



(12) 发明专利



(10) 授权公告号 CN 113924665 B

(45) 授权公告日 2023. 09. 29

(21) 申请号 202080038728.7	李禹哲 李在卓 尹正民
(22) 申请日 2020.11.27	(74) 专利代理机构 北京集佳知识产权代理有限公司 11227
(65) 同一申请的已公布的文献号 申请公布号 CN 113924665 A	专利代理师 梁笑 黄水娜
(43) 申请公布日 2022.01.11	(51) Int.Cl.
(30) 优先权数据 10-2019-0157080 2019.11.29 KR	H10K 85/60 (2023.01)
(85) PCT国际申请进入国家阶段日 2021.11.24	H10K 50/11 (2023.01)
(86) PCT国际申请的申请数据 PCT/KR2020/017129 2020.11.27	H10K 50/14 (2023.01)
(87) PCT国际申请的公布数据 W02021/107699 KO 2021.06.03	H10K 50/17 (2023.01)
(73) 专利权人 株式会社LG化学 地址 韩国首尔	H10K 50/18 (2023.01)
(72) 发明人 许东旭 琴水井 李在九 洪性佑	(56) 对比文件
	CN 110462862 A,2019.11.15
	CN 106164215 A,2016.11.23
	CN 109075261 A,2018.12.21
	EP 2752904 A1,2014.07.09
	审查员 赵慧敏
	权利要求书40页 说明书122页 附图1页

(54) 发明名称

有机发光器件

(57) 摘要

本说明书提供了有机发光器件,其包括阳极;阴极;设置在阳极与阴极之间的发光层;以及设置在发光层与阴极之间的第一有机材料层。

9
7
6
2
1

1.一种有机发光器件,包括:

阳极:

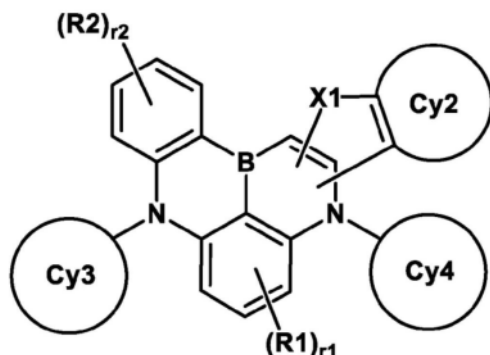
阴极:

设置在所述阳极与所述阴极之间的发光层;以及

设置在所述发光层与所述阴极之间的第一有机材料层,

其中所述发光层包含由以下化学式1表示的化合物,以及所述第一有机材料层包含由以下化学式2表示的化合物:

[化学式1]



在化学式1中，

X1为0;或S,

Cy2为选自由经取代或未经取代的芳族烃环;和经取代或未经取代的脂族烃环组成的组中的一者,或者为选自上述组中的两个或更多个环的稠环,

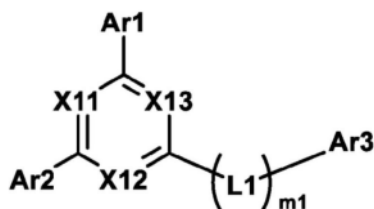
Cy3和Cy4彼此相同或不同,并且各自独立地为选自自由经取代或未经取代的芳族烃环;经取代或未经取代的脂族烃环;和经取代或未经取代的芳族杂环组成的组中的一者,或者为选自上述组中的两个或更多个环的稠环,

R1和R2彼此相同或不同,并且各自独立地为氢;氘;氰基;卤素基团;经取代或未经取代的烷基;经取代或未经取代的烷氧基;经取代或未经取代的烷基硫基;经取代或未经取代的环烷基;经取代或未经取代的甲硅烷基;经取代或未经取代的芳基;经取代或未经取代的芳氧基;经取代或未经取代的芳基硫基;经取代或未经取代的杂环基;或者经取代或未经取代的胺基,或者与相邻取代基键合以形成经取代或未经取代的环,

r_1 为0至3的整数,并且当 r_1 为2或更大时, R_1 彼此相同或不同,以及

r_2 为0至4的整数,并且当 r_2 为2或更大时, R_2 彼此相同或不同,

[化学式2]



在化学式2中,

X11至X13为N;或CR',并且X11至X13中的至少一者为N,

R' 为氢; 氘; 氰基; 卤素基团; 经取代或未经取代的烷基; 经取代或未经取代的烯基; 经

取代或未经取代的烷氧基；经取代或未经取代的烷基硫基；经取代或未经取代的环烷基；经取代或未经取代的甲硅烷基；经取代或未经取代的芳基；经取代或未经取代的芳氧基；经取代或未经取代的芳基硫基；或者经取代或未经取代的杂环基，

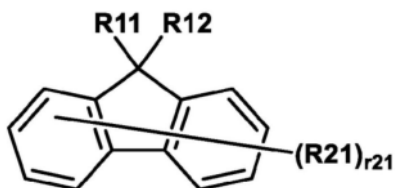
L1为直接键；经取代或未经取代的亚芳基；或者经取代或未经取代的二价杂环基，

m1为1至3的整数，并且当m1为2或更大时，L1彼此相同或不同，

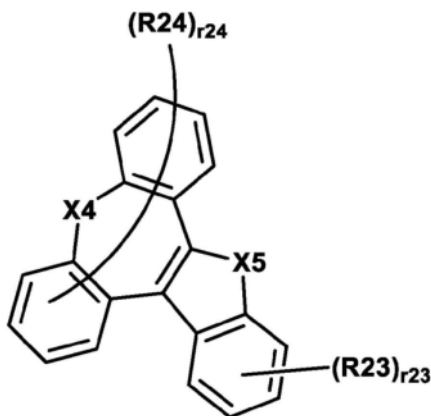
Ar1和Ar2彼此相同或不同，并且各自独立地为经取代或未经取代的芳基；或者经取代或未经取代的杂环基，以及

Ar3为以下化学式2-A至2-C中的任一者，

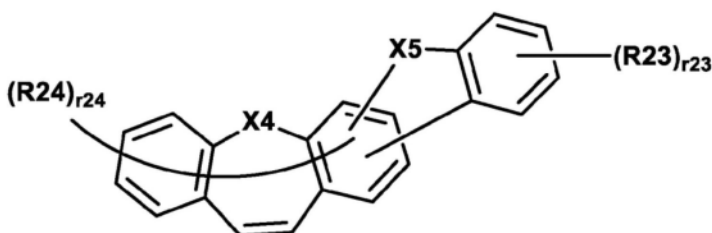
[化学式2-A]



[化学式2-B]



[化学式2-C]



在化学式2-A至2-C中，

R11和R12为经取代或未经取代的烷基；或者经取代或未经取代的芳基，或者与相邻基团键合以形成经取代或未经取代的环，

X4为O；S；或NR25，

X5为O；S；或NR22，

R21至R25中的任一者与化学式2连接，以及余者彼此相同或不同，并且各自独立地为氢；氘；氰基；卤素基团；经取代或未经取代的烷基；经取代或未经取代的烷氧基；经取代或未经取代的烷基硫基；经取代或未经取代的环烷基；经取代或未经取代的甲硅烷基；经取代或未经取代的芳基；经取代或未经取代的芳氧基；经取代或未经取代的芳基硫基；经取代或

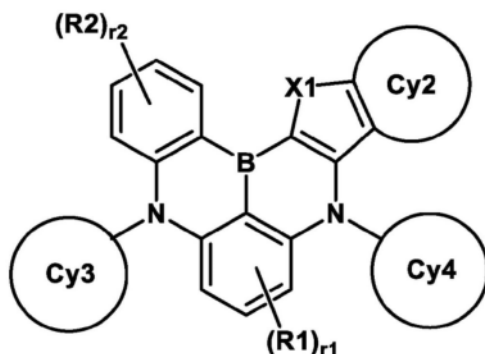
未经取代的杂环基；或者经取代或未经取代的氨基，或者与相邻取代基键合以形成经取代或未经取代的环，

r21为0至7的整数，r23为0至4的整数，以及r24为0至8的整数，以及

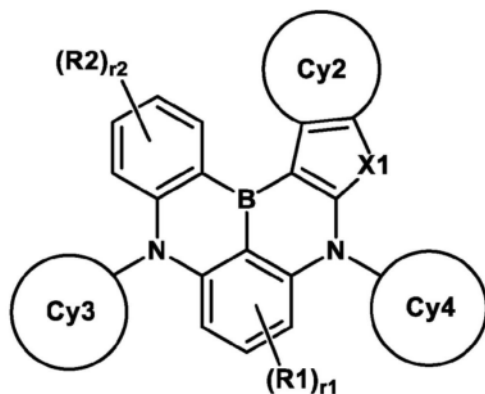
当r21、r23和r24各自为2或更大时，括号中的取代基彼此相同或不同。

2. 根据权利要求1所述的有机发光器件，其中化学式1由以下化学式101或102表示：

[化学式101]



[化学式102]



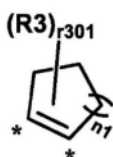
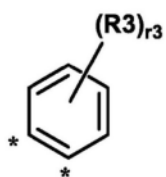
在化学式101和102中，

X1、Cy2至Cy4、R1、R2、r1和r2具有与化学式1中相同的限定。

3. 根据权利要求1所述的有机发光器件，其中Cy2由以下化学式Cy2-1或Cy2-2表示：

[化学式 Cy2-1]

[化学式 Cy2-2]



在化学式Cy2-1和Cy2-2中，

R3为氢；氘；氰基；卤素基团；经取代或未经取代的烷基；经取代或未经取代的烷氧基；经取代或未经取代的烷基硫基；经取代或未经取代的环烷基；经取代或未经取代的甲硅烷基；经取代或未经取代的芳基；经取代或未经取代的芳氧基；经取代或未经取代的芳基硫基；经取代或未经取代的杂环基；或者经取代或未经取代的氨基，或者与相邻取代基键合以形成经取代或未经取代的芳族烃环；经取代或未经取代的脂族烃环；或者经取代或未经取代的芳族烃环和脂族烃环的稠环，

n_1 为1或2,

r_3 为0至4的整数,以及 r_{301} 为0至8的整数,

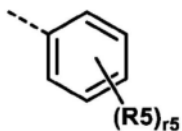
当 r_3 和 r_{301} 各自为2或更大时,两个或更多个 R_3 彼此相同或不同,以及

*意指与化学式1稠合的位置。

4. 根据权利要求1所述的有机发光器件,其中 Cy_3 和 Cy_4 彼此相同或不同,并且各自独立地为经取代或未经取代的苯环;经取代或未经取代的萘环;经取代或未经取代的菲环;经取代或未经取代的茚环;经取代或未经取代的苯并茚环;经取代或未经取代的四氢萘环;经取代或未经取代的二苯并呋喃环;经取代或未经取代的二苯并噻吩环;经取代或未经取代的二苯并噻咯环;经取代或未经取代的萘并苯并呋喃环;经取代或未经取代的萘并苯并噻吩环;或者经取代或未经取代的萘并苯并噻咯环。

5. 根据权利要求1所述的有机发光器件,其中 Cy_3 和 Cy_4 彼此相同或不同,并且各自独立地由以下化学式1-A表示:

[化学式1-A]



在化学式1-A中,

虚线为与化学式1连接的位置,

R_5 为氢;氘;氰基;卤素基团;经取代或未经取代的烷基;经取代或未经取代的烷氧基;经取代或未经取代的烷基硫基;经取代或未经取代的环烷基;经取代或未经取代的甲硅烷基;经取代或未经取代的芳基;经取代或未经取代的芳氧基;经取代或未经取代的芳基硫基;经取代或未经取代的杂环基;或者经取代或未经取代的胺基,或者与相邻取代基键合以形成经取代或未经取代的环,以及

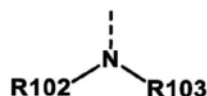
r_5 为0至5的整数,并且当 r_5 为2或更大时, R_5 彼此相同或不同。

6. 根据权利要求1所述的有机发光器件,其中 R_1 由以下化学式1-B-1至1-B-4中的任一者表示:

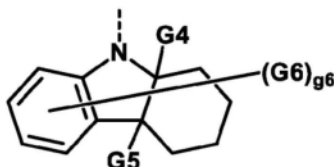
[化学式 1-B-1]



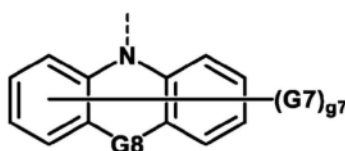
[化学式 1-B-2]



[化学式 1-B-3]



[化学式 1-B-4]



在化学式1-B-1至1-B-4中,

G_8 为直接键; $-O-$; $-S-$; $-CG_9G_{10}-$; 或 $-SiG_9G_{10}-$,

R_{101} 至 R_{103} 和 G_4 至 G_7 彼此相同或不同,并且各自独立地为氢;氘;氰基;卤素基团;经取

代或未经取代的烷基；经取代或未经取代的烷氧基；经取代或未经取代的烷基硫基；经取代或未经取代的环烷基；经取代或未经取代的甲硅烷基；经取代或未经取代的芳基；经取代或未经取代的芳氧基；经取代或未经取代的芳基硫基；经取代或未经取代的杂环基；或者经取代或未经取代的胺基，或者与相邻取代基键合以形成经取代或未经取代的环，

G9和G10彼此相同或不同，并且各自独立地为氢；氘；经取代或未经取代的烷基；或者经取代或未经取代的芳基，或者与相邻取代基键合以形成经取代或未经取代的环，

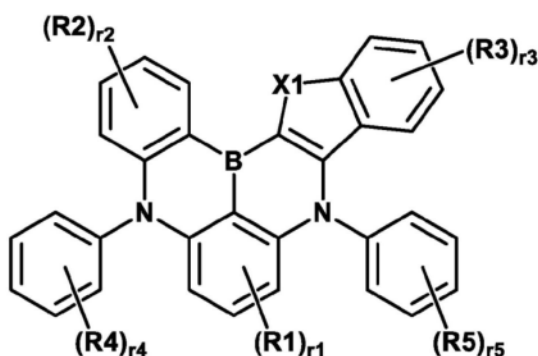
g6为0至12的整数，以及g7为0至8的整数，

当g6和g7各自为2或更大时，括号中的取代基彼此相同或不同，以及

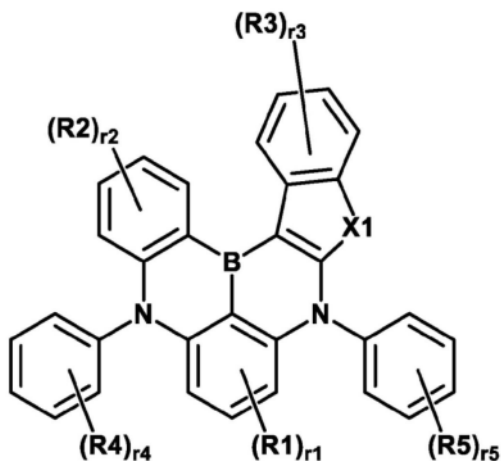
虚线意指与化学式1键合的位置。

7. 根据权利要求1所述的有机发光器件，其中化学式1由以下化学式103至106中的任一者表示：

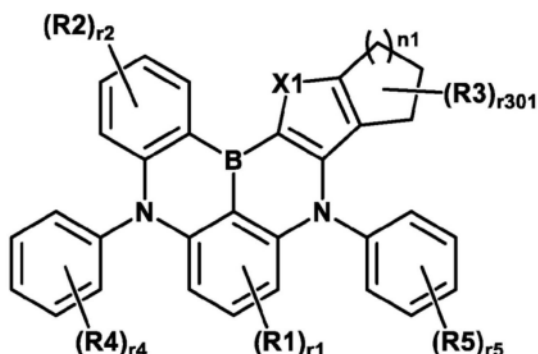
[化学式103]



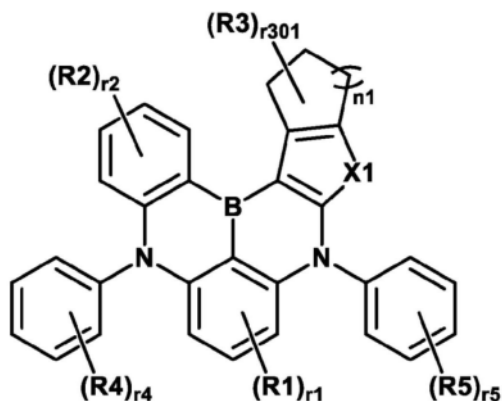
[化学式104]



[化学式105]



[化学式106]



在化学式103至106中，

X1、R1、R2、r1和r2具有与化学式1中相同的限定，

R3至R5彼此相同或不同，并且各自独立地为氢；氘；氰基；卤素基团；经取代或未经取代的烷基；经取代或未经取代的烷氧基；经取代或未经取代的烷基硫基；经取代或未经取代的环烷基；经取代或未经取代的甲硅烷基；经取代或未经取代的芳基；经取代或未经取代的芳氧基；经取代或未经取代的芳基硫基；经取代或未经取代的杂环基；或者经取代或未经取代的胺基，

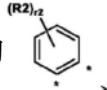
R3与相邻取代基键合以形成经取代或未经取代的芳族烃环；经取代或未经取代的脂族烃环；或者经取代或未经取代的芳族烃环和脂族烃环的稠环，

R4和R5各自与相邻取代基键合以形成经取代或未经取代的环，

n1为1或2，

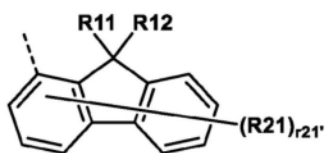
r3为0至4的整数，r4和r5各自为0至5的整数，以及r301为0至8的整数，以及

当r3至r5和r301各自为2或更大时，括号中的取代基彼此相同或不同。

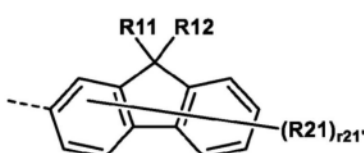
8. 根据权利要求1所述的有机发光器件，其中化学式1的  Cy2至Cy4和R1中的至少一者包含稠合有经取代或未经取代的脂族烃环的环，以及*意指与化学式1稠合的位置。

9. 根据权利要求1所述的有机发光器件，其中Ar3为以下化学式2-A-1至2-A-4中的任一者：

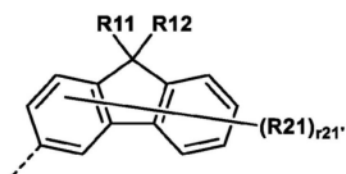
[化学式 2-A-1]



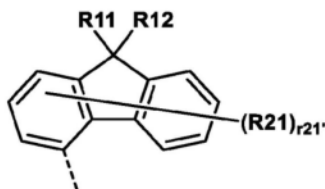
[化学式 2-A-2]



[化学式 2-A-3]



[化学式 2-A-4]



在化学式2-A-1至2-A-4中,

R11和R12具有与化学式2中相同的限定,

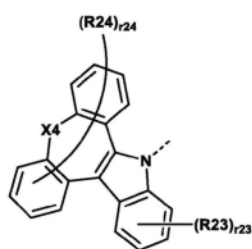
虚线意指与化学式2连接的位置,

R21为氢;氘;氰基;卤素基团;经取代或未经取代的烷基;经取代或未经取代的烷氧基;经取代或未经取代的烷基硫基;经取代或未经取代的环烷基;经取代或未经取代的甲硅烷基;经取代或未经取代的芳基;经取代或未经取代的芳氧基;经取代或未经取代的芳基硫基;经取代或未经取代的杂环基;或者经取代或未经取代的氨基,或者与相邻取代基键合以形成经取代或未经取代的环,以及

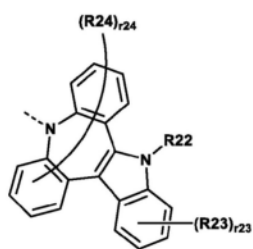
r_{21}' 为0至7的整数,并且当 r_{21}' 为2或更大时,R21彼此相同或不同。

10. 根据权利要求1所述的有机发光器件,其中Ar3为以下化学式2-B-1、2-B-2和2-C-1至2-C-4中的任一者:

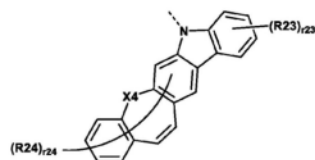
[化学式 2-B-1]



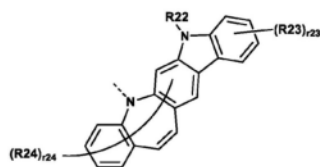
[化学式 2-B-2]



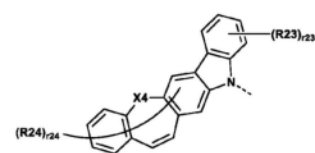
[化学式 2-C-1]



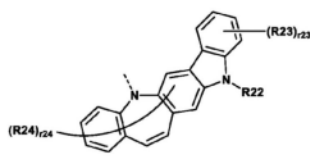
[化学式 2-C-2]



[化学式 2-C-3]



[化学式 2-C-4]

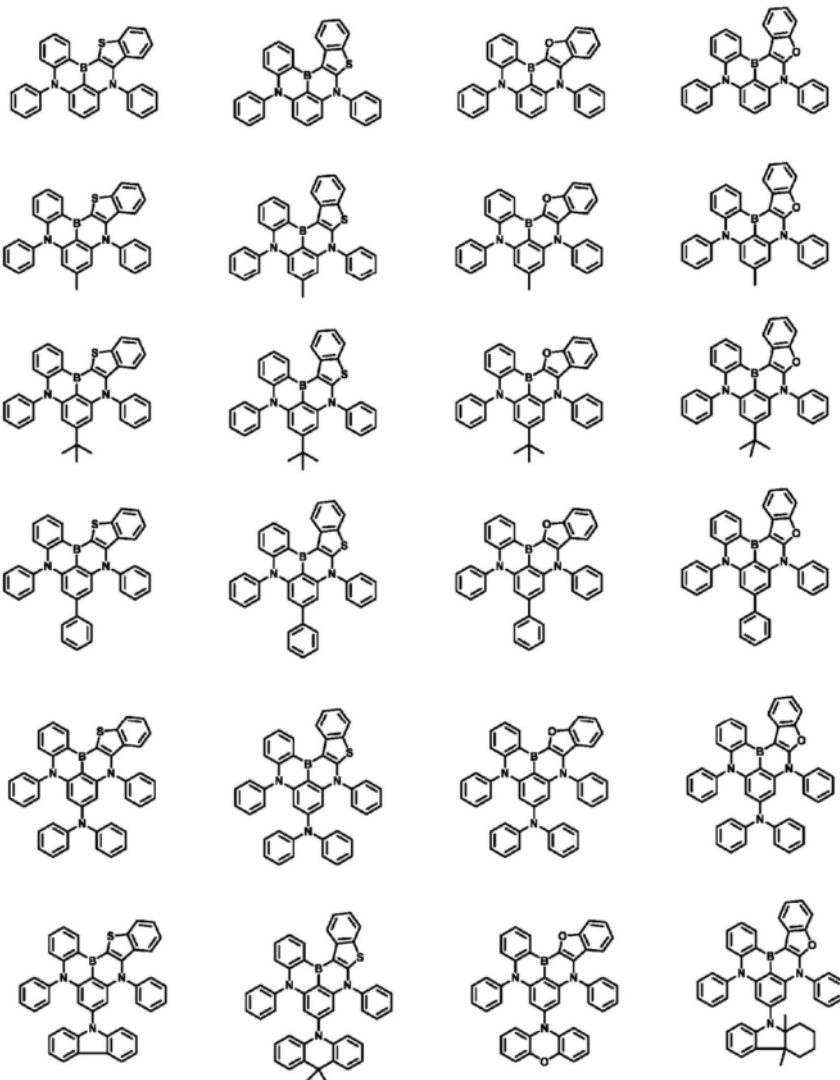


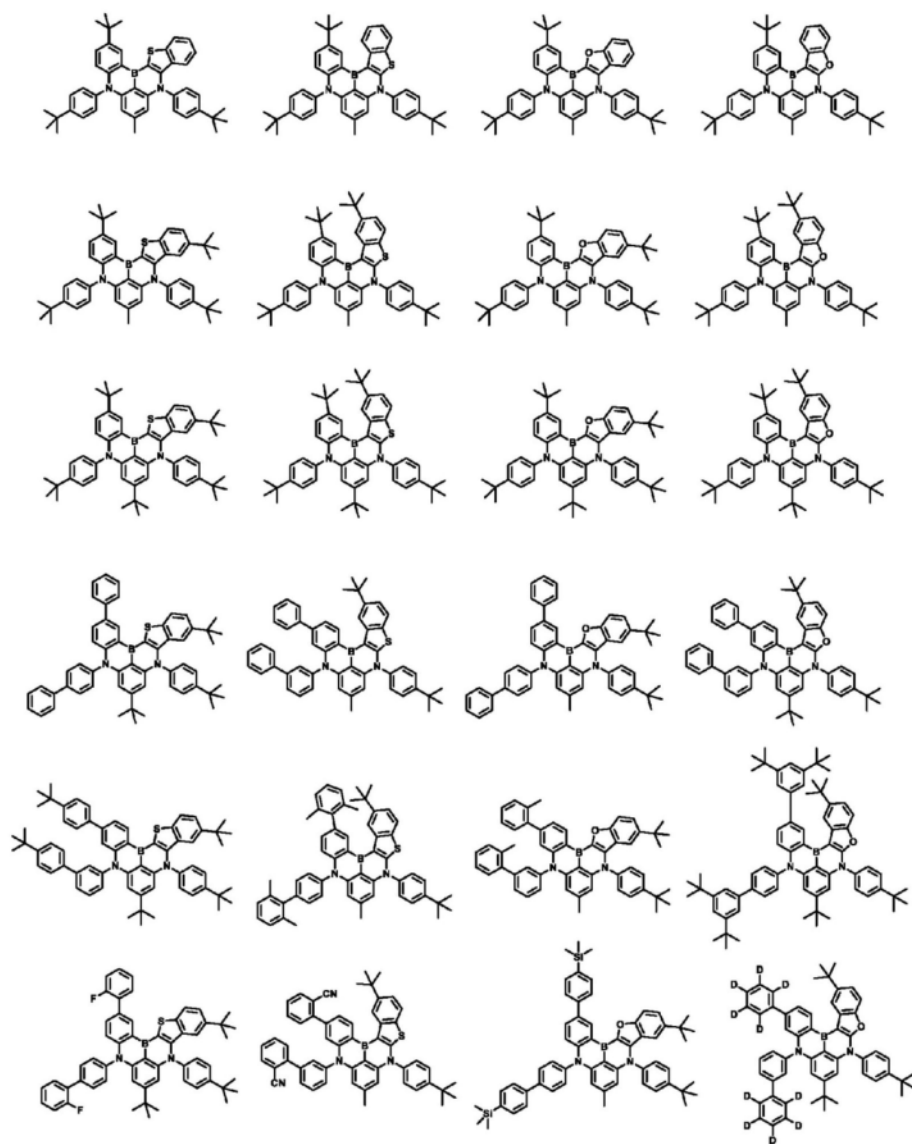
在化学式2-B-1、2-B-2和2-C-1至2-C-4中，

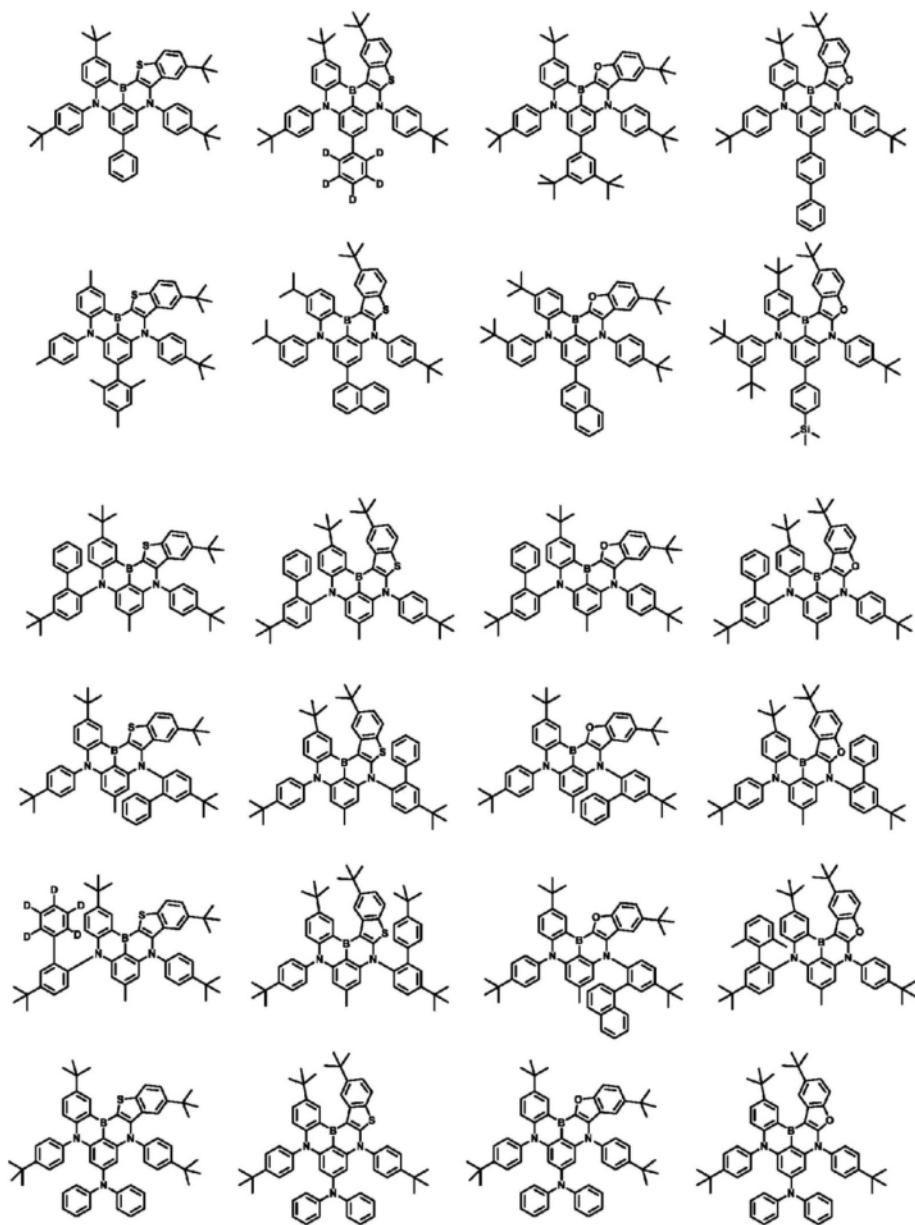
虚线、X4、R22至R24、r23和r24具有与化学式2中相同的限定。

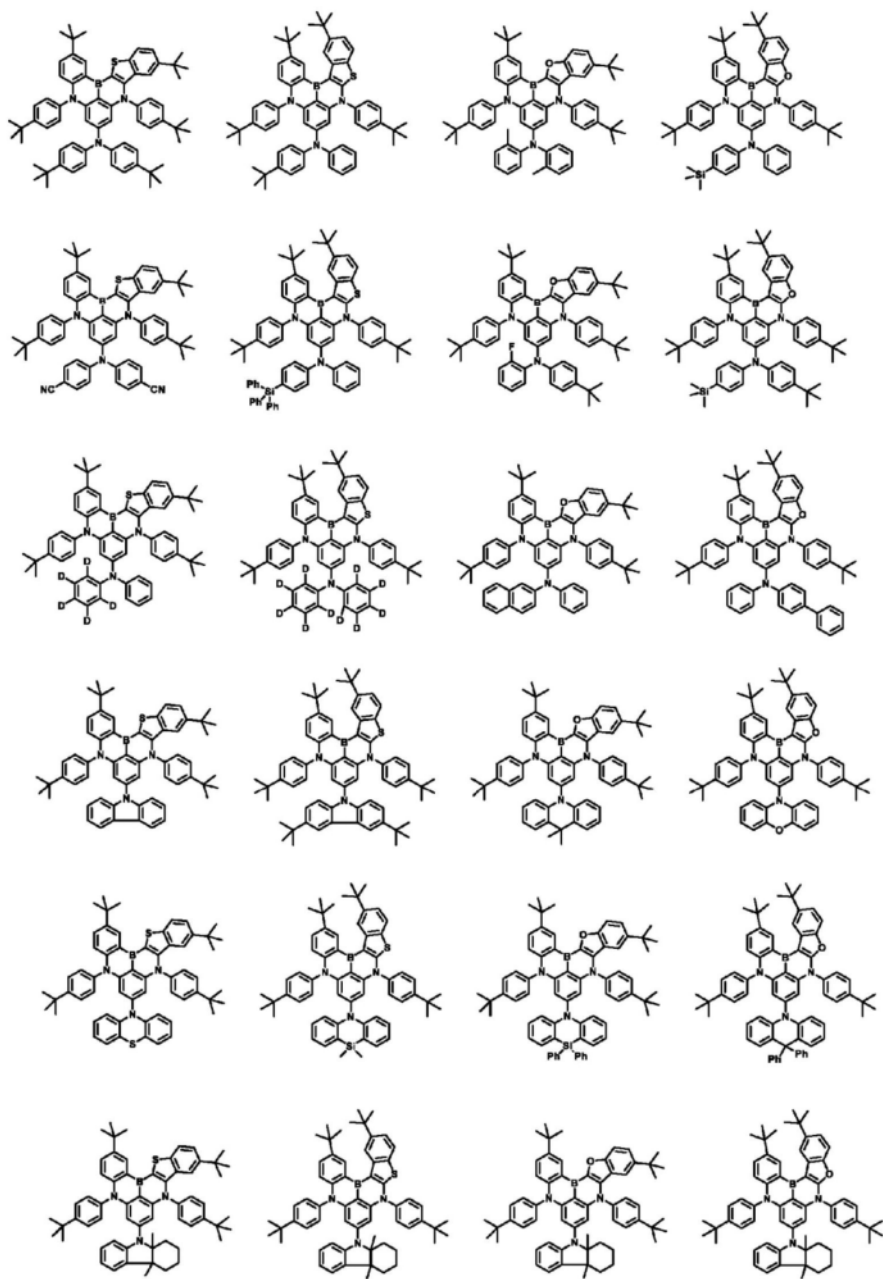
11. 根据权利要求1所述的有机发光器件，其中L1为直接键；或者C6-C30亚芳基，以及Ar1和Ar2彼此相同或不同，并且各自独立地为C6-C30芳基。

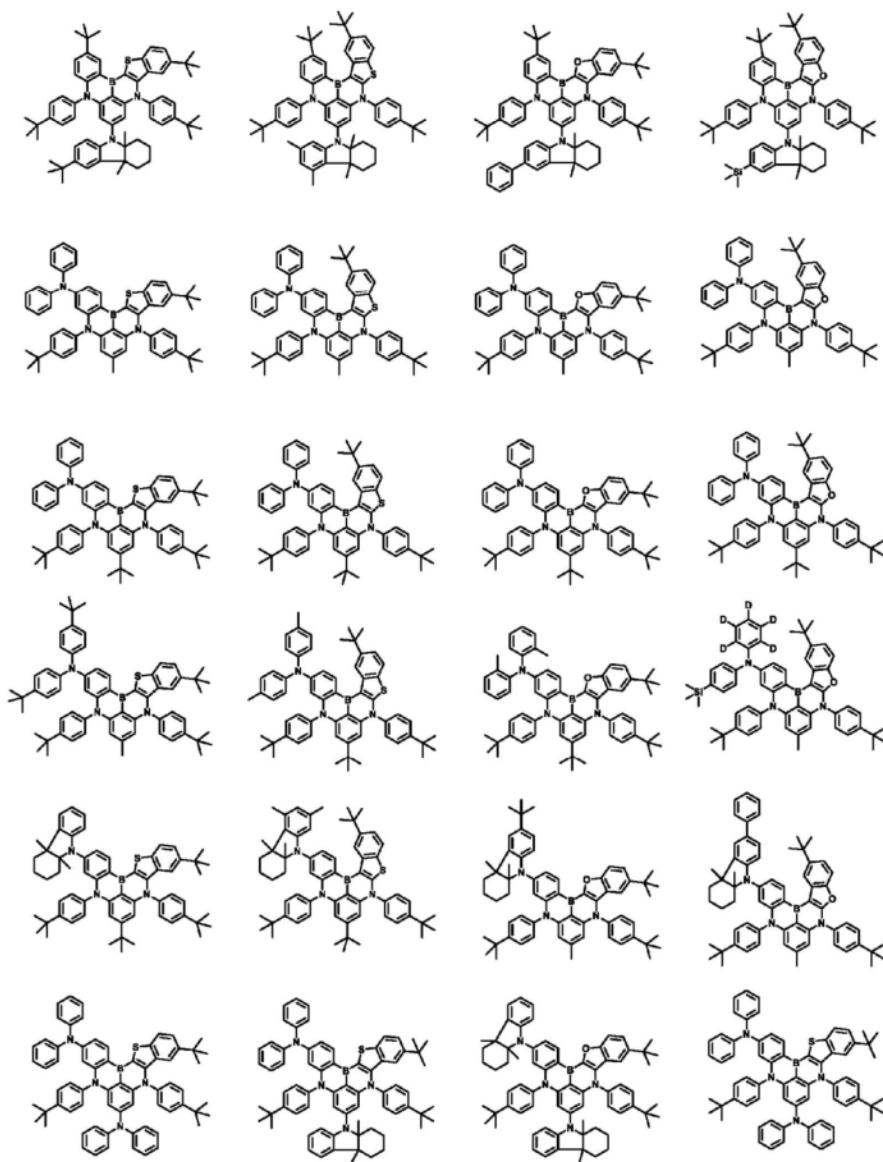
12. 根据权利要求1所述的有机发光器件，其中化学式1由以下化合物中的任一者表示：

