



(19)中華民國智慧財產局

(12)發明說明書公開本

(11)公開編號：TW 201920159 A

(43)公開日：中華民國 108 (2019) 年 06 月 01 日

- (21)申請案號：107129394 (22)申請日：中華民國 107 (2018) 年 08 月 23 日
- (51)Int. Cl. : C07D413/10 (2006.01) C07D413/14 (2006.01)
 C09K11/06 (2006.01) H01L51/00 (2006.01)
 H01L51/50 (2006.01) H05B33/20 (2006.01)
- (30)優先權：2017/08/23 日本 2017-159989
- (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：加瀨幸喜 KASE, KOUKI (JP)；李秀珍 LEE, SUJIN (JP)；平山雄太 HIRAYAMA, YUTA (JP)；駿河和行 SURUGA, KAZUYUKI (JP)；林秀一 HAYASHI, SHUICHI (JP)
- (74)代理人：賴正健；張耀暉
- 申請實體審查：無 申請專利範圍項數：11 項 圖式數：13 共 61 頁

(54)名稱

具有茛苳并苯并吡咯環構造之化合物以及有機電致發光元件

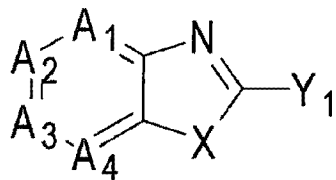
COMPOUND HAVING INDENOBENZAZOLE RING STRUCTURE AND ORGANIC ELECTROLUMINESCENT ELEMENT

(57)摘要

本發明之目的係提供一種有機化合物，作為高效率、高耐久性之有機 EL 元件用材料具有下述優異特性：在電子注入、輸送性能方面優異，具有電洞阻止能力，於薄膜狀態之穩定性高；本發明進而提供一種使用此化合物而為高效率、高耐久性之有機 EL 元件。

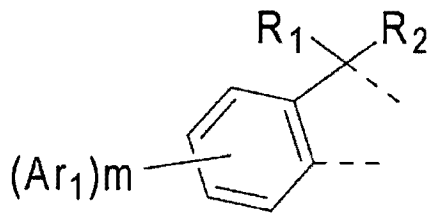
本發明之解決手段係一種具有茛苳并苯并吡咯環構造之化合物，係由下述通式(1)所表示：

(1)



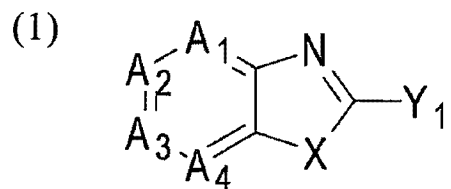
(式中，A₁ 至 A₄ 可相互相同也可不同，表示氫原子、重氫原子或是具有取代基之碳原子、具有取代或未取代之芳香族烴基之碳原子、具有取代或未取代之芳香族雜環基之碳原子、具有取代或未取代之縮合多環芳香族基之碳原子，或是氮原子，Y₁ 表示氫原子、重氫原子、取代或未取代之芳香族烴基、取代或未取代之芳香族雜環基、取代或未取代之縮合多環芳香族基、可具有取代基之碳原子數 1 至 6 之直鏈狀或分支狀之烷基、可具有取代基之碳原子數 5 至 10 之環烷基、或是可具有取代基之碳原子數 2 至 6 之直鏈狀或分支狀之烯基，X 表示氧原子或是硫原子；其中，A₁ 至 A₄ 當中相鄰接之碳原子的一處為下述構造式(A-1))。

(A-1)



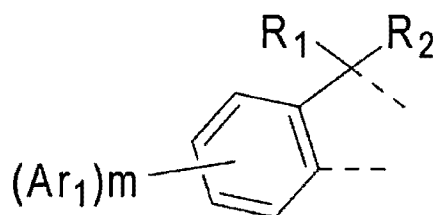
An object of the present invention is to provide an organic compound which is served as a material for an organic electroluminescence element having high efficiency and high durability and has superior transportation performance, hole blocking ability and excellent stability in thin film state; in addition, the present invention further provides an organic electroluminescence element having high efficiency and high durability by using the organic compound.

One solution provided by the present invention is to provide a compound having an indenobenzazole ring structure represented by the following general formula (1):

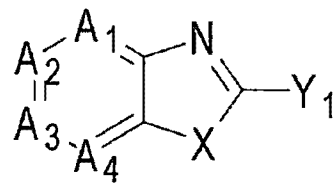


(In the formula, A_1 to A_4 may be the same as or different from each other, and represent a hydrogen atom, a deuterium atom, or a carbon atom having a substituted group, a carbon atom having a substituted or an unsubstituted aromatic hydrocarbon group, a carbon atom having a substituted or an unsubstituted aromatic heterocyclic group, a carbon atom having a substituted or an unsubstituted condensed polycyclic aromatic group, or a nitrogen atom; Y_1 represents a hydrogen atom, a heavy hydrogen atom, a substituted or an unsubstituted aromatic hydrocarbon group, a substituted or an unsubstituted aromatic heterocyclic group, a substituted or an unsubstituted condensed polycyclic aromatic group, a linear or a branched alkyl group having 1 to 6 carbon atoms which may have a substituted group, a cycloalkyl group having 5 to 10 carbon atoms which may have a substituted group, or a linear or a branched alkenyl group having 2 to 6 carbon atoms which may have a substituted group; and X represents an oxygen atom or a sulfur atom; wherein, one of the adjacent carbon atoms of A_1 to A_4 is defined as the following structural formula (A-1)).

(A-1)



特徵化學式：



發明專利說明書

【發明名稱】

具有茛苳并苯并吡咯環構造之化合物以及有機電致發光元件
/COMPOUND HAVING INDENOBENZAZOLE RING STRUCTURE
AND ORGANIC ELECTROLUMINESCENT ELEMENT

【技術領域】

[0001]

本發明係關於一種適於各種顯示裝置之自發光元件亦即有機電致發光元件(以下簡稱為有機 EL(electroluminescence)元件)的化合物與元件，詳而言之係關於一種具有茛苳并吡咯環構造的化合物、以及使用該化合物的有機 EL 元件。

【先前技術】

[0002]

有機EL元件由於為自發光性元件，相較於液晶元件來得明亮、辨識性優異而可進行鮮明的顯示，故研究蓬勃發展。

[0003]

1987年伊士曼柯達公司的C. W. Tang等人藉由開發出由各別材料來分擔各種功用的積層構造元件，而使得使用有機材料的有機EL元件邁入實用化。他們是將可輸送電子的螢光體與可輸送電洞的有機物加以積層，使得雙方的電荷注入螢光體層之中來進行發光，藉以得到在10V以下的電壓為1000cd/m²以上的高亮度(例如參見專利文獻1以及專利文獻2)。

[0004]

到目前為止，為了達成有機EL元件的實用化而進行了諸多改

良，將積層構造的各种功用加以進而細分化，藉由於基板上依序設置有陽極、電洞注入層、電洞輸送層、發光層、電子輸送層、電子注入層、陰極的電場發光元件而達成了高效率與耐久性(例如參見非專利文獻1)。

[0005]

此外，基於進而提升發光效率的目的嘗試利用三重激發態，而檢討利用磷光發光性化合物(例如參見非專利文獻2)。此外，也開發出利用熱活性化延遲螢光(TADF；Thermally Activated Delayed Fluorescence)所致發光的元件。2011年九州大學的安達等藉由使用有熱活性化延遲螢光材料的元件來實現5.3%的外部量子效率(例如參見非專利文獻3)。

[0006]

發光層一般可對於被稱為主型材料的電荷輸送性化合物摻雜螢光性化合物、磷光發光性化合物、或是輻射延遲螢光的材料來製作。如前述非專利文獻所記載般，有機EL元件中之有機材料的選擇會對於該元件之效率、耐久性等各種特性造成顯著影響(例如參見非專利文獻2)。

[0007]

對於有機EL元件而言，係使得從兩電極所注入的電荷於發光層再結合而得到發光，此時如何使得電洞、電子的兩電荷能高效率地傳送至發光層為重要。

可藉由提高電子注入性來提高其移動率，進而提高將自陽極所注入的電洞加以阻擋的電洞阻止性來提高電洞與電子行再結合的機率，甚至是將發光層內所生成的激子加以封鎖其中，來得到高效率發光。因而電子輸送材料所扮演的功能實屬重要，從而尋求一種電子注入性高、電子移動率大、電洞阻止性高、進而對電洞的耐久性高的電子輸送材料。

[0008]

此外，關於元件的壽命，材料的耐熱性、非晶質性也重要。耐熱性低的材料會因元件驅動時所生之熱，即使在低溫也發生熱分解，造成材料劣化。對於非晶質性低的材料而言，即使是短時間也會發生薄膜的結晶化，造成元件劣化。從而在所使用的材料方面需要耐熱性高、非晶質性良好的性質。

[0009]

作為代表性發光材料的三(8-羥基喹啉)鋁(以下簡稱為Alq3)一般也當作電子輸送材料來使用，但電子移動慢，且功函數為5.6eV，故電洞阻止性能未能說充分。

[0010]

作為改良電子注入性、移動率等特性的化合物，有人提議一種具有苯并三唑構造的化合物(例如專利文獻3)，將此等化合物用於電子輸送層的元件雖在發光效率等獲得改良但未能說充分，故尋求進一步的低驅動電壓化或是進一步的高發光效率化。

[0011]

此外，作為電洞阻止性優異的電子輸送材料，有人提議一種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)(例如參見專利文獻4)。

[0012]

TAZ由於功函數高達6.6eV從而電洞阻止能力高，故作為以真空蒸鍍、塗布等所製作的螢光發光層、磷光發光層之積層於陰極側的電子輸送性的電洞阻止層來使用，可助益於有機EL元件的高效率化(例如參見非專利文獻4)。

[0013]

但是，低電子輸送性為TAZ的重大課題，有必要使得TAZ與電子輸送性更高的電子輸送材料作組合來製作有機EL元件(例如參見非專

利文獻5)。

[0014]

此外，雖BCP(bathocuproine；2,9-二甲基-4,7-二苯基-1,10-啡啉)之功函數也高達6.7eV而有高電洞阻止能力，然由於玻璃轉換溫度(Tg)低至83°C故缺乏薄膜穩定性，以電洞阻止層而言未能說充分發揮功能。

[0015]

上述任一材料均於膜穩定性上不足，或是阻止電洞的功能不充分。為了改善有機EL元件的元件特性，仍在尋求一種在電子之注入、輸送性能以及電洞阻止能力方面優異、於薄膜狀態的穩定性高的有機化合物。

[先前技術文獻]

[專利文獻]

[0016]

專利文獻1：日本特開平8-048656號公報。

專利文獻2：日本專利第3194657號公報。

專利文獻3：國際公開第2013/054764號。

專利文獻4：日本專利登錄第2734341號。

專利文獻5：日本特開2010-83862公報。

專利文獻6：國際公開第2015/038503號。

專利文獻7：國際公開第2014/009310號。

專利文獻8：國際公開第2017/111439號。

[非專利文獻]

[0017]

非專利文獻1：應用物理學會第9次講習會文稿集55頁至61頁(2001)。

非專利文獻2：應用物理學會第9次講習會文稿集23頁至31頁

(2001)。

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

非專利文獻4：第50次應用物理學相關聯合演講會28p-A-6演講文稿集1413頁(2003)。

非專利文獻5：應用物理學會有機分子、生物電子學小組委員會會刊11卷1號13頁至19頁(2000)。

非專利文獻6：J. Org. chcm., 71, 1802(2006)。

非專利文獻7：J. Org. chcm., 79, 6310(2014)。

【發明內容】

(發明所欲解決之課題)

