



(12) 发明专利

(10) 授权公告号 CN 101838262 B

(45) 授权公告日 2014. 07. 23

(21) 申请号 201010145971. 7

(22) 申请日 2010. 03. 19

(30) 优先权数据

2009-069177 2009. 03. 20 JP

(73) 专利权人 株式会社半导体能源研究所

地址 日本神奈川县厚木市

(72) 发明人 野村洸子 川上祥子 大泽信晴

濑尾哲史

(74) 专利代理机构 中国专利代理(香港)有限公

司 72001

代理人 吴娟 林毅斌

(56) 对比文件

CN 101270075 A, 2008. 09. 24, 说明书第
1-265 页.

WO 2005/090512 A1, 2005. 09. 29, 说明书第
1-91 页.

CN 101293865 A, 2008. 10. 29, 说明书第
1-97 页.

WO 2009/020095 A1, 2009. 02. 12, 说明书第
[0001]-[0155] 段.

审查员 温国永

(51) Int. Cl.

C07D 403/12(2006. 01)

C07D 403/14(2006. 01)

C07D 413/12(2006. 01)

C07D 413/14(2006. 01)

C09K 11/06(2006. 01)

H01L 51/54(2006. 01)

H01L 27/32(2006. 01)

权利要求书12页 说明书69页 附图25页

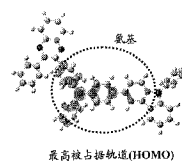
(54) 发明名称

具有杂芳环的咔唑衍生物及使用它的发光元
件及发光装置

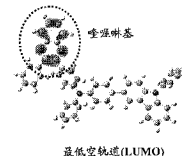
(57) 摘要

本发明的课题在于:提供激发能大的物质,
特别是具有比发射可见光的磷光化合物的三重激
发能宽的能隙的化合物;提供具有双极性的化合
物;提高发光元件的元件特性;以及提供耗电量
少且驱动电压低的发光装置及电子设备。本发明
提供:在同一分子中包括具有电子传输性的杂芳
环的噁二唑骨架或喹喔啉骨架和具有空穴传输性
的咔唑骨架的具有杂芳环的咔唑衍生物;将所述
具有杂芳环的咔唑衍生物用于发光层或载流子传
输层的发光元件;以及应用所述发光元件的发光
装置及电子设备。

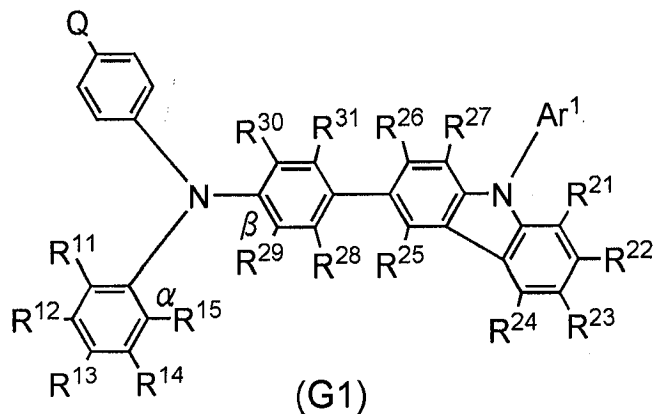
27A



27B

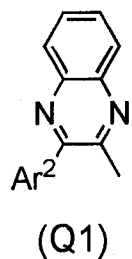


1. 一种由通式 (G1) 表示的唑啉衍生物,



其中:

Q 是由通式 (Q1) 表示的取代基



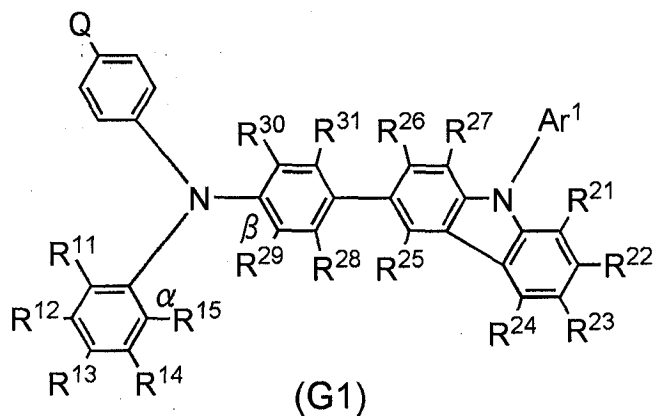
Ar¹ 和 Ar² 分别是苯基;

R¹¹ 至 R¹⁵ 以及 R²¹ 至 R²⁷ 分别是氢原子、碳数为 1 至 4 的烷基或形成环的碳数为 6 至 10 的芳基;

R²⁸ 至 R³¹ 分别是氢原子或碳数为 1 至 4 的烷基;

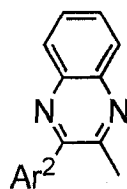
并且, α 位的碳和 β 位的碳不彼此结合。

2. 一种由通式 (G1) 表示的唑啉衍生物,



其中:

Q 是由通式 (Q1) 表示的取代基



(Q1)

;

Ar¹ 和 Ar² 分别是苯基；

R¹¹ 至 R¹⁵ 以及 R²¹ 至 R²⁷ 分别是氢原子、碳数为 1 至 4 的烷基或形成环的碳数为 6 至 10 的芳基；

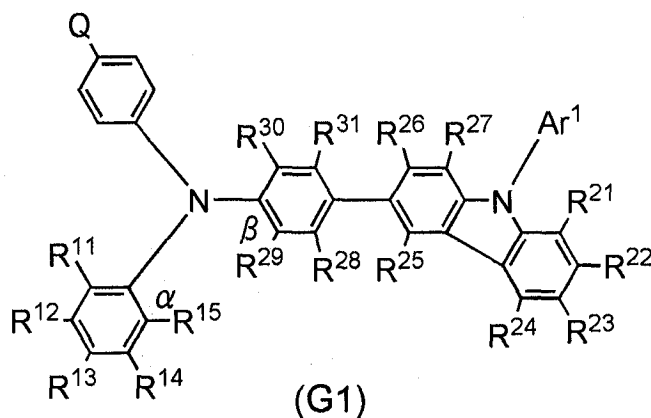
R²⁸ 至 R³¹ 分别是氢原子或碳数为 1 至 4 的烷基；

并且，α 位的碳和 β 位的碳彼此结合来形成呋唑环。

3. 根据权利要求 1 所述的呋唑衍生物，

其中 R¹¹、R¹²、R¹⁴、R¹⁵ 以及 R²⁸ 至 R³¹ 分别是氢原子。

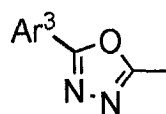
4. 一种由通式 (G1) 表示的呋唑衍生物，



(G1)

其中：

Q 是由通式 (Q2) 表示的取代基



(Q2)

;

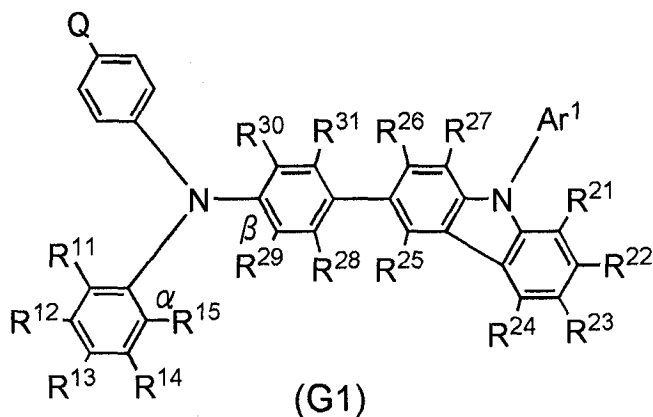
Ar¹ 和 Ar³ 分别是苯基；

R¹¹ 至 R¹⁵ 以及 R²¹ 至 R²⁷ 分别是氢原子、碳数为 1 至 4 的烷基或形成环的碳数为 6 至 10 的芳基；

R²⁸ 至 R³¹ 分别是氢原子或碳数为 1 至 4 的烷基；

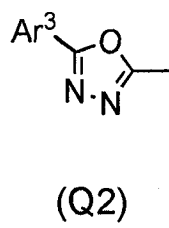
并且，α 位的碳和 β 位的碳不彼此结合。

5. 一种由通式 (G1) 表示的呋唑衍生物，



其中：

Q 是由通式 (Q2) 表示的取代基



Ar¹ 和 Ar³ 分别是苯基；

R¹¹ 至 R¹⁵ 以及 R²¹ 至 R²⁷ 分别是氢原子、碳数为 1 至 4 的烷基或形成环的碳数为 6 至 10 的芳基；

R²⁸ 至 R³¹ 分别是氢原子或碳数为 1 至 4 的烷基；

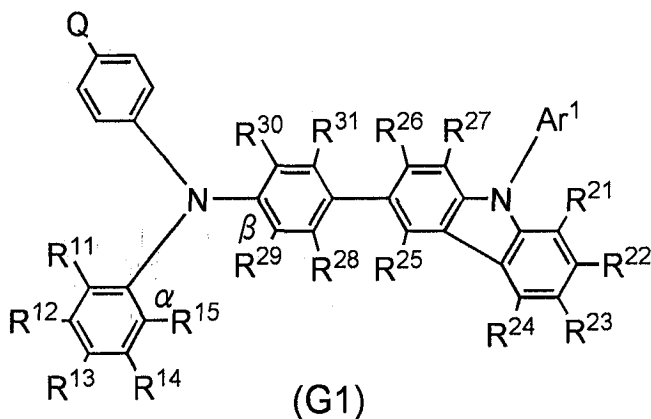
并且，α 位的碳和 β 位的碳彼此结合来形成呋唑环。

6. 根据权利要求 4 所述的呋唑衍生物，

其中 R¹¹、R¹²、R¹⁴、R¹⁵ 以及 R²⁸ 至 R³¹ 分别是氢原子。

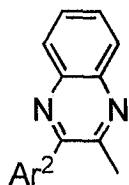
7. 一种具有发光元件的发光装置，所述发光元件在一对电极之间包括呋唑衍生物，其中：

由通式 (G1) 表示所述呋唑衍生物



；

Q 是由通式 (Q1) 表示的取代基



(Q1)

;

Ar¹ 和 Ar² 分别是苯基；

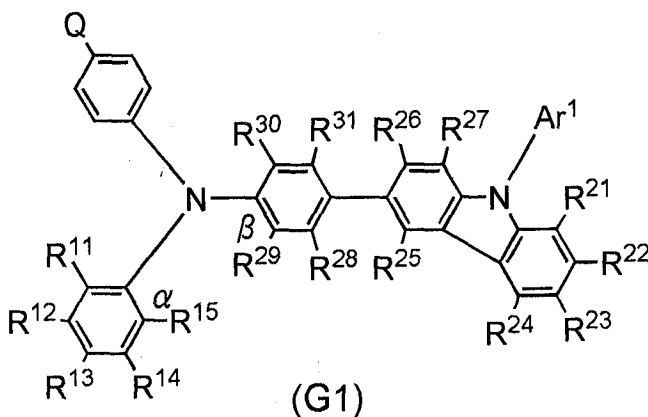
R¹¹ 至 R¹⁵ 以及 R²¹ 至 R²⁷ 分别是氢原子、碳数为 1 至 4 的烷基或形成环的碳数为 6 至 10 的芳基；

R²⁸ 至 R³¹ 分别是氢原子或碳数为 1 至 4 的烷基；

并且，α 位的碳和 β 位的碳不彼此结合。

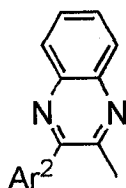
8. 一种具有发光元件的发光装置，所述发光元件在一对电极之间包括咔唑衍生物，其中：

所述咔唑衍生物由通式 (G1) 表示，



(G1)

Q 是由通式 (Q1) 表示的取代基



(Q1)

;

Ar¹ 和 Ar² 分别是苯基；

R¹¹ 至 R¹⁵ 以及 R²¹ 至 R²⁷ 分别是氢原子、碳数为 1 至 4 的烷基或形成环的碳数为 6 至 10 的芳基；

R²⁸ 至 R³¹ 分别是氢原子或碳数为 1 至 4 的烷基；

并且，α 位的碳和 β 位的碳彼此结合来形成咔唑环。

9. 根据权利要求 7 或 8 所述的发光装置，

其中：

所述发光元件在所述一对电极之间包括发光层；

并且发光物质和所述咔唑衍生物包括在所述发光层中。

10. 根据权利要求 7 或 8 所述的发光装置，

其中：

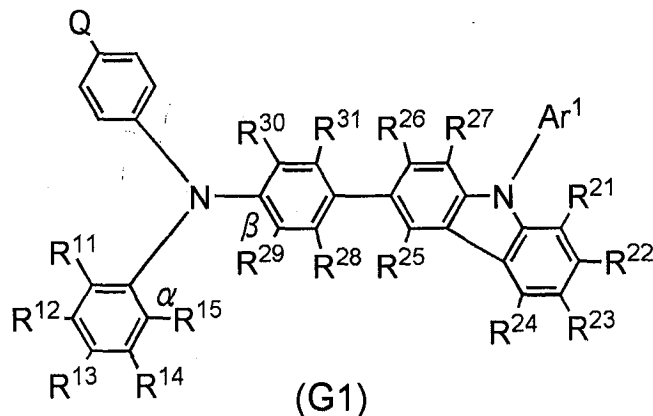
所述发光元件在所述一对电极之间包括发光层；

并且磷光物质和所述咪唑衍生物包括在所述发光层中。

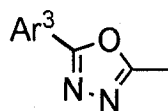
11. 一种具有发光元件的发光装置，所述发光元件在一对电极之间包括咪唑衍生物，

其中：

由通式 (G1) 表示所述咪唑衍生物



Q 是由通式 (Q2) 表示的取代基



(Q2) ;

Ar¹ 和 Ar³ 分别是苯基；

R¹¹ 至 R¹⁵ 以及 R²¹ 至 R²⁷ 分别是氢原子、碳数为 1 至 4 的烷基或形成环的碳数为 6 至 10 的芳基；

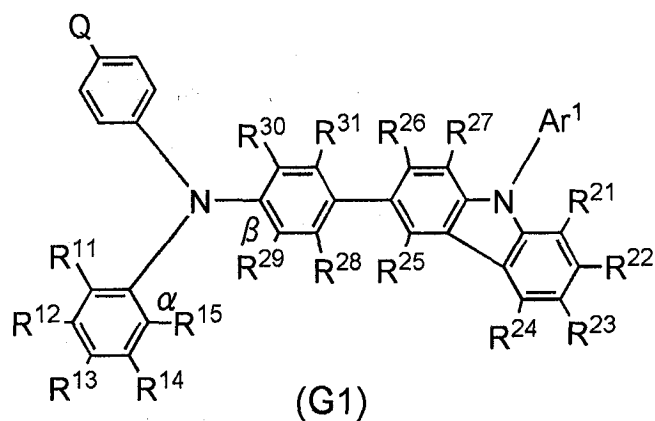
R²⁸ 至 R³¹ 分别是氢原子或碳数为 1 至 4 的烷基；

并且，α 位的碳和 β 位的碳不彼此结合。

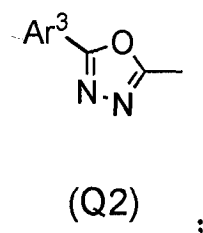
12. 一种具有发光元件的发光装置，所述发光元件在一对电极之间包括咪唑衍生物，

其中：

所述咪唑衍生物由通式 (G1) 表示，



Q 是由通式 (Q2) 表示的取代基



Ar¹ 和 Ar³ 分别是苯基；

R¹¹ 至 R¹⁵ 以及 R²¹ 至 R²⁷ 分别是氢原子、碳数为 1 至 4 的烷基或形成环的碳数为 6 至 10 的芳基；

R²⁸ 至 R³¹ 分别是氢原子或碳数为 1 至 4 的烷基；

并且，α 位的碳和 β 位的碳彼此结合来形成呋唑环。

13. 根据权利要求 11 或 12 所述的发光装置，

其中：

所述发光元件在所述一对电极之间包括发光层；

并且发光物质和所述呋唑衍生物包括在所述发光层中。

14. 根据权利要求 11 或 12 所述的发光装置，

其中：

所述发光元件在所述一对电极之间包括发光层；

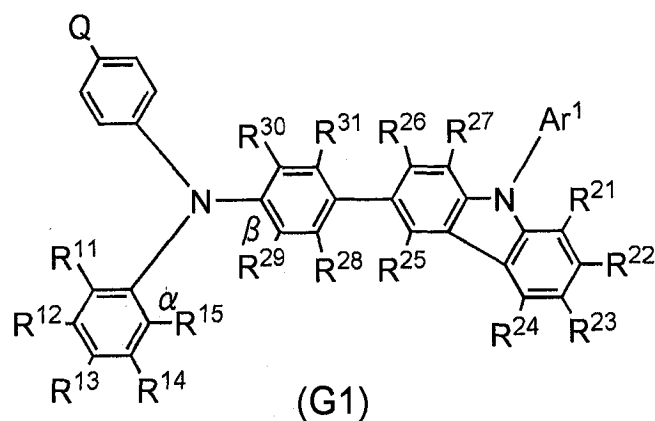
并且磷光物质和所述呋唑衍生物包括在所述发光层中。

15. 一种具有像素部的电子设备，所述像素部包括发光元件，

其中：

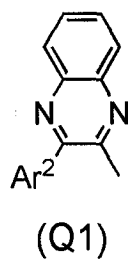
所述发光元件在一对电极之间包括呋唑衍生物；

由通式 (G1) 表示所述呋唑衍生物



;

Q 是由通式 (Q1) 表示的取代基



;

Ar¹ 和 Ar² 分别是苯基；

R¹¹ 至 R¹⁵ 以及 R²¹ 至 R²⁷ 分别是氢原子、碳数为 1 至 4 的烷基或形成环的碳数为 6 至 10 的芳基；

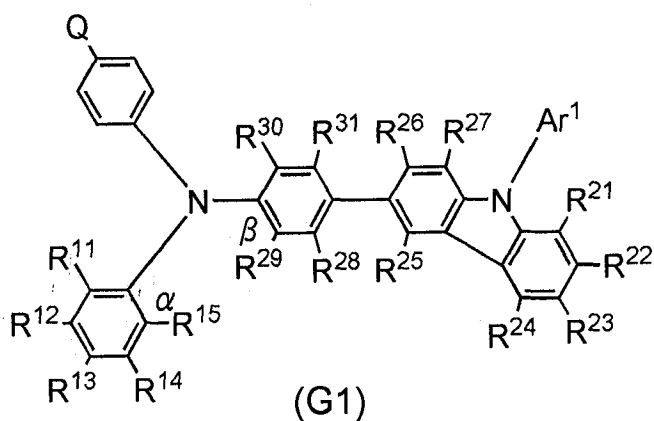
R²⁸ 至 R³¹ 分别是氢原子或碳数为 1 至 4 的烷基；

并且，α 位的碳和 β 位的碳不彼此结合。

16. 一种具有像素部的电子设备，所述像素部包括发光元件，
其中：

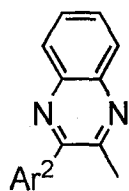
所述发光元件在一对电极之间包括咪唑衍生物；

由通式 (G1) 表示所述咪唑衍生物



;

Q 是由通式 (Q1) 表示的取代基



(Q1)

;

Ar¹ 和 Ar² 分别是苯基；

R¹¹ 至 R¹⁵ 以及 R²¹ 至 R²⁷ 分别是氢原子、碳数为 1 至 4 的烷基或形成环的碳数为 6 至 10 的芳基；

R²⁸ 至 R³¹ 分别是氢原子或碳数为 1 至 4 的烷基；

并且，α 位的碳和 β 位的碳彼此结合来形成咪唑环。

17. 根据权利要求 15 或 16 所述的电子设备，

其中：

所述发光元件在所述一对电极之间包括发光层；

并且发光物质和所述咪唑衍生物包括在所述发光层中。

18. 根据权利要求 15 或 16 所述的电子设备，

其中：

所述发光元件在所述一对电极之间包括发光层；

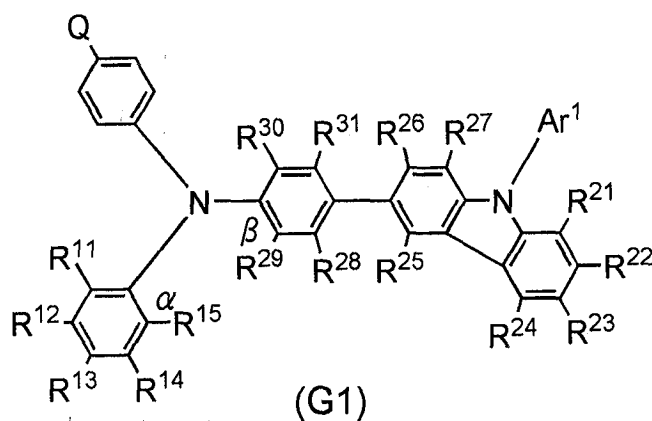
并且磷光物质和所述咪唑衍生物包括在所述发光层中。

19. 一种具有像素部的电子设备，所述像素部包括发光元件，

其中：

所述发光元件在一对电极之间包括咪唑衍生物；

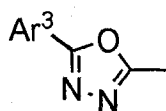
由通式 (G1) 表示所述咪唑衍生物



(G1)

;

Q 是由通式 (Q2) 表示的取代基



(Q2)

;

Ar¹ 和 Ar³ 分别是苯基；

R¹¹ 至 R¹⁵ 以及 R²¹ 至 R²⁷ 分别是氢原子、碳数为 1 至 4 的烷基或形成环的碳数为 6 至 10 的芳基；

R²⁸ 至 R³¹ 分别是氢原子或碳数为 1 至 4 的烷基；

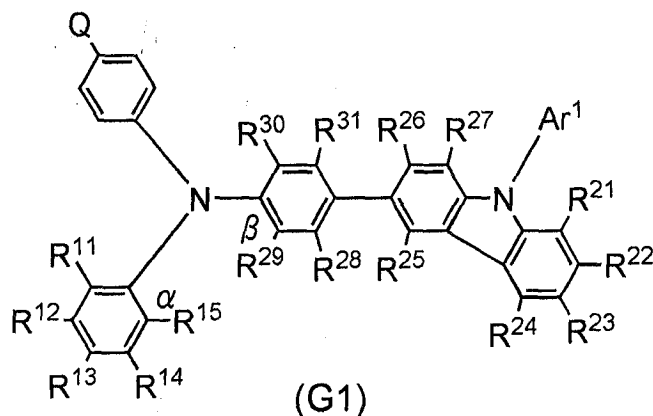
并且，α 位的碳和 β 位的碳不彼此结合。

20. 一种具有像素部的电子设备，所述像素部包括发光元件，

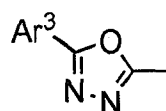
其中：

所述发光元件在一对电极之间包括咪唑衍生物；

由通式 (G1) 表示所述咪唑衍生物



Q 是由通式 (Q2) 表示的取代基



(Q2)

Ar¹ 和 Ar³ 分别是苯基；

R¹¹ 至 R¹⁵ 以及 R²¹ 至 R²⁷ 分别是氢原子、碳数为 1 至 4 的烷基或形成环的碳数为 6 至 10 的芳基；

R²⁸ 至 R³¹ 分别是氢原子或碳数为 1 至 4 的烷基；

并且，α 位的碳和 β 位的碳彼此结合来形成咪唑环。

21. 根据权利要求 19 或 20 所述的电子设备，

其中：

所述发光元件在所述一对电极之间包括发光层；

并且发光物质和所述咪唑衍生物包括在所述发光层中。

22. 根据权利要求 19 或 20 所述的电子设备，

其中：

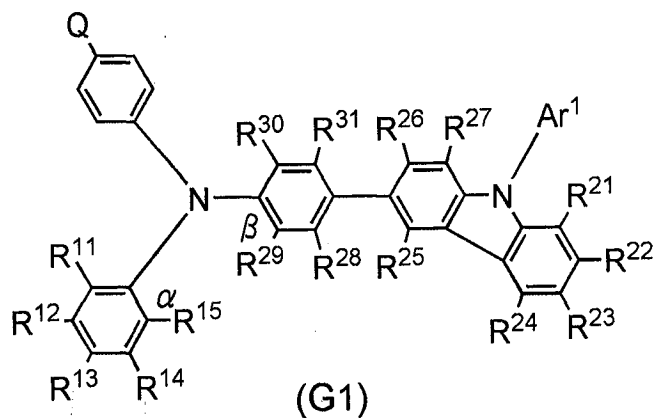
所述发光元件在所述一对电极之间包括发光层；

并且磷光物质和所述咪唑衍生物包括在所述发光层中。

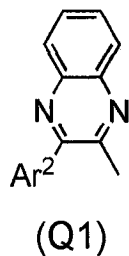
23. 一种包括发光元件的照明装置，

其中：

所述发光元件在一对电极之间包括咪唑衍生物；
由通式 (G1) 表示所述咪唑衍生物



Q 是由通式 (Q1) 表示的取代基



Ar¹ 和 Ar² 分别是苯基；

R¹¹ 至 R¹⁵ 以及 R²¹ 至 R²⁷ 分别是氢原子、碳数为 1 至 4 的烷基或形成环的碳数为 6 至 10 的芳基；

R²⁸ 至 R³¹ 分别是氢原子或碳数为 1 至 4 的烷基；

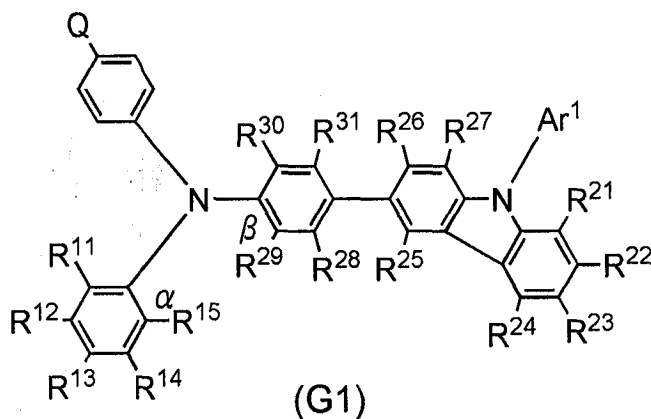
并且，α 位的碳和 β 位的碳不彼此结合。

24. 一种包括发光元件的照明装置，

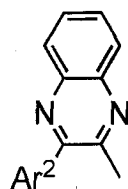
其中：

所述发光元件在一对电极之间包括咪唑衍生物；

由通式 (G1) 表示所述咪唑衍生物



Q 是由通式 (Q1) 表示的取代基



(Q1) ;

Ar¹ 和 Ar² 分别是苯基；

R¹¹ 至 R¹⁵ 以及 R²¹ 至 R²⁷ 分别是氢原子、碳数为 1 至 4 的烷基或形成环的碳数为 6 至 10 的芳基；

R²⁸ 至 R³¹ 分别是氢原子或碳数为 1 至 4 的烷基；

并且，α 位的碳和 β 位的碳彼此结合来形成咪唑环。

25. 根据权利要求 23 或 24 所述的照明装置，

其中：

所述发光元件在所述一对电极之间包括发光层；

并且发光物质和所述咪唑衍生物包括在所述发光层中。

26. 根据权利要求 23 或 24 所述的照明装置，

其中：

所述发光元件在所述一对电极之间包括发光层；

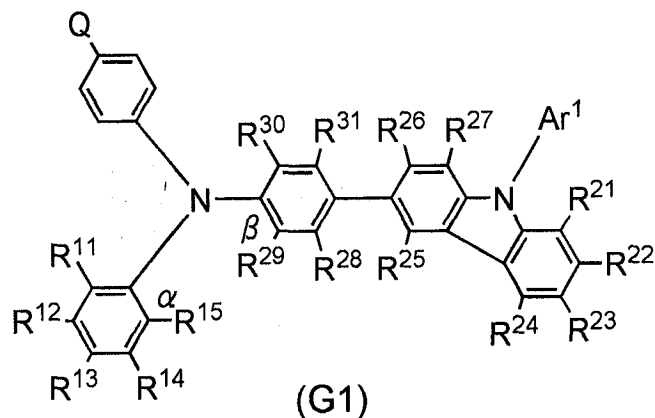
并且磷光物质和所述咪唑衍生物包括在所述发光层中。

27. 一种包括发光元件的照明装置，

其中：

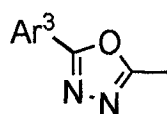
所述发光元件在一对电极之间包括咪唑衍生物；

由通式 (G1) 表示所述咪唑衍生物



;

Q 是由通式 (Q2) 表示的取代基



(Q2) ;

Ar¹ 和 Ar³ 分别是苯基；

R¹¹ 至 R¹⁵ 以及 R²¹ 至 R²⁷ 分别是氢原子、碳数为 1 至 4 的烷基或形成环的碳数为 6 至 10 的芳基；

R²⁸ 至 R³¹ 分别是氢原子或碳数为 1 至 4 的烷基；

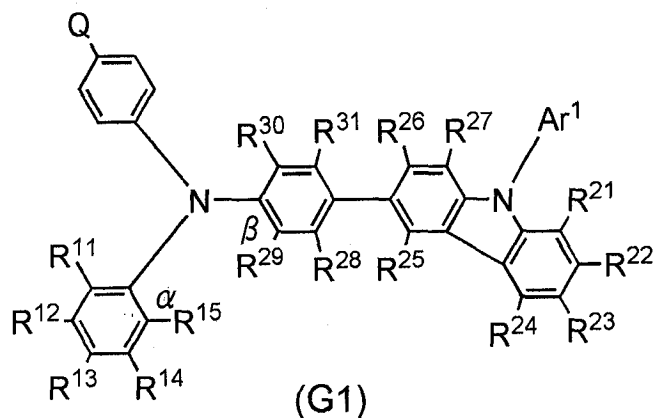
并且，α 位的碳和 β 位的碳不彼此结合。

28. 一种包括发光元件的照明装置，

其中：

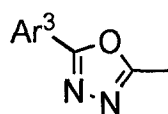
所述发光元件在一对电极之间包括咪唑衍生物；

由通式 (G1) 表示所述咪唑衍生物



；

Q 是由通式 (Q2) 表示的取代基



(Q2)

；

Ar¹ 和 Ar³ 分别是苯基；

R¹¹ 至 R¹⁵ 以及 R²¹ 至 R²⁷ 分别是氢原子、碳数为 1 至 4 的烷基或形成环的碳数为 6 至 10 的芳基；

R²⁸ 至 R³¹ 分别是氢原子或碳数为 1 至 4 的烷基；

并且，α 位的碳和 β 位的碳彼此结合来形成咪唑环。

29. 根据权利要求 27 或 28 所述的照明装置，

其中：

所述发光元件在所述一对电极之间包括发光层；

并且发光物质和所述咪唑衍生物包括在所述发光层中。

30. 根据权利要求 27 或 28 所述的照明装置，

其中：

所述发光元件在所述一对电极之间包括发光层；

并且磷光物质和所述咪唑衍生物包括在所述发光层中。

具有杂芳环的咔唑衍生物及使用它的发光元件及发光装置

技术领域

[0001] 本发明涉及一种具有杂芳环的咔唑衍生物、使用具有杂芳环的咔唑衍生物的发光元件、发光装置及电子设备。

背景技术

[0002] 近年来,积极地进行对利用电致发光 (Electroluminescence) 的发光元件的研究开发。这种发光元件的基本结构是在一对电极之间夹有包含发光物质的层的结构。通过对该元件施加电压,可以获得来自发光物质的发光。

[0003] 因为这种发光元件是不必使用背光灯的自发光型,且具有与液晶显示器相比像素的可见性高等的优点,所以该发光元件被认为优选不仅用作照明,而且用作平板显示器。此外,这种发光元件还具有可以制造为厚度薄且重量轻的大优点。另外,相当快的响应速度也是这种发光元件的特征之一。

[0004] 另外,因为这种发光元件可以形成为膜状,所以可以容易获得具有大面积的面发光。这是在以白炽灯泡或 LED 为代表的点光源或以荧光灯为代表的线光源等上不容易获得的特征,因而,上述发光元件的作为可应用于照明等的面光源的利用价值也很高。

[0005] 所述利用电致发光的发光元件可以根据发光物质是有机化合物还是无机化合物而被大致分类。在将有机化合物用作发光物质时,通过对发光元件施加电压,电子及空穴分别从一对电极注入到包含发光有机化合物的层,以电流流过。而且,通过这些载流子(电子及空穴)重新结合,发光有机化合物形成激发态,并且在该激发态回到基态时发光。

[0006] 因这种机制而这种发光元件被称为电流激发型发光元件。注意,作为有机化合物所形成的激发态的种类,可以实现单重激发态和三重激发态。来自单重激发态(S^*)的发光被称为荧光,来自三重激发态(T^*)的发光被称为磷光。此外,发光元件中的统计上的生成比例为 $S^* : T^* = 1 : 3$,即认为单重激发态的生成比例为 25%,三重激发态的生成比例为 75%。

[0007] 一般地,从单重激发态发光的化合物(以下称为荧光化合物)在室温下没有观察到来自三重激发态的发光(磷光),而仅观察到来自单重激发态的发光(荧光)。从而,由于发光元件中的单重激发态的生成比率为 25%,因此使用荧光化合物的发光元件的内量子效率(所产生的光子对于注入的载流子的比率)的理论限度为 25%。

[0008] 另一方面,不仅发光元件中的三重激发态的生成比率成为 75%,而且有时单重激发态的有机分子跃迁到三重激发态。因此,如果使用从三重激发态发光的化合物(以下称为磷光化合物),发光元件的内量子效率可在理论上提高到 75%至 100%,可以实现使用荧光化合物的发光元件的 3 倍至 4 倍的发光效率。因为这些原因,为了实现高效率的发光元件,近年来积极地开发使用磷光化合物的发光元件(专利文献 1 及非专利文献 1)。

[0009] 在使用上述磷光化合物形成发光元件的发光层时,为了抑制磷光化合物的浓度猝灭或三重态-三重态湮灭所导致的猝灭,通常使该磷光化合物分散于由其他物质形成的矩阵中来形成。此时,成为矩阵的物质被称为主体材料,如磷光化合物分散在矩阵中的物质被

称为客体材料。

[0010] 当以磷光化合物为客体材料时,主体材料需要具有比该磷光化合物大的三重激发能(基态和三重激发态之间的能差)。已知在非专利文献 1 中用作主体材料的 CBP 具有比呈现绿色至红色的发光的磷光化合物大的三重激发能,并且 CBP 广泛地用于对磷光化合物的主体材料。

[0011] 然而,虽然 CBP 具有大的三重激发能,但是其受到空穴或电子的能力差,所以具有驱动电压增高的问题。因此,作为对磷光化合物的主体材料,需要具有大的三重激发能,容易接收空穴和电子,可传输空穴和电子的物质(即,具有双极性的物质)。

[0012] 此外,由于单重激发能(基态和单重激发态之间的能差)比三重激发能大,因此具有大三重激发能的物质还具有大单重激发能。因此,上述具有大三重激发能并具有双极性的物质还有利于将荧光化合物用作发光物质的发光元件。

[0013] [专利文献 1] 日本专利申请公开 2002-352957 号公报

[0014] [非专利文献 1] M. A. Baldo 以及其他四名, Applied Physics Letters (应用物理快报), vol. 75, No. 1, pp. 4-6, 1999

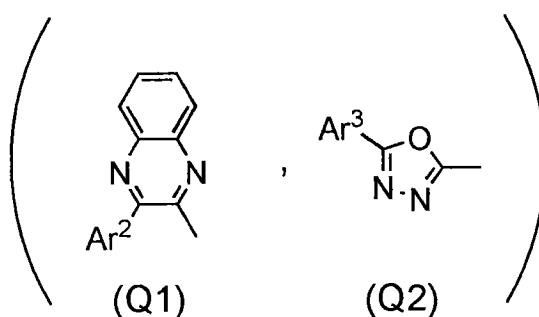
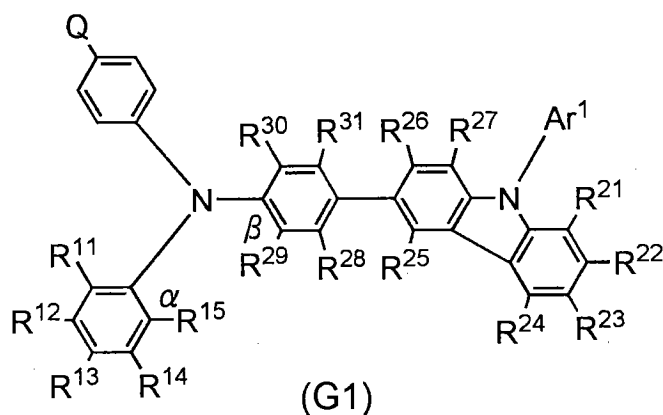
发明内容

[0015] 本发明的一个方式的课题在于:提供激发能大的物质,特别是,具有比发射可见光的磷光化合物的三重激发能宽的能隙的化合物;提供具有双极性的化合物;提高发光元件的元件特性;提供耗电量低,且驱动电压低的发光装置及电子设备。

[0016] 具体而言,本发明的一个方式提供:具有杂芳环的咪唑衍生物,其中在同一分子中包括具有电子传输性的杂芳环的噁二唑骨架或喹喔啉骨架和具有空穴传输性的咪唑骨架;在发光层或载流子传输层中使用具有所述杂芳环的咪唑衍生物的发光元件;或应用所述发光元件的发光装置及电子设备。

[0017] 本发明之一是下述通式 (G1) 所示的具有杂芳环的咪唑衍生物。

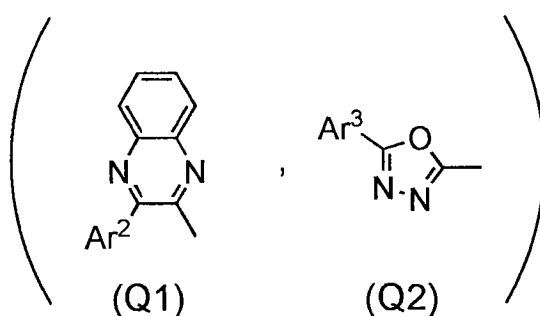
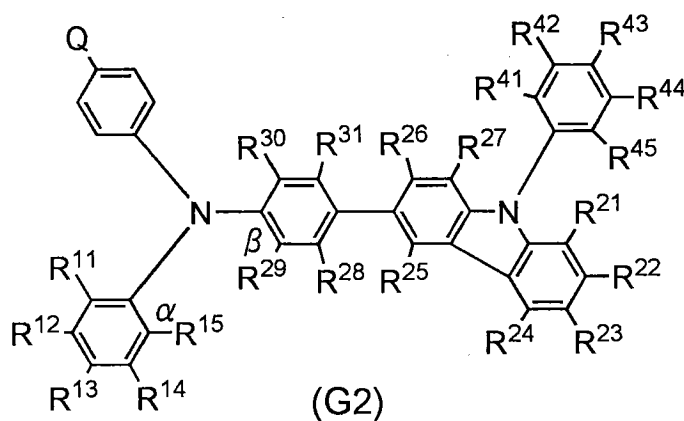
[0018]



[0019] (在通式中, Q 是通式 Q1 或 Q2 所示的取代基。此外, Ar¹ 至 Ar³ 是形成环的碳数为 6 至 10 的芳基, 所述芳基也可以具有取代基。R²⁸ 至 R³¹ 表示氢原子或碳数为 1 至 4 的烷基, R¹¹ 至 R¹⁵ 以及 R²¹ 至 R²⁷ 是氢原子、碳数为 1 至 4 的烷基或形成环的碳数为 6 至 10 的芳基, 所述芳基可以具有取代基。另外, α 位的碳和 β 位的碳也可以直接结合而形成咪唑环。)

[0020] 所公开的发明的另一例是下述通式 (G2) 所示的具有杂芳环的咪唑衍生物。

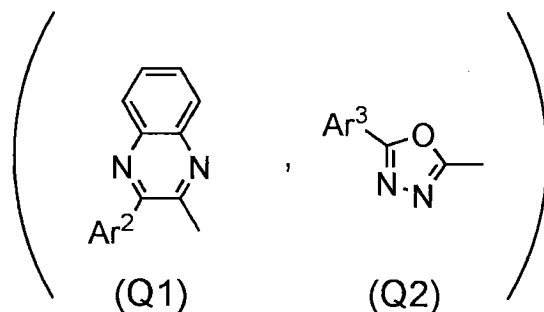
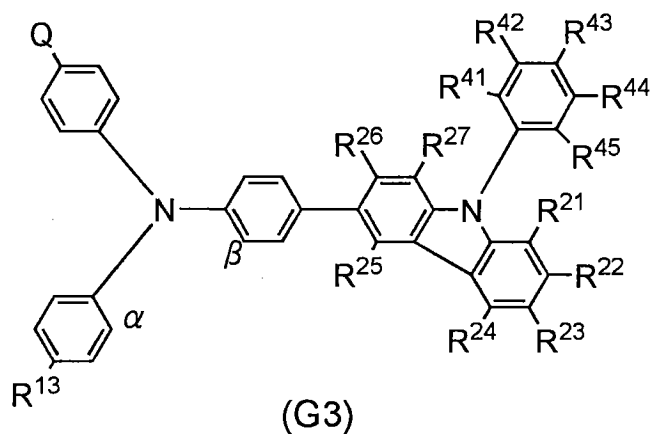
[0021]



[0022] (在通式中, Q 是通式 Q1 或 Q2 所示的取代基。Ar² 及 Ar³ 是形成环的碳数为 6 至 10 的芳基, 所述芳基也可以具有取代基。R²⁸ 至 R³¹ 表示氢原子或碳数为 1 至 4 的烷基。R¹¹ 至 R¹⁵、R²¹ 至 R²⁷ 以及 R⁴¹ 至 R⁴⁵ 是氢原子、碳数为 1 至 4 的烷基或形成环的碳数为 6 至 10 的芳基, 所述芳基也可以具有取代基。另外, α 位的碳和 β 位的碳也可以直接结合而形成咪唑环。)

[0023] 所公开的发明的另一例是下述通式 (G3) 所示的具有杂芳环的咪唑衍生物。

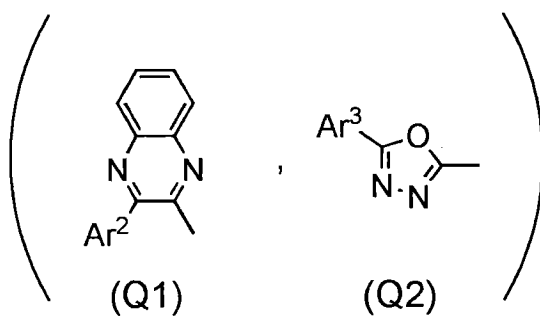
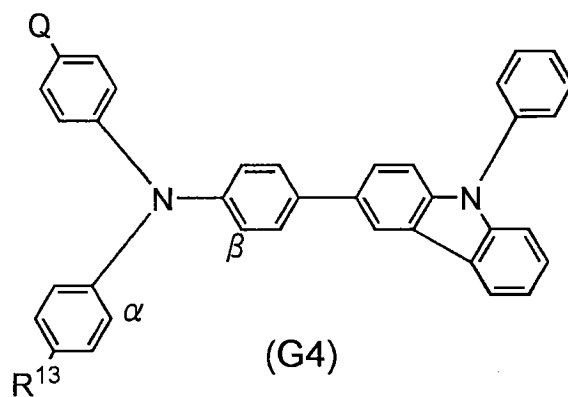
[0024]



[0025] (在通式中, Q 是通式 Q1 或 Q2 所示的取代基。Ar² 及 Ar³ 是形成环的碳数为 6 至 10 的芳基, 所述芳基也可以具有取代基。此外, R¹³、R²¹ 至 R²⁷ 以及 R⁴¹ 至 R⁴⁵ 是氢原子、碳数为 1 至 4 的烷基或形成环的碳数为 6 至 10 的芳基, 所述芳基也可以具有取代基。另外, α 位的碳和 β 位的碳也可以直接结合而形成咪唑环。)

[0026] 所公开的发明的另一例是下述通式 (G4) 所示的具有杂芳环的咪唑衍生物。

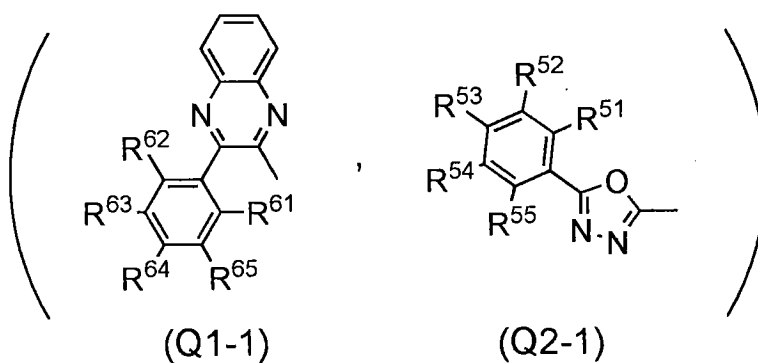
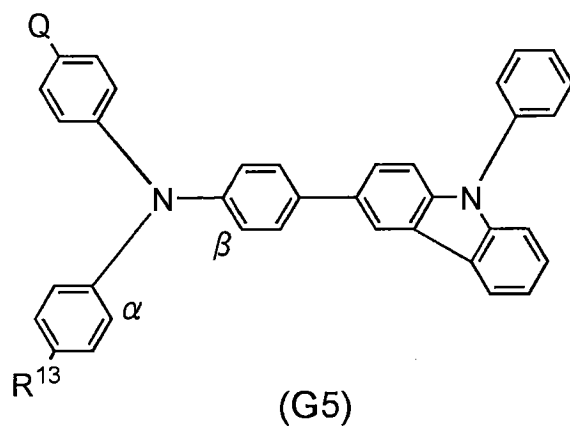
[0027]



[0028] (在通式中, Q 是通式 Q1 或 Q2 所示的取代基。Ar² 及 Ar³ 是形成环的碳数为 6 至 10 的芳基, 所述芳基也可以具有取代基, R¹³ 是氢原子、碳数为 1 至 4 的烷基或形成环的碳数为 6 至 10 的芳基, 所述芳基也可以具有取代基。另外, α 位的碳和 β 位的碳可以直接结合而形成咪唑环。)

