



(12) 发明专利

(10) 授权公告号 CN 111655674 B

(45) 授权公告日 2024. 01. 23

(21) 申请号 201980010449.7

(22) 申请日 2019.01.28

(65) 同一申请的已公布的文献号
申请公布号 CN 111655674 A

(43) 申请公布日 2020.09.11

(30) 优先权数据
2018-012793 2018.01.29 JP

(85) PCT国际申请进入国家阶段日
2020.07.28

(86) PCT国际申请的申请数据
PCT/JP2019/002729 2019.01.28

(87) PCT国际申请的公布数据
W02019/146781 JA 2019.08.01

(73) 专利权人 出光兴产株式会社
地址 日本国东京都

(72) 发明人 伊藤裕胜 羽毛田匡 工藤裕

(74) 专利代理机构 中科专利商标代理有限责任
公司 11021
专利代理师 王铭浩

(51) Int.Cl.
C07D 307/91 (2006.01)
H10K 85/60 (2023.01)
H10K 50/15 (2023.01)

(56) 对比文件
CN 105541790 A, 2016.05.04
CN 102596907 A, 2012.07.18
CN 104903421 A, 2015.09.09
CN 105712962 A, 2016.06.29
KR 20170100709 A, 2017.09.05

审查员 袁腊梅

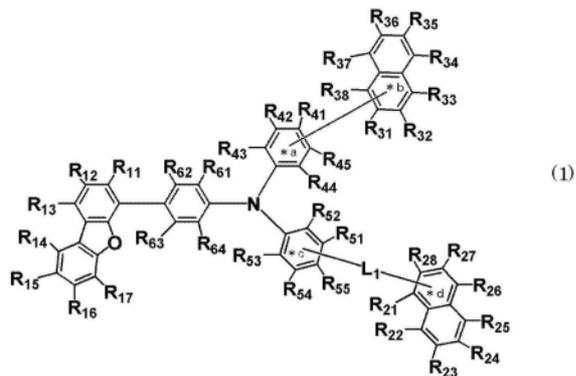
权利要求书11页 说明书44页 附图1页

(54) 发明名称

化合物和使用该化合物的有机电致发光元
件

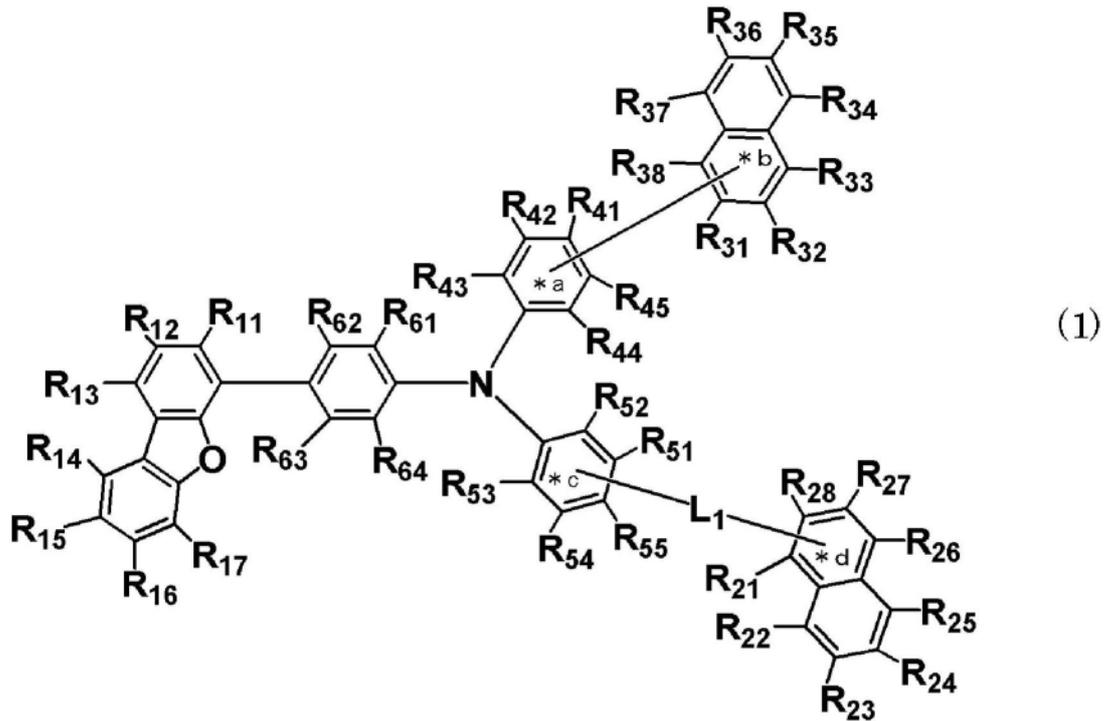
(57) 摘要

提供外部量子效率高且长寿命的有机EL元
件和能够实现其的化合物,使用下述式(1)所示
的化合物。



上述式中, R₁₁ ~ R₁₇、R₂₁ ~ R₂₈、R₃₁ ~ R₃₈、R₄₁ ~ R₄₅、
R₅₁ ~ R₅₅、R₆₁ ~ R₆₄、L₁与说明书中定义相同。

1. 下述式 (1) 所示的化合物,



式 (1) 中,

$R_{11} \sim R_{17}$ 和 $R_{61} \sim R_{64}$ 各自独立地为氢原子、或者未取代的碳数 1 ~ 20 的烷基,

$R_{41} \sim R_{45}$ 中的 1 个表示与 *a 键合的单键, 与 *a 键合的单键以外的 $R_{41} \sim R_{45}$ 各自独立地为氢原子、或者未取代的碳数 1 ~ 20 的烷基,

$R_{51} \sim R_{55}$ 中的 1 个表示与 *c 键合的单键, 与 *c 键合的单键以外的 $R_{51} \sim R_{55}$ 各自独立地为氢原子、或者未取代的碳数 1 ~ 20 的烷基,

$R_{21} \sim R_{28}$ 中的 1 个表示与 *d 键合的单键, 与 *d 键合的单键以外的 $R_{21} \sim R_{28}$ 各自独立地为氢原子、取代或未取代的碳数 1 ~ 20 的烷基、或者取代或未取代的成环碳数 6 ~ 50 的芳基,

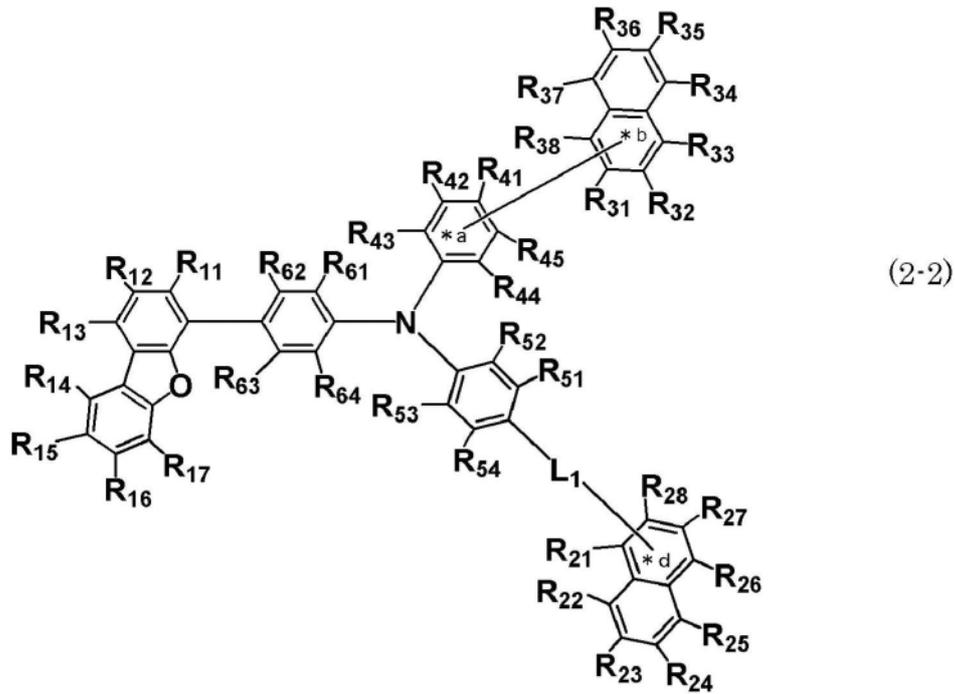
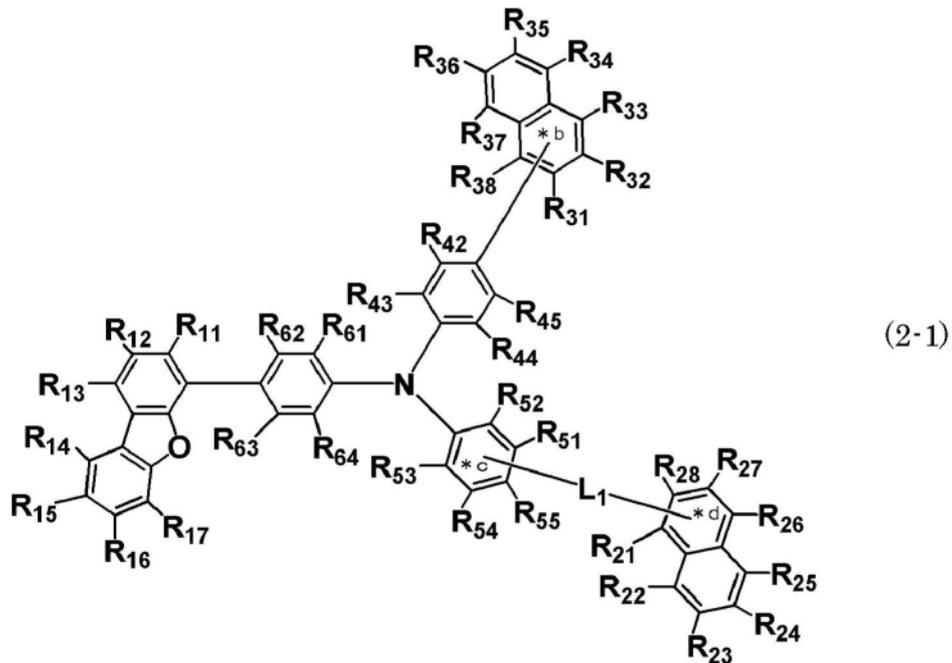
$R_{31} \sim R_{38}$ 中的 1 个表示与 *b 键合的单键, 与 *b 键合的单键以外的 $R_{31} \sim R_{38}$ 各自独立地为氢原子、取代或未取代的碳数 1 ~ 20 的烷基、或者取代或未取代的成环碳数 6 ~ 50 的芳基,

L_1 为单键、取代或未取代的亚苯基、或者取代或未取代的亚联苯基,

在 $R_{11} \sim R_{17}$ 、 $R_{21} \sim R_{28}$ 、 $R_{31} \sim R_{38}$ 、 $R_{41} \sim R_{45}$ 、 $R_{51} \sim R_{55}$ 和 $R_{61} \sim R_{64}$ 中, 相邻的取代基彼此不相互键合不形成环,

表述为“取代或未取代的”时的取代基选自未取代的碳数 1 ~ 18 的烷基、未取代的成环碳数 3 ~ 10 的环烷基、未取代的成环碳数 6 ~ 18 的芳基、卤素原子、氰基。

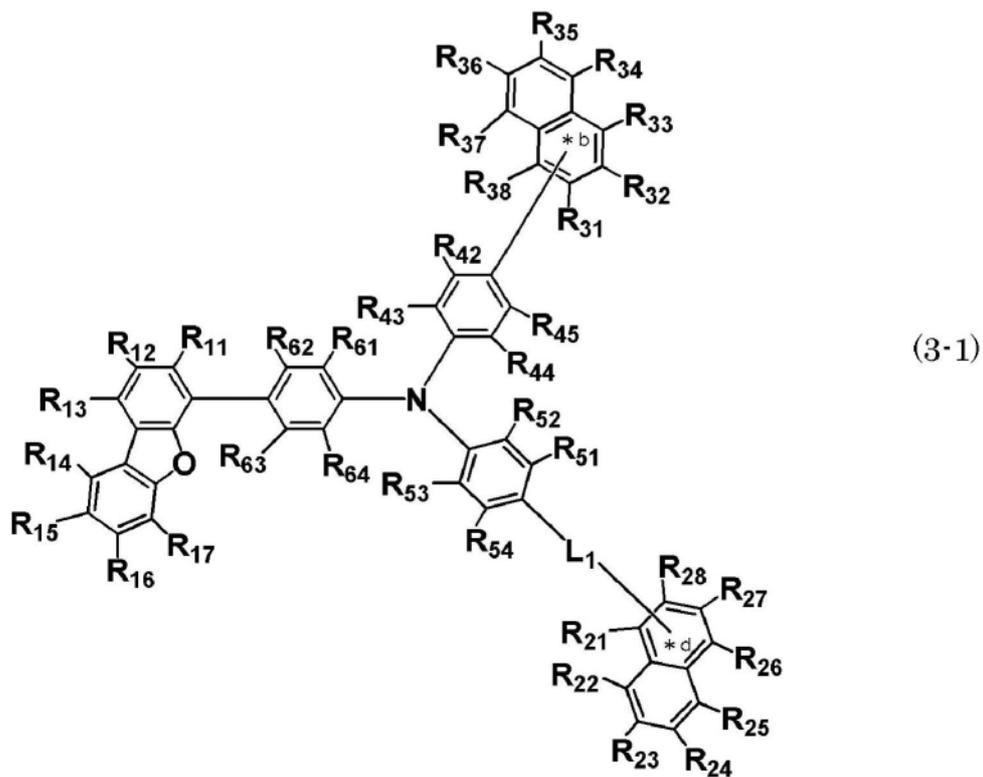
2. 根据权利要求 1 所述的化合物, 其中, 所述式 (1) 所示的化合物由下述式 (2-1) 或式 (2-2) 表示,



式(2-1)、式(2-2)中,

*a、*b、*c、*d、 $R_{11} \sim R_{17}$ 、 $R_{21} \sim R_{28}$ 、 $R_{31} \sim R_{38}$ 、 $R_{41} \sim R_{45}$ 、 $R_{51} \sim R_{55}$ 、 $R_{61} \sim R_{64}$ 和 L_1 与所述式(1)中的定义相同。

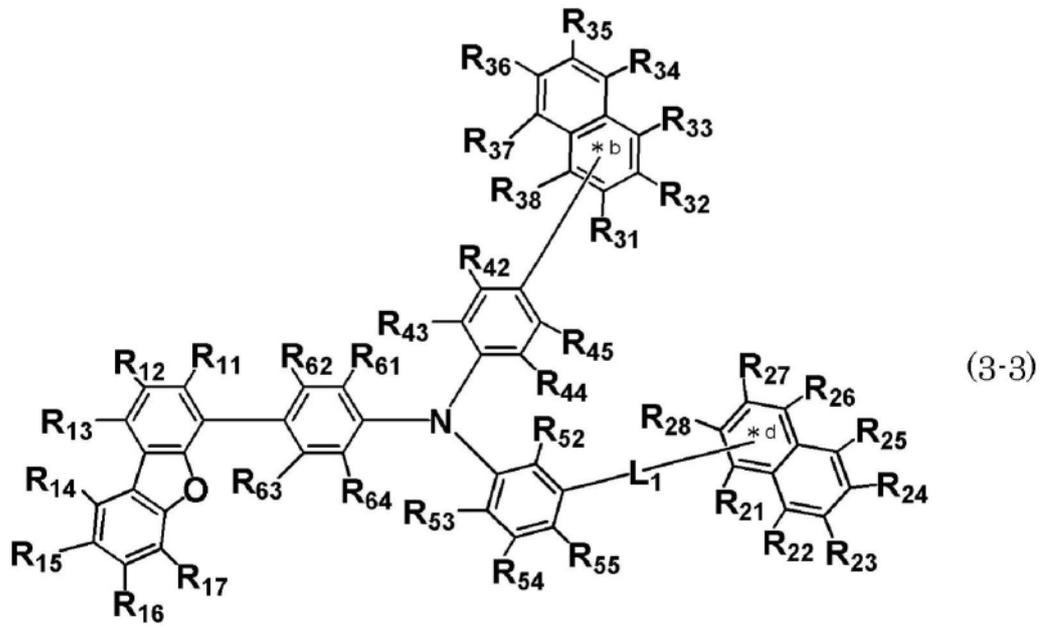
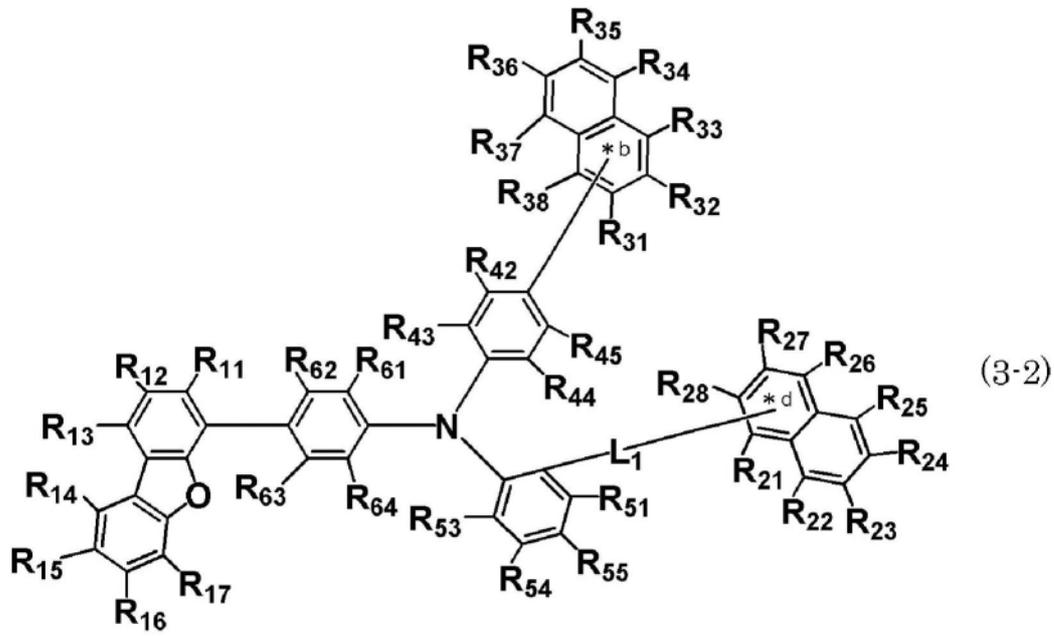
3. 根据权利要求1所述的化合物,其中,所述式(1)所示的化合物由下述式(3-1)表示,

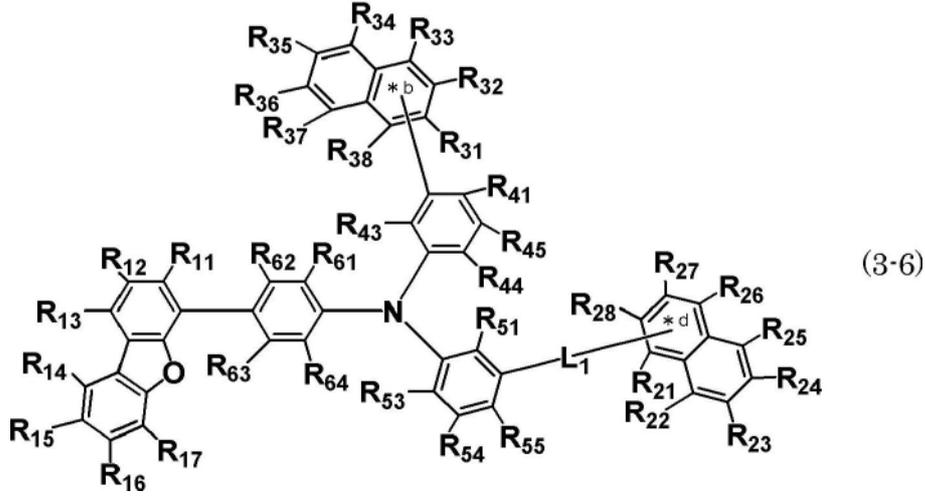
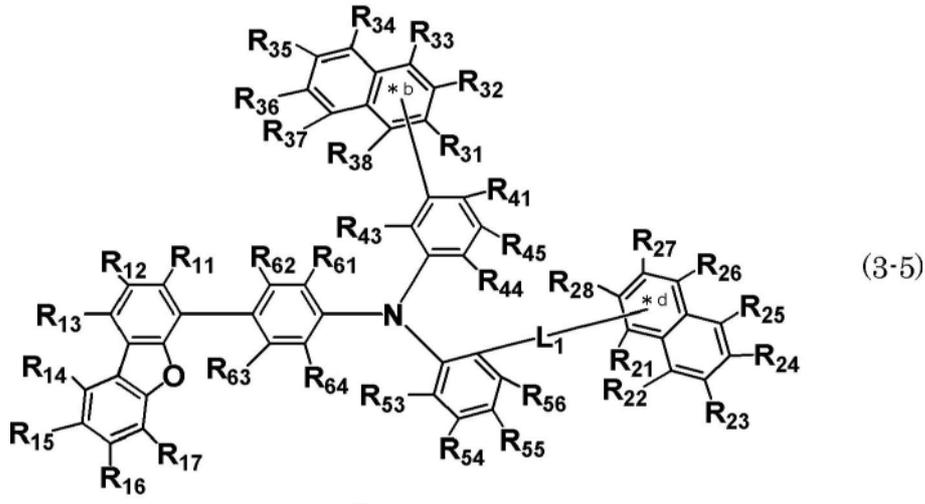
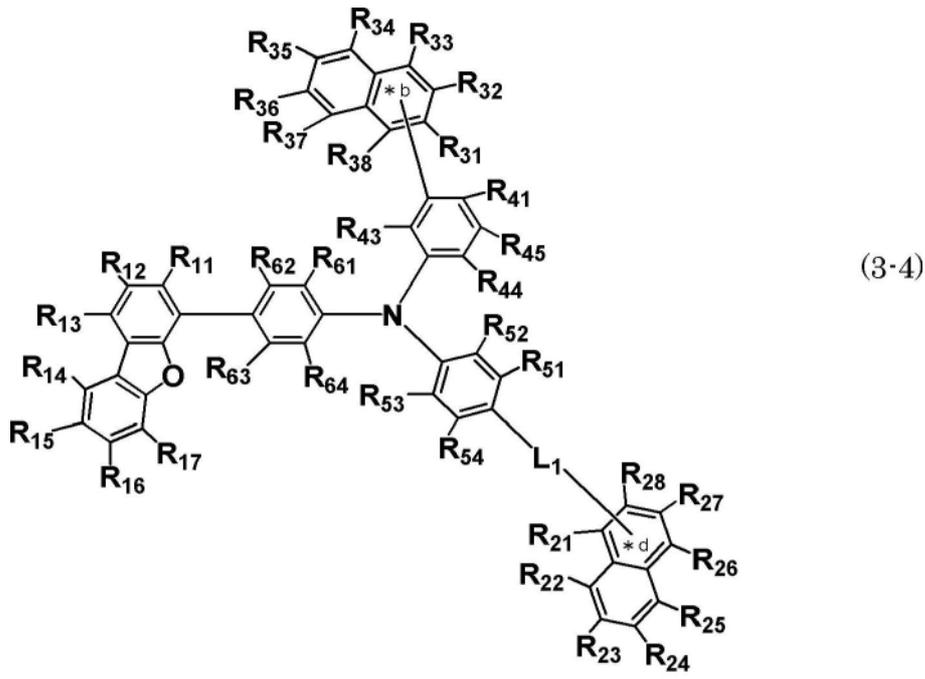


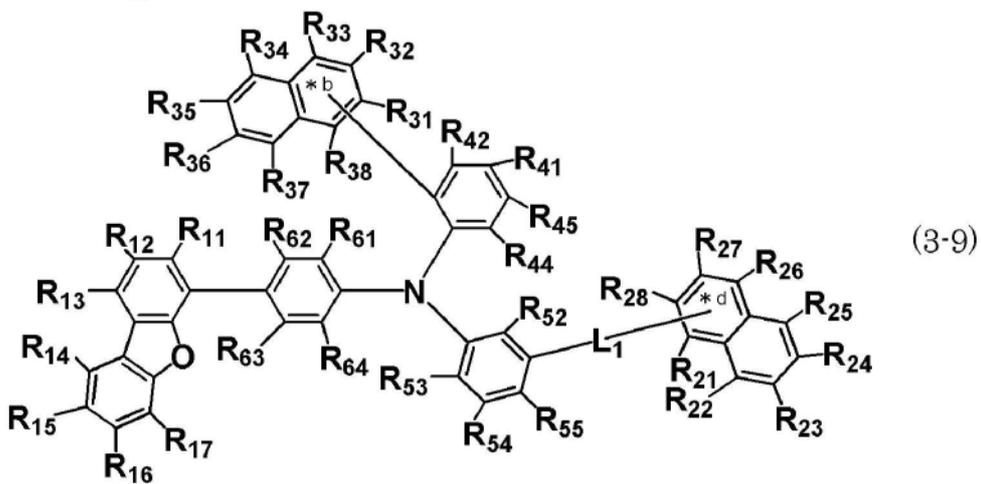
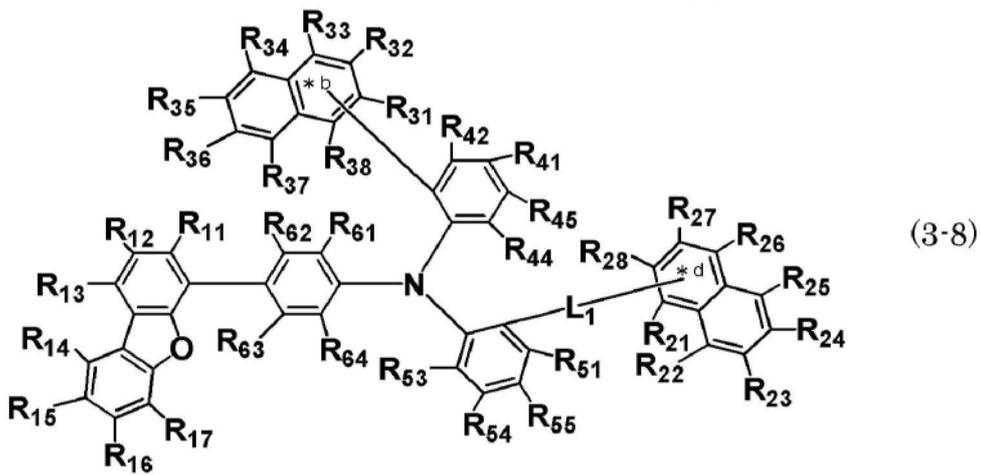
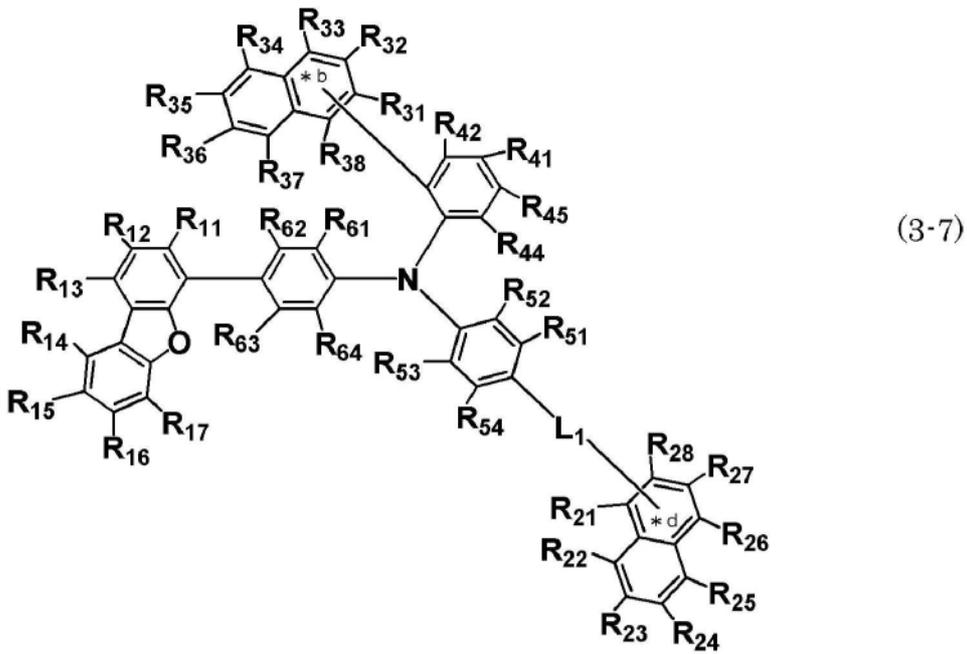
式(3-1)中,

*b、*d、 $R_{11} \sim R_{17}$ 、 $R_{21} \sim R_{28}$ 、 $R_{31} \sim R_{38}$ 、 $R_{42} \sim R_{45}$ 、 $R_{51} \sim R_{54}$ 、 $R_{61} \sim R_{64}$ 和 L_1 与所述式(1)中的定义相同。