[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元件用材料所具有之優異特性包括：在電子注入、輸送性能方面優異、具有電洞阻止能力、於薄膜狀態之穩定性高；另提供一種使用此化合物而為高效率、高耐久性之有機EL元件。

[0019]

本發明所欲提供之有機化合物應具備之物理特性可舉出：(1)電子之注入特性優良；(2)電子之移動率高；(3)電洞阻止能力優異；(4)薄膜狀態穩定；(5)耐熱性優異。此外，本發明所欲提供之有機EL元件所應具備之物理特性可舉出：(1)發光效率以及功率效率高；(2)發光起始電壓低；(3)實用驅動電壓低；(4)長壽命。

(用以解決課題之手段)

[0020]

是以，本發明者等為了達成上述目的，著眼於屬於電子親和性的苯并吡咯環的氮原子具有配位於金屬的能力、耐熱性優異，而設計並化學合成出具有苯并吡咯環構造的化合物，使用該化合物試作各種有

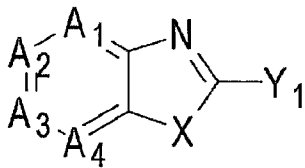
機EL元件，並鑽研進行元件之特性評價的結果，從而完成了本發明。

[0021]

〔1〕亦即，本發明係一種具有茚并苯并吡咯環構造之化合物，係以下述通式(1)所表示：

[0022]

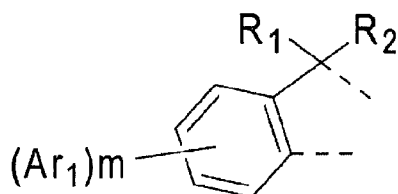
(1)



(式中， A_1 至 A_4 可相互相同也可不同，表示氫原子、重氫原子或是具有取代基之碳原子、具有取代或未取代之芳香族經基之碳原子、具有取代或未取代之芳香族雜環基之碳原子、具有取代或未取代之縮合多環芳香族基之碳原子、或是氮原子， Y_1 表示氫原子、重氫原子、取代或未取代之芳香族經基、取代或未取代之芳香族雜環基、或是取代或未取代之縮合多環芳香族基、可具有取代基之碳原子數1至6之直鏈狀或分支狀之烷基、可具有取代基之碳原子數5至10之環烷基、或是可具有取代基之碳原子數2至6之直鏈狀或分支狀之烯基， X 表示氧原子或是硫原子；其中， A_1 至 A_4 當中相鄰接之碳原子的一處為下述構造式(A-1))

[0023]

(A-1)



(式中，以斷線部作為鍵結部位， R_1 、 R_2 可相互相同也可不同，表示

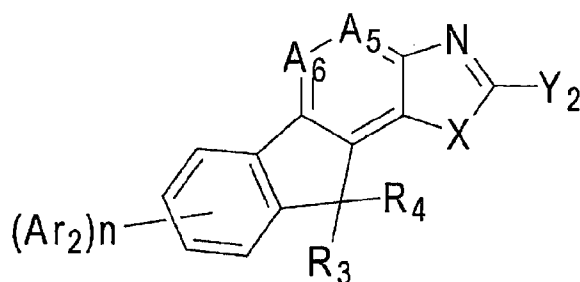
可具有取代基之碳原子數1至6之直鏈狀或分支狀之烷基、可具有取代基之碳原子數5至10之環烷基、或是可具有取代基之碳原子數2至6之直鏈狀或分支狀之烯基， Ar_1 表示重氫原子、氟原子、氯原子、氰基、硝基、三甲基矽基、三苯基矽基、取代或未取代之芳香族烴基、取代或未取代之芳香族雜環基、取代或未取代之縮合多環芳香族基、可具有取代基之碳原子數1至6之直鏈狀或分支狀之烷基、可具有取代基之碳原子數5至10之環烷基、或是可具有取代基之碳原子數2至6之直鏈狀或分支狀之烯基， m 表示0至5之整數；當 m 為2以上之整數時，複數個鍵結於同一苯環上的 Ar_1 可相互相同也可不同；此外，苯環與取代於苯環之取代基、或是複數取代於同一苯環之取代基彼此也可經由單鍵、取代或未取代之亞甲基、氧原子或是硫原子來相互鍵結形成環。)

[0024]

〔2〕此外，本發明係如〔1〕所記載之具有茛并苯并吡咯環構造之化合物，其中前述通式(1)係以下述通式(2)所表示：

[0025]

(2)



(式中， A_5 、 A_6 可相互相同也可不同，表示氫原子、重氫原子或是具有取代基之碳原子、具有取代或未取代之芳香族烴基之碳原子、具有取代或未取代之芳香族雜環基之碳原子、具有取代或未取代之縮合多環芳香族基之碳原子、或是氮原子， Y_2 表示氫原子、重氫原子、取代或未取代之芳香族烴基、取代或未取代之芳香族雜環基、取代或未取代之縮合多環芳香族基、可具有取代基之碳原子數1至6之直鏈狀或分

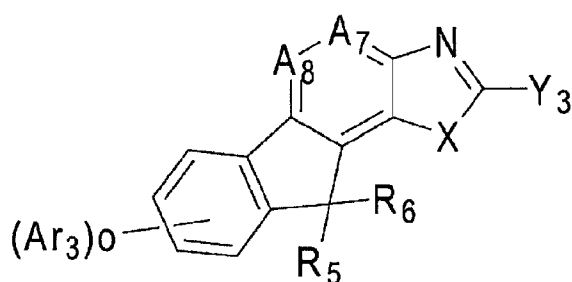
支狀之烷基、可具有取代基之碳原子數5至10之環烷基、或是可具有取代基之碳原子數2至6之直鏈狀或分支狀之烯基，X表示氧原子或是硫原子， R_3 、 R_4 可相互相同也可不同，表示可具有取代基之碳原子數1至6之直鏈狀或分支狀之烷基、可具有取代基之碳原子數5至10之環烷基、或是可具有取代基之碳原子數2至6之直鏈狀或分支狀之烯基， Ar_2 表示重氫原子、氟原子、氯原子、氰基、硝基、三甲基矽基、三苯基矽基、取代或未取代之芳香族烴基、取代或未取代之芳香族雜環基、或是取代或未取代之縮合多環芳香族基、可具有取代基之碳原子數1至6之直鏈狀或分支狀之烷基、可具有取代基之碳原子數5至10之環烷基、或是可具有取代基之碳原子數2至6之直鏈狀或分支狀之烯基，n表示0至5之整數；當n為2以上之整數時，複數個鍵結於同一苯環上之 Ar_2 可相互相同也可不同；此外，苯環與取代於苯環之取代基、或是複數取代於同一苯環之取代基彼此也可經由單鍵、取代或未取代之亞甲基、氧原子或是硫原子來相互鍵結形成環。)

[0026]

〔3〕此外本發明係如〔2〕所記載之具有茛并苯并吡咯環構造之化合物，其中前述通式(2)係以下述通式(3)所表示：

[0027]

(3)



(式中， A_7 、 A_8 可相互相同也可不同，表示氫原子、重氫原子或是具有取代基之碳原子、具有取代或未取代之芳香族烴基之碳原子、具有取代或未取代之芳香族雜環基之碳原子、或是具有取代或未取代之縮

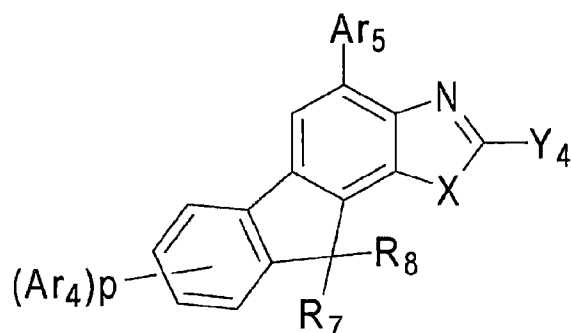
合多環芳香族基之碳原子， Y_3 表示氫原子、重氫原子、取代或未取代之芳香族烴基、取代或未取代之芳香族雜環基、取代或未取代之縮合多環芳香族基、可具有取代基之碳原子數1至6之直鏈狀或分支狀之烷基、可具有取代基之碳原子數5至10之環烷基、或是可具有取代基之碳原子數2至6之直鏈狀或分支狀之烯基， X 表示氧原子或是硫原子， R_5 、 R_6 可相互相同也可不同，表示可具有取代基之碳原子數1至6之直鏈狀或分支狀之烷基、可具有取代基之碳原子數5至10之環烷基、或是可具有取代基之碳原子數2至6之直鏈狀或分支狀之烯基， Ar_3 表示重氫原子、氟原子、氯原子、氰基、硝基、三甲基矽基、三苯基矽基、取代或未取代之芳香族烴基、取代或未取代之芳香族雜環基、取代或未取代之縮合多環芳香族基、可具有取代基之碳原子數1至6之直鏈狀或分支狀之烷基、可具有取代基之碳原子數5至10之環烷基、或是可具有取代基之碳原子數2至6之直鏈狀或分支狀之烯基， o 表示0至5之整數；當 o 為2以上之整數時，複數個鍵結於同一苯環上的 Ar_3 可相互相同也可不同；此外，苯環與取代於苯環之取代基、或是複數取代於同一苯環之取代基彼此也可經由單鍵、取代或未取代之亞甲基、氧原子或是硫原子來相互鍵結形成環。)

[0028]

〔4〕此外本發明係如〔3〕所記載之具有茚并苯并吡咯環構造之化合物，其中前述通式(3)係以下述通式(4)所表示：

[0029]

(4)



(式中， Y_4 表示氫原子、重氫原子、取代或未取代之芳香族烴基、取代或未取代之芳香族雜環基、取代或未取代之縮合多環芳香族基、可具有取代基之碳原子數1至6之直鏈狀或分支狀之烷基、可具有取代基之碳原子數5至10之環烷基、或是可具有取代基之碳原子數2至6之直鏈狀或分支狀之烯基， X 表示氧原子或是硫原子， R_7 、 R_8 可相互相同也可不同，表示可具有取代基之碳原子數1至6之直鏈狀或分支狀之烷基、可具有取代基之碳原子數5至10之環烷基、或是可具有取代基之碳原子數2至6之直鏈狀或分支狀之烯基， Ar_4 表示重氫原子、氟原子、氯原子、氰基、硝基、三甲基矽基、三苯基矽基、取代或未取代之芳香族烴基、取代或未取代之芳香族雜環基、或是取代或未取代之縮合多環芳香族基、可具有取代基之碳原子數1至6之直鏈狀或分支狀之烷基、可具有取代基之碳原子數5至10之環烷基、或是可具有取代基之碳原子數2至6之直鏈狀或分支狀之烯基， Ar_5 表示氫原子、重氫原子、取代或未取代之芳香族烴基、取代或未取代之芳香族雜環基、或是取代或未取代之縮合多環芳香族基， p 表示0至5之整數；當 p 為2以上之整數時，複數個鍵結於同一苯環上之 Ar_4 可相互相同也可不同；此外，苯環與取代於苯環之取代基、或是複數取代於同一苯環之取代基彼此也可經由單鍵、取代或未取代之亞甲基、氧原子或是硫原子來相互鍵結形成環。)

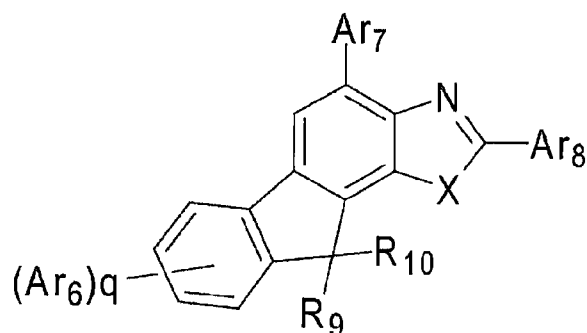
[0030]