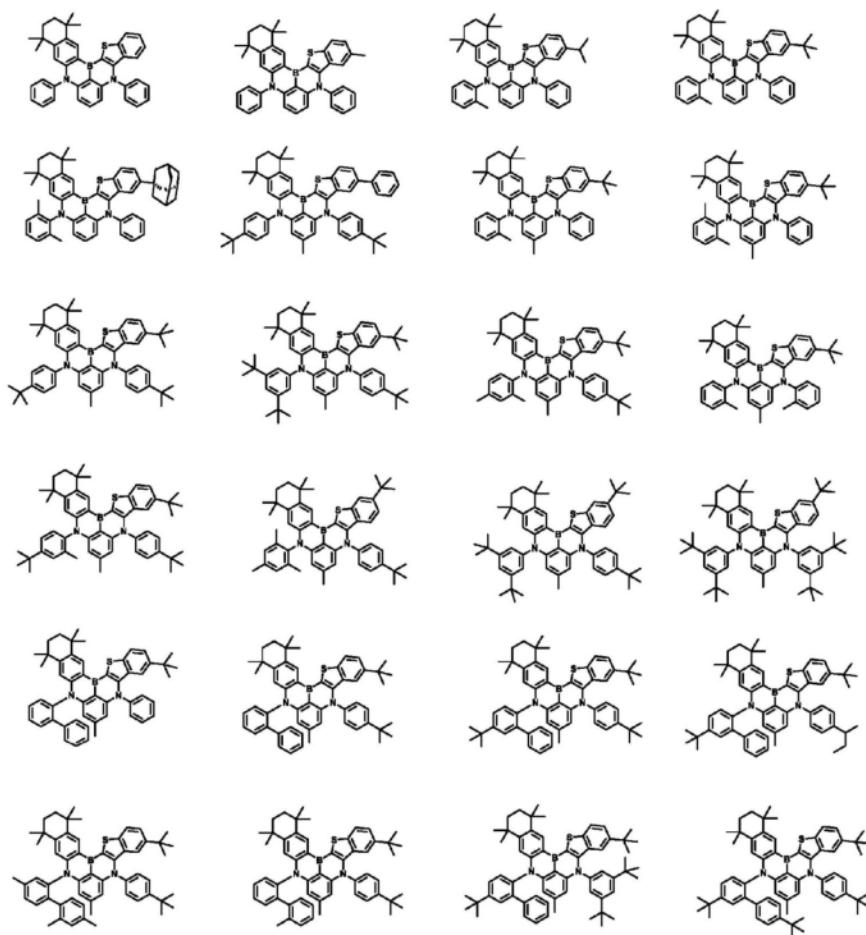


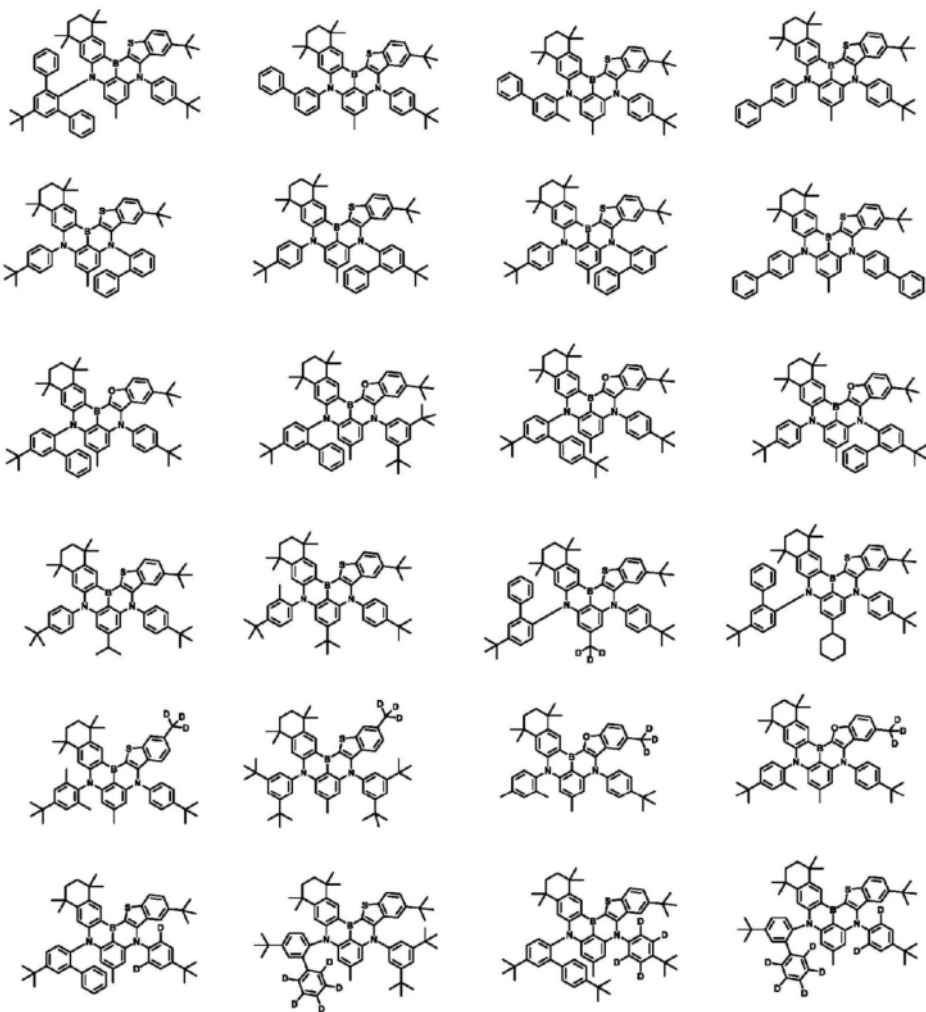


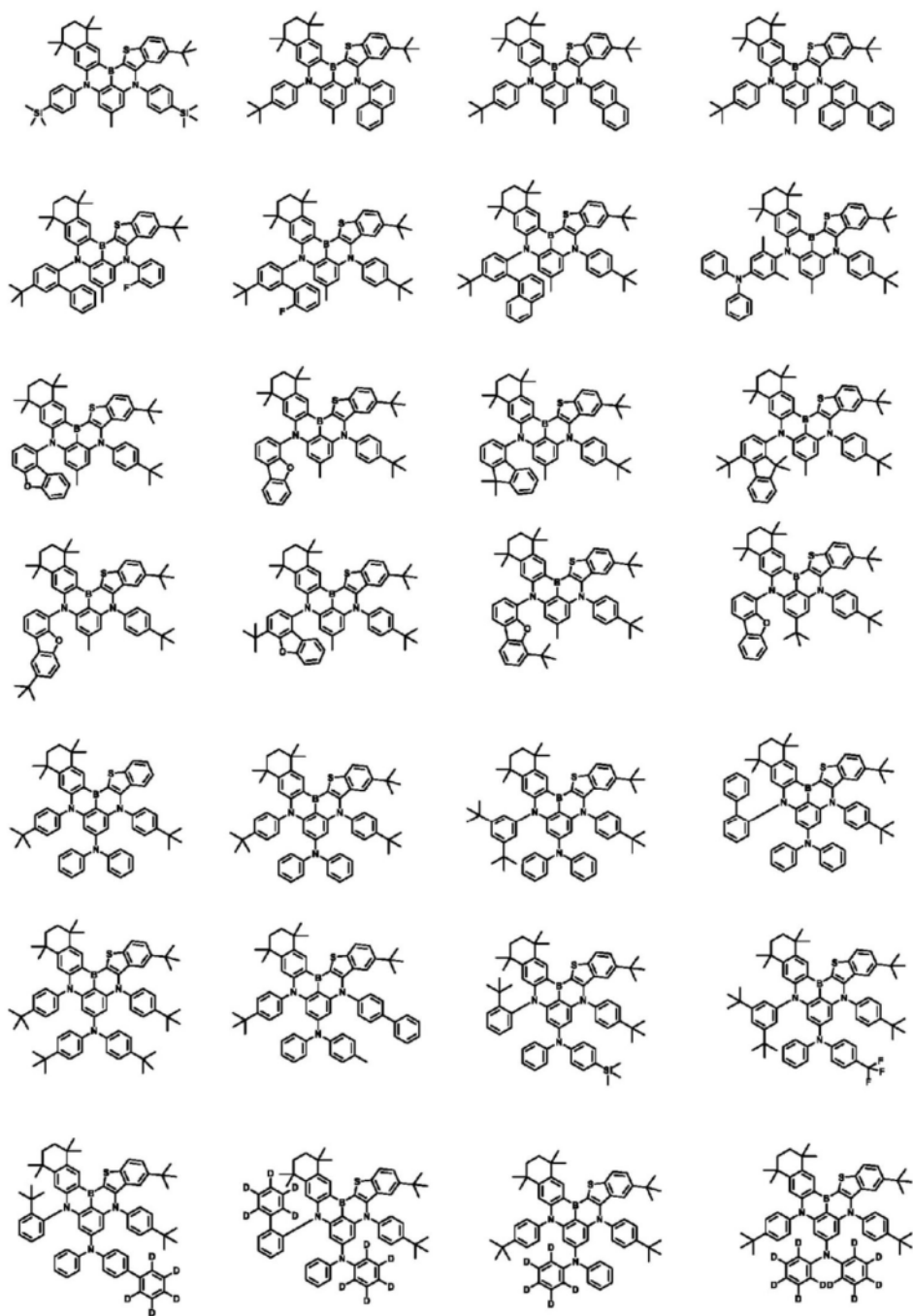


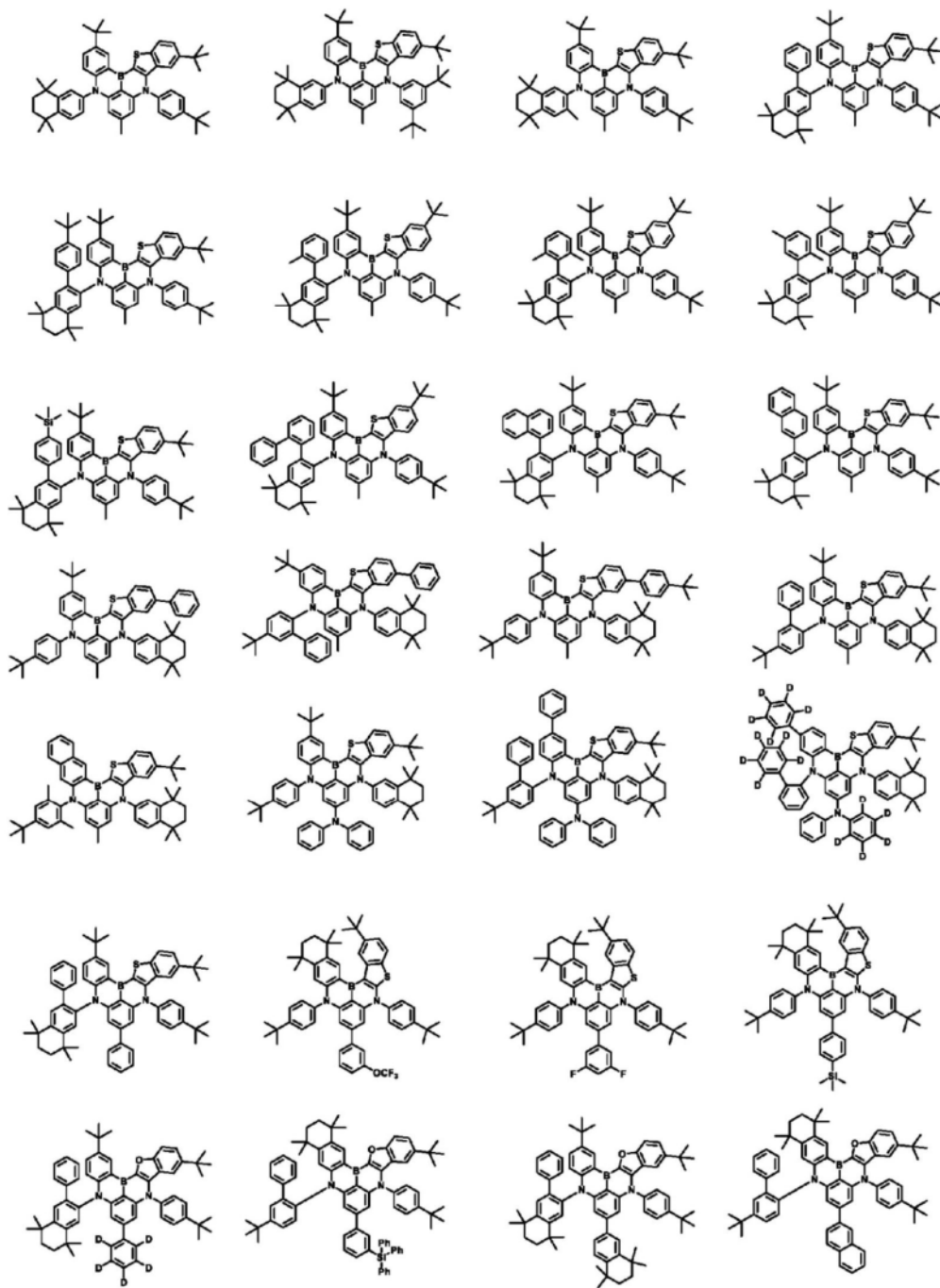


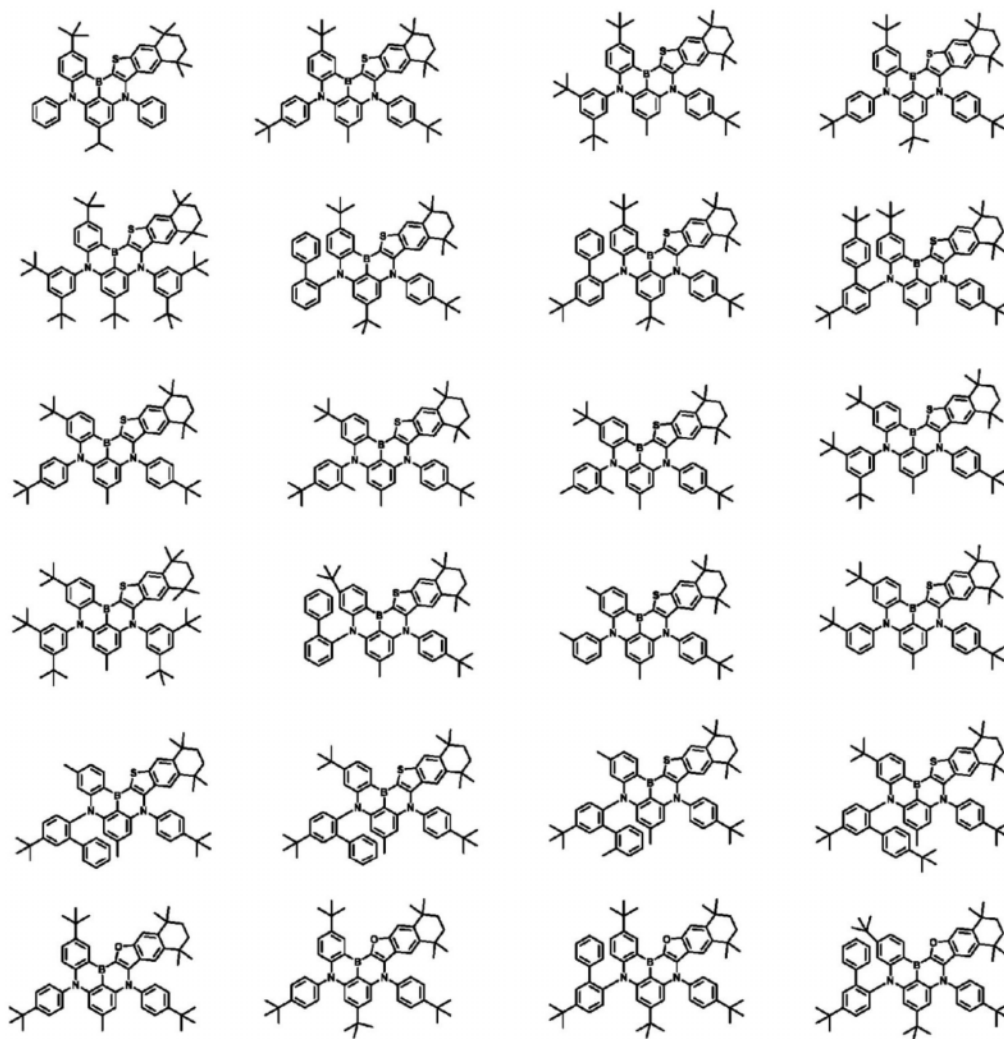


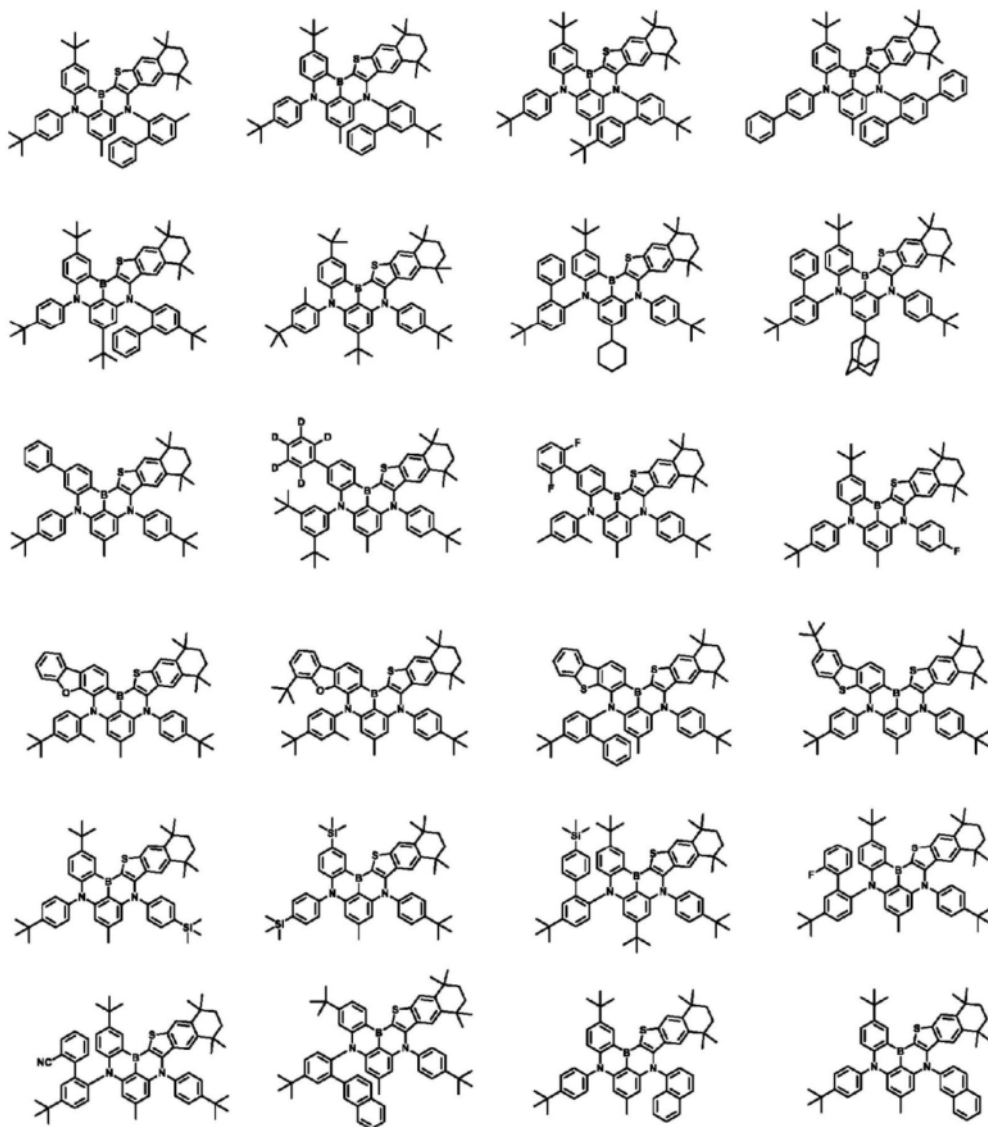


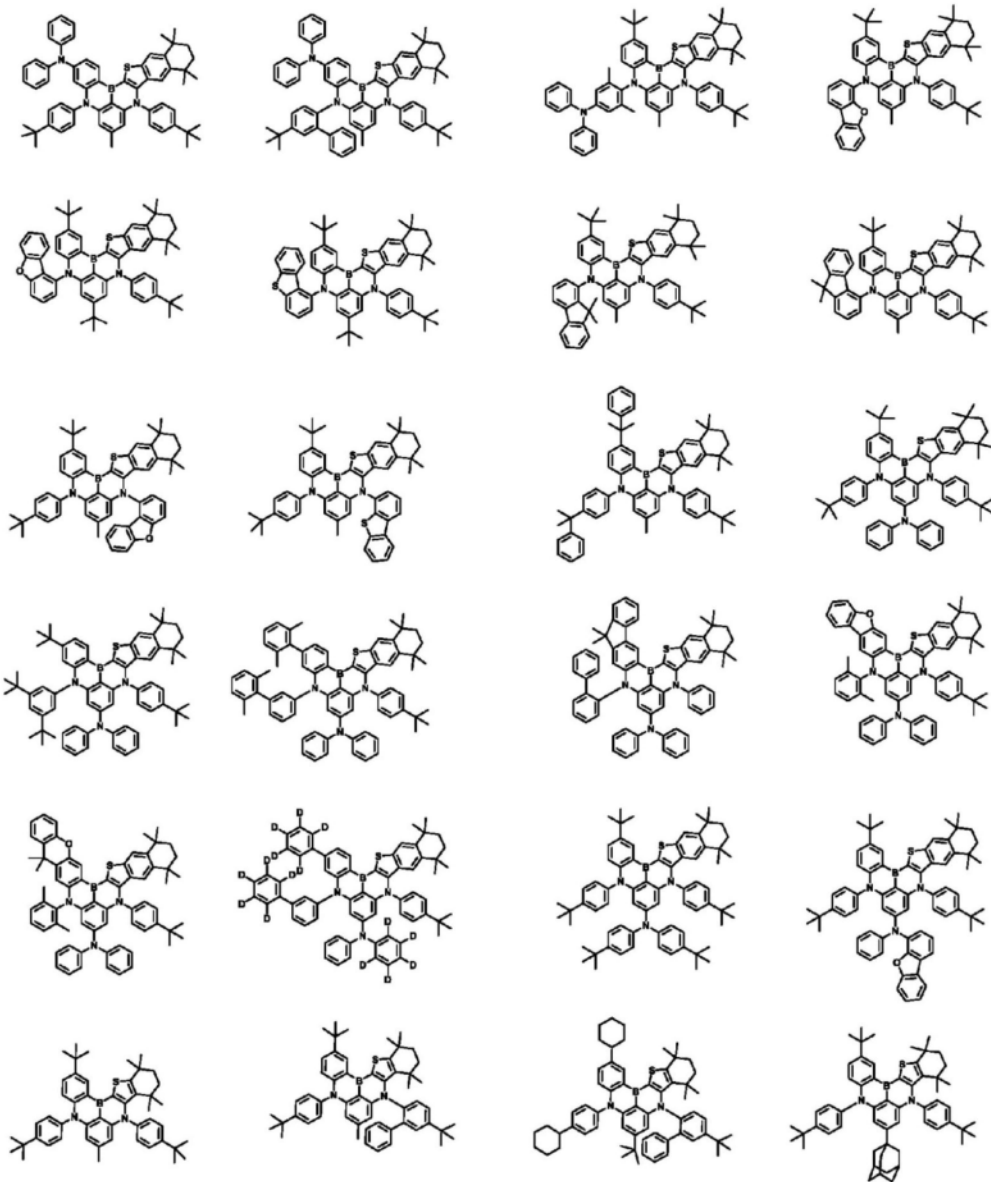


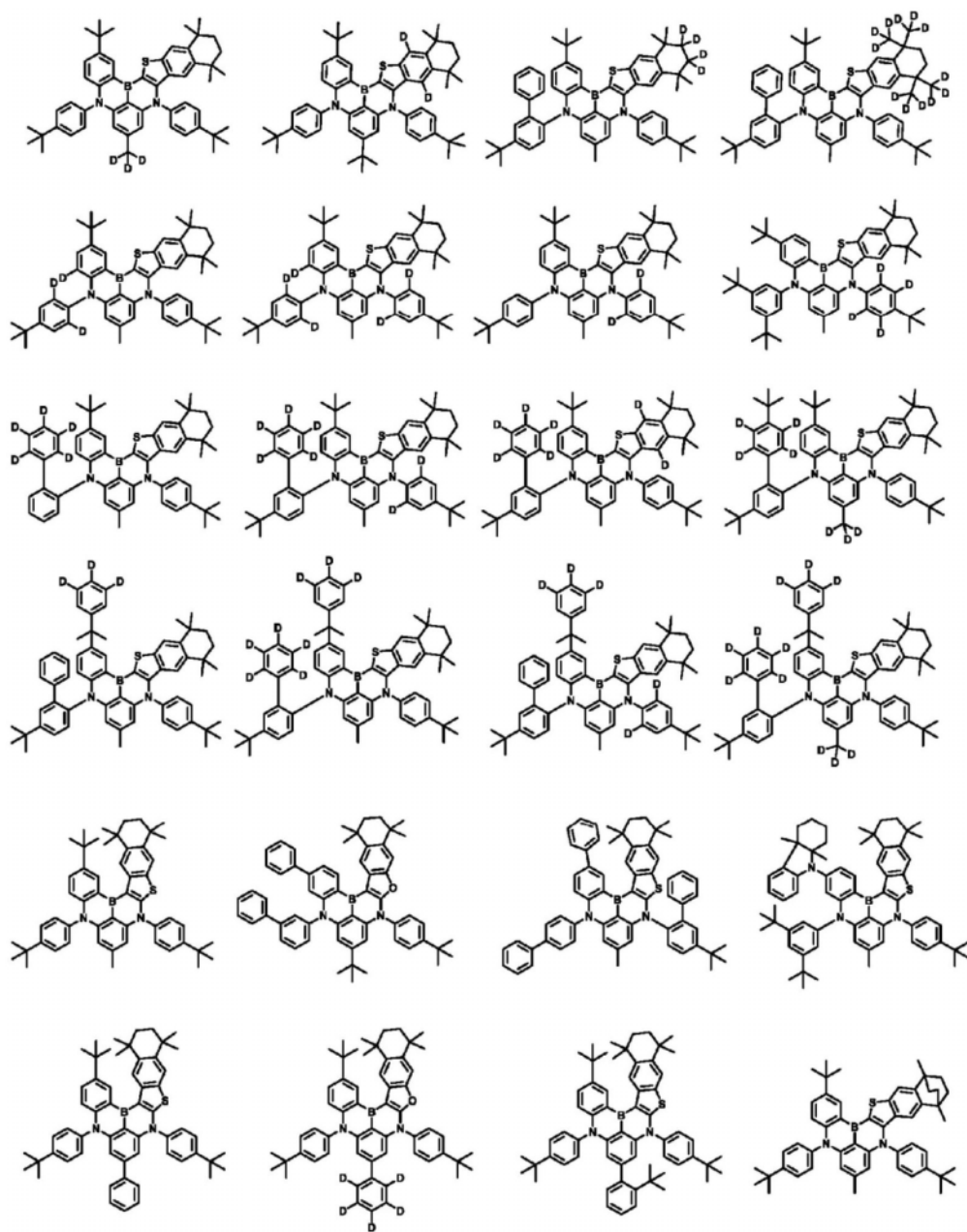


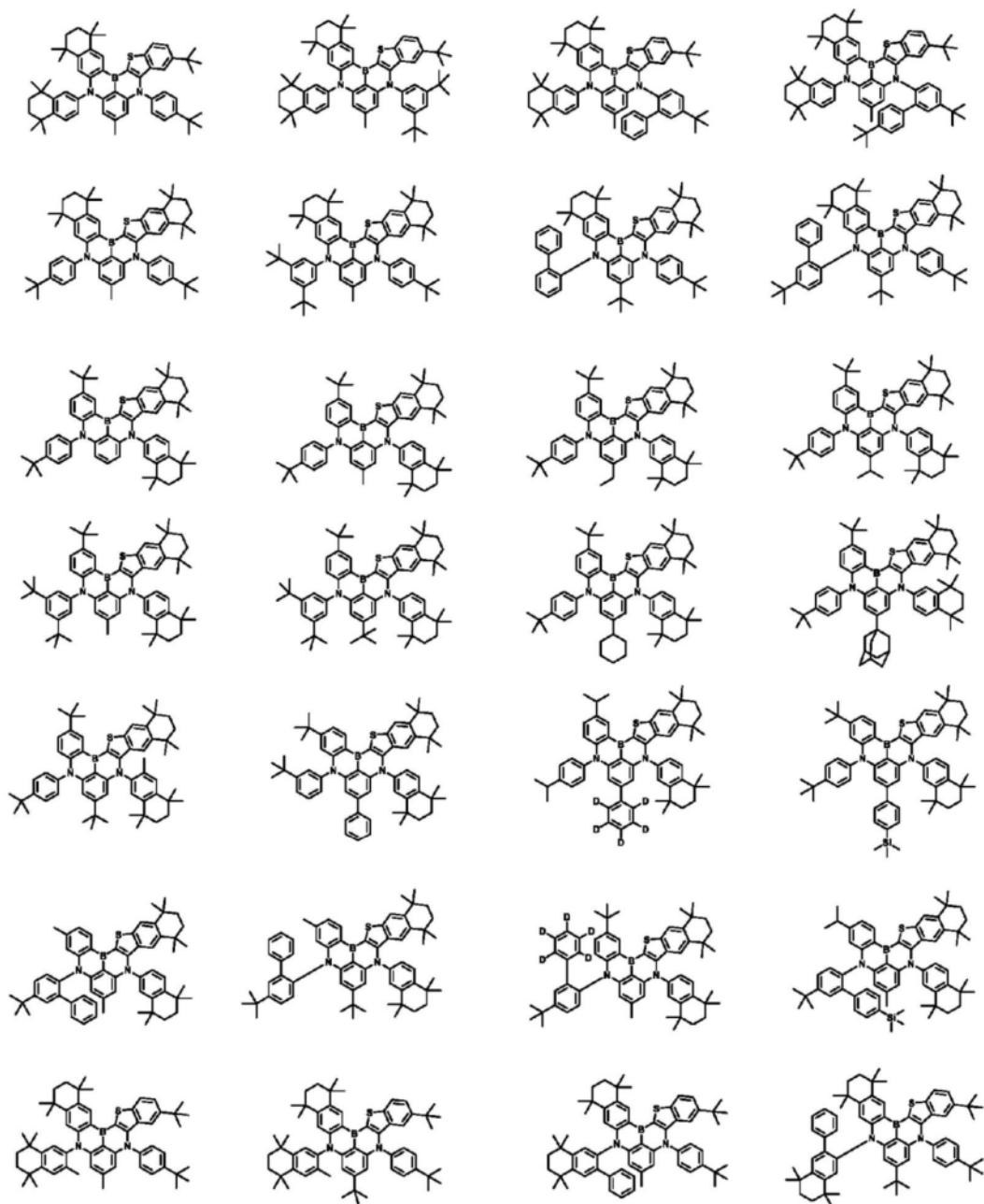


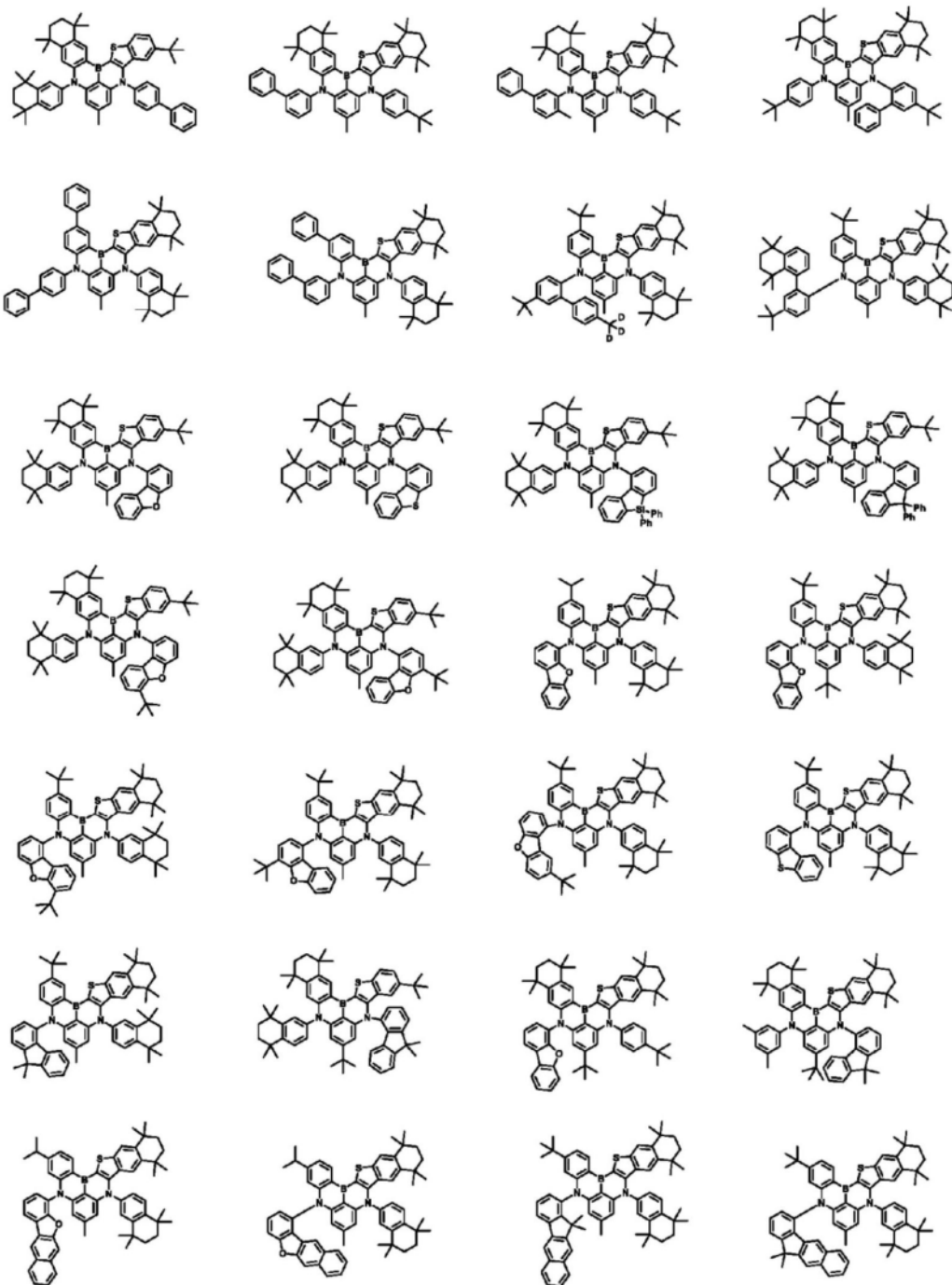


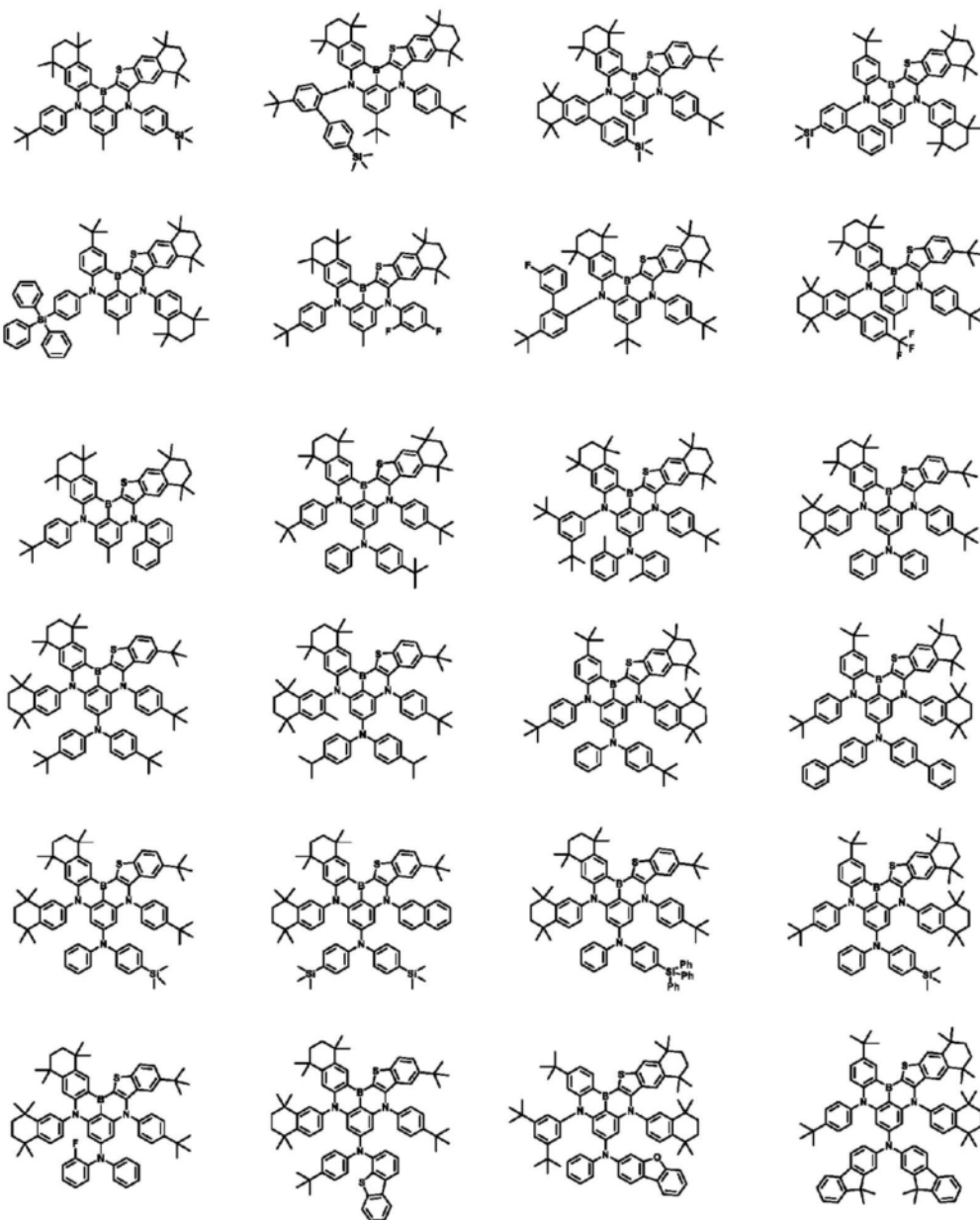


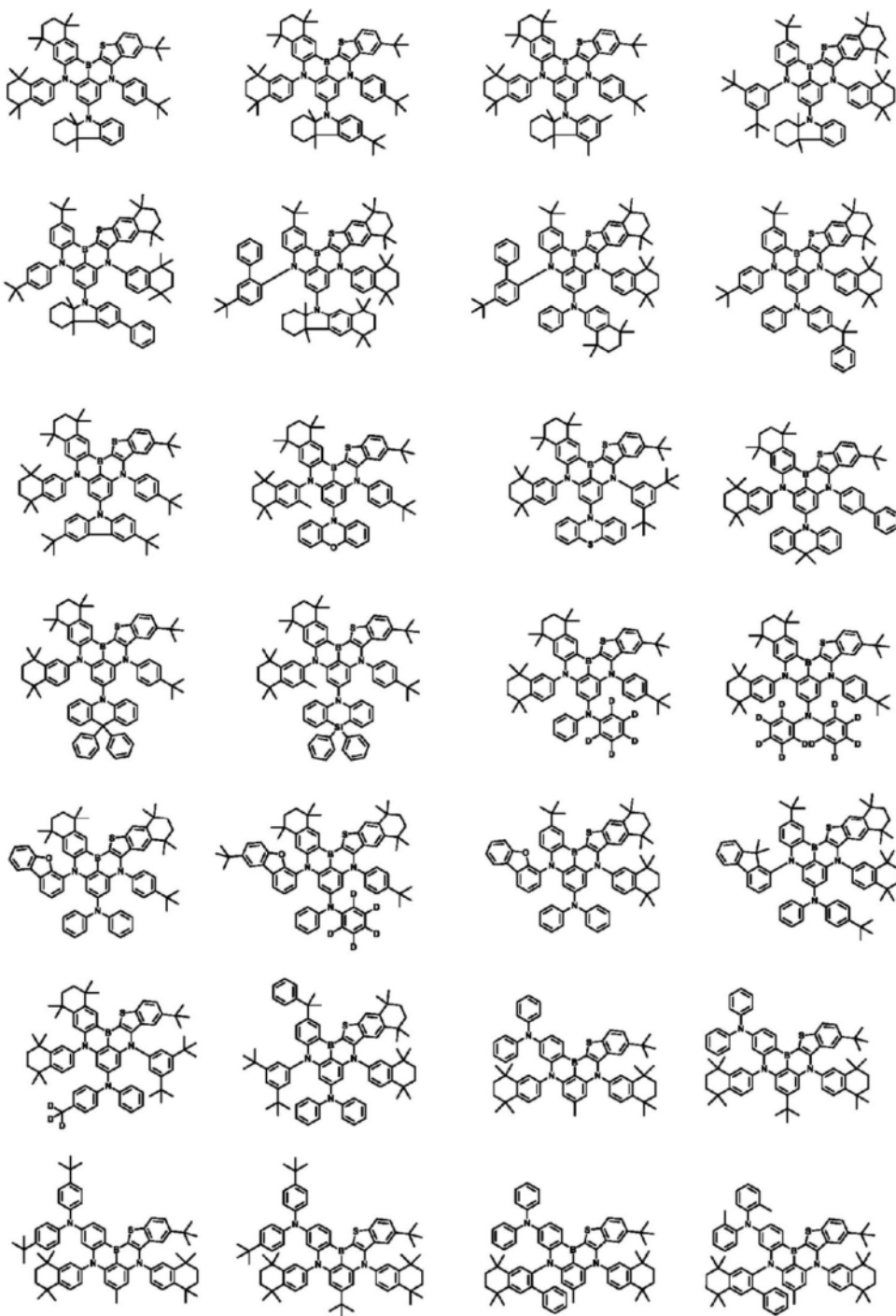


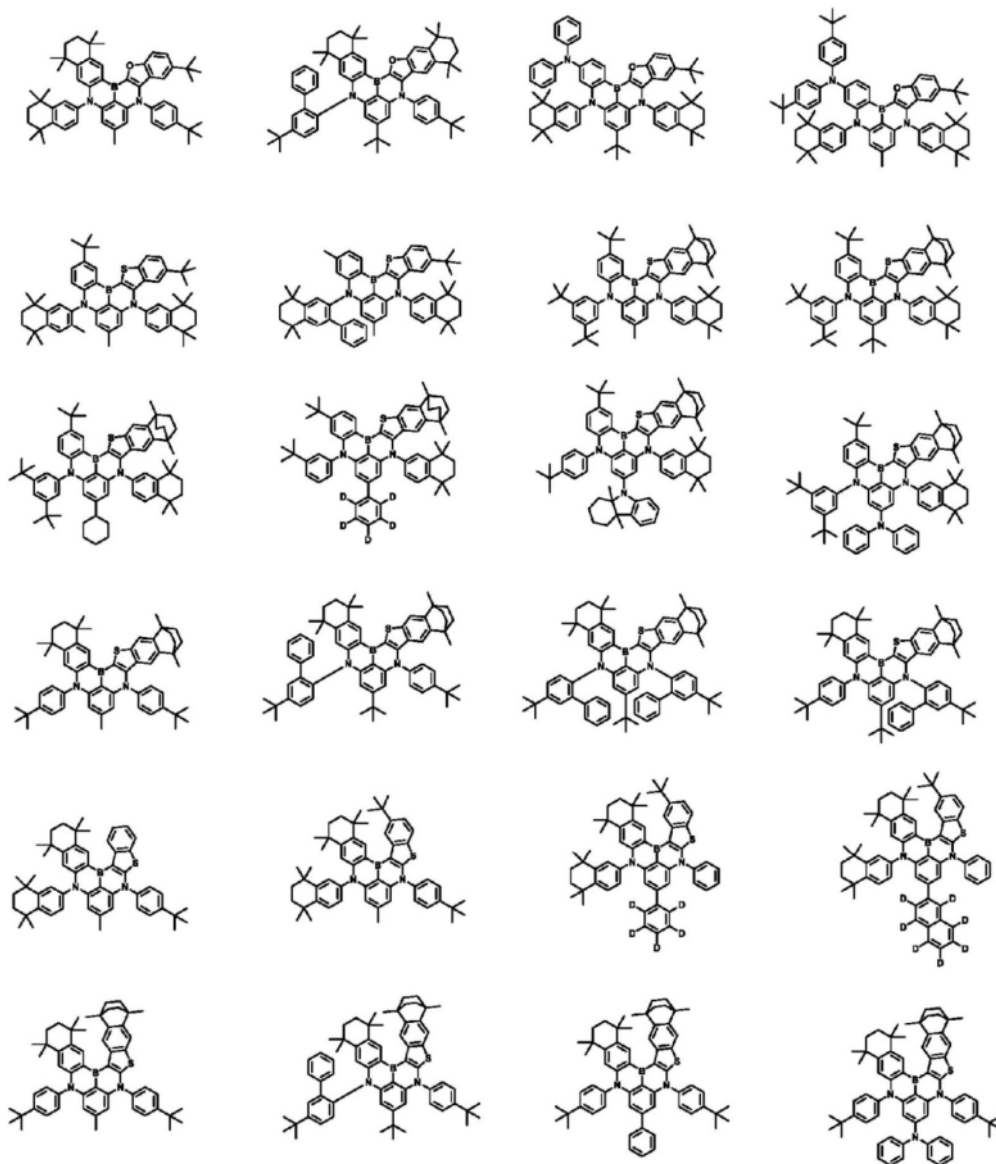


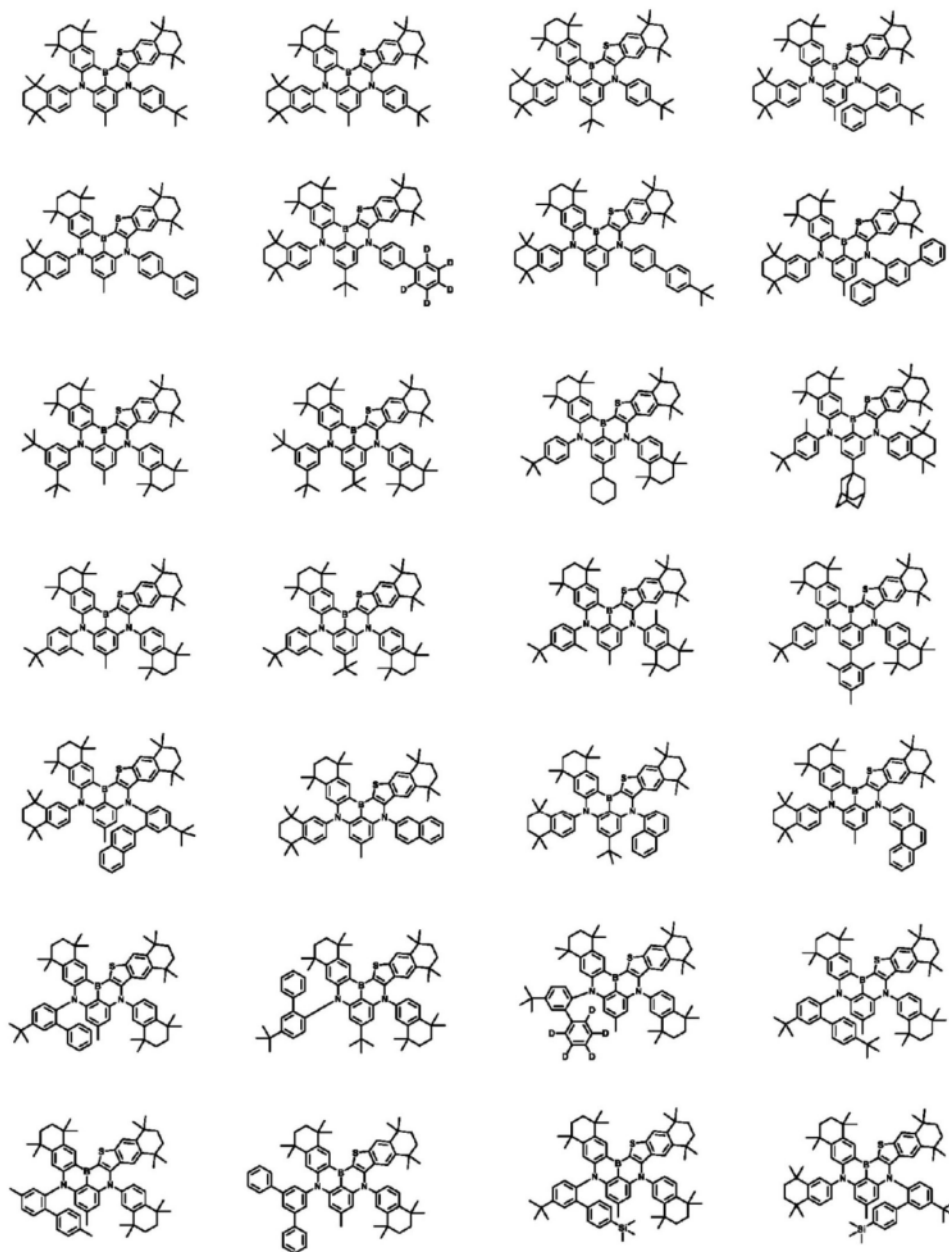


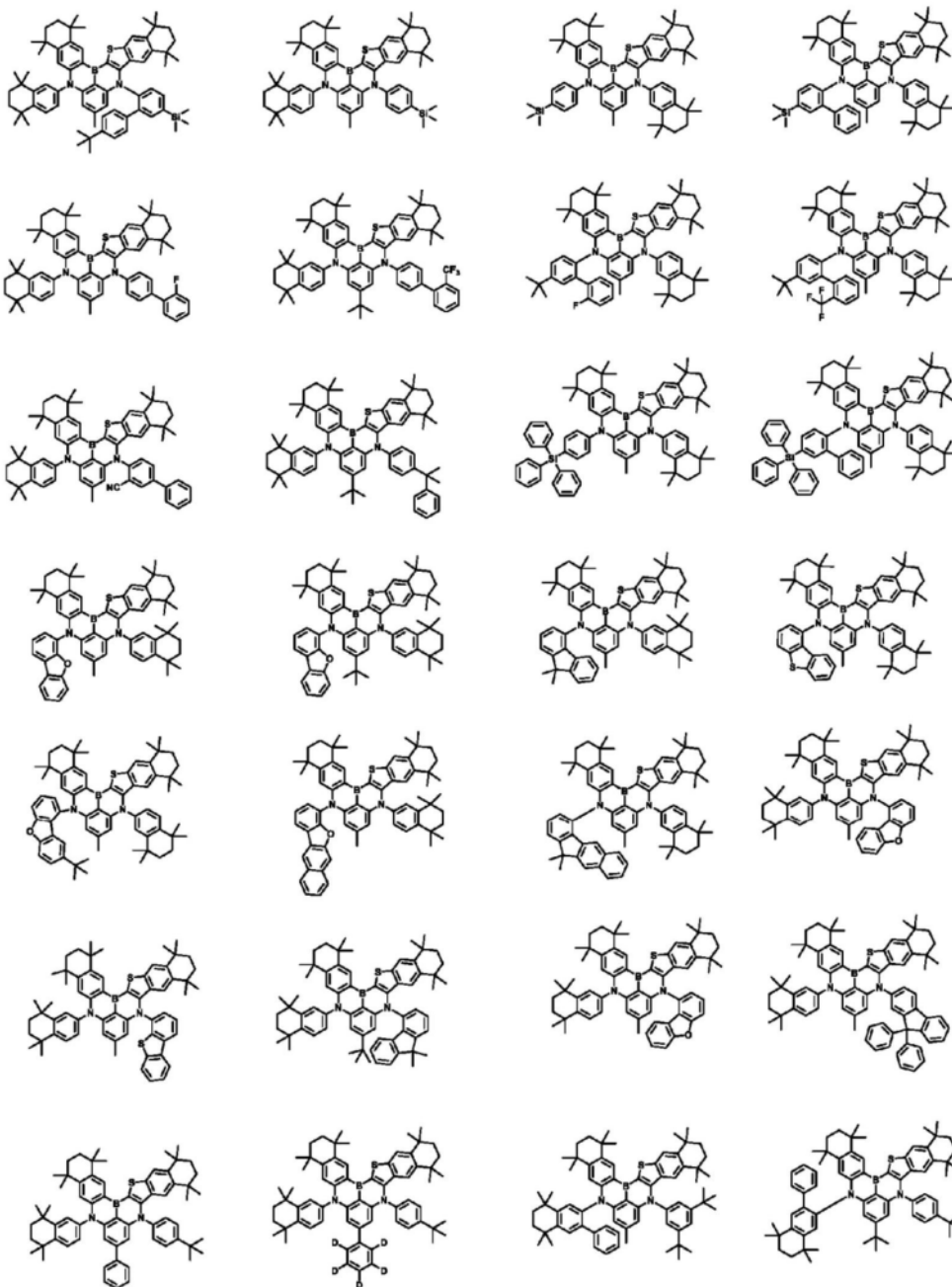


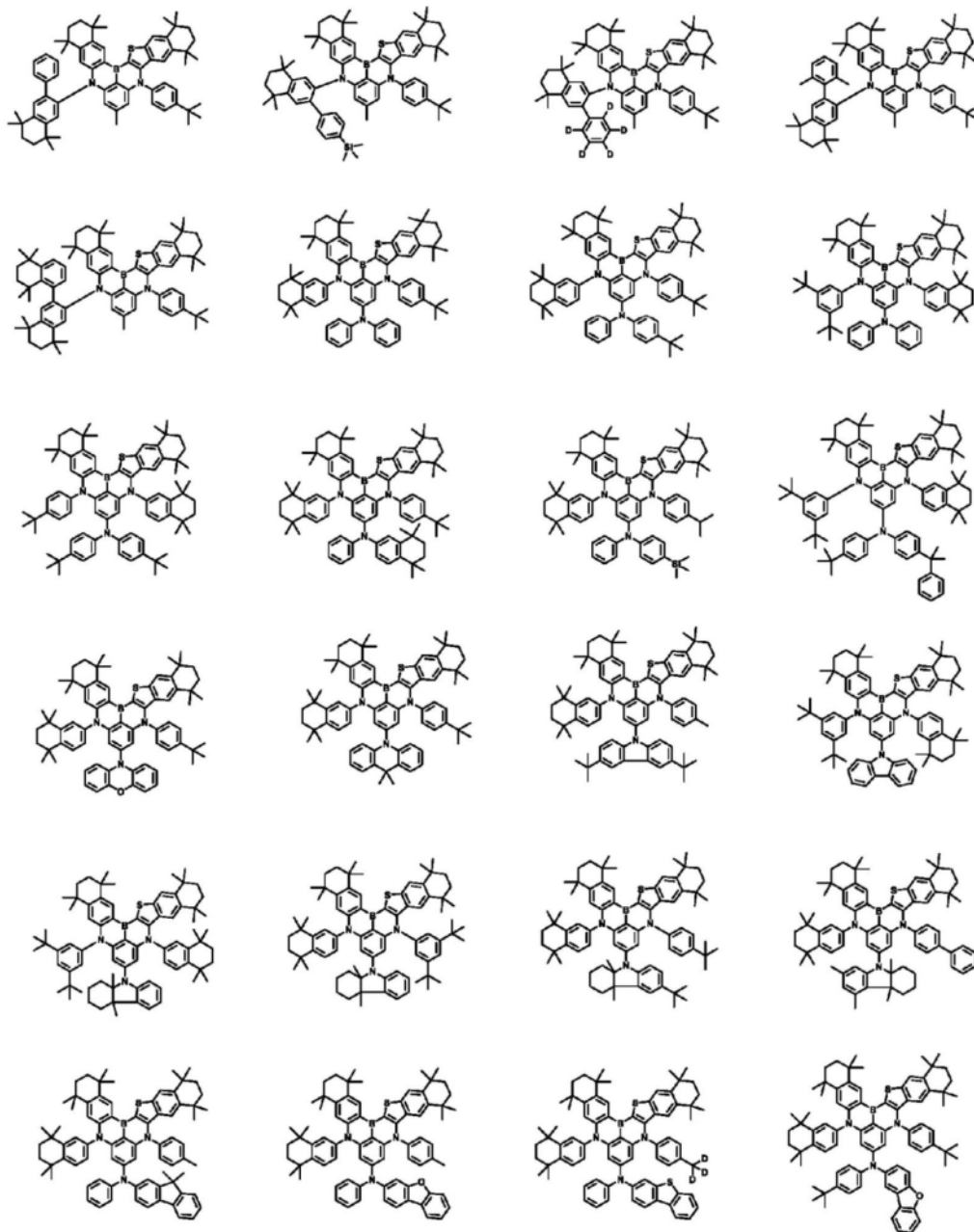


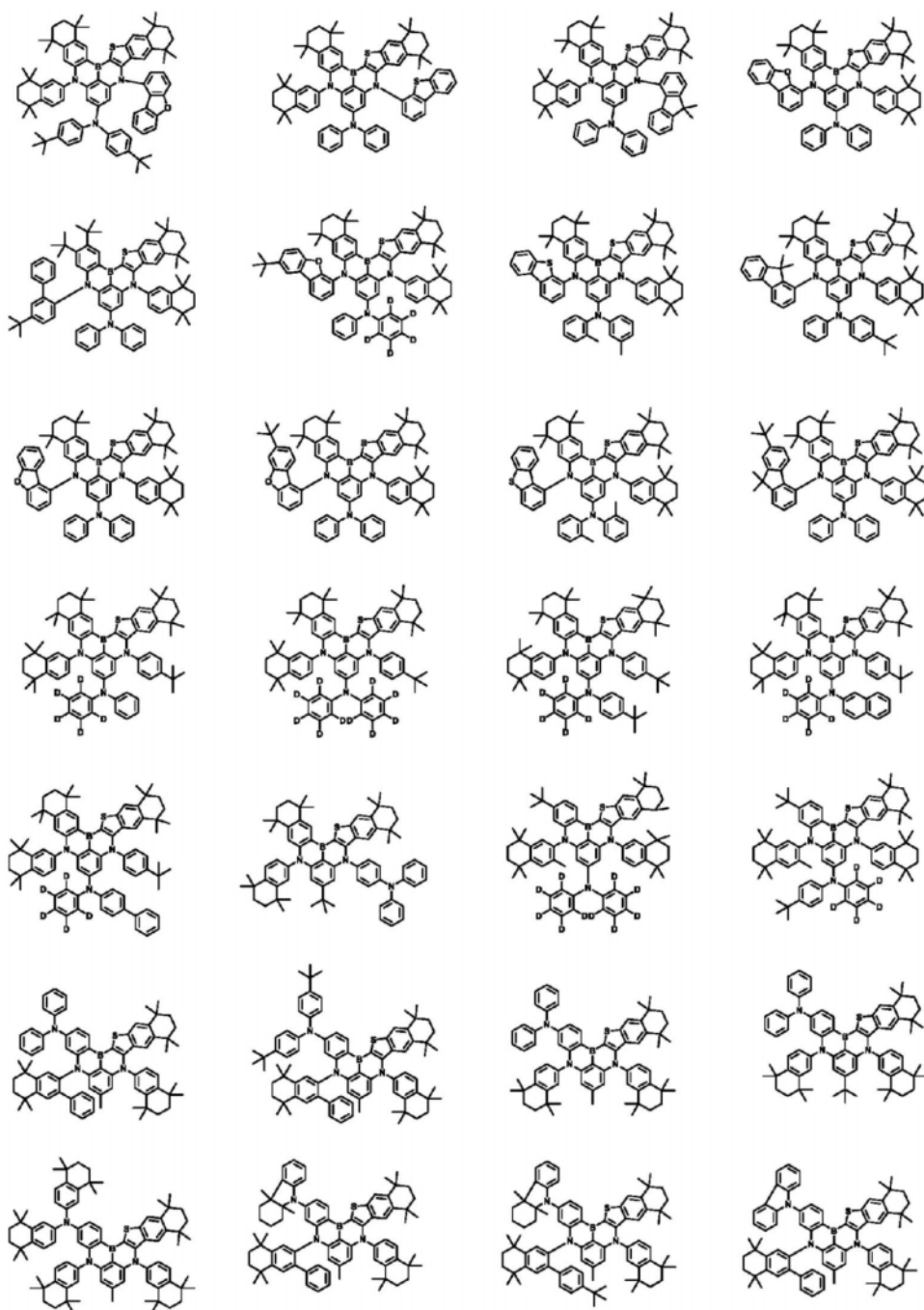


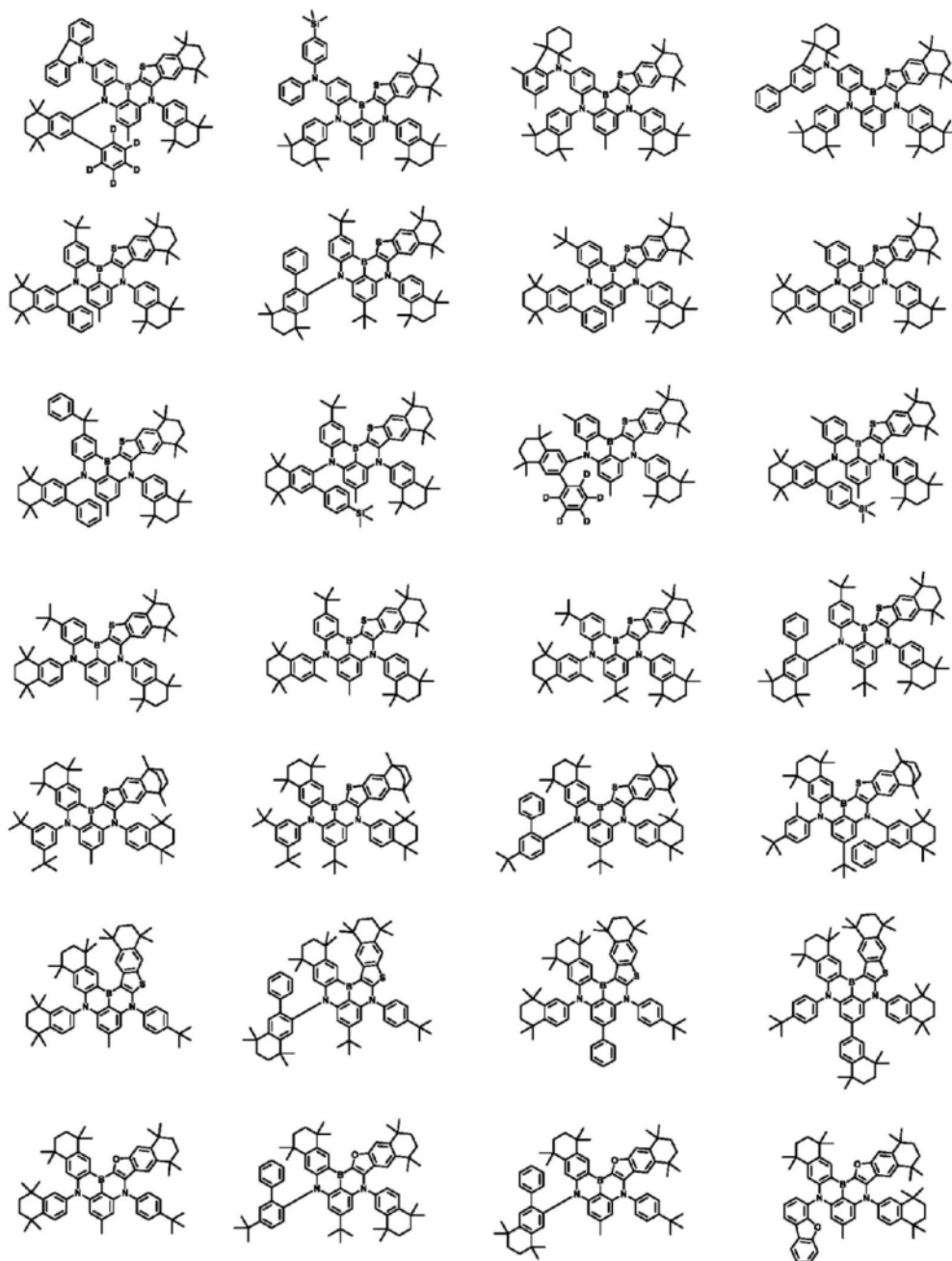


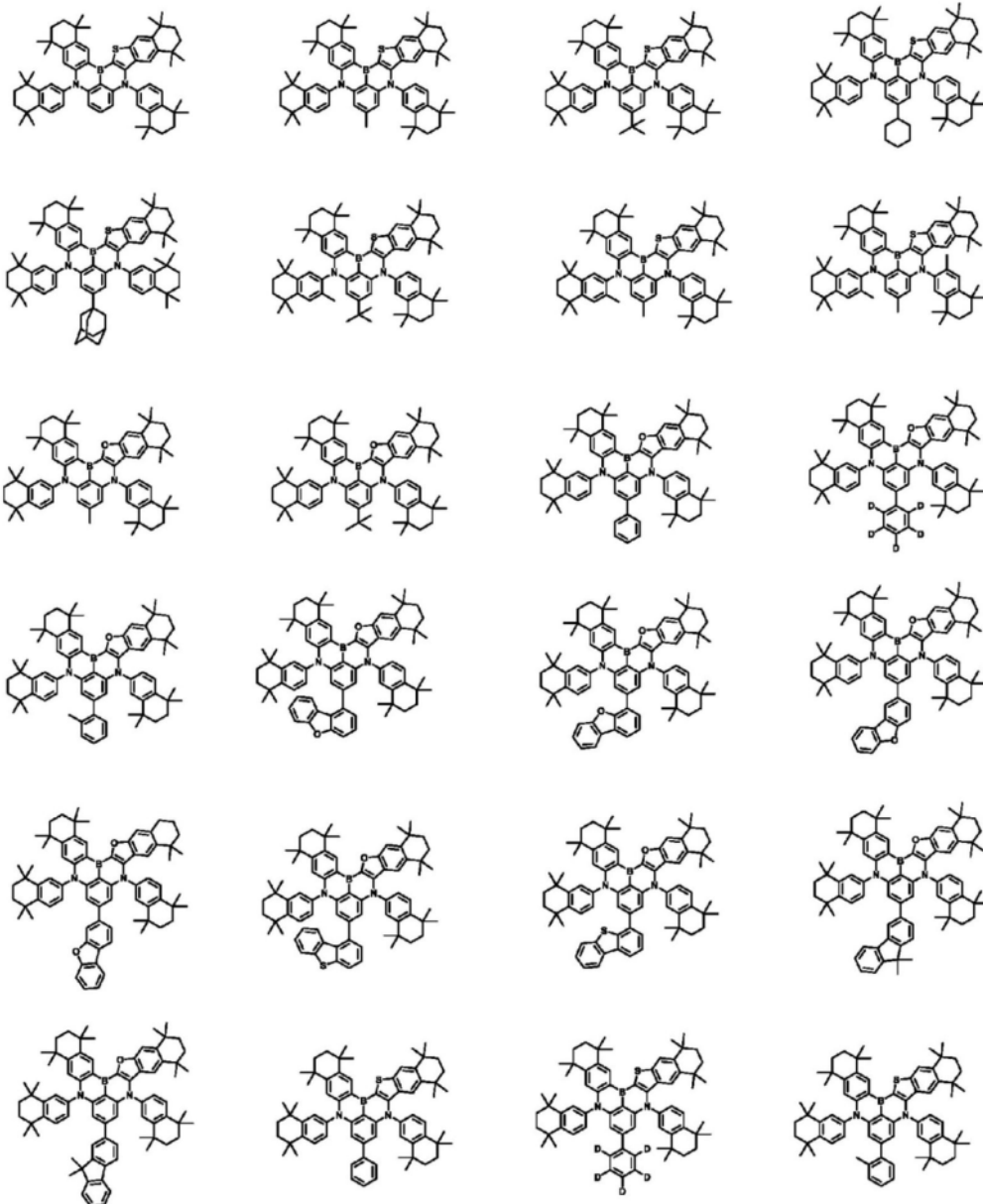


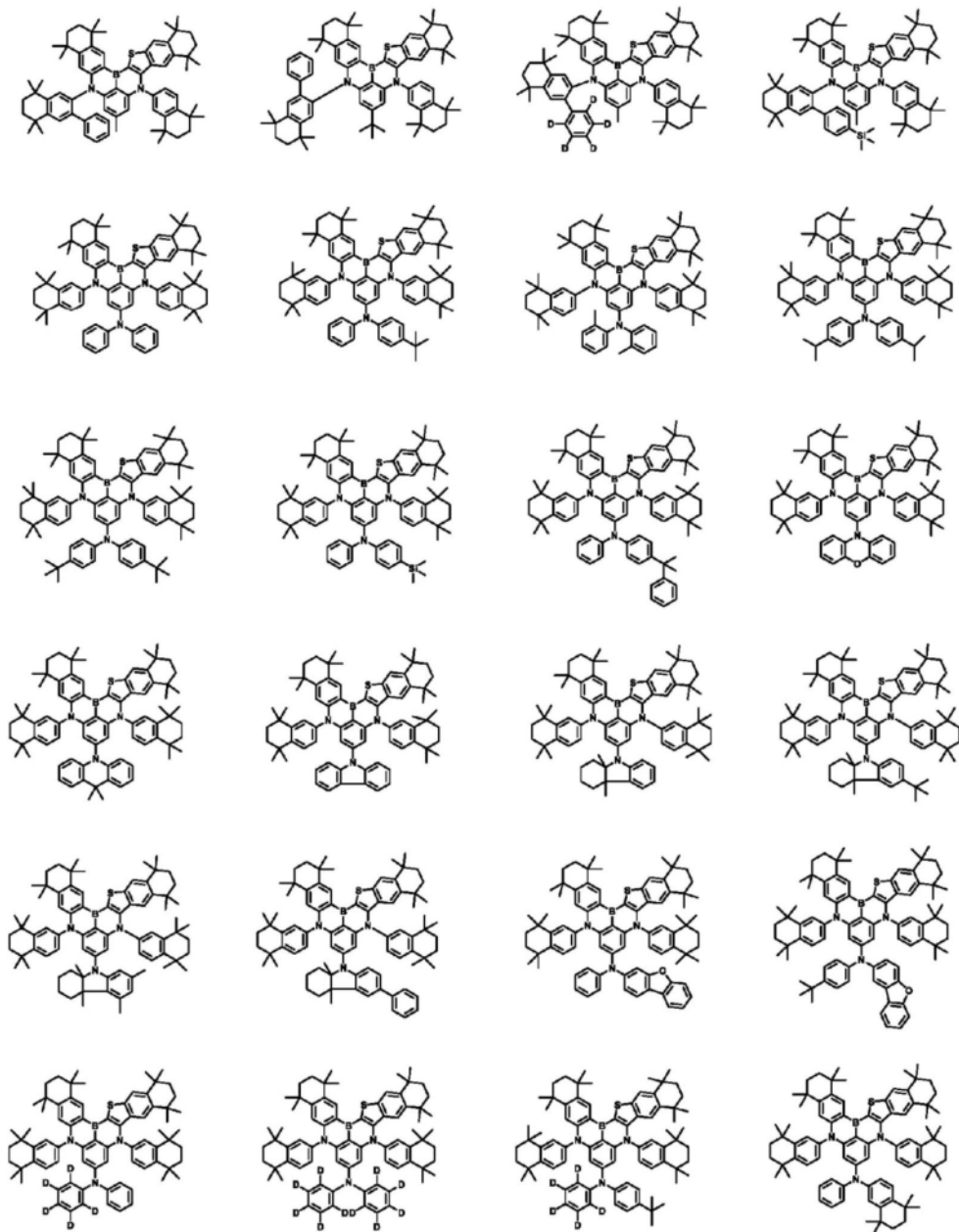


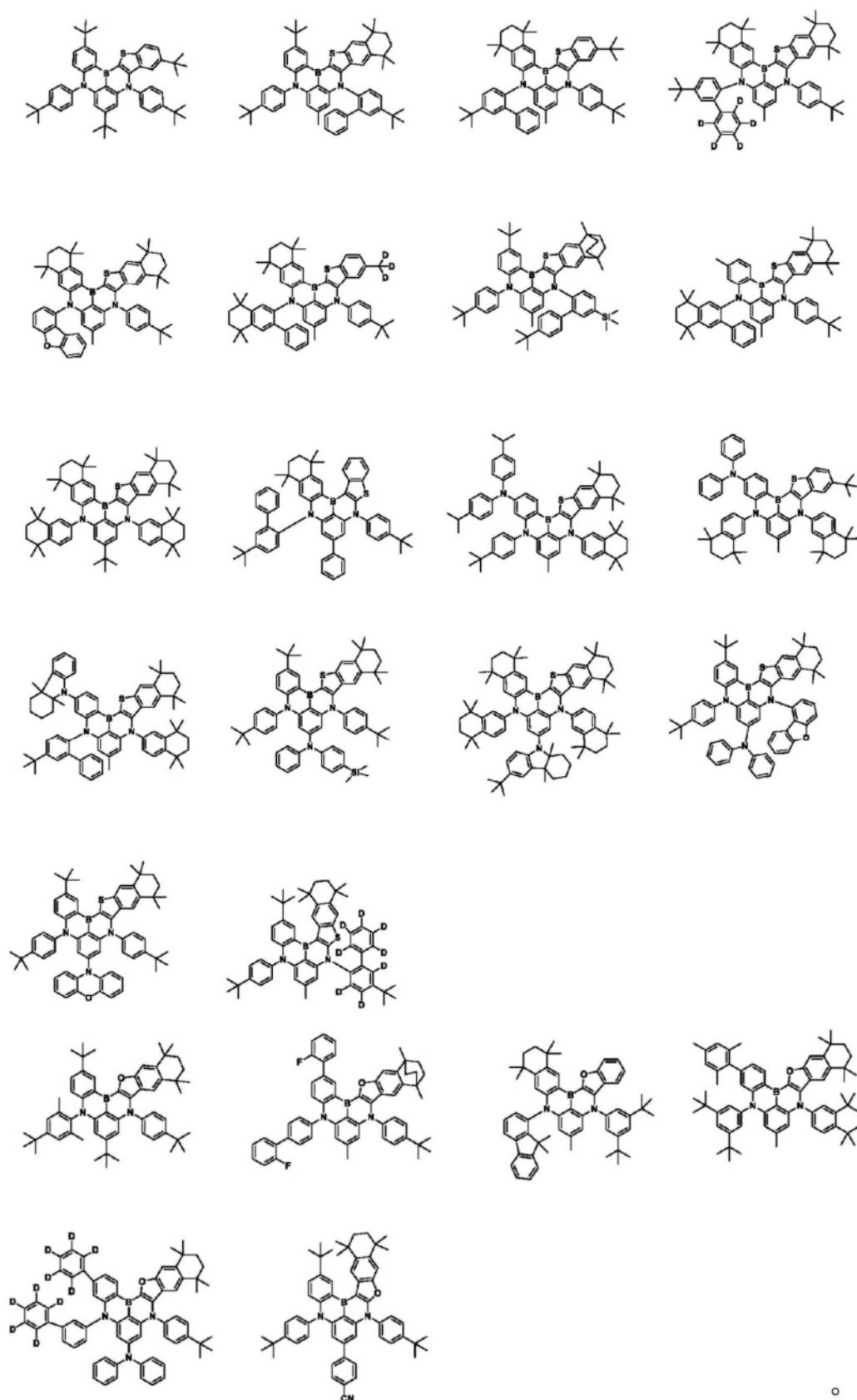




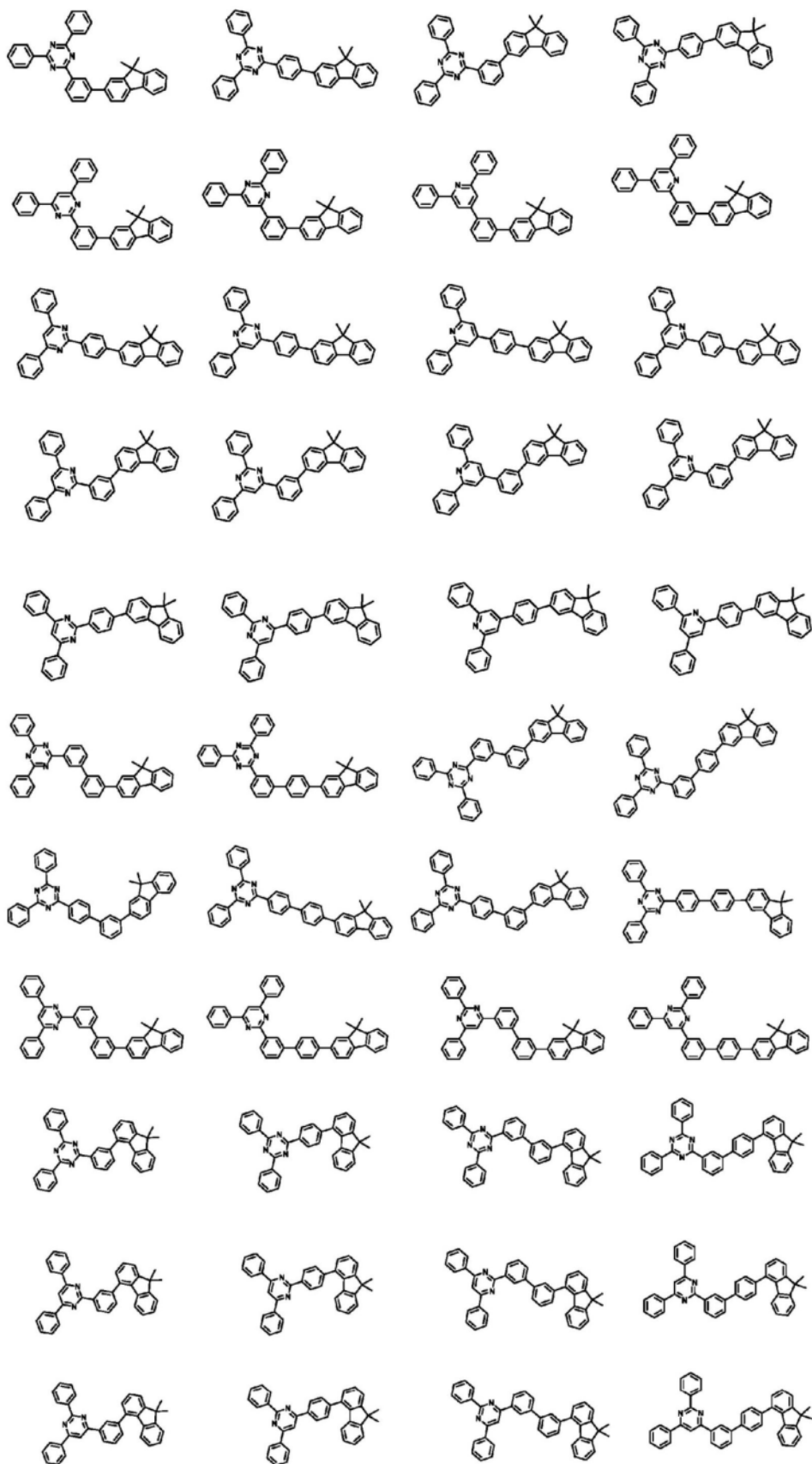


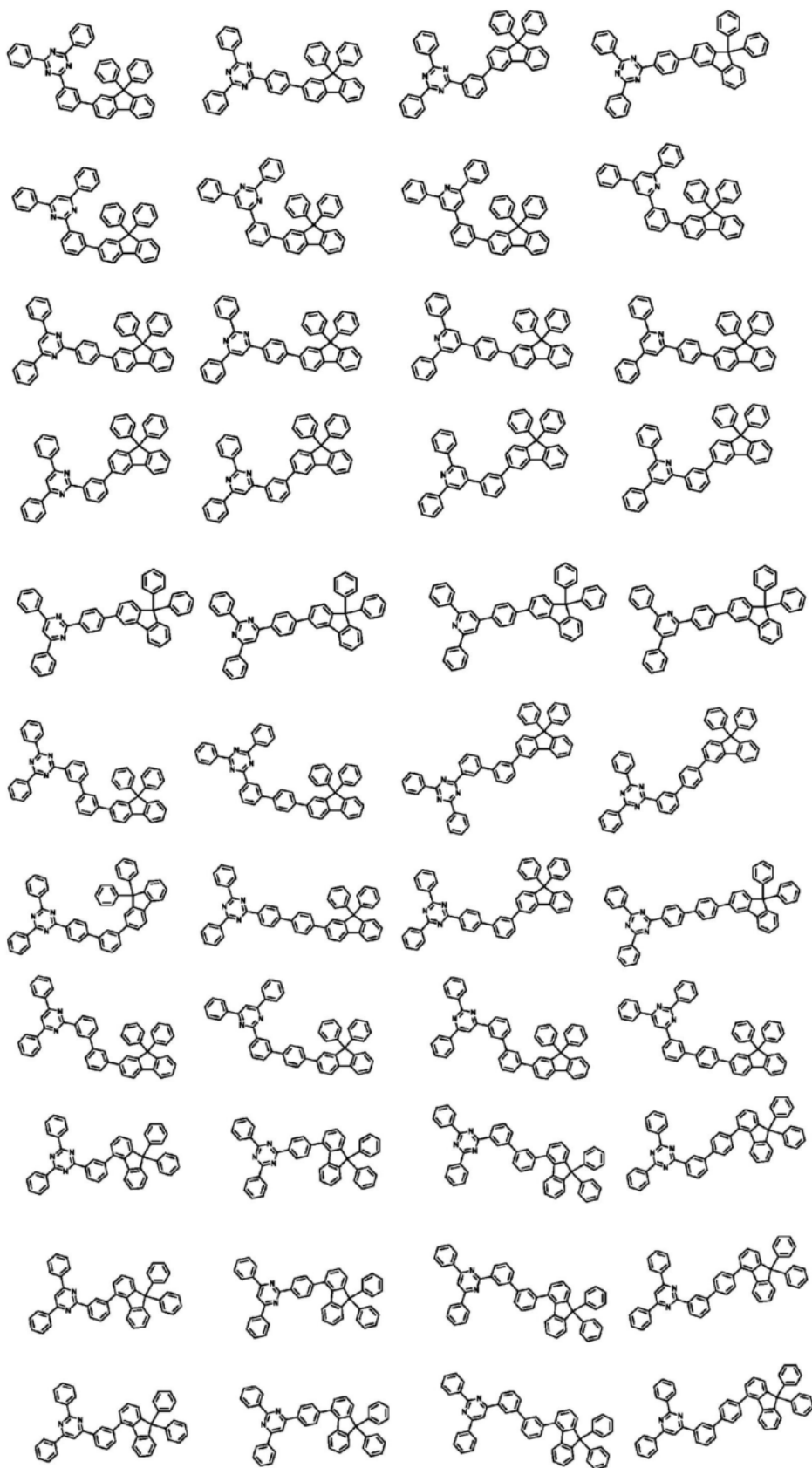


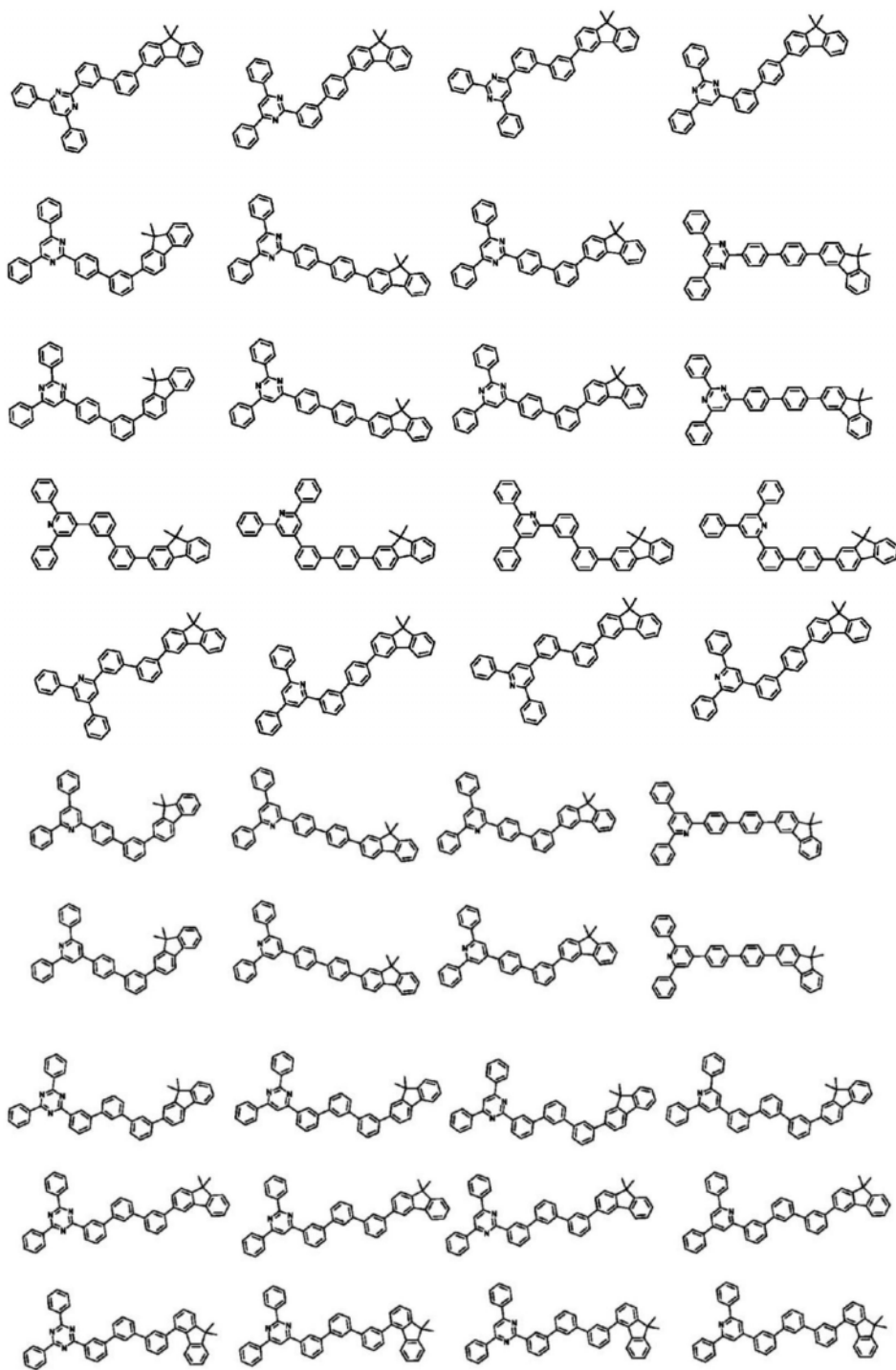


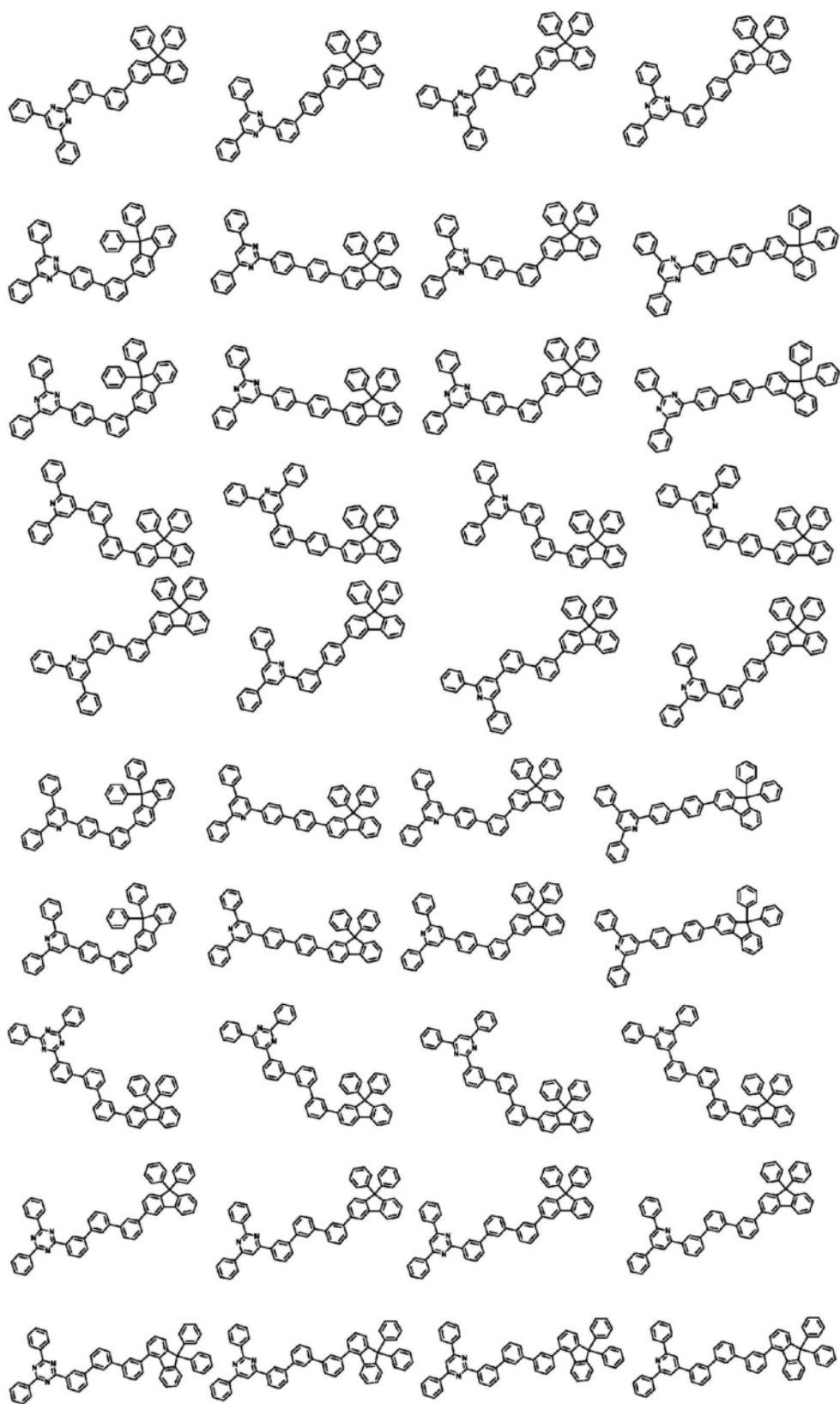


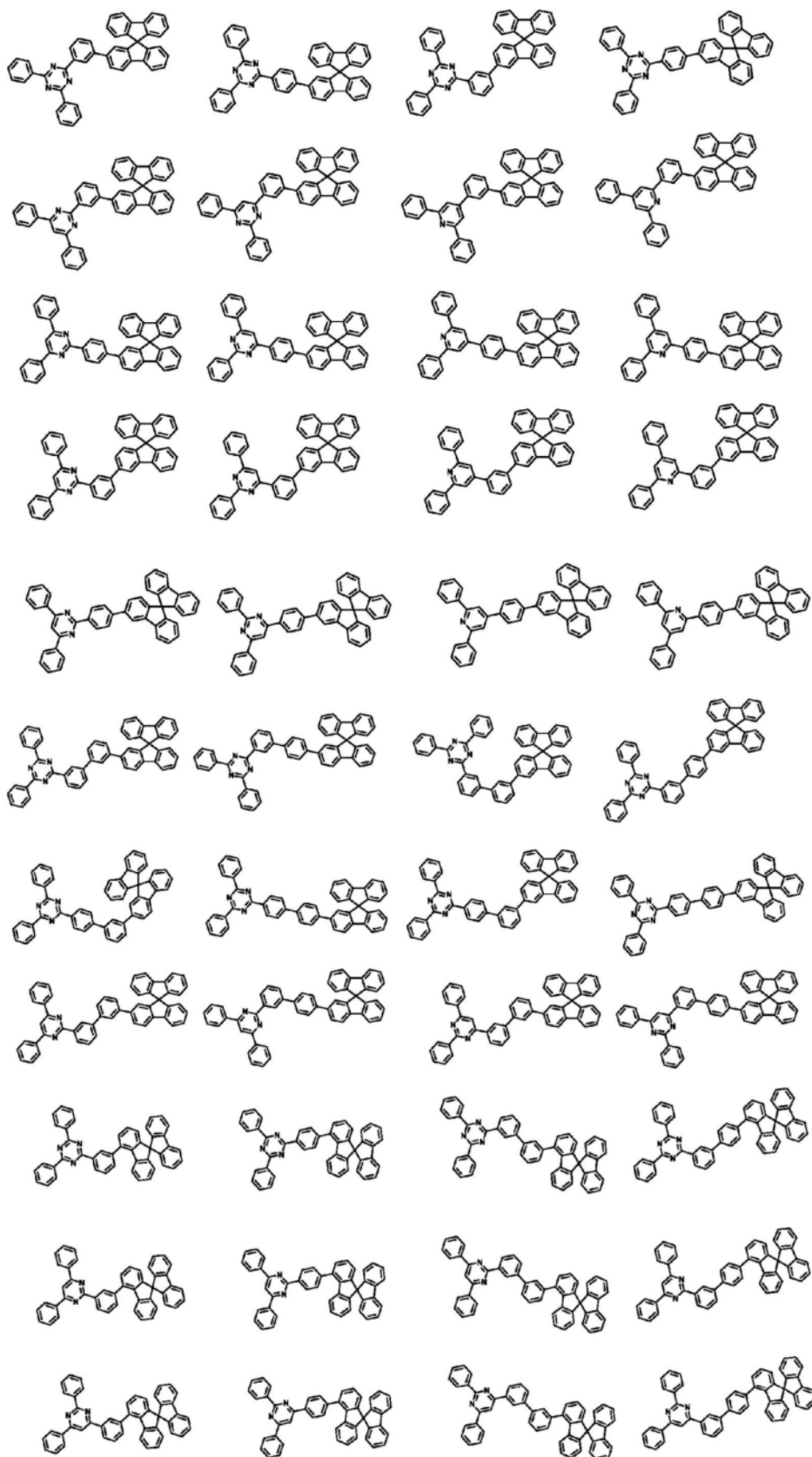
13. 根据权利要求1所述的有机发光器件,其中化学式2由以下化合物中的任一者表示:

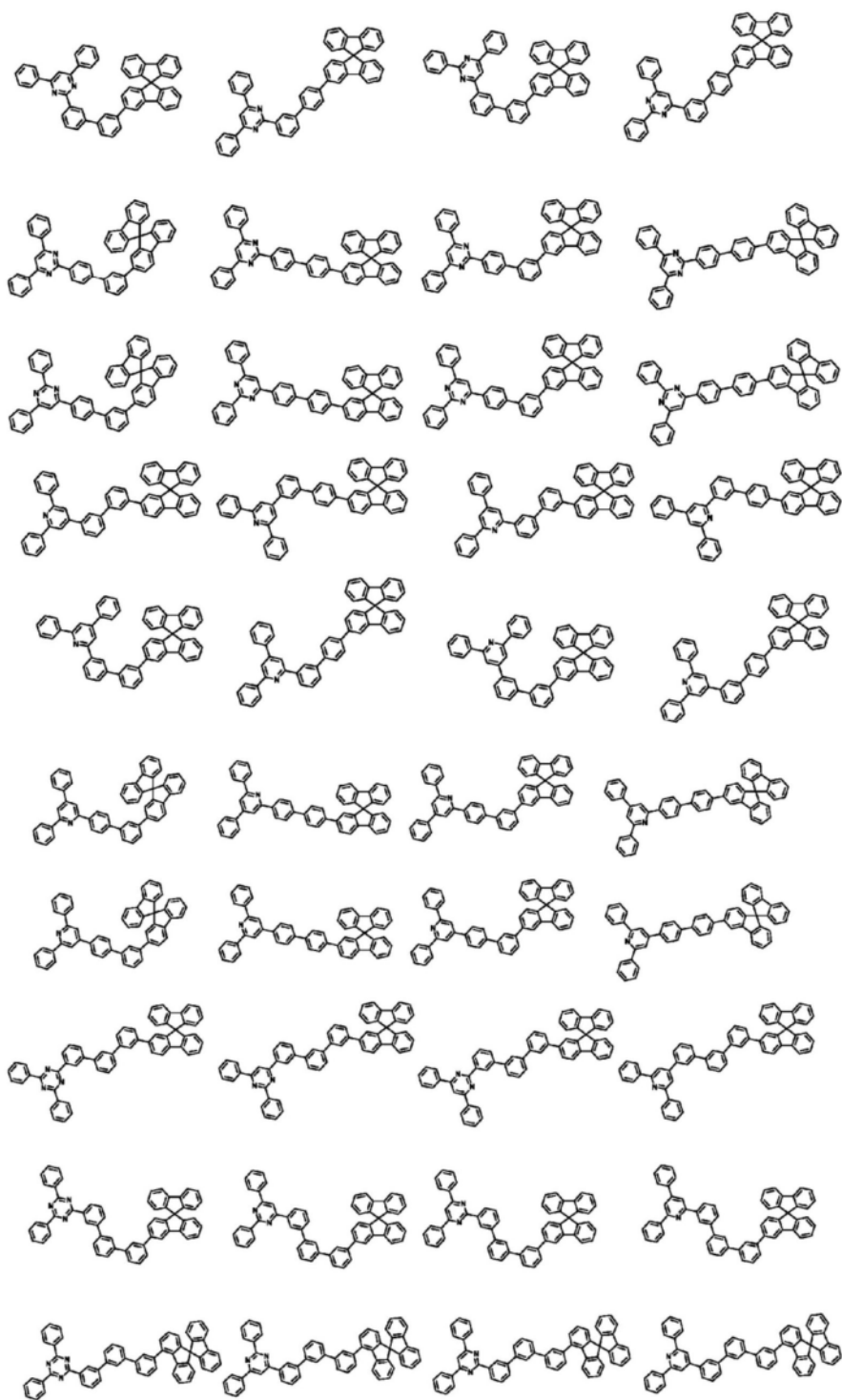


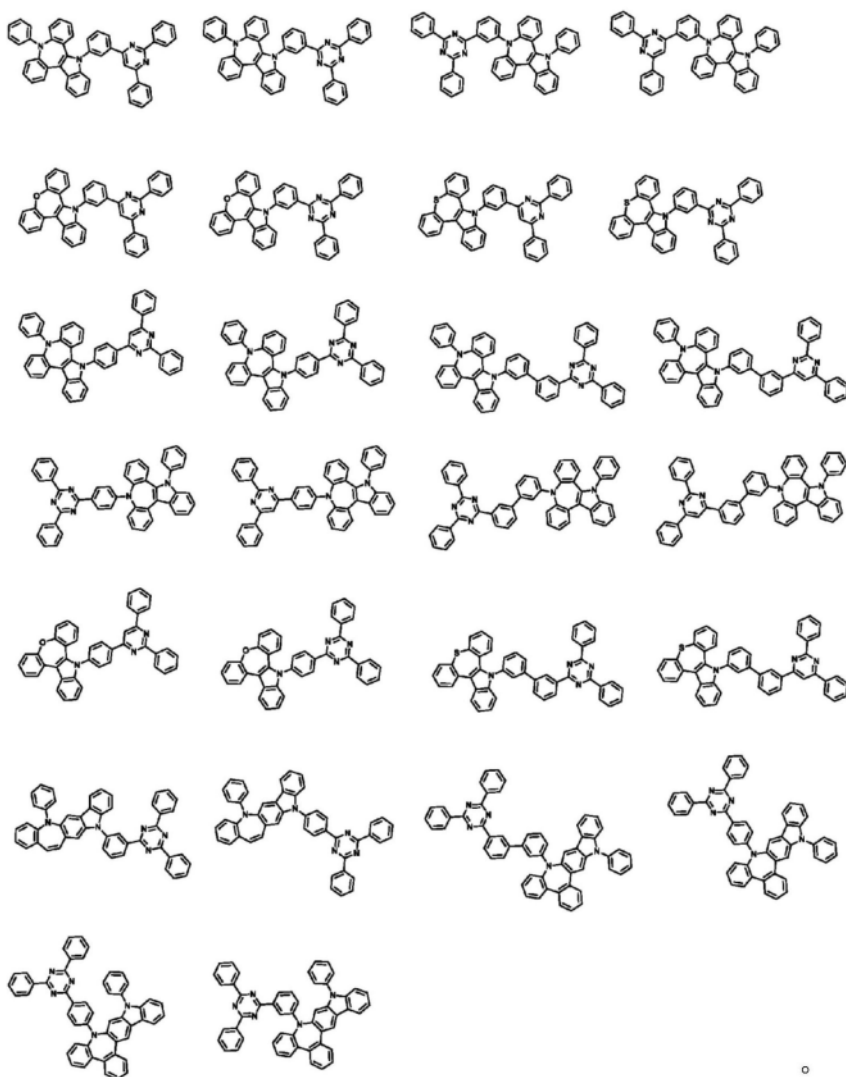












14. 根据权利要求1所述的有机发光器件,其中所述第一有机材料层被设置成与所述发光层直接接触。

15. 根据权利要求1所述的有机发光器件,其中所述发光层在400nm至500nm处具有最大发射峰。

16. 根据权利要求1所述的有机发光器件,其中所述发光层包含由化学式1表示的化合物作为掺杂剂。

17. 根据权利要求1所述的有机发光器件,还包括空穴传输层、空穴注入层、电子阻挡层、电子传输和注入层、电子传输层、电子注入层、空穴阻挡层以及空穴传输和注入层中的一个或更多个有机材料层。

有机发光器件

技术领域

[0001] 本申请要求于2019年11月29日向韩国知识产权局提交的韩国专利申请第10-2019-0157080号的优先权和权益,其全部内容通过引用并入本文。

[0002] 本说明书涉及有机发光器件。

背景技术

[0003] 有机发光现象通常是指利用有机材料将电能转换为光能的现象。利用有机发光现象的有机发光器件通常具有包括阳极、阴极和介于其间的有机材料层的结构。在本文中,为了增加有机发光器件的效率和稳定性,有机材料层通常形成为由不同材料形成的多层结构,例如,可以由空穴注入层、空穴传输层、发光层、电子传输层、电子注入层等形成。当在这样的有机发光器件结构中在两个电极之间施加电压时,空穴和电子分别从阳极和阴极注入到有机材料层,当注入的空穴和电子相遇时形成激子,并且当这些激子落回至基态时发光。

[0004] 持续需要开发用于这样的有机发光器件的新材料。

[0005] [现有技术文献]

[0006] (专利文献1)KR 10-2006-0051622 A

发明内容

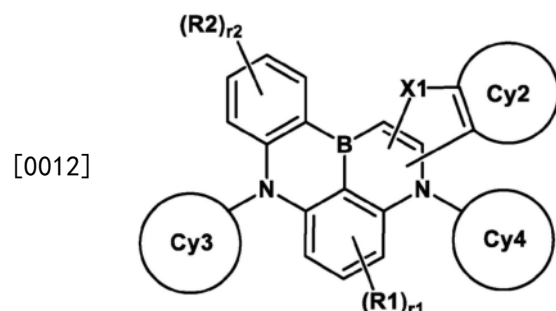
[0007] 技术问题

[0008] 本说明书提供了有机发光器件。

[0009] 技术方案

[0010] 本说明书的一个实施方案提供了有机发光器件,其包括阳极;阴极;设置在阳极与阴极之间的发光层;以及设置在发光层与阴极之间的第一有机材料层,其中发光层包含由以下化学式1表示的化合物,以及第一有机材料层包含由以下化学式2表示的化合物。

[0011] [化学式1]



[0013] 在化学式1中,

[0014] X1为O;或S,

[0015] Cy2为选自由经取代或未经取代的芳族烃环;和经取代或未经取代的脂族烃环组成的组中的一者,或者为选自上述组中的两个或更多个环的稠环,

[0016] Cy3和Cy4彼此相同或不同,并且各自独立地为选自由经取代或未经取代的芳族烃

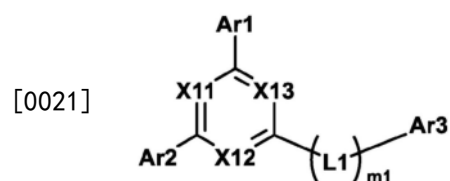
环;经取代或未经取代的脂族烃环;和经取代或未经取代的芳族杂环组成的组中的一者,或者为选自上述组中的两个或更多个环的稠环,

[0017] R1和R2彼此相同或不同,并且各自独立地为氢;氘;氰基;卤素基团;经取代或未经取代的烷基;经取代或未经取代的烷氧基;经取代或未经取代的烷基硫基;经取代或未经取代的环烷基;经取代或未经取代的甲硅烷基;经取代或未经取代的芳基;经取代或未经取代的芳氧基;经取代或未经取代的芳基硫基;经取代或未经取代的杂环基;或者经取代或未经取代的胺基,或者与相邻取代基键合以形成经取代或未经取代的环,

[0018] r1为0至3的整数,并且当r1为2或更大时,R1彼此相同或不同,以及

[0019] r2为0至4的整数,并且当r2为2或更大时,R2彼此相同或不同,

[0020] [化学式2]



[0022] 在化学式2中,

[0023] X11至X13为N;或CR',并且X11至X13中的至少一者为N,

[0024] R'为氢;氘;氰基;卤素基团;经取代或未经取代的烷基;经取代或未经取代的烯基;经取代或未经取代的烷氧基;经取代或未经取代的烷基硫基;经取代或未经取代的环烷基;经取代或未经取代的甲硅烷基;经取代或未经取代的芳基;经取代或未经取代的芳氧基;经取代或未经取代的芳基硫基;或者经取代或未经取代的杂环基,

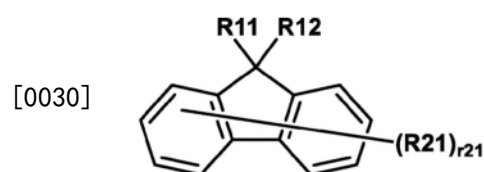
[0025] L1为直接键;经取代或未经取代的亚芳基;或者经取代或未经取代的二价杂环基,

[0026] m1为1至3的整数,并且当m1为2或更大时,L1彼此相同或不同,

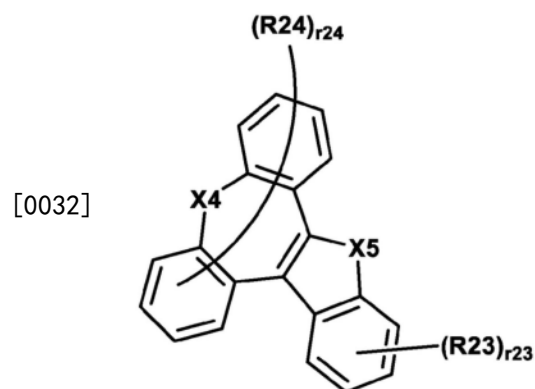
[0027] Ar1和Ar2彼此相同或不同,并且各自独立地为经取代或未经取代的芳基;或者经取代或未经取代的杂环基,以及

[0028] Ar3为以下化学式2-A至2-C中的任一者,

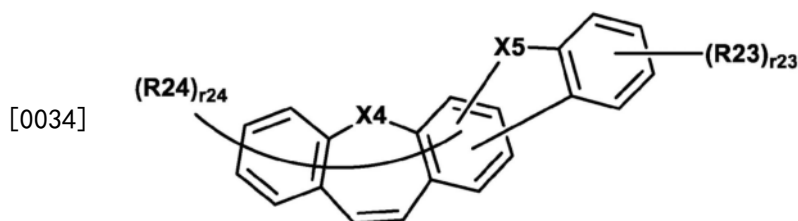
[0029] [化学式2-A]



[0031] [化学式2-B]



[0033] [化学式2-C]



[0035] 在化学式2-A至2-C中,

[0036] R_{11} 和 R_{12} 为经取代或未经取代的烷基;或者经取代或未经取代的芳基,或者与相邻基团键合以形成经取代或未经取代的环,

[0037] X_4 为O;S;或 NR_{25} ,

[0038] X_5 为O;S;或 NR_{22} ,

[0039] R_{21} 至 R_{25} 中的任一者与化学式2连接,以及余者彼此相同或不同,并且各自独立地为氢;氘;氰基;卤素基团;经取代或未经取代的烷基;经取代或未经取代的烷氧基;经取代或未经取代的烷基硫基;经取代或未经取代的环烷基;经取代或未经取代的甲硅烷基;经取代或未经取代的芳基;经取代或未经取代的芳氧基;经取代或未经取代的芳基硫基;经取代或未经取代的杂环基;或者经取代或未经取代的胺基,或者与相邻取代基键合以形成经取代或未经取代的环,

[0040] r_{21} 为0至7的整数, r_{23} 为0至4的整数,以及 r_{24} 为0至8的整数,并且

[0041] 当 r_{21} 、 r_{23} 和 r_{24} 各自为2或更大时,括号中的取代基彼此相同或不同。

[0042] 有益效果

[0043] 通过在发光层中包含化学式1的化合物以及在第一有机材料层中包含化学式2的化合物,本说明书中描述的有机发光器件具有低驱动电压、优异的效率特性和/或优异的寿命。具体地,可以通过适当地调节HOMO能级和LUMO能级来控制空穴和/或电子传输的程度而获得低驱动电压、高效率和改善的寿命。

附图说明

[0044] 图1示出了其中连续地层合有基底1、阳极2、发光层6、空穴阻挡层7和阴极9的有机发光器件的实例。

[0045] 图2示出了其中连续地层合有基底1、阳极2、空穴注入层3、第一空穴传输层4、第二空穴传输层5、发光层6、空穴阻挡层7、电子传输和注入层8以及阴极9的有机发光器件的实例。

[0046] [附图标记]

