



(12) 发明专利

(10) 授权公告号 CN 108473424 B

(45) 授权公告日 2021.08.17

(21) 申请号 201680076802.8

(22) 申请日 2016.12.28

(65) 同一申请的已公布的文献号
申请公布号 CN 108473424 A

(43) 申请公布日 2018.08.31

(30) 优先权数据
2015-256570 2015.12.28 JP
2016-079892 2016.04.12 JP

(85) PCT国际申请进入国家阶段日
2018.06.28

(86) PCT国际申请的申请数据
PCT/JP2016/089033 2016.12.28

(87) PCT国际申请的公布数据
W02017/115834 JA 2017.07.06

(73) 专利权人 九州有机光材股份有限公司
地址 日本福岡
专利权人 国立大学法人九州大学

(72) 发明人 那须圭朗 安达千波矢 中野谷一
野村洸子

(74) 专利代理机构 北京三友知识产权代理有限公司 11127
代理人 庞东成 褚瑶杨

(51) Int.Cl.
C07D 209/86 (2006.01)
C09K 11/06 (2006.01)
H01L 51/50 (2006.01)

(56) 对比文件
CN 106316924 A, 2017.01.11
CN 105602553 A, 2016.05.25
CN 104204132 A, 2014.12.10
EP 2039737 A2, 2009.03.25
US 2015129849 A1, 2015.05.14

审查员 高原

权利要求书4页 说明书60页 附图8页

(54) 发明名称

化合物、发光材料及有机发光元件

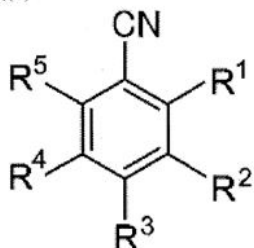
(57) 摘要

本发明涉及一种化合物、发光材料及有机发光元件。本发明的具有下述通式所表示的结构的化合物放射延迟荧光,作为发光材料有用。 R^1 、 R^2 、 R^4 及 R^5 中的3个以上表示9-呋唑基、10-吩噻嗪基或10-吩噻嗪基。其余的 R^3 表示氢原子或其它取代基,但不是氰基。另外, R^3 不是芳基、杂芳基、



1. 一种化合物,其具有下述通式(1)所表示的结构,
[化1]

通式(1)