4. 根据权利要求1所述的化合物,其中,所述式(1)所示的化合物由下述式(3-2)~式(3-9)中的任一式表示,

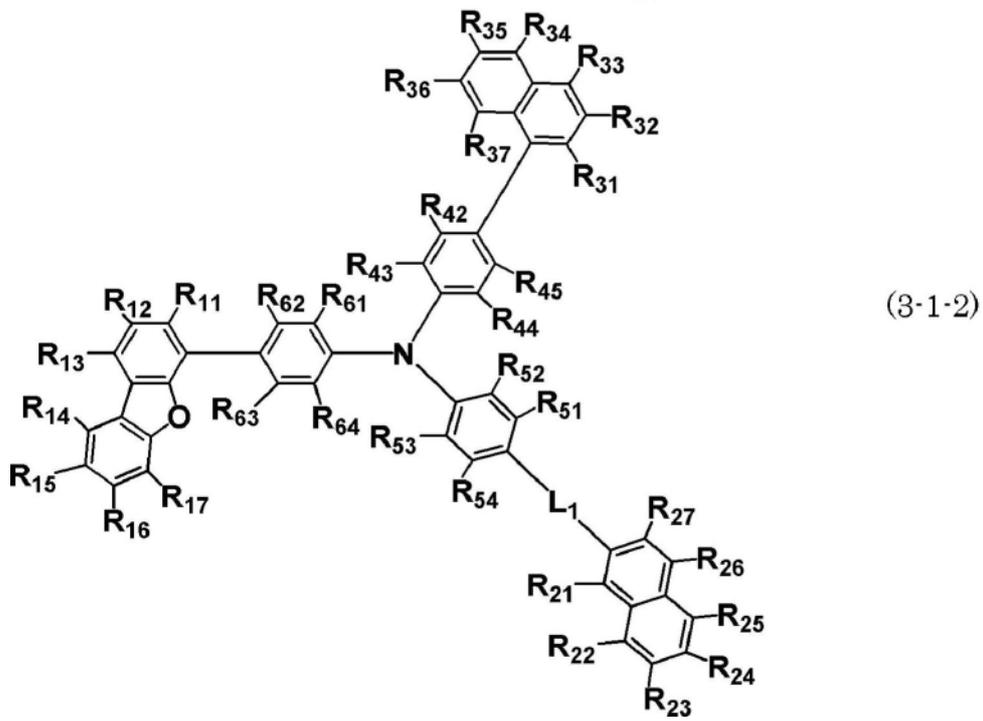
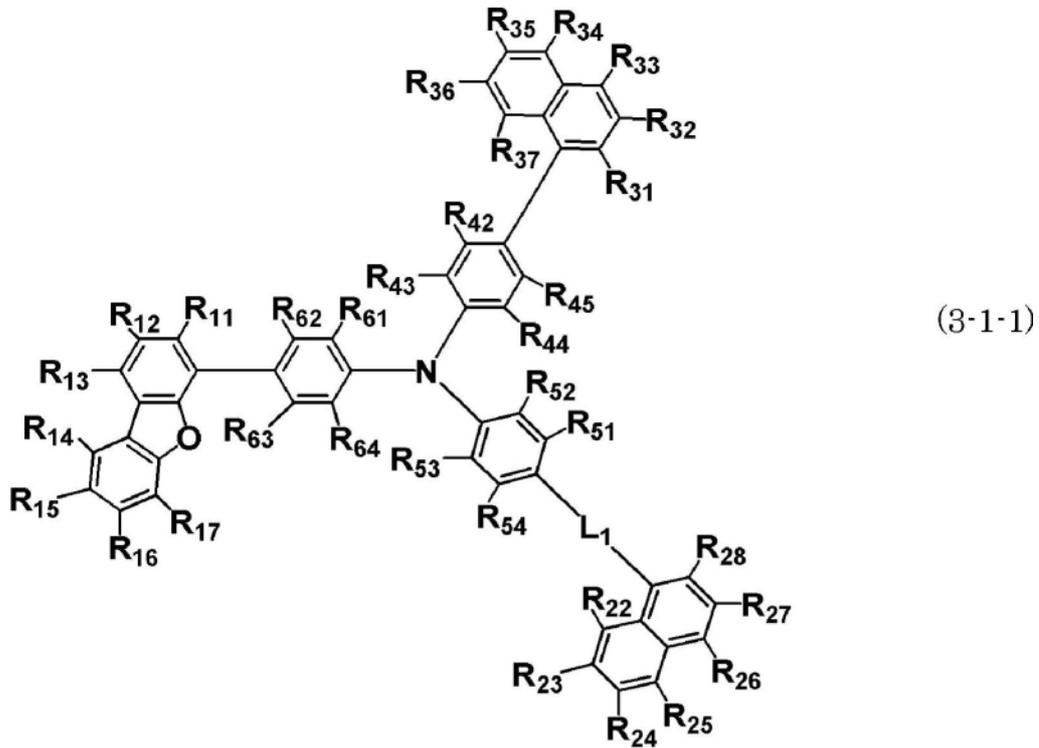


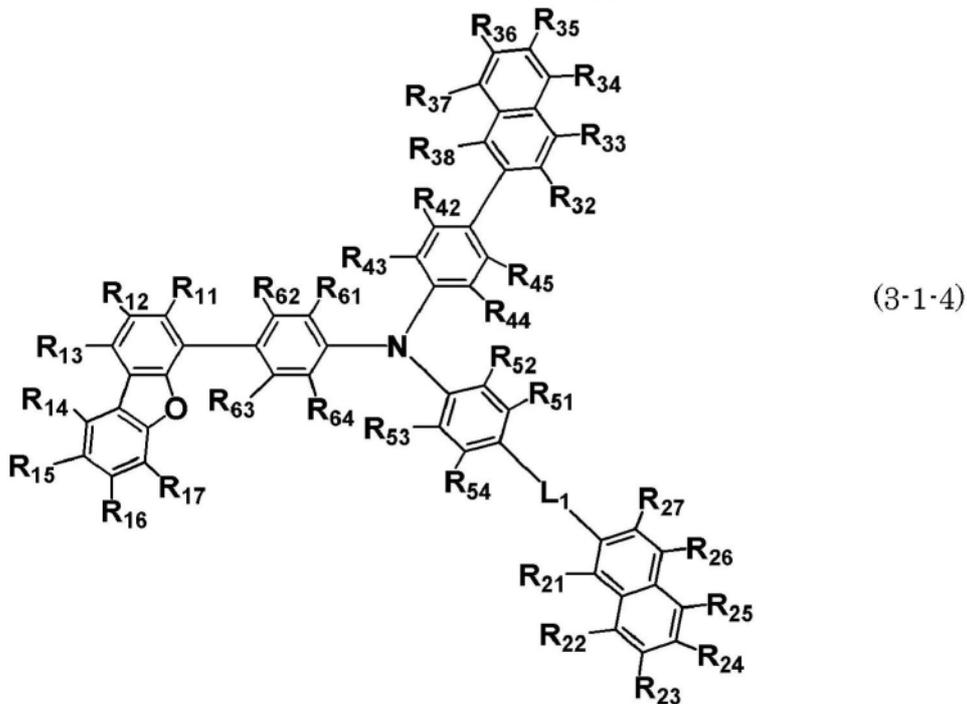
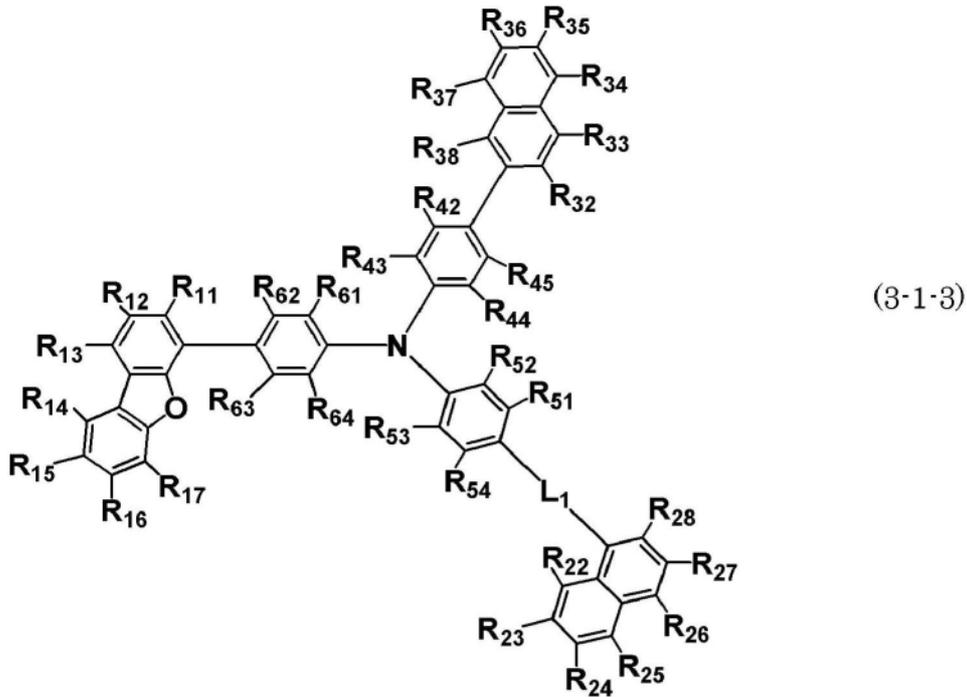




式(3-2)~式(3-9)中,*b、*d、R₁₁~R₁₇、R₂₁~R₂₈、R₃₁~R₃₈、R₄₁~R₄₅、R₅₁~R₅₅、R₆₁~R₆₄和L₁与前述式(1)中的定义相同。

5. 根据权利要求3所述的化合物,其中,所述式(3-1)所示的化合物由下述式(3-1-1)~式(3-1-4)中任一式表示,





式(3-1-1)~式(3-1-4)中, $R_{11} \sim R_{17}$ 、 $R_{21} \sim R_{28}$ 、 $R_{31} \sim R_{38}$ 、 $R_{42} \sim R_{45}$ 、 $R_{51} \sim R_{54}$ 、 $R_{61} \sim R_{64}$ 和 L_1 与
所述式(1)中的定义相同。

6. 根据权利要求1~5中任一项所述的化合物,其中,
所述 L_1 为单键、未取代的亚苯基或者未取代的亚联苯基。
7. 根据权利要求1~5中任一项所述的化合物,其中,
所述 L_1 为单键或者未取代的亚苯基。
8. 根据权利要求1~5中任一项所述的化合物,其中,
所述 L_1 为单键。
9. 根据权利要求1~5中任一项所述的化合物,其中,

所述 $R_{11} \sim R_{17}$ 、与*a键合的单键以外的所述 $R_{41} \sim R_{45}$ 、与*c键合的单键以外的所述 $R_{51} \sim R_{55}$ 和所述 $R_{61} \sim R_{64}$ 各自独立地为氢原子、未取代的碳数1~5的烷基,与*d键合的单键以外的所述 $R_{21} \sim R_{28}$ 和与*b键合的单键以外的所述 $R_{31} \sim R_{38}$ 各自独立地为氢原子、取代或未取代的碳数1~5的烷基。

10. 根据权利要求1~5中任一项所述的化合物,其中,所述 $R_{11} \sim R_{17}$ 为氢原子。

11. 根据权利要求1~5中任一项所述的化合物,其中,

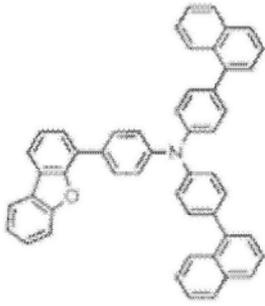
与*a键合的单键以外的所述 $R_{41} \sim R_{45}$ 、与*c键合的单键以外的所述 $R_{51} \sim R_{55}$ 和 $R_{61} \sim R_{64}$ 为氢原子。

12. 根据权利要求1~5中任一项所述的化合物,其中,

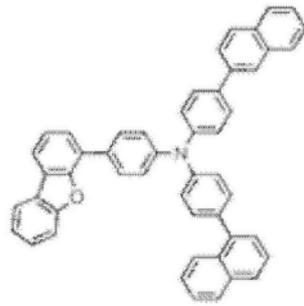
与*d键合的单键以外的所述 $R_{21} \sim R_{28}$ 和与*b键合的单键以外的所述 $R_{31} \sim R_{38}$ 为氢原子。

13. 根据权利要求1所述的化合物,其中,

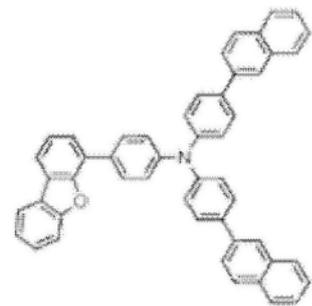
所述化合物选自下述化合物1~8,



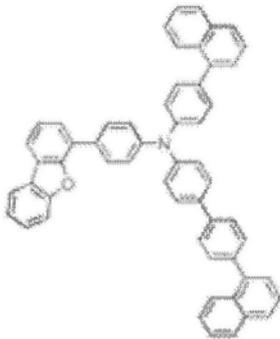
化合物1



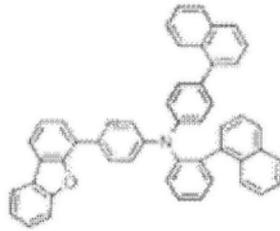
化合物2



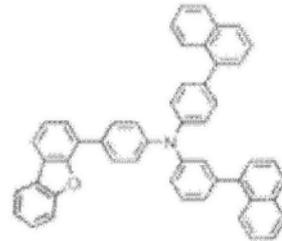
化合物3



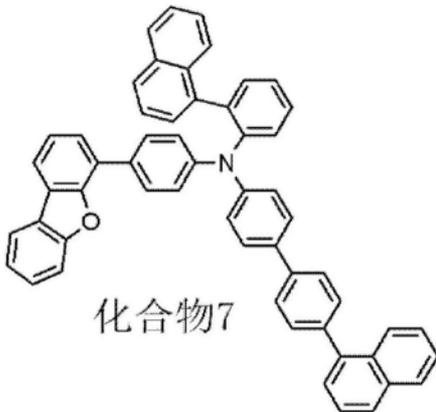
化合物4



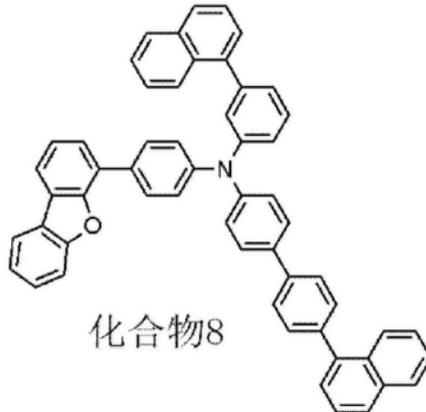
化合物5



化合物6



化合物7



化合物8

14. 一种有机电致发光元件用材料,其包含权利要求1~13中任一项所述的化合物。

15. 一种有机电致发光元件,所述有机电致发光元件具有阳极、阴极以及在该阳极与阴极之间具有有机层,该有机层包含发光层,

该有机层的至少1层包含权利要求1~13中任一项所述的化合物。

16. 根据权利要求15所述的有机电致发光元件,其中,

在所述阳极与所述发光层之间具有有机层,该有机层包含所述化合物。

17. 根据权利要求15所述的有机电致发光元件,其中,

所述有机层包含所述发光层和空穴传输层,并且在所述阳极与该发光层之间具有该空穴传输层,该空穴传输层包含所述化合物。

18. 根据权利要求17所述的有机电致发光元件,其中,

所述空穴传输层包含第一空穴传输层和第二空穴传输层,该第二空穴传输层包含所述

化合物。

19. 一种电子设备,其具备权利要求15~18中任一项所述的有机电致发光元件。

化合物和使用该化合物的有机电致发光元件

技术领域

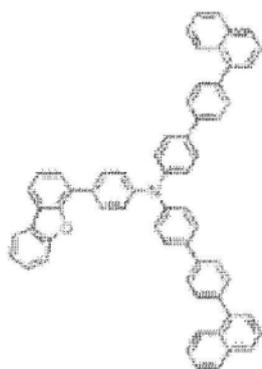
[0001] 本发明涉及化合物和使用其的有机电致发光元件。

背景技术

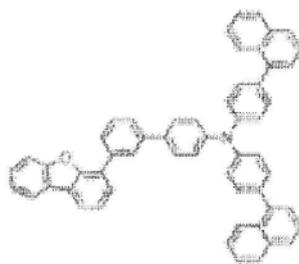
[0002] 一般而言,有机电致发光(EL)元件由阳极、阴极、以及被阳极和阴极所夹持的1层以上的有机薄膜层构成。若对两电极间施加电压,则从阴极侧向发光区域注入电子,从阳极侧向发光区域注入空穴,所注入的电子和空穴在发光区域中发生复合而生成激发态,激发态恢复到基态时发出光。因此,在得到高效率有机EL元件方面重要的是,开发高效率向发光区域传输电子或空穴、使电子和空穴的复合变得容易的化合物。另外,近年来,随着使用有机EL元件的智能电话、有机EL电视、有机EL照明等进一步普及,要求在高效率的同时能够满足充分元件寿命的化合物。

[0003] 专利文献1~7例如公开了具有二苯并呋喃结构、芳基的下述式(C-1)~(C-8)所示的化合物。

[0004] [化1]



(C-1)

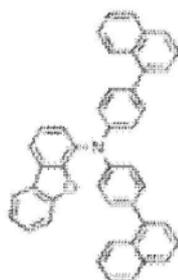


(C-2)

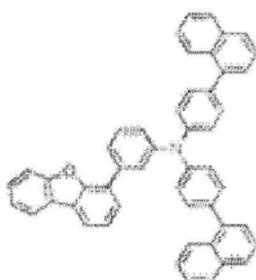


(C-3)

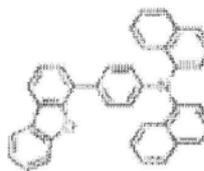
[0005]



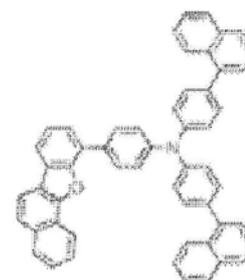
(C-4)



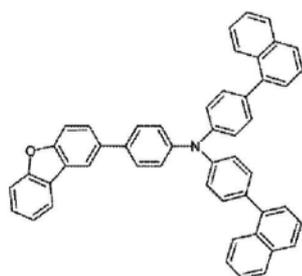
(C-5)



(C-6)



(C-7)



(C-8)

[0006] 然而,这些之中记载的化合物例如在作为有机EL元件的空穴传输层使用时,由于发光效率和寿命不充分,因而要求开发具有更高发光效率和长寿命的化合物。

[0007] 现有技术文献

[0008] 专利文献

[0009] 专利文献1:国际公开第2009/145016号公报

[0010] 专利文献2:韩国专利1579490号公报

[0011] 专利文献3:日本特开2016-86155号公报

[0012] 专利文献4:国际公开第2016/064111号公报

[0013] 专利文献5:美国专利公开2016/133848号公报

[0014] 专利文献6:美国专利公开2016/118596号公报

[0015] 专利文献7:国际公开第2016/190600号公报

发明内容

[0016] 发明要解决的问题

[0017] 本发明是为了解决上述课题而完成的,提供外部量子效率高且长寿命的有机EL元件和能够实现其的化合物。

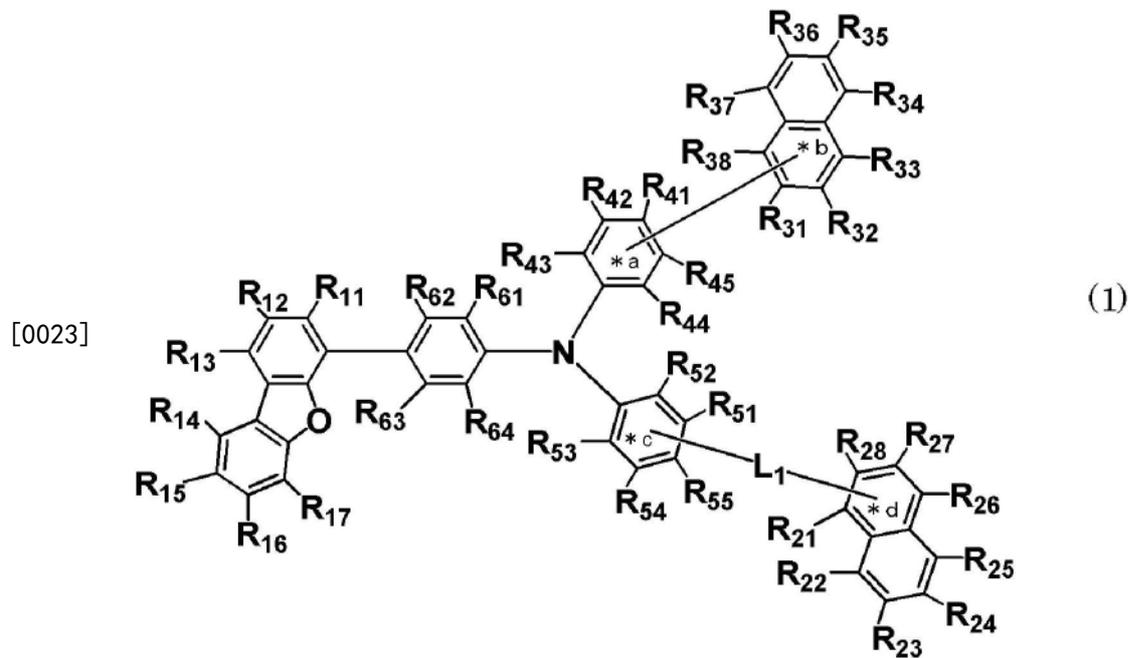
[0018] 用于解决问题的手段

[0019] 本发明人为了实现上述目的而反复深入研究,结果发现,式(1)所示的化合物相比于上述式(C-1)~(C-8)所示的化合物,不但能够提高耐性(分子内的电子接受性的抑制),而且能够有效地将激子封闭于发光层。另外,通过使用具有这些特性的化合物,可得到外部量子效率高且长寿命的有机EL元件。

[0020] 即,在一个方案中,本发明提供下述式(1)所示的化合物(以下有时也称作“化合物(1)”)。

[0021] 下述式(1)所示的化合物。

[0022] [化2]



[0024] (式(1)中,

[0025] $R_{11} \sim R_{17}$ 和 $R_{61} \sim R_{64}$ 各自独立地为氢原子、未取代的碳数1~20的烷基或者未取代的成环原子数3~50的杂芳基。

[0026] $R_{41} \sim R_{45}$ 中的1个表示与*a键合的单键,与*a键合的单键以外的 $R_{41} \sim R_{45}$ 各自独立地为氢原子、未取代的碳数1~20的烷基或者未取代的成环原子数3~50的杂芳基。

[0027] $R_{51} \sim R_{55}$ 中的1个表示与*c键合的单键,与*c键合的单键以外的 $R_{51} \sim R_{55}$ 各自独立地为氢原子、未取代的碳数1~20的烷基或者未取代的成环原子数3~50的杂芳基。

[0028] $R_{21} \sim R_{28}$ 中的1个表示与*d键合的单键,与*d键合的单键以外的 $R_{21} \sim R_{28}$ 各自独立地为氢原子、取代或未取代的碳数1~20的烷基、取代或未取代的成环碳数6~50的芳基或者取代或未取代的成环原子数3~50的杂芳基。

[0029] $R_{31} \sim R_{38}$ 中的1个表示与*b键合的单键,与*b键合的单键以外的 $R_{31} \sim R_{38}$ 各自独立地为氢原子、取代或未取代的碳数1~20的烷基、取代或未取代的成环碳数6~50的芳基或者

取代或未取代的成环原子数3~50的杂芳基。

[0030] L_1 为单键、取代或未取代的亚苯基或者取代或未取代的亚联苯基。

[0031] 在 $R_{11} \sim R_{17}$ 、 $R_{21} \sim R_{28}$ 、 $R_{31} \sim R_{38}$ 、 $R_{41} \sim R_{45}$ 、 $R_{51} \sim R_{55}$ 和 $R_{61} \sim R_{64}$ 中,相邻的取代基彼此不相互键合不形成环。)

[0032] 在另一个方案中,本发明提供包含上述化合物(1)的有机EL元件用材料。

[0033] 另外,在另一个方案中,本发明提供一种有机电致发光元件,其具有阳极、阴极、和位于该阳极和阴极之间的有机层,该有机层包含发光层,所述有机EL元件中,该有机层中的至少1层含有上述化合物(1)。

[0034] 此外,在另一个方案中,本发明提供具备上述有机EL元件的电子设备。

[0035] 发明的效果

[0036] 通过使用上述化合物(1),可得到外部量子效率高且长寿命的有机EL元件。

附图说明

[0037] 图1是表示本发明实施方式涉及的有机电致发光元件的一例的构成的示意图。

具体实施方式

[0038] 本说明书中,“取代或未取代的碳数XX~YY的ZZ基”这样的表述中的“碳数XX~YY”表示ZZ基未取代时的碳数,发生了取代时的取代基的碳数不包括在内。

[0039] 另外,本说明书中,“取代或未取代的原子数XX~YY的ZZ基”这样的表述中的“原子数XX~YY”表示ZZ基未取代时的原子数,发生了取代时的取代基的原子数不包括在内。

[0040] 本说明书中,成环碳数表示原子以环状键合的结构(例如单环化合物、稠环化合物、桥环化合物、碳环化合物、杂环化合物)的构成该环自身的原子之中的碳原子的数量。该环被取代基取代时,取代基所包含的碳不包括在成环碳数中。关于以下所述的“成环碳数”,只要没有特别记载则同样如此。例如,苯环的成环碳数为6,萘环的成环碳数为10,吡啶基的成环碳数为5,呋喃基的成环碳数为4。另外,苯环或萘环上作为取代基取代有例如烷基时,该烷基的碳数不包括在成环碳数的数量中。另外,苧环上作为取代基取代有例如苧环时(包括螺苧环),作为取代基的苧环的碳数不包括在成环碳数的数量中。

[0041] 另外,本说明书中,成环原子数表示原子以环状键合的结构(例如单环、稠环、集合环)的化合物(例如单环化合物、稠环化合物、桥环化合物、碳环化合物、杂环化合物)的构成该环自身的原子的数量。不构成环的原子、该环被取代基取代时的取代基所包含的原子不包含在成环原子数中。关于以下所述的“成环原子数”,只要没有特别记载则同样如此。例如,吡啶环的成环原子数为6,喹啉环的成环原子数为10,呋喃环的成环原子数为5。吡啶环、喹啉环的碳原子上分别键合的氢原子或取代基的构成原子不包括在成环原子数的数量中。另外,苧环上作为取代基键合有例如苧环时(包含螺苧环),作为取代基的苧环的原子数不包括在成环原子数的数量中。

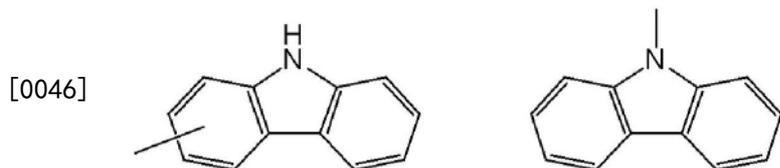
[0042] 另外,本说明书中,“氢原子”包括中子数不同的同位素、即氕(protium)、氘(deuterium)和氚(tritium)。

[0043] 本说明书中,“杂芳基”、“亚杂芳基”和“杂环基”为包含至少1个杂原子作为成环原子的基团,作为该杂原子,优选为选自氮原子、氧原子、硫原子、硅原子和硒原子中的1种以

上。

[0044] 本说明书中，“取代或未取代的咪唑基”表示下述的咪唑基，

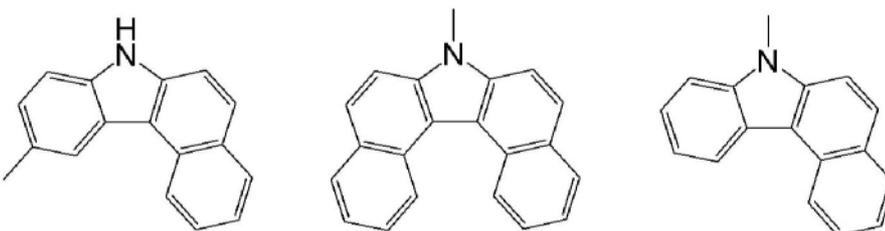
[0045] [化3]



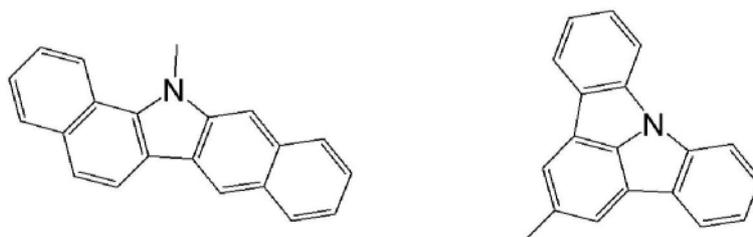
[0047] 以及上述基团进一步具有任选取代基的取代咪唑基。

[0048] 需要说明的是，该取代咪唑基中，任选取代基彼此可以相互键合而形成稠环，也可以包含氮原子、氧原子、硫原子、硅原子和硒原子等杂原子，另外，键合位置可以为1位~9位中任一个。作为这样的取代咪唑基的具体例，例如可以举出下述所示的基团。

[0049] [化4]

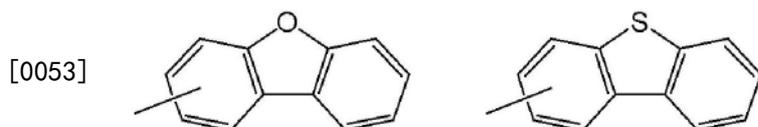


[0050]



[0051] 本说明书中，“取代或未取代的二苯并呋喃基”和“取代或未取代的二苯并噻吩基”表示下述二苯并呋喃基和二苯并噻吩基，

[0052] [化5]