[0047] 1:基底

[0048] 2:阳极

[0049] 3:空穴注入层

[0050] 4:第一空穴传输层

[0051] 5:第二空穴传输层

[0052] 6:发光层

[0053] 7:空穴阻挡层

[0054] 8:电子传输和注入层

[0055] 9:阴极

具体实施方式

[0056] 在下文中,将更详细地描述本说明书。

[0057] 本公开内容的化学式1包含含有氧或硫原子的5元杂环,并且能够利用足够的电子来确保化合物的结构稳定性和优异的电化学特性。具体地,化学式1的第一三线态激发能量降低,并且第一单线态激发能量与第一三线态激发能量之间的差值增加。因此,三线态猝灭被抑制,因此,包含其的有机发光器件的电压、效率和/或寿命得到增强。

[0058] 本公开内容的化学式2通过包含含有N的单环以及通过包含苄基或者含有N、O或S的稠合环状环基团来增强电子迁移特性,通过形成分子的宽带隙来增强空穴阻挡和电子传输的效果,因此,获得了包含其的有机发光器件的电压、效率和/或寿命得到增强的效果。

[0059] 在本文中,当在发光层中使用化学式1的化合物以及在第一有机材料层(具体地,电子传输区域)中使用化学式2的化合物时,有机发光器件的长寿命、低电压和/或高效率的特性由于器件中的协同效应而增强。

[0060] 因此,当在有机发光器件中使用上述由化学式1表示的化合物和由化学式2表示的化合物时,可以获得具有高效率、低电压和/或长寿命的特性的有机发光器件。

[0061] 在本说明书中,除非特别说明相反,否则某部分“包括”某构成要素的描述意指还能够包括另外的构成要素,并且不排除另外的构成要素。

[0062] 在本说明书中,一个构件放置在另一构件“上”的描述不仅包括一个构件与另一构件接触的情况,而且还包括在这两个构件之间存在又一构件的情况。

[0063] 在本说明书中,  或虚线意指与化学式或化合物键合的位置。

[0064] 以下描述本说明书中的取代基的实例,然而,取代基不限于此。

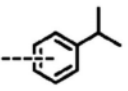
[0065] 术语“取代”意指与化合物的碳原子键合的氢原子变为另外的取代基,并且取代的位置没有限制,只要其是氢原子被取代的位置(即,取代基可以取代的位置)即可,并且当两个或更多个取代基取代时,两个或更多个取代基可以彼此相同或不同。

[0066] 在本说明书中,术语“经取代或未经取代的”意指经选自以下的一个、两个或更多个取代基取代:氘;卤素基团;氰基;硝基;羟基;烷基;环烷基;烷氧基;氧化膦基;芳氧基;烷基硫基;芳基硫基;烷基硫基;芳基硫基;烷基磺酰基;芳基磺酰基;烯基;甲硅烷基;硼基;胺基;芳基;或杂环基,或者经以上例示的取代基中的两个或更多个取代基相连接的取代基取代,或者不具有取代基。例如,“两个或更多个取代基相连接的取代基”可以包括联苯基。换言之,联苯基可以为芳基,或者被解释为两个苯基相连接的取代基。

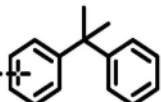
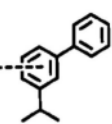
[0067] 在本说明书中,术语“经取代或未经取代的”意指经选自以下的一个、两个或更多个取代基取代:氘;卤素基团;氰基;硝基;羟基;胺基;甲硅烷基;硼基;烷氧基;芳氧基;烷基;环烷基;芳基;和杂环基,或者经以上例示的取代基中的两个或更多个取代基相连接的取代基取代,或者不具有取代基。

[0068] 在本说明书中,术语“经取代或未经取代的”意指经选自以下的一个、两个或更多个取代基取代:氘;氰基;卤素基团;烷基;烷氧基;环烷基;甲硅烷基;芳基;芳氧基;杂环基;

或氨基,或者经以上例示的取代基中的两个或更多个取代基相连接的取代基取代,或者不具有取代基。

[0069] 在本说明书中,两个或更多个取代基相连接是指任一取代基的氢被另外的取代基替代。例如,异丙基和苯基可以连接以成为或的取代基。

[0070] 在本说明书中,三个取代基相连接不仅包括(取代基1)-(取代基2)-(取代基3)连续地连接,而且还包括(取代基2)和(取代基3)与(取代基1)相连接。例如,两个苯基和一个

异丙基可以连接以成为或的取代基。以上描述的相同规则也适用

于四个或更多个取代基相连接。

[0071] 在本说明书中,“经A或B取代”不仅包括仅经A取代或仅经B取代的情况,而且还包括经A和B取代的情况。

[0072] 以下描述取代基的实例,然而,取代基不限于此。

[0073] 在本说明书中,卤素基团的实例可以包括氟(-F)、氯(-Cl)、溴(-Br)或碘(-I)。

[0074] 在本说明书中,甲硅烷基可以由化学式 $-\text{SiY}_a\text{Y}_b\text{Y}_c$ 表示,并且 Y_a 、 Y_b 和 Y_c 可以各自为氢;经取代或未经取代的烷基;或者经取代或未经取代的芳基。甲硅烷基的具体实例可以包括三甲基甲硅烷基、三乙基甲硅烷基、叔丁基二甲基甲硅烷基、乙烯基二甲基甲硅烷基、丙基二甲基甲硅烷基、三苯基甲硅烷基、二苯基甲硅烷基、苯基甲硅烷基等,但不限于此。

[0075] 在本说明书中,硼基可以由化学式 $-\text{BY}_d\text{Y}_e$ 表示,并且 Y_d 和 Y_e 可以各自为氢;经取代或未经取代的烷基;或者经取代或未经取代的芳基。硼基的具体实例可以包括三甲基硼基、三乙基硼基、叔丁基二甲基硼基、三苯基硼基、苯基硼基等,但不限于此。

[0076] 在本说明书中,烷基可以为线性或支化的,并且虽然不特别限于此,但碳原子数优选为1至60。根据一个实施方案,烷基的碳原子数为1至30。根据另一个实施方案,烷基的碳原子数为1至20。根据另一个实施方案,烷基的碳原子数为1至10。烷基的具体实例可以包括甲基、乙基、丙基、正丙基、异丙基、丁基、正丁基、异丁基、叔丁基、戊基、正戊基、己基、正己基、庚基、正庚基、辛基、正辛基等,但不限于此。

[0077] 在本说明书中,以上提供的关于烷基的描述可以应用于芳基烷基,不同之处在于芳基烷基是经芳基取代的。

[0078] 在本说明书中,烷氧基可以为线性、支化或环状的。烷氧基的碳原子数没有特别限制,但优选为1至20。其具体实例可以包括甲氧基、乙氧基、正丙氧基、异丙氧基、正丁氧基、异丁氧基、叔丁氧基、仲丁氧基、正戊氧基、新戊氧基、异戊氧基、正己氧基、3,3-二甲基丁氧基、2-乙基丁氧基、正辛氧基、正壬氧基、正癸氧基等,但不限于此。

[0079] 本说明书中描述的包含烷基、烷氧基和另外的烷基部分的取代基包括线性形式或支化形式二者。

[0080] 在本说明书中,烯基可以为线性或支化的,并且虽然不特别限于此,但碳原子数优选为2至40。根据一个实施方案,烯基的碳原子数为2至20。根据另一个实施方案,烯基的碳原子数为2至10。根据另一个实施方案,烯基的碳原子数为2至6。其具体实例可以包括乙烯基、1-丙烯基、异丙烯基、1-丁烯基、2-丁烯基、3-丁烯基、1-戊烯基、2-戊烯基、3-戊烯基、3-

甲基-1-丁烯基、1,3-丁二烯基、烯丙基、1-苯基乙烯基-1-基、2-苯基乙烯基-1-基、2,2-二苯基乙烯基-1-基、2-苯基-2-(萘基-1-基)乙烯基-1-基、2,2-双(二苯基-1-基)乙烯基-1-基、茛基、苯乙烯基等,但不限于此。

[0081] 在本说明书中,炔基为包含碳原子与碳原子之间的三键的取代基,可以为线性或支化的,并且虽然不特别限于此,但碳原子数优选为2至40。根据一个实施方案,炔基的碳原子数为2至20。根据另一个实施方案,炔基的碳原子数为2至10。

[0082] 在本说明书中,环烷基没有特别限制,但优选具有3至60个碳原子,根据一个实施方案,环烷基的碳原子数为3至30。根据另一个实施方案,环烷基的碳原子数为3至20。根据另一个实施方案,环烷基的碳原子数为3至6。其具体实例可以包括环丙基、环丁基、环戊基、环己基、环庚基、环辛基等,但不限于此。

[0083] 在本说明书中,胺基可以选自-NH₂;烷基胺基;烷基芳基胺基;芳基胺基;芳基杂芳基胺基;烷基杂芳基胺基和杂芳基胺基,并且虽然不特别限于此,但碳原子数优选为1至60。在芳基胺基中,碳原子数为6至60。根据另一个实施方案,芳基胺基的碳原子数为6至40。胺基的具体实例可以包括甲基胺基;二甲基胺基;乙基胺基;二乙基胺基;苯基胺基;萘基胺基;联苯基胺基;蒽基胺基;9-甲基蒽基胺基;二苯基胺基;N-苯基萘基胺基;二甲苯基胺基;N-苯基甲苯基胺基;三苯基胺基;N-苯基联苯基胺基;N-苯基萘基胺基;N-联苯基萘基胺基;N-萘基苊基胺基;N-苯基菲基胺基;N-联苯基菲基胺基;N-苯基苊基胺基;N-苯基三联苯基胺基;N-菲基苊基胺基;N-联苯基苊基胺基;N-(4-(叔丁基)苯基)-N-苯基胺基;N,N-双(4-(叔丁基)苯基)胺基;N,N-双(3-(叔丁基)苯基)胺基等,但不限于此。

[0084] 在本说明书中,烷基芳基胺基意指其中胺基的N取代有烷基和芳基的胺基。

[0085] 在本说明书中,芳基杂芳基胺基意指其中胺基的N取代有芳基和杂芳基的胺基。

[0086] 在本说明书中,烷基杂芳基胺基意指其中胺基的N取代有烷基和杂芳基的胺基。

[0087] 在本说明书中,烷基胺基、芳基烷基胺基、烷基硫基、烷基磺酰基和烷基杂芳基胺基中的烷基与烷基的实例相同。烷基硫基的具体实例可以包括甲基硫基;乙基硫基;叔丁基硫基;己基硫基;辛基硫基等,烷基磺酰基的具体实例可以包括甲磺酰基;乙基磺酰基;丙基磺酰基;丁基磺酰基等,然而,烷基硫基和烷基磺酰基不限于此。

[0088] 在本说明书中,环烷基没有特别限制,但优选具有3至60个碳原子,根据一个实施方案,环烷基的碳原子数为3至30。根据另一个实施方案,环烷基的碳原子数为3至20。根据另一个实施方案,环烷基的碳原子数为3至6。环烷基不仅包括单环基团,而且还包括双环基团例如桥环、稠环或螺环。其具体实例可以包括环丙基、环丁基、环戊基、环己基、环庚基、环辛基、金刚烷基等,但不限于此。

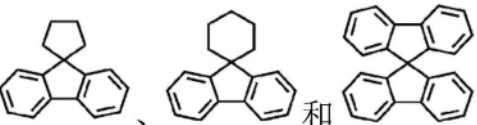
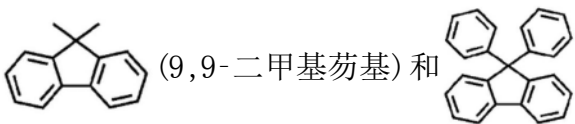
[0089] 在本说明书中,环烯烃是具有存在于烃环中的双键的环状基团,但不是芳族的,并且虽然不特别限于此,但碳原子数可以为3至60,根据一个实施方案,碳原子数可以为3至30。环烯烃不仅包括单环基团,而且还包括双环基团例如桥环、稠环或螺环。环烯烃的实例可以包括环丙烯、环丁烯、环戊烯、环己烯等,但不限于此。

[0090] 在本说明书中,芳基没有特别限制,但优选具有6至60个碳原子,并且可以为单环芳基或多环芳基。根据一个实施方案,芳基的碳原子数为6至30。根据一个实施方案,芳基的碳原子数为6至20。当芳基为单环芳基时,其实例可以包括苯基、联苯基、三联苯基、四联苯基等,但不限于此。多环芳基的实例可以包括萘基、蒽基、菲基、芘基、花基、三亚苯基、**蒾**

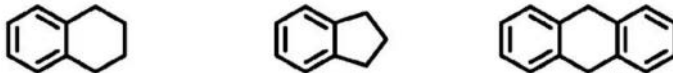
基、苄基、三苄基等,但不限于此。

[0091] 在本说明书中,苄基可以被取代,并且两个取代基可以彼此键合以形成螺环结构。在本文中,螺环结构可以为芳族烃环或脂族烃环。

[0092] 当苄基被取代时,

[0093] 可以包括螺苄基例如 , 或者经取代的苄基例如 , (9,9-二甲基苄基) 和 (9,9-二苯基苄基)。然而,结构不限于此。

[0094] 在本说明书中,经取代的芳基还可以包括其中脂族环与芳基稠合的形式。例如,经取代的芳基中包括以下结构的四氢萘基或二氢茚基。在以下结构中,苯环的碳中的一者可以与另外的位置连接。

[0095] 
四氢萘 二氢茚 二氢苊

[0096] 在本说明书中,烷基芳基意指经烷基取代的芳基,并且可以具有另外地与其连接的除烷基之外的取代基。

[0097] 在本说明书中,芳基烷基意指经芳基取代的烷基,并且可以具有另外地与其连接的除芳基之外的取代基。

[0098] 在本说明书中,芳氧基意指芳基与氧原子相连接,芳基硫基意指芳基与硫原子相连接,作为芳氧基和芳基硫基中的芳基,可以应用以上提供的关于芳基的描述。芳氧基中的芳基与上述芳基的实例相同。芳氧基的具体实例可以包括苯氧基、对甲苯氧基、间甲苯氧基、3,5-二甲基-苯氧基、2,4,6-三甲基苯氧基、对叔丁基苯氧基、3-联苯氧基、4-联苯氧基、1-萘氧基、2-萘氧基、4-甲基-1-萘氧基、5-甲基-2-萘氧基、1-蒽氧基、2-蒽氧基、9-蒽氧基、1-菲氧基、3-菲氧基、9-菲氧基等,芳基硫基的实例可以包括苯基硫基、2-甲基苯基硫基、4-叔丁基苯基硫基等,然而,芳氧基和芳基硫基不限于此。

[0099] 在本说明书中,杂环基是包含N、O、P、S、Si和Se中的一者或更多者作为杂原子的环状基团,并且虽然不特别限于此,但碳原子数优选为2至60。根据一个实施方案,杂环基的碳原子数为2至30。根据一个实施方案,杂环基的碳原子数为2至20。杂环基的实例可以包括吡啶基;喹啉基;噻吩基;二苯并噻吩基;呋喃基;二苯并呋喃基;萘并苯并呋喃基;呋唑基;苯并呋唑基;萘并苯并噻吩基;二苯并噻咯基;萘并苯并噻咯基;六氢呋唑基;二氢吡啶基;二氢二苯并氮杂硅烷基;吩噻嗪基;吩噻嗪基;二氢二苯并氮杂硅烷基;螺(二苯并噻咯-二苯并氮杂硅烷)基;螺(吡啶-苄)基等,但不限于此。

[0111] 在本说明书中,芳族杂环意指包含一个或更多个杂原子的芳族环。芳族杂环的实例可以包括吡啶、吡咯、噻吩、哒嗪、呋喃、噻吩、咪唑、吡唑、**噻唑**、异**噻唑**、噻唑、异噻唑、三唑、**噻二唑**、噻二唑、二噻唑、四唑、吡喃、噻喃、二噻喃、**噻喃**、噻喃、二**噻英**、三噻、四噻、异噻啉、噻啉、醌、噻啉、噻啉、噻啉、萘啶、吡啶、菲啶、二氮杂萘、三氮杂茛、吡啶、吡啶、苯并噻唑、苯并**噻唑**、苯并咪唑、苯并噻吩、苯并呋喃、二苯并噻吩、二苯并呋喃、吡啶、苯并吡啶、二苯并吡啶、吩噻、咪唑并吡啶、吩**噻**、吡啶并吡啶、茛并吡啶等,但不限于此。

[0112] 在本说明书中,芳族烃环和脂族烃环的稠环意指芳族烃环和脂族烃环形成稠环。芳族和脂族的稠环的实例可以包括1,2,3,4-四氢萘基、2,3-二氢-1H-茛基等,但不限于此。

[0113] 在本说明书中,“相邻”基团可以意指对与相应取代基取代的原子直接连接的原子进行取代的取代基、处于空间上最接近相应取代基的取代基、或者对相应取代基取代的原子进行取代的另外的取代基。例如,苯环中邻位取代的两个取代基和脂族环中取代同一碳的两个取代基可以被解释为彼此“相邻”的基团。此外,脂族环中与连续两个碳原子连接的取代基(总共4个)也可以被解释为彼此“相邻”的基团。

[0114] 在本说明书中,取代基中的“相邻基团彼此键合以形成环”的含义是与相邻基团键合以形成经取代或未经取代的烃环;或者经取代或未经取代的杂环。

[0115] 在本说明书中,“通过使相邻基团彼此键合而形成的五元环或六元环”意指包含参与成环的取代基的环是五元的或六元的。其包含与包含参与成环的取代基的环稠合的另外的环。

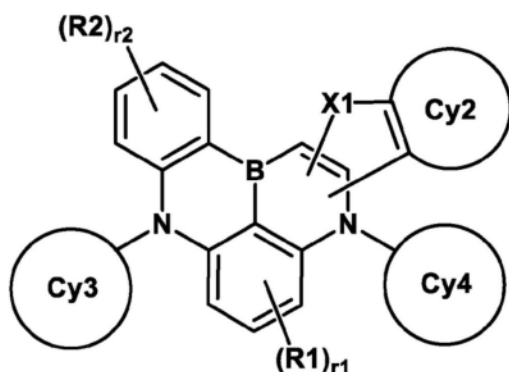
[0116] 在本说明书中,当芳族烃环或芳基的取代基与相邻取代基键合以形成脂族烃环时,即使在未指定双键时,脂族烃环也包含芳族烃环或芳基的两个 π 电子(碳-碳双键)。

[0117] 在下文中,将详细地描述本公开内容的优选实施方案。然而,本公开内容的实施方案可以被修改成多种形式,并且本公开内容的范围不限于以下描述的实施方案。

[0118] 在下文中,将详细地描述化学式1。

[0119] [化学式1]

[0120]



[0121] 在化学式1中,

[0122] X1为O;或S,

[0123] Cy2为选自由经取代或未经取代的芳族烃环;和经取代或未经取代的脂族烃环组成的组中的一者,或者为选自上述组中的两个或更多个环的稠环,

[0124] Cy3和Cy4彼此相同或不同,并且各自独立地为选自由经取代或未经取代的芳族烃环;经取代或未经取代的脂族烃环;和经取代或未经取代的芳族杂环组成的组中的一者,或

者为选自上述组中的两个或更多个环的稠环，

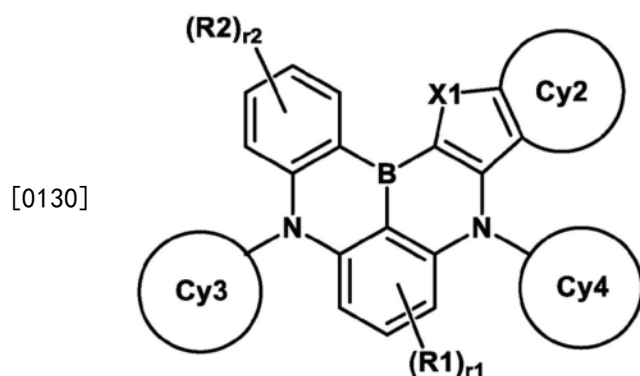
[0125] R1和R2彼此相同或不同，并且各自独立地为氢；氘；氰基；卤素基团；经取代或未经取代的烷基；经取代或未经取代的烷氧基；经取代或未经取代的烷基硫基；经取代或未经取代的环烷基；经取代或未经取代的甲硅烷基；经取代或未经取代的芳基；经取代或未经取代的芳氧基；经取代或未经取代的芳基硫基；经取代或未经取代的杂环基；或者经取代或未经取代的胺基，或者与相邻取代基键合以形成经取代或未经取代的环，

[0126] r1为0至3的整数，并且当r1为2或更大时，R1彼此相同或不同，以及

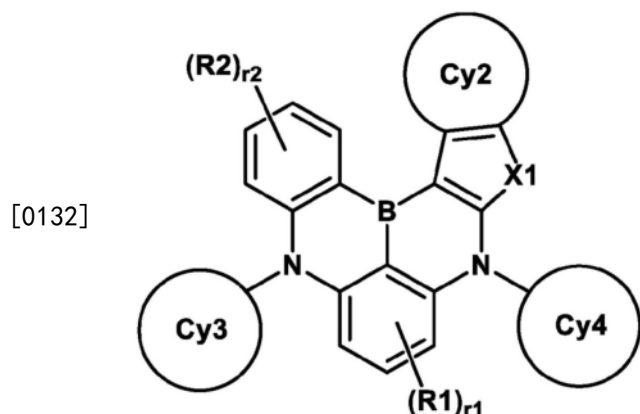
[0127] r2为0至4的整数，并且当r2为2或更大时，R2彼此相同或不同。

[0128] 在本说明书的一个实施方案中，化学式1由以下化学式101或102表示。

[0129] [化学式101]



[0131] [化学式102]



[0133] 在化学式101和102中，

[0134] X1、Cy2至Cy4、R1、R2、r1和r2具有与化学式1中相同的限定。

[0135] 在本说明书的一个实施方案中，Cy2为选自由经取代或未经取代的芳族烃环；和经取代或未经取代的脂族烃环组成的组中的一者，或者为选自上述组中的两个或更多个环的稠环。

[0136] 在本说明书的一个实施方案中，Cy2为经取代或未经取代的芳族烃环；经取代或未经取代的脂族烃环；或者经取代或未经取代的芳族烃环和脂族烃环的稠环。

[0137] 在本说明书的一个实施方案中，Cy2为经取代或未经取代的C6-C60芳族烃环；经取代或未经取代的C5-C60脂族烃环；或者经取代或未经取代的C6-C60芳族烃环和C5-C60脂族烃环的稠环。

[0138] 在本说明书的一个实施方案中，Cy2为经取代或未经取代的C6-C30芳族烃环；经取

代或未经取代的C5-C30脂族烃环;或者经取代或未经取代的C6-C30芳族烃环和C5-C30脂族烃环的稠环。

[0139] 在本说明书的一个实施方案中,Cy2为经取代或未经取代的C6-C20芳族烃环;经取代或未经取代的C5-C20脂族烃环;或者经取代或未经取代的C6-C20芳族烃环和C5-C20脂族烃环的稠环。

[0140] 在本说明书的一个实施方案中,Cy2为选自由经取代或未经取代的苯环;经取代或未经取代的萘环;经取代或未经取代的茚环;经取代或未经取代的苯并茚环;经取代或未经取代的环己烯环;经取代或未经取代的环戊烯环;和经取代或未经取代的双环辛烯环组成的组中的一者,或者为选自上述组中的两个或更多个环的稠环。

[0141] 在本说明书的一个实施方案中,Cy2为选自由苯环;萘环;茚环;苯并茚环;环己烯环;环戊烯环;和双环辛烯环组成的组中的一者,或者为选自上述组中的两个或更多个环的稠环,并且所述环是未经取代或者经选自由氘、具有1至10个碳原子的烷基、具有3至20个碳原子的环烷基和具有6至20个碳原子的芳基组成的组中的一个或更多个基团,或者选自上述组中的两个或更多个基团相连接的基团取代的。

[0142] 在本说明书的一个实施方案中,Cy2为选自由经取代或未经取代的苯环;经取代或未经取代的萘环;经取代或未经取代的环己烯环;经取代或未经取代的环戊烯环;和经取代或未经取代的双环辛烯环组成的组中的一者,或者为选自上述组中的两个或更多个环的稠环。

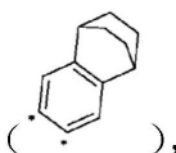
[0143] 在本说明书的一个实施方案中,Cy2为选自由苯环;萘环;环己烯环;环戊烯环;和双环辛烯环组成的组中的一者,或者为选自上述组中的两个或更多个环的稠环,并且所述环是未经取代或者经选自由氘、具有1至10个碳原子的烷基、具有3至20个碳原子的环烷基和具有6至20个碳原子的芳基组成的组中的一个或更多个基团,或者选自上述组中的两个或更多个基团相连接的基团取代的。

[0144] 在本说明书的一个实施方案中,Cy2为经取代或未经取代的苯环;经取代或未经取代的环己烯环;经取代或未经取代的四氢萘环;或者经取代或未经取代的1,2,3,4-四氢-1,4-桥亚乙基萘环。

[0145] 在本说明书的一个实施方案中,Cy2为苯环;环己烯环;四氢萘环;或者1,2,3,4-四氢-1,4-桥亚乙基萘环,并且所述环是未经取代或者经选自由氘、具有1至10个碳原子的烷基、具有3至20个碳原子的环烷基和具有6至20个碳原子的芳基组成的组中的一个或更多个基团,或者选自上述组中的两个或更多个基团相连接的基团取代的。

[0146] 在本说明书的一个实施方案中,Cy2为未经取代或者经氘、甲基、CD₃、异丙基、叔丁基、金刚烷基或苯基取代的苯环;未经取代或经甲基取代的环己烯环;未经取代或者经氘、甲基、CD₃、异丙基或叔丁基取代的四氢萘环;或者未经取代或者经氘、甲基、CD₃、异丙基或叔丁基取代的1,2,3,4-四氢-1,4-桥亚乙基萘环。

[0147] 在本说明书的一个实施方案中,Cy2为未经取代或者经氘、甲基、CD₃、异丙基、叔丁基、金刚烷基或苯基取代的苯环;未经取代或经甲基取代的环己烯环;未经取代或者经氘、甲基或CD₃取代的四氢萘环;或者未经取代或经甲基取代的1,2,3,4-四氢-1,4-桥亚乙基萘

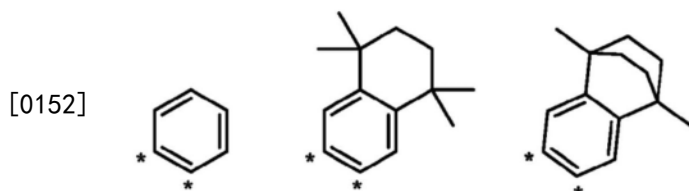
环 , 以及*意指与化学式1耦合的位置。

[0148] 在本说明书的一个实施方案中, Cy2为未经取代或经R3取代的苯环; 未经取代或经R3取代的环己烯环; 未经取代或经R3取代的四氢萘环; 或者未经取代或经R3取代的1,2,3,4-四氢-1,4-桥亚乙基萘环。

[0149] 在本说明书的一个实施方案中, Cy2为未经取代或者经氘或未被取代或被氘取代的C1-C10烷基取代的苯环; 经C1-C10烷基取代的四氢萘环; 或者经C1-C10烷基取代的1,2,3,4-四氢-1,4-桥亚乙基萘环。

[0150] 在本说明书的一个实施方案中, Cy2为未经取代或者经甲基、CD₃或叔丁基取代的苯环; 经甲基取代的四氢萘环; 或者经甲基取代的1,2,3,4-四氢-1,4-桥亚乙基萘环。

[0151] 在本说明书的一个实施方案中, Cy2由以下结构式中的任一者表示, 并且以下结构式是未经取代或者经甲基、CD₃或叔丁基取代的。

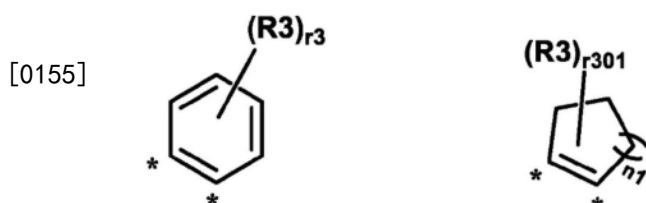


[0153] 在所述结构式中,*意指耦合位置。

[0154] 在本说明书的一个实施方案中, Cy2由以下化学式Cy2-1或Cy2-2表示。

[化学式 Cy2-1]

[化学式 Cy2-2]



[0156] 在化学式Cy2-1和Cy2-2中,

[0157] R3为氢; 氘; 氰基; 卤素基团; 经取代或未经取代的烷基; 经取代或未经取代的烷氧基; 经取代或未经取代的烷基硫基; 经取代或未经取代的环烷基; 经取代或未经取代的甲硅烷基; 经取代或未经取代的芳基; 经取代或未经取代的芳氧基; 经取代或未经取代的芳基硫基; 经取代或未经取代的杂环基; 或者经取代或未经取代的胺基, 或者与相邻取代基键合以形成经取代或未经取代的芳族烃环; 经取代或未经取代的脂族烃环; 或者经取代或未经取代的芳族烃环和脂族烃环的稠环,

[0158] n1为1或2,

[0159] r3为0至4的整数, 以及r301为0至8的整数,

[0160] 当r3和r301各自为2或更大时, 两个或更多个R3彼此相同或不同, 以及

[0161] *意指与化学式1耦合的位置。

[0162] 在本说明书的一个实施方案中, R3为氢; 氘; 氰基; 卤素基团; 经取代或未经取代的烷基; 经取代或未经取代的环烷基; 经取代或未经取代的甲硅烷基; 经取代或未经取代的芳

基;经取代或未经取代的杂环基;或者经取代或未经取代的胺基,或者与相邻取代基键合以形成经取代或未经取代的芳族烃环;经取代或未经取代的脂族烃环;或者经取代或未经取代的芳族烃环和脂族烃环的稠环。

[0163] 在本说明书的一个实施方案中,R3为氢;氘;氰基;卤素基团;经取代或未经取代的C1-C60烷基;经取代或未经取代的C3-C60环烷基;经取代或未经取代的甲硅烷基;经取代或未经取代的C6-C60芳基;经取代或未经取代的C2-C60杂环基;或者经取代或未经取代的胺基,或者与相邻取代基键合以形成经取代或未经取代的C6-C60芳族烃环;经取代或未经取代的C5-C60脂族烃环;或者经取代或未经取代的C6-C60芳族烃环和C5-C60脂族烃环的稠环。

[0164] 在本说明书的一个实施方案中,R3为氢;氘;氰基;卤素基团;经取代或未经取代的C1-C30烷基;经取代或未经取代的C3-C30环烷基;经取代或未经取代的甲硅烷基;经取代或未经取代的C6-C30芳基;经取代或未经取代的C2-C30杂环基;或者经取代或未经取代的胺基,或者与相邻取代基键合以形成经取代或未经取代的C6-C30芳族烃环;经取代或未经取代的C5-C30脂族烃环;或者经取代或未经取代的C6-C30芳族烃环和C5-C30脂族烃环的稠环。

[0165] 在本说明书的一个实施方案中,R3为氢;氘;氰基;卤素基团;经取代或未经取代的C1-C20烷基;经取代或未经取代的C3-C20环烷基;经取代或未经取代的甲硅烷基;经取代或未经取代的C6-C20芳基;经取代或未经取代的C2-C20杂环基;或者经取代或未经取代的胺基,或者与相邻取代基键合以形成经取代或未经取代的C6-C20芳族烃环;经取代或未经取代的C5-C20脂族烃环;或者经取代或未经取代的C6-C20芳族烃环和C5-C20脂族烃环的稠环。

[0166] 在本说明书的一个实施方案中,R3为氢;氘;经取代或未经取代的C1-C20烷基;经取代或未经取代的C3-C20环烷基;经取代或未经取代的C6-C20芳基;或者经取代或未经取代的C2-C20杂环基,或者与相邻取代基键合以形成经取代或未经取代的C6-C20芳族烃环;或者经取代或未经取代的C5-C20脂族烃环。

[0167] 在本说明书的一个实施方案中,R3为氢;氘;未经取代或经氘取代的C1-C20烷基;未经取代或经氘取代的C3-C20环烷基;未经取代或经氘取代的C6-C20芳基;或者未经取代或经氘取代的C2-C20杂环基,或者与相邻取代基键合以形成未经取代或者经氘或未被取代或被氘取代的烷基取代的C6-C20芳族烃环;或者未经取代或者经氘或未被取代或被氘取代的烷基取代的C5-C20脂族烃环。

[0168] 在本说明书的一个实施方案中,R3为氢;氘;经取代或未经取代的甲基;经取代或未经取代的丙基;经取代或未经取代的丁基;经取代或未经取代的金刚烷基;或者经取代或未经取代的苯基,或者与相邻取代基键合以形成经取代或未经取代的环己烯环;或者经取代或未经取代的双环辛烯环。

[0169] 在本说明书的一个实施方案中,R3为氢;氘;未经取代或经氘取代的甲基;未经取代或经氘取代的丙基;未经取代或经氘取代的丁基;未经取代或者经氘或未被取代或被氘取代的烷基取代的金刚烷基;或者未经取代或者经氘或未被取代或被氘取代的烷基取代的苯基,或者与相邻取代基键合以形成未经取代或者经氘或未被取代或被氘取代的烷基取代的环己烯环;或者未经取代或者经氘或未被取代或被氘取代的烷基取代的双环辛烯环。

[0170] 在本说明书的一个实施方案中,R3为氢;氘;甲基;丙基;丁基;金刚烷基;或苯基,或者与相邻取代基键合以形成环己烯环;或双环辛烯环,并且所述基团或环是未经取代或者经氘或未被取代或被氘取代的烷基取代的。

[0171] 在本说明书的一个实施方案中,R3为氢;氘;未经取代或经氘取代的甲基;未经取代或经氘取代的丙基;未经取代或经氘取代的丁基;未经取代或经氘取代的金刚烷基;或者未经取代或经氘取代的苯基,或者与相邻取代基键合以形成未经取代或者经氘、甲基或CD₃取代的环己烯环;或者未经取代或者经氘、甲基或CD₃取代的双环辛烯环。

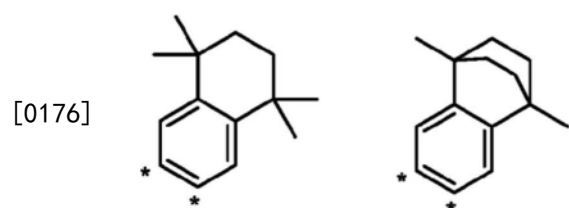
[0172] 在本说明书的一个实施方案中,R3为氢;氘;甲基;CD₃;异丙基;叔丁基;金刚烷基;或苯基,或者与相邻取代基键合以形成未经取代或者经氘、甲基或CD₃取代的环己烯环;或者

者未经取代或经甲基取代的双环[2.2.2]辛-2-烯 () 环,以及*意指与化学式Cy2-1或Cy2-2耦合的位置。

[0173] 在本说明书的一个实施方案中,R3为氢;氘;或者未经取代或经氘取代的C1-C10烷基,或者与相邻取代基键合以形成经C1-C10烷基取代的环己烯环;或者经C1-C10烷基取代的双环[2.2.2]辛-2-烯环。

[0174] 在本说明书的一个实施方案中,R3为氢;氘;甲基;CD₃;或叔丁基,或者与相邻取代基键合以形成经甲基取代的环己烯环;或者经甲基取代的双环[2.2.2]辛-2-烯环。

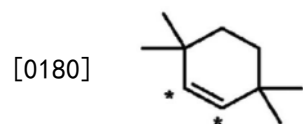
[0175] 在本说明书的一个实施方案中,当R3形成环时,Cy2-1由以下结构式中的任一者表示。



[0177] 在所述结构式中,*意指与化学式1耦合的位置,并且所述结构式是未经取代或者经氘或未被取代或被氘取代的烷基取代的。

[0178] 在本说明书的一个实施方案中,所述结构式是未经取代或者经氘、甲基或CD₃取代的。

[0179] 在本说明书的一个实施方案中,Cy2-2由以下结构式表示。



[0181] 在所述结构式中,*意指与化学式1耦合的位置。

[0182] 在本说明书的一个实施方案中,n1为2。

[0183] 在本说明书的一个实施方案中,r3为0至4的整数。

[0184] 在本说明书的一个实施方案中,r3为1至4的整数。

[0185] 在本说明书的一个实施方案中,r301为0至8的整数。

[0186] 在本说明书的一个实施方案中,r301为1至8的整数。

[0187] 在本说明书的一个实施方案中,Cy3和Cy4彼此相同或不同,并且各自独立地为选

自由经取代或未经取代的芳族烃环;经取代或未经取代的脂族烃环;和经取代或未经取代的芳族杂环组成的组中的一者,或者为选自上述组中的两个或更多个环的稠环。

[0188] 在本说明书的一个实施方案中,Cy3和Cy4彼此相同或不同,并且各自独立地为选自由经取代或未经取代的C6-C60芳族烃环;经取代或未经取代的C5-C60脂族烃环;和经取代或未经取代的C2-C60芳族杂环组成的组中的一者,或者选自上述组中的两个或更多个环的稠合C9-C60环。

[0189] 在本说明书的一个实施方案中,Cy3和Cy4彼此相同或不同,并且各自独立地为选自由经取代或未经取代的C6-C30芳族烃环;经取代或未经取代的C5-C30脂族烃环;和经取代或未经取代的C2-C30芳族杂环组成的组中的一者,或者选自上述组中的两个或更多个环的经取代或未经取代的稠合C9-C30环。

[0190] 在本说明书的一个实施方案中,Cy3和Cy4彼此相同或不同,并且各自独立地为选自由经取代或未经取代的C6-C20芳族烃环;经取代或未经取代的C5-C20脂族烃环;和经取代或未经取代的C2-C20芳族杂环组成的组中的一者,或者选自上述组中的两个或更多个环的经取代或未经取代的稠合C9-C20环。

[0191] 在本说明书的一个实施方案中,Cy3和Cy4彼此相同或不同,并且各自独立地为选自由经取代或未经取代的C6-C20芳族烃环;和经取代或未经取代的C5-C20脂族烃环组成的组中的一者,或者选自上述组中的两个或更多个环的经取代或未经取代的稠合C9-C20环。

[0192] 在本说明书的一个实施方案中,Cy3和Cy4彼此相同或不同,并且各自独立地为选自由经取代或未经取代的苯环;经取代或未经取代的萘环;经取代或未经取代的菲环;经取代或未经取代的茚环;经取代或未经取代的苯并茚环;经取代或未经取代的环己烯环;经取代或未经取代的环戊烯环;经取代或未经取代的四氢萘环;经取代或未经取代的二苯并呋喃环;经取代或未经取代的二苯并噻吩环;经取代或未经取代的二苯并噻咯环;经取代或未经取代的萘并苯并呋喃环;经取代或未经取代的萘并苯并噻吩环;和经取代或未经取代的萘并苯并噻咯环组成的组中的一者,或者为选自上述组中的两个或更多个环的稠环。

[0193] 在本说明书的一个实施方案中,Cy3和Cy4彼此相同或不同,并且各自独立地为经取代或未经取代的苯环;经取代或未经取代的萘环;经取代或未经取代的菲环;经取代或未经取代的茚环;经取代或未经取代的苯并茚环;经取代或未经取代的四氢萘环;经取代或未经取代的二苯并呋喃环;经取代或未经取代的二苯并噻吩环;经取代或未经取代的二苯并噻咯环;经取代或未经取代的萘并苯并呋喃环;经取代或未经取代的萘并苯并噻吩环;或者经取代或未经取代的萘并苯并噻咯环。

[0194] 在本说明书的一个实施方案中,Cy3和Cy4彼此相同或不同,并且各自独立地为经取代或未经取代的苯环;经取代或未经取代的萘环;经取代或未经取代的菲环;经取代或未经取代的茚环;经取代或未经取代的苯并茚环;经取代或未经取代的四氢萘环;经取代或未经取代的二苯并呋喃环;经取代或未经取代的二苯并噻吩环;经取代或未经取代的二苯并噻咯环;或者经取代或未经取代的萘并苯并呋喃环。

[0195] 在本说明书的一个实施方案中,Cy3和Cy4彼此相同或不同,并且各自独立地为未经取代或者经氘、卤素基团、C1-C10烷基、甲硅烷基或C6-C20芳基取代的苯环;未经取代或者经C1-C10烷基或C6-C20芳基取代的茚环;经C1-C10烷基或C6-C20芳基取代的四氢萘环;或者二苯并呋喃环。

[0196] 在本说明书的一个实施方案中,Cy3和Cy4彼此相同或不同,并且各自独立地为未经取代或者经氘、氟基、甲基、叔丁基、三甲基甲硅烷基或苯基取代的苯环;二甲基茈环;经甲基或苯基取代的四氢萘环;或者二苯并呋喃环。

[0197] 在本说明书的一个实施方案中,Cy3为未经取代或经R4取代的苯环;未经取代或经R4取代的萘环;未经取代或经R4取代的菲环;未经取代或经R4取代的茈环;未经取代或经R4取代的苯并茈环;未经取代或经R4取代的四氢萘环;未经取代或经R4取代的二苯并呋喃环;未经取代或经R4取代的二苯并噻吩环;未经取代或经R4取代的二苯并噻咯环;未经取代或经R4取代的萘并苯并呋喃环;未经取代或经R4取代的萘并苯并噻吩环;或者未经取代或经R4取代的萘并苯并噻咯环。

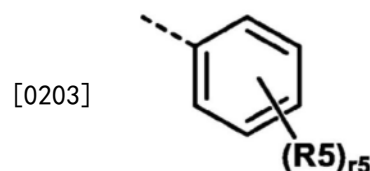
[0198] 在本说明书的一个实施方案中,Cy4为未经取代或经R5取代的苯环;未经取代或经R5取代的萘环;未经取代或经R5取代的菲环;未经取代或经R5取代的茈环;未经取代或经R5取代的苯并茈环;未经取代或经R5取代的四氢萘环;未经取代或经R5取代的二苯并呋喃环;未经取代或经R5取代的二苯并噻吩环;未经取代或经R5取代的二苯并噻咯环;未经取代或经R5取代的萘并苯并呋喃环;未经取代或经R5取代的萘并苯并噻吩环;或者未经取代或经R5取代的萘并苯并噻咯环。

[0199] 在本说明书的一个实施方案中,Cy2至Cy4各自为未经取代或者经稍后将描述的取代基R3至R5取代的。

[0200] 在本说明书的一个实施方案中,稍后将提供的关于R5的描述可以应用于R4。

[0201] 在本说明书的一个实施方案中,Cy3和Cy4彼此相同或不同,并且各自独立地由以下化学式1-A表示。

[0202] [化学式1-A]



[0204] 在化学式1-A中,

[0205] 虚线为与化学式1连接的位置,

[0206] R5为氢;氘;氟基;卤素基团;经取代或未经取代的烷基;经取代或未经取代的烷氧基;经取代或未经取代的烷基硫基;经取代或未经取代的环烷基;经取代或未经取代的甲硅烷基;经取代或未经取代的芳基;经取代或未经取代的芳氧基;经取代或未经取代的芳基硫基;经取代或未经取代的杂环基;或者经取代或未经取代的胺基,或者与相邻取代基键合以形成经取代或未经取代的环,以及

[0207] r5为0至5的整数,并且当r5为2或更大时,R5彼此相同或不同。

[0208] 在本说明书的一个实施方案中,R5为氢;氘;氟基;卤素基团;经取代或未经取代的烷基;经取代或未经取代的环烷基;经取代或未经取代的甲硅烷基;经取代或未经取代的芳基;经取代或未经取代的杂环基;或者经取代或未经取代的胺基,或者与相邻取代基键合以形成经取代或未经取代的环。

[0209] 在本说明书的一个实施方案中,R5为氢;氘;氟基;卤素基团;经取代或未经取代的C1-C60烷基;经取代或未经取代的C3-C60环烷基;经取代或未经取代的甲硅烷基;经取代或

未经取代的C6-C60芳基；经取代或未经取代的C2-C60杂环基；或者经取代或未经取代的胺基，或者与相邻取代基键合以形成经取代或未经取代的C2-C60环。

[0210] 在本说明书的一个实施方案中，R5为氢；氘；氚；氰基；卤素基团；经取代或未经取代的C1-C30烷基；经取代或未经取代的C3-C30环烷基；经取代或未经取代的甲硅烷基；经取代或未经取代的C6-C30芳基；经取代或未经取代的C2-C30杂环基；或者经取代或未经取代的胺基，或者与相邻取代基键合以形成经取代或未经取代的C2-C30环。

[0211] 在本说明书的一个实施方案中，R5为氢；氘；氚；氰基；卤素基团；经取代或未经取代的C1-C20烷基；经取代或未经取代的C3-C20环烷基；经取代或未经取代的甲硅烷基；经取代或未经取代的C6-C20芳基；经取代或未经取代的C2-C20杂环基；或者经取代或未经取代的胺基，或者与相邻取代基键合以形成经取代或未经取代的C2-C20环。

[0212] 在本说明书的一个实施方案中，R5为氢；氘；氚；氰基；卤素基团；未经取代或经氘取代的C1-C20烷基；未经取代或经氘取代的C6-C20芳基烷基；未经取代或经氘取代的C3-C20环烷基；未经取代或者经C1-C20烷基或C6-C20芳基取代的甲硅烷基；未经取代或者经选自氘、氰基、卤素基团、C1-C20烷基、甲硅烷基和C6-C20芳基组成的组中的一个或多个基团，或者选自上述组中的两者或更多者相连接的基团取代的C6-C20芳基；或者未经取代或经C6-C20芳基取代的胺基，或者与相邻取代基键合以形成未经取代或者经选自氘、氰基、卤素基团、C1-C20烷基、甲硅烷基和C6-C20芳基组成的组中的一个或多个基团，或者选自上述组中的两者或更多者相连接的基团取代的C2-C30环。

[0213] 在本说明书的一个实施方案中，R5为氢；氘；氚；氰基；氟基；经取代或未经取代的甲基；经取代或未经取代的丙基；经取代或未经取代的丁基；经取代或未经取代的苯基丙基；经取代或未经取代的环己基；经取代或未经取代的甲硅烷基；经取代或未经取代的苯基；经取代或未经取代的联苯基；经取代或未经取代的萘基；经取代或未经取代的四氢萘基；或者经取代或未经取代的胺基，或者两个或多个R5与苯环键合以形成经取代或未经取代的萘环；经取代或未经取代的菲环；经取代或未经取代的茚环；经取代或未经取代的苯并茚环；经取代或未经取代的四氢萘环；经取代或未经取代的二苯并呋喃环；经取代或未经取代的二苯并噻吩环；经取代或未经取代的二苯并噻咯环；经取代或未经取代的萘并苯并呋喃环；经取代或未经取代的萘并苯并噻吩环；或者经取代或未经取代的萘并苯并噻咯环。

[0214] 在本说明书的一个实施方案中，R5为氢；氘；氚；氰基；氟基；经取代或未经取代的甲基；经取代或未经取代的丙基；经取代或未经取代的丁基；经取代或未经取代的苯基丙基；经取代或未经取代的环己基；经取代或未经取代的甲硅烷基；经取代或未经取代的苯基；经取代或未经取代的联苯基；经取代或未经取代的萘基；经取代或未经取代的四氢萘基；或者经取代或未经取代的胺基，或者两个或多个R5与苯环键合以形成经取代或未经取代的萘环；经取代或未经取代的菲环；经取代或未经取代的茚环；经取代或未经取代的苯并茚环；经取代或未经取代的四氢萘环；经取代或未经取代的二苯并呋喃环；经取代或未经取代的二苯并噻吩环；经取代或未经取代的二苯并噻咯环；或者经取代或未经取代的萘并苯并呋喃环。

[0215] 在本说明书的一个实施方案中，R5为氢；氘；氚；氰基；氟基；未经取代或经氘取代的甲基；未经取代或经氘取代的丙基；未经取代或经氘取代的丁基；未经取代或经氘取代的苯基丙基；未经取代或经氘取代的环己基；未经取代或者经甲基或苯基取代的甲硅烷基；未经取

代或者经选自由氘、氰基、氟基、甲基、叔丁基、甲硅烷基、苯基、联苯基和萘基组成的组中的一个或多个基团,或者选自上述组中的两者或更多者相连接的基团取代的苯基;未经取代或者经选自由氘、氰基、氟基、甲基、叔丁基、甲硅烷基、苯基、联苯基和萘基组成的组中的一个或多个基团,或者选自上述组中的两者或更多者相连接的基团取代的联苯基;未经取代或者经选自由氘、氰基、氟基、甲基、叔丁基、甲硅烷基、苯基、联苯基和萘基组成的组中的一个或多个基团,或者选自上述组中的两者或更多者相连接的基团取代的萘基;未经取代或经甲基取代的四氢萘基;或者未经取代或经苯基取代的胺基,或者两个或更多个R5与苯环键合以形成萘环;菲环;二甲基茚环;二苯基茚环;苯并茚环;四氢萘环;二苯并呋喃环;二苯并噻吩环;二苯并噻咯环;或者萘并苯并呋喃环,并且所述环是未经取代或者经选自由氘、氰基、氟基、甲基、叔丁基、甲硅烷基、苯基、联苯基和萘基组成的组中的一个或多个基团,或者选自上述组中的两者或更多者相连接的基团取代的。

[0216] 在本说明书的一个实施方案中,R5为氢;氘;氰基;氟基;甲基;CD₃;异丙基;叔丁基;仲丁基;苯基丙基;环己基;三甲基甲硅烷基;三苯基甲硅烷基;未经取代或者经氘、氰基、氟基、甲基、CD₃、CF₃、叔丁基、三甲基甲硅烷基、苯基、联苯基或萘基取代的苯基;联苯基;萘基;经甲基取代的四氢萘基;或者二苯基胺基,或者两个或更多个R5与苯环键合以形成未经取代或经苯基取代的萘环;菲环;未经取代或经叔丁基取代的二甲基茚环;未经取代或经叔丁基取代的二苯基茚环;未经取代或经甲基取代的苯并茚环;经甲基取代的四氢萘环;未经取代或经叔丁基取代的二苯并呋喃环;未经取代或经叔丁基取代的二苯并噻吩环;未经取代或经苯基取代的二苯并噻咯环;或者萘并苯并呋喃环。在本文中,经甲基取代的四氢萘环是未经取代或者经未经取代或者经氘、甲基、CD₃、CF₃、叔丁基、三甲基甲硅烷基、苯基、联苯基或萘基取代的苯基取代的。

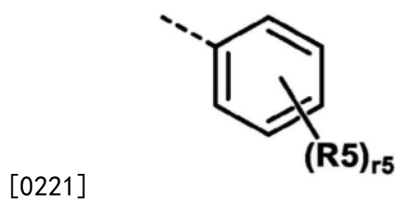
[0217] 在本说明书的一个实施方案中,R5为氢;氘;卤素基团;C1-C10烷基;未经取代或者经C1-C10烷基或C6-C20芳基取代的甲硅烷基;或者未经取代或者经氘、卤素基团或C1-C10烷基取代的苯基,或者两个或更多个R5与苯环键合以形成未经取代或者经C1-C10烷基或C6-C20芳基取代的茚环;经C1-C10烷基或C6-C20芳基取代的四氢萘环;或者二苯并呋喃环。

[0218] 在本说明书的一个实施方案中,R5为氢;氘;氟基;甲基;叔丁基;三甲基甲硅烷基;或者未经取代或者经氘、氟基或叔丁基取代的苯基,或者两个或更多个R5与苯环键合以形成二甲基茚环;经甲基或苯基取代的四氢萘环;或者二苯并呋喃环。

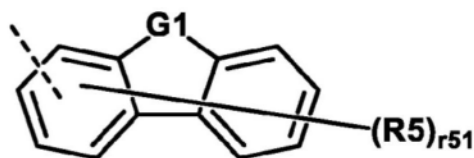
[0219] 在本说明书中的一个实施方案中,非氢的取代基(R5)连接至化学式1-A的相对于虚线的邻位。

[0220] 在本说明书的一个实施方案中,化学式1-A由以下化学式1-A-1至1-A-3中的任一者表示。

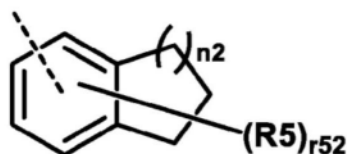
[化学式 1-A-1]



[化学式 1-A-2]



[化学式 1-A-3]



[0222] 在化学式1-A-1至1-A-3中,

[0223] 虚线、R5和r5具有与化学式1-A中相同的限定,

[0224] G1为-O-; -S-; -NG2-; -CG2G3-; 或-SiG2G3-,

[0225] G2和G3彼此相同或不同,并且各自独立地为氢; 氘; 经取代或未经取代的烷基; 或者经取代或未经取代的芳基, 或者与相邻取代基键合以形成经取代或未经取代的环,

[0226] n2为1或2, 以及

[0227] r51为0至7的整数, r52为0至11的整数, 并且当r51和r52各自为2或更大时, R5彼此相同或不同。

[0228] 在本说明书的一个实施方案中, n2为2。

[0229] 在本说明书的一个实施方案中, G1为-O-; -S-; 或-CG2G3-。

[0230] 在本说明书的一个实施方案中, G2和G3彼此相同或不同, 并且各自独立地为氢; 氘; 经取代或未经取代的烷基; 或者经取代或未经取代的芳基, 或者与相邻取代基键合以形成经取代或未经取代的环。

[0231] 在本说明书的一个实施方案中, G2和G3彼此相同或不同, 并且各自独立地为氢; 氘; 经取代或未经取代的C1-C10烷基; 或者经取代或未经取代的C6-C30芳基, 或者与相邻取代基键合以形成经取代或未经取代的C6-C30芳族烃环。

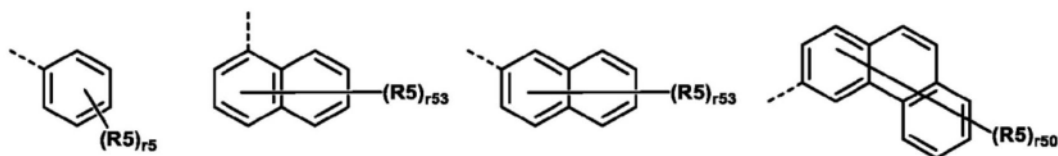
[0232] 在本说明书的一个实施方案中, G2和G3彼此相同或不同, 并且各自独立地为氢; 氘; 未经取代或经氘取代的C1-C6烷基; 或者未经取代或者经氘或C1-C6烷基取代的C6-C30芳基, 或者与相邻取代基键合以形成C6-C20芳族烃环。

[0233] 在本说明书的一个实施方案中, G2和G3彼此相同或不同, 并且各自独立地为氢; 氘; 甲基; 或苯基, 或者彼此键合以形成茚环。

[0234] 在本说明书的一个实施方案中, G2和G3彼此相同或不同, 并且各自独立地为氢; 氘; 甲基; 或苯基。

[0235] 在本说明书的一个实施方案中, 化学式1-A-1选自以下结构。

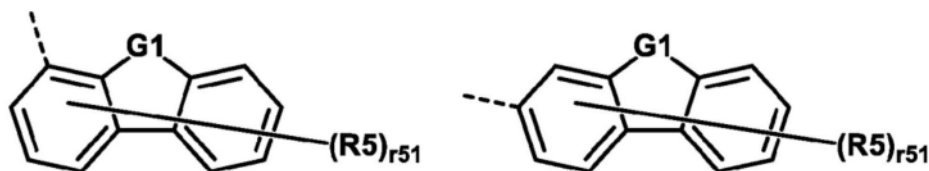
[0236]



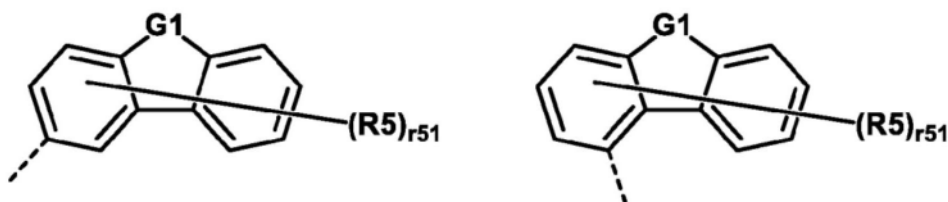
[0237] 在所述结构中,虚线、R5和r5具有与化学式1-A-1中相同的限定,以及

[0238] r50为0至9的整数,r53为0至7的整数,并且当r50和r53各自为2或更大时,R5彼此相同或不同。

[0239] 在本说明书的一个实施方案中,化学式1-A-2选自以下结构。



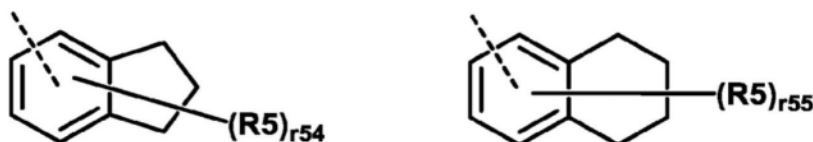
[0240]



[0241] 在所述结构中,虚线、G1、R5和r51具有与化学式1-A-2中相同的限定。

[0242] 在本说明书的一个实施方案中,化学式1-A-3选自以下结构。

[0243]

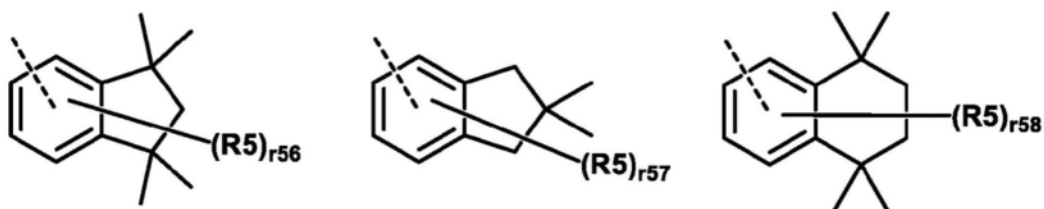


[0244] 在所述结构中,虚线和R5具有与化学式1-A-3中相同的限定,

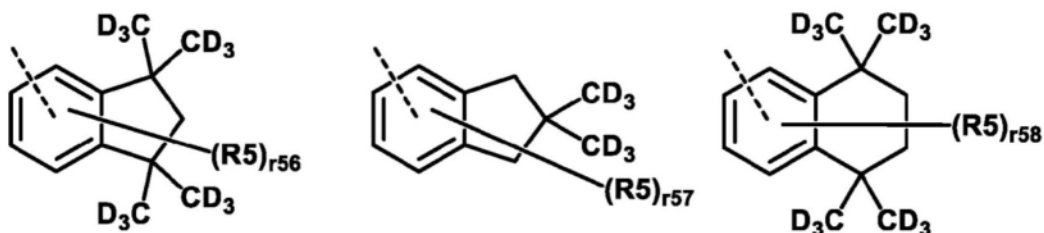
[0245] r54为0至9的整数,以及r55为0至11的整数,并且

[0246] 当r54和r55各自为2或更大时,R5彼此相同或不同。

[0247] 在本说明书的一个实施方案中,化学式1-A-3选自以下结构。



[0248]



[0249] 在所述结构中,虚线和R5具有与化学式1-A-3中相同的限定,

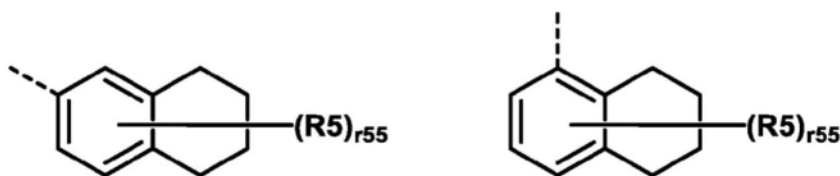
[0250] r56为0至5的整数,r57为0至7的整数,以及r58为0至7的整数,并且

[0251] 当r56至r58各自为2或更大时,R5彼此相同或不同。

[0252] 在本说明书的一个实施方案中,化学式1-A-3选自以下结构。



[0253]



[0254] 在所述结构中,虚线和R5具有与化学式1-A-3中相同的限定,

[0255] r54为0至9的整数,以及r55为0至11的整数,并且

[0256] 当r54和r55各自为2或更大时,R5彼此相同或不同。

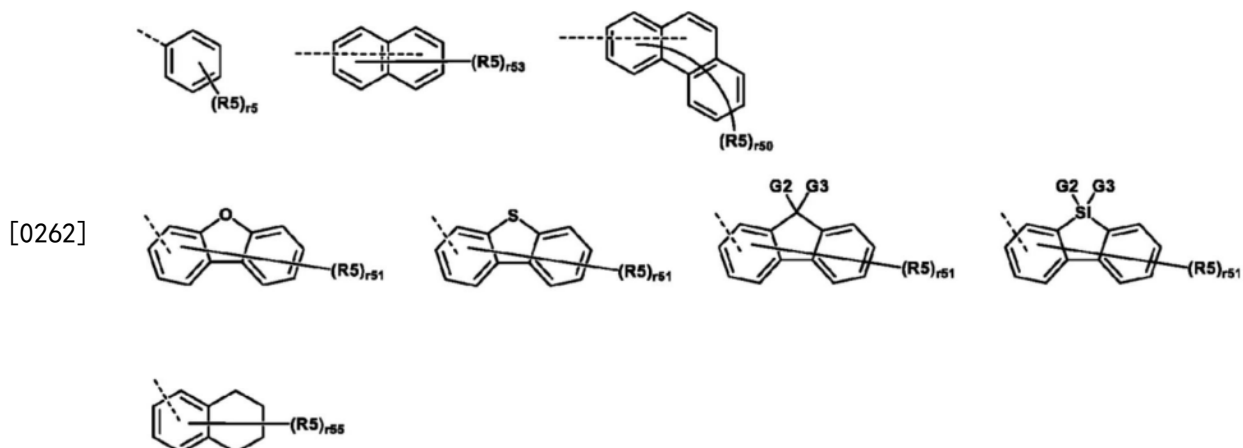
[0257] 在本说明书的一个实施方案中,化学式1-A-3选自以下结构。



[0259] 在所述结构中,虚线和R5具有与化学式1-A-3中相同的限定,

[0260] r55为0至11的整数,并且当r55为2或更大时,R5彼此相同或不同。

[0261] 在本说明书的一个实施方案中,Cy3和Cy4彼此相同或不同,并且各自独立地由以下结构式中的任一者表示。



[0263] 在所述结构式中，

[0264] R5为氢；氘；氰基；卤素基团；经取代或未经取代的烷基；经取代或未经取代的烷氧基；经取代或未经取代的烷基硫基；经取代或未经取代的环烷基；经取代或未经取代的甲硅烷基；经取代或未经取代的芳基；经取代或未经取代的芳氧基；经取代或未经取代的芳基硫基；经取代或未经取代的杂环基；或者经取代或未经取代的胺基，或者与相邻取代基键合以形成经取代或未经取代的环，

[0265] G2和G3彼此相同或不同，并且各自独立地为氢；氘；经取代或未经取代的烷基；或者经取代或未经取代的芳基，或者与相邻取代基键合以形成经取代或未经取代的环，

[0266] r5为0至5的整数，r50为0至9的整数，r51为0至7的整数，r53为0至7的整数，以及r55为0至11的整数，

[0267] 当r5、r50、r51、r53和r55各自为2或更大时，R5彼此相同或不同，以及

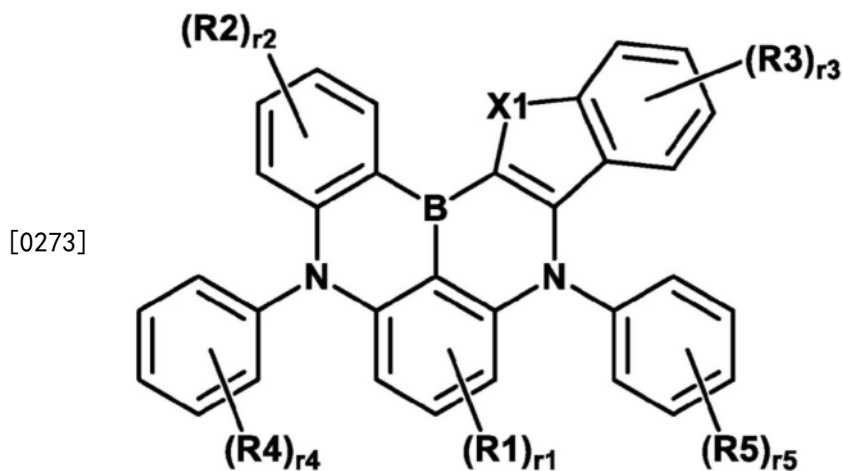
[0268] 虚线意指与化学式1连接的位置。

[0269] 在本说明书的一个实施方案中，Cy3和Cy4中的至少一者为经取代或未经取代的四氢萘环。

[0270] 在本说明书的一个实施方案中，Cy3和Cy4中的至少一者由化学式1-A-3表示。

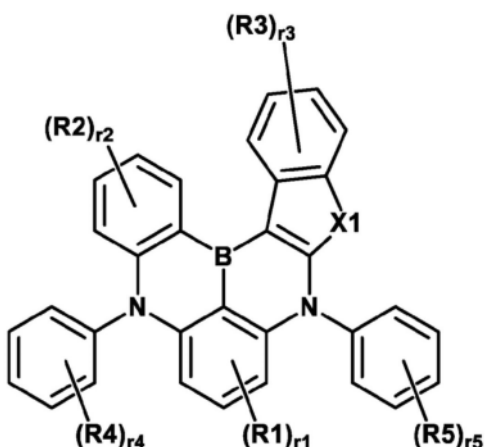
[0271] 在本说明书的一个实施方案中，化学式1为以下化学式103至106中的任一者。

[0272] [化学式103]



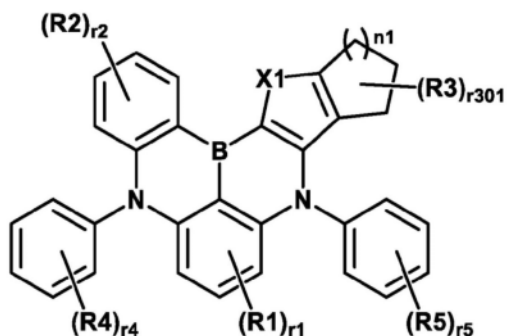
[0274] [化学式104]

[0275]



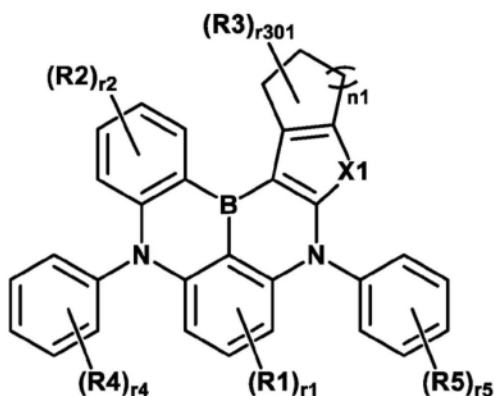
[0276] [化学式105]

[0277]



[0278] [化学式106]

[0279]



[0280] 在化学式103至106中，

[0281] X1、R1、R2、r1和r2具有与化学式1中相同的限定，

[0282] R3至R5彼此相同或不同，并且各自独立地为氢；氘；氰基；卤素基团；经取代或未经取代的烷基；经取代或未经取代的烷氧基；经取代或未经取代的烷基硫基；经取代或未经取代的环烷基；经取代或未经取代的甲硅烷基；经取代或未经取代的芳基；经取代或未经取代的芳氧基；经取代或未经取代的芳基硫基；经取代或未经取代的杂环基；或者经取代或未经取代的胺基，

[0283] R3可以与相邻取代基键合以形成经取代或未经取代的芳族烃环；经取代或未经取代的脂族烃环；或者经取代或未经取代的芳族烃环和脂族烃环的稠环，

[0284] R4和R5可以各自与相邻取代基键合以形成经取代或未经取代的环，n1为1或2，

[0285] r3为0至4的整数，r4和r5各自为0至5的整数，以及r301为0至8的整数，并且

[0286] 当r3至r5和r301各自为2或更大时,括号中的取代基彼此相同或不同。

[0287] 在本说明书的一个实施方案中,上述关于R5的限定可以应用于R4。

[0288] 在本说明书的一个实施方案中,R1和R2彼此相同或不同,并且各自独立地为氢;氘;氰基;卤素基团;经取代或未经取代的C1-C30烷基;经取代或未经取代的C1-C30烷氧基;经取代或未经取代的C1-C30烷基硫基;经取代或未经取代的C3-C60环烷基;经取代或未经取代的甲硅烷基;经取代或未经取代的C6-C60芳基;经取代或未经取代的C6-C60芳氧基;经取代或未经取代的C6-C60芳基硫基;经取代或未经取代的C2-C60杂环基;或者经取代或未经取代的胺基,或者与相邻取代基键合以形成经取代或未经取代的C2-C30环。

[0289] 在本说明书的一个实施方案中,R1和R2彼此相同或不同,并且各自独立地为氢;氘;氰基;卤素基团;经取代或未经取代的C1-C10烷基;经取代或未经取代的C1-C10烷氧基;经取代或未经取代的C1-C10烷基硫基;经取代或未经取代的C3-C30环烷基;经取代或未经取代的甲硅烷基;经取代或未经取代的C6-C30芳基;经取代或未经取代的C6-C30芳氧基;经取代或未经取代的C6-C30芳基硫基;经取代或未经取代的C2-C30杂环基;或者经取代或未经取代的胺基,或者与相邻取代基键合以形成经取代或未经取代的C2-C30环。

[0290] 在本说明书的一个实施方案中,R1和R2彼此相同或不同,并且各自独立地为氢;氘;氰基;卤素基团;经取代或未经取代的C1-C10烷基;经取代或未经取代的C1-C10烷氧基;经取代或未经取代的C1-C10烷基硫基;经取代或未经取代的C3-C30环烷基;经取代或未经取代的C1-C30烷基甲硅烷基;经取代或未经取代的C6-C90芳基甲硅烷基;经取代或未经取代的C6-C30芳基;经取代或未经取代的C6-C30芳氧基;经取代或未经取代的C6-C30芳基硫基;经取代或未经取代的C2-C30杂环基;经取代或未经取代的C6-C30芳基胺基;或者经取代或未经取代的C2-C30杂芳基胺基,或者与相邻取代基键合以形成经取代或未经取代的C2-C30环。

[0291] 在本说明书的一个实施方案中,R3至R5彼此相同或不同,并且各自独立地为氢;氘;氰基;卤素基团;经取代或未经取代的C1-C30烷基;经取代或未经取代的C1-C30烷氧基;经取代或未经取代的C1-C30烷基硫基;经取代或未经取代的C3-C60环烷基;经取代或未经取代的甲硅烷基;经取代或未经取代的C6-C60芳基;经取代或未经取代的C6-C60芳氧基;经取代或未经取代的C6-C60芳基硫基;经取代或未经取代的C2-C60杂环基;或者经取代或未经取代的胺基。

[0292] 在本说明书的一个实施方案中,R3至R5彼此相同或不同,并且各自独立地为氢;氘;氰基;卤素基团;经取代或未经取代的C1-C10烷基;经取代或未经取代的C1-C10烷氧基;经取代或未经取代的C1-C10烷基硫基;经取代或未经取代的C3-C30环烷基;经取代或未经取代的甲硅烷基;经取代或未经取代的C6-C30芳基;经取代或未经取代的C6-C30芳氧基;经取代或未经取代的C6-C30芳基硫基;经取代或未经取代的C2-C30杂环基;或者经取代或未经取代的胺基。

[0293] 在本说明书的一个实施方案中,R3至R5彼此相同或不同,并且各自独立地为氢;氘;氰基;卤素基团;经取代或未经取代的C1-C10烷基;经取代或未经取代的C1-C10烷氧基;经取代或未经取代的C1-C10烷基硫基;经取代或未经取代的C3-C30环烷基;经取代或未经取代的C1-C30烷基甲硅烷基;经取代或未经取代的C6-C90芳基甲硅烷基;经取代或未经取代的C6-C30芳基;经取代或未经取代的C6-C30芳氧基;经取代或未经取代的C6-C30芳基硫

基;经取代或未经取代的C2-C30杂环基;经取代或未经取代的C6-C30芳基氨基;或者经取代或未经取代的C2-C30杂芳基氨基。

[0294] 在本说明书的一个实施方案中,R3可以与相邻取代基键合以形成经取代或未经取代的芳族烃环;经取代或未经取代的脂族烃环;或者经取代或未经取代的芳族烃环和脂族烃环的稠环。

[0295] 在本说明书的一个实施方案中,R3可以与相邻取代基键合以形成经取代或未经取代的C6-C60芳族烃环;经取代或未经取代的C3-C60脂族烃环;或者经取代或未经取代的C6-C60芳族烃环和C3-C60脂族烃环的稠环。

[0296] 在本说明书的一个实施方案中,R3可以与相邻取代基键合以形成经取代或未经取代的C6-C30芳族烃环;经取代或未经取代的C3-C30脂族烃环;或者经取代或未经取代的C6-C30芳族烃环和C3-C30脂族烃环的稠环。

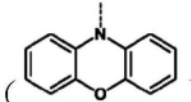
[0297] 在本说明书的一个实施方案中,R4和R5可以各自与相邻取代基键合以形成经取代或未经取代的环。

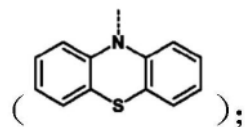
[0298] 在本说明书的一个实施方案中,R4和R5可以各自与相邻取代基键合以形成经取代或未经取代的C2-C60环。

[0299] 在本说明书的一个实施方案中,R4和R5可以各自与相邻取代基键合以形成经取代或未经取代的C2-C30环。

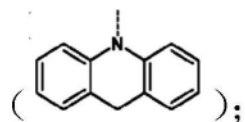
[0300] 在本说明书的一个实施方案中,R1为氢;氘;经取代或未经取代的烷基;经取代或未经取代的环烷基;经取代或未经取代的芳基;经取代或未经取代的杂环基;或者经取代或未经取代的胺基。