[0029] 所公开的发明的另一例是下述通式 (G5) 所示的具有杂芳环的咪唑衍生物。

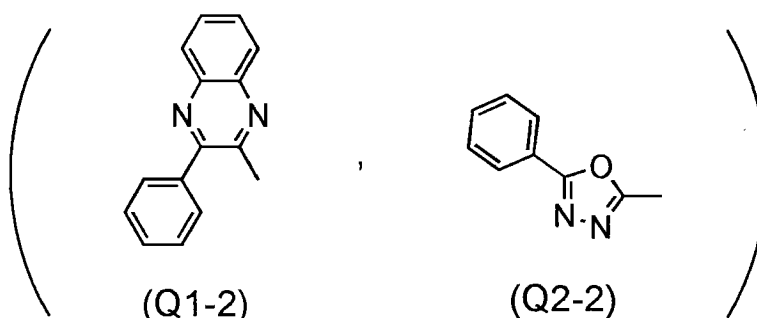
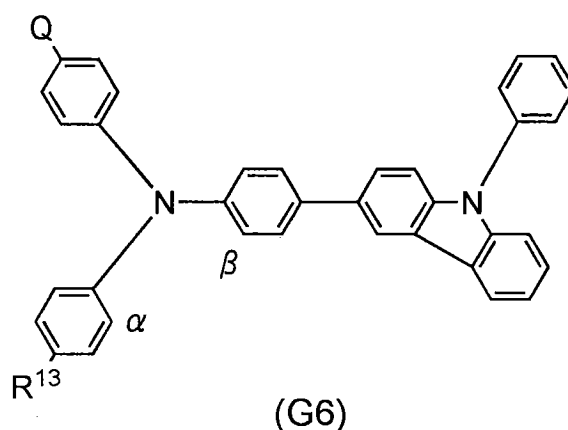
[0030]



[0031] (在通式中, Q 是通式 Q1-1 或 Q2-1 所示的取代基。此外, R^{13} 、 R^{51} 至 R^{55} 以及 R^{61} 至 R^{65} 是氢原子、碳数为 1 至 4 的烷基或形成环的碳数为 6 至 10 的芳基, 所述芳基也可以具有取代基。另外, α 位的碳和 β 位的碳也可以直接结合而形成咪唑环。)

[0032] 所公开的发明的另一例是下述通式 (G6) 所示的具有杂芳环的咪唑衍生物。

[0033]



[0034] (在通式中, Q 是结构式 Q1-2 或 Q2-2 所示的取代基。此外, R^{13} 是氢原子、碳数为 1 至 4 的烷基或形成环的碳数为 6 至 10 的芳基, 所述芳基可以具有取代基。另外, α 位的碳和 β 位的碳也可以直接结合而形成咪唑环。)

[0035] 所公开的发明的另一例是一种发光元件, 其中在一对电极之间包括上述通式 (G1)、(G2)、(G3)、(G4)、(G5) 以及 (G6) 所示的具有杂芳环的咪唑衍生物中的至少一个。

[0036] 所公开的发明的另一例是一种发光元件, 其中在一对电极之间包括包含上述通式 (G1)、(G2)、(G3)、(G4)、(G5) 以及 (G6) 所示的具有杂芳环的咪唑衍生物和发光物质的发光层。

[0037] 所公开的发明的另一例是一种发光元件, 其中在一对电极之间包括包含上述通式 (G1)、(G2)、(G3)、(G4)、(G5) 以及 (G6) 所示的具有杂芳环的咪唑衍生物和发射磷光的物质的发光层。

[0038] 所公开的发明的另一例是一种发光装置及电子设备, 其中使用在一对电极之间包括包含上述通式 (G1)、(G2)、(G3)、(G4)、(G5) 以及 (G6) 所示的具有杂芳环的咪唑衍生物和发光物质的发光层的发光元件。

[0039] 另外, 本说明书中的发光装置包括使用发光元件的图像显示器件或发光器件。此外, 本发明的发光装置包括在形成有发光元件的衬底上连接有例如各向异性导电薄膜、TCP(带载封装, Tape Carrier Package) 等的 TAB(带式自动焊接, Tape Automated Bonding) 带的连接器的模块; 在其端部还设置有印刷线路板的模块; 以及在形成有发光元件的衬底上通过 COG(Chip On Glass, 玻璃上芯片安装) 方式直接安装 IC(集成电路) 的模块。

[0040] 本发明的一个方式的发光元件在一对电极之间包括包含根据本发明的一个方式的具有杂芳环的咪唑衍生物层。

[0041] 此外,本发明的一个方式的发光装置包括所述发光元件以及控制所述发光元件的发光的控制单元。此外,本发明的一个方式的电子设备包括显示部,该显示部具备所述发光元件和控制所述发光元件的发光的控制单元。

[0042] 另外,由于本发明的一个方式的发光元件可以以高效率获得光,因此使用该发光元件的发光装置还可以实现低耗电量。从而,本发明包括使用该发光元件的发光装置及电子设备。

[0043] 另外,形成环的碳数为6至10的芳基所具有的取代基是包括碳数为1至4的烷基、或形成环的碳数为6至10的芳基,并且该芳基也可以包括碳数为1至4的烷基。

[0044] 根据本发明可以提供一种新颖的具有杂芳环的咪唑衍生物,其中具有比发射可见光的磷光化合物的三重激发能宽的能隙并可以用作发光元件的电子传输层或发光层的主体材料。此外,通过使用新颖的具有杂芳环的咪唑衍生物,可以提供发光效率高的发光元件。此外,可以提供耗电量少的发光装置及电子设备。

附图说明

[0045] 图1A至1C是说明根据本发明的实施方式的发光元件的图;

[0046] 图2A和2B是说明根据本发明的实施方式的发光元件的图;

[0047] 图3是说明根据本发明的实施方式的发光元件的图;

[0048] 图4A和4B是说明根据本发明的实施方式的发光装置的图;

[0049] 图5A和5B是说明根据本发明的实施方式的发光装置的图;

[0050] 图6A至6D是说明根据本发明的实施方式的电子设备的图;

[0051] 图7是说明根据本发明的实施方式的电子设备的图;

[0052] 图8是说明根据本发明的实施方式的照明装置的图;

[0053] 图9是说明根据本发明的实施方式的照明装置的图;

[0054] 图10A和10B示出PCBA1PQ的¹H NMR图;

[0055] 图11A和11B是示出PCBA1PQ的甲苯溶液及薄膜的紫外·可见吸收光谱及发射光谱的图;

[0056] 图12A和12B是示出PCBA1PQ的CV测量结果的图;

[0057] 图13A和13B示出PCBA011的¹H NMR图;

[0058] 图14A和14B是示出PCBA011的甲苯溶液及薄膜的紫外·可见吸收光谱及发射光谱的图;

[0059] 图15A和15B是示出PCBA011的CV测量结果的图;

[0060] 图16A和16B示出PCC1PQ的¹H NMR图;

[0061] 图17A和17B是示出PCC1PQ的甲苯溶液及薄膜的紫外·可见吸收光谱及发射光谱的图;

[0062] 图18A和18B是示出PCC1PQ的CV测量结果的图;

[0063] 图19A和19B示出PCC011的¹H NMR图;

[0064] 图20A和20B是示出PCC011的甲苯溶液及薄膜的紫外·可见吸收光谱及发射光谱的图;

[0065] 图21A和21B是示出PCC011的CV测量结果的图;

- [0066] 图 22 是说明在实施例中制造的发光元件的图；
- [0067] 图 23A 和 23B 是示出在实施例 5 中制造的发光元件的电流密度 - 亮度特性及电压 - 亮度特性的图；
- [0068] 图 24A 和 24B 是示出在实施例 5 中制造的发光元件的电压 - 电流特性及发射光谱的图；
- [0069] 图 25A 和 25B 是示出在实施例 6 中制造的发光元件的电流密度 - 亮度特性及电压 - 亮度特性的图；
- [0070] 图 26A 和 26B 是示出在实施例 6 中制造的发光元件的电压 - 电流特性及发射光谱的图；
- [0071] 图 27A 和 27B 是示出 PCBA1PQ 的理想分子结构的最高被占据轨道 (HOMO) 和最低空轨道 (LUMO) 的图；
- [0072] 图 28A 和 28B 是示出 PCC011 的理想分子结构的最高被占据轨道 (HOMO) 和最低空轨道 (LUMO) 的图。

具体实施方式

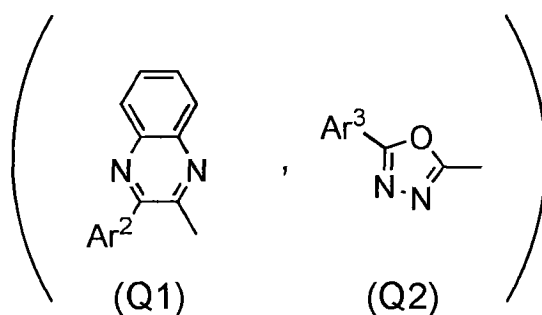
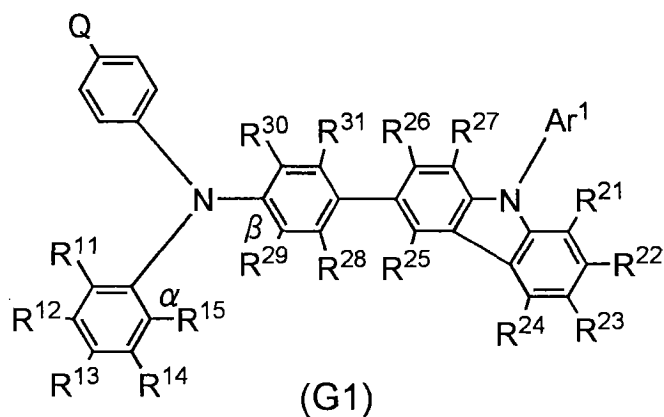
[0073] 下面,关于本发明的实施方式将参照附图给予详细的说明。但是,本发明不局限于以下说明,所属技术领域的普通技术人员可以很容易地理解一个事实,就是其方式和详细内容可以被变换为各种各样的形式而不脱离本发明的宗旨及其范围。因此,本发明不应该被解释为仅限定在下面所示的实施方式所记载的内容中。

[0074] 实施方式 1

[0075] 在本实施方式中说明本发明的一个方式的具有杂芳环的咪唑衍生物。

[0076] 下面示出本实施方式的具有杂芳环的咪唑衍生物的通式 (G1)。

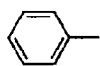
[0077]



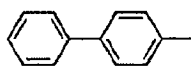
[0078] (在通式中, Q 是通式 Q1 或 Q2 所示的取代基。Ar¹ 至 Ar³ 是形成环的碳数为 6 至 10 的芳基, 所述芳基可也以具有取代基。R²⁸ 至 R³¹ 表示氢原子或碳数为 1 至 4 的烷基。R¹¹ 至 R¹⁵ 以及 R²¹ 至 R²⁷ 是氢原子、碳数为 1 至 4 的烷基或形成环的碳数为 6 至 10 的芳基, 所述芳基也可以具有取代基。另外, α 位的碳和 β 位的碳也可以直接结合而形成呋唑环。) 当引入烷基时, 本发明的一个方式的具有杂芳环的呋唑衍生物的溶解性提高。

[0079] 在通式 (G1) 中, Ar¹ 至 Ar³ 是形成环的碳数为 6 至 10 的芳基, 所述芳基也可以具有取代基。具体而言, 作为其例子可以举出结构式 S-1 至 S-17 所示的取代基。

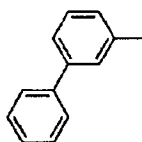
[0080]



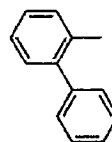
(S-1)



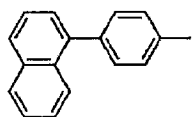
(S-2)



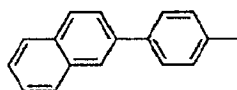
(S-3)



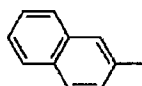
(S-4)



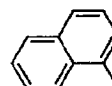
(S-5)



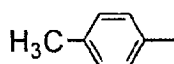
(S-6)



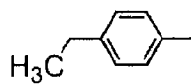
(S-7)



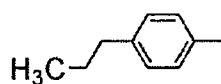
(S-8)



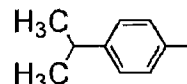
(S-9)



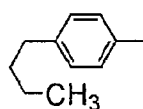
(S-10)



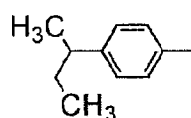
(S-11)



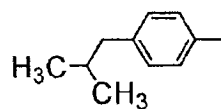
(S-12)



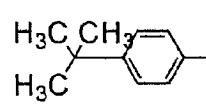
(S-13)



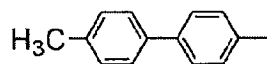
(S-14)



(S-15)



(S-16)



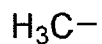
(S-17)

[0081] 此外,在通式 (G1) 中, R^{28} 至 R^{31} 表示氢原子或碳数为 1 至 4 的烷基。具体而言,作为其例子,可以举出结构式 S-18 至 S-26 所示的取代基。

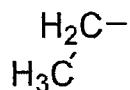
[0082]



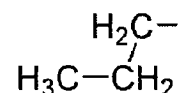
(S-18)



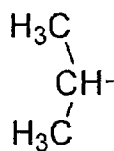
(S-19)



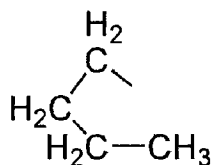
(S-20)



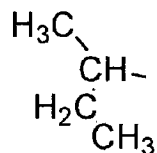
(S-21)



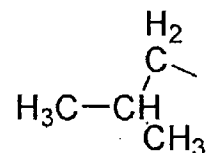
(S-22)



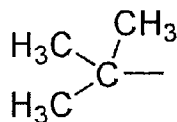
(S-23)



(S-24)



(S-25)



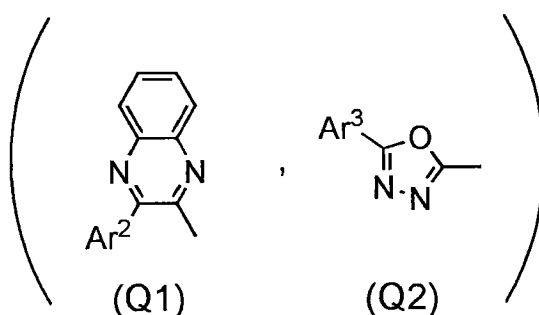
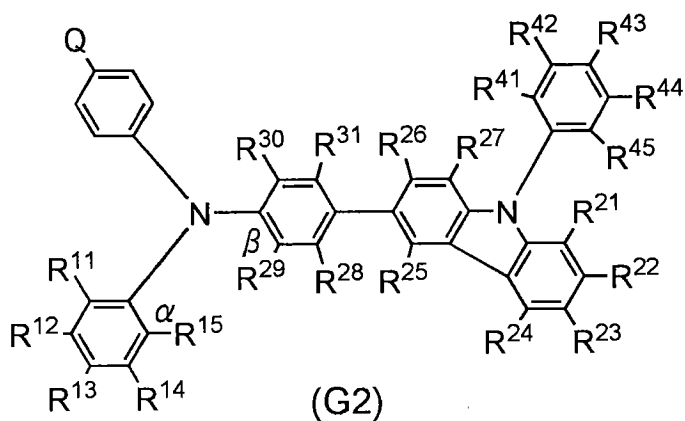
(S-26)

[0083] 此外,在通式 (G1) 中, R^{11} 至 R^{15} 以及 R^{21} 至 R^{27} 是氢原子、碳数为 1 至 4 的烷基或形成环的碳数为 6 至 10 的芳基,所述芳基也可以具有取代基。作为 R^{11} 至 R^{15} 以及 R^{21} 至 R^{27} 的具体例子,举出结构式 S-1 至 S-26 所示的取代基。

[0084] 另外,在通式 (G1) 中, α 位的碳和 β 位的碳也可以直接结合而形成咪唑环。

[0085] 此外,当通式 (G1) 的 Ar^1 是苯基时,容易合成且其合成原料廉价,所以是优选的。在此情况下,下述通式 (G2) 表示本发明的一个方式的具有杂芳环的咪唑衍生物。

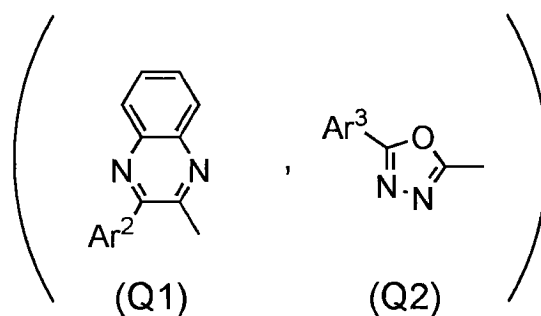
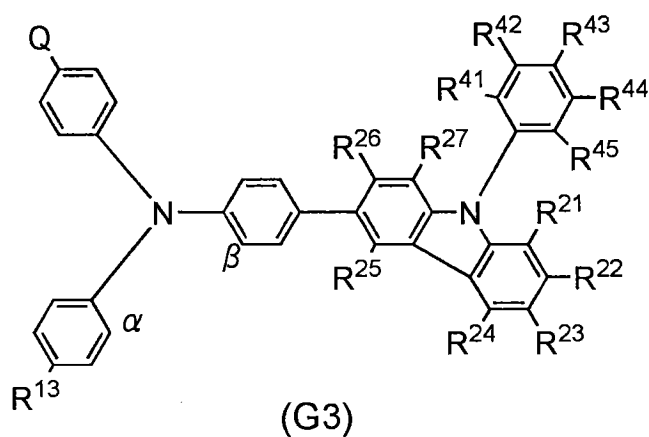
[0086]



[0087] (在通式中, Q 是通式 Q1 或 Q2 所示的取代基。Ar² 及 Ar³ 是形成环的碳数为 6 至 10 的芳基, 所述芳基也可以具有取代基。R²⁸ 至 R³¹ 表示氢原子或碳数为 1 至 4 的烷基。R¹¹ 至 R¹⁵、R²¹ 至 R²⁷ 以及 R⁴¹ 至 R⁴⁵ 是氢原子、碳数为 1 至 4 的烷基或形成环的碳数为 6 至 10 的芳基, 所述芳基也可以具有取代基。另外, α 位的碳和 β 位的碳也可以直接结合而形成咪唑环。)

[0088] 此外, 当通式 (G2) 的 R¹¹、R¹²、R¹⁴、R¹⁵ 及 R²⁸ 至 R³¹ 是氢原子时, 不容易产生位阻并容易合成, 所以是优选的。在此情况下, 下述通式 (G3) 表示本发明的一个方式的具有杂芳环的咪唑衍生物。

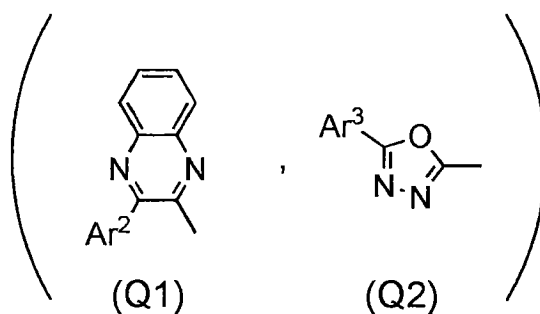
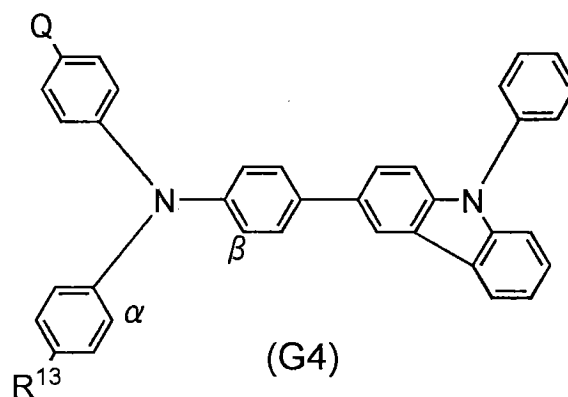
[0089]



[0090] (在通式中, Q 是通式 Q1 或 Q2 所示的取代基。Ar² 及 Ar³ 是形成环的碳数为 6 至 10 的芳基, 所述芳基也可以具有取代基。R¹³、R²¹ 至 R²⁷ 以及 R⁴¹ 至 R⁴⁵ 是氢原子、碳数为 1 至 4 的烷基或形成环的碳数为 6 至 10 的芳基, 所述芳基也可以具有取代基。另外, α 位的碳和 β 位的碳也可以直接结合而形成呋唑环。)

[0091] 再者, 当通式 (G3) 的 R⁴¹ 至 R⁴⁵ 以及 R²¹ 至 R²⁷ 是氢原子时, 三重激发能高, 所以是优选的。在此情况下, 下述通式 (G4) 表示本发明的一个方式的具有杂芳基的呋唑衍生物。

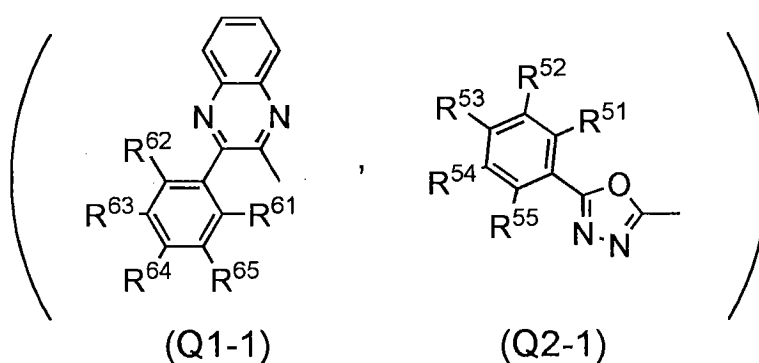
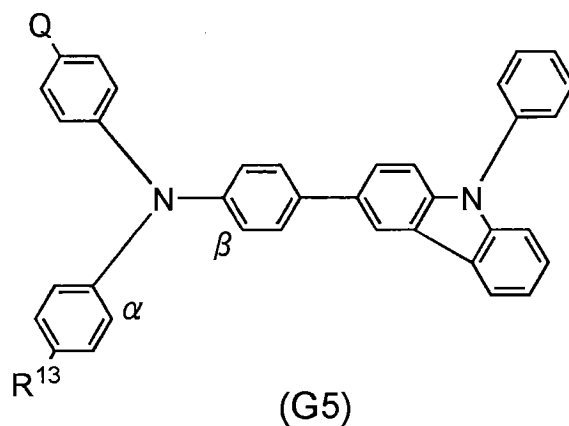
[0092]



[0093] (在通式中, Q 是通式 Q1 或 Q2 所示的取代基。Ar² 及 Ar³ 是形成环的碳数为 6 至 10 的芳基, 所述芳基也可以具有取代基。R¹³ 是氢原子、碳数为 1 至 4 的烷基或形成环的碳数为 6 至 10 的芳基, 所述芳基也可以具有取代基。另外, α 位的碳和 β 位的碳也可以直接结合而形成呋唑环。)

[0094] 此外, 当通式 (G4) 的 Ar² 及 Ar³ 是苯基时, 三重激发能更高, 所以是优选的。在此情况下, 下述通式 (G5) 表示本发明的一个方式的具有杂芳基的呋唑衍生物。

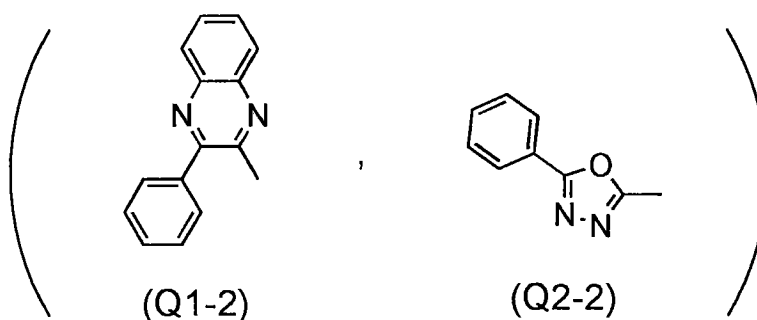
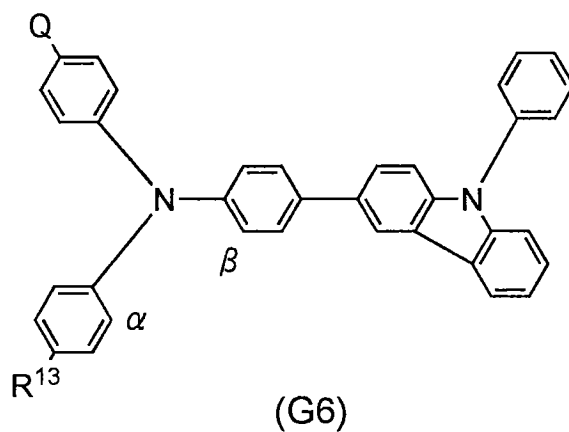
[0095]



[0096] (在通式中, Q 是通式 Q1-1 或 Q2-1 所示的取代基。R¹³、R⁵¹ 至 R⁵⁵ 以及 R⁶¹ 至 R⁶⁵ 是氢原子、碳数为 1 至 4 的烷基或形成环的碳数为 6 至 10 的芳基, 所述芳基也可以具有取代基。另外, α 位的碳和 β 位的碳也可以直接结合而形成咪唑环。)

[0097] 此外, 当通式 (G5) 的 R⁵¹ 至 R⁵⁵ 以及 R⁶¹ 至 R⁶⁵ 是氢原子时, 三重激发能更高, 所以是优选的。在此情况下, 下述通式 (G6) 表示本发明的一个方式的具有杂芳基的咪唑衍生物。

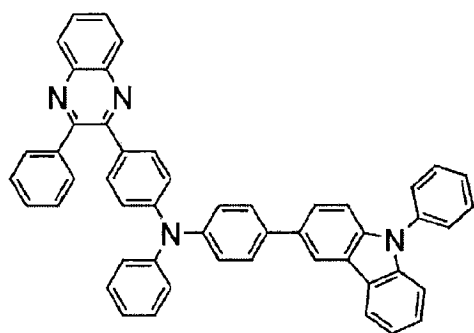
[0098]



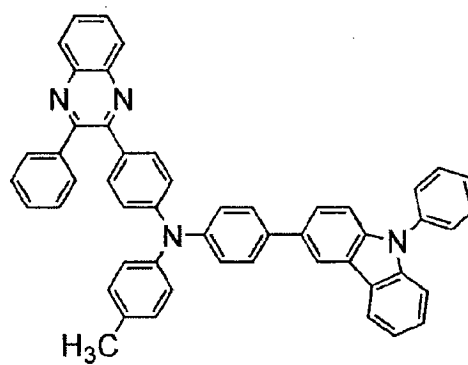
[0099] (在通式中, Q 是结构式 Q1-2 或 Q2-2 所示的取代基。R¹³ 是氢原子、碳数为 1 至 4 的烷基或形成环的碳数为 6 至 10 的芳基, 所述芳基也可以具有取代基。另外, α 位的碳和 β 位的碳也可以直接结合而形成呋唑环。)

[0100] 作为本发明的一个方式的具有杂芳环的呋唑衍生物的具体例子, 可以举出结构式 (1) 至 (128) 所示的化合物。但是, 本发明不局限于此。

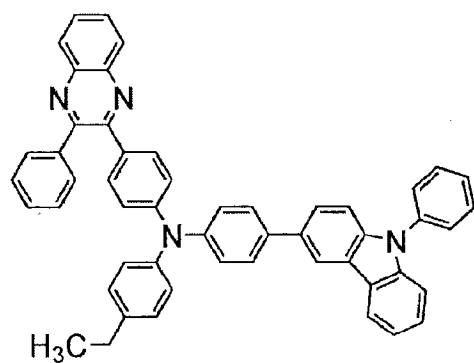
[0101]



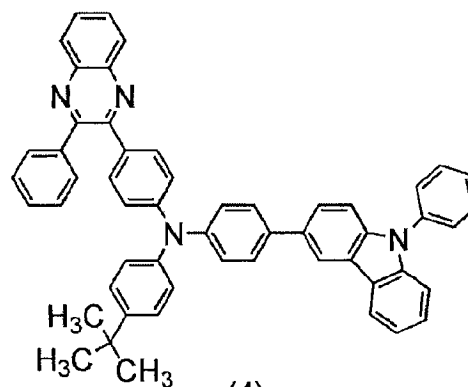
(1)



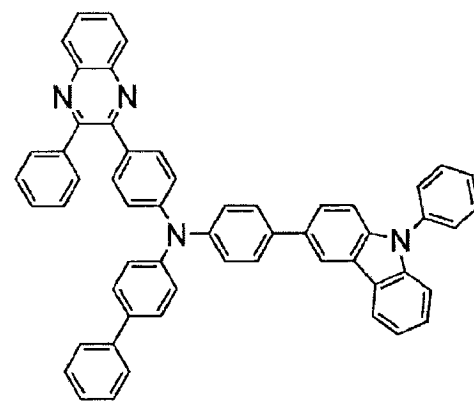
(2)



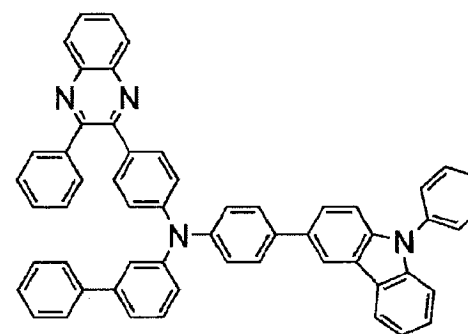
(3)



(4)

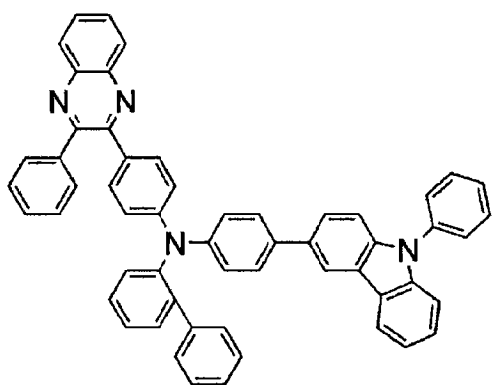


(5)

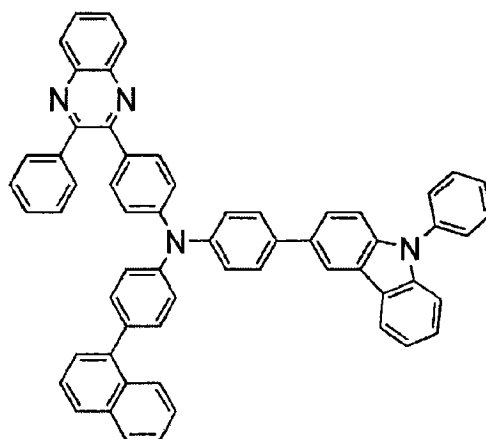


(6)

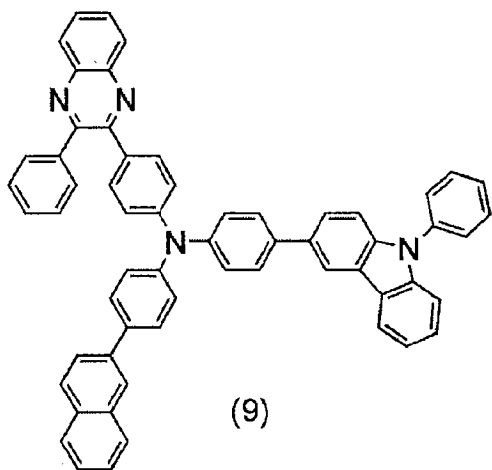
[0102]



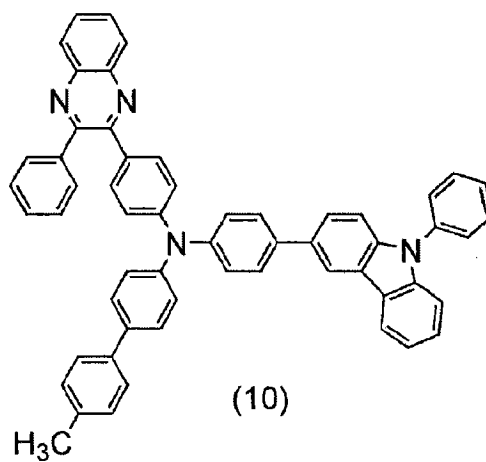
(7)



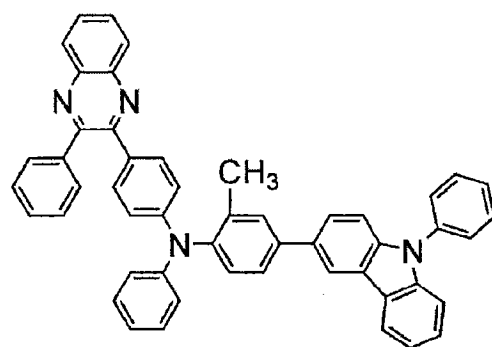
(8)



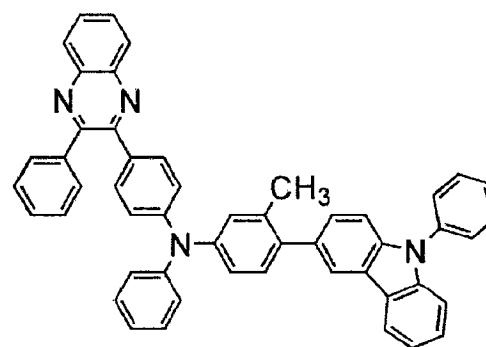
(9)



(10)

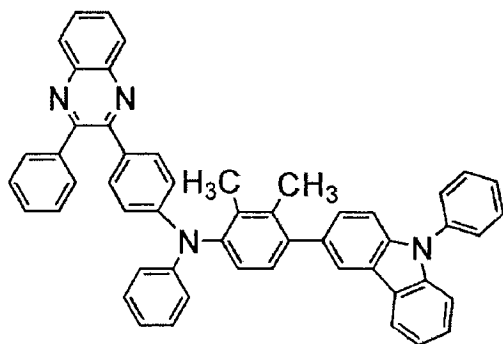


(11)

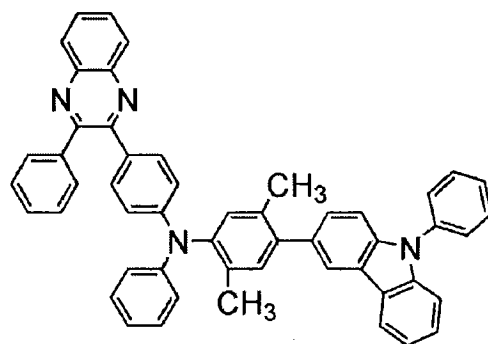


(12)

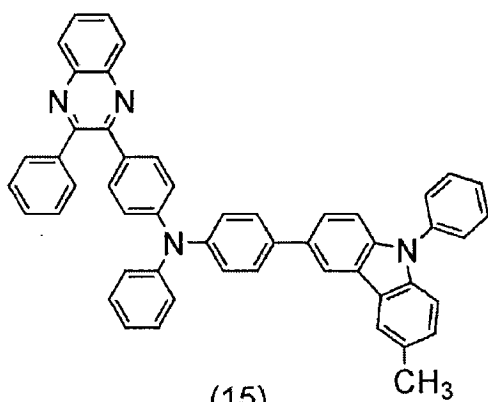
[0103]



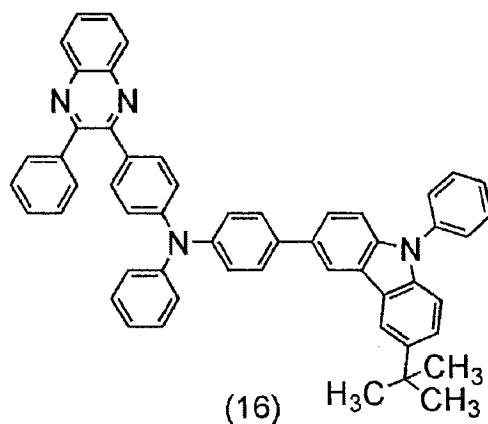
(13)



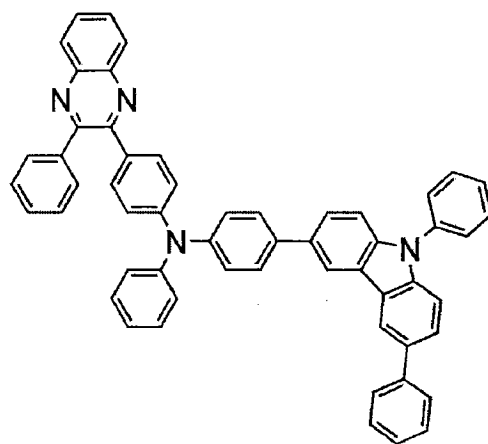
(14)



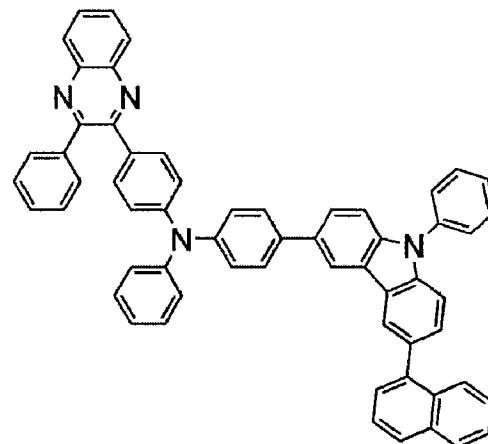
(15)



(16)

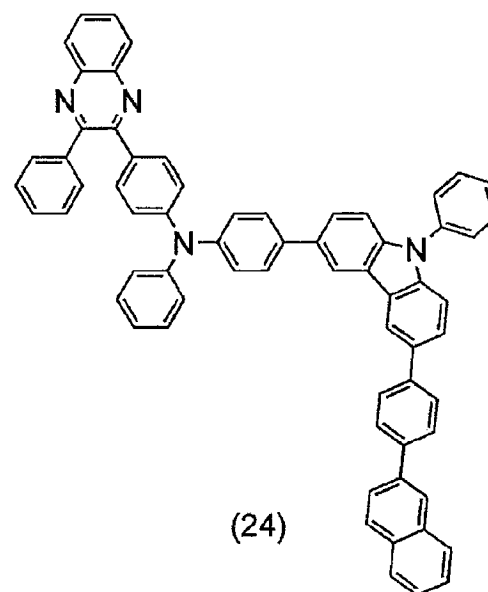
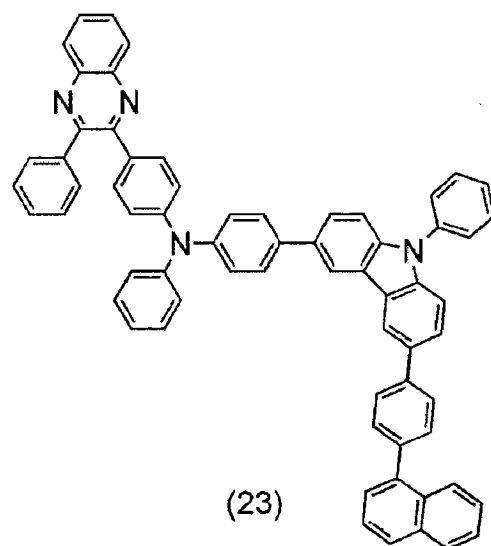
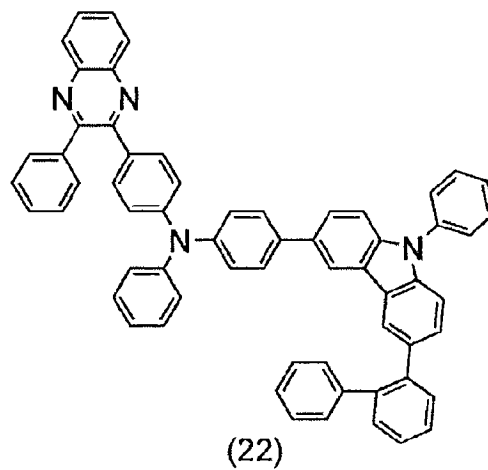
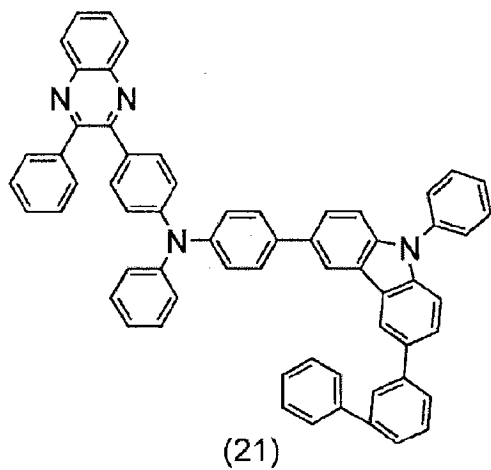
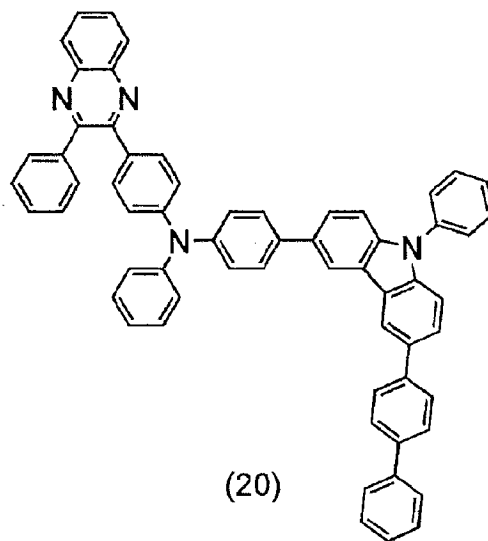
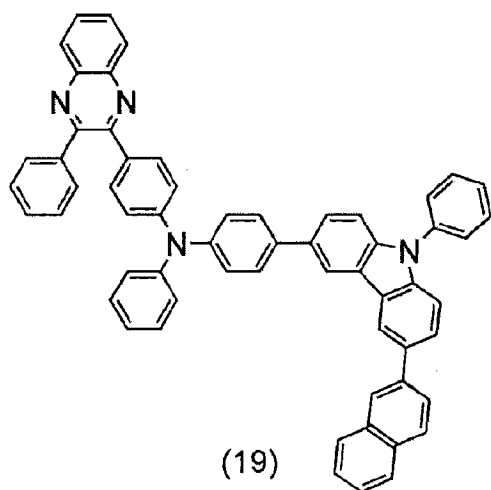


(17)

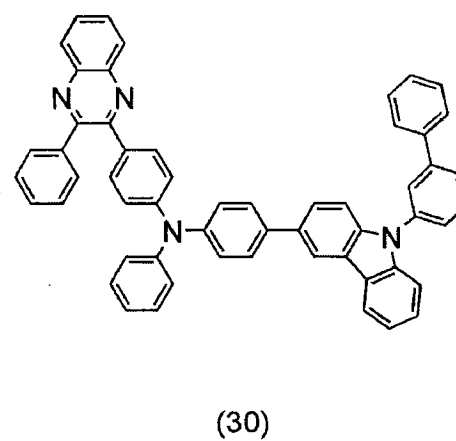
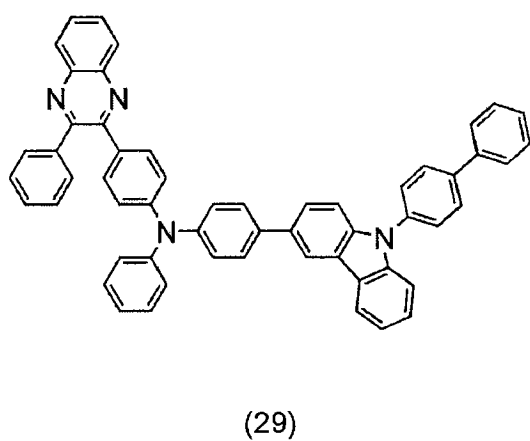
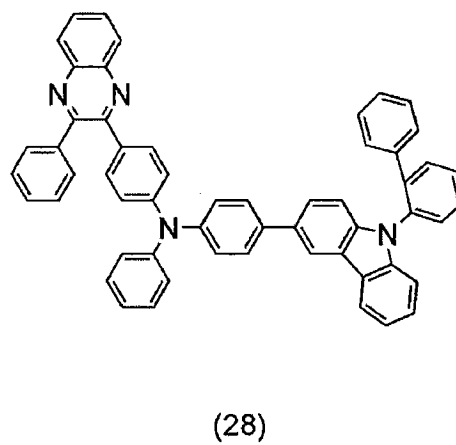
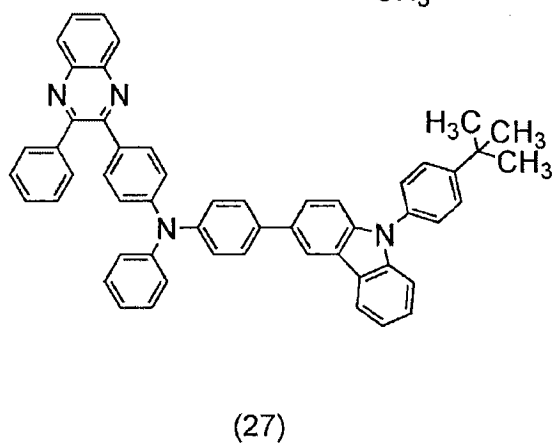
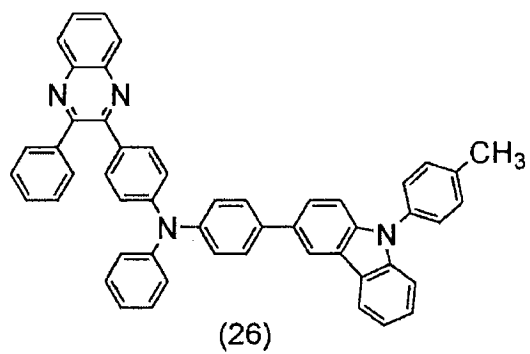
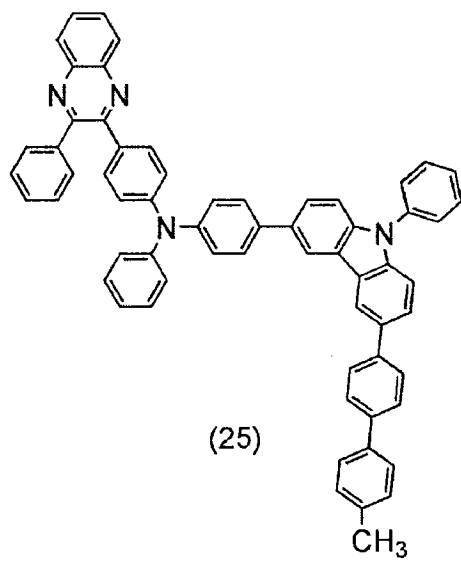


