

(12) 按照专利合作条约所公布的国际申请

(19) 世界知识产权组织

国 际 局

(43) 国际公布日

2022 年 6 月 30 日 (30.06.2022)



WIPO | PCT



(10) 国际公布号

WO 2022/134613 A1

(51) 国际专利分类号:

C07D 403/14 (2006.01) *C07B 59/00* (2006.01)
C07D 405/14 (2006.01) *H01L 51/50* (2006.01)
C07D 409/14 (2006.01) *H01L 51/54* (2006.01)
C09K 11/06 (2006.01)

(21) 国际申请号:

PCT/CN2021/111906

(22) 国际申请日:

2021 年 8 月 10 日 (10.08.2021)

(25) 申请语言:

中文

(26) 公布语言:

中文

(30) 优先权:

202011572846.4 2020 年 12 月 24 日 (24.12.2020) CN

(71) 申请人: 陕西莱特光电材料股份有限公司 (SHAANXI LIGHTE OPTOELECTRONICS MATERIAL CO., LTD.) [CN/CN]; 中国陕西省西安市高新区隆丰路 99 号 3 幢 3 号楼, Shaanxi 710065 (CN).

(72) 发明人: 马天天 (MA, Tiantian); 中国陕西省西安市莲湖区高新四路西北大学桃园校区三乙楼 202 室, Shaanxi 710084 (CN)。藏研 (ZANG, Yan); 中国陕西省西安市高陵区泾环北路中段 27 号 6 号楼 2-2101 室, Shaanxi 710200 (CN)。南朋 (NAN,

Peng); 中国陕西省西安市高新区隆丰路 99 号 3 幢 2 号楼 8419 室, Shaanxi 710065 (CN)。

(74) 代理人: 北京英创嘉友知识产权代理事务所 (普通合伙) (INNOTRACK INTELLECTUAL PROPERTY LAW FIRM); 中国北京市朝阳区德胜门外北沙滩 1 号院 31 号楼 A1108 室, Beijing 100083 (CN)。

(81) 指定国(除另有指明, 要求每一种可提供的国家保护): AE, AG, AL, AM, AO, AT, AU, AZ, BA, BB, BG, BH, BN, BR, BW, BY, BZ, CA, CH, CL, CN, CO, CR, CU, CZ, DE, DJ, DK, DM, DO, DZ, EC, EE, EG, ES, FI, GB, GD, GE, GH, GM, GT, HN, HR, HU, ID, IL, IN, IR, IS, IT, JO, JP, KE, KG, KH, KN, KP, KR, KW, KZ, LA, LC, LK, LR, LS, LU, LY, MA, MD, ME, MG, MK, MN, MW, MX, MY, MZ, NA, NG, NI, NO, NZ, OM, PA, PE, PG, PH, PL, PT, QA, RO, RS, RU, RW, SA, SC, SD, SE, SG, SK, SL, ST, SV, SY, TH, TJ, TM, TN, TR, TT, TZ, UA, UG, US, UZ, VC, VN, WS, ZA, ZM, ZW。

(84) 指定国(除另有指明, 要求每一种可提供的地区保护): ARIPO (BW, GH, GM, KE, LR, LS, MW, MZ, NA, RW, SD, SL, ST, SZ, TZ, UG, ZM, ZW), 欧亚 (AM, AZ, BY, KG, KZ, RU, TJ, TM), 欧洲 (AL, AT, BE, BG,

(54) Title: NITROGEN-CONTAINING COMPOUND, ELECTRONIC COMPONENT COMPRISING SAME, AND ELECTRONIC APPARATUS

(54) 发明名称: 一种含氮化合物及包含其的电子元件和电子装置

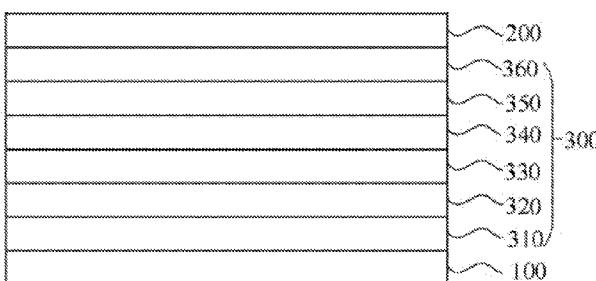


图 1

(57) Abstract: The present application relates to the technical field of organic electroluminescence, and provides a nitrogen-containing compound, an electronic component comprising same, and an electronic apparatus. In the compound of the present application, a nitrogen atom of carbazolyl is connected to site 1 of another carbazole group, and moreover, a benzene ring of the carbazolyl is connected to a triazine group, such that the entire molecular structure has a relatively good spatial configuration, the T1 energy level of a material can be improved while the molecular structure has better rigidity and higher mobility, and low crystallinity is achieved. The nitrogen-containing compound is more suitable for being used as an electronic body material in a light-emitting layer hybrid body of an organic electroluminescent device, and is particularly suitable for being used as an electronic body material of a green light device. When the nitrogen-containing compound of the present application is used as a light-emitting layer material of the organic electroluminescent device, the electronic transmission performance of the device is effectively improved, the light-emitting efficiency of the device is improved, and the service life of the device is prolonged.



CH, CY, CZ, DE, DK, EE, ES, FI, FR, GB, GR, HR, HU, IE, IS, IT, LT, LU, LV, MC, MK, MT, NL, NO, PL, PT, RO, RS, SE, SI, SK, SM, TR), OAPI (BF, BJ, CF, CG, CI, CM, GA, GN, GQ, GW, KM, ML, MR, NE, SN, TD, TG)。

本国际公布：

— 包括国际检索报告(条约第21条(3))。

(57) 摘要：本申请提供一种含氮化合物及包含其电子元件和电子装置，属于有机电致发光技术领域。本申请化合物将咔唑基的氮原子与另一咔唑类基团的1号位连接，同时将咔唑基的苯环与三嗪类基团相连接，这种连接方式使得整个分子结构具有较好的立体构型，可以使分子结构具有更好的刚性，更高迁移率的同时提升材料T1能级，并有较低的结晶性。该含氮化合物更适合作为有机电致发光器件的发光层混合主体中的电子型主体材料，尤其适合用于绿光器件的电子型主体材料。将本申请含氮化合物用于有机电致发光器件的发光层材料时，将有效提升器件的电子传输性能，改善器件发光效率以及使用寿命。

一种含氮化合物及包含其的电子元件和电子装置

相关申请的交叉引用

本申请要求于 2020 年 12 月 24 日递交的申请号为 202011572846.4 的中国专利申请的优先权，在此引用上述中国专利申请的内容全文以作为本申请的一部分。

技术领域

本申请属于有机电致发光技术领域，具体提供一种含氮化合物及包含其的电子元件和电子装置。

背景技术

随着电子技术的发展和材料科学的进步，用于实现电致发光或者光电转化的电子元器件的应用范围越来越广泛。该类电子元器件通常包括相对设置的阴极和阳极，以及设置于阴极和阳极之间的功能层。该功能层由多层有机或者无机膜层组成，且一般包括能量转化层、位于能量转化层与阳极之间的空穴传输层、位于能量转化层与阴极之间的电子传输层。以有机电致发光器件为例，其一般包括依次层叠设置的阳极、空穴传输层、作为能量转化层的电致发光层、电子传输层和阴极。当阴阳两极施加电压时，两电极产生电场，在电场的作用下，阴极侧的电子向电致发光层移动，阳极侧的空穴也向发光层移动，电子和空穴在电致发光层结合形成激子，激子处于激发态向外释放能量，进而使得电致发光层对外发光。

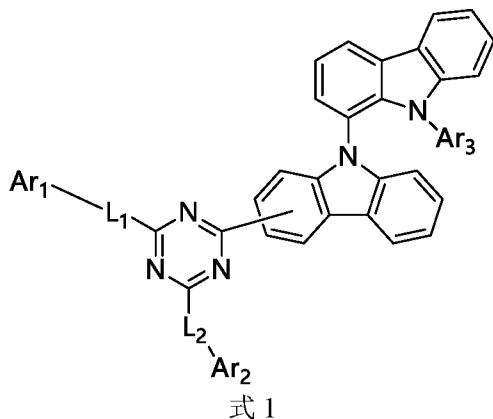
现有技术文献也对此进行了研究，例如：专利文献 WO2019096717A2；US20180166634A1；KR101904669B1；CN107652295A 等公开了可以在有机电致发光器件中制备发光主体材料。然而，依然有必要继续研发新型的材料，以进一步提高电子元器件的性能。

发明内容

本申请的目的在于克服上述现有技术中的不足，提供一种含氮化合物及包含其的电子元件和电子装置，可提高发光效率，延长器件寿命。

为实现上述发明目的，本申请采用如下技术方案：

根据本申请的第一个方面，提供了一种含氮化合物，所述含氮化合物的结构如式 1 所示：



其中， Ar_1 和 Ar_2 相同或不同，且分别独立地选自碳原子数为 6~30 的取代或未取代的芳基、碳原子数为 3~30 的取代或未取代的杂芳基；

Ar_3 选自碳原子数为 6~15 的取代或未取代的芳基；

所述 Ar_3 中的取代基各自独立地选自氘、卤素基团、氰基或苯基；

L₁ 和 L₂ 相同或不同，且分别独立地选自单键、碳原子数为 6~30 的取代或未取代的亚芳基、碳原子数为 3~30 的取代或未取代的亚杂芳基；

所述 Ar₁、Ar₂、L₁、L₂ 中的取代基相同或不同，且分别独立地选自氘，卤素基团，氰基，碳原子数为 3~20 的杂芳基，任选地被 0、1、2、3、4 或 5 个独立选自氘、氟、氰基、甲基、叔丁基的取代基所取代的碳原子数为 6~20 的芳基，碳原子数为 3~12 的三烷基硅基，碳原子数为 18~24 的三芳基硅基，碳原子数为 1~10 的烷基，碳原子数为 1~10 的卤代烷基，碳原子数为 2~6 的烯基，碳原子数为 2~6 的炔基，碳原子数为 3~10 的环烷基，碳原子数为 2~10 的杂环烷基、碳原子数为 5~10 的环烯基，碳原子数为 4~10 的杂环烯基，碳原子数为 1~10 的烷氧基，碳原子数为 1~10 的烷硫基，碳原子数为 6~18 的芳氧基，碳原子数为 6~18 的芳硫基，碳原子数为 6~18 的膦氧基。

本申请提供的含氮化合物，将咔唑基的氮原子与另一咔唑类基团的 1 号位连接，同时将咔唑基的苯环与三嗪类基团相连接，这种连接方式使得整个分子结构具有较好的立体构型，可以使分子结构具有更好的刚性，更高迁移率的同时提升材料 T₁ 能级，并有较低的结晶性。该含氮化合物更适合作为有机电致发光器件发光层的混合主体中的电子型主体材料，尤其适合用于发光器件的电子型主体材料。将本申请含氮化合物用于有机电致发光器件的发光层材料时，将有效提升器件的电子传输性能，改善器件发光效率以及使用寿命。

根据本申请的第二个方面，提供一种电子元件，包括阳极、阴极、以及介于阳极与阴极之间的至少一层功能层，功能层包含上述的含氮化合物；

优选地，所述功能层包括发光层，所述发光层包括所述含氮化合物。

根据本申请的第三个方面，提供一种电子装置，包括上述的电子元件。

应当理解的是，以上的一般描述和后文的细节描述仅是示例性和解释性的，并不能限制本申请。

附图说明

附图是用来提供对本申请的进一步理解，并且构成说明书的一部分，与下面的具体实施方式一起用于解释本申请，但并不构成对本申请的限制。

在附图中：

图 1 是本申请的一实施方式的有机电致发光器件的结构示意图。

图 2 是本申请一实施方式的电子装置的结构示意图。

图 3 是本申请化合物 14 的分子结构模型图。

图 4 是本申请比较例化合物 C 的分子结构模型图。

附图标记说明

100、阳极；200、阴极；300、功能层；310、空穴注入层；320、空穴传输层；330、空穴调整层；340、发光层；350、电子传输层；360、电子注入层；400、电子装置。

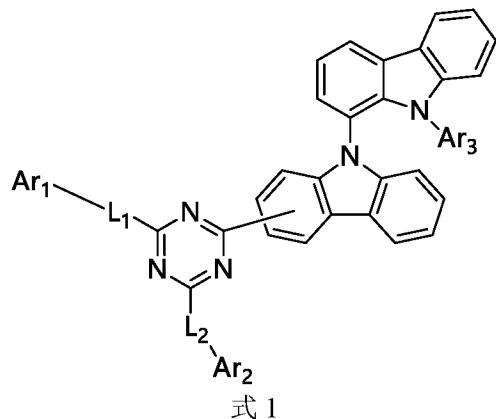
具体实施方式

现在将参考附图更全面地描述示例实施例。然而，示例实施例能够以多种形式实施，且不应被理解为限于在此阐述的范例；相反，提供这些实施例使得本申请将更加全面和完整，并将示例实施例的构思全面地传达给本领域的技术人员。所描述的特征、结构或特性可以以任何合适的方式结

合在一个或更多实施例中。在下面的描述中，提供许多具体细节从而给出对本申请的实施例的充分理解。

在图中，为了清晰，可能夸大了区域和层的厚度。在图中相同的附图标记表示相同或类似的结构，因而将省略它们的详细描述。

本申请提供了一种含氮化合物，该含氮化合物的结构通式如式 1 所示：



其中，Ar₁ 和 Ar₂ 相同或不同，且分别独立地选自碳原子数为 6~30 的取代或未取代的芳基、碳原子数为 3~30 的取代或未取代的杂芳基；

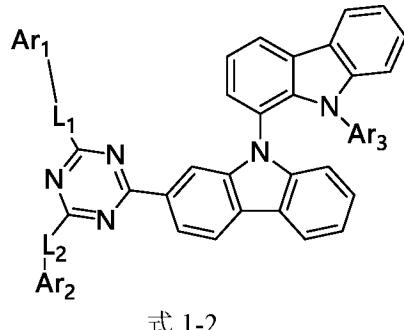
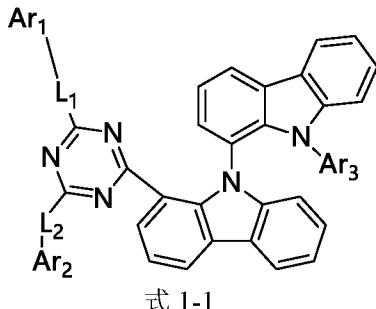
Ar₃ 选自碳原子数为 6~15 的取代或未取代的芳基；

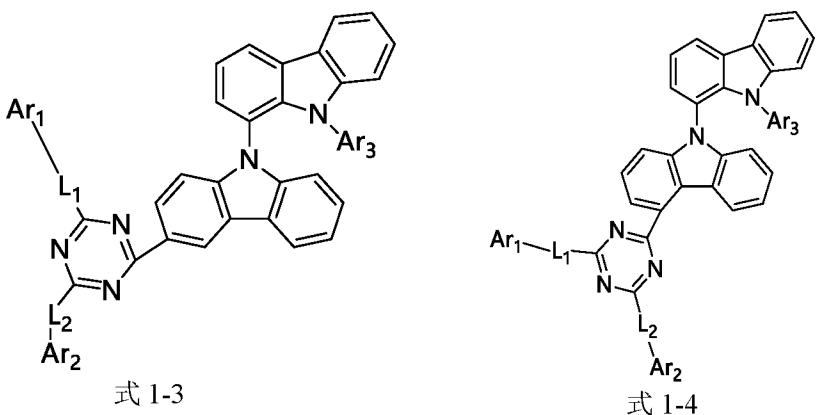
所述 Ar₃ 的取代基各自独立地选自氘、卤素基团、氰基或苯基；

L₁ 和 L₂ 相同或不同，且分别独立地选自单键、碳原子数为 6~30 的取代或未取代的亚芳基、碳原子数为 3~30 的取代或未取代的亚杂芳基；

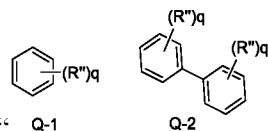
所述 Ar₁、Ar₂、L₁、L₂ 中的取代基相同或不同，且分别独立地选自氘，卤素基团，氰基，碳原子数为 3~20 的杂芳基，任选地被 0、1、2、3、4 或 5 个独立选自氘、氟、氰基、甲基、叔丁基的取代基所取代的碳原子数为 6~20 的芳基，碳原子数为 3~12 的三烷基硅基，碳原子数为 18~24 的三芳基硅基，碳原子数为 1~10 的烷基，碳原子数为 1~10 的卤代烷基，碳原子数为 2~6 的烯基，碳原子数为 2~6 的炔基，碳原子数为 3~10 的环烷基，碳原子数为 2~10 的杂环烷基、碳原子数为 5~10 的环烯基，碳原子数为 4~10 的杂环烯基，碳原子数为 1~10 的烷氧基，碳原子数为 1~10 的烷硫基，碳原子数为 6~18 的芳氧基，碳原子数为 6~18 的芳硫基，碳原子数为 6~18 的膦氧基。

可选地，所述含氮化合物具有式 1-1、式 1-2、式 1-3 和式 1-4 中任一种所示的结构：





在本申请中，所采用的描述方式“各自独立地选自”与“分别独立地选自”可以互换，均应做广义理解，其既可以是指在不同基团中，相同符号之间所表达的具体选项之间互相不影响，也可以表示



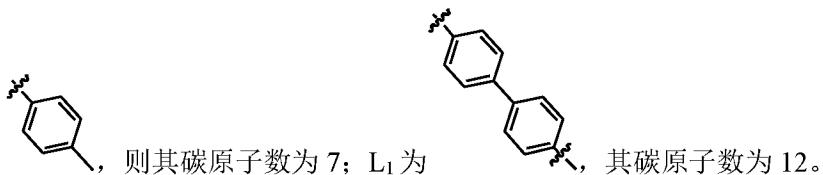
在相同的基团中，相同符号之间所表达的具体选项之间互相不影响。例如，“ Q-1

其中，各 q 独立地为 0、1、2 或 3，各 R'' 独立地选自氢、氘、氟、氯”，其含义是：式 Q-1 表示苯环上有 q 个取代基 R'' ，各个 R'' 可以相同也可以不同，每个 R'' 的选项之间互不影响；式 Q-2 表示联苯的每一个苯环上有 q 个取代基 R'' ，两个苯环上的 R'' 取代基的个数 q 可以相同或不同，各个 R'' 可以相同也可以不同，每个 R'' 的选项之间互不影响。

在本申请中，“取代或未取代的”这样的术语是指，在该术语后面记载的官能团可以具有或不具有取代基（下文为了便于描述，将取代基统称为 Rc）。例如，“取代或未取代的芳基”是指具有取代基 Rc 的芳基或者非取代的芳基。其中上述的取代基即 Rc 例如可以为氘，卤素基团，氰基，碳原子数为 3~20 的杂芳基，任选地被 0、1、2、3、4 或 5 个独立选自氘、氟、氰基、甲基、叔丁基的取代基所取代的碳原子数为 6~20 的芳基，碳原子数为 3~12 的三烷基硅基，碳原子数为 18~24 的三芳基硅基，碳原子数为 1~10 的烷基，碳原子数为 1~10 的卤代烷基，碳原子数为 2~6 的烯基，碳原子数为 2~6 的炔基，碳原子数为 3~10 的环烷基，碳原子数为 2~10 的杂环烷基、碳原子数为 5~10 的环烯基，碳原子数为 4~10 的杂环烯基，碳原子数为 1~10 的烷氧基，碳原子数为 1~10 的烷硫基，碳原子数为 6~18 的芳氧基，碳原子数为 6~18 的芳硫基，碳原子数为 6~18 的膦氧基。在本申请中，“取代的”官能团可以被上述 Rc 中的一个或 2 个以上的取代基取代；当同一个原子上连接有两个取代基 Rc 时，这两个取代基 Rc 可以独立地存在或者相互连接以与所述原子形成环；当官能团上存在两个相邻的取代基 Rc 时，相邻的两个取代基 Rc 可以独立地存在或者与其所连接的官能团稠合成环。

在本申请中，任选地被 0、1、2、3、4 或 5 个选自氘、氟、氰基、甲基的取代基所取代的碳原子数为 6~20 的芳基”是指芳基可以被氘、氟、氰基、甲基中的一个或多个取代，也可以不被氘、氟、氰基、甲基取代，且当芳基上的取代基的个数大于等于 2 时，各取代基可以相同或不同。

在本申请中，取代或未取代的官能团的碳原子数，指的是所有碳原子数。举例而言，若 L₁ 选自取代的碳原子数为 12 的亚芳基，则亚芳基及其上的取代基的所有碳原子数为 12。例如：Ar₁ 为



在本申请中，当没有另外提供具体的定义时，“杂”是指在一个官能团中包括至少 1 个 B、N、O、S、P、Si 或 Se 等杂原子且其余原子为碳和氢。

在本申请中，“烷基”可以包括直链烷基或支链烷基。烷基可具有 1 至 10 个碳原子，在本申请中，诸如“1 至 10”的数值范围是指给定范围中的各个整数；例如，“1 至 10 个碳原子”是指可包含 1 个碳原子、2 个碳原子、3 个碳原子、4 个碳原子、5 个碳原子、6 个碳原子、7 个碳原子、8 个碳原子、9 个碳原子、10 个碳原子的烷基。优选地，烷基选自碳原子数为 1~5 的烷基，具体施例包括但不限于，甲基、乙基、丙基、异丙基、正丁基、异丁基、仲丁基、叔丁基和戊基。

在本申请中，“烯基”是指在直链或支链烃链中包含一个或多个双键的烃基。烯基可为未取代的或取代的。烯基可具有 2 至 6 个碳原子，每当在本申请出现时，诸如“2 至 6”的数值范围是指给定范围中的各个整数；例如，“2 至 6 个碳原子”是指可包含 1 个碳原子、2 个碳原子、3 个碳原子、4 个碳原子、5 个碳原子或 6 个碳原子的烯基。例如，烯基可以为乙烯基、丁二烯。

在本申请中，环烷基指的是含有脂环结构的饱和烃，包含单环和稠环结构。环烷基可具有 3~10 个碳原子，诸如“3 至 10”的数值范围是指给定范围中的各个整数；例如，“3 至 10 个碳原子”是指可包含 3 个碳原子、4 个碳原子、5 个碳原子、6 个碳原子、7 个碳原子、8 个碳原子、9 个碳原子或 10 个碳原子的环烷基。此外，环烷基可为取代的或未取代的。例如，环己烷基。

在本申请中，芳基指的是衍生自芳香碳环的任选官能团或取代基。芳基可以是单环芳基（例如苯基）或多环芳基，换言之，芳基可以是单环芳基、稠环芳基、通过碳碳键共轭连接的两个或者更多个单环芳基、通过碳碳键共轭连接的单环芳基和稠环芳基、通过碳碳键共轭连接的两个或者更多个稠环芳基。即，除非另有说明，通过碳碳键共轭连接的两个或者更多个芳香基团也可以视为本申请的芳基。其中，稠环芳基例如可以包括双环稠合芳基（例如萘基）、三环稠合芳基（例如菲基、芴基、蒽基）等。芳基中不含有 B、N、O、S、P、Se 和 Si 等杂原子。芳基的实例可以包括但不限于，苯基、萘基、芴基、蒽基、菲基、联苯基、三联苯基、四联苯基、五联苯基、苯并[9,10]菲基、芘基、苯并荧蒽基、䓛基等。本申请的“取代或未取代的芳基”可含有 6~30 个碳原子，在一些实施例中，取代或未取代的芳基中的碳原子数可以是 6~20 个，在一些实施例中，取代或未取代的芳基中的碳原子数可以是 6~15 个，在另一些实施例中取代或未取代的芳基中的碳原子数可以是 6~12 个。本申请中，取代或未取代的芳基的碳原子数是 6 个、12 个、13 个、14 个、15 个、18 个、20 个、24 个、25 个或 30 个，当然，碳原子数还可以是其他数量，在此不再一一列举。在本申请中，联苯基可以理解为苯基取代的芳基，也可以理解为未取代的芳基。

本申请中，涉及的亚芳基是指芳基进一步失去一个氢原子所形成的二价基团。

在本申请中，取代的芳基可以是芳基中的一个或者两个以上氢原子被诸如氘原子、卤素基团、氰基、芳基、杂芳基、三烷基硅基、烷基、环烷基、烷氧基、烷硫基等基团取代。杂芳基取代的芳基的具体实例包括但不限于，苯并咪唑取代的苯基、嘧啶并苯并噻吩取代的苯基、喹喔啉取代的苯基等。应当理解地是，取代的芳基的碳原子数，指的是芳基和芳基上的取代基的碳原子总数，例如碳原子数为 18 的取代的芳基，指的是芳基及其取代基的总碳原子数为 18。

在本申请中，作为取代基的芳基，具体实例包括但不限于：苯基、萘基、蒽基、菲基、二甲基芴基、联苯基等等。

在本申请中，杂芳基是指环中包含 1、2、3、4、5 或 6 个杂原子的一价芳香环或其衍生物，杂原子可以是 B、O、N、P、Si、Se 和 S 中的至少一种。杂芳基可以是单环杂芳基或多环杂芳基，换言之，杂芳基可以是单个芳香环体系，也可以是通过碳碳键共轭连接的多个芳香环体系，且任一芳香环体系为一个芳香单环或者一个芳香稠环。示例地，杂芳基可以包括噻吩基、呋喃基、吡咯基、咪唑基、噻唑基、噁唑基、噁二唑基、三唑基、吡啶基、联吡啶基、嘧啶基、三嗪基、吖啶基、哒嗪基、吡嗪基、喹啉基、喹唑啉基、喹喔啉基、吩噁嗪基、酞嗪基、吡啶并嘧啶基、吡啶并吡嗪基、吡嗪并吡嗪基、异喹啉基、吲哚基、咔唑基、苯并噁唑基、苯并咪唑基、苯并噻唑基、苯并咔唑基、苯并噻吩基、二苯并噻吩基、噻吩并噻吩基、苯并呋喃基、菲咯啉基、异噁唑基、噁二唑基、苯并噁唑基、吩噁嗪基、硅苪基、二苯并呋喃基以及 N-芳基咔唑基（如 N-苯基咔唑基）、N-杂芳基咔唑基（如 N-吡啶基咔唑基）、N-烷基咔唑基（如 N-甲基咔唑基）等，而不限于此。其中，噻吩基、呋喃基、菲咯啉基等为单个芳香环体系类型的杂芳基，N-苯基咔唑基、N-吡啶基咔唑基为通过碳碳键共轭连接的多环体系类型的杂芳基。本申请的“取代或未取代的杂芳基”可含有 3-30 个碳原子，在一些实施例中，取代或未取代的杂芳基中的碳原子数是 3-20 个，在另一些实施例中取代或未取代的杂芳基中的碳原子数是 5-12 个。本申请中，取代或未取代的杂芳基其碳原子数是 3 个、4 个、5 个、7 个、12 个、13 个、18 个、20 个、24 个、25 个或 30 个，当然，碳原子数还可以是其他数量，在此不再一一列举。