[0301] 在本说明书的一个实施方案中,R1为氢;氘;经取代或未经取代的甲基;经取代或未经取代的乙基;经取代或未经取代的丙基;经取代或未经取代的丁基;经取代或未经取代的环己基;经取代或未经取代的金刚烷基;经取代或未经取代的苯基;经取代或未经取代的联苯基;经取代或未经取代的萘基;经取代或未经取代的茚基;经取代或未经取代的四氢萘基;经取代或未经取代的二苯并呋喃基;经取代或未经取代的二苯并噻吩基;经取代或未经取代的咪唑基;经取代或未经取代的六氢咪唑基;经取代或未经取代的稠合有环己烯的六

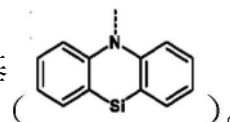
氢咪唑基;经取代或未经取代的吩噻嗪基  经取代或未经取代的吩噻嗪基



经取代或未经取代的胺基;经取代或未经取代的二氢吡啶基



或者经取代或未经取代的二氢二苯并氮杂硅烷基



[0302] 在本说明书的一个实施方案中,R1为氢;氘;C1-C10烷基;未经取代或经氰基取代的苯基;未经取代或经C1-C10烷基取代的六氢咪唑基;吩噻嗪基;或者未经取代或经C1-C10烷基甲硅烷基取代的二苯基胺基。

[0303] 在本说明书的一个实施方案中,R1为氢;氘;甲基;叔丁基;未经取代或经氰基取代

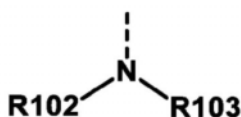
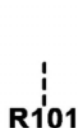
的苯基；未经取代或者经甲基或叔丁基取代的六氢吡啶基；吩噻嗪基；或者未经取代或经三甲基甲硅烷基取代的二苯基胺基。

[0304] 在本说明书的一个实施方案中，R1是未经取代或者经选自自由氘、氰基、卤素基团、烷基、烷氧基、甲硅烷基和芳基组成的组中的一个或多个基团，或者选自上述组中的两者或更多者相连接的基团取代的。

[0305] 在本说明书的一个实施方案中，R1由以下化学式1-B-1至1-B-4中的任一者表示。

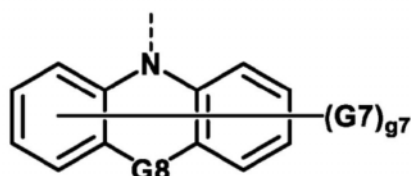
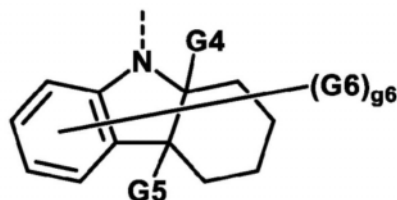
[化学式 1-B-1]

[化学式 1-B-2]



[0306] [化学式 1-B-3]

[化学式 1-B-4]



[0307] 在化学式1-B-1至1-B-4中，

[0308] G8为直接键；-O-；-S-；-CG9G10-；或-SiG9G10-，

[0309] R101至R103和G4至G7彼此相同或不同，并且各自独立地为氢；氘；氰基；卤素基团；经取代或未经取代的烷基；经取代或未经取代的烷氧基；经取代或未经取代的烷基硫基；经取代或未经取代的环烷基；经取代或未经取代的甲硅烷基；经取代或未经取代的芳基；经取代或未经取代的芳氧基；经取代或未经取代的芳基硫基；经取代或未经取代的杂环基；或者经取代或未经取代的胺基，或者与相邻取代基键合以形成经取代或未经取代的环，

[0310] G9和G10彼此相同或不同，并且各自独立地为氢；氘；经取代或未经取代的烷基；或者经取代或未经取代的芳基，或者与相邻取代基键合以形成经取代或未经取代的环，

[0311] g6为0至12的整数，以及g7为0至8的整数，

[0312] 当g6和g7各自为2或更大时，括号中的取代基彼此相同或不同，以及

[0313] 虚线意指与化学式1键合的位置。

[0314] 在本说明书的一个实施方案中，G8为直接键。

[0315] 在本说明书的一个实施方案中，G8为-O-；或-S-。

[0316] 在本说明书的一个实施方案中，G8为-CG9G10-；或-SiG9G10-。

[0317] 在本说明书的一个实施方案中，G9和G10彼此相同或不同，并且各自独立地为氢；氘；经取代或未经取代的烷基；或者经取代或未经取代的芳基。

[0318] 在本说明书的一个实施方案中，G9和G10彼此相同或不同，并且各自独立地为经取代或未经取代的C1-C10烷基；或者经取代或未经取代的C6-C30芳基。

[0319] 在本说明书的一个实施方案中，G9和G10彼此相同或不同，并且各自独立地为经取代或未经取代的甲基；或者经取代或未经取代的苯基。

[0320] 在本说明书的一个实施方案中,G9和G10彼此相同或不同,并且各自独立地为甲基;或苯基。

[0321] 在本说明书的一个实施方案中,R101至R103和G4至G7彼此相同或不同,并且各自独立地为氢;氘;经取代或未经取代的烷基;经取代或未经取代的环烷基;经取代或未经取代的甲硅烷基;经取代或未经取代的芳基;或者经取代或未经取代的杂环基,或者与相邻取代基键合以形成经取代或未经取代的环。

[0322] 在本说明书的一个实施方案中,R101至R103和G4至G7彼此相同或不同,并且各自独立地为氢;氘;经取代或未经取代的C1-C60烷基;经取代或未经取代的C3-C60环烷基;经取代或未经取代的甲硅烷基;经取代或未经取代的C6-C60芳基;或者经取代或未经取代的C2-C60杂环基,或者与相邻取代基键合以形成经取代或未经取代的C2-C60环。

[0323] 在本说明书的一个实施方案中,R101至R103和G4至G7彼此相同或不同,并且各自独立地为氢;氘;经取代或未经取代的C1-C30烷基;经取代或未经取代的C3-C30环烷基;经取代或未经取代的甲硅烷基;经取代或未经取代的C6-C30芳基;或者经取代或未经取代的C2-C30杂环基,或者与相邻取代基键合以形成经取代或未经取代的C2-C30环。

[0324] 在本说明书的一个实施方案中,R101至R103和G4至G7彼此相同或不同,并且各自独立地为氢;氘;经取代或未经取代的C1-C20烷基;经取代或未经取代的C3-C20环烷基;经取代或未经取代的甲硅烷基;经取代或未经取代的C6-C20芳基;或者经取代或未经取代的C2-C20杂环基,或者与相邻取代基键合以形成经取代或未经取代的C2-C20环。

[0325] 在本说明书的一个实施方案中,R101至R103和G4至G7彼此相同或不同,并且各自独立地为氢;氘;未经取代或者经选自由氘、氰基、卤素基团、C1-C20烷基、C1-C20烷氧基、甲硅烷基和C6-C20芳基组成的组中的一个或多个基团,或者选自上述组中的两者或更多者相连接的基团取代的C1-C30烷基;未经取代或者经选自由氘、氰基、卤素基团、C1-C20烷基、C1-C20烷氧基、甲硅烷基和C6-C20芳基组成的组中的一个或多个基团,或者选自上述组中的两者或更多者相连接的基团取代的C3-C30环烷基;未经取代或者经选自由氘、氰基、卤素基团、C1-C20烷基、C1-C20烷氧基、甲硅烷基和C6-C20芳基组成的组中的一个或多个基团,或者选自上述组中的两者或更多者相连接的基团取代的甲硅烷基;未经取代或者经选自由氘、氰基、卤素基团、C1-C20烷基、C1-C20烷氧基、甲硅烷基和C6-C20芳基组成的组中的一个或多个基团,或者选自上述组中的两者或更多者相连接的基团取代的C6-C30芳基;或者未经取代或者经选自由氘、氰基、卤素基团、C1-C20烷基、C1-C20烷氧基、甲硅烷基和C6-C20芳基组成的组中的一个或多个基团,或者选自上述组中的两者或更多者相连接的基团取代的C2-C30杂环基,或者与相邻取代基键合以形成未经取代或者经选自由氘、氰基、卤素基团、C1-C20烷基、C1-C20烷氧基、甲硅烷基和C6-C20芳基组成的组中的一个或多个基团,或者选自上述组中的两者或更多者相连接的基团取代的C2-C30环。

[0326] 在本说明书的一个实施方案中,R101为氢;氘;经取代或未经取代的烷基;经取代或未经取代的环烷基;经取代或未经取代的芳基;或者经取代或未经取代的杂环基。

[0327] 在本说明书的一个实施方案中,R101为氢;氘;经取代或未经取代的甲基;经取代或未经取代的乙基;经取代或未经取代的丙基;经取代或未经取代的丁基;经取代或未经取代的环己基;经取代或未经取代的金刚烷基;经取代或未经取代的苯基;经取代或未经取代的联苯基;经取代或未经取代的萘基;经取代或未经取代的茚基;经取代或未经取代的四氢

萘基;经取代或未经取代的二苯并呋喃基;或者经取代或未经取代的二苯并噻吩基。

[0328] 在本说明书的一个实施方案中,R101为氢;氘;未经取代或经氘取代的甲基;未经取代或经氘取代的乙基;未经取代或经氘取代的丙基;未经取代或经氘取代的丁基;未经取代或经氘取代的环己基;未经取代或经氘取代的金刚烷基;未经取代或者经选自由氘、氰基、氟基、甲基、丙基、丁基、甲氧基、甲硅烷基和苯基组成的组中的一个或多个基团,或者选自上述组中的两者或更多者相连接的基团取代的苯基;未经取代或者经选自由氘、氰基、氟基、甲基、丙基、丁基、甲氧基、甲硅烷基和苯基组成的组中的一个或多个基团,或者选自上述组中的两者或更多者相连接的基团取代的联苯基;未经取代或者经选自由氘、氰基、氟基、甲基、丙基、丁基、甲氧基、甲硅烷基和苯基组成的组中的一个或多个基团,或者选自上述组中的两者或更多者相连接的基团取代的萘基;未经取代或者经选自由氘、氰基、氟基、甲基、丙基、丁基、甲氧基、甲硅烷基和苯基组成的组中的一个或多个基团,或者选自上述组中的两者或更多者相连接的基团取代的苄基;未经取代或者经氘、甲基或丁基取代的四氢萘基;未经取代或者经氘、甲基或丁基取代的二苯并呋喃基;或者未经取代或者经氘、甲基或丁基取代的二苯并噻吩基。

[0329] 在本说明书的一个实施方案中,R101为氢;氘;甲基; CD_3 ;乙基;异丙基;叔丁基;环己基;金刚烷基;未经取代或者经选自由氘、氰基、氟基、甲基、叔丁基、 $-OCF_3$ 、三甲基甲硅烷基、三苯基甲硅烷基和苯基组成的组中的一个或多个基团,或者选自上述组中的两者或更多者相连接的基团取代的苯基;联苯基;未经取代或经氘取代的萘基;未经取代或者经甲基或苯基取代的苄基;未经取代或经甲基取代的四氢萘基;二苯并呋喃基;或者二苯并噻吩基。

[0330] 在本说明书的一个实施方案中,R101为氢;氘;甲基; CD_3 ;乙基;异丙基;叔丁基;环己基;金刚烷基;未经取代或者经氘、氰基、氟基、甲基、叔丁基、 $-OCF_3$ 、三甲基甲硅烷基、三苯基甲硅烷基或苯基取代的苯基;联苯基;未经取代或经氘取代的萘基;二甲基苄基;未经取代或经甲基取代的四氢萘基;二苯并呋喃基;或者二苯并噻吩基。

[0331] 在本说明书的一个实施方案中,R101为氢;氘;甲基;叔丁基;或者未经取代或经氰基取代的苯基。

[0332] 在本说明书的一个实施方案中,R102和R103彼此相同或不同,并且各自独立地为氢;氘;经取代或未经取代的芳基;或者经取代或未经取代的杂环基。

[0333] 在本说明书的一个实施方案中,R102和R103彼此相同或不同,并且各自独立地为经取代或未经取代的苯基;经取代或未经取代的联苯基;经取代或未经取代的萘基;经取代或未经取代的苄基;经取代或未经取代的四氢萘基;经取代或未经取代的二苯并呋喃基;或者经取代或未经取代的二苯并噻吩基。

[0334] 在本说明书的一个实施方案中,R102和R103彼此相同或不同,并且各自独立地为未经取代或者经选自由氘、氰基、氟基、甲基、丙基、丁基、甲氧基、甲硅烷基和苯基组成的组中的一个或多个基团,或者选自上述组中的两者或更多者相连接的基团取代的苯基;未经取代或者经选自由氘、氰基、氟基、甲基、丙基、丁基、甲氧基、甲硅烷基和苯基组成的组中的一个或多个基团,或者选自上述组中的两者或更多者相连接的基团取代的联苯基;未经取代或者经选自由氘、氰基、氟基、甲基、丙基、丁基、甲氧基、甲硅烷基和苯基组成的组中的一个或多个基团,或者选自上述组中的两者或更多者相连接的基团取代的萘基;未经

取代或者经选自由氘、氰基、氟基、甲基、丙基、丁基、甲氧基、甲硅烷基和苯基组成的组中的一个或多个基团,或者选自上述组中的两者或更多者相连接的基团取代的苄基;未经取代或者经选自由氘、氰基、氟基、甲基、丙基、丁基、甲氧基、甲硅烷基和苯基组成的组中的一个或多个基团,或者选自上述组中的两者或更多者相连接的基团取代的四氢萘基;未经取代或者经选自由氘、氰基、氟基、甲基、丙基、丁基、甲氧基、甲硅烷基和苯基组成的组中的一个或多个基团,或者选自上述组中的两者或更多者相连接的基团取代的二苯并呋喃基;或者未经取代或者经选自由氘、氰基、氟基、甲基、丙基、丁基、甲氧基、甲硅烷基和苯基组成的组中的一个或多个基团,或者选自上述组中的两者或更多者相连接的基团取代的二苯并噻吩基。

[0335] 在本说明书的一个实施方案中,R102和R103彼此相同或不同,并且各自独立地为未经取代或者经选自由氘、氰基、氟基、甲基、丙基、丁基、甲氧基、甲硅烷基和苯基组成的组中的一个或多个基团,或者选自上述组中的两者或更多者相连接的基团取代的苯基;未经取代或经氘取代的联苯基;未经取代或经氘取代的萘基;未经取代或者经甲基或苯基取代的苄基;未经取代或经甲基取代的四氢萘基;二苯并呋喃基;或者二苯并噻吩基。

[0336] 在本说明书的一个实施方案中,R102和R103彼此相同或不同,并且各自独立地为未经取代或者经氘、氰基、氟基、甲基、CD₃、CF₃、异丙基、叔丁基、三甲基甲硅烷基、三苯基甲硅烷基或苯基丙基取代的苯基;未经取代或经氘取代的联苯基;萘基;二甲基苄基;未经取代或经甲基取代的四氢萘基;二苯并呋喃基;或者二苯并噻吩基。

[0337] 在本说明书的一个实施方案中,R102和R103彼此相同或不同,并且各自独立地为未经取代或经C1-C10烷基甲硅烷基取代的苯基。

[0338] 在本说明书的一个实施方案中,R102和R103彼此相同或不同,并且各自独立地为未经取代或经三甲基甲硅烷基取代的苯基。

[0339] 在本说明书的一个实施方案中,G4至G7彼此相同或不同,并且各自独立地为氢;氘;经取代或未经取代的烷基;经取代或未经取代的甲硅烷基;或者经取代或未经取代的芳基,或者与相邻取代基键合以形成经取代或未经取代的环。

[0340] 在本说明书的一个实施方案中,G4至G7彼此相同或不同,并且各自独立地为氢;氘;经取代或未经取代的C1-C10烷基;经取代或未经取代的C1-C30烷基甲硅烷基;经取代或未经取代的C6-C30芳基甲硅烷基;或者经取代或未经取代的C6-C30芳基,或者与相邻取代基键合以形成经取代或未经取代的C3-C30脂族烃环;或者经取代或未经取代的C6-C30芳族烃环。

[0341] 在本说明书的一个实施方案中,G4至G7彼此相同或不同,并且各自独立地为氢;氘;未经取代或经氘取代的C1-C6烷基;C1-C18烷基甲硅烷基;C6-C60芳基甲硅烷基;或者未经取代或者经氘或C1-C6烷基取代的C6-C30芳基,或者与相邻取代基键合以形成未经取代或者经氘或烷基取代的C3-C20脂族烃环;或者未经取代或者经氘或烷基取代的C6-C20芳族烃环。

[0342] 在本说明书的一个实施方案中,G4和G5彼此相同或不同,并且各自独立地为未经取代或经氘取代的甲基。

[0343] 在本说明书的一个实施方案中,G4和G5为甲基。

[0344] 在本说明书的一个实施方案中,G6和G7彼此相同或不同,并且各自独立地为氢;

氘;经取代或未经取代的甲基;经取代或未经取代的叔丁基;经取代或未经取代的三甲基甲硅烷基;或者经取代或未经取代的苯基,或者与相邻取代基键合以形成经取代或未经取代的环己烯环;或者经取代或未经取代的苯环。

[0345] 在本说明书的一个实施方案中,G6和G7彼此相同或不同,并且各自独立地为氢;氘;甲基;叔丁基;三甲基甲硅烷基;或苯基,或者与相邻取代基键合以形成未经取代或经甲基取代的环己烯环。

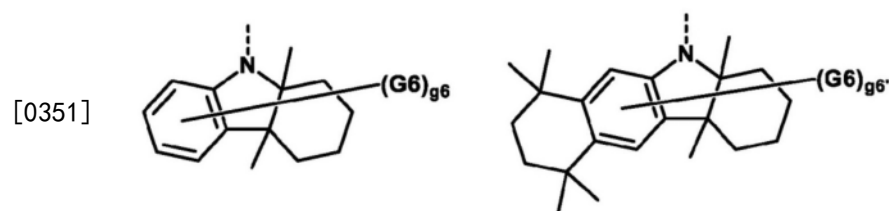
[0346] 在本说明书的一个实施方案中,G6为氢;氘;甲基;叔丁基;三甲基甲硅烷基;或苯基,或者与相邻取代基键合以形成未经取代或经甲基取代的环己烯环。

[0347] 在本说明书的一个实施方案中,G6为氢;氘;或叔丁基。

[0348] 在本说明书的一个实施方案中,G7为氢;或氘。

[0349] 在本说明书的一个实施方案中,G7为氢。

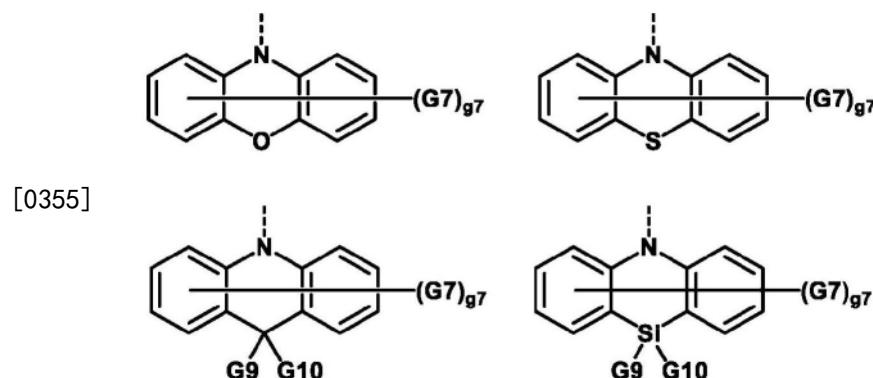
[0350] 在本说明书的一个实施方案中,化学式1-B-3由以下结构式中的任一者表示。



[0352] 在所述结构式中,虚线、G6和g6具有与化学式1-B-3中相同的限定,以及

[0353] g6'为0至10的整数,并且当g6'为2或更大时,两个或更多个G6彼此相同或不同。

[0354] 在本说明书的一个实施方案中,化学式1-B-4由以下结构式中的任一者表示。



[0356] 在所述结构式中,虚线、G7、G9、G10和g7具有与化学式1-B-4中相同的限定。

[0357] 在本说明书的一个实施方案中,R2为氢;氘;经取代或未经取代的烷基;经取代或未经取代的甲硅烷基;经取代或未经取代的烷基芳基;经取代或未经取代的环烷基;经取代或未经取代的芳基;经取代或未经取代的杂环基;或者经取代或未经取代的胺基,或者与相邻取代基键合以形成经取代或未经取代的脂族烃环;经取代或未经取代的芳族烃环;或者经取代或未经取代的杂环。

[0358] 在本说明书的一个实施方案中,R2是未经取代或者经选自由氘、氰基、卤素基团、烷基、甲硅烷基和芳基组成的组中的一个或更多个基团,或者选自上述组中的两者或更多者相连接的基团取代的。

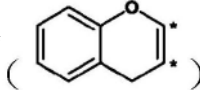
[0359] 在本说明书的一个实施方案中,R2为氢;氘;经取代或未经取代的甲基;经取代或未经取代的丙基;经取代或未经取代的丁基;经取代或未经取代的甲硅烷基;经取代或未经

取代的苯基丙基;经取代或未经取代的环己基;经取代或未经取代的苯基;经取代或未经取代的六氢吡啶基;经取代或未经取代的吡啶基;或者经取代或未经取代的胺基,或者与相邻取代基键合以形成经取代或未经取代的环己烯环;经取代或未经取代的苯环;经取代或未经取代的苯并呋喃环;经取代或未经取代的苯并噻吩环;经取代或未经取代的茚环;或者经取代或未经取代的苯并吡喃环。

[0360] 在本说明书的一个实施方案中,R2为氢;氘;甲基;丙基;丁基;甲硅烷基;苯基丙基;环己基;苯基;六氢吡啶基;吡啶基;或胺基,或者与相邻取代基键合以形成环己烯环;苯环;苯并呋喃环;苯并噻吩环;茚环;或苯并吡喃环,并且所述取代基或所述环是未经取代或者经选自自由氘、氰基、卤素基团、烷基、甲硅烷基和芳基组成的组中的一个或多个基团,或者选自上述组中的两者或更多者相连接的基团取代的。

[0361] 在本说明书的一个实施方案中,R2为氢;氘;未经取代或经氘取代的甲基;未经取代或经氘取代的丙基;未经取代或经氘取代的丁基;未经取代或者经甲基或苯基取代的甲硅烷基;未经取代或经氘取代的苯基丙基;未经取代或经氘取代的环己基;未经取代或者经选自自由氘、氰基、氟基、甲基、丙基、丁基和甲硅烷基组成的组中的一个或多个基团,或者选自上述组中的两者或更多者相连接的基团取代的苯基;未经取代或者经甲基、丙基、丁基或苯基取代的六氢吡啶基;吡啶基;未经取代或者经选自自由氘、甲基、丙基、丁基、甲硅烷基和苯基组成的组中的一个或多个基团,或者选自上述组中的两者或更多者相连接的基团取代的胺基;或者经未被取代或被甲基取代的四氢萘基取代的胺基,或者与相邻取代基键合以形成未经取代或经甲基取代的环己烯环;苯环;未经取代或经丁基取代的苯并呋喃环;未经取代或经丁基取代的苯并噻吩环;未经取代或经甲基取代的茚环;或者未经取代或经甲基取代的苯并吡喃环。

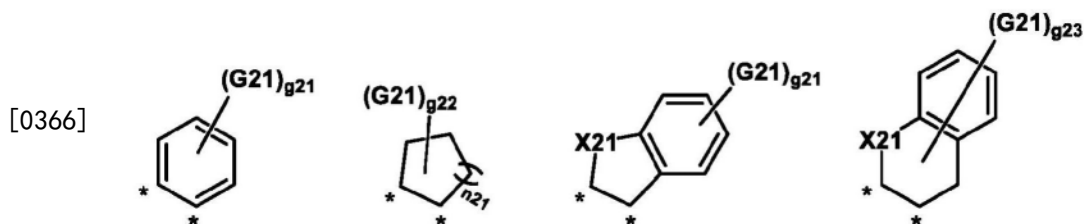
[0362] 在本说明书的一个实施方案中,R2为氢;氘;甲基;异丙基;叔丁基;三甲基甲硅烷基;未经取代或经氘取代的苯基丙基;环己基;未经取代或者经氘、氰基、氟基、甲基、异丙基、叔丁基或三甲基甲硅烷基取代的苯基;未经取代或者经甲基、叔丁基或苯基取代的六氢吡啶基;吡啶基;未经取代或者经氘、甲基、异丙基、叔丁基或三甲基甲硅烷基取代的二苯基胺基;或者经未被取代或被甲基取代的四氢萘基取代的胺基,或者与相邻取代基键合以形成未经取代或经甲基取代的环己烯环;苯环;未经取代或经叔丁基取代的苯并呋喃环;未经取代或经叔丁基取代的苯并噻吩环;未经取代或经甲基取代的茚环;或者未经取代或经甲

基取代的苯并吡喃()环,以及*意指稠合位置。

[0363] 在本说明书的一个实施方案中,R2为氢;氘;C1-C10烷基;未经取代或者经氘、卤素基团或C1-C10烷基取代的苯基;经C1-C10烷基取代的六氢吡啶基;或者未经取代或经C1-C10烷基取代的二苯基胺基,或者与相邻取代基键合以形成经甲基取代的环己烯环。

[0364] 在本说明书的一个实施方案中,R2为氢;氘;甲基;叔丁基;未经取代或者经氘、氟基或甲基取代的苯基;经甲基取代的六氢吡啶基;或者未经取代或经异丙基取代的二苯基胺基,或者与相邻取代基键合以形成经甲基取代的环己烯环。

[0365] 在本说明书的一个实施方案中,当R2形成环时,其由以下结构式中的任一者表示。



[0367] 在所述结构式中,

[0368] X_{21} 为O;S;或CG201G202,

[0369] G21、G201和G202彼此相同或不同,并且各自独立地为氢;氘;经取代或未经取代的烷基;或者经取代或未经取代的芳基,

[0370] n_{21} 为1或2, g_{21} 为0至4的整数, g_{22} 为0至8的整数,以及 g_{23} 为0至6的整数,

[0371] 当 n_{21} 、 g_{21} 、 g_{22} 和 g_{23} 各自为2或更大时,两个或更多个G21彼此相同或不同,以及

[0372] *意指与化学式1耦合的位置。

[0373] 在本说明书的一个实施方案中,G21、G201和G202彼此相同或不同,并且为氢;氘;或者经取代或未经取代的烷基。

[0374] 在本说明书的一个实施方案中,G21、G201和G202彼此相同或不同,并且为氢;氘;或者经取代或未经取代的C1-C30烷基。

[0375] 在本说明书的一个实施方案中,G21、G201和G202彼此相同或不同,并且为氢;氘;或者经取代或未经取代的C1-C20烷基。

[0376] 在本说明书的一个实施方案中,G21、G201和G202彼此相同或不同,并且为氢;氘;或者经取代或未经取代的甲基。

[0377] 在本说明书的一个实施方案中,G21、G201和G202彼此相同或不同,并且为氢;氘;或者未经取代或经氘取代的甲基。

[0378] 在本说明书的一个实施方案中,G21、G201和G202彼此相同或不同,并且为氢;氘;或甲基。

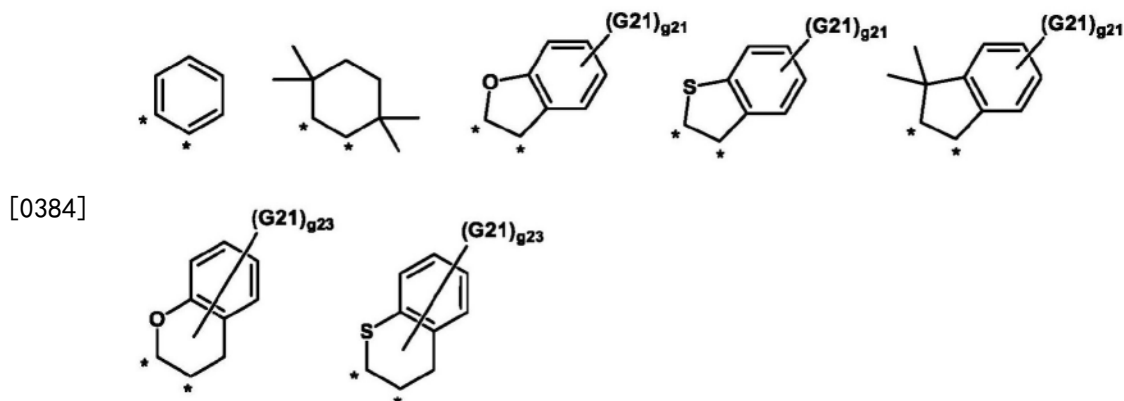
[0379] 在本说明书的一个实施方案中, n_{21} 为2。

[0380] 在本说明书的一个实施方案中, g_{21} 为1至4的整数。

[0381] 在本说明书的一个实施方案中, g_{22} 为1至4的整数。

[0382] 在本说明书的一个实施方案中, g_{23} 为1至4的整数。

[0383] 在本说明书的一个实施方案中,当R2形成环时,其由以下结构式中的任一者表示。

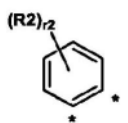


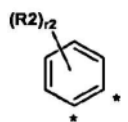
[0385] 在所述结构式中,取代基具有与以上相同的限定。

[0386] 在本说明书的一个实施方案中, R3具有与化学式Cy2-1和Cy2-2中相同的限定。

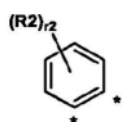
[0387] 在本说明书的一个实施方案中, R4具有与化学式1-A中的R5相同的限定。

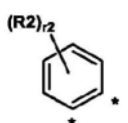
[0388] 在本说明书的一个实施方案中, R5具有与化学式1-A中相同的限定。

[0389] 在本说明书的一个实施方案中, 在化学式1中,  Cy2至Cy4和R1中的至少一者包含稠合有经取代或未经取代的脂族烃环的环, 以及*意指与化学式1稠合的位置。

[0390] 在本说明书的一个实施方案中, 在化学式1中,  Cy2至Cy4和R1中的至少一者包含稠合有未经取代或经C1-C20烷基取代的C6-C30脂族烃环的环, 以及*意指与化学式1稠合的位置。

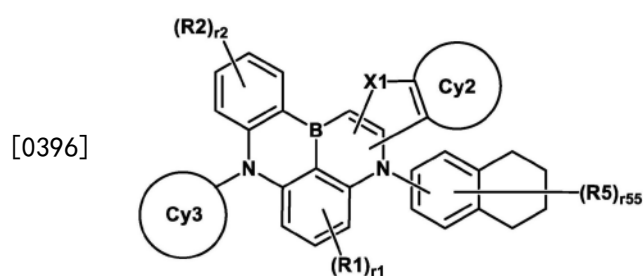
[0391] 在本说明书的一个实施方案中, 脂族烃环可以为六边形环。

[0392] 在本说明书的一个实施方案中, 在化学式1中,  Cy2至Cy4和R1中的至少一者包含稠合有经取代或未经取代的环己烯环; 或者经取代或未经取代的双环辛烯环的环, 以及*意指与化学式1稠合的位置。

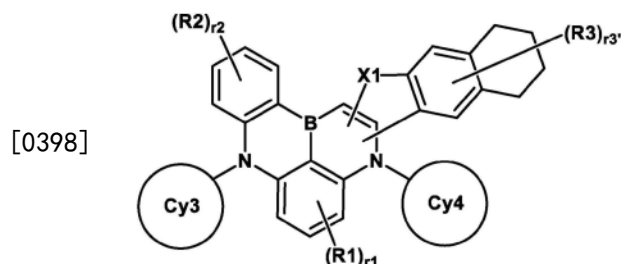
[0393] 在本说明书的一个实施方案中, 在化学式1中,  Cy2至Cy4和R1中的至少一者包含稠合有未经取代或经甲基取代的环己烯环; 或者未经取代或经甲基取代的双环辛烯环的环, 以及*意指与化学式1稠合的位置。

[0394] 在本说明书的一个实施方案中, 化学式1为以下化学式107至109中的任一者。

[0395] [化学式107]

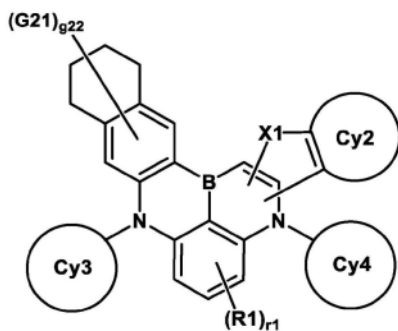


[0397] [化学式108]



[0399] [化学式109]

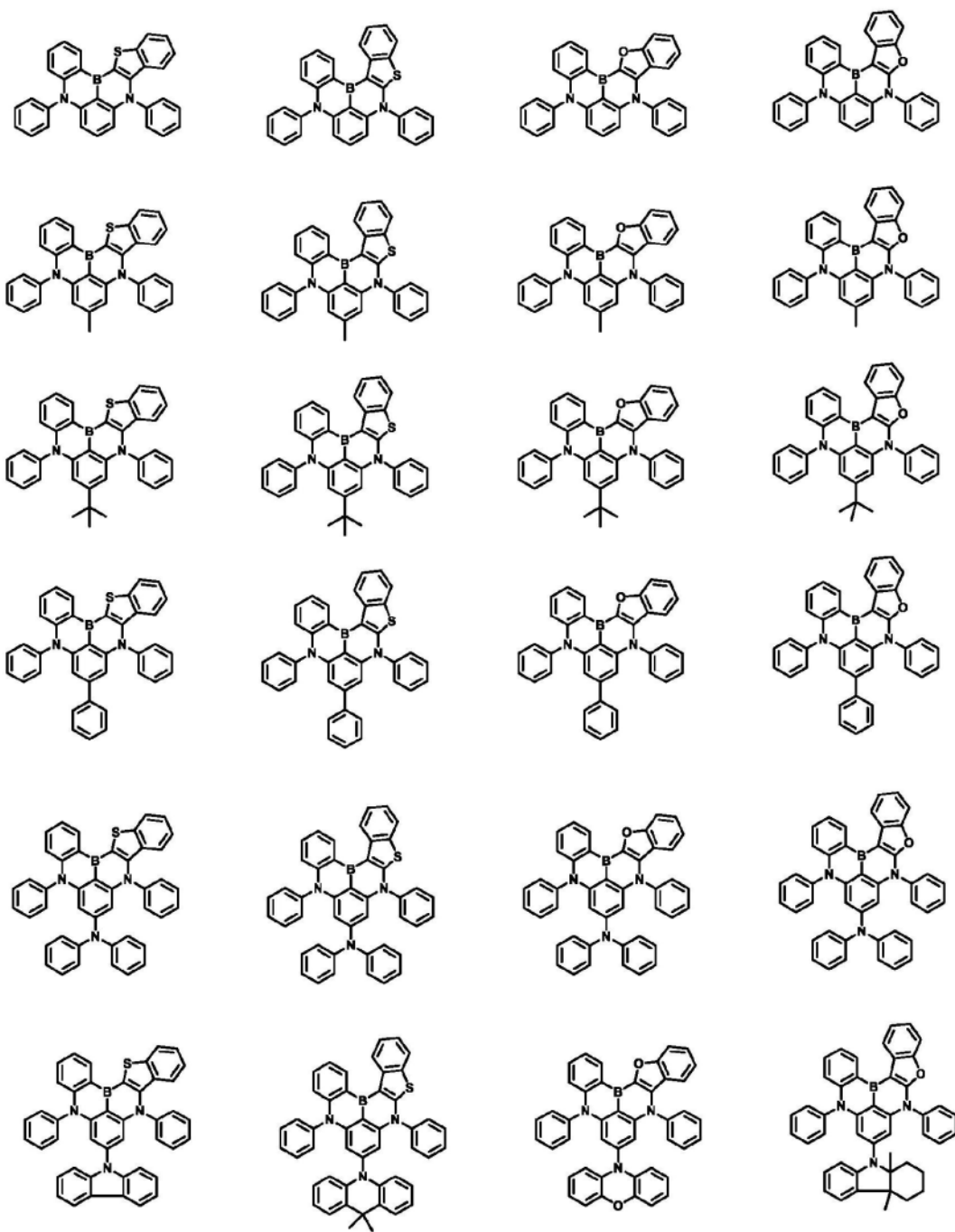
[0400]

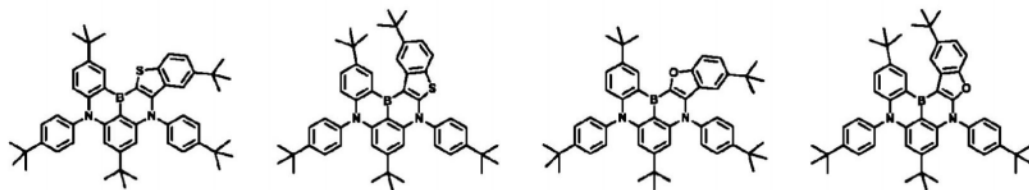
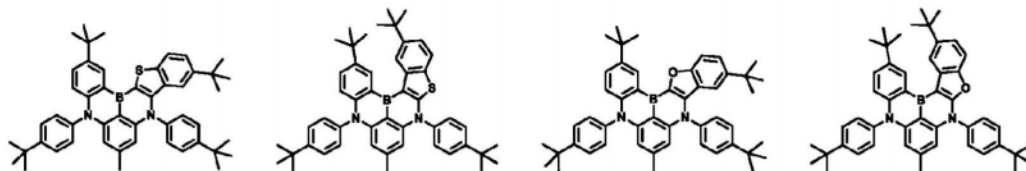
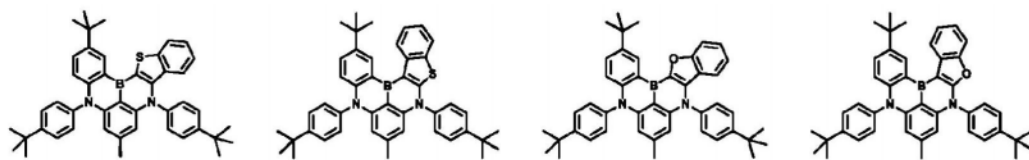


[0401] 在化学式107至109中,取代基具有与以上相同的限定, r_3' 为0至10的整数,并且当 r_3' 为2或更大时,两个或更多个 R_3 彼此相同或不同。

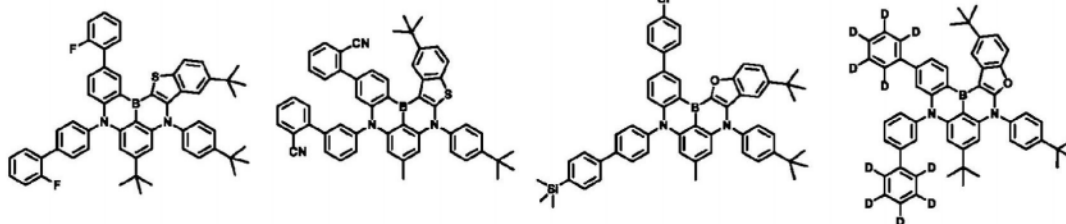
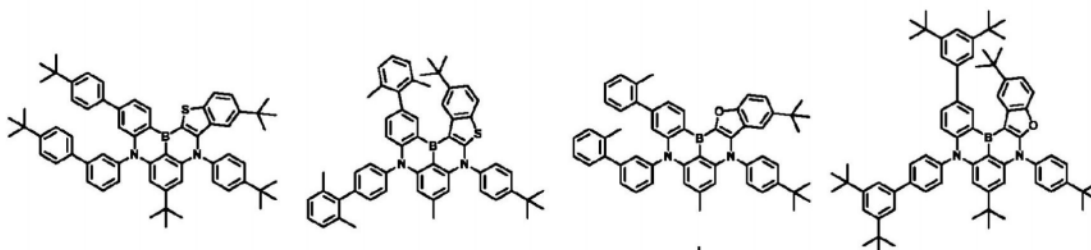
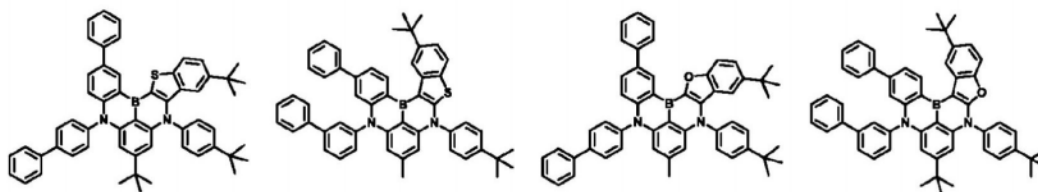
[0402] 在本说明书的一个实施方案中,化学式1由以下化合物中的任一者表示。

[0403]

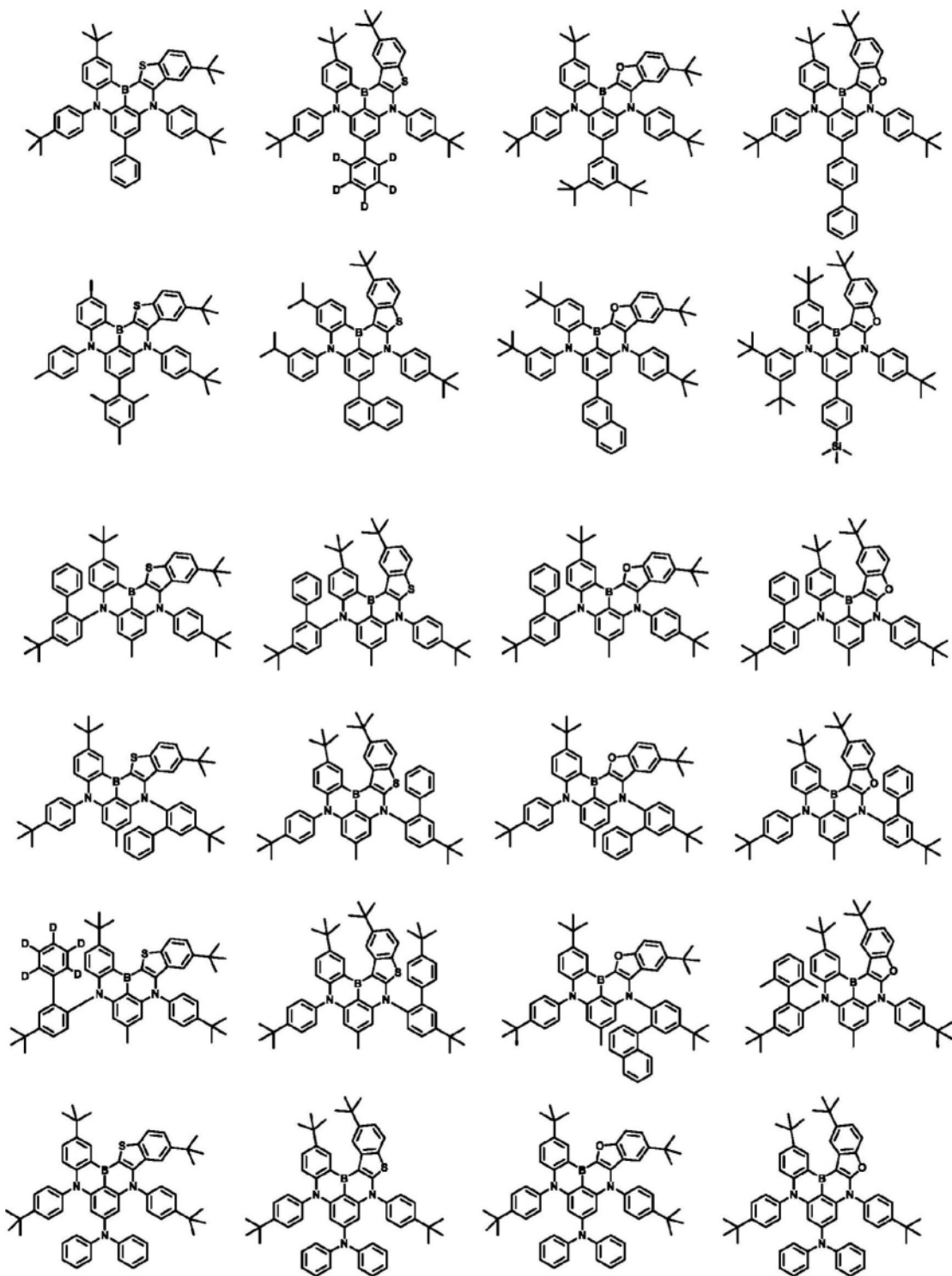


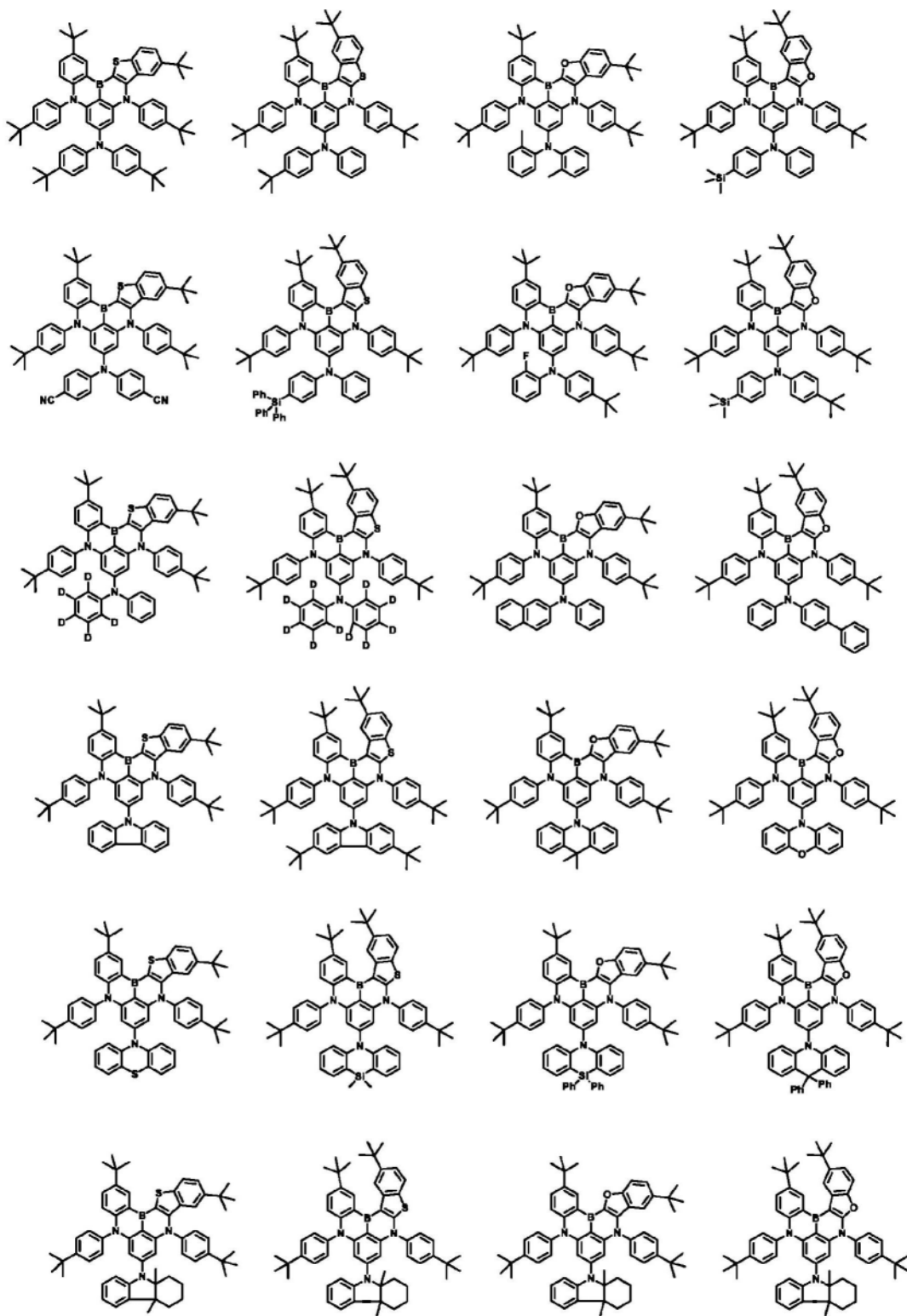


[0404]

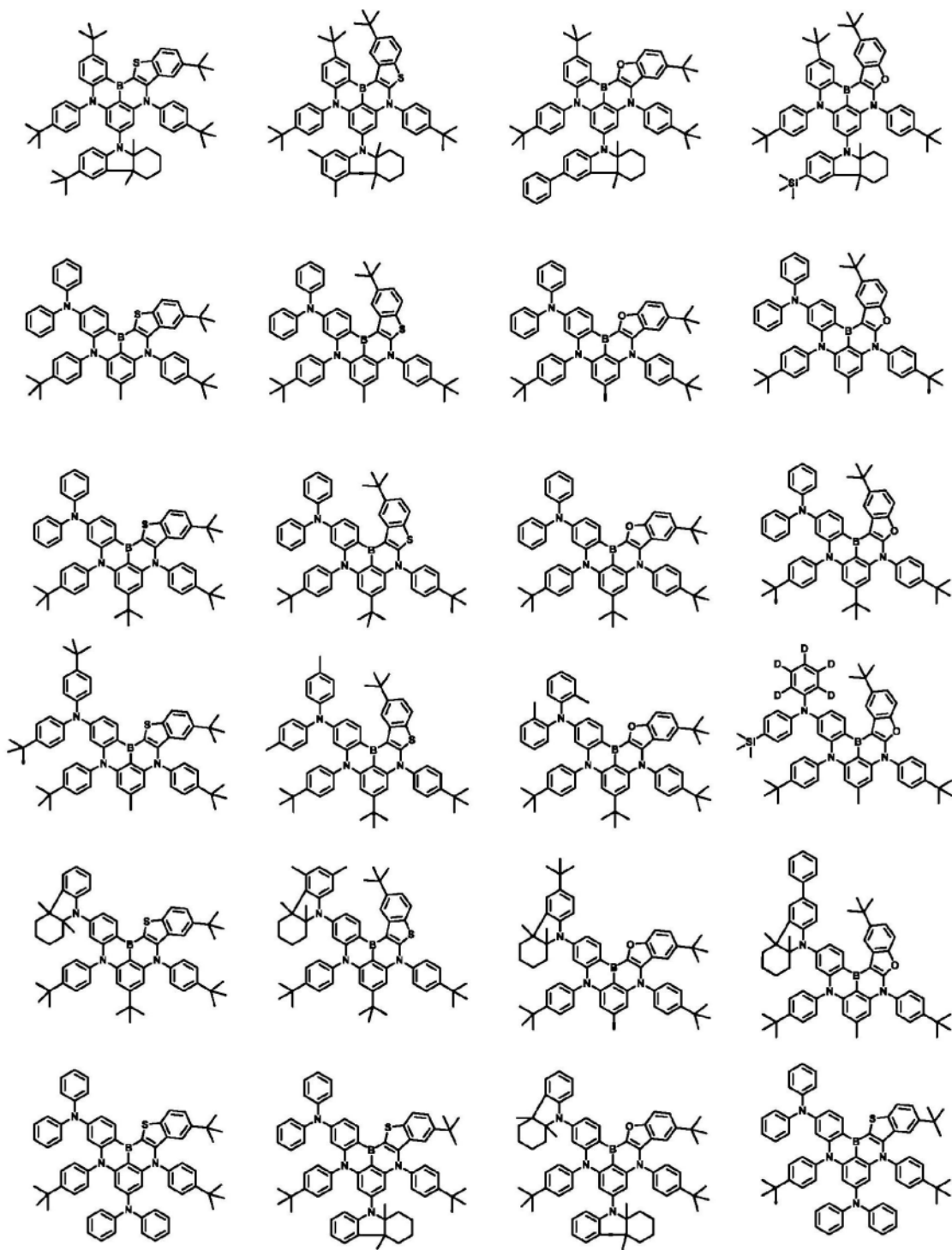


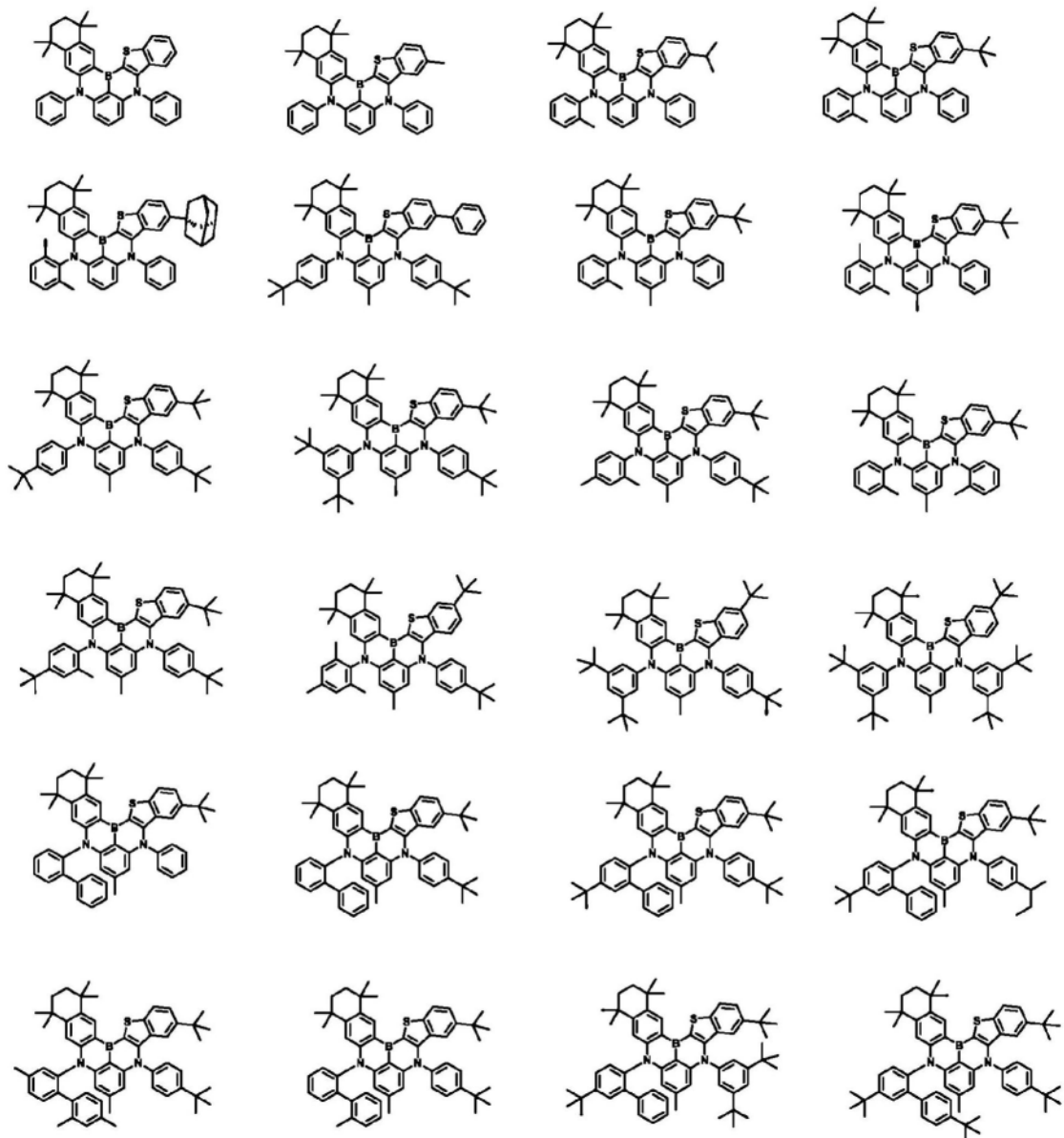
[0405]



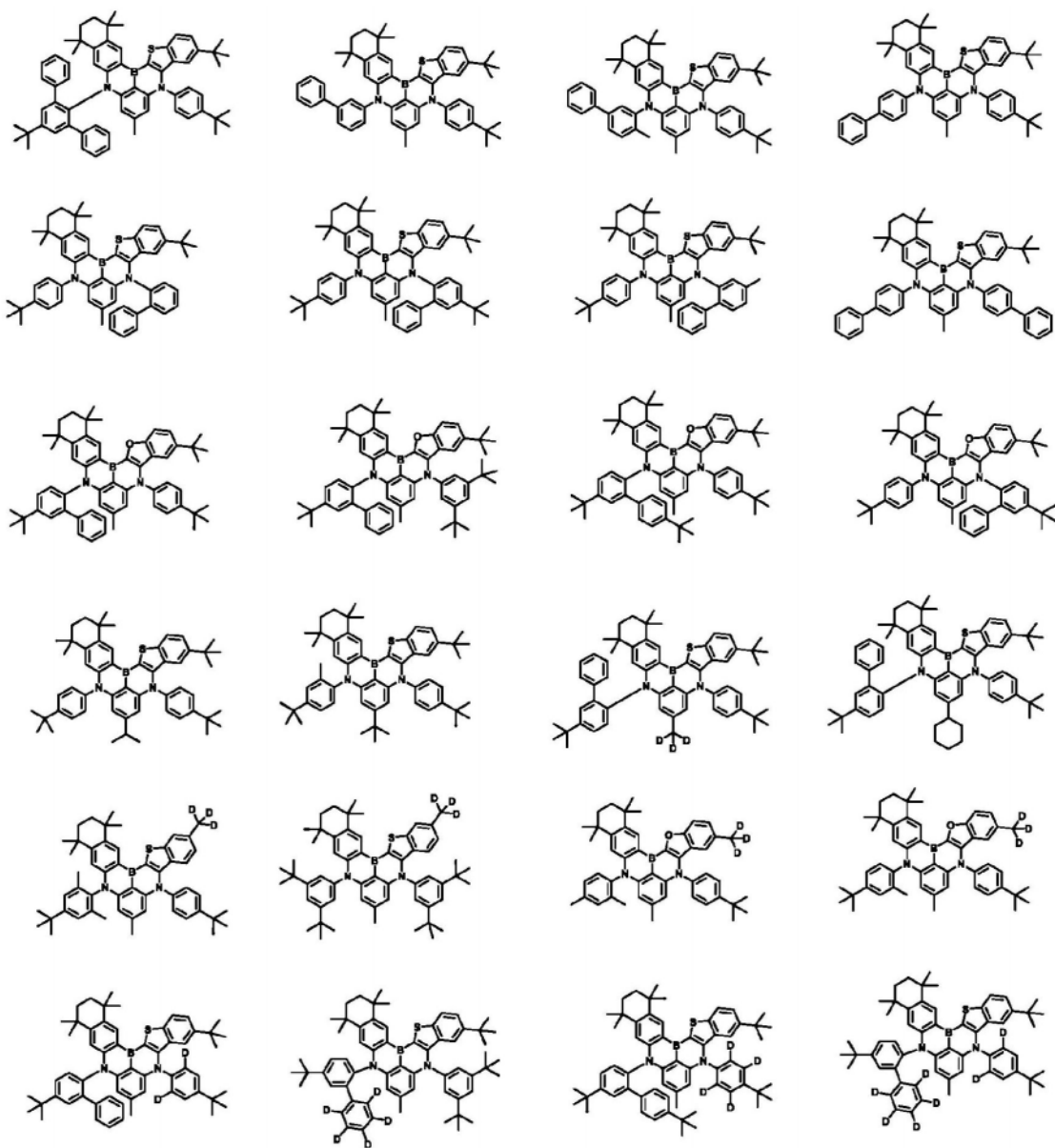


[0407]

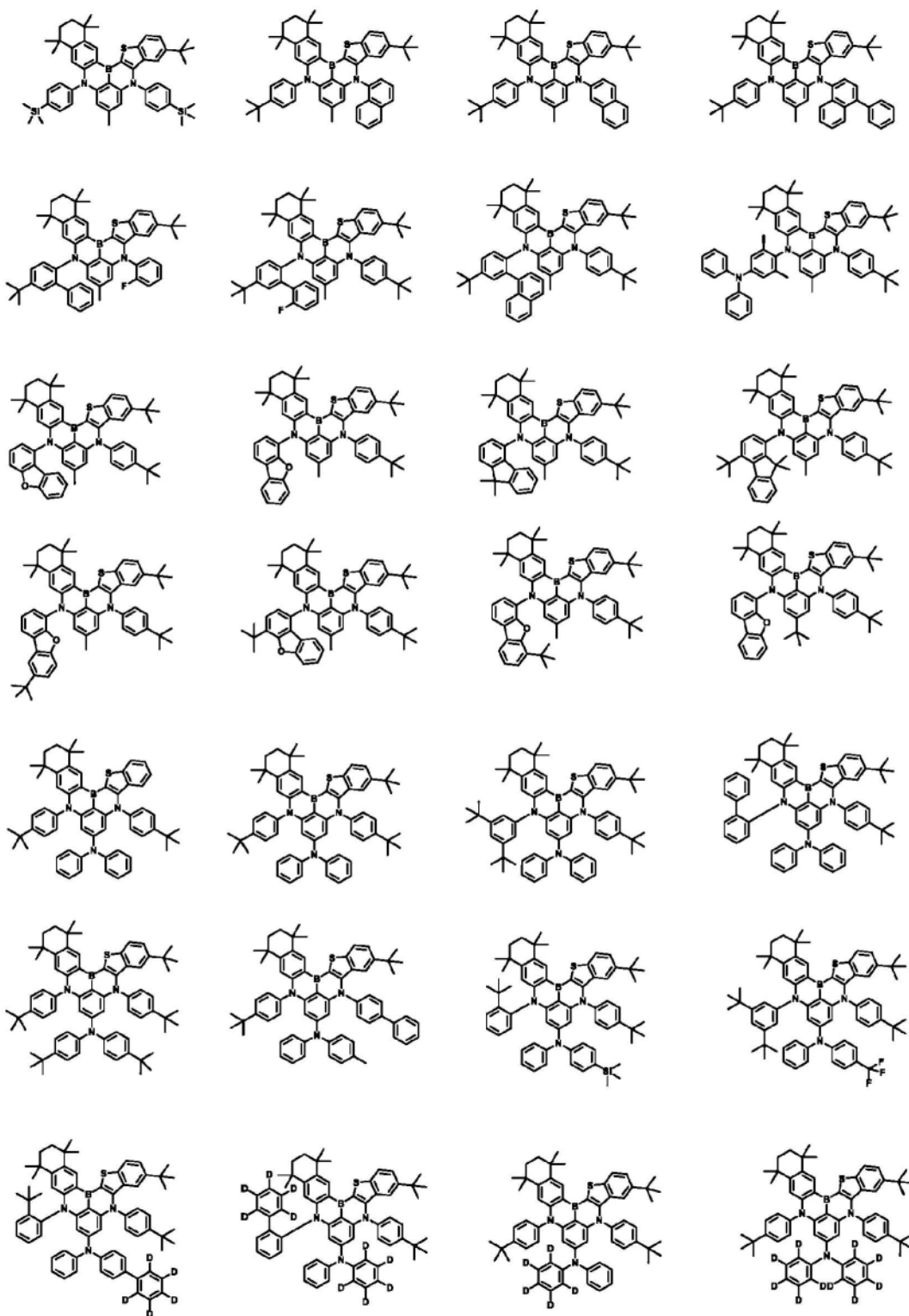




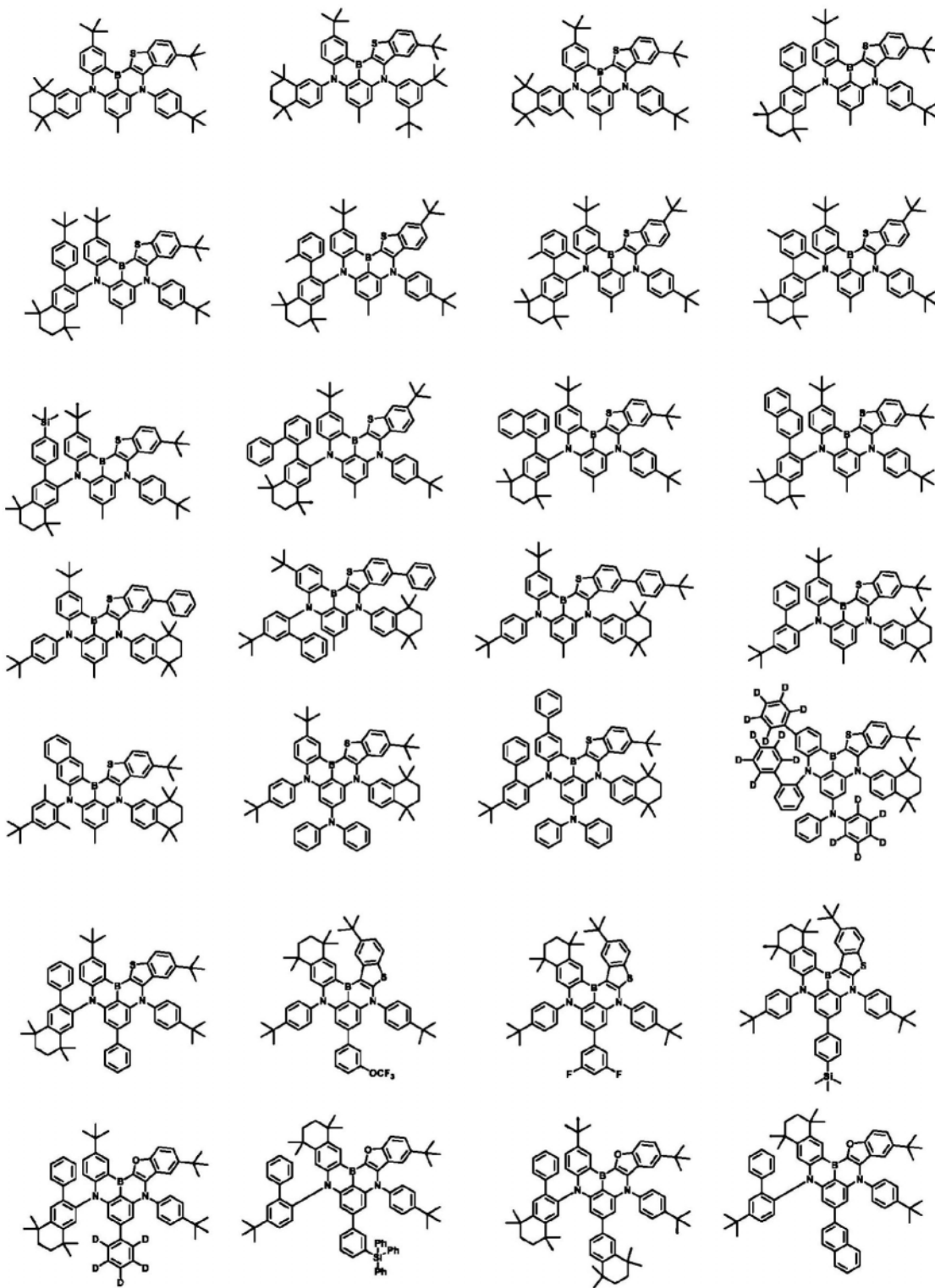
[0409]



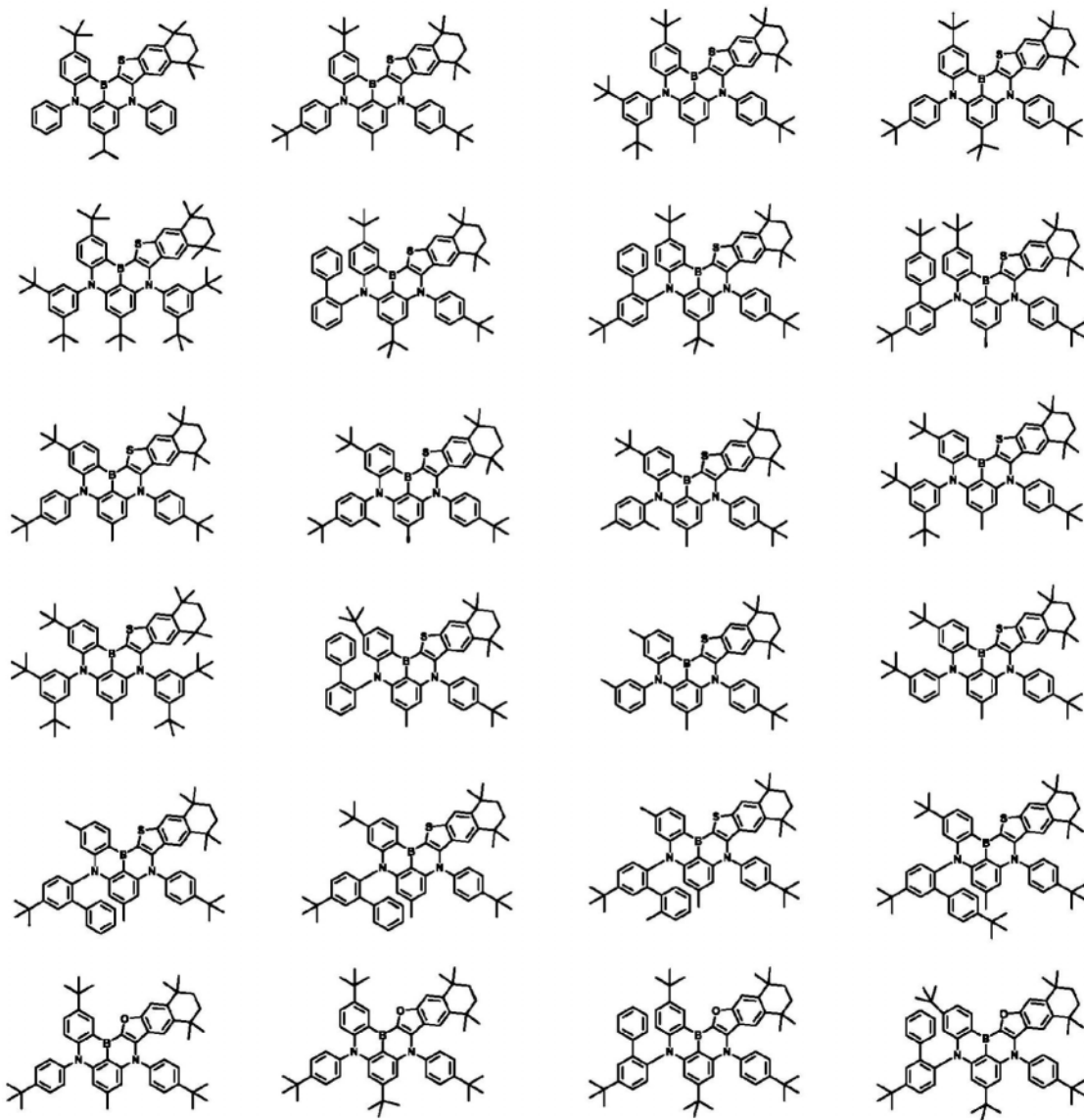
[0410]



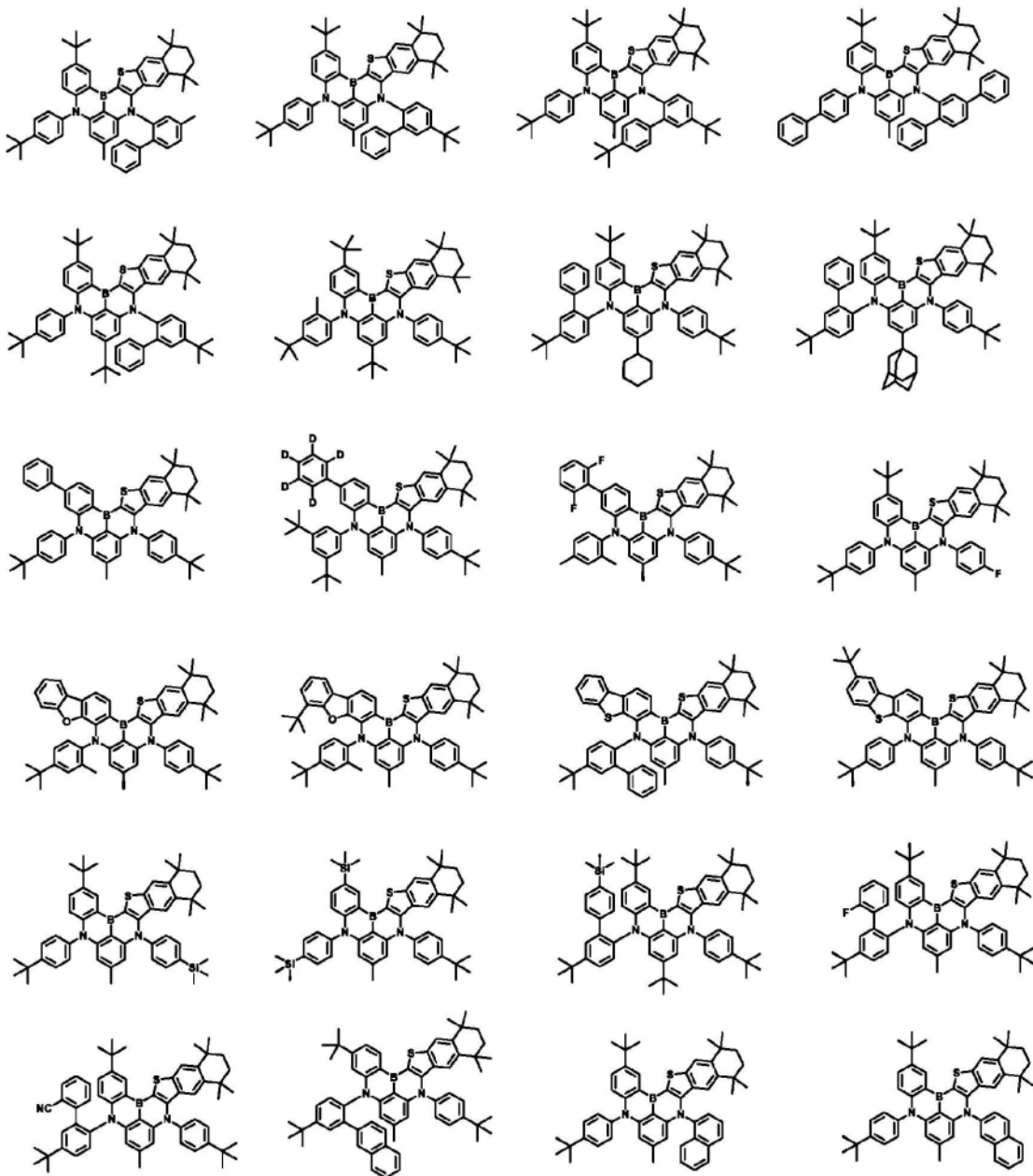
[0411]