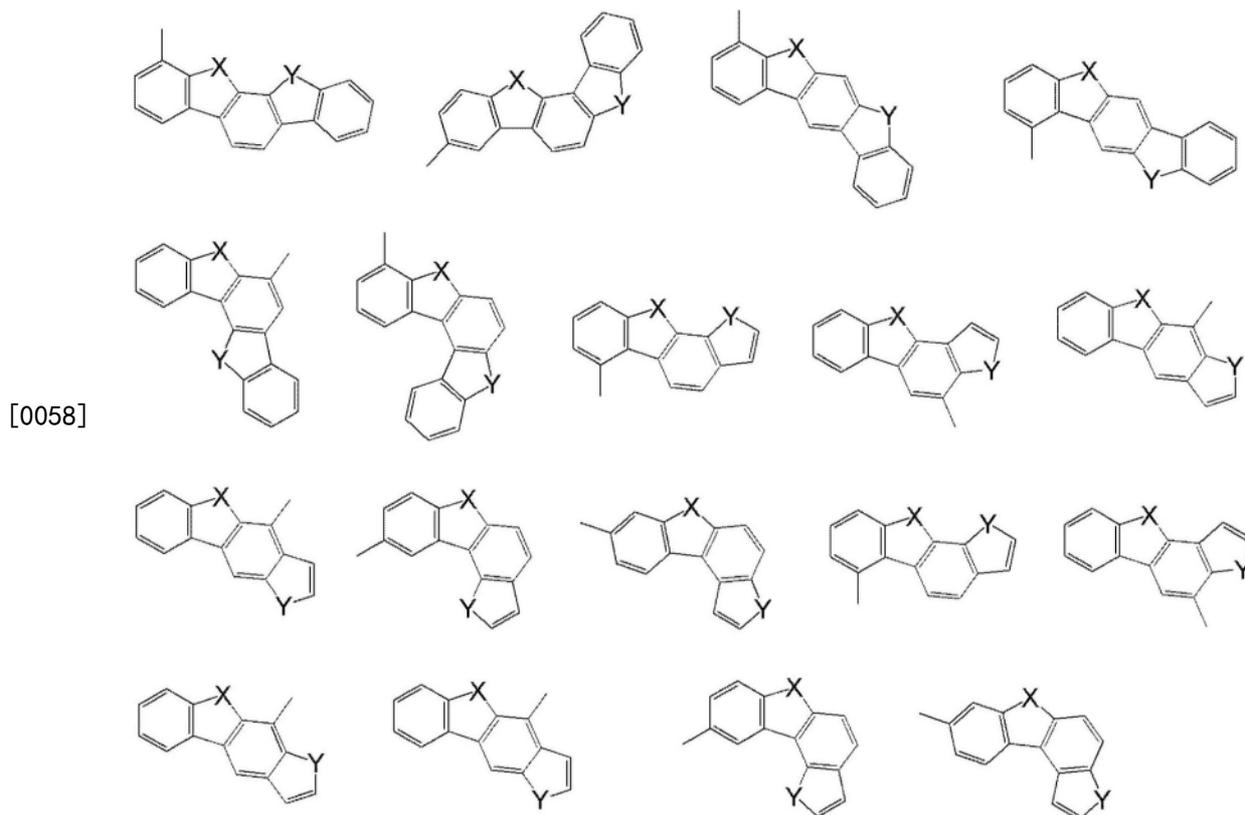


[0054] 以及上述基团进一步具有任选取代基的取代二苯并呋喃基和取代二苯并噻吩基。

[0055] 需要说明的是，该取代二苯并呋喃基和取代二苯并噻吩基中，任选取代基彼此可以相互键合而形成稠环，可以包含氮原子、氧原子、硫原子、硅原子和硒原子等杂原子，另外，键合位置可以为1位~8位中的任一个。

[0056] 作为这样的取代二苯并呋喃基和取代二苯并噻吩基的具体例，例如可以举出下述所示的基团。

[0057] [化6]



[0059] [上述式中, X表示氧原子或硫原子, Y表示氧原子、硫原子、NH、NR^a (R^a为烷基或芳基)、CH₂或CR^b₂ (R^b为烷基或芳基) 。]

[0060] 另外, 作为“取代基”或者“取代或未取代”这样记载中的取代基, 只要没有特别限定, 则优选选自由碳数1~50 (优选为1~18、更优选为1~8) 的烷基; 成环碳数3~50 (优选为3~10、更优选为3~8、进一步优选为5或6) 的环烷基; 成环碳数6~50 (优选为6~25、更优选为6~18) 的芳基; 具有成环碳数6~50 (优选为6~25、更优选为6~18) 的芳基的碳数7~51 (优选为7~30、更优选为7~20) 的芳烷基; 氨基; 具有选自碳数1~50 (优选为1~18、更优选为1~8) 的烷基和成环碳数6~50 (优选为6~25、更优选为6~18) 的芳基中的取代基的单取代或二取代氨基; 具有碳数1~50 (优选为1~18、更优选为1~8) 的烷基的烷氧基; 具有成环碳数6~50 (优选为6~25、更优选为6~18) 的芳基的芳氧基; 具有选自碳数1~50 (优选为1~18、更优选为1~8) 的烷基和成环碳数6~50 (优选为6~25、更优选为6~18) 的芳基中的取代基的单取代、二取代或三取代甲硅烷基; 成环原子数5~50 (优选为5~24、更优选为5~13) 的杂芳基; 碳数1~50 (优选为1~18、更优选为1~8) 的卤代烷基; 卤素原子 (氟原子、氯原子、溴原子、碘原子); 氰基; 硝基; 具有选自碳数1~50 (优选为1~18、更优选为1~8) 的烷基和成环碳数6~50 (优选为6~25、更优选为6~18) 的芳基中的取代基的磺酰基; 具有选自碳数1~50 (优选为1~18、更优选为1~8) 的烷基和成环碳数6~50 (优选为6~25、更优选为6~18) 的芳基中的取代基的二取代磷酰基; 烷基磺酰氧基; 芳基磺酰氧基; 烷基羰氧基; 芳基羰氧基; 含硼基团; 含锌基团; 含锡基团; 含硅基团; 含镁基团; 含锂基团; 羟基; 烷基取代或芳基取代羰基; 羧基; 乙烯基; (甲基) 丙烯酰基; 环氧基; 以及氧杂环丁基组成的组中的至少1个, 并不刻意限定于此。

[0061] 这些取代基可以进一步被上述任选取代基取代。另外, 这些取代基中, 多个取代基

也可以相互键合而形成环。

[0062] 表述为“取代或未取代的”时的“未取代”是指,未被上述取代基取代而键合有氢原子。

[0063] 上述取代基之中,更优选为取代或未取代的碳数1~50(优选为1~18、更优选为1~8)的烷基、取代或未取代的成环碳数3~50(优选为3~10、更优选为3~8、进一步优选为5或6)的环烷基、取代或未取代的成环碳数6~50(优选为6~25、更优选为6~18)的芳基、具有选自取代或未取代的碳数1~50(优选为1~18、更优选为1~8)的烷基和取代或未取代的成环碳数6~50(优选为6~25、更优选为6~18)的芳基中的取代基的单取代或二取代氨基、取代或未取代的成环原子数5~50(优选为5~24、更优选为5~13)的杂芳基、卤素原子、氰基。

[0064] 作为上述碳数1~50的烷基,例如可以举出:甲基、乙基、正丙基、异丙基、正丁基、异丁基、仲丁基、叔丁基、戊基(包括异构体基团)、己基(包括异构体基团)、庚基(包括异构体基团)、辛基(包括异构体基团)、壬基(包括异构体基团)、癸基(包括异构体基团)、十一烷基(包括异构体基团)、和十二烷基(包括异构体基团)。这些之中,优选甲基、乙基、正丙基、异丙基、正丁基、异丁基、仲丁基、叔丁基和戊基(包括异构体基团),更优选甲基、乙基、正丙基、异丙基、正丁基、异丁基、仲丁基和叔丁基,特别优选甲基、乙基、异丙基和叔丁基。

[0065] 作为上述成环碳数3~50的环烷基,例如可以举出:环丙基、环丁基、环戊基、环己基、环庚基、环辛基、金刚烷基等。这些之中,优选环戊基、环己基。

[0066] 作为上述成环碳数6~50的芳基,例如可以举出:苯基、联苯基、三联苯基、萘基、蒽烯基、蒽基、苯并蒽基、苯并蒽基、菲基、苯并[c]菲基、非那烯基、芴基、茚基、戊芬基、茈基、蒎基、苯并[g]蒎基、对称引达省基、不对称引达省基、荧蒽基、苯并[k]荧蒽基、三亚苯基(triphenylenyl)、苯并[b]三亚苯基和茈基等。这些之中,优选苯基、联苯基、三联苯基、萘基、蒽基、茈基、荧蒽基,更优选苯基、联苯基、三联苯基,进一步优选苯基。

[0067] 作为具有上述成环碳数6~50的芳基的碳数7~51的芳烷基的具体例,可以举出芳基部位为上述成环碳数6~50的芳基的具体例的基团,可以举出烷基部位为上述碳数1~50的烷基的具体例的基团。作为上述碳数7~51的芳烷基的优选例,可以举出上述芳基部位为上述成环碳数6~50的芳基的优选例的基团,可以举出上述烷基部位为上述碳数1~50的烷基的优选例的基团。对于更优选的具体例、进一步优选的具体例也是同样。

[0068] 作为具有选自上述碳数1~50的烷基和成环碳数6~50的芳基中的取代基的单取代或二取代氨基的具体例,可以举出芳基部位为上述成环碳数6~50的芳基的具体例的基团,可以举出烷基部位为上述碳数1~50的烷基的具体例的基团。作为具有选自上述碳数1~50的烷基和成环碳数6~50的芳基中的取代基的单取代或二取代氨基的优选例,可以举出上述芳基部位为上述成环碳数6~50的芳基的优选例的基团,可以举出上述烷基部位为上述碳数1~50的烷基的优选例的基团。对于更优选的具体例、进一步优选的具体例、特别优选的具体例也是同样。

[0069] 作为具有上述碳数1~50的烷基的烷氧基的具体例,可以举出烷基部位为上述碳数1~50的烷基的具体例的基团。作为具有上述碳数1~50的烷基的烷氧基的优选例,可以举出上述烷基部位为上述碳数1~50的烷基的优选例的基团。对于更优选的具体例、进一步优选的具体例、特别优选的具体例也是同样。

[0070] 作为具有上述成环碳数6~50的芳基的芳氧基的具体例,可以举出芳基部位为上述成环碳数6~50的芳基的具体例的基团。作为具有上述成环碳数6~50的芳基的芳氧基的优选例,可以举出上述芳基部位为上述成环碳数6~50的芳基的优选例的基团。对于更优选的具体例、进一步优选的具体例也同样。

[0071] 作为具有选自上述碳数1~50的烷基和成环碳数6~50的芳基中的取代基的单取代、二取代或三取代甲硅烷基,可以举出:单烷基甲硅烷基、二烷基甲硅烷基、三烷基甲硅烷基;单芳基甲硅烷基、二芳基甲硅烷基、三芳基甲硅烷基;单烷基二芳基甲硅烷基、二烷基单芳基甲硅烷基,可以举出将它们的烷基部位和芳基部位分别设为上述成环碳数6~50的芳基、碳数1~50的烷基的具体例的例子。另外,作为具有选自上述碳数1~50的烷基和成环碳数6~50的芳基中的取代基的单取代、二取代或三取代甲硅烷基的优选例,可以举出:单烷基甲硅烷基、二烷基甲硅烷基、三烷基甲硅烷基;单芳基甲硅烷基、二芳基甲硅烷基、三芳基甲硅烷基;单烷基二芳基甲硅烷基、二烷基单芳基甲硅烷基的烷基部位和芳基部位分别为上述成环碳数6~50的芳基、碳数1~50的烷基的优选例的基团。对于更优选的具体例、进一步优选的具体例、特别优选的具体例也同样。

[0072] 作为上述成环原子数5~50的杂芳基,例如可以举出:吡咯基、呋喃基、噻吩基、吡啶基、咪唑并吡啶基、哒嗪基、嘧啶基、吡嗪基、三嗪基、咪唑基、噁唑基、噻唑基、吡唑基、异噁唑基、异噻唑基、噁二唑基、噻二唑基、三唑基、四唑基、吡啶基、异吡啶基、苯并呋喃基、异苯并呋喃基、苯并噻吩基、异苯并噻吩基、吡嗪基、喹啉基、异喹啉基、噌啉基、酞嗪基、喹唑啉基、喹喔啉基、苯并咪唑基、苯并噁唑基、苯并噻唑基、吡唑基、苯并异噁唑基、苯并异噻唑基、二苯并呋喃基、二苯并噻吩基、咪唑基、9-苯基咪唑基、菲啶基、吡啶基、菲咯啉基、吩嗪基、吩噻嗪基、吩噁嗪基和咕吨基等。这些之中,优选吡啶基、咪唑并吡啶基、哒嗪基、嘧啶基、吡嗪基、三嗪基、苯并咪唑基、二苯并呋喃基、二苯并噻吩基、咪唑基、9-苯基咪唑基、菲咯啉基、喹唑啉基、喹喔啉基。

[0073] 作为上述卤素原子,可以举出氟原子、氯原子、溴原子、碘原子等。

[0074] 作为上述碳数1~50的卤代烷基的具体例,可以举出:上述碳数1~50的烷基的氢原子被上述卤素原子取代的例子,此时的优选烷基可以举出作为上述碳数1~50的烷基的优选例的基团。对于更优选的具体例、进一步优选的具体例、特别优选的具体例也同样。

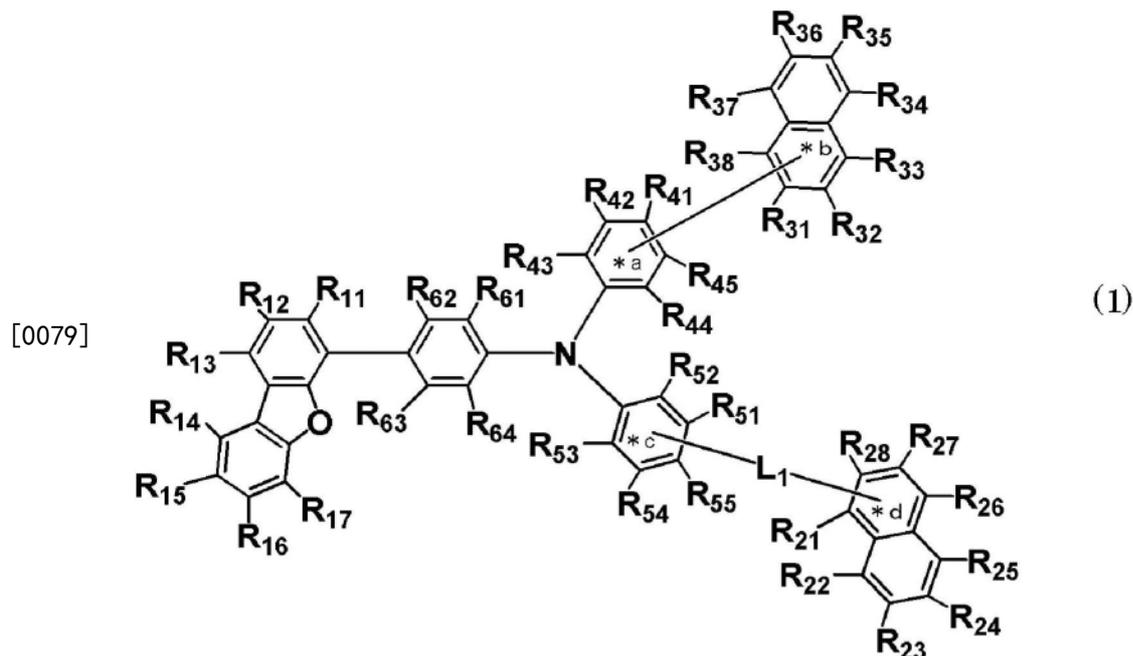
[0075] 作为具有选自上述碳数1~50的烷基和成环碳数6~50的芳基中的取代基的磺酰基、具有选自上述碳数1~50的烷基和成环碳数6~50的芳基中的取代基的二取代磷酰基、烷基磺酰氧基、芳基磺酰氧基、烷基羰氧基、芳基羰氧基、烷基取代或芳基取代羰基的例子,可以举出各自的芳基部位和烷基部位分别设为上述成环碳数6~50的芳基、碳数1~50的烷基的具体例而成的例子。另外,作为具有选自上述碳数1~50的烷基和成环碳数6~50的芳基中的取代基的磺酰基、具有选自上述碳数1~50的烷基和成环碳数6~50的芳基中的取代基的二取代磷酰基、烷基磺酰氧基、芳基磺酰氧基、烷基羰氧基、芳基羰氧基、烷基取代或芳基取代羰基的优选例,可以举出各自的芳基部位和烷基部位分别为上述成环碳数6~50的芳基、碳数1~50的烷基的优选例的基团。对于更优选的具体例、进一步优选的具体例、特别优选的具体例也同样。

[0076] 本说明书中,视为优选的方案(例如化合物、各种基团、数值范围等)能够与其他任何方案(例如化合物、各种基团、数值范围等)任意进行组合,另外,视为优选的方案(包括更

优选的方案、进一步优选的方案、特别优选的方案)的组合可以说是更优选的。

[0077] 上述化合物(1)如下述式(1)所示。

[0078] [化7]



[0080] 式(1)中, $R_{11} \sim R_{17}$ 和 $R_{61} \sim R_{64}$ 各自独立地为氢原子、未取代的碳数1~20、优选为1~5、更优选为1~4的烷基或者未取代的成环原子数3~50、优选为3~24、更优选为3~12的杂芳基。

[0081] $R_{41} \sim R_{45}$ 中的1个表示与*a键合的单键,与*a键合的单键以外的 $R_{41} \sim R_{45}$ 各自独立地为氢原子、未取代的碳数1~20、优选为1~5、更优选为1~4的烷基或者未取代的成环原子数3~50、优选为3~24、更优选为3~12的杂芳基。

[0082] $R_{51} \sim R_{55}$ 中的1个表示与*c键合的单键,与*c键合的单键以外的 $R_{51} \sim R_{55}$ 各自独立地为氢原子、未取代的碳数1~20、优选为1~5、更优选为1~4的烷基或者未取代的成环原子数3~50、优选为3~24、更优选为3~12的杂芳基。

[0083] $R_{21} \sim R_{28}$ 中的1个表示与*d键合的单键,与*d键合的单键以外的 $R_{21} \sim R_{28}$ 各自独立地为氢原子、取代或未取代的碳数1~20、优选为1~5、更优选为1~4的烷基、取代或未取代的成环碳数6~50、优选为6~24、更优选为6~12的芳基或者取代或未取代的成环原子数3~50、优选为3~24、更优选为3~12的杂芳基。

[0084] $R_{31} \sim R_{38}$ 中的1个表示与*b键合的单键,与*b键合的单键以外的 $R_{31} \sim R_{38}$ 各自独立地为氢原子、取代或未取代的碳数1~20、优选为1~5、更优选为1~4的烷基、取代或未取代的成环碳数6~50、优选为6~24、更优选为6~12的芳基或者取代或未取代的成环原子数3~50、优选为3~24、更优选为3~12的杂芳基。

[0085] L_1 为单键、取代或未取代的亚苯基或者取代或未取代的亚联苯基。

[0086] 在 $R_{11} \sim R_{17}$ 、 $R_{21} \sim R_{28}$ 、 $R_{31} \sim R_{38}$ 、 $R_{41} \sim R_{45}$ 、 $R_{51} \sim R_{55}$ 和 $R_{61} \sim R_{64}$ 中,相邻的取代基彼此不相互键合不形成环。

[0087] 式(1)中,优选的是, $R_{11} \sim R_{17}$ 均为氢原子,更优选的是, $R_{11} \sim R_{17}$ 、与*a键合的单键以外的上述 $R_{41} \sim R_{45}$ 、与*c键合的单键以外的上述 $R_{51} \sim R_{55}$ 和 $R_{61} \sim R_{64}$ 均为氢原子。

[0088] 式(1)中,优选的是,与*d键合的单键以外的上述 $R_{21} \sim R_{28}$ 和与*b键合的单键以外的上述 $R_{31} \sim R_{38}$ 均为氢原子。

[0089] 式(1)中,特别优选的是, $R_{11} \sim R_{17}$ 、 $R_{61} \sim R_{64}$ 、 $R_{41} \sim R_{45}$ 、 $R_{51} \sim R_{55}$ 、 $R_{21} \sim R_{28}$ 、和 $R_{31} \sim R_{38}$ 均为氢原子。

[0090] 式(1)中, L_1 优选为单键、未取代的亚苯基或者未取代的亚联苯基,更优选为单键或者未取代的亚苯基,进一步优选为单键。

[0091] 作为 $R_{11} \sim R_{17}$ 、与*a键合的单键以外的上述 $R_{41} \sim R_{45}$ 、与*c键合的单键以外的上述 $R_{51} \sim R_{55}$ 和 $R_{61} \sim R_{64}$ 中的上述未取代的碳数1~20烷基、以及与*d键合的单键以外的上述 $R_{21} \sim R_{28}$ 和与*b键合的单键以外的上述 $R_{31} \sim R_{38}$ 中的上述取代或未取代的碳数1~20烷基,例如可以举出甲基、乙基、正丙基、异丙基、正丁基、异丁基、仲丁基、叔丁基、戊基(包括异构体基团)、己基(包括异构体基团)、庚基(包括异构体基团)、辛基(包括异构体基团)、壬基(包括异构体基团)、癸基(包括异构体基团)、十一烷基(包括异构体基团)和十二烷基(包括异构体基团)等,优选甲基、乙基、正丙基、异丙基、正丁基、异丁基、仲丁基、叔丁基和戊基(包括异构体基团),更优选甲基、乙基、正丙基、异丙基、正丁基、异丁基、仲丁基和叔丁基,进一步优选甲基和叔丁基。

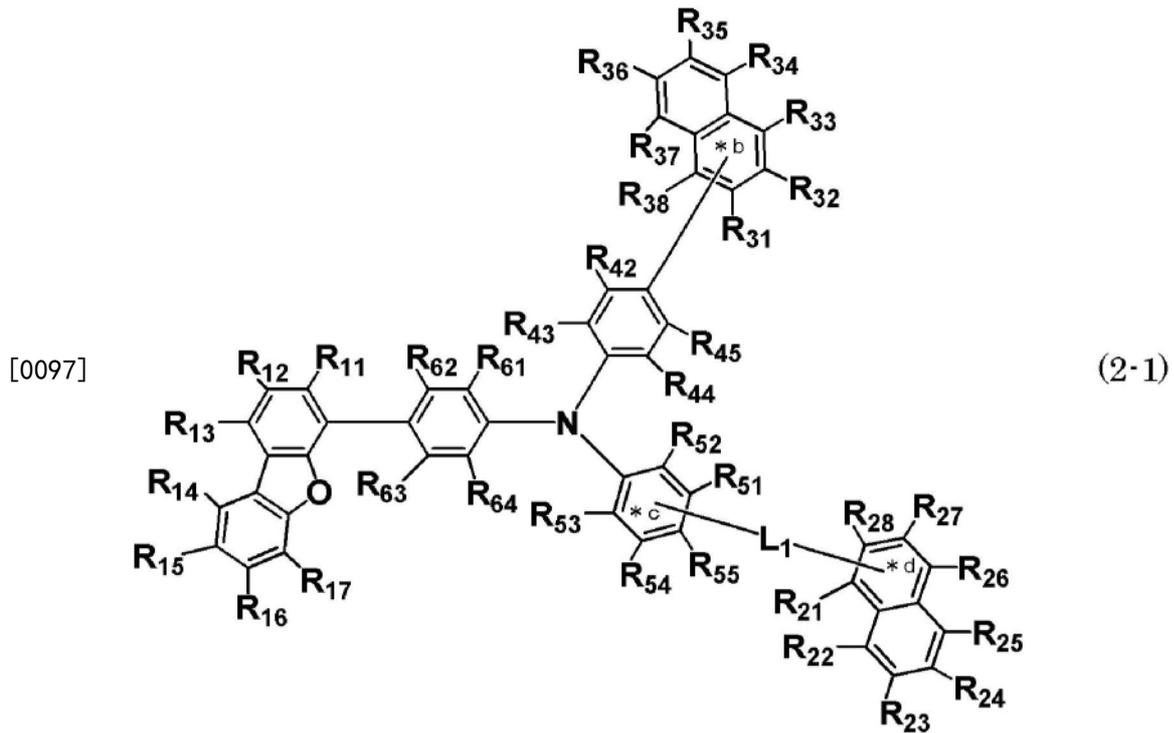
[0092] 上述成环原子数3~50的杂芳基包含至少1个、优选1~3个相同或不同的杂原子(例如氮原子、硫原子和氧原子)。

[0093] 作为 $R_{11} \sim R_{17}$ 、与*a键合的单键以外的上述 $R_{41} \sim R_{45}$ 、与*c键合的单键以外的上述 $R_{51} \sim R_{55}$ 和 $R_{61} \sim R_{64}$ 中的上述未取代的成环原子数3~50的杂芳基、以及与*d键合的单键以外的上述 $R_{21} \sim R_{28}$ 和与*b键合的单键以外的上述 $R_{31} \sim R_{38}$ 中的上述取代或未取代的成环原子数3~50的杂芳基,例如可以举出:吡咯基、呋喃基、噻吩基、吡啶基、哒嗪基、嘧啶基、吡嗪基、三嗪基、咪唑基、噁唑基、噻唑基、吡唑基、异噁唑基、异噻唑基、噁二唑基、噻二唑基、三唑基、吡啶基、异吡啶基、苯并呋喃基、异苯并呋喃基、苯并噻吩基、吡嗪基、喹啉基、喹啉基、异喹啉基、噌啉基、酞嗪基、喹唑啉基、喹喔啉基、苯并咪唑基、苯并噁唑基、苯并噻唑基、吡唑基、苯并异噁唑基、苯并异噻唑基、二苯并呋喃基、二苯并噻吩基、咪唑基、菲啶基、吡啶基、菲咯啉基、吩嗪基、吩噻嗪基、吩噁嗪基、和咕吨基等,优选呋喃基、噻吩基、吡啶基、哒嗪基、嘧啶基、吡嗪基、三嗪基、苯并呋喃基、苯并噻吩基、二苯并呋喃基、二苯并噻吩基、咪唑基,更优选苯并呋喃基、苯并噻吩基、二苯并呋喃基、二苯并噻吩基、咪唑基。

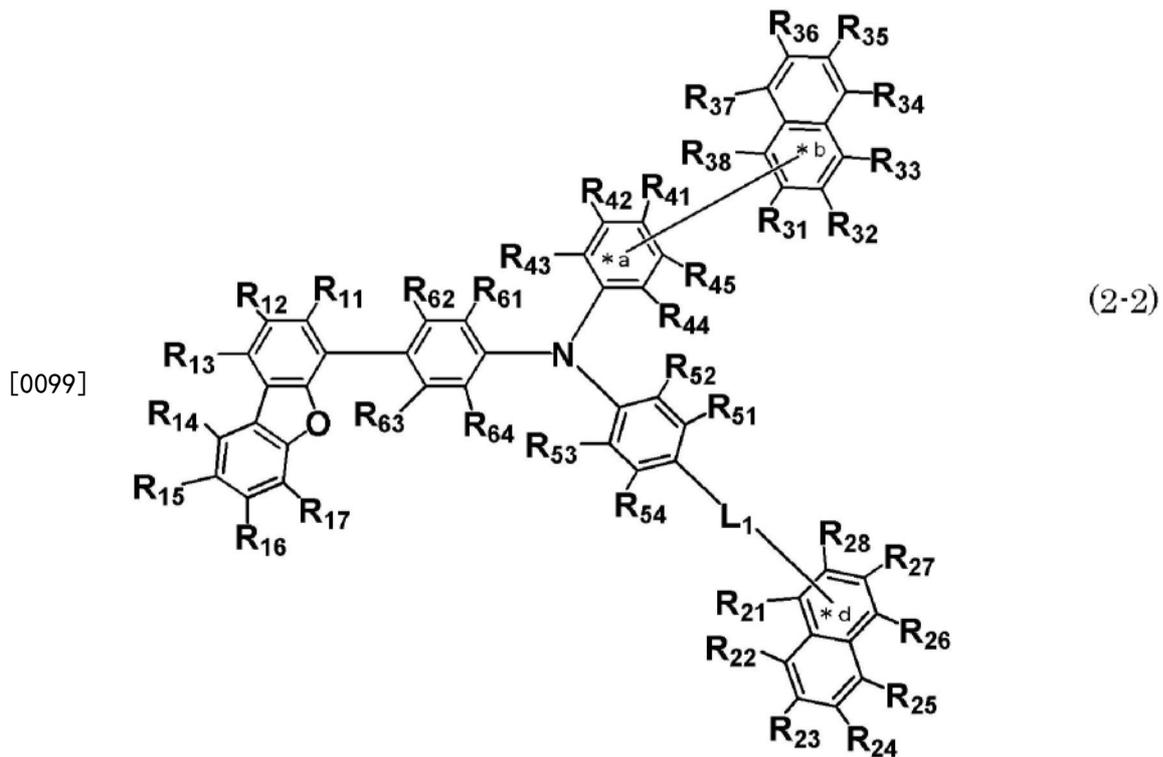
[0094] 作为与*d键合的单键以外的上述 $R_{21} \sim R_{28}$ 和与*b键合的单键以外的上述 $R_{31} \sim R_{38}$ 中的上述取代或未取代的成环碳数6~50的芳基,例如可以举出:苯基、萘基苯基、联苯基、三联苯基、联苯烯基、萘基、苯基萘基、茚烯基、蒽基、苯并蒽基、苯并茚基、菲基、苯并菲基、非那烯基、茚基、9,9-二甲基茚基、7-苯基-9,9-二甲基茚基、并五苯基、茈基、戊芬基、茈基、蒽基、苯并蒽基、对称引达省基、不对称引达省基、荧蒽基、和茈基等,优选苯基、萘基苯基、联苯基、三联苯基、萘基、9,9-二甲基茚基,更优选苯基、联苯基、萘基、9,9-二甲基茚基,进一步优选苯基。

[0095] 在本发明的一个方案中,化合物(1)优选由下述式(2-1)或式(2-2)表示。

[0096] [化8]



[0098] [化9]

