</sup>上的每个C<sub>3</sub>至C<sub>11</sub>杂芳基取代基可被C<sub>1</sub>至C<sub>4</sub>烷基或卤素取代;

[0294] -Z独立地选自C<sub>6</sub>至C<sub>18</sub>芳基,

[0295] -其中每个Z可被独立地选自如下中的一个或两个取代基取代:C<sub>6</sub>至C<sub>12</sub>芳基和C<sub>1</sub>至C<sub>6</sub>烷基、D、C<sub>1</sub>至C<sub>6</sub>烷氧基、C<sub>3</sub>至C<sub>6</sub>支化的烷基、C<sub>3</sub>至C<sub>6</sub>环状烷基、C<sub>3</sub>至C<sub>6</sub>支化的烷氧基、C<sub>3</sub>至C<sub>6</sub>环状烷氧基、部分或全氟化的C<sub>1</sub>至C<sub>6</sub>烷基、部分或全氟化的C<sub>1</sub>至C<sub>6</sub>烷氧基、部分或全氘化的C<sub>1</sub>至C<sub>6</sub>烷基、部分或全氘化的C<sub>1</sub>至C<sub>6</sub>烷氧基、卤素、CN或PY(R<sup>10</sup>)<sub>2</sub>,其中Y选自O、S或Se,优选为O,并且R<sup>10</sup>独立地选自C<sub>6</sub>至C<sub>12</sub>芳基、C<sub>3</sub>至C<sub>12</sub>杂芳基、C<sub>1</sub>至C<sub>6</sub>烷基、C<sub>1</sub>至C<sub>6</sub>烷氧基、部分或全氟化的C<sub>1</sub>至C<sub>6</sub>烷基、部分或全氟化的C<sub>1</sub>至C<sub>6</sub>烷氧基、部分或全氘化的C<sub>1</sub>至C<sub>6</sub>烷基、部分或全氘化的C<sub>1</sub>至C<sub>6</sub>烷氧基;

[0296] -其中Z上的每个C<sub>6</sub>至C<sub>12</sub>芳基取代基可被C<sub>1</sub>至C<sub>4</sub>烷基或卤素取代;

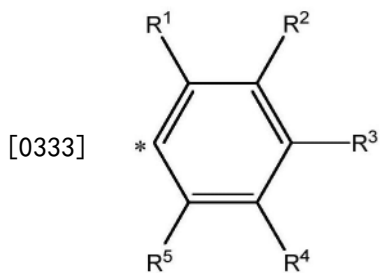
[0297] -G选择为使化合物G-苯基的偶极矩 $\geq 2D$ 且 $\leq 6D$ ;并且

[0298] -第一电子传输层和第二电子传输层不含电掺杂剂;并且

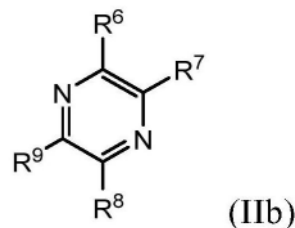
[0299] -式(I)化合物不含1,3,5-三嗪;

- [0300] 根据一个实施方案,提供一种有机发光二极管,所述有机发光二极管包含不透明衬底、阳极、阴极、发光层、电子注入层和电子传输层叠层;其中
- [0301] -电子传输层叠层布置在发光层与电子注入层之间;
- [0302] -电子传输层叠层包含第一电子传输层和第二电子传输层;
- [0303] -第一电子传输层包含式 (I) 化合物,
- [0304]  $(Ar^1-A_c)_a-X_b$  (I);
- [0305] -a和b独立地为1或2;
- [0306] -c独立地为0或1;
- [0307] -Ar<sup>1</sup>独立地选自C<sub>6</sub>至C<sub>30</sub>芳基或C<sub>2</sub>至C<sub>24</sub>杂芳基,
- [0308] -其中每个Ar<sup>1</sup>可被独立地选自如下中的一个或两个取代基取代:苯基、萘基、联苯基、吡啶基、甲代吡啶基、二甲基吡啶基、二苯并呋喃基、二苯并噻吩基和苯并噻吩基;
- [0309] -A独立地选自C<sub>6</sub>至C<sub>18</sub>芳基,
- [0310] -其中每个A可被独立地选自苯基和C<sub>1</sub>至C<sub>4</sub>烷基中的一个或两个取代基取代;
- [0311] -X独立地选自C<sub>3</sub>至C<sub>21</sub>含N杂芳基和C<sub>3</sub>至C<sub>21</sub>含O杂芳基,
- [0312] -其中每个X可被独立地选自苯基、萘基和联苯基中的一个或两个取代基取代;
- [0313] -式 (I) 化合物的分子偶极矩 $\geq 0.2D$ 且 $\leq 3.5D$ ;
- [0314] -第二电子传输层包含式 (II) 化合物,
- [0315]  $(Ar^2)_m-(Z_k-G)_n$  (II);
- [0316] -m和n独立地为1或2;
- [0317] -k独立地为0、1或2;
- [0318] -Ar<sup>2</sup>独立地选自C<sub>3</sub>至C<sub>21</sub>杂芳基和C<sub>6</sub>至C<sub>24</sub>芳基,
- [0319] -其中每个Ar<sup>2</sup>可被独立地选自苯基、吡啶基和联苯基,任选对联苯基中的一个或两个取代基取代;
- [0320] -Z独立地选自C<sub>6</sub>至C<sub>18</sub>芳基,
- [0321] -其中每个Z可被独立地选自苯基和C<sub>1</sub>至C<sub>4</sub>烷基中的一个或两个取代基取代;
- [0322] -G选自二烷基氧磷基、二芳基氧磷基、烷基芳基氧磷基、腈、苯甲腈、烟腈、酰胺、脲基和C<sub>2</sub>至C<sub>42</sub>杂芳基;其中G可包含连接到所述基团的一个或多个取代基,其中所述一个或多个取代基选自C<sub>6</sub>至C<sub>18</sub>芳基、C<sub>1</sub>至C<sub>10</sub>烷基、C<sub>2</sub>至C<sub>14</sub>杂芳基;并且
- [0323] -第一电子传输层和第二电子传输层不含电掺杂剂;并且
- [0324] -式 (I) 化合物不含1,3,5-三嗪。
- [0325] 根据一个实施方案,提供一种有机发光二极管,所述有机发光二极管包含不透明衬底、阳极、阴极、发光层、电子注入层和电子传输层叠层;其中
- [0326] -电子传输层叠层布置在发光层与电子注入层之间;
- [0327] -电子传输层叠层包含第一电子传输层和第二电子传输层;
- [0328] -第一电子传输层包含式 (I) 化合物,
- [0329]  $(Ar^1-A_c)_a-X_b$  (I);
- [0330] -a和b独立地为1或2;
- [0331] -c独立地为0或1;
- [0332] -Ar<sup>1</sup>独立地选自苯基、萘基、蒽基、荧蒽基、咕吨基、二苯并呋喃基、噻啶基、吡嗪

基、螺-咕吨基、芴基、螺-芴基、三苯基甲硅烷基、四苯基甲硅烷基、具有式 (IIa) 的基团和具有式 (IIb) 的基团，



(IIa)



(IIb)

[0334] 其中

[0335] -星号“\*”表示将式 (IIa) 的基团结合到A的结合位置；并且

[0336] -R<sup>1</sup>至R<sup>9</sup>独立地选自H、C<sub>6</sub>至C<sub>12</sub>芳基和C<sub>4</sub>至C<sub>10</sub>杂芳基，

[0337] -其中每个Ar<sup>1</sup>可被独立地选自如下中的一个或两个取代基取代：苯基、萘基、联苯基、吡啶基、甲代吡啶基、二甲基吡啶基、二苯并咪喃基、二苯并噻吩基和苯并噻吩基；

[0338] -A独立地选自亚苯基、亚萘基、亚联苯基和亚三联苯基，

[0339] -其中每个A可被独立地选自苯基和C<sub>1</sub>至C<sub>4</sub>烷基中的一个或两个取代基取代；

[0340] -X独立地选自C<sub>3</sub>至C<sub>21</sub>含N杂芳基，

[0341] -其中每个X可被独立地选自苯基、萘基和联苯基中的一个或两个取代基取代；

[0342] -式 (I) 化合物的分子偶极矩≥0.4D且≤3.2D；

[0343] -第二电子传输层包含式 (II) 化合物，

[0344]  $(Ar^2)_m - (Z_k - G)_n$  (II)；

[0345] -m和n独立地为1或2；

[0346] -k独立地为1或2；

[0347] -Ar<sup>2</sup>独立地选自C<sub>3</sub>至C<sub>21</sub>含N杂芳基和C<sub>6</sub>至C<sub>24</sub>芳基，

[0348] -其中每个Ar<sup>2</sup>可被独立地选自苯基、吡啶基和联苯基，任选对联苯基中的一个或两个取代基取代；

[0349] -Z独立地选自亚苯基、亚萘基、亚苯基-亚萘基、亚联苯基和亚三联苯基，

[0350] -其中每个Z可被独立地选自苯基和C<sub>1</sub>至C<sub>4</sub>烷基中的一个或两个取代基取代；

[0351] -G选自C<sub>2</sub>至C<sub>25</sub>杂芳基；G可包含连接到所述基团的一个或多个取代基，其中所述一个或多个取代基选自C<sub>6</sub>至C<sub>12</sub>芳基、C<sub>1</sub>至C<sub>6</sub>烷基、C<sub>2</sub>至C<sub>11</sub>杂芳基；并且

[0352] -第一电子传输层和第二电子传输层不含电掺杂剂；并且

[0353] -式 (I) 化合物不含1, 3, 5-三嗪。

[0354] 根据一个实施方案，提供一种有机发光二极管，所述有机发光二极管包含不透明衬底、阳极、阴极、发光层、电子注入层和电子传输层叠层；其中

[0355] -电子传输层叠层布置在发光层与电子注入层之间；

[0356] -电子传输层叠层包含第一电子传输层和第二电子传输层；

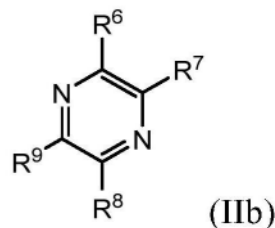
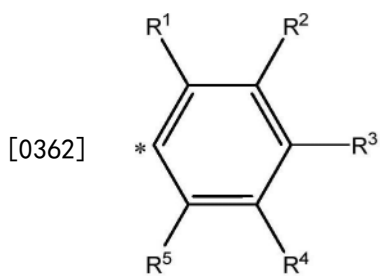
[0357] -第一电子传输层包含式 (I) 化合物，

[0358]  $(Ar^1 - A_c)_a - X_b$  (I)；

[0359] -a和b独立地为1或2；

[0360] -c独立地为0或1；

[0361] -Ar<sup>1</sup>独立地选自茱萸基、二苯并呋喃基、嘧啶基、吡嗪基、9,9-二甲基芴基、具有式(IIa)的基团、具有式(IIb)的基团,



[0363] 其中

[0364] -星号“\*”表示将式(IIa)的基团结合到A的结合位置;并且

[0365] -R<sup>1</sup>为H,且R<sup>2</sup>至R<sup>5</sup>独立地为苯基;或

[0366] -R<sup>1</sup>和R<sup>3</sup>为苯基,且R<sup>2</sup>、R<sup>4</sup>和R<sup>5</sup>为H或

[0367] -R<sup>6</sup>至R<sup>9</sup>为苯基,

[0368] -其中每个Ar<sup>1</sup>可被独立地选自如下中的一个或两个取代基取代:苯基、萘基、联苯基、吡啶基、甲代吡啶基、二甲基吡啶基、二苯并呋喃基、二苯并噻吩基和苯并噻吩基;

[0369] -A独立地选自亚苯基、亚萘基、亚联苯基和亚三联苯基,

[0370] -其中每个A可被独立地选自苯基和C<sub>1</sub>至C<sub>4</sub>烷基中的一个或两个取代基取代;

[0371] -X独立地选自:哒嗪基、嘧啶基、吡嗪基、喹啉基、苯并喹啉基、苯并咪唑基、喹啉基、苯并吡啶基、二苯并吡啶基、菲咯啉基和二萘并呋喃基,其可分别被取代或未被取代,

[0372] -其中每个X可被独立地选自苯基、萘基和联苯基中的一个或两个取代基取代;

[0373] -式(I)化合物的分子偶极矩为 $\geq 0.4D$ 且 $\leq 3.2D$ ;

[0374] -第二电子传输层包含式(II)化合物,

[0375]  $(Ar^2)_m - (Z_k - G)_n$  (II);

[0376] -m和n独立地为1或2;

[0377] -k独立地为1或2;

[0378] -Ar<sup>2</sup>独立地选自吡啶基、三嗪基、1,2-二嗪基、1,3-二嗪基、1,4-二嗪基、喹啉基、苯并喹啉基、苯并咪唑基、喹啉基、苯并喹啉基、苯并吡啶基、二苯并吡啶基、茱萸基、萸基、萘基、联三苯叉基、菲咯啉基和二萘并呋喃基,

[0379] -其中每个Ar<sup>2</sup>可被独立地选自苯基、吡啶基和联苯基,任选对联苯基中的一个或两个取代基取代;

[0380] -Z独立地选自亚苯基、亚萘基、亚苯基-亚萘基、亚联苯基和亚三联苯基,

[0381] -其中每个Z可被独立地选自苯基和C<sub>1</sub>至C<sub>4</sub>烷基中的一个或两个取代基取代;

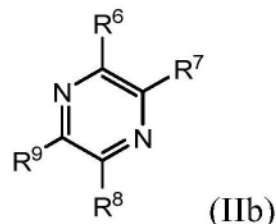
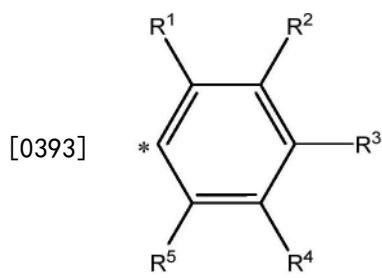
[0382] -G选自二-C<sub>1</sub>至C<sub>4</sub>烷基氧磷基、二-C<sub>6</sub>至C<sub>10</sub>芳基氧磷基和C<sub>2</sub>至C<sub>25</sub>杂芳基;其中相应的G可包含连接到所述基团的一个或多个取代基,其中所述一个或多个取代基选自C<sub>6</sub>至C<sub>10</sub>芳基、C<sub>1</sub>至C<sub>4</sub>烷基、C<sub>2</sub>至C<sub>5</sub>杂芳基;并且

[0383] -第一电子传输层和第二电子传输层不含电掺杂剂;

[0384] -式(I)化合物不含1,3,5-三嗪。

[0385] 根据一个实施方案,提供一种有机发光二极管,所述有机发光二极管包含不透明衬底、阳极、阴极、发光层、电子注入层和电子传输层叠层;其中

- [0386] -电子传输层叠层布置在发光层与电子注入层之间；  
 [0387] -电子传输层叠层包含第一电子传输层和第二电子传输层；  
 [0388] -第一电子传输层包含式 (I) 化合物，  
 [0389]  $(Ar^1-A_c)_a-X_b$  (I)；  
 [0390] -a和b独立地为1或2；  
 [0391] -c独立地为0或1；  
 [0392] -Ar<sup>1</sup>独立地选自茱萸基、二苯并呋喃基、嘧啶基、吡嗪基、9,9-二甲基芴基、具有式 (IIa) 的基团、具有式 (IIb) 的基团，



- [0394] 其中  
 [0395] -星号“\*”表示将式 (IIa) 的基团结合到A的结合位置；并且  
 [0396] -R<sup>1</sup>为H,且R<sup>2</sup>至R<sup>5</sup>独立地为苯基；或  
 [0397] -R<sup>1</sup>和R<sup>3</sup>为苯基,且R<sup>2</sup>、R<sup>4</sup>和R<sup>5</sup>为H或  
 [0398] -R<sup>6</sup>至R<sup>9</sup>为苯基；  
 [0399] -其中每个Ar<sup>1</sup>可被独立地选自如下中的一个或两个取代基取代：苯基、萘基、联苯基、吡啶基、甲代吡啶基、二甲基吡啶基、二苯并呋喃基、二苯并噻吩基和苯并噻吩基；  
 [0400] -A独立地选自亚苯基和亚联苯基；  
 [0401] -其中每个A可被独立地选自苯基和C<sub>1</sub>至C<sub>4</sub>烷基中的一个或两个取代基取代；  
 [0402] -X独立地选自：嘧啶基、吡嗪基、喹啉基、苯并喹啉基、苯并吡啶基、二苯并吡啶基,其可分别被取代或未被取代，  
 [0403] -其中每个X可被独立地选自苯基、萘基和联苯基中的一个或两个取代基取代；  
 [0404] -式 (I) 化合物的分子偶极矩为 $\geq 0.4D$ 且 $\leq 3.2D$ ；  
 [0405] -第二电子传输层包含式 (II) 化合物，  
 [0406]  $(Ar^2)_m-(Z_k-G)_n$  (II)；  
 [0407] -m和n独立地为1或2；  
 [0408] -k独立地为1或2；  
 [0409] -Ar<sup>2</sup>独立地选自：二苯并吡啶基、1,3-二嗪基、1,4-二嗪基、茱萸基、三嗪基、菲咯啉基、联三苯叉基、吡啶基、二萘并呋喃基，  
 [0410] -其中每个Ar<sup>2</sup>可被独立地选自苯基、吡啶基和联苯基,任选对联苯基中的一个或两个取代基取代；  
 [0411] -Z独立地选自亚苯基、亚萘基、亚苯基-亚萘基、亚联苯基和亚三联苯基，  
 [0412] -其中每个Z可被独立地选自苯基和C<sub>1</sub>至C<sub>4</sub>烷基中的一个或两个取代基取代；  
 [0413] -G选自二甲基氧膦基、二苯基氧膦基、膦、苯甲膦、烟膦、二氢-苯并咪唑酮基,二苯基丙烷基、N,N-二甲基乙酰胺、酰胺、脲基、咪唑基、苯基苯并咪唑基、乙基苯并咪唑基、苯基

苯并噻啉基、苯基苯并咪唑并噻啉基、吡啶基、联吡啶基、甲代吡啶基、二甲基吡啶基、哒嗪基、嘧啶基、吡嗪基、三苯基-吡嗪基、苯并噻啉基、菲咯啉基、苯基菲咯啉和吡啶基-咪唑并吡啶基；并且