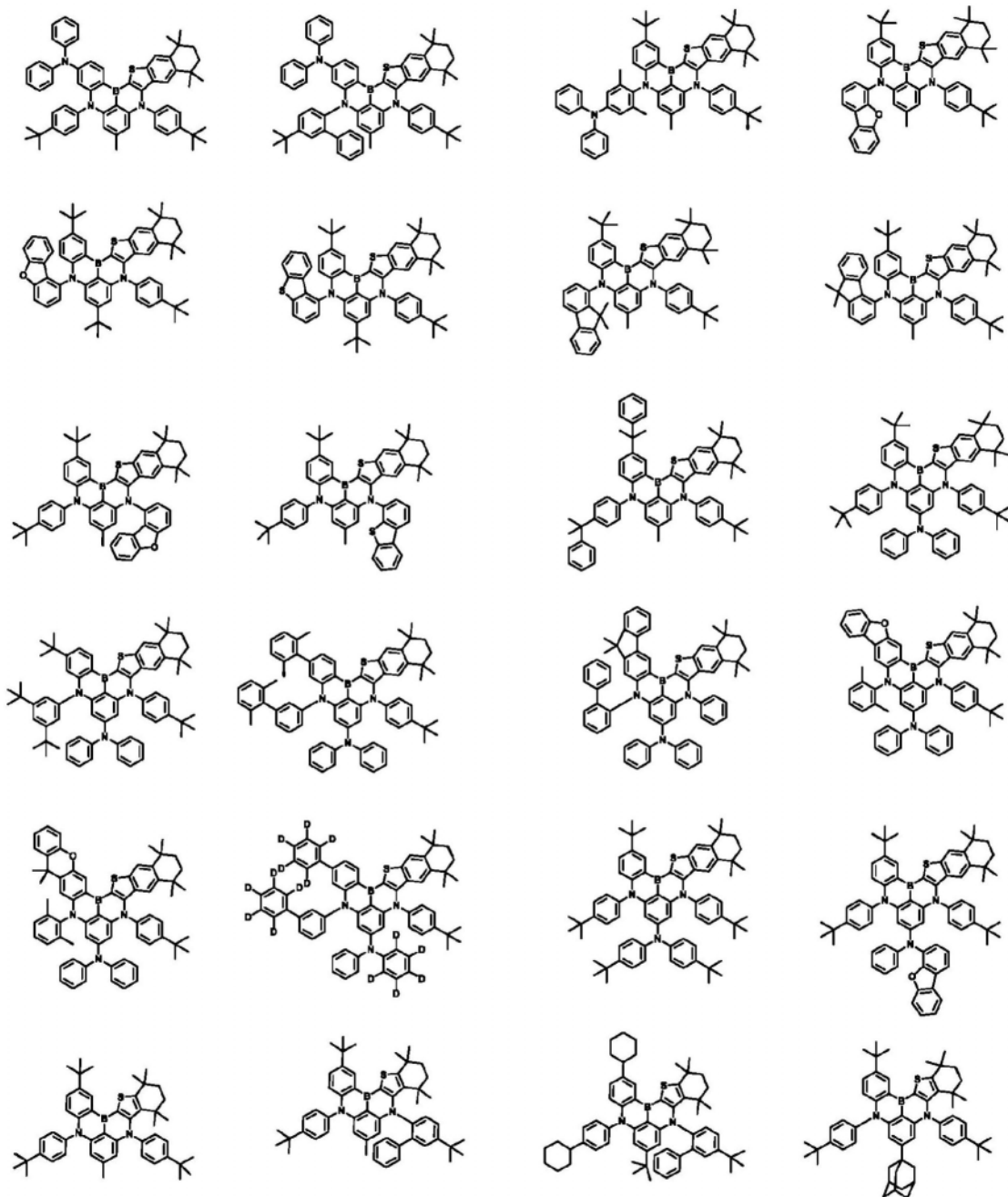
[0412]



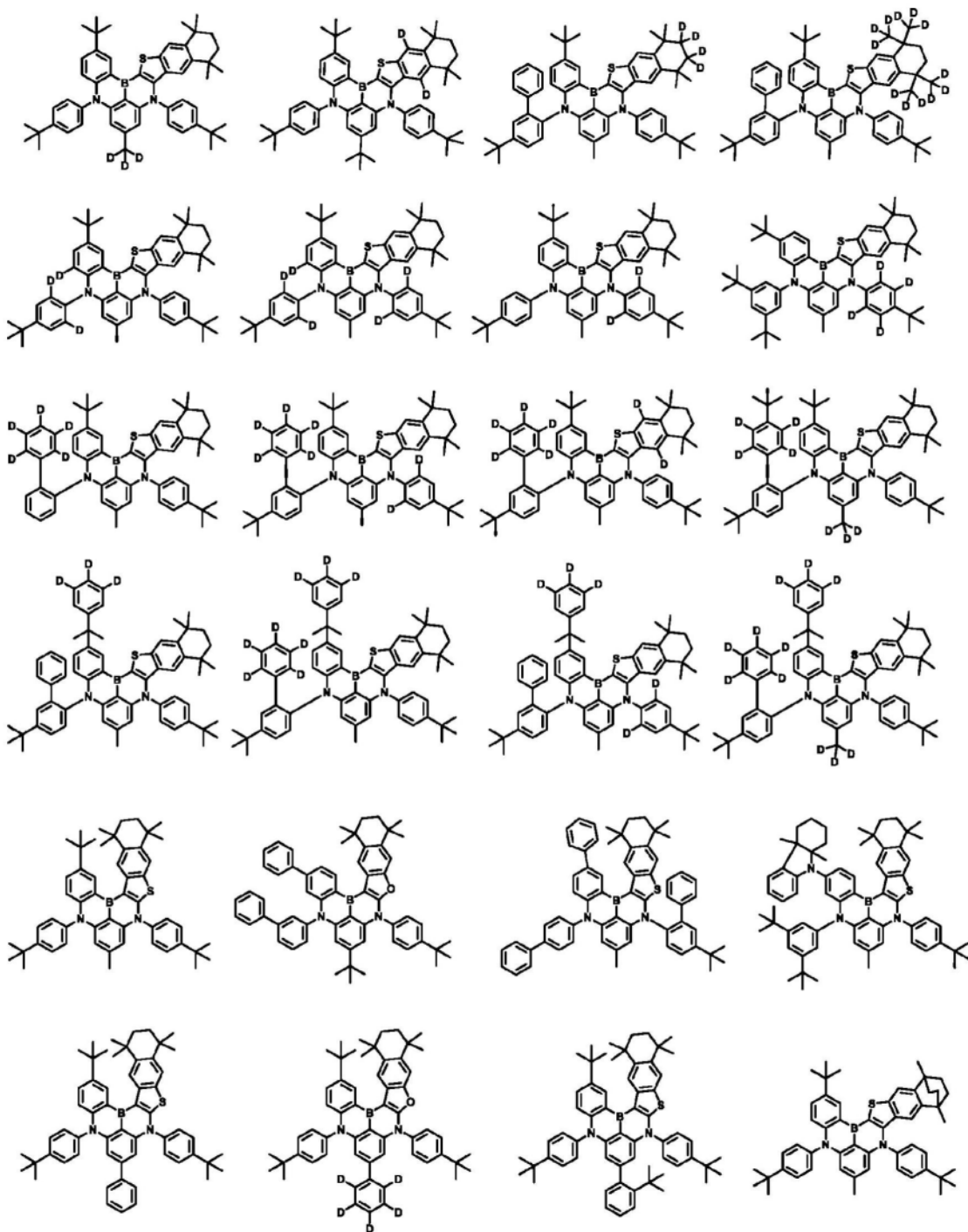
[0413]



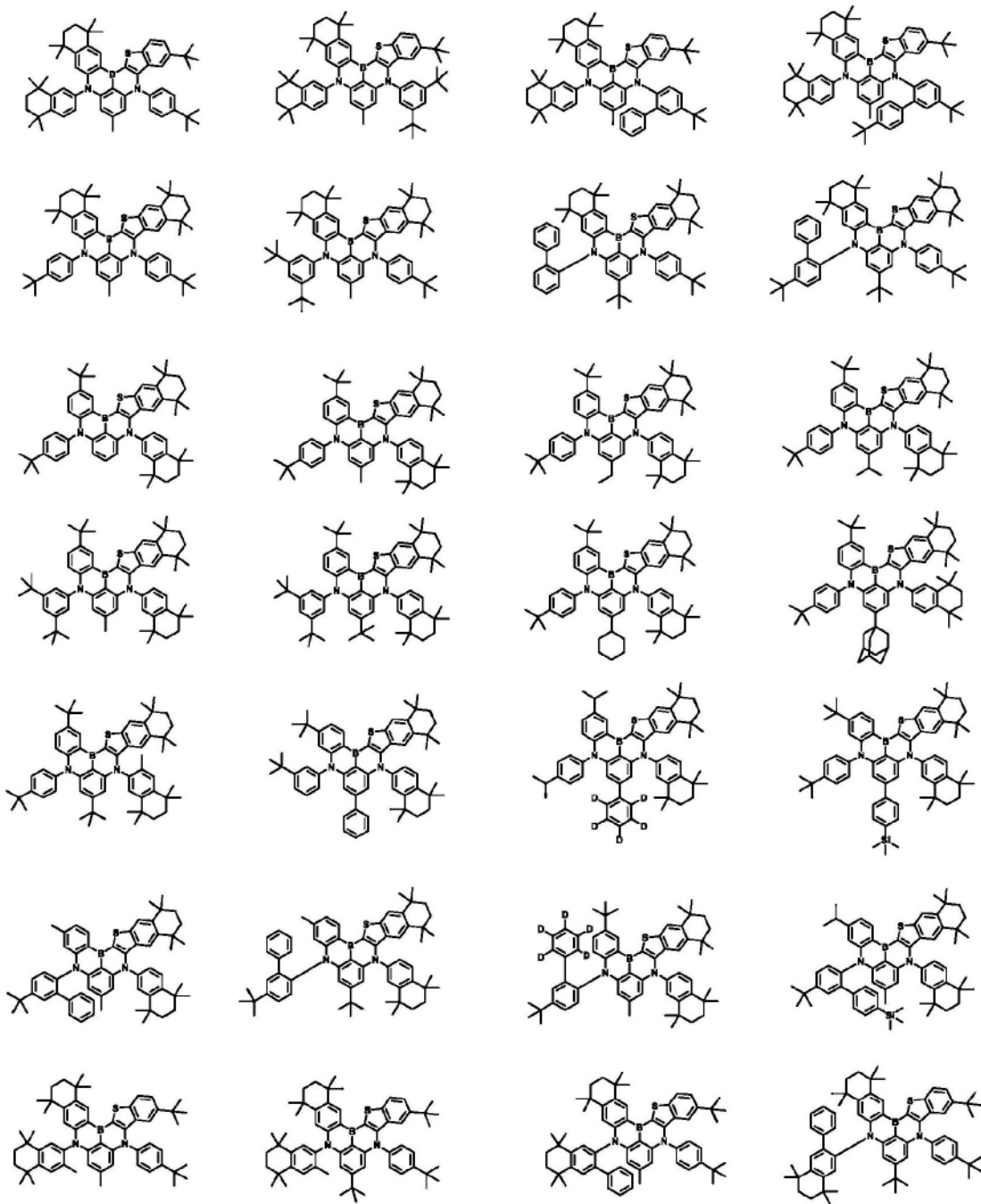
[0414]



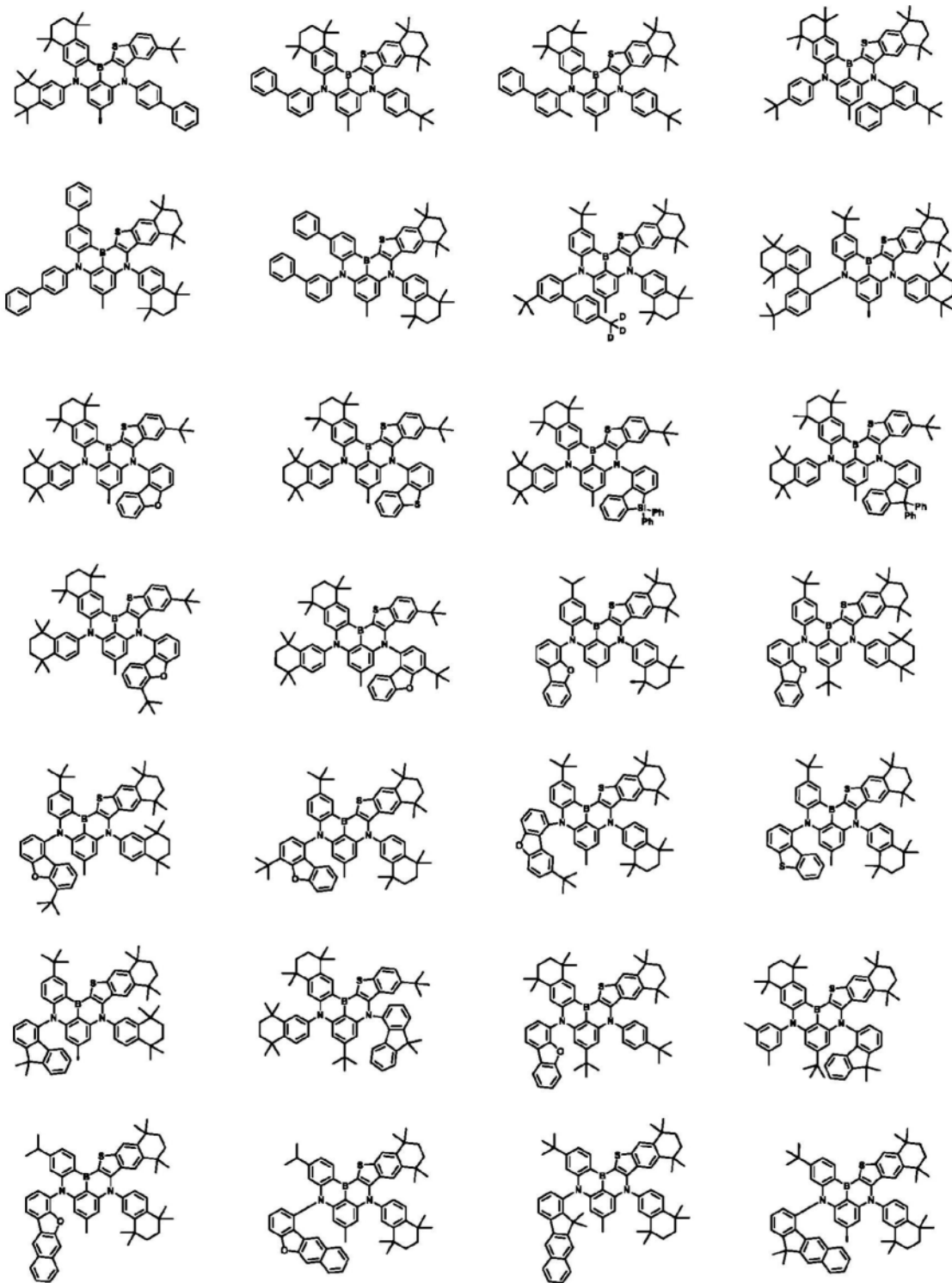
[0415]



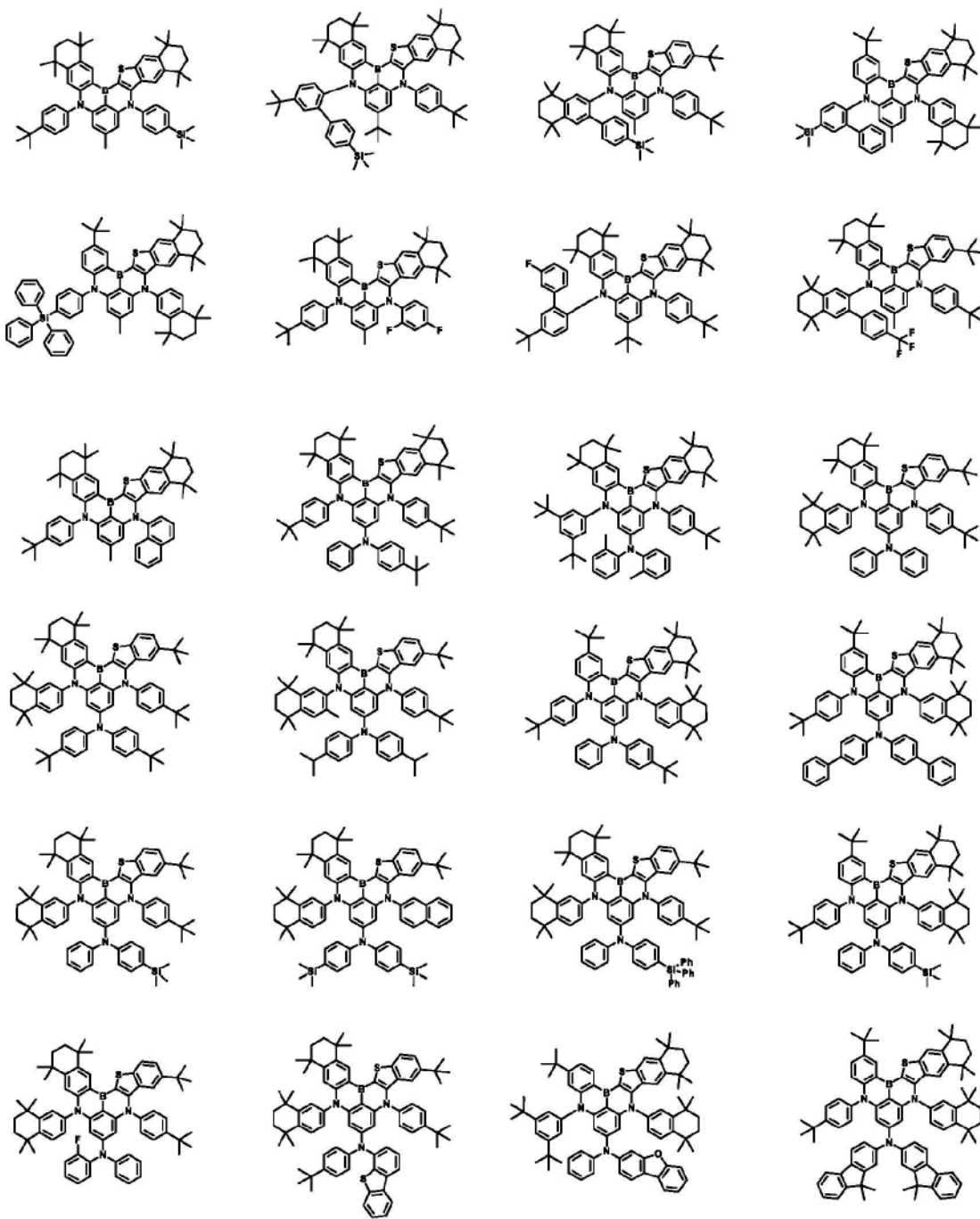
[0416]



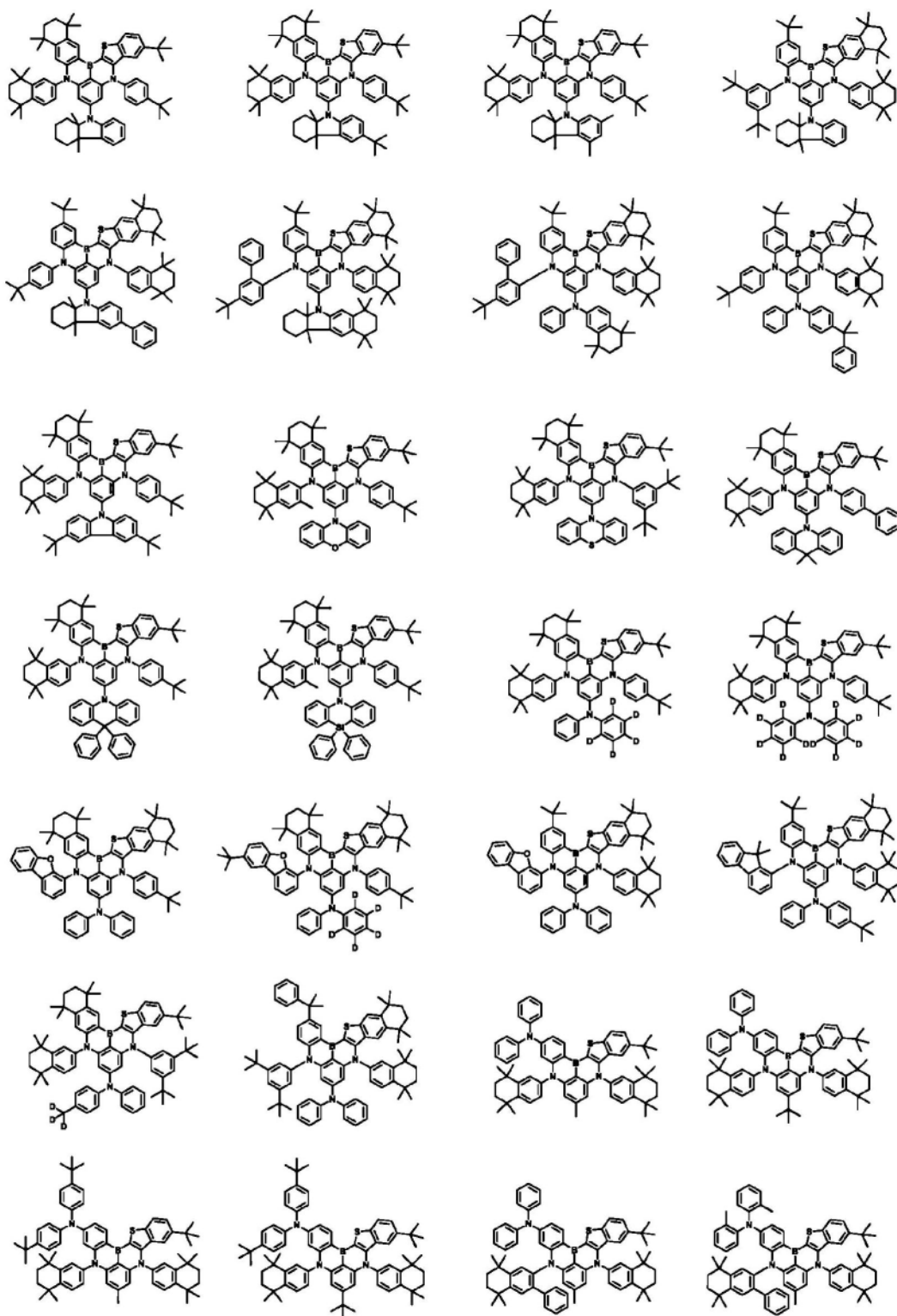
[0417]

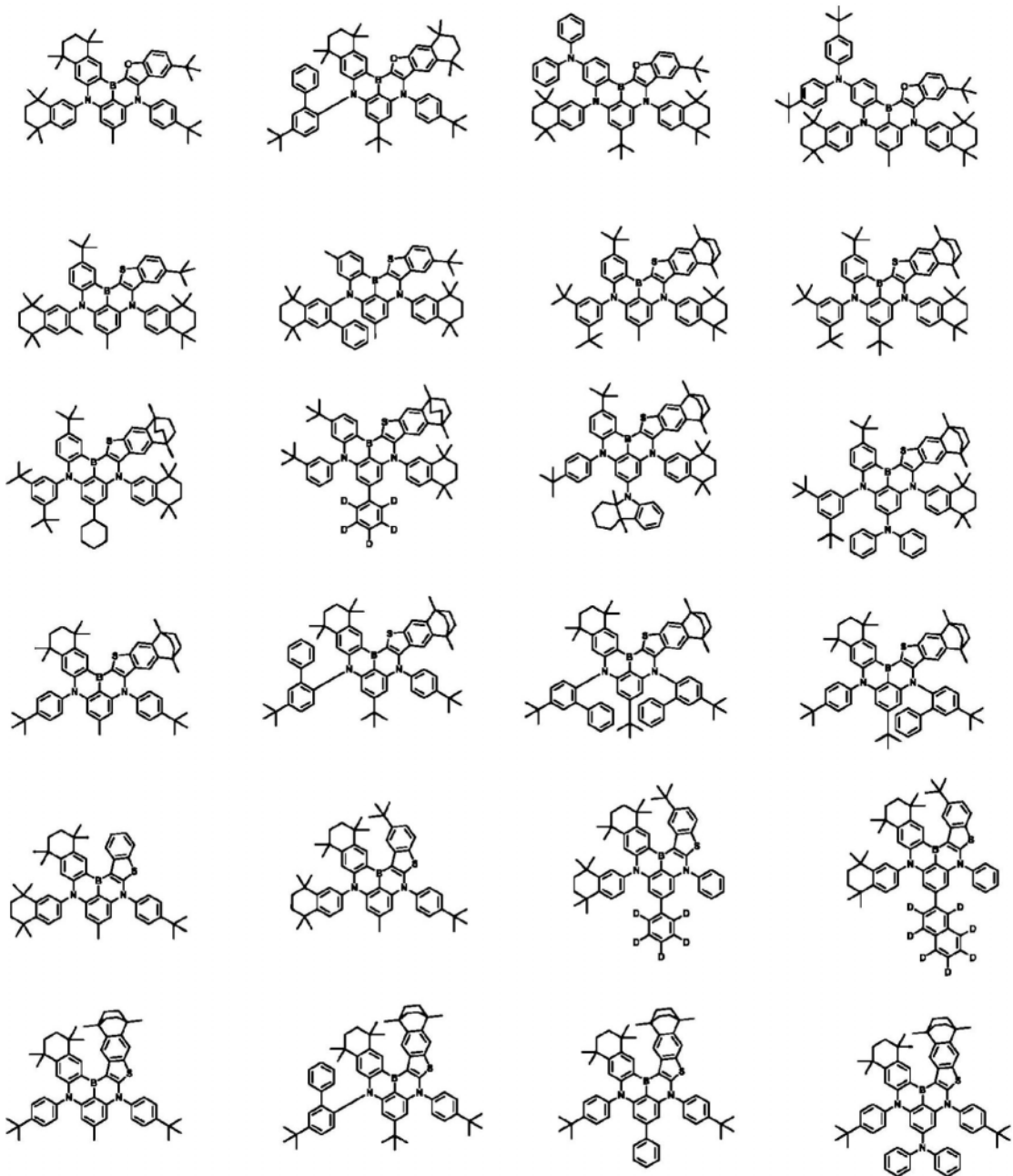


[0418]

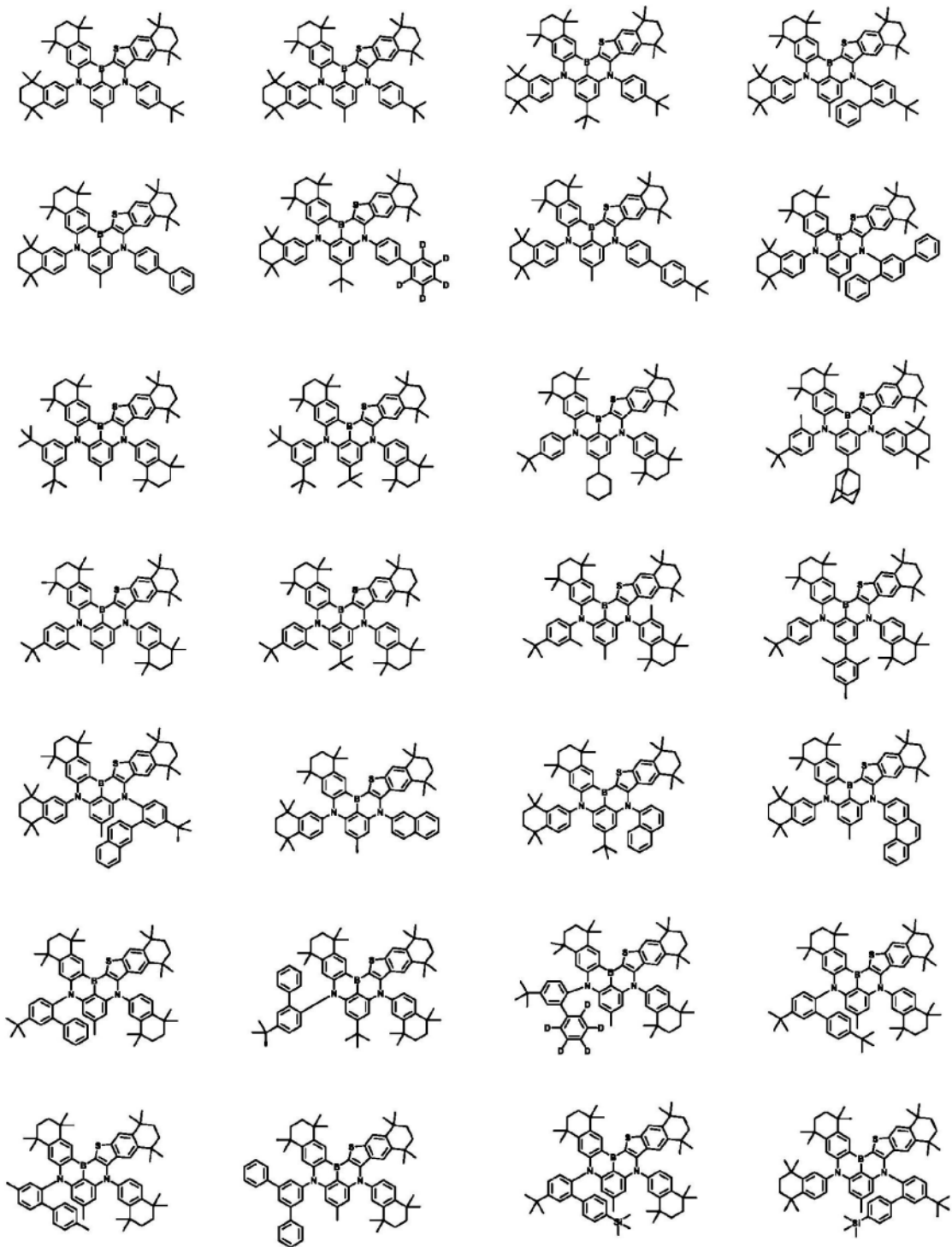


[0419]

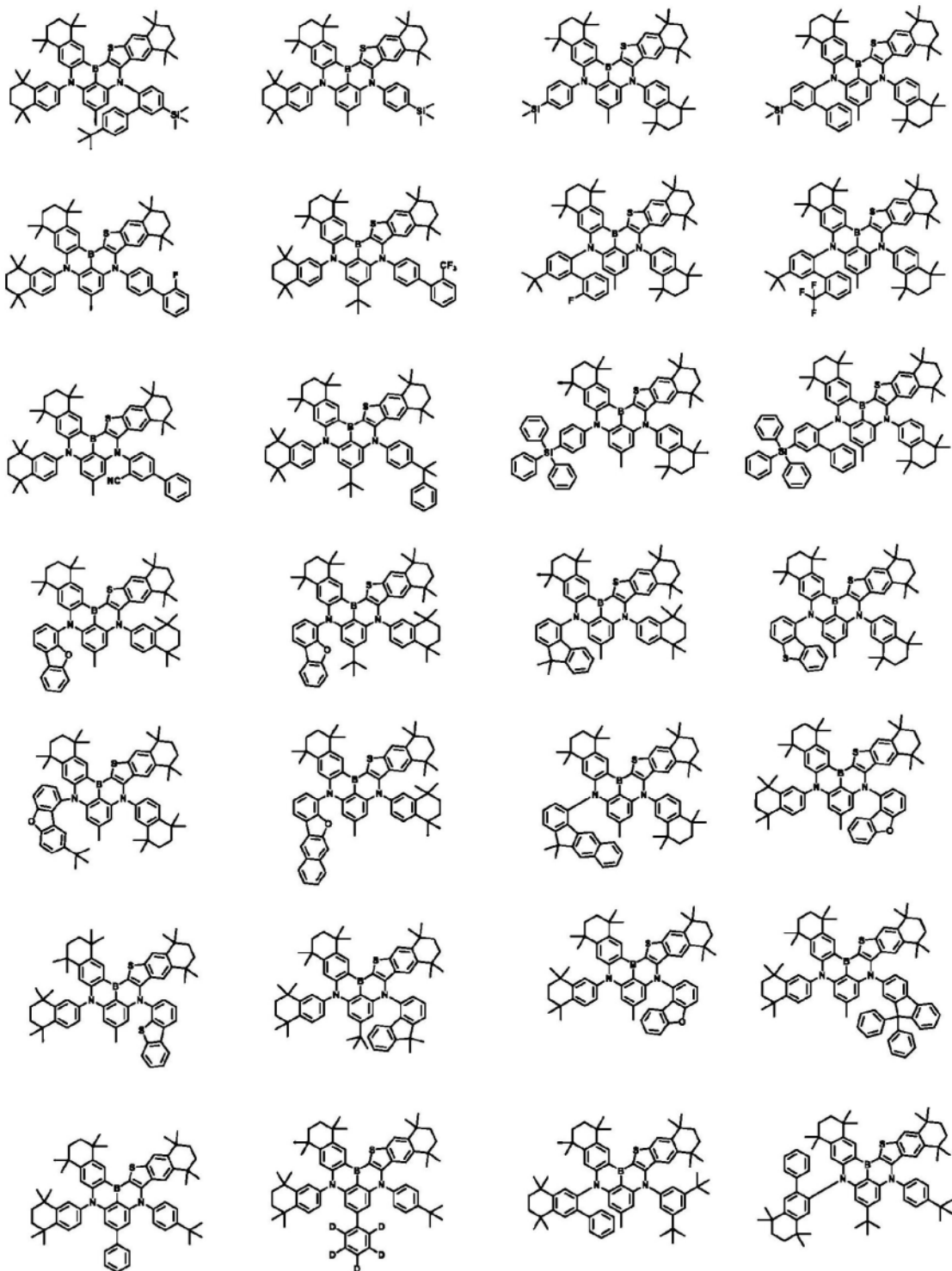


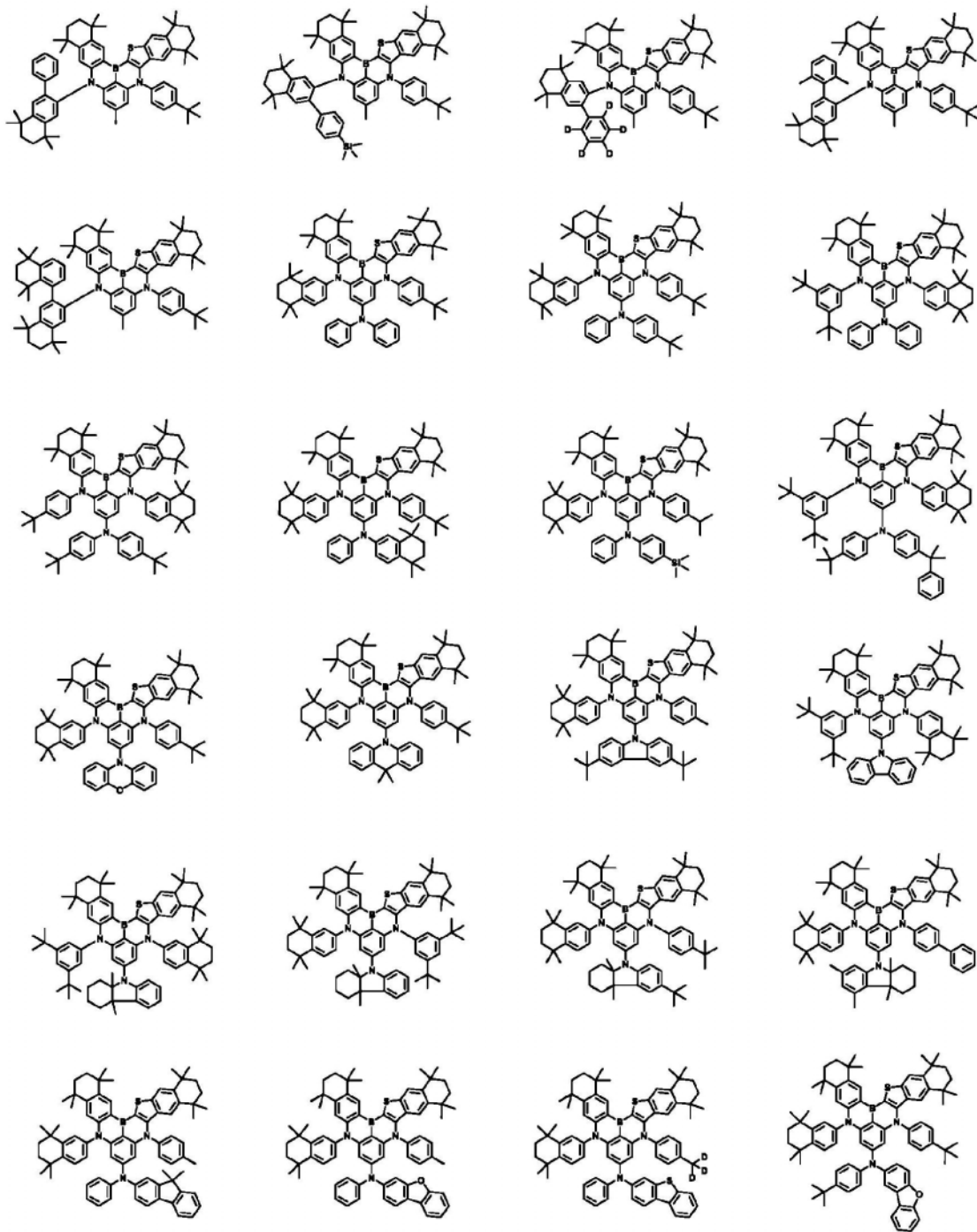


[0421]

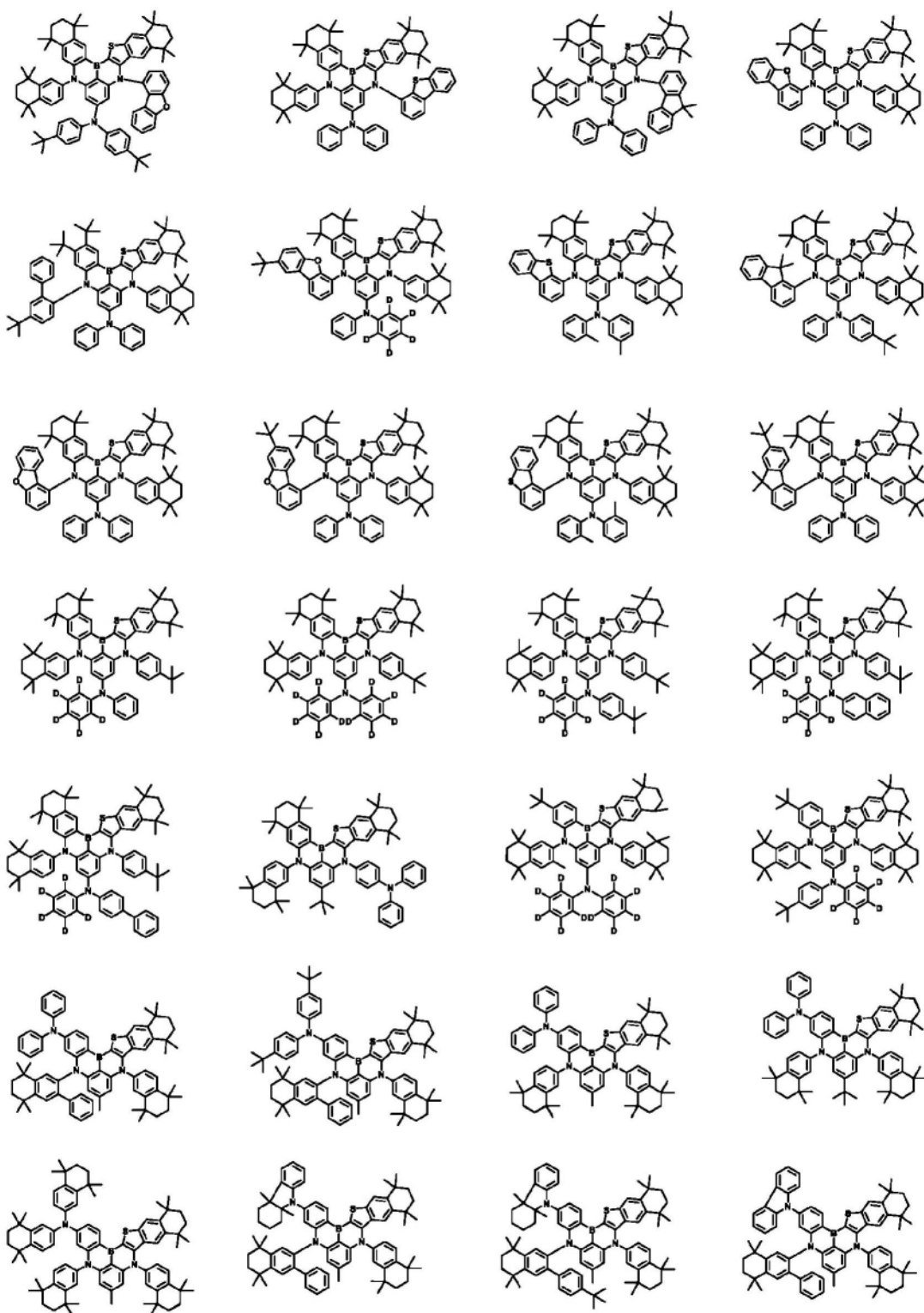


[0422]

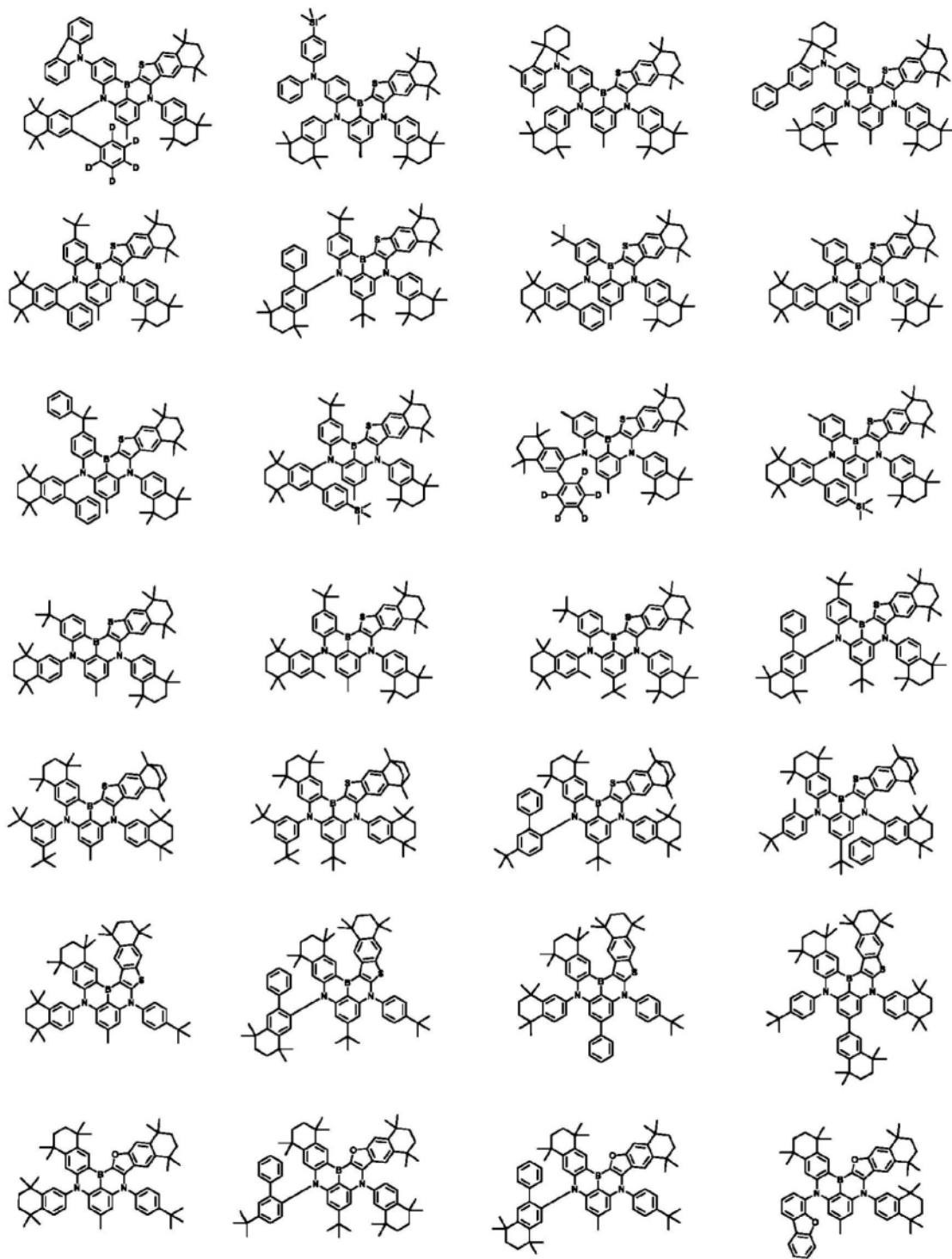




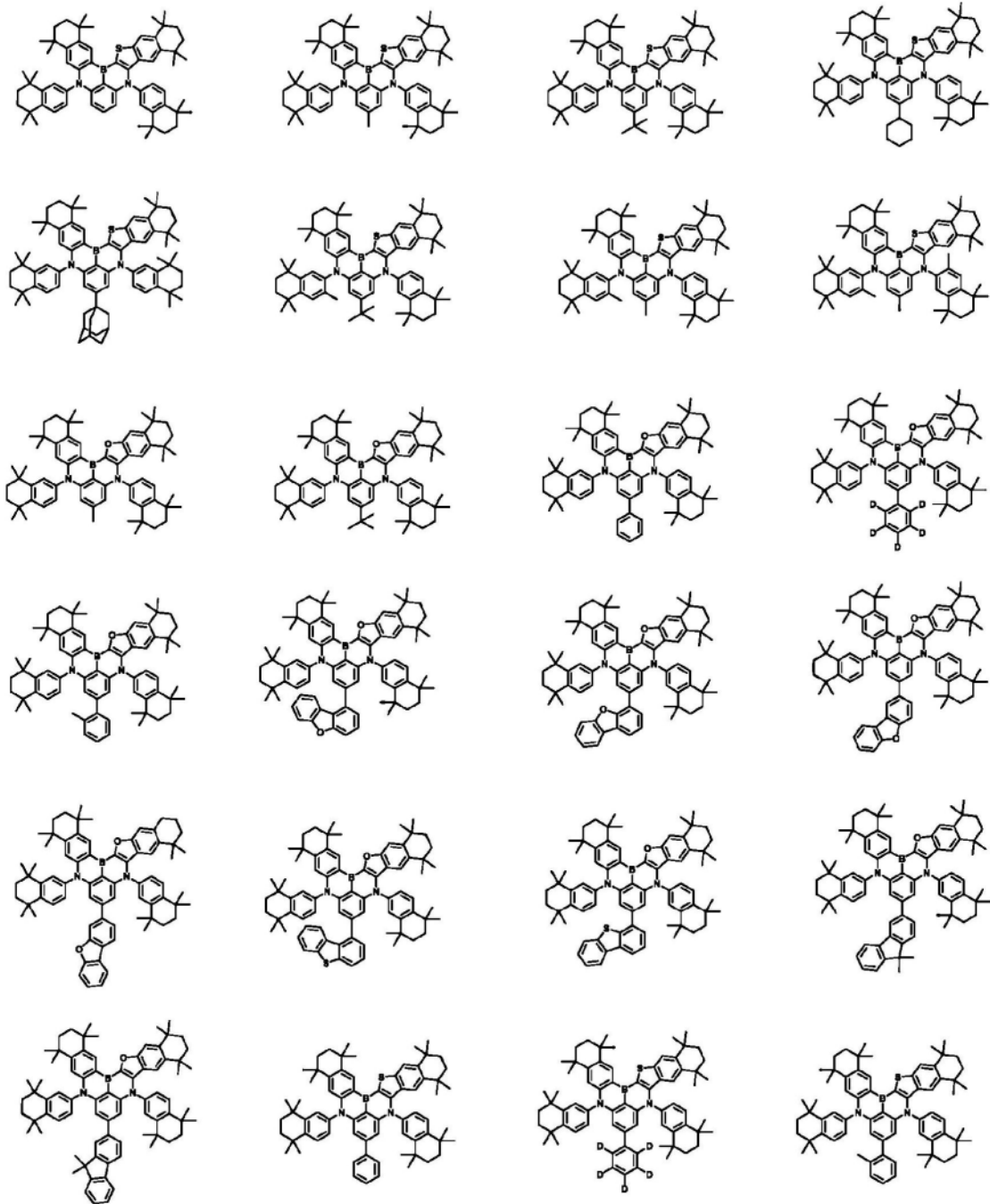
[0424]

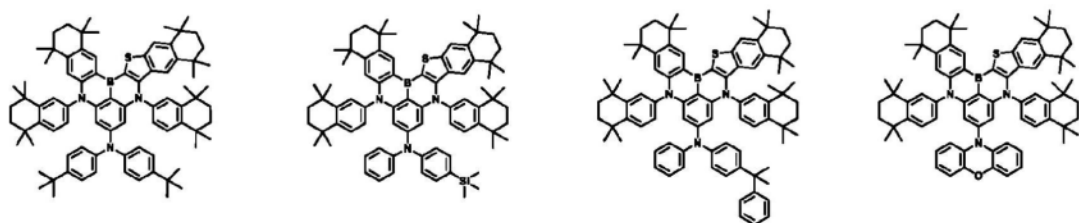
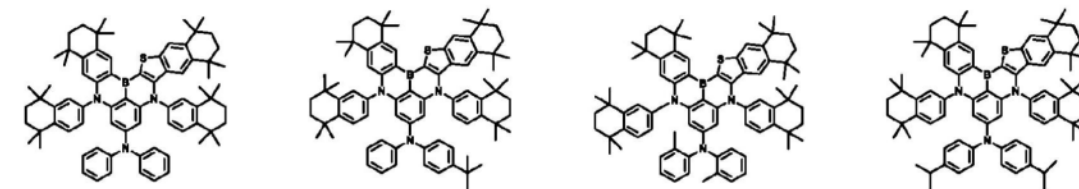
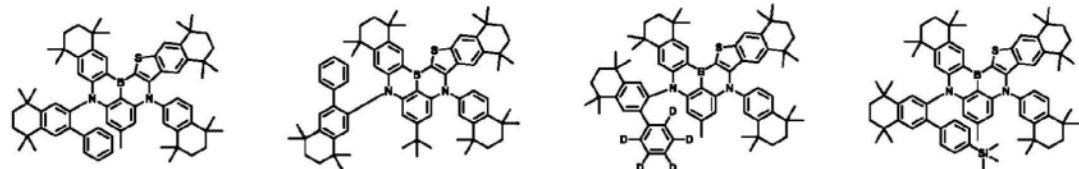


[0425]

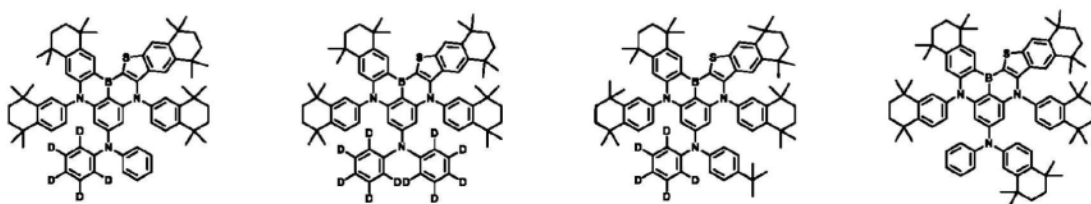
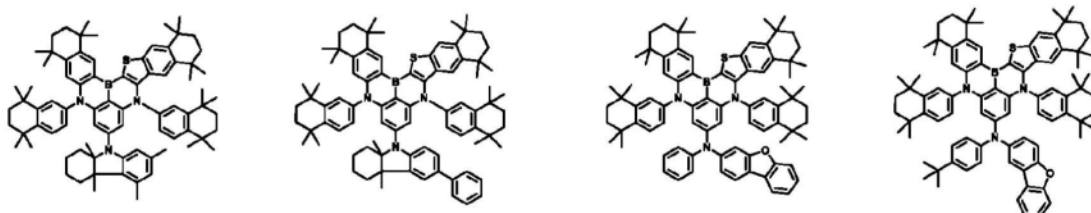
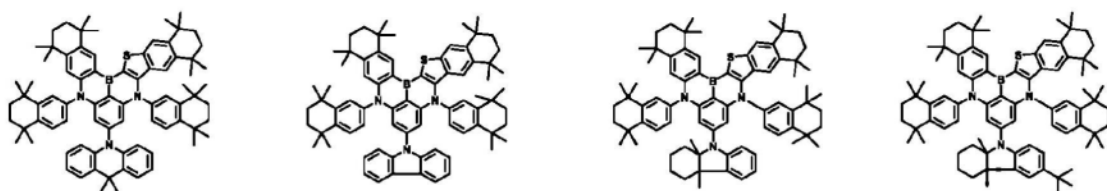


[0426]

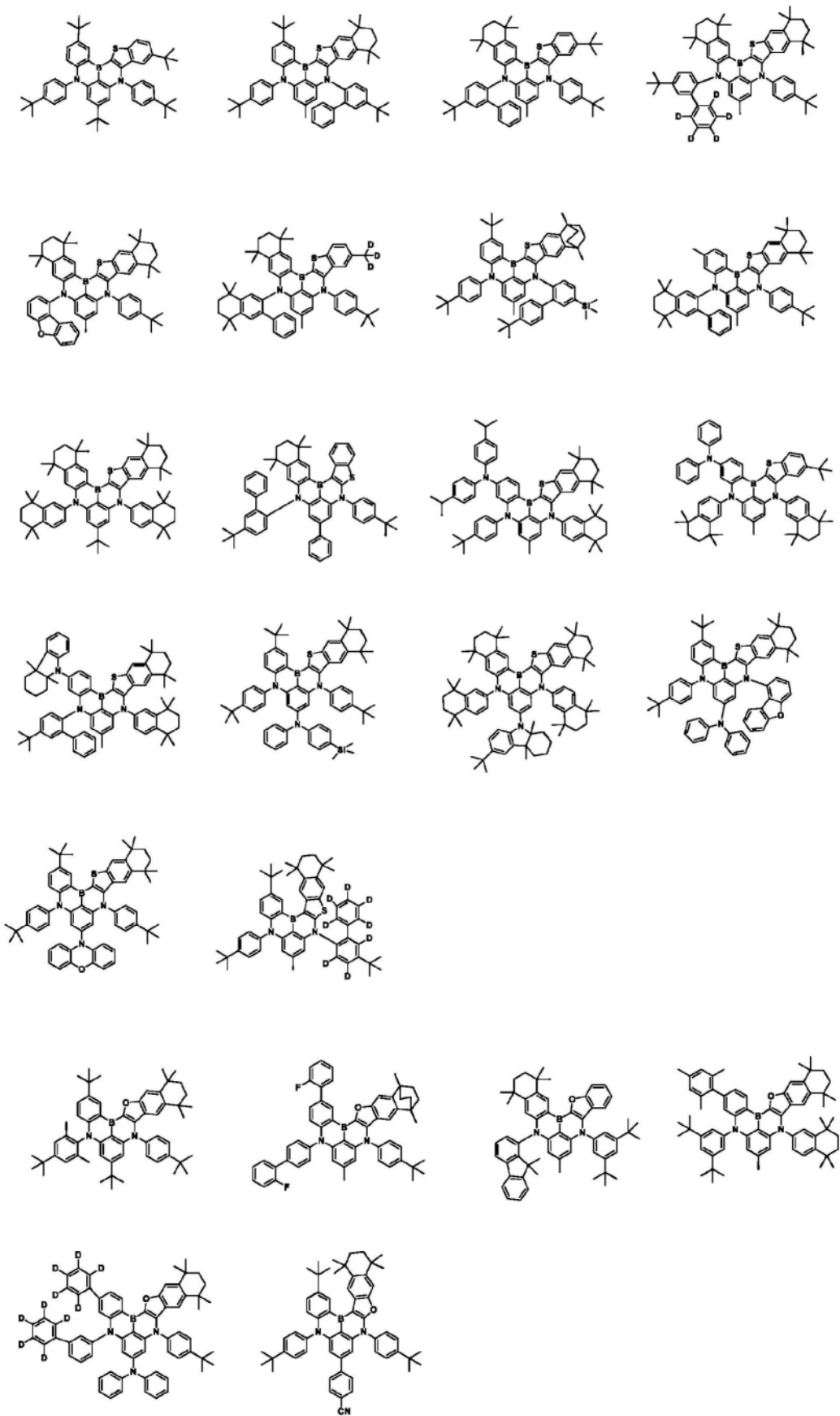




[0427]

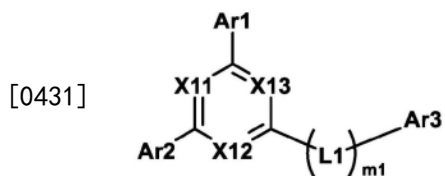


[0428]



[0429] 在下文中,将详细地描述化学式2。

[0430] [化学式2]



[0432] 在化学式2中,

[0433] X11至X13为N;或CR', 并且X11至X13中的至少一者为N,

[0434] R'为氢;氘;氰基;卤素基团;经取代或未经取代的烷基;经取代或未经取代的烯基;经取代或未经取代的烷氧基;经取代或未经取代的烷基硫基;经取代或未经取代的环烷基;经取代或未经取代的甲硅烷基;经取代或未经取代的芳基;经取代或未经取代的芳氧基;经取代或未经取代的芳基硫基;或者经取代或未经取代的杂环基,

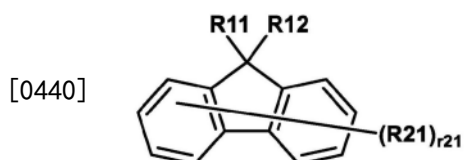
[0435] L1为直接键;经取代或未经取代的亚芳基;或者经取代或未经取代的二价杂环基,

[0436] m1为1至3的整数, 并且当m1为2或更大时, L1彼此相同或不同,

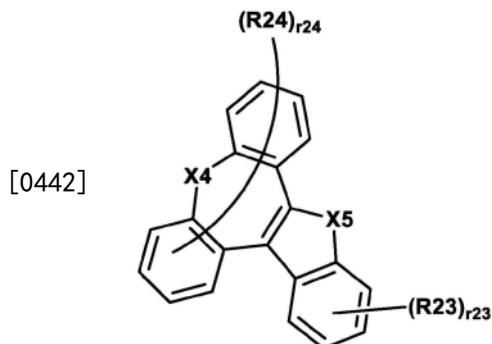
[0437] Ar1和Ar2彼此相同或不同, 并且各自独立地为经取代或未经取代的芳基;或者经取代或未经取代的杂环基, 以及

[0438] Ar3为以下化学式2-A至2-C中的任一者,

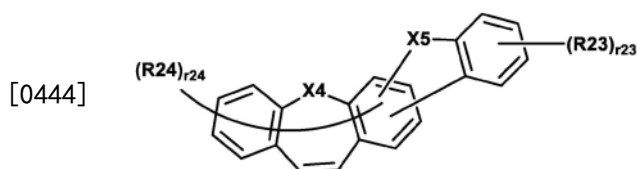
[0439] [化学式2-A]



[0441] [化学式2-B]



[0443] [化学式2-C]



[0445] 在化学式2-A至2-C中,

[0446] R11和R12为经取代或未经取代的烷基;或者经取代或未经取代的芳基, 或者与相邻基团键合以形成经取代或未经取代的环,

[0447] X4为O;S;或NR25,

[0448] X5为O;S;或NR22,

[0449] R21至R25中的任一者与化学式2连接, 以及余者彼此相同或不同, 并且各自独立地

为氢;氘;氰基;卤素基团;经取代或未经取代的烷基;经取代或未经取代的烷氧基;经取代或未经取代的烷基硫基;经取代或未经取代的环烷基;经取代或未经取代的甲硅烷基;经取代或未经取代的芳基;经取代或未经取代的芳氧基;经取代或未经取代的芳基硫基;经取代或未经取代的杂环基;或者经取代或未经取代的胺基,或者与相邻取代基键合以形成经取代或未经取代的环,

[0450] r_{21} 为0至7的整数, r_{23} 为0至4的整数,以及 r_{24} 为0至8的整数,并且

[0451] 当 r_{21} 、 r_{23} 和 r_{24} 各自为2或更大时,括号中的取代基彼此相同或不同。

[0452] 在本说明书的一个实施方案中, X_{11} 至 X_{13} 中的至少一者为N。

[0453] 在本说明书的一个实施方案中, X_{11} 至 X_{13} 中的至少两者为N。

[0454] 在本说明书的一个实施方案中, X_{11} 至 X_{13} 为N。

[0455] 在本说明书的一个实施方案中, X_{11} 为N,以及 X_{12} 和 X_{13} 为CR'。

[0456] 在本说明书的一个实施方案中, X_{12} 为N,以及 X_{11} 和 X_{13} 为CR'。

[0457] 在本说明书的一个实施方案中, X_{13} 为N,以及 X_{11} 和 X_{12} 为CR'。

[0458] 在本说明书的一个实施方案中, X_{11} 和 X_{12} 为N,以及 X_{13} 为CR'。

[0459] 在本说明书的一个实施方案中, X_{11} 和 X_{13} 为N,以及 X_{12} 为CR'。

[0460] 在本说明书的一个实施方案中, X_{12} 和 X_{13} 为N,以及 X_{11} 为CR'。

[0461] 在本说明书的一个实施方案中,R'为氢;氘;氰基;卤素基团;经取代或未经取代的烷基;经取代或未经取代的烯基;经取代或未经取代的烷氧基;经取代或未经取代的烷基硫基;经取代或未经取代的环烷基;经取代或未经取代的甲硅烷基;经取代或未经取代的芳基;经取代或未经取代的芳氧基;经取代或未经取代的芳基硫基;或者经取代或未经取代的杂环基。

[0462] 在本说明书的一个实施方案中,R'为氢;氘;经取代或未经取代的烷基;或者经取代或未经取代的芳基。

[0463] 在本说明书的一个实施方案中,R'为氢或氘。

[0464] 在本说明书的一个实施方案中,R'为氢。

[0465] 在本说明书的一个实施方案中, Ar_1 和 Ar_2 彼此相同或不同,并且各自独立地为经取代或未经取代的芳基;或者经取代或未经取代的杂环基。

[0466] 在本说明书的一个实施方案中, Ar_1 和 Ar_2 彼此相同或不同,并且各自独立地为经取代或未经取代的C₆-C₆₀芳基;或者经取代或未经取代的C₂-C₆₀杂环基。

[0467] 在本说明书的一个实施方案中, Ar_1 和 Ar_2 彼此相同或不同,并且各自独立地为经取代或未经取代的C₆-C₃₀芳基;或者经取代或未经取代的C₂-C₃₀杂环基。

[0468] 在本说明书的一个实施方案中, Ar_1 和 Ar_2 彼此相同或不同,并且各自独立地为C₆-C₃₀芳基。

[0469] 在本说明书的一个实施方案中, Ar_1 和 Ar_2 彼此相同或不同,并且各自独立地为经取代或未经取代的单环或多环C₆-C₂₀芳基。

[0470] 在本说明书的一个实施方案中, Ar_1 和 Ar_2 彼此相同或不同,并且各自独立地为经取代或未经取代的苯基;经取代或未经取代的联苯基;经取代或未经取代的三联苯基;经取代或未经取代的四联苯基;经取代或未经取代的萘基;经取代或未经取代的蒽基;经取代或未经取代的菲基;或者经取代或未经取代的三亚苯基。

[0471] 在本说明书的一个实施方案中,Ar1和Ar2彼此相同或不同,并且各自独立地为经取代或未经取代的苯基;经取代或未经取代的联苯基;或者经取代或未经取代的萘基。

[0472] 在本说明书的一个实施方案中,Ar1和Ar2彼此相同或不同,并且各自独立地为经取代或未经取代的苯基。

[0473] 在本说明书的一个实施方案中,Ar1和Ar2彼此相同。

[0474] 在本说明书的一个实施方案中,Ar1和Ar2彼此不同。

[0475] 在本说明书的一个实施方案中,Ar1和Ar2为苯基。

[0476] 在本说明书的一个实施方案中,L1为直接键;经取代或未经取代的C6-C60亚芳基;或者经取代或未经取代的C2-C60二价杂环基。

[0477] 在本说明书的一个实施方案中,L1为直接键;经取代或未经取代的C6-C30亚芳基;或者经取代或未经取代的C2-C30二价杂环基。

[0478] 在本说明书的一个实施方案中,L1为直接键;或者经取代或未经取代的C6-C30亚芳基。

[0479] 在本说明书的一个实施方案中,L1为经取代或未经取代的C6-C30亚芳基。

[0480] 在本说明书的一个实施方案中,L1为直接键;或者经取代或未经取代的单环或多环C6-C20亚芳基。

[0481] 在本说明书的一个实施方案中,L1为直接键;经取代或未经取代的亚苯基;经取代或未经取代的亚联苯基;经取代或未经取代的亚三联苯基;或者经取代或未经取代的亚萘基。

[0482] 在本说明书的一个实施方案中,L1为直接键;经取代或未经取代的亚苯基;经取代或未经取代的亚联苯基;或者经取代或未经取代的亚三联苯基。

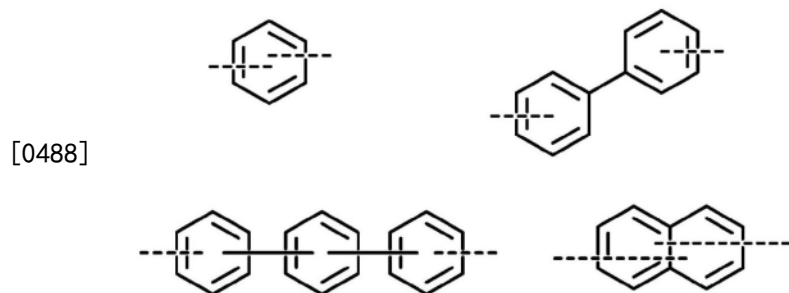
[0483] 在本说明书的一个实施方案中,L1为直接键;亚苯基;亚联苯基;或亚三联苯基。

[0484] 在本说明书的一个实施方案中,L1为亚苯基;亚联苯基;或亚三联苯基。

[0485] 在本说明书的一个实施方案中,L1为直接键;或亚苯基。

[0486] 在本说明书的一个实施方案中,L1为直接键;间亚苯基;或对亚苯基。

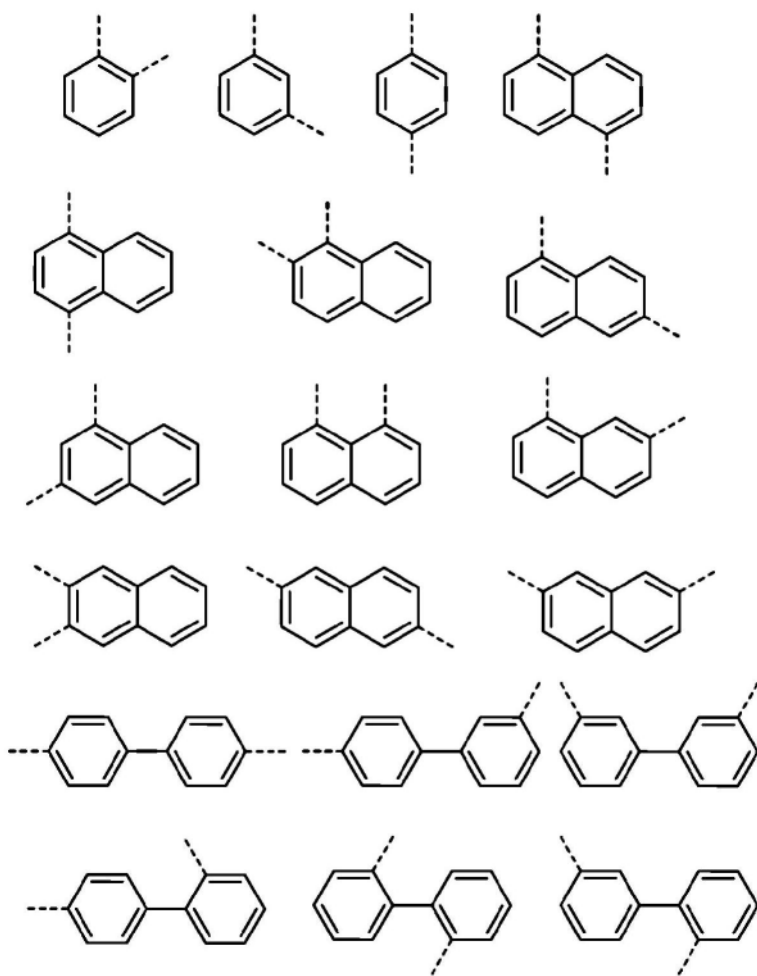
[0487] 在本说明书的一个实施方案中,L1为直接键,或者选自以下结构。

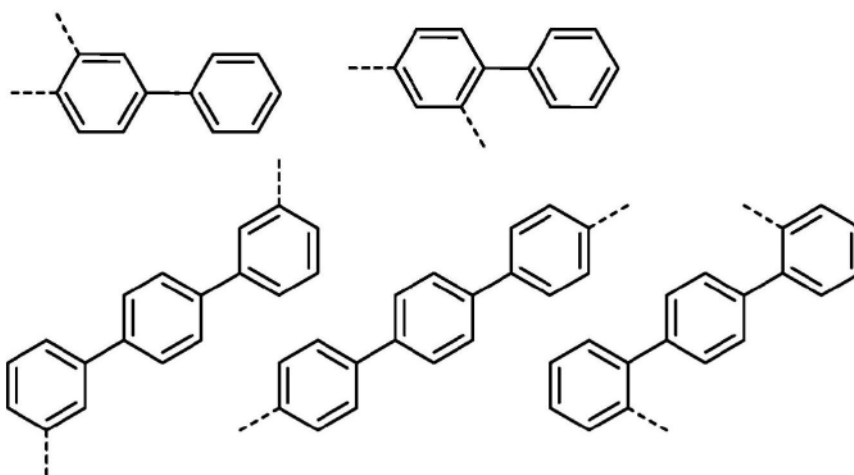


[0489] 在所述结构中,虚线为与化学式2连接的位置。

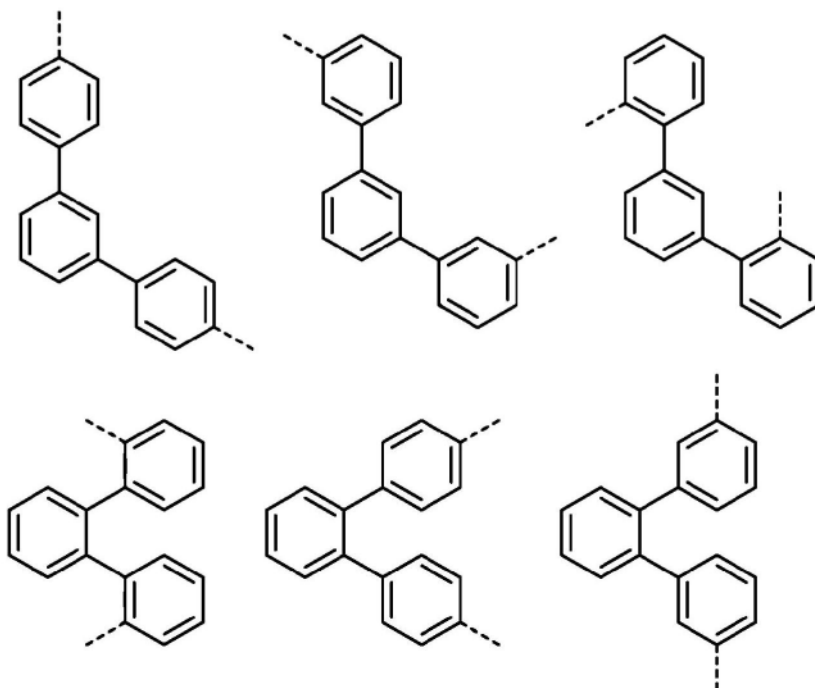
[0490] 在本说明书的一个实施方案中,L1为直接键,或者选自以下结构。

[0491]



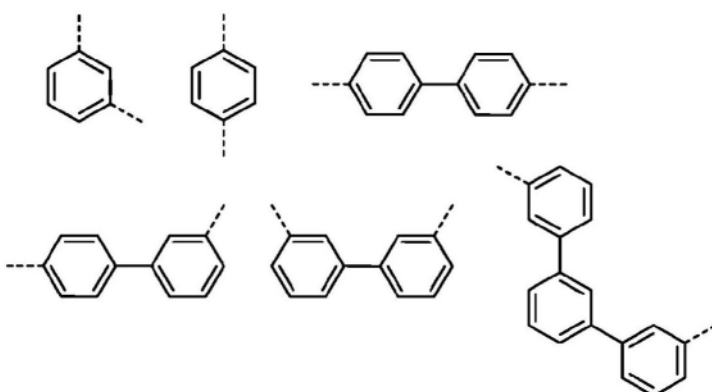


[0492]



[0493] 在所述结构中,虚线为与化学式2连接的位置。

[0494] 在本说明书的一个实施方案中,L1为直接键,或者选自以下结构。



[0495]