(18)

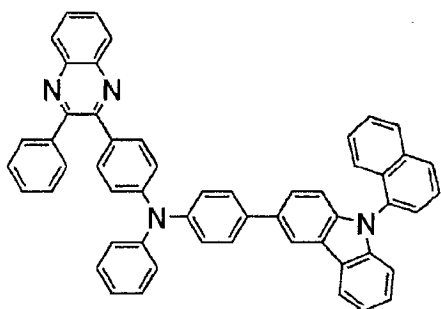
[0104]



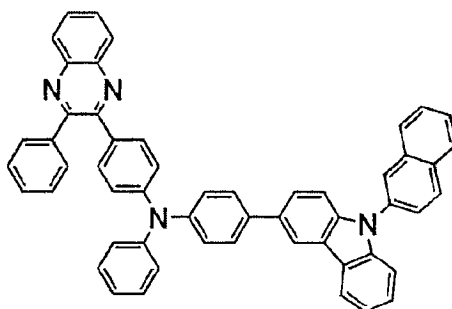
[0105]



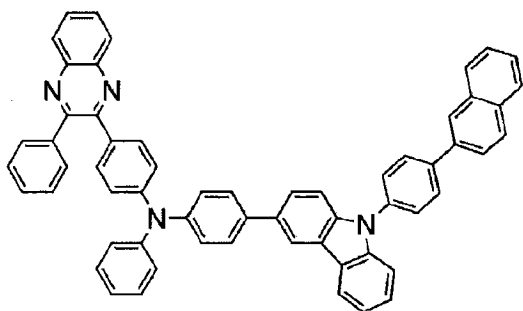
[0106]



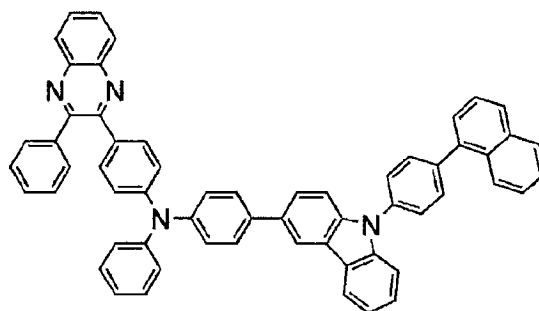
(31)



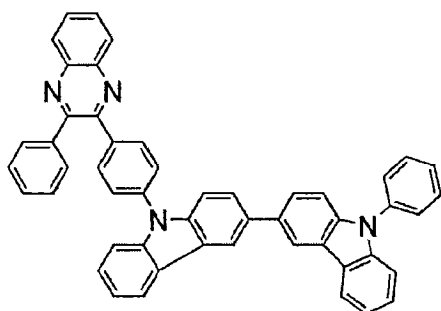
(32)



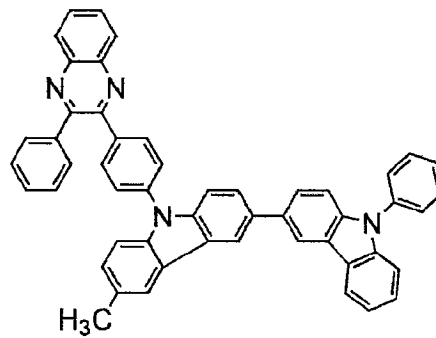
(33)



(34)

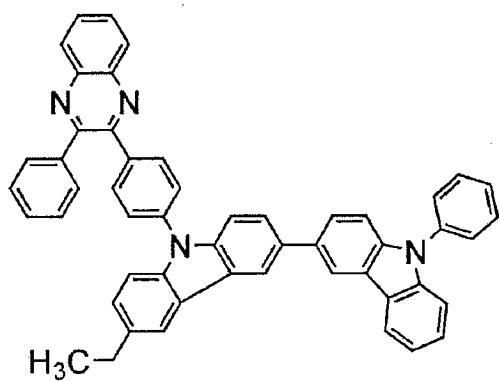


(35)

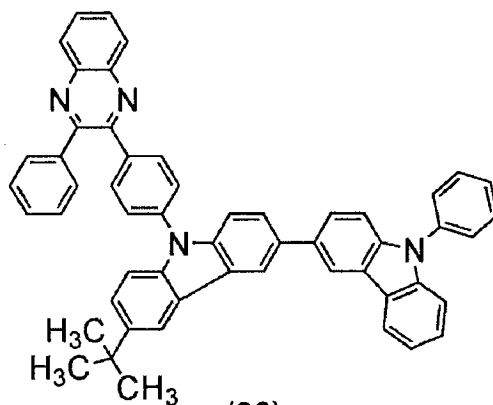


(36)

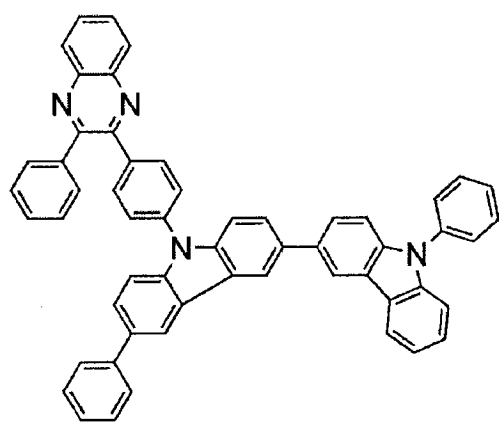
[0107]



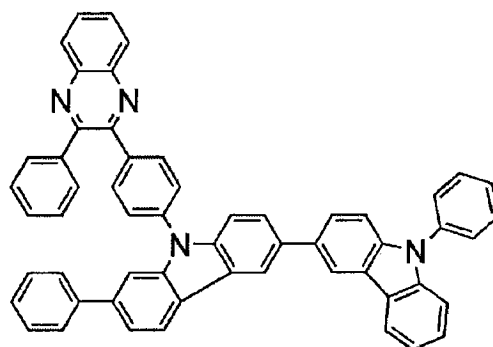
(37)



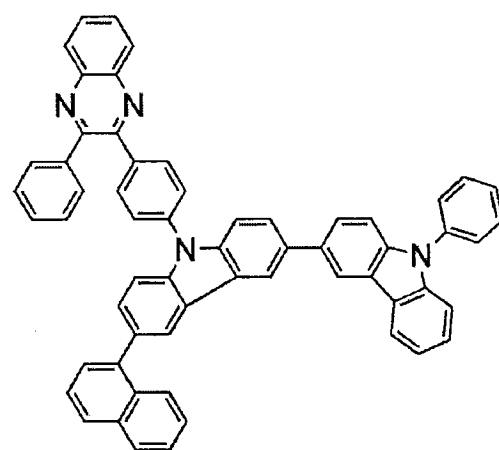
(38)



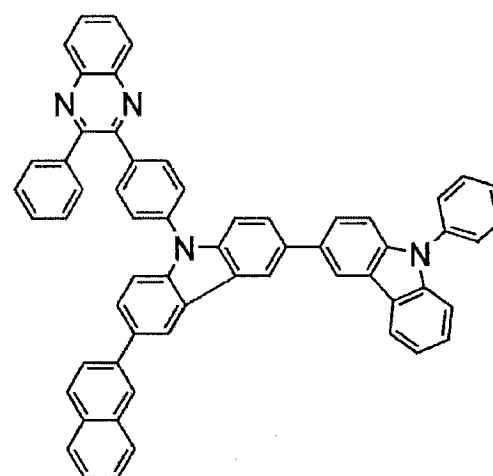
(39)



(40)

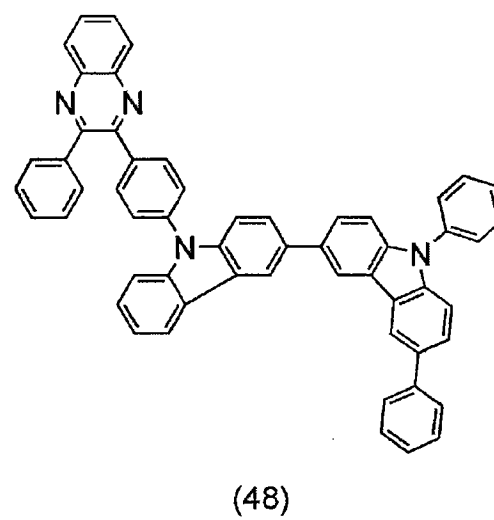
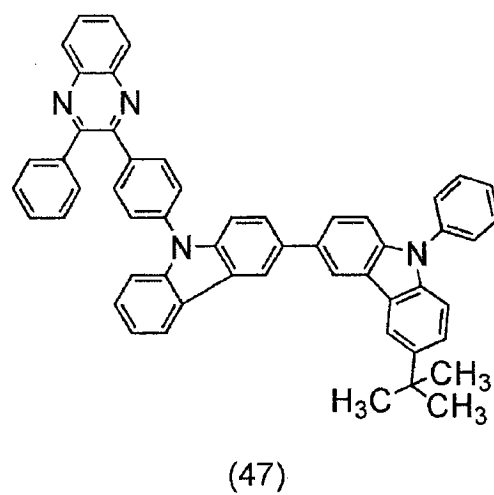
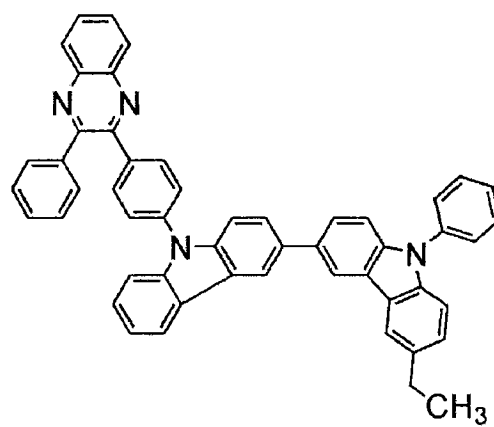
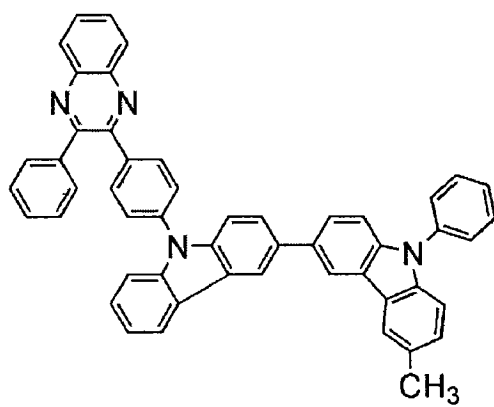
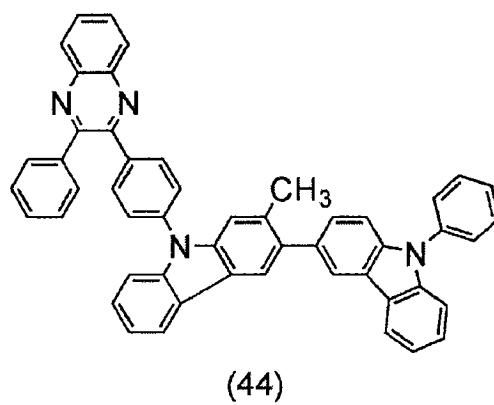
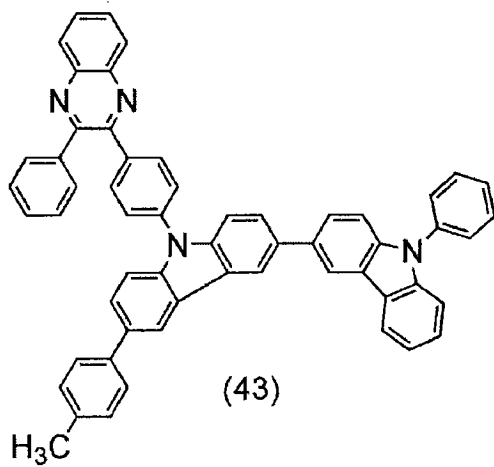


(41)

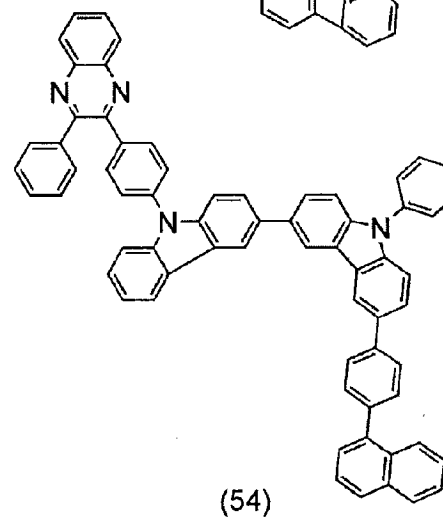
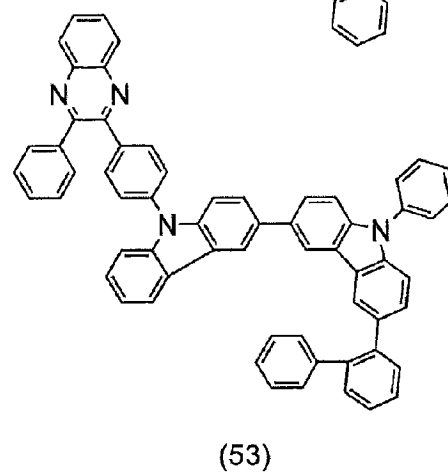
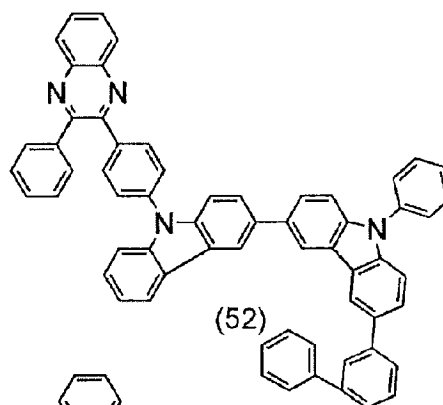
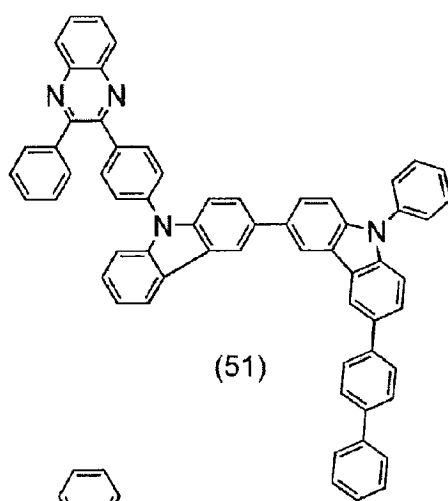
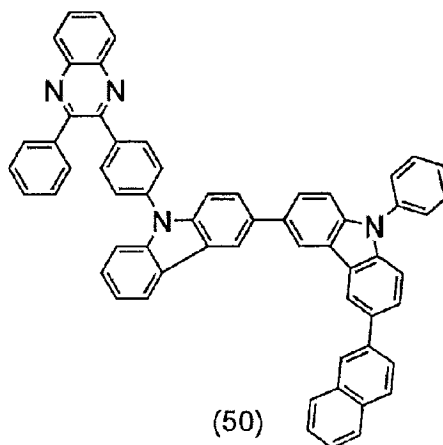
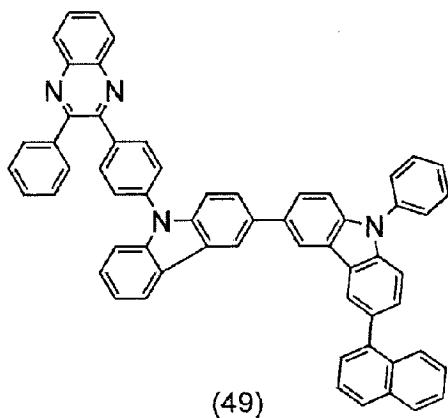


(42)

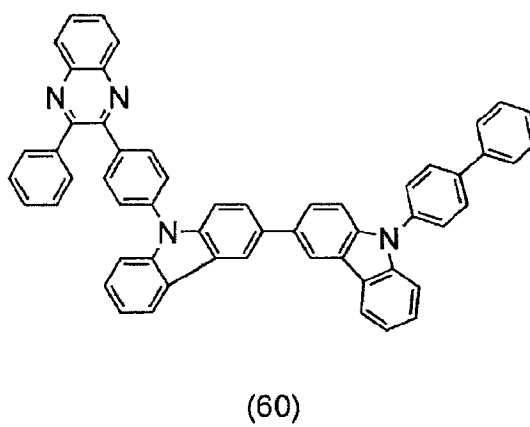
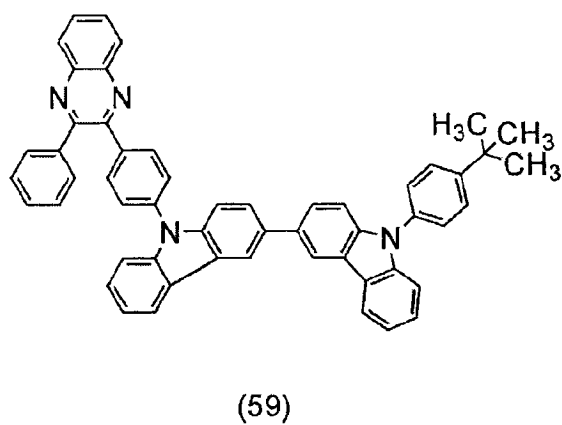
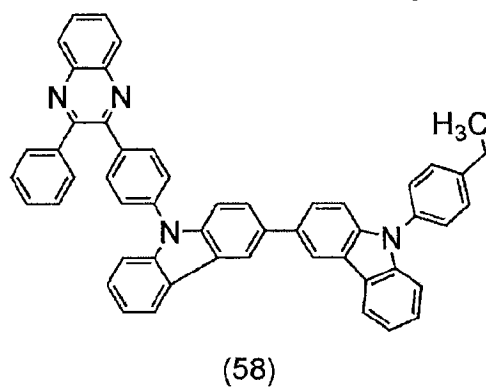
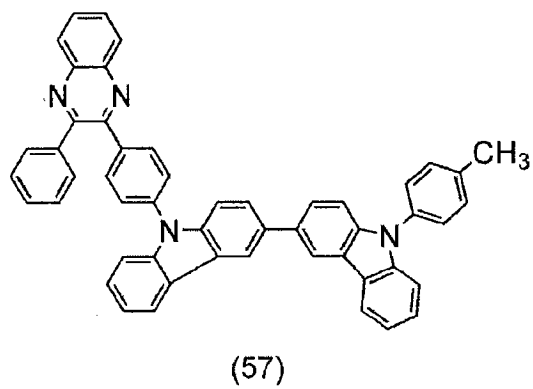
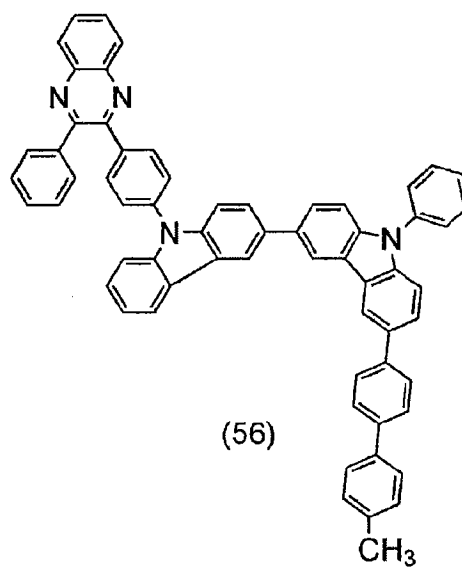
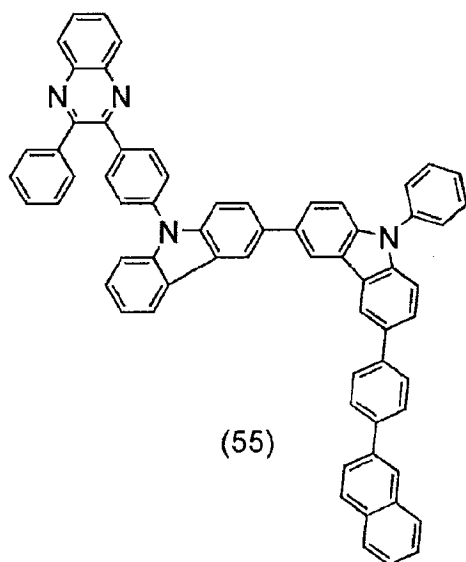
[0108]



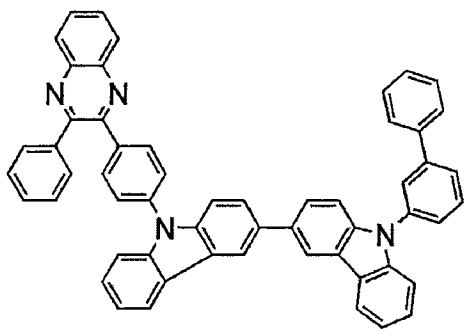
[0109]



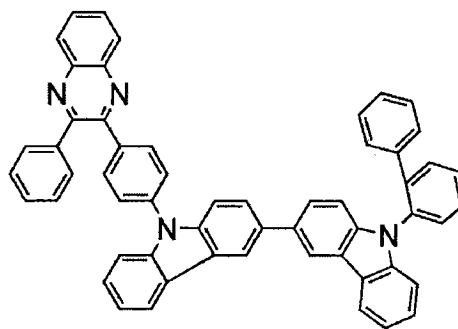
[0110]



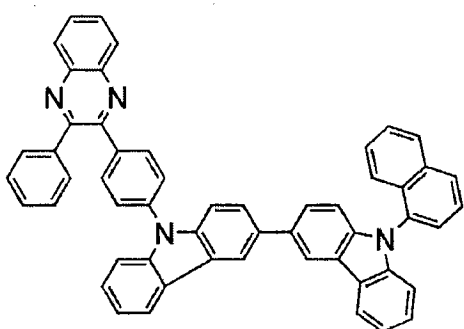
[0111]



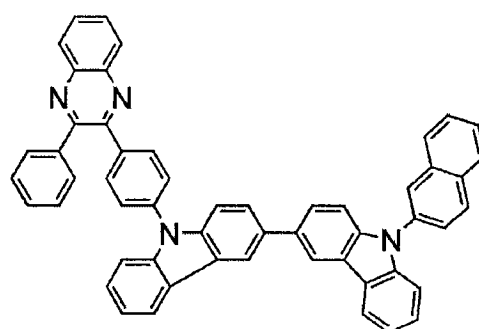
(61)



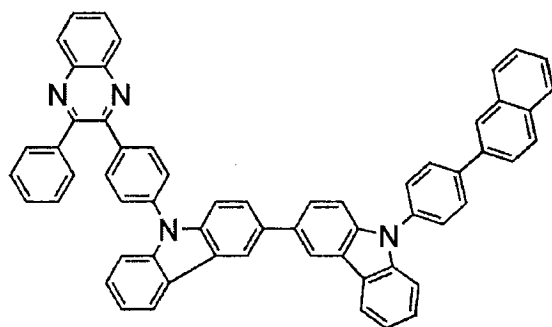
(62)



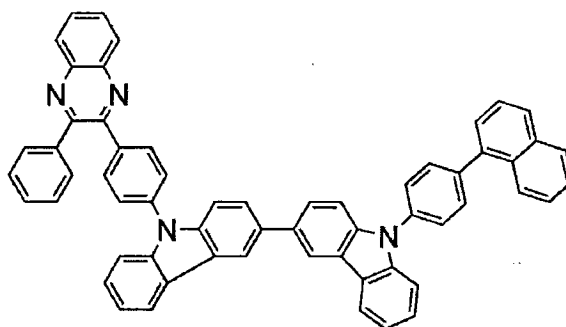
(63)



(64)

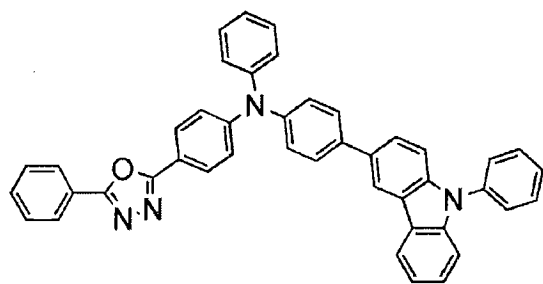


(65)

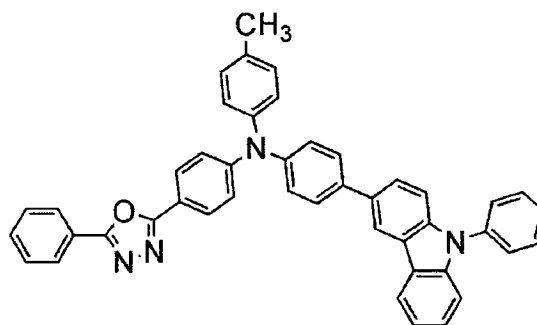


(66)

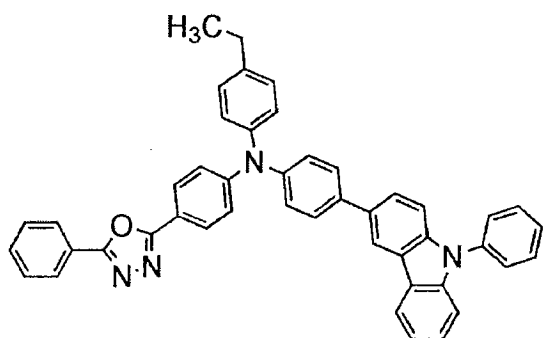
[0112]



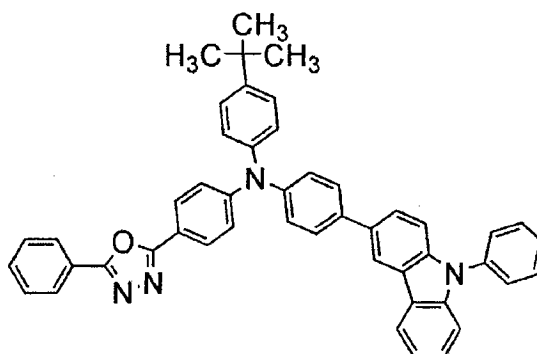
(67)



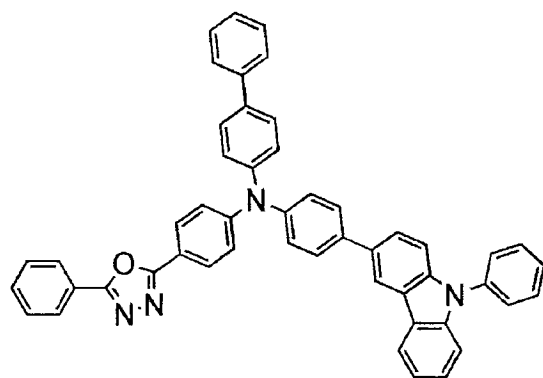
(68)



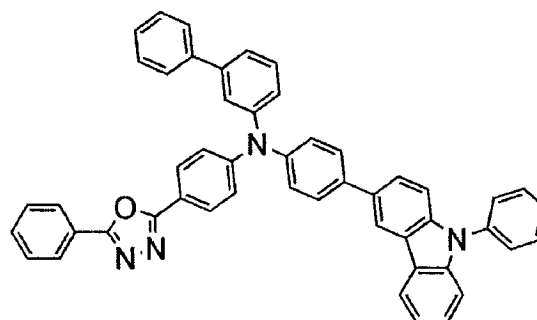
(69)



(70)

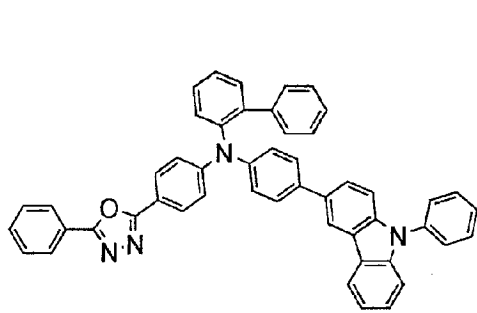


(71)

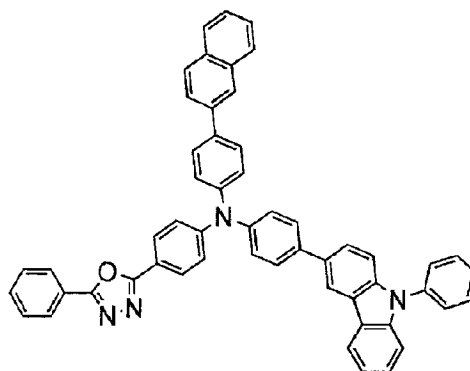


(72)

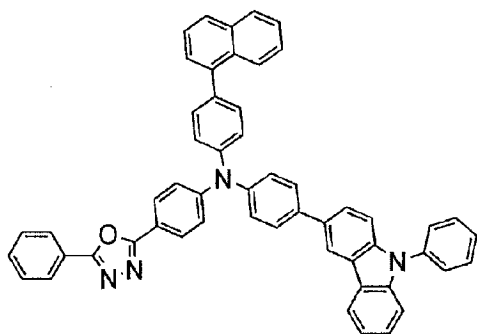
[0113]



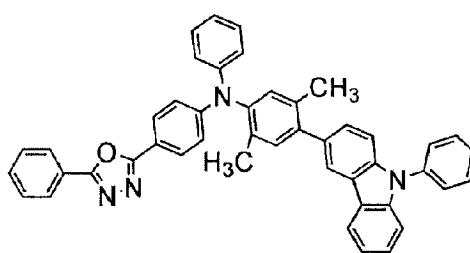
(73)



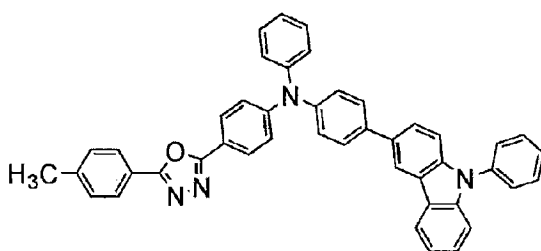
(74)



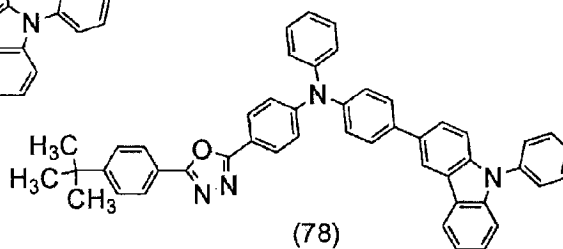
(75)



(76)

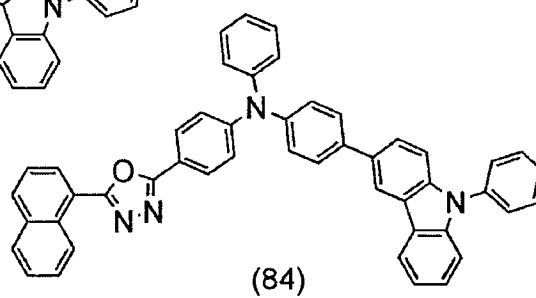
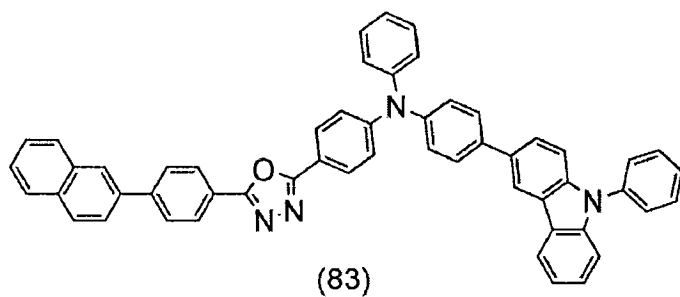
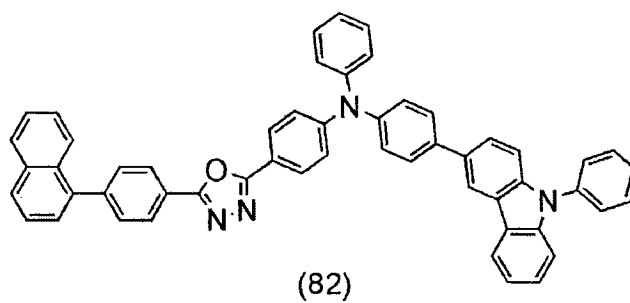
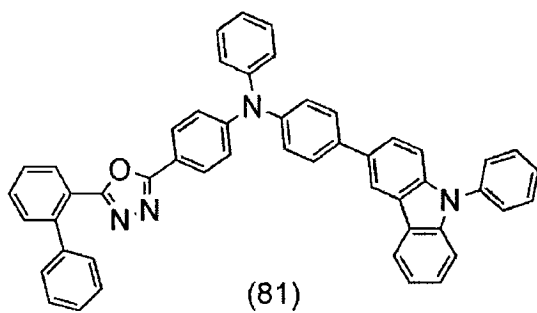
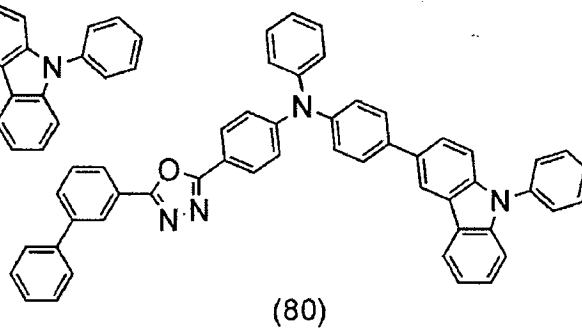
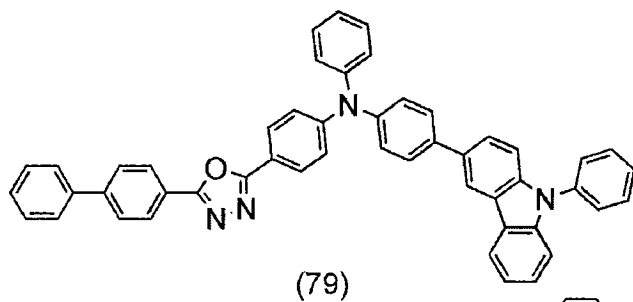


(77)

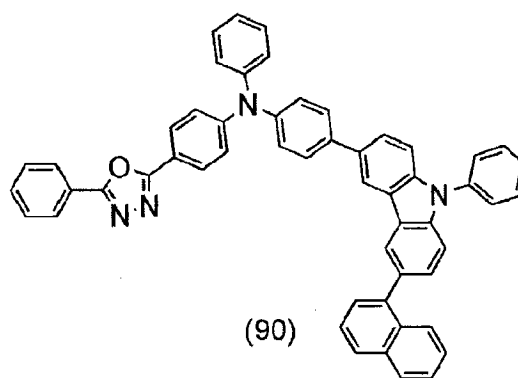
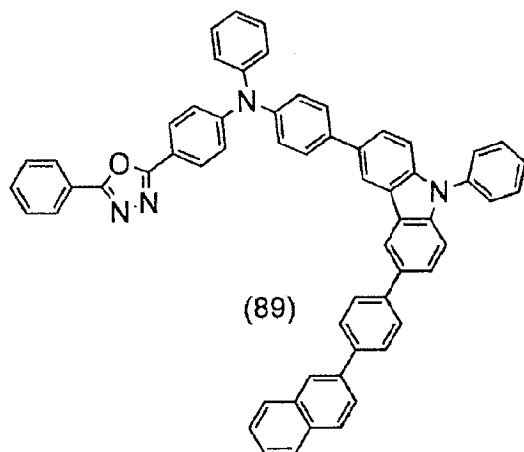
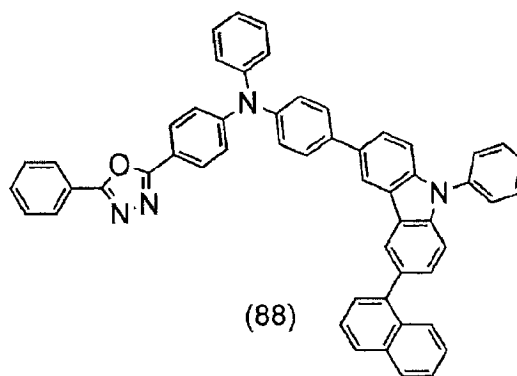
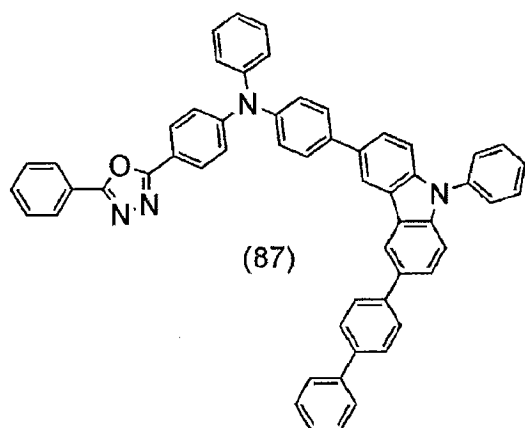
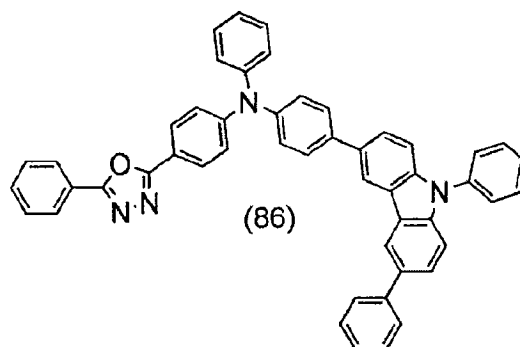
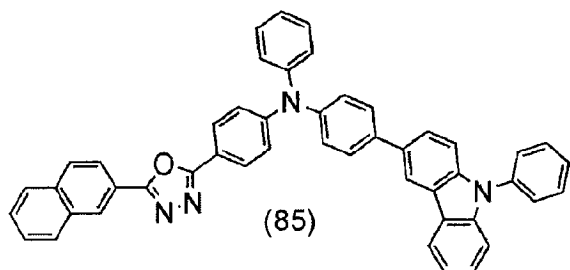


(78)

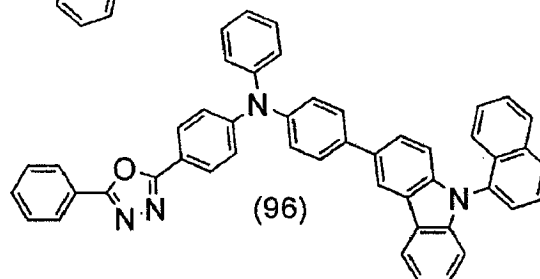
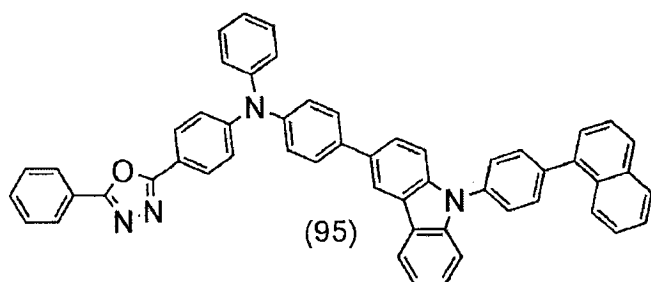
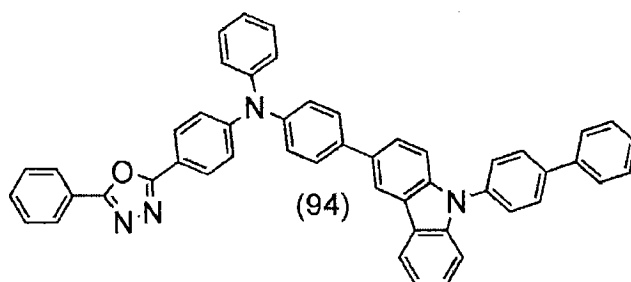
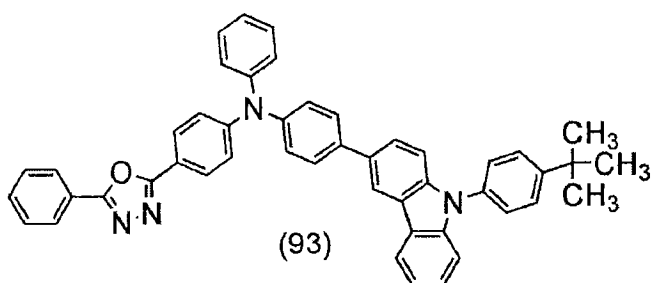
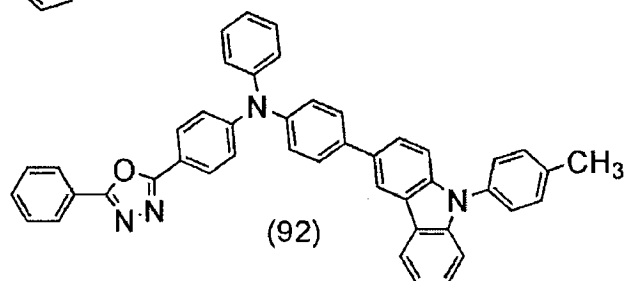
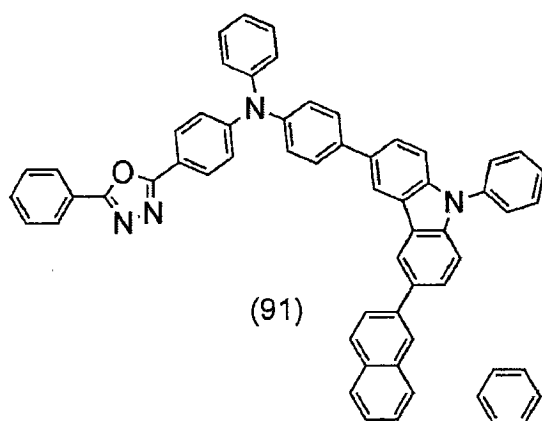
[0114]



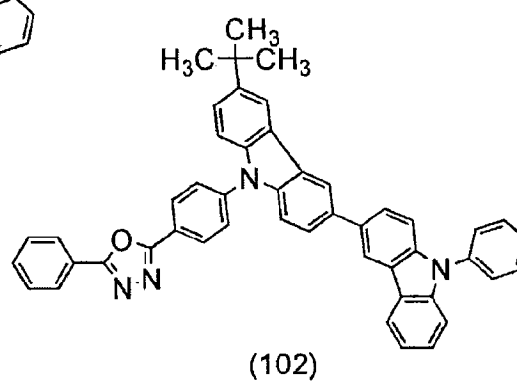
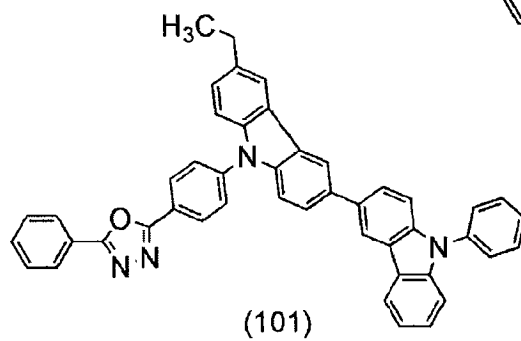
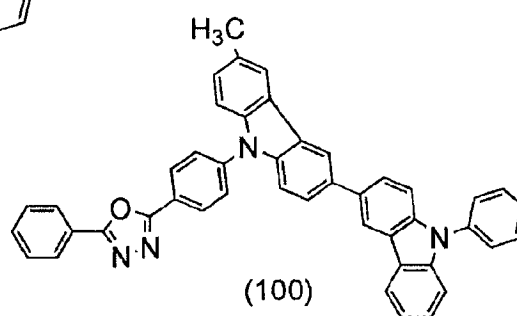
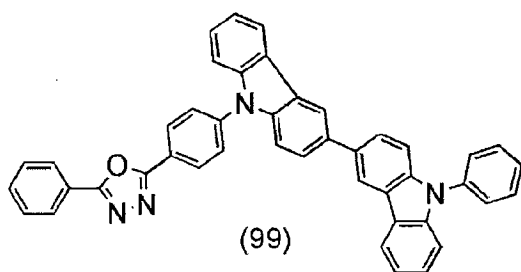
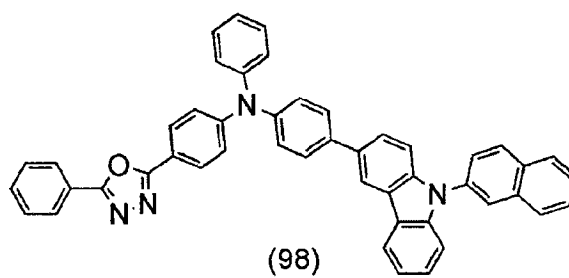
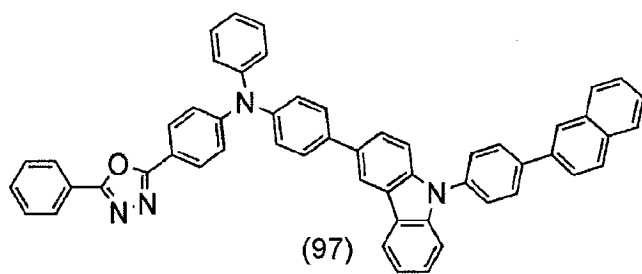
[0115]