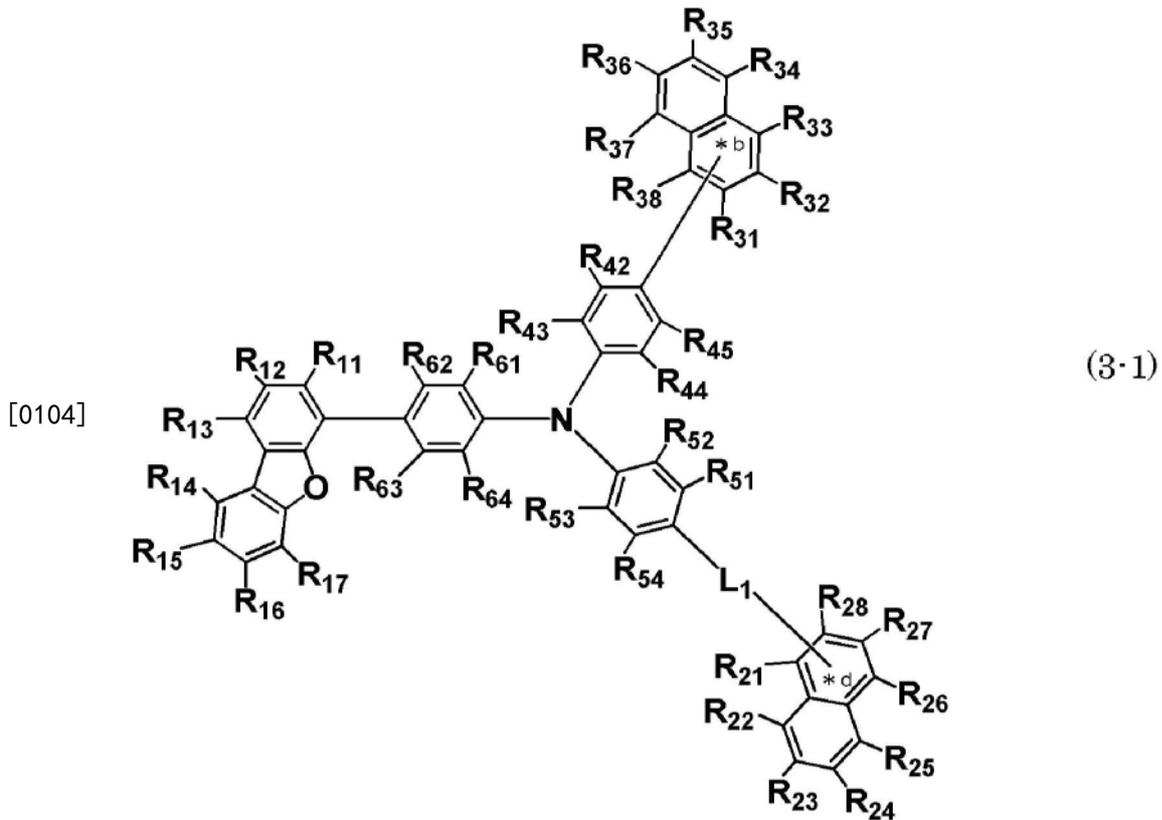


[0100] (式(2-1)、式(2-2)中, $R_{11} \sim R_{17}$ 、 $R_{21} \sim R_{28}$ 、 $R_{31} \sim R_{38}$ 、 $R_{41} \sim R_{45}$ 、 $R_{51} \sim R_{55}$ 、 $R_{61} \sim R_{64}$ 、 L_1 与上文相同。)

[0101] 式(2-1)、式(2-2)中, $R_{11} \sim R_{17}$ 、 $R_{21} \sim R_{28}$ 、 $R_{31} \sim R_{38}$ 、 $R_{41} \sim R_{45}$ 、 $R_{51} \sim R_{55}$ 、 $R_{61} \sim R_{64}$ 、 L_1 的各基的具体例、优选碳数和原子数等与上文相同。另外,在 $R_{11} \sim R_{17}$ 、 $R_{21} \sim R_{28}$ 、 $R_{31} \sim R_{38}$ 、 $R_{41} \sim R_{45}$ 、 $R_{51} \sim R_{55}$ 、 $R_{61} \sim R_{64}$ 中,相邻的取代基彼此不相互键合不形成环。

[0102] 在本发明的一个方案中,化合物(1)更优选由下述式(3-1)表示。

[0103] [化10]



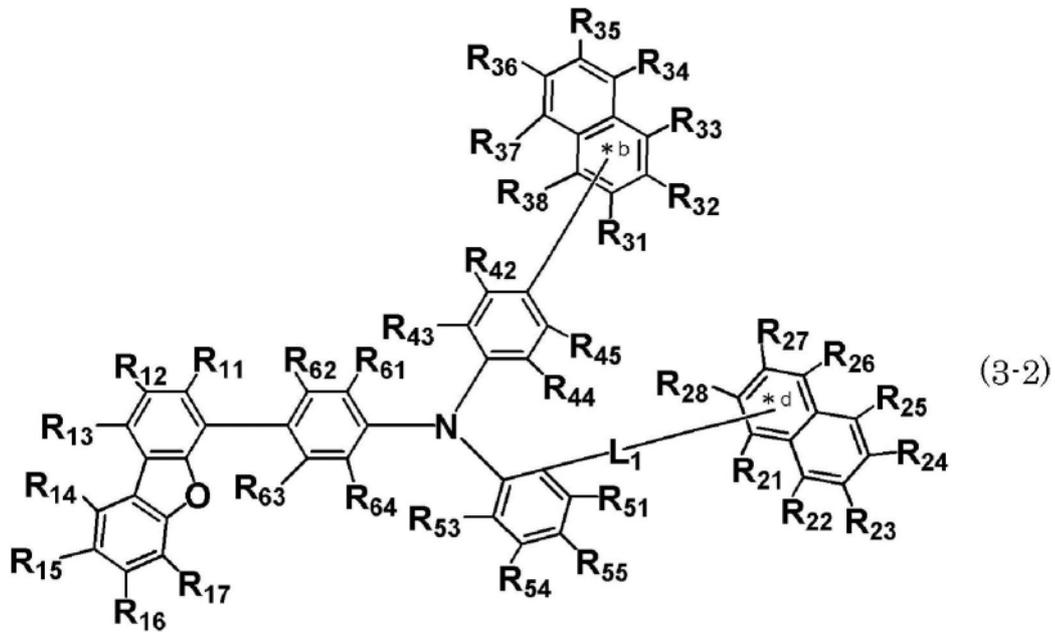
[0105] (式(3-1)中, $R_{11} \sim R_{17}$ 、 $R_{21} \sim R_{28}$ 、 $R_{31} \sim R_{38}$ 、 $R_{42} \sim R_{45}$ 、 $R_{51} \sim R_{54}$ 、 $R_{61} \sim R_{64}$ 、 L_1 与上文相同。)

[0106] 式(3-1)中, $R_{11} \sim R_{17}$ 、 $R_{21} \sim R_{28}$ 、 $R_{31} \sim R_{38}$ 、 $R_{42} \sim R_{45}$ 、 $R_{51} \sim R_{54}$ 、 $R_{61} \sim R_{64}$ 、 L_1 的各基的具体例、优选碳数和原子数等与上文相同。另外,在 $R_{11} \sim R_{17}$ 、 $R_{21} \sim R_{28}$ 、 $R_{31} \sim R_{38}$ 、 $R_{42} \sim R_{45}$ 、 $R_{51} \sim R_{54}$ 、 $R_{61} \sim R_{64}$ 中,相邻的取代基彼此不相互键合不形成环。

[0107] 在本发明的一个方案中,化合物(1)更优选由下述式(3-2)~式(3-9)中任一式表示。

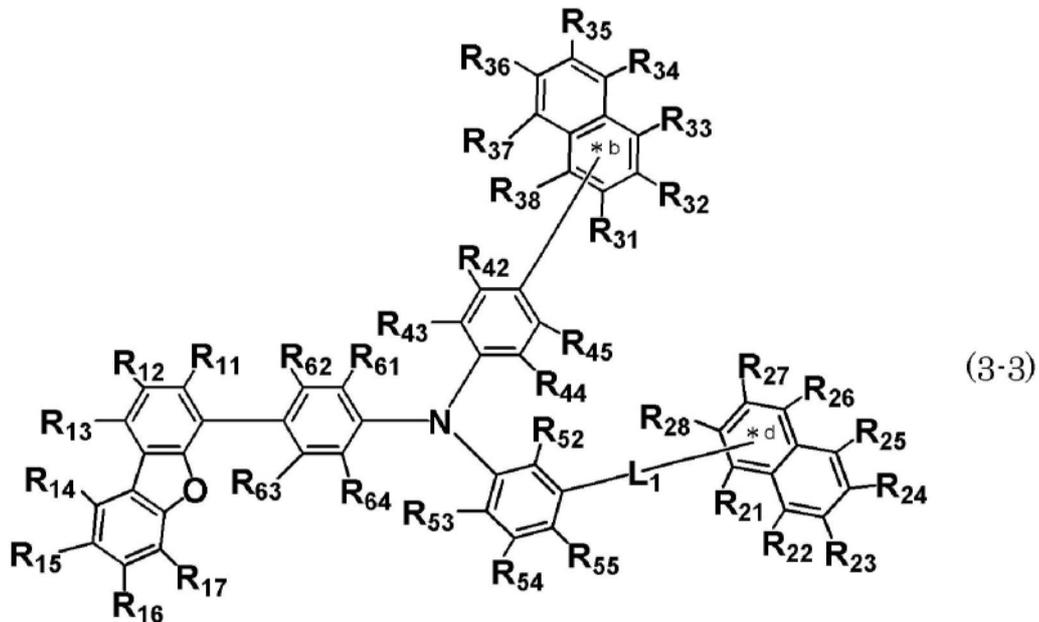
[0108] [化11]

[0109]



[0110] [化12]

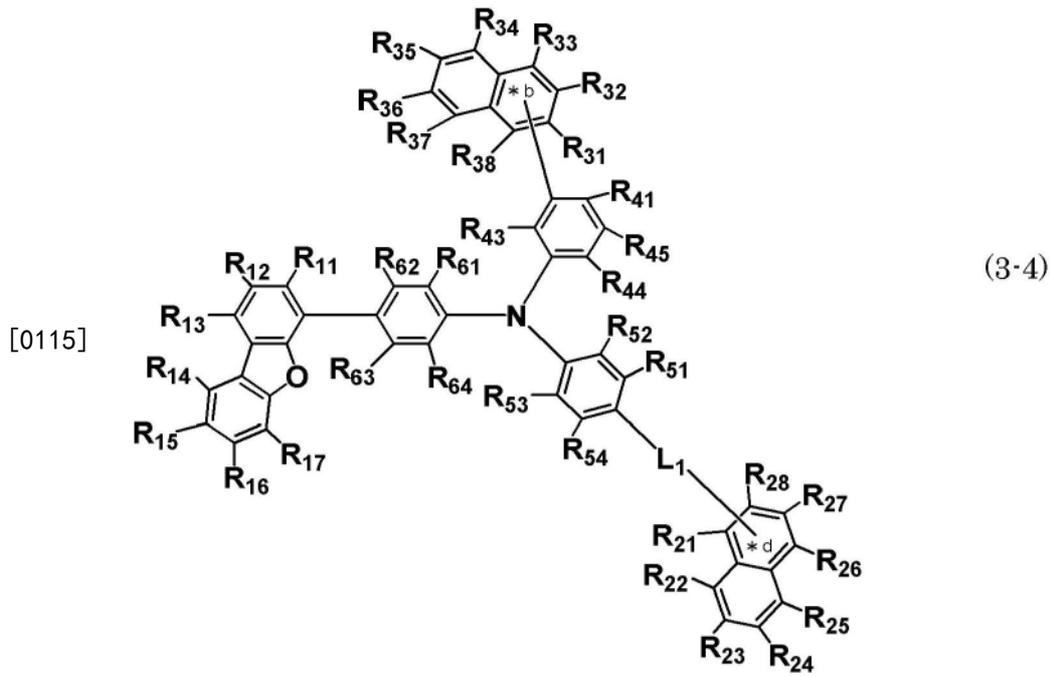
[0111]



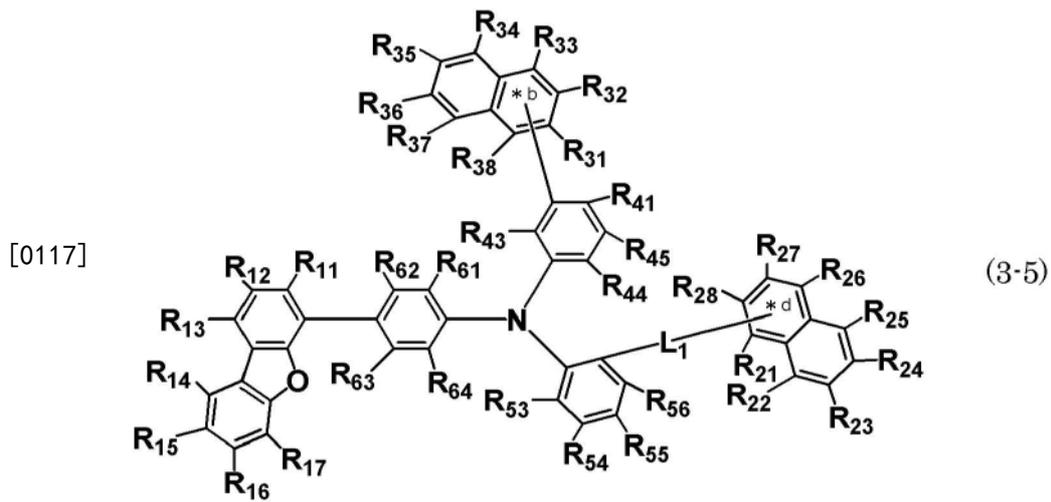
[0112] (式(3-2)、式(3-3)中, $R_{11} \sim R_{17}$ 、 $R_{21} \sim R_{28}$ 、 $R_{31} \sim R_{38}$ 、 $R_{42} \sim R_{45}$ 、 $R_{51} \sim R_{55}$ 、 $R_{61} \sim R_{64}$ 、 L_1 与上文相同。)

[0113] 式(3-2)、式(3-3)中, $R_{11} \sim R_{17}$ 、 $R_{21} \sim R_{28}$ 、 $R_{31} \sim R_{38}$ 、 $R_{42} \sim R_{45}$ 、 $R_{51} \sim R_{55}$ 、 $R_{61} \sim R_{64}$ 、 L_1 的各基的具体例、优选碳数和原子数等与上文相同。另外,在 $R_{11} \sim R_{17}$ 、 $R_{21} \sim R_{28}$ 、 $R_{31} \sim R_{38}$ 、 $R_{42} \sim R_{45}$ 、 $R_{51} \sim R_{55}$ 、 $R_{61} \sim R_{64}$ 中,相邻的取代基彼此不相互键合不形成环。

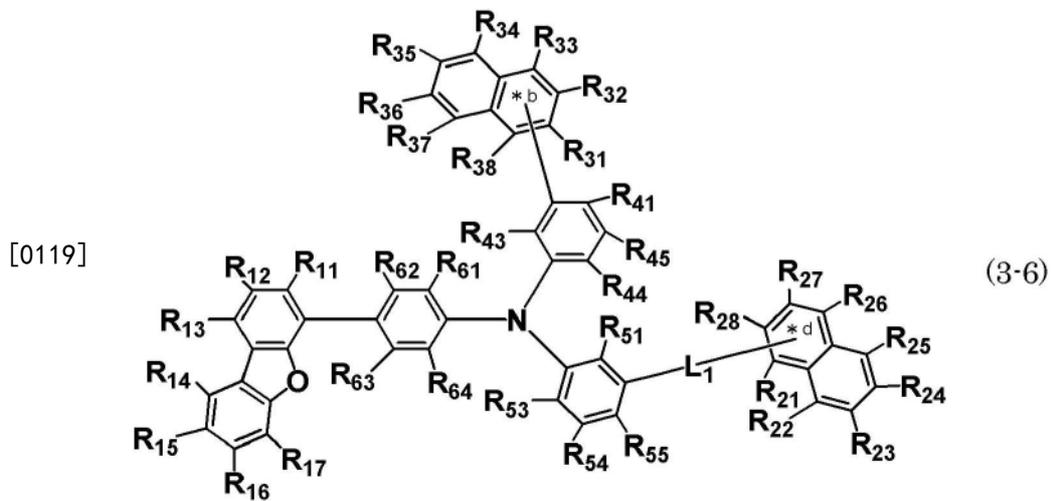
[0114] [化13]



[0116] [化14]



[0118] [化15]

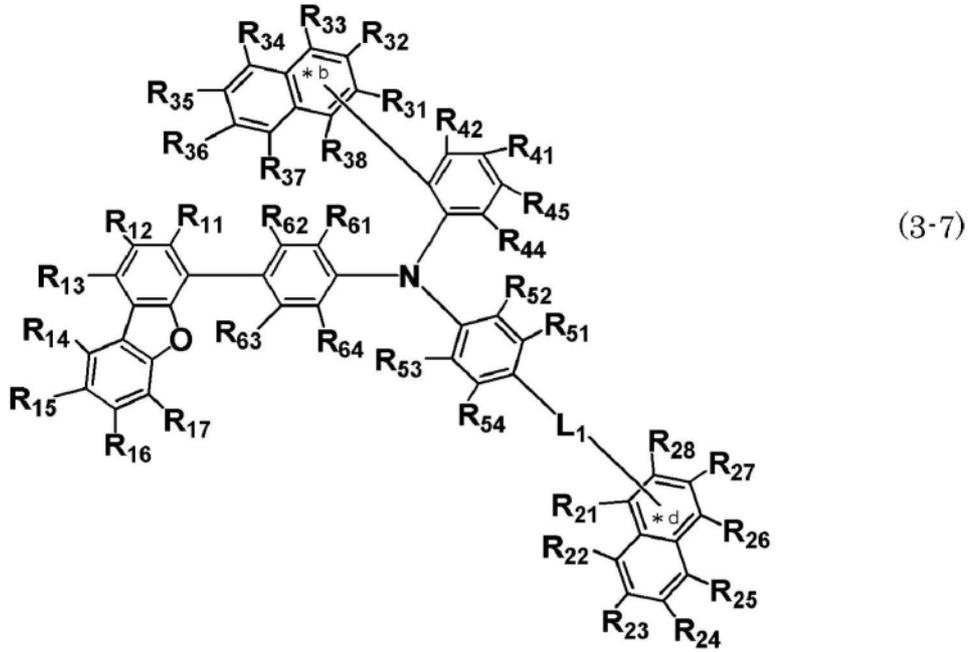


[0120] (式(3-4)、式(3-5)和式(3-6)中, R₁₁ ~ R₁₇、R₂₁ ~ R₂₈、R₃₁ ~ R₃₈、R₄₁、R₄₃ ~ R₄₅、R₅₃ ~

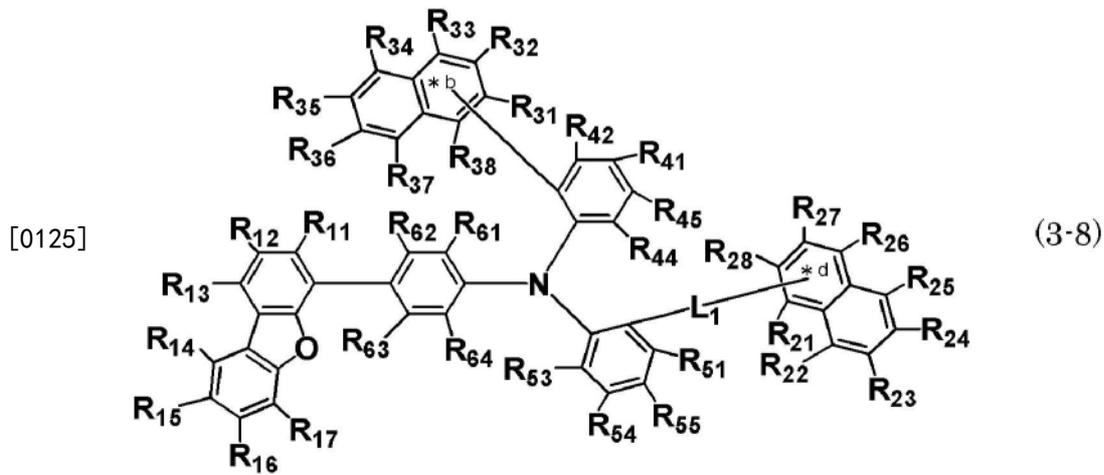
R_{56} 、 $R_{61} \sim R_{64}$ 、 L_1 与上文相同。)

[0121] 式(3-4)、式(3-5)和式(3-6)中, $R_{11} \sim R_{17}$ 、 $R_{21} \sim R_{28}$ 、 $R_{31} \sim R_{38}$ 、 R_{41} 、 $R_{43} \sim R_{45}$ 、 $R_{53} \sim R_{56}$ 、 $R_{61} \sim R_{64}$ 、 L_1 的各基的具体例、优选碳数和原子数等与上文相同。另外,在 $R_{11} \sim R_{17}$ 、 $R_{21} \sim R_{28}$ 、 $R_{31} \sim R_{38}$ 、 R_{41} 、 $R_{43} \sim R_{45}$ 、 $R_{53} \sim R_{56}$ 、 $R_{61} \sim R_{64}$ 中,相邻的取代基彼此不相互键合不形成环。

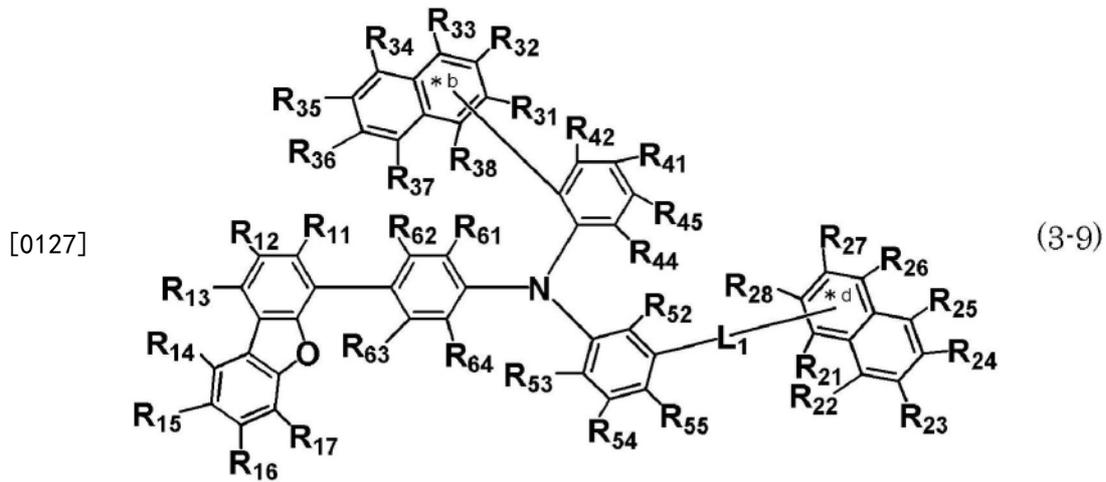
[0122] [化16]



[0124] [化17]



[0126] [化18]

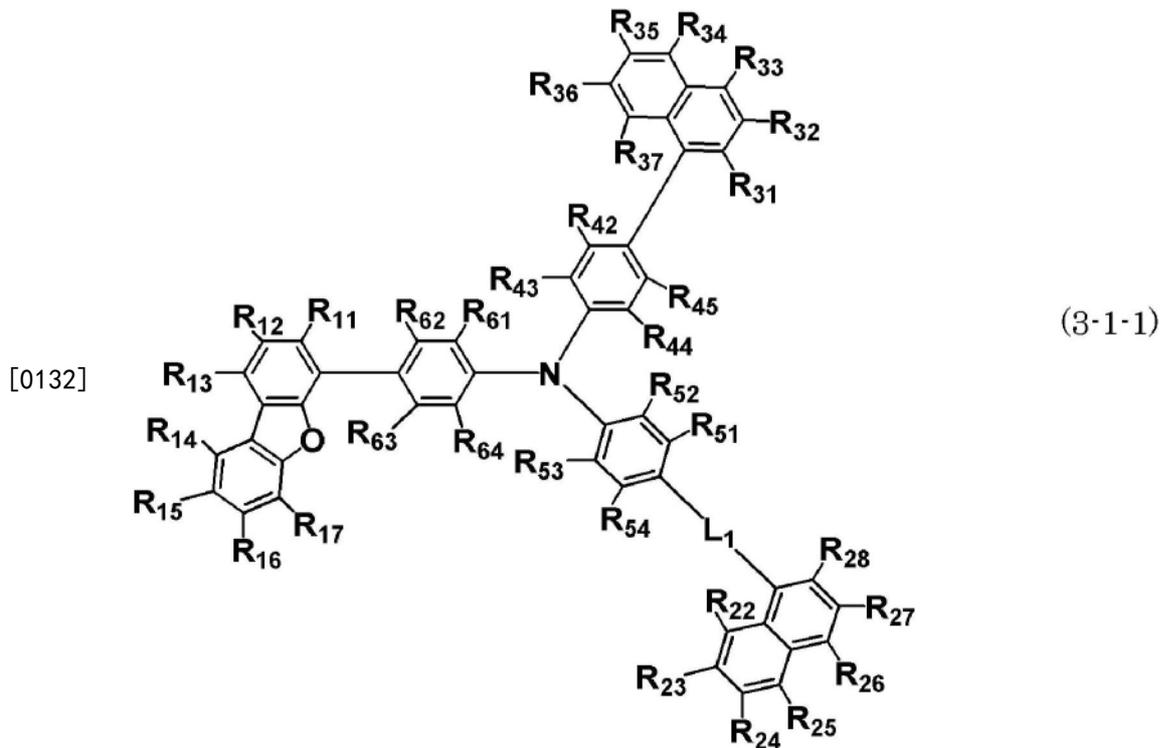


[0128] (式(3-7)、式(3-8)和式(3-9)中, $R_{11} \sim R_{17}$ 、 $R_{21} \sim R_{28}$ 、 $R_{31} \sim R_{38}$ 、 R_{41} 、 R_{42} 、 R_{44} 、 R_{45} 、 $R_{51} \sim R_{55}$ 、 $R_{61} \sim R_{64}$ 、 L_1 与上文相同。)

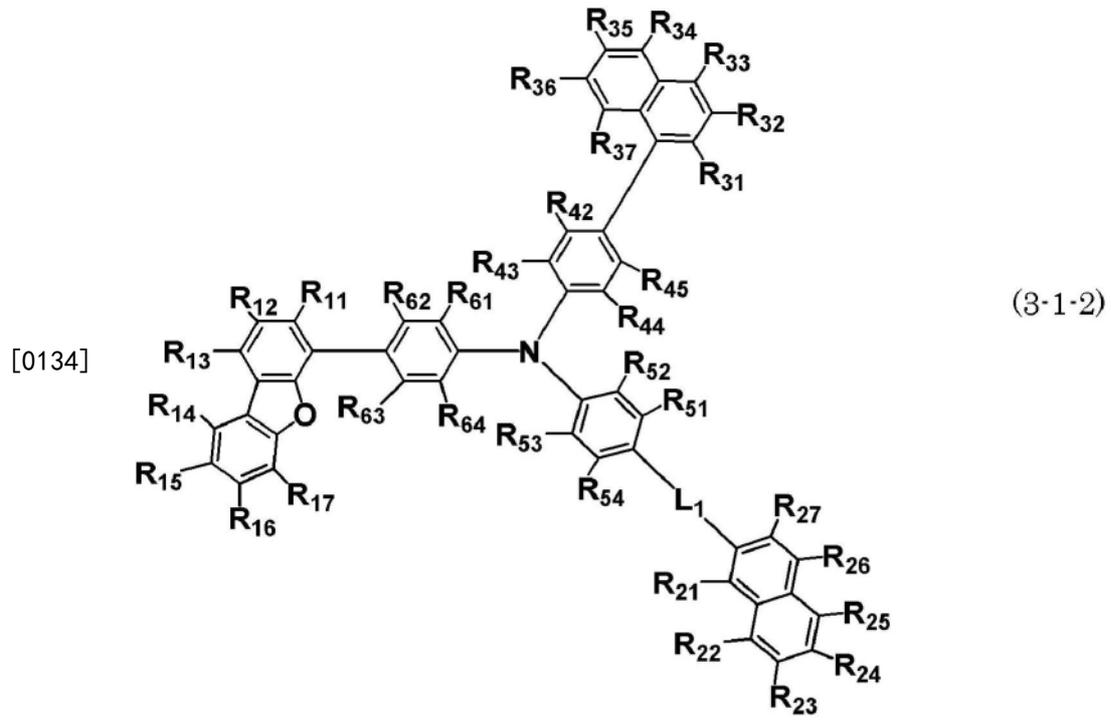
[0129] 式(3-7)、式(3-8)和式(3-9)中, $R_{11} \sim R_{17}$ 、 $R_{21} \sim R_{28}$ 、 $R_{31} \sim R_{38}$ 、 R_{41} 、 R_{42} 、 R_{44} 、 R_{45} 、 $R_{51} \sim R_{55}$ 、 $R_{61} \sim R_{64}$ 、 L_1 的各基的具体例、优选碳数和原子数等与上文相同。另外,在 $R_{11} \sim R_{17}$ 、 $R_{21} \sim R_{28}$ 、 $R_{31} \sim R_{38}$ 、 R_{41} 、 R_{42} 、 R_{44} 、 R_{45} 、 $R_{51} \sim R_{55}$ 、 $R_{61} \sim R_{64}$ 中,相邻的取代基彼此不相互键合不形成环。

