



(12)发明专利申请

(10)申请公布号 CN 110799624 A

(43)申请公布日 2020.02.14

(21)申请号 201880042612.3

(74)专利代理机构 北京三友知识产权代理有限公司 11127

(22)申请日 2018.06.27

代理人 沈娥 褚瑶杨

(30)优先权数据

2017-124947 2017.06.27 JP

2018-114758 2018.06.15 JP

(51)Int.Cl.

G09K 11/06(2006.01)

G07C 255/58(2006.01)

G07D 209/88(2006.01)

G07D 405/14(2006.01)

H01L 51/50(2006.01)

(85)PCT国际申请进入国家阶段日

2019.12.25

(86)PCT国际申请的申请数据

PCT/JP2018/024302 2018.06.27

(87)PCT国际申请的公布数据

W02019/004254 JA 2019.01.03

(71)申请人 九州有机光材股份有限公司

地址 日本福冈县

(72)发明人 能塚直人 杨扭锡 吉崎飞鸟

权利要求书5页 说明书60页 附图3页

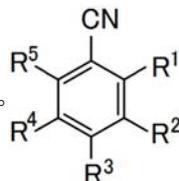
(54)发明名称

发光材料、化合物、延迟荧光体及发光元件

(57)摘要

下述通式所表示的化合物为优异的发光材料。R¹~R⁵表示氢原子或取代基，R¹~R⁵中的1个为氰基；R¹~R⁵中的1~3个为可以经烷基或芳基取代的芳基Ar；R¹~R⁵中的1~3个为供体基团D，

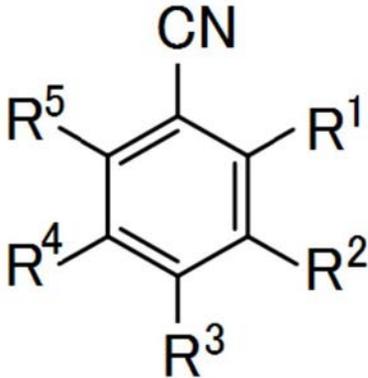
但是，相当于Ar的基团除外。



1. 一种发光材料,其由下述通式(1)所表示的化合物组成,

[化学式1]

通式(1)



通式(1)中,

$R^1 \sim R^5$ 分别独立地表示氢原子或取代基,

$R^1 \sim R^5$ 中的1个表示氰基,

$R^1 \sim R^5$ 中的1~3个表示可以经烷基或芳基取代的芳基Ar,但是,构成后者芳基的苯环中可以稠合有除了碳原子以外还可以包含氧原子或硫原子作为环骨架构成原子的环,但不会存在稠合有包含除了氧原子及硫原子以外的杂原子作为环骨架构成原子的环的情况, $R^1 \sim R^5$ 中的2个以上为Ar时,这些Ar可以彼此相同也可以不同,

$R^1 \sim R^5$ 中的1~3个表示供体基团D,但是,相当于Ar的基团除外, $R^1 \sim R^5$ 中的2个以上为D时,这些D可以彼此相同也可以不同。

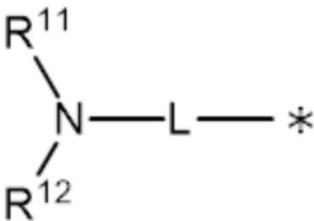
2. 根据权利要求1所述的发光材料,其中, $R^1 \sim R^5$ 分别独立地为氰基、Ar或D。

3. 根据权利要求1或2所述的发光材料,其中,D包含取代氨基。

4. 根据权利要求3所述的发光材料,其中,D为下述通式(2a)所表示的基团,

[化学式2]

通式(2a)

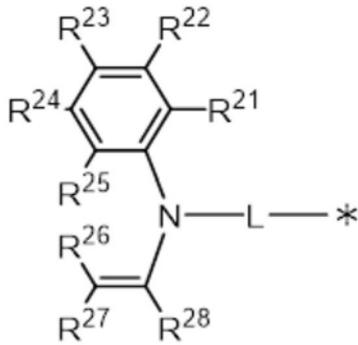


通式(2a)中, R^{11} 和 R^{12} 分别独立地表示经取代或未经取代的烷基、经取代或未经取代的烯基、经取代或未经取代的芳基或者经取代或未经取代的杂芳基,L表示单键、经取代或未经取代的亚芳基或者经取代或未经取代的杂亚芳基, R^{11} 和 R^{12} 可以彼此键结而形成环状结构,*表示与通式(1)中的构成苯环的环骨架的碳原子(C)的键结位置。

5. 根据权利要求3所述的发光材料,其中,D为下述通式(2b)所表示的基团,

[化学式3]

通式(2b)

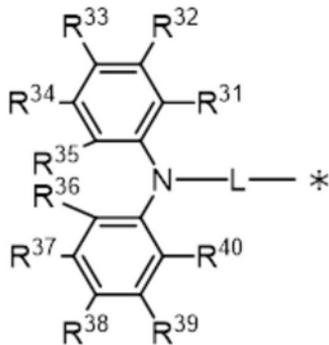


通式 (2b) 中, $R^{21} \sim R^{28}$ 分别独立地表示氢原子或取代基, L 表示单键、经取代或未经取代的亚芳基或者经取代或未经取代的杂亚芳基, R^{21} 和 R^{22} 、 R^{22} 和 R^{23} 、 R^{23} 和 R^{24} 、 R^{24} 和 R^{25} 、 R^{26} 和 R^{27} 、 R^{27} 和 R^{28} 可以彼此键结而形成为了形成环状结构所需的连接基团, 并且, R^{25} 和 R^{26} 可以彼此键结而形成单键或连接基团。

6. 根据权利要求 3 所述的发光材料, 其中, D 为下述通式 (2c) 所表示的基团,

[化学式 4]

通式 (2c)



通式 (2c) 中, $R^{31} \sim R^{40}$ 分别独立地表示氢原子或取代基, L 表示单键、经取代或未经取代的亚芳基或者经取代或未经取代的杂亚芳基, R^{31} 和 R^{32} 、 R^{32} 和 R^{33} 、 R^{33} 和 R^{34} 、 R^{34} 和 R^{35} 、 R^{36} 和 R^{37} 、 R^{37} 和 R^{38} 、 R^{38} 和 R^{39} 、 R^{39} 和 R^{40} 可以彼此键结而形成为了形成环状结构所需的连接基团, 并且, R^{35} 和 R^{36} 可以彼此键结而形成单键或连接基团, * 表示与通式 (1) 中的构成苯环的环骨架的碳原子 (C) 的键结位置。

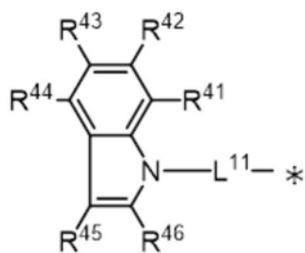
7. 根据权利要求 4 至 6 中任一项所述的发光材料, 其中, L 为单键。

8. 根据权利要求 4 至 6 中任一项所述的发光材料, 其中, R^3 为氰基, 且 L 为经取代或未经取代的亚苯基。

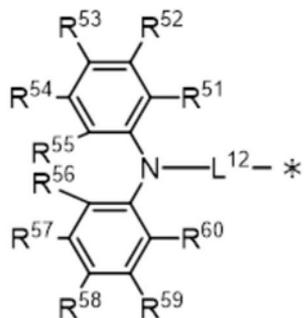
9. 根据权利要求 4 至 8 中任一项所述的发光材料, 其中, D 为下述通式 (3) ~ (6) 中的任一个所表示的基团,

[化学式 5]

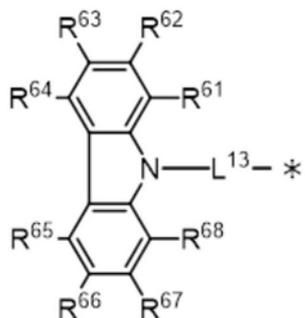
通式 (3)



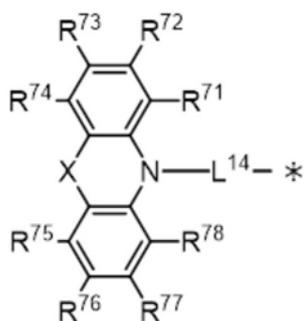
通式 (4)



通式 (5)



通式 (6)

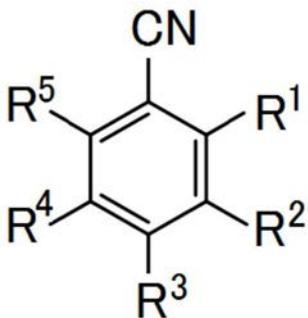


通式 (3) ~ (6) 中, $R^{41} \sim R^{46}$ 、 $R^{51} \sim R^{60}$ 、 $R^{61} \sim R^{68}$ 、 $R^{71} \sim R^{78}$ 分别独立地表示氢原子或取代基, $L^{11} \sim L^{14}$ 表示单键、经取代或未经取代的亚芳基或者经取代或未经取代的杂亚芳基, 通式 (6) 中的 X 表示连接链长度为 1 原子的 2 价的氧原子、硫原子、经取代或未经取代的氮原子、经取代或未经取代的碳原子、经取代或未经取代的硅原子、羰基、或者键结链长度为 2 原子的 2 价的经取代或未经取代的乙烯基、经取代或未经取代的亚乙烯基、经取代或未经取代的邻亚芳基或者经取代或未经取代的邻杂亚芳基。

10. 一种化合物, 其由下述通式 (1) 表示:

[化学式 6]

通式 (1)



通式(1)中,

$R^1 \sim R^5$ 分别独立地表示氢原子或取代基,

$R^1 \sim R^5$ 中的1个表示氰基,

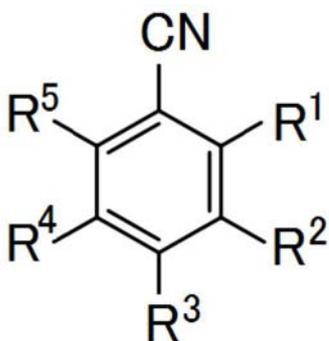
$R^1 \sim R^5$ 中的1~3个表示可以经烷基或芳基取代的芳基Ar,但是,构成后者芳基的苯环中可以稠合有除了碳原子以外还可以包含氧原子或硫原子作为环骨架构成原子的环,但不会存在稠合有包含除了氧原子及硫原子以外的杂原子作为环骨架构成原子的环的情况, $R^1 \sim R^5$ 中的2个以上为Ar时,这些Ar可以彼此相同也可以不同,

$R^1 \sim R^5$ 中的1~3个表示供体基团D,但是,相当于Ar的基团除外, $R^1 \sim R^5$ 中的2个以上为D时,这些D可以彼此相同也可以不同。

11. 一种延迟荧光体,其由下述通式(1)所表示的化合物组成,

[化学式7]

通式(1)



通式(1)中,

$R^1 \sim R^5$ 分别独立地表示氢原子或取代基,

$R^1 \sim R^5$ 中的1个表示氰基,

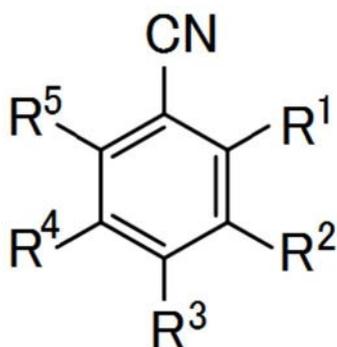
$R^1 \sim R^5$ 中的1~3个表示可以经烷基或芳基取代的芳基Ar,但是,构成后者芳基的苯环中可以稠合有除了碳原子以外还可以包含氧原子或硫原子作为环骨架构成原子的环,但不会存在稠合有包含除了氧原子及硫原子以外的杂原子作为环骨架构成原子的环的情况, $R^1 \sim R^5$ 中的2个以上为Ar时,这些Ar可以彼此相同也可以不同,

$R^1 \sim R^5$ 中的1~3个表示供体基团D,但是,相当于Ar的基团除外, $R^1 \sim R^5$ 中的2个以上为D时,这些D可以彼此相同也可以不同。

12. 一种发光元件,其特征在于,包含下述通式(1)所表示的化合物,

[化学式8]

通式(1)



通式(1)中,

R¹~R⁵分别独立地表示氢原子或取代基,

R¹~R⁵中的1个表示氰基,

R¹~R⁵中的1~3个表示可以经烷基或芳基取代的芳基Ar,但是,构成后者芳基的苯环中可以稠合有除了碳原子以外还可以包含氧原子或硫原子作为环骨架构成原子的环,但不会存在稠合有包含除了氧原子及硫原子以外的杂原子作为环骨架构成原子的环的情况,R¹~R⁵中的2个以上为Ar时,这些Ar可以彼此相同也可以不同,

R¹~R⁵中的1~3个表示供体基团D,但是,相当于Ar的基团除外,R¹~R⁵中的2个以上为D时,这些D可以彼此相同也可以不同。

13. 根据权利要求12所述的发光元件,其发射延迟荧光。

14. 根据权利要求12或13所述的发光元件,其中,所述发光元件具有发光层,所述发光层包含所述化合物和主体材料。

15. 根据权利要求12至14中任一项所述的发光元件,其中,所述发光元件具有发光层,所述发光层包含所述化合物和发光材料。

发光材料、化合物、延迟荧光体及发光元件

技术领域

[0001] 本发明涉及一种作为发光材料有用的化合物及使用其的发光元件。并且，本发明还涉及一种发射延迟荧光的延迟荧光体。

背景技术

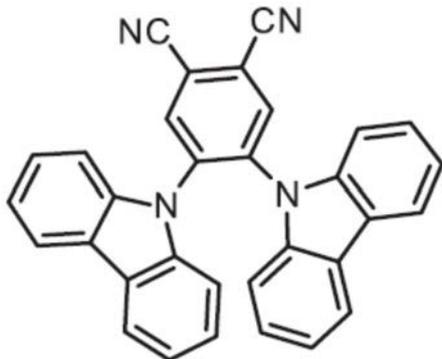
[0002] 在积极进行提高有机电致发光元件(有机EL元件)等发光元件的发光效率的研究。尤其是想各种办法通过新开发构成有机电致发光元件的电子传输材料、空穴传输材料、发光材料等并进行组合来提高发光效率。其中，也可以见到关于利用延迟荧光材料的有机电致发光元件的研究。

[0003] 延迟荧光材料是在激发态下产生从激发三重态向激发单重态的反向系间窜越后，在从该激发单重态向基态返回时发射出荧光的材料。由这种途径产生的荧光比来自基态直接产生的激发单重态的荧光(通常的荧光)更迟被观测到，因此称为延迟荧光。在此，例如在通过载子的注入而激发发光性化合物的情况下，激发单重态与激发三重态的产生机率统计为25%:75%，因此若仅通过来自直接产生的激发单重态的荧光，则发光效率的提高存在极限。另一方面，由于延迟荧光材料除了激发单重态以外，激发三重态也能够通过所述经由反向系间窜越的途径而用于荧光发光，因此相较于通常的荧光材料能够获得较高的发光效率。

[0004] 这种原理被明确以后，通过各种研究发现了各种延迟荧光材料。然而，并不是只要为发射延迟荧光的材料就能够立即作为发光材料而有用。延迟荧光材料中有比较难以产生反向系间窜越的材料，也有延迟荧光的寿命长的材料。并且，还有激子在高电流密度区域中积累而导致发光效率降低或者若长时间持续驱动则导致快速劣化的材料。因此，实际情况是，有极多延迟荧光材料在实用性的方面存在改进空间。因此，已指出，作为延迟荧光材料周知的氰基苯衍生物中也存在问题。例如，虽然具有下述结构的2CzPN为发射延迟荧光的材料，但是存在发光效率不高且高电流密度区域中的发光效率显著降低等问题(参考非专利文献1)。

[0005] [化学式1]

[0006]



[0007] 以往技术文献

[0008] 非专利文献

[0009] 非专利文献1:Organic Electronics 14(2013) 2721-2726

发明内容

[0010] 发明要解决的技术课题

[0011] 尽管指出存在这种问题,但是很难说对延迟荧光材料的化学结构和特性之间的关系进行了充分的阐明。因此,使作为发光材料有用的化合物的化学结构普及化在现状而言较为困难,有许多不明确的点。

[0012] 在这种状况下,本发明人等以提供作为发光元件用的发光材料更有用的化合物为目的反复进行了研究。而且,以导出作为发光材料更有用的化合物的通式并使其普及化为目的进行了深入研究。

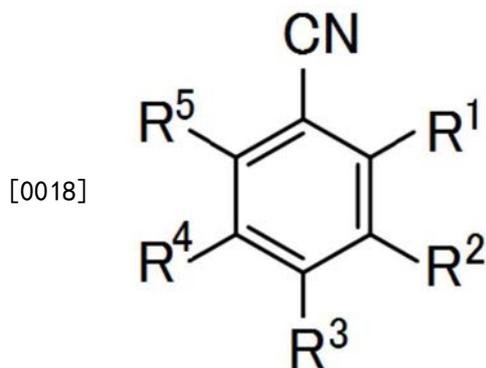
[0013] 用于解决技术课题的手段

[0014] 本发明人等为了达到上述目的而进行了深入研究的结果,发现为经供体基团取代的二氰基苯衍生物且进一步经特定的芳基取代的化合物作为发光元件用的材料有用。本发明基于这种见解而被提出,具体而言,具有以下结构。

[0015] [1]一种发光材料,其由下述通式(1)所表示的化合物组成。

[0016] [化学式2]

[0017] 通式(1)



[0019] [通式(1)中,

[0020] $R^1 \sim R^5$ 分别独立地表示氢原子或取代基,

[0021] $R^1 \sim R^5$ 中的1个表示氰基,

[0022] $R^1 \sim R^5$ 中的1~3个表示可以经烷基或芳基取代的芳基Ar(但是,构成后者芳基的苯环中可以稠合有除了碳原子以外还可以包含氧原子或硫原子作为环骨架构成原子的环,但不会存在稠合有包含除了氧原子及硫原子以外的杂原子作为环骨架构成原子的环的情况), $R^1 \sim R^5$ 中的2个以上为Ar时,这些Ar可以彼此相同也可以不同,

[0023] $R^1 \sim R^5$ 中的1~3个表示供体基团D(但是,相当于Ar的基团除外), $R^1 \sim R^5$ 中的2个以上为D时,这些D可以彼此相同也可以不同。]

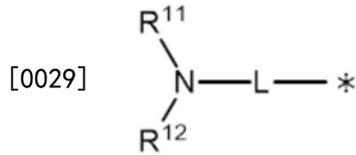
[0024] [2]根据[1]所述的发光材料,其中, $R^1 \sim R^5$ 分别独立地为氰基、Ar或D。

[0025] [3]根据[1]或[2]所述的发光材料,其中,D包含取代氨基。

[0026] [4]根据[3]所述的发光材料,其中,D为下述通式(2a)所表示的基团。

[0027] [化学式3]

[0028] 通式(2a)

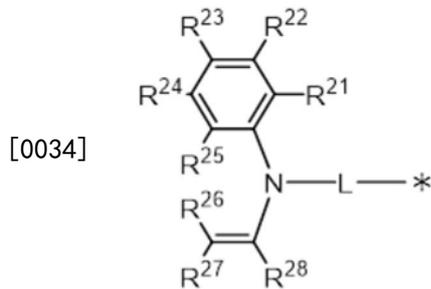


[0030] [通式 (2a) 中, R^{11} 和 R^{12} 分别独立地表示经取代或未经取代的烷基、经取代或未经取代的烯基、经取代或未经取代的芳基或者经取代或未经取代的杂芳基。L 表示单键、经取代或未经取代的亚芳基或者经取代或未经取代的杂亚芳基, * 表示与通式 (1) 中的构成苯环的环骨架的碳原子 (C) 的键结位置。 R^{11} 和 R^{12} 可以彼此键结而形成环状结构。]

[0031] [5] 根据 [3] 所述的发光材料, 其中, D 为下述通式 (2b) 所表示的基团。

[0032] [化学式 4]

[0033] 通式 (2b)

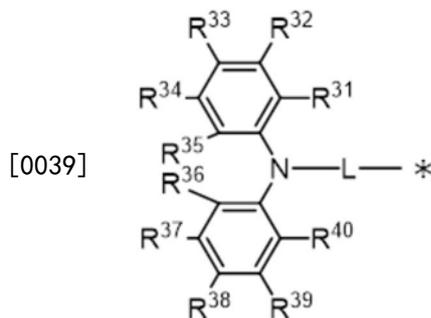


[0035] [通式 (2b) 中, $R^{21} \sim R^{28}$ 分别独立地表示氢原子或取代基。L 表示单键、经取代或未经取代的亚芳基或者经取代或未经取代的杂亚芳基, R^{21} 和 R^{22} 、 R^{22} 和 R^{23} 、 R^{23} 和 R^{24} 、 R^{24} 和 R^{25} 、 R^{26} 和 R^{27} 、 R^{27} 和 R^{28} 可以彼此键结而形成为了形成环状结构所需的连接基团。并且, R^{25} 和 R^{26} 可以彼此键结而形成单键或连接基团。]

[0036] [6] 根据 [3] 所述的发光材料, 其中, D 为下述通式 (2c) 所表示的基团。

[0037] [化学式 5]

[0038] 通式 (2c)



[0040] [通式 (2c) 中, $R^{31} \sim R^{40}$ 分别独立地表示氢原子或取代基。L 表示单键、经取代或未经取代的亚芳基或者经取代或未经取代的杂亚芳基, R^{31} 和 R^{32} 、 R^{32} 和 R^{33} 、 R^{33} 和 R^{34} 、 R^{34} 和 R^{35} 、 R^{36} 和 R^{37} 、 R^{37} 和 R^{38} 、 R^{38} 和 R^{39} 、 R^{39} 和 R^{40} 可以彼此键结而形成为了形成环状结构所需的连接基团。并且, R^{35} 和 R^{36} 可以彼此键结而形成单键或连接基团。* 表示与通式 (1) 中的构成苯环的环骨架的碳原子 (C) 的键结位置。]

[0041] [7] 根据 [4] ~ [6] 中任一项所述的发光材料, 其中, L 为单键。

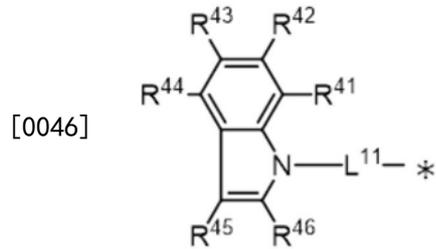
[0042] [8] 根据 [4] ~ [6] 中任一项所述的发光材料, 其中, R^3 为氰基, 且 L 为经取代或未经

取代的亚苯基。

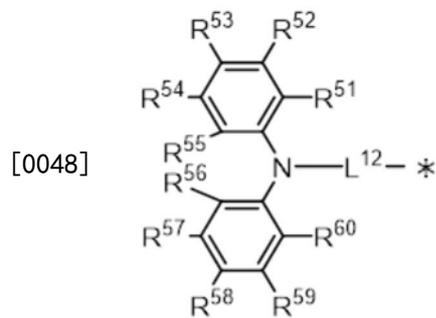
[0043] [9]根据[4]~[8]中任一项所述的发光材料,其中,D为下述通式(3)~(6)中的一个所表示的基团。

[0044] [化学式6]

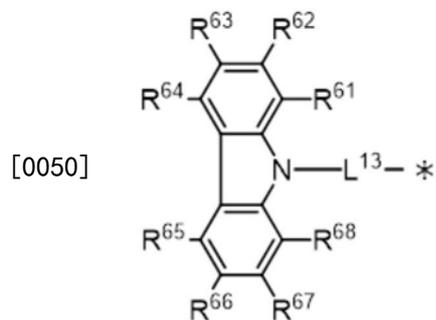
[0045] 通式(3)



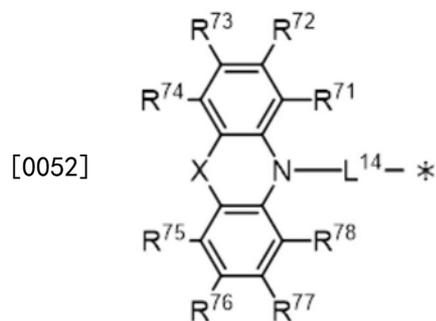
[0047] 通式(4)



[0049] 通式(5)



[0051] 通式(6)



[0053] [通式(3)~(6)中,R⁴¹~R⁴⁶、R⁵¹~R⁶⁰、R⁶¹~R⁶⁸、R⁷¹~R⁷⁸分别独立地表示氢原子或取代基。L¹¹~L¹⁴表示单键、经取代或未经取代的亚芳基或者经取代或未经取代的杂亚芳基。通式(6)中的X表示连接链长度为1原子的2价的氧原子、硫原子、经取代或未经取代的氮原子、经取代或未经取代的碳原子、经取代或未经取代的硅原子、羰基、或者键结链长度为2

原子的2价的经取代或未经取代的乙烯基、经取代或未经取代的亚乙烯基、经取代或未经取代的邻亚芳基或者经取代或未经取代的邻杂亚芳基。]

[0054] [10]一种化合物,其由下述通式(1)表示。

[0055] [11]一种延迟荧光体,其由上述通式(1)所表示的化合物组成。

[0056] [12]一种发光元件,其特征在于,包含上述通式(1)所表示的化合物。

[0057] [13]根据[12]所述的发光元件,其发射延迟荧光。

[0058] [14]根据[12]或[13]所述的发光元件,其中,所述发光元件具有发光层,所述发光层包含所述化合物和主体材料。

[0059] [15]根据[12]~[14]中任一项所述的发光元件,其中,所述发光元件具有发光层,所述发光层包含所述化合物和发光材料。

[0060] 发明效果

[0061] 本发明的化合物作为发光材料而有用。并且,本发明的化合物中还包含能够发射延迟荧光且能够将其激发三重态能量有效利用于发光的化合物。因此,将本发明的化合物用作发光材料的有机发光元件能够实现较高的发光效率。

附图说明

[0062] 图1是表示有机电致发光元件的层结构例的概略剖视图。

[0063] 图2是实施例1的发明化合物6-1的荧光光谱和磷光光谱。

[0064] 图3是仅由实施例1的发明化合物6-1组成的薄膜的瞬态衰减曲线。

[0065] 图4是实施例2的发明化合物6-1的掺杂薄膜的瞬态衰减曲线。

[0066] 图5是比较例2的比较化合物6-1的掺杂薄膜的瞬态衰减曲线。

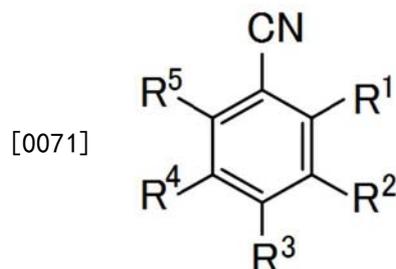
具体实施方式

[0067] 以下对本发明的内容进行详细地说明。关于以下所记载的构成要件的说明是基于本发明的代表性的实施方式或具体例来进行的,但本发明并不受这种实施方式或具体例的限定。另外,在本说明书中,使用“~”所表示的数值范围是指包含“~”的前后所记载的数值作为下限值及上限值的范围。并且,在本发明中所使用的化合物的分子内存在的氢原子的同位体种类并无特别限定,例如分子内的氢原子可以全部为 ^1H ,也可以一部分或全部为 ^2H (氘(deuterium)D)。并且,将日本专利申请2018-114758的记载事项、尤其是本申请说明书的表1~5作为本说明书的一部分而引用于此。

[0068] [通式(1)所表示的化合物]

[0069] [化学式7]

[0070] 通式(1)



[0072] 通式(1)的 $R^1\sim R^5$ 分别独立地表示氢原子或取代基。

[0073] $R^1\sim R^5$ 中的仅1个表示氰基。表示氰基的基团可以为 R^1 、 R^2 或 R^3 。

[0074] 通式(1)的 $R^1\sim R^5$ 中的1~3个表示可以经烷基或芳基取代的芳基Ar。 $R^1\sim R^5$ 中为芳基Ar的基团可以为1~3个中的任一个数,但优选为1个或2个。具有Ar的键结键的苯环可以为单环也可以为稠环的一部分。在苯环中进一步稠合有环的情况下,其稠合的环可以为仅由碳原子组成环骨架构成原子的环,也可以为包含氧原子或硫原子作为环骨架构成原子的环。但是,在苯环中进一步稠合有环时,不会存在其稠合的环为包含除了氧原子及硫原子以外的杂原子作为环骨架构成原子的环的情况。作为在具有Ar的键结键的苯环中能够进一步稠合的环的例,能够举出苯环、呋喃环、噻吩环、环戊烯环、环戊二烯环、环己烯环、环己二烯环、环庚烯环、环庚二烯环、环庚三烯环。在具有Ar的键结键的苯环中可以稠合有一个环,也可以稠合有两个以上的环。并且,在与具有Ar的键结键的苯环稠合的环中可以进一步稠合有环。如此稠合有多个环的情况下,其稠合的环为仅由碳原子组成环骨架构成原子的环,或者为包含氧原子或硫原子作为环骨架构成原子的环。并且,稠合有两个以上的环时,这两个以上的环可以彼此相同也可以不同。