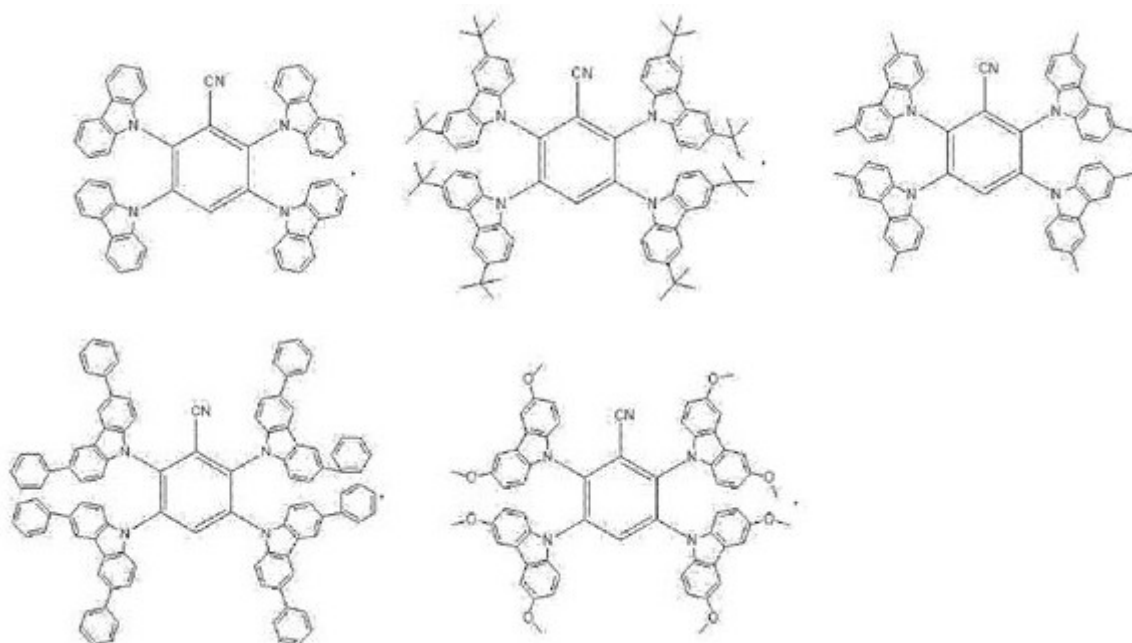


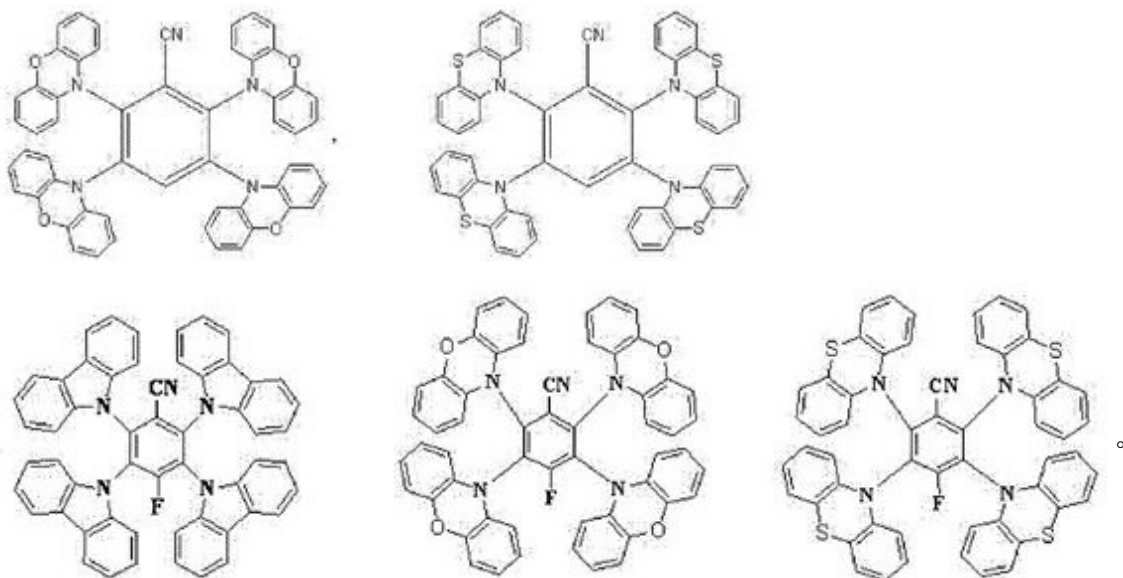
通式(1)中, R^1 、 R^2 、 R^4 及 R^5 中的3个以上分别独立地表示经取代或未经取代的9-咔唑基、经取代或未经取代的10-吩噻嗪基、或者经取代或未经取代的10-吩噻嗪基,其余表示氢原子或者选自碳数1~20的未经取代的烷基、碳数1~20的未经取代的烷氧基的取代基;构成所述9-咔唑基、所述10-吩噻嗪基及所述10-吩噻嗪基的各环骨架的1个以上的碳原子可以被氮原子取代; R^3 分别独立地表示氢原子或者选自碳数1~20的未经取代的烷基、碳数1~20的未经取代的烷氧基和经碳数2~20的二烷基取代的氨基的取代基;

其中所述经取代的9-咔唑基是经选自碳数3~20的未经取代的支链状烷基、碳数1~20的未经取代的烷氧基、经碳数1~20的未经取代的烷氧基所取代的二芳基氨基、及未经取代的二芳基氨基中的1个以上的取代基所取代的9-咔唑基,

所述经取代的10-吩噻嗪基或经取代的10-吩噻嗪基的取代基是羟基、卤素原子、氰基、碳数1~20的烷基、碳数1~20的烷氧基、碳数1~20的烷硫基、经碳数1~20的烷基取代的氨基;并且

所述通式(1)不包括以下结构:





2. 根据权利要求1所述的化合物,其特征在于: R^1 、 R^2 、 R^4 及 R^5 中的3个以上是经选自碳数3~20的未经取代的支链状烷基、碳数1~20的未经取代的烷氧基、及未经取代的二芳基氨基中的1个以上的取代基所取代的9-咔唑基,或者未经取代的9-咔唑基。

3. 根据权利要求1或2所述的化合物,其特征在于: R^1 、 R^2 、 R^4 及 R^5 中的3个以上是取代有1个以上的碳数3~20的未经取代的支链状烷基的9-咔唑基。

4. 根据权利要求1或2所述的化合物,其特征在于: R^1 、 R^2 、 R^4 及 R^5 全部为经取代或未经取代的9-咔唑基。

5. 根据权利要求1或2所述的化合物,其特征在于: R^1 、 R^2 、 R^4 及 R^5 中的3个是经取代或未经取代的9-咔唑基。

6. 根据权利要求1或2所述的化合物,其特征在于: R^1 、 R^2 、 R^4 及 R^5 的3个以上是未经取代的9-咔唑基。

7. 根据权利要求1或2所述的化合物,其特征在于: R^1 、 R^2 、 R^4 及 R^5 的3个以上是3位和6位经取代基取代的9-咔唑基。

8. 根据权利要求1或2所述的化合物,其中 R^3 是氢原子。

9. 一种根据权利要求1至8中任一项所述的化合物的用途,其用作发光材料。

10. 根据权利要求9所述的用作发光材料的用途,其特征在于放射延迟荧光。

11. 一种有机发光元件,其特征在于:在衬底上具有包含根据权利要求1至8中任一项所述的化合物和主体材料的发光层。

12. 根据权利要求11所述的有机发光元件,其特征在于:其是有机电致发光元件。

13. 一种化合物的用途,其用作延迟荧光体,且该化合物具有下述通式(1')所表示的结构,

[化2]

通式(1')