[0130] 在本发明的另一个方案中,化合物(1)进一步优选由下述式(3-1-1)~式(3-1-4)中任一式表示。

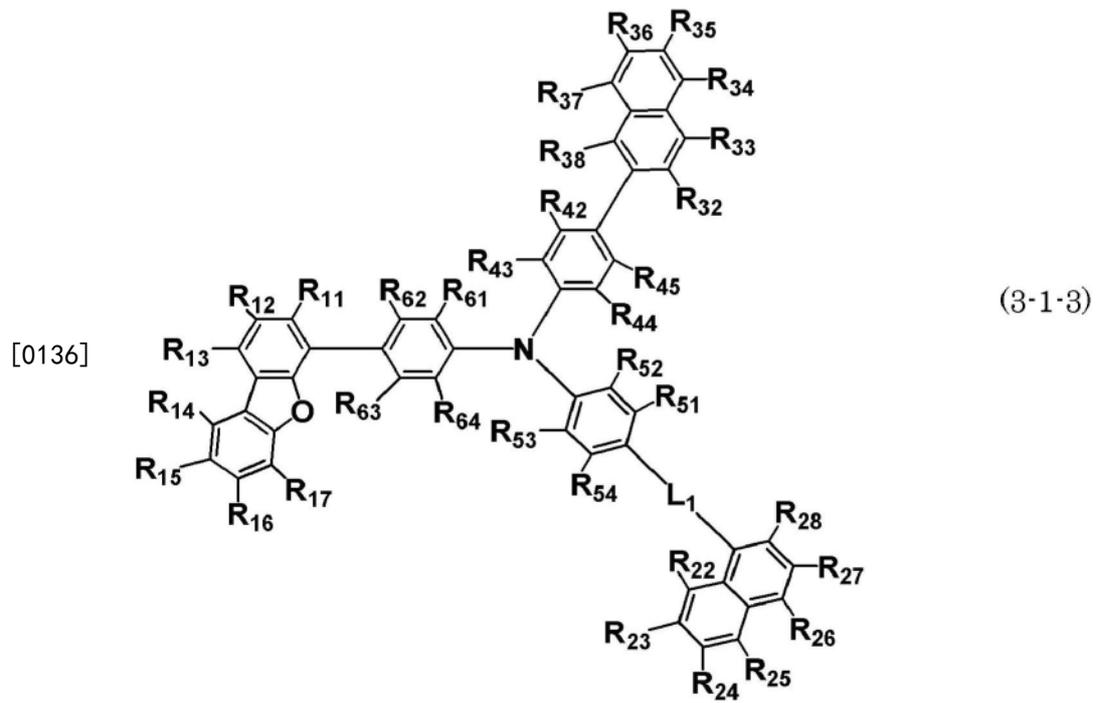
[0131] [化19]



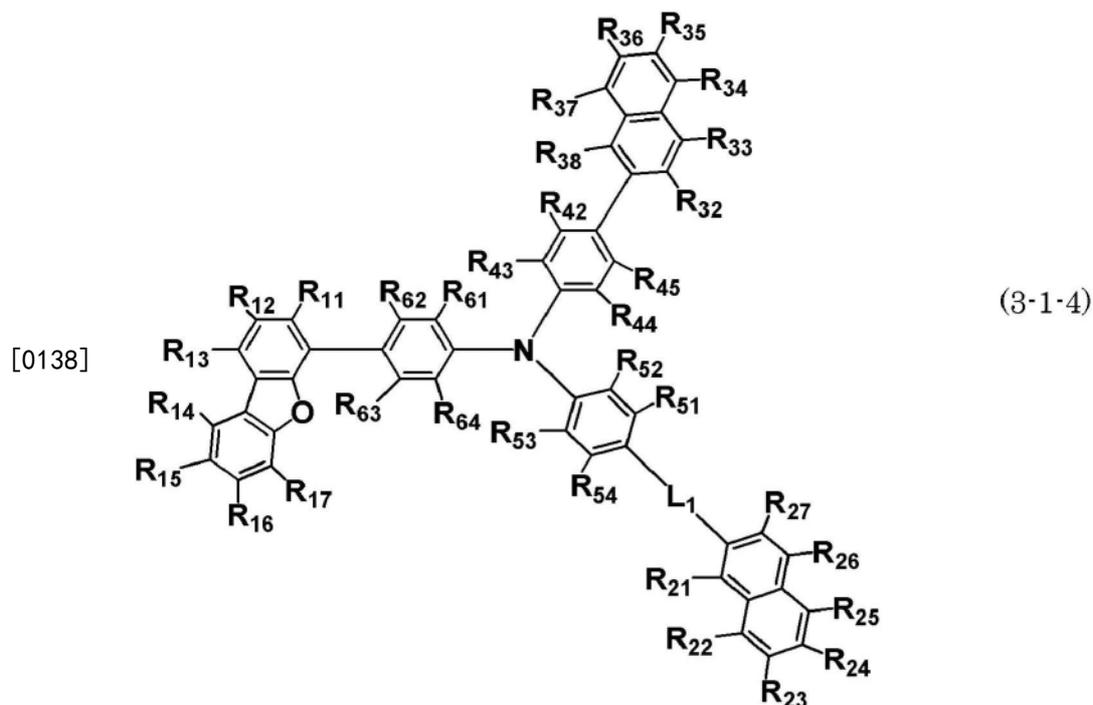
[0133] [化20]



[0135] [化21]



[0137] [化22]



[0139] (式(3-1-1)、式(3-1-2)、式(3-1-3)和式(3-1-4)中, $R_{11} \sim R_{17}$ 、 $R_{21} \sim R_{28}$ 、 $R_{31} \sim R_{38}$ 、 $R_{42} \sim R_{45}$ 、 $R_{51} \sim R_{54}$ 、 $R_{61} \sim R_{64}$ 、 L_1 与上文相同。)

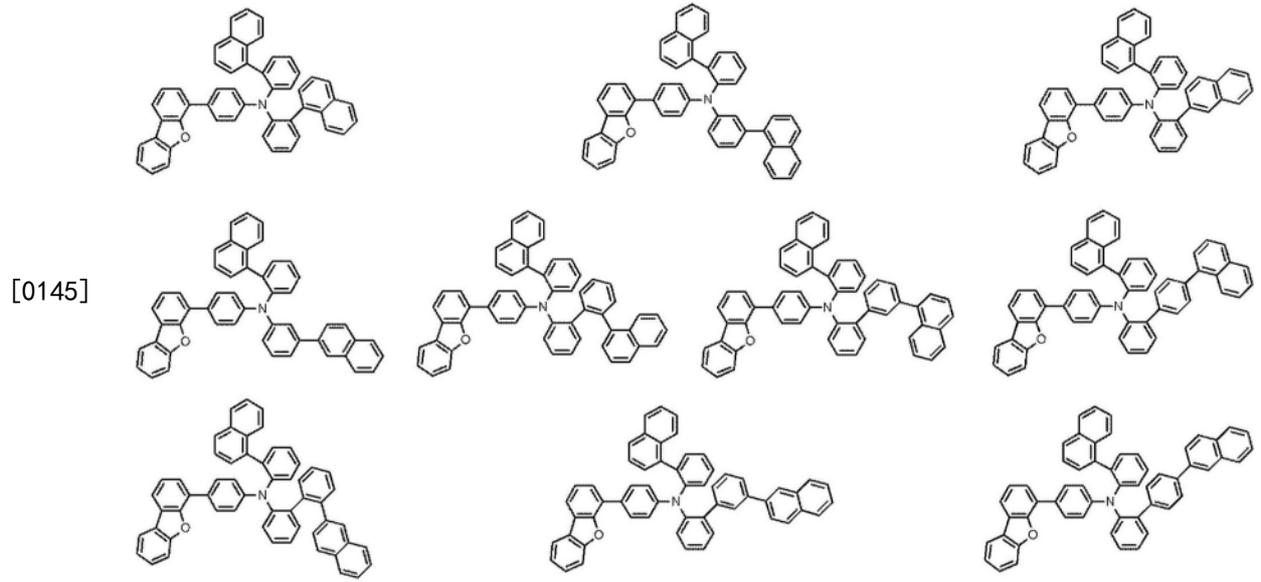
[0140] 式(3-1-1)、式(3-1-2)、式(3-1-3)和式(3-1-4)中, $R_{11} \sim R_{17}$ 、 $R_{21} \sim R_{28}$ 、 $R_{31} \sim R_{38}$ 、 $R_{42} \sim R_{45}$ 、 $R_{51} \sim R_{54}$ 、 $R_{61} \sim R_{64}$ 、 L_1 的各基的具体例、优选碳数和原子数等与上文相同。另外,在 $R_{11} \sim R_{17}$ 、 $R_{21} \sim R_{28}$ 、 $R_{31} \sim R_{38}$ 、 $R_{42} \sim R_{45}$ 、 $R_{51} \sim R_{54}$ 、 $R_{61} \sim R_{64}$ 中,相邻的取代基彼此不相互键合不形成环。

[0141] 在 $R_{11} \sim R_{17}$ 、 $R_{21} \sim R_{28}$ 、 $R_{31} \sim R_{38}$ 、 $R_{41} \sim R_{45}$ 、 $R_{51} \sim R_{55}$ 和 $R_{61} \sim R_{64}$ 中,相邻的取代基彼此不相互键合。

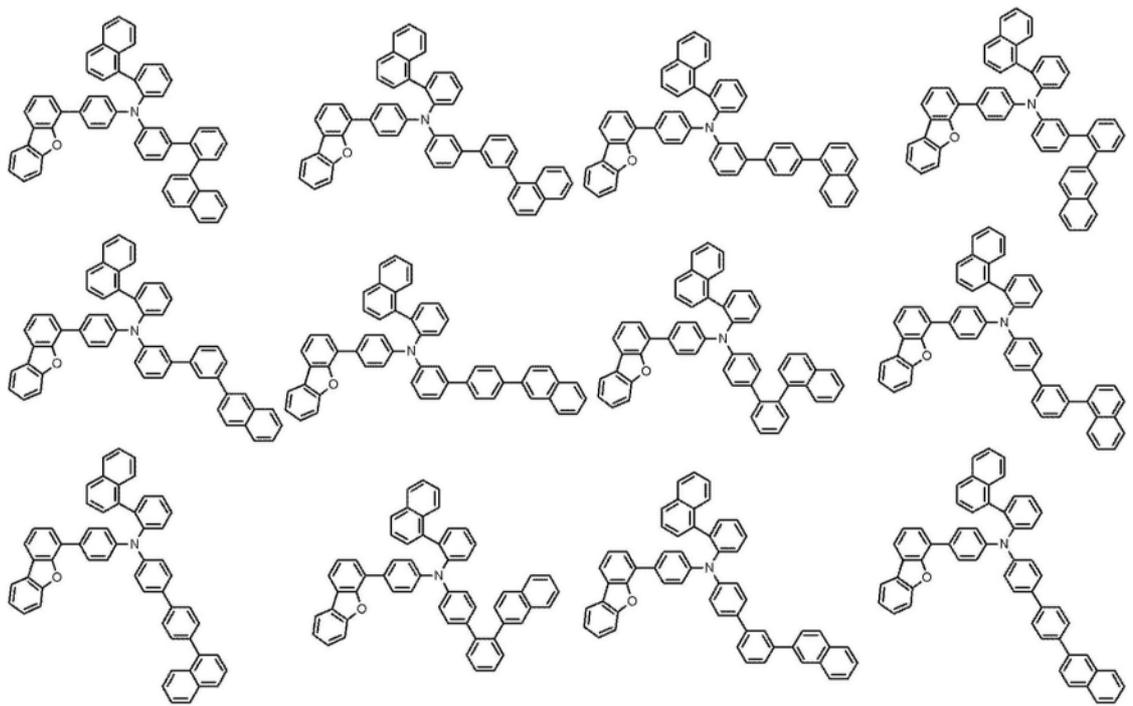
[0142] 即,在 $R_{11} \sim R_{17}$ 、 $R_{21} \sim R_{28}$ 、 $R_{31} \sim R_{38}$ 、 $R_{41} \sim R_{45}$ 、 $R_{51} \sim R_{55}$ 和 $R_{61} \sim R_{64}$ 中,相邻的取代基彼此间不形成环。

[0143] 以下举出本发明涉及的化合物的具体例,并不刻意限定于此。

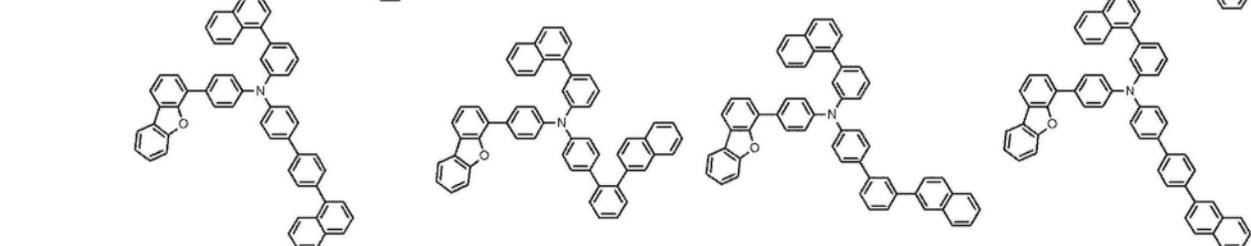
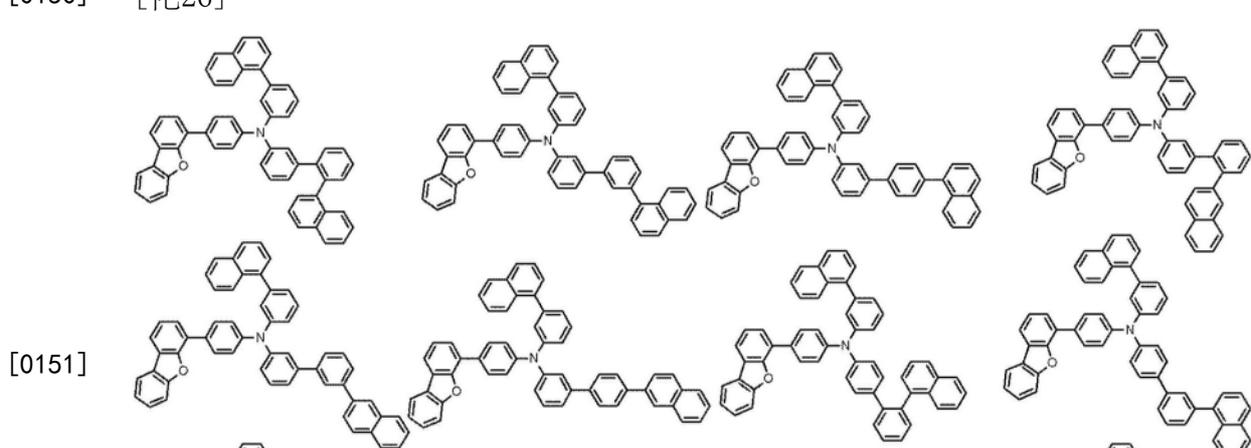
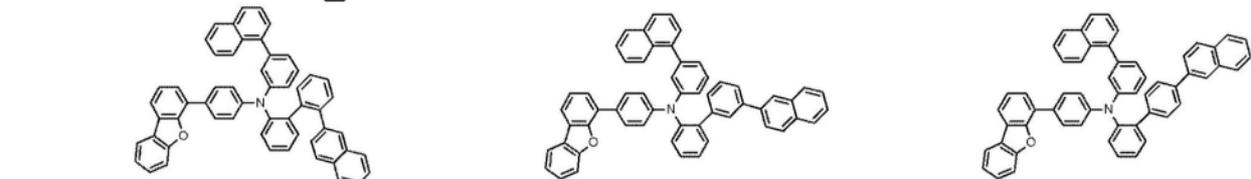
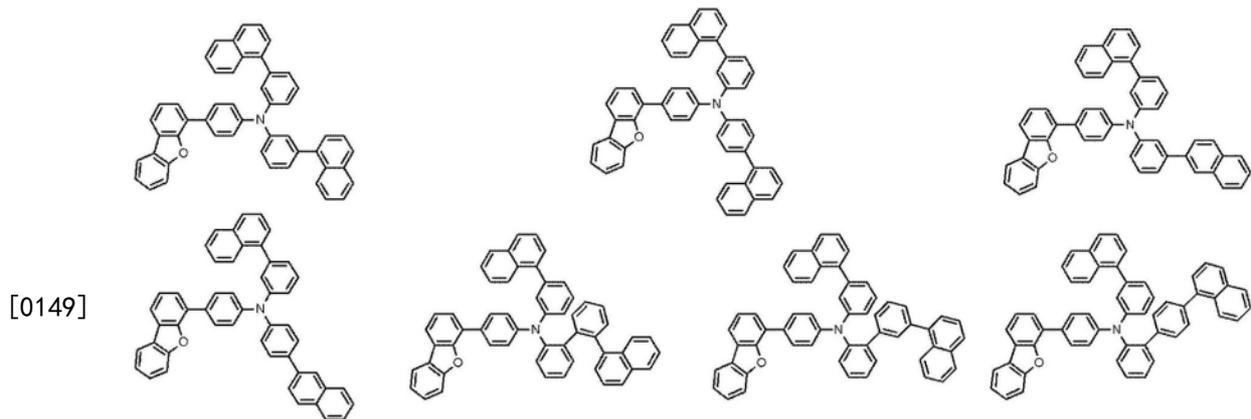
[0144] [化23]



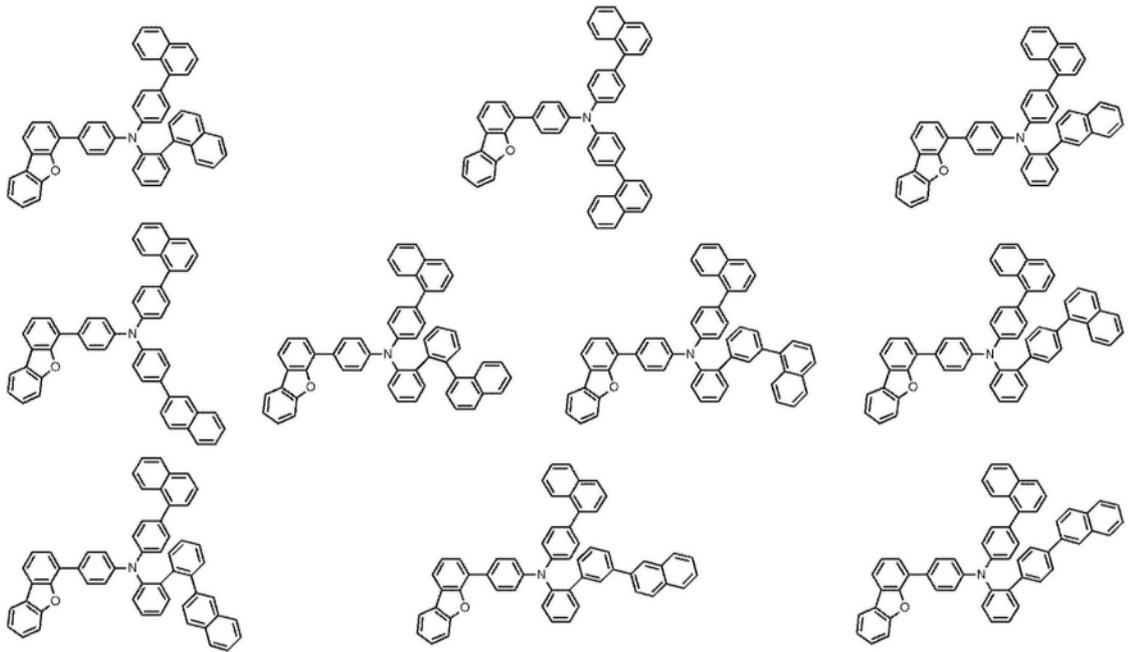
[0146] [化24]



[0148] [化25]

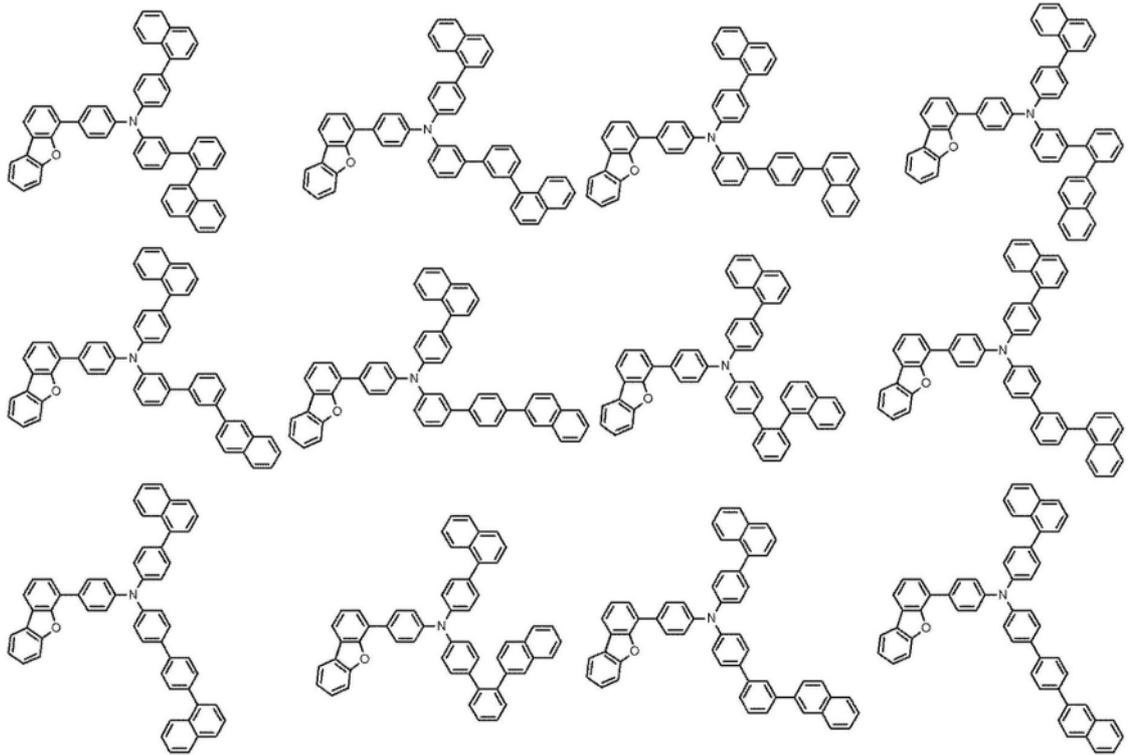


[0153]



[0154]

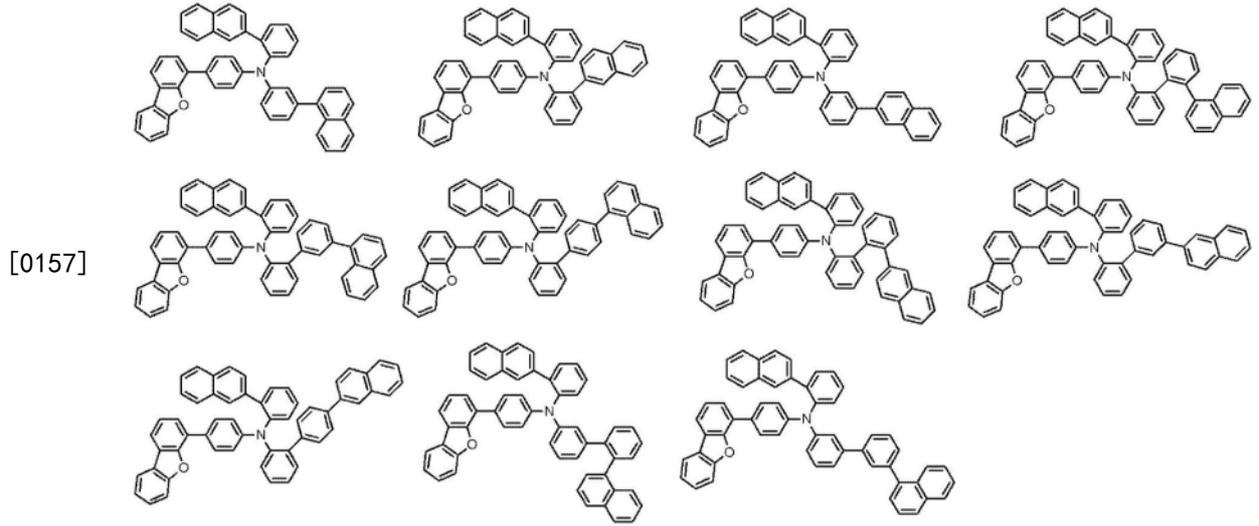
[化28]



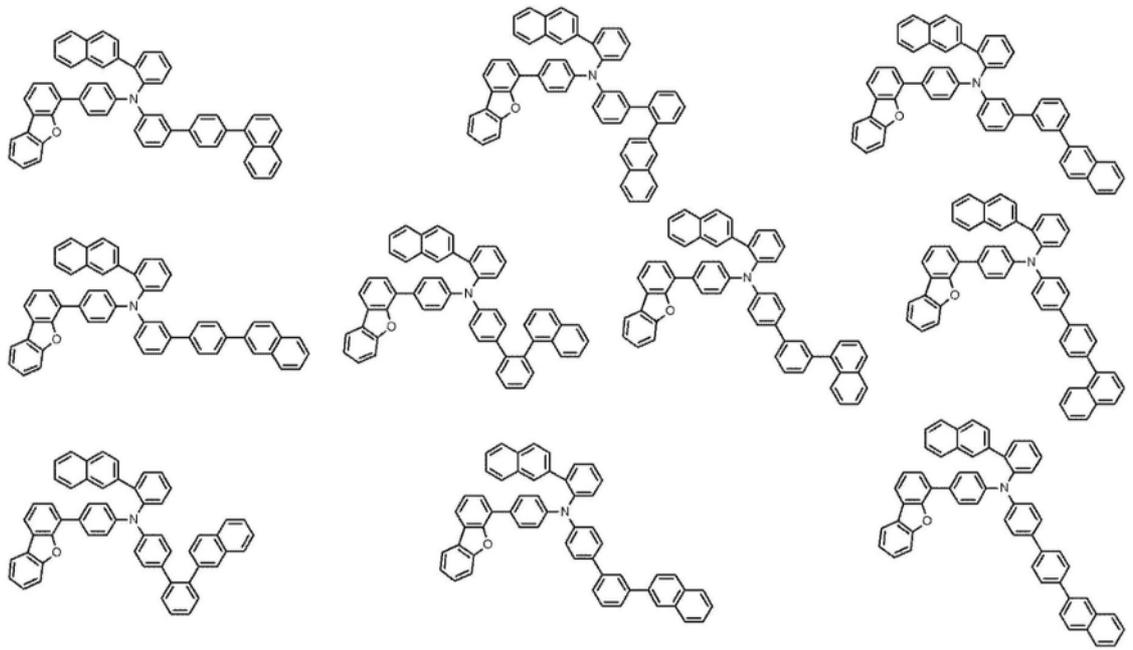
[0155]

[0156]

[化29]

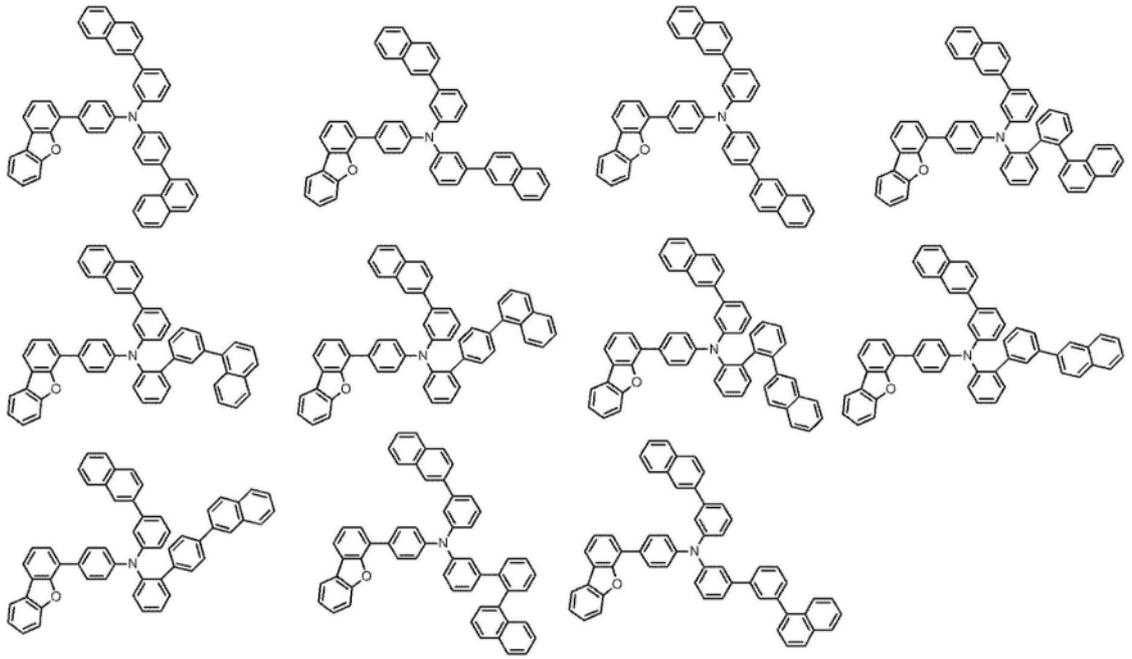


[0158] [化30]