[0075] 具有Ar的键结键的苯环或包含其苯环作为一部分的稠环可以经烷基及芳基中的至少一个取代基取代。在此所言的取代基是指能够取代为氢原子的1价的基团,并不是包含稠合的基团的概念。

[0076] 作为在此所言的取代基的“烷基”可以为直链状、支链状及环状中的任一种。并且,可以混合直链部分、环状部分及支链部分中的2种以上。烷基的碳原子数例如能够设为1以上、2以上、4以上。并且,碳原子数能够设为30以下、20以下、10以下、6以下、4以下。作为烷基的具体例,能够举出甲基、乙基、正丙基、异丙基、正丁基、异丁基、叔丁基、正戊基、异戊基、正己基、异己基、2-乙基己基、正庚基、异庚基、正辛基、异辛基、正壬基、异壬基、正癸基、异十二烷基、环戊基、环己基、环庚基。作为取代基的烷基可以进一步经芳基取代。

[0077] 作为在此所言的取代基的“芳基”可以为仅由一个芳烃环组成的基团,也可以为在芳烃环中稠合一个以上的环而成的基团。为在芳烃环中稠合一个以上的环而成的基团的情况下,能够采用在芳烃环中稠合有芳烃环、脂肪族烃环及非芳香族杂环中的1以上的基团。芳基的碳原子数例如能够设为6以上、10以上。并且,碳原子数能够设为30以下、18以下、14以下、10以下。作为芳基的具体例,能够举出苯基、1-萘基、2-萘基、1-蒎基、2-蒎基、9-蒎基。作为取代基的芳基可以进一步经烷基和芳基取代。

[0078] 具有Ar的键结键的苯环具有取代基时,其取代基的取代位置优选为3~5位中的任一个。例如,能够优选地例示出在3位、4位、3位和5位、3位和4位和5位中具有取代基的情况。

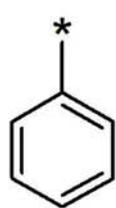
[0079] Ar所表示的基团的总碳原子数优选为6~50,更优选为6~30,进一步优选为6~18,更进一步优选为6~12。

[0080] 作为Ar的优选组,能够举出苯基、经烷基取代的苯基、经苯基取代的苯基、经烷基和苯基取代的苯基、萘基、经烷基取代的萘基、经苯基取代的萘基、经烷基和苯基取代的萘基、二苯并呋喃基、经烷基取代的二苯并呋喃基、经烷基和苯基取代的二苯并呋喃基、二苯并噻吩基、经烷基取代的二苯并噻吩基、经烷基和苯基取代的二苯并噻吩基、苋基、经烷基取代的苋基、经苯基取代的苋基、经烷基和苯基取代的苋基。作为Ar的另一优选组,能够举出苯基、单烷基苯基、二烷基苯基、三烷基苯基、四烷基苯基、五烷基苯基、单苯基苯基、二苯

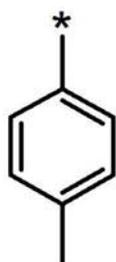
基苯基、萘基、单烷基萘基、二烷基萘基、三烷基萘基、四烷基萘基、五烷基萘基、单苯基萘基、二苯并呋喃基、单烷基二苯并呋喃基、二烷基二苯并呋喃基、三烷基二苯并呋喃基、四烷基二苯并呋喃基、五烷基二苯并呋喃基、单苯基二苯并呋喃基、二苯并噻吩基、单烷基二苯并噻吩基、二烷基二苯并噻吩基、三烷基二苯并噻吩基、四烷基二苯并噻吩基、五烷基二苯并噻吩基、单苯基烷基二苯并噻吩基、单烷基苄基、二烷基苄基、三烷基苄基、四烷基苄基、八烷基苄基、单苯基苄基、二苯基苄基、三苯基苄基、四苯基苄基。

[0081] 以下举出Ar所表示的基团的具体例,但能够用于本发明的Ar并不被这种具体例做限定性地解释。

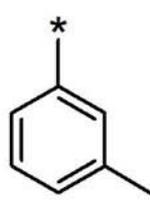
[0082] [化学式8-1]



Ar 1



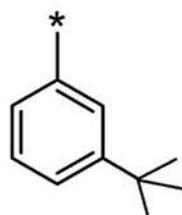
Ar 2



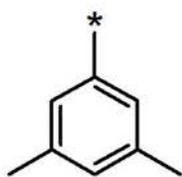
Ar 3



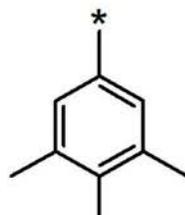
Ar 4



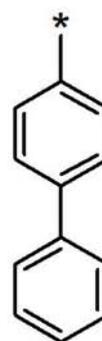
Ar 5



Ar 6

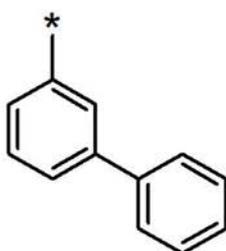


Ar 7

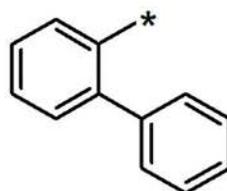


Ar 8

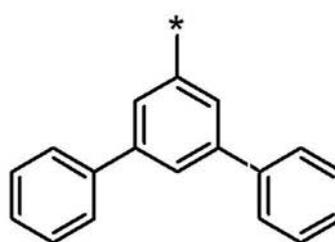
[0083]



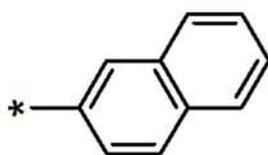
Ar 9



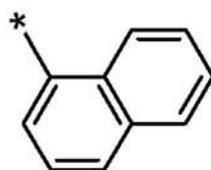
Ar 10



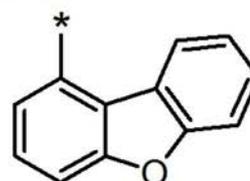
Ar 11



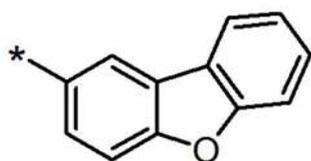
Ar 12



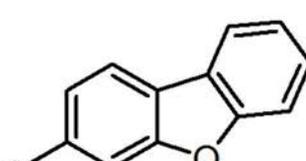
Ar 13



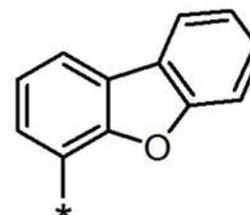
Ar 14



Ar 15

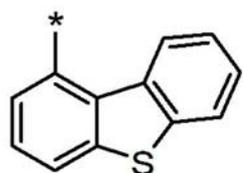


Ar 16

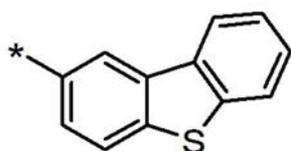


Ar 17

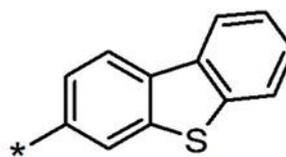
[0084] [化学式8-2]



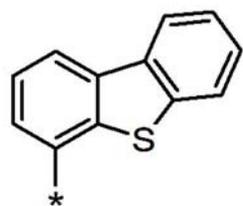
Ar 18



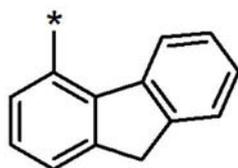
Ar 19



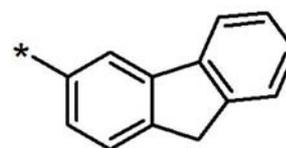
Ar 20



Ar 21

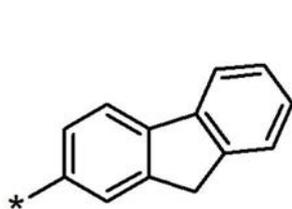


Ar 22

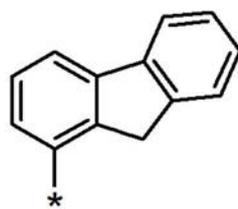


Ar 23

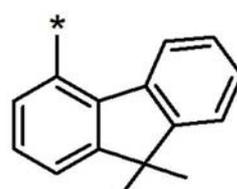
[0085]



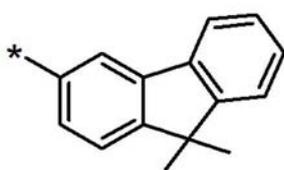
Ar 24



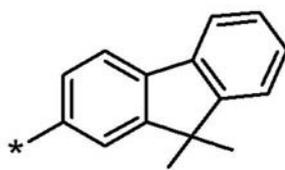
Ar 25



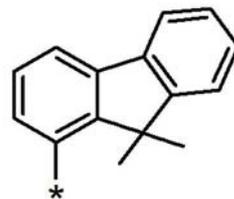
Ar 26



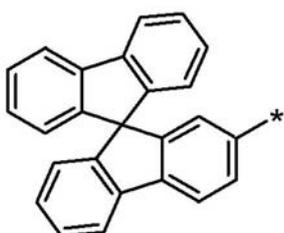
Ar 27



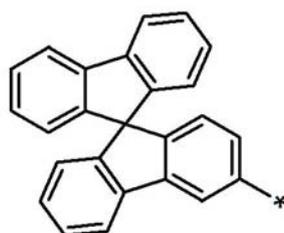
Ar 28



Ar 29

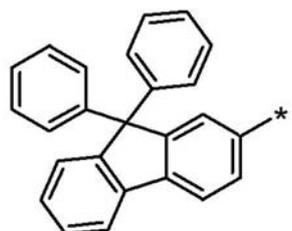


Ar 30

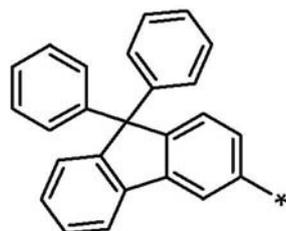


Ar 31

[0086]



Ar 32



Ar 33

[0087] 通式(1)中的 $R^1 \sim R^5$ 中的1~3个表示供体基团D。但是,供体基团D中并不包含相当

于上述Ar的基团。

[0088] 本说明书中的“供体基团”是哈密特 (Hammett) 的 σ_p 值为负的基团。在此,“哈密特的 σ_p 值”是由L.P.Hammett所提出,使取代基对对位取代苯衍生物的反应速度或平衡带来的影响定量化。具体而言,为对位取代苯衍生物中的取代基与反应速度常数或平衡常数之间成立的下述式:

$$[0089] \quad \log(k/k_0) = \rho\sigma_p$$

[0090] 或

[0091] $\log(k/k_0) = \rho\sigma_p$ 的取代基所特有的常数(σ_p)。在上式中,k表示不具有取代基的苯衍生物的速度常数, k_0 表示经取代基取代的苯衍生物的速度常数,K表示不具有取代基的苯衍生物的平衡常数, k_0 表示经取代基取代的苯衍生物的平衡常数, ρ 表示由反应的种类及条件所决定的反应常数。关于与本发明中的“哈密特的 σ_p 值”相关的说明及各取代基的数值,能够参考与Hansch,C.et.al.,Chem.Rev.,91,165-195(1991)的 σ_p 值相关的记载。存在如下趋势:哈密特的 σ_p 值为负的基团显出供电子性(供体性),哈密特的 σ_p 值为正的基团显出拉电子性(受体性)。

[0092] 通式(1)中的D优选为包含取代氨基的基团。与氨基的氮原子键结的取代基优选为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芳基或者经取代或未经取代的杂芳基,更优选为经取代或未经取代的芳基或者经取代或未经取代的杂芳基。尤其,优选为经取代或未经取代的二芳基氨基或者经取代或未经取代的二杂芳基氨基。通式(1)中的D可以为经取代氨基的氮原子键结的基团,也可以为经键结有取代氨基的基团键结的基团。键结有取代氨基的基团优选为 π 共轭基团。

[0093] 关于作为在此所言的取代基的“烷基”,能够参考作为通式(1)中Ar的取代基的烷基所对应的记载。

[0094] 作为在此所言的取代基的“烯基”可以为直链状、支链状及环状中的任一种。并且,可以混合直链部分、环状部分及支链部分中的2种以上。烯基的碳原子数例如能够设为2以上、4以上。并且,碳原子数能够设为30以下、20以下、10以下、6以下、4以下。作为烯基的具体例,能够举出乙烯基、正丙烯基、异丙烯基、正丁烯基、异丁烯基、正戊烯基、异戊烯基、正己烯基、异己烯基、2-乙基己烯基。作为取代基的烯基可以进一步经取代基取代。

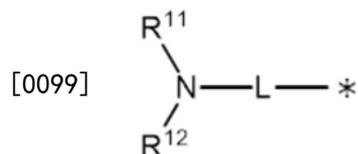
[0095] 作为在此所言的取代基的“芳基”及“杂芳基”可以为单环,也可以为两个以上的环稠合而成的稠环。为稠环的情况下,稠合的环的个数优选为2~6,例如能够从2~4中选择。作为环的具体例,能够举出苯环、吡啶环、嘧啶环、三嗪环、萘环、蒽环、菲环、三亚苯环、喹啉环、吡嗪环、喹啉环、萘啶环。作为亚芳基或杂亚芳基的具体例,能够举出苯基、1-萘基、2-萘基、1-蒽基、2-蒽基、9-蒽基、2-吡啶基、3-吡啶基、4-吡啶基。亚芳基或杂亚芳基可以具有取代基,也可以未经取代。具有两个以上的取代基的情况下,多个取代基可以彼此相同也可以不同。作为取代基,可举出羟基、卤素原子、碳原子数1~20的烷基、碳原子数1~20的烷氧基、碳原子数1~20的烷硫基、碳原子数1~20的烷基取代氨基、碳原子数1~26的芳基取代氨基、碳原子数6~40的芳基、碳原子数3~40的杂芳基、碳原子数2~10的烯基、碳原子数2~10的炔基、碳原子数2~20的烷酰胺基、碳原子数7~21的芳酰胺基、碳原子数3~20的三烷基甲硅烷基等。这种的具体例中能够进一步经取代基取代的基团可以经取代。更优选的取代基为碳原子数1~20的烷基、碳原子数1~20的烷氧基、碳原子数1~20的烷硫基、碳原

子数1~26的烷基取代氨基、碳原子数1~20的芳基取代氨基、碳原子数6~40的芳基、碳原子数3~40的杂芳基。

[0096] 作为通式(1)中的供体基团D,例如优选为下述的通式(2a)所表示的基团。

[0097] [化学式9]

[0098] 通式(2a)



[0100] 通式(2a)中, R^{11} 和 R^{12} 分别独立地表示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芳基或者经取代或未经取代的杂芳基。 R^{11} 和 R^{12} 可以彼此键结而形成环状结构。L表示单键、经取代或未经取代的亚芳基或者经取代或未经取代的杂亚芳基。能够导入到L的亚芳基或杂亚芳基中的取代基可以为通式(1)所表示的基团,也可以为后述的通式(2a)、(2b)、(2c)、(3)~(6)所表示的基团。这种(1)~(6)所表示的基团可以导入到L,直至能够导入的取代基的最大个数。并且,导入有多个通式(1)~(6)所表示的基团的情况下,这些取代基可以彼此相同也可以不同。*表示与通式(1)中的构成苯环的环骨架的碳原子(C)的键结位置。

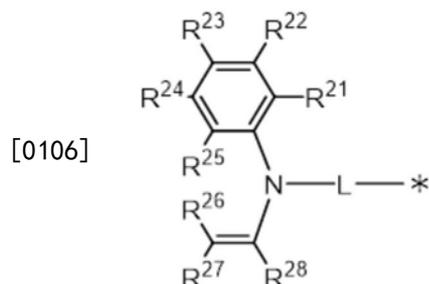
[0101] 通式(2a)中的 R^{11} 和 R^{12} 可以通过彼此键结而与通式(2a)的氮原子一同形成环状结构。

[0102] 关于 R^{11} 和 R^{12} 所表示的芳基或杂芳基,能够参考作为与氨基的氮原子键结的取代基的芳基和杂芳基的说明。

[0103] 通式(2a)所表示的取代基优选为下述的通式(2b)所表示的取代基。

[0104] [化学式10]

[0105] 通式(2b)



[0107] 通式(2b)中, R^{21} ~ R^{28} 分别独立地表示氢原子或取代基。L表示单键、经取代或未经取代的亚芳基或者经取代或未经取代的杂亚芳基, R^{21} 和 R^{22} 、 R^{22} 和 R^{23} 、 R^{23} 和 R^{24} 、 R^{24} 和 R^{25} 、 R^{26} 和 R^{27} 、 R^{27} 和 R^{28} 可以彼此键结而形成为形成环状结构所需的连接基团。并且, R^{25} 和 R^{26} 可以彼此键结而形成单键或连接基团。例如, R^{25} 和 R^{26} 通过彼此键结而形成单键来使通式(2b)所表示的化合物包含咪唑环。*表示与通式(1)中的构成苯环的环骨架的碳原子(C)的键结位置。关于 R^{21} ~ R^{28} 能够采用的取代基的具体例和优选范围,能够参考作为通式(1)中Ar的取代基的亚芳基或杂亚芳基的记载。

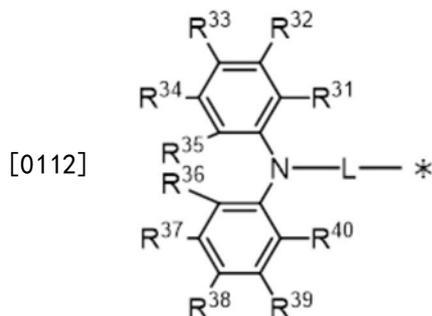
[0108] R^{21} 和 R^{22} 、 R^{22} 和 R^{23} 、 R^{23} 和 R^{24} 、 R^{24} 和 R^{25} 、 R^{25} 和 R^{26} 、 R^{26} 和 R^{27} 、 R^{27} 和 R^{28} 彼此键结而形成的环状结构可以为芳香环也可以为脂肪环,还可以为包含杂原子的结构,而且,环状结构可以

为包含2环以上的稠环。作为在此所言的杂原子优选为选自包括氮原子、氧原子及硫原子的组中的原子。作为所形成的环状结构的例,能够举出苯环、萘环、吡啶环、哒嗪环、嘧啶环、吡嗪环、吡咯环、咪唑环、吡唑环、咪唑啉环、噁唑环、异噁唑环、噻唑环、异噻唑环、环己二烯环、环己烯环、环戊烯环、环庚三烯环、环庚二烯环、环庚烯环、呋喃环、噻吩环、萘啶环、喹啉环、喹啉环等。

[0109] 通式(2a)所表示的取代基优选为以下通式(2c)所表示的取代基。

[0110] [化学式11]

[0111] 通式(2c)



[0113] 通式(2c)中, $R^{31} \sim R^{40}$ 分别独立地表示氢原子或取代基。 L 表示单键、经取代或未经取代的亚芳基或者经取代或未经取代的杂亚芳基, R^{31} 和 R^{32} 、 R^{32} 和 R^{33} 、 R^{33} 和 R^{34} 、 R^{34} 和 R^{35} 、 R^{35} 和 R^{36} 和 R^{37} 、 R^{37} 和 R^{38} 、 R^{38} 和 R^{39} 、 R^{39} 和 R^{40} 可以彼此键结而形成为了形成环状结构所需的连接基团。并且, R^{35} 和 R^{36} 可以彼此键结而形成单键或连接基团。 $*$ 表示与通式(1)中的构成苯环的环骨架的碳原子(C)的键结位置。关于 $R^{31} \sim R^{40}$ 能够采用的取代基的具体例和优选范围,能够参考作为通式(1)中Ar的取代基的亚芳基或杂亚芳基的记载。

[0114] 关于 R^{31} 和 R^{32} 、 R^{32} 和 R^{33} 、 R^{33} 和 R^{34} 、 R^{34} 和 R^{35} 、 R^{35} 和 R^{36} 、 R^{36} 和 R^{37} 、 R^{37} 和 R^{38} 、 R^{38} 和 R^{39} 、 R^{39} 和 R^{40} 彼此键结而形成的环状结构,能够参考与通式(2a)中的 R^{21} 和 R^{22} 所形成的环状结构相对应的记载。

[0115] 通式(2a)~(2c)中, L 表示单键、经取代或未经取代的亚芳基或者经取代或未经取代的杂亚芳基。 L 优选为单键或者经取代或未经取代的亚芳基。

[0116] 构成 L 所表示的亚芳基的芳香环可以为单环,也可以为2个以上的芳香环稠合而成的稠环,还可以为2个以上的芳香环连接而成的连接环。连接2个以上的芳香环的情况下,可以连接成直链状,也可以连接成支链状。构成 L 所表示的亚芳基的芳香环的碳原子数优选为6~22,更优选为6~18,进一步优选为6~14,更进一步优选为6~10。作为亚芳基的具体例,能够举出亚苯基、萘二基、亚联苯基。

[0117] 并且,构成 L 所表示的杂亚芳基的杂环可以为单环,也可以为1个以上的杂环和芳香环或杂环稠合而成的稠环,还可以为1个以上的杂环和芳香环或杂环连接而成的连接环。杂环的碳原子数优选为5~22,更优选为5~18,进一步优选为5~14,更进一步优选为5~10。构成杂环的杂原子优选为氮原子。作为杂环的具体例,能够举出吡啶环、哒嗪环、嘧啶环、三唑环、苯并三唑环。

[0118] L 所表示的更优选的基团为亚苯基。 L 为亚苯基时,亚苯基可以为1,2-亚苯基、1,3-亚苯基、1,4-亚苯基中的任一个,但优选为1,4-亚苯基。并且, L 可以经取代基取代。 L 的取代基的个数及取代位置并无特别限制。关于能够导入到 L 的取代基的说明和优选范围,能够参

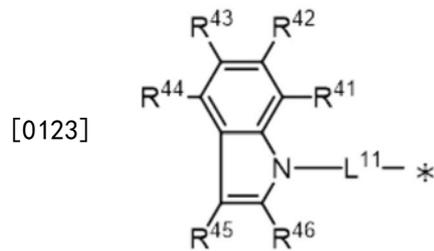
考上述 R^{11} 和 R^{12} 能够采用的取代基的说明和优选范围。并且,能够导入到L的亚芳基或杂亚芳基的取代基可以为通式(1)、(2a)、(2b)、(2c)所表示的基团,也可以为后述的通式(3)~(6)所表示的基团。这种(1)~(6)所表示的基团可以导入到L,直至能够导入的取代基的最大个数。并且,导入有多个通式(1)~(6)所表示的基团的情况下,这些取代基可以彼此相同也可以不同。

[0119] L具有取代基的情况下,其取代基可以与(2a)中的 R^{11} 及 R^{12} 、(2b)中的 R^{21} 及 R^{28} 、(2c)中的 R^{31} 及 R^{40} 形成环状结构。

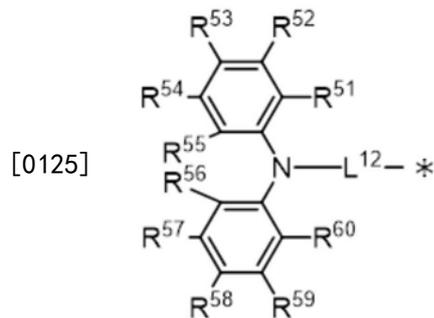
[0120] 通式(2a)~(2c)所表示的取代基优选为下述通式(3)~(6)中的任一个通式所表示的取代基,其中优选为通式(3)~(5)所表示的基团,更优选为通式(5)所表示的基团。

[0121] [化学式12]

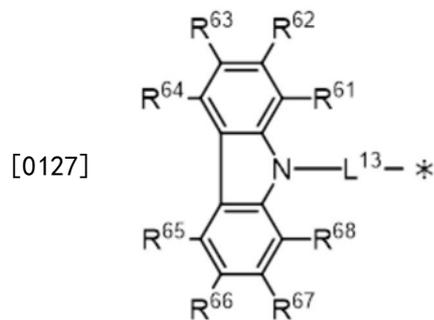
[0122] 通式(3)



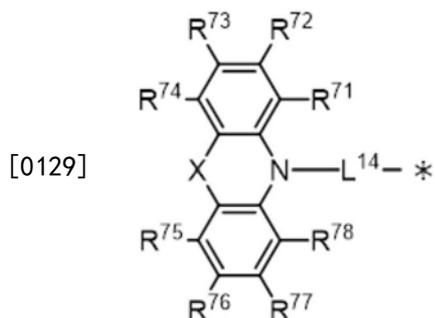
[0124] 通式(4)



[0126] 通式(5)



[0128] 通式(6)



[0130] 通式(3)~(6)中, $R^{41}\sim R^{46}$ 、 $R^{51}\sim R^{60}$ 、 $R^{61}\sim R^{68}$ 、 $R^{71}\sim R^{78}$ 分别独立地表示氢原子或取代基。关于在此所言的取代基的说明和优选范围,能够参考作为上述通式(1)中Ar的取代基的亚芳基或杂亚芳基的记载。优选 $R^{41}\sim R^{46}$ 、 $R^{51}\sim R^{60}$ 、 $R^{61}\sim R^{68}$ 、 $R^{71}\sim R^{78}$ 分别独立地为上述通式(3)~(6)中的任一个所表示的基团。通式(3)~(6)中的取代基的个数并无特别限制。也优选均为未经取代(即,氢原子)的情况。并且,在通式(3)~(6)的各自中存在两个以上取代基的情况下,这种取代基可以相同也可以不同。通式(3)~(6)中存在取代基的情况下,若为在通式(3)中,则其取代基优选为 $R^{42}\sim R^{46}$ 中的任一个,更优选为 R^{45} 及 R^{46} 中的至少一个。若为在通式(4)中,则优选为 $R^{52}\sim R^{59}$ 中的任一个,若为在通式(5)中,则优选为 $R^{62}\sim R^{67}$ 中的任一个,若为在通式(6)中,则优选为 $R^{72}\sim R^{77}$ 中的任一个。

[0131] 通式(3)~(6)中, R^{41} 和 R^{42} 、 R^{42} 和 R^{43} 、 R^{43} 和 R^{44} 、 R^{45} 和 R^{46} 、 R^{51} 和 R^{52} 、 R^{52} 和 R^{53} 、 R^{53} 和 R^{54} 、 R^{54} 和 R^{55} 、 R^{55} 和 R^{56} 、 R^{56} 和 R^{57} 、 R^{57} 和 R^{58} 、 R^{58} 和 R^{59} 、 R^{59} 和 R^{60} 、 R^{61} 和 R^{62} 、 R^{62} 和 R^{63} 、 R^{63} 和 R^{64} 、 R^{65} 和 R^{66} 、 R^{66} 和 R^{67} 、 R^{67} 和 R^{68} 、 R^{71} 和 R^{72} 、 R^{72} 和 R^{73} 、 R^{73} 和 R^{74} 、 R^{75} 和 R^{76} 、 R^{76} 和 R^{77} 、 R^{77} 和 R^{78} 可以彼此键结而形成环状结构。关于环状结构的说明和优选例,能够参考上述通式(2b)中的 R^{21} 和 R^{22} 等彼此键结而形成的环状结构的说明和优选例。