本申请中，涉及的亚杂芳基是指杂芳基进一步失去一个氢原子所形成的二价基团。

在本申请中，取代的杂芳基可以是杂芳基中的一个或者两个以上氢原子被诸如氘原子、卤素基团、氰基、芳基、杂芳基、三烷基硅基、烷基、环烷基、烷氧基、烷硫基等基团取代。芳基取代的杂芳基的具体实例包括但不限于，苯基取代的二苯并呋喃基、苯基取代的二苯并噻吩基、N-苯基咔唑基等。应当理解地是，取代的杂芳基的碳原子数，指的是杂芳基和杂芳基上的取代基的碳原子总数。

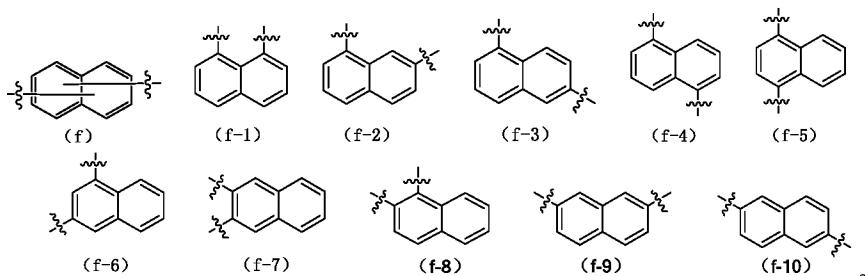
在本申请中，作为取代基的杂芳基，具体实例包括但不限于：吡啶基、咔唑基、二苯并呋喃基、二苯并噻吩基。

在本申请中，卤素基团可以包括氟、碘、溴、氯等。

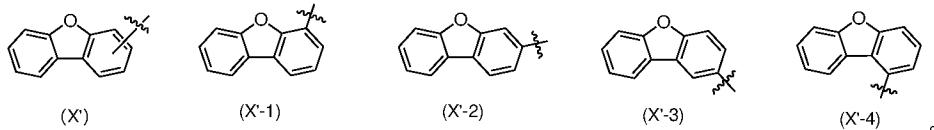
在本申请中，碳原子数为 3~12 的三烷基硅基的具体实例包括但不限于，三甲基硅基、三乙基硅基等。

本申请中，不定位连接键是指从环体系中伸出的单键“ $\text{---}\xi\text{---}$ ”，其表示该连接键的一端可以连接该键所贯穿的环体系中的任意位置，另一端连接化合物分子其余部分。

举例而言，如下式(f)中所示地，式(f)所表示的萘基通过两个贯穿双环的不定位连接键与分子其他位置连接，其所表示的含义，包括如式(f-1)~式(f-10)所示出的任一可能的连接方式。



再举例而言，如下式(X')中所示地，式(X')所表示的二苯并呋喃基通过一个从一侧苯环中间伸出的不定位连接键与分子其他位置连接，其所表示的含义，包括如式(X'-1)~式(X'-4)所示出的任一可能的连接方式。



下文中对于不定位连接或不定位取代的含义与此处相同，后续将不再进行赘述。

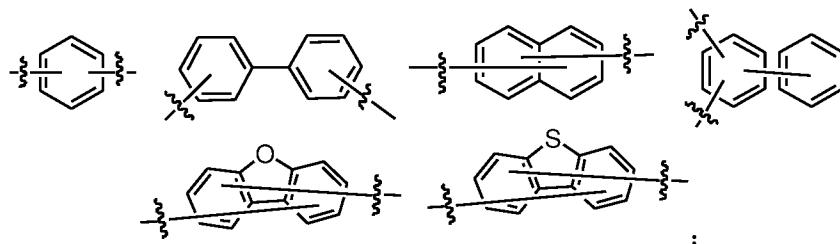
在本申请的一种实施方式中，所述 L₁ 和 L₂ 分别独立地选自单键、碳原子数为 6~15 的取代或未取代的亚芳基、或者碳原子数为 5~12 的取代或未取代的亚杂芳基。

可选地，所述 L₁ 和 L₂ 中的取代基分别独立地选自氘、卤素基团、氰基、碳原子数为 6 的芳基、碳原子数为 1~5 的烷基。

具体地，所述 L₁ 和 L₂ 中的各取代基分别独立地选自：氘、氟、氰基、甲基、乙基、正丙基、异丙基、叔丁基、苯基。

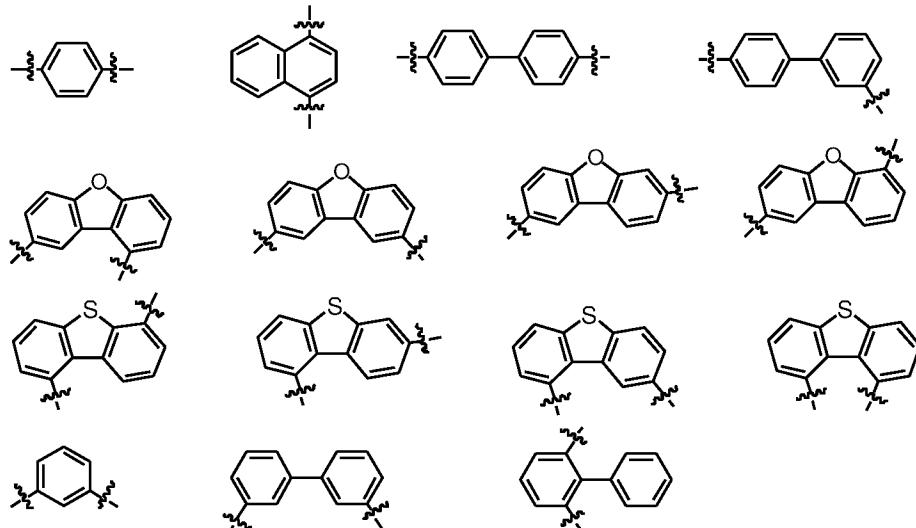
进一步可选地，所述 L₁ 和 L₂ 分别独立地选自单键、取代或未取代的亚苯基、取代或未取代的亚萘基、取代或未取代的亚菲基、取代或未取代的亚芴基、取代或未取代的亚联苯基、取代或未取代的亚二苯并呋喃基、取代或未取代的亚二苯并噻吩基。

在本申请另一种实施方式中，所述 L₁ 和 L₂ 分别独立地选自单键或者取代或未取代的基团 V，未取代的基团 V 选自如下基团所组成的组：



其中， ---^{t} 表示化学键；取代的基团 V 上具有一个或多个的取代基，所述取代基各自独立地选自：氘、氰基、氟、甲基、乙基、正丙基、异丙基、叔丁基、苯基；当基团 V 中的取代基个数大于 1 时，各取代基相同或不同。

可选地，L₁ 和 L₂ 分别独立地选自单键或者如下基团所组成的组：



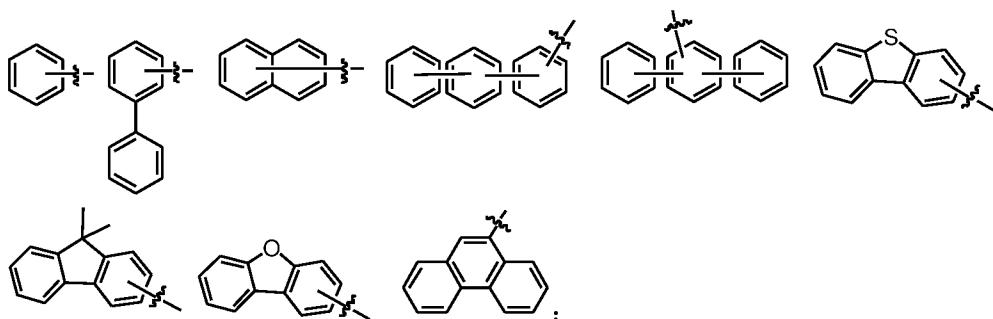
在本申请的一种实施方式中，所述 Ar₁ 和 Ar₂ 分别独立地选自碳原子数为 6~20 的取代或未取代的芳基、碳原子数为 3~20 的取代或未取代的杂芳基。

可选地，所述 Ar₁ 和 Ar₂ 中的取代基分别独立地选自氘、卤素基团、氰基、碳原子数为 6~12 的芳基、碳原子数为 5~12 的杂芳基或碳原子数为 1~5 的烷基。

具体地，所述 Ar₁ 和 Ar₂ 中的取代基分别独立地选自：氘、氟、氰基、甲基、乙基、正丙基、异丙基、叔丁基、苯基、萘基或联苯基。

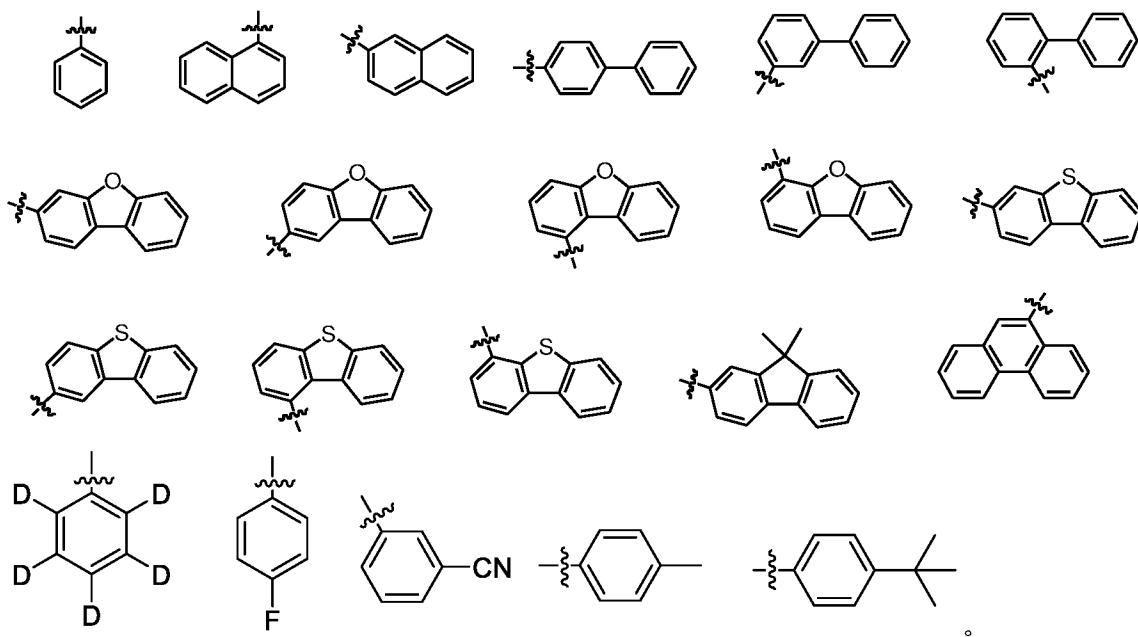
进一步可选地，所述 Ar₁ 和 Ar₂ 分别独立地选自取代或未取代的苯基、取代或未取代的萘基、取代或未取代的菲基、取代或未取代的芴基、取代或未取代的联苯基、取代或未取代的二苯并呋喃基、取代或未取代的二苯并噻吩基。

在本申请另一种实施方式中，所述 Ar₁ 和 Ar₂ 分别独立地选自取代或未取代的基团 W，未取代的基团 W 选自如下基团所组成的组：



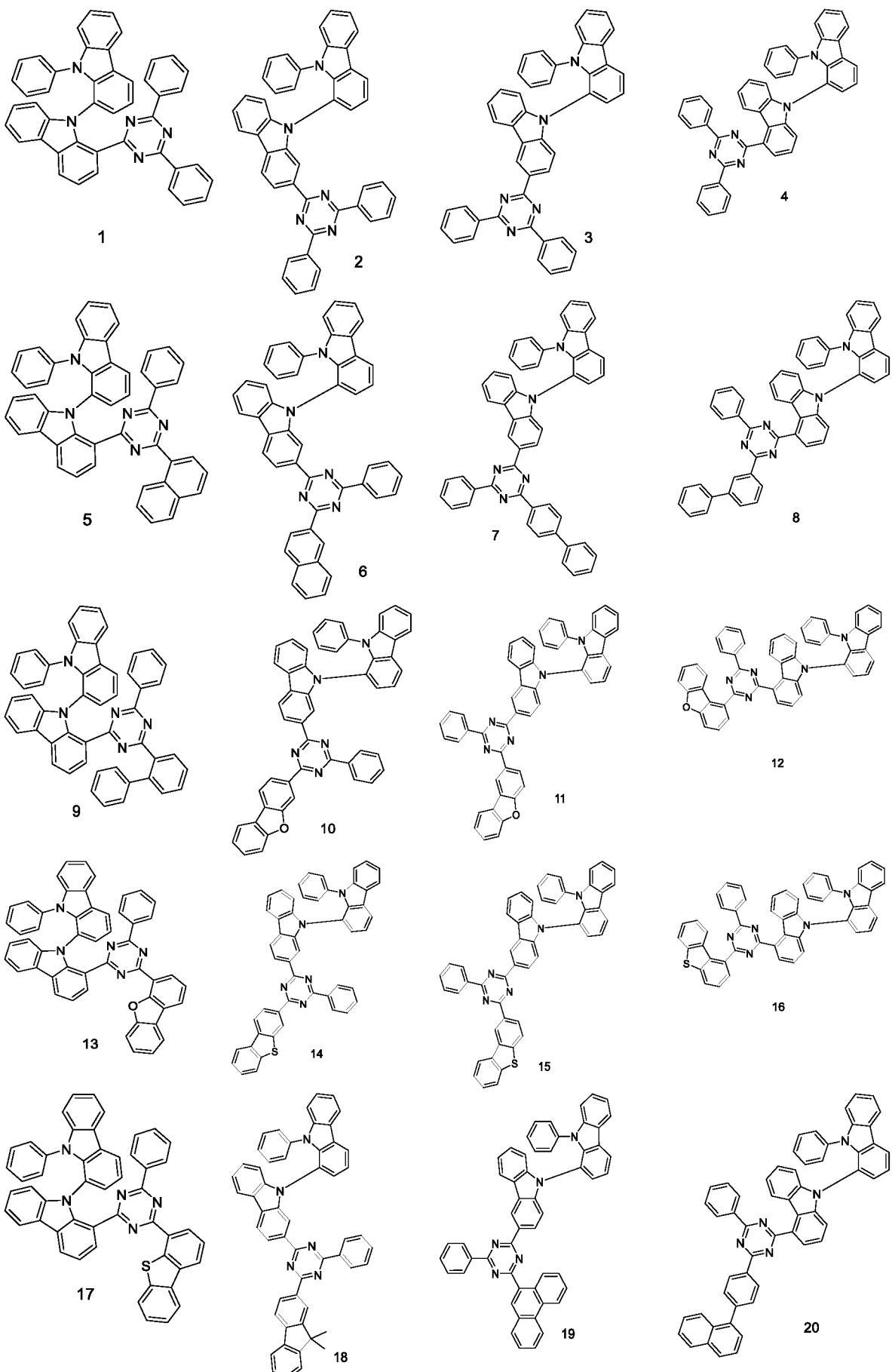
其中， ---^{w} 表示化学键；取代的 W 上具有一个或多个的取代基，所述取代基各自独立地选自：氘、氰基、氟、甲基、乙基、正丙基、异丙基、叔丁基、苯基、萘基、联苯基；当基团 W 中的取代基个数大于 1 时，各取代基相同或不同。