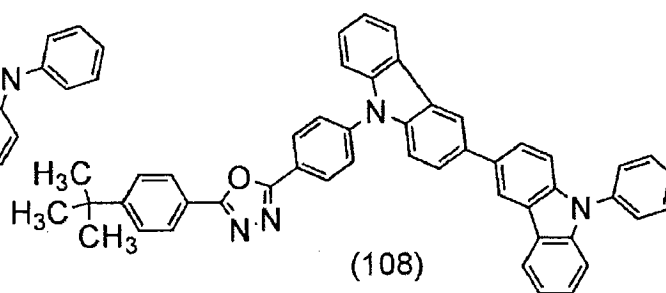
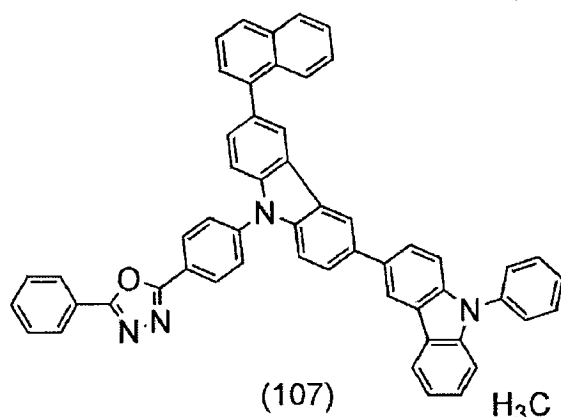
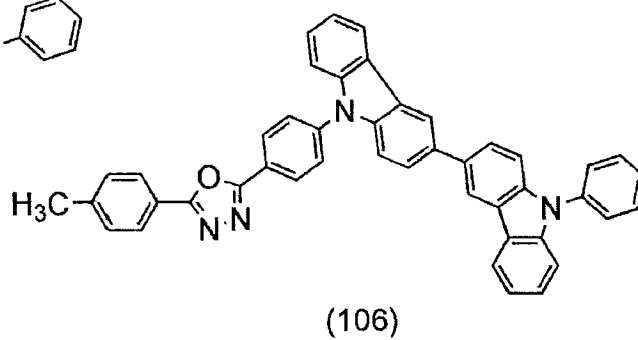
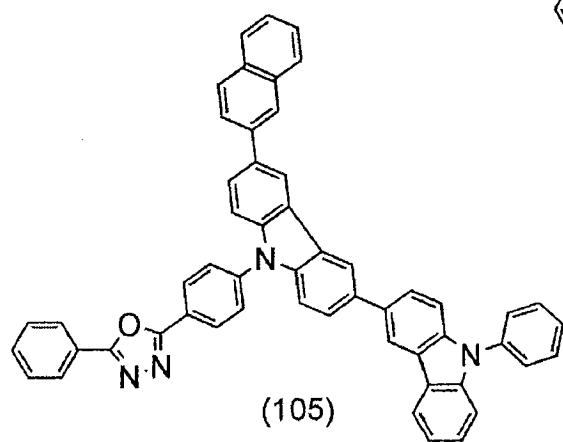
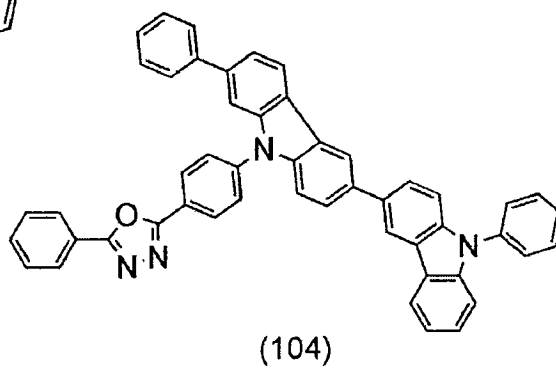
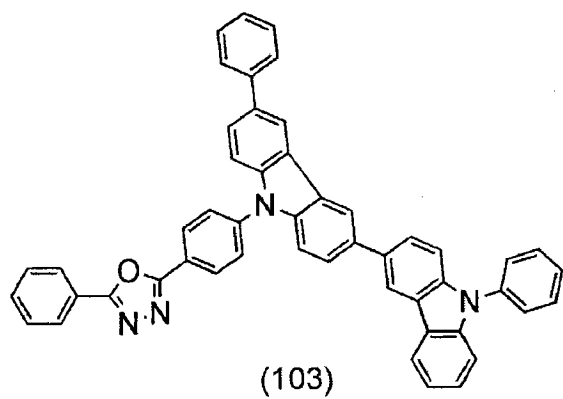
[0116]



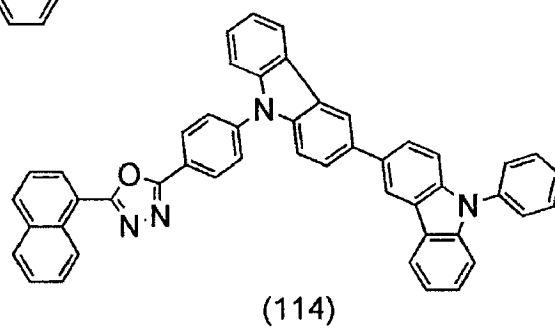
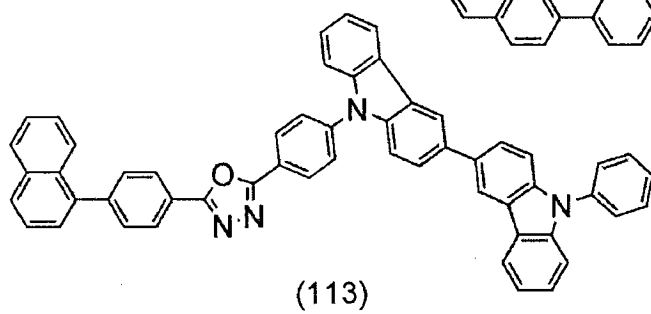
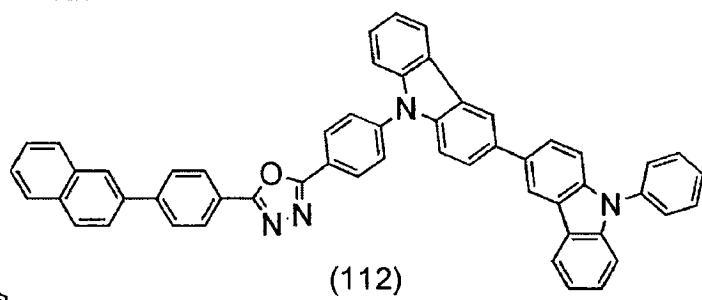
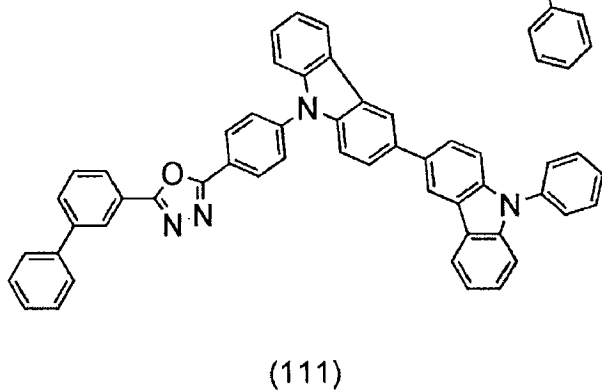
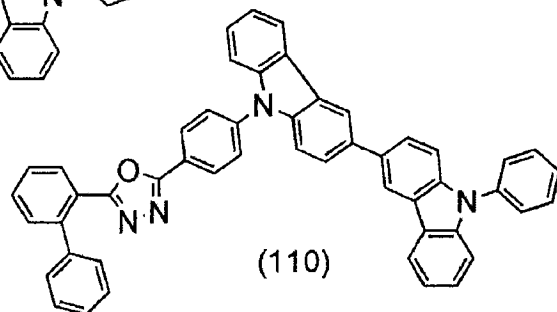
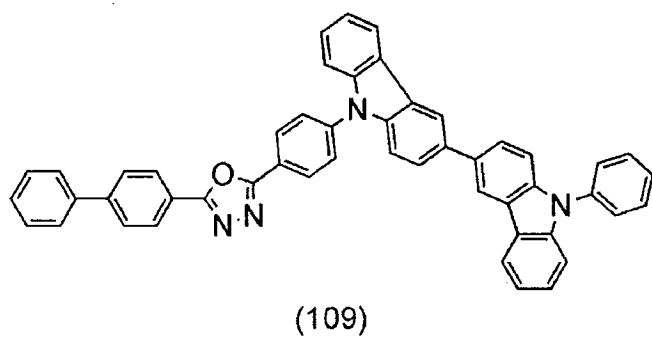
[0117]



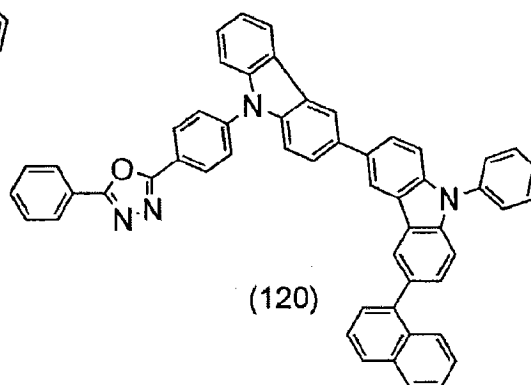
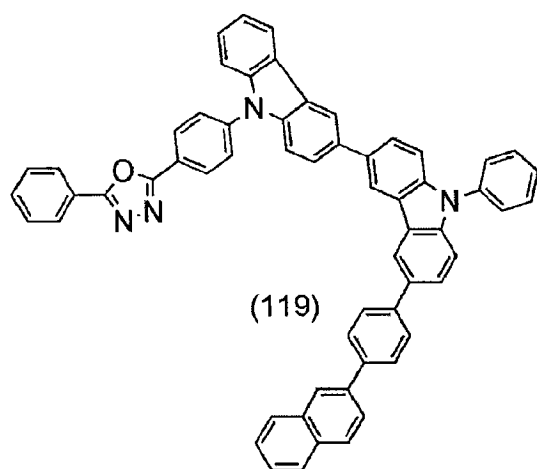
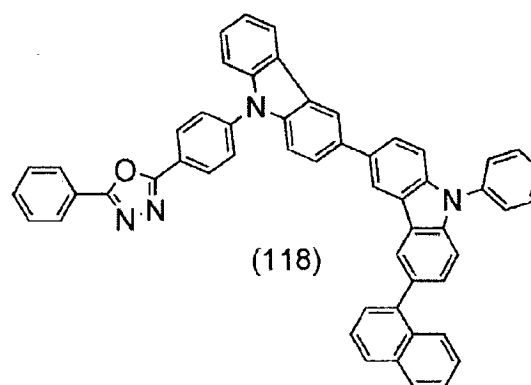
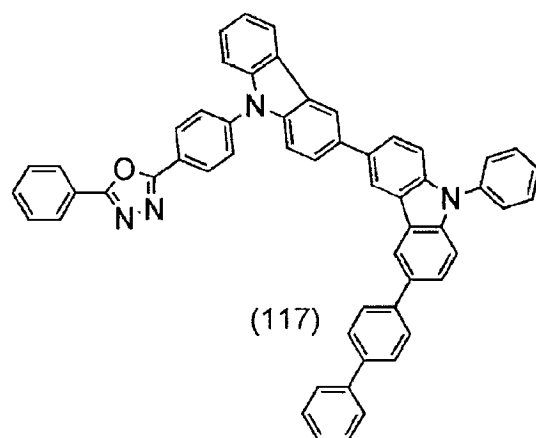
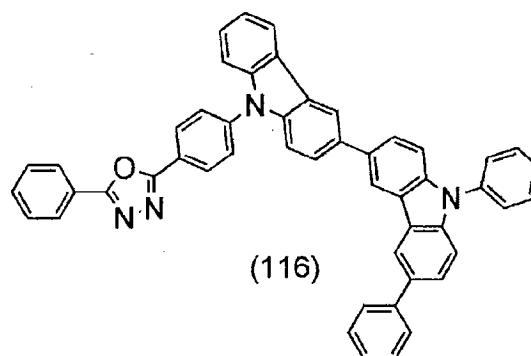
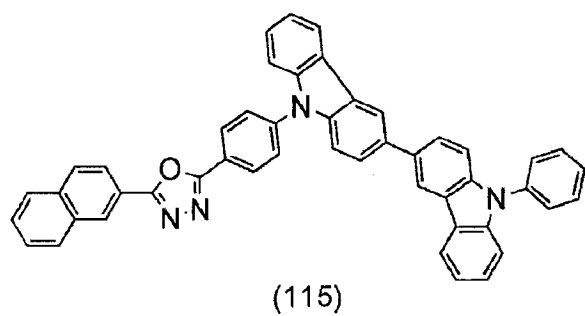
[0118]



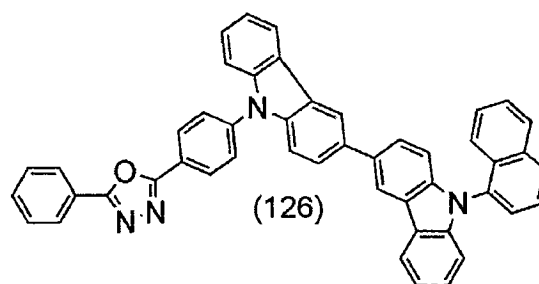
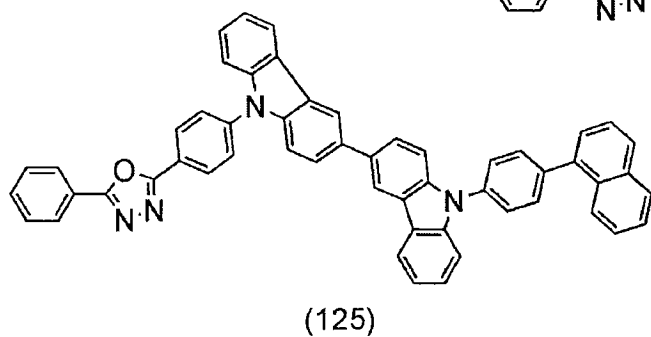
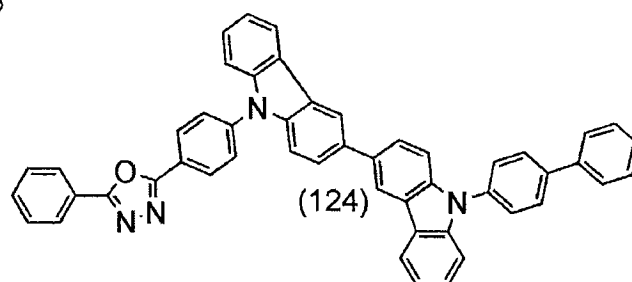
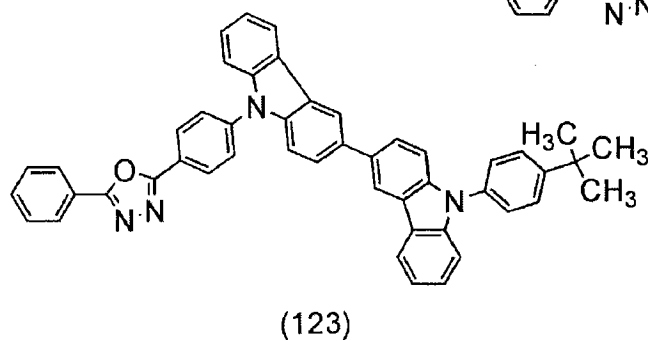
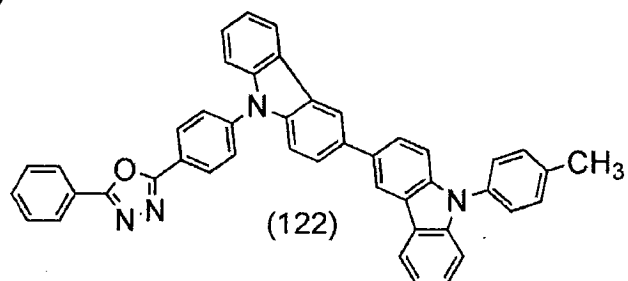
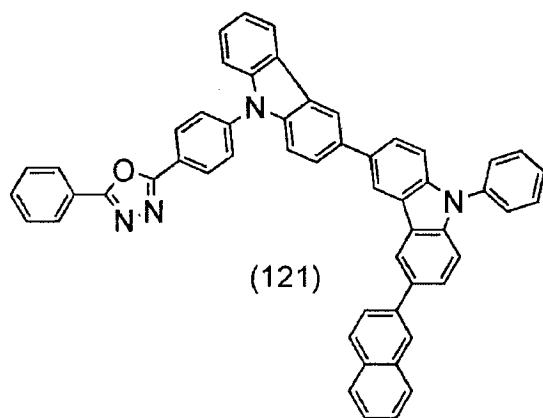
[0119]



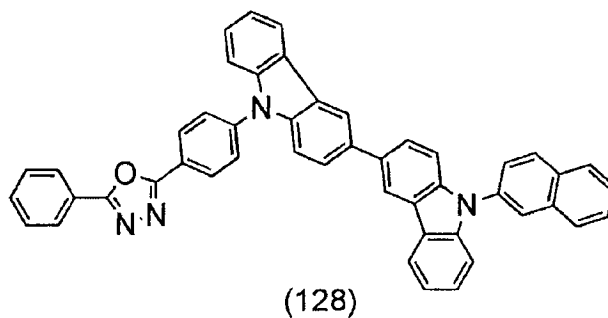
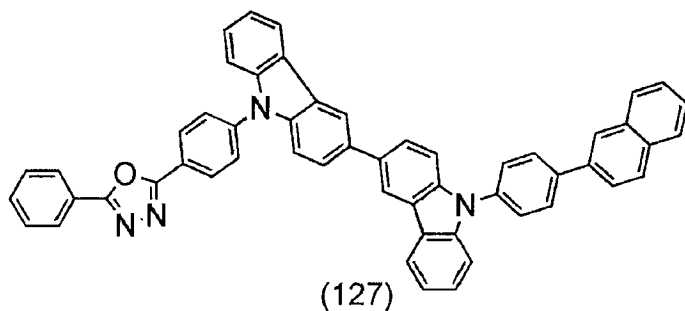
[0120]



[0121]



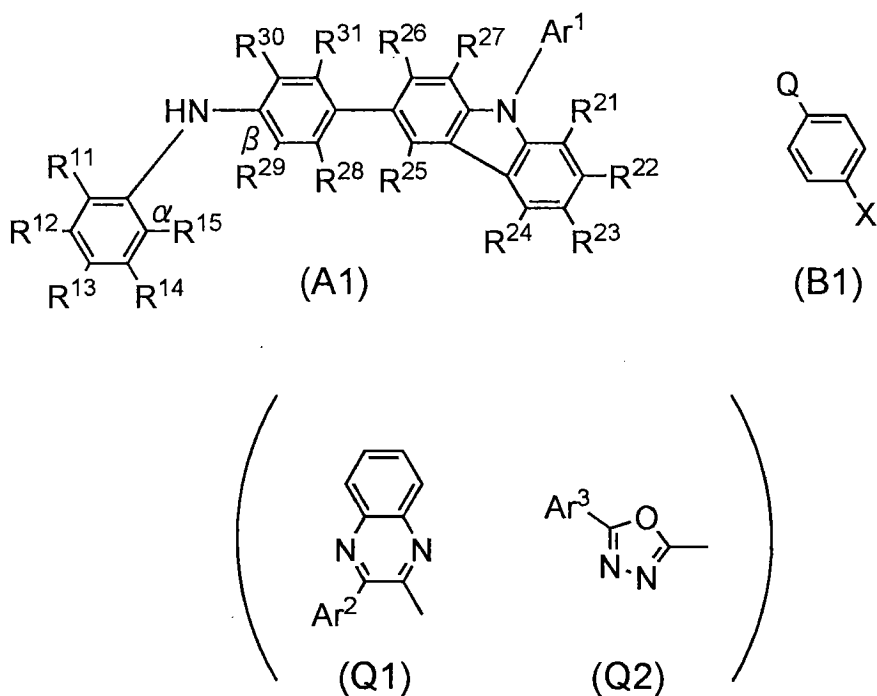
[0122]



[0123] 接着,说明本发明的一个方式的具有杂芳环的咪唑衍生物的合成方法的一例。

[0124] 通式 (G1) 所示的具有杂芳环的咪唑衍生物可以通过使下面所示的咪唑衍生物 (A1) 和卤化的具有杂芳环的化合物 (B1) 起反应来合成。

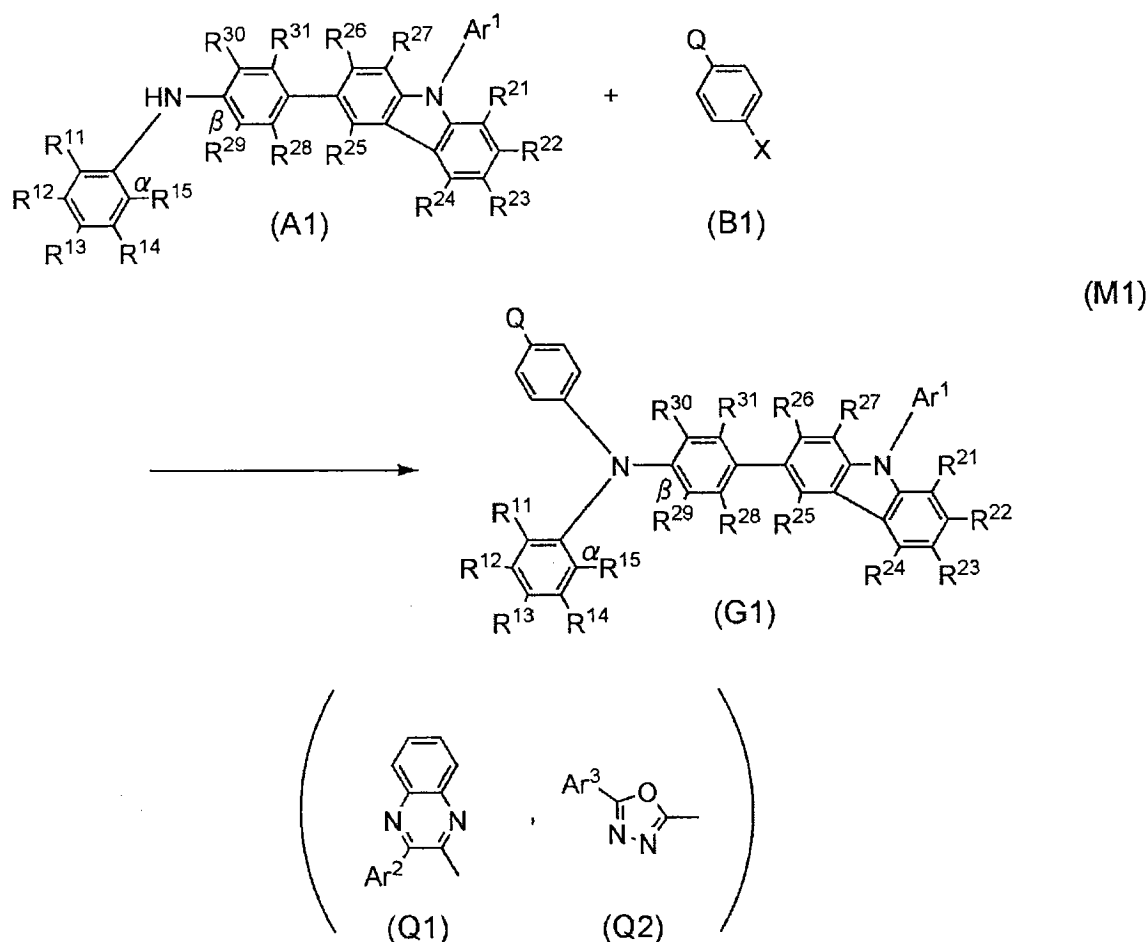
[0125]



[0126] (在通式中, Q 是通式 Q1 或 Q2 所示的取代基, X 是卤原子。Ar¹ 至 Ar³ 是形成环的碳数为 6 至 10 的芳基, 所述芳基也可以具有取代基。此外, R²⁸ 至 R³¹ 表示氢原子或碳数为 1 至 4 的烷基。R¹¹ 至 R¹⁵ 以及 R²¹ 至 R²⁷ 是氢原子、碳数为 1 至 4 的烷基或形成环的碳数为 6 至 10 的芳基, 所述芳基也可以具有取代基。另外, α 位的碳和 β 位的碳也可以直接结合而形成咪唑环。)

[0127] 下面, 示出本实施方式所例示的具有杂芳环的咪唑衍生物的合成图解 (M1)。

[0128]



[0129] 另外, 卤化的具有杂芳环的化合物 (B1) 的取代基 X 表示卤原子, 并且在合成图解 (M1) 中优选采用碘或溴。

[0130] 在本合成图解 (M1) 中, 通过耦合咪唑衍生物 (A1) 和卤化的具有杂芳环的化合物 (B1), 获得具有杂芳环的咪唑衍生物 (G1)。本合成图解 (M1) 所示的反应通过利用在存在有碱的情况下使用钯催化剂的哈特维希-布赫瓦尔德 (Hartwig-Buchwald) 反应或使用铜或铜化合物的乌尔曼反应等来迅速地进行。

[0131] 当进行哈特维希-布赫瓦尔德反应时, 作为钯催化剂可以举出双(二亚苄基丙酮)钯 (0)、乙酸钯 (II) 等, 并且作为钯催化剂的配位体, 可以使用三(叔丁基)膦、三(n-己基)膦、三环己基膦等。此外, 作为碱, 可以使用-叔丁醇钠等的有机碱、碳酸钾等的无机碱等。作为溶剂, 可以使用甲苯、二甲苯、苯、四氢呋喃等。

[0132] 此外, 当进行乌尔曼反应时, 除了碘化铜 (I)、乙酸铜 (II) 等的铜化合物之外还可以使用铜。此外, 作为碱, 可以使用碳酸钾等的无机碱。作为溶剂, 可以使用 1,3-二甲基-3,4,5,6-四氢-2(1H) 嘧啶酮 (DMPU)、甲苯、二甲苯、苯等。在乌尔曼反应中, 当反应温度为 100℃ 以上时可以以较短的时间且高收率获得目的物, 因此作为溶剂优选使用沸点高的 DMPU、二甲苯。此外, 反应温度更优选为 150℃ 以上, 因此更优选使用 DMPU。

[0133] 以上, 作为合成方法的一例举出反应图解 (M1) 而进行说明, 当然, 本发明的一个方式的具有杂芳环的咪唑衍生物 (G1) 可以通过其他任何合成方法合成, 即可。

[0134] 如上所说明的本发明的一个方式的具有杂芳环的咪唑衍生物包括具有电子传输性的杂芳环的噁二唑骨架或喹啉骨架和具有空穴传输性的咪唑骨架, 且是电子及空穴传

输性高的双极材料。此外,具有宽的能隙。因此,通过将本发明的一个方式的具有杂芳环的咪唑衍生物用于发光层或电子传输层,可以形成载流子平衡优良的发光元件。

[0135] 实施方式 2

[0136] 在本实施方式中,参照图 1A 至 1C 说明将本发明的一个方式的具有杂芳环的咪唑衍生物用作磷光化合物的主体材料的发光元件的一个方式。

[0137] 图 1A 至 1C 是示出在第一电极 101 和第二电极 102 之间包括发光层 113 的发光元件的图。所述发光层 113 包含用作磷光化合物的主体材料的上述实施方式 1 所例示的具有杂芳环的咪唑衍生物。

[0138] 在本实施方式所说明的发光元件中,将发光元件的第一电极 101 用作阳极,将第二电极 102 用作阴极,并且对元件施加电压。将从第一电极 101 注入的空穴和从第二电极 102 注入的电子传输到包含具有杂芳环的咪唑衍生物的发光层 113,并且在发光层 113 中,电子和空穴再结合而使发光物质的磷光化合物激发。激发状态下的磷光化合物在回到基态时发光,而发光元件起作用。可以将本发明的一个方式的具有杂芳环的咪唑衍生物用作这种发光(电致发光)元件的发光层中的主体材料、空穴传输材料或电子传输材料等。

[0139] 本实施方式的发光层 113 包含本发明的一个方式的具有杂芳环的咪唑衍生物。本发明的一个方式的具有杂芳环的咪唑衍生物具有大激发能而优选用作发光物质的主体材料。另外,也可以将具有杂芳环的咪唑衍生物的单体用作发光物质。

[0140] 在主体材料的具有杂芳环的咪唑衍生物中分散发光物质来形成发光层 113。特别是,从发光效率的观点来看,分散磷光化合物作为发光物质的发光层 113 是优选的。此外,通过将磷光化合物分散于主体材料而使用,可以防止磷光化合物的发光因磷光化合物的浓度而猝灭的现象。

[0141] 当将磷光化合物用作发光物质时,磷光化合物的三重激发能需要比其主体材料的三重激发能大。注意,三重激发能是三重激发态和基态之间的能差,并且单重激发能是指单重激发态和基态之间的能差。

[0142] 本发明的一个方式的具有杂芳环的咪唑衍生物具有大的三重激发能。由此,将具有杂芳环的咪唑衍生物用作主体材料,例如分散用作发光物质的呈现红色类或绿色类的发光的磷光化合物来形成发光层 113。通过使用这种发光层 113,可以制造发光效率高的发光元件。

[0143] 作为可以与本发明的一个方式的具有杂芳环的咪唑衍生物一起用于发光层 113 的磷光化合物,例如可以举出以下有机金属配合物。注意,与主体材料一起使用的磷光化合物需要选自具有比主体材料的三重激发能小的三重激发能的磷光化合物中。

[0144] 例如,作为绿色类的发光物质,可以举出三(2-苯基吡啶-N, C^{2'})合铱(III)(简称:Ir(ppy)₃)、双(2-苯基吡啶-N, C^{2'})合铱(III)乙酰丙酮(简称:Ir(ppy)₂(acac))、双(1,2-二苯基-1H-苯并咪唑)合铱(III)乙酰丙酮(简称:Ir(pbi)₂(acac))、双(苯并[h]喹啉)合铱(III)乙酰丙酮(简称:Ir(bzq)₂(acac))等。

[0145] 另外,作为黄色类的发光物质,可以举出双(2,4-二苯基-1,3-恶唑-N, C^{2'})合铱(III)乙酰丙酮(简称:Ir(dpo)₂(acac))、双[2-(4'-全氟苯基苯基)吡啶]合铱(III)乙酰丙酮(简称:Ir(p-PF-ph)₂(acac))、双(2-苯基苯并噻唑-N, C^{2'})合铱(III)乙酰丙酮(简称:Ir(bt)₂(acac))等。

[0146] 另外,作为橙色类的发光物质,可以举出三(2-苯基喹啉-N, C^{2'})合铱(III)(简称:Ir(pq)₃)、双(2-苯基喹啉-N, C^{2'})合铱(III)乙酰丙酮(简称:Ir(pq)₂(acac))等。

[0147] 另外,作为红色类的发光物质,可以举出双[2-(2'-苯并[4,5- α]噻吩基)吡啶-N, C^{3'}]合铱(III)乙酰丙酮(简称:Ir(btp)₂(acac))、双(1-苯基异喹啉-N, C^{2'})合铱(III)乙酰丙酮(简称:Ir(piq)₂(acac))、(乙酰丙酮)双[2,3-双(4-氟苯基)噻喔啉]合铱(III)(简称:Ir(Fdpq)₂(acac))、(2,3,7,8,12,13,17,18-八乙基-21H,23H-卟啉)合铂(II)(简称:PtOEP)等。

[0148] 此外,由于三(乙酰丙酮)(一菲咯啉)合铽(III)(简称:Tb(acac)₃(Phen))、三(1,3-二苯基-1,3-丙二酮)(一菲咯啉)合铕(III)(简称:Eu(DBM)₃(Phen))、三[1-(2-噻吩甲酰基)-3,3,3-三氟丙酮](一菲咯啉)合铕(III)(简称:Eu(TTA)₃(Phen))等的稀土金属配合物从稀土金属离子(在不同多重态之间的电子跃迁)发射光,因此可以用作磷光化合物。

[0149] 此外,本发明的一个方式的具有杂芳环的咪唑衍生物具有大的单重激发能。因此,将具有杂芳环的咪唑衍生物用作主体材料,并分散用作发光物质的各种荧光化合物来可以形成发光层113。作为可以与本发明的一个方式的具有杂芳环的咪唑衍生物一起用于发光层113的荧光化合物,例举以下化合物。

[0150] 例如,作为蓝色类的发光物质,可以举出二苯嵌苯、2,5,8,11-三(叔丁基)二苯嵌苯(简称:TBP)、4,4'-双(2,2-二苯基乙烯基)联苯(简称:DPVBi)、4,4'-双[2-(9-乙基咪唑-3-基)乙烯基]联苯(简称:BCzVBi)、双(2-甲基-8-羟基喹啉)(4-苯基苯酚盐)合铝(简称:BAIq)、氯化双(2-甲基-8-羟基喹啉)合镓(简称:Gamq2Cl)、N,N'-双[4-(9H-咪唑-9-基)苯基]-N,N'-二苯基芪-4,4'-二胺(简称:YGA2S)、4-(9H-咪唑-9-基)-4'-(10-苯基-9-蒽基)三苯胺(简称:YGAPA)等。

[0151] 另外,作为绿色类的发光物质,可以举出N-(9,10-二苯基-2-蒽基)-N,9-二苯基-9H-咪唑-3-胺(简称:2PCAPA)、N-[9,10-双(1,1'-联苯-2-基)-2-蒽基]-N,9-二苯基-9H-咪唑-3-胺(简称:2PCABPhA)、N-(9,10-二苯基-2-蒽基)-N,N',N'-三苯基-1,4-苯二胺(简称:2DPAPA)、N-[9,10-双(1,1'-联苯-2-基)-2-蒽基]-N,N',N'-三苯基-1,4-苯二胺(简称:2DPABPhA)、N-[9,10-双(1,1'-联苯-2-基)]-N-[4-(9H-咪唑-9-基)苯基]-N-苯基蒽-2-胺(简称:2YGABPhA)、N,N,9-三苯基蒽-9-胺(简称:DPhAPhA)等。

[0152] 另外,作为黄色类的发光物质,可以举出红荧烯、5,12-双(1,1'-联苯-4-基)-6,11-二苯基并四苯(简称:BPT)等。

[0153] 另外,作为红色类的发光物质,可以举出N,N,N',N'-四(4-甲基苯基)并四苯-5,11-二胺(简称:p-mPhTD)、7,14-二苯基-N,N,N',N'-四(4-甲基苯基)萘并[1,2-a]荧蒽-3,10-二胺(简称:p-mPhAFD)等。

[0154] 由于本发明的一个方式的具有杂芳环的咪唑衍生物包括具有电子传输性的杂芳环的噻二唑骨架或噻喔啉骨架和具有空穴传输性的咪唑骨架,因此它是电子及空穴的传输性高的双极材料。由此,可以将本发明的一个方式的具有杂芳环的咪唑衍生物的单体用作分散发光物质的主体材料。

[0155] 此外,混合本发明的一个方式的具有杂芳环的咪唑衍生物和其他材料并用于分散

发光物质的主体材料。例如,也可以将混合本发明的一个方式的具有杂芳环的咪唑衍生物和具有空穴传输性或电子传输性的有机化合物而成的材料用作主体材料。

[0156] 在发光层中,作为获得最合适的载流子平衡的方法,将混合具有空穴传输性的有机化合物和具有电子传输性的有机化合物的材料用于主体的方法是特别有效的。此外,由于发光区扩大,因此可以期待发光元件的发光效率或可靠性的提高。

[0157] 作为可以与本发明的一个方式的具有杂芳环的咪唑衍生物混合来用作主体材料的具有空穴传输性的有机化合物,可以使用如下物质:4,4'-双[N-(1-萘基)-N-苯基氨基]联苯(简称:NPB)、4,4'-双[N-(9-菲基)-N-苯基氨基]联苯(简称:PPB)、4,4'-双[N-(3-甲基苯基)-N-苯基氨基]联苯(简称:TPD)、4,4'-双[N-(9,9-二甲基芴-2-基)-N-苯基氨基]联苯(简称:DFLDPBi)、4,4',4''-三(N,N-二苯基氨基)三苯基胺(简称:TDATA)、4,4',4''-三[N-(3-甲基苯基)-N-苯基氨基]三苯基胺(简称:m-MTDATA)、4,4',4''-三(N-咪唑基)三苯基胺(简称:TCTA)、1,1-双[4-(二苯基氨基)苯基]环己烷(简称:TPAC)、9,9-双[4-(二苯基氨基)苯基]芴(简称:TPAF)、4-(9-咪唑基)-4'-(5-苯基-1,3,4-噁二唑-2-基)三苯基胺(简称:YGA011)、N-[4-(9-咪唑基)苯基]-N-苯基-9,9-二甲基芴-2-胺(简称:YGAF)等的芳香族胺化合物,或者4,4'-二(N-咪唑基)联苯(简称:CBP)、1,3-双(N-咪唑基)苯(简称:mCP)、1,3,5-三(N-咪唑基)苯(简称:TCzB)等的咪唑衍生物。

[0158] 作为可以与本发明的一个方式的具有杂芳环的咪唑衍生物混合来用作主体材料的具有电子传输性的有机化合物,可以使用如下物质:9-[4-(5-苯基-1,3,4-噁二唑-2-基)苯基]咪唑(简称:C011)、1,3-双[5-(对-叔丁基苯基)-1,3,4-噁二唑-2-基]苯(简称:OXD-7)、2-(4-联苯基)-5-(4-叔丁基苯基)-1,3,4-噁二唑(简称:PBD)、2,2',2''-(1,3,5-苯三基)三(1-苯基-1H-苯并咪唑)(简称:TPBI)、3-(4-叔丁基苯基)-4-苯基-5-(4-联苯基)-1,2,4-三唑(简称:TAZ)、3-(4-叔丁基苯基)-4-(4-乙基苯基)-5-(4-联苯基)-1,2,4-三唑(简称:p-EtTAZ)、9,9',9''-[1,3,5-三嗪-2,4,6-三基]三咪唑(简称:TCzTRZ)、2,2',2''-(1,3,5-苯三基)三(6,7-二甲基-3-苯基喹喔啉)(简称:TriMeQn)、2,3-双(4-二苯基氨基苯基)喹喔啉(简称:TPAQn)、9,9'-(喹喔啉-2,3-二基二-4,1-亚苯基)二(9H-咪唑)(简称:CzQn)、3,3',6,6'-四苯基-9,9'-(喹喔啉-2,3-二基二-4,1-亚苯基)二(9H-咪唑)(简称:DCzPQ)、红菲绕啉(简称:BPhen)、浴铜灵(简称:BCP)等的芳香杂环化合物;三(8-羟基喹啉)合铝(简称:Alq₃)、双(2-甲基-8-羟基喹啉)(4-苯基苯酚盐)合铝(III)(简称:BA1q)、三[2-(2-羟基苯基)-5-苯基-1,3,4-噁二唑]合铝(III)(简称:Al(OXD)₃)、三(2-羟基苯基-1-苯基-1H-苯并咪唑)合铝(III)(简称:Al(BIZ)₃)、双[2-(2-羟基苯基)苯并噻唑]合锌(II)(简称:Zn(BTZ)₂)、双[2-(2-羟基苯基)苯并噁唑]合锌(II)(简称:Zn(PBO)₂)、双[2-(2-羟基苯基)吡啶]锌(简称:Znpp₂)等的金属配合物。

[0159] 另外,不仅可以与本发明的一个方式的具有杂芳环的咪唑衍生物用作发光层的主体材料,而且可以将它的单体用作发光层。此外,也可以将它分散于具有比本发明的一个方式的具有杂芳环的咪唑衍生物大的带隙的主体材料中而用作发光物质。

[0160] 另外,发光层 113 可以通过使用如溅射法或蒸镀法等的方法来形成。

[0161] 另外,通过使用如喷墨法或旋涂法等湿法涂布将本发明的一个方式的具有杂芳

环的咪唑衍生物和发光物质溶解或分散于适当的溶剂中而得的涂布液,可以形成发光层 113。

[0162] 作为溶剂,可以使用如甲苯、甲氧基苯(苯甲醚)等的具有芳香环的有机溶剂;如二乙醚、二氧六环、四氢呋喃(THF)等的醚;如甲醇、乙醇、异丙醇、丁醇、2-甲氧基乙醇、2-乙氧基乙醇等的醇;乙腈;或者这些的混合溶剂等。但是,不局限于此。

[0163] 在使用湿法层叠有机薄膜的情况下,需要选择使想要成膜的材料溶解而不使成为基底的层溶解的溶剂来制成涂布液。另外,优选使用沸点为 50℃以上且 200℃以下的挥发性有机溶剂,以便在薄膜中不残留溶剂。

[0164] 在使用湿法层叠有机薄膜的情况下,可以涂布混合发光物质和本发明的一个方式的具有杂芳环的咪唑衍生物而得的溶液,还可以进一步添加所述具有空穴传输性的有机化合物、具有空穴传输性的高分子化合物或具有电子传输性的高分子化合物来使用。

[0165] 另外,为了提高所形成的膜的性质,也可以包含粘合剂。作为粘合剂,优选使用电惰性高分子化合物。具体地说,可以使用聚甲基丙烯酸甲酯(简称:PMMA)或聚酰亚胺等。

[0166] 作为具有空穴传输性的高分子化合物,例如可以使用聚(N-乙烯基咪唑)(简称:PVK)、聚(4-乙烯基三苯胺)(简称:PVTTPA)、聚[N-(4-{N'-[4-(4-二苯基氨基)苯基]苯基-N'-苯基氨基}苯基)甲基丙烯酸酰胺](简称:PTPDMA)、聚[N,N'-双(4-丁基苯基)-N,N'-双(苯基)联苯胺](简称:Poly-TPD)等。

[0167] 此外,作为具有电子传输层的高分子化合物,例如可以使用聚(2,5-吡啶-二基)(简称:PPy)、聚[(9,9-二己基芴-2,7-二基)-co-(吡啶-3,5,二基)](简称:PF-Py)、聚[(9,9-二辛基芴-2,7-二基)-co-(2,2'-联吡啶-6,6'-二基)](简称:PF-BPy)等。

[0168] 在图 1A 至 1C 中,衬底 100 用作发光元件的支撑体。作为衬底 100,可以使用例如玻璃或塑料等的衬底。另外,只要可以用作发光元件的支撑体,就可以采用除此之外的材料。

[0169] 另外,对第一电极 101 没有特别的限制,但是在像本实施方式这样用作阳极的情况下,优选由功函数高的物质形成。具体来说,除了铟锡氧化物(ITO)、包含氧化硅的铟锡氧化物(ITSO)、包含 2wt%至 20wt%的氧化锌的氧化铟(IZO)之外,还可以使用金(Au)、铂(Pt)、镍(Ni)、钨(W)、铬(Cr)、钼(Mo)、铁(Fe)、钴(Co)、铜(Cu)、钯(Pd)等。另外,第一电极 101 例如可以使用溅射法、蒸镀法等来形成。

[0170] 另外,对第二电极 102 也没有特别的限制,但是在像本实施方式这样用作阴极的情况下,优选由功函数低的物质形成。具体来说,除了铝(Al)、铟(In)之外,还可以使用锂(Li)、铯(Cs)等的碱金属;镁(Mg)、钙(Ca)等的碱土金属;铒(Er)、镱(Yb)等的稀土金属。另外,还可以使用铝锂合金(AlLi)、镁银合金(MgAg)等的合金。另外,第二电极 102 例如可以使用溅射法、蒸镀法等来形成。

[0171] 将发光穿过第一电极 101 及第二电极 102 中的任一方或双方取出到外部。因此,第一电极 101 及第二电极 102 中的任一方或双方是由 ITO 等的透过可见光的导电膜构成的电极,或者是以几 nm 至几十 nm 的厚度形成以使可见光透过的电极。在只有第一电极 101 由具有透光性的导电膜构成的情况下,如图 1A 所示,穿过第一电极 101 和衬底 100 取出发光。此外,在只有第二电极 102 由具有透光性的导电膜构成的情况下,如图 1B 所示,穿过第一电极 102 取出发光。在第一电极 101 及第二电极 102 都由具有透光性的导电膜构成的情

况下,如图 1C 所示,穿过第一电极 101 及第二电极 102 从发光元件的双面取出发光。

[0172] 另外,也可以在第一电极 101 和发光层 113 之间如图 1A 至 1C 所示设置空穴传输层 112。这里,空穴传输层是指具有将从第一电极 101 注入的空穴传输到发光层 113 的功能的层。通过像这样设置空穴传输层 112 来将第一电极 101 和发光层 113 隔开,可以防止发光因金属而淬灭。但是,空穴传输层 112 并不是必需的。

[0173] 对于构成空穴传输层 112 的物质没有特别的限制,可以代表性地使用 4,4'-双[N-(1-萘基)-N-苯基氨基]联苯(简称:NPB)、4,4'-双[N-(3-甲基苯基)-N-苯基氨基]联苯(简称:TPD)、4,4'-双[N-(9,9-二甲基芴-2-基)-N-苯基氨基]联苯(简称:DFLDPBi)、4,4',4''-三(N,N-二苯基氨基)三苯胺(简称:TDATA)、4,4',4''-三[N-(3-甲基苯基)-N-苯基氨基]三苯胺(简称:m-MTDATA)等的芳香族胺化合物。另外,还可以使用聚(4-乙烯基三苯胺)(简称:PVTPA)等的高分子化合物。

[0174] 另外,空穴传输层 112 也可以是层叠两层以上的层而形成的多层结构。另外,也可以混合两种以上的物质来形成。

[0175] 另外,可以在第二电极 102 和发光层 113 之间如图 1A 至 1C 所示设置电子传输层 114。这里,电子传输层是指具有将从第二电极 102 注入的电子传输到发光层 113 的功能的层。通过像这样设置电子传输层 114 来将第二电极 102 和发光层 113 隔开,可以防止发光因存在于近旁的第二电极 102 中的金属而淬灭。但是,电子传输层 114 并不是必需的。

[0176] 对于构成电子传输层 114 的物质没有特别的限制,可以代表性地举出三(8-羟基喹啉)合铝(简称:Alq₃)、三(4-甲基-8-羟基喹啉)合铝(简称:Almq₃)、双(10-羟基苯并[h]喹啉)合铍(简称:BeBq₂)、双(2-甲基-8-羟基喹啉)(4-苯基苯酚盐)合铝(简称:BA1q)、双[2-(2-羟基苯基)-苯并恶唑]合锌(简称:ZnBOX)、双[2-(2-羟基苯基)苯并噻唑]合锌(简称:Zn(BTZ)₂)等的金属配合物。另外,还可以使用 2-(4-联苯基)-5-(4-叔丁基苯基)-1,3,4-噁二唑(简称:PBD)、1,3-双[5-(对-叔丁基苯基)-1,3,4-噁二唑-2-基]苯(简称:OXD-7)、3-(4-叔丁基苯基)-4-苯基-5-(4-联苯基)-1,2,4-三唑(简称:TAZ)、3-(4-叔丁基苯基)-4-(4-乙基苯基)-5-(4-联苯基)-1,2,4-三唑(简称:p-EtTAZ)、红菲绕啉(简称:BPhen)、浴铜灵(简称:BCP)、4,4'-双(5-甲基苯并恶唑-2-基)二苯乙烯(简称:BzOs)等的芳香杂环化合物。另外,还可以使用如聚(2,5-吡啶-二基)(简称:PPy)等的高分子化合物。另外,电子传输层 114 也可以是层叠两层以上的层而形成的多层结构。此外,也可以混合两种以上的物质来形成。

[0177] 另外,由于本发明的一个方式的具有杂芳环的唑啉衍生物是电子及空穴的传输性高的双极材料,因此可以用作空穴传输层或电子传输层的材料。特别是,由于本发明的一个方式的具有杂芳环的唑啉衍生物具有大激发能,因此将它用于与发光层相邻的层来可以防止产生在发光层的激子扩散到其他层。其结果,可以获得发光效率高的发光元件。