〔5〕此外本發明係如請求項〔4〕所記載之具有茛并苯并吡咯環構造之化合物，其中前述通式(4)係以下述通式(5)所表示：

[0031]

(5)

[0031]



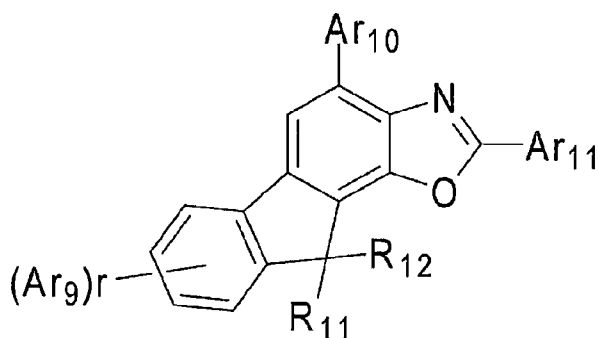
(式中，X表示氧原子或是硫原子， R_9 、 R_{10} 可相互相同也可不同，表示可具有取代基之碳原子數1至6之直鏈狀或分支狀之烷基、可具有取代基之碳原子數5至10之環烷基、或是可具有取代基之碳原子數2至6之直鏈狀或分支狀之烯基， Ar_6 表示重氫原子、氟原子、氯原子、氰基、硝基、三甲基矽基、三苯基矽基、取代或未取代之芳香族烴基、取代或未取代之芳香族雜環基、取代或未取代之縮合多環芳香族基、可具有取代基之碳原子數1至6之直鏈狀或分支狀之烷基、可具有取代基之碳原子數5至10之環烷基、或是可具有取代基之碳原子數2至6之直鏈狀或分支狀之烯基， Ar_7 、 Ar_8 可相互相同也可不同，表示取代或未取代之芳香族烴基、取代或未取代之芳香族雜環基、或是取代或未取代之縮合多環芳香族基，q表示0至5之整數；當q為2以上之整數時，複數個鍵結於同一苯環上之 Ar_6 可相互相同也可不同；此外，苯環與取代於苯環之取代基、或是複數取代於同一苯環之取代基彼此也可經由單鍵、取代或未取代之亞甲基、氧原子或是硫原子來相互鍵結形成環；其中， Ar_7 、 Ar_8 定為氫原子、重氫原子以外者。)

[0032]

〔6〕此外本發明係如〔5〕所記載之具有茛并苯并吡咯環構造之化合物，其中前述通式(5)係以下述通式(6)所表示：

[0033]

(6)



(式中， R_{11} 、 R_{12} 可相互相同也可不同，表示可具有取代基之碳原子數1至6之直鏈狀或分支狀之烷基、可具有取代基之碳原子數5至10之環烷基、或是可具有取代基之碳原子數2至6之直鏈狀或分支狀之烯基， Ar_9 表示重氫原子、氟原子、氯原子、氰基、硝基、三甲基矽基、三苯基矽基、取代或未取代之芳香族烴基、取代或未取代之芳香族雜環基、取代或未取代之縮合多環芳香族基、可具有取代基之碳原子數1至6之直鏈狀或分支狀之烷基、可具有取代基之碳原子數5至10之環烷基、或是可具有取代基之碳原子數2至6之直鏈狀或分支狀之烯基， Ar_{10} 、 Ar_{11} 可相互相同也可不同，表示取代或未取代之芳香族烴基、取代或未取代之芳香族雜環基、或是取代或未取代之縮合多環芳香族基， r 表示0至5之整數；當 r 為2以上之整數時，複數個鍵結於同一苯環上之 Ar_9 可相互相同也可不同；此外，苯環與取代於苯環之取代基、或是複數取代於同一苯環之取代基彼此也可經由單鍵、取代或未取代之亞甲基、氧原子或是硫原子來相互鍵結形成環；其中， Ar_{10} 、 Ar_{11} 係定為氫原子、重氫原子以外者。)

[0034]

〔7〕此外，本發明係一種有機電致發光元件，具有一對之電極與夾在中間之至少一層之有機層，上述〔1〕至〔6〕任一項所記載之具有茛并苯并吡咯環構造之化合物係作為至少1層之有機層之構成材料來使用。

[0035]

〔8〕此外，本發明係如上述〔7〕所記載之有機電致發光元件，

其中使用有前述具有茛苳并苯并吡咯環構造之化合物的有機層為電子輸送層。

[0036]

[9] 此外，本發明係如上述〔7〕所記載之有機電致發光元件，其中使用有前述具有茛苳并苯并吡咯環構造之化合物的有機層為電洞阻止層。

[0037]

[10] 此外，本發明係如上述〔7〕所記載之有機電致發光元件，其中使用有前述具有茛苳并苯并吡咯環構造之化合物的有機層為發光層。

[0038]

[11] 此外，本發明係如上述〔7〕所記載之有機電致發光元件，其中使用有前述具有茛苳并苯并吡咯環構造之化合物的有機層為電子注入層。

[0039]

作為通式(1)至通式(6)中之以A₁至A₆所表示之「具有取代或未取代之芳香族烴基之碳原子」、「具有取代或未取代之芳香族雜環基之碳原子」、或是「具有取代或未取代之縮合多環芳香族基之碳原子」當中之「芳香族烴基」、「芳香族雜環基」、或是「縮合多環芳香族基」，具體上係選自：苯基、聯苯基、聯三苯基、萘基、蔥基、菲基、芴基、螺二芴基、茛苳基、茈基、茈基、丙[二]烯合萘基、聯伸三苯基、吡啶基、嘧啶基、三嗪基、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、吡啶基、吡啶基、吡啶基、二苯并呋喃基、二苯并噻吩基、萘基、吡啶基、吡啶基、以及吡啶基等，尚包括由碳數6至30所構成之芳基、或是由碳數2至20所構成之雜芳基。

[0040]

作為通式(1)至通式(6)中以A₁至A₆所表示之「具有取代基之碳原子」、「具有取代芳香族烴基之碳原子」、「具有取代芳香族雜環基之碳原子」、或是「具有取代縮合多環芳香族基之碳原子」當中之「取代基」，具體上可舉出重氫原子、氰基、硝基；氟原子、氯原子、溴原子、碘原子等的鹵素原子；三甲基矽基、三苯基矽基等的矽基；甲基、乙基、丙基等的碳原子數1至6之直鏈狀或分支狀之烷基；甲氧基、乙氧基、丙氧基等的碳原子數1至6之直鏈狀或分支狀之烷氧基；乙烯基、丙烯基等的烯基；苯氧基、甲苯氧基等的芳氧基；苄氧基、苯乙氧基等的芳烷氧基；苯基、聯苯基、聯三苯基、萘基、蒽基、菲基、芴基、螺二芴基、茚基、茚基、茚基、丙[二]烯合萘基、聯伸三苯基等的芳香族烴基或是縮合多環芳香族基；吡啶基、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、咪唑基、苯并噁唑基、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、吡啶基等之芳香族雜環基類的基，此等取代基可進而被前述例示之取代基所取代。此外，此等取代基與經取代之苯環或是複數取代於同一苯環之取代基彼此可經由單鍵、取代或未取代之亞甲基、氧原子或是硫原子而相互鍵結形成環。

[0041]

作為通式(1)至通式(4)中之以Y₁至Y₄所表示之「取代或未取代之芳香族烴基」、「取代或未取代之芳香族雜環基」、或是「取代或未取代之縮合多環芳香族基」當中之「芳香族烴基」、「芳香族雜環基」、或是「縮合多環芳香族基」，可舉出和前述通式(1)至通式(6)中關於以A₁至A₆所表示之「芳香族烴基」、「芳香族雜環基」、或是「縮合多環芳香族基」所示同樣者，可採行之態樣也可舉出同樣者。

[0042]

作為通式(1)至通式(4)中之以Y₁至Y₄所表示之「可具有取代基之碳原子數1至6之直鏈狀或分支狀之烷基」、「可具有取代基之碳原子

數5至10之環烷基」、或是「可具有取代基之碳原子數2至6之直鏈狀或分支狀之烯基」當中之「碳原子數1至6之直鏈狀或分支狀之烷基」、「碳原子數5至10之環烷基」、或是「碳原子數2至6之直鏈狀或分支狀之烯基」，具體上可舉出甲基、乙基、正丙基、異丙基、正丁基、異丁基、第三丁基、正戊基、異戊基、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、丙烯基、異丙烯基、以及2-丁烯基等。

[0043]

作為通式(1)至通式(4)中之以 Y_1 至 Y_4 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」、「可具有取代基之碳原子數1至6之直鏈狀或分支狀之烷基」、「可具有取代基之碳原子數5至10之環烷基」、或是「可具有取代基之碳原子數2至6之直鏈狀或分支狀之烯基」當中的「取代基」，可舉出和前述通式(1)至通式(6)中關於以 A_1 至 A_6 所表示之「取代基」所示同樣者，可採行之態樣也可舉出同樣者。

[0044]

作為通式(1)至通式(6)中之以 Ar_1 至 Ar_{11} 所表示之「取代或未取代之芳香族烴基」、「取代或未取代之芳香族雜環基」或是「取代或未取代之縮合多環芳香族基」當中之「芳香族烴基」、「芳香族雜環基」或是「縮合多環芳香族基」，可舉出和前述通式(1)至通式(6)中關於以 A_1 至 A_6 所表示之「芳香族烴基」、「芳香族雜環基」或是「縮合多環芳香族基」所示同樣者，可採行之態樣也可舉出同樣者。

[0045]

作為通式(1)至通式(6)中之以 Ar_1 至 Ar_{11} 所表示之「可具有取代基之碳原子數1至6之直鏈狀或分支狀之烷基」、「可具有取代基之碳原子數5至10之環烷基」、或是「可具有取代基之碳原子數2至6之直鏈狀或分支狀之烯基」當中之「碳原子數1至6之直鏈狀或分支狀之烷

基」、「碳原子數5至10之環烷基」、或是「碳原子數2至6之直鏈狀或分支狀之烯基」，可舉出和前述通式(1)至通式(4)中關於以 Y_1 至 Y_4 所表示之「碳原子數1至6之直鏈狀或分支狀之烷基」、「碳原子數5至10之環烷基」、或是「碳原子數2至6之直鏈狀或分支狀之烯基」所示同樣者，可採行之態樣也可舉出同樣者。

[0046]

作為通式(1)至通式(6)中之以 Ar_1 至 Ar_{11} 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」、「可具有取代基之碳原子數1至6之直鏈狀或分支狀之烷基」、「可具有取代基之碳原子數5至10之環烷基」、或是「可具有取代基之碳原子數2至6之直鏈狀或分支狀之烯基」當中之「取代基」，可舉出和前述通式(1)至通式(6)中關於以 A_1 至 A_6 所表示之「取代基」所示同樣者，可採行之態樣也可舉出同樣者。

[0047]

作為通式(1)至通式(6)中之以 R_1 至 R_{12} 所表示之「可具有取代基之碳原子數1至6之直鏈狀或分支狀之烷基」、「可具有取代基之碳原子數5至10之環烷基」、或是「可具有取代基之碳原子數2至6之直鏈狀或分支狀之烯基」當中之「碳原子數1至6之直鏈狀或分支狀之烷基」、「碳原子數5至10之環烷基」、或是「碳原子數2至6之直鏈狀或分支狀之烯基」，可舉出和前述通式(1)至通式(4)中關於以 Y_1 至 Y_4 所表示之「碳原子數1至6之直鏈狀或分支狀之烷基」、「碳原子數5至10之環烷基」、或是「碳原子數2至6之直鏈狀或分支狀之烯基」所示同樣者，可採行之態樣也可舉出同樣者。

