



(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 I864012 B

(45)公告日：中華民國 113 (2024) 年 12 月 01 日

(21)申請案號：109118757

(22)申請日：中華民國 109 (2020) 年 06 月 04 日

(51)Int. Cl. : C07D249/20 (2006.01)

H10K85/00 (2023.01)

H10K50/80 (2023.01)

(30)優先權：2019/06/06 日本

2019-106028

(71)申請人：日商保土谷化學工業股份有限公司 (日本) HODOGAYA CHEMICAL CO., LTD.

(JP)

日本

(72)發明人：加瀬幸喜 KASE, KOUKI (JP) ; 林栽建 LIM, JAE-GEON (KR) ; 金志泳 KIM, JI-

YUNG (KR) ; 平山雄太 HIRAYAMA, YUTA (JP) ; 駿河和行 SURUGA,

KAZUYUKI (JP)

(74)代理人：賴經臣；宿希成

(56)參考文獻：

TW 201321360A

GB 1403564A

審查人員：杜玟玟

申請專利範圍項數：14 項 圖式數：14 共 65 頁

(54)名稱

具有苯并三唑環構造之化合物及有機電致發光元件

(57)摘要

本發明之目的在於提供一種有機化合物作為高效率、高耐久性之有機 EL 元件用材料，該有機化合物具有以下優異特性，即，電子注入-傳輸性能優異，具有電洞阻擋能力，且薄膜狀態下之穩定性較高；進而提供一種使用該化合物之高效率、高耐久性之有機 EL 元件。

本發明著眼於電子親和性之苯并三唑環構造所具有之氮原子配位於金屬之能力及耐熱性優異，設計具有苯并三唑環構造之化合物，進行化學合成，使用該等化合物進行有機 EL 元件之特性評價，結果發現，藉由使用具有苯并三唑環構造之特定構造之化合物，可獲得優異特性之有機 EL。



I864012

【發明摘要】

【中文發明名稱】 具有苯并三唑環構造之化合物及有機電致發光元件

【中文】

本發明之目的在於提供一種有機化合物作為高效率、高耐久性之有機 EL 元件用材料，該有機化合物具有以下優異特性，即，電子注入-傳輸性能優異，具有電洞阻擋能力，且薄膜狀態下之穩定性較高；進而提供一種使用該化合物之高效率、高耐久性之有機 EL 元件。

本發明著眼於電子親和性之苯并三唑環構造所具有之氮原子配位於金屬之能力及耐熱性優異，設計具有苯并三唑環構造之化合物，進行化學合成，使用該等化合物進行有機EL元件之特性評價，結果發現，藉由使用具有苯并三唑環構造之特定構造之化合物，可獲得優異特性之有機EL。

【指定代表圖】 無

【發明說明書】

【中文發明名稱】 具有苯并三唑環構造之化合物及有機電致發光元件

【技術領域】

【0001】 本發明係關於一種適於適宜各種顯示裝置之自發光元件即有機電致發光元件(以下，簡稱為有機 EL 元件)之化合物及元件，詳細而言，係關於一種具有苯并三唑環構造之化合物、及使用該化合物之有機 EL 元件。

【先前技術】

【0002】 由於有機 EL 元件為自發光性元件，故而與液晶元件相比亮度高，視認性優異，可進行清晰之顯示，因此進行有活躍之研究。

【0003】 1987 年，伊士曼柯達(Eastman Kodak)公司之 C.W.Tang 等人藉由開發出將各種作用分擔至各材料之積層構元件，而將使用有機材料之有機 EL 元件實用化。他們將可傳輸電子之螢光體、及可傳輸電洞之有機物積層，將兩者之電荷注入至螢光體之層中使之發光，藉此於 10 V 以下之電壓下獲得 1000 cd/m² 以上之高亮度(例如，參照專利文獻 1 及專利文獻 2)。

【0004】 至今，為了使有機 EL 元件實用化而進行多次改良，將積層構造中之各種作用進一步細分化，製成基板上依序設置陽極、電洞注入層、電洞傳輸層、發光層、電子傳輸層、電子注入層、陰極而成之電場發光元件，藉此達成高效率及耐久性(例如，參照非專利文獻 1)。

【0005】 又，為了進一步提高發光效率，嘗試利用三重態激子，並研究利用磷光發光性化合物(例如，參照非專利文獻 2)。

並且，亦開發出利用熱活化延遲螢光(TADF)之發光之元件，2011

第1頁，共 46 頁(發明說明書)

年，九州大學之安達等人藉由使用熱活化延遲螢光材料而實現 5.3% 之外部量子效率(例如，參照非專利文獻 3)。

【0006】 發光層亦可於通常被稱作主體材料之電荷傳輸性化合物中摻雜螢光性化合物或磷光發光性化合物或放射延遲螢光之材料而製作。如上述非專利文獻所記載，有機 EL 元件中之有機材料之選擇會對該元件之效率或耐久性等诸多特性帶來較大影響(例如，參照非專利文獻 2)。

【0007】 於有機 EL 元件中，自兩電極注入之電荷於發光層發生再結合而獲得發光，但重要的是如何將電洞、電子之兩種電荷高效率地傳送至發光層。為此，需要藉由提高電子注入性，使其移動度變大而提高電洞與電子於發光層內發生再結合之概率，進而，需要藉由將自陽極側傳輸之電洞封入至發光層，防止電子傳輸層之劣化，以及封入發光層內生成之激子，而構建進一步再結合之環境。藉由構建此種環境，可獲得高效率發光。因此，電子傳輸材料所發揮之作用較為重要，尋求一種電子注入性較高，電子移動度較大，電洞阻擋性較高，進而對於電洞之耐久性較高之電子傳輸材料。

【0008】 又，就元件之壽命而言，材料之耐熱性或非晶性亦較為重要。若為耐熱性較低之材料，則因元件驅動時所產生之熱，即便於較低之溫度，亦會發生熱分解，使材料劣化。若為非晶性較低之材料，則即便於較短時間，亦會發生薄膜之結晶化，造成元件劣化。因此，對所使用之材料要求耐熱性較高、非晶性良好之性質。

【0009】 作為代表性發光材料之叁(8-羥基喹啉)鋁(以下，簡稱為 Alq3)通常亦用作電子傳輸材料，但由於電子移動較慢，且工作函數為 5.6 eV，故而難謂電洞阻擋性能充分。

第2頁，共 46 頁(發明說明書)

【0010】 作為電子注入性或移動度等特性經改良之化合物，提出具有苯并三唑構造之化合物(例如，專利文獻 3)，於將該等化合物用於電子傳輸層所得之元件中，雖發光效率等被加以改良，但尚不能說充分，要求進一步低驅動電壓化、或進一步高發光效率化。

【0011】 又，作為電洞阻擋性優異之電子傳輸材料，提出 3-(4-聯苯基)-4-苯基-5-(4-第三丁基苯基)-1,2,4-三唑(以下，簡稱為 TAZ)(例如，參照專利文獻 4)。

【0012】 由於 TAZ 之工作函數高達 6.6 eV，電洞阻擋能力較高，故而用作藉由真空蒸鍍或塗佈等所製作之螢光發光層或磷光發光層的積層於陰極側之電子傳輸性之電洞阻擋層，有助於實現有機 EL 元件之高效率化(例如，參照非專利文獻 4)。

【0013】 然而，電子傳輸性較低成為 TAZ 之較大課題，需要與電子傳輸性更高之電子傳輸材料組合來製作有機 EL 元件(例如，參照非專利文獻 5)。

【0014】 又，2,9-二甲基-4,7-聯苯-1,10-啡啉(bathocuproine，以下，簡稱為 BCP)雖然其工作函數高達 6.7 eV，電洞阻擋能力較高，但由於玻璃轉移點(T_g)低至 83℃，故而缺乏薄膜之穩定性，難謂充分發揮作為電洞阻擋層之功能。

【0015】 任何材料均膜穩定性不足，或阻擋電洞之功能不充分。為了改善有機 EL 元件之元件特性，要求電子之注入-傳輸性能及電洞阻擋能力優異且薄膜狀態下之穩定性較高之有機化合物。

[先前技術文獻]

[專利文獻]

【0016】

第3頁，共 46 頁(發明說明書)

專利文獻 1：US5792557

專利文獻 2：US5639914

專利文獻 3：US9123897

專利文獻 4：US5869199

專利文獻 5：US20080027226

專利文獻 6：EP2684932

專利文獻 7：US9199966

專利文獻 8：US6878469

[非專利文獻]

【0017】

非專利文獻 1：應用物理學會第 9 次講習會論文集 55～61 頁(2001)

非專利文獻 2：應用物理學會第 9 次講習會論文集 23～31 頁(2001)

非專利文獻 3：Appl. Phys. Lett., 98, 083302 (2011)

非專利文獻 4：第 50 次應用物理學關係聯合演講會 28p-A-6 演講
論文集 1413 頁(2003)

非專利文獻 5：應用物理學會有機分子-生物電子學分科委員會會刊
11 卷 1 號 13～19 頁(2000)

【發明內容】

【0018】 本發明之目的在於提供一種有機化合物作為高效率、高耐久性之有機 EL 元件用材料，該有機化合物具有如下優異特性，即，電子注入-傳輸性能優異，具有電洞阻擋能力，且薄膜狀態下之穩定性較高；進而提供一種使用該化合物之高效率、高耐久性之有機 EL 元件。

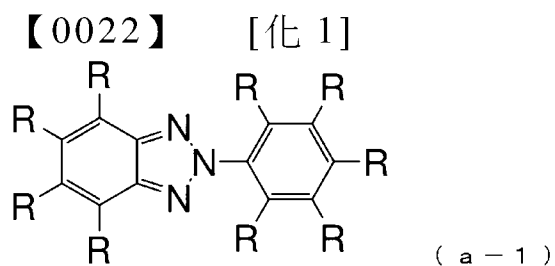
【0019】 作為本發明所欲提供之有機化合物應具備之物理特性，可列舉：(1)電子之注入特性良好；(2)電子之移動度較大；(3)電洞

第4頁，共 46 頁(發明說明書)

阻擋能力優異；(4)薄膜狀態較為穩定；(5)耐熱性優異。又，作為本發明所欲提供之有機 EL 元件應具備之物理特性，可列舉：(1)發光效率及功率效率較高；(2)發光起始電壓較低；(3)實用驅動電壓較低；(4)長壽命。

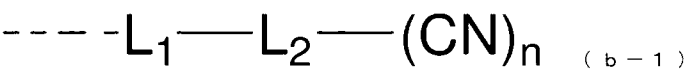
【0020】 因此，本發明者等人為了達成上述目的，著眼於電子親和性之苯并三唑環構造所具有之氮原子配位於金屬之能力、及耐熱性優異，設計具有苯并三唑環構造之化合物，進行化學合成，使用該化合物試製各種有機 EL 元件，銳意進行元件之特性評價，結果完成了本發明。

【0021】 1)即，本發明係一種具有苯并三唑環構造之化合物，其由下述通式(a-1)表示：



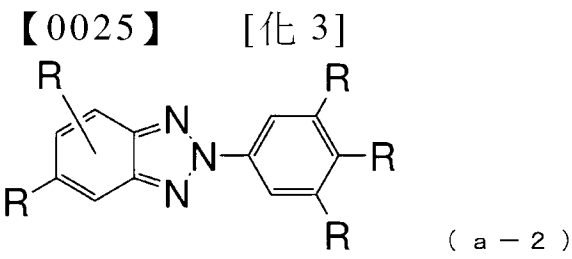
(式中，R 各自可相同亦可不同，表示下述構造式(b-1)所表示之基、氫原子、氖原子、氟原子、氯原子、氫基、硝基、三甲基矽烷基、三苯基矽烷基、二苯基氧磷基、二苯基氧化磷基、經取代或未經取代之芳香族烴基、經取代或未經取代之芳香族雜環基、經取代或未經取代之縮合多環芳香族基、可具有取代基之碳原子數 1~6 之直鏈狀或支鏈狀之烷基、可具有取代基之碳原子數 5~10 之環烷基、可具有取代基之碳原子數 2~6 之直鏈狀或支鏈狀之烯基、可具有取代基之碳原子數 1~6 之直鏈狀或支鏈狀之烷氧基、或者可具有取代基之碳原子數 5~10 之環烷氧基；其中，至少 1 個以上之 R 為下述構造式(b-1)所表示之基)；

【0023】 [化 2]



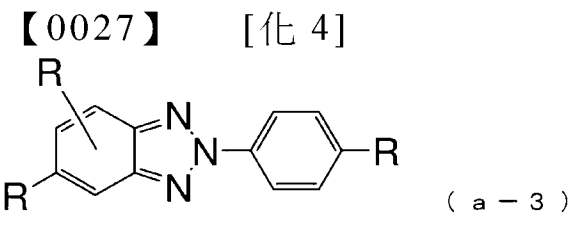
(式中，虛線部表示鍵結部位，L₁ 表示單鍵、經取代或未經取代之芳香族烴基、經取代或未經取代之芳香族雜環基、或者經取代或未經取代之縮合多環芳香族基，L₂ 表示經取代或未經取代之芳香族烴基、經取代或未經取代之芳香族雜環基、或者經取代或未經取代之縮合多環芳香族基；n 為整數 1 或 2；其中，當 n 為整數 2 時，L₂ 為三價基)。

【0024】 2)又，本發明係如上述 1)所記載之具有苯并三唑環構造之化合物，其係由下述通式(a-2)表示：



(式中，R 為與上述通式(a-1)相同之含義)。

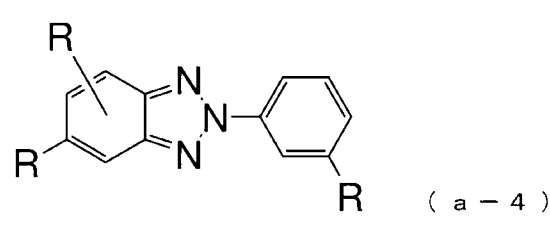
【0026】 3)又，本發明係如上述 2)所記載之具有苯并三唑環構造之化合物，其係由下述通式(a-3)表示：



(式中，R 為與上述通式(a-1)相同之含義)。

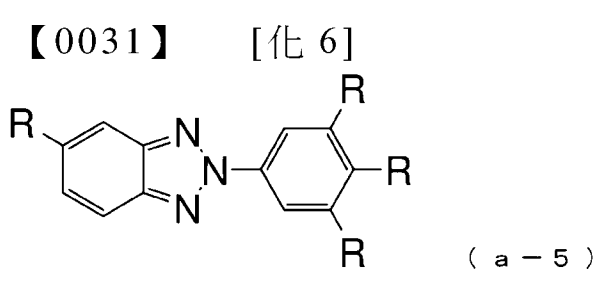
【0028】 4)又，本發明係如上述 2)所記載之具有苯并三唑環構造之化合物，其係由下述通式(a-4)表示：





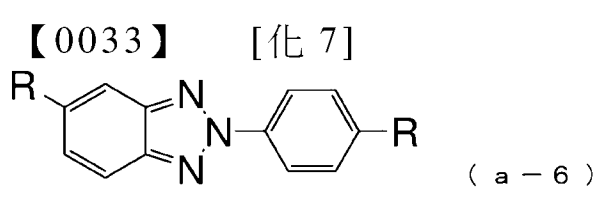
(式中，R 為與上述通式(a-1)相同之含義)。

【0030】 5)又，本發明係如上述 2)所記載之具有苯并三唑環構造之化合物，其係由下述通式(a-5)表示：



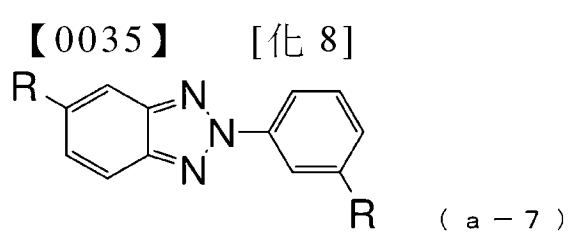
(式中，R 為與上述通式(a-1)相同之含義)。

【0032】 6)又，本發明係如上述 5)所記載之具有苯并三唑環構造之化合物，其係由下述通式(a-6)表示：



(式中，R 為與上述通式(a-1)相同之含義)。

【0034】 7)又，本發明係如上述 5)所記載之具有苯并三唑環構造之化合物，其係由下述通式(a-7)表示：



(式中，R 為與上述通式(a-1)相同之含義)。

【0036】 8)又，本發明係如上述 1)至 7)所記載之具有苯并三唑環構造之化合物，其中，上述構造式(b-1)中之 n 為整數 1。

【0037】 9)又，本發明係如上述 1)至 7)所記載之具有苯并三唑環構造之化合物，其中，上述構造式(b-1)中之 L_2 為經取代或未經取代之芳香族烴基。

【0038】 10)又，本發明係一種有機 EL 元件，其係具有一對電極、及夾於其等之間之至少一層有機層者，且至少一層有機層為包含上述 1)至 9)中任一項所記載之具有苯并三唑環構造之化合物之有機層。

【0039】 11)又，本發明係如上述 10)所記載之有機 EL 元件，其中，上述包含苯并三唑環構造之有機層為電子傳輸層。

【0040】 12)又，本發明係如上述 10)所記載之有機 EL 元件，其中，上述包含苯并三唑環構造之有機層為電洞阻擋層。

【0041】 13)又，本發明係如上述 10)所記載之有機 EL 元件，其中，上述包含苯并三唑環構造之有機層為發光層。

【0042】 14)又，本發明係如上述 10)所記載之有機 EL 元件，其中，上述包含苯并三唑環構造之有機層為電子注入層。

【0043】 作為通式(a-1)中之 R 所表示之「經取代或未經取代之芳香族烴基」、「經取代或未經取代之芳香族雜環基」或者「經取代或未經取代之縮合多環芳香族基」中之「芳香族烴基」、「芳香族雜環基」或「縮合多環芳香族基」，具體而言，可列舉：苯基、聯苯基、聯三苯基、萘基、蒽基、菲基、蒾基、螺二蒾基、茛基、芘基、芴基、丙二烯合蒾基、聯伸三苯基、吡啶基、嘧啶基、三吡基、呋喃基、吡咯基、噻吩基、喹啉基、異喹啉基、苯并呋喃基、苯并噻吩基、吡啶基、吡嗪基、苯并吡啶基、苯并噻吩基、氮雜蒾基、二氮雜蒾基、氮雜螺二蒾基、二氮雜螺二蒾基、喹啉基、苯并咪唑基、吡唑基、二苯并呋喃基、二苯并噻吩基、萘啶基、菲咯啉基、吡啶基、及吡啶基等，亦可自包含碳數

6~30 之芳基、或包含碳數 2~20 之雜芳基中選擇。

【0044】 作為通式(a-1)中之 R 所表示之「取代芳香族烴基」、「取代芳香族雜環基」、「取代縮合多環芳香族基」中之「取代基」，具體而言，可列舉：氖原子、氦基、硝基；氟原子、氯原子、溴原子、碘原子等鹵素原子；三甲基矽烷基、三苯基矽烷基等矽烷基；甲基、乙基、丙基等碳原子數 1 至 6 之直鏈狀或支鏈狀之烷基；甲氧基、乙氧基、丙氧基等碳原子數 1 至 6 之直鏈狀或支鏈狀之烷氧基；乙烯基、烯丙基等烯基；苯氧基、甲苯氧基等芳氧基；苄氧基、苯乙氧基等芳基烷氧基；環戊基、環己基、1-金剛烷基、2-金剛烷基等環烷基；苯基、聯苯基、聯三苯基、萘基、蒽基、菲基、萸基、螺二萸基、茛基、茈基、茈基、丙二烯合萸基、聯伸三苯基等芳香族烴基或縮合多環芳香族基；吡啶基、嘧啶基、三吡基、噻吩基、呋喃基、吡咯基、喹啉基、異喹啉基、苯并呋喃基、苯并噻吩基、吲哚基、呋唑基、苯并呋唑基、苯并噻唑基、喹啉基、苯并咪唑基、吡唑基、二苯并呋喃基、二苯并噻吩基、呋啉基等芳香族雜環基之類之基；該等取代基亦可進一步經上述例示之取代基取代。又，該等取代基與經取代之苯環，或者於同一苯環上取代之數個取代基彼此，亦可經由單鍵、經取代或未經取代之亞甲基、氧原子或硫原子相互鍵結而形成環。