- [0414] -第一电子传输层和第二电子传输层不含电掺杂剂；
- [0415] -式(I)化合物不含1,3,5-三嗪。
- [0416] 根据一个实施方案,提供一种有机发光二极管,所述有机发光二极管包含不透明衬底、阳极、阴极、发光层、电子注入层和电子传输层叠层；其中
- [0417] -电子传输层叠层布置在发光层与电子注入层之间；
- [0418] -电子传输层叠层包含第一电子传输层和第二电子传输层；
- [0419] -第一电子传输层包含选自化合物A-1至A-12中的化合物；
- [0420] -第二电子传输层包含选自表2中所示化合物B-1至B-26中的化合物；
- [0421] -第一电子传输层和第二电子传输层不含电掺杂剂；并且
- [0422] -式(I)化合物不含1,3,5-三嗪。
- [0423] 根据一个实施方案,提供一种有机发光二极管,所述有机发光二极管包含不透明衬底、阳极、阴极、发光层、电子注入层和电子传输层叠层；其中
- [0424] -电子传输层叠层布置在发光层与电子注入层之间；
- [0425] -电子传输层叠层包含第一电子传输层和第二电子传输层；
- [0426] -第一电子传输层包含式(I)化合物,
- [0427]  $(Ar^1-A_c)_a-X_b$  (I)；
- [0428] -a和b独立地为1或2；
- [0429] -c独立地为0或1；
- [0430] -Ar<sup>1</sup>独立地选自C<sub>6</sub>至C<sub>30</sub>芳基或C<sub>2</sub>至C<sub>24</sub>杂芳基,
- [0431] -其中每个Ar<sup>1</sup>可被独立地选自如下中的一个或两个取代基取代:C<sub>6</sub>至C<sub>12</sub>芳基、C<sub>3</sub>至C<sub>11</sub>杂芳基和C<sub>1</sub>至C<sub>6</sub>烷基、D、C<sub>1</sub>至C<sub>6</sub>烷氧基、C<sub>3</sub>至C<sub>6</sub>支化的烷基、C<sub>3</sub>至C<sub>6</sub>环状烷基、C<sub>3</sub>至C<sub>6</sub>支化的烷氧基、C<sub>3</sub>至C<sub>6</sub>环状烷氧基、部分或全氟化的C<sub>1</sub>至C<sub>6</sub>烷基、部分或全氟化的C<sub>1</sub>至C<sub>6</sub>烷氧基、部分或全氘化的C<sub>1</sub>至C<sub>6</sub>烷基、部分或全氘化的C<sub>1</sub>至C<sub>6</sub>烷氧基、卤素、CN或PY(R<sup>10</sup>)<sub>2</sub>,其中Y选自O、S或Se,优选为O,并且R<sup>10</sup>独立地选自C<sub>6</sub>至C<sub>12</sub>芳基、C<sub>3</sub>至C<sub>12</sub>杂芳基、C<sub>1</sub>至C<sub>6</sub>烷基、C<sub>1</sub>至C<sub>6</sub>烷氧基、部分或全氟化的C<sub>1</sub>至C<sub>6</sub>烷基、部分或全氟化的C<sub>1</sub>至C<sub>6</sub>烷氧基、部分或全氘化的C<sub>1</sub>至C<sub>6</sub>烷基、部分或全氘化的C<sub>1</sub>至C<sub>6</sub>烷氧基；
- [0432] -其中Ar<sup>1</sup>上的每个C<sub>6</sub>至C<sub>12</sub>芳基取代基和Ar<sup>1</sup>上的每个C<sub>3</sub>至C<sub>11</sub>杂芳基取代基可被C<sub>1</sub>至C<sub>4</sub>烷基或卤素取代；
- [0433] -A独立地选自C<sub>6</sub>至C<sub>18</sub>芳基,
- [0434] -其中每个A可被独立地选自如下中的一个或两个取代基取代:C<sub>6</sub>至C<sub>12</sub>芳基和C<sub>1</sub>至C<sub>6</sub>烷基、D、C<sub>1</sub>至C<sub>6</sub>烷氧基、C<sub>3</sub>至C<sub>6</sub>支化的烷基、C<sub>3</sub>至C<sub>6</sub>环状烷基、C<sub>3</sub>至C<sub>6</sub>支化的烷氧基、C<sub>3</sub>至C<sub>6</sub>环状烷氧基、部分或全氟化的C<sub>1</sub>至C<sub>6</sub>烷基、部分或全氟化的C<sub>1</sub>至C<sub>6</sub>烷氧基、部分或全氘化的C<sub>1</sub>至C<sub>6</sub>烷基、部分或全氘化的C<sub>1</sub>至C<sub>6</sub>烷氧基、卤素、CN或PY(R<sup>10</sup>)<sub>2</sub>,其中Y选自O、S或Se,优选为O,并且R<sup>10</sup>独立地选自C<sub>6</sub>至C<sub>12</sub>芳基、C<sub>3</sub>至C<sub>12</sub>杂芳基、C<sub>1</sub>至C<sub>6</sub>烷基、C<sub>1</sub>至C<sub>6</sub>烷氧基、部分或全氟化的C<sub>1</sub>至C<sub>6</sub>烷基、部分或全氟化的C<sub>1</sub>至C<sub>6</sub>烷氧基、部分或全氘化的C<sub>1</sub>至C<sub>6</sub>烷基、部分或全氘化的C<sub>1</sub>至C<sub>6</sub>烷氧基；

- [0435] -其中A上的每个C<sub>6</sub>至C<sub>12</sub>芳基取代基可被C<sub>1</sub>至C<sub>4</sub>烷基或卤素取代;
- [0436] -X独立地选自C<sub>3</sub>至C<sub>21</sub>杂芳基,
- [0437] -其中每个X可被独立地选自如下中的一个或两个取代基取代:C<sub>6</sub>至C<sub>12</sub>芳基、C<sub>3</sub>至C<sub>11</sub>杂芳基和C<sub>1</sub>至C<sub>6</sub>烷基、D、C<sub>1</sub>至C<sub>6</sub>烷氧基、C<sub>3</sub>至C<sub>6</sub>支化的烷基、C<sub>3</sub>至C<sub>6</sub>环状烷基、C<sub>3</sub>至C<sub>6</sub>支化的烷氧基、C<sub>3</sub>至C<sub>6</sub>环状烷氧基、部分或全氟化的C<sub>1</sub>至C<sub>6</sub>烷基、部分或全氟化的C<sub>1</sub>至C<sub>6</sub>烷氧基、部分或全氘化的C<sub>1</sub>至C<sub>6</sub>烷基、部分或全氘化的C<sub>1</sub>至C<sub>6</sub>烷氧基、卤素、CN或PY(R<sup>10</sup>)<sub>2</sub>,其中Y选自O、S或Se,优选为O,并且R<sup>10</sup>独立地选自C<sub>6</sub>至C<sub>12</sub>芳基、C<sub>3</sub>至C<sub>12</sub>杂芳基、C<sub>1</sub>至C<sub>6</sub>烷基、C<sub>1</sub>至C<sub>6</sub>烷氧基、部分或全氟化的C<sub>1</sub>至C<sub>6</sub>烷基、部分或全氟化的C<sub>1</sub>至C<sub>6</sub>烷氧基、部分或全氘化的C<sub>1</sub>至C<sub>6</sub>烷基、部分或全氘化的C<sub>1</sub>至C<sub>6</sub>烷氧基;
- [0438] -其中X上的每个C<sub>6</sub>至C<sub>12</sub>芳基取代基和X上的每个C<sub>3</sub>至C<sub>11</sub>杂芳基取代基可被C<sub>1</sub>至C<sub>4</sub>烷基或卤素取代;
- [0439] -式(I)化合物的分子偶极矩为≥0D且≤3.5D;
- [0440] -第二电子传输层包含式(II)化合物,
- [0441] (Ar<sup>2</sup>)<sub>m</sub> - (Z<sub>k</sub>-G)<sub>n</sub> (II);
- [0442] -m和n独立地为1或2;
- [0443] -k独立地为0、1或2;
- [0444] -Ar<sup>2</sup>独立地选自C<sub>3</sub>至C<sub>30</sub>杂芳基和C<sub>6</sub>至C<sub>42</sub>芳基,
- [0445] -其中每个Ar<sup>2</sup>可被独立地选自如下中的一个或两个取代基取代:C<sub>6</sub>至C<sub>12</sub>芳基、C<sub>3</sub>至C<sub>11</sub>杂芳基和C<sub>1</sub>至C<sub>6</sub>烷基、D、C<sub>1</sub>至C<sub>6</sub>烷氧基、C<sub>3</sub>至C<sub>6</sub>支化的烷基、C<sub>3</sub>至C<sub>6</sub>环状烷基、C<sub>3</sub>至C<sub>6</sub>支化的烷氧基、C<sub>3</sub>至C<sub>6</sub>环状烷氧基、部分或全氟化的C<sub>1</sub>至C<sub>6</sub>烷基、部分或全氟化的C<sub>1</sub>至C<sub>6</sub>烷氧基、部分或全氘化的C<sub>1</sub>至C<sub>6</sub>烷基、部分或全氘化的C<sub>1</sub>至C<sub>6</sub>烷氧基、卤素、CN或PY(R<sup>10</sup>)<sub>2</sub>,其中Y选自O、S或Se,优选为O,并且R<sup>10</sup>独立地选自C<sub>6</sub>至C<sub>12</sub>芳基、C<sub>3</sub>至C<sub>12</sub>杂芳基、C<sub>1</sub>至C<sub>6</sub>烷基、C<sub>1</sub>至C<sub>6</sub>烷氧基、部分或全氟化的C<sub>1</sub>至C<sub>6</sub>烷基、部分或全氟化的C<sub>1</sub>至C<sub>6</sub>烷氧基、部分或全氘化的C<sub>1</sub>至C<sub>6</sub>烷基、部分或全氘化的C<sub>1</sub>至C<sub>6</sub>烷氧基;
- [0446] -其中Ar<sup>2</sup>上的每个C<sub>6</sub>至C<sub>12</sub>芳基取代基和Ar<sup>2</sup>上的每个C<sub>3</sub>至C<sub>11</sub>杂芳基取代基可被C<sub>1</sub>至C<sub>4</sub>烷基或卤素取代;
- [0447] -Z独立地选自C<sub>6</sub>至C<sub>18</sub>芳基,
- [0448] -其中每个Z可被独立地选自如下中的一个或两个取代基取代:C<sub>6</sub>至C<sub>12</sub>芳基和C<sub>1</sub>至C<sub>6</sub>烷基、D、C<sub>1</sub>至C<sub>6</sub>烷氧基、C<sub>3</sub>至C<sub>6</sub>支化的烷基、C<sub>3</sub>至C<sub>6</sub>环状烷基、C<sub>3</sub>至C<sub>6</sub>支化的烷氧基、C<sub>3</sub>至C<sub>6</sub>环状烷氧基、部分或全氟化的C<sub>1</sub>至C<sub>6</sub>烷基、部分或全氟化的C<sub>1</sub>至C<sub>6</sub>烷氧基、部分或全氘化的C<sub>1</sub>至C<sub>6</sub>烷基、部分或全氘化的C<sub>1</sub>至C<sub>6</sub>烷氧基、卤素、CN或PY(R<sup>10</sup>)<sub>2</sub>,其中Y选自O、S或Se,优选为O,并且R<sup>10</sup>独立地选自C<sub>6</sub>至C<sub>12</sub>芳基、C<sub>3</sub>至C<sub>12</sub>杂芳基、C<sub>1</sub>至C<sub>6</sub>烷基、C<sub>1</sub>至C<sub>6</sub>烷氧基、部分或全氟化的C<sub>1</sub>至C<sub>6</sub>烷基、部分或全氟化的C<sub>1</sub>至C<sub>6</sub>烷氧基、部分或全氘化的C<sub>1</sub>至C<sub>6</sub>烷基、部分或全氘化的C<sub>1</sub>至C<sub>6</sub>烷氧基;
- [0449] -其中Z上的每个C<sub>6</sub>至C<sub>12</sub>芳基取代基可被C<sub>1</sub>至C<sub>4</sub>烷基或卤素取代;
- [0450] -G选择为使化合物G-苯基的偶极矩为≥2D且≤6D;
- [0451] -第二电子传输层还包含化合物(III),其中所述化合物(III)包含8至13个芳族或杂芳族环;
- [0452] -第一电子传输层和第二电子传输层不含电掺杂剂;并且

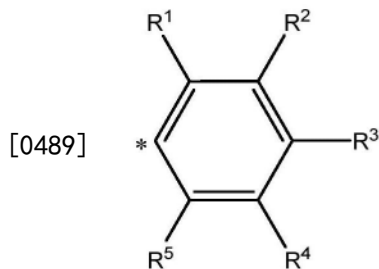
- [0453] -式(I)化合物不含1,3,5-三嗪。
- [0454] 根据一个实施方案,提供一种有机发光二极管,所述有机发光二极管包含不透明衬底、阳极、阴极、发光层、电子注入层和电子传输层叠层;其中
- [0455] -电子传输层叠层布置在发光层与电子注入层之间;
- [0456] -电子传输层叠层包含第一电子传输层和第二电子传输层;
- [0457] -第一电子传输层包含式(I)化合物,
- [0458]  $(Ar^1-A_c)_a-X_b$  (I);
- [0459] -a和b独立地为1或2;
- [0460] -c独立地为0或1;
- [0461] -Ar<sup>1</sup>独立地选自C<sub>6</sub>至C<sub>30</sub>芳基或C<sub>2</sub>至C<sub>24</sub>杂芳基,
- [0462] -其中每个Ar<sup>1</sup>可被独立地选自如下中的一个或两个取代基取代:苯基、萘基、联苯基、吡啶基、甲代吡啶基、二甲基吡啶基、二苯并呋喃基、二苯并噻吩基和苯并噻吩基;
- [0463] -A独立地选自C<sub>6</sub>至C<sub>18</sub>芳基,
- [0464] -其中每个A可被独立地选自苯基和C<sub>1</sub>至C<sub>4</sub>烷基中的一个或两个取代基取代;
- [0465] -X独立地选自C<sub>3</sub>至C<sub>21</sub>含N杂芳基和C<sub>3</sub>至C<sub>21</sub>含O杂芳基,
- [0466] -其中每个X可被独立地选自苯基、萘基和联苯基中的一个或两个取代基取代;
- [0467] -式(I)化合物的分子偶极矩为 $\geq 0.2D$ 且 $\leq 3.5D$ ;
- [0468] -第二电子传输层包含式(II)化合物,
- [0469]  $(Ar^2)_m-(Z_k-G)_n$  (II);
- [0470] -m和n独立地为1或2;
- [0471] -k独立地为0、1或2;
- [0472] -Ar<sup>2</sup>独立地选自C<sub>3</sub>至C<sub>21</sub>杂芳基和C<sub>6</sub>至C<sub>24</sub>芳基,
- [0473] -其中每个Ar<sup>2</sup>可被独立地选自苯基、吡啶基和联苯基,任选对联苯基中的一个或两个取代基取代;
- [0474] -Z独立地选自C<sub>6</sub>至C<sub>18</sub>芳基,
- [0475] -其中每个Z可被独立地选自苯基和C<sub>1</sub>至C<sub>4</sub>烷基中的一个或两个取代基取代;
- [0476] -G选自二烷基氧磷基、二芳基氧磷基、烷基芳基氧磷基、腈、苯甲腈、烟腈、酰胺、脲基和C<sub>2</sub>至C<sub>42</sub>杂芳基;其中G可包含连接到所述基团的一个或多个取代基,其中所述一个或多个取代基选自C<sub>6</sub>至C<sub>18</sub>芳基、C<sub>1</sub>至C<sub>10</sub>烷基、C<sub>2</sub>至C<sub>14</sub>杂芳基;
- [0477] -第二电子传输层还包含化合物(III),其中所述化合物(III)包含8至13个芳族或杂芳族环;
- [0478] -化合物(III)包含至少一个杂芳族环;
- [0479] -第一电子传输层和第二电子传输层不含电掺杂剂;并且
- [0480] -式(I)化合物不含1,3,5-三嗪。
- [0481] 根据一个实施方案,提供一种有机发光二极管,所述有机发光二极管包含不透明衬底、阳极、阴极、发光层、电子注入层和电子传输层叠层;其中
- [0482] -电子传输层叠层布置在发光层与电子注入层之间;
- [0483] -电子传输层叠层包含第一电子传输层和第二电子传输层;
- [0484] -第一电子传输层包含式(I)化合物,

[0485]  $(Ar^1-A_c)_a-X_b$  (I);

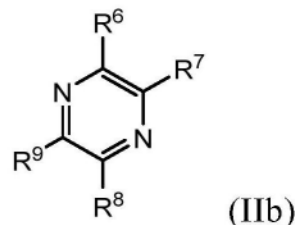
[0486] -a和b独立地为1或2;

[0487] -c独立地为0或1;

[0488] -Ar<sup>1</sup>独立地选自苯基、萘基、蒽基、荧蒽基、咕吨基、二苯并呋喃基、嘧啶基、吡嗪基、螺-咕吨基、茛基、螺-茛基、三苯基甲硅烷基、四苯基甲硅烷基、具有式 (IIa) 的基团和具有式 (IIb) 的基团,



(IIa)



(IIb)

[0490] 其中

[0491] -星号“\*”表示将式 (IIa) 的基团结合到A的结合位置;并且

[0492] -R<sup>1</sup>至R<sup>9</sup>独立地选自H、C<sub>6</sub>至C<sub>12</sub>芳基和C<sub>4</sub>至C<sub>10</sub>杂芳基,

[0493] -其中每个Ar<sup>1</sup>可被独立地选自如下中的一个或两个取代基取代:苯基、萘基、联苯基、吡啶基、甲代吡啶基、二甲基吡啶基、二苯并呋喃基、二苯并噻吩基和苯并噻吩基;

[0494] -A独立地选自亚苯基、亚萘基、亚联苯基和亚三联苯基,

[0495] -其中每个A可被独立地选自苯基和C<sub>1</sub>至C<sub>4</sub>烷基中的一个或两个取代基取代;

[0496] -X独立地选自C<sub>3</sub>至C<sub>21</sub>含N杂芳基,

[0497] -其中每个X可被独立地选自苯基、萘基和联苯基中的一个或两个取代基取代;

[0498] -式 (I) 化合物的分子偶极矩为 $\geq 0.4D$ 且 $\leq 3.2D$ ;

[0499] -第二电子传输层包含式 (II) 化合物,

[0500]  $(Ar^2)_m-(Z_k-G)_n$  (II);

[0501] -m和n独立地为1或2;

[0502] -k独立地为1或2;

[0503] -Ar<sup>2</sup>独立地选自C<sub>3</sub>至C<sub>21</sub>含N杂芳基和C<sub>6</sub>至C<sub>24</sub>芳基,

[0504] -其中每个Ar<sup>2</sup>可被独立地选自苯基、吡啶基和联苯基,任选对联苯基中的一个或两个取代基取代;

[0505] -Z独立地选自亚苯基、亚萘基、亚苯基-亚萘基、亚联苯基和亚三联苯基,

[0506] -其中每个Z可被独立地选自苯基和C<sub>1</sub>至C<sub>4</sub>烷基中的一个或两个取代基取代;

[0507] -G选自C<sub>2</sub>至C<sub>25</sub>杂芳基;G可包含连接到所述基团的一个或多个取代基,其中所述一个或多个取代基选自C<sub>6</sub>至C<sub>12</sub>芳基、C<sub>1</sub>至C<sub>6</sub>烷基、C<sub>2</sub>至C<sub>11</sub>杂芳基;

[0508] -第二电子传输层可还包含化合物 (III),其中所述化合物 (III) 包含8至13个芳族或杂芳族环;

[0509] -化合物 (III) 包含至少一个杂芳族环;

[0510] -化合物 (III) 的芳族或杂芳族环是6元环;

[0511] -第一电子传输层和第二电子传输层不含电掺杂剂;并且

[0512] -式 (I) 化合物不含1,3,5-三嗪。

[0513] 根据一个实施方案,提供一种有机发光二极管,所述有机发光二极管包含不透明衬底、阳极、阴极、发光层、电子注入层和电子传输层叠层;其中

[0514] -电子传输层叠层布置在发光层与电子注入层之间;

[0515] -电子传输层叠层包含第一电子传输层和第二电子传输层;