[0048]

作為通式(1)至通式(6)中之以 R_1 至 R_{12} 所表示之「可具有取代基之碳原子數1至6之直鏈狀或分支狀之烷基」、「可具有取代基之碳原子數5至10之環烷基」、或是「可具有取代基之碳原子數2至6之直鏈狀

或分支狀之烯基」當中之「取代基」，可舉出和前述通式(1)至通式(6)中關於以A₁至A₆所表示之「取代基」所示同樣者，可採行之態樣也可舉出同樣者。

[0049]

本發明之有機EL元件所適切使用之以前述通式(1)所表示之具有茛苳并苯并吡咯環構造之化合物可作為有機EL元件之電子注入層、電子輸送層或是電洞阻止層之構成材料來使用。

作為電子移動率高之電子注入層或是電子輸送層之材料為令人喜好之化合物。

[0050]

本發明之有機EL元件由於使用有在電子注入、輸送性能、薄膜穩定性、耐久性優異之有機EL元件用材料，故相較於以往之有機EL元件可提高從電子輸送層往發光層之電子輸送效率而提高發光效率，並可降低驅動電壓而提高有機EL元件之耐久性。

從而可實現高效率、低驅動電壓、長壽命之有機EL元件。

(發明效果)

[0051]

本發明之有機EL元件藉由選擇可有效展現電子注入、輸送功用之特定具有茛苳并苯并吡咯環構造之化合物，可使得電子高效率地從電子輸送層注入、輸送至發光層，藉此，可實現在電子之注入、輸送性能、薄膜穩定性、耐久性方面優異，且高效率、低驅動電壓、長壽命之有機EL元件。

依據本發明，可改良以往之有機EL元件之發光效率以及驅動電壓、以及耐久性。

【圖式簡單說明】

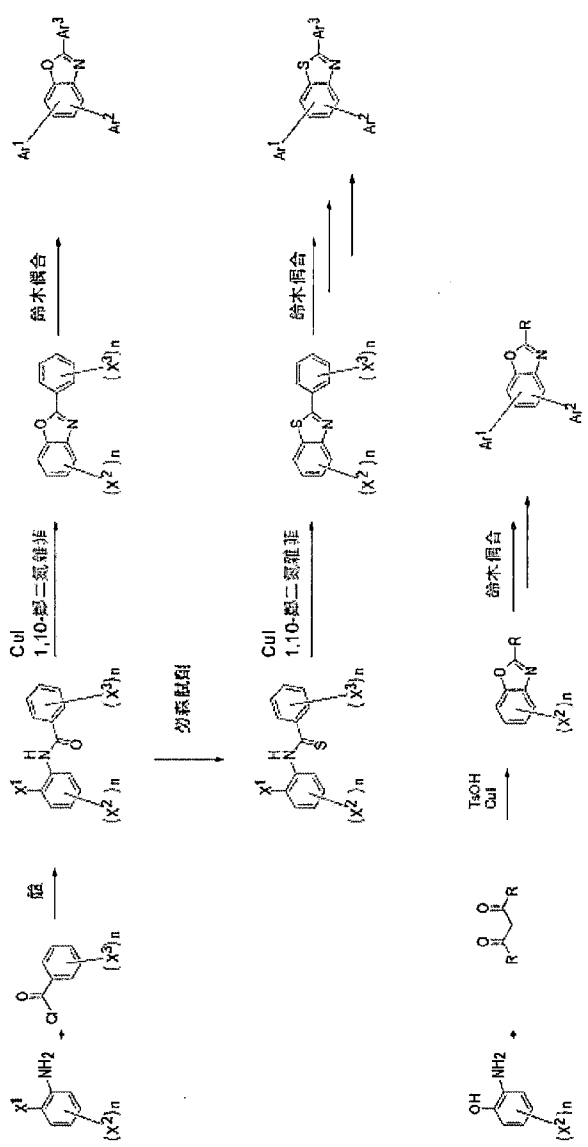
[0052]

圖1係顯示本發明之例示化合物1至例示化合物15之構造圖。
圖2係顯示本發明之例示化合物16至例示化合物30之構造圖。
圖3係顯示本發明之例示化合物31至例示化合物45之構造圖。
圖4係顯示本發明之例示化合物46至例示化合物60之構造圖。
圖5係顯示本發明之例示化合物61至例示化合物74之構造圖。
圖6係顯示本發明之例示化合物75至例示化合物89之構造圖。
圖7係顯示本發明之例示化合物90至例示化合物107之構造圖。
圖8係顯示本發明之例示化合物108至例示化合物122之構造圖。
圖9係顯示本發明之例示化合物123至例示化合物137之構造圖。
圖10係顯示本發明之例示化合物138至例示化合物152之構造圖。
圖11係顯示本發明之例示化合物153至例示化合物167之構造圖。
圖12係顯示本發明之例示化合物168至例示化合物176之構造圖。
圖13係顯示實施例6至實施例8、比較例1至比較例3之有機EL元件構成之圖。

【實施方式】

[0053]

本發明之具有苯并吡咯環構造之化合物為新穎的化合物。此等化合物例如以下所示般，化合物本身能依照周知方法來合成(例如參見專利文獻5、6與非專利文獻6、7)。



[0054]

可適切使用於本發明之有機EL元件之以前述通式(1)所表示之苯并噁唑化合物之中，較佳化合物之具體例如以下圖1至圖12所示，但不限定於此等化合物。

[0055]

以通式(1)至通式(6)所表示之具有茚并苯并吡咯環構造之化合物之精製係以管柱層析所作精製、以氧化矽凝膠、活性碳、活性白土等所作吸附精製、以溶媒所作再結晶或晶析法、昇華精製法等來進行。化合物之鑑識係藉由NMR(nuclear magnetic resonance;核磁共振)分析來進行。物性值方面係進行了熔點、玻璃轉換溫度(Tg; glass transition temperature)與功函數之測定。熔點係成為蒸鍍性之指標，玻璃轉換溫度(Tg)係成為薄膜狀態之穩定性之指標，功函數係成為電洞輸送性、電洞阻止性之指標。

[0056]

熔點與玻璃轉換溫度(Tg)係使用粉體而藉由高感度微差掃描熱卡計(Bruker AXS製造，DSC3100SA)來測定。

[0057]

功函數係於ITO(Indium Tin Oxide; 氧化銻錫)基板上製作100nm之薄膜，藉由電離電位測定裝置(住友重機械工業股份有限公司製造，PYS-202)來得到。

[0058]

本發明之有機EL元件之構造可舉出基板上依序由陽極、電洞注入層、電洞輸送層、發光層、電子輸送層、電子注入層以及陰極所構成者；或是於電洞輸送層與發光層之間具有電子阻止層者；或是於發光層與電子輸送層之間具有電洞阻止層者。此等多層構造中有機層可省略數層或是兼作數層，例如可成為兼作電洞注入層與電洞輸送層之構成、成為兼作電子注入層與電子輸送層之構成等。此外，也可成為

使得具有同一機能之有機層來積層2層以上之構成、使得電洞輸送層來積層2層之構成、使得發光層來積層2層之構成、使得電子輸送層來積層2層之構成等。

[0059]

本發明之有機EL元件之陽極係使用ITO、金之類功函數大的電極材料。本發明之有機EL元件之電洞注入層除了使用以銅酞酐青為代表之卟啉化合物以外，尚可使用星爆(Starburst)型之三苯胺衍生物、分子中具有2個以上三苯胺構造或是咪唑基構造且分別具有以單鍵或是不含雜原子之2價基作連結之構造的芳胺化合物等、以及六氫雜苯并菲類的受體性雜環化合物或塗布型高分子材料。此等材料除了蒸鍍法以外亦可藉由旋塗法、噴墨法等周知方法來進行薄膜形成。

[0060]

作為本發明之有機EL元件之電洞輸送層，可使用N,N'-二苯基-N,N'-二(間甲苯基)-聯苯胺(以下簡稱為TPD)、N,N'-二苯基-N,N'-二(α -萘基)-聯苯胺(以下簡稱為NPD)、N,N,N',N'-四聯苯基聯苯胺等的聯苯胺衍生物、1,1-雙〔(二-4-甲苯基胺基)苯基〕環己烷(以下簡稱為TAPC)、分子中具有2個以上三苯胺構造或是咪唑基構造且具有分別以單鍵或是不含雜原子之2價基來連結之構造的芳胺化合物等。此等材料可單獨成膜，也可和其他材料混合而成膜作為單層使用，也可作為利用上述複數材料所單獨成膜之層彼此的積層構造、利用上述複數材料所混合成膜之層彼此的積層構造、或是利用上述複數材料所混合成膜之層和利用上述複數材料所單獨成膜之層相混合成膜之層的積層構造。此外，作為電洞之注入、輸送層，可使用聚(3,4-二氧乙基噻吩)(以下簡稱為PEDOT)/聚(苯乙烯磺酸鹽)(以下簡稱為PSS)等之塗布型高分子材料。此等材料除了蒸鍍法以外，也可藉由旋塗法、噴墨法等周知方法來進行薄膜形成。

[0061]

此外，電洞注入層或是電洞輸送層可使用對該層所通常使用之材料進而摻雜有三溴苯基胺六氟銻、軸烯衍生物(例如參見專利文獻7)者、或是使用部分構造具有TPD等聯苯胺衍生物之構造的高分子化合物等。

[0062]

本發明之有機EL元件之電子阻止層可使用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〕芴、1,3-雙(咔唑-9-基)苯(以下簡稱為mCP)、2,2-雙(4-咔唑-9-基)金剛烷(以下簡稱為Ad-CZ)等咔唑衍生物、以9-〔4-(咔唑-9-基)苯基〕-9-〔4-(三苯基矽基)苯基〕-9H-芴為代表之具有三苯基矽基與三芳胺構造之化合物等的具有電子阻止作用之化合物。此等可單獨成膜，亦可和其他材料混合而成膜作為單層使用，也可作為利用上述複數材料所單獨成膜之層彼此的積層構造、利用上述複數材料所混合成膜之層彼此的積層構造、或是利用上述複數材料所混合成膜之層和利用上述複數材料所單獨成膜之層相混合而成膜之層的積層構造。此等材料除了蒸鍍法以外，也可藉由旋塗法、噴墨法等周知方法來進行薄膜形成。

[0063]

作為本發明之有機EL元件之發光層，除了本發明之具有茛苳并苯并吡咯環構造之化合物以外，尚可使用以Alq3為首之喹啉衍生物之金屬錯合物、以及各種之金屬錯合物、蔥衍生物、雙苯乙炔基苯衍生物、芘衍生物、噁唑衍生物、聚(對伸苯[伸]乙炔)衍生物等。此外，發光層能以主型材料與摻雜物材料來構成，在主型材料方面較佳使用蔥衍生物，此外，也可使用以本發明之具有茛苳并苯并吡咯環構造之化合物為首之前述發光材料，以及以縮合環之部分構造的形式具有吡啶環的雜環化合物、以縮合環之部分構造的形式具有咔唑環的雜環化合物、咔唑衍生物、噻唑衍生物、苯并咪唑衍生物、聚二烷芴衍生物等。此外作為摻雜物材料可使用喹吡酮、香豆素、紅螢烯、芘以及此等之

衍生物、苯并噁喃衍生物、若丹明衍生物、胺基苯乙烯衍生物等。此等可單獨成膜，亦可和其他材料混合而成膜作為單層使用，也可作為利用上述複數材料所單獨成膜之層彼此的積層構造、利用上述複數材料所混合成膜之層彼此的積層構造、或是和利用上述複數材料所單獨成膜之層相混合而成膜之層的積層構造。