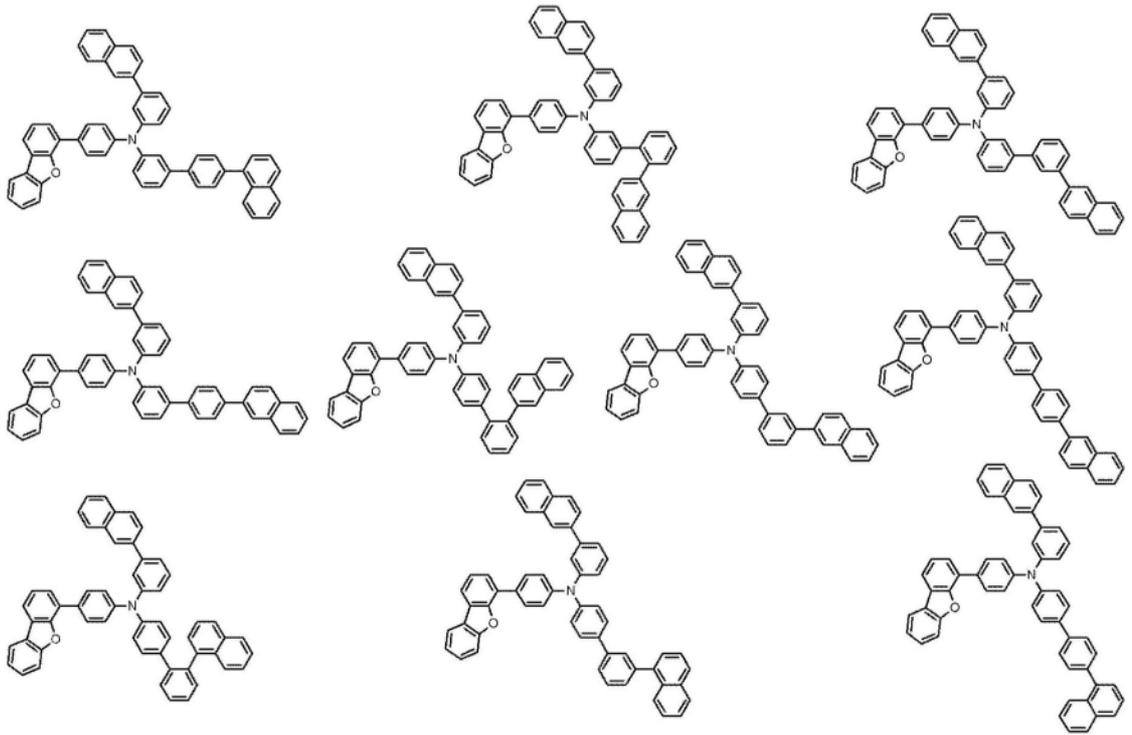


[0160] [化31]

[0161]

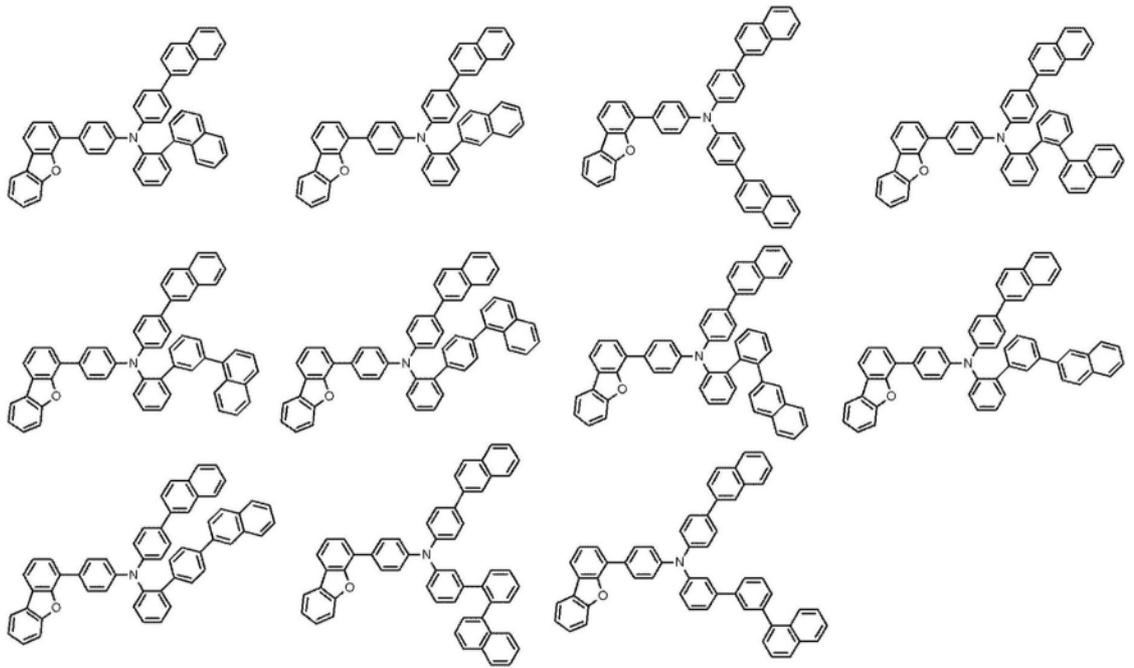


[0162] [化32]



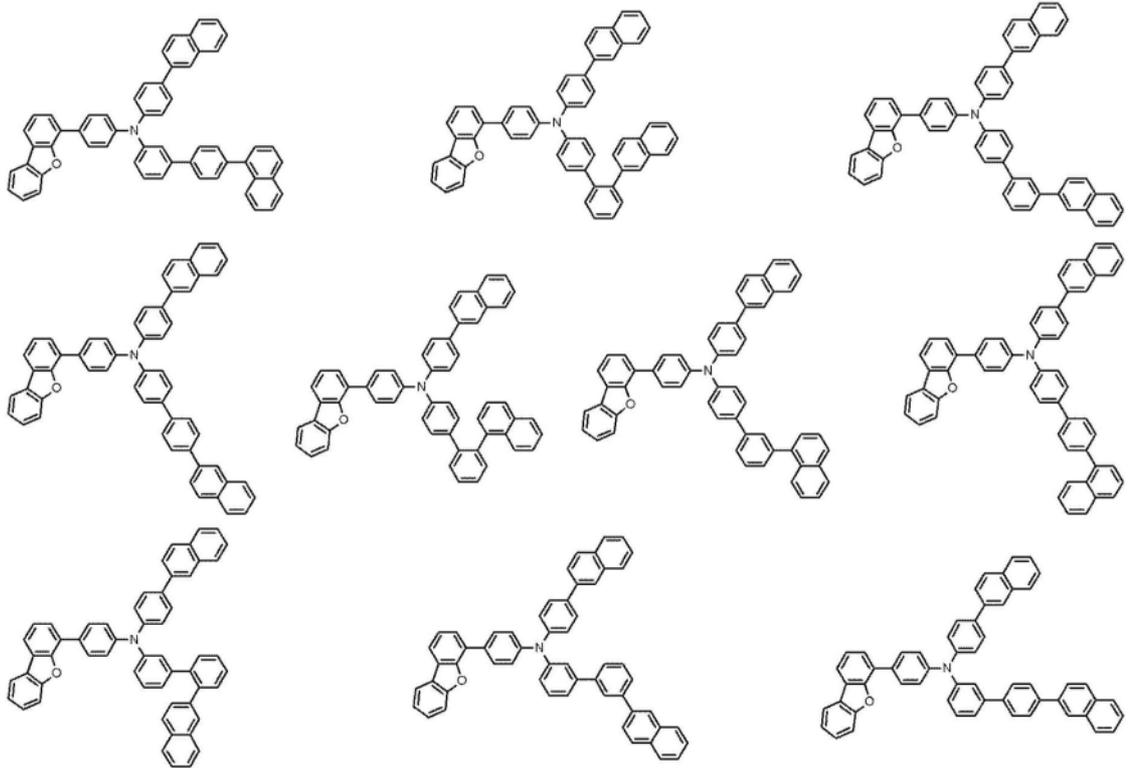
[0164] [化33]

[0165]



[0166]

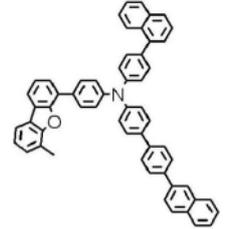
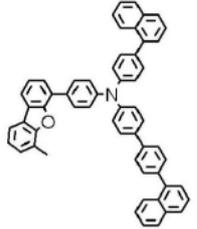
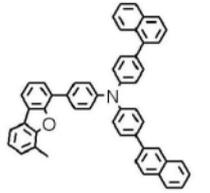
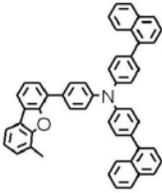
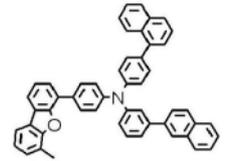
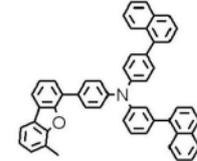
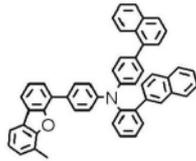
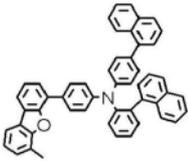
[化34]



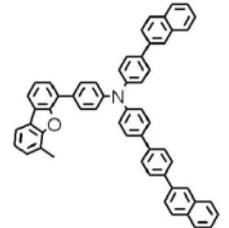
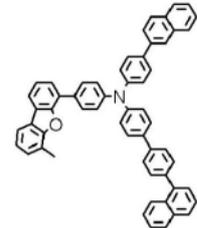
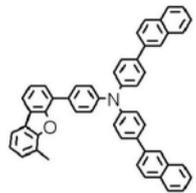
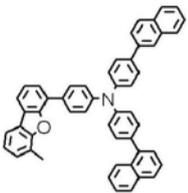
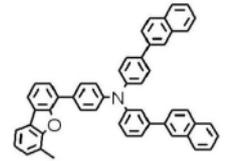
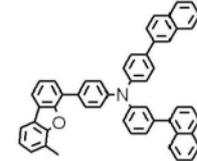
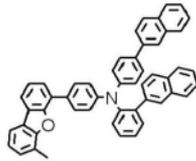
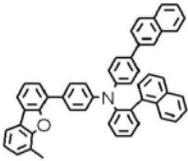
[0167]

[0168]

[化35]

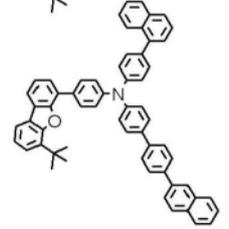
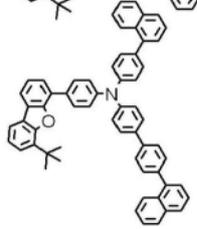
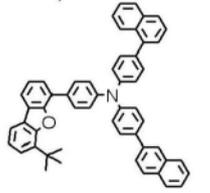
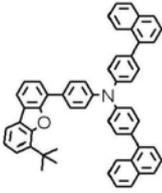
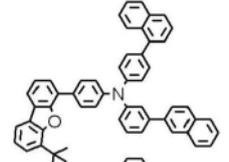
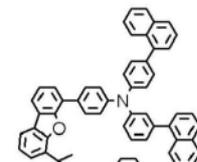
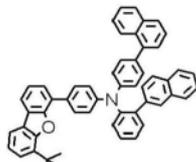
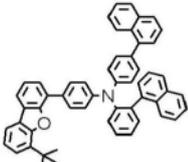


[0169]

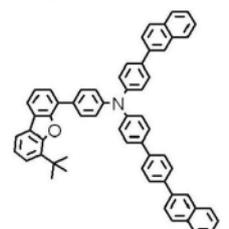
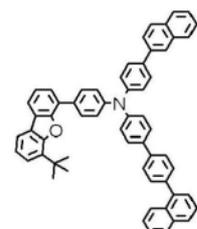
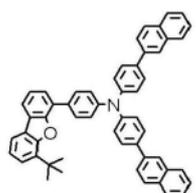
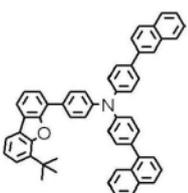
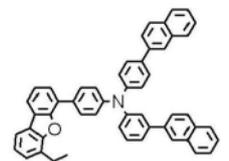
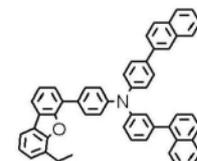
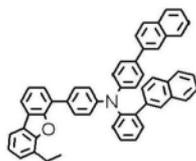
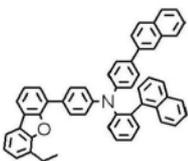


[0170]

[化36]

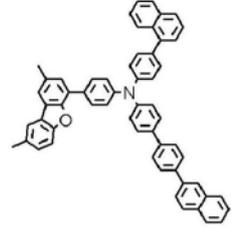
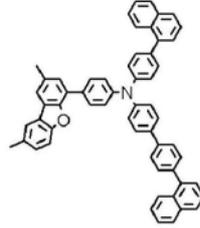
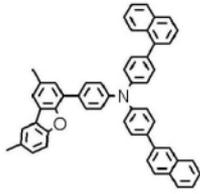
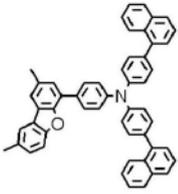
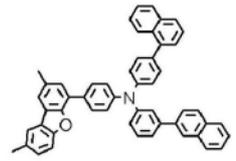
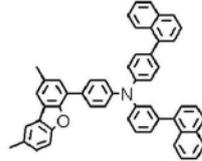
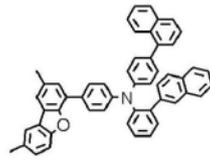
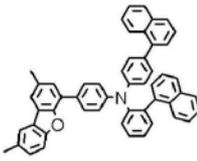


[0171]

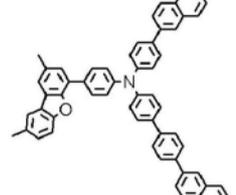
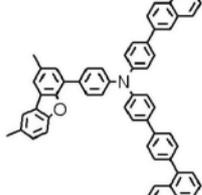
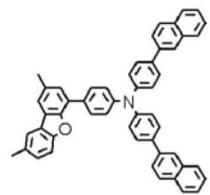
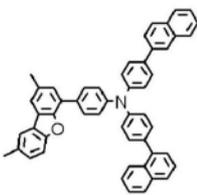
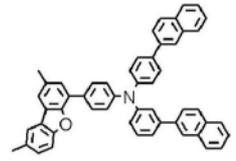
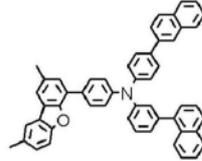
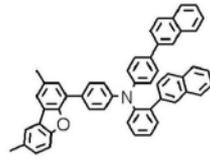
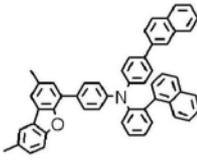


[0172]

[化37]



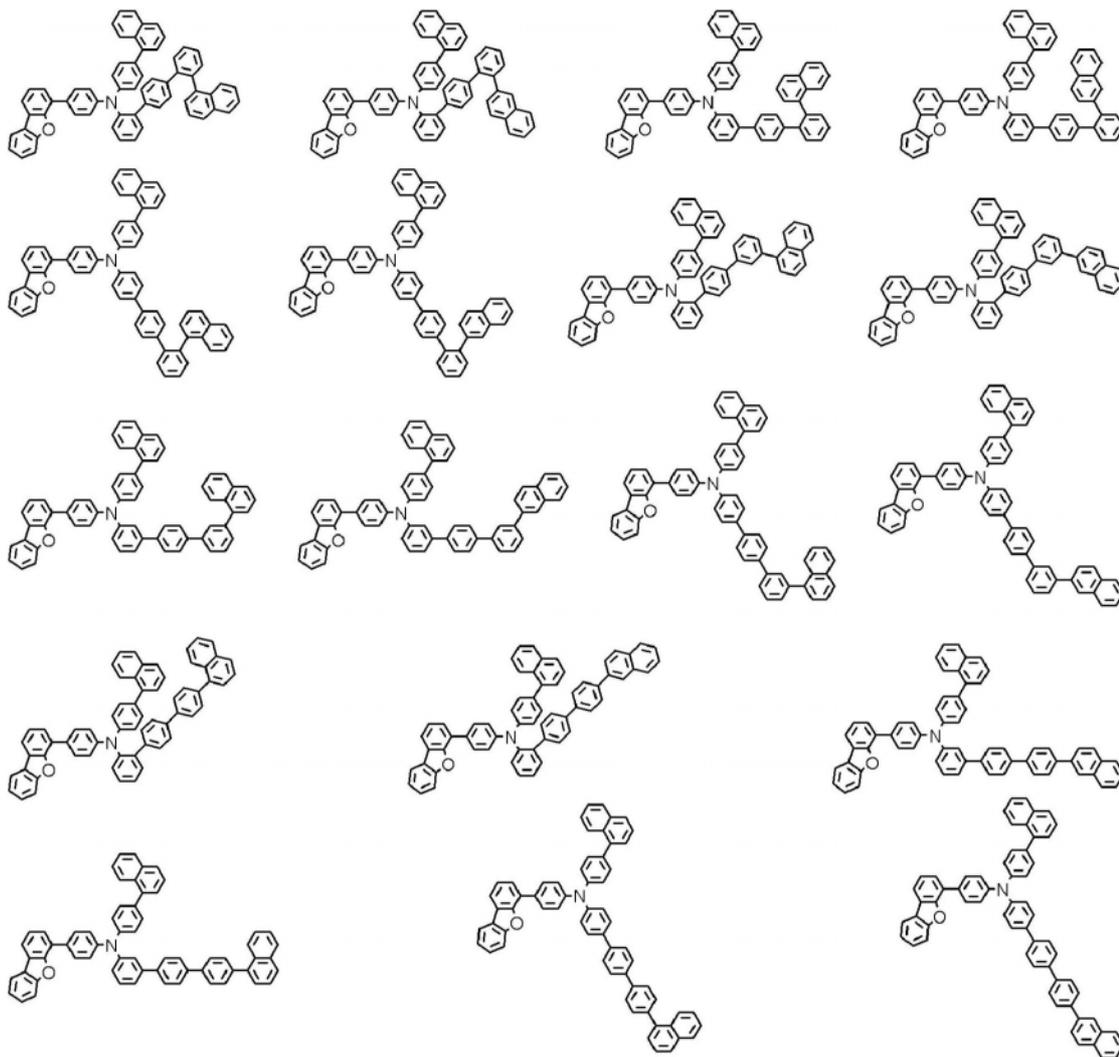
[0173]



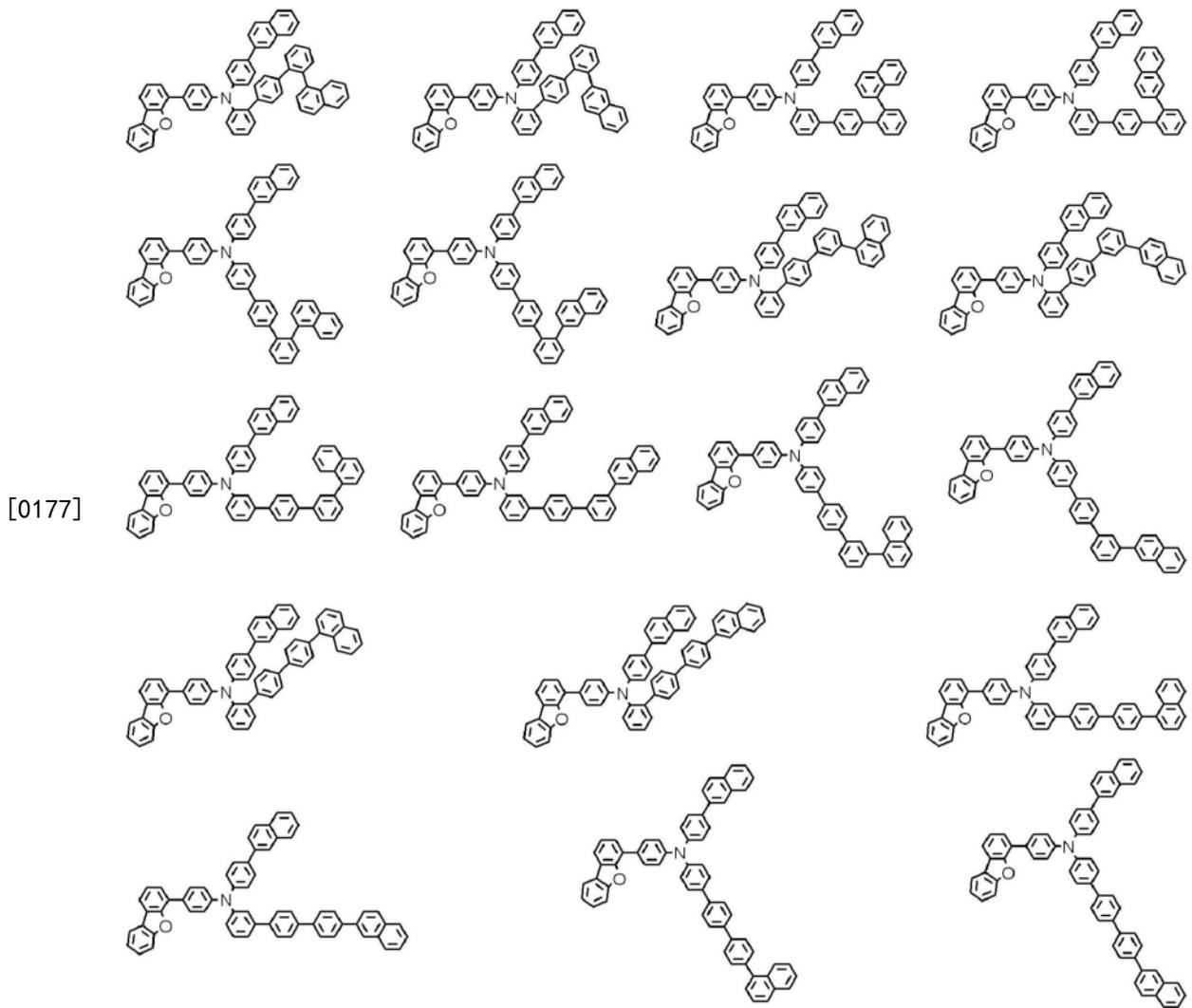
[0174]

[化38]

[0175]



[0176] [化39]



[0178] 化合物(1)作为有机EL元件用材料、空穴传输材料、设置于阳极和发光层之间的有机层例如空穴注入层和空穴传输层的材料有用。该化合物(1)的制造方法没有特别限制,本领域技术人员能够参照本说明书的实施例并且利用以及变更公知的合成反应而容易地制造。

[0179] 以下,对有机EL元件构成进行说明。

[0180] 作为有机EL元件的典型元件构成,可以列举以下的(1)~(13),不特别限定于此。需要说明的是,优选使用(8)的元件构成。

[0181] (1) 阳极/发光层/阴极

[0182] (2) 阳极/空穴注入层/发光层/阴极

[0183] (3) 阳极/发光层/电子注入层/阴极

[0184] (4) 阳极/空穴注入层/发光层/电子注入层/阴极

[0185] (5) 阳极/有机半导体层/发光层/阴极

[0186] (6) 阳极/有机半导体层/电子阻挡层/发光层/阴极

[0187] (7) 阳极/有机半导体层/发光层/附着改善层/阴极

[0188] (8) 阳极/空穴注入层/空穴传输层/发光层/(电子传输层/)电子注入层/阴极

[0189] (9) 阳极/绝缘层/发光层/绝缘层/阴极

[0190] (10) 阳极/无机半导体层/绝缘层/发光层/绝缘层/阴极

[0191] (11) 阳极/有机半导体层/绝缘层/发光层/绝缘层/阴极

[0192] (12) 阳极/绝缘层/空穴注入层/空穴传输层/发光层/绝缘层/阴极

[0193] (13) 阳极/绝缘层/空穴注入层/空穴传输层/发光层/(电子传输层/)电子注入层/阴极

[0194] 上述化合物(1)可以用于有机EL元件中的任一有机层,从有助于提高外部量子效率和寿命的观点出发,优选用于空穴注入层或空穴传输层,更优选用于空穴传输层。

[0195] 上述化合物(1)在有机层、优选为空穴注入层或空穴传输层中的含量相对于该有机层的成分的总摩尔量,优选为30~100摩尔%、更优选为50~100摩尔%、进一步优选为80~100摩尔%,特别优选为实质上为100摩尔%。

[0196] 以下,以将上述化合物(1)用于空穴注入层、空穴传输层的有机EL元件为例,对各层进行说明。

[0197] (基板)

[0198] 基板被用作有机EL元件的支撑体。作为基板,例如可以使用玻璃、石英、塑料等的板。另外,也可以使用挠性基板。挠性基板是指能够进行弯曲的(柔性的)基板,例如可以举出包含聚碳酸酯、聚芳酯、聚醚砜、聚丙烯、聚酯、聚氟乙烯或聚氯乙烯的塑料基板等。另外,也可以使用无机蒸镀膜。

[0199] (阳极)

[0200] 形成在基板上的阳极优选使用功函数大的(例如4.0eV以上)金属、合金、导电性化合物和它们的混合物等。具体而言,例如可以举出氧化铟-氧化锡(ITO:Indium Tin Oxide, 铟锡氧化物);含有硅或氧化硅的氧化铟-氧化锡;氧化铟-氧化锌;含有氧化钨和氧化锌的氧化铟;石墨烯等。此外,可以举出金(Au)、铂(Pt)、镍(Ni)、钨(W)、铬(Cr)、钼(Mo)、铁(Fe)、钴(Co)、铜(Cu)、钯(Pd)、钛(Ti)、或上述金属的氮化物(例如氮化钛)等。

[0201] 这些材料通常通过溅射法进行成膜。例如,氧化铟-氧化锌可以通过使用相对于氧化铟加入了1~10wt%的氧化锌的靶利用溅射法而形成;含有氧化钨和氧化锌的氧化铟可以通过使用相对于氧化铟含有0.5~5wt%氧化钨和0.1~1wt%氧化锌的靶利用溅射法而形成。另外,也可以通过真空蒸镀法、涂布法、喷墨法、旋涂法等进行制作。

[0202] 与阳极相邻地形成的空穴注入层使用与阳极的功函数无关地容易进行空穴注入的材料形成,因此作为电极材料,可以使用一般所用的材料(例如金属、合金、导电性化合物、和它们的混合物、属于元素周期表的第一族或第二族的元素)。

[0203] 还可以使用作为功函数小的材料的属于元素周期表的第一族或第二族的元素、即锂(Li)、铯(Cs)等碱金属、和镁(Mg)、钙(Ca)、锶(Sr)等碱土金属、和包含它们的合金(例如MgAg、AlLi)、铕(Eu)、镱(Yb)等稀土金属和包含它们的合金等。需要说明的是,使用碱金属、碱土金属、和包含它们的合金来形成阳极时,可以使用真空蒸镀法、溅射法。此外,在使用银浆等时,可以使用涂布法、喷墨法等。

[0204] (空穴注入层)

[0205] 空穴注入层是包含空穴注入性高的材料的层。上述化合物(1)可以单独或与下述化合物组合用于空穴注入层。

[0206] 作为空穴注入性高的物质,可以使用钼氧化物、钛氧化物、钒氧化物、铌氧化物、钇

氧化物、铬氧化物、锆氧化物、钨氧化物、钼氧化物、银氧化物、钨氧化物、锰氧化物等。

[0207] 作为空穴注入层材料,也可以举出作为低分子的有机化合物的4,4',4''-三(N,N-二苯基氨基)三苯基胺(简称:TDATA)、4,4',4''-三[N-(3-甲基苯基)-N-苯基氨基]三苯基胺(简称:MTDATA)、4,4'-双[N-(4-二苯基氨基苯基)-N-苯基氨基]联苯(简称:DPAB)、4,4'-双(N-{4-[N'-(3-甲基苯基)-N'-苯基氨基]苯基}-N-苯基氨基)联苯(简称:DNTPD)、1,3,5-三[N-(4-二苯基氨基苯基)-N-苯基氨基]苯(简称:DPA3B)、3-[N-(9-苯基咪唑-3-基)-N-苯基氨基]-9-苯基咪唑(简称:PCzPCA1)、3,6-双[N-(9-苯基咪唑-3-基)-N-苯基氨基]-9-苯基咪唑(简称:PCzPCA2)、3-[N-(1-萘基)-N-(9-苯基咪唑-3-基)氨基]-9-苯基咪唑(简称:PCzPCN1)等芳香族化合物等。

[0208] 也可以使用高分子化合物(低聚物、树状高分子、聚合物等)。例如,可以举出聚(N-乙烯基咪唑)(简称:PVK)、聚(4-乙烯基三苯胺)(简称:PVTPA)、聚[N-(4-{N'-[4-(4-二苯基氨基)苯基]苯基}-N'-苯基氨基)苯基]甲基丙烯酰胺(简称:PTPDMA)、聚[N,N'-双(4-丁基苯基)-N,N'-双(苯基)联苯胺](简称:Poly-TPD)等高分子化合物。另外,也可以使用聚(3,4-亚乙二氧基噻吩)/聚(苯乙烯磺酸)(PEDOT/PSS)、聚苯胺/聚(苯乙烯磺酸)(PAni/PSS)等添加了酸的高分子化合物。

[0209] (空穴传输层)

[0210] 空穴传输层是包含空穴传输性高的材料的层。上述化合物(1)可以单独或与下述化合物组合用于空穴传输层。

[0211] 空穴传输层中可以使用芳香族化合物、咪唑衍生物、噻吩衍生物等。具体而言,可以使用4,4'-双[N-(1-萘基)-N-苯基氨基]联苯(简称:NPB)、N,N'-双(3-甲基苯基)-N,N'-二苯基-[1,1'-联苯]-4,4'-二胺(简称:TPD)、4-苯基-4'-(9-苯基苻-9-基)三苯胺(简称:BAFLP)、4,4'-双[N-(9,9-二甲基苻-2-基)-N-苯基氨基]联苯(简称:DFLDPBi)、4,4',4''-三(N,N-二苯基氨基)三苯胺(简称:TDATA)、4,4',4''-三[N-(3-甲基苯基)-N-苯基氨基]三苯胺(简称:MTDATA)、4,4'-双[N-(螺-9,9'-双苻-2-基)-N-苯基氨基]联苯(简称:BSPB)等芳香族化合物等。在此所述的物质主要是具有 $10^{-6}\text{cm}^2/\text{Vs}$ 以上的空穴迁移率的物质。

[0212] 空穴传输层中也可以使用CBP、CzPA、PCzPA之类的咪唑衍生物、t-BuDNA、DNA、DPAnth之类的噻吩衍生物。也可以使用聚(N-乙烯基咪唑)(简称:PVK)、聚(4-乙烯基三苯胺)(简称:PVTPA)等高分子化合物。