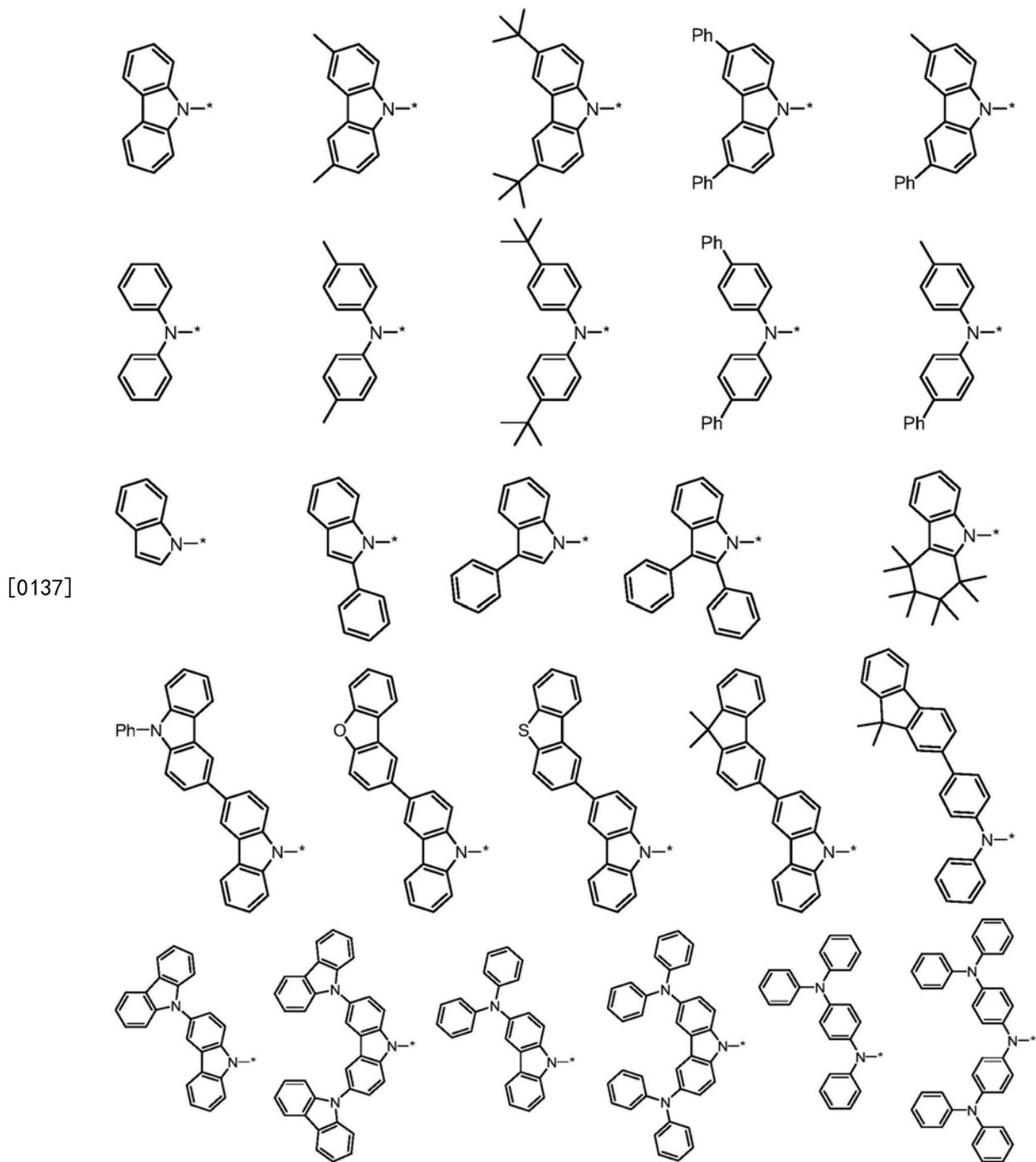
[0132] 通式(6)中X表示连接链长度为1原子的2价的氧原子、硫原子、经取代或未经取代的氮原子、经取代或未经取代的碳原子、经取代或未经取代的硅原子、羰基、或者键结链长度为2原子的2价的经取代或未经取代的乙烯基、经取代或未经取代的亚乙烯基、经取代或未经取代的邻亚芳基或者经取代或未经取代的邻杂亚芳基。关于取代基的具体例和优选范围,能够参考通式(2a)中的 R^{11} 所表示的亚芳基或杂亚芳基的取代基所对应的记载。

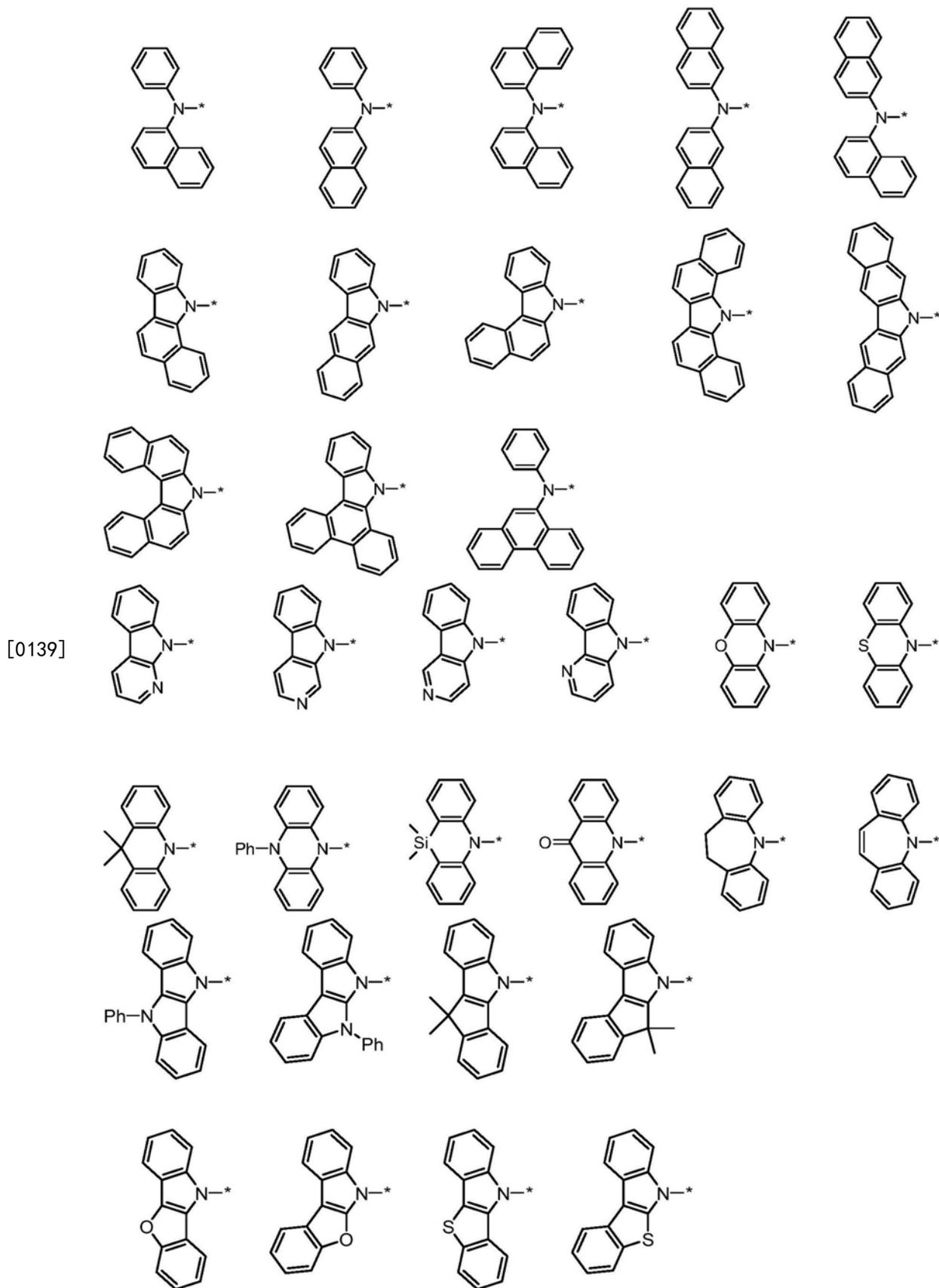
[0133] 通式(3)~(6)中, $L^{11}\sim L^{14}$ 表示单键、经取代或未经取代的亚芳基或者经取代或未经取代的杂亚芳基。在此所言的亚芳基和杂亚芳基的取代基可以为通式(1)~(6)所表示的基团。通式(1)~(6)所表示的基团可以导入到 $L^{11}\sim L^{14}$,直至能够导入的取代基的最大个数。并且,导入有多个通式(1)~(6)所表示的基团的情况下,这些取代基可以彼此相同也可以不同。

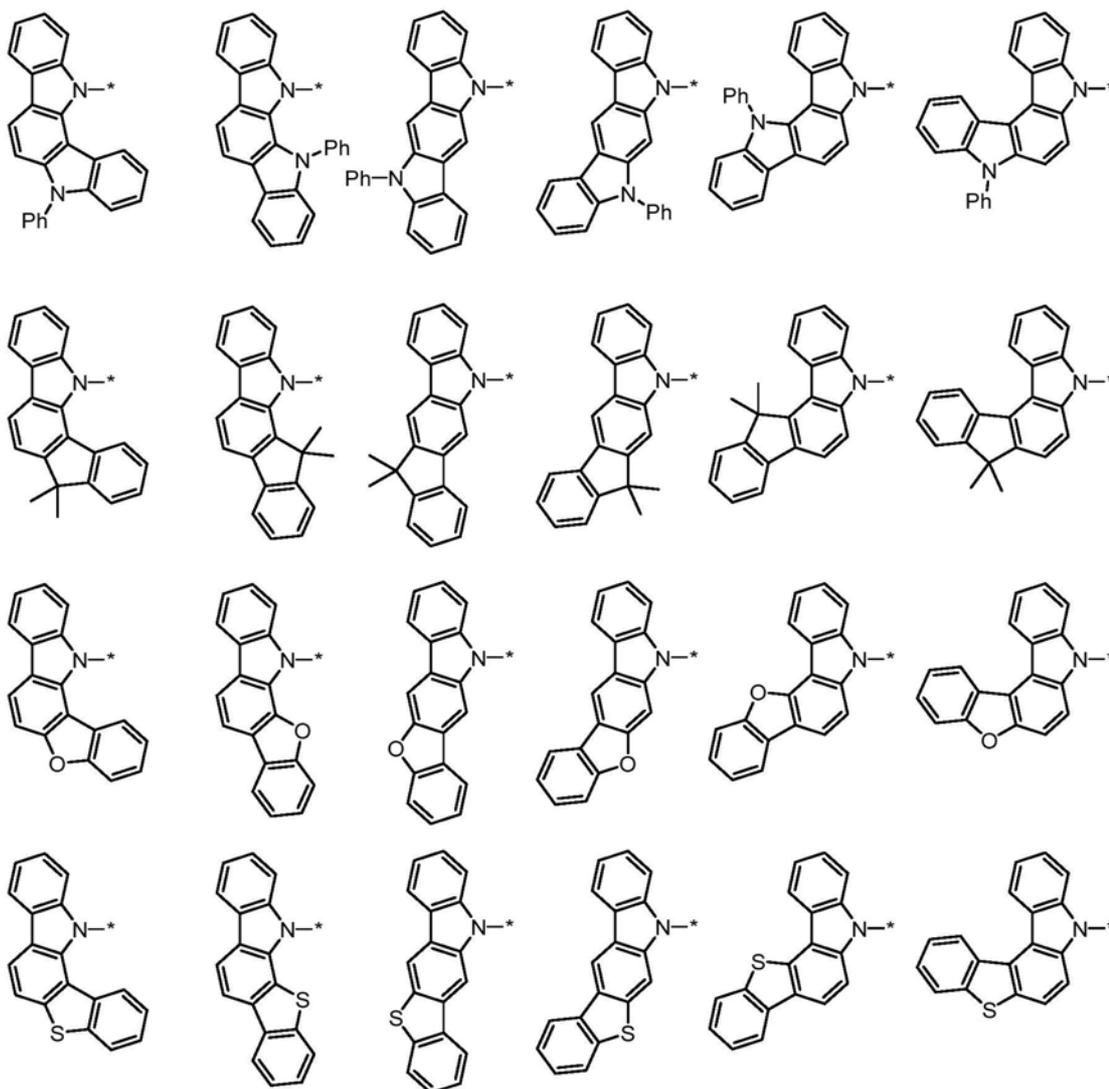
[0134] *表示与通式(1)中的构成苯环的环骨架的碳原子(C)的键结位置。关于 $L^{11}\sim L^{14}$ 所表示的亚芳基或杂亚芳基及能够导入到这种基团的取代基的说明和优选范围,能够参考L所表示的亚芳基或杂亚芳基及能够导入到这种基团的取代基的说明和优选范围。 $L^{11}\sim L^{14}$ 优选为单键、经取代或未经取代的亚芳基。

[0135] 以下举出取代氨基的具体例,但能够用于本发明的取代氨基并不被这种具体例做限定性地解释。*表示与通式(2a)~(2c)中的连接基团(L)的键结位置。

[0136] [化学式13-1]







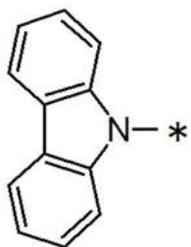
[0141]

[0142] 通式(1)的 $R^1 \sim R^5$ 中的两个以上为D时,这些多个D可以相同也可以不同。

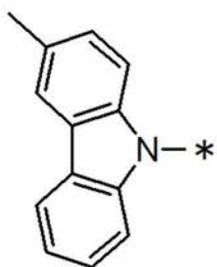
[0143] 不同时,两个D均具有芳香环,在两个D之间,该芳香环共通,但优选取代于该芳香环上的取代基的个数、芳香环的经取代基取代的位置及取代于芳香环上的取代基的结构中的至少一个条件彼此不同的情况。

[0144] 以下举出D所表示的基团的具体例,但能够用于本发明的D并不被这种具体例做限定性地解释。

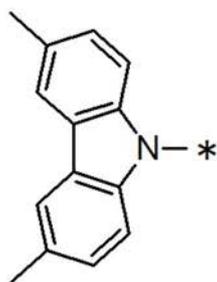
[0145] [化学式14-1]



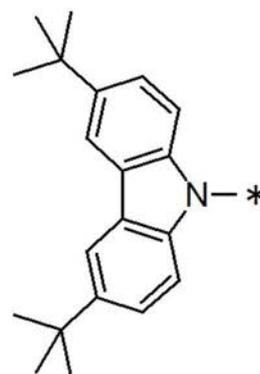
D1



D2

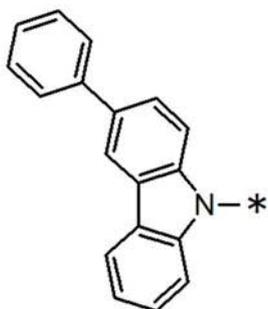


D3

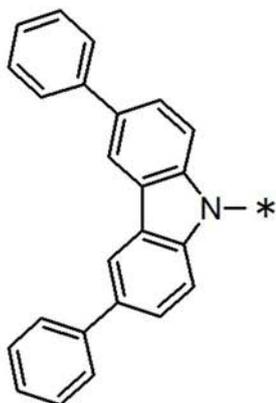


D4

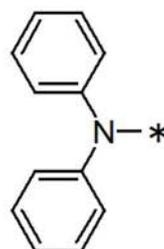
[0146]



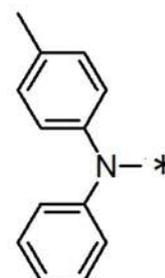
D5



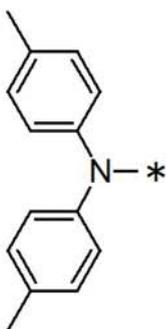
D6



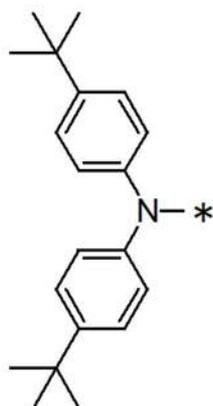
D7



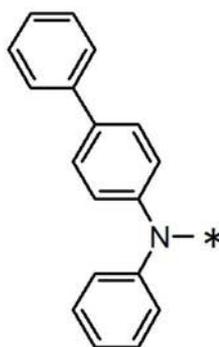
D8



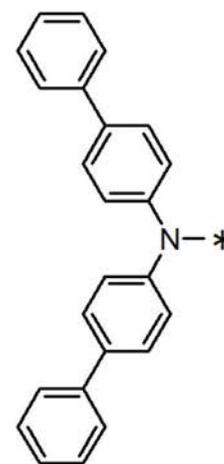
D9



D10

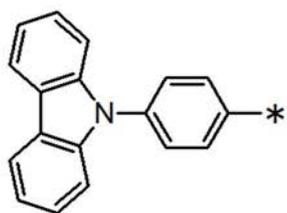


D11

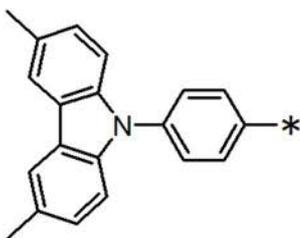


D12

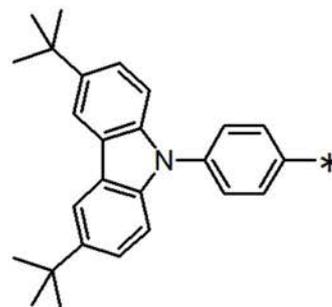
[0147] [化学式14-2]



D13

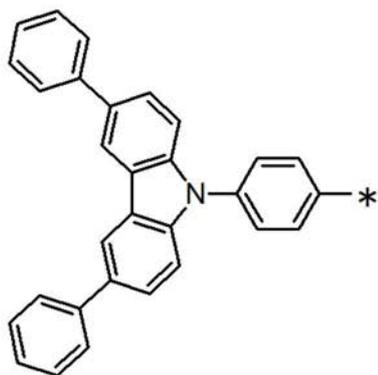


D14

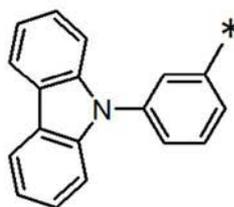


D15

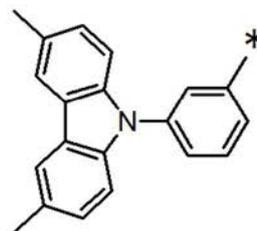
[0148]



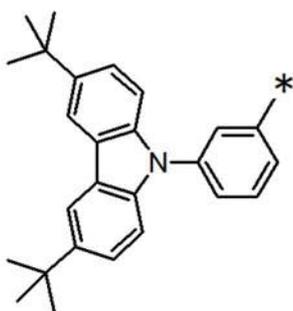
D16



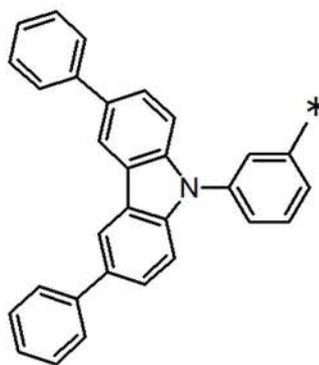
D17



D18

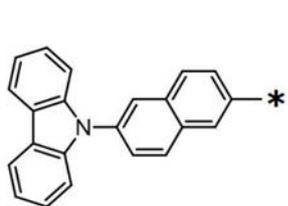


D19

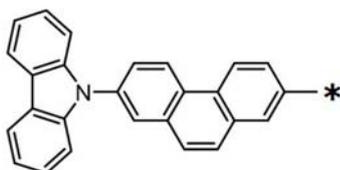


D20

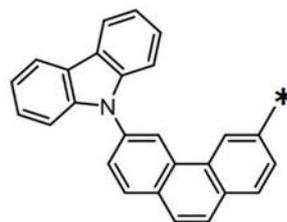
[0149] [化学式14-3]



D21

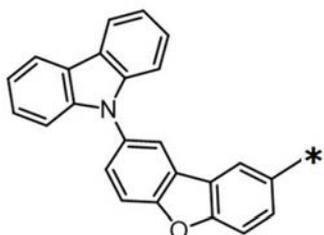


D22

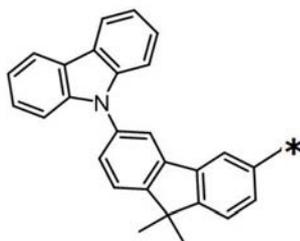


D23

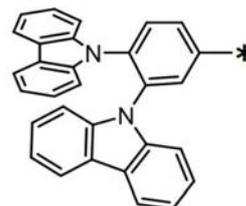
[0150]



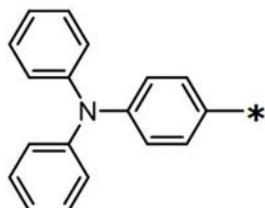
D24



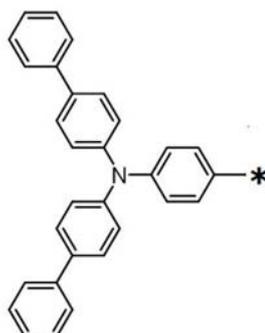
D25



D26



D27



D28

[0151] 通式(1)的 $R^1 \sim R^5$ 中的任一个为氰基、至少一个为Ar、至少一个为D。其余两个可以为氢原子、Ar或D或者除了Ar和D以外的取代基(但是氰基除外)。其余两个优选从氢原子、Ar及D中选择,更优选从Ar及D中选择。例如,能够将其余两个中的一个设为Ar且将另一个设为D。

[0152] 通式(1)可以为对称化合物,也可以为非对称化合物。

[0153] 通式(1)所表示的化合物的最低激发单重态能级(E_{S1})和最低激发三重态能级(E_{T1})的能量差 ΔE_{ST} 为将从该化合物除去Ar而得的参考化合物的 ΔE_{ST} 设为1时的相对值,0.9以下为良好,优选为0.8以下,更优选为0.7以下,进一步优选为0.6以下,更进一步优选为0.5以下,尤其优选为0.4以下。如此比参考化合物的 ΔE_{ST} 小的化合物存在如下趋势,在延迟荧光材料中,尤其容易引起从激发三重态向激发单重态的反向系间窜越,缩短延迟荧光的寿命。通过将延迟荧光寿命短的发光材料用于电致发光元件,缓和由高电流密度区域中的激子积累引起的发光效率的降低和由元件的长时间驱动引起的劣化,从而能够改善元件性能。

[0154] 化合物的 ΔE_{ST} 能够根据对其化合物进行测量而得的荧光光谱及磷光光谱来求出,

且也能够通过计算化学方法来计算。根据这种方法求出的 ΔE_{ST} 的相对值 (将参考化合物的 ΔE_{ST} 设为1时的相对值) 易吻合。关于根据荧光光谱及磷光光谱的 ΔE_{ST} 的算出方法及基于计算化学方法的 ΔE_{ST} 的算出方法, 能够参考实施例栏中的记载。

[0155] 通式 (1) 所表示的化合物在氰基苯系衍生物中的发光颜色的变化广。因此, 也能够向青色区域提供有用的化合物。

[0156] 以下举出通式 (1) 所表示的化合物的具体例。但是, 能够用于本发明的通式 (1) 所表示的化合物并不被下述具体例做限定性地解释。

[0157] [表1]

[0158]

No	R ¹	R ²	R ³	R ⁴	R ⁵
1	D1	D1	CN	D1	Ar1
2	D1	D1	CN	Ar1	Ar1
3	D1	Ar1	CN	D1	Ar1
4	Ar1	D1	CN	D1	Ar1
5	D1	Ar1	CN	Ar1	Ar1
6	D1	D1	CN	H	Ar1
7	D1	H	CN	D1	Ar1
8	D1	H	CN	Ar1	D1
9	D1	H	CN	Ar1	Ar1
10	D1	Ar1	CN	H	Ar1
11	D1	Ar1	CN	Ar1	H
12	D1	H	CN	H	Ar1
13	D1	H	CN	Ar1	H
14	D1	Ar1	CN	H	H
15	CN	D1	D1	D1	Ar1
16	CN	D1	D1	Ar1	D1
17	CN	D1	D1	Ar1	Ar1
18	CN	D1	Ar1	D1	Ar1
19	CN	Ar1	D1	D1	Ar1
20	CN	D1	Ar1	Ar1	Ar1
21	CN	Ar1	D1	Ar1	Ar1
22	CN	D1	H	Ar1	D1
23	CN	D1	H	D1	Ar1
24	CN	D1	Ar1	D1	H
25	CN	D1	D1	Ar1	H
26	CN	H	D1	D1	Ar1
27	CN	D1	H	Ar1	Ar1
28	CN	D1	Ar1	H	Ar1
29	CN	H	Ar1	D1	Ar1
30	CN	Ar1	D1	H	Ar1
31	CN	D1	Ar1	Ar1	H
32	CN	Ar1	D1	H	H
33	CN	Ar1	H	D1	H
34	CN	D1	H	Ar1	H
35	CN	H	D1	Ar1	H
36	CN	D1	H	H	Ar1
37	CN	D1	Ar1	Ar1	D1
38	D1	CN	D1	D1	Ar1
39	D1	CN	D1	Ar1	D1
40	Ar1	CN	D1	D1	D1
41	D1	CN	D1	Ar1	Ar1
42	D1	CN	Ar1	D1	Ar1
43	Ar1	CN	D1	D1	Ar1
44	Ar1	CN	D1	Ar1	D1

[0159] [表2]

No	R ¹	R ²	R ³	R ⁴	R ⁵
45	D1	CN	Ar1	Ar1	Ar1
46	Ar1	CN	D1	Ar1	Ar1
47	Ar1	CN	Ar1	D1	Ar1
48	D1	CN	D1	H	Ar1
49	D1	CN	H	D1	Ar1
50	H	CN	D1	D1	Ar1
51	Ar1	CN	D1	D1	H
52	H	CN	D1	Ar1	D1
53	Ar1	CN	D1	H	D1
54	Ar1	CN	Ar1	H	D1
55	Ar1	CN	H	Ar1	D1
56	H	CN	Ar1	Ar1	D1
57	D1	CN	Ar1	Ar1	H
58	H	CN	Ar1	D1	Ar1
59	D1	CN	Ar1	H	Ar1
60	H	CN	H	D1	Ar1
61	H	CN	D1	H	Ar1
62	D1	CN	H	H	Ar1
63	Ar1	CN	H	H	D1
64	D1	CN	H	Ar1	H
65	Ar1	CN	H	D1	H
66	D1	Ar2	CN	D1	Ar2
67	D1	Ar3	CN	D1	Ar3
68	D1	Ar4	CN	D1	Ar4
69	D1	Ar5	CN	D1	Ar5
70	D1	Ar6	CN	D1	Ar6
71	D1	Ar7	CN	D1	Ar7
72	D1	Ar8	CN	D1	Ar8
73	D1	Ar9	CN	D1	Ar9
74	D1	Ar10	CN	D1	Ar10
75	D1	Ar11	CN	D1	Ar11
76	D1	Ar12	CN	D1	Ar12
77	D1	Ar13	CN	D1	Ar13
78	D1	Ar14	CN	D1	Ar14
79	D1	Ar15	CN	D1	Ar15
80	D1	Ar16	CN	D1	Ar16
81	D1	Ar17	CN	D1	Ar17
82	D1	Ar18	CN	D1	Ar18
83	D1	Ar19	CN	D1	Ar19
84	D1	Ar20	CN	D1	Ar20
85	D1	Ar21	CN	D1	Ar21
86	D1	Ar22	CN	D1	Ar22
87	D1	Ar23	CN	D1	Ar23
88	D1	Ar24	CN	D1	Ar24

[0160]

No	R ¹	R ²	R ³	R ⁴	R ⁵
89	D1	Ar25	CN	D1	Ar25
90	D1	Ar26	CN	D1	Ar26
91	D1	Ar27	CN	D1	Ar27
92	D1	Ar28	CN	D1	Ar28
93	D1	Ar29	CN	D1	Ar29
94	D1	Ar30	CN	D1	Ar30
95	D1	Ar31	CN	D1	Ar31
96	D1	Ar32	CN	D1	Ar32
97	D1	Ar33	CN	D1	Ar33
98	D2	Ar1	CN	D2	Ar1
99	D3	Ar1	CN	D3	Ar1
100	D4	Ar1	CN	D4	Ar1
101	D5	Ar1	CN	D5	Ar1
102	D6	Ar1	CN	D6	Ar1
103	D7	Ar1	CN	D7	Ar1
104	D8	Ar1	CN	D8	Ar1
105	D9	Ar1	CN	D9	Ar1
106	D10	Ar1	CN	D10	Ar1
107	D11	Ar1	CN	D11	Ar1
108	D12	Ar1	CN	D12	Ar1
109	D13	Ar1	CN	D13	Ar1
110	D14	Ar1	CN	D14	Ar1
111	D15	Ar1	CN	D15	Ar1
112	D16	Ar1	CN	D16	Ar1
113	D17	Ar1	CN	D17	Ar1
114	D18	Ar1	CN	D18	Ar1
115	D19	Ar1	CN	D19	Ar1
116	D20	Ar1	CN	D20	Ar1
117	D21	Ar1	CN	D21	Ar1
118	D22	Ar1	CN	D22	Ar1
119	D23	Ar1	CN	D23	Ar1
120	D24	Ar1	CN	D24	Ar1
121	D25	Ar1	CN	D25	Ar1
122	D26	Ar1	CN	D26	Ar1
123	D27	Ar1	CN	D27	Ar1
124	D28	Ar1	CN	D28	Ar1
125	D1	CN	Ar2	D1	Ar2
126	D1	CN	Ar3	D1	Ar3
127	D1	CN	Ar4	D1	Ar4
128	D1	CN	Ar5	D1	Ar5
129	D1	CN	Ar6	D1	Ar6
130	D1	CN	Ar7	D1	Ar7
131	D1	CN	Ar8	D1	Ar8
132	D1	CN	Ar9	D1	Ar9