[0064]

此外，發光材料也可使用磷光發光體。作為磷光發光體可使用銥、鉑等之金屬錯合物之磷光發光體。可使用Ir(ppy)₃(三[2-苯基吡啶]合銥)等之綠色磷光發光體、FIrpic(雙[4,6-二氟苯基吡啶-N,C2]吡啶甲醯合銥)、FIr6(雙[2,4-二氟苯基吡啶]四(1-吡啶基)硼酸銥)等之藍色磷光發光體、Btp2Ir(acac)(2-吡啶-苯并噻吩銥乙醯丙酮)等之紅色磷光發光體等，此時作為主型材料在電洞注入、輸送性之主型材料方面除了4,4'-二(N-吡啶基)聯苯(以下簡稱為CBP)或TCTA(4,4',4'-三(吡啶基-9-基)三苯胺)、mCP(間二(N-吡啶基)苯)等之吡啶衍生物等以外，尚可使用具有本發明之苯并吡咯環構造與吡啶并吡啶環構造之化合物。作為電子輸送性之主型材料可使用對-雙(三苯基矽基)苯(以下簡稱為UGH2)、2,2',2''-(1,3,5-伸苯基)-三(1-苯基-1H-苯并咪唑)(以下簡稱為TPBI)等，可製作高性能之有機EL元件。

[0065]

磷光性發光材料摻雜於主型材料時，為了避免濃度驟減，相對於發光層全體以1重量百分比至30重量百分比之範圍並藉由共蒸鍍來摻雜為佳。

[0066]

此外，發光材料也可使用PIC-TRZ(2-聯苯基-4,6-雙(12-苯并吡啶[2,3a]吡啶-11-基)-1,3,5-三嗪)、CC2TA(2,4-雙[3-(9H-吡啶-9-基)-9H-吡啶-9-基]-6-苯基-1,3,5-三嗪)、PXZ-TRZ(吩噁嗪-三苯基三嗪)、4CZIPN(2,4,5,6-四(9H-吡啶-9-基)間苯二甲腈)等之CDCB(吡啶二氟苯)

衍生物等之輻射出延遲螢光之材料(例如參見非專利文獻3)。此等材料除了蒸鍍法以外，也可藉由旋塗法、噴墨法等周知方法來進行薄膜形成。

[0067]

作為本發明之有機EL元件之電洞阻止層除了使用本發明之具有茛苳并苯并吡咯環構造之化合物以外，尚可使用浴銅靈(bathocuproine；以下簡稱為BCP)等之啡啉衍生物、BALq(三(8-羥基喹啉)鋁)等之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、三嗪衍生物等之具有電洞阻止作用之化合物。此等材料也可兼作為電子輸送層之材料。此等可單獨成膜，亦可和其他材料混合而成膜作為單層使用，也可作為利用上述複數材料所單獨成膜之層彼此的積層構造、利用上述複數材料所混合成膜之層彼此的積層構造、或是和利用上述複數材料所單獨成膜之層相混合而成膜之層的積層構造。此等材料除了蒸鍍法以外，也可藉由旋塗法、噴墨法等周知方法來進行薄膜形成。

[0068]

作為本發明之有機EL元件之電子輸送層，除了使用本發明之具有茛苳并苯并吡咯環構造之化合物以外，尚可使用以Alq₃、BALq為首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、三嗪衍生物、噁二唑衍生物、吡啶衍生物、苯并咪唑衍生物、噻二吡啶衍生物、噁衍生物、碳化二亞胺衍生物、喹噁啉衍生物、吡啶并吡啶衍生物、啡啉衍生物、矽咯衍生物等。此等可單獨成膜，亦可和其他材料混合而成膜作為單層使用，也可作為利用上述複數材料所單獨成膜之層彼此的積層構造、利用上述複數材料所混合成膜之層彼此的積層構造、或是和利用上述複數材料所單獨成膜之層相混合而成膜之層的積層構造。此等材料除了蒸鍍法以外，也可藉由旋塗法、噴墨法等周知方法來進行薄膜形成。

[0069]

作為本發明之有機EL元件之電子注入層，除了使用本發明之具有茛苳并苯并吡咯環構造之化合物以外，尚可使用氟化鋰、氟化銫等之鹼金屬鹽、氟化鎂等之鹼土類金屬鹽、鋰喹啉酚等之喹啉酚衍生物之金屬錯合物、氧化鋁等之金屬氧化物、或是鐿(Yb)、釷(Sm)、鈣(Ca)、銦(Sr)、銫(Cs)等之金屬等，但在電子輸送層與陰極之較佳選擇中可省略此等材料。

[0070]

再者，電子注入層或電子輸送層可使用對於該層所通常使用之材料進而N摻雜有銫等金屬所成材料。

[0071]

作為本發明之有機EL元件之陰極，係將鋁之類的功函數低之電極材料、或是鎂銀合金、鎂銻合金、鋁鎂合金之類的功函數更低之合金作為電極材料使用。

[0072]

以下，針對本發明之實施形態以實施例來具體說明，但本發明在不超脫要旨之範圍內，並不受限於以下實施例。

實施例1

[0073]

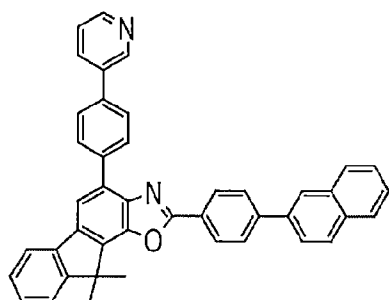
<10,10-二甲基-2- { 4-(萘-2-基)-苯基 } -4- { 4-(吡啶-3-基)-苯基 } -茛 [1,2,g] 苯并噁唑(化合物-105)之合成>

於反應容器加入10,10-二甲基-2-(4-氯苯基)-4- { 4-(吡啶-3-基)-苯基 } -茛 [1,2,g] 苯并噁唑：6.0g、2-萘硼酸：3.1g、三(二亞苳基丙酮)二鈮(0)：0.6g、三環己基膦：0.7g、磷酸三鉀5.0g，於1,4-二噁烷/H₂O混合溶媒下回流攪拌一晚。放置冷卻之後分液，自水層以醋酸乙酯進行萃取之後濃縮，將所得之粗生成物以管柱層析(擔體：氧化矽凝膠，洗提液：二氯甲烷/醋酸乙酯)進行精製，得到10,10-二甲基-2- { 4-(萘

-2-基)-苯基}-4-{4-(吡啶-3-基)-苯基}-茚〔1,2,g〕苯并噁唑(化合物-105)之白色粉體：3.7g(產率52%)。

[0074]

(化合物-105)



[0075]

針對所得到的白色粉體使用NMR來鑑識構造。

以¹H-NMR(CDCl₃)檢測出以下30個氫之訊號。

δ (ppm) = 9.06(1H), 8.68(1H), 8.32(2H), 8.12(1H), 8.07(1H), 7.99(1H), 7.98-7.76(9H), 7.63(2H), 7.58-7.33(6H), 1.44(6H)。

實施例2

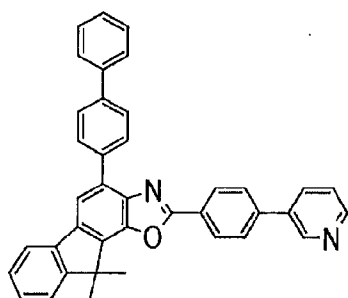
[0076]

<10,10-二甲基-4-(聯苯-4-基)-2-{4-(吡啶-3-基)-苯基}-茚〔1,2,g〕苯并噁唑(化合物-4)之合成>

於反應容器加入10,10-二甲基-2-(4-氯苯基)-4-{4-(吡啶-3-基)-苯基}-茚〔1,2,g〕苯并噁唑：15.0g、3-吡啶基硼酸：4.8g、三(二亞苄基丙酮)二鈣(0)：0.7g、三環磷：0.8g、磷酸三鉀：5.0g，於1,4-二噁烷/H₂O混合溶媒下回流攪拌一晚。放置冷卻之後，進行分液萃取後濃縮來得到粗生成物。粗生成物藉由管柱層析(擔體：氧化矽凝膠，洗提液：二氯甲烷/醋酸乙酯)進行精製，得到10,10-二甲基-4-(聯苯-4-基)-2-{4-(吡啶-3-基)-苯基}-茚〔1,2,g〕苯并噁唑(化合物-4)之白色粉體：6.7g(產率41%)。

[0077]

(化合物-4)



[0078]

針對所得到的白色粉體使用NMR來鑑識構造。

以¹H-NMR(CDCl₃)檢測出以下28個氫之訊號。

$\delta(\text{ppm}) = 8.92(1\text{H}), 8.65(1\text{H}), 8.32(2\text{H}), 7.98(1\text{H}), 7.94(1\text{H}), 7.88-7.76(5\text{H}), 7.70(2\text{H}), 7.57(2\text{H}), 7.52(2\text{H}), 7.47-7.33(5\text{H}), 1.44(6\text{H})$ 。

實施例3

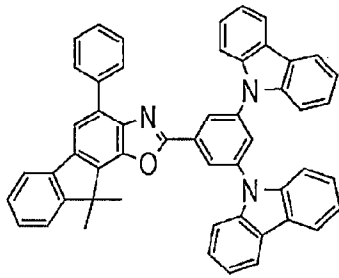
[0079]

<10,10-二甲基-2- { 4-(萘-1-基)-苯基 } -4- { 4-(吡啶-3-基)-苯基 } -萘 [1,2,g] 苯并噁唑(化合物-132)之合成>

於反應容器加入10,10-二甲基-2-(4-氯苯基)-4- { 4-(吡啶-3-基)-苯基 } -萘 [1,2,g] 苯并噁唑：10.5g、吡啶：5.4g、三(二亞苄基丙酮)二鈦(0)：1.0g、三環磷：1.2g、磷酸三鉀：8.7g，於1,4-二噁烷/H₂O混合溶媒下回流攪拌一晚。放置冷卻之後分液，自水層以醋酸乙酯進行萃取之後濃縮，將所得之粗生成物以管柱層析(擔體：氧化矽凝膠，洗提液：二氯甲烷/醋酸乙酯)進行精製，得到10,10-二甲基-2- { 4-(萘-1-基)-苯基 } -4- { 4-(吡啶-3-基)-苯基 } -萘 [1,2,g] 苯并噁唑(化合物-132)之白色粉體：3.1g(產率46%)。

[0080]

(化合物-132)



[0081]

針對所得到的白色粉體使用NMR來鑑識構造。

以¹H-NMR(CDCl₃)檢測出以下35個氫之訊號。

$\delta(\text{ppm}) = 8.52(2\text{H})$, $8.19(4\text{H})$, $7.94(1\text{H})$, $7.92(1\text{H})$, $7.82(1\text{H})$,
 $7.57(4\text{H})$, $7.53-7.32(16\text{H})$, $1.38(6\text{H})$ 。

實施例4

[0082]

針對通式(1)所表示茛苳并苯并吡咯化合物，藉由高感度微差掃描熱卡計(Bruker AXS製造，DSC3100SA)來測定熔點與玻璃轉換溫度。

| | 熔點 | 玻璃轉換溫度 |
|----------|--------|--------|
| 實施例1之化合物 | 269 °C | 136 °C |
| 實施例2之化合物 | 256 °C | 127 °C |
| 實施例3之化合物 | 353 °C | 178 °C |

[0083]

以通式(1)所表示具有茛苳并苯并吡咯環構造之化合物具有100°C以上之玻璃轉換溫度，薄膜狀態呈現穩定。

實施例5

[0084]