[0213] 其中,只要是空穴传输性高于电子传输性的材料,则可以使用这些以外的材料。需要说明的是,包含空穴传输性高的材料的层不仅可以是单层的层,也可以设为包含上述物质的层层叠二层以上而成的层。例如,空穴传输层可以设为第一空穴传输层(阳极侧)和第二空穴传输层(阴极侧)的二层结构。此时,上述化合物(1)可以包含在第一空穴传输层和第二空穴传输层中的任一个中,从更容易得到本发明的效果的观点出发,更优选包含在配置于发光层侧(阴极侧)的第二空穴传输层中。

[0214] (发光层的客体材料)

[0215] 发光层是包含发光性高的物质(客体材料)的层,可以使用各种材料。例如,作为客体材料,可以使用荧光性化合物、磷光性化合物。荧光性化合物是能够由单重态激发态发光的化合物,磷光性化合物是能够由三重态激发态发光的化合物。

[0216] 作为可用于发光层的蓝色系的荧光发光材料,可以使用苝衍生物、苯乙烯基胺衍

生物、蒽衍生物、荧蒽衍生物、芴衍生物、二胺衍生物、三芳基胺衍生物等。具体来说,可以举出N,N'-双[4-(9H-咪唑-9-基)苯基]-N,N'-二苯基芪-4,4'-二胺(简称:YGA2S)、4-(9H-咪唑-9-基)-4'-(10-苯基-9-蒽基)三苯胺(简称:YGAPA)、4-(10-苯基-9-蒽基)-4'-(9-苯基-9H-咪唑-3-基)三苯胺(简称:PCBAPA)等。

[0217] 作为可用于发光层的绿色系的荧光发光材料,可以使用芳香族胺衍生物等。具体来说,可以举出N-(9,10-二苯基-2-蒽基)-N,9-二苯基-9H-咪唑-3-胺(简称:2PCAPA)、N-[9,10-双(1,1'-联苯-2-基)-2-蒽基]-N,9-二苯基-9H-咪唑-3-胺(简称:2PCABPhA)、N-(9,10-二苯基-2-蒽基)-N,N',N'-三苯基-1,4-苯二胺(简称:2DPAPA)、N-[9,10-双(1,1'-联苯-2-基)-2-蒽基]-N,N',N'-三苯基-1,4-苯二胺(简称:2DPABPhA)、N-[9,10-双(1,1'-联苯-2-基)]-N-[4-(9H-咪唑-9-基)苯基]-N-苯基蒽-2-胺(简称:2YGABPhA)、N,N,9-三苯基蒽-9-胺(简称:DPhAPhA)等。

[0218] 作为可用于发光层的红色系的荧光发光材料,可以使用并四苯衍生物、二胺衍生物等。具体来说,可以举出N,N,N',N'-四(4-甲基苯基)并四苯-5,11-二胺(简称:p-mPhTD)、7,14-二苯基-N,N,N',N'-四(4-甲基苯基)茚并[1,2-a]荧蒽-3,10-二胺(简称:p-mPhAFD)等。

[0219] 作为可用于发光层的蓝色系的磷光发光材料,使用铱络合物、铱络合物、铂络合物等金属络合物。具体来说,可以举出双[2-(4',6'-二氟苯基)吡啶-N,C2']合铱(III)四(1-吡啶基)硼酸盐(简称:FIr6)、双[2-(4',6'-二氟苯基)吡啶-N,C2']合铱(III)吡啶甲酸盐(简称:FIrpic)、双[2-(3',5'-双(三氟甲基)苯基)吡啶-N,C2']合铱(III)吡啶甲酸盐(简称:Ir(CF₃ppy)₂(pic))、双[2-(4',6'-二氟苯基)吡啶-N,C2']合铱(III)乙酰丙酮盐(简称:FIracac)等。

[0220] 作为可用于发光层的绿色系的磷光发光材料,使用铱络合物等。可以举出三(2-苯基吡啶-N,C2')合铱(III)(简称:Ir(ppy)₃)、双(2-苯基吡啶-N,C2')合铱(III)乙酰丙酮盐(简称:Ir(ppy)₂(acac))、双(1,2-二苯基-1H-苯并咪唑)合铱(III)乙酰丙酮盐(简称:Ir(pbi)₂(acac))、双(苯并[h]喹啉)铱(III)乙酰丙酮盐(简称:Ir(bzq)₂(acac))等。

[0221] 作为可用于发光层的红色系的磷光发光材料,使用铱络合物、铂络合物、铽络合物、钕络合物等金属络合物。具体来说,可以举出双[2-(2'-苯并[4,5- α]噻吩基)吡啶-N,C3']合铱(III)乙酰丙酮盐(简称:Ir(btp)₂(acac))、双(1-苯基异喹啉-N,C2')合铱(III)乙酰丙酮盐(简称:Ir(piq)₂(acac))、(乙酰丙酮盐)双[2,3-双(4-氟苯基)喹喔啉]合铱(III)(简称:Ir(Fdpq)₂(acac))、2,3,7,8,12,13,17,18-八乙基-21H,23H-卟啉铂(II)(简称:PtOEP)等有机金属络合物。

[0222] 另外,三(乙酰丙酮盐)(单菲咯啉)铽(III)(简称:Tb(acac)₃(Phen))、三(1,3-二苯基-1,3-丙二酮基)(单菲咯啉)铕(III)(简称:Eu(DBM)₃(Phen))、三[1-(2-噻吩甲酰基)-3,3,3-三氟丙酮](单菲咯啉)铕(III)(简称:Eu(TTA)₃(Phen))等稀土金属络合物由于是来自稀土金属离子的发光(不同多重度间的电子跃迁),因此可以用作磷光性化合物。

[0223] (发光层的主体材料)

[0224] 作为发光层,可以为将上述客体材料分散在其他物质(主体材料)中的构成。作为主体材料,可以使用各种主体材料,优选使用最低未占轨道能级(LUMO能级)高于客体材料、最高已占轨道能级(HOMO能级)低于客体材料的物质。

[0225] 作为主体材料,使用

[0226] (1) 铝络合物、铍络合物、或者锌络合物等金属络合物、

[0227] (2) 噁二唑衍生物、苯并咪唑衍生物、或者菲咯啉衍生物等杂环化合物、

[0228] (3) 咪唑衍生物、噻衍生物、菲衍生物、茈衍生物、或者蒽衍生物等稠合芳香族化合物、

[0229] (4) 三芳基胺衍生物或稠合多环芳香族胺衍生物等芳香族化合物。

[0230] 具体来说,可以使用三(8-羟基喹啉)铝(III)(简称:Alq)、三(4-甲基-8-羟基喹啉)铝(III)(简称:Almq₃)、双(10-羟基苯并[h]喹啉)铍(II)(简称:BeBq₂)、双(2-甲基-8-羟基喹啉)(4-苯基苯酚)铝(III)(简称:BA1q)、双(8-羟基喹啉)锌(II)(简称:Znq)、双[2-(2-苯并噁唑基)苯酚]锌(II)(简称:ZnPB0)、双[2-(2-苯并噁唑基)苯酚]锌(II)(简称:ZnBTZ)等金属络合物、2-(4-联苯基)-5-(4-叔丁基苯基)-1,3,4-噁二唑(简称:PBD)、1,3-双[5-(对叔丁基苯基)-1,3,4-噁二唑-2-基]苯(简称:OXD-7)、3-(4-联苯基)-4-苯基-5-(4-叔丁基苯基)-1,2,4-三唑(简称:TAZ)、2,2',2''-(1,3,5-苯三基)三(1-苯基-1H-苯并咪唑)(简称:TPBI)、红菲咯啉(简称:BPhen)、浴铜灵(简称:BCP)等杂环化合物、9-[4-(10-苯基-9-噻基)苯基]-9H-咪唑(简称:CzPA)、3,6-二苯基-9-[4-(10-苯基-9-噻基)苯基]-9H-咪唑(简称:DPCzPA)、9,10-双(3,5-二苯基苯基)噻(简称:DPPA)、9,10-二(2-萘基)噻(简称:DNA)、2-叔丁基-9,10-二(2-萘基)噻(简称:t-BuDNA)、9,9'-联噻(简称:BANT)、9,9'-(茈-3,3'-二基)二菲(简称:DPNS)、9,9'-(茈-4,4'-二基)二菲(简称:DPNS2)、3,3',3''-(苯-1,3,5-三基)三茈(简称:TPB3)、9,10-二苯基噻(简称:DPAnth)、6,12-二甲氧基-5,11-二苯基蒽等稠合芳香族化合物、N,N-二苯基-9-[4-(10-苯基-9-噻基)苯基]-9H-咪唑-3-胺(简称:CzA1PA)、4-(10-苯基-9-噻基)三苯胺(简称:DPhPA)、N,9-二苯基-N-[4-(10-苯基-9-噻基)苯基]-9H-咪唑-3-胺(简称:PCAPA)、N,9-二苯基-N-{4-[4-(10-苯基-9-噻基)苯基]苯基}-9H-咪唑-3-胺(简称:PCAPBA)、N-(9,10-二苯基-2-噻基)-N,9-二苯基-9H-咪唑-3-胺(简称:2PCAPA)、NPB(或 α -NPD)、TPD、DFLDPBi、BSPB等芳香族化合物等。另外,主体材料可以使用两种以上。

[0231] (电子传输层)

[0232] 电子传输层是包含电子传输性高的物质的层。电子传输层可以使用

[0233] (1) 铝络合物、铍络合物、锌络合物等金属络合物、

[0234] (2) 咪唑衍生物、苯并咪唑衍生物、吡嗪衍生物、咪唑衍生物、菲咯啉衍生物等杂芳香族化合物、

[0235] (3) 高分子化合物。

[0236] 具体而言,作为低分子的有机化合物,可以使用Alq、三(4-甲基-8-羟基喹啉)铝(简称:Almq₃)、双(10-羟基苯并[h]喹啉)铍(简称:BeBq₂)、BA1q、Znq、ZnPB0、ZnBTZ等金属络合物等。另外,除了金属络合物以外,还可以使用2-(4-联苯基)-5-(4-叔丁基苯基)-1,3,4-噁二唑(简称:PBD)、1,3-双[5-(对叔丁基苯基)-1,3,4-噁二唑-2-基]苯(简称:OXD-7)、3-(4-叔丁基苯基)-4-苯基-5-(4-联苯基)-1,2,4-三唑(简称:TAZ)、3-(4-叔丁基苯基)-4-(4-乙基苯基)-5-(4-联苯基)-1,2,4-三唑(简称:p-EtTAZ)、红菲咯啉(简称:BPhen)、浴铜灵(简称:BCP)、4,4'-双(5-甲基苯并噁唑-2-基)茈(简称:BzOs)等杂芳香族化合物。上述材

料主要是具有 $10^{-6}\text{cm}^2/\text{Vs}$ 以上的电子迁移率的材料。需要说明的是,只要是电子传输性高于空穴传输性的材料,则可以使用上述以外的材料作为电子传输层。另外,电子传输层不仅可以是单层的层,也可以为包含上述材料的层层叠二层以上而成的层。

[0237] 另外,电子传输层也可以使用高分子化合物。例如,可以使用聚[(9,9-二己基芴-2,7-二基)-co-(吡啶-3,5-二基)](简称:PF-Py)、聚[(9,9-二辛基芴-2,7-二基)-co-(2,2'-联吡啶-6,6'-二基)](简称:PF-BPy)等。

[0238] (电子注入层)

[0239] 电子注入层为包含电子注入性高的材料的层。电子注入层可以使用锂(Li)、铯(Cs)、钙(Ca)、氟化锂(LiF)、氟化铯(CsF)、氟化钙(CaF_2)、锂氧化物(LiO_x)等碱金属、碱土金属、或它们的化合物。另外,也可以使用具有电子传输性的材料含有碱金属、碱土金属、或它们的化合物而成的材料,具体地可以使用使Alq中含有镁(Mg)而成的材料等。需要说明的是,此时,能够更高效地进行自阴极的电子注入。

[0240] 或者,也可以将混合有机化合物和供电子体(供体)而成的复合材料用于电子注入层。由于有机化合物从供电子体接受电子,因此这样的复合材料的电子注入性和电子传输性优异。此时,作为有机化合物,优选为所接受的电子的传输优异的材料,具体地,例如可以使用上述的构成电子传输层的材料(金属络合物、杂芳香族化合物等)。作为供电子体,只要是对有机化合物表现出供电子性的材料即可。具体地,优选碱金属、碱土金属和稀土金属,可以举出锂、铯、镁、钙、钪、镱等。另外,优选碱金属氧化物、碱土金属氧化物,可以举出锂氧化物、钙氧化物、钡氧化物等。另外,也可以使用氧化镁之类的路易斯碱。另外,也可以使用四硫富瓦烯(简称:TTF)等有机化合物。

[0241] (阴极)

[0242] 阴极优选利用功函数小的(具体地为3.8eV以下)金属、合金、导电性化合物、和它们的混合物等。作为这样的阴极材料的具体例,可以举出属于元素周期表的第一族或第二族的元素、即锂(Li)、铯(Cs)等碱金属、和镁(Mg)、钙(Ca)、锶(Sr)等碱土金属、和包含它们的合金(例如MgAg、AlLi)、铕(Eu)、镱(Yb)等稀土金属和包含它们的合金等。

[0243] 需要说明的是,在使用碱金属、碱土金属、包含它们的合金来形成阴极的情况下,可以使用真空蒸镀法、溅射法。另外,在使用银浆等的情况下,可以使用涂布法、喷墨法等。

[0244] 需要说明的是,通过设置电子注入层,就可以与功函数的大小无关地使用Al、Ag、ITO、石墨烯、含有硅或氧化硅的氧化铟-氧化锡等各种导电性材料来形成阴极。这些导电性材料可以使用溅射法、喷墨法、旋涂法等进行成膜。

[0245] (绝缘层)

[0246] 有机EL元件由于对超薄膜施加电场,因而容易产生因泄漏、短路导致的像素缺陷。为了防止该像素缺陷,可以在一对电极间插入包含绝缘性的薄膜层的绝缘层。

[0247] 作为绝缘层中使用的材料,例如可以举出氧化铝、氟化锂、氧化锂、氟化铯、氧化铯、氧化镁、氟化镁、氧化钙、氟化钙、氮化铝、氧化钛、氧化硅、氧化锗、氮化硅、氮化硼、氧化钼、氧化钨、氧化钒等。需要说明的是,可以使用它们的混合物、层叠物。

[0248] 另外,从提高有机EL元件相对于温度、湿度、气氛等的稳定性的观点出发,可以在有机EL元件的表面设置保护层,也可以利用硅油、树脂等将有机EL元件整体保护。

[0249] 有机EL元件的各层的形成可以使用真空蒸镀、溅射、等离子体、离子镀等干式成膜

法;旋涂、浸涂、流涂等湿式成膜法中的任意方法。

[0250] 湿式成膜法的情况下,使用将形成各层的材料溶解或分散于乙醇、氯仿、四氢呋喃、二氧六环等适当溶剂而成的溶液或分散液来形成薄膜。另外,为了提高成膜性、防止膜的针孔等,该溶液或分散液可以包含树脂、添加剂。作为该树脂,可以举出聚苯乙烯、聚碳酸酯、聚芳酯、聚酯、聚酰胺、聚氨酯、聚砜、聚甲基丙烯酸甲酯、聚丙烯酸甲酯、纤维素等绝缘性树脂和它们的共聚物、聚-N-乙烯基吡唑、聚硅烷等光导电性树脂、聚噻吩、聚吡咯等导电性树脂。另外,作为添加剂,可以举出抗氧化剂、紫外线吸收剂、增塑剂等。

[0251] 各层的膜厚没有特别限定,以可得到良好元件性能的方式进行选择即可。若膜厚过厚,则为了得到一定的光通量而需要大的施加电压,效率恶化。若膜厚过薄,则产生针孔等,即便施加电场也不能得到充分的发光亮度。膜厚通常为5nm~10 μ m,更优选为10nm~0.2 μ m。

[0252] 使用上述化合物(1)得到的有机EL元件可以用于有机EL面板模块等的显示部件;电视、移动电话、个人电脑等的显示装置;照明、车辆用灯具的发光装置等电子设备。

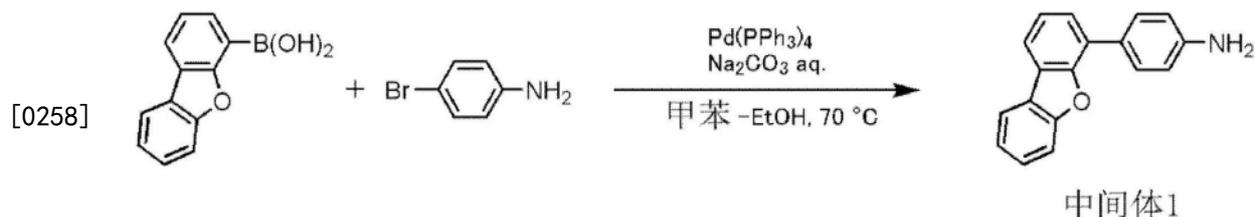
[0253] 实施例

[0254] 以下,通过实施例对本发明进行具体说明,但本发明不受它们任何限定。

[0255] 合成实施例1(化合物1的合成)

[0256] (1) 中间体1的合成

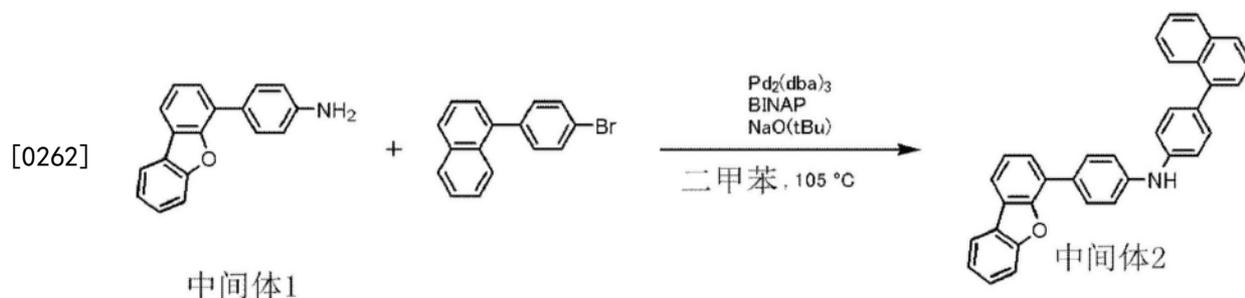
[0257] [化40]



[0259] 在氩气氛下,将4-溴苯胺23.7g(138mmol)、二苯并呋喃-4-基硼酸29.2g(138mmol)、四(三苯基膦)钯(0)3.18g(2.75mmol)、2M碳酸钠水溶液(138mL)、甲苯(300mL)、乙醇(100mL)的混合物在70 $^{\circ}$ C搅拌2小时。恢复至室温,将反应溶液用甲苯进行萃取,将甲苯层用无水硫酸镁进行干燥后,进行过滤,进行减压浓缩。将所得到的残渣通过硅胶柱色谱和重结晶进行精制,得到了中间体1(20.9g)。产率为58%。

[0260] (2) 中间体2的合成

[0261] [化41]

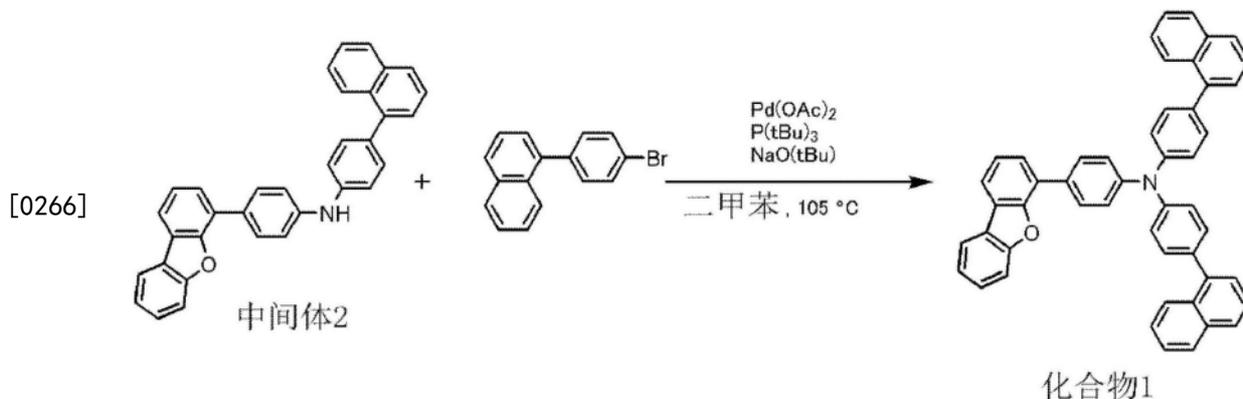


[0263] 在氩气氛下,将中间体120.9g(80.6mmol)、1-(4-溴苯基)萘17.6g(62mmol)的二甲苯(350mL)溶液加热至85 $^{\circ}$ C,加入三(二亚苄基丙酮)二钯(0)852mg(0.93mmol)、2,2'-双(二苯膦基)-1,1'-联萘1.16g(1.86mmol)、叔丁醇钠11.9g(124mmol),升温至105 $^{\circ}$ C,搅拌16小

时。恢复到室温,在反应液中加入水,进行分液,将有机层减压浓缩后,利用柱色谱进行精制,得到了中间体2(17.8g)。产率为60%。

[0264] (3) 化合物1的合成

[0265] [化42]



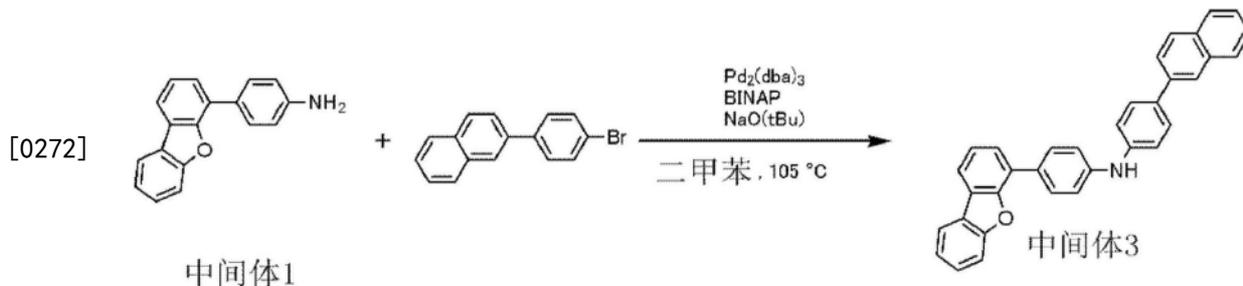
[0267] 在氩气氛下,将乙酸钯(II) 89mg (0.39mmol) 和三叔丁基膦160mg (0.79mmol) 的二甲苯(140mL) 溶液在室温搅拌30分钟。在反应液中加入9.1g (19.7mmol) 中间体2、1-(4-溴苯基)萘5.58g (19.7mmol), 在90℃进行搅拌, 然后加入叔丁醇钠2.27g (23.7mmol), 在105℃搅拌2.5小时。恢复到室温,在反应液中加入甲醇,滤取所生成的固体。将所得到的固体用硅胶柱色谱和重结晶进行精制,得到了白色固体(9.3g)。

[0268] 将所得到的固体用质谱进行分析,确认为作为目标的化合物1。相对于分子量633.26, $m/e=633$ 。产率为71%。

[0269] 合成实施例2(化合物2的合成)

[0270] (1) 中间体3的合成

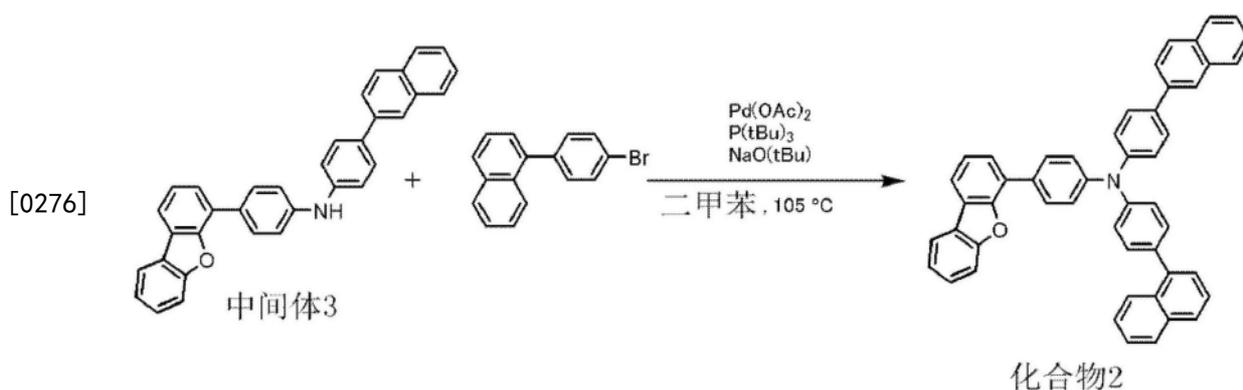
[0271] [化43]



[0273] 在中间体2的合成中,代替1-(4-溴苯基)萘而使用2-(4-溴苯基)萘,除此以外进行与中间体2的合成同样的操作,得到了中间体3。

[0274] (2) 化合物2的合成

[0275] [化44]

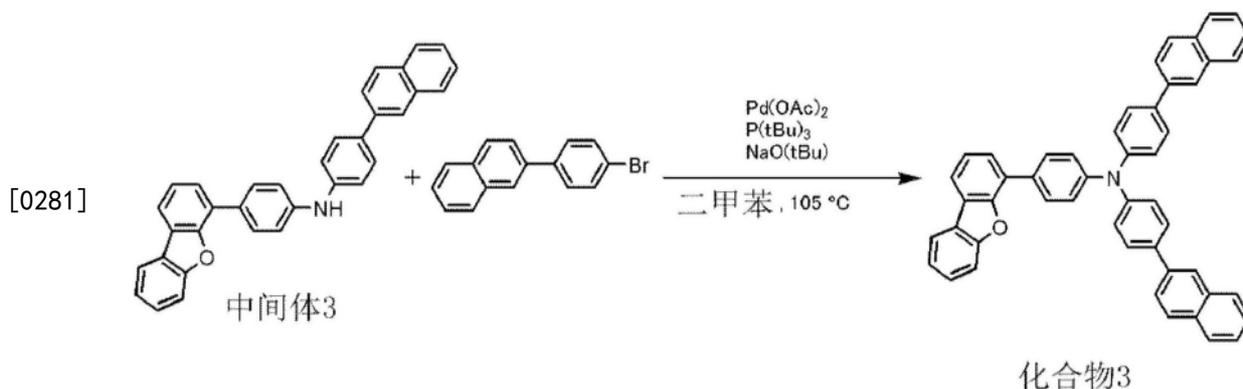


[0277] 在合成实施例1 (3) 中,代替中间体2而使用中间体3,除此以外,进行与合成实施例1 (3) 同样的操作,得到了白色固体。

[0278] 将所得到的固体用质谱进行分析,确认为作为目标的化合物2。相对于分子量 633.26, $m/e=633$ 。产率为68%。

[0279] 合成实施例3 (化合物3的合成)

[0280] [化45]



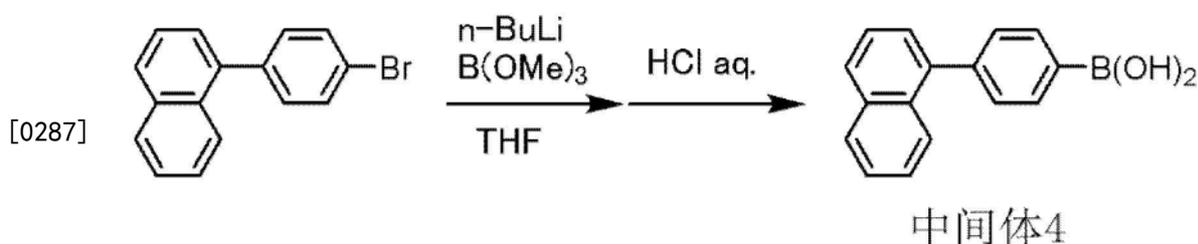
[0282] 在合成实施例1 (3) 中,代替中间体2而使用中间体3,代替1-(4-溴苯基)萘而使用2-(4-溴苯基)萘,除此以外,进行与合成实施例1 (3) 同样的操作,得到了白色固体。

[0283] 将所得到的固体用质谱进行分析,确认为作为目标的化合物3。相对于分子量 633.26, $m/e=633$ 。产率为70%。

[0284] 合成实施例4 (化合物4的合成)

[0285] (1) 中间体4的合成

[0286] [化46]

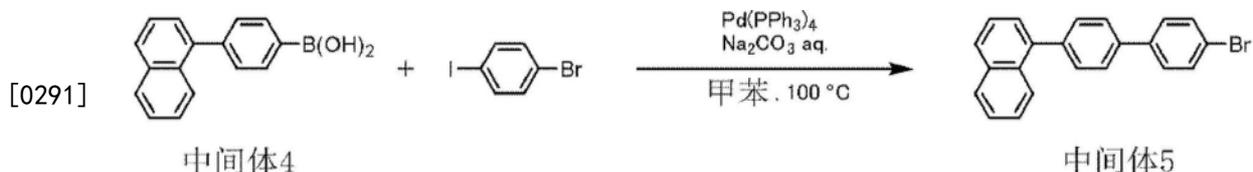


[0288] 在氩气氛下,将1-(4-溴苯基)萘7.08g (25mmol) 的THF (125ml) 溶液用干冰/丙酮浴进行冷却,滴加1.6M正丁基锂己烷溶液17.2ml (27.5mmol), 搅拌2小时。滴加硼酸三甲酯3.35ml (30mmol) 的THF (10mL) 溶液, 搅拌1小时, 卸去干冰/丙酮浴, 升温至室温。将反应用水浴进行冷却, 加入2M盐酸后, 升温至室温并搅拌1小时。将所得到的反应液用乙酸乙酯进