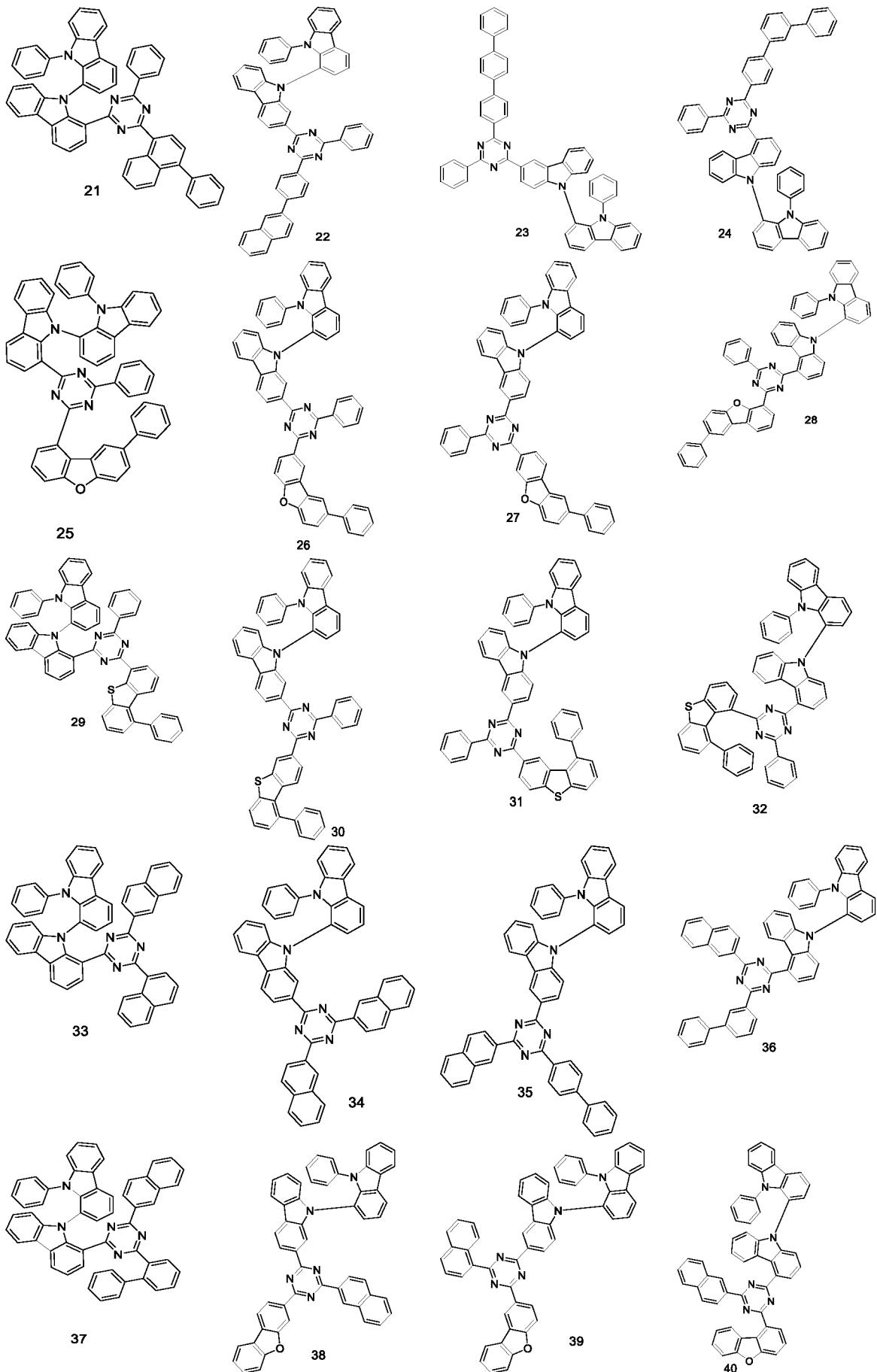
可选地，Ar₁ 和 Ar₂ 分别独立地选自如下基团所组成的组：

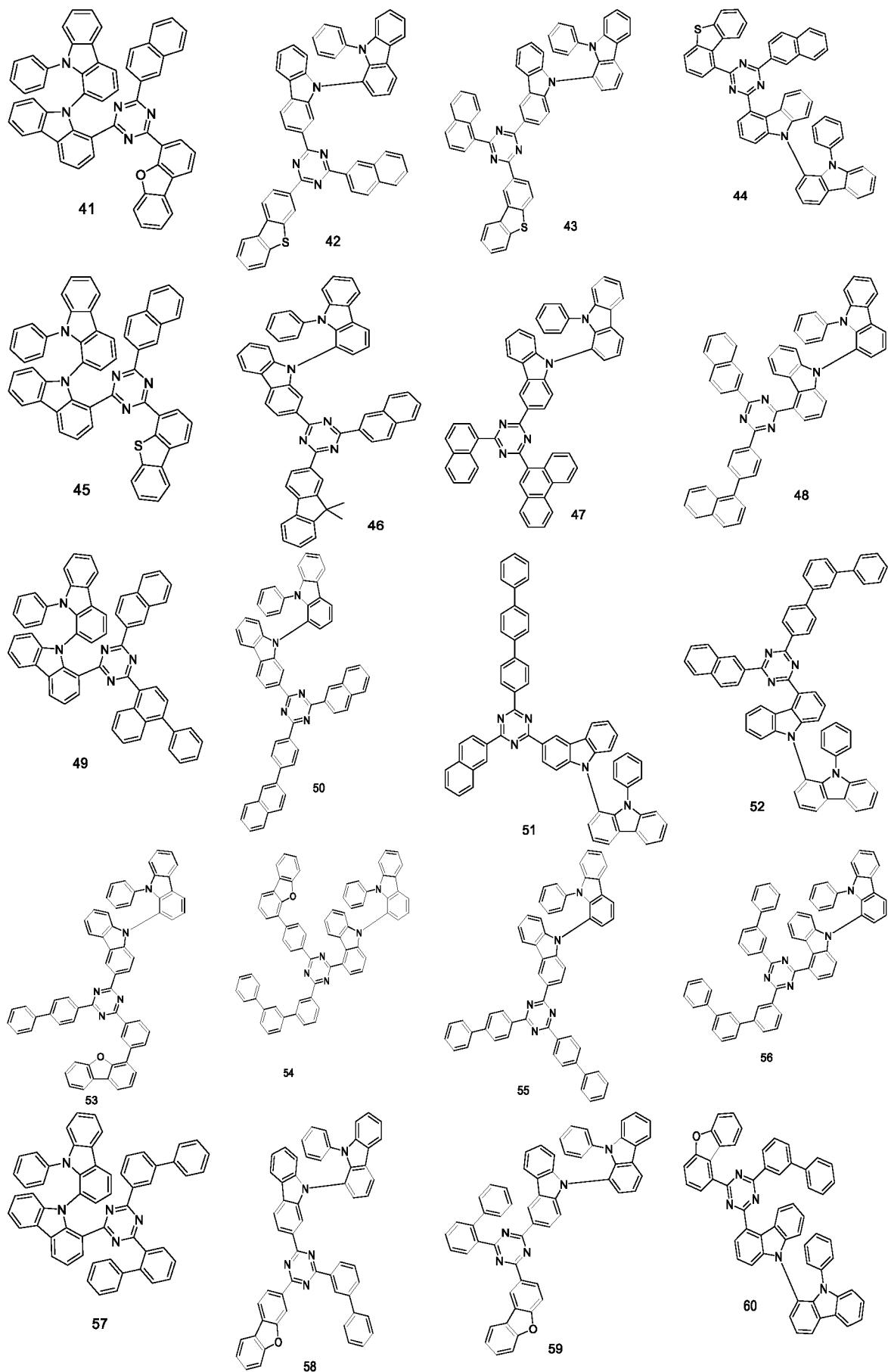


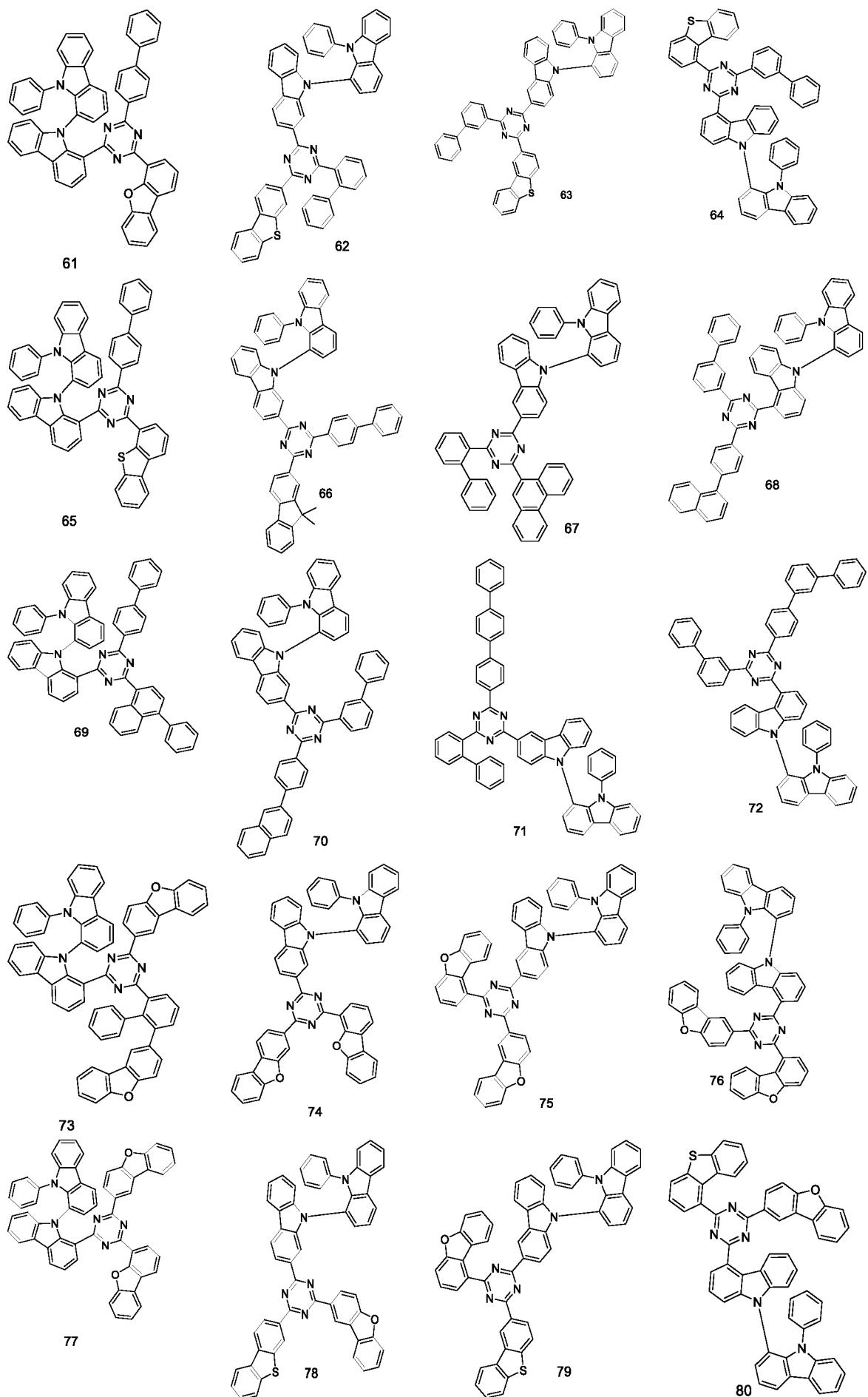
可选地，所述 Ar₃ 选自苯基、萘基或联苯基。

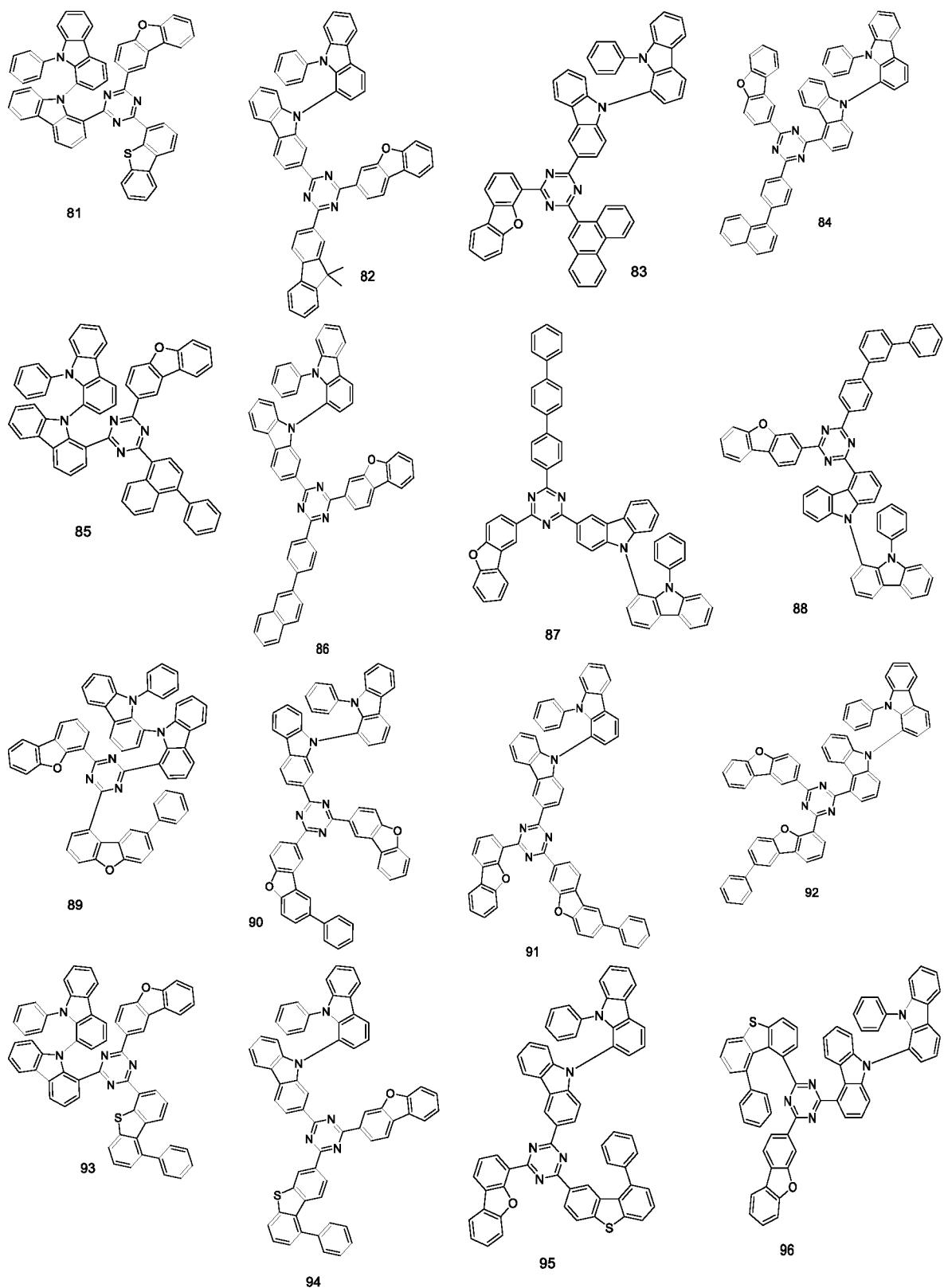
可选地，含氮化合物选自如下化合物组成的组，但不仅限于此：

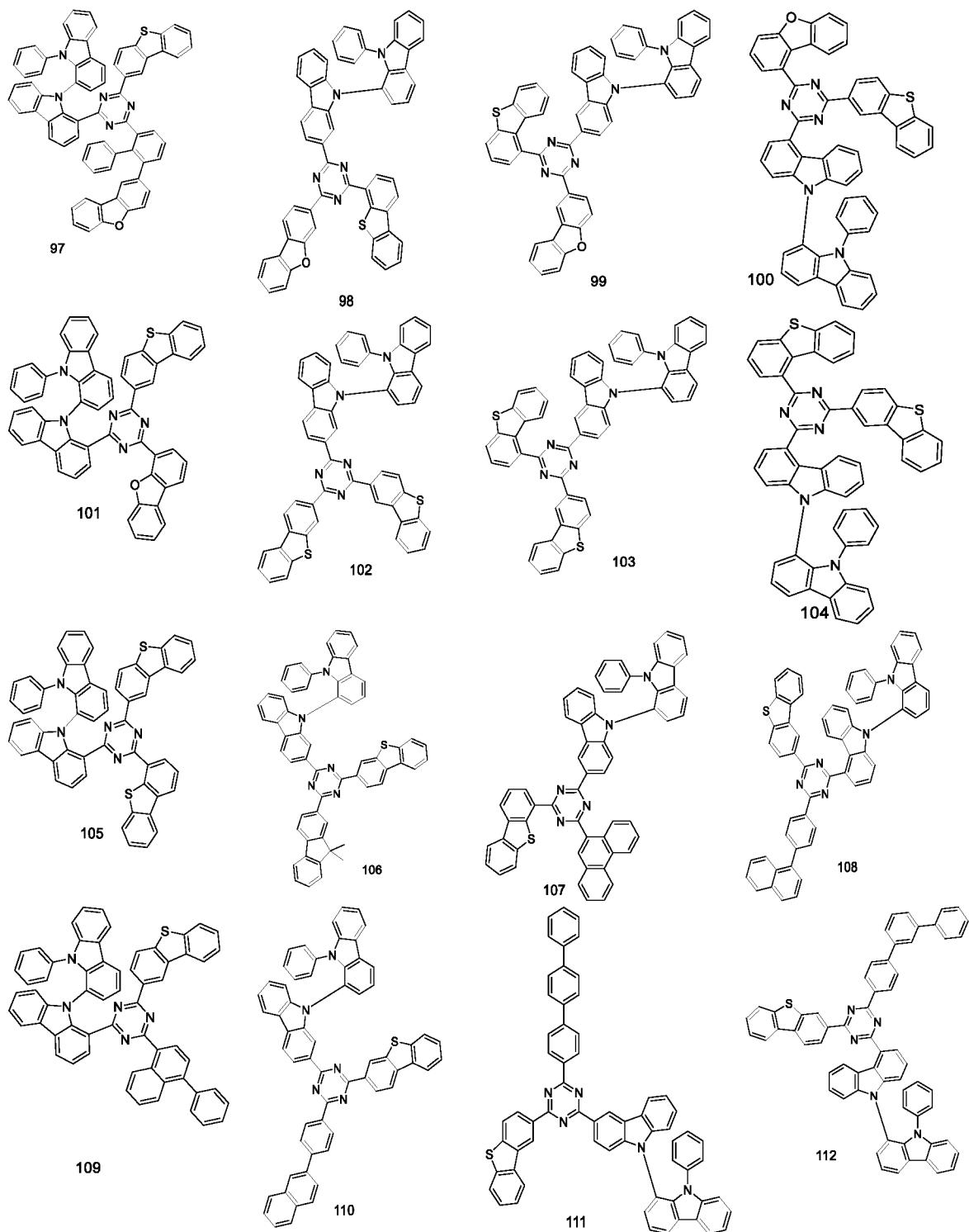


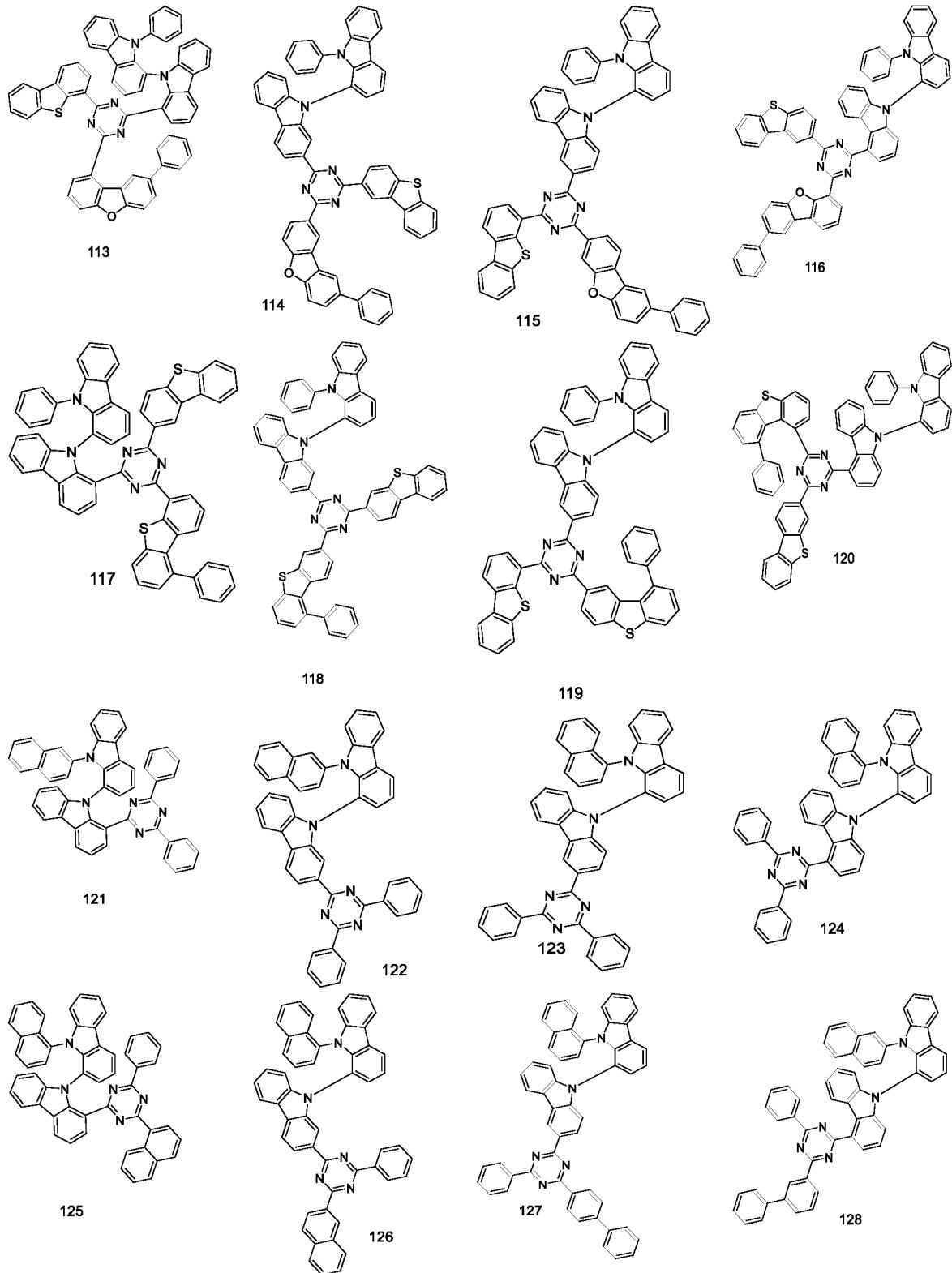


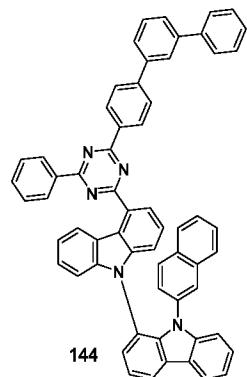
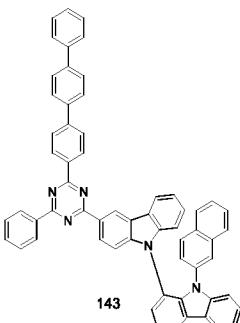
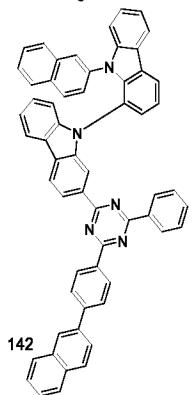
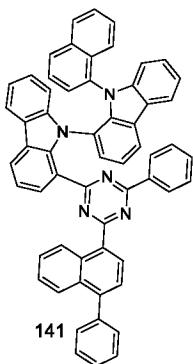
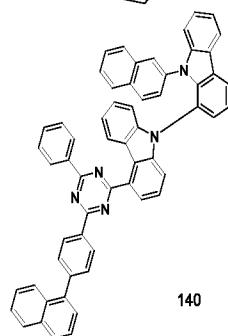
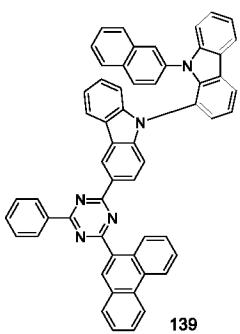
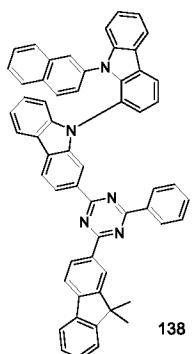
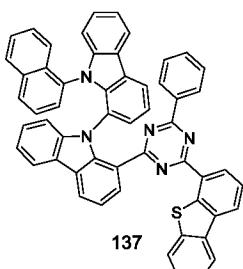
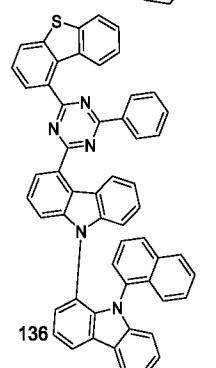
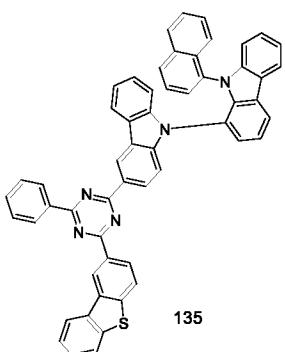
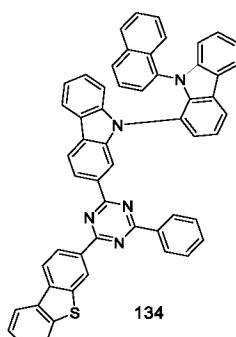
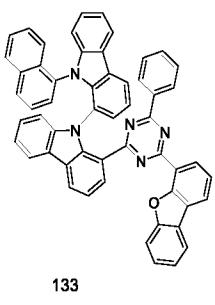
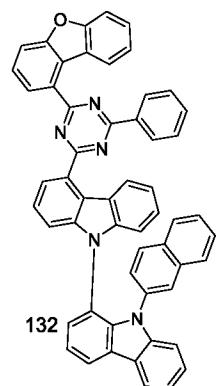
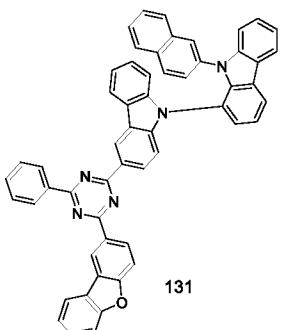
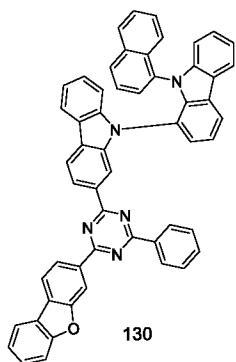
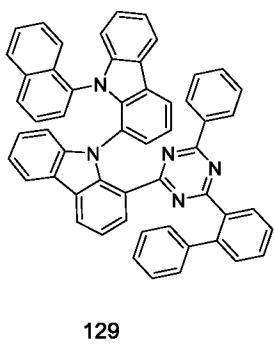