使用以通式(1)所表示具有茛苳并苯并吡咯環構造之化合物，於ITO基板之上製作膜厚100nm之蒸鍍膜，藉由電離電位測定裝置(住友重機

械工業股份有限公司製造，PYS-202)來測定功函數。

| | 功函數 |
|----------|---------|
| 實施例1之化合物 | 6.26 eV |
| 實施例2之化合物 | 6.38 eV |
| 實施例3之化合物 | 6.25 eV |

[0085]

以通式(1)所表示之具有茛苳并苯并吡咯環構造之化合物具有較NPD、TPD等一般的電洞輸送材料所擁有之功函數5.5eV來得大之數值，而具有高電洞阻止能力。

實施例6

[0086]

有機EL元件係如圖13所示般，在玻璃基板1上事先形成有ITO電極作為透明陽極2之物上依序蒸鍍電洞注入層3、電洞輸送層4、發光層5、電洞阻止層6、電子輸送層7、電子注入層8、陰極(鋁電極)9而製作。

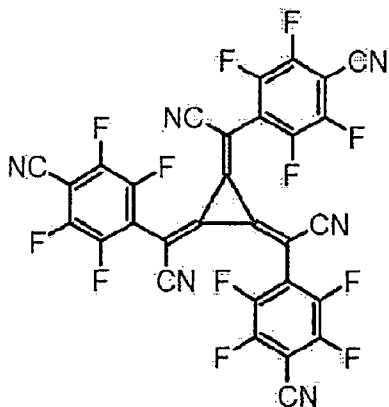
[0087]

具體上係使得形成有膜厚50nm之ITO的玻璃基板1在異丙醇中進行超音波洗淨20分鐘後，於加熱至200°C之熱板上進行10分鐘乾燥。之後，進行UV臭氧處理15分鐘後，將此具有ITO之玻璃基板裝設於真空蒸鍍機內，減壓至0.001Pa以下。接著，以覆蓋透明陽極2的方式使得下述構造式之電子受體(Acceptor-1)與下述構造式之化合物(HTM-1)以蒸鍍速度比成為Acceptor-1：化合物(HTM-1)=3：97之蒸鍍速度來進行二元蒸鍍至膜厚達10nm來形成電洞注入層3。於此電洞注入層3之上，以下述構造式之化合物(HTM-1)成為膜厚60nm的方式來形成電洞輸送層4。於此電洞輸送層4之上，使得下述構造式之化合物EMD-1與下述構造式之化合物EMH-1以蒸鍍速度比成為EMD-1：EMH-1=5：95之蒸鍍速度來進行二元蒸鍍至膜厚達20nm來形成發光層5。於

此發光層5之上，使得本發明實施例1之化合物(化合物-105)與下述構造之化合物ETM-1以蒸鍍速度比成為本發明實施例1之化合物(化合物-105)：ETM-1 = 50 : 50之蒸鍍速度進行二元蒸鍍至膜厚達30nm來形成電洞阻止層兼電子輸送層6以及7。於此電洞阻止層兼電子輸送層6以及7之上，以氟化鋰成為膜厚1nm的方式來形成電子注入層8。最後，蒸鍍鋁100nm來形成陰極9。針對所製作之有機EL元件，於大氣中、常溫來進行特性測定。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係彙整顯示於表1。

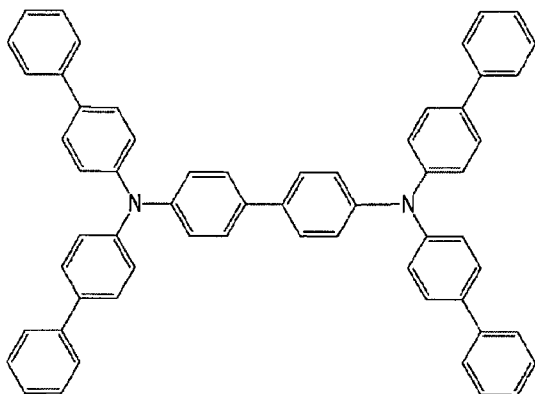
[0088]

(Acceptor-1)



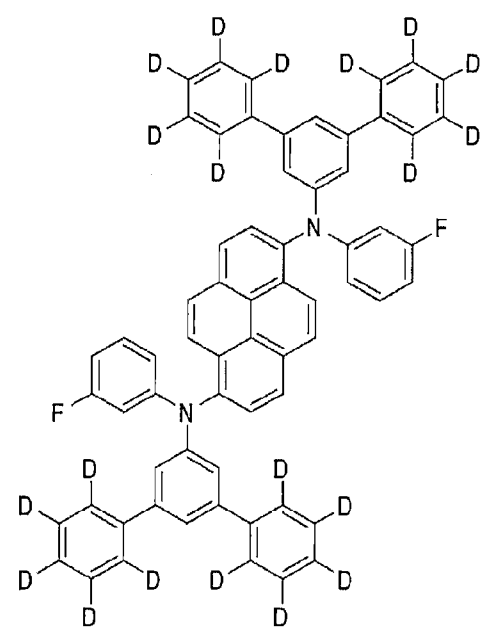
[0089]

(HTM-1)



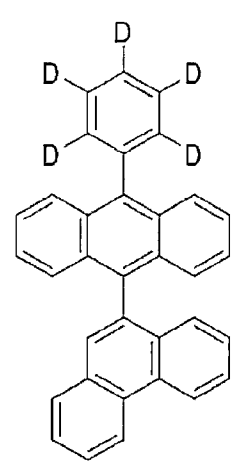
[0090]

(EMD-1)



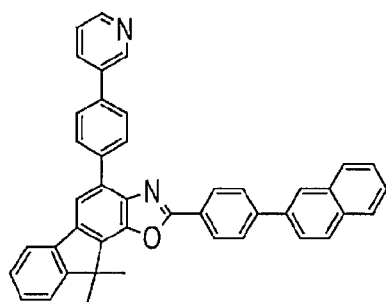
[0091]

(EMH-1)



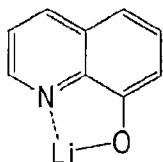
[0092]

(化合物-105)



[0093]

(ETM-1)



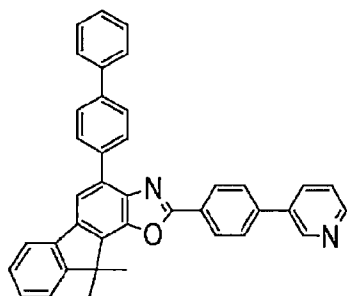
實施例7

[0094]

除了於實施例6中，在電洞阻止層兼電子輸送層6以及7之材料方面不使用本發明實施例1之化合物(化合物-105)而改用實施例2之化合物(化合物-4)，以蒸鍍速度比成為(化合物-4)：ETM-1 = 50：50之蒸鍍速度來進行二元蒸鍍以外，係以同樣的條件來製作出有機EL元件。針對所製作之有機EL元件，於大氣中、常溫進行特性測定。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係彙整顯示於表1。

[0095]

(化合物-4)



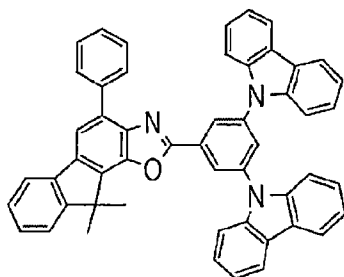
實施例8

[0096]

除了於實施例6中，在電洞阻止層兼電子輸送層6以及7之材料方面不使用本發明實施例1之化合物(化合物-105)而改用實施例3之化合物(化合物-132)，以蒸鍍速度比成為(化合物-132)：ETM-1 = 50：50之蒸鍍速度來進行二元蒸鍍以外，係以同樣的條件來製作出有機EL元件。針對所製作之有機EL元件，於大氣中、常溫進行特性測定。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係彙整顯示於表1。

[0097]

(化合物-132)



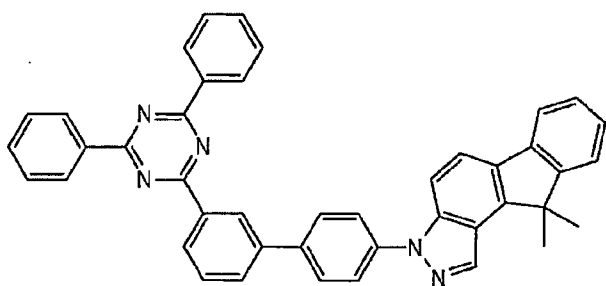
[0098]

〔比較例1〕

基於比較起見，除了於實施例6中，在電洞阻止層兼電子輸送層6以及7之材料方面不使用本發明實施例1之化合物(化合物-105)而改如下述構造式之化合物ETM-2(例如參見專利文獻8)，以蒸鍍速度比成為ETM-2：ETM-1 = 50：50之蒸鍍速度來進行二元蒸鍍以外，係以同樣的條件來製作出有機EL元件。針對所製作之有機EL元件，於大氣中、常溫進行特性測定。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係彙整顯示於表1。

[0099]

(ETM-2)



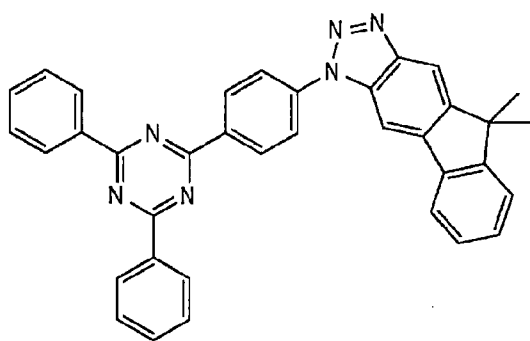
[0100]

〔比較例2〕

基於比較起見，除了於實施例6中，在電洞阻止層兼電子輸送層6以及7之材料方面不使用本發明實施例1之化合物(化合物-105)而改用下述構造式之化合物ETM-3(例如參見專利文獻8)，以蒸鍍速度比成為ETM-3：ETM-1 = 50：50之蒸鍍速度來進行二元蒸鍍以外，係以同樣的條件來製作出有機EL元件。針對所製作之有機EL元件，於大氣中、常溫進行特性測定。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係彙整顯示於表1。

[0101]

(ETM-3)



[0102]

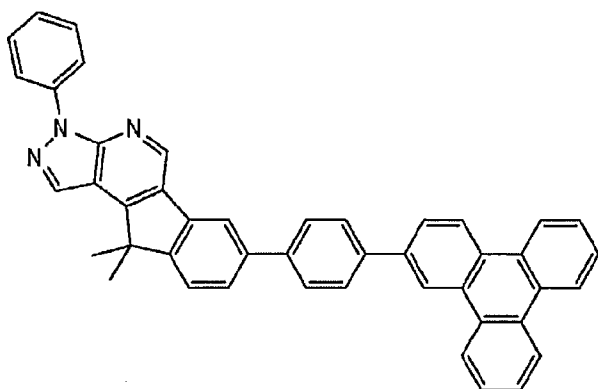
〔比較例3〕

基於比較起見，除了於實施例6中，在電洞阻止層兼電子輸送層6以及7之材料方面不使用本發明實施例1之化合物(化合物-105)而改用下述構造式之化合物ETM-4(例如參見專利文獻8)，以蒸鍍速度比成為

ETM-4：ETM-1 = 50：50之蒸鍍速度來進行二元蒸鍍以外，係以同樣的條件來製作出有機EL元件。針對所製作之有機EL元件，於大氣中、常溫進行特性測定。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係彙整顯示於表1。

[0103]

(ETM-4)



[0104]