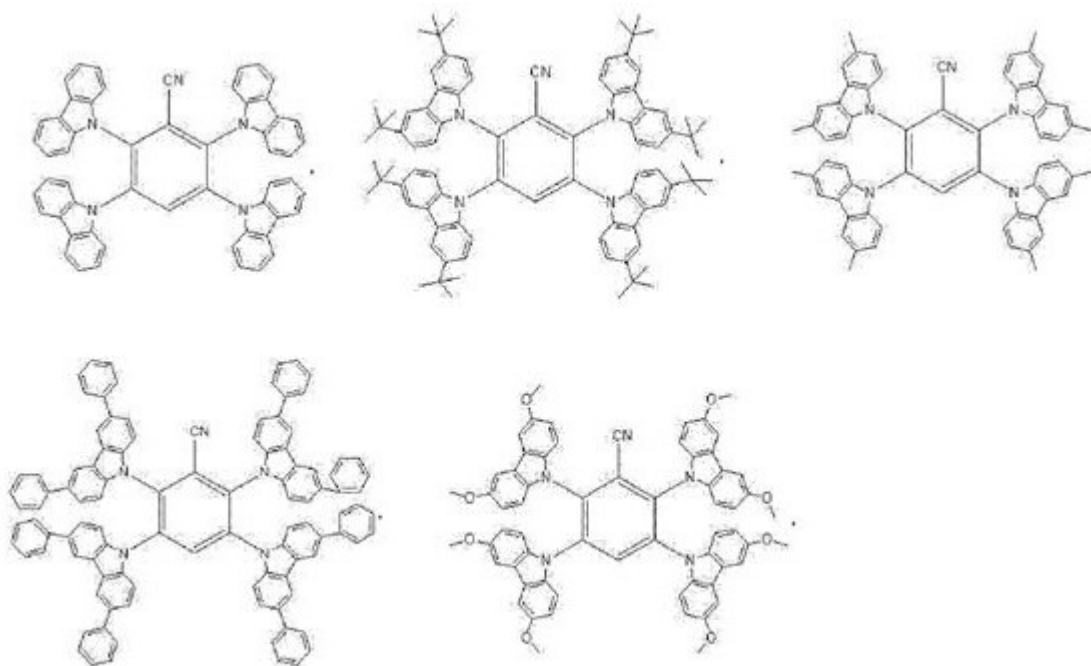


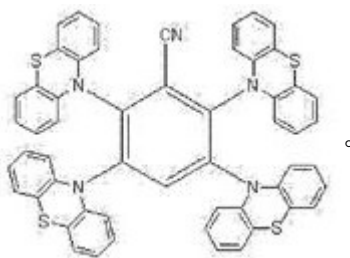
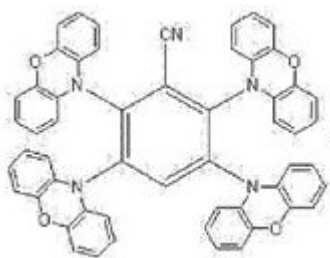
通式(1')中, $R^{1'}$ 、 $R^{2'}$ 、 $R^{4'}$ 及 $R^{5'}$ 中的3个以上分别独立地表示经取代或未经取代的9-咔唑基、经取代或未经取代的10-吩噻嗪基、或者经取代或未经取代的10-吩噻嗪基,其余表示氢原子或者选自碳数1~20的未经取代的烷基、碳数1~20的未经取代的烷氧基的取代基;构成所述9-咔唑基、所述10-吩噻嗪基及所述10-吩噻嗪基的各环骨架的1个以上的碳原子可以被氮原子取代; $R^{3'}$ 分别独立地表示氢原子或者选自碳数1~20的未经取代的烷基、碳数1~20的未经取代的烷氧基和经碳数2~20的二烷基取代的氨基的取代基;

其中所述经取代的9-咔唑基是经选自碳数3~20的未经取代的支链状烷基、碳数1~20的未经取代的烷氧基、经碳数1~20的未经取代的烷氧基所取代的二芳基氨基、及未经取代的二芳基氨基中的1个以上的取代基所取代的9-咔唑基,

所述经取代的10-吩噻嗪基或经取代的10-吩噻嗪基的取代基是羟基、卤素原子、氰基、碳数1~20的烷基、碳数1~20的烷氧基、碳数1~20的烷硫基、经碳数1~20的烷基取代的氨基;并且

所述通式(1')不包括以下结构:





化合物、发光材料及有机发光元件

技术领域

[0001] 本发明涉及一种作为发光材料有用的化合物和使用其的有机发光元件。

背景技术

[0002] 业界正积极地进行提高有机电致发光元件(有机EL元件)等有机发光元件的发光效率的研究。特别是想出了各种办法,通过新开发构成有机电致发光元件的电子传输材料、空穴传输材料、发光材料等并加以组合来提高发光效率。其中,也可以看到着眼于放射延迟荧光的化合物的研究。

[0003] 延迟荧光是在通过能量供给转变为激发状态的化合物中,产生从激发三重态向激发单重态的逆系间跨越之后,从该激发单重态恢复至基底状态时放射的荧光,且是比直接产生的来自激发单重态的荧光(普通荧光)迟地观测到的荧光。如果将能够放射这种延迟荧光的化合物用于有机电致发光元件的发光材料,那么其形成概率大的激发三重态的能量被转换为荧光,能够有效利用于发光,所以可以期待高发光效率。因此,业界盛行开发放射延迟荧光的化合物,也提出了一些将这样的化合物用于发光材料的提案。

[0004] 例如,在专利文献1中,记载了在苯环上取代有2个氰基和1个以上唑基等的化合物是能够放射延迟荧光的化合物。并且,记载了如果将这些化合物用作有机电致发光元件等的发光材料,那么可以提高发光效率。

[0005] [现有技术文献]

[0006] [专利文献]

[0007] 专利文献1:日本专利第5366106号

发明内容

[0008] [发明要解决的问题]

[0009] 然而,关于一般在具有什么样的化学结构的情况下才能够放射延迟荧光的方面,至今尚不明确。例如,即便是和专利文献1所记载的化合物类似的化合物,也未必能够放射延迟荧光,难以根据其结构推测出能否放射延迟荧光。因此,为了能够从更广泛的化合物群中采用能够放射延迟荧光的化合物,认为必须从专利文献1中提出的化合物以外的范围进一步发现能够放射延迟荧光的化合物并供于使用。