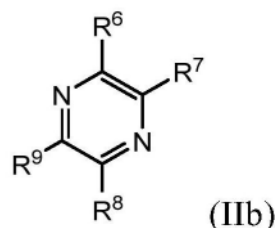
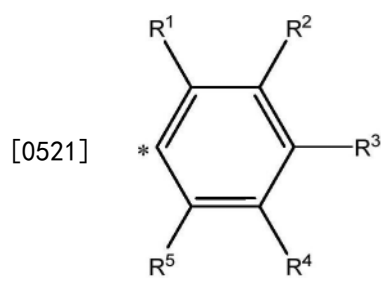
[0516] -第一电子传输层包含式 (I) 化合物,

[0517]  $(Ar^1-A_c)_a-X_b$  (I);

[0518] -a和b独立地为1或2;

[0519] -c独立地为0或1;

[0520] -Ar<sup>1</sup>独立地选自荧蒽基、二苯并呋喃基、嘧啶基、吡嗪基、9,9-二甲基芴基、具有式 (IIa) 的基团、具有式 (IIb) 的基团,



[0522] 其中

[0523] -星号“\*”表示将式 (IIa) 的基团结合到A的结合位置;并且

[0524] -R<sup>1</sup>为H,且R<sup>2</sup>至R<sup>5</sup>独立地为苯基;或

[0525] -R<sup>1</sup>和R<sup>3</sup>为苯基,且R<sup>2</sup>、R<sup>4</sup>和R<sup>5</sup>为H或

[0526] -R<sup>6</sup>至R<sup>9</sup>为苯基,

[0527] -其中每个Ar<sup>1</sup>可被独立地选自如下中的一个或两个取代基取代:苯基、萘基、联苯基、吡啶基、甲代吡啶基、二甲基吡啶基、二苯并呋喃基、二苯并噻吩基和苯并噻吩基;

[0528] -A独立地选自亚苯基、亚萘基、亚联苯基和亚三联苯基,

[0529] -其中每个A可被独立地选自苯基和C<sub>1</sub>至C<sub>4</sub>烷基中的一个或两个取代基取代;

[0530] -X独立地选自:哒嗪基、嘧啶基、吡嗪基、喹啉基、苯并喹啉基、苯并咪唑基、喹啉基、苯并吡啶基、二苯并吡啶基、菲咯啉基和二萘并呋喃基,其可分别被取代或未被取代,

[0531] -其中每个X可被独立地选自苯基、萘基和联苯基中的一个或两个取代基取代;

[0532] -式 (I) 化合物的分子偶极矩为 $\geq 0.4D$ 且 $\leq 3.2D$ ;

[0533] -第二电子传输层包含式 (II) 化合物,

[0534]  $(Ar^2)_m-(Z_k-G)_n$  (II);

[0535] -m和n独立地为1或2;

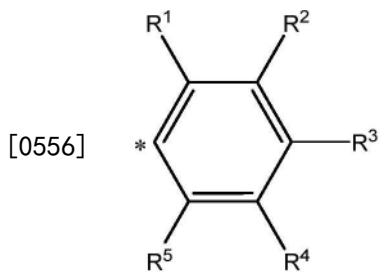
[0536] -k独立地为1或2;

[0537] -Ar<sup>2</sup>独立地选自吡啶基、三嗪基、1,2-二嗪基、1,3-二嗪基、1,4-二嗪基、喹啉基、苯并喹啉基、苯并咪唑基、喹啉基、苯并喹啉基、苯并吡啶基、二苯并吡啶基、荧蒽基、蒽基、萘基、联三苯叉基、菲咯啉基和二萘并呋喃基,

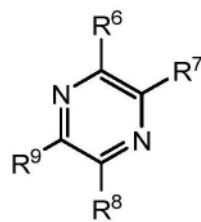
[0538] -其中每个Ar<sup>2</sup>可被独立地选自苯基、吡啶基和联苯基,任选对联苯基中的一个或两个取代基取代;

[0539] -Z独立地选自亚苯基、亚萘基、亚苯基-亚萘基、亚联苯基和亚三联苯基,

- [0540] -其中每个Z可被独立地选自苯基和C<sub>1</sub>至C<sub>4</sub>烷基中的一个或两个取代基取代；
- [0541] -G选自二-C<sub>1</sub>至C<sub>4</sub>烷基氧磷基、二-C<sub>6</sub>至C<sub>10</sub>芳基氧磷基和C<sub>2</sub>至C<sub>25</sub>杂芳基；其中相应的G可包含连接到所述基团的一个或多个取代基，其中所述一个或多个取代基选自C<sub>6</sub>至C<sub>10</sub>芳基、C<sub>1</sub>至C<sub>4</sub>烷基、C<sub>2</sub>至C<sub>5</sub>杂芳基；
- [0542] -第二电子传输层可还包含化合物(III)，其中所述化合物(III)包含8至13个芳族或杂芳族环；
- [0543] -化合物(III)包含至少一个杂芳族环；
- [0544] -化合物(III)的芳族或杂芳族环是6元环；
- [0545] -化合物(III)的杂芳族环是含N杂芳族环；
- [0546] -第一电子传输层和第二电子传输层不含电掺杂剂；
- [0547] -式(I)化合物不含1,3,5-三嗪。
- [0548] 根据一个实施方案，提供一种有机发光二极管，所述有机发光二极管包含不透明衬底、阳极、阴极、发光层、电子注入层和电子传输层叠层；其中
- [0549] -电子传输层叠层布置在发光层与电子注入层之间；
- [0550] -电子传输层叠层包含第一电子传输层和第二电子传输层；
- [0551] -第一电子传输层包含式(I)化合物，
- [0552]  $(Ar^1-A_c)_a-X_b$  (I)；
- [0553] -a和b独立地为1或2；
- [0554] -c独立地为0或1；
- [0555] -Ar<sup>1</sup>独立地选自茱萸基、二苯并呋喃基、嘧啶基、吡嗪基、9,9-二甲基芴基、具有式(IIa)的基团、具有式(IIb)的基团，



(IIa)



(IIb)

- [0557] 其中
- [0558] -星号“\*”表示将式(IIa)的基团结合到A的结合位置；并且
- [0559] -R<sup>1</sup>为H，且R<sup>2</sup>至R<sup>5</sup>独立地为苯基；或
- [0560] -R<sup>1</sup>和R<sup>3</sup>为苯基，且R<sup>2</sup>、R<sup>4</sup>和R<sup>5</sup>为H或
- [0561] -R<sup>6</sup>至R<sup>9</sup>为苯基；
- [0562] -其中每个Ar<sup>1</sup>可被独立地选自如下中的一个或两个取代基取代：苯基、萘基、联苯基、吡啶基、甲代吡啶基、二甲基吡啶基、二苯并呋喃基、二苯并噻吩基和苯并噻吩基；
- [0563] -A独立地选自亚苯基和亚联苯基；
- [0564] -其中每个A可被独立地选自苯基和C<sub>1</sub>至C<sub>4</sub>烷基中的一个或两个取代基取代；
- [0565] -X独立地选自：嘧啶基、吡嗪基、喹唑啉基、苯并喹唑啉基、苯并吡啶基、二苯并吡啶基，其可分别被取代或未被取代，
- [0566] -其中每个X可被独立地选自苯基、萘基和联苯基中的一个或两个取代基取代；

- [0567] -式(I)化合物的分子偶极矩为 $\geq 0.4D$ 且 $\leq 3.2D$ ;
- [0568] -第二电子传输层包含式(II)化合物,
- [0569]  $(Ar^2)_m - (Z_k - G)_n$  (II);
- [0570] -m和n独立地为1或2;
- [0571] -k独立地为1或2;
- [0572] - $Ar^2$ 独立地选自:二苯并吡啶基、1,3-二嗪基、1,4-二嗪基、噻基、三嗪基、菲咯啉基、联三苯叉基、吡啶基、二萘并呋喃基,
- [0573] -其中每个 $Ar^2$ 可被独立地选自苯基、吡啶基和联苯基,任选对联苯基中的一个或两个取代基取代;
- [0574] -Z独立地选自亚苯基、亚萘基、亚苯基-亚萘基、亚联苯基和亚三联苯基,
- [0575] -其中每个Z可被独立地选自苯基和 $C_1$ 至 $C_4$ 烷基中的一个或两个取代基取代;
- [0576] -G选自二甲基氧磷基、二苯基氧磷基、膦、苯甲膦、烟膦、二氢-苯并咪唑酮基,二苯基丙烷基、N,N-二甲基乙酰胺、酰胺、脲基、咪唑基、苯基苯并咪唑基、乙基苯并咪唑基、苯基苯并喹啉基、苯基苯并咪唑并喹啉基、吡啶基、联吡啶基、甲代吡啶基、二甲基吡啶基、哒嗪基、嘧啶基、吡嗪基、三苯基-吡嗪基、苯并喹啉基、菲咯啉基、苯基菲咯啉和吡啶基-咪唑并吡啶基;
- [0577] -第二电子传输层可还包含化合物(III),其中所述化合物(III)包含8至13个芳族或杂芳族环;
- [0578] -化合物(III)包含至少一个杂芳族环;
- [0579] -化合物(III)的芳族或杂芳族环是6元环;
- [0580] -化合物(III)的杂芳族环是含N杂芳族环;
- [0581] -化合物(III)可包含至少一个在每个杂芳族环中含有1至3个N原子的6元杂芳族环;
- [0582] -第一电子传输层和第二电子传输层不含电掺杂剂;
- [0583] -式(I)化合物不含1,3,5-三嗪。
- [0584] 根据一个实施方案,提供一种有机发光二极管,所述有机发光二极管包含不透明衬底、阳极、阴极、发光层、电子注入层和电子传输层叠层;其中
- [0585] -电子传输层叠层布置在发光层与电子注入层之间;
- [0586] -电子传输层叠层包含第一电子传输层和第二电子传输层;
- [0587] -第一电子传输层包含选自化合物A-1至A-12中的化合物;
- [0588] -第二电子传输层包含选自表2中所示化合物B-1至B-26中的化合物;
- [0589] -第二电子传输层还包含选自表3中所示化合物C-1至C-6中的化合物;
- [0590] -第一电子传输层和第二电子传输层不含电掺杂剂;并且
- [0591] -式(I)化合物不含1,3,5-三嗪。
- [0592] 其它层
- [0593] 根据本发明,除了上面已经提到的层之外,有机电子器件可还包含其它层。下面对每个层的示例性实施方案进行描述:
- [0594] 衬底
- [0595] 不透明衬底可以是通常用于制造诸如有机发光二极管的电子器件的任意的相应

衬底。因为通过顶表面发光,所以衬底是不透明的材料,例如塑料衬底、金属衬底、涂布有诸如不透明阳极层的不透明层的玻璃衬底或硅衬底。

#### [0596] 阳极电极

[0597] 包含在发明有机电子器件中的第一电极或第二电极可以是阳极电极。可通过沉积或溅射用于形成阳极电极的材料来形成阳极电极。用于形成阳极电极的材料可以是高功函材料,从而有助于空穴注入。阳极材料也可选自低功函材料(即铝)。阳极电极可以是透明或反射电极。可使用透明的导电氧化物如铟锡氧化物(ITO)、铟锌氧化物(IZO)、二氧化锡( $\text{SnO}_2$ )、铝锌氧化物( $\text{AlZnO}$ )和氧化锌( $\text{ZnO}$ )来形成阳极电极。阳极电极也可使用金属或金属合金来形成,所述金属通常为银(Ag)、金(Au)。

#### [0598] 空穴注入层

[0599] 可通过真空沉积、旋涂、印刷、流延、缝模涂布、Langmuir-Blodgett(LB)沉积等在阳极电极上形成空穴注入层(HIL)。当使用真空沉积来形成HIL时,沉积条件可随用于形成HIL的化合物以及HIL的期望结构和热性能而变化。然而,通常,真空沉积的条件可包括 $100^\circ\text{C}$ 至 $500^\circ\text{C}$ 的沉积温度、 $10^{-8}$ 至 $10^{-3}$ Torr的压力(1Torr等于133.322Pa)和0.1至10nm/sec的沉积速率。

[0600] 当使用旋涂或印刷来形成HIL时,涂布条件可随用于形成HIL的化合物以及HIL的期望结构和热性能而变化。例如,涂布条件可包括约2000rpm至约5000rpm的涂布速度和约 $80^\circ\text{C}$ 至约 $200^\circ\text{C}$ 的热处理温度。在进行涂布之后,进行热处理以除去溶剂。

[0601] HIL可由通常用于形成HIL的任意化合物形成。可用于形成HIL的化合物的实例包括酞菁化合物如酞菁铜( $\text{CuPc}$ )、4,4',4''-三(3-甲基苯基苯基氨基)三苯胺(m-MTDATA)、TDATA、2T-NATA、聚苯胺/十二烷基苯磺酸(Pani/DBSA)、聚(3,4-亚乙基二氧噻吩)/聚(4-苯乙烯磺酸盐)(PEDOT/PSS)、聚苯胺/樟脑磺酸(Pani/CSA)和聚苯胺/聚(4-苯乙烯磺酸盐)(PANI/PSS)。

[0602] HIL可包含或由p型掺杂剂构成并且p型掺杂剂可选自:四氟-四氰基醌二甲烷(F4TCNQ)、2,2'-(全氟萘-2,6-二亚基(diylidene))二丙二腈、4,4',4''-((1E,1'E,1''E)-环丙烷-1,2,3-三亚基三(氰基甲基亚基))三(2,3,5,6-四氟苜蓿)或2,2',2''-(环丙烷-1,2,3-三亚基)三(2-(对氰基四氟苯基)乙腈),但不限于此。HIL可选自掺杂有p型掺杂剂的空穴传输基质化合物。已知的掺杂的空穴传输材料的典型实例是:掺杂有四氟-四氰基醌二甲烷(F4TCNQ)的酞菁铜( $\text{CuPc}$ ),所述酞菁铜( $\text{CuPc}$ )的HOMO能级为约-5.2eV并且所述四氟-四氰基醌二甲烷(F4TCNQ)的LUMO能级为约-5.2eV;掺杂有F4TCNQ的酞菁锌( $\text{ZnPc}$ )(HOMO=-5.2eV);掺杂有F4TCNQ的 $\alpha$ -NPD(N,N'-双(萘-1-基)-N,N'-双(苯基)-联苯胺);掺杂有2,2'-(全氟萘-2,6-二亚基)二丙二腈的 $\alpha$ -NPD。所述p型掺杂剂的浓度能够选自1至20重量%,更优选选自3重量%至10重量%。

[0603] HIL的厚度可在约1nm至约100nm的范围内,并且例如在约1nm至约25nm的范围内。当HIL的厚度在该范围内时,HIL可具有优异的空穴注入特性,而不会对驱动电压造成实质性的损害。

#### [0604] 空穴传输层

[0605] 可通过真空沉积、旋涂、缝模涂布、印刷、流延、Langmuir-Blodgett(LB)沉积等在HIL上形成空穴传输层(HTL)。当通过真空沉积或旋涂来形成HTL时,沉积和涂布的条件可类

似于形成HIL的条件。然而,真空或溶液沉积的条件可随用于形成HTL的化合物而变化。

[0606] HTL可由通常用于形成HTL的任意化合物形成。例如在Yasuhiko Shirota and Hiroshi Kageyama, Chem. Rev. 2007, 107, 953-1010中公开了能够适合使用的化合物并通过参考并入本文中。可用于形成HTL的化合物的实例是: 咪唑衍生物如N-苯基咪唑或聚乙烯基咪唑; 联苯胺衍生物如N,N'-双(3-甲基苯基)-N,N'-二苯基-[1,1-联苯基]-4,4'-二胺(TPD)或N,N'-二(萘-1-基)-N,N'-二苯基联苯胺( $\alpha$ -NPD); 和三苯胺类化合物4,4',4''-三(N-咪唑基)三苯胺(TCTA)。在这些化合物中,TCTA能够传输空穴并抑制激子扩散到EML中。

[0607] HTL的厚度可在约5nm至约250nm、优选地约10nm至约200nm、进一步约20nm至约190nm、进一步约40nm至约180nm、进一步约60nm至约170nm、进一步约80nm至约160nm、进一步约100nm至约160nm、进一步约120nm至约140nm的范围内。HTL的优选厚度可以是170nm至200nm。

[0608] 当HTL的厚度在该范围内时,HTL可具有优异的空穴传输特性,而不会对驱动电压造成实质性的损害。

[0609] 电子阻挡层

[0610] 电子阻挡层(EBL)的功能是防止电子从发光层转移到空穴传输层,从而将电子限制在发光层。由此,改善了效率、工作电压和/或寿命。通常,电子阻挡层包含三芳基胺化合物。三芳基胺化合物的LUMO能级比空穴传输层的LUMO能级更接近真空能级。与空穴传输层的HOMO能级相比,电子阻挡层可具有更远离真空能级的HOMO能级。电子阻挡层的厚度可在2~20nm之间选择。

[0611] 如果电子阻挡层具有高三重态能级,则也可将其描述为三重态控制层。

[0612] 如果使用磷光绿色或蓝色发光层,则三重态控制层的功能是减少三重态的猝灭。由此,能够实现源自磷光发光层的更高的发光效率。三重态控制层选自三重态能级高于相邻发光层中磷光发光体的三重态能级的三芳基胺化合物。在EP 2 722 908 A1中描述了用于三重态控制层的合适化合物,特别是三芳基胺化合物。

[0613] 发光层(EML)

[0614] 可通过真空沉积、旋涂、缝模涂布、印刷、流延、LB沉积等在HTL上形成EML。当使用真空沉积或旋涂形成EML时,沉积和涂布的条件可能类似于形成HIL的条件。然而,沉积和涂布的条件可随用于形成EML的化合物而变化。

[0615] 发光层可不包含式(I)、(II)的化合物和/或化合物(III)。

[0616] 发光层(EML)可由主体和发光体掺杂剂的组合形成。主体的实例是Alq<sub>3</sub>、4,4'-N,N'-二咪唑-联苯(CBP)、聚(n-乙烯基咪唑)(PVK)、9,10-二(萘-2-基)蒽(ADN)、4,4',4''-三(咪唑-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-9,10-二-2-萘基蒽(TBADN)、二苯乙烯基亚芳基(DSA)和双(2-(2-羟基苯基)苯并噻唑酸)锌(Zn(BTZ)<sub>2</sub>)。

[0617] 发光体掺杂剂可以是磷光或荧光发光体。磷光发光体和经由热激活延迟荧光(TADF)机制发光的发光体可由于它们更高的效率而是优选的。发光体可以是小分子或聚合物。

[0618] 红色发光体掺杂剂的实例是PtOEP、Ir(piq)<sub>3</sub>和Btp2lr(acac),但不限于此。这些化合物是磷光发光体,然而,也可使用荧光红色发光体掺杂剂。

[0619] 磷光绿色发光体掺杂剂的实例是Ir(ppy)<sub>3</sub> (ppy = 苯基吡啶)、Ir(ppy)<sub>2</sub>(acac)、Ir(mpyp)<sub>3</sub>。

[0620] 磷光蓝色发光体掺杂剂的实例为:F2Irpic、(F2ppy)<sub>2</sub>Ir(tmd)和Ir(dfppz)<sub>3</sub>;以及三芴、4,4'-双(4-二苯基氨基苯乙烯基)联苯(DPAVBi)、2,5,8,11-四叔丁基芘(TBPe)是荧光蓝色发光体掺杂剂的实例。

[0621] 基于100重量份的主体,发光体掺杂剂的量可在约0.01至约50重量份的范围内。或者,发光层可由发光聚合物构成。EML可具有约10nm至约100nm的厚度、例如约20nm至约60nm的厚度。当EML的厚度在该范围内时,EML可具有优异的光发射,而不会对驱动电压造成实质性的损害。