使用以實施例6至實施例8以及比較例1至比較例3所製作之有機EL元件，將測定元件壽命之結果彙整表示於表1。元件壽命係以將發光開始時之發光亮度(初期亮度)定為2000cd/m²來進行定電流驅動時，發光亮度衰減至1900cd/m²(相當於以初期亮度為100%時成為95%：95%衰減)為止之時間來測定。

[0105]

[表 1]

| | 電洞阻止層兼 電子輸送層 | 電壓[V] (@10mA/cm ²) | 亮度[cd/m ²] (@10mA/cm ²) | 發光效率[cd/A] (@10mA/cm ²) | 功率效率[lm/W] (@10mA/cm ²) | 元件壽命 95%衰減 |
|------|-------------------|-----------------------------------|--|--|--|---------------|
| 實施例6 | 化合物-105/ ETM-1 | 3.37 | 874 | 8.74 | 8.14 | 129小時 |
| 實施例7 | 化合物-4/ ETM-1 | 3.60 | 858 | 8.58 | 7.48 | 149小時 |
| 實施例8 | 化合物-132/ ETM-1 | 3.47 | 886 | 8.87 | 8.03 | 134小時 |
| 比較例1 | ETM-2/ ETM-1 | 4.05 | 768 | 7.68 | 5.96 | 48小時 |

| | | | | | | |
|------|-----------------|------|-----|------|------|------|
| 比較例2 | ETM-3/ ETM-1 | 3.81 | 764 | 7.64 | 6.30 | 35小時 |
| 比較例3 | ETM-4/ ETM-1 | 3.87 | 740 | 7.40 | 6.01 | 55小時 |

[0106]

如表1所示般，流經電流密度 $10\text{mA}/\text{cm}^2$ 之電流時的驅動電壓，相對於使用有前述構造式之化合物ETM-2至ETM-4之比較例1至比較例3之有機EL元件之3.81V至4.05V，實施例6至實施例8之有機EL元件則低電壓化成為3.37V至3.60V。此外，在發光效率方面，相對於比較例1至比較例3之有機EL元件之7.40cd/A至7.68cd/A，實施例6至實施例8之有機EL元件則提升成為8.58cd/A至8.87cd/A，即使是功率效率方面，相對於比較例1至比較例3之有機EL元件之5.96lm/W至6.30lm/W，實施例6至實施例8之有機EL元件則大幅提升成為7.48lm/W至8.14lm/W。

尤其，在元件壽命(95%衰減)方面，相對於比較例1至比較例3之有機EL元件中之35小時至55小時，實施例6至實施例8之有機EL元件則大幅長壽命化成為129小時至149小時。

[0107]

如此般，可知本發明之有機EL元件相較於使用前述構造式之化合物ETM-2至ETM-4之元件，在發光效率以及功率效率方面優異，可實現長壽命之有機EL元件。

(產業上可利用性)

[0108]

本發明之具有特定茛苳并苯并吡咯環構造之化合物由於電子之注入特性良好、電洞阻止能力優異、薄膜狀態穩定，故可作為優異之有機EL元件用化合物。藉由使用該化合物來製作有機EL元件，可獲得高效率，且可降低驅動電壓，而可改善耐久性。例如邁向家電化製品或照明之用途成為可能。

【符號說明】

- 1 玻璃基板
- 2 透明陽極
- 3 電洞注入層
- 4 電洞輸送層
- 5 發光層
- 6 電洞阻止層
- 7 電子輸送層
- 8 電子注入層
- 9 陰極

發明摘要

※ 申請案號：

※ 申請日：

※IPC 分類：

【發明名稱】

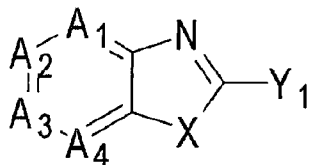
具有茛并苯并吡咯環構造之化合物以及有機電致發光元件
/COMPOUND HAVING INDENOBENZAZOLE RING STRUCTURE
AND ORGANIC ELECTROLUMINESCENT ELEMENT

【中文】

本發明之目的係提供一種有機化合物，作為高效率、高耐久性之有機EL元件用材料具有下述優異特性：在電子注入、輸送性能方面優異，具有電洞阻止能力，於薄膜狀態之穩定性高；本發明進而提供一種使用此化合物而為高效率、高耐久性之有機EL元件。

本發明之解決手段係一種具有茛并苯并吡咯環構造之化合物，係由下述通式(1)所表示：

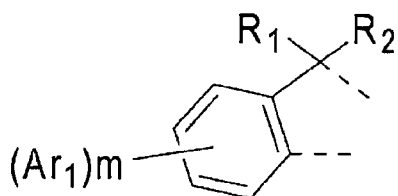
(1)



(式中， A_1 至 A_4 可相互相同也可不同，表示氫原子、重氫原子或是具有取代基之碳原子、具有取代或未取代之芳香族經基之碳原子、具有取代或未取代之芳香族雜環基之碳原子、具有取代或未取代之縮合多環芳香族基之碳原子，或是氮原子， Y_1 表示氫原子、重氫原子、取代或未取代之芳香族經基、取代或未取代之芳香族雜環基、取代或未取代之縮合多環芳香族基、可具有取代基之碳原子數1至6之直鏈狀或分支狀之烷基、可具有取代基之碳原子數5至10之環烷基、或是可具有取代基之碳原子數2至6之直鏈狀或分支狀之烯基， X 表示氧原子或是

硫原子；其中， A_1 至 A_4 當中相鄰接之碳原子的一處為下述構造式(A-1)。

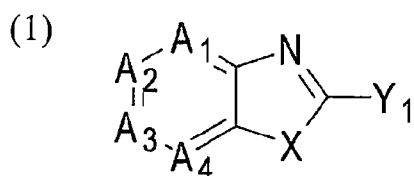
(A-1)



【英文】

An object of the present invention is to provide an organic compound which is served as a material for an organic electroluminescence element having high efficiency and high durability and has superior transportation performance, hole blocking ability and excellent stability in thin film state; in addition, the present invention further provides an organic electroluminescence element having high efficiency and high durability by using the organic compound.

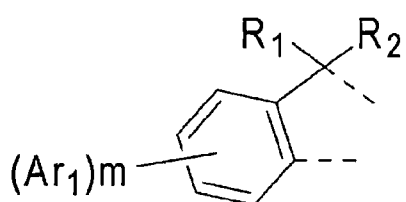
One solution provided by the present invention is to provide a compound having an indenobenzazole ring structure represented by the following general formula (1):



(In the formula, A_1 to A_4 may be the same as or different from each other, and represent a hydrogen atom, a deuterium atom, or a carbon atom having a substituted group, a carbon atom having a

substituted or an unsubstituted aromatic hydrocarbon group, a carbon atom having a substituted or an unsubstituted aromatic heterocyclic group, a carbon atom having a substituted or an unsubstituted condensed polycyclic aromatic group, or a nitrogen atom; Y_1 represents a hydrogen atom, a heavy hydrogen atom, a substituted or an unsubstituted aromatic hydrocarbon group, a substituted or an unsubstituted aromatic heterocyclic group, a substituted or an unsubstituted condensed polycyclic aromatic group, a linear or a branched alkyl group having 1 to 6 carbon atoms which may have a substituted group, a cycloalkyl group having 5 to 10 carbon atoms which may have a substituted group, or a linear or a branched alkenyl group having 2 to 6 carbon atoms which may have a substituted group; and X represents an oxygen atom or a sulfur atom; wherein, one of the adjacent carbon atoms of A_1 to A_4 is defined as the following structural formula (A-1)).

(A-1)



【代表圖】

【本案指定代表圖】：無。

【本代表圖之符號簡單說明】：

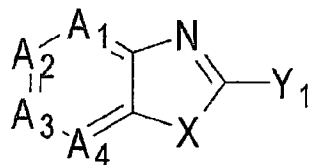
無。

【本案若有化學式時，請揭示最能顯示發明特徵的化學式】：



申請專利範圍

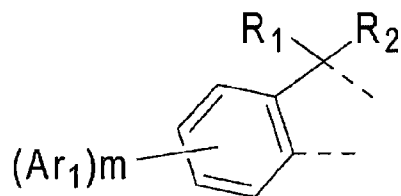
1. 一種具有茛并苯并吡咯環構造之化合物，係以下述通式(1)所表示：
- (1)



式中， A_1 至 A_4 可相互相同也可不同，表示氫原子、重氫原子或是具有取代基之碳原子、具有取代或未取代之芳香族經基之碳原子、具有取代或未取代之芳香族雜環基之碳原子、具有取代或未取代之縮合多環芳香族基之碳原子、或是氫原子， Y_1 表示氫原子、重氫原子、取代或未取代之芳香族經基、取代或未取代之芳香族雜環基、或是取代或未取代之縮合多環芳香族基、可具有取代基之碳原子數1至6之直鏈狀或分支狀之烷基、可具有取代基之碳原子數5至10之環烷基、或是可具有取代基之碳原子數2至6之直鏈狀或分支狀之烯基， X 表示氧原子或是硫原子；其中， A_1 至 A_4 當中相鄰接之碳原子的一處為下述構造式

(A-1)

(A-1)

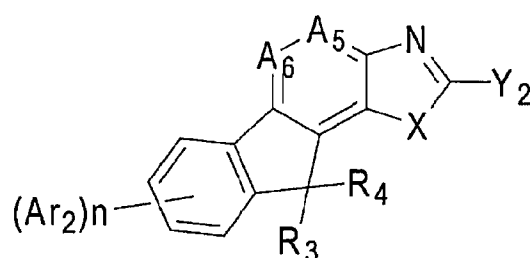


式中，以斷線部作為鍵結部位， R_1 、 R_2 可相互相同也可不同，表示可具有取代基之碳原子數 1 至 6 之直鏈狀或分支狀之烷

基、可具有取代基之碳原子數 5 至 10 之環烷基、或是可具有取代基之碳原子數 2 至 6 之直鏈狀或分支狀之烯基， Ar_1 表示重氫原子、氟原子、氯原子、氰基、硝基、三甲基矽基、三苯基矽基、取代或未取代之芳香族烴基、取代或未取代之芳香族雜環基、取代或未取代之縮合多環芳香族基、可具有取代基之碳原子數 1 至 6 之直鏈狀或分支狀之烷基、可具有取代基之碳原子數 5 至 10 之環烷基、或是可具有取代基之碳原子數 2 至 6 之直鏈狀或分支狀之烯基， m 表示 0 至 5 之整數；當 m 為 2 以上之整數時，複數個鍵結於同一苯環上的 Ar_1 可相互相同也可不同；此外，苯環與取代於苯環之取代基、或是複數取代於同一苯環之取代基彼此也可經由單鍵、取代或未取代之亞甲基、氧原子或是硫原子來相互鍵結形成環。

2. 如請求項 1 所記載之具有茛并苯并吡咯環構造之化合物，其中前述通式(1)係以下述通式(2)所表示：

(2)

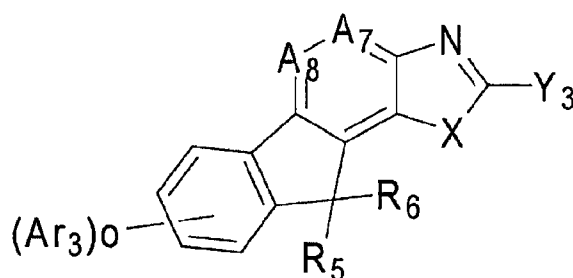


式中， A_5 、 A_6 可相互相同也可不同，表示氫原子、重氫原子或是具有取代基之碳原子、具有取代或未取代之芳香族烴基之碳原子、具有取代或未取代之芳香族雜環基之碳原子、具有取代或未取代之縮合多環芳香族基之碳原子，或是氫原子， Y_2 表示氫原子、重氫原子、取代或未取代之芳香族烴基、取代或未取