[0496] 在所述结构中,虚线为与化学式2连接的位置。

[0497] 在本说明书的一个实施方案中,当m1为2或更大时,两个或更多个L1中的至少一者为间亚苯基。

[0498] 在本说明书的一个实施方案中,当 m_1 为2或更大时,两个或更多个L1中的至少一者不为直接键。

[0499] 在本说明书的一个实施方案中,当 m_1 为2或更大时,两个或更多个L1中的至少一者为亚芳基。

[0500] 在本说明书的一个实施方案中,当 m_1 为2或更大时,两个或更多个L1中的至少一者为间亚苯基。

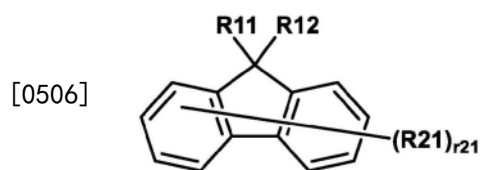
[0501] 在本说明书的一个实施方案中, m_1 为1。

[0502] 在本说明书的一个实施方案中, m_1 为2。

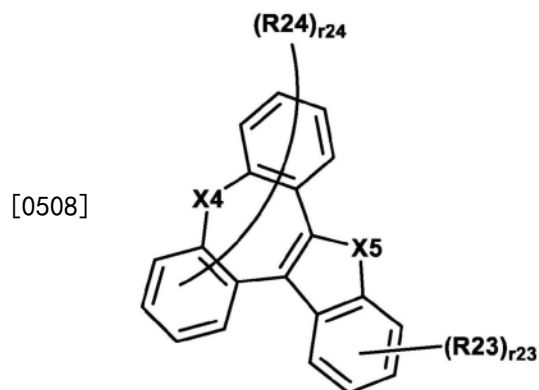
[0503] 在本说明书的一个实施方案中, m_1 为3。

[0504] 在本说明书的一个实施方案中, Ar_3 为以下化学式2-A至2-C中的任一者。

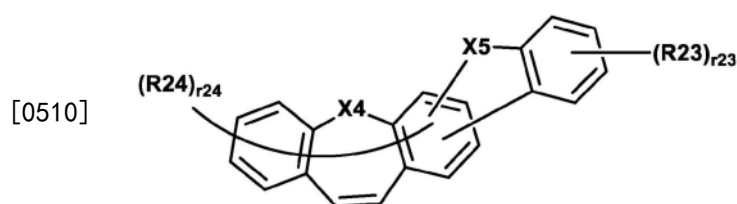
[0505] [化学式2-A]



[0507] [化学式2-B]



[0509] [化学式2-C]



[0511] 在化学式2-A至2-C中,

[0512] R11和R12为经取代或未经取代的烷基;或者经取代或未经取代的芳基,或者与相邻基团键合以形成经取代或未经取代的环,

[0513] X4为0;S;或NR25,

[0514] X5为0;S;或NR22,

[0515] R21至R25中的任一者与化学式2连接,以及余者彼此相同或不同,并且各自独立地为氢;氘;氰基;卤素基团;经取代或未经取代的烷基;经取代或未经取代的烷氧基;经取代或未经取代的烷基硫基;经取代或未经取代的环烷基;经取代或未经取代的甲硅烷基;经取代或未经取代的芳基;经取代或未经取代的芳氧基;经取代或未经取代的芳基硫基;经取代

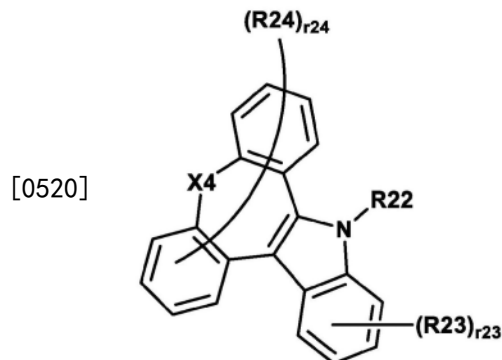
或未经取代的杂环基;或者经取代或未经取代的氨基,或者与相邻取代基键合以形成经取代或未经取代的环,

[0516] r_{21} 为0至7的整数, r_{23} 为0至4的整数,以及 r_{24} 为0至8的整数,并且

[0517] 当 r_{21} 、 r_{23} 和 r_{24} 各自为2或更大时,括号中的取代基彼此相同或不同。

[0518] 在本说明书的一个实施方案中,化学式2-B由以下化学式2-B1表示。

[0519] [化学式2-B1]



[0521] 在化学式2-B1中, X_4 、 R_{22} 至 R_{24} 、 r_{23} 和 r_{24} 具有与化学式2-B中相同的限定。

[0522] 在本说明书的一个实施方案中,化学式2-A的 R_{21} 中的任一者与化学式2连接。

[0523] 在本说明书的一个实施方案中,化学式2-B和2-C的 R_{22} 至 R_{25} 中的任一者与化学式2连接。

[0524] 在本说明书的一个实施方案中,化学式2-B的 R_{22} 和 R_{25} 中的任一者与化学式2连接。

[0525] 在本说明书的一个实施方案中,化学式2-C的 R_{22} 和 R_{25} 中的任一者与化学式2连接。

[0526] 在本说明书的一个实施方案中, R_{11} 和 R_{12} 为经取代或未经取代的 C_1 - C_{10} 烷基;或者经取代或未经取代的 C_6 - C_{30} 芳基,或者彼此键合以形成经取代或未经取代的 C_5 - C_{30} 环。

[0527] 在本说明书的一个实施方案中, R_{11} 和 R_{12} 为经取代或未经取代的 C_1 - C_6 烷基;或者经取代或未经取代的 C_6 - C_{20} 芳基,或者彼此键合以形成经取代或未经取代的 C_5 - C_{20} 环。

[0528] 在本说明书的一个实施方案中, R_{11} 和 R_{12} 为经取代或未经取代的甲基;或者经取代或未经取代的苯基,或者彼此键合以形成经取代或未经取代的茚环。

[0529] 在本说明书的一个实施方案中, R_{11} 和 R_{12} 为甲基;或苯基,或者彼此键合以形成茚环。

[0530] 在本说明书的一个实施方案中,化学式2-A选自以下结构。

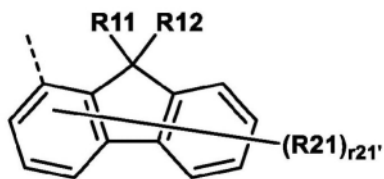


[0532] 在所述结构中, R_{21} 和 r_{21} 具有与化学式2-A中相同的限定。

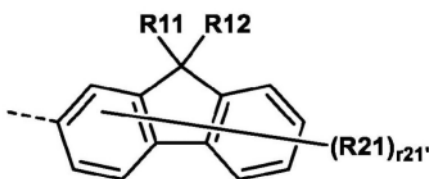
[0533] 在本说明书的一个实施方案中,化学式2-A为以下化学式2-A-1至2-A-4中的任一者。

[0534] 在另一个实施方案中,Ar₃为以下化学式2-A-1至2-A-4中的任一者。

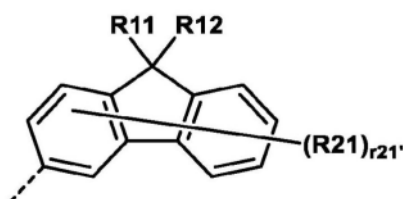
[化学式 2-A-1]



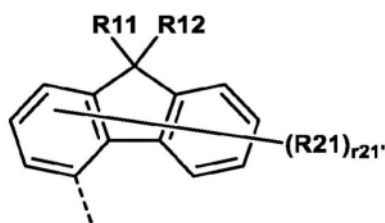
[化学式 2-A-2]



[0535] [化学式 2-A-3]



[化学式 2-A-4]



[0536] 在化学式2-A-1至2-A-4中,R11和R12具有与化学式2中相同的限定,

[0537] 虚线意指与化学式2连接的位置,

[0538] R21为氢;氘;氰基;卤素基团;经取代或未经取代的烷基;经取代或未经取代的烷氧基;经取代或未经取代的烷基硫基;经取代或未经取代的环烷基;经取代或未经取代的甲硅烷基;经取代或未经取代的芳基;经取代或未经取代的芳氧基;经取代或未经取代的芳基硫基;经取代或未经取代的杂环基;或者经取代或未经取代的胺基,或者与相邻取代基键合以形成经取代或未经取代的环,以及

[0539] r₂₁'为0至7的整数,并且当r₂₁'为2或更大时,R21彼此相同或不同。

[0540] 在本说明书的一个实施方案中,R21为氢;氘;氰基;卤素基团;经取代或未经取代的C1-C10烷基;经取代或未经取代的C1-C10烷氧基;经取代或未经取代的C1-C10烷基硫基;经取代或未经取代的C3-C30环烷基;经取代或未经取代的甲硅烷基;经取代或未经取代的C6-C30芳基;经取代或未经取代的C6-C30芳氧基;经取代或未经取代的C6-C30芳基硫基;经取代或未经取代的C2-C30杂环基;或者经取代或未经取代的胺基,或者与相邻取代基键合以形成经取代或未经取代的C6-C30环。

[0541] 在本说明书的一个实施方案中,R21为氢;或氘。

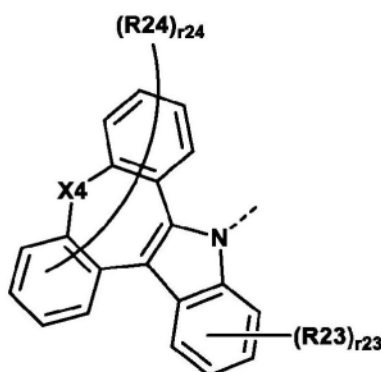
[0542] 在本说明书的一个实施方案中,化学式2-B为以下化学式2-B-1或2-B-2。

[0543] 在本说明书的一个实施方案中,化学式2-C为以下化学式2-C-1至2-C-4中的任一者。

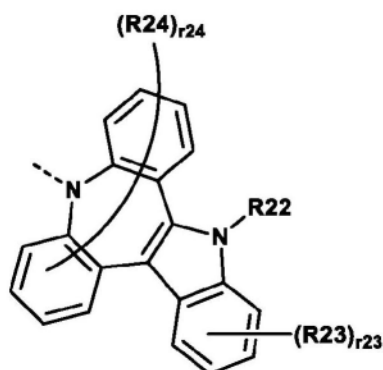
[0544] 在另一个实施方案中,Ar₃为以下化学式2-B-1、2-B-2和2-C-1至2-C-4中的任一者。

[化学式 2-B-1]

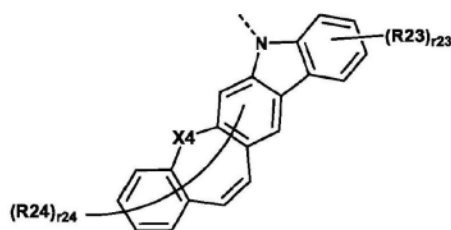
[0545]



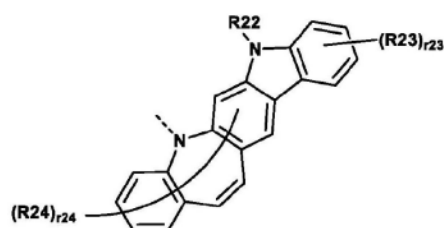
[化学式 2-B-2]



[化学式 2-C-1]

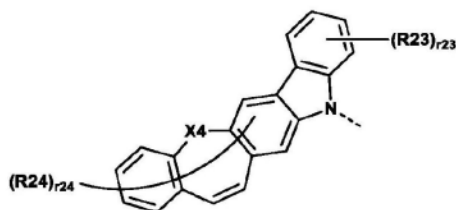


[化学式 2-C-2]

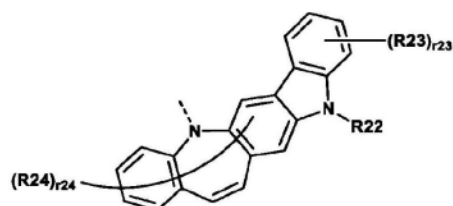


[0546]

[化学式 2-C-3]



[化学式 2-C-4]



[0547] 在化学式2-B-1、2-B-2和2-C-1至2-C-4中,虚线、X4、R22至R24、r23和r24具有与化学式2中相同的限定。

[0548] 在本说明书的一个实施方案中,化学式2-B的X4为O;S;NR25。

[0549] 在本说明书的一个实施方案中,化学式2-B的X5为NR22。

[0550] 在本说明书的一个实施方案中,化学式2-C的X4为NR25。

[0551] 在本说明书的一个实施方案中,化学式2-C的X5为NR22。

[0552] 在本说明书的一个实施方案中,未与化学式2连接的R22至R25彼此相同或不同,并且各自独立地为氢;氘;氰基;卤素基团;经取代或未经取代的C1-C10烷基;经取代或未经取代的C1-C10烷氧基;经取代或未经取代的C1-C10烷基硫基;经取代或未经取代的C3-C30环烷基;经取代或未经取代的甲硅烷基;经取代或未经取代的C6-C30芳基;经取代或未经取代的C6-C30芳氧基;经取代或未经取代的C6-C30芳基硫基;经取代或未经取代的C2-C30杂环基;或者经取代或未经取代的胺基,或者与相邻取代基键合以形成经取代或未经取代的C6-C30环。

[0553] 在本说明书的一个实施方案中,未与化学式2连接的R22至R25彼此相同或不同,并且各自独立地为氢;氘;经取代或未经取代的C6-C30芳基;或者经取代或未经取代的C2-C30

杂环基,或者与相邻取代基键合以形成经取代或未经取代的C6-C30芳族烃环。

[0554] 在本说明书的一个实施方案中,R22为经取代或未经取代的C6-C20芳基。

[0555] 在本说明书的一个实施方案中,R22为经取代或未经取代的苯基。

[0556] 在本说明书的一个实施方案中,R22为苯基。

[0557] 在本说明书的一个实施方案中,R23为氢;或氘。

[0558] 在本说明书的一个实施方案中,R23为氢。

[0559] 在本说明书的一个实施方案中,R24为氢;或氘,或者相邻的两个R24彼此键合以形成C6-C20芳族烃环。

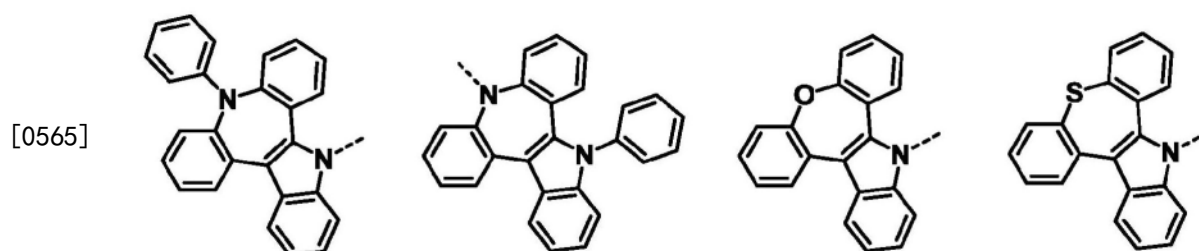
[0560] 在本说明书的一个实施方案中,R24为氢;或氘,或者相邻的两个R24彼此键合以形成苯环。

[0561] 在本说明书的一个实施方案中,R24为氢,或者相邻的两个R24彼此键合以形成苯环。

[0562] 在本说明书的一个实施方案中,化学式2-B的R24为氢。

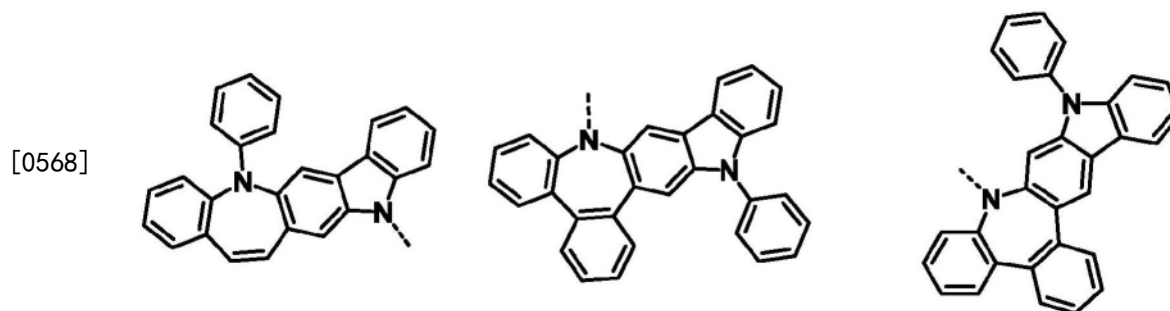
[0563] 在本说明书的一个实施方案中,化学式2-C的R24为氢,或者相邻的两个R24彼此键合以形成苯环。

[0564] 在本说明书的一个实施方案中,化学式2-B选自以下结构。



[0566] 在所述结构中,虚线为与化学式2连接的位置。

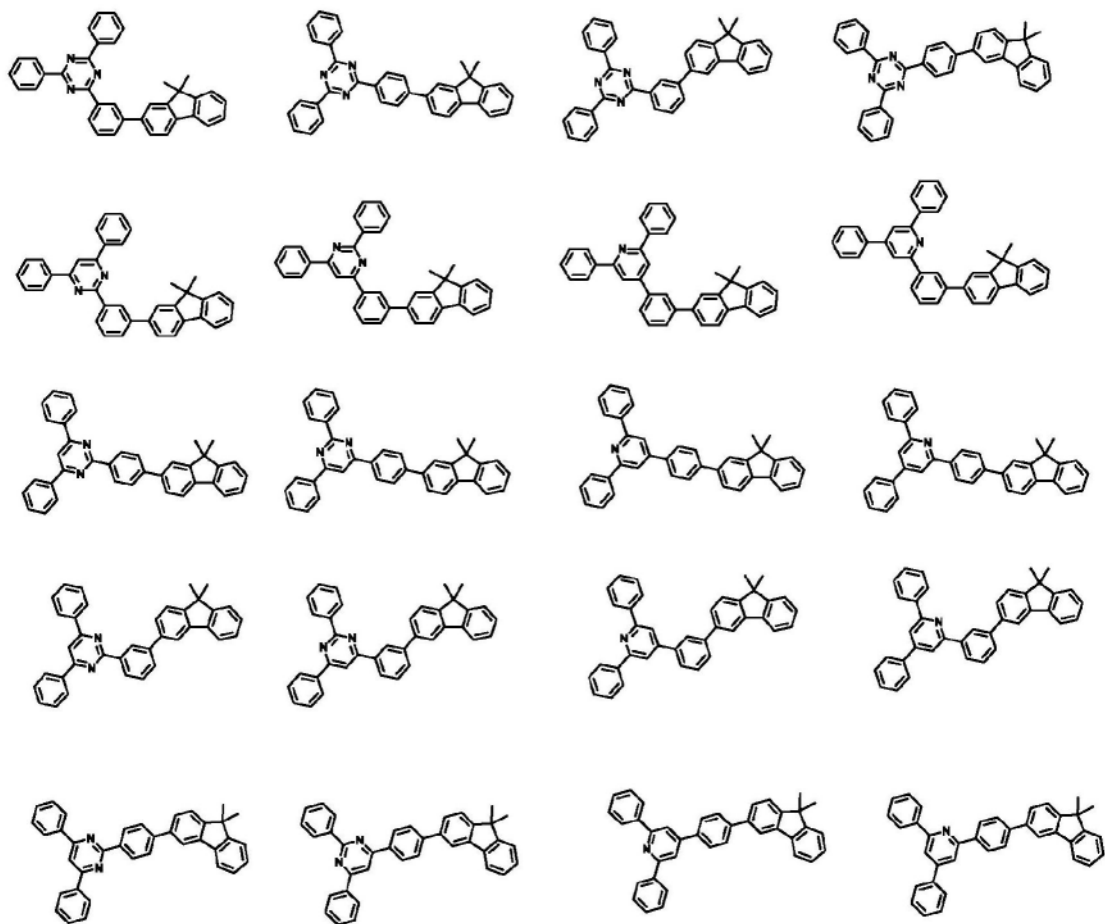
[0567] 在本说明书的一个实施方案中,化学式2-C选自以下结构。

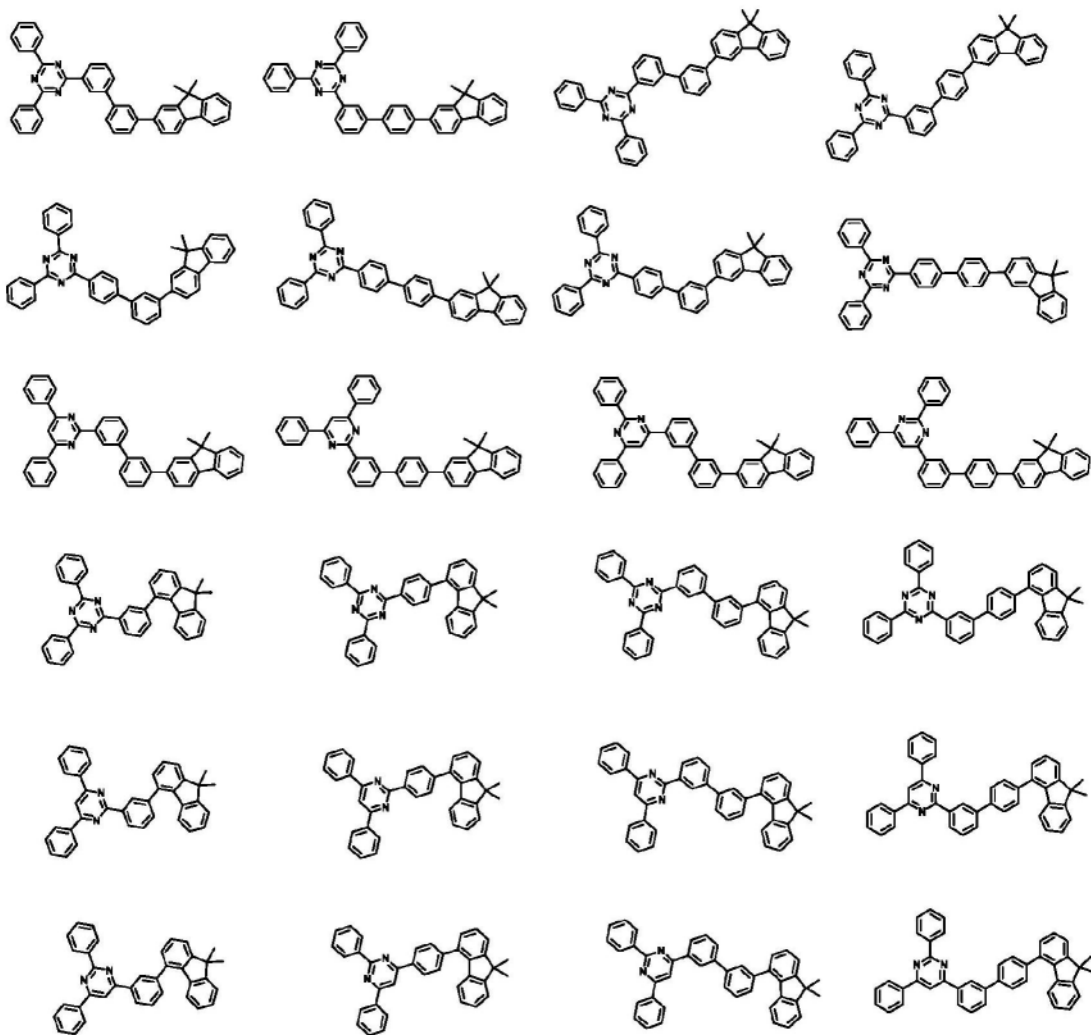


[0569] 在所述结构中,虚线为与化学式2连接的位置。

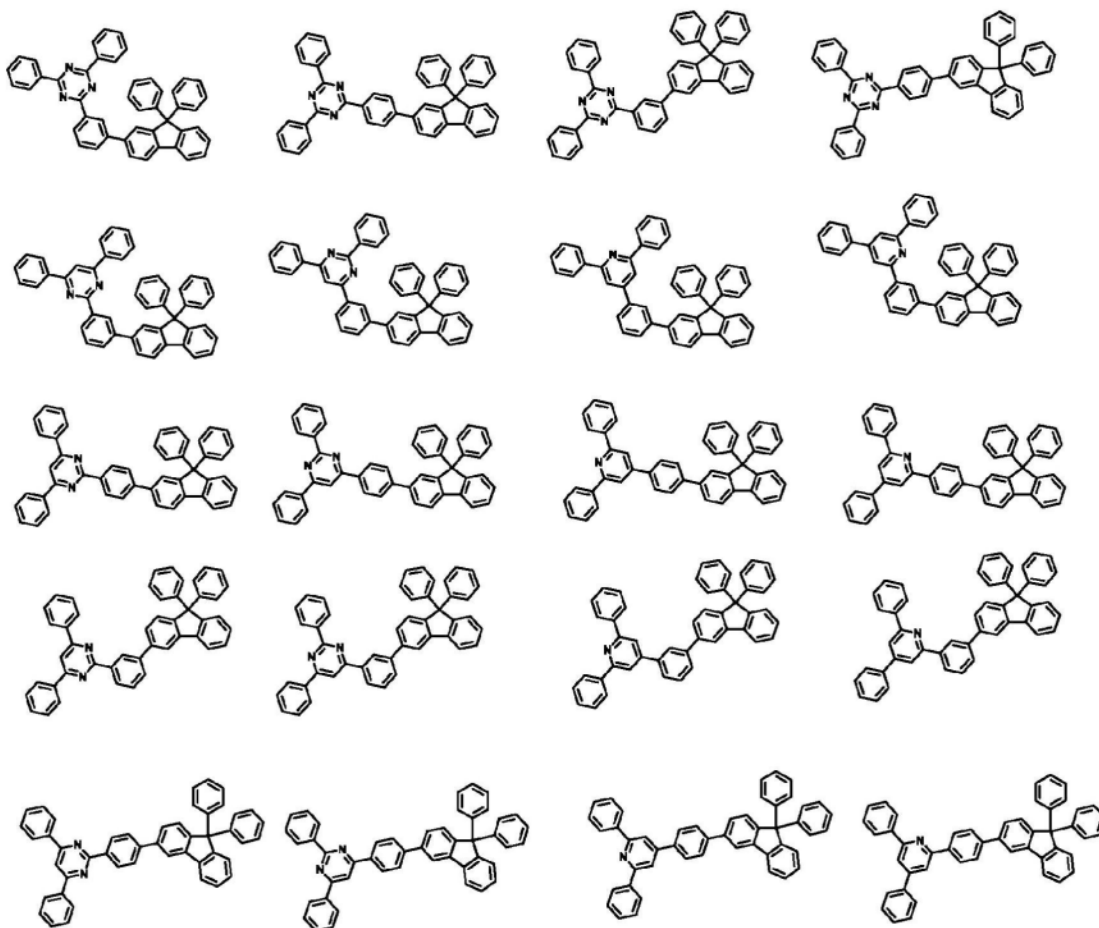
[0570] 在本说明书的一个实施方案中,化学式2由以下化合物中的任一者表示。

[0571]

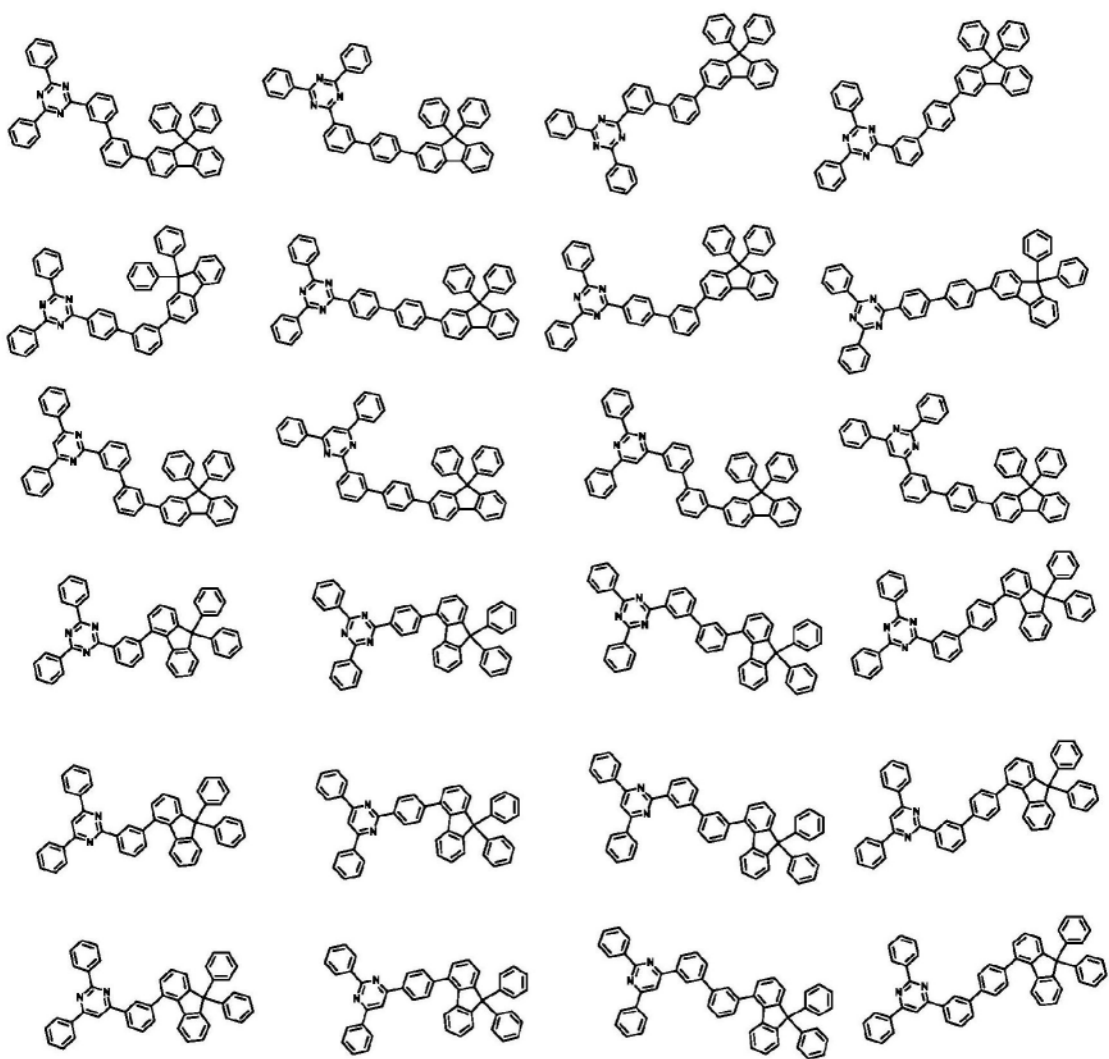




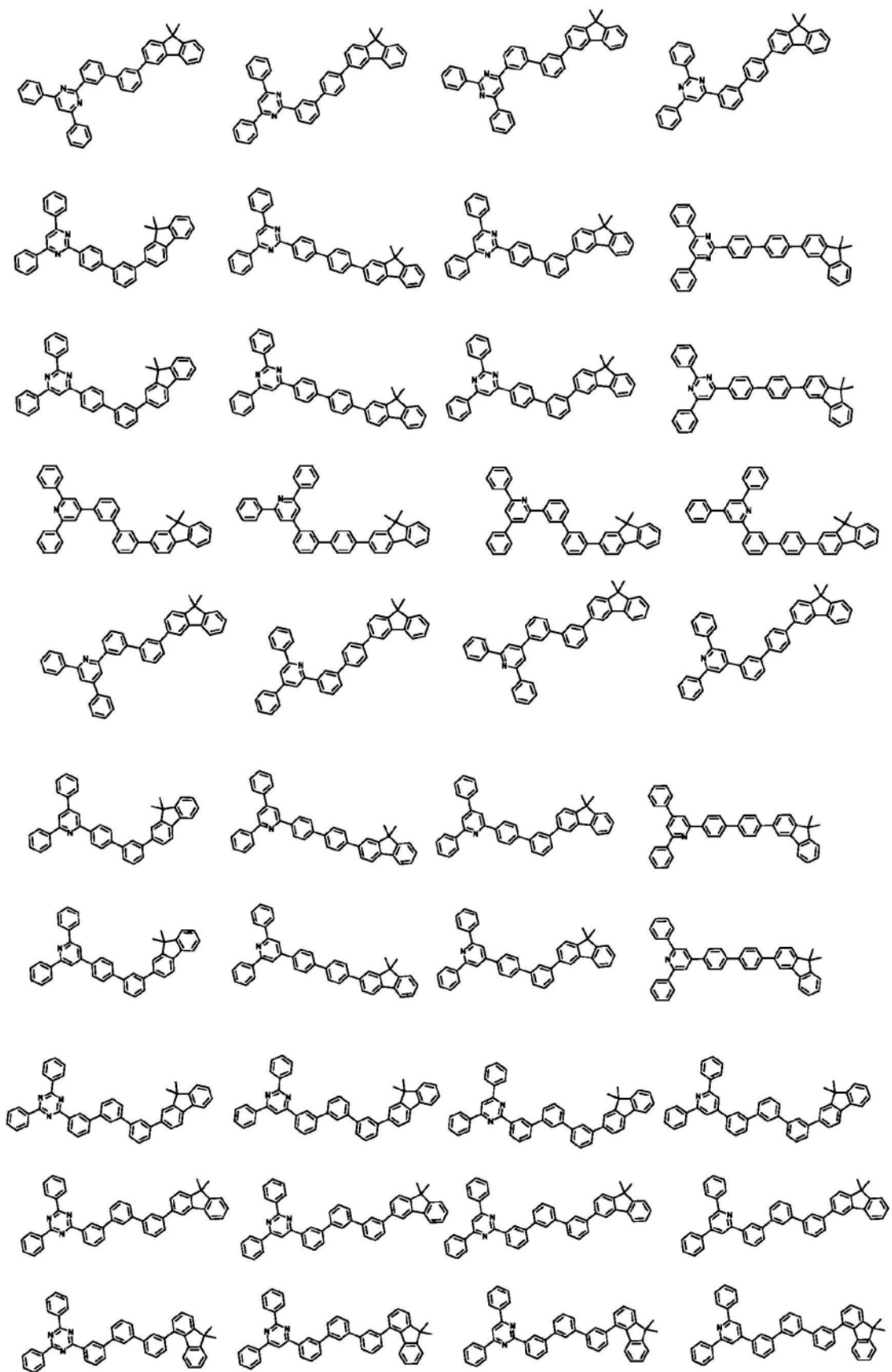
[0573]

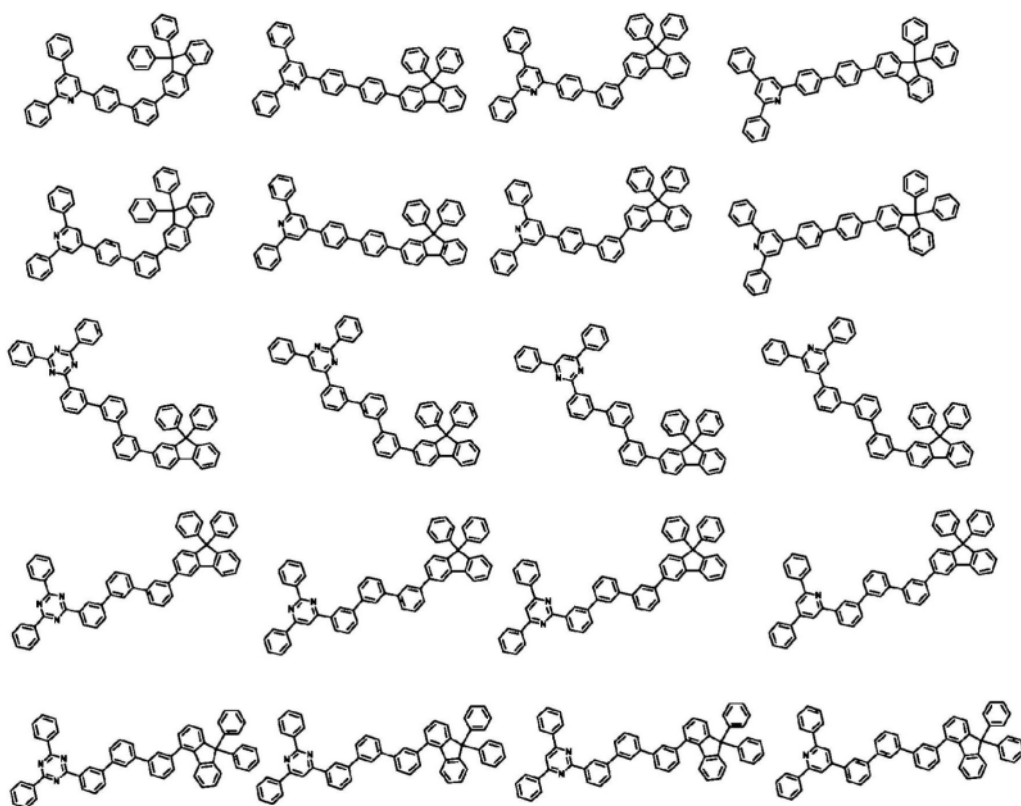
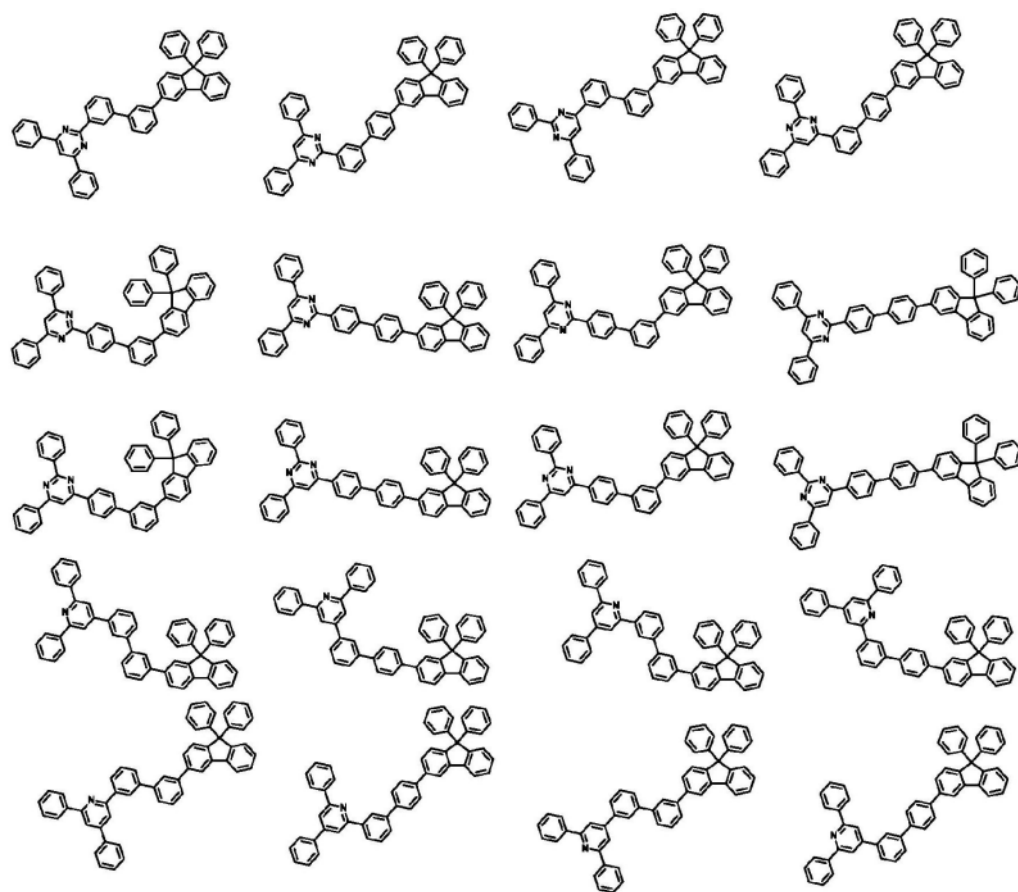


[0574]

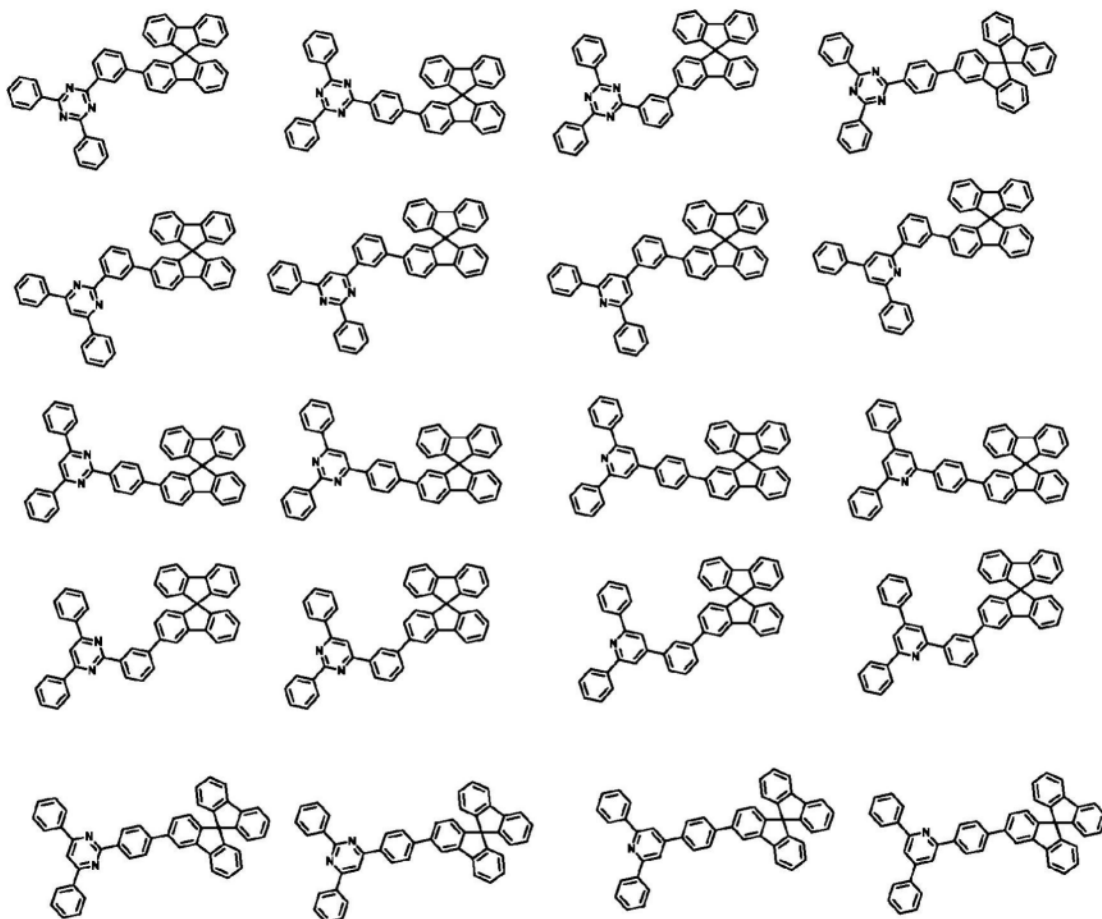


[0575]

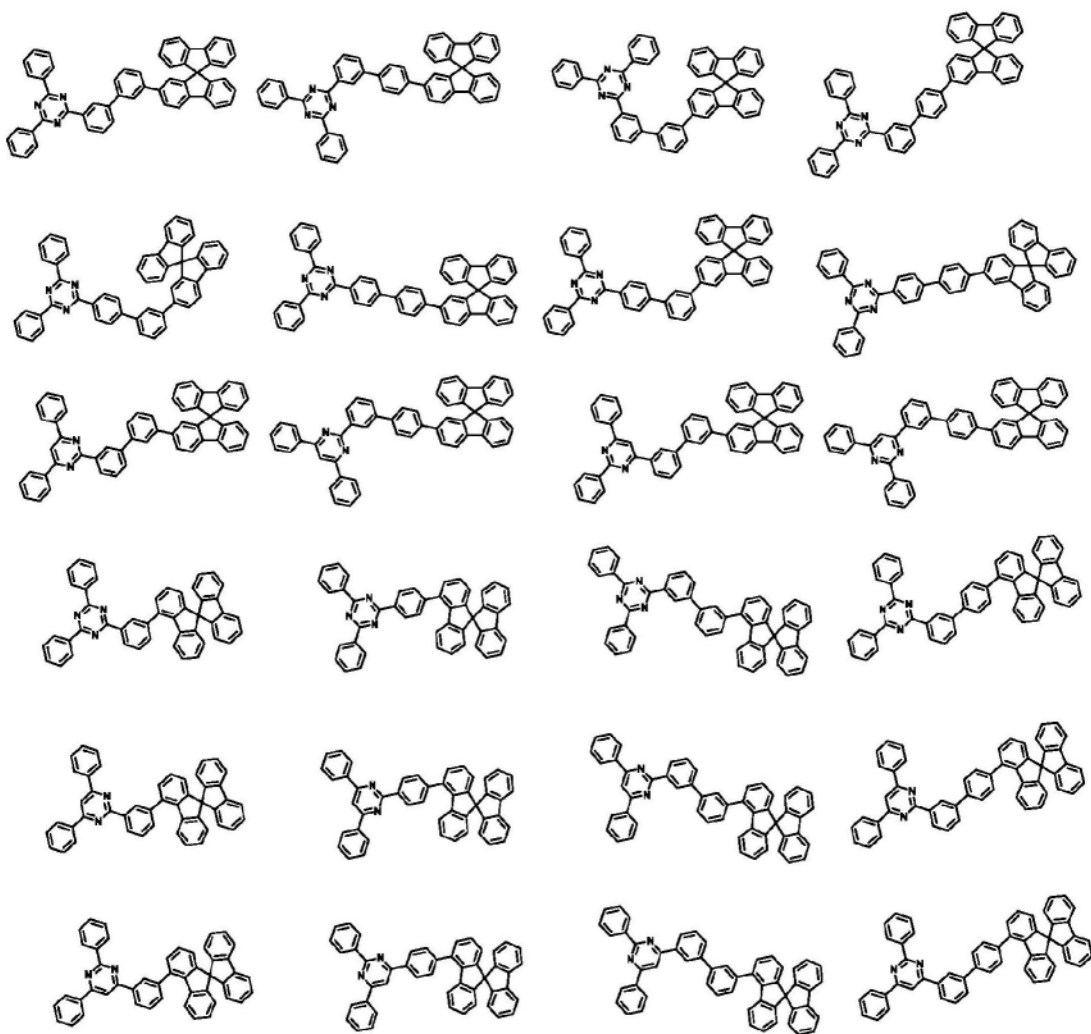


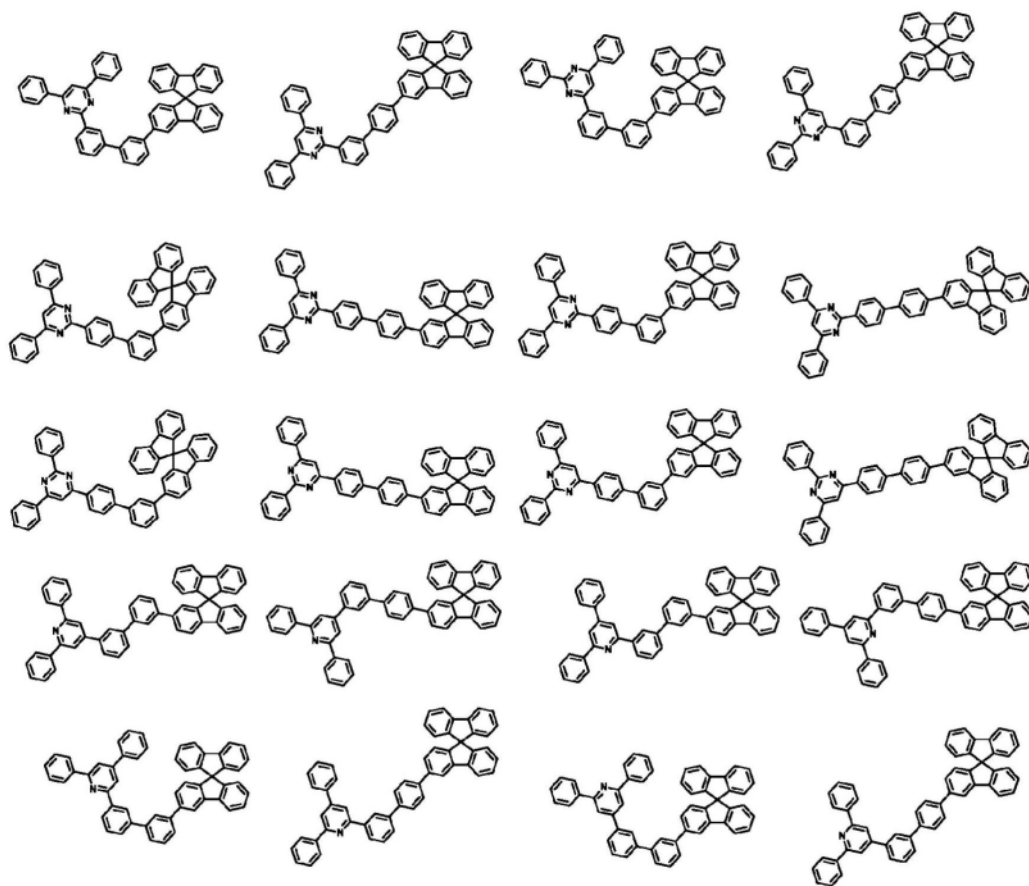


[0577]

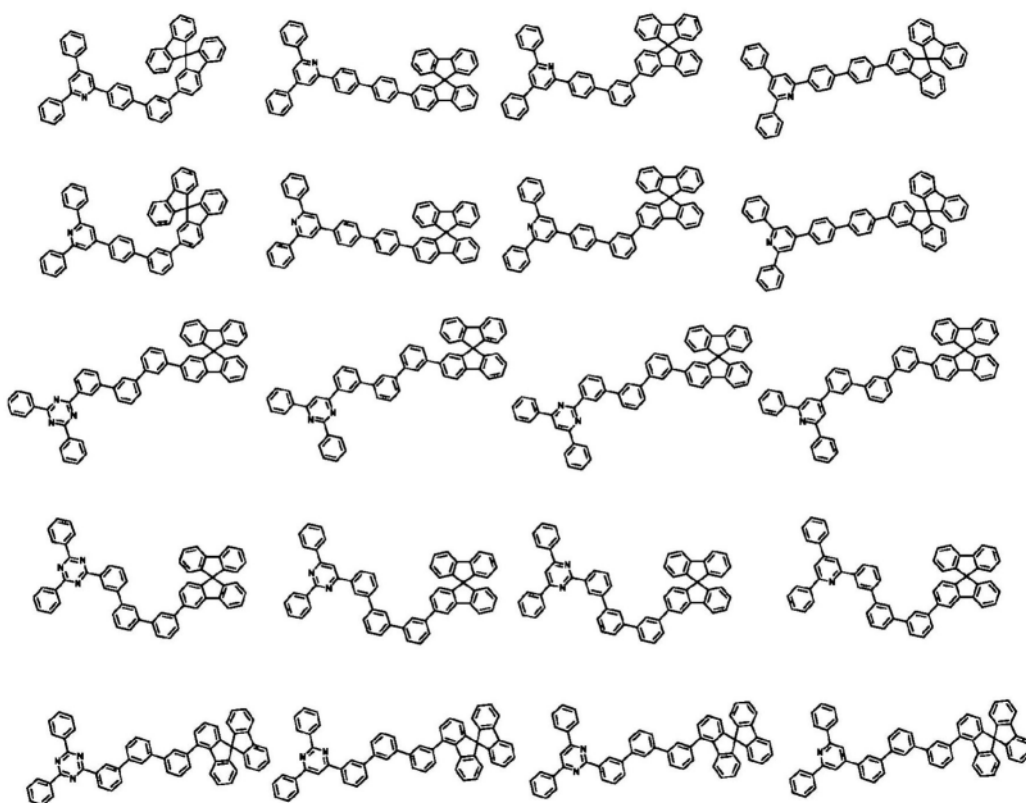


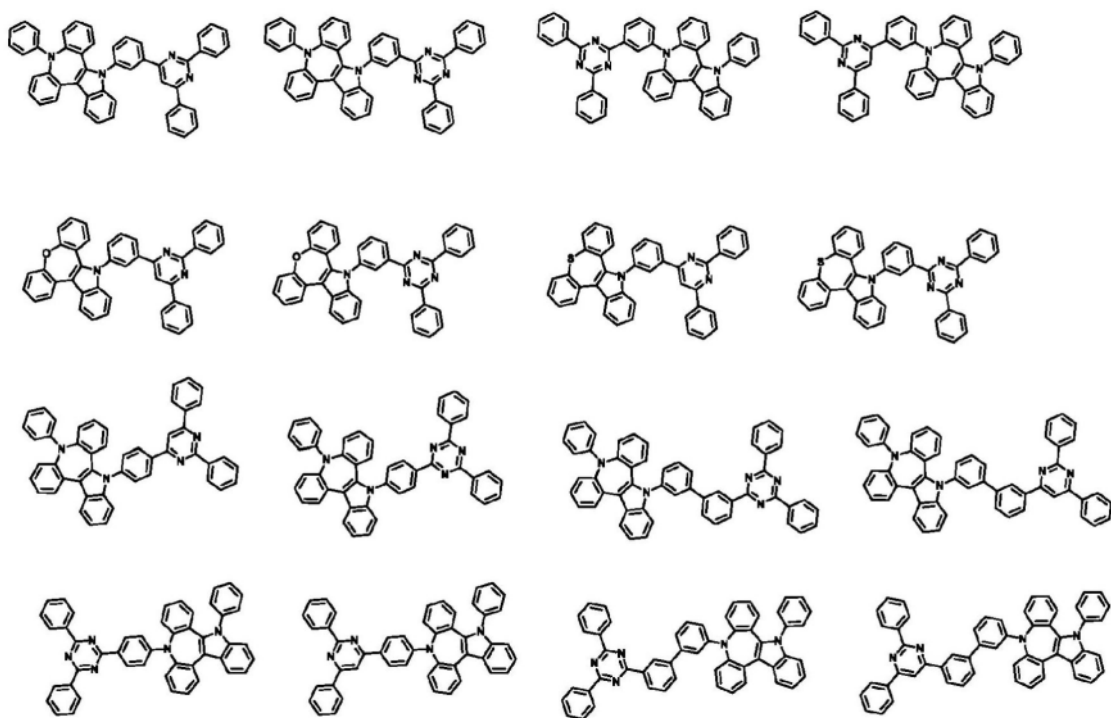
[0578]



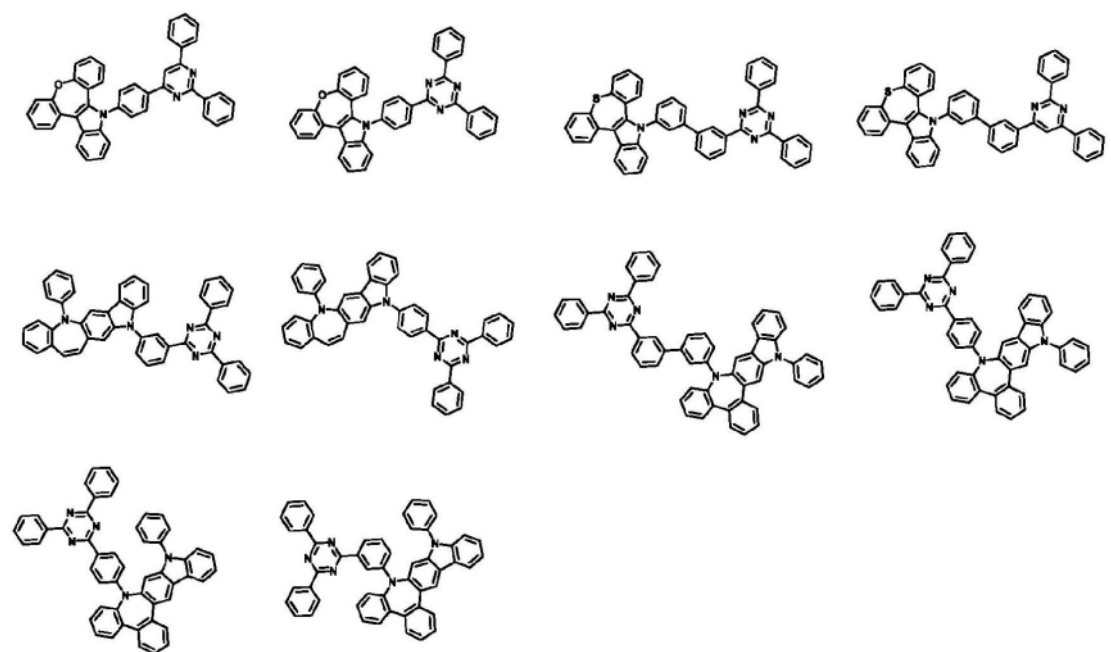


[0579]





[0580]



[0581] 根据本说明书的一个实施方案的由化学式1表示的化合物可以具有如稍后将描述的合成例中所制备的核结构。取代基可以使用本领域已知的方法键合,并且取代基的类型、位置和数目可以根据本领域已知的技术而变化。

[0582] 根据本说明书的一个实施方案的由化学式2表示的化合物可以具有如稍后将描述的合成例中所制备的核结构。取代基可以使用本领域已知的方法键合,并且取代基的类型、位置和数目可以根据本领域已知的技术而变化。

[0583] 在合成例中,示出了合成其中特定取代基键合至特定位置的化合物的过程,然而,对应于化学式1的范围和化学式2的范围的化合物可以使用本领域已知的起始材料、中间材

料等利用本领域已知的合成方法来合成。

[0584] 在本说明书中,具有各种能带隙的化合物可以通过向由化学式1表示的化合物和由化学式2表示的化合物的核结构中引入各种取代基来合成。此外,在本说明书中化合物的HOMO和LUMO能级也可以通过向具有如上结构的核结构中引入各种取代基来调节。

[0585] 此外,本说明书的一个实施方案提供了有机发光器件,其包含上述由化学式1表示的化合物和由化学式2表示的化合物。

[0586] 在下文中,将描述有机发光器件。

[0587] 根据本说明书的有机发光器件包括阳极;阴极;设置在阳极与阴极之间的发光层;以及设置在发光层与阴极之间的第一有机材料层,其中发光层包含由化学式1表示的化合物,以及第一有机材料层包含由化学式2表示的化合物。

[0588] 本说明书的有机发光器件可以使用常用的有机发光器件制造方法和材料来制造,不同之处在于使用上述化学式1的化合物形成发光层,以及使用化学式2的化合物形成第一有机材料层。

[0589] 在制造有机发光器件时,可以使用溶液涂覆法以及真空沉积法将化合物形成为有机材料层。在本文中,溶液涂覆法意指旋涂、浸涂、喷墨印刷、丝网印刷、喷洒法、辊涂等,但不限于此。

[0590] 本说明书的有机发光器件的有机材料层可以形成为单层结构,但也可以形成为其中层合有两个或更多个有机材料层的多层结构。例如,本公开内容的有机发光器件可以具有包括空穴传输层、空穴注入层、电子阻挡层、空穴传输和注入层、电子传输层、电子注入层、空穴阻挡层以及电子传输和注入层中的一者或更多者作为有机材料层的结构。然而,本说明书的有机发光器件的结构不限于此,并且可以包括较少数量或较多数量的有机材料层。

[0591] 在本说明书的有机发光器件中,第一有机材料层设置在发光层与阴极之间。

[0592] 在本说明书的有机发光器件中,第一有机材料层包括电子传输层或电子注入层,并且电子传输层或电子注入层可以包含上述由化学式2表示的化合物。

[0593] 在本说明书的另一个有机发光器件中,第一有机材料层包括空穴阻挡层,并且空穴阻挡层可以包含上述由化学式2表示的化合物。

[0594] 根据一个实施方案,包含化学式1的化合物的发光层的厚度为10 Å至500 Å,并且优选为20 Å至300 Å。

[0595] 根据一个实施方案,包含化学式2的化合物的第一有机材料层的厚度为10 Å至500 Å,并且优选为20 Å至100 Å。

[0596] 在本说明书的一个实施方案中,第一有机材料层为电子注入层、电子传输层或空穴阻挡层。

[0597] 在本说明书的有机发光器件中,第一有机材料层为空穴阻挡层。

[0598] 在本说明书的有机发光器件中,发光层可以包含由化学式1表示的化合物作为发光层的主体。

[0599] 根据另一个实施方案,发光层可以包含由化学式1表示的化合物作为发光层的掺杂剂。

[0600] 根据另一个实施方案,发光层可以包含两种或更多种类型的由化学式1表示的化合物作为发光层的掺杂剂。

[0601] 在本说明书的一个实施方案中,发光层包含由化学式1表示的化合物作为发光层的掺杂剂,并且还可以包含主体。

[0602] 在本说明书的一个实施方案中,发光层包含化学式1的化合物作为掺杂剂,并且可以包含荧光主体或磷光主体。

[0603] 在本文中,基于100重量份的主体,掺杂剂可以以1重量份至60重量份包含在内,并且优选以1重量份至10重量份包含在内。当主体的含量和掺杂剂的含量满足上述范围时,在有机电致发光器件中电压、效率和/或寿命特性得到改善。

[0604] 在本说明书的一个实施方案中,发光层包含基于蒽的化合物作为主体。

[0605] 除包含化学式1的化合物的发光层之外,根据本说明书的一个实施方案的有机发光器件还可以包括另外的发光层。在本文中,另外的发光层包含磷光掺杂剂或荧光掺杂剂,并且包含磷光主体或荧光掺杂剂。另外的发光层发射红色、绿色或蓝色光。

[0606] 发光层还可以包含主体材料,并且主体包括稠合芳族环衍生物、含杂环的化合物等。具体地,可以包括蒽衍生物、茈衍生物、萘衍生物、并五苯衍生物、菲化合物、荧蒽化合物等作为稠合芳族环衍生物,可以包括咪唑衍生物、二苯并咪唑衍生物、梯子型咪唑化合物、嘧啶衍生物、三嗪衍生物等作为含杂环的化合物,并且可以包括其两种或更多种类型的混合物,然而,主体材料不限于此。

[0607] 根据本说明书的一个实施方案,发光层包含一种或更多种类型的主体。

[0608] 根据本说明书的一个实施方案,发光层包含两种或更多种类型的混合主体。

[0609] 在本说明书的一个实施方案中,发光层包含由化学式1表示的化合物作为发光层的掺杂剂,并且还可以包含掺杂剂。

[0610] 在根据本说明书的一个实施方案的有机发光器件中,发光层还包含荧光掺杂剂或磷光掺杂剂。

[0611] 在本文中,作为还包含的掺杂剂,可以使用磷光材料例如(4,6-F2ppy)₂Irpac,或者荧光材料例如螺-DPVBi、螺-6P、二苯乙烯基苯(DSB)、二苯乙烯基亚芳基(DSA)、基于PFO的聚合物、基于PPV的聚合物、基于蒽的化合物、基于茈的化合物或基于硼的化合物,然而,还包含的掺杂剂不限于此。

[0612] 在另一个实施方案中,除由化学式1表示的化合物之外,发光层还可以包含另外的有机化合物、金属或金属化合物。

[0613] 在另一个实施方案中,除由化学式2表示的化合物之外,第一有机材料层还可以包含另外的有机化合物、金属或金属化合物。

[0614] 在本说明书的一个实施方案的有机发光器件中,发光层在400nm至500nm处具有最大发射峰。

[0615] 根据一个实施方案,第一有机材料层被设置成与发光层接触。在本文中,接触的含义是在第一有机材料层与发光层之间不存在另外的有机材料层。

[0616] 本说明书的有机发光器件还可以包括空穴传输层、空穴注入层、电子阻挡层、电子传输和注入层、电子传输层、电子注入层、空穴阻挡层以及空穴传输和注入层中的一个或更多个有机材料层。

[0617] 本说明书的有机发光器件还可以包括空穴传输层、空穴注入层、电子阻挡层、发光层、电子传输和注入层、电子传输层、电子注入层、空穴阻挡层以及空穴传输和注入层中的一个或更多个有机材料层。

[0618] 本说明书的有机发光器件还可以包括空穴传输层、空穴注入层、电子阻挡层、发光层、电子传输和注入层、电子传输层、电子注入层、空穴阻挡层以及空穴传输和注入层中的两个或更多个有机材料层。

[0619] 在本说明书的一个实施方案中,作为两个或更多个有机材料层,两者或更多者可以选自发光层、空穴传输层、空穴注入层、空穴传输和注入层、以及电子阻挡层。

[0620] 在本说明书的一个实施方案中,作为两个或更多个有机材料层,两者或更多者可以选自发光层、电子传输层、电子注入层、电子传输和注入层、电子控制层和空穴阻挡层。

[0621] 在本说明书的一个实施方案中,有机材料层包括两个或更多个发光层,并且两个或更多个发光层中的至少一者包含由化学式1表示的化合物。具体地,在本说明书的一个实施方案中,由化学式1表示的化合物可以包含在两个或更多个发光层中的一者中,或者可以包含在两个或更多个发光层中的每一者中。

[0622] 此外,在本说明书的一个实施方案中,当由化学式1表示的化合物包含在两个或更多个发光层中的每一者中时,除由化学式1表示的化合物之外的材料可以彼此相同或不同。

[0623] 在本说明书的一个实施方案中,有机材料层包括两个或更多个电子传输层,并且两个或更多个电子传输层中的至少一者包含由化学式2表示的化合物。具体地,在本说明书的一个实施方案中,由化学式2表示的化合物可以包含在两个或更多个电子传输层中的一者中,或者可以包含在两个或更多个电子传输层中的每一者中。

[0624] 此外,在本说明书的一个实施方案中,当由化学式2表示的化合物包含在两个或更多个电子传输层中的每一者中时,除由化学式2表示的化合物之外的材料可以彼此相同或不同。

[0625] 包含由化学式2表示的化合物的第一有机材料层还可以包含n型掺杂剂。作为n型掺杂剂,可以使用本领域已知的那些,例如,可以使用金属或金属配合物。例如,包含由化学式2表示的化合物的第一有机材料层还可以包含喹啉锂(LiQ)。根据一个实施方案,由化学式2表示的化合物和n型掺杂剂可以以2:8至8:2,例如4:6至6:4的重量比包含在内。根据一个实施方案,由化学式2表示的化合物和n型掺杂剂可以以1:1的重量比包含在内。

[0626] 在本说明书的一个实施方案中,有机发光器件可以为具有其中阳极、一个或更多个有机材料层、以及阴极连续地层合在基底上的结构的有机发光器件(正常型)。

[0627] 在本说明书的一个实施方案中,有机发光器件可以为具有其中阴极、一个或更多个有机材料层、以及阳极连续地层合在基底上的反向结构的有机发光器件(倒置型)。

[0628] 在本公开内容的有机发光器件中,有机材料层可以包括电子阻挡层,作为电子阻挡层,可以使用本领域已知的材料。

[0629] 有机发光器件可以具有例如如下的层合结构,然而,结构不限于此。

[0630] (1) 阳极/空穴传输层/发光层/阴极

[0631] (2) 阳极/空穴注入层/空穴传输层/发光层/阴极

[0632] (3) 阳极/空穴注入层/空穴缓冲层/空穴传输层/发光层/阴极

[0633] (4) 阳极/空穴传输层/发光层/电子传输层/阴极

- [0634] (5) 阳极/空穴传输层/发光层/电子传输层/电子注入层/阴极
- [0635] (6) 阳极/空穴注入层/空穴传输层/发光层/电子传输层/阴极
- [0636] (7) 阳极/空穴注入层/空穴传输层/发光层/电子传输层/电子注入层/阴极
- [0637] (8) 阳极/空穴注入层/空穴缓冲层/空穴传输层/发光层/电子传输层/阴极
- [0638] (9) 阳极/空穴注入层/空穴缓冲层/空穴传输层/发光层/电子传输层/电子注入层/阴极
- [0639] (10) 阳极/空穴传输层/电子阻挡层/发光层/电子传输层/阴极
- [0640] (11) 阳极/空穴传输层/电子阻挡层/发光层/电子传输层/电子注入层/阴极
- [0641] (12) 阳极/空穴注入层/空穴传输层/电子阻挡层/发光层/电子传输层/阴极
- [0642] (13) 阳极/空穴注入层/空穴传输层/电子阻挡层/发光层/电子传输层/电子注入层/阴极
- [0643] (14) 阳极/空穴传输层/发光层/空穴阻挡层/电子传输层/阴极
- [0644] (15) 阳极/空穴传输层/发光层/空穴阻挡层/电子传输层/电子注入层/阴极
- [0645] (16) 阳极/空穴注入层/空穴传输层/发光层/空穴阻挡层/电子传输层/阴极
- [0646] (17) 阳极/空穴注入层/空穴传输层/发光层/空穴阻挡层/电子传输层/电子注入层/阴极
- [0647] 本说明书的有机发光器件可以具有如图1和图2所示的结构,然而,结构不限于此。
- [0648] 图1示出了其中连续地层合有基底1、阳极2、发光层6、空穴阻挡层7和阴极9的有机发光器件的结构。在这样的结构中,由化学式1表示的化合物可以包含在发光层6中,由化学式2表示的化合物可以包含在空穴阻挡层7中。
- [0649] 图2示出了其中连续地层合有基底1、阳极2、空穴注入层3、第一空穴传输层4、第二空穴传输层5、发光层6、空穴阻挡层7、电子传输和注入层8以及阴极9的有机发光器件的结构。在这样的结构中,由化学式1表示的化合物可以包含在发光层6中,由化学式2表示的化合物可以包含在空穴阻挡层7或电子传输和注入层8中。
- [0650] 在本说明书的一个实施方案中,第一有机材料层和发光层可以相邻地设置。例如,第一有机材料层和发光层可以被设置成彼此物理接触。
- [0651] 当有机发光器件包括复数个有机材料层时,有机材料层可以由彼此相同或不同的材料形成。
- [0652] 有机材料层还可以包括空穴传输层、空穴注入层、电子阻挡层、电子传输和注入层、电子传输层、电子注入层、空穴阻挡层以及空穴传输和注入层中的一个或多个层。
- [0653] 有机材料层可以具有包括空穴注入层、空穴传输层、空穴注入和传输层、电子阻挡层、发光层、电子传输层、电子注入层、电子传输和注入层等的多层结构,但不限于此,并且可以具有单层结构。此外,使用各种聚合物材料,可以使用溶剂法例如旋涂、浸涂、刮涂、丝网印刷、喷墨印刷、热转印法等代替沉积法将有机材料层制备成较少数量的层。
- [0654] 阳极是注入空穴的电极,作为阳极材料,通常优选具有大的功函数的材料,使得空穴注入至有机材料层是顺利的。可用于本公开内容中的阳极材料的具体实例包括:金属,例如钪、铬、铜、锌和金,或其合金;金属氧化物,例如氧化锌、氧化铟、氧化铟锡(ITO)和氧化铟锌(IZO);金属和氧化物的组合,例如 $\text{ZnO}:\text{Al}$ 或 $\text{SnO}_2:\text{Sb}$;导电聚合物,例如聚(3-甲基噻吩)、聚[3,4-(亚乙基-1,2-二氧)噻吩](PEDOT)、聚吡咯和聚苯胺,但不限于此。

[0655] 阴极是注入电子的电极,作为阴极材料,通常优选具有小的功函数的材料,使得电子注入至有机材料层是顺利的。阴极材料的具体实例包括:金属,例如镁、钙、钠、钾、钛、钼、钇、锂、钽、铝、银、锡和铅,或其合金;多层结构材料,例如LiF/Al或LiO₂/Al;等等,但不限于此。

[0656] 空穴注入层是发挥将来自阳极的空穴顺利地注入至发光层的作用的层。空穴注入材料是能够在低电压下有利地接收来自阳极的空穴的材料,并且空穴注入材料的最高占据分子轨道(HOMO)优选在阳极材料的功函数与周围有机材料层的HOMO之间。空穴注入材料的具体实例包括金属卟啉、低聚噻吩、基于芳基胺的有机材料、基于六腈六氮杂苯并菲的有机材料、基于喹吖啶酮的有机材料、基于茈的有机材料、葱醌、基于聚苯胺和基于聚噻吩的导电聚合物等,但不限于此。空穴注入层的厚度可以为1nm至150nm。厚度为1nm或更大的空穴注入层具有防止空穴注入特性下降的优点,厚度为150nm或更小具有防止驱动电压增加以增强由空穴注入层太厚而引起的空穴迁移的优点。

[0657] 空穴传输层可以发挥顺利地传输空穴的作用。作为空穴传输材料,能够接收来自阳极或空穴注入层的空穴,使空穴移动至发光层,并具有高的空穴迁移率的材料是合适的。其具体实例包括基于芳基胺的有机材料、导电聚合物、同时具有共轭部分和非共轭部分的嵌段共聚物等,但不限于此。

[0658] 还可以在空穴注入层与空穴传输层之间设置空穴缓冲层,并且可以包含本领域已知的空穴注入或传输材料。

[0659] 电子阻挡层可以设置在空穴传输层与发光层之间。作为电子阻挡层,可以使用上述化合物、或本领域已知的材料。

[0660] 发光层可以发射红色、绿色或蓝色光,并且可以由磷光材料或荧光材料形成。发光材料是能够通过接收分别来自空穴传输层和电子传输层的空穴和电子并使空穴和电子结合而发射可见光区域内的光的材料,并且优选对荧光或磷光具有有利的量子效率的材料。其具体实例包括8-羟基-喹啉铝配合物(Alq₃);基于咔唑的化合物;二聚苯乙烯基化合物;BALq;10-羟基苯并喹啉-金属化合物;基于苯并噻唑、基于苯并噻唑和基于苯并咪唑的化合物;基于聚(对亚苯基亚乙烯基)(PPV)的聚合物;螺环化合物;聚芴;红荧烯;等等,但不限于此。

[0661] 作为发光层的主体材料,可以包括稠合芳族环衍生物、含杂环的化合物等。具体地,可以包括蒽衍生物、芘衍生物、萘衍生物、并五苯衍生物、菲化合物、荧蒽化合物等作为稠合芳族环衍生物,可以包括咔唑衍生物、二苯并呋喃衍生物、梯子型呋喃化合物、嘧啶衍生物等作为含杂环的化合物,然而,主体材料不限于此。