[0010] 在此这种情况下,本发明者等人为了找出具有专利文献1没有记载的结构并且放射延迟荧光的化合物,进行了努力研究。并且,为了推导出这种化合物的通式,使发光效率高的有机发光元件的构成概括化,进行了努力研究。

[0011] [解决问题的技术手段]

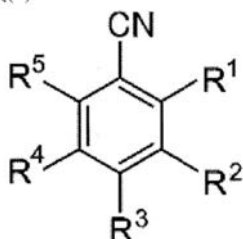
[0012] 本发明人等进行努力研究,结果发现:在具有苯环上仅取代有1个氰基的结构的化合物中,也存在能够放射延迟荧光的化合物。并且,获得了如下见解:通过将这种能够放射延迟荧光的化合物用于发光材料,能够提供发光效率高的有机发光元件。本发明是基于这种见解提出的,具体来说具有以下构成。

[0013] [1]一种化合物,其具有下述通式(1)所表示的结构,

[0014] [化1]

通式(1)

[0015]



[0016] [通式(1)中, R^1 、 R^2 、 R^4 及 R^5 中的3个以上分别独立地表示经取代或未经取代的9-咪唑基、经取代或未经取代的10-吩噻嗪基、或者经取代或未经取代的10-吩噻嗪基、或者氰基;其余表示氢原子或取代基,但该取代基不是经取代或未经取代的9-咪唑基、经取代或未经取代的10-吩噻嗪基、或者经取代或未经取代的10-吩噻嗪基;构成所述9-咪唑基、所述10-吩噻嗪基及所述10-吩噻嗪基的各环骨架的1个以上的碳原子可以被氮原子取代; R^3 分别独立地表示氢原子或取代基,但该取代基不是经取代或未经取代的9-咪唑基、经取代或未经取代的10-吩噻嗪基、氰基、经取代或未经取代的10-吩噻嗪基、经取代或未经取代的芳基、经取代或未经取代的杂芳基、经取代或未经取代的炔基]。

[0017] [2]根据[1]所述的化合物,其特征在于: R^1 、 R^2 、 R^4 及 R^5 中的3个以上是经选自经取代或未经取代的支链状烷基、经取代或未经取代的烷氧基、及经取代或未经取代的二芳基氨基中的1个以上的取代基所取代的9-咪唑基,或者未经取代的9-咪唑基。

[0018] [3]根据[1]或[2]所述的化合物,其特征在于: R^1 、 R^2 、 R^4 及 R^5 中的3个以上是取代有1个以上的经取代或未经取代的支链状烷基的9-咪唑基。

[0019] [4]根据[1]或[2]所述的化合物,其特征在于: R^1 、 R^2 、 R^4 及 R^5 全部为经取代或未经取代的9-咪唑基。

[0020] [5]根据[1]或[2]所述的化合物,其特征在于: R^1 、 R^2 、 R^4 及 R^5 中的3个是经取代或未经取代的9-咪唑基。

[0021] [6]根据[1]或[2]所述的化合物,其特征在于: R^1 、 R^2 、 R^4 及 R^5 的3个以上是未经取代的9-咪唑基。

[0022] [7]根据[1]至[3]中任一项所述的化合物,其特征在于: R^1 、 R^2 、 R^4 及 R^5 的3个以上是3位和6位经取代基取代的9-咪唑基。

[0023] [8]根据[1]至[7]中任一项所述的化合物,其特征在于: R^3 为氢原子。

[0024] [9]一种发光材料,其包含根据[1]至[8]中任一项所述的化合物。

[0025] [10]根据[9]所述的发光材料,其特征在于放射延迟荧光。

[0026] [11]一种有机发光元件,其特征在于:其在衬底上具有包含根据[9]或[10]所述的发光材料的发光层。

[0027] [12]根据[11]所述的有机发光元件,其特征在于:其是有机电致发光元件。

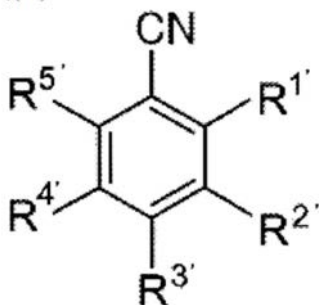
[0028] [13]根据[11]或[12]所述的有机发光元件,其特征在于:所述发光层包含根据[1]至[8]中任一项所述的化合物和主体材料。

[0029] [14]一种延迟荧光体,其具有下述通式(1')所表示的结构,

[0030] [化2]

通式(1')

[0031]



[0032] [通式(1')中, $R^{1'}$ 、 $R^{2'}$ 、 $R^{4'}$ 及 $R^{5'}$ 中的3个以上分别独立地表示经取代或未经取代的9-呋唑基、经取代或未经取代的10-吩噻嗪基、或者经取代或未经取代的10-吩噻嗪基;其余表示氢原子或取代基,但该取代基不是经取代或未经取代的9-呋唑基、经取代或未经取代的10-吩噻嗪基、或者经取代或未经取代的10-吩噻嗪基、或者氰基;构成所述9-呋唑基、所述10-吩噻嗪基及所述10-吩噻嗪基的各环骨架的1个以上的碳原子可以被氮原子取代; $R^{3'}$ 分别独立地表示氢原子或取代基,但该取代基不是经取代或未经取代的9-呋唑基、经取代或未经取代的10-吩噻嗪基、经取代或未经取代的10-吩噻嗪基、或者氰基]。

[0033] [发明的效果]

[0034] 本发明的化合物作为发光材料有用。另外,本发明的化合物能够放射延迟荧光,且可以将其激发三重态能量有效用于发光。因此,将本发明的化合物用作发光材料的有机发光元件能够实现高发光效率。