行萃取,将有机层进行水洗后,用无水硫酸钠进行干燥,进行减压浓缩。将所得到的残渣结晶化,得到了4.03g中间体4。产率为65%。

[0289] (2) 中间体5的合成

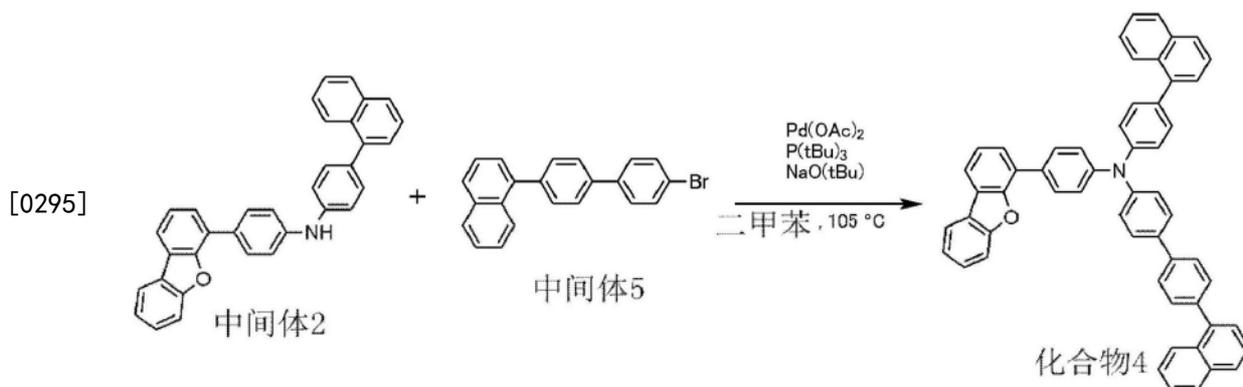
[0290] [化47]



[0292] 在氩气氛下,将3.72g (15mmol) 中间体4、4-溴碘苯4.24g (15mmol)、四(三苯基膦)钯(0) 347mg (0.30mmol)、2M碳酸钠水溶液22.5mL和甲苯45mL的混合物在100℃搅拌7小时。恢复到室温,加入水,用甲苯进行萃取,将所得到的甲苯层用无水硫酸钠进行干燥,进行减压浓缩。将所得到的残渣用硅胶柱色谱进行精制,得到了2.96g中间体5。产率为55%。

[0293] (3) 化合物4的合成

[0294] [化48]



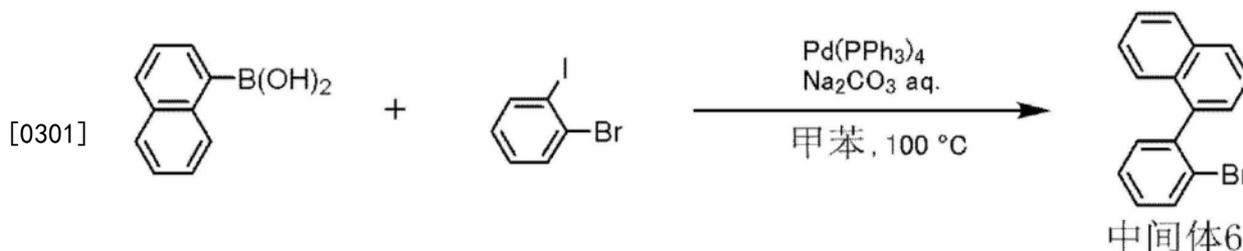
[0296] 在合成实施例1(3)中,代替1-(4-溴苯基)萘而使用中间体5,除此以外,进行与合成实施例1(3)同样的操作,得到了白色固体。

[0297] 将所得到的固体用质谱进行分析,确认为作为目标的化合物4。相对于分子量739.29, $m/e=739$ 。产率为62%。

[0298] 合成实施例5(化合物5的合成)

[0299] (1) 中间体6的合成

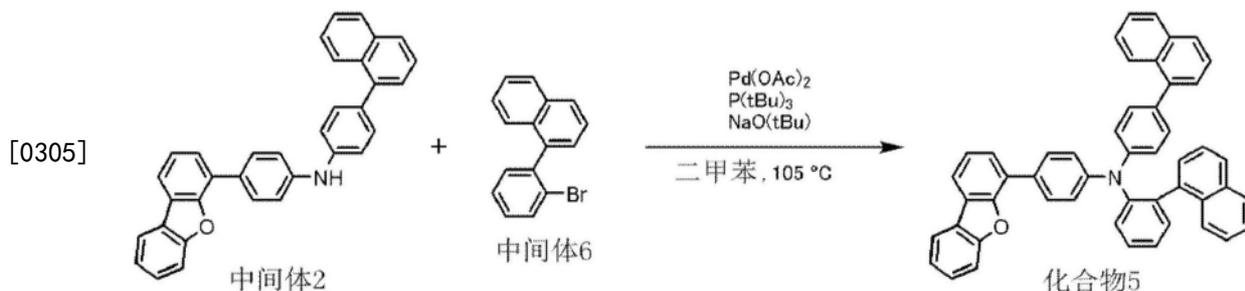
[0300] [化49]



[0302] 在中间体5的合成中,代替中间体4而使用1-萘基硼酸,代替4-溴碘苯而使用2-溴碘苯,除此以外,进行与中间体5的合成同样的操作,得到了中间体6。

[0303] (2) 化合物5的合成

[0304] [化50]



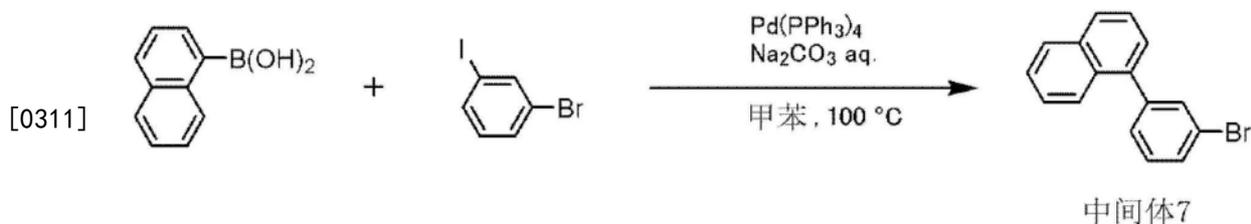
[0306] 在合成实施例1 (3) 中,代替1-(4-溴苯基)萘而使用中间体6,除此以外,进行与合成实施例1 (3) 同样的操作,得到了白色固体。

[0307] 将所得到的固体用质谱进行分析,确认为作为目标的化合物5。相对于分子量633.26, $m/e=633$ 。产率为58%。

[0308] 合成实施例6 (化合物6的合成)

[0309] (1) 中间体7的合成

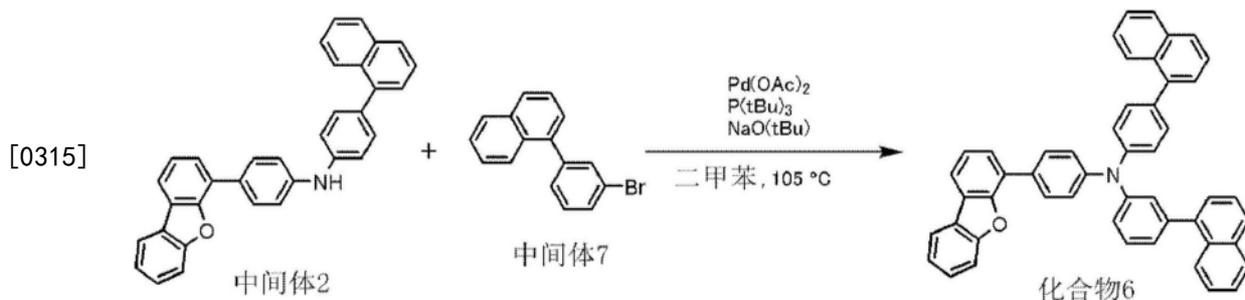
[0310] [化51]



[0312] 在中间体5的合成中,代替中间体4而使用1-萘基硼酸,代替4-溴碘苯而使用3-溴碘苯,除此以外,进行与中间体5的合成同样的操作,得到了中间体7。

[0313] (2) 化合物6的合成

[0314] [化52]



[0316] 在合成实施例1 (3) 中,代替1-(4-溴苯基)萘而使用中间体7,除此以外,进行与合成实施例1 (3) 同样的操作,得到了白色固体。

[0317] 将所得到的固体用质谱进行分析,确认为作为目标的化合物6。相对于分子量633.26, $m/e=633$ 。产率为66%。

[0318] <有机EL元件的制作>

[0319] 如下制造有机EL元件。

[0320] (实施例1)

[0321] 将25mm×75mm×1.1mm厚的带有ITO透明电极(阳极)的玻璃基板(Geomatec公司制)在异丙醇中进行超声波清洗5分钟后,进行UV臭氧清洗30分钟。ITO的膜厚为130nm。

[0322] 将清洗后的上述玻璃基板安装于真空蒸镀装置的基板架,首先在形成有透明电极

线的一侧的面上以覆盖透明电极的方式蒸镀HI-1,形成了膜厚5nm的空穴注入层。

[0323] 在该空穴注入层之上,蒸镀HT-1,形成了膜厚80nm的第一空穴传输层。在该第一空穴传输层之上,蒸镀由合成实施例1得到的化合物1,形成了膜厚10nm的第二空穴传输层。接着,在该第二空穴传输层之上,共蒸镀BH-1(主体材料)和BD-1(掺杂剂材料),形成了膜厚25nm的发光层。发光层内的BD-1(掺杂剂材料)的浓度为4质量%。

[0324] 接着,在该发光层之上蒸镀ET-1,形成了膜厚10nm的第一电子传输层。接着,在该第一电子传输层之上蒸镀ET-2,形成了膜厚15nm的第二电子传输层。

[0325] 进一步,在该第二电子传输层之上蒸镀氟化锂(LiF),形成了膜厚1nm的电子注入性电极。

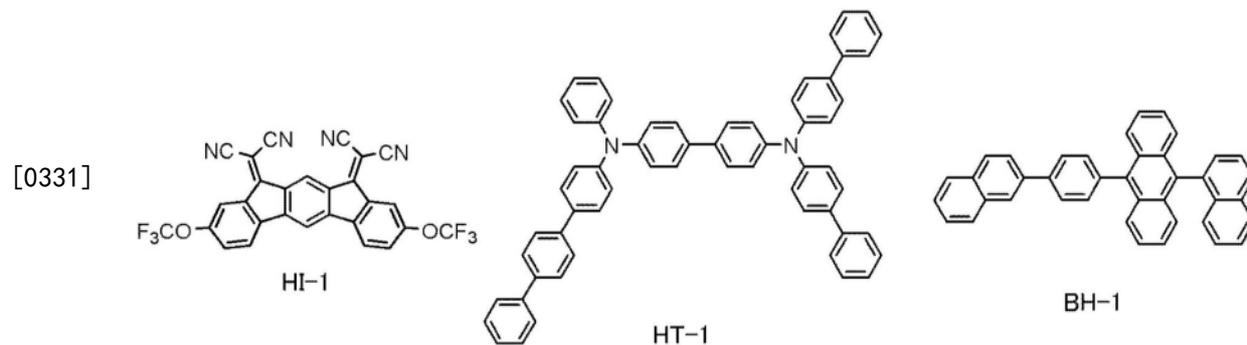
[0326] 然后,在该电子注入性电极之上蒸镀金属铝(Al),形成了膜厚80nm的金属阴极。

[0327] 实施例1的有机EL元件为下述构成。

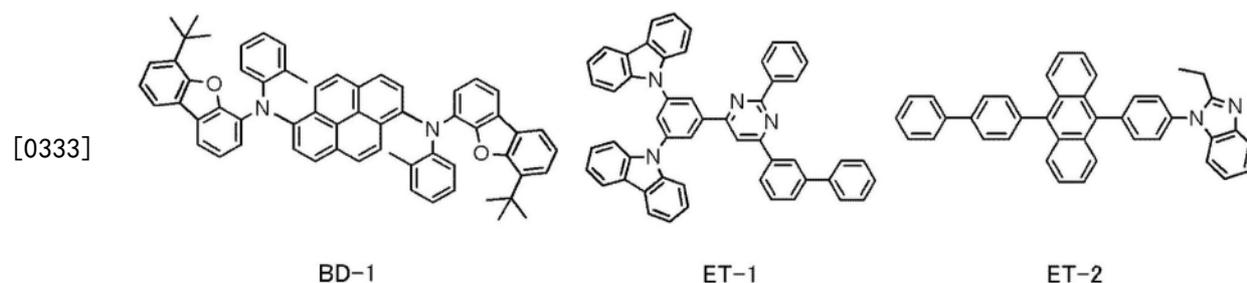
[0328] ITO(130)/HI-1(5)/HT-1(80)/化合物1(10)/BH-1:BD-1(25:4质量%)/ET-1(10)/ET-2(15)/LiF(1)/Al(80)

[0329] 需要说明的是,括弧内的数字表示膜厚(单位:nm)。

[0330] [化53]



[0332] [化54]



[0334] (实施例2)

[0335] 代替实施例1的第二空穴传输层中使用的化合物1而使用合成实施例2中得到的化合物2,除此以外,与实施例1同样地制作了有机EL元件。

[0336] (实施例3)

[0337] 代替实施例1的第二空穴传输层中使用的化合物1而使用合成实施例3中得到的化合物3,除此以外,与实施例1同样地制作了有机EL元件。

[0338] (实施例4)

[0339] 代替实施例1的第二空穴传输层中使用的化合物1而使用合成实施例4中得到的化合物4,除此以外,与实施例1同样地制作了有机EL元件。

[0340] (实施例5)

[0341] 代替实施例1的第二空穴传输层中使用的化合物1而使用合成实施例5中得到的化合物5,除此以外,与实施例1同样地制作了有机EL元件。

[0342] (实施例6)

[0343] 代替实施例1的第二空穴传输层中使用的化合物1而使用合成实施例6中得到的化合物6,除此以外,与实施例1同样地制作了有机EL元件。

[0344] (比较例1)

[0345] 代替实施例1的第二空穴传输层中使用的化合物1而使用下述比较化合物1,除此以外,与实施例1同样地制作了有机EL元件。

[0346] (比较例2)

[0347] 代替实施例1的第二空穴传输层中使用的化合物1而使用下述比较化合物2,除此以外,与实施例1同样地制作了有机EL元件。

[0348] (比较例3)

[0349] 代替实施例1的第二空穴传输层中使用的化合物1而使用下述比较化合物3,除此以外,与实施例1同样地制作了有机EL元件。

[0350] (比较例4)

[0351] 代替实施例1的第二空穴传输层中使用的化合物1而使用下述比较化合物4,除此以外,与实施例1同样地制作了有机EL元件。

[0352] (比较例5)

[0353] 代替实施例1的第二空穴传输层中使用的化合物1而使用下述比较化合物5,除此以外,与实施例1同样地制作了有机EL元件。

[0354] (比较例6)

[0355] 代替实施例1的第二空穴传输层中使用的化合物1而使用下述比较化合物6,除此以外,与实施例1同样地制作了有机EL元件。

[0356] (比较例7)

[0357] 代替实施例1的第二空穴传输层中使用的化合物1而使用下述比较化合物7,除此以外,与实施例1同样地制作了有机EL元件。

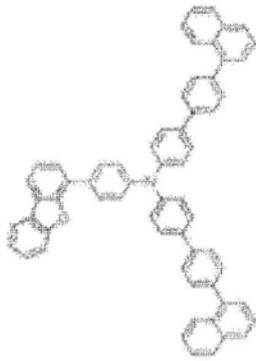
[0358] (比较例8)

[0359] 代替实施例1的第二空穴传输层中使用的化合物1而使用下述比较化合物8,除此以外,与实施例1同样地制作了有机EL元件。

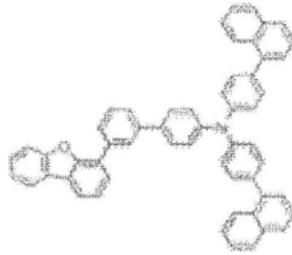
[0360] (比较例9)

[0361] 代替实施例1的第二空穴传输层中使用的化合物1而使用下述比较化合物9,除此以外,与实施例1同样地制作了有机EL元件。

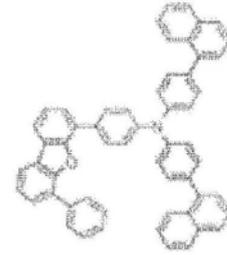
[0362] [化55]



比较化合物 1

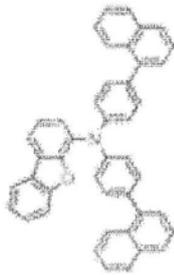


比较化合物 2

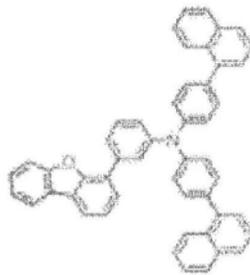


比较化合物 3

[0363]



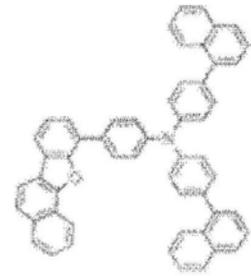
比较化合物 4



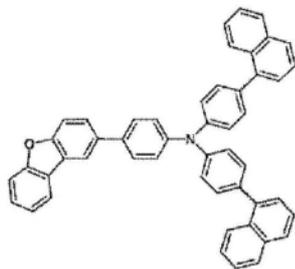
比较化合物 5



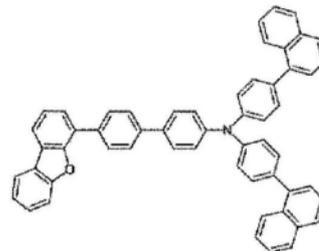
比较化合物 6



比较化合物 7



比较化合物 8



比较化合物 9

[0364] <有机EL元件的评价1>

[0365] 对于所制作的有机EL元件,对有机EL元件施加电压使得电流密度达到 $10\text{mA}/\text{cm}^2$,进行外部量子效率的评价。另外,对有机EL元件施加电压使得电流密度达到 $50\text{mA}/\text{cm}^2$,进行90%寿命(LT90)的评价。结果示于表1。在此,90%寿命(LT90)是指,在恒电流驱动时亮度下降至初始亮度的90%为止的时间(hr)。

[0366] [表1]

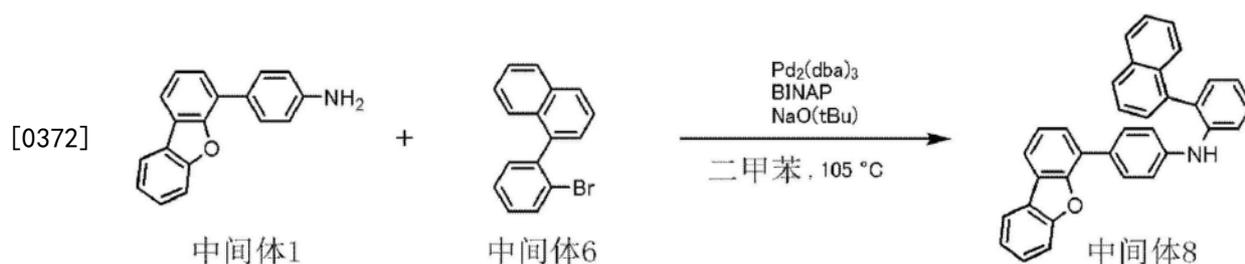
[0367] 表1

	空穴传输材料	外部量子效率 (%)	90%寿命 (hr)
	化合物 1	9.5	170
	化合物 2	9.4	160
	化合物 3	9.4	150
	化合物 4	9.2	170
	化合物 5	9.6	130
	化合物 6	9.5	140
[0368]	比较例 1	8.6	130
	比较例 2	9.2	80
	比较例 3	8.7	130
	比较例 4	9.0	70
	比较例 5	9.0	80
	比较例 6	8.8	75
	比较例 7	8.4	90
	比较例 8	9.3	50
	比较例 9	8.5	130

[0369] 合成实施例7 (化合物7的合成)

[0370] (1) 中间体8的合成

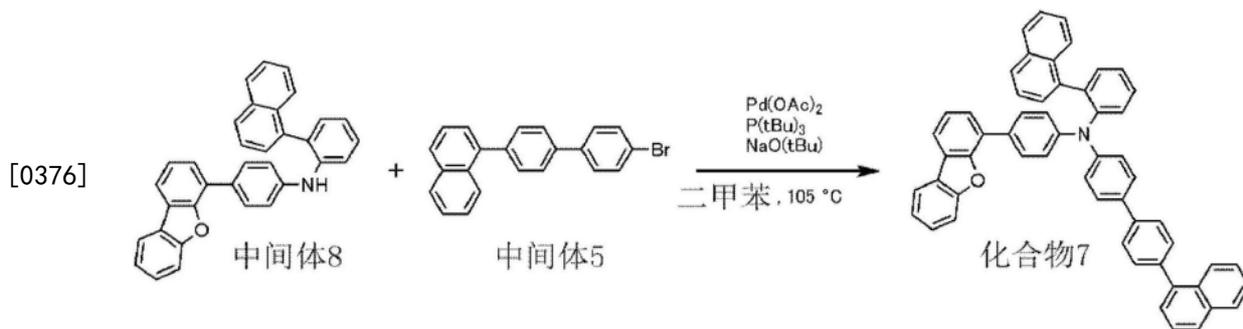
[0371] [化56]



[0373] 在中间体2的合成中,代替1-(4-溴苯基)萘而使用中间体6,除此以外,进行与中间体2的合成同样的操作,得到了中间体8。

[0374] (2) 化合物7的合成

[0375] [化57]



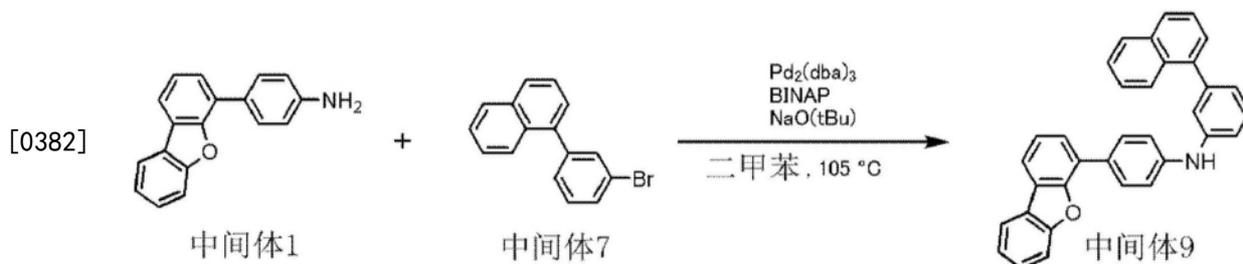
[0377] 在合成实施例1(3)中,代替中间体2而使用中间体8,代替1-(4-溴苯基)萘而使用中间体5,除此以外,进行与合成实施例1(3)同样的操作,得到了白色固体。

[0378] 将所得到的固体用质谱进行分析,确认为作为目标的化合物7。相对于分子量739.29, $m/e=739$ 。产率为55%。

[0379] 合成实施例8(化合物8的合成)

[0380] (1) 中间体9的合成

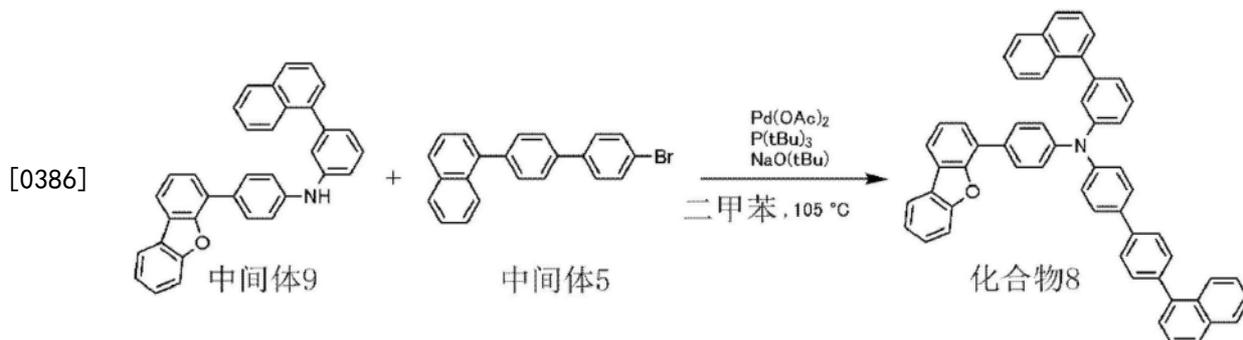
[0381] [化58]



[0383] 在中间体2的合成中,代替1-(4-溴苯基)萘而使用中间体7,除此以外,进行与中间体2的合成同样的操作,得到了中间体9。

[0384] (2) 化合物8的合成

[0385] [化59]



[0387] 在合成实施例1(3)中,代替中间体2而使用中间体9,代替1-(4-溴苯基)萘而使用中间体5,除此以外,进行与合成实施例1(3)同样的操作,得到了白色固体。

[0388] 将所得到的固体用质谱进行分析,确认为作为目标的化合物8。相对于分子量739.29, $m/e=739$ 。产率为60%。

[0389] (实施例7)

[0390] 代替实施例1的第二空穴传输层中使用的化合物1而使用合成实施例7中得到的化合物7,除此以外,与实施例1同样地制作了有机EL元件。

[0391] (实施例8)

[0392] 代替实施例1的第二空穴传输层中使用的化合物1而使用合成实施例8中得到的化合物8,除此以外,与实施例1同样地制作了有机EL元件。

[0393] <有机EL元件的评价2>

[0394] 对于所制作的有机EL元件,与实施例1~6同样地进行外部量子效率和90%寿命(LT90)的评价。结果示于表2。

[0395] [表2]

[0396] 表2

	空穴传输材料	外部量子效率 (%)	90%寿命 (hr)
[0397] 实施例 7	化合物 7	9.5	150
实施例 8	化合物 8	9.4	140

[0398] 根据表1和表2明确可知,通过使用具有特定结构的化合物(1)所包括的化合物1~8作为有机EL元件的空穴传输材料,能够得到利用比较化合物1~9所实现不了的同时满足高外部量子效率和长寿命的有机EL元件。

[0399] 据认为本发明的材料不像比较化合物1那样具有多个由3个键接以上的环结构组成的侧链,不像比较化合物3、7那样在共轭体系的扩展最大的二苯并咪唑部位导入芳基取代基或形成稠环,不像比较化合物9那样将与氮原子之间的连接基团设为2个苯,而是通过像化合物1~8那样限制为1个,由此保持了大的单重态能隙。据认为由此可将激子封闭在发光层中,无损失地将能量转换为光,由此实现高效率。另外,据认为像比较化合物4、6那样萘环或二苯并咪唑环的电子接受性相对高的部位直接连接于氮原子时,材料在保持电子时与中心氮原子发生强烈作用由此变得不稳定,因此,据认为这些环通过连接基团与胺原子键合的本申请的结构实现了长寿命。另外据认为,像比较化合物2、5那样,对于电子接受性最高的二苯并咪唑而言连接基团为弯曲型时在接受了电子时分子会不稳定化,因此,据认为具有对亚苯基连接基团的本发明的材料实现了长寿命。此外据认为,不像比较化合物8那样二苯并咪唑环利用从2位起的延长而键合于中心氮原子,而像化合物1~8那样利用从4位起的延长而键合于中心氮原子,由此结构稳定化,相比于已知的2位取代体,实现了长寿命。

[0400] 符号说明

[0401] 1 有机电致发光元件

[0402] 2 基板

[0403] 3 阳极

[0404] 4 阴极

[0405] 5 发光层

[0406] 6 空穴注入层/空穴传输层

[0407] 7 电子注入层/电子传输层

[0408] 10 发光单元

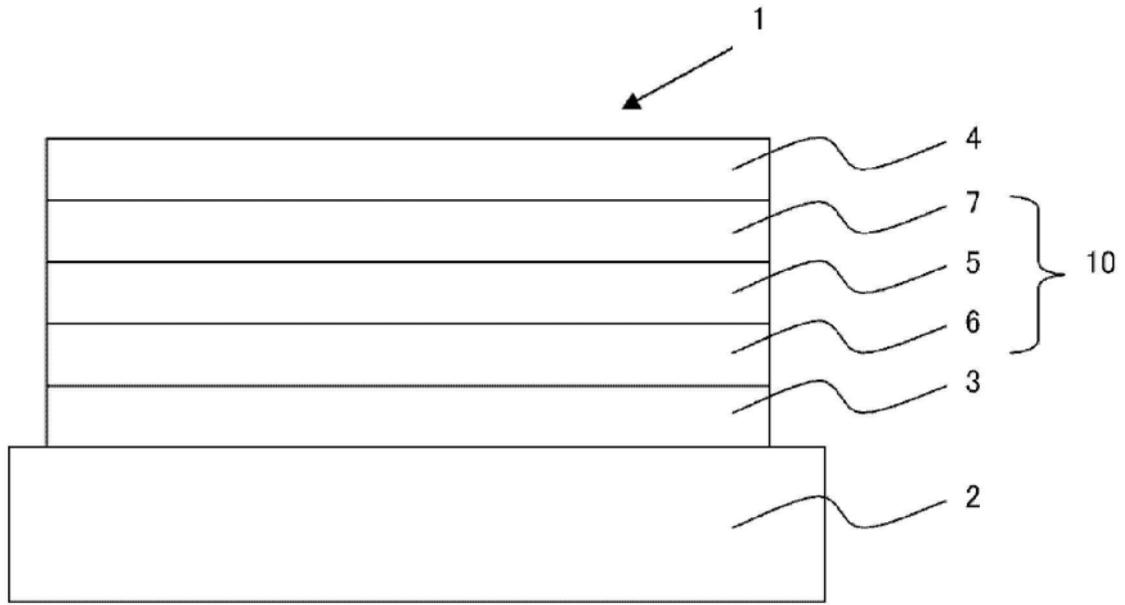


图1