



(12)发明专利

(10)授权公告号 CN 107787314 B

(45)授权公告日 2020.06.02

(21)申请号 201680034231.1

(22)申请日 2016.05.18

(65)同一申请的已公布的文献号
申请公布号 CN 107787314 A

(43)申请公布日 2018.03.09

(30)优先权数据
10-2015-0083505 2015.06.12 KR

(85)PCT国际申请进入国家阶段日
2017.12.12

(86)PCT国际申请的申请数据
PCT/KR2016/005275 2016.05.18

(87)PCT国际申请的公布数据
W02016/200070 KO 2016.12.15

(73)专利权人 德山新勒克斯有限公司
地址 韩国忠清南道

(72)发明人 苏己镐 金大成 李允硕 吴大焕
朴亨根 崔莲姬 李揆愔

(74)专利代理机构 北京英赛嘉华知识产权代理
有限责任公司 11204

代理人 王达佐 洪欣

(51)Int.Cl.
C07C 211/61(2006.01)
C07D 209/80(2006.01)
C07D 209/88(2006.01)
C07D 307/91(2006.01)
C07D 333/76(2006.01)
C07D 405/12(2006.01)
C07D 409/04(2006.01)
C07D 409/12(2006.01)
C07D 409/14(2006.01)
C09K 11/06(2006.01)
H01L 51/00(2006.01)
H01L 51/50(2006.01)
H01L 51/54(2006.01)

(56)对比文件
WO 2011055932 A2,2011.05.12,

审查员 张艳青

权利要求书11页 说明书55页 附图1页

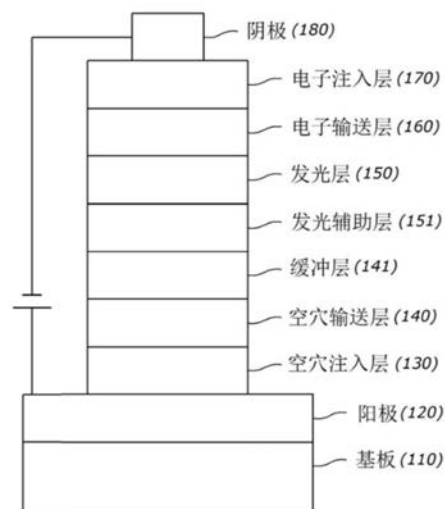
(54)发明名称

有机电气元件用化合物、利用其的有机电气
元件及其电子装置

(57)摘要

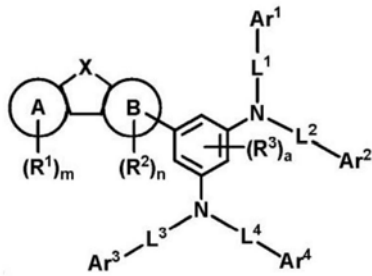
本发明提供由化学式1表示的化合物。并且，
提供包括第一电极、第二电极及上述第一电极和
第二电极之间的有机物层的有机电气元件，上述
有机物层包含由化学式1表示的化合物。若在有机
电气元件的有机物层包含由化学式1表示的化合
物，能够降低驱动电压，提高发光效率、色纯度
及寿命。

100

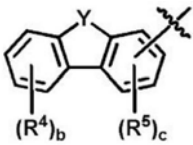


1. 一种化合物,由下述化学式1表示:

<化学式1>



<化学式1a>



在上述化学式1中,

X为C(R^a) (R^b) 或N(R^c),

上述R^a至R^c彼此独立地选自C₆-C₆₀的芳基;苄基;含有选自O、N、S、Si和P中至少一种杂原子的C₂-C₆₀的杂环基;以及C₁-C₅₀的烷基,

A环及B环彼此独立地为C₆-C₁₈的芳基,但是排除A环和B环同时为C₆的芳基的情况,

当X为N(R^c)时,A环及B环中的一种为C₁₀的芳基,并且另一种为C₆的芳基或C₁₀的芳基,

Ar¹至Ar⁴彼此独立地选自C₆-C₆₀的芳基;苄基;以及含有选自O、N、S、Si和P中至少一种杂原子的C₂-C₆₀的杂环基,此时,Ar¹至Ar⁴中至少一种为上述化学式1a,

L¹至L⁴彼此独立地选自单键;C₆-C₆₀的亚芳基;亚苄基;以及含有选自O、N、S、Si和P中至少一种杂原子的C₂-C₆₀的杂环基,且除了单键以外,其分别由选自重氢;卤素;未取代的或者被C₁-C₂₀烷基或C₆-C₂₀芳基取代的硅烷基;硅氧烷基;硼基;锆基;镱基;镱基;C₁-C₂₀的烷基硫基;C₁-C₂₀的烷氧基;C₁-C₂₀的烷基;C₂-C₂₀的烯基;C₂-C₂₀的炔基;C₆-C₂₀的芳基;被重氢取代的C₆-C₂₀的芳基;苄基;含有选自O、N、S、Si和P中至少一种杂原子的C₂-C₂₀的杂环基;C₃-C₂₀的环烷基;C₇-C₂₀的芳基烷基;以及C₈-C₂₀的芳基烯基中的一种以上的取代基进一步取代,

R¹至R³彼此独立地选自重氢;卤素;氰基;硝基;C₆-C₆₀的芳基;苄基;含有选自O、N、S、Si和P中至少一种杂原子的C₂-C₆₀的杂环基;C₁-C₅₀的烷基;以及C₂-C₂₀的烯基,m为0至8的整数,n为0至7的整数,a为0至3的整数,m,n,及a2以上的整数的情况下,多个R¹至R³分别相互相同或相异,

在上述化学式1a中,

Y为S、O、C(R^d) (R^e) 或N(R^f);

上述R^d至R^f彼此独立地选自C₆-C₆₀的芳基;苄基;含有选自O、N、S、Si和P中至少一种杂原子的C₂-C₆₀的杂环基;以及C₁-C₅₀的烷基,R^d及R^e相互键合,从而能够选择性地与其相键合的碳一起形成螺环化合物,

R⁴及R⁵彼此独立地i)为重氢或C₆-C₆₀的芳基,或ii)可由相邻的基之间相互键合而形成至少一个环,此时未形成环的R⁴及R⁵与在上述i)中定义的相同,

b为0至4的整数,c为0至3的整数,b及c为2以上的整数的情况下,多个R⁴及R⁵分别相同或

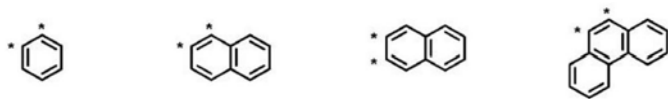
相异,

当上述 Ar^1 至 Ar^4 ,及 R^1 至 R^5 为芳基时,其分别由选自重氢;卤素;未取代的或者被 C_1 - C_{20} 烷基或 C_6 - C_{20} 芳基取代的硅烷基;硅氧烷基;硼基;锆基;镱基;硝基; C_1 - C_{20} 的烷基硫基; C_1 - C_{20} 的烷氧基; C_1 - C_{20} 的烷基; C_2 - C_{20} 的烯基; C_2 - C_{20} 的炔基; C_6 - C_{20} 的芳基;被重氢取代的 C_6 - C_{20} 的芳基;苄基;含有选自O、N、S、Si和P中至少一种杂原子的 C_2 - C_{20} 的杂环基; C_3 - C_{20} 的环烷基; C_7 - C_{20} 的芳基烷基;以及 C_8 - C_{20} 的芳基烯基中的一种以上的取代基进一步取代,且当各取代基彼此相邻时彼此键合形成环,

当上述 Ar^1 至 Ar^4 ,及 R^1 至 R^3 为苄基或杂环基时,其分别由选自重氢;卤素;未取代的或者被 C_1 - C_{20} 烷基或 C_6 - C_{20} 芳基取代的硅烷基;硅氧烷基;硼基;锆基;镱基;硝基; C_1 - C_{20} 的烷基硫基; C_1 - C_{20} 的烷氧基; C_1 - C_{20} 的烷基; C_2 - C_{20} 的烯基; C_2 - C_{20} 的炔基; C_6 - C_{20} 的芳基;被重氢取代的 C_6 - C_{20} 的芳基;苄基;含有选自O、N、S、Si和P中至少一种杂原子的 C_2 - C_{20} 的杂环基; C_3 - C_{20} 的环烷基; C_7 - C_{20} 的芳基烷基;以及 C_8 - C_{20} 的芳基烯基中的一种以上的取代基进一步取代,且当各取代基彼此相邻时彼此键合形成环,

当上述 R^1 至 R^3 为烷基、烯基时,其分别由选自重氢;卤素;未取代的或者被 C_1 - C_{20} 烷基或 C_6 - C_{20} 芳基取代的硅烷基;硅氧烷基;硼基;锆基;镱基;硝基; C_1 - C_{20} 的烷基硫基; C_1 - C_{20} 的烷氧基; C_1 - C_{20} 的烷基; C_2 - C_{20} 的烯基; C_2 - C_{20} 的炔基; C_6 - C_{20} 的芳基;被重氢取代的 C_6 - C_{20} 的芳基;苄基;含有选自O、N、S、Si和P中至少一种杂原子的 C_2 - C_{20} 的杂环基; C_3 - C_{20} 的环烷基; C_7 - C_{20} 的芳基烷基;以及 C_8 - C_{20} 的芳基烯基中的一种以上的取代基进一步取代,且当各取代基彼此相邻时彼此键合形成环。

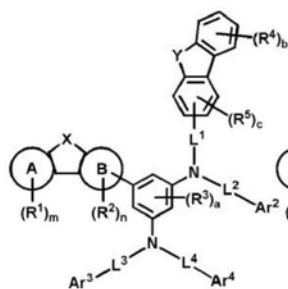
2. 根据权利要求1所述的化合物,其中,上述化学式1的A环及B环相互独立地为下述化学式中的一个:



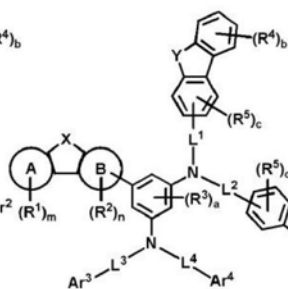
其中,符号*为对于键合部分的表示。

3. 根据权利要求1所述的化合物,其中,上述化学式1由以下化学式2至化学式6中的一种表示,

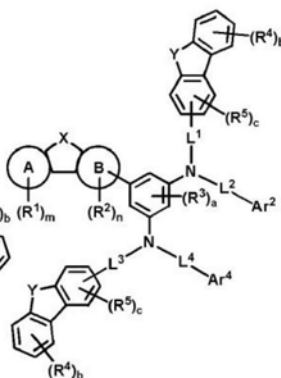
<化学式2>



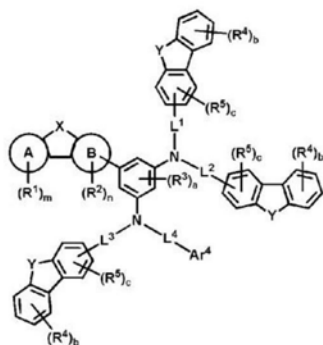
<化学式3>



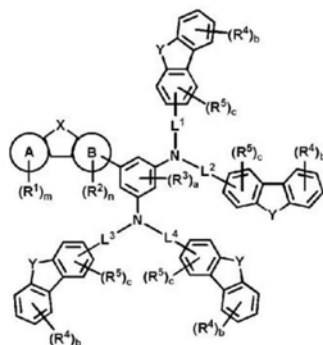
<化学式4>



<化学式5>

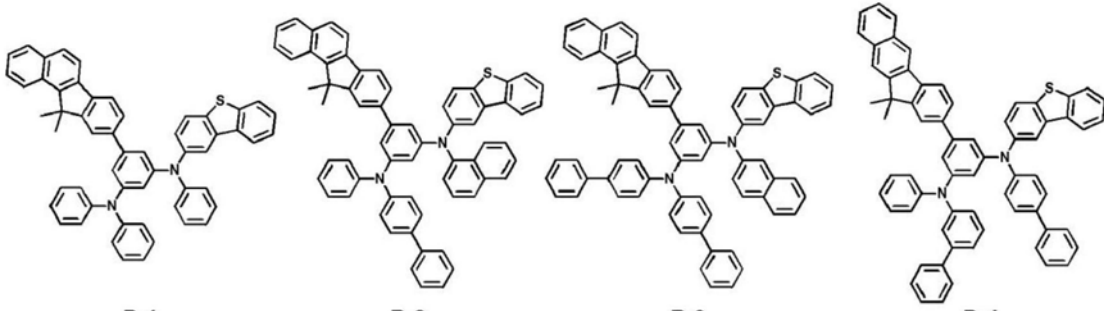


<化学式6>



在上述化学式2至化学式6中,A环、B环、X、Y、R¹至R⁵、Ar²至Ar⁴、L¹至L⁴、m、n、a、b及c在权利要求1中的定义相同。

4. 根据权利要求1所述的化合物,上述化学式1为以下化合物中的一种:

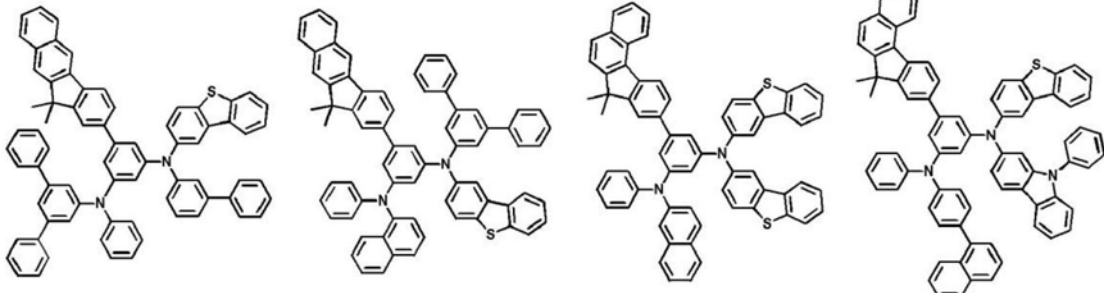


P-1

P-2

P-3

P-4

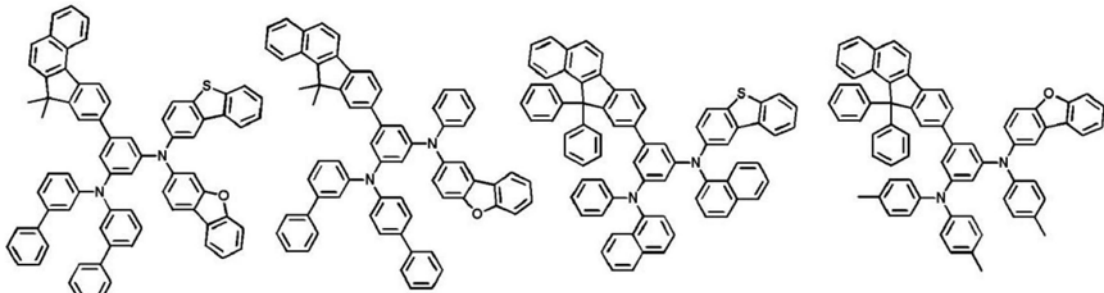


P-5

P-6

P-7

P-8

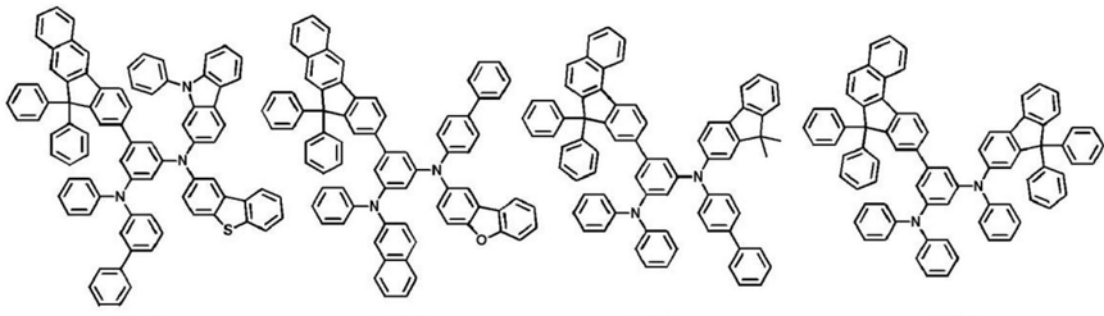


P-9

P-10

P-11

P-12

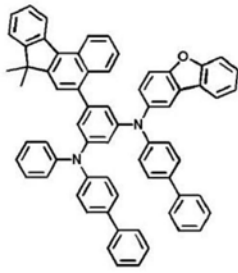


P-13

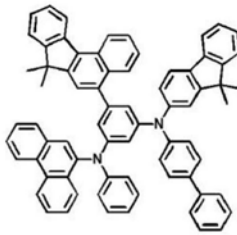
P-14

P-15

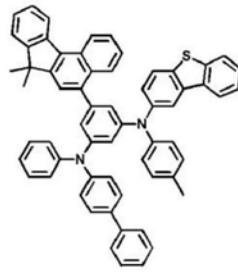
P-16



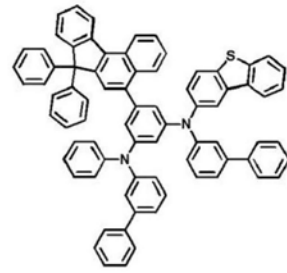
P-17



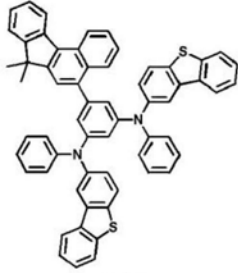
P-18



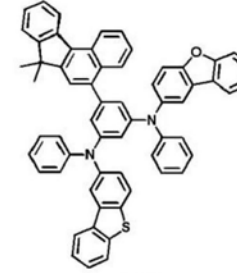
P-19



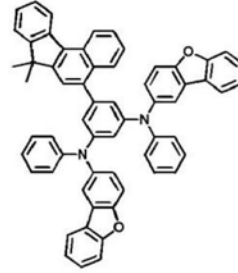
P-20



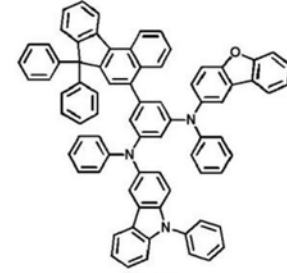
P-21



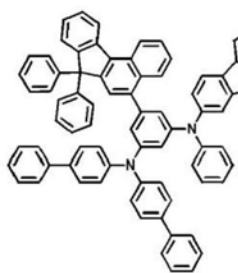
P-22



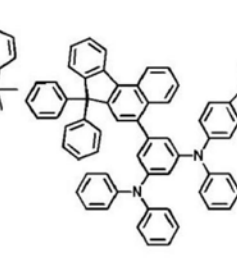
P-23



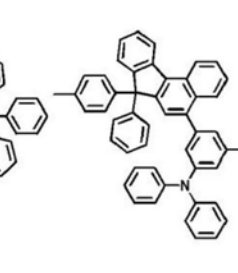
P-24



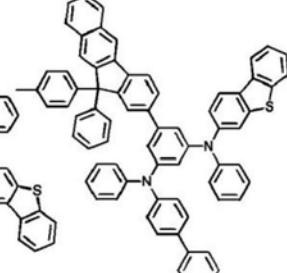
P-25



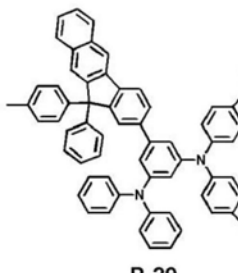
P-26



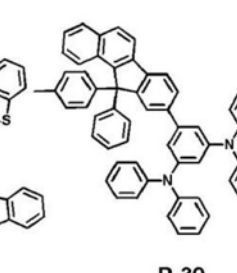
P-27



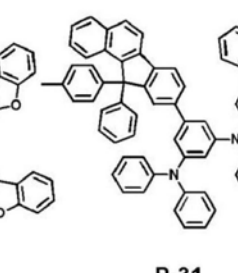
P-28



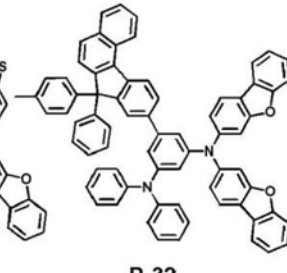
P-29



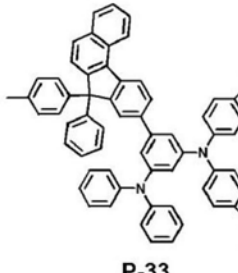
P-30



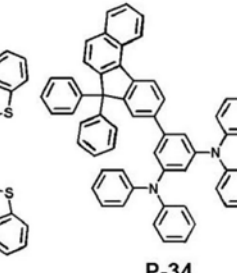
P-31



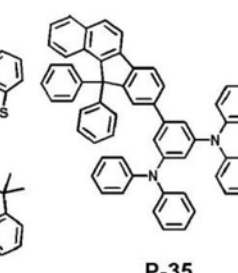
P-32



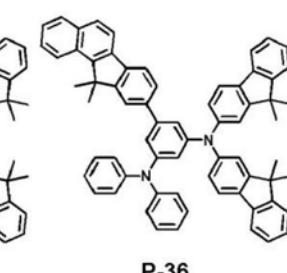
P-33



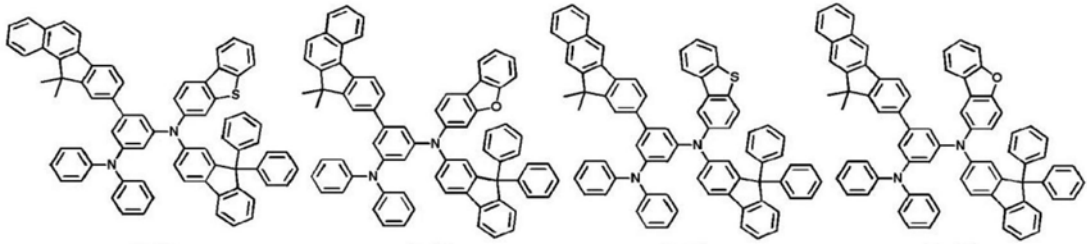
P-34



P-35



P-36

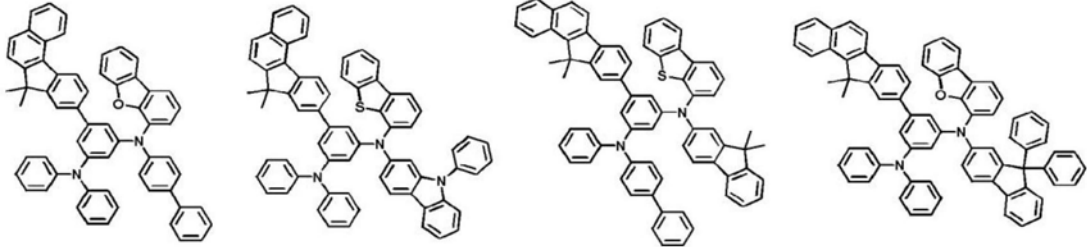


P-37

P-38

P-39

P-40

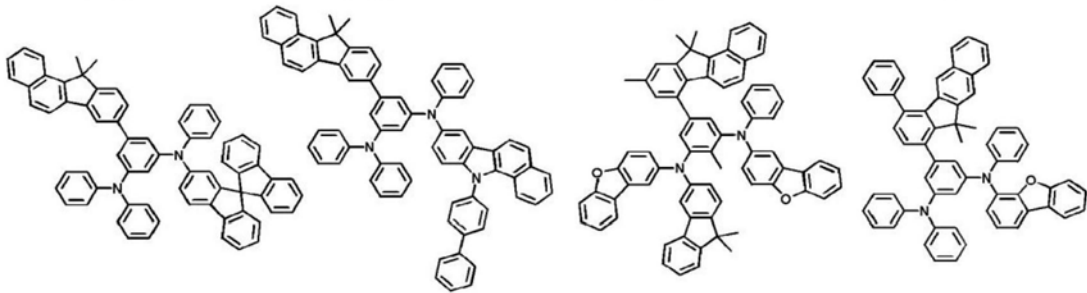


P-41

P-42

P-43

P-44

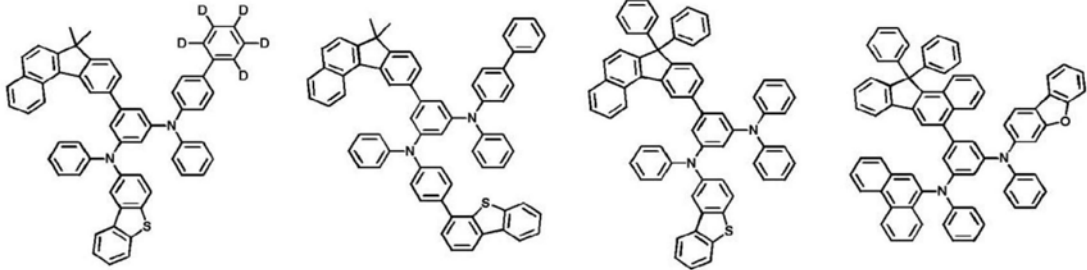


P-45

P-46

P-47

P-48

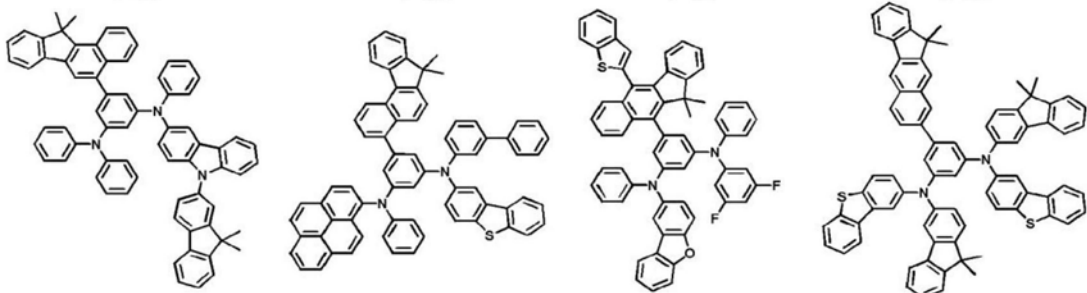


P-49

P-50

P-51

P-52

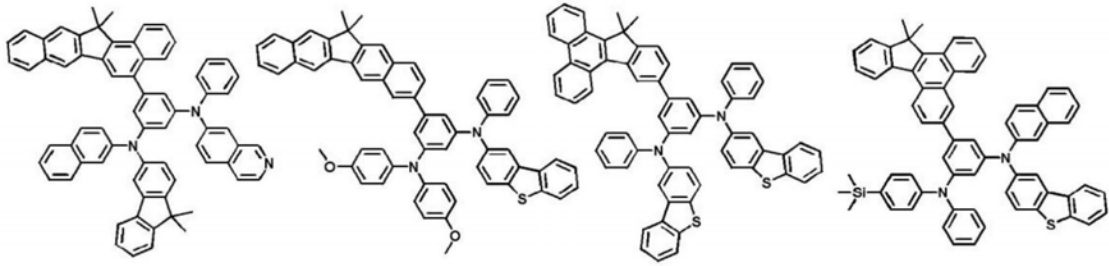


P-53

P-54

P-55

P-56

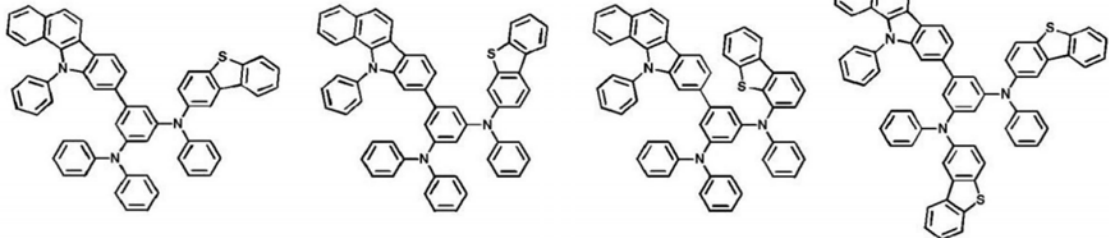


P-57

P-58

P-59

P-60

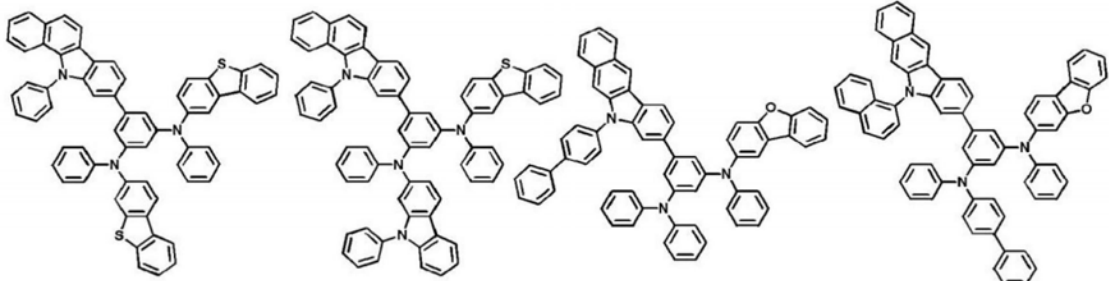


P-61

P-62

P-63

P-64

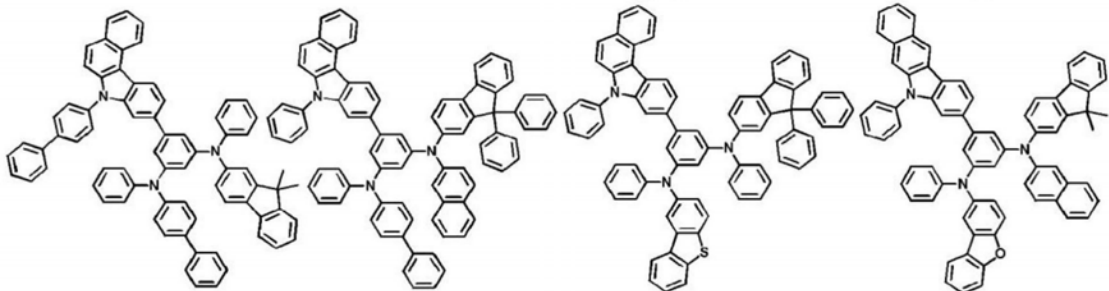


P-65

P-66

P-67

P-68

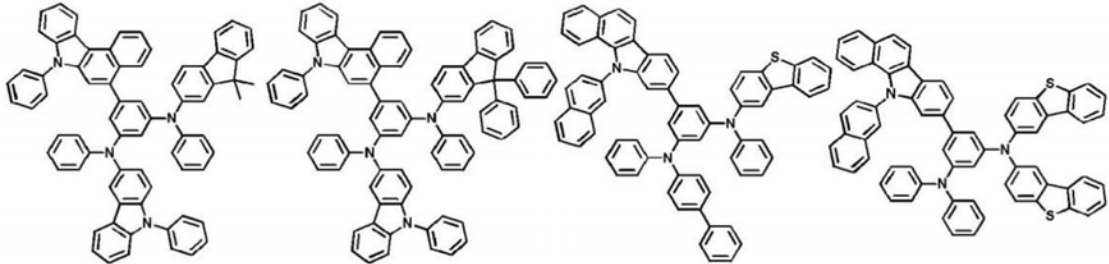


P-69

P-70

P-71

P-72

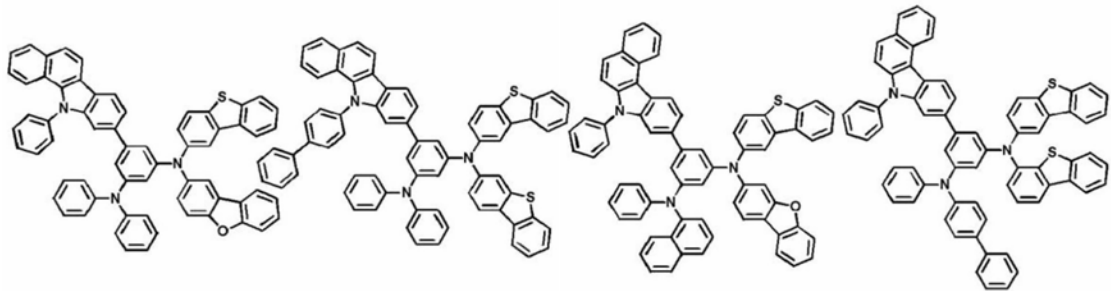


P-73

P-74

P-75

P-76

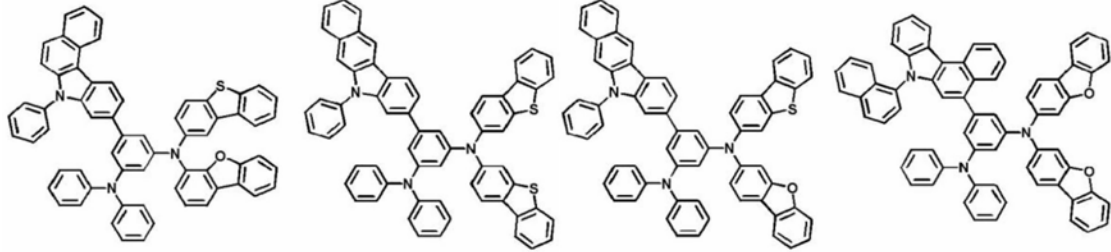


P-77

P-78

P-79

P-80

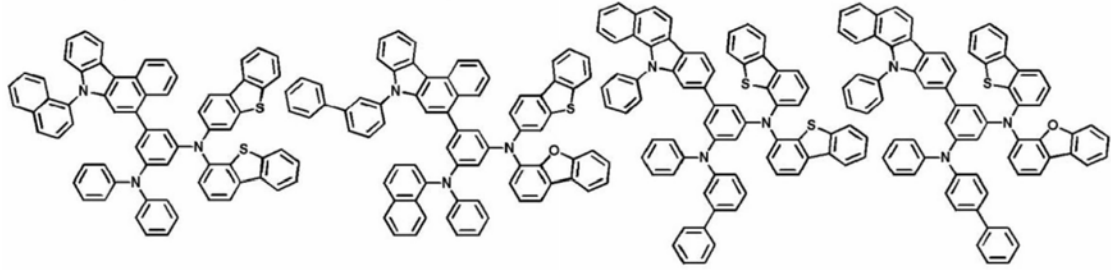


P-81

P-82

P-83

P-84

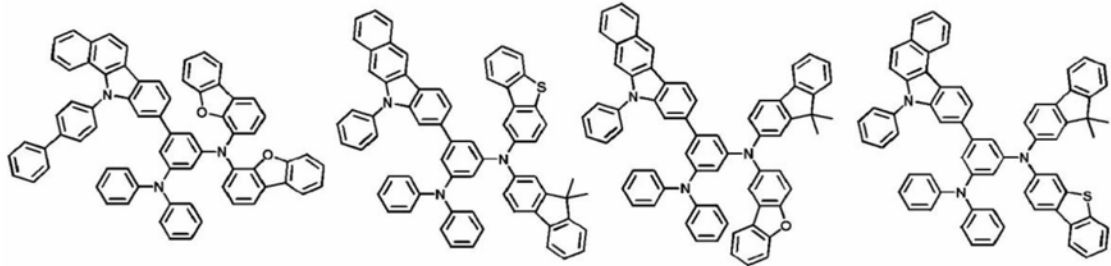


P-85

P-86

P-87

P-88

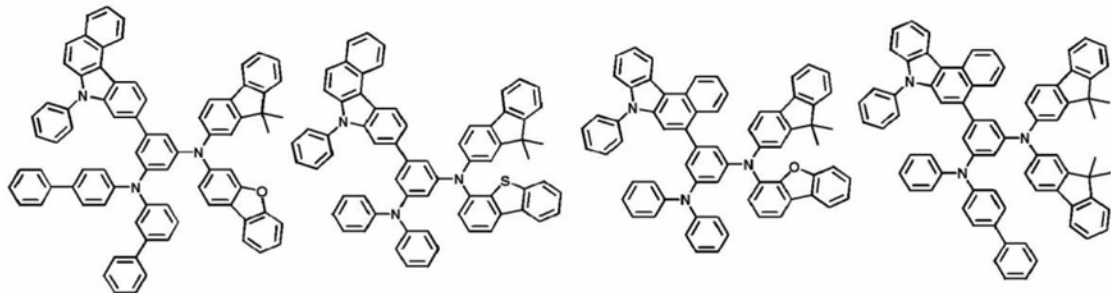


P-89

P-90

P-91

P-92

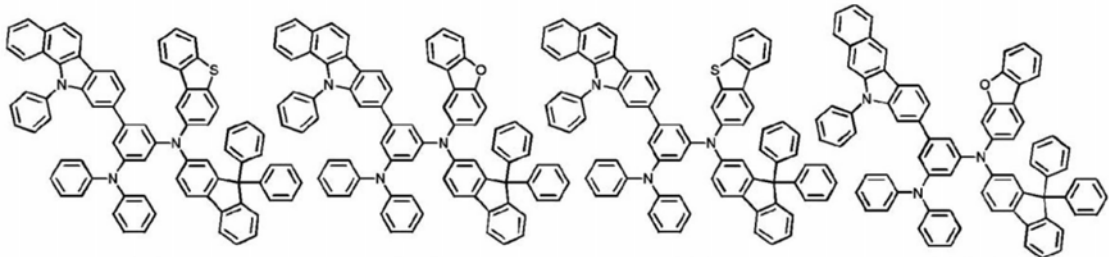


P-93

P-94

P-95

P-96

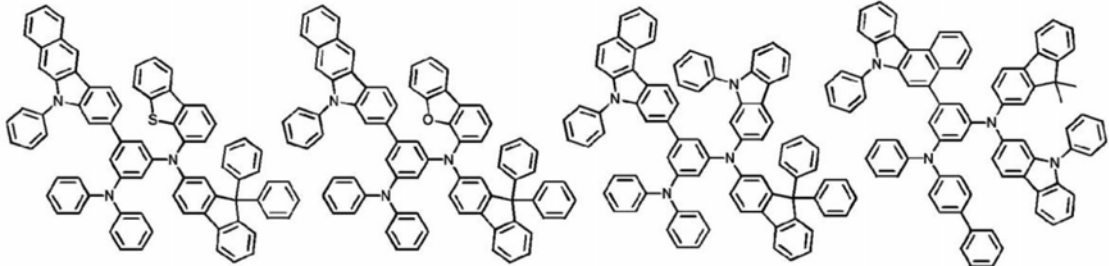


P-97

P-98

P-99

P-100

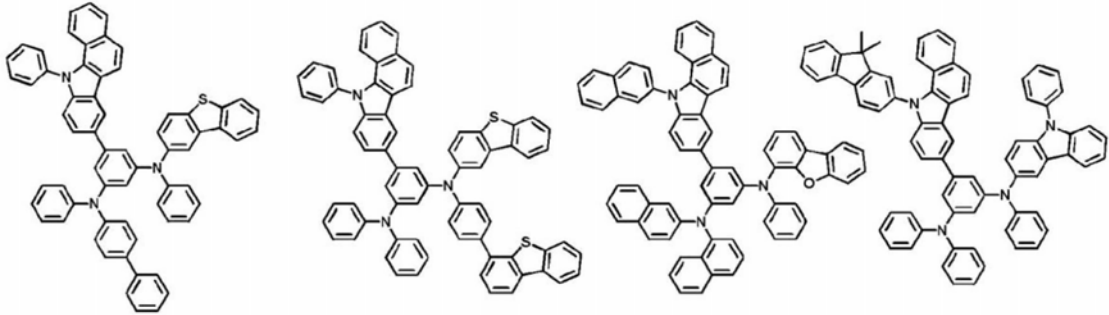


P-101

P-102

P-103

P-104

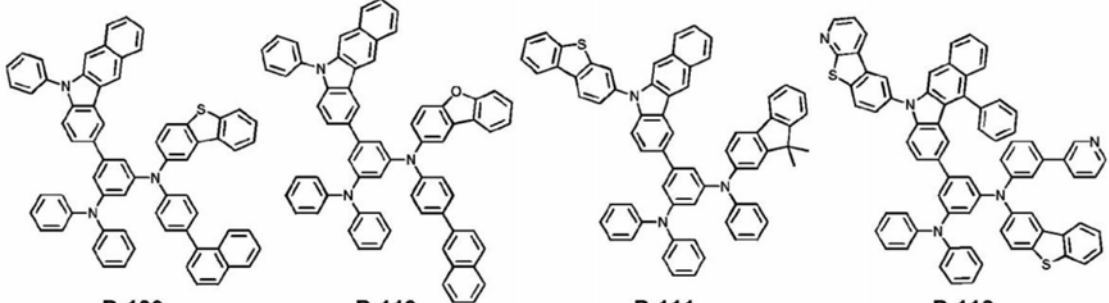


P-105

P-106

P-107

P-108

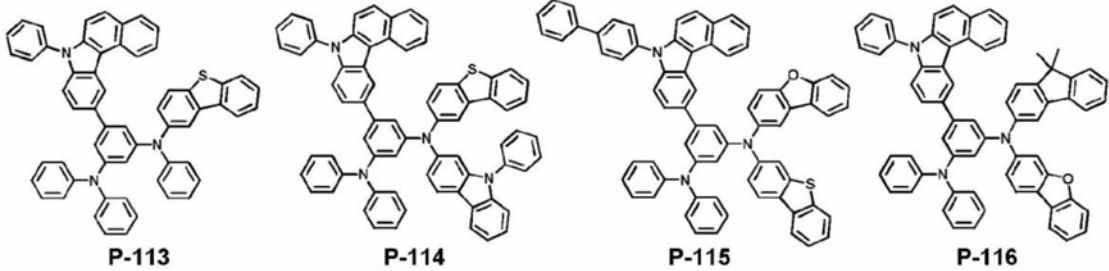


P-109

P-110

P-111

P-112

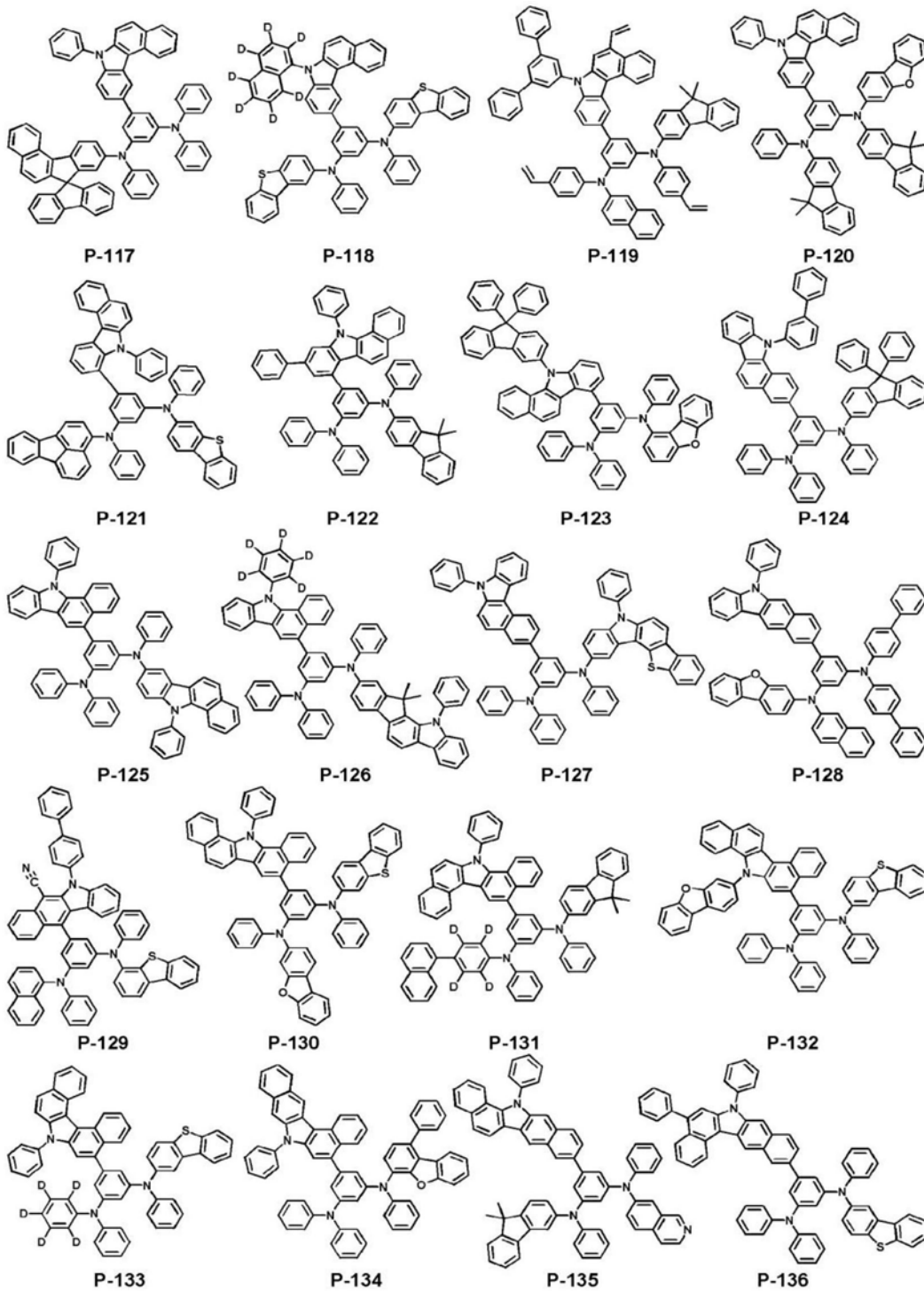


P-113

P-114

P-115

P-116



5. 一种有机电气元件,包括第一电极、第二电极、以及位于上述第一电极和第二电极之间的有机物层,其中,上述有机物层含有权利要求1所述的化合物。

6. 根据权利要求5所述的有机电气元件,其中,上述有机物层的空穴注入层、空穴输送层、发光辅助层、发光层、电子输送辅助层、电子输送层及电子注入层中的至少一种层包含上述化合物,上述化合物为一种单独化合物或两种以上的混合物。

7. 根据权利要求5所述的有机电气元件,其中,上述有机物层通过旋涂工序、喷嘴印刷工序、喷墨打印工序、狭缝涂布工序、浸涂工序或卷对卷工序来形成。

8. 一种电子装置,其中,包括:

显示装置,包括权利要求5的有机电气元件;以及控制部,用于驱动上述显示装置。

9.根据权利要求8所述的电子装置,其中,上述有机电气元件为下列中的一个:有机电致发光元件、有机太阳能电池、有机感光体、有机晶体管、及单色或白色照明用元件。

有机电气元件用化合物、利用其的有机电气元件及其电子装置

技术领域

[0001] 本发明涉及有机电气元件用化合物、利用其的有机电气元件及其电子装置。

背景技术

[0002] 通常,有机发光现象是指,利用有机物质将电能转换为光能的现象。利用有机发光现象的有机电气元件通常具有阳极、阴极及它们之间包括有机物层的结构。在此,有机物层为了提高有机电气元件的效率和稳定性而普遍形成为由各种不同物质构成的多层结构,例如,能够由空穴注入层、空穴输送层、发光层、电子输送层及电子注入层等形成。

[0003] 在有机电气元件中,用作有机物层的材料能够根据功能来分为发光材料和电荷输送材料,例如,空穴注入材料、空穴输送材料、电子输送材料及电子注入材料等。

[0004] 目前,便携式显示屏市场为了满足大面积显示屏的需求而呈现出其大小不断增加的趋势,因此,所消耗的电力也高于现有便携式显示屏的消耗电力。在这种情况下,对于仅配备了电池这一有限电力供应源的便携式显示屏,电力消耗是一种非常重要的性能因素,也必须解决其效率和寿命问题。

[0005] 效率、寿命及驱动电压等相互具有关联,若效率增加,则驱动电压相对降低,而在降低驱动电压并驱动时所发生的基于焦耳加热(Joule heating)的有机物质的结晶化减少,最终呈现出寿命提高的倾向。但即使单纯地改善上述有机物层,也无法将效率极大化。这是因为,只有在各有机物层之间的能量等级及T1值、物质的固有特性(移动率、表面特性等)形成最佳的组合时,才能同时实现长寿命和高的效率。

[0006] 而且,就最近的有机电致发光元件而言,为了解决在空穴输送层的发光问题,一直在研究着在空穴输送层与发光层之间使用发光辅助层的方法,由于根据各发光层(R、G、B)而所希望的物质性特性不同,使得现在需要开发根据各发光层的发光辅助层。

[0007] 通常,电子(electron)从电子输送层向发光层传递,空穴(hole)从空穴输送层向发光层传递,借助重组(recombination)来生成激子(exciton)。

[0008] 但是,用于空穴输送层的物质应具有低的最高占据分子轨道(HOMO)值,因此,大部分具有低T1值,由此,在发光层中生成的激子(exciton)转移到空穴输送层界面或者空穴输送层侧,最终导致在发光层内界面的发光或者发光层内的电荷不平衡(charge unbalance),从而在空穴输送层的界面上发光。

[0009] 在空穴输送层界面上发光的情况下,将出现有机电气元件的色纯度及效率变低和寿命变短的问题。因此,迫切需要开发一种发光辅助层,所述发光辅助层需要具有在空穴输送层的最高占据分子轨道能级和发光层的最高占据分子轨道能级之间的最高占据分子轨道能级的物质,且具有高T1值,并具有适当的驱动电压范围内(full device的blue元件驱动电压范围内)的空穴迁移率(hole mobility)。

[0010] 但是,这不能单纯以对于发光辅助层物质的核的结构特性而形成,而是只有在发光辅助层物质的核及sub-取代基的特性,且在发光辅助层与空穴输送层,发光辅助层与发

光层之间实现了适合的组合的时候,才能够体现出高效率及高寿命的元件。

[0011] 另外,应解决导致有机电致发光元件的寿命缩短的原因之一,金属氧化物从阳极电极(ITO)向有机层的浸透扩散的延迟,应实现对元件驱动时所发生的焦耳加热(Joule heating)的稳定的特性,即需要对具有高的玻璃化转变温度的空穴注入/输送层材料的开发。空穴输送层材料的低的玻璃化转变温度具有在元件驱动时,降低薄膜表面的均匀度的特性,据悉,这种特性会对元件寿命产生大的影响。

[0012] 并且,有机发光二极管(OLED)主要借助沉积方法而形成,目前需要开发一种在沉积时可长时间承受的材料,即,具有强耐热特性的材料。

[0013] 即,为了充分发挥有机电气元件所具有的优秀特征,在元件内的构成有机物层的物质,例如空穴注入物质、空穴输送物质、发光物质、电子输送物质、电子注入物质、发光辅助层物质等应率先做到由稳定且有效率的材料而予以支撑,但目前为止还未充分开发出稳定又高效的有机电气元件用的有机物层材料。因此,需要持续开发新的材料,尤其,迫切需要开发发光辅助层和空穴输送层的材料。

发明内容

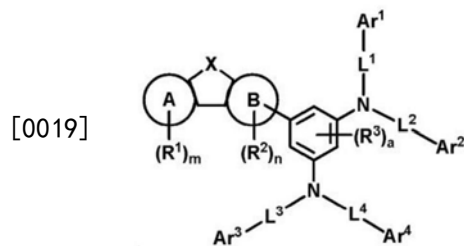
[0014] 技术课题

[0015] 本发明是为了解决如上所述的以往的问题而提出的,其目的在于提供具有高效的电子阻挡能力及空穴输送能力的化合物的同时,利用这样的化合物来提供具有元件的高发光效率、低驱动电压、高耐热性,并且可提高色纯度及寿命的化合物,以及利用该化合物的有机电气元件及其电子装置。

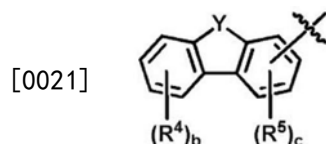
[0016] 技术方案

[0017] 在一实施方式中,本发明提供由以下化学式表示的化合物。下述化学式表示追加融合(fused)有芳香族环的形态的苄基或咪唑核及2个胺基以连接基进行键合的化合物,以下化学式1的Ar¹至Ar⁴中的至少一个为以下化学式1a。

[0018] <化学式1>



[0020] <化学式1a>



[0022] 在另一实施方式中,本发明提供利用由上述化学式1表示的化合物的有机电气元件及其电子装置。

[0023] 技术效果

[0024] 根据本发明,将对于提高分子的平面性的取代基的导入,键合于连接基的胺基的

种类、键合位置及个数等进行限定的特定化合物,作为有机电气元件的材料来进行利用,从而使得空穴输送能力(hole transfer ability)及热稳定性得到提升,具有易于实现发光层内的电荷均衡的最高占据分子轨道能级与高T1值,从而能够提高有机电气元件的发光效率、耐热性、寿命等,并且能够降低驱动电压。

附图说明

[0025] 图1为本发明的有机电致发光元件的例示图。

[0026] 附图标记的说明

[0027]	100:有机电气元件	110:基板
[0028]	120:第一电极	130:空穴注入层
[0029]	140:空穴输送层	141:缓冲层
[0030]	150:发光层	151:发光辅助层
[0031]	160:电子输送层	170:电子注入层
[0032]	180:第二电极	

具体实施方式

[0033] 以下,参照附图对本发明的实施例进行详细说明。

[0034] 在对各附图的结构要素附加附图标记的过程中,要留意相同的结构要素即使显示于不同的附图上,也尽可能地赋予相同的附图标记。并且,在对本发明进行说明的过程中,在判断相关的公知结构或功能的具体说明会模糊本发明的要旨的情况下,将省略详细说明。

[0035] 在说明本发明的结构要素的过程中,可使用第一、第二、A、B、(a)、(b)等术语。这种术语仅用于与其他结构要素相互区别,相关结构要素的本质、次序或顺序等不会因这种术语而受到限制。在一个结构要素与另一结构要素“连接”、“结合”或“联接”的情况下,其结构要素既可以与另一结构要素直接连接或联接,但也可以理解为在各结构要素之间“连接”、“结合”或“联接”有其他结构要素。

[0036] 并且,在层、膜、区域及板等结构要素位于其他结构要素“上”或“上部”的情况下,这不仅可以理解为位于其他结构要素的“正上方”,而且还可以理解为在中间还有其他结构要素。相反,在一个结构要素位于另一部分的“正上方”的情况下,应理解为中间没有其他部分。

[0037] 如在本说明书及添加的保护范围中所进行的使用,只要没有标注不同的意思,以下术语的意义如下。

[0038] 在本说明书中所使用的术语“卤代”或“卤素”只要没有不同的说明,就是氟(F)、溴(Br)、氯(Cl)或碘(I)。

[0039] 在本发明中所使用的术语“烷”或“烷基”,就具有1至60的碳数的单键,并意味着包含直链烷基、分子链烷基、环烷基(脂环族)、被烷取代的环烷基、被环烷基所取代的烷基的饱和脂肪族官能团的自由基。

[0040] 在本发明中所使用的术语“卤烷基”或“卤素烷基”,除非另行说明,则表示被卤素所取代的烷基。

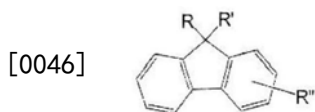
[0041] 在本发明中所使用的术语“烯基”或“炔基”只要没有别的说明,就分别具有2至60的碳数的双键或三键,并包含直链型或侧链型链基,但并不局限于此。

[0042] 在本发明中所使用的术语“环烷基”只要没有其他说明,就意味着形成具有3至60的碳数的环的烷,但并不局限于此。

[0043] 在本发明中所使用的术语“烷氧基”、“烷氧”或“烷氧基”意味着附着有氧自由基的烷基,只要没有其他说明,就具有1至60的碳数,但并不局限于此。

[0044] 在本发明中所使用的术语“芳氧基”或“芳氧”意味着附着有氧自由基的芳基,只要没有其他说明,就具有6至60的碳数,但并不局限于此。

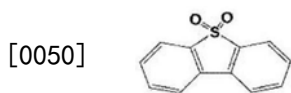
[0045] 只要没有其他说明,在本发明中所使用的术语“苄基”或“苄烯基”分别意味着在以下结构中R、R'及R''均为氢的1价或2价官能团,“被取代的苄基”或“被取代的苄烯基”意味着取代基R、R'、R''中的至少一种为除了氢之外的取代基,并包括R和R'相结合来与其相结合的碳一同形成螺环化合物的情况。



[0047] 在本发明中所使用的术语“芳基”及“亚芳香基”只要没有别的说明,就分别具有6至60的碳数,但并不局限于此。在本发明中,芳基或亚芳香基包含单环型、环聚集体、融合后的多环类及螺环化合物等。

[0048] 在本发明中所使用的术语“杂环基”不仅包含“杂芳基”或“杂亚芳香基”之类的芳香族环,而且还包含非芳香族环,只要没有其他说明,就意味着分别包含一种以上的杂原子的碳原子数2至60的环,但本发明并不局限于此。只要没有其他说明在本说明书中所使用的术语“杂原子”表示N、O、S、P或Si,杂环基意味着包含杂原子的单环型、环聚集体、融合后的多环类及螺环化合物等。

[0049] 并且,“杂环基”除了形成环的碳,还可以包括包含SO₂的环。例如,“杂环基”包括下列化合物。



[0051] 在本发明中所使用的术语“环”包含单链及多链,并包含杂环,上述杂环不仅包含碳氢环,而且还包含至少一种杂原子,上述术语“环”也包含芳香族及非芳香族环。

[0052] 在本发明中所使用的术语“多链”包含联苯、三联苯等环聚集体(ring assemblies)、融合(fused)后的多环类及螺环化合物,不仅包含芳香族,而且包含非芳香族,碳氢环当然也包含含有至少一种杂原子的杂环。

[0053] 在本发明中所使用的术语“环聚集体(ring assemblies)”意味着两种或两种以上的环类(单环或融合后的环类)通过单键或双键来相互键合,且这种环之间的直接连接的数量比这种化合物所包含的环类的总数少一个。环聚集体可以由相同或不同的环类通过单键或双键来相互直接连接。

[0054] 在本发明中所使用的术语“融合后的多环类”意味着至少两种原子所共享的融合(fused)后的环形态,并且包括两种以上的碳氢类的环类融合后的形态及包含至少一种杂原子的杂环类融合至少一种的形态等。这种融合后的多环类可以为芳香族环、杂芳香族环、

脂肪族环或这些环的组合。

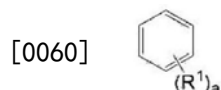
[0055] 在本发明中所使用的术语“螺环化合物”意味着“螺接(spiro union)”,而螺接意味着由两个环仅仅共享一个原子,从而实现连接。此时,将在两个环中共享的原子称为“螺环原子”,并且,根据一种化合物所包含的螺环原子的数,将这些分别称为“单螺环-”、“二螺环-”、“三螺环-”化合物。

[0056] 并且,在前缀连续命名的情况下,意味着首先按所记载的顺序罗列取代基。例如,在芳烷氧基的情况下,意味着被芳基所取代的烷氧基,在烷氧羰基的情况下,意味着被烷氧基所取代的羰基,并且,在芳基烯基的情况下,意味着被芳基羰基所取代的烯基,其中,芳基羰基为被芳基所取代的羰基。

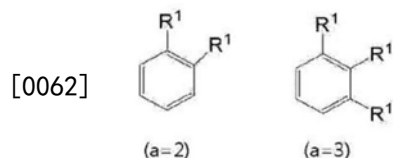
[0057] 并且,只要没有明确的说明,在本发明中所使用的术语“取代或非取代”中,“取代”意味着被选自由重氢、卤素、氨基、腈基、硝基、 C_1-C_{20} 的烷基、 C_1-C_{20} 的烷氧基、 C_1-C_{20} 的烷基胺、 C_1-C_{20} 的烷基噻吩、 C_6-C_{20} 的芳噻吩、 C_2-C_{20} 的烯基、 C_2-C_{20} 的炔基、 C_3-C_{20} 的环烷基、 C_6-C_{20} 的芳基、被重氢所取代的 C_6-C_{20} 的芳基、 C_8-C_{20} 的芳烯基、硅烷基、硼基、锆基及包含选自由O、N、S、Si及P组成的组的至少一种杂原子的 C_2-C_{20} 的杂环基组成的组的至少一种取代基所取代,但并不局限于这些取代基。

[0058] 在本说明书中,以各符号及其取代基的示例被示出的对应于芳基、亚芳香基、杂环基等的“基名称”,可记载“反映价数的基的名称”,但是,也可记载为“母体化合物名称”。例如,在作为芳基的一种的“菲”的情况下,一价的“基”为“菲(基)”,二价的基为“伸菲(基)”等,也可通过区分价数来记载基的名称,但是,与价数无关地,也可记载为作为母体化合物名称的“菲”。类似地,在嘧啶的情况下,也与价数无关地,可记载为“嘧啶”,或者可记载为该价数的“基的名称”,例如,在一价的情况下,可记载为嘧啶(基)、在二价的情况下,可记载为亚嘧啶(基)等。

[0059] 并且,只要没有明确的说明,在本说明书中所使用的化学式能够以与以下化学式的指数定义的取代基的定义相同地适用。



[0061] 其中,在a为0的整数的情况下,取代基 R^1 不存在,在a为1的整数的情况下,一个取代基 R^1 与用于形成苯环的碳中的一个碳相键合,在a为2或3的整数的情况下,分别以如下方式相键合,此时, R^1 可以相同或不同,在a为4至6的整数的情况下,以类似的方式与苯环的碳相键合,另一方面,省略与用于形成苯环的碳相键合的氢的表示。



[0063] 图1为本发明的一实施例的有机电气元件的例示图。

[0064] 参照图1,本发明的一实施例的有机电气元件100包括:第一电极120、第二电极180,形成于基板110上;以及有机物层,在第一电极120和第二电极180之间包含本发明的化合物。此时,第一电极120可以为Anode(阳极),第二电极180可以为Cathode(阴极),在倒置型的情况下,第一电极可以为阴极,第二电极可以为阳极。

[0065] 有机物层可在第一电极120上依次包括空穴注入层130、空穴输送层140、发光层150、电子输送层160及电子注入层170。此时,除了发光层150之外,剩余的层可以无需形成。还可以包括空穴阻挡层、电子阻挡层、发光辅助层151、缓冲层141等,也可以由电子输送层160等执行空穴阻挡层的作用。

[0066] 并且,虽未图示,但本发明的一实施例的有机电气元件还可以包括形成于第一电极和第二电极中的至少一面中与上述有机物层相反的一面的保护层或光效率改善层(Capping layer)。

[0067] 适用于上述有机物层的根据本发明的一个实施例的化合物,可以用作空穴注入层130,空穴输送层140,电子输送层160,电子输送辅助层,电子注入层170,发光层150的主体或掺杂剂材料,或者可以用作光效率改善层等的材料。例如,本发明的化合物可以用作发光层150,空穴输送层140和/或发光辅助层151,优选是用作空穴输送层140和/或发光辅助层151材料。

[0068] 此外,即使是相同的母核,根据哪个位置上哪个取代基被键合,带隙(band gap)、电气特性、界面特性等可能会有所不同,因此需要对核的选择以及与其键合的子(sub)取代体的组合进行研究,特别是,当各有机物层之间的能级和 T_1 值,物质的固有特性(迁移率,界面特性等)实现最佳组合时,可以同时实现长寿命和高效率。

[0069] 如上所述,为了解决有机电致发光元件中空穴输送层的发光问题,优选是在空穴输送层和发光层之间形成发光辅助层,开发根据各发光层(R,G,B)的互不相同的发光辅助层。

[0070] 此外,对于发光辅助层,由于须掌握空穴输送层与发光层(主体)之间的相互关系,这是由于就算使用相似的核,使用的有机物层不同的话也较难推断其特性。

[0071] 因此,在本发明中,通过使用由化学式1表示的化合物,来形成空穴输送层和/或发光辅助层,从而可将有机物层之间的能级和 T_1 值,固有特性(迁移率,界面特性等)优化,同时提高有机电致发光元件的寿命和效率。

[0072] 本发明的一实施例的有机电致发光元件可利用多种蒸镀法(deposition)来制备。可利用PVD或CVD等蒸镀方法来制备,例如,可通过在基板上蒸镀金属或具有导电性的金属氧化物或它们的合金来形成阳极120,并在其上方形成包括空穴注入层130、空穴输送层140、发光层150、电子输送层160及电子注入层170的有机物层之后,在其上方蒸镀能够用作阴极180的物质来制成。并且,可在空穴输送层140与发光层150之间还形成有发光辅助层151,可在上述发光层150与电子输送层160之间还形成有电子输送辅助层。

[0073] 并且,有机物层使用多种高分子材料,通过并非蒸镀法的溶剂处理或溶剂精制法(solvent process),例如,旋涂工序、喷嘴印刷工序、喷墨打印工序、狭缝涂布工序、浸涂工序、卷对卷工序、刮涂工序、丝网印刷工序或热转印方法等方法来制成为更少数量的层。由于本发明的有机物层能够由多种方法形成,因此,本发明的保护范围不会因形成方法而受到限制。

[0074] 本发明的一实施例的有机电气元件可根据所使用的材料分为前面发光型、后面发光型或双面发光型。

[0075] 白色有机发光二极管WOLED(White Organic Light Emitting Device)既具有容易实现高分辨率,且工序性优秀的优点,又具有能够利用以往的液晶显示器(LCD)的彩色滤

色器技术来制备的优点。正提出主要用于背光装置白色有机发光元件的多种结构,并实现专利化。代表性的有,以相互平面方式并列配置(side-by-side)R(Red)、G(Green)、B(Blue)发光部的方式;R、G、B发光层上下层叠的层叠(stacking)方式;利用经蓝色(B)有机发光层的电致发光和由此产生的光从而利用无机荧光体的光致发光(photo-luminescence)的色转换物质(color conversion material,CCM)方式等,本发明可适用于这种WOLED。

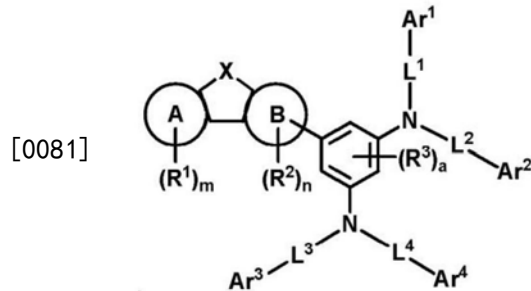
[0076] 并且,本发明的一实施例的有机电气元件可以为有机电致发光元件、有机太阳能电池、有机感光体、有机晶体管、单色或白色照明用元件中的一种。

[0077] 本发明的另一实施例可包括电子装置,上述电子装置包括:显示装置,包括上述本发明的有机电气元件;以及控制部,用于控制上述显示装置。此时,电子装置可以为当前或未来的有无线通信终端,并包括手机等移动通信终端、PDA、电子词典、PMP、遥控器、导航仪、游戏机、各种TV、各种计算机等所有电子装置。

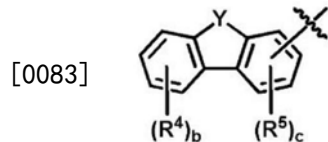
[0078] 以下,对本发明的一实施方式的化合物进行说明。

[0079] 本发明的一实施方式的化合物由以下化学式1表示。

[0080] <化学式1>



[0082] <化学式1a>



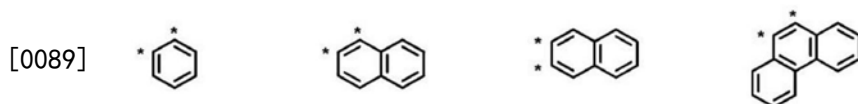
[0084] 在上述化学式1中,各符号能够以如下方式进行定义。

[0085] 在上述化学式1中,X为C(R^a) (R^b) 或N(R^c)。

[0086] 上述R^a至R^c可彼此独立地从C₆-C₆₀的芳基;苄基;含有选自O、N、S、Si和P中至少一种杂原子的C₂-C₆₀的杂环基;C₃-C₆₀的脂肪族环和C₆-C₆₀的芳香族环的稠环基;C₁-C₅₀的烷基;C₂-C₂₀的烯基;C₂-C₂₀的炔基;C₁-C₃₀的烷氧;以及C₆-C₃₀的芳氧基;所形成的组中被选出。