附图说明

[0035] 图1是表示有机电致发光元件的层构成例的概略剖视图。

[0036] 图2是实施例1的化合物1的甲苯溶液的发光光谱和吸收光谱。

[0037] 图3是实施例1的化合物1的甲苯溶液的过渡衰减曲线。

[0038] 图4是实施例2的化合物2的甲苯溶液的发光光谱和吸收光谱。

[0039] 图5是实施例2的化合物2的甲苯溶液的过渡衰减曲线。

[0040] 图6是实施例3的化合物3的甲苯溶液的发光光谱和吸收光谱。

[0041] 图7是实施例3的化合物3的甲苯溶液的过渡衰减曲线。

[0042] 图8是实施例4的化合物814的甲苯溶液的发光光谱。

[0043] 图9是实施例4的化合物814的甲苯溶液的过渡衰减曲线。

[0044] 图10是实施例5的化合物816的甲苯溶液的发光光谱和吸收光谱。

[0045] 图11是实施例5的化合物816的甲苯溶液的过渡衰减曲线。

[0046] 图12是比较化合物1的甲苯溶液的过渡衰减曲线。

[0047] 图13是比较化合物2的甲苯溶液的过渡衰减曲线。

[0048] 图14是比较化合物3的甲苯溶液的过渡衰减曲线。

[0049] 图15是使用化合物1的有机电致发光元件的发光光谱。

[0050] 图16是表示使用化合物1的有机电致发光元件的亮度-外部量子效率特性的曲线图。

具体实施方式

[0051] 以下详细地说明本发明的内容。以下记载的构成要件的说明有时是基于本发明的代表性实施方式或具体例完成的,但本发明并不限于这样的实施方式或具体例。另外,本说明书中以“~”表示的数值范围意指包含“~”的前后所记载的数值作为下限值及上限值的范围。另外,本发明中使用的化合物的分子内存在的氢原子的同位素种类没有特别限定,例如分子内的氢原子可以全部为 ^1H ,或也可以一部分或全部为 ^2H (氘D)。

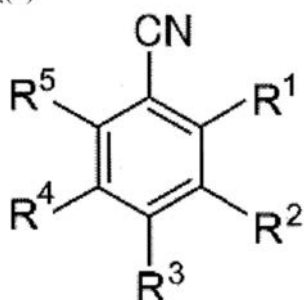
[0052] [通式(1)所表示的化合物]

[0053] 本发明的发光材料的特征在于包含下述通式(1)所表示的化合物。

[0054] [化3]

通式(1)

[0055]



[0056] 通式(1)中, R^1 、 R^2 、 R^4 及 R^5 中的3个以上分别独立地表示经取代或未经取代的9-呋唑基、经取代或未经取代的10-吩噻嗪基、或者经取代或未经取代的10-吩噻嗪基。其余表示氢原子或取代基,但该取代基不是经取代或未经取代的9-呋唑基、经取代或未经取代的10-吩噻嗪基、经取代或未经取代的10-吩噻嗪基、或者氰基。

[0057] R^1 、 R^2 、 R^4 及 R^5 中,经取代或未经取代的9-呋唑基、经取代或未经取代的10-吩噻嗪基、或经取代或未经取代的10-吩噻嗪基可以为3个,也可以为4个,优选为4个。 R^1 、 R^2 、 R^4 及 R^5 中的3个为经取代或未经取代的9-呋唑基、经取代或未经取代的10-吩噻嗪基、或者经取代或未经取代的10-吩噻嗪基时,这些基可以是 R^1 、 R^2 及 R^4 ,也可以是 R^1 、 R^2 及 R^5 。 R^1 、 R^2 、 R^4 及 R^5 中,为经取代或未经取代的9-呋唑基、经取代或未经取代的10-吩噻嗪基、或者经取代或未经取代的10-吩噻嗪基时可以是相同结构,也可以是不同结构,优选为相同结构。

[0058] R^1 、 R^2 、 R^4 及 R^5 优选其至少1个为经取代或未经取代的9-呋唑基,更优选其3个以上为经取代或未经取代的9-呋唑基,即 R^1 、 R^2 、 R^4 及 R^5 全部为经取代或未经取代的9-呋唑基,或者 R^1 、 R^2 、 R^4 及 R^5 中的3个为经取代或未经取代的9-呋唑基。此外, R^1 、 R^2 、 R^4 及 R^5 中的3个以上更优选经选自经取代或未经取代的支链状烷基、经取代或未经取代的烷氧基、及经取代或未经取代的二芳基氨基中的1个以上的取代基所取代的9-呋唑基,或未经取代的9-呋唑基;进一步优选经选自碳数3~20的未经取代的支链状烷基、碳数1~20的未经取代的烷氧基、经碳数1~20的未经取代的烷氧基所取代的二芳基氨基、及未经取代的二芳基氨基中的1个以上的取代基所取代的9-呋唑基,或者未经取代的9-呋唑基;尤其优选的取代有1个以上的碳数3~20的未经取代的支链状烷基的9-呋唑基,或者未经取代的9-呋唑基。这里,未经取代的支链状烷基的碳数更优选3~10,进一步优选3~5。当9-呋唑基具有取代基时,其取代位置没有特别限定。作为优选例,例如可以列举3位及6位的至少一个被取代的基,更优选3位和6位两者均被取代的基。