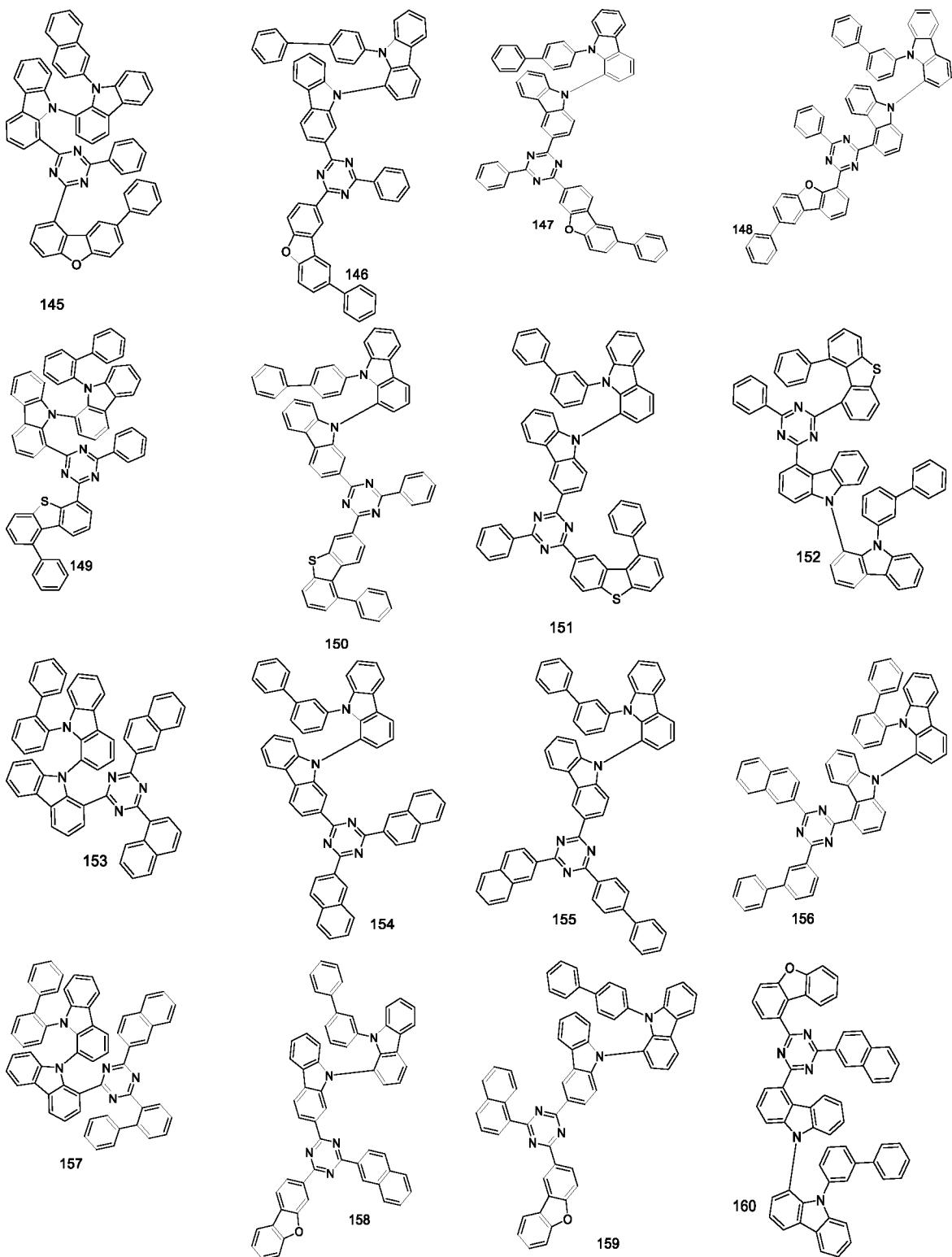


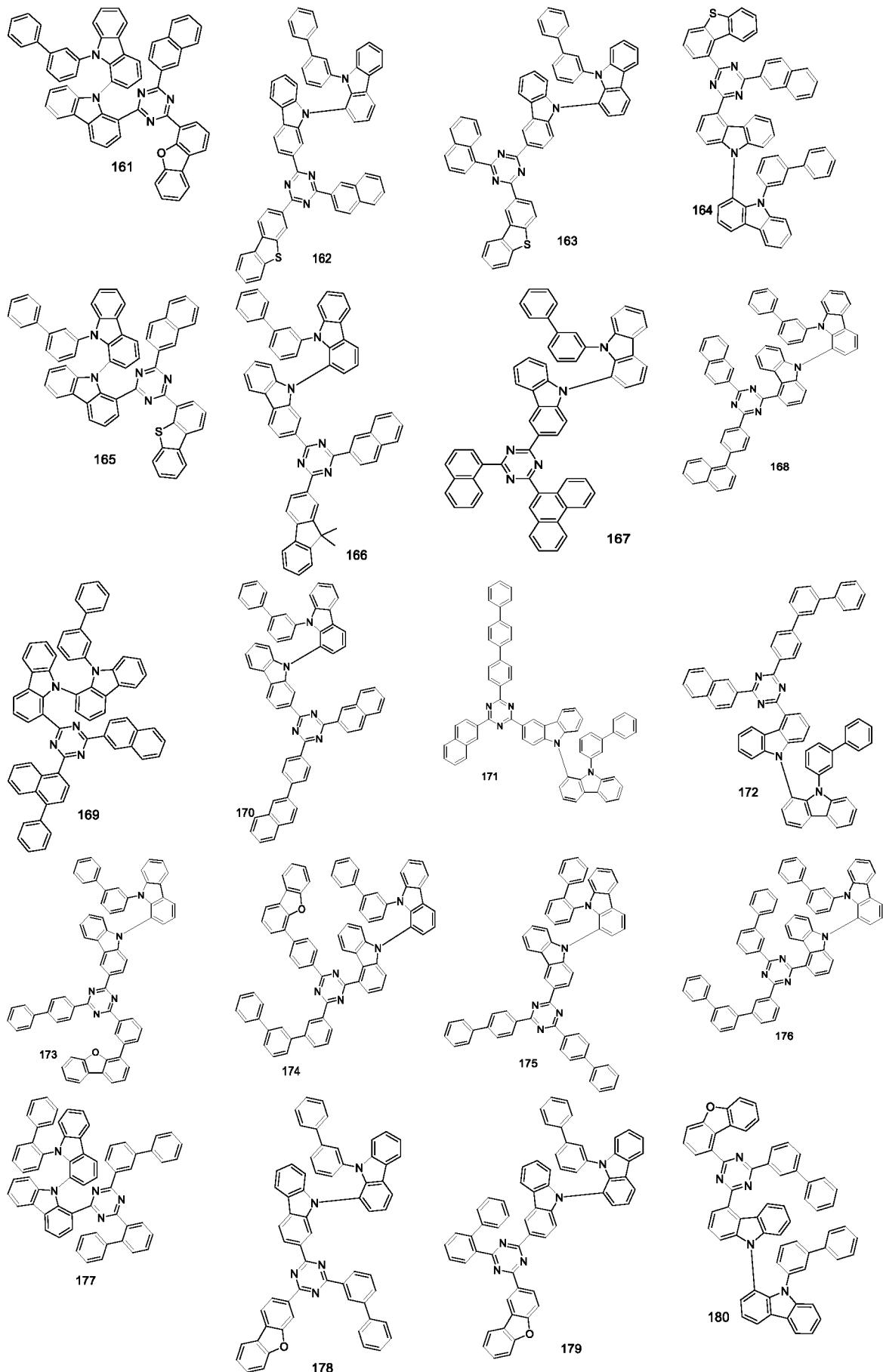


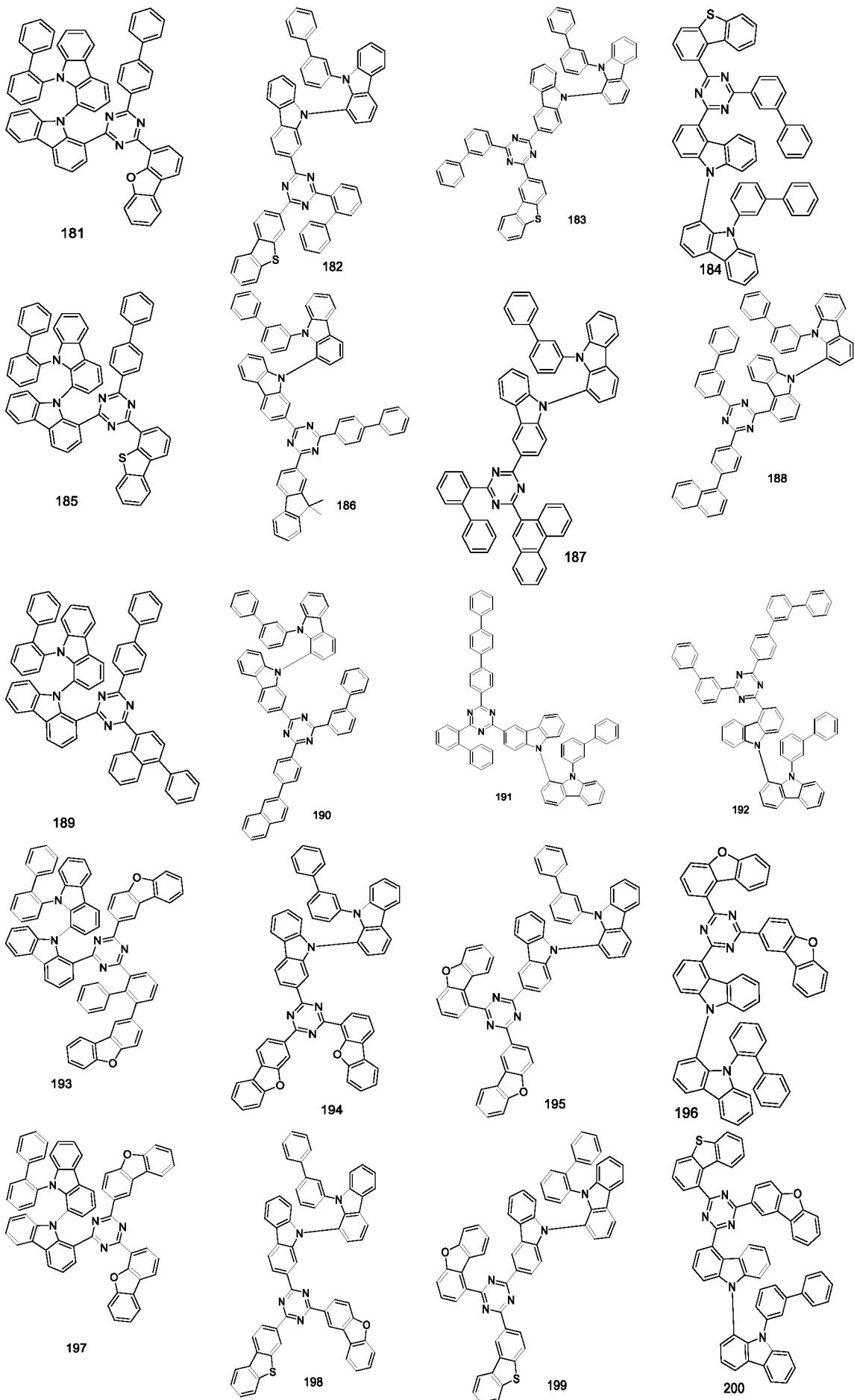


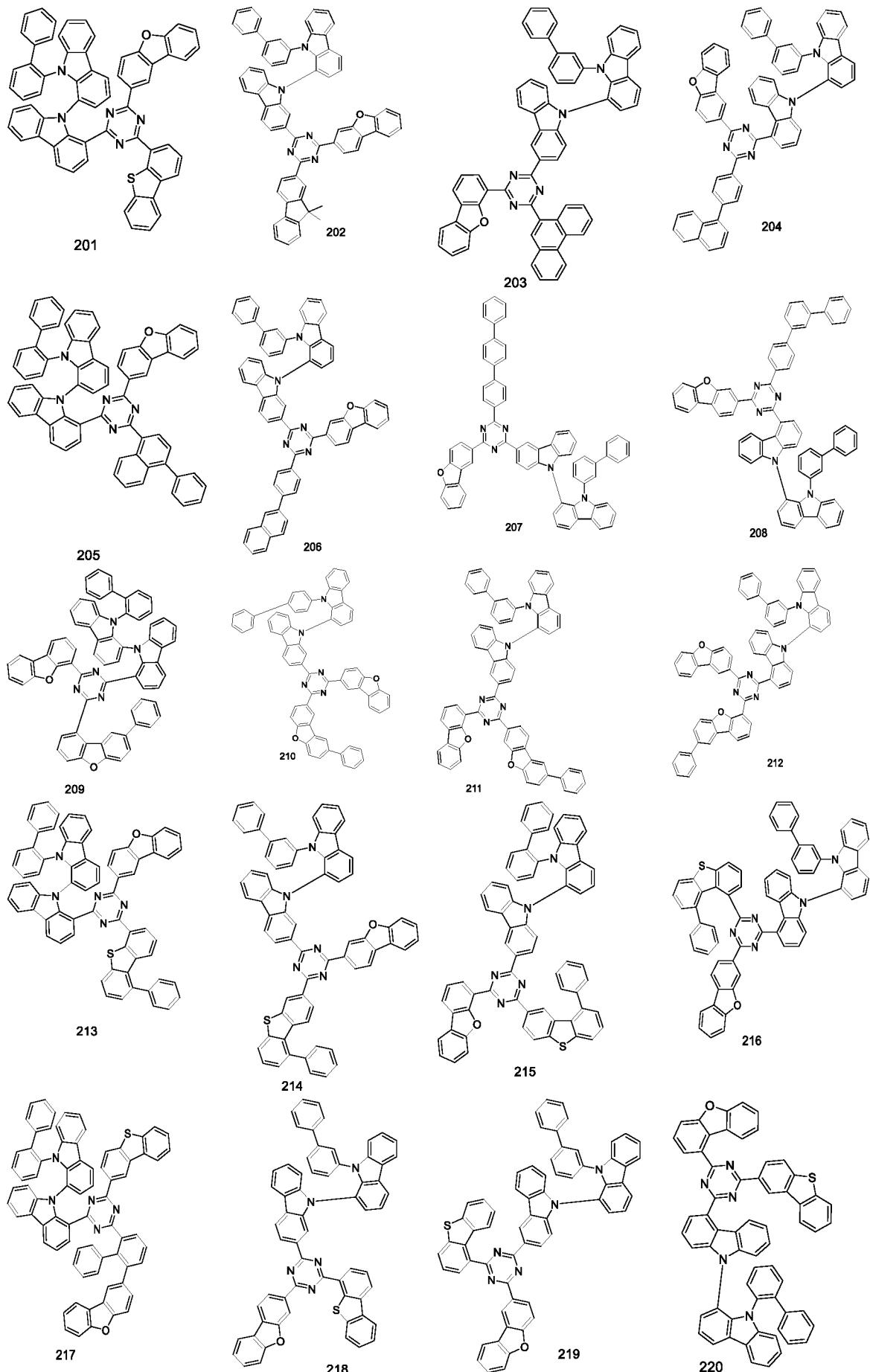


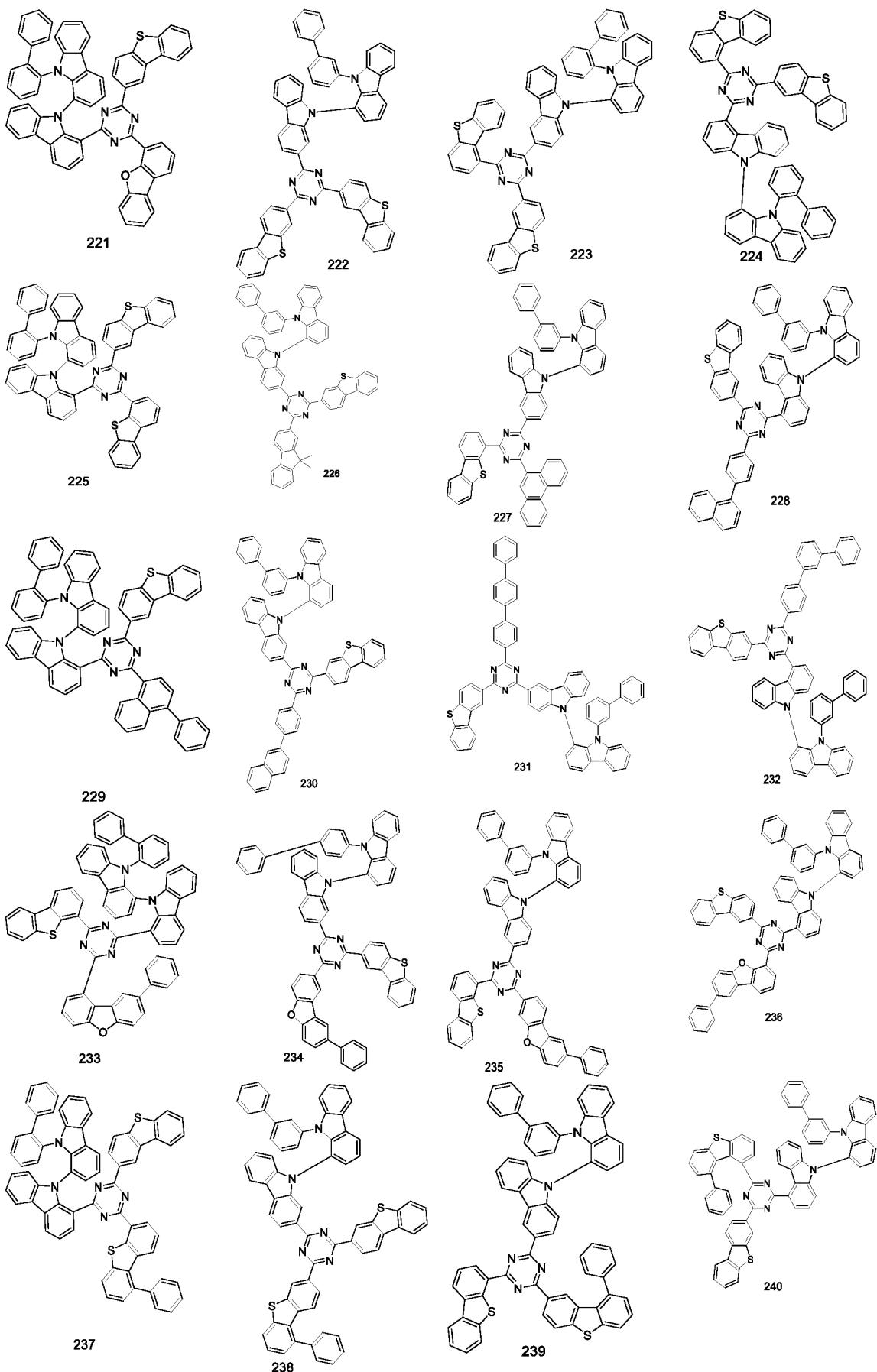


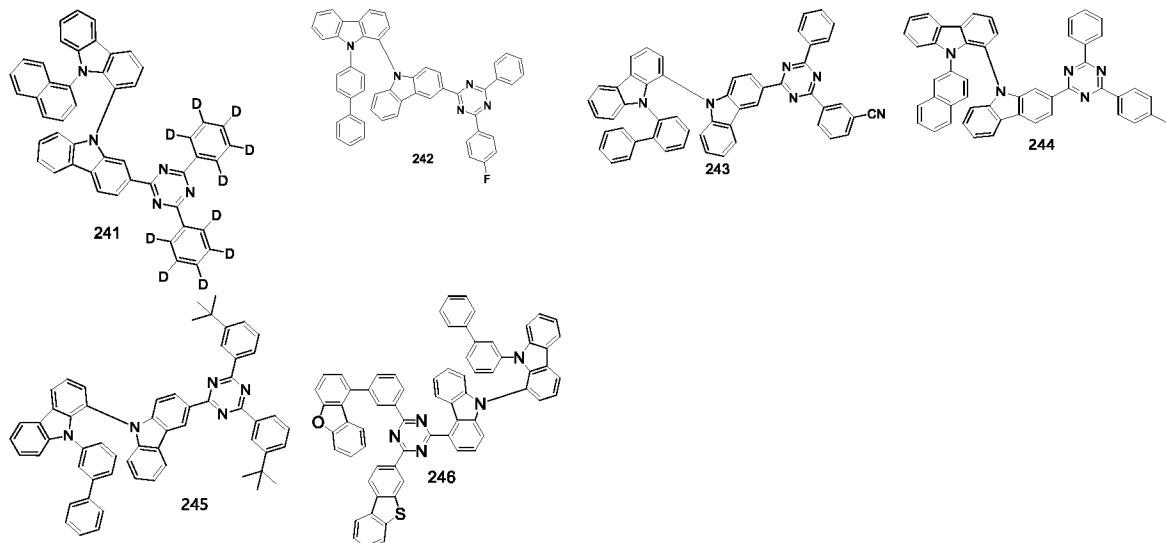












本申请还提供一种电子元件，用于实现电光转化。该电子元件包括相对设置的阳极和阴极，以及介于阳极与阴极之间的至少一层功能层，该功能层包含本申请的含氮化合物。

在本申请一种具体实施方式中，如图1所示，本申请的有机电致发光器件包括阳极100、阴极200、以及介于阳极层与阴极层之间的至少一层功能层300，该功能层300包括空穴注入层310、空穴传输层320、空穴调整层330、发光层340、电子传输层350以及电子注入层360；空穴注入层310、空穴传输层320、空穴调整层330、发光层340、电子传输层350以及电子注入层360可以依次形成在阳极100上，发光层340可以含有本申请第一方面所述的含氮化合物，优选含有含氮化合物1-246中的至少一种。

可选地，阳极100包括以下阳极材料，其优选地是有助于空穴注入至功能层中的具有大逸出功(功函数，work function)材料。阳极材料具体实例包括：金属如镍、铂、钒、铬、铜、锌和金或它们的合金；金属氧化物如氧化锌、氧化铟、氧化铟锡(ITO)和氧化铟锌(IZO)；组合的金属和氧化物如ZnO:Al或SnO₂:Sb；或导电聚合物如聚(3-甲基噻吩)、聚[3,4-(亚乙基-1,2-二氧化基)噻吩](PEDT)、聚吡咯和聚苯胺，但不限于此。优选包括包含氧化铟锡(铟锡氧化物，indium tin oxide)(ITO)作为阳极的透明电极。

可选地，空穴传输层320可以包括一种或者多种空穴传输材料，空穴传输材料可以选自咔唑多聚体、咔唑连接三芳胺类化合物或者其他类型的化合物，本申请对此不做特殊的限定。举例而言，在本申请的一种实施方式中，空穴传输层320由化合物NPB组成。

可选地，空穴调整层330可以包括一种或者多种空穴调整材料，空穴调整材料可以选自芳环或者芳杂环连接的含氮化合物或者其他类型的化合物，本申请对此不做特殊的限定。举例而言，在本申请的一种实施方式中，空穴调整层330由化合物HT-1组成。

可选地，发光层340可以由单一发光材料组成，也可以包括主体材料和客体材料。可选地，发光层340由主体材料和客体材料组成，注入发光层340的空穴和电子可以在发光层340复合而形成激子，激子将能量传递给主体材料，主体材料将能量传递给客体材料，进而使得客体材料能够发光。

发光层340的主体材料由本申请所提供的含氮化合物和H-GH组成。本申请提供的含氮化合物，将咔唑基的氮原子与另一咔唑类基团的1号位连接，同时将咔唑基的苯环与三嗪类基团相连接，这种连接方式使得整个分子结构具有较好的立体构型，可以使分子结构具有更好的刚

性，更高迁移率的同时提升材料 T1 能级，并有较低的结晶性。该含氮化合物更适合作为有机电致发光器件的混合主体中的电子型主体材料，尤其适合用于绿光器件的电子型主体材料。将本申请含氮化合物用于有机电致发光器件的发光层材料时，将有效提升器件的电子传输性能，改善器件发光效率以及使用寿命。

发光层 340 的客体材料可以为具有缩合芳基环的化合物或其衍生物、具有杂芳基环的化合物或其衍生物、芳香族胺衍生物或者其他材料，本申请对此不做特殊的限制。在本申请的一种实施方式中，发光层 340 的客体材料可以为 Ir(ppy)₃。

电子传输层 350 可以为单层结构，也可以为多层结构，其可以包括一种或者多种电子传输材料，电子传输材料可以选自苯并咪唑衍生物、噁二唑衍生物、喹喔啉衍生物或者其他电子传输材料，本申请对此不做特殊的限定。举例而言，在本申请的一种实施方式中，电子传输层 350 可以由 ET-1 和 LiQ 组成。

可选地，阴极 200 包括以下阴极材料，其是有助于电子注入至功能层中的具有小逸出功的材料。阴极材料的具体实例包括：金属如镁、钙、钠、钾、钛、钢、钇、锂、钆、铝、银、锡和铅或它们的合金；或多层材料如 LiF/Al, Liq/Al, LiO₂/Al, LiF/Ca, LiF/Al 和 BaF₂/Ca，但不限于此。优选包括包含银和镁的金属电极作为阴极。

可选地，在阳极 100 和空穴传输层 320 之间还可以设置有空穴注入层 310，以增强向空穴传输层 320 注入空穴的能力。空穴注入层 310 可以选用联苯胺衍生物、星爆状芳基胺类化合物、酞菁衍生物或者其他材料，本申请对此不做特殊的限制。在本申请的一种实施方式中，空穴注入层 310 可以由 F4-TCNQ 组成。

可选地，在阴极 200 和电子传输层 350 之间还可以设置有电子注入层 360，以增强向电子传输层 350 注入电子的能力。电子注入层 360 可以包括有碱金属硫化物、碱金属卤化物等无机材料，或者可以包括碱金属与有机物的络合物。在本申请的一种实施方式中，电子注入层 360 可以包括镱(Yb)。

本申请还提供一种电子装置，该电子装置包括本申请所述的电子元件。

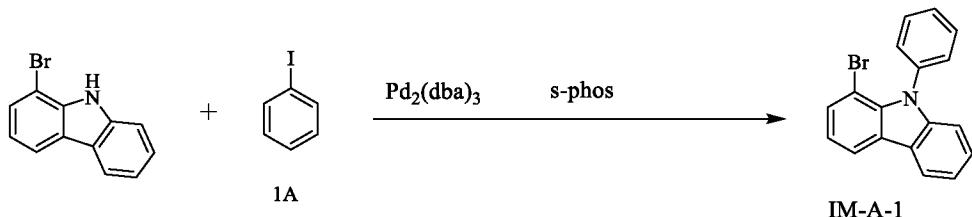
举例而言，如图 2 所示，本申请提供的电子装置为电子装置 400，该电子装置 400 包括上述有机电致发光器件实施方式所描述的任意一种有机电致发光器件。该电子装置可以为显示装置、照明装置、光通讯装置或者其他类型的电子装置，例如可以包括但不限于电脑屏幕、手机屏幕、电视机、电子纸、应急照明灯、光模块等。由于电子装置 400 具有上述有机电致发光器件，因此具有相同的有益效果，本申请在此不再赘述。

下面将结合实施例详细描述本申请，但是，以下描述是用于解释本申请，而不是以任意方式限制本申请的范围。

合成实施例

所属领域的专业人员应该认识到，本申请所描述的化学反应可以用来合适地制备许多本申请的其他化合物，且用于制备本申请的化合物的其它方法都被认为是在本申请的范围之内。例如，根据本申请那些非例证的化合物的合成可以成功地被所属领域的技术人员通过修饰方法完成，如适当的保护干扰基团，通过利用其他已知的试剂除了本申请所描述的，或将反应条件做一些常规的修改。另外，本申请所公开的反化合物合成。

(1)中间体 IM-A-1 的合成

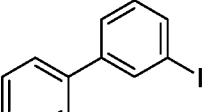
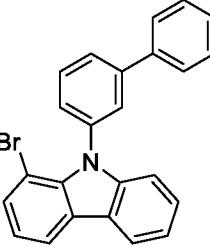
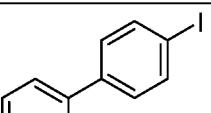
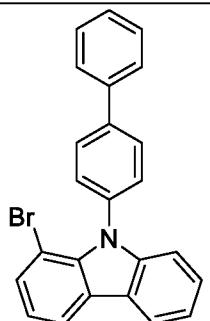


向装有机械搅拌、温度计、球形冷凝管的三口瓶中通入氮气(0.100L/min)置换15min，依次加入原料1-溴咔唑(9.06g, 37mmol)，反应物1A(15.09g, 74mmol)和甲苯(100mL)，开启搅拌和加热，待温度上升到50℃，依次加入叔丁醇钠(5.28g, 55mmol)，s-phos(0.37g, 0.37mmol)，Pd₂(dba)₃(0.1g, 0.18mmol)；甲苯回流反应10h，待反应完成后停止搅拌和加热，待温度降到室温时开始处理反应；在反应液中加入超纯水80mL，搅拌分液，水相用100mL甲苯萃取两次，合并有机相，将有机相用100mL每次的超纯水水洗三次；再用无水硫酸钠进行干燥有机相，将有机相过硅胶柱，过柱后用200mL的甲苯淋洗柱子，合并过柱液浓缩得到粗品，粗品使用80mL甲苯加热使其完全溶解，冷却析晶，过滤固体，再使用40mL的二氯乙烷重结晶，得到白色固体中间体IM-A-1(6.53g，收率55%)。

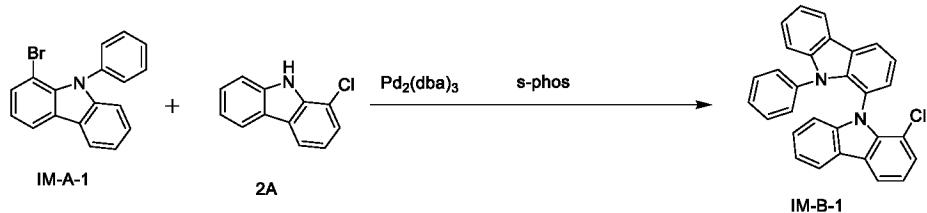
参照中间体IM-A-1的合成方法，合成下表1所示的中间体，其中反应物1B、反应物1C、反应物1D、反应物1E和反应物1F代替反应物1A，合成如下表1所示的中间体IM-A-X，其中，X为2, 3, 4, 5或6。

表1

反应物	中间体IM-A-X	收率%
		50
		45
		35

		40
		45

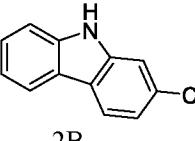
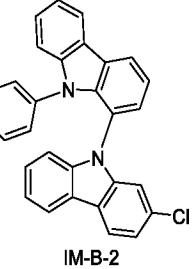
(2) 中间体 IM-A-2 的合成

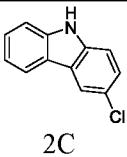
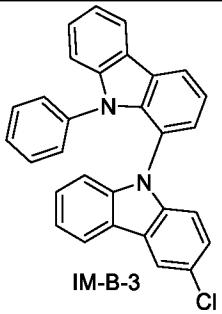
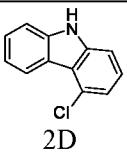
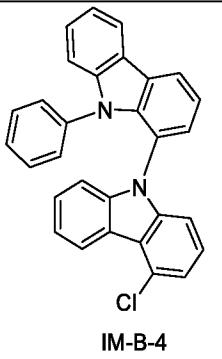
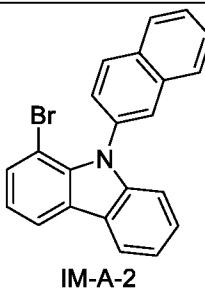
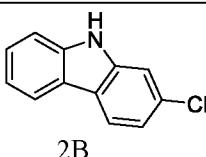
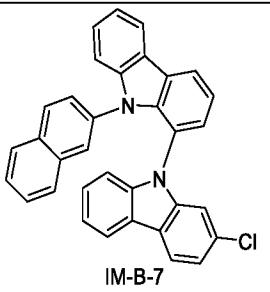
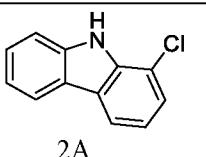
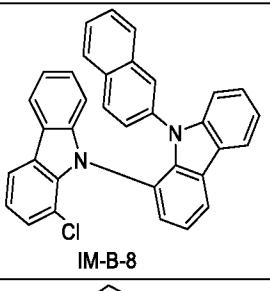
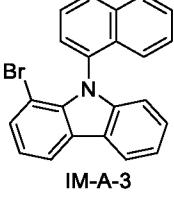
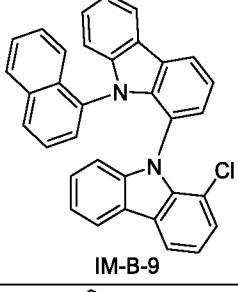
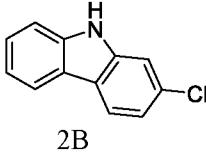
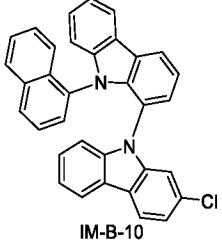


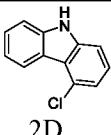
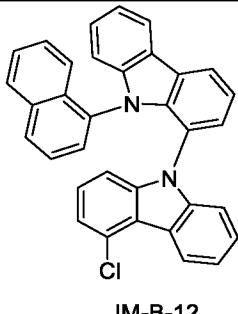
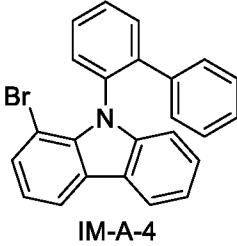
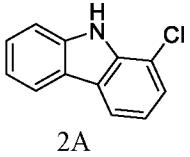
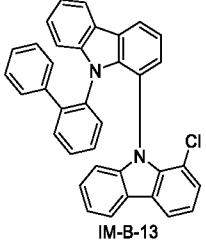
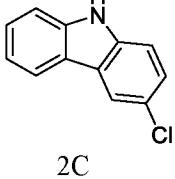
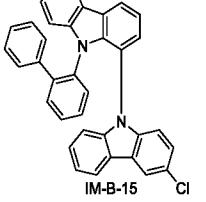
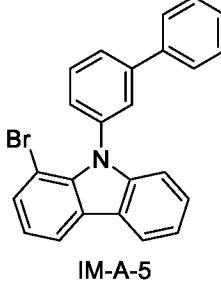
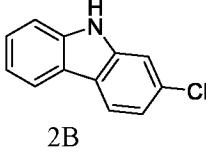
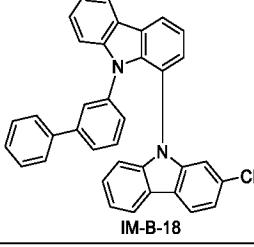
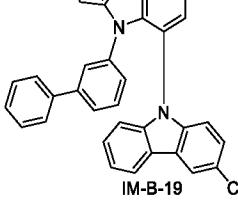
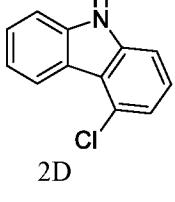
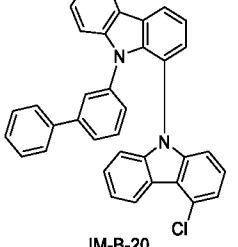
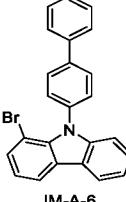
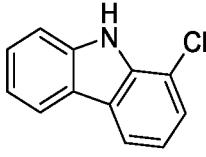
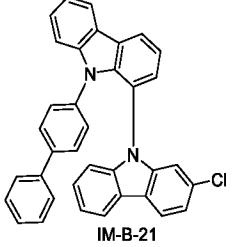
向装有机械搅拌、温度计、球形冷凝管的三口瓶中通入氮气(0.100L/min)置换15min，依次加入中间体IM-A-1(6.53g, 20.34mmol)，反应物2A(4.09g, 20.34mmol)，二甲苯(60mL)，开启搅拌和加热，待温度上升到50°C，依次加入叔丁醇钠(2.93g, 30.51mmol)，s-phos(0.16g, 0.40mmol)，Pd₂(dba)₃(0.18g, 0.20mmol)；二甲苯回流反应5h，反应结束后，冷却至室温。在反应液中加入超纯水60mL搅拌分液，水相用60mL甲苯萃取共两次，合并有机相，每次用60mL超纯水水洗三次；用无水硫酸钠进行干燥，过硅胶柱，过柱后用50mL的甲苯淋洗柱子，有机相浓缩得到粗品，粗品用40mL甲苯加热至完全溶解，冷却析晶，过滤固体，用30mL甲苯重结晶两次，得到白色固体中间体IM-B-1(4.42g，收率50%)。

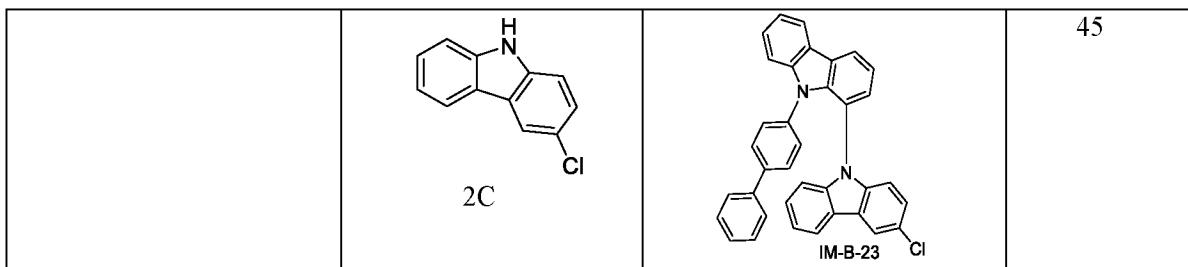
参照中间体IM-B-1的合成方法，合成下表2所示的中间体，其中，反应物2A、反应物2B、反应物2C、反应物2D代替反应物2A，中间体IM-A-1、中间体IM-A-2、中间体IM-A-3、中间体IM-A-4、中间体IM-A-5、中间体IM-A-6代替中间体IM-A-1，合成如下表2所示的中间体IM-B-X。

表2

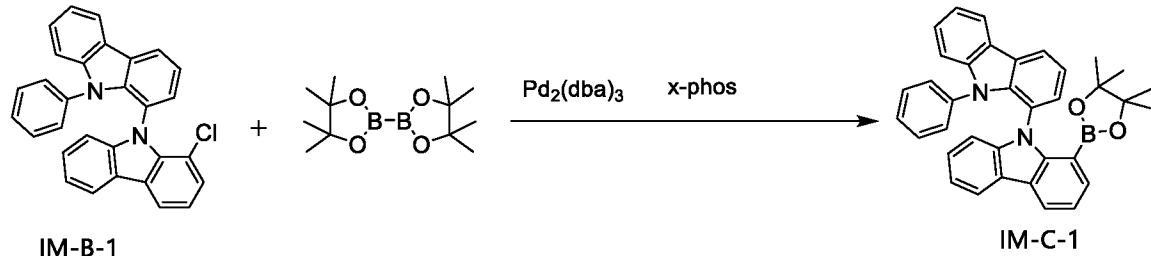
中间体IM-A-X	反应物	中间体IM-B-X	收率%
			45

			50
			35
			42
			38
			46
			50

	 2D	 IM-B-12	46
 IM-A-4	 2A	 IM-B-13	40
	 2C	 IM-B-15	45
 IM-A-5	 2B	 IM-B-18	43
	 2C	 IM-B-19	45
	 2D	 IM-B-20	40
 IM-A-6	 2A	 IM-B-21	42