[0161] [表3]

No	R ¹	R ²	R ³	R ⁴	R ⁵
133	D1	CN	Ar10	D1	Ar10
134	D1	CN	Ar11	D1	Ar11
135	D1	CN	Ar12	D1	Ar12
136	D1	CN	Ar13	D1	Ar13
137	D1	CN	Ar14	D1	Ar14
138	D1	CN	Ar15	D1	Ar15
139	D1	CN	Ar16	D1	Ar16
140	D1	CN	Ar17	D1	Ar17
141	D1	CN	Ar18	D1	Ar18
142	D1	CN	Ar19	D1	Ar19
143	D1	CN	Ar20	D1	Ar20
144	D1	CN	Ar21	D1	Ar21
145	D1	CN	Ar22	D1	Ar22
146	D1	CN	Ar23	D1	Ar23
147	D1	CN	Ar24	D1	Ar24
148	D1	CN	Ar25	D1	Ar25
149	D1	CN	Ar26	D1	Ar26
150	D1	CN	Ar27	D1	Ar27
151	D1	CN	Ar28	D1	Ar28
152	D1	CN	Ar29	D1	Ar29
153	D1	CN	Ar30	D1	Ar30
154	D1	CN	Ar31	D1	Ar31
155	D1	CN	Ar32	D1	Ar32
156	D1	CN	Ar33	D1	Ar33
157	D2	CN	Ar1	D2	Ar1
158	D3	CN	Ar1	D3	Ar1
159	D4	CN	Ar1	D4	Ar1
160	D5	CN	Ar1	D5	Ar1
161	D6	CN	Ar1	D6	Ar1
162	D7	CN	Ar1	D7	Ar1
163	D8	CN	Ar1	D8	Ar1
164	D9	CN	Ar1	D9	Ar1
165	D10	CN	Ar1	D10	Ar1
166	D11	CN	Ar1	D11	Ar1
167	D12	CN	Ar1	D12	Ar1
168	D13	CN	Ar1	D13	Ar1
169	D14	CN	Ar1	D14	Ar1
170	D15	CN	Ar1	D15	Ar1
171	D16	CN	Ar1	D16	Ar1
172	D17	CN	Ar1	D17	Ar1
173	D18	CN	Ar1	D18	Ar1
174	D19	CN	Ar1	D19	Ar1
175	D20	CN	Ar1	D20	Ar1
176	D21	CN	Ar1	D21	Ar1

[0162]

No	R ¹	R ²	R ³	R ⁴	R ⁵
177	D22	CN	Ar1	D22	Ar1
178	D23	CN	Ar1	D23	Ar1
179	D24	CN	Ar1	D24	Ar1
180	D25	CN	Ar1	D25	Ar1
181	D26	CN	Ar1	D26	Ar1
182	D27	CN	Ar1	D27	Ar1
183	D28	CN	Ar1	D28	Ar1
184	Ar2	CN	D1	Ar2	D1
185	Ar3	CN	D1	Ar3	D1
186	Ar4	CN	D1	Ar4	D1
187	Ar5	CN	D1	Ar5	D1
188	Ar6	CN	D1	Ar6	D1
189	Ar7	CN	D1	Ar7	D1
190	Ar8	CN	D1	Ar8	D1
191	Ar9	CN	D1	Ar9	D1
192	Ar10	CN	D1	Ar10	D1
193	Ar11	CN	D1	Ar11	D1
194	Ar12	CN	D1	Ar12	D1
195	Ar13	CN	D1	Ar13	D1
196	Ar14	CN	D1	Ar14	D1
197	Ar15	CN	D1	Ar15	D1
198	Ar16	CN	D1	Ar16	D1
199	Ar17	CN	D1	Ar17	D1
200	Ar18	CN	D1	Ar18	D1
201	Ar19	CN	D1	Ar19	D1
202	Ar20	CN	D1	Ar20	D1
203	Ar21	CN	D1	Ar21	D1
204	Ar22	CN	D1	Ar22	D1
205	Ar23	CN	D1	Ar23	D1
206	Ar24	CN	D1	Ar24	D1
207	Ar25	CN	D1	Ar25	D1
208	Ar26	CN	D1	Ar26	D1
209	Ar27	CN	D1	Ar27	D1
210	Ar28	CN	D1	Ar28	D1
211	Ar29	CN	D1	Ar29	D1
212	Ar30	CN	D1	Ar30	D1
213	Ar31	CN	D1	Ar31	D1
214	Ar32	CN	D1	Ar32	D1
215	Ar33	CN	D1	Ar33	D1
216	Ar1	CN	D2	Ar1	D2
217	Ar1	CN	D3	Ar1	D3
218	Ar1	CN	D4	Ar1	D4
219	Ar1	CN	D5	Ar1	D5
220	Ar1	CN	D6	Ar1	D6

[0163] [表4]

No	R ¹	R ²	R ³	R ⁴	R ⁵
221	Ar1	CN	D7	Ar1	D7
222	Ar1	CN	D8	Ar1	D8
223	Ar1	CN	D9	Ar1	D9
224	Ar1	CN	D10	Ar1	D10
225	Ar1	CN	D11	Ar1	D11
226	Ar1	CN	D12	Ar1	D12
227	Ar1	CN	D13	Ar1	D13
228	Ar1	CN	D14	Ar1	D14
229	Ar1	CN	D15	Ar1	D15
230	Ar1	CN	D16	Ar1	D16
231	Ar1	CN	D17	Ar1	D17
232	Ar1	CN	D18	Ar1	D18
233	Ar1	CN	D19	Ar1	D19
234	Ar1	CN	D20	Ar1	D20
235	Ar1	CN	D21	Ar1	D21
236	Ar1	CN	D22	Ar1	D22
237	Ar1	CN	D23	Ar1	D23
238	Ar1	CN	D24	Ar1	D24
239	Ar1	CN	D25	Ar1	D25
240	Ar1	CN	D26	Ar1	D26
241	Ar1	CN	D27	Ar1	D27
242	Ar1	CN	D28	Ar1	D28
243	D1	CN	D1	Ar2	D1
244	D1	CN	D1	Ar3	D1
245	D1	CN	D1	Ar4	D1
246	D1	CN	D1	Ar5	D1
247	D1	CN	D1	Ar6	D1
248	D1	CN	D1	Ar7	D1
249	D1	CN	D1	Ar8	D1
250	D1	CN	D1	Ar9	D1
251	D1	CN	D1	Ar10	D1
252	D1	CN	D1	Ar11	D1
253	D1	CN	D1	Ar12	D1
254	D1	CN	D1	Ar13	D1
255	D1	CN	D1	Ar14	D1
256	D1	CN	D1	Ar15	D1
257	D1	CN	D1	Ar16	D1
258	D1	CN	D1	Ar17	D1
259	D1	CN	D1	Ar18	D1
260	D1	CN	D1	Ar19	D1
261	D1	CN	D1	Ar20	D1
262	D1	CN	D1	Ar21	D1
263	D1	CN	D1	Ar22	D1
264	D1	CN	D1	Ar23	D1

[0164]

No	R ¹	R ²	R ³	R ⁴	R ⁵
265	D1	CN	D1	Ar24	D1
266	D1	CN	D1	Ar25	D1
267	D1	CN	D1	Ar26	D1
268	D1	CN	D1	Ar27	D1
269	D1	CN	D1	Ar28	D1
270	D1	CN	D1	Ar29	D1
271	D1	CN	D1	Ar30	D1
272	D1	CN	D1	Ar31	D1
273	D1	CN	D1	Ar32	D1
274	D1	CN	D1	Ar33	D1
275	D2	CN	D2	Ar1	D2
276	D3	CN	D3	Ar1	D3
277	D4	CN	D4	Ar1	D4
278	D5	CN	D5	Ar1	D5
279	D6	CN	D6	Ar1	D6
280	D7	CN	D7	Ar1	D7
281	D8	CN	D8	Ar1	D8
282	D9	CN	D9	Ar1	D9
283	D10	CN	D10	Ar1	D10
284	D11	CN	D11	Ar1	D11
285	D12	CN	D12	Ar1	D12
286	D13	CN	D13	Ar1	D13
287	D14	CN	D14	Ar1	D14
288	D15	CN	D15	Ar1	D15
289	D16	CN	D16	Ar1	D16
290	D17	CN	D17	Ar1	D17
291	D18	CN	D18	Ar1	D18
292	D19	CN	D19	Ar1	D19
293	D20	CN	D20	Ar1	D20
294	D21	CN	D21	Ar1	D21
295	D22	CN	D22	Ar1	D22
296	D23	CN	D23	Ar1	D23
297	D24	CN	D24	Ar1	D24
298	D25	CN	D25	Ar1	D25
299	D26	CN	D26	Ar1	D26
300	D27	CN	D27	Ar1	D27
301	D28	CN	D28	Ar1	D28
302	Ar2	CN	D1	D1	D1
303	Ar3	CN	D1	D1	D1
304	Ar4	CN	D1	D1	D1
305	Ar5	CN	D1	D1	D1
306	Ar6	CN	D1	D1	D1
307	Ar7	CN	D1	D1	D1
308	Ar8	CN	D1	D1	D1

[0165] [表5]

No	R ¹	R ²	R ³	R ⁴	R ⁵
309	Ar9	CN	D1	D1	D1
310	Ar10	CN	D1	D1	D1
311	Ar11	CN	D1	D1	D1
312	Ar12	CN	D1	D1	D1
313	Ar13	CN	D1	D1	D1
314	Ar14	CN	D1	D1	D1
315	Ar15	CN	D1	D1	D1
316	Ar16	CN	D1	D1	D1
317	Ar17	CN	D1	D1	D1
318	Ar18	CN	D1	D1	D1
319	Ar19	CN	D1	D1	D1
320	Ar20	CN	D1	D1	D1
321	Ar21	CN	D1	D1	D1
322	Ar22	CN	D1	D1	D1
323	Ar23	CN	D1	D1	D1
324	Ar24	CN	D1	D1	D1
325	Ar25	CN	D1	D1	D1
326	Ar26	CN	D1	D1	D1
327	Ar27	CN	D1	D1	D1
328	Ar28	CN	D1	D1	D1
329	Ar29	CN	D1	D1	D1
330	Ar30	CN	D1	D1	D1
331	Ar31	CN	D1	D1	D1
332	Ar32	CN	D1	D1	D1
333	Ar33	CN	D1	D1	D1
334	Ar1	CN	D2	D2	D2
335	Ar1	CN	D3	D3	D3
336	Ar1	CN	D4	D4	D4
337	Ar1	CN	D5	D5	D5
338	Ar1	CN	D6	D6	D6
339	Ar1	CN	D7	D7	D7
340	Ar1	CN	D8	D8	D8
341	Ar1	CN	D9	D9	D9
342	Ar1	CN	D10	D10	D10
343	Ar1	CN	D11	D11	D11
344	Ar1	CN	D12	D12	D12
345	Ar1	CN	D13	D13	D13
346	Ar1	CN	D14	D14	D14
347	Ar1	CN	D15	D15	D15
348	Ar1	CN	D16	D16	D16
349	Ar1	CN	D17	D17	D17
350	Ar1	CN	D18	D18	D18
351	Ar1	CN	D19	D19	D19
352	Ar1	CN	D20	D20	D20

[0166]

No	R ¹	R ²	R ³	R ⁴	R ⁵
353	Ar1	CN	D21	D21	D21
354	Ar1	CN	D22	D22	D22
355	Ar1	CN	D23	D23	D23
356	Ar1	CN	D24	D24	D24
357	Ar1	CN	D25	D25	D25
358	Ar1	CN	D26	D26	D26
359	Ar1	CN	D27	D27	D27
360	Ar1	CN	D28	D28	D28
361	D1	Ar1	CN	D1	Ar2
362	D1	Ar1	CN	D1	Ar3
363	D1	Ar1	CN	D1	Ar4
364	D1	Ar1	CN	D1	Ar5
365	D1	Ar1	CN	D1	Ar6
366	D1	Ar1	CN	D1	Ar7
367	D1	Ar1	CN	D1	Ar8
368	D1	Ar1	CN	D1	Ar9
369	D1	Ar1	CN	D1	Ar10
370	D1	Ar1	CN	D1	Ar11
371	D1	Ar1	CN	D1	Ar12
372	D1	Ar1	CN	D1	Ar13
373	D1	Ar1	CN	D1	Ar14
374	D1	Ar1	CN	D1	Ar15
375	D1	Ar1	CN	D1	Ar16
376	D1	Ar1	CN	D1	Ar17
377	D1	Ar1	CN	D1	Ar18
378	D1	Ar1	CN	D1	Ar19
379	D1	Ar1	CN	D1	Ar20
380	D1	Ar1	CN	D1	Ar21
381	D1	Ar1	CN	D1	Ar22
382	D1	Ar1	CN	D1	Ar23
383	D1	Ar1	CN	D1	Ar24
384	D1	Ar1	CN	D1	Ar25
385	D1	Ar1	CN	D1	Ar26
386	D1	Ar1	CN	D1	Ar27
387	D1	Ar1	CN	D1	Ar28
388	D1	Ar1	CN	D1	Ar29
389	D1	Ar1	CN	D1	Ar30
390	D1	Ar1	CN	D1	Ar31
391	D1	Ar1	CN	D1	Ar32
392	D1	Ar1	CN	D1	Ar33
393	D1	Ar1	CN	D2	Ar1

No	R ¹	R ²	R ³	R ⁴	R ⁵
394	D1	Ar1	CN	D3	Ar1
395	D1	Ar1	CN	D4	Ar1
396	D1	Ar1	CN	D5	Ar1
397	D1	Ar1	CN	D6	Ar1
398	D1	Ar1	CN	D7	Ar1
399	D1	Ar1	CN	D8	Ar1
400	D1	Ar1	CN	D9	Ar1
401	D1	Ar1	CN	D10	Ar1
402	D1	Ar1	CN	D11	Ar1
403	D1	Ar1	CN	D12	Ar1
404	D1	Ar1	CN	D13	Ar1
405	D1	Ar1	CN	D14	Ar1
406	D1	Ar1	CN	D15	Ar1
407	D1	Ar1	CN	D16	Ar1
408	D1	Ar1	CN	D17	Ar1
409	D1	Ar1	CN	D18	Ar1
410	D1	Ar1	CN	D19	Ar1
411	D1	Ar1	CN	D20	Ar1
412	D1	Ar1	CN	D21	Ar1
413	D1	Ar1	CN	D22	Ar1
414	D1	Ar1	CN	D23	Ar1
415	D1	Ar1	CN	D24	Ar1
416	D1	Ar1	CN	D25	Ar1
417	D1	Ar1	CN	D26	Ar1
418	D1	Ar1	CN	D27	Ar1
419	D1	Ar1	CN	D28	Ar1
420	D7	Ar1	CN	D8	Ar1
421	D7	Ar1	CN	D9	Ar1
422	D7	Ar1	CN	D10	Ar1
423	D7	Ar1	CN	D11	Ar1
424	D7	Ar1	CN	D12	Ar1
425	D13	Ar1	CN	D14	Ar1
426	D13	Ar1	CN	D15	Ar1
427	D13	Ar1	CN	D16	Ar1
428	D13	Ar1	CN	D17	Ar1
429	D13	Ar1	CN	D18	Ar1
430	D13	Ar1	CN	D19	Ar1
431	D13	Ar1	CN	D20	Ar1
432	D17	Ar1	CN	D18	Ar1
433	D17	Ar1	CN	D19	Ar1
434	D17	Ar1	CN	D20	Ar1

[0167] 关于通式(1)所表示的化合物的分子量,例如在试图通过蒸镀法对包含通式(1)所表示的化合物的有机层进行制膜并利用的情况下,优选为1500以下,更优选为1200以下,进一步优选为1000以下,更进一步优选为900以下。分子量的下限值为通式(1)所表示的最小化合物的分子量。

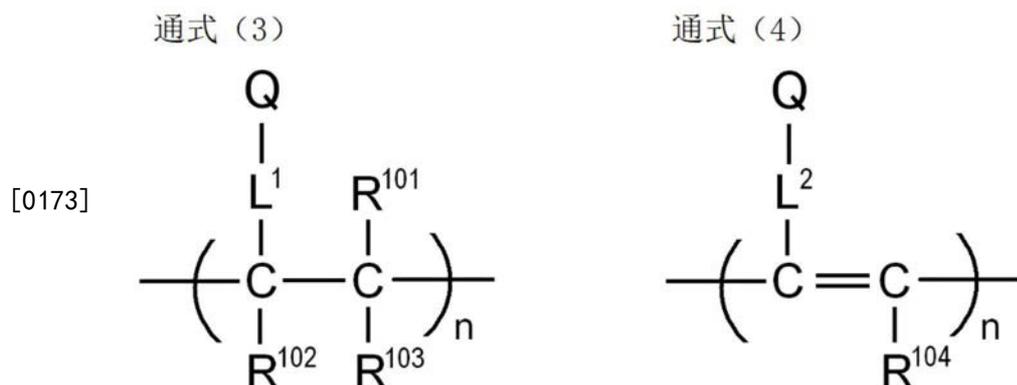
[0168] 通式(1)所表示的化合物无论分子量如何均可以利用涂布法进行成膜。若使用涂布法,则即便为分子量相对较大的化合物也能够成膜。通式(1)所表示的化合物存在在氰基苯系化合物中容易溶解于有机溶剂中的优点。因此,通式(1)所表示的化合物容易应用涂布法,并且进行纯化而容易提高纯度。

[0169] 也可以考虑应用本发明,将分子内包含多个通式(1)所表示的结构的化合物用作发光材料。

[0170] 例如,可以考虑将通过使聚合性基预先存在于通式(1)所表示的结构中并使该聚合性基进行聚合而获得的聚合物用作发光材料。具体而言,可以考虑准备在通式(1)的 $R^1 \sim R^5$ 中的任一个中包含聚合性官能团的单体,使其单独进行聚合或与其他单体一起进行共聚,由此获得具有重复单元的聚合物,而将该聚合物用作发光材料。或者,也可以考虑通过使具有通式(1)所表示的结构的化合物彼此偶合获得二聚物或三聚物,将这种用作发光材料。

[0171] 作为具有包含通式(1)所表示的结构的重复单元的聚合物的例,能够举出包含下述通式(3)或(4)所表示的结构的聚合物。

[0172] [化学式15]



[0174] 在通式(3)或(4)中,Q表示包含通式(1)所表示的结构的基团, L^1 及 L^2 表示连接基团。连接基团的碳原子数优选为0~20,更优选为1~15,进一步优选为2~10。连接基团优选为具有 $-X^{11}-L^{11}-$ 所表示的结构的连接基团。在此, X^{11} 表示氧原子或硫原子,优选为氧原子。 L^{11} 表示连接基团,优选为经取代或未经取代的亚烷基或者经取代或未经取代的亚芳基,更优选为碳原子数1~10的经取代或未经取代的亚烷基或者经取代或未经取代的亚苯基。

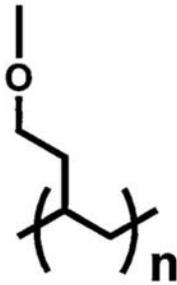
[0175] 在通式(3)或(4)中, R^{101} 、 R^{102} 、 R^{103} 及 R^{104} 分别独立地表示取代基。优选为碳原子数1~6的经取代或未经取代的烷基、碳原子数1~6的经取代或未经取代的烷氧基、卤素原子,更优选为碳原子数1~3的未经取代的烷基、碳原子数1~3的未经取代的烷氧基、氟原子、氯原子,进一步优选为碳原子数1~3的未经取代的烷基、碳原子数1~3的未经取代的烷氧基。

[0176] L^1 及 L^2 所表示的连接基团能够键结于构成Q的通式(1)的 $R^1 \sim R^5$ 中的任一个。可以相对于一个Q连接两个以上的连接基团而形成交联结构或网状结构。

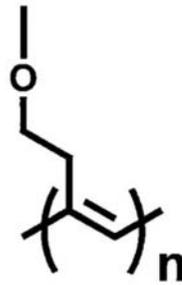
[0177] 作为重复单元的具体结构例,能够举出下述式(5)~(8)所表示的结构。

[0178] [化学式16]

式 (5)

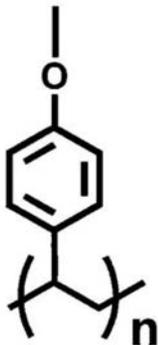


式 (6)

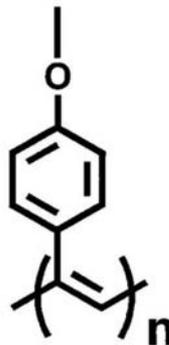


[0179]

式 (7)



式 (8)

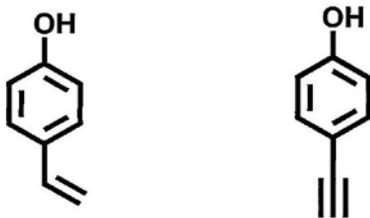


[0180] 具有包含这种式 (5) ~ (8) 的重复单元的聚合物能够通过如下进行合成: 预先对通式 (1) 的 $R^1 \sim R^5$ 中的任一个导入羟基, 将其作为连接基团使下述化合物进行反应而导入聚合性基, 并使该聚合性基进行聚合。

[0181] [化学式17]



[0182]



[0183] 在分子内包含通式 (1) 所表示的结构 of 的聚合物可以为仅由具有通式 (1) 所表示的结构 of 的重复单元组成的聚合物, 也可以为包含具有除此以外的结构的重复单元的聚合物。并且, 聚合物中所包含的具有通式 (1) 所表示的结构 of 的重复单元可以为单独一种, 也可以为 2 种以上。作为不具有通式 (1) 所表示的结构 of 的重复单元, 能够举出由通常用于共聚的单体所衍生的重复单元。例如, 能够举出由乙烯、苯乙烯等具有乙烯性不饱和键的单体所衍生的重复单元。

[0184] [通式 (1) 所表示的化合物的合成方法]

[0185] 通式 (1) 所表示的化合物为新型化合物。

[0186] 通式 (1) 所表示的化合物能够通过组合已知的反应来进行合成。例如, 将四卤代二

氰基苯作为原料,通过使其在NaH存在下与咪唑进行反应,能够获得代替一部分的卤素原子导入了作为供体基团的咪唑基而得的二氰基苯衍生物。通过在催化剂存在下使三丁基苯基锡与所获得的二氰基苯衍生物进行反应,只要将卤素原子取代为苯基,则能够合成具有咪唑基和苯基的通式(1)所表示的二氰基苯衍生物。关于该反应的具体条件和反应步骤,能够参考后述的合成例。并且,其他通式(1)所表示的化合物也能够通过利用同样的步骤和公知的合成法来合成。

[0187] [有机发光元件]

[0188] 本发明的通式(1)所表示的化合物作为有机发光元件的发光材料而有用。因此,本发明的通式(1)所表示的化合物能够在有机发光元件的发光层中有效地用作发光材料。并且,本发明的通式(1)所表示的化合物可以用作主体或辅助掺杂剂。

[0189] 通式(1)所表示的化合物中包含有发射延迟荧光的延迟荧光体。即,本发明还提供具有通式(1)所表示的结构延迟荧光体的发明、将通式(1)所表示的化合物用作延迟荧光体的发明及使用通式(1)所表示的化合物发出延迟荧光的方法的发明。将这种化合物用作发光材料的有机发光元件具有发射出延迟荧光且发光效率较高的特征。若对其原理以有机电致发光元件为例进行说明,则如下。

[0190] 在有机电致发光元件中,通过正负的两电极将载子注入至发光材料,产生激发态的发光材料而发光。通常,在载子注入型的有机电致发光元件的情况下,所产生的激子中,被激发为激发单重态的为25%,其余75%被激发为激发三重态。因此,利用作为来自激发三重态的发光磷光,能量的利用效率更高。然而,激发三重态由于寿命较长,因此会产生因激发态的饱和或激发三重态的激子的相互作用而引起的能量失活,通常多数情况下磷光的量子产率不高。另一方面,延迟荧光材料通过系间窜越等使能量转移至激发三重态之后,通过三重态-三重态湮灭或者热能的吸收而向激发单重态进行反向系间窜越,发射出荧光。认为在有机电致发光元件中,其中基于热能的吸收的热活化型的延迟荧光材料尤其有用。在将延迟荧光材料用于有机电致发光元件的情况下,激发单重态的激子如通常那样发射出荧光。另一方面,激发三重态的激子吸收设备所发出的热而向激发单重态进行系间窜越,发射出荧光。此时,由于是来自激发单重态的发光,因此是与荧光相同波长的发光,并且通过从激发三重态向激发单重态的反向系间窜越,产生的光的寿命(发光寿命)长于通常的荧光,因此作为比这种延迟的荧光被观察到。能够将其定义为延迟荧光。若使用这种热活化型的反向系间窜越机制,则通过在载子注入后经由热能的吸收,能够将通常仅产生25%的激发单重态的化合物的比率提高至25%以上。若使用即便在小于100℃的较低的温度下也发出较强的荧光及延迟荧光的化合物,则通过设备的热便会充分地产生从激发三重态向激发单重态的系间窜越,发射出延迟荧光,因此能够飞跃性地提高发光效率。

[0191] 通过将本发明的通式(1)所表示的化合物用作发光层的发光材料,能够提供有机光致发光元件(有机PL元件)或有机电致发光元件(有机EL元件)等优异的有机发光元件。有机光致发光元件具有在基板上至少形成了发光层的结构。并且,有机电致发光元件至少具有阳极、阴极及在阳极与阴极之间形成了有机层的结构。有机层至少包含发光层,可以仅由发光层构成,也可以除了发光层以外具有1层以上的有机层。作为这种其他有机层,能够举出空穴传输层、空穴注入层、电子阻挡层、空穴阻挡层、电子注入层、电子传输层、激子阻挡层等。空穴传输层可以为具有空穴注入功能的空穴注入传输层,电子传输层可以为具有电

子注入功能的电子注入传输层。将具体的有机电致发光元件的结构示于图1。在图1中,1表示基板,2表示阳极,3表示空穴注入层,4表示空穴传输层,5表示发光层,6表示电子传输层,7表示阴极。

[0192] 以下中,对有机电致发光元件的各部件及各层进行说明。另外,基板及发光层的说明也相当于有机光致发光元件的基板及发光层。

[0193] (基板)

[0194] 本发明的有机电致发光元件优选由基板支持。关于该基板,并无特别限制,只要为从以往在有机电致发光元件中惯用的基板即可,例如能够使用由玻璃、透明塑料、石英、硅等构成的基板。

[0195] (阳极)

[0196] 作为有机电致发光元件的阳极,可以优选地使用将功函数较大(4eV以上)的金属、合金、导电性化合物及它们的混合物作为电极材料的阳极。作为这种电极材料的具体例,可举出Au等金属、CuI、氧化铟锡(ITO)、SnO₂、ZnO等导电性透明材料。并且,也可以使用IDIXO(In₂O₃-ZnO)等非晶质且能够制作透明导电膜的材料。关于阳极,可以通过蒸镀或溅射等方法使这种电极材料形成为薄膜,并利用光刻法形成所需形状图案,或者对图案精度要求不高的情况(100μm以上左右)下,可以在所述电极材料的蒸镀或溅射时经由所需形状的掩模形成图案。或者,在使用如有机导电性化合物那样能够涂布的材料的情况下,也能够使用印刷方式、涂布方式等湿式成膜法。在从该阳极取出发光的情况下,优选将透射率设为大于10%,并且作为阳极的薄膜电阻优选为数百Ω/sq.(ohms per square)以下。而且,膜厚也取决于材料,通常在10~1000nm、优选为10~200nm的范围内进行选择。

[0197] (阴极)

[0198] 另一方面,作为阴极,可以使用将功函数较小(4eV以下)的金属(称为电子注入性金属)、合金、导电性化合物及它们的混合物作为电极材料的阴极。作为这种电极材料的具体例,可举出钠、钠-钾合金、镁、锂、镁/铜混合物、镁/银混合物、镁/铝混合物、镁/铟混合物、铝/氧化铝(Al₂O₃)混合物、铟/锂/铝混合物、稀土类金属等。这些之中,从电子注入性及对氧化等的耐久性的观点考虑,优选为电子注入性金属与作为功函数的值比其大且稳定的金属即第二金属的混合物,例如,镁/银混合物、镁/铝混合物、镁/铟混合物、铝/氧化铝(Al₂O₃)混合物、锂/铝混合物、铝等。阴极能够通过使这种电极材料利用蒸镀或溅射等方法形成薄膜而制作。并且,作为阴极的薄膜电阻优选为数百Ω/sq.(ohms per square)以下,膜厚通常在10nm~5μm,优选在50~200nm的范围内选择。另外,若为了使发出的光透过而有机电致发光元件的阳极或阴极中的任一个为透明或半透明,则发光亮度提高而优选。