[0059] R^1 、 R^2 、 R^4 及 R^5 中的9-呋唑基、10-吩噻嗪基及10-吩噻嗪基的构成其各环骨架的1个

以上的碳原子也可以被氮原子取代。被氮原子取代的碳原子的数量没有特别限制,优选1~4个,更优选1或2个。

[0060] R^3 表示氢原子或取代基,但该取代基不是经取代或未经取代的9-呋唑基、经取代或未经取代的10-吩噻嗪基、经取代或未经取代的10-吩噻嗪基、氰基、经取代或未经取代的芳基、经取代或未经取代的杂芳基、经取代或未经取代的炔基。优选 R^3 为氢原子。

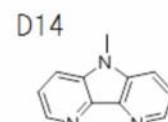
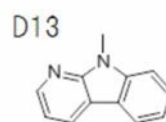
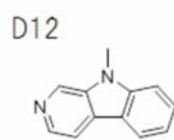
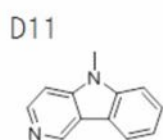
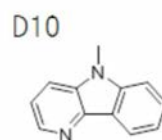
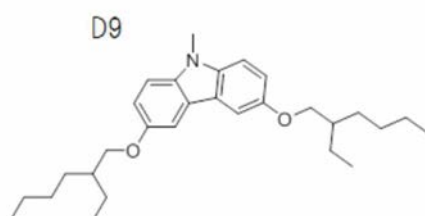
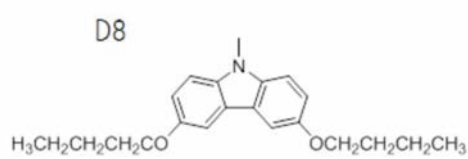
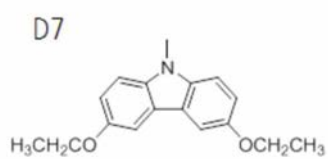
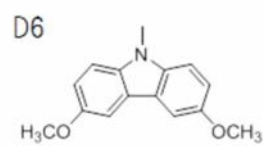
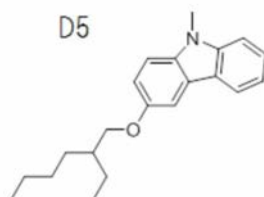
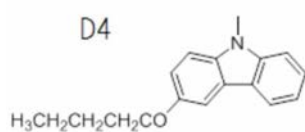
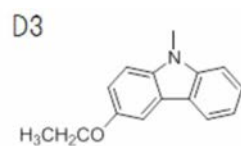
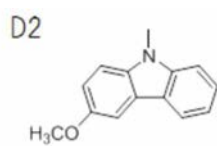
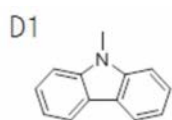
[0061] 当 R^1 、 R^2 、 R^4 、 R^5 分别为经取代基取代的10-吩噻嗪基或10-吩噻嗪基时,作为该10-吩噻嗪基或10-吩噻嗪基的取代基,例如可以列举:羟基、卤素原子、氰基、碳数1~20的烷基、碳数1~20的烷氧基、碳数1~20的烷硫基、经碳数1~20的烷基取代的氨基、碳数2~20的酰基、碳数6~40的芳基、碳数3~40的杂芳基、碳数2~10的烯基、碳数2~10的炔基、碳数2~10的烷氧羰基、碳数1~10的烷基磺酰基、碳数1~10的卤烷基、酰胺基、碳数2~10的烷基酰胺基、碳数3~20的三烷基甲硅烷基、碳数4~20的三烷基甲硅烷基烷基、碳数5~20的三烷基甲硅烷基烯基、碳数5~20的三烷基甲硅烷基炔基及硝基等。这些具体例中,能够进一步经取代基取代的基也可以经取代。更优选的取代基是卤素原子、氰基、碳数1~20的经取代或未经取代的烷基、碳数1~20的烷氧基、碳数6~40的经取代或未经取代的芳基、碳数3~40的经取代或未经取代的杂芳基、经碳数2~20的二烷基取代的氨基。进一步优选的取代基为氟原子、氯原子、氰基、碳数1~10的经取代或未经取代的烷基、碳数1~10的经取代或未经取代的烷氧基、碳数6~15的经取代或未经取代的芳基、碳数3~12的经取代或未经取代的杂芳基。

[0062] 作为 R^1 、 R^2 、 R^4 及 R^5 中的3个为经取代或未经取代的9-呋唑基、经取代或未经取代的10-吩噻嗪基、或者经取代或未经取代的10-吩噻嗪基时的其余的 R^1 、 R^2 、 R^4 或者 R^5 所可取的取代基,可以列举作为所述10-吩噻嗪基或者10-吩噻嗪基的取代基所例示的基中除氰基以外的基,但杂芳基不包含经取代或未经取代的9-呋唑基、经取代或未经取代的10-吩噻嗪基、或者经取代或未经取代的10-吩噻嗪基。更优选的取代基是碳数1~20的经取代或未经取代的烷基、碳数1~20的烷氧基、碳数6~40的经取代或未经取代的芳基。

[0063] 另外,作为 R^3 所可取的取代基,可以列举作为所述10-吩噻嗪基、取代10-吩噻嗪基的取代基所例示的基中,除碳数6~40的经取代或未经取代的芳基、碳数3~40的经取代或未经取代的杂芳基、碳数2~10的炔基、碳数5~20的三烷基甲硅烷基炔基及氰基以外的基。更优选的取代基是碳数1~20的经取代或未经取代的烷基、碳数1~20的烷氧基、经碳数2~20的二烷基取代的氨基。二烷基氨基也可以将烷基彼此用氧原子等连结而形成环结构。