[0622] 空穴阻挡层(HBL)

[0623] 可通过使用真空沉积、旋涂、缝模涂布、印刷、流延、LB沉积等在EML上形成空穴阻挡层(HBL),以防止空穴扩散到ETL中。当EML包含磷光掺杂剂时,HBL可还具有三重态激子阻挡功能。

[0624] HBL也可称为辅助ETL或a-ETL。

[0625] 当使用真空沉积或旋涂来形成HBL时,沉积和涂布的条件可类似于用于形成HIL的条件。然而,沉积和涂布的条件可随用于形成HBL的化合物而变化。可使用通常用于形成HBL的任意化合物。用于形成HBL的化合物的实例包括噁二唑衍生物、三唑衍生物和菲咯啉衍生物。

[0626] HBL的厚度可在约5nm至约100nm、例如约10nm至约30nm的范围内。当HBL的厚度在该范围内时,HBL可具有优异的空穴阻挡性质,而不会对驱动电压造成实质性的损害。

[0627] 电子传输层(ETL)

[0628] 根据本发明的OLED包含至少两个电子传输层(ETL)。电子传输层中的至少两个是如本文中所定义的第一电子传输层和第二电子传输层。此外,OLED可包含可以是或可以不是如上述所定义的其它ETL。如果其它ETL与上述定义的不同,则其特征如下。

[0629] 根据多种实施方案,OLED可包含电子传输层叠层,所述电子传输层叠层包括包含式(I)化合物的至少第一电子传输层(ETL-1)和包含式(II)化合物的至少第二电子传输层(ETL-2)。

[0630] 通过适当地调节ETL的特定层的能级,可控制电子的注入和传输,并且可有效地阻挡空穴。由此,OLED可具有长的寿命、改善的性能和稳定性。

[0631] 电子注入层(EIL)

[0632] 可促进电子从阴极注入到电子传输层叠层中的EIL可形成在电子传输层叠层上,优选直接形成在电子传输层叠层上,优选直接形成在第二电子传输层上,优选直接与第二电子传输层接触。用于形成EIL或包含在EIL中的材料的实例包括本领域已知的8-羟基喹啉锂(LiQ)、LiF、NaCl、CsF、Li<sub>2</sub>O、BaO、Ca、Ba、Yb、Mg。用于形成EIL的沉积和涂布条件类似于用于形成HIL的条件,尽管根据用于形成EIL的材料,沉积和涂布条件可能会有所不同。EIL可包含掺杂有n型掺杂剂的有机基质材料。基质材料可选自通常用作电子传输层的基质材料的材料。

[0633] EIL可由多个单独的EIL子层构成。在EIL由多个单独的EIL子层构成的情况下,子层的数量优选为2。单独的EIL子层可包含用于形成EIL的不同材料。

[0634] EIL的厚度可在约0.1nm至约10nm的范围内,例如在约0.5nm至约9nm的范围内。当EIL的厚度在该范围内时,EIL可具有令人满意的电子注入性质,而不会对驱动电压造成实质性的损害。

[0635] 本发明的电子传输叠层不是电子注入层的一部分。

[0636] 式(I)化合物可能不包含在电子注入层中。

[0637] 阴极电极

[0638] 如果存在,则在EIL上、优选直接在EIL上、优选以与EIL直接接触的方式形成阴极电极。在本发明的意义上,阴极和EIL可被视为能够将电子注入电子传输层叠层中的一个功能部分。阴极电极可由金属、合金、导电化合物或其混合物形成。阴极电极可具有低功函。例如,阴极电极可由锂(Li)、镁(Mg)、铝(Al)、铝(Al)-锂(Li)、钙(Ca)、钡(Ba)、镱(Yb)、镁(Mg)-铟(In)、镁(Mg)-银(Ag)等形成。或者,阴极电极可由诸如ITO或IZO的透明导电氧化物形成。

[0639] 阴极电极的厚度可在约5nm至约1000nm的范围内,例如在约10nm至约100nm的范围内。当阴极电极的厚度在约5nm至约50nm的范围内时,即使由金属或金属合金形成,阴极电极也可以是透明或半透明的。所述透明或半透明的阴极可促进光通过阴极的发射。

[0640] 应当理解,阴极电极和电子注入层不是电子传输层叠层的一部分。

[0641] 有机电致发光二极管(OLED)

[0642] 根据本发明的有机电子器件是一种有机发光器件。

[0643] 根据本发明的一个方面,提供一种有机发光二极管(OLED),所述有机发光二极管(OLED)包含:衬底;形成在衬底上的阳极电极;空穴注入层、空穴传输层、发光层、电子传输层叠层和阴极电极。

[0644] 根据本发明的一个方面,提供一种有机发光二极管(OLED),所述有机发光二极管(OLED)包含:衬底;形成在衬底上的阳极电极;空穴注入层、空穴传输层、电子阻挡层、发光层、电子传输层叠层、电子注入层和阴极电极。

[0645] 根据本发明的另一个方面,提供一种OLED,所述OLED包含:衬底;形成在衬底上的阳极电极;空穴注入层、空穴传输层、电子阻挡层、发光层、空穴阻挡层、电子传输层叠层和阴极电极。

[0646] 根据本发明的另一个方面,提供一种OLED,所述OLED包含:衬底;形成在衬底上的阳极电极;空穴注入层、空穴传输层、电子阻挡层、发光层、空穴阻挡层、电子传输层叠层、电子注入层和阴极电极。

[0647] 根据本发明的多种实施方案,可在衬底上或在顶部电极上提供布置在上述层之间的OLED层。

[0648] 根据一个方面,OLED可包含与阳极电极相邻着布置的衬底的层结构,阳极电极与第一空穴注入层相邻着布置,第一空穴注入层与第一空穴传输层相邻着布置,第一空穴传输层与第一电子阻挡层相邻着布置,第一电子阻挡层与第一发光层相邻着布置,第一发光层与第一电子传输层相邻着布置,第一电子传输层与第二电子传输层相邻着布置,第二电子传输层与第一电子注入层相邻着布置,电子注入层与阴极电极相邻着布置。

[0649] 例如,根据图1的OLED(100)可通过如下方法形成,其中在衬底(110)上,以如下所述的顺序先后形成:阳极(120)、空穴注入层(130)、空穴传输层(140)、发光层(150)、包含第

一电子传输层(161)和第二电子传输层(162)的电子传输层叠层(160)、电子注入层(180)和阴极电极(190)。

[0650] 例如,根据图2的OLED(100)可通过如下方法形成,其中在衬底(110)上,以如下所述的顺序先后形成:阳极(120)、空穴注入层(130)、空穴传输层(140)、电子阻挡层(145)、发光层(150)、包含第一电子传输层(161)和第二电子传输层(162)的电子传输层叠层(160),电子注入层(180)和阴极电极(190)。

[0651] 根据本发明的另一个方面,提供一种制造有机电子器件的方法,所述方法使用:

[0652] -至少一个沉积源,优选两个沉积源,更优选至少三个沉积源。

[0653] 适合的沉积方法包括:

[0654] -通过真空热蒸发进行的沉积;

[0655] -通过溶液处理进行的沉积,优选所述处理选自旋涂、印刷、流延;和/或

[0656] -缝模涂布。

[0657] 在第二电子传输层包含化合物(III)和式(II)化合物的情况下,可通过从两个单独沉积源共沉积或从一个单独沉积源沉积为预混物的形式来沉积两种化合物。预混物是至少两种化合物的混合物,并且所述混合物在填充到沉积源之前制备。

[0658] 根据本发明的多种实施方案,所述方法可还包括在阳极电极上形成发光层和在阳极电极与第一电子传输层之间形成选自如下中的至少一个层:形成空穴注入层、形成空穴传输层或形成电子空穴阻挡层。

[0659] 根据本发明的多种实施方案,所述方法可还包括用于形成有机发光二极管(OLED)的步骤,其中

[0660] -在衬底上形成第一阳极电极,

[0661] -在第一阳极电极上形成发光层,

[0662] -在发光层上形成电子传输层叠层,任选地在发光层上形成空穴阻挡层,并在电子传输层上形成电子注入层,

[0663] -并且最后形成阴极电极,

[0664] -任选地在第一阳极电极与发光层之间依次形成空穴注入层、空穴传输层和空穴阻挡层,

[0665] -在电子传输层叠层与阴极电极之间形成电子注入层。

[0666] 根据本发明的多种实施方案,所述方法还包括在有机半导体层上形成电子注入层。根据多种实施方案,OLED可具有如下层结构,其中所述层具有如下顺序:

[0667] 阳极、空穴注入层、第一空穴传输层、第二空穴传输层、发光层、任选的空穴阻挡层、电子传输层叠层、电子注入层和阴极。

[0668] 根据本发明的另一个方面,提供一种电子装置,所述电子装置包含根据整个该申请中所述的任意实施方案的至少一种有机发光器件,优选地,所述电子装置包含在整个该申请中所述的一个实施方案中的有机发光二极管。更优选地,电子装置是显示装置。

[0669] 在一个实施方案中,根据本发明的有机电子器件可还包括包含轴烯化合物和/或醌二甲烷化合物的层。

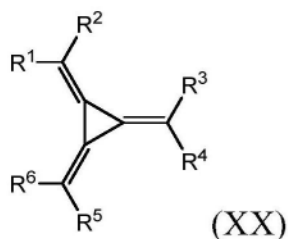
[0670] 在一个实施方案中,可用一个或多个卤素原子和/或一个或多个吸电子基团取代轴烯化合物和/或醌二甲烷化合物。吸电子基团可选自腈基、卤代烷基基团,或者选自全卤

代烷基基团,或者选自全氟代烷基基团。吸电子基团的其它实例可以是酰基、磺酰基基团或磷酰基基团。

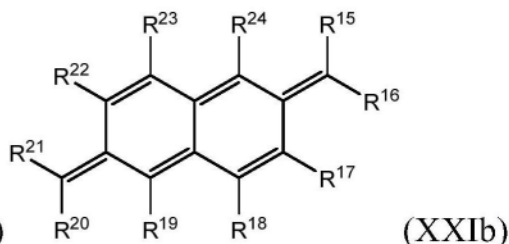
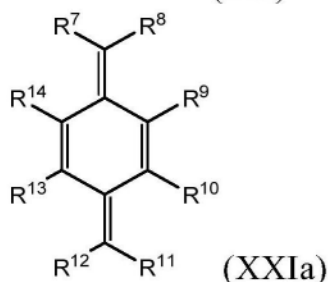
[0671] 或者,酰基基团、磺酰基基团和/或磷酰基基团可包含卤代和/或全卤代烃基。在一个实施方案中,全卤代烃基可以是全氟代烃基。全氟代烃基的实例能够是全氟甲基、全氟乙基、全氟丙基、全氟异丙基、全氟丁基、全氟苯基、全氟甲苯基;包含卤代烃基的磺酰基基团的实例可以是三氟甲基磺酰基、五氟乙基磺酰基、五氟苯基磺酰基、七氟丙基磺酰基、九氟丁基磺酰基等。

[0672] 在一个实施方案中,轴烯和/或醌二甲烷化合物可包含在空穴注入层、空穴传输层和/或空穴产生层中。

[0673] 在一个实施方案中,轴烯化合物可具有式 (XX) 和/或醌二甲烷化合物可具有式 (XXIa) 或 (XXIb) :



[0674]



[0675] 其中 $R^1$ 、 $R^2$ 、 $R^3$ 、 $R^4$ 、 $R^5$ 、 $R^6$ 、 $R^7$ 、 $R^8$ 、 $R^{11}$ 、 $R^{12}$ 、 $R^{15}$ 、 $R^{16}$ 、 $R^{20}$ 、 $R^{21}$ 独立地选自上述吸电子基团并且 $R^9$ 、 $R^{10}$ 、 $R^{13}$ 、 $R^{14}$ 、 $R^{17}$ 、 $R^{18}$ 、 $R^{19}$ 、 $R^{22}$ 、 $R^{23}$ 和 $R^{24}$ 独立地选自:H、卤素和上述吸电子基团。

[0676] 在下文中,将参考实例对实施方案进行更详细地说明。然而,本发明不限于如下实例。现在将详细参考示例性方面。

[0677] 化合物

[0678] 根据本发明的一个方面,提供一种下式 (IV) 的化合物,

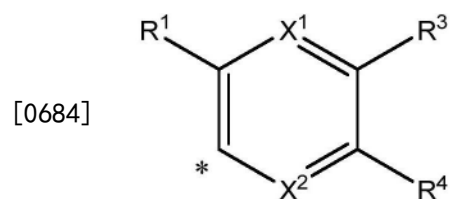
[0679]  $(Ar'^1-A'_d)_e-X'_f$  (IV)

[0680] 其中

[0681] -e和f独立地为1或2;

[0682] -d独立地为0或1;

[0683] -Ar'<sup>1</sup>独立地选自具有式 (IVa) 的基团和具有式 (IVb) 的基团,

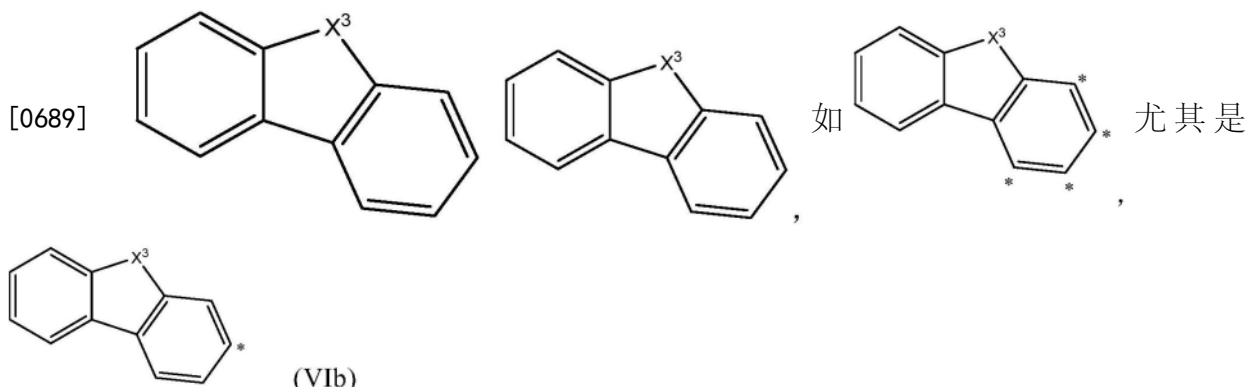


[0685] 其中在 (IVa) 中,

[0686] -星号“\*”表示将式(IVa)的基团结合到A'的结合位置;

[0687] -X<sup>1</sup>和X<sup>2</sup>均为N;或X<sup>1</sup>为CR<sup>2</sup>且X<sup>2</sup>为CR<sup>5</sup>;并且

[0688] -R<sup>1</sup>和R<sup>5</sup>中的至少一个为苯基;和/或R<sup>1</sup>和R<sup>2</sup>均为苯基;和/或R<sup>2</sup>和R<sup>3</sup>均为苯基;和/或R<sup>3</sup>和R<sup>4</sup>均为苯基;和/或R<sup>4</sup>和R<sup>5</sup>均为苯基,其中R<sup>1</sup>至R<sup>5</sup>分别尤其是未取代的苯基;



[0690] 其中在(IVb)中,

[0691] -星号“\*”表示将式(IVb)的基团结合到A'的结合位置或在d=0的情况下结合到X的结合位置;并且

[0692] -X<sup>3</sup>选自C(CH<sub>3</sub>)<sub>2</sub>、O或S;

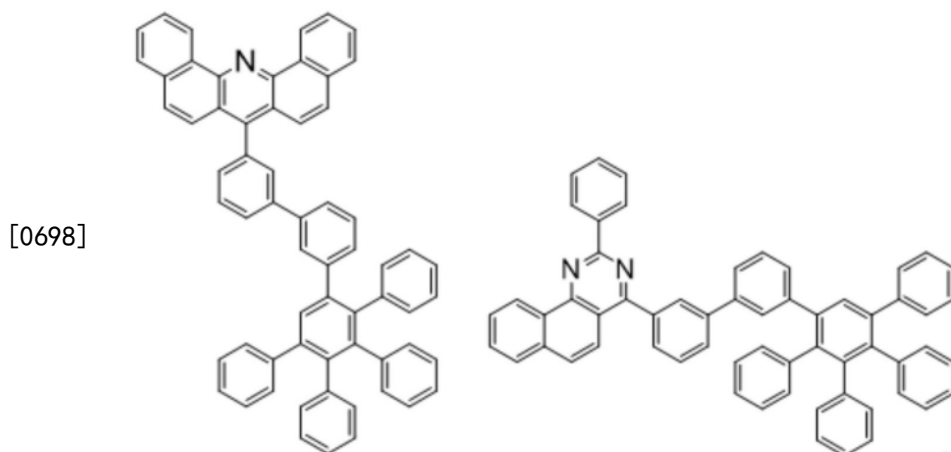
[0693] -其中每个Ar<sup>1</sup>可被一个或两个苯基,优选一个苯基取代;

[0694] -A'独立地选自亚苯基或亚联苯基;

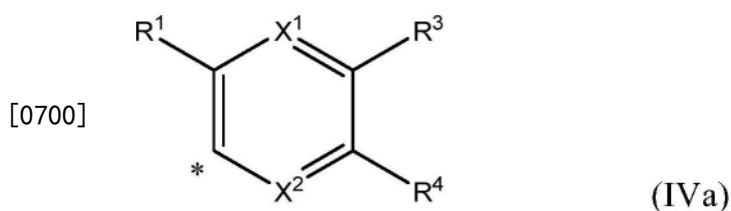
[0695] -X'独立地选自嘧啶基、吡嗪基、喹唑啉基、苯并喹唑啉基、苯并吡啶基和二苯并吡啶基;

[0696] 其中每个嘧啶基、吡嗪基、喹唑啉基和苯并喹唑啉基可独立地被一个或多个苯基取代,优选被一个或两个苯基取代;

[0697] 其中如下化合物不包括在式(IV)中,



[0699] Ar<sup>1</sup>可独立地选自具有式(IVa)的基团和具有式(IVb)的基团,

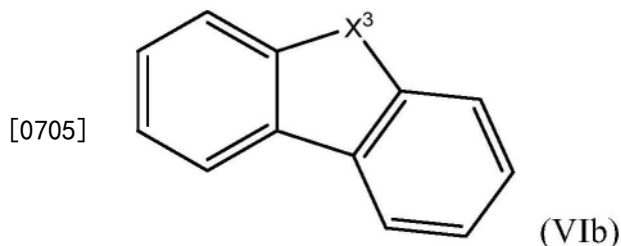


[0701] 其中在 (IVa) 中,

[0702] -星号“\*”表示将式 (IVa) 的基团结合到A'的结合位置或者或在d=0的情况下结合到X'的结合位置;

[0703] -X<sup>1</sup>为CR<sup>2</sup>;X<sup>2</sup>为CR<sup>5</sup>;R<sup>1</sup>为H,并且R<sup>2</sup>至R<sup>5</sup>分别为苯基;或

[0704] -X<sup>1</sup>为CR<sup>2</sup>;X<sup>2</sup>为CR<sup>5</sup>;R<sup>1</sup>和R<sup>3</sup>为苯基并且R<sup>2</sup>、R<sup>4</sup>和R<sup>5</sup>为H;