[0178] 此外,可以在第一电极 101 和空穴传输层 112 之间如图 1A 至 1C 所示设置空穴注入层 111。这里,空穴注入层是指具有辅助空穴从用作阳极的电极注入到空穴传输层 112 的功能的层。但是,空穴注入层 111 并不是必需的。

[0179] 对构成空穴注入层 111 的物质没有特别的限制,可以使用钒氧化物、铌氧化物、钽氧化物、铬氧化物、钼氧化物、钨氧化物、锰氧化物、镱氧化物、钆氧化物等的金属氧化物。另外,还可以使用酞菁(简称:H₂Pc)或铜酞菁(简称:CuPc)等的酞菁化合物。另外,还可以

使用上述的构成空穴传输层 112 的物质。另外,也可以使用如聚(乙烯二氧噻吩)和聚(苯乙烯磺酸盐)的混合物(简称:PEDOT/PSS)等的高分子化合物。

[0180] 或者,也可以在空穴注入层 111 中使用由有机化合物和电子受体混合而成的复合材料。在这种复合材料中,因电子受体而在有机化合物中产生空穴(阳离子基),因此空穴注入性及空穴传输性良好。在此情况下,作为有机化合物,优选使用所产生的空穴的传输性优异的材料,具体来说,可以使用例如上述构成空穴传输层 112 的物质(芳香族胺化合物等)。

[0181] 作为电子受体,只要是对有机化合物呈现电子接受性的物质。具体来说,作为电子受体,优选使用过渡金属氧化物,例如可以举出钒氧化物、铌氧化物、钽氧化物、铬氧化物、钼氧化物、钨氧化物、锰氧化物、镱氧化物、钆氧化物等。此外,也可以使用氯化铁(III)、氯化铝(III)等的路易斯酸(Lewis acid)。另外,也可以使用 7,7,8,8-四氰基-2,3,5,6-四氰对醌二甲烷(简称: F_4 -TCNQ)等的有机化合物。另外,空穴注入层 111 也可以是层叠两层以上的层而形成的多层结构。

[0182] 另外,也可以在第二电极 102 和电子传输层 114 之间如图 1A 至 1C 所示设置电子注入层 115。这里,电子注入层是指具有辅助电子从用作阴极的电极注入到电子传输层 114 的功能的层。但是,电子注入层 115 并不是必需的。

[0183] 对于构成电子注入层 115 的物质没有特别的限制,可以使用如氟化锂(LiF)、氟化铯(CsF)、氟化钙(CaF_2)、铷氧化物等的碱金属化合物或碱土金属化合物。另外,也可以使用如氟化铒(ErF_3)等的稀土金属化合物。另外,还可以使用上述构成电子传输层 114 的物质。

[0184] 或者,作为电子注入层 115,也可以使用将有机化合物和对上述有机化合物的电子给体混合而成的复合材料。在这种复合材料中,因电子给体在有机化合物中产生电子,因此电子注入性及电子传输性良好。在此情况下,作为有机化合物,优选使用所产生的电子的传输性优异的材料,具体来说,可以使用例如上述构成电子传输层 114 的物质(金属配合物或芳香杂环化合物等)。作为电子给体,只要是对有机化合物呈现电子给予性的物质即可。具体来说,作为电子给体,优选使用碱金属、碱土金属或者稀土金属,可以举出锂、铯、镁、钙、钇、镱等。另外,优选使用碱金属氧化物、碱土金属氧化物,可以举出锂氧化物、钙氧化物、钡氧化物等。另外,还可以使用如氧化镁等的路易斯碱。另外,还可以使用如四硫富瓦烯(简称:TTF)等的有机化合物。

[0185] 在以上所述的发光元件中,空穴注入层 111、空穴传输层 112、发光层 113、电子传输层 114、电子注入层 115 分别可以通过蒸镀法、喷墨法、涂布法等中的任一种方法形成。另外,对于第一电极 101 或第二电极 102,也可以通过溅射法、蒸镀法等和喷墨法、涂布法等湿法等中的任一种方法形成。

[0186] 本发明的一个方式的具有杂芳环的咪唑衍生物包括具有电子传输性的杂芳环的噁二唑骨架或唑啉骨架和具有空穴传输性的咪唑骨架,且是电子及空穴传输性高的双极材料。此外,具有宽的能隙。因此,可以通过将本发明的一个方式的具有杂芳环的咪唑衍生物用于发光层或载流子传输层来提供发光效率高的发光元件。

[0187] 注意,本实施方式可以与其他实施方式适当地组合。

[0188] 实施方式 3

[0189] 在本实施方式中,参照图 2A 和 2B 说明与实施方式 2 所示的结构不同的结构的发光元件。

[0190] 图 2A 示出一种结构,其中在将本发明的一个方式的具有杂芳环的咔唑衍生物用作主体并分散发光物质的发光层 113 和电子传输层 114b 之间设置控制电子载流子的移动的层 114a。控制电子载流子的移动的层 114a 是对在实施方式 2 中例示为构成电子传输层的物质的电子传输性高的材料添加少量的电子捕捉性高的物质的层或对电子传输性高的材料添加 LUMO 能级低的具有空穴传输性的材料的层,并且通过使用控制电子载流子的移动的层 114a 控制电子载流子的移动,可以调节载流子平衡。这种结构对因电子穿过发光层 113 到达与发光层 113 的阳极一侧相邻的层而引起的问题(例如,元件寿命的降低)的抑制发挥大的效果。

[0191] 此外,作为其他结构,也可以使用多个层构成发光层 113。图 2B 示出发光层 113 由第一发光层 113a 和第二发光层 113b 的两层构成的例子。

[0192] 例如,在从空穴传输层 112 一侧按顺序层叠第一发光层 113a 和第二发光层 113b 形成发光层 113 时,有如下结构等:将具有空穴传输性的物质用于第一发光层 113a 的主体材料,并将具有电子传输性的物质用于第二发光层 113b 的主体材料。

[0193] 本发明的一个方式的具有杂芳环的咔唑衍生物包括具有电子传输性的杂芳环的噁二唑骨架或喹喔啉骨架和具有空穴传输性的咔唑骨架,且是电子及空穴的传输性高的双极材料。此外,具有宽的能隙。因此,在发光元件中,本发明的一个方式的具有杂芳环的咔唑衍生物还可以用作分散发光物质的主体材料、发光物质、载流子传输材料。

[0194] 注意,根据其载流子传输性决定应用本发明的一个方式的具有杂芳环的咔唑衍生物的层,即可。例如,当应用于图 2B 所示的结构元件时,可以将与电子传输性相比空穴传输性较优良的具有杂芳环的咔唑衍生物用于第一发光层 113a,并可以将与空穴传输性相比电子传输性较优良的具有杂芳环的咔唑衍生物用于第二发光层 113b。

[0195] 此外,本实施方式可以与其他实施方式适当地组合。

[0196] 实施方式 4

[0197] 在本实施方式中,参照图 3 说明具有多个发光层的方式作为使用本发明的一个方式的具有杂芳环的咔唑衍生物的发光元件的一例。图 3 的发光元件具有多个发光层,可以混合多个发光层所发射的光来利用。通过混合不同的发光层的光,例如可以获得白色光。

[0198] 图 3 的发光元件在第一电极 301 和第二电极 302 之间设置第一发光层 313 和第二发光层 316。此外,在第一发光层 313 和第二发光层 316 之间设置用作电荷产生层的 N 层 321 及 P 层 322。

[0199] N 层 321 是产生电子的层,P 层 322 是产生空穴的层。当以第一电极 301 的电位高于第二电极 302 的电位的方式施加电压时,从第一电极 301 注入的空穴和从 N 层 321 注入的电子在第一发光层 313 中重结结合,包含在第一发光层 313 中的第一发光物质发光。并且,从第二电极 302 注入的电子和从 P 层 322 注入的空穴在第二发光层 316 中重新结合,包含在第二发光层 316 中的第二发光物质发光。

[0200] 第一发光层 313 和第二发光层 316 可以由与上述实施方式 2 所例示的发光层 113 同样的层构成。例如,可以使用将本发明的一个方式的具有杂芳环的咔唑衍生物用作主体材料并分散发光物质而形成的层。

[0201] 这里,第一发光层 313 使用在本发明的一个方式的具有杂芳环的咪唑衍生物中分散在 450nm 至 510nm(即,蓝色至蓝绿色区)具有发光峰值的荧光化合物而得的层。由于本发明的一个方式的具有杂芳环的咪唑衍生物具有宽的能隙,因此可以用于蓝色的发光物质的主体材料。

[0202] 另一方面,第二发光层 316 使用在本发明的一个方式的具有杂芳环的咪唑衍生物中分散能够得到红色的发光的磷光化合物或荧光化合物而得的层。由于本发明的一个方式的具有杂芳环的咪唑衍生物具有宽的能隙,因此可以用于蓝色至红色的各种发光物质的主体材料。

[0203] 由于 N 层 321 是产生电子的层,因此使用上述实施方式 2 所述的将有机化合物和电子给体混合而成的复合材料来形成即可。通过采用这样的构成,可以将电子注入到第一发光层 313 一侧。

[0204] 由于 P 层 322 是产生空穴的层,所以使用上述实施方式 2 所述的将有机化合物和电子受体混合而成的复合材料来形成即可。通过采用这样的构成,可以将空穴注入到第二发光层 316 一侧。另外,P 层 322 还可以使用如钼氧化物、钒氧化物、ITO、ITSO 等的空穴注入性优异的金属氧化物。

[0205] 另外,在本实施方式中记载有如图 3 所示的设置有两个发光层的发光元件,但是发光层的数量不局限于两个而例如可以是三个。并且,只要来自每个发光层的发光被混合即可。结果,例如可以得到白色光。

[0206] 另外,第一电极 301 采用与上述实施方式 2 所述的第一电极 101 同样的结构即可。另外,第二电极 302 也采用与上述实施方式 2 所述的第二电极 102 同样的结构即可。

[0207] 另外,在本实施方式中,如图 3 所示,设置有空穴注入层 311、空穴传输层 312 及空穴传输层 315、电子传输层 314 及电子传输层 317、电子注入层 318。关于这些层的结构,也采用上述实施方式 2 及 3 所述的各层的结构即可。但是,这些层并不是必需的,根据元件特性而适当地设置即可。

[0208] 由于本发明的一个方式的具有杂芳环的咪唑衍生物具有优良的电子传输性,因此将它用于与发光层接触的电子传输层时,可以降低发光元件的驱动电压。另外,由于它具有大的能隙,因此能量不容易从发光层的激子转移,从而发光效率不容易降低。

[0209] 另外,由于本发明的一个方式的具有杂芳环的咪唑衍生物具有大的能隙,因此可以用于发光层作为呈现发光峰值波长为 400nm 以上且 500nm 以下的短波长的蓝色类发光的磷光化合物的主体材料。其结果是,如本实施方式的叠层型发光元件那样,可以只将在发光效率方面优于荧光物质的磷光化合物用于发光物质,而可以制造发光效率优良的白色发光元件。

[0210] 如上所述,若使用利用本发明的一个方式的具有杂芳环的咪唑衍生物的发光元件,则可以实现耗电量低的发光装置。

[0211] 另外,通过像本实施方式的发光元件那样,在一对电极间将多个发光单元以电荷产生层隔开来配置,可以在维持低电流密度的情况下获得高亮度的发光。

[0212] 另外,本实施方式可以与其他实施方式适当地组合。

[0213] 实施方式 5

[0214] 在本实施方式中,使用图 4A 和 4B 以及图 5A 和 5B 对使用本发明的一个方式的具

有杂芳环的唑啉衍生物制造的发光装置进行说明。另外,图 4A 是表示发光装置的俯视图,而图 4B 是沿着 A-A' 切断图 4A 而得的截面图。以虚线表示的附图标记 401 是驱动电路部(源极侧驱动电路),附图标记 402 是像素部,附图标记 403 是驱动电路部(栅极侧驱动电路)。另外,附图标记 404 是密封衬底,附图标记 405 是密封材料,由密封材料 405 围绕的内侧形成空间 407。

[0215] 另外,引导布线 408 是用来传送输入到源极侧驱动电路 401 及栅极侧驱动电路 403 的信号的布线,从成为外部输入端子的 FPC(柔性印刷电路)409 接收视频信号、时钟信号、起始信号、复位信号等。另外,虽然这里仅图示了 FPC,但是在该 FPC 上也可以安装有印刷线路板(PWB)。本说明书中的发光装置除了发光装置主体以外,还包括在其上安装有 FPC 或 PWB 的状态。

[0216] 接下来,使用图 4B 说明其截面结构。在衬底 410 上形成有驱动电路部及包括多个像素的像素部,这里示出作为驱动电路部的源极侧驱动电路 401 和形成在像素部 402 的多个像素中的一个像素。

[0217] 另外,源极侧驱动电路 401 形成有组合 n 沟道型 TFT423 和 p 沟道型 TFT424 的 CMOS 电路。另外,形成驱动电路的 TFT 也可以由各种 CMOS 电路、PMOS 电路或者 NMOS 电路形成。另外,虽然在本实施方式中示出了在衬底上形成有驱动电路的驱动器一体型,但是这并不一定需要,也可以不是在衬底上而是在外部形成。

[0218] 另外,像素部 402 由包括开关 TFT411、电流控制 TFT412 以及与其漏极电连接的第一电极 413 的多个像素形成。另外,以覆盖第一电极 413 的端部的方式形成有绝缘物 414。这里,通过使用正型感光性丙烯酸树脂膜来形成。

[0219] 另外,为了获得良好的覆盖性,在绝缘物 414 的上端部或下端部形成具有曲率的曲面。例如,在使用正型感光性丙烯酸树脂作为绝缘物 414 的材料的情况下,优选只使绝缘物 414 的上端部存在具有曲率半径(0.2 μm 至 3 μm)的曲面。另外,作为绝缘物 414,还可以使用通过感光性的光而成为不溶于蚀刻剂的负型或者通过光而成为可溶于蚀刻剂的正型中的任一种。

[0220] 在第一电极 413 上分别形成有包含发光物质的层 416 以及第二电极 417。在此,作为用于用作阳极的第一电极 413 的材料,优选使用功函数高的材料。例如,除了可以使用 ITO(铟锡氧化物)膜或者包含硅的铟锡氧化物膜、铟锌氧化物(IZO)膜、氮化钛膜、铬膜、钨膜、Zn 膜、Pt 膜等的单层膜之外,还可以使用氮化钛膜和以铝为主要成分的膜的叠层以及氮化钛膜、以铝为主要成分的膜和氮化钛膜的三层结构等。另外,通过采用叠层结构,作为布线的电阻也低,可以得到良好的欧姆接触,还可使它用作阳极。

[0221] 夹于第一电极 413 和第二电极 417 之间的包含发光物质的层 416 与实施方式 2 至实施方式 4 同样地形成,且其一部分使用实施方式 1 所示的本发明的一个方式的具有杂芳环的唑啉衍生物。作为可以与本发明的一个方式的具有杂芳环的唑啉衍生物组合而使用的材料,还可以是低分子类材料、低聚物、树枝状聚合物或者高分子类材料。另外,包含发光物质的层 416 通常大多使用有机化合物的单层或叠层形成,但是在本发明中,还包括在由有机化合物形成的膜的一部分中使用无机化合物的结构。

[0222] 另外,包含发光物质的层 416 可以通过使用蒸镀掩模的蒸镀法、喷墨法、旋涂法等

[0223] 此外,作为用于形成在包含发光物质的层 416 上的第二电极 417 的材料,优选使用功函数低的材料(Al、Ag、Li、Ca 或者它们的合金或化合物、MgAg、MgIn、AlLi、CaF₂、氮化钙或氟化钙)。另外,在使包含发光物质的层 416 中产生的光穿过用作阴极的第二电极 417 的情况下,作为第二电极 417,优选使用减小膜厚度的金属薄膜和透明导电膜(ITO(铟锡氧化物)、氧化铟氧化锌合金(In₂O₃-ZnO)、氧化锌(ZnO)等)的叠层。

[0224] 此外,通过使用密封材料 405 贴合密封衬底 404 和衬底 410,形成在由衬底 410、密封衬底 404 以及密封材料 405 围绕而成的空间 407 中具有发光元件 418 的结构。另外,除了空间 407 中填充惰性气体(氮或氩等)的情况以外,还包括由密封材料 405 填充空间 407 的结构。

[0225] 另外,作为密封材料 405,优选使用环氧类树脂。另外,这些材料优选是尽可能地不透过水分或氧的材料。另外,作为用于密封衬底 404 的材料,除了玻璃衬底、石英衬底以外,还可以使用由 FRP(Fiberglass-Reinforced Plastics,玻璃纤维增强塑料)、PVF(聚氟乙烯)、聚酯或丙烯酸树脂等构成的塑料衬底。

[0226] 通过上述方法,可以得到使用本发明的一个方式的具有杂芳环的咔唑衍生物制造的发光装置。

[0227] 本发明的发光装置由于使用实施方式 1 所示的具有杂芳环的咔唑衍生物,所以可以得到具备良好特性的发光装置。具体来说,由于具有发光效率高的发光元件,所以可以得到耗电量减少并能够进行长时间驱动的发光装置。

[0228] 以上,对利用晶体管来控制发光元件的驱动的有源矩阵型图像显示装置进行了说明,除此之外还可以是无源矩阵型图像显示装置。图 5A 和 5B 表示应用本发明制造的无源矩阵型图像显示装置。另外,图 5A 是表示无源矩阵型图像显示装置的立体图,而图 5B 是沿着 X-Y 切断图 5A 而得的截面图。在图 5A 和 5B 中,在衬底 951 上设置有电极 952 和电极 956 以及夹在它们之间的包含发光物质的层 955。电极 952 的端部被绝缘层 953 覆盖。并且,在绝缘层 953 上设置有隔断层 954。

[0229] 隔断层 954 的侧壁具有倾斜,即越近于衬底面,一方侧壁和另一方侧壁之间的间隔越窄。换言之,隔断层 954 的短边方向上的截面是梯形,底边(朝向与绝缘层 953 的面方向同样的方向且与绝缘层 953 接触的边)比上边(朝向与绝缘层 953 的面方向同样的方向且不与绝缘层 953 接触的边)短。像这样,通过设置隔断层 954,可以防止由串扰等引起的发光元件的缺陷。

[0230] 夹于电极 952 和电极 956 之间的包含发光物质的层 955 可以与实施方式 2 至实施方式 4 同样地形成,且其一部分使用实施方式 1 所示的本发明的一个方式的具有杂芳环的咔唑衍生物。

[0231] 由于本发明的发光装置使用实施方式 1 所示的具有杂芳环的咔唑衍生物,因此可以得到具有良好特性的发光装置。具体而言,由于具有发光效率高的发光元件,所以可以得到耗电量减少并能够进行长时间驱动的发光装置。

[0232] 实施方式 6

[0233] 在本实施方式中,对本发明的电子设备进行说明,其一部分包括实施方式 5 所示的发光装置。本发明的电子设备包括显示部,该显示部含有实施方式 1 所示的具有杂芳环的咔唑衍生物,并且具有发光效率高、耗电量减少、能够进行长时间驱动。另外,本发明的电

子设备具有颜色再现性优异的显示部。

[0234] 作为具有使用本发明的一个方式的具有杂芳环的咪唑衍生物制造的发光元件的电子设备,可以举出摄像机、数码相机、护目镜型显示器、导航系统、声音再现装置(汽车音响、组合音响等)、计算机、游戏机、便携式信息终端(便携式计算机、手机、便携式游戏机或电子书籍等)以及具备记录介质的图像再现装置(具体地,能够再现数字通用光盘(DVD)等)的记录介质并具有能够显示其图像的显示装置的装置)等。这些电子设备的具体例子示于图 6A 至 6D。

[0235] 图 6A 是根据本发明的电视装置,包括框体 9101、支撑台 9102、显示部 9103、扬声器部 9104、视频输入端子 9105 等。在该电视装置中,显示部 9103 通过将与实施方式 2 至实施方式 4 所说明的发光元件相同的发光元件排列成矩阵状而构成。该发光元件具有发光效率高的特征。因为由该发光元件构成的显示部 9103 也具有相同的特征,所以该电视装置能够发射高亮度的光并可以实现低耗电量化。由于根据本发明的电视装置实现了低耗电量化及高图像质量化,因此可以提供适合于居住环境的产品。

[0236] 图 6B 是根据本发明的计算机,包括主体 9201、框体 9202、显示部 9203、键盘 9204、外部连接端口 9205、定位装置 9206 等。在该计算机中,显示部 9203 通过将与实施方式 2 至实施方式 4 所说明的发光元件相同的发光元件排列成矩阵状而构成。该发光元件具有发光效率高的特征。因为由该发光元件构成的显示部 9203 也具有相同的特征,所以该计算机能够发射高亮度的光,并可以实现低耗电量化。由于根据本发明的计算机实现了低耗电量化及高图像质量化,因此可以提供适合于环境的产品。

[0237] 图 6C 是根据本发明的手机 1000,其中框体 1001 具备有显示部 1002、操作按钮 1003、外部连接端口 1004、扬声器 1005、麦克风 1006 等。可以通过用手指等触摸显示部 1002 来输入信息。此外,打电话或制作电子邮件的操作也可以通过用手指等触摸显示部 1002 来进行。在该手机中,显示部 1002 通过将与实施方式 2 至实施方式 4 所说明的发光元件相同的发光元件排列成矩阵状而构成。该发光元件具有发光效率高的特征。因为由该发光元件构成的显示部 1002 也具有相同的特征,所以该手机能够发射高亮度的光并可以实现低耗电量化。由于根据本发明的手机实现了低耗电量化及高图像质量化,因此可以提供适合于携带的产品。

[0238] 图 6D 是根据本发明的影像拍摄装置,包括主体 9501、显示部 9502、框体 9503、外部连接端口 9504、遥控接收部 9505、图像接收部 9506、电池 9507、声音输入部 9508、操作键 9509、目镜部 9510 等。在影像拍摄装置中,显示部 9502 通过将与实施方式 2 至实施方式 4 所说明的发光元件相同的发光元件排列成矩阵状而构成。该发光元件具有发光效率高、能够进行长时间驱动的特征。因为由该发光元件构成的显示部 9502 也具有相同的特征,所以该影像拍摄装置能够发射高亮度的光,且可以实现低耗电量化。由于根据本发明的影像拍摄装置实现了低耗电量化及高图像质量化,因此可以提供适合于携带的产品。

[0239] 如上所述,本发明的发光装置的应用范围极广,可以将该发光装置应用于各种领域的电子设备。通过使用本发明的一个方式的具有杂芳环的咪唑衍生物,可以提供具有发光效率高,能够进行长时间驱动且耗电量减少的显示部的电子设备。

[0240] 另外,本发明的发光装置还可以用作照明装置。使用图 7 对将本发明的发光元件用作照明装置的一个方式进行说明。

[0241] 图 7 是将本发明的一个方式的发光装置用作背光灯的液晶显示装置的一例。图 7 所示的液晶显示装置包括框体 9601、液晶层 9602、背光灯 9603、框体 9604, 液晶层 9602 与驱动器 IC9605 连接。另外, 背光灯 9603 使用本发明的一个方式的发光装置, 通过端子 9606 供给电流。

[0242] 通过将本发明的一个方式的发光装置用作液晶显示装置的背光灯, 可以得到耗电量减少的液晶显示装置。另外, 由于本发明的一个方式的发光装置是面发光的照明装置, 也可以实现大面积化, 所以可以实现背光灯的大面积化, 从而也可以实现液晶显示装置的大面积化。再者, 由于本发明的一个方式的发光装置为薄型, 所以还可以实现液晶显示装置的薄型化。另外, 本发明的一个方式的发光装置能够发射高亮度的光, 因此使用本发明的一个方式的发光装置的液晶显示装置也能够发射高亮度的光。

[0243] 图 8 是将应用本发明的发光装置用作照明装置的台灯的一例。图 8 所示的台灯包括框体 2001 以及光源 2002, 作为光源 2002, 使用本发明的一个方式的发光装置。由于本发明的一个方式的发光装置的发光效率高并能够进行长时间驱动, 且耗电量低, 所以台灯也具有高发光效率, 能够进行长时间驱动且其耗电量低。

[0244] 图 9 是将应用本发明的发光装置用作室内的照明装置 3001 的例子。

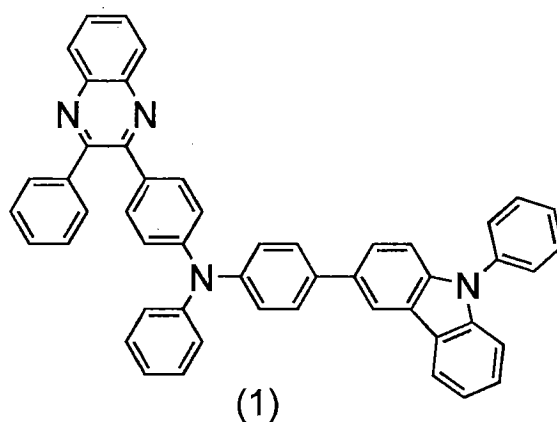
[0245] 本发明的一个方式的发光装置可以实现大面积化, 从而可以用作大面积的照明装置。另外, 由于本发明的一个方式的发光装置为薄型且其耗电量低, 所以可以用作薄型化且低耗电量的照明装置。通过在像这样将应用本发明的发光装置用作室内的照明装置 3001 的房间里设置如图 6A 所说明的根据本发明的电视装置 3002, 观赏公营广播或电影。在这种情况下, 因为这些装置的耗电量低, 所以可以在明亮的室内观赏扣人心弦的影像而不必担心电费。

[0246] 实施例 1

[0247] 《合成例 1》

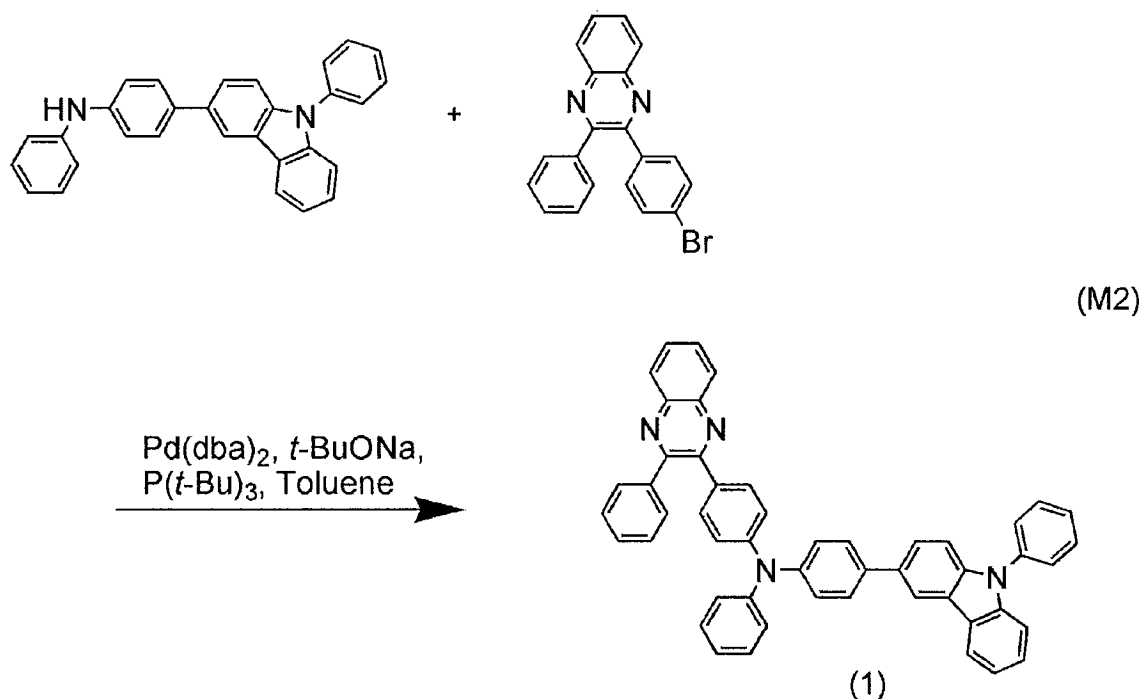
[0248] 在本实施例中说明在实施方式 1 中表示为结构式 (1) 的具有杂芳环的咔唑衍生物的 4-(9-苯基-9H-咔唑-3-基)-4'-(3-苯基喹喔啉-2-基)三苯胺(简称:PCBA1PQ)的合成方法。

[0249]



[0250] (M2) 示出 4-(9-苯基-9H-咔唑-3-基)-4'-(3-苯基喹喔啉-2-基)三苯胺的合成图解。

[0251]



[0252] 将 1.7g (4.2mmol) 的 4-(9-苯基-9H-咔唑-3-基)二苯胺、1.5g (4.2mmol) 的 2-(4-溴苯基)-3-苯基喹喔啉及 1.0g (10mmol) 的叔丁醇钠放入在 100mL 的三口烧瓶中, 对烧瓶的内部进行氮取代。对该混合物添加 15mL 的甲苯及 0.10mL 的三(叔丁基)膦 (10wt% 己烷溶液), 在减压下搅拌而脱气, 然后, 对烧瓶的内部进行氮取代。对该混合物添加 0.020g (0.035mmol) 的双(二亚苄基丙酮)钯 (0) 并以 80℃ 搅拌 5 个小时。

[0253] 在反应之后, 通过硅藻土 (日本和光纯药工业株式会社、目录号码: 531-16855)、矾土、硅酸镁 (日本和光纯药工业株式会社、目录号码: 540-00135) 对该混合物添加甲苯而成的悬浮液进行抽滤。对所获得的滤液依次使用饱和碳酸钠水溶液和饱和盐水进行洗涤。在对有机层添加硫酸镁进行干燥之后, 对该混合物进行抽滤并去除硫酸镁。浓缩所获得的滤液并通过柱层析法对残渣进行纯化。

[0254] 在柱层析法中, 依次使用用作第一展开剂的甲苯: 己烷 = 1 : 1 的混合溶剂、用作第二展开剂的甲苯、用作第三展开剂的甲苯: 乙酸乙酯 = 5 : 1 的混合溶剂。通过使用二氯甲烷和甲醇的混合溶剂使浓缩所获得的馏分而得的固体重新结合, 以 92% 的收率获得收获量为 2.7g 的粉末状黄色固体。

[0255] 此外, 通过梯度升华法对所获得的 1.6g 的黄色固体进行升华纯化。在 7Pa 的减压下, 将氩流量设定为 3mL/min, 以 310℃ 进行 18 个小时的升华纯化。收获量为 1.2g, 收率为 75%。

[0256] 另外, 下面示出对如上所获得的粉末利用核磁共振分光法 (¹H NMR) 进行分析而得到的结果。图 10A 及 10B 示出 ¹H NMR 图。另外, 图 10B 是扩大图 10A 中的 7.0ppm 至 8.5ppm 的范围而示出的图。

[0257] ¹H NMR (CDCl₃, 300MHz): δ 7.04-7.10 (m, 3H), 7.17-7.79 (m, 27H), 8.14-8.20 (m, 3H), 8.33 (s, 1H)

[0258] 根据 ¹H NMR 的分析结果, 确认到通过本合成例获得的化合物是上述结构式 (1) 所示的本发明的一个方式的 4-(9-苯基-9H-咔唑-3-基)-4'-(3-苯基喹喔啉-2-基)三苯

基胺（简称：PCBA1PQ）。

[0259] 接着，测量 PCBA1PQ 的紫外可见吸收光谱及发射光谱。将放置在石英皿中的 PCBA1PQ 的甲苯溶液和真空蒸镀于石英衬底上的 PCBA1PQ 的薄膜用作样品，并且使用紫外可见分光光度计（日本分光株式会社制，V550 型）测量吸收光谱。使用荧光光度计（日本滨松光子学株式会社（Hamamatsu Photonics K.K.）制，FS920 型）测量发射光谱。

[0260] 图 11A 示出 PCBA1PQ 的甲苯溶液的测量结果，图 11B 示出薄膜的测量结果。图表的横轴示出波长（nm），纵轴示出吸光度及发光强度的任意强度。另外，至于吸收光谱，当使用溶液样品的情况下，图示出减去只将甲苯放入到石英皿而测量的吸收光谱而得的结果，而当使用薄膜样品的情况下，图示出减去石英衬底的吸收光谱而得的结果。

[0261] PCBA1PQ 的甲苯溶液的吸收光谱的峰值波长为 403nm，荧光光谱的峰值波长为 500nm（激发波长 403nm）。另外，PCBA1PQ 的薄膜样品的吸收光谱的峰值波长为 417nm，荧光光谱的峰值波长为 527nm（激发波长 410nm）。

[0262] 此外，对 PCBA1PQ 的薄膜状态下的 HOMO 能级和 LUMO 能级进行测量。将通过大气中的光电子分光法（日本理研计器株式会社制，AC-2）测量的电离电位值换算为负数值，以获得 HOMO 能级的值。另外，使用 PCBA1PQ 的薄膜的吸收光谱的数据，从假定直接跃迁的 T_{auc} 绘图找到吸收端，且以该吸收端为光学能隙将它加入 HOMO 能级的值，以获得 LUMO 能级的值。其结果，PCBA1PQ 的 HOMO 能级是 -5.42eV，能隙为 2.66eV，LUMO 能级为 -2.76eV。由此可知，PCBA1PQ 是具有超过 2eV 的能隙的有机物质。

[0263] 此外，测量 PCBA1PQ 的氧化还原反应特性。通过循环伏安（CV）测量，测量氧化还原反应特性。另外，使用电化学分析仪（日本 BAS 株式会社制，型号：ALS 模型 600A）进行测量。

[0264] 至于进行 CV 测量时的溶液，作为溶剂使用脱水二甲基甲酰胺（DMF）（西格玛奥德里奇公司制，99.8%，目录号码：22705-6），以其浓度成为 100mmol/L 的方式将作为支持电解质的高氯酸四正丁基铵（tetra-*n*-butylammonium perchlorate）（ $n\text{-Bu}_4\text{NClO}_4$ ）（日本东京化成工业株式会社（Tokyo Chemical Industry Co., Ltd.）制，目录号码：T0836）溶解于 DMF 中，再者，以其浓度成为 1mmol/L 的方式对测量对象溶解于上述溶液中而调整。作为工作电极使用铂电极（日本 BAS 株式会社制，PTE 铂电极），并作为辅助电极使用铂电极（日本 BAS 株式会社制，VC-3 用 Pt 对电极（5cm）），并且作为参比电极使用 Ag/Ag^+ 电极（日本 BAS 株式会社制，RE7 非水溶剂类参比电极）。另外，在室温下进行测量。

[0265] 通过下述方法检查 PCBA1PQ 的氧化反应特性。以在将相对于参比电极的工作电极的电位从 0.28V 变化至 0.65V 之后从 0.65V 变化至 0.28V 的扫描为一个周期，对 100 个周期进行测量。另外，将 CV 测量的扫描速度设定为 0.1V/s。

[0266] 通过下述方法测量 PCBA1PQ 的还原反应特性。以在将相对于参比电极的工作电极的电位从 -1.40V 变化至 -2.24V 之后从 -2.24V 变化至 -1.40V 的扫描为一个周期，对 100 个周期进行测量。另外，将 CV 测量的扫描速度设定为 0.1V/s。

[0267] 图 12A 示出 PCBA1PQ 的氧化一侧的 CV 测量结果，图 12B 示出还原一侧的 CV 测量结果。在图 12A 及 12B 中，横轴示出相对于参比电极的工作电极的电位（V），纵轴示出工作电极和辅助电极之间流过的电流值（ μA ）。从图 12A 可知，在 +0.52V（vs. Ag/Ag^+ 电极）观察到呈现氧化的电流。从图 12B 可知，在 -1.98V（vs. Ag/Ag^+ 电极）观察到呈现还原的电流。

[0268] 不管反复 100 个周期的扫描,在氧化反应及还原反应的 CV 曲线的峰值位置和强度没有发现大的变化。由此可知,根据本发明的具有杂芳环的唑啉衍生物对于氧化还原反应的反复稳定。

[0269] 此外,利用密度泛函理论法 (DFT) 计算了 PCBA1PQ 的基态下的理想分子结构。以电势能、电子间静电能、电子的运动能、包括所有的其他复杂的电子间的互相作用的交换相关能的总合表示 DFT 的所有的能量。在 DFT 中,由于使用以电子密度表示的电子电势的一个泛函数 (意味着函数的函数) 近似表示交换相关作用,所以高速且高精度地进行计算。在此,利用混合泛函数的 B3LYP 对根据交换相关能的各参数进行权重。此外,作为基底函数将 6-311 (对每个原子价轨道使用三个缩短函数的三重分裂价层 (triple split valence) 基底类的基底函数) 应用到所有原子。通过上述基底函数,例如关于氢原子,考虑到 1s 至 3s 的轨道,而关于碳原子,考虑到 1s 至 4s、2p 至 4p 的轨道。再者,作为极化基底类,对氢原子加上 p 函数,对氢原子以外的原子加上 d 函数,以便提高计算精度。

[0270] 此外,作为量子化学计算程序,使用 Gaussian03。使用高性能计算机 (日本 SGI 株式会社制,Altix4700) 进行计算。

[0271] 使用 Gauss View4.1 使通过计算求得的 PCBA1PQ 的理想分子结构中的最高被占据轨道 (HOMO) 和最低空轨道 (LUMO) 可见化而示出于图 27A 和 27B。图 27A 示出最高被占据轨道 (HOMO),图 27B 示出最低空轨道 (LUMO)。附图中的球表示构成 PCBA1PQ 的原子,存在于原子周边的云状物表示最高被占据轨道 (HOMO) 或最低空轨道 (LUMO)。

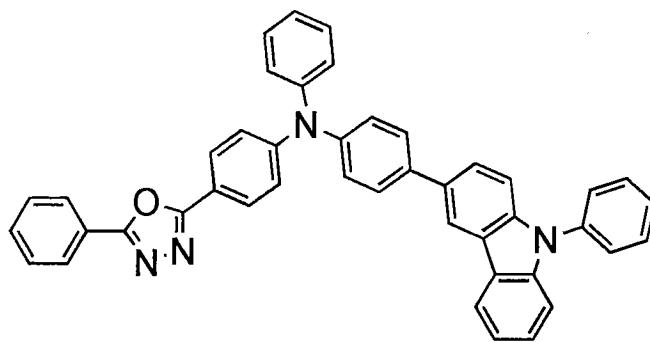
[0272] 从图 27A 和 27B 可知,在 PCBA1PQ 中最高被占据轨道存在于胺附近,并且对 PCBA1PQ 的空穴传输性氨基的影响大。此外,由于最低空轨道存在于喹啉附近,因此可知对 PCBA1PQ 的电子传输性喹啉基 (quinoxalyl) 的影响大。由此可知,因为在 PCBA1PQ 中,在分子中引入有具有电子传输性的杂芳环的喹啉骨架和具有空穴传输性的唑啉骨架,所以可以实现双极材料。

[0273] 实施例 2

[0274] 《合成例 2》

[0275] 在本实施例中说明在实施方式 1 中表示为结构式 (67) 的具有杂芳环的唑啉衍生物物的 4-(5-苯基-1,3,4-噁二唑-2-基)-4'-(9-苯基-9H-喹啉-3-基)三苯胺 (简称:PCBA011) 的合成方法。

[0276]

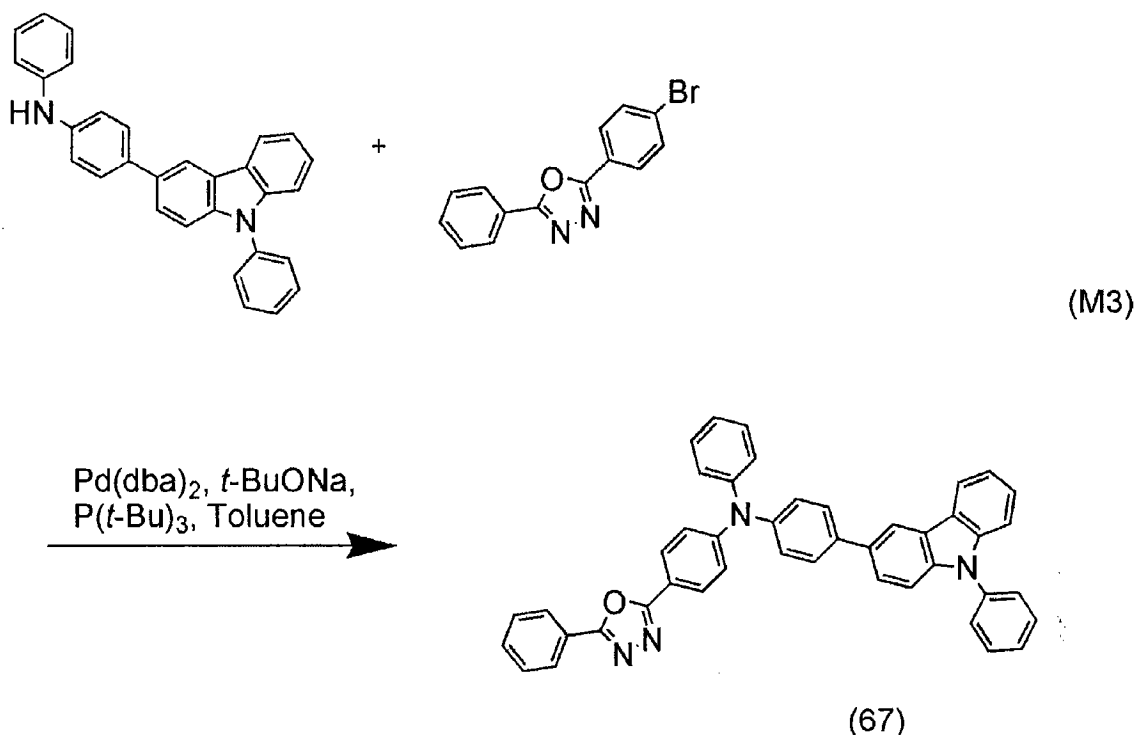


(67)

[0277] (M3) 示出 4-(5-苯基-1,3,4-噁二唑-2-基)-4'-(9-苯基-9H-喹啉-3-基)

三苯胺（简称：PCBA011）的合成图解。

[0278]



[0279] 将 1.8g(4.3mmol) 的 4-(9-苯基-9H-吡唑-3-基)二苯胺、1.3g(4.3mmol) 的 2-(4-溴苯基)-5-苯基-1,3,4-噁二唑及 1.0g(10mmol) 的叔丁醇钠放入在 100mL 的三口烧瓶中,对烧瓶的内部进行氮取代。对该混合物添加 15mL 的甲苯及 0.10mL 的三(叔丁基)膦(10wt%己烷溶液),在减压下搅拌而脱气。在进行脱气之后,添加 0.020g(0.035mmol) 的双(二亚苄基丙酮)钯(0)。以 80℃加热搅拌该混合物 5 个小时。

[0280] 在反应之后,通过硅藻土(日本和光纯药工业株式会社、目录号码:531-16855)、矾土、硅酸镁(日本和光纯药工业株式会社、目录号码:540-00135)对该混合物添加甲苯而成的悬浮液进行抽滤。对所获得的滤液依次使用饱和碳酸钠水溶液和饱和盐水进行洗涤。在对有机层添加硫酸镁进行干燥之后,对该混合物进行抽滤并去除硫酸镁。浓缩所获得的滤液并通过柱层析法对残渣进行纯化。

[0281] 依次使用用作第一展开剂的甲苯、用作第二展开剂的甲苯:乙酸乙酯=20:1 的混合溶剂进行柱层析法。通过使用氯仿和己烷的混合溶剂使通过浓缩所获得的馏分而得的固体重新结合,以 92%的收率获得收获量为 2.5g 的粉末状淡黄色固体。

[0282] 此外,通过梯度升华法对所获得的固体进行升华纯化。在 7Pa 的减压下,将氩流量设定为 3mL/min,以 300℃进行 12 个小时的升华纯化。当对 2.5g 的 PCBA011 进行升华纯化时,收获量为 2.2g,收率为 88%。

[0283] 另外,下面示出对如上所获得的粉末利用核磁共振分光法(¹H NMR)进行分析而得到的结果。图 13A 及 13B 示出 ¹H NMR 图。图 13B 是扩大图 13A 中的 7.0ppm 至 8.5ppm 的范围而示出的图。

[0284] ¹H NMR. (CDCl₃, 300MHz): δ 7.13-7.70 (m, 24H), 7.98 (d, J = 8.8Hz, 2H), 8.11-8.15 (m, 2H)、8.19 (d, J = 7.8Hz, 1H), 8.35 (sd, J = 2.0Hz, 1H)。

[0285] 根据 ^1H NMR 的分析结果,确认到通过本合成例获得的化合物是上述结构式 (67) 所示的本发明的一个方式的 4-(5- 苯基 -1,3,4- 噁二唑 -2- 基)-4'-(9- 苯基 -9H- 吡唑 -3- 基) 三苯胺 (简称:PCBA011)。

[0286] 此外,使用差示扫描量热计 (DSC:Differential ScanningCalorimetry,珀金埃尔默公司 (Perkin Elmer Co.,Ltd.) 制,型号:Pyris1 DSC) 测量的 PCBA011 的玻璃转变温度是 118℃。根据其结果,可知 PCBA011 是具有优良的耐热性的材料。

[0287] 此外,测量 PCBA011 的紫外可见吸收光谱及发射光谱。将放置在石英皿中的 PCBA011 的甲苯溶液和真空蒸镀于石英衬底上的 PCBA011 的薄膜用作样品,并且使用紫外可见分光光度计 (日本分光株式会社制,V550 型) 测量吸收光谱。使用荧光光度计 (日本滨松光子学株式会社 (Hamamatsu Photonics K.K.) 制,FS920 型) 测量发射光谱。

[0288] 图 14A 示出 PCBA011 的甲苯溶液的测量结果,图 14B 示出薄膜的测量结果。图表的横轴示出波长 (nm),纵轴示出吸光度及发光强度的任意强度。另外,至于吸收光谱,当使用溶液样品的情况下,图示出减去只将甲苯放入到石英皿而测定的吸收光谱而得的结果,而当使用薄膜样品的情况下,图示出减去石英衬底的吸收光谱而得的结果。

[0289] PCBA011 的甲苯溶液的吸收光谱的峰值波长为 366nm,荧光光谱的峰值波长为 439nm(激发波长 366nm)。另外,PCBA011 的薄膜样品的吸收光谱的峰值波长为 379nm,荧光光谱的峰值波长为 471nm(激发波长 368nm)。