(3)中间体 IM-C-1 的合成

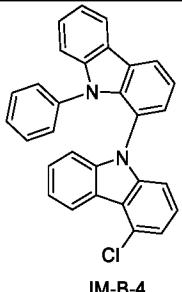
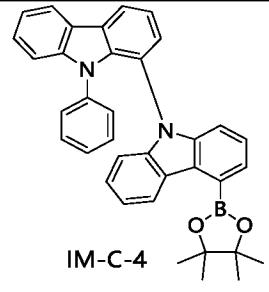
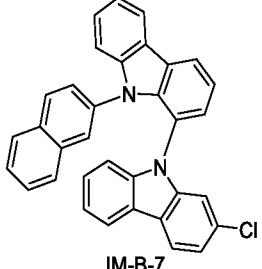
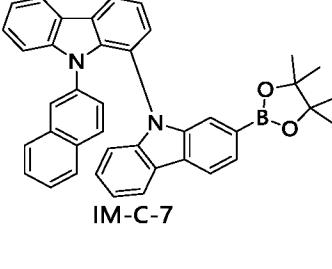
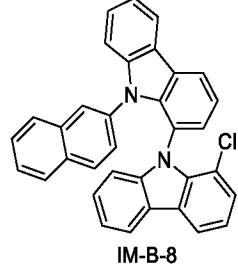
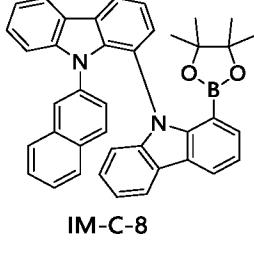
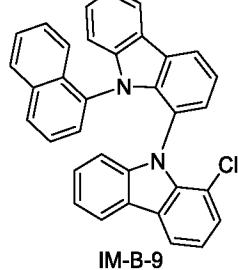
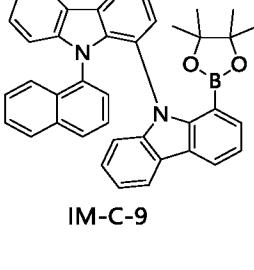
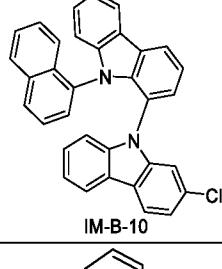
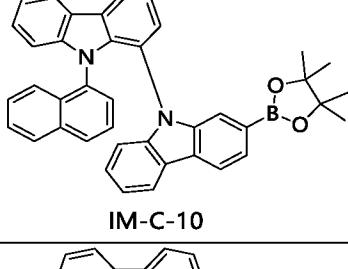
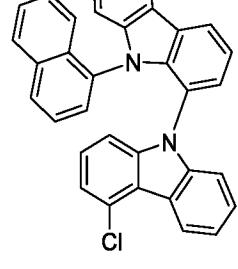
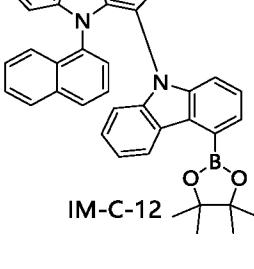


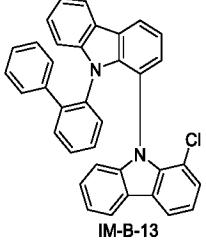
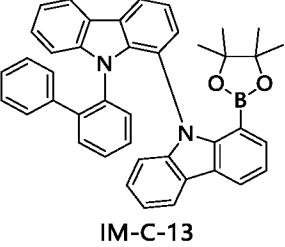
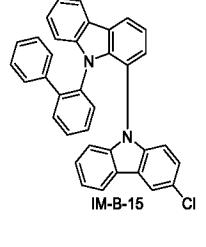
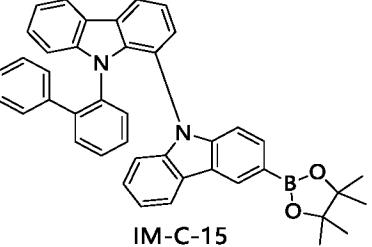
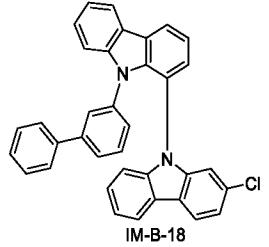
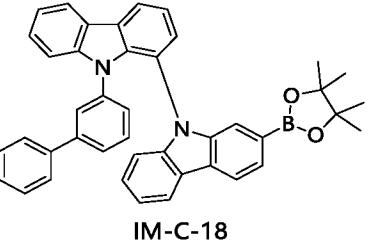
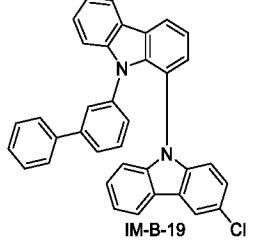
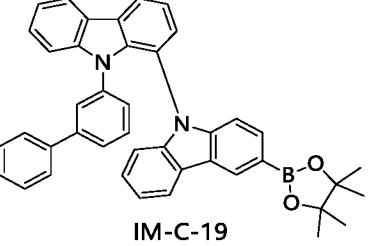
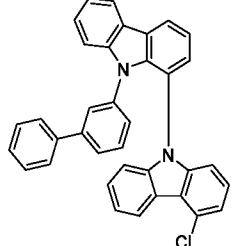
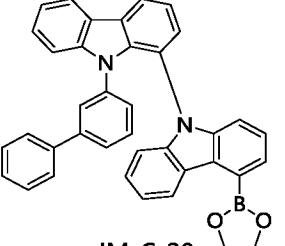
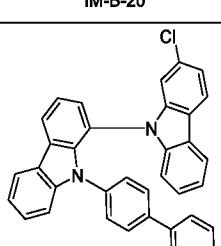
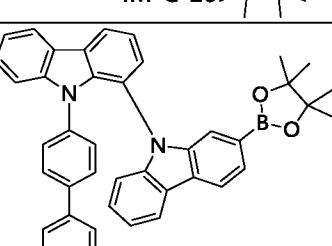
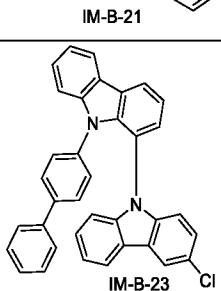
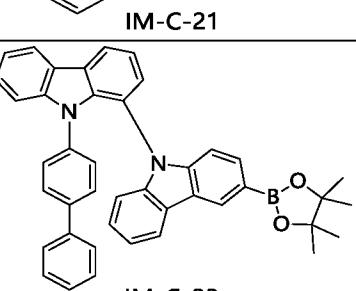
向装有机械搅拌、温度计、球形冷凝管的三口瓶中通入氮气(0.100L/min)置换15min，依次加入中间体IM-B-1(4.42g, 10.00mmol)，联硼酸频哪醇酯(3.05g, 12.00mmol)，1, 4 二氧六环(50ml)，启搅拌和加热，待温度上升到50°C，依次加入乙酸钾(1.47g, 15.00mmol)，x-phos(0.095g, 0.20mmol)， $\text{Pd}_2(\text{dba})_3$ (0.091g, 0.10mmol)，1,4-二氧六环回流反应5h，反应结束后，冷却至室温。洗涤，过滤固体；固体用正庚烷60°C打浆，降温至25°C过滤得到中间体IM-C-1(4.00g，收率75%)。

参照中间体IM-C-1的合成方法，合成下表3所示的中间体IM-C-X，不同之处在于，使用中间体IM-B-2、中间体IM-B-3、中间体IM-B-4、中间体IM-B-7、中间体IM-B-8、中间体IM-B-9、中间体IM-B-10、中间体IM-B-12、中间体IM-B-13、中间体IM-B-15、中间体IM-B-18、中间体IM-B-19、中间体IM-B-20、中间体IM-B-21、中间体IM-B-23代替中间体IM-B-1，合成中间体IM-C-X。

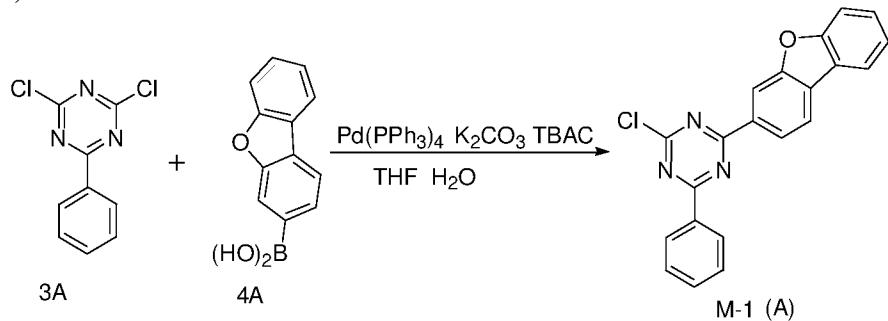
表3

中间体IM-B-X	中间体IM-C-X	收率%
		70
		71

		74
		71
		54
		56
		67
		54

		56
		70
		68
		70
		51
		50
		70

(4)中间体 M-1 的合成

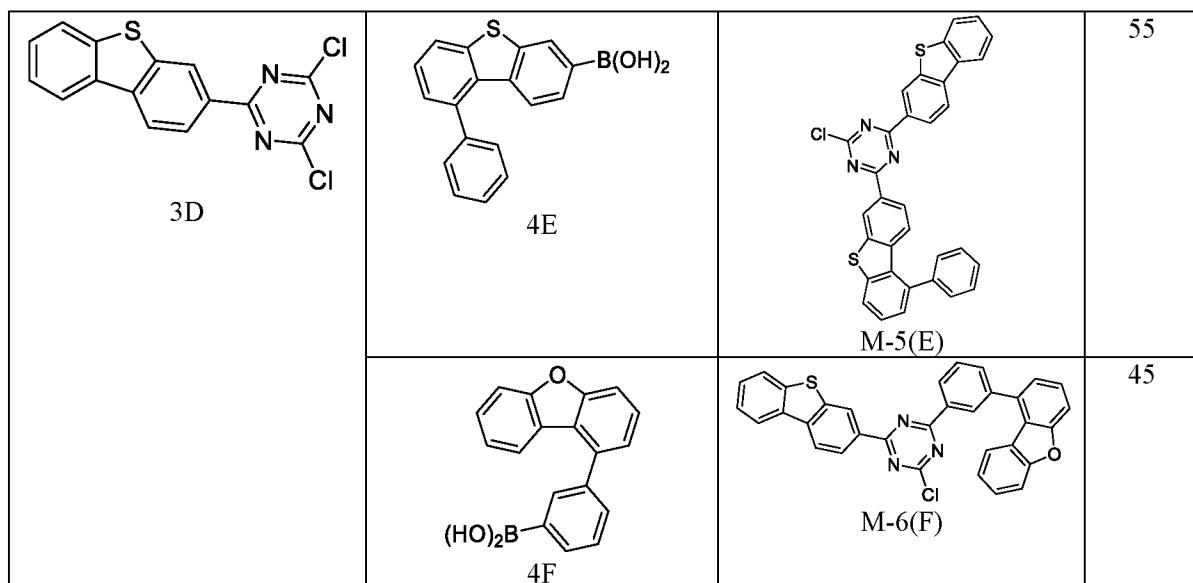


将反应物 3A(6.65g, 29.4mmol)、反应物 4A(5.0g, 23.6mmol)、四三苯基磷钯(1.7g, 1.47mmol)、碳酸钾(8.14g, 58.9mmol)、四丁基氯化铵(0.41g, 1.47mmol)分别加入三口烧瓶中，量取四氢呋喃(200mL)、水(40mL)加入反应器中，80°C下回流 12h，当反应结束时，使用二氯甲烷和水进行萃取，取有机相无水 MgSO₄ 干燥，抽滤，浓缩有机层，粗产物硅胶过柱提纯，得到中间体 M-1(A)(5.1g，收率 60%)。

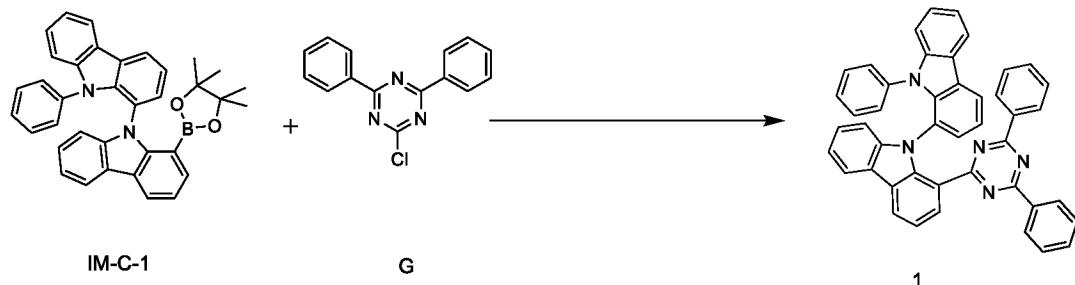
参照中间体 M-1(A)的方法合成表 4 中的中间体 M-X，不同之处在于，使用反应物 3B、反应物 3C、反应物 3D 代替反应物 3A，反应物 4B、反应物 4C、反应物 4D、反应物 4E、反应物 4F 代替反应物 4A，制得的表 4 所示的中间体 M-X，其中，X 为 2, 3, 4, 5 或 6。

表 4

反应物	反应物	中间体 M-X	收率%
			50
			51
			53



(5) 化合物 1 的合成

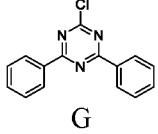
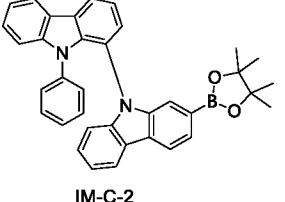
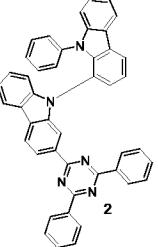
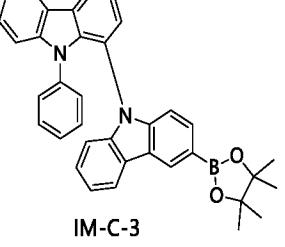
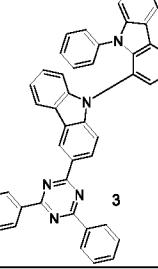
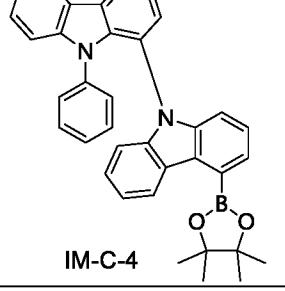
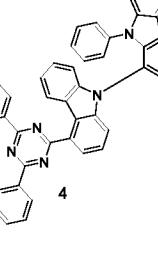
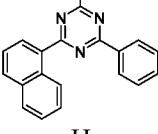
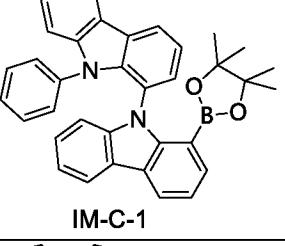
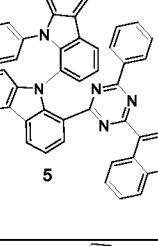
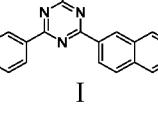
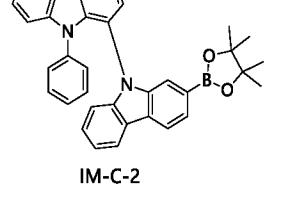
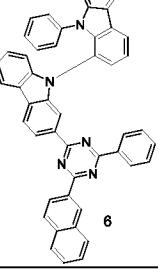
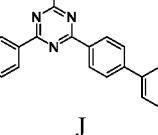
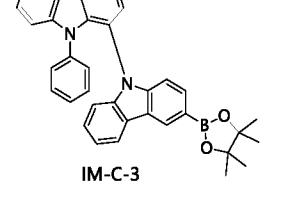
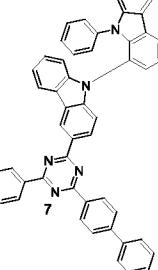


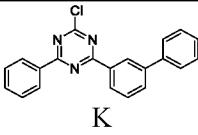
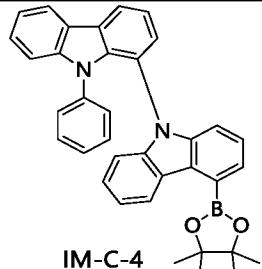
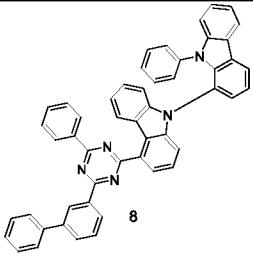
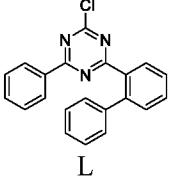
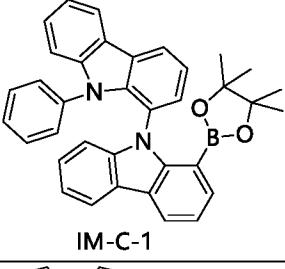
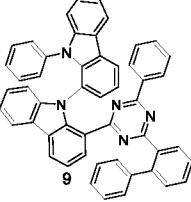
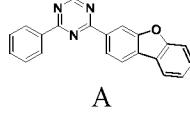
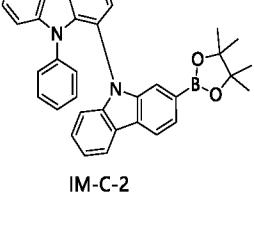
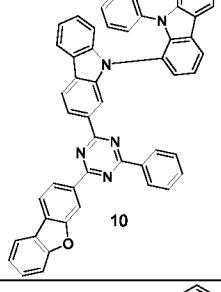
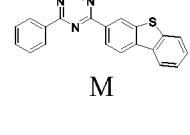
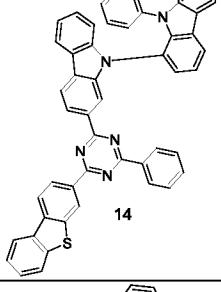
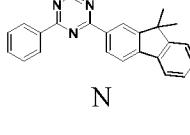
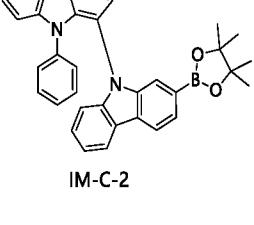
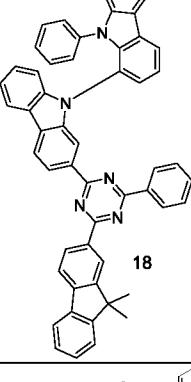
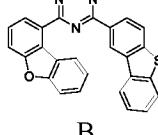
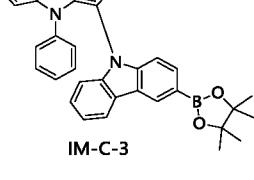
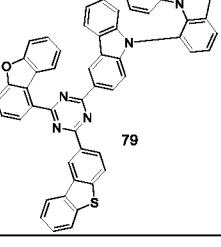
向装有机械搅拌、温度计、球形冷凝管的三口瓶中通入氮气(0.100L/min)置换15min，依次加入中间体IM-C-1(10.00g, 18.71mmol)，反应物G(5.00g, 18.71mmol)，碳酸钾(5.17g, 37.42mmol)，四丁基溴化铵(0.60g, 1.87mmol)，甲苯(80mL)，乙醇(20mL)，超纯水(20mL)；开启搅拌和加热，待温度上升到40°C，加入四三苯基膦钯(0.21g, 0.18mmol)；回流反应12h，反应结束后，冷却至室温。用150mL的甲苯进行萃取，200mL的超纯水进行洗涤，用无水硫酸钠进行干燥，萃取完成后过硅胶柱，将过柱液进行浓缩得到粗品，加入60mL甲苯并加热让固体完全溶解，缓慢冷却重结晶得到产物，使用柱层析(石油醚：乙酸乙酯的体积比=6: 1)对产物进行二次提纯得到固体化合物1(7.17g，收率60%)，质谱： m/z =640.24 [M+H]⁺。

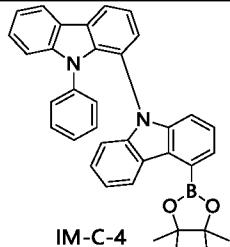
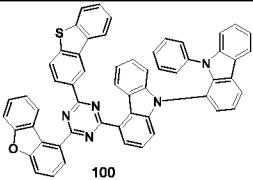
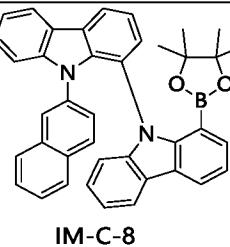
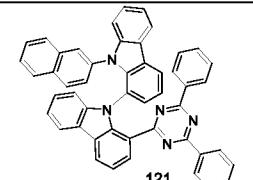
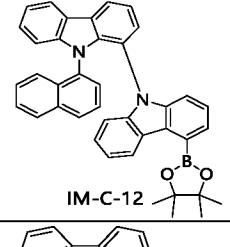
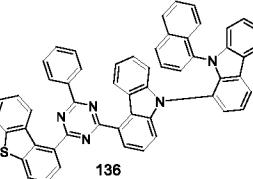
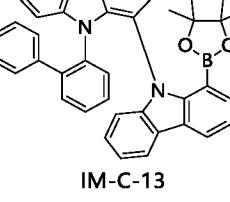
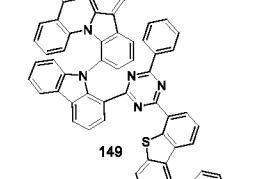
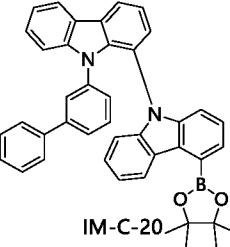
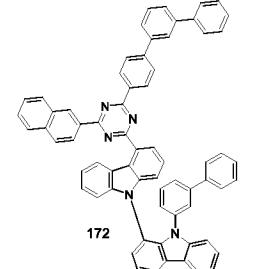
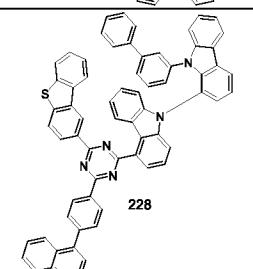
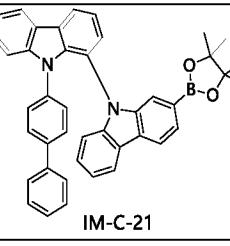
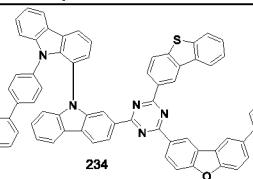
参照化合物 1 的合成方法，合成表 5 所示的化合物，不同之处在于，使用反应物 A、反应物 B、反应物 C、反应物 D、反应物 E、反应物 F、反应物 H、反应物 I、反应物 J、反应物 K、反应物 L、反应物 M、反应物 N、反应物 O、反应物 P、反应物 Q、反应物 R、反应物 S、反应物 T、反应物 U 和反应物 V 代替反应物 G，使用中间体 IM-C-1、中间体 IM-C-2、中间体 IM-C-3、中间体 IM-C-4、中间体 IM-C-7、中间体 IM-C-8、中间体 IM-C-10、中间体 IM-C-12、中间体 IM-C-13、中间体 IM-C-15、中间体 IM-C-18、中间体 IM-C-19、中间体 IM-C-20、中间体 IM-C-21、中间体 IM-C-23 代替中间体 IM-C-1，制备下列化合物。

表 5

反应物	中间体 IM-C-X	化合物结构	收率%	质谱(m/z) $[M+H]^+$
-----	------------	-------	-----	--------------------------

			56	640.24
			57	640.24
			45	640.24
			41	690.26
			45	690.26
			50	716.27

			40	716.27
			39	716.27
			40	730.25
			41	746.23
			42	756.30
			45	836.24

			40	836.24
G			40	690.26
O			41	796.25
P			44	898.29
D			45	918.35
Q			50	948.31
C			43	988.30

			45	1004.28
			46	988.3
			44	700.3
			43	734.3
			45	741.3
			43	704.3
			44	828.4

部分化合物核磁数据如下表 6 所示

表 6

化合物	核磁数据
化合物 1	¹ H NMR(400MHz CD ₂ Cl ₂): 8.82(d, 4H), 8.31(dd, 1H), 8.26(dd, 1H), 8.18(d, 1H), 8.07(d, 1H), 7.80(t, 2H), (7.66-7.51)(m, 8H), (7.47-7.31)(m, 8H), 7.27(t, 2H), 7.19(t, 1H).
化合物 136	¹ H NMR(400MHz CD ₂ Cl ₂): 8.85(d, 2H), 8.47(d, 1H), 8.40(d, 1H), 8.34(d, 1H), 8.31(d, 1H), 8.16(d, 2H), 8.08(t, 2H), 7.73(d, 2H), (7.67-7.38)(m, 15H), (7.35-7.16)(m, 6H).