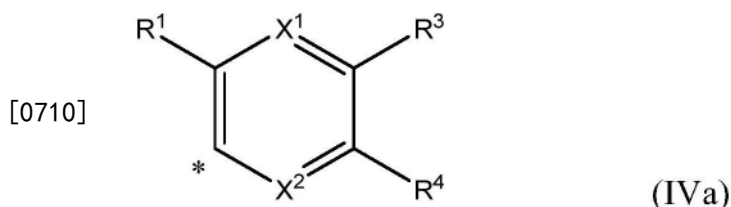


[0706] 其中在 (IVb) 中,

[0707] -星号“\*”表示将式 (IVb) 的基团结合到A'的结合位置或在d=0的情况下结合到X'的结合位置;并且

[0708] -X<sup>3</sup>选自C(CH<sub>3</sub>)<sub>2</sub>或O。

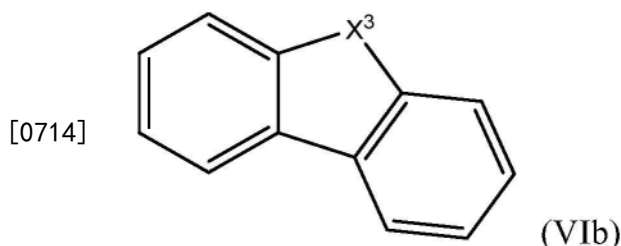
[0709] Ar<sup>1</sup>可独立地选自具有式 (IVa) 的基团和具有式 (IVb) 的基团,



[0711] 其中在 (IVa) 中,

[0712] -星号“\*”表示将式 (IVa) 的基团结合到A'的结合位置或在d=0的情况下结合到X'的结合位置;

[0713] -X<sup>1</sup>为CR<sup>2</sup>;X<sup>2</sup>为CR<sup>5</sup>;R<sup>1</sup>为H,并且R<sup>2</sup>至R<sup>5</sup>分别为苯基;



[0715] 其中在 (IVb) 中,

[0716] -星号“\*”表示将式 (IVb) 的基团结合到A'的结合位置或在d=0的情况下结合到X'的结合位置;并且

[0717] -X<sup>3</sup>选自C(CH<sub>3</sub>)<sub>2</sub>。

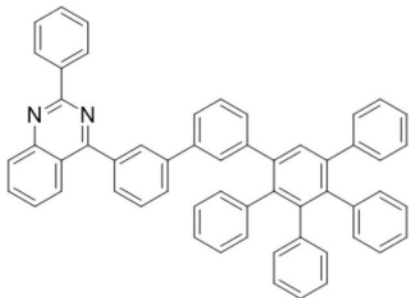
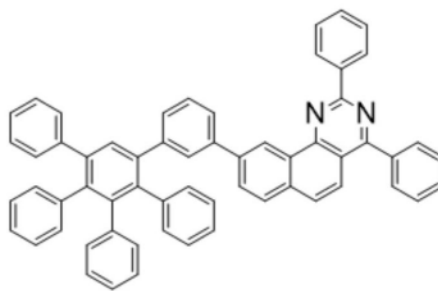
[0718] 在式 (IV) 化合物中,e和f独立地为1或2。或者,e和f都可以是1。

[0719] A'可选自:

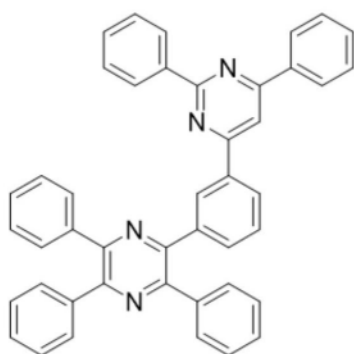
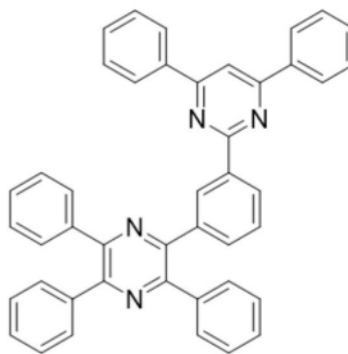


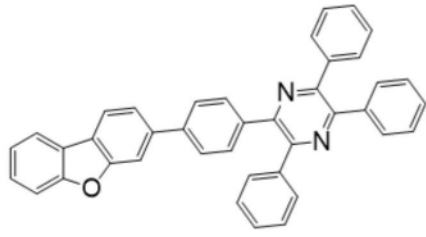
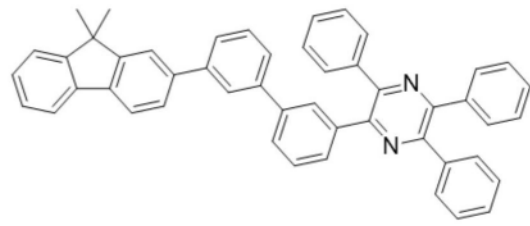
[0727] 其中星号“\*”表示分别结合到A'的结合位置和在d=0的情况下结合到Ar'<sup>1</sup>的结合位置。

[0728] 式(IV)化合物可选自A-1至A-18,

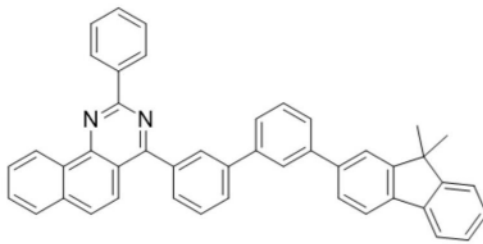
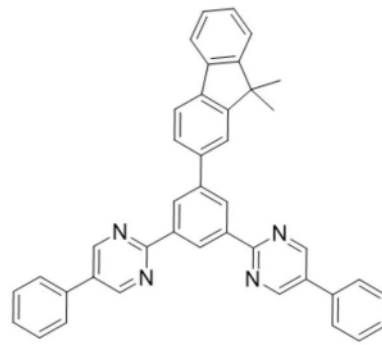
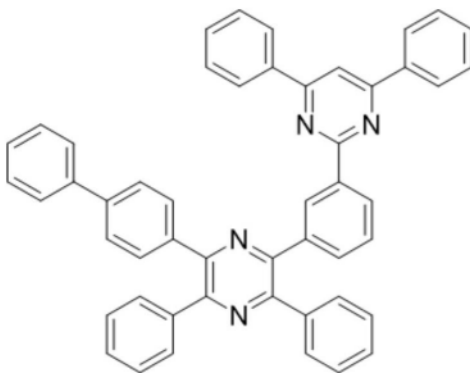
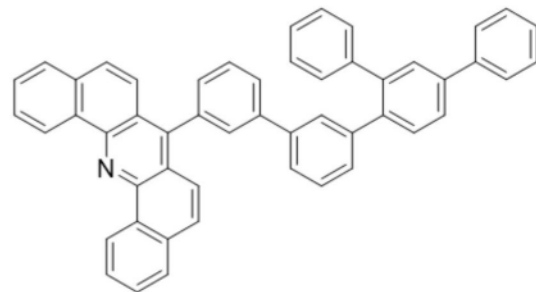
**A-1****A-2**

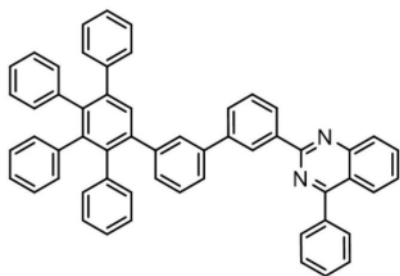
[0729]

**A-3****A-4**

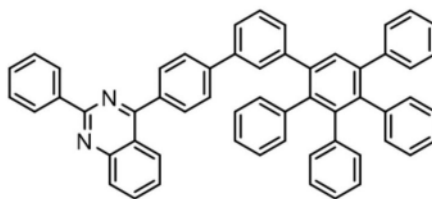
**A-5****A-6**

[0730]

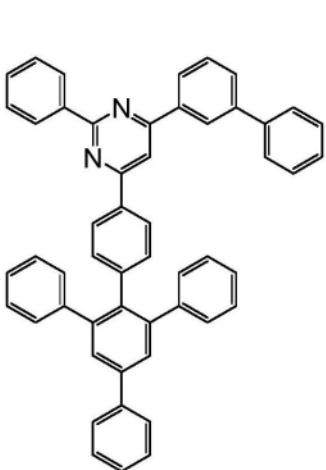
**A-7****A-8****A-9****A-10**



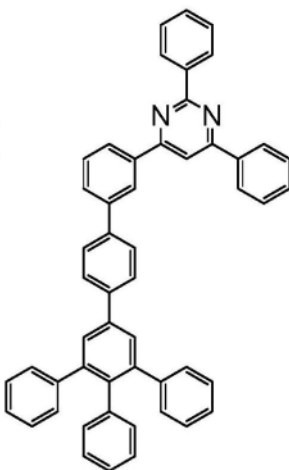
A-11



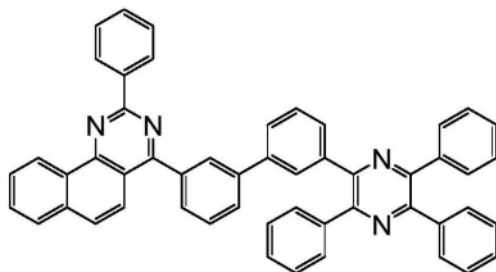
A-12



A-13

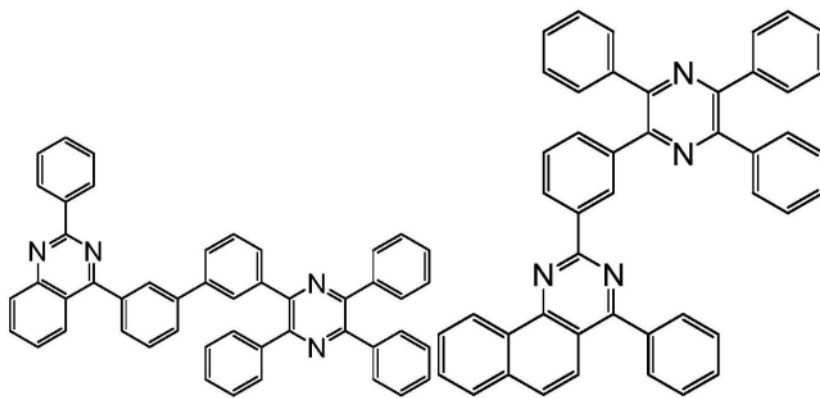


A-14



A-15

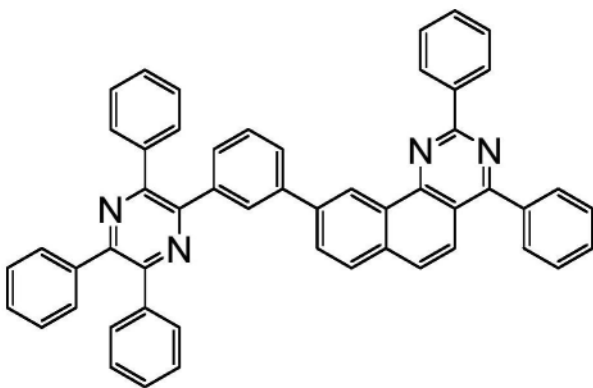
[0731]



A-16

A-17

[0732]



A-18。

[0733] 式(IV)化合物可选自A-1至A-4、A-7、A-9、A-11至A-18。

[0734] 一般定义

[0735] 在本说明书中,当没有另外提供定义时,“烷基基团”可以是指脂族烃基。烷基基团可以是指没有任何双键或三键的“饱和烷基基团”。如本文中所使用的术语“烷基”应涵盖直联以及支化的和环状烷基。例如,C<sub>3</sub>-烷基可选自正丙基和异丙基。同样,C<sub>4</sub>-烷基包括正丁基、仲丁基和叔丁基。同样,C<sub>6</sub>-烷基包括正己基和环己基。

[0736] 如本文中所使用的,如果没有另外明确提及,则星号“\*”表示相应标记的部分与另一部分键合的结合位置。

[0737] C<sub>n</sub>中的下标数n涉及相应的烷基、亚芳基、杂亚芳基或芳基基团中的碳原子总数。

[0738] 如本文中所使用的术语“芳基”或“亚芳基”应涵盖:苯基(C<sub>6</sub>-芳基);稠合芳族化合物如萘、蒽、菲、并四苯等。还涵盖联苯和低聚-或聚-苯基如三联苯、苯基取代的联苯、苯基取代的三联苯(例如四苯基苯基团)等。“亚芳基”、相应地“杂亚芳基”是指与两个另外的部分连接的基团。在本说明书中,术语“芳基基团”或“亚芳基基团”可以是指包含至少一个烃芳族部分的基团,并且所述烃芳族部分的所有元素都可具有形成共轭的p轨道,例如苯基基团、萘基基团、蒽基基团、菲基基团、芘基基团、芴基基团等。还包括螺化合物,其中两个芳族部分通过螺原子彼此连接,例如9,9'-螺二[9H-芴]基。芳基或亚芳基基团可包括单环或稠环多环(即,共享相邻碳原子对的连接)官能团。

[0739] 如本文中所使用的,术语“杂芳基”是指其中至少一个碳原子被杂原子取代的芳基基团。术语“杂芳基”可以是指具有至少一个杂原子的芳族杂环,并且烃杂芳族部分的所有元素可具有形成共轭的p轨道。杂原子可选自N、O、S、B、Si、P、Se,优选选自N、O和S。杂亚芳基环可包含至少1个至3个杂原子。优选地,杂亚芳基环可包含独立选自N、S和/或O中的至少1个至3个杂原子。正如在“芳基”/“亚芳基”的情况下,术语“杂芳基”包括例如其中两个芳族部分相互连接的螺化合物,例如螺[芴-9,9'-咕吨]。其它示例性杂芳基基团为二嗪、三嗪、二苯并呋喃、二苯并硫代呋喃、吡啶、苯并吡啶和二苯并吡啶等。

[0740] 如本文中所使用的,术语“烯基”是指包含碳-碳双键的基团-CR<sup>1</sup>=CR<sup>2</sup>R<sup>3</sup>。

[0741] 如本文中所使用的,术语“全卤代的”是指其中烃基基团的所有氢原子都被卤素(F、Cl、Br、I)原子代替的烃基基团。

[0742] 如本文中所使用的,术语“烷氧基”是指式-OR的结构片段,其中R为烃基,优选烷基或环烷基。

[0743] 如本文中所使用的,术语“硫代烷基”是指式-SR的结构片段,其中R为烃基,优选烷基或环烷基。

[0744]  $C_n$ -杂芳基中的下标数字n仅指除杂原子数之外的碳原子数。在该上下文中,显然 $C_3$ 杂亚芳基基团是包含三个碳原子的芳族化合物如吡唑、咪唑、噁唑、噻唑等。

[0745] 如此处所使用的术语“杂芳基”应包括吡啶、喹啉、苯并喹啉、喹唑啉、苯并喹唑啉、嘧啶、吡嗪、三嗪、苯并咪唑、苯并噻唑、苯并[4,5]噻吩并[3,2-d]嘧啶、呋唑、咕吨、吩噻嗪、苯并吡啶、二苯并吡啶等。

[0746] 在本说明书中,术语单键是指直接键。

[0747] 如本文中所使用的,术语“氟化的”是指其中烃基中包含的至少一个氢原子被氟原子取代的烃基。其中其所有氢原子都被氟原子取代的氟化基团称为全氟化基团,并特别用术语“氟化的”来表示。

[0748] 根据本发明,如果该基团中包含的一个氢原子被另一个基团置换,则基团被另一个基团“取代”,其中另一个基团是取代基。

[0749] 根据本发明,关于在两个其它层之间的一个层的表述“在……之间”并不排除存在可布置在一个层与两个其它层中的一个层之间的另外的层。根据本发明,关于相互直接接触的两个层的表述“直接接触”是指在这两个层之间没有布置另外的层。沉积在另一个层顶上的一个层认为与该层直接接触。

[0750] 术语“接触式夹在”是指三层的排列,由此中间的层与两个相邻的层直接接触。

[0751] 关于本发明的电子传输层叠层,在实验部分中提到的化合物是最优选的。

[0752] 照明装置可是用于照明、辐射、信号或投影的任何装置。它们相应地分类为照明、辐射、发信号和投影装置。照明装置通常由如下元件构成:光辐射源;将辐射通量按所需方向传输到空间中的器件;以及将部件连接成单个器件并保护辐射源和光传输系统免受环境损坏和影响的外壳。

[0753] 有机电致发光器件(OLED)可是底部发光器件或顶部发光器件。有机电致发光器件(OLED)可通过透明阳极或通过透明阴极发射光。

[0754] 另一个方面涉及一种包含至少一种有机电致发光器件(OLED)的装置。

[0755] 包含有机发光二极管的装置例如是显示器或照明面板。

[0756] 在本发明中,对于接下来定义的术语,除非在权利要求或本说明书的其它地方给出了不同的定义,否则应采用这些定义。

[0757] 在本说明书的上下文中,与基质材料相关的术语“不同”是指基质材料在其结构式方面不同。

[0758] 术语“OLED”和“有机发光二极管”同时使用并且具有相同的含义。如本文中所使用的术语“有机电致发光器件”可包括有机发光二极管以及有机发光晶体管(OLET)。

[0759] 如本文中所使用的,“重量百分比”、“重量%”及其变体是指组合物、组分、物质或试剂的作为相应电子传输层的组分、物质或试剂的重量除以其相应电子传输层的总重量并乘以100而得到的值。应理解,相应电子传输层和电子注入层的所有组分、物质和试剂的总重量百分比量以使得其不超过100重量%的方式来选择。

[0760] 如本文中所使用的,“体积百分比”、“体积%”及其变体是指组合物、组分、物质或试剂的作为相应电子传输层的组分、物质或试剂的体积除以其相应电子传输层的总体积并

乘以100而得到的值。应理解,阴极层的所有组分、物质和试剂的总重量百分比量以使得其不超过100体积%的方式来选择。

[0761] 无论是否明确指出,本文假设所有数值均由术语“约”修饰。如本文中所使用的,术语“约”是指可发生的数量的变化。无论是否由术语“约”修饰,权利要求包括所述数量的等同物。

[0762] 应注意,如在该说明书和所附权利要求中使用的,单数形式的表述“一个”、“一种”以及“所述”包括复数指示物,除非内容另有明确说明。

[0763] 术语“不含”、“不含有”、“不包含”不排除杂质。杂质对于本发明所实现的目的没有技术影响。

[0764] 在本说明书的上下文中,术语“基本上非发光性的”或“不发光”是指相对于可见光发光光谱,化合物或层对源自器件的可见光发光光谱的贡献小于10%,优选小于5%。可见光发光光谱是具有约 $\geq 380\text{nm}$ 至约 $\leq 780\text{nm}$ 的波长的发光光谱。

[0765] 优选地,包含式(I)化合物的有机半导体层基本上是非发光性的或不发光的。

[0766] 工作电压,也称作U,在每平方厘米10毫安( $\text{mA}/\text{cm}^2$ )下以伏特(V)为单位测量。

[0767] 每安培的坎德拉(candela)效率,也称作cd/A效率,在每平方厘米10毫安( $\text{mA}/\text{cm}^2$ )下以每安培的坎德拉为单位测量。

[0768] 外部量子效率,也称作EQE,以百分比(%)为单位测量。

[0769] 通过坐标CIE-x和CIE-y(国际照明委员会1931)描述颜色空间。对于蓝色发光,CIE-y特别重要。CIE-y越小,表示蓝色越深。效率值在相同的CIE-y下进行比较。