[0199] 并且,通过将在阳极的说明中所举出的导电性透明材料用于阴极,能够制作透明或半透明的阴极,通过应用该阴极,能够制作阳极与阴极这两个具有透过性的元件。

[0200] (发光层)

[0201] 发光层是在通过从阳极及阴极的各自所注入的空穴及电子进行再键结而产生激子之后发光的层,可以将发光材料单独用于发光层,优选包含发光材料及主体材料。作为发光材料,能够使用选自通式(1)所表示的本发明的化合物组中的1种或2种以上。为了使本发明的有机电致发光元件及有机光致发光元件显出较高的发光效率,重要的是,将在发光材料所产生的单重态激子及三重态激子封入发光材料中。因此,优选在发光层中除了发光材

料以外还使用主体材料。作为主体材料,能够使用具有高于本发明的发光材料的激发单重态能量、激发三重态能量中的至少任一个的值的有机化合物。其结果,能够将本发明的发光材料中所产生的单重态激子及三重态激子封入本发明的发光材料的分子中,能够充分地发挥其发光效率。但是,也存在即便无法将单重态激子及三重态激子充分地封入也能够获得较高的发光效率的情况,因此只要为能够实现较高的发光效率的主体材料,则能够无特别制约地用于本发明中。在本发明的有机发光元件或有机电致发光元件中,发光由发光层所包含的本发明的发光材料产生。该发光包含荧光发光及延迟荧光发光这两个。其中,也可以为发光的一部分或局部具有来自主体材料的发光。

[0202] 发光层中的通式(1)所表示的化合物的含量优选设为小于50重量%。而且,通式(1)所表示的化合物的含量的上限值优选设为小于30重量%,并且含量的上限值例如也能够设为小于20重量%、小于10重量%、小于5重量%、小于3重量%、小于1重量%、小于0.5重量%。下限值优选设为0.001重量%以上,例如也能够设为大于0.01重量%、大于0.1重量%、大于0.5重量%、大于1重量%。

[0203] 作为发光层的主体材料,优选为具有空穴传输能力、电子传输能力且防止发光的长波长化而且具有较高的玻璃转移温度的有机化合物。

[0204] 通式(1)所表示的化合物也能够用作发光层的主体材料。

[0205] (注入层)

[0206] 注入层是指,为了降低驱动电压或提高发光亮度而设置于电极与有机层间的层,因此,存在空穴注入层及电子注入层,可以使其存在于阳极与发光层或空穴传输层之间及阴极与发光层或电子传输层之间。注入层能够根据需要而设置。

[0207] (阻挡层)

[0208] 阻挡层是能够阻止存在于发光层中的电荷(电子或者空穴)和/或激子向发光层外扩散的层。电子阻挡层能够配置于发光层及空穴传输层之间,阻止电子朝向空穴传输层通过发光层。同样地,空穴阻挡层能够配置于发光层及电子传输层之间,阻止空穴朝向电子传输层通过发光层。阻挡层也能够为了阻止激子扩散至发光层的外侧而使用。即,电子阻挡层、空穴阻挡层分别也能够兼备作为激子阻挡层的功能。本说明书中所述的电子阻挡层或激子阻挡层是以包括作为一个层具有电子阻挡层及激子阻挡层的功能的层的含义而使用。

[0209] (空穴阻挡层)

[0210] 空穴阻挡层在广义上具有电子传输层的功能。空穴阻挡层具有传输电子并且阻止空穴到达电子传输层的作用,由此能够提高发光层中的电子与空穴的再键结机率。作为空穴阻挡层的材料,能够根据需要使用后述的电子传输层的材料。

[0211] (电子阻挡层)

[0212] 电子阻挡层在广义上具有传输空穴的功能。电子阻挡层具有传输空穴并且阻止电子到达空穴传输层的作用,由此能够提高发光层中的电子与空穴进行再键结的机率。

[0213] (激子阻挡层)

[0214] 激子阻挡层是指,为了阻挡因空穴与电子在发光层内进行再键结而产生的激子扩散至电荷传输层的层,通过本层的插入能够有效率地将激子封入发光层内,能够提高元件的发光效率。激子阻挡层邻接于发光层而能够插入于阳极侧、阴极侧中的任一侧,也能够同时插入于两侧。即,在阳极侧具有激子阻挡层的情况下,能够在空穴传输层与发光层之间,

邻接于发光层而插入该层,在插入于阴极侧的情况下,能够在发光层与阴极之间,邻接于发光层而插入该层。并且,在阳极与邻接于发光层的阳极侧的激子阻挡层之间能够具有空穴注入层或电子阻挡层等,在阴极与邻接于发光层的阴极侧的激子阻挡层之间能够具有电子注入层、电子传输层、空穴阻挡层等。在配置阻挡层的情况下,优选为用作阻挡层的材料的激发单重态能量及激发三重态能量中的至少任一个高于发光材料的激发单重态能量及激发三重态能量。

[0215] (空穴传输层)

[0216] 空穴传输层由具有传输空穴的功能的空穴传输材料组成,空穴传输层能够设置单层或多层。

[0217] 作为空穴传输材料,具有空穴的注入或传输、电子的阻挡性中的任一个,可以为有机物、无机物中的任一个。作为能够使用的公知的空穴传输材料,例如可举出三唑衍生物、噁二唑衍生物、咪唑衍生物、呋唑衍生物、吡啶并呋唑衍生物、聚芳基烷烃衍生物、吡啶啉衍生物及吡啶啉酮衍生物、苯二胺衍生物、芳基胺衍生物、氨基取代查耳酮衍生物、噁唑衍生物、苯乙烯基蒽衍生物、茚酮衍生物、脞衍生物、茈衍生物、硅氮烷衍生物、苯胺系共聚物,还可举出导电性高分子低聚物,尤其可举出噁吩低聚物等,优选使用卟啉化合物、芳香族叔胺化合物及苯乙烯胺化合物,更优选使用芳香族叔胺化合物。

[0218] (电子传输层)

[0219] 电子传输层由具有传输电子的功能的材料组成,电子传输层能够设置单层或多层。

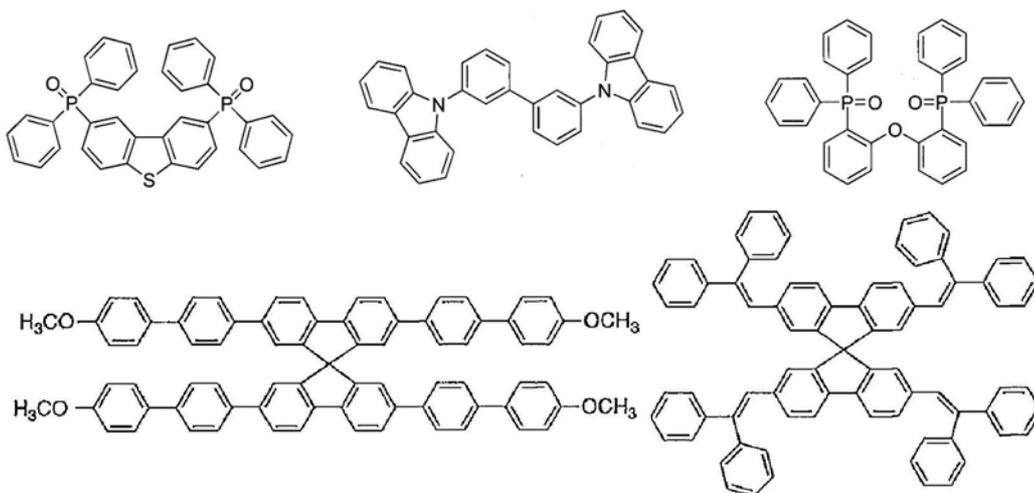
[0220] 作为电子传输材料(也存在兼作空穴阻挡材料的情况),只要具有将从阴极注入的电子传递至发光层的功能即可。作为能够使用的电子传输层,例如可举出硝基取代茚衍生物、二苯基醌衍生物、噻喃二氧化物(Thiopyran dioxide)衍生物、碳二亚胺、亚茚基甲烷(fluorenylidene methane)衍生物、蒽醌二甲烷(anthraquino dimethane)及蒽酮衍生物、噁二唑衍生物等。而且,在上述噁二唑衍生物中,将噁二唑环的氧原子取代为硫原子而得的噻二唑衍生物、具有作为吸电子基团已知的喹啉环的喹啉衍生物也能够用作电子传输材料。而且,也能够使用将这种材料导入到高分子链或将这种材料作为高分子的主链的高分子材料。

[0221] 在制作有机电致发光元件之际,通式(1)所表示的化合物不仅用于1层的有机层(例如,电子传输层),也可以用于多个有机层。此时,用于各有机层的通式(1)所表示的化合物可以彼此相同也可以不同。例如,除了电子传输层和发光层以外也可以在上述注入层、阻挡层、空穴阻挡层、电子阻挡层、激子阻挡层、空穴传输层等中使用通式(1)所表示的化合物。这种层的制膜方法并无特别限定,利用干式步骤、湿式步骤中的任一个进行制作均可。

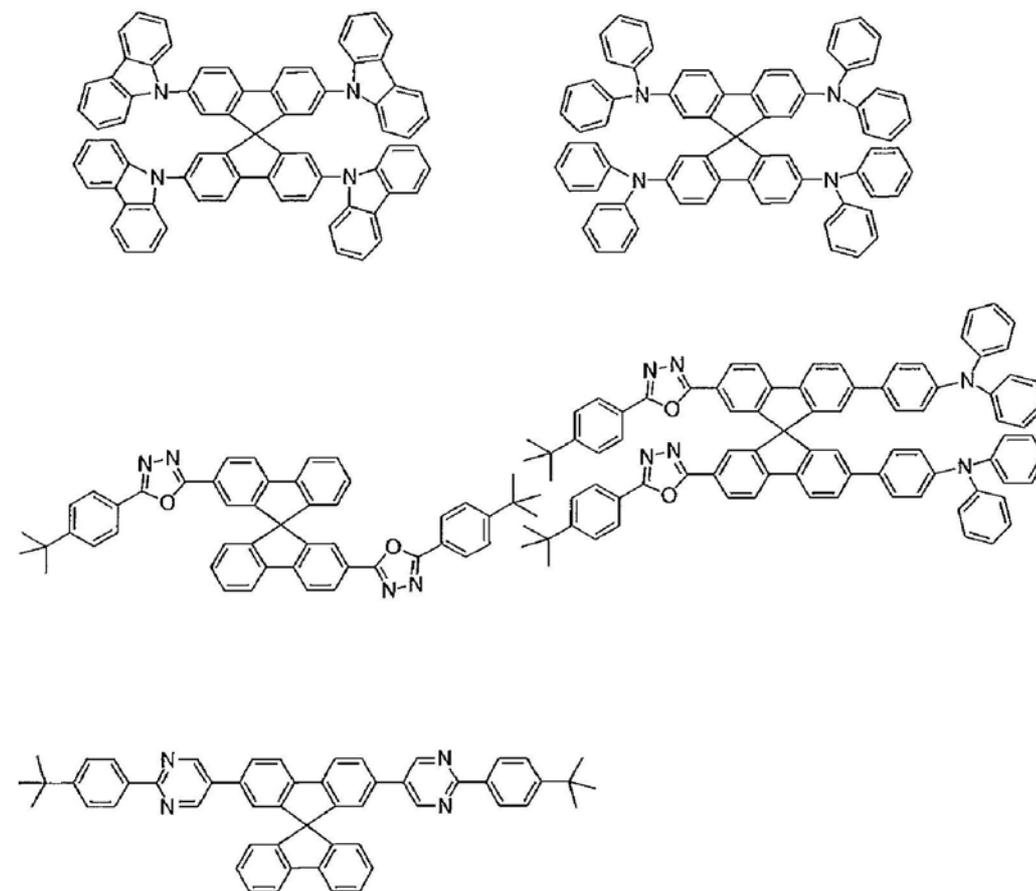
[0222] 以下,具体地例示能够用于有机电致发光元件的优选的材料。其中,在本发明中能够使用的材料并不被以下例示化合物做限定性地解释。并且,即便为作为具有特定的功能材料而例示的化合物,也能够转用作具有其他功能的材料。

[0223] 首先,举出也能够用作发光层的主体材料的优选的化合物。

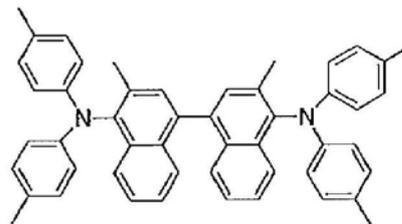
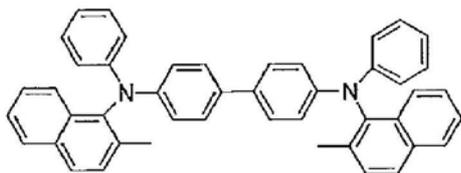
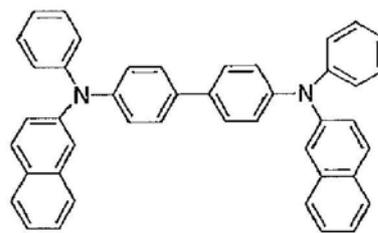
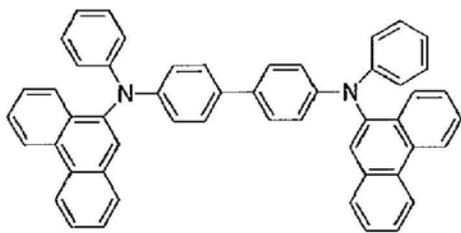
[0224] [化学式18]



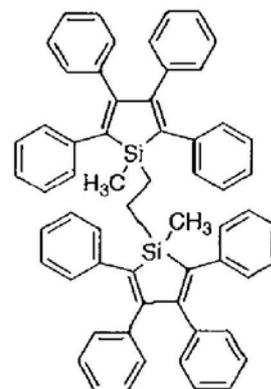
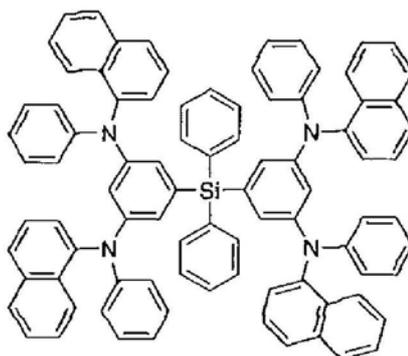
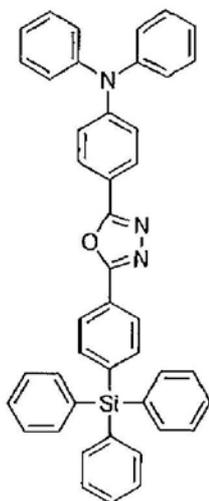
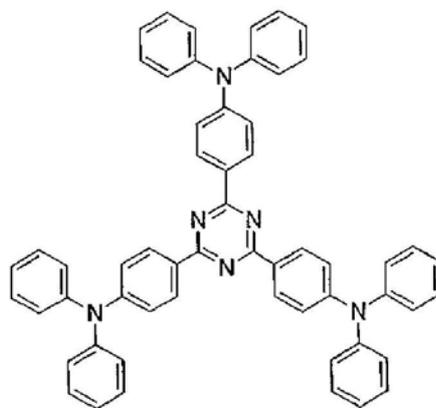
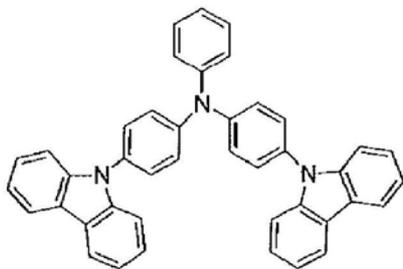
[0225]



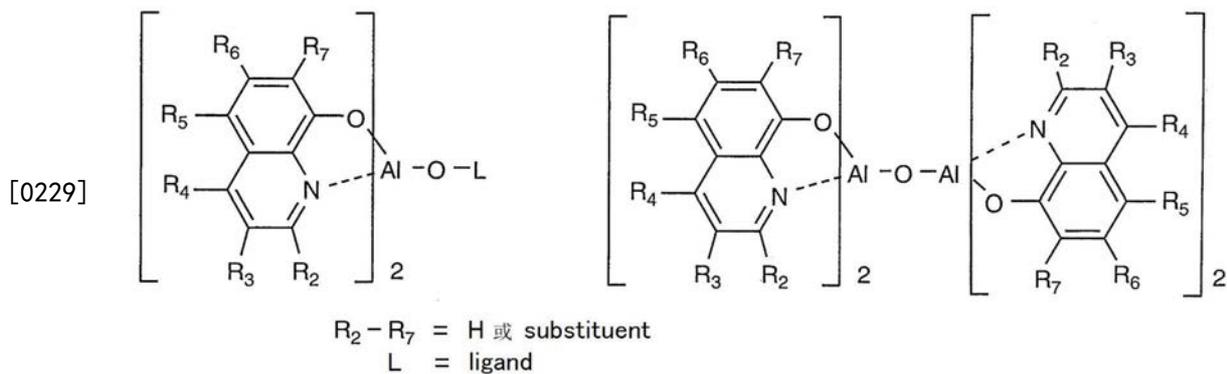
[0226] [化学式19-1]



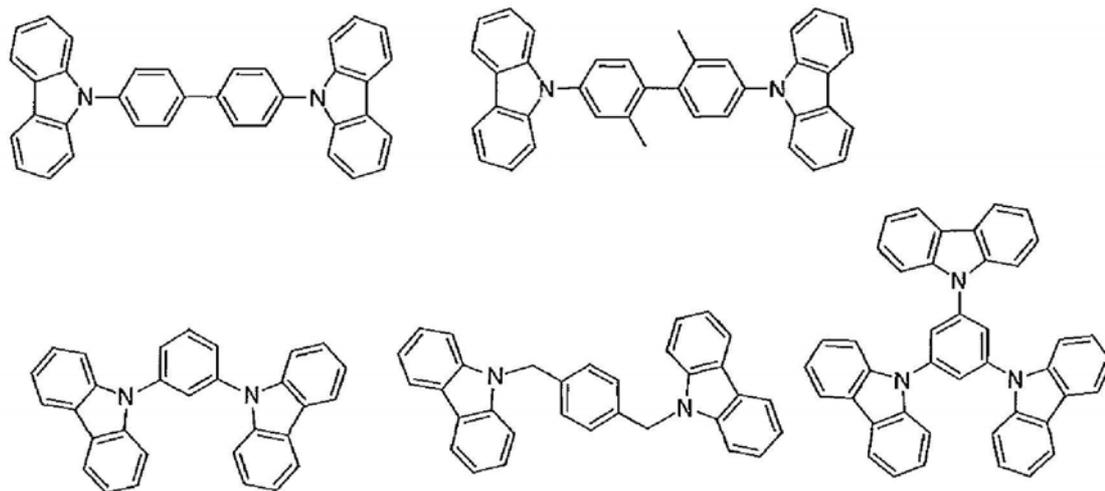
[0227]



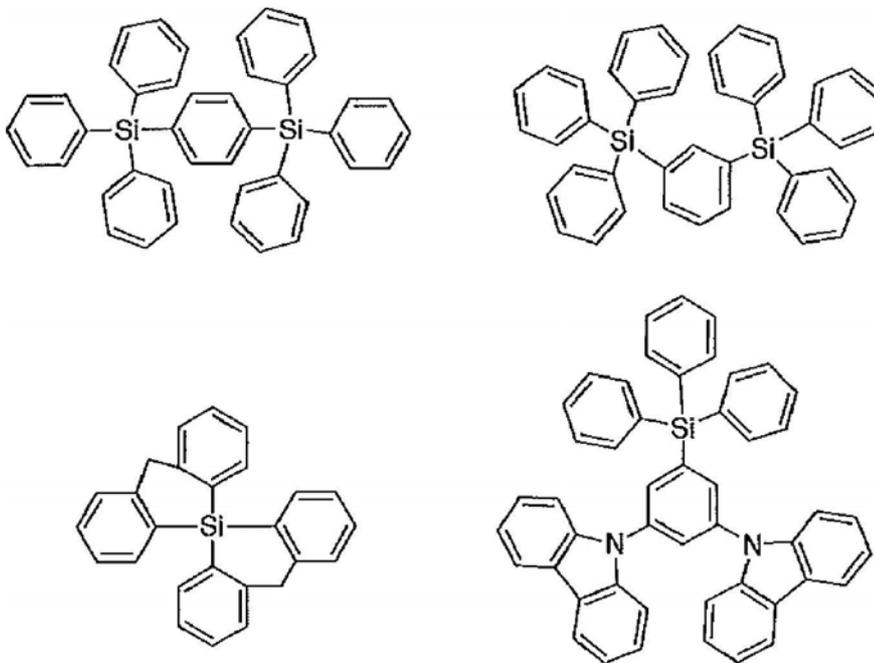
[0228] [化学式19-2]



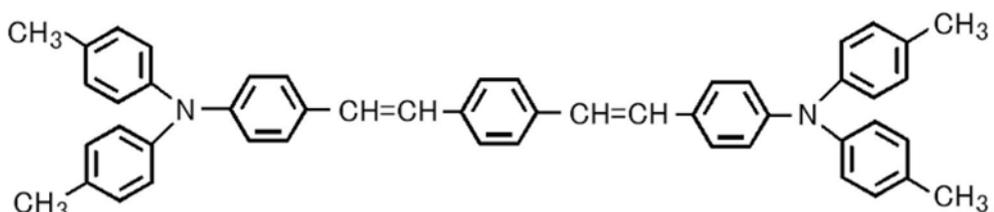
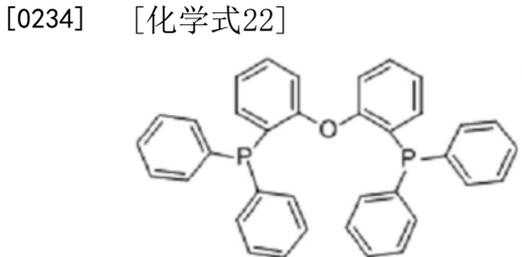
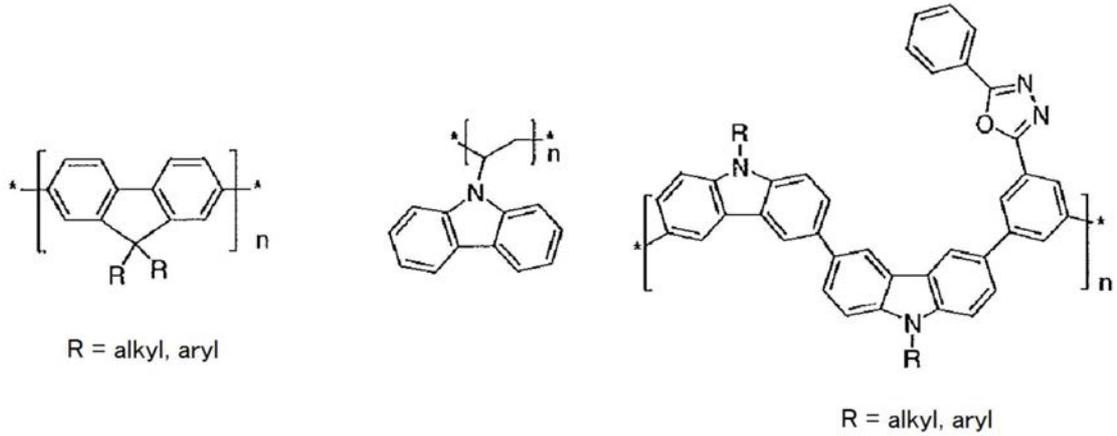
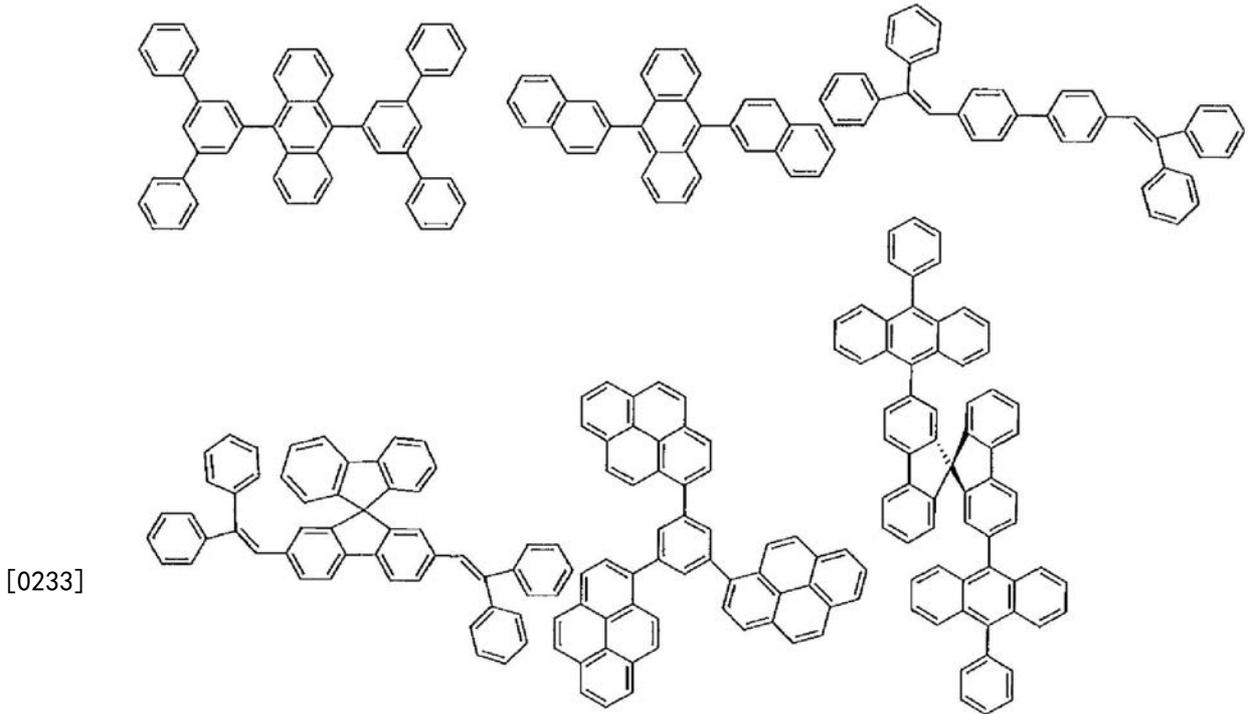
[0230] [化学式20]



[0231]

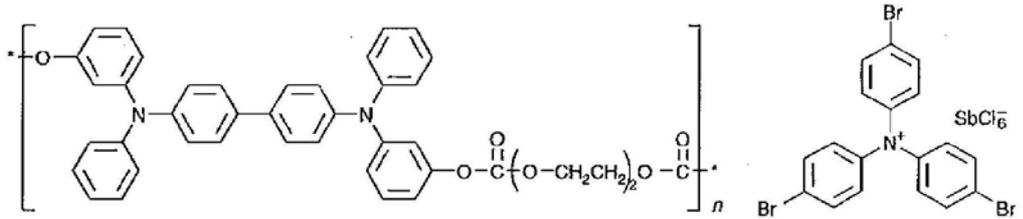
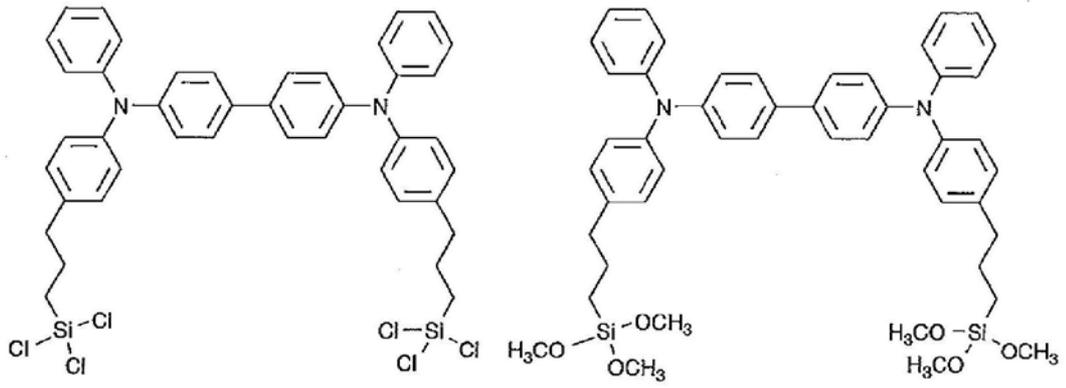