[0087] R^a至R^c为芳基时,优选地为C₆-C₃₀的芳基,更优选地可为C₆-C₁₈的芳基,杂环基的情况下,优选地可为C₂-C₃₀的杂环基、C₂-C₁₂的杂环基。具体地,R^a至R^c可以为相互独立地,甲基(methyl)、苯基(phenyl)、联苯基(biphenyl)、萘基(naphthyl)、三联苯基(terphenyl)、芴基(fluorenyl)、二苯并呋喃(dibenzofuryl)、二苯并噻吩(dibenzothieryl)或苯并噻吩并吡啶(benzothienopyridyl)等,这些分别还可被重氢、甲基或苯基取代。

[0088] 在上述化学式1中,A环及B环彼此独立地为C₆-C₁₈的芳基;此时,A环和B环同时为C₆的芳基的情况可以除外。优选地,A环及B环相互独立地,可为下述化学式中的一个。



[0090] 其中,符号*为对于键合部分的表示。

[0091] 另外,优选地,上述X为N(R^c)时,A环与B环中至少一个为C₁₀的芳基。

[0092] 在上述化学式1中,Ar¹至Ar⁴可彼此独立地从C₆-C₆₀的芳基;苄基;含有选自O、N、S、Si和P中至少一种杂原子的C₂-C₆₀的杂环基;C₃-C₆₀的脂肪族环和C₆-C₆₀的芳香族环的稠环基;C₁-C₅₀的烷基;C₂-C₂₀的烯基;C₂-C₂₀的炔基;C₁-C₃₀的烷氧基;以及C₆-C₃₀的芳氧基;所形成的组中被选出,此时,Ar¹至Ar⁴中至少一个优选为上述化学式1a。

[0093] Ar¹至Ar⁴为芳基的情况下,优选地为C₆-C₃₀的芳基,更优选地可以为C₆-C₁₈的芳基,在杂环基的情况下,优选地为C₂-C₃₀的杂环基,更为优选地可为C₂-C₁₉的杂环基。具体地,Ar¹至Ar⁴为相互独立地可以为,甲基、乙烯基、甲氧基、苯基、联苯基、萘基、三联苯基、菲基(phenanthrene)、芘基(pyrene)、荧蒽基(fluoranthene)、吡啶基(pyridyl),异喹啉基(isoquinolyl)、咪唑基(carbazole)、苯并咪唑基(benzocarbazole)、二苯并噻吩(dibenzothiophene)、二苯并呋喃(dibenzofuran)、苯并硫代咪唑基(benzothiocarbazole)、茛并咪唑基(indenocarbazole)、二甲基苄基、联苯基苄基或螺二苄基等,这些分别可由重氢、氟、甲基、乙烯基、甲氧基、三甲基硅烷、苯基、萘基、吡啶基或苄基而取代。

[0094] 在上述化学式1中,L¹至L⁴彼此独立地从单键;C₆-C₆₀的亚芳基;亚苄基;含有选自O、N、S、Si和P中至少一种杂原子的C₂-C₆₀的杂环基;C₃-C₆₀的脂肪族环和C₆-C₆₀的芳香族环的稠环基;以及C₂-C₆₀的脂肪族烃基所形成的组中被选出,且除了单键以外,其分别由从重氢;卤素;被C₁-C₂₀烷基或C₆-C₂₀芳基取代或未取代的硅烷基;硅氧烷基;硼基;锆基;镉基;硝基;C₁-C₂₀的烷基硫基;C₁-C₂₀的烷氧基;C₁-C₂₀的烷基;C₂-C₂₀的烯基;C₂-C₂₀的炔基;C₆-C₂₀的芳基;被重氢取代的C₆-C₂₀的芳基;苄基;含有选自O、N、S、Si和P中至少一种杂原子的C₂-C₂₀的杂环基;C₃-C₂₀的环烷基;C₇-C₂₀的芳基烷基;以及C₈-C₂₀的芳基烯基形成的组中被选出的一种以上取代基被进一步取代。

[0095] L¹至L⁴为亚芳基时,优选地为C₆-C₃₀的亚芳基,更为优选地可以为C₆-C₁₀的亚芳基,在杂环基的情况下,优选地为C₂-C₃₀的杂环基,更为优选地可以为C₂-C₁₆的杂环基。具体地,L¹至L⁴为相互独立地可以为单键、亚苯基、伸萘基、亚咪唑基、苯并亚咪唑基或二苯并亚咪唑等、这些分别还可以重氢进行取代。

[0096] 在上述化学式1中,R¹至R³彼此独立地从重氢;超重氢;卤素;镉基;硝基;C₆-C₆₀的芳基;苄基;含有选自O、N、S、Si和P中至少一种杂原子的C₂-C₆₀的杂环基;C₃-C₆₀的脂肪族环和C₆-C₆₀的芳香族环的稠环基;C₁-C₅₀的烷基;C₂-C₂₀的烯基;C₂-C₂₀的炔基;C₁-C₃₀的烷氧基;以及C₆-C₃₀的芳氧基所形成的组中被选出,m为0至8的整数,n为0至7的整数,a为0至3的整数,m,n,及a2以上的整数的情况下,多个R¹至R³分别相互相同或相异。

[0097] R¹至R³为芳基的情况下,优选地为C₆-C₃₀的芳基,更为优选地可以为C₆-C₁₂的芳基,杂环基的情况下,优选地为C₂-C₃₀的杂环基,更为优选地可以为C₂-C₈的杂环基。具体地R¹至R³相互独立地,可以为镉基、甲基、乙烯基、苯基、萘基、联苯基或苯并噻吩等。

[0098] 在上述化学式1中,Y彼此独立地从S,O,C(R^d)(R^e)或N(R^f)。

[0099] 上述 R^d 至 R^f 彼此独立地从 C_6 - C_{60} 的芳基;苄基;含有选自O、N、S、Si和P中至少一种杂原子的 C_2 - C_{60} 的杂环基; C_3 - C_{60} 的脂肪族环和 C_6 - C_{60} 的芳香族环的稠环基; C_1 - C_{50} 的烷基; C_2 - C_{20} 的烯基; C_2 - C_{20} 的炔基; C_1 - C_{30} 的烷氧基;以及 C_6 - C_{30} 的芳氧基;所形成的组中被选出。而且, R^d 及 R^e 相互键合,从而能够选择性地与其相键合的碳一起还形成螺环化合物。

[0100] R^d 至 R^f 为芳基的情况下,优选地为 C_6 - C_{30} 的芳基,更为优选地可为 C_6 - C_{12} 的芳基。具体地 R^d 至 R^f 相互独立地可以为甲基、苯基、联苯基或苄等,这些分别还可以甲基取代。另外 R^d 及 R^e 相互键合,从而能够与其相键合的碳一起形成螺二苄基。

[0101] 在上述化学式1中, R^4 及 R^5 彼此独立地从重氢;超重氢;卤素;氰基;硝基; C_6 - C_{60} 的芳基;苄基;含有选自O、N、S、Si和P中至少一种杂原子的 C_2 - C_{60} 的杂环基; C_3 - C_{60} 的脂肪族环和 C_6 - C_{60} 的芳香族环的稠环基; C_1 - C_{50} 的烷基; C_2 - C_{20} 的烯基; C_2 - C_{20} 的炔基; C_1 - C_{30} 的烷氧基;以及 C_6 - C_{30} 的芳氧基;所形成的组中被选出。另外, R^4 及 R^5 相互独立地,由相邻的基之间相互键合而可选择性地还形成至少一个环,此时未形成环的 R^4 及 R^5 与上述中定义的相同。 b 为0至4的整数, c 为0至3的整数, b 及 c 为2以上的整数的情况下,有可能多个 R^4 及 R^5 分别相同或相异。

[0102] R^4 及 R^5 为芳基的情况下,优选地为 C_6 - C_{30} 的芳基,更为优选地可以为 C_6 - C_{12} 的芳基,具体地可以为苯基。而且, R^4 及 R^5 相互独立地,由相邻的基之间相互键合,可选择性地形成 C_6 - C_{20} 饱和环或 C_6 - C_{20} 不饱和环,上述形成的饱和环或不饱和环的碳原子可以从氮、氧及硫中选择一个以上的杂原子代替。具体地可以形成苯、萘、吲哚或苯并噻吩等的环。

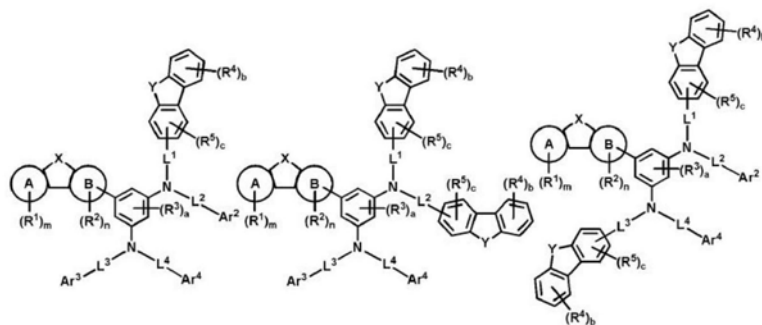
[0103] 当上述 Ar^1 至 Ar^4 ,及 R^1 至 R^5 为芳基、苄基、杂环基、稠环基、烷基、烯基、炔基、烷氧基、芳氧基时,其分别由从重氢;卤素;被 C_1 - C_{20} 烷基或 C_6 - C_{20} 芳基取代或未取代的硅烷基;硅氧烷基;硼基;锆基;氰基;硝基; C_1 - C_{20} 的烷基硫基; C_1 - C_{20} 的烷氧基; C_1 - C_{20} 的烷基; C_2 - C_{20} 的烯基; C_2 - C_{20} 的炔基; C_6 - C_{20} 的芳基;被重氢取代的 C_6 - C_{20} 的芳基;苄基;含有选自O、N、S、Si和P中至少一种杂原子的 C_2 - C_{20} 的杂环基; C_3 - C_{20} 的环烷基; C_7 - C_{20} 的芳基烷基;以及 C_8 - C_{20} 的芳基烯基形成的组中被选出的一种以上取代基被进一步取代,且当各取代基彼此相邻时彼此键合形成环。

[0104] 具体地,上述化学式1可以以下述化学式2至化学式6中的一个表示。下述化学式2至化学式6为对上述化学式1的 Ar^1 至 Ar^4 中的至少一个为上述化学式1a的情况的显示。

<化学式2>

<化学式3>

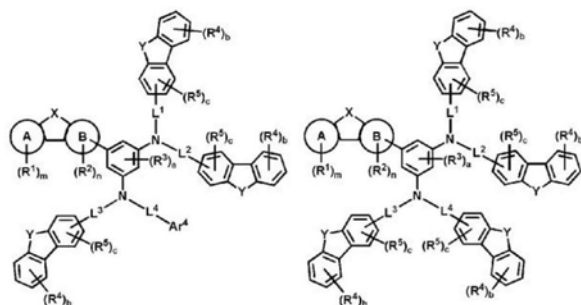
<化学式4>



[0105]

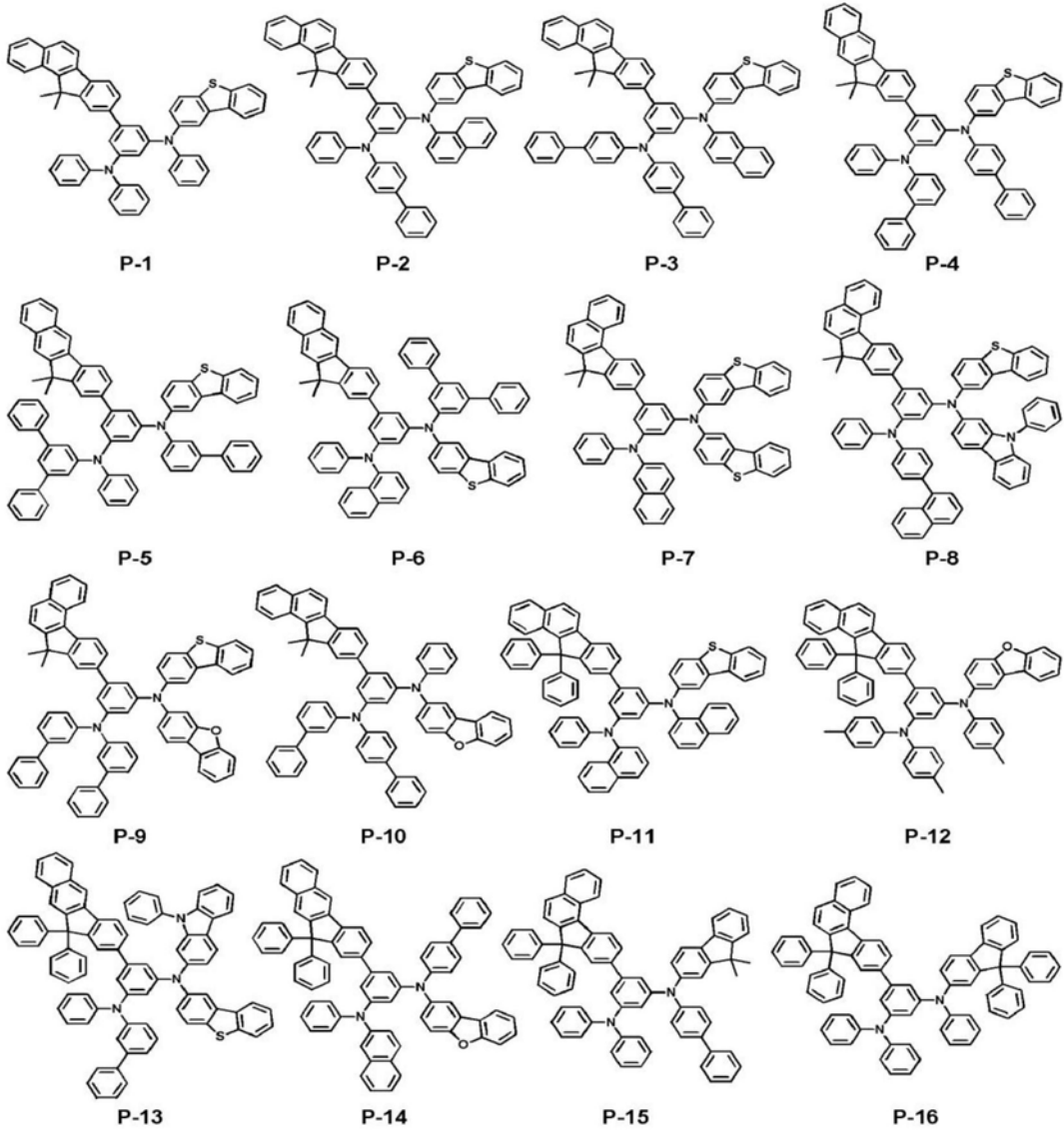
<化学式5>

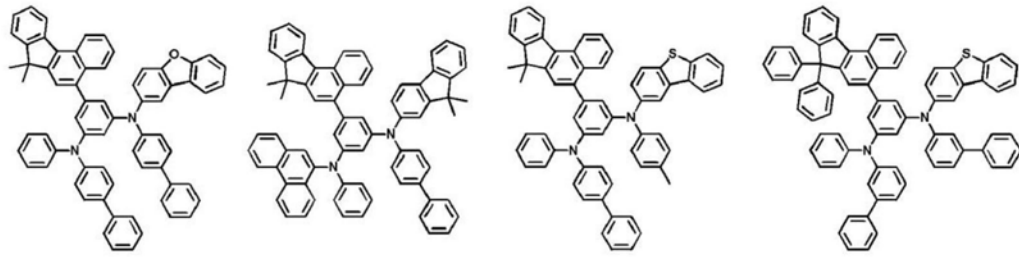
<化学式6>



[0106] 在上述化学式2至化学式6中,A环,B环,X,Y,R¹至R⁵,Ar²至Ar⁴,L¹至L⁴,m,n,a,b及c与上述化学式1的定义相同。

[0107] 具体地,上述化学式1可以为以下化合物中的一种。



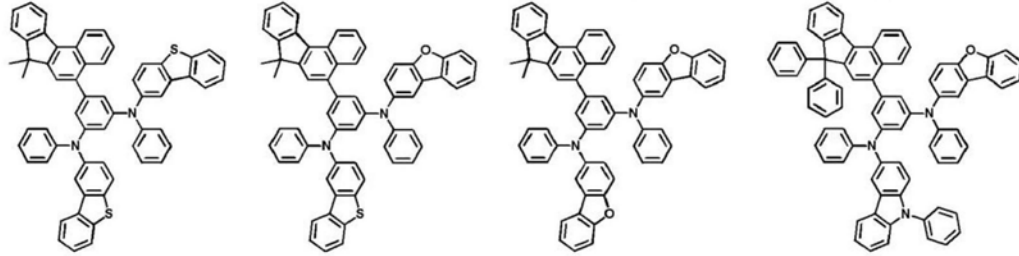


P-17

P-18

P-19

P-20



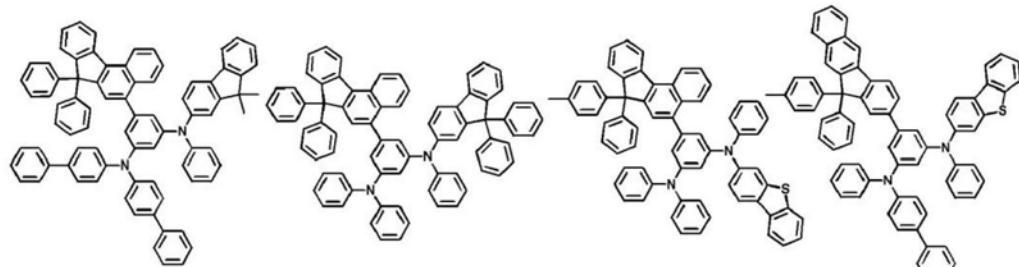
P-21

P-22

P-23

P-24

[0109]

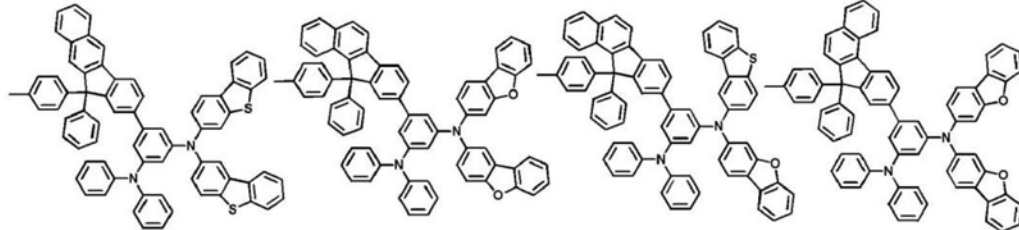


P-25

P-26

P-27

P-28

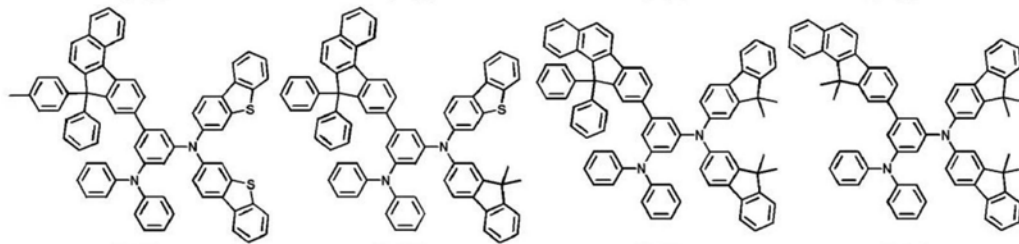


P-29

P-30

P-31

P-32



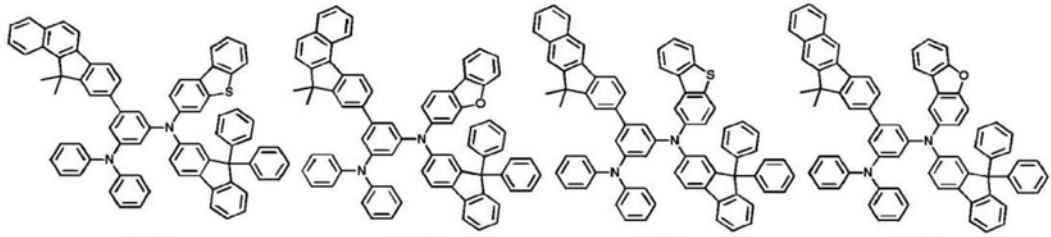
P-33

P-34

P-35

P-36

[0110]

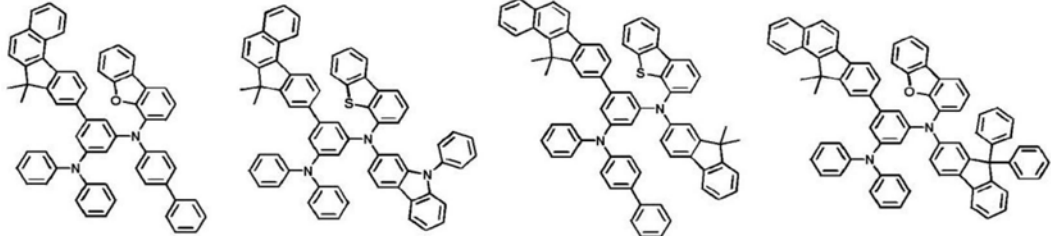


P-37

P-38

P-39

P-40

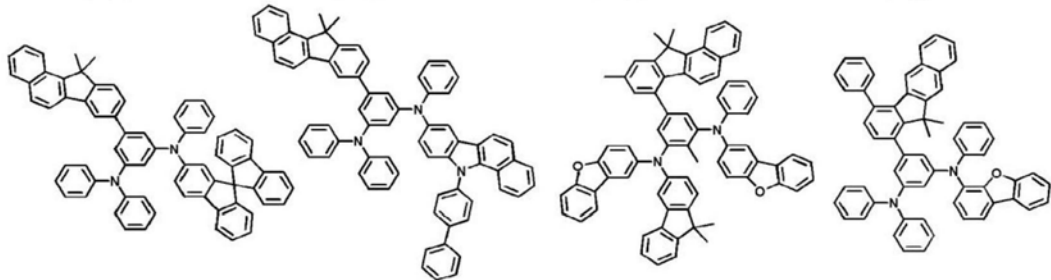


P-41

P-42

P-43

P-44

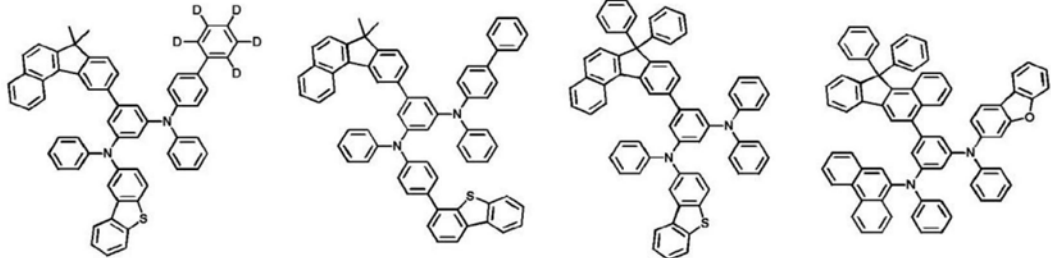


P-45

P-46

P-47

P-48

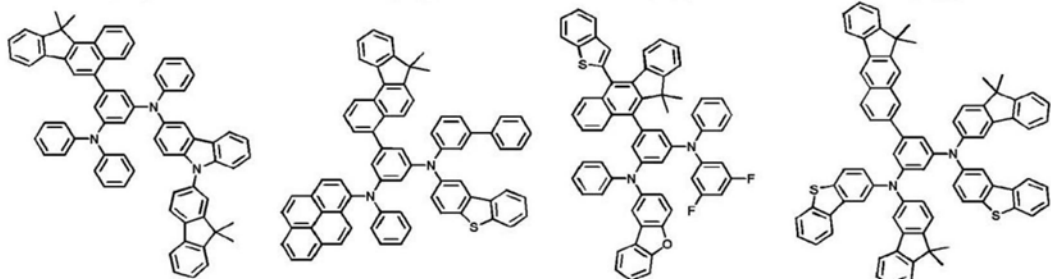


P-49

P-50

P-51

P-52

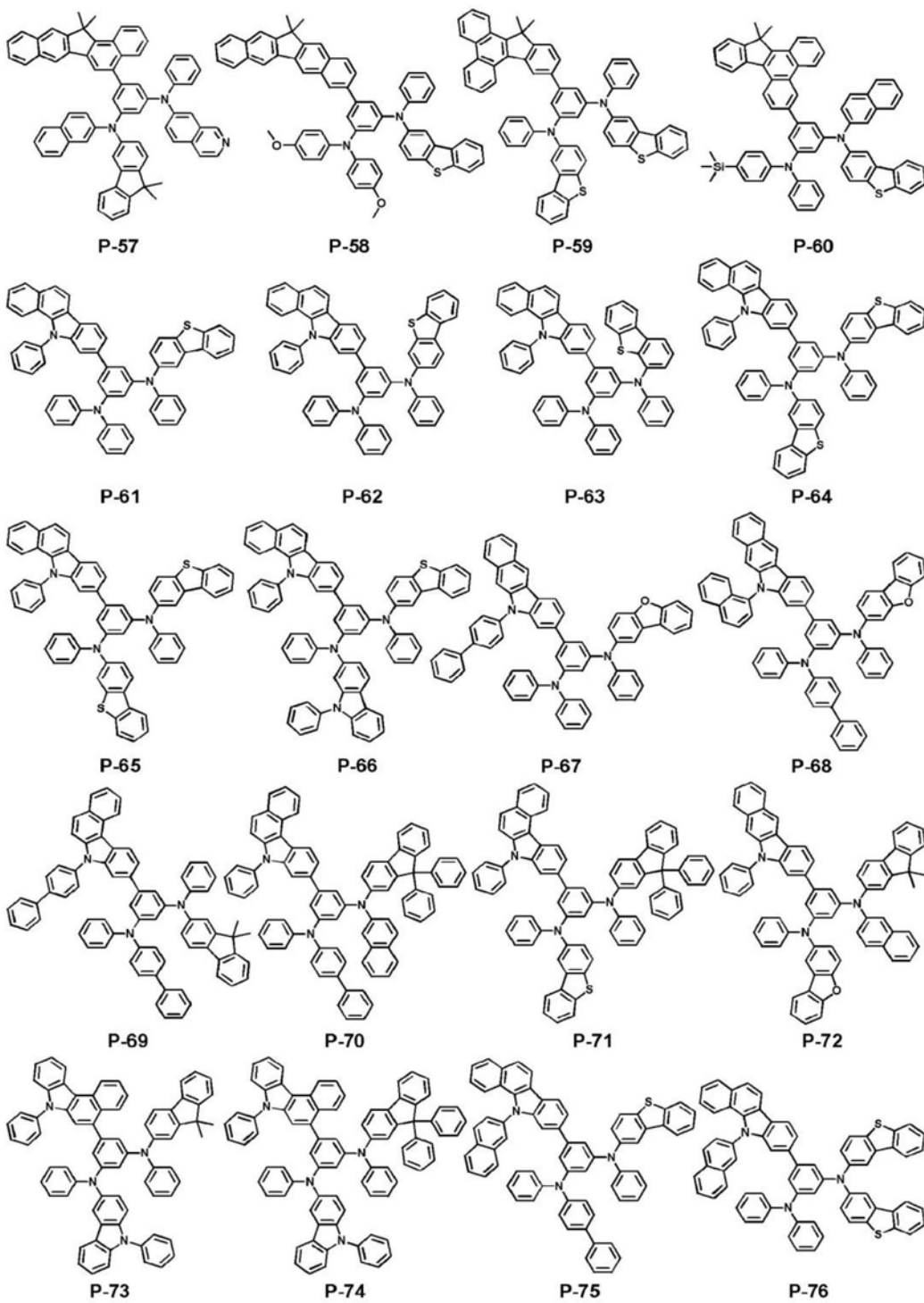


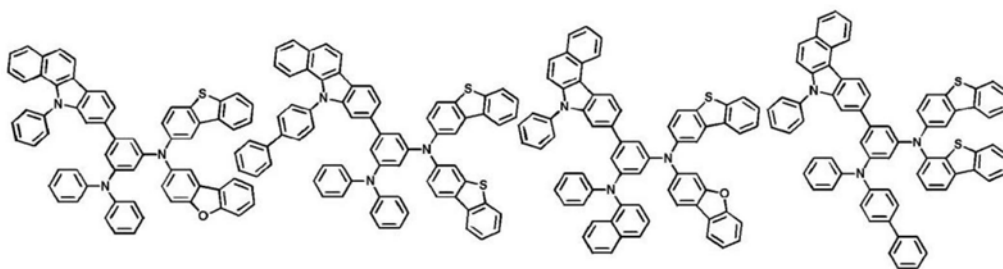
P-53

P-54

P-55

P-56



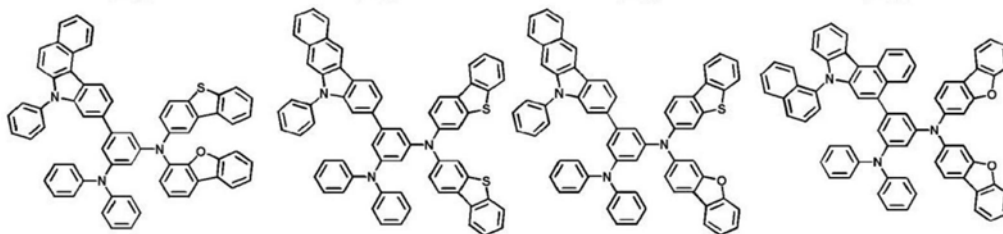


P-77

P-78

P-79

P-80



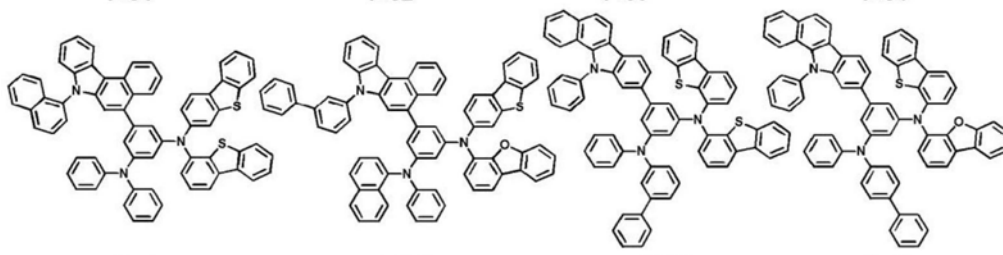
P-81

P-82

P-83

P-84

[0112]

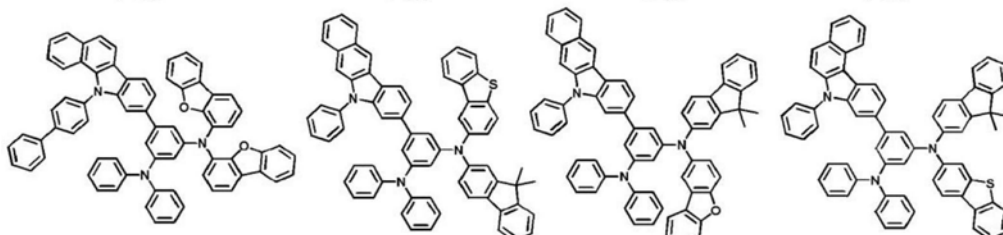


P-85

P-86

P-87

P-88

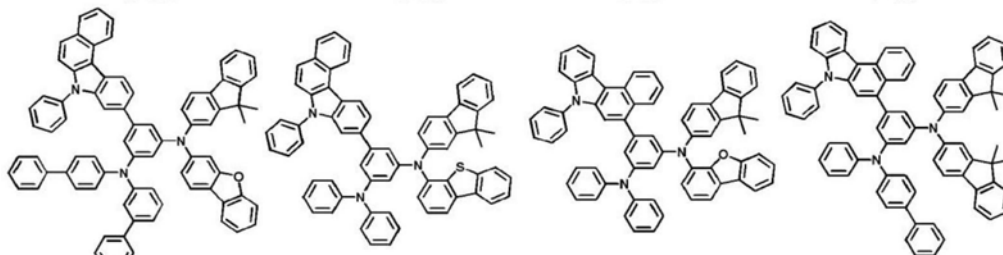


P-89

P-90

P-91

P-92

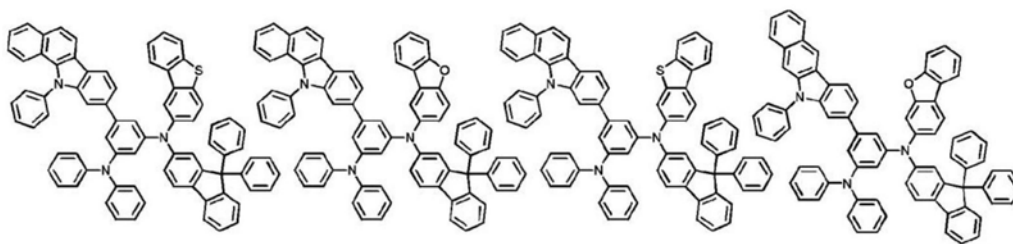


P-93

P-94

P-95

P-96

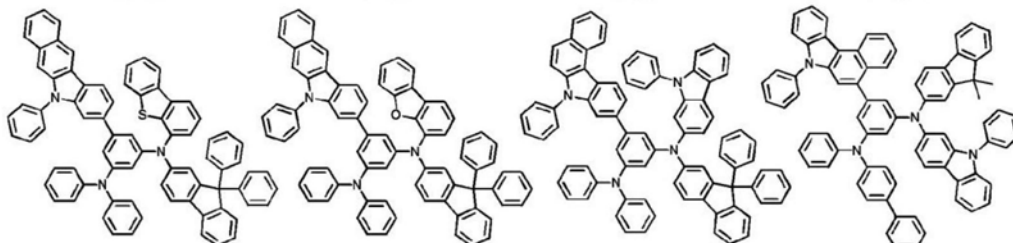


P-97

P-98

P-99

P-100



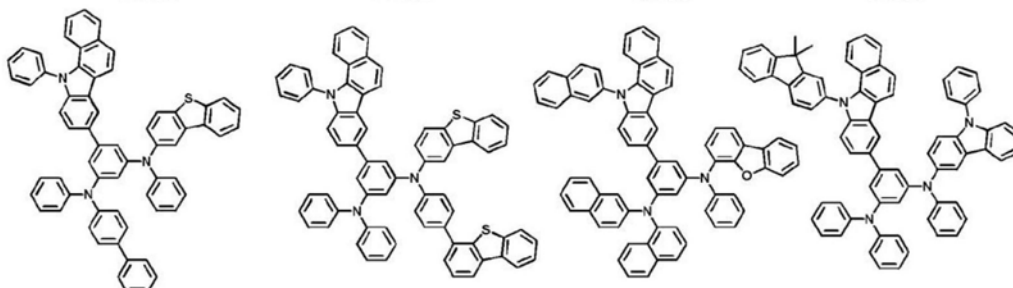
P-101

P-102

P-103

P-104

[0113]