[0770] 最高占据分子轨道(也称作HOMO)和最低未被占据分子轨道(也称作LUMO)以电子伏特(eV)为单位测量。

[0771] 术语“OLED”、“有机发光二极管”、“有机发光器件”、“有机光电器件”和“有机发光二极管”同时使用并且具有相同的含义。

[0772] 术语“使用寿命”和“寿命”同时使用并且具有相同的含义。

[0773] 可将阳极和阴极描述为阳极电极/阴极电极或阳极电极/阴极电极或阳极电极层/阴极电极层。

[0774] 室温,也称为环境温度,为 $23^\circ\text{C}$ 。

## 附图说明

[0775] 从如下结合附图对示例性实施方案的描述,将使得本发明的这些和/或其它方面和优点变得清楚并且更容易理解,其中:

[0776] 图1是根据本发明示例性实施方案的一种有机发光二极管(OLED)的示意性截面图。

[0777] 图2是根据本发明示例性实施方案的一种OLED的示意性截面图。

[0778] 发明详述

[0779] 现在将详细参考本发明的示例性实施方案,其实例示于附图中,其中相同的附图标记始终表示相同的元件。下面通过参考附图来描述示例性实施方案,以便解释本发明的多个方面。

[0780] 在此,当第一元件是指形成或设置在第二元件“上”时,第一元件能够直接设置在

第二元件上,或者一个或多个其它元件可设置在其间。当第一元件是指“直接”形成或设置在第二元件上时,在其间没有设置其它元件。

[0781] 图1是根据本发明示例性实施方案的有机发光二极管(OLED) 100的示意性截面图。OLED 100包含不透明衬底110、阳极120、空穴注入层(HIL) 130、空穴传输层(HTL) 140、发光层(EML) 150、电子传输层(ETL) 叠层160,所述电子传输层(ETL) 叠层160包含第一电子传输层161和第二电子传输层162。在EML 150上形成电子传输层(ETL) 160。在电子传输层(ETL) 160上,设置电子注入层(EIL) 180。阴极190直接设置在电子注入层(EIL) 180上。

[0782] 图2是根据本发明另一个示例性实施方案的OLED 100的示意性截面图。图2与图1的不同之处在于,图2的OLED 100包含电子阻挡层(EBL) 145。

[0783] 参考图2,OLED 100包含不透明衬底110、阳极120、空穴注入层(HIL) 130、空穴传输层(HTL) 140、电子阻挡层(EBL) 145、发光层(EML) 150、包含第一电子传输层161和第二电子传输层162的电子传输层(ETL) 叠层160、电子注入层(EIL) 180和阴极电极190。

[0784] 尽管在图1和图2中未示出,但可进一步在阴极电极190上形成密封层,以密封OLED 100和200。此外,可对其完成多种其它变体。

[0785] 在下文中,将参考如下实例来详细描述本发明的一个或多个示例性实施方案。然而,这些实例并不旨在限制本发明的一个或多个示例性实施方案的目的和范围。

[0786] 偶极矩

[0787] 含N原子的分子的偶极矩 $|\vec{\mu}|$ 由下式给出:

$$[0788] \quad \vec{\mu} = \sum_i^N q_i \vec{r}_i$$

$$[0789] \quad |\vec{\mu}| = \sqrt{\mu_x^2 + \mu_y^2 + \mu_z^2}$$

[0790] 其中 $q_i$ 和 $\vec{r}_i$ 是分子中原子i的部分电荷和位置。

[0791] 偶极矩由半经验分子轨道法确定。

[0792] 如程序包TURBOMOLE V6.5 (TURBOMOLE GmbH, Litzenhardtstrasse 19, 76135 Karlsruhe, Germany) 中所实现的在气相中使用具有6-31G\*基础设置的混合泛函B3LYP对分子结构的几何形状进行优化。如果超过一种的构象是可行的,则选择具有最低总能量的构象以确定分子的键长。

[0793] 计算出的HOMO和LUMO

[0794] HOMO和LUMO是使用程序包TURBOMOLE V6.5 (TURBOMOLE GmbH, Litzenhardtstrasse 19, 76135 Karlsruhe, Germany) 计算的。分子结构的最佳几何构型以及HOMO和LUMO能级是通过在气相中应用具有6-31G\*基础设置的混合泛函B3LYP来确定的。如果超过一种的构象是可行的,则选择具有最低总能量的构象。

[0795] 熔点

[0796] 根据上述TGA-DSC测量的DSC曲线或单独的DSC测量(Mettler Toledo DSC822e,在纯氮气流下在10K/min的加热速率下将样品从室温加热至完全熔化。将量为4至6mg的样品放入40 $\mu$ L带盖的Mettler Toledo铝盘中,在盖上打一个<1mm的孔)作为峰值温度来确定熔点(mp)。

## [0797] 玻璃化转变温度

[0798] 如在2010年3月公布的DIN EN ISO 11357中所述,在Mettler Toledo DSC 822e差示扫描量热计中在氮气下并使用10K/min的加热速率来测量玻璃化转变温度(Tg)。

## [0799] 速率起始温度

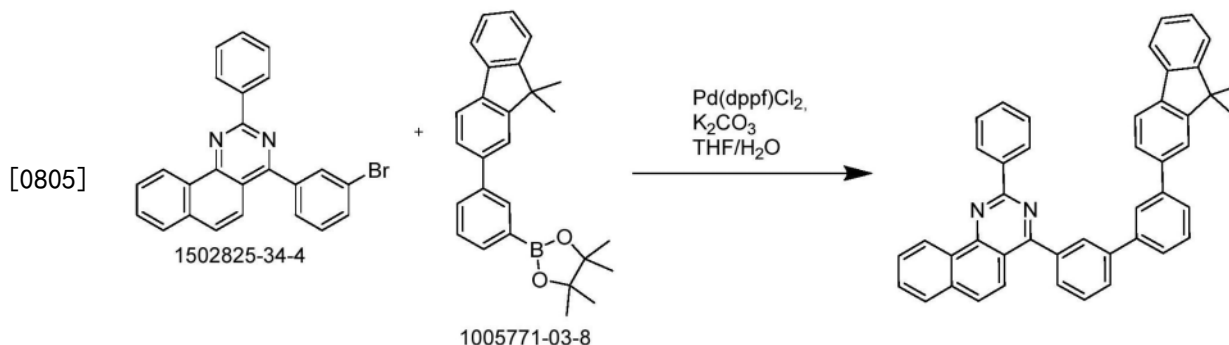
[0800] 速率起始温度(TRO)是通过将100mg化合物装载到VTE源中确定的。作为VTE源,可使用Kurt J. Lesker Company ([www.Lesker.com](http://www.Lesker.com))或CreaPhys GmbH (<http://www.creaphys.com>)提供的有机材料点源。在小于 $10^{-5}$ mbar的压力下以15K/min的恒定速率加热VTE源,并用热电偶测量源内部的温度。用QCM检测器检测化合物的蒸发,所述检测器检测化合物在检测器的石英晶体上的沉积。石英晶体上的沉积速率以 $\text{Å}/\text{s}$ 为单位来测量。为了确定速率起始温度,将沉积速率相对于VTE源温度作图。速率起始是在QCM检测器上发生明显沉积的温度。为了获得准确的结果,将VTE源加热并冷却3次,并且仅将第二次和第三次运行的结果用于确定速率起始温度。

[0801] 为了很好地控制有机化合物的蒸发速率,速率起始温度可在200至255°C的范围内。如果速率起始温度低于200°C,则蒸发可能会太快,因此难以控制。如果速率起始温度高于255°C,则蒸发速率可能太低,这可能导致作业时间缩短,并且由于长时间暴露于高温下,VTE源中的有机化合物可能发生分解。

[0802] 速率起始温度是化合物挥发性的间接量度。速率起始温度越高,化合物的挥发性越低。

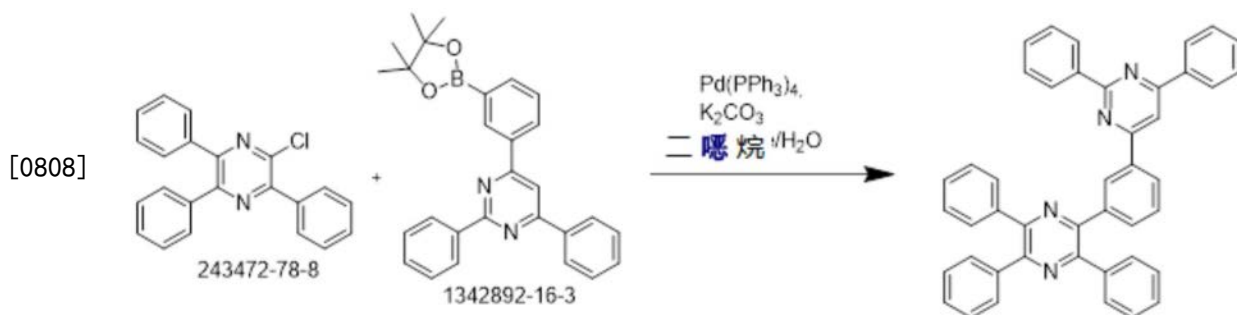
## [0803] 合成程序

## [0804] 化合物A-7



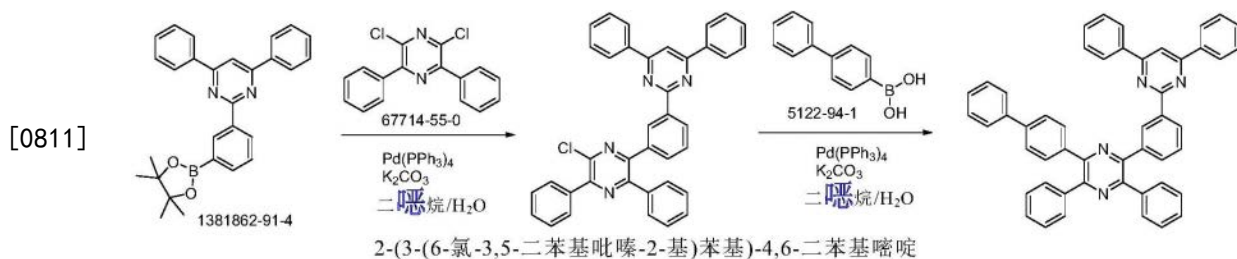
[0806] 用氮气冲洗烧瓶并装入4-(3-溴苯基)-2-苯基苯并[h]喹啉(CAS 1502825-34-4, 7.5g, 18.2mmol)、2-(3-(9,9-二甲基-9H-芴-2-基)苯基)-4,4,5,5-四甲基-1,3,2-二氧硼戊环(CAS1005771-03-8, 7.9g, 20.0mmol)、[1,1'-双(二苯基膦)二茂铁]二氯化钯(II)(CAS14221-01-3, 0.40g, 0.5mmol)和 $\text{K}_2\text{CO}_3$ (7.6g, 54.6mmol)。添加除气的THF/水(4:1)的混合物,并将反应混合物在氮气气氛下加热回流过夜。在冷却至室温后,对相进行分离并在减压下干燥有机相。将所得固体溶解于100mL DCM中,用 $2 \times 50\text{mL}$   $\text{H}_2\text{O}$ 洗涤,用硫酸钠干燥并通过弗洛里西尔(Florisil)衬垫进行过滤。在减压下部分除去溶剂,并加入正己烷诱发沉淀。过滤产物,用己烷洗涤,并使用DCM/己烷1:1柱层析来进一步纯化,以在干燥后得到7.35g (67%)淡黄色固体。通过升华来实现最终纯化。 $m/z = 601$  ( $[\text{m}+\text{H}]^+$ )。

## [0807] 化合物A-3



[0809] 用氮气冲洗烧瓶并装入2-氯-3,5,6-三苯基吡啶 (CAS243472-78-8, 11.2g, 32.5mmol)、2,4-二苯基-6-(3-(4,4,5,5-四甲基-1,3,2-二氧硼戊环-2-基)苯基)嘧啶 (CAS1342892-16-3, 17.0g, 39.0mmol)、四(三苯基膦)钯(0) (CAS14221-01-3, 0.75g, 0.7mmol) 和 $K_2CO_3$  (9.0g, 65.1mmol)。添加除气的二噁烷/水(4:1)的混合物,并在氮气气氛下将反应混合物加热至 $80^\circ C$ 过夜。在冷却至室温后,通过抽滤分离所得沉淀,用 $H_2O$  ( $2 \times 200mL$ ) 和二噁烷 (175mL) 洗涤并干燥。然后将粗产物溶解在DCM (1L) 中,通过弗洛里西尔衬垫过滤并用另外500mL DCM漂洗。在减压除去溶剂后,将产物从甲苯 (100mL) 中重结晶,以在干燥后得到12.3g (62%) 白色固体。通过升华实现最终纯化。 $m/z = 615 ([m+H]^+)$ 。

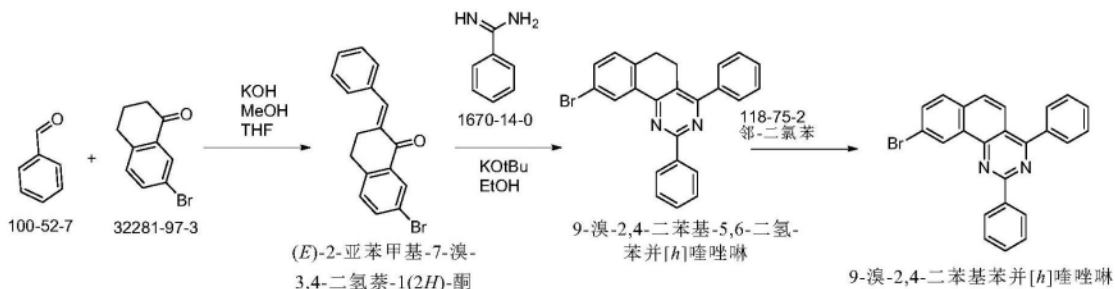
[0810] 化合物A-9



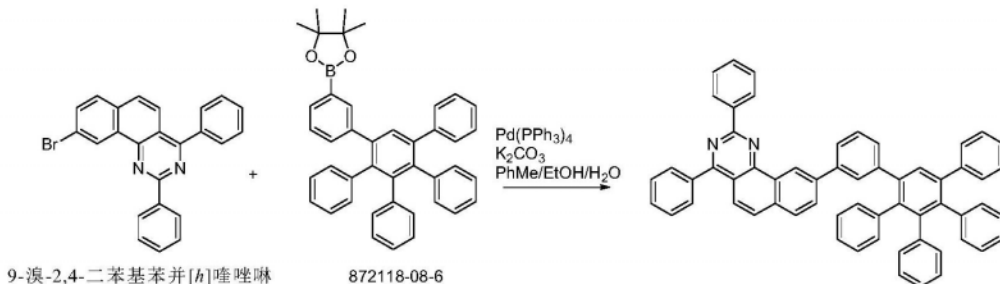
[0812] 用氮气冲洗烧瓶并装入2,6-二氯-3,5-二苯基吡啶 (CAS 67714-55-0, 21.0g, 69.8mmol)、4,6-二苯基-2-(3-(4,4,5,5-四甲基-1,3,2-二氧硼戊环-2-基)苯基)嘧啶 (CAS1381862-91-4, 30.3g, 69.8mmol)、四(三苯基膦)钯(0) (CAS14221-01-3, 2.02g, 1.8mmol) 和 $K_2CO_3$  (19.3g, 139.6mmol)。添加除气的二噁烷/水(4:1)的混合物,并在氮气气氛下将反应混合物加热至 $80^\circ C$ 过夜。在冷却至室温后,通过抽滤分离所得沉淀,用 $H_2O$ 、二噁烷和甲醇洗涤并干燥。粗产物然后由甲苯重结晶,用正己烷洗涤并干燥。然后用DCM/Hex (3:2) 柱层析纯化产物,以在干燥后得到10.4g (26%) 白色固体。HPLC/ESI-MS: 100%,  $m/z = 574 ([m+H]^+)$ 。

[0813] 用氮气冲洗烧瓶并装入2-(3-(6-氯-3,5-二苯基吡啶-2-基)苯基)-4,6-二苯基嘧啶 (19.0g, 33.2mmol)、[1,1'-联苯]-4-基硼酸 (CAS 5122-94-1, 7.9g, 39.8mmol)、四(三苯基膦)钯(0) (CAS14221-01-3, 0.8g, 0.66mmol) 和 $K_2CO_3$  (9.2g, 66.3mmol)。添加除气的二噁烷/水(4:1)的混合物,并在氮气气氛下将反应混合物加热至 $80^\circ C$ 超过三天。在冷却至室温后,通过抽滤分离产生的沉淀物,用二噁烷洗涤。然后将粗产物溶解在DCM中并在水中萃取。有机相用 $Na_2SO_4$ 干燥并通过弗洛里西尔衬垫过滤,并用100mL DCM漂洗。在真空中除去溶剂后,将产物在甲苯中重结晶,用乙醇覆盖。将粗固体过滤并从THF中重结晶,以得到15.8g产物 (69%), 其为灰白色固体。通过升华实现最终纯化。 $m/z = 1381 ([2M+H]^+)$ 。

## [0814] 化合物A-2



## [0815]



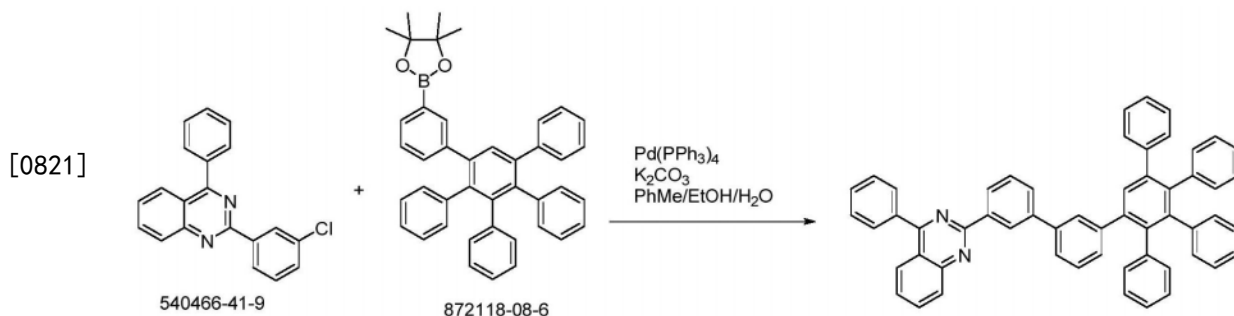
[0816] 用氮气冲洗烧瓶并装入7-溴-3,4-二氢萘-1(2H)-酮(CAS 32281-97-3, 15.0g, 66.6mmol)、苯甲醛(CAS100-52-7, 8.8mL, 86.6mmol)和4%氢氧化钾的甲醇溶液(CAS1310-58-3, 112mL, 218.0mmol),并在室温下搅拌1h。过滤产物,并用甲醇洗涤。分离固体产物,为17.3g(83%)。GC-MS100%,  $m/z=313[M]^+$ 。

[0817] 用氮气冲洗烧瓶并装入(E)-2-亚苄基-7-溴-3,4-二氢萘-1(2H)-酮(17.1g, 54.6mmol)、苯肼(CAS1670-14-0, 8.6g, 54.6mmol)和叔丁醇钾(CAS 865-47-4, 12.3g, 109.2mmol),并在乙醇中稀释。将反应混合物回流过夜。过滤沉淀物,用水和乙醇洗涤并干燥。分离产物,为16.4g(73%)。ESI-MS100%,  $m/z=415([M]^+)$ 。