代之芳香族雜環基、取代或未取代之縮合多環芳香族基、可具有取代基之碳原子數 1 至 6 之直鏈狀或分支狀之烷基、可具有取代基之碳原子數 5 至 10 之環烷基、或是可具有取代基之碳原子數 2 至 6 之直鏈狀或分支狀之烯基，X 表示氧原子或是硫原子， R_3 、 R_4 可相互相同也可不同，表示可具有取代基之碳原子數 1 至 6 之直鏈狀或分支狀之烷基、可具有取代基之碳原子數 5 至 10 之環烷基、或是可具有取代基之碳原子數 2 至 6 之直鏈狀或分支狀之烯基， Ar_2 表示重氫原子、氟原子、氯原子、氰基、硝基、三甲基矽基、三苯基矽基、取代或未取代之芳香族烴基、取代或未取代之芳香族雜環基、或是取代或未取代之縮合多環芳香族基、可具有取代基之碳原子數 1 至 6 之直鏈狀或分支狀之烷基、可具有取代基之碳原子數 5 至 10 之環烷基、或是可具有取代基之碳原子數 2 至 6 之直鏈狀或分支狀之烯基，n 表示 0 至 5 之整數；當 n 為 2 以上之整數時，複數個鍵結於同一苯環上之 Ar_2 可相互相同也可不同；此外，苯環與取代於苯環之取代基、或是複數取代於同一苯環之取代基彼此也可經由單鍵、取代或未取代之亞甲基、氧原子或是硫原子來相互鍵結形成環。

3. 如請求項 2 所記載之具有茛苳并苯并吡咯環構造之化合物，其中前述通式(2)係以下述通式(3)所表示：

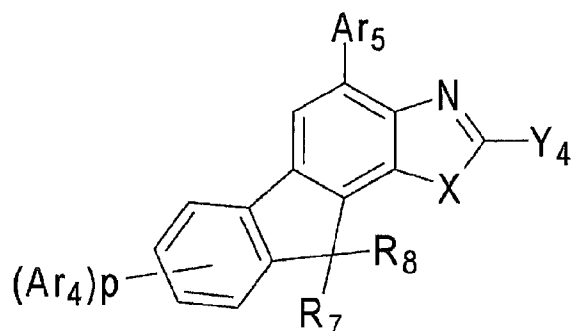
(3)



式中， A_7 、 A_8 可相互相同也可不同，表示氫原子、重氫原子或是具有取代基之碳原子、具有取代或未取代之芳香族烴基之碳原子、具有取代或未取代之芳香族雜環基之碳原子、或是具有取代或未取代之縮合多環芳香族基之碳原子， Y_3 表示氫原子、重氫原子、取代或未取代之芳香族烴基、取代或未取代之芳香族雜環基、取代或未取代之縮合多環芳香族基、可具有取代基之碳原子數 1 至 6 之直鏈狀或分支狀之烷基、可具有取代基之碳原子數 5 至 10 之環烷基、或是可具有取代基之碳原子數 2 至 6 之直鏈狀或分支狀之烯基， X 表示氧原子或是硫原子， R_5 、 R_6 可相互相同也可不同，表示可具有取代基之碳原子數 1 至 6 之直鏈狀或分支狀之烷基、可具有取代基之碳原子數 5 至 10 之環烷基、或是可具有取代基之碳原子數 2 至 6 之直鏈狀或分支狀之烯基， Ar_3 表示重氫原子、氟原子、氯原子、氰基、硝基、三甲基矽基、三苯基矽基、取代或未取代之芳香族烴基、取代或未取代之芳香族雜環基、取代或未取代之縮合多環芳香族基、可具有取代基之碳原子數 1 至 6 之直鏈狀或分支狀之烷基、可具有取代基之碳原子數 5 至 10 之環烷基、或是可具有取代基之碳原子數 2 至 6 之直鏈狀或分支狀之烯基， o 表示 0 至 5 之整數；當 o 為 2 以上之整數時，複數個鍵結於同一苯環上之 Ar_3 可相互相同也可不同；此外，苯環與取代於苯環之取代基、或是複數取代於同一苯環之取代基彼此也可經由單鍵、取代或未取代之亞甲基、氧原子或是硫原子來相互鍵結形成環。

4. 如請求項 3 所記載之具有茛并苯并吡咯環構造之化合物，其中前述通式(3)係以下述通式(4)所表示：

(4)

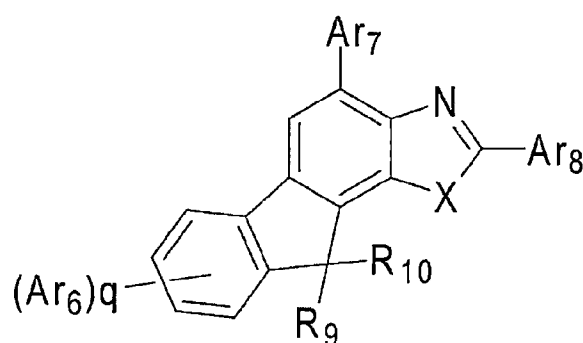


式中， Y_4 表示氫原子、重氫原子、取代或未取代之芳香族烴基、取代或未取代之芳香族雜環基、取代或未取代之縮合多環芳香族基、可具有取代基之碳原子數 1 至 6 之直鏈狀或分支狀之烷基、可具有取代基之碳原子數 5 至 10 之環烷基、或是可具有取代基之碳原子數 2 至 6 之直鏈狀或分支狀之烯基， X 表示氧原子或是硫原子， R_7 、 R_8 可相互相同也可不同，表示可具有取代基之碳原子數 1 至 6 之直鏈狀或分支狀之烷基、可具有取代基之碳原子數 5 至 10 之環烷基、或是可具有取代基之碳原子數 2 至 6 之直鏈狀或分支狀之烯基， Ar_4 表示重氫原子、氟原子、氯原子、氰基、硝基、三甲基矽基、三苯基矽基、取代或未取代之芳香族烴基、取代或未取代之芳香族雜環基、或是取代或未取代之縮合多環芳香族基、可具有取代基之碳原子數 1 至 6 之直鏈狀或分支狀之烷基、可具有取代基之碳原子數 5 至 10 之環烷基、或是可具有取代基之碳原子數 2 至 6 之直鏈狀或分支狀之烯基， Ar_5 表示氫原子、重氫原子、取代或未取代之芳香族烴基、取代或未取代之芳香族雜環基、或是取代或未取代之縮合多環芳香族基， p 表示 0 至 5 之整數；當 p 為 2 以上之整數時，複數個鍵結於同一苯環上之 Ar_4 可相互相同也可不

同；此外，苯環與取代於苯環之取代基、或是複數取代於同一苯環之取代基彼此也可經由單鍵、取代或未取代之亞甲基、氧原子或是硫原子來相互鍵結形成環。

5. 如請求項 4 所記載之具有茛苳并苯并吡咯環構造之化合物，其中前述通式(4)係以下述通式(5)所表示：

(5)

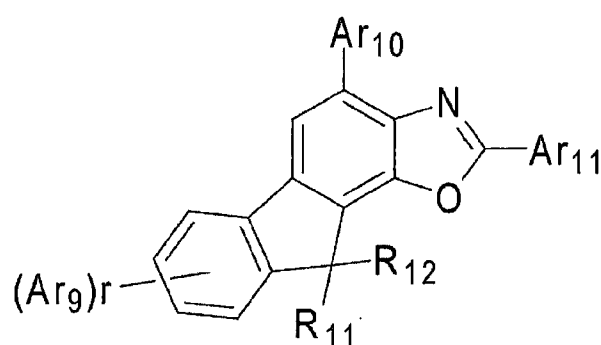


式中，X 表示氧原子或是硫原子， R_9 、 R_{10} 可相互相同也可不同，表示可具有取代基之碳原子數 1 至 6 之直鏈狀或分支狀之烷基、可具有取代基之碳原子數 5 至 10 之環烷基、或是可具有取代基之碳原子數 2 至 6 之直鏈狀或分支狀之烯基， Ar_6 表示重氫原子、氟原子、氯原子、氰基、硝基、三甲基矽基、三苯基矽基、取代或未取代之芳香族烴基、取代或未取代之芳香族雜環基、取代或未取代之縮合多環芳香族基、可具有取代基之碳原子數 1 至 6 之直鏈狀或分支狀之烷基、可具有取代基之碳原子數 5 至 10 之環烷基、或是可具有取代基之碳原子數 2 至 6 之直鏈狀或分支狀之烯基， Ar_7 、 Ar_8 可相互相同也可不同，表示取代或未取代之芳香族烴基、取代或未取代之芳香族雜環基、或是取代或未取代之縮合多環芳香族基， q 表示 0 至 5 之整數；當 q 為 2 以上之整數時，複數個鍵結於同一苯環上之 Ar_6 可相互

相同也可不同；此外，苯環與取代於苯環之取代基、或是複數取代於同一苯環之取代基彼此也可經由單鍵、取代或未取代之亞甲基、氧原子或是硫原子來相互鍵結形成環；其中， Ar_7 、 Ar_8 定為氫原子、重氫原子以外者。

6. 如請求項 5 所記載之具有茛并苯并吡咯環構造之化合物，其中前述通式(5)係以下述通式(6)所表示：

(6)



式中， R_{11} 、 R_{12} 可相互相同也可不同，表示可具有取代基之碳原子數 1 至 6 之直鏈狀或分支狀之烷基、可具有取代基之碳原子數 5 至 10 之環烷基、或是可具有取代基之碳原子數 2 至 6 之直鏈狀或分支狀之烯基， Ar_9 表示重氫原子、氟原子、氯原子、氰基、硝基、三甲基矽基、三苯基矽基、取代或未取代之芳香族烴基、取代或未取代之芳香族雜環基、取代或未取代之縮合多環芳香族基、可具有取代基之碳原子數 1 至 6 之直鏈狀或分支狀之烷基、可具有取代基之碳原子數 5 至 10 之環烷基、或是可具有取代基之碳原子數 2 至 6 之直鏈狀或分支狀之烯基， Ar_{10} 、 Ar_{11} 可相互相同也可不同，表示取代或未取代之芳香族烴基、取代或未取代之芳香族雜環基、或是取代或未取代之縮合多環芳香族基， r 表示 0 至 5 之整數；當 r 為 2 以上之整

數時，複數個鍵結於同一苯環上之 Ar_9 可相互相同也可不同；此外，苯環與取代於苯環之取代基、或是複數取代於同一苯環之取代基彼此也可經由單鍵、取代或未取代之亞甲基、氧原子或是硫原子來相互鍵結形成環；其中， Ar_{10} 、 Ar_{11} 係定為氫原子、重氫原子以外者。

7. 一種有機電致發光元件，具有一對之電極與夾在中間之至少一層之有機層，如請求項 1 至 6 中任一項所記載之具有茚并苯并吡咯環構造之化合物係作為至少 1 層之有機層之構成材料來使用。
8. 如請求項 7 所記載之有機電致發光元件，其中使用有前述具有茚并苯并吡咯環構造之化合物之有機層為電子輸送層。
9. 如請求項 7 所記載之有機電致發光元件，其中使用有前述具有茚并苯并吡咯環構造之化合物之有機層為電洞阻止層。
10. 如請求項 7 所記載之有機電致發光元件，其中使用有前述具有茚并苯并吡咯環構造之化合物之有機層為發光層。
11. 如請求項 7 所記載之有機電致發光元件，其中使用有前述具有茚并苯并吡咯環構造之化合物之有機層為電子注入層。