【0045】 作為通式(a-1)中之 R 所表示之「可具有取代基之碳原子數 1~6 之直鏈狀或支鏈狀之烷基」、「可具有取代基之碳原子數 5~10 之環烷基」、或者「可具有取代基之碳原子數 2~6 之直鏈狀或支鏈狀之烯基」中之「碳原子數 1~6 之直鏈狀或支鏈狀之烷基」、「碳原子數 5~10 之環烷基」、或「碳原子數 2~6 之直鏈狀或支鏈狀之烯基」，具體而言，可列舉：甲基、乙基、正丙基、異丙基、正丁基、異丁基、

第9頁，共 46 頁(發明說明書)

第三丁基、正戊基、異戊基、新戊基、正己基、環戊基、環己基、1-金剛烷基、2-金剛烷基、乙烯基、烯丙基、異丙烯基、及 2-丁烯基等；該等取代基與經取代之苯環，或者於同一苯環上取代之數個取代基彼此，亦可經由單鍵、經取代或未經取代之亞甲基、經取代或未經取代之胺基、氧原子或硫原子相互鍵結而形成環。

【0046】 作為通式(a-1)中之 R 所表示之「可具有取代基之碳原子數 1~6 之直鏈狀或支鏈狀之烷基」、「可具有取代基之碳原子數 5~10 之環烷基」、或者「可具有取代基之碳原子數 2~6 之直鏈狀或支鏈狀之烯基」中之「取代基」，可列舉：與關於通式(a-1)中之 R 所表示之「取代芳香族烴基」、「取代芳香族雜環基」、「取代縮合多環芳香族基」中之「取代基」所例示者相同之基，可取之態樣亦可列舉相同者。

【0047】 作為通式(a-1)中之 R 所表示之「可具有取代基之碳原子數 1~6 之直鏈狀或支鏈狀之烷氧基」、或者「可具有取代基之碳原子數 5~10 之環烷氧基」中之「碳原子數 1~6 之直鏈狀或支鏈狀之烷氧基」、或「碳原子數 5~10 之環烷氧基」，具體而言，可列舉：甲氧基、乙氧基、正丙氧基、異丙氧基、正丁氧基、第三丁氧基、正戊氧基、正己氧基、環戊氧基、環己氧基、環庚氧基、環辛氧基、1-金剛烷氧基、2-金剛烷氧基等；該等取代基與經取代之苯環，或者於同一苯環上取代之數個取代基彼此，亦可經由單鍵、經取代或未經取代之亞甲基、經取代或未經取代之胺基、氧原子或硫原子相互鍵結而形成環。

【0048】 作為通式(a-1)中之 R 所表示之「可具有取代基之碳原子數 1~6 之直鏈狀或支鏈狀之烷氧基」、或者「可具有取代基之碳原子數 5~10 之環烷氧基」中之「取代基」，可列舉：與關於通式(a-1)中之 R 所表示之「取代芳香族烴基」、「取代芳香族雜環基」、「取代縮合

多環芳香族基」中之「取代基」所例示者相同之基，可取之態樣亦可列舉相同者。

【0049】 作為構造式(b-1)中之 L_1 及 L_2 所表示之「經取代或未經取代之芳香族烴基」、「經取代或未經取代之芳香族雜環基」或者「經取代或未經取代之縮合多環芳香族基」中之「芳香族烴基」、「芳香族雜環基」、或「縮合多環芳香族基」，可列舉：與關於通式(a-1)中之 R 所表示之「經取代或未經取代之芳香族烴基」、「經取代或未經取代之芳香族雜環基」或者「經取代或未經取代之縮合多環芳香族基」中之「芳香族烴基」、「芳香族雜環基」或「縮合多環芳香族基」所例示者相同之基，可取之態樣亦可列舉相同者。

【0050】 作為構造式(b-1)中之 L_1 及 L_2 所表示之「取代芳香族烴基」、「取代芳香族雜環基」、或「取代縮合多環芳香族基」中之「取代基」，可列舉：與關於通式(a-1)中之 R 所表示之「取代芳香族烴基」、「取代芳香族雜環基」、或「取代縮合多環芳香族基」中之「取代基」所例示者相同之基，可取之態樣亦可列舉相同者。

【0051】 適合用於本發明之有機 EL 元件的上述通式(a-1)所表示之具有苯并三唑環構造之化合物，可用作有機 EL 元件之電子注入層、電子傳輸層或電洞阻擋層之構成材料。上述通式(a-1)所表示之具有苯并三唑環構造之化合物的電子之移動度較高，其作為電子注入層或電子傳輸層之材料係較佳之化合物。

【0052】 藉由使用電子之注入-傳輸性能、薄膜之穩定性或耐久性優異之有機 EL 元件用材料，與習知之有機 EL 元件相比，可使自電子傳輸層向發光層之電子傳輸效率提高，使發光效率提高，且使驅動電壓降低，使耐久性提高，從而可實現高效率、低驅動電壓、長壽命之有

機 EL 元件。

【0053】 本發明之具有苯并三唑環構造之化合物具有以下特性：(1)電子之注入特性良好；(2)電子之移動度較快；(3)電洞阻擋能力優異；(4)薄膜狀態下穩定地存在；(5)耐熱性優異等；本發明之有機 EL 元件具有以下特性：(6)發光效率較高；(7)發光起始電壓較低；(8)實用驅動電壓較低；(9)長壽命等。

【0054】 本發明之具有苯并三唑環構造之化合物的電子之注入-移動度較快。因此，具有使用該化合物作為電子注入材料及/或電子傳輸材料所製作之電子注入層及/或電子傳輸層之有機 EL 元件，使向發光層之電子傳輸效率提高，使發光效率提高，且使驅動電壓降低，藉此使耐久性提高。

【0055】 本發明之具有苯并三唑環構造之化合物具有以下特徵，即，電洞阻擋能力及電子傳輸性優異，且即便於薄膜狀態下亦較為穩定，封入發光層內生成之激子。因此，具有使用該化合物作為電洞阻擋材料所製作之電洞阻擋層之有機 EL 元件，成為使電洞與電子再結合之概率提高而抑制熱失活，從而具有較高發光效率者，藉由使驅動電壓降低，改善電流耐性而提高最大發光亮度。

【0056】 本發明之具有苯并三唑環構造之化合物之電子傳輸性優異，且帶隙較寬，藉此具有使用該化合物作為主體材料所製作之發光層之有機 EL 元件，藉由擔載被稱為摻雜劑之螢光發光體或磷光發光體、延遲螢光發光體來形成發光層，而使驅動電壓降低，改善發光效率。

【0057】 因此，本發明之具有苯并三唑環構造之化合物，作為有機 EL 元件之電子注入層、電子傳輸層、電洞阻擋層或發光層之材料較為有用，可改良習知之有機 EL 元件之發光效率及驅動電壓，並且改

良耐久性。

【圖式簡單說明】

【0058】

圖 1 係表示化合物 1～18 之構造作為通式(a-1)～(a-7)所表示之具有苯并三唑環構造之化合物之具體例的圖。

圖 2 係表示化合物 19～33 之構造作為通式(a-1)～(a-7)所表示之具有苯并三唑環構造之化合物之具體例的圖。

圖 3 係表示化合物 34～54 之構造作為通式(a-1)～(a-7)所表示之具有苯并三唑環構造之化合物之具體例的圖。

圖 4 係表示化合物 55～68 之構造作為通式(a-1)～(a-7)所表示之具有苯并三唑環構造之化合物之具體例的圖。

圖 5 係表示化合物 69～82 之構造作為通式(a-1)～(a-7)所表示之具有苯并三唑環構造之化合物之具體例的圖。

圖 6 係表示化合物 83～97 之構造作為通式(a-1)～(a-7)所表示之具有苯并三唑環構造之化合物之具體例的圖。

圖 7 係表示化合物 98～114 之構造作為通式(a-1)～(a-7)所表示之具有苯并三唑環構造之化合物之具體例的圖。

圖 8 係表示化合物 115～130 之構造作為通式(a-1)～(a-7)所表示之具有苯并三唑環構造之化合物之具體例的圖。

圖 9 係表示化合物 131～146 之構造作為通式(a-1)～(a-7)所表示之具有苯并三唑環構造之化合物之具體例的圖。

圖 10 係表示化合物 147～162 之構造作為通式(a-1)～(a-7)所表示之具有苯并三唑環構造之化合物之具體例的圖。

圖 11 係表示化合物 163～179 之構造作為通式(a-1)～(a-7)所表示

之具有苯并三唑環構造之化合物之具體例的圖。

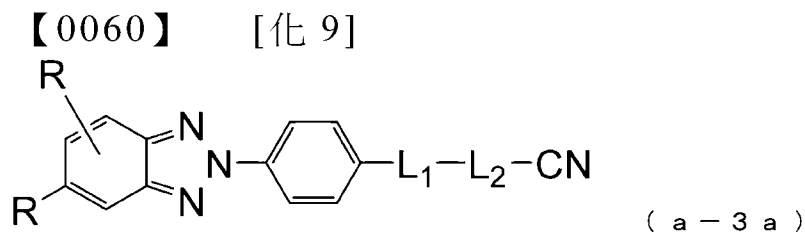
圖 12 係表示化合物 180～193 之構造作為通式(a-1)～(a-7)所表示之具有苯并三唑環構造之化合物之具體例的圖。

圖 13 係表示化合物 194～207 之構造作為通式(a-1)～(a-7)所表示之具有苯并三唑環構造之化合物之具體例的圖。

圖 14 係表示實施例 16～28、比較例 1、2 之有機 EL 元件構成之圖。

【實施方式】

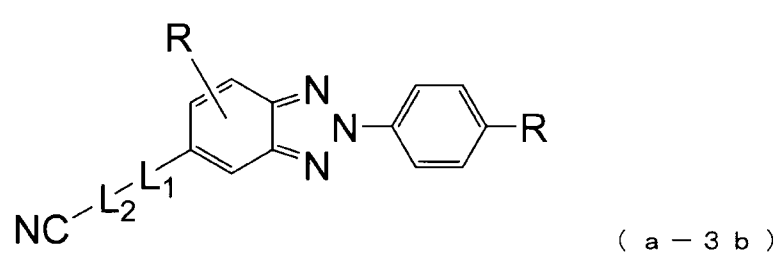
【0059】 本發明之具有苯并三唑環構造之化合物係上述通式(a-1)～(a-7)所表示之化合物，就電子之注入-傳輸性能之觀點而言，更佳為上述通式(a-3)所表示之化合物，特佳為下述通式(a-3a)或下述通式(a-3b)所表示之化合物。



(式中，R 各自可相同亦可不同，表示氫原子、經取代或未經取代之芳香族烴基、經取代或未經取代之芳香族雜環基、或者經取代或未經取代之縮合多環芳香族基，其中，2 個 R 不同時為氫原子；

L₁ 表示單鍵、經取代或未經取代之芳香族烴基、或者經取代或未經取代之縮合多環芳香族基，L₂ 表示經取代或未經取代之芳香族烴基、或者經取代或未經取代之縮合多環芳香族基。)

【0061】 [化 10]



(式中，R 各自可相同亦可不同，表示氫原子、經取代或未經取代之芳香族烴基、經取代或未經取代之芳香族雜環基、或者經取代或未經取代之縮合多環芳香族基，其中，2 個 R 不同時為氫原子；

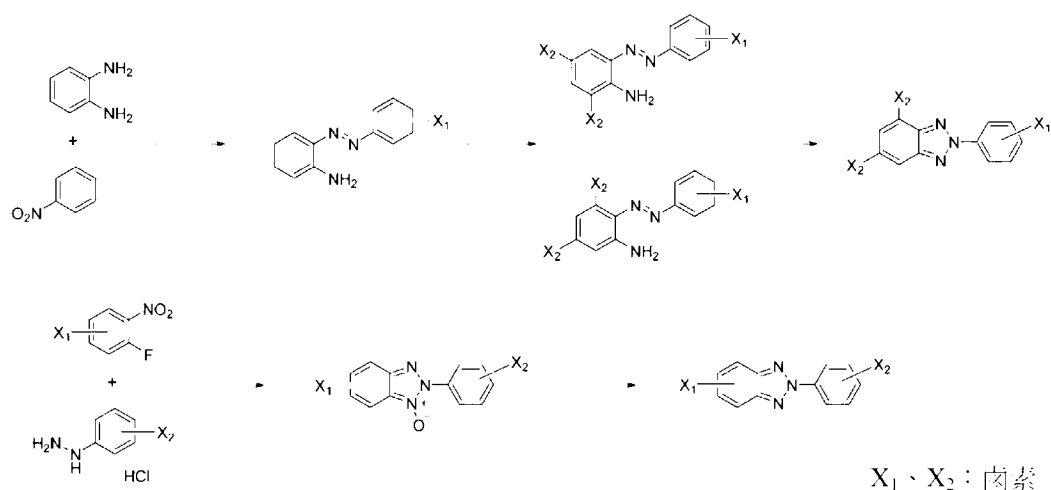
L₁ 表示單鍵、經取代或未經取代之芳香族烴基、或者經取代或未經取代之縮合多環芳香族基，L₂ 表示經取代或未經取代之芳香族烴基、或者經取代或未經取代之縮合多環芳香族基。)

【0062】 就電子之注入-傳輸性能之觀點而言，較佳為上述通式(a-3a)及(a-3b)中之 L₁ 為單鍵或 1,4-伸萘基，L₂ 為 1,4-伸苯基或 4,4'-伸聯苯基。

【0063】 於適合用於本發明之有機 EL 元件的上述通式(a-1)～(a-7)所表示之具有苯并三唑環構造之化合物中，將較佳之化合物之具體例示於圖 1～13，但並不限定於該等化合物。

【0064】 本發明之具有苯并三唑環構造之化合物為新穎之化合物。該等化合物係例如以下所示，可依據其等自身公知之方法而合成(例如，參照專利文獻 3 及專利文獻 5)。

【0065】 [化 11]



【0066】 通式(a-1)~(a-7)所表示之具有苯并三唑環構造之化合物之精製，可藉由利用管柱層析儀之精製；利用矽膠、活性碳、活性白土等之吸附精製；利用溶媒之再結晶或晶析法、昇華精製法等而進行。化合物之鑑定可藉由核磁共振(NMR, nuclear magnetic resonance)分析而進行。作為物性值，較佳為進行熔點、玻璃轉移點(T_g)及工作函數之測定。熔點成為蒸鍍性之指標，玻璃轉移點(T_g)成為薄膜狀態之穩定性之指標，工作函數成為電洞傳輸性或電洞阻擋性之指標。

【0067】 熔點及玻璃轉移點(T_g)係例如可使用粉體，藉由高感度示差掃描熱量計(Bruker AXS 公司製造、DSC3100SA)進行測定。

【0068】 工作函數係例如可於 ITO(Indium Tin Oxides, 氧化銦錫)基板上製作 100 nm 之薄膜，藉由離子化電位測定裝置(住友重機械工業股份有限公司製造、PYS-202)而求出。

【0069】 作為本發明之有機 EL 元件之構造，可列舉：基板上依序包含陽極、電洞注入層、電洞傳輸層、發光層、電子傳輸層、電子注入層及陰極者；又，於電洞傳輸層與發光層之間具有電子阻擋層者；及於發光層與電子傳輸層之間具有電洞阻擋層者。於該等多層構造中，可使 1 個有機層兼具任一層之作用，例如亦可設為 1 個有機層兼具電洞注

入層及電洞傳輸層之構成，及 1 個有機層兼具電子注入層及電子傳輸層之構成等。又，可設為將具有相同功能之有機層積層有 2 層以上之構成，亦可設為將電洞傳輸層積層有 2 層之構成、將發光層積層有 2 層之構成、將電子傳輸層積層有 2 層之構成等。

【0070】 作為本發明之有機 EL 元件之陽極，係使用 ITO 或金之類之工作函數較大之電極材料。作為本發明之有機 EL 元件之電洞注入層之材料，除使用酞菁銅所代表之卟啉化合物以外，還可使用：星爆型之三苯胺衍生物、分子中具有 2 個以上之三苯胺構造或卟啉基構造且具有分別經單鍵或不含雜原子之二價基連結而成之構造的芳基胺化合物、六氰基氮雜聯三仲苯之類之受體性雜環化合物、及塗佈型高分子材料等。該等材料除使用蒸鍍法以外，還可藉由旋轉塗佈法或噴墨法等公知之方法進行薄膜形成。

【0071】 作為本發明之有機 EL 元件之電洞傳輸層之材料，可使用：N,N'-二苯基-N,N'-二(間甲苯基)-聯苯胺(以下，簡稱為 TPD)或 N,N'-二苯基-N,N'-二(α -萘基)-聯苯胺(以下，簡稱為 NPD)、N,N,N',N'-四聯苯基聯苯胺等聯苯胺衍生物、1,1-雙[(二-4-甲苯基胺基)苯基]環己烷(以下，簡稱為 TAPC)、及分子中具有 2 個以上之三苯胺構造或卟啉基構造且具有分別經單鍵或不含雜原子之二價基連結而成之構造的芳基胺化合物等。

該等材料可單獨成膜，亦可與其他材料混合後成膜，皆可作為單層使用。又，亦可設為將該等材料單獨成膜而成之層彼此之積層構造、將數種材料混合後成膜而成之層彼此之積層構造、或將該等材料單獨成膜而成之層與將數種材料混合後成膜而成之層的積層構造。

又，作為電洞之注入-傳輸層，可使用聚(3,4-仲乙二氧基噻吩)(以

第17頁，共 46 頁(發明說明書)

下，簡稱為 PEDOT)/聚(苯乙烯磺酸酯)(以下，簡稱為 PSS)等塗佈型高分子材料。

該等材料除使用蒸鍍法以外，還可藉由旋轉塗佈法或噴墨法等公知之方法進行薄膜形成。

【0072】 又，於電洞注入層及電洞傳輸層中，可使用對於通常用於該等層之材料進行三溴苯胺六氯銻、軸烯衍生物(例如，參照專利文獻 6)之 P 摻雜所得者、或於其部分構造具有 TPD 等聯苯胺衍生物之構造之高分子化合物等。

【0073】 作為本發明之有機 EL 元件之電子阻擋層之材料，可使用 4,4',4''-三(N-咔唑基)三苯胺(以下，簡稱為 TCTA)、9,9-雙[4-(咔唑-9-基)苯基]萘、1,3-雙(咔唑-9-基)苯(以下，簡稱為 mCP)、2,2-雙(4-咔唑-9-基苯基)金剛烷(以下，簡稱為 Ad-Cz)等咔唑衍生物、9-[4-(咔唑-9-基)苯基]-9-[4-(三苯基矽烷基)苯基]-9H-萘所代表之具有三苯基矽烷基與三芳基胺構造之化合物等具有電子阻擋作用之化合物。

該等材料可單獨成膜，亦可與其他材料混合後成膜，皆可作為單層使用。又，亦可設為將該等材料單獨成膜而成之層彼此之積層構造、將數種材料混合後成膜而成之層彼此之積層構造、或將該等材料單獨成膜而成之層與將數種材料混合後成膜而成之層的積層構造。該等材料除使用蒸鍍法以外，還可藉由旋轉塗佈法或噴墨法等公知之方法進行薄膜形成。

【0074】 作為本發明之有機 EL 元件之發光層之材料，除使用本發明之具有苯并三唑環構造之化合物以外，還可使用以 Alq₃ 為代表之喹啉酚衍生物之金屬錯合物、以及各種金屬錯合物、蔥衍生物、雙苯乙烯基苯衍生物、芘衍生物、喹啉衍生物、聚對伸苯伸乙烯衍生物等。