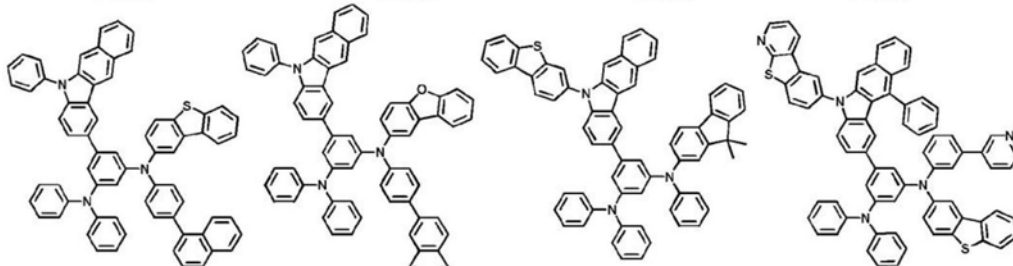


P-105

P-106

P-107

P-108

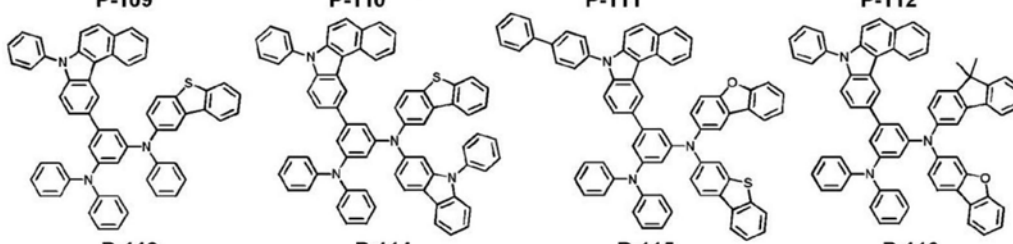


P-109

P-110

P-111

P-112

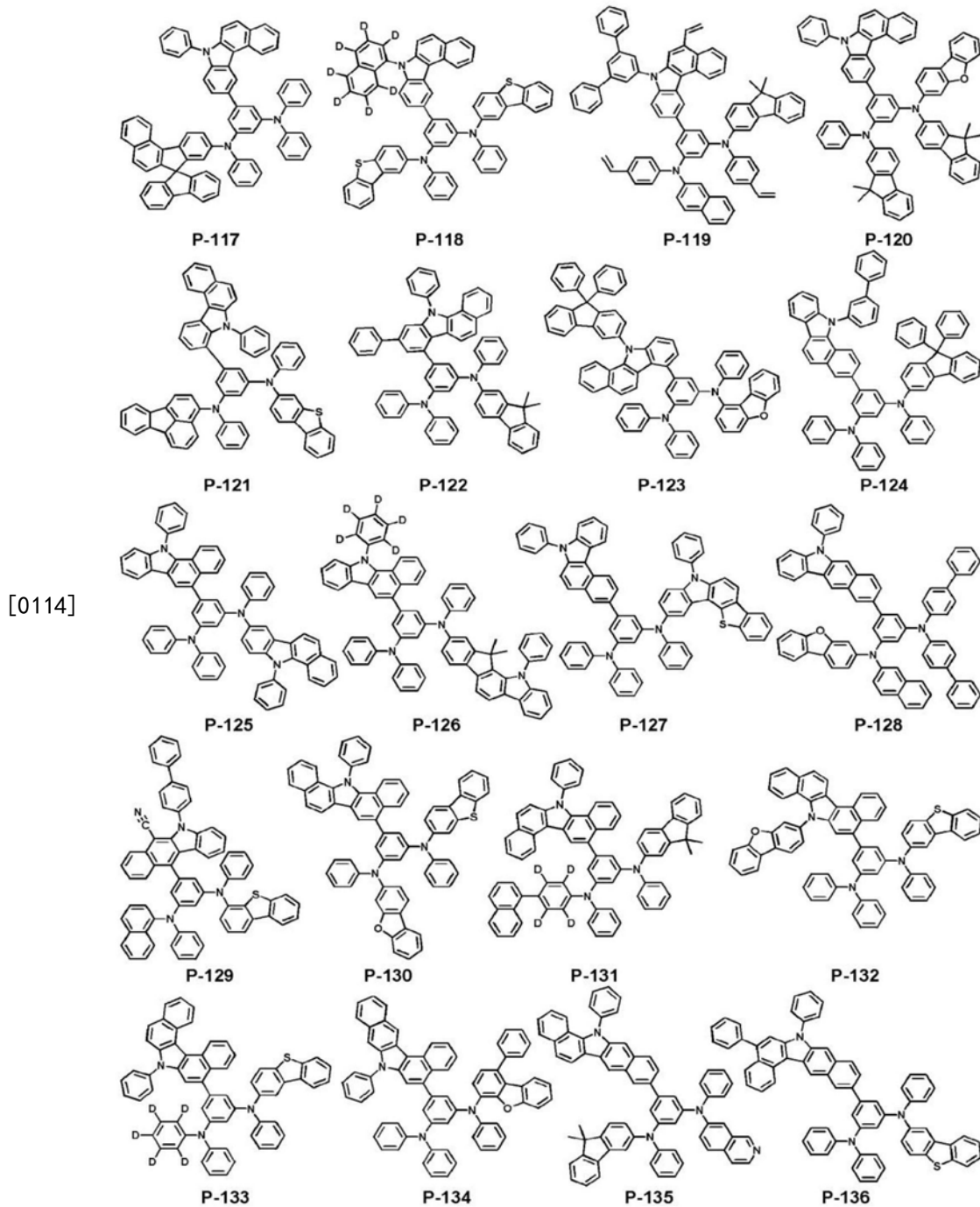


P-113

P-114

P-115

P-116



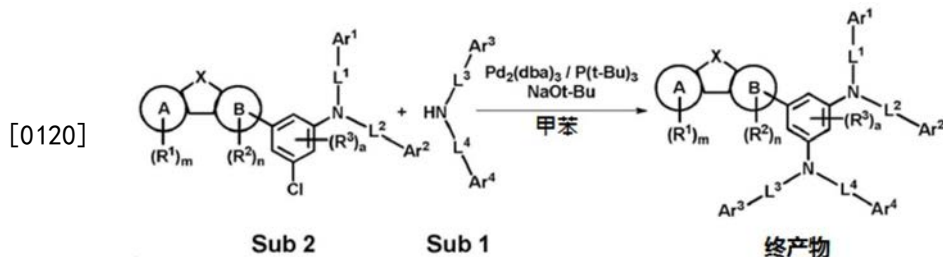
[0115] 根据本发明的另一侧面,本发明提供包括第一电极、第二电极以及位于上述第一电极和第二电极之间的有机物层的有机电气元件,此时,有机物层包括空穴注入层、空穴输送层、发光辅助层、发光层、电子输送辅助层、电子输送层及电子注入层中的至少一种层,上述化合物中的至少一种被包含在这种有机物层中。即,有机物层可以由上述化学式1表示的一种单独化合物或两种以上的混合物来形成。优选地,以上述化学式1来表示的单独化合物或包含两种以上的化合物的混合物,可包含于空穴输送层和/或发光辅助层或可形成这些层。

[0116] 以下,举出实施例来对本发明的由化学式1表示的化合物的合成例及有机电气元件的制备例进行具体说明,但本发明并不局限于以下的实施例。

[0117] 合成例

[0118] 本发明的以化学式1表示的化合物 (final products) 如以下化学式1, 通过使Sub1与Sub2反应来合成, 但不受此限定。

[0119] <反应式1>

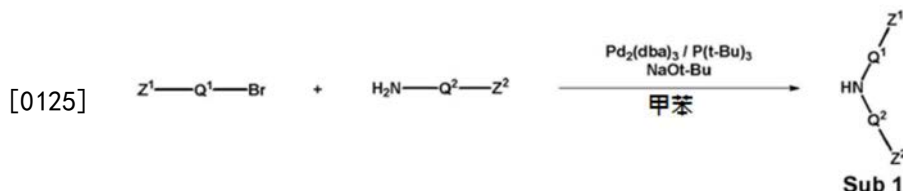


[0121] A环, B环, X, R¹至R³, Ar¹至Ar⁴, L¹至L⁴及a与上述化学式1的定义相同。

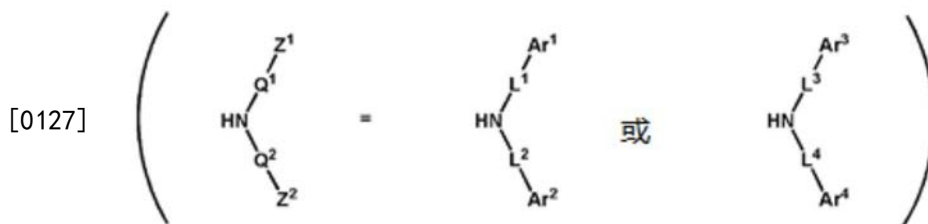
[0122] I. Sub1的合成

[0123] 反应式1的Sub1可通过以下反应式2的反应途径来合成, 但并不局限于此。

[0124] <反应式2>



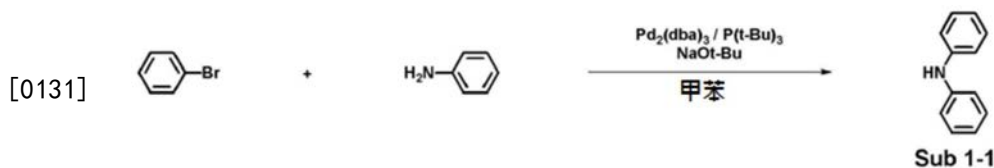
[0126] Z¹为Ar¹或Ar³, Z²为Ar²或Ar⁴, Q¹为L¹或L³, Q²为L²或L⁴



[0128] 属于Sub1的化合物的合成例如下。

[0129] 1. Sub1-1的合成例

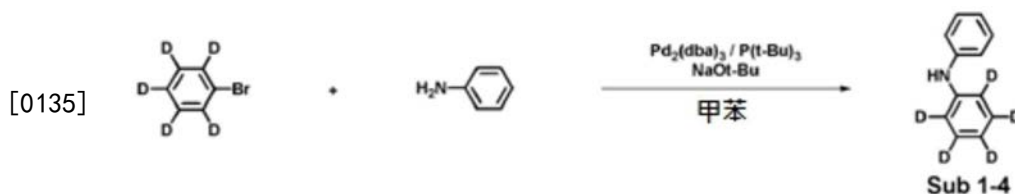
[0130] <反应式3>



[0132] 将起始物质bromobenzene (40.68g、259.09mmol) 在圆底烧瓶中以甲苯 (1360ml) 溶化后, 添加苯胺 (26.54g、285.00mmol)、Pd₂(dba)₃ (7.12g、7.77mmol)、50%P(t-Bu)₃ (10.1ml、20.73mmol)、NaOt-Bu (74.70g、777.28mmol), 在80℃下进行搅拌。反应完成后, 以CH₂Cl₂和水萃取后, 将有机层以MgSO₄干燥及浓缩, 然后将所生成的化合物通过硅胶柱之后进行重结晶, 从而获得生成物32.88g (收率: 75%)。

[0133] 2. Sub1-4的合成例

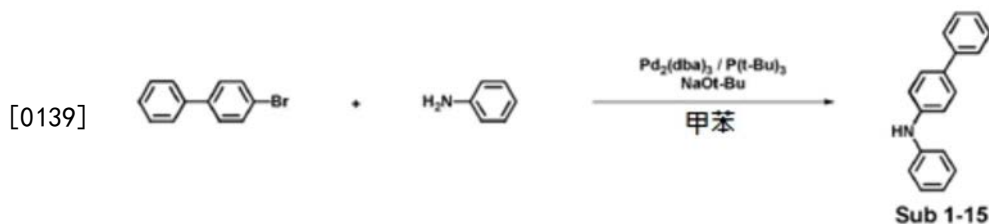
[0134] <反应式4>



[0136] 在作为起始物质的Bromobenzene-d₅ (12.74g、78.62mmol) 添加苯胺 (8.05g、86.48mmol)、Pd₂(dba)₃ (2.16g、2.36mmol)、50%P(t-Bu)₃ (3.1ml、6.29mmol)、NaOt-Bu (22.67g、235.87mmol)、甲苯 (550ml), 使用上述Sub1-1的合成例来获得生成物10.82g (收率:79%)。

[0137] 3.Sub1-15的合成例

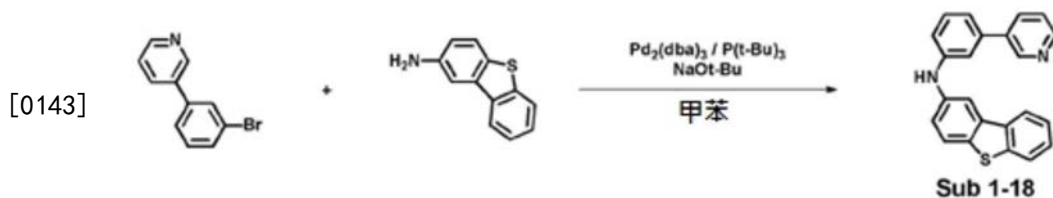
[0138] <反应式5>



[0140] 在作为起始物质的4-溴-1,1'-联苯 (23.65g、101.46mmol) 添加苯胺 (10.39g、111.60mmol)、Pd₂(dba)₃ (2.79g、3.04mmol)、50%P(t-Bu)₃ (4.0ml、8.12mmol)、NaOt-Bu (29.25g、304.38mmol)、甲苯 (710ml), 使用上述Sub1-1的合成例来获得生成物20.66g (收率:83%)。

[0141] 4.Sub1-18的合成例

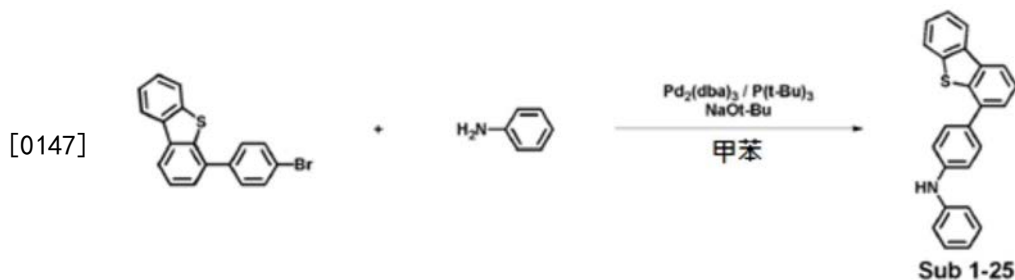
[0142] <反应式6>



[0144] 在作为起始物质的3-(3-溴苯)吡啶 (10.53g、44.98mmol) 添加d二苯并[b,d]噻吩-2-胺 (9.86g、49.48mmol)、Pd₂(dba)₃ (1.24g、1.35mmol)、50%P(t-Bu)₃ (1.8ml、3.60mmol)、NaOt-Bu (12.97g、134.95mmol)、甲苯 (315ml), 使用上述Sub1-1的合成例来获得生成物11.26g (收率:71%)。

[0145] 5.Sub1-25的合成例

[0146] <反应式7>

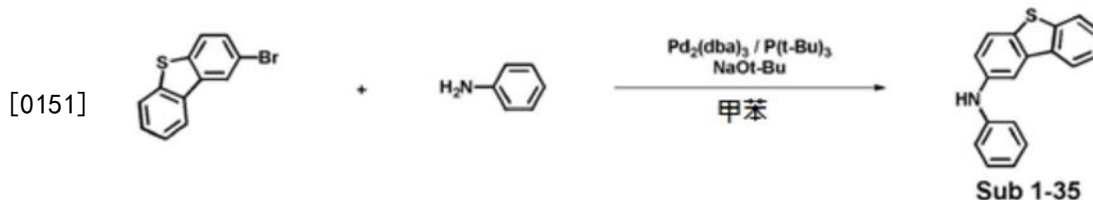


[0148] 在作为起始物质的4-(4-溴苯)二苯并[b,d]噻吩 (12.59g、37.11mmol) 添加苯胺

(3.80g、40.82mmol)、 $\text{Pd}_2(\text{dba})_3$ (1.02g、1.11mmol)、50% $\text{P}(\text{t-Bu})_3$ (1.4ml、2.97mmol)、 NaOt-Bu (10.70g、111.33mmol)、甲苯 (260ml), 使用上述Sub1-1的合成例来获得生成物10.43g (收率:80%)。

[0149] 6.Sub1-35的合成例

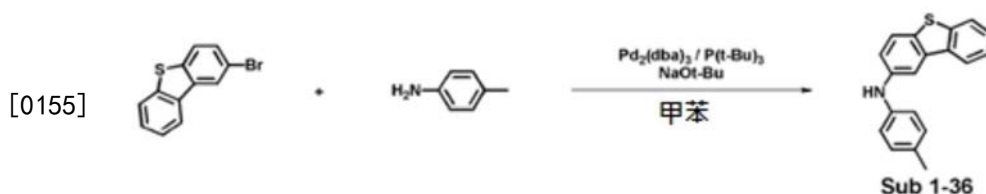
[0150] <反应式8>



[0152] 在作为起始物质的2-溴二苯并[b,d]噻吩 (38.11g、144.82mmol) 添加苯胺 (14.84g、159.30mmol)、 $\text{Pd}_2(\text{dba})_3$ (3.98g、4.34mmol)、50% $\text{P}(\text{t-Bu})_3$ (5.6ml、11.59mmol)、 NaOt-Bu (41.76g、434.47mmol)、甲苯 (760ml), 使用上述Sub1-1的合成例来获得生成物30.71g (收率:77%)。

[0153] 7.Sub1-36的合成例

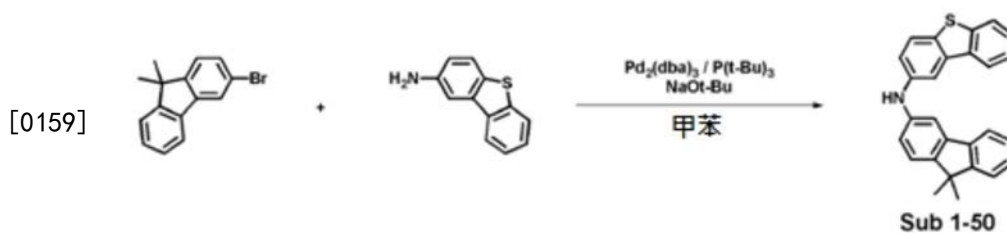
[0154] <反应式9>



[0156] 在作为起始物质的2-溴二苯并[b,d]噻吩 (12.55g、47.69mmol) 添加对甲苯胺 (5.62g、52.46mmol)、 $\text{Pd}_2(\text{dba})_3$ (1.31g、1.43mmol)、50% $\text{P}(\text{t-Bu})_3$ (1.9ml、3.82mmol)、 NaOt-Bu (13.75g、143.07mmol)、甲苯 (335ml), 使用上述Sub1-1的合成例来获得生成物10.21g (收率:74%)。

[0157] 8.Sub1-50的合成例

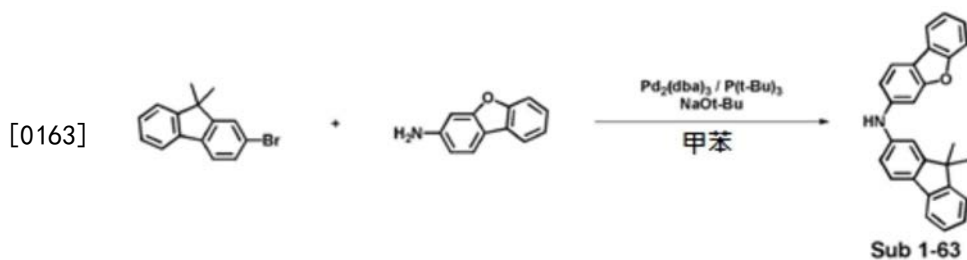
[0158] <反应式10>



[0160] 在作为起始物质的3-溴-9,9-二甲基-9H-芴 (21.84g、79.95mmol) 添加二苯并[b,d]噻吩-2-胺 (17.52g、87.95mmol)、 $\text{Pd}_2(\text{dba})_3$ (2.20g、2.40mmol)、50% $\text{P}(\text{t-Bu})_3$ (3.1ml、6.40mmol)、 NaOt-Bu (23.05g、239.85mmol)、甲苯 (560ml), 使用上述Sub1-1的合成例来获得生成物22.54g (收率:72%)。

[0161] 9.Sub1-63的合成例

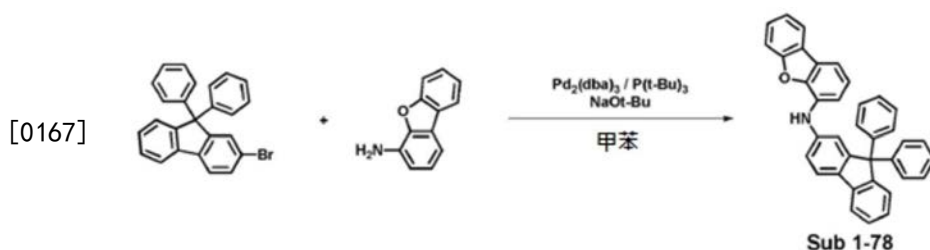
[0162] <反应式11>



[0164] 在作为起始物质的2-溴-9,9-二甲基-9H-芴(10.43g、38.18mmol)添加二苯并[b,d]呋喃-3-胺(7.69g、42.00mmol)、Pd₂(dba)₃(1.05g、1.15mmol)、50%P(t-Bu)₃(1.5ml、3.05mmol)、NaOt-Bu(11.01g、114.54mmol)、甲苯(270ml),使用上述Sub1-1的合成例来获得生成物10.46g(收率:73%)。

[0165] 10.Sub1-78的合成例

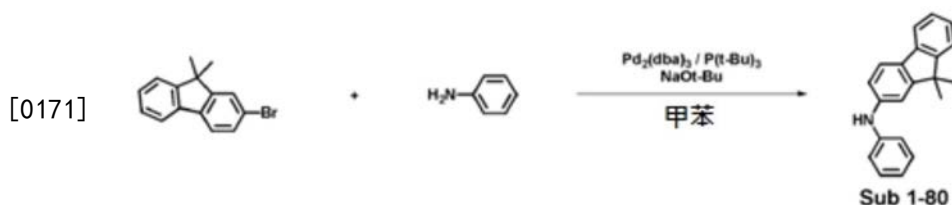
[0166] <反应式12>



[0168] 在作为起始物质的2-溴-9,9-二苯基-9H-芴(12.13g、30.53mmol)添加二苯并[b,d]呋喃-4-胺(6.15g、33.58mmol)、Pd₂(dba)₃(0.84g、0.92mmol)、50%P(t-Bu)₃(1.2ml、2.44mmol)、NaOt-Bu(8.80g、91.59mmol)、甲苯(215ml),使用上述Sub1-1的合成例来获得生成物10.37g(收率:68%)。

[0169] 11.Sub1-80的合成例

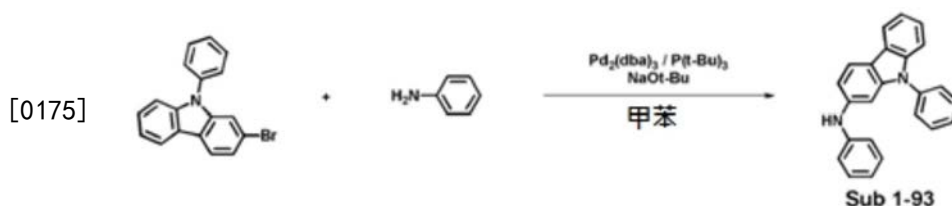
[0170] <反应式13>



[0172] 在作为起始物质的2-溴-9,9-二甲基-9H-芴(12.51g、45.80mmol)添加苯胺(4.69g、50.38mmol)、Pd₂(dba)₃(1.26g、1.37mmol)、50%P(t-Bu)₃(1.8ml、3.66mmol)、NaOt-Bu(13.20g、137.39mmol)、甲苯(320ml),使用上述Sub1-1的合成例来获得生成物10.72g(收率:82%)。

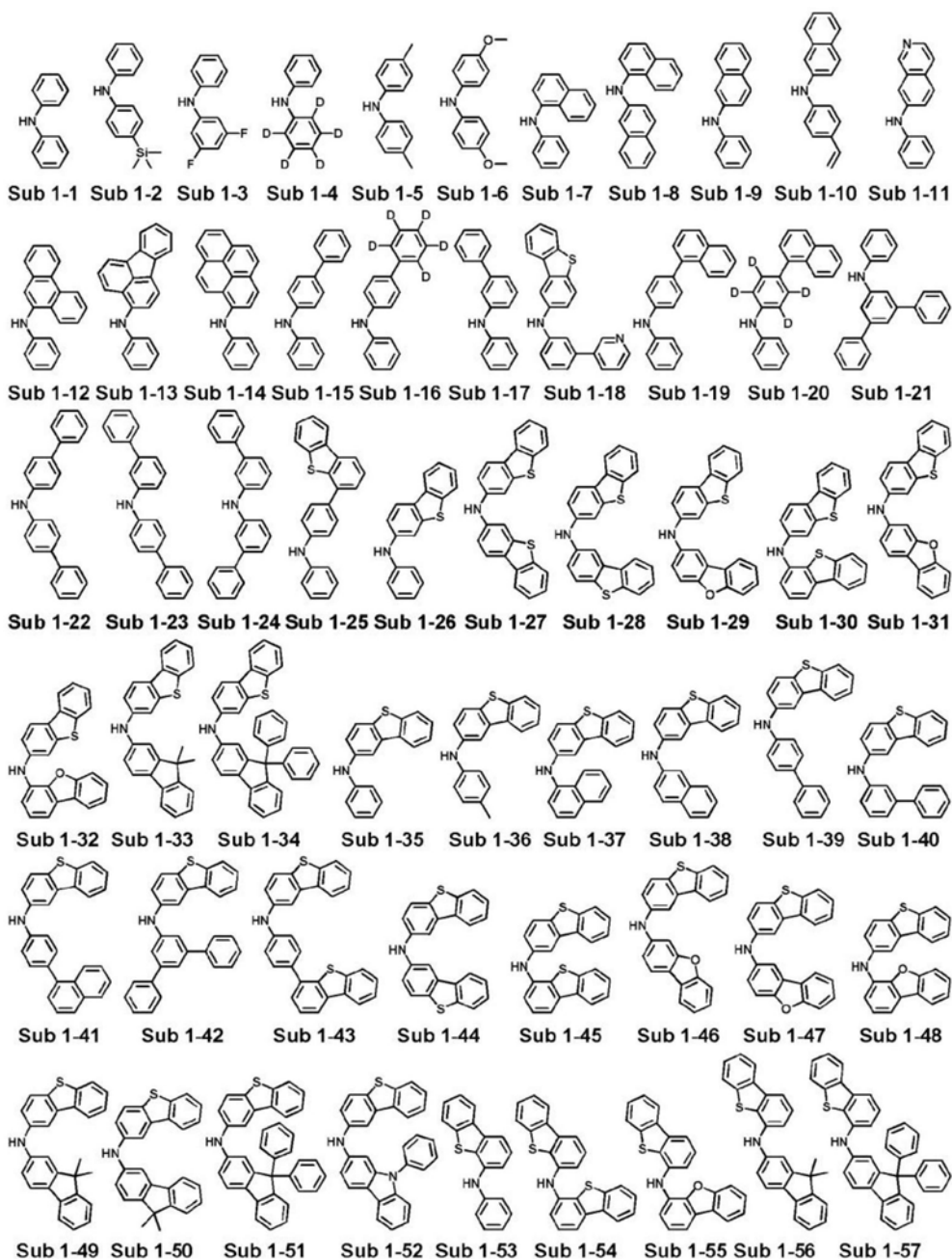
[0173] 12.Sub1-93的合成例

[0174] <反应式14>



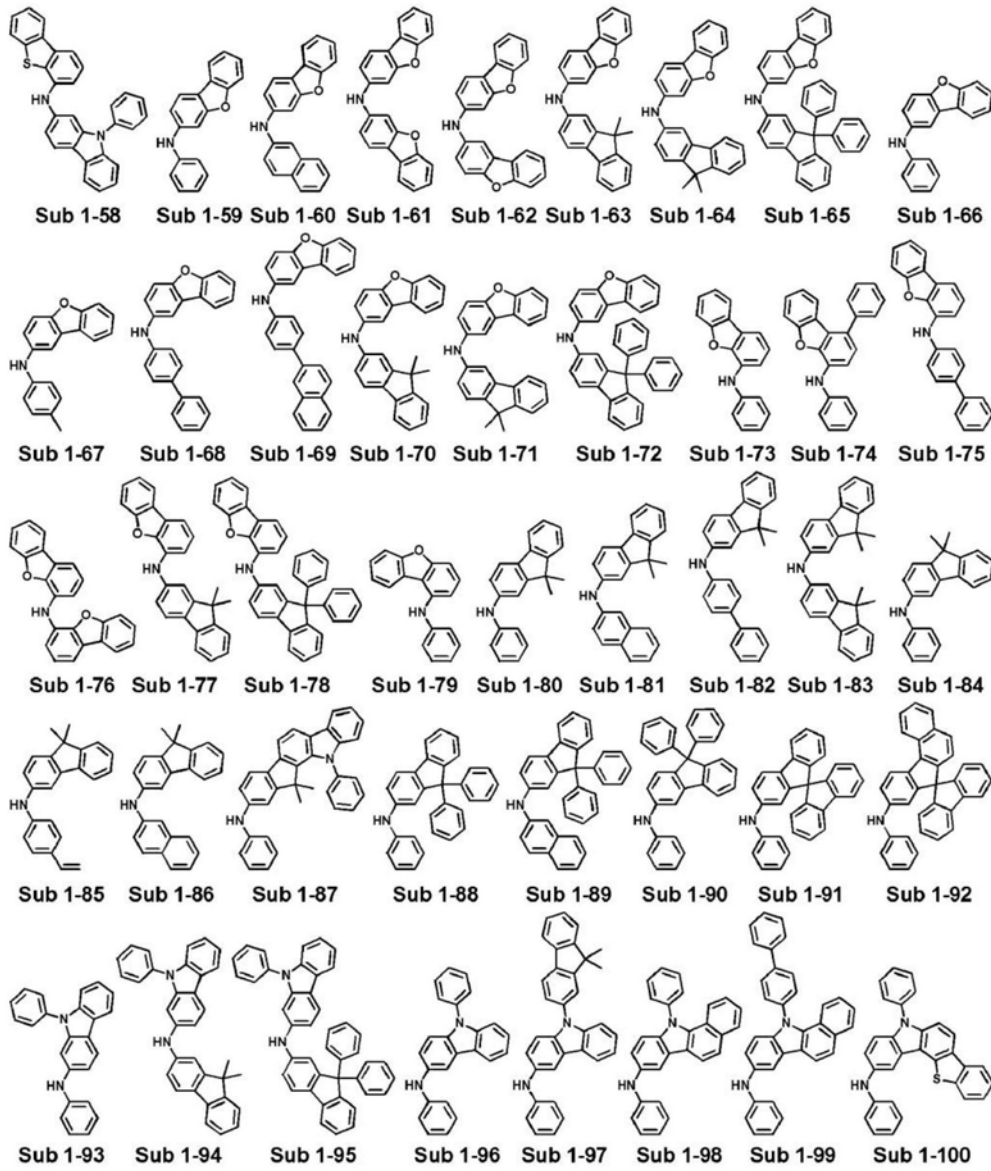
[0176] 在作为起始物质的2-溴-9-苯-9H-吡啶(14.71g、45.65mmol)添加苯胺(4.68g、50.22mmol)、 $\text{Pd}_2(\text{dba})_3$ (1.25g、1.37mmol)、50% $\text{P}(\text{t-Bu})_3$ (1.8ml、3.65mmol)、 NaOt-Bu (13.16g、136.96mmol)、甲苯(320ml),使用上述Sub1-1的合成例来获得生成物10.99g(收率:72%)。

[0177] 另一方面,属于Sub1的化合物可为如下所述的化合物,但并不局限于此,表1表示属于Sub1的化合物的FD-MS值。



[0178]

[0179]



[0180] [表1]

[0181]