有机电致发光器件的制备和性能评估

实施例 1

绿色有机电致发光器件

将厚度为 1500 Å 的阳极 100 ITO 基板切割成 40mm(长) × 40mm(宽) × 0.7mm(厚)的尺寸，采用光刻工序，将其制备成具有阴极 200、阳极 100 以及绝缘层图案的实验基板，利用紫外臭氧以及 O₂:N₂ 等离子进行表面处理，以增加阳极 100(实验基板)的功函数，并采用有机溶剂清洗 ITO 基板表面，以清除 ITO 基板表面的浮渣及油污。

在实验基板上真空蒸镀化合物 F4-TCNQ (结构式见下文)以形成厚度为 100 Å 的空穴注入层 310(HIL)；并在空穴注入层 310 上方真空蒸镀化合物 NPB，以形成厚度为 1030 Å 的空穴传输层 320(HTL)。

在空穴传输层 320 上真空蒸镀一层 HT-1，形成厚度为 380 Å 的空穴调整层 330。

在空穴调整层 330 上，将化合物 1: H-GH: Ir(ppy)₃ 以 45%: 45%: 10% 膜厚比例进行共同蒸镀，形成厚度为 330 Å 的绿色发光层 340(G-EML)。

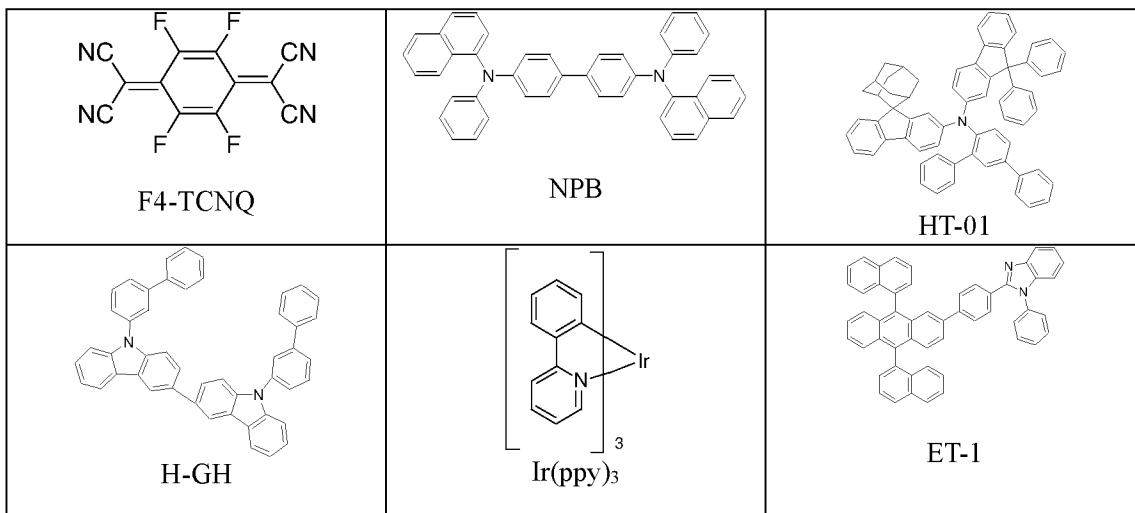
将 ET-1 和 LiQ 以 1:1 的重量比进行混合并蒸镀形成 350 Å 厚的电子传输层 350(ETL)，接着将 Yb 蒸镀在电子传输层上，形成厚度为 15 Å 的电子注入层 360(EIL)。

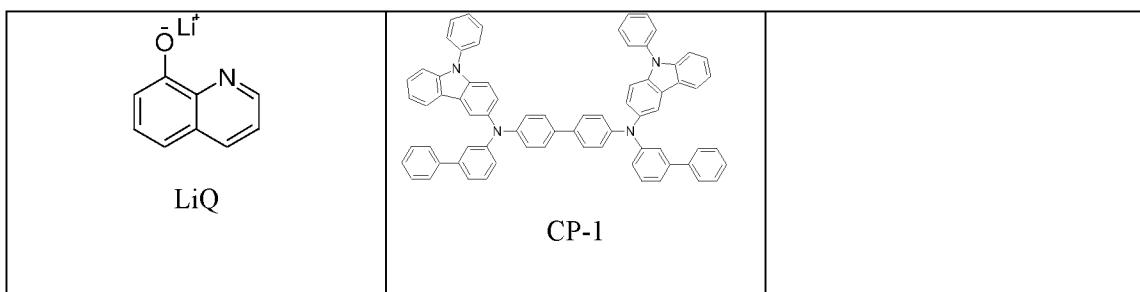
将镁(Mg)和银(Ag)以 1:9 的膜厚比真空蒸镀在电子注入层上，形成厚度为 120 Å 的阴极 200。

此外，在上述阴极 200 上作为保护层蒸镀一层厚度为 650 Å 的 CP-1，形成覆盖层(CPL)，从而完成有机发光器件的制造。

其中，F4-TCNQ、NPB、HT-01、H-GH、Ir(ppy)₃、ET-1、LiQ 以及 CP-1 的结构式如下表 7 所示：

表 7





实施例 2-27

除了在形成发光层(EML)时，采用表9中所示的化合物替代化合物1以外，采用与实施例1相同的方法制作绿色有机电致发光器件。

比较例 1

利用化合物 A 替代化合物 1，采用与实施例 1 相同的方法制作绿色有机电致发光器件。

比较例 2

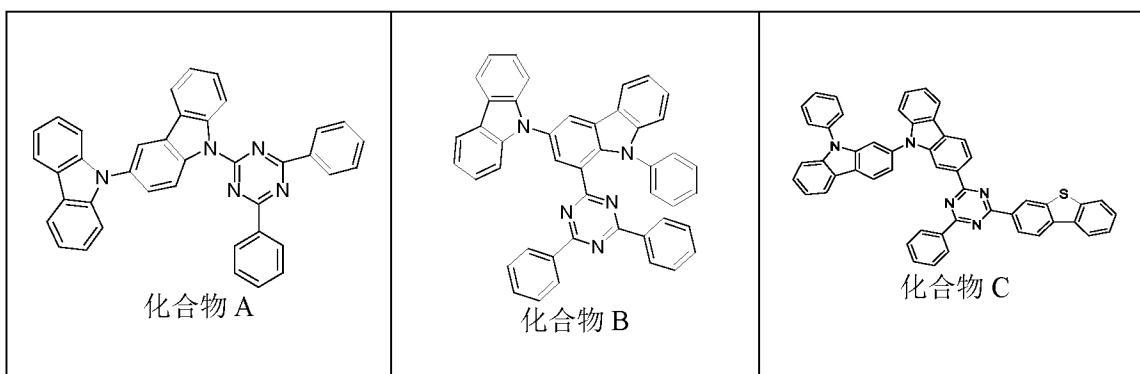
利用化合物 B 替代化合物 1，采用与实施例 1 相同的方法制作绿色有机电致发光器件。

比较例 3

利用化合物 C 替代化合物 1，采用与实施例 1 相同的方法制作绿色有机电致发光器件。

其中，化合物 A、化合物 B 以及化合物 C 的结构式如下表 8 所示：

表 8



对如上制得的有机电致发光器材，在 20 mA/cm^2 的条件下分析了器材的性能，其结果示于表9。

表 9 绿色有机电致发光器件的性能测试结果

实施例	发光层 化合物 X: H-GH: $\text{Ir(ppy)}_3=45\%$ %: 45%: 10%	驱动 电压 (V)	电流效率 (Cd/A)	功率效率 (lm/W)	色坐标 CIE _x	色坐标 CIE _y	外量子 效率 EQE(%)	T95 寿 命(h)
实施例 1	化合物 1	3.85	81.29	66.33	0.22	0.73	20.32	299
实施例 2	化合物 2	3.91	82.64	66.40	0.22	0.73	20.66	327
实施例 3	化合物 3	3.95	82.61	65.70	0.22	0.73	20.65	330
实施例 4	化合物 4	3.88	80.75	65.38	0.22	0.73	20.19	298
实施例 5	化合物 5	3.82	80.92	66.55	0.22	0.73	20.23	313
实施例 6	化合物 6	3.88	82.39	66.71	0.22	0.73	20.60	297
实施例 7	化合物 7	3.85	81.23	66.28	0.22	0.73	20.31	296

实施例 8	化合物 8	3.91	80.94	65.03	0.22	0.73	20.24	308
实施例 9	化合物 9	3.89	80.25	64.81	0.22	0.73	20.06	304
实施例 10	化合物 10	3.94	79.72	63.56	0.22	0.73	19.93	325
实施例 11	化合物 14	3.92	81.17	65.05	0.22	0.73	20.29	318
实施例 12	化合物 18	3.85	80.70	65.85	0.22	0.73	20.18	326
实施例 13	化合物 79	3.88	79.61	64.46	0.22	0.73	19.90	327
实施例 14	化合物 100	3.86	80.65	65.64	0.22	0.73	20.16	318
实施例 15	化合物 121	3.89	82.35	66.50	0.22	0.73	20.59	311
实施例 16	化合物 136	3.82	79.93	65.73	0.22	0.73	19.98	314
实施例 17	化合物 149	3.85	80.39	65.60	0.22	0.73	20.10	317
实施例 18	化合物 172	3.91	81.49	65.47	0.22	0.73	20.37	298
实施例 19	化合物 228	3.93	81.27	64.96	0.22	0.73	20.32	303
实施例 20	化合物 234	3.91	80.13	64.38	0.22	0.73	20.03	319
实施例 21	化合物 238	3.95	80.80	64.26	0.22	0.73	20.20	320
实施例 22	化合物 246	3.86	81.56	66.38	0.22	0.73	20.39	310
实施例 23	化合物 241	3.88	80.46	65.17	0.22	0.73	20.51	298
实施例 24	化合物 242	3.92	81.24	64.80	0.22	0.73	19.94	323
实施例 25	化合物 243	3.91	81.12	65.79	0.22	0.73	20.34	315
实施例 26	化合物 244	3.94	80.84	65.48	0.22	0.73	20.28	326
实施例 27	化合物 245	3.87	79.86	64.68	0.22	0.73	20.03	300
比较例 1	化合物 A	4.22	69.69	51.88	0.22	0.73	17.42	248
比较例 2	化合物 B	4.31	66.26	48.30	0.22	0.73	16.57	224
比较例 3	化合物 C	4.34	68.07	49.27	0.22	0.73	17.02	229

根据表 9 的结果可知，在化合物作为发光层的 OLED 器件中，与比较例相比，实施例 1-27 制备的有机电致发光器件的各项性能均有所提高。其中，作为发光层的化合物的实施例 1-27 与现有技术中的化合物所对应的比较例 1-3 相比，本申请中使用的化合物作为发光层制备的上述有机电致发光器件的驱动电压至少降低了 0.27V，发光效率(Cd/A)至少提高了 14.23%，外量子效率至少提高了 14.24%，寿命最少提高了 19.35%，最高的寿命可提高 106h。由上述数据可知，采用本申请的含氮化合物作为电子元件的发光层，该电子元件的发光效率(Cd/A)、外量子效率(EQE)以及寿命(T95)都有显著的提高。因此，在发光层中使用本申请的含氮化合物可制备得到高发光效率、长寿命的有机电致发光器件。

下表 10 为本申请部分化合物和比较例化合物的 T1 值计算，计算软件及版本：Spartan 16，计算方法：DFT/B3LYP/6-31G。

表 10

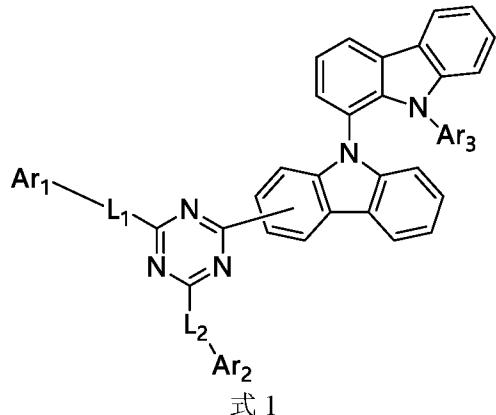
化合物	T1 值
化合物 1	2.93(eV)
化合物 2	2.72(eV)
化合物 3	2.85(eV)
化合物 4	2.67(eV)
化合物 14	2.69(eV)
化合物 C	2.59(eV)

从表 10 可知，本申请含氮化合物相比于比较例化合物，由于特定的基团和特定的连接方

式，极大程度地提升了空间位阻，从而有效提高了化合物分子的 T₁ 值。该含氮化合物用作绿光主体材料时，具有降低电压、提高效率和寿命的性能。根据本申请化合物 14 的分子结构模型图（图 3）与比较例化合物 C 的分子结构模型图（图 4）的对比可以看出，本申请含氮化合物特定的连接方式，极大程度地改变了分子空间结构，使其具备更高的空间位阻，从而有效提高了化合物分子的 T₁ 值。

权利要求书

1、一种含氮化合物，其特征在于，所述含氮化合物的结构如式 1 所示：



其中，Ar₁ 和 Ar₂ 相同或不同，且分别独立地选自碳原子数为 6~30 的取代或未取代的芳基、碳原子数为 3~30 的取代或未取代的杂芳基；

Ar₃ 选自碳原子数为 6~15 的取代或未取代的芳基；

所述 Ar₃ 中的取代基各自独立地选自氘、卤素基团、氟基或苯基；

L₁ 和 L₂ 相同或不同，且分别独立地选自单键、碳原子数为 6~30 的取代或未取代的亚芳基、碳原子数为 3~30 的取代或未取代的亚杂芳基；

所述 Ar₁、Ar₂、L₁、L₂ 中的取代基相同或不同，且分别独立地选自氘，卤素基团，氟基，碳原子数为 3~20 的杂芳基，任选地被 0、1、2、3、4 或 5 个独立选自氘、氟、氯基、甲基、叔丁基的取代基所取代的碳原子数为 6~20 的芳基，碳原子数为 3~12 的三烷基硅基，碳原子数为 18~24 的三芳基硅基，碳原子数为 1~10 的烷基，碳原子数为 1~10 的卤代烷基，碳原子数为 2~6 的烯基，碳原子数为 2~6 的炔基，碳原子数为 3~10 的环烷基，碳原子数为 2~10 的杂环烷基、碳原子数为 5~10 的环烯基，碳原子数为 4~10 的杂环烯基，碳原子数为 1~10 的烷氧基，碳原子数为 1~10 的烷硫基，碳原子数为 6~18 的芳氧基，碳原子数为 6~18 的芳硫基，碳原子数为 6~18 的膦氧基。

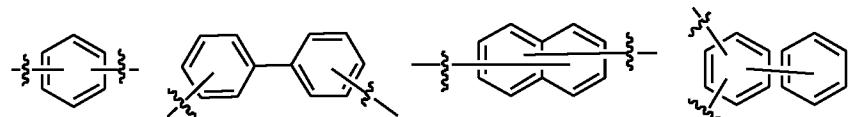
2、根据权利要求 1 所述的含氮化合物，其特征在于，所述 L₁ 和 L₂ 分别独立地选自单键、碳原子数为 6~15 的取代或未取代的亚芳基、或者碳原子数为 5~12 的取代或未取代的亚杂芳基；

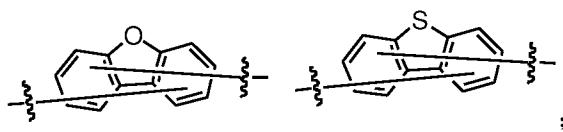
优选地，所述 L₁ 和 L₂ 中的取代基分别独立地选自氘、卤素基团、氟基、碳原子数为 6 的芳基、碳原子数为 1~5 的烷基。

3、根据权利要求 1 所述的含氮化合物，其特征在于，所述 L₁ 和 L₂ 分别独立地选自单键、取代或未取代的亚苯基、取代或未取代的亚萘基、取代或未取代的亚菲基、取代或未取代的亚芴基、取代或未取代的亚联苯基、取代或未取代的亚二苯并呋喃基、取代或未取代的亚二苯并噻吩基；

优选地，所述 L₁ 和 L₂ 中的取代基分别独立地选自氘、氟、氯基、甲基、乙基、正丙基、异丙基、叔丁基、苯基。

4、根据权利要求 1 所述的含氮化合物，其特征在于，所述 L₁ 和 L₂ 分别独立地选自单键或者取代或未取代的基团 V，未取代的基团 V 选自如下基团所组成的组：



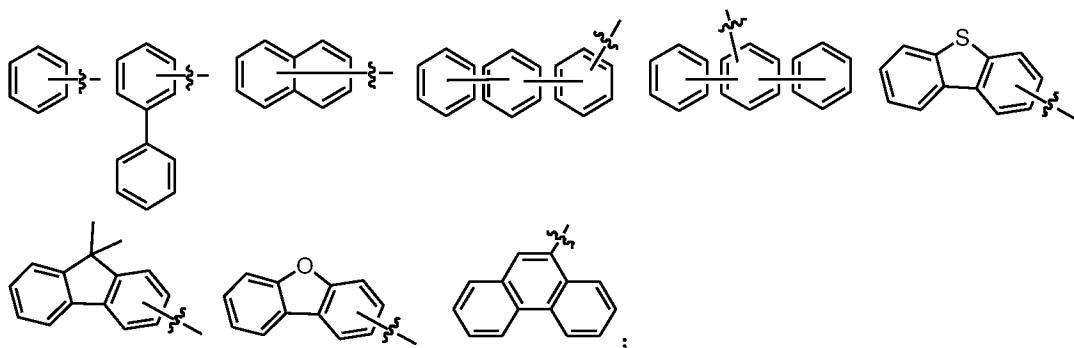


其中， $\ddot{\wedge}$ 表示化学键；取代的基团 V 上具有一个或多个的取代基，所述取代基各自独立地选自：氘、氰基、氟、甲基、乙基、正丙基、异丙基、叔丁基、苯基；当基团 V 中的取代基个数大于 1 时，各取代基相同或不同。

5、根据权利要求 1 所述的含氮化合物，其特征在于，所述 Ar₁ 和 Ar₂ 分别独立地选自碳原子数为 6~20 的取代或未取代的芳基、碳原子数为 3~20 的取代或未取代的杂芳基；

优选地，所述 Ar₁ 和 Ar₂ 中的取代基分别独立地选自氘、卤素基团、氰基、碳原子数为 6~12 的芳基、碳原子数为 5~12 的杂芳基、碳原子数为 1~5 的烷基。

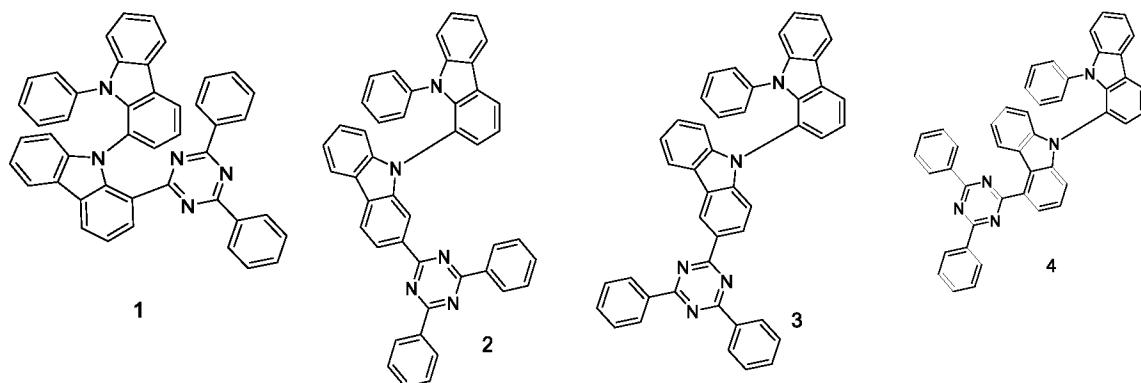
6、根据权利要求 1 所述的含氮化合物，其特征在于，所述 Ar₁ 和 Ar₂ 分别独立地选自取代或未取代的基团 W，未取代的基团 W 选自如下基团所组成的组：

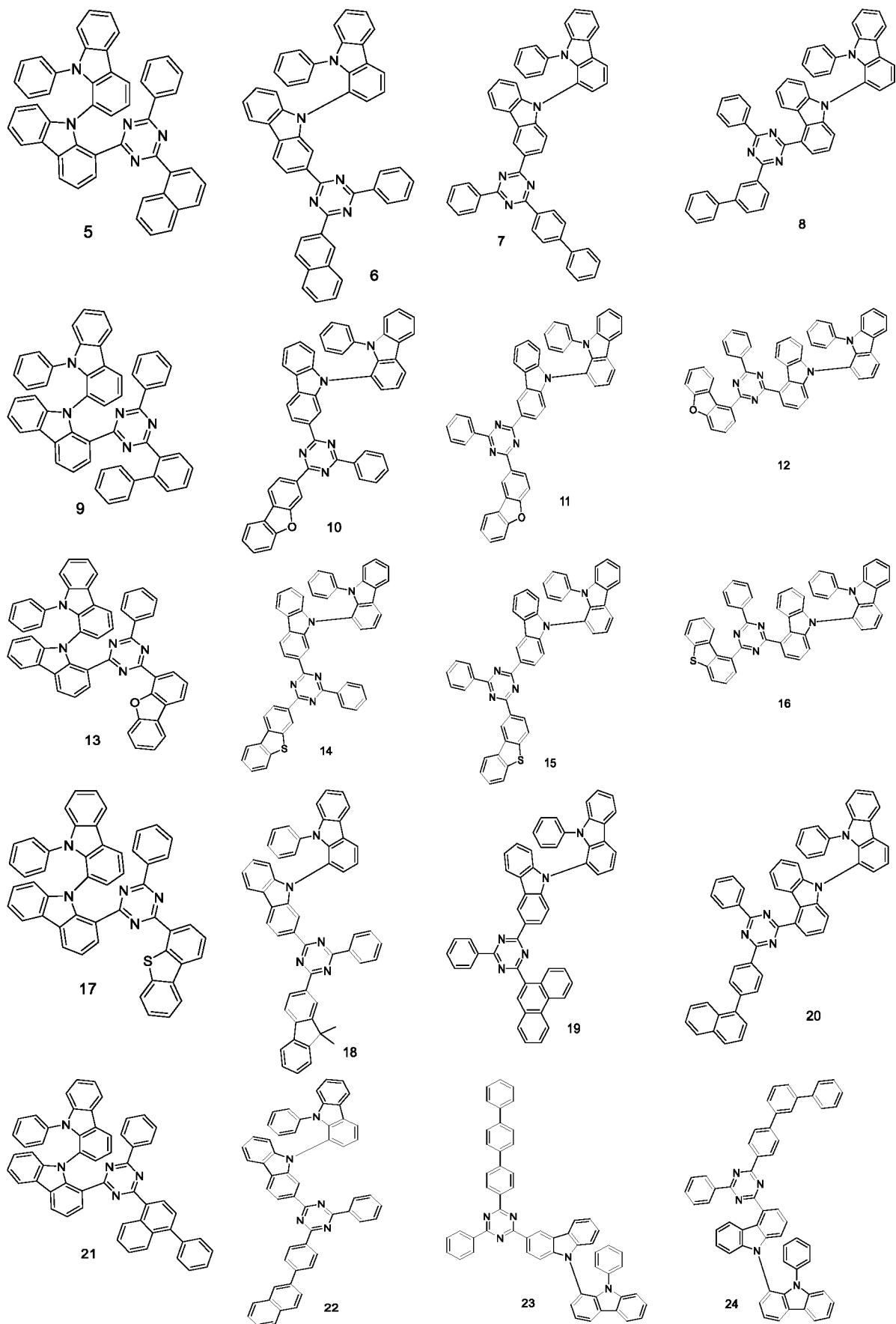


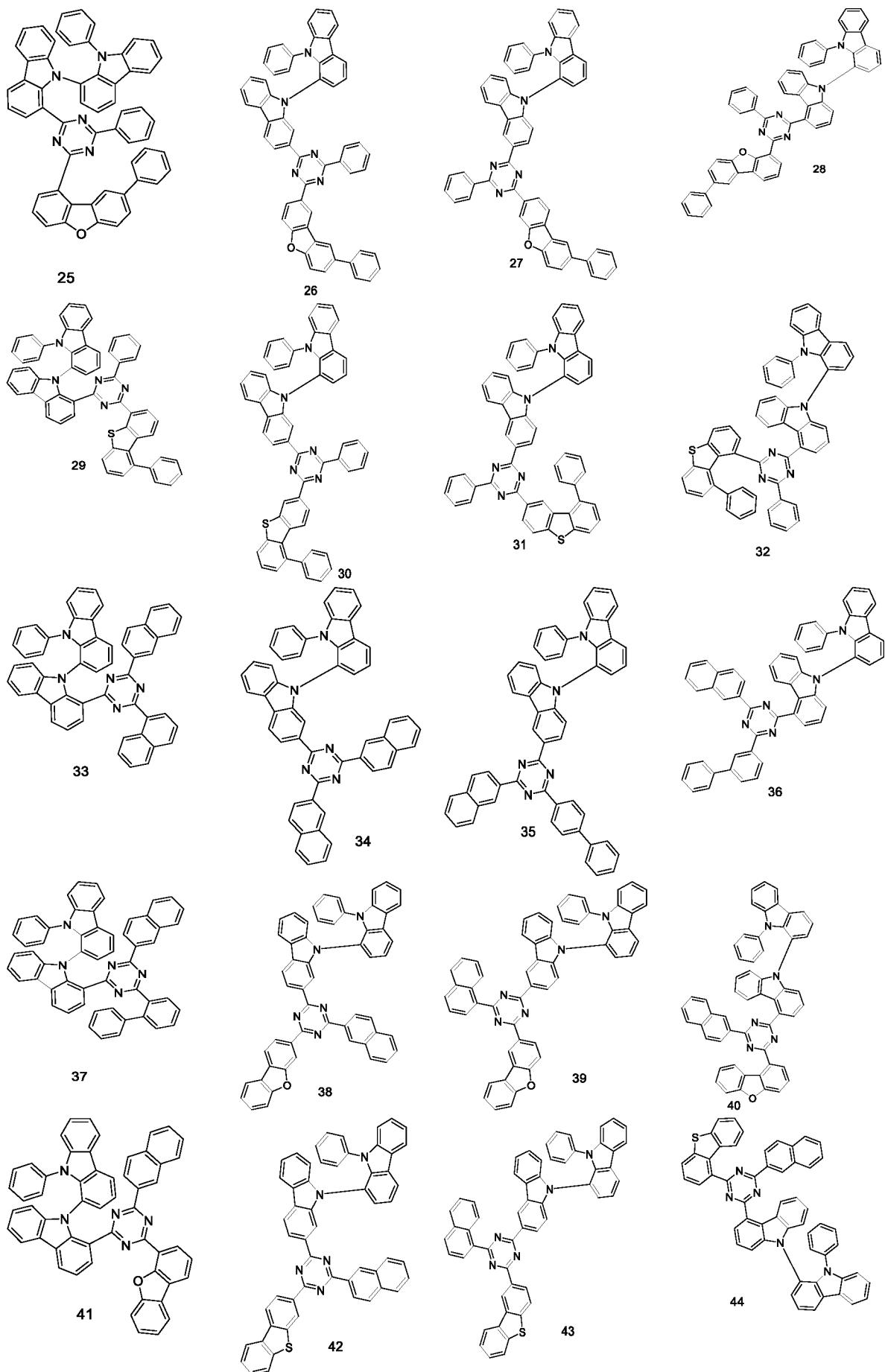
其中， $\ddot{\wedge}$ 表示化学键；取代的基团 W 上具有一个或多个的取代基，所述取代基各自独立地选自：氘、氰基、氟、甲基、乙基、正丙基、异丙基、叔丁基、苯基、萘基、联苯基；当基团 W 中的取代基个数大于 1 时，各取代基相同或不同。