[0662] 当发光层发射红色光时,可以使用磷光材料例如双(1-苯基异喹啉)乙酰丙酮铱(PIr(acac))、双(1-苯基喹啉)乙酰丙酮铱(PQIr(acac))、三(1-苯基喹啉)铱(PQIr)或八乙基卟啉铂(PtOEP),或者荧光材料例如三(8-羟基喹啉)铝(Alq₃)作为发光掺杂剂,然而,发光掺杂剂不限于此。当发光层发射绿色光时,可以使用磷光材料例如面式三(2-苯基吡啶)铱(Ir(ppy)₃),或者荧光材料例如三(8-羟基喹啉)铝(Alq₃)、基于蒽的化合物、基于芘的化合物或基于硼的化合物作为发光掺杂剂,然而,发光掺杂剂不限于此。当发光层发射蓝色光时,可以使用磷光材料例如(4,6-F₂ppy)₂Irpic,或者荧光材料例如螺-DPVBi、螺-6P、二苯乙烯基苯(DSB)、二苯乙烯基亚芳基(DSA)、基于PFO的聚合物、基于PPV的聚合物、基于蒽

的化合物、基于芘的化合物或基于硼的化合物作为发光掺杂剂,然而,发光掺杂剂不限于此。

[0663] 空穴阻挡层可以设置在电子传输层与发光层之间,并且可以使用本领域已知的材料。

[0664] 电子传输层可以发挥顺利地传输电子的作用。作为电子传输材料,能够有利地接收来自阴极的电子,使电子移动至发光层,并具有高的电子迁移率的材料是合适的。其具体实例包括上述化合物;8-羟基喹啉的Al配合物;包含Alq₃的配合物;有机自由基化合物;羟基黄酮-金属配合物;等等,但不限于此。电子传输层的厚度可以为1nm至50nm。厚度为1nm或更大的电子传输层具有防止电子传输特性下降的优点,厚度为50nm或更小具有防止驱动电压增加以增强由电子传输层太厚而引起的电子迁移的优点。

[0665] 电子注入层可以发挥顺利地注入电子的作用。作为电子注入材料,这样的化合物是优选的:其具有电子传输能力,具有注入来自阴极的电子的效应,对发光层或发光材料具有优异的电子注入效应,并防止发光层中产生的激子移动至空穴注入层,并且除此之外还具有优异的薄膜形成能力。其具体实例可以包括茚酮、蒽酮二甲烷、联苯酮、噻喃二氧化物、**噻唑**、**噻**二唑、三唑、咪唑、茚四羧酸、亚苄基甲烷、蒽酮等及其衍生物,金属配合物化合物,含氮5元环衍生物等,但不限于此。

[0666] 金属配合物化合物包括8-羟基喹啉锂、双(8-羟基喹啉)锌、双(8-羟基喹啉)铜、双(8-羟基喹啉)锰、三(8-羟基喹啉)铝、三(2-甲基-8-羟基喹啉)铝、三(8-羟基喹啉)镓、双(10-羟基苯并[h]喹啉)铍、双(10-羟基苯并[h]喹啉)锌、双(2-甲基-8-喹啉)氯镓、双(2-甲基-8-喹啉)(邻甲酚)镓、双(2-甲基-8-喹啉)(1-萘酚)铝、双(2-甲基-8-喹啉)(2-萘酚)镓等,但不限于此。

[0667] 空穴阻挡层是阻挡空穴到达阴极的层,并且通常可以在与空穴注入层相同的条件下形成。其具体实例可以包括**噻**二唑衍生物、三唑衍生物、菲咯啉衍生物、BCP、铝配合物等,但不限于此。

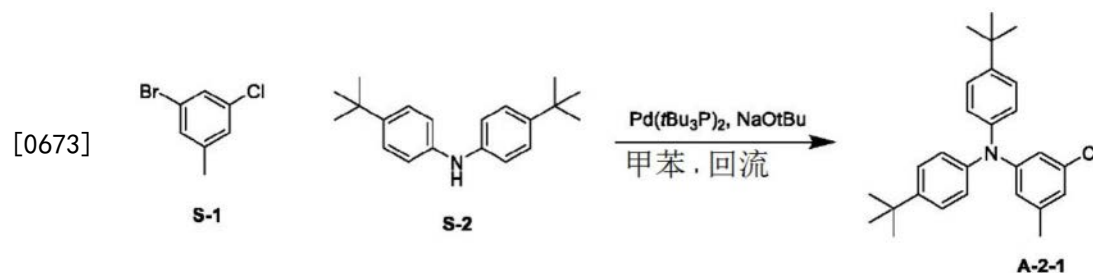
[0668] 根据使用的材料,根据本公开内容的有机发光器件可以为顶部发射型、底部发射型或双发射型。

[0669] 发明实施方式

[0670] 在下文中,将参照实施例详细地描述本说明书。然而,根据本说明书的实施例可以被修改成各种其他形式,并且本申请的范围不应被解释为限于以下描述的实施例。提供本申请的实施例以向本领域普通技术人员更充分地描述本说明书。

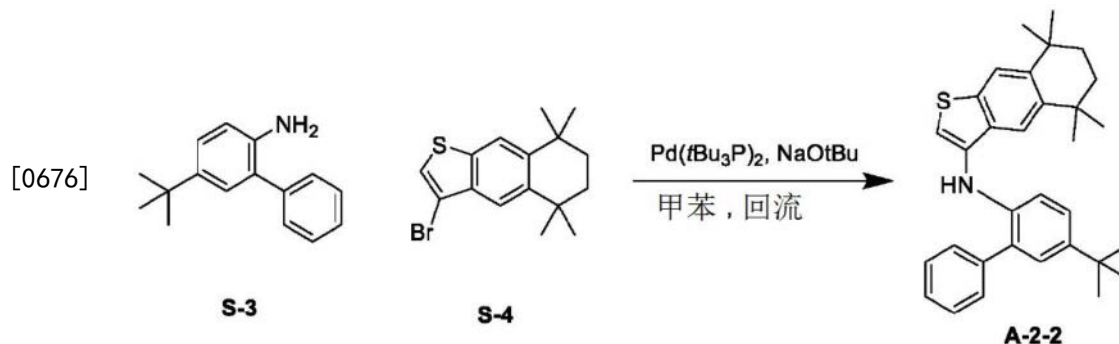
[0671] <合成例>

[0672] 合成例1. 化合物A-2-1的合成



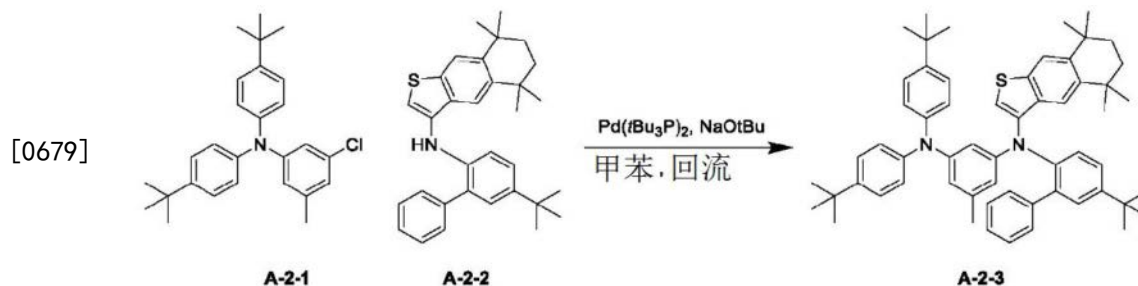
[0674] 在三颈烧瓶中,在将1-溴-3-氯-5-甲基苯(146mmol,30g,1当量)和双(4-(叔丁基)苯基)胺(146mmol,41.1g,1当量)溶解在甲苯(0.2M,730ml)中之后,向其中引入叔丁醇钠(219mmol,21g,1.5当量)和双(三-叔丁基膦)钯(0)(1.46mmol,0.75g,0.01当量),将所得物在氩气气氛下在回流下搅拌1小时。当反应结束时,将所得物冷却至室温,然后向其中引入蒸馏水,将反应溶液转移至分液漏斗并萃取。将萃取物用 MgSO_4 干燥并浓缩,将样品使用硅胶柱色谱法纯化以获得化合物A-2-1(49g,产率83%, $\text{MS}[\text{M}+\text{H}]^+=405$)。

[0675] 合成例2.化合物A-2-2的合成



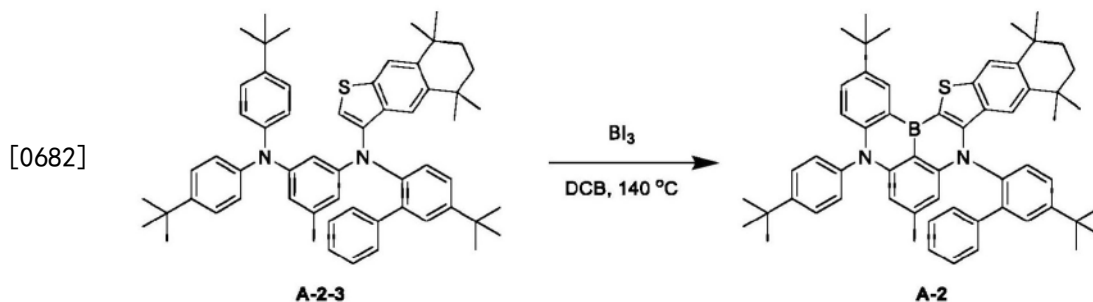
[0677] 在三颈烧瓶中,在将5-叔丁基-[1,1'-联苯]-2-胺(66.6mmol,15g,1当量)和3-溴-5,5,8,8-四甲基-5,6,7,8-四氢萘并[2,3-b]噻吩(66.6mmol,21.5g,1当量)溶解在甲苯(0.2M,335ml)中之后,向其中引入叔丁醇钠(99.9mmol,9.60g,1.5当量)和双(三-叔丁基膦)钯(0)(0.666mmol,0.340g,0.01当量),将所得物在氩气气氛下在回流下搅拌12小时。当反应结束时,将所得物冷却至室温,然后向其中引入 H_2O ,将反应溶液转移至分液漏斗并萃取。将萃取物用 MgSO_4 干燥并浓缩,将样品使用硅胶柱色谱法纯化以获得化合物A-2-2(24.2g,产率78%, $\text{MS}[\text{M}+\text{H}]^+=468$)。

[0678] 合成例3.化合物A-2-3的合成



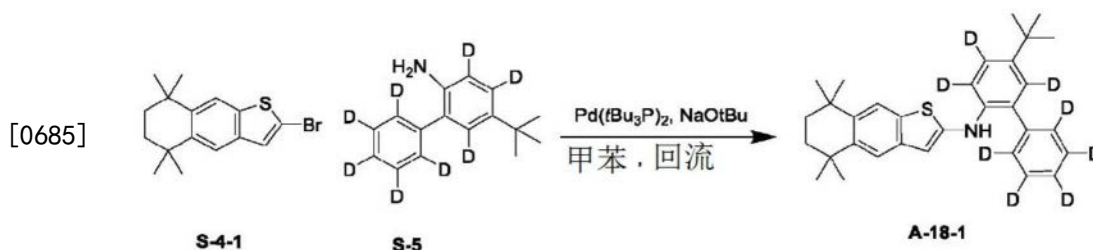
[0680] 在三颈烧瓶中,在将化合物A-2-1(49.3mmol,20g,1当量)和化合物A-2-2(49.3mmol,23.0g,1当量)溶解在甲苯(0.2M,250ml)中之后,向其中引入叔丁醇钠(73.9mmol,7.10g,1.5当量)和双(三-叔丁基膦)钯(0)(0.493mmol,0.252g,0.01当量),将所得物在氩气气氛下在回流下搅拌12小时。当反应结束时,将所得物冷却至室温,然后向其中引入 H_2O ,将反应溶液转移至分液漏斗并萃取。将萃取物用 MgSO_4 干燥并浓缩,将样品使用硅胶柱色谱法纯化以获得化合物A-2-3(36.1g,产率88%, $\text{MS}[\text{M}+\text{H}]^+=837$)。

[0681] 合成例4.化合物A-2的合成



[0683] 在三颈烧瓶中,在将化合物A-2-3 (43.1mmol, 36.1g, 1当量) 溶解在1,2-二氯苯 (0.1M, 430ml) 中之后,向其中引入三碘化硼 (69.0mmol, 27.0g, 1.6当量),将所得物在氩气气氛下在140℃下搅拌3小时。将反应物质冷却至0℃,在向其中添加N,N-二异丙基乙胺 (388mmol, 50.2g, 9当量) 之后,将所得物搅拌1小时。将所得物使用甲苯和水在分液漏斗中萃取。将萃取物用MgSO₄干燥并浓缩,将样品使用硅胶柱色谱法纯化,然后经历升华纯化以获得化合物A-2 (7.1g, 产率19%, MS [M+H]⁺ = 603)。

[0684] 合成例5. 化合物A-18-1的合成



[0686] 以与合成例2中相同的方式获得化合物A-18-1 (18.2g, 产率95%, MS [M+H]⁺ = 476), 不同之处在于使用化合物S-4-1 (13g, 1当量) 和S-5代替化合物S-3和S-4。

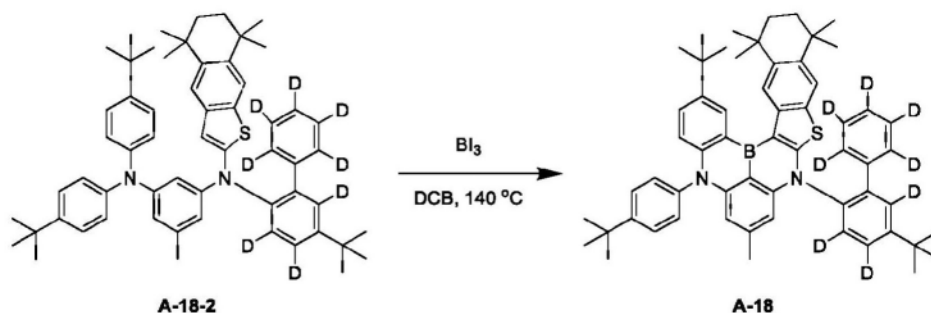
[0687] 合成例6. 化合物A-18-2的合成



[0689] 以与合成例3中相同的方式获得化合物A-18-2 (18.4g, 产率59%, MS [M+H]⁺ = 845), 不同之处在于使用化合物A-2-1 (15g, 1当量) 和A-18-1代替化合物A-2-1和A-2-2。

[0690] 合成例7. 化合物A-18的合成

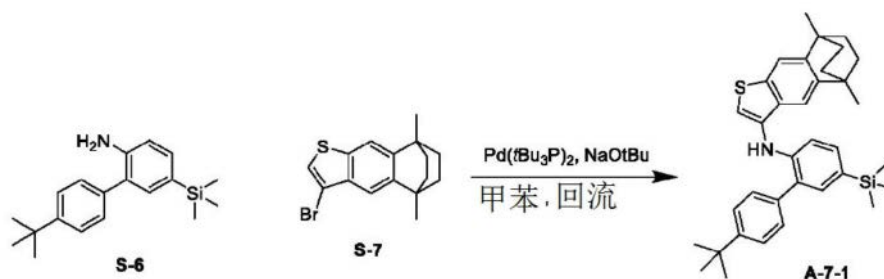
[0691]



[0692] 以与合成例4中相同的方式获得化合物A-18(3.2g,产率59%,MS[M+H]⁺=853),不同之处在于使用化合物A-18-2(18.4g,1当量)代替化合物A-2-3。

[0693] 合成例8.化合物A-7-1的合成

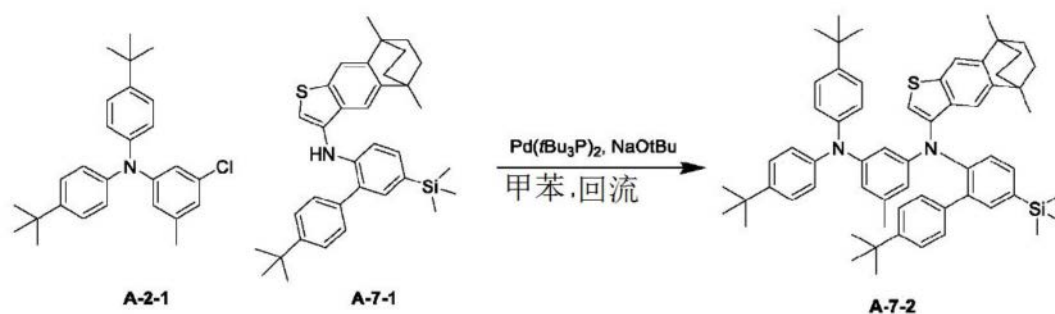
[0694]



[0695] 以与合成例2中相同的方式获得化合物A-7-1(14.6g,产率62%,MS[M+H]⁺=538),不同之处在于使用化合物S-6(13g,1当量)和S-7代替化合物S-3和S-4。

[0696] 合成例9.化合物A-7-2的合成

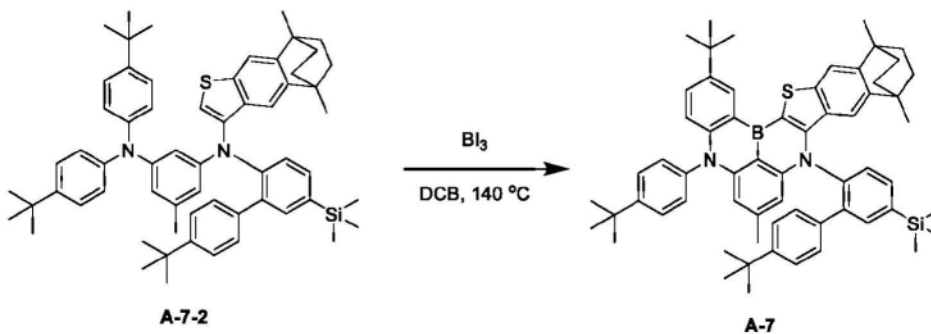
[0697]



[0698] 以与合成例3中相同的方式获得化合物A-7-2(16.5g,产率74%,MS[M+H]⁺=907),不同之处在于使用化合物A-2-1(10g,1当量)和A-7-1代替化合物A-2-1和A-2-2。

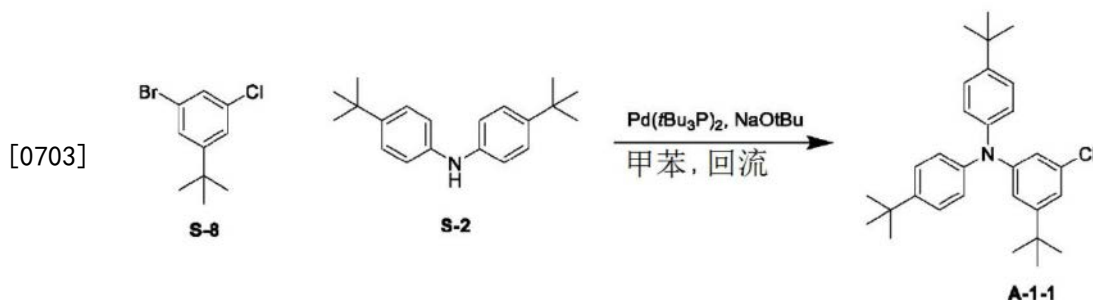
[0699] 合成例10.化合物A-7的合成

[0700]



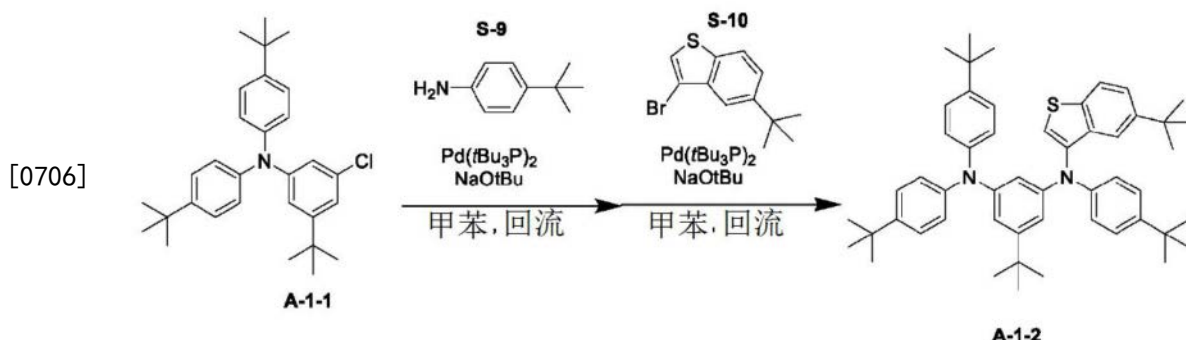
[0701] 以与合成例4中相同的方式获得化合物A-7(2.8g,产率17%,MS[M+H]⁺=915),不同之处在于使用化合物A-7-2(16.5g,1当量)代替化合物A-2-3。

[0702] 合成例10-2. 化合物A-1-1的合成



[0704] 以与合成例1中相同的方式获得化合物A-1-1 (50.4g, 产率74%, $\text{MS}[\text{M}+\text{H}]^+=448$), 不同之处在于使用化合物S-8(1当量)代替化合物S-1。

[0705] 合成例11. 化合物A-1-2的合成

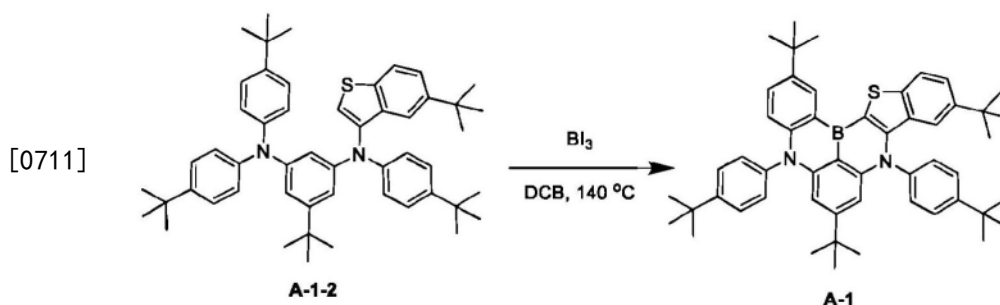


[0707] 在将化合物A-1-1 (29.4g, 49.6mmol, 1当量)、4-(叔丁基)苯胺 (7.78g, 52.1mmol, 1.05当量)、 $\text{Pd}(\text{Pt}-\text{Bu}_3)_2$ (0.25g, 0.01当量) 和 $\text{NaOt}-\text{Bu}$ (7.2g, 1.5当量) 溶解在甲苯 (250ml) 中之后, 将所得物在回流下搅拌。当反应结束时, 将所得物冷却至室温, 然后将反应物质转移至分液漏斗并萃取。将所得物用 MgSO_4 干燥, 过滤并浓缩, 并在没有进一步纯化的情况下进行下一步反应。

[0708] 在将化合物S-10 (11.1g, 51.1mmol, 1.5当量)、 $\text{Pd}(\text{Pt}-\text{Bu}_3)_2$ (0.25g, 0.1当量) 和 $\text{NaOt}-\text{Bu}$ (7.2g, 1.5当量) 溶解在甲苯 (204ml) 中之后, 将所得物在回流下搅拌。当反应结束时, 将所得物冷却至室温, 然后将反应物质转移至分液漏斗并萃取。将所得物用 MgSO_4 干燥, 过滤并浓缩, 并使用柱色谱法纯化以获得化合物A-1-2 (22.9g, 55%)。

[0709] $\text{MS}:[\text{M}+\text{H}]^+=749$

[0710] 合成例12. 化合物A-1的合成



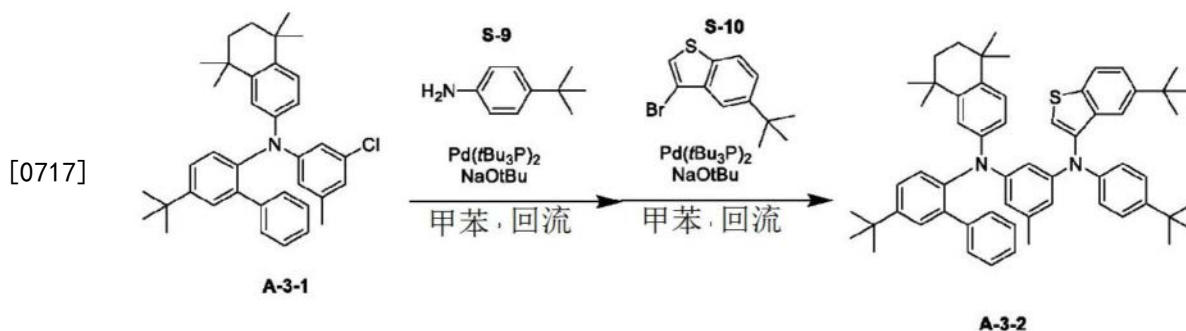
[0712] 以与合成例4中相同的方式获得化合物A-1 (2.8g, 产率17%, $\text{MS}[\text{M}+\text{H}]^+=757$), 不同之处在于使用化合物A-1-2 (16.5g, 1当量) 代替化合物A-2-3。

[0713] 合成例13. 化合物A-3-1的合成



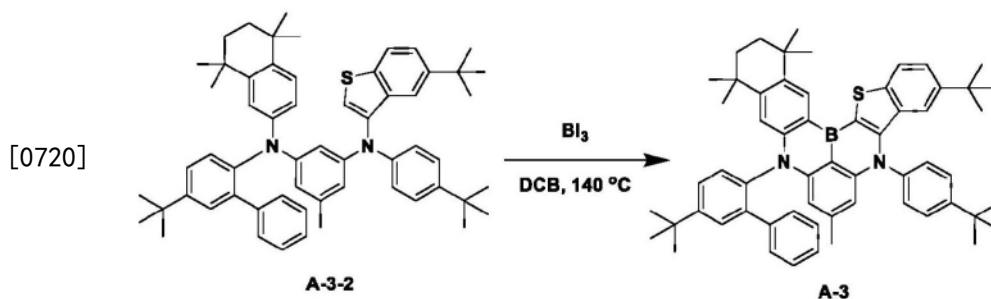
[0715] 以与合成例1中相同的方式获得化合物A-3-1 (17.9g, 产率68%, $\text{MS}[\text{M}+\text{H}]^+ = 536$), 不同之处在于使用化合物S-11 (20.3g, 1当量) 代替化合物S-2。

[0716] 合成例14. 化合物A-3-2的合成



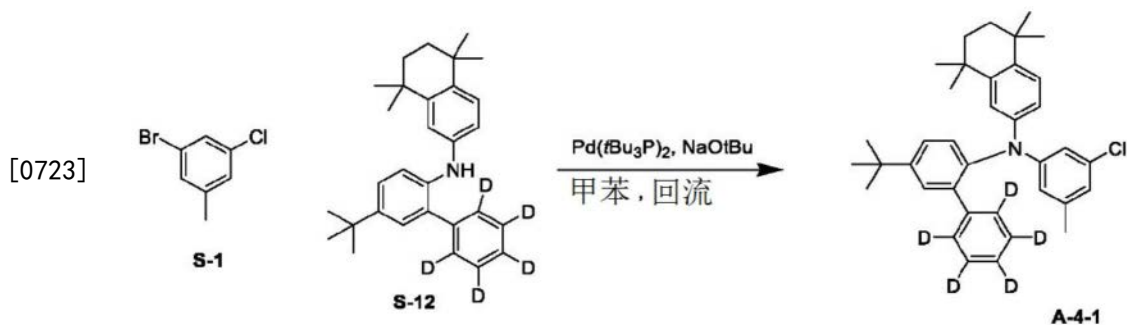
[0718] 以与合成例11中相同的方式获得化合物A-3-2 (9.6g, 产率57%, $\text{MS}[\text{M}+\text{H}]^+ = 838$), 不同之处在于使用化合物A-3-1 (1当量) 代替化合物A-1-1。

[0719] 合成例15. 化合物A-3的合成



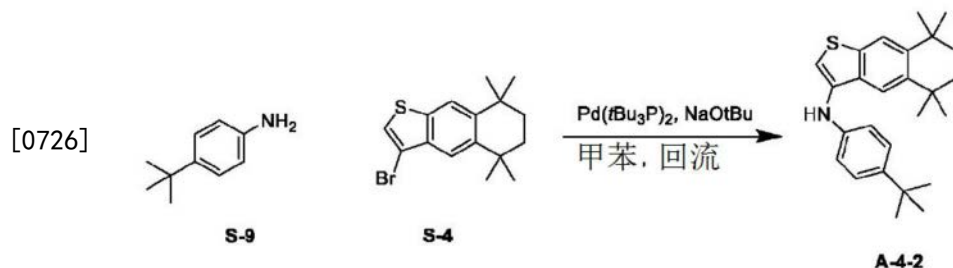
[0721] 以与合成例4中相同的方式获得化合物A-3 (3.1g, 产率22%, $\text{MS}[\text{M}+\text{H}]^+ = 846$), 不同之处在于使用化合物A-3-2 (1当量) 代替化合物A-2-3。

[0722] 合成例15. 化合物A-4-1的合成



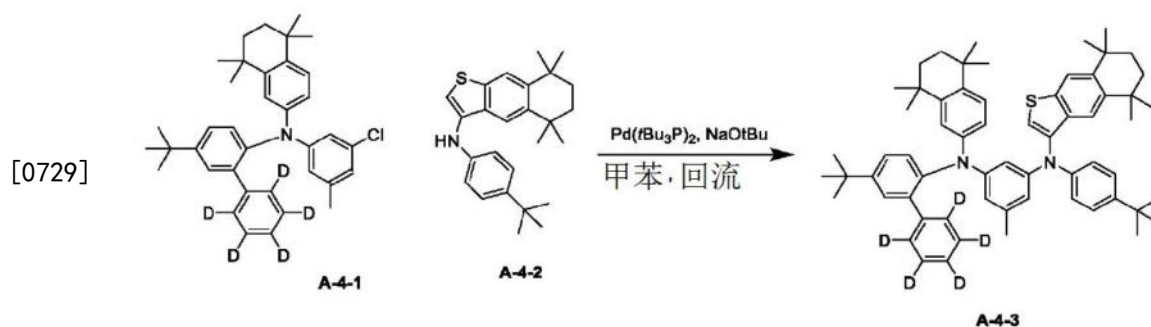
[0724] 以与合成例1中相同的方式获得化合物A-4-1(17.9g,产率68%, $MS[M+H]^+=541$),不同之处在于使用化合物S-12(20.3g,1当量)代替化合物S-2。

[0725] 合成例16.化合物A-4-2的合成



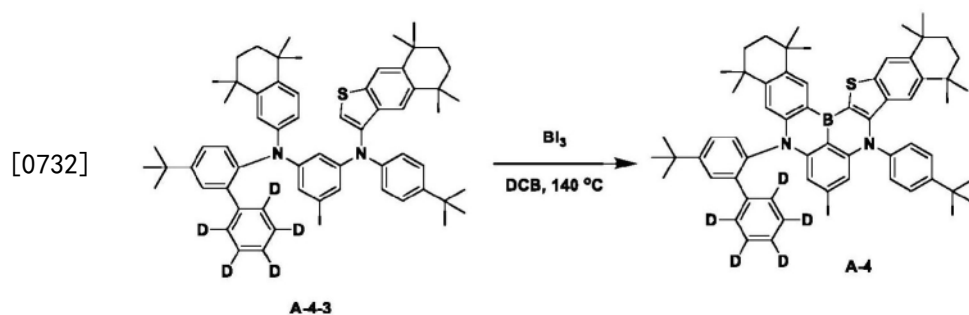
[0727] 以与合成例2中相同的方式获得化合物A-4-2(15.5g,产率59%, $MS[M+H]^+=392$),不同之处在于使用化合物S-9(10g,1当量)代替化合物S-3。

[0728] 合成例17.化合物A-4-3的合成



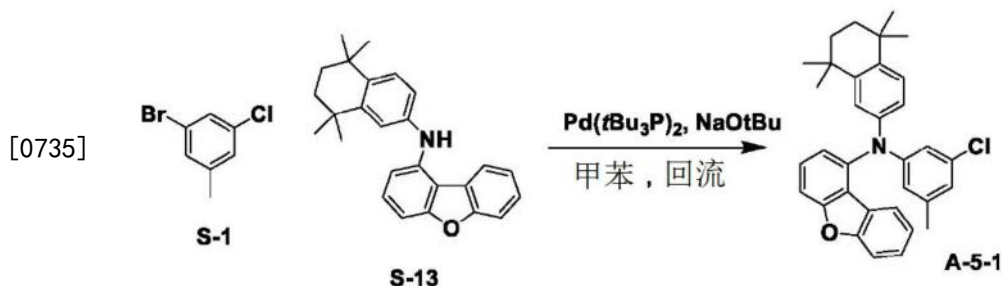
[0730] 以与合成例3中相同的方式获得化合物A-4-3(18.8g,产率71%, $MS[M+H]^+=857$),不同之处在于使用化合物A-4-1(16g,1当量)和A-4-2(11.6g,1当量)代替化合物A-2-1和A-2-2。

[0731] 合成例18.化合物A-4的合成



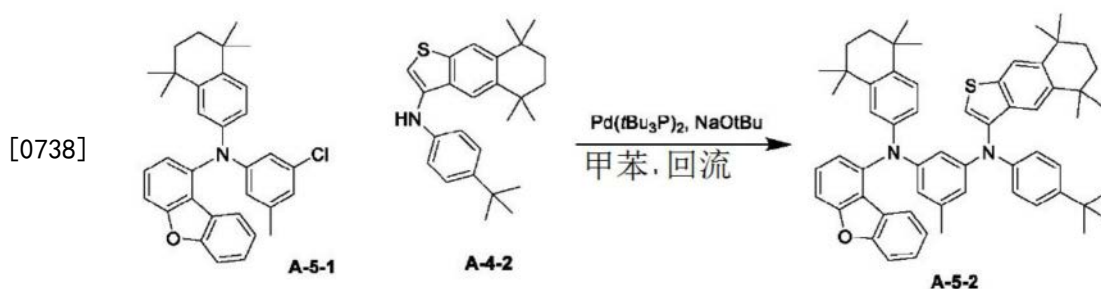
[0733] 以与合成例4中相同的方式获得化合物A-4(4.2g,产率23%, $MS[M+H]^+=905$),不同之处在于使用化合物A-4-3(18g,1当量)代替化合物A-2-3。

[0734] 合成例19.化合物A-5-1的合成



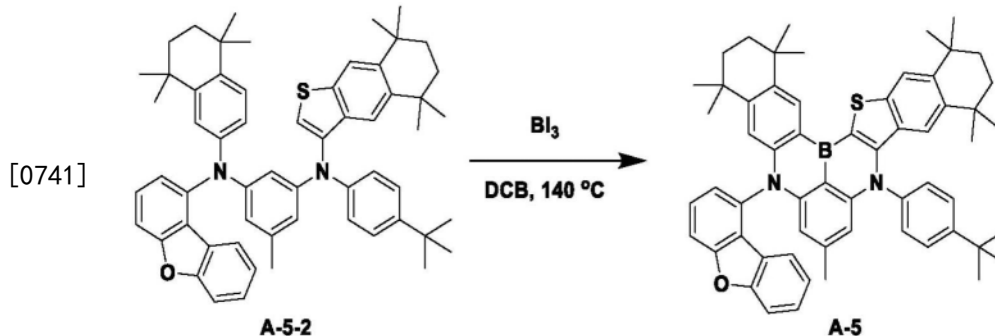
[0736] 以与合成例1中相同的方式获得化合物A-5-1(18.5g,产率77%,MS[M+H]⁺=494),不同之处在于使用化合物S-13(18g,1当量)代替化合物S-2。

[0737] 合成例20.化合物A-5-2的合成



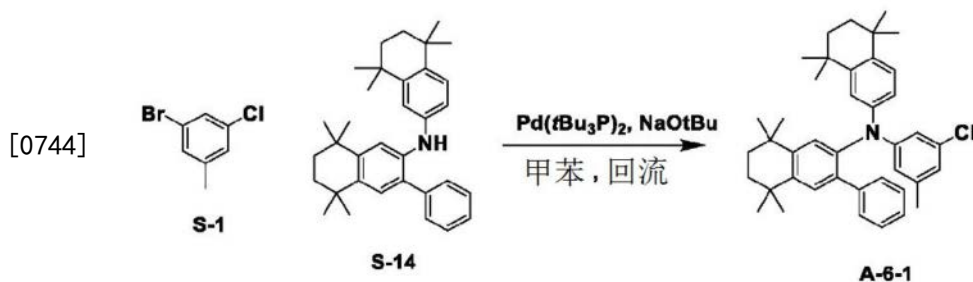
[0739] 以与合成例3中相同的方式获得化合物A-5-2(9.9g,产率64%,MS[M+H]⁺=849),不同之处在于使用化合物A-5-1(9g,1当量)和A-4-2(7.1g,1当量)代替化合物A-2-1和A-2-2。

[0740] 合成例21.化合物A-5的合成



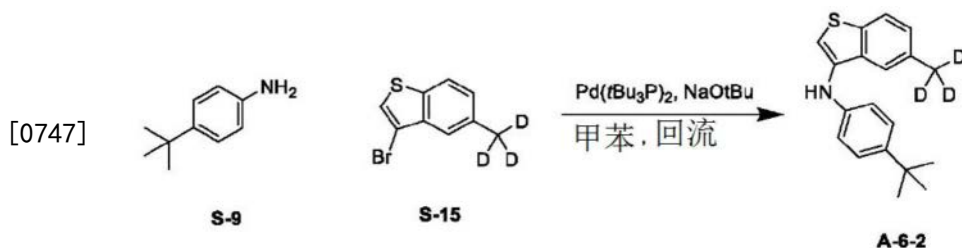
[0742] 以与合成例4中相同的方式获得化合物A-5(3.5g,产率35%,MS[M+H]⁺=857),不同之处在于使用化合物A-5-2(9.9g,1当量)代替化合物A-2-3。

[0743] 合成例22.化合物A-6-1的合成



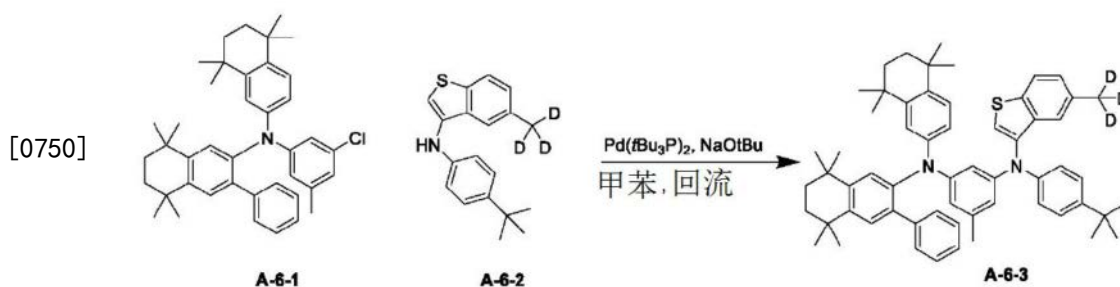
[0745] 以与合成例1中相同的方式获得化合物A-6-1(124.1g,产率84%,MS[M+H]⁺=590),不同之处在于使用化合物S-14(22.7g,1当量)代替化合物S-2。

[0746] 合成例23. 化合物A-6-2的合成



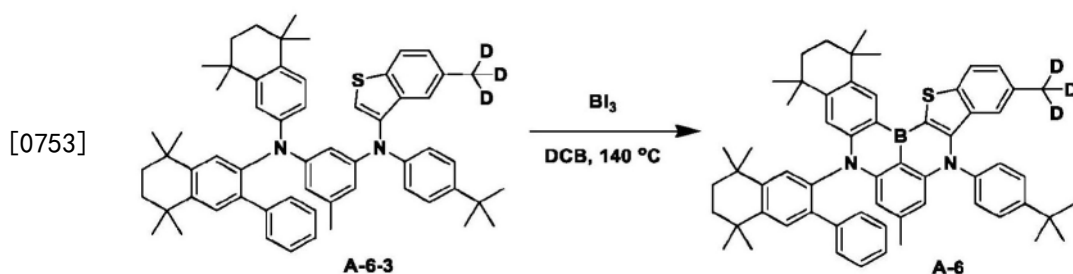
[0748] 以与合成例2中相同的方式获得化合物A-6-2(8.8g, 产率55%, MS[M+H]⁺=299), 不同之处在于使用化合物S-9(8g, 1当量)和S-15(12.3g)代替化合物S-3和S-4。

[0749] 合成例24. 化合物A-6-3的合成



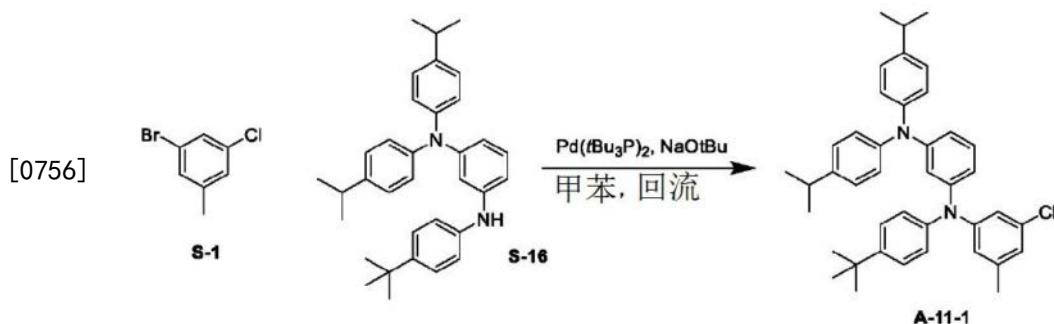
[0751] 以与合成例3中相同的方式获得化合物A-6-3(10.6g, 产率61%, MS[M+H]⁺=523), 不同之处在于使用化合物A-6-1(12g, 1当量)和A-6-2(6.1g)代替化合物A-2-1和A-2-2。

[0752] 合成例25. 化合物A-6的合成



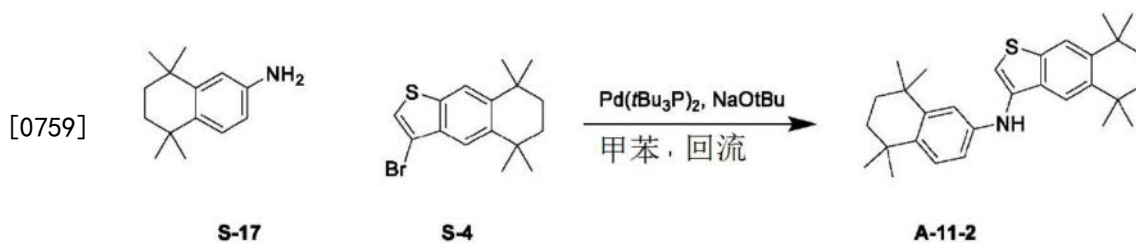
[0754] 以与合成例4中相同的方式获得化合物A-6(2.5g, 产率26%, MS[M+H]⁺=861), 不同之处在于使用化合物A-6-3(9.5g, 1当量)代替化合物A-2-3。

[0755] 合成例26. 化合物A-11-1的合成



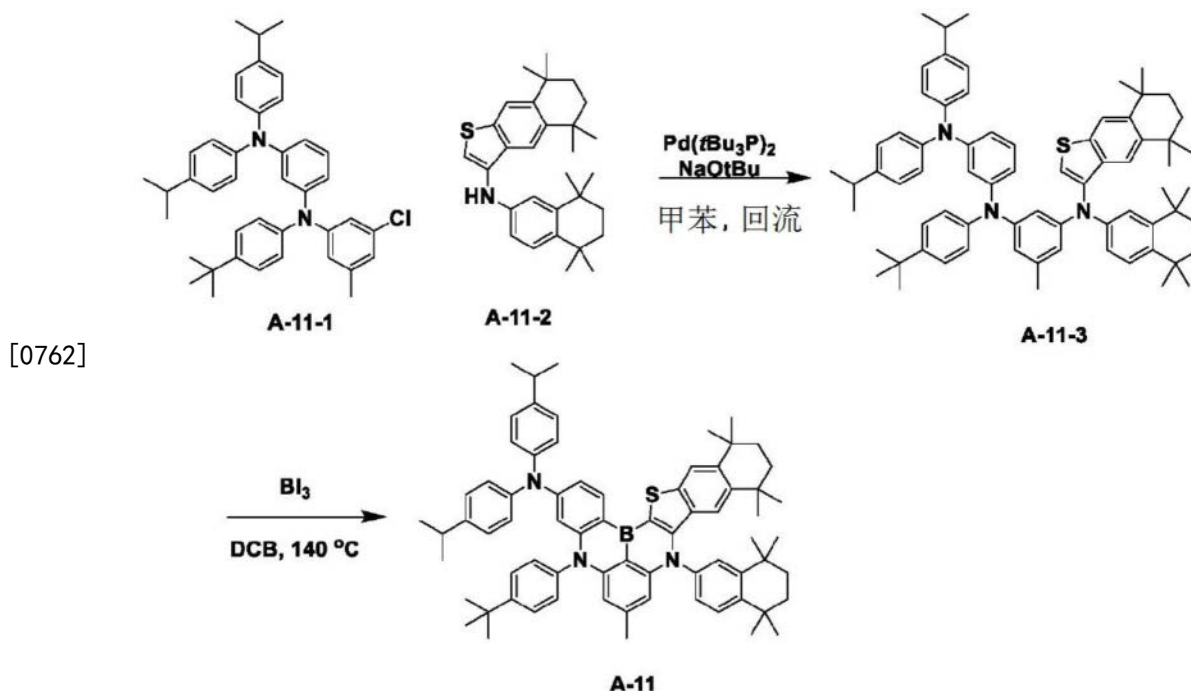
[0757] 以与合成例1中相同的方式获得化合物A-11-1(18.0g, 产率77%, MS[M+H]⁺=601), 不同之处在于使用化合物S-16(18.6g, 1当量)代替化合物S-2。

[0758] 合成例27. 化合物A-11-2的合成



[0760] 以与合成例2中相同的方式获得化合物A-11-2 (12.5g, 产率71%, MS [M+H]⁺ = 446), 不同之处在于使用化合物S-17 (8g, 1当量) 和S-4 (12.7g) 代替化合物S-3和S-4。

[0761] 合成例28. 化合物A-11的合成



[0763] 以与合成例3中相同的方式获得化合物A-11-3 (18.5g, 产率71%, MS [M+H]⁺ = 1010), 不同之处在于使用化合物A-11-1 (15.5g, 1当量) 和A-11-2 (11.5g) 代替化合物A-2-1和A-2-2。

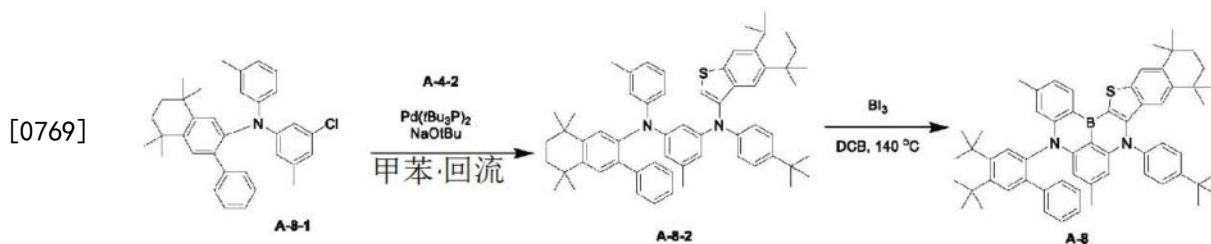
[0764] 以与合成例4中相同的方式获得化合物A-11 (3.2g, 产率22%, MS [M+H]⁺ = 1017), 不同之处在于使用化合物A-11-3 (14.5g, 1当量) 代替化合物A-2-3。

[0765] 合成例29. 化合物A-8-1的合成



[0767] 以与合成例1中相同的方式获得化合物A-8-1 (16.5g, 产率66%, MS [M+H]⁺ = 494), 不同之处在于使用化合物S-18 (1当量) 代替化合物S-2。

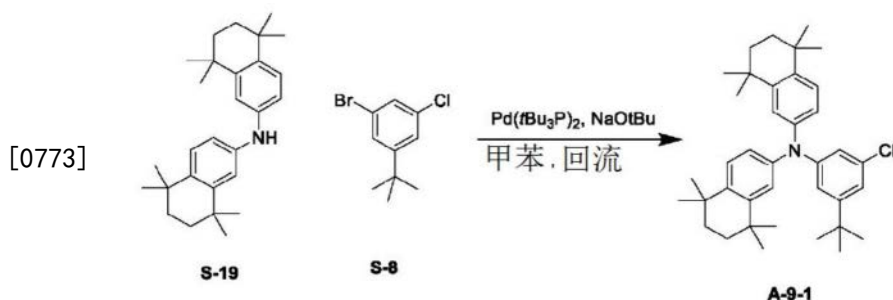
[0768] 合成例30. 化合物A-8的合成



[0770] 以与合成例3中相同的方式获得化合物A-8-2(9.1g,产率62%, $\text{MS}[\text{M}+\text{H}]^+=850$),不同之处在于使用化合物A-8-1(1当量)和A-4-2代替化合物A-2-1和A-2-2。

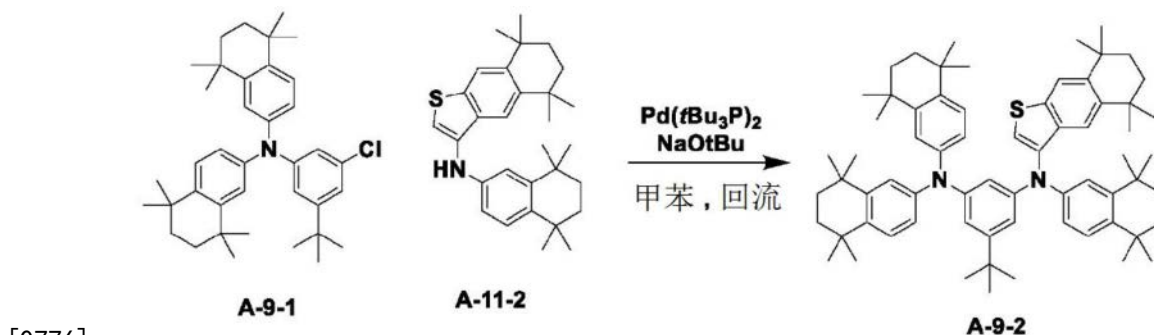
[0771] 以与合成例4中相同的方式获得化合物A-8(3.4g,产率27%, $\text{MS}[\text{M}+\text{H}]^+=858$),不同之处在于使用化合物A-8-2(1当量)代替化合物A-2-3。

[0772] 合成例31.化合物A-9-1的合成



[0774] 以与合成例1中相同的方式获得化合物A-9-1(35.5g,产率79%, $\text{MS}[\text{M}+\text{H}]^+=556$),不同之处在于使用化合物S-8(20g,1当量)和化合物S-19(31.5g)代替化合物S-1和S-2。

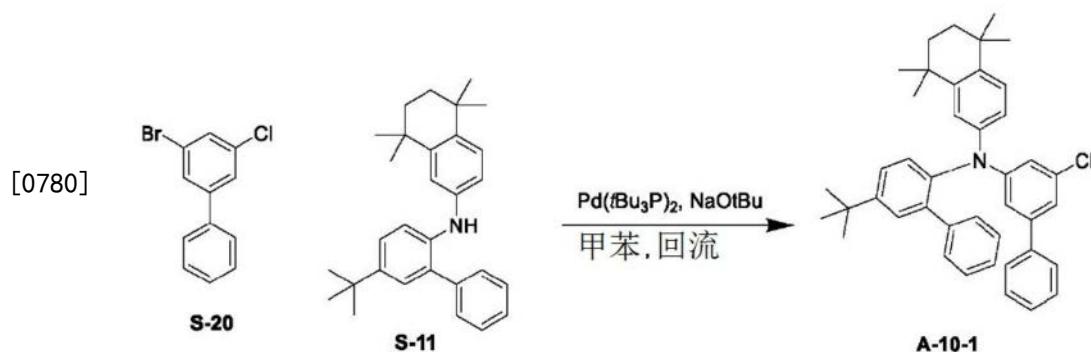
[0775] 合成例32.化合物A-9的合成



[0777] 以与合成例3中相同的方式获得化合物A-9-2(11.8g,产率68%, $\text{MS}[\text{M}+\text{H}]^+=966$),不同之处在于使用化合物A-9-1(10g,1当量)和A-11-2(8g)代替化合物A-2-1和A-2-2。

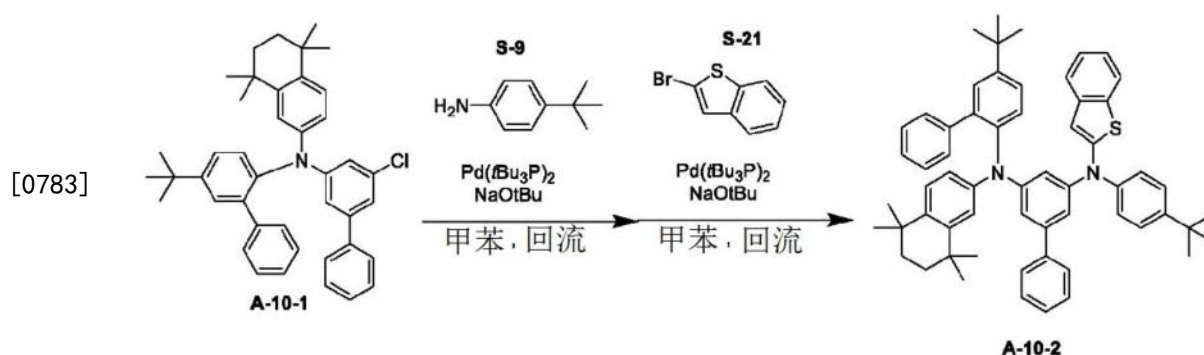
[0778] 以与合成例4中相同的方式获得化合物A-9(3.9g,产率39%, $\text{MS}[\text{M}+\text{H}]^+=973$),不同之处在于使用化合物A-9-2(10g,1当量)代替化合物A-2-3。

[0779] 合成例33. 化合物A-10-1的合成



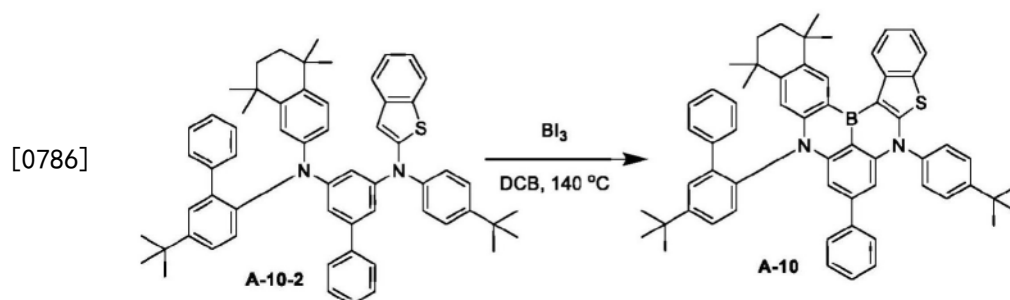
[0781] 以与合成例1中相同的方式获得化合物A-10-1 (19.9g, 产率68%, $\text{MS} [\text{M}+\text{H}]^+ = 598$), 不同之处在于使用化合物S-20和S-11 (20.3g, 1当量) 代替化合物S-1和S-2。

[0782] 合成例34. 化合物A-10-2的合成



[0784] 以与合成例11中相同的方式获得化合物A-10-2 (9.1g, 产率57%, $\text{MS} [\text{M}+\text{H}]^+ = 843$), 不同之处在于使用化合物A-10-1 (1当量) 和S-21代替化合物A-1-1和S-10。

[0785] 合成例35. 化合物A-10的合成



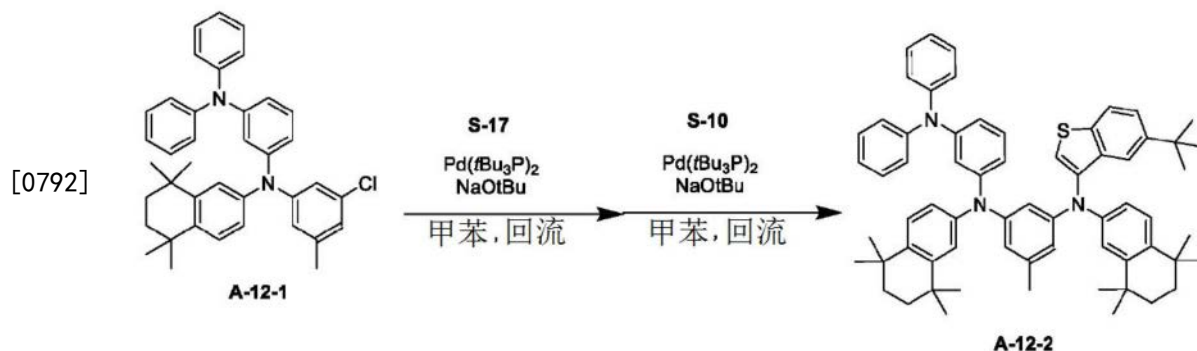
[0787] 以与合成例4中相同的方式获得化合物A-10 (1.9g, 产率12%, $\text{MS} [\text{M}+\text{H}]^+ = 851$), 不同之处在于使用化合物A-10-2 (1当量) 代替化合物A-2-3。

[0788] 合成例36. 化合物A-12-1的合成



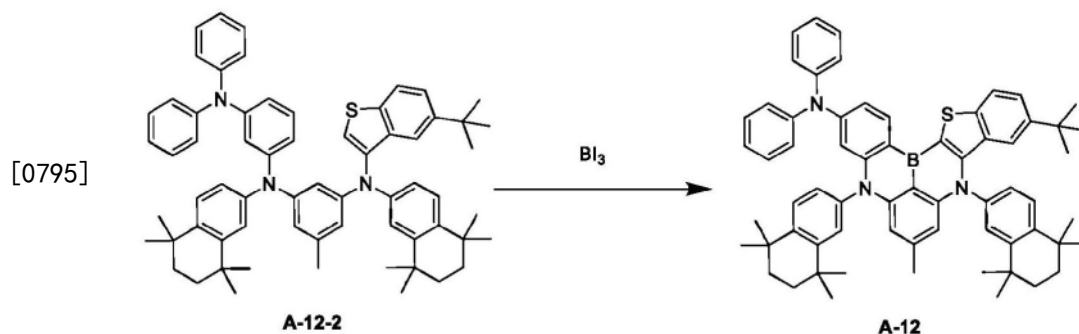
[0790] 以与合成例1中相同的方式获得化合物A-12-1 (21.1g, 产率67%, MS [M+H]⁺ = 571), 不同之处在于使用化合物S-22 (1当量) 代替化合物S-2。

[0791] 合成例37. 化合物A-12-2的合成



[0793] 以与合成例11中相同的方式获得化合物A-12-2 (10.2g, 产率53%, MS [M+H]⁺ = 927), 不同之处在于使用化合物A-12-1 (1当量) 和S-17代替化合物A-1-1和S-9。

[0794] 合成例38. 化合物A-12的合成



[0796] 以与合成例4中相同的方式获得化合物A-12 (1.7g, 产率15%, MS [M+H]⁺ = 935), 不同之处在于使用化合物A-12-2 (1当量) 代替化合物A-2-3。

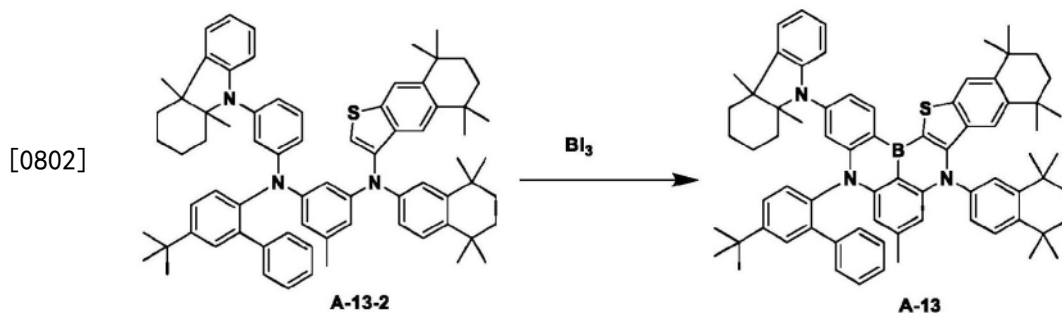
[0797] 合成例39. 化合物A-13-2的合成



[0799] 以与合成例1中相同的方式获得化合物A-13-1 (24g, 产率68%, MS [M+H]⁺ = 625), 不同之处在于使用化合物S-23 (1当量) 代替化合物S-2。

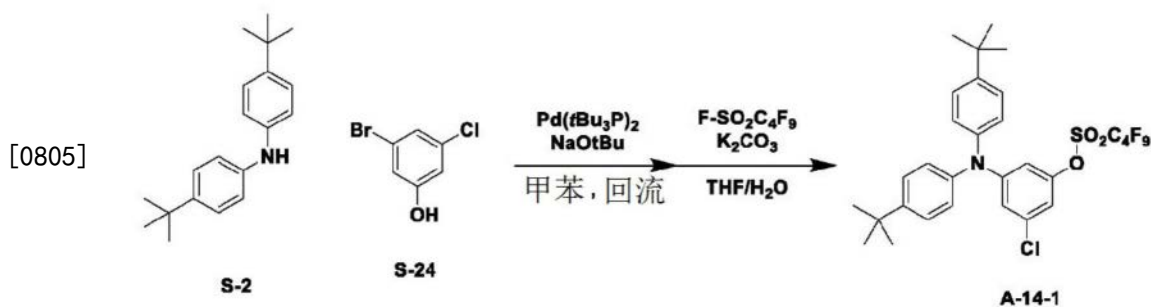
[0800] 以与合成例3中相同的方式获得化合物A-13-2 (18.1g, 产率69%, MS [M+H]⁺ = 1035), 不同之处在于使用化合物A-13-1 (1当量) 和A-11-2代替化合物A-2-1和A-2-2。

[0801] 合成例40. 化合物A-13的合成



[0803] 以与合成例4中相同的方式获得化合物A-13 (3.3g, 产率24%, MS [M+H]⁺=1043), 不同之处在于使用化合物A-13-2(1当量)代替化合物A-2-3。

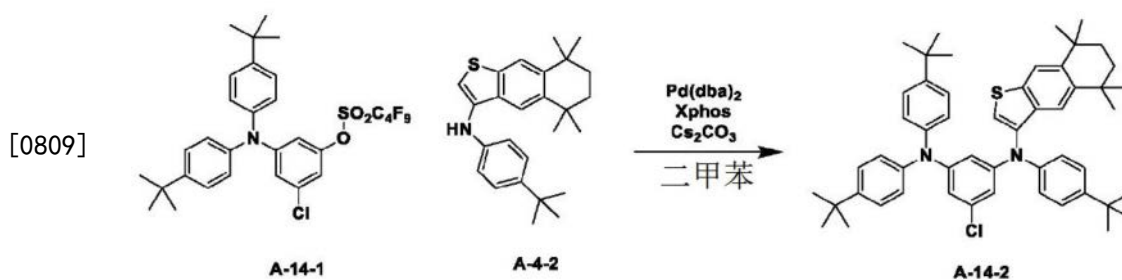
[0804] 合成例41. 化合物A-14-1的合成



[0806] 以与合成例1中相同的方式进行制备, 不同之处在于使用化合物S-24(20g, 1当量)和S-2(27.1g)代替化合物S-1和S-2, 并在没有进一步纯化的情况下进行下一步反应。

[0807] 在将未经历纯化的反应产物溶解在四氢呋喃(THF)(240mL)中之后, 向其中缓慢添加溶解在水(80mL)中的碳酸钾(17.3g, 1.3当量)。向其中添加全氟丁烷磺酰氟(43.7g, 1.5当量), 将所得物在室温下搅拌2小时。当反应完成时, 通过向其中添加水和乙酸乙酯来将反应溶液分离, 然后在用MgSO₄(无水)处理之后过滤。在真空下通过蒸馏来除去经过滤的溶液, 并使用柱色谱法纯化以获得化合物A-14-1(44.7g, 产率67%)。

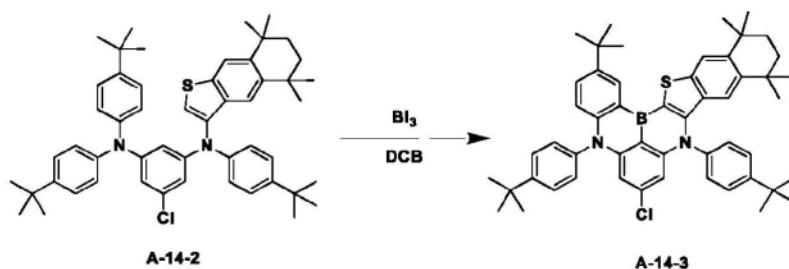
[0808] 合成例42. 化合物A-14-2的合成



[0810] 将装有化合物A-14-1(12g, 17.4mmol, 1当量)、化合物A-4-2(7.2g, 1.05当量)、双(二亚苄基丙酮)钯(0) (Pd(dba)₂) (0.1g, 0.01当量)、2-二环己基膦基-2',4',6'-三异丙基联苯(Xphos) (0.17g, 0.02当量)、Cs₂CO₃ (17g, 3当量)和二甲苯(90ml)的烧瓶加热至140℃, 将混合物搅拌12小时。将反应溶液冷却至室温, 通过向其中添加饱和NH₄Cl水溶液和甲苯来分离, 并在真空下通过蒸馏来除去溶液。将所得物使用硅胶柱色谱法(乙酸乙酯/己烷)纯化以获得化合物A-14-2(9.8g, 产率72%, MS [M+H]⁺=781)。

[0811] 合成例43. 化合物A-14-3的合成

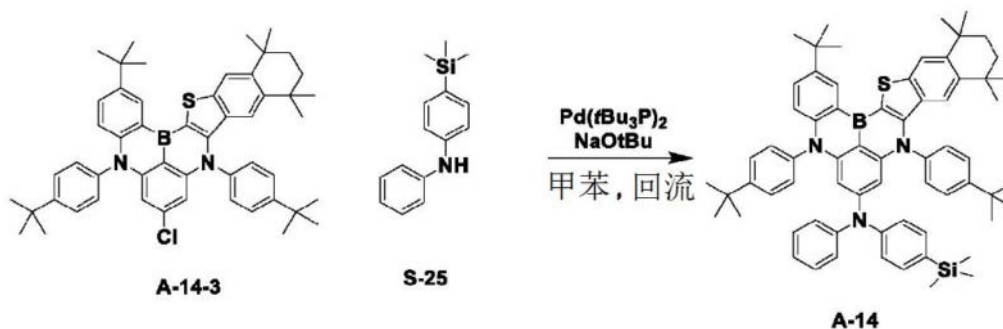
[0812]



[0813] 以与合成例4中相同的方式获得化合物A-14-3 (4.0g, 产率42%, MS[M+H]⁺=775), 不同之处在于使用化合物A-14-2 (9.7g, 1当量) 代替化合物A-2-3。

[0814] 合成例44. 化合物A-14的合成

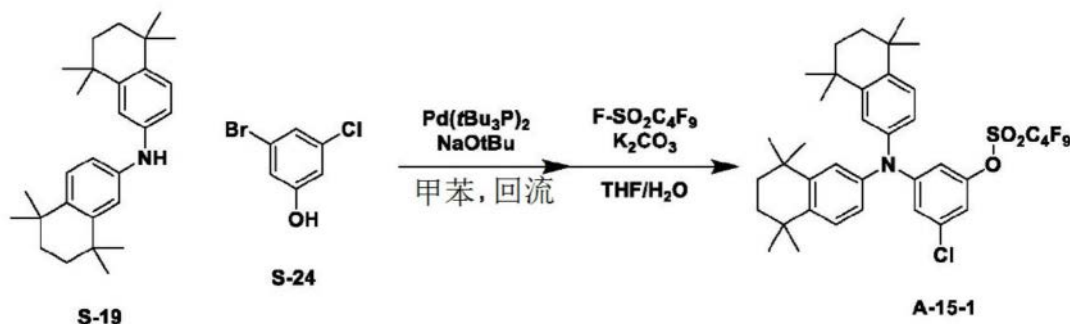
[0815]



[0816] 以与合成例3中相同的方式获得化合物A-14 (3.8g, 产率74%, MS[M+H]⁺=995), 不同之处在于使用化合物A-14-3 (4g, 1当量) 和S-25 (1.5g, 1.2当量) 代替化合物A-2-1和A-2-2。

[0817] 合成例45. 化合物A-15-1的合成

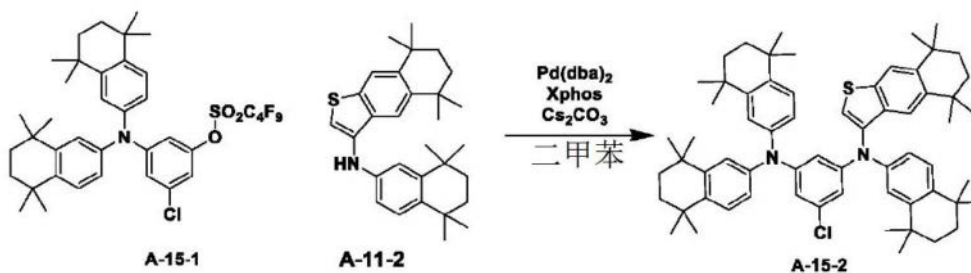
[0818]



[0819] 以与合成例41中相同的方式获得化合物A-15-1 (38.2g, 产率65%), 不同之处在于使用化合物S-19 (1当量) 代替化合物S-2。

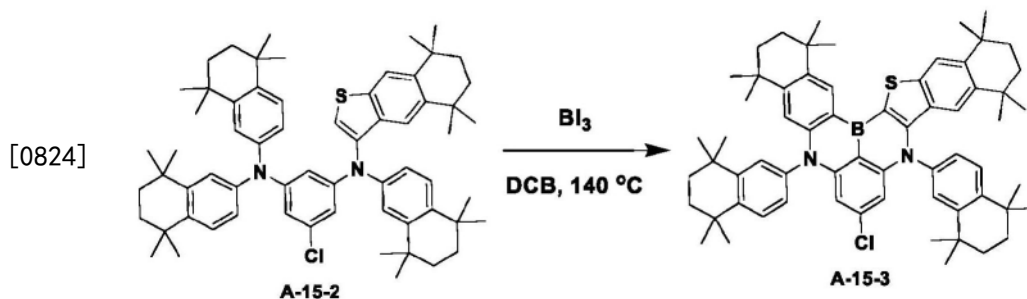
[0820] 合成例46. 化合物A-15-2的合成

[0821]



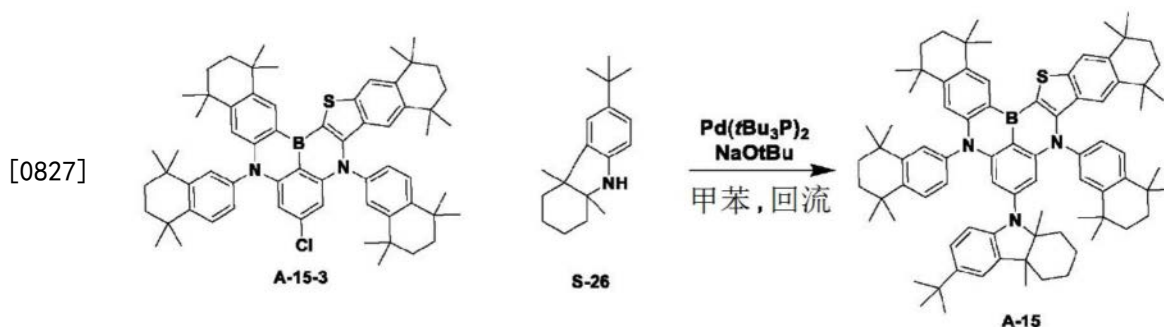
[0822] 以与合成例42中相同的方式获得化合物A-15-2 (17.6g, 产率55%, MS[M+H]⁺=944), 不同之处在于使用化合物A-15-1 (1当量) 和A-11-2代替化合物A-14-1和A-4-2。

[0823] 合成例47. 化合物A-15-3的合成



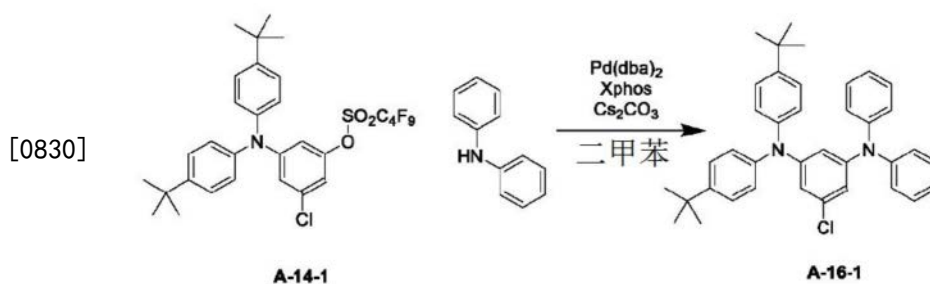
[0825] 以与合成例4中相同的方式获得化合物A-15-3 (7.6g, 产率58%, MS[M+H]⁺=952), 不同之处在于使用化合物A-15-2 (9.7g, 1当量) 代替化合物A-2-3。