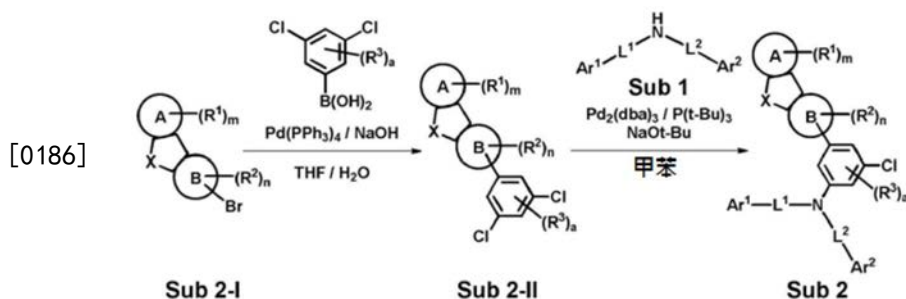
化合物	FD-MS	化合物	FD-MS
Sub 1-1	m/z=169.09 (C ₁₂ H ₁₁ N=169.22)	Sub 1-2	m/z=241.13 (C ₁₅ H ₁₉ NSi=241.40)
Sub 1-3	m/z=205.07 (C ₁₂ H ₉ F ₂ N=205.20)	Sub 1-4	m/z=174.12 (C ₁₂ H ₆ D ₅ N=174.25)
Sub 1-5	m/z=197.12 (C ₁₄ H ₁₅ N=197.28)	Sub 1-6	m/z=229.11 (C ₁₄ H ₁₅ NO ₂ =229.27)
Sub 1-7	m/z=219.10 (C ₁₆ H ₁₃ N=219.28)	Sub 1-8	m/z=269.12 (C ₂₀ H ₁₅ N=269.34)
Sub 1-9	m/z=219.10 (C ₁₆ H ₁₃ N=219.28)	Sub 1-10	m/z=245.12 (C ₁₈ H ₁₅ N=245.32)
Sub 1-11	m/z=220.10 (C ₁₅ H ₁₂ N ₂ =220.27)	Sub 1-12	m/z=269.12 (C ₂₀ H ₁₅ N=269.34)
Sub 1-13	m/z=293.12 (C ₂₂ H ₁₅ N=293.36)	Sub 1-14	m/z=293.12 (C ₂₂ H ₁₅ N=293.36)
Sub 1-15	m/z=245.12 (C ₁₈ H ₁₅ N=245.32)	Sub 1-16	m/z=250.15 (C ₁₈ H ₁₀ D ₅ N=250.35)
Sub 1-17	m/z=245.12 (C ₁₈ H ₁₅ N=245.32)	Sub 1-18	m/z=246.12 (C ₁₇ H ₁₄ N ₂ =246.31)
Sub 1-19	m/z=295.14 (C ₂₂ H ₁₇ N=295.38)	Sub 1-20	m/z=299.16 (C ₂₂ H ₁₃ D ₄ N=299.40)
Sub 1-21	m/z=321.15 (C ₂₄ H ₁₉ N=321.41)	Sub 1-22	m/z=321.15 (C ₂₄ H ₁₉ N=321.41)
Sub 1-23	m/z=321.15 (C ₂₄ H ₁₉ N=321.41)	Sub 1-24	m/z=321.15 (C ₂₄ H ₁₉ N=321.41)
Sub 1-25	m/z=351.11 (C ₂₄ H ₁₇ NS=351.46)	Sub 1-26	m/z=275.08 (C ₁₈ H ₁₃ NS=275.37)
Sub 1-27	m/z=381.06 (C ₂₄ H ₁₅ NS ₂ =381.51)	Sub 1-28	m/z=381.06 (C ₂₄ H ₁₅ NS ₂ =381.51)
Sub 1-29	m/z=381.06 (C ₂₄ H ₁₅ NS ₂ =381.51)	Sub 1-30	m/z=365.09 (C ₂₄ H ₁₅ NOS=365.45)
Sub 1-31	m/z=365.09 (C ₂₄ H ₁₅ NOS=365.45)	Sub 1-32	m/z=365.09 (C ₂₄ H ₁₅ NOS=365.45)
Sub 1-33	m/z=391.14 (C ₂₇ H ₂₁ NS=391.53)	Sub 1-34	m/z=515.17 (C ₃₇ H ₂₅ NS=515.67)
Sub 1-35	m/z=275.08 (C ₁₈ H ₁₃ NS=275.37)	Sub 1-36	m/z=289.09 (C ₁₉ H ₁₅ NS=289.39)
Sub 1-37	m/z=325.09 (C ₂₂ H ₁₅ NS=325.43)	Sub 1-38	m/z=325.09 (C ₂₂ H ₁₅ NS=325.43)
Sub 1-39	m/z=351.11 (C ₂₄ H ₁₇ NS=351.46)	Sub 1-40	m/z=351.11 (C ₂₄ H ₁₇ NS=351.46)
Sub 1-41	m/z=401.12 (C ₂₈ H ₁₉ NS=401.52)	Sub 1-42	m/z=427.14 (C ₃₀ H ₂₁ NS=427.56)
Sub 1-43	m/z=457.10 (C ₃₀ H ₁₉ NS ₂ =457.61)	Sub 1-44	m/z=381.06 (C ₂₄ H ₁₅ NS ₂ =381.51)
Sub 1-45	m/z=381.06 (C ₂₄ H ₁₅ NS ₂ =381.51)	Sub 1-46	m/z=365.09 (C ₂₄ H ₁₅ NOS=365.45)
Sub 1-47	m/z=365.09 (C ₂₄ H ₁₅ NOS=365.45)	Sub 1-48	m/z=365.09 (C ₂₄ H ₁₅ NOS=365.45)
Sub 1-49	m/z=391.14 (C ₂₇ H ₂₁ NS=391.53)	Sub 1-50	m/z=391.14 (C ₂₇ H ₂₁ NS=391.53)
Sub 1-51	m/z=515.17 (C ₃₇ H ₂₅ NS=515.67)	Sub 1-52	m/z=440.13 (C ₃₀ H ₂₀ N ₂ S=440.56)
Sub 1-53	m/z=275.08 (C ₁₈ H ₁₃ NS=275.37)	Sub 1-54	m/z=381.06 (C ₂₄ H ₁₅ NS ₂ =381.51)
Sub 1-55	m/z=365.09 (C ₂₄ H ₁₅ NOS=365.45)	Sub 1-56	m/z=391.14 (C ₂₇ H ₂₁ NS=391.53)
Sub 1-57	m/z=515.17 (C ₃₇ H ₂₅ NS=515.67)	Sub 1-58	m/z=440.13 (C ₃₀ H ₂₀ N ₂ S=440.56)
Sub 1-59	m/z=259.10 (C ₁₈ H ₁₃ NO=259.30)	Sub 1-60	m/z=309.12 (C ₂₂ H ₁₅ NO=309.36)
Sub 1-61	m/z=349.11 (C ₂₄ H ₁₅ NO ₂ =349.38)	Sub 1-62	m/z=349.11 (C ₂₄ H ₁₅ NO ₂ =349.38)
Sub 1-63	m/z=375.16 (C ₂₇ H ₂₁ NO=375.46)	Sub 1-64	m/z=375.16 (C ₂₇ H ₂₁ NO=375.46)
Sub 1-65	m/z=499.19 (C ₃₇ H ₂₅ NO=499.60)	Sub 1-66	m/z=259.10 (C ₁₈ H ₁₃ NO=259.30)
Sub 1-67	m/z=273.12 (C ₁₉ H ₁₅ NO=273.33)	Sub 1-68	m/z=335.13 (C ₂₄ H ₁₇ NO=335.40)

	Sub 1-69	m/z=385. 15 (C ₂₆ H ₁₉ N=385. 46)	Sub 1-70	m/z=375. 16 (C ₂₇ H ₂₁ N=375. 46)
	Sub 1-71	m/z=375. 16 (C ₂₇ H ₂₁ N=375. 46)	Sub 1-72	m/z=499. 19 (C ₃₇ H ₂₅ N=499. 60)
	Sub 1-73	m/z=259. 10 (C ₁₈ H ₁₃ N=259. 30)	Sub 1-74	m/z=335. 13 (C ₂₄ H ₁₇ N=335. 40)
	Sub 1-75	m/z=335. 13 (C ₂₄ H ₁₇ N=335. 40)	Sub 1-76	m/z=349. 11 (C ₂₄ H ₁₅ N=349. 38)
	Sub 1-77	m/z=375. 16 (C ₂₇ H ₂₁ N=375. 46)	Sub 1-78	m/z=499. 19 (C ₃₇ H ₂₅ N=499. 60)
	Sub 1-79	m/z=259. 10 (C ₁₈ H ₁₃ N=259. 30)	Sub 1-80	m/z=285. 15 (C ₂₁ H ₁₉ N=285. 38)
	Sub 1-81	m/z=335. 17 (C ₂₅ H ₂₁ N=335. 44)	Sub 1-82	m/z=361. 18 (C ₂₇ H ₂₃ N=361. 48)
[0182]	Sub 1-83	m/z=401. 21 (C ₃₀ H ₂₇ N=401. 54)	Sub 1-84	m/z=285. 15 (C ₂₁ H ₁₉ N=285. 38)
	Sub 1-85	m/z=311. 17 (C ₂₃ H ₂₁ N=311. 42)	Sub 1-86	m/z=335. 17 (C ₂₅ H ₂₁ N=335. 44)
	Sub 1-87	m/z=450. 21 (C ₃₃ H ₂₆ N ₂ =450. 57)	Sub 1-88	m/z=409. 18 (C ₃₁ H ₂₃ N=409. 52)
	Sub 1-89	m/z=459. 20 (C ₃₅ H ₂₅ N=459. 58)	Sub 1-90	m/z=409. 18 (C ₃₁ H ₂₃ N=409. 52)
	Sub 1-91	m/z=407. 17 (C ₃₁ H ₂₁ N=407. 51)	Sub 1-92	m/z=457. 18 (C ₃₅ H ₂₃ N=457. 56)
	Sub 1-93	m/z=334. 15 (C ₂₄ H ₁₈ N ₂ =334. 41)	Sub 1-94	m/z=450. 21 (C ₃₃ H ₂₆ N ₂ =450. 57)
	Sub 1-95	m/z=574. 24 (C ₄₃ H ₃₀ N ₂ =574. 71)	Sub 1-96	m/z=334. 15 (C ₂₄ H ₁₈ N ₂ =334. 41)
	Sub 1-97	m/z=450. 21 (C ₃₃ H ₂₆ N ₂ =450. 57)	Sub 1-98	m/z=384. 16 (C ₂₈ H ₂₀ N ₂ =384. 47)
	Sub 1-99	m/z=460. 19 (C ₃₄ H ₂₄ N ₂ =460. 57)	Sub 1-100	m/z=440. 13 (C ₃₀ H ₂₀ N ₂ S=440. 56)

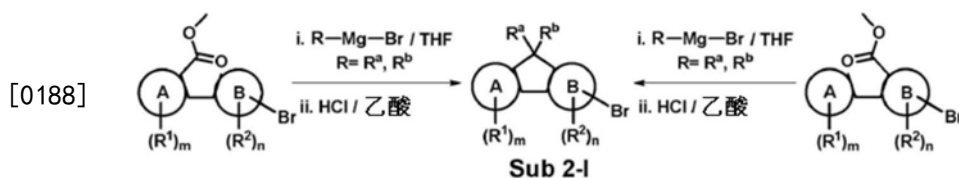
[0183] II. Sub2的合成

[0184] 上述反应式1的Sub2可通过以下反应式15至反应式17的反应途径来合成,但并不局限于此。

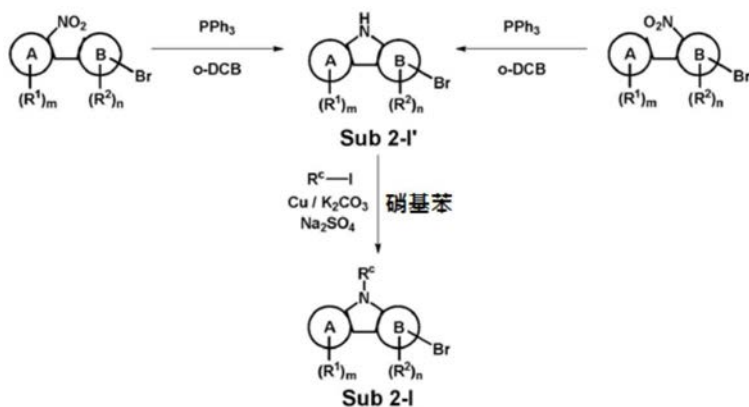
[0185] <反应式15>



[0187] <反应式16>X为CR^aR^b时



[0189] <反应式17>X为NR^c时

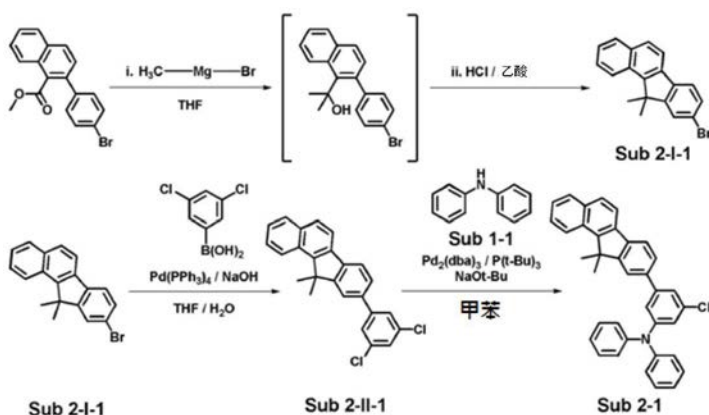


[0190]

[0191] 属于Sub2的化合物的合成例如下。

[0192] 1. Sub2-1的合成例

[0193] <反应式18>



[0194]

[0195] (1) Sub2-I-1的合成

[0196] 将起始物质2-(4-溴苯)-1-萘甲酸甲酯(43.26g、126.79mmol)放入圆底烧瓶中,以THF(635ml)溶化后,缓慢滴加含1.0M甲基溴化镁的THF(507.2ml、507.15mmol)之后,在常温下进行搅拌。反应完成后,以乙醚和水萃取后将有机层以MgSO₄干燥及浓缩,获得中间产物。将该中间产物以乙酸溶液(500ml)进行溶化后,在添加HCl(10ml)之后使其回流。反应完成后,添加水进行搅拌,将生成的固体减压过滤之后,用水和甲醇清洗,获得了白色粉末的生成物35.24g(收率:86%基于两步)。

[0197] (2) Sub2-II-1的合成

[0198] 将上述合成中获得的Sub2-I-1(25.67g、79.42mmol)以THF(260ml)溶解于圆底烧瓶中,添加(3,5-二氯苯)硼酸(15.15g、79.42mmol)、Pd(PPh₃)₄(2.75g、2.38mmol)、NaOH(9.53g、238.25mmol)、水(130ml),在80℃下进行搅拌。反应完成后,以CH₂Cl₂和水萃取后,将有机层以MgSO₄干燥及浓缩,然后将所生成的化合物通过硅胶柱之后进行重结晶,从而获得生成物23.81g(收率:77%)。

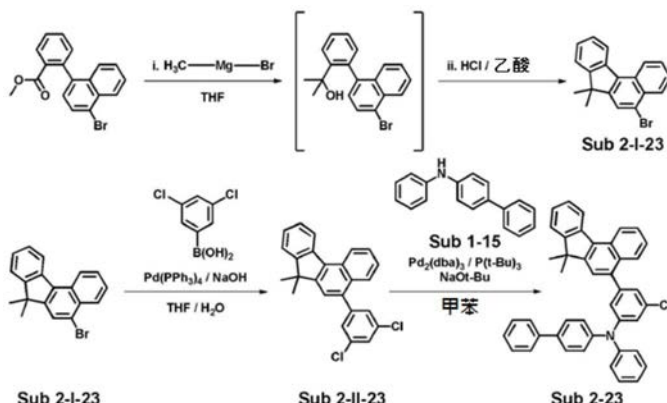
[0199] (3) Sub2-1的合成

[0200] 将上述合成中获得的Sub1-1(6.90g、40.78mmol)以甲苯(340ml)溶解于圆底烧瓶中,添加Sub2-II-1(23.81g、61.16mmol)、Pd₂(dba)₃(1.12g、1.22mmol)、50%P(t-Bu)₃(1.6ml、3.26mmol)、NaOt-Bu(11.76g、122.33mmol),在80℃下进行搅拌。反应完成后,以CH₂Cl₂和水萃取后,将有机层以MgSO₄干燥及浓缩,然后将所生成的化合物通过硅胶柱之后

进行重结晶,从而获得生成物12.35g(收率:58%)。

[0201] 2.Sub2-23的合成例

[0202] <反应式19>



[0203]

[0204] (1) Sub2-I-23的合成

[0205] 在起始物质2-(4-溴萘-1-基)苯甲酸甲酯(42.62g,124.91mmol)中使用含1.0M甲基溴化镁的THF(499.6ml、499.65mmol)、THF(625ml),获得中间产物后,添加乙酸溶液(500ml)、HCl(10ml),使用上述Sub2-I-1的合成例来获得了生成物33.51g(收率:83%基于两步)。

[0206] (2) Sub2-II-23的合成

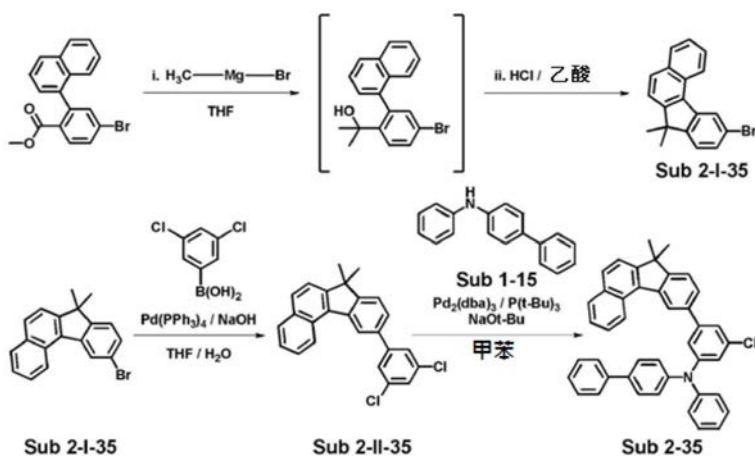
[0207] 将上述合成中获得的Sub2-I-23(16.57g、51.26mmol)添加(3,5-二氯苯)硼酸(9.78g、51.26mmol)、Pd(PPh₃)₄(1.78g、1.54mmol)、NaOH(6.15g、153.79mmol)、THF(170ml)、水(85ml),使用上述Sub2-II-1的合成例来获得生成物15.97g(收率:80%)。

[0208] (3) Sub2-23的合成

[0209] 将上述合成中获得的Sub1-15(6.71g、27.35mmol)添加Sub2-II-23(15.97g、41.03mmol)、Pd₂(dba)₃(0.75g、0.82mmol)、50%P(t-Bu)₃(1.1ml、2.19mmol)、NaOt-Bu(7.89g、82.06mmol)、甲苯(230ml),使用上述Sub2-1的合成例来获得生成物10.31g(收率:63%)。

[0210] 3.Sub2-35的合成例

[0211] <反应式20>



[0212]

[0213] (1) Sub2-I-35的合成

[0214] 在起始物质4-溴-2-(萘-1-基)苯甲酸甲酯(43.01g、126.06mmol)中使用含1.0M甲基溴化镁的THF(504.2ml、504.22mmol)、THF(630ml),获得中间产物后,添加乙酸溶液(500ml)、HCl(10ml),并使用上述Sub2-I-1的合成例,获得了生成物34.23g(收率:84%基于两步)。

[0215] (2) Sub2-II-35的合成

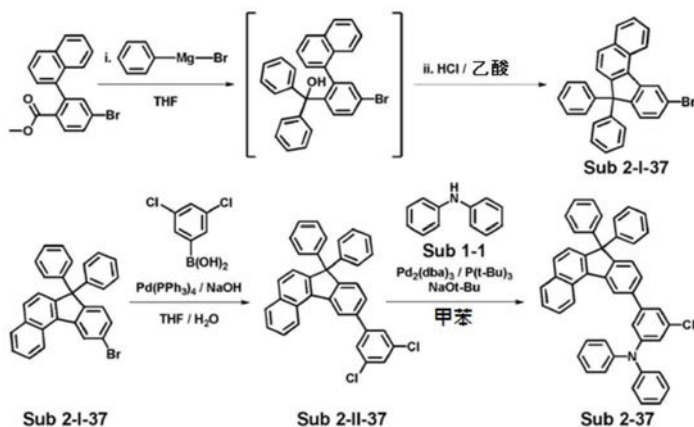
[0216] 将上述合成中获得的Sub2-I-35(16.13g、49.90mmol)添加(3,5-二氯苯)硼酸(9.52g、49.90mmol)、Pd(PPh₃)₄(1.73g、1.50mmol)、NaOH(5.99g、149.71mmol)、THF(160ml)、水(80ml),使用上述Sub2-II-1的合成例来获得生成物15.35g(收率:79%)。

[0217] (3) Sub2-35的合成

[0218] 将上述合成中获得的Sub1-15(6.45g、26.29mmol)添加Sub2-II-35(15.35g、39.44mmol)、Pd₂(dba)₃(0.72g、0.79mmol)、50%P(t-Bu)₃(1.0ml、2.10mmol)、NaOt-Bu(7.58g、78.88mmol)、甲苯(220ml),使用上述Sub2-1的合成例来获得生成物10.22g(收率:65%)。

[0219] 4. Sub2-37的合成例

[0220] <反应式21>



[0221] (1) Sub2-I-37的合成

[0222] 在起始物质4-溴-2-(萘-1-基)苯甲酸甲酯(42.78g、125.38mmol)中使用含1.0M甲基溴化镁的THF(501.5ml、501.52mmol)、THF(630ml)获得中间产物后,添加乙酸溶液(500ml)、HCl(10ml),并使用上述Sub2-I-1的合成例,获得了生成物43.19g(收率:77%基于两步)。

[0223] (2) Sub2-II-37的合成

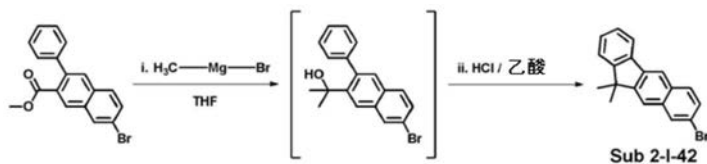
[0224] 将上述合成中获得的Sub2-I-37(24.43g、54.61mmol)添加(3,5-二氯苯)硼酸(10.42g、54.61mmol)、Pd(PPh₃)₄(1.89g、1.64mmol)、NaOH(6.55g、163.82mmol)、THF(180ml)、水(90ml),使用上述Sub2-II-1的合成例来获得生成物21.03g(收率:75%)。

[0225] (3) Sub2-37的合成

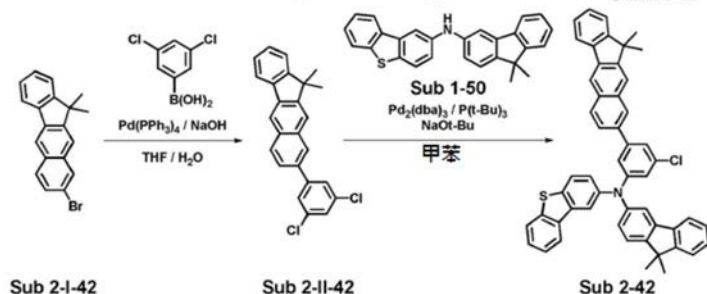
[0226] 将上述合成中获得的Sub1-1(4.62g、27.30mmol)添加Sub2-II-37(21.03g、40.95mmol)、Pd₂(dba)₃(0.75g、0.82mmol)、50%P(t-Bu)₃(1.1ml、2.18mmol)、NaOt-Bu(7.87g、81.91mmol)、甲苯(230ml),使用上述Sub2-1的合成例来获得生成物10.76g(收率:61%)。

[0227] 5. Sub2-42的合成例

[0229] <反应式22>



[0230]



[0231] (1) Sub2-I-42的合成

[0232] 在起始物质7-溴-3-苯-2-苯甲酸甲酯(42.72g、125.21mmol)中使用含1.0M甲基溴化镁的THF(500.8ml、500.82mmol)、THF(625ml)获得中间产物后,添加乙酸溶液(500ml)、HCl(10ml),并使用上述Sub2-I-1的合成例,获得了生成物31.97g(收率:79%基于两步)。

[0233] (2) Sub2-II-42的合成

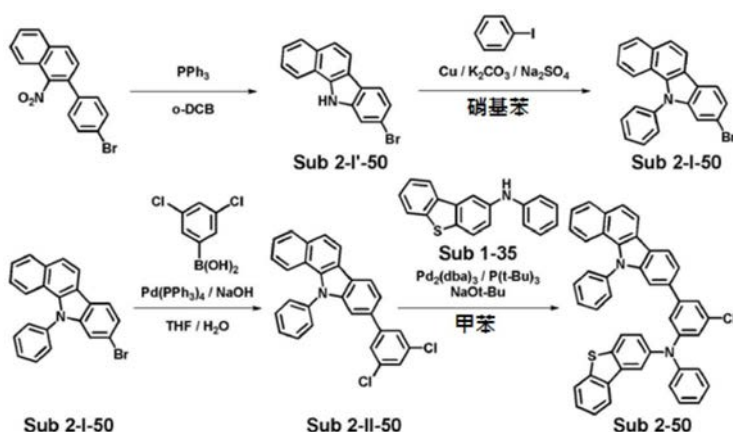
[0234] 将上述合成中获得的Sub2-I-42(17.84g、55.19mmol)添加(3,5-二氯苯)硼酸(10.53g、55.19mmol)、Pd(PPh₃)₄(1.91g、1.66mmol)、NaOH(6.62g、165.58mmol)、THF(180ml)、水(90ml),使用上述Sub2-II-1的合成例来获得生成物15.26g(收率:71%)。

[0235] (3) Sub2-42的合成

[0236] 将上述合成中获得的Sub1-50(10.23g、26.13mmol)添加Sub2-II-42(15.26g、39.19mmol)、Pd₂(dba)₃(0.72g、0.78mmol)、50%P(t-Bu)₃(1.0ml、2.09mmol)、NaOt-Bu(7.53g、78.38mmol)、甲苯(220ml),使用上述Sub2-1的合成例来获得生成物11.67g(收率:60%)。

[0237] 6.Sub2-50的合成例

[0238] <反应式23>



[0240] (1) Sub2-I'-50的合成

[0241] 在作为起始物质的2-(4-溴苯)-1-硝基萘(30.18g、91.97mmol)以邻-二氯苯(805ml)溶解于圆底烧瓶中,添加三苯基膦(60.31g、229.92mmol),在200℃下进行搅拌。反应完成后通过蒸馏来除去邻-二氯苯,以CH₂Cl₂和水萃取后,将有机层以MgSO₄干燥及浓缩,

然后将所生成的化合物通过硅胶柱之后进行重结晶,从而获得生成物19.07g(收率:70%)。

[0242] (2) Sub2-I-50的合成

[0243] 将上述合成中获得的Sub2-I'-50(19.07g、64.39mmol)以硝基苯(400ml)溶解于圆底烧瓶中,添加碘苯(19.70g、96.59mmol)、Na₂SO₄(9.15g、64.39mmol)、K₂CO₃(8.90g、64.39mmol)、Cu(1.23g、19.32mmol),在200℃下进行搅拌。反应完成后,通过蒸馏来除去硝基苯,用CH₂Cl₂与水进行萃取。将有机层以MgSO₄干燥及浓缩,然后将所生成的化合物通过硅胶柱之后进行重结晶,从而获得生成物17.98g(收率:75%)。

[0244] (3) Sub2-II-50的合成

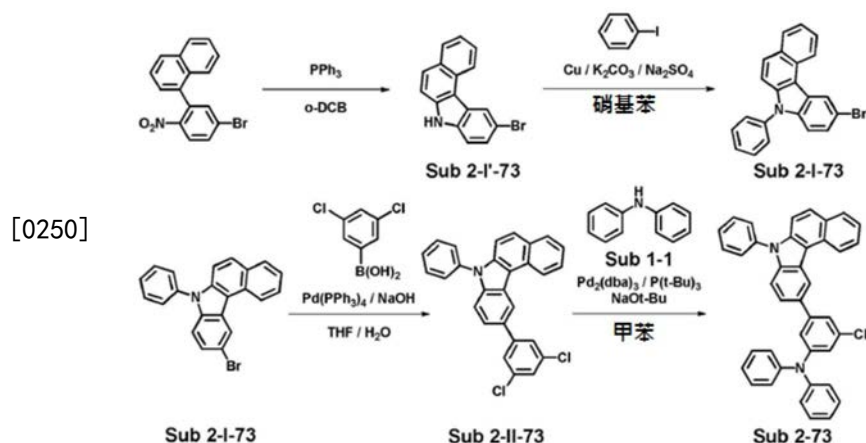
[0245] 将上述合成中获得的Sub2-I-50(16.93g、45.48mmol)添加(3,5-二氯苯)硼酸(8.68g、45.48mmol)、Pd(PPh₃)₄(1.58g、1.36mmol)、NaOH(5.46g、136.44mmol)、THF(150ml)、水(75ml),使用上述Sub2-II-1的合成例来获得生成物16.55g(收率:83%)。

[0246] (4) Sub2-50的合成

[0247] 将上述合成中获得的Sub1-35(6.93g、25.17mmol)添加Sub2-II-50(16.55g、37.75mmol)、Pd₂(dba)₃(0.69g、0.75mmol)、50%P(t-Bu)₃(1.0ml、2.01mmol)、NaOt-Bu(7.26g、75.50mmol)、甲苯(210ml),使用上述Sub2-1的合成例来获得生成物11.25g(收率:66%)。

[0248] 7. Sub2-73的合成例

[0249] <反应式24>



[0251] (1) Sub2-I'-73的合成

[0252] 在作为起始物质的1-(5-溴-2-硝基苯)萘(66.04g、201.24mmol)添加三苯基膦(131.96g、503.11mmol)、邻-二氯苯(1760ml),使用上述Sub2-I'-50的合成例来获得生成物43.51g(收率:73%)。

[0253] (2) Sub2-I-73的合成

[0254] 将上述合成中获得的Sub2-I'-73(43.51g、146.91mmol)添加1-碘苯(44.96g、220.37mmol)、Na₂SO₄(20.87g、146.91mmol)、K₂CO₃(20.30g、146.91mmol)、Cu(2.80g、44.07mmol)、硝基苯(920ml),使用上述Sub2-I-50的合成例来获得生成物42.66g(收率:78%)。

[0255] (3) Sub2-II-73的合成

[0256] 将上述合成中获得的Sub2-I-73(42.38g、113.85mmol)添加(3,5-二氯苯)硼酸

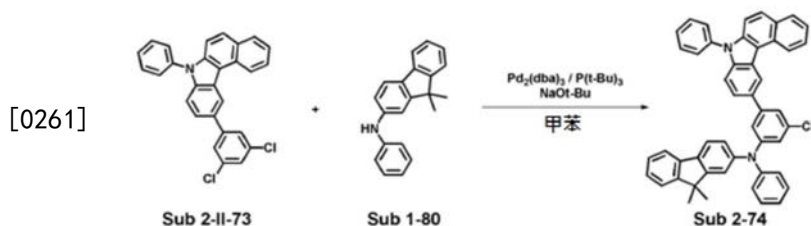
(21.72g、113.85mmol)、Pd(PPh₃)₄(3.95g、3.42mmol)、NaOH(13.66g、341.54mmol)、THF(380ml)、水(190ml),使用上述Sub2-II-1的合成例来获得生成物40.92g(收率:82%)。

[0257] (4) Sub2-73的合成

[0258] 将上述合成中获得的Sub1-1(5.52g、32.62mmol)添加Sub2-II-73(21.45g、48.93mmol)、Pd₂(dba)₃(0.90g、0.98mmol)、50%P(t-Bu)₃(1.3ml、2.61mmol)、NaOt-Bu(9.41g、97.86mmol)、甲苯(270ml),使用上述Sub2-1的合成例来获得生成物11.18g(收率:60%)。

[0259] 8.Sub2-74的合成例

[0260] <反应式25>



[0262] 将上述合成中获得的Sub1-80(7.87g、27.58mmol)添加Sub2-II-73(18.13g、41.37mmol)、Pd₂(dba)₃(0.76g、0.83mmol)、50%P(t-Bu)₃(1.1ml、2.21mmol)、NaOt-Bu(7.95g、82.73mmol)、甲苯(230ml),使用上述Sub2-1的合成例来获得生成物11.75g(收率:62%)。

[0263] 9.Sub2-80的合成例

[0264] <反应式26>

[0265] (1) Sub2-I'-80的合成

[0266] 在作为起始物质的2-(5-溴-2-硝基苯)-1-苯基萘(74.35g、183.92mmol)添加三苯基膦(120.60g、459.79mmol)、邻-二氯苯(1600ml),使用上述Sub2-I'-50的合成例来获得生成物41.08g(收率:60%)。

[0267] (2) Sub2-I-80的合成

[0268] 将上述合成中获得的Sub2-I'-80(41.08g、110.35mmol)添加6-碘苯并[4,5]噻吩并[2,3-b]吡啶(51.50g、165.53mmol)、Na₂SO₄(15.67g、110.35mmol)、K₂CO₃(15.25g、110.35mmol)、Cu(2.10g、33.11mmol)、硝基苯(690ml),使用上述Sub2-I-50的合成例来获得生成物38.01g(收率:62%)。

[0269] (3) Sub2-II-80的合成

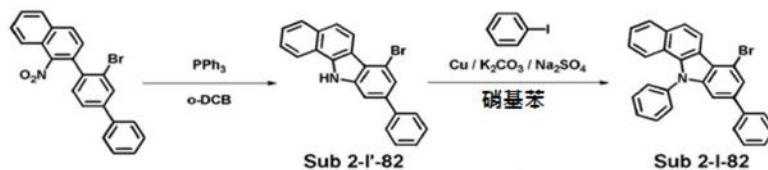
[0270] 将上述合成中获得的Sub2-I-80(37.45g、73.28mmol)添加(3,5-二氯苯)硼酸(13.98g、73.28mmol)、Pd(PPh₃)₄(2.54g、2.20mmol)、NaOH(8.79g、219.85mmol)、THF(240ml)、水(120ml),使用上述Sub2-II-1的合成例来获得生成物29.15g(收率:64%)。