[0818] 用氮气冲洗烧瓶并装入9-溴-2,4-二苯基-5,6-二氢苯并[h]喹唑啉(16.2g, 39.2mmol)和2,3,5,6-四氯环己-2,5-二烯-1,4-二酮(CAS118-75-2, 19.3g, 78.4mmol)。加入1,2-二氯苯,并将反应混合物在氮气气氛下回流过夜。向反应混合物中加入甲醇以诱发沉淀。然后过滤粗固体并用甲醇洗涤。干燥后得到白色固体的产物,为12.1g(75%)。HPLC/ESI-MS100%,  $m/z=411([M]^+)$ 。

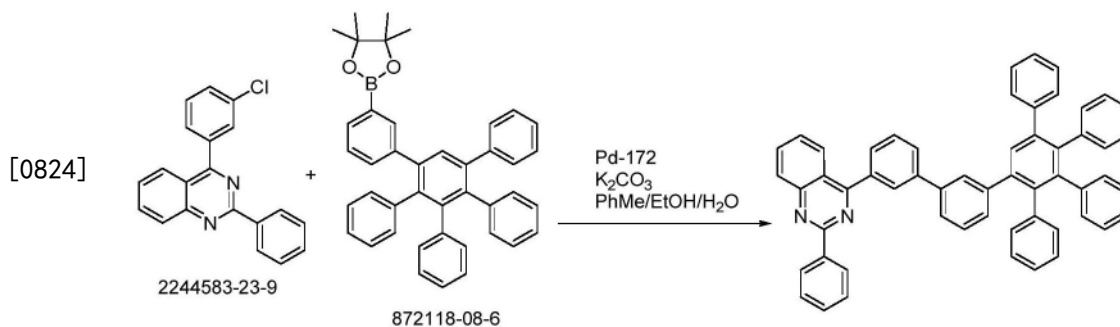
[0819] 用氮气冲洗烧瓶并装入9-溴-2,4-二苯基苯并[h]喹唑啉(9.0g, 21.9mmol)、4,4',5,5'-四甲基-2,2-(3',4',5'-三苯基-[1,1',2',1'']-三苯基)-3-基)-1,3,2-二氧硼戊环-2-基)吡啶(CAS 872118-08-6, 12.4g, 21.2mmol)、四(三苯基膦)钯(0)(CAS14221-01-3, 0.76g, 0.7mmol)和 $\text{K}_2\text{CO}_3$ (6.0g, 43.8mmol)。添加除气的甲苯/乙醇/水(2:1:1)的混合物,并将反应混合物在氮气气氛下加热至85℃过夜。过滤粗固体,用水和甲醇洗涤。将产物溶解在 $\text{CHCl}_3$ 中,并通过弗洛里西尔衬垫过滤并用另外的100mL  $\text{CHCl}_3$ 漂洗。在蒸发溶剂后,固体用正己烷洗涤。干燥后得到产物,为13.7g(82%)。  $m/z=789([m+H]^+)$ 。通过升华实现最终的纯化。

## [0820] 化合物A-11



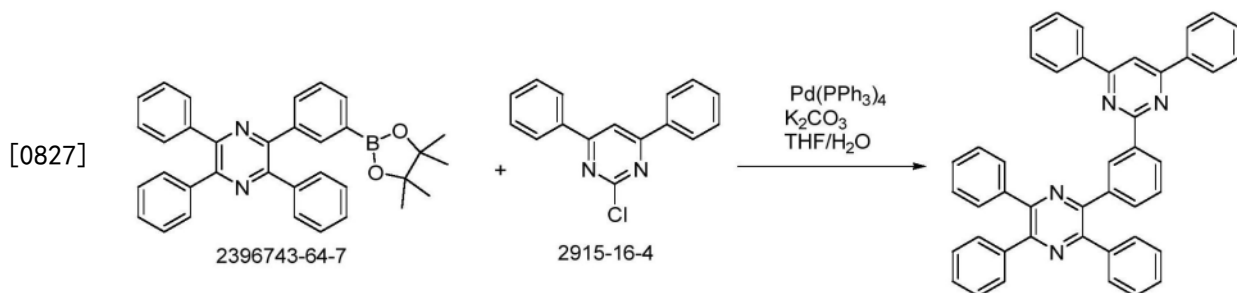
[0822] 用氮气冲洗烧瓶并装入2-(3-氯苯基)-4-苯基喹唑啉 (CAS540466-41-9, 7.5g, 23.7mmol)、4,4',5,5'-四甲基-2-(3',4',5'-三苯基-[1,1',2',1'']-三苯基)-3-基)-1,3,2-二氧硼戊环 (CAS 872118-08-6, 13.4g, 23.0mmol)、四(三苯基膦)钯(0) (CAS14221-01-3, 2.2g, 1.9mmol) 和 $\text{K}_2\text{CO}_3$  (17.5g, 126.6mmol)。添加除气的甲苯/乙醇/水(4:1:1)的混合物,并将反应混合物在氮气气氛下加热至85℃过夜。过滤粗固体,用水洗涤。将产物溶解在 $\text{CHCl}_3$ 中,并通过弗洛里西尔衬垫过滤并用另外200mL  $\text{CHCl}_3$ 漂洗。在部分蒸发溶剂后,加入正己烷以诱发沉淀。将固体产物从乙酸乙酯重结晶。将灰白色固体用乙酸乙酯和己烷的混合物(1:1)洗涤,以在干燥后得到9.3g (55%)的产物。 $m/z = 739$  ( $[\text{M}+\text{H}]^+$ )。

[0823] 化合物A-1



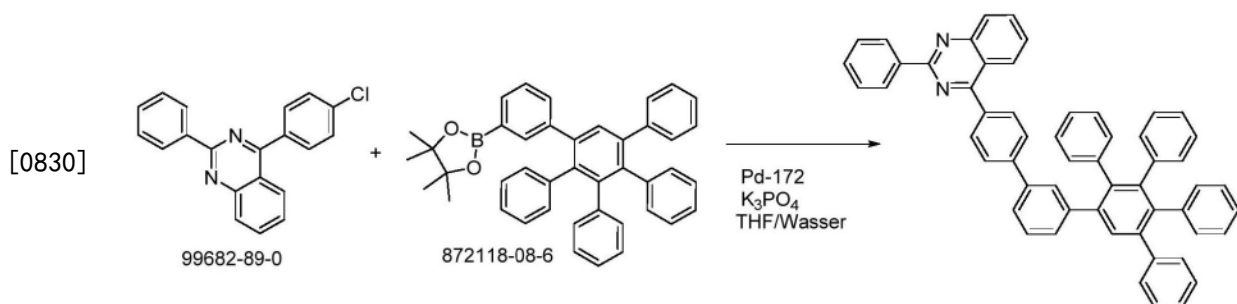
[0825] 用氮气冲洗烧瓶并装入4-(3-氯苯基)-2-苯基喹唑啉 (CAS 2244583-23-9, 20.2g, 63.8mmol)、4,4',5,5'-四甲基-2-(3',4',5'-三苯基-[1,1',2',1'']-三苯基)-3-基)-1,3,2-二氧硼戊环 (CAS 872118-08-6, 36.6g, 62.5mmol)、Pd-172 (CAS1798781-99-3, 0.8g, 1.2mmol) 和 $\text{K}_2\text{CO}_3$  (27.1g, 127.6mmol)。添加除气的四氢呋喃/水(4:1)的混合物,并在氮气气氛下将反应混合物加热至45℃过夜。从混合物中蒸发掉四氢呋喃,并将粗产物溶解在DCM中并用水萃取两次。有机相在 $\text{Na}_2\text{SO}_4$ 上干燥,并通过弗洛里西尔二氧化硅的衬垫过滤,用水洗涤。在真空中除去溶剂后,将固体溶解在环己烷中,并加入正庚烷以诱发沉淀。将固体产物从乙酸异丙酯中重结晶两次。将灰白色固体用正己烷洗涤,以在干燥后得到28.4g (60%)产物。通过升华实现最终的纯化。 $m/z = 739$  ( $[\text{M}+\text{H}]^+$ )。

[0826] 化合物A-4



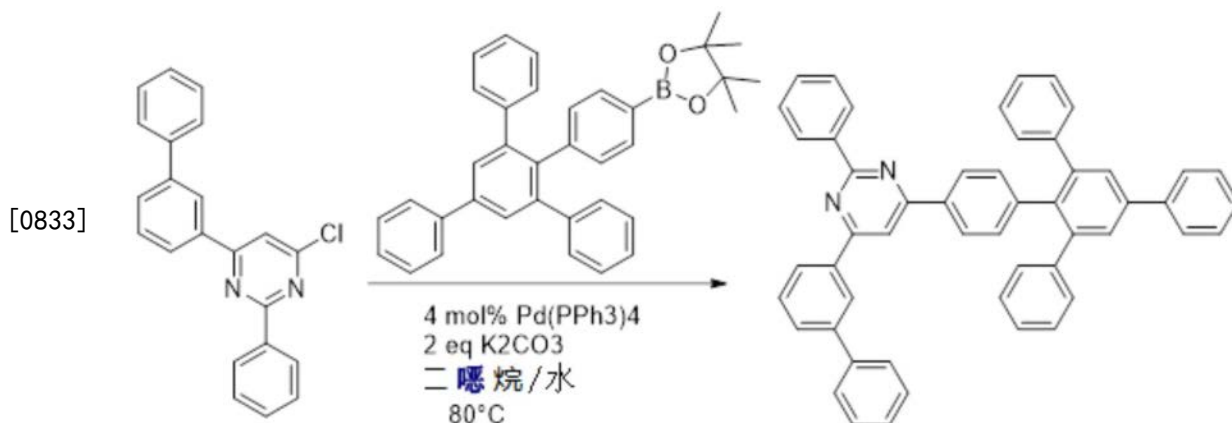
[0828] 用氮气冲洗3颈圆底烧瓶并装入2,3,5-三苯基-6-(3-(4,4,5,5-四甲基-1,3,2-二氧硼戊环-2-基)苯基)吡啶(CAS2396743-64-7,34.8g,68.2mmol)、2-氯-4,6-二苯基嘧啶(CAS2915-16-4,20.0g,75.0mmol)、四(三苯基膦)钯(0)(CAS14221-01-3,2.4g,2.0mmol)、碳酸钾(CAS 584-08-7,18.8g,138.2mmol)。添加除气的THF/水(4:1)的混合物。反应在氮气气氛下回流运行过夜。第二天将反应冷却,并形成浓黄色悬浮液,过滤沉淀物并用水洗涤。将灰色固体溶解于1.2L氯仿中,用水2×200mL洗涤,在硫酸镁上干燥,通过硅胶垫过滤。通过用热THF洗涤和从氯苯中重结晶来进一步纯化。通过升华完成最终纯化。得到白色结晶粉末。收率:32.3g(77%)。m/z=637([M+Na]<sup>+</sup>)。

[0829] 化合物A-12



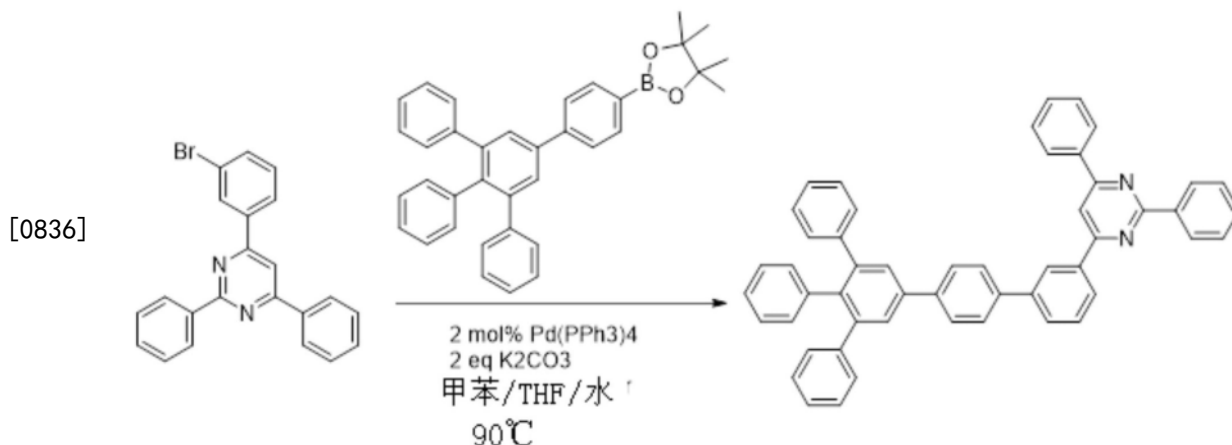
[0831] 用氮气冲洗三口圆底烧瓶并装入4,4,5,5-四甲基-2-(3',4',5'-三苯基-[1,1':2',1''-三联苯基]-3-基)-1,3,2-二氧硼戊环(CAS 872118-08-6,32.5g,55.6mmol)、4-(4-氯苯基)-2-苯基嘧啶(CAS 99682-89-0,17.6g,55.6mmol)、氯(巴豆基)(2-二环己基膦-2',6'-二甲氧基联苯)钯(II)(CAS 1798781-99-3,0.7g,1.1mmol)、磷酸钾(CAS 7778-53-2,23.6g,111.2mmol)。添加除气的四氢呋喃/水(5:1)混合物。反应在55℃的氮气气氛下运行过夜。第二天将反应冷却;在减压下蒸发溶剂。残渣溶于700mL氯仿中,用水洗涤,用硫酸镁干燥,通过硅胶垫过滤;在减压下蒸发溶剂。所得白色粉末首先从甲苯中重结晶,第二次从甲苯/乙腈1:1的混合物中重结晶。通过升华完成最终纯化。得到白色结晶粉末。收率:27.1g(66%)。m/z=739([M+H]<sup>+</sup>)。

[0832] 4-([1,1'-联苯]-3-基)-6-(2',6'-二苯基-[1,1':4',1''-三联苯基]-4-基)-2-苯基嘧啶(A-13)



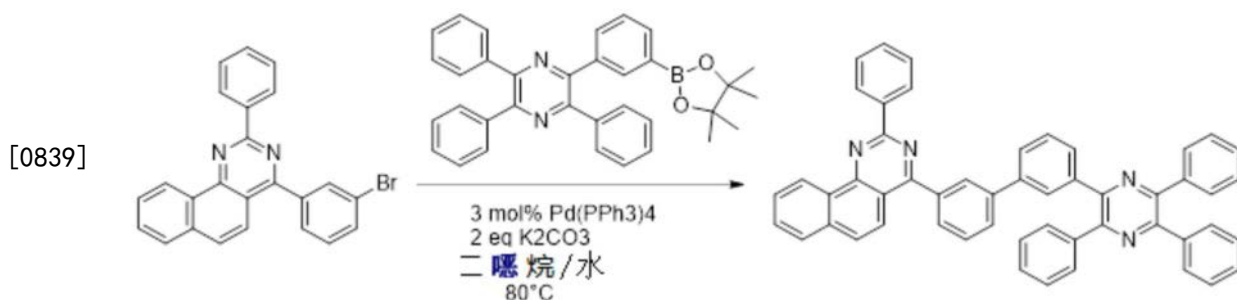
[0834] 用氮气冲洗三口圆底烧瓶并装入4-([1,1'-联苯]-3-基)-6-氯-2-苯基嘧啶(CAS1852465-76-9,1当量,10.4g)、2-(2',6'-二苯基-[1,1':4',1''-三联苯基]-4-基)-4,4,5,5-四甲基-1,3,2-二氧硼戊环(CAS2576432-67-0,1.2当量,18.7g)、四(三苯基膦)钯(0)(CAS14221-01-3,0.04当量,1.4g)、碳酸钾(CAS 584-08-7,2当量,8.4g)。添加除气的120ml二噁烷和30ml水的混合物。反应在80°C的氮气气氛下运行过夜。冷却至室温后形成黄色悬浮液。过滤原固体材料,用甲苯、乙腈和2-甲氧基-2-甲基丙烷洗涤。然后将固体溶解在650ml热甲苯中,并通过硅胶垫过滤,使其冷却以结晶。通过升华完成最终纯化。得到白色粉末。收率:17.1g(81%)。(ESI-MS:689)。

[0835] 4-(3',5'-二苯基-[1,1':4',1''-四苯基]-3-基)-2,6-二苯基嘧啶(A-14)



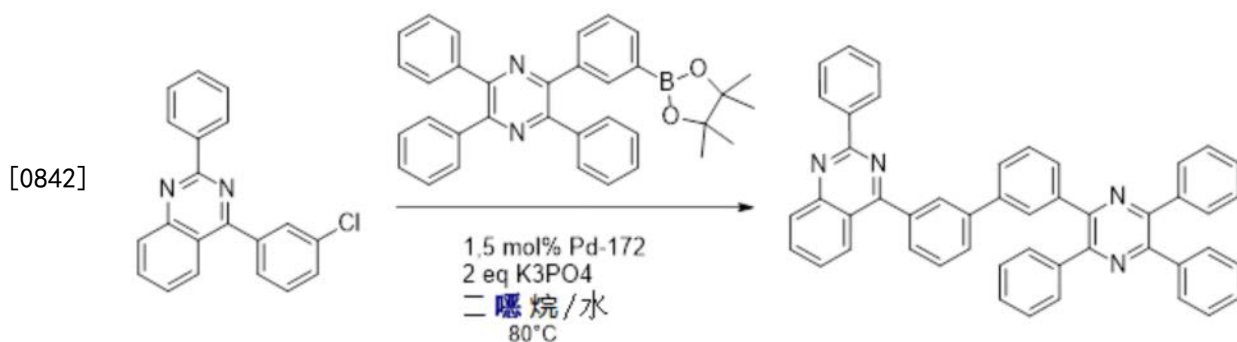
[0837] 用氮气冲洗三口圆底烧瓶并装入4-(3-溴苯基)-2,6-二苯基嘧啶(CAS 864377-28-6,1.2当量,16.9g)、2-(3',5'-二苯基-[1,1':4',1''-三联苯基]-4-基)-4,4,5,5-四甲基-1,3,2-二氧硼戊环(CAS2358709-40-5,1当量,18.5g)、四(三苯基膦)钯(0)(CAS14221-01-3,0.02当量,0.8g)、碳酸钾(CAS 584-08-7,2当量,10.0g)。添加除气的160mL甲苯、40mL THF和40mL水的混合物。反应在90°C的氮气气氛下运行过夜。冷却至室温后形成白色悬浮液。过滤原固体材料,用甲苯/THF(4:1)和水洗涤。将产物溶解于600mL二氯甲烷中,并通过弗洛里西尔衬垫过滤,在低压下蒸发溶剂。通过升华完成最终纯化。得到白色粉末。收率:16.9g(68%)。(ESI-MS:689)。

[0838] 2-苯基-4-(3'-(3,5,6-三苯基吡嗪-2-基)-[1,1'-联苯]-3-基)苯[h]喹唑啉(A-15)