[0232] [化学式21]

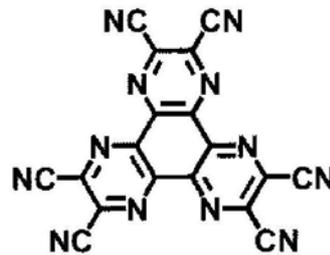
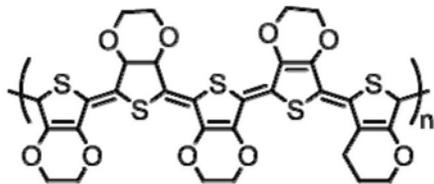
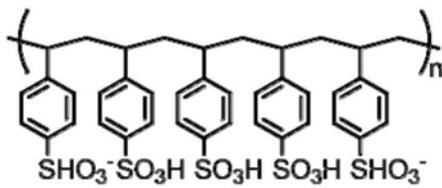
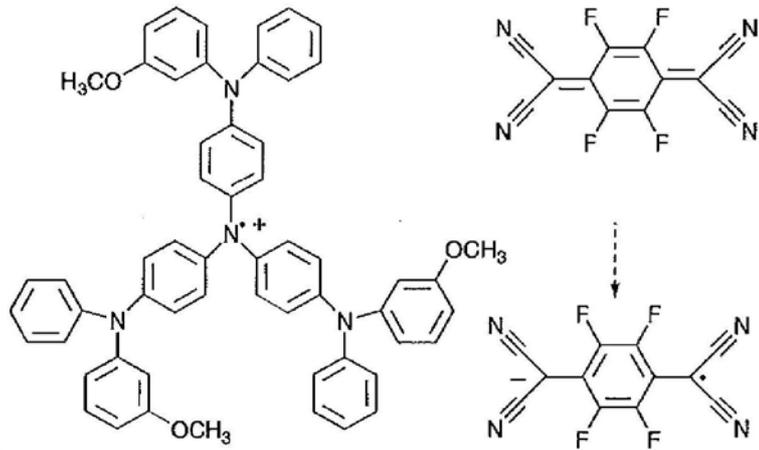


[0236] 接着,举出能够用作空穴注入材料的优选的化合物例。

[0237] [化学式23]

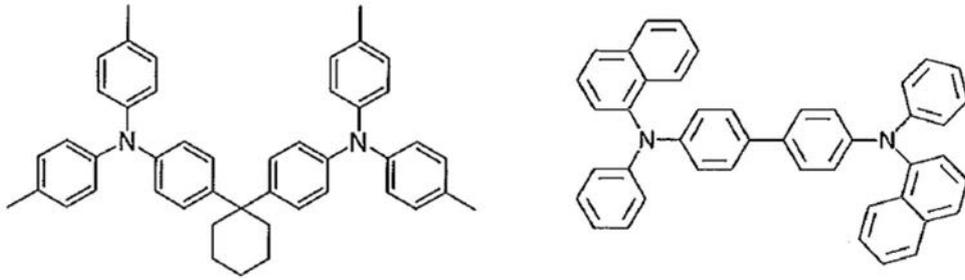


[0238]

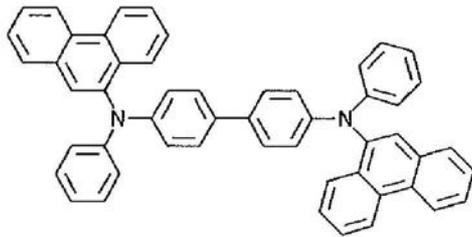
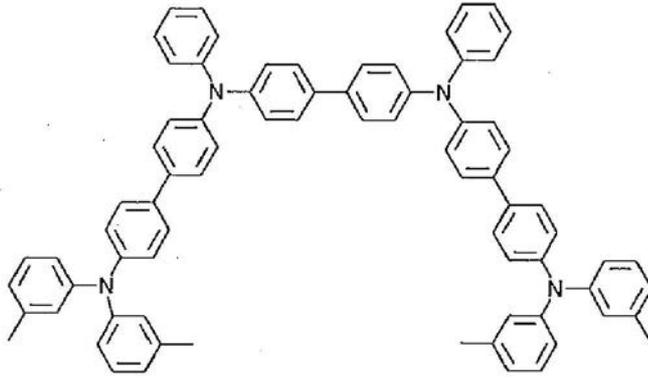


[0239] 接着,举出能够用作空穴传输材料的优选的化合物例。

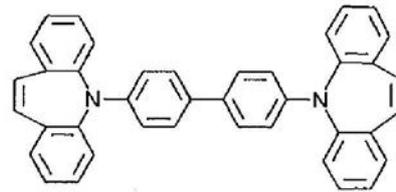
[0240] [化学式24]

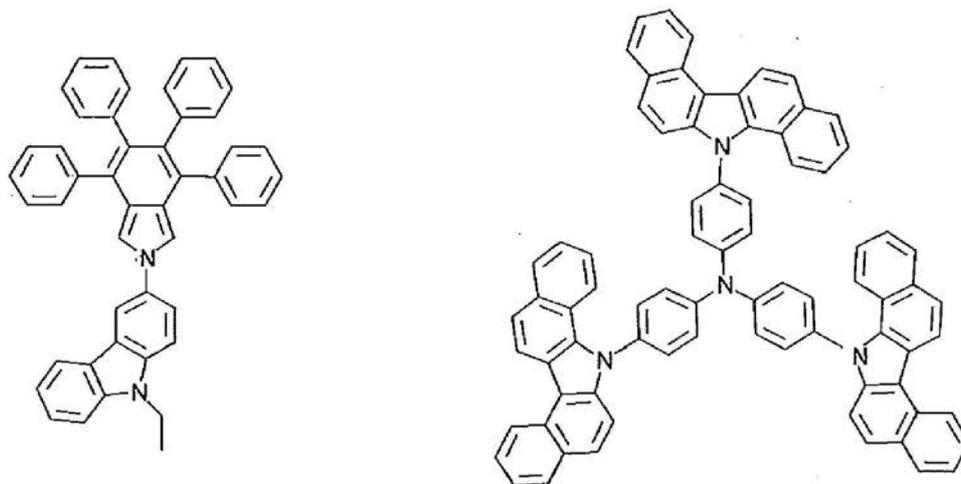


[0241]

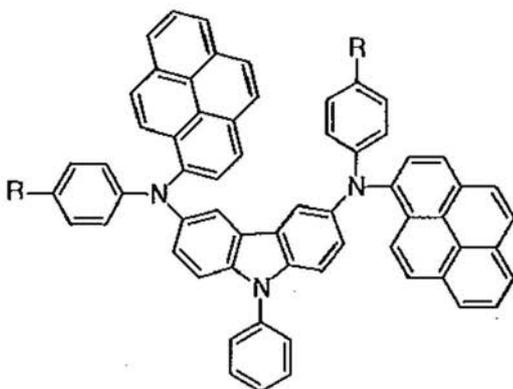
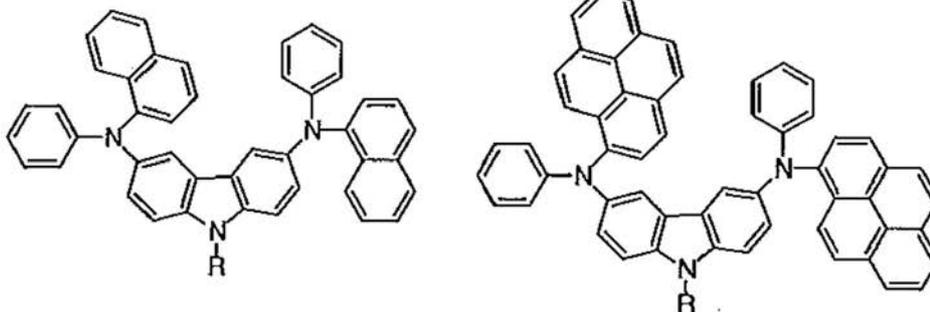


[0242] [化学式25-1]



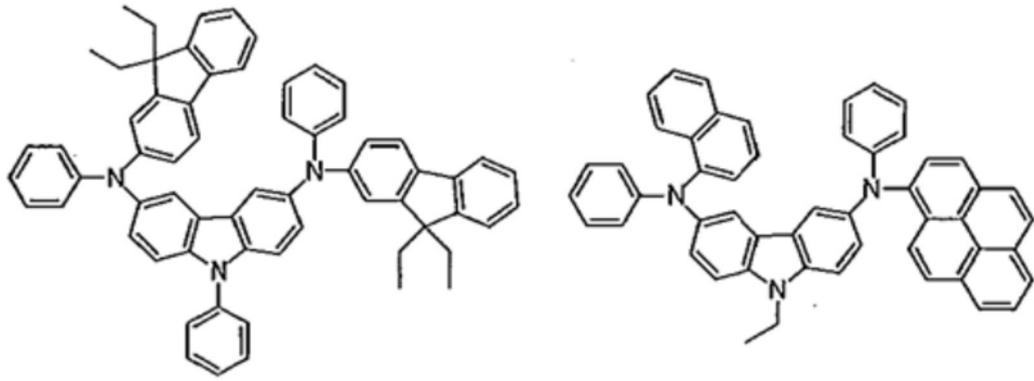


[0243]

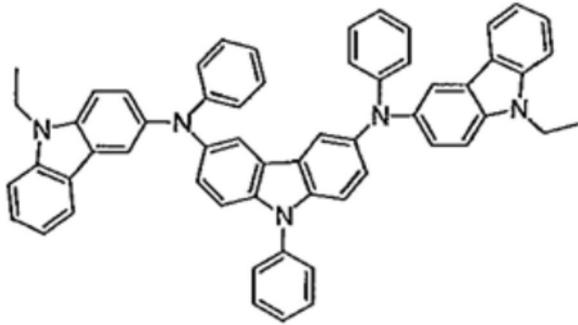


R = alkyl, aryl, alkoxy, aryloxy,
9,9'-dialkylfluorene

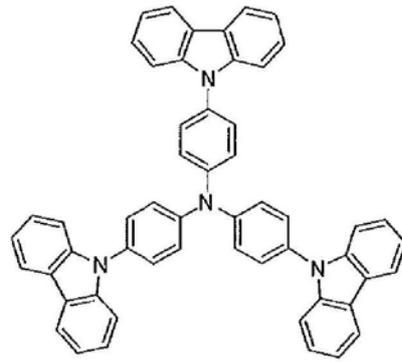
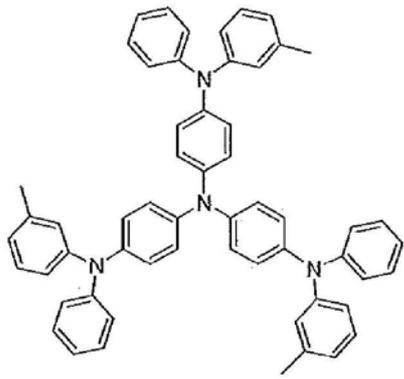
[0244] [化学式25-2]



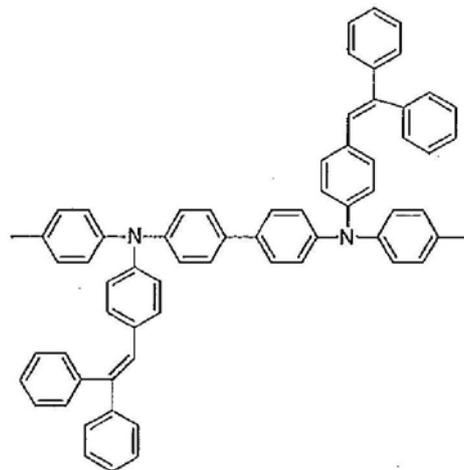
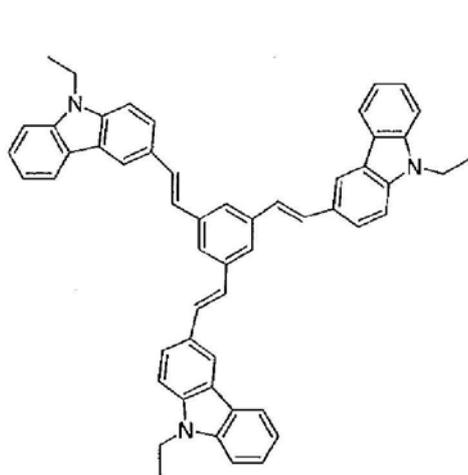
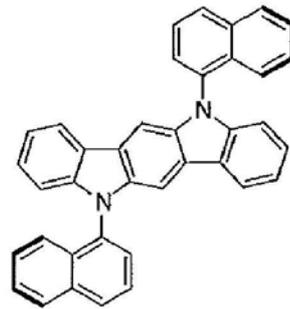
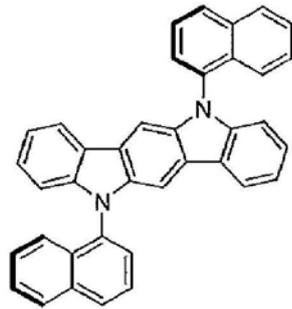
[0245]



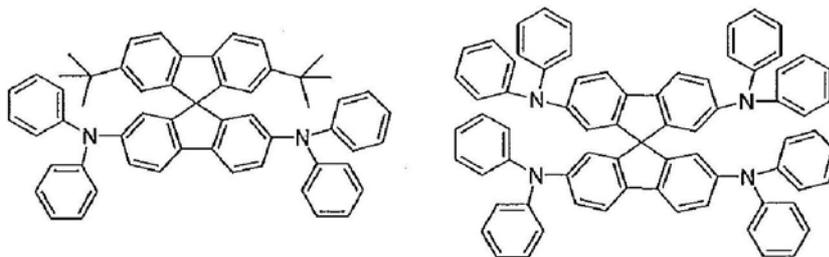
[0246] [化学式26]



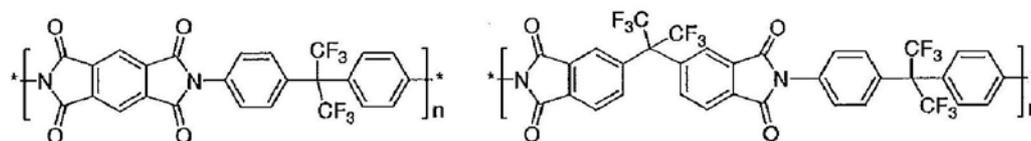
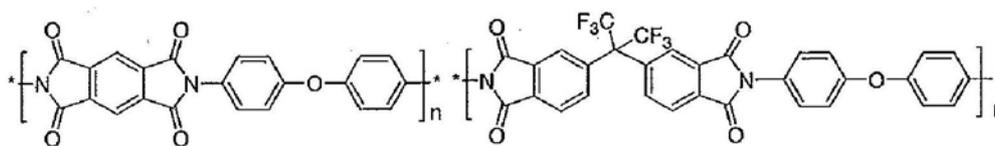
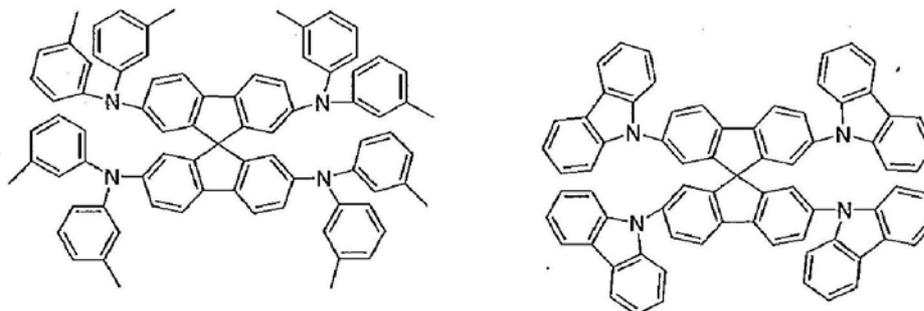
[0247]



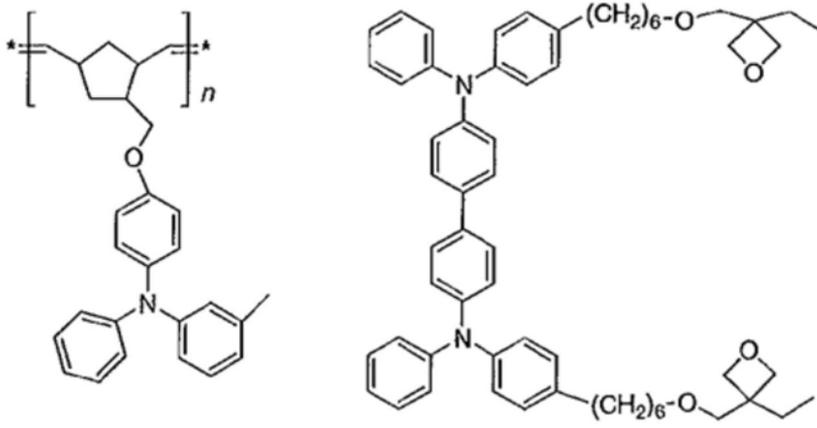
[0248] [化学式27]



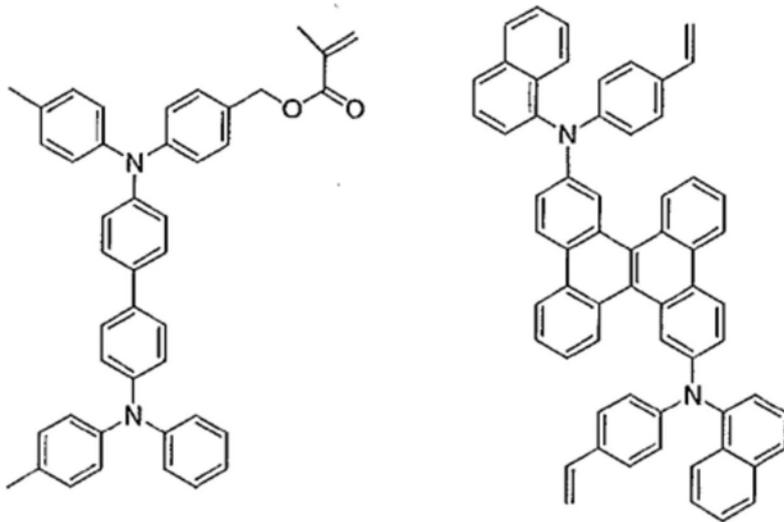
[0249]



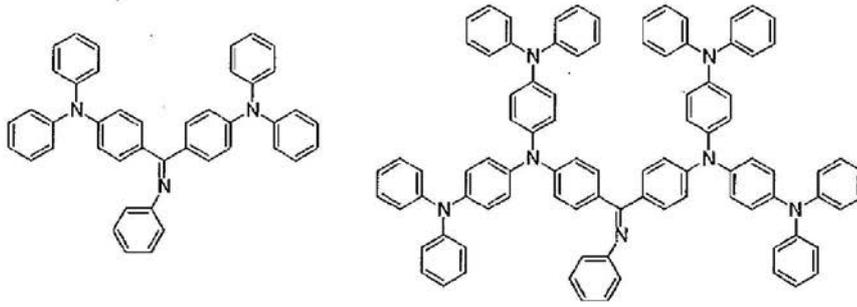
[0250] [化学式28]



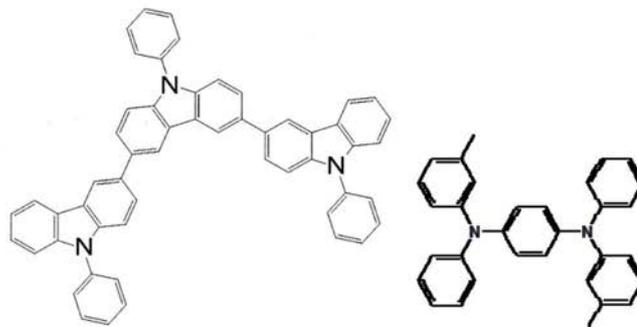
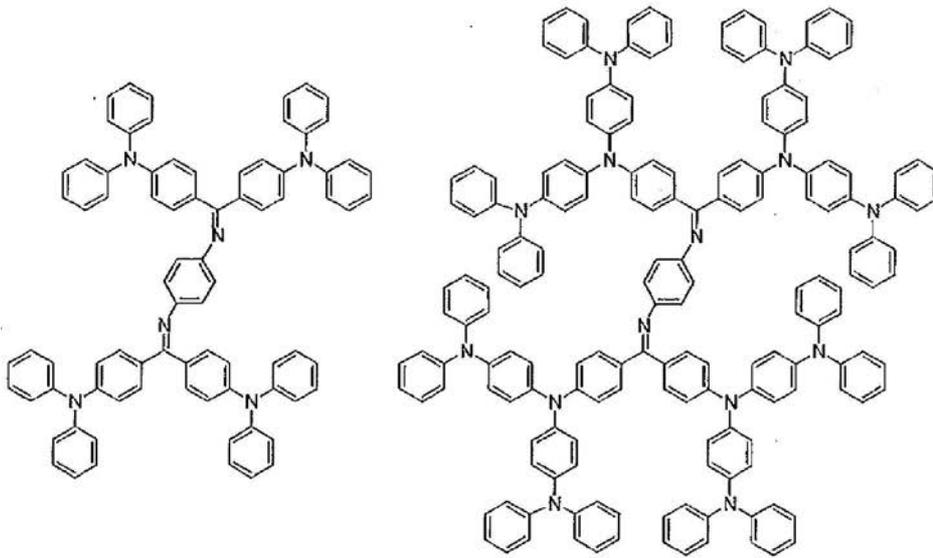
[0251]



[0252] [化学式29]

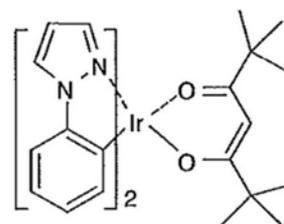
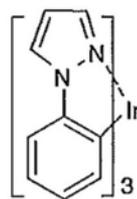
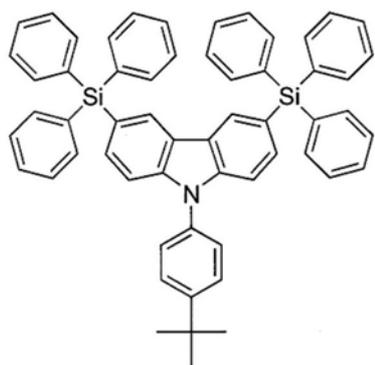


[0253]

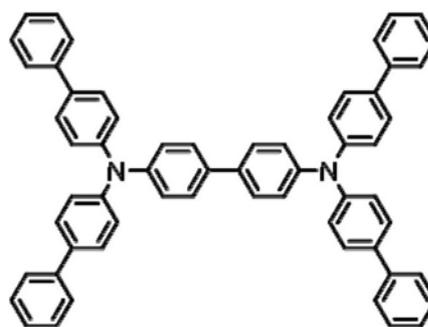
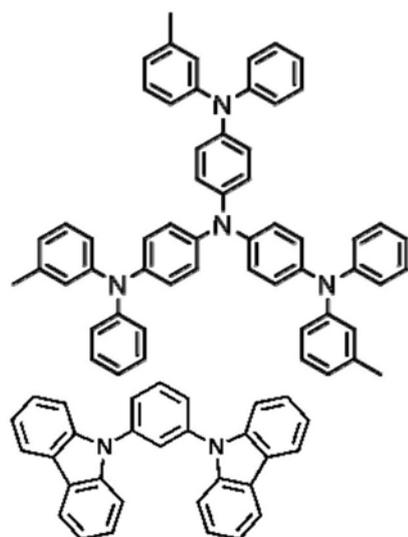
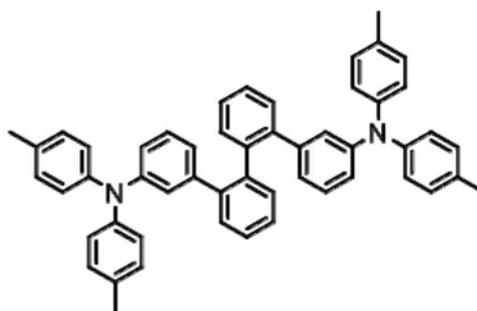
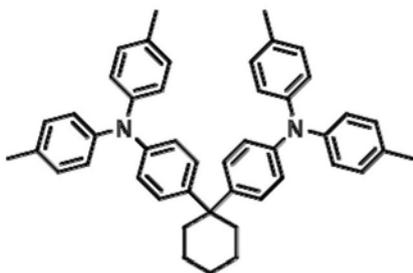


[0254] 接着,举出能够用作电子阻挡材料的优选的化合物例。

[0255] [化学式30]

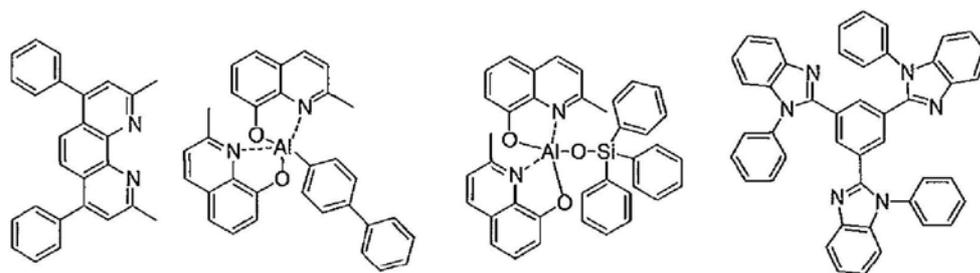


[0256]

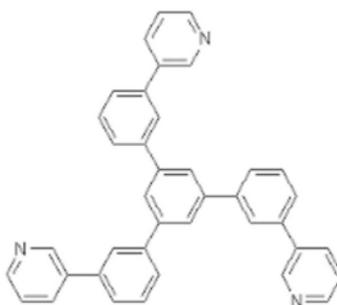
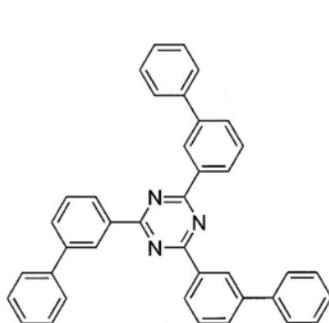
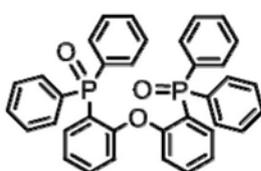
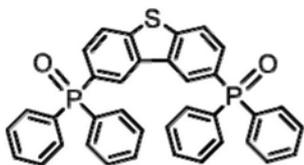
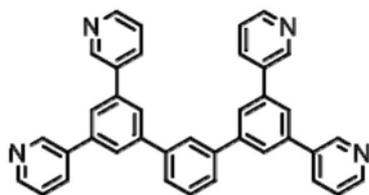
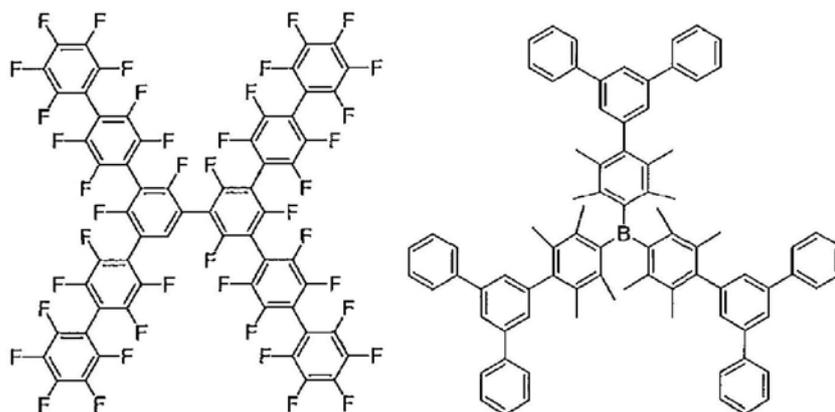


[0257] 接着,举出能够用作空穴阻挡材料的优选的化合物例。

[0258] [化学式31]

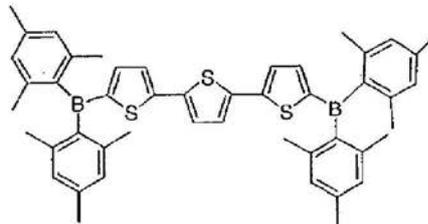
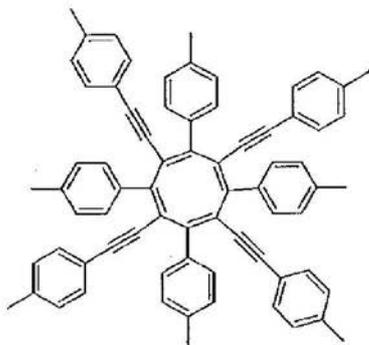
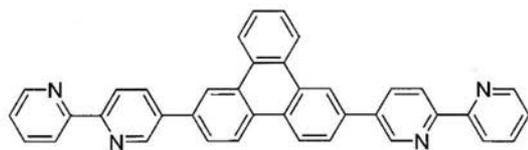