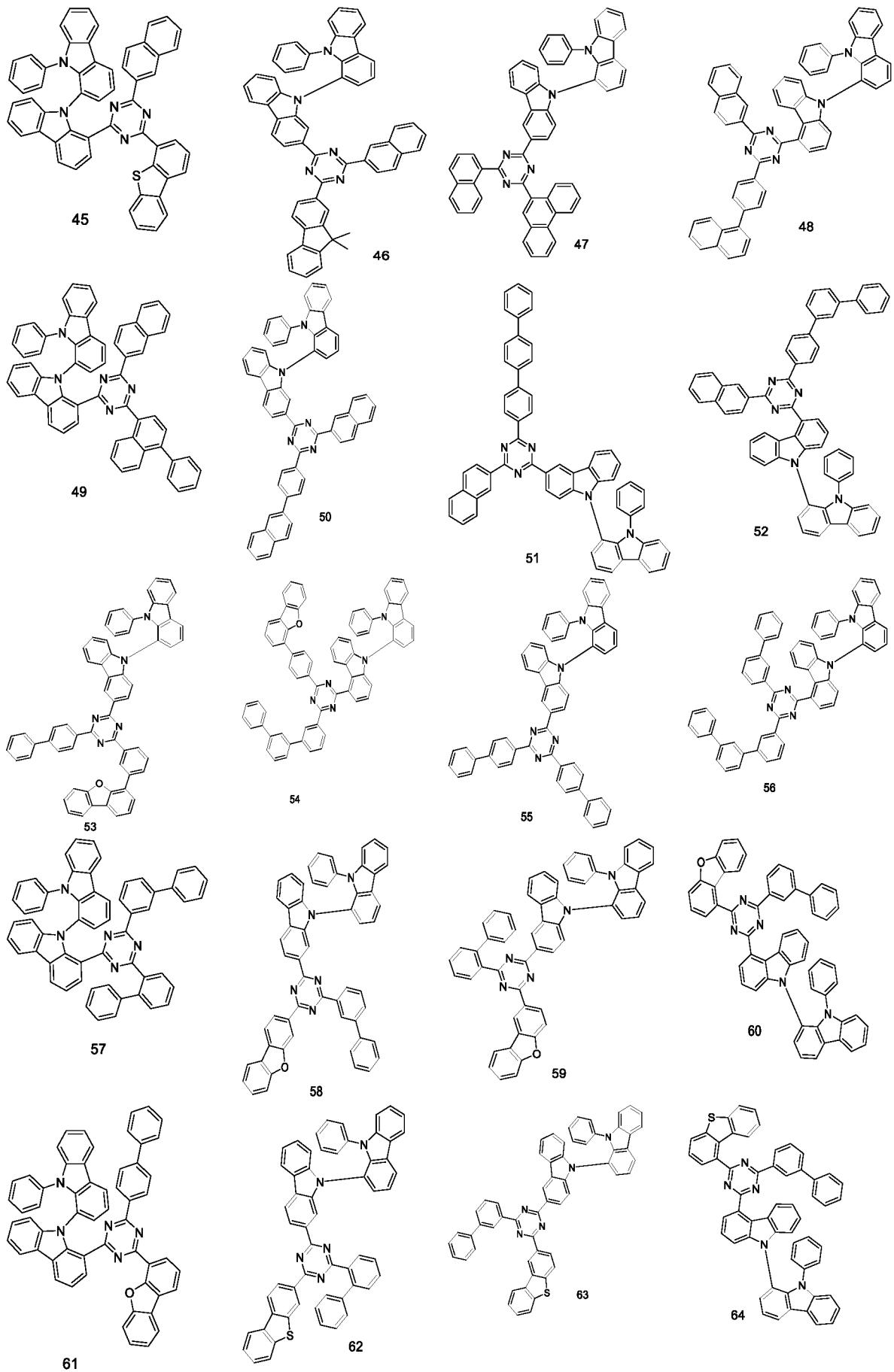
7、根据权利要求 1 所述的含氮化合物，其特征在于，所述 Ar₃ 选自苯基、萘基或联苯基。

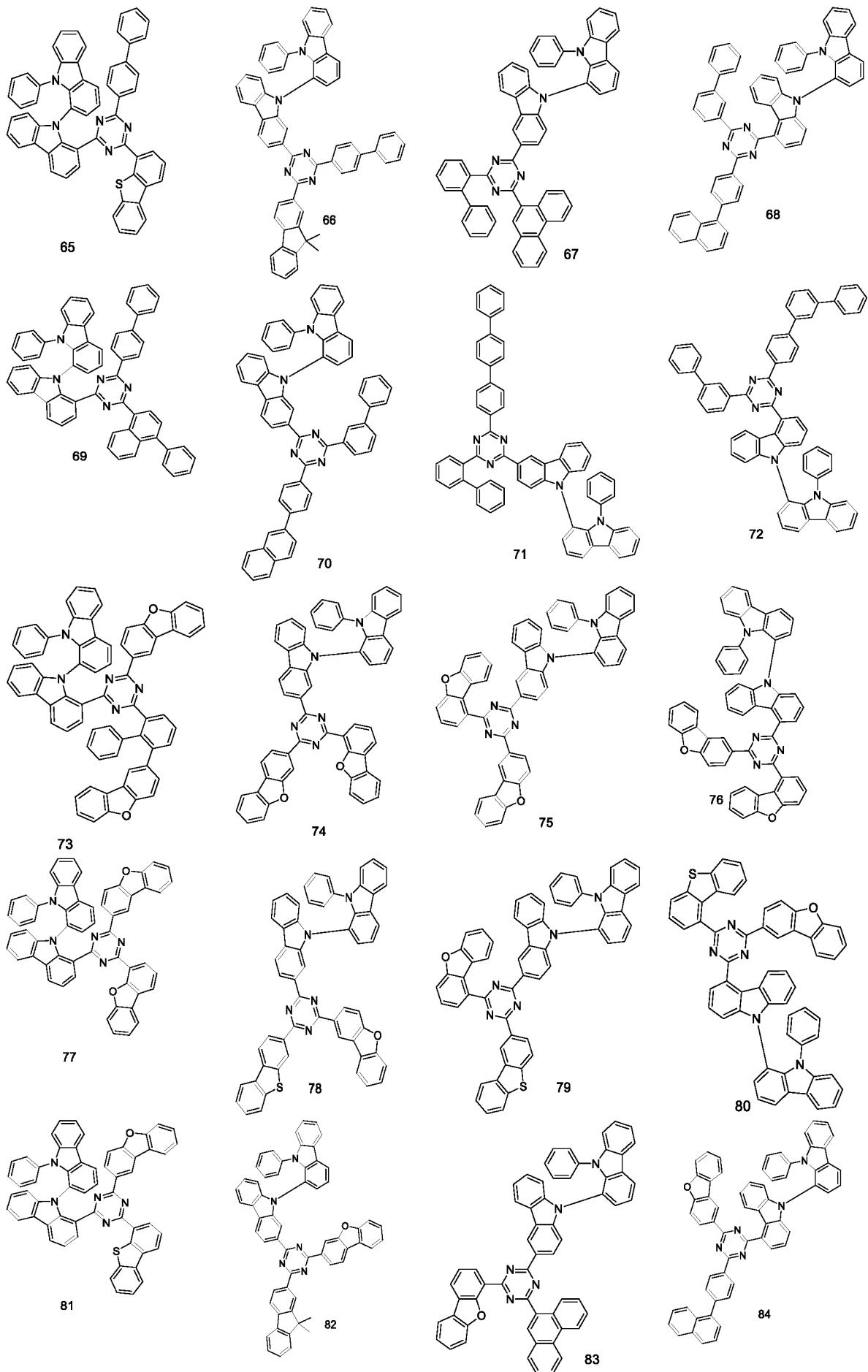
8、根据权利要求 1 所述的含氮化合物，其特征在于，所述含氮化合物选自如下化合物组成的组：

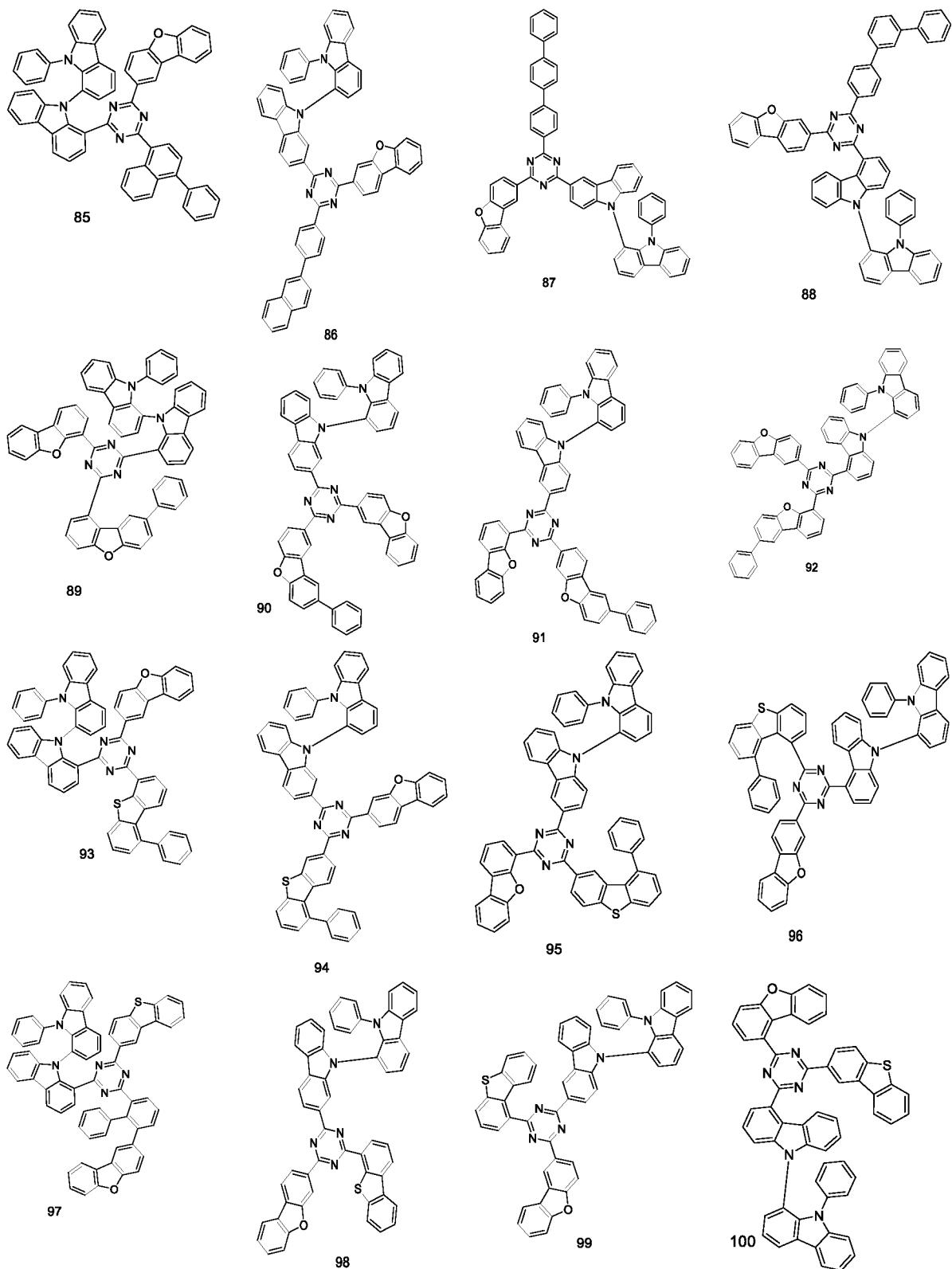


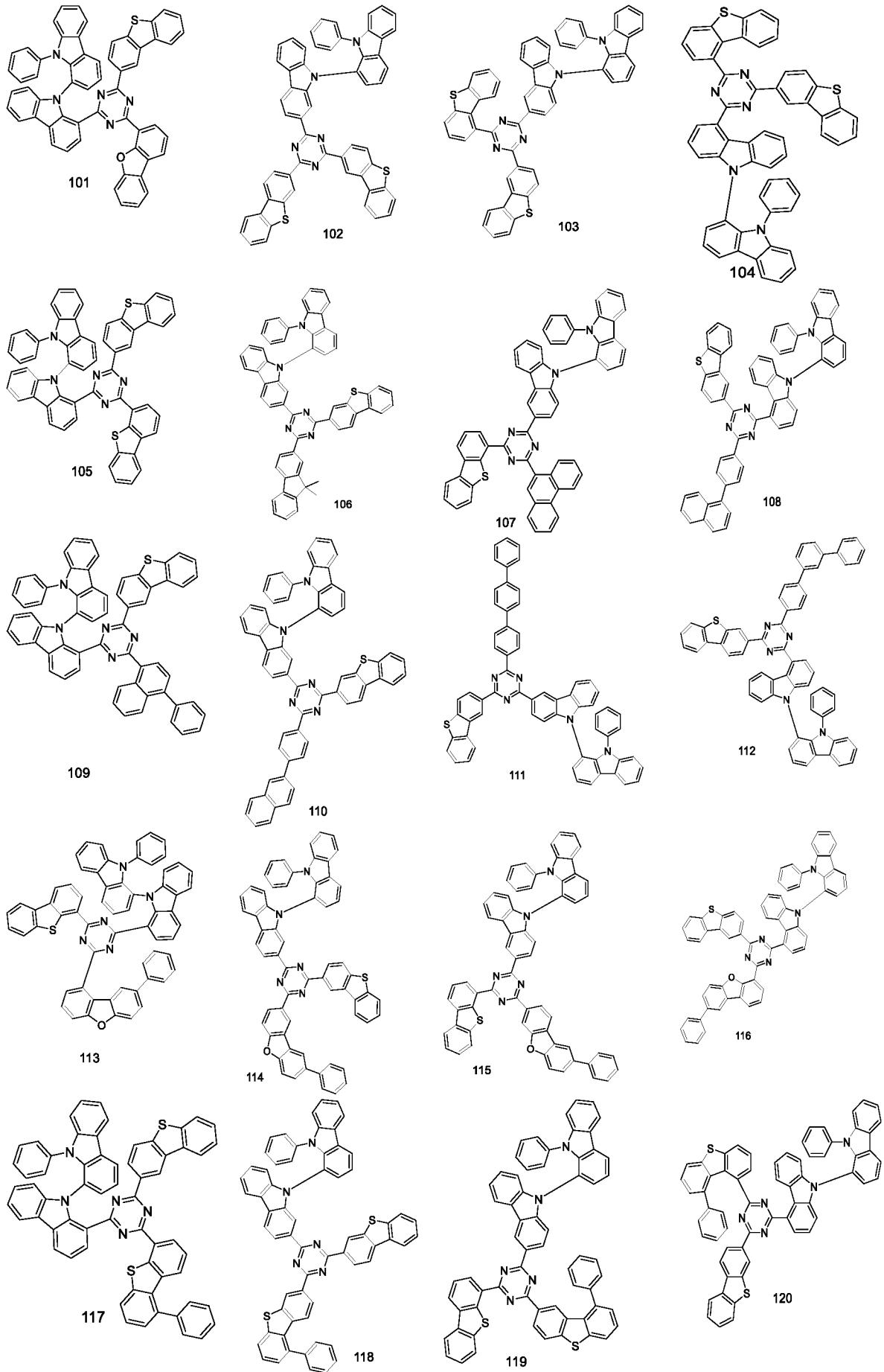


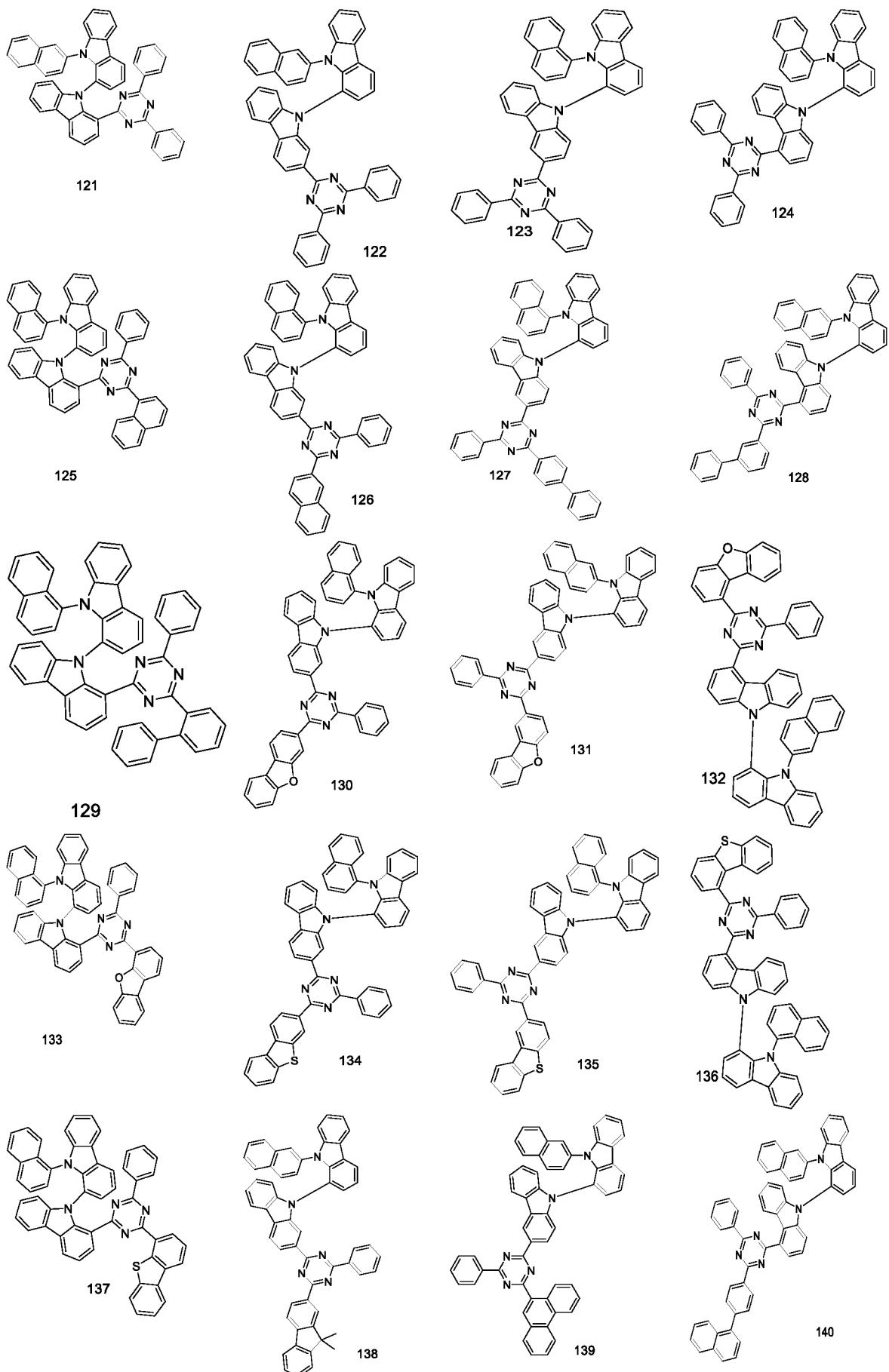


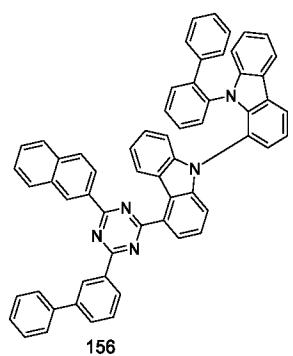
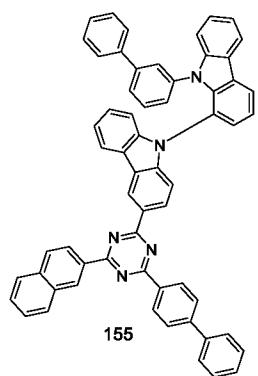
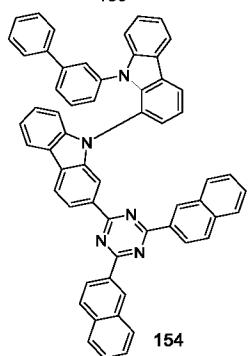
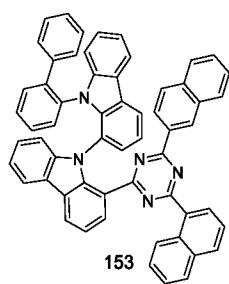
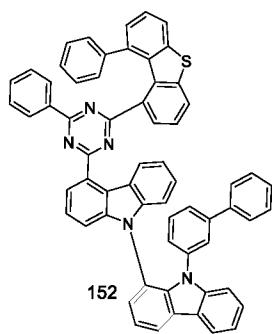
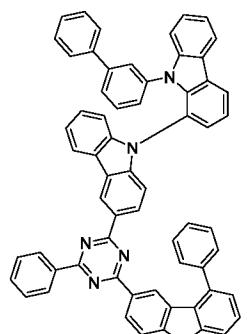
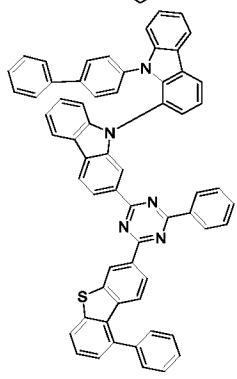
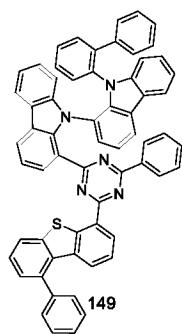
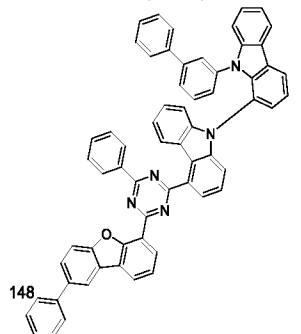
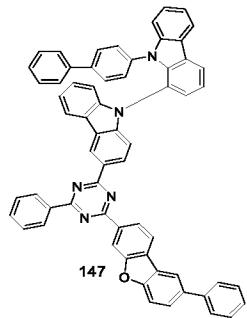
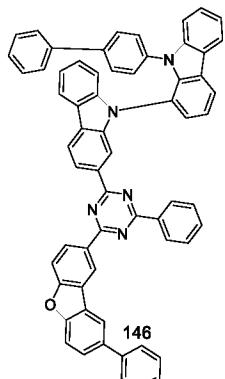
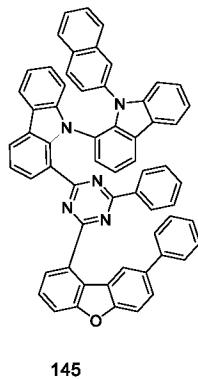
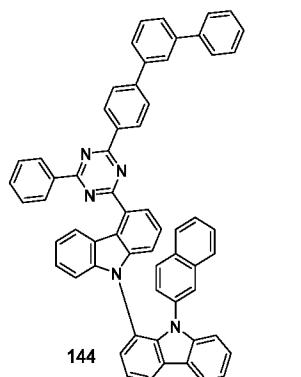
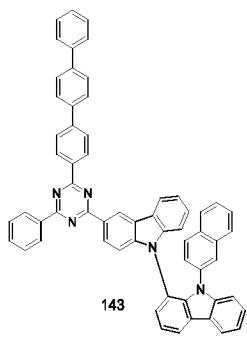
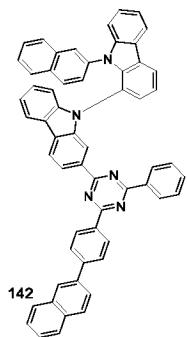
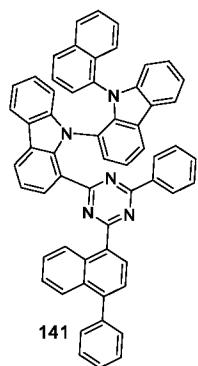