[0826] 合成例48. 化合物A-15的合成



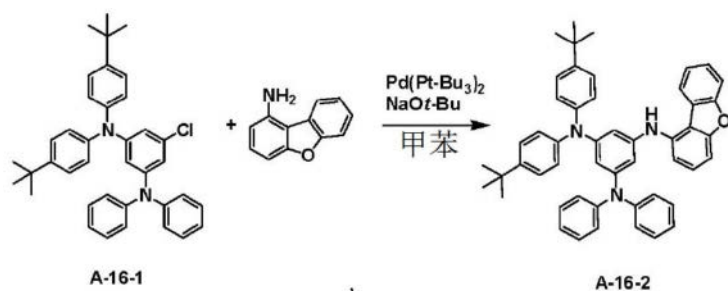
[0828] 以与合成例3中相同的方式获得化合物A-15 (4.1g, 产率71%, MS[M+H]⁺=1173), 不同之处在于使用化合物A-15-3 (1当量) 和S-26 (1.2当量) 代替化合物A-2-1和A-2-2。

[0829] 合成例49. 化合物A-16-1的合成

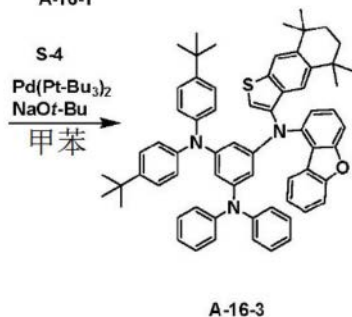


[0831] 以与合成例42中相同的方式获得化合物A-16-1 (18.7g, 产率73%, MS[M+H]⁺=559), 不同之处在于使用二苯胺代替化合物A-4-2。

[0832] 合成例50. 化合物A-16-3的合成

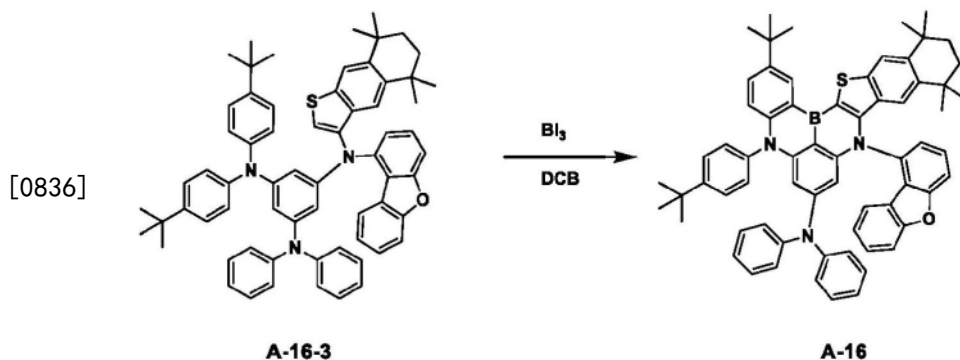


[0833]



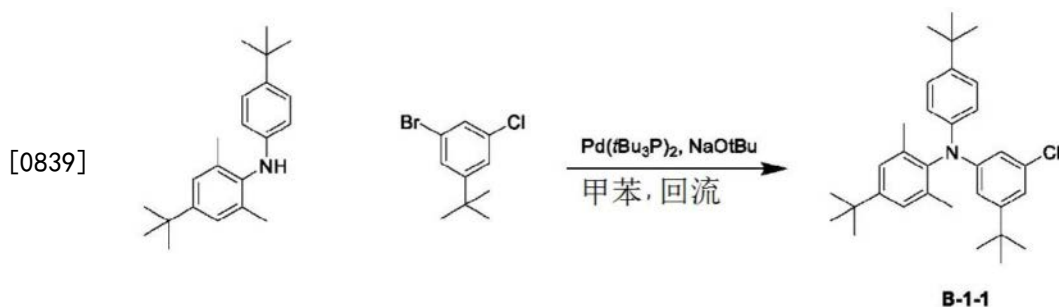
[0834] 以与合成例11中相同的方式获得化合物A-16-3 (15.7g, 产率58%, MS [M+H]⁺ = 949), 不同之处在于使用化合物A-16-1 (16g, 1当量)、二苯并[b,d]呋喃-1-胺和化合物S-4代替化合物A-1-1、S-9和S-10。

[0835] 合成例51. 化合物A-16的合成



[0837] 以与合成例4中相同的方式获得化合物A-16 (2.1g, 产率21%, MS [M+H]⁺ = 957), 不同之处在于使用化合物A-16-3 (10g, 1当量)代替化合物A-2-3。

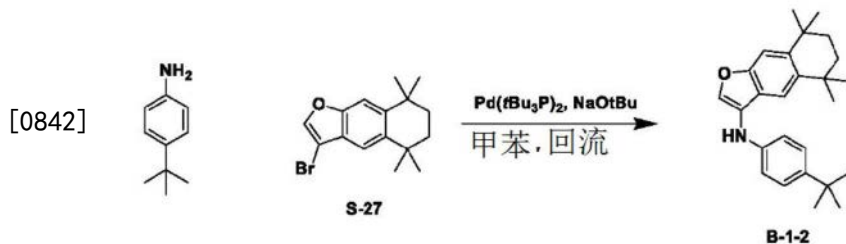
[0838] 合成例52. 化合物B-1-1的合成



[0840] 在三颈烧瓶中, 在将1-溴-3-氯-5-叔丁基苯 (121mmol, 30g) 和4-叔丁基-N-(4-叔丁基苯基)-2,6-二甲基苯胺 (121mmol, 37.5g) 溶解在甲苯 (0.2M, 605ml) 中之后, 向其中引入叔丁醇钠 (182mmol, 17.5g) 和双(三-叔丁基膦) 钯 (0) (1.2mmol, 0.62g), 将所得物在氩气氛下在回流下搅拌4小时。当反应结束时, 将所得物冷却至室温, 然后向其中引入H₂O, 将

反应溶液转移至分液漏斗并萃取。将萃取物用 MgSO_4 干燥并浓缩,将样品使用硅胶柱色谱法纯化以获得化合物B-1-1(51.2g,产率89%, $\text{MS}[\text{M}+\text{H}]^+=476$)。

[0841] 合成例53.化合物B-1-2的合成



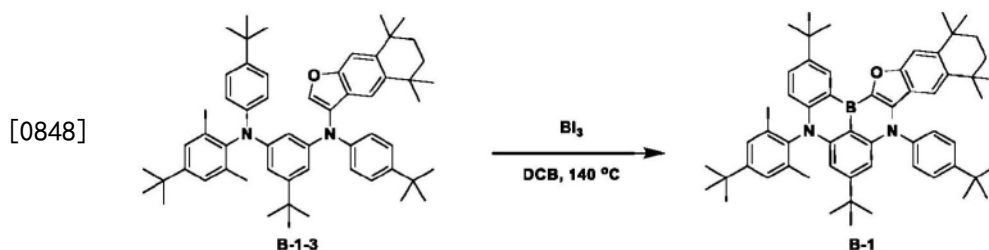
[0843] 在三颈烧瓶中,在将化合物S-27(97.6mmol,30g)和4-叔丁基苯胺(97.6mmol,14.6g)溶解在甲苯(0.2M,488ml)中之后,向其中引入叔丁醇钠(146.5mmol,14.1g)和双(三-叔丁基膦)钯(0)(0.98mmol,0.5g),将所得物在氩气气氛下在回流下搅拌6小时。当反应结束时,将所得物冷却至室温,然后向其中引入 H_2O ,将反应溶液转移至分液漏斗并萃取。将萃取物用 MgSO_4 干燥并浓缩,将样品使用硅胶柱色谱法纯化以获得化合物B-1-2(35.4g,产率97%, $\text{MS}[\text{M}+\text{H}]^+=376$)。

[0844] 合成例54.化合物B-1-3的合成



[0846] 在三颈烧瓶中,在将化合物B-1-1(44.1mmol,21g)和化合物B-1-2(44.1mmol,16.6g)溶解在甲苯(0.2M,220ml)中之后,向其中引入叔丁醇钠(66.2mmol,6.4g)和双(三-叔丁基膦)钯(0)(0.44mmol,0.23g),将所得物在氩气气氛下在回流下搅拌6小时。当反应结束时,将所得物冷却至室温,然后向其中引入 H_2O ,将反应溶液转移至分液漏斗并萃取。将萃取物用 MgSO_4 干燥并浓缩,将样品使用硅胶柱色谱法纯化以获得化合物B-1-3(21.8g,产率61%, $\text{MS}[\text{M}+\text{H}]^+=815$)。

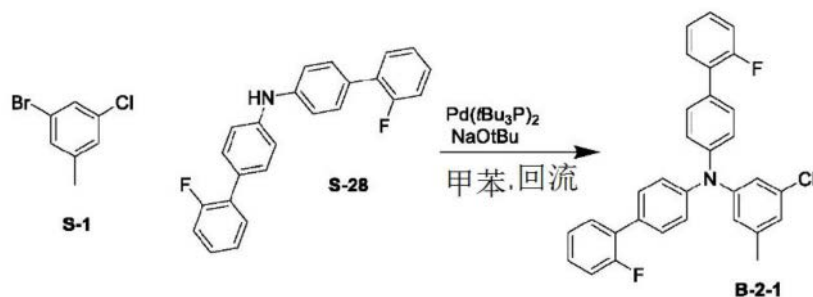
[0847] 合成例55.化合物B-1的合成



[0849] 以与合成例4中相同的方式获得化合物B-1(5.3g,产率21%, $\text{MS}[\text{M}+\text{H}]^+=957$),不同之处在于使用化合物B-1-3(21.8g,1当量)代替化合物A-2-3并在140℃下进行搅拌。

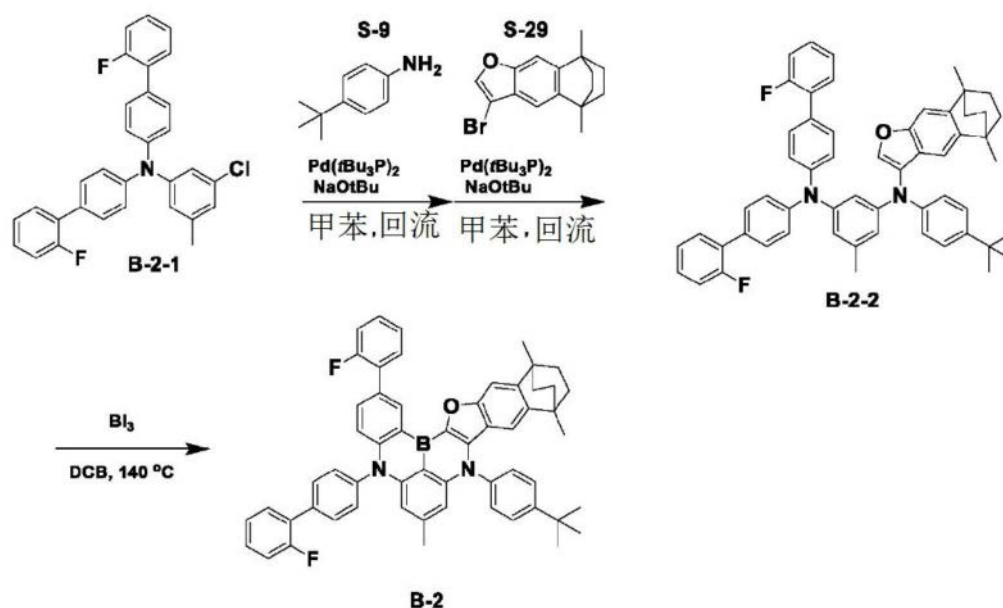
[0850] 合成例56.化合物B-2-1的合成

[0851]



[0852] 以与合成例1中相同的方式获得化合物B-2-1 (15.2g, 产率88%, MS [M+H]⁺ = 482), 不同之处在于使用化合物S-28代替化合物S-2。

[0853] 合成例57. 化合物B-2的合成



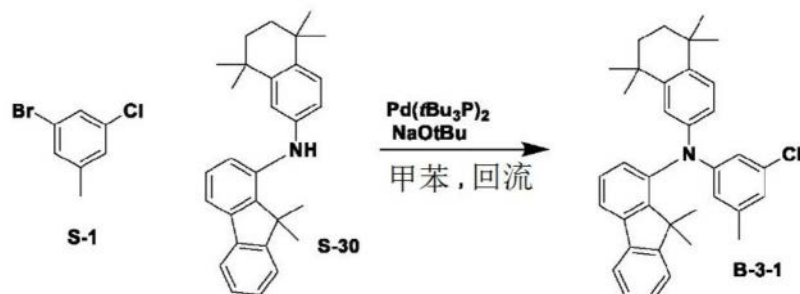
[0854]

[0855] 以与合成例11中相同的方式获得化合物B-2-2 (12.6g, 产率47%, MS [M+H]⁺ = 819), 不同之处在于使用化合物B-2-1 (15g, 1当量) 和S-29代替化合物A-1-1和S-10。

[0856] 以与合成例55中相同的方式获得化合物B-2 (3.5g, 产率38%, MS [M+H]⁺ = 827), 不同之处在于使用化合物B-2-2 (9g, 1当量) 代替化合物B-1-3。

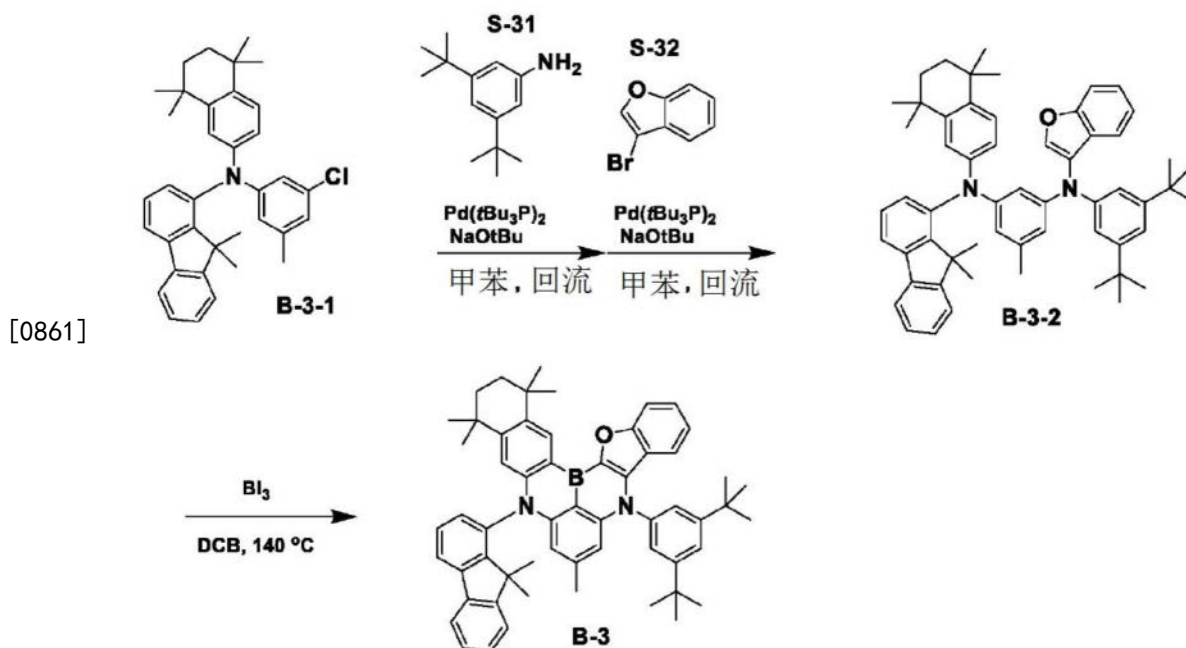
[0857] 合成例58. 化合物B-3-1的合成

[0858]



[0859] 以与合成例1中相同的方式获得化合物B-3-1 (11.1g, 产率78%, MS [M+H]⁺ = 520), 不同之处在于使用化合物S-30代替化合物S-2。

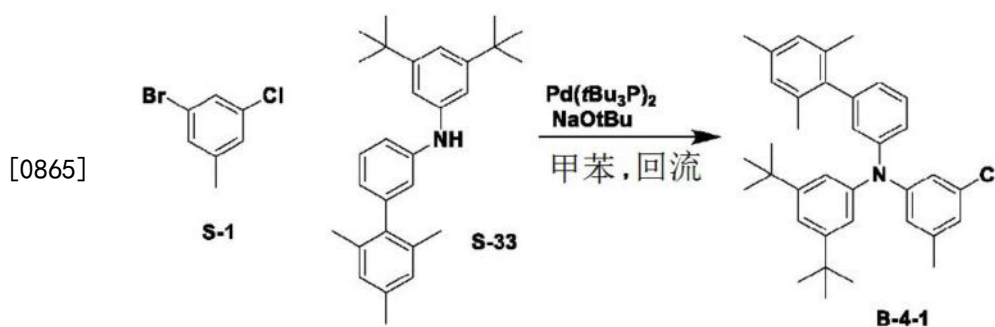
[0860] 合成例59. 化合物B-3的合成



[0862] 以与合成例11中相同的方式获得化合物B-3-2 (8.7g, 产率56%, $\text{MS}[\text{M}+\text{H}]^+=806$), 不同之处在于使用化合物B-3-1 (10g, 1当量)、S-31和S-32代替化合物A-1-1、S-9和S-10。

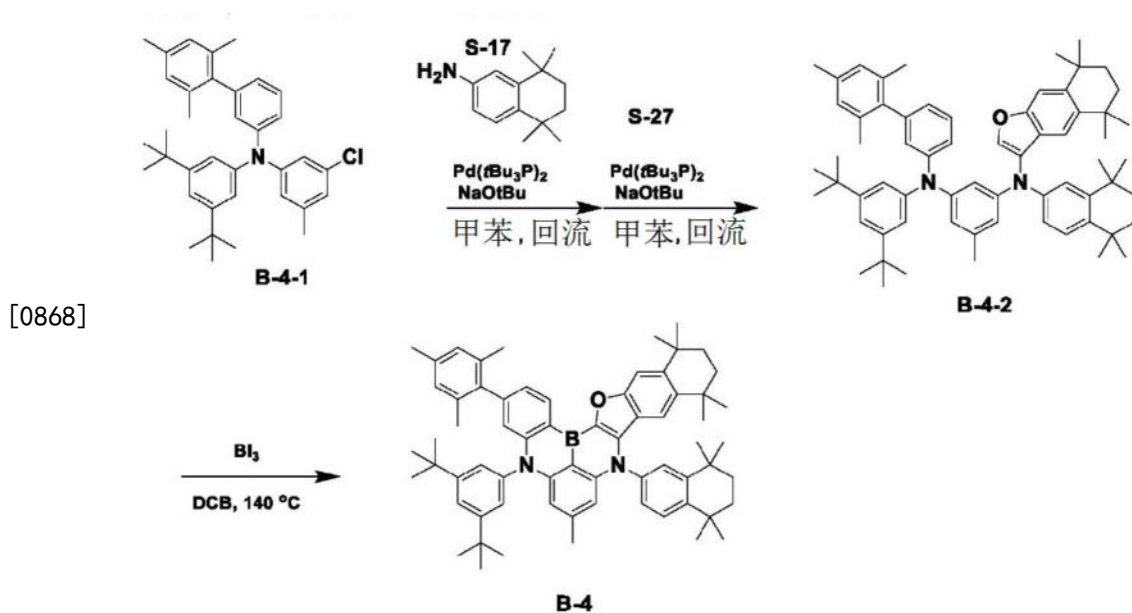
[0863] 以与合成例55中相同的方式获得化合物B-3 (2.3g, 产率26%, $\text{MS}[\text{M}+\text{H}]^+=813$), 不同之处在于使用化合物B-3-2 (8.7g, 1当量)代替化合物B-1-3。

[0864] 合成例60. 化合物B-4-1的合成



[0866] 以与合成例1中相同的方式获得化合物B-4-1 (16.3g, 产率73%, $\text{MS}[\text{M}+\text{H}]^+=524$), 不同之处在于使用化合物S-33代替化合物S-2。

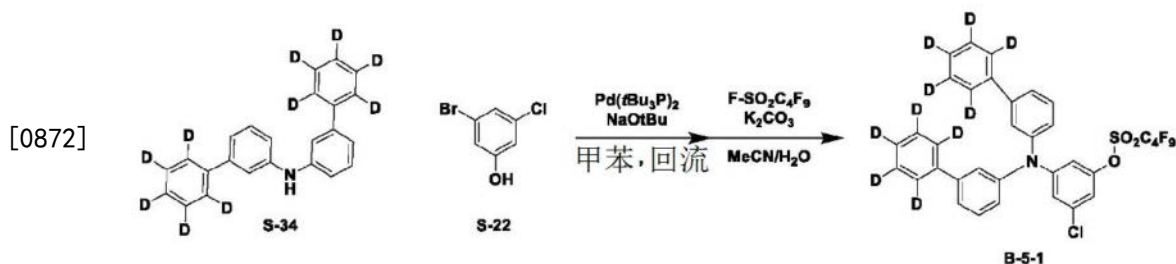
[0867] 合成例61. 化合物B-4的合成



[0869] 以与合成例11中相同的方式获得化合物B-4-2 (12.8g, 产率52%, $\text{MS}[\text{M}+\text{H}]^+=918$), 不同之处在于使用化合物B-4-1 (14g, 1当量)、S-17和S-27代替化合物A-1-1、S-9和S-10。

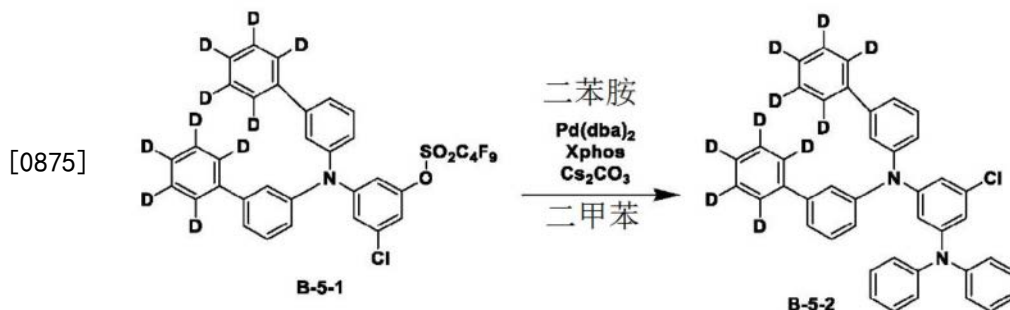
[0870] 以与合成例55中相同的方式获得化合物B-4 (2.8g, 产率25%, $\text{MS}[\text{M}+\text{H}]^+=926$), 不同之处在于使用化合物B-4-2 (11g, 1当量) 代替化合物B-1-3。

[0871] 合成例62. 化合物B-5-1的合成



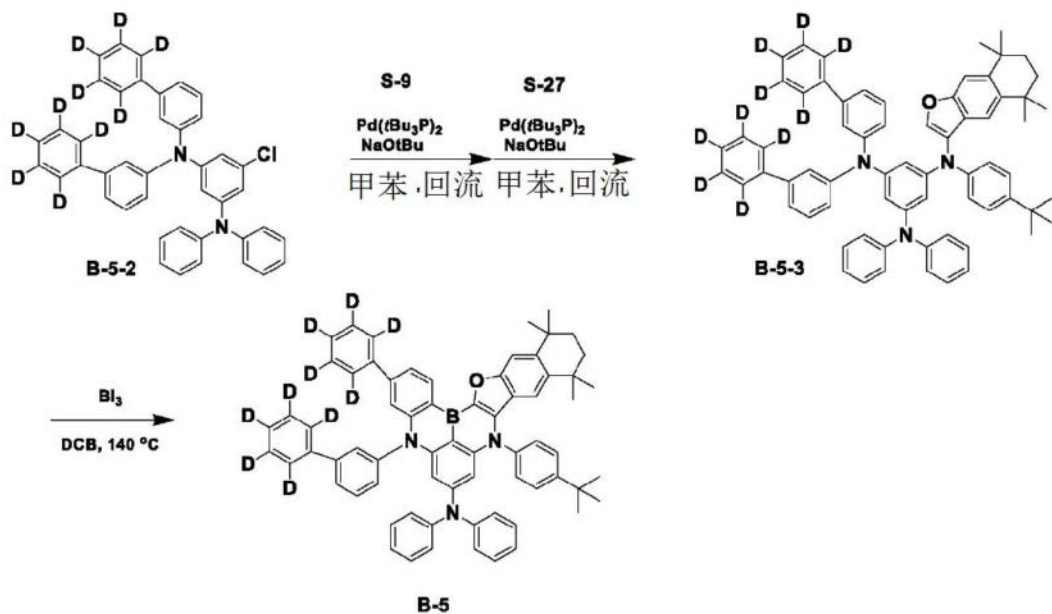
[0873] 以与合成例41中相同的方式获得化合物B-5-1 (19.1g, 产率79%), 不同之处在于使用化合物S-34代替化合物S-2。

[0874] 合成例63. 化合物B-5-2的合成



[0876] 以与合成例42中相同的方式获得化合物B-5-2 (10.7g, 产率72%, $\text{MS}[\text{M}+\text{H}]^+=609$), 不同之处在于使用化合物B-5-1 (18g, 1当量) 和二苯胺代替化合物A-14-1和A-4-2。

[0877] 合成例64. 化合物B-5的合成



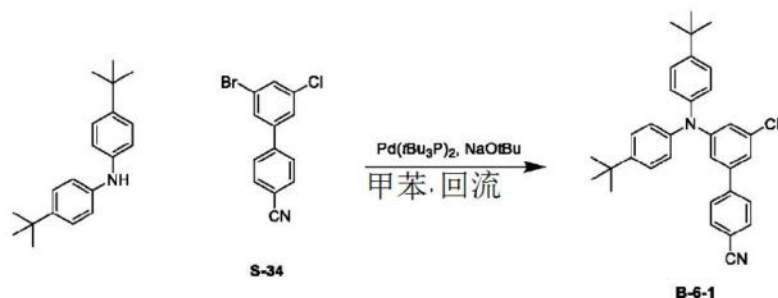
[0878]

[0879] 以与合成例11中相同的方式获得化合物B-5-3 (7.8g, 产率47%, MS [M+H]⁺ = 949), 不同之处在于使用化合物B-5-2 (10.7g, 1当量) 和S-27代替化合物A-1-1和S-10。

[0880] 以与合成例55中相同的方式获得化合物B-5 (1.7g, 产率21%, MS [M+H]⁺ = 957), 不同之处在于使用化合物B-5-3 (7.8g, 1当量) 代替化合物B-1-3。

[0881] 合成例65. 化合物B-6-1的合成

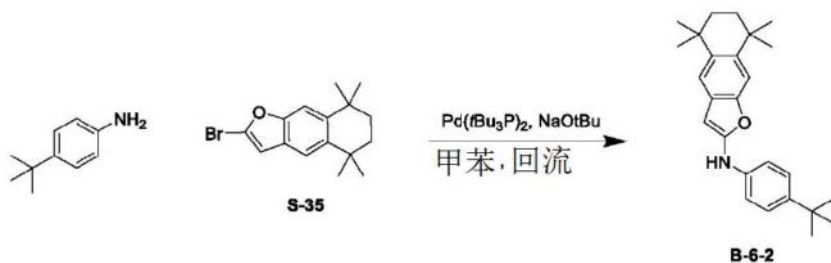
[0882]



[0883] 以与合成例1中相同的方式获得化合物B-6-1 (20.1g, 产率80%, MS [M+H]⁺ = 493), 不同之处在于使用化合物S-34代替化合物S-1。

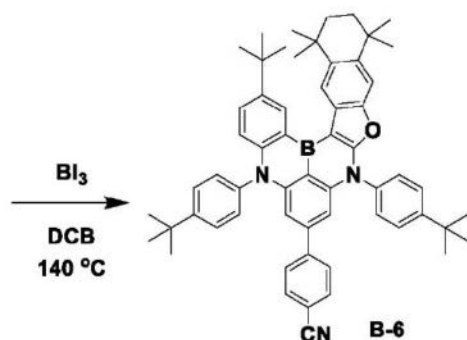
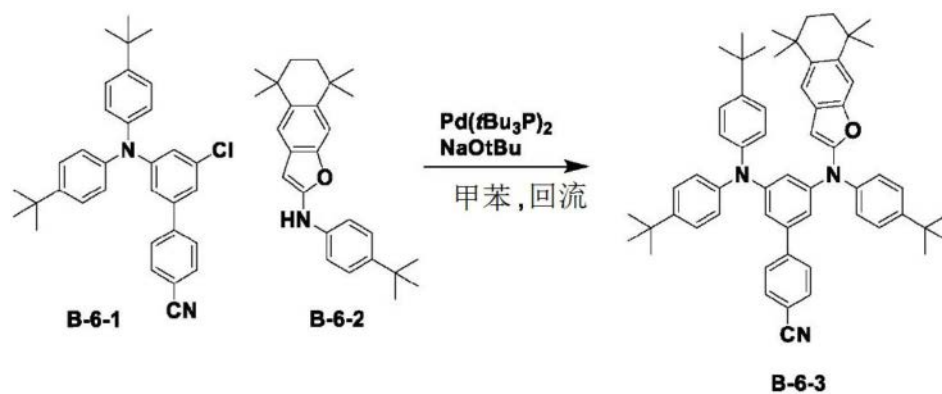
[0884] 合成例66. 化合物B-6-2的合成

[0885]



[0886] 以与合成例53中相同的方式获得化合物B-6-2 (20.6g, 产率70%, MS [M+H]⁺ = 376), 不同之处在于使用化合物S-35代替化合物S-27。

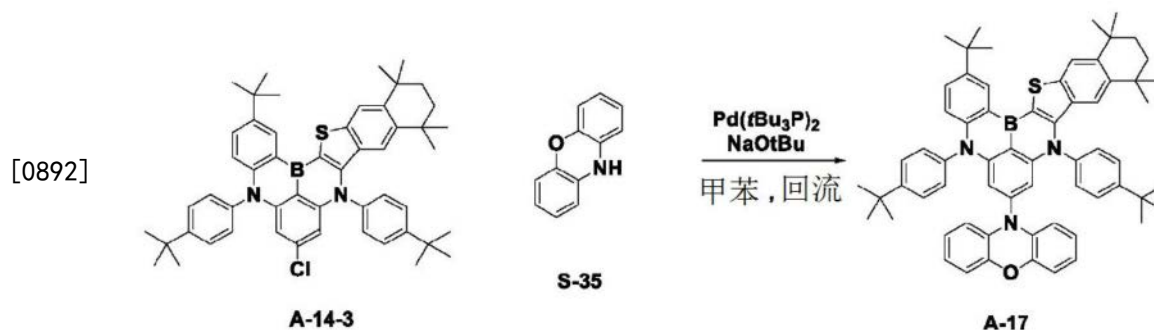
[0887] 合成例67. 化合物B-6的合成



[0889] 以与合成例3中相同的方式获得化合物B-6-3 (21.2g, 产率69%, MS[M+H]⁺=833), 不同之处在于使用化合物B-6-1 (19.4g, 1当量) 和B-6-2代替化合物A-2-1和A-2-2。

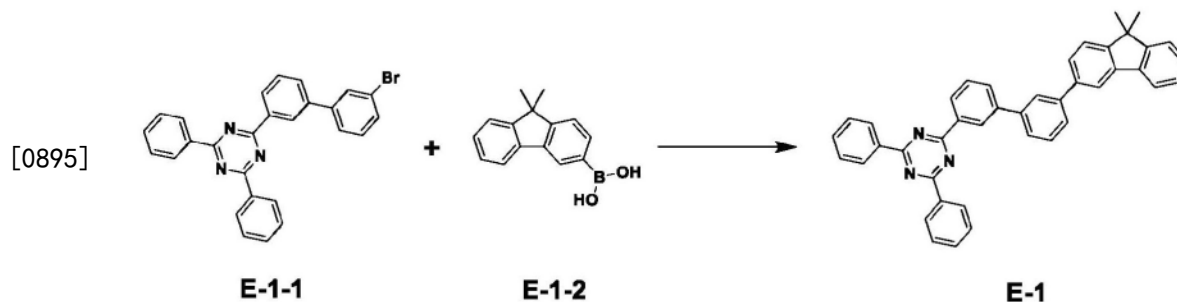
[0890] 以与合成例55中相同的方式获得化合物B-6 (1.3g, 产率12%, MS[M+H]⁺=841), 不同之处在于使用化合物B-6-3 (11g, 1当量) 代替化合物B-1-3。

[0891] 合成例68. 化合物A-17的合成



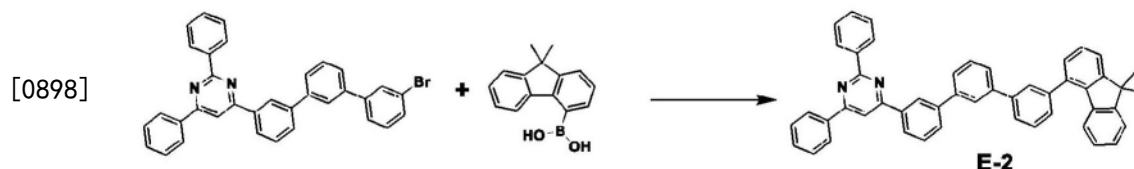
[0893] 以与合成例3中相同的方式获得化合物A-17 (1.9g, 产率78%, MS[M+H]⁺=937), 不同之处在于使用化合物A-14-3 (2g, 1当量) 和S-35 (0.6g, 1.2当量) 代替化合物A-2-1和A-2-2。

[0894] 合成例69. 化合物E-1的合成



[0896] 将E-1-1 (20g, 43.1mmol) 和E-1-2 (10.3g, 43.1mmol) 引入至四氢呋喃 (400ml) 中, 在氮气气氛下搅拌并回流。此后, 向其中引入溶解在水 (18ml) 中的碳酸钾 (17.9g, 129.2mmol), 在将所得物充分搅拌之后, 向其中引入四三苯基-膦钾 (1.5g, 1.3mmol)。使所得物反应1小时, 然后冷却至室温, 在将有机层和水层分离之后, 将有机层蒸馏。将其再次引入并溶解在氯仿 (20倍, 498mL) 中, 并用水洗涤两次。在向其中引入无水硫酸镁之后, 将有机层分离, 搅拌, 然后过滤, 将滤液真空蒸馏。将浓缩的化合物用氯仿和乙酸乙酯重结晶以制备白色固体化合物E-1 (15.7g, 63%, MS: $[M+H]^+ = 578$)。

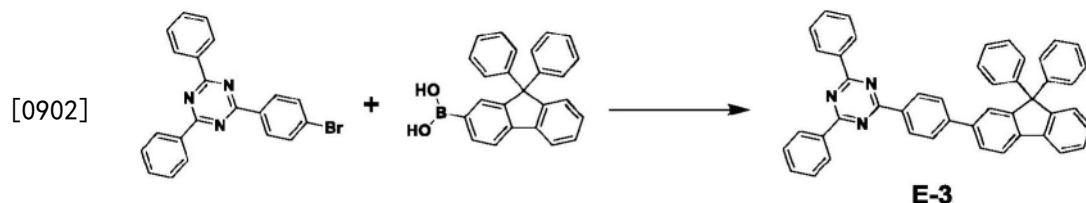
[0897] 合成例70: 化合物E-2的制备



[0899] 以与合成例69中相同的方式制备化合物E-2, 不同之处在于采用如反应式中的各起始材料。

[0900] MS: $[M+H]^+ = 653$

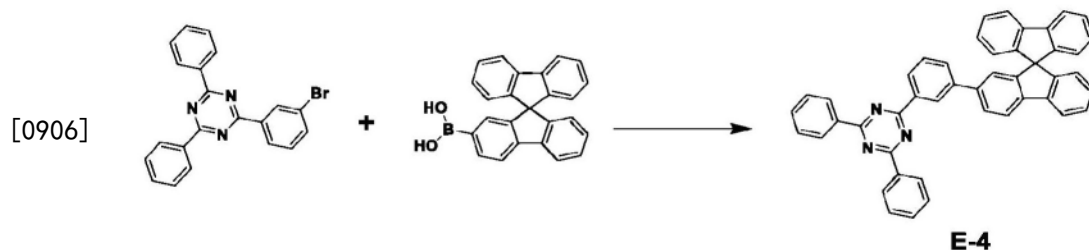
[0901] 合成例71: 化合物E-3的制备



[0903] 以与合成例69中相同的方式制备化合物E-3, 不同之处在于采用如反应式中的各起始材料。

[0904] MS: $[M+H]^+ = 626$

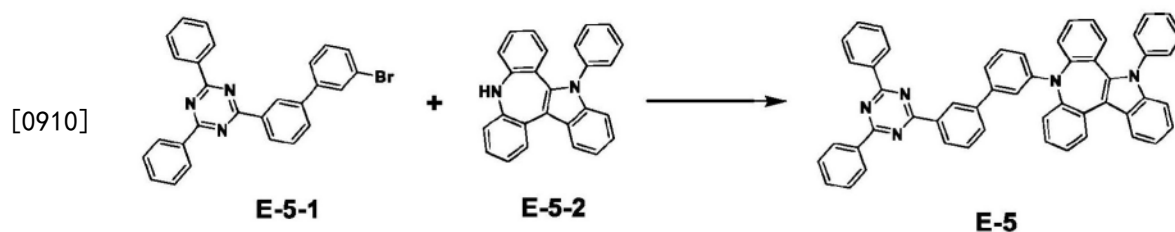
[0905] 合成例72: 化合物E-4的制备



[0907] 以与合成例69中相同的方式制备化合物E-4, 不同之处在于采用如反应式中的各起始材料。

[0908] MS: $[M+H]^+ = 624$

[0909] 合成例73: 化合物E-5的制备



[0911] 将E-5-1 (20g, 43.1mmol) 和E-5-2 (15.4g, 43.1mmol) 引入至二甲苯 (400ml) 中, 在氮气气氛下搅拌并回流。此后, 向其中引入叔丁醇钠 (12.4g, 129.2mmol), 在将所得物充分搅拌之后, 向其中引入双(三-叔丁基膦) 钯 (0.7g, 1.3mmol)。使所得物反应3小时, 然后冷却至室温, 将有机层过滤以除去盐, 将经过滤的有机层蒸馏。将其再次引入并溶解在氯仿 (10倍, 320mL) 中, 并用水洗涤两次。在向其中引入无水硫酸镁之后, 将有机层分离, 搅拌, 然后过滤, 将滤液真空蒸馏。将浓缩的化合物使用氯仿和乙酸乙酯通过硅胶柱来纯化以制备白色固体化合物E-5 (20.4g, 64%, MS: $[M+H]^+ = 742$)。

[0912] <实施例>

[0913] 实施例1-1

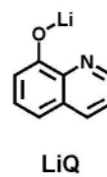
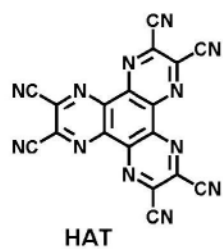
[0914] 将其上涂覆有厚度为 $1,000 \text{ \AA}$ 的氧化铟锡 (ITO) 作为薄膜的玻璃基底放入溶解有清洁剂的蒸馏水中并进行超声波清洗。在本文中, 使用Fischer Co. 的产品作为清洁剂, 使用利用由Millipore Co. 制造的过滤器过滤两次的蒸馏水作为蒸馏水。在将ITO清洗30分钟之后, 使用蒸馏水重复两次超声波清洗10分钟。在用蒸馏水清洗完成之后, 将基底用异丙醇、丙酮和甲醇溶剂超声波清洗, 然后干燥, 然后转移至等离子体清洗机。此外, 将基底使用氧等离子体清洗5分钟, 然后转移至真空沉积装置。

[0915] 在如上准备的透明ITO电极上, 将以下HI-A化合物热真空沉积至 $600 \text{ \AA}$ 的厚度以形成空穴注入层。通过连续地真空沉积以下HAT化合物至 $50 \text{ \AA}$ 和以下HT-A化合物至 $60 \text{ \AA}$ 来在空穴注入层上形成第一空穴传输层和第二空穴传输层。

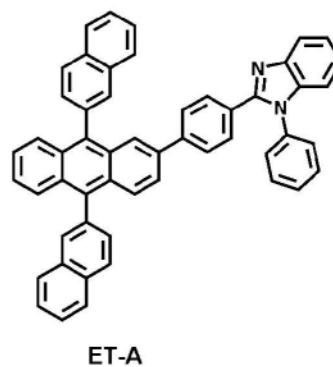
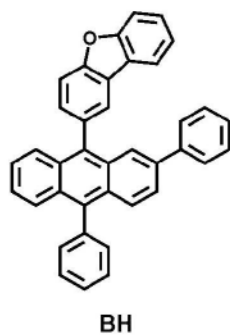
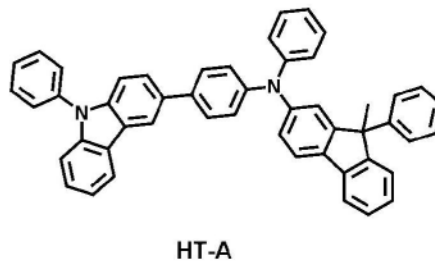
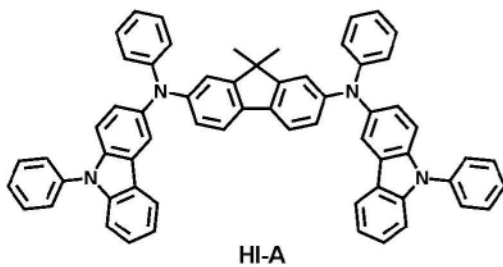
[0916] 随后, 通过将以下BH化合物和合成例12中制备的化合物A-1以25:2的重量比真空沉积至 $200 \text{ \AA}$ 的膜厚度来在第二空穴传输层上形成发光层。

[0917] 在发光层上, 通过将合成例69中制备的化合物E-1真空沉积至 $50 \text{ \AA}$ 的厚度来形成空穴阻挡层, 通过将ET-A和以下LiQ化合物以1:1的重量比真空沉积来形成厚度为 $300 \text{ \AA}$ 的电子传输和注入层。在电子传输和注入层上, 通过连续地沉积氟化锂 (LiF) 至 $10 \text{ \AA}$ 的厚度和铝至 $1000 \text{ \AA}$ 的厚度来形成阴极。

[0918] 在上述过程中, 将有机材料的沉积速率保持在 $0.4 \text{ \AA/秒}$ 至 $0.9 \text{ \AA/秒}$, 将阴极的氟化锂和铝的沉积速率分别保持在 $0.3 \text{ \AA/秒}$ 和 $2 \text{ \AA/秒}$, 将沉积期间的真空度保持在 1×10^{-7} 托至 5×10^{-5} 托, 因此, 制造了有机发光器件。

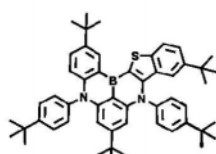


[0919]

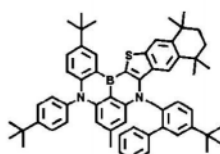


[0920] 实施例1-2至1-120

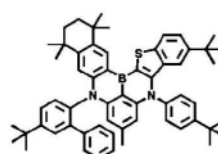
[0921] 以与实施例1-1中相同的方式制造有机发光器件,不同之处在于各自使用下表1中描述的化合物代替化合物A-1和E-1。



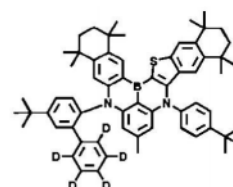
A-1



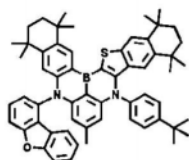
A-2



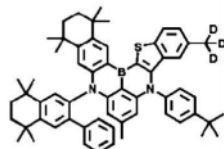
A-3



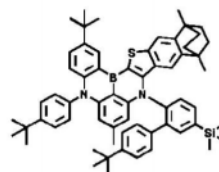
A-4



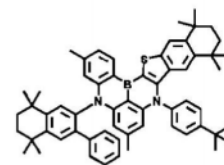
A-5



A-6

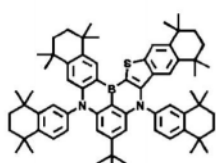


A-7

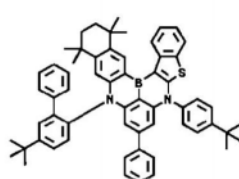


A-8

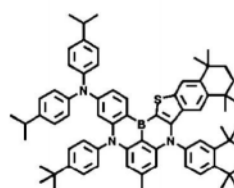
[0922]



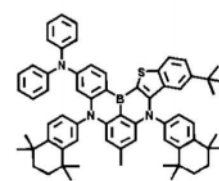
A-9



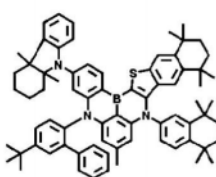
A-10



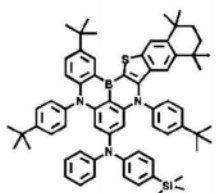
A-11



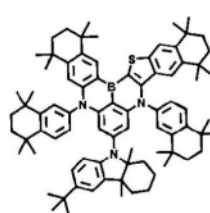
A-12



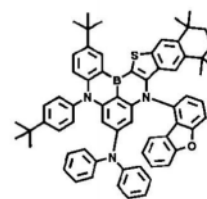
A-13



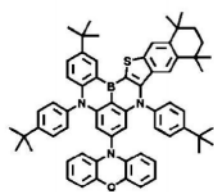
A-14



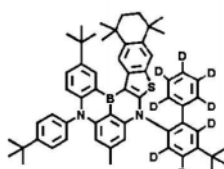
A-15



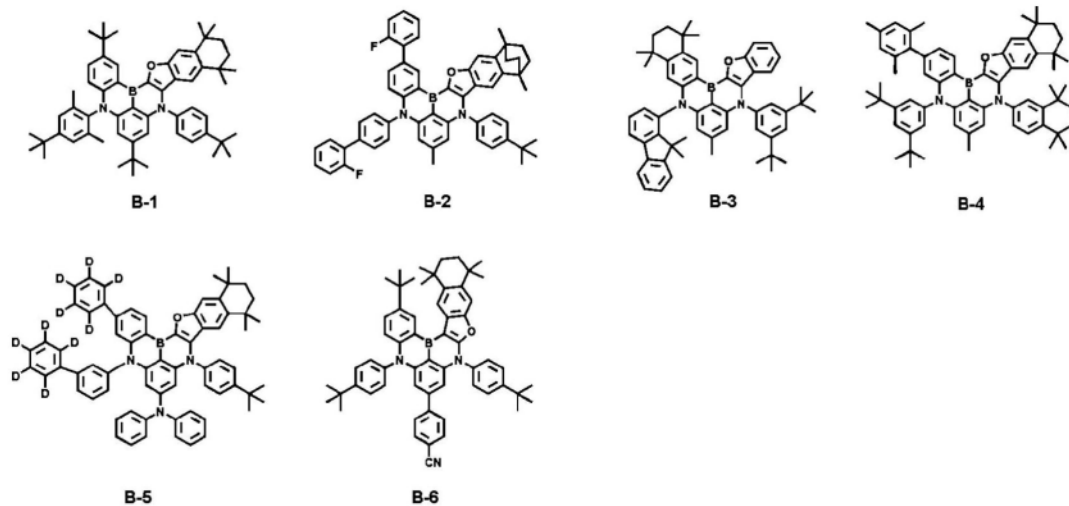
A-16



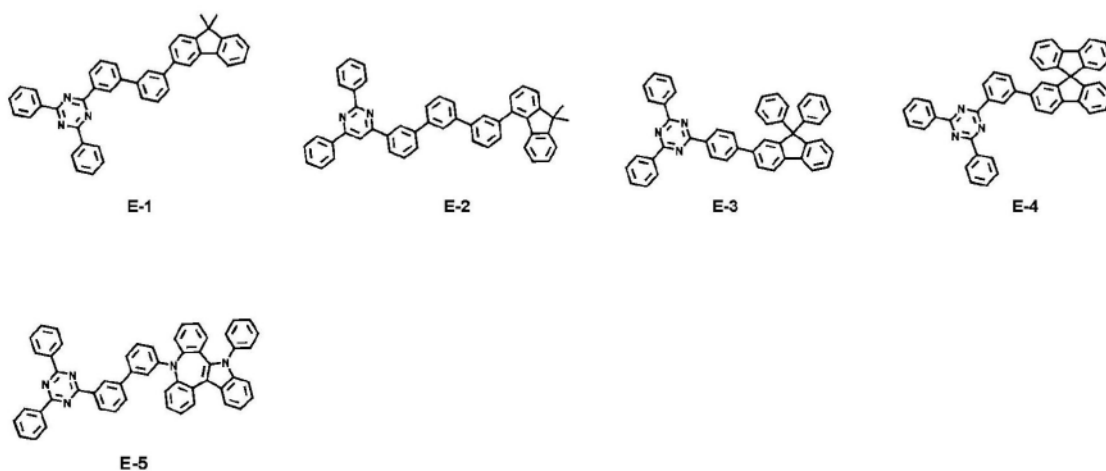
A-17



A-18

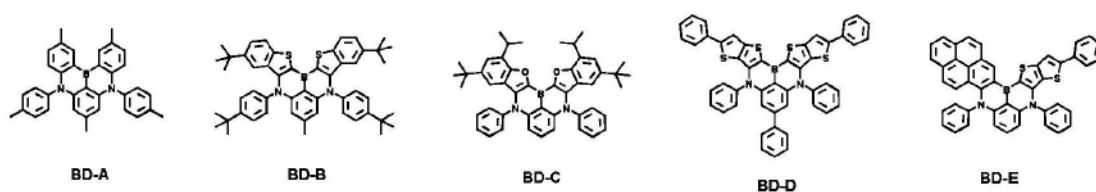


[0923]

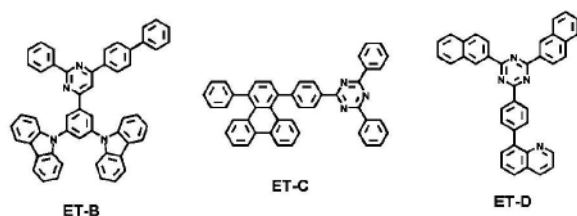


[0924] 比较例1-1至1-126

[0925] 以与实施例1-1中相同的方式制造有机发光器件,不同之处在于各自使用下表1中描述的化合物代替化合物A-1和E-1。



[0926]



[0927] 对于实施例1-1至1-120和比较例1-1至1-126中制造的各有机发光器件,在10mA/cm²的电流密度下测量驱动电压和发光效率,在20mA/cm²的电流密度下测量相对于初始亮度变为90%所花费的时间(T90)。结果示于下表1中。

[0928] [表1]

条目	掺杂剂	空穴阻挡层	电压 (V @10 mA/cm ²)	效率 (cd/A @10 mA/cm ²)	色坐标 (x, y)	寿命 (小时) T90 @20 mA/cm ²)
实施例 1-1	A-1	E-1	3.75	6.09	(0.135, 0.088)	224
实施例 1-2	A-2	E-1	3.71	6.36	(0.135, 0.089)	289
实施例 1-3	A-3	E-1	3.71	6.27	(0.135, 0.087)	234
实施例 1-4	A-4	E-1	3.75	6.46	(0.135, 0.088)	302
实施例 1-5	A-5	E-1	3.75	6.42	(0.135, 0.089)	255
实施例 1-6	A-6	E-1	3.71	6.41	(0.135, 0.087)	244
实施例 1-7	A-7	E-1	3.71	6.22	(0.135, 0.088)	232
实施例 1-8	A-8	E-1	3.75	6.20	(0.135, 0.088)	252
实施例 1-9	A-9	E-1	3.71	6.76	(0.135, 0.089)	298
实施例 1-10	A-10	E-1	3.71	6.11	(0.135, 0.087)	240
实施例 1-11	A-11	E-1	3.75	6.26	(0.135, 0.088)	271
实施例 1-12	A-12	E-1	3.75	6.14	(0.135, 0.089)	254
实施例 1-13	A-13	E-1	3.71	6.64	(0.135, 0.087)	261
实施例 1-14	A-14	E-1	3.71	6.24	(0.135, 0.088)	236
实施例 1-15	A-15	E-1	3.75	6.61	(0.135, 0.088)	281
实施例 1-16	A-16	E-1	3.71	6.33	(0.135, 0.089)	265
实施例 1-17	A-17	E-1	3.71	6.31	(0.135, 0.087)	227
实施例 1-18	A-18	E-1	3.75	6.18	(0.135, 0.088)	218
实施例 1-19	B-1	E-1	3.75	6.34	(0.135, 0.089)	254
实施例 1-20	B-2	E-1	3.71	6.19	(0.135, 0.087)	259
实施例 1-21	B-3	E-1	3.71	6.11	(0.135, 0.088)	205
实施例 1-22	B-4	E-1	3.75	6.20	(0.135, 0.088)	234
实施例 1-23	B-5	E-1	3.71	6.27	(0.135, 0.089)	232
实施例 1-24	B-6	E-1	3.71	6.12	(0.135, 0.087)	252
实施例 1-25	A-1	E-2	3.76	6.19	(0.135, 0.088)	216
实施例 1-26	A-2	E-2	3.73	6.47	(0.135, 0.089)	278

[0929]

[0930]

实施例 1-27	A-3	E-2	3.73	6.38	(0.135, 0.087)	225
实施例 1-28	A-4	E-2	3.76	6.57	(0.135, 0.088)	291
实施例 1-29	A-5	E-2	3.76	6.53	(0.135, 0.088)	246
实施例 1-30	A-6	E-2	3.73	6.51	(0.135, 0.089)	234
实施例 1-31	A-7	E-2	3.73	6.33	(0.135, 0.087)	223
实施例 1-32	A-8	E-2	3.76	6.30	(0.135, 0.088)	242
实施例 1-33	A-9	E-2	3.73	6.87	(0.135, 0.089)	287
实施例 1-34	A-10	E-2	3.73	6.21	(0.135, 0.087)	231
实施例 1-35	A-11	E-2	3.76	6.37	(0.135, 0.088)	261
实施例 1-36	A-12	E-2	3.76	6.24	(0.135, 0.088)	244
实施例 1-37	A-13	E-2	3.73	6.75	(0.135, 0.089)	251
实施例 1-38	A-14	E-2	3.73	6.34	(0.135, 0.087)	227
实施例 1-39	A-15	E-2	3.76	6.72	(0.135, 0.088)	270
实施例 1-40	A-16	E-2	3.73	6.43	(0.135, 0.089)	255
实施例 1-41	A-17	E-2	3.73	6.42	(0.135, 0.087)	218
实施例 1-42	A-18	E-2	3.76	6.28	(0.135, 0.088)	210
实施例 1-43	B-1	E-2	3.76	6.45	(0.135, 0.088)	244
实施例 1-44	B-2	E-2	3.73	6.30	(0.135, 0.089)	249
实施例 1-45	B-3	E-2	3.73	6.22	(0.135, 0.087)	197
实施例 1-46	B-4	E-2	3.76	6.30	(0.135, 0.088)	225
实施例 1-47	B-5	E-2	3.73	6.37	(0.135, 0.089)	223
实施例 1-48	B-6	E-2	3.73	6.22	(0.135, 0.087)	242
实施例 1-49	A-1	E-3	3.78	5.99	(0.135, 0.088)	242
实施例 1-50	A-2	E-3	3.75	6.26	(0.135, 0.088)	311
实施例 1-51	A-3	E-3	3.75	6.17	(0.135, 0.089)	252
实施例 1-52	A-4	E-3	3.78	6.35	(0.135, 0.087)	326
实施例 1-53	A-5	E-3	3.78	6.32	(0.135, 0.088)	275
实施例 1-54	A-6	E-3	3.75	6.30	(0.135, 0.089)	263
实施例 1-55	A-7	E-3	3.75	6.12	(0.135, 0.087)	250
实施例 1-56	A-8	E-3	3.78	6.09	(0.135, 0.088)	271
实施例 1-57	A-9	E-3	3.75	6.65	(0.135, 0.088)	321

[0931]

实施例 1-58	A-10	E-3	3.75	6.01	(0.135, 0.089)	258
实施例 1-59	A-11	E-3	3.78	6.16	(0.135, 0.087)	292
实施例 1-60	A-12	E-3	3.78	6.04	(0.135, 0.088)	273
实施例 1-61	A-13	E-3	3.75	6.53	(0.135, 0.089)	281
实施例 1-62	A-14	E-3	3.75	6.14	(0.135, 0.087)	254
实施例 1-63	A-15	E-3	3.78	6.50	(0.135, 0.088)	303
实施例 1-64	A-16	E-3	3.75	6.22	(0.135, 0.088)	286
实施例 1-65	A-17	E-3	3.75	6.21	(0.135, 0.089)	245
实施例 1-66	A-18	E-3	3.78	6.08	(0.135, 0.087)	235
实施例 1-67	B-1	E-3	3.78	6.24	(0.135, 0.088)	273
实施例 1-68	B-2	E-3	3.75	6.09	(0.135, 0.089)	279
实施例 1-69	B-3	E-3	3.75	6.01	(0.135, 0.087)	221
实施例 1-70	B-4	E-3	3.78	6.09	(0.135, 0.088)	252
实施例 1-71	B-5	E-3	3.75	6.17	(0.135, 0.088)	250
实施例 1-72	B-6	E-3	3.75	6.02	(0.135, 0.089)	271
实施例 1-73	A-1	E-4	3.75	6.14	(0.135, 0.087)	221
实施例 1-74	A-2	E-4	3.71	6.42	(0.135, 0.088)	284
实施例 1-75	A-3	E-4	3.71	6.32	(0.135, 0.089)	230
实施例 1-76	A-4	E-4	3.75	6.52	(0.135, 0.087)	298
实施例 1-77	A-5	E-4	3.75	6.48	(0.135, 0.088)	252
实施例 1-78	A-6	E-4	3.71	6.46	(0.135, 0.088)	240
实施例 1-79	A-7	E-4	3.71	6.27	(0.135, 0.089)	228
实施例 1-80	A-8	E-4	3.75	6.25	(0.135, 0.087)	248
实施例 1-81	A-9	E-4	3.71	6.82	(0.135, 0.088)	294
实施例 1-82	A-10	E-4	3.71	6.16	(0.135, 0.089)	236
实施例 1-83	A-11	E-4	3.75	6.31	(0.135, 0.087)	267
实施例 1-84	A-12	E-4	3.75	6.19	(0.135, 0.088)	250
实施例 1-85	A-13	E-4	3.71	6.69	(0.135, 0.088)	257
实施例 1-86	A-14	E-4	3.71	6.29	(0.135, 0.089)	232
实施例 1-87	A-15	E-4	3.75	6.66	(0.135, 0.087)	277
实施例 1-88	A-16	E-4	3.71	6.38	(0.135, 0.088)	261

[0932]

实施例 1-89	A-17	E-4	3.71	6.36	(0.135, 0.089)	224
实施例 1-90	A-18	E-4	3.75	6.23	(0.135, 0.087)	215
实施例 1-91	B-1	E-4	3.75	6.39	(0.135, 0.088)	250
实施例 1-92	B-2	E-4	3.71	6.24	(0.135, 0.088)	255
实施例 1-93	B-3	E-4	3.71	6.16	(0.135, 0.089)	202
实施例 1-94	B-4	E-4	3.75	6.25	(0.135, 0.087)	230
实施例 1-95	B-5	E-4	3.71	6.32	(0.135, 0.088)	228
实施例 1-96	B-6	E-4	3.71	6.17	(0.135, 0.089)	248
实施例 1-97	A-1	E-5	3.79	5.84	(0.135, 0.087)	235
实施例 1-98	A-2	E-5	3.75	6.10	(0.135, 0.088)	302
实施例 1-99	A-3	E-5	3.75	6.01	(0.135, 0.088)	245
实施例 1-100	A-4	E-5	3.79	6.19	(0.135, 0.089)	316
实施例 1-101	A-5	E-5	3.79	6.16	(0.135, 0.087)	267
实施例 1-102	A-6	E-5	3.75	6.14	(0.135, 0.088)	255
实施例 1-103	A-7	E-5	3.75	5.96	(0.135, 0.089)	243
实施例 1-104	A-8	E-5	3.79	5.94	(0.135, 0.087)	263
实施例 1-105	A-9	E-5	3.75	6.48	(0.135, 0.088)	312
实施例 1-106	A-10	E-5	3.75	5.85	(0.135, 0.088)	251
实施例 1-107	A-11	E-5	3.79	6.00	(0.135, 0.089)	284
实施例 1-108	A-12	E-5	3.79	5.88	(0.135, 0.087)	266
实施例 1-109	A-13	E-5	3.75	6.36	(0.135, 0.088)	273
实施例 1-110	A-14	E-5	3.75	5.98	(0.135, 0.089)	247

[0933]

实施例 1-111	A-15	E-5	3.79	6.33	(0.135, 0.087)	294
实施例 1-112	A-16	E-5	3.75	6.06	(0.135, 0.088)	277
实施例 1-113	A-17	E-5	3.75	6.05	(0.135, 0.088)	238
实施例 1-114	A-18	E-5	3.79	5.92	(0.135, 0.089)	228
实施例 1-115	B-1	E-5	3.79	6.08	(0.135, 0.087)	265
实施例 1-116	B-2	E-5	3.75	5.93	(0.135, 0.088)	271
实施例 1-117	B-3	E-5	3.75	5.86	(0.135, 0.089)	214
实施例 1-118	B-4	E-5	3.79	5.94	(0.135, 0.087)	245
实施例 1-119	B-5	E-5	3.75	6.01	(0.135, 0.088)	243
实施例 1-120	B-6	E-5	3.75	5.87	(0.135, 0.088)	263
比较例 1-1	BD-A	-	3.90	5.00	(0.135, 0.089)	150
比较例 1-2	BD-B	-	4.10	3.50	(0.135, 0.087)	180
比较例 1-3	BD-C	-	4.08	3.60	(0.135, 0.088)	122
比较例 1-4	BD-D	-	4.02	4.45	(0.135, 0.089)	116
比较例 1-5	BD-E	-	4.17	3.65	(0.135, 0.087)	98
比较例 1-6	A-1	-	3.86	5.08	(0.135, 0.088)	173
比较例 1-7	A-2	-	3.82	5.30	(0.135, 0.088)	222
比较例 1-8	A-3	-	3.82	5.23	(0.135, 0.089)	180
比较例 1-9	A-4	-	3.86	5.38	(0.135, 0.087)	233
比较例 1-10	A-5	-	3.86	5.35	(0.135, 0.088)	197
比较例 1-11	A-6	-	3.82	5.34	(0.135, 0.089)	188
比较例 1-12	A-7	-	3.82	5.19	(0.135, 0.087)	179

[0934]

比较例 1-13	A-8	-	3.86	5.17	(0.135, 0.088)	194
比较例 1-14	A-9	-	3.82	5.63	(0.135, 0.088)	230
比较例 1-15	A-10	-	3.82	5.09	(0.135, 0.089)	185
比较例 1-16	A-11	-	3.86	5.22	(0.135, 0.087)	209
比较例 1-17	A-12	-	3.86	5.12	(0.135, 0.088)	195
比较例 1-18	A-13	-	3.82	5.53	(0.135, 0.089)	201
比较例 1-19	A-14	-	3.82	5.20	(0.135, 0.087)	182
比较例 1-20	A-15	-	3.86	5.51	(0.135, 0.088)	216
比较例 1-21	A-16	-	3.82	5.27	(0.135, 0.088)	204
比较例 1-22	A-17	-	3.82	5.26	(0.135, 0.089)	175
比较例 1-23	A-18	-	3.86	5.15	(0.135, 0.087)	168
比较例 1-24	B-1	-	3.86	5.29	(0.135, 0.088)	195
比较例 1-25	B-2	-	3.82	5.16	(0.135, 0.089)	200
比较例 1-26	B-3	-	3.82	5.10	(0.135, 0.087)	158
比较例 1-27	B-4	-	3.86	5.17	(0.135, 0.088)	180
比较例 1-28	B-5	-	3.82	5.23	(0.135, 0.088)	179
比较例 1-29	B-6	-	3.82	5.10	(0.135, 0.089)	194
比较例 1-30	A-1	ET-B	3.82	5.28	(0.135, 0.087)	138
比较例 1-31	A-2	ET-B	3.78	5.52	(0.135, 0.088)	178
比较例 1-32	A-3	ET-B	3.78	5.44	(0.135, 0.089)	144
比较例 1-33	A-4	ET-B	3.82	5.60	(0.135, 0.087)	186
比较例 1-34	A-5	ET-B	3.82	5.57	(0.135, 0.088)	157
比较例 1-35	A-6	ET-B	3.78	5.55	(0.135, 0.088)	150
比较例 1-36	A-7	ET-B	3.78	5.39	(0.135, 0.089)	143
比较例 1-37	A-8	ET-B	3.82	5.37	(0.135, 0.087)	155
比较例 1-38	A-9	ET-B	3.78	5.86	(0.135, 0.088)	184
比较例 1-39	A-10	ET-B	3.78	5.29	(0.135, 0.088)	148
比较例 1-40	A-11	ET-B	3.82	5.43	(0.135, 0.089)	167
比较例 1-41	A-12	ET-B	3.82	5.32	(0.135, 0.087)	156
比较例 1-42	A-13	ET-B	3.78	5.75	(0.135, 0.088)	161
比较例 1-43	A-14	ET-B	3.78	5.41	(0.135, 0.089)	145

[0935]

比较例 1-44	A-15	ET-B	3.82	5.73	(0.135, 0.087)	173
比较例 1-45	A-16	ET-B	3.78	5.48	(0.135, 0.088)	163
比较例 1-46	A-17	ET-B	3.78	5.47	(0.135, 0.088)	140
比较例 1-47	A-18	ET-B	3.82	5.36	(0.135, 0.089)	134
比较例 1-48	B-1	ET-B	3.82	5.50	(0.135, 0.087)	156
比较例 1-49	B-2	ET-B	3.78	5.37	(0.135, 0.088)	160
比较例 1-50	B-3	ET-B	3.78	5.30	(0.135, 0.088)	126
比较例 1-51	B-4	ET-B	3.82	5.37	(0.135, 0.089)	144
比较例 1-52	B-5	ET-B	3.78	5.43	(0.135, 0.087)	143
比较例 1-53	B-6	ET-B	3.78	5.30	(0.135, 0.088)	155
比较例 1-54	A-1	ET-C	3.90	5.18	(0.135, 0.089)	136
比较例 1-55	A-2	ET-C	3.86	5.41	(0.135, 0.087)	175
比较例 1-56	A-3	ET-C	3.86	5.33	(0.135, 0.088)	142
比较例 1-57	A-4	ET-C	3.90	5.49	(0.135, 0.088)	184
比较例 1-58	A-5	ET-C	3.90	5.46	(0.135, 0.089)	155
比较例 1-59	A-6	ET-C	3.86	5.45	(0.135, 0.087)	148
比较例 1-60	A-7	ET-C	3.86	5.29	(0.135, 0.088)	141
比较例 1-61	A-8	ET-C	3.90	5.27	(0.135, 0.088)	153
比较例 1-62	A-9	ET-C	3.86	5.75	(0.135, 0.089)	181
比较例 1-63	A-10	ET-C	3.86	5.19	(0.135, 0.087)	146
比较例 1-64	A-11	ET-C	3.90	5.32	(0.135, 0.088)	165
比较例 1-65	A-12	ET-C	3.90	5.22	(0.135, 0.089)	154
比较例 1-66	A-13	ET-C	3.86	5.64	(0.135, 0.087)	159
比较例 1-67	A-14	ET-C	3.86	5.30	(0.135, 0.088)	143
比较例 1-68	A-15	ET-C	3.90	5.62	(0.135, 0.088)	171
比较例 1-69	A-16	ET-C	3.86	5.38	(0.135, 0.089)	161
比较例 1-70	A-17	ET-C	3.86	5.37	(0.135, 0.087)	138
比较例 1-71	A-18	ET-C	3.90	5.25	(0.135, 0.088)	133
比较例 1-72	B-1	ET-C	3.90	5.39	(0.135, 0.088)	154
比较例 1-73	B-2	ET-C	3.86	5.26	(0.135, 0.089)	158
比较例 1-74	B-3	ET-C	3.86	5.20	(0.135, 0.087)	124

[0936]

比较例 1-75	B-4	ET-C	3.90	5.27	(0.135, 0.088)	142
比较例 1-76	B-5	ET-C	3.86	5.33	(0.135, 0.089)	141
比较例 1-77	B-6	ET-C	3.86	5.20	(0.135, 0.087)	153
比较例 1-78	A-1	ET-D	3.94	5.23	(0.135, 0.088)	121
比较例 1-79	A-2	ET-D	3.90	5.46	(0.135, 0.088)	155
比较例 1-80	A-3	ET-D	3.90	5.38	(0.135, 0.089)	126
比较例 1-81	A-4	ET-D	3.94	5.55	(0.135, 0.087)	163
比较例 1-82	A-5	ET-D	3.94	5.51	(0.135, 0.088)	138
比较例 1-83	A-6	ET-D	3.90	5.50	(0.135, 0.088)	131
比较例 1-84	A-7	ET-D	3.90	5.34	(0.135, 0.089)	125
比较例 1-85	A-8	ET-D	3.94	5.32	(0.135, 0.087)	135
比较例 1-86	A-9	ET-D	3.90	5.80	(0.135, 0.088)	161
比较例 1-87	A-10	ET-D	3.90	5.24	(0.135, 0.089)	129
比较例 1-88	A-11	ET-D	3.94	5.37	(0.135, 0.087)	146
比较例 1-89	A-12	ET-D	3.94	5.27	(0.135, 0.088)	137
比较例 1-90	A-13	ET-D	3.90	5.70	(0.135, 0.088)	141
比较例 1-91	A-14	ET-D	3.90	5.36	(0.135, 0.089)	127
比较例 1-92	A-15	ET-D	3.94	5.67	(0.135, 0.087)	151
比较例 1-93	A-16	ET-D	3.90	5.43	(0.135, 0.088)	143
比较例 1-94	A-17	ET-D	3.90	5.42	(0.135, 0.088)	122
比较例 1-95	A-18	ET-D	3.94	5.30	(0.135, 0.089)	118
比较例 1-96	B-1	ET-D	3.94	5.44	(0.135, 0.087)	137
比较例 1-97	B-2	ET-D	3.90	5.31	(0.135, 0.088)	140
比较例 1-98	B-3	ET-D	3.90	5.25	(0.135, 0.089)	110
比较例 1-99	B-4	ET-D	3.94	5.32	(0.135, 0.087)	126
比较例 1-100	B-5	ET-D	3.90	5.38	(0.135, 0.088)	125
比较例 1-101	B-6	ET-D	3.90	5.25	(0.135, 0.088)	135
比较例 1-102	BD-A	E-1	3.82	5.60	(0.135, 0.089)	168

[0937]

比较例 1-103	BD-B	E-1	4.01	3.92	(0.135, 0.087)	202
比较例 1-104	BD-C	E-1	3.99	4.03	(0.135, 0.088)	136
比较例 1-105	BD-D	E-1	3.94	4.98	(0.135, 0.088)	129
比较例 1-106	BD-E	E-1	4.09	4.09	(0.135, 0.089)	109
比较例 1-107	BD-A	E-2	3.80	5.70	(0.135, 0.087)	162
比较例 1-108	BD-B	E-2	3.99	3.99	(0.135, 0.088)	194
比较例 1-109	BD-C	E-2	3.97	4.10	(0.135, 0.089)	131
比较例 1-110	BD-D	E-2	3.92	5.07	(0.135, 0.087)	125
比较例 1-111	BD-E	E-2	4.07	4.16	(0.135, 0.088)	105
比较例 1-112	BD-A	E-3	3.82	5.40	(0.135, 0.088)	179
比较例 1-113	BD-B	E-3	4.01	3.78	(0.135, 0.089)	214
比较例 1-114	BD-C	E-3	3.99	3.89	(0.135, 0.087)	145
比较例 1-115	BD-D	E-3	3.94	4.81	(0.135, 0.088)	137
比较例 1-116	BD-E	E-3	4.09	3.94	(0.135, 0.088)	116
比较例 1-117	BD-A	E-4	3.82	5.65	(0.135, 0.089)	165
比较例 1-118	BD-B	E-4	4.01	3.96	(0.135, 0.087)	198
比较例 1-119	BD-C	E-4	3.99	4.07	(0.135, 0.088)	134

[0938]

比较例 1-120	BD-D	E-4	3.94	5.03	(0.135, 0.089)	127
比较例 1-121	BD-E	E-4	4.09	4.12	(0.135, 0.087)	107
比较例 1-122	BD-A	E-5	3.85	5.55	(0.135, 0.088)	174
比较例 1-123	BD-B	E-5	4.05	3.89	(0.135, 0.088)	209
比较例 1-124	BD-C	E-5	4.03	4.00	(0.135, 0.089)	141
比较例 1-125	BD-D	E-5	3.97	4.94	(0.135, 0.087)	134
比较例 1-126	BD-E	E-5	4.12	4.05	(0.135, 0.088)	113

[0939] 如表1所示,确定在发光层中使用本公开内容的由化学式1表示的化合物以及在电子传输区域中使用由化学式2表示的化合物的有机发光器件在驱动电压、效率和寿命方面表现出显著的效果。

[0940] 具体地,根据本公开内容的化学式1包含含有氧原子或硫原子的5元杂环,这降低了化合物的第一三线态激发能量,从而增加了第一单线态激发能量与第一三线态激发能量之间的差值,因此,获得了特别地改善包含其的有机发光器件的寿命特性的结果。此外,根据本公开内容的化学式2通过包含含有N的单环以及通过包含苄基或者含有N、O或S的稠合环状环基团来增强电子迁移特性,通过形成分子的宽带隙来增强空穴阻挡和电子传输的效果,因此,获得了特别地增强包含其的有机发光器件的效率的效果。

[0941] 在本文中,确定当通过在空穴阻挡层中使用化学式2的化合物并由此降低界面之间的能垒来在有机发光器件中增强低电压和高效率特性,以及通过在发光层中使用化学式1的化合物来增强有机发光器件的寿命时,通过将化学式1和化学式2组合,有机发光器件的低电压、高效率和长寿命特性通常进一步增强。

[0942] 因此,确定在发光层和空穴阻挡层中使用根据本公开内容的化学式1的化合物和化学式2的化合物二者的有机发光器件在电压、效率和寿命特性方面实现了优异的结果。

9
7
6
2
1

图1

9
8
7
6
5
4
3
2
1

图2