[0290] 此外,对 PCBA011 的薄膜状态下的 HOMO 能级和 LUMO 能级进行测量。将通过大气中的光电子分光法 (日本理研计器株式会社制,AC-2) 测量的电离电位值换算为负数值,以获得 HOMO 能级的值。另外,使用 PCBA011 的薄膜的吸收光谱的数据,从假定直接跃迁的 Tauc 绘图找到吸收端,且以该吸收端为光学能隙将它加入 HOMO 能级的数值,以获得 LUMO 能级的值。其结果,PCBA011 的 HOMO 能级为 -5.39eV,能隙为 2.98eV,LUMO 能级为 -2.41eV。由此可知,PCBA011 是具有大致为 3eV 的大的能隙的有机物质。

[0291] 此外,测量 PCBA011 的氧化还原反应特性。通过循环伏安 (CV) 测量,测量氧化还原反应特性。另外,使用电化学分析仪 (日本 BAS 株式会社制,型号:ALS 模型 600A) 进行测量。

[0292] 至于进行 CV 测量时的溶液,作为溶剂使用脱水二甲基甲酰胺 (DMF) (西格玛奥德里奇公司制,99.8%,目录号码:22705-6),以其浓度成为 100mmol/L 的方式将作为支持电解质的高氯酸四正丁基铵 ($n\text{-Bu}_4\text{NClO}_4$) (日本东京化成工业株式会社 (Tokyo Chemical IndustryCo., Ltd.) 制,目录号码:T0836) 溶解于 DMF 中,并且,以其浓度成为 1mmol/L 的方式将测量对象溶解于上述溶液中而调整。作为工作电极使用铂电极 (日本 BAS 株式会社制,PTE 铂电极),并作为辅助电极使用铂电极 (日本 BAS 株式会社制,VC-3 用 Pt 对电极 (5cm)),并且作为参比电极使用 Ag/Ag^+ 电极 (日本 BAS 株式会社制,RE7 非水溶剂类参比电极)。另外,在室温下进行测量。

[0293] 通过下述方法测量 PCBA011 的氧化反应特性。以在将相对于参比电极的工作电极的电位从 0.214V 变化至 0.900V 之后从 0.900V 变化至 0.214V 的扫描为一个周期,对 100 个周期进行测量。另外,将 CV 测量的扫描速度设定为 0.1V/s。

[0294] 通过下述方法测量 PCBA011 的还原反应特性。以在将相对于参比电极的工作电极的电位从 -1.25V 变化至 -2.65V 之后从 -2.65V 变化至 -1.25V 的扫描为一个周期,对 100

个周期进行测量。另外,将 CV 测量的扫描速度设定为 0.1V/s。

[0295] 图 15A 示出 PCBA011 的氧化一侧的 CV 测量结果,图 15B 示出还原一侧的 CV 测量结果。在图 15A 及 15B 中,横轴示出相对于标准电极的工作电极的电位 (V),纵轴示出工作电极和辅助电极之间流过的电流值 (μA)。从图 15A 可知,在 +0.58V(vs. Ag/Ag^+ 电极) 观察到呈现氧化的电流。从图 15B 可知,在 -2.46V(vs. Ag/Ag^+ 电极) 观察到呈现还原的电流。

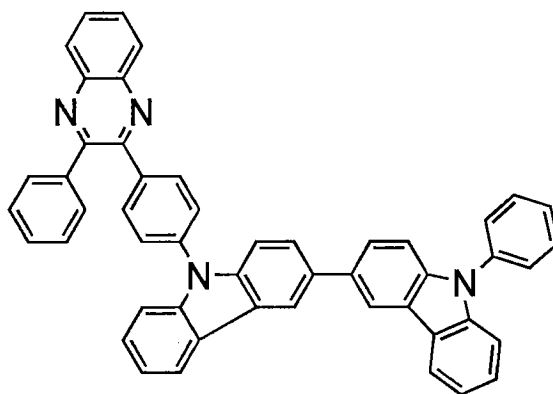
[0296] 不管反复 100 个周期的扫描,在氧化反应及还原反应的 CV 曲线的峰值位置和强度没有发现大的变化。由此可知,根据本发明的具有杂芳环的咔唑衍生物对于氧化还原反应的反复稳定。

[0297] 实施例 3

[0298] 《合成例 3》

[0299] 在本实施例中说明在实施方式 1 中表示为结构式 (35) 的具有杂芳环的咔唑衍生物的 9-苯基-9'-[4-(3-苯基喹喔啉-2-基)苯基]-3,3'-联(9H-咔唑) (简称:PCC1PQ) 的合成方法。

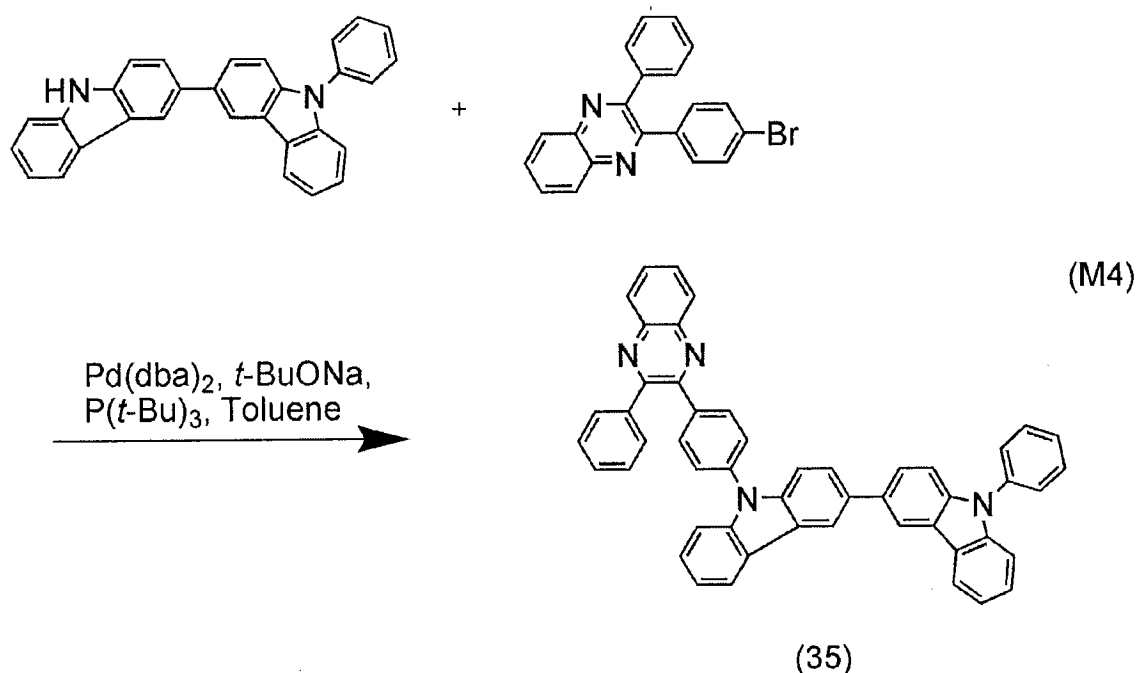
[0300]



(35)

[0301] (M4) 示出 9-苯基-9'-[4-(3-苯基喹喔啉-2-基)苯基]-3,3'-联(9H-咔唑) (简称:PCC1PQ) 的合成图解。

[0302]



[0303] 将 1.7g (4.2mmol) 的 9-苯基-3,3'-联(9H-咔唑)、1.5g (4.2mmol) 的 2-(4-溴苯基)-3-苯基喹喔啉及 1.0g (10mmol) 的叔丁醇钠放入在 100mL 的三口烧瓶中,对烧瓶的内部进行氮取代。对该混合物添加 15mL 的甲苯及 0.1mL 的三(叔丁基)膦(10wt%己烷溶液),在减压下搅拌而脱气。在进行脱气之后,添加 0.020g (0.035mmol) 的双(二亚苄基丙酮)钯(0)。以 80℃加热搅拌该混合物 5 个小时。

[0304] 在反应之后,通过硅藻土(日本和光纯药工业株式会社、目录号码:531-16855)、硅酸镁(日本和光纯药工业株式会社、目录号码:540-00135)、矾土对该混合物添加甲苯而成的悬浮液进行抽滤。使用水对所获得的滤液进行洗涤。在对有机层添加硫酸镁进行干燥之后,对该混合物进行抽滤并去除硫酸镁。浓缩所获得的滤液并通过柱层析法对残渣进行纯化。

[0305] 依次使用用作第一展开剂的甲苯:己烷=1:1的混合溶剂、用作第二展开剂的甲苯:乙酸乙酯=5:1的混合溶剂进行柱层析法。通过使用二氯甲烷和甲醇的混合溶剂使通过浓缩所获得的馏分而得的固体重新结合,以 75% 的收率获得收获量为 2.2g 的粉末状淡黄色固体。

[0306] 此外,通过梯度升华法对所获得的固体进行升华纯化。在 7Pa 的减压下,将氩流量设定为 3mL/min,以 320℃进行 22 个小时的升华纯化。当对 1.7g 的 PCC1PQ 进行升华纯化时,收获量为 0.85g,收率为 50%。

[0307] 另外,下面示出对如上所获得的粉末利用核磁共振分光法(^1H NMR)进行分析而得到的结果。图 16A 及 16B 示出 ^1H NMR 图。图 16B 是扩大图 16A 中的 7.0ppm 至 9.0ppm 的范围而示出的图。

[0308] ^1H NMR. (CDCl_3 , 300MHz): δ 7.29-7.36 (m, 2H), 7.44-7.86 (m, 24H), 8.22-8.27 (m, 4H), 8.45-8.48 (m, 2H)

[0309] 根据 ^1H NMR 的分析结果,确认到通过本合成例获得的化合物是上述结构式 (35) 所示的本发明的一个方式的 9-苯基-9'-[4-(3-苯基喹喔啉-2-基)苯基]-3,3'-联(9H-咔唑)(简称:PCC1PQ)。

[0310] 此外,测量 PCC1PQ 的紫外可见吸收光谱及发射光谱。将放置在石英皿中的 PCC1PQ 的甲苯溶液和真空蒸镀于石英衬底上的 PCC1PQ 的薄膜用作样品,并且使用紫外可见分光光度计(日本分光株式会社制,V550 型)测量吸收光谱。使用荧光光度计(日本滨松光子学株式会社(Hamamatsu Photonics K.K.)制,FS920 型)测量发射光谱。

[0311] 图 17A 示出 PCC1PQ 的甲苯溶液的测量结果,图 17B 示出薄膜的测量结果。图表的横轴示出波长(nm),纵轴示出吸光度及发光强度的任意强度。另外,至于吸收光谱,当使用溶液样品的情况下,图示出减去只将甲苯放入到石英皿而测量的吸收光谱而得的结果,而当使用薄膜样品的情况下,图示出减去石英衬底的吸收光谱而得的结果。

[0312] PCC1PQ 的甲苯溶液的吸收光谱的峰值波长为 371nm,荧光光谱的峰值波长为 466nm(激发波长 371nm)。另外,PCC1PQ 的薄膜样品的吸收光谱的峰值波长为 386nm,荧光光谱的峰值波长为 503nm(激发波长 307nm)。

[0313] 此外,对 PCC1PQ 的薄膜状态下的 HOMO 能级和 LUMO 能级进行测量。将通过大气中的光电子分光法(日本理研计器株式会社制,AC-2)测量的电离电位值换算为负数值,以获得 HOMO 能级的值。另外,使用 PCC1PQ 的薄膜的吸收光谱的数据,从假定直接跃迁的 T_{auc} 绘图找到吸收端,且以该吸收端为光学能隙将它加入 HOMO 能级的数值,以获得 LUMO 能级的值。其结果,PCC1PQ 的 HOMO 能级为 -5.55eV,能隙为 2.88eV, LUMO 能级为 -2.67eV。由此可知,PCC1PQ 是具有超过 2eV 的大的能隙的有机物质。

[0314] 此外,测量 PCC1PQ 的氧化还原反应特性。通过循环伏安(CV)测量,测量氧化还原反应特性。另外,使用电化学分析仪(日本 BAS 株式会社制,型号:ALS 模型 600A)进行测量。

[0315] 至于进行 CV 测量时的溶液,作为溶剂使用脱水二甲基甲酰胺(DMF)(西格玛奥德里奇公司制,99.8%,目录号码:22705-6),以其浓度成为 100mmol/L 的方式将作为支持电解质的高氯酸四正丁基铵($n\text{-Bu}_4\text{NCIO}_4$)(日本东京化成工业株式会社(Tokyo Chemical Industry Co., Ltd.)制,目录号码:T0836)溶解于 DMF 中,并且,以其浓度成为 1mmol/L 的方式将测量对象溶解于上述溶液中而调整。作为工作电极使用铂电极(日本 BAS 株式会社制,PTE 铂电极),并作为辅助电极使用铂电极(日本 BAS 株式会社制,VC-3 用 Pt 对电极(5cm)),并且作为参比电极使用 Ag/Ag^+ 电极(日本 BAS 株式会社制,RE7 非水溶剂类参比电极)。另外,在室温下进行测量。

[0316] 通过下述方法测量 PCC1PQ 的氧化反应特性。以在将相对于参比电极的工作电极的电位从 0.026V 变化至 0.839V 之后从 0.839V 变化至 0.026V 的扫描为一个周期,对 100 个周期进行测量。另外,将 CV 测量的扫描速度设定为 0.1V/s。

[0317] 通过下述方法测量 PCC1PQ 的还原反应特性。在将相对于参比电极的工作电极的电位从 -1.37V 变化至 -2.19V 之后,从 -2.19V 变化至 -1.37V 的扫描为一个周期,对 100 个周期进行测量。另外,将 CV 测量的扫描速度设定为 0.1V/s。

[0318] 图 18A 示出 PCC1PQ 的氧化一侧的 CV 测量结果,图 18B 示出还原一侧的 CV 测量结果。在图 18A 及 18B 中,横轴示出相对于参比电极的工作电极的电位(V),纵轴示出工作电极和辅助电极之间流过的电流值(μA)。从图 18A 可知,在 +0.67V(vs. Ag/Ag^+ 电极)观察到呈现氧化的电流。从图 18B 可知,在 -1.93V(vs. Ag/Ag^+ 电极)观察到呈现还原的电流。

[0319] 不管反复 100 个周期的扫描,在氧化反应及还原反应的 CV 曲线的峰值位置和强度

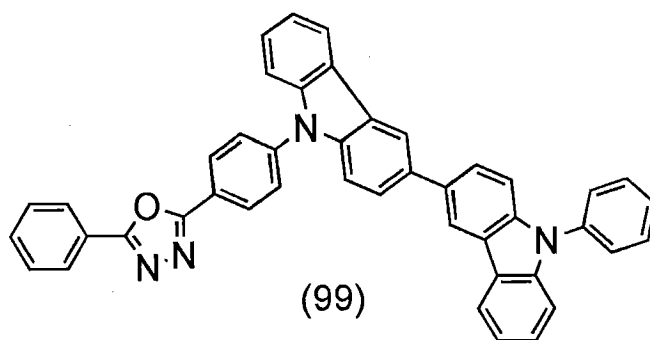
没有发现大的变化。由此可知,根据本发明的具有杂芳环的咪唑衍生物相对于氧化还原反应的反复稳定。

[0320] 实施例 4

[0321] 《合成例 4》

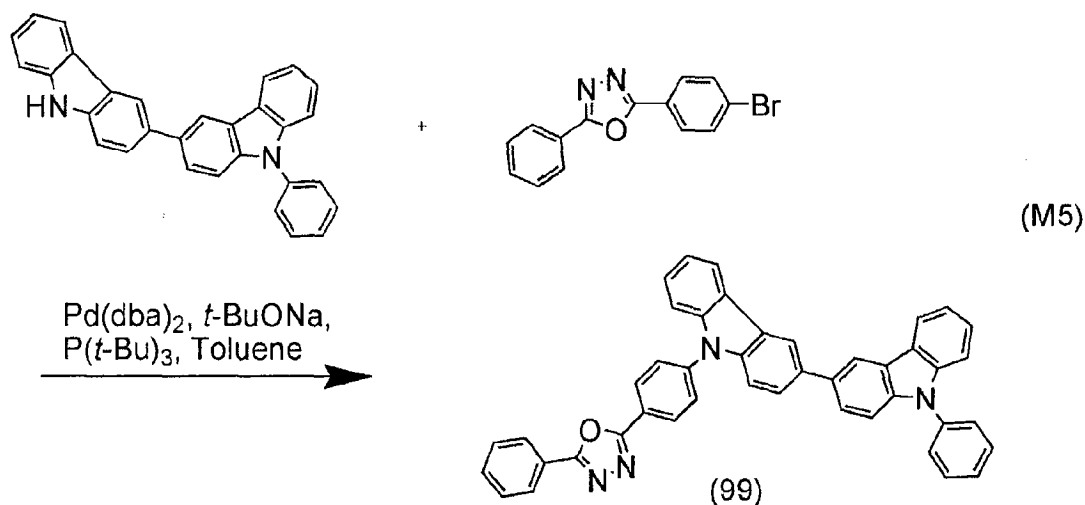
[0322] 在本实施例中说明在实施方式 1 中表示为结构式 (99) 的具有杂芳环的咪唑衍生物的 9-苯基-9'-[4-(5-苯基-1,3,4-噁二唑-2-基)苯基]-3,3'-联(9H-咪唑)(简称:PCC011)的合成方法。

[0323]



[0324] (M5) 示出 9-苯基-9'-[4-(5-苯基-1,3,4-噁二唑-2-基)苯基]-3,3'-联(9H-咪唑)(简称:PCC011)的合成图解。

[0325]



[0326] 将 1.8g(4.3mmol) 的 9-苯基-3,3'-联(9H-咪唑)、1.3g(4.3mmol) 的 2-(4-溴苯基)-5-苯基-1,3,4-噁二唑及 1.0g(10mmol) 的叔丁醇钠放入在 100mL 的三口烧瓶中,对烧瓶的内部进行氮取代。对该混合物添加 15mL 的甲苯及 0.1mL 的三(叔丁基)膦(10wt% 己烷溶液),在减压下搅拌而脱气。在进行脱气之后,对该混合物添加 0.020g(0.035mmol) 的双(二亚苄基丙酮)钯(0)。以 80℃ 搅拌该混合物 5 个小时。

[0327] 在反应之后,通过硅藻土(日本和光纯药工业株式会社、目录号码:531-16855)、矾土、硅酸镁(日本和光纯药工业株式会社、目录号码:540-00135)对该混合物添加甲苯而成的悬浮液进行抽滤。对所获得的滤液依次使用饱和碳酸钠水溶液和饱和盐水进行洗涤。在对有机层添加硫酸镁进行干燥之后,对该混合物进行抽滤并去除硫酸镁。通过柱层析法对浓缩所获得的滤液而得的固体进行纯化。

[0328] 依次使用用作第一展开剂的甲苯、用作第二展开剂的甲苯：乙酸乙酯=20：1的混合溶剂进行柱层析法。通过使用氯仿和己烷的混合溶剂使通过浓缩所获得的馏分而得的固体重结晶，以78%的收率获得收获量为2.1g的粉末状淡黄色固体。

[0329] 此外，通过梯度升华法对所获得的固体进行升华纯化。在7Pa的减压下，将氩流量设定为3mL/min，以320℃进行12个小时的升华纯化。当对1.8g的PCC011进行升华纯化时，收获量为1.1g，收率为61%。

[0330] 另外，下面示出对如上所获得的粉末利用核磁共振分光法(^1H NMR)进行分析而得到的结果。图19A及19B示出 ^1H NMR图。图19B是扩大图19A中的7.0ppm至9.0ppm的范围而示出的图。

[0331] ^1H NMR. (CDCl_3 , 300MHz) : δ 7.30–7.65 (m, 16H) , 7.75–7.86 (m, 4H) , 8.18–8.28 (m, 4H) , 8.42 (d, J = 8.8Hz, 2H) , 8.47 (sd, J = 1.5Hz, 2H)

[0332] 根据 ^1H NMR的分析结果，确认到通过本合成例获得的化合物是上述结构式(99)所示的本发明的一个方式的9-苯基-9'-[4-(5-苯基-1,3,4-噁二唑-2-基)苯基]-3,3'-联(9H-咔唑)(简称:PCC011)。

[0333] 此外，使用差示扫描量热计(DSC:Differential ScanningCalorimetry, 珀金埃尔默公司(Perkin Elmer Co., Ltd.)制, 型号:Pyris1 DSC)测量的PCC011的玻璃转变温度是138℃。根据其结果，可知PCC011是具有优良的耐热性的材料。

[0334] 此外，测量PCC011的紫外可见吸收光谱及发射光谱。将放置在石英皿的PCC011的甲苯溶液和真空蒸镀于石英衬底上的PCC011的薄膜用作样品，并且使用紫外可见分光光度计(日本分光株式会社制, V550型)测量吸收光谱。使用荧光光度计(日本滨松光子学株式会社(Hamamatsu Photonics K.K.)制, FS920型)测量发射光谱。

[0335] 图20A示出PCC011的甲苯溶液的测量结果，图20B示出薄膜的测量结果。图表的横轴示出波长(nm)，纵轴示出吸光度及发光强度的任意强度。另外，至于吸收光谱，当使用溶液样品的情况下，图示出减去只将甲苯放入到石英皿而测定的吸收光谱而得的结果，而当使用薄膜样品的情况下，图示出减去石英衬底的吸收光谱而得的结果。

[0336] PCC011的甲苯溶液的吸收光谱的峰值波长为350nm，荧光光谱的峰值波长为418nm(激发波长350nm)。另外，PCC011的薄膜样品的吸收光谱的峰值波长为358nm，荧光光谱的峰值波长为456nm(激发波长355nm)。

[0337] 此外，对PCC011的薄膜状态下的HOMO能级和LUMO能级进行测量。将通过大气中的光电子分光法(日本理研计器株式会社制, AC-2)测量的电离电位数值换算为负数值，以获得HOMO能级的值。另外，使用PCC011的薄膜的吸收光谱的数据，从假定直接跃迁的Tauc绘图找到吸收端，且以该吸收端为光学能隙将它加入HOMO能级的数值，以获得LUMO能级的值。其结果，PCC011的HOMO能级为-5.47eV，能隙为3.02eV，LUMO能级为-2.45eV。由此可知，PCC011是具有超过3eV的大的能隙的有机物质。

[0338] 此外，测量PCC011的氧化还原反应特性。通过循环伏安(CV)测量，测量氧化还原反应特性。另外，使用电化学分析仪(日本BAS株式会社制, 型号:ALS模型600A)进行测量。

[0339] 至于进行CV测量时的溶液，作为溶剂使用脱水二甲基甲酰胺(DMF)(西格玛奥德里奇公司制, 99.8%，目录号码:22705-6)，以其浓度成为100mmol/L的方式将作为支持

电解质的高氯酸四正丁基铵 ($n\text{-Bu}_4\text{NCIO}_4$) (日本东京化成工业株式会社 (Tokyo Chemical Industry Co., Ltd.) 制, 目录号码: T0836) 溶解于 DMF 中, 并且, 以其浓度成为 1mmol/L 的方式将测量对象溶解于上述溶液中而调整。作为工作电极使用铂电极 (日本 BAS 株式会社制, PTE 铂电极), 并作为辅助电极使用铂电极 (日本 BAS 株式会社制, VC-3 用 Pt 对电极 (5cm)), 并且作为参比电极使用 Ag/Ag^+ 电极 (日本 BAS 株式会社制, RE7 非水溶剂类参比电极)。另外, 在室温下进行测量。

[0340] 通过下述方法测量 PCC011 的氧化反应特性。以在将相对于参比电极的工作电极的电位从 0.324V 变化至 0.800V 之后从 0.800V 变化至 0.324V 的扫描为一个周期, 对 100 个周期进行测量。另外, 将 CV 测量的扫描速度设定为 0.1V/s 。

[0341] 通过下述方法测量 PCC011 的还原反应特性。以在将相对于参比电极的工作电极的电位从 -1.59V 变化至 -2.49V 之后, 从 -2.49V 变化至 -1.59V 的扫描为一个周期, 对 100 个周期进行测量。另外, 将 CV 测量的扫描速度设定为 0.1V/s 。

[0342] 图 21A 示出 PCC1PQ 的氧化一侧的 CV 测量结果, 图 21B 示出还原一侧的 CV 测量结果。在图 21A 及 21B 中, 横轴示出相对于标准电极的工作电极的电位 (V), 纵轴示出工作电极和辅助电极之间流过的电流值 (μA)。从图 21A 可知, 在 $+0.69\text{V}$ (vs. Ag/Ag^+ 电极) 观察到呈现氧化的电流。从图 21B 可知, 在 -2.34V (vs. Ag/Ag^+ 电极) 观察到呈现还原的电流。

[0343] 不管反复 100 个周期的扫描, 在氧化反应及还原反应的 CV 曲线的峰值位置和强度没有发现大的变化。由此可知, 根据本发明的具有杂芳环的唑啉衍生物对于氧化还原反应的反复稳定。

[0344] 此外, 与上述 PCBA1PQ 同样的方法使 PCC011 的基态的分子结构最适化。

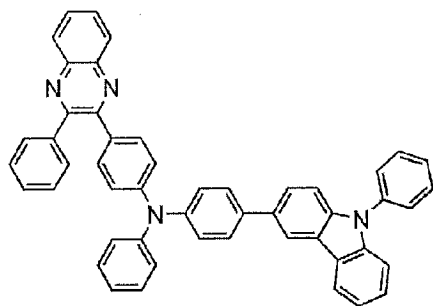
[0345] 使用 Gauss View4.1 使通过计算求得的 PCC011 的理想分子结构中的最高被占据轨道 (HOMO) 和最低空轨道 (LUMO) 可见化而示出于图 28A 和 28B。图 28A 示出最高被占据轨道 (HOMO), 图 28B 示出最低空轨道。附图中的球表示构成 PCC011 的原子, 存在于原子周边的云状物表示最高被占据轨道 (HOMO) 或最低空轨道 (LUMO)。

[0346] 从图 28A 和 28B 可知, 在 PCC011 中最高被占据轨道存在于唑啉附近, 并且对 PCC011 的空穴传输性唑啉基的影响大。此外, 由于最低空轨道存在于噻二唑附近, 因此可知对 PCC011 的电子传输性噻二唑基的影响大。由此可知, 因为在 PCC011 中, 在分子中引入具有电子传输性的杂芳环的噻二唑骨架和具有空穴传输性的唑啉骨架, 所以可以实现双极材料。

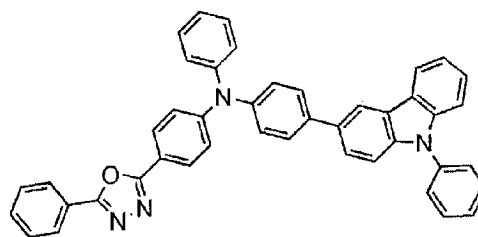
[0347] 实施例 5

[0348] 在本实施例中, 参照图 22 至图 24B 说明本发明的一个方式的发光元件。以下说明在本实施例中使用的材料的化学式。

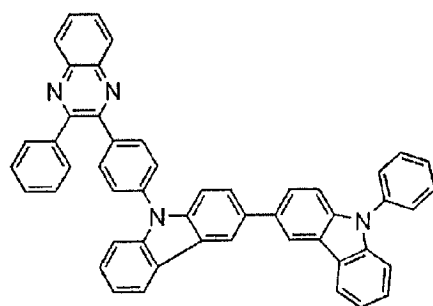
[0349]



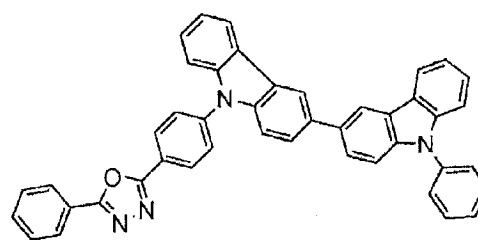
(1)



(67)

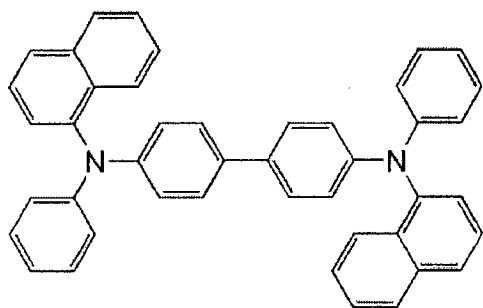


(35)

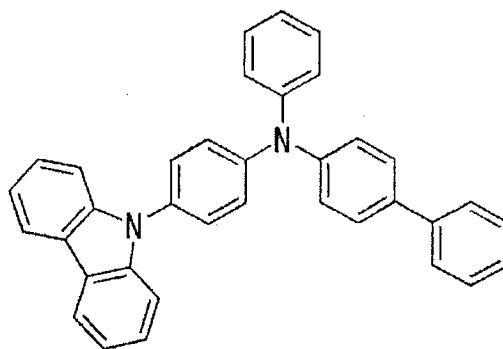


(99)

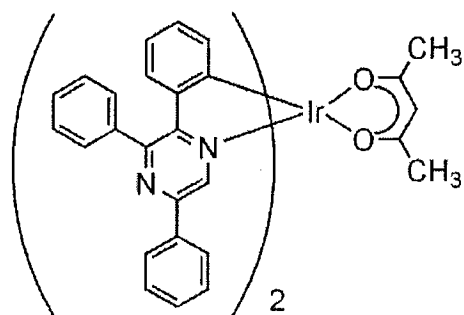
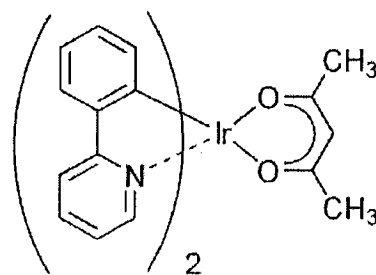
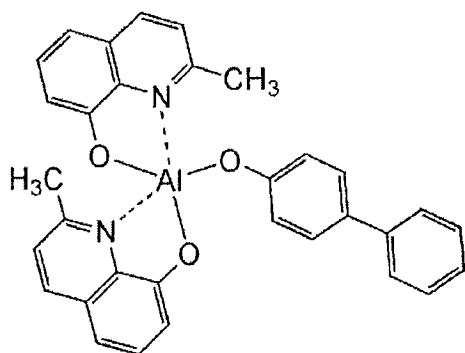
[0350]



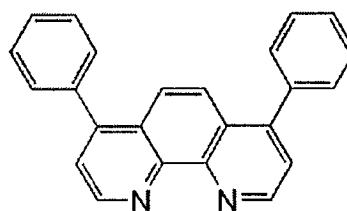
NPB



YGA1BP

Ir(tppy)₂acacIr(ppy)₂acac

BAlq



BPhen

[0351] 以下示出本实施例的发光元件的制造方法。

[0352] (发光元件 1)

[0353] 首先,在玻璃衬底 2100 上通过溅射法形成包含氧化硅的氧化铟锡 (ITO) 来形成第一电极 2101。另外,其厚度为 110nm,电极面积为 2mm×2mm。

[0354] 接着,将形成有第一电极 2101 的衬底固定到设置在真空蒸镀装置中的衬底支架以使其形成有第一电极 2101 的面朝向下面。在减压到 10⁻⁴Pa 左右之后,在第一电极 2101

上共蒸镀 4,4'-双[N-(1-萘基)-N-苯基氨基]联苯(简称:NPB)和氧化钼(VI),从而形成包含复合有机化合物和无机化合物而成的复合材料的第一层 2111 作为空穴注入层。其厚度为 50nm,将 NPB 和氧化钼(VI)的重量比调节为 4:1(=NPB:氧化钼)。注意,共蒸镀法是在一个处理室内从多个蒸发源同时进行蒸镀的蒸镀法。

[0355] 接着,通过利用电阻加热的蒸镀法,在包含复合材料的第一层 2111 上以 10nm 的厚度形成 4,4'-双[N-(1-萘基)-N-苯基氨基]联苯(简称:NPB),以形成第二层 2112 作为空穴传输层。

[0356] 再者,通过共蒸镀结构式(1)所示的 4-(9-苯基-9H-吡唑-3-基)-4'-(3-苯基喹喔啉-2-基)三苯胺(简称:PCBA1PQ)和(乙酰丙酮)双(2,3,5-三苯基吡嗪)铱(III)(简称: $\text{Ir}(\text{tppr})_2\text{acac}$),在第二层 2112 上形成第三层 2113 作为发光层。在此,将 PCBA1PQ 和 $\text{Ir}(\text{tppr})_2\text{acac}$ 的重量比调节为 1:0.08(=PCBA1PQ: $\text{Ir}(\text{tppr})_2\text{acac}$)。此外,第三层 2113 的厚度为 40nm。

[0357] 然后,通过在第三层 2113 上依次蒸镀 10nm 的双(2-甲基-8-羟基喹啉)(4-苯基苯酚盐)合铝(简称:BA1q)和 20nm 的红菲绕啉(简称:BPhen)层叠,形成第四层 2114 作为电子传输层。再者,通过在第四层 2114 上蒸镀 10nm 的氟化锂(LiF),形成第五层 2115 作为电子注入层。最后,蒸镀 200nm 的铝作为用作阴极的第二电极 2102,来形成本实施例的发光元件 1。

[0358] 另外,在上述蒸镀过程中,作为蒸镀都采用电阻加热法。

[0359] (发光元件 2)

[0360] 在发光元件 2 中,将结构式(67)所示的 4-(5-苯基-1,3,4-噁二唑-2-基)-4'-(9-苯基-9H-吡唑-3-基)三苯胺(简称:PCBA011)用作主体材料代替在发光元件 1 的第三层 2113 中用作主体材料的 PCBA1PQ。也就是,通过共蒸镀 PCBA011 和 $\text{Ir}(\text{tppr})_2\text{acac}$,在第二层 2112 上形成第三层 2113 作为发光层。在此,将 PCBA011 和 $\text{Ir}(\text{tppr})_2\text{acac}$ 的重量比调节为 1:0.08(=PCBA011: $\text{Ir}(\text{tppr})_2\text{acac}$)。此外,第三层 2113 的厚度为 40nm。除了第三层 2113 之外,与发光元件 1 同样地制造。

[0361] (发光元件 3)

[0362] 在发光元件 3 中,将结构式(35)所示的 9-苯基-9'-[4-(3-苯基喹喔啉-2-基)苯基]-3,3'-联(9H-吡唑)(简称:PCC1PQ)用作主体材料代替在发光元件 1 的第三层 2113 中用作主体材料的 PCBA1PQ。也就是,通过共蒸镀 PCC1PQ 和 $\text{Ir}(\text{tppr})_2\text{acac}$,在第二层 2112 上形成第三层 2113 作为发光层。在此,将 PCC1PQ 和 $\text{Ir}(\text{tppr})_2\text{acac}$ 的重量比调节为 1:0.08(=PCC1PQ: $\text{Ir}(\text{tppr})_2\text{acac}$)。此外,第三层 2113 的厚度为 40nm。除了第三层 2113 之外,与发光元件 1 同样地制造。

[0363] (发光元件 4)

[0364] 在发光元件 4 中,将结构式(99)所示的 9-苯基-9'-[4-(5-苯基-1,3,4-噁二唑-2-基)苯基]-3,3'-联(9H-吡唑)(简称:PCC011)用作主体材料代替在发光元件 1 的第三层 2113 中用作主体材料的 PCBA1PQ。也就是,通过共蒸镀 PCC011 和 $\text{Ir}(\text{tppr})_2\text{acac}$,在第二层 2112 上形成第三层 2113 作为发光层。在此,将 PCC011 和 $\text{Ir}(\text{tppr})_2\text{acac}$ 的重量比调节为 1:0.08(=PCC011: $\text{Ir}(\text{tppr})_2\text{acac}$)。此外,第三层 2113 的厚度为 40nm。除了第三层 2113 之外,与发光元件 1 同样地制造。

[0365] 在氮气氛的手套箱内,对通过上述工序获得的发光元件 1、发光元件 2、发光元件 3 及发光元件 4 进行密封工作,以使发光元件不暴露于大气,然后对这些发光元件的工作特性进行测量。注意,在室温(保持为 25℃的气氛)下进行测量。

[0366] 图 23A 示出发光元件 1、发光元件 2、发光元件 3 及发光元件 4 的电流密度-亮度特性。在图 23A 中,横轴示出电流密度(mA/cm^2),纵轴示出亮度(cd/m^2)。此外,图 23B 示出电压-亮度特性。在图 23B 中,横轴示出施加到发光元件的电压(V),纵轴示出亮度(cd/m^2)。此外,图 24A 示出亮度-电流效率特性。在图 24A 中,横轴示出亮度(cd/m^2),纵轴示出电流效率(cd/A)。

[0367] 当电压为 3.6V 时,发光元件 1 的发光颜色的 CIE 色度坐标是($x = 0.65, y = 0.35$),电流效率为 23.0 cd/A 。此时的外部量子效率为 16.8%。此外,当电压为 4.0V 时,发光元件 2 的发光颜色的 CIE 色度坐标为($x = 0.65, y = 0.35$),电流效率为 12.3 cd/A 。此时的外部量子效率为 8.5%。此外,当电压为 4.2V 时,发光元件 3 的发光颜色的 CIE 色度坐标是($x = 0.66, y = 0.34$),电流效率为 15.0 cd/A 。此时的外部量子效率为 11.8%。而且,当电压为 4.2V 时,发光元件 4 的发光颜色的 CIE 色度坐标是($x = 0.65, y = 0.35$),电流效率为 11.6 cd/A 。此时的外部量子效率为 8.3%。

[0368] 另外,图 24B 示出流过 0.5mA 的电流时的发射光谱。在图 24B 中,横轴示出波长(nm),纵轴示出强度(任意单位)。如图 24B 所示,从所制造的发光元件 1、发光元件 2、发光元件 3 及发光元件 4 观测来源于 $\text{Ir}(\text{tppr})_2\text{acac}$ 的红色的发光。

[0369] 如上述结果所示,通过将本发明的一个方式的具有杂芳环的咔唑衍生物用作发光层的主体材料,可以以低电压且高效率制造可获得深红色的发光的元件。

[0370] 实施例 6

[0371] 在本实施例中,参照图 25A 至图 26B 说明与实施例 5 所示的结构不同的结构的发光元件。

[0372] 下面示出本实施例的发光元件的制造方法。

[0373] (发光元件 5)

[0374] 首先,在玻璃衬底 2100 上通过溅射法形成包含氧化硅的氧化铟锡(ITSO)来形成第一电极 2101。另外,其厚度为 110nm,电极面积为 $2\text{mm} \times 2\text{mm}$ 。

[0375] 接着,将形成有第一电极 2101 的衬底固定到设置在真空蒸镀装置中的衬底支架以使形成有第一电极 2101 的面朝向下面。在减压到 10^{-4}pa 左右之后,在第一电极 2101 上共蒸镀 4,4'-双[N-(1-萘基)N-苯胺]联苯(简称:NPB)和氧化钼(VI),从而形成包含复合有机化合物和无机化合物而成的复合材料的第一层 2111 作为空穴注入层。其厚度为 40nm,将 NPB 和氧化钼(VI)的重量比调节为 4:1(=NPB:氧化钼)。注意,共蒸镀法是在一个处理室内从多个蒸发源同时进行蒸镀的蒸镀法。

[0376] 接着,通过利用电阻加热的蒸镀法,在包含复合材料的第一层 2111 上以 20nm 的厚度形成 4-(9H-咔唑-9-基)苯基-4'-苯基三苯胺(简称:YGA1BP),且以形成第二层 2112 作为空穴传输层。

[0377] 再者,通过共蒸镀结构式(99)所示的 9-苯基-9'-[4-(5-苯基-1,3,4-噁二唑-2-基)苯基]-3,3'-联(9H-咔唑)(简称:PCC011)和双(2-苯基吡啶-N, $C^{2'}$)铱(III)乙酰丙酮(简称: $\text{Ir}(\text{ppy})_2\text{acac}$),在第二层 2112 上形成第三层 2113 作为发光层。在此,将

PCC011 和 $\text{Ir}(\text{ppy})_2\text{acac}$ 的重量比调节为 1 : 0.06 (= PCC011 : $\text{Ir}(\text{ppy})_2\text{acac}$)。此外,第三层 2113 的厚度为 40nm。

[0378] 然后,通过在第三层 2113 上依次蒸镀 10nm 的双(2-甲基-8-羟基喹啉)(4-苯基苯酚盐)合铝(简称:BAIq)和 20nm 的红菲绕啉(简称:BPhen)层叠,形成第四层 2114 作为电子传输层。再者,通过在第四层 2114 上蒸镀 10nm 的氟化锂(LiF),形成第五层 2115 作为电子注入层。最后,形成 200nm 的铝作为用作阴极的第二电极 2102,来形成本实施例的发光元件 5。

[0379] 另外,在上述蒸镀工序中,作为蒸镀都采用电阻加热法。

[0380] 在氮气氛的手套箱内,对通过上述工序获得的发光元件 5 进行密封工作,以使发光元件不暴露于大气,然后对这些发光元件的工作特性进行测量。注意,在室温(保持为 25℃的气氛)下进行测量。

[0381] 图 25A 示出发光元件 5 的电流密度-亮度特性。在图 25A 中,横轴示出电流密度(mA/cm^2),纵轴示出亮度(cd/m^2)。此外,图 25B 示出电压-亮度特性。在图 25B 中,横轴示出施加到发光元件的电压(V),纵轴示出亮度(cd/m^2)。此外,图 26A 示出亮度-电流效率特性。在图 26A 中,横轴示出亮度(cd/m^2),纵轴示出电流效率(cd/A)。

[0382] 当电压为 4.2V 时,发光元件 5 的发光颜色的 CIE 色度坐标为 ($x = 0.35$, $y = 0.62$),电流效率为 62.9 cd/A 。此时的外部量子效率为 17.6%。

[0383] 另外,图 26B 示出流过 0.1mA 的电流时的发射光谱。在图 26B 中,横轴示出波长(nm),纵轴示出强度(任意单位)。如图 26B 所示,从所制造的发光元件 5 观测来源于 $\text{Ir}(\text{ppy})_2\text{acac}$ 的绿色的发光。