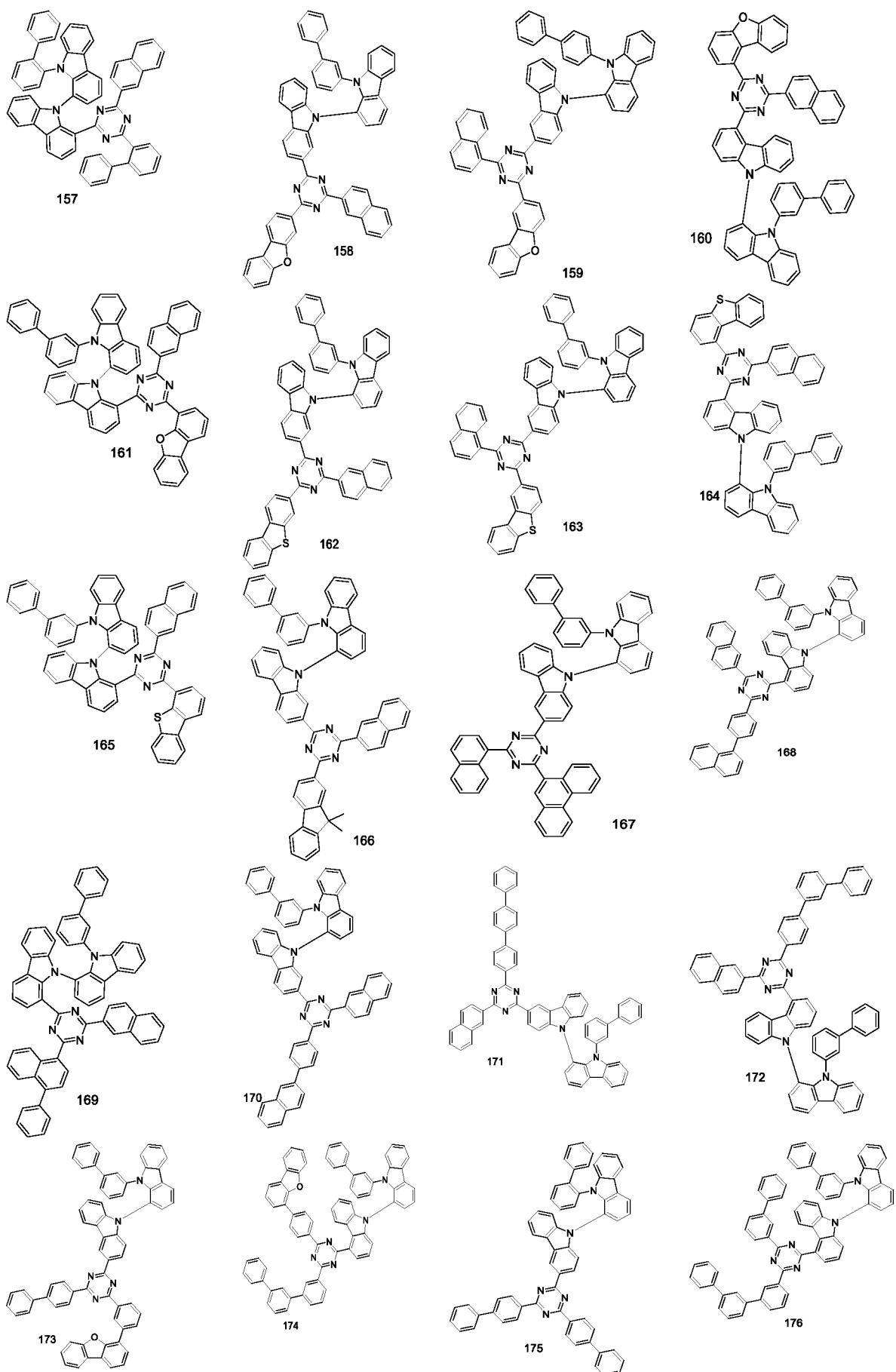


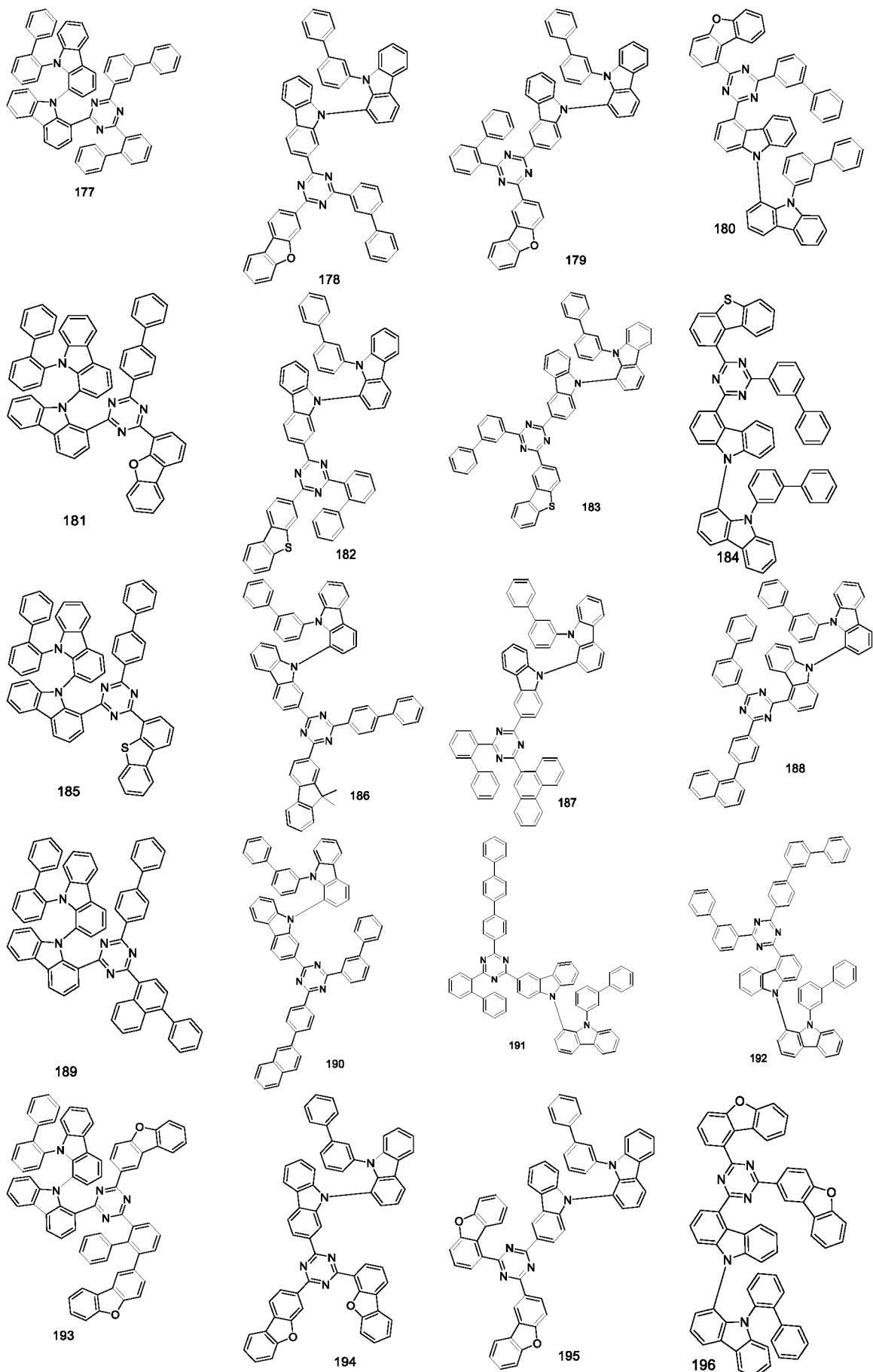


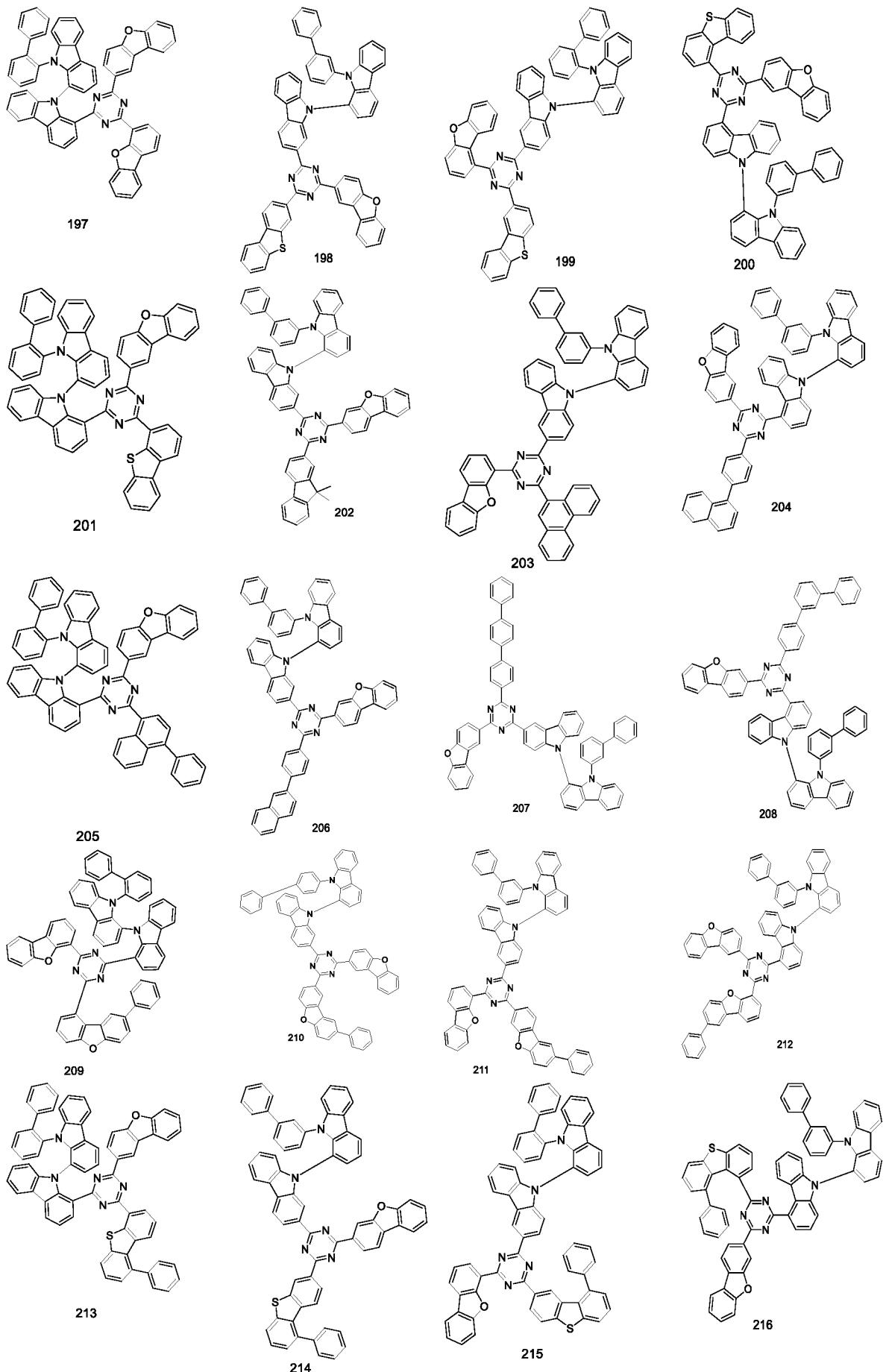


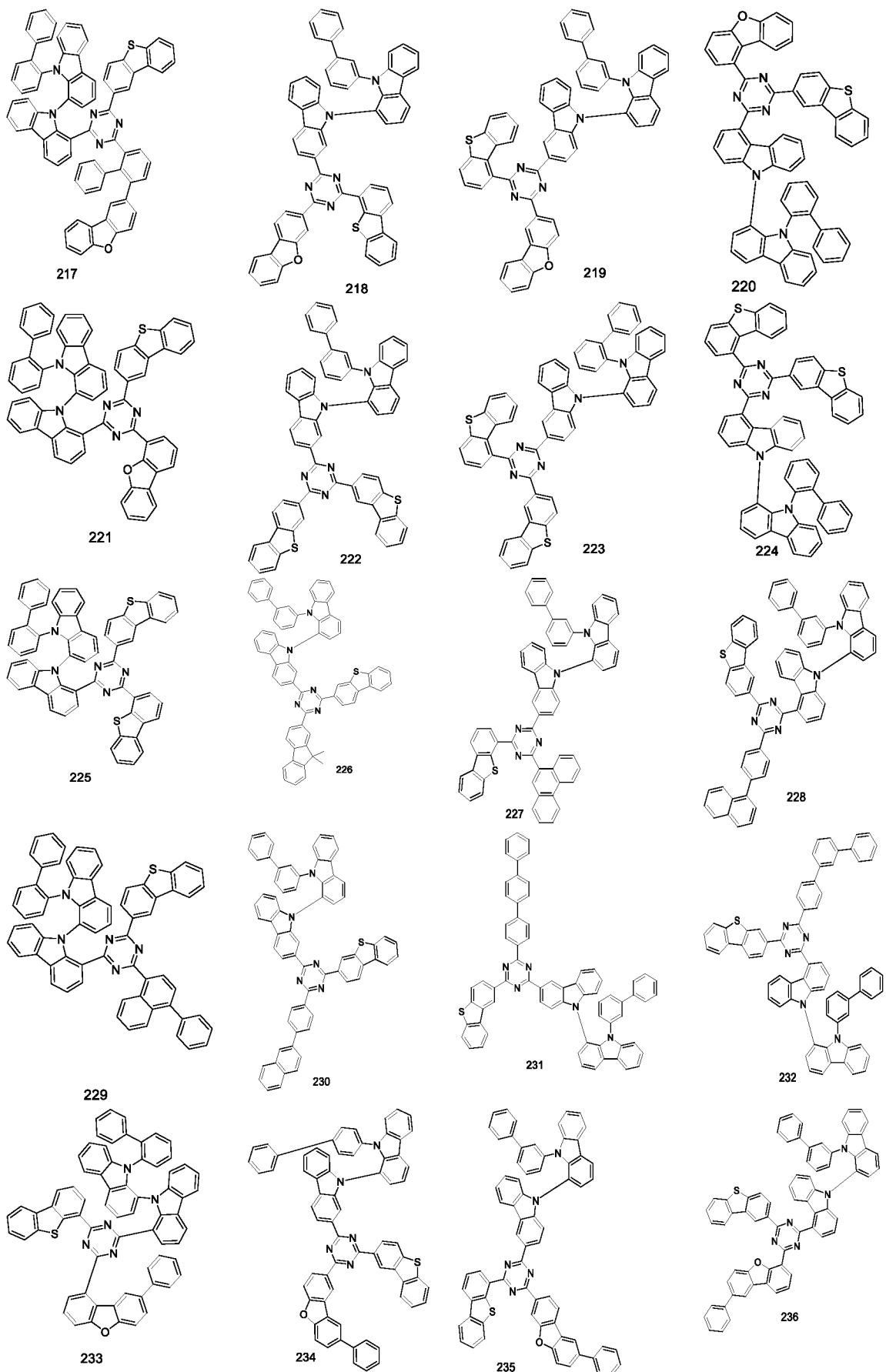


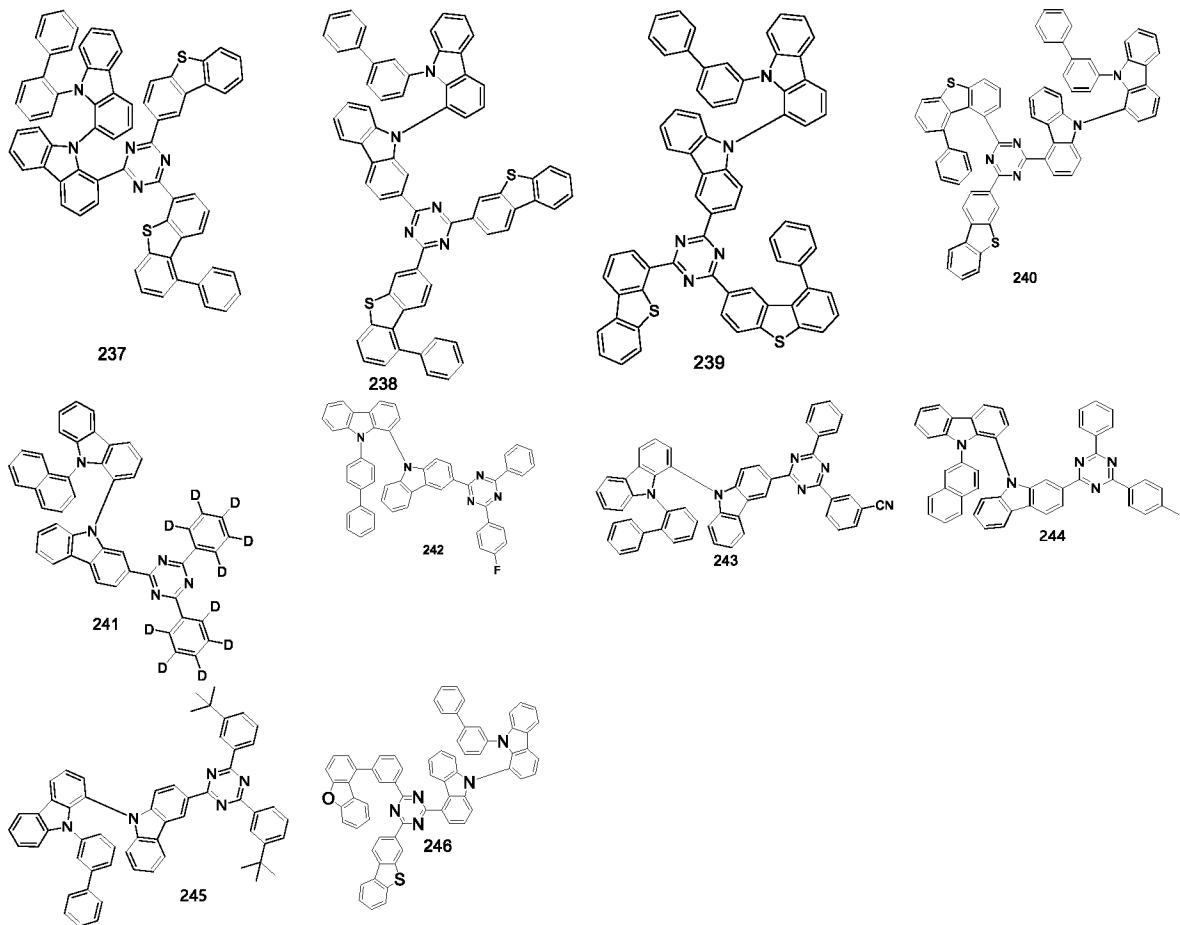












9、一种电子元件，其特征在于，所述电子元件包括阳极、阴极、以及介于阳极与阴极之间的至少一层功能层，所述功能层包含权利要求1-8中任意一项所述的含氮化合物；

优选地，所述功能层包括发光层，所述发光层包括所述含氮化合物。

10、根据权利要求9所述的电子元件，其特征在于，所述电子元件为有机电致发光器件；

优选地，所述有机电致发光器件为绿色有机电致发光器件。

11、一种电子装置，其特征在于，包括权利要求9或10所述的电子元件。

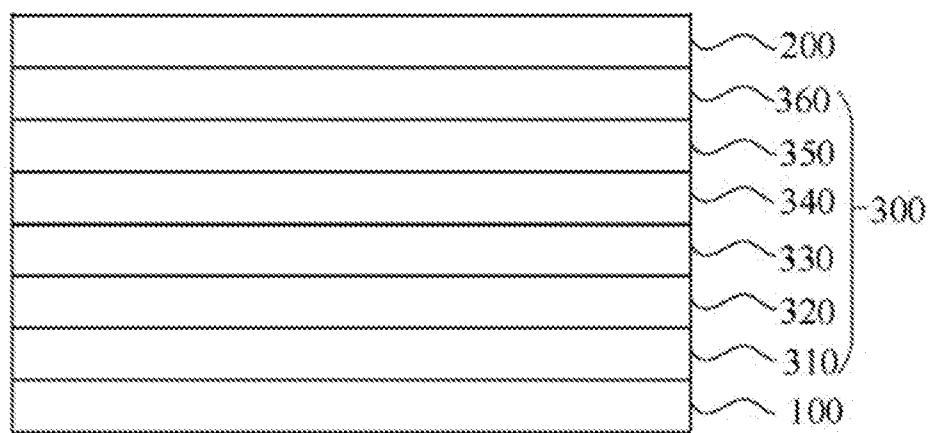


图 1

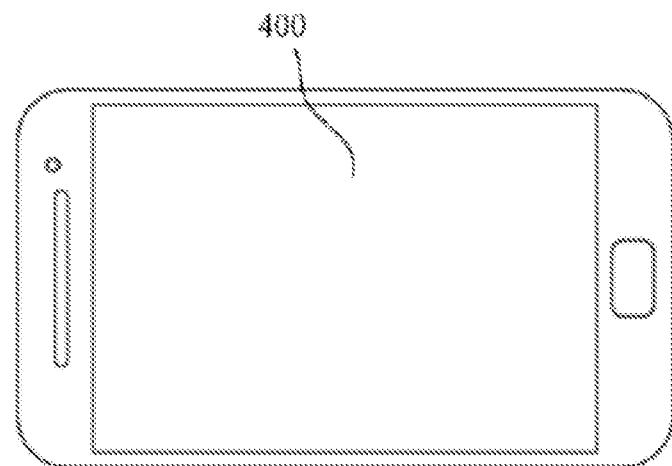


图 2

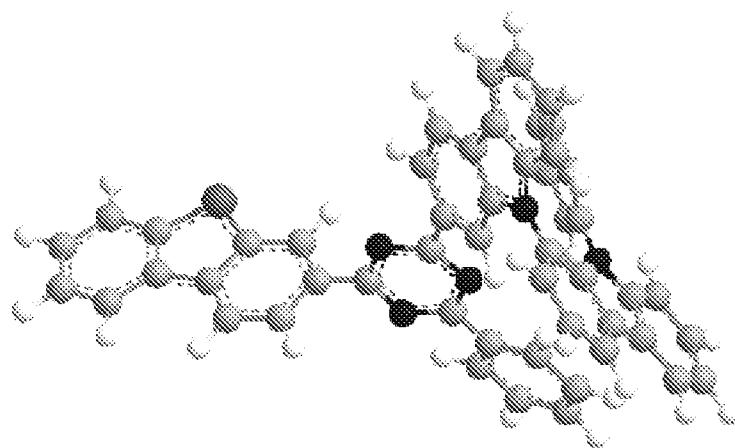


图 3

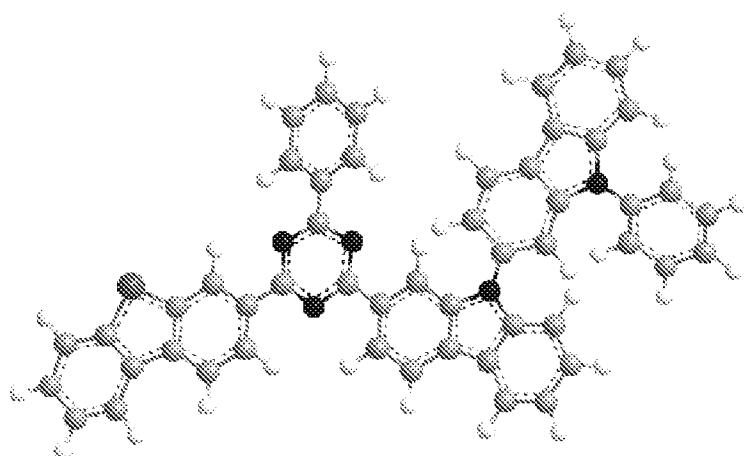


图 4

INTERNATIONAL SEARCH REPORT

International application No.

PCT/CN2021/111906

A. CLASSIFICATION OF SUBJECT MATTER

C07D 403/14(2006.01)i; C07D 405/14(2006.01)i; C07D 409/14(2006.01)i; C09K 11/06(2006.01)i; C07B 59/00(2006.01)i; H01L 51/50(2006.01)i; H01L 51/54(2006.01)i

According to International Patent Classification (IPC) or to both national classification and IPC

B. FIELDS SEARCHED

Minimum documentation searched (classification system followed by classification symbols)

C07D403/-; C07D405/-; C07D409/-; C09K11/-; C07B59/-; H01L51/-

Documentation searched other than minimum documentation to the extent that such documents are included in the fields searched

Electronic data base consulted during the international search (name of data base and, where practicable, search terms used)

CNKI, CNABS, SIPOABS, DWPI, REGISTRY, CAPLUS(STN), 陕西莱特光电材料股份有限公司, 卡唑基, 三嗪基, 有机电致发光, carbazol+, triazin+, oled, search on the basis of the compound structure in claim 1

C. DOCUMENTS CONSIDERED TO BE RELEVANT

Category*	Citation of document, with indication, where appropriate, of the relevant passages	Relevant to claim No.
PX	CN 113683599 A (SHAANXI LIGHTE OPTOELECTRONICS MATERIAL CO., LTD.) 23 November 2021 (2021-11-23) claims 1-11	1-11
Y	CN 111511878 A (MERCK PATENT GMBH) 07 August 2020 (2020-08-07) claims 1, 8-12, description page 19	1-11
Y	CN 107652295 A (LG CHEMICAL LTD.) 02 February 2018 (2018-02-02) claims 1, 4-8, description page 31	1-11
Y	US 2015349273 A1 (UNIVERSAL DISPLAY CORPORATION) 03 December 2015 (2015-12-03) claims 1, 12-20	1-11
A	KR 20190130341 A (DUK SAN NEOLUX CO., LTD.) 22 November 2019 (2019-11-22) entire document	1-11

Further documents are listed in the continuation of Box C.

See patent family annex.

* Special categories of cited documents:

"A" document defining the general state of the art which is not considered to be of particular relevance

"E" earlier application or patent but published on or after the international filing date

"L" document which may throw doubts on priority claim(s) or which is cited to establish the publication date of another citation or other special reason (as specified)

"O" document referring to an oral disclosure, use, exhibition or other means

"P" document published prior to the international filing date but later than the priority date claimed

"T" later document published after the international filing date or priority date and not in conflict with the application but cited to understand the principle or theory underlying the invention

"X" document of particular relevance; the claimed invention cannot be considered novel or cannot be considered to involve an inventive step when the document is taken alone

"Y" document of particular relevance; the claimed invention cannot be considered to involve an inventive step when the document is combined with one or more other such documents, such combination being obvious to a person skilled in the art

"&" document member of the same patent family

Date of the actual completion of the international search

21 December 2021

Date of mailing of the international search report

29 December 2021

Name and mailing address of the ISA/CN

China National Intellectual Property Administration (ISA/CN)
No. 6, Xitucheng Road, Jimenqiao, Haidian District, Beijing 100088, China

Authorized officer

Facsimile No. **(86-10)62019451**

Telephone No.

INTERNATIONAL SEARCH REPORT

Information on patent family members

International application No.

PCT/CN2021/111906

Patent document cited in search report				Publication date (day/month/year)		Patent family member(s)		Publication date (day/month/year)	
CN 113683599 A 23 November 2021				None					
CN 111511878 A 07 August 2020	EP 3710557 A2 23 September 2020	WO 2019096717 A2 23 May 2019	WO 2019096717 A3 18 July 2019	JP 2021503180 A 04 February 2021	KR 20200084886 A 13 July 2020	US 2020395548 A1 17 December 2020	TW 201932578 A 16 August 2019		
CN 107652295 A 02 February 2018	CN 107652295 B 22 September 2020								
US 2015349273 A1 03 December 2015	JP 6731218 B2 29 July 2020	US 2020044163 A1 06 February 2020	KR 20150139459 A 11 December 2015	JP 2015229677 A 21 December 2015	CN 105294658 A 03 February 2016	JP 6814243 B2 13 January 2021	US 10461260 B2 29 October 2019	JP 2019145808 A 29 August 2019	CN 105294658 B 23 April 2019

国际检索报告

国际申请号

PCT/CN2021/111906

A. 主题的分类

C07D 403/14(2006.01)i; C07D 405/14(2006.01)i; C07D 409/14(2006.01)i; C09K 11/06(2006.01)i; C07B 59/00(2006.01)i; H01L 51/50(2006.01)i; H01L 51/54(2006.01)i

按照国际专利分类(IPC)或者同时按照国家分类和IPC两种分类

B. 检索领域

检索的最低限度文献(标明分类系统和分类号)

C07D403/-; C07D405/-; C07D409/-; C09K11/-; C07B59/-; H01L51/-

包含在检索领域中的除最低限度文献以外的检索文献

在国际检索时查阅的电子数据库(数据库的名称, 和使用的检索词(如使用))

CNKI, CNABS, SipoABS, DWPI, REGISTRY, CAPLUS (STN), 陕西莱特光电材料股份有限公司, 咪唑基, 三嗪基, 有机电致发光, carbazol+, triazin+, oled, 基于权利要求1化合物的结构检索

C. 相关文件

类型*	引用文件, 必要时, 指明相关段落	相关的权利要求
PX	CN 113683599 A (陕西莱特光电材料股份有限公司) 2021年11月23日 (2021 - 11 - 23) 权利要求1-11	1-11
Y	CN 111511878 A (默克专利有限公司) 2020年8月7日 (2020 - 08 - 07) 权利要求1, 8-12, 说明书第19页	1-11
Y	CN 107652295 A (株式会社LG化学) 2018年2月2日 (2018 - 02 - 02) 权利要求1, 4-8, 说明书第31页	1-11
Y	US 2015349273 A1 (UNIVERSAL DISPLAY CORP) 2015年12月3日 (2015 - 12 - 03) 权利要求1, 12-20	1-11
A	KR 20190130341 A (DUK SAN NEOLUX CO LTD) 2019年11月22日 (2019 - 11 - 22) 全文	1-11

其余文件在C栏的续页中列出。

见同族专利附件。

- * 引用文件的具体类型:
- "A" 认为不特别相关的表示了现有技术一般状态的文件
- "E" 在国际申请日的当天或之后公布的在先申请或专利
- "L" 可能对优先权要求构成怀疑的文件, 或为确定另一篇引用文件的公布日而引用的或者因其他特殊理由而引用的文件(如具体说明的)
- "O" 涉及口头公开、使用、展览或其他方式公开的文件
- "P" 公布日先于国际申请日但迟于所要求的优先权日的文件

- "T" 在申请日或优先权日之后公布, 与申请不相抵触, 但为了理解发明之理论或原理的在后文件
- "X" 特别相关的文件, 单独考虑该文件, 认定要求保护的发明不是新颖的或不具有创造性
- "Y" 特别相关的文件, 当该文件与另一篇或者多篇该类文件结合并且这种结合对于本领域技术人员为显而易见时, 要求保护的发明不具有创造性
- "&" 同族专利的文件

国际检索实际完成的日期

2021年12月21日

国际检索报告邮寄日期

2021年12月29日

ISA/CN的名称和邮寄地址

中国国家知识产权局(ISA/CN)
中国北京市海淀区蓟门桥西土城路6号 100088

受权官员

王俊

传真号 (86-10)62019451

电话号码 62086346

国际检索报告
关于同族专利的信息

国际申请号

PCT/CN2021/111906

检索报告引用的专利文件			公布日 (年/月/日)	同族专利		公布日 (年/月/日)
CN	113683599	A	2021年11月23日	无		
CN	111511878	A	2020年8月7日	EP	3710557	A2 2020年9月23日
				WO	2019096717	A2 2019年5月23日
				WO	2019096717	A3 2019年7月18日
				JP	2021503180	A 2021年2月4日
				KR	20200084886	A 2020年7月13日
				US	2020395548	A1 2020年12月17日
				TW	201932578	A 2019年8月16日
CN	107652295	A	2018年2月2日	CN	107652295	B 2020年9月22日
US	2015349273	A1	2015年12月3日	JP	6731218	B2 2020年7月29日
				US	2020044163	A1 2020年2月6日
				KR	20150139459	A 2015年12月11日
				JP	2015229677	A 2015年12月21日
				CN	105294658	A 2016年2月3日
				JP	6814243	B2 2021年1月13日
				US	10461260	B2 2019年10月29日
				JP	2019145808	A 2019年8月29日
				CN	105294658	B 2019年4月23日