[0259]

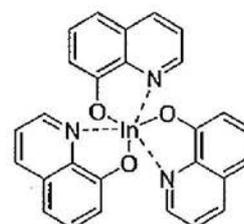
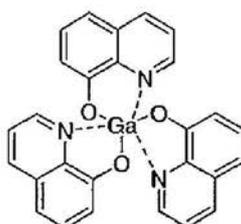
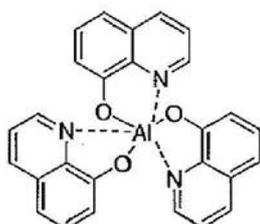


[0260] 接着,举出能够用作电子传输材料的优选的化合物例。

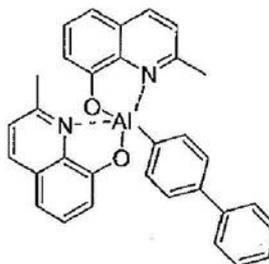
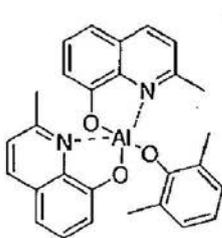
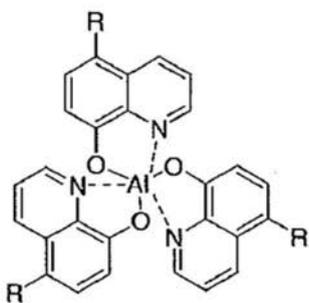
[0261] [化学式32-1]



[0262]

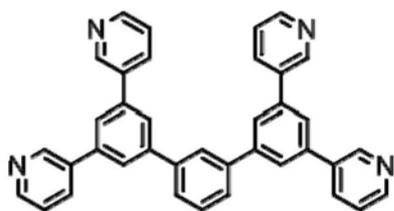


R = H, alkyl, aryl,
heteroaryl



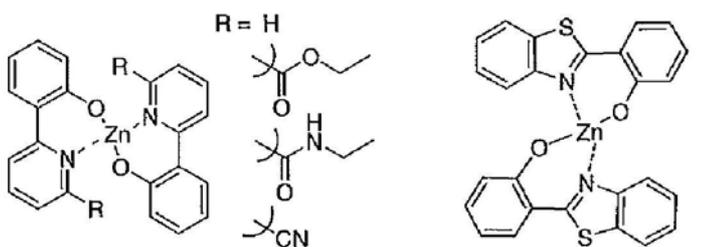
[0263] [化学式32-2]

[0264]

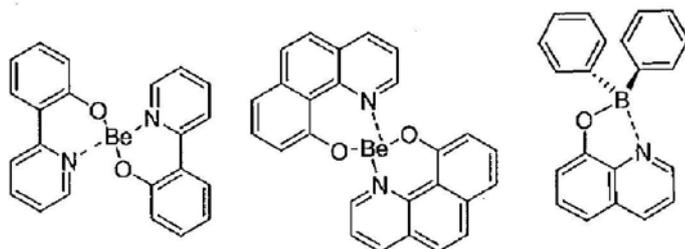


[0265]

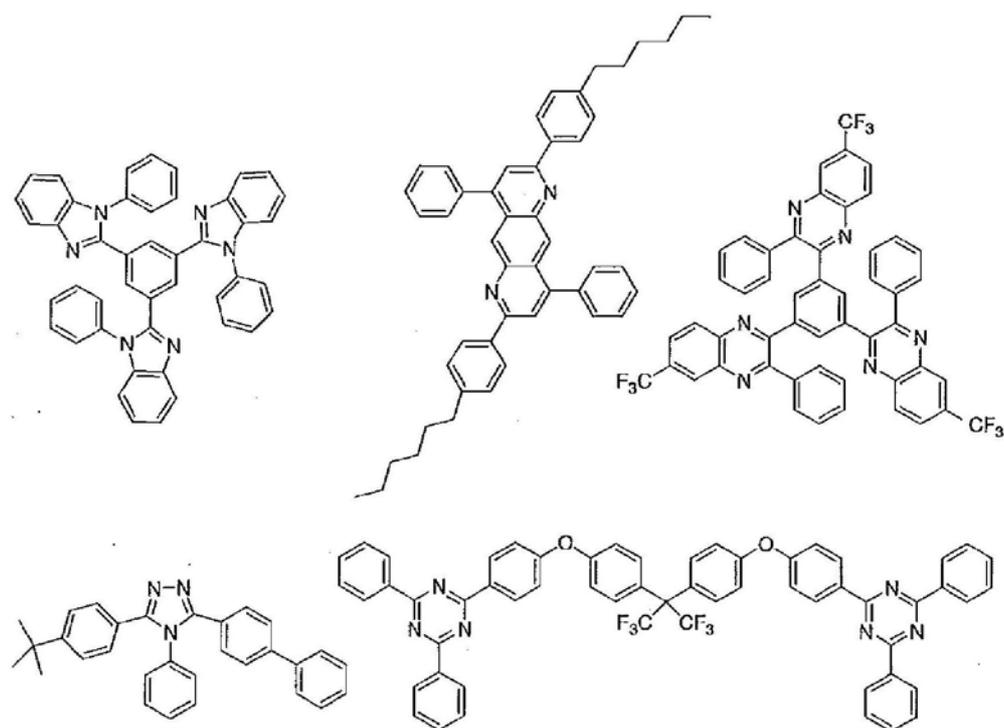
[化学式33]



[0266]

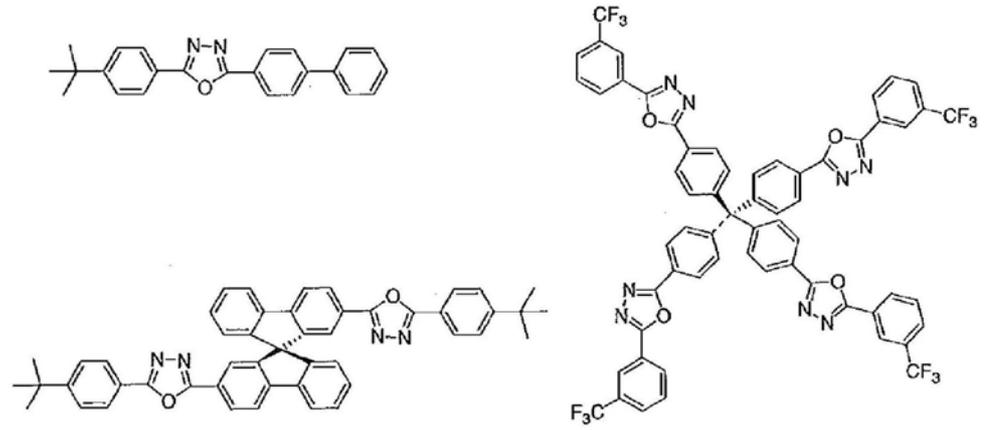


[0267]

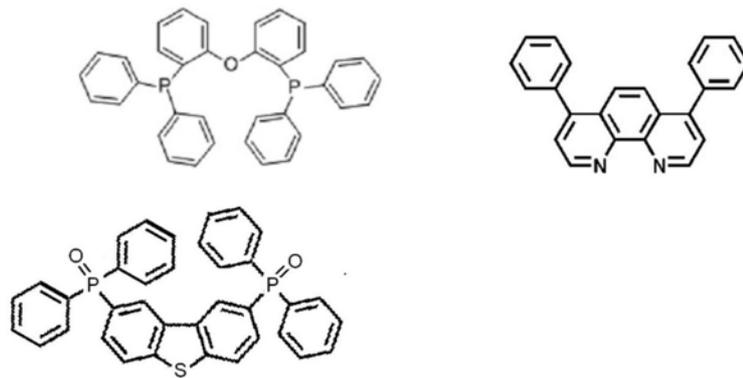
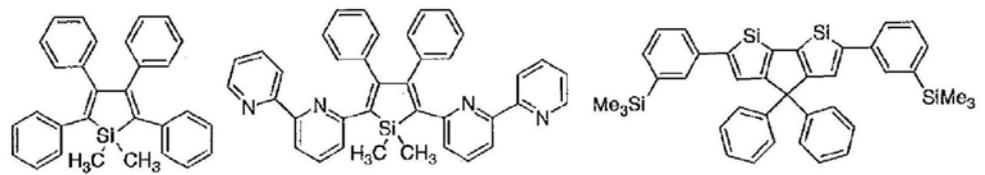


[0268]

[化学式34]



[0269]

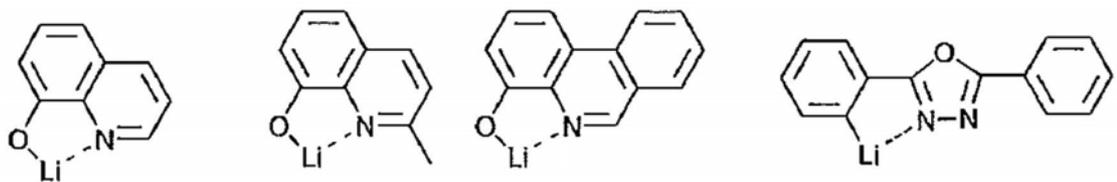


[0270] 接着,举出能够用作电子注入材料的优选的化合物例。

[0271] [化学式35]

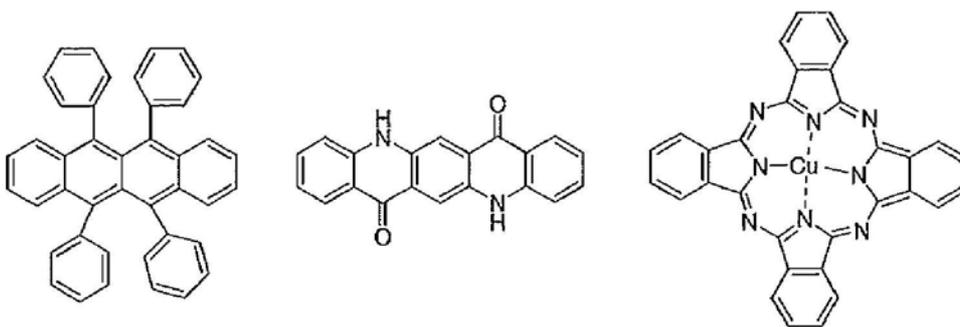
[0272] LiF, CsF

[0273]

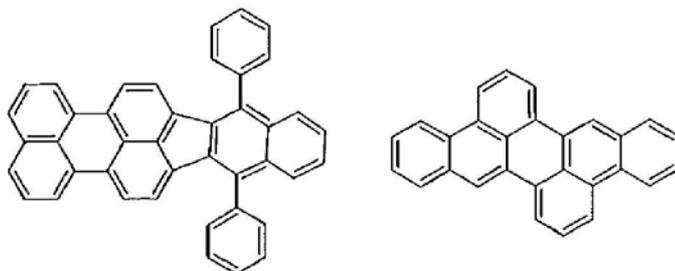


[0274] 而且,举出作为能够添加的材料优选的化合物例。例如,可以考虑作为稳定化材料进行添加等。

[0275] [化学式36]



[0276]



[0277] 通过上述方法所制作的有机电致发光元件是通过对所获得的元件的阳极与阴极之间施加电场而发光。此时，只要为基于激发单重态能量的发光，则与其能阶相应的波长的光被确认为荧光发光及延迟荧光发光。并且，只要为基于激发三重态能量的发光，则与其能阶相应的波长被确认为磷光。通常的荧光的荧光寿命短于延迟荧光发光，因此发光寿命能够根据荧光与延迟荧光进行区别。

[0278] 另一方面，关于磷光，由于如本发明的化合物那样的通常的有机化合物中激发三重态能量不稳定，热失活的速度常数大且发光的速度常数小而使其立即失活，因此在室温下几乎无法观测到。为了测量通常的有机化合物的激发三重态能量，能够通过观测极低温条件下的发光来进行测量。

[0279] 本发明的有机电致发光元件在单独的元件、由以阵列状配置的结构构成的元件、阳极与阴极以X-Y矩阵状配置的结构中的任一个中均能够应用。根据本发明，通过使发光层含有通式(1)所表示的化合物，可以获得发光效率得到大幅改善的有机发光元件。本发明的有机电致发光元件等有机发光元件能够进一步应用于各种用途。例如，使用本发明的有机电致发光元件能够制造有机电致发光显示装置，详细而言，能够参考时任静士、安达千波矢、村田英幸共著的“有机EL显示器”(Ohmsha, Ltd.)。并且，尤其本发明的有机电致发光元件也能够应用于需求较大的有机电致发光照明或背光中。

[0280] 实施例

[0281] 以下举出合成例及实施例对本发明的特征进行进一步具体的说明。以下所示的材料、处理内容、处理顺序等只要不脱离本发明的主旨，则能够适当进行变更。因此，本发明的范围不应被以下所示的具体例做限定性地解释。

[0282] 以下中的发光特性的评价是使用源表(Keithley公司制造:2400系列)、半导体参数分析仪(Agilent Technologies Japan, Ltd.制造:E5273A)、光功率计测量装置(Newport Corporation制造:1930C)、光谱仪(Ocean Optics公司制造:USB2000)、分光辐射计(TOPCON CORPORATION制造:SR-3)、氮气激光(USHIO INC.制造、激发波长337nm)及条纹照相机(Hamamatsu Photonics K.K.制造的C4334型)来进行的。

[0283] [最低激发单重态能级 (E_{S1}) 和最低激发三重态能级 (E_{T1}) 之差 ΔE_{ST} 的测量]

[0284] 根据对化合物进行测量而得的荧光光谱及磷光光谱以以下的方法计算出最低激发单重态能级 (E_{S1}) 和最低激发三重态能级 (E_{T1}), 并通过计算 $\Delta E_{ST} = E_{S1} - E_{T1}$ 来求出了化合物的最低激发单重态能级 (E_{S1}) 和最低激发三重态能级 (E_{T1}) 之差 ΔE_{ST} 。

[0285] (1) 最低激发单重态能级 (E_{S1})

[0286] 制备测量对象化合物的薄膜或者甲苯溶液 (浓度 10^{-5} mol/L) 作为试样。在常温 (300K) 下测量该试样的荧光光谱。荧光光谱中, 将纵轴设为发光, 将横轴设为波长。相对于该发光光谱的短波侧的上升划出切线, 求出该切线与横轴的交点的波长值 $\lambda_{\text{edge}} [\text{nm}]$ 。将该波长值利用如下所示的换算式换算成能量值, 将所得的值作为 E_{S1} 。

[0287] 换算式: $E_{S1} [\text{eV}] = 1239.85 / \lambda_{\text{edge}}$

[0288] 发光光谱的测量是将LED光源 (Thorlabs Japan Inc. 制造, M340L4) 用于激发光源, 并通过检测器 (Hamamatsu Photonics K.K. 制造, PMA-50) 来进行的。

[0289] (2) 最低激发三重态能级 (E_{T1})

[0290] 将与最低激发单重态能级 (E_{S1}) 的测量中所使用的试样相同的试样通过液态氮冷却至 77 [K], 对磷光测量用试样照射激发光 (340nm), 使用检测器对磷光进行测量。将从照射激发光后 100 毫秒以后的发光制成磷光光谱。相对于该磷光光谱的短波长侧的上升划出切线, 求出该切线与横轴的交点的波长值 $\lambda_{\text{edge}} [\text{nm}]$ 。将该波长值利用如下所示的换算式换算成能量值, 将所得的值作为 E_{T1} 。

[0291] 换算式: $E_{T1} [\text{eV}] = 1239.85 / \lambda_{\text{edge}}$

[0292] 对于磷光光谱的短波长侧的上升的切线如下划出。在光谱曲线上从磷光光谱的短波长侧起至光谱的极大值中最短波长侧的极大值进行移动时, 考虑朝向长波长侧的曲线上各点上的切线。随着曲线上升 (即, 随着纵轴增加), 该切线的斜率增加。将在该斜率的值取极大值的点上所划出的切线设为对于该磷光光谱的短波长侧的上升的切线。

[0293] 另外, 具有光谱的最大峰强度的 10% 以下的峰强度的极大点不包括在上述最短波长侧的极大值, 将在最接近于最短波长侧的极大值且斜率的值取极大值的点上所划出的切线设为对于该磷光光谱的短波长侧的上升的切线。

[0294] [基于计算化学方法的最低激发单重态能级 (E_{S1}) 和最低激发三重态能级 (E_{T1}) 之差 ΔE_{ST} 的计算]

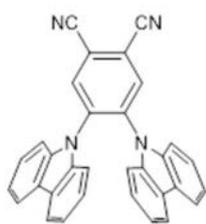
[0295] 本实施例中, 还通过计算化学方法来计算出化合物的最低激发单重态能级 (E_{S1}) 和最低激发三重态能级 (E_{T1}) 之差 ΔE_{ST} 。计算化学方法中使用了 GAUSSIAN 公司的 GAUSSIAN09 及 GAUSSIAN16 程序。在此, 对使基态单重态 S_0 的分子结构最适当化以及电子状态的计算中使用了 B3LYP/6-31G (d) 法, 对最低激发单重态能级 (E_{S1}) 和最低激发三重态能级 (E_{T1}) 的计算中使用了时间依赖密度泛函法 (TD-DFT) 法。根据所获得的最低激发单重态能级 (E_{S1}) 和最低激发三重态能级 (E_{T1}) 计算出 $\Delta E_{ST} = E_{S1} - E_{T1}$ 。

[0296] [本实施例中所使用的化合物]

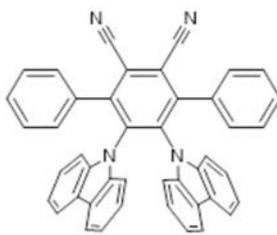
[0297] 以下示出本实施例中所使用的发明化合物及比较化合物、作为掺杂膜的主体所使用的 mCBP 的结构。

[0298] [化学式 37-1]

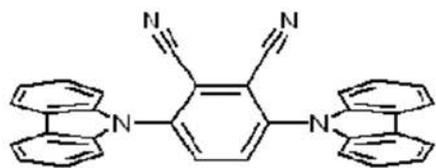
[0299]



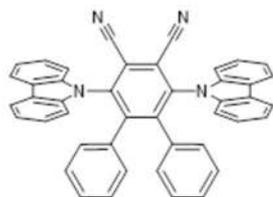
比较化合物1-1



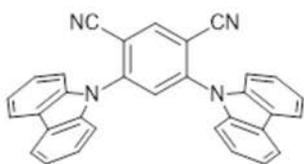
发明化合物1-1



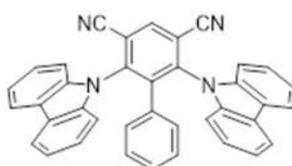
比较化合物2-1



发明化合物2-1

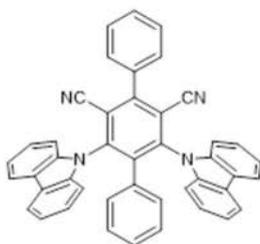


比较化合物3-1

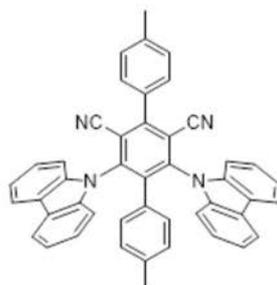


发明化合物3-1

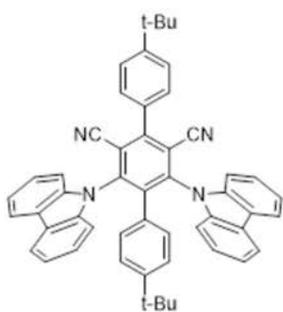
[0300]



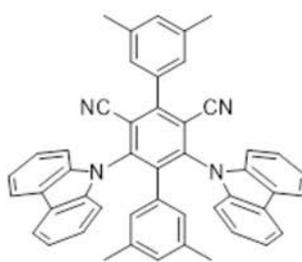
发明化合物3-2



发明化合物3-3

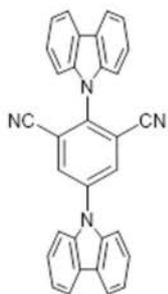


发明化合物3-4

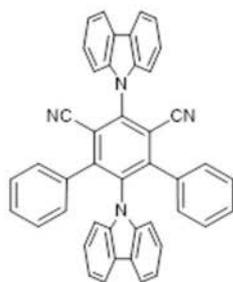


发明化合物3-5

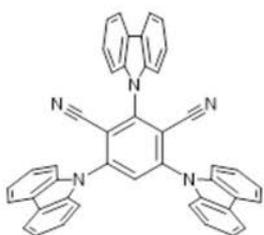
[0301] [化学式37-2]



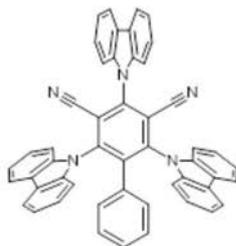
比较化合物4-1



发明化合物4-1

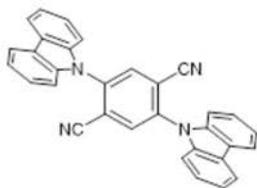


比较化合物5-1

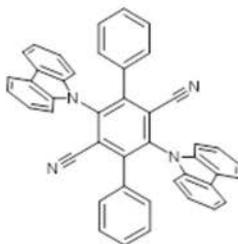


发明化合物5-1

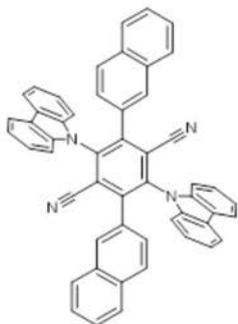
[0302]



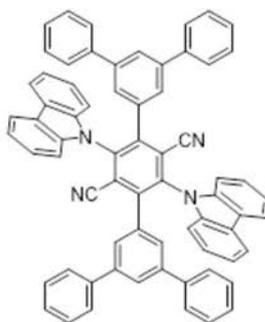
比较化合物6-1



发明化合物6-1

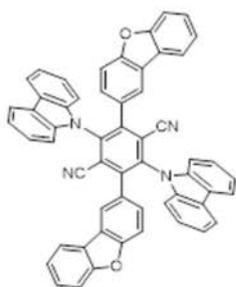


发明化合物6-2

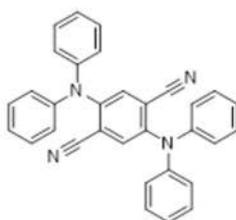


发明化合物6-3

[0303] [化学式37-3]

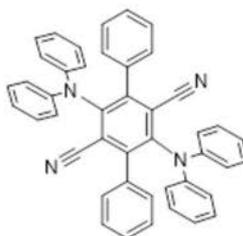


发明化合物6-4

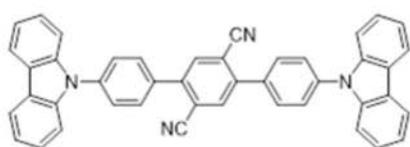


[0304]

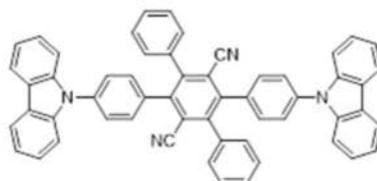
比较化合物7-1



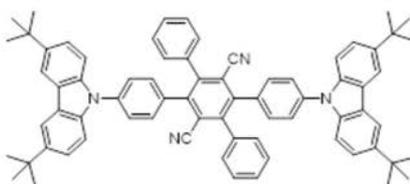
发明化合物7-1



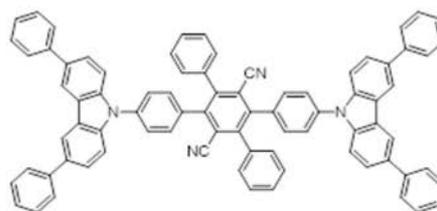
比较化合物8-1



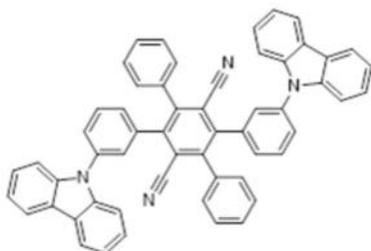
发明化合物8-1



发明化合物8-2

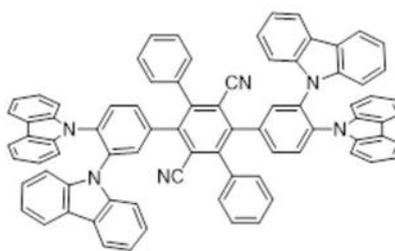


发明化合物8-3



[0305]

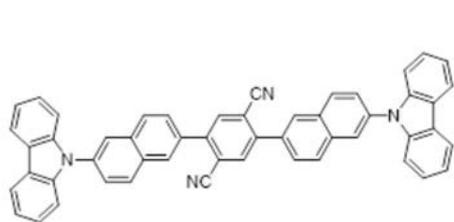
发明化合物8-4



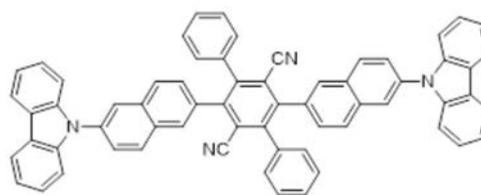
发明化合物8-5

[0306]

[化学式37-4]

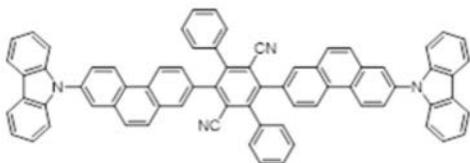


比较化合物9-1

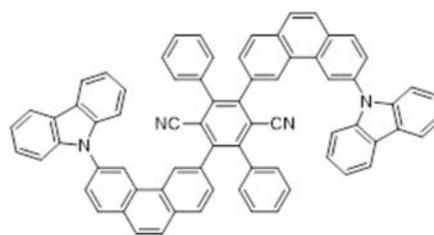


发明化合物9-1

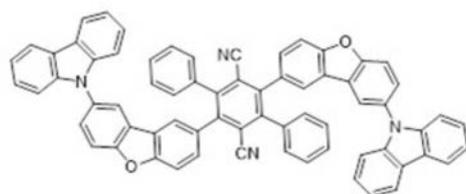
[0307]



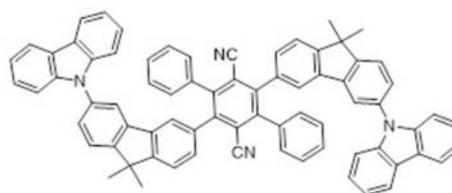
发明化合物9-2



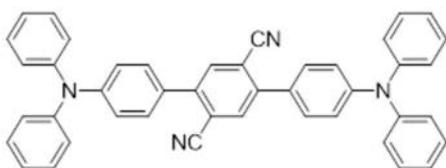
发明化合物9-3



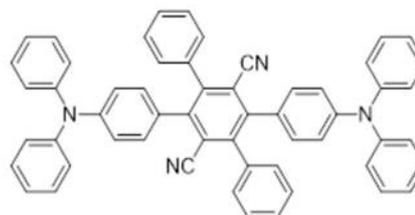
发明化合物9-4



发明化合物9-5

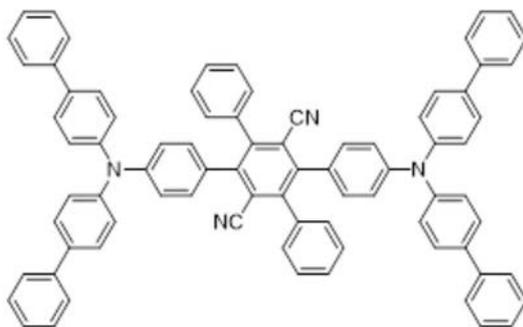


比较化合物10-1



发明化合物10-1

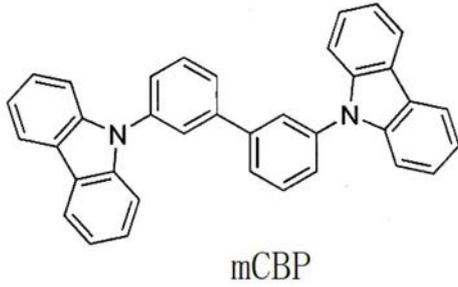
[0308]



发明化合物10-2

[0309] [化学式37-5]

[0310]