[0384] 如上述结果所示,通过将本发明的一个方式的具有杂芳环的咔唑衍生物用作发光层的主体材料,可以以低电压且高效率制造可获得鲜明的绿色的发光的元件。

[0385] 本说明书根据 2009 年 3 月 20 日在日本专利局受理的日本专利申请编号 2009-069177 而制作,所述申请内容包括在本说明书中。

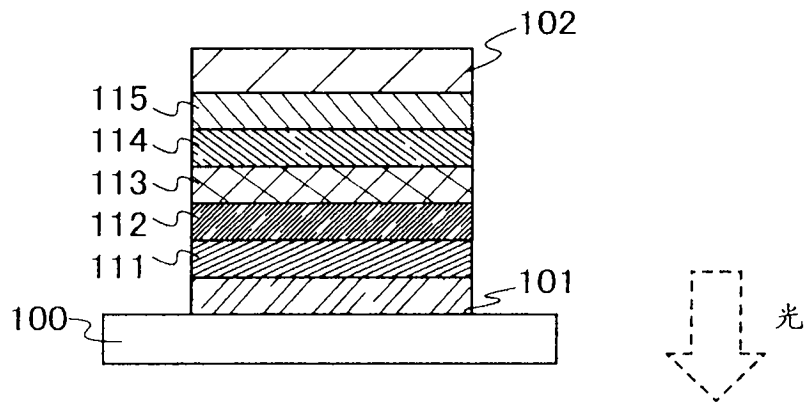


图 1A

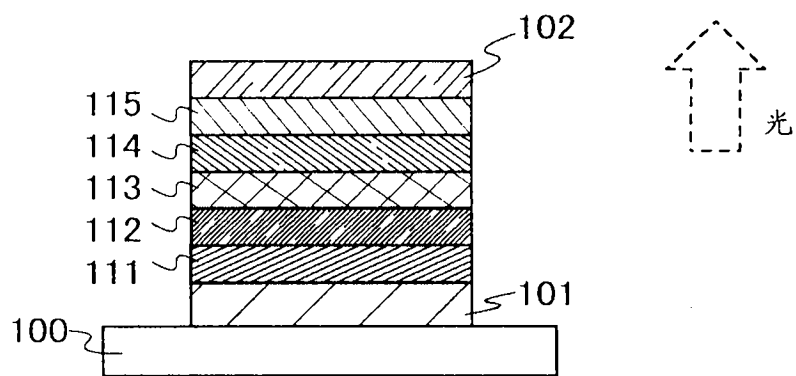


图 1B

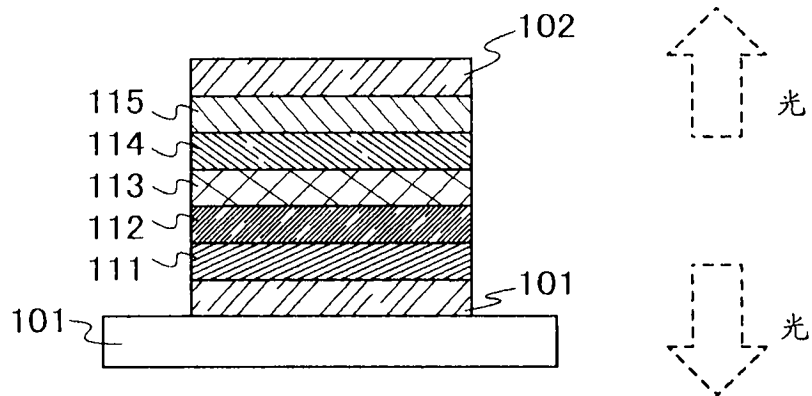


图 1C

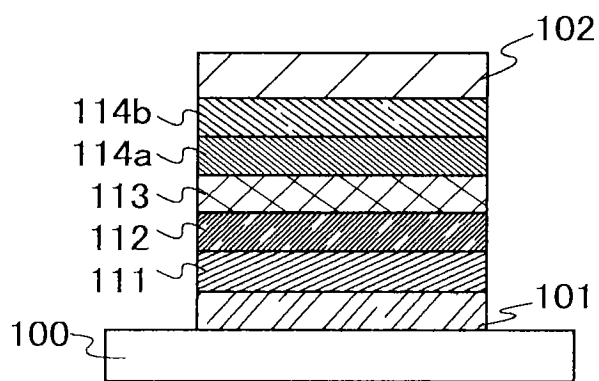


图 2A

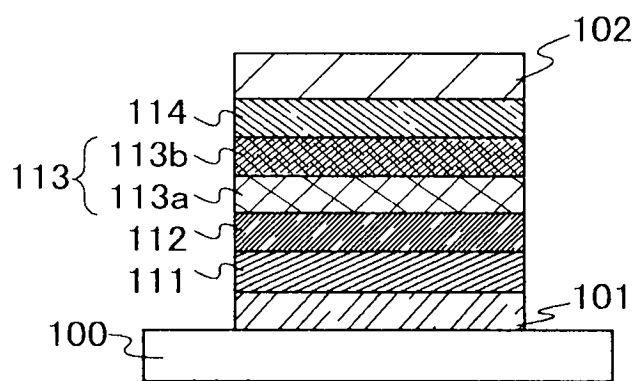


图 2B

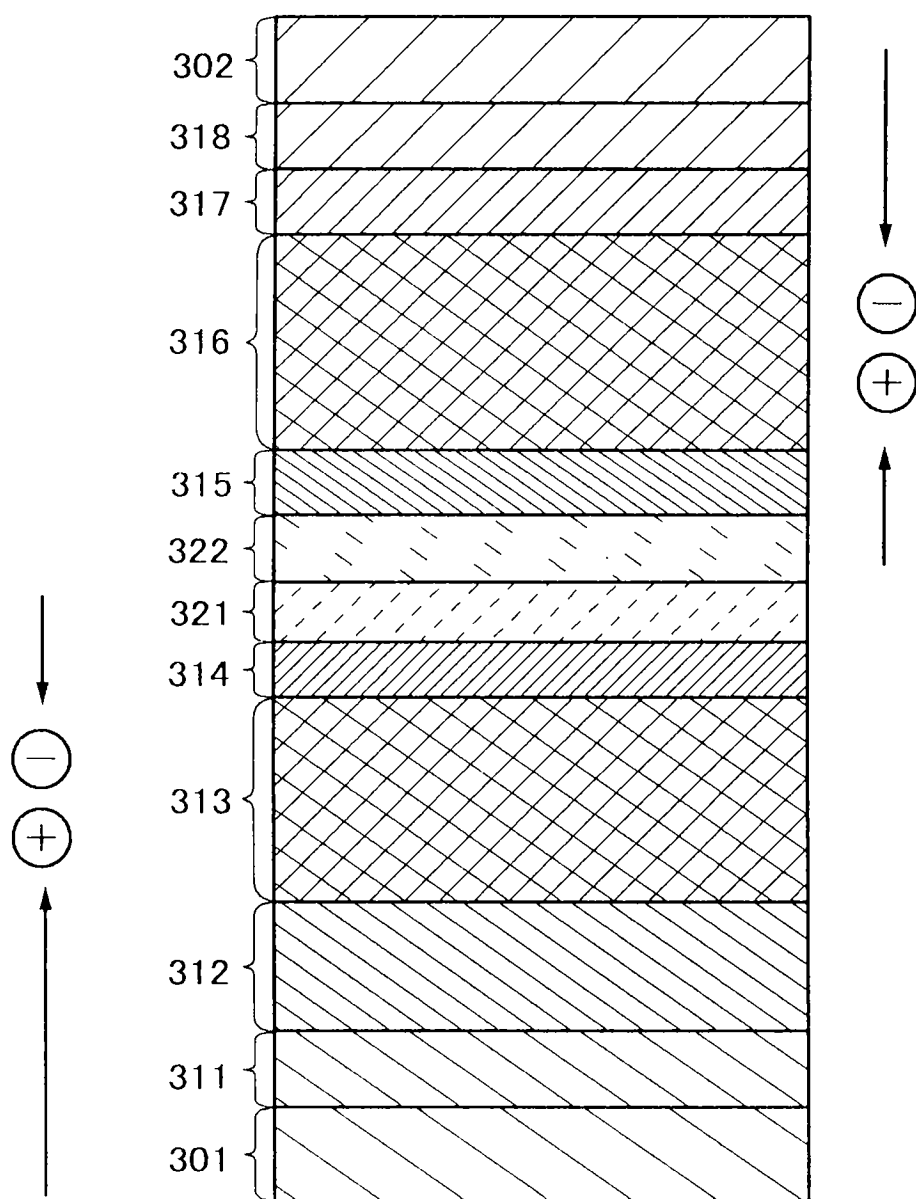


图 3

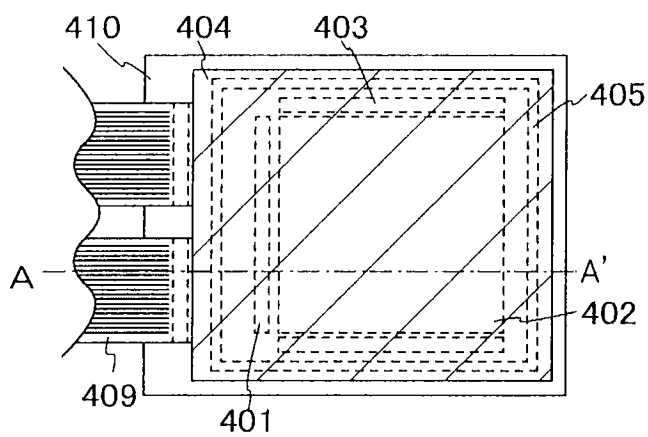


图 4A

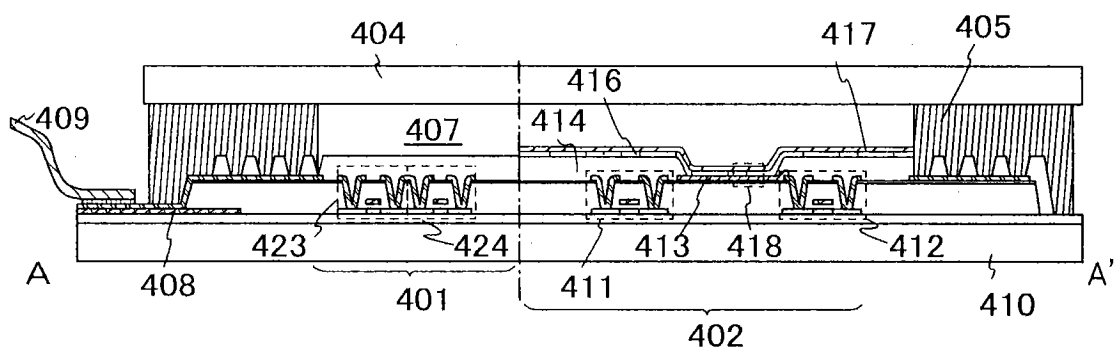


图 4B

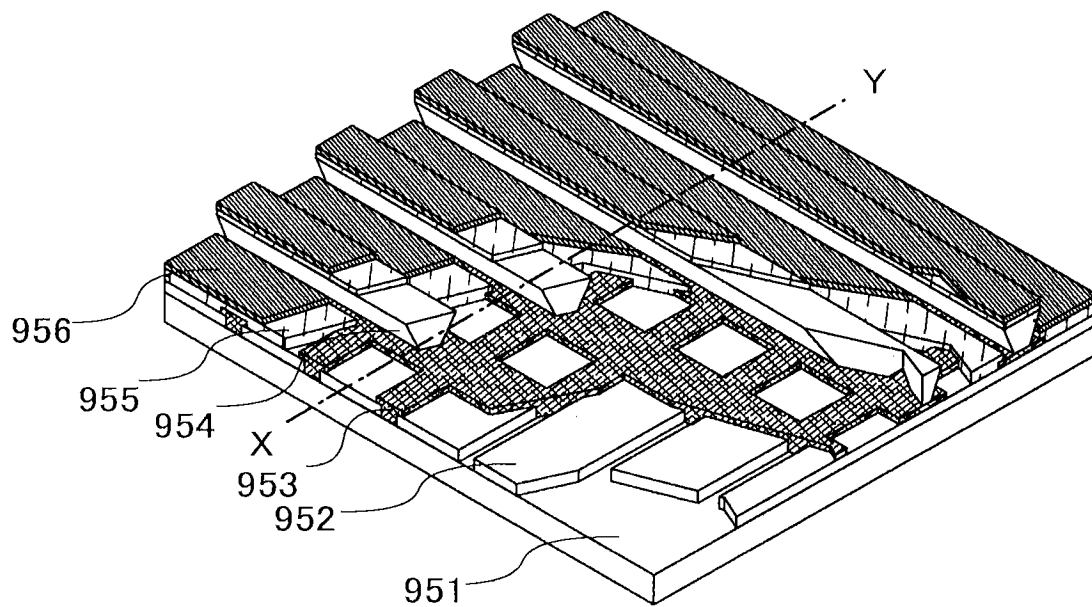


图 5A

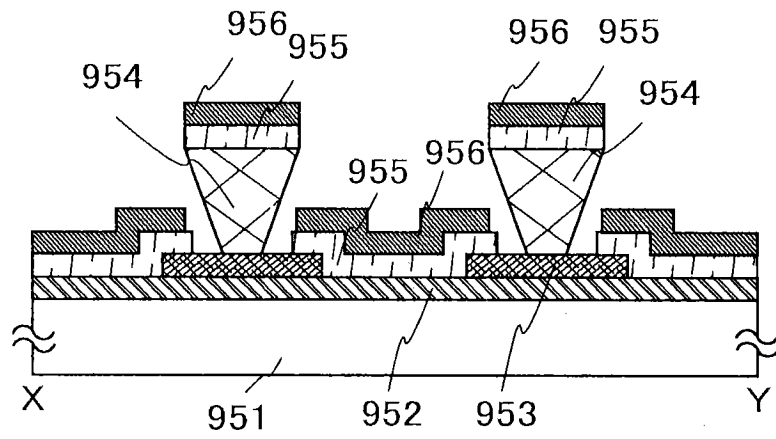


图 5B

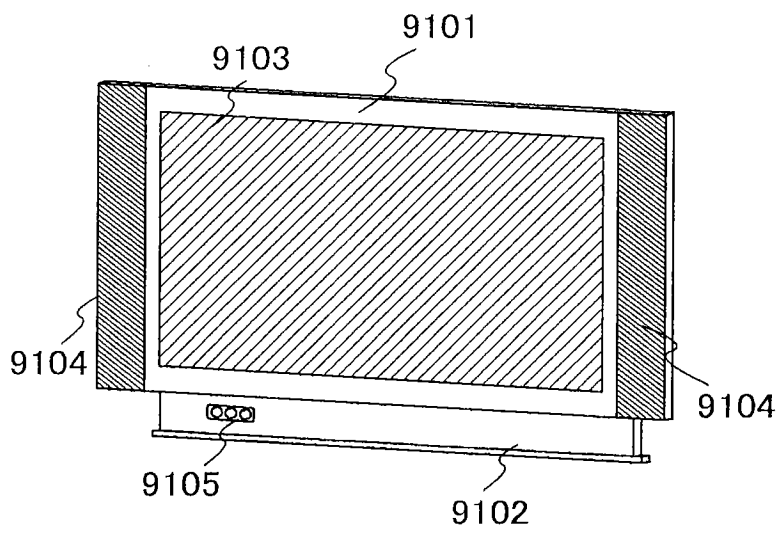


图 6A

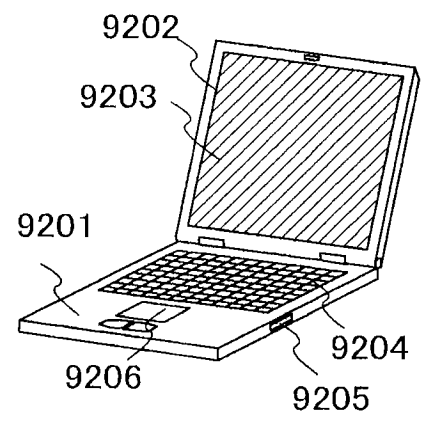


图 6B

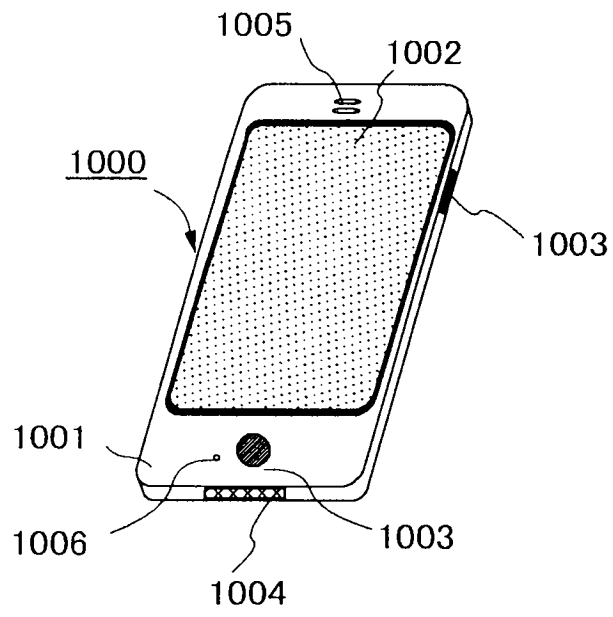


图 6C

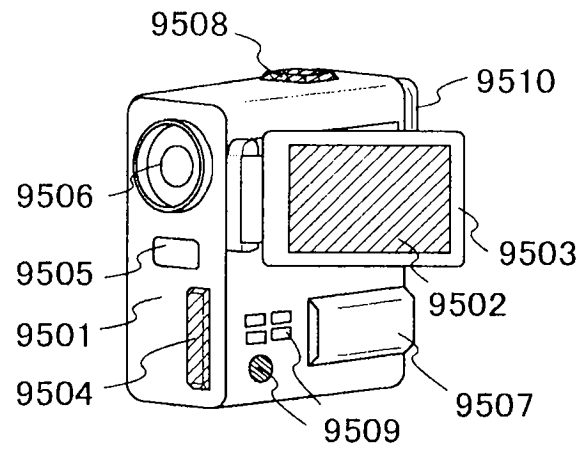


图 6D

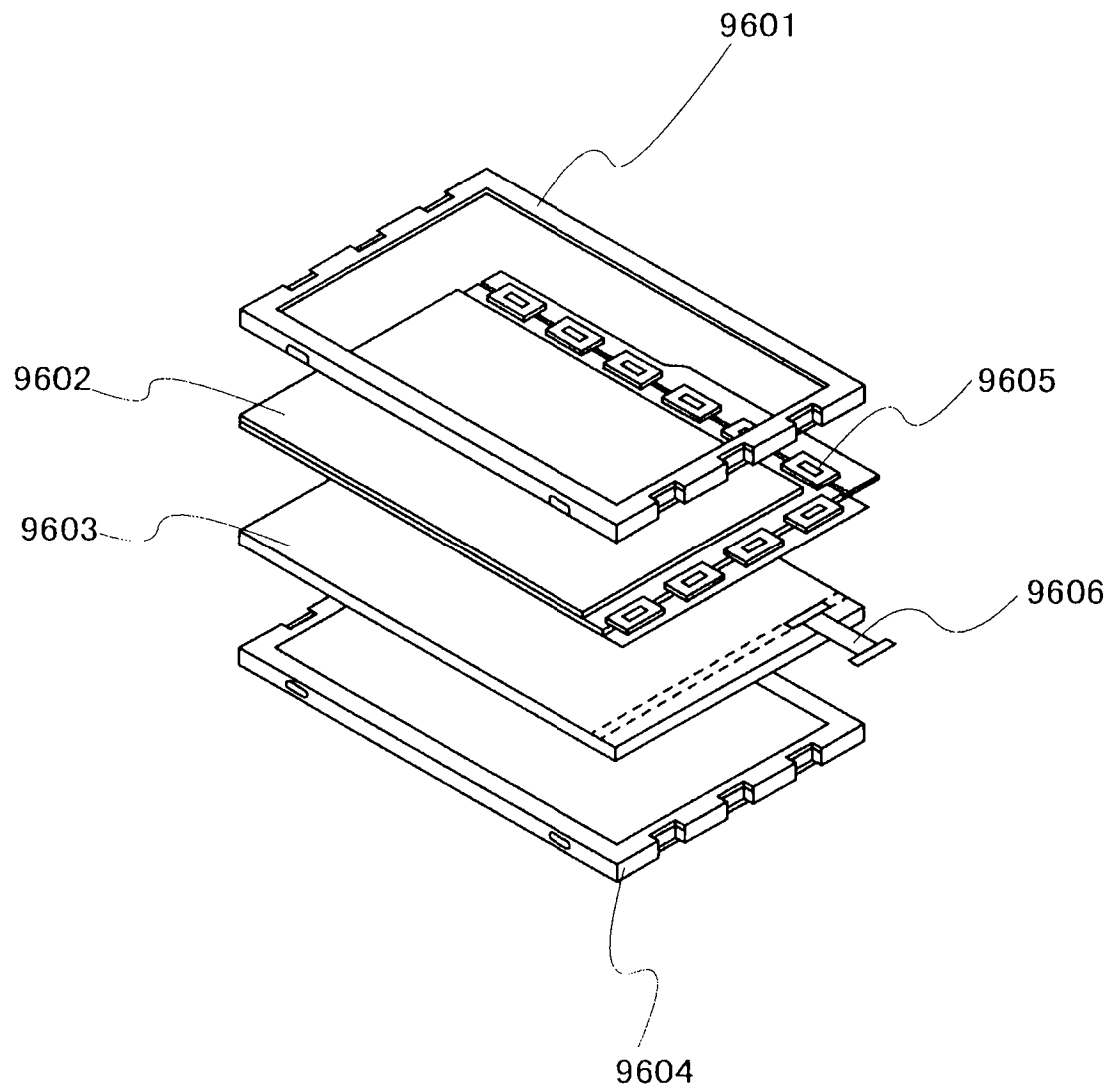


图 7

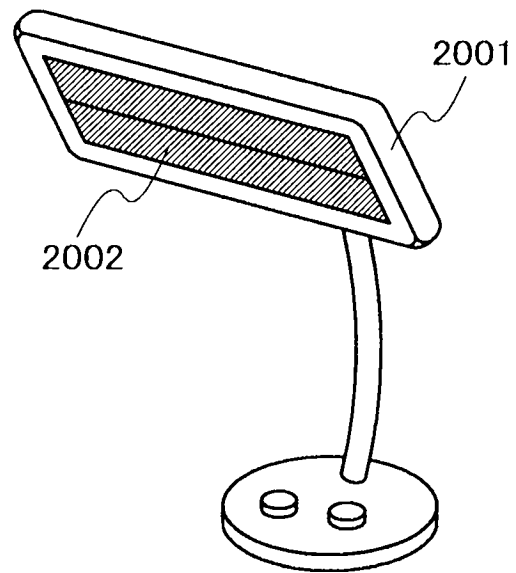


图 8

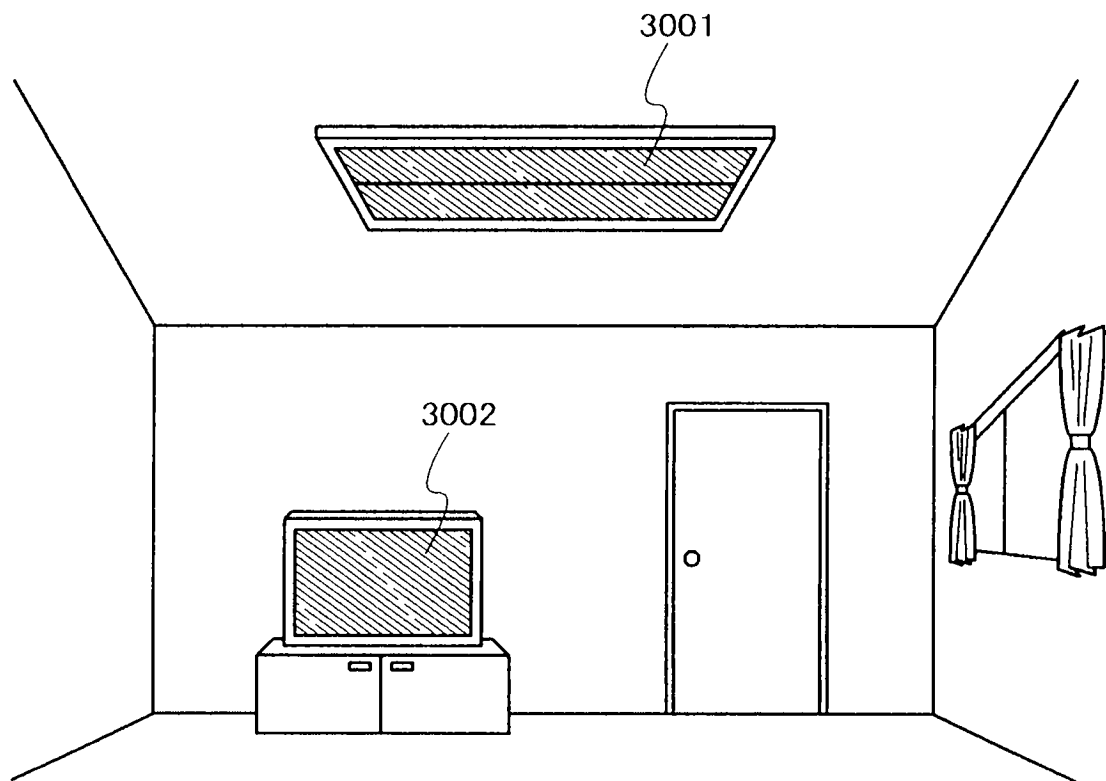


图 9

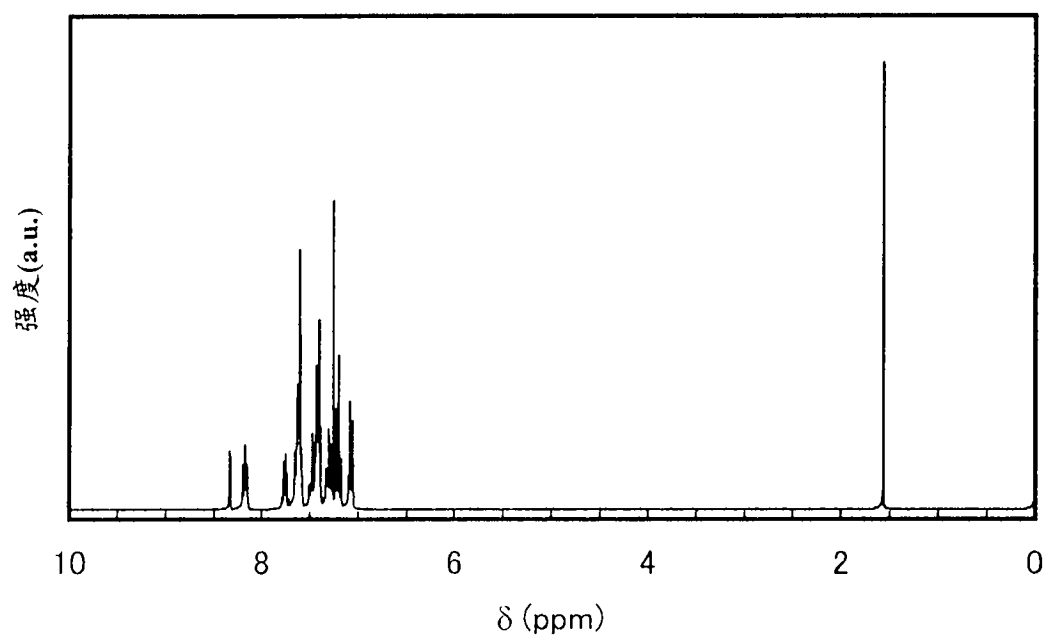


图 10A

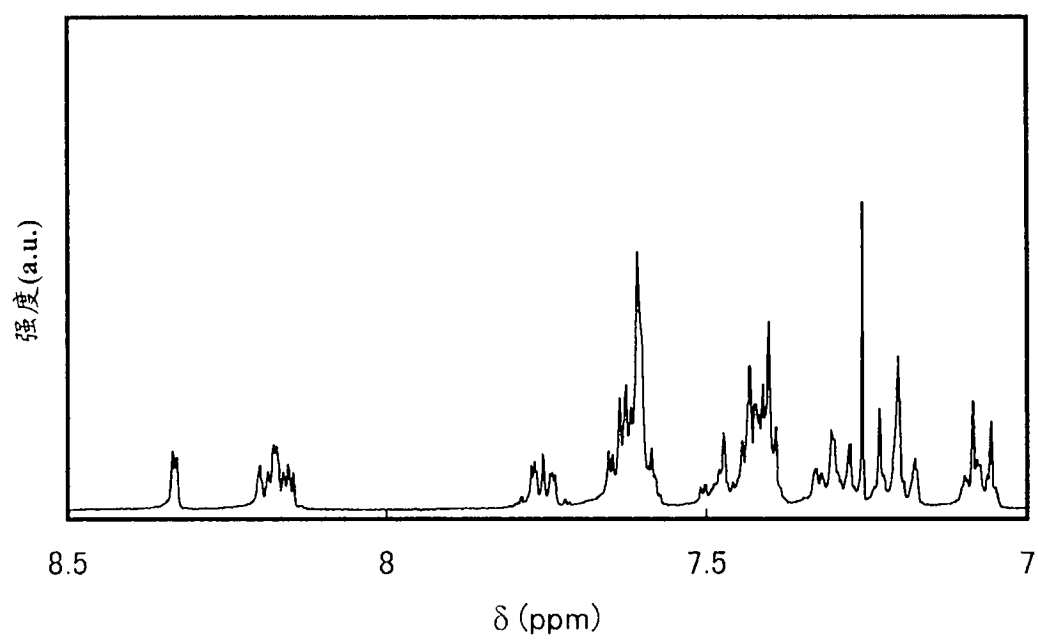


图 10B

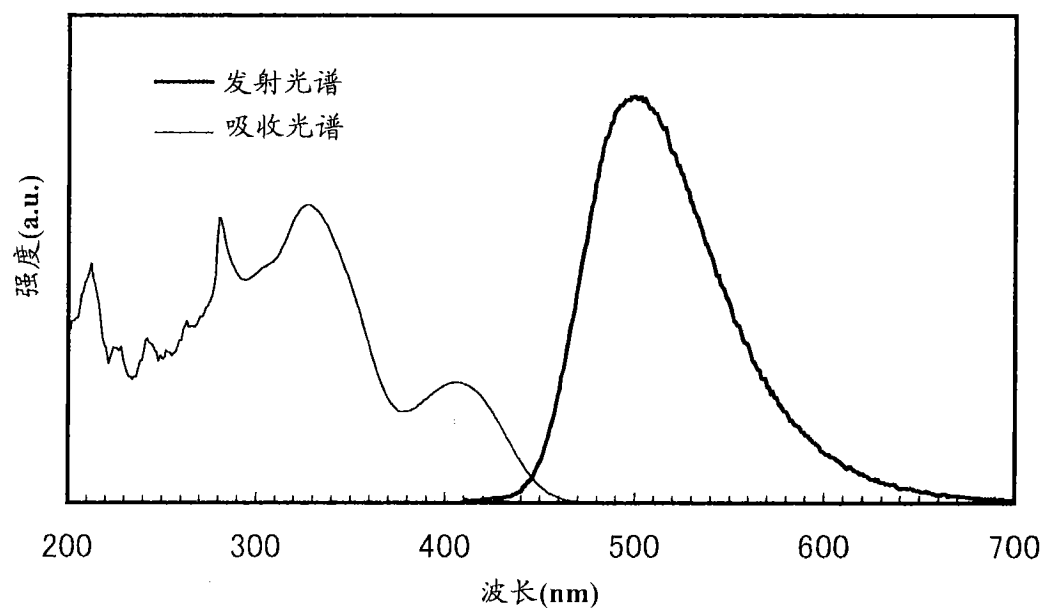


图 11A

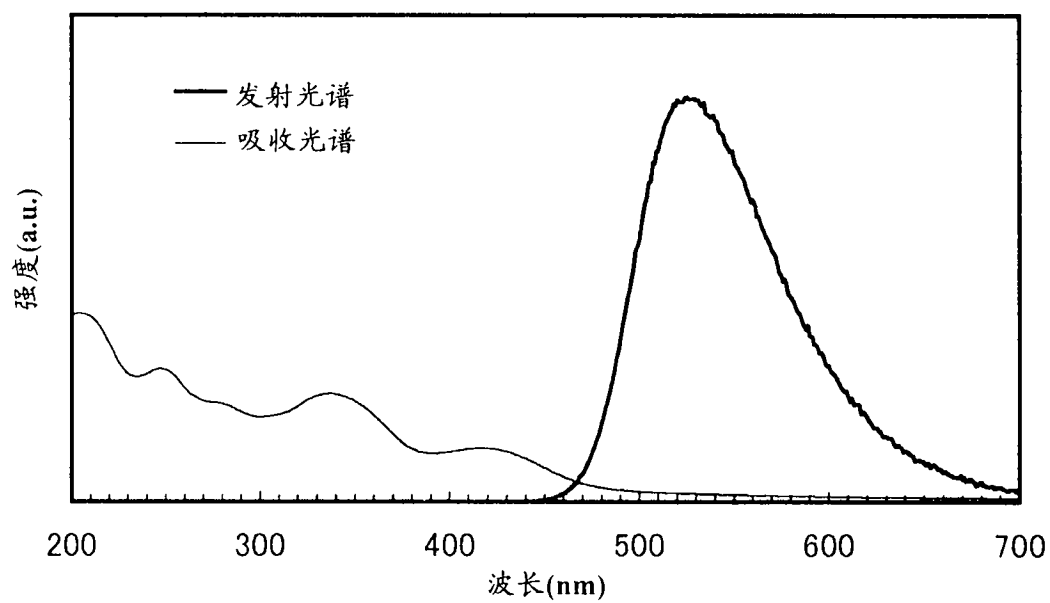


图 11B

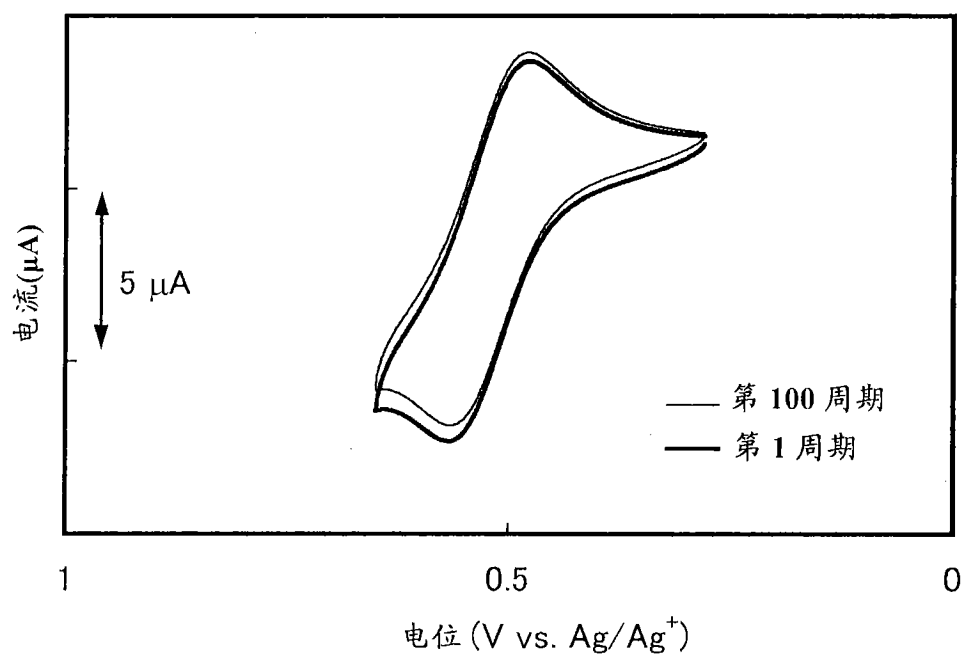


图 12A

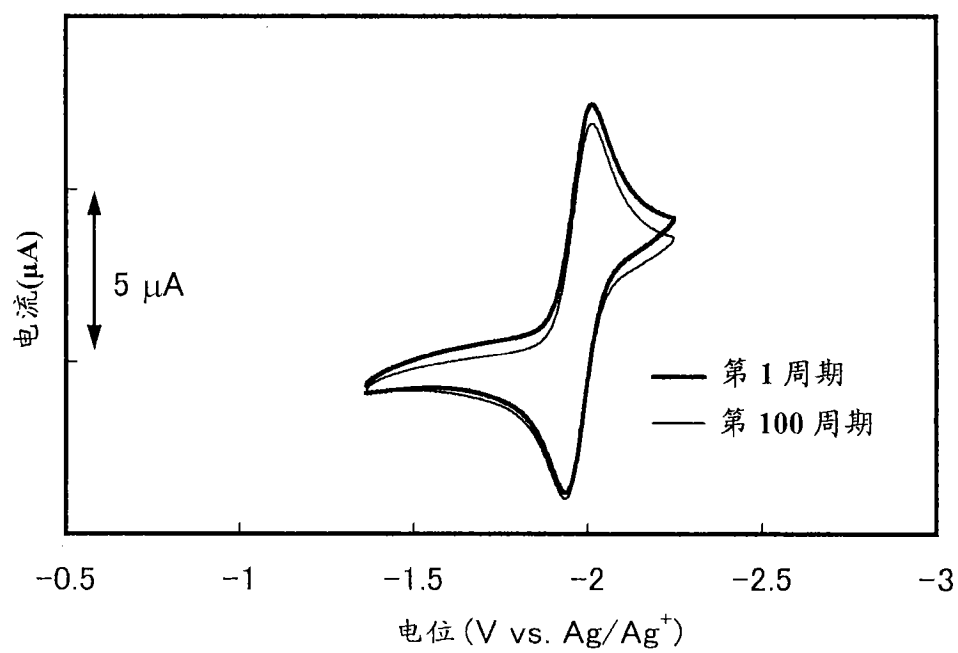


图 12B

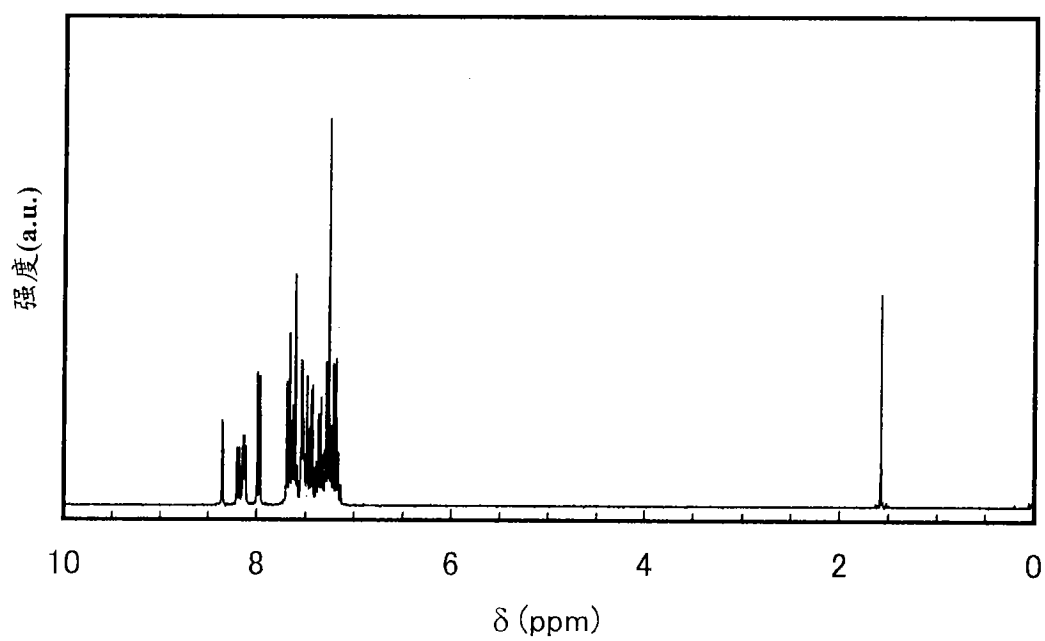


图 13A

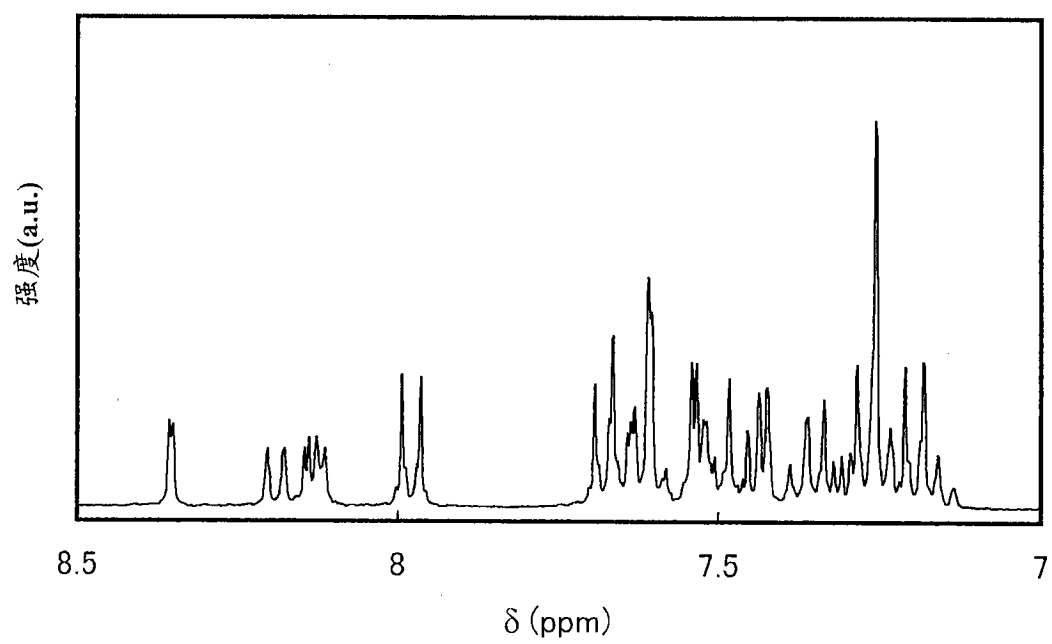


图 13B

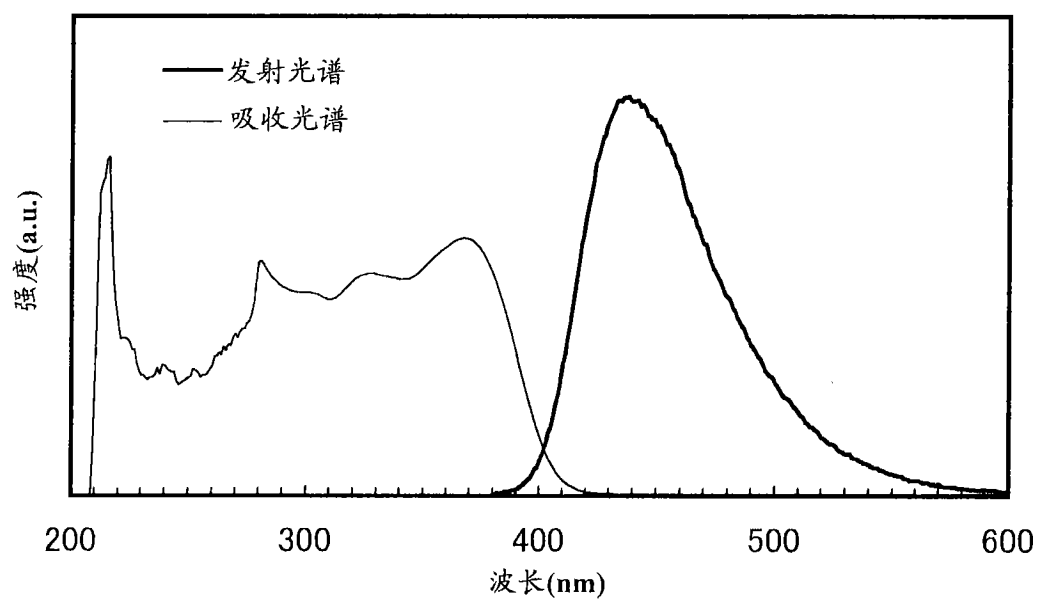


图 14A

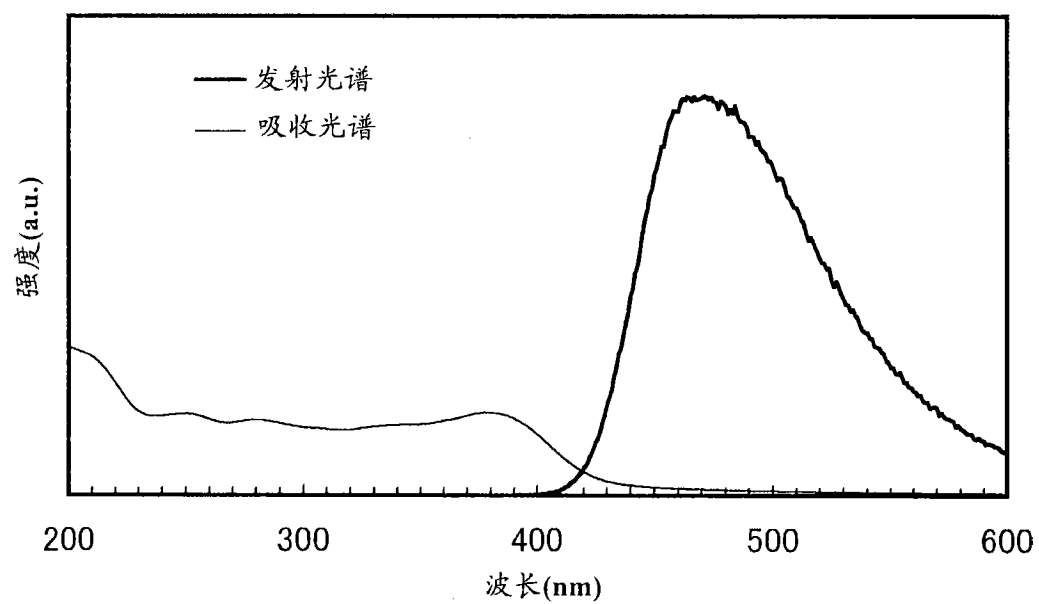


图 14B

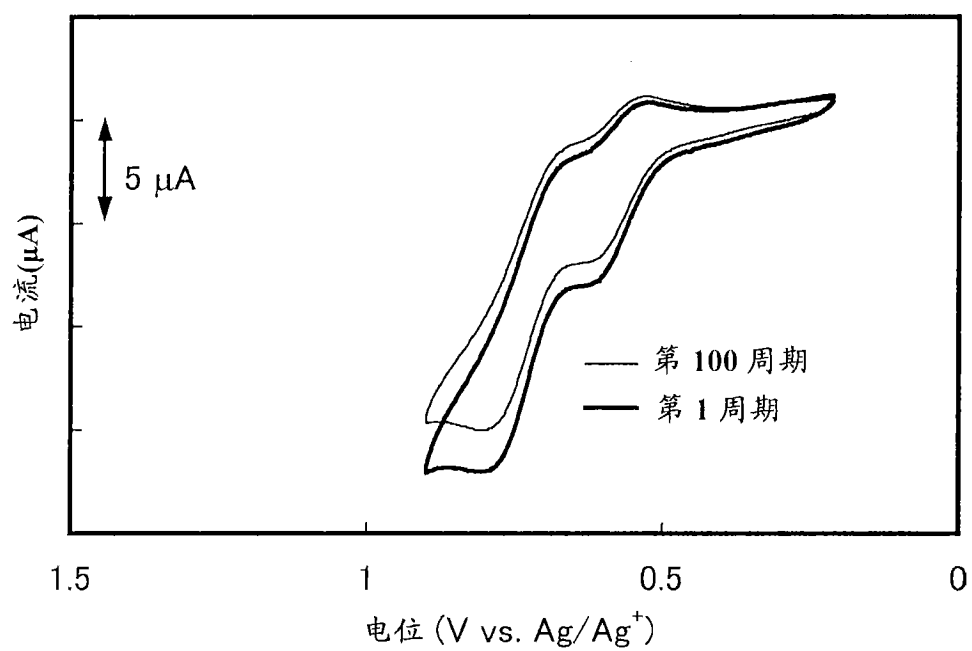


图 15A

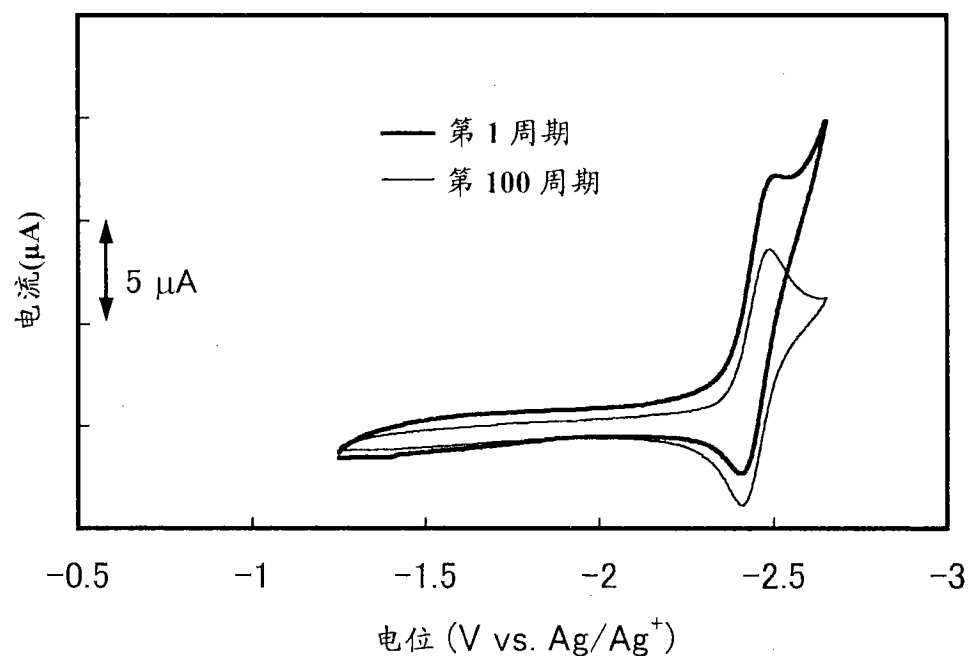


图 15B

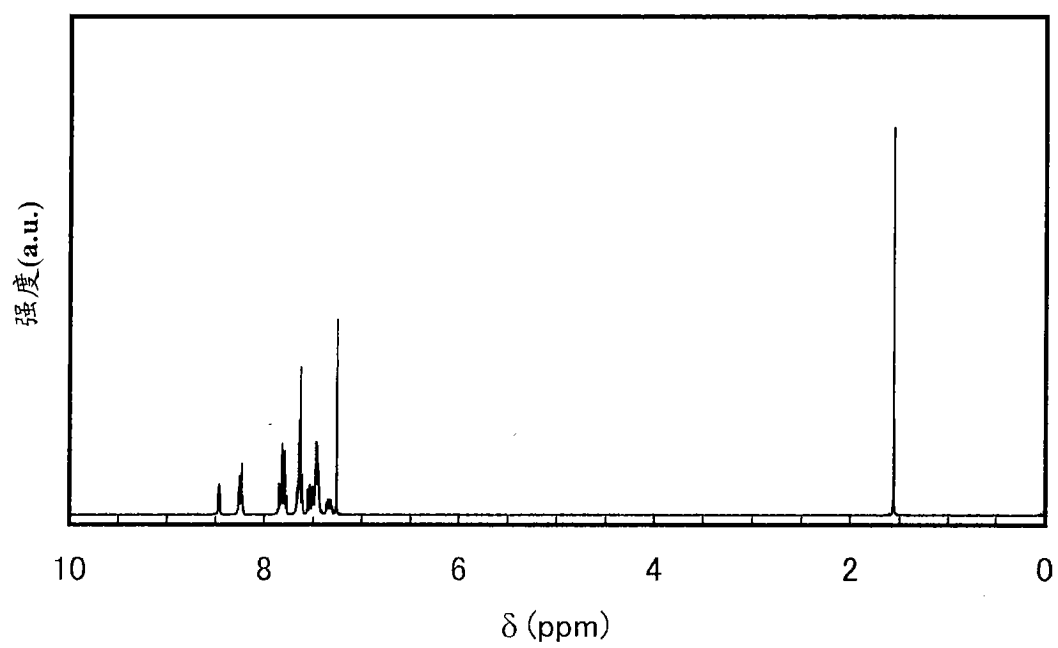


图 16A

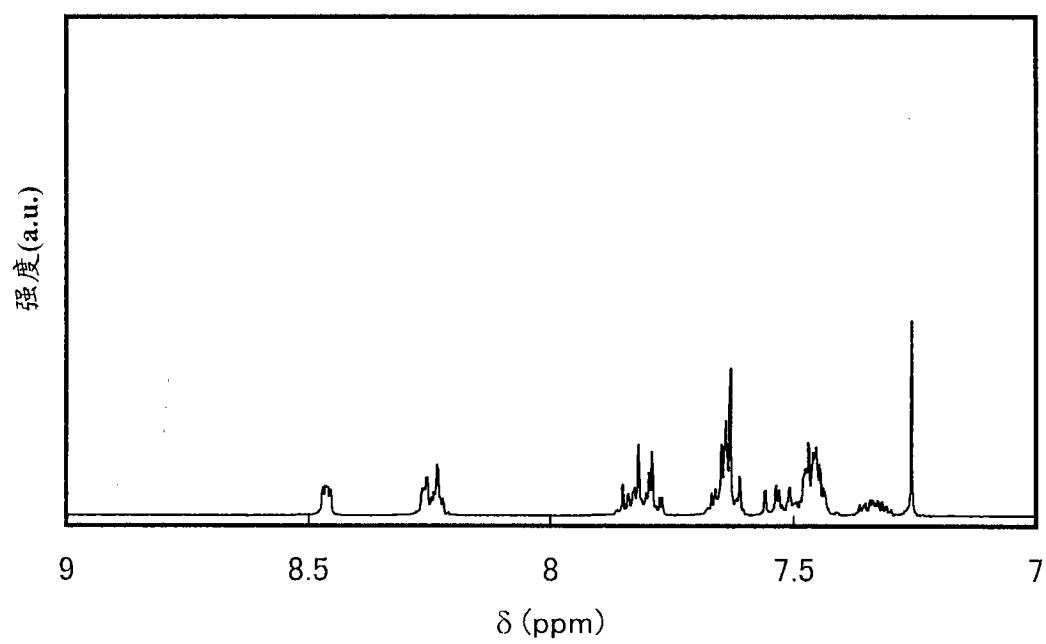


图 16B

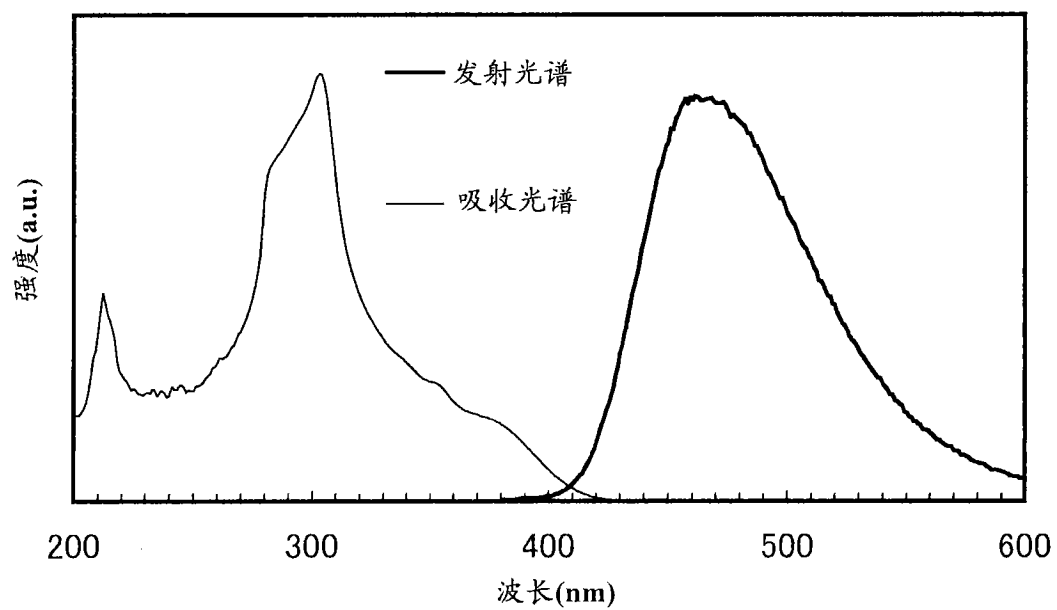


图 17A

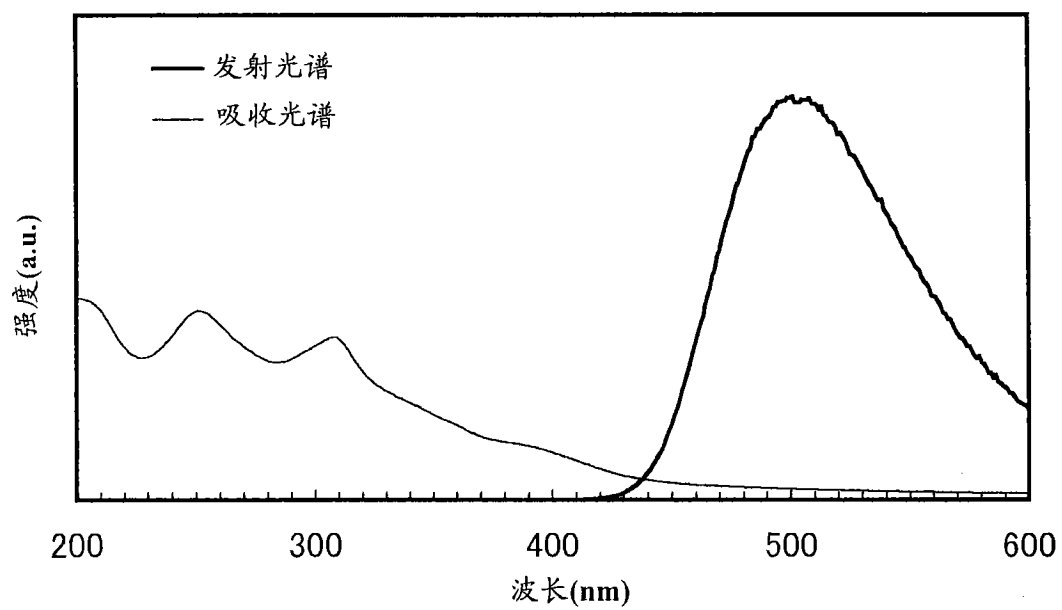


图 17B

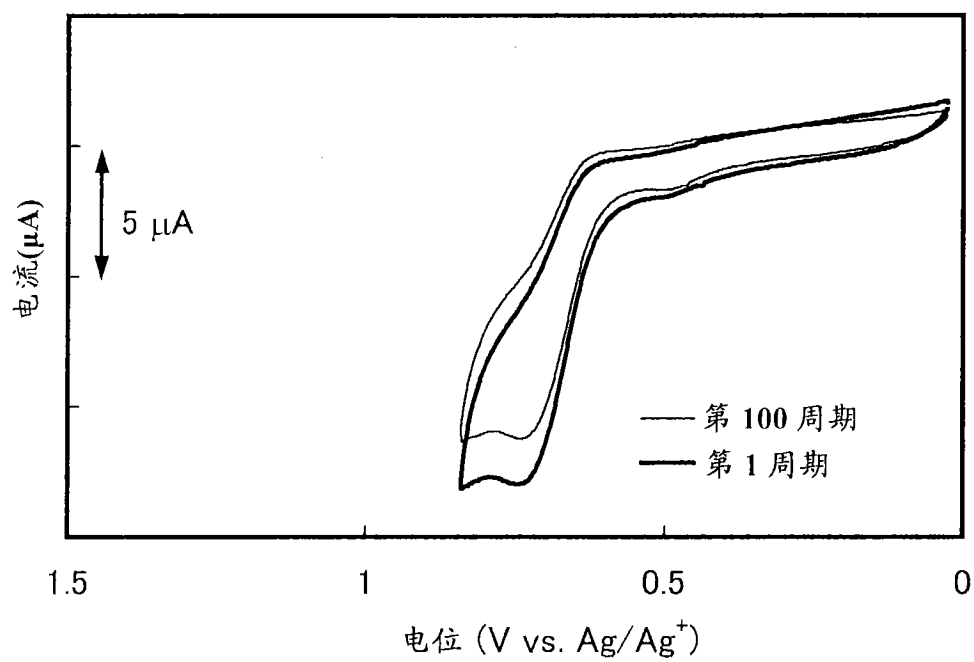


图 18A

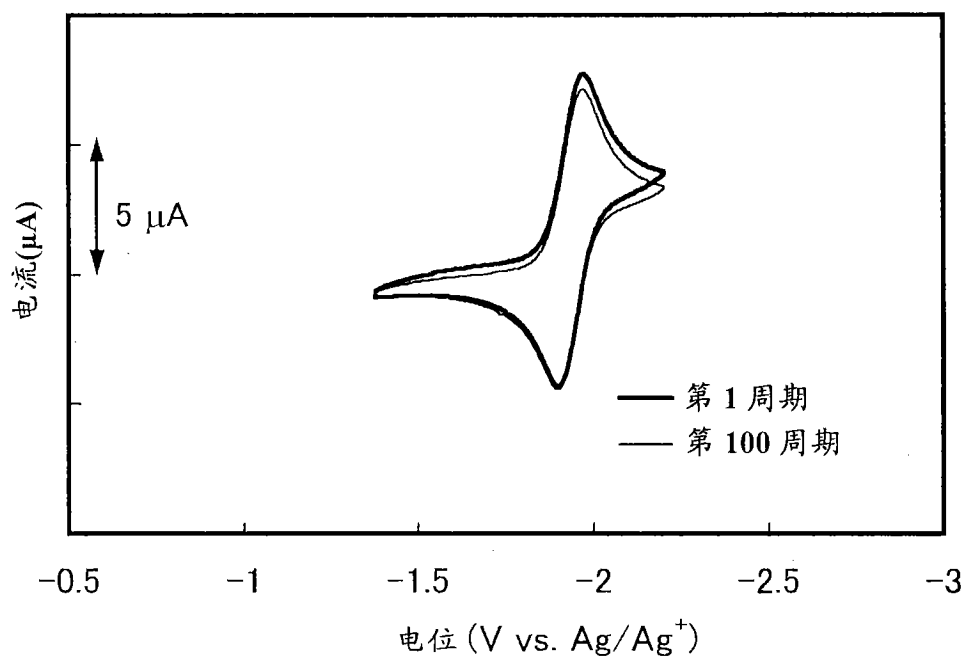


图 18B

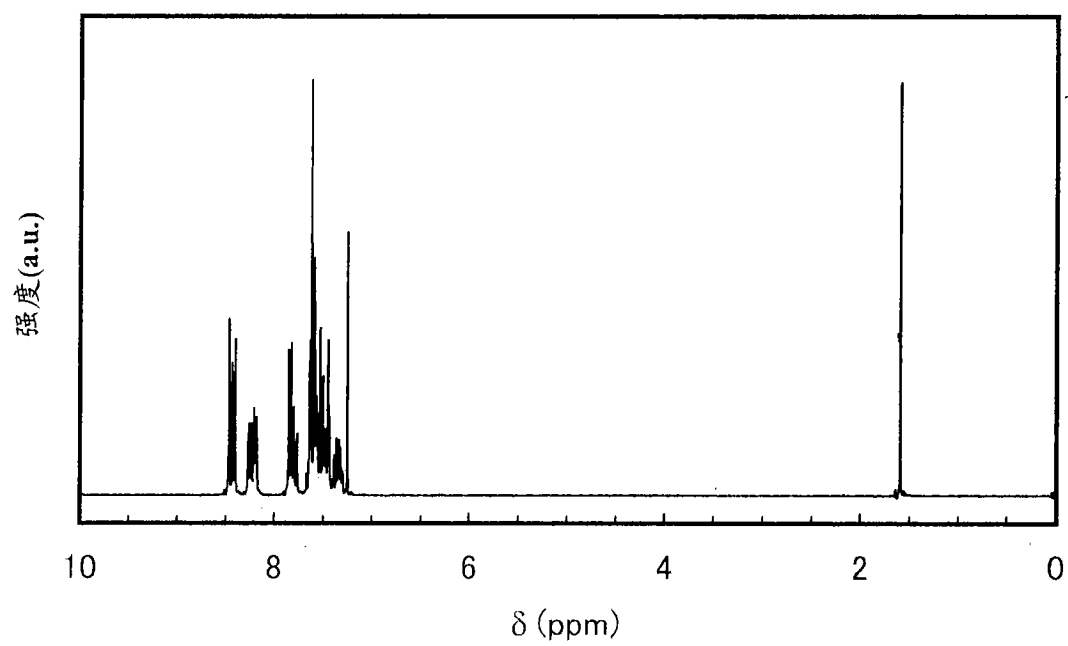


图 19A

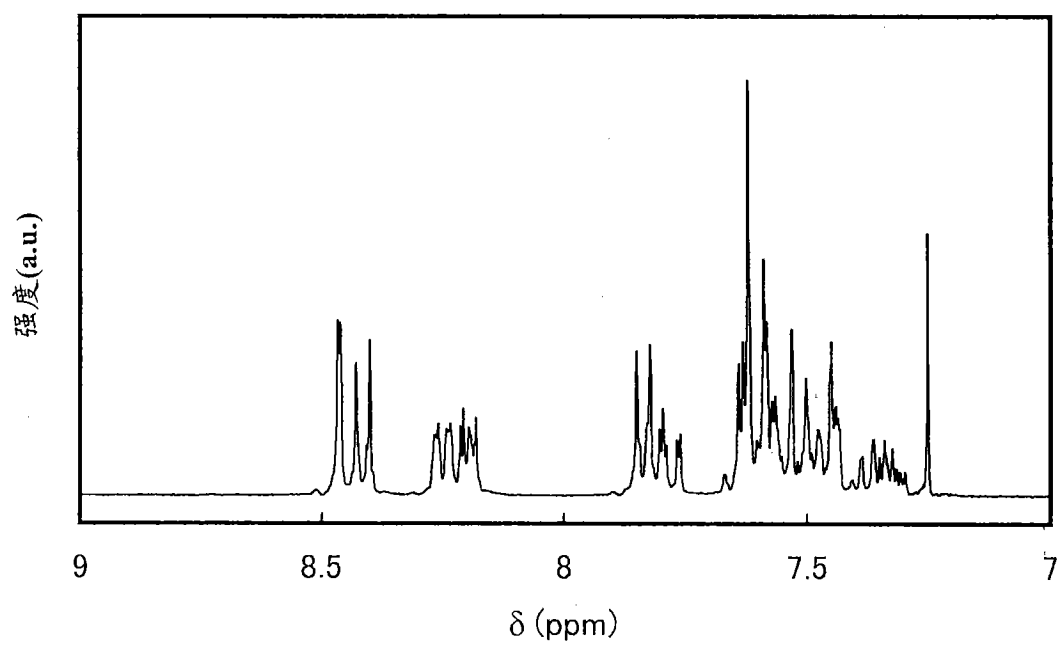


图 19B

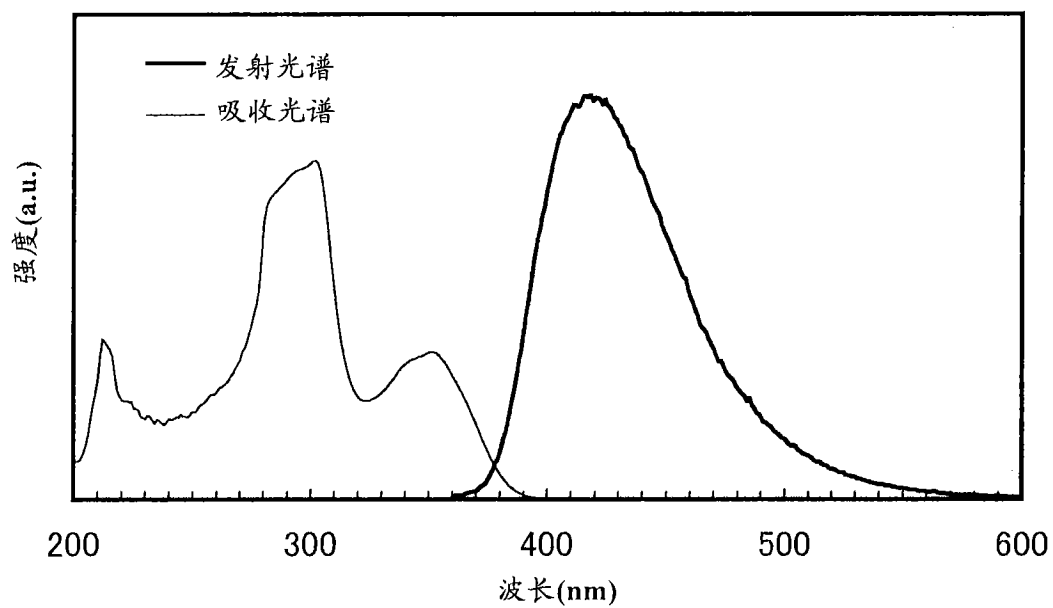


图 20A

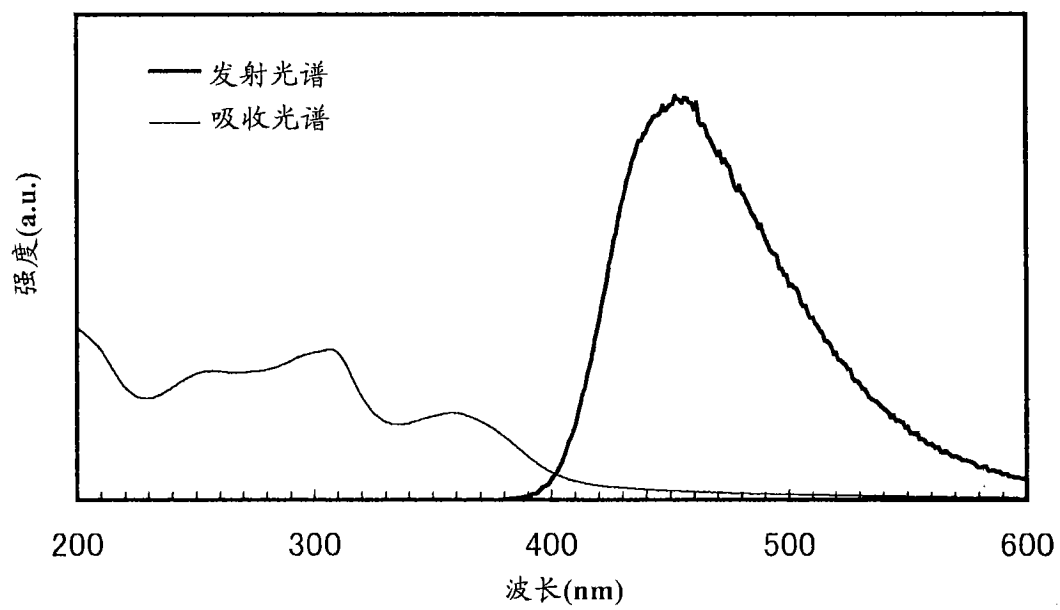


图 20B

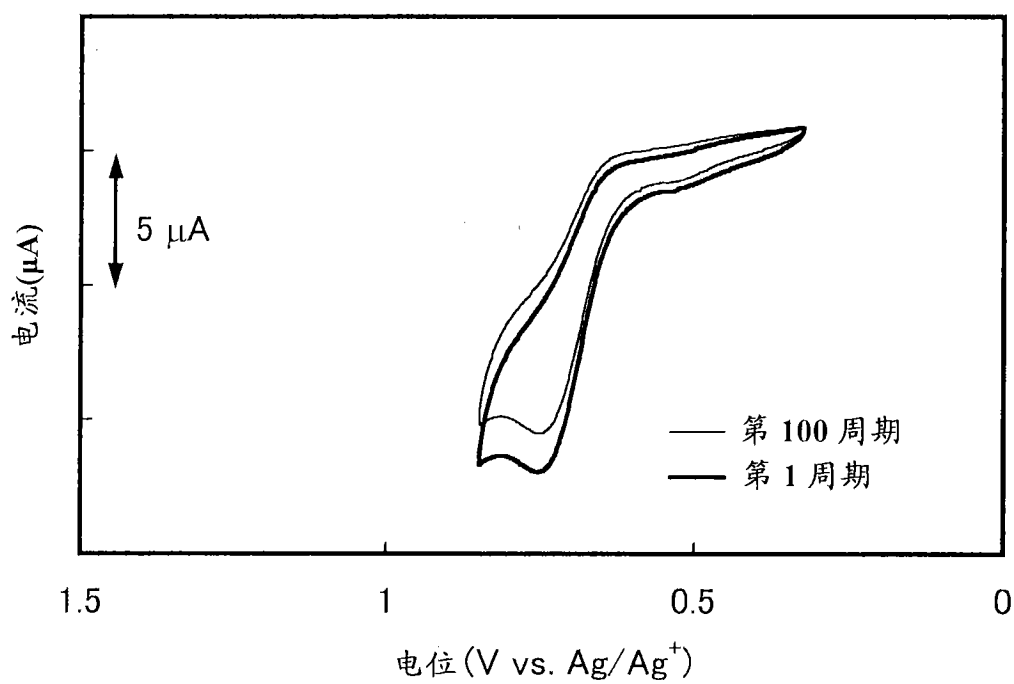


图 21A

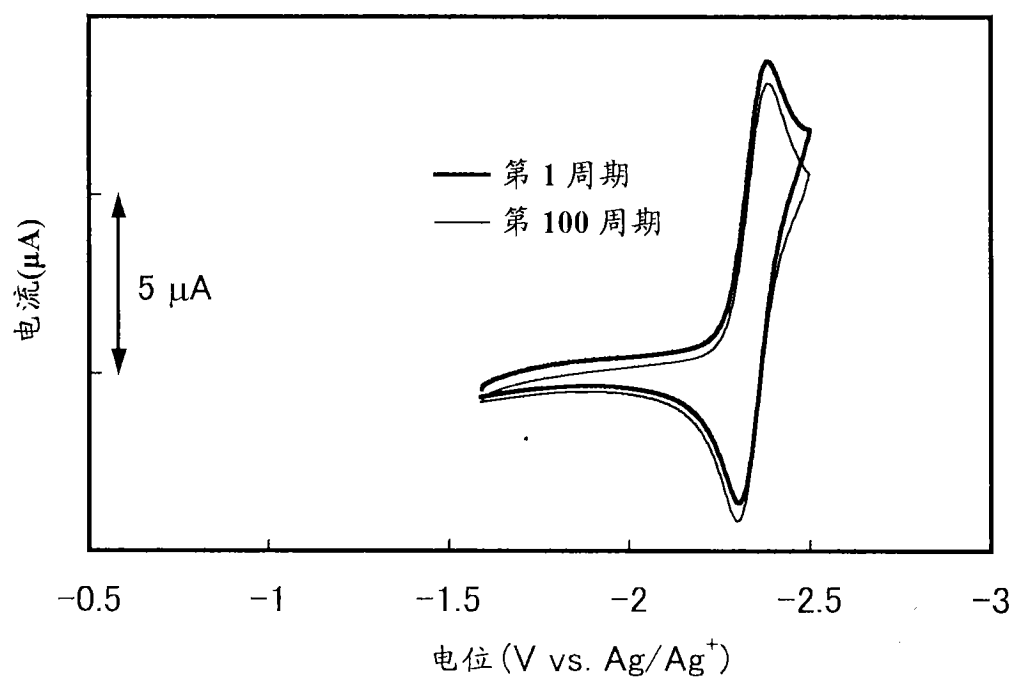


图 21B

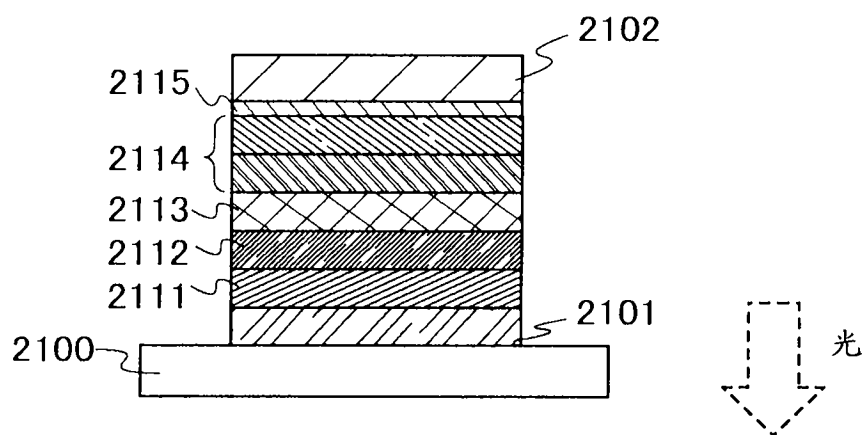


图 22

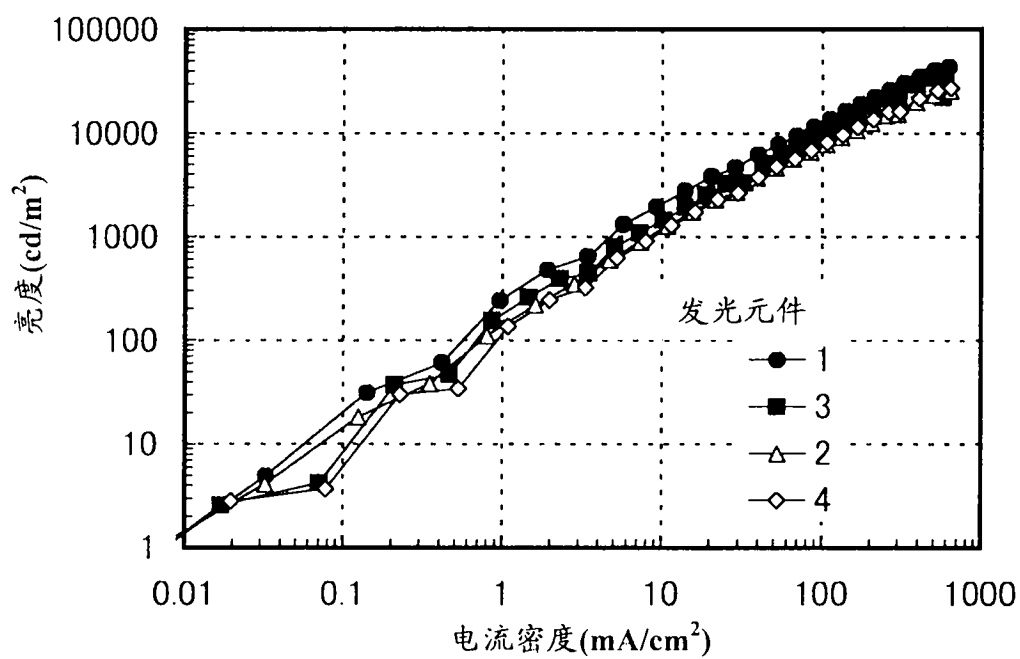


图 23A

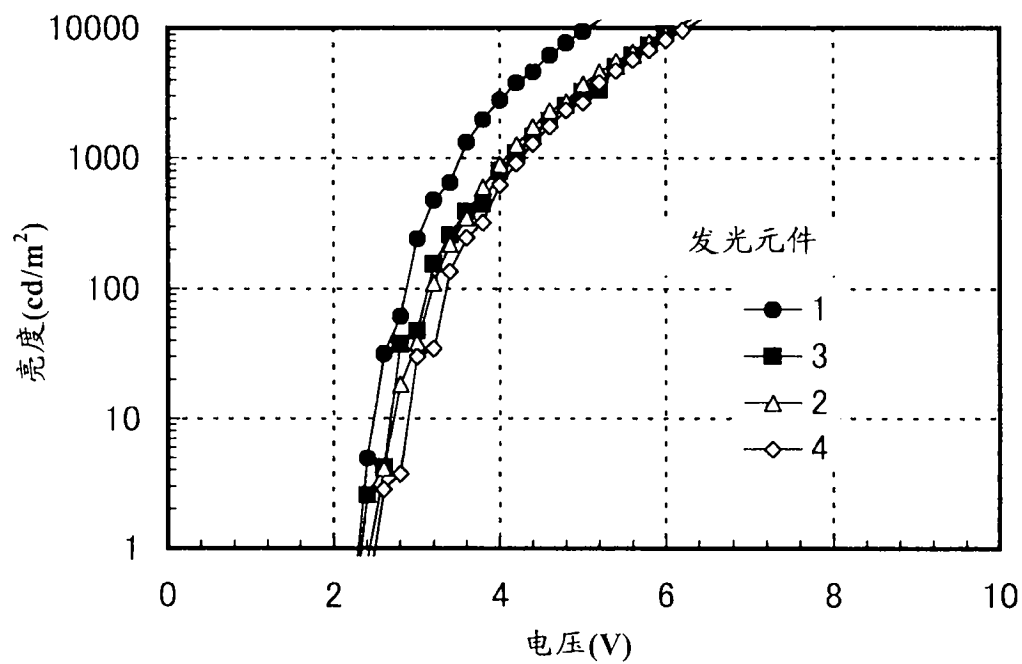


图 23B

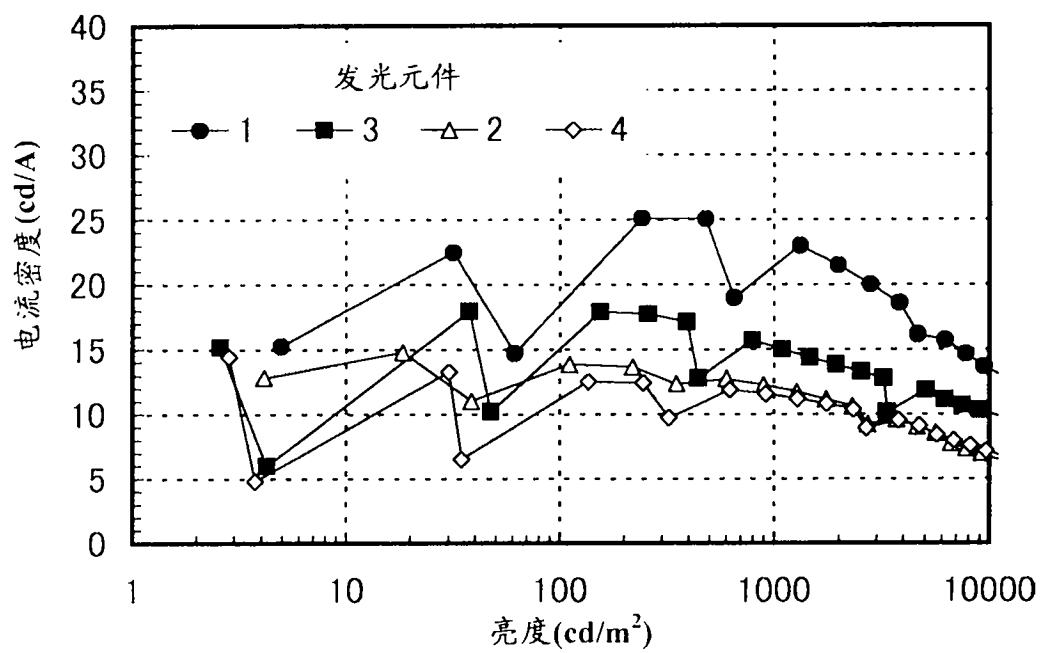


图 24A

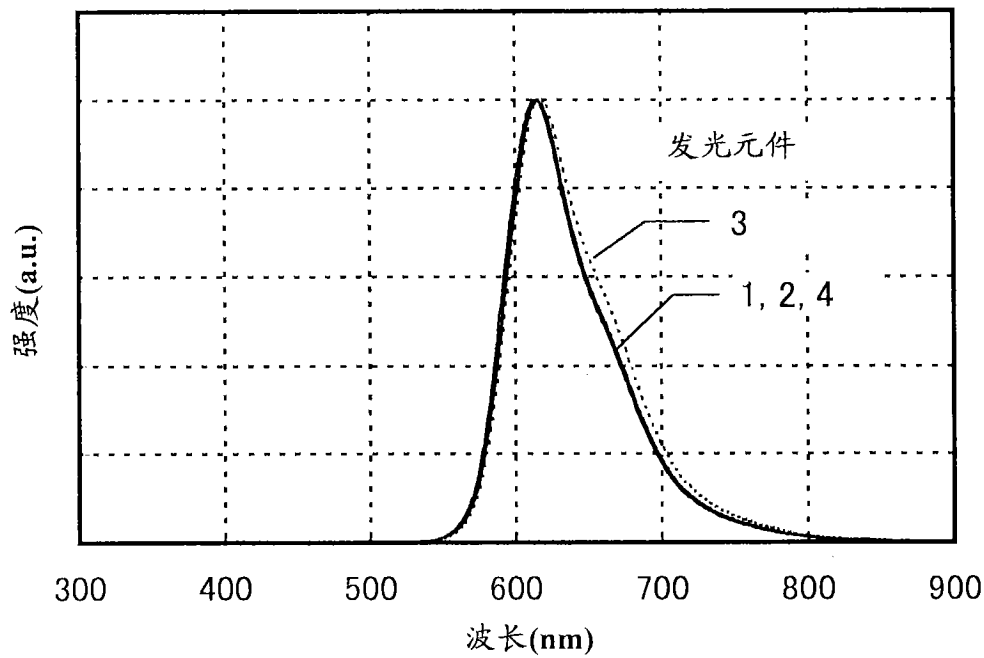


图 24B

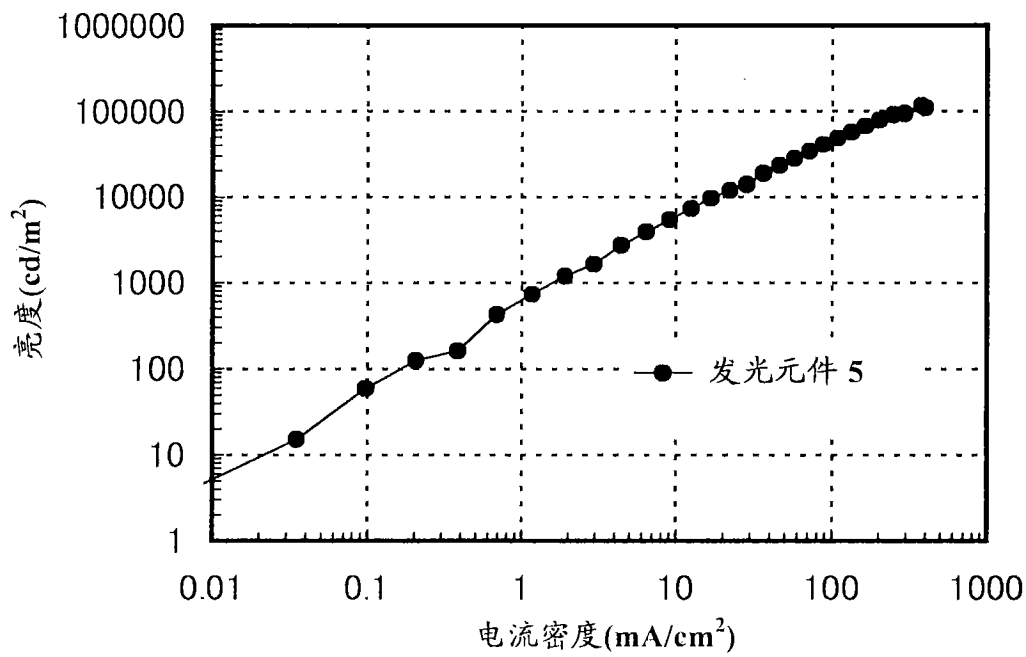


图 25A

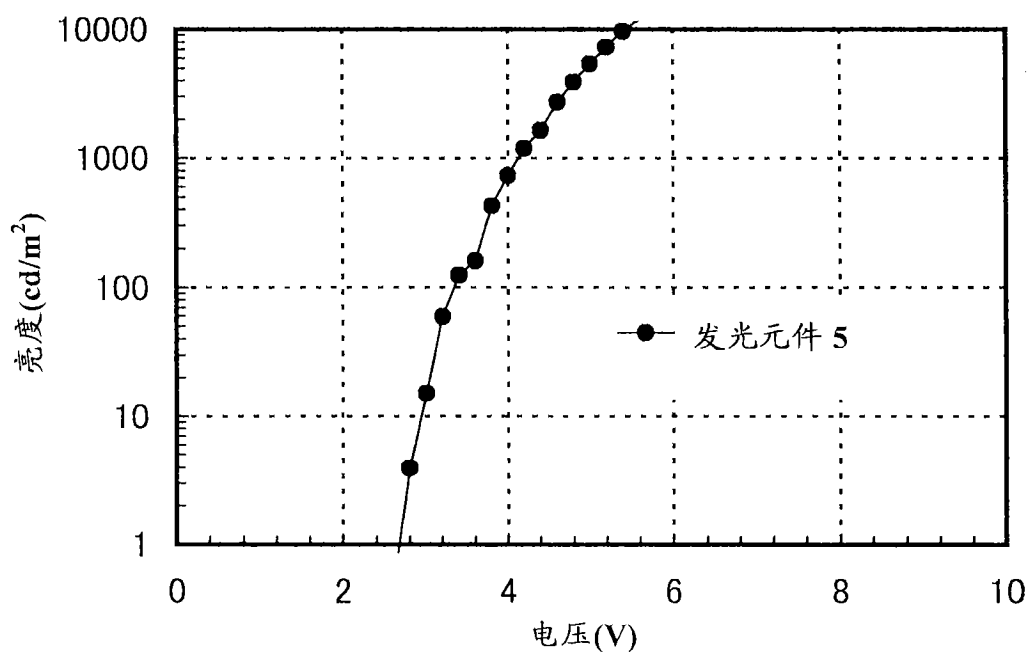


图 25B

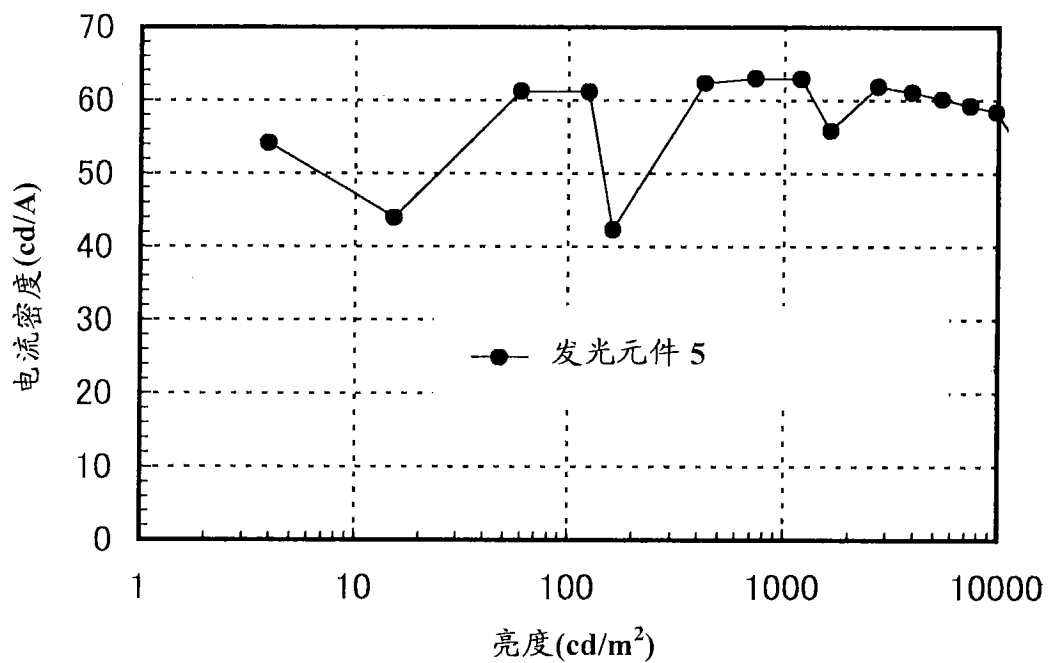


图 26A

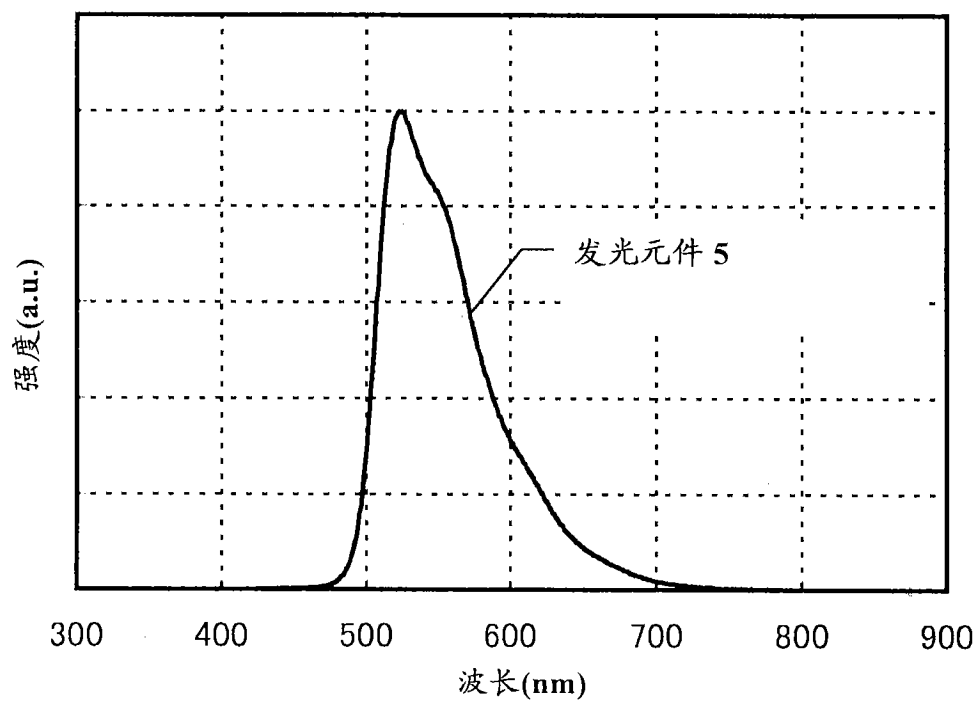
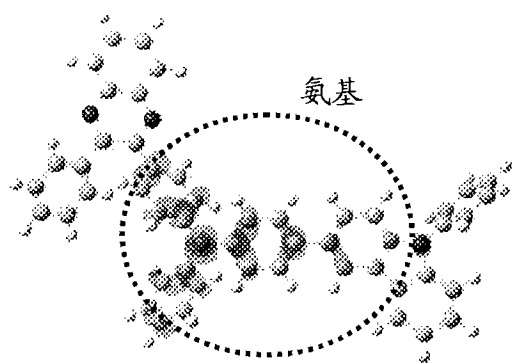
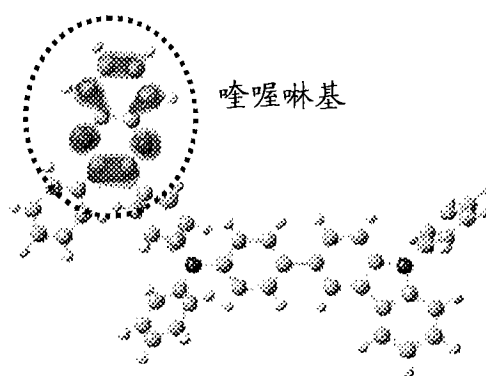


图 26B



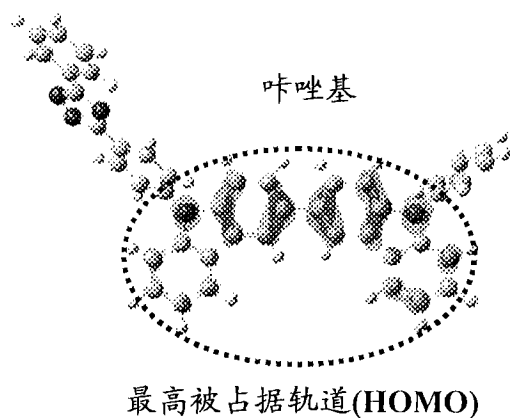
最高被占据轨道(HOMO)

图 27A



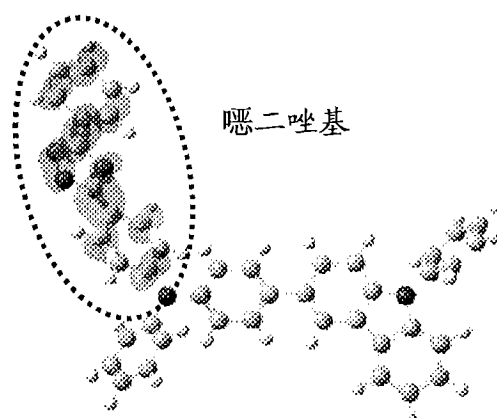
最低空轨道(LUMO)

图 27B



最高被占据轨道(HOMO)

图 28A



最低空轨道(LUMO)

图 28B