



(19)中華民國智慧財產局

(12)發明說明書公告本 (11)證書號數：TW I612054 B

(45)公告日：中華民國 107(2018)年01月21日

(21)申請案號：102132851

(51)Int. Cl. : **C07F5/02 (2006.01)**
C07F9/6584 (2006.01)
H01L51/50 (2006.01)

(30)優先權：2012/09/11 日本 2012-199232
 2013/07/03 日本 2013-140007

(71)申請人：捷恩智股份有限公司 (日本) JNC CORPORATION (JP)
 日本
 國立大學法人京都大學 (日本) KYOTO UNIVERSITY (JP)
 日本

(72)發明人：小野洋平 ONO, YOHEI (JP)；枝連一志 SHIREN, KAZUSHI (JP)；生田利昭 IKUTA, TOSHIAKI (JP)；倪靜萍 NI, JINGPING (CN)；松下武司 MATSUSHITA, TAKESHI (JP)；畠山琢次 HATAKEYAMA, TAKUJI (JP)；中村正治 NAKAMURA, MASAHIARU (JP)；橋本土雄磨 HASHIMOTO, SIGUMA (JP)

(74)代理人：詹銘文；葉璟宗

(56)參考文獻：

WO 2012121398A1

Nakamura et al, Journal of the American Chemical Society, 2011, 133 (46), p18614-18617

審查人員：蔡榮哲

申請專利範圍項數：10 項 圖式數：1 共 264 頁

(54)名稱

有機電場發光元件、顯示裝置以及照明裝置

ORGANIC ELECTROLUMINESCENT ELEMENT, DISPLAY DEVICE AND LIGHTING DEVICE

(57)摘要

本發明提供一種提高了驅動電壓及電流效率的有機電場發光元件。本發明提供一種有機電場發光元件，其使用其中氮原子與其他雜原子或金屬原子(X)於非芳香環內鄰接的多環芳香族化合物作為有機電場發光元件用材料，藉此提高了上述特性。

An organic electroluminescent element having improved driving voltage and current efficiency is provided. The organic electroluminescent element use a polycyclic aromatic compound as a material for the organic electroluminescent element to improve the above-mentioned properties. In the polycyclic aromatic compound, a nitrogen atom and another hetero atom or a metal atom (X) are adjacent in a non-aromatic ring.

指定代表圖：

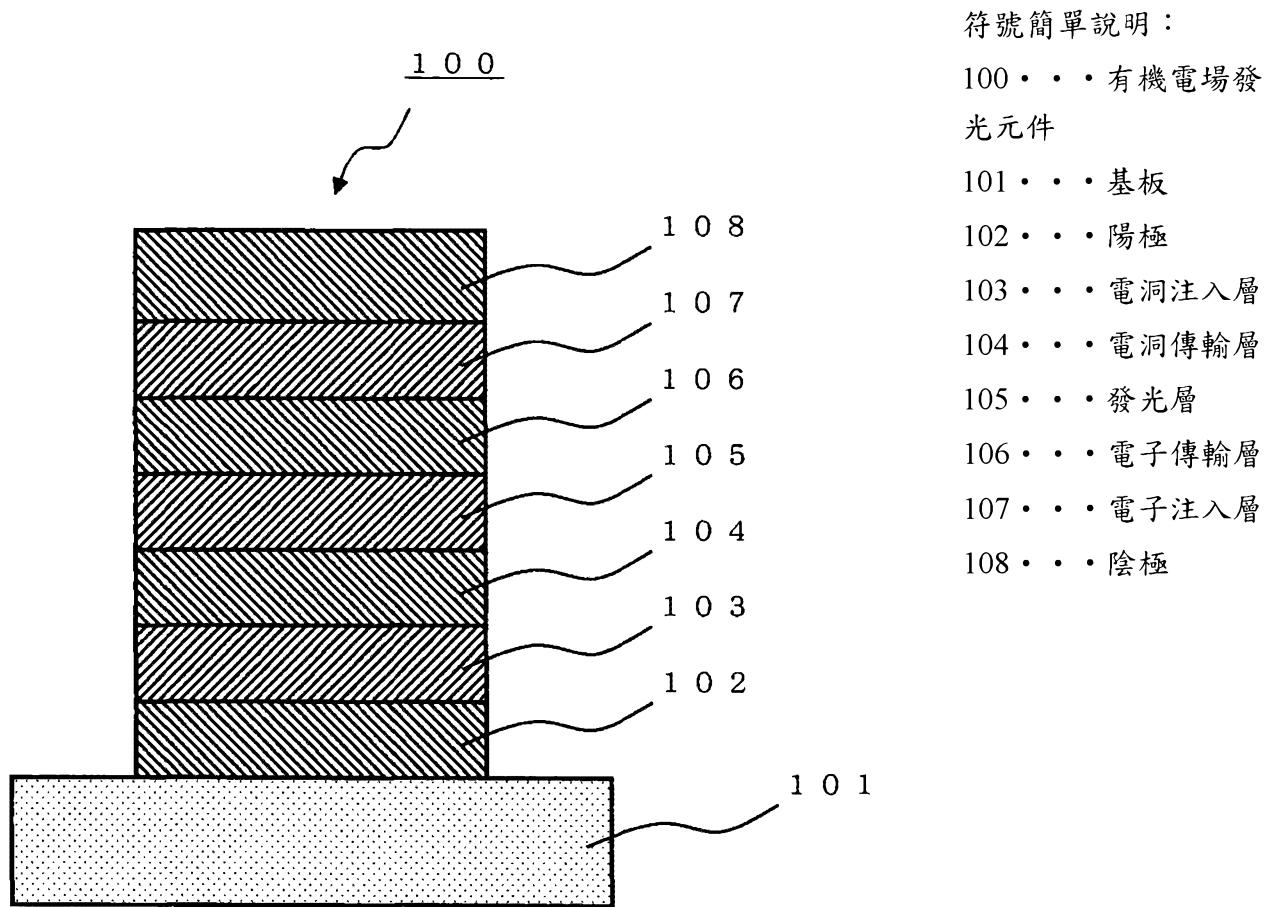


圖1

[專利文獻 2] 國際公開第 2008/147721 號

[專利文獻 3] 日本專利特開 2001-172232 號公報

[專利文獻 4] 日本專利特開 2006-199679 號公報

[專利文獻 5] 日本專利特開 2005-268199 號公報

[專利文獻 6] 日本專利特開 2007-088433 號公報

[專利文獻 7] 國際公開第 2003/078541

[專利文獻 8] 國際公開第 2003/080760

[專利文獻 9] 日本專利特開 2005-170911 號公報

[專利文獻 10] 日本專利特開 2003-146951 號公報

[專利文獻 11] 日本專利特開平 08-12600 號公報

[專利文獻 12] 日本專利特開 2003-123983 號公報

[專利文獻 13] 日本專利特開平 11-297473 號公報

[非專利文獻]

【0007】 [非專利文獻 1] 美國化學會期刊 (J. Am. Chem. Soc.) ,

2011, 133, 18614-18617

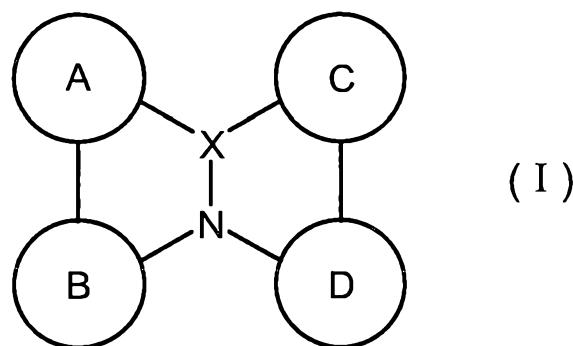
【0008】 如上所述，作為有機電場發光元件中所用的材料，已開發出了各種材料，但尚未知將非專利文獻 1 中報告般的具有 B-N 鍵結部位的二苯并巰系化合物應用於該元件中的情形時具有何種性能。

【發明內容】

【0009】 本發明者等人為了解決上述課題而進行了努力研究，結

果發現了氮原子與其他雜原子或金屬原子(X)於非芳香環內鄰接的新穎的多環芳香族化合物，並成功地製造了該化合物。另外發現，藉由將含有該多環芳香族化合物的層配置於一對電極間來構成有機電場發光元件，可獲得提高了驅動電壓及電流效率的有機電場發光元件，從而完成了本發明。即，本發明提供如下多環芳香族化合物或其鹽，進而提供含有如下多環芳香族化合物或其鹽的有機電場發光元件用材料。

【0010】 [1] 一種有機電場發光元件用材料，含有具有下述通式(I)所表示的部分結構的多環芳香族化合物或其鹽，



(上述式(I)中，

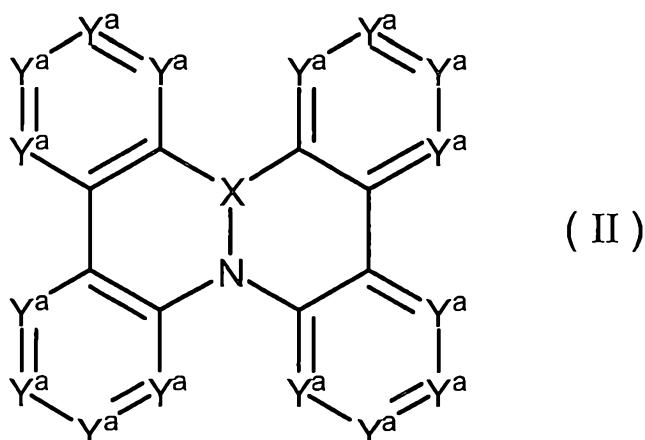
X 為 B、P、P=O、P=S、P=Se、As、As=O、As=S、As=Se、Sb、Sb=O、Sb=S、Sb=Se、可經取代的週期表第 3 族～第 11 族的金屬元素、或者可經取代的週期表第 13 族～第 14 族的金屬元素或半金屬元素，

A 環、B 環、C 環及 D 環分別獨立地為可經取代的芳香族環或可經取代的雜芳香族環，鄰接的 2 個環亦可藉由連結基或單鍵

而於該些環之間形成環，而且，

上述式(I)所表示的部分結構具有至少一個氫，而且該部分結構中的至少一個氫可經氘取代)。

【0011】 [2] 如上述[1]所記載的有機電場發光元件用材料，含有具有下述通式(II)所表示的部分結構的多環芳香族化合物或其鹽，



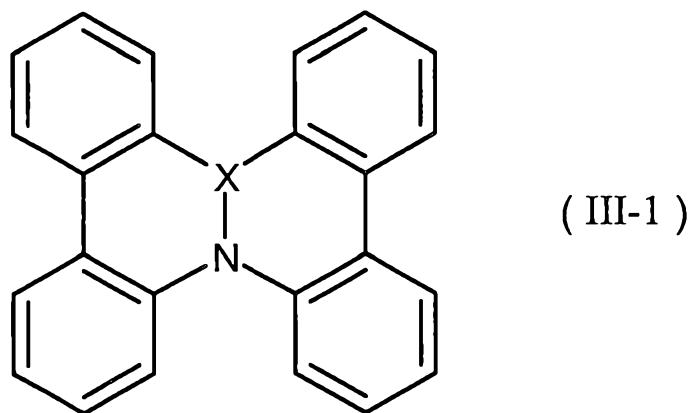
(上述式(II)中，

X 為 B、P、P=O、P=S、P=Se、As、As=O、As=S、As=Se、Sb、Sb=O、Sb=S、Sb=Se、可經取代的週期表第 3 族～第 11 族的金屬元素、或者可經取代的週期表第 13 族～第 14 族的金屬元素或半金屬元素，

Y^a 分別獨立地為 C 或 N，於同一環上鄰接的 2 個 Y^a 與該些 Y^a 之間的鍵亦可一起而成為 N、O、S 或 Se，環可分別獨立地經取代，同一環上的鄰接的取代基亦可鍵結而形成環己烷環、苯環或吡啶環，鄰接的 2 個環亦可藉由連結基或單鍵而於該些環之間形成環，而且，

上述式 (II) 所表示的部分結構具有至少一個氫，而且該部分結構中的至少一個氫可經氘取代)。

【0012】 [3] 如上述[1]所記載的有機電場發光元件用材料，含有具有下述通式 (III-1) 所表示的部分結構的多環芳香族化合物或其鹽，



(上述式 (III-1) 中，

X 為 B、P、P=O、P=S、P=Se、As、As=O、As=S、As=Se、Sb、Sb=O、Sb=S、Sb=Se、可經取代的週期表第 3 族～第 11 族的金屬元素、或者可經取代的週期表第 13 族～第 14 族的金屬元素或半金屬元素，

上述式中的苯環可分別獨立地經取代，同一環上的鄰接的取代基亦可鍵結而形成環己烷環、苯環或吡啶環，

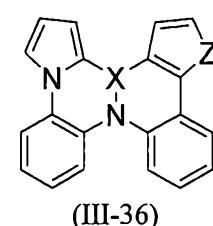
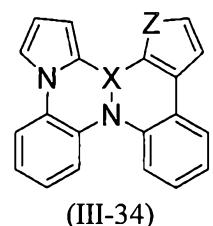
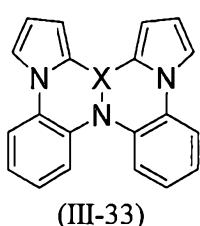
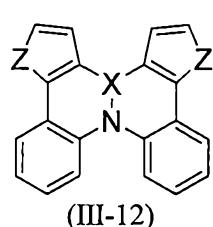
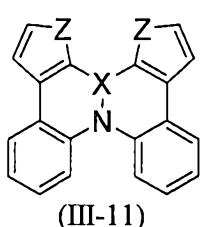
上述式中的鄰接的 2 個苯環亦可藉由連結基或單鍵而於該些苯環之間形成環，而且，

上述式 (III-1) 所表示的部分結構具有至少一個氫，而且該



部分結構中的至少一個氫可經氘取代)。

【0013】 [4] 如上述[1]所記載的有機電場發光元件用材料，含有具有下述通式(III-11)～通式(III-13)及通式(III-33)～通式(III-36)的任一個所表示的部分結構的多環芳香族化合物或其鹽，



(上述各式中，

X 為 B、P、P=O、P=S、P=Se、As、As=O、As=S、As=Se、Sb、Sb=O、Sb=S、Sb=Se、可經取代的週期表第 3 族～第 11 族的金屬元素、或者可經取代的週期表第 13 族～第 14 族的金屬元素或半金屬元素，

Z 為 N、O、S 或 Se，

上述各式中的苯環及五員環可分別獨立地經取代，同一環上的鄰接的取代基亦可鍵結而形成環己烷環、苯環或吡啶環，

上述各式中的鄰接的 2 個苯環亦可藉由連結基或單鍵而於該

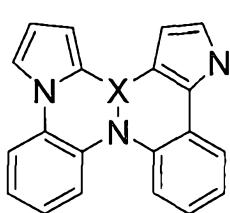
些苯環之間形成環，而且，

上述各式所表示的部分結構具有至少一個氫，而且該部分結構中的至少一個氫可經氘取代)。

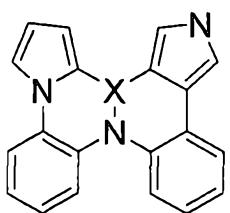
【0014】 [5] 如上述[1]所記載的有機電場發光元件用材料，含有具有下述通式 (III-33) 及通式 (III-55) ~ 通式 (III-57) 的任一個所表示的部分結構的多環芳香族化合物或其鹽，



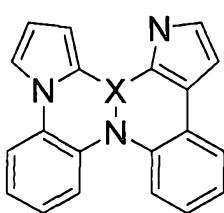
(III-33)



(III-55)



(III-56)



(III-57)

(上述各式中，

X 為 B、P、P=O、P=S、P=Se、As、As=O、As=S、As=Se、Sb、Sb=O、Sb=S、Sb=Se、可經取代的週期表第 3 族～第 11 族的金屬元素、或者可經取代的週期表第 13 族～第 14 族的金屬元素或半金屬元素，

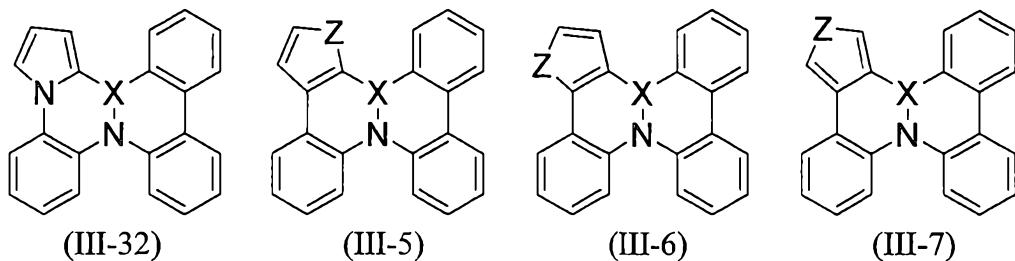
上述各式中的苯環及五員環可分別獨立地經取代，同一環上的鄰接的取代基亦可鍵結而形成環己烷環、苯環或吡啶環，

上述各式中的鄰接的 2 個苯環亦可藉由連結基或單鍵而於該些苯環之間形成環，而且，

上述各式所表示的部分結構具有至少一個氫，而且該部分結

構中的至少一個氫可經氘取代)。

【0015】 [6] 如上述[1]所記載的有機電場發光元件用材料，含有具有下述通式(III-32)及通式(III-5)～通式(III-7)的任一個所表示的部分結構的多環芳香族化合物或其鹽，



(上述各式中，

X 為 B、P、P=O、P=S、P=Se、As、As=O、As=S、As=Se、Sb、Sb=O、Sb=S、Sb=Se、可經取代的週期表第 3 族～第 11 族的金屬元素、或者可經取代的週期表第 13 族～第 14 族的金屬元素或半金屬元素，

● Z 為 N、O、S 或 Se，

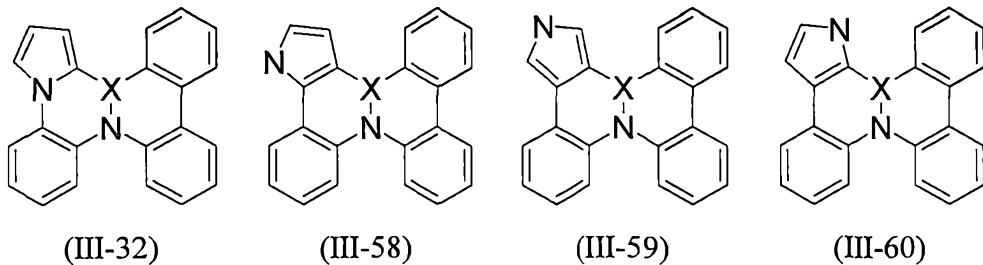
上述各式中的苯環及五員環可分別獨立地經取代，同一環上的鄰接的取代基亦可鍵結而形成環己烷環、苯環或吡啶環，

上述各式中的鄰接的 2 個苯環亦可藉由連結基或單鍵而於該些苯環之間形成環，而且，

上述各式所表示的部分結構具有至少一個氫，而且該部分結構中的至少一個氫可經氘取代)。

【0016】 [7] 如上述[1]所記載的有機電場發光元件用材料，含有

具有下述通式（III-32）及通式（III-58）～通式（III-60）的任一個所表示的部分結構的多環芳香族化合物或其鹽，



(上述各式中，

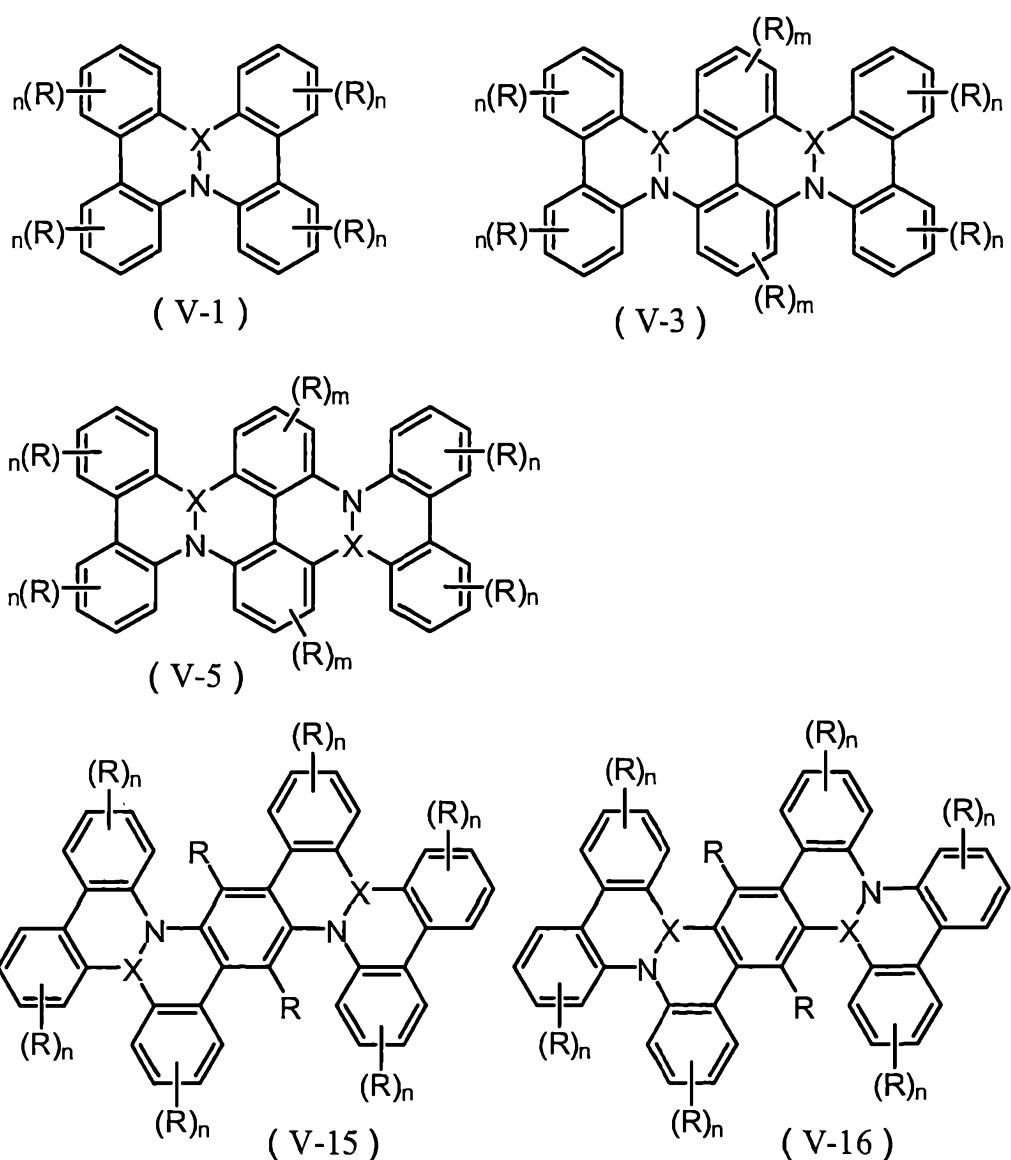
X 為 B、P、P=O、P=S、P=Se、As、As=O、As=S、As=Se、Sb、Sb=O、Sb=S、Sb=Se、可經取代的週期表第 3 族～第 11 族的金屬元素、或者可經取代的週期表第 13 族～第 14 族的金屬元素或半金屬元素，

上述各式中的苯環及五員環可分別獨立地經取代，同一環上的鄰接的取代基亦可鍵結而形成環己烷環、苯環或吡啶環，

上述各式中的鄰接的 2 個苯環亦可藉由連結基或單鍵而於該些苯環之間形成環，而且，

上述各式所表示的部分結構具有至少一個氫，而且該部分結構中的至少一個氫可經氘取代)。

【0017】 [8] 如上述[1]所記載的有機電場發光元件用材料，含有
下述通式（V-1）、通式（V-3）、通式（V-5）、通式（V-15）或通
式（V-16）所表示的多環芳香族化合物或其鹽，



(上述各式中，

X 為 B、P、P=O、P=S、P=Se、As、As=O、As=S、As=Se、Sb、Sb=O、Sb=S、Sb=Se、可經取代的週期表第 3 族～第 11 族的金屬元素、或者可經取代的週期表第 13 族～第 14 族的金屬元素或半金屬元素，

R 為氫、經氟取代或未經取代的 C₁₋₂₀ 烷基、C₃₋₈ 環烷基、C₂₋₂₀ 烯基、經單芳基或二芳基取代的 C₂₋₁₂ 烯基、經單雜芳基或二雜芳

基取代的 C_{2-12} 烯基、經氟取代或未經取代的 C_{1-20} 烷氧基、 C_{1-20} 烷基羰基、氰基、硝基、二芳基胺基、可經取代的芳基、可經取代的雜芳基、 $B(R^a)_2$ 或 $Si(R^a)_3$ (此處， R^a 分別獨立地為可經取代的烷基、可經取代的芳基或可經取代的雜芳基)，

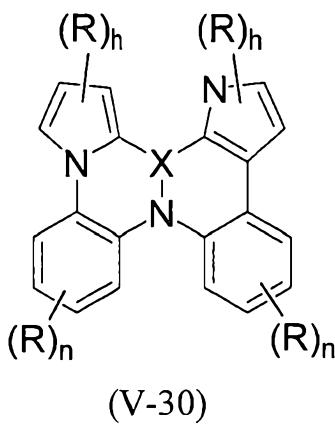
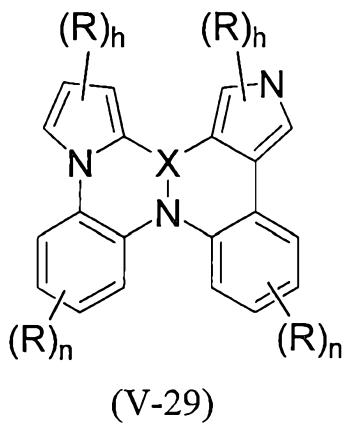
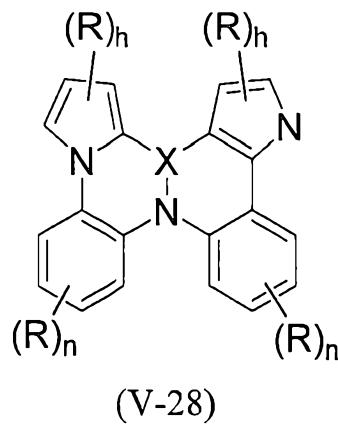
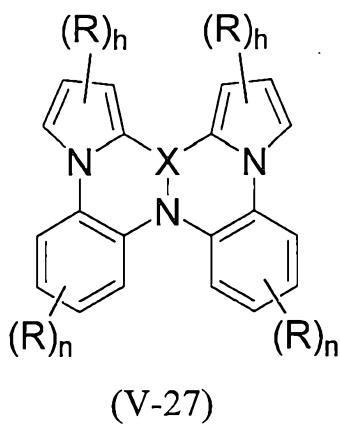
於同一環上鄰接的 2 個 R 亦可鍵結而形成環己烷環、苯環或吡啶環，

上述各式中的鄰接的 2 個苯環亦可藉由經由單鍵、 CH_2 、 CHR^a 、 $C(R^a)_2$ 、 NR^a 、 $Si(R^a)_2$ 、 BR^a (此處， R^a 如上述所定義)、Se、S 或 O 的鍵而鍵結，而於該些苯環之間形成環，

n 為 $0 \sim 4$ 的整數， m 為 $0 \sim 3$ 的整數，而且，

上述各式所表示的化合物或其鹽中的至少一個氫可經氘取代)。

【0018】 [9] 如上述[1]所記載的有機電場發光元件用材料，含有下述通式 (V-27) ~ 通式 (V-30) 所表示的多環芳香族化合物或其鹽，



(上述各式中，

X 為 B、P、P=O、P=S、P=Se、As、As=O、As=S、As=Se、

Sb、Sb=O、Sb=S、Sb=Se、可經取代的週期表第 3 族～第 11 族的金屬元素、或者可經取代的週期表第 13 族～第 14 族的金屬元素或半金屬元素，

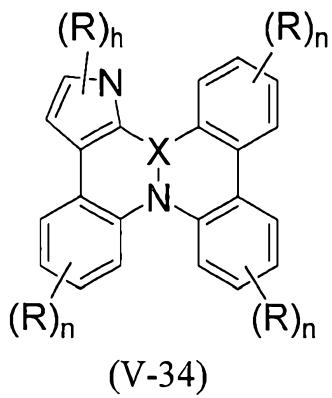
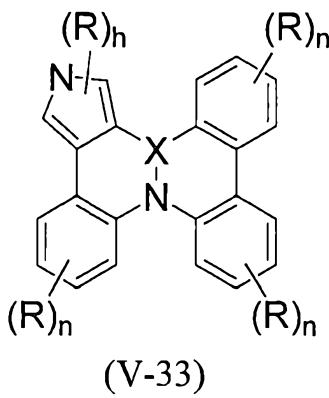
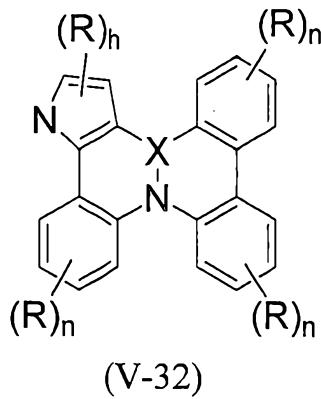
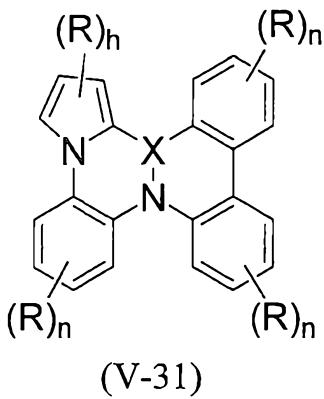
R 為氫、經氟取代或未經取代的 C₁₋₂₀ 烷基、C₃₋₈ 環烷基、C₂₋₂₀ 烯基、經單芳基或二芳基取代的 C₂₋₁₂ 烯基、經單雜芳基或二雜芳基取代的 C₂₋₁₂ 烯基、經氟取代或未經取代的 C₁₋₂₀ 烷氨基、C₁₋₂₀ 烷基羰基、氰基、硝基、二芳基胺基、可經取代的芳基、可經取代的雜芳基、B(R^a)₂ 或 Si(R^a)₃（此處，R^a 分別獨立地為可經取代

的烷基、可經取代的芳基或可經取代的雜芳基)，
於同一環上鄰接的 2 個 R 亦可鍵結而形成環己烷環、苯環或
吡啶環，

上述各式中的鄰接的 2 個苯環亦可藉由經由單鍵、CH₂、
CHR^a、C(R^a)₂、NR^a、Si(R^a)₂、BR^a(此處，R^a如上述所定義)、Se、
S 或 O 的鍵而鍵結，而於該些苯環之間形成環，
n 為 0~4 的整數，h 為 0~3 的整數，而且，

上述各式所表示的化合物或其鹽中的至少一個氫可經氘取
代)。

【0019】 [10] 如上述[1]所記載的有機電場發光元件用材料，含
有下述通式(V-31)~通式(V-34)所表示的多環芳香族化合物
或其鹽，



(上述各式中，

X 為 B、P、P=O、P=S、P=Se、As、As=O、As=S、As=Se、

Sb、Sb=O、Sb=S、Sb=Se、可經取代的週期表第3族～第11族的金屬元素、或者可經取代的週期表第13族～第14族的金屬元素或半金屬元素，

R 為氫、經氟取代或未經取代的 C₁₋₂₀ 烷基、C₃₋₈ 環烷基、C₂₋₂₀ 烯基、經單芳基或二芳基取代的 C₂₋₁₂ 烯基、經單雜芳基或二雜芳基取代的 C₂₋₁₂ 烯基、經氟取代或未經取代的 C₁₋₂₀ 烷氧基、C₁₋₂₀ 烷基羰基、氰基、硝基、二芳基胺基、可經取代的芳基、可經取代的雜芳基、B(R^a)₂ 或 Si(R^a)₃（此處，R^a 分別獨立地為可經取代

的烷基、可經取代的芳基或可經取代的雜芳基)，

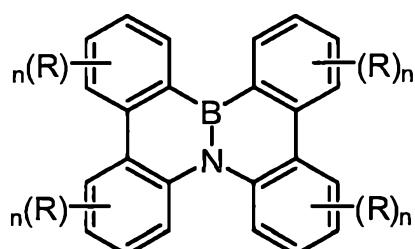
於同一環上鄰接的 2 個 R 亦可鍵結而形成環己烷環、苯環或吡啶環，

上述各式中的鄰接的 2 個苯環亦可藉由經由單鍵、 CH_2 、 CHR^a 、 $\text{C}(\text{R}^a)_2$ 、 NR^a 、 $\text{Si}(\text{R}^a)_2$ 、 BR^a (此處， R^a 如上述所定義)、Se、S 或 O 的鍵而鍵結，而於該些苯環之間形成環，

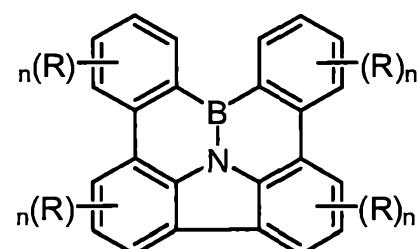
n 為 $0 \sim 4$ 的整數， h 為 $0 \sim 3$ 的整數，而且，

上述各式所表示的化合物或其鹽中的至少一個氫可經氘取代)。

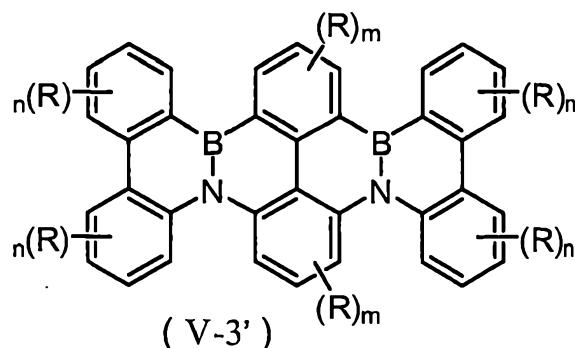
【0020】 [11] 如上述[1]所記載的有機電場發光元件用材料，含有下述通式 (V-1') ~ 通式 (V-3') 所表示的多環芳香族化合物或其鹽，



(V-1')



(V-2')



(V-3')

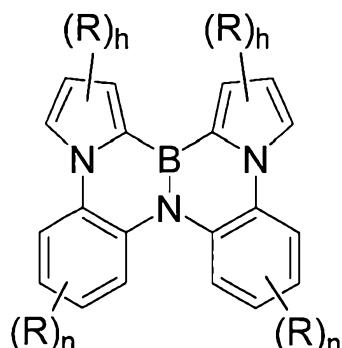
(上述各式中，

R 為經氟取代或未經取代的 C₁₋₂₀ 烷基、C₃₋₈ 環烷基、C₂₋₂₀ 烯基、經單芳基或二芳基取代的 C₂₋₁₂ 烯基、經單雜芳基或二雜芳基取代的 C₂₋₁₂ 烯基、經氟取代或未經取代的 C₁₋₂₀ 烷氧基、C₁₋₂₀ 烷基氨基、氟基、硝基、二芳基胺基、可經取代的芳基、可經取代的雜芳基、B(R^a)₂ 或 Si(R^a)₃（此處，R^a 分別獨立地為可經取代的烷基、可經取代的芳基或可經取代的雜芳基），

於同一環上鄰接的 2 個 R 亦可鍵結而形成環己烷環、苯環或
● 吡啶環，

n 為 0~4 的整數，m 為 0~3 的整數，而且，
上述各式所表示的化合物或其鹽中的至少一個氫可經氘取代）。

【0021】 [12] 如上述[1]所記載的有機電場發光元件用材料，含有下述通式（V-27'）所表示的多環芳香族化合物或其鹽，



(V-27')

（上述式中，

R 為經氟取代或未經取代的 C₁₋₂₀ 烷基、C₃₋₈ 環烷基、C₂₋₂₀ 烯

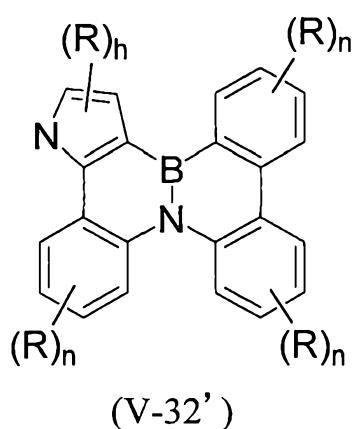
基、經單芳基或二芳基取代的 C₂₋₁₂ 烯基、經單雜芳基或二雜芳基取代的 C₂₋₁₂ 烯基、經氟取代或未經取代的 C₁₋₂₀ 烷氧基、C₁₋₂₀ 烷基
羰基、氰基、硝基、二芳基胺基、可經取代的芳基、可經取代的雜芳基、B(R^a)₂ 或 Si(R^a)₃ (此處，R^a 分別獨立地為可經取代的烷基、可經取代的芳基或可經取代的雜芳基)，

於同一環上鄰接的 2 個 R 亦可鍵結而形成環己烷環、苯環或吡啶環，

n 為 0~4 的整數，h 為 0~3 的整數，而且，

上述式所表示的化合物或其鹽中的至少一個氫可經氘取代)。

【0022】 [13] 如上述[1]所記載的有機電場發光元件用材料，含有下述通式 (V-32') 所表示的多環芳香族化合物或其鹽，



(上述式中，

R 為經氟取代或未經取代的 C₁₋₂₀ 烷基、C₃₋₈ 環烷基、C₂₋₂₀ 烯基、經單芳基或二芳基取代的 C₂₋₁₂ 烯基、經單雜芳基或二雜芳基取代的 C₂₋₁₂ 烯基、經氟取代或未經取代的 C₁₋₂₀ 烷氧基、C₁₋₂₀ 烷基

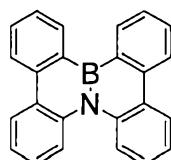
羰基、氯基、硝基、二芳基胺基、可經取代的芳基、可經取代的雜芳基、 $B(R^a)_2$ 或 $Si(R^a)_3$ (此處， R^a 分別獨立地為可經取代的烷基、可經取代的芳基或可經取代的雜芳基)，

於同一環上鄰接的 2 個 R 亦可鍵結而形成環己烷環、苯環或吡啶環，

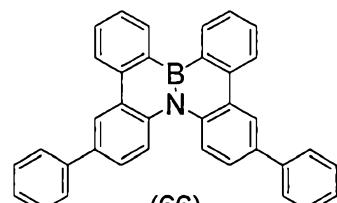
n 為 0~4 的整數， h 為 0~3 的整數，而且，

上述式所表示的化合物或其鹽中的至少一個氫可經氘取代)。

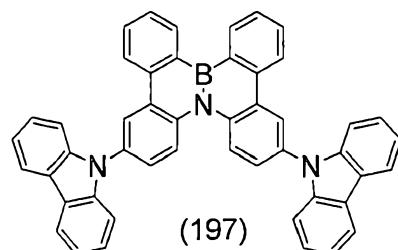
【0023】 [14] 如上述[1]所記載的有機電場發光元件用材料，含有下述式(1)、式(66)、式(197)、式(198)或式(251)所表示的多環芳香族化合物或其鹽，



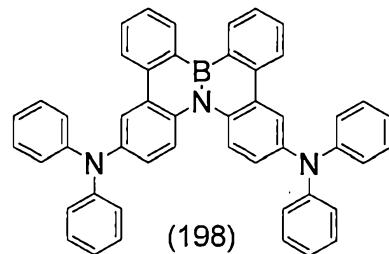
(1)



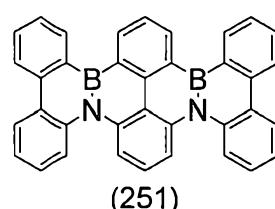
(66)



(197)

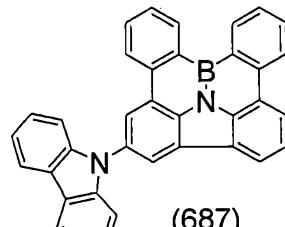
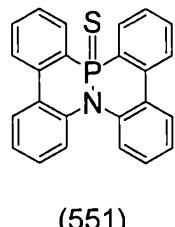
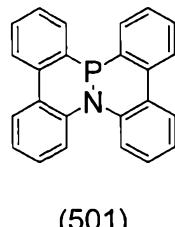
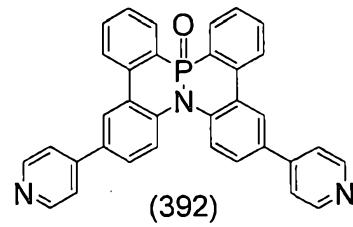
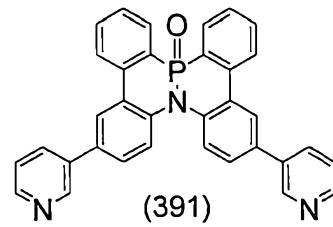
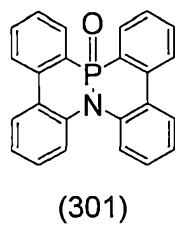


(198)



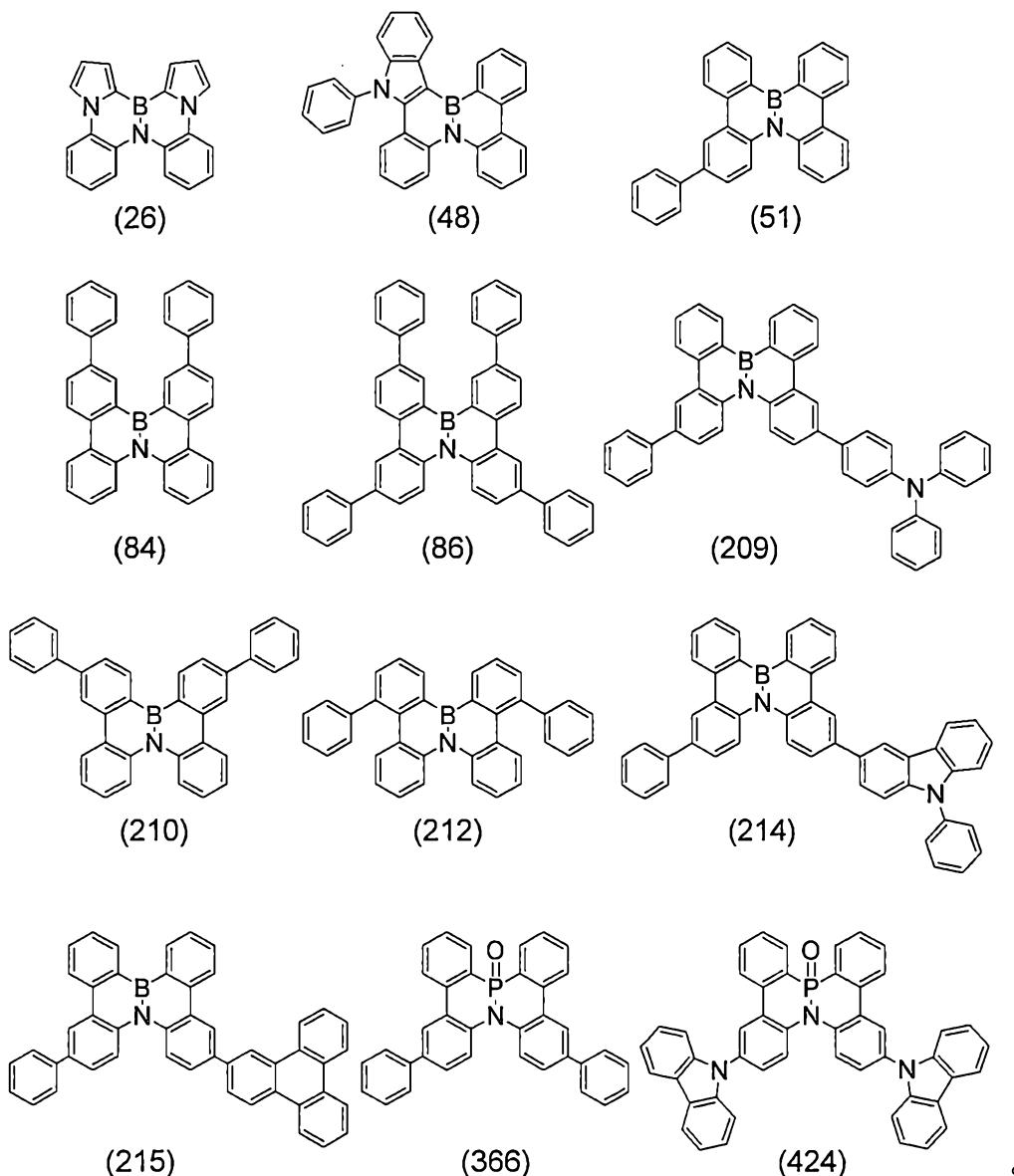
(251)

【0024】 [15] 如上述[1]所記載的有機電場發光元件用材料，含有下述式(301)、式(391)、式(392)、式(501)、式(551)或式(687)所表示的多環芳香族化合物或其鹽，



【0025】 [16] 如上述[1]所記載的有機電場發光元件用材料，含有下述式(26)、式(48)、式(51)、式(84)、式(86)、式(209)、式(210)、式(212)、式(214)、式(215)、式(366)或式(424)所表示的多環芳香族化合物或其鹽，





【0026】 [17] 如上述[1]至[16]中任一項所記載的有機電場發光元件用材料，其為發光層用材料。

【0027】 [18] 如上述[1]至[16]中任一項所記載的有機電場發光元件用材料，其為電洞注入層用材料或電洞傳輸層用材料。

【0028】 [19] 如上述[1]至[16]中任一項所記載的有機電場發光元件用材料，其為電洞阻擋層用材料或電子傳輸層用材料。

【0029】 [20] 一種有機電場發光元件，具有：包含陽極及陰極的

一對電極；以及配置於該一對電極間且含有如上述[17]所記載的發光層用材料的發光層。

【0030】 [21] 一種有機電場發光元件，具有：包含陽極及陰極的一對電極；配置於該一對電極間的發光層；以及配置於上述陽極與上述發光層之間且含有如上述[18]所記載的電洞層用材料的電洞注入層及/或電洞傳輸層。

【0031】 [22] 一種有機電場發光元件，具有：包含陽極及陰極的一對電極；配置於該一對電極間的發光層；以及配置於上述陰極與上述發光層之間且含有如上述[19]所記載的電洞阻擋層用材料或電子傳輸層用材料的電洞阻擋層及/或電子傳輸層。

【0032】 [23] 如上述[20]或[21]所記載的有機電場發光元件，更具有配置於上述陰極與該發光層之間的電子傳輸層及/或電子注入層，該電子傳輸層及電子注入層的至少一者含有選自由羥喹啉系金屬錯合物、吡啶衍生物、啡啉衍生物、硼烷衍生物及苯并咪唑衍生物所組成的組群中的至少一種。

【0033】 [24] 如上述[22]所記載的有機電場發光元件，其中上述電洞阻擋層及電子傳輸層的至少一者含有選自由羥喹啉系金屬錯合物、吡啶衍生物、啡啉衍生物、硼烷衍生物及苯并咪唑衍生物所組成的組群中的至少一種。

【0034】 [25] 如上述[23]或[24]所記載的有機電場發光元件，其中上述電洞阻擋層、電子傳輸層及/或電子注入層更含有選自由鹼金屬、鹼土金屬、稀土金屬、鹼金屬的氧化物、鹼金屬的鹵化物、

鹼土金屬的氧化物、鹼土金屬的鹵化物、稀土金屬的氧化物、稀土金屬的鹵化物、鹼金屬的有機錯合物、鹼土金屬的有機錯合物及稀土金屬的有機錯合物所組成的組群中的至少一種。

【0035】 [26] 一種顯示裝置，具備如上述[20]至[25]中任一項所記載的有機電場發光元件。

【0036】 [27] 一種照明裝置，具備如上述[20]至[25]中任一項所記載的有機電場發光元件。

● [發明的效果]

【0037】 根據本發明的較佳態樣，例如可提供一種作為有機電場發光元件材料而優異的多環芳香族化合物，從而可提供一種藉由使用該多環芳香族化合物而提高了驅動電壓及電流效率的有機電場發光元件。

● 【圖式簡單說明】

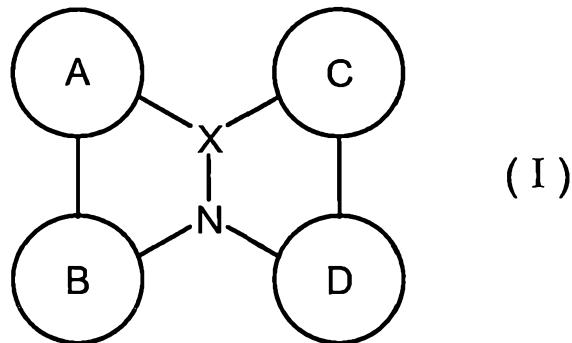
● 【0038】

圖 1 為表示本實施形態的有機電場發光元件的概略剖面圖。

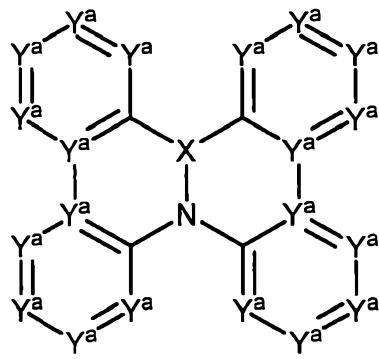
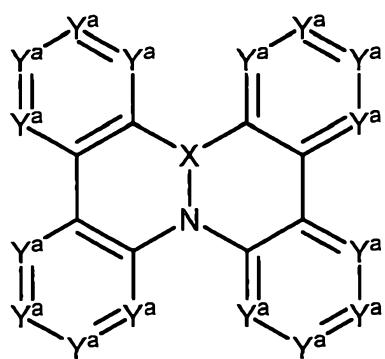
● 【實施方式】

【0039】 1. 構成多環芳香族化合物的部分結構

本發明的多環芳香族化合物（及其鹽）具有下述通式（I）所表示的部分結構，作為有機電場發光元件用材料而有用。再者，式中的各記號如上所述。



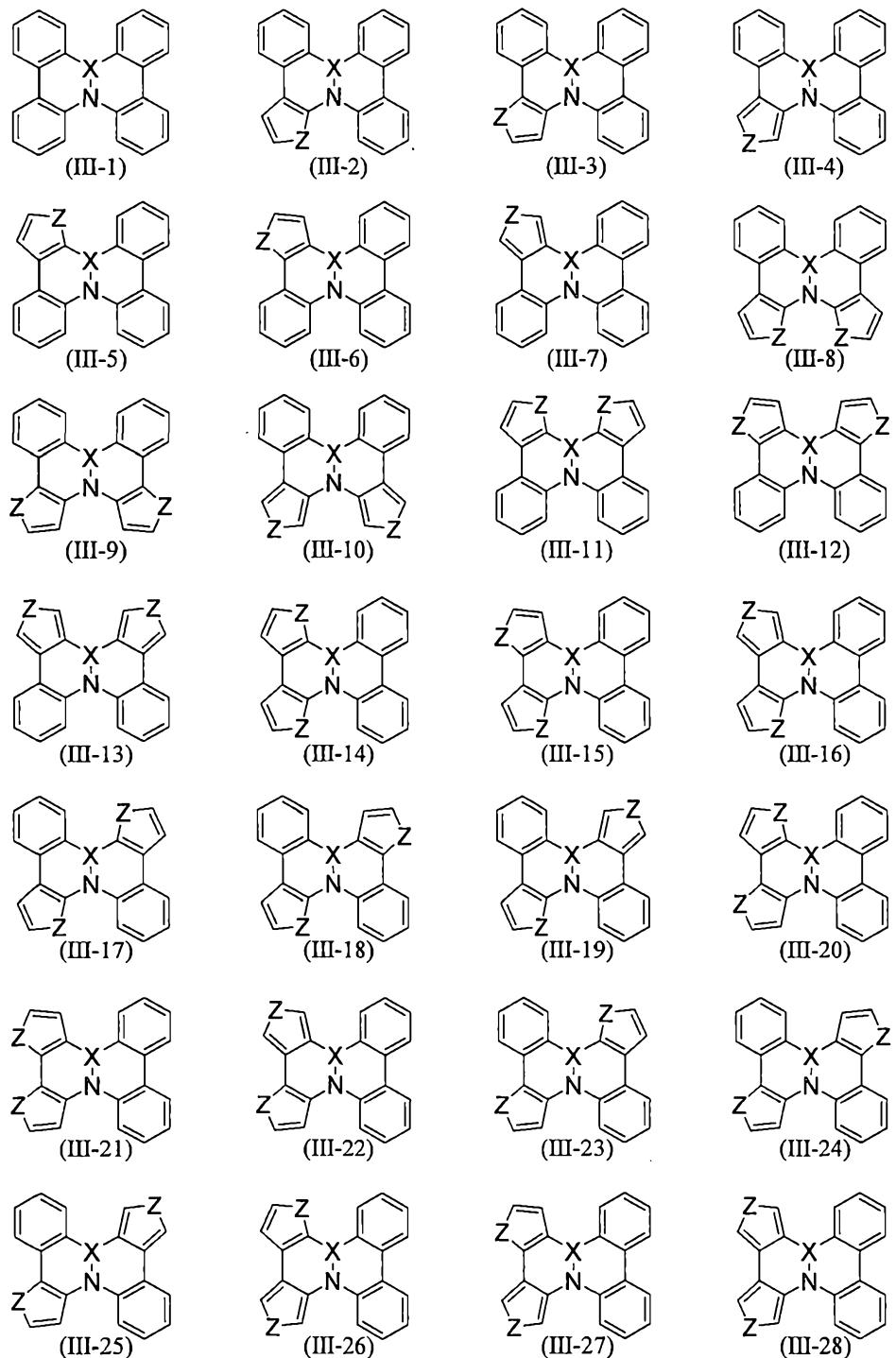
【0040】 上述式(I)所表示的部分結構更具體可列舉下述通式(II)或通式(II')所表示的部分結構。再者，式中的各記號如上所述。



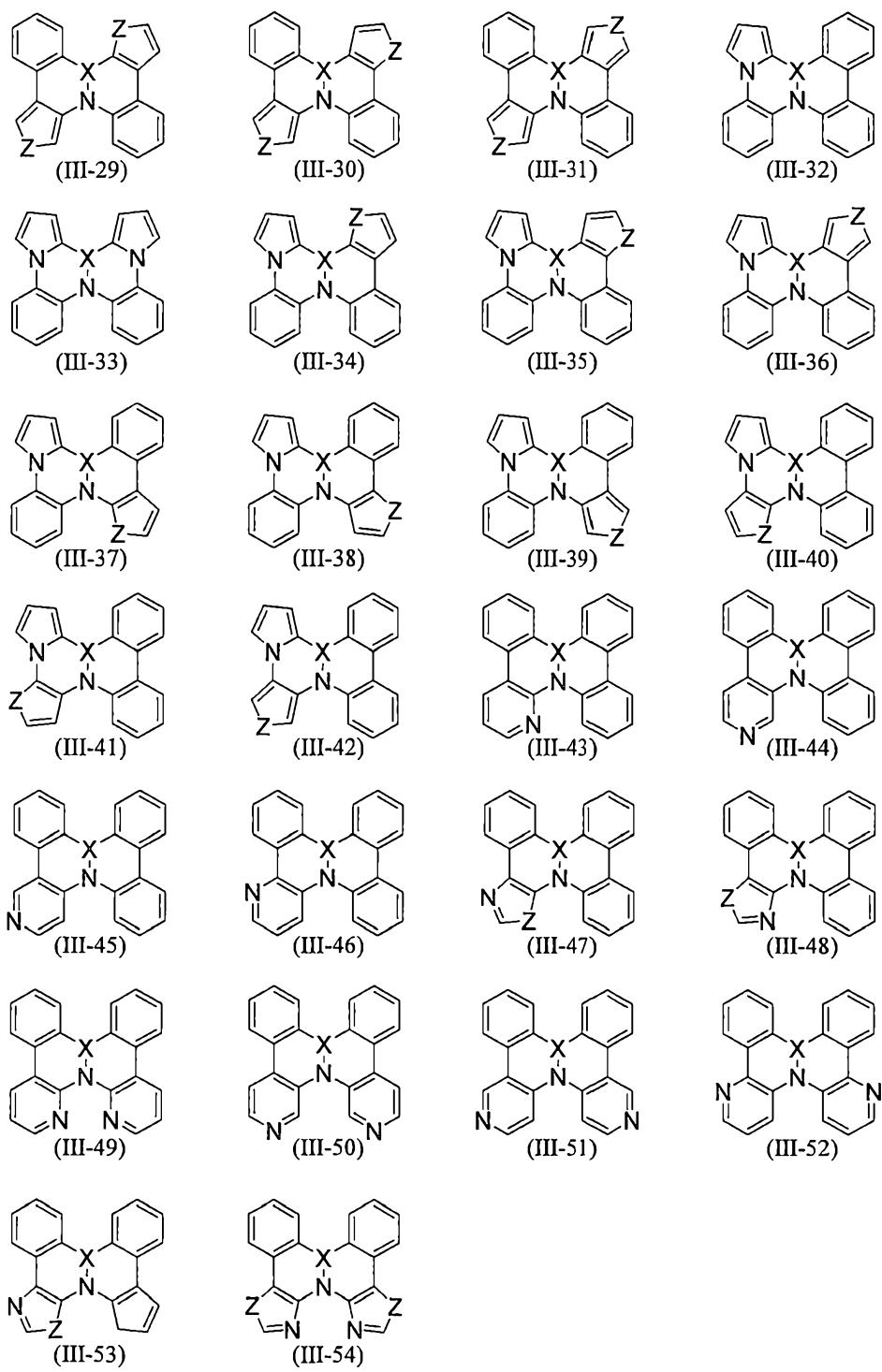
【0041】 上述式(II)或式(II')所表示的部分結構更具體而言，例如可列舉下述通式(III-1)～式(III-54)及通式(III-55)～式(III-60)所表示的部分結構。再者，各式中，X為B、P、P=O、P=S、P=Se、As、As=O、As=S、As=Se、Sb、Sb=O、Sb=S、Sb=Se、可經取代的週期表第3族～第11族的金屬元素、或者可經取代的週期表第13族～第14族的金屬元素或半金屬元素，Z為N、O、S或Se。另外，各式中的苯環及五員環可分別獨立地經取代，同

一環上的鄰接的取代基亦可鍵結而形成環己烷環、苯環或吡啶環。另外，各式中的鄰接的 2 個苯環亦可藉由連結基或單鍵而於該些苯環之間形成環，各部分結構具有至少一個氫，而且該部分結構中的至少一個氫可經氘取代。再者，關於 Z，可參照後述「於同一環上鄰接的 2 個 Y^a 與該些 Y^a 之間的鍵一起而成爲 N、O、S 或 Se」的定義的說明。

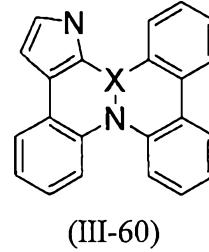
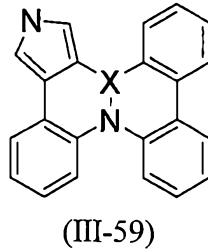
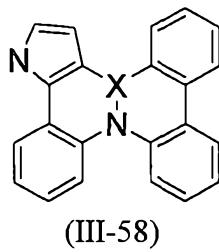
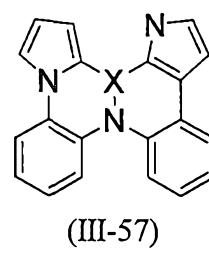
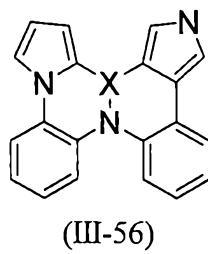
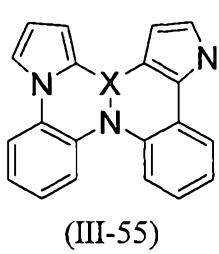
【0042】



【0043】



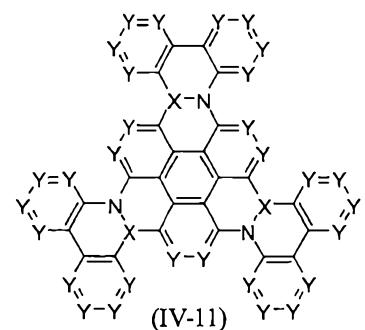
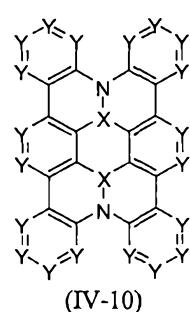
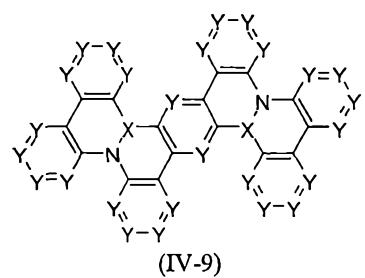
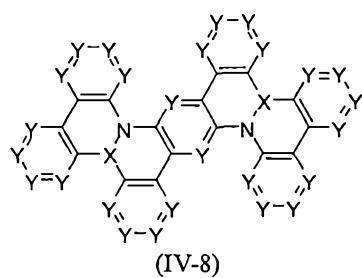
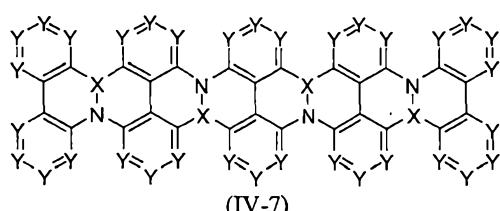
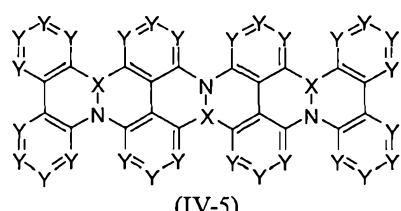
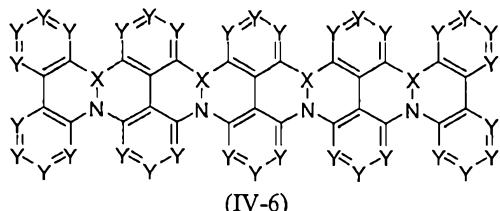
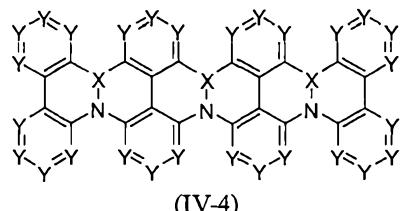
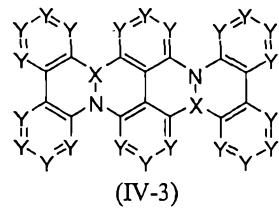
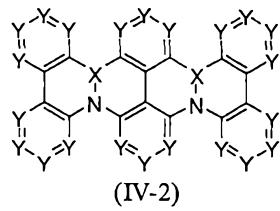
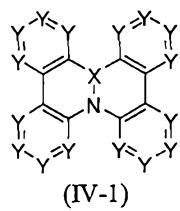
【 0044 】



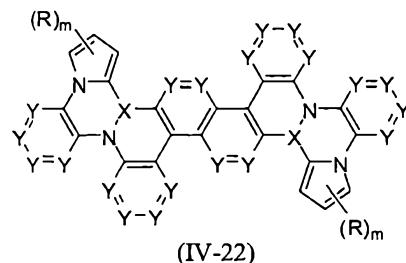
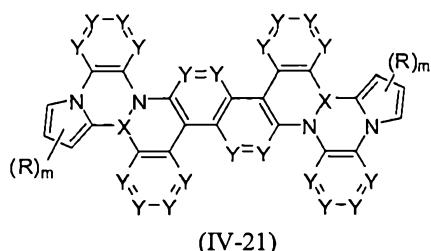
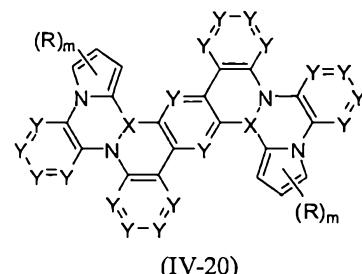
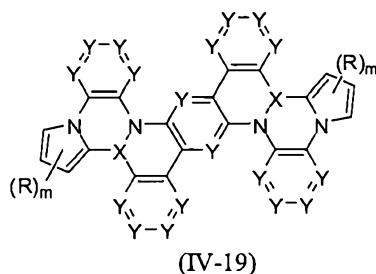
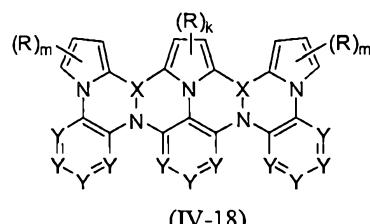
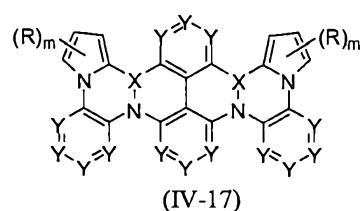
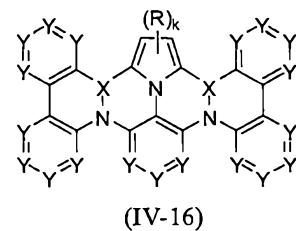
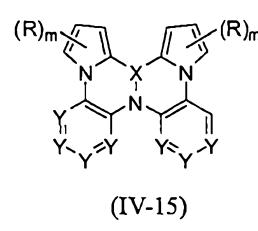
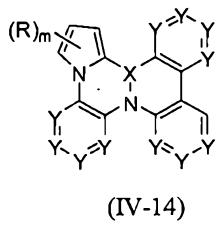
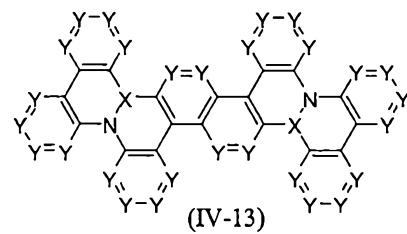
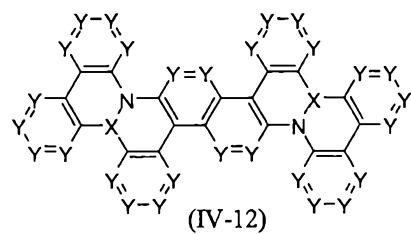
【0045】 2.多環芳香族化合物的整體結構

本發明的多環芳香族化合物（及其鹽）為含有上述部分結構的（例如包含該部分結構的重複的）化合物，具體而言，例如可列舉下述通式（IV-1）～式（IV-22）所表示的化合物。

【0046】



【0047】



【0048】 上述式 (IV-1) ~ 式 (IV-22) 中，Y 分別獨立地為 CR (R 將於後述) 或 N，於同一環上鄰接的 2 個 Y 與該些 Y 之間的鍵亦可一起而成為 NR (R 將於後述)、O、S 或 Se。X 表示 B、P、P=O、P=S、P=Se、As、As=O、As=S、As=Se、

Sb、Sb=O、Sb=S、Sb=Se、可經取代的週期表第3族～第11族的金屬元素、或者可經取代的週期表第13族～第14族的金屬元素或半金屬元素。

【0049】 上述式(IV-1)～式(IV-22)中的R(亦包括上述CR或NR中的R)是指氫、鹵素、C₁₋₂₀烷基、羥基C₁₋₂₀烷基、三氟甲基、C₂₋₁₂全氟烷基、C₃₋₈環烷基、C₂₋₂₀烯基、C₂₋₂₀炔基、經單芳基或二芳基取代的烯基、經單雜芳基或二雜芳基取代的烯基、芳基乙炔基、雜芳基乙炔基、羥基、C₁₋₂₀烷氧基、芳氧基、三氟甲氧基、三氟乙氧基、C₂₋₁₂全氟烷氧基、C₁₋₂₀烷基碳酸基、C₁₋₂₀烷基礦醯基、氰基、硝基、胺基、單烷基胺基、單芳基胺基、單雜芳基胺基、二芳基胺基、呡唑基、C₁₋₂₀烷氧基碳酸基胺基、胺甲醯基、單烷基胺甲醯基或二烷基胺甲醯基、胺礦醯基、單烷基胺礦醯基或二烷基胺礦醯基、C₁₋₂₀烷基礦醯基胺基、C₁₋₂₀烷基碳酸基胺基、可經取代的芳基、可經取代的雜芳基、C₁₋₂₀烷氧基碳酸基、羧基、5-呡唑基、礦基(-SO₂OH)、氟礦醯基、SR^a、N(R^a)₂、B(R^a)₂、Si(R^a)₃、-C≡C-Si(R^a)₃(此處，R^a分別獨立地表示可經取代的烷基、可經取代的芳基或可經取代的雜芳基，2個R^a亦可與該些R^a所鍵結的原子一起而為可具有雜原子的二環式基或三環式基)。

【0050】 其中，烷基、烯基、炔基及烷氧基可經選自以下基團中的1個～3個基團所取代：鹵素、羥基、C₁₋₂₀烷氧基、芳氧基、胺基、呡唑基、N(R^a)₂(R^a如上述所定義)、三氟甲基、C₂₋₁₂全氟烷基、C₃₋₈環烷基、芳基及雜芳基，且上述芳基、芳基部分、雜芳

基、雜芳基部分、呡唑基可經選自以下基團中的 1 個基團～5 個基團所取代：鹵素、 C_{1-20} 烷基、羥基 C_{1-20} 烷基、三氟甲基、 C_{2-12} 全氟烷基、 C_{3-8} 環烷基、 C_{2-20} 烯基、 C_{2-20} 炔基、經單芳基或二芳基取代的烯基、經單雜芳基或二雜芳基取代的烯基、芳基乙炔基、雜芳基乙炔基、羥基、 C_{1-20} 烷氧基、芳氧基、三氟甲氧基、三氟乙氧基、 C_{2-12} 全氟烷氧基、氰基、硝基、胺基、呡唑基、單烷基胺基、單芳基胺基、單雜芳基胺基、 $N(R^a)_2$ (R^a 如上述所定義)、胺甲醯基、單烷基胺甲醯基或二烷基胺甲醯基、胺磺醯基、單烷基胺磺醯基或二烷基胺磺醯基、 C_{1-20} 烷基羧基、 C_{1-20} 烷基磺醯基、 C_{1-20} 烷基磺醯基胺基、 C_{1-20} 烷基羧基胺基、亞甲基二氧基、雜芳基及芳基(該芳基可經選自以下基團中的 1 個～5 個基團所取代：鹵素、 C_{1-20} 烷基、 C_{3-8} 環烷基、 C_{2-20} 烯基、 C_{2-20} 炔基、羥基、三氟甲基、 C_{2-12} 全氟烷基、羥基、 C_{1-20} 烷氧基、芳氧基、三氟甲氧基、三氟乙氧基、 C_{2-12} 全氟烷氧基、 C_{1-20} 烷基羧基、 C_{1-20} 烷基磺醯基、亞甲基二氧基、氰基、硝基、胺基、呡唑基、 $N(R^a)_2$ (R^a 如上述所定義))。

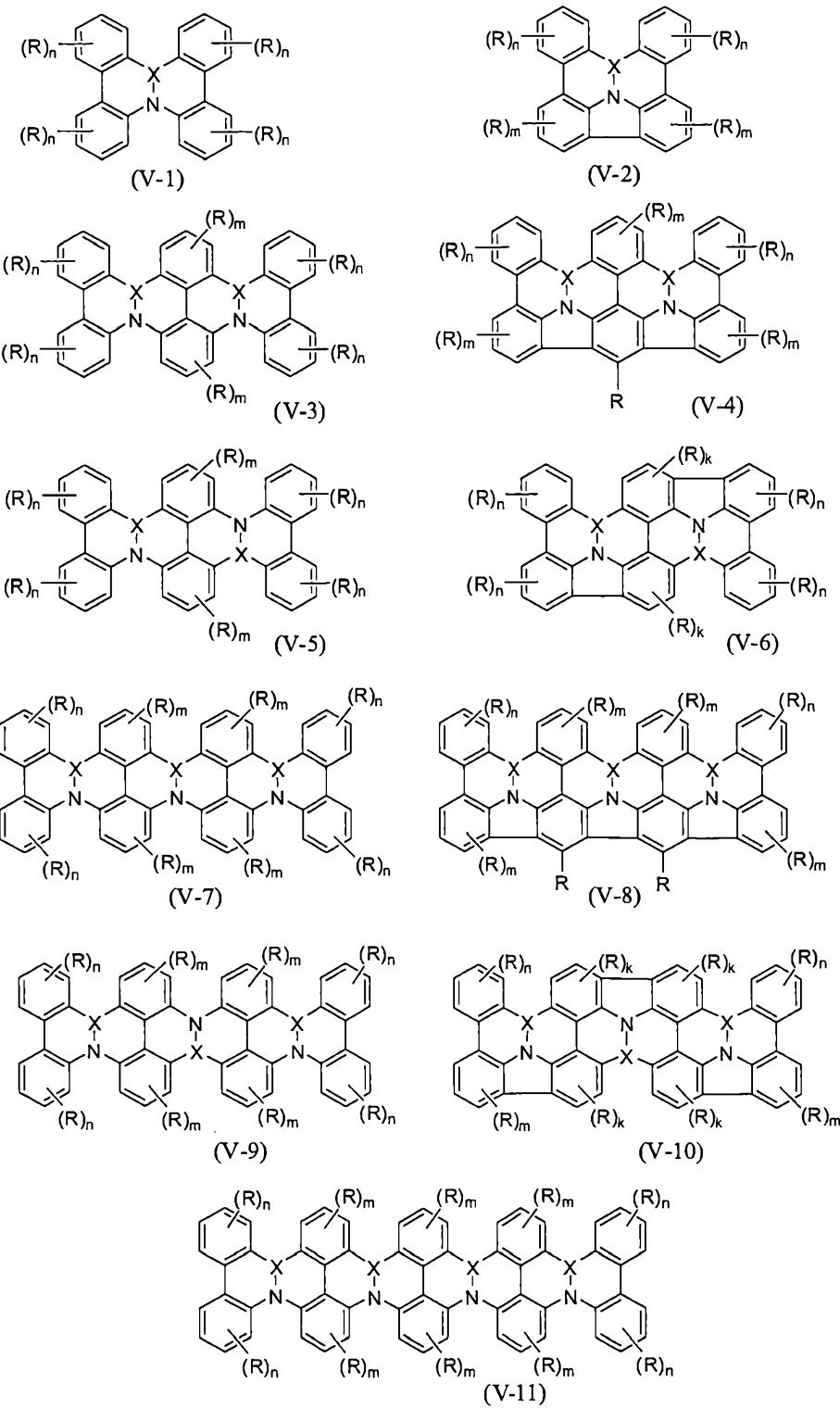
【0051】 另外，鄰接的 2 個 R 亦可與該些 R 所鍵結的碳原子一起而形成 5 賓環或 6 賓環的可具有雜原子的單環式基、二環式基或三環式基，例如可列舉形成環己烷環、苯環或吡啶環的例子。進而，鄰接的 3 個 R 亦可與該些 R 所鍵結的碳原子一起而形成可具有雜原子的二環式基或三環式基。於鄰接的 2 個 R 分別為取代於鄰接的環上的 R 的情形時，2 個 R 亦可形成單鍵、 CH_2 、 CHR^a 、

CR^{a}_2 、 NR^{a} 、 $\text{Si}(\text{R}^{\text{a}})_2$ 、 BR^{a} (R^{a} 如上述所定義)、 Se 、 S 或 O 而將 2 個鄰接的環鍵結。另外，整體結構中的至少一個氫可經氣取代。

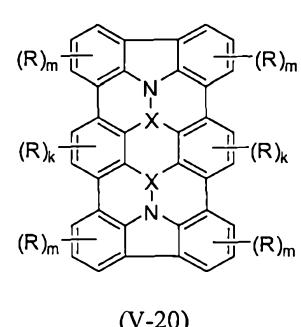
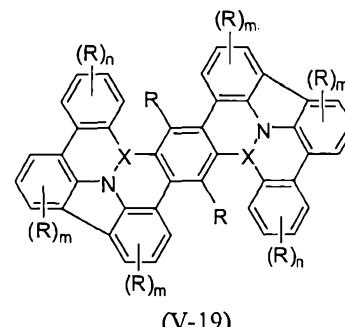
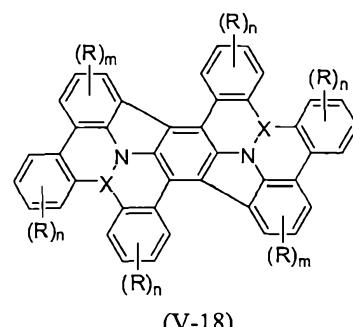
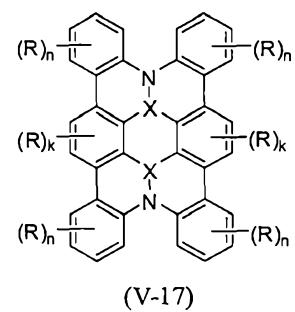
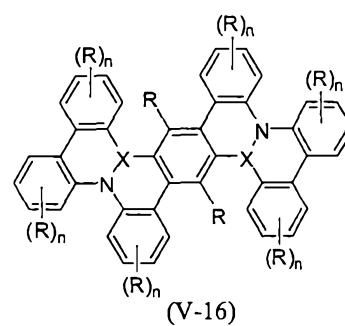
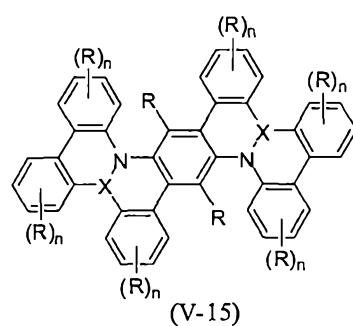
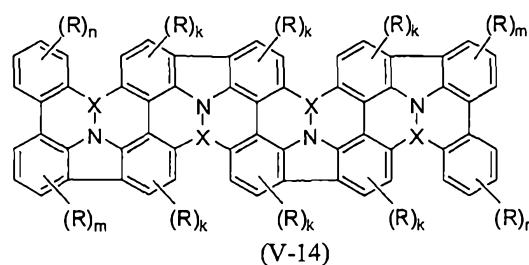
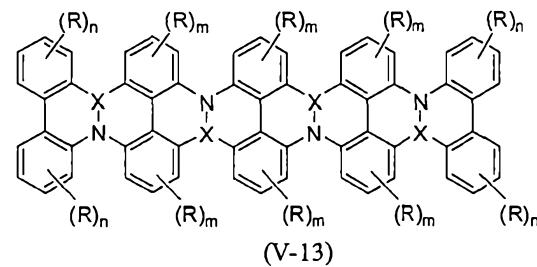
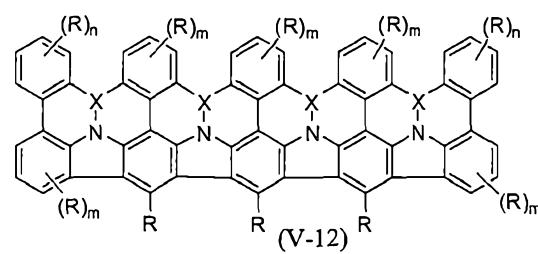
【0052】 m 為 $0 \sim 3$ 的整數，較佳為 $0 \sim 2$ 的整數，更佳為 $0 \sim 1$ 的整數，進而佳為 0。 k 為 $0 \sim 2$ 的整數，較佳為 $0 \sim 1$ 的整數，更佳為 0。

【0053】 關於本發明的多環芳香族化合物（及其鹽）的更具體的例子，例如可列舉下述通式（V-1）～式（V-26）及通式（V-27）～式（V-34）所表示的化合物。

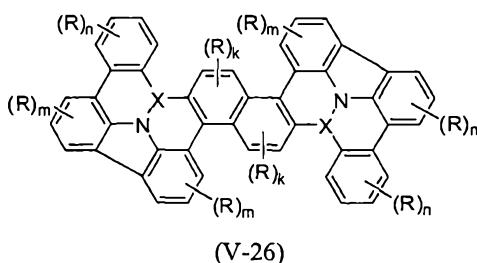
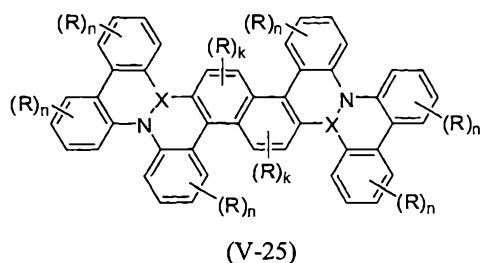
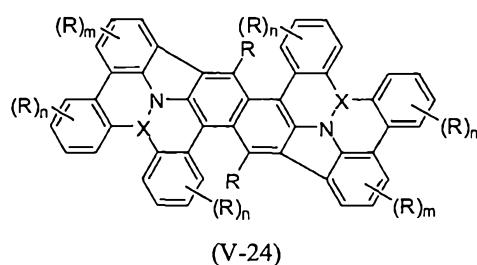
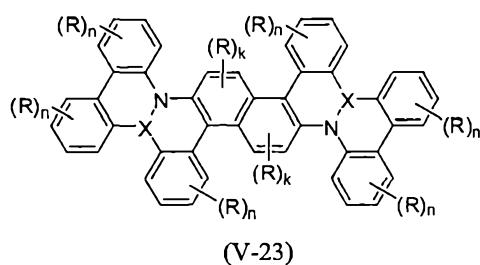
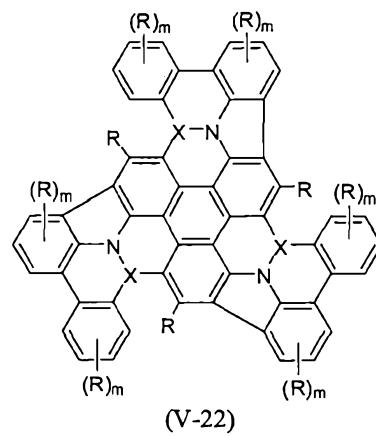
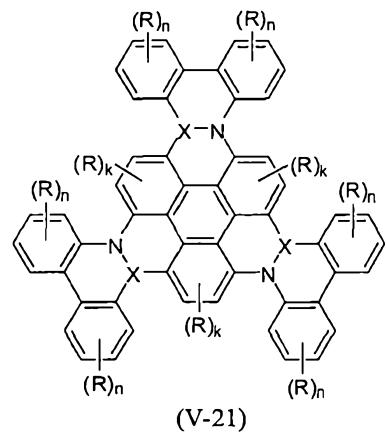
【0054】



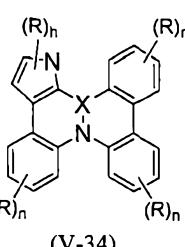
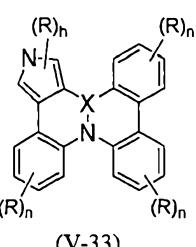
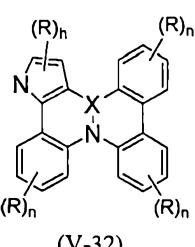
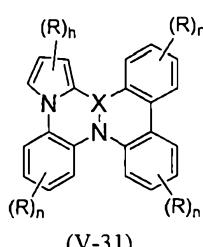
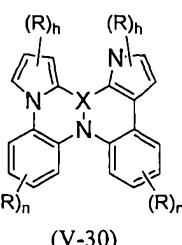
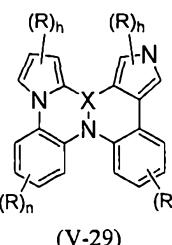
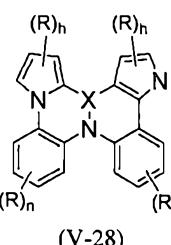
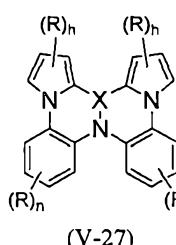
【0055】



【 0056 】



【0057】



【0058】 上述式 (V-1) ~ 式 (V-26) 及式 (V-27) ~ 式 (V-34) 中，X 表示 B、P、P=O、P=S、P=Se、As、As=O、As=S、As=Se、Sb、Sb=O、Sb=S、Sb=Se、可經取代的週期表第 3 族～第 11 族的金屬元素、或者可經取代的週期表第 13 族～第 14 族的金屬元素或半金屬元素。

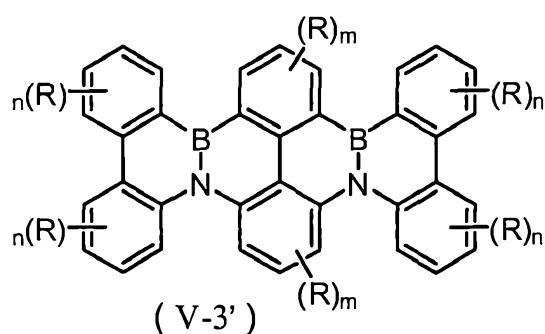
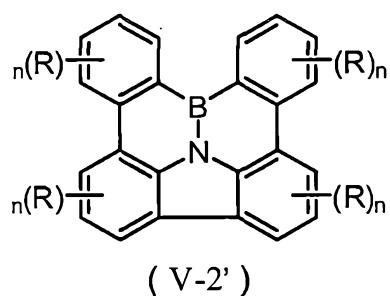
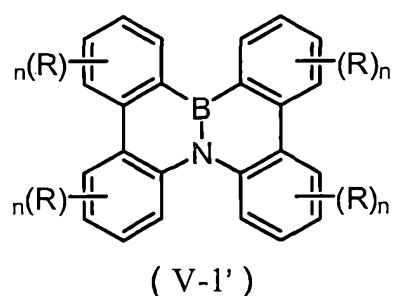
【0059】 上述式 (V-1) ~ 式 (V-26) 及式 (V-27) ~ 式 (V-34) 中的 R 是指氫、經氟取代或未經取代的 C₁₋₂₀ 烷基、C₃₋₈ 環烷基、C₂₋₂₀ 烯基、經單芳基或二芳基取代的 C₂₋₁₂ 烯基、經單雜芳基或二雜芳基取代的 C₂₋₁₂ 烯基、經氟取代或未經取代的 C₁₋₂₀ 烷氧基、C₁₋₂₀ 烷基羰基、氰基、硝基、二芳基胺基、可經取代的芳基、可經取代的雜芳基、B(R^a)₂ 或 Si(R^a)₃ (此處，R^a 分別獨立地為可經取代的烷基、可經取代的芳基或可經取代的雜芳基)。再者，式 (V-27) ~ 式 (V-34) 中的吡咯環中，對於 N 參與縮合者 (例如式 (V-27) 的吡咯環) 以外的吡咯環 (例如式 (V-32) 的吡咯環) 的 N，基本上鍵結氫 (>N-H)，但亦可鍵結取代基 R (>N-R)。使用圖的詳細說明可參照後述「於同一環上鄰接的 2 個 Y^a 與該些 Y^a 之間的鍵一起而成為 N、O、S 或 Se」的說明。

【0060】 另外，於同一環上鄰接的 2 個 R 亦可鍵結而形成環己烷環、苯環或吡啶環。進而，上述各式中的鄰接的 2 個苯環亦可藉由經由單鍵、CH₂、CHR^a、C(R^a)₂、NR^a、Si(R^a)₂、BR^a (此處，R^a 如上述所定義)、Se、S 或 O 的鍵而鍵結，而於該些苯環之間形成環。另外，整體結構中的至少一個氫可經氣取代。

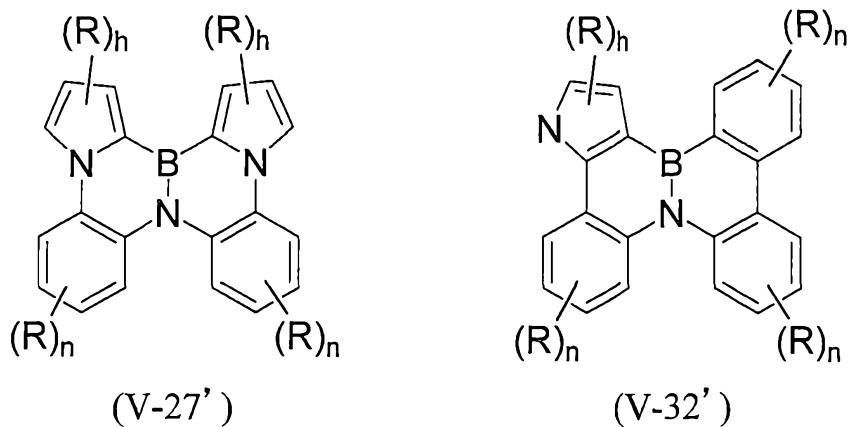
【0061】 n 為 0~4 的整數，較佳為 0~2 的整數，更佳為 0~1 的整數，進而佳為 0。m 為 0~3 的整數，較佳為 0~2 的整數，更佳為 0~1 的整數，進而佳為 0。k 為 0~2 的整數，較佳為 0~1 的整數，更佳為 0。h 為 0~3 的整數，較佳為 0~2 的整數，更佳為 0~1 的整數，進而佳為 0。

【0062】 關於本發明的多環芳香族化合物（及其鹽）的更具體的例子，例如可列舉下述通式（V-1'）、式（V-2'）或式（V-3'）所表示的化合物及下述通式（V-27'）或式（V-32'）所表示的化合物。該些化合物分別相當於選擇 B 元素作為上述通式（V-1）、式（V-2）或式（V-3）及上述通式（V-27）或式（V-32）中的 X 者。式中的 R、n、m 及 h 如上述所定義。

【0063】



【0064】



【0065】 其中，關於上述通式 (V-1')、通式 (V-27') 及式 (V-32') 中取代基 R 為芳基的化合物，R 的具體例例如可列舉：苯基、(2-、3-、4-)聯苯基、聯三苯基（間聯三苯-2'-基、間聯三苯-4'-基、間聯三苯-5'-基、鄰聯三苯-3'-基、鄰聯三苯-4'-基、對聯三苯-2'-基、間聯三苯-2-基、間聯三苯-3-基、間聯三苯-4-基、鄰聯三苯-2-基、鄰聯三苯-3-基、鄰聯三苯-3-基、鄰聯三苯-4-基、對聯三苯-2-基、對聯三苯-3-基、對聯三苯-4-基）、(1-、2-)萘基、(1-、2-)聯伸三苯基、或(1-、2-、3-、4-、9-)咔唑基等，較佳為苯基、聯苯基或聯三苯基。

關於 R 的取代位置，於上述通式 (V-1')、通式 (V-27') 及式 (V-32') 中鍵結於 N 的苯環（相當於式 (I) 的 B 環及/或 D 環）上，較佳為以鍵結於 N 的碳的位置為基準而取代於對位上，可將 B 環或 D 環的一個環的對位取代，或將兩個環的對位取代，較佳為將兩個環的對位取代。另外，於上述通式 (V-1') 及式 (V-32') 中鍵結於 B 的苯環（相當於式 (I) 的 A 環及/或 C 環）上，較佳

爲以鍵結於 B 的碳的位置爲基準而取代於鄰位上，可將 A 環或 C 環的一個環的鄰位取代，或將兩個環的鄰位取代。

具體而言，較佳爲後述式 (51) ~ 式 (86) 所表示的化合物，更佳爲式 (66) ~ 式 (83) 及式 (86) 所表示的化合物，進而佳爲式 (66) ~ 式 (74) 所表示的化合物。

【0066】 另外，取代基 R (芳基) 可進一步經取代。例如可列舉經苯基、二芳基胺基或可經取代的咔唑基等取代的例子。二芳基胺基的「芳基」可列舉後述芳基 (例如苯基或萘基)，咔唑基上的取代基可列舉後述烷基 (例如 C_{1-3} 烷基) 或後述芳基 (例如苯基、聯苯基或萘基) 等。具體而言，較佳爲後述式 (192)、式 (196)、式 (199)、式 (205) 及式 (209) 所表示的化合物。

【0067】 關於上述通式 (V-1')、通式 (V-27') 及式 (V-32') 中取代基 R 為含 N 的結構的化合物，R 的具體例例如可列舉二芳基胺基或可經取代的咔唑基等。二芳基胺基的「芳基」可列舉後述芳基 (例如苯基或萘基)，咔唑基上的取代基可列舉後述烷基 (例如 C_{1-3} 烷基) 或後述芳基 (例如苯基、聯苯基或萘基) 等。

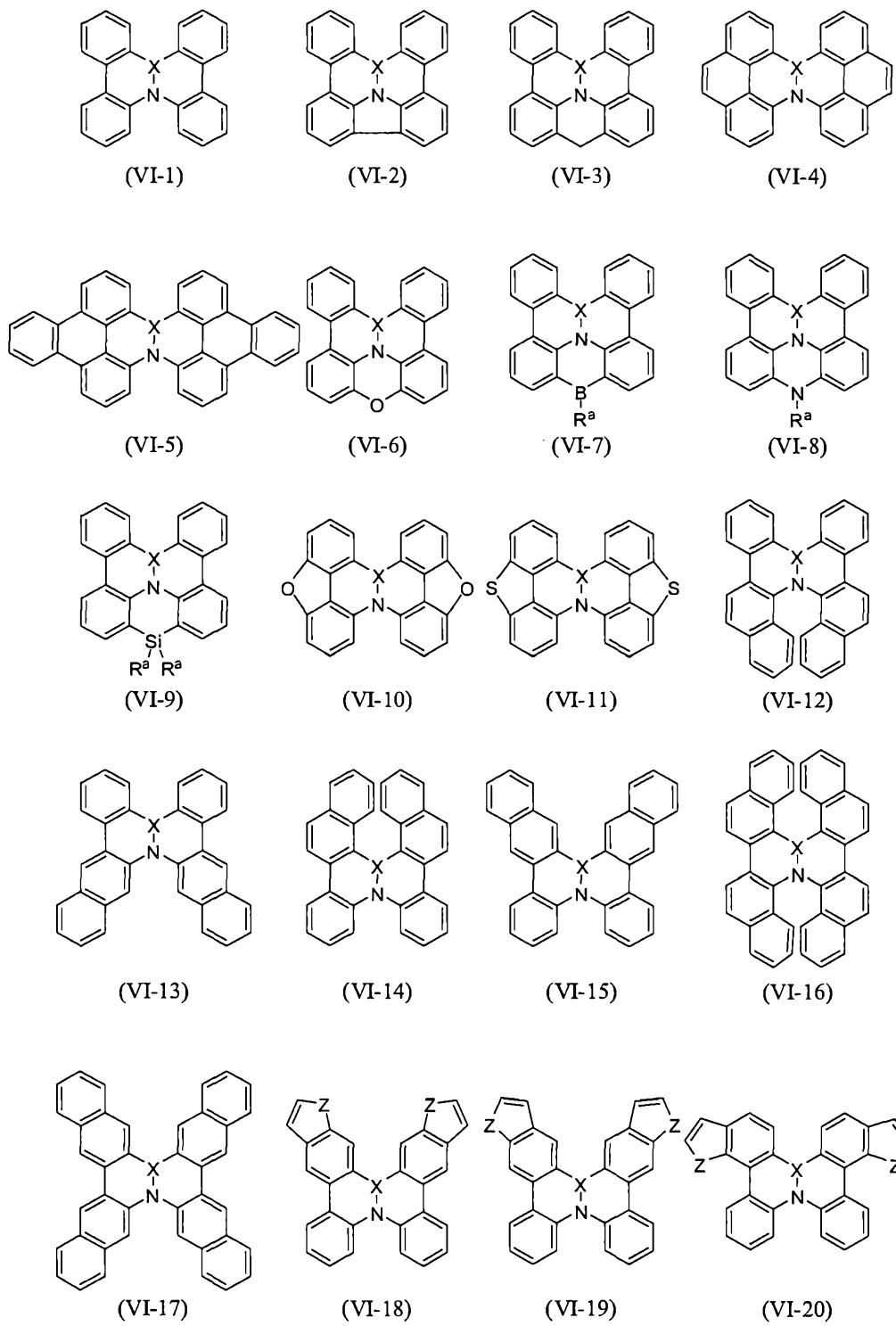
關於 R 的取代位置，於上述通式 (V-1')、通式 (V-27') 及式 (V-32') 中鍵結於 N 的苯環 (相當於式 (I) 的 B 環及/或 D 環) 上，較佳爲以鍵結於 N 的碳的位置爲基準而取代於對位上，可將 B 環或 D 環的一個環的對位取代，或將兩個環的對位取代。

具體而言，較佳爲後述式 (188) ~ 式 (191)、式 (193) ~ 式 (195)、式 (197)、式 (198)、式 (200) ~ 式 (204) 及式 (206)

～式（208）所表示的化合物。

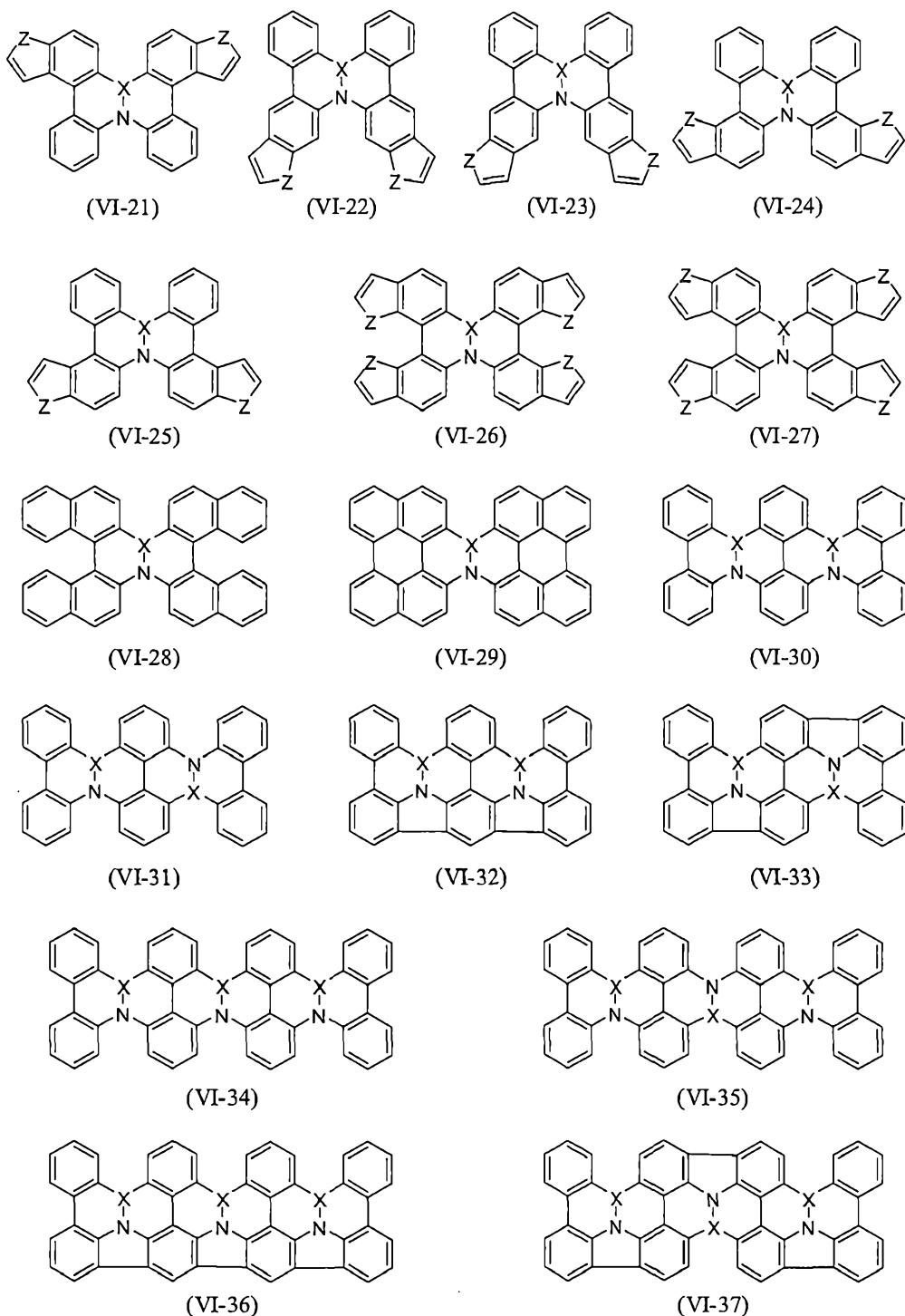
【0068】 本發明的多環芳香族化合物（及其鹽）的更具體的例子例如可列舉下述通式（VI-1）～式（VI-149）所表示的化合物（該些化合物可進一步經取代，該些取代基亦可相互鍵結而形成環己烷環、苯環或吡啶環）。再者，各式中，X、Z如上述所定義。

【0069】

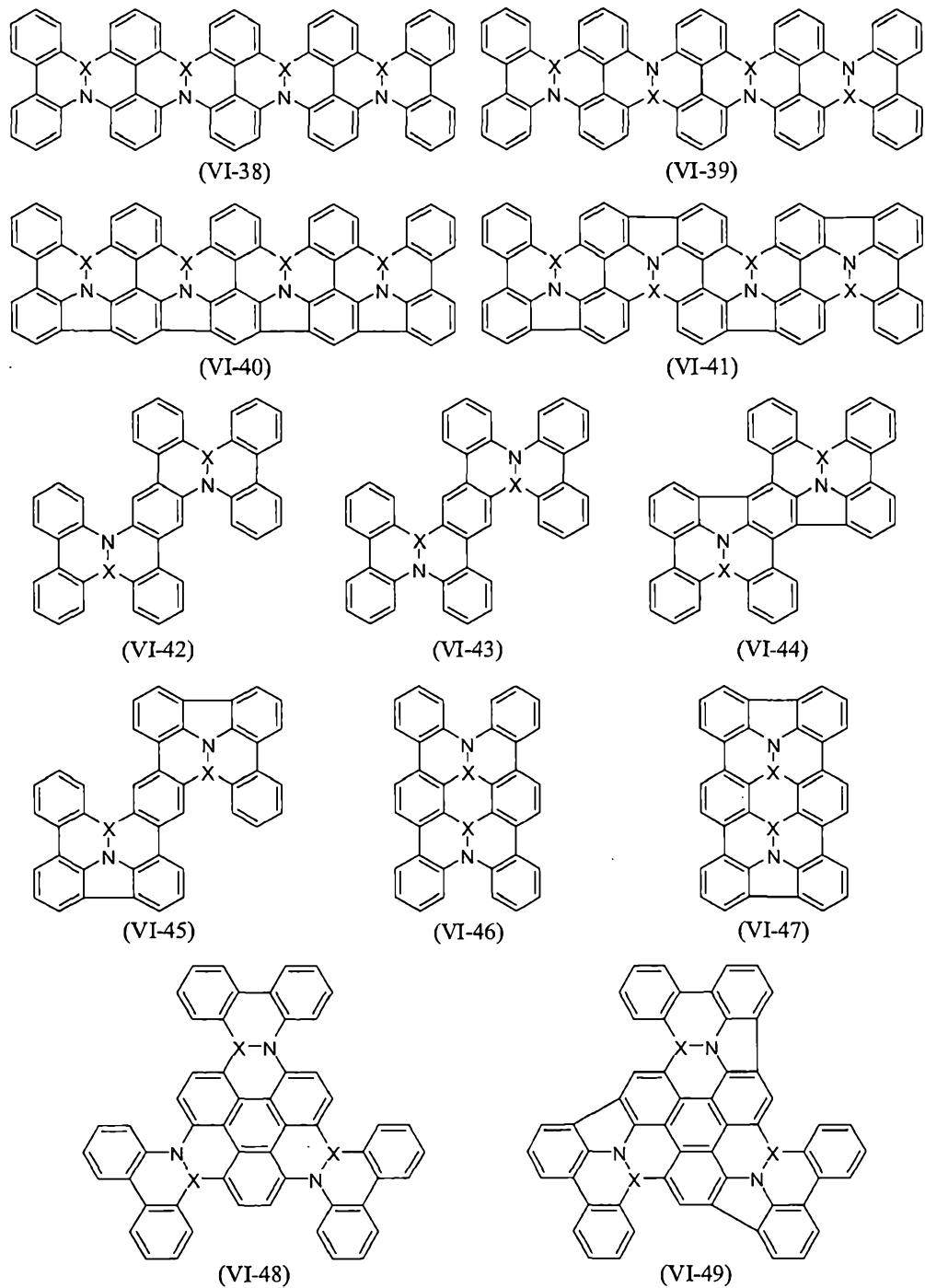


【0070】

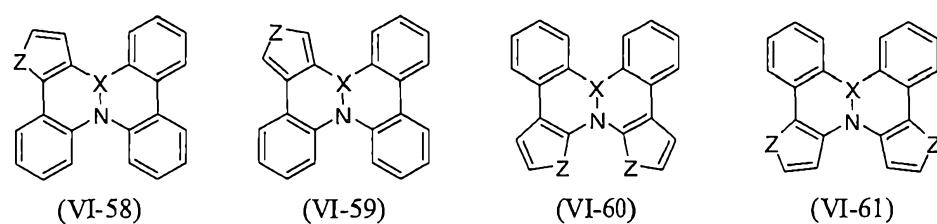
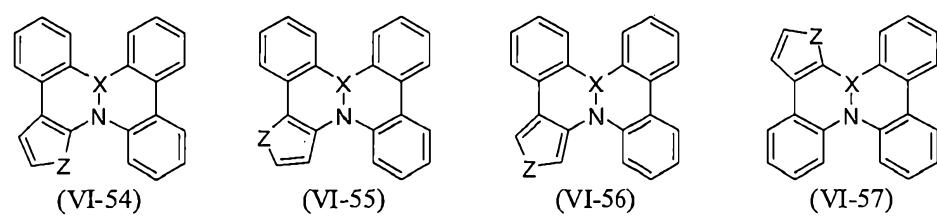
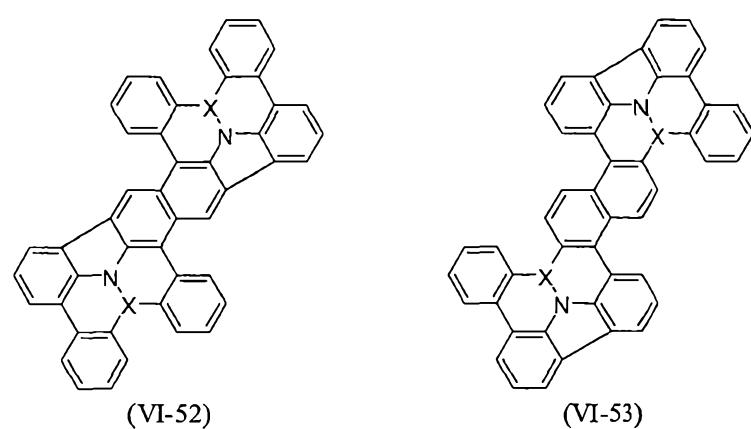
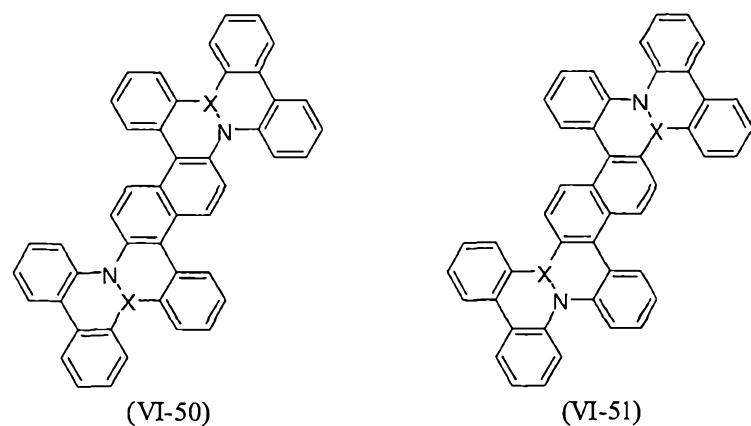




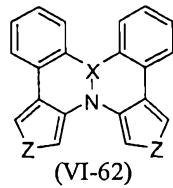
【 0071 】



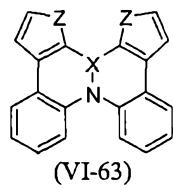
【0072】



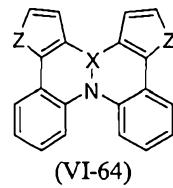
【 0073 】



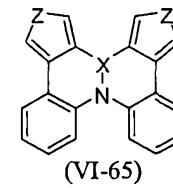
$$\begin{array}{c}
 \text{Z} \\
 | \\
 \text{C}_6\text{H}_4 - \text{C}_6\text{H}_4 - \text{X} - \text{N} - \text{C}_6\text{H}_4 - \text{C}_6\text{H}_4 - \text{Z} \\
 | \\
 \text{Z}
 \end{array} \quad (\text{VI}-66)$$



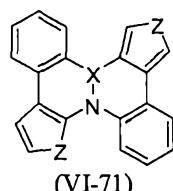
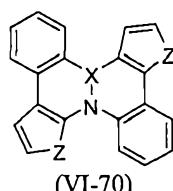
$$\text{Chemical Structure (VI-67): A central nitrogen atom is bonded to two Z groups, one X group, and a quinoline ring system.}$$



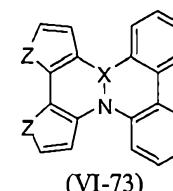
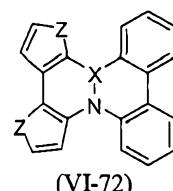
$$\begin{array}{c}
 \text{Z} \\
 | \\
 \text{C}_6\text{H}_4 - \text{C}_6\text{H}_4 - \text{X} - \text{C}_6\text{H}_4 - \text{C}_6\text{H}_4 - \text{Z} \\
 | \\
 \text{N} \\
 | \\
 \text{C}_6\text{H}_4 - \text{C}_6\text{H}_4
 \end{array}
 \quad (\text{VI-68})$$



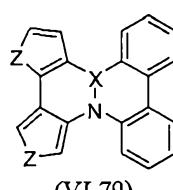
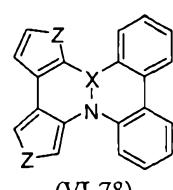
$$\begin{array}{c}
 \text{Chemical Structure VI-69:} \\
 \text{A central nitrogen atom is bonded to two 2-phenylbenzimidazole groups. Each group consists of a benzene ring fused with a five-membered imidazole ring. The imidazole rings have substituents Z at the 2 and 5 positions. The nitrogen atom is also bonded to an X atom, which is further bonded to a Z-substituted benzene ring.} \\
 \text{(VI-69)}
 \end{array}$$



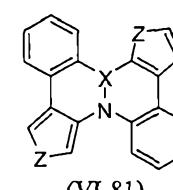
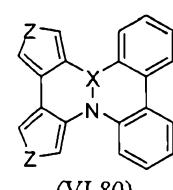
(CH₂)₆



$$\text{Chemical Structure: A bis-indole derivative where two indole rings are connected at their 3-positions via a central nitrogen atom. Each indole ring has a phenyl group at its 2-position and a substituent 'Z' at its 5-position. The nitrogen atom is also bonded to an 'X' group.}$$

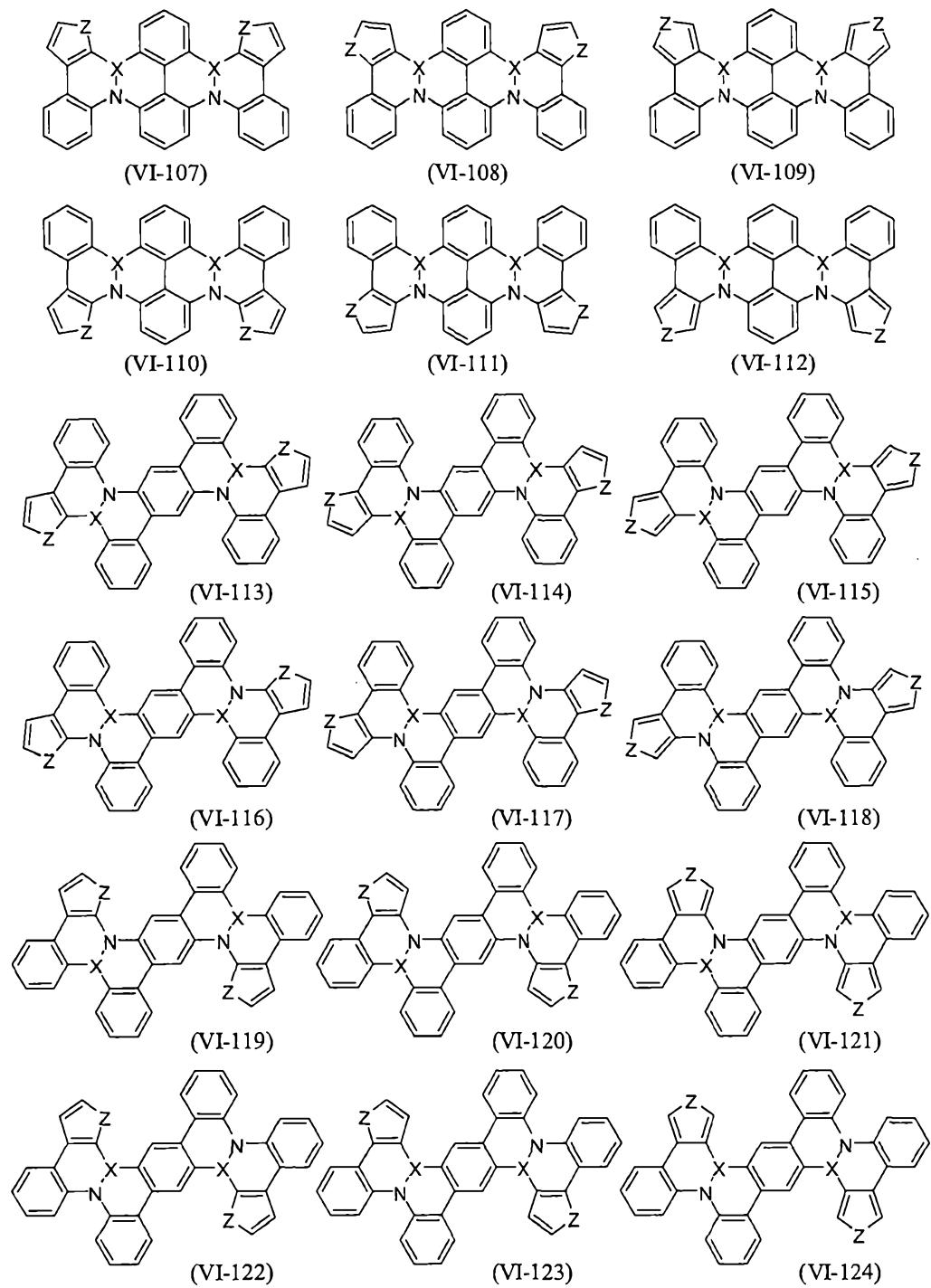


$$\begin{array}{c}
 \text{Chemical Structure of } \text{GVI-82} \\
 \text{A central nitrogen atom is bonded to two phenyl groups (one with substituent } Z) \text{ and two } X \text{ groups. Each } X \text{ group is bonded to a } 2,5\text{-furanediyl bridge.} \\
 \text{Structure: } \text{N}(\text{C}_6\text{H}_4\text{Z}-X-\text{C}_4\text{H}_2\text{Z}-\text{C}_6\text{H}_4\text{Z})_2
 \end{array}$$

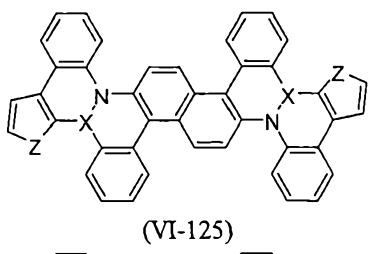


$$\text{СД-85)}$$

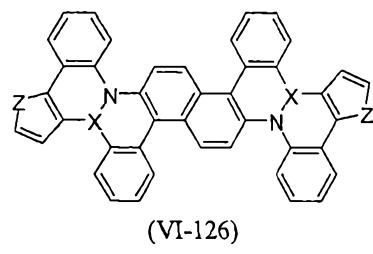
【0074】



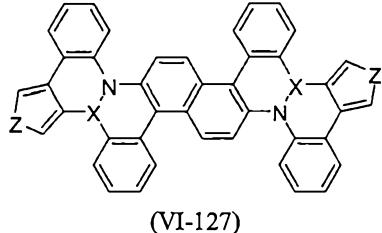
【0076】



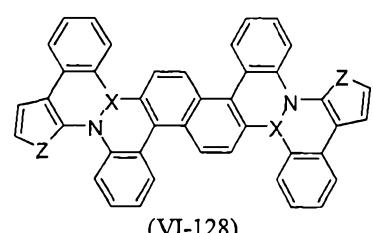
(VI-125)



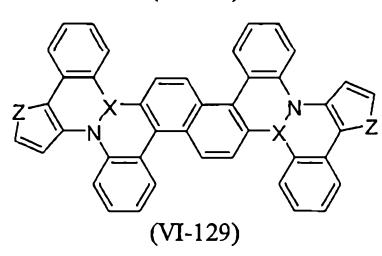
(VI-126)



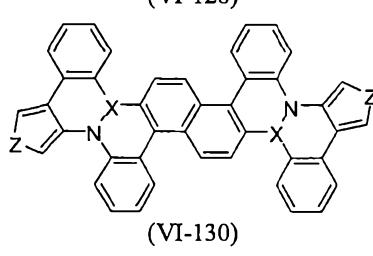
(VI-127)



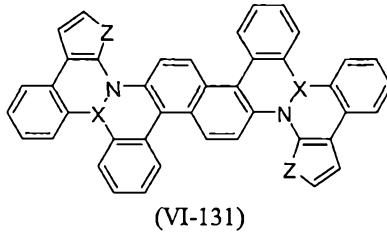
(VI-128)



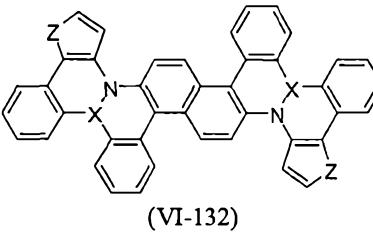
(VI-129)



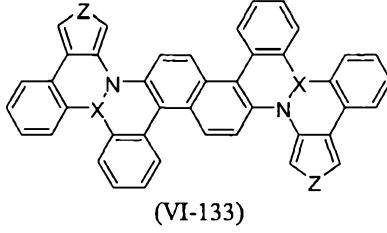
(VI-130)



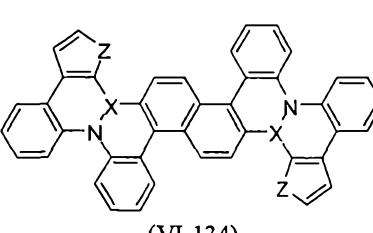
(VI-131)



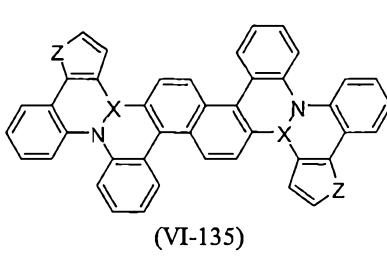
(VI-132)



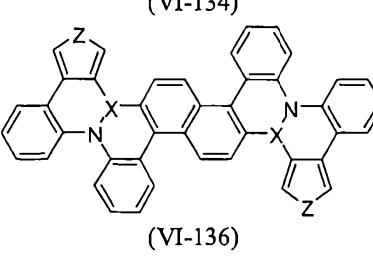
(VI-133)



(VI-134)

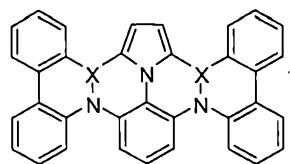


(VI-135)

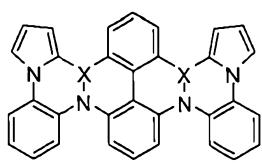


(VI-136)

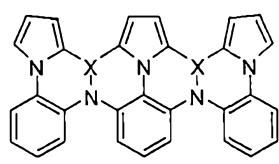
【0077】



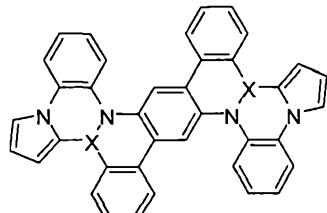
(VI-137)



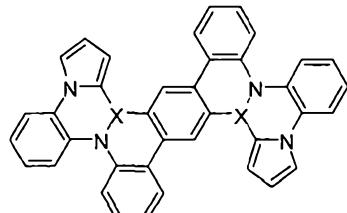
(VI-138)



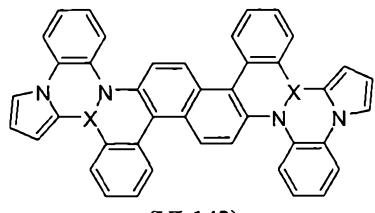
(VI-139)



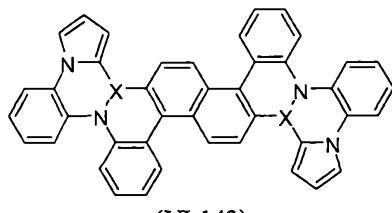
(VI-140)



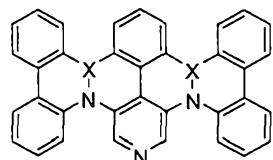
(VI-141)



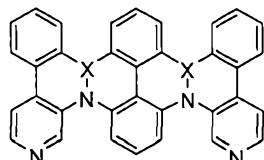
(VI-142)



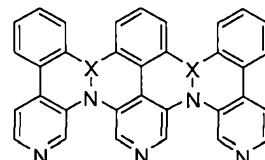
(VI-143)



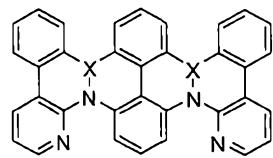
(VI-144)



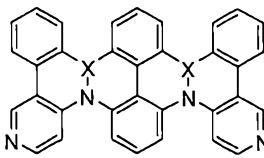
(VI-145)



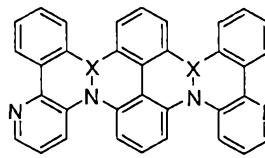
(VI-146)



(VI-147)

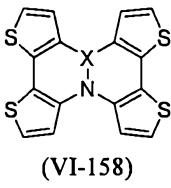
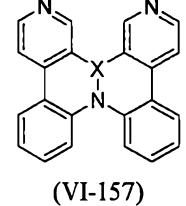
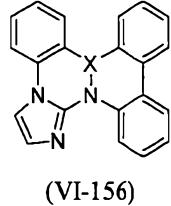
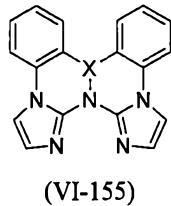
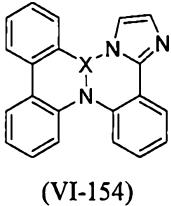
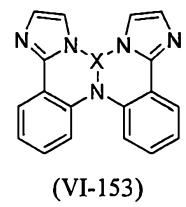
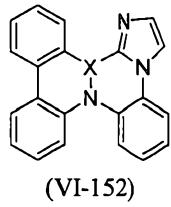
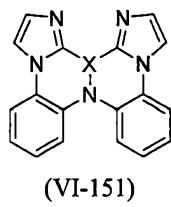
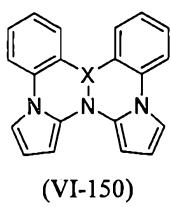


(VI-148)



(VI-149)

【0078】



【0079】 X 所表示的週期表第 3 族～第 11 族的金屬元素、週期表第 13 族～第 14 族的金屬元素或半金屬元素可例示以下者。

第 3 族：Sc、Y、鑭系 (Lanthanoid)

第 4 族：Ti、Zr、Hf

第 5 族：V、Nb、Ta

第 6 族：Cr、Mo、W

第 7 族：Mn、Tc、Re

第 8 族：Fe、Ru、Os

第 9 族：Co、Rh、Ir

第 10 族：Ni、Pd、Pt

第 11 族：Cu、Ag、Au

第 13 族：Al、Ga、In、Tl

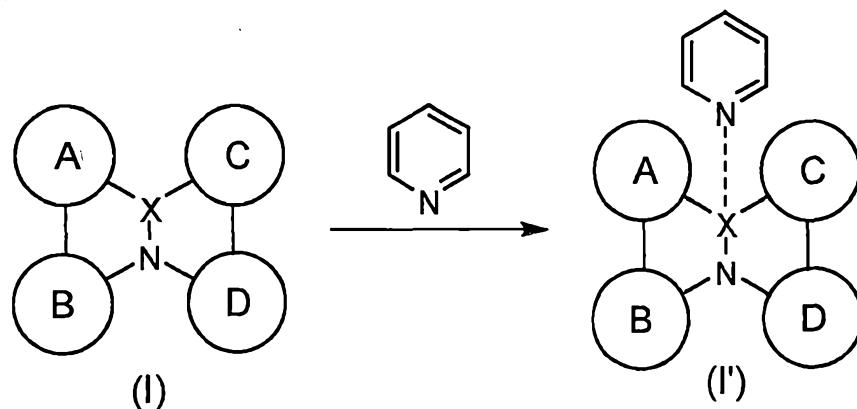
第 14 族：Si、Ge、Sn、Pb

【0080】 X 所表示的週期表第 3 族～第 11 族的金屬元素、週期表第 13 族～第 14 族的金屬元素或半金屬元素可分別經取代。此處，所謂該些金屬元素或半金屬元素「經取代」，是指具有 1 個～3 個取代基 R (R 如上述所定義)、或具有 1 個～3 個中性配位基 R^1 。中性配位基 R^1 可列舉：吡啶、聯吡啶、啡啉、三聯吡啶、咪唑、嘧啶、吡嗪、喹啉、異喹啉、吖啶等具有氮原子作為環原子的芳香族化合物及該些化合物的衍生物。其中，於 X 具有 R 與 R^1 兩者的情形時，亦可如下述情況（3）般藉由一個化合物（8-羥基喹啉）來形成 R 與 R^1 。

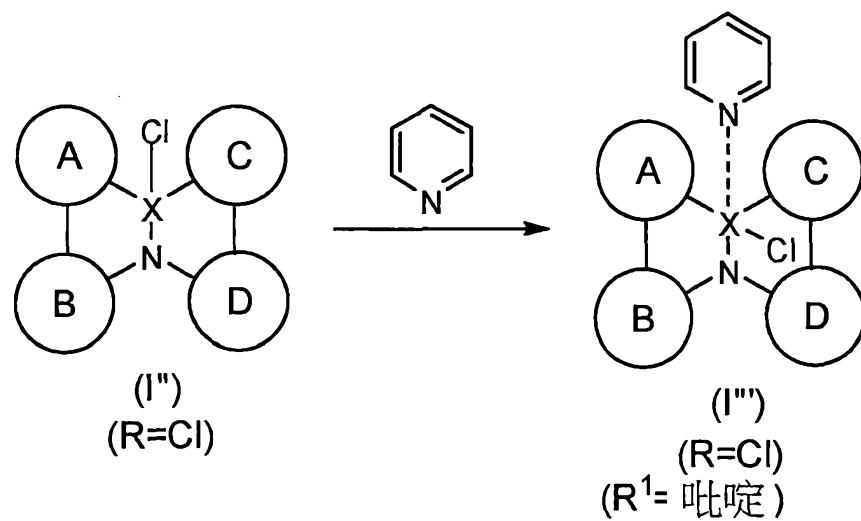
【0081】 具有中性配位基 R^1 的化合物例如可如以下般製造。

（下述式中，(R) 表示 R^1 為上述所定義的 R，(R^1) 表示 R^1 為中性配位基）

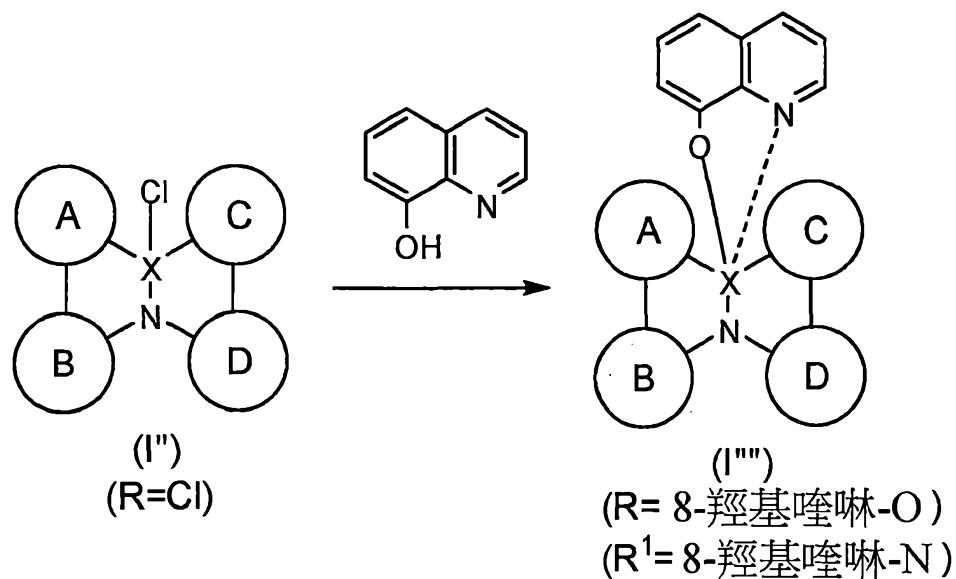
情況(1)



情況(2)



情況(3)



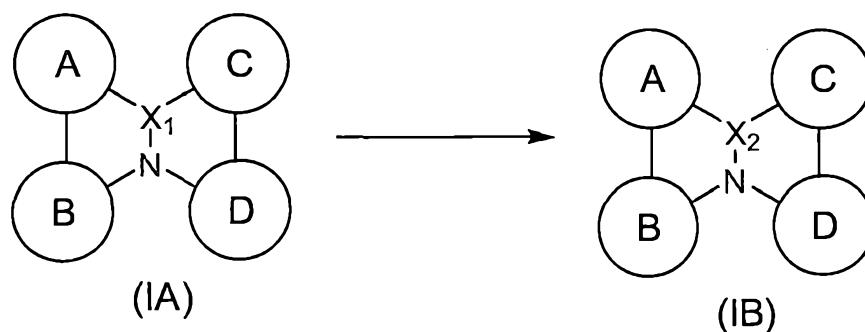
【0082】情況(1)表示中性配位基(R^1)鍵結於式(I)的X(金屬元素或半金屬元素)上而獲得(I')化合物的情形。

【0083】情況(2)表示X(金屬元素或半金屬元素)經R取代，且對R=C1的(Iⁿ)進一步鍵結中性配位基(R¹)而獲得(I^{n'})化合物的情形。

【0084】情況(3)表示X(金屬元素或半金屬元素)經R取代，且使8-羥基喹啉作用於R=Cl的(Iⁿ)，將作為R的Cl取代為酚性羥基的氧原子，同時作為中性配位基的喹啉的環內N原子(R¹)進行配位，由此獲得具有(R)及(R¹)的(Iⁿ)化合物的方法。

【0085】 具有中性配位基的化合物可參考上述情況（1）～情況（3）由本領域技術人員容易地製造。

【0086】另外，可如下述所示般將 X_1 變更爲 X_2 。



【0087】 X_1 、 X_2 於電負度為相同程度的情形、或成為 $X_1 < X_2$ 的組合時可變更。例如於 $X_1=Ge-R$ 的情形時， X_2 可變更為 B、P、
 $P=O$ 、 $P=S$ 、 $P=Se$ 、As、 $As=O$ 、 $As=S$ 、 $As=Se$ 、Sb、 $Sb=O$ 、 $Sb=S$ 、
 $Sb=Se$ 、Mo、W、Ru、Os、Rh、Ir、Pd、Pt、Au、Pb（該些金屬

元素可經取代)。

【0088】 關於變更的方法，對具有 X_1 的(IA)的化合物使用 1 莫耳~過剩量的 X_2 的鹵化物、烷氧基衍生物、芳氧基衍生物、醯 氧基衍生物、鹵代胺基衍生物、0 莫耳~過剩量的路易斯酸以及 0 莫耳~過剩量的鹼，於溶劑中或無溶劑條件下於室溫~ 250°C 左右的溫度下攪拌 30 分鐘~24 小時進行反應，由此獲得具有 X_2 的(IB) 的化合物。

【0089】 溶劑可使用：無水二乙醚、無水四氫呋喃 (Tetrahydrofuran , THF)、無水二丁醚等無水醚系溶劑，或苯、甲苯、二甲苯、均三甲苯 (mesitylene) 等芳香族烴系溶劑，或氯苯、1,2-二氯苯等芳香族鹵化物系溶劑。

【0090】 路易斯酸可使用： AlCl_3 、 AlBr_3 、 $\text{BF}_3 \cdot \text{OEt}_2$ 、 BCl_3 、 BBr_3 、 GaCl_3 、 GaBr_3 、 InCl_3 、 InBr_3 、 $\text{In}(\text{OTf})_3$ 、 SnCl_4 、 SnBr_4 、 AgOTf 、 $\text{Sc}(\text{OTf})_3$ 、 ZnCl_2 、 ZnBr_2 、 $\text{Zn}(\text{OTf})_2$ 、 MgCl_2 、 MgBr_2 、 $\text{Mg}(\text{OTf})_2$ 等。

【0091】 鹼可使用：二異丙基乙基胺、2,2,6,6-四甲基哌啶、1,2,2,6,6-五甲基哌啶、2,4,6-三甲基吡啶 (2,4,6-collidine)、2,6-二甲基吡啶 (2,6-lutidine)、三乙胺、三異丁胺等。藉由 $X_2 = \text{P}$ 且 於硫 (S8) 的存在下進行使用路易斯酸及鹼的反應，可直接獲得 X_2 為 $\text{P}=\text{S}$ 的化合物。關於 X_2 為 As 、 Sb 等其他元素，可同樣地獲得硫原子鍵結的化合物。

【0092】 上文中對具有通式 (I) 的部分結構的化合物進行了記

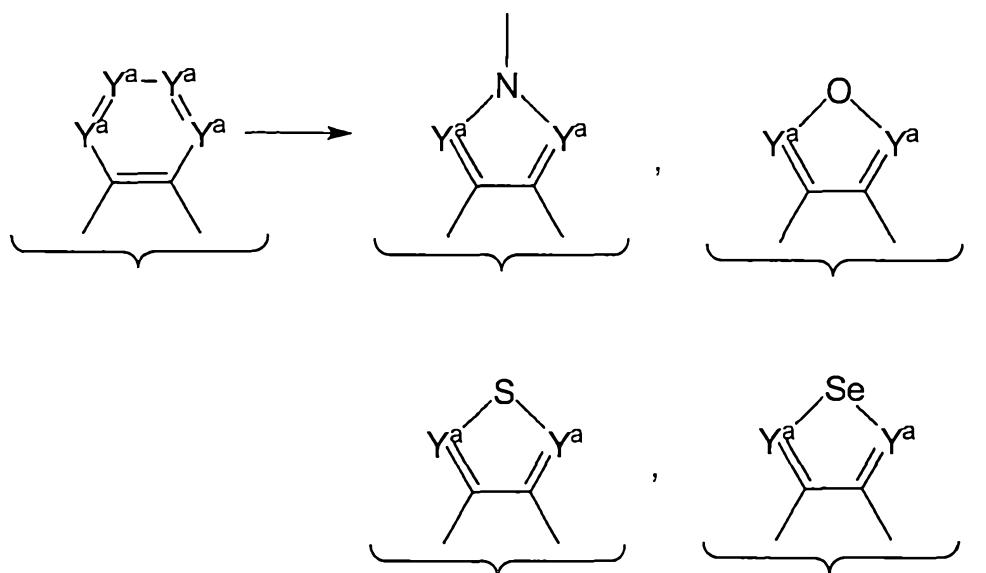
載，但對上述所有的部分結構及整體結構亦可同樣地導入中性配位基，另外可由 X_1 轉變為 X_2 。

【0093】 較佳的 X 可列舉：B、P、P=O、P=S、Si-R、Ge-R、Ga、Pt、Ru、Ir、Au 等。

【0094】 於本說明書中，所謂「鄰接的 2 個環」或「鄰接的 2 個苯環」，若使用上述通式 (I) 來說明，則分別是指環 A 與環 B、環 C 與環 D、環 A 與環 C、環 B 與環 D。

於本說明書中，所謂「部分結構具有至少一個氫」，若使用上述通式 (I) 來說明，是指形成環 A、環 B、環 C 及環 D 的原子不可全部與其他結構連結，至少一個原子必須與氫鍵結而封端，於含有上述通式 (I) 所表示的部分結構的（例如包含該部分結構的重複的）多環芳香族化合物或其鹽中，例如是指不含其富勒烯或碳奈米管的碳骨架的一部分經硼及氮等取代而成的雜富勒烯或雜碳奈米管等。

【0095】 於本說明書中，所謂「於同一環上鄰接的 2 個 Y^a 與該些 Y^a 之間的鍵一起而成為 N、O、S 或 Se」，於如 $Y^a=Y^a$ 般鄰接的 Y^a 以雙鍵進行鍵結的情形時，是指「 $Y^a=Y^a$ 」可成為 N、O、S 或 Se，於如 Y^a-Y^a 般鄰接的 Y^a 以單鍵進行鍵結的情形時，是指可成為下述式（式中， Y^a 如上述所定義）般的結構。再者，自 N 伸出的結合鍵上基本上鍵結氫 ($>N-H$)，但於 5 員環經取代的情形時，亦可於 N 上鍵結取代基 ($>N-R$)。



「於同一環上鄰接的 2 個 Y 與該些 Y 之間的鍵一起而成爲 NR、O、S 或 Se」亦爲相同的含意。

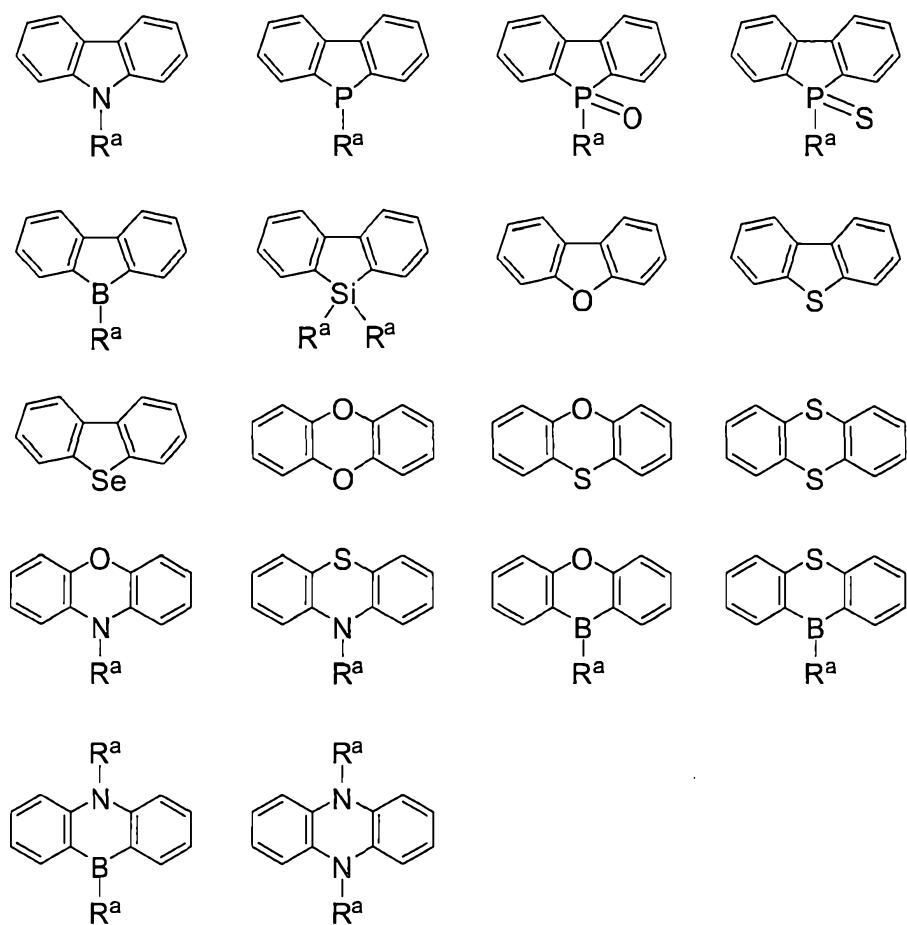
【0096】 於本說明書中，「鄰接的 R」可爲同一環上的鄰接的基團，亦可爲鄰接的環的最近的 R 彼此。

【0097】 「可經取代的芳香族環」的芳香族環可列舉：苯環、萘環、薁環、聯苯環、茀環、蒽環、苯并二茚環 (indacene ring)、菲環、葩環 (phenalene ring)、茈環、茚環、聯三伸苯 (triphenylene) 環、螢蒽環 (fluoranthene ring)、醋菲烯環 (acephenanthrylene ring)、醋蒽烯環 (aceanthrylene ring)、茈環 (picene ring)、稠四苯環 (naphthacene ring)、茀環、苊環 (acenaphthylene ring)、二氫苊環 (acenaphthene ring)、二氫茚環、茚環、四氫萘環。

【0098】 「可經取代的雜芳香族環」的雜芳香族環可列舉：呋喃環、噻吩環、硒吩環 (selenophene ring)、吡咯環、咪唑環、噁唑環、異噁唑環、噁唑環、異噁唑環、三唑環、硼雜環戊二烯環 (borole)

ring)、磷雜環戊二烯環 (phosphole ring)、矽雜環戊二烯環 (silole ring)、氮雜硼烷環 (azaborine ring)、吡啶環、嘧啶環、三嗪環、吡喃環、吲哚環、異吲哚環、喹啉環、異喹啉環、喹噁啉環、苯并噁唑環、苯并噻唑環、苯并異噁唑環、苯并異噻唑環、苯并呋喃環、苯并噻吩環、苯并吡喃環、苯并咪唑環、苯并硼雜環戊二烯環、苯并磷雜環戊二烯環、苯并矽雜環戊二烯環、苯并氮雜硼烷環、咔唑環、吲哚嗪環、吖啶環、吩嗪環、啡啶環、啡啉環、啡噁嗪環、啡噻嗪環、苯并硒吩環、萘并呋喃環、萘并噁唑環、萘并噻唑環、萘并異噁唑環、萘并咪唑環、萘并硼雜環戊二烯環、萘并磷雜環戊二烯環、萘并矽雜環戊二烯環、萘并氮雜硼烷環、萘并吡喃環、苯并吲哚環、苯并異吲哚環、苯并喹啉環、苯并異喹啉環、苯并喹噁啉環、下述式所表示的環 (式中， R^a 如上述所定義)。

【0099】

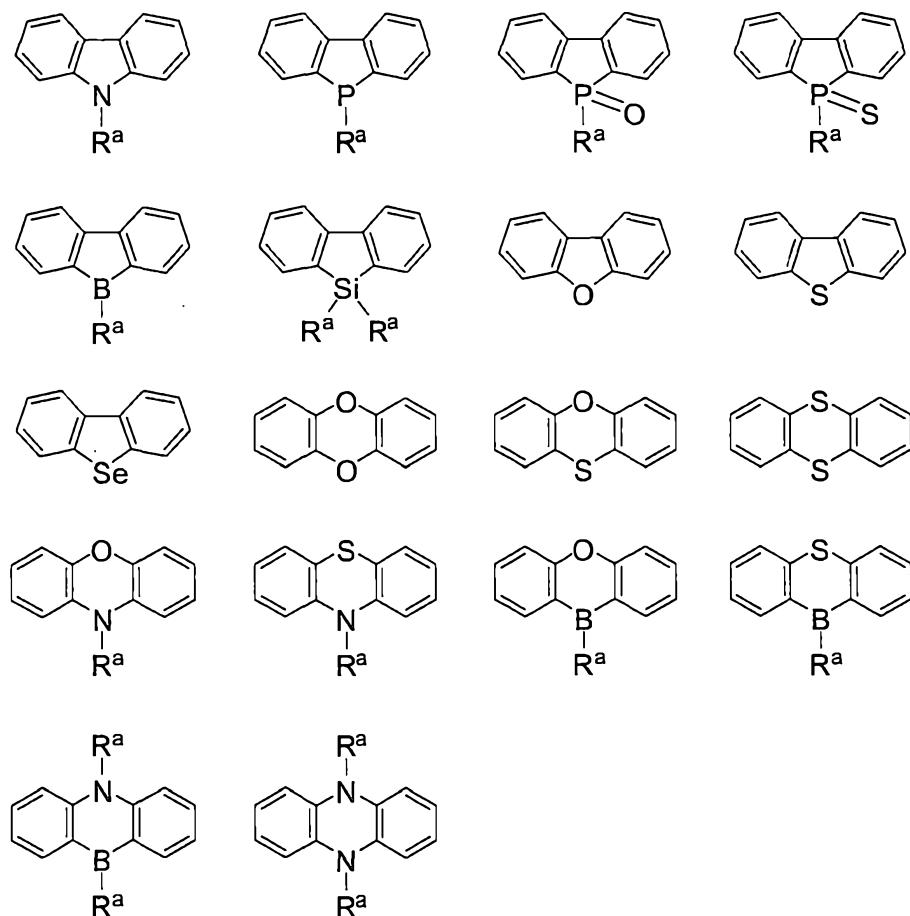


【0100】 可經取代的芳香族環或可經取代的雜芳香族環的取代基個數為 1 個～4 個，較佳為 1 個、2 個或 3 個。可經取代的芳香族環或可經取代的雜芳香族環的取代基可列舉 R 所表示的基團。

【0101】 「5 員環或 6 員環的可具有雜原子的單環式基、二環式基或三環式基」可列舉：苯、萘、薁、聯苯、茀、蒽、苯并二茚、菲、葩、苊、二氫苊、二氫茚、茚、四氫萘、環戊二烯、環己二烯、呋喃、噻吩、硒吩、吡咯、咪唑、噻唑、異噻唑、噁唑、異噁唑、三唑、硼雜環戊二烯、磷雜環戊二烯、矽雜環戊二烯、氮雜硼烷、吡啶、嘧啶、三嗪、吡喃、吲哚、異吲哚、喹啉、異喹啉、噁噁啉、苯并噁唑、苯并噻唑、苯并異噁唑、苯并異噻唑、

苯并呋喃、苯并噻吩、苯并吡喃、苯并咪唑、苯并硼雜環戊二烯、苯并磷雜環戊二烯、苯并矽雜環戊二烯、苯并氮雜硼烷、吲哚嗪、吖啶、吩嗪、啡啶、啡啉、苯并硒吩、萘并呋喃、萘并噁唑、萘并噻唑、萘并異噁唑、萘并咪唑、萘并硼雜環戊二烯、萘并磷雜環戊二烯、萘并矽雜環戊二烯、萘并氮雜硼烷、萘并吡喃、苯并吲哚、苯并異吲哚、苯并喹啉、苯并異喹啉、苯并喹噁啉、下述式所表示的基團（式中，R^a如上述所定義）、或具有X的5員環或6員環的基團。

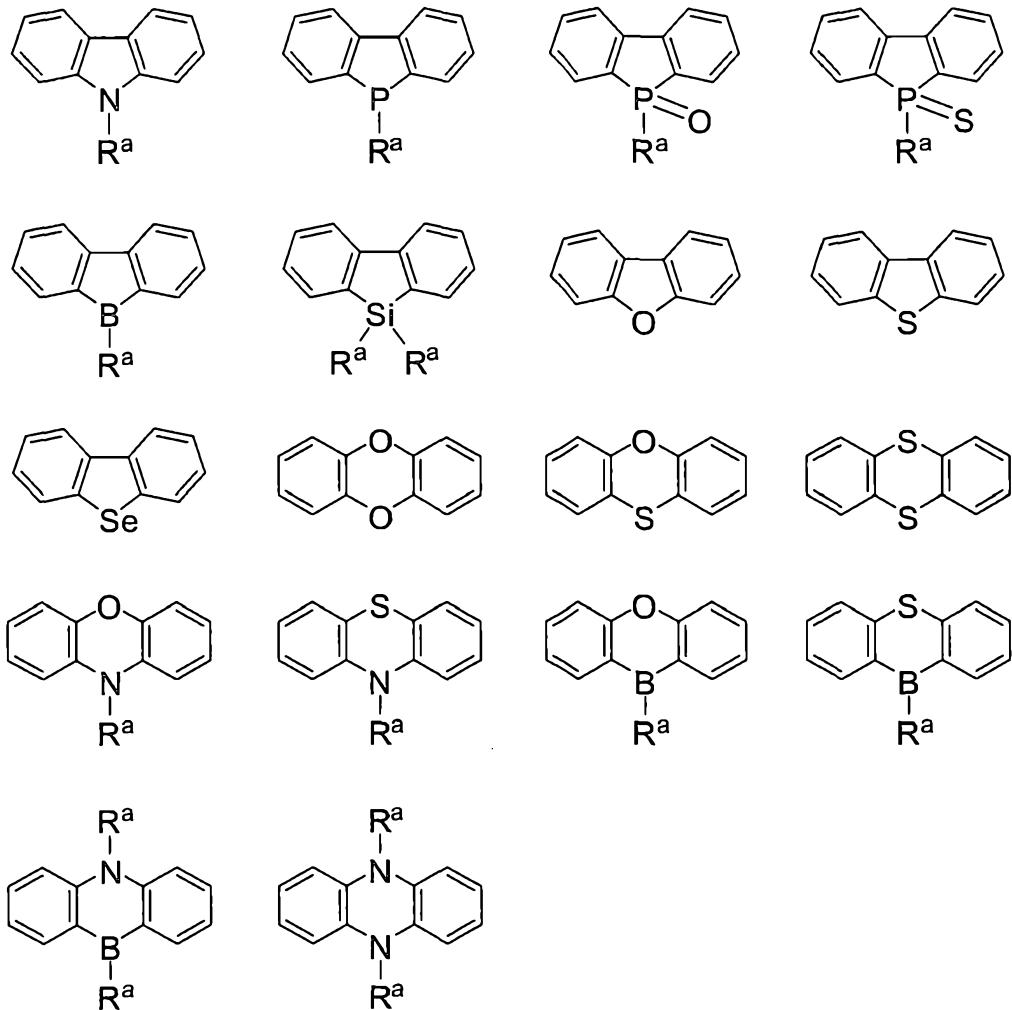
【0102】



【0103】「可具有雜原子的二環式基或三環式基」可列舉：萘、

薁、聯苯、茀、蒽、苯并二茚、菲、葩、苊、二氫苊、二氫茚、茚、四氫萘、吲哚、異吲哚、喹啉、異喹啉、喹噁啉、苯并噁唑、苯并噻唑、苯并異噁唑、苯并異噻唑、苯并呋喃、苯并噻吩、苯并吡喃、苯并咪唑、苯并硼雜環戊二烯、苯并磷雜環戊二烯、苯并矽雜環戊二烯、苯并氮雜硼烷、吲哚嗪、吖啶、吩嗪、啡啶、啡啉、苯并硒吩、萘并呋喃、萘并噁唑、萘并噻唑、萘并異噁唑、萘并咪唑、萘并硼雜環戊二烯、萘并磷雜環戊二烯、萘并矽雜環戊二烯、萘并氮雜硼烷、萘并吡喃、苯并吲哚、苯并異吲哚、苯并喹啉、苯并異喹啉、苯并喹噁啉、下述式所表示的基團（式中， R^a 如上述所定義）。

【0104】



【0105】 於本說明書中，如「C₁₋₂₀烷基羰基」般來規定碳原子數，該碳原子數僅修飾緊隨其後的基團或部分。因此，上述情況下，C₁₋₂₀僅修飾烷基，故「C₁烷基羰基」相當於乙醯基。

【0106】 烷基及烷基部分可為直鏈狀亦可為分支鏈狀。

【0107】 於本說明書，所謂烷基部分，不僅是指可經取代的烷基、C₁₋₂₀烷基磺醯基、C₁₋₂₀烷基磺醯基胺基、C₁₋₂₀烷基羰基胺基及C₁₋₂₀烷基羰基等中的各烷基，還包含單烷基胺基、單-烷基胺磺醯基或二-烷基胺磺醯基、單-烷基胺甲醯基或二-烷基胺甲醯基等的作為取代基的烷基。



【0108】 所謂芳基部分，是指經單芳基或二芳基取代的烯基、芳基乙炔基、芳氧基、單芳基胺基、可經取代的芳基等的芳基。

【0109】 所謂雜芳基部分，是指單雜芳基胺基、經單芳基或雜芳基取代的烯基、雜芳基乙炔基、可經取代的雜芳基等的雜芳基。

【0110】 所謂「鹵素」，是指氟、氯、溴、碘，較佳為氟、氯、溴。

【0111】 所謂「 C_{1-20} 烷基」，可為直鏈狀、分支鏈狀或環狀的任一種，例如可列舉：甲基、乙基、正丙基、異丙基、正丁基、異丁基、第三丁基、正戊基、異戊基、己基、庚基、辛基、壬基、癸基、十一烷基、十二烷基、十四烷基、十六烷基、十八烷基、二十烷基等 C_{1-20} 烷基，較佳可列舉 C_{1-10} 烷基，更佳可列舉 C_{1-6} 烷基。

【0112】 「 C_{3-8} 環烷基」可列舉：環丙基、環丁基、環戊基、環己基及環庚基、環辛基。

【0113】 所謂「 C_{2-20} 烯基」，可為直鏈狀、分支鏈狀或環狀的任一種，是指具有至少一個雙鍵的基團，例如可列舉：乙烯基、烯丙基、1-丙烯基、2-甲基-2-丙烯基、異丙烯基、1-丁烯基、2-丁烯基或 3-丁烯基、2-戊烯基、3-戊烯基或 4-戊烯基、2-甲基-2-丁烯基、3-甲基-2-丁烯基、5-己烯基、1-環戊烯基、1-環己烯基、3-甲基-3-丁烯基，較佳可列舉 C_{2-12} 烯基，更佳可列舉 C_{2-6} 烯基。

【0114】 所謂「 C_{2-20} 炔基」，可為直鏈狀、分支鏈狀或環狀的任一種，是指具有至少一個三鍵的基團，例如可列舉：乙炔基、1-

丙炔基或 2-丙炔基、1-丁炔基、2-丁炔基或 3-丁炔基、1-甲基-2-丙炔基、1-戊炔基、1-己炔基、1-庚炔基、1-辛炔基、1-壬炔基、1-癸炔基、1-十一炔基、1-十二炔基，較佳可列舉 C_{2-10} 炔基，更佳可列舉 C_{2-6} 炔基。

【0115】 所謂「羥基 C_{1-20} 烷基」，可為直鏈狀、分支鏈狀的任一種，例如可列舉：羥基甲基、羥基乙基、羥基正丙基、羥基異丙基、羥基正丁基、羥基異丁基、羥基第三丁基、羥基正戊基、羥基異戊基、羥基己基、羥基庚基、羥基辛基、羥基壬基、羥基癸基、羥基十一烷基、羥基十二烷基、羥基十四烷基、羥基十六烷基、羥基十八烷基、羥基二十烷基等羥基 C_{1-20} 烷基，較佳可列舉羥基 C_{1-10} 烷基，更佳可列舉羥基 C_{1-6} 烷基。

【0116】 所謂「 C_{1-20} 烷氧基」，是指直鏈狀、分支鏈狀的任一種，例如可列舉：甲氧基、乙氧基、丙氧基、異丙氧基、丁氧基、異丁氧基、第三丁氧基、戊氧基、異戊氧基、己氧基、庚氧基、辛氧基、壬氧基、癸氧基、十一烷氧基、十二烷氧基、十四烷氧基、十六烷氧基、十八烷氧基、二十烷氧基等 C_{1-20} 烷氧基，較佳可列舉 C_{1-10} 烷氧基，更佳可列舉 C_{1-6} 烷氧基。

【0117】 三氟乙氧基較佳為 $CF_3CH_2O^-$ 。

【0118】 所謂「 C_{2-12} 全氟烷基」，可為直鏈狀、分支鏈狀的任一種，例如可列舉：全氟乙基、全氟正丙基、全氟異丙基、全氟正丁基、全氟異丁基、全氟第三丁基、全氟正戊基、全氟異戊基、全氟己基、全氟庚基、全氟辛基、全氟壬基、全氟癸基、全氟十

一烷基等 C_{2-12} 全氟烷基，較佳可列舉 C_{2-10} 全氟烷基，更佳可列舉 C_{2-6} 全氟烷基。

【0119】 所謂「 C_{2-12} 全氟烷氧基」，可為直鏈狀、分支鏈狀的任一種，例如可列舉：全氟乙氧基、全氟正丙氧基、全氟異丙氧基、全氟正丁氧基、全氟異丁氧基、全氟第三丁氧基、全氟正戊氧基、全氟異戊氧基、全氟己氧基、全氟庚氧基、全氟辛氧基、全氟壬氧基、全氟癸氧基、全氟十一烷氧基等 C_{2-12} 全氟烷氧基，較佳可列舉 C_{2-10} 全氟烷氧基，更佳可列舉 C_{2-6} 全氟烷氧基。

【0120】 所謂單烷基胺基、單烷基胺甲醯基或二烷基胺甲醯基或者單烷基胺磺醯基或二烷基胺磺醯基中的「單烷基」，是指胺基、胺甲醯基或胺磺醯基的氮原子上鍵結的 1 個氫原子經 C_{1-20} 烷基所取代，所謂「二烷基」，是指胺基、胺甲醯基或胺磺醯基的氮原子上鍵結的 2 個氫原子經相同或不同的 C_{1-20} 烷基所取代，或經 3 員～8 員、較佳為 5 員或 6 員的含氮環式基所取代。所謂含氮環式基，可列舉嗎啉基、1-吡咯啶基、哌啶基及 4-甲基-1-哌嗪基。

【0121】 單烷基胺基可列舉：甲基胺基、乙基胺基、正丙基胺基、異丙基胺基、正丁基胺基、異丁基胺基、第三丁基胺基、正戊基胺基、異戊基胺基、己基胺基等經 C_{1-20} 烷基、較佳為 C_{1-10} 烷基，更佳為 C_{1-6} 烷基進行單取代而成的胺基。

【0122】 單烷基胺甲醯基可列舉：甲基胺甲醯基、乙基胺甲醯基、正丙基胺甲醯基、異丙基胺甲醯基、正丁基胺甲醯基、異丁基胺甲醯基、第三丁基胺甲醯基、正戊基胺甲醯基、異戊基胺甲

醯基、己基胺甲醯基等經 C₁₋₂₀ 烷基、較佳為 C₁₋₁₀ 烷基、更佳為 C₁₋₆ 烷基進行單取代而成的胺甲醯基。

【0123】 二烷基胺甲醯基可列舉：二甲基胺甲醯基、二乙基胺甲醯基、二正丙基胺甲醯基、二異丙基胺甲醯基、二正丁基胺甲醯基、二異丁基胺甲醯基、二-第三丁基胺甲醯基、二正戊基胺甲醯基、二異戊基胺甲醯基、二己基胺甲醯基等經 C₁₋₂₀ 烷基、較佳為 C₁₋₁₀ 烷基、更佳為 C₁₋₆ 烷基進行二取代而成的胺甲醯基。

【0124】 單烷基胺礦醯基可列舉：甲基胺礦醯基、乙基胺礦醯基、正丙基胺礦醯基、異丙基胺礦醯基、正丁基胺礦醯基、異丁基胺礦醯基、第三丁基胺礦醯基、正戊基胺礦醯基、異戊基胺礦醯基、己基胺礦醯基等經 C₁₋₂₀ 烷基、較佳為 C₁₋₁₀ 烷基、更佳為 C₁₋₆ 烷基進行單取代而成的胺礦醯基。

【0125】 二烷基胺礦醯基可列舉：二甲基胺礦醯基、二乙基胺礦醯基、二正丙基胺礦醯基、二異丙基胺礦醯基、二正丁基胺礦醯基、二異丁基胺礦醯基、二-第三丁基胺礦醯基、二正戊基胺礦醯基、二異戊基胺礦醯基、二己基胺礦醯基等經 C₁₋₂₀ 烷基、較佳為 C₁₋₁₀ 烷基、更佳為 C₁₋₆ 烷基進行二取代而成的胺礦醯基。

【0126】 所謂「芳基」，是指包含 5 賁或 6 賁的芳香族烴環的單環或多環系的基團，具體例可列舉：苯基、(1-、2-)萘基、茀基、蒽基、(2-、3-、4-)聯苯基、四氫萘基、2,3-二氫-1,4-二氧雜萘基、聯三苯基（間聯三苯-2'-基、間聯三苯-4'-基、間聯三苯-5'-基、鄰聯三苯-3'-基、鄰聯三苯-4'-基、對聯三苯-2'-基、間聯三苯-2-基、

間聯三苯-3-基、間聯三苯-4-基、鄰聯三苯-2-基、鄰聯三苯-3-基、鄰聯三苯-4-基、對聯三苯-2-基、對聯三苯-3-基、對聯三苯-4-基)、二氫茚基、茚基、苯并二茚基、茈基、稠四苯基、茈基、茚基、苊基、二氫苊基及菲基，另外，如上述所定義，該些基團亦可經 1 個～5 個基團所取代。

【0127】 所謂「雜芳基」，是指含有選自 N、O、S、Se 及 Si 中的 1 個～3 個雜原子的包含 5 頁或 6 頁的芳香族環的單環或多環系的基團，於為多環系的情形時，只要至少一個環為芳香族環即可。具體例可列舉：呋喃基、噻吩基、硒吩基、吡咯基、咪唑基、吡唑基、噁唑基、噻唑基、異噁唑基、異噻唑基、吡啶、吡嗪基、嘧啶基、噠嗪基、吲哚基、喹啉基、異喹啉基、咔唑基、苯并二氫吡喃基 (chromanyl)、矽雜環戊二烯、苯并[b]矽雜環戊二烯、苯并[b]呋喃基、苯并[b]噻吩基、苯并[b]硒吩、苯并吲哚基、苯并喹啉基、苯并異喹啉基、苯并咔唑基、苯并苯并二氫吡喃基、苯并咪唑基、苯并吡唑基、苯并噁唑基、苯并噻唑基、苯并異噁唑基、苯并異噻唑基、二苯并[b,d]呋喃基、二苯并[b,d]噻吩基、噻吩並[3,4-b]噻吩基、噻吩並[3,2-b]噻吩基及氟[3,2-b]呋喃基，另外，如上述所定義，該些基團亦可經 1 個～5 個基團所取代。

【0128】 單芳基胺基可列舉芳基為上述所定義的基團的單芳基胺基。

【0129】 二芳基胺基可列舉芳基為上述所定義的基團的二芳基胺基。

【0130】 單雜芳基胺基可列舉雜芳基爲上述所定義的基團的單雜芳基胺基。

【0131】 所謂「 C_{1-20} 烷基礦醯基」，可爲直鏈狀、分支鏈狀或環狀的任一種，例如可列舉：甲基礦醯基、乙基礦醯基、正丙基礦醯基、異丙基礦醯基、正丁基礦醯基、異丁基礦醯基、第三丁基礦醯基、正戊基礦醯基、異戊基礦醯基、己基礦醯基、庚基礦醯基、辛基礦醯基、壬基礦醯基、癸基礦醯基、十一烷基礦醯基、十二烷基礦醯基、十四烷基礦醯基、十六烷基礦醯基、十八烷基礦醯基、二十烷基礦醯基等 C_{1-20} 烷基礦醯基，較佳可列舉 C_{1-10} 烷基礦醯基，更佳可列舉 C_{1-6} 烷基礦醯基。

【0132】 所謂「 C_{1-20} 烷基羰基胺基」，可爲直鏈狀、分支鏈狀或環狀的任一種，例如可列舉：甲基羰基胺基、乙基羰基胺基、正丙基羰基胺基、異丙基羰基胺基、正丁基羰基胺基、異丁基羰基胺基、第三丁基羰基胺基、正戊基羰基胺基、異戊基羰基胺基、己基羰基胺基、庚基羰基胺基、辛基羰基胺基、壬基羰基胺基、癸基羰基胺基、十一烷基羰基胺基、十二烷基羰基胺基、十四烷基羰基胺基、十六烷基羰基胺基、十八烷基羰基胺基、二十烷基羰基胺基等 C_{1-20} 烷基羰基胺基，較佳可列舉 C_{1-10} 烷基羰基胺基，更佳可列舉 C_{1-6} 烷基羰基胺基。

【0133】 C_{1-20} 烷氧基羰基胺基（例如 C_{1-12} 烷氧基羰基胺基、 C_{1-6} 烷氧基羰基胺基）可列舉：甲氧基羰基胺基、乙氧基羰基胺基、丙氧基羰基胺基、異丙氧基羰基胺基、丁氧基羰基胺基、異丁氧

基羰基胺基、第三丁氧基羰基胺基、戊氧基羰基胺基、異戊氧基羰基胺基及己氧基羰基胺基。

【0134】 C_{1-20} 烷基磺醯基胺基（例如 C_{1-10} 烷基磺醯基胺基、 C_{1-6} 烷基磺醯基胺基）可列舉：甲基磺醯基胺基、乙基磺醯基胺基、正丙基磺醯基胺基、異丙基磺醯基胺基、正丁基磺醯基胺基、異丁基磺醯基胺基、第三丁基磺醯基胺基、正戊基磺醯基胺基、異戊基磺醯基胺基、己基磺醯基胺基、辛基磺醯基胺基、壬基磺醯基胺基、癸基磺醯基胺基、十一烷基磺醯基胺基、十二烷基磺醯基胺基、十四烷基磺醯基胺基、十六烷基磺醯基胺基、十八烷基磺醯基胺基、二十烷基磺醯基胺基等 C_{1-12} 烷基磺醯基胺基，較佳可列舉 C_{1-10} 烷基磺醯基胺基，更佳可列舉 C_{1-6} 烷基磺醯基胺基。

【0135】 C_{1-20} 烷氧基羰基（例如 C_{1-10} 烷氧基羰基、 C_{1-6} 烷氧基羰基）可列舉：甲氧基羰基、乙氧基羰基、丙氧基羰基、異丙氧基羰基、丁氧基羰基、異丁氧基羰基、第三丁氧基羰基、戊氧基羰基、異戊氧基羰基及己氧基羰基。

【0136】 C_{1-20} 烷基羰基（例如 C_{1-10} 烷基羰基、 C_{1-6} 烷基羰基）可列舉：乙醯基、丙醯基、丁醯基、戊基羰基、己基羰基、庚基羰基、辛基羰基、壬基羰基、癸基羰基。

【0137】 經單芳基取代的烯基（例如經單芳基取代的 C_{2-12} 烯基、經單芳基取代的 C_{2-6} 烯基）可列舉芳基為上述所定義的基團的經單芳基取代的烯基、例如苯乙烯基。

【0138】 經二芳基取代的烯基（例如經二芳基取代的 C_{2-12} 烯基、

經二芳基取代的 C_{2-6} 烯基) 可列舉芳基為上述所定義的基團的經二芳基取代的烯基、例如二苯基乙烯基。

【0139】 經單雜芳基取代的烯基(例如經單雜芳基取代的 C_{2-12} 烯基、經單雜芳基取代的 C_{2-6} 烯基) 可列舉雜芳基為上述所定義的基團的經單雜芳基取代的烯基、例如噁吩基乙烯基。

【0140】 經二雜芳基取代的烯基(例如經二雜芳基取代的 C_{2-12} 烯基、經二雜芳基取代的 C_{2-6} 烯基) 可列舉雜芳基為上述所定義的基團的經二雜芳基取代的烯基、例如二噁吩基乙烯基。

【0141】 芳基乙炔基可列舉芳基為上述所定義的基團的芳基乙炔基。

【0142】 雜芳基乙炔基可列舉雜芳基為上述所定義的基團的雜芳基乙炔基。

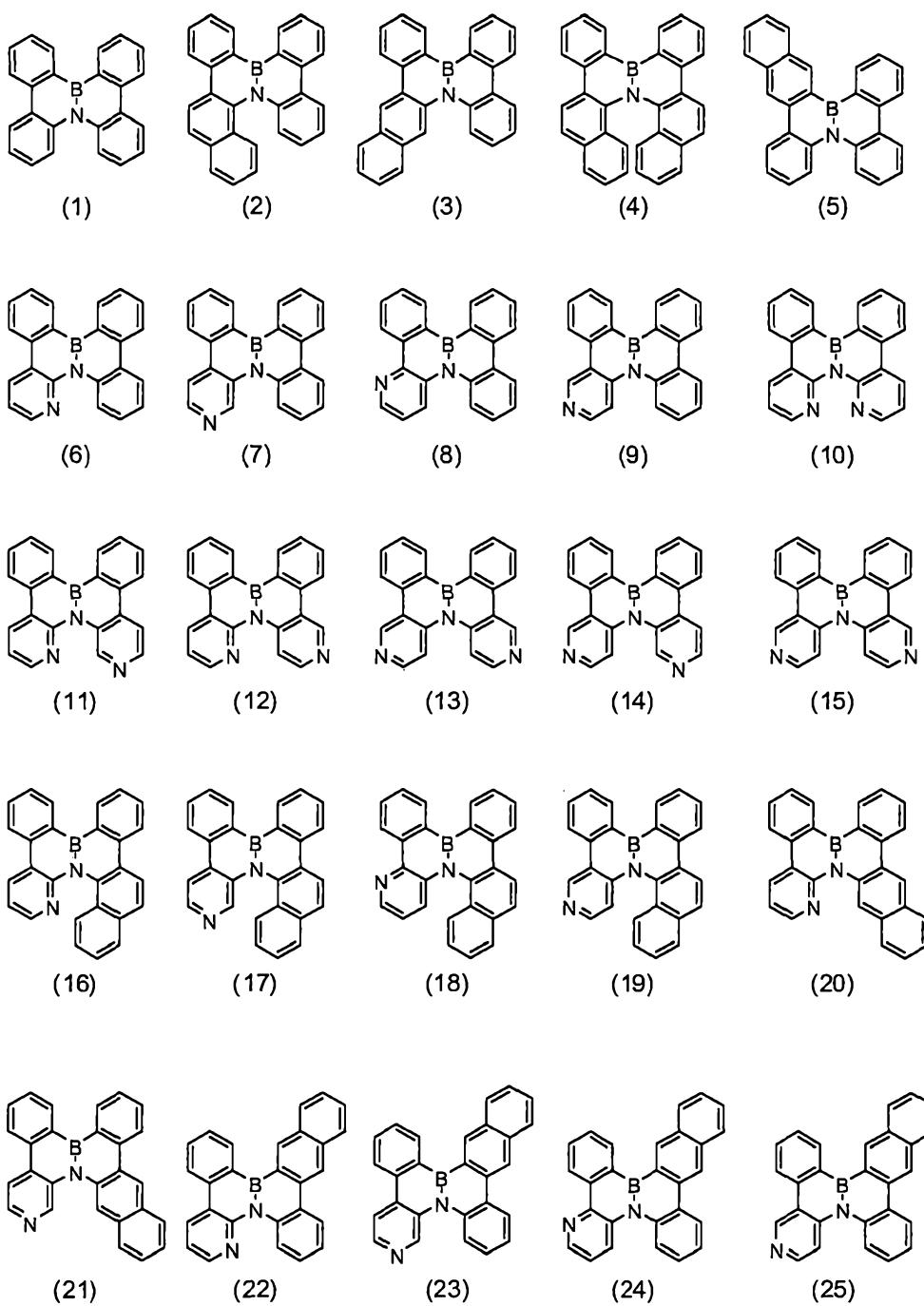
【0143】 芳氯基可列舉芳基為上述所定義的基團的芳氯基。

【0144】 R^a 表示可經取代的烷基、可經取代的芳基或可經取代的雜芳基。可經取代的烷基的「烷基」可列舉上述 C_{1-20} 烷基，可經取代的芳基的「芳基」可列舉上述芳基。可經取代的雜芳基的「雜芳基」可列舉上述雜芳基。

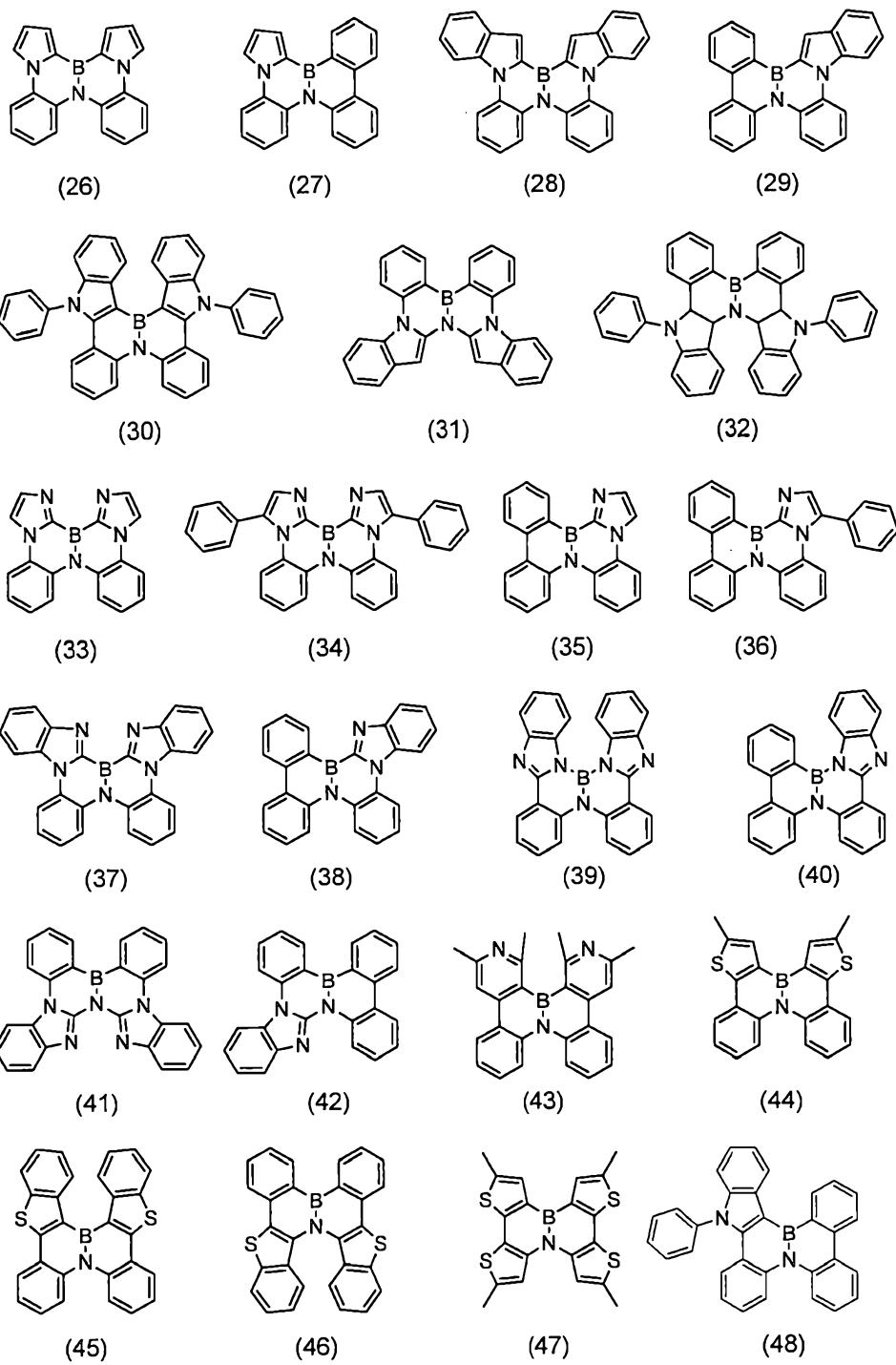
【0145】 本發明的多環芳香族化合物的更具體的例子例如可列舉下述式(1)~式(709)所表示的化合物。

【0146】

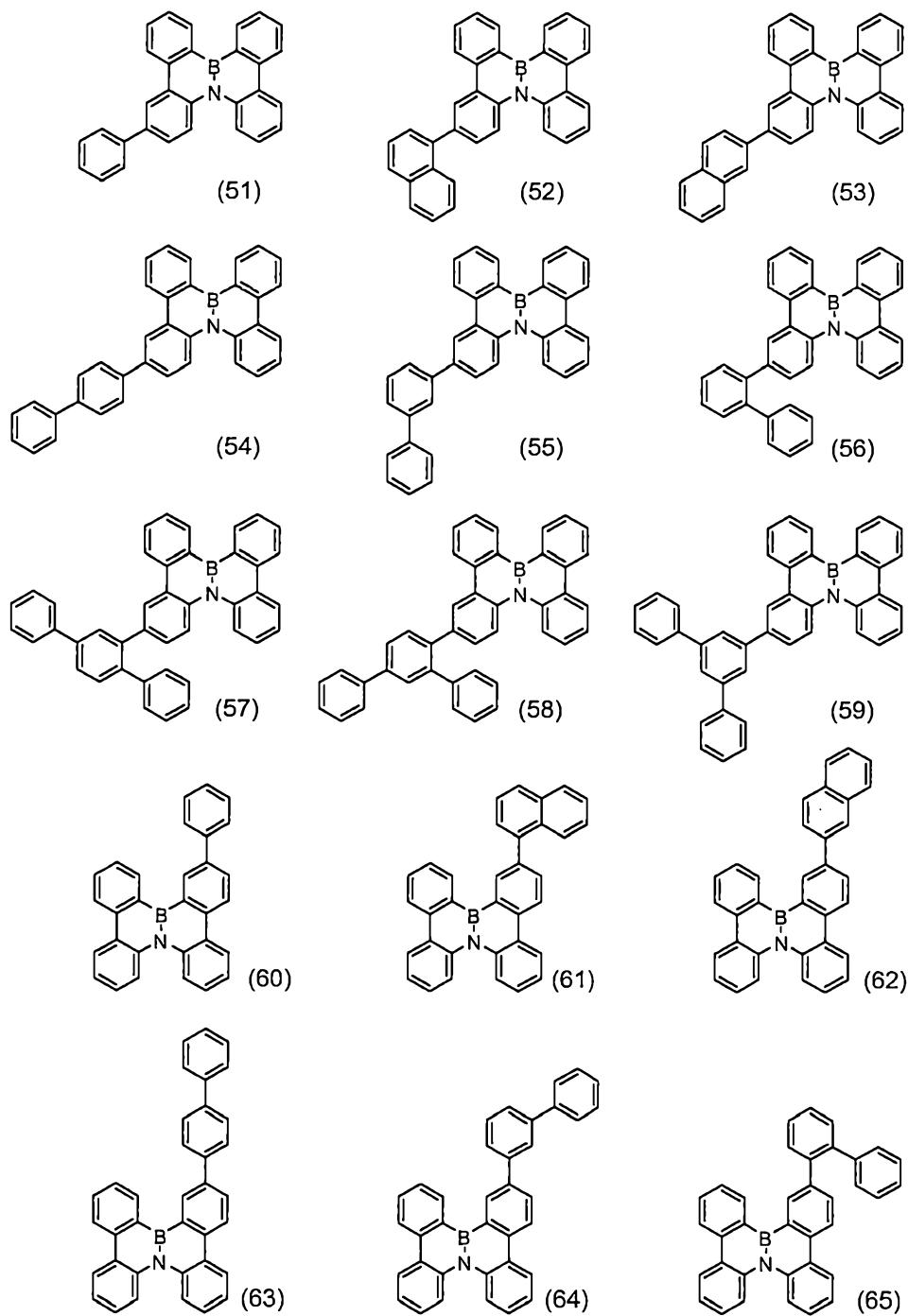




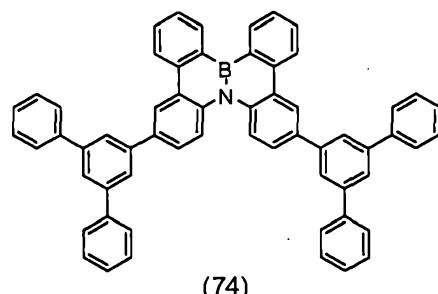
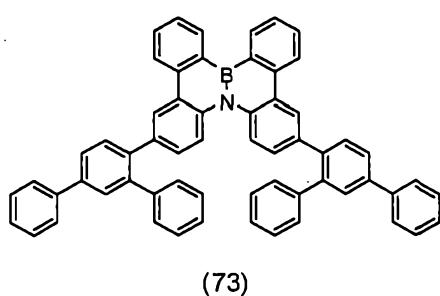
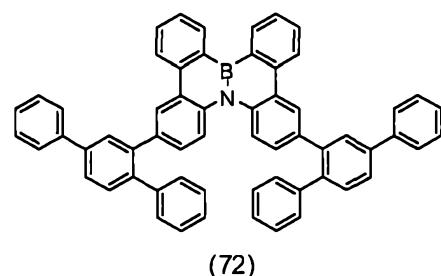
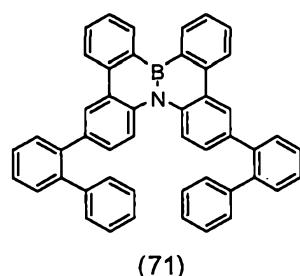
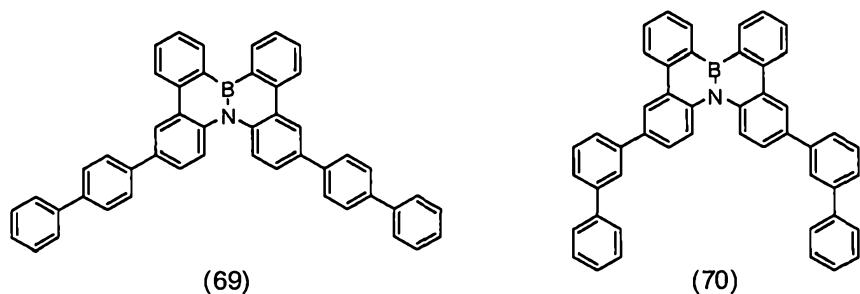
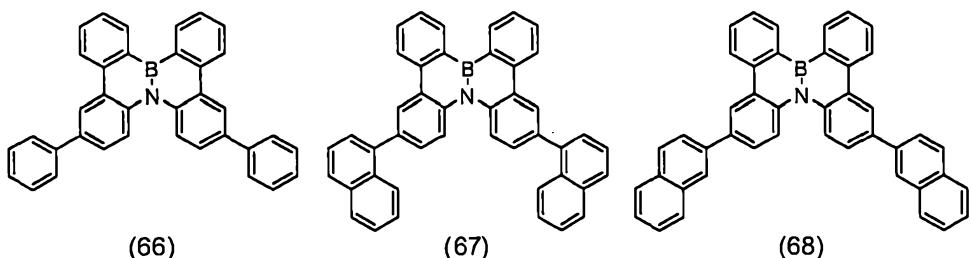
[0147]



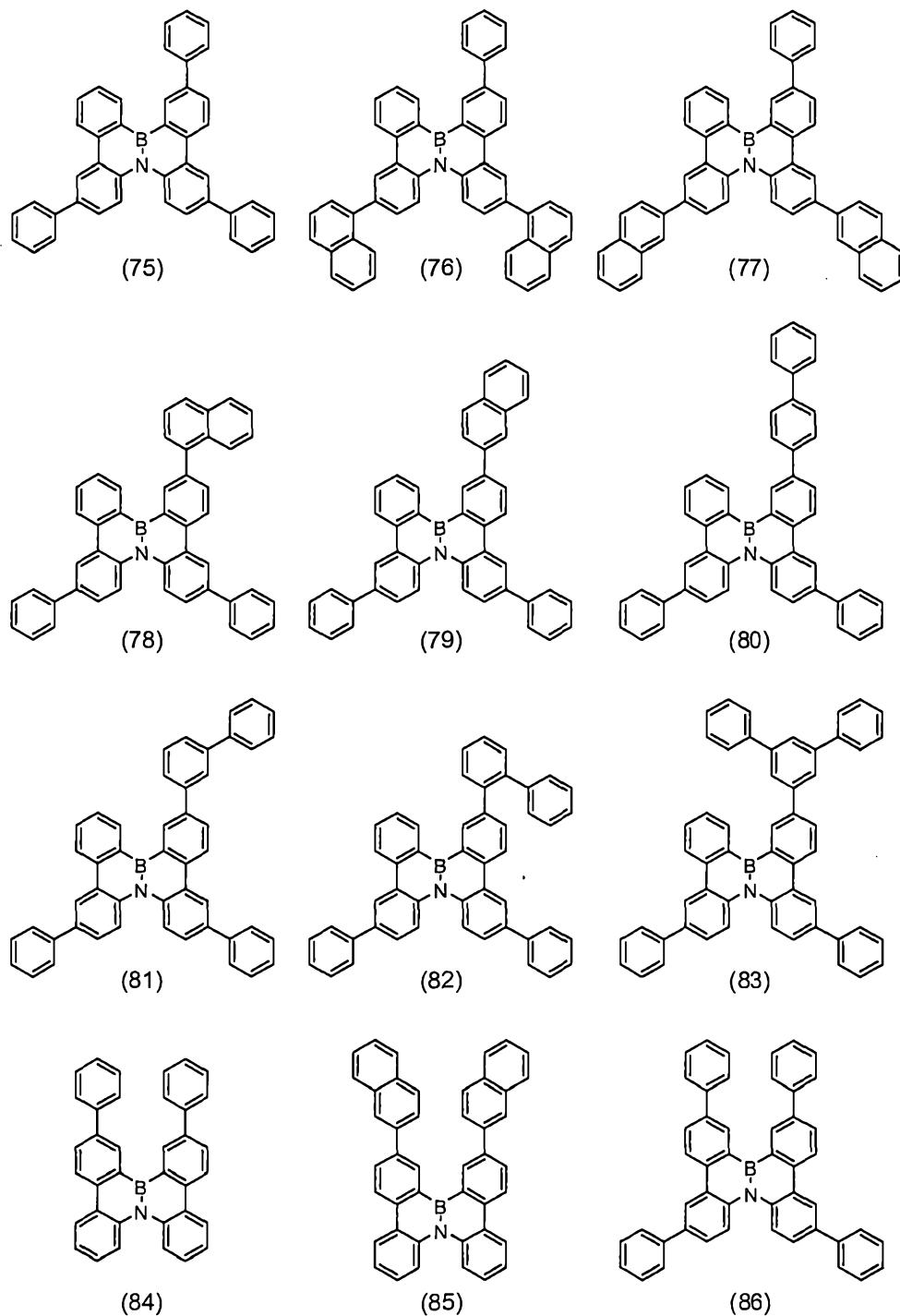
【0148】



【0149】

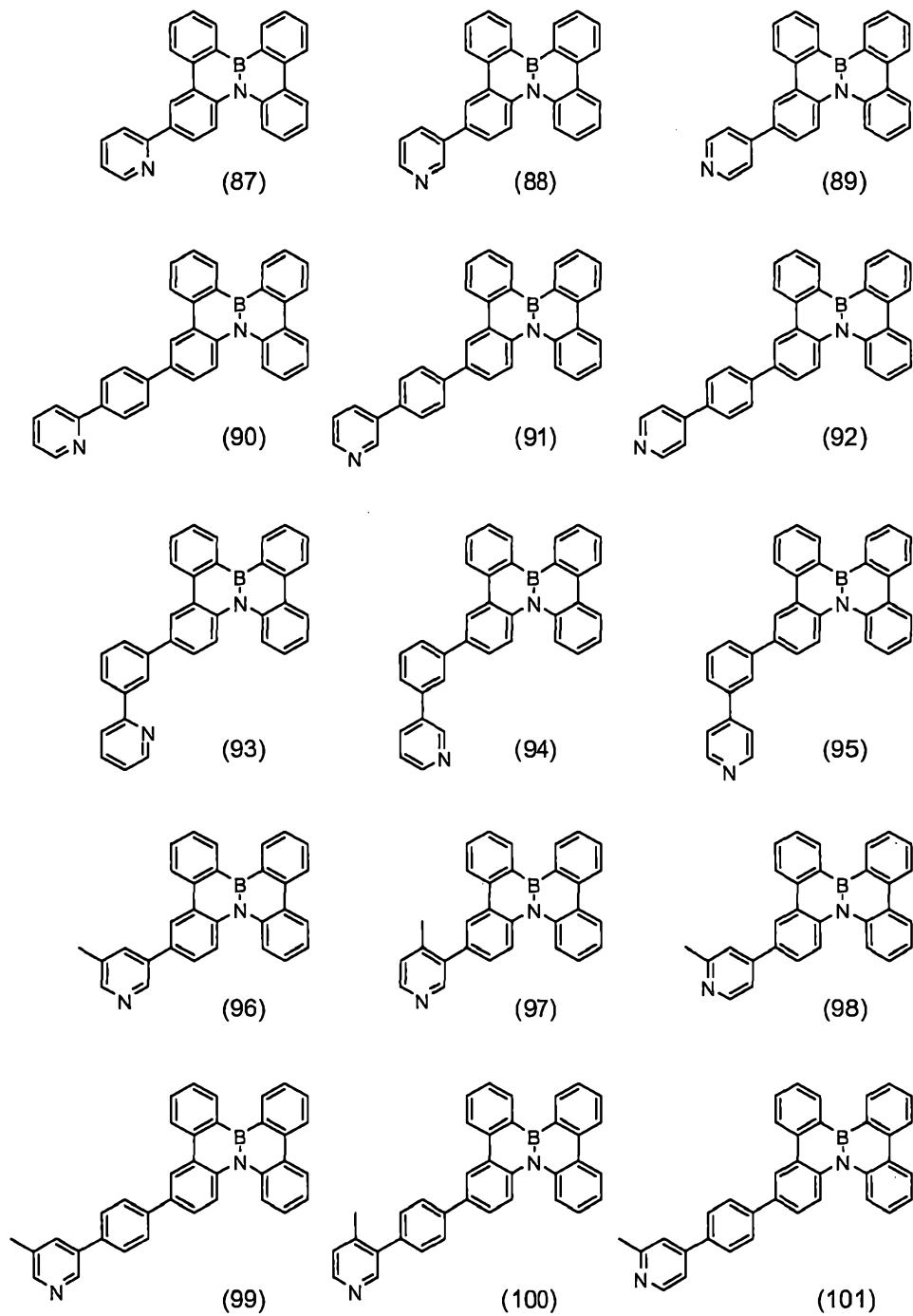


【0150】

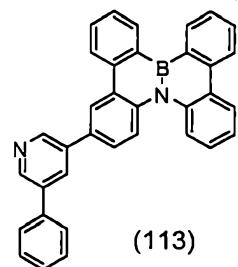
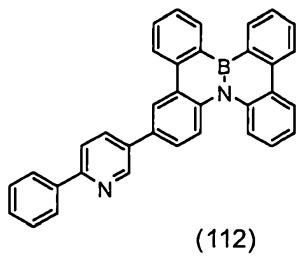
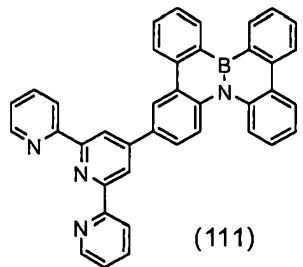
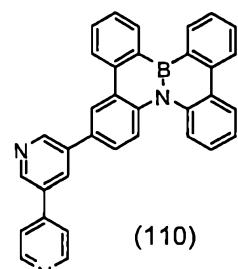
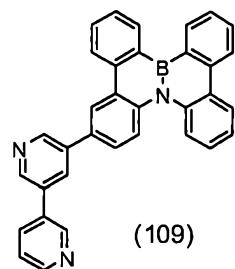
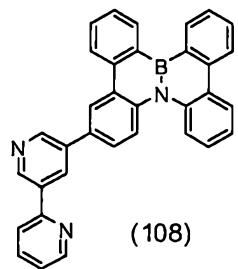
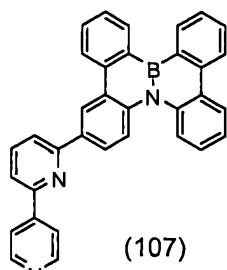
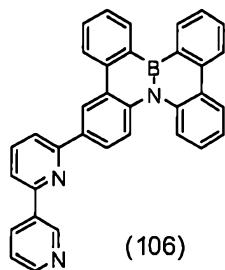
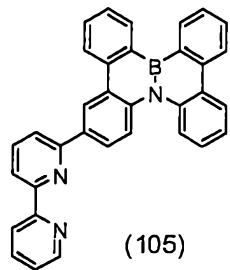
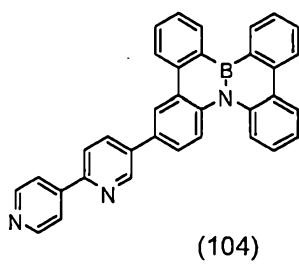
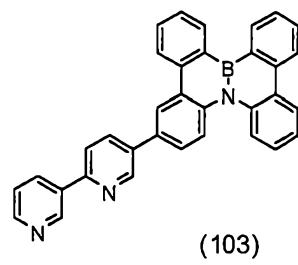
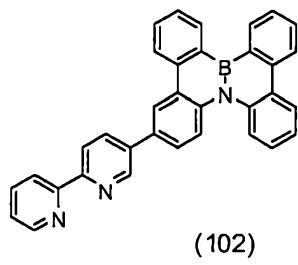


【0151】

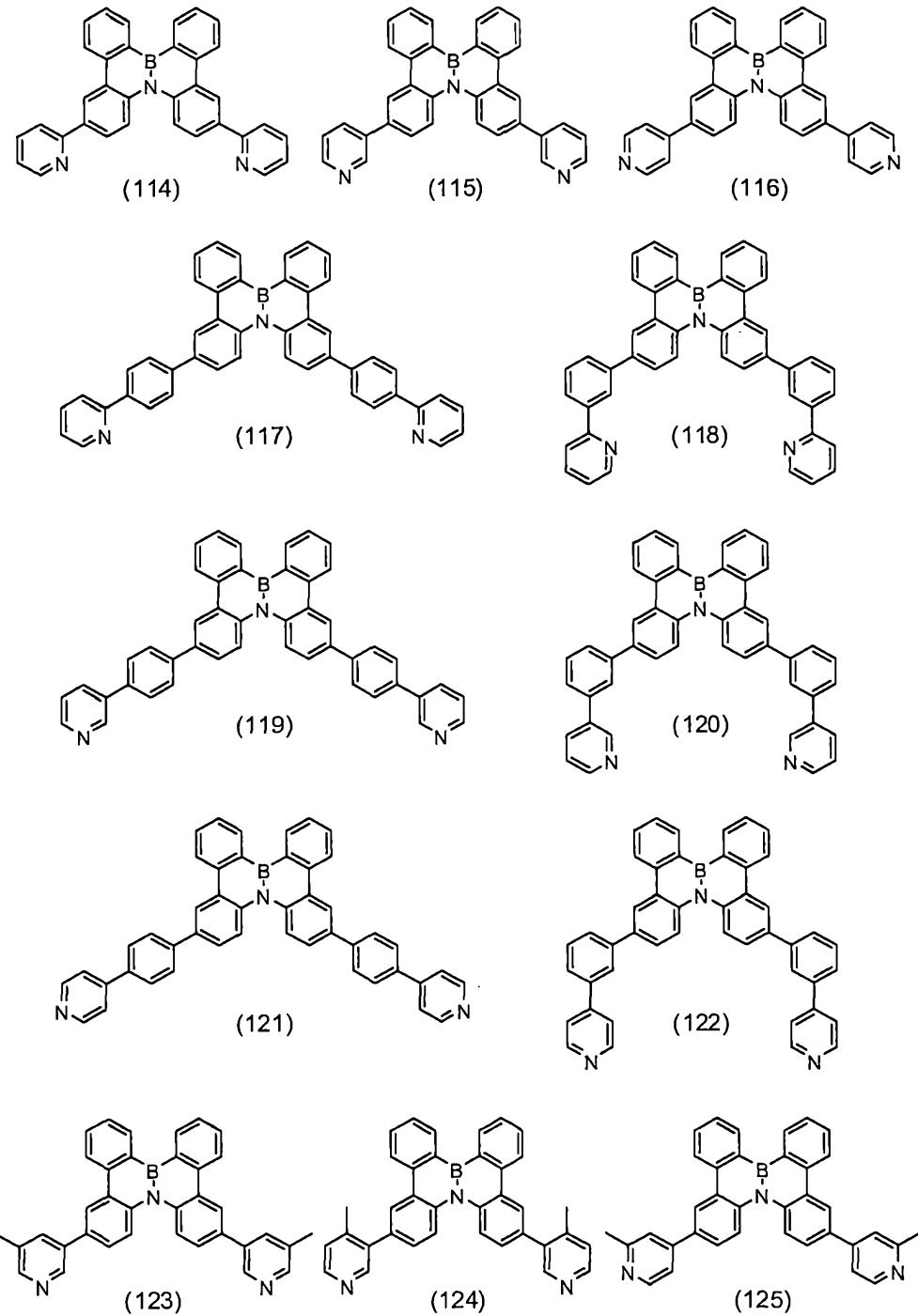




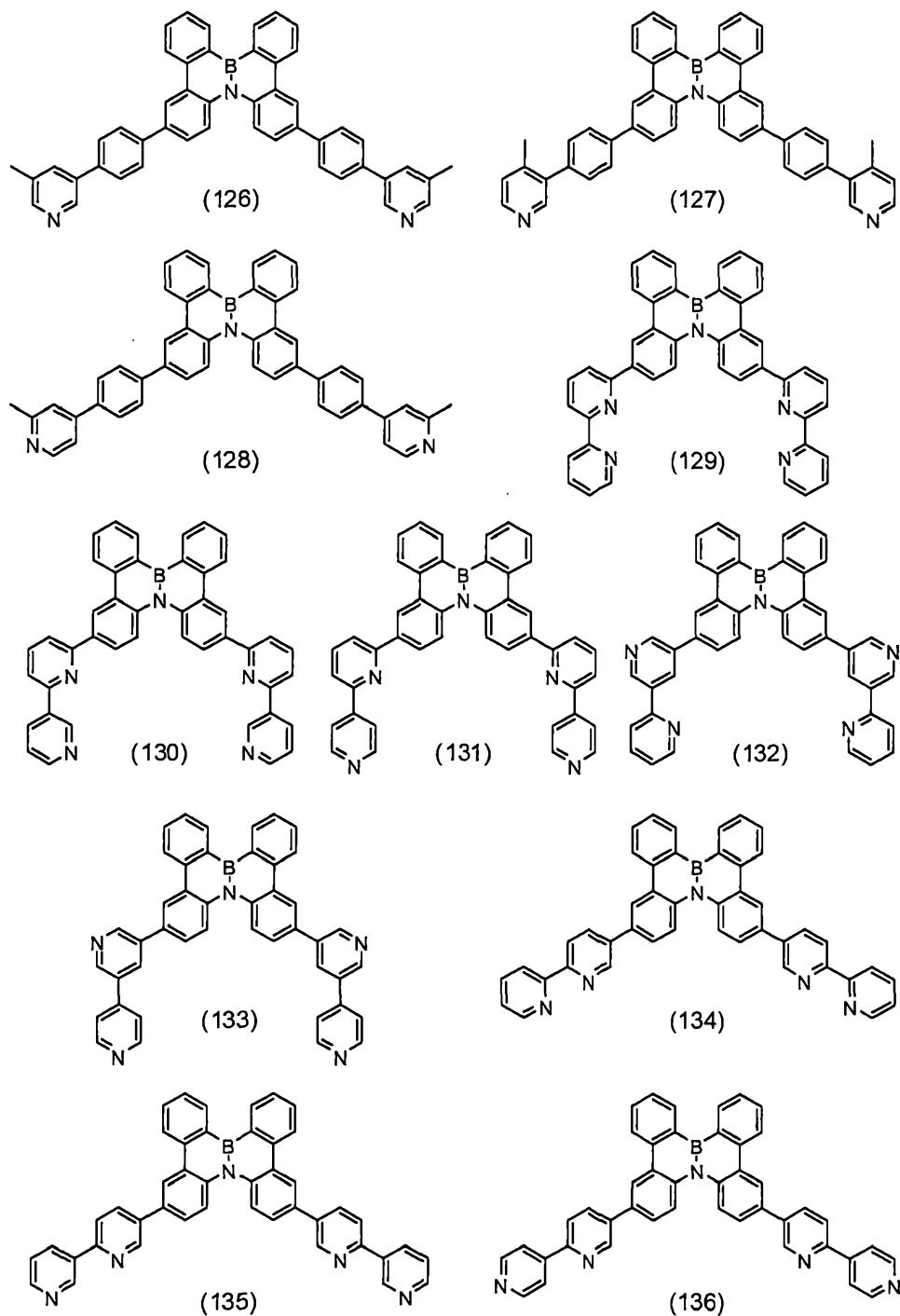
【0152】



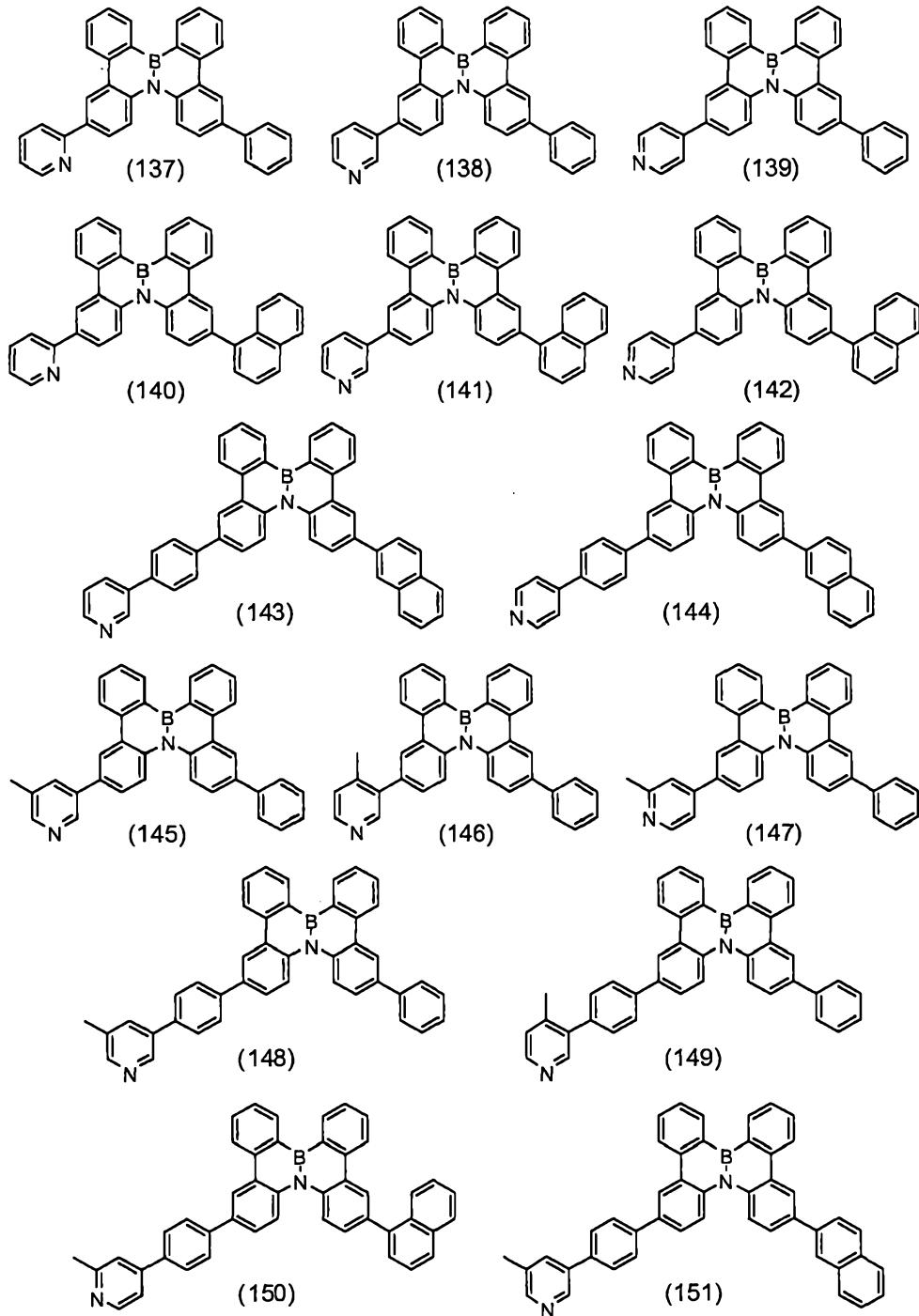
【0153】



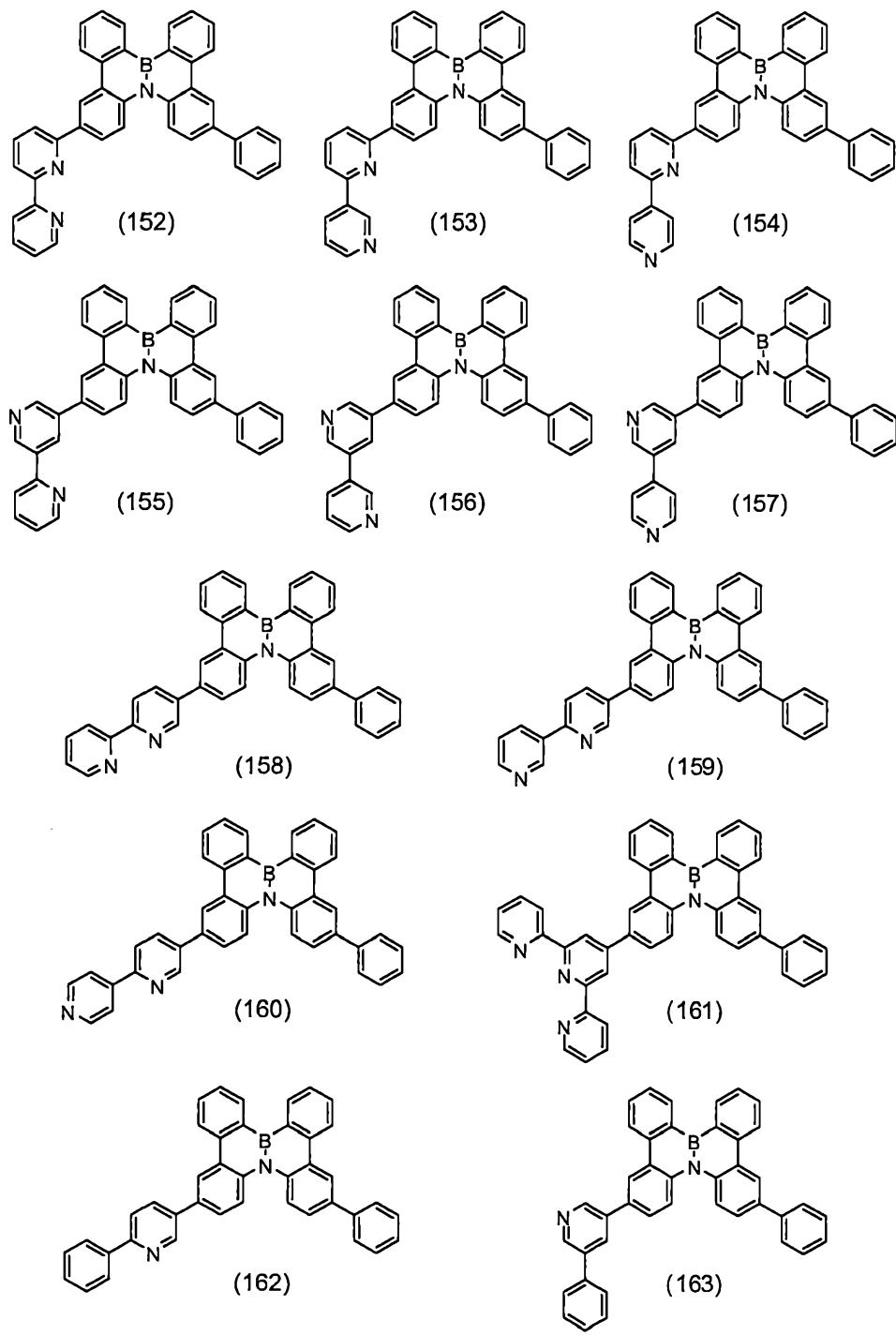
【0154】



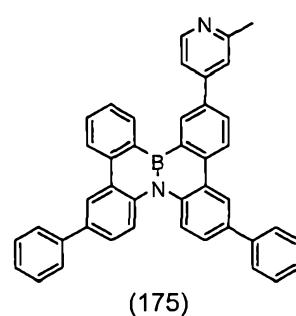
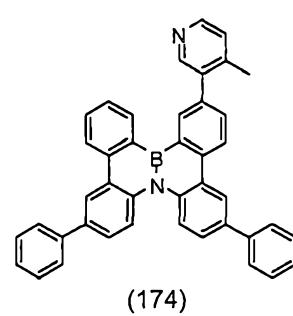
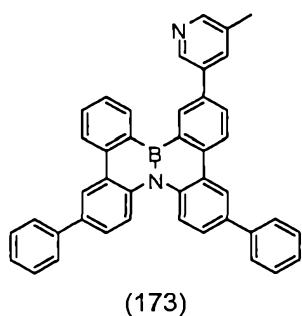
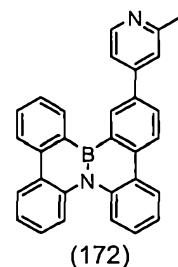
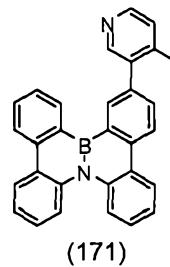
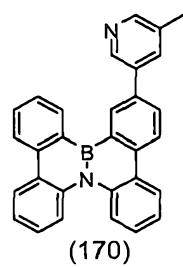
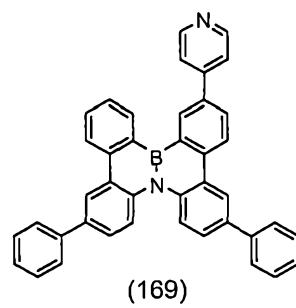
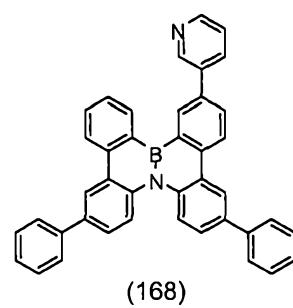
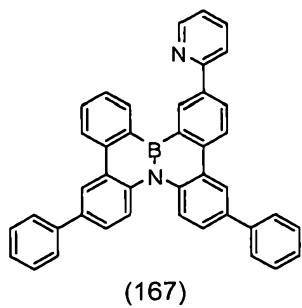
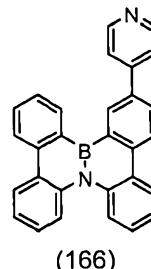
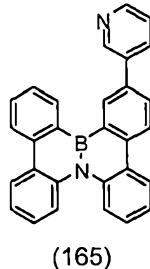
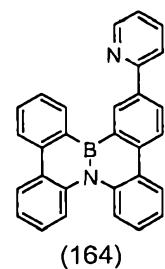
【0155】



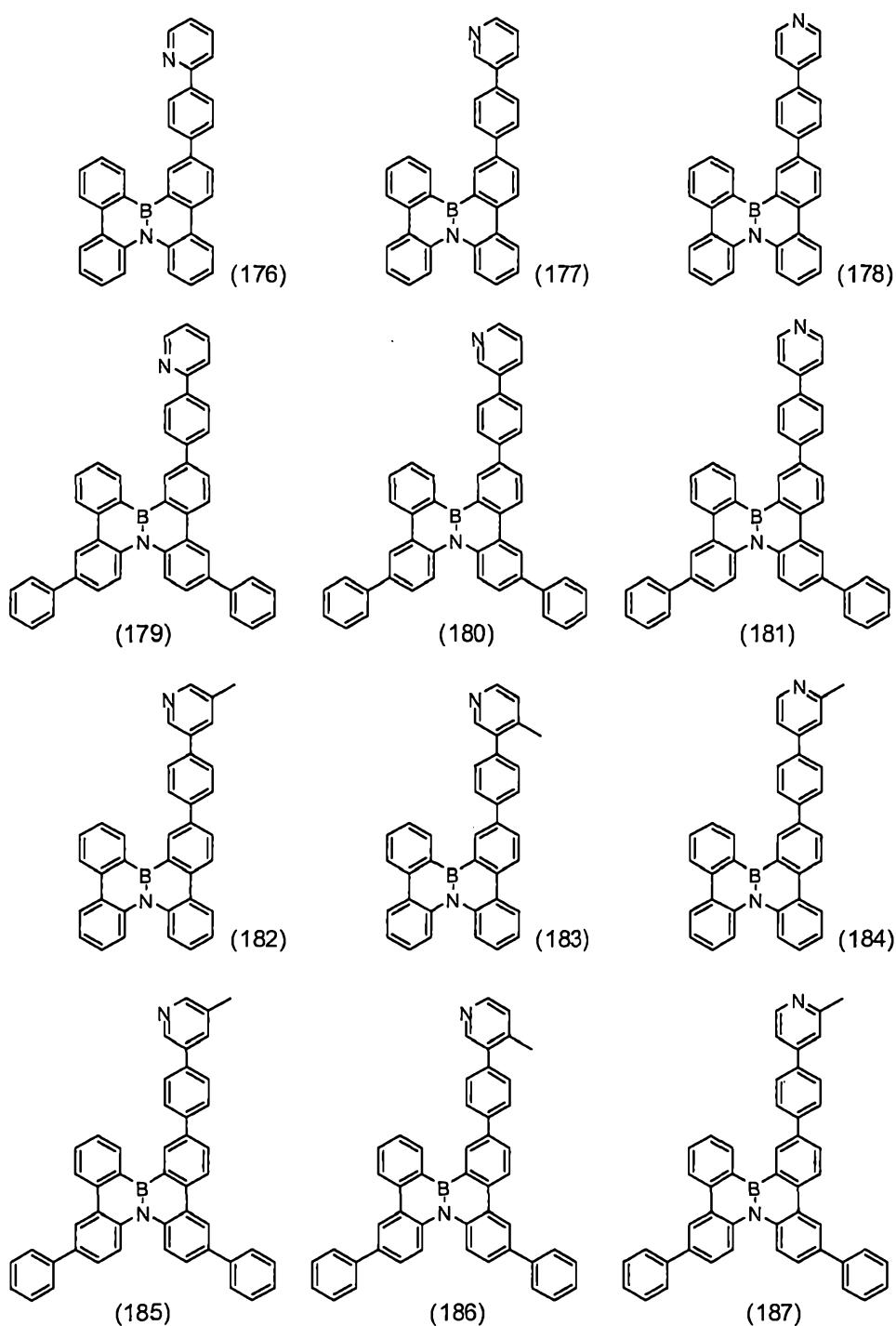
【0156】



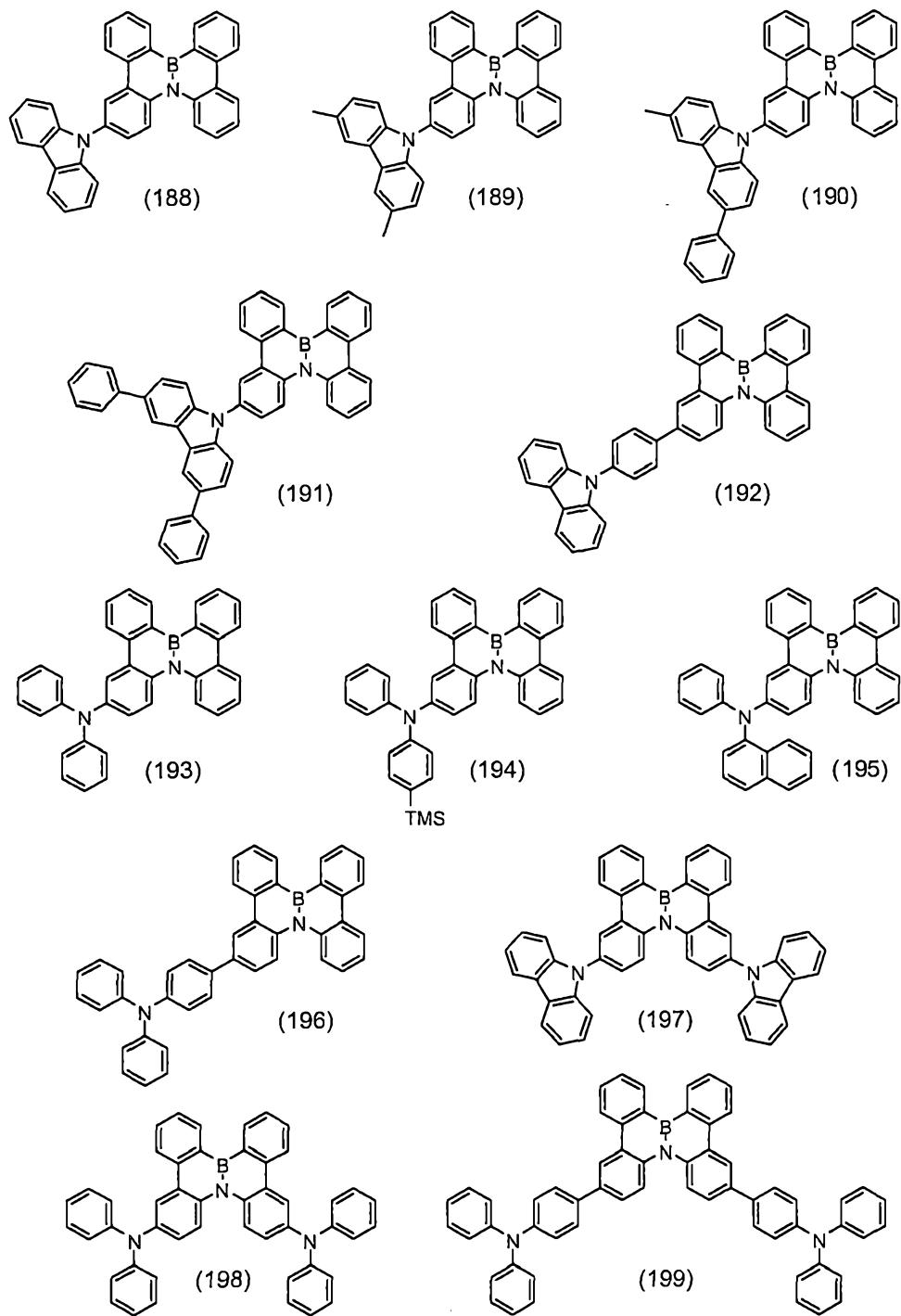
【0157】



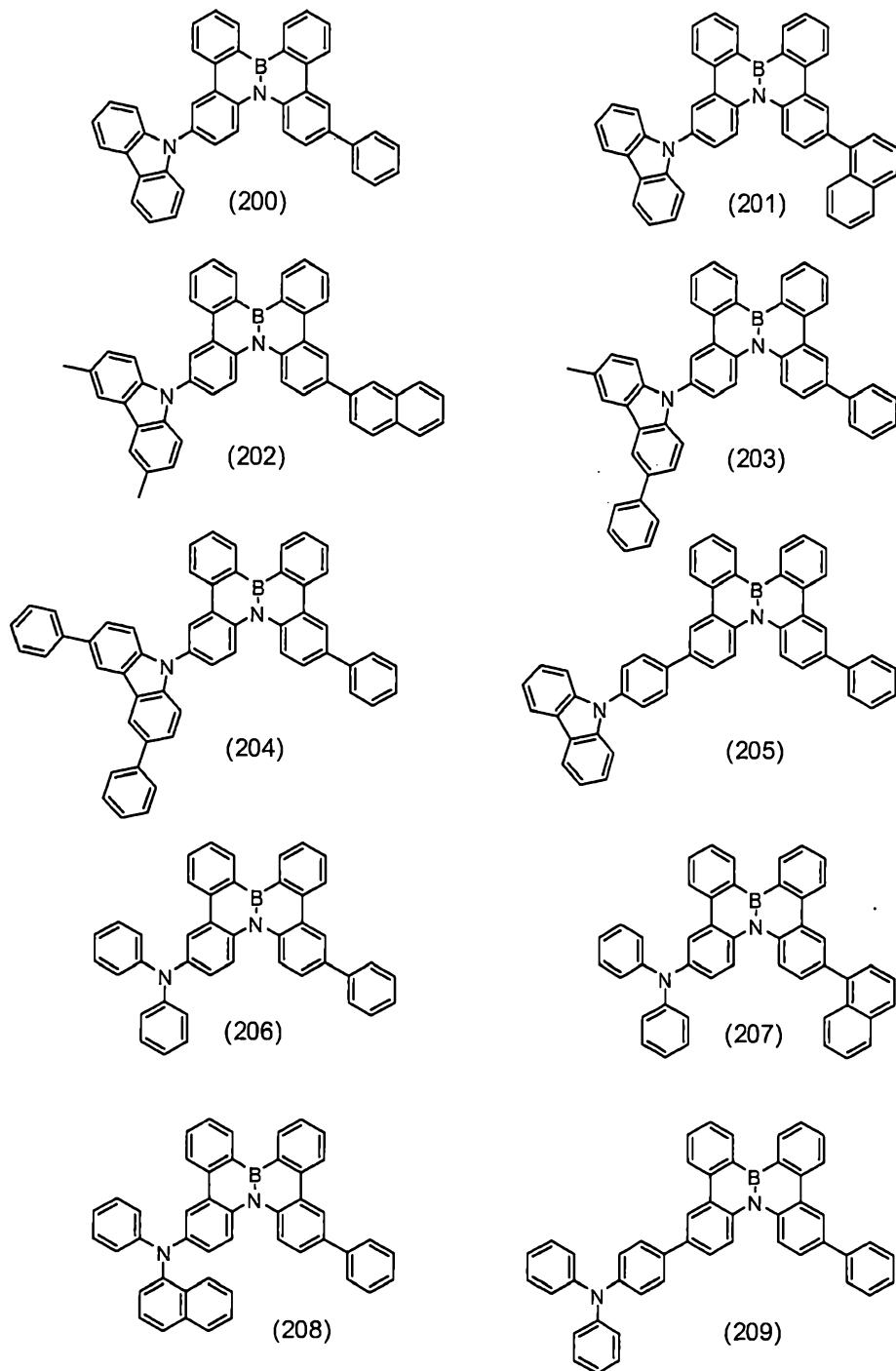
【0158】



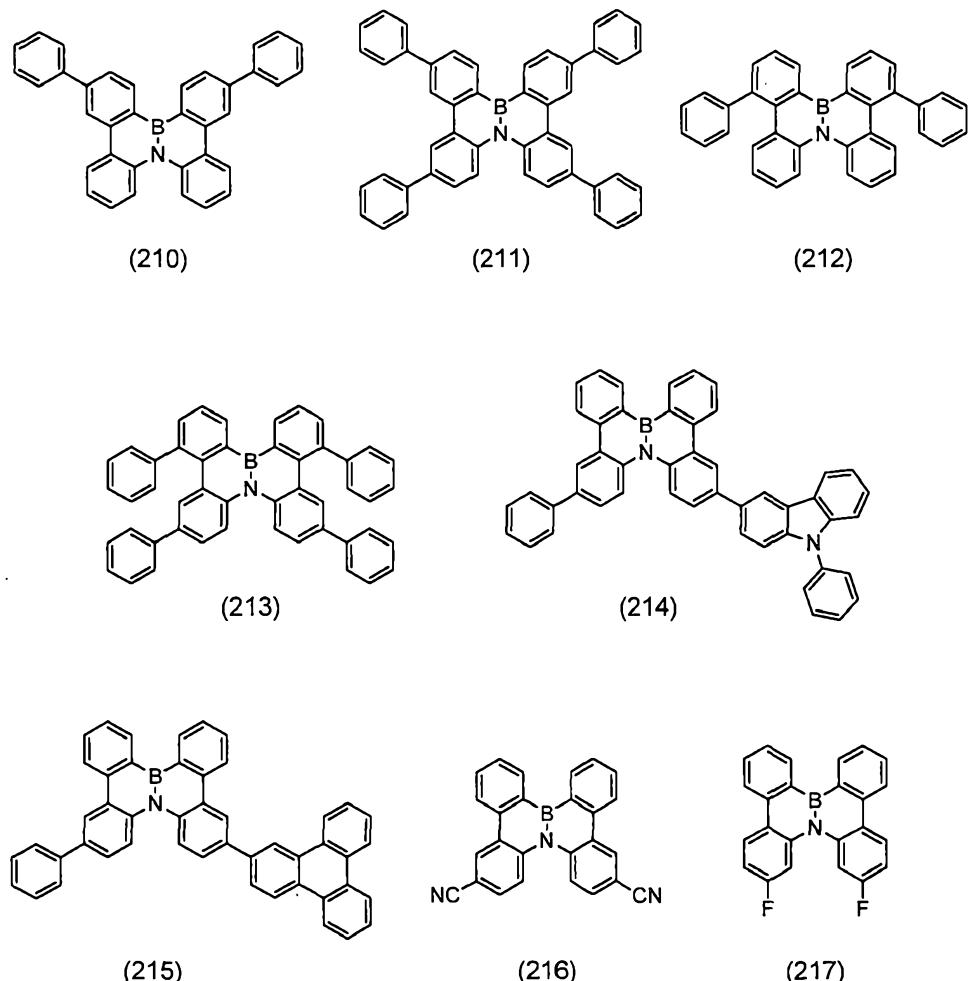
【0159】



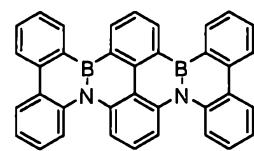
【0160】



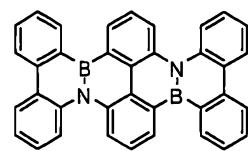
【0161】



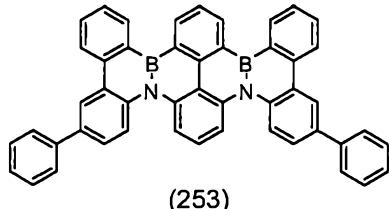
[0162]



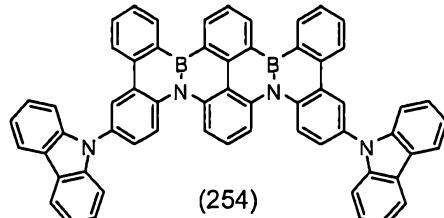
(251)



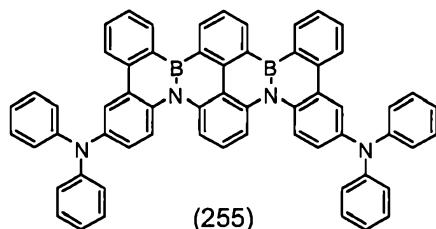
(252)



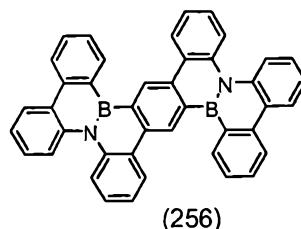
(253)



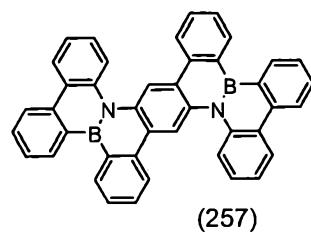
(254)



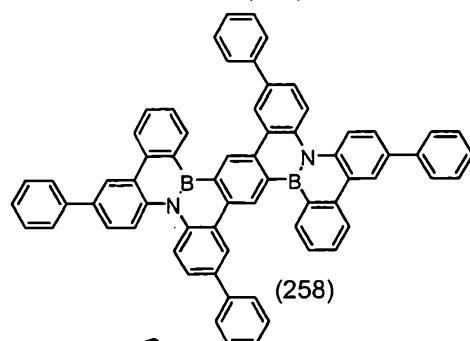
(255)



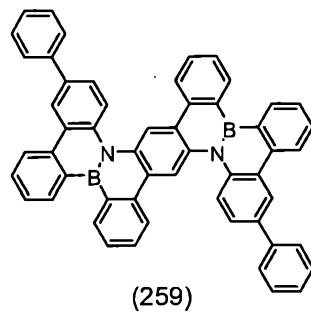
(256)



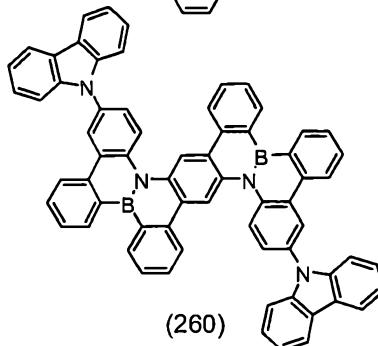
(257)



(258)

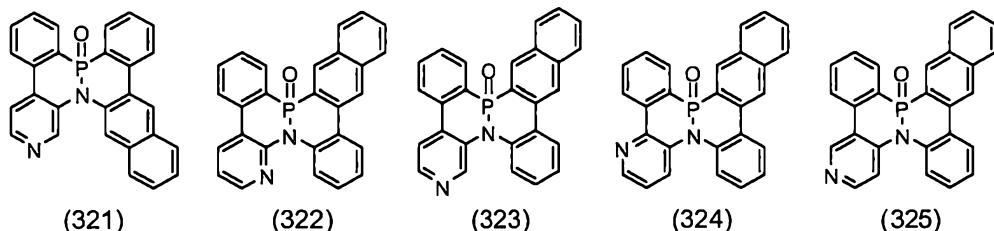
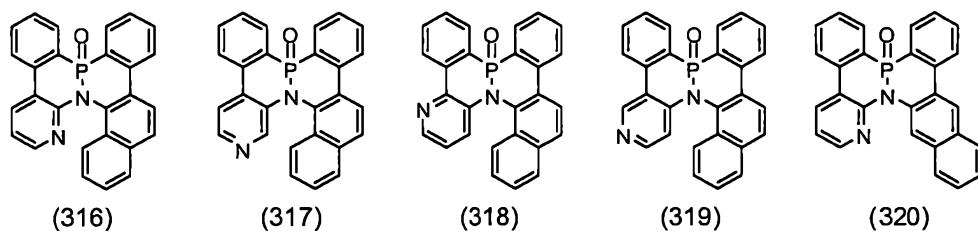
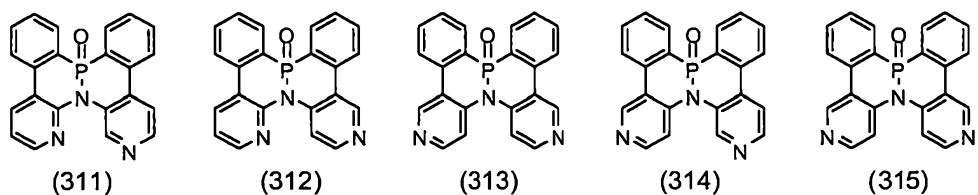
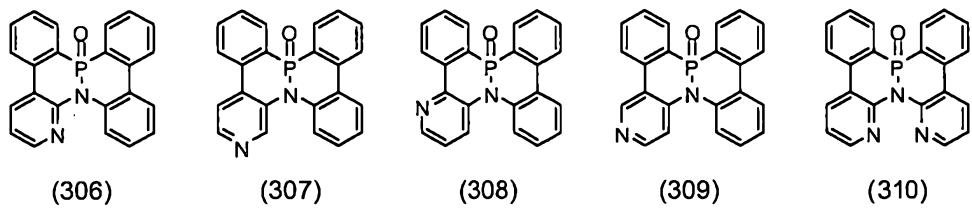
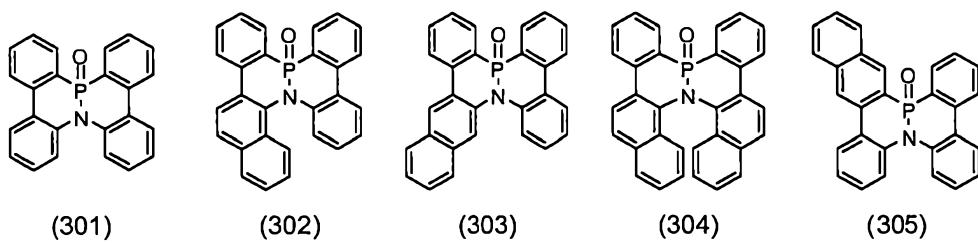


(259)

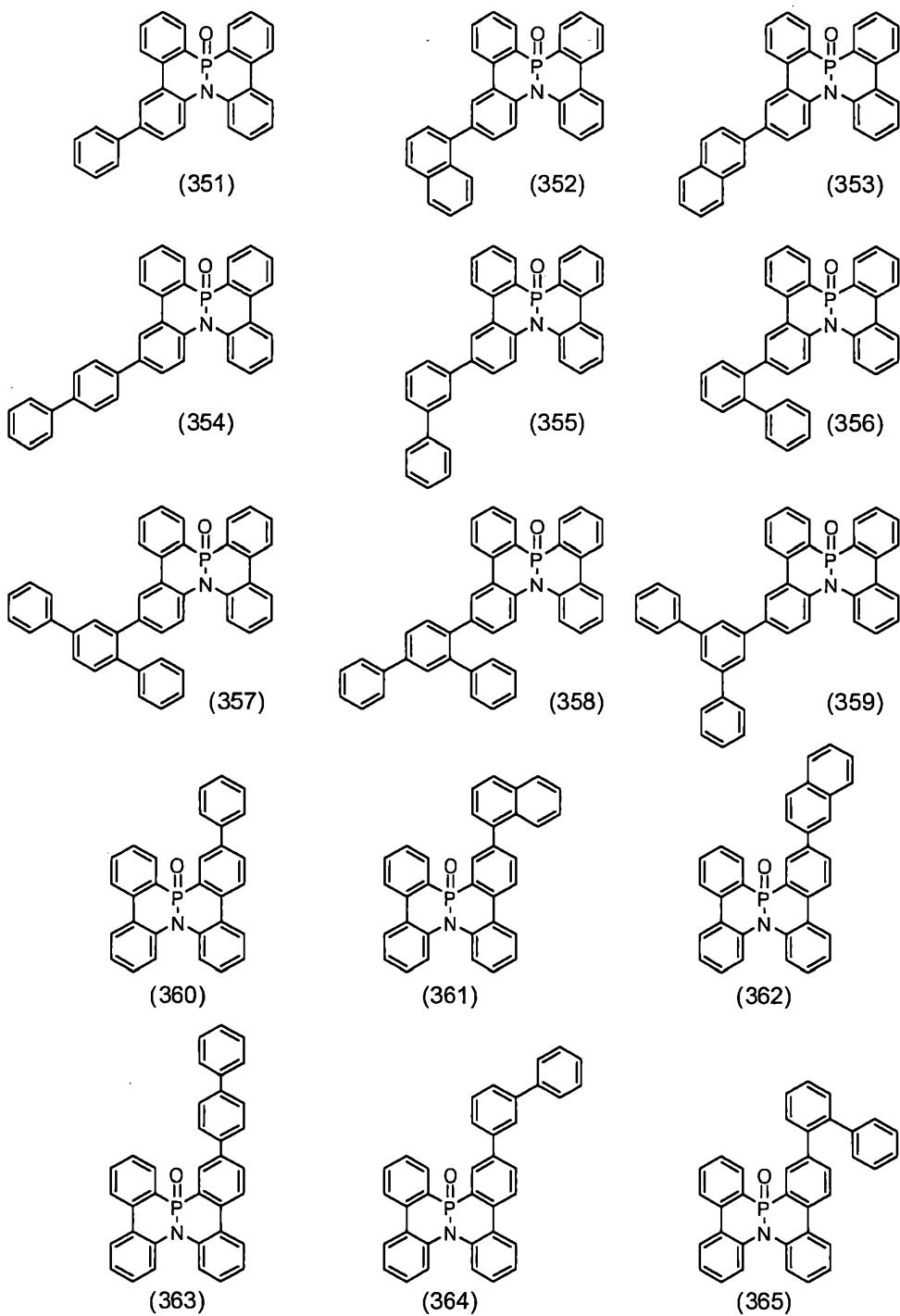


(260)

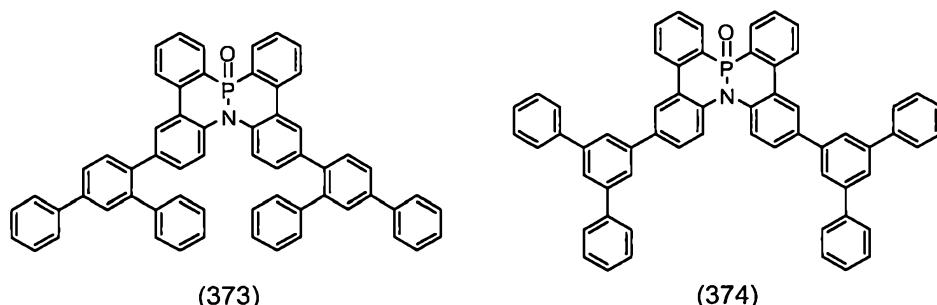
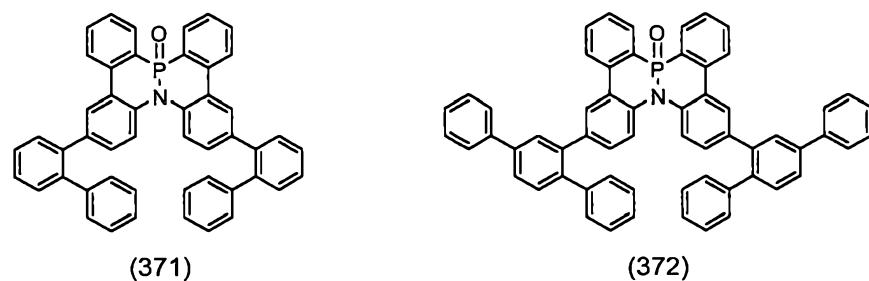
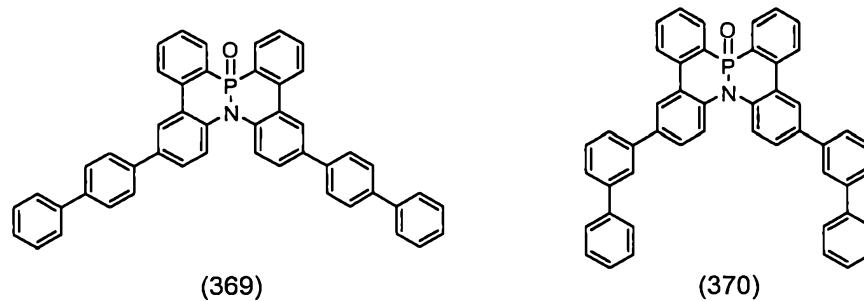
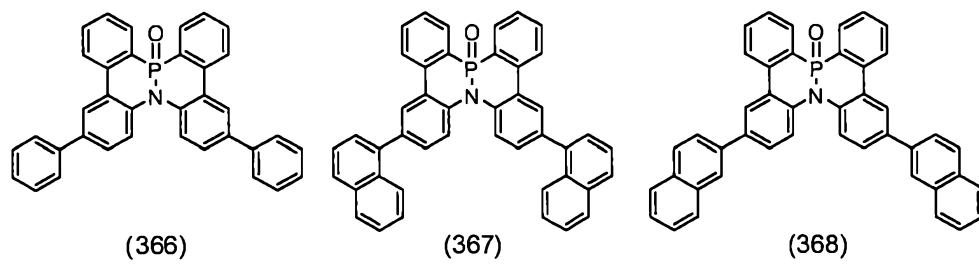
【0163】



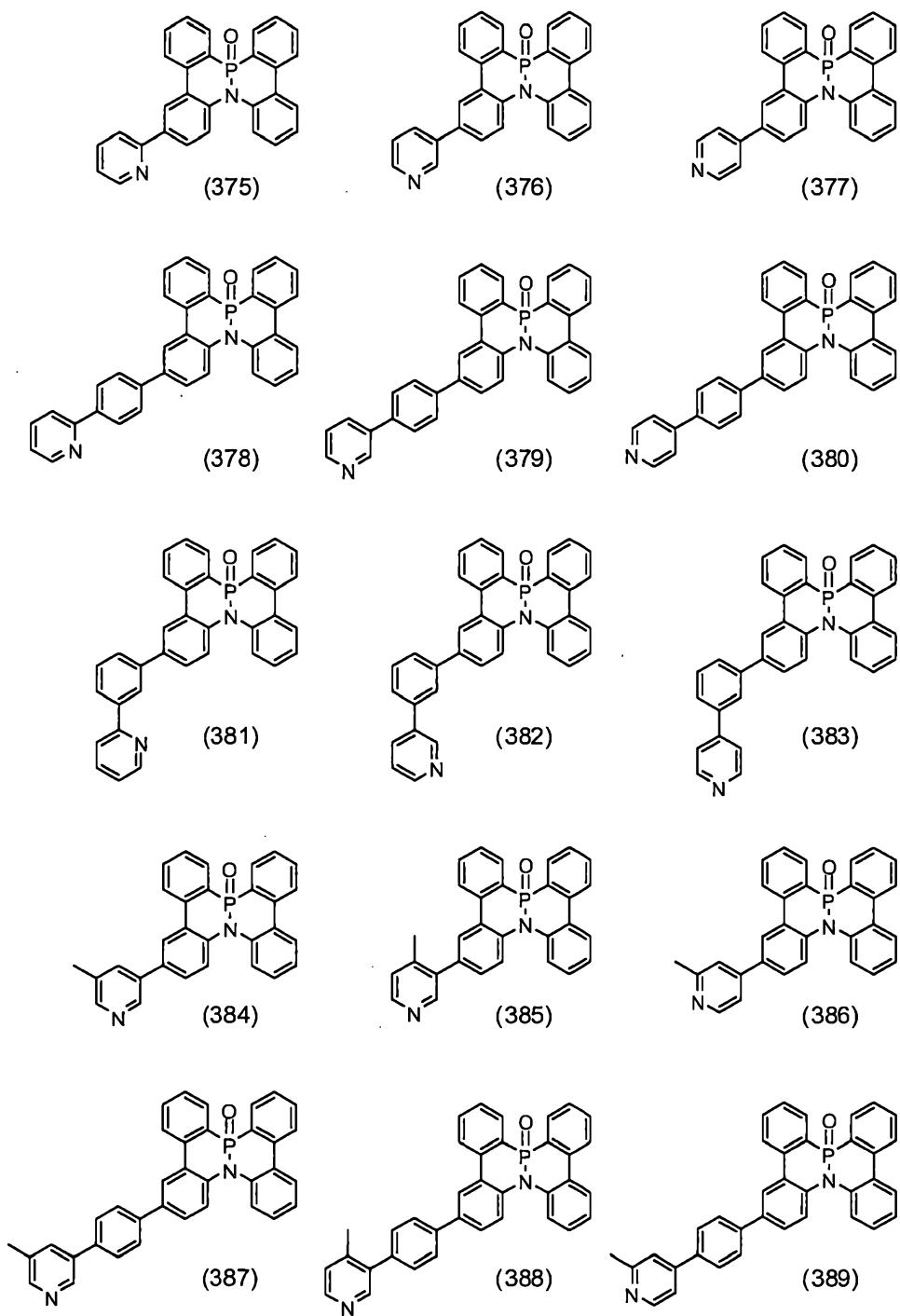
【0164】



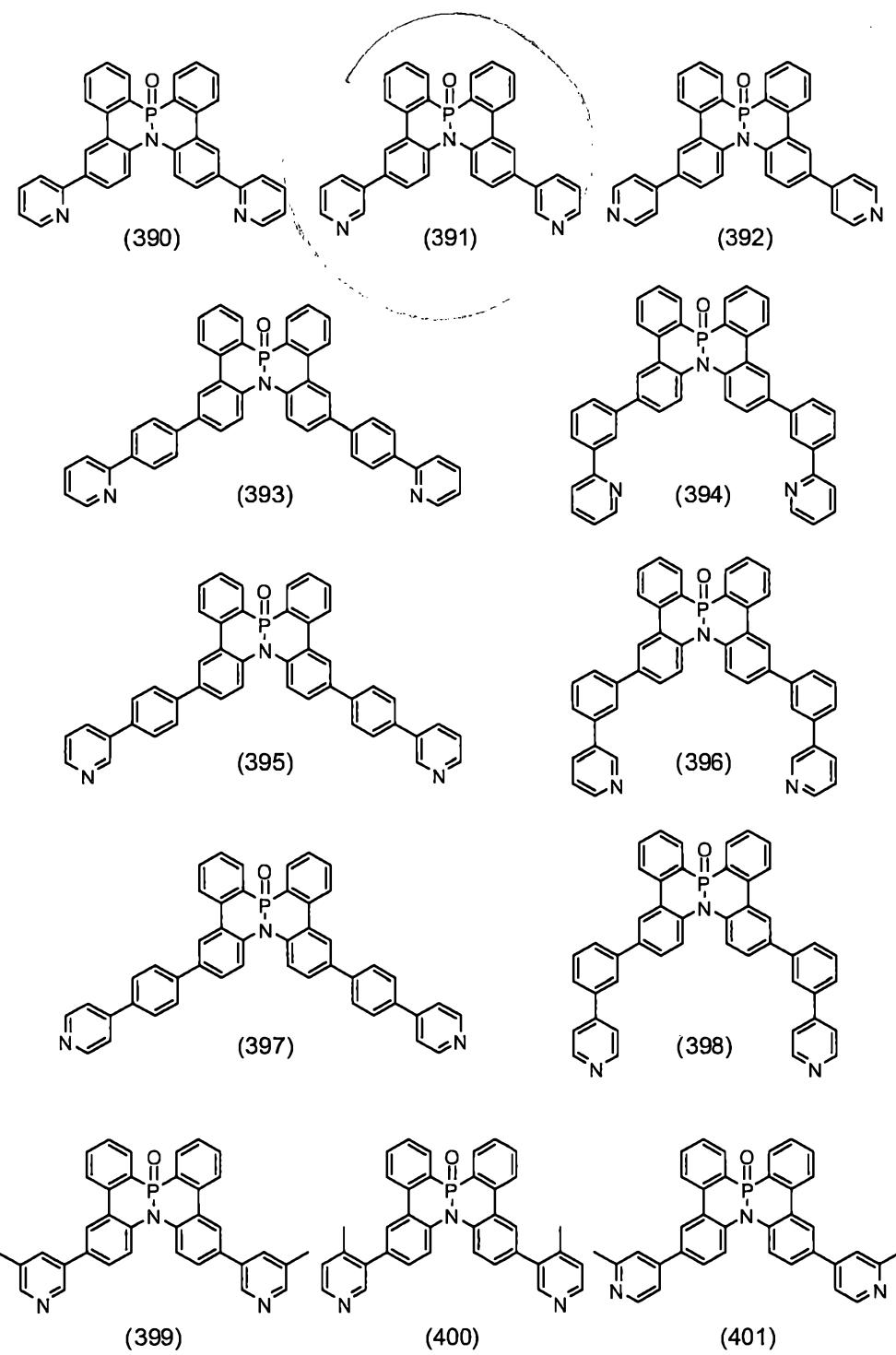
【0165】



【0166】

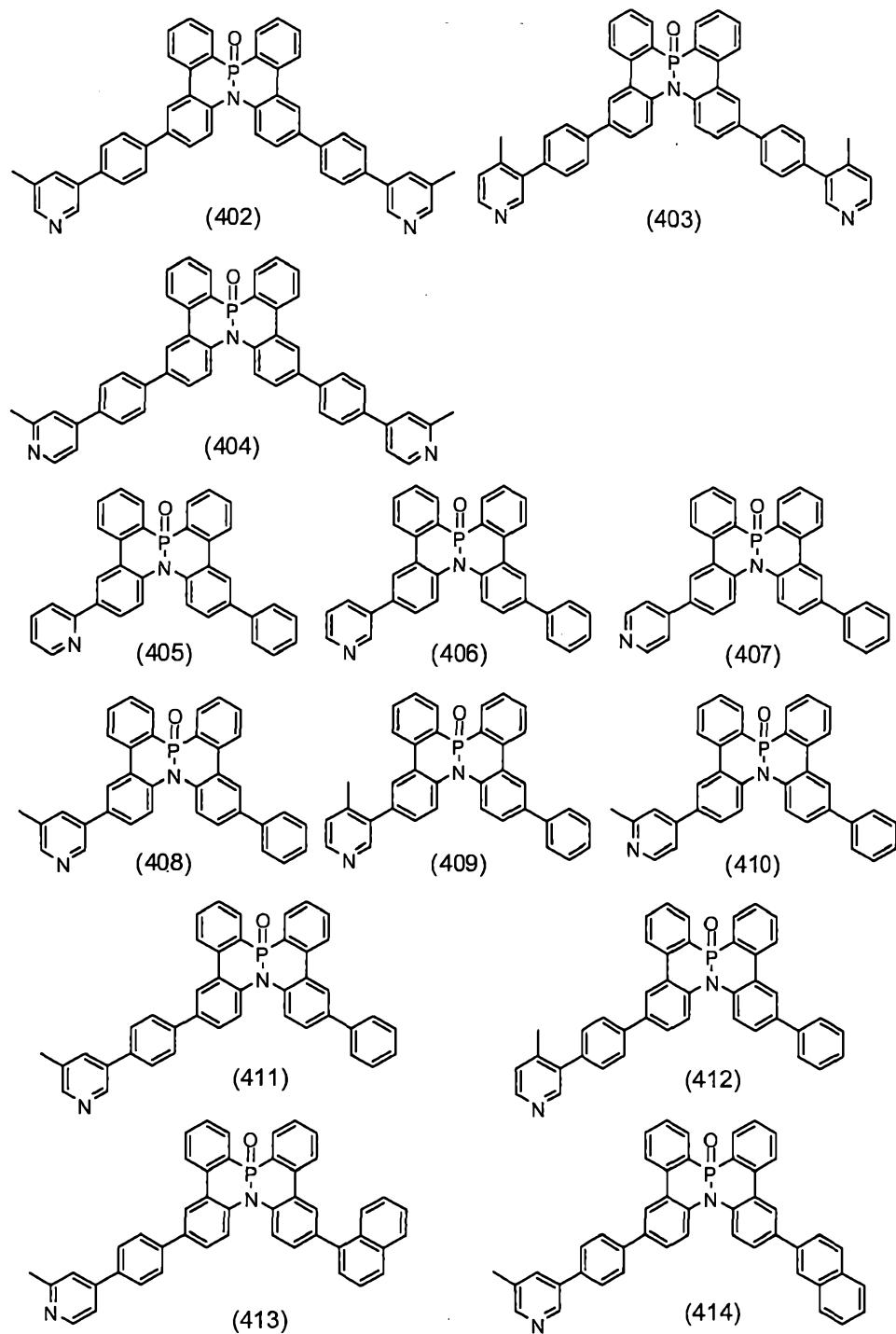


【0167】

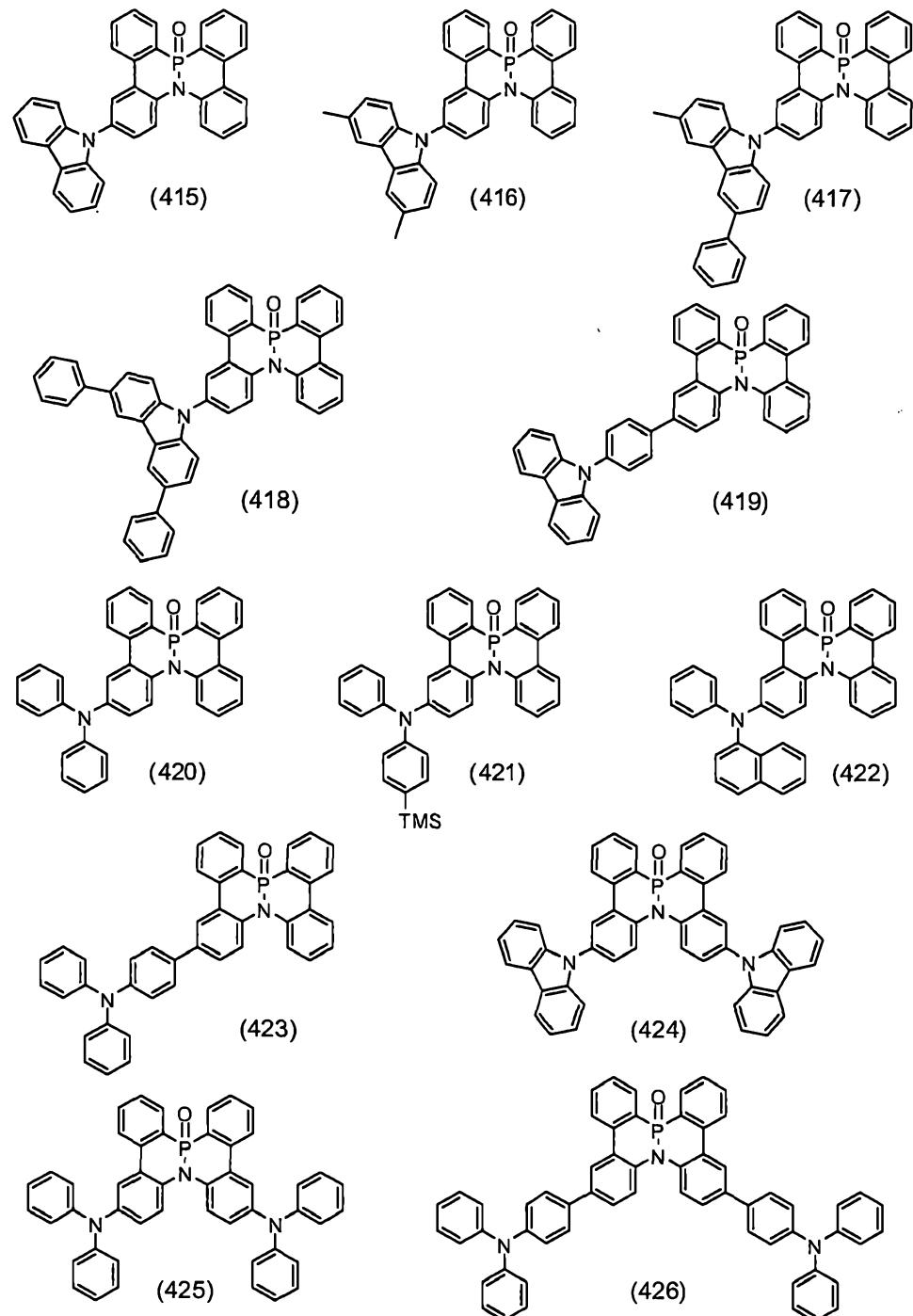


【0168】

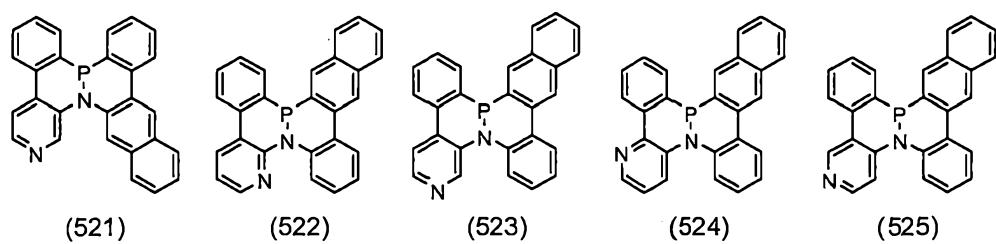
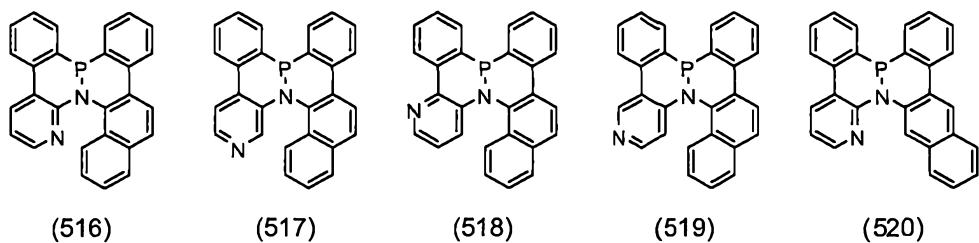
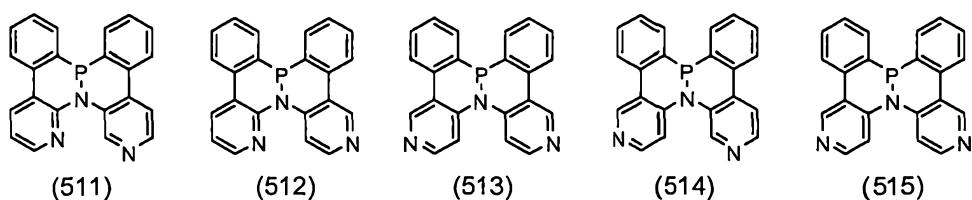
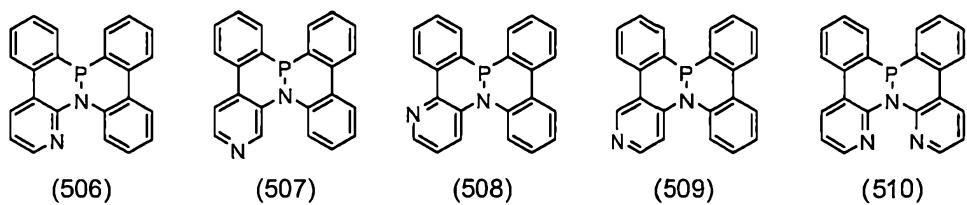
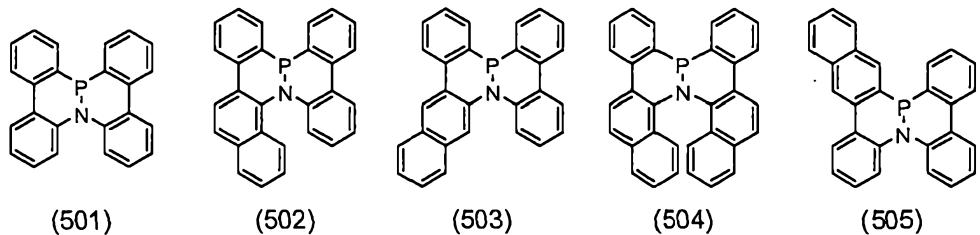




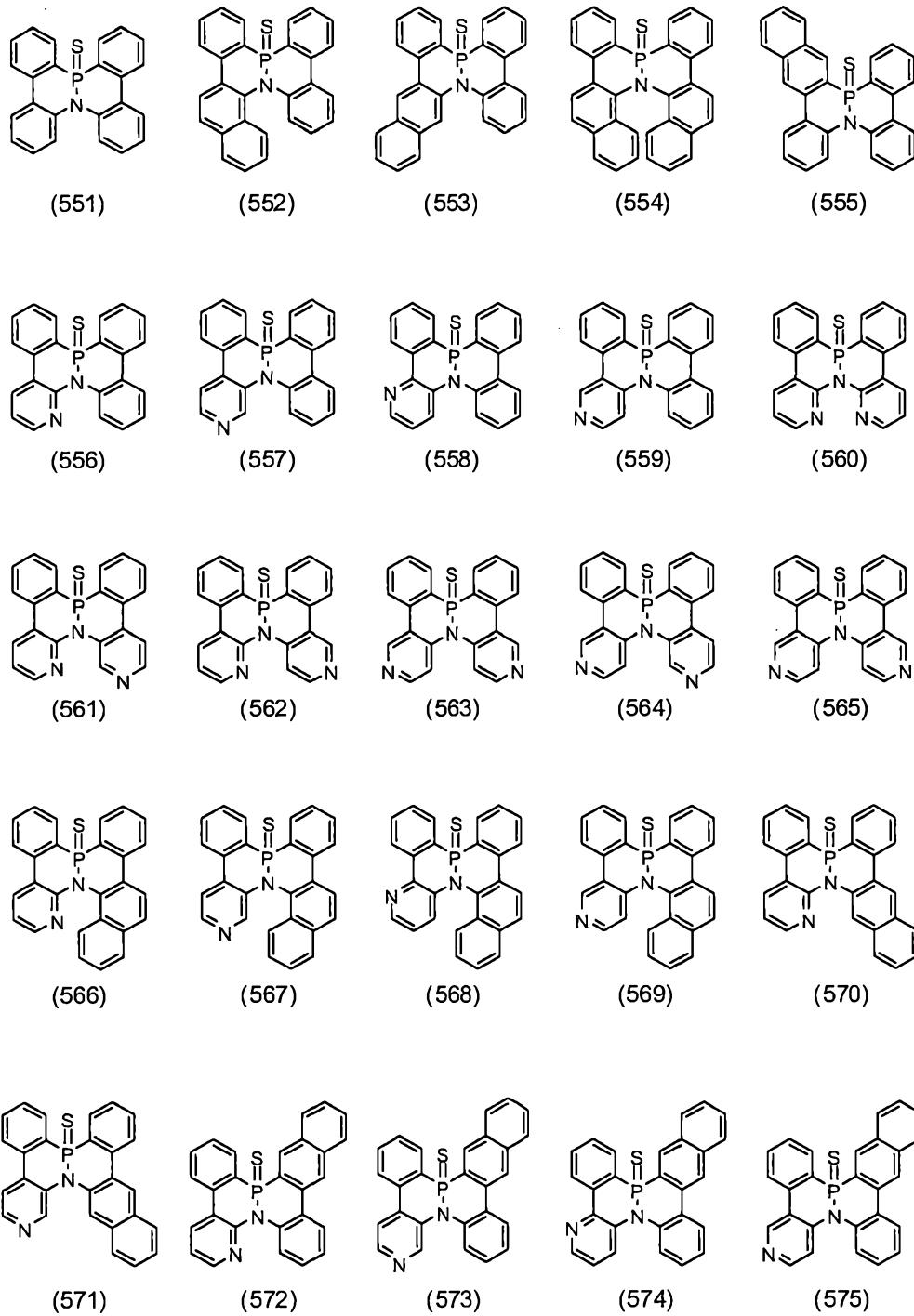
【0169】



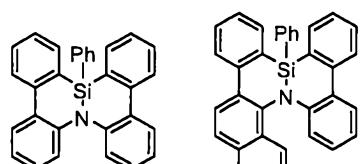
【0170】



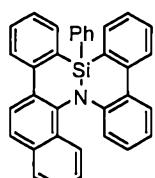
【0171】



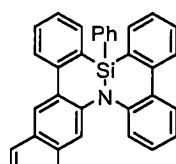
【0172】



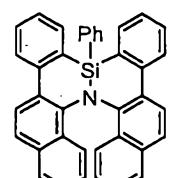
(601)



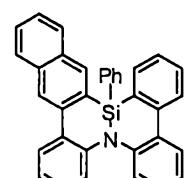
(602)



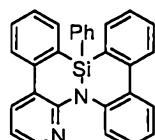
(603)



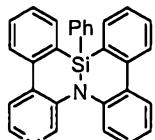
(604)



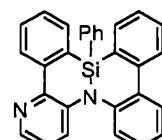
(605)



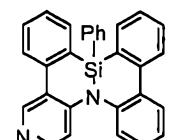
(606)



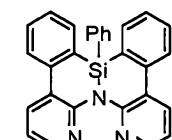
(607)



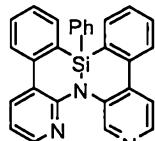
(608)



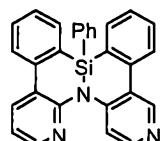
(609)



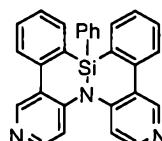
(610)



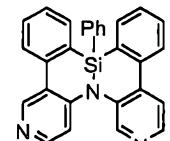
(611)



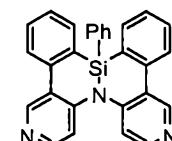
(612)



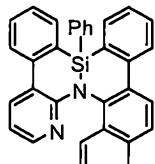
(613)



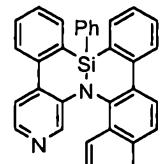
(614)



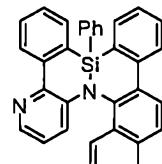
(615)



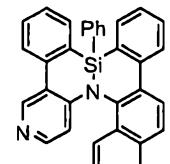
(616)



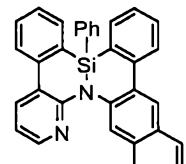
(617)



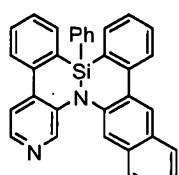
(618)



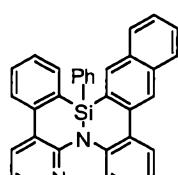
(619)



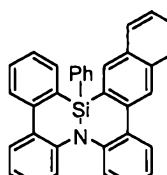
(620)



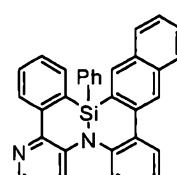
(621)



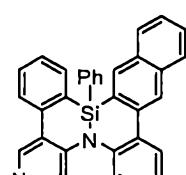
(622)



(623)

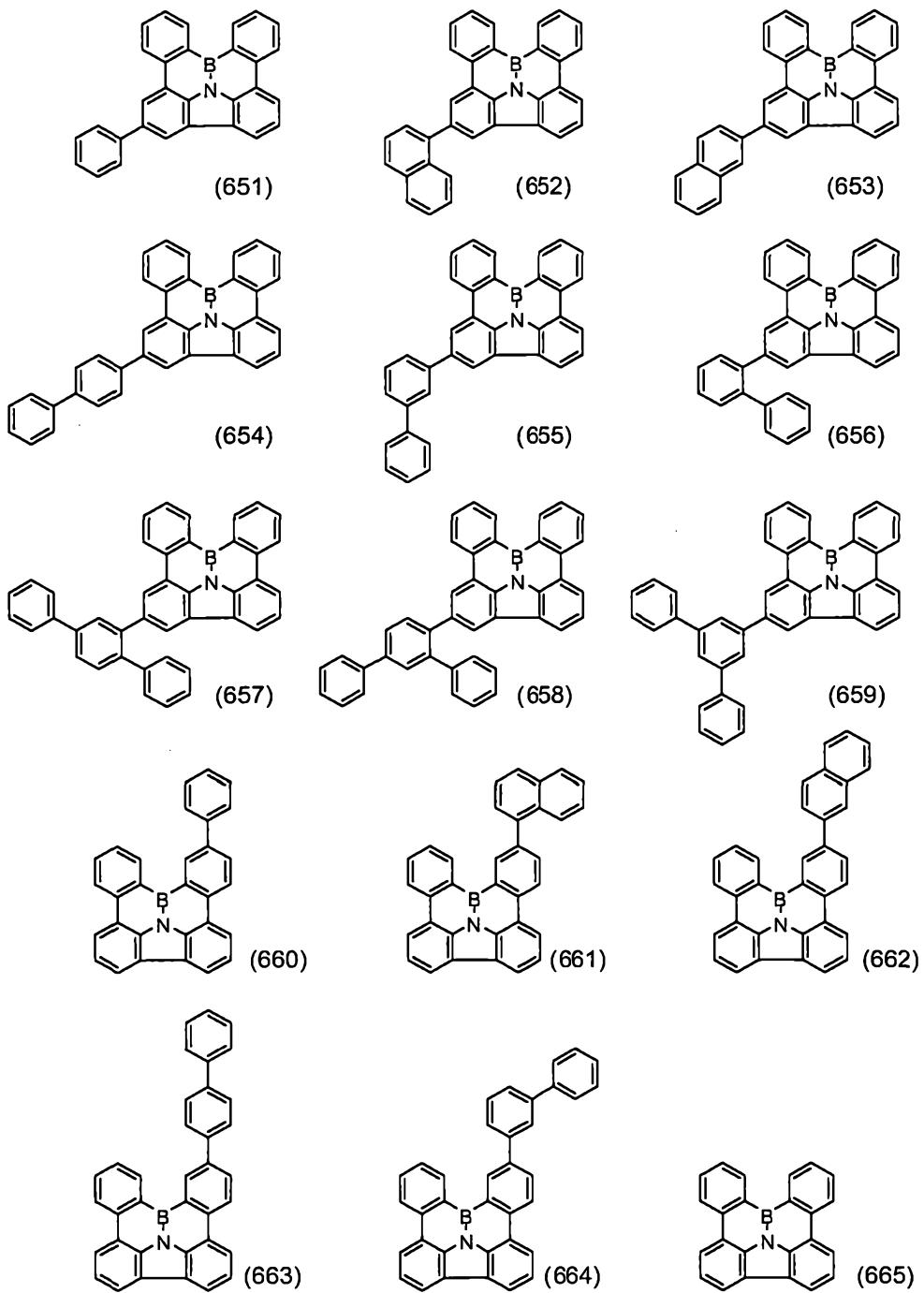


(624)

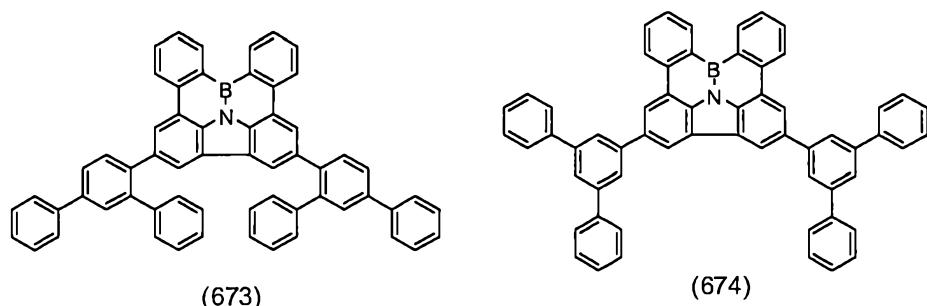
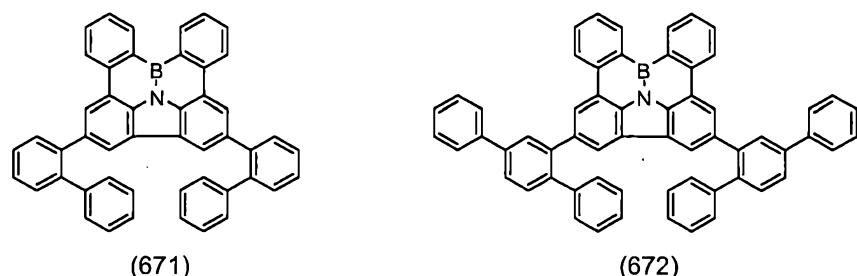
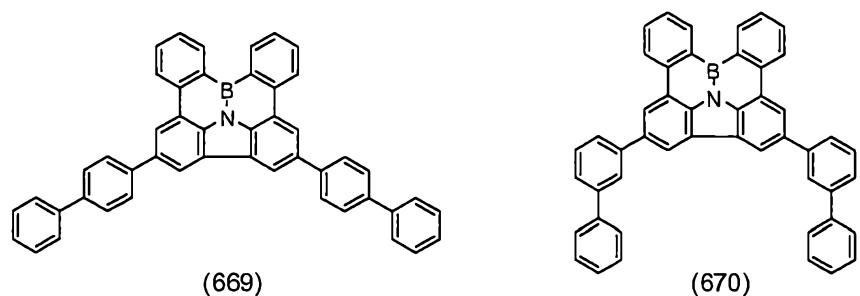
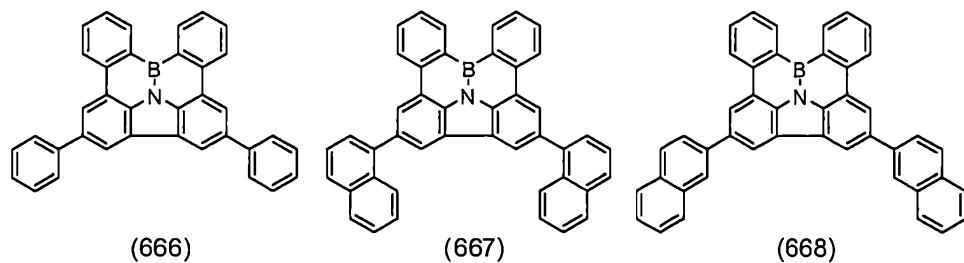


(625)

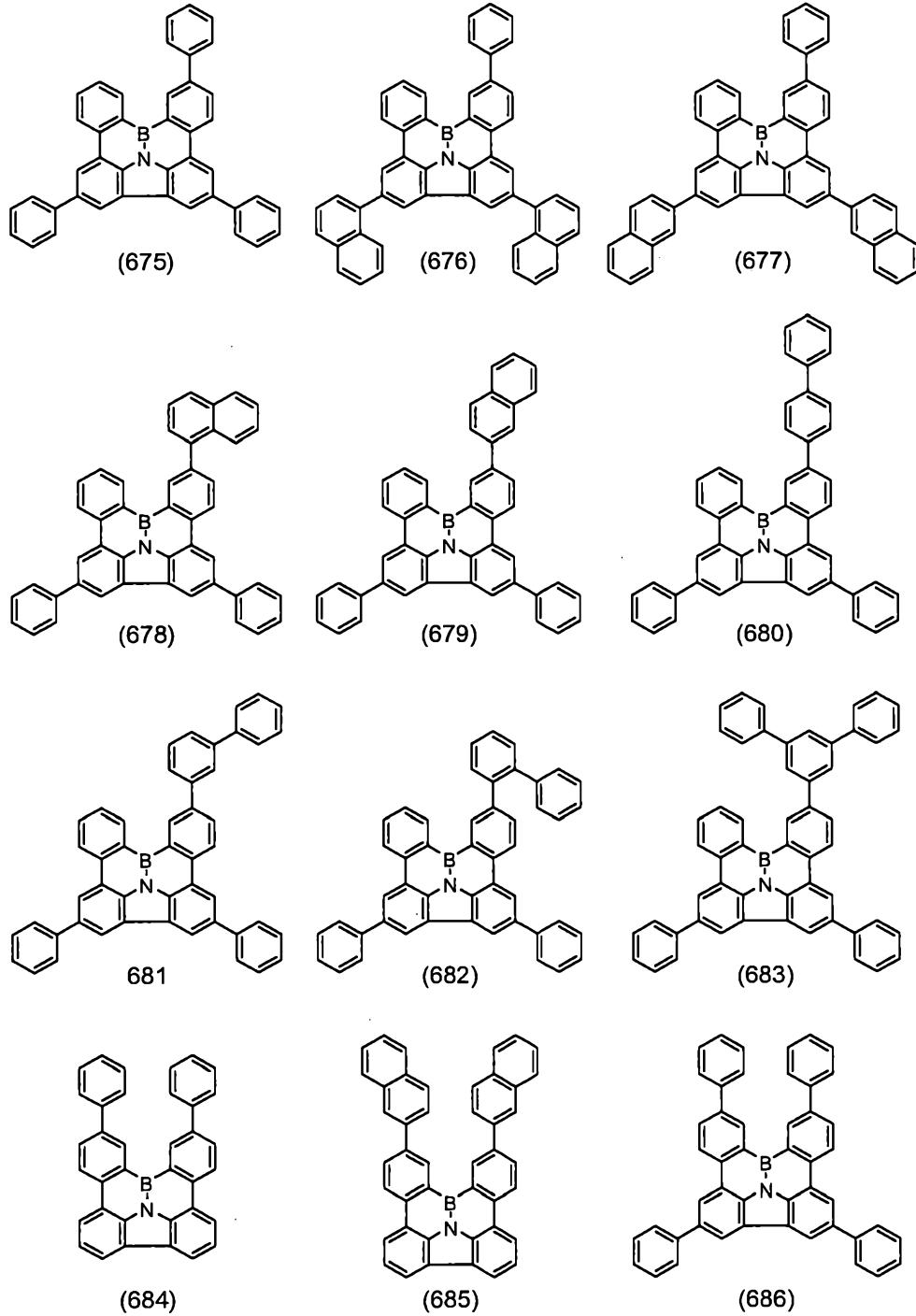
【0173】



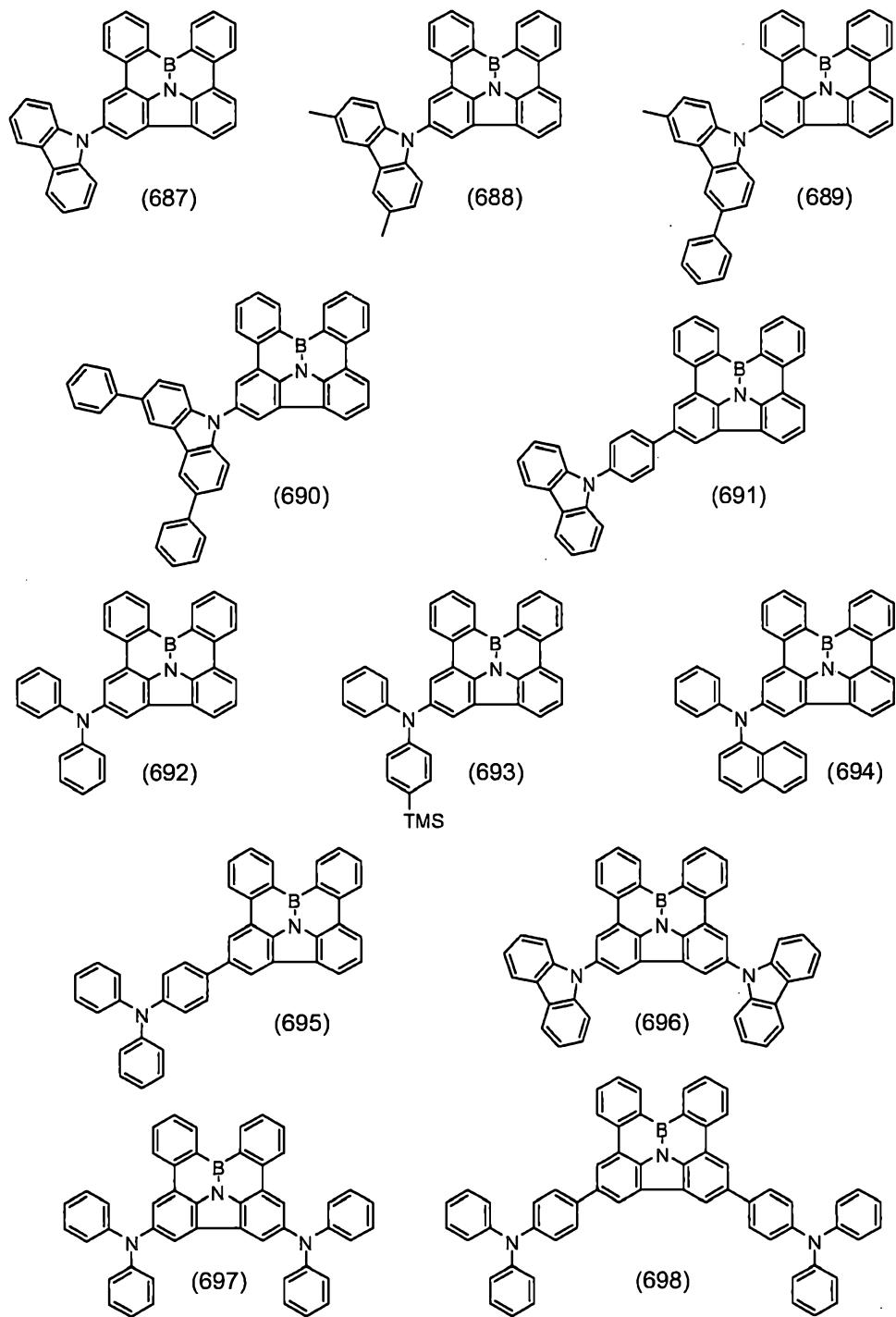
【0174】



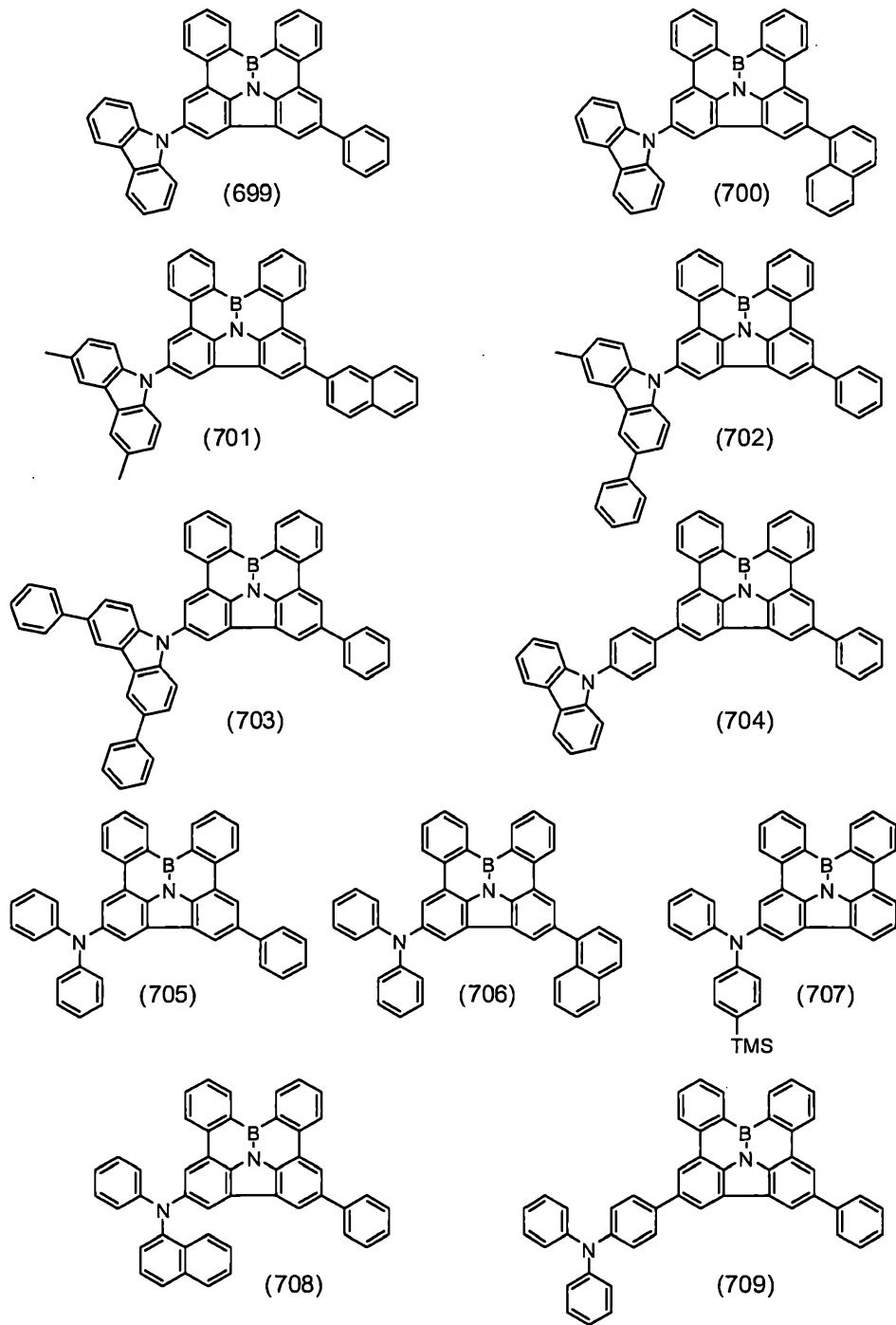
【0175】



【0176】



【0177】



【0178】 2.式(I)所表示的多環芳香族化合物的製造方法

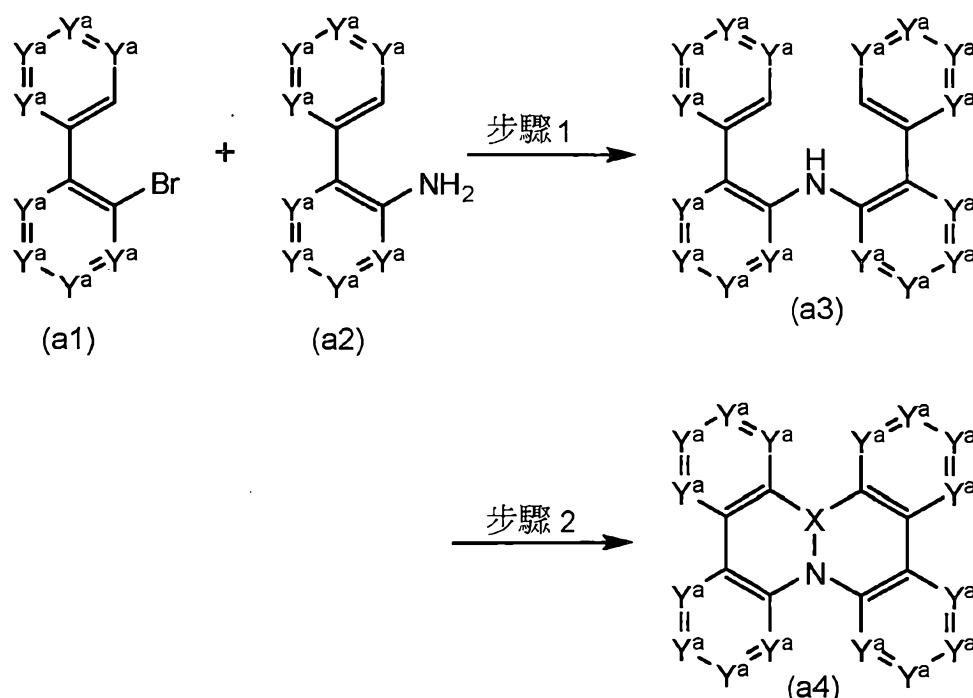
繼而，對本發明的化合物的製造方法加以說明。本發明的化合物為多環芳香族化合物（及其鹽），為具有上述通式(I)所表示的部分結構、更具體而言為具有上述通式(II)或通式(II')所表示的部分結構、進而為具有上述通式(III-1)～式(III-54)及

上述通式(III-55)～式(III-60)等所表示的部分結構的多環芳香族化合物。整體結構例如為上述通式(IV-1)～式(IV-22)所表示的多環芳香族化合物，更具體而言為上述通式(V-1)～式(V-26)及上述通式(V-27)～式(V-34)所表示的多環芳香族化合物，上述通式(V-1')、式(V-2')及式(V-3')所表示的多環芳香族化合物及上述通式(V-27')或式(V-32')所表示的多環芳香族化合物，上述通式(VI-1)～式(VI-149)所表示的多環芳香族化合物，上述式(1)～式(709)所表示的多環芳香族化合物。

【0179】 構成本發明的多環芳香族化合物的基本結構、即上述通式(I)、式(II)、式(II')或式(III)系列所表示的部分結構可依照以下的流程1來合成。再者，流程1中Y^a、X如上述所定義。

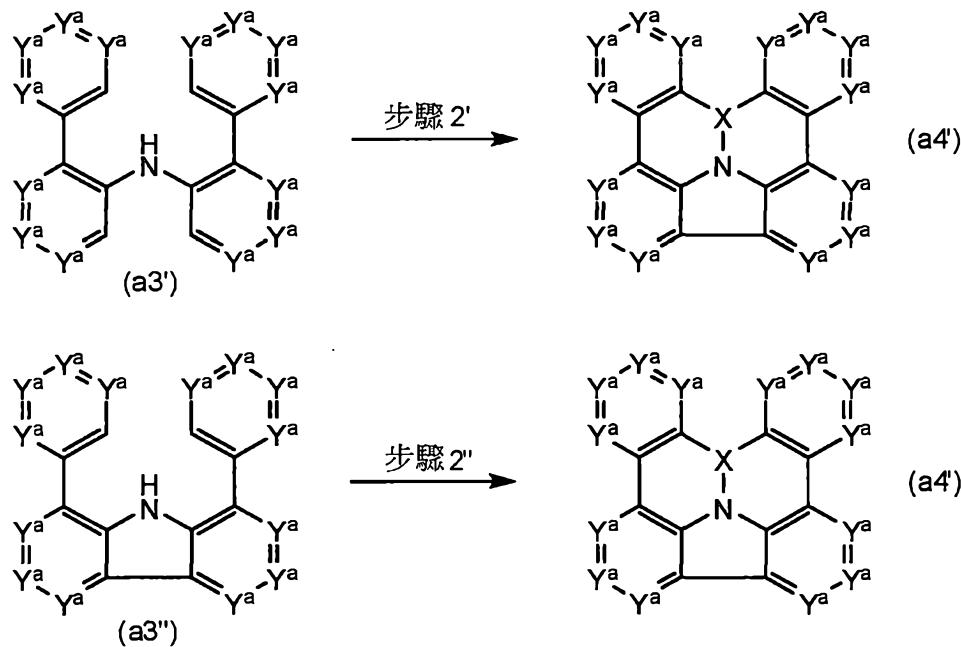
【0180】

<流程1-1>



【0181】

<流程1-2>



【0182】 步驟 1 的反應中，相對於化合物 (a1) 1 莫耳，使用 1 莫耳左右～過剩量的 n-BuLi 等烷基鋰、n-BuMgBr 等格林納試劑 (Grignard reagent)、NaH、KH 等鹼金屬氫化物、NaO^tBu、KO^tBu 等鹼金屬烷氧化物、Na₂CO₃、NaHCO₃、K₂CO₃、Cs₂CO₃ 等鹼金屬碳酸鹽等鹼以及 1 莫耳～過剩量的化合物 (a2)，進而使用 Pd(dba)₂、P^tBu₃，於溶劑中於-78°C～室溫左右的溫度下攪拌 30 分鐘～24 小時而進行反應，由此獲得化合物 (a3)。溶劑可使用無水二乙醚、無水 THF、無水二丁醚等無水醚系溶劑或苯、甲苯、二甲苯、均三甲苯等芳香族烴系溶劑。

【0183】 繼而，於步驟 2 的反應中，藉由 n-BuLi 等脫質子化劑對化合物 (a3) 進行脫質子後，添加含有 X 的化合物 (X 的鹵化

物、烷氧基衍生物、芳氧基衍生物、醯氧基衍生物、鹵代胺基衍生物)，藉此導入 X，於 AlCl_3 等路易斯酸與二異丙基乙基胺等鹼的存在下進行佛瑞德-克來福特 (Friedel-Crafts) 型的反應，藉此可獲得化合物 (a4)。

【0184】 含有 X 的化合物例如於 $X=P$ 的情形時可列舉： PF_3 、 PCl_3 、 PBr_3 、 PI_3 等鹵化物， P(OMe)_3 、 P(OEt)_3 、 P(O-nPr)_3 、 P(O-iPr)_3 、 P(O-nBu)_3 、 P(O-iBu)_3 、 P(O-secBu)_3 、 P(O-t-Bu)_3 等烷氧基衍生物， P(OPh)_3 、 P(O-萘基)_3 等芳氧基衍生物， P(OAc)_3 、 P(O-三氟乙醯基)_3 、 P(O-丙醯基)_3 、 P(O-丁醯基)_3 、 P(O-苯甲醯基)_3 等醯氧基衍生物， $\text{PCl}(\text{NMe}_2)_2$ 、 $\text{PCl}(\text{NEt}_2)_2$ 、 $\text{PCl}(\text{NPr}_2)_2$ 、 $\text{PCl}(\text{NBu}_2)_2$ 、 $\text{PBr}(\text{NMe}_2)_2$ 、 $\text{PBr}(\text{NEt}_2)_2$ 、 $\text{PBr}(\text{NPr}_2)_2$ 、 $\text{PBr}(\text{NBu}_2)_2$ 等鹵代胺基衍生物。

【0185】 X 為 P 以外 (具體而言 X 為 B、 P=O 、 P=S 、 P=Se 、As、 As=O 、 As=S 、 As=Se 、Sb、 Sb=O 、 Sb=S 、 Sb=Se 、週期表第 3 族～第 11 族的金屬元素、週期表第 13 族～第 14 族的金屬元素或半金屬元素等的情形) 亦可同樣地使用 X 的鹵化物、烷氧基衍生物、芳氧基衍生物、醯氧基衍生物、鹵代胺基衍生物。

【0186】 步驟 2 的反應中，相對於式 (a3) 的化合物 1 莫耳，使用 1 莫耳～過剩量的 $n\text{-BuLi}$ 等脫質子化劑、1 莫耳～過剩量的含有 X 的化合物、觸媒量～過剩量的路易斯酸及 0 莫耳～過剩量的鹼，於溶劑中於 -78°C ~ 溶劑的沸點左右的溫度下攪拌 30 分鐘～24 小時來進行反應，結果可獲得化合物 (a4)。

【0187】 溶劑可使用：無水二乙醚、無水 THF、無水二丁醚等無

水醚系溶劑，或苯、甲苯、二甲苯、均三甲苯等芳香族烴系溶劑，或氯苯、1,2-二氯苯等芳香族鹵化物系溶劑。

【0188】 脫質子化劑除了 n-BuLi 以外，可使用：MeLi、t-BuLi、PhLi 等烷基鋰，MeMgBr、EtMgBr、n-BuMgBr 等格林納試劑，或 NaH、KH 等鹼金屬氫化物等。

【0189】 路易斯酸可使用： AlCl_3 、 AlBr_3 、 $\text{BF}_3 \cdot \text{OEt}_2$ 、 BCl_3 、 BBr_3 、 GaCl_3 、 GaBr_3 、 InCl_3 、 InBr_3 、 In(OTf)_3 、 SnCl_4 、 SnBr_4 、 AgOTf 、 Sc(OTf)_3 、 ZnCl_2 、 ZnBr_2 、 Zn(OTf)_2 、 MgCl_2 、 MgBr_2 、 Mg(OTf)_2 等。

【0190】 鹼可使用：二異丙基乙基胺、2,2,6,6-四甲基哌啶、1,2,2,6,6-五甲基哌啶、2,4,6-三甲基吡啶、2,6-二甲基吡啶、三乙胺、三異丁胺等。

【0191】 藉由 $X=P$ 且於硫 (S8) 的存在下進行使用路易斯酸與鹼的反應，可直接獲得 X 為 $P=S$ 的化合物。關於 X 為 As、Sb 等其他元素，亦可同樣地獲得硫原子鍵結的化合物。

【0192】 於步驟 2'的反應中，使用化合物 (a3') 來代替化合物 (a3)，於與步驟 2 的反應相同的條件下進行佛瑞德-克來福特 (Friedel-Crafts) 型反應及舍爾 (Scholl) 型反應，藉此可獲得化合物 (a4')。

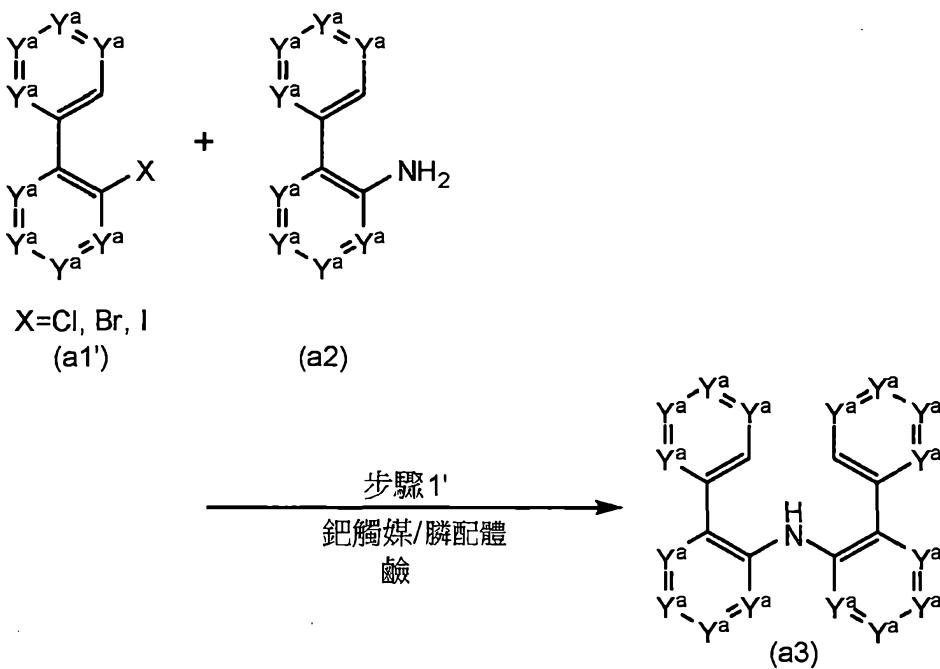
【0193】 於步驟 2"的反應中，使用化合物 (a3") 來代替化合物 (a3)，於與步驟 2 的反應相同的條件下進行佛瑞德-克來福特 (Friedel-Crafts) 型反應，藉此可獲得化合物 (a4')。



【0194】 另外，亦可使用以下的流程 1-3 的步驟 1'的反應來代替上述反應流程 1-1 的步驟 1 的反應。即，該步驟為於鹼的存在下使用鈀觸媒使芳香族鹵化物（a1'）與芳香族胺（a2）反應來製造二芳基胺（a3）的步驟。

【0195】

<流程1-3>



【0196】 步驟 1'中所用的鈀觸媒的具體例為二氯化[1,1-雙(二苯基膦基)二茂鐵]鈀 (II)：Pd(dppf)Cl₂、四(三苯基膦)鈀 (0)：Pd(PPh₃)₄、二氯化雙(三苯基膦)鈀 (II)：PdCl₂(PPh₃)₂、乙酸鈀 (II)：Pd(OAc)₂、三(二亞苄基丙酮)二鈀 (0)：Pd₂(dba)₃、三(二亞苄基丙酮)二鈀 (0) 氯仿錯合物：Pd₂(dba)₃·CHCl₃、雙(二亞苄基丙酮)鈀 (0)：Pd(dba)₂、PdCl₂{P(t-Bu)₂-(p-NMe₂-Ph)}₂、二氯化雙(三鄰甲苯基膦)-鈀 (II) (PdCl₂(o-tolyl)₃)₂ 等。

【0197】 另外，為了促進反應，視情形亦可於該些鈀化合物中添加膦化合物。該膦化合物的具體例為三(第三丁基)膦、三環己基膦、1-(N,N-二甲基胺基甲基)-2-(二-第三丁基膦基)二茂鐵、1-(N,N-二丁基胺基甲基)-2-(二-第三丁基膦基)二茂鐵、1-(甲氧基甲基)-2-(二-第三丁基膦基)二茂鐵、1,1'-雙(二-第三丁基膦基)二茂鐵、2,2'-雙(二-第三丁基膦基)-1,1'-聯萘、2-甲氧基-2'-(二-第三丁基膦基)-1,1'-聯萘、1,1'-雙(二苯基膦基)二茂鐵、雙(二苯基膦基)聯萘、4-二甲基胺基苯基二-第三丁基膦、苯基二-第三丁基膦等。

【0198】 步驟 1'中所用的鹼的具體例為碳酸鈉、碳酸鉀、碳酸銫、碳酸氫鈉、氫氧化鈉、氫氧化鉀、氫氧化鋇、乙氧化鈉、第三丁氧化鈉、乙酸鈉、磷酸三鉀、氟化鉀等。

【0199】 進而，步驟 1'中所用的溶劑的具體例為苯、1,2,4-三甲基苯、甲苯、二甲苯、N,N-二甲基甲醯胺、四氫呋喃、二乙醚、第三丁基甲基醚、1,4-二噁烷、甲醇、乙醇、異丙醇等。該些溶劑可根據進行反應的芳香族鹵化物的結構來適當選擇。溶劑可單獨使用，亦能以混合溶劑的形式使用。

【0200】 另外，例如上述通式 (IV-1) ~ 式 (IV-22) 所表示的多環芳香族化合物，更具體而言上述通式 (V-1) ~ 式 (V-26) 及上述通式 (V-27) ~ 式 (V-34) 所表示的多環芳香族化合物，上述通式 (V-1')、式 (V-2') 及式 (V-3') 所表示的多環芳香族化合物及上述通式 (V-27') 或式 (V-32') 所表示的多環芳香族化合物，上述通式 (VI-1) ~ 式 (VI-149) 所表示的多環芳香族化合物，上

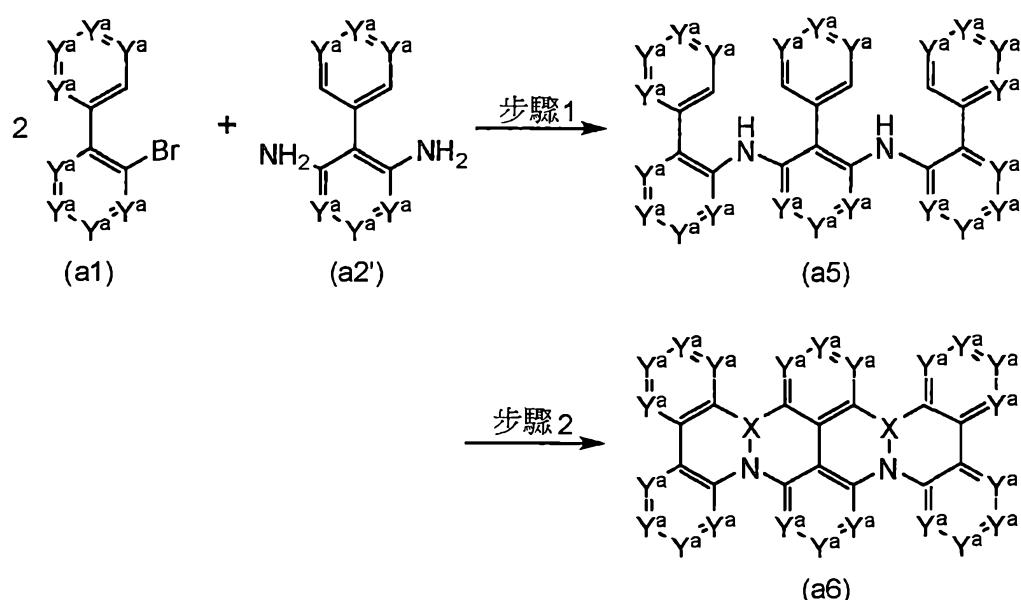


述式(1)～式(709)所表示的多環芳香族化合物可藉由上述部分結構的合成流程1或應用該合成流程1的流程2～流程8來合成。再者，流程2～流程8中Y^a、X如上述所定義。

【0201】 於流程2中，除了變更進行反應的化合物以外，可與流程1同樣地獲得目標化合物。

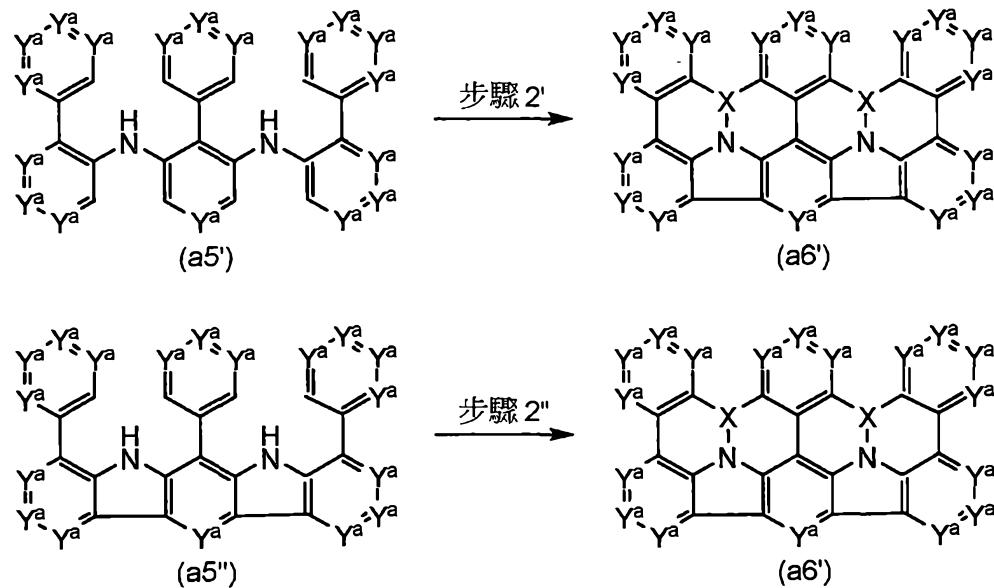
【0202】

<流程2-1>



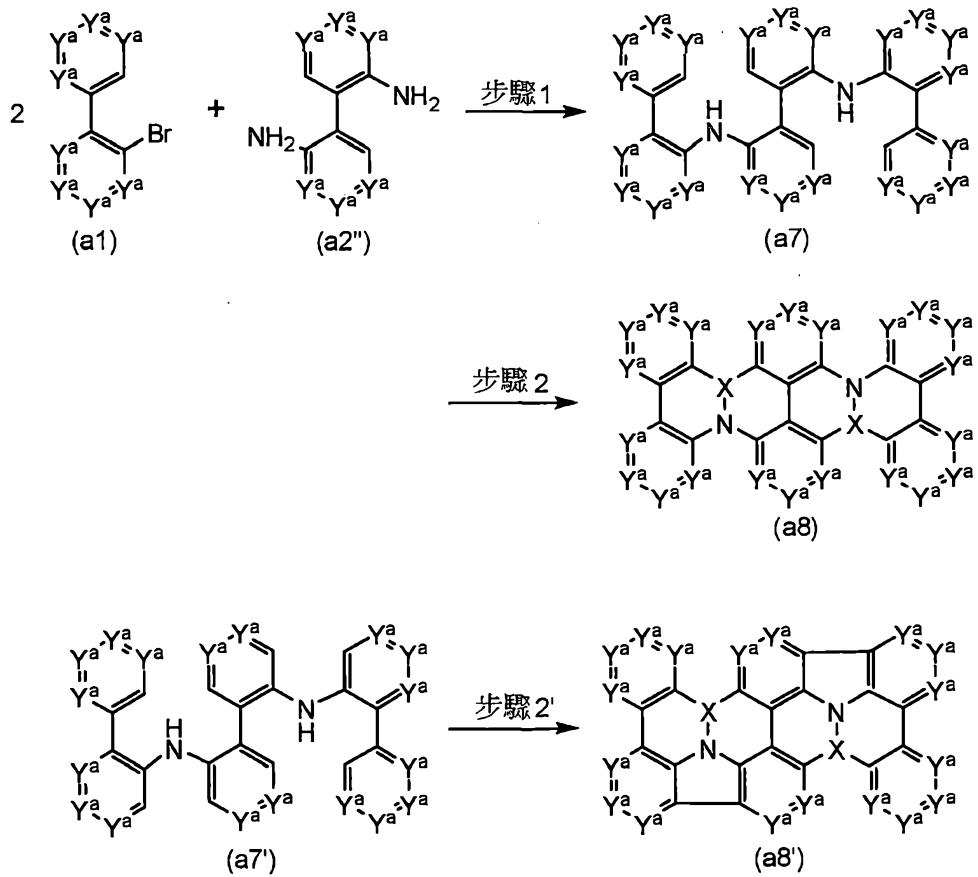
【0203】

<流程2-2>



【0204】

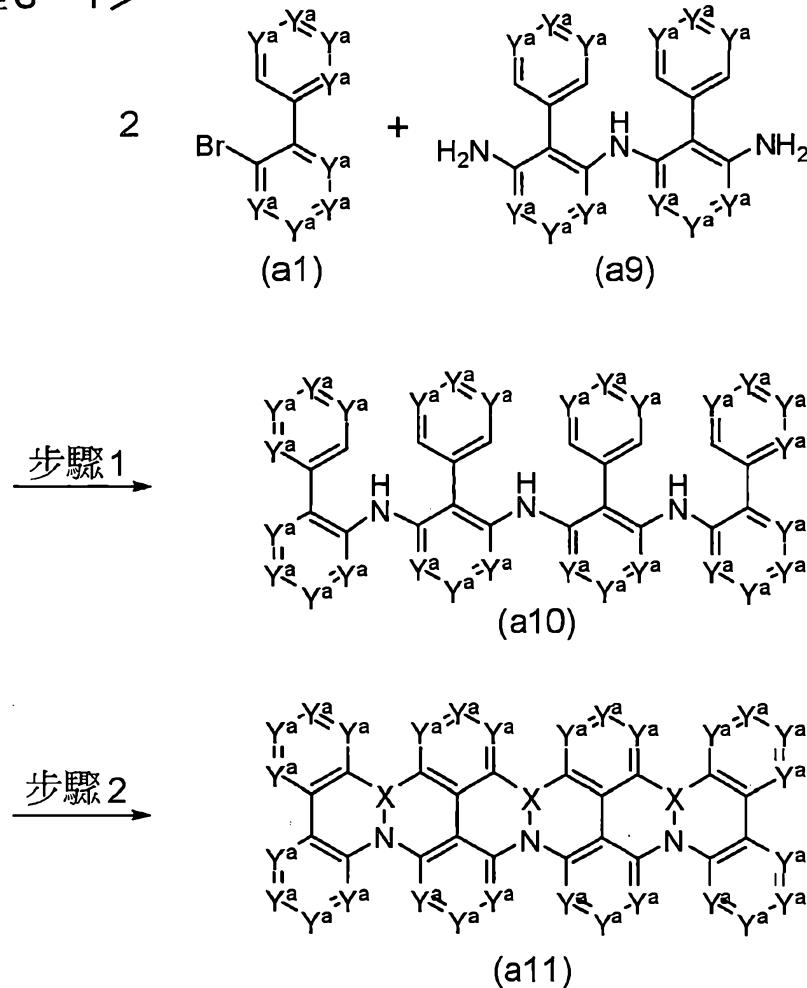
<流程2-3>



【0205】 於流程 3 中，除了變更進行反應的化合物以外，可與流程 1 同樣地獲得目標化合物。

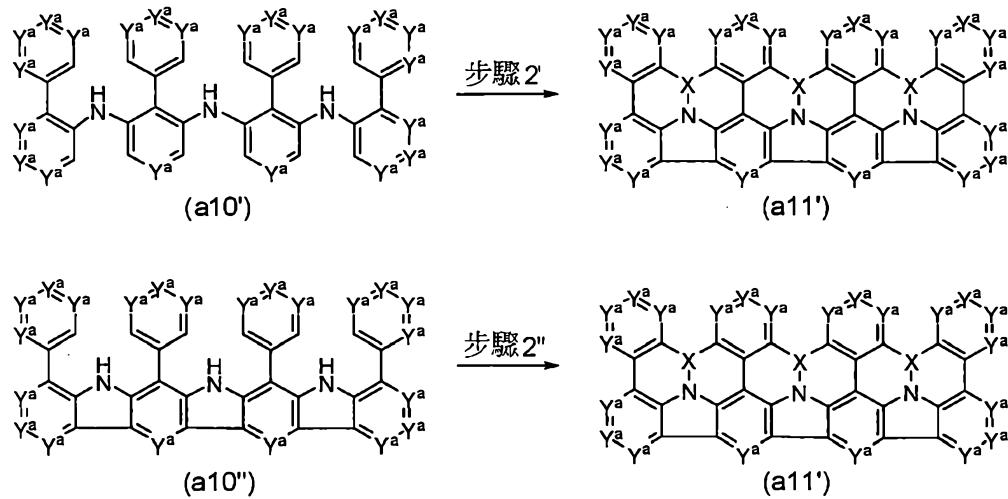
【0206】

<流程 3-1>



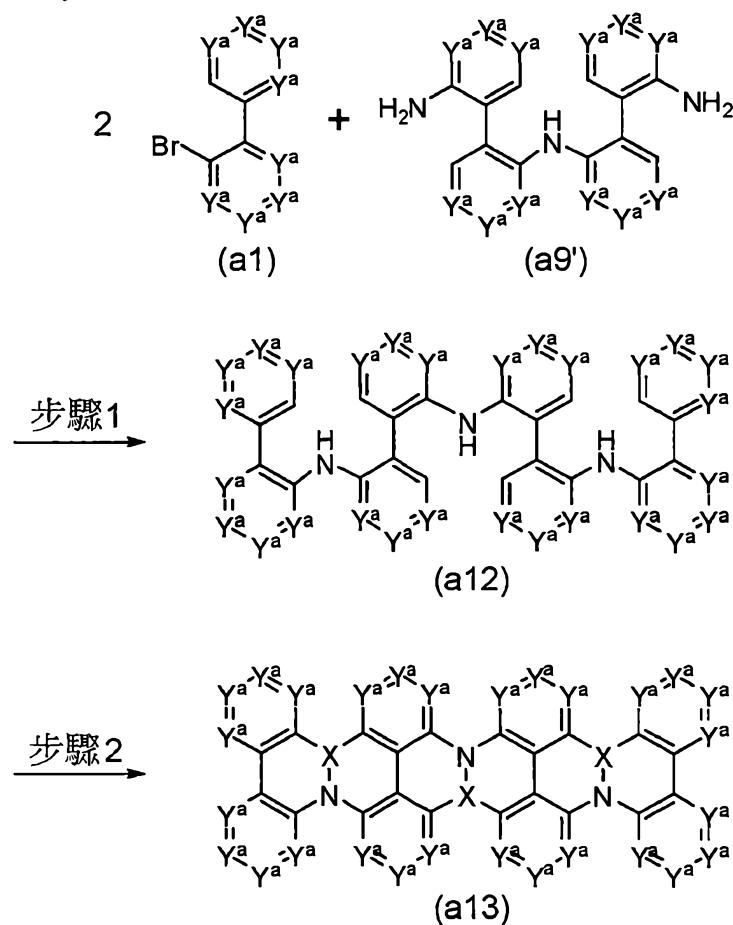
【0207】

<流程3-2>



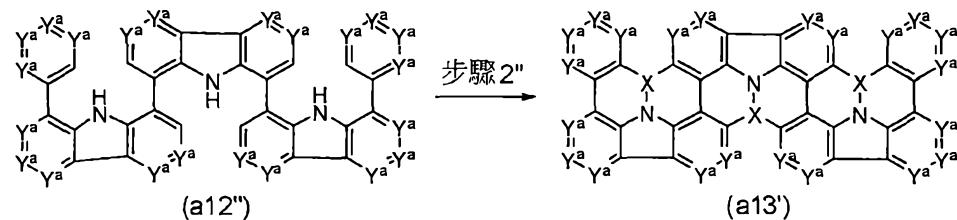
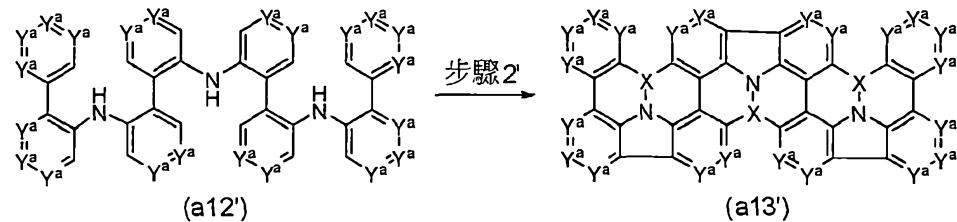
【0208】

<流程3-3>



【0209】

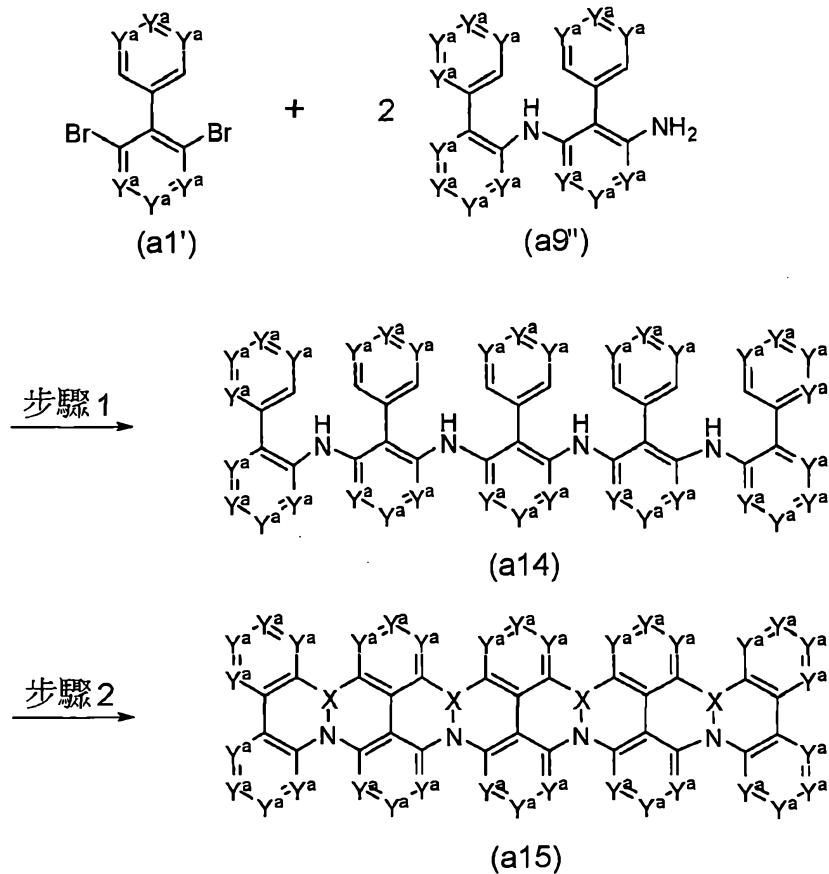
<流程3-4>



【0210】 於流程 4 中，除了變更進行反應的化合物以外，可與流程 1 同樣地獲得目標化合物。

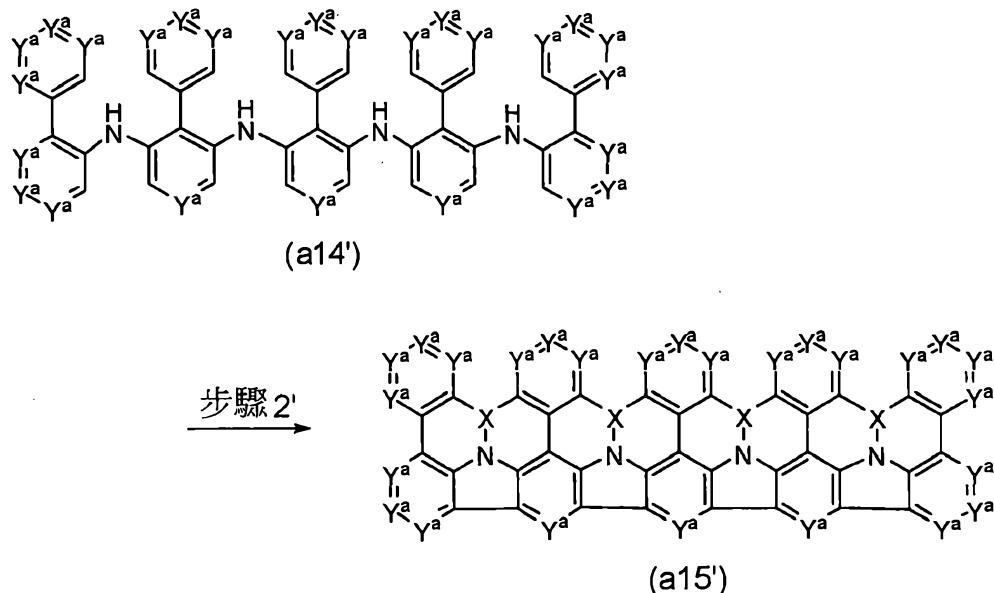
【0211】

<流程 4-1>



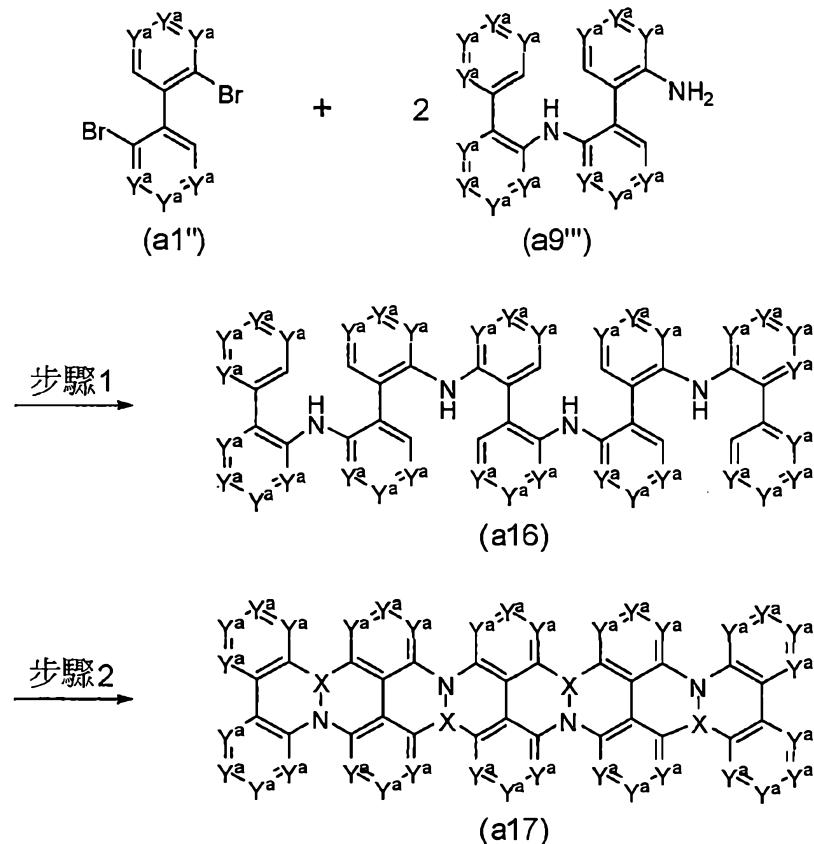
【0212】

<流程 4-2>



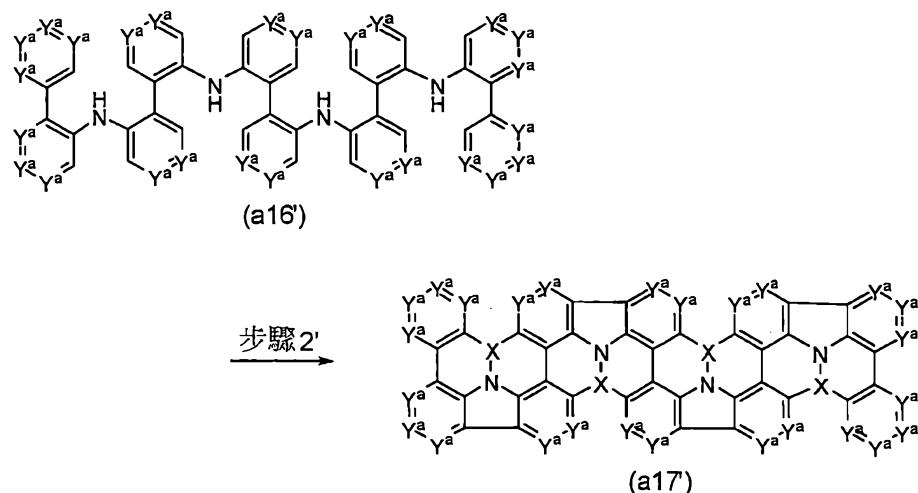
【0213】

<流程4-3>



【0214】

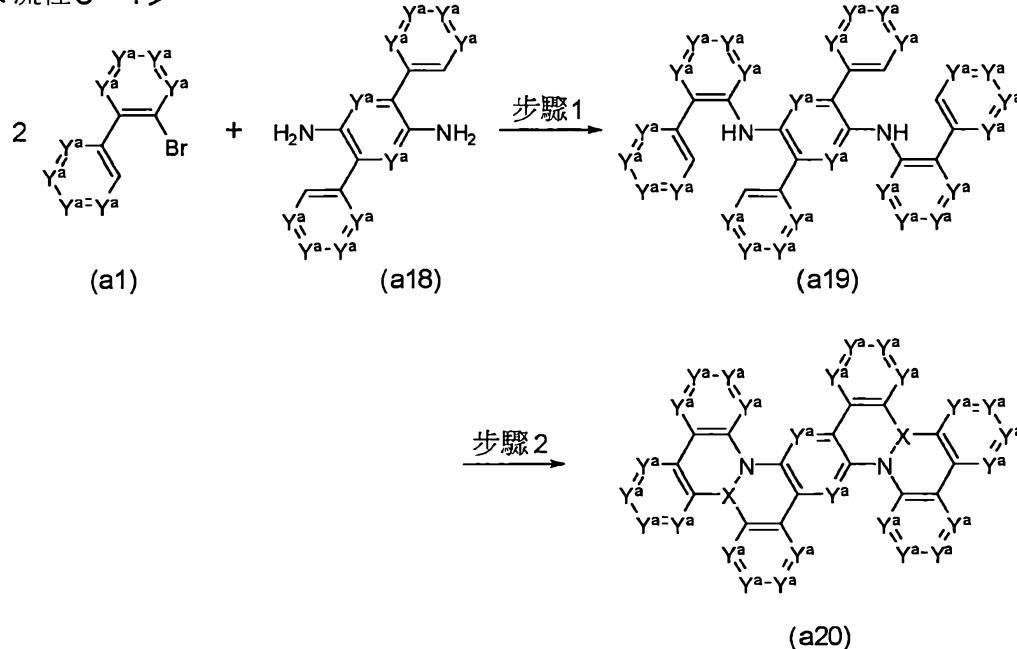
<流程4-4>



【0215】 於流程 5 中，除了變更進行反應的化合物以外，可與流程 1 同樣地獲得目標化合物。

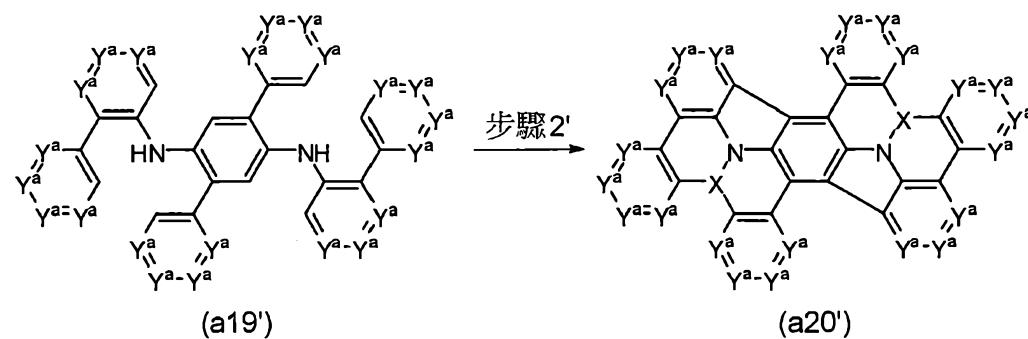
【0216】

<流程 5-1>



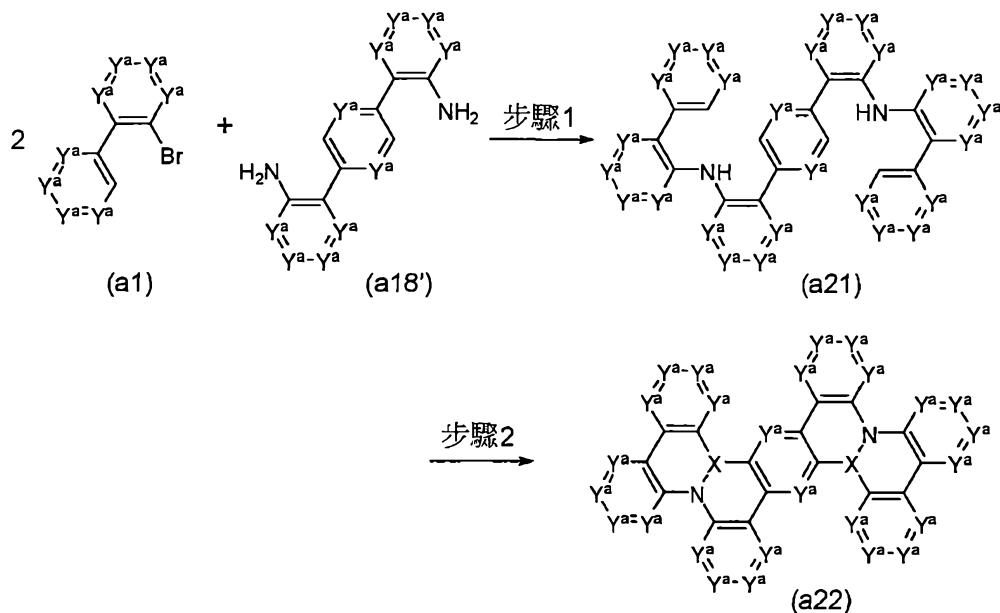
【0217】

<流程 5-2>



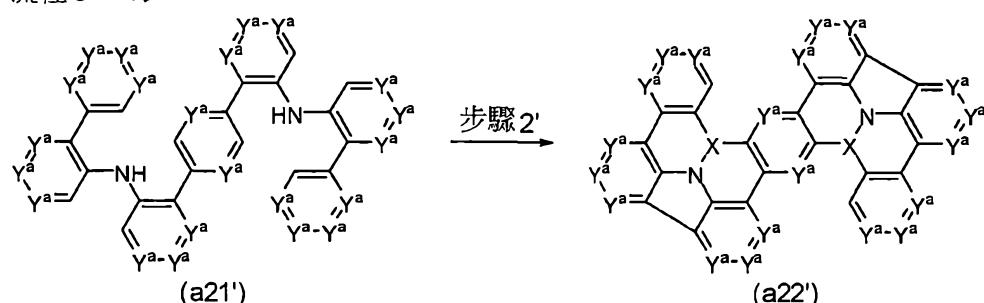
【0218】

<流程5-3>



【0219】

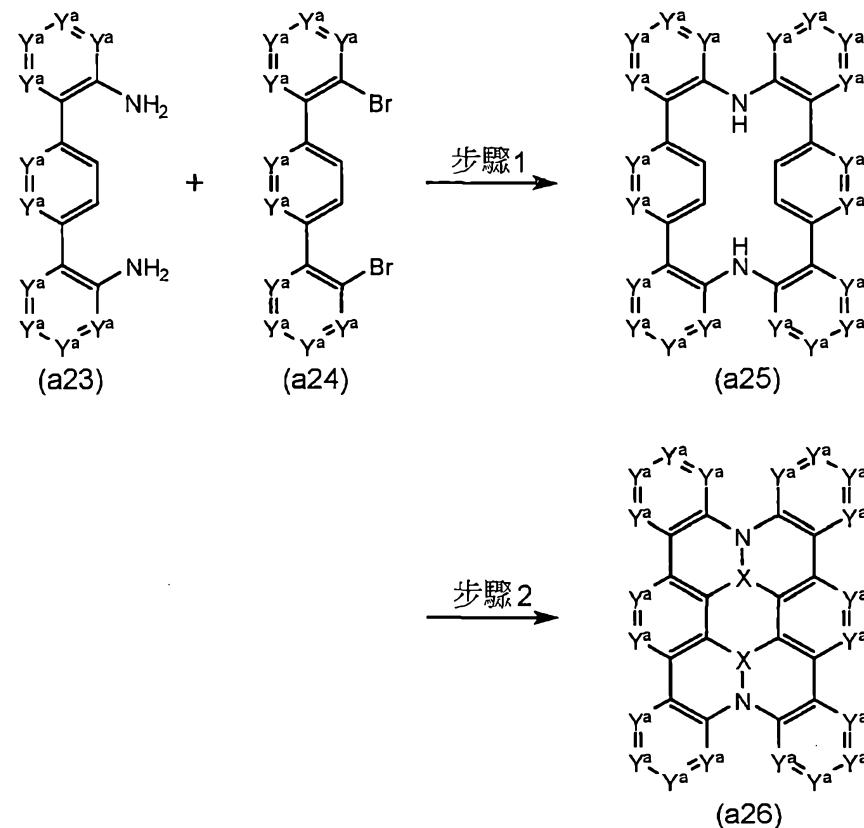
<流程5-4>



【0220】 於流程 6 中，除了變更進行反應的化合物以外，可與流程 1 同樣地獲得目標化合物。

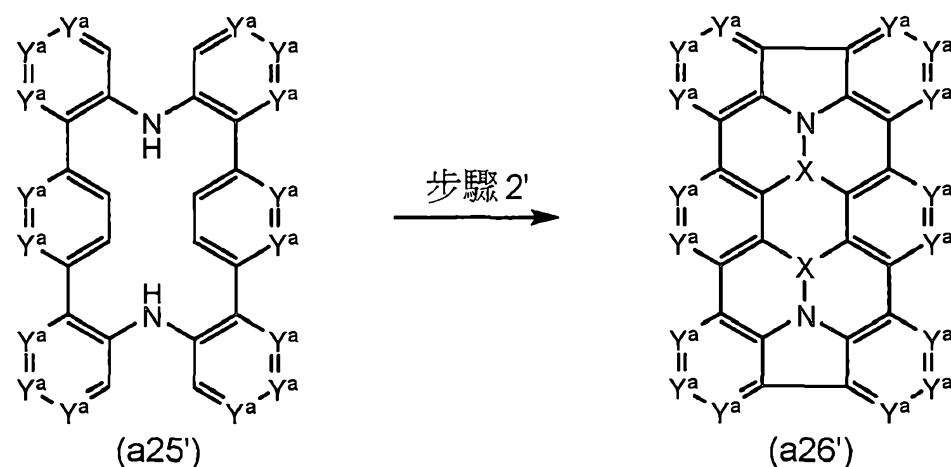
【0221】

<流程6-1>



【0222】

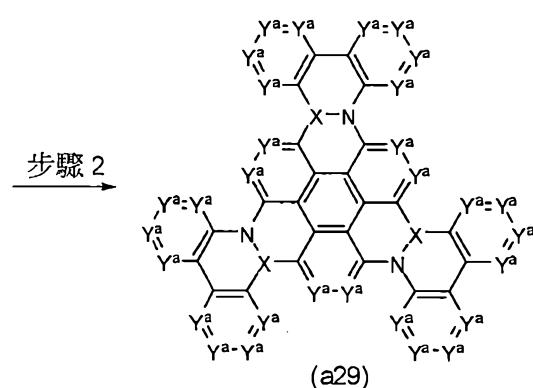
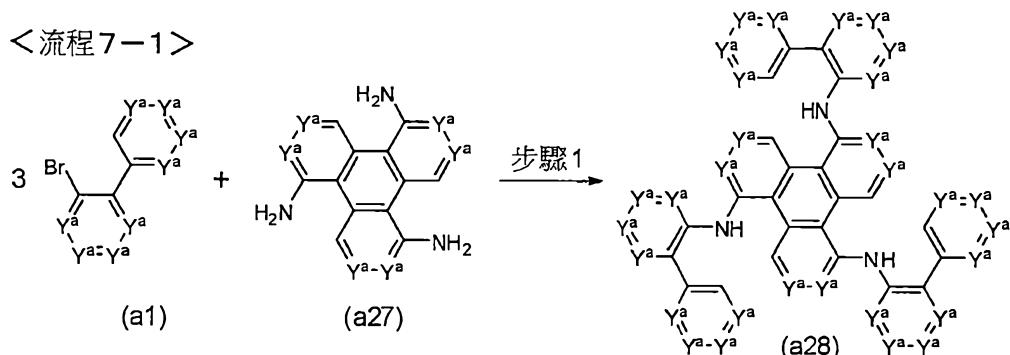
<流程6-2>



【0223】 於流程 7 中，除了變更進行反應的化合物以外，可與流

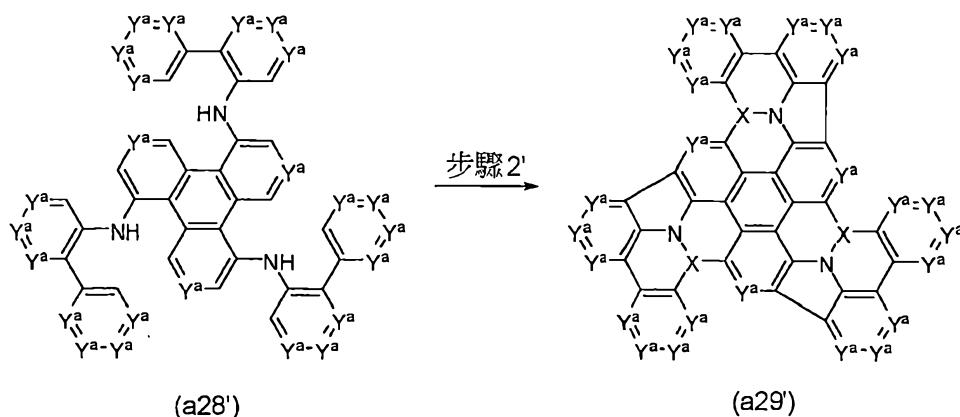
程 1 同樣地獲得目標化合物。

【0224】



【0225】

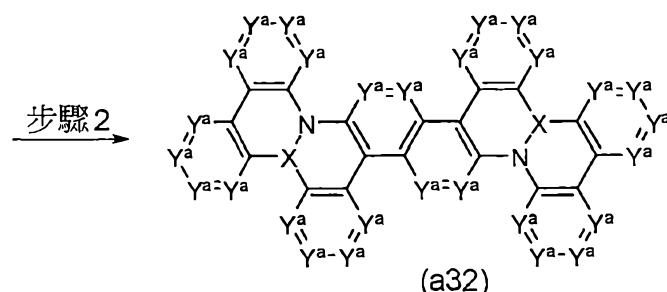
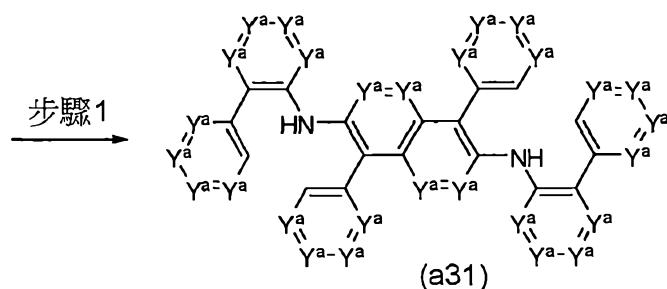
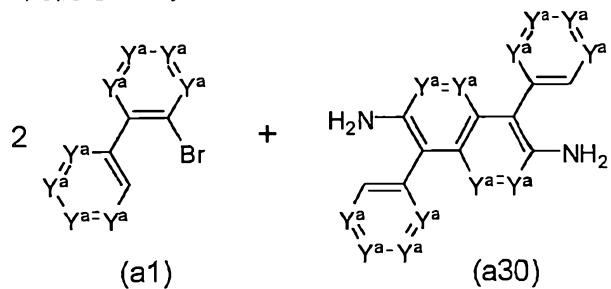
<流程 7-2>



【0226】 於流程 8 中，除了變更進行反應的化合物以外，可與流程 1 同樣地獲得目標化合物。

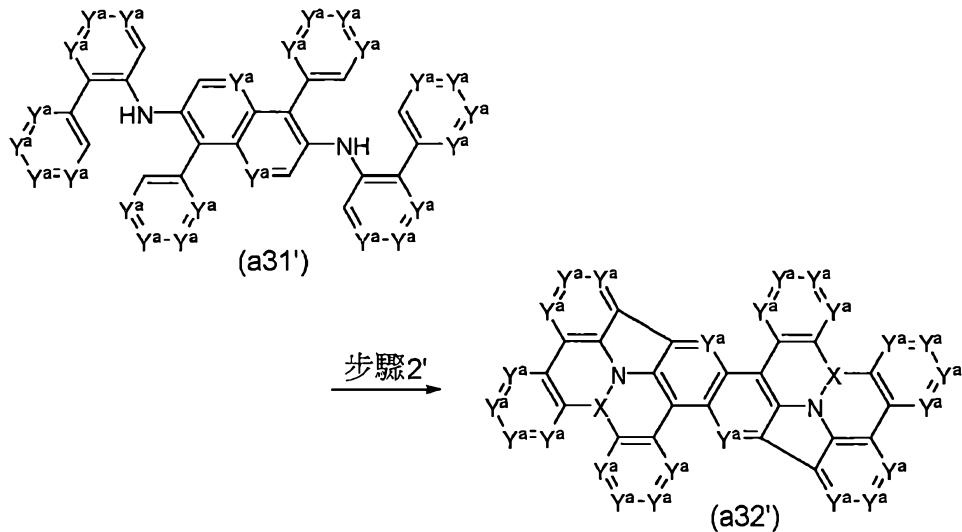
【0227】

<流程 8-1>



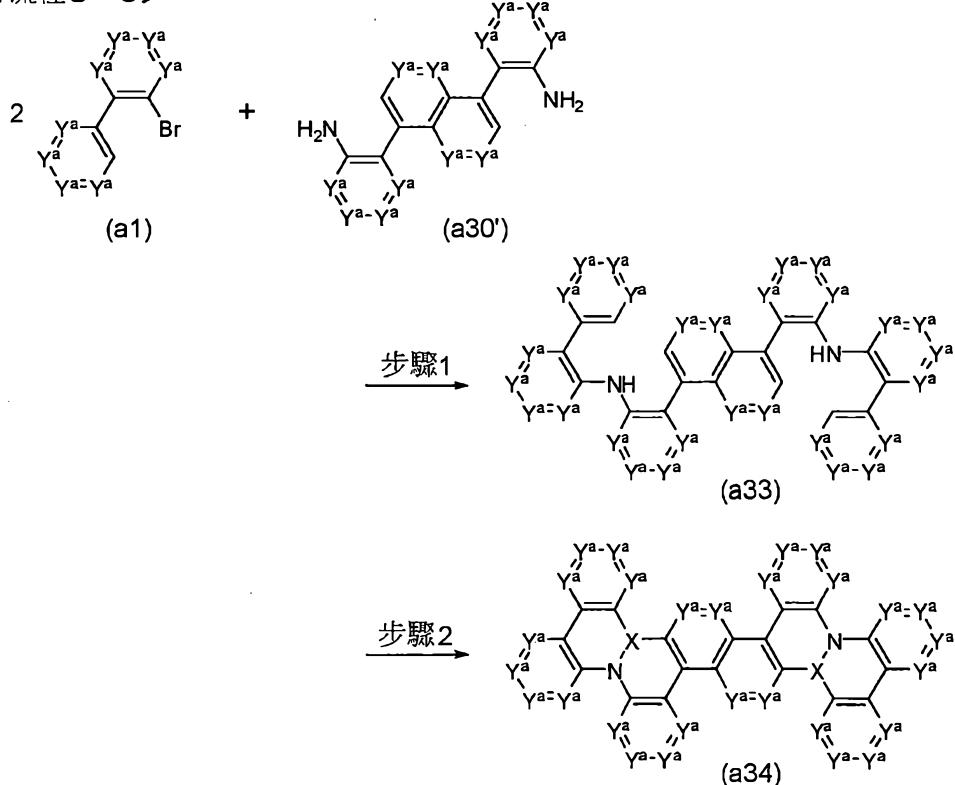
【0228】

<流程8-2>



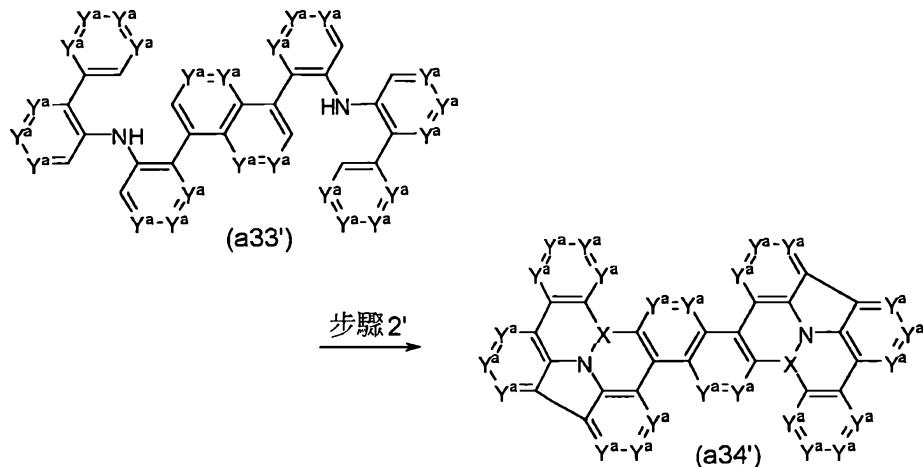
【0229】

<流程8-3>



【0230】

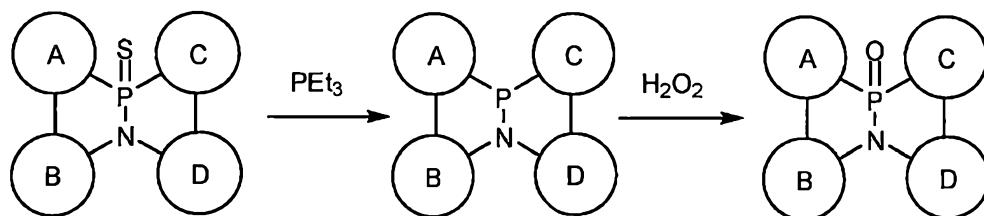
<流程 8-4>



【0231】 另外，由 X 為 P=S 的情形的化合物向 X 為 P 或 P=O 的情形的化合物的轉變可依照以下的流程 9 來進行。關於本發明的其他化合物，亦可進行同樣的轉變。

【0232】

<流程 9>

**【0233】 3.有機電場發光元件**

本發明的多環芳香族化合物例如可用作有機電場發光元件的材料。以下，根據圖式對本實施形態的有機電場發光元件加以詳細說明。圖 1 為表示本實施形態的有機電場發光元件的概略剖面圖。

【0234】 <有機電場發光元件的構造>

圖 1 所示的有機電場發光元件 100 具有基板 101、設於基板 101 上的陽極 102、設於陽極 102 上的電洞注入層 103、設於電洞注入層 103 上的電洞傳輸層 104、設於電洞傳輸層 104 上的發光層 105、設於發光層 105 上的電子傳輸層 106、設於電子傳輸層 106 上的電子注入層 107 及設於電子注入層 107 上的陰極 108。

【0235】 再者，有機電場發光元件 100 亦可將製作順序顛倒而設定為例如以下構成：具有基板 101、設於基板 101 上的陰極 108、設於陰極 108 上的電子注入層 107、設於電子注入層 107 上的電子傳輸層 106、設於電子傳輸層 106 上的發光層 105、設於發光層 105 上的電洞傳輸層 104、設於電洞傳輸層 104 上的電洞注入層 103 及設於電洞注入層 103 上的陽極 102。

【0236】 上述各層並非全部必需，將最小構成單位設定為包含陽極 102、發光層 105、電子傳輸層 106 及/或電子注入層 107 以及陰極 108 的構成，電洞注入層 103 及電洞傳輸層 104 為任意設置的層。另外，上述各層可分別包含單一層，亦可包含多層。

【0237】 構成有機電場發光元件的層的態樣除了上述「基板/陽極/電洞注入層/電洞傳輸層/發光層/電子傳輸層/電子注入層/陰極」的構成態樣以外，亦可為「基板/陽極/電洞傳輸層/發光層/電子傳輸層/電子注入層/陰極」、「基板/陽極/電洞注入層/發光層/電子傳輸層/電子注入層/陰極」、「基板/陽極/電洞注入層/電洞傳輸層/發光層/電子注入層/陰極」、「基板/陽極/電洞注入層/電洞傳輸層/發光層/電子注入層/陰極」。

電子傳輸層/陰極」、「基板/陽極/發光層/電子傳輸層/電子注入層/陰極」、「基板/陽極/電洞傳輸層/發光層/電子注入層/陰極」、「基板/陽極/電洞傳輸層/發光層/電子傳輸層/陰極」、「基板/陽極/電洞注入層/發光層/電子注入層/陰極」、「基板/陽極/電洞注入層/發光層/電子傳輸層/陰極」、「基板/陽極/發光層/電子傳輸層/陰極」、「基板/陽極/發光層/電子注入層/陰極」的構成態樣。

【0238】 <有機電場發光元件中的基板>

基板 101 成爲有機電場發光元件 100 的支撐體，通常可使用石英、玻璃、金屬、塑膠等。基板 101 可根據目的而形成爲板狀、膜狀或片狀，例如可使用玻璃板、金屬板、金屬箔、塑膠膜、塑膠片等。其中，較佳爲玻璃板及聚酯、聚甲基丙烯酸酯、聚碳酸酯、聚礦等透明的合成樹脂製的板。若爲玻璃基板，則可使用鹼石灰玻璃（soda lime glass）或無鹼玻璃等，另外，厚度亦只要有保持機械強度的充分厚度即可，故例如只要爲 0.2 mm 以上即可。厚度的上限值例如爲 2 mm 以下，較佳爲 1 mm 以下。關於玻璃的材質，由於自玻璃的溶出離子以少爲佳，故較佳爲無鹼玻璃，但實施了 SiO_2 等的阻障塗佈（barrier coat）的鹼石灰玻璃亦有市售，故亦可使用該玻璃。另外，對於基板 101，爲了提高阻氣性，亦可於至少單面設置緻密的矽氧化膜等阻氣膜，尤其於使用阻氣性低的合成樹脂製的板、膜或片作爲基板 101 的情形時，較佳爲設置阻氣膜。

【0239】 <有機電場發光元件中的陽極>

陽極 102 發揮對發光層 105 注入電洞的功能。再者，於在陽極 102 與發光層 105 之間設有電洞注入層 103 及/或電洞傳輸層 104 的情形時，經由該些層對發光層 105 注入電洞。

【0240】 形成陽極 102 的材料可列舉無機化合物及有機化合物。
 無機化合物例如可列舉：金屬（鋁、金、銀、鎳、鈀、鉻等）、金屬氧化物（銦的氧化物、錫的氧化物、銦-錫氧化物（Indium Tin Oxide, ITO）、銦-鋅氧化物（Indium Zinc Oxide, IZO）等）、鹵化金屬（碘化銅等）、硫化銅、碳黑、ITO 玻璃或奈塞玻璃（NESA Glass）等。有機化合物例如可列舉：聚(3-甲基噻吩)等聚噻吩、聚吡咯、聚苯胺等導電性聚合物等。除此以外，可自被用作有機電場發光元件的陽極的物質中適當選擇使用。

【0241】 關於透明電極的電阻，只要可對發光元件的發光供給充分的電流，則並無限定，就發光元件的消耗電力的觀點而言，理想的是低電阻。例如若為 $300 \Omega/\square$ 以下的 ITO 基板則作為元件電極而發揮功能，但目前由於亦可供給 $10 \Omega/\square$ 左右的基板，故尤其理想的是使用例如 $100 \Omega/\square \sim 5 \Omega/\square$ 、較佳為 $50 \Omega/\square \sim 5 \Omega/\square$ 的低電阻品。ITO 的厚度可根據電阻值來任意選擇，通常大多於 $50 \text{ nm} \sim 200 \text{ nm}$ 之間使用。

【0242】 <有機電場發光元件中的電洞注入層、電洞傳輸層>

電洞注入層 103 發揮將自陽極 102 移動而來的電洞高效地注入至發光層 105 內或電洞傳輸層 104 內的功能。電洞傳輸層 104 發揮將自陽極 102 注入的電洞或自陽極 102 經由電洞注入層 103

注入的電洞高效地傳輸至發光層 105 的功能。電洞注入層 103 及電洞傳輸層 104 分別是藉由將電洞注入/傳輸材料的一種或兩種以上積層、混合來形成，或藉由電洞注入/傳輸材料與高分子黏結劑的混合物而形成。另外，亦可於電洞注入/傳輸材料中添加如氯化鐵（III）般的無機鹽而形成層。

【0243】 電洞注入/傳輸性物質必須於被施加了電場的電極間高效地注入/傳輸來自正極的電洞，理想的是電洞注入效率高，且高效地傳輸所注入的電洞。因此，較佳為電離電位（ionization potential）小、而且電洞遷移率（hole mobility）大、進而穩定性優異、於製造時及使用時不易產生為陷阱（trap）的雜質的物質。

【0244】 形成電洞注入層 103 或電洞傳輸層 104 的材料（電洞層用材料）可使用具有上述通式（I）所表示的部分結構的多環芳香族化合物或其鹽。電洞注入層 103 或電洞傳輸層 104 中的具有上述通式（I）所表示的部分結構的多環芳香族化合物或其鹽的含量視該等的種類而不同，只要根據該等的特性來決定即可。具有上述通式（I）所表示的部分結構的多環芳香族化合物或其鹽的含量的標準較佳為電洞層用材料總體的 1 重量%～100 重量%，更佳為 10 重量%～100 重量%，進而佳為 50 重量%～100 重量%，尤佳為 80 重量%～100 重量%。於不單獨（100 重量%）使用具有上述通式（I）所表示的部分結構的多環芳香族化合物或其鹽的情形時，亦可混合以下將詳述的其他材料。

【0245】 形成電洞注入層 103 及電洞傳輸層 104 的其他材料可自

以下材料中選擇使用任意者：於光導電材料中，作為電洞的電荷傳輸材料而先前以來慣用的化合物，p型半導體、有機電場發光元件的電洞注入層及電洞傳輸層中使用的公知材料。該些材料的具體例為咔唑衍生物（N-苯基咔唑、聚乙烯基咔唑等），雙(N-芳基咔唑)或雙(N-烷基咔唑)等雙咔唑衍生物，三芳基胺衍生物（於主鏈或側鏈上具有芳香族三級氨基的聚合物，1,1-雙(4-二-對甲苯基胺基苯基)環己烷、N,N'-二苯基-N,N'-二(3-甲基苯基)-4,4'-二胺基聯苯、N,N'-二苯基-N,N'-二萘基-4,4'-二胺基聯苯、N,N'-二苯基-N,N'-二(3-甲基苯基)-4,4'-二苯基-1,1'-二胺、N,N'-二萘基-N,N'-二苯基-4,4'-二苯基-1,1'-二胺、4,4',4"-三(3-甲基苯基(苯基)胺基)三苯基胺等三苯基胺衍生物，星爆狀胺(starburst amine)衍生物等），二苯乙烯衍生物，酞菁衍生物（不含金屬的酞菁、銅酞菁等），吡唑啉衍生物、腙系化合物、苯并呋喃衍生物或噻吩衍生物、噁二唑衍生物、卟啉衍生物等雜環化合物，聚矽烷等。聚合物系中較佳為於側鏈上具有上述單體的聚碳酸酯或苯乙烯衍生物、聚乙基咔唑及聚矽烷等，只要為形成製作發光元件所必需的薄膜、可自陽極注入電洞、進而可傳輸電洞的化合物，則並無特別限定。

【0246】 另外，亦已知有機半導體的導電性視其摻雜(doping)而受到強烈影響。此種有機半導體基質物質包含供電子性良好的化合物或受電子性(electron-accepting)良好的化合物。為了摻雜供電子物質，已知四氰基醌二甲烷(Tetracyanoquinodimethane, TCNQ)或2,3,5,6-四氟四氰基-1,4-苯并醌二甲烷

(Tetrafluoro-tetracyanoquinodimethane , F4TCNQ) 等強的電子受體 (electron acceptor) (例如參照文獻 「 M.Pfeiffer,A.Beyer,T.Fritz,K.Leo , 應用物理快報 (Appl.Phys.Lett.) , 73 (22) , 3202-3204(1998) 」 及文獻 「 J.Blochwitz,M.Pfeiffer,T.Fritz,K.Leo , 應用物理快報 (Appl.Phys.Lett.) , 73 (6) , 729-731 (1998) 」) 。該些化合物藉由供電子型基質物質 (電洞傳輸物質) 的電子移動製程而生成所謂電洞。基質物質的導電性視電洞的個數及遷移率 (mobility) 而相當大幅度地變化。具有電洞傳輸特性的基質物質例如已知有聯苯胺衍生物 (N,N'-二苯基-N,N'-二(3-甲基苯基)-1,1'-聯苯-4,4'-二胺 (N,N'-diphenyl-N,N'-di(3-methylphenyl)-1,1'-biphenyl-4,4'-diamine , TPD) 等) 或星爆狀胺衍生物 (4,4',4"-三(N,N-二苯基-胺基)三苯基胺 (4,4',4"-tris(N,N-diphenyl-amino)triphenylamine , TDATA) 等) 、或特定的金屬酞菁 (特別是鋅酞菁 ZnPc 等) (日本專利特開 2005-167175 號公報) 。

【0247】 <有機電場發光元件中的發光層>

發光層 105 藉由在被施加了電場的電極間使自陽極 102 注入的電洞、與自陰極 108 注入的電子再結合而發光。形成發光層 105 的材料只要為藉由電洞與電子的再結合受到激發而發光的化合物 (發光性化合物) 即可，較佳為可形成穩定的薄膜形狀，且於固體狀態下顯示出強的發光 (螢光及/或磷光) 效率的化合物。本實施形態的發光元件的發光材料為螢光性或磷光性均可。

【0248】 發光層爲單一層或包含多層均可，分別是藉由發光材料（主體材料、摻雜材料）所形成。主體材料與摻雜材料分別爲一種或多種的組合均可。摻雜材料含有於主體材料整體中或局部地含有均可。關於摻雜方法，可藉由與主體材料的共蒸鍍法來形成，亦可與主體材料預先混合後同時蒸鍍。

【0249】 主體材料的使用量視主體材料的種類而不同，只要根據該主體材料的特性來決定即可。主體材料的使用量的標準較佳爲發光材料總體的 50 重量%～99.999 重量%，更佳爲 80 重量%～99.95 重量%，進而佳爲 90 重量%～99.9 重量%。

【0250】 摻雜材料的使用量視摻雜材料的種類而不同，只要根據該摻雜材料的特性來決定即可（例如若使用量過多則可能有濃度消光現象）。摻雜劑的使用量的標準較佳爲發光材料總體的 0.001 重量%～50 重量%，更佳爲 0.05 重量%～20 重量%，進而佳爲 0.1 重量%～10 重量%。

【0251】 具有上述通式（I）所表示的部分結構的多環芳香族化合物或其鹽亦可用作主體材料或摻雜材料。各材料中的具有上述通式（I）所表示的部分結構的多環芳香族化合物或其鹽的含量視該等的種類而不同，只要根據該等的特性來決定即可。具有上述通式（I）所表示的部分結構的多環芳香族化合物或其鹽的含量的標準較佳爲主體材料（或摻雜材料）的總體的 1 重量%～100 重量%，更佳爲 10 重量%～100 重量%，進而佳爲 50 重量%～100 重量%，尤佳爲 80 重量%～100 重量%。於不單獨（100 重量%）使用

具有上述通式(I)所表示的部分結構的多環芳香族化合物或其鹽的情形時，只要混合以下將詳述的其他主體材料（或摻雜材料）即可。

【0252】 主體材料並無特別限定，可較佳地使用先前以來作為發光體而已知的蒽或茈等縮合環衍生物、以三(8-羥基喹啉)鋁為代表的金屬螯合化類冂辛(oxinoid)化合物、雙苯乙烯基蒽衍生物或二苯乙烯基苯衍生物等雙苯乙烯基衍生物、四苯基丁二烯衍生物、香豆素衍生物、噁二唑衍生物、吡咯並吡啶衍生物、哌瑞酮衍生物、環戊二烯衍生物、噁二唑並吡啶衍生物、吡咯並吡咯衍生物、茀衍生物、苯并茀衍生物，聚合物系中可較佳地使用聚苯乙炔衍生物、聚對苯衍生物、以及聚噁吩衍生物。

【0253】 除此以外，主體材料可自化學工業 2004 年 6 月號 13 頁及其中所列舉的參考文獻等中記載的化合物等中適當選擇使用。

【0254】 另外，摻雜材料並無特別限定，可使用已知的化合物，可根據所需的發光色自各種材料中選擇。具體而言，例如可列舉：菲、蒽、茈、稠四苯、稠五苯、茈、萘并茈、二苯并茈、紅螢烯(rubrene)及茚等縮合環衍生物，苯并噁唑衍生物、苯并噁二唑衍生物、苯并咪唑衍生物、苯并三唑衍生物、噁唑衍生物、噁二唑衍生物、咪唑衍生物、噁二唑衍生物、三唑衍生物、吡唑啉衍生物、二苯乙烯衍生物、噁吩衍生物、四苯基丁二烯衍生物、環戊二烯衍生物，雙苯乙烯基蒽衍生物或二苯乙烯基苯衍生物等雙苯乙烯基衍生物（日本專利特開平 1-245087 號公報），



雙苯乙烯基伸芳基衍生物（日本專利特開平 2-247278 號公報），二氮雜苯并二茚衍生物，呋喃衍生物、苯并呋喃衍生物、苯基異苯并呋喃、二-均三甲苯基異苯并呋喃、二(2-甲基苯基)異苯并呋喃、二(2-三氟甲基苯基)異苯并呋喃、苯基異苯并呋喃等異苯并呋喃衍生物，二苯并呋喃衍生物，7-二烷基胺基香豆素衍生物、7-哌啶基香豆素衍生物、7-羥基香豆素衍生物、7-甲氧基香豆素衍生物、7-乙醯氧基香豆素衍生物、3-苯并噁唑基香豆素衍生物、3-苯并咪唑基香豆素衍生物、3-苯并噁唑基香豆素衍生物等香豆素衍生物，二氰基亞甲基吡喃衍生物、二氰基亞甲硫基吡喃衍生物、聚次甲基衍生物、花青衍生物、氧化苯并蒽衍生物、二苯并哌喃（xanthene）衍生物、若丹明（rhodamine）衍生物、螢光素（fluorescein）衍生物、吡喃鎓（pyrylium）衍生物、喹諾酮（carbostyryl）衍生物、吖啶衍生物、噁嗪（oxazine）衍生物、苯醚衍生物、喹吖啶酮衍生物、喹唑啉衍生物、吡咯並吡啶衍生物、呋喃並吡啶（fuopyridine）衍生物、1,2,5-噁二唑並茈衍生物、吡咯亞甲基（pyrromethene）衍生物、哌瑞酮衍生物、吡咯並吡咯衍生物、方酸內鎓（squarylium）衍生物、紫蒽酮（violanthrone）衍生物、吩嗪衍生物、吖啶酮（acridone）衍生物、去氮雜黃素（deazaflavin）衍生物、茀衍生物及苯并茀衍生物等。

【0255】 若依發色光來例示，則藍色～藍綠色摻雜材料可列舉：萘、蒽、菲、芘、聯三伸苯（triphenylene）、芘、茀、茚、巰等芳香族烴化合物或其衍生物，呋喃、吡咯、噁吩、矽雜環戊二烯、9-

矽茀、9,9'-螺二矽茀、苯并噻吩、苯并呋喃、吲哚、二苯并噻吩、二苯并呋喃、咪唑並吡啶(imidazopyridine)、啡啉、吡嗪、萘啶(naphthyridine)、喹噁啉、吡咯並吡啶、噻噁噁(thioxanthene)等芳香族雜環化合物或其衍生物，二苯乙烯基苯衍生物、四苯基丁二烯衍生物、二苯乙烯衍生物、醛連氮(aldazine)衍生物、香豆素衍生物，咪唑、噻唑、噻二唑、咔唑、噁唑、噁二唑、三唑等唑衍生物及其金屬錯合物及 N,N'-二苯基-N,N'-二(3-甲基苯基)-4,4'-二苯基-1,1'-二胺所代表的芳香族胺衍生物等。

【0256】 另外，綠色～黃色摻雜材料可列舉：香豆素衍生物、鄰苯二甲醯亞胺衍生物、萘二甲醯亞胺衍生物、哌瑞酮衍生物、吡咯並吡咯衍生物、環戊二烯衍生物、吖啶酮衍生物、喹吖啶酮衍生物及紅螢烯等稠四苯衍生物等，進而亦可列舉於作為上述藍色～藍綠色摻雜材料而例示的化合物中導入芳基、雜芳基、芳基乙稀基、胺基、氯基等可使波長變長的取代基而成的化合物作為較佳例。

【0257】 進而，橙色～紅色摻雜材料可列舉：雙(二異丙基苯基)菲四羧酸醯亞胺等萘二甲醯亞胺衍生物、哌瑞酮衍生物、以乙醯丙酮或苯甲醯基丙酮與啡啉等作為配位基的铕(Eu)錯合物等稀土錯合物、4-(二氯基亞甲基)-2-甲基-6-(對二甲基胺基苯乙稀基)-4H-吡喃或其類似物，鎂酞菁、鋁氯酞菁等金屬酞菁衍生物，若丹明化合物、去氮雜黃素衍生物、香豆素衍生物、喹吖啶酮衍生物、啡噁嗪衍生物、噁嗪衍生物、喹唑啉衍生物、吡咯並吡啶

衍生物、方酸內鎘衍生物、紫蔥酮衍生物、吩嗪衍生物、啡噁嗪衍生物及噻二唑並苳衍生物等，進而亦可列舉於作為上述藍色～藍綠色及綠色～黃色摻雜材料而例示的化合物中導入芳基、雜芳基、芳基乙烯基、胺基、氰基等可使波長變長的取代基而成的化合物作為較佳例。進而，亦可列舉三(2-苯基吡啶)銻 (III) 所代表的以銻或鉑作為中心金屬的磷光性金屬錯合物作為較佳例。

【0258】 除此以外，摻雜劑亦可自化學工業 2004 年 6 月號 13 頁及其中所列舉的參考文獻等中記載的化合物等中適當選擇使用。

【0259】 上述摻雜材料中，尤佳為苳衍生物、硼烷衍生物、含胺苯乙烯基衍生物、芳香族胺衍生物、香豆素衍生物、吡喃衍生物、銻錯合物或鉑錯合物。

【0260】 苳衍生物例如可列舉：3,10-雙(2,6-二甲基苯基)苳、3,10-雙(2,4,6-三甲基苯基)苳、3,10-二苯基苳、3,4-二苯基苳、2,5,8,11-四-第三丁基苳、3,4,9,10-四苯基苳、3-(1'-苳基)-8,11-二(第三丁基)苳、3-(9'-蔥基)-8,11-二(第三丁基)苳、3,3'-雙(8,11-二(第三丁基)苳基)等。

另外，亦可使用日本專利特開平 11-97178 號公報、日本專利特開 2000-133457 號公報、日本專利特開 2000-26324 號公報、日本專利特開 2001-267079 號公報、日本專利特開 2001-267078 號公報、日本專利特開 2001-267076 號公報、日本專利特開 2000-34234 號公報、日本專利特開 2001-267075 號公報、及日本專利特開 2001-217077 號公報等中記載的苳衍生物。

【0261】 硼烷衍生物例如可列舉：1,8-二苯基-10-(二-均三甲苯基硼基)蒽、9-苯基-10-(二-均三甲苯基硼基)蒽、4-(9'-蒽基)二-均三甲苯基硼基萘、4-(10'-苯基-9'-蒽基)二-均三甲苯基硼基萘、9-(二-均三甲苯基硼基)蒽、9-(4'-聯苯基)-10-(二-均三甲苯基硼基)蒽、9-(4'-(N-咔唑基)苯基)-10-(二-均三甲苯基硼基)蒽等。

另外，亦可使用國際公開第 2000/40586 號等中記載的硼烷衍生物。

【0262】 含胺的苯乙烯基衍生物例如可列舉：N,N,N',N'-四(4-聯苯基)-4,4'-二胺基二苯乙烯、N,N,N',N'-四(1-萘基)-4,4'-二胺基二苯乙烯、N,N,N',N'-四(2-萘基)-4,4'-二胺基二苯乙烯、N,N'-二(2-萘基)-N,N'-二苯基-4,4'-二胺基二苯乙烯、N,N'-二(9-菲基)-N,N'-二苯基-4,4'-二胺基二苯乙烯、4,4'-雙[4"-雙(二苯基胺基)苯乙烯基]-聯苯、1,4-雙[4'-雙(二苯基胺基)苯乙烯基]-苯、2,7-雙[4'-雙(二苯基胺基)苯乙烯基]-9,9-二甲基茀、4,4'-雙(9-乙基-3-咔唑乙烯基)-聯苯、4,4'-雙(9-苯基-3-咔唑乙烯基)-聯苯等。另外，亦可使用日本專利特開 2003-347056 號公報及日本專利特開 2001-307884 號公報等中記載的含胺的苯乙烯基衍生物。

【0263】 芳香族胺衍生物例如可列舉：N,N,N,N-四苯基蒽-9,10-二胺、9,10-雙(4-二苯基胺基-苯基)蒽、9,10-雙(4-二(1-萘基胺基)苯基)蒽、9,10-雙(4-二(2-萘基胺基)苯基)蒽、10-二-對甲苯基胺基-9-(4-二苯基胺基-1-萘基)蒽、10-二苯基胺基-9-(4-二苯基胺基-1-萘基)蒽、10-二苯基胺基-9-(6-二苯基胺基-2-萘基)蒽、[4-(4-



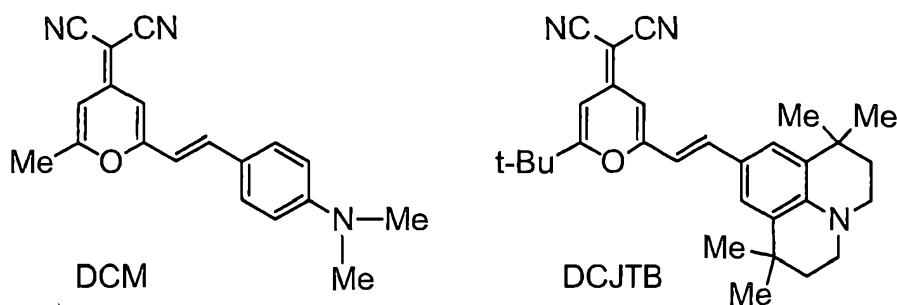
二苯基胺基-苯基)萘-1-基]-二苯基胺、[6-(4-二苯基胺基-苯基)萘-2-基]-二苯基胺、4,4'-雙[4-二苯基胺基萘-1-基]聯苯、4,4'-雙[6-二苯基胺基萘-2-基]聯苯、4,4"-雙[4-二苯基胺基萘-1-基]-對聯三苯、4,4"-雙[6-二苯基胺基萘-2-基]-對聯三苯等。

另外，亦可使用日本專利特開 2006-156888 號公報等中記載的芳香族胺衍生物。

【0264】 香豆素衍生物可列舉香豆素-6、香豆素-334 等。

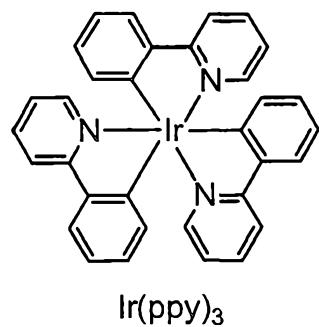
● 另外，亦可使用日本專利特開 2004-43646 號公報、日本專利特開 2001-76876 號公報及日本專利特開平 6-298758 號公報等中記載的香豆素衍生物。

【0265】 吡喃衍生物可列舉下述 4-(二氰基亞甲基)-2-甲基-6-(4-二甲基胺基基苯乙烯基)-4H-吡喃
 (4-(Dicyanomethylene)-2-methyl-6-(4-dimethylaminostyryl)-4H-pyran, DCM)、4-(二氰基亞甲基)-2-第三丁基-6-(1,1,7,7-四甲基久咯呢定-4-基-乙烯基)-4H-吡喃
 (4-(Dicyanomethylene)-2-tert-butyl-6-(1,1,7,7-tetramethyljulolidin-4-yl-vinyl)-4H-pyran, DCJTB) 等。



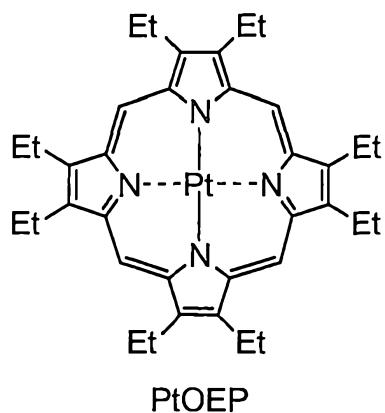
另外，亦可使用日本專利特開 2005-126399 號公報、日本專利特開 2005-097283 號公報、日本專利特開 2002-234892 號公報、日本專利特開 2001-220577 號公報、日本專利特開 2001-081090 號公報及日本專利特開 2001-052869 號公報等中記載的吡喃衍生物。

【0266】 銻錯合物可列舉下述 $\text{Ir}(\text{ppy})_3$ 等。



另外，亦可使用日本專利特開 2006-089398 號公報、日本專利特開 2006-080419 號公報、日本專利特開 2005-298483 號公報、日本專利特開 2005-097263 號公報及日本專利特開 2004-111379 號公報等中記載的銻錯合物。

【0267】 鉑錯合物可列舉下述八乙基卟吩鉑 ($\text{Pt}(\text{II})\text{Octaethylporphine}$, PtOEP) 等。



另外，亦可使用日本專利特開 2006-190718 號公報、日本專利特開 2006-128634 號公報、日本專利特開 2006-093542 號公報、日本專利特開 2004-335122 號公報及日本專利特開 2004-331508 號公報等中記載的鉑錯合物。

【0268】 <有機電場發光元件中的電子注入層、電子傳輸層>

電子注入層 107 發揮將自陰極 108 移動而來的電子高效地注入至發光層 105 內或電子傳輸層 106 內的功能。電子傳輸層 106 發揮將自陰極 108 注入的電子或自陰極 108 經由電子注入層 107 注入的電子高效地傳輸至發光層 105 的功能。電子傳輸層 106 及電子注入層 107 分別是藉由將電子傳輸/注入材料的一種或兩種以上積層、混合來形成，或藉由電子傳輸/注入材料與高分子黏結劑的混合物而形成。

【0269】 所謂電子注入/傳輸層，是指發揮自陰極注入電子、進而傳輸電子的作用的層，理想的是電子注入效率高，且高效地傳輸所注入的電子。因此，較佳為電子親和力大、而且電子遷移率大、進而穩定性優異、於製造時及使用時不易產生成為陷阱的雜質的

物質。然而，於考慮到電洞與電子的傳輸平衡的情形時，於主要發揮可高效地阻擋來自陽極的電洞並未再結合而流向陰極側的功能的情形時，即便電子傳輸能力不那麼高，亦具有與電子傳輸能力高的材料同等的提高發光效率的效果。因此，本實施形態中的電子注入/傳輸層亦可包含可高效地阻擋電洞的移動的層的功能。

【0270】 形成電子傳輸層 106 或電子注入層 107 的材料（電子層用材料）可使用具有上述通式（I）所表示的部分結構的多環芳香族化合物或其鹽。電子傳輸層 106 或電子注入層 107 中的具有上述通式（I）所表示的部分結構的多環芳香族化合物或其鹽的含量視該等的種類而不同，只要根據該等的特性來決定即可。具有上述通式（I）所表示的部分結構的多環芳香族化合物或其鹽的含量的標準較佳為電子傳輸層用材料（或電子注入層用材料）的總體的 1 重量%～100 重量%，更佳為 10 重量%～100 重量%，進而佳為 50 重量%～100 重量%，尤佳為 80 重量%～100 重量%。於不單獨（100 重量%）使用具有上述通式（I）所表示的部分結構的多環芳香族化合物或其鹽的情形時，亦可混合以下將詳述的其他材料。

【0271】 形成電子傳輸層或電子注入層的其他材料可自以下化合物中任意選擇而使用：於光導電材料中作為電子傳輸（electron transfer）化合物而先前以來慣用的化合物、有機電場發光元件的電子注入層及電子傳輸層中使用的公知的化合物。

【0272】 電子傳輸層或電子注入層中所用的材料較佳為含有選



自以下化合物中的至少一種：包含由選自碳、氫、氧、硫、矽及磷中的一種以上的原子構成的芳香環或雜芳香環的化合物，吡咯衍生物及其縮合環衍生物及具有受電子性氮的金屬錯合物。具體可列舉：萘、蒽等縮合環系芳香環衍生物，4,4'-雙(二苯基乙烯基)聯苯所代表的苯乙烯基系芳香環衍生物、哌瑞酮衍生物、香豆素衍生物、萘二甲醯亞胺衍生物、蒽醌或聯對苯醌等醌衍生物、氧化磷衍生物、咔唑衍生物及吲哚衍生物等。具有受電子性氮的金屬錯合物例如可列舉：羥基苯基噁唑錯合物等羥基噁唑錯合物、偶氮次甲基錯合物、托酚酮金屬錯合物、黃酮醇金屬錯合物及苯并喹啉金屬錯合物等。該些材料可單獨使用，亦可與不同的材料混合而使用。其中，就耐久性的觀點而言，可較佳地使用 9,10-雙(2-萘基)蒽等蒽衍生物、4,4'-雙(二苯基乙烯基)聯苯等苯乙烯基系芳香環衍生物、4,4'-雙(N-咔唑基)聯苯、1,3,5-三(N-咔唑基)苯等咔唑衍生物。

【0273】 另外，其他電子傳輸化合物的具體例可列舉：吡啶衍生物、萘衍生物、蒽衍生物、啡啉衍生物、哌瑞酮衍生物、香豆素衍生物、萘二甲醯亞胺衍生物、蒽醌衍生物、聯對苯醌衍生物、二苯醌衍生物、苝衍生物、噁二唑衍生物（1,3-雙[(4-第三丁基苯基)1,3,4-噁二唑基]苯等）、噻吩衍生物、三唑衍生物（N-萘基-2,5-二苯基-1,3,4-三唑等）、噻二唑衍生物、奧辛（oxine）衍生物的金屬錯合物、羥喹啉系金屬錯合物、喹噁啉衍生物、喹噁啉衍生物的聚合物、苯并唑（benzazole）類化合物、鎵錯合物、吡唑衍生

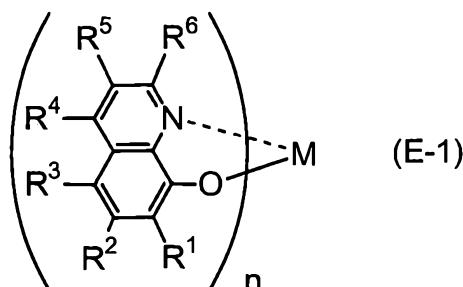
物、全氟化苯衍生物、三嗪衍生物、吡嗪衍生物、苯并喹啉衍生物（2,2'-雙(苯并[h]喹啉-2-基)-9,9'-螺二茀等）、咪唑並吡啶衍生物、硼烷衍生物、苯并咪唑衍生物（三(N-苯基苯并咪唑-2-基)苯等）、苯并噁唑衍生物、苯并噻唑衍生物、喹啉衍生物、三聯吡啶等低聚吡啶衍生物、聯吡啶衍生物、三聯吡啶衍生物（1,3-雙(4'-(2,2':6'2"-三聯吡啶基))苯等）、萘啶衍生物（雙(1-萘基)-4-(1,8-萘啶-2-基)苯基氧化膦等）、醛連氮衍生物、咔唑衍生物、吲哚衍生物、氧化磷衍生物、雙苯乙烯基衍生物等。

【0274】 另外，亦可使用具有受電子性氮的金屬錯合物，例如可列舉羥喹啉系金屬錯合物或羥基苯基噁唑錯合物等羥基唑錯合物、偶氮次甲基錯合物、托酚酮金屬錯合物、黃酮醇金屬錯合物及苯并喹啉金屬錯合物等。

【0275】 上述材料可單獨使用，亦可與不同的材料混合而使用。

【0276】 上述材料中，較佳為羥喹啉系金屬錯合物、聯吡啶衍生物、啡啉衍生物、硼烷衍生物或苯并咪唑衍生物。

【0277】 羥喹啉系金屬錯合物為下述通式（E-1）所表示的化合物。

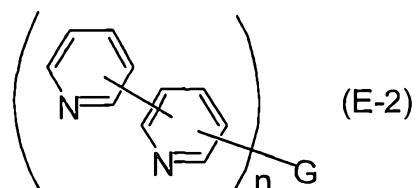


式中， $R^1 \sim R^6$ 為氫或取代基，M 為 Li、Al、Ga、Be 或 Zn，n 為 1~3 的整數。

【0278】 紅噁啉系金屬錯合物的具體例可列舉：8-羥基噁啉鋰、三(8-羥基噁啉)鋁、三(4-甲基-8-羥基噁啉)鋁、三(5-甲基-8-羥基噁啉)鋁、三(3,4-二甲基-8-羥基噁啉)鋁、三(4,5-二甲基-8-羥基噁啉)鋁、三(4,6-二甲基-8-羥基噁啉)鋁、雙(2-甲基-8-羥基噁啉)(苯酚)鋁、雙(2-甲基-8-羥基噁啉)(2-甲基苯酚)鋁、雙(2-甲基-8-羥基噁啉)(3-甲基苯酚)鋁、雙(2-甲基-8-羥基噁啉)(4-甲基苯酚)鋁、雙(2-甲基-8-羥基噁啉)(2-苯基苯酚)鋁、雙(2-甲基-8-羥基噁啉)(3-苯基苯酚)鋁、雙(2-甲基-8-羥基噁啉)(4-苯基苯酚)鋁、雙(2-甲基-8-羥基噁啉)(2,3-二甲基苯酚)鋁、雙(2-甲基-8-羥基噁啉)(2,6-二甲基苯酚)鋁、雙(2-甲基-8-羥基噁啉)(3,4-二甲基苯酚)鋁、雙(2-甲基-8-羥基噁啉)(3,5-二-第三丁基苯酚)鋁、雙(2-甲基-8-羥基噁啉)(2,6-二苯基苯酚)鋁、雙(2-甲基-8-羥基噁啉)(2,4,6-三苯基苯酚)鋁、雙(2-甲基-8-羥基噁啉)(2,4,6-三甲基苯酚)鋁、雙(2-甲基-8-羥基噁啉)(2,4,5,6-四甲基苯酚)鋁、雙(2-甲基-8-羥基噁啉)(1-萘酚)鋁、雙(2-甲基-8-羥基噁啉)(2-萘酚)鋁、雙(2,4-二甲基-8-羥基噁啉)(2-苯基苯酚)鋁、雙(2,4-二甲基-8-羥基噁啉)(3-苯基苯酚)鋁、雙(2,4-二甲基-8-羥基噁啉)(4-苯基苯酚)鋁、雙(2,4-二甲基-8-羥基噁啉)(3,5-二甲基苯酚)鋁、雙(2,4-二甲基-8-羥基噁啉)(3,5-二-第三丁基苯酚)鋁、雙(2-甲基-8-羥基噁啉)

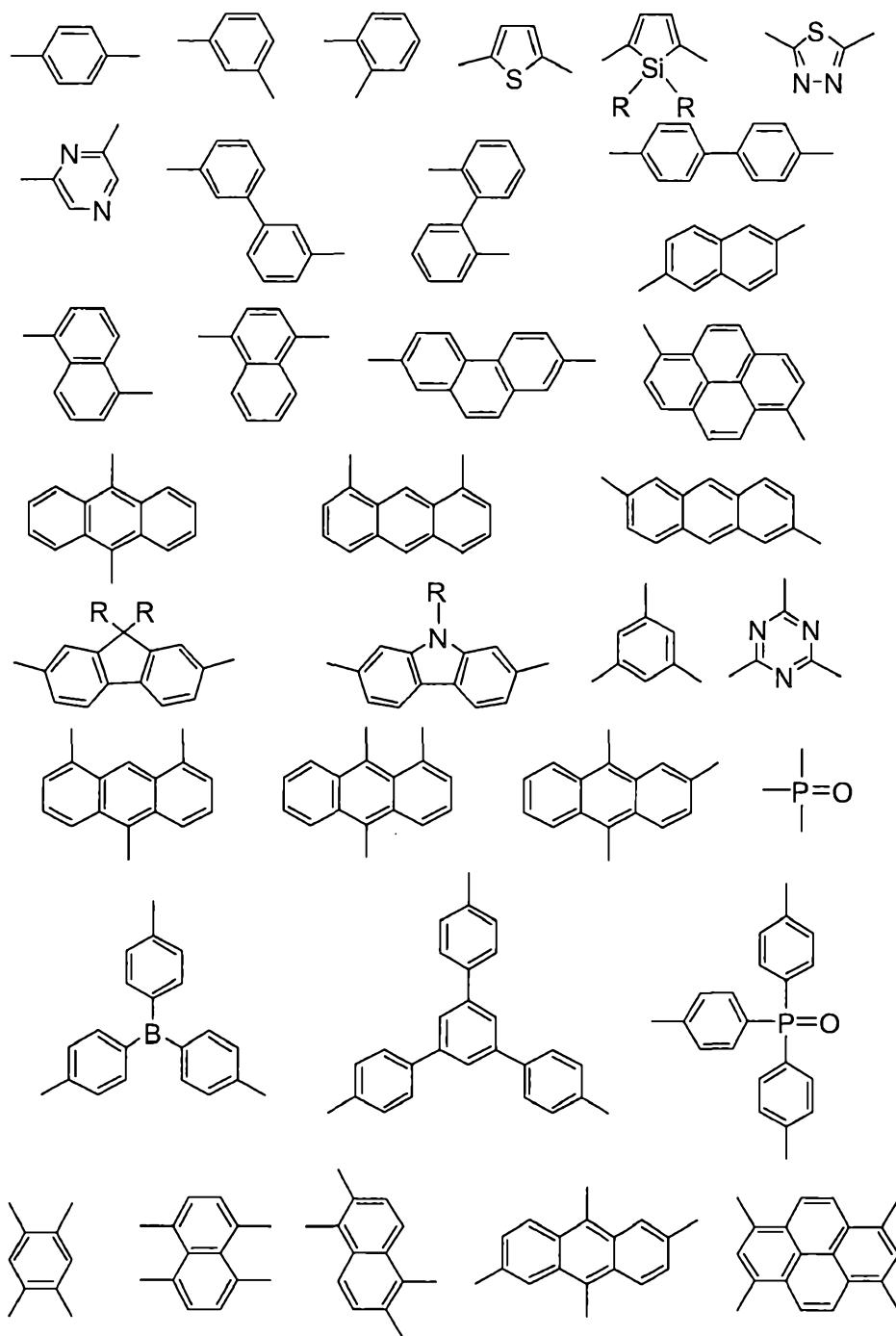
鋁- μ -氧化-雙(2-甲基-8-羥基喹啉)鋁、雙(2,4-二甲基-8-羥基喹啉)
鋁- μ -氧化-雙(2,4-二甲基-8-羥基喹啉)鋁、雙(2-甲基-4-乙基-8-羥基
喹啉)鋁- μ -氧化-雙(2-甲基-4-乙基-8-羥基喹啉)鋁、雙(2-甲基-4-甲
氧基-8-羥基喹啉)鋁- μ -氧化-雙(2-甲基-4-甲氧基-8-羥基喹啉)鋁、
雙(2-甲基-5-氟基-8-羥基喹啉)鋁- μ -氧化-雙(2-甲基-5-氟基-8-羥基
喹啉)鋁、雙(2-甲基-5-三氟甲基-8-羥基喹啉)鋁- μ -氧化-雙(2-甲基
-5-三氟甲基-8-羥基喹啉)鋁、雙(10-羥基苯并[h]喹啉)鉞等。

【0279】 聯吡啶衍生物爲下述通式 (E-2) 所表示的化合物。



式中，G 表示單鍵或 n 價連結基，n 為 2~8 的整數。另外，
吡啶-吡啶或吡啶-G 的鍵中所不用的碳原子可經取代。

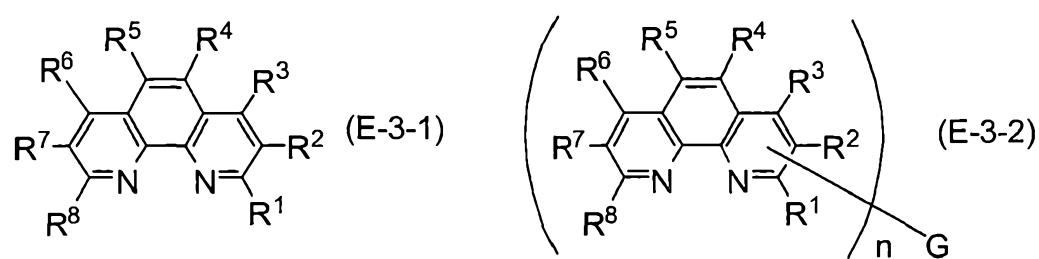
【0280】 通式 (E-2) 的 G 例如可列舉以下的結構式。再者，下
述結構式中的 R 分別獨立地爲氫、甲基、乙基、異丙基、環己基、
苯基、1-萘基、2-萘基、聯苯基或聯三苯基。



【0281】 吡啶衍生物的具體例可列舉：2,5-雙(2,2'-聯吡啶-6-基)-1,1-二甲基-3,4-二苯基矽雜環戊二烯、2,5-雙(2,2'-聯吡啶-6-基)-1,1-二甲基-3,4-二均三甲苯基矽雜環戊二烯、2,5-雙(2,2'-聯吡啶-5-基)-1,1-二甲基-3,4-二苯基矽雜環戊二烯、2,5-雙(2,2'-聯吡啶-5-基)-1,1-二甲基-3,4-二均三甲苯基矽雜環戊二烯、9,10-二(2,2'-

聯吡啶-6-基)蒽、9,10-二(2,2'-聯吡啶-5-基)蒽、9,10-二(2,3'-聯吡啶-6-基)蒽、9,10-二(2,3'-聯吡啶-5-基)蒽、9,10-二(2,3'-聯吡啶-6-基)-2-苯基蒽、9,10-二(2,3'-聯吡啶-5-基)-2-苯基蒽、9,10-二(2,2'-聯吡啶-6-基)-2-苯基蒽、9,10-二(2,2'-聯吡啶-5-基)-2-苯基蒽、9,10-二(2,4'-聯吡啶-6-基)-2-苯基蒽、9,10-二(2,4'-聯吡啶-5-基)-2-苯基蒽、9,10-二(3,4'-聯吡啶-6-基)-2-苯基蒽、9,10-二(3,4'-聯吡啶-5-基)-2-苯基蒽、3,4-二苯基-2,5-二(2,2'-聯吡啶-6-基)噻吩、3,4-二苯基-2,5-二(2,3'-聯吡啶-5-基)噻吩、6'6"-二(2-吡啶基)2,2':4',4":2",2""-四聯吡啶等。

【0282】 啡啉衍生物爲下述通式(E-3-1)或通式(E-3-2)所表示的化合物。



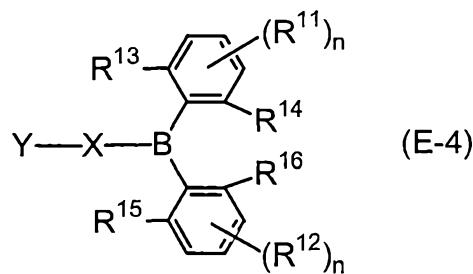
式中， $R^1 \sim R^8$ 為氫或取代基，鄰接的基團亦可相互鍵結而形成縮合環， G 表示單鍵或 n 價連結基， n 為 2~8 的整數。另外，通式(E-3-2)的 G 例如可列舉與聯吡啶衍生物一欄中說明的 G 相同者。

【0283】 啡啉衍生物的具體例可列舉：4,7-二苯基-1,10-啡啉、2,9-二甲基-4,7-二苯基-1,10-啡啉、9,10-二(1,10-啡啉-2-基)蒽、2,6-二

(1,10-啡啉-5-基)吡啶、1,3,5-三(1,10-啡啉-5-基)苯、9,9'-二氟-雙(1,10-啡啉-5-基)、2,9-二甲基-4,7-聯苯-1,10-啡啉（bathocuproin）或1,3-雙(2-苯基-1,10-啡啉-9-基)苯等。

【0284】 尤其對將啡啉衍生物用於電子傳輸層、電子注入層中的情形加以說明。為了長時間獲得穩定的發光，理想的是熱穩定性或薄膜形成性優異的材料，啡啉衍生物中，較佳為取代基自身具有三維立體結構者、或者藉由與啡啉骨架的立體排斥或與鄰接取代基的立體排斥而具有三維立體結構者、或者將多個啡啉骨架連結而成者。進而，於將多個啡啉骨架連結的情形時，更佳為於連結單元中含有共軛鍵、經取代或未經取代的芳香族烴、經取代或未經取代的芳香雜環的化合物。

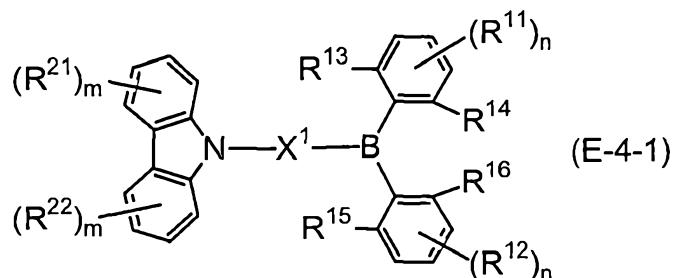
【0285】 硼烷衍生物為下述通式(E-4)所表示的化合物，詳細揭示於日本專利特開2007-27587號公報中。



式中， R^{11} 及 R^{12} 分別獨立地為氫、烷基、可經取代的芳基、經取代的矽烷基、可經取代的含氮雜環或氰基的至少一個， $R^{13} \sim R^{16}$ 分別獨立地為可經取代的烷基或可經取代的芳基， X 為可經取

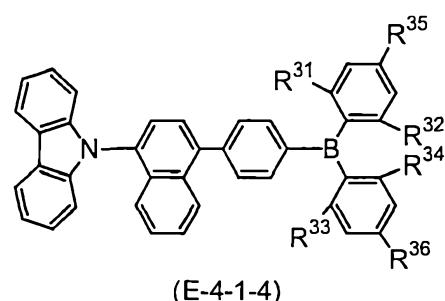
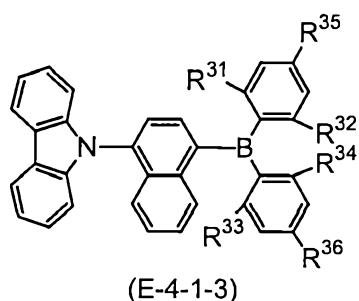
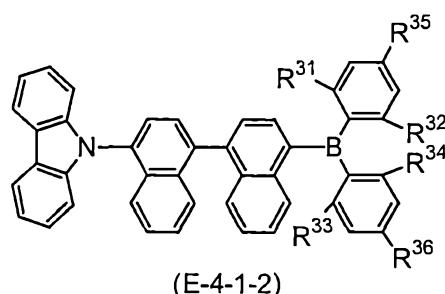
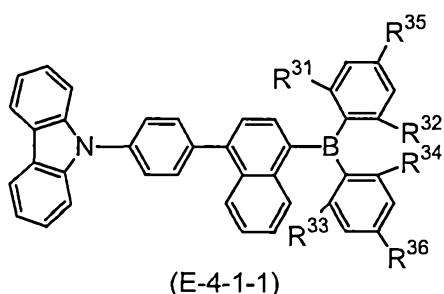
代的伸芳基，Y 為可經取代的碳數 16 以下的芳基、經取代的硼基或可經取代的咔唑基，而且，n 分別獨立地為 0~3 的整數。

【0286】 上述通式 (E-4) 所表示的化合物中，較佳為下述通式 (E-4-1) 所表示的化合物，進而佳為下述通式 (E-4-1-1) ~ 通式 (E-4-1-4) 所表示的化合物。具體例可列舉：9-[4-(4-二-均三甲苯基硼基萘-1-基)苯基]咔唑、9-[4-(4-二-均三甲苯基硼基萘-1-基)萘-1-基]咔唑等。



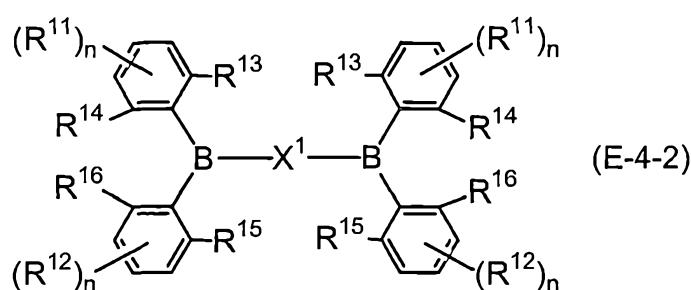
式中， R^{11} 及 R^{12} 分別獨立地為氫、烷基、可經取代的芳基、經取代的矽烷基、可經取代的含氮雜環或氰基的至少一個， $R^{13} \sim R^{16}$ 分別獨立地為可經取代的烷基或可經取代的芳基， R^{21} 及 R^{22} 分別獨立地為氫、烷基、可經取代的芳基、經取代的矽烷基、可經取代的含氮雜環或氰基的至少一個， X^1 為可經取代的碳數 20 以下的伸芳基，n 分別獨立地為 0~3 的整數，而且，m 分別獨立地為 0~4 的整數。

【0287】



各式中， $R^{31} \sim R^{34}$ 分別獨立地為甲基、異丙基或苯基的任一個，而且， R^{35} 及 R^{36} 分別獨立地為氫、甲基、異丙基或苯基的任一個。

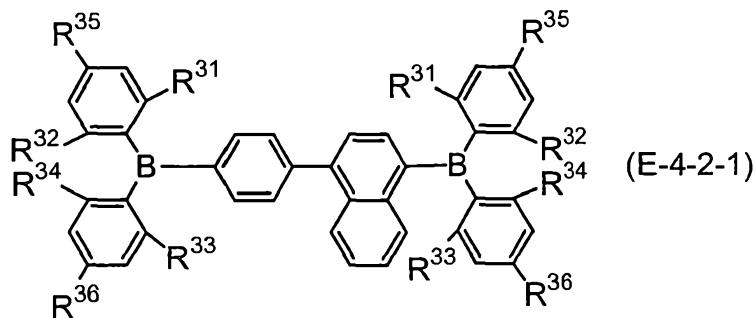
【0288】 上述通式 (E-4) 所表示的化合物中，較佳為下述通式 (E-4-2) 所表示的化合物，進而佳為下述通式 (E-4-2-1) 所表示的化合物。



式中， R^{11} 及 R^{12} 分別獨立地為氫、烷基、可經取代的芳基、經取代的矽烷基、可經取代的含氮雜環或氯基的至少一個， $R^{13} \sim R^{16}$

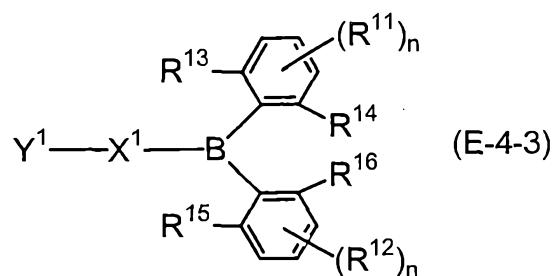
R^{16} 分別獨立地為可經取代的烷基或可經取代的芳基， X^1 為可經取代的碳數 20 以下的伸芳基，而且， n 分別獨立地為 0~3 的整數。

【0289】



式中， $R^{31} \sim R^{34}$ 分別獨立地為甲基、異丙基或苯基的任一個，而且， R^{35} 及 R^{36} 分別獨立地為氫、甲基、異丙基或苯基的任一個。

【0290】 上述通式 (E-4) 所表示的化合物中，較佳為下述通式 (E-4-3) 所表示的化合物，進而佳為下述通式 (E-4-3-1) 或通式 (E-4-3-2) 所表示的化合物。

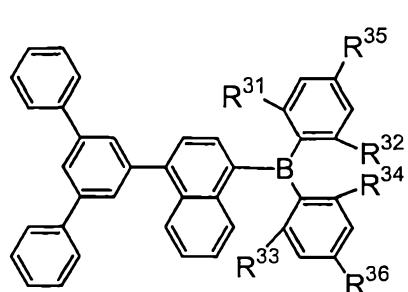


式中， R^{11} 及 R^{12} 分別獨立地為氫、烷基、可經取代的芳基、經取代的矽烷基、可經取代的含氮雜環或氰基的至少一個， $R^{13} \sim R^{16}$ 分別獨立地為可經取代的烷基或可經取代的芳基， X^1 為可經取

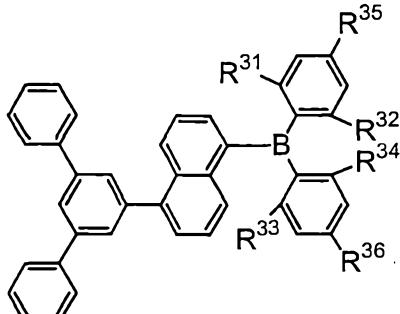


代的碳數 10 以下的伸芳基， Y^1 為可經取代的碳數 14 以下的芳基，而且， n 分別獨立地為 0~3 的整數。

〔0291〕



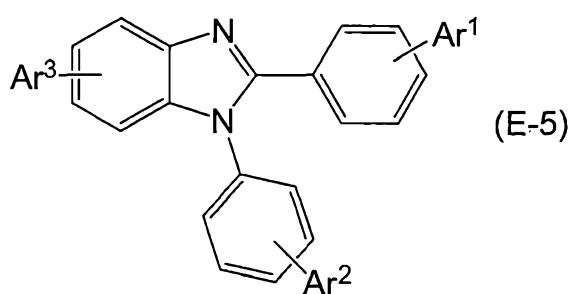
(E-4-3-1)



(E-4-3-2)

各式中， $R^{31} \sim R^{34}$ 分別獨立地爲甲基、異丙基或苯基的任一個，而且， R^{35} 及 R^{36} 分別獨立地爲氫、甲基、異丙基或苯基的任一個。

【0292】 萘并咪唑衍生物爲下述通式（E-5）所表示的化合物。



(E-5)

式中， $\text{Ar}^1 \sim \text{Ar}^3$ 分別獨立地為氫或可經取代的碳數 6~30 的芳基。尤佳為 Ar^1 為可經取代的蔥基的苯并咪唑衍生物。

【0293】 碳數 6~30 的芳基的具體例為苯基、1-萘基、2-萘基、

苊-1-基、苊-3-基、苊-4-基、苊-5-基、茀-1-基、茀-2-基、茀-3-基、茀-4-基、茀-9-基、葩-1-基、葩-2-基、1-菲基、2-菲基、3-菲基、4-菲基、9-菲基、1-蒽基、2-蒽基、9-蒽基、螢蒽-1-基、螢蒽-2-基、螢蒽-3-基、螢蒽-7-基、螢蒽-8-基、聯三伸苯-1-基、聯三伸苯-2-基、茈-1-基、茈-2-基、茈-4-基、嵐-1-基、嵐-2-基、嵐-3-基、嵐-4-基、嵐-5-基、嵐-6-基、稠四苯-1-基、稠四苯-2-基、稠四苯-5-基、苊-1-基、苊-2-基、苊-3-基、稠五苯-1-基、稠五苯-2-基、稠五苯-5-基、稠五苯-6-基。

【0294】 芬并咪唑衍生物的具體例為 1-苯基-2-(4-(10-苯基蒽-9-基)苯基)-1H-芬并[d]咪唑、2-(4-(10-(萘-2-基)蒽-9-基)苯基)-1-苯基-1H-芬并[d]咪唑、2-(3-(10-(萘-2-基)蒽-9-基)苯基)-1-苯基-1H-芬并[d]咪唑、1-(4-(10-(萘-2-基)蒽-9-基)苯基)-2-苯基-1H-芬并[d]咪唑、2-(4-(9,10-二(萘-2-基)蒽-2-基)苯基)-1-苯基-1H-芬并[d]咪唑、1-(4-(9,10-二(萘-2-基)蒽-2-基)苯基)-2-苯基-1H-芬并[d]咪唑、5-(9,10-二(萘-2-基)蒽-2-基)-1,2-二苯基-1H-芬并[d]咪唑。

【0295】 電子傳輸層或電子注入層中，亦可更含有可將形成電子傳輸層或電子注入層的材料還原的物質。該還原性物質只要具有一定的還原性，則可使用各種物質，例如可較佳地使用選自由鹼金屬、鹼土金屬、稀土金屬、鹼金屬的氧化物、鹼金屬的鹵化物、鹼土金屬的氧化物、鹼土金屬的鹵化物、稀土金屬的氧化物、稀土金屬的鹵化物、鹼金屬的有機錯合物、鹼土金屬的有機錯合物



及稀土金屬的有機錯合物所組成的組群中的至少一種。

【0296】 較佳的還原性物質可列舉：Na（功函數爲 2.36 eV）、K（功函數爲 2.28 eV）、Rb（功函數爲 2.16 eV）或 Cs（功函數爲 1.95 eV）等鹼金屬，或者 Ca（功函數爲 2.9 eV）、Sr（功函數爲 2.0 eV~2.5 eV）或 Ba（功函數爲 2.52 eV）等鹼土金屬，尤佳爲功函數爲 2.9 eV 以下者。該些物質中，更佳的還原性物質爲 K、Rb 或 Cs 的鹼金屬，進而佳爲 Rb 或 Cs，最佳爲 Cs。該些鹼金屬的還原能力特別高，藉由以相對較少的量添加至形成電子傳輸層或電子注入層的材料中，可實現有機 EL 元件的發光亮度的提高或長壽命化。另外，功函數爲 2.9 eV 以下的還原性物質亦較佳爲該等兩種以上的鹼金屬的組合，尤佳爲含有 Cs 的組合，例如 Cs 與 Na、Cs 與 K、Cs 與 Rb 或 Cs 與 Na 與 K 的組合。藉由含有 Cs，可有效地發揮還原能力，藉由添加至形成電子傳輸層或電子注入層的材料中，可實現有機 EL 元件的發光亮度的提高或長壽命化。

【0297】 <有機電場發光元件中的陰極>

陰極 108 發揮經由電子注入層 107 及電子傳輸層 106 向發光層 105 注入電子的功能。

【0298】 形成陰極 108 的材料只要爲可將電子高效地注入至有機層中的物質，則並無特別限定，可使用與形成陽極 102 的材料相同者。其中，較佳爲錫、銻、鈣、鋁、銀、銅、鎳、鉻、金、鉑、鐵、鋅、鋰、鈉、鉀、銫及鎂等金屬或該些金屬的合金（鎂-銀合金、鎂-銻合金、氟化鋰/鋁等鋁-鋰合金等）等。爲了提高電子注

入效率而提高元件特性，有效的是鋰、鈉、鉀、銫、鈣、鎂或含有該些低功函數金屬的合金。然而，該些低功函數金屬通常大多情況下於大氣中不穩定。為了改善此方面，例如已知於有機層中摻雜微量的鋰、銫或鎂而使用穩定性高的電極的方法。其他摻雜劑亦可使用如氟化鋰、氟化銫、氧化鋰及氧化銫般的無機鹽。然而，不限定於該些物質。

【0299】 進而，為了保護電極，可列舉積層以下物質作為較佳例：鉑、金、銀、銅、鐵、錫、鋁及銨等金屬或使用該些金屬的合金，以及二氧化矽、氧化鈦及氮化矽等無機物，聚乙稀醇、氯乙稀、烴系高分子化合物等。該些電極的製作方法只要為電阻加熱、電子束射束、濺鍍、離子鍍（ion plating）及塗佈等可取得導通的方法，則並無特別限制。

【0300】 <各層中可使用的黏結劑>

以上的電洞注入層、電洞傳輸層、發光層、電子傳輸層及電子注入層中所用的材料可單獨形成各層，亦可分散於作為高分子黏結劑的以下物質中而使用：聚氯乙稀、聚碳酸酯、聚苯乙稀、聚(N-乙稀基咔唑)、聚甲基丙烯酸甲酯、聚甲基丙烯酸丁酯、聚酯、聚碩、聚苯醚、聚丁二烯、烴樹脂、酮樹脂、苯氧樹脂、聚醯胺、乙基纖維素、乙酸乙稀酯樹脂、丙烯腈-丁二烯-苯乙稀（Acrylonitrile-Butadiene-Styrene，ABS）樹脂、聚胺基甲酸酯樹脂等溶劑可溶性樹脂，或酚樹脂、二甲苯樹脂、石油樹脂、脲樹脂、三聚氰胺樹脂、不飽和聚酯樹脂、醇酸樹脂、環氧樹脂、矽



酮樹脂等硬化性樹脂等。

【0301】 <有機電場發光元件的製作方法>

構成有機電場發光元件的各層可藉由以下方式來形成：利用蒸鍍法、電阻加熱蒸鍍、電子束蒸鍍、濺鍍、分子積層法、印刷法、旋塗法或澆注法、塗佈法等方法將應構成各層的材料製成薄膜。如此而形成的各層的膜厚並無特別限定，可根據材料的性質而適當設定，通常為 $2\text{ nm} \sim 5000\text{ nm}$ 的範圍。膜厚通常可利用石英振盪式膜厚測定裝置等來測定。於使用蒸鍍法來進行薄膜化的情形時，其蒸鍍條件視材料的種類、膜的目標晶體結構及締合結構等而不同。蒸鍍條件較佳為通常於舟（boat）加熱溫度為 $50^\circ\text{C} \sim 400^\circ\text{C}$ 、真空度為 $10^{-6}\text{ Pa} \sim 10^{-3}\text{ Pa}$ 、蒸鍍速度為 $0.01\text{ nm/s} \sim 50\text{ nm/s}$ 、基板溫度為 $-150^\circ\text{C} \sim +300^\circ\text{C}$ 、膜厚為 $2\text{ nm} \sim 5\text{ }\mu\text{m}$ 的範圍內適當設定。

【0302】 繼而，作為製作有機電場發光元件的方法的一例，對包含陽極/電洞注入層/電洞傳輸層/包含主體材料與摻雜材料的發光層/電子傳輸層/電子注入層/陰極的有機電場發光元件的製作方法加以說明。於適當的基板上藉由蒸鍍法等來形成陽極材料的薄膜而製作陽極後，於該陽極上形成電洞注入層及電洞傳輸層的薄膜。於其上將主體材料與摻雜材料共蒸鍍而形成薄膜製成發光層，於該發光層上形成電子傳輸層、電子注入層，進而藉由蒸鍍法等來形成包含陰極用物質的薄膜而製成陰極，藉此可獲得目標有機電場發光元件。再者，上述有機電場發光元件的製作中，亦

可將製作順序顛倒而依序製作陰極、電子注入層、電子傳輸層、發光層、電洞傳輸層、電洞注入層、陽極。

【0303】 於對如此而獲得的有機電場發光元件施加直流電壓的情形時，只要使陽極爲+極性、陰極爲-極性來施加電壓即可，若施加 2 V～40 V 左右的電壓，則自透明或半透明的電極側（陽極或陰極及兩者）可觀測到發光。另外，該有機電場發光元件於施加脈波電流（pulsed current）或交流電流的情形時亦發光。再者，所施加的交流的波形可爲任意。

【0304】 <有機電場發光元件的應用例>

另外，本發明亦可應用於具備有機電場發光元件的顯示裝置或具備有機電場發光元件的照明裝置等。

具備有機電場發光元件的顯示裝置或照明裝置可藉由將本實施形態的有機電場發光元件與公知的驅動裝置連接等公知的方法來製造，可適當使用直流驅動、脈波驅動、交流驅動等公知的驅動方法來驅動。

【0305】 顯示裝置例如可列舉：彩色平板顯示器等面板顯示器、撓性彩色有機電場發光（Electroluminescence，EL）顯示器等撓性顯示器等（例如參照日本專利特開平 10-335066 號公報、日本專利特開 2003-321546 號公報、日本專利特開 2004-281086 號公報等）。另外，顯示器的顯示方式例如可列舉矩陣及/或區段（segment）方式等。再者，矩陣顯示與區段顯示亦可於同一面板中共存。

【0306】 所謂矩陣，是指將用以進行顯示的畫素以格子狀或馬賽



克（mosaic）狀等二維地配置而成者，以畫素的集合來顯示文字或圖像。畫素的形狀或尺寸是根據用途來決定。例如於個人電腦（personal computer）、監視器（monitor）、電視的圖像及文字顯示時，通常使用一邊為 $300 \mu\text{m}$ 以下的四角形的畫素，另外，於如顯示面板般的大型顯示器的情況下，使用一邊為毫米（mm）級（order）的畫素。於單色顯示（monochrome display）的情況下，只要排列相同顏色的畫素即可，於彩色顯示的情況下，排列紅色、綠色、藍色的畫素來進行顯示。於該情形時，典型而言有三角型（delta type）與條紋型（stripe type）。而且，該矩陣的驅動方法可為線序驅動方法或主動式矩陣的任一種。線序驅動（line sequential driving）有結構簡單的優點，但於考慮到動作特性的情形時，有時主動式矩陣優異，故該驅動方式亦必須根據用途來區分使用。

【0307】 區段方式（型）的情況下，以形成預定資訊的方式來形成圖案，使預定的區域發光。例如可列舉：數位鐘或溫度計的時刻或溫度顯示、音訊設備或電磁爐等的動作狀態顯示及汽車的面板顯示等。

【0308】 照明裝置例如可列舉：室內照明等照明裝置、液晶顯示裝置的背光等（例如參照日本專利特開 2003-257621 號公報、日本專利特開 2003-277741 號公報、日本專利特開 2004-119211 號公報等）。背光主要是為了提高不自發光的顯示裝置的視認性而使用，被用於液晶顯示裝置、鐘、音訊裝置、汽車面板、顯示板及招牌等。尤其作為液晶顯示裝置、其中薄型化成為課題的個人電

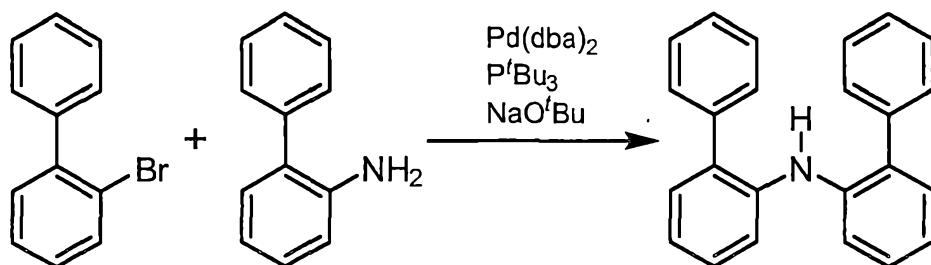
腦用途的背光，若考慮到現有方式的背光因包含螢光燈或導光板而難以實現薄型化，則使用本實施形態的發光元件的背光的薄型且輕量成為特徵。

[實施例]

【0309】 以下，藉由實施例對本發明加以更具體說明，但本發明不限定於該些實施例。首先，以下對實施例中所用的多環芳香族化合物的合成例加以說明。

【0310】 合成例（1）：

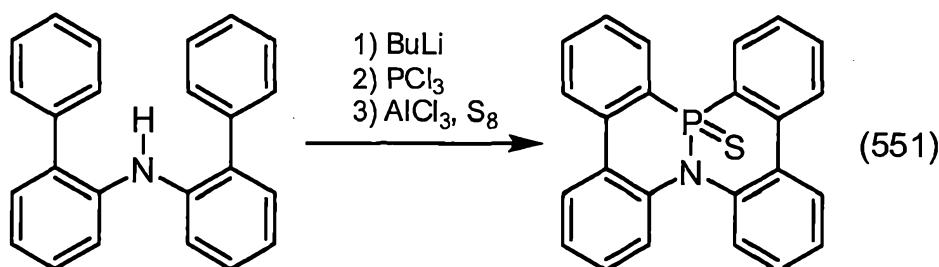
4b-氮雜-12b-硫代磷雜二苯并[g,p]巰的合成



【0311】 首先，於 2-胺基聯苯（16.9 g、0.10 mol）、雙(二亞苄基丙酮)鈀（0.575 g、1.0 mmol）、第三丁氧基鈉（14.4 g、0.15 mol）及甲苯（100 mL）中，於氬氣環境下於 0°C 下添加 2-溴聯苯（23.1 g、0.10 mol），於室溫下攪拌 7 小時後，進行弗羅里矽土（Florisil）過濾，將溶劑於減壓下蒸餾去除，對所得的褐色的油狀物質使用己烷進行溶提（trituration），藉此以白色粉末的形式獲得雙(聯苯-2-基)胺（32.1 g，產率為 98%）。

【0312】 ^1H NMR (δ ppm 於 CDCl_3 中 (in CDCl_3)); 5.79 (s, 1H), 6.92 (t, $J = 7.2$ Hz, 2H), 7.17-7.27 (m, 14H), 7.40 (d, 2H, $J = 8.1$ Hz) ^{13}C NMR (δ ppm in CDCl_3) 117.0, 120.8, 127.2, 128.1, 128.7, 129.0, 130.6, 132.0, 138.9, 140.1.

【0313】



【0314】 繼而，於雙(聯苯-2-基)胺 (3.21 g、10.0 mmol) 及 THF (50 mL) 中，於氬氣環境下於-78°C 下添加丁基鋰的己烷溶液 (6.13 mL、1.63 M、10.0 mmol) 進行攪拌。1 小時後，添加三氯化磷 (1.37 g、10.0 mmol)，攪拌 1 小時後，升溫至 0°C 並進一步攪拌 1 小時。將溶劑於減壓下蒸餾去除，添加 1,2-二氯苯 (80 mL) 後，添加三氯化鋁 (4.00 g、30.0 mmol) 及硫 (0.481 g、15.0 mmol)，於 120°C 下攪拌 18 小時。添加 1,4-二氮雜雙環[2.2.2]辛烷 (3.36 g、30.0 mmol) 進行過濾後，將溶劑於減壓下蒸餾去除，利用高效液相層析儀 (High Performance Liquid Chromatography, HPLC) 及凝膠滲透層析儀 (Gel Permeation Chromatography, GPC) 對所得的粗產物進行分離，藉此以白色粉末的形式獲得式 (551) 所表示的化合物 (0.725 g，產率為 19%)。

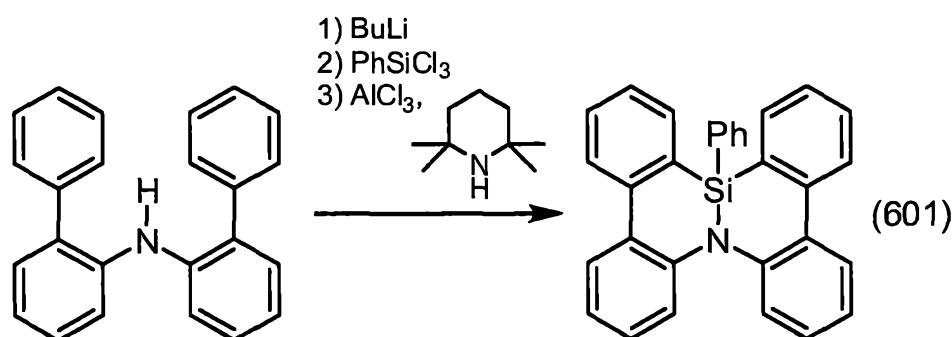
【0315】 HRMS(EI) m/z; 計算值 (calcd.) 381.0741[M]⁺; 實測值 (found) 381.0746.

¹H NMR (δ ppm 於 CD₂Cl₂ 中於 -40°C 下 (in CD₂Cl₂ at -40°C)); 6.65 (d, 1H, J = 8.4 Hz), 7.01 (t, 1H, J = 7.2 Hz), 7.09 (t, 1H, J = 7.8 Hz), 7.19 (dd, 1H, J = 7.8, 13.8 Hz), 7.31 (td, 1H, J = 3.0, 7.8 Hz), 7.54 (t, 1H, J = 7.8 Hz), 7.62 (d, 1H, J = 7.2 Hz), 7.65-7.69 (m, 2H), 7.75 (td, 1H, J = 3.0, 7.8 Hz), 7.84-7.91 (m, 3H), 8.05 (d, 2H, J = 7.2 Hz), 8.09 (t, 1H, J = 7.2 Hz), 8.58 (dd, 1H, J = 7.8, 15.6 Hz)

¹³C NMR (δ ppm in CD₂Cl₂ at -40°C); 118.1, 120.8, 121.2, 122.3, 124.4, 126.5, 128.1, 128.5, 128.6, 128.7, 128.9, 129.3, 130.2 (2C), 131.6, 132.1, 132.8, 132.9, 134.4, 134.5, 135.2, 135.3, 136.2, 141.5

【0316】 合成例 (2):

4b-氮雜-12b-苯基-12b-矽雜二苯并[g,p]蒽的合成

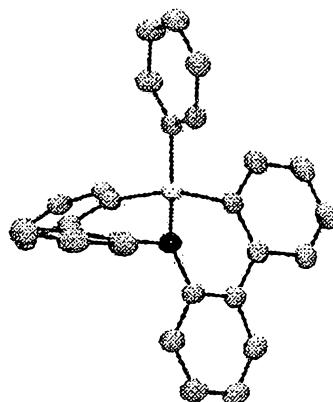


【0317】 於雙(聯苯-2-基)胺 (0.321 g、1.00 mmol) 及四氫呋喃 (5 mL) 中，於氳氣環境下於 -78°C 下添加丁基鋰的己烷溶液 (0.62 mL、1.60 M、1.00 mmol) 進行攪拌。攪拌 1 小時後，於 -78°C 下添加苯基三氯矽烷 (0.212 g、1.00 mmol)，於室溫下攪拌 12 小時。

將溶劑於減壓下蒸餾去除，添加 1,2-二氯苯後，添加三氯化鋁（0.533 g、4.00 mmol）及 2,2,6,6-四甲基哌啶（0.233 g、1.50 mmol），於 150°C 下攪拌 18 小時。添加 1,4-二氮雜雙環[2.2.2]辛烷（0.449 g、4.00 mmol）進行過濾後，將溶劑於減壓下蒸餾去除，利用 HPLC 及 GPC 對所得的粗產物進行分離，藉此以白色粉末的形式獲得式（601）所表示的化合物（0.064 g，產率為 15%）。

另外，使式（601）所表示的化合物從己烷中進行再結晶，藉此獲得無色針狀結晶，藉由 X 射線晶體結構分析來確定結構。

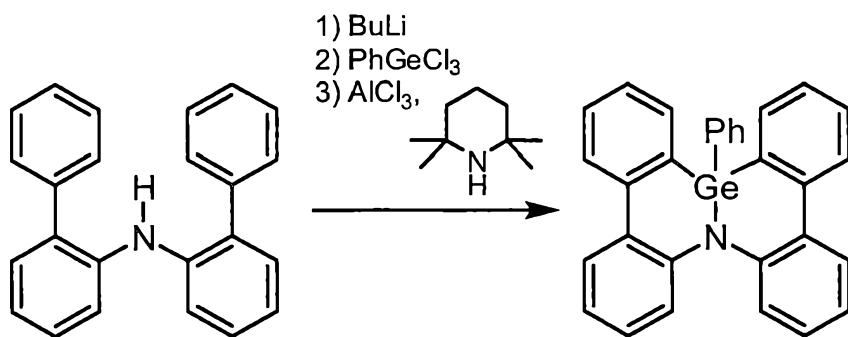
【0318】 HRMS(FAB) m/z; calcd. 423.1443[M]⁺; found 423.1426.
X 射線晶體結構 (X-ray crystal structure)



分子式	$C_{30}H_{21}NSi$	吸收係數, cm^{-1}	0.127
式量	423.57	F(000)	888.00
溫度, K	100(2)	晶體尺寸, mm^3	0.05, 0.02, 0.01
波長, Å	0.71069	$2\theta_{\min}, 2\theta_{\max}, \text{deg}$	3.78, 51.0
晶系	單斜晶系	指標範圍	-10 h 11
空間群	P 2 ₁ /n (No. 14)		-18 k 19
a, Å	9.2321(2)		-17 l 17
b, Å	16.4740(4)	反射(獨立)	3878
c, Å	14.2878(3)	反射 ($I > 2.0\sigma(I)$)	3371
α , deg	90	參數	289
β , deg	96.1539(8)	基於F ² 的擬合優度	1.087
γ , deg	90	R_1 ($I > 2.0\sigma(I)$)	0.0538
體積, Å ³	2160.50(8)	R, wR_2 (所有資料)	0.0632, 0.1387
Z	4	最大差值的峰頂與峰谷, $e, \text{\AA}^{-3}$	0.560, -0.494
密度 _{計算} , g·cm ⁻³	1.302		

【0319】 合成例（3）：

4b-氮雜-12b-鍺-12b-苯基二苯并[g,p]巰的合成



【0320】 於雙(聯苯-2-基)胺(0.643 g、2.00 mmol)及甲苯(80 mL)

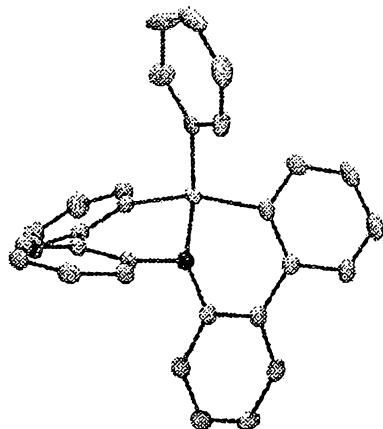
中，於氰氣環境下於-78°C 下添加丁基鋰的己烷溶液(1.25 mL、1.60 M、2.00 mmol)進行攪拌。1小時後升溫至0°C並進一步攪拌1小時後，於-78°C 下添加苯基三氯鍺(0.512 g、2.00 mmol)，於室溫下攪拌12小時。將溶劑於減壓下蒸餾去除，添加1,2-二氯苯後，添加三氯化鋁(1.07 g、8.00 mmol)及2,2,6,6-四甲基哌啶(0.466 g、3.00 mmol)，於150°C 下攪拌24小時。添加1,4-二氮雜雙環[2.2.2]辛烷(1.12 g、10.0 mmol)進行過濾後，將溶劑於減壓下蒸餾去除，利用HPLC及GPC對所得的粗產物進行分離，藉此以白色粉末的形式獲得標題化合物(0.389 g，產率為42%)。

另外，使標題化合物從己烷中進行再結晶，藉此獲得無色柱狀結晶，藉由X射線晶體結構分析來確定結構。

【0321】 HRMS(MALDI) m/z; calcd. 470.0964[M+H]⁺; found

470.0980.

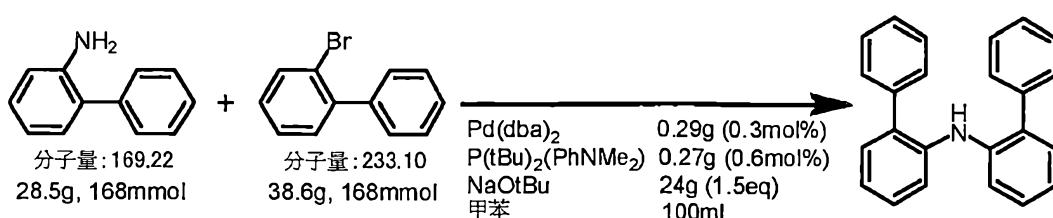
X 射線晶體結構 (X-ray crystal structure)



分子式	$C_{30}H_{21}NGe$	吸收係數, cm^{-1}	1.416
式量	468.09	$F(000)$	480.00
溫度, K	173	晶體尺寸, mm^3	0.2, 0.2, 0.2
波長, \AA	0.71070	$2\theta_{\min}, 2\theta_{\max}, \text{deg}$	6.3, 54.9
晶系	三斜晶系	指標範圍	-11 h 11 -12 k 12 -15 l 15
空間群	P-1 (No. 2)		
$a, \text{\AA}$	9.655(3)	反射 (獨立)	4293
$b, \text{\AA}$	10.225(2)	反射 ($I > 2.0\sigma(I)$)	3856
$c, \text{\AA}$	12.886(3)	參數	289
α, deg	67.894(11)	基於 F^2 的擬合優度	1.046
β, deg	71.624(11)	$R_1 (I > 2.0\sigma(I))$	0.0300
γ, deg	72.722(13)	R, wR_2 (所有資料)	0.0347, 0.0705
體積, \AA^3	1095.4(5)	最大差值的峰頂與峰谷, $e, \text{\AA}^{-3}$	0.440, -0.290
Z	2		
密度, $\text{g} \cdot \text{cm}^{-3}$	1.419		

【0322】 合成例 (4) :

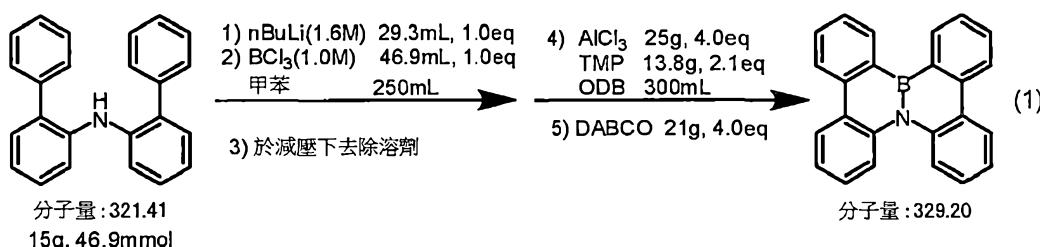
4b-氮雜-12b-硼雜二苯并[g,p]屢的合成



【0323】 首先，將放入有[1,1'-聯苯]-2-胺 (28.5 g) 、2-溴-1,1'-聯

苯 (38.6 g)、第三丁氧化鈉 (24.0 g)、Pd(dba)₂ (0.29 g)、4-(二-第三丁基膦基)-N,N-二甲基苯胺 (0.27 g) 及甲苯 (100 ml) 的燒瓶於氮氣環境下於 70°C 下攪拌 1 小時。將反應液冷卻至室溫為止後，添加水及甲苯進行分液。繼而，將溶劑減壓蒸餾去除後，利用活性氧化鋁管柱層析儀(展開液：甲苯)進行純化，獲得二([1,1'-聯苯]-2-基)胺 (54.0 g)。

【0324】

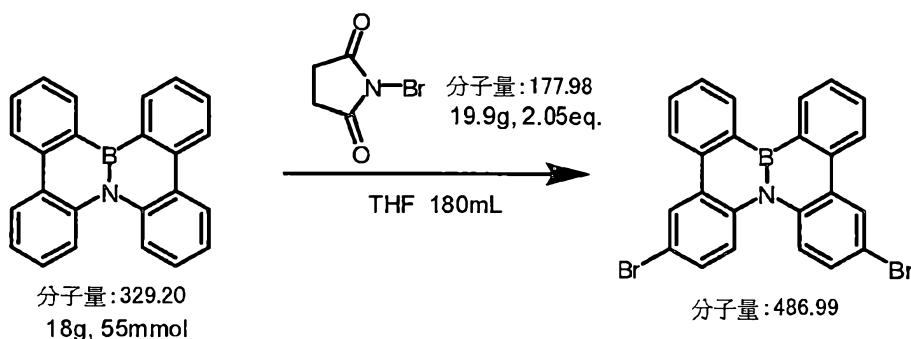


【0325】 繼而，將放入有二([1,1'-聯苯]-2-基)胺 (15.0 g) 及甲苯 (250 ml) 的燒瓶冷卻至-75°C 為止，滴加正丁基鋰的 1.6 M 己烷溶液 (29.3 ml)。滴加結束後，暫且升溫至 0°C 為止，於 0°C 下攪拌 1 小時。其後，再次冷卻至-75°C 為止，滴加三氯化硼的 1.0 M 庚烷溶液 (46.9 ml)。繼而，將反應液升溫至室溫為止後，暫且將溶劑減壓蒸餾去除。於其中添加鄰二氯苯 (300 ml)、2,2,6,6-四甲基哌啶 (13.8 g)、三氯化鋁 (25.0 g)，於 150°C 下攪拌 18 小時。添加 1,4-二氮雜雙環[2.2.2]辛烷「DABCO」(21.0 g) 進行攪拌後，添加甲苯 (500 ml) 及矽藻土進行攪拌後，靜置約 1 小時。繼而，藉由使用鋪設有矽藻土的桐山漏斗的抽吸過濾將析出的沈澱去除。

後，將溶劑減壓蒸餾去除。進而利用活性氧化鋁管柱層析儀（展開液：甲苯/乙酸乙酯/三乙胺=90/10/1（容量比））進行純化後，利用乙酸乙酯/庚烷混合溶劑進行再沈澱，獲得式（1）所表示的化合物（8.2 g）。

【0326】 合成例（5）：

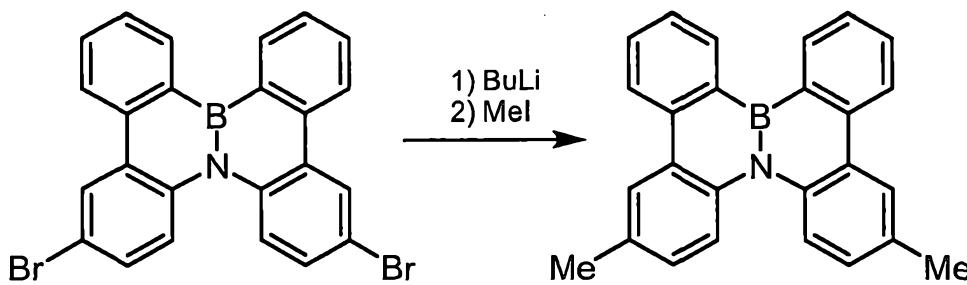
2,7-二溴-4b-氮雜-12b-硼雜二苯并[g,p]茚的合成



【0327】 於氮氣環境下，於 4b-氮雜-12b-硼雜二苯并[g,p]茚（18.0 g）的 THF（180 ml）溶液中添加 N-溴代丁二醯亞胺（NBS）（19.9 g），於室溫下攪拌 1 小時。反應結束後，添加亞硫酸鈉水溶液，將 THF 減壓蒸餾去除後，添加甲苯進行分液。繼而，利用活性氧化鋁管柱層析儀（展開液：甲苯/乙酸乙酯/三乙胺=95/5/1（容量比））進行純化，獲得標題化合物（24.7 g）。

【0328】 合成例（6）：

2,7-二甲基-4b-氮雜-12b-硼雜二苯并[g,p]茚的合成



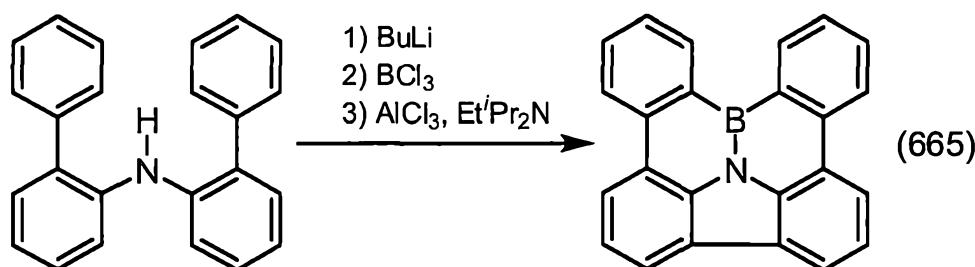
【0329】 於 2,7-二溴-4b-氮雜-12b-硼雜二苯并[g,p]茚（0.243 g、0.50 mmol）及甲苯（5.0 mL）中，於氳氣環境下於-78°C 下添加丁基鋰的己烷溶液（0.63 mL、1.60 M、1.00 mmol），於 40°C 下攪拌 24 小時後，添加碘甲烷（0.178 g、1.00 mmol）並攪拌 1 小時。將溶劑於減壓下蒸餾去除，利用 GPC 對所得的粗產物進行分離，藉此以白黃色粉末的形式獲得標題化合物（0.228 g，產率為 20%）。

【0330】 HRMS(EI) m/z; calcd. 357.1689[M]⁺; found 357.1692.

¹¹B NMR (δ ppm in C₆D₆) 34.0.

【0331】 合成例（7）：

14b¹-氮雜-14b-硼雜苯并[p]茚并[1,2,3,4-defg]茚的合成



【0332】 於雙(聯苯-2-基)胺（0.643 g、2.00 mmol）及甲苯（10 mL）中，於氳氣環境下於-78°C 下添加丁基鋰的己烷溶液（1.23 mL、1.60

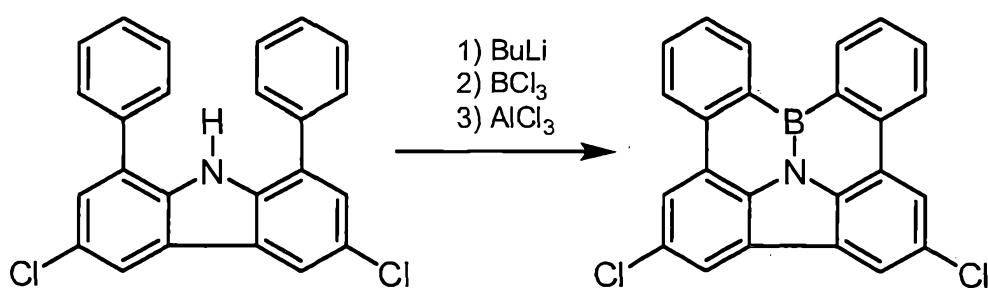
M、2.00 mmol) 進行攪拌。1 小時後升溫至 0°C 並進一步攪拌 1 小時後，於 -78°C 下添加三氯化硼的庚烷溶液 (2.00 mL、1.00 M、2.00 mmol)，於室溫下攪拌 12 小時。將溶劑於減壓下蒸餾去除，添加 1,2-二氯苯 (20 mL) 後，添加三氯化鋁 (1.07 g、8.00 mmol)、乙基二異丙基胺 (0.258 g、2.00 mmol)，於 180°C 下攪拌 12 小時。添加 1,4-二氮雜雙環[2.2.2]辛烷 (0.896 g、8.00 mmol) 進行過濾後，將溶劑於減壓下蒸餾去除，利用 HPLC 及 GPC 對所得的粗產物進行分離，藉此以白黃色粉末的形式獲得式 (665) 所表示的化合物 (0.255 g，產率為 39%)。

【0333】 HRMS(EI) m/z; calcd. 327.1219[M]⁺; found 327.1215.

¹H NMR (δ ppm in CDCl₃); 7.66-7.72 (m, 4H), 7.84 (td, 2H, J = 1.4, 8.2 Hz), 8.21 (d, 2H, J = 7.8 Hz), 8.43 (d, 2H, J = 7.8 Hz), 8.67 (d, 2H, J = 7.8 Hz), 9.18 (d, 2H, J = 7.8 Hz).

【0334】 合成例 (8)：

6,9-二氯-14b¹-氮雜-14b-硼雜苯并[p]茚并[1,2,3,4-defg]茚的合成



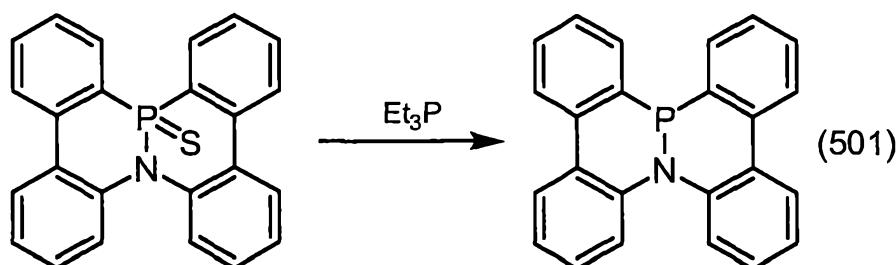
【0335】 於 3,6-二氯-1,8-二苯基咔唑 (0.971 g、2.50 mmol) 及甲

苯 (10 mL) 中，於氬氣環境下於-78°C 下添加丁基鋰的己烷溶液 (1.56 mL、1.60 M、2.50 mmol) 進行攪拌。1 小時後升溫至 0°C 並進一步攪拌 1 小時後，於-78°C 下添加三氯化硼的庚烷溶液 (2.50 mL、1.00 M、2.50 mmol)，於室溫下攪拌 12 小時。將溶劑於減壓下蒸餾去除，添加 1,2-二氯苯 (50 mL) 後，添加三氯化鋁 (1.33 g、10.0 mmol)，於 160°C 下攪拌 14 小時。添加 1,4-二氮雜雙環[2.2.2]辛烷 (1.12 g、10.0 mmol) 進行過濾後，將溶劑於減壓下蒸餾去除，利用 HPLC 及 GPC 對所得的粗產物進行分離，藉此以黃褐色粉末的形式獲得標題化合物 (0.297 g，產率為 30%)。

【0336】 HRMS(EI) m/z; calcd. 395.0440[M]⁺; found 395.0426.

【0337】 合成例 (9)：

4b-氮雜-12b-磷雜二苯并[g,p]屢的合成



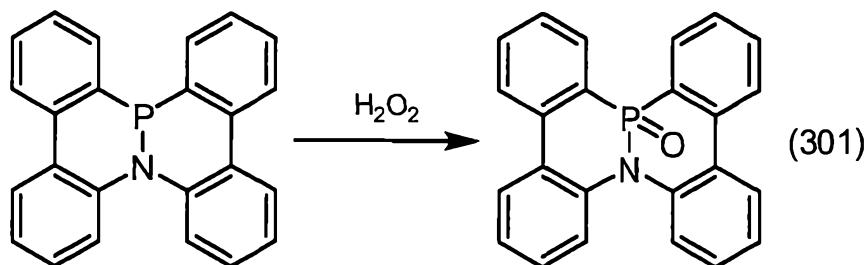
【0338】 於 4b-氮雜-12b-硫代磷雜二苯并[g,p]屢 (0.114 g、0.30 mmol) 及三乙膦 (0.039 g、0.33 mmol) 中，於氬氣環境下於 0°C 下添加氯苯 (3.0 mL)，於 120°C 下攪拌 18 小時。將溶劑於減壓下蒸餾去除，添加己烷進行溶提，藉此以白色粉末的形式獲得式 (501) 所表示的化合物 (0.073 g，產率為 70%)。

【0339】 HRMS(EI) m/z; calcd. 349.1020[M]⁺; found 349.1013.

³¹P NMR (δ ppm in C₆D₆) 12.7.

【0340】 合成例 (10):

4b-氮雜-12b-氧雜磷雜-二苯并[g,p]巰的合成



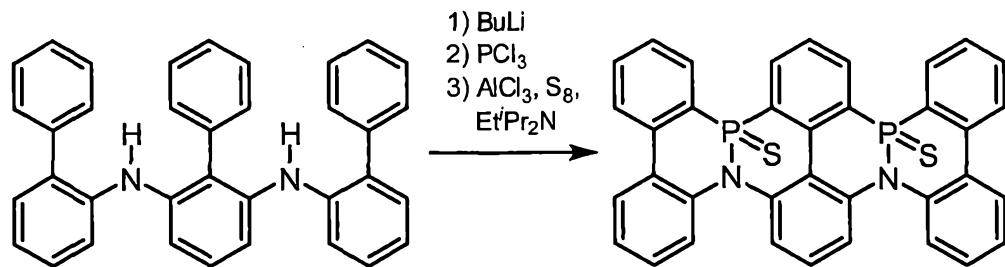
【0341】 對 4b-氮雜-12b-磷雜二苯并[g,p]巰 (0.070 g, 0.20 mmol) 及二氯甲烷 (2.0 mL) 添加 30% 過氧化氫水 (2.0 mL)，於室溫下攪拌 6 小時。將萃取出的有機層的溶劑於減壓下蒸餾去除，利用 HPLC 及 GPC 對所得的粗產物進行分離，藉此以白黃色粉末的形式獲得式 (301) 所表示的化合物 (0.066 g，產率為 90%)。

【0342】 HRMS(ESI) m/z; calcd. 366.1042[M+H]⁺; found 366.1032.

³¹P NMR (δ ppm in C₆D₆) 6.6.

【0343】 合成例 (11):

8b,19b-二氮雜-11b,22b-二硫代磷雜六苯并[a,c,fg,j,l,op]稠四苯的合成

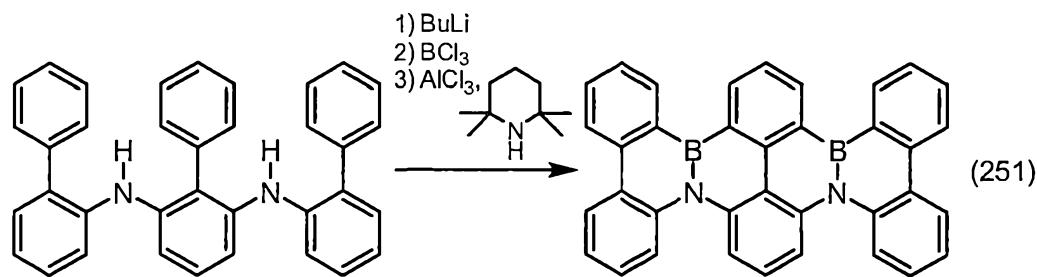


【0344】 於 N,N' -雙(聯苯-2-基)-2,6-二胺基聯苯 (0.977 g、2.00 mmol) 及甲苯 (20 mL) 中，於氳氣環境下於-78°C 下添加丁基鋰的己烷溶液 (2.45 mL、1.63 M、4.0 mmol) 進行攪拌。1 小時後，添加三氯化磷 (0.549 g、4.0 mmol)，攪拌 1 小時後，升溫至 0°C 並進一步攪拌 1 小時。將溶劑於減壓下蒸餾去除，添加 1,2-二氯苯 (40 mL) 後，添加三氯化鋁 (2.13 g、16.0 mmol)、硫 (0.192 g、6.0 mmol) 及乙基二異丙基胺 (1.55 g、12.0 mmol)，於 120°C 下攪拌 18 小時。添加 1,4-二氮雜雙環[2.2.2]辛烷 (1.79 g、16.0 mmol) 進行過濾後，將溶劑於減壓下蒸餾去除，利用 HPLC 及 GPC 對所得的粗產物進行分離，藉此以白黃色粉末的形式獲得標題化合物 (0.122 g，產率為 10%)。

【0345】 HRMS(FAB) m/z; calcd. 609.0778[M+H]⁺; found 609.0762.

【0346】 合成例 (12) :

8b,19b-二氮雜-11b,22b-二硼雜六苯并[a,c,fg,j,l,op]稠四苯的合成



【0347】 於 N,N' -雙(聯苯-2-基)-2,6-二胺基聯苯 (0.977 g、2.00 mmol) 及甲苯 (20 mL) 中，於氬氣環境下於-78°C 下添加丁基鋰的己烷溶液 (2.45 mL、1.63 M、4.0 mmol) 進行攪拌。1 小時後升溫至 0°C 並進一步攪拌 1 小時後，於-78°C 下添加三氯化硼的庚烷溶液 (4.00 mL、1.00 M、4.0 mmol)，攪拌 1 小時後，升溫至室溫並進一步攪拌 12 小時。將溶劑於減壓下蒸餾去除，添加 1,2-二氯苯 (40 mL) 後，添加三氯化鋁 (2.13 g、16.0 mmol) 及 2,2,6,6-四甲基哌啶 (0.192 g、6.0 mmol)，於 150°C 下攪拌 24 小時。添加 1,4-二氮雜雙環[2.2.2]辛烷 (1.79 g、16.0 mmol) 進行過濾後，將溶劑於減壓下蒸餾去除，利用 HPLC 及 GPC 對所得的粗產物進行分離，藉此以白黃色粉末的形式獲得式 (251) 所表示的化合物 (0.122 g，產率為 40%)。

【0348】 Anal. calcd for $C_{36}H_{22}N_2B_2C$, 85.76; H, 4.40; N, 5.56. found C, 85.85; H, 4.24; N, 5.66.

1H NMR (δ ppm in $CS_2/CD_2Cl_2=2/1$, 600 MHz) 7.31-7.34 (m, 4H, NCCCHCH), 7.55 (t, $J = 8.4$ Hz, 1H, NCCHCHCHCN), 7.61 (td, $J = 1.2, 7.2$ Hz, 2H, BCCHCHCHCH), 7.78 (td, $J = 1.2, 7.2$ Hz, 2H, BCCHCHCHCH), 7.91 (t, $J = 7.2$ Hz, 1H, BCCHCHCHCB), 8.05

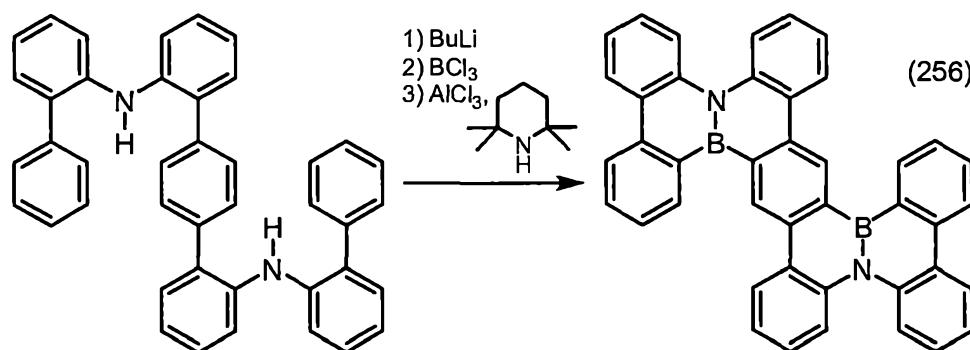
(d, $J = 8.4$ Hz, 2H, NCCHCHCHCN), 8.11-8.13 (m, 2H, NCCHCHCHCH), 8.32-8.35 (m, 2H, NCCCH), 8.40 (d, $J = 7.2$ Hz, 2H, BCCCH), 8.71 (d, $J = 7.2$ Hz, 2H, BCCHCHCHCH), 8.96 (d, $J = 7.2$ Hz, 2H, BCCHCHCHCB)

¹³C NMR (δ ppm in CS₂/CD₂Cl₂=2/1, 151 MHz) 114.3 (2C), 119.2, 121.8 (2C), 123.1 (2C), 123.4 (2C), 125.7, 125.8 (2C), 126.2, 126.7 (2C), 127.1 (2C), 128.1 (2C), 130.5 (br, 2C, CBCCCCB), 131.4 (2C), 133.0 (br, 2C, CBCCCCB), 135.8 (2C), 137.5 (4C), 137.6 (2C), 138.9, 139.0 (2C)

¹¹B NMR (δ ppm in CS₂/CD₂Cl₂=2/1, 193 MHz) 36.5.

【0349】 合成例（13）：

4b,17b-二氮雜-9b,22b-二硼雜四苯并[a,c,f,m]菲並[9,10-k]四
芳(tetraphene)的合成



【0350】 於 N,N"-雙(聯苯-2-基)-2,2"-二胺基聯三苯 (0.565 g、1.00 mmol) 及甲苯 (10 mL) 中，於氬氣環境下於-78°C 下添加丁基鋰的己烷溶液 (0.62 mL、1.63 M、1.0 mmol) 進行攪拌。1 小時後升溫至 0°C 並進一步攪拌 1 小時後，於-78°C 下添加三氯化硼的庚

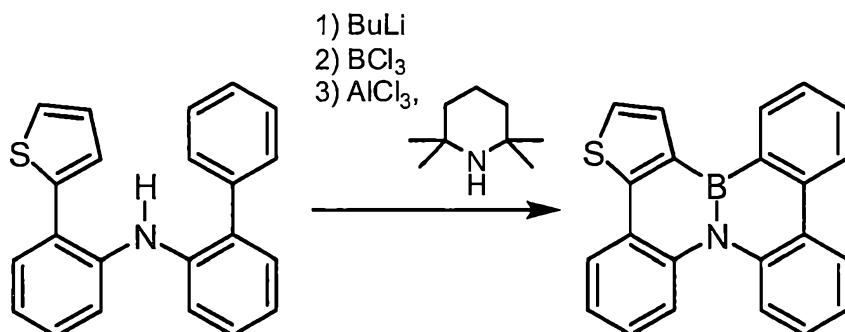
烷溶液 (1.00 mL、1.00 M、1.0 mmol)，攪拌 1 小時後，升溫至室溫並進一步攪拌 12 小時。將溶劑於減壓下蒸餾去除，添加 1,2-二氯苯 (20 mL) 後，添加三氯化鋁 (2.13 g、16.0 mmol) 及 2,2,6,6-四甲基哌啶 (0.192 g、6.0 mmol)，於 150°C 下攪拌 24 小時。添加 1,4-二氮雜雙環[2.2.2]辛烷 (1.79 g、16.0 mmol) 進行過濾後，將溶劑於減壓下蒸餾去除，利用 HPLC 及 GPC 對所得的粗產物進行分離，藉此以白黃色粉末的形式獲得式 (256) 所表示的化合物 (0.133 g，產率為 23%)。

【0351】 HRMS(FAB) m/z; calcd. 580.2282[M]⁺; found 580.2296.

¹¹B NMR (δ ppm in CS₂/C₆D₆=2/1, 126 MHz) 35.7.

【0352】 合成例 (14)：

11b-氮雜-3b-硼雜苯并[11,12]庚並[6,5-b]噻吩的合成



【0353】 於 N-[(2-噻吩基)苯基]-N-(聯苯-2-基)胺 (0.655 g、2.00 mmol) 及甲苯 (10 mL) 中，於氰氣環境下於-78°C 下添加丁基鋰的己烷溶液 (1.25 mL、1.60 M、2.00 mmol) 進行攪拌。1 小時後升溫至 0°C 並進一步攪拌 1 小時後，於-78°C 下添加三氯化硼的庚

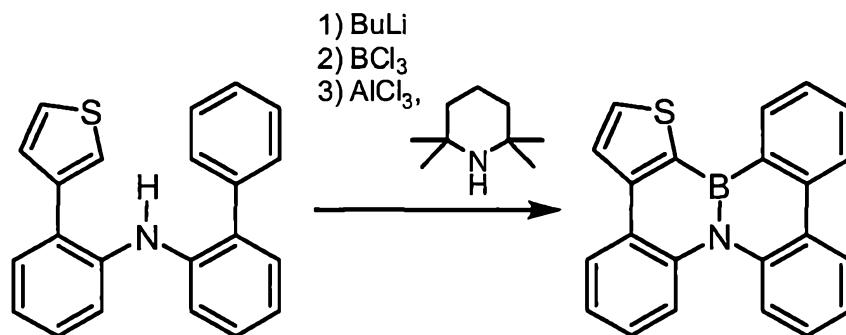
烷溶液 (2.00 mL、1.00 M、2.00 mmol)，於室溫下攪拌 12 小時。將溶劑於減壓下蒸餾去除，添加 1,2-二氯苯 (10 mL) 後，添加三氯化鋁 (1.07 g、8.00 mmol) 及 2,2,6,6-四甲基哌啶 (0.621 g、4.00 mmol)，於 150°C 下攪拌 24 小時。添加 1,4-二氮雜雙環[2.2.2]辛烷 (0.897 g、8.00 mmol) 進行過濾後，將溶劑於減壓下蒸餾去除，利用 HPLC 及 GPC 對所得的粗產物進行分離，藉此以白黃色粉末的形式獲得標題化合物 (0.054 g，產率為 8%)。

【0354】 HRMS(EI) m/z; calcd. 335.0940[M]⁺; found 335.0926.

¹H NMR (δ ppm in C₆D₆, 392 MHz) 6.92-7.11 (m, 5H), 7.39 (td, J = 0.9, 7.6 Hz, 1H), 7.50 (td, J = 1.8, 7.2 Hz, 1H), 7.91-8.00 (m, 4H), 8.11-8.16 (m, 2H), 8.63 (dd, J = 0.9, 7.6 Hz, 1H).

【0355】 合成例 (15)：

11b-氮雜-3b-硼雜苯并[11,12]扁並[5,6-b]噻吩的合成



【0356】 於 N-[(3-噻吩基)苯基]-N-(聯苯-2-基)胺 (0.655 g、2.00 mmol) 及甲苯 (10 mL) 中，於氳氣環境下於-78°C 下添加丁基鋰的己烷溶液 (1.25 mL、1.60 M、2.00 mmol) 進行攪拌。1 小時後

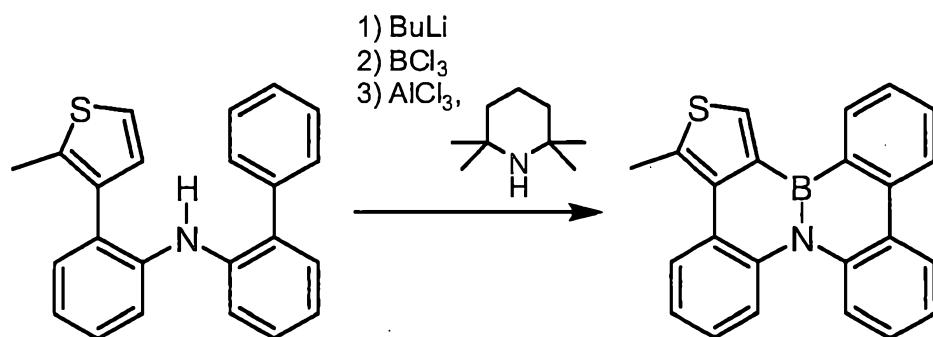
升溫至 0°C 並進一步攪拌 1 小時後，於 -78°C 下添加三氯化硼的庚烷溶液 (2.00 mL、1.00 M、2.00 mmol)，於室溫下攪拌 12 小時。將溶劑於減壓下蒸餾去除，添加 1,2-二氯苯 (10 mL) 後，添加三氯化鋁 (1.07 g、8.00 mmol) 及 2,2,6,6-四甲基哌啶 (0.621 g、4.00 mmol)，於 150°C 下攪拌 24 小時。添加 1,4-二氮雜雙環[2.2.2]辛烷 (0.897 g、8.00 mmol) 進行過濾後，將溶劑於減壓下蒸餾去除，利用 HPLC 及 GPC 對所得的粗產物進行分離，藉此以白黃色粉末的形式獲得標題化合物 (0.020 g，產率為 3%)。

【0357】 HRMS(EI) m/z; calcd. 335.0940[M]⁺; found 335.0943.

¹H NMR (δ ppm in C₆D₆, 392 MHz) 7.00-7.05 (m, 2H), 7.07-7.12 (m, 2H), 7.40-7.50 (m, 3H), 7.63 (d, J = 4.9 Hz, 1H), 7.94 (dd, J = 1.8, 8.1 Hz, 1H), 8.03 (dd, J = 1.3, 8.5 Hz, 1H), 8.08-8.15 (m, 3H), 8.95 (dd, J = 1.4, 7.6 Hz, 1H).

【0358】 合成例 (16)：

1-甲基-11b-氮雜-3b-硼雜苯并[11,12]茚並[5,6-c]噻吩的合成



【0359】 於 N-[(3-(2-甲基)噻吩基)苯基]-N-(聯苯-2-基)胺 (0.683

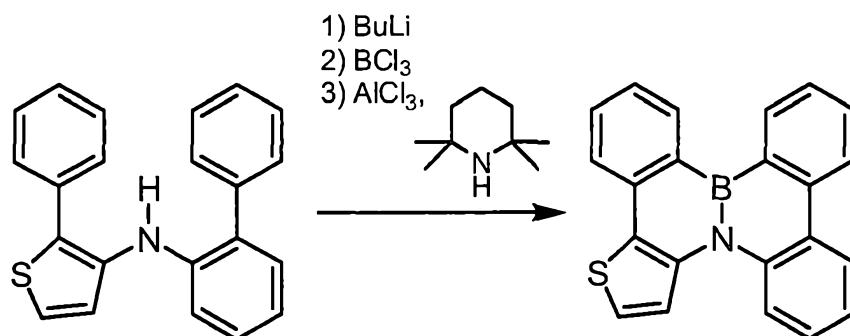
g、2.00 mmol) 及甲苯 (10 mL) 中，於氰氣環境下於-78°C 下添加丁基鋰的己烷溶液 (1.25 mL、1.60 M、2.00 mmol) 進行攪拌。1 小時後升溫至 0°C 並進一步攪拌 1 小時後，於-78°C 下添加三氯化硼的庚烷溶液 (2.00 mL、1.00 M、2.00 mmol)，於室溫下攪拌 12 小時。將溶劑於減壓下蒸餾去除，添加 1,2-二氯苯 (10 mL) 後，添加三氯化鋁 (1.07 g、8.00 mmol) 及 2,2,6,6-四甲基哌啶 (0.621 g、4.00 mmol)，於 150°C 下攪拌 18 小時。添加 1,4-二氮雜雙環[2.2.2]辛烷 (0.897 g、8.00 mmol) 進行過濾後，將溶劑於減壓下蒸餾去除，利用 HPLC 及 GPC 對所得的粗產物進行分離，藉此以褐色粉末的形式獲得標題化合物 (0.035 g，產率為 5%)。

HRMS(MALDI) m/z; calcd. 349.1091[M]⁺; found 349.1088.

¹¹B NMR (δ ppm in C₆D₆, 126 MHz) 32.5.

【0360】 合成例 (17)：

3b-氮雜-11b-硼雜苯并[11,12]扁並[6,5-b]噻吩的合成



【0361】 於 N-([1,1'-聯苯]-2-基)-2-苯基噻吩-3-胺 (0.655 g、2.00 mmol) 及甲苯 (10 mL) 中，於氰氣環境下於-78°C 下添加丁基鋰

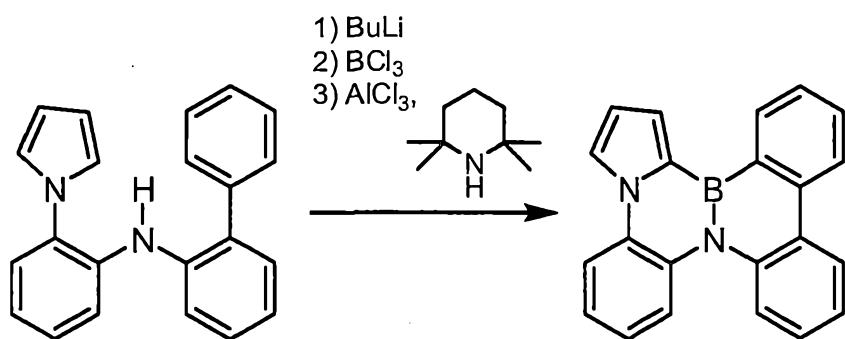
的己烷溶液 (1.25 mL、1.60 M、2.00 mmol) 進行攪拌。1 小時後升溫至 0°C 並進一步攪拌 1 小時後，於-78°C 下添加三氯化硼的庚烷溶液 (2.00 mL、1.00 M、2.00 mmol)，於室溫下攪拌 12 小時。將溶劑於減壓下蒸餾去除，添加 1,2-二氯苯 (10 mL) 後，添加三氯化鋁 (1.07 g、8.00 mmol) 及 2,2,6,6-四甲基哌啶 (0.621 g、4.00 mmol)，於 150°C 下攪拌 24 小時。添加 1,4-二氮雜雙環[2.2.2]辛烷 (0.897 g、8.0 mmol) 進行過濾後，將溶劑於減壓下蒸餾去除，利用 HPLC 及 GPC 對所得的粗產物進行分離，藉此以白黃色粉末的形式獲得標題化合物 (0.030 g，產率為 4%)。

【0362】 HRMS(EI) m/z; calcd. 335.0940[M]⁺; found 335.0929.

¹¹B NMR (δ ppm in C₆D₆, 126 MHz) 34.5.

【0363】 合成例 (18)：

12b-氮雜-4b-硼雜二苯并[1,k]吡咯並[1,2-f]咁啶的合成



【0364】 於 N-(2-(1H-吡咯-1-基)苯基)-[1,1'-聯苯]-2-胺 (0.621 g、2.00 mmol) 及甲苯 (10 mL) 中，於氰氣環境下於-78°C 下添加丁基鋰的己烷溶液 (1.25 mL、1.60 M、2.00 mmol) 進行攪拌。1

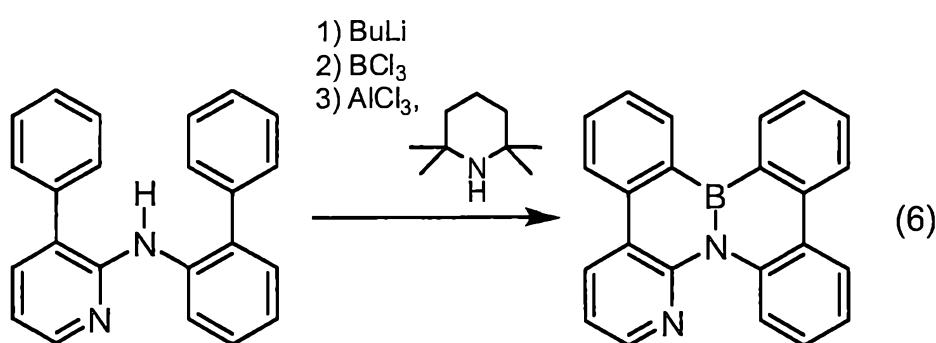
小時後升溫至 0°C 並進一步攪拌 1 小時後，於 -78°C 下添加三氯化硼的庚烷溶液 (2.00 mL、1.00 M、2.00 mmol)，於室溫下攪拌 12 小時。將溶劑於減壓下蒸餾去除，添加 1,2-二氯苯 (10 mL) 後，添加三氯化鋁 (1.07 g、8.00 mmol) 及 2,2,6,6-四甲基哌啶 (0.466 g、3.00 mmol)，於 150°C 下攪拌 24 小時。添加 1,4-二氮雜雙環[2.2.2]辛烷 (1.12 g、10.0 mmol) 進行過濾後，將溶劑於減壓下蒸餾去除，利用 HPLC 及 GPC 對所得的粗產物進行分離，藉此以白色粉末的形式獲得標題化合物 (0.023 g，產率為 4%)。

【0365】 HRMS(EI) m/z; calcd. 318.1328[M]⁺; found 318.1324.

¹H NMR (δ ppm in C₆D₆, 392 MHz) 6.72-6.73 (m, 1H), 6.76-6.80 (m, 1H), 6.85-6.89 (m, 1H), 7.01-7.09 (m, 2H), 7.28 (dd, J = 1.3, 8.5 Hz, 1H), 7.35-7.39 (m, 1H), 7.46-7.51 (m, 2H), 7.55 (dd, J = 1.3, 3.6 Hz, 1H), 7.80 (dd, J = 1.3, 8.5 Hz, 1H), 7.86-7.89 (m, 1H), 8.09-8.13 (m, 2H), 8.71 (dd, J = 1.3, 7.6 Hz, 1H).

【0366】 合成例 (19)：

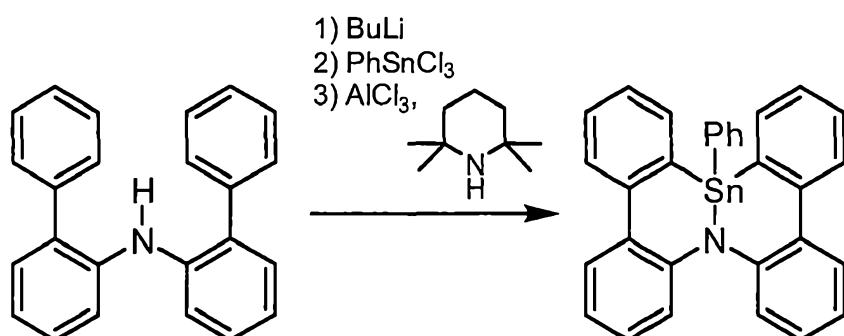
4b-氮雜-12b-硼雜苯并[f]菲並[9,10-h]喹啉的合成



【0367】 於 N-([1,1'-聯苯]-2-基)-3-苯基吡啶-2-胺 (0.645 g、2.00 mmol) 及甲苯 (10 mL) 中，於氳氣環境下於-78°C 下添加丁基鋰的己烷溶液 (1.25 mL、1.60 M、2.00 mmol) 進行攪拌。1 小時後升溫至 0°C 並進一步攪拌 1 小時後，於-78°C 下添加三氯化硼的庚烷溶液 (2.00 mL、1.00 M、2.00 mmol)，於室溫下攪拌 12 小時。將溶劑於減壓下蒸餾去除，添加 1,2-二氯苯 (10 mL) 後，添加三氯化鋁 (1.07 g、8.00 mmol) 及 2,2,6,6-四甲基哌啶 (0.621 g、4.00 mmol)，於 150°C 下攪拌 24 小時。添加 1,4-二氮雜雙環[2.2.2]辛烷 (0.897 g、8.0 mmol) 進行過濾後，將溶劑於減壓下蒸餾去除，利用 HPLC 及 GPC 對所得的粗產物進行分離，藉此可獲得式 (6) 所表示的化合物。

【0368】 合成例 (20)：

4b-氮雜-12b-苯基-12b-錫雜二苯并[g,p]茚的合成

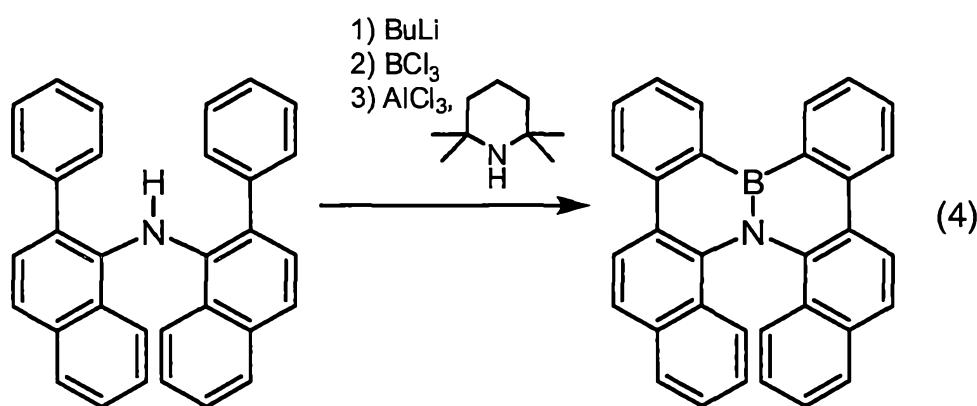


【0369】 於雙(聯苯-2-基)胺 (0.321 g、1.00 mmol) 及 THF (10 mL) 中，於氳氣環境下於-78°C 下添加丁基鋰的己烷溶液 (0.63 mL、1.60 M、1.00 mmol) 進行攪拌。1 小時後，於-78°C 下添加苯基三氯鉛

(0.302 g、1.00 mmol)攪拌1小時後，於室溫下攪拌12小時。將溶劑於減壓下蒸餾去除，添加1,2-二氯苯後，添加三氯化鋁(0.533 g、4.00 mmol)及2,2,6,6-四甲基哌啶(0.232 g、1.50 mmol)，於150°C下攪拌12小時。添加1,4-二氮雜雙環[2.2.2]辛烷(0.448 g、4.00 mmol)進行過濾後，將溶劑於減壓下蒸餾去除，利用HPLC及GPC對所得的粗產物進行分離，藉此可獲得標題化合物。

【0370】 合成例(21)：

6c-氮雜-16b-硼雜二苯并[c,p]萘并[1,2-g]巰的合成



【0371】 於雙(2-苯基萘-1-基)胺(5.91 g、14.0 mmol)及甲苯(70 mL)中，於氫氣環境下於-78°C下添加丁基鋰的己烷溶液(8.75 mL、1.60 M、14.0 mmol)進行攪拌。5分鐘後升溫至0°C並進一步攪拌2.5小時後，於-78°C下添加三氯化硼的庚烷溶液(14.0 mL、1.00 M、14.0 mmol)，於室溫下攪拌12小時。將溶劑於減壓下蒸餾去除，添加1,2-二氯苯後，添加三氯化鋁(14.9 g、112 mmol)

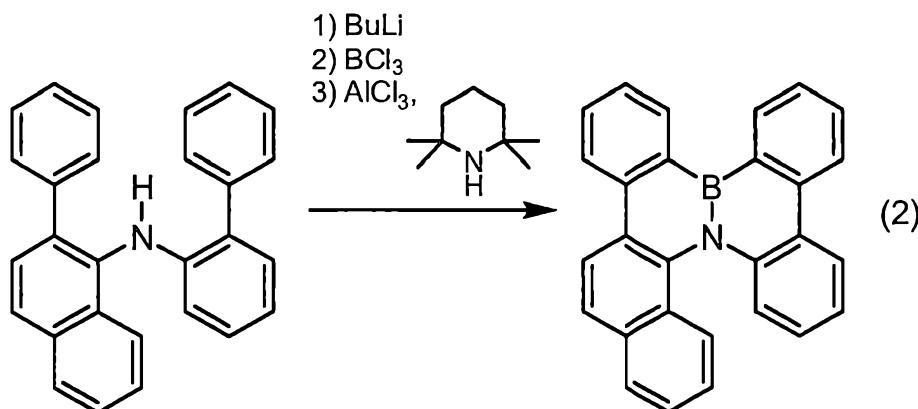
及 2,2,6,6-四甲基哌啶 (9.53 mL、56.0 mmol)，於 150°C 下攪拌 12 小時。添加 1,4-二氮雜雙環[2.2.2]辛烷 (12.6 g、112 mmol) 進行過濾後，將溶劑於減壓下蒸餾去除，藉由己烷清洗對所得的粗產物進行分離，藉此以茶色粉末的形式獲得式 (4) 所表示的化合物 (4.27 g，產率為 68%)。

【0372】 HRMS(EI) m/z; calcd. 429.1694[M]⁺; found 429.1698.

¹H NMR (δ ppm in CDCl₃); 6.65-6.69 (m, 2H), 7.11 (t, 2H, J = 7.4 Hz), 7.16 (d, 2H, J = 8.9 Hz), 7.64-7.70 (m, 4H), 7.79 (d, 2H, J = 8.9 Hz), 7.86 (dd, 2H, J = 0.9, 7.6 Hz), 8.48 (d, 2H, J = 8.9 Hz), 8.60 (d, 2H, J = 8.1 Hz), 8.84 (d, 2H, J = 7.1 Hz).

【0373】 合成例 (22)：

6c-氮雜-14b-硼雜三苯并[c,g,p]屢的合成



【0374】 於 N-([1,1'-聯苯]-2-基)-2-苯基萘-1-胺 (0.559 g、1.51 mmol) 及甲苯 (7.5 mL) 中，於氰氣環境下於-78°C 下添加丁基鋰的己烷溶液 (0.940 mL、1.60 M、1.50 mmol) 進行攪拌。10 分鐘

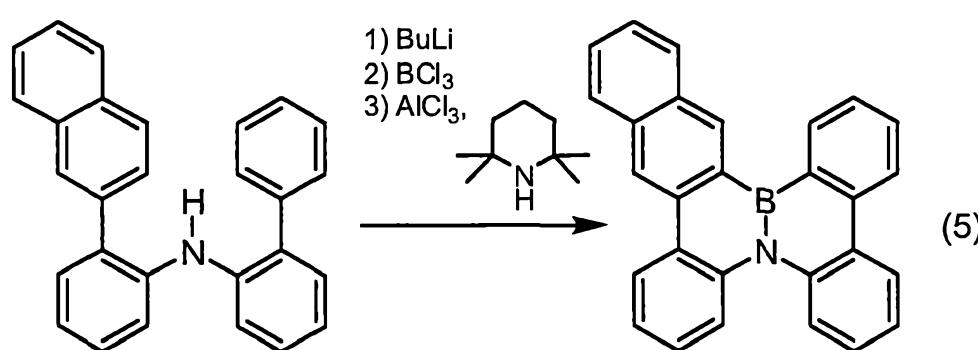
後升溫至 0°C 並進一步攪拌 1.5 小時後，於 -78°C 下添加三氯化硼的庚烷溶液 (1.50 mL、1.00 M、1.50 mmol)，於室溫下攪拌 12 小時。將溶劑於減壓下蒸餾去除，添加 1,2-二氯苯後，添加三氯化鋁 (0.800 g、6.00 mmol) 及 2,2,6,6-四甲基哌啶 (0.510 mL、3.00 mmol)，於 150°C 下攪拌 12 小時。添加 1,4-二氮雜雙環[2.2.2]辛烷 (0.675 g、6.01 mmol) 進行過濾後，將溶劑於減壓下蒸餾去除，利用 GPC 對所得的粗產物進行分離，藉此以茶色粉末的形式獲得式 (2) 所表示的化合物 (0.132 g，產率為 23%)。

【0375】 HRMS(EI) m/z; calcd. 379.1532[M]⁺; found 379.1521.

¹H NMR (δ ppm in CDCl₃); 7.04-7.06 (m, 2H), 7.10-7.15 (m, 1H), 7.18-7.22 (m, 1H), 7.37-7.41 (m, 1H), 7.58-7.62 (m, 2H), 7.63-7.67 (m, 1H), 7.77-7.89 (m, 4H), 8.30 (d, 1H, J = 7.6 Hz), 8.44 (d, 1H, J = 8.5 Hz), 8.46 (d, 1H, J = 8.0 Hz), 8.51 (d, 1H, J = 8.0 Hz), 8.74-8.77 (m, 2H).

【0376】 合成例 (23)：

4b-氮雜-14b-硼雜三苯并[a,c,f]四芬的合成



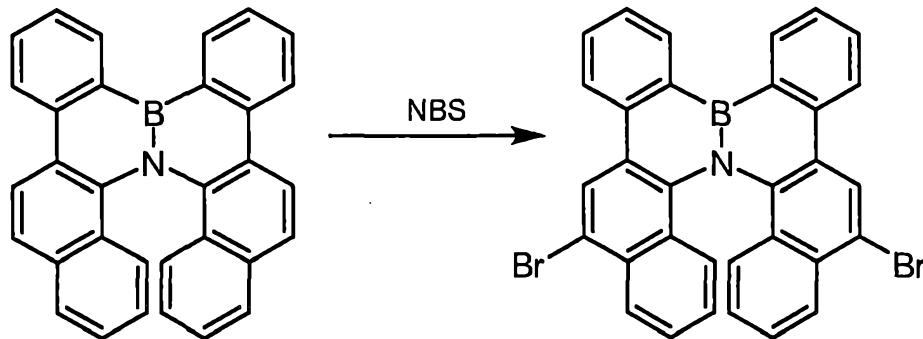
【0377】 於 N-(2-(萘-2-基)苯基)-[1,1'-聯苯]-2-胺 (0.370 g、0.996 mmol) 及甲苯 (5.0 mL) 中，於氬氣環境下於-78°C 下添加丁基鋰的己烷溶液 (0.625 mL、1.60 M、1.00 mmol) 進行攪拌。15 分鐘後升溫至 0°C 並進一步攪拌 1.5 小時後，於-78°C 下添加三氯化硼的庚烷溶液 (1.00 mL、1.00 M、1.00 mmol)，於室溫下攪拌 12 小時。將溶劑於減壓下蒸餾去除，添加 1,2-二氯苯後，添加三氯化鋁 (1.07 g、8.00 mmol) 及 2,2,6,6-四甲基哌啶 (0.680 mL、4.00 mmol)，於 150°C 下攪拌 12 小時。添加 1,4-二氮雜雙環[2.2.2]辛烷 (0.897 g、8.00 mmol) 進行過濾後，將溶劑於減壓下蒸餾去除，利用 GPC 對所得的粗產物進行分離，藉此以茶色粉末的形式獲得式 (5) 所表示的化合物 (0.219 g，產率為 55%)。

【0378】 HRMS(EI) m/z; calcd. 379.1532[M]⁺; found 379.1538.

¹H NMR (δ ppm in CDCl₃); 7.26-7.38 (m, 4H), 7.49-7.53 (m, 1H), 7.54-7.60 (m, 1H), 7.61-7.65 (m, 1H), 7.75-7.79 (m, 1H), 7.97-8.07 (m, 4H), 8.32 (dd, 1H, J = 1.6, 7.8 Hz), 8.38-8.43 (m, 2H), 8.73 (s, 1H), 8.78 (dd, 1H, J = 1.4, 7.6 Hz), 9.10 (s, 1H).

【0379】 合成例 (24) :

2,11-二溴-6c-氮雜-16b-硼雜二苯并[c,p]萘并[1,2-g]蒽的合成



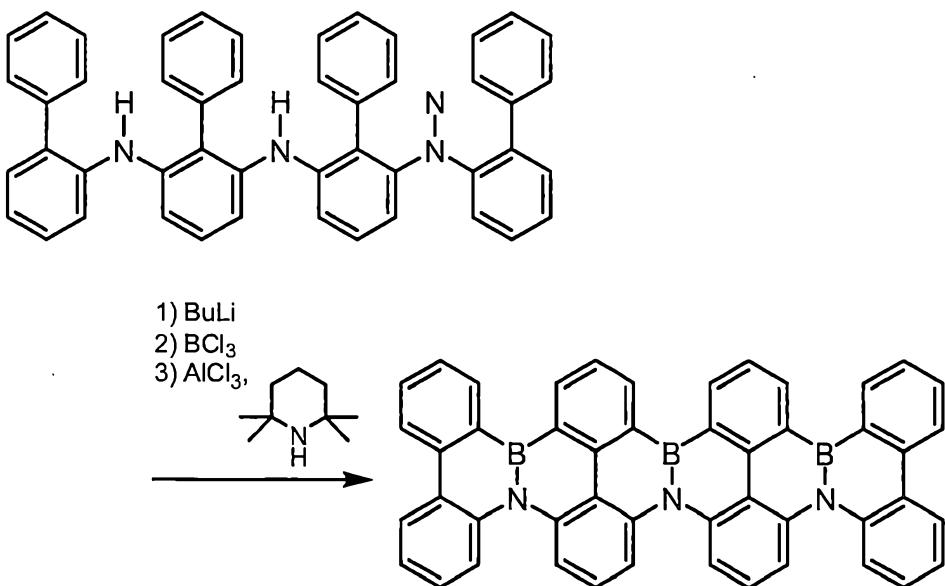
【0380】 於 6c-氮雜-16b-硼雜二苯并[c,p]萘并[1,2-g]扁 (0.0427 g、0.996 mmol) 及二氯甲烷 (1.0 mL) 中，於室溫下添加 N-溴代丁二醯亞胺 (0.0444 g、0.249 mmol) 並攪拌 6 小時。將溶劑於減壓下蒸餾去除，利用 GPC 對所得的粗產物進行分離，藉此以茶色粉末的形式獲得標題化合物 (0.0222 g，產率為 38%)。

【0381】 HRMS(EI) m/z; calcd. 586.9887[M]⁺; found 586.9885.

¹H NMR (δ ppm in CDCl₃); 6.79 (dt, 2H, J = 1.4, 7.7 Hz), 7.19-7.24 (m, 4H), 7.70 (t, 2H, J = 6.7 Hz), 7.90 (dt, 2H, J = 1.3, 7.4 Hz), 8.12 (d, 2H, J = 8.5 Hz), 8.55 (d, 2H, J = 8.1 Hz), 8.80 (s, 2H), 8.84 (d, 2H, J = 6.7 Hz).

【0382】 合成例 (25) :

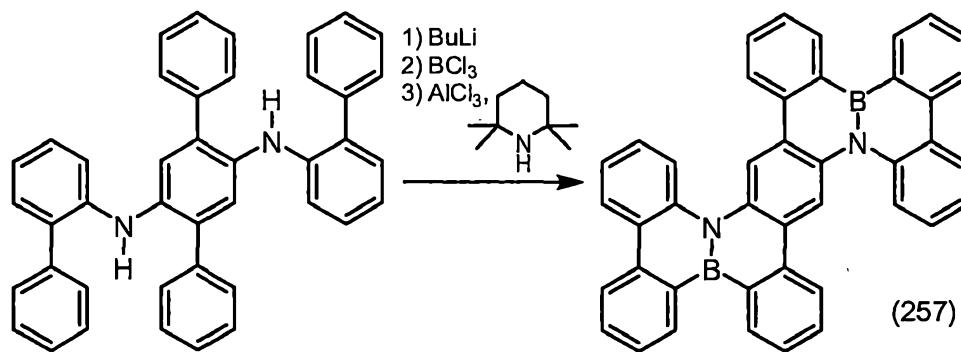
8b,11b,14b- 三 氮 雜 -22b,25b,28b- 三 硼 雜 八 苯 并 [a,c,fg,jk,n,p,st,wx]稠六苯的合成



【0383】 於 $\text{N}^2\text{-}([1,1'\text{-聯苯}]\text{-}2\text{-基})\text{-}\text{N}^6\text{-}(6\text{-}([1,1'\text{-聯苯}]\text{-}2\text{-基})\text{-}[1,1'\text{-聯苯}]\text{-}2,6\text{-二胺})$ (1.31 g、2.00 mmol) 及 甲苯 (20 mL) 中，於氰氣環境下於-78°C 下添加丁基鋰的己烷溶液 (3.68 mL、1.63 M、6.00 mmol) 進行攪拌。1 小時後，升溫至 0°C 並進一步攪拌 1 小時後，於-78°C 下添加三氯化硼的庚烷溶液 (6.00 mL、1.00 M、6.00 mmol)，於室溫下攪拌 12 小時。將溶劑於減壓下蒸餾去除，添加 1,2-二氯苯 (40 mL) 後，添加三氯化鋁 (4.01 g、30.0 mmol)、2,2,6,6-四甲基哌啶 (1.74 g、11.3 mmol)，於 150°C 下攪拌 12 小時。添加 1,4-二氮雜雙環[2.2.2]辛烷 (3.36 g、30.0 mmol) 進行過濾後，將溶劑於減壓下蒸餾去除，利用 HPLC 及 GPC 對所得的粗產物進行分離，藉此可獲得標題化合物。

【0384】 合成例 (26)：

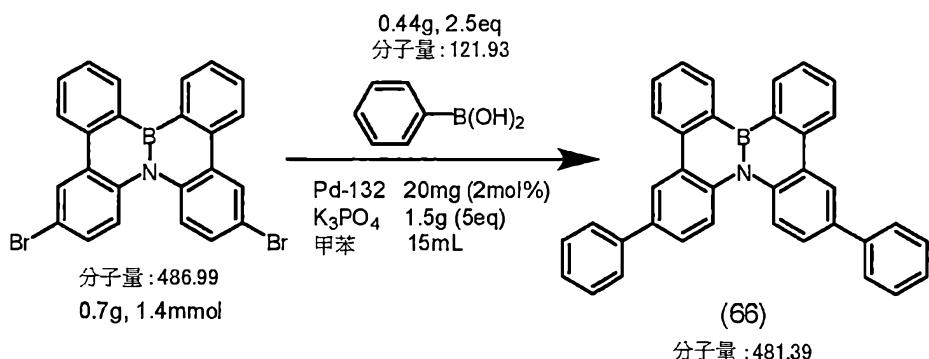
9b,22b-二氮雜-4b,17b-二硼雜四苯并[a,c,f,m]菲並[9,10-k]四芬的合成



【0385】 於 $N^{2'},N^{5'}\text{-二}([1,1'\text{-聯苯}]\text{-2-基})\text{-}[1,1':4',1''\text{-聯三苯}]\text{-2',5'}$ -二胺 (1.13 g、2.00 mmol) 及甲苯 (20 mL) 中，於氰氣環境下於-78°C 下添加丁基鋰的己烷溶液 (2.45 mL、1.63 M、4.00 mmol) 並進行攪拌。1 小時後，升溫至 0°C 並進一步攪拌 1 小時後，於-78°C 下添加三氯化硼的庚烷溶液 (4.00 mL、1.00 M、4.00 mmol)，於室溫下攪拌 12 小時。將溶劑於減壓下蒸餾去除，添加 1,2-二氯苯 (40 mL) 後，添加三氯化鋁 (2.67 g、20.0 mmol)、2,2,6,6-四甲基哌啶 (1.16 g、7.50 mmol)，於 150°C 下攪拌 12 小時。添加 1,4-二氮雜雙環[2.2.2]辛烷 (2.24 g、20.0 mmol) 進行過濾後，將溶劑於減壓下蒸餾去除，利用 HPLC 及 GPC 對所得的粗產物進行分離，藉此可獲得式 (257) 所表示的化合物。

【0386】 合成例 (27)：

2,7-二苯基-4b-氮雜-12b-硼雜二苯并[g,p]巎的合成



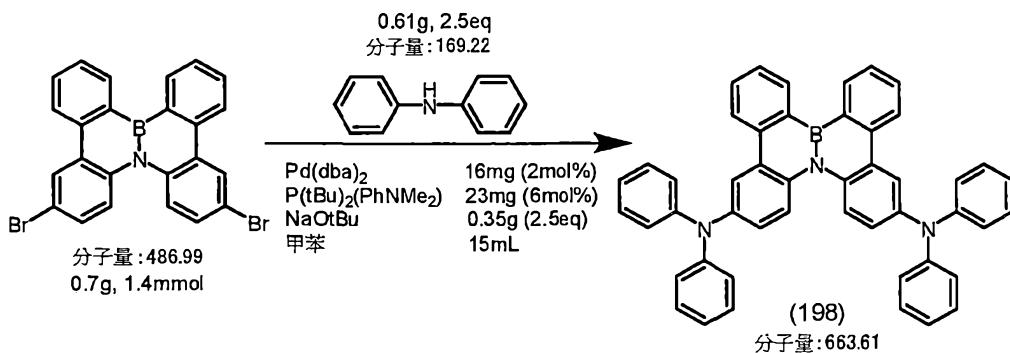
【0387】 將放入有 2,7-二溴-4b-氮雜-12b-硼雜二苯并[g,p]巰 (0.70 g)、苯基硼酸 (0.44 g)、磷酸鉀 (1.5 g)、Pd-132 (約翰遜馬西 (Johnson Matthey)) (0.02 g) 及甲苯 (15 mL) 的燒瓶於氮氣環境下於 70°C 下攪拌 1 小時。將反應液冷卻至室溫為止後，添加水及甲苯進行分液。繼而，將溶劑於減壓下蒸餾去除後，利用活性氧化鋁管柱層析儀 (展開液：甲苯/三乙胺=99/1 (容量比)) 進行純化。將溶劑減壓蒸餾去除後，依序用庚烷、乙酸乙酯對得的固體進行清洗，進而自氯苯/庚烷混合溶液中進行再結晶，藉此獲得式 (66) 所表示的化合物 (0.51 g)。

【0388】 藉由核磁共振 (Nuclear Magnetic Resonance, NMR) 測定確認了所得的化合物的結構。

¹H-NMR (CDCl₃) : δ = 8.73 (d, 2H), 8.60 (m, 2H), 8.51 (d, 2H), 8.23 (d, 2H), 7.82 (t, 2H), 7.75 (d, 4H), 7.64 (m, 4H), 7.51 (t, 4H), 7.40 (t, 2H).

【0389】 合成例 (28) :

N²,N²,N⁷,N⁷-四苯基-4b-氮雜-12b-硼雜二苯并[g,p]巰-2,7-二胺的合成



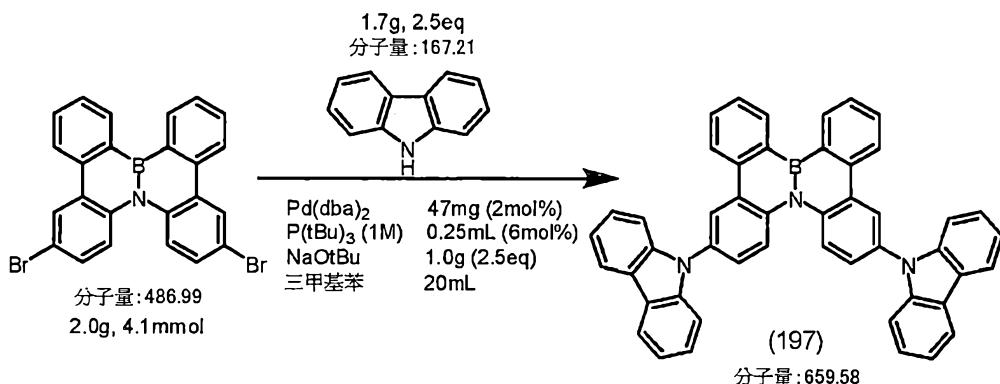
【0390】 將放入有 2,7-二溴-4b-氮雜-12b-硼雜二苯并[g,p]巰 (0.70 g)、二苯基胺 (0.61 g)、第三丁氧化鈉 (0.35 g)、Pd(dba)₂ (0.02 g)、4-(二-第三丁基膦基)-N,N-二甲基苯胺 (0.02 g) 及甲苯 (15 ml) 的燒瓶於氮氣環境下於 70°C 下攪拌 1 小時。將反應液冷卻至室溫為止後，添加水及甲苯進行分液。繼而，將溶劑減壓蒸餾去除後，利用活性氧化鋁管柱層析儀（展開液：甲苯/庚烷/三乙胺=10/10/1（容量比））進行純化。將溶劑減壓蒸餾去除後，利用庚烷對所得的固體進行清洗，獲得式 (198) 所表示的化合物 (0.22 g)。

【0391】 藉由 NMR 測定確認了所得的化合物的結構。

¹H-NMR (CDCl₃) : δ = 8.67 (d, 2H), 8.12 (m, 4H), 8.03 (d, 2H), 7.67 (t, 2H), 7.57 (t, 2H), 7.26 (m, 8H), 7.16 (m, 8H), 7.13 (dd, 2H), 7.02 (t, 4H).

【0392】 合成例 (29) :

2,7-二咔唑基-4b-氮雜-12b-硼雜二苯并[g,p]巰的合成



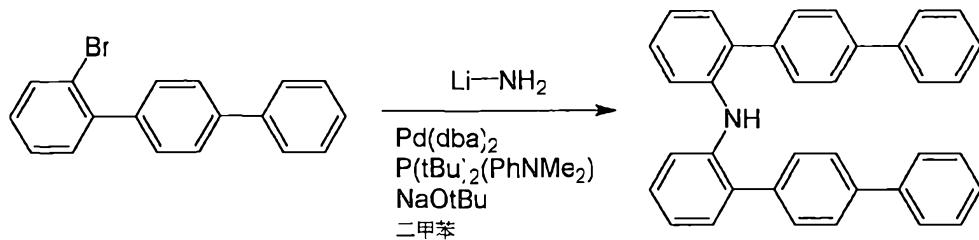
【0393】 將放入有 2,7-二溴-4b-氮雜-12b-硼雜二苯并[g,p]巰 (2.00 g)、咔唑 (1.70 g)、第三丁氧化鈉 (1.00 g)、Pd(dba)₂ (0.05 g)、三-第三丁基膦的 1 M 甲苯溶液 (0.25 ml) 及 1,2,4-三甲基苯 (20 ml) 的燒瓶於氮氣環境下於 150°C 下攪拌 1 小時。將反應液冷卻至室溫為止後，藉由抽吸過濾來採集所析出的固體，依序利用甲醇、水、甲醇進行清洗。繼而，使其溶解於經加熱的氯苯中，通過活性氧化鋁短管柱。此時，使用展開液 (甲苯/乙酸乙酯/三乙胺=95/5/1(容量比)) 使其自管柱中溶出。將溶劑減壓蒸餾去除後，利用乙酸乙酯對所得的固體進行清洗，獲得式 (197) 所表示的化合物 (1.50 g)。

【0394】 藉由 NMR 測定確認了所得的化合物的結構。

¹H-NMR (CDCl₃) : δ = 8.80 (d, 2H), 8.60 (m, 2H), 8.48 (d, 2H), 8.37 (d, 2H), 8.20 (d, 4H), 7.81 (t, 2H), 7.70 (t, 2H), 7.65 (dd, 2H), 7.40-7.60 (m, 8H), 7.33 (t, 4H).

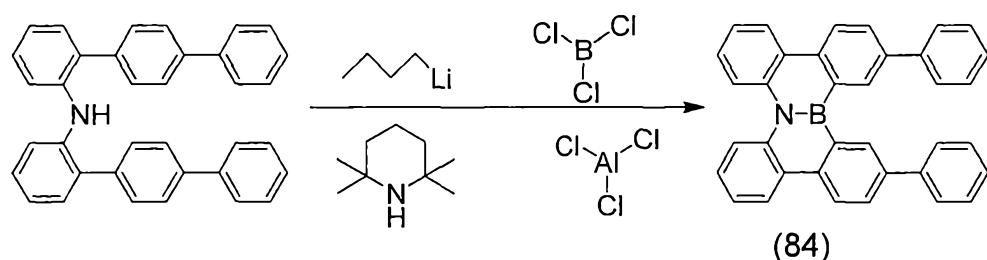
【0395】 合成例 (30) :

2,7,11,14-四苯基-4b-氮雜-12b-硼雜二苯并[g,p]巰的合成



【0396】 首先，將放入有 2-溴-1,1':4',1"-聯三苯 (35.0 g)、第三丁氧化鈉 (10.9 g)、Pd(dba)₂ (0.65 g)、4-(二-第三丁基膦基)-N,N-二甲基苯胺 (0.60 g)、二甲苯 (100 ml) 及鋰醯胺 (1.3 g) 的燒瓶於氮氣環境下於 90°C 下攪拌 2 小時。將反應液冷卻至室溫為止後，添加水及乙酸乙酯進行分液。繼而，將溶劑減壓蒸餾去除後，利用活性氧化鋁管柱層析儀（展開液：甲苯）進行純化。將溶劑減壓蒸餾去除後，添加庚烷，藉此使沈澱析出，利用庚烷對所得的沈澱進行清洗，獲得二([1,1':4',1"-聯三苯]-2-基)胺 (22.2 g)。

【0397】



【0398】 繼而，將放入有二([1,1':4',1"-聯三苯]-2-基)胺 (22.2 g) 及甲苯 (250 ml) 的燒瓶冷卻至 -70°C 為止，滴加正丁基鋰的 2.6 M 己烷溶液 (18.0 ml)。滴加結束後，暫且升溫至 0°C 為止，於 0°C



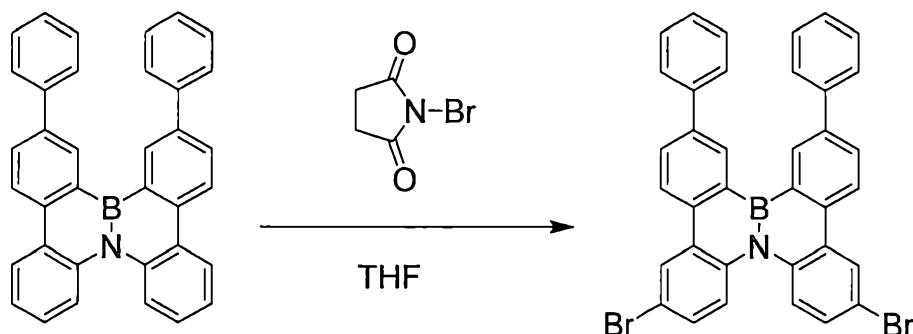
下攪拌 5 分鐘。其後，再次冷卻至 -70°C 為止，滴加三氯化硼的 1.0 M 庚烷溶液 (46.9 ml)。繼而，將反應液升溫至室溫為止後，暫且將溶劑減壓蒸餾去除。於其中添加鄰二氯苯 (300 ml)、2,2,6,6-四甲基哌啶 (13.9 g)、三氯化鋁 (25.0 g)，於 160°C 下攪拌 12 小時。將反應液冷卻至室溫為止，添加甲苯 (500 ml) 及矽藻土進行攪拌後，靜置約 1 小時。繼而，藉由使用鋪設有矽藻土的桐山漏斗的抽吸過濾將析出的沈澱去除後，將溶劑減壓蒸餾去除。進而利用活性氧化鋁管柱層析儀（展開液：甲苯/乙酸乙酯/三乙胺 = 90/10/1 (容量比)）進行純化後，於乙酸乙酯/庚烷混合溶劑中再沈澱，獲得式 (84) 所表示的化合物 (16.2 g)。

【0399】 藉由 NMR 測定確認了所得的化合物的結構。

¹H-NMR (CDCl₃) : δ = 9.00 (m, 2H), 8.50 (d, 2H), 8.41 (d, 2H), 8.15 (d, 2H), 8.04 (d, 2H), 7.77 (d, 4H), 7.50 (t, 4H), 7.40 (m, 6H).

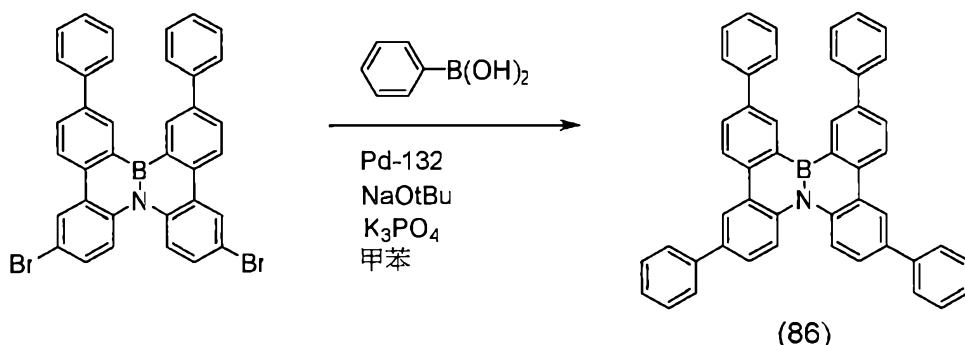
【0400】 合成例 (31) :

2,7-二溴-11,14-二苯基-4b-氮雜-12b-硼雜二苯并[g,p]扁的合成



【0401】 首先，於氮氣環境下，於 2,7,11,14-四苯基-4b-氮雜-12b-硼雜二苯并[g,p]巰 (4.8 g) 的 THF (50 ml) 溶液中，添加 N-溴代丁二醯亞胺 (NBS) (3.7 g)，於室溫下攪拌 1 小時。反應結束後，添加亞硝酸鈉水溶液，藉由抽吸過濾來採集所析出的沈澱。繼而，利用活性氧化鋁管柱層析儀(展開液：甲苯/三乙胺=99/1(容量比))對所得的固體進行純化，獲得 2,7-二溴-11,14-二苯基-4b-氮雜-12b-硼雜二苯并[g,p]巰 (5.2 g)。

【0402】



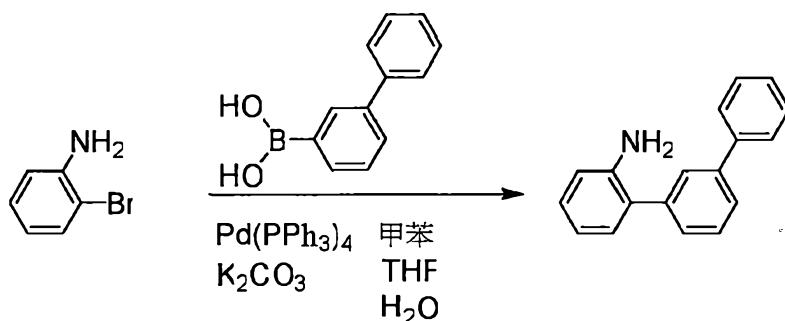
【0403】 繼而，將放入有 2,7-二溴-11,14-二苯基-4b-氮雜-12b-硼雜二苯并[g,p]巰 (2.0 g)、苯基硼酸 (1.0 g)、磷酸鉀 (1.3 g)、第三丁氧化鈉 (0.6 g)、Pd-132(約翰遜馬西 (Johnson Matthey)) (0.04 g) 及甲苯 (40 mL) 的燒瓶於氮氣環境下於 100°C 下攪拌 1 小時。將反應液冷卻至室溫為止後，添加水及乙酸乙酯進行分液。繼而，將溶劑減壓蒸餾去除後，利用活性氧化鋁管柱層析儀 (展開液：甲苯/三乙胺=99/1(容量比)) 進行純化。將溶劑減壓蒸餾去除後，添加庚烷進行再沈澱，藉此獲得式 (86) 所表示的化合物 (1.8 g)。

【0404】 藉由 NMR 測定確認了所得的化合物的結構。

$^1\text{H-NMR}$ (CDCl_3) : $\delta = 9.03$ (s, 2H), 8.64 (s, 2H), 8.59 (d, 2H), 8.26 (d, 2H), 8.06 (d, 2H), 7.79 (m, 8H), 7.67 (d, 2H), 7.52 (m, 8H), 7.40 (m, 4H).

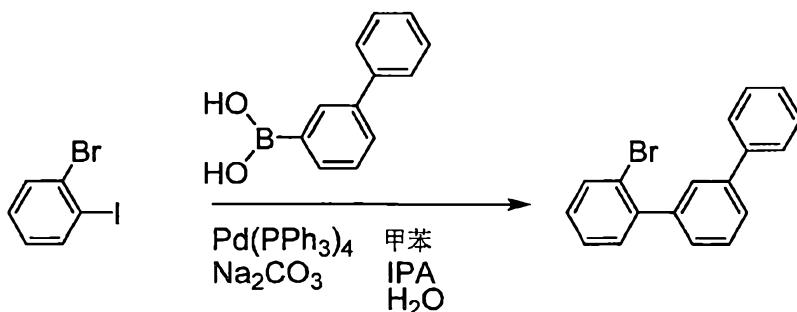
【0405】 合成例 (32)：

10,15-二苯基-4b-氮雜-12b-硼雜二苯并[g,p]扁的合成



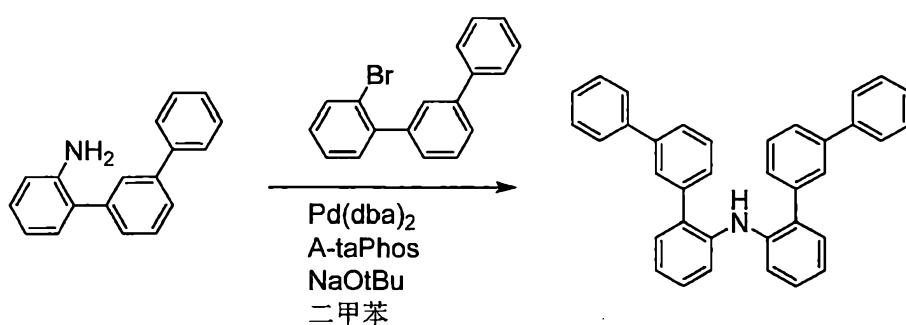
【0406】 首先，將放入有 2-溴苯胺 (25.0 g)、[1,1'-聯苯]-3-基硼酸 (28.8 g)、碳酸鉀 (50.2 g)、 $\text{Pd}(\text{PPh}_3)_4$ (5.0 g)、甲苯 (200 ml)、THF (70 ml) 及水 (30 ml) 的燒瓶於回流溫度下攪拌 8 小時。將反應液冷卻至室溫為止後，添加水進行分液，將溶劑減壓蒸餾去除。利用矽膠短管柱 (展開液：甲苯) 對所得的油狀物質進行純化，將溶劑減壓蒸餾去除，於所得的油狀物質中添加庚烷進行再沈澱，獲得 [1,1':3',1"-聯三苯]-2-胺 (33.0 g)。

【0407】



【0408】 繼而，將放入有 1-溴-2-碘苯（35.0 g）、[1,1'-聯苯]-3-基硼酸（24.5 g）、碳酸鈉（32.8 g）、Pd(PPh₃)₄（4.3 g）、甲苯（200 ml）、異丙醇（50 ml）及水（20 ml）的燒瓶於回流溫度下攪拌 8 小時。將反應液冷卻至室溫為止後，添加水進行分液，將溶劑減壓蒸餾去除。利用矽膠短管柱（展開液：甲苯）對所得的油狀物質進行純化。將溶劑減壓蒸餾去除，藉由減壓蒸餾對所得的油狀物質進行進一步純化，獲得 2-溴-1,1':3',1"-聯三苯（34.4 g）。

【0409】

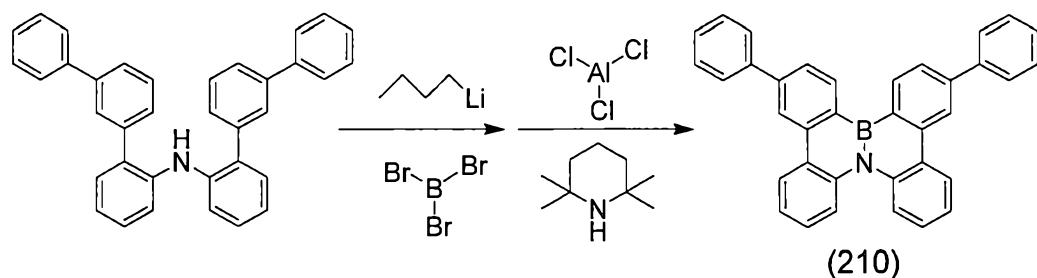


【0410】 進而，將放入有[1,1':3',1"-聯三苯]-2-胺（20.0 g）、2-溴-1,1':3',1"-聯三苯（25.2 g）、第三丁氧化鈉（11.8 g）、Pd(dba)₂（0.11 g）、4-(二-第三丁基膦基)-N,N-二甲基苯胺「A-taPhos」（0.11 g）



及二甲苯 (150 ml) 的燒瓶於氮氣環境下於 110°C 下攪拌 2 小時。將反應液冷卻至室溫為止後，添加水進行分液，將溶劑減壓蒸餾去除。利用矽膠管柱層析儀（展開液：甲苯/庚烷=2/8 (容量比)）對所得的油狀物質進行純化，獲得二([1,1':3',1"-聯三苯]-2-基)胺 (32.6 g)。

【0411】



【0412】 將放入有如上述般所得的二([1,1':3',1"-聯三苯]-2-基)胺 (22.2 g) 及甲苯 (250 ml) 的燒瓶冷卻至 -70°C 為止，滴加正丁基鋰的 2.6 M 己烷溶液 (18.0 ml)。滴加結束後，暫且升溫至 0°C 為止，於 0°C 下攪拌 5 分鐘。其後，再次冷卻至 -70°C 為止，滴加使三溴化硼 (11.7 g) 溶解於庚烷中所得的溶液。繼而，將反應液升溫至室溫為止後，暫且將溶劑減壓蒸餾去除。於其中添加鄰二氯苯 (300 ml)、2,2,6,6-四甲基哌啶 (13.9 g)、三氯化鋁 (25.0 g)，於 160°C 下攪拌 12 小時。將反應液冷卻至室溫為止，添加甲苯 (500 ml) 及矽藻土進行攪拌後，靜置約 1 小時。繼而，藉由使用鋪設有矽藻土的桐山漏斗的抽吸過濾將析出的沈澱去除後，將溶劑減壓蒸餾去除。進而利用活性氧化鋁管柱層析儀（展開液：甲苯/庚

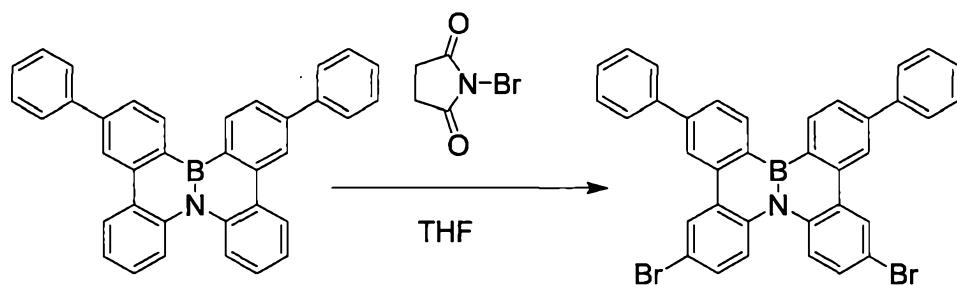
烷/三乙胺=50/50/1(容量比))進行純化後，於乙酸乙酯/乙醇混合溶劑中再沈澱，獲得式(210)所表示的化合物(17.0 g)。

【0413】 藉由NMR測定確認了所得的化合物的結構。

$^1\text{H-NMR}(\text{CDCl}_3):\delta=8.80(\text{d}, 2\text{H}), 8.64(\text{m}, 2\text{H}), 8.47(\text{d}, 2\text{H}), 8.16(\text{d}, 2\text{H}), 7.87(\text{d}, 2\text{H}), 7.82(\text{d}, 4\text{H}), 7.55(\text{t}, 4\text{H}), 7.34\text{--}7.50(\text{m}, 6\text{H})$.

【0414】 合成例(33)：

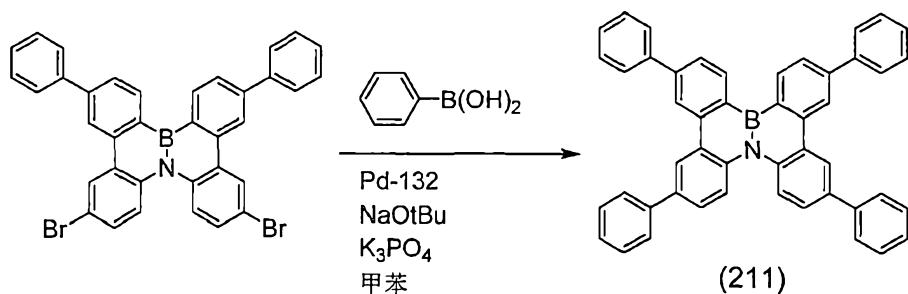
2,7,10,15-四苯基-4b-氮雜-12b-硼雜二苯并[g,p]巰的合成



【0415】 首先，於氮氣環境下，於10,15-二苯基-4b-氮雜-12b-硼雜二苯并[g,p]巰(4.8 g)的THF(40 ml)溶液中添加N-溴代丁二醯亞胺(NBS)(3.7 g)，於室溫下攪拌1小時。反應結束後，添加亞硝酸鈉水溶液，藉由抽吸過濾來採集所析出的沈澱。進而，利用活性氧化鋁管柱層析儀(展開液：甲苯/三乙胺=99/1(容量比))對所得的固體進行純化。將溶劑減壓蒸餾去除，利用乙酸乙酯對所得的固體進行清洗，獲得2,7-二溴-10,15-二苯基-4b-氮雜-12b-硼雜二苯并[g,p]巰(5.9 g)。

【0416】





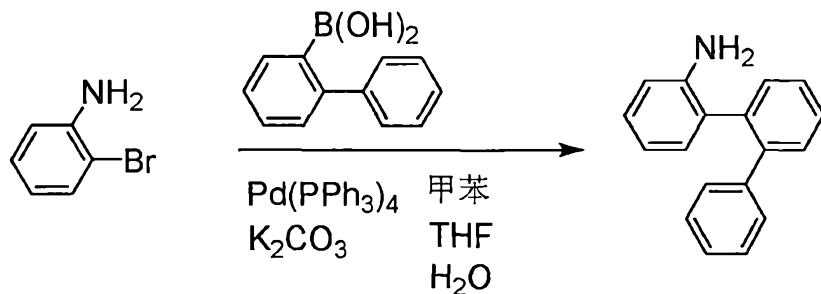
【0417】繼而，將放入有 2,7-二溴-10,15-二苯基-4b-氮雜-12b-硼雜二苯并[g,p]巰 (2.0 g)、苯基硼酸 (1.0 g)、磷酸鉀 (2.0 g)、第三丁氧化鈉 (0.3 g)、Pd-132(約翰遜馬西 (Johnson Matthey)) (0.05 g) 及甲苯 (40 mL) 的燒瓶於氮氣環境下於 100°C 下攪拌 1 小時。將反應液冷卻至室溫為止後，添加水及甲苯進行分液。繼而，將溶劑減壓蒸餾去除後，利用活性氧化鋁管柱層析儀（展開液：甲苯/三乙胺=99/1 (容量比)）進行純化。將溶劑減壓蒸餾去除後，自甲苯中進行再結晶，藉此獲得式 (211) 所表示的化合物 (1.8 g)。

【0418】藉由 NMR 測定確認了所得的化合物的結構。

$^1\text{H-NMR}$ (CDCl_3) : $\delta = 8.82$ (d, 2H), 8.69 (m, 2H), 8.65 (m, 2H), 8.25 (d, 2H), 7.88 (dd, 2H), 7.82 (d, 4H), 7.76 (d, 4H), 7.66 (dd, 2H), 7.49-7.59 (m, 8H), 7.46 (t, 2H), 7.40 (t, 2H).

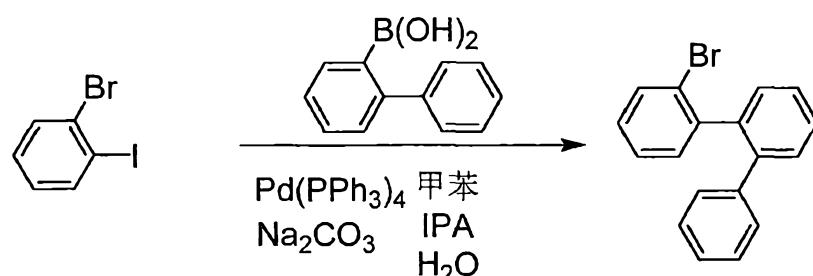
【0419】合成例 (34)：

9,16-二苯基-4b-氮雜-12b-硼雜二苯并[g,p]巰化合物的合成



【0420】首先，將放入有 2-溴苯胺（21.7 g）、[1,1'-聯苯]-2-基硼酸（25.0 g）、碳酸鉀（44.0 g）、 $\text{Pd}(\text{PPh}_3)_4$ （4.4 g）、甲苯（175 ml）、THF（60 ml）及水（20 ml）的燒瓶於回流溫度下攪拌 8 小時。將反應液冷卻至室溫為止後，添加水進行分液，將溶劑減壓蒸餾去除。利用矽膠短管柱（展開液：甲苯/庚烷=1/1（容量比））對所得的油狀物質進行純化。將溶劑減壓蒸餾去除，藉由減壓蒸餾對所得的油狀物質進行進一步純化，獲得[1,1':2',1"-聯三苯]-2-胺（25.6 g）。

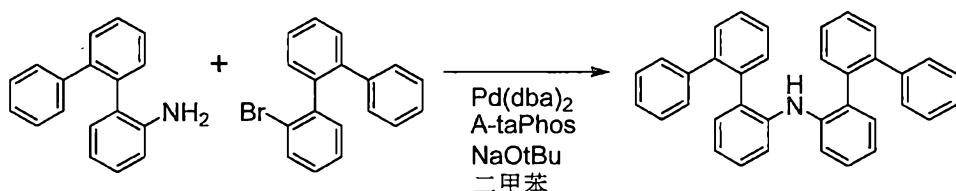
【0421】



【0422】繼而，將放入有 1-溴-2-碘苯（35.0 g）、[1,1'-聯苯]-2-基硼酸（24.5 g）、碳酸鈉（32.8 g）、 $\text{Pd}(\text{PPh}_3)_4$ （4.3 g）、甲苯（200 ml）、異丙醇（50 ml）及水（20 ml）的燒瓶於回流溫度下攪拌 8

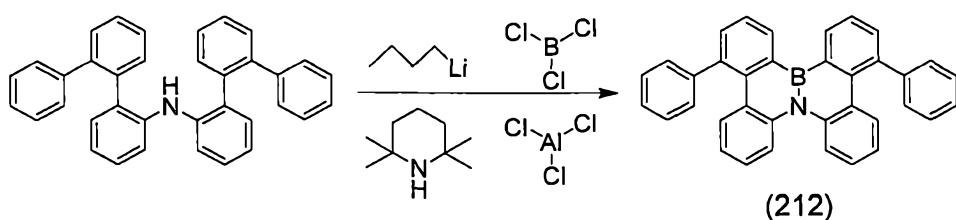
小時。將反應液冷卻至室溫為止後，添加水進行分液，將溶劑減壓蒸餾去除。利用矽膠短管柱（展開液：甲苯/庚烷=1/1（容量比））對所得的油狀物質進行純化。將溶劑減壓蒸餾去除，藉由減壓蒸餾對所得的油狀物質進行進一步純化，獲得 2-溴-1,1':2',1"-聯三苯（22.0 g）。

【0423】



【0424】 進而，將放入有[1,1':2',1"-聯三苯]-2-胺（17.5 g）、2-溴-1,1':2',1"-聯三苯（22.0 g）、第三丁氧化鈉（10.3 g）、Pd(dba)₂（0.10 g）、4-(二-第三丁基膦基)-N,N-二甲基苯胺（0.09 g）及二甲苯（100 ml）的燒瓶於氮氣環境下於 110°C 下攪拌 2 小時。將反應液冷卻至室溫為止後，添加水進行分液，將溶劑減壓蒸餾去除。利用矽膠管柱層析儀（展開液：甲苯/庚烷混合溶液）對所得的油狀物質進行純化，獲得二([1,1':2',1"-聯三苯]-2-基)胺（32.6 g）。此時，參考「有機化學實驗入門（1）-物質操作法與分離純化法-」（化學同人出版股份有限公司，94 頁）中記載的方法，使展開液中的甲苯的比率逐漸增加而使目標物溶出。獲得二([1,1':2',1"-聯三苯]-2-基)胺（20.1 g）。

【0425】



【0426】 將放入有如上述般所得的二([1,1':2',1"-聯三苯]-2-基)胺 (19.0 g) 及甲苯 (250 ml) 的燒瓶冷卻至-70°C 為止，滴加正丁基鋰的 2.6 M 己烷溶液 (15.4 ml)。滴加結束後，暫且升溫至 0°C 為止，於 0°C 下攪拌 5 分鐘。其後，將該溶液滴加至經冷卻至-70°C 的三氯化硼 (29.7 g) 的甲苯溶液中。繼而，暫且將溶劑減壓蒸餾去除，添加鄰二氯苯 (300 ml)、2,2,6,6-四甲基哌啶 (11.9 g)、三氯化鋁 (21.4 g)，於 160°C 下攪拌 12 小時。將反應液冷卻至室溫為止，添加甲苯 (500 ml) 及矽藻土進行攪拌後，靜置約 1 小時。繼而，藉由使用鋪設有矽藻土的桐山漏斗的抽吸過濾將析出的沈澱去除後，將溶劑減壓蒸餾去除。進而利用活性氧化鋁管柱層析儀 (展開液：甲苯/庚烷/三乙胺=90/10/1 (容量比)) 進行純化後，於乙酸乙酯/乙醇混合溶劑中再沈澱，獲得式 (212) 所表示的化合物 (2.3 g)。

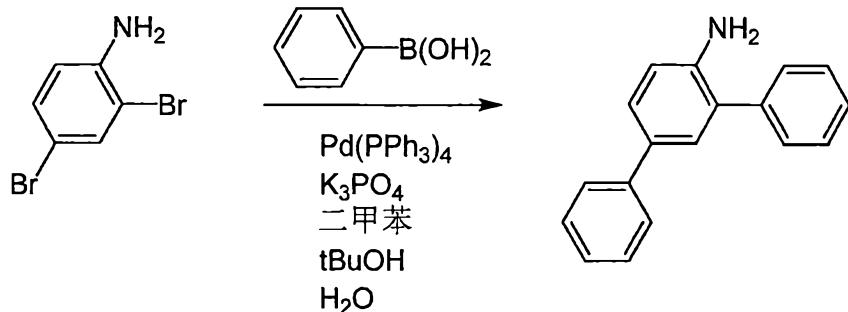
【0427】 藉由 NMR 測定確認了所得的化合物的結構。

$^1\text{H-NMR}$ (CDCl_3) : $\delta = 8.74$ (d, 2H), 8.70 (m, 1H), 8.06 (d, 2H), 7.26-7.70 (m, 16H), 7.21 (t, 2H), 6.77 (t, 2H).

【0428】 合成例 (35) :

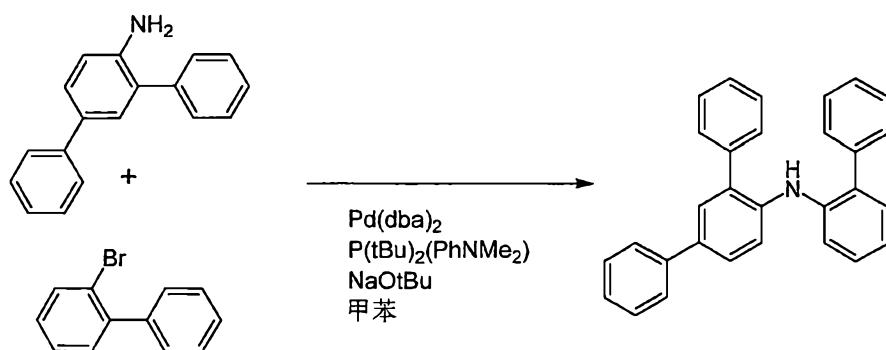


2-苯基-4b-氮雜-12b-硼雜二苯并[g,p]巰化合物的合成



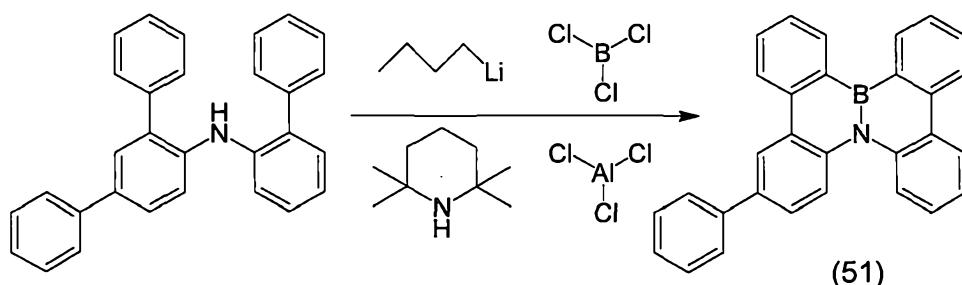
【0429】首先，將放入有 2,4-二溴苯胺 (25.0 g)、苯基硼酸 (30.0 g)、 $\text{Pd}(\text{PPh}_3)_4$ (5.8 g)、磷酸三鉀 (106.0 g)、二甲苯 (300 ml)、第三丁醇 (50 ml) 及水 (50 ml) 的燒瓶於 120°C 下攪拌 30 分鐘。將反應液冷卻至室溫為止，添加水及乙酸乙酯進行分液。使有機層於矽膠短管柱中通過，去除高極性的副產物後，將溶劑減壓蒸餾去除。進而利用矽膠管柱層析儀（展開液：甲苯/庚烷=8/2（容量比））進行純化後，利用庚烷進行再沈澱，獲得 [1,1':3',1"-聯三苯]-4'-胺 (13.1 g)。

【0430】



【0431】繼而，將放入有[1,1':3',1"-聯三苯]-4'-胺(13.0 g)、2-溴聯苯(12.4 g)、第三丁氧化鈉(7.6 g)、Pd(dba)₂(0.08 g)、4-(二-第三丁基膦基)-N,N-二甲基苯胺(0.07 g)及甲苯(100 ml)的燒瓶於氮氣環境下於80°C下攪拌30分鐘。將反應液冷卻至室溫為止，添加水及乙酸乙酯進行分液。將溶劑減壓蒸餾去除後，利用矽膠管層析儀(展開液：甲苯/庚烷=2/8(容量比))進行純化，獲得N-([1,1'-聯苯]-2-基)-[1,1':3',1"-聯三苯]-4'-胺(20.0 g)。

【0432】



【0433】將放入有如上述般所得的N-([1,1'-聯苯]-2-基)-[1,1':3',1"-聯三苯]-4'-胺(18.6 g)及甲苯(250 ml)的燒瓶冷卻至-70°C為止，滴加正丁基鋰的1.6 M己烷溶液(29.3 ml)。滴加結束後，暫且升溫至0°C為止，將藉此所得的懸浮液於-60°C下滴加至利用甲苯將三氯化硼的1.0 M庚烷溶液(46.9 ml)稀釋所得的溶液中。繼而，將反應液升溫至室溫為止後，暫且將溶劑減壓蒸餾去除。於其中添加鄰二氯苯(300 ml)、2,2,6,6-四甲基哌啶(13.9 g)、三氯化鋁(25.0 g)，於170°C下攪拌20小時。將反應液冷卻至60°C為止，加入至添加有碳酸鈉(10.0 g)及乙酸鈉(31.0

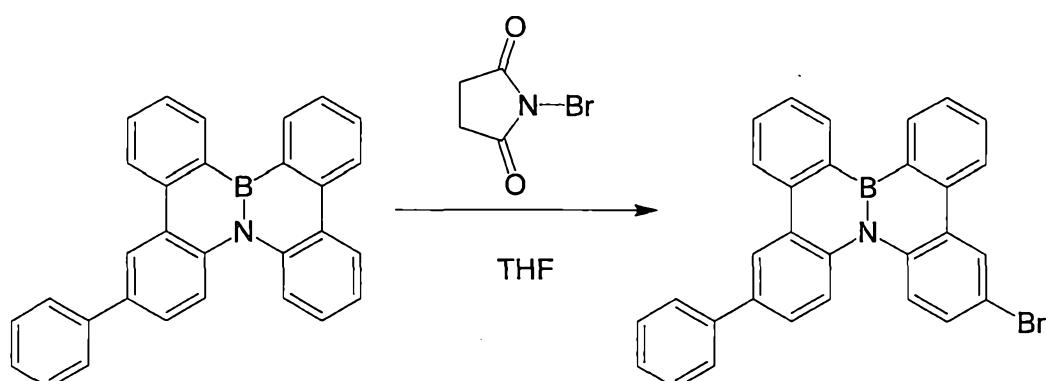
g) 的冰水（懸浮溶液）中。將有機層分液後，藉由鋪設有矽藻土的桐山漏斗進行抽吸過濾，將溶劑減壓蒸餾去除。繼而，利用活性氧化鋁管柱層析儀（展開液：甲苯/三乙胺=100/1（容量比））進行純化後，利用乙酸乙酯/庚烷混合溶劑進行再沈澱，獲得式（51）所表示的化合物（14.0 g）。

【0434】 藉由 NMR 測定確認了所得的化合物的結構。

● $^1\text{H-NMR} (\text{CDCl}_3) : \delta = 8.71 (\text{m}, 2\text{H}), 8.58 (\text{m}, 1\text{H}), 8.50 (\text{d}, 1\text{H}), 8.43 (\text{d}, 1\text{H}), 8.38 (\text{d}, 1\text{H}), 8.19 (\text{d}, 1\text{H}), 8.16 (\text{d}, 1\text{H}), 7.80 (\text{m}, 2\text{H}), 7.74 (\text{d}, 2\text{H}), 7.63 (\text{m}, 3\text{H}), 7.50 (\text{t}, 2\text{H}), 7.33-7.43 (\text{m}, 3\text{H}).$

【0435】 合成例（36）：

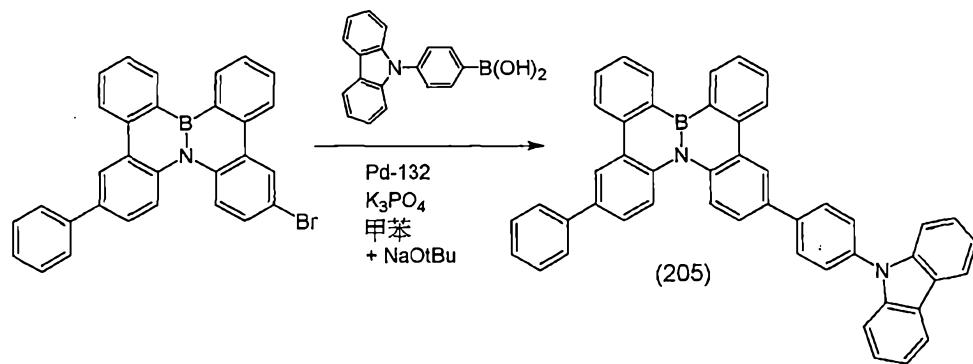
9-(4-(7-苯基-4b-氮雜-12b-硼雜二苯并[g,p]扁-2-基)苯基)-9H-咔唑的合成



【0436】 首先，於氮氣環境下，於 2-苯基-4b-氮雜-12b-硼雜二苯并[g,p]扁（6.0 g）的 THF（40 ml）溶液中添加 N-溴代丁二醯亞胺（NBS）（2.8 g），於室溫下攪拌整夜。反應結束後，添加亞硝酸鈉水溶液及甲苯進行分液，將溶劑減壓蒸餾去除。使所得的固體

溶解於氯苯中，於活性氧化鋁短管柱（展開液：甲苯/三乙胺=100/1（容量比））中通過。將溶劑減壓蒸餾去除，利用庚烷對所得的固體進行清洗，藉此獲得 2-溴-7-苯基-4b-氮雜-12b-硼雜二苯并[g,p]扁（6.1 g）。

【0437】



【0438】 繼而，將放入有 2-溴-7-苯基-4b-氮雜-12b-硼雜二苯并[g,p]扁（2.0 g）、(4-(9H-咔唑-9-基)苯基)硼酸（1.4 g）、Pd-132（0.06 g）、磷酸三鉀（1.75 g）、第三丁氧化鈉（1.0 g）及甲苯（40 ml）的燒瓶於 80°C 下攪拌 1 小時。將反應液冷卻至室溫為止，添加水及乙酸乙酯進行分液。繼而，將溶劑減壓蒸餾去除後，於活性氧化鋁短管柱（展開液：鄰二氯苯）中通過。將溶劑減壓蒸餾去除後，使其溶解於經加熱的氯苯中，添加庚烷，藉此進行再沈澱，獲得式（205）所表示的化合物（1.0 g）。

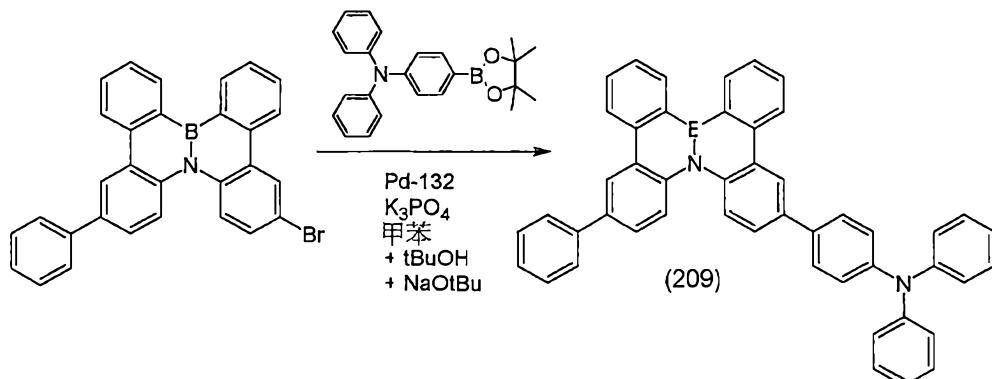
【0439】 藉由 NMR 測定確認了所得的化合物的結構。

$^1\text{H-NMR}$ (CDCl_3) : $\delta = 8.76$ (m, 2H), 8.70 (m, 1H), 8.62 (m, 1H), 8.58 (d, 1H), 8.54 (d, 1H), 8.30 (d, 1H), 8.26 (d, 1H), 8.18 (d, 2H),

7.99 (d, 2H), 7.84 (m, 2H), 7.64-7.79 (m, 8H), 7.53 (m, 4H), 7.45 (t, 2H), 7.40 (t, 1H), 7.32 (t, 2H).

【0440】 合成例 (37)：

N,N-二苯基-4-(7-苯基-4b-氮雜-12b-硼雜二苯并[g,p]茚-2-基)苯胺的合成



【0441】 將放入有 2-溴-7-苯基-4b-氮雜-12b-硼雜二苯并[g,p]茚 (2.0 g)、N,N-二苯基-4-(4,4,5,5-四甲基-1,3,2-二氧雜硼烷-2-基)苯胺 (1.7 g)、Pd-132 (0.06 g)、磷酸三鉀 (1.75 g)、第三丁氧化鈉 (1.0 g)、第三丁醇 (0.4 ml) 及甲苯 (40 ml) 的燒瓶於 90°C 下攪拌 1 小時。將反應液冷卻至室溫為止，添加水及乙酸乙酯進行分液。繼而，將溶劑減壓蒸餾去除後，於活性氧化鋁短管柱 (展開液：甲苯/三乙胺=100/1 (容量比)) 中通過。將溶劑減壓蒸餾去除後，添加庚烷，藉此進行再沈澱，獲得式 (209) 所表示的化合物 (0.9 g)。

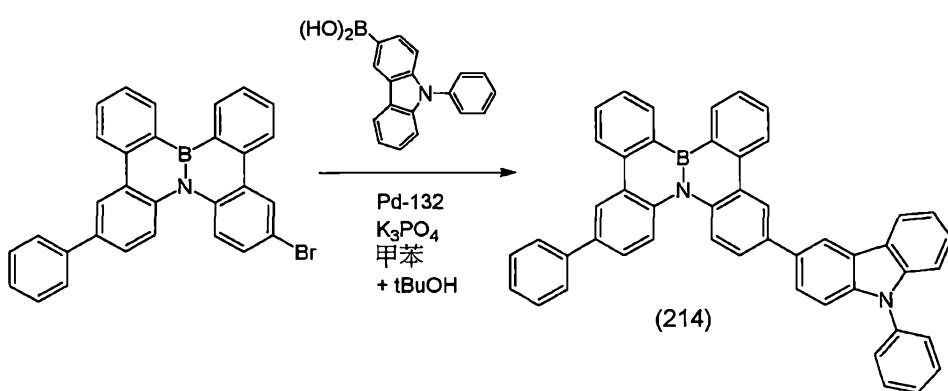
【0442】 藉由 NMR 測定確認了所得的化合物的結構。

$^1\text{H-NMR}$ (CDCl_3) : $\delta = 8.73$ (d, 2H), 8.60 (m, 1H), 8.57 (m, 1H),

8.51 (m, 2H), 8.22 (m, 2H), 7.81 (m, 2H), 7.75 (d, 2H), 7.63 (m, 6H),
7.52 (t, 2H), 7.40 (t, 1H), 7.29 (m, 4H), 7.20 (d, 2H), 7.18 (m, 4H),
7.05 (t, 2H).

【0443】 合成例 (38) :

9-苯基-3-(7-苯基-4b-氮雜-12b-硼雜二苯并[g,p]蒽-2-基)-9H-咔唑的合成



【0444】 將放入有 2-溴-7-苯基-4b-氮雜-12b-硼雜二苯并[g,p]蒽 (2.0 g)、(9-苯基-9H-咔唑-3-基)硼酸 (1.4 g)、Pd-132 (0.06 g)、磷酸三鉀 (1.75 g)、甲苯 (40 ml) 及第三丁醇 (10 ml) 的燒瓶於 120°C 下攪拌 2 小時。將反應液冷卻至室溫為止，添加水及乙酸乙酯進行分液。繼而，將溶劑減壓蒸餾去除後，於活性氧化鋁短管柱 (展開液：甲苯/三乙胺=100/1 (容量比)) 中通過。將溶劑減壓蒸餾去除後，添加庚烷，藉此進行再沈澱，獲得式 (214) 所表示的化合物 (1.6 g)。

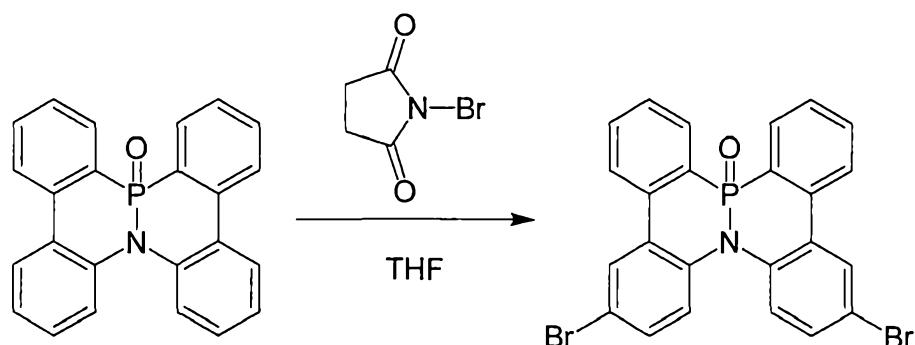
【0445】 藉由 NMR 測定確認了所得的化合物的結構。



¹H-NMR (CDCl₃) : δ = 8.75 (d, 2H), 8.71 (m, 1H), 8.61 (m, 1H), 8.59 (d, 1H), 8.51 (d, 1H), 8.50 (m, 1H), 8.26 (m, 3H), 7.79-7.87 (m, 3H), 7.77 (m, 3H), 7.60-7.70 (m, 7H), 7.47-7.57 (m, 4H), 7.45 (m, 2H), 7.40 (t, 1H), 7.33 (m, 1H).

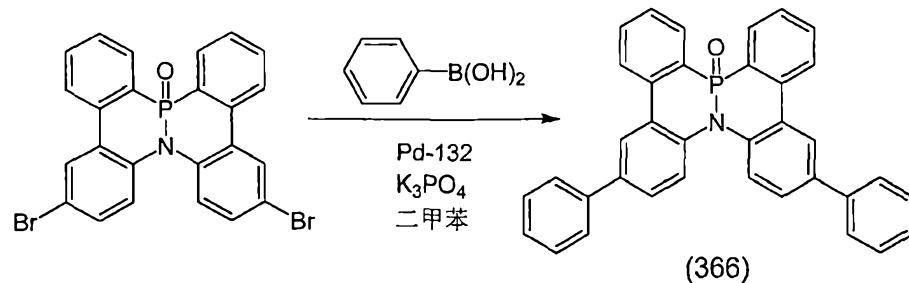
【0446】 合成例 (39) :

2,7-二苯基-4b-氮雜-12b-氧雜磷雜-二苯并[g,p]扁的合成



【0447】 首先，於氮氣環境下，於 4b-氮雜-12b-氧雜磷雜-二苯并 [g,p] 扁 (3.5 g) 的 THF (150 ml) 溶液中添加 N-溴代丁二醯亞胺 (NBS) (13.6 g)，於回流溫度下攪拌 2 小時。反應結束後，添加亞硝酸鈉水溶液及甲苯進行分液，將溶劑減壓蒸餾去除。於所得的油狀物質中添加乙醇，藉此進行再沈澱，獲得 2,7-二溴-4b-氮雜 -12b-氧雜磷雜-二苯并[g,p]扁 (4.5 g)。

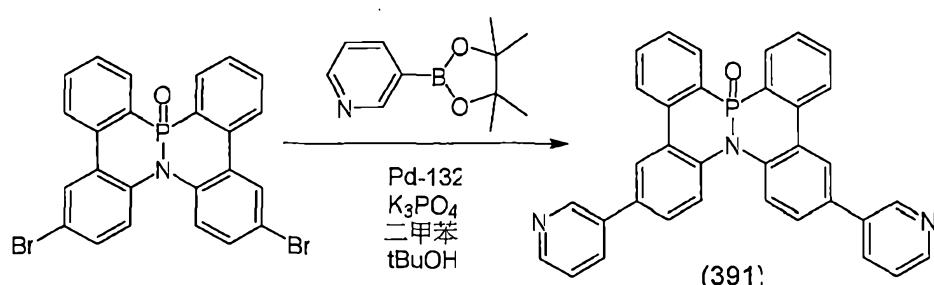
【0448】



【0449】 繼而，將放入有 2,7-二溴-4b-氮雜-12b-氧雜磷雜-二苯并 [g,p] 菸 (1.5 g)、苯基硼酸 (0.9 g)、磷酸鉀 (3.0 g)、Pd-132 (約 翰遜馬西 (Johnson Matthey)) (0.04 g) 及二甲苯 (30 mL) 的燒 瓶於氮氣環境下於 70°C 下攪拌 1 小時。將反應液冷卻至室溫為止 後，添加庚烷，藉由抽吸過濾來採集所產生的沈澱。利用溫水對 所得的固體進行清洗後，利用矽膠管柱層析儀（展開液：甲苯/乙 酸乙酯混合溶液）進行純化。此時，使展開液中的乙酸乙酯的比 率逐漸增加而使目標物溶出。另外，於矽膠上吸附 (charge) 試樣 時使用溶解於經加熱的氯苯中的溶液。進而自乙酸乙酯中進行再 結晶，獲得式 (366) 所表示的化合物 (1.3 g)。

【0450】 合成例 (40)：

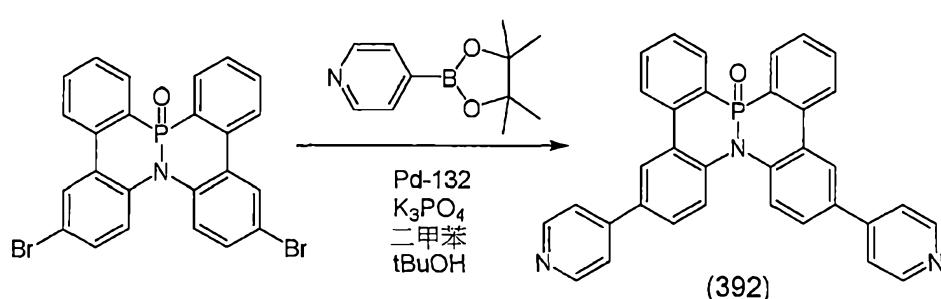
2,7-二(吡啶-3-基)-4b-氮雜-12b-氧雜磷雜-二苯并[g,p] 菸的合 成



【0451】 將放入有 2,7-二溴-4b-氮雜-12b-氧雜磷雜-二苯并[g,p]扁(2.0 g)、3-(4,4,5,5-四甲基-1,3,2-二氫雜硼烷-2-基)吡啶(2.0 g)、磷酸鉀(4.0 g)、Pd-132(約翰遜馬西(Johnson Matthey))(0.05 g)、二甲苯(40 mL)及第三丁醇(4 ml)的燒瓶於氮氣環境下於100°C下攪拌1小時。將反應液冷卻至室溫為止後，添加乙酸乙酯及水。進而添加稀鹽酸將水層中和後進行分液。將溶劑減壓蒸餾去除，利用 NH 修飾矽膠(DM1020：富士西利西亞(Fuji-Silyisia)製造)管柱層析儀(展開液：氯苯/乙酸乙酯=9/1(容量比))對所得的固體進行純化，將溶劑蒸餾去除，於所得的濃縮液中添加庚烷進行再沈澱，獲得式(391)所表示的化合物(1.0 g)。

【0452】 合成例(41)：

2,7-二(吡啶-4-基)-4b-氮雜-12b-氧雜磷雜-二苯并[g,p]扁的合成

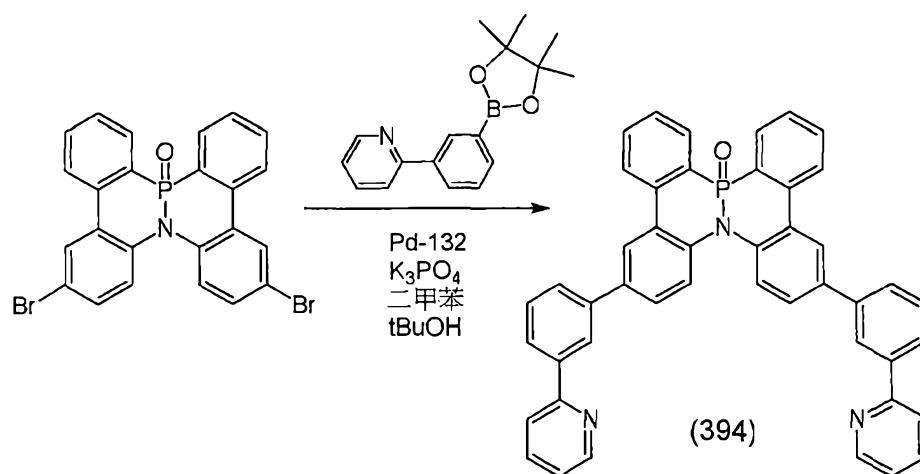


【0453】 將放入有 2,7-二溴-4b-氮雜-12b-氧雜磷雜-二苯并[g,p]扁(1.5 g)、4-(4,4,5,5-四甲基-1,3,2-二氫雜硼烷-2-基)吡啶(1.5 g)、磷酸鉀(4.0 g)、Pd-132(約翰遜馬西(Johnson Matthey))(0.05 g)

g)、二甲苯（40 mL）及第三丁醇（4 ml）的燒瓶於氮氣環境下於120°C下攪拌2小時。將反應液冷卻至室溫為止後，添加庚烷，藉由抽吸過濾來採集所產生的沈澱。利用溫水對所得的固體進行清洗後，利用NH修飾矽膠（DM1020：富士西利西亞（Fuji-Silysia）製造）短管柱（展開液：經加熱的氯苯）進行純化。將溶劑減壓蒸餾去除後，添加庚烷進行再沈澱，獲得式（392）所表示的化合物（0.4 g）。

【0454】 合成例（42）：

2,7-雙(3-(吡啶-2-基)苯基)-4b-氮雜-12b-氧雜磷雜-二苯并[g,p]扁的合成

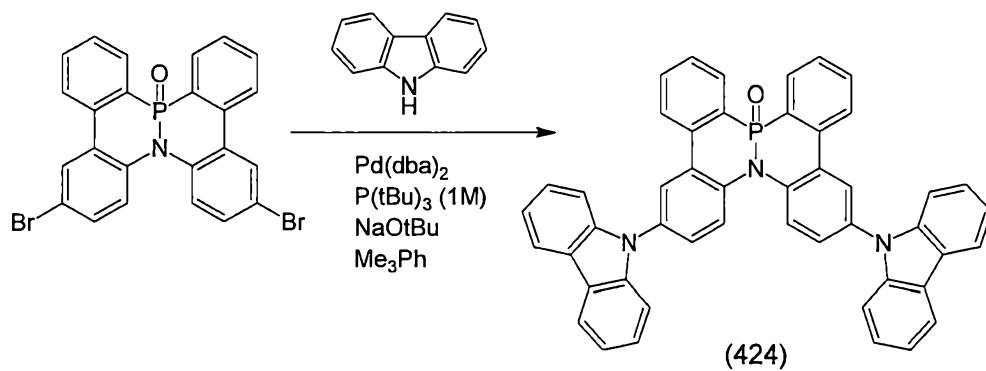


【0455】 將放入有2,7-二溴-4b-氮雜-12b-氧雜磷雜-二苯并[g,p]扁（2.0 g）、2-(3-(4,4,5,5-四甲基-1,3,2-二氫雜硼烷-2-基)苯基)吡啶（2.7 g）、磷酸鉀（4.0 g）、Pd-132（約翰遜馬西（Johnson Matthey））（0.05 g）、二甲苯（40 mL）及第三丁醇（4 ml）的燒

瓶於氮氣環境下於 120°C 下攪拌 3 小時。將反應液冷卻至室溫為止後，添加甲苯及稀鹽酸進行分液。將溶劑減壓蒸餾去除後，利用 NH 修飾矽膠（DM1020：富士西利西亞（Fuji-Silysia）製造）短管柱（展開液：經加熱的甲苯/乙酸乙酯=9/1（容量比））進行純化。進而利用甲苯/庚烷混合溶液進行再沈澱，獲得式（394）所表示的化合物（1.6 g）。

【0456】 合成例（43）：

2,7-二(咔唑-9-基)-4b-氮雜-12b-氧雜磷雜-二苯并[g,p]巰的合成

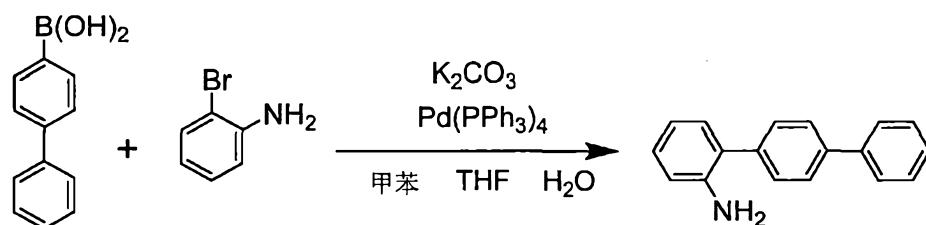


【0457】 將放入有 2,7-二溴-4b-氮雜-12b-氧雜磷雜-二苯并[g,p]巰（2.0 g）、咔唑（1.6 g）、第三丁氧化鈉（0.64 g）、Pd(dba)₂（0.07 g）、三-第三丁基膦 1 M 甲苯溶液（0.34 ml）及 1,2,4-三甲基苯「Me₃Ph」（40 mL）的燒瓶於氮氣環境下於 150°C 下攪拌 16 小時。將反應液冷卻至室溫為止後，添加水及甲苯進行分液。將溶劑減壓蒸餾去除後，利用矽膠管柱層析儀（展開液：甲苯/乙酸

乙酯混合溶液)進行純化。此時，使展開液中的乙酸乙酯的比率逐漸增加來使目標物溶出。將溶劑減壓蒸餾去除後，利用乙酸乙酯進行清洗，進而利用氯苯/乙酸乙酯混合溶劑進行再沈澱，獲得式(424)所表示的化合物(0.9 g)。

【0458】 合成例(44)：

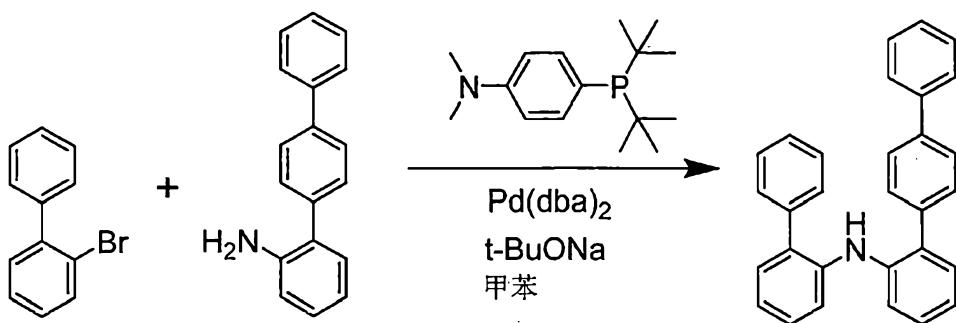
2-苯基-14b¹-氮雜-14b-硼雜苯并[p]茚并[1,2,3,4-defg]茚的合成



【0459】首先，將放入有4-聯苯硼酸(13.5 g)、2-溴苯胺(12.9 g)、碳酸鉀(18.8 g)、Pd(PPh₃)₄(1.6 g)、甲苯(135 ml)、THF(65 ml)及水(30 ml)的燒瓶於氮氣環境下於回流溫度下攪拌7小時。將反應液冷卻至室溫為止，添加水及甲苯進行分液。將溶劑減壓蒸餾去除後，利用矽膠管柱層析儀(展開液：甲苯/庚烷混合溶液)進行純化，獲得[1,1':4',1"-聯三苯]-2-胺(11.1 g)。此時，使展開液中的甲苯的比率逐漸增加而使目標物溶出。另外，於矽膠上吸附試樣時使用溶解於經加熱的氯苯中的溶液。

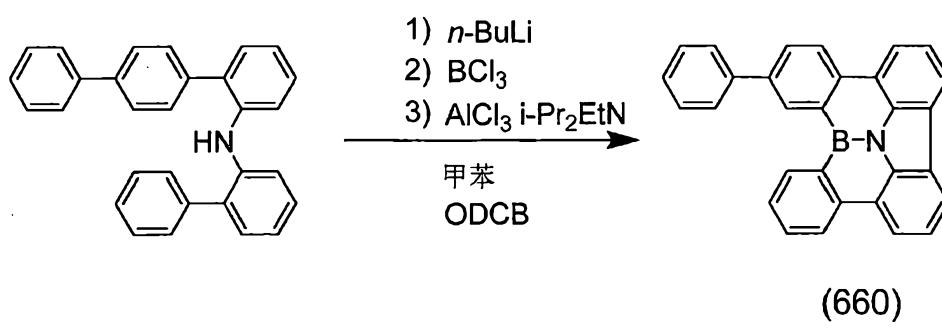
【0460】





【0461】繼而，將放入有[1,1':4',1"-聯三苯]-2-胺（11.0 g）、2-溴聯苯（10.5 g）、第三丁氧化鈉（5.2 g）、Pd(dba)₂（0.06 g）、4-(二-第三丁基膦基)-N,N-二甲基苯胺（0.06 g）及甲苯的燒瓶於氮氣環境下於回流溫度下攪拌 3 小時。將反應液冷卻至室溫為止後，添加水及甲苯進行分析。將溶劑減壓蒸餾去除後，利用矽膠管柱層析儀（展開液：甲苯/庚烷混合溶液）進行純化，獲得 N-([1,1'-聯苯]-2-基)-[1,1':4',1"-聯三苯]-2-胺（17.5 g）。此時，使展開液中的甲苯的比率逐漸增加而使目標物溶出。

【0462】



【0463】將放入有如上述般所得的 N-([1,1'-聯苯]-2-基)-[1,1':4',1"-聯三苯]-2-胺（7.5 g）及甲苯（100 ml）的燒瓶冷卻

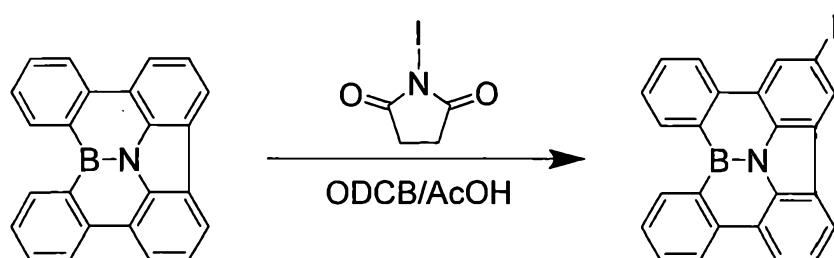
至-70°C 為止，滴加正丁基鋰的 1.6 M 己烷溶液 (11.7 ml)。滴加結束後，暫且升溫至 0°C 為止，於 0°C 下攪拌 5 分鐘。其後，再次冷卻至-70°C 為止，滴加三氯化硼的 1.0 M 庚烷溶液 (18.8 ml)。繼而，將反應液升溫至室溫為止後，暫且將溶劑減壓蒸餾去除。於其中添加鄰二氯苯「ODCB」(100 ml)、二異丙基乙基胺 (3.2 ml)、三氯化鋁 (10.0 g)，於 170°C 下攪拌 13 小時。將反應液冷卻至室溫為止後，利用碳酸氫鈉水溶液進行中和，添加氯苯及水進行分液。繼而，利用活性氧化鋁短管柱（展開液：甲苯）進行純化，進而自氯苯中進行再結晶，藉此獲得式(660)所表示的化合物 (0.2 g)。

【0464】 藉由 NMR 測定確認了所得的化合物的結構。

$^1\text{H-NMR}$ (CDCl_3) : $\delta = 9.42$ (m, 1H), 9.27 (d, 1H), 8.77 (d, 1H), 8.73 (d, 1H), 8.50 (dd, 2H), 8.27 (dd, 2H), 8.10 (dd, 1H), 7.88 (m, 3H), 7.73 (m, 3H), 7.60 (t, 2H), 7.47 (t, 1H).

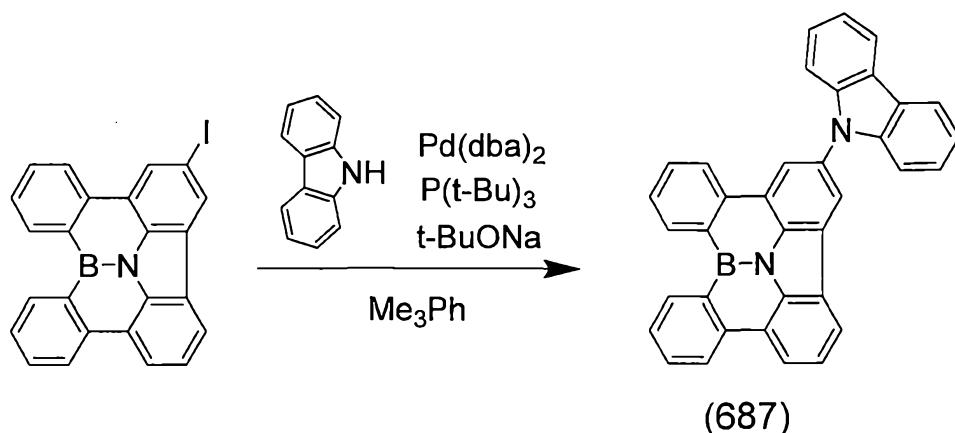
【0465】 合成例 (45)：

2-(14 b^1 -氮雜-14 b -硼雜苯并[p]茚并[1,2,3,4-defg]巔-6-基)-9H-咔唑的合成



【0466】首先，於氮氣環境下，於 $14b^1$ -氮雜- $14b$ -硼雜苯并[p]茚并[1,2,3,4-defg]蒽（1.0 g）的鄰二氯苯（10 ml）及乙酸（1 ml）的混合溶液中添加 N-碘代丁二醯亞胺（NIS）（2.8 g），於室溫下攪拌 26 小時。添加硫代硫酸鈉水溶液使反應停止，藉由抽吸過濾來採集所析出的固體。利用水、甲醇對所得的固體進行清洗後，自氯苯中進行再結晶，藉此獲得 6 -碘- $14b^1$ -氮雜- $14b$ -硼雜苯并[p]茚并[1,2,3,4-defg]蒽（0.4 g）。

● 【0467】



【0468】繼而，將放入有 6 -碘- $14b^1$ -氮雜- $14b$ -硼雜苯并[p]茚并[1,2,3,4-defg]蒽（0.4 g）、咔唑（0.2 g）、第三丁氧化鈉（0.1 g）、 $Pd(dba)_2$ （0.03 g）、1 M 的三-第三丁基膦甲苯溶液（0.13 ml）及 $1,2,4$ -三甲基苯「 Me_3Ph 」（10 ml）的燒瓶於氮氣環境下於回流溫度下攪拌 3 小時。將反應液冷卻至室溫為止後，添加水，藉由抽吸過濾來採集所析出的固體。利用水及甲醇對所得的固體進行清洗後，於活性氧化鋁短管柱（展開液：甲苯）中通過。進而自氯

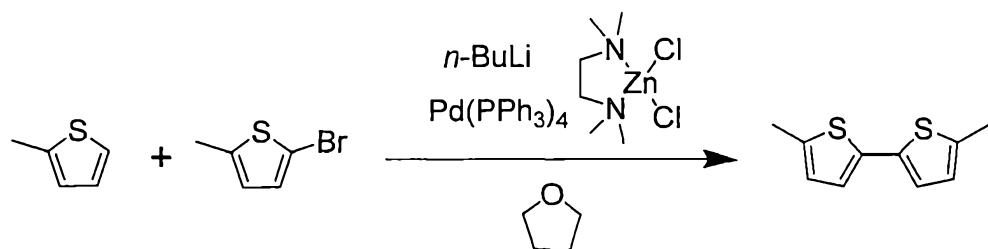
苯中進行再結晶，獲得式（687）所表示的化合物（0.2 g）。

【0469】 藉由 NMR 測定確認了所得的化合物的結構。

¹H-NMR (CDCl₃) : δ = 9.27 (m, 2H), 8.74 (d, 1H), 8.61 (m, 2H), 8.53 (d, 1H), 8.40 (m, 1H), 8.24 (m, 3H), 7.91 (t, 1H), 7.85 (t, 1H), 7.72-7.80 (m, 3H), 7.42-7.51 (m, 4H), 7.35 (t, 2H).

【0470】 合成例（46）：

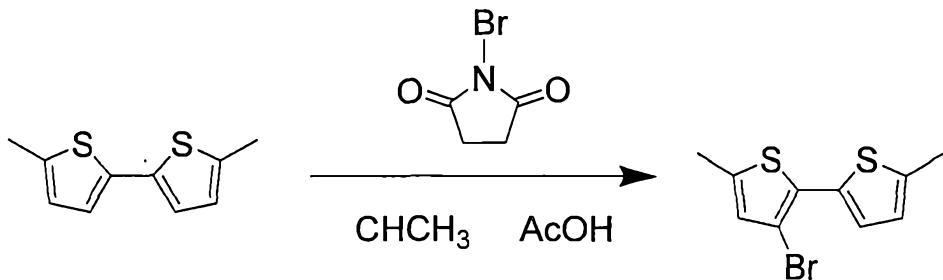
2,5,8,11- 四 甲 基 -3b- 氮 雜 -9b- 硼 雜 - 蔽 并
[2,1-b:3,-b':6,5-b":7,8-b'']四噻吩的合成



【0471】 使 2-甲基噻吩（5.0 g）溶解於 THF（50 ml）中，冷卻至-78°C 為止。於其中緩慢地滴加 1.6 M 的正丁基鋰己烷溶液（35.0 ml）。滴加結束後經過 30 分鐘後升溫至 0°C 為止，攪拌 3 小時後，添加氯化鋅四甲基乙二胺錯合物（14.2 g），進而攪拌 30 分鐘。繼而，將反應液升溫至室溫為止後，添加 2-溴-5-甲基噻吩（6.8 g）及 $Pd(PPh_3)_4$ ，進而升溫至回流溫度為止而攪拌 3 小時。將反應液冷卻至室溫為止後，添加使乙二胺四乙酸·四鈉鹽二水合物溶解於適量的水中所得的溶液（以下簡稱為 EDTA·4Na 水溶液）及甲苯進行分液。將溶劑減壓蒸餾去除後，利用矽膠管柱層析儀（展開

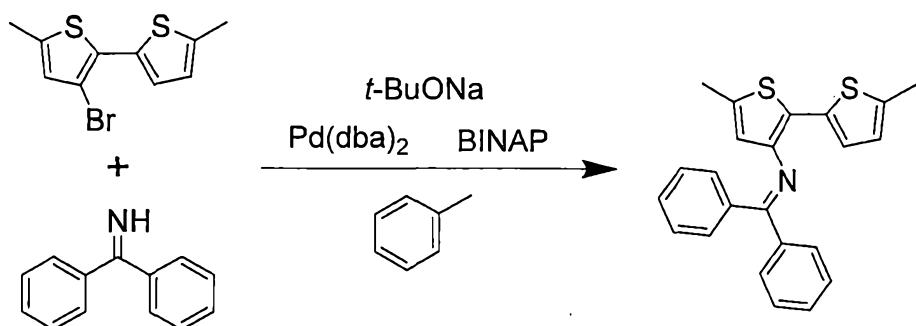
液：庚烷）進行純化，獲得 5,5'-二甲基-2,2'-聯噻吩（20.3 g）。

【0472】



● 【0473】使 5,5'-二甲基-2,2'-聯噻吩（7.5 g）溶解於氯仿（75 ml）/乙酸（37.5 ml）的混合溶液中，冷卻至 0°C。向其中緩慢地添加 N-溴代丁二醯亞胺「NBS」（6.9 g）後，升溫至室溫為止。反應結束後，添加水進行分液，進而利用碳酸鈉水溶液對有機層進行清洗。將溶劑減壓蒸餾去除，利用矽膠管柱層析儀（展開液：庚烷）進行純化，獲得 3-溴-5,5'-二甲基-2,2'-聯噻吩（10.0 g）。

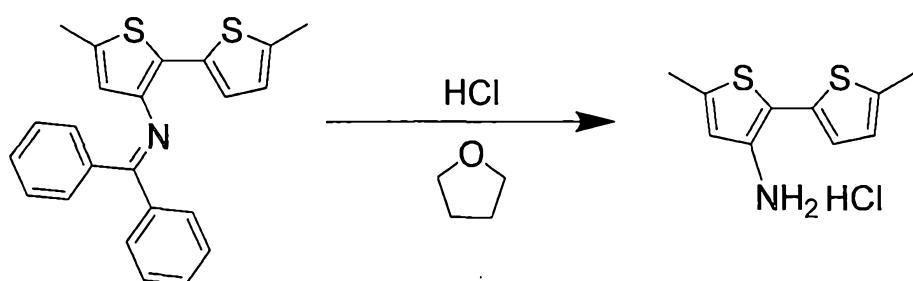
【0474】



【0475】於氮氣環境下，將放入有 3-溴-5,5'-二甲基-2,2'-聯噻吩（8.3 g）、二苯基甲烷亞胺（11.0 g）、Pd(dba)₂（0.5 g）、2,2'-雙(二

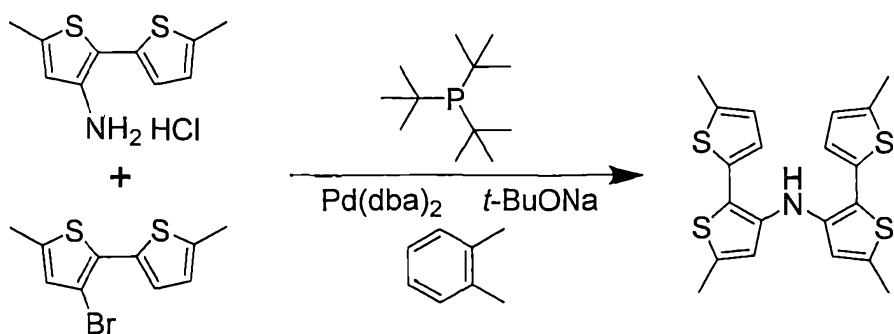
苯基膦基)-1,1'-聯萘「BINAP」(1.1 g)、第三丁氧化鈉(10.2 g)及甲苯(100 ml)的燒瓶於回流溫度下攪拌20小時。將反應液冷卻至室溫為止，藉由抽吸過濾來過濾分離固體成分。繼而，將溶劑減壓蒸餾去除後，利用矽膠管柱層析儀(展開液：庚烷/甲苯=1/1(容量比))進行純化，獲得N-(二苯基亞甲基)-5,5'-二甲基-[2,2'-聯噻吩]-3-胺(11.4 g)。

【0476】



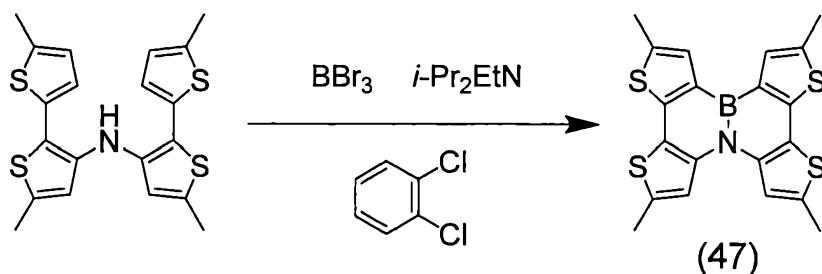
【0477】使N-(二苯基亞甲基)-5,5'-二甲基-[2,2'-聯噻吩]-3-胺(11.4 g)溶解於THF(165 ml)中。向其中添加6 M鹽酸(98 ml)，於室溫下攪拌10分鐘。將溶劑減壓蒸餾去除，藉由抽吸過濾來採集所析出的固體，利用庚烷進行清洗，由此獲得5,5'-二甲基-[2,2'-聯噻吩]-3-胺鹽酸鹽(10.0 g)。

【0478】



【0479】 將放入有 5,5'-二甲基-[2,2'-聯噻吩]-3-胺鹽酸鹽 (10.0 g)、3-溴-5,5'-二甲基-2,2'-聯噻吩 (13.0 g)、Pd(dba)₂ (0.5 g)、1 M 三-第三丁基膦甲苯溶液 (4.3 ml)、第三丁氧化鈉 (11.4 g) 及二甲苯 (130 ml) 的燒瓶於氮氣環境下於 120°C 下攪拌 12 小時。將反應液冷卻至室溫為止，添加水及甲苯進行分液。將溶劑減壓蒸餾去除，利用矽膠管柱層析儀(展開液：庚烷/甲苯=10/1(容量比))進行純化後，自庚烷中進行再結晶，藉此獲得雙(5,5'-二甲基-[2,2'-聯噻吩]-3-基)胺 (10.7 g)。

【0480】



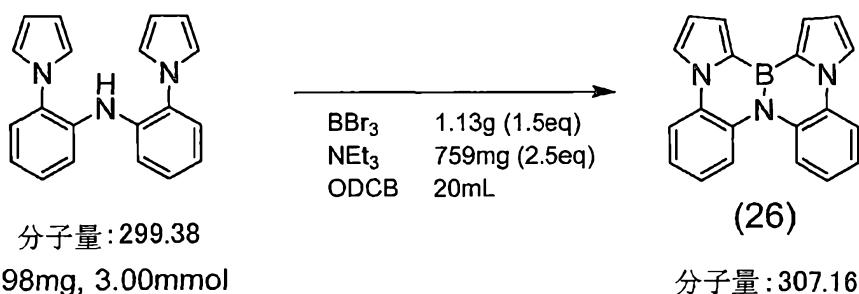
【0481】 於氮氣環境下，於放入有雙(5,5'-二甲基-[2,2'-聯噻吩]-3-基)胺 (5.0 g)、二異丙基乙基胺 (4.4 ml) 及鄰二氯苯 (50 ml) 的燒瓶中添加三溴化硼 (1.8 ml)，於 180°C 下攪拌 8 小時。將溶劑減壓蒸餾去除，利用活性氧化鋁管柱層析儀 (展開液：氯苯) 進行純化。將溶劑減壓蒸餾去除，利用經加熱的庚烷對所得的固體進行清洗，獲得式 (47) 所表示的化合物 (0.7 g)。

【0482】 藉由 NMR 測定確認了所得的化合物的結構。

¹H-NMR (CDCl₃) : δ = 7.73 (s, 2H), 7.71 (s, 2H), 2.69 (s, 6H), 2.66 (s, 6H).

【0483】 合成例(47)：

11b-氮雜-3b-硼雜二苯并[c,f]二吡咯並[2,1-a:1',2'-h][2,7]萘啶的合成



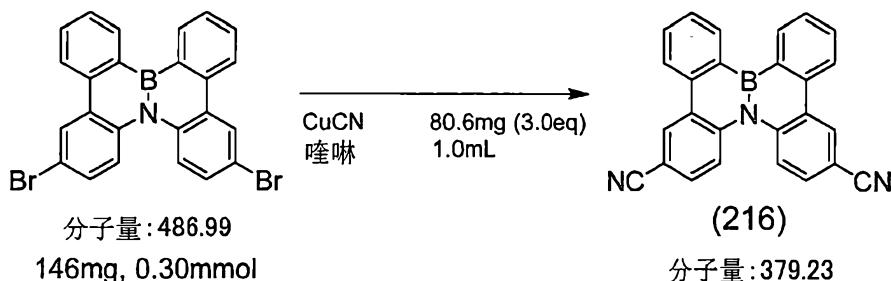
【0484】 將放入有雙(2-(1H-吡咯-1-基))苯基胺 (0.898 g)、三溴化硼 (1.13 g)、三乙胺「 NEt_3 」(0.759 g) 及 1,2-二氯苯「ODCB」(20 ml) 的燒瓶於氬氣環境下於 120°C 下攪拌 2 小時。將反應液冷卻至室溫為止後，添加 1,4-二氮雜雙環[2.2.2]辛烷 (2.02 g) 並使其於活性氧化鋁短管柱中通過。此時，使用甲苯使其自管柱中溶出。將溶劑減壓蒸餾去除後，利用己烷對所得的固體進行清洗，獲得式(26)所表示的化合物 (0.789 g)。

〔0485〕 藉由 NMR 測定確認了所得的化合物的結構。

¹H-NMR (CDCl₃) : δ = 8.01 (dd, 2H), 7.84 (dd, 2H), 7.74 (dd, 2H), 7.31 (dd, 2H), 7.16-7.23 (m, 4H), 6.73 (dd, 2H).

【0486】 合成例（48）：

2,7-二氟基-4b-氮杂-12b-硼杂二苯并[g,p]薁的合成



【0487】 將放入有 2,7-二溴-4b-氮雜-12b-硼雜二苯并[g,p]巰 (0.146 g)、氯化銅 (80.6 mg) 及喹啉 (1.0 mL) 的燒瓶於氫氣環境下於 200°C 下攪拌 40 小時。將反應液冷卻至室溫為止後，使其於活性氧化鋁短管柱中通過。此時，使用甲苯使其自管柱中溶出。將溶劑減壓蒸餾去除後，利用 GPC 對所得的粗產物進行分離，藉此以淡黃色粉末的形式獲得式 (216) 所表示的化合物 (58.0 mg)。

【0488】 藉由 NMR 測定確認了所得的化合物的結構。

¹H-NMR (CDCl₃) : δ = 8.66-8.70 (m, 4H), 8.38 (d, 2H), 8.05 (d, 2H), 7.89 (d, 2H), 7.73 (d, 2H), 7.65 (dd, 2H).

【0489】 合成例 (49)：

3,6-二氟-4b-氮雜-12b-硼雜二苯并[g,p]巰的合成



【0490】 將放入有二([4-氟-1,1'-聯苯]-2-基)胺(2.29 g)及甲苯(40 ml)的燒瓶冷卻至 -78°C 為止，滴加正丁基鋰的 1.6 M 己烷溶液(4.0 ml)。滴加結束後，暫且升溫至 0°C 為止，於 0°C 下攪拌 1 小時。其後，再次冷卻至 -78°C 為止，滴加三氯化硼的 1.0 M 甲苯溶液(6.4 ml)。繼而，將反應液升溫至室溫為止後，暫且將溶劑減壓蒸餾去除。於其中添加鄰二氯苯(90 ml)、2,2,6,6-四甲基哌啶「TMP」(1.49 g)、三氯化鎔 (4.51 g)，於 135°C 下攪拌 24 小時，繼而於 150°C 下攪拌 15 小時。添加 1,4-二氮雜雙環[2.2.2]辛烷 (5.74 g) 及甲苯 (100 ml) 進行攪拌。繼而，藉由使用鋪設有矽藻土的玻璃過濾器 (glass filter) 的抽吸過濾將析出的沈澱去除後，將溶劑減壓蒸餾去除。添加甲苯(36 ml)，藉由使用濾紙的過濾將沈澱去除。進而，藉由使用中性氧化鋁 (Alumina Neutral) 的短管柱 (展開液：甲苯 / 二氯甲烷 = 1/1 (容量比)) 將金屬鹽去除，利用 GPC 對所得的粗產物進行分離，藉此以白色粉末的形式獲得式 (217) 所表示的化合物 (1.05 g)。

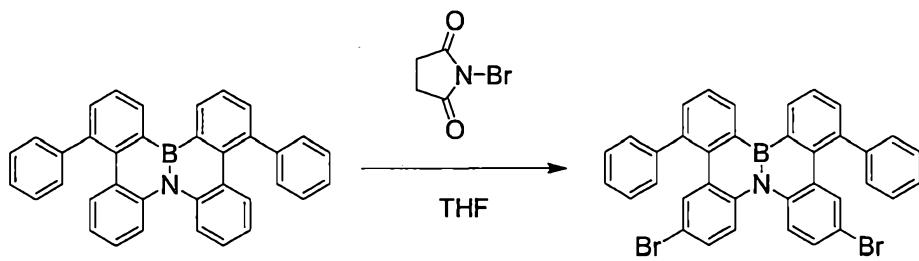
【0491】 藉由 NMR 測定確認了所得的化合物的結構。

$^1\text{H-NMR}$ (CDCl_3) : $\delta = 8.63$ (dd, 2H), 8.30 (d, 2H), 8.29 (d, 2H), 7.78 (dd, 2H), 7.76 (dd, 2H), 7.59 (dd, 2H), 7.08 (dd, 2H), 7.06 (dd, 2H).

【0492】 合成例 (50) :

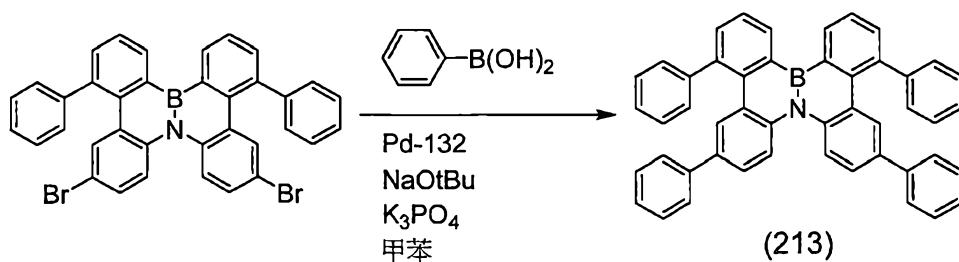
2,7,9,16-四苯基-4b-氮雜-12b-硼雜二苯并[g,p]蒽的合成





【0493】 首先，於氮氣環境下，於 9,16-二苯基-4b-氮雜-12b-硼雜二苯并[g,p]巰 (2.3 g) 的 THF (20 ml) 溶液中添加 N-溴代丁二醯亞胺 (NBS) (1.8 g)，於室溫下攪拌 1 小時。反應結束後，添加亞硝酸鈉水溶液，藉由抽吸過濾來採集所析出的沈澱。進而，利用活性氧化鋁管柱層析儀 (展開液：甲苯/三乙胺=99/1 (容量比)) 對所得的固體進行純化。將溶劑減壓蒸餾去除，利用乙酸乙酯對所得的固體進行清洗，獲得 2,7-二溴-9,16-二苯基-4b-氮雜-12b-硼雜二苯并[g,p]巰 (2.6 g)。

【0494】



【0495】 繼而，將放入有 2,7-二溴-9,16-二苯基-4b-氮雜-12b-硼雜二苯并[g,p]巰 (1.8 g)、苯基硼酸 (0.9 g)、磷酸鉀 (1.8 g)、第三丁氧化鈉 (0.3 g)、Pd-132 (約翰遜馬西 (Johnson Matthey)) (0.04 g) 及甲苯 (30 mL) 的燒瓶於氮氣環境下於 80°C 下攪拌 1 小時。

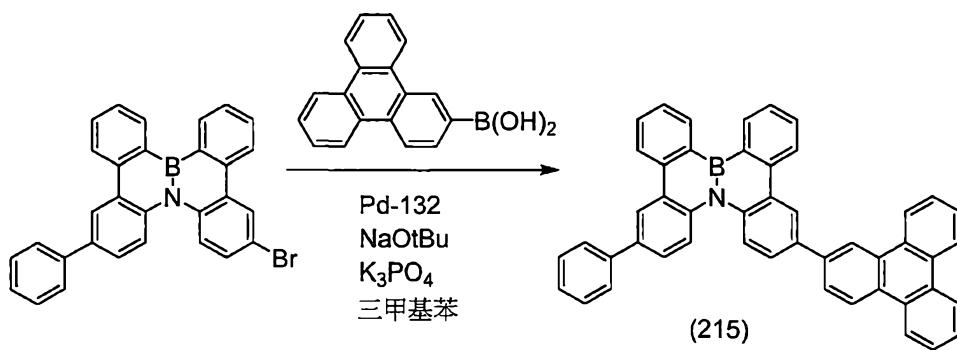
將反應液冷卻至室溫為止後，添加水及甲苯進行分液。繼而，將溶劑減壓蒸餾去除後，利用活性氧化鋁管柱層析儀（展開液：甲苯/三乙胺=99/1（容量比））進行純化。進而，溶解於甲苯中後添加庚烷，藉此進行再沈澱，由此獲得式(213)所表示的化合物(1.2 g)。

【0496】 藉由 NMR 測定確認了所得的化合物的結構。

¹H-NMR (CDCl₃) : δ = 8.77 (d, 2H), 8.16 (d, 2H), 7.81 (m, 2H), 7.66-7.74 (m, 4H), 7.46-7.55 (m, 4H), 7.20-7.30 (m, 14H), 7.01 (m, 4H).

【0497】 合成例(51)：

2-苯基-7-(聯三伸苯-2-基)-4b-氮雜-12b-硼雜二苯并[g,p]扁的合成



【0498】 將放入有 2-溴-7-苯基-4b-氮雜-12b-硼雜苯并[g,p]扁(2.0 g)、2-聯三伸苯硼酸(1.2 g)、Pd-132(0.06 g)、磷酸三鉀(0.9 g)、第三丁氧化鈉(0.4 g)及1,2,4-三甲基苯(50 ml)的燒瓶於115°C下攪拌1小時。將反應液冷卻至室溫為止，添加水及庚

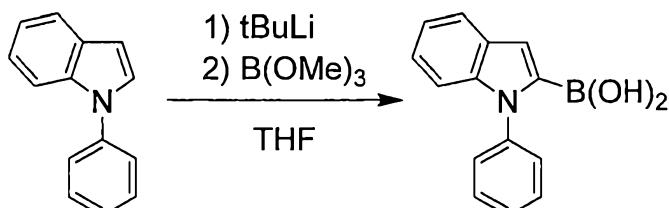
烷，藉由抽吸過濾來採集所析出的固體。繼而，使其溶解於經加熱的氯苯中，於活性氧化鋁短管柱（展開液：甲苯/三乙胺=99/1（容量比））中通過。將溶劑減壓蒸餾去除，利用乙酸乙酯對所得的固體進行清洗後，自氯苯中進行再結晶，藉此獲得式（215）所表示的化合物（0.6 g）。

【0499】 藉由 NMR 測定確認了所得的化合物的結構。

● $^1\text{H-NMR}$ (CDCl_3) : $\delta = 9.00$ (m, 1H), 8.83 (m, 1H), 8.75-8.80 (m, 4H), 8.68-8.74 (m, 3H), 8.61 (m, 2H), 8.53 (d, 1H), 8.31 (d, 1H), 8.27 (d, 1H), 8.05 (d, 1H), 7.81-7.89 (m, 3H), 7.77 (m, 2H), 7.64-7.75 (m, 7H), 7.52 (t, 2H), 7.40 (t, 1H).

【0500】 合成例（52）：

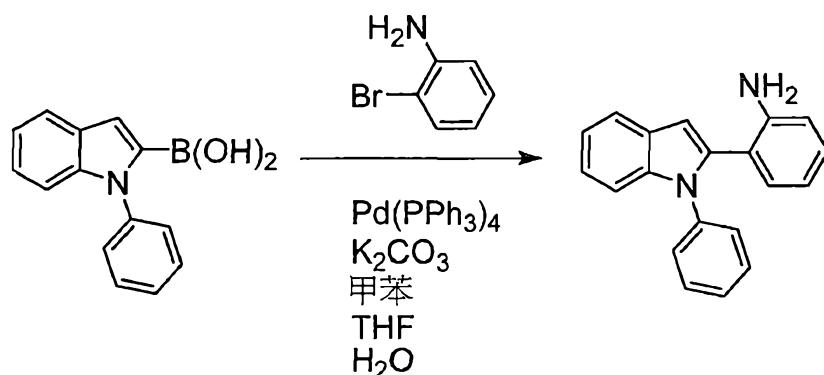
13c-氮雜-4b-硼雜-9-苯基-9,13c-二氫-4bH-苯并[a]菲並[9,10-c]咔唑的合成



【0501】 首先，將使 1-苯基-1H-呡噪（31.0 g）溶解於 THF（500 ml）中所得的溶液冷卻至-78°C。於該溶液中滴加第三丁基鋰（99.7 ml）後，緩慢升溫至室溫為止，攪拌 1 小時。再次冷卻至-78°C 為止，滴加三甲氧基硼烷（23.3 g）。其後升溫至室溫為止，進行整夜攪拌，將 THF 適量減壓蒸餾去除，添加氯化銨水溶液並攪拌 1

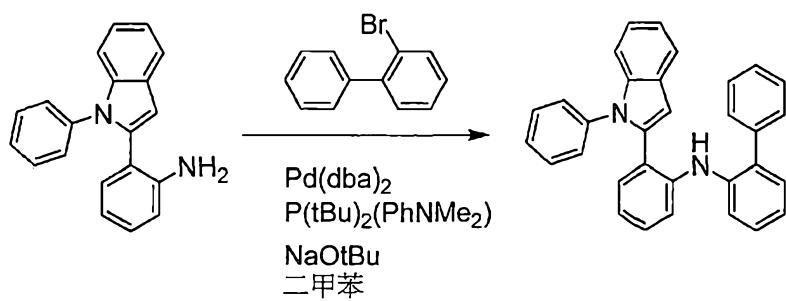
小時。添加乙酸乙酯進行分液，將有機層的溶劑減壓蒸餾去除，添加甲苯進行共沸脫水，獲得(1-苯基-1H-吲哚並-2-基)硼酸 (31.0 g)。

【0502】



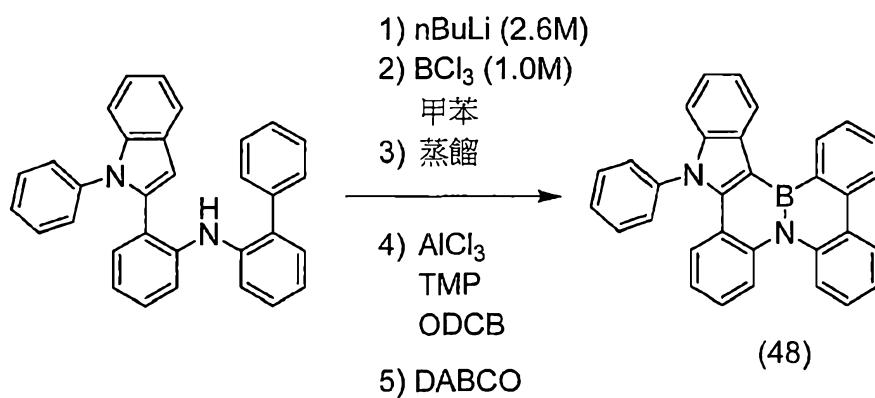
【0503】 繼而，將放入有(1-苯基-1H-吲哚並-2-基)硼酸 (30.0 g)、2-溴-苯胺 (20.0 g)、Pd(PPh₃)₄ (5.0 g)、碳酸鉀 (50.0 g)、甲苯 (200 ml)、THF (70 ml) 及水 (30 ml) 的燒瓶於氮氣環境下於80°C下攪拌 4 小時。將反應液冷卻至室溫為止後，添加水及乙酸乙酯進行分液，將溶劑減壓蒸餾去除。利用矽膠管柱層析儀（展開液：甲苯/庚烷=1 (容量比)) 對所得的油狀物質進行純化後，將低沸點成分減壓蒸餾去除而獲得 2-(1-苯基-1H-吲哚並-2-基)苯胺 (26.8 g)。

【0504】



【0505】 進而，將放入有 2-(1-苯基-1H-吲哚並-2-基)苯胺 (25.0 g)、2-溴聯苯 (20.5 g)、第三丁氧化鈉 (13.0 g)、 $\text{Pd}(\text{dba})_2$ (0.13 g)、4-(二-第三丁基膦基)-N,N-二甲基苯胺 (0.12 g) 及二甲苯 (120 ml) 的燒瓶於氮氣環境下於 90°C 下攪拌 1 小時。將反應液冷卻至室溫為止後，添加水及氯苯進行分析，利用活性氧化鋁短管柱（展開液：氯苯）進行純化。將溶劑減壓蒸餾去除，於所得的油狀物質中添加庚烷及少量的乙酸乙酯，藉此進行再沈澱，獲得 N-(2-(1-苯基-1H-吲哚並-2-基)苯基)-[1,1'-聯苯]-2-胺 (36.2 g)。

【0506】



【0507】 將放入有如上述般所得的 N-(2-(1-苯基-1H-吲哚並-2-基)苯基)-[1,1'-聯苯]-2-胺 (16.3 g) 及甲苯 (150 ml) 的燒瓶冷卻至 -70°C

爲止，滴加正丁基鋰的 2.6 M 己烷溶液 (14.4 ml)。滴加結束後，暫且升溫至 0°C 為止，於 0°C 下攪拌 5 分鐘。其後，將該溶液冷卻至 -70°C，滴加 1 M 的三氯化硼甲苯溶液 (37.3 ml)。繼而暫且將溶劑減壓蒸餾去除，添加鄰二氯苯 (150 ml)、2,2,6,6-四甲基哌啶 (11.1 g)、三氯化鋁 (25.0 g)，於 160°C 下攪拌 8 小時。將反應液冷卻至室溫爲止後，添加使 1,4-二氮雜雙環[2.2.2]辛烷「DABCO」(21.0 g) 懸浮於甲苯中所得的溶液，藉由使用鋪設有矽藻土的漏斗的減壓過濾將析出的固體過濾分離。進而利用活性氧化鋁管柱層析儀 (甲苯/庚烷/三乙胺=30/70/2 (容量比)) 進行純化後，利用庚烷進行清洗，獲得式 (48) 所表示的化合物 (12.0 g)。

【0508】 藉由 NMR 測定確認了所得的化合物的結構。

$^1\text{H-NMR}$ (CDCl_3) : $\delta = 8.97$ (d, 1H), 8.55 (m, 1H), 8.40 (d, 1H), 8.38 (d, 1H), 8.23 (d, 1H), 8.11 (d, 1H), 7.73-7.90 (m, 3H), 7.54-7.68 (m, 3H), 7.21-7.39 (m, 8H), 6.92 (t, 1H).

【0509】 藉由適當變更原料的化合物，可利用依據上述合成例的方法來合成本發明的其他多環芳香族化合物。

【0510】 以下，爲了對本發明加以更詳細說明而示出了各實施例，但本發明不限定於該些實施例。

【0511】 製作實施例 1～實施例 4 及比較例 1 的電場發光元件，分別測定以可獲得 1000 cd/m^2 的亮度的電流密度進行恆定電流驅動時的驅動起始電壓 (V) 及電流效率 (cd/A)。以下，對實施例及比較例加以詳細說明。

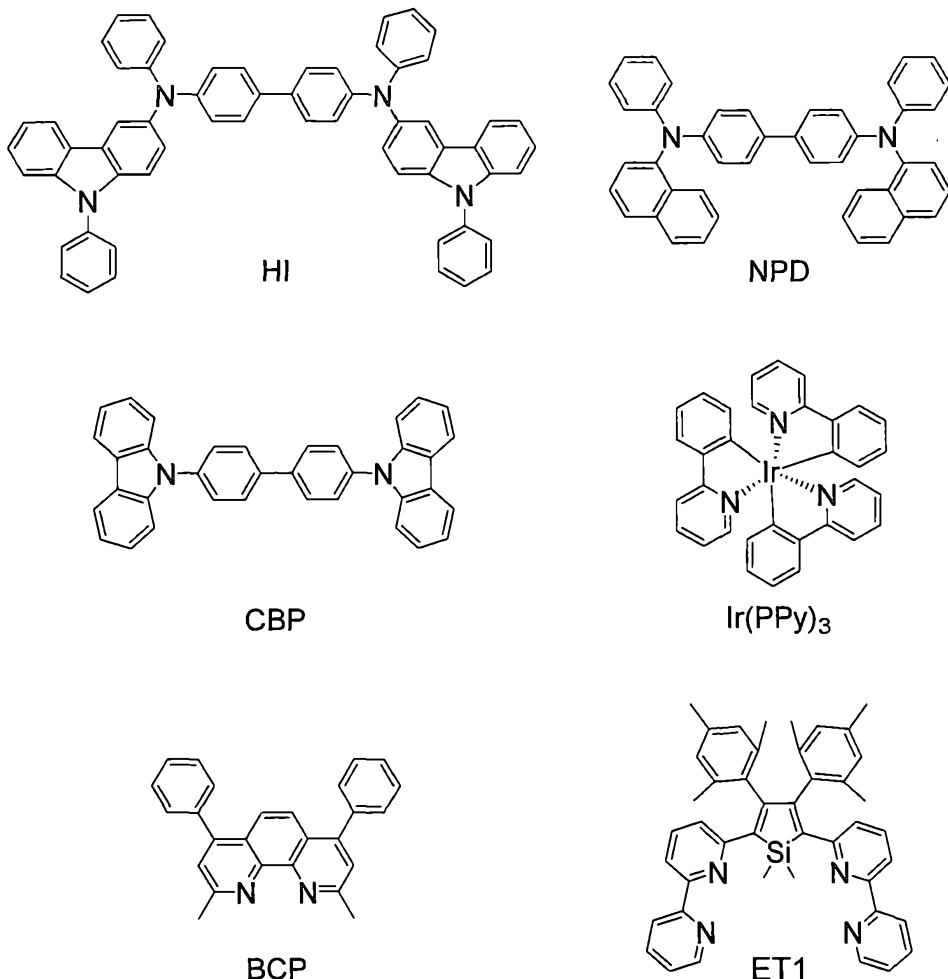
【0512】 將所製作的實施例 1～實施例 4 及比較例 1 的有機電場發光元件的各層的材料構成示於下述表 1 中。

[表 1]

	電洞注入層 (40 nm)	電洞傳輸層 (10 nm)	發光層 (35 nm)		電洞阻擋層 (5 nm)	電子傳輸層 (15 nm)	陰極 (1 nm/100 nm)
			主體	摻雜劑			
實施例 1	HI	NPD	化合物 (1)	Ir(PPy) ₃	BCP	ET1	LiF/Al
實施例 2	HI	NPD	化合物 (66)	Ir(PPy) ₃	BCP	ET1	LiF/Al
實施例 3	HI	NPD	化合物 (197)	Ir(PPy) ₃	BCP	ET1	LiF/Al
實施例 4	HI	化合物 (198)	CBP	Ir(PPy) ₃	BCP	ET1	LiF/Al
比較例 1	HI	NPD	CBP	Ir(PPy) ₃	BCP	ET1	LiF/Al

【0513】 於表 1 中，「HI」為 N⁴,N^{4'}-二苯基-N⁴,N^{4'}-雙(9-苯基-9H-咔唑-3-基)-[1,1'-聯苯]-4,4'-二胺，「NPD」為 N⁴, N^{4'}-二(萘-1-基)-N⁴,N^{4'}-二苯基-[1,1'-聯苯]-4,4'-二胺，「CBP」為 4,4'-二(9H-咔唑基-9-基)-1,1'-聯苯，「Ir(PPy)₃」為三(2-苯基吡啶)銥(III)，「BCP」為 2,9-二甲基-4,7-二苯基-1,10-啡啉，而且「ET1」為 2,5-雙-(2',2"-聯吡啶-6'-基)-1,1-二甲基-3,4-雙(2,4,6-三甲基苯基)矽雜環戊二烯(於以下的表中亦相同)。以下示出化學結構。

【0514】



【0515】 < 實施例 1 >

< 將化合物（1）用於發光層的主體材料的元件 >

將以下基板作為透明支撐基板：將藉由濺鍍以 180 nm 的厚度成膜的 ITO 研磨至 150 nm 為止的 26 mm×28 mm×0.7 mm 的玻璃基板（光電科技（Optoscience）（股）製造）。將該透明支撐基板固定於市售的蒸鍍裝置（昭和真空（股）製造）的基板固持器上，安裝放入有 HI 的鋁製蒸鍍用舟、放入有 NPD 的鋁製蒸鍍用舟、放入有本發明的化合物（1）的鋁製蒸鍍用舟、放入有 $\text{Ir}(\text{PPh}_3)_3$ 的鋁製蒸鍍用舟、放入有 BCP 的鋁製蒸鍍用舟、放入有 ET1 的鋁製



蒸鍍用舟、放入有 LiF 的鋁製蒸鍍用舟及放入有鋁的鎢製蒸鍍用舟。

【0516】 於透明支撐基板的 ITO 膜上依序形成下述各層。將真空槽減壓至 5×10^{-4} Pa 為止，首先對放入有 HI 的蒸鍍用舟進行加熱，以膜厚成爲 40 nm 的方式進行蒸鍍而形成電洞注入層，繼而對放入有 NPD 的蒸鍍用舟進行加熱，以膜厚成爲 10 nm 的方式進行蒸鍍而形成電洞傳輸層。繼而，對放入有化合物（1）的蒸鍍用舟與放入有 Ir(PPy)₃ 的蒸鍍用舟同時進行加熱，以膜厚成爲 35 nm 的方式進行蒸鍍而形成發光層。以化合物（1）與 Ir(PPy)₃ 的重量比成爲大致 95 比 5 的方式來調節蒸鍍速度。繼而，對放入有 BCP 的蒸鍍用舟進行加熱，以膜厚成爲 5 nm 的方式進行蒸鍍而形成電洞阻擋層。繼而，對放入有 ET1 的蒸鍍用舟進行加熱，以膜厚成爲 15 nm 的方式進行蒸鍍而形成電子傳輸層。各層的蒸鍍速度爲 0.01 nm/s ~ 1 nm/s。

【0517】 其後，對放入有 LiF 的蒸鍍用舟進行加熱，以膜厚成爲 1 nm 的方式以 0.01 nm/s ~ 0.1 nm/s 的蒸鍍速度進行蒸鍍。繼而，對放入有鋁的蒸鍍用舟進行加熱，以膜厚成爲 100 nm 的方式以 0.01 nm/s ~ 2 nm/s 的蒸鍍速度來蒸鍍鋁，藉此形成陰極，獲得有機 EL 元件。

【0518】 若以 ITO 電極爲陽極、以 LiF/鋁電極爲陰極來施加直流電壓，則可獲得波長爲約 515 nm 的綠色發光。另外，用以獲得初始亮度 1000 cd/m² 的驅動電壓爲 6.0 V，此時的電流效率爲 34.2



cd/A。

【0519】 < 實施例 2 >

< 將化合物 (66) 用於發光層的主體材料的元件 >

除了將作為發光層的主體材料的化合物 (1) 換成化合物 (66) 以外，利用依據實施例 1 的方法來獲得有機 EL 元件。若對兩電極施加直流電壓，則可獲得波長為約 515 nm 的綠色發光。另外，用以獲得初始亮度 1000 cd/m^2 的驅動電壓為 5.7 V，此時的電流效率為 36.4 cd/A。

【0520】 < 實施例 3 >

< 將化合物 (197) 用於發光層的主體材料的元件 >

除了將作為發光層的主體材料的化合物 (1) 換成化合物 (197) 以外，利用依據實施例 1 的方法來獲得有機 EL 元件。若對兩電極施加直流電壓，則可獲得波長為約 515 nm 的綠色發光。另外，用以獲得初始亮度 1000 cd/m^2 的驅動電壓為 5.6 V，此時的電流效率為 28.1 cd/A。

【0521】 < 實施例 4 >

< 將化合物 (198) 用於電洞傳輸層的元件 >

除了將作為電洞傳輸材料的 NPD 換成化合物 (198)、作為發光層的主體材料的化合物 (1) 換成 CBP 以外，利用依據實施例 1 的方法來獲得有機 EL 元件。若對兩電極施加直流電壓，則可獲得波長為約 515 nm 的綠色發光。另外，用以獲得初始亮度 1000 cd/m^2 的驅動電壓為 5.9 V，此時的電流效率為 26.4 cd/A。



【0522】 <比較例 1>

除了將作為發光層的主體材料的化合物(1)換成CBP以外，利用依據實施例1的方法來獲得有機EL元件。若對兩電極施加直流電壓，則可獲得波長為約515 nm的綠色發光。另外，用以獲得初始亮度 1000 cd/m^2 的驅動電壓為6.7 V，此時的電流效率為24.6 cd/A。

【0523】 將以上結果匯總於表2中。

[表 2]

	電洞傳輸層的材料	發光層的主體材料	驅動電壓 (V)	電流效率 (cd/A)
實施例1	NPD	化合物(1)	6.0	34.2
實施例2	NPD	化合物(66)	5.7	36.4
實施例3	NPD	化合物(197)	5.6	28.1
實施例4	化合物(198)	CBP	5.9	26.4
比較例1	NPD	CBP	6.7	24.6

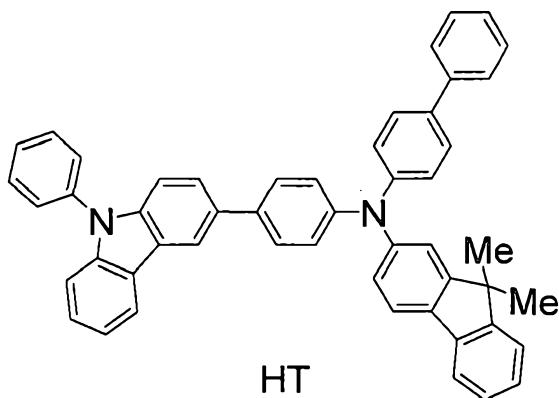
【0524】 繼而，製作實施例5及比較例2的電場發光元件，分別測定以可獲得 1000 cd/m^2 的亮度的電流密度進行恆定電流驅動時的驅動起始電壓(V)及電流效率(cd/A)。以下，對實施例及比較例加以詳細說明。

【0525】 將所製作的實施例5及比較例2的有機電場發光元件中的各層的材料構成示於下述表3中。

[表 3]

	電洞注入 層 (30 nm)	電洞傳輸 層 (20 nm)	發光層 (35 nm)		電洞阻擋 層 (5 nm)	電子傳輸 層 (15 nm)	陰極 (1 nm/100 nm)
			主體	摻雜劑			
實施例 5	HI	HT	化合物 (251)	Ir(PPy) ₃	BCP	ET1	LiF/Al
比較例 2	HI	HT	CBP	Ir(PPy) ₃	BCP	ET1	LiF/Al

【0526】 於表 3 中，「HT」為 N-([1,1'-聯苯]-4-基)-9,9-二甲基-N-(4-(9-苯基-9H-咔唑-3-基)苯基)-9H-茀-2-胺（於以下的表中相同）。以下示出化學結構。



【0527】 < 實施例 5 >

< 將化合物 (251) 用於發光層的主體材料的元件 >

使用以下基板作為透明支撐基板：將藉由濺鍍以 180 nm 的厚度成膜的 ITO 研磨至 150 nm 為止的 26 mm×28 mm×0.7 mm 的玻璃基板（光電科技（Optoscience）（股）製造）。將該透明支撐基板固定於市售的蒸鍍裝置（昭和真空（股）製造）的基板固持器上，安裝放入有 HI 的鋁製蒸鍍用舟、放入有 HT 的鋁製蒸鍍用舟、

放入有本發明的化合物（251）的鋁製蒸鍍用舟、放入有 $\text{Ir}(\text{PPy})_3$ 的鋁製蒸鍍用舟、放入有 BCP 的鋁製蒸鍍用舟、放入有 ET1 的鋁製蒸鍍用舟、放入有 LiF 的鋁製蒸鍍用舟及放入有鋁的鎢製蒸鍍用舟。

【0528】 於透明支撐基板的 ITO 膜上依序形成下述各層。將真空槽減壓至 5×10^{-4} Pa 為止，首先對放入有 HI 的蒸鍍用舟進行加熱，以膜厚成爲 30 nm 的方式進行蒸鍍而形成電洞注入層，繼而對放入有 HT 的蒸鍍用舟進行加熱，以膜厚成爲 20 nm 的方式進行蒸鍍而形成電洞傳輸層。繼而，對放入有化合物（251）的蒸鍍用舟與放入有 $\text{Ir}(\text{PPy})_3$ 的蒸鍍用舟同時進行加熱，以膜厚成爲 35 nm 的方式進行蒸鍍而形成發光層。以化合物（251）與 $\text{Ir}(\text{PPy})_3$ 的重量比大致成爲 95 比 5 的方式調節蒸鍍速度。繼而，對放入有 BCP 的蒸鍍用舟進行加熱，以膜厚成爲 5 nm 的方式進行蒸鍍而形成電洞阻擋層。繼而，對放入有 ET1 的蒸鍍用舟進行加熱，以膜厚成爲 15 nm 的方式進行蒸鍍而形成電子傳輸層。各層的蒸鍍速度爲 $0.01 \text{ nm/s} \sim 1 \text{ nm/s}$ 。

【0529】 其後，對放入有 LiF 的蒸鍍用舟進行加熱，以膜厚成爲 1 nm 的方式以 $0.01 \text{ nm/s} \sim 0.1 \text{ nm/s}$ 的蒸鍍速度進行蒸鍍。繼而，對放入有鋁的蒸鍍用舟進行加熱，以膜厚成爲 100 nm 的方式以 $0.01 \text{ nm/s} \sim 2 \text{ nm/s}$ 的蒸鍍速度來蒸鍍鋁，藉此形成陰極，獲得有機 EL 元件。

【0530】 若以 ITO 電極爲陽極、以 LiF/鋁電極爲陰極來施加直流

電壓，則可獲得波長為約 515 nm 的綠色發光。另外，用以獲得初始亮度 1000 cd/m^2 的驅動電壓為 5.0 V，此時的電流效率為 33.7 cd/A。

【0531】 <比較例 2>

除了將作為發光層的主體材料的化合物（251）換成 CBP 以外，利用依據實施例 5 的方法來獲得有機 EL 元件。若對兩電極施加直流電壓，則可獲得波長為約 515 nm 的綠色發光。另外，用以獲得初始亮度 1000 cd/m^2 的驅動電壓為 5.9 V，此時的電流效率為 31.8 cd/A。

【0532】 將以上結果匯總於表 4 中。

[表 4]

	電洞傳輸層的材料	發光層的主體材料	驅動電壓 (V)	電流效率 (cd/A)
實施例 5	HT	化合物 (251)	5.0	33.7
比較例 2	HT	CBP	5.9	31.8

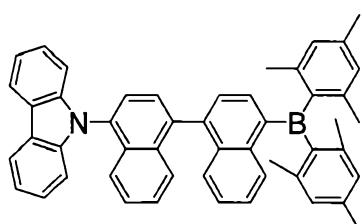
【0533】 繼而，製作實施例 6～實施例 14 及比較例 3～比較例 4 的電場發光元件，分別測定以可獲得 1000 cd/m^2 的亮度的電流密度進行恆定電流驅動時的驅動起始電壓 (V) 及電流效率 (cd/A)。以下，對實施例及比較例加以詳細說明。

【0534】 將所製作的實施例 6～實施例 14 及比較例 3～比較例 4 的有機電場發光元件中的各層的材料構成示於下述表 5 中。

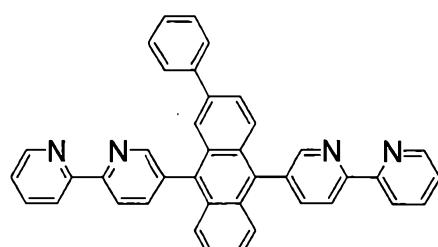
[表 5]

	電洞注入 層 (30 nm)	電洞傳輸 層 (10 nm)	發光層 (30 nm)		電洞阻擋 層 (10 nm)	電子傳輸 層 (20 nm)	陰極 (1 nm/100 nm)
			主體	摻雜劑			
實施例 6	HI	HT	化合物 (1)	Ir(PPy) ₃	HB1	ET2	LiF/Al
實施例 7	HI	HT	化合物 (501)	Ir(PPy) ₃	HB1	ET2	LiF/Al
實施例 8	HI	HT	化合物 (551)	Ir(PPy) ₃	HB1	ET2	LiF/Al
實施例 9	HI	HT	化合物 (687)	Ir(PPy) ₃	HB1	ET2	LiF/Al
比較例 3	HI	HT	CBP	Ir(PPy) ₃	HB1	ET2	LiF/Al
實施例 10	HI	HT	CBP	Ir(PPy) ₃	化合物 (301)	化合物 (301)	LiF/Al
實施例 11	HI	HT	CBP	Ir(PPy) ₃	化合物 (391)	化合物 (391)	LiF/Al
實施例 12	HI	HT	CBP	Ir(PPy) ₃	化合物 (392)	化合物 (392)	LiF/Al
實施例 13	HI	HT	CBP	Ir(PPy) ₃	化合物 (391)	ET2	LiF/Al
實施例 14	HI	HT	CBP	Ir(PPy) ₃	化合物 (392)	ET2	LiF/Al
比較例 4	HI	HT	CBP	Ir(PPy) ₃	BCP	ET2	LiF/Al

【0535】 於表 5 中，「HB1」為 9-(4'-(二-均三甲苯基硼基)-[1,1'-聯萘]-4-基)-9H-咔唑，「ET2」為 5,5''-(2-苯基蒽-9,10-二基)二-2,2'-聯吡啶（於以下的表中相同）。以下示出化學結構。



HB1



ET2

【0536】 <實施例 6>

<將化合物（1）用於發光層的主體材料的元件 其二>

使用以下基板作為透明支撐基板：將藉由濺鍍以 180 nm 的厚度成膜的 ITO 研磨至 150 nm 為止的 26 mm×28 mm×0.7 mm 的玻璃基板（光電科技（Optoscience）（股）製造）。將該透明支撐基板固定於市售的蒸鍍裝置（昭和真空（股）製造）的基板固持器上，安裝放入有 HI 的鋁製蒸鍍用舟、放入有 HT 的鋁製蒸鍍用舟、放入有本發明的化合物（1）的鋁製蒸鍍用舟、放入有 Ir(PPy)₃ 的鋁製蒸鍍用舟、放入有 HB1 的鋁製蒸鍍用舟、放入有 ET2 的鋁製蒸鍍用舟、放入有 LiF 的鋁製蒸鍍用舟及放入有鋁的鎢製蒸鍍用舟。

【0537】 於透明支撐基板的 ITO 膜上依序形成下述各層。將真空槽減壓至 5×10^{-4} Pa 為止，首先對放入有 HI 的蒸鍍用舟進行加熱，以膜厚成為 30 nm 的方式進行蒸鍍而形成電洞注入層，繼而對放入有 HT 的蒸鍍用舟進行加熱，以膜厚成為 10 nm 的方式進行蒸鍍而形成電洞傳輸層。繼而，對放入有化合物（1）的蒸鍍用舟與放入有 Ir(PPy)₃ 的蒸鍍用舟同時進行加熱，以膜厚成為 30 nm 的方式進行蒸鍍而形成發光層。以化合物（1）與 Ir(PPy)₃ 的重量比大致成為 95 比 5 的方式來調節蒸鍍速度。繼而，對放入有 HB1 的蒸鍍用舟進行加熱，以膜厚成為 10 nm 的方式進行蒸鍍而形成電洞阻擋層。繼而，對放入有 ET2 的蒸鍍用舟進行加熱，以膜厚成為 20 nm 的方式進行蒸鍍而形成電子傳輸層。各層的蒸鍍速度為 0.01

nm/s~1 nm/s。

【0538】 其後，對放入有 LiF 的蒸鍍用舟進行加熱，以膜厚成爲 1 nm 的方式以 0.01 nm/s~0.1 nm/s 的蒸鍍速度進行蒸鍍。繼而，對放入有鋁的蒸鍍用舟進行加熱，以膜厚成爲 100 nm 的方式以 0.01 nm/s~2 nm/s 的蒸鍍速度來蒸鍍鋁，藉此形成陰極，獲得有機 EL 元件。

【0539】 若以 ITO 電極爲陽極、以 LiF/鋁電極爲陰極來施加直流電壓，則可獲得波長爲約 515 nm 的綠色發光。另外，用以獲得初始亮度 1000 cd/m² 的驅動電壓爲 5.2 V，此時的電流效率爲 43.7 cd/A。

【0540】 <實施例 7>

<將化合物（501）用於發光層的主體材料的元件>

除了將作爲發光層的主體材料的化合物(1)換成化合物(501)以外，利用依據實施例 6 的方法來獲得有機 EL 元件。若對兩電極施加直流電壓，則可獲得波長爲約 515 nm 的綠色發光。另外，用以獲得初始亮度 1000 cd/m² 的驅動電壓爲 6.2 V，此時的電流效率爲 29.0 cd/A。

【0541】 <實施例 8>

<將化合物（551）用於發光層的主體材料的元件>

除了將作爲發光層的主體材料的化合物(1)換成化合物(551)以外，利用依據實施例 6 的方法來獲得有機 EL 元件。若對兩電極施加直流電壓，則可獲得波長爲約 515 nm 的綠色發光。另外，用

以獲得初始亮度 1000 cd/m^2 的驅動電壓為 4.8 V ，此時的電流效率為 31.7 cd/A 。

【0542】 <實施例 9>

<將化合物（687）用於發光層的主體材料的元件>

除了將作為發光層的主體材料的化合物（1）換成化合物（687）以外，利用依據實施例 6 的方法來獲得有機 EL 元件。若對兩電極施加直流電壓，則可獲得波長為約 515 nm 的綠色發光。另外，用以獲得初始亮度 1000 cd/m^2 的驅動電壓為 4.0 V ，此時的電流效率為 28.3 cd/A 。

【0543】 <比較例 3>

<將 CBP 用於發光層的主體材料的元件>

除了將作為發光層的主體材料的化合物（1）換成 CBP 以外，利用依據實施例 6 的方法來獲得有機 EL 元件。若對兩電極施加直流電壓，則可獲得波長為約 515 nm 的綠色發光。另外，用以獲得初始亮度 1000 cd/m^2 的驅動電壓為 5.4 V ，此時的電流效率為 24.2 cd/A 。

【0544】 <實施例 10>

<將化合物（301）用於電洞阻擋層兼電子傳輸層（用於一層中）的元件>

使用以下基板作為透明支撐基板：將藉由濺鍍以 180 nm 的厚度成膜的 ITO 研磨至 150 nm 為止的 $26 \text{ mm} \times 28 \text{ mm} \times 0.7 \text{ mm}$ 的玻璃基板（光電科技（Optoscience）（股）製造）。將該透明支撐基



板固定於市售的蒸鍍裝置（昭和真空（股）製造）的基板固持器上，安裝放入有 HI 的鋁製蒸鍍用舟、放入有 HT 的鋁製蒸鍍用舟、放入有本發明的 CBP 的鋁製蒸鍍用舟、放入有 $\text{Ir}(\text{PPy})_3$ 的鋁製蒸鍍用舟、放入有化合物（301）的鋁製蒸鍍用舟、放入有 LiF 的鋁製蒸鍍用舟及放入有鋁的鎢製蒸鍍用舟。

【0545】 於透明支撐基板的 ITO 膜上依序形成下述各層。將真空槽減壓至 5×10^{-4} Pa 為止，首先，對放入有 HI 的蒸鍍用舟進行加熱，以膜厚成爲 30 nm 的方式進行蒸鍍而形成電洞注入層，繼而對放入有 HT 的蒸鍍用舟進行加熱，以膜厚成爲 10 nm 的方式進行蒸鍍而形成電洞傳輸層。繼而，對放入有 CBP 的蒸鍍用舟與放入有 $\text{Ir}(\text{PPy})_3$ 的蒸鍍用舟同時進行加熱，以膜厚成爲 30 nm 的方式進行蒸鍍而形成發光層。以 CBP 與 $\text{Ir}(\text{PPy})_3$ 的重量比大致成爲 95 比 5 的方式來調節蒸鍍速度。繼而，對放入有化合物（301）的蒸鍍用舟進行加熱，以膜厚成爲 30 nm 的方式進行蒸鍍而形成電洞阻擋層兼電子傳輸層。各層的蒸鍍速度爲 $0.01 \text{ nm/s} \sim 1 \text{ nm/s}$ 。

【0546】 其後，對放入有 LiF 的蒸鍍用舟進行加熱，以膜厚成爲 1 nm 的方式以 $0.01 \text{ nm/s} \sim 0.1 \text{ nm/s}$ 的蒸鍍速度進行蒸鍍。繼而，對放入有鋁的蒸鍍用舟進行加熱，以膜厚成爲 100 nm 的方式以 $0.01 \text{ nm/s} \sim 2 \text{ nm/s}$ 的蒸鍍速度來蒸鍍鋁，藉此形成陰極，獲得有機 EL 元件。

【0547】 若以 ITO 電極爲陽極、以 LiF/鋁電極爲陰極來施加直流電壓，則可獲得波長爲約 515 nm 的綠色發光。另外，用以獲得初

始亮度 1000 cd/m^2 的驅動電壓為 5.6 V ，此時的電流效率為 32.2 cd/A 。

【0548】 <實施例 11>

<將化合物（391）用於電洞阻擋層兼電子傳輸層（用於一層中）的元件>

除了將作為電洞阻擋層兼電子傳輸層的化合物（301）換成化合物（391）以外，利用依據實施例 10 的方法來獲得有機 EL 元件。若對兩電極施加直流電壓，則可獲得波長為約 515 nm 的綠色發光。另外，用以獲得初始亮度 1000 cd/m^2 的驅動電壓為 6.0 V ，此時的電流效率為 28.0 cd/A 。

【0549】 <實施例 12>

<將化合物（392）用於電洞阻擋層兼電子傳輸層（用於一層中）的元件>

除了將作為電洞阻擋層兼電子傳輸層的化合物（301）換成化合物（392）以外，利用依據實施例 10 的方法來獲得有機 EL 元件。若對兩電極施加直流電壓，則可獲得波長為約 515 nm 的綠色發光。另外，用以獲得初始亮度 1000 cd/m^2 的驅動電壓為 6.2 V ，此時的電流效率為 26.2 cd/A 。

【0550】 <實施例 13>

<將化合物（391）用於電洞阻擋層的元件>

使用以下基板作為透明支撐基板：將藉由濺鍍以 180 nm 的厚度成膜的 ITO 研磨至 150 nm 為止的 $26 \text{ mm} \times 28 \text{ mm} \times 0.7 \text{ mm}$ 的玻



璃基板（光電科技（Optoscience）（股）製造）。將該透明支撐基板固定於市售的蒸鍍裝置（昭和真空（股）製造）的基板固持器上，安裝放入有 HI 的鋁製蒸鍍用舟、放入有 HT 的鋁製蒸鍍用舟、放入有本發明的 CBP 的鋁製蒸鍍用舟、放入有 $\text{Ir}(\text{PPy})_3$ 的鋁製蒸鍍用舟、放入有化合物（391）的鋁製蒸鍍用舟、放入有 ET2 的鋁製蒸鍍用舟、放入有 LiF 的鋁製蒸鍍用舟及放入有鋁的鎢製蒸鍍用舟。

【0551】 於透明支撐基板的 ITO 膜上依序形成下述各層。將真空槽減壓至 5×10^{-4} Pa 為止，首先對放入有 HI 的蒸鍍用舟進行加熱，以膜厚成爲 30 nm 的方式進行蒸鍍而形成電洞注入層，繼而對放入有 HT 的蒸鍍用舟進行加熱，以膜厚成爲 10 nm 的方式進行蒸鍍而形成電洞傳輸層。繼而，對放入有 CBP 的蒸鍍用舟與放入有 $\text{Ir}(\text{PPy})_3$ 的蒸鍍用舟同時進行加熱，以膜厚成爲 30 nm 的方式進行蒸鍍而形成發光層。以 CBP 與 $\text{Ir}(\text{PPy})_3$ 的重量比大致成爲 95 比 5 的方式來調節蒸鍍速度。繼而，對放入有化合物（391）的蒸鍍用舟進行加熱，以膜厚成爲 10 nm 的方式進行蒸鍍而形成電洞阻擋層。繼而，對放入有 ET2 的蒸鍍用舟進行加熱，以膜厚成爲 20 nm 的方式進行蒸鍍而形成電子傳輸層。各層的蒸鍍速度爲 0.01 nm/s ~ 1 nm/s。

【0552】 其後，對放入有 LiF 的蒸鍍用舟進行加熱，以膜厚成爲 1 nm 的方式以 0.01 nm/s ~ 0.1 nm/s 的蒸鍍速度進行蒸鍍。繼而，對放入有鋁的蒸鍍用舟進行加熱，以膜厚成爲 100 nm 的方式以

0.01 nm/s~2 nm/s 的蒸鍍速度來蒸鍍鋁，藉此形成陰極，獲得有機 EL 元件。

【0553】 若以 ITO 電極為陽極、以 LiF/鋁電極為陰極來施加直流電壓，則可獲得波長為約 515 nm 的綠色發光。另外，用以獲得初始亮度 1000 cd/m² 的驅動電壓為 3.6 V，此時的電流效率為 28.0 cd/A。

【0554】 <實施例 14>

<將化合物（392）用於電洞阻擋層的元件>

除了將作為電洞阻擋層的化合物（391）換成化合物（392）以外，利用依據實施例 13 的方法來獲得有機 EL 元件。若對兩電極施加直流電壓，則可獲得波長為約 515 nm 的綠色發光。另外，用以獲得初始亮度 1000 cd/m² 的驅動電壓為 4.9 V，此時的電流效率為 32.7 cd/A。

【0555】 <比較例 4>

<將 BCP 用於電洞阻擋層的元件>

除了將作為電洞阻擋層的化合物（391）換成 BCP 以外，利用依據實施例 13 的方法來獲得有機 EL 元件。若對兩電極施加直流電壓，則可獲得波長為約 515 nm 的綠色發光。另外，用以獲得初始亮度 1000 cd/m² 的驅動電壓為 5.7 V，此時的電流效率為 28.7 cd/A。

【0556】 將以上結果匯總於表 6 及表 7 中。

[表 6]



	電洞傳輸層的材料	發光層的主體材料	驅動電壓 (V)	電流效率 (cd/A)
實施例 6	HT	化合物 (1)	5.2	43.7
實施例 7	HT	化合物 (501)	6.2	29.0
實施例 8	HT	化合物 (551)	4.8	31.7
實施例 9	HT	化合物 (687)	4.0	28.3
比較例 3	HT	CBP	5.4	24.2

【0557】 [表 7]

	電洞阻擋層的材料	電子傳輸層的材料	驅動電壓 (V)	電流效率 (cd/A)
實施例 10	化合物 (301)	化合物 (301)	5.6	32.2
實施例 11	化合物 (391)	化合物 (391)	6.0	28.0
實施例 12	化合物 (392)	化合物 (392)	6.2	26.2
實施例 13	化合物 (391)	ET2	3.6	28.0
實施例 14	化合物 (392)	ET2	4.9	32.7
比較例 4	BCP	ET2	5.7	28.7

【0558】 進而，製作實施例 15～實施例 29 及比較例 5 的電場發光元件，分別測定以可獲得 1000 cd/m^2 的亮度的電流密度進行恆定電流驅動時的驅動起始電壓 (V) 及電流效率 (cd/A)。以下，對實施例及比較例加以詳細說明。

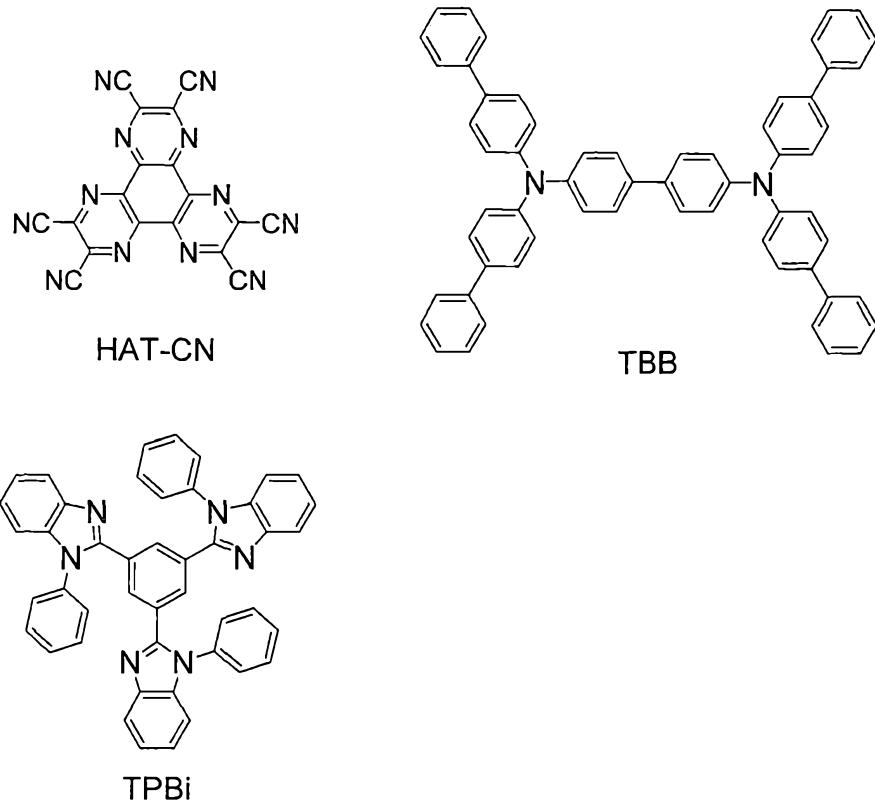
【0559】 將所製作的實施例 15～實施例 29 及比較例 5 的有機電場發光元件中的各層的材料構成示於下述表 8 中。

【0560】 [表 8]

	電洞注入層 (10 nm)	電洞傳輸 層 (30 nm)	發光層 (30 nm)		電子傳輸 層 (50 nm)	陰極 (1 nm/100 nm)
			主體	摻雜劑		
實施例 15	HAT-CN	TBB	化合物(1)	Ir(PPy) ₃	TPBi	LiF/Al
實施例 16	HAT-CN	TBB	化合物 (66)	Ir(PPy) ₃	TPBi	LiF/Al
實施例 17	HAT-CN	TBB	化合物 (84)	Ir(PPy) ₃	TPBi	LiF/Al
實施例 18	HAT-CN	TBB	化合物 (86)	Ir(PPy) ₃	TPBi	LiF/Al
實施例 19	HAT-CN	TBB	化合物 (197)	Ir(PPy) ₃	TPBi	LiF/Al
實施例 20	HAT-CN	TBB	化合物 (51)	Ir(PPy) ₃	TPBi	LiF/Al
實施例 21	HAT-CN	TBB	化合物 (214)	Ir(PPy) ₃	TPBi	LiF/Al
實施例 22	HAT-CN	TBB	化合物 (26)	Ir(PPy) ₃	TPBi	LiF/Al
實施例 23	HAT-CN	TBB	化合物 (210)	Ir(PPy) ₃	TPBi	LiF/Al
實施例 24	HAT-CN	TBB	化合物 (212)	Ir(PPy) ₃	TPBi	LiF/Al
實施例 25	HAT-CN	TBB	化合物 (215)	Ir(PPy) ₃	TPBi	LiF/Al
實施例 26	HAT-CN	TBB	化合物 (48)	Ir(PPy) ₃	TPBi	LiF/Al
實施例 27	HAT-CN	化合物 (209)	CBP	Ir(PPy) ₃	TPBi	LiF/Al
實施例 28	HAT-CN	TBB	CBP	Ir(PPy) ₃	化合物 (366)	LiF/Al
實施例 29	HAT-CN	TBB	CBP	Ir(PPy) ₃	化合物 (424)	LiF/Al
比較例 5	HAT-CN	TBB	CBP	Ir(PPy) ₃	TPBi	LiF/Al

【0561】 於表 8 中，「HAT-CN」為 1,4,5,8,9,12-六氮雜聯三伸苯六甲腈，「TBB」為 N⁴,N⁴,N^{4'},N^{4'}-四([1,1'-聯苯]-4-基)-[1,1'-聯

苯]-4,4'-二胺，「TPBi」為 1,3,5-三(1-苯基-1H-苯并[d]咪唑-2-基)苯（於以下的表中相同）。以下示出化學結構。



【0562】 <實施例 15>

<將化合物（1）用於發光層的主體材料的元件 其三>

使用以下基板作為透明支撐基板：將藉由濺鍍以 180 nm 的厚度成膜的 ITO 研磨至 150 nm 為止的 26 mm×28 mm×0.7 mm 的玻璃基板（光電科技（Optoscience）（股）製造）。將該透明支撐基板固定於市售的蒸鍍裝置（昭和真空（股）製造）的基板固持器上，安裝放入有 HAT-CN 的鋁製蒸鍍用舟、放入有 TBB 的鋁製蒸鍍用舟、放入有本發明的化合物（1）的鋁製蒸鍍用舟、放入有

$\text{Ir}(\text{PPy})_3$ 的鋁製蒸鍍用舟、放入有 TPBi 的鋁製蒸鍍用舟、放入有 LiF 的鋁製蒸鍍用舟及放入有鋁的鎢製蒸鍍用舟。

【0563】 於透明支撐基板的 ITO 膜上依序形成下述各層。將真空槽減壓至 5×10^{-4} Pa 為止，首先對放入有 HAT-CN 的蒸鍍用舟進行加熱，以膜厚成爲 10 nm 的方式進行蒸鍍而形成電洞注入層，繼而對放入有 TBB 的蒸鍍用舟進行加熱，以膜厚成爲 30 nm 的方式進行蒸鍍而形成電洞傳輸層。繼而，對放入有化合物（1）的蒸鍍用舟與放入有 $\text{Ir}(\text{PPy})_3$ 的蒸鍍用舟同時進行加熱，以膜厚成爲 30 nm 的方式進行蒸鍍而形成發光層。以化合物（1）與 $\text{Ir}(\text{PPy})_3$ 的重量比大致成爲 95 比 5 的方式來調節蒸鍍速度。繼而，對放入有 TPBi 的蒸鍍用舟進行加熱，以膜厚成爲 50 nm 的方式進行蒸鍍而形成電子傳輸層。各層的蒸鍍速度爲 $0.01 \text{ nm/s} \sim 1 \text{ nm/s}$ 。

【0564】 其後，對放入有 LiF 的蒸鍍用舟進行加熱，以膜厚成爲 1 nm 的方式以 $0.01 \text{ nm/s} \sim 0.1 \text{ nm/s}$ 的蒸鍍速度進行蒸鍍。繼而，對放入有鋁的蒸鍍用舟進行加熱，以膜厚成爲 100 nm 的方式以 $0.01 \text{ nm/s} \sim 2 \text{ nm/s}$ 的蒸鍍速度來蒸鍍鋁，藉此形成陰極，獲得有機 EL 元件。

【0565】 若以 ITO 電極爲陽極、以 LiF/鋁電極爲陰極來施加直流電壓，則可獲得波長爲約 515 nm 的綠色發光。另外，用以獲得初始亮度 1000 cd/m^2 的驅動電壓爲 5.2 V，此時的電流效率爲 28.9 cd/A。

【0566】 < 實施例 16 >



<將化合物（66）用於發光層的主體材料的元件>

除了將作為發光層的主體材料的化合物（1）換成化合物（66）以外，利用依據實施例 15 的方法來獲得有機 EL 元件。若對兩電極施加直流電壓，則可獲得波長為約 515 nm 的綠色發光。另外，用以獲得初始亮度 1000 cd/m^2 的驅動電壓為 4.8 V，此時的電流效率為 37.0 cd/A。

【0567】 <實施例 17>

<將化合物（84）用於發光層的主體材料的元件>

除了將作為發光層的主體材料的化合物（1）換成化合物（84）以外，利用依據實施例 15 的方法來獲得有機 EL 元件。若對兩電極施加直流電壓，則可獲得波長為約 515 nm 的綠色發光。另外，用以獲得初始亮度 1000 cd/m^2 的驅動電壓為 5.6 V，此時的電流效率為 35.9 cd/A。

【0568】 <實施例 18>

<將化合物（86）用於發光層的主體材料的元件>

除了將作為發光層的主體材料的化合物（1）換成化合物（86）以外，利用依據實施例 15 的方法來獲得有機 EL 元件。若對兩電極施加直流電壓，則可獲得波長為約 515 nm 的綠色發光。另外，用以獲得初始亮度 1000 cd/m^2 的驅動電壓為 5.0 V，此時的電流效率為 29.0 cd/A。

【0569】 <實施例 19>

<將化合物（197）用於發光層的主體材料的元件>

除了將作為發光層的主體材料的化合物(1)換成化合物(197)以外，利用依據實施例15的方法來獲得有機EL元件。若對兩電極施加直流電壓，則可獲得波長為約515 nm的綠色發光。另外，用以獲得初始亮度 1000 cd/m^2 的驅動電壓為4.9 V，此時的電流效率為32.4 cd/A。

【0570】 <實施例20>

<將化合物(51)用於發光層的主體材料的元件>

除了將作為發光層的主體材料的化合物(1)換成化合物(51)以外，利用依據實施例15的方法來獲得有機EL元件。若對兩電極施加直流電壓，則可獲得波長為約515 nm的綠色發光。另外，用以獲得初始亮度 1000 cd/m^2 的驅動電壓為5.1 V，此時的電流效率為39.2 cd/A。

【0571】 <實施例21>

<將化合物(214)用於發光層的主體材料的元件>

除了將作為發光層的主體材料的化合物(1)換成化合物(214)以外，利用依據實施例15的方法來獲得有機EL元件。若對兩電極施加直流電壓，則可獲得波長為約515 nm的綠色發光。另外，用以獲得初始亮度 1000 cd/m^2 的驅動電壓為4.2 V，此時的電流效率為35.2 cd/A。

【0572】 <實施例22>

<將化合物(26)用於發光層的主體材料的元件>

除了將作為發光層的主體材料的化合物(1)換成化合物(26)

以外，利用依據實施例 15 的方法來獲得有機 EL 元件。若對兩電極施加直流電壓，則可獲得波長為約 515 nm 的綠色發光。另外，用以獲得初始亮度 1000 cd/m^2 的驅動電壓為 4.7 V，此時的電流效率為 42.2 cd/A 。

【0573】 < 實施例 23 >

< 將化合物（210）用於發光層的主體材料的元件 >

除了將作為發光層的主體材料的化合物(1)換成化合物(210)以外，利用依據實施例 15 的方法來獲得有機 EL 元件。若對兩電極施加直流電壓，則可獲得波長為約 515 nm 的綠色發光。另外，用以獲得初始亮度 1000 cd/m^2 的驅動電壓為 5.1 V，此時的電流效率為 32.7 cd/A 。

【0574】 < 實施例 24 >

< 將化合物（212）用於發光層的主體材料的元件 >

除了將作為發光層的主體材料的化合物(1)換成化合物(212)以外，利用依據實施例 15 的方法來獲得有機 EL 元件。若對兩電極施加直流電壓，則可獲得波長為約 515 nm 的綠色發光。另外，用以獲得初始亮度 1000 cd/m^2 的驅動電壓為 5.3 V，此時的電流效率為 27.0 cd/A 。

【0575】 < 實施例 25 >

< 將化合物（215）用於發光層的主體材料的元件 >

除了將作為發光層的主體材料的化合物(1)換成化合物(215)以外，利用依據實施例 15 的方法來獲得有機 EL 元件。若對兩電

極施加直流電壓，則可獲得波長為約 515 nm 的綠色發光。另外，用以獲得初始亮度 1000 cd/m^2 的驅動電壓為 5.5 V，此時的電流效率為 27.7 cd/A。

【0576】 <實施例 26>

<將化合物（48）用於發光層的主體材料的元件>

除了將作為發光層的主體材料的化合物（1）換成化合物（48）以外，利用依據實施例 15 的方法來獲得有機 EL 元件。若對兩電極施加直流電壓，則可獲得波長為約 515 nm 的綠色發光。另外，用以獲得初始亮度 1000 cd/m^2 的驅動電壓為 5.5 V，此時的電流效率為 29.2 cd/A。

【0577】 <實施例 27>

<將化合物（209）用於電洞傳輸層的元件>

使用以下基板作為透明支撐基板：將藉由濺鍍以 180 nm 的厚度成膜的 ITO 研磨至 150 nm 為止的 $26 \text{ mm} \times 28 \text{ mm} \times 0.7 \text{ mm}$ 的玻璃基板（光電科技（Optoscience）（股）製造）。將該透明支撐基板固定於市售的蒸鍍裝置（昭和真空（股）製造）的基板固持器上，安裝放入有 HAT-CN 的鋁製蒸鍍用舟、放入有本發明的化合物（209）的鋁製蒸鍍用舟、放入有 CBP 的鋁製蒸鍍用舟、放入有 $\text{Ir}(\text{PPy})_3$ 的鋁製蒸鍍用舟、放入有 TPBi 的鋁製蒸鍍用舟、放入有 LiF 的鋁製蒸鍍用舟及放入有鋁的鎢製蒸鍍用舟。

【0578】 於透明支撐基板的 ITO 膜上依序形成下述各層。將真空槽減壓至 $5 \times 10^{-4} \text{ Pa}$ 為止，首先對放入有 HAT-CN 的蒸鍍用舟進行



加熱，以膜厚成爲 10 nm 的方式進行蒸鍍而形成電洞注入層，繼而對放入有化合物(209)的蒸鍍用舟進行加熱，以膜厚成爲 30 nm 的方式進行蒸鍍而形成電洞傳輸層。繼而，對放入有 CBP 的蒸鍍用舟與放入有 $\text{Ir}(\text{PPy})_3$ 的蒸鍍用舟同時進行加熱，以膜厚成爲 30 nm 的方式進行蒸鍍形成發光層。以 CBP 與 $\text{Ir}(\text{PPy})_3$ 的重量比大致成爲 95 比 5 的方式來調節蒸鍍速度。繼而，對放入有 TPBi 的蒸鍍用舟進行加熱，以膜厚成爲 50 nm 的方式進行蒸鍍而形成電子傳輸層。各層的蒸鍍速度爲 $0.01 \text{ nm/s} \sim 1 \text{ nm/s}$ 。

【0579】 其後，對放入有 LiF 的蒸鍍用舟進行加熱，以膜厚成爲 1 nm 的方式以 $0.01 \text{ nm/s} \sim 0.1 \text{ nm/s}$ 的蒸鍍速度進行蒸鍍。繼而，對放入有鋁的蒸鍍用舟進行加熱，以膜厚成爲 100 nm 的方式以 $0.01 \text{ nm/s} \sim 2 \text{ nm/s}$ 的蒸鍍速度來蒸鍍鋁，藉此形成陰極，獲得有機 EL 元件。

【0580】 若以 ITO 電極爲陽極、以 LiF/鋁電極爲陰極來施加直流電壓，則可獲得波長爲約 515 nm 的綠色發光。另外，用以獲得初始亮度 1000 cd/m^2 的驅動電壓爲 6.8 V，此時的電流效率爲 27.2 cd/A 。

【0581】 <實施例 28>

<將化合物(366)用於電子傳輸層的元件>

使用以下基板作爲透明支撐基板：將藉由濺鍍以 180 nm 的厚度成膜的 ITO 研磨至 150 nm 為止的 $26 \text{ mm} \times 28 \text{ mm} \times 0.7 \text{ mm}$ 的玻璃基板（光電科技（Optoscience）（股）製造）。將該透明支撐基

板固定於市售的蒸鍍裝置（昭和真空（股）製造）的基板固持器上，安裝放入有 HAT-CN 的鋁製蒸鍍用舟、放入有 TBB 的鋁製蒸鍍用舟、放入有 CBP 的鋁製蒸鍍用舟、放入有 Ir(PPy)₃ 的鋁製蒸鍍用舟、放入有本發明的化合物（366）的鋁製蒸鍍用舟、放入有 LiF 的鋁製蒸鍍用舟及放入有鋁的鎢製蒸鍍用舟。

【0582】 於透明支撐基板的 ITO 膜上依序形成下述各層。將真空槽減壓至 5×10^{-4} Pa 為止，首先對放入有 HAT-CN 的蒸鍍用舟進行加熱，以膜厚成爲 10 nm 的方式進行蒸鍍而形成電洞注入層，繼而對放入有 TBB 的蒸鍍用舟進行加熱，以膜厚成爲 30 nm 的方式進行蒸鍍而形成電洞傳輸層。繼而，對放入有 CBP 的蒸鍍用舟與放入有 Ir(PPy)₃ 的蒸鍍用舟同時進行加熱，以膜厚成爲 30 nm 的方式進行蒸鍍而形成發光層。以 CBP 與 Ir(PPy)₃ 的重量比大致成爲 95 比 5 的方式來調節蒸鍍速度。繼而，對放入有化合物（366）的蒸鍍用舟進行加熱，以膜厚成爲 50 nm 的方式進行蒸鍍而形成電子傳輸層。各層的蒸鍍速度爲 0.01 nm/s ~ 1 nm/s。

【0583】 其後，對放入有 LiF 的蒸鍍用舟進行加熱，以膜厚成爲 1 nm 的方式以 0.01 nm/s ~ 0.1 nm/s 的蒸鍍速度進行蒸鍍。繼而，對放入有鋁的蒸鍍用舟進行加熱，以膜厚成爲 100 nm 的方式以 0.01 nm/s ~ 2 nm/s 的蒸鍍速度來蒸鍍鋁，藉此形成陰極，獲得有機 EL 元件。

【0584】 若以 ITO 電極爲陽極、以 LiF/鋁電極爲陰極來施加直流電壓，則可獲得波長爲約 515 nm 的綠色發光。另外，用以獲得初



始亮度 1000 cd/m^2 的驅動電壓為 6.6 V ，此時的電流效率為 26.1 cd/A 。

【0585】 <實施例 29>

<將化合物（424）用於電子傳輸層的元件>

除了將作為電子傳輸材料的化合物（366）換成化合物（424）以外，利用依據實施例 28 的方法來獲得有機 EL 元件。若對兩電極施加直流電壓，則可獲得波長為約 515 nm 的綠色發光。另外，用以獲得初始亮度 1000 cd/m^2 的驅動電壓為 6.4 V ，此時的電流效率為 27.5 cd/A 。

【0586】 <比較例 5>

除了將作為電子傳輸材料的化合物（366）換成 TPBi 以外，利用依據實施例 28 的方法來獲得有機 EL 元件。若對兩電極施加直流電壓，則可獲得波長為約 515 nm 的綠色發光。另外，用以獲得初始亮度 1000 cd/m^2 的驅動電壓為 5.5 V ，此時的電流效率為 27.1 cd/A 。

【0587】 將以上結果匯總於表 9 中。

[表 9]

	電洞傳輸層的材料	發光層的主體材料	電子傳輸層的材料	驅動電壓(V)	電流效率(cd/A)
實施例 15	TBB	化合物(1)	TPBi	5.2	28.9
實施例 16	TBB	化合物(66)	TPBi	4.8	37.0
實施例 17	TBB	化合物(84)	TPBi	5.6	35.9
實施例 18	TBB	化合物(86)	TPBi	5.0	29.0
實施例 19	TBB	化合物(197)	TPBi	4.9	32.4
實施例 20	TBB	化合物(51)	TPBi	5.1	39.2
實施例 21	TBB	化合物(214)	TPBi	4.2	35.2
實施例 22	TBB	化合物(26)	TPBi	4.7	42.2
實施例 23	TBB	化合物(210)	TPBi	5.1	32.7
實施例 24	TBB	化合物(212)	TPBi	5.3	27.0
實施例 25	TBB	化合物(215)	TPBi	5.5	27.7
實施例 26	TBB	化合物(48)	TPBi	5.5	29.2
實施例 27	化合物(209)	CBP	TPBi	6.8	27.2
實施例 28	TBB	CBP	化合物(366)	6.6	26.1
實施例 29	TBB	CBP	化合物(424)	6.4	27.5
比較例 5	TBB	CBP	TPBi	5.5	27.1

【0588】<載子遷移率的測定>

<式(1)所表示的化合物的載子遷移率測定>

將 26 mm×28 mm×0.5 mm 的玻璃基板（日本板硝子（股）製造）作為透明支撐基板。將該透明支撐基板與用以獲得 2 mm 寬的下部鋁電極的金屬遮罩同時安裝於市售的蒸鍍裝置的基板固持器上。繼而，將載置有鋁的鎢製蒸鍍舟設置於蒸鍍裝置中。將真空槽減壓至 5×10^{-3} Pa 以下為止，對蒸鍍用舟進行加熱，以膜厚成為 10 nm 的方式形成半透明的下部鋁電極。蒸鍍速度為 0.05 nm/s ~ 1 nm/s。

【0589】 繼而，將用以形成以覆蓋下部鋁電極的方式設計的有機層的金屬遮罩安裝於基板固持器上，與放入有式（1）所表示的化合物的鉑製蒸鍍用舟一併設置於蒸鍍裝置中。將真空槽減壓至 5×10^{-3} Pa 以下為止，對蒸鍍用舟進行加熱而蒸鍍式（1）所表示的化合物。膜厚為 6 μm，蒸鍍速度為 0.1 nm/s~10 nm/s。

【0590】 繼而，於基板固持器上安裝用以形成上部鋁電極的金屬遮罩，與載置有鋁的鎢製蒸鍍舟一併設置於蒸鍍裝置中。該金屬遮罩是以上部鋁電極及下部鋁電極的夾持有機層的重疊面積成為 4 mm² 的方式設計。將真空槽減壓至 5×10^{-3} Pa 以下為止，對蒸鍍用舟進行加熱，以膜厚成為 50 nm 的方式形成上部鋁電極。蒸鍍速度為 0.05 nm/s~1 nm/s。

【0591】 遷移率的測定是使用飛行時間（Time Of Flight）法來實施。測定是使用市售的測定裝置 TOF-401（住友重機械先進機器（Sumitomo Heavy Industries-Advanced Machinery）（股）製造）來實施。激發光源是使用氮氣雷射。於在上部鋁電極與下部鋁電極之間施加有適當的電壓的狀態下，自半透明的下部鋁電極側照射光，觀測瞬態光電流（transient photocurrent）而求出遷移率。關於根據瞬態光電流波形的分析來導出遷移率的方法，於文獻「有機 EL 材料與顯示器」（出版：CMC 股份有限公司）的 P69-P70 中有記載。

【0592】 關於測定的結果，於 0.5 MV/cm 的電場強度下，式（1）所表示的化合物的電子遷移率獲得了 2×10^{-3} (cm²/Vs) 的結果，電

洞遷移率獲得了 4×10^{-4} (cm^2/Vs) 的結果。

【0593】 <式(4)所表示的化合物的遷移率測定>

將式(1)所表示的化合物變更為式(4)所表示的化合物進行蒸鍍，所得的有機層的膜厚成為 $8.2 \mu\text{m}$ ，除此以外，利用相同的方法來製作樣品，並利用相同的方法來進行遷移率的觀測。

【0594】 關於測定的結果，於 0.5 MV/cm 的電場強度下，式(4)所表示的化合物的電洞遷移率獲得了 4.6×10^{-4} (cm^2/Vs) 的結果。

[產業上之可利用性]

【0595】 根據本發明的較佳態樣，可提供一種提高了驅動電壓及電流效率的有機電場發光元件、具備其的顯示裝置及具備其的照明裝置等。

【符號說明】

【0596】

100：有機電場發光元件

101：基板

102：陽極

103：電洞注入層

104：電洞傳輸層

105：發光層

106：電子傳輸層

107：電子注入層

108：陰極



圖式

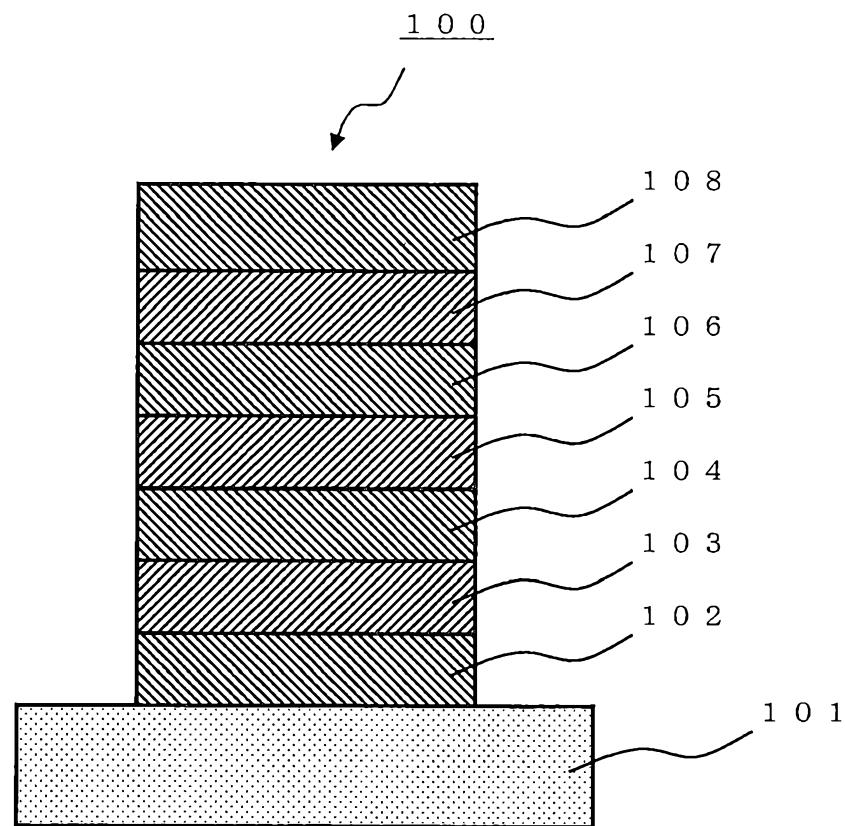


圖1

106.10.6

106-10-6

發明專利說明書

(本說明書格式、順序，請勿任意更動)

【發明名稱】

有機電場發光元件、顯示裝置以及照明裝置

ORGANIC ELECTROLUMINESCENT ELEMENT, DISPLAY
DEVICE AND LIGHTING DEVICE

【技術領域】

【0001】 本發明是有關於一種使用多環芳香族化合物的有機電場發光元件、顯示裝置及照明裝置。

【先前技術】

【0002】 先前，使用進行電場發光的發光元件的顯示裝置由於可實現小電力化或薄型化，故正在進行各種研究，進而，包含有機材料的有機電場發光元件由於容易實現輕量化或大型化，故正在進行活躍的研究。尤其關於具有以作為光的三原色之一的藍色為代表的發光特性的有機材料的開發及具備電洞、電子等的電荷傳輸能力（有可能成為半導體或超電導體）的有機材料的開發，無論高分子化合物、低分子化合物，迄今為止均正在進行活躍的研究。

【0003】 有機電場發光元件具有包含以下構件的結構：包含陽極及陰極的一對電極；以及配置於該一對電極間且含有有機化合物的一層或多層。含有有機化合物的層中，有發光層或者傳輸或注入電洞、電子等電荷的電荷傳輸/注入層等，正在開發適於該些層

正稿
106年10月6日

的各種有機材料。

【0004】 作為發光層用材料，例如正在開發苯并茀（benzofluorene）系化合物或巰（chrysene）系化合物等（國際公開第 2004/061047 號或國際公開第 2008/147721 號）。另外，作為電洞傳輸材料，例如正在開發三苯基胺系化合物或咔唑系化合物等（日本專利特開 2001-172232 號公報、日本專利特開 2006-199679 號公報、日本專利特開 2005-268199 號公報、日本專利特開 2007-088433 號公報、國際公開第 2003/078541、國際公開第 2003/080760）。另外，作為電子傳輸材料，例如正在開發蔥系化合物或將中心骨架設定為聯蔥、聯萘或萘與蔥的結合物的化合物等（日本專利特開 2005-170911 號公報、日本專利特開 2003-146951 號公報、日本專利特開平 08-12600 號公報、日本專利特開 2003-123983 號公報、日本專利特開平 11-297473 號公報）。

【0005】 另外，近年來作為有機電子（organic electronics）、色素、感測器、液晶顯示器中使用的材料，多環芳香族烴（PAHs）受到關注，亦報告了具有 B-N 鍵結部位的二苯并巰系化合物的合成例（美國化學會期刊（J. Am. Chem. Soc.），2011, 133, 18614-18617）。

[先前技術文獻]

[專利文獻]

【0006】 [專利文獻 1] 國際公開第 2004/061047 號

I612054

專利案號: 102132851



公 告 本

106年10月6日

修 正 本

106年10月06日 修正替換頁

申請日:

106-10-6

IPC分類:

C07F 5/02, 7/10,

C07F P/6584

C07D 4/88/00

H01L 51/50 (2006.01)

發明摘要

※ 申請案號: 102132851

※ 申請日: 102.9.11

※ IPC 分類:

【發明名稱】

有機電場發光元件、顯示裝置以及照明裝置

ORGANIC ELECTROLUMINESCENT ELEMENT, DISPLAY

DEVICE AND LIGHTING DEVICE

【中文】

本發明提供一種提高了驅動電壓及電流效率的有機電場發光元件。本發明提供一種有機電場發光元件，其使用其中氮原子與其他雜原子或金屬原子(X)於非芳香環內鄰接的多環芳香族化合物作為有機電場發光元件用材料，藉此提高了上述特性。

【英文】

An organic electroluminescent element having improved driving voltage and current efficiency is provided. The organic electroluminescent element use a polycyclic aromatic compound as a material for the organic electroluminescent element to improve the above-mentioned properties. In the polycyclic aromatic compound, a nitrogen atom and another hetero atom or a metal atom (X) are adjacent in a non-aromatic ring.

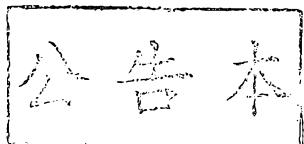
【代表圖】

【本案指定代表圖】: 圖 1。

【本代表圖之符號簡單說明】:

106年10月6日
審查員

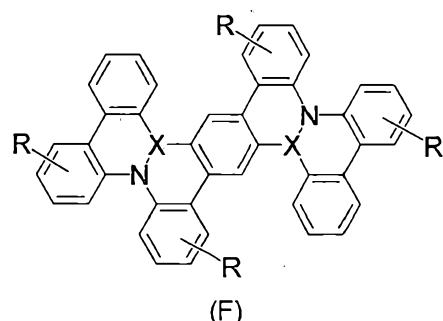
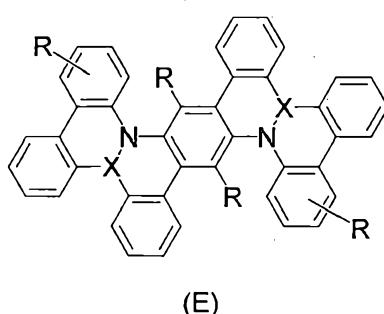
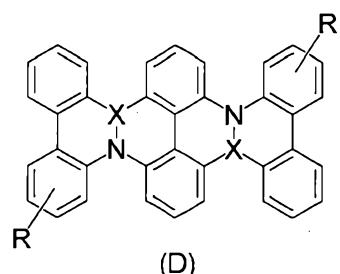
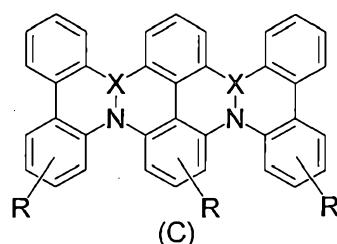
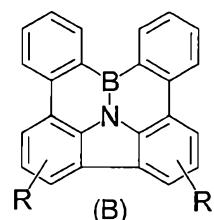
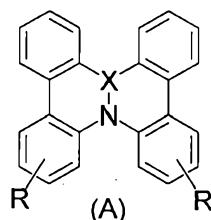
106年10月6日 修正替換頁



申請專利範圍

106-10-6

1. 一種有機電場發光元件，包括：
包含陽極及陰極的一對電極；以及
有機層，配置於上述一對電極間且含有下述式 (A) ~式 (F)
的任一者所表示的多環芳香族化合物：



上述式 (A) ~式 (F) 中，

X 為 B 或 P=O，

R 分別獨立地為下述 (a) ~ (e) 的任一者，一個式中的全部

R 不會同時成為下述 (a)，

106-10-6

- (a) 氢或苯基，
- (b) 二芳基氨基，
- (c) 可經芳基取代的咔唑基，
- (d) 經二芳基氨基取代的苯基，以及
- (e) 經可經芳基取代的咔唑基取代的苯基，

上述式(A)~式(F)所表示的化合物中的至少一個氫可經氘取代。

2. 如申請專利範圍第1項所述的有機電場發光元件，其中

上述式(A)~式(F)中，

X為B或P=O，

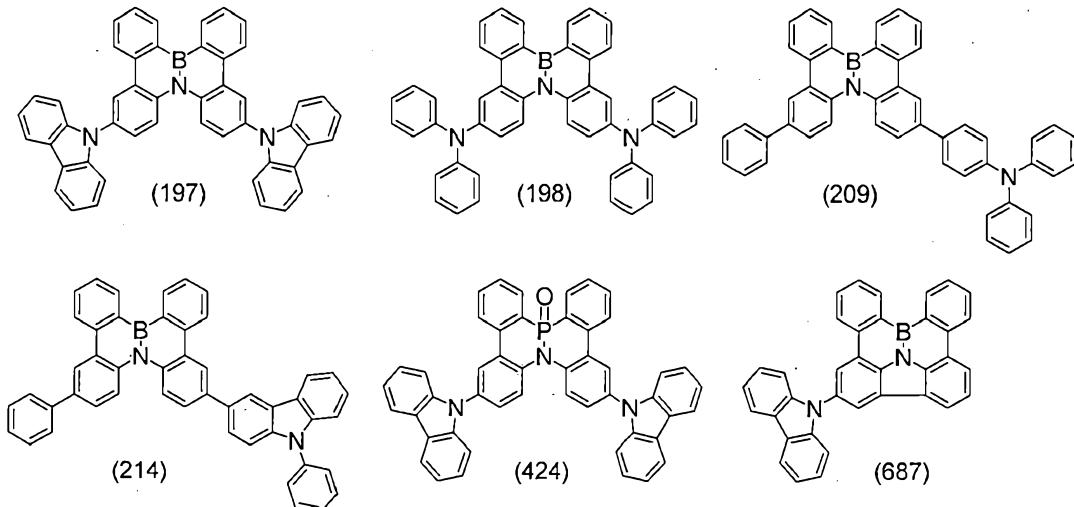
R分別獨立地為下述(a)~(e)的任一者，一個式中的全部R不會同時成為下述(a)，

- (a) 氢，
- (b) 二苯基氨基，
- (c) 經苯基取代的咔唑基，
- (d) 經二苯基氨基取代的苯基，以及
- (e) 經咔唑基取代的苯基，上述咔唑基經苯基取代。

3. 如申請專利範圍第1項所述的有機電場發光元件，其中

上述多環芳香族化合物為下述任一式所表示的多環芳香族化合物，

106-10-6



4. 如申請專利範圍第1項至第3項中任一項所述的有機電場發光元件，其中上述有機層為發光層。
5. 如申請專利範圍第1項至第3項中任一項所述的有機電場發光元件，其中上述有機層為電洞傳輸層及/或電洞注入層。
6. 如申請專利範圍第1項至第3項中任一項所述的有機電場發光元件，其中上述有機層為電洞阻擋層、電子傳輸層及/或電子注入層。
7. 如申請專利範圍第6項所述的有機電場發光元件，其中上述有機電場發光元件所具有的上述電洞阻擋層、上述電子傳輸層及/或上述電子注入層含有選自由羥喹啉系金屬錯合物、吡啶衍生物、啡啉衍生物、硼烷衍生物及苯并咪唑衍生物所組成的組群中的至少一種。
8. 如申請專利範圍第6項所述的有機電場發光元件，其中上述電洞阻擋層、上述電子傳輸層及/或上述電子注入層含有選自由鹼金屬、鹼土金屬、稀土金屬、鹼金屬的氧化物、鹼金屬的鹵化物及/或上述電子注入層含有選自由羥喹啉系金屬錯合物、吡啶衍生物、啡啉衍生物、硼烷衍生物及苯并咪唑衍生物所組成的組群中的至少一種。

106-10-6

物、鹼土金屬的氧化物、鹼土金屬的鹵化物、稀土金屬的氧化物、稀土金屬的鹵化物、鹼金屬的有機錯合物、鹼土金屬的有機錯合物及稀土金屬的有機錯合物所組成的組群中的至少一種。

9. 一種顯示裝置，包括如申請專利範圍第 1 項至第 8 項中任一項所述的有機電場發光元件。

10. 一種照明裝置，包括如申請專利範圍第 1 項至第 8 項中任一項所述的有機電場發光元件。

I612054

專利案號: 102132851



公 告 本

106年10月6日

修 正 本

106年10月06日 修正替換頁

申請日:

106-10-6

IPC分類:

C07F 5/02, 7/10,

C07F P/6584

C07D 4/88/00

H01L 51/50 (2006.01)

發明摘要

※ 申請案號: 102132851

※ 申請日: 102.9.11

※ IPC 分類:

【發明名稱】

有機電場發光元件、顯示裝置以及照明裝置

ORGANIC ELECTROLUMINESCENT ELEMENT, DISPLAY

DEVICE AND LIGHTING DEVICE

【中文】

本發明提供一種提高了驅動電壓及電流效率的有機電場發光元件。本發明提供一種有機電場發光元件，其使用其中氮原子與其他雜原子或金屬原子(X)於非芳香環內鄰接的多環芳香族化合物作為有機電場發光元件用材料，藉此提高了上述特性。

【英文】

An organic electroluminescent element having improved driving voltage and current efficiency is provided. The organic electroluminescent element use a polycyclic aromatic compound as a material for the organic electroluminescent element to improve the above-mentioned properties. In the polycyclic aromatic compound, a nitrogen atom and another hetero atom or a metal atom (X) are adjacent in a non-aromatic ring.

【代表圖】

【本案指定代表圖】: 圖 1。

【本代表圖之符號簡單說明】:

106-10-6

100：有機電場發光元件

101：基板

102：陽極

103：電洞注入層

104：電洞傳輸層

105：發光層

106：電子傳輸層

107：電子注入層

108：陰極

【本案若有化學式時，請揭示最能顯示發明特徵的化學式】：

無