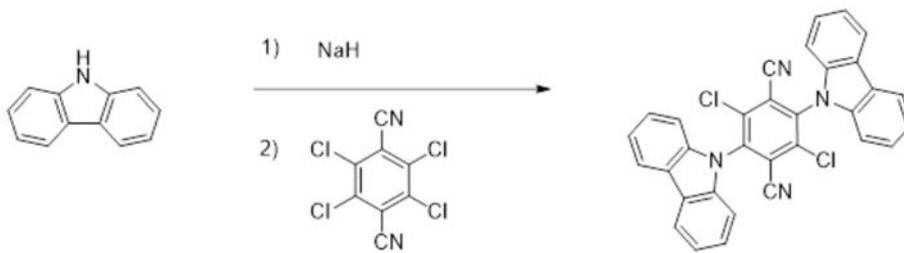
[0311] [A]化合物的合成

[0312] (合成例1)发明化合物6-1的合成

[0313] (1) 中间体1的合成

[0314] [化学式38]

[0315]



中间体1

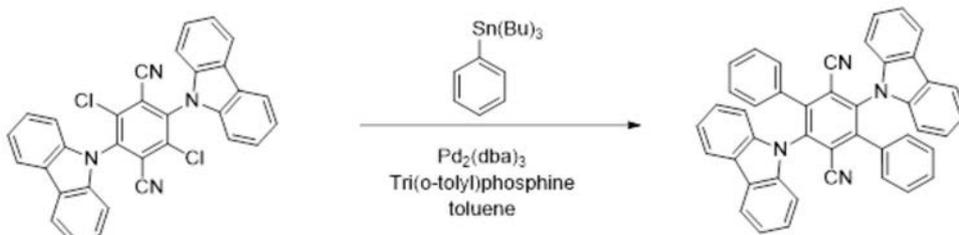
[0316] 将0.94mg (23.5mmol) 的60%氢化钠投入到300mL三口烧瓶,使氢化钠干燥,将该烧瓶内置换成氮,加入200mL的四氢呋喃(脱水溶剂)并进行了搅拌。向该混合物加入3.14g (18.8mmol) 的9H-咔唑,在氮气流下于室温搅拌了60分钟。搅拌后,向该混合物加入2.50g (9.40mmol) 的四氯对苯二甲腈,将该混合物在氮气氛下于室温搅拌了12小时。搅拌后,向该混合物加入水且进行搅拌,并对该沉淀物进行了过滤。过滤后,根据硅胶柱色谱法对该混合物进行了纯化。柱色谱法中,将甲苯:己烷的混合溶剂用作展开溶剂。将对所获得的组分进行浓缩而得的固体利用丙酮和己烷的混合溶剂重结晶的结果,以产量2.01g、收率40.3%获得了黄色粉末状固体。

[0317] $^1\text{H NMR}$ (500Hz、 CDCl_3 、 δ): 8.21 (d、 $J=10\text{Hz}$ 、2H)、7.54 (td、 $J=7.5\text{Hz}$ 、 $J=1\text{Hz}$ 、2H)、7.45 (td、 $J=7.5\text{Hz}$ 、 $J=1\text{Hz}$ 、2H)、7.15 (d、 $J=8.5\text{Hz}$ 、2H)

[0318] 质谱分析:526.0

[0319] [化学式39]

[0320]



发明化合物6-1

[0321] (2) 发明化合物6-1的合成

[0322] 向200mL三颈瓶加入1.55g (2.93mmol)的中间体1、3.2g (8.8mmol)的三丁基苯基锡、0.10g (0.093mmol)的三(二亚苄基丙酮)二钯(0)、0.26g (0.88mmol)的三(邻甲苯基)磷化氢,将该烧瓶内置换成氮。向该混合物加入70mL的甲苯,在氮气氛下以100℃搅拌了24小时。根据硅胶柱色谱法对该混合物进行了纯化。柱色谱法中,将乙酸乙酯:己烷=1:9的混合溶剂用作展开溶剂。将对所获得的组分进行浓缩而得的固体利用丙酮和己烷的混合溶剂重结晶的结果,以产量0.36g、收率20.2%获得了黄色粉末状固体。

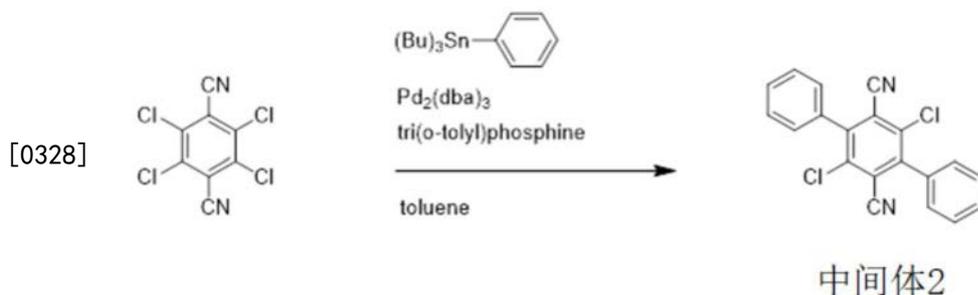
[0323] $^1\text{H NMR}$ (500Hz、 CDCl_3 , δ): 8.03 (d, $J=7.9\text{Hz}$, 4H)、7.42 (t, $J=8.0\text{Hz}$, 4H)、7.28 (t, $J=7.9\text{Hz}$, 4H)、7.19 (d, $J=8.1\text{Hz}$, 4H)、7.14 (d, $J=7.0\text{Hz}$, 4H)、7.09 (t, $J=7.9\text{Hz}$, 2H)、7.42 (t, $J=7.7\text{Hz}$, 4H)

[0324] 质谱分析:610.10

[0325] (合成例2)发明化合物8-1的合成

[0326] (1) 中间体2的合成

[0327] [化学式40]

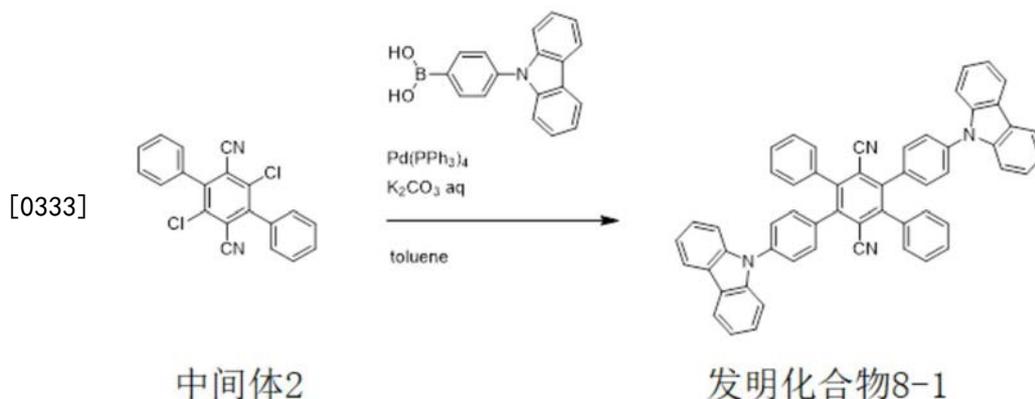


[0329] 向烧瓶加入0.26g (1.0mmol)的四氯对苯二甲腈、0.81g (2.2mmol)的三丁基苯基锡、0.03g (0.03mmol)的三(二亚苄基丙酮)二钯(0)及0.09g (0.3mmol)的三(邻甲苯基)磷化氢,将该烧瓶内置换成氮之后,加入20mL的甲苯,在氮气氛下以120℃搅拌了24小时。搅拌后,将混合物降温至室温,根据硅胶柱色谱法进行了纯化。对柱色谱法的展开溶剂使用了甲苯及己烷。将对所获得的组分进行浓缩而得的固体利用二氯甲烷及己烷重结晶的结果,以产量0.070g、收率20%获得了中间体2。

[0330] 质谱分析:347.98

[0331] (2) 发明化合物8-1的合成

[0332] [化学式41]



[0334] 向显微管加入0.17g (0.5mmol)的中间体2、0.31g (1.1mmol)的4-(9H-咔唑基)苯硼酸及15mL的脱水甲苯。向该混合物加入0.11g (0.1mmol)的四(三苯基磷化氢)二钯(0)、6mL

的2M的碳酸钾水溶液,在80℃下搅拌72小时。搅拌后,将混合物降温至室温,从而获取混合物中的沉淀物。通过依次利用水、己烷、甲醇洗净该沉淀物而可获得发明化合物8-1。

[0335] [B]基于计算化学方法的 ΔE_{ST} 的计算

[0336] 将根据计算化学方法计算出的上述各发明化合物及各比较化合物的最低激发单重态能级 (E_{S1})、最低激发三重态能级 (E_{T1}) 及这些能量差 ΔE_{ST} 示于表6~表15。各表中的发明化合物的“相对值”是将相对应的比较化合物(相同的表中所揭示的比较化合物)的 ΔE_{ST} 设为1.00来计算出的各发明化合物的 ΔE_{ST} 的相对值。

[0337] [表6]

	E_{S1} (eV)	E_{T1} (eV)	ΔE_{ST} (eV)	相对值
比较化合物1-1	2.842	2.501	0.341	1.00
发明化合物1-1	2.627	2.473	0.154	0.45

[0339] [表7]

	E_{S1} (eV)	E_{T1} (eV)	ΔE_{ST} (eV)	相对值
比较化合物2-1	2.665	2.489	0.176	1.00
发明化合物2-1	2.598	2.553	0.045	0.25

[0341] [表8]

	E_{S1} (eV)	E_{T1} (eV)	ΔE_{ST} (eV)	相对值
比较化合物3-1	2.806	2.601	0.205	1.00
发明化合物3-1	2.584	2.524	0.061	0.30
发明化合物3-2	2.629	2.570	0.059	0.29
发明化合物3-3	2.651	2.591	0.061	0.29
发明化合物3-4	2.657	2.596	0.061	0.30
发明化合物3-5	2.662	2.604	0.059	0.29

[0343] [表9]

	E_{S1} (eV)	E_{T1} (eV)	ΔE_{ST} (eV)	相对值
比较化合物4-1	2.704	2.599	0.105	1.00
发明化合物4-1	2.719	2.663	0.055	0.53

[0345] [表10]

	E_{S1} (eV)	E_{T1} (eV)	ΔE_{ST} (eV)	相对值
比较化合物5-1	2.684	2.568	0.116	1.00
发明化合物5-1	2.487	2.449	0.039	0.33

[0347] [表11]

	E_{S1} (eV)	E_{T1} (eV)	ΔE_{ST} (eV)	相对值
比较化合物 6-1	2.477	2.294	0.183	1.00
发明化合物 6-1	2.498	2.420	0.079	0.43
发明化合物 6-2	2.509	2.426	0.084	0.46

[0348]

[0349]	发明化合物 6-3	2.493	2.415	0.078	0.42
	发明化合物 6-4	2.477	2.414	0.063	0.35

[0350] [表12]

[0351]		E_{S1} (eV)	E_{T1} (eV)	ΔE_{ST} (eV)	相对值
	比较化合物7-1	2.531	2.097	0.434	1.00
	发明化合物7-1	2.379	2.133	0.246	0.57

[0352] [表13]

[0353]		E_{S1} (eV)	E_{T1} (eV)	ΔE_{ST} (eV)	相对值
	比较化合物8-1	2.577	2.419	0.158	1.00
	发明化合物8-1	2.706	2.642	0.064	0.40
	发明化合物8-2	2.566	2.516	0.050	0.32
	发明化合物8-3	2.554	2.515	0.039	0.24
	发明化合物8-4	2.452	2.375	0.077	0.49
	发明化合物8-5	2.586	2.574	0.012	0.08

[0354] [表14]

[0355]		E_{S1} (eV)	E_{T1} (eV)	ΔE_{ST} (eV)	相对值
	比较化合物9-1	2.586	2.336	0.250	1.00
	发明化合物9-1	2.746	2.525	0.221	0.88
	发明化合物9-2	2.800	2.618	0.182	0.73
	发明化合物9-3	2.755	2.560	0.196	0.78
	发明化合物9-4	2.766	2.761	0.004	0.02
	发明化合物9-5	2.778	2.776	0.003	0.01

[0356] [表15]

[0357]		E_{S1} (eV)	E_{T1} (eV)	ΔE_{ST} (eV)	相对值
	比较化合物10-1	2.517	2.236	0.281	1.00
	发明化合物10-1	2.534	2.434	0.100	0.35
	发明化合物10-2	2.452	2.375	0.077	0.27

[0358] 如各表所示,具有氰基、芳基及供体基团的各发明化合物的 ΔE_{ST} 值相较于与其相对应的比较化合物(缺少芳基Ar的比较化合物)为较小的值。

[0359] [C]薄膜的制作和评价

[0360] (实施例1)仅由发明化合物6-1组成的薄膜的制作和评价

[0361] 利用真空蒸镀法在真空度小于 1×10^{-3} Pa 的条件下,将发明化合物6-1蒸镀于石英基板上,并以70nm的厚度形成了仅由发明化合物6-1组成的薄膜。

[0362] 使用337nm激发光观察了所获得的薄膜的发光光谱的结果,峰波长(λ_{max})为530nm。图2示出荧光光谱和磷光光谱。将使用337nm激发光观察到的发光的瞬态衰减曲线示于图3。延迟荧光的寿命(τ_d)为5.62 μ s(微秒)。并且,测量了 ΔE_{ST} 的结果,为0.123eV。而且,使用300nm激发光来测量了光致发光量子效率(PLQY)的结果,在空气中为36.0%,在氮中为

39.9%。

[0363] (实施例2) 使用了发明化合物6-1而得的掺杂薄膜的制作和评价

[0364] 利用真空蒸镀法在真空度小于 1×10^{-3} Pa的条件下,根据不同的蒸镀源将发明化合物6-1和mCBP蒸镀于石英基板上,并以100nm的厚度形成了发明化合物6-1的浓度为20重量%的薄膜。

[0365] 使用337nm激发光观察了所获得的薄膜的发光光谱的结果,峰波长(λ_{\max})为518nm。将使用337nm激发光观察到的发光的瞬态衰减曲线示于图4。延迟荧光的寿命(τ_d)为9.16 μ s(微秒)。而且,使用300nm激发光测量了光致发光量子效率(PLQY)的结果,在氮中为65.7%。

[0366] (比较例1) 仅由比较化合物6-1组成的薄膜的制作和评价

[0367] 使用了比较化合物6-1来代替发明化合物6-1,除此以外,以与实施例1相同的方式,以70nm的膜厚形成了仅由比较化合物6-1组成的薄膜。

[0368] 测量了所获得的薄膜的 ΔE_{ST} 的结果,为0.213eV。

[0369] (比较例2) 使用了比较化合物6-1而得的掺杂薄膜的制作和评价

[0370] 使用了比较化合物6-1来代替发明化合物6-1,除此以外,以与实施例2相同的方式,以100nm的膜厚形成了比较化合物6-1的浓度为20重量%的薄膜。

[0371] 将使用337nm激发光观察到的所获得的薄膜的发光的瞬态衰减曲线示于图5。并且,对图4所示的实施例2的发光的瞬态衰减曲线的横轴及纵轴的比例进行变更并将其一同示于图5中。比较例2的薄膜的延迟荧光的寿命(τ_d)为76.8 μ s(微秒)。

[0372] 比较了实施例1及比较例1的测量结果,其结果,实施例1中所制作的发明化合物6-1的薄膜的 ΔE_{ST} 相对于比较例1中所制作的比较化合物6-1的薄膜的 ΔE_{ST} 大约为0.58倍。并且,若看表11的计算结果,则发明化合物6-1的 ΔE_{ST} 相对于比较化合物6-1的薄膜的 ΔE_{ST} 大约为0.43倍。由此,可以确认 ΔE_{ST} 的计算结果的趋势与实际测量值的趋势相符合。并且,实施例2的薄膜的延迟荧光的寿命(τ_d)相对于比较例2的薄膜的延迟荧光的寿命(τ_d)大约为0.12倍,发明化合物6-1的 τ_d 相较于比较化合物6-1的 τ_d 非常短。这是因为,发明化合物6-1中,由于 ΔE_{ST} 小而容易引起从激发三重态向激发单重态向的反向系间窜越。

[0373] 根据以上的测量结果及计算结果可知,示出本实施例中所采用的发明化合物的 ΔE_{ST} 相较于所对应的比较化合物的 ΔE_{ST} 均较小,由此,这种发明化合物容易产生反向系间窜越,即其延迟荧光寿命短。如此应用了发光寿命短的化合物的电致发光元件可缓和由高电流密度区域中的激子积累引起的发光效率的降低和由元件的长时间驱动引起的劣化,从而显示出优异的元件性能。根据这种结果可知,通式(1)所表示的化合物能够对实现这种发光元件做出巨大贡献。

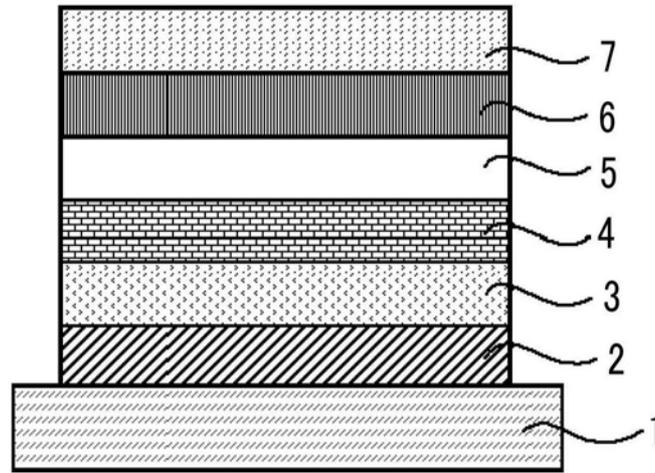


图1

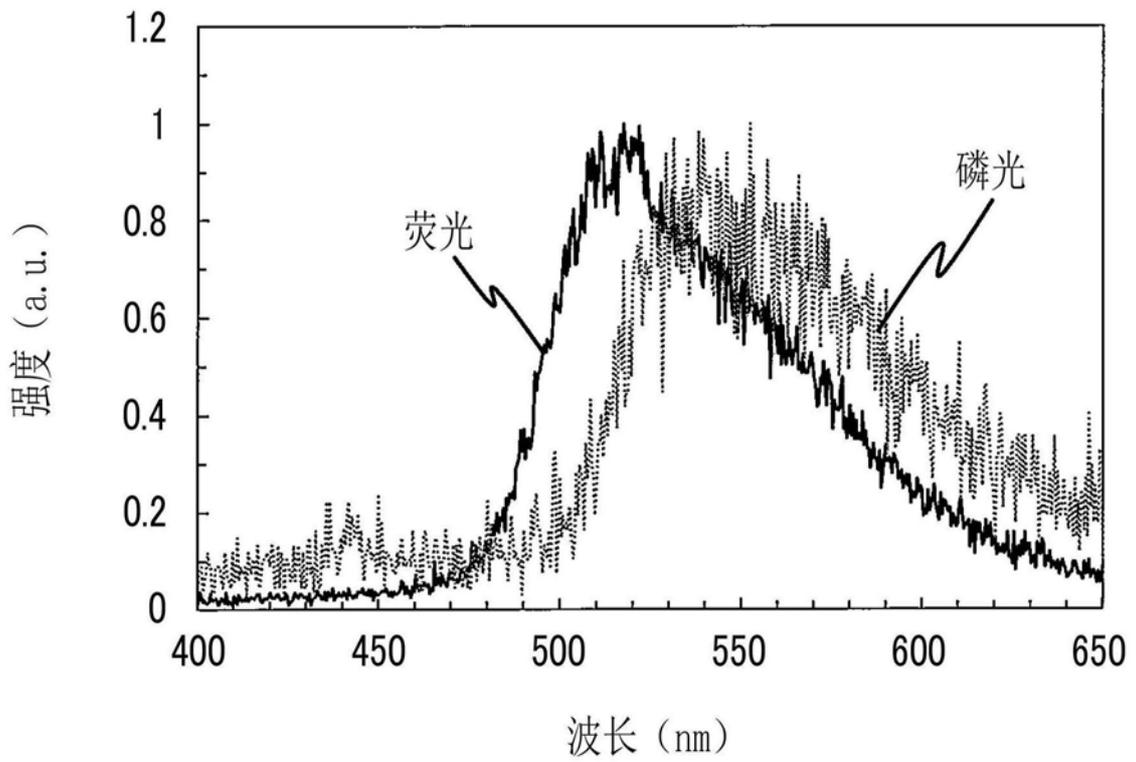


图2

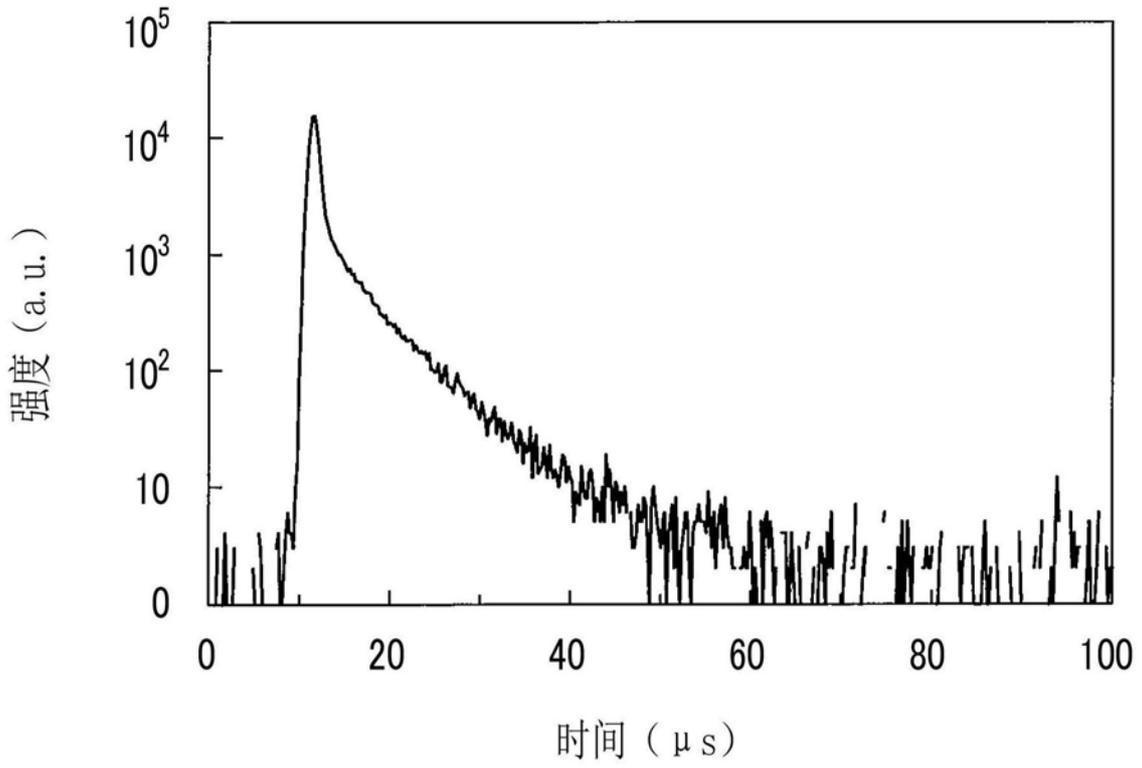


图3

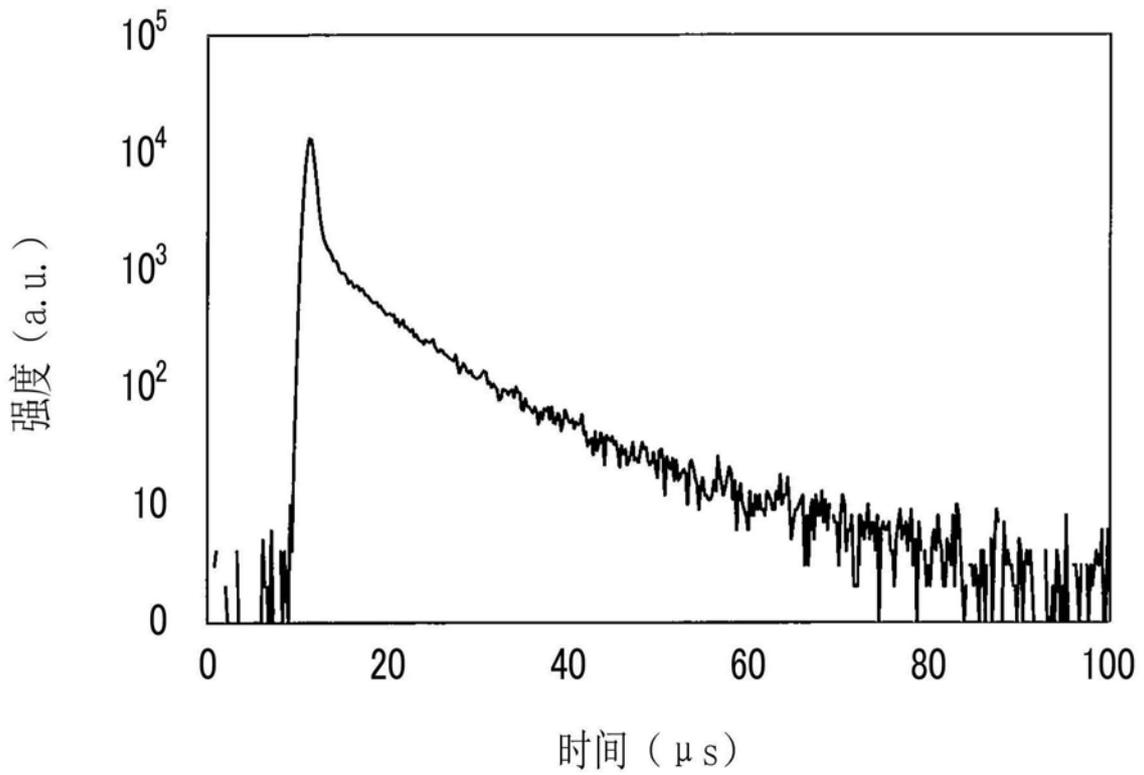


图4

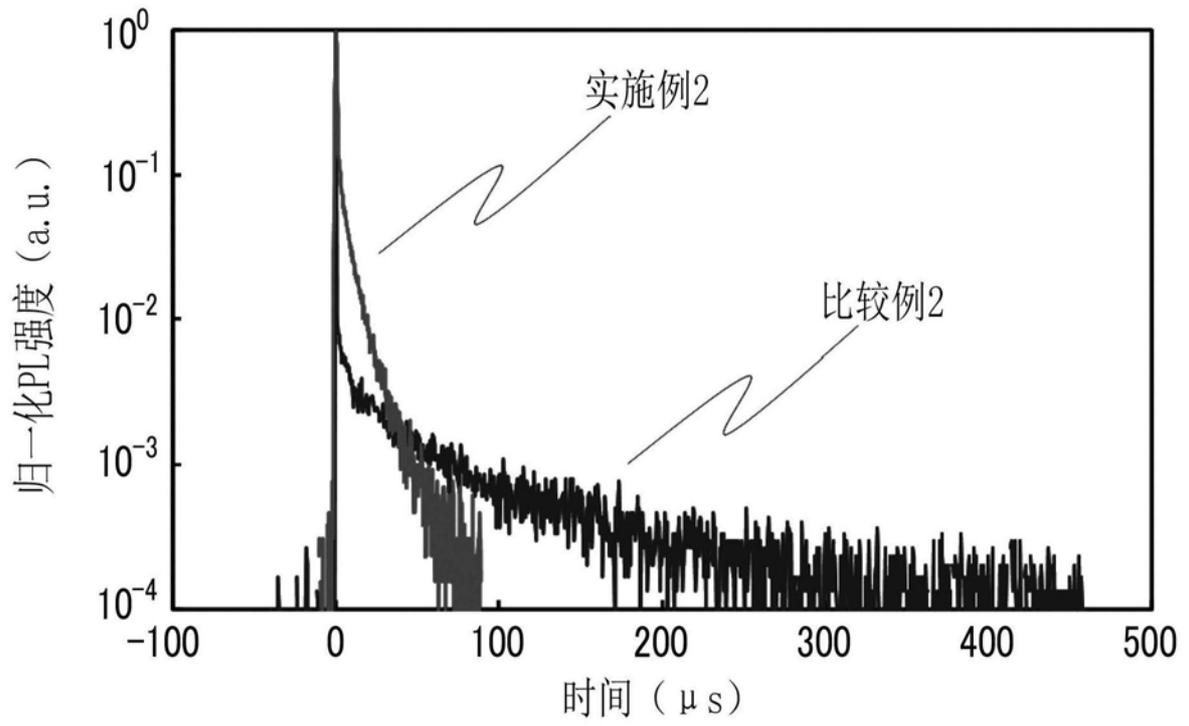


图5