[0271] (4) Sub2-80的合成

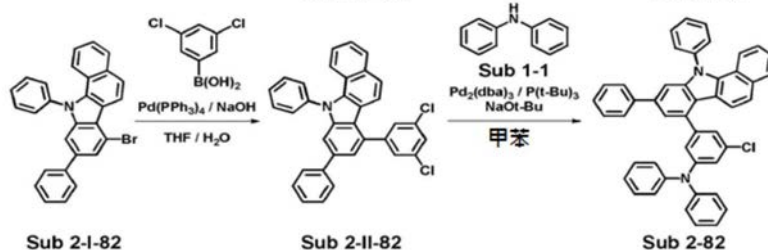
[0272] 将上述合成中获得的Sub1-1(5.29g、31.26mmol)添加Sub2-II-80(29.15g、46.89mmol)、Pd₂(dba)₃(0.86g、0.94mmol)、50%P(t-Bu)₃(1.2ml、2.50mmol)、NaOt-Bu(9.01g、93.78mmol)、甲苯(260ml),使用上述Sub2-1的合成例来获得生成物11.79g(收率:50%)。

[0273] 10.Sub2-82的合成例

[0274] <反应式27>



[0275]



[0276] (1) Sub2-I'-82的合成

[0277] 在作为起始物质的2-(3-溴-[1,1'-二苯]-4-yl)-1-硝基二萘(55.53g、137.36mmol)添加三苯基膦(90.07g、343.41mmol)、邻-二氯苯(1200ml),使用上述Sub2-I'-50的合成例来获得生成物32.73g(收率:64%)。

[0278] (2) Sub2-I-82的合成

[0279] 将上述合成中获得的Sub2-I'-82(32.73g、87.92mmol)添加1-碘苯(26.91g、131.88mmol)、Na₂SO₄(12.49g、87.92mmol)、K₂CO₃(12.15g、87.92mmol)、Cu(1.68g、26.38mmol)、硝基苯(550ml),使用上述Sub2-I-50的合成例来获得生成物29.57g(收率:75%)。

[0280] (3) Sub2-II-82的合成

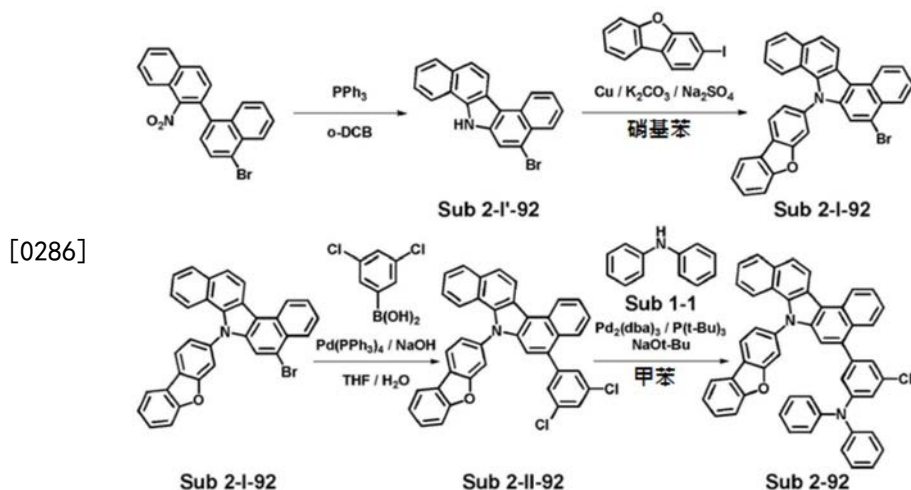
[0281] 将上述合成中获得的Sub2-I-82(28.46g、63.48mmol)添加(3,5-二氯苯)硼酸(12.11g、63.48mmol)、Pd(PPh₃)₄(2.20g、1.90mmol)、NaOH(7.62g、190.43mmol)、THF(210ml)、水(105ml),使用上述Sub2-II-1的合成例来获得生成物22.53g(收率:69%)。

[0282] (4) Sub2-82的合成

[0283] 将上述合成中获得的Sub1-1(4.94g、29.19mmol)添加Sub2-II-82(22.53g、43.79mmol)、Pd₂(dba)₃(0.80g、0.88mmol)、50%P(t-Bu)₃(1.1ml、2.34mmol)、NaOt-Bu(8.42g、87.58mmol)、甲苯(240ml),使用上述Sub2-1的合成例来获得生成物10.58g(收率:56%)。

[0284] 11.Sub2-92的合成例

[0285] <反应式28>



[0287] (1) Sub2-I'-92的合成

[0288] 在作为起始物质的4-溴-1'-硝基-1,2'-二萘(53.43g、141.27mmol)添加三苯基膦(92.63g、353.17mmol)、邻-二氯苯(1230ml),使用上述Sub2-I'-50的合成例来获得生成物33.26g(收率:68%)。

[0289] (2) Sub2-I-92的合成

[0290] 将上述合成中获得的Sub2-I'-92(33.26g、96.07mmol)添加3-碘二苯并[b,d]呋喃(42.38g、144.10mmol)、Na₂SO₄(13.65g、96.07mmol)、K₂CO₃(13.28g、96.07mmol)、Cu(1.83g、28.82mmol)、硝基苯(600ml),使用上述Sub2-I-50的合成例来获得生成物31.01g(收率:63%)。

[0291] (3) Sub2-II-92的合成

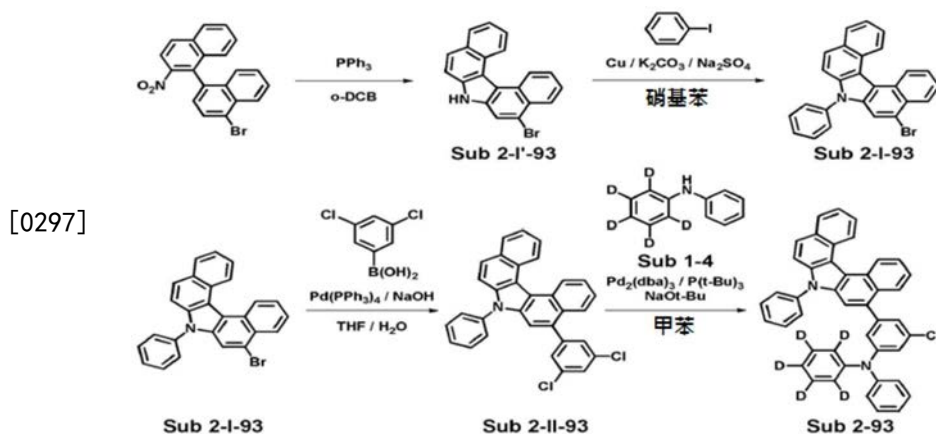
[0292] 将上述合成中获得的Sub2-I-92(29.27g、57.12mmol)添加(3,5-二氯苯)硼酸(10.90g、57.12mmol)、Pd(PPh₃)₄(1.98g、1.71mmol)、NaOH(6.85g、171.37mmol)、THF(190ml)、水(95ml),使用上述Sub2-II-1的合成例来获得生成物23.13g(收率:70%)。

[0293] (4) Sub2-92的合成

[0294] 将上述合成中获得的Sub1-1(4.51g、26.65mmol)添加Sub2-II-92(23.13g、39.98mmol)、Pd₂(dba)₃(0.73g、0.80mmol)、50%P(t-Bu)₃(1.0ml、2.13mmol)、NaOt-Bu(7.68g、79.96mmol)、甲苯(220ml),使用上述Sub2-1的合成例来获得生成物10.43g(收率:55%)。

[0295] 12.Sub2-93的合成例

[0296] <反应式29>



[0298] (1) Sub2-I'-93的合成

[0299] 在作为起始物质的4'-溴-2-硝基-1,1'-二萘(60.08g、158.85mmol)添加三苯基膦(104.16g、397.12mmol)、邻-二氯苯(1390ml),使用上述Sub2-I'-50的合成例来获得生成物35.75g(收率:65%)。

[0300] (2) Sub2-I-93的合成

[0301] 将上述合成中获得的Sub2-I'-93(35.75g、103.26mmol)添加1-碘苯(31.60g、154.89mmol)、 Na_2SO_4 (14.67g、103.26mmol)、 K_2CO_3 (14.27g、103.26mmol)、Cu(1.97g、30.98mmol)、硝基苯(645ml),使用上述Sub2-I-50的合成例来获得生成物30.09g(收率:69%)。

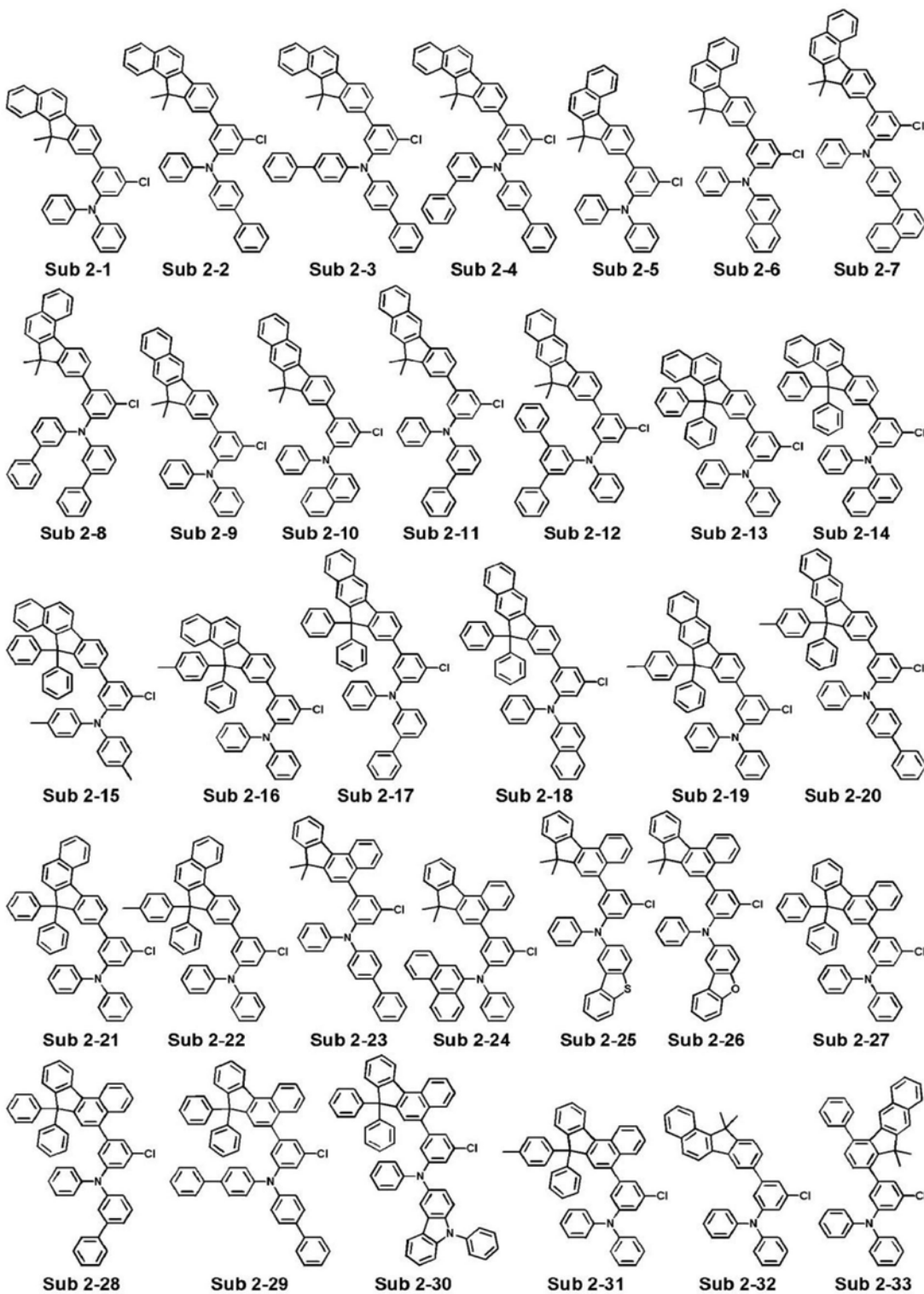
[0302] (3) Sub2-II-93的合成

[0303] 将上述合成中获得的Sub2-I-93(28.31g、67.03mmol)添加(3,5-二氯苯)硼酸(12.79g、67.03mmol)、 $\text{Pd}(\text{PPh}_3)_4$ (2.32g、2.01mmol)、NaOH(8.04g、201.10mmol)、THF(220ml)、水(110ml),使用上述Sub2-II-1的合成例来获得生成物23.25g(收率:71%)。

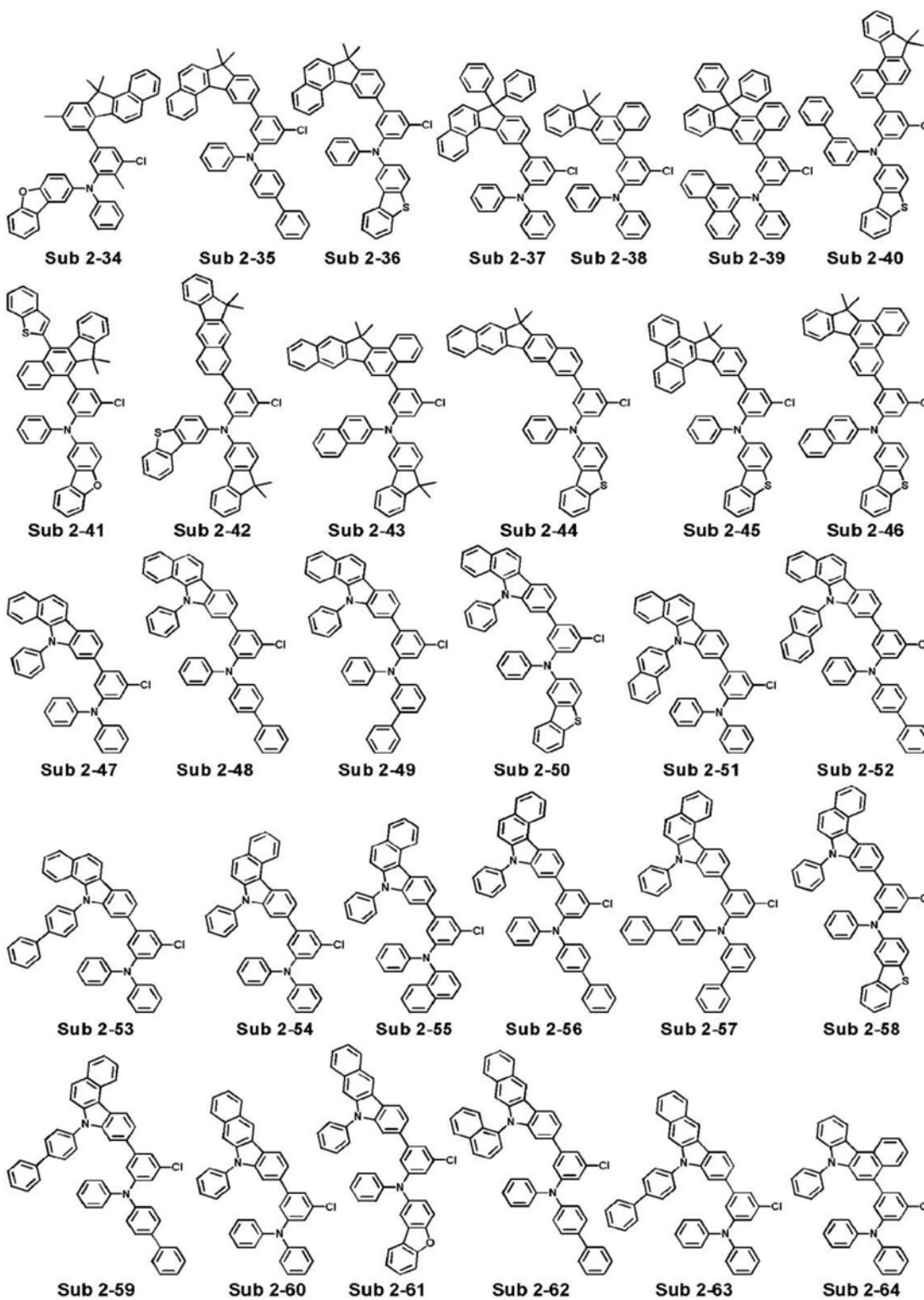
[0304] (4) Sub2-93的合成

[0305] 将上述合成中获得的Sub1-4(5.53g、31.74mmol)添加Sub2-II-93(23.25g、47.60mmol)、 $\text{Pd}_2(\text{dba})_3$ (0.87g、0.95mmol)、50% $\text{P}(\text{t-Bu})_3$ (1.2ml、2.54mmol)、NaOt-Bu(9.15g、95.21mmol)、甲苯(260ml),使用上述Sub2-1的合成例来获得生成物10.53g(收率:53%)。

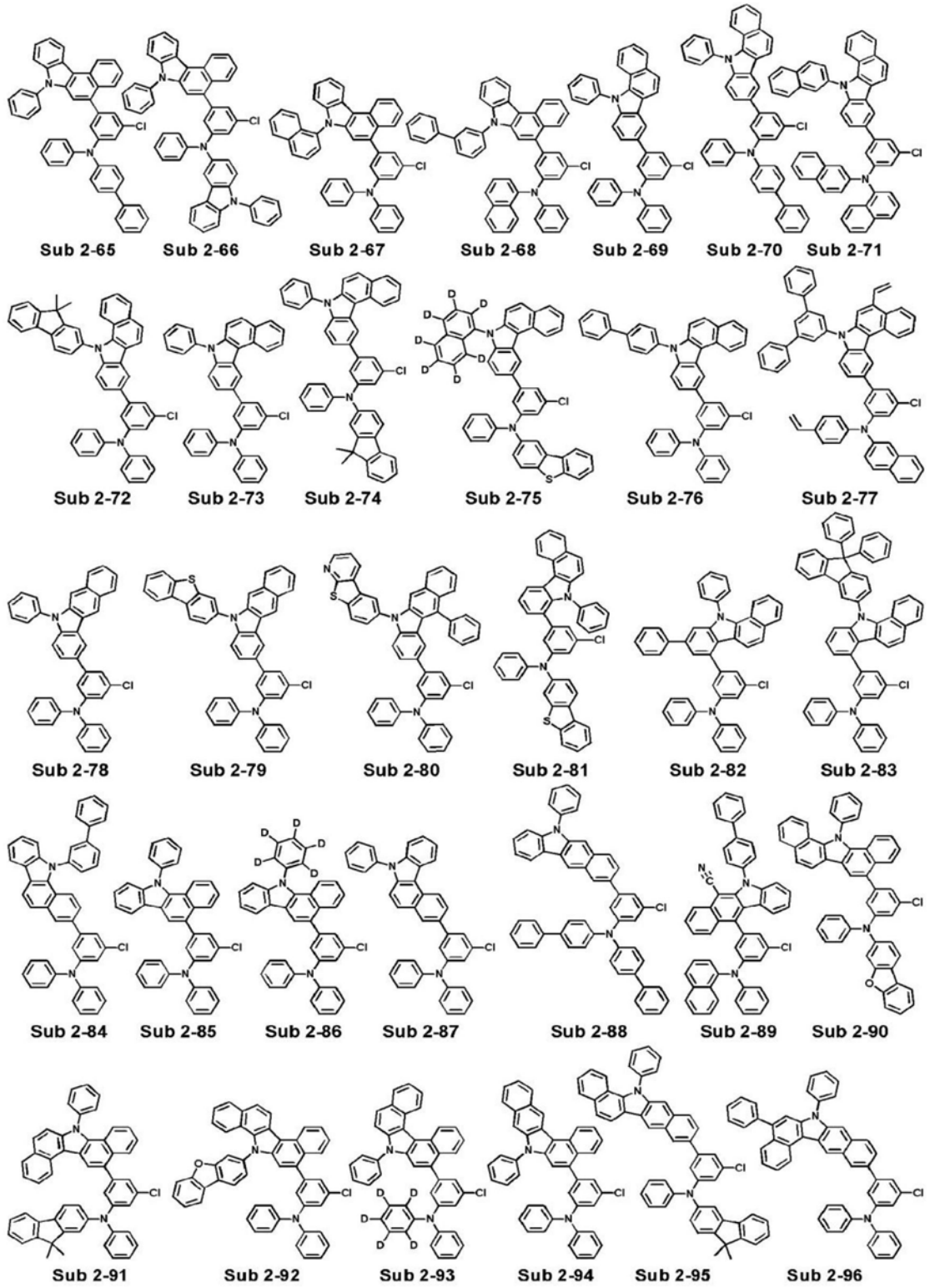
[0306] 另一方面,属于Sub2的化合物可为如下所述的化合物,但并不局限于此,表2表示属于Sub2的化合物的FD-MS值。



[0307]



[0308]



[0309]

[0310] [表2]

[0311]

化合物	FD-MS	化合物	FD-MS
Sub 2-1	m/z=521. 19 (C ₃₇ H ₂₈ ClN=522. 08)	Sub 2-2	m/z=597. 22 (C ₄₃ H ₃₂ ClN=598. 17)
Sub 2-3	m/z=673. 25 (C ₄₉ H ₃₆ ClN=674. 27)	Sub 2-4	m/z=673. 25 (C ₄₉ H ₃₆ ClN=674. 27)
Sub 2-5	m/z=521. 19 (C ₃₇ H ₂₈ ClN=522. 08)	Sub 2-6	m/z=571. 21 (C ₄₁ H ₃₀ ClN=572. 14)
Sub 2-7	m/z=647. 24 (C ₄₇ H ₃₄ ClN=648. 23)	Sub 2-8	m/z=673. 25 (C ₄₉ H ₃₆ ClN=674. 27)
Sub 2-9	m/z=521. 19 (C ₃₇ H ₂₈ ClN=522. 08)	Sub 2-10	m/z=571. 21 (C ₄₁ H ₃₀ ClN=572. 14)
Sub 2-11	m/z=597. 22 (C ₄₃ H ₃₂ ClN=598. 17)	Sub 2-12	m/z=673. 25 (C ₄₉ H ₃₆ ClN=674. 27)
Sub 2-13	m/z=645. 22 (C ₄₇ H ₃₂ ClN=646. 22)	Sub 2-14	m/z=695. 24 (C ₅₁ H ₃₄ ClN=696. 28)
Sub 2-15	m/z=673. 25 (C ₄₉ H ₃₆ ClN=674. 27)	Sub 2-16	m/z=659. 24 (C ₄₈ H ₃₄ ClN=660. 24)
Sub 2-17	m/z=721. 25 (C ₅₃ H ₃₆ ClN=722. 31)	Sub 2-18	m/z=695. 24 (C ₅₁ H ₃₄ ClN=696. 28)
Sub 2-19	m/z=659. 24 (C ₄₈ H ₃₄ ClN=660. 24)	Sub 2-20	m/z=735. 27 (C ₅₄ H ₃₈ ClN=736. 34)
Sub 2-21	m/z=645. 22 (C ₄₇ H ₃₂ ClN=646. 22)	Sub 2-22	m/z=659. 24 (C ₄₈ H ₃₄ ClN=660. 24)
Sub 2-23	m/z=597. 22 (C ₄₃ H ₃₂ ClN=598. 17)	Sub 2-24	m/z=621. 22 (C ₄₅ H ₃₂ ClN=622. 20)
Sub 2-25	m/z=627. 18 (C ₄₃ H ₃₀ ClNS=628. 22)	Sub 2-26	m/z=611. 20 (C ₄₃ H ₃₀ ClNO=612. 16)
Sub 2-27	m/z=645. 22 (C ₄₇ H ₃₂ ClN=646. 22)	Sub 2-28	m/z=721. 25 (C ₅₃ H ₃₆ ClN=722. 31)
Sub 2-29	m/z=797. 28 (C ₅₉ H ₄₀ ClN=798. 41)	Sub 2-30	m/z=810. 28 (C ₅₉ H ₃₈ ClN ₂ =811. 41)
Sub 2-31	m/z=659. 24 (C ₄₈ H ₃₄ ClN=660. 24)	Sub 2-32	m/z=521. 19 (C ₃₇ H ₂₈ ClN=522. 08)
Sub 2-33	m/z=597. 22 (C ₄₃ H ₃₂ ClN=598. 17)	Sub 2-34	m/z=639. 23 (C ₄₅ H ₃₄ ClNO=640. 21)
Sub 2-35	m/z=597. 22 (C ₄₃ H ₃₂ ClN=598. 17)	Sub 2-36	m/z=627. 18 (C ₄₃ H ₃₀ ClNS=628. 22)
Sub 2-37	m/z=645. 22 (C ₄₇ H ₃₂ ClN=646. 22)	Sub 2-38	m/z=521. 19 (C ₃₇ H ₂₈ ClN=522. 08)
Sub 2-39	m/z=745. 25 (C ₅₅ H ₃₆ ClN=746. 33)	Sub 2-40	m/z=703. 21 (C ₄₉ H ₃₄ ClNS=704. 32)
Sub 2-41	m/z=743. 20 (C ₅₁ H ₃₄ ClNOS=744. 34)	Sub 2-42	m/z=743. 24 (C ₅₂ H ₃₈ ClNS=744. 38)
Sub 2-43	m/z=737. 28 (C ₅₄ H ₄₀ ClN=738. 36)	Sub 2-44	m/z=677. 19 (C ₄₇ H ₃₂ ClNS=678. 28)
Sub 2-45	m/z=677. 19 (C ₄₇ H ₃₂ ClNS=678. 28)	Sub 2-46	m/z=727. 21 (C ₅₁ H ₃₄ ClNS=728. 34)
Sub 2-47	m/z=570. 19 (C ₄₀ H ₂₇ ClN ₂ =571. 11)	Sub 2-48	m/z=646. 22 (C ₄₆ H ₃₃ ClN ₂ =647. 20)
Sub 2-49	m/z=646. 22 (C ₄₆ H ₃₁ ClN ₂ =647. 20)	Sub 2-50	m/z=676. 17 (C ₄₆ H ₂₉ ClN ₂ S=677. 25)
Sub 2-51	m/z=620. 20 (C ₄₄ H ₂₉ ClN ₂ =621. 17)	Sub 2-52	m/z=696. 23 (C ₅₀ H ₃₃ ClN ₂ =697. 26)
Sub 2-53	m/z=646. 22 (C ₄₆ H ₃₁ ClN ₂ =647. 20)	Sub 2-54	m/z=570. 19 (C ₄₀ H ₂₇ ClN ₂ =571. 11)
Sub 2-55	m/z=620. 20 (C ₄₄ H ₂₉ ClN ₂ =621. 17)	Sub 2-56	m/z=646. 22 (C ₄₆ H ₃₁ ClN ₂ =647. 20)
Sub 2-57	m/z=722. 25 (C ₅₂ H ₃₅ ClN ₂ =723. 30)	Sub 2-58	m/z=676. 17 (C ₄₆ H ₂₉ ClN ₂ S=677. 25)
Sub 2-59	m/z=722. 25 (C ₅₂ H ₃₅ ClN ₂ =723. 30)	Sub 2-60	m/z=570. 19 (C ₄₀ H ₂₇ ClN ₂ =571. 11)
Sub 2-61	m/z=660. 20 (C ₄₆ H ₂₉ ClN ₂ O=661. 19)	Sub 2-62	m/z=696. 23 (C ₅₀ H ₃₃ ClN ₂ =697. 26)
Sub 2-63	m/z=646. 22 (C ₄₆ H ₃₁ ClN ₂ =647. 20)	Sub 2-64	m/z=570. 19 (C ₄₀ H ₂₇ ClN ₂ =571. 11)
Sub 2-65	m/z=646. 22 (C ₄₆ H ₃₁ ClN ₂ =647. 20)	Sub 2-66	m/z=735. 24 (C ₅₂ H ₃₄ ClN ₃ =736. 30)
Sub 2-67	m/z=620. 20 (C ₄₄ H ₂₉ ClN ₂ =621. 17)	Sub 2-68	m/z=696. 23 (C ₅₀ H ₃₃ ClN ₂ =697. 26)
Sub 2-69	m/z=570. 19 (C ₄₀ H ₂₇ ClN ₂ =571. 11)	Sub 2-70	m/z=646. 22 (C ₄₆ H ₃₁ ClN ₂ =647. 20)

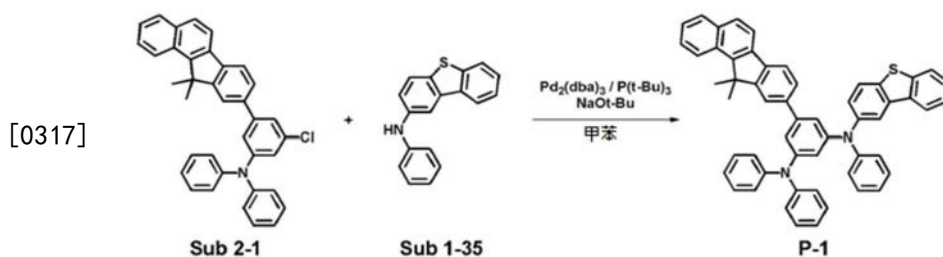
Sub 2-71	m/z=720. 23 (C ₅₂ H ₃₃ ClN ₂ =721. 28)	Sub 2-72	m/z=686. 25 (C ₄₉ H ₃₅ ClN ₂ =687. 27)
Sub 2-73	m/z=570. 19 (C ₄₀ H ₂₇ ClN ₂ =571. 11)	Sub 2-74	m/z=686. 25 (C ₄₉ H ₃₅ ClN ₂ =687. 27)
Sub 2-75	m/z=733. 23 (C ₅₀ H ₂₄ D ₇ ClN ₂ S=734. 36)	Sub 2-76	m/z=646. 22 (C ₄₆ H ₃₁ ClN ₂ =647. 20)
Sub 2-77	m/z=824. 30 (C ₆₀ H ₄₁ ClN ₂ =825. 43)	Sub 2-78	m/z=570. 19 (C ₄₀ H ₂₇ ClN ₂ =571. 11)
Sub 2-79	m/z=676. 17 (C ₄₆ H ₂₉ ClN ₂ S=677. 25)	Sub 2-80	m/z=753. 20 (C ₅₁ H ₃₂ ClN ₃ S=754. 34)
Sub 2-81	m/z=676. 17 (C ₄₆ H ₂₉ ClN ₂ S=677. 25)	Sub 2-82	m/z=646. 22 (C ₄₆ H ₃₁ ClN ₂ = 647. 20)
[0312] Sub 2-83	m/z=810. 28 (C ₅₉ H ₃₉ ClN ₂ =811. 41)	Sub 2-84	m/z=646. 22 (C ₄₆ H ₃₁ ClN ₂ =647. 20)
Sub 2-85	m/z=570. 19 (C ₄₀ H ₂₇ ClN ₂ =571. 11)	Sub 2-86	m/z=575. 22 (C ₄₀ H ₂₂ D ₅ ClN ₂ =576. 14)
Sub 2-87	m/z=570. 19 (C ₄₀ H ₂₇ ClN ₂ =571. 11)	Sub 2-88	m/z=722. 25 (C ₅₂ H ₃₅ ClN ₂ =723. 30)
Sub 2-89	m/z=721. 23 (C ₅₁ H ₃₂ ClN ₃ =722. 27)	Sub 2-90	m/z=710. 21 (C ₅₀ H ₃₁ ClN ₂ O=711. 25)
Sub 2-91	m/z=736. 26 (C ₅₃ H ₃₇ ClN ₂ =737. 33)	Sub 2-92	m/z=710. 21 (C ₅₀ H ₃₁ ClN ₂ O=711. 25)
Sub 2-93	m/z=625. 23 (C ₄₄ H ₂₄ D ₅ ClN ₂ =626. 20)	Sub 2-94	m/z=620. 20 (C ₄₄ H ₂₅ ClN ₂ =621. 17)
Sub 2-95	m/z=736. 26 (C ₅₃ H ₃₇ ClN ₂ =737. 33)	Sub 2-96	m/z=696. 23 (C ₅₀ H ₃₃ ClN ₂ =697. 26)

[0313] III. 最终生成物 (Final product) 的合成

[0314] 将Sub2 (1当量) 以甲苯溶解于圆底烧瓶中, 添加Sub1 (1当量)、Pd₂(dba)₃ (0.03当量)、P(t-Bu)₃ (0.08当量)、NaOt-Bu (3当量), 在100℃下进行搅拌。反应完成后, 以CH₂Cl₂和水萃取后, 将有机层以MgSO₄干燥及浓缩, 然后将所生成的化合物通过硅胶柱之后进行重结晶, 获得最终生成物 (final product)。

[0315] 1. P-1的合成例

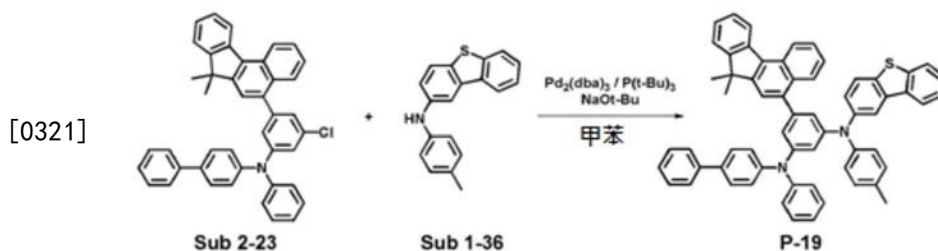
[0316] <反应式30>



[0318] 将在上述合成中获得的Sub2-1 (6.31g、12.09mmol) 以甲苯 (120ml) 溶解于圆底烧瓶中, 添加Sub1-35 (3.33g、12.09mmol)、Pd₂(dba)₃ (0.33g、0.36mmol)、50%P(t-Bu)₃ (0.5ml、0.97mmol)、NaOt-Bu (3.48g、36.26mmol), 在100℃下进行搅拌。反应完成后, 以CH₂Cl₂和水萃取后, 将有机层以MgSO₄干燥及浓缩, 然后将所生成的化合物通过硅胶柱之后进行重结晶, 从而获得生成物7.63g (收率:83%)。