[0064] 以下,例示通式(1)的 R^1 、 R^2 、 R^4 及 R^5 的具体例(D1~D38)、及通式(1)所表示的化合物的具体例(表1的化合物1~835)。但是,在本发明中,通式(1)的 R^1 、 R^2 、 R^4 及 R^5 、通式(1)所表示的化合物并不应受这些具体例限定地解释。另外,表1中,“t-Bu”表示叔丁基,“Ph”表示苯基。

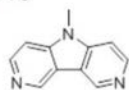
[0065] [化4]



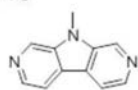
[0066]

[0067] [化5]

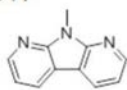
D15



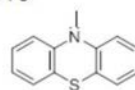
D16



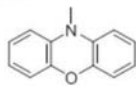
D17



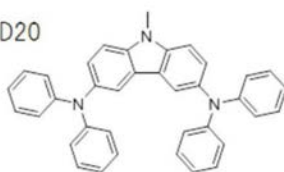
D18



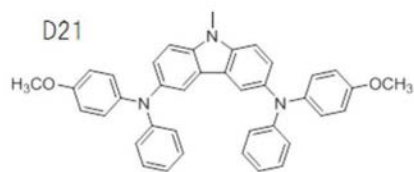
D19



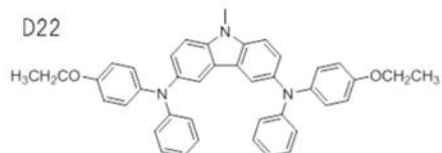
D20



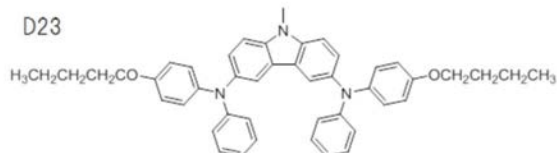
D21



D22

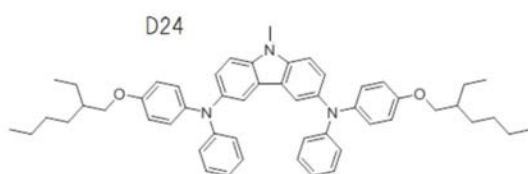


D23

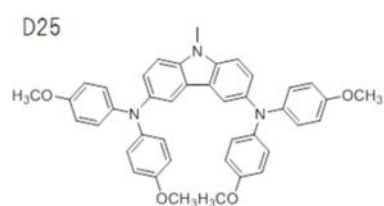


[0068]

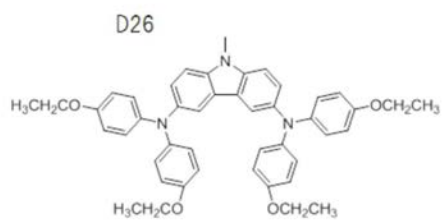
D24



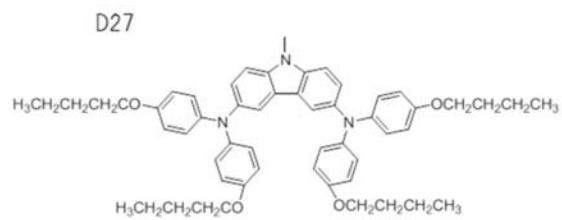
D25



D26



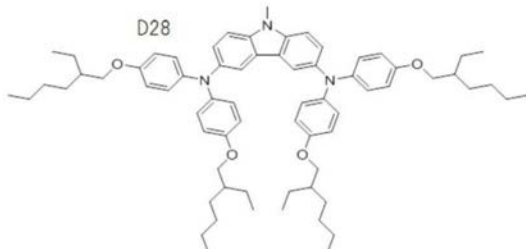
D27



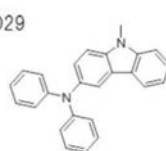
[0069]

[化6]

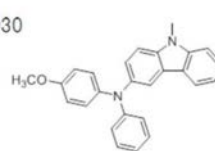
D28



D29

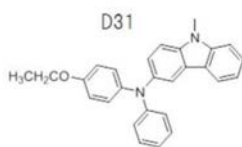


D30

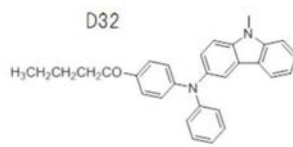


[0070]

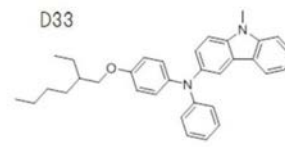
D31



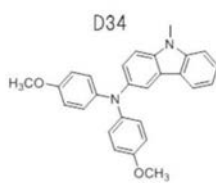
D32



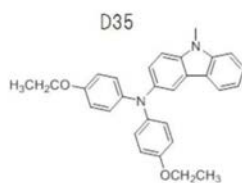
D33



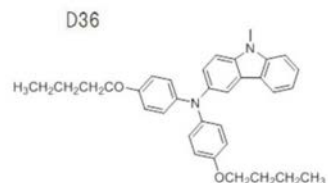
D34

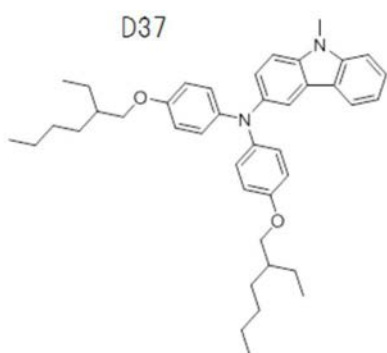


D35

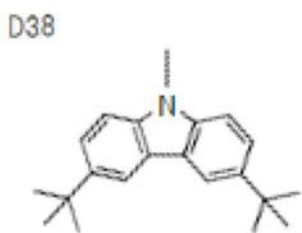


D36

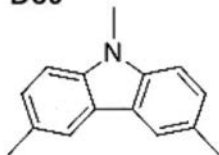




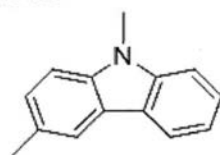
[0071]