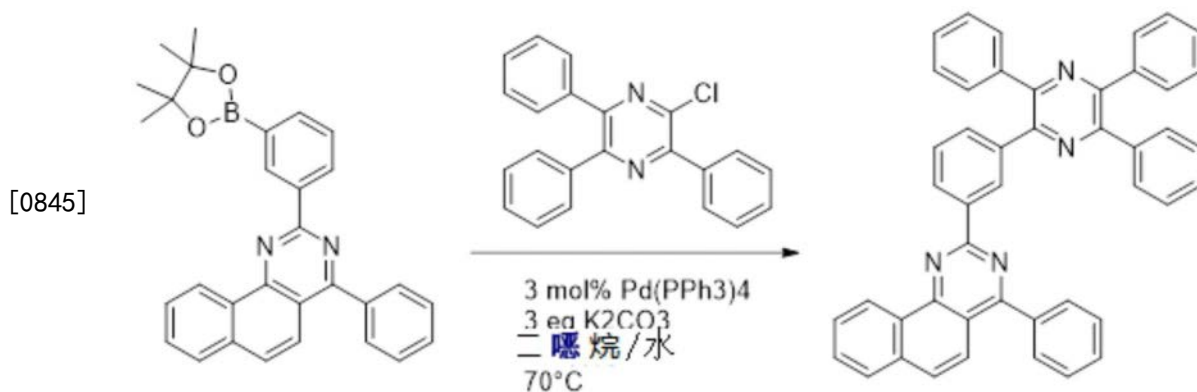
[0840] 用氮气冲洗三口圆底烧瓶并装入4-(3-溴苯基)-2-苯基苯并[h]喹唑啉(CAS1502825-34-4,1当量,20.0g)、2,3,5-三苯基-6-(3-(4,4,5,5-四甲基-1,3,2-二氧硼戊环-2-基)苯基)吡嗪(CAS2396743-64-7,1当量,25.9g)、四(三苯基膦)钯(0)(CAS14221-01-3,0.03当量,1.7g)、碳酸钾(CAS 584-08-7,2当量,13.4g)。添加除气的300mL二噁烷和50mL水的混合物。反应在80°C的氮气气氛下运行过夜。在冷却至室温后形成棕色悬浮液。过滤原固体材料,用二噁烷、水和己烷洗涤。然后将产物溶解于700mL氯仿中并通过硅胶垫过滤,在低压下蒸发溶剂。接下来,将产物从甲苯中重结晶。通过升华完成最终纯化。得到白色粉末。收率:20.9g(60%)。(ESI-MS:715)。

[0841] 2-苯基-4-(3'-(3,5,6-三苯基吡嗪-2-基)-[1,1'-联苯]-3-基)喹唑啉(A-16)



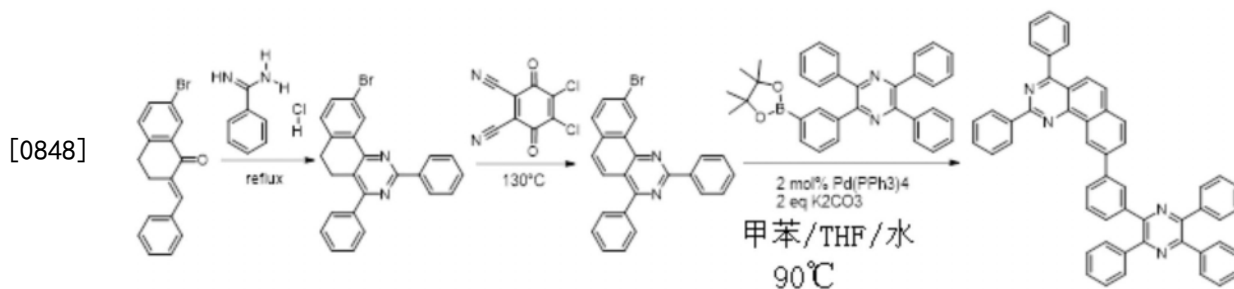
[0843] 用氮气冲洗三口圆底烧瓶并装入4-(3-氯苯基)-2-苯基喹唑啉(CAS 2244583-23-9,1当量,,14.3g)、2,3,5-三苯基-6-(3-(4,4,5,5-四甲基-1,3,2-二氧硼戊环-2-基)苯基)吡嗪(CAS2396743-64-7,1.4当量,33.0g)、氯(巴豆基)(2-二环己基膦-2',6'-二甲氧基联苯)钯(II)(CAS1798781-99-3,0.015当量,0.4g)、磷酸钾(CAS 7778-53-2,2当量,19.2g)。添加200mL二噁烷和50mL水的除气的混合物。反应在80°C的氮气气氛下运行过夜。冷却至室温后形成棕色悬浮液。过滤固体并用水洗涤。将原产物溶解于800mL热氯苯中,并通过硅胶过滤,在低压下蒸发溶剂。然后将产物从甲苯中重结晶。通过升华完成最终纯化。得到白色粉末。收率:13.1g(43%)。(ESI-MS:665)。

[0844] 4-苯基-2-(3-(3,5,6-三苯基吡嗪-2-基)苯基)苯并[h]喹唑啉(A-17)



[0846] 用氮气冲洗三口圆底烧瓶并装入4-苯基-2-(3-(4,4,5,5-四甲基-1,3,2-二氧硼戊环-2-基)苯基)苯并[h]喹唑啉(CAS2639481-16-4,1当量,13.2g)、2-氯-3,5,6-三苯基吡嗪(CAS243472-78-8,1当量,9.9g)、四(三苯基膦)钯(0)(CAS14221-01-3,0.03当量,1.0g)、碳酸钾(CAS 584-08-7,3当量,11.9g)。添加170mL二噁烷和40mL水的除气的混合物。反应在50°C的氮气气氛下运行过夜。在冷却至室温后形成灰色悬浮液。过滤固体,并用二噁烷、水和甲醇洗涤。将原产物溶解在800mL热氯苯中,并通过硅胶过滤,在低压下蒸发溶剂。通过升华完成最终纯化。得到白色粉末。收率:12.2g(68%)。(ESI-MS:639)。

[0847] 2,4-二苯基-9-(3-(3,5,6-三苯基吡嗪-2)-基)苯基)苯并[h]喹唑啉(A-18)



[0849] 第一步:9-溴-2,4-二苯基-5,6-二氢苯并[h]喹唑啉

[0850] 向圆底烧瓶中装入入2-亚苄基-7-溴-3,4-二氢萘-1(2H)-酮(CAS 116047-27-9,1当量,10.6g)、苯甲脒盐酸盐(CAS1670-14-0,1当量,5.5g)、氢氧化钠(1.1当量,1.5g)、230mL乙醇。将所得混合物回流48小时。形成黄色悬浮液,过滤原固体材料,用乙醇洗涤,干燥并用于下一步而无需另外纯化。收率:13.2g(94%)。

[0851] 第2步:9-溴-2,4-二苯基苯并[h]喹唑啉

[0852] 用氩气冲洗三口圆底烧瓶并装入9-溴-2,4-二苯基-5,6-二氢苯并[h]喹唑啉(无CAS号,1当量,78.5g)、4,5-二氯-3,6-二氧环己-1,4-二烯-1,2-二甲腈(CAS 84-58-2,2当量,86.3g)。添加除气的1,2-二氯苯(1200mL)并将反应混合物在130°C下加热48小时。然后冷却反应,通过硅胶垫过滤溶液,在低压下蒸发溶剂。将所得材料从氯仿中结晶。收率:44.8g(57%)。

[0853] 第三步:2,4-二苯基-9-(3-(3,5,6-三苯基吡嗪-2)-基)苯基)苯并[h]喹唑啉

[0854] 用氮气冲洗三口圆底烧瓶并装入9-溴-2,4-二苯基苯并[h]喹唑啉(无CAS号,1当量,15.0g)、2,3,5-三苯基-6-(3-(4,4,5,5-四甲基-1,3,2-二氧硼戊环-2-基)苯基)吡嗪(CAS2396743-64-7,1当量,19.6g)、四(三苯基膦)钯(0)(CAS14221-01-3,0.02当量,0.9g)、碳酸钾(CAS 584-08-7,2当量,10.1g)。添加150mL甲苯、40mL THF和40mL水的除气的混合

物。将反应在90℃的氮气气氛下运行过夜。在冷却至室温后形成悬浮液。过滤固体材料,用水和甲醇洗涤。将原产物溶解于600mL氯苯中,并通过硅胶过滤,在低压下蒸发溶剂。然后将产物从氯苯中重结晶。通过升华完成最终纯化。得到白色粉末。收率:13.2g (50%)。(ESI-MS:715)。

[0855] OLED制造的一般程序

[0856] 对于顶部发光OLED器件,将尺寸为150mm×150mm×0.7mm的衬底用Deconex FPD 211的2%的水溶液超声清洗7分钟,然后用纯水清洗5分钟,并在旋转漂洗干燥机中干燥15分钟。随后,在 $10^{-5}$ 至 $10^{-7}$ mbar的压力下沉积Ag以作为阳极。

[0857] 然后,将HT-1和D-1真空共沉积在阳极上以形成HIL。然后,将HT-1真空沉积在HIL上,以形成HTL。然后,将HT-2真空沉积在HTL上以形成电子阻挡层(EBL)。

[0858] 然后通过共沉积HOST-1和EMITTER-1在EBL上形成发光层。

[0859] 然后,将式(I)化合物(化合物A-1至A-5和A-13至A-18)、相应的比较化合物T-2、T-9至T-11或T13至T-16真空沉积在发光层上以形成第一电子传输层。

[0860] 通过沉积式(II)和化合物(III)的预混化合物,在第一电子传输层上形成第二电子传输层。

[0861] 然后,通过首先沉积LiQ,随后沉积Yb,在第二电子传输层上形成双层的电子注入层。

[0862] 在阴极上形成HT-3的包覆层。

[0863] 下面给出顶部发光OLED器件中层叠层的细节。斜线“/”隔开每个层。方括号[...]中给出了层厚度,圆括号(···)中给出了以重量%表示的混合比例:

[0864] 用于表5的OLED器件中的层叠层详细信息:

[0865] Ag[100nm]/HT-1:NDP-9(重量%92:8)[10nm]/HT-1[130nm]/HT-2[5nm]/H09:BD200(重量%97:3)[20nm]/式(I)化合物[5nm]/ET-1[30nm]/LiQ[1nm]/Yb[2nm]/Ag:Mg(重量%90:10)[13nm]/HT-3[75nm]。

[0866] ET-1=B-17:C-3=20:80重量%。

[0867] 表4:所使用化合物的列表

[0868] 表4:

[0869]

	IUPAC 名称	参考文献
HT-1	N-([1,1'-联苯]-2-基)-N-(9,9-二甲基-9H-芴-2-基)-9,9'-螺二[芴]-2-胺 [CAS 1364603-07-5]	WO2012034627
HT-2	N-([1,1'-联苯]-4-基)-9,9-二苯基-N-(4-(三苯基甲硅烷基)苯基)-9H-芴-2-胺 [CAS 1613079-70-1]	WO2014088047
D-1	4,4',4''-((1E,1'E,1''E)-环丙烷-1,2,3-三亚基三(氰基甲基亚基))三(2,3,5,6-四氟苯甲腈) [CAS 1224447-88-4]	US2008265216
HOST-1	H09(蓝色荧光主体材料)	商购得自 Sun Fine Chemicals, Inc, S. Korea
EMITTER-1	BD200(蓝色荧光发光材料)	商购得自 Sun Fine Chemicals, Inc, S. Korea
LiQ	8-羟基喹啉锂 [CAS 850918-68-2]	WO2013079217

HT-3	N-([1,1'-联苯]-4-基)-9,9-二甲基-N-(4-(9-苯基-9H-咪唑-3-基)-9H-芴-2-基) [CAS 1242056-42-3]	US2016322581
T-2	2,4-二苯基-6-(4',5',6'-三苯基-[1,1':2',1":3",1"':3"',1"''''-五联苯]-3"''-基)-1,3,5-三嗪 2032364-64-8	不适用
T-9	2-([1,1'-联苯]-2-基)-4-苯基-6-(3-(3,5,6-三苯基吡嗪-2-基苯基)-1,3,5-三嗪	不适用
T-10	2-(4',5'-二苯基-[1,1':2',1":3",1"':4''-四联苯]-3"''-基)-4,6-二苯基-1,3,5-三嗪	不适用
T-11	2-(2-([1,2'-双二苯并[b,d]呋喃]-7'-基)苯基)-4,6-二苯基-1,3,5-三嗪	不适用
T-13	2-([1,1'-联苯]-3-基)-4-苯基-6-(3-(9-苯基-9H-芴-9-基)苯基)-1,3,5-三嗪 2396647-22-4	WO2019235871
T-14	2,4-二苯基-6-(3"-(1,2,2-三苯基乙烯基)-[1,1':3',1"':三苯基]-3-基)-1,3,5-三嗪	不适用
T-15	2,4-二苯基-6-(3"-(3,5,6-三苯基吡嗪-2-基)-[1,1':3',1"':三苯基]-3-基)-1,3,5-三嗪 2396743-80-7	不适用
T-16	2-(3",5"-二苯基-[1,1':3',1"':4",1"':四联苯]-3-基)-4,6-二苯基-1,3,5-三嗪	不适用
B-17	(3-(4-(4-(4,6-二苯基-1,3,5-三嗪-2-基)苯基)萘-1-基)苯基)二甲基氧化膦 2253724-56-8	EP3407401
C-3	2-([1,1'-联苯]-3-基)-4-苯基-6-(3-(10-苯基蒽-9-基)苯基)-1,3,5-三嗪 2437303-42-7	EP3667753 A2
ET-1	B-17:C-3=20:80 重量%。	

[0871] 表5:在第一电子传输层中包含式(I)化合物并且在第二电子传输层中包含式(II)化合物和化合物(III)的混合物的有机电致发光器件的性能。

[0872]

	第一电子传输层	第二电子传输层	EIL	在 10 mA/cm <sup>2</sup> 下的相对工作电压 (相对于比较-1 的%)	在 10 mA/cm <sup>2</sup> 下的相对 cd/A 效率 (相对于比较-1 的%)
比较-1	T-2	ET-1	LiQ	100	100
比较-2	T-9	ET-1	LiQ	98	103
比较-3	T-10	ET-1	LiQ	99	101
比较-4	T-11	ET-1	LiQ	101	96
比较-5	T-13	ET-1	LiQ	99	95
比较-6	T-14	ET-1	LiQ	98	96
比较-7	T-15	ET-1	LiQ	101	92
比较-8	T-16	ET-1	LiQ	100	91
OLED-1	A-1	ET-1	LiQ	99	108
OLED-2	A-2	ET-1	LiQ	97	112
OLED-3	A-3	ET-1	LiQ	99	118
OLED-4	A-4	ET-1	LiQ	100	108
OLED-5	A-5	ET-1	LiQ	98	108
OLED-6	A-13	ET-1	LiQ	99	110
OLED-7	A-14	ET-1	LiQ	101	107
OLED-8	A-15	ET-1	LiQ	97	111
OLED-9	A-16	ET-1	LiQ	100	106
OLED-10	A-17	ET-1	LiQ	97	107
OLED-11	A-18	ET-1	LiQ	99	106

[0873] 从本发明实施例(OLED 1至11)与其中分别使用含1,3,5-三嗪的化合物作为式(I)化合物的比较例的比较中能够看出,在第一电子传输层中使用本发明的不含1,3,5-三嗪的化合物作为式(I)化合物导致在大致相同的电压下具有更高的效率。

[0874] 前述说明书和附属权利要求中公开的特征可单独地和以其任意组合两种方式为以其多种形式实现独立权利要求中所公开的方面的素材。

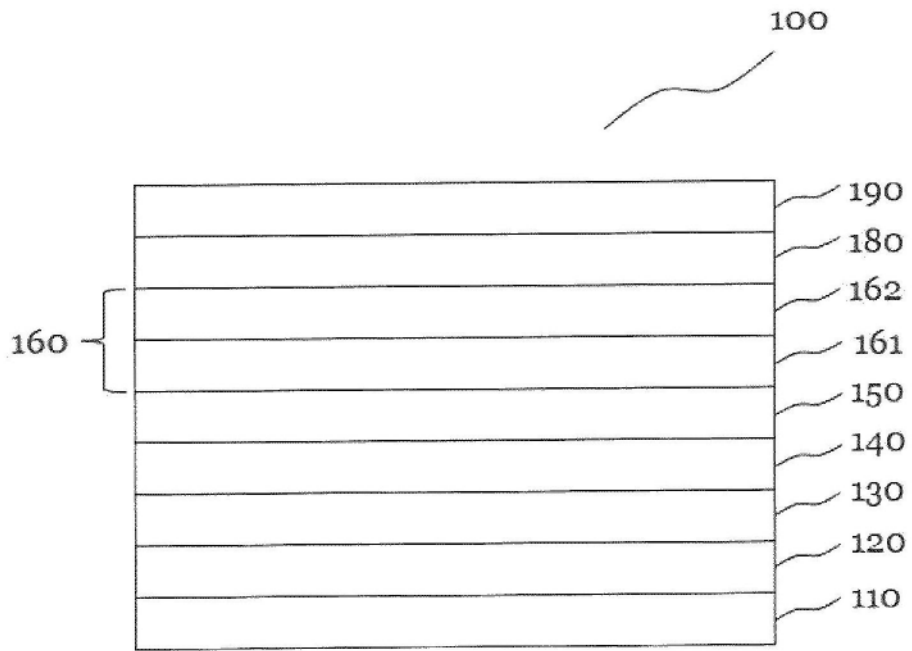


图1

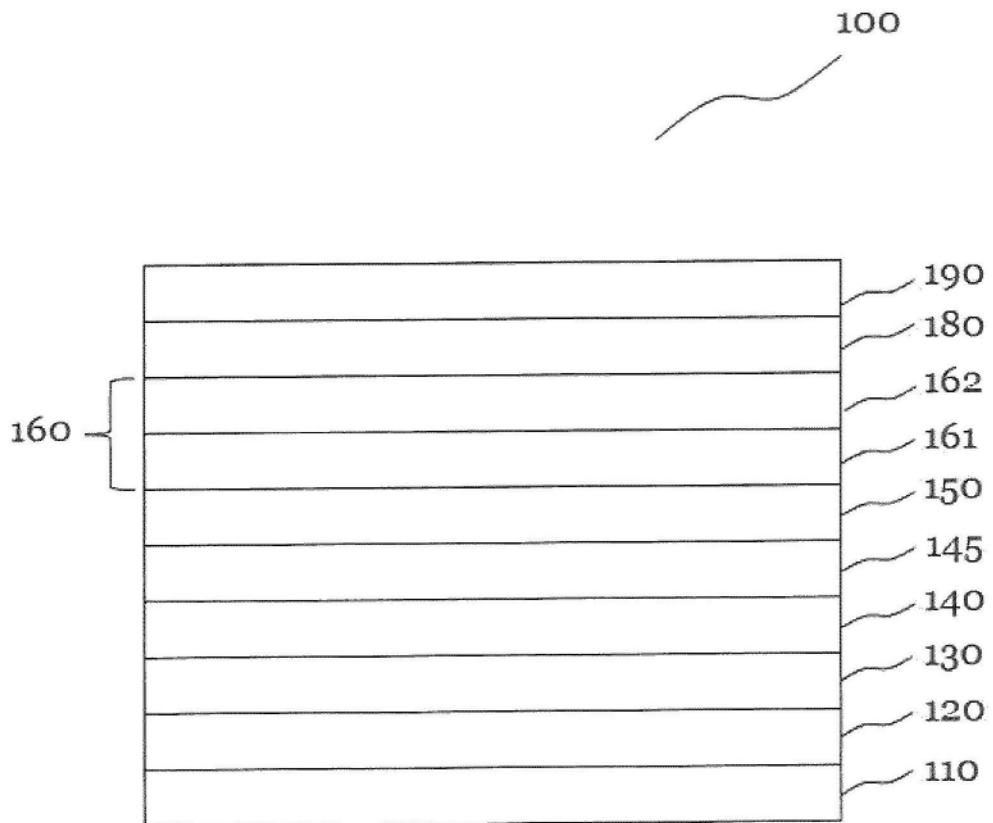


图2