[0319] 2. P-19的合成例

[0320] <反应式31>

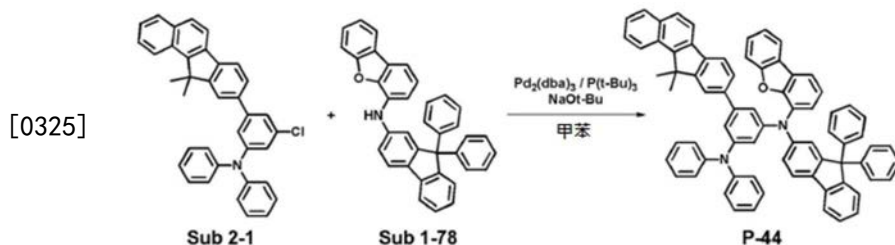


[0322] 向在上述合成中获得的Sub2-23 (7.05g、11.79mmol) 添加Sub1-36 (3.41g、

11.79mmol)、 $\text{Pd}_2(\text{dba})_3$ (0.32g、0.35mmol)、50% $\text{P}(\text{t-Bu})_3$ (0.5ml、0.94mmol)、 NaOt-Bu (3.40g、35.36mmol)、甲苯(120ml),使用上述P-1的合成例来获得生成物7.52g(收率:75%)。

[0323] 3.P-44的合成例

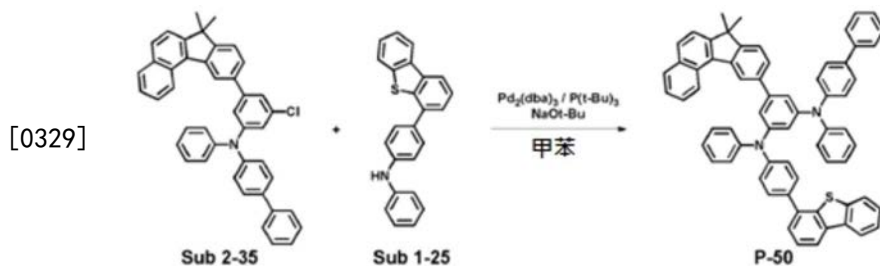
[0324] <反应式32>



[0326] 向在上述合成中获得的Sub2-1 (5.71g、10.94mmol)添加Sub1-78 (5.46g、10.94mmol)、 $\text{Pd}_2(\text{dba})_3$ (0.30g、0.33mmol)、50% $\text{P}(\text{t-Bu})_3$ (0.4ml、0.87mmol)、 NaOt-Bu (3.15g、32.81mmol)、甲苯(110ml),使用上述P-1的合成例来获得生成物7.76g(收率:72%)。

[0327] 4.P-50的合成例

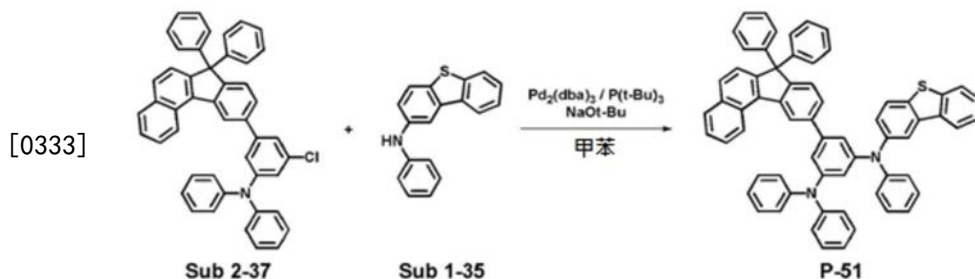
[0328] <反应式33>



[0330] 向在上述合成中获得的Sub2-35 (6.02g、10.06mmol)添加Sub1-25 (3.54g、10.06mmol)、 $\text{Pd}_2(\text{dba})_3$ (0.28g、0.30mmol)、50% $\text{P}(\text{t-Bu})_3$ (0.4ml、0.81mmol)、 NaOt-Bu (2.90g、30.19mmol)、甲苯(100ml),使用上述P-1的合成例来获得生成物7.26g(收率:79%)。

[0331] 5.P-51的合成例

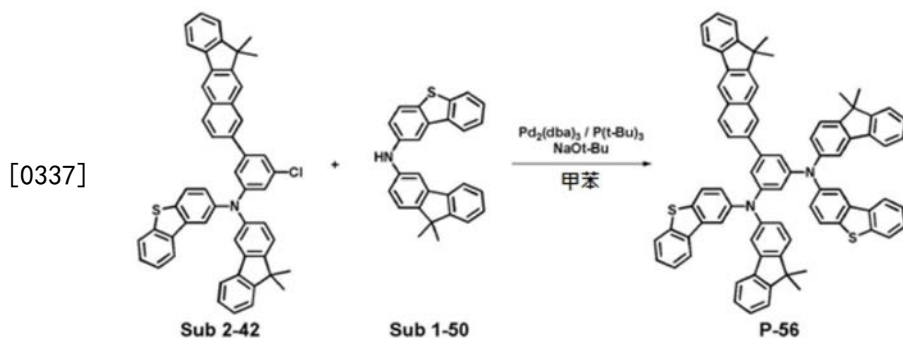
[0332] <反应式34>



[0334] 向在上述合成中获得的Sub2-37 (7.03g、10.88mmol)添加Sub1-35 (3.00g、10.88mmol)、 $\text{Pd}_2(\text{dba})_3$ (0.30g、0.33mmol)、50% $\text{P}(\text{t-Bu})_3$ (0.4ml、0.87mmol)、 NaOt-Bu (3.14g、32.64mmol)、甲苯(110ml),使用上述P-1的合成例来获得生成物7.41g(收率:77%)。

[0335] 6.P-56的合成例

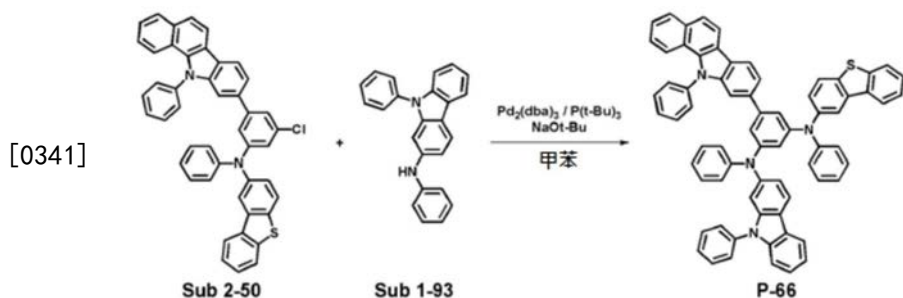
[0336] <反应式35>



[0338] 向在上述合成中获得的Sub2-42 (7.45g、10.01mmol) 添加Sub1-50 (3.92g、10.01mmol)、Pd₂(dba)₃ (0.27g、0.30mmol)、50%P(t-Bu)₃ (0.4ml、0.80mmol)、NaOt-Bu (2.89g、30.02mmol)、甲苯(100ml),使用上述P-1的合成例来获得生成物7.48g(收率:68%)。

[0339] 7.P-66的合成例

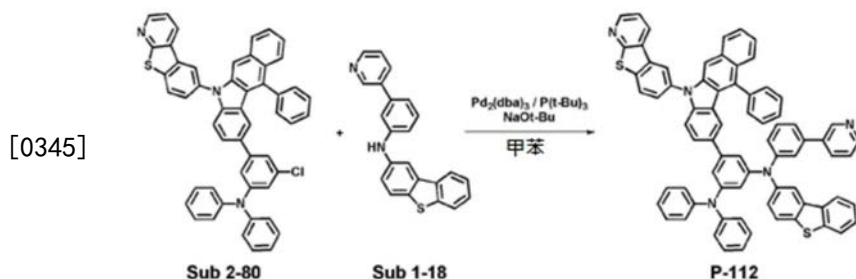
[0340] <反应式36>



[0342] 向在上述合成中获得的Sub2-50 (6.76g、9.98mmol) 添加Sub1-93 (3.34g、9.98mmol)、Pd₂(dba)₃ (0.27g、0.30mmol)、50%P(t-Bu)₃ (0.4ml、0.80mmol)、NaOt-Bu (2.88g、29.94mmol)、甲苯(100ml),使用上述P-1的合成例来获得生成物7.88g(收率:81%)。

[0343] 8.P-112的合成例

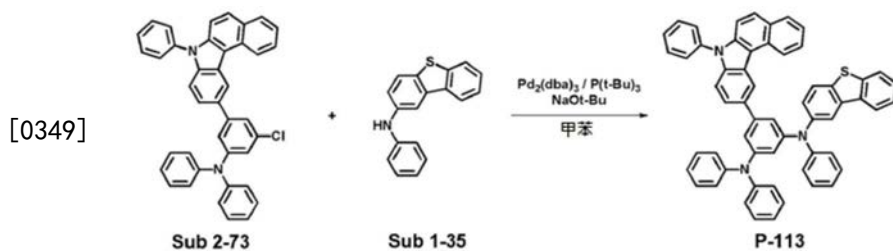
[0344] <反应式37>



[0346] 向在上述合成中获得的Sub2-80 (8.32g、11.03mmol) 添加Sub1-18 (3.89g、11.03mmol)、Pd₂(dba)₃ (0.30g、0.33mmol)、50%P(t-Bu)₃ (0.4ml、0.88mmol)、NaOt-Bu (3.18g、33.09mmol)、甲苯(110ml),使用上述P-1的合成例来获得生成物7.08g(收率:60%)。

[0347] 9.P-113的合成例

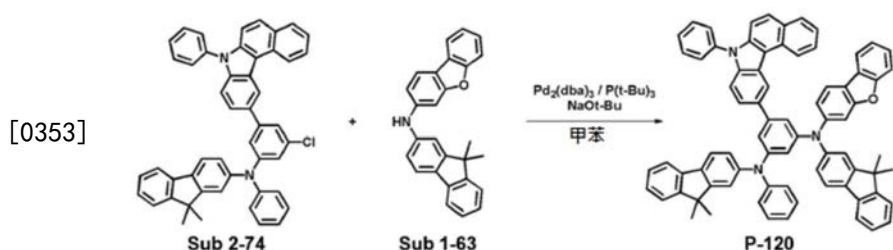
[0348] <反应式38>



[0350] 向在上述合成中获得的Sub2-73 (6.18g、10.82mmol) 添加Sub1-35 (2.98g、10.82mmol)、Pd₂(dba)₃ (0.30g、0.32mmol)、50%P(t-Bu)₃ (0.4ml、0.87mmol)、NaOt-Bu (3.12g、32.46mmol)、甲苯(110ml),使用上述P-1的合成例来获得生成物7.36g (收率: 84%)。

[0351] 10.P-120的合成例

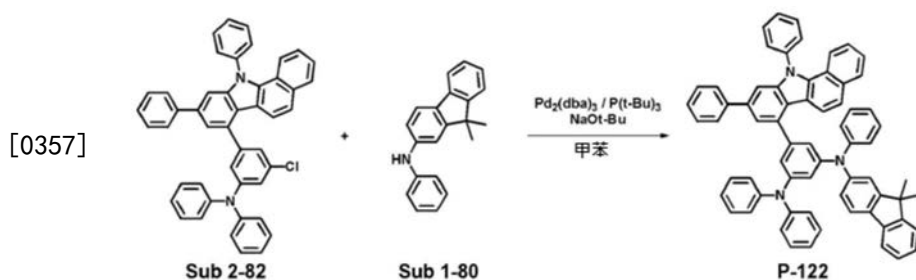
[0352] <反应式39>



[0354] 向在上述合成中获得的Sub2-74 (7.12g、10.36mmol) 添加Sub1-63 (3.89g、10.36mmol)、Pd₂(dba)₃ (0.28g、0.31mmol)、50%P(t-Bu)₃ (0.4ml、0.83mmol)、NaOt-Bu (2.99g、31.08mmol)、甲苯(105ml),使用上述P-1的合成例来获得生成物7.55g (收率: 71%)。

[0355] 11.P-122的合成例

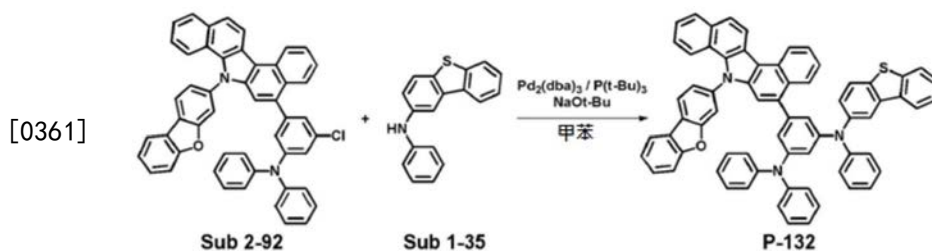
[0356] <反应式40>



[0358] 向在上述合成中获得的Sub2-82 (7.04g、10.88mmol) 添加Sub1-80 (3.10g、10.88mmol)、Pd₂(dba)₃ (0.30g、0.33mmol)、50%P(t-Bu)₃ (0.4ml、0.87mmol)、NaOt-Bu (3.14g、32.63mmol)、甲苯(110ml),使用上述P-1的合成例来获得生成物7.41g (收率: 76%)。

[0359] 12.P-132的合成例

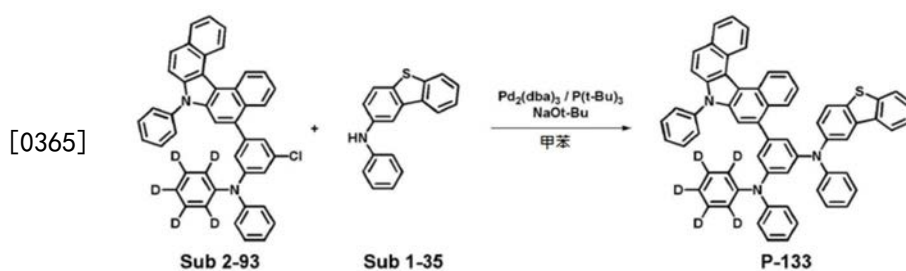
[0360] <反应式41>



[0362] 向在上述合成中获得的Sub2-92 (8.47g、11.91mmol) 添加Sub1-35 (3.28g、11.91mmol)、Pd₂(dba)₃ (0.33g、0.36mmol)、50%P(t-Bu)₃ (0.5ml、0.95mmol)、NaOt-Bu (3.43g、35.73mmol)、甲苯 (120ml)，使用上述P-1的合成例来获得生成物7.35g (收率：65%)。

[0363] 13.P-133的合成例

[0364] <反应式42>



[0366] 向在上述合成中获得的Sub2-93 (7.66g、12.23mmol) 添加Sub1-35 (3.37g、12.23mmol)、Pd₂(dba)₃ (0.34g、0.37mmol)、50%P(t-Bu)₃ (0.5ml、0.98mmol)、NaOt-Bu (3.53g、36.70mmol)、甲苯 (120ml)，使用上述P-1的合成例来获得生成物7.09g (收率：67%)。

[0367] 此外，根据上述合成例制备的本发明的化合物P-1至P-136的FD-MS值在以下表3中被示出。

[0368] [表3]

[0369]

化合物	FD-MS	化合物	FD-MS
P-1	m/z=760. 29 (C ₅₅ H ₄₀ N ₂ S=760. 98)	P-2	m/z=886. 34 (C ₆₅ H ₄₆ N ₂ S=887. 14)
P-3	m/z=962. 37 (C ₇₁ H ₅₀ N ₂ S=963. 24)	P-4	m/z=912. 35 (C ₆₇ H ₄₈ N ₂ S=913. 18)
P-5	m/z=988. 39 (C ₇₃ H ₅₂ N ₂ S=989. 27)	P-6	m/z=962. 37 (C ₇₁ H ₅₀ N ₂ S=963. 24)
P-7	m/z=916. 29 (C ₆₅ H ₄₄ N ₂ S ₂ =917. 19)	P-8	m/z=1051. 40 (C ₇₇ H ₅₃ N ₃ S=1052. 33)
P-9	m/z=1002. 36 (C ₇₃ H ₅₀ N ₂ OS=1003. 26)	P-10	m/z=896. 38 (C ₆₇ H ₄₈ N ₂ O=897. 11)
P-11	m/z=984. 35 (C ₇₃ H ₄₈ N ₂ S=985. 24)	P-12	m/z=910. 39 (C ₆₈ H ₅₀ N ₂ O=911. 14)
P-13	m/z=1125. 41 (C ₈₃ H ₅₅ N ₃ S=1126. 41)	P-14	m/z=994. 39 (C ₇₅ H ₅₀ N ₂ O=995. 21)
P-15	m/z=970. 43 (C ₇₄ H ₅₄ N ₂ =971. 23)	P-16	m/z=1018. 43 (C ₇₈ H ₅₄ N ₂ =1019. 28)
P-17	m/z=896. 38 (C ₆₇ H ₄₈ N ₂ O=897. 11)	P-18	m/z=946. 43 (C ₇₂ H ₅₄ N ₂ =947. 21)
P-19	m/z=850. 34 (C ₆₂ H ₄₆ N ₂ S=851. 11)	P-20	m/z=1036. 39 (C ₇₇ H ₅₂ N ₂ S=1037. 32)
P-21	m/z=866. 28 (C ₆₁ H ₄₂ N ₂ S ₂ =867. 13)	P-22	m/z=850. 30 (C ₆₁ H ₄₂ N ₂ OS=851. 06)
P-23	m/z=834. 32 (C ₆₁ H ₄₂ N ₂ O ₂ =835. 00)	P-24	m/z=1033. 40 (C ₇₇ H ₅₁ N ₃ O=1034. 25)
P-25	m/z=1046. 46 (C ₈₀ H ₅₈ N ₂ =1047. 33)	P-26	m/z=1018. 43 (C ₇₈ H ₅₄ N ₂ =1019. 28)
P-27	m/z=898. 34 (C ₆₆ H ₄₆ N ₂ S=899. 15)	P-28	m/z=974. 37 (C ₇₂ H ₅₀ N ₂ S=975. 25)
P-29	m/z=1004. 33 (C ₇₂ H ₄₈ N ₂ S ₂ =1005. 29)	P-30	m/z=972. 37 (C ₇₂ H ₄₈ N ₂ O ₂ =973. 16)
P-31	m/z=988. 35 (C ₇₂ H ₄₈ N ₂ OS=989. 23)	P-32	m/z=972. 37 (C ₇₂ H ₄₈ N ₂ O ₂ =973. 16)
P-33	m/z=1004. 33 (C ₇₂ H ₄₈ N ₂ S ₂ =1005. 29)	P-34	m/z=1000. 39 (C ₇₄ H ₅₂ N ₂ S=1001. 28)
P-35	m/z=1010. 46 (C ₇₇ H ₅₈ N ₂ =1011. 30)	P-36	m/z=886. 43 (C ₆₇ H ₅₄ N ₂ =887. 16)
P-37	m/z=1000. 39 (C ₇₄ H ₅₂ N ₂ S=1001. 28)	P-38	m/z=984. 41 (C ₇₄ H ₅₂ N ₂ O=985. 22)
P-39	m/z=1000. 39 (C ₇₄ H ₅₂ N ₂ S=1001. 28)	P-40	m/z=984. 41 (C ₇₄ H ₅₂ N ₂ O=985. 22)
P-41	m/z=820. 35 (C ₆₁ H ₄₄ N ₂ O=821. 01)	P-42	m/z=925. 35 (C ₆₇ H ₄₇ N ₃ S=926. 18)
P-43	m/z=952. 39 (C ₇₀ H ₅₂ N ₂ S=953. 24)	P-44	m/z=984. 41 (C ₇₄ H ₅₂ N ₂ O=985. 22)
P-45	m/z=892. 38 (C ₆₈ H ₄₈ N ₂ =893. 12)	P-46	m/z=945. 41 (C ₇₁ H ₅₁ N ₃ =946. 18)
P-47	m/z=978. 42 (C ₇₂ H ₅₄ N ₂ O ₂ =979. 21)	P-48	m/z=820. 35 (C ₆₁ H ₄₄ N ₂ O=821. 01)
P-49	m/z=841. 35 (C ₆₁ H ₃₉ D ₅ N ₂ S=842. 11)	P-50	m/z=912. 35 (C ₆₇ H ₄₈ N ₂ S=913. 18)
P-51	m/z=884. 32 (C ₆₅ H ₄₄ N ₂ S=885. 12)	P-52	m/z=968. 38 (C ₇₃ H ₄₈ N ₂ O=969. 18)
P-53	m/z=935. 42 (C ₇₀ H ₅₃ N ₃ =936. 19)	P-54	m/z=960. 35 (C ₇₁ H ₄₈ N ₂ S=961. 22)
P-55	m/z=912. 30 (C ₆₃ H ₄₂ F ₂ N ₂ OS=913. 08)	P-56	m/z=1098. 40 (C ₇₉ H ₅₈ N ₂ S ₂ =1099. 45)
P-57	m/z=921. 41 (C ₆₉ H ₅₁ N ₃ =922. 16)	P-58	m/z=870. 33 (C ₆₁ H ₄₆ N ₂ O ₂ S=871. 10)
P-59	m/z=916. 29 (C ₆₅ H ₄₄ N ₂ S ₂ =917. 19)	P-60	m/z=932. 36 (C ₆₆ H ₅₂ N ₂ SSi=933. 28)
P-61	m/z=809. 29 (C ₅₈ H ₃₉ N ₃ S=810. 02)	P-62	m/z=809. 29 (C ₅₈ H ₃₉ N ₃ S=810. 02)
P-63	m/z=809. 29 (C ₅₈ H ₃₉ N ₃ S=810. 02)	P-64	m/z=915. 27 (C ₆₄ H ₄₁ N ₃ S ₂ =916. 16)
P-65	m/z=915. 27 (C ₆₄ H ₄₁ N ₃ S ₂ =916. 16)	P-66	m/z=974. 34 (C ₇₀ H ₄₆ N ₄ S=975. 21)
P-67	m/z=869. 34 (C ₆₄ H ₄₃ N ₃ O=870. 05)	P-68	m/z=919. 36 (C ₆₈ H ₄₅ N ₃ O=920. 10)
P-69	m/z=971. 42 (C ₇₃ H ₅₃ N ₃ =972. 22)	P-70	m/z=1069. 44 (C ₈₁ H ₅₅ N ₃ =1070. 32)

[0370]

P-71	m/z=1049.38 (C ₇₇ H ₅₁ N ₃ S=1050.31)	P-72	m/z=959.39 (C ₇₁ H ₄₉ N ₃ O=960.17)
P-73	m/z=984.42 (C ₇₃ H ₅₂ N ₄ =985.22)	P-74	m/z=1108.45 (C ₈₃ H ₅₆ N ₄ =1109.36)
P-75	m/z=935.33 (C ₆₈ H ₄₅ N ₃ S=936.17)	P-76	m/z=965.29 (C ₆₈ H ₄₃ N ₃ S ₂ =966.22)
P-77	m/z=899.30 (C ₆₄ H ₄₁ N ₃ O=900.09)	P-78	m/z=991.31 (C ₇₀ H ₄₅ N ₃ S ₂ =992.26)
P-79	m/z=949.31 (C ₆₈ H ₄₃ N ₃ O=950.15)	P-80	m/z=991.31 (C ₇₀ H ₄₅ N ₃ S ₂ =992.26)
P-81	m/z=899.30 (C ₆₄ H ₄₁ N ₃ O=900.09)	P-82	m/z=915.27 (C ₆₄ H ₄₁ N ₃ S ₂ =916.16)
P-83	m/z=899.30 (C ₆₄ H ₄₁ N ₃ O=900.09)	P-84	m/z=933.34 (C ₆₈ H ₄₃ N ₃ O ₂ =934.09)
P-85	m/z=965.29 (C ₆₈ H ₄₃ N ₃ S ₂ =966.22)	P-86	m/z=1025.34 (C ₇₄ H ₄₇ N ₃ O=1026.25)
P-87	m/z=991.31 (C ₇₀ H ₄₅ N ₃ S ₂ =992.26)	P-88	m/z=975.33 (C ₇₀ H ₄₅ N ₃ O=976.19)
P-89	m/z=959.35 (C ₇₀ H ₄₅ N ₃ O ₂ =960.13)	P-90	m/z=925.35 (C ₆₇ H ₄₇ N ₃ S=926.18)
P-91	m/z=909.37 (C ₆₇ H ₄₇ N ₃ O=910.11)	P-92	m/z=925.35 (C ₆₇ H ₄₇ N ₃ S=926.18)
P-93	m/z=1061.43 (C ₇₉ H ₅₅ N ₃ O=1062.30)	P-94	m/z=925.35 (C ₆₇ H ₄₇ N ₃ S=926.18)
P-95	m/z=909.37 (C ₆₇ H ₄₇ N ₃ O=910.11)	P-96	m/z=1011.46 (C ₇₆ H ₅₇ N ₃ =1012.29)
P-97	m/z=1049.38 (C ₇₇ H ₅₁ N ₃ S=1050.31)	P-98	m/z=1083.42 (C ₈₁ H ₅₃ N ₃ O=1034.25)
P-99	m/z=1049.38 (C ₇₇ H ₅₁ N ₃ S=1050.31)	P-100	m/z=1033.40 (C ₇₇ H ₅₁ N ₃ O=1034.25)
P-101	m/z=1049.38 (C ₇₇ H ₅₁ N ₃ S=1050.31)	P-102	m/z=1033.40 (C ₇₇ H ₅₁ N ₃ O=1034.25)
P-103	m/z=1108.45 (C ₈₃ H ₅₆ N ₄ =1109.36)	P-104	m/z=1060.45 (C ₇₉ H ₅₆ N ₄ =1061.32)
P-105	m/z=885.32 (C ₆₄ H ₄₃ N ₃ S=886.11)	P-106	m/z=991.31 (C ₇₀ H ₄₅ N ₃ S ₂ =992.26)
P-107	m/z=943.36 (C ₇₀ H ₄₅ N ₃ O=944.13)	P-108	m/z=984.42 (C ₇₃ H ₅₂ N ₄ =985.22)
P-109	m/z=935.33 (C ₆₈ H ₄₅ N ₃ S=936.17)	P-110	m/z=919.36 (C ₆₈ H ₄₅ N ₃ O=920.10)
P-111	m/z=925.35 (C ₆₇ H ₄₇ N ₃ S=926.18)	P-112	m/z=963.34 (C ₆₈ H ₄₅ N ₃ S=964.18)
P-113	m/z=809.29 (C ₅₈ H ₃₉ N ₃ S=810.02)	P-114	m/z=974.34 (C ₇₀ H ₄₆ N ₄ S=975.21)
P-115	m/z=975.33 (C ₇₀ H ₄₅ N ₃ O=976.19)	P-116	m/z=909.37 (C ₆₇ H ₄₇ N ₃ O=910.11)
P-117	m/z=991.39 (C ₇₅ H ₄₉ N ₃ =992.21)	P-118	m/z=972.33 (C ₆₈ H ₃₆ D ₇ N ₃ S ₂ =973.26)
P-119	m/z=1099.49 (C ₈₃ H ₆₁ N ₃ =1100.39)	P-120	m/z=1025.43 (C ₇₆ H ₅₅ N ₃ O=1026.27)
P-121	m/z=933.32 (C ₆₈ H ₄₃ N ₃ S=934.15)	P-122	m/z=895.39 (C ₆₇ H ₄₉ N ₃ =896.13)
P-123	m/z=1033.40 (C ₇₇ H ₅₁ N ₃ O=1034.25)	P-124	m/z=1019.42 (C ₇₇ H ₅₃ N ₃ =1020.26)
P-125	m/z=918.37 (C ₆₈ H ₄₆ N ₄ =919.12)	P-126	m/z=989.45 (C ₇₃ H ₄₇ D ₅ N ₄ =990.25)
P-127	m/z=974.34 (C ₇₀ H ₄₆ N ₄ S=975.21)	P-128	m/z=995.39 (C ₇₄ H ₄₉ N ₃ O=996.20)
P-129	m/z=960.33 (C ₆₉ H ₄₄ N ₄ S=961.18)	P-130	m/z=949.31 (C ₆₈ H ₄₃ N ₃ O=950.15)
P-131	m/z=999.45 (C ₇₅ H ₄₉ D ₄ N ₃ =1000.27)	P-132	m/z=949.31 (C ₆₈ H ₄₃ N ₃ O=950.15)
P-133	m/z=864.33 (C ₆₂ H ₃₆ D ₅ N ₃ S=865.10)	P-134	m/z=919.36 (C ₆₈ H ₄₅ N ₃ O=920.10)
P-135	m/z=920.39 (C ₆₈ H ₄₈ N ₄ =921.14)	P-136	m/z=935.33 (C ₆₈ H ₄₅ N ₃ S=936.17)

[0371] 虽然在上述中说明了以化学式1表示的本发明的示例性的合成例,这些均是基于Buchwald-Hartwig交联反应、Suzuki交联反应、Grignard反应、环脱水反应、PPh₃-介导的还原环化反应(J.Org.Chem.2005,70,5014.)及Ullmann反应等的,因此所属领域的技术人员也可以很容易地理解,除了在具体合成例中明示的取代基之外,即使与在化学式1中定义的另外的取代基(A环,B环,X,Ar¹至Ar⁴,L¹至L⁴,a等的取代基)进行键合,上述反应也是会进行的。

[0372] 例如,在反应式1中的Sub1与Sub2-→最终生成物反应,在反应式2中的起始物质-→

Sub1反应,在反应式1中的Sub2-II→Sub2反应基于Buchwald-Hartwig交联反应,在反应式1中的Sub2-I→Sub2-II反应基于Suzuki交联反应,在反应式1中的起始物质→Sub2-I反应基于Grignard反应/环脱水反应。接着,在反应式1中的起始物质→Sub2-I'反应基于PPh₃-介导的还原环化,在反应式1中的Sub2-I'→Sub2-I反应基于Ullmann反应。即使与未进行具体明示的取代基进行键合,上述反应仍会进行。

[0373] 有机电气元件的制造评价

[0374] [实施例I-1]绿色有机电致发光元件(空穴输送层)

[0375] 本发明的化合物使用空穴输送层物质并采用通常的方法来制作有机电致发光元件。首先,在形成于有机基板的ITO层(阳极)上以60nm的厚度真空沉积4,4',4''-三[2-萘基(苯基)氨基]三苯基胺(以下,简称为“2-TNATA”)来形成空穴注入层后,在上述空穴注入层上以60nm的厚度真空沉积本发明的化合物P-1来形成空穴输送层。接着,在上述空穴输送层上以4,4'-N,N'-二咔唑-联苯(以下,简称为“CBP”)作为主体并以三(2-苯基吡啶)铱(以下,简称为“Ir(ppy)₃”)作为掺杂剂,将以90:10重量掺杂的混合物以30nm的厚度真空沉积来形成发光层。接着,在上述发光层上以10nm的厚度真空沉积((1,1'-二苯基-4-羟基)二(2-甲基-8-羟基喹啉))铝(以下,简称为“BA1q”)来形成空穴阻挡层,在上述空穴阻挡层上以40nm的厚度真空沉积三(8-喹啉醇)铝(以下,简称为“Alq₃”)来形成电子输送层。然后,以0.2nm的厚度沉积作为卤化碱金属的LiF来形成电子注入层,接着,以150nm的厚度沉积铝(Al)来形成阴极,制备出有机电致发光元件。

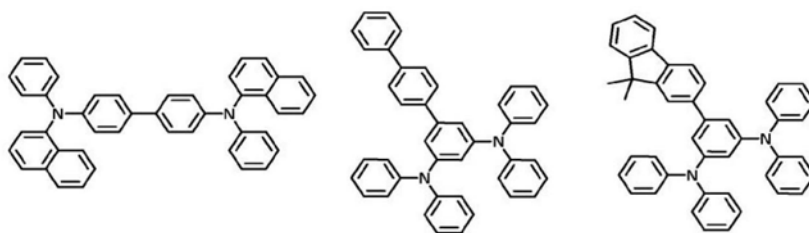
[0376] [实施例I-2]至[实施例I-70]绿色有机电致发光元件(空穴输送层)

[0377] 除了使用以下表4所记载的本发明的化合物P-2至P-136来代替本发明的化合物P-1作空穴输送层物质之外,与上述实施例I-1相同的方法制成了有机电致发光元件。

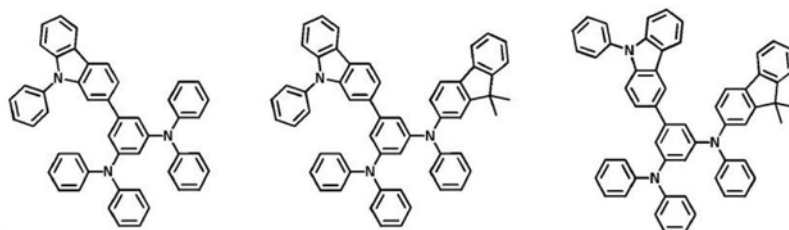
[0378] [比较例I-1]至[比较例I-6]

[0379] 除了使用以下表4所记载的下述比较化合物1至比较化合物6来代替本发明的化合物P-1作空穴输送层物质之外,与上述实施例I-1相同的方法制成了有机电致发光元件。

[0380] <比较化合物1> <比较化合物2> <比较化合物3>



[0381] <比较化合物4> <比较化合物5> <比较化合物6>



[0382] 向在本发明的实施例I-1至实施例I-70、比较例I-1至比较例I-6中制备的有机电致发光元件施加正向偏压直流电压,利用photoresearch公司的PR-650来测定电致发光

(EL) 特性,在5000cd/m²基准亮度下,利用由Mscience公司制备的寿命测定装备来测定T95寿命,其测定结果如下表4所示。

[0383] [表4]

	化合物	驱动电压 (v)	电流密度 (mA/cm ²)	亮度 (cd/m ²)	效率 (cd/A)	寿命 T(95)	CIE	
							x	y
比较例(I-1)	比较化合物 1	6.0	21.5	5000	23.3	57.3	0.32	0.61
比较例(I-2)	比较化合物 2	5.9	19.8	5000	25.3	67.9	0.32	0.62
比较例(I-3)	比较化合物 3	5.9	18.4	5000	27.2	76.5	0.33	0.61
比较例(I-4)	比较化合物 4	5.9	17.6	5000	28.4	79.3	0.33	0.62
比较例(I-5)	比较化合物 5	5.8	17.1	5000	29.2	83.4	0.33	0.61
比较例(I-6)	比较化合物 6	5.8	17.4	5000	28.7	82.6	0.33	0.61
实施例(I-1)	化合物(P-1)	5.5	12.4	5000	40.2	132.7	0.33	0.62
实施例(I-2)	化合物(P-2)	5.6	12.3	5000	40.6	126.1	0.33	0.61
实施例(I-3)	化合物(P-3)	5.6	12.5	5000	40.0	128.1	0.33	0.61
实施例(I-4)	化合物(P-4)	5.7	13.2	5000	37.8	122.7	0.33	0.62
实施例(I-5)	化合物(P-7)	5.5	12.8	5000	39.2	129.7	0.33	0.61
实施例(I-6)	化合物(P-8)	5.6	12.7	5000	39.5	127.4	0.33	0.62
实施例(I-7)	化合物(P-10)	5.6	12.6	5000	39.6	125.5	0.33	0.62
实施例(I-8)	化合物(P-11)	5.7	13.1	5000	38.2	121.3	0.33	0.62
实施例(I-9)	化合物(P-14)	5.7	13.6	5000	36.7	120.5	0.33	0.62
实施例(I-10)	化合物(P-15)	5.5	12.5	5000	40.0	125.2	0.33	0.61
实施例(I-11)	化合物(P-16)	5.6	13.1	5000	38.1	121.6	0.33	0.62
实施例(I-12)	化合物(P-19)	5.7	13.5	5000	36.9	118.4	0.33	0.62
实施例(I-13)	化合物(P-21)	5.7	13.1	5000	38.0	122.8	0.33	0.61
实施例(I-14)	化合物(P-22)	5.7	12.9	5000	38.9	121.2	0.33	0.62
实施例(I-15)	化合物(P-24)	5.6	13.3	5000	37.5	123.0	0.33	0.61
实施例(I-16)	化合物(P-25)	5.7	13.4	5000	37.2	118.6	0.33	0.61
实施例(I-17)	化合物(P-34)	5.6	13.0	5000	38.4	119.3	0.33	0.61
实施例(I-18)	化合物(P-40)	5.6	13.7	5000	36.5	120.2	0.33	0.62
实施例(I-19)	化合物(P-41)	5.6	12.8	5000	39.1	128.3	0.33	0.61
实施例(I-20)	化合物(P-42)	5.5	12.5	5000	40.0	124.5	0.33	0.62
实施例(I-21)	化合物(P-43)	5.5	12.7	5000	39.4	129.1	0.33	0.62
实施例(I-22)	化合物(P-45)	5.7	13.2	5000	37.7	122.4	0.33	0.62
实施例(I-23)	化合物(P-46)	5.5	12.6	5000	39.7	129.9	0.33	0.62
实施例(I-24)	化合物(P-48)	5.6	14.8	5000	33.8	115.8	0.33	0.62
实施例(I-25)	化合物(P-49)	5.6	12.6	5000	39.8	128.4	0.33	0.62
实施例(I-26)	化合物(P-50)	5.6	13.3	5000	37.6	122.1	0.33	0.62
实施例(I-27)	化合物(P-51)	5.6	12.6	5000	39.7	128.2	0.33	0.61
实施例(I-28)	化合物(P-53)	5.6	13.3	5000	37.5	119.7	0.33	0.61

[0384]

[0385]

实施例(I-29)	化合物(P-59)	5.7	14.3	5000	34.8	111.7	0.33	0.61
实施例(I-30)	化合物(P-61)	5.5	11.6	5000	43.3	153.7	0.33	0.61
实施例(I-31)	化合物(P-62)	5.6	11.7	5000	42.8	148.8	0.33	0.61
实施例(I-32)	化合物(P-63)	5.6	11.7	5000	42.7	148.1	0.33	0.61
实施例(I-33)	化合物(P-64)	5.5	11.6	5000	43.3	150.4	0.33	0.61
实施例(I-34)	化合物(P-65)	5.5	11.7	5000	42.8	147.4	0.33	0.62
实施例(I-35)	化合物(P-66)	5.6	11.6	5000	43.0	147.3	0.33	0.61
实施例(I-36)	化合物(P-67)	5.6	12.7	5000	39.3	133.9	0.33	0.61
实施例(I-37)	化合物(P-69)	5.6	11.9	5000	41.9	142.8	0.33	0.61
实施例(I-38)	化合物(P-70)	5.6	12.0	5000	41.6	142.8	0.33	0.61
实施例(I-39)	化合物(P-71)	5.6	12.1	5000	41.5	142.0	0.33	0.62
实施例(I-40)	化合物(P-72)	5.5	12.6	5000	39.6	137.8	0.33	0.62
实施例(I-41)	化合物(P-73)	5.6	12.7	5000	39.3	133.4	0.33	0.62
实施例(I-42)	化合物(P-74)	5.6	13.3	5000	37.7	126.7	0.33	0.61
实施例(I-43)	化合物(P-75)	5.5	11.7	5000	42.8	149.1	0.33	0.61
实施例(I-44)	化合物(P-76)	5.5	12.1	5000	41.2	141.3	0.33	0.61
实施例(I-45)	化合物(P-77)	5.5	12.1	5000	41.3	141.1	0.33	0.61
实施例(I-46)	化合物(P-83)	5.6	12.8	5000	39.1	134.7	0.33	0.61
实施例(I-47)	化合物(P-89)	5.5	12.0	5000	41.6	142.0	0.33	0.62
实施例(I-48)	化合物(P-92)	5.6	12.1	5000	41.2	142.0	0.33	0.62
实施例(I-49)	化合物(P-95)	5.5	12.7	5000	39.2	138.0	0.33	0.62
实施例(I-50)	化合物(P-99)	5.5	12.3	5000	40.5	137.8	0.33	0.61
实施例(I-51)	化合物(P-103)	5.5	12.4	5000	40.3	138.1	0.33	0.62
实施例(I-52)	化合物(P-104)	5.7	13.3	5000	37.7	126.1	0.33	0.62
实施例(I-53)	化合物(P-105)	5.5	12.1	5000	41.3	143.3	0.33	0.62
实施例(I-54)	化合物(P-106)	5.5	12.5	5000	40.1	137.7	0.33	0.62
实施例(I-55)	化合物(P-108)	5.5	12.5	5000	40.0	138.4	0.33	0.62
实施例(I-56)	化合物(P-109)	5.6	12.5	5000	39.9	138.7	0.33	0.61
实施例(I-57)	化合物(P-111)	5.7	13.0	5000	38.4	124.6	0.33	0.61
实施例(I-58)	化合物(P-113)	5.6	12.0	5000	41.5	144.3	0.33	0.62
实施例(I-59)	化合物(P-114)	5.6	12.4	5000	40.4	138.6	0.33	0.62
实施例(I-60)	化合物(P-115)	5.6	12.4	5000	40.3	136.6	0.33	0.62
实施例(I-61)	化合物(P-116)	5.6	12.3	5000	40.8	138.4	0.33	0.62
实施例(I-62)	化合物(P-118)	5.6	11.9	5000	42.2	143.9	0.33	0.61
实施例(I-63)	化合物(P-120)	5.6	12.8	5000	39.2	138.8	0.33	0.61
实施例(I-64)	化合物(P-122)	5.6	12.6	5000	39.7	138.7	0.33	0.61

[0386]	实施例(I-65)	化合物(P-124)	5.6	12.9	5000	38.8	125.0	0.33	0.62
	实施例(I-66)	化合物(P-125)	5.5	12.8	5000	39.1	138.2	0.33	0.62
	实施例(I-67)	化合物(P-126)	5.7	13.1	5000	38.2	127.6	0.33	0.62
	实施例(I-68)	化合物(P-132)	5.6	13.4	5000	37.3	126.1	0.33	0.62
	实施例(I-69)	化合物(P-133)	5.6	13.1	5000	38.3	127.6	0.33	0.61
	实施例(I-70)	化合物(P-136)	5.6	13.6	5000	36.7	127.9	0.33	0.62

[0387] 从上述表4的结果可知,能够确认将本发明的化合物作为空穴输送层的材料来使用的有机电致发光元件,示出低的驱动电压、高的发光效率及高的寿命。

[0388] 特别是,使用两个胺基键合于茈或唑核被取代的连接基苯基的两侧的比较化合物3至比较化合物6的比较例I-3至比较例I-6,其与使用一般广泛用作为NPB的比较化合物1及两个胺基键合于以芳基进行取代的连接基苯基的两侧的比较化合物2的比较例I-1、比较例I-2相比,在发光效率方面表现出更高的效果,与比较例I-3至比较例I-6相比,追加融合(fused)芳香族环的形态的茈或唑核被取代的连接基苯基的两侧键合有两个胺基,若使用被这些胺基取代的取代基中至少一个为具有非芳基的茈基、二苯并咪唑、二苯并噻吩、唑的形态的本发明的化合物的实施例I-1至实施例I-70,表现出具有较低的驱动电压的同时,具有更高的发光效率及得到显著改善的寿命。

[0389] 如上所述结果是因为,与比较化合物1至比较化合物6相比,本发明的化合物被导入了更多的提高分子的平面性的取代基的缘故。

[0390] 在两个胺基键合于连接基苯基的两侧的相同的结构中,为了提高分子的平面性而导入取代基,使得分子之间 π - π 堆积(π - π Stacking)得到提高,从而增加分子之间的 π - π 轨道重叠(π - π orbital overlap),由此 π 轨道的孤对电子(lone pair electron)使分子之间易于进行输送(transfer),从而实现空穴输送能力(hole transfer ability)的提高。因此认为,随着空穴输送能力(hole transfer ability)变得优秀,减少了ITO和HTL界面上的热化,并且元件的寿命得到了提升,同时使得发光层空穴易于移动,很好地实现了空穴和电子的发光层内电荷平衡(charge balance),由此提高发光效率和寿命。

[0391] 因此,具有将追加融合(fused)有芳香族环的形态的茈与唑作为核,且(键合于连接基苯基)被两个胺基取代的取代基中至少一个为具有非芳基的茈基、二苯并咪唑、二苯并噻吩、唑的形态的本发明的化合物的情况下,分子的平面性更为增加的同时堆积密度(Packing density)得到提高,使得较低的驱动电压及元件驱动时所发生的焦耳加热减少,可确认到以高的热稳定性,相比于比较化合物1至比较化合物6寿命显著得到增加。

[0392] 综合上述说明的特性(高的空穴传达能力及高的热稳定性),根据是否导入提高分子的平面性的取代基,而能够极大地改变电气特性及界面特性等,并且能够确认其起到提高元件性能的主要因素的作用。

[0393] 此外,对于空穴输送层,须掌握与发光层(主体)的相互关系,这是由于,就算使用相似的核,本领域的普通技术人员也较难类推使用本发明的化合物的空穴输送层所表现出的特性。

[0394] [实施例II-1]绿色有机电致发光元件(发光辅助层)

[0395] 将本发明的化合物用作空穴输送层物质并采用通常的方法来制作有机电致发光

元件。首先,在形成于有机基板的ITO层(阳极)上以60nm的厚度真空沉积2-TNATA来形成空穴注入层后,在上述空穴注入层上以60nm的厚度真空蒸镀N,N'-双(1-萘基)-N,N'-二苯基-(1,1'-联苯)-4,4'-二胺(以下,简称为“NPB”)来形成空穴输送层。之后,在空穴输送层上以20nm的厚度真空蒸镀本发明的化合物P-1来形成发光辅助层。接着,在上述发光层上以CBP作为主体并以Ir(ppy)₃作为掺杂剂,将以90:10重量掺杂的混合物以30nm的厚度真空沉积来形成发光层。接着,在上述发光层上以10nm的厚度真空沉积BA1q来形成空穴阻挡层,在上述空穴阻挡层上以40nm的厚度真空沉积Alq₃来形成电子输送层。然后,以0.2nm的厚度沉积作为卤化碱金属的LiF来形成电子注入层,接着,以150nm的厚度沉积铝(Al)来形成阴极,制备出有机电致发光元件。

[0396] [实施例II-2]至[实施例II-72]绿色有机电致发光元件(发光辅助层)

[0397] 除了使用以下表5所记载的本发明的化合物P-2至P-136来代替本发明的化合物P-1作发光辅助层物质之外,以与上述实施例II-1相同的方法制成了有机电致发光元件。

[0398] [比较例II-1]

[0399] 除了未形成发光辅助层这一点外,以与上述实施例II-1相同的方法制成了有机电致发光元件。

[0400] [比较例II-2]至[比较例II-5]

[0401] 除了使用以比较化合物3至比较化合物6来代替本发明的化合物P-1作发光辅助层物质之外,以与上述实施例II-1相同的方法制成了有机电致发光元件。

[0402] 向在本发明的实施例II-1至实施例II-72、比较例II-1至比较例II-5中制备的有机电致发光元件施加正向偏压直流电压,利用photoresearch公司的PR-650来测定电致发光(EL)特性,在5000cd/m²基准亮度下,利用由Mcsience公司制备的寿命测定装备来测定T95寿命,其测定结果如下表5所示。

[0403] [表5]

[0404]

	化合物	驱动电压 (v)	电流密度 (mA/cm ²)	亮度 (cd/m ²)	效率 (cd/A)	寿命 T(95)	CIE	
							x	y
比较例 (II-1)	-	6.0	21.5	5000	23.3	57.3	0.32	0.61
比较例 (II-2)	比较化合物 3	6.6	13.6	5000	36.9	99.8	0.33	0.62
比较例 (II-3)	比较化合物 4	6.6	13.0	5000	38.5	109.7	0.33	0.61
比较例 (II-4)	比较化合物 5	6.5	12.5	5000	40.0	112.4	0.33	0.62
比较例 (II-5)	比较化合物 6	6.5	12.6	5000	39.7	106.7	0.33	0.62
实施例 (II-1)	化合物 (P-1)	6.3	9.8	5000	50.8	164.1	0.33	0.62
实施例 (II-2)	化合物 (P-2)	6.3	10.0	5000	49.8	156.0	0.33	0.61
实施例 (II-3)	化合物 (P-3)	6.3	10.0	5000	50.0	160.0	0.33	0.61
实施例 (II-4)	化合物 (P-4)	6.3	10.4	5000	48.2	153.6	0.33	0.62
实施例 (II-5)	化合物 (P-7)	6.3	10.2	5000	49.2	161.1	0.33	0.62
实施例 (II-6)	化合物 (P-8)	6.3	10.1	5000	49.3	159.0	0.33	0.62
实施例 (II-7)	化合物 (P-10)	6.3	10.2	5000	49.1	160.9	0.33	0.61
实施例 (II-8)	化合物 (P-11)	6.4	10.3	5000	48.4	152.1	0.33	0.61
实施例 (II-9)	化合物 (P-14)	6.4	10.5	5000	47.5	155.6	0.33	0.62
实施例 (II-10)	化合物 (P-19)	6.4	10.6	5000	47.3	154.3	0.33	0.62
实施例 (II-11)	化合物 (P-21)	6.3	10.3	5000	48.6	153.5	0.33	0.61
实施例 (II-12)	化合物 (P-22)	6.4	10.3	5000	48.7	155.9	0.33	0.62
实施例 (II-13)	化合物 (P-24)	6.4	10.6	5000	47.3	151.2	0.33	0.62
实施例 (II-14)	化合物 (P-25)	6.3	10.5	5000	47.6	150.6	0.33	0.62
实施例 (II-15)	化合物 (P-34)	6.4	10.3	5000	48.3	154.0	0.33	0.61
实施例 (II-16)	化合物 (P-40)	6.3	10.5	5000	47.6	155.7	0.33	0.61
实施例 (II-17)	化合物 (P-41)	6.3	10.2	5000	48.9	160.3	0.33	0.61
实施例 (II-18)	化合物 (P-42)	6.4	10.2	5000	49.0	160.7	0.33	0.62
实施例 (II-19)	化合物 (P-43)	6.3	10.1	5000	49.5	158.6	0.33	0.62
实施例 (II-20)	化合物 (P-45)	6.3	10.3	5000	48.3	150.1	0.33	0.61
实施例 (II-21)	化合物 (P-46)	6.4	10.1	5000	49.4	161.5	0.33	0.61
实施例 (II-22)	化合物 (P-48)	6.3	10.7	5000	46.6	155.2	0.33	0.61
实施例 (II-23)	化合物 (P-49)	6.4	10.1	5000	49.4	156.0	0.33	0.62
实施例 (II-24)	化合物 (P-50)	6.3	10.3	5000	48.4	154.8	0.33	0.62
实施例 (II-25)	化合物 (P-51)	6.4	10.2	5000	49.1	158.5	0.33	0.62
实施例 (II-26)	化合物 (P-52)	6.3	10.7	5000	46.6	154.9	0.33	0.62
实施例 (II-27)	化合物 (P-53)	6.3	10.4	5000	47.9	154.1	0.33	0.62
实施例 (II-28)	化合物 (P-59)	6.4	10.7	5000	46.6	154.6	0.33	0.61
实施例 (II-29)	化合物 (P-61)	6.2	9.1	5000	54.7	184.4	0.33	0.61

[0405]

实施例(II-30)	化合物(P-62)	6.2	9.3	5000	53.9	176.4	0.33	0.61
实施例(II-31)	化合物(P-63)	6.2	9.3	5000	53.6	178.6	0.33	0.62
实施例(II-32)	化合物(P-64)	6.3	9.2	5000	54.6	183.4	0.33	0.61
实施例(II-33)	化合物(P-65)	6.2	9.4	5000	53.5	178.4	0.33	0.61
实施例(II-34)	化合物(P-66)	6.2	9.4	5000	53.3	177.1	0.33	0.61
实施例(II-35)	化合物(P-67)	6.3	10.0	5000	50.2	169.6	0.33	0.62
实施例(II-36)	化合物(P-68)	6.2	9.9	5000	50.3	172.3	0.33	0.62
实施例(II-37)	化合物(P-69)	6.2	9.5	5000	52.6	177.3	0.33	0.62
实施例(II-38)	化合物(P-71)	6.3	9.6	5000	52.3	177.1	0.33	0.62
实施例(II-39)	化合物(P-72)	6.3	9.9	5000	50.4	172.8	0.33	0.61
实施例(II-40)	化合物(P-73)	6.2	10.0	5000	50.2	174.2	0.33	0.62
实施例(II-41)	化合物(P-74)	6.4	10.0	5000	49.8	168.8	0.33	0.61
实施例(II-42)	化合物(P-75)	6.3	9.3	5000	53.5	179.9	0.33	0.62
实施例(II-43)	化合物(P-76)	6.2	9.4	5000	53.0	179.6	0.33	0.61
实施例(II-44)	化合物(P-77)	6.3	9.5	5000	52.8	178.0	0.33	0.61
实施例(II-45)	化合物(P-82)	6.2	9.9	5000	50.5	170.7	0.33	0.61
实施例(II-46)	化合物(P-86)	6.3	9.9	5000	50.6	171.2	0.33	0.61
实施例(II-47)	化合物(P-89)	6.3	9.4	5000	53.0	179.3	0.33	0.62
实施例(II-48)	化合物(P-92)	6.2	9.4	5000	53.0	177.9	0.33	0.62
实施例(II-49)	化合物(P-95)	6.3	9.9	5000	50.7	171.2	0.33	0.61
实施例(II-50)	化合物(P-99)	6.3	9.7	5000	51.4	171.8	0.33	0.61
实施例(II-51)	化合物(P-104)	6.3	10.0	5000	49.8	168.9	0.33	0.62
实施例(II-52)	化合物(P-105)	6.3	9.6	5000	52.3	179.0	0.33	0.62
实施例(II-53)	化合物(P-106)	6.2	9.7	5000	51.5	173.9	0.33	0.62
实施例(II-54)	化合物(P-108)	6.2	9.7	5000	51.7	170.6	0.33	0.61
实施例(II-55)	化合物(P-109)	6.2	9.9	5000	50.5	169.6	0.33	0.62
实施例(II-56)	化合物(P-110)	6.3	10.0	5000	50.0	167.3	0.33	0.61
实施例(II-57)	化合物(P-111)	6.4	10.0	5000	49.9	167.7	0.33	0.62
实施例(II-58)	化合物(P-112)	6.4	10.5	5000	47.5	167.9	0.33	0.62
实施例(II-59)	化合物(P-113)	6.3	9.4	5000	53.2	178.6	0.33	0.61
实施例(II-60)	化合物(P-114)	6.3	9.8	5000	51.3	174.0	0.33	0.61
实施例(II-61)	化合物(P-115)	6.3	9.7	5000	51.7	171.1	0.33	0.62
实施例(II-62)	化合物(P-116)	6.2	9.7	5000	51.7	172.0	0.33	0.62
实施例(II-63)	化合物(P-117)	6.3	9.8	5000	50.9	174.9	0.33	0.62
实施例(II-64)	化合物(P-118)	6.2	9.5	5000	52.5	179.8	0.33	0.62
实施例(II-65)	化合物(P-124)	6.3	10.1	5000	49.3	167.8	0.33	0.62

[0406]	实施例(II-66)	化合物(P-125)	6.3	9.8	5000	51.0	171.0	0.33	0.62
	实施例(II-67)	化合物(P-127)	6.4	10.1	5000	49.6	167.8	0.33	0.62
	实施例(II-68)	化合物(P-128)	6.3	10.1	5000	49.7	167.6	0.33	0.62
	实施例(II-69)	化合物(P-132)	6.3	10.2	5000	48.9	168.5	0.33	0.61
	实施例(II-70)	化合物(P-133)	6.3	10.1	5000	49.7	167.8	0.33	0.62
	实施例(II-71)	化合物(P-134)	6.3	10.2	5000	49.2	167.2	0.33	0.62
	实施例(II-72)	化合物(P-136)	6.3	10.2	5000	49.0	167.7	0.33	0.62

[0407] [实施例III-1]红色有机电致发光元件(发光辅助层)

[0408] 将本发明的化合物用作发光辅助层物质,按照通常的方法,制备有机电致发光元件。首先,在形成于有机基板的ITO层(阳极)上以60nm的厚度真空沉积2-TNATA来形成空穴注入层后,在上述空穴注入层上以60nm的厚度真空蒸镀比较NPB来形成空穴输送层。接着,在上述空穴输送层上以20nm的厚度真空沉积本发明的化合物P-1来形成发光辅助层后,在上述发光辅助层上以CBP作为主体,并以双(1-苯基异喹啉基)乙酰丙酮铱(III)(以下,简称为“(piq)₂Ir(acac)”)作为掺杂剂,将以95:5重量掺杂的化合物以30nm的厚度进行真空沉积后形成发光层。接着,在上述发光层上以10nm的厚度真空沉积BA1q来形成空穴阻挡层,在上述空穴阻挡层上以40nm的厚度真空沉积Alq₃来形成电子输送层。然后,以0.2nm的厚度沉积作为卤化碱金属的LiF来形成电子注入层,接着,以150nm的厚度沉积铝(Al)来形成阴极,由此,制备出有机电致发光元件。

[0409] [实施例III-2]至[实施例III-40]红色有机电致发光元件(发光辅助层)

[0410] 除了使用以下表6所记载的本发明的化合物P-2至P-136来代替本发明的化合物P-1作发光辅助层物质之外,与上述实施例III-1相同的方法制成了有机电致发光元件。

[0411] [比较例III-1]

[0412] 除了未形成发光辅助层这一点外,与上述实施例III-1相同的方法制成了有机电致发光元件。

[0413] [比较例III-2]至[比较例III-5]

[0414] 除了使用以比较化合物3至比较化合物6来代替本发明的化合物P-1作发光辅助层物质之外,与上述实施例III-1相同的方法制成了有机电致发光元件。

[0415] 向在本发明的实施例III-1至实施例III-40、比较例III-1至比较例III-5中制备的有机电致发光元件施加正向偏压直流电压,利用photoresearch公司的PR-650来测定电致发光(EL)特性,在2500cd/m²基准亮度下,利用由Mscience公司制备的寿命测定装备来测定T95寿命,其测定结果如下表6所示。

[0416] [表6]

[0417]

	化合物	驱动电压 (v)	电流密度 (mA/cm ²)	亮度 (cd/m ²)	效率 (cd/A)	寿命 T(95)	CIE	
							x	y
比较例 (III-1)	-	6.5	33.8	2500	7.4	63.9	0.66	0.32
比较例 (III-2)	比较化合物 3	6.9	28.0	2500	8.9	86.6	0.66	0.33
比较例 (III-3)	比较化合物 4	6.9	26.6	2500	9.4	93.1	0.66	0.32
比较例 (III-4)	比较化合物 5	6.8	25.3	2500	9.9	97.2	0.66	0.33
比较例 (III-5)	比较化合物 6	6.8	26.0	2500	9.6	95.0	0.66	0.32
实施例 (III-1)	化合物 (P-1)	6.7	16.1	2500	15.5	161.5	0.66	0.32
实施例 (III-2)	化合物 (P-2)	6.6	16.3	2500	15.4	155.8	0.66	0.32
实施例 (III-3)	化合物 (P-7)	6.6	17.0	2500	14.7	149.7	0.66	0.33
实施例 (III-4)	化合物 (P-8)	6.6	16.7	2500	15.0	152.5	0.66	0.32
实施例 (III-5)	化合物 (P-11)	6.7	17.3	2500	14.4	149.9	0.66	0.32
实施例 (III-6)	化合物 (P-14)	6.7	18.0	2500	13.9	147.4	0.66	0.32
实施例 (III-7)	化合物 (P-21)	6.7	17.4	2500	14.4	147.5	0.66	0.33
实施例 (III-8)	化合物 (P-22)	6.8	17.6	2500	14.2	149.8	0.66	0.32
实施例 (III-9)	化合物 (P-24)	6.8	17.5	2500	14.3	151.4	0.66	0.33
实施例 (III-10)	化合物 (P-34)	6.7	17.4	2500	14.4	149.8	0.66	0.33
实施例 (III-11)	化合物 (P-40)	6.7	17.9	2500	14.0	146.8	0.66	0.33
实施例 (III-12)	化合物 (P-43)	6.6	16.8	2500	14.9	150.1	0.66	0.33
实施例 (III-13)	化合物 (P-45)	6.8	18.0	2500	13.9	147.1	0.66	0.33
实施例 (III-14)	化合物 (P-46)	6.6	17.2	2500	14.5	147.5	0.66	0.33
实施例 (III-15)	化合物 (P-49)	6.6	16.9	2500	14.8	147.8	0.66	0.33
实施例 (III-16)	化合物 (P-50)	6.8	17.7	2500	14.1	152.2	0.66	0.33
实施例 (III-17)	化合物 (P-51)	6.6	16.8	2500	14.9	147.8	0.66	0.33
实施例 (III-18)	化合物 (P-52)	6.8	17.8	2500	14.1	149.5	0.66	0.32
实施例 (III-19)	化合物 (P-53)	6.8	17.5	2500	14.3	147.4	0.66	0.32
实施例 (III-20)	化合物 (P-59)	6.8	17.7	2500	14.1	150.5	0.66	0.32
实施例 (III-21)	化合物 (P-61)	6.6	14.6	2500	17.2	176.5	0.66	0.32
实施例 (III-22)	化合物 (P-64)	6.6	14.6	2500	17.1	178.6	0.66	0.33
实施例 (III-23)	化合物 (P-65)	6.6	15.0	2500	16.6	173.5	0.66	0.32
实施例 (III-24)	化合物 (P-66)	6.6	14.7	2500	17.0	169.0	0.66	0.33
实施例 (III-25)	化合物 (P-71)	6.7	15.5	2500	16.2	170.9	0.66	0.33
实施例 (III-26)	化合物 (P-75)	6.6	14.7	2500	17.0	173.8	0.66	0.32
实施例 (III-27)	化合物 (P-76)	6.6	15.5	2500	16.1	173.5	0.66	0.32
实施例 (III-28)	化合物 (P-86)	6.7	16.1	2500	15.5	161.5	0.66	0.32
实施例 (III-29)	化合物 (P-99)	6.6	16.0	2500	15.6	161.5	0.66	0.32

[0418]	实施例(III-30)	化合物(P-106)	6.6	16.1	2500	15.5	163.9	0.66	0.32
	实施例(III-31)	化合物(P-108)	6.7	15.8	2500	15.8	159.1	0.66	0.33
	实施例(III-32)	化合物(P-113)	6.6	15.3	2500	16.4	173.2	0.66	0.33
	实施例(III-33)	化合物(P-114)	6.6	16.0	2500	15.6	162.3	0.66	0.33
	实施例(III-34)	化合物(P-115)	6.7	15.8	2500	15.8	162.5	0.66	0.32
	实施例(III-35)	化合物(P-116)	6.7	16.0	2500	15.7	161.4	0.66	0.33
	实施例(III-36)	化合物(P-117)	6.7	16.0	2500	15.6	161.8	0.66	0.32
	实施例(III-37)	化合物(P-118)	6.6	15.5	2500	16.1	173.7	0.66	0.33
	实施例(III-38)	化合物(P-132)	6.6	16.4	2500	15.3	166.4	0.66	0.33
	实施例(III-39)	化合物(P-133)	6.6	16.4	2500	15.3	161.6	0.66	0.32
	实施例(III-40)	化合物(P-136)	6.7	16.3	2500	15.3	161.6	0.66	0.32

[0419] 从上述表及表6的结果可知,使用本发明的化合物作为发光辅助层的材料的有机电致发光元件与比较例II-1至比较例III-5的有机电致发光元件相比,发光效率得到了提高,且寿命得到了显著的改善。

[0420] 从上述结果可以看出,与未形成发光辅助层的元件相比,使用比较化合物3至比较化合物8及本发明的化合物作为发光辅助层的元件,具有改善的发光效率和寿命,其中,可以确认本发明的化合物在发光效率和寿命方面显示出明显较高的结果。

[0421] 将具有追加融合(fused)由芳香族环的形态的芴与咪唑作为核,并(键合于连接基苯基)被两个胺基取代的取代基中的至少一个为具有非芳基的苄基、二苯并呋喃、二苯并噻吩、咪唑的形态的结构,称为提高分子的平面性的取代基的导入,在这方面而言,不仅是空穴输送层,而且在发光辅助层(绿色磷光、蓝色荧光)中,也起到提高元件性能的主要因素的作用,用作发光辅助层材料的本发明的化合物被确认具有深的HOMO能级及高的T1值,维持发光层内的电荷平衡,并可有效地执行电子阻挡功能,由此提高发光效率及寿命。

[0422] 另外,前述的元件制备的评价结果中,虽然仅说明了将本发明的化合物适用于空穴输送层和发光辅助层中的一个层的元件特性,但本发明的化合物也可均适用于空穴输送层和发光辅助层而进行使用。

[0423] 以上的说明仅为例示,只要是本发明所属技术领域的普通技术人员,就能在不脱离本发明的本质特性的范围内进行多种变形。因此,本说明书所公开的实施例并不用于限定本发明,而是用于说明本发明,本发明的思想和范围不会因这种实施例而受到限制。本发明的保护范围应根据发明要求保护范围来解释,与其等同范围内的所有技术应解释为包括在本发明的保护范围。

[0424] 相关专利申请的交叉引用

[0425] 本专利申请根据美国专利法119(a)条(35U.S.C§119(a)),针对2015年6月12日在韩国申请的专利申请编号第10-2015-0083505号主张优先权,其全部内容作为参照文献合并于本专利申请。并且,除了在美国之外,若本专利申请在其他国家也以相同的理由而主张优先权,则其全部内容作为参照文献合并于本专利申请。

100

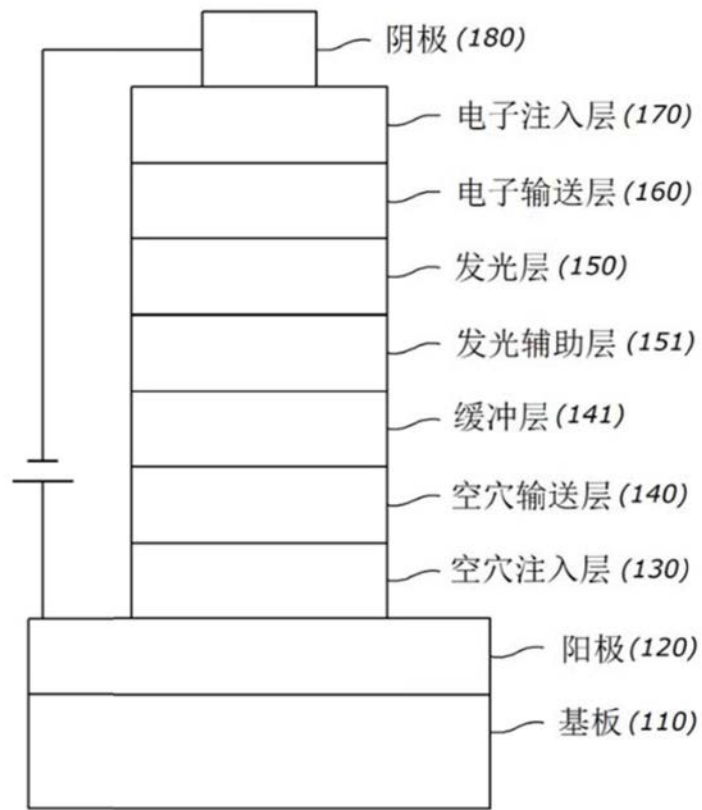


图1