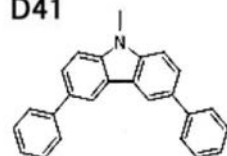
D39



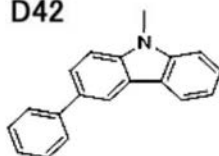
D40



D41



D42



[0072] [表1-1]

[0073]

化合物 编号	R ¹	R ²	R ³	R ⁴	R ⁵
1	D1	D1	H	D1	D1
2	D1	D1	H	H	D1
3	D1	D1	H	D1	H
4	D2	D2	H	D2	H
5	D2	D2	H	H	D2
6	D2	D2	H	D2	D2
7	D3	D3	H	D3	H
8	D3	D3	H	H	D3
9	D3	D3	H	D3	D3
10	D4	D4	H	D4	H
11	D4	D4	H	H	D4
12	D4	D4	H	D4	D4
13	D5	D5	H	D5	H
14	D5	D5	H	H	D5
15	D5	D5	H	D5	D5
16	D6	D6	H	D6	H
17	D6	D6	H	H	D6
18	D6	D6	H	D6	D6
19	D7	D7	H	D7	H
20	D7	D7	H	H	D7
21	D7	D7	H	D7	D7
22	D8	D8	H	D8	H
23	D8	D8	H	H	D8
24	D8	D8	H	D8	D8
25	D9	D9	H	D9	H
26	D9	D9	H	H	D9
27	D9	D9	H	D9	D9
28	D10	D10	H	D10	H
29	D10	D10	H	H	D10
30	D10	D10	H	D10	D10
31	D11	D11	H	D11	H
32	D11	D11	H	H	D11
33	D11	D11	H	D11	D11
34	D12	D12	H	D12	H
35	D12	D12	H	H	D12
36	D12	D12	H	D12	D12
37	D13	D13	H	D13	H
38	D13	D13	H	H	D13
39	D13	D13	H	D13	D13
40	D14	D14	H	D14	H
41	D14	D14	H	H	D14
42	D14	D14	H	D14	D14
43	D15	D15	H	D15	H
44	D15	D15	H	H	D15
45	D15	D15	H	D15	D15
46	D16	D16	H	D16	H
47	D16	D16	H	H	D16
48	D16	D16	H	D16	D16
49	D17	D17	H	D17	H
50	D17	D17	H	H	D17

[0074] [表1-2]

[0075]

化合物 编号	R ¹	R ²	R ³	R ⁴	R ⁵
51	D17	D17	H	D17	D17
52	D18	D18	H	D18	H
53	D18	D18	H	H	D18
54	D18	D18	H	D18	D18
55	D19	D19	H	D19	H
56	D19	D19	H	H	D19
57	D19	D19	H	D19	D19
58	D20	D20	H	D20	H
59	D20	D20	H	H	D20
60	D20	D20	H	D20	D20
61	D21	D21	H	D21	H
62	D21	D21	H	H	D21
63	D21	D21	H	D21	D21
64	D22	D22	H	D22	H
65	D22	D22	H	H	D22
66	D22	D22	H	D22	D22
67	D23	D23	H	D23	H
68	D23	D23	H	H	D23
69	D23	D23	H	D23	D23
70	D24	D24	H	D24	H
71	D24	D24	H	H	D24
72	D24	D24	H	D24	D24
73	D25	D25	H	D25	H
74	D25	D25	H	H	D25
75	D25	D25	H	D25	D25
76	D26	D26	H	D26	H
77	D26	D26	H	H	D26
78	D26	D26	H	D26	D26
79	D27	D27	H	D27	H
80	D27	D27	H	H	D27
81	D27	D27	H	D27	D27
82	D28	D28	H	D28	H
83	D28	D28	H	H	D28
84	D28	D28	H	D28	D28
85	D29	D29	H	D29	H
86	D29	D29	H	H	D29
87	D29	D29	H	D29	D29
88	D30	D30	H	D30	H
89	D30	D30	H	H	D30
90	D30	D30	H	D30	D30
91	D31	D31	H	D31	H
92	D31	D31	H	H	D31
93	D31	D31	H	D31	D31
94	D32	D32	H	D32	H
95	D32	D32	H	H	D32
96	D32	D32	H	D32	D32
97	D33	D33	H	D33	H
98	D33	D33	H	H	D33
99	D33	D33	H	D33	D33
100	D34	D34	H	D34	H

[0076] [表1-3]

[0077]

化合物 编号	R ¹	R ²	R ³	R ⁴	R ⁵
101	D34	D34	H	H	D34
102	D34	D34	H	D34	D34
103	D35	D35	H	D35	H
104	D35	D35	H	H	D35
105	D35	D35	H	D35	D35
106	D36	D36	H	D36	H
107	D36	D36	H	H	D36
108	D36	D36	H	D36	D36
109	D37	D37	H	D37	H
110	D37	D37	H	H	D37
111	D1	D1	甲基	D1	甲基