又，亦可由主體材料與摻雜劑材料構成發光層，作為主體材料，可較佳地使用蔥衍生物，此外，可使用以本發明之具有苯并三唑環構造之化合物為代表之上述發光材料，還可使用：具有吡啶環作為縮合環之部分構造之雜環化合物、具有呋唑環作為縮合環之部分構造之雜環化合物、呋唑衍生物、噻唑衍生物、苯并咪唑衍生物、聚二烷基萸衍生物等。又，作為摻雜劑材料，可使用：喹吖酮、香豆素、紅螢烯、茈及其等之衍生物、苯并吡喃衍生物、羅丹明衍生物、胺基苯乙烯衍生物等。

該等材料可單獨成膜，亦可與其他材料混合後成膜，皆可作為單層使用。又，亦可設為將該等材料單獨成膜而成之層彼此之積層構造、將數種材料混合後成膜而成之層彼此之積層構造、或將該等材料單獨成膜而成之層與將數種材料混合後成膜而成之層的積層構造。

【0075】 又，亦可使用磷光發光體作為發光材料。作為磷光發光體，可使用銨或鉑等之金屬錯合物之磷光發光體。可列舉： Ir(ppy)_3 等綠色之磷光發光體、 FIrpic 、 FIr6 等藍色之磷光發光體、 $\text{Btp}_2\text{Ir(acac)}$ 等紅色之磷光發光體等。關於此時之主體材料，作為電洞注入-傳輸性之主體材料，除使用 4,4'-二(N-呋唑基)聯苯(以下，簡稱為 CBP)或 TCTA、mCP 等呋唑衍生物等以外，還可使用本發明之具有苯并三唑環構造之化合物，作為電子傳輸性之主體材料，可使用對-雙(三苯基矽烷基)苯(以下，簡稱為 UGH2)或 2,2',2''-(1,3,5-仲苯基)-叁(1-苯基-1H-苯并咪唑)(以下，簡稱為 TPBI)等。

【0076】 關於磷光性之發光材料對於主體材料之摻雜，為了避免濃度淬滅，較佳為於相對於發光層全體為 1~30 重量百分比之範圍，藉由共蒸鍍進行摻雜。

【0077】 又，作為發光材料，亦可使用 PIC-TRZ、CC2TA、PXZ-

第19頁，共 46 頁(發明說明書)

TRZ、及 4CzIPN 等 CDCB 衍生物等放射延遲螢光之材料(例如，參照非專利文獻 3)。該等材料除使用蒸鍍法以外，還可藉由旋轉塗佈法或噴墨法等公知之方法進行薄膜形成。

【0078】 作為本發明之有機 EL 元件之電洞阻擋層之材料，除使用本發明之具有苯并三唑環構造之化合物以外，還可使用 BCP 等啡啉衍生物、或 BAlq 等喹啉酚衍生物之金屬錯合物、各種稀土類錯合物、噁唑衍生物、三唑衍生物、三吡啉衍生物等具有電洞阻擋作用之化合物。該等材料亦可兼作電子傳輸層之材料。

該等材料可單獨成膜，亦可與其他材料混合後成膜，皆可作為單層使用。又，亦可設為將該等材料單獨成膜而成之層彼此之積層構造、將數種材料混合後成膜而成之層彼此之積層構造、或將該等材料單獨成膜而成之層與將數種材料混合後成膜而成之層的積層構造。該等材料除使用蒸鍍法以外，還可藉由旋轉塗佈法或噴墨法等公知之方法進行薄膜形成。

【0079】 作為本發明之有機 EL 元件之電子傳輸層之材料，除使用本發明之具有苯并三唑環構造之化合物以外，還可使用以 Alq₃、BAlq 為代表之喹啉酚衍生物之金屬錯合物、各種金屬錯合物、三唑衍生物、三吡啉衍生物、噁二唑衍生物、吡啶衍生物、苯并咪唑衍生物、噻二唑衍生物、噻吩衍生物、噻二噻亞胺衍生物、噻吩噻吩衍生物、吡啶并噻吩衍生物、啡啉衍生物、噻咯衍生物等。

該等材料可單獨成膜，亦可與其他材料混合後成膜，皆可作為單層使用。又，亦可設為將該等材料單獨成膜而成之層彼此之積層構造、將數種材料混合後成膜而成之層彼此之積層構造、或將該等材料單獨成膜而成之層與將數種材料混合後成膜而成之層的積層構造。該等材料除使

用蒸鍍法以外，還可藉由旋轉塗佈法或噴墨法等公知之方法進行薄膜形成。

【0080】 作為本發明之有機 EL 元件之電子注入層之材料，除使用本發明之具有苯并三唑環構造之化合物以外，還可使用氟化鋰、氟化銫等鹼金屬鹽；氟化鎂等鹼土類金屬鹽；喹啉酚鋰等喹啉酚衍生物之金屬錯合物；氧化鋁等金屬氧化物；或鐿(Yb)、釷(Sm)、鈣(Ca)、銦(Sr)、銫(Cs)等金屬等，但藉由電子傳輸層及陰極之較佳之選擇，可將其省略。

【0081】 進而，於電子注入層及電子傳輸層中，可使用對於通常用於該等層之材料進行銫等金屬之 N 摻雜所得者。

【0082】 作為本發明之有機 EL 元件之陰極，可使用鋁之類之工作函數較低之電極材料、或鎂銀合金、鎂銦合金、鋁鎂合金之類之工作函數更低之合金作為電極材料。

[實施例]

【0083】 以下，對於本發明之實施形態，藉由實施例具體地進行說明，但只要本發明不超過其要旨，則並不限定於以下之實施例。

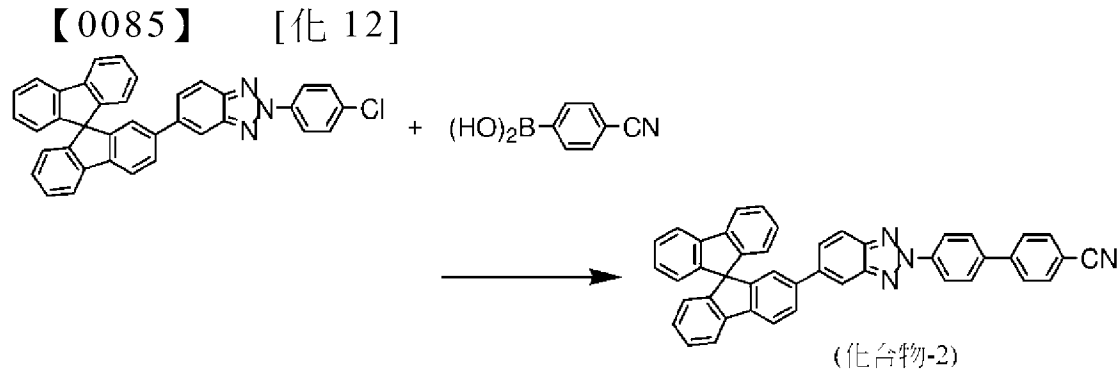
【0084】

[實施例 1]

<2-(4'-氰基-聯苯-4-基)-5-(9,9'-螺雙[9H]芴-2-基)-2H-苯并三唑(化合物-2)之合成>

於反應容器中加入 2-(4-氯-苯基)-5-(9,9'-螺雙[9H]芴-2-基)-2H-苯并三唑：9.0 g、4-氰基-苯基硼酸：2.9 g、叁(二亞苺基丙酮)二鈾(0)：0.5 g、三環己基膦：0.2 g、磷酸三鉀：10.5 g，於 1,4-二噁烷、H₂O 混合溶媒下進行整晚回流攪拌。放冷後，於系統內加入乙酸乙酯/H₂O，進行萃取及分液操作，對所提取之有機層進行濃縮。藉由管柱層析儀(載

體：矽膠、洗提液：二氯甲烷/正庚烷)對所獲得之濃縮物進行精製，藉此獲得 2-(4'-氰基-聯苯-4-基)-5-(9,9'-螺雙[9H]芴-2-基)-2H-苯并三唑(化合物-2)之黃色粉體 8.1 g(產率：80%)。



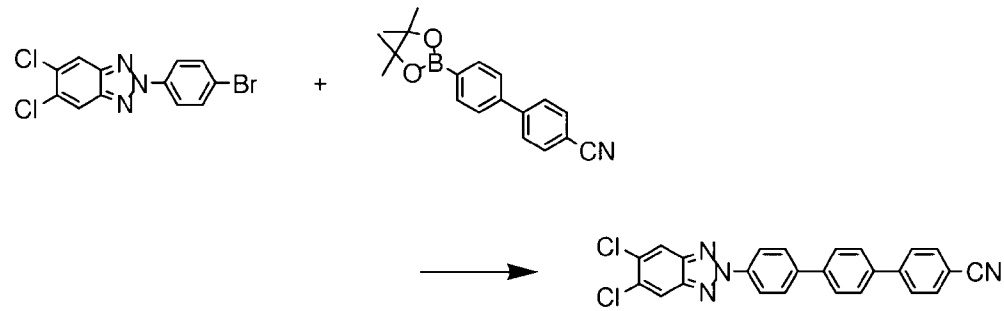
【0086】 對於所獲得之黃色粉體使用 NMR 對構造進行鑑定。
由 ¹H-NMR(CDCl₃)檢測出以下之 26 個氫訊號。
 $\delta(\text{ppm}) = 8.46$ (2H)、 7.97 (2H)、 7.94 (1H)、 7.90 (3H)、 7.81 - 7.72 (7H)、 7.59 (1H)、 7.43 (1H)、 7.42 (2H)、 7.16 (3H)、 7.07 (1H)、 6.83 (2H)、 6.79 (1H)

【0087】
[實施例 2]
<2-(4-氰基-[1,1',4',1'']聯三苯-4''-基)-5,6-二苯基-苯并三唑(化合物-40)之合成>

於反應容器中加入 2-(4-溴苯基)-5,6-二氯-苯并三唑：20.0 g、4'-(4,4,5,5-四甲基-[1,3,2]二氧雜硼烷-2-基)聯苯-4-甲腈：18.7 g、甲苯：210 mL、乙醇：70 mL，繼而，加入預先將碳酸鉀：9.7 g 溶解於 H₂O：70 mL 所得之水溶液，一面照射超音波 30 分鐘，一面通入氮氣。於通入氮氣所得之溶液中，加入肆(三苯基膦)鈰：1.7 g，於加熱回流下進行整晚回流攪拌。攪拌後放冷，加入甲醇、H₂O 進行分散洗淨及過濾，從

而獲得粗產物。對所獲得之粗產物進行利用丙酮溶媒之分散洗淨，藉此獲得 2-(4-氰基-[1,1',4',1'']聯三苯-4''-基)-5,6-二氯-苯并三唑之亮黃色粉體 21.8 g(產率：85%)。

【0088】 [化 13]

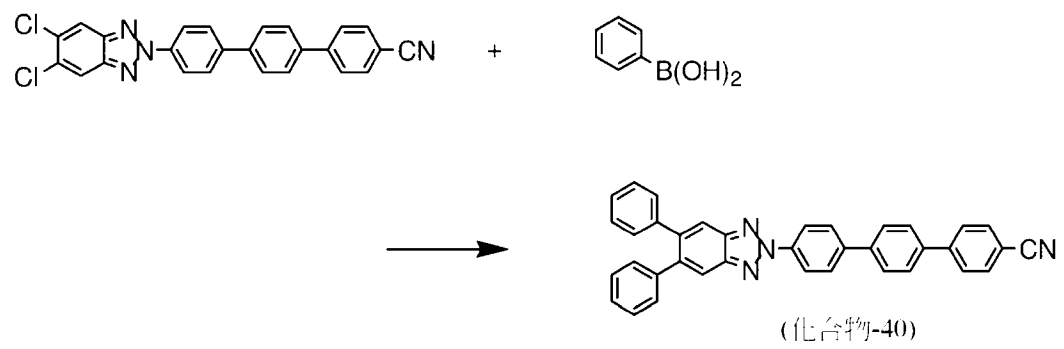


【0089】 對於所獲得之亮黃色粉體使用 NMR 對構造進行鑑定。由 ¹H-NMR(CDCl₃)檢測出以下之 14 個氫訊號。

$\delta(\text{ppm}) = 8.46 (2\text{H})、8.12 (2\text{H})、7.87 (2\text{H})、7.84-7.71 (8\text{H})$

【0090】 然後，加入 2-(4-氰基-[1,1',4',1'']聯三苯-4''-基)-5,6-二氯-苯并三唑：8.0 g、苯基硼酸：6.6 g、叁(二亞苧基丙酮)二鈹(0)：0.8 g、三環己基磷：1.0 g、磷酸三鉀：23.1 g，於 1,4-二噁烷、H₂O 混合溶媒下進行整晚回流攪拌。放冷後，於系統內加入 H₂O，進行分散洗淨及過濾，從而獲得粗產物。對所獲得之粗產物進行利用二氯苯溶媒之再結晶精製，藉此獲得 2-(4-氰基-[1,1',4',1'']聯三苯-4''-基)-5,6-二苯基-苯并三唑(化合物-40)之白色粉體 8.3 g(產率：87%)。

【0091】 [化 14]



【0092】 對於所獲得之白色粉體使用 NMR 對構造進行鑑定。

由 ¹H-NMR(CDCl₃)檢測出以下之 24 個氫訊號。

δ(ppm) = 8.53 (2H)、8.00 (2H)、7.87 (2H)、7.79 (8H)、7.28-7.16 (10H)

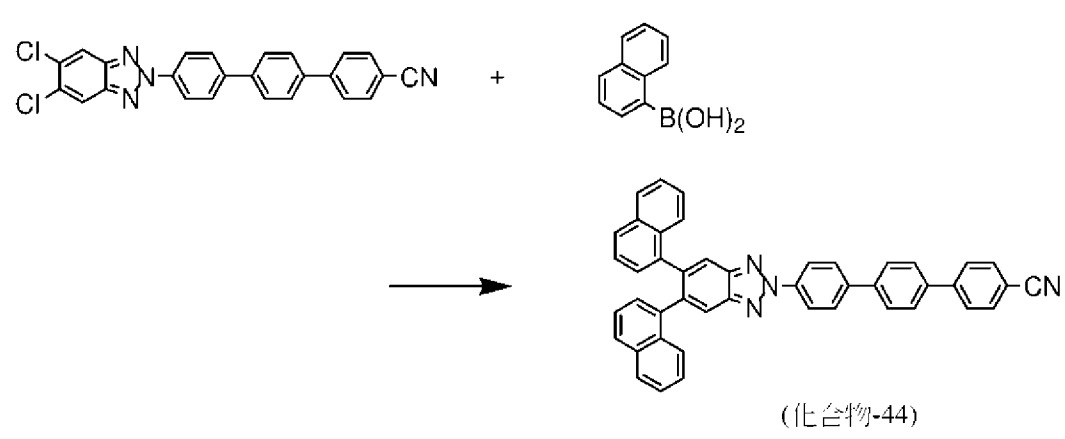
【0093】

[實施例 3]

<2-(4-氰基-[1,1',4',1'']聯三苯-4''-基)-5,6-二(萘-1-基)-苯并三唑(化合物-44)之合成>

於反應容器中加入 2-(4-氰基-[1,1',4',1'']聯三苯-4''-基)-5,6-二氯-苯并三唑：5.0 g、1-萘硼酸：6.2 g、叁(二亞苄基丙酮)二鈾(0)：0.5 g、三環己基磷：0.6 g、磷酸三鉀：14.4 g，於 1,4-二噁烷、H₂O 混合溶媒下進行整晚回流攪拌。放冷後，於系統內加入 H₂O，進行分散洗淨及過濾，從而獲得粗產物。對所獲得之粗產物進行利用二氯苯/丙酮混合溶媒之晶析精製，藉此獲得 2-(4-氰基-[1,1',4',1'']聯三苯-4''-基)-5,6-二(萘-1-基)-苯并三唑(化合物-44)之白色粉體 4.6 g(產率：65%)。

【0094】 [化 15]



【0095】 對於所獲得之白色粉體使用 NMR 對構造進行鑑定。

由 ¹H-NMR(CDCl₃)檢測出以下之 28 個氫訊號。

δ(ppm) = 8.58 (2H)、8.14 (2H)、7.94-7.73 (13H)、7.60 (3H)、7.46 (2H)、7.28 (3H)、7.11 (1H)、7.01 (2H)

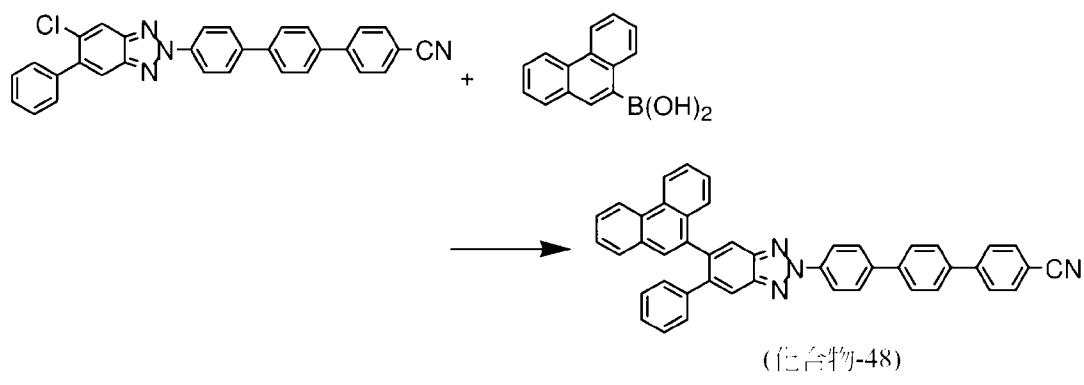
【0096】

[實施例 4]

<2-(4"-氰基-[1,1';4',1'']聯三苯-4-基)-5-(菲-9-基)-6-苯基-2H-苯并三唑(化合物-48)之合成>

於反應容器中加入 5-氯-2-(4"-氰基-[1,1';4',1'']聯三苯-4-基)-6-苯基-2H-苯并三唑：13.1 g、9-菲硼酸：12.6 g、叁(二亞苄基丙酮)二鈹(0)：1.5 g、三環己基磷：1.5 g、磷酸三鉀：23.0 g，於 1,4-二噁烷、H₂O 混合溶媒下進行整晚回流攪拌。放冷後，於系統內加入甲醇，進行分散洗淨及過濾，從而獲得粗產物。對所獲得之粗產物進行利用氯苯溶媒之再結晶精製，藉此獲得 2-(4"-氰基-[1,1';4',1'']聯三苯-4-基)-5-(菲-9-基)-6-苯基-2H-苯并三唑(化合物-48)之白色粉體 6.6 g(產率：39%)。

【0097】 [化 16]



【0098】 對於所獲得之白色粉體使用 NMR 對構造進行鑑定。

由 ¹H-NMR(CDCl₃)檢測出以下之 28 個氫訊號。

δ(ppm) = 8.68 (2H)、8.56 (2H)、8.10 (2H)、7.89 (2H)、7.84 (3H)、7.77 (6H)、7.70 (1H)、7.67 (2H)、7.59 (2H)、7.42 (1H)、7.23 (2H)、7.00 (3H)

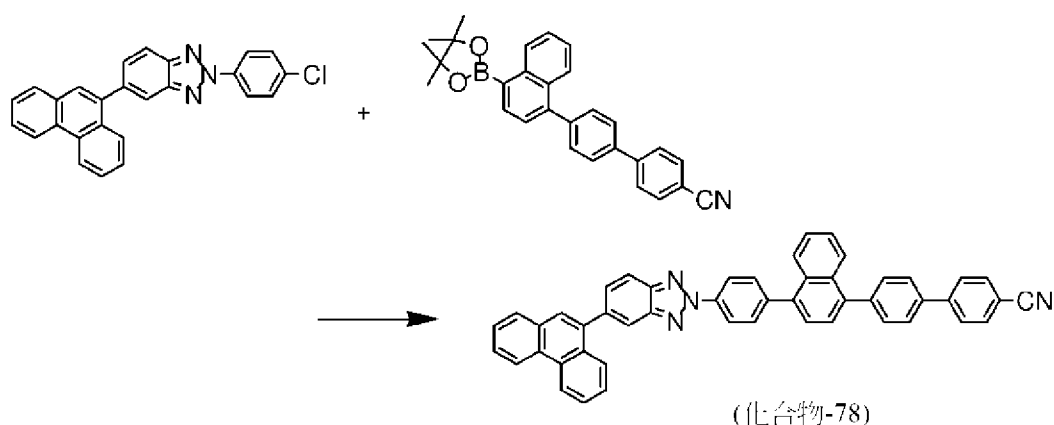
【0099】

[實施例 5]

<2-[4-{4-(4'-氰基-聯苯-4-基)-萘-1-基}-苯基]-5-(菲-9-基)-2H-苯并三唑(化合物-78)之合成>

於反應容器中加入 2-(4-氯-苯基)-5-(菲-9-基)-2H-苯并三唑：5.6 g、4'-{4-(4,4,5,5-四甲基-[1,3,2]二氧雜硼烷-2-基)-萘-1-基}-聯苯-4-甲腈：6.2 g、叁(二亞苄基丙酮)二鈹(0)：0.4 g、三環己基磷：0.4 g、磷酸三鉀：5.9 g，於 1,4-二噁烷、H₂O 混合溶媒下進行整晚回流攪拌。放冷後，於系統內加入甲醇，進行分散洗淨及過濾，從而獲得粗產物。對所獲得之粗產物進行利用氯苯/丙酮混合溶媒之晶析精製，藉此獲得 2-[4-{4-(4'-氰基-聯苯-4-基)-萘-1-基}-苯基]-5-(菲-9-基)-2H-苯并三唑(化合物-78)之淡黃色粉體 3.3 g(產率：35%)。

【0100】 [化 17]



【0101】 對於所獲得之淡黃色粉體使用 NMR 對構造進行鑑定。
由 $^1\text{H-NMR}(\text{CDCl}_3)$ 檢測出以下之 30 個氫訊號。

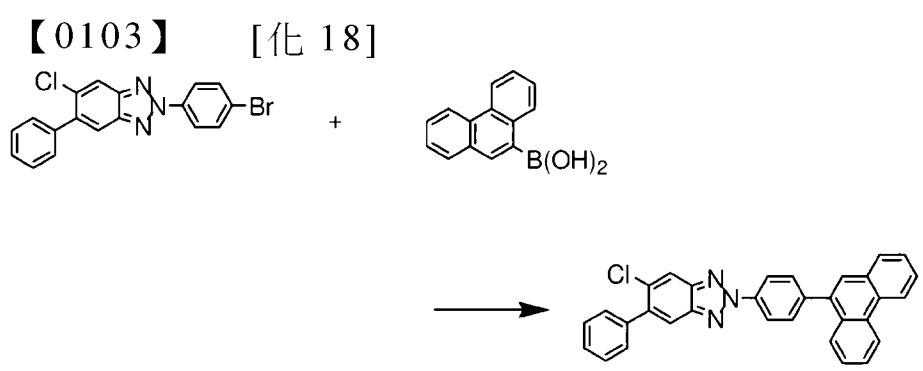
$\delta(\text{ppm}) = 8.86 (1\text{H})、8.80 (1\text{H})、8.60 (2\text{H})、8.18 (1\text{H})、8.10 (2\text{H})、8.08 (1\text{H})、8.00 (1\text{H})、7.97 (1\text{H})、7.88-7.65 (15\text{H})、7.61 (3\text{H})、7.55 (2\text{H})$

【0102】

[實施例 6]

<2-(4-(菲-9-基)-苯基)-5-(4'-氰基-聯苯-4-基)-6-苯基-苯并三唑(化合物-104)之合成>

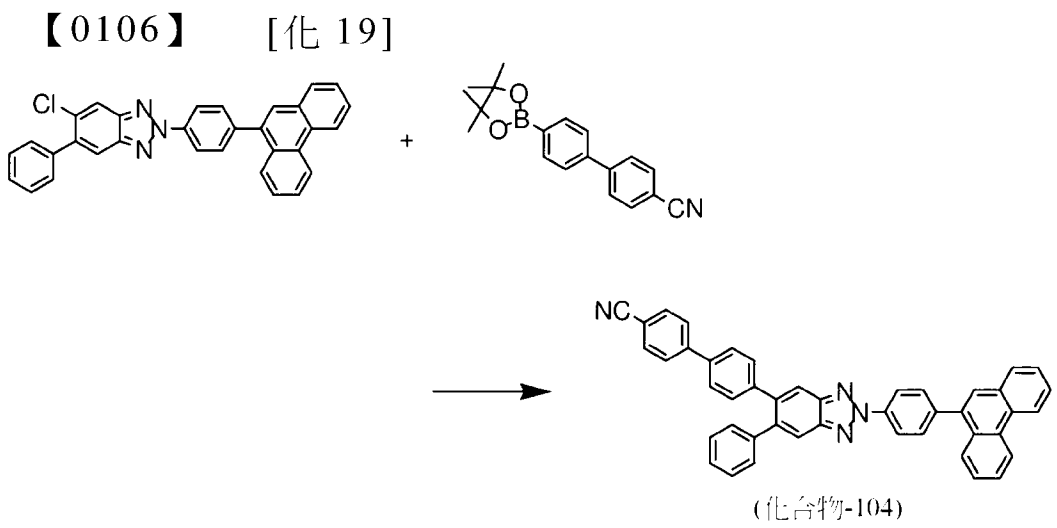
於反應容器中加入 2-(4-溴苯基)-5-氯-6-苯基-苯并三唑：26.0 g、9-菲硼酸：15.8 g、甲苯：180 mL、乙醇：45 mL，繼而，加入預先將碳酸鉀：11.2 g 溶解於 H_2O ：40 mL 所得之水溶液，一面照射超音波 30 分鐘，一面通入氮氣。於通入氮氣所得之溶液中，加入肆(三苯基膦)鉀：1.6 g，於加熱回流下進行整晚回流攪拌。攪拌後放冷，加入乙酸乙酯、 H_2O ，藉由萃取及分液操作提取有機層，於減壓濃縮下獲得粗產物。對所獲得之粗產物進行利用丙酮/甲醇混合溶媒之晶析精製，藉此獲得 2-(4-(菲-9-基)-苯基)-5-氯-6-苯基-苯并三唑之黃色粉體 28.0 g(產率：86%)。



【0104】 對於所獲得之黃色粉體使用 NMR 對構造進行鑑定。
由 ¹H-NMR(CDCl₃)檢測出以下之 20 個氫訊號。

δ(ppm) = 8.84 (1H)、8.78 (1H)、8.54 (2H)、8.15 (1H)、7.97 (3H)、7.84-7.45 (12H)

【0105】 然後，加入 2-(4-(菲-9-基)-苯基)-5-氯-6-苯基-苯并三唑：14.0 g、4'-(4,4,5,5-四甲基-[1,3,2]二氧雜硼烷-2-基)聯苯-4-甲腈：9.3 g、叁(二亞苺基丙酮)二鈮(0)：0.8 g、三環己基磷：0.8 g、磷酸三鉀：12.3 g，於 1,4-二噁烷、H₂O 混合溶媒下進行整晚回流攪拌。放冷後，於系統內加入甲醇，對所析出之固體進行過濾，從而獲得粗產物。對所獲得之粗產物進行利用單氯苯溶媒之再結晶精製，藉此獲得 2-(4-(菲-9-基)-苯基)-5-(4'-氰基-聯苯-4-基)-6-苯基-苯并三唑(化合物-104)之白色粉體 11.8 g(產率：65%)。



【0107】 對於所獲得之白色粉體使用 NMR 對構造進行鑑定。

由 ¹H-NMR(CDCl₃)檢測出以下之 28 個氫訊號。

δ(ppm) = 8.85 (1H)、8.78 (1H)、8.58 (2H)、8.07 (2H)、7.98 (2H)、7.87-7.64 (9H)、7.61 (1H)、7.53 (2H)、7.40-7.23 (8H)

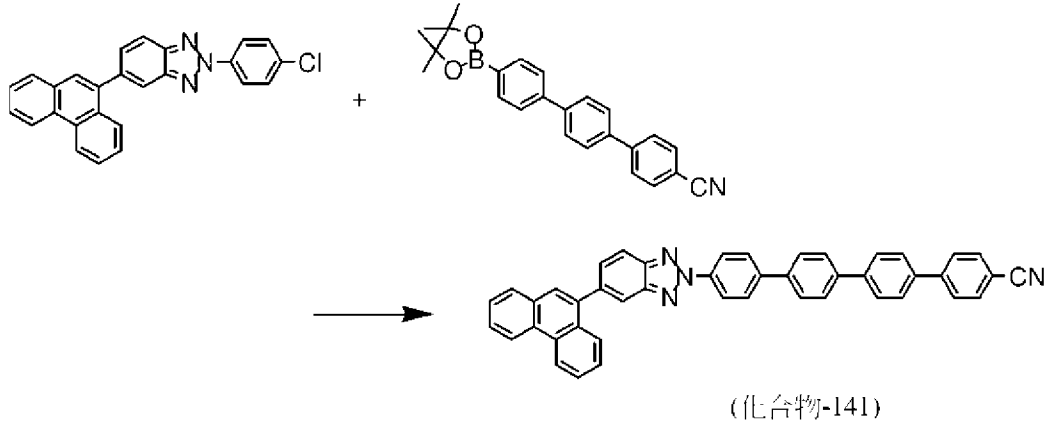
【0108】

[實施例 7]

<2-(4'''-氰基-[1,1';4',1'';4'',1''']聯四苯-4-基)-5-(菲-9-基)-2H-苯并三唑(化合物-141)之合成>

於反應容器中加入 2-(4-氯-苯基)-5-(菲-9-基)-2H-苯并三唑：10.0 g、4-(4,4,5,5-四甲基-[1,3,2]二氧雜硼烷-2-基)-[1,1';4',1'']聯三苯-4''-甲腈：9.9 g、叁(二亞苺基丙酮)二鈹(0)：0.7 g、三環己基磷：0.7 g、磷酸三鉀：10.5 g，於 1,4-二噁烷、H₂O 混合溶媒下進行整晚回流攪拌。放冷後，於系統內加入甲醇，進行分散洗淨及過濾，從而獲得粗產物。對所獲得之粗產物進行利用 1,2-二氯苯溶媒之再結晶精製，藉此獲得 2-(4'''-氰基-[1,1';4',1'';4'',1''']聯四苯-4-基)-5-(菲-9-基)-2H-苯并三唑(化合物-141)之黃色粉體 10.4 g(產率：67%)。

【0109】 [化 20]



【0110】 對於所獲得之黃色粉體使用 NMR 對構造進行鑑定。

由 ¹H-NMR(CDCI₃)檢測出以下之 30 個氫訊號。

δ(ppm) = 8.82 (1H)、8.77 (1H)、8.53 (2H)、8.13 (1H)、8.07 (1H)、7.95 (2H)、7.88 (2H)、7.81 (7H)、7.77 (5H)、7.75-7.60 (7H)、7.57 (1H)

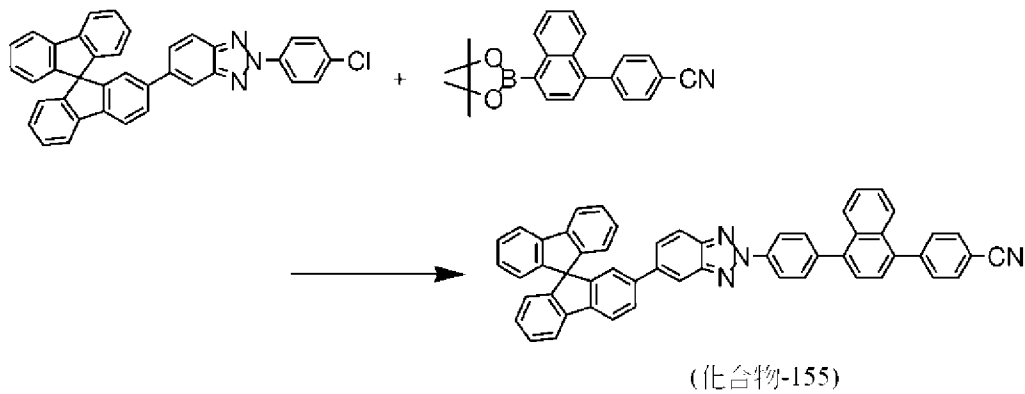
【0111】

[實施例 8]

<2-[4-{4-(4-氰基-苯基)-萘-1-基}-苯基]-5-(9,9'-螺雙[9H]蒽-2-基)-2H-苯并三唑(化合物-155)之合成>

於反應容器中加入 2-(4-氯-苯基)-5-(9,9'-螺雙[9H]蒽-2-基)-2H-苯并三唑：9.0 g、4-{4-(4,4,5,5-四甲基-[1,3,2]二氧雜硼烷-2-基)-萘-1-基}-苯基-甲腈：6.5 g、叁(二亞苺基丙酮)二鈹(0)：0.3 g、三環己基膦：0.2 g、磷酸三鉀：7.0 g，於 1,4-二噁烷、H₂O 混合溶媒下進行整晚回流攪拌。放冷後，於系統內加入乙酸乙酯/H₂O，進行萃取及分液操作，對所提取之有機層進行濃縮。對所獲得之粗產物進行利用丙酮溶媒之再結晶精製，藉此獲得 2-[4-{4-(4-氰基-苯基)-萘-1-基}-苯基]-5-(9,9'-螺雙[9H]蒽-2-基)-2H-苯并三唑(化合物-155)之白色粉體 7.6 g(產率：62%)。

【0112】 [化 21]



【0113】 對於所獲得之白色粉體使用 NMR 對構造進行鑑定。

由 ¹H-NMR(CDCl₃)檢測出以下之 32 個氫訊號。

δ(ppm) = 8.50 (2H)、8.03 (1H)、8.00 (1H)、7.98 (1H)、7.91 (5H)、7.85 (2H)、7.80-7.65 (5H)、7.63-7.38 (8H)、7.17 (3H)、7.09 (1H)、6.84 (2H)、6.80 (1H)

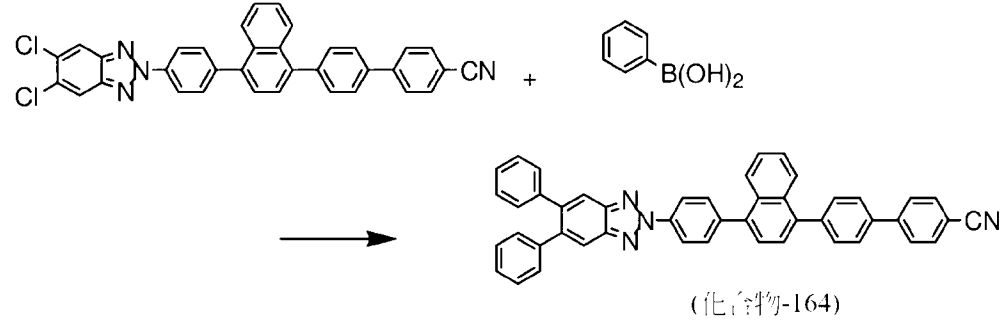
【0114】

[實施例 9]

<5,6-二苯基-2-[4-{4-(4'-氰基-聯苯-4-基)-萘-1-基}-苯基]-2H-苯并三唑(化合物-164)之合成>

於反應容器中加入 5,6-二氯-2-[4-{4-(4'-氰基-聯苯-4-基)-萘-1-基}-苯基]-2H-苯并三唑：12.0 g、苯基硼酸：7.7 g、叁(二亞苺基丙酮)二鈣(0)：1.0 g、三環己基膦：1.2 g、磷酸三鉀：26.9 g，於 1,4-二噁烷、H₂O 混合溶媒下進行整晚回流攪拌。放冷後，於系統內加入 H₂O，進行分散洗淨及過濾，從而獲得粗產物。對所獲得之粗產物進行利用氯苯溶媒之再結晶精製，藉此獲得 5,6-二苯基-2-[4-{4-(4'-氰基-聯苯-4-基)-萘-1-基}-苯基]-2H-苯并三唑(化合物-164)之白色粉體 8.2 g(產率：60%)。

【0115】 [化 22]



【0116】 對於所獲得之白色粉體使用 NMR 對構造進行鑑定。

由 ¹H-NMR(CDCl₃)檢測出以下之 30 個氫訊號。

δ(ppm) = 8.55 (2H)、8.04 (2H)、8.00 (2H)、7.80 (4H)、7.77

(4H)、7.69 (2H)、7.57 (2H)、7.52 (2H)、7.29-7.16 (10H)

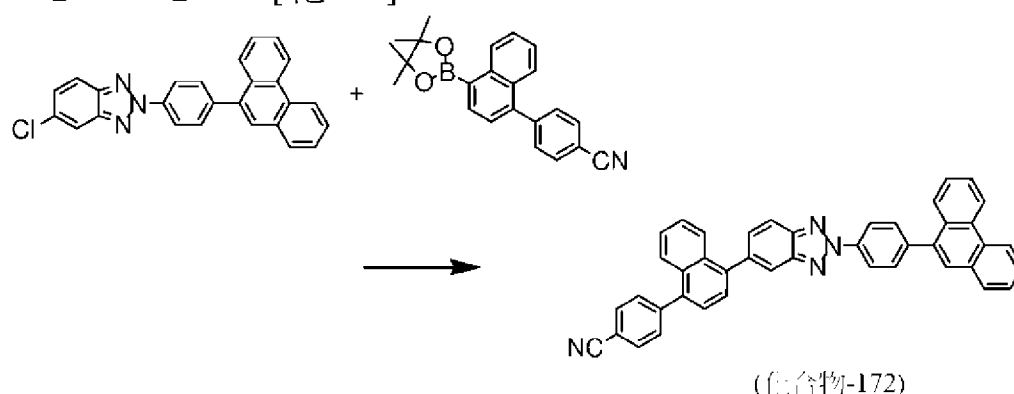
【0117】

[實施例 10]

<5-{4-(4-氰基-苯基)-萘-1-基}-2-{4-(菲-9-基)-苯基}-2H-苯并三唑
(化合物-172)之合成>

於反應容器中加入 5-氯-2-{4-(菲-9-基)-苯基}-2H-苯并三唑：11.0 g、4-{4-(4,4,5,5-四甲基-[1,3,2]二氧雜硼烷-2-基)-萘-1-基}-苯基-甲腈：10.1 g、叁(二亞苺基丙酮)二鈹(0)：0.7 g、三環己基膦：0.8 g、磷酸三鉀：11.5 g，於 1,4-二噁烷、H₂O 混合溶媒下進行整晚回流攪拌。放冷後，於系統內加入甲醇，進行分散洗淨及過濾，從而獲得粗產物。對所獲得之粗產物進行利用甲苯溶媒之再結晶精製，藉此獲得 5-{4-(4-氰基-苯基)-萘-1-基}-2-{4-(菲-9-基)-苯基}-2H-苯并三唑(化合物-172)之淡黃色粉體 10.5 g(產率：71%)。

【0118】 [化 23]



【0119】 對於所獲得之淡黃色粉體使用 NMR 對構造進行鑑定。由 ¹H-NMR(CDCl₃)檢測出以下之 26 個氫訊號。

δ(ppm) = 8.82 (1H)、8.80 (1H)、8.57 (2H)、8.12 (1H)、8.11 (1H)、8.04 (1H)、7.98 (1H)、7.94 (1H)、7.88 (1H)、7.84 (2H)、7.79 (2H)、7.78 (1H)、7.74-7.56 (8H)、7.53 (1H)、7.51 (1H)、7.50 (1H)

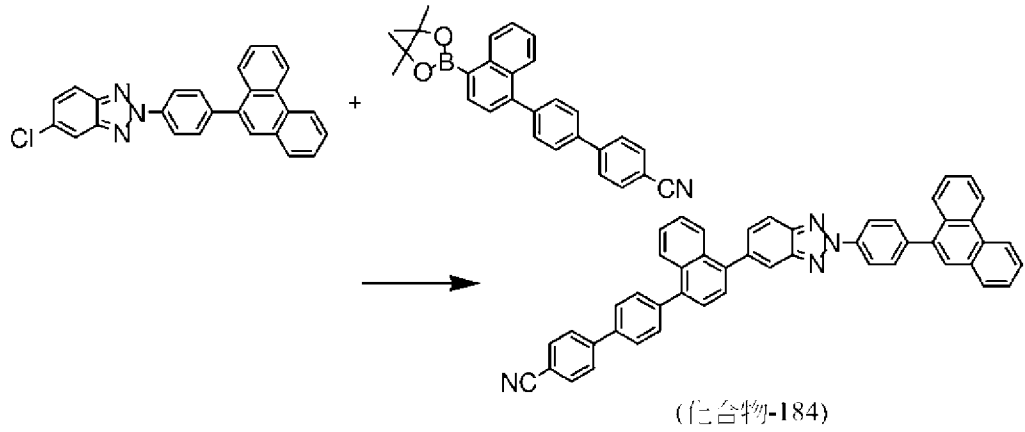
【0120】

[實施例 11]

<5-{4-(4'-氰基-聯苯-4-基)-萘-1-基}-2-{4-(菲-9-基)-苯基}-2H-苯并三唑(化合物-184)之合成>

於反應容器中加入 5-氯-2-{4-(菲-9-基)-苯基}-2H-苯并三唑：10.0 g、4'-{4-(4,4,5,5-四甲基-[1,3,2]二氧雜硼烷-2-基)-萘-1-基}-聯苯-4-甲腈：11.2 g、叁(二亞苄基丙酮)二鈹(0)：0.7 g、三環己基膦：0.7 g、磷酸三鉀：10.5 g，於 1,4-二噁烷、H₂O 混合溶媒下進行整晚回流攪拌。放冷後，於系統內加入甲醇，進行分散洗淨及過濾，從而獲得粗產物。對所獲得之粗產物進行利用氯苯溶媒之再結晶精製，藉此獲得 5-{4-(4'-氰基-聯苯-4-基)-萘-1-基}-2-{4-(菲-9-基)-苯基}-2H-苯并三唑(化合物-184)之淡黃色粉體 4.1 g(產率：25%)。

【0121】 [化 24]



【0122】 對於所獲得之淡黃色粉體使用 NMR 對構造進行鑑定。

由 ¹H-NMR(CDCl₃)檢測出以下之 30 個氫訊號。

δ(ppm) = 8.82 (1H)、8.76 (1H)、8.57 (2H)、8.13 (1H)、8.10 (1H)、8.05 (2H)、7.98 (1H)、7.94 (1H)、7.84-7.75 (9H)、7.74-7.54 (9H)、7.51 (2H)

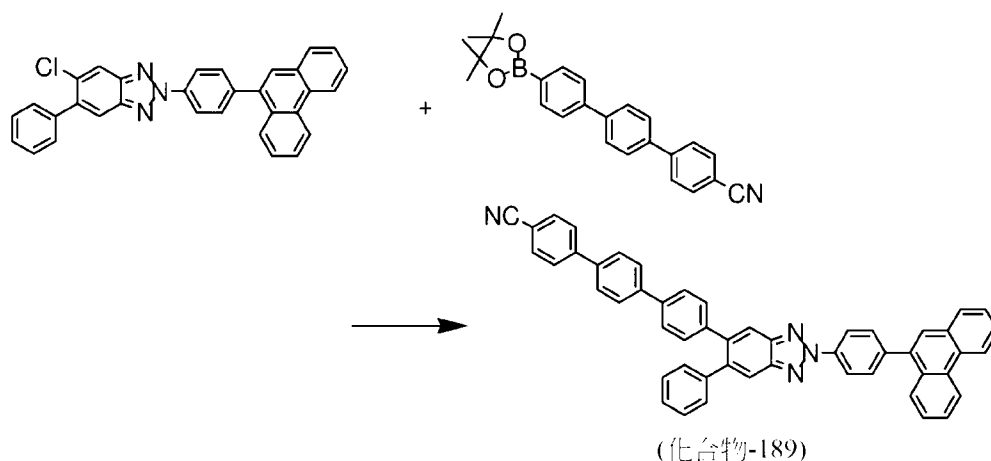
【0123】

[實施例 12]

<5-(4"-氰基-[1,1';4',1"]聯三苯-4-基)-2-{4-(菲-9-基)-苯基}-6-苯基-2H-苯并三唑(化合物-189)之合成>

於反應容器中加入 5-氯-2-{4-(菲-9-基)-苯基}-6-苯基-2H-苯并三唑：13.0 g、4-(4,4,5,5-四甲基-[1,3,2]二氧雜硼烷-2-基)-[1,1';4',1"]聯三苯-4"-甲腈：8.6 g、叁(二亞苺基丙酮)二鉀(0)：0.7 g、三環己基磷：0.8 g、磷酸三鉀：11.5 g，於 1,4-二噁烷、H₂O 混合溶媒下進行整晚回流攪拌。放冷後，於系統內加入甲醇，進行分散洗淨及過濾，從而獲得粗產物。對所獲得之粗產物進行利用氯苯溶媒之再結晶精製，藉此獲得 5-(4"-氰基-[1,1';4',1"]聯三苯-4-基)-2-{4-(菲-9-基)-苯基}-6-苯基-2H-苯并三唑(化合物-189)之白色粉體 10.0 g(產率：53%)。

【0124】 [化 25]



【0125】 對於所獲得之白色粉體使用 NMR 對構造進行鑑定。

由 ¹H-NMR(CDCl₃)檢測出以下之 32 個氫訊號。

δ(ppm) = 8.85 (1H)、8.78 (1H)、8.58 (2H)、8.07 (2H)、7.99 (2H)、7.85-7.61 (14H)、7.58 (2H)、7.32 (8H)

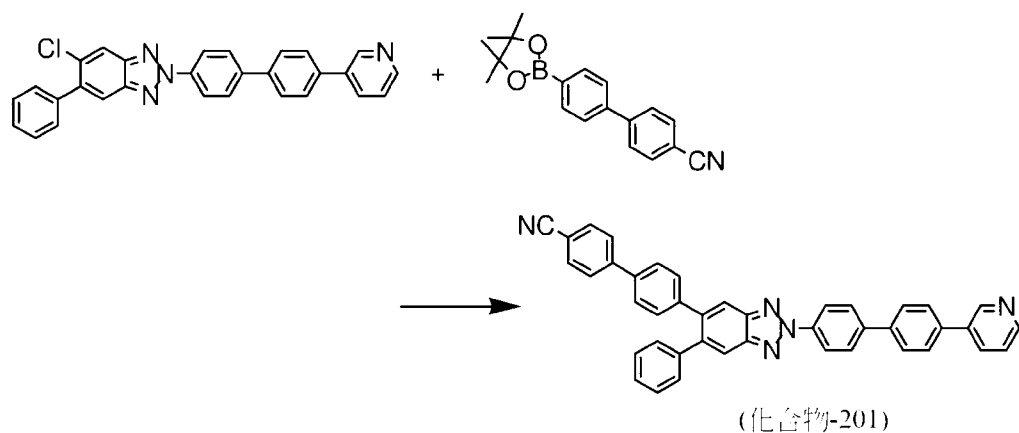
【0126】

[實施例 13]

<5-(4'-氰基-聯苯-4-基)-6-苯基-2-(4'-吡啶-3-基-聯苯-4-基)-2H-苯并三唑(化合物-201)之合成>

於反應容器中加入 5-氯-6-苯基-2-(4'-吡啶-3-基-聯苯-4-基)-2H-苯并三唑：12.0 g、4'-(4,4,5,5-四甲基-[1,3,2]二氧雜硼烷-2-基)聯苯-4-甲腈：8.4 g、叁(二亞苺基丙酮)二鈹(0)：0.7 g、三環己基磷：0.7 g、磷酸三鉀：11.1 g，於 1,4-二噁烷、H₂O 混合溶媒下進行整晚回流攪拌。放冷後，於系統內加入甲醇，進行分散洗淨及過濾，從而獲得粗產物。對所獲得之粗產物進行利用氯苯溶媒之再結晶精製，藉此獲得 5-(4'-氰基-聯苯-4-基)-6-苯基-2-(4'-吡啶-3-基-聯苯-4-基)-2H-苯并三唑(化合物-201)之白色粉體 6.4 g(產率：41%)。

【0127】 [化 26]



【0128】對於所獲得之白色粉體使用 NMR 對構造進行鑑定。

由 ¹H-NMR(CDCl₃)檢測出以下之 27 個氫訊號。

$\delta(\text{ppm}) = 8.46$ (1H)、 8.66 (1H)、 8.53 (2H)、 8.04 (2H)、 7.98 (1H)、 7.89 (2H)、 7.84 (2H)、 7.75 (6H)、 7.52 (2H)、 7.44 (1H)、 7.37 - 7.22 (7H)

【0129】

[實施例 14]

關於實施例 1～13 中所合成之具有苯并三唑環構造之化合物，藉由高感度示差掃描熱量計(Bruker AXS 公司製造、DSC3100SA)測定熔點及玻璃轉移點。將測得之結果彙總示於表 1。

【0130】

[表 1]

	熔點	玻璃轉移點
實施例 1 之化合物	311℃	151℃
實施例 2 之化合物	307℃	—
實施例 3 之化合物	326℃	—
實施例 4 之化合物	306℃	139℃
實施例 5 之化合物	257℃	117℃
實施例 6 之化合物	303℃	137℃
實施例 7 之化合物	336℃	—
實施例 8 之化合物	312℃	167℃
實施例 9 之化合物	302℃	118℃
實施例 10 之化合物	—	121℃
實施例 11 之化合物	—	121℃
實施例 12 之化合物	329℃	141℃
實施例 13 之化合物	283℃	110℃

【0131】 實施例 1～13 中所合成之具有苯并三唑環構造之化合物皆具有 98℃ 以上之玻璃轉移點，其表示薄膜狀態較為穩定。

【0132】

[實施例 15]

關於實施例 1～13 中所合成之具有苯并三唑環構造之化合物，分別於 ITO 基板上製作膜厚 100 nm 之蒸鍍膜，藉由離子化電位測定裝置(住友重機械工業股份有限公司製造、PYS-202)測定工作函數。將測得之結

果彙總示於表 2。

【0133】

[表 2]

	工作函數
實施例 1 之化合物	6.41 eV
實施例 2 之化合物	6.51 eV
實施例 3 之化合物	6.42 eV
實施例 4 之化合物	6.44 eV
實施例 5 之化合物	6.41 eV
實施例 6 之化合物	6.51 eV
實施例 7 之化合物	6.34 eV
實施例 8 之化合物	6.41 eV
實施例 9 之化合物	6.40 eV
實施例 10 之化合物	6.46 eV
實施例 11 之化合物	6.42 eV
實施例 12 之化合物	6.43 eV
實施例 13 之化合物	6.62 eV

【0134】 關於實施例 1～13 中所合成之具有苯并三唑環構造之化合物，具有大於 NPD、TPD 等一般之電洞傳輸材料所具有之工作函數 5.5 eV 之值，從而判斷具有較大之電洞阻擋能力。

【0135】

[實施例 16]

有機 EL 元件係如圖 14 所示，於在玻璃基板 1 上預先形成 ITO 電極作為透明陽極 2 所得者之上，依序蒸鍍電洞注入層 3、電洞傳輸層 4、發光層 5、電洞阻擋層 6、電子傳輸層 7、電子注入層 8、陰極(鋁電極)9 而製作。

【0136】 具體而言，將成膜有膜厚 50 nm 之 ITO 作為透明陽極 2 之玻璃基板 1 於異丙醇中進行超音波洗淨 20 分鐘後，於加熱至 200℃

之加熱板上進行 10 分鐘乾燥。其後，進行紫外線臭氧處理 15 分鐘後，將該附 ITO 之玻璃基板安裝於真空蒸鍍機內，減壓至 0.001 Pa 以下。繼而，以覆蓋透明陽極 2 之方式，將下述構造式之電子受體(Acceptor-1)與下述構造式之化合物(HTM-1)於蒸鍍速度比成為 Acceptor-1：HTM-1 = 3：97 之蒸鍍速度下進行共蒸鍍，以膜厚成為 10 nm 之方式形成為電洞注入層 3。

於該電洞注入層 3 之上，將下述構造式之化合物(HTM-1)以膜厚成為 60 nm 之方式形成為電洞傳輸層 4。

於該電洞傳輸層 4 之上，將下述構造式之化合物(EMD-1)與下述構造式之化合物(EMH-1)於蒸鍍速度比成為 EMD-1：EMH-1 = 5：95 之蒸鍍速度下進行共蒸鍍，以膜厚成為 20 nm 之方式形成為發光層 5。

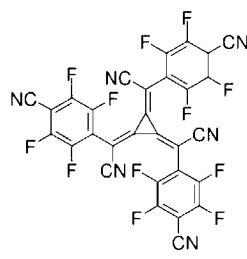
於該發光層 5 之上，將實施例 1 之化合物(化合物-2)與下述構造式之化合物(ETM-1)於蒸鍍速度比成為化合物-2：ETM-1 = 50：50 之蒸鍍速度下進行共蒸鍍，以膜厚成為 30 nm 之方式形成為電洞阻擋層兼電子傳輸層 6 及 7。

於該電洞阻擋層兼電子傳輸層 6 及 7 之上，將氟化鋰以膜厚成為 1 nm 之方式形成為電子注入層 8。

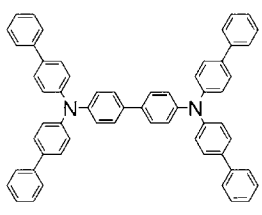
最後，於電子注入層 8 之上，蒸鍍 100 nm 之鋁而形成陰極 9。

對於所製作之有機 EL 元件，於大氣中、常溫下進行特性測定。將對所製作之有機 EL 元件施加直流電壓時之發光特性之測定結果彙總示於表 3。

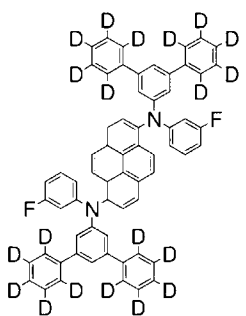
【0137】 [化 27]



(Acceptor - 1)

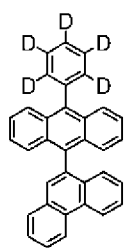


(H T M - 1)

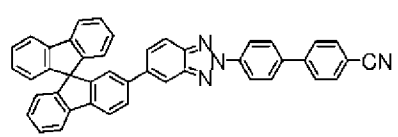


(E M D - 1)

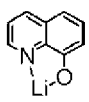
【0138】 [化 28]



(E M H - 1)



(化合物-2)



(E T M - 1)

【0139】

[實施例 17]

於實施例 16 中，作為電洞阻擋層兼電子傳輸層 6 及 7 之材料，使用實施例 2 之化合物(化合物-40)代替實施例 1 之化合物(化合物-2)，於蒸鍍速度比成為化合物-40：ETM-1＝50：50 之蒸鍍速度下進行共蒸鍍，除此以外，於相同之條件下製作有機 EL 元件。對於所製作之有機 EL 元件，於大氣中、常溫下進行特性測定。將對所製作之有機 EL 元件施加直流電壓時之發光特性之測定結果彙總示於表 3。

【0140】

[實施例 18]

於實施例 16 中，作為電洞阻擋層兼電子傳輸層 6 及 7 之材料，使用實施例 3 之化合物(化合物-44)代替實施例 1 之化合物(化合物-2)，於蒸鍍速度比成為化合物-44：ETM-1＝50：50 之蒸鍍速度下進行共蒸鍍，除此以外，於相同之條件下製作有機 EL 元件。對於所製作之有機 EL 元

件，於大氣中、常溫下進行特性測定。將對所製作之有機 EL 元件施加直流電壓時之發光特性之測定結果彙總示於表 3。

【0141】

[實施例 19]

於實施例 16 中，作為電洞阻擋層兼電子傳輸層 6 及 7 之材料，使用實施例 4 之化合物(化合物-48)代替實施例 1 之化合物(化合物-2)，於蒸鍍速度比成為化合物-48：ETM-1 = 50：50 之蒸鍍速度下進行共蒸鍍，除此以外，於相同之條件下製作有機 EL 元件。對於所製作之有機 EL 元件，於大氣中、常溫下進行特性測定。將對所製作之有機 EL 元件施加直流電壓時之發光特性之測定結果彙總示於表 3。

【0142】

[實施例 20]

於實施例 16 中，作為電洞阻擋層兼電子傳輸層 6 及 7 之材料，使用實施例 5 之化合物(化合物-78)代替實施例 1 之化合物(化合物-2)，於蒸鍍速度比成為化合物-78：ETM-1 = 50：50 之蒸鍍速度下進行共蒸鍍，除此以外，於相同之條件下製作有機 EL 元件。對於所製作之有機 EL 元件，於大氣中、常溫下進行特性測定。將對所製作之有機 EL 元件施加直流電壓時之發光特性之測定結果彙總示於表 3。

【0143】

[實施例 21]

於實施例 16 中，作為電洞阻擋層兼電子傳輸層 6 及 7 之材料，使用實施例 6 之化合物(化合物-104)代替實施例 1 之化合物(化合物-2)，於蒸鍍速度比成為化合物-104：ETM-1 = 50：50 之蒸鍍速度下進行共蒸鍍，除此以外，於相同之條件下製作有機 EL 元件。對於所製作之有

機 EL 元件，於大氣中、常溫下進行特性測定。將對所製作之有機 EL 元件施加直流電壓時之發光特性之測定結果彙總示於表 3。

【0144】

[實施例 22]

於實施例 16 中，作為電洞阻擋層兼電子傳輸層 6 及 7 之材料，使用實施例 7 之化合物(化合物-141)代替實施例 1 之化合物(化合物-2)，於蒸鍍速度比成為化合物-141：ETM-1 = 50：50 之蒸鍍速度下進行共蒸鍍，除此以外，於相同之條件下製作有機 EL 元件。對於所製作之有機 EL 元件，於大氣中、常溫下進行特性測定。將對所製作之有機 EL 元件施加直流電壓時之發光特性之測定結果彙總示於表 3。

【0145】

[實施例 23]

於實施例 16 中，作為電洞阻擋層兼電子傳輸層 6 及 7 之材料，使用實施例 8 之化合物(化合物-155)代替實施例 1 之化合物(化合物-2)，於蒸鍍速度比成為化合物-155：ETM-1 = 50：50 之蒸鍍速度下進行共蒸鍍，除此以外，於相同之條件下製作有機 EL 元件。對於所製作之有機 EL 元件，於大氣中、常溫下進行特性測定。將對所製作之有機 EL 元件施加直流電壓時之發光特性之測定結果彙總示於表 3。

【0146】

[實施例 24]

於實施例 16 中，作為電洞阻擋層兼電子傳輸層 6 及 7 之材料，使用實施例 9 之化合物(化合物-164)代替實施例 1 之化合物(化合物-2)，於蒸鍍速度比成為化合物-164：ETM-1 = 50：50 之蒸鍍速度下進行共蒸鍍，除此以外，於相同之條件下製作有機 EL 元件。對於所製作之有

機 EL 元件，於大氣中、常溫下進行特性測定。將對所製作之有機 EL 元件施加直流電壓時之發光特性之測定結果彙總示於表 3。

【0147】

[實施例 25]

於實施例 16 中，作為電洞阻擋層兼電子傳輸層 6 及 7 之材料，使用實施例 10 之化合物(化合物-172)代替實施例 1 之化合物(化合物-2)，於蒸鍍速度比成為化合物-172：ETM-1 = 50：50 之蒸鍍速度下進行共蒸鍍，除此以外，於相同之條件下製作有機 EL 元件。對於所製作之有機 EL 元件，於大氣中、常溫下進行特性測定。將對所製作之有機 EL 元件施加直流電壓時之發光特性之測定結果彙總示於表 3。

【0148】

[實施例 26]

於實施例 16 中，作為電洞阻擋層兼電子傳輸層 6 及 7 之材料，使用實施例 11 之化合物(化合物-184)代替實施例 1 之化合物(化合物-2)，於蒸鍍速度比成為化合物-184：ETM-1 = 50：50 之蒸鍍速度下進行共蒸鍍，除此以外，於相同之條件下製作有機 EL 元件。對於所製作之有機 EL 元件，於大氣中、常溫下進行特性測定。將對所製作之有機 EL 元件施加直流電壓時之發光特性之測定結果彙總示於表 3。

【0149】

[實施例 27]

於實施例 16 中，作為電洞阻擋層兼電子傳輸層 6 及 7 之材料，使用實施例 12 之化合物(化合物-189)代替實施例 1 之化合物(化合物-2)，於蒸鍍速度比成為化合物-189：ETM-1 = 50：50 之蒸鍍速度下進行共蒸鍍，除此以外，於相同之條件下製作有機 EL 元件。對於所製作之有

機 EL 元件，於大氣中、常溫下進行特性測定。將對所製作之有機 EL 元件施加直流電壓時之發光特性之測定結果彙總示於表 3。

【0150】

[實施例 28]

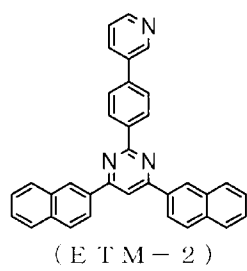
於實施例 16 中，作為電洞阻擋層兼電子傳輸層 6 及 7 之材料，使用實施例 13 之化合物(化合物-201)代替實施例 1 之化合物(化合物-2)，於蒸鍍速度比成為化合物-201：ETM-1 = 50：50 之蒸鍍速度下進行共蒸鍍，除此以外，於相同之條件下製作有機 EL 元件。對於所製作之有機 EL 元件，於大氣中、常溫下進行特性測定。將對所製作之有機 EL 元件施加直流電壓時之發光特性之測定結果彙總示於表 3。

【0151】

[比較例 1]

為了進行比較，於實施例 16 中，作為電洞阻擋層兼電子傳輸層 6 及 7 之材料，使用下述構造式之化合物(ETM-2)(例如，參照專利文獻 7)代替實施例 1 之化合物(化合物-2)，於蒸鍍速度比成為 ETM-2：ETM-1 = 50：50 之蒸鍍速度下進行共蒸鍍，除此以外，於相同之條件下製作有機 EL 元件。對於所製作之有機 EL 元件，於大氣中、常溫下進行特性測定。將對所製作之有機 EL 元件施加直流電壓時之發光特性之測定結果彙總示於表 3。

【0152】 **[化 29]**

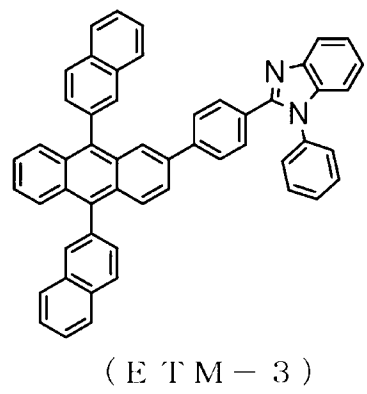


【0153】

[比較例 2]

為了進行比較，於實施例 16 中，作為電洞阻擋層兼電子傳輸層 6 及 7 之材料，使用下述構造式之化合物(ETM-3)(例如，參照專利文獻 8)代替實施例 1 之化合物(化合物-2)，於蒸鍍速度比成為 ETM-3：ETM-1＝50：50 之蒸鍍速度下進行共蒸鍍，除此以外，於相同之條件下製作有機 EL 元件。對於所製作之有機 EL 元件，於大氣中、常溫下進行特性測定。將對所製作之有機 EL 元件施加直流電壓時之發光特性之測定結果彙總示於表 3。

【0154】 [化 30]



【0155】 使用實施例 16 至實施例 28 及比較例 1、2 中所製作之有機 EL 元件，測定元件壽命，將所得之結果彙總示於表 3。元件壽命係作為將發光起始時之發光亮度(初始亮度)設為 2000 cd/m² 進行定電流驅動，直至發光亮度衰減至 1900 cd/m²(相當於將初始亮度設為 100%時之 95%：95%衰減)之時間而測定。

【0156】 [表 3]

	電洞阻擋層兼 電子傳輸層	電壓[V] (@10 mA/cm ²)	亮度[cd/m ²] (@10 mA/cm ²)	發光效率 [cd/A] (@10 mA/cm ²)	功率效率 [lm/W] (@10 mA/cm ²)	元件壽命 95%衰減
實施例 16	化合物-2/ETM-1	3.51	883	8.84	7.93	365 小時
實施例 17	化合物-40/ETM-1	3.67	863	8.63	7.40	305 小時
實施例 18	化合物-44/ETM-1	3.68	884	8.84	7.56	374 小時
實施例 19	化合物-48/ETM-1	3.71	883	8.85	7.51	286 小時
實施例 20	化合物-78/ETM-1	3.58	905	9.05	7.95	326 小時
實施例 21	化合物-104/ETM-1	3.58	897	8.97	7.88	262 小時
實施例 22	化合物-104/ETM-1	3.50	877	8.78	7.89	263 小時
實施例 23	化合物-104/ETM-1	3.54	887	8.87	7.89	373 小時
實施例 24	化合物-104/ETM-1	3.52	870	8.70	7.77	279 小時
實施例 25	化合物-104/ETM-1	3.55	909	9.10	8.05	389 小時
實施例 26	化合物-104/ETM-1	3.43	880	8.81	8.08	385 小時
實施例 27	化合物-104/ETM-1	3.50	868	8.69	7.82	344 小時
實施例 28	化合物-104/ETM-1	3.55	834	8.34	7.39	405 小時
比較例 1	ETM-2/ETM-1	3.82	805	8.05	6.62	165 小時
比較例 2	ETM-3/ETM-1	4.01	659	6.59	5.16	203 小時

【0157】 如表 3 所示，關於流過電流密度 10 mA/cm² 之電流時之驅動電壓，相對於使用上述構造式之化合物 ETM-2、3 的比較例 1、2 之有機 EL 元件之 3.82~4.01 V，於實施例 16 至實施例 28 之有機 EL 元件中，低電壓化至 3.43~3.71 V。又，於發光效率中，相對於比較例 1、2 之有機 EL 元件之 6.59~8.05 cd/A，於實施例 16 至實施例 28 之有機 EL 元件中，提高至 8.34~9.10 cd/A，於功率效率中，相對於比較例 1、2 之有機 EL 元件之 5.16~6.62 lm/W，於實施例 16 至實施例 28 之有機 EL 元件中，亦大幅提高至 7.39~8.08 lm/W。特別是，於元件壽命(95%衰減)中，相對於比較例 1、2 之有機 EL 元件中之 165~203 小時，於實施例 16 至實施例 28 之有機 EL 元件中，大幅地長壽命化至

262～405 小時。

【0158】 如此可知，本發明之有機 EL 元件與使用上述構造式之化合物 ETM-2、3 之元件相比，發光效率及功率效率優異，可實現長壽命之有機 EL 元件。

(產業上之可利用性)

【0159】 本發明之具有特定之苯并三唑環構造之化合物，由於電子注入特性較好，電洞阻擋能力優異，薄膜狀態較為穩定，故而作為有機 EL 元件用之化合物較為優異。藉由使用該化合物製作有機 EL 元件，可獲得高效率，且可降低驅動電壓，可改善耐久性。例如，可擴展至家用電器或照明之用途。

【符號說明】

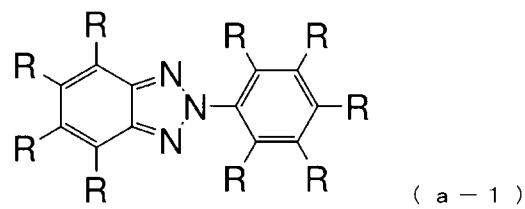
【0160】

- 1:玻璃基板
- 2:透明陽極
- 3:電洞注入層
- 4:電洞傳輸層
- 5:發光層
- 6:電洞阻擋層
- 7:電子傳輸層
- 8:電子注入層
- 9:陰極

【發明申請專利範圍】

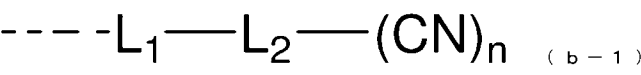
【請求項1】 一種具有苯并三唑環構造之化合物，其係由下述通式(a-1)表示：

[化1]



(式中，R各自可相同亦可不同，表示下述構造式(b-1)所表示之基、氫原子、氘原子、氟原子、氯原子、氰基、硝基、三甲基矽烷基、三苯基矽烷基、二苯基氧膦基、二苯基氧化膦基、經取代或未經取代之芳香族烴基、經取代或未經取代之芳香族雜環基、經取代或未經取代之縮合多環芳香族基、可具有取代基之碳原子數1~6之直鏈狀或支鏈狀之烷基、可具有取代基之碳原子數5~10之環烷基、可具有取代基之碳原子數2~6之直鏈狀或支鏈狀之烯基、可具有取代基之碳原子數1~6之直鏈狀或支鏈狀之烷氧基、或者可具有取代基之碳原子數5~10之環烷氧基；其中，至少1個以上之R為下述構造式(b-1)所表示之基)；

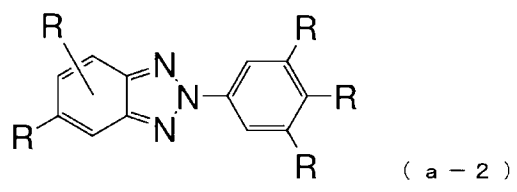
[化2]



(式中，虛線部表示鍵結部位，L₁表示單鍵、未經取代之芳香族烴基、或者未經取代之縮合多環芳香族基，L₂表示未經取代之芳香族烴基、或者未經取代之縮合多環芳香族基；n為整數1或2；其中，當n為整數2時，L₂為三價基)。

【請求項2】 如請求項1之具有苯并三唑環構造之化合物，其係由下述通式(a-2)表示：

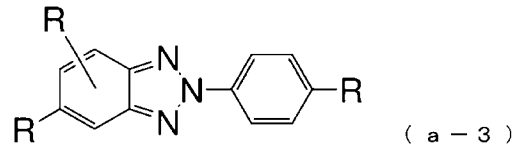
[化3]



(式中，R為與上述通式(a-1)相同之含義)。

【請求項3】 如請求項2之具有苯并三唑環構造之化合物，其係由下述通式(a-3)表示：

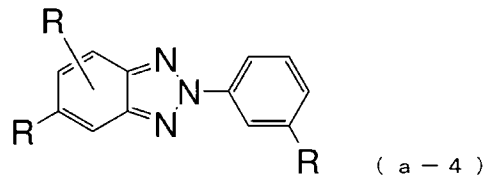
[化4]



(式中，R為與上述通式(a-1)相同之含義)。

【請求項4】 如請求項2之具有苯并三唑環構造之化合物，其係由下述通式(a-4)表示：

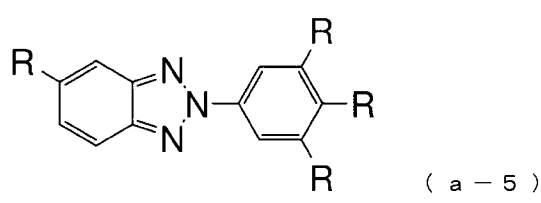
[化5]



(式中，R為與上述通式(a-1)相同之含義)。

【請求項5】 如請求項2之具有苯并三唑環構造之化合物，其係由下述通式(a-5)表示：

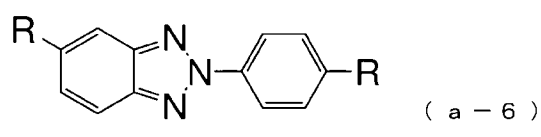
[化6]



(式中，R為與上述通式(a-1)相同之含義)。

【請求項6】 如請求項5之具有苯并三唑環構造之化合物，其係由下述通式(a-6)表示：

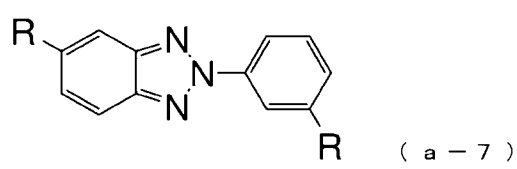
[化7]



(式中，R為與上述通式(a-1)相同之含義)。

【請求項7】 如請求項5之具有苯并三唑環構造之化合物，其係由下述通式(a-7)表示：

[化8]



(式中，R為與上述通式(a-1)相同之含義)。

【請求項8】 如請求項1至7中任一項之具有苯并三唑環構造之化合物，其中，上述構造式(b-1)中之n為整數1。

【請求項9】 如請求項1至7中任一項之具有苯并三唑環構造之化合物，其中，上述構造式(b-1)中之L₂為經取代或未經取代之芳香族烴基。

【請求項10】 一種有機電致發光元件，其係具有1對電極、及夾於其等之間之至少一層有機層者，且至少一層有機層為包含請求項1至7中任一項之具有苯并三唑環構造之化合物之有機層。

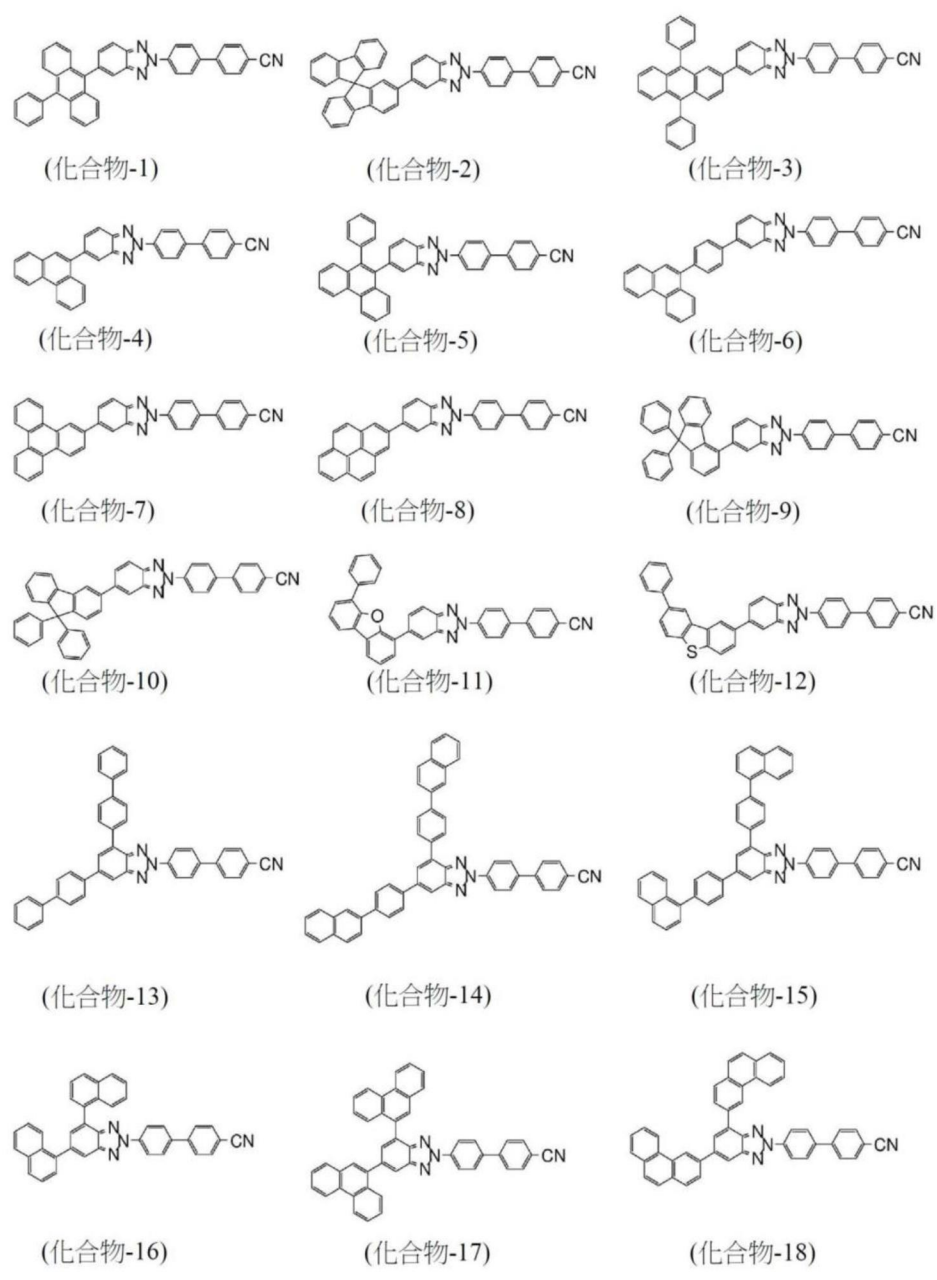
【請求項11】 如請求項10之有機電致發光元件，其中，上述包含具有苯并三唑環構造之化合物之有機層為電子傳輸層。

【請求項12】 如請求項10之有機電致發光元件，其中，上述包含具有苯并三唑環構造之化合物之有機層為電洞阻擋層。

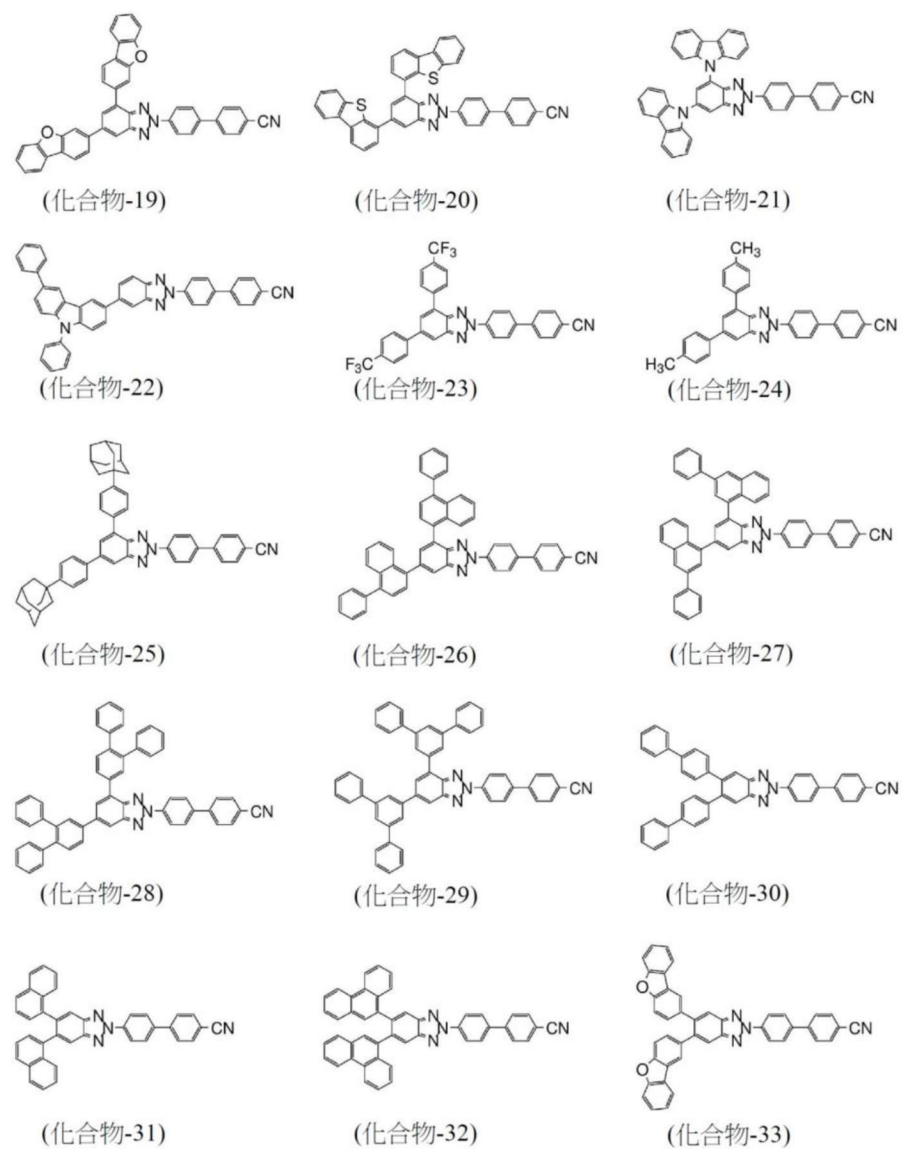
【請求項13】 如請求項10之有機電致發光元件，其中，上述包含具有苯并三唑環構造之化合物之有機層為發光層。

【請求項14】 如請求項10之有機電致發光元件，其中，上述包含具有苯并三唑環構造之化合物之有機層為電子注入層。

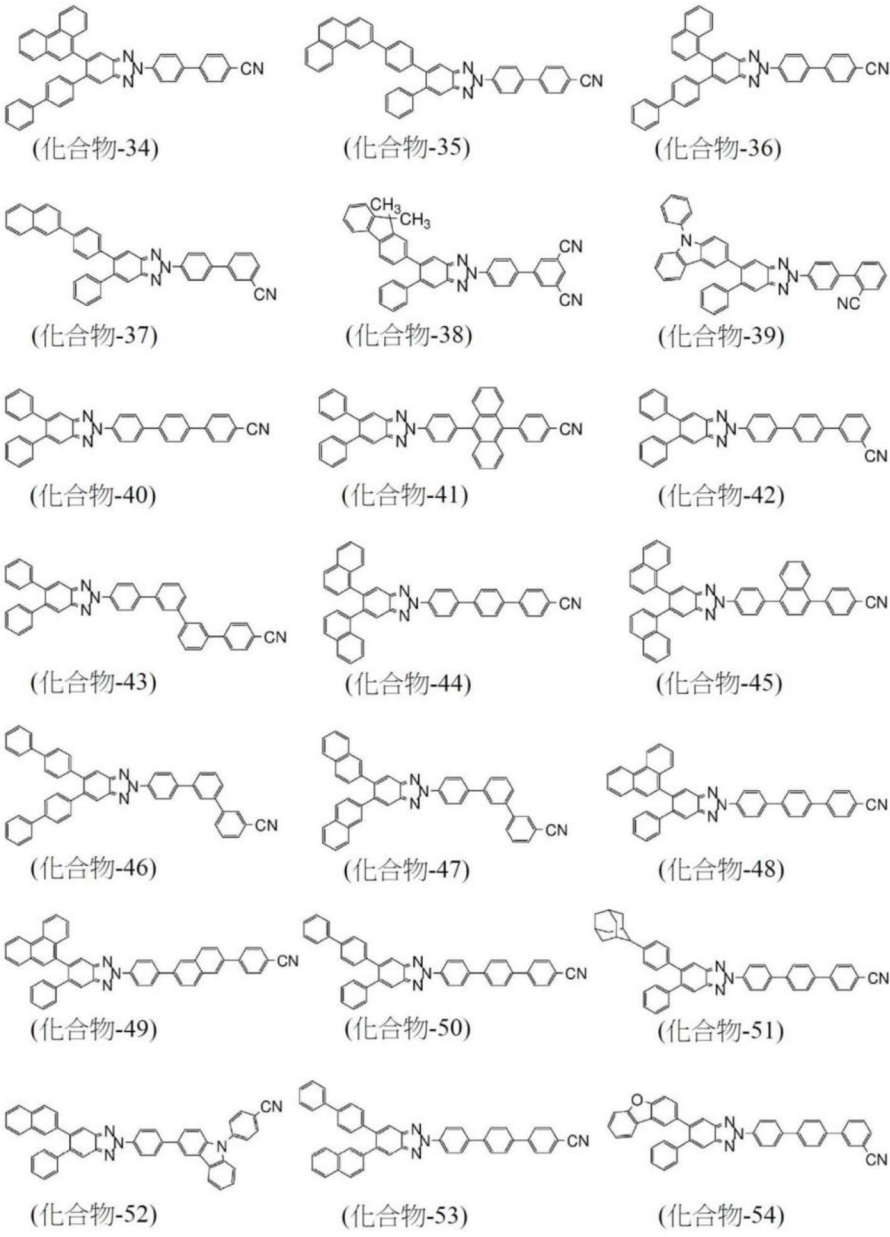
【發明圖式】



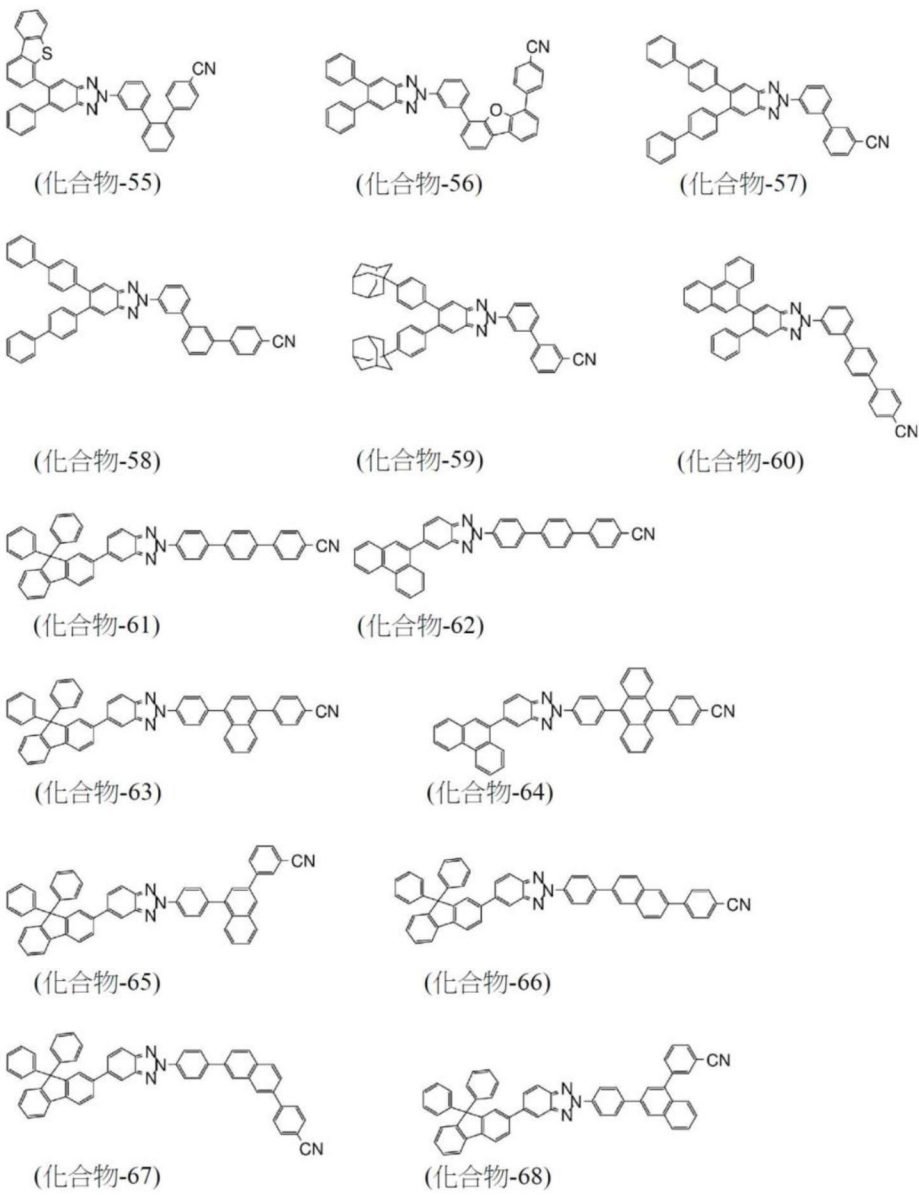
【圖1】



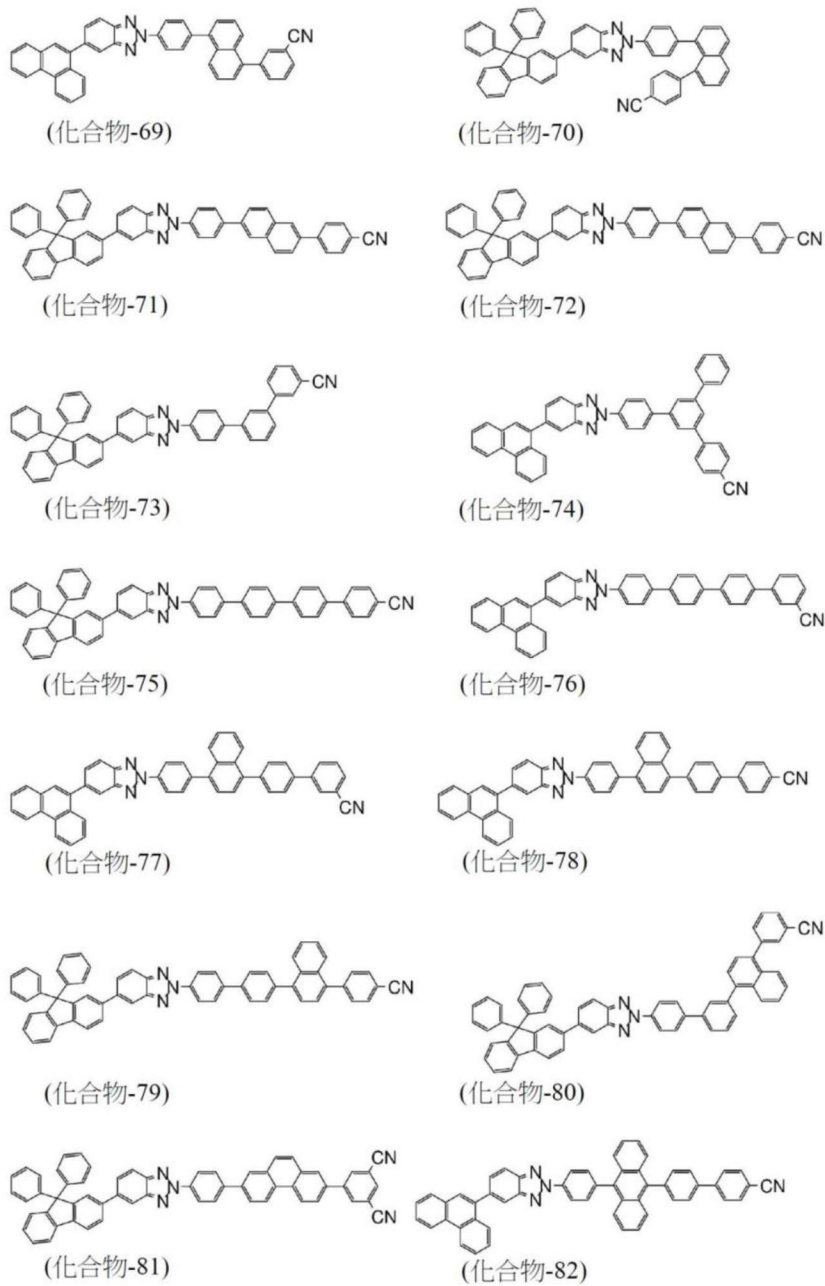
【圖2】



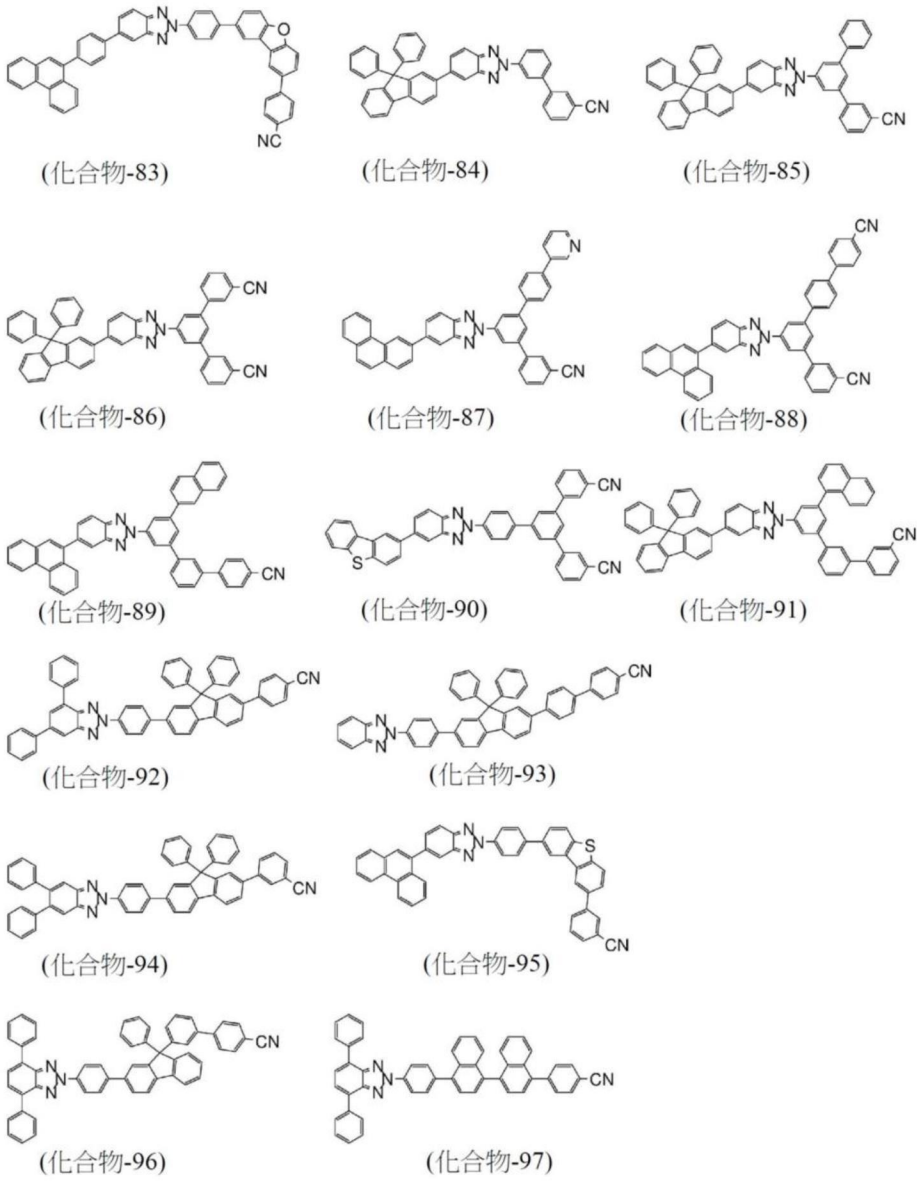
【圖3】



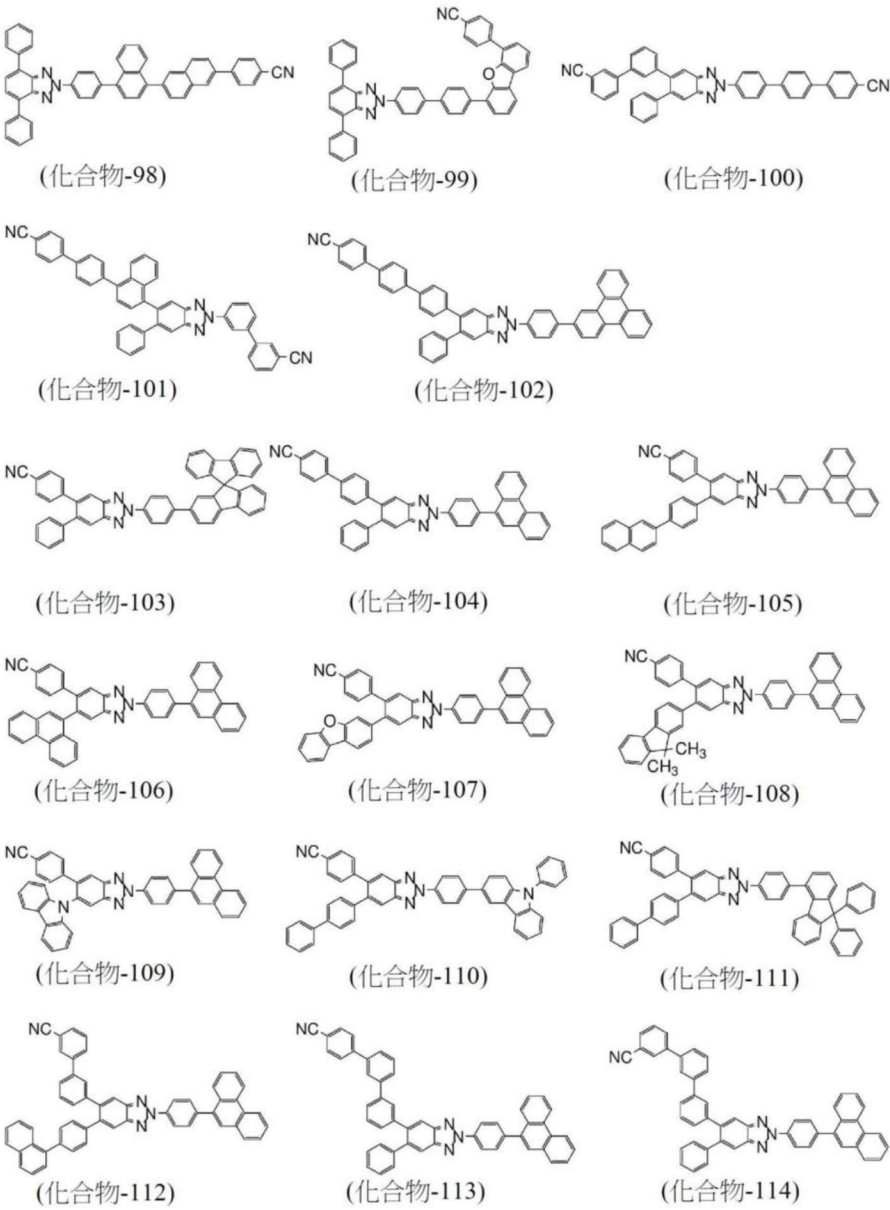
【圖4】



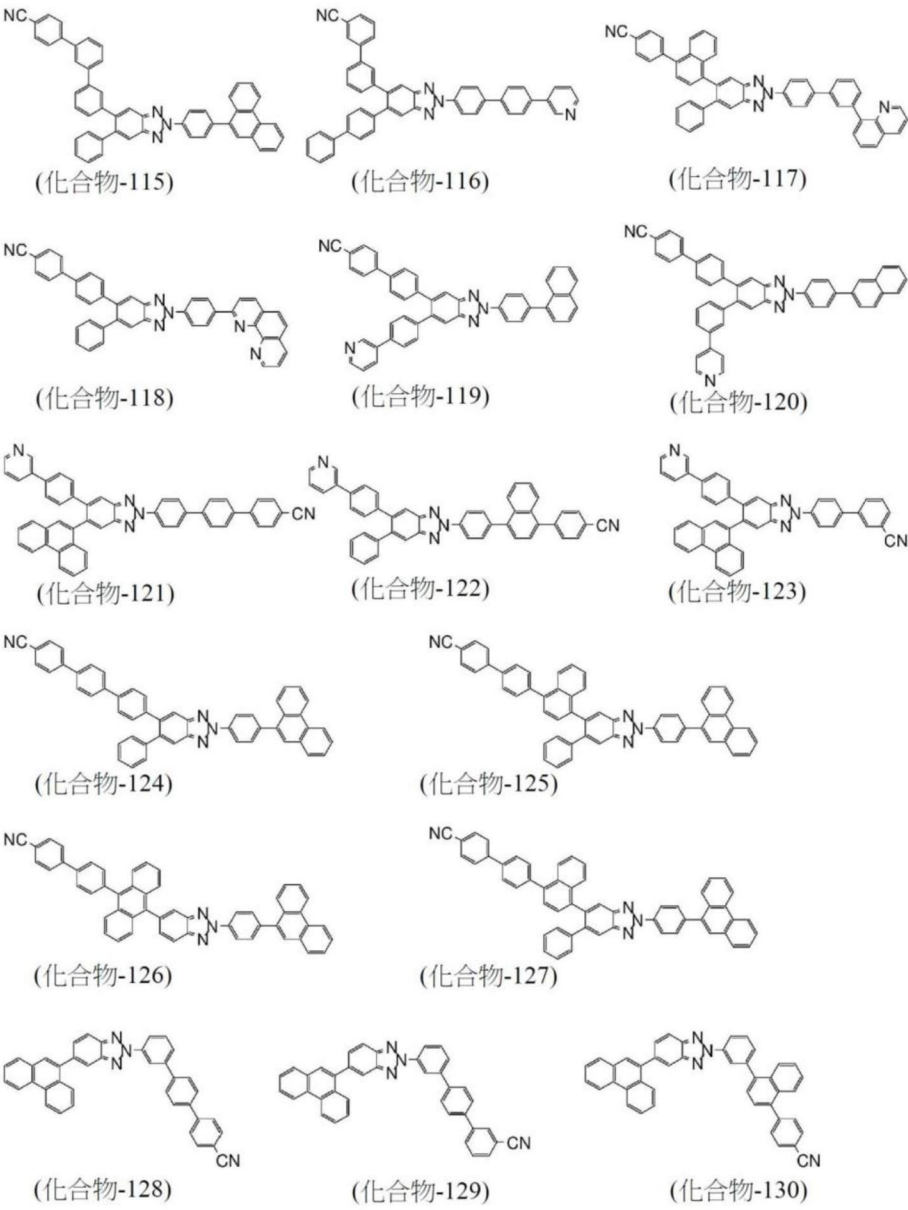
【圖5】



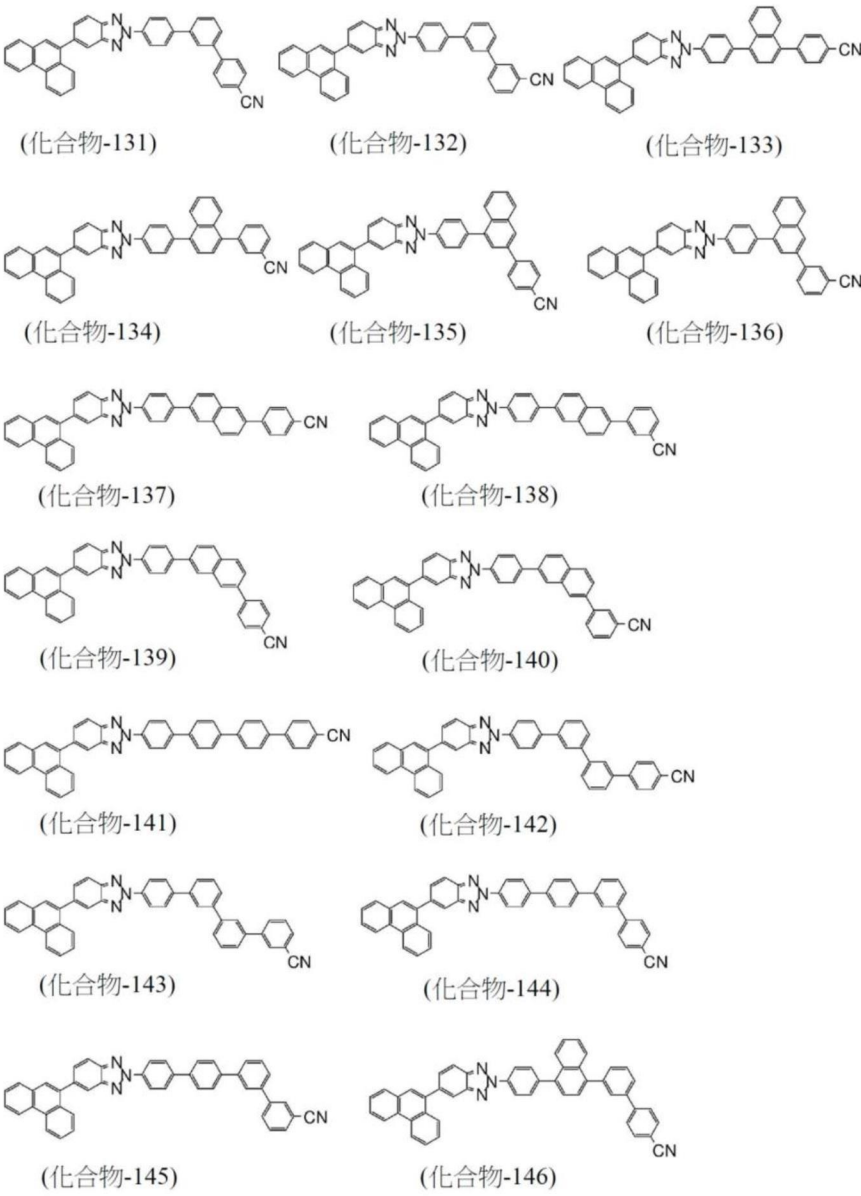
【圖6】



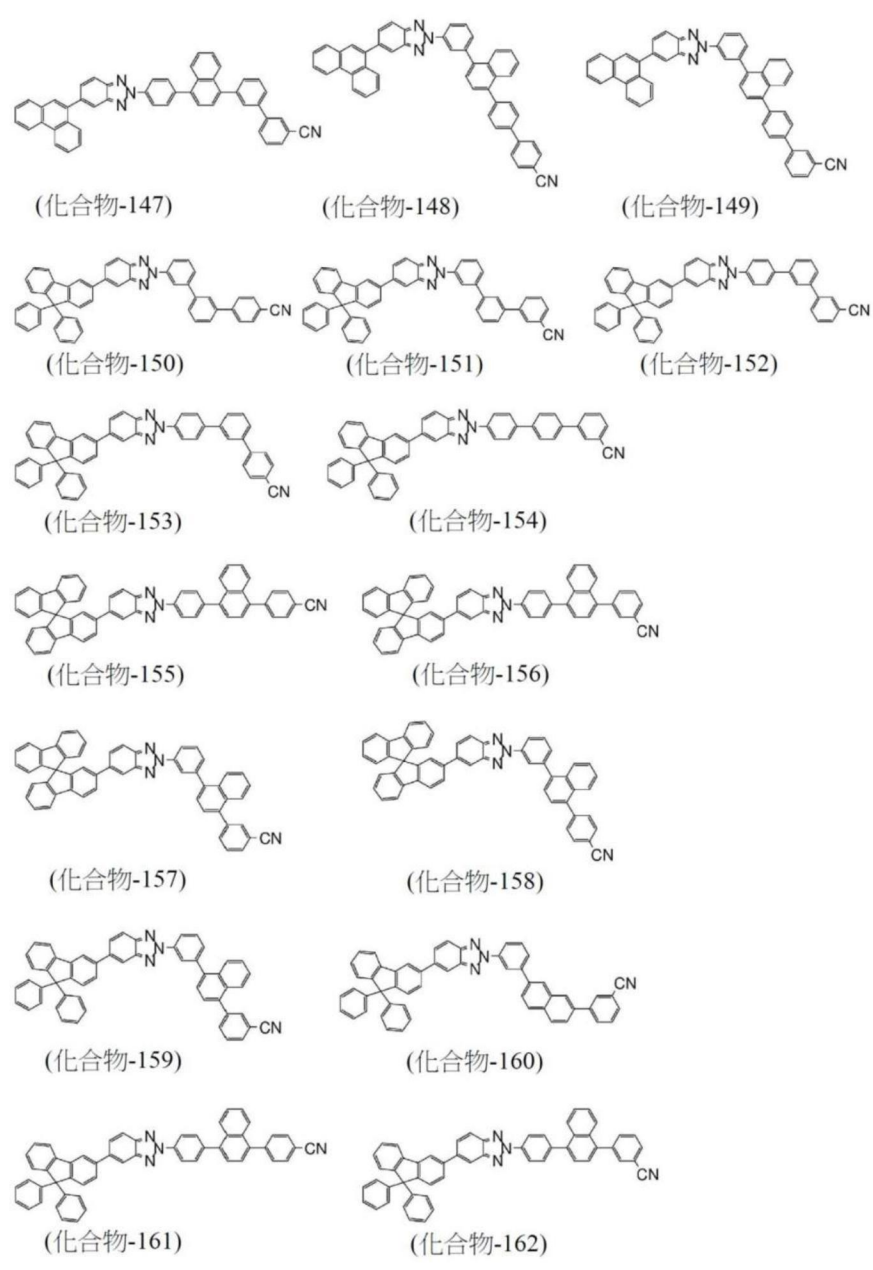
【圖7】



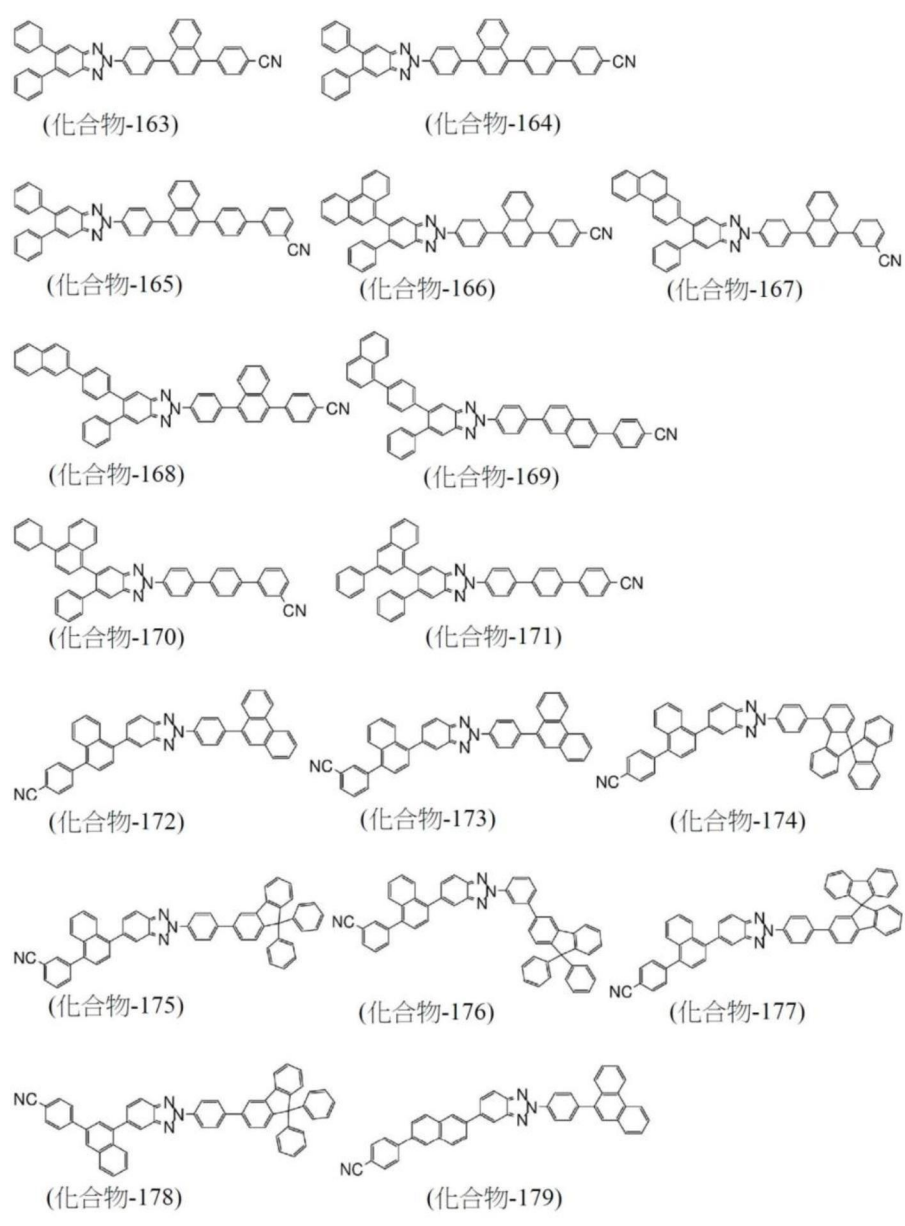
【圖8】



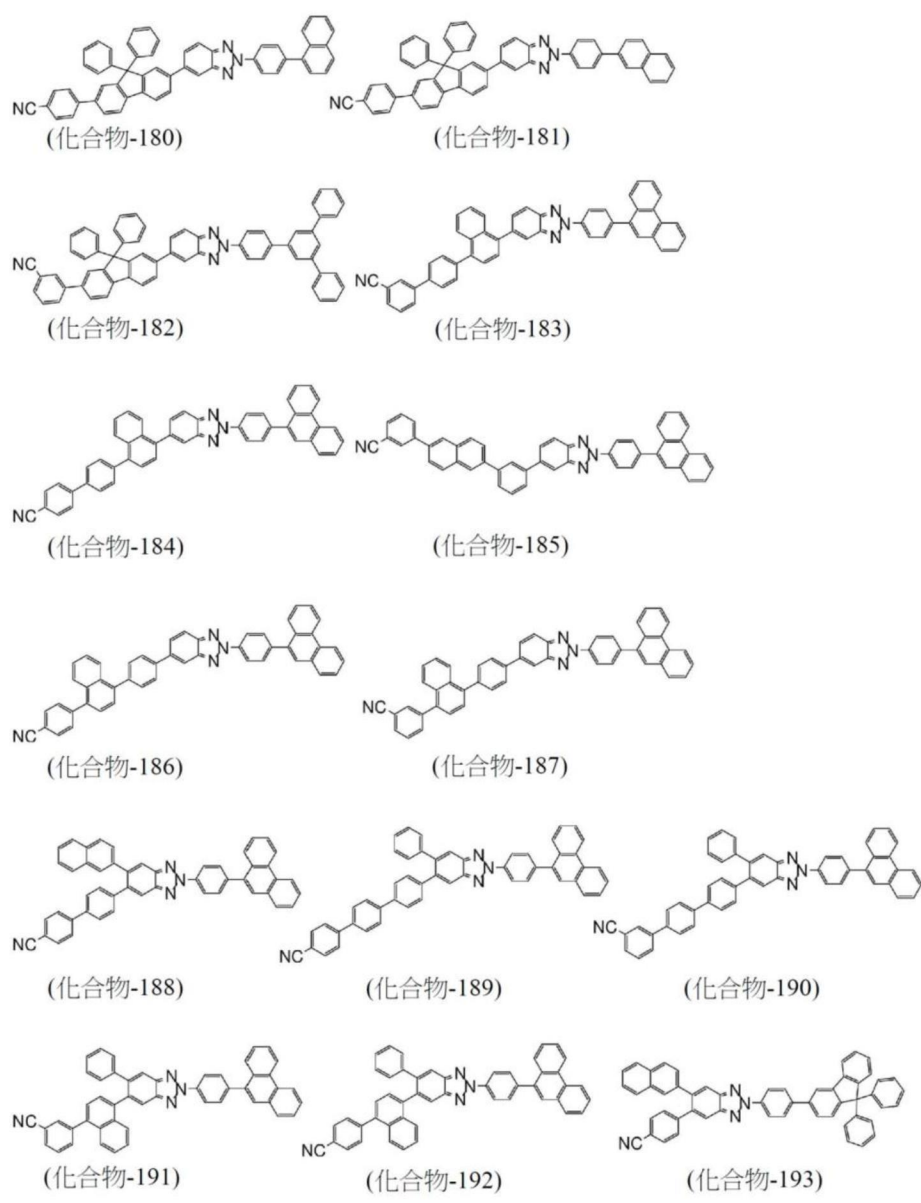
【圖9】



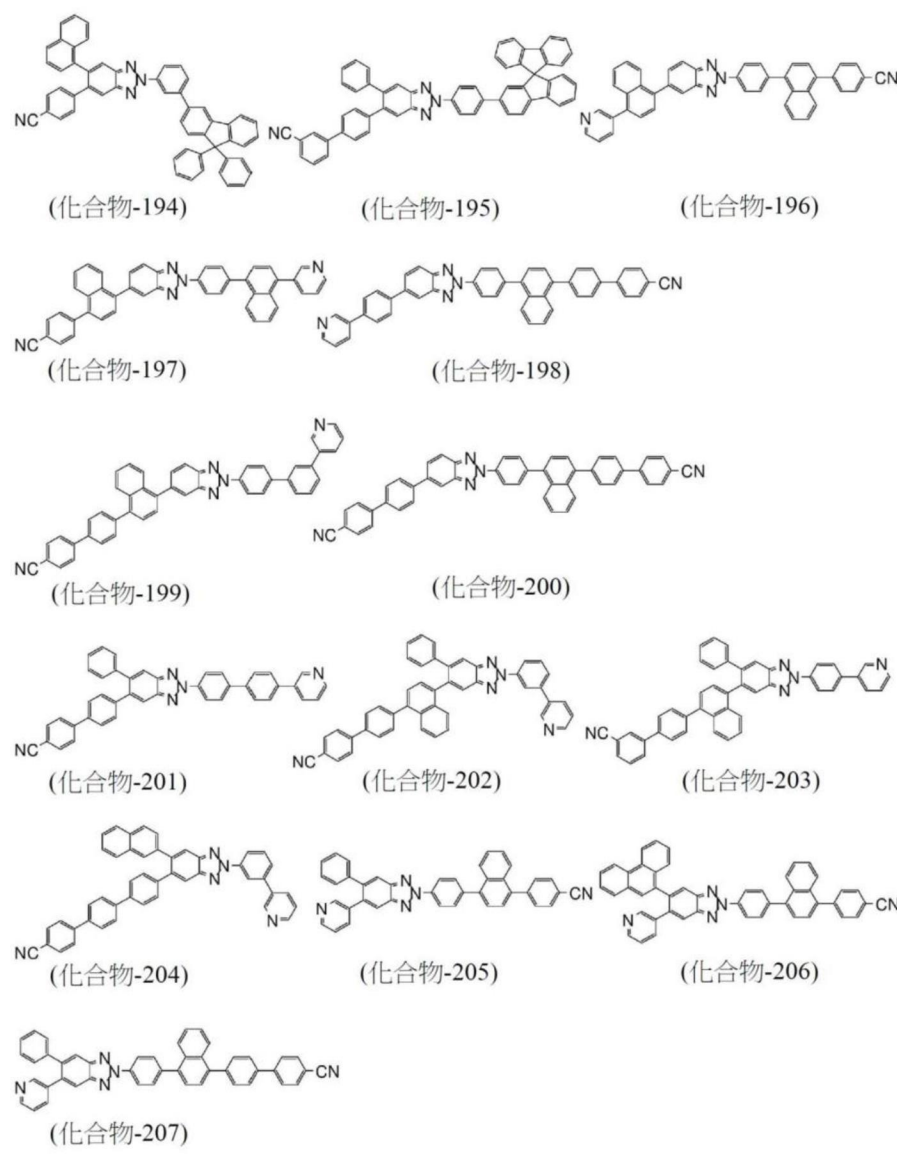
【圖10】



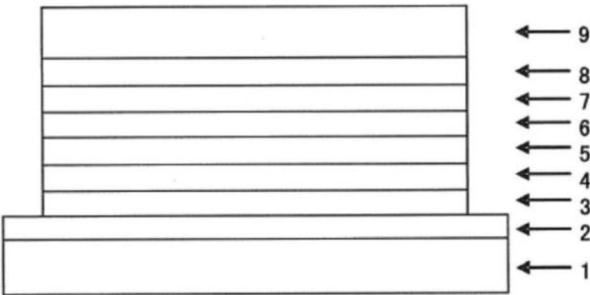
【圖11】



【圖12】



【圖13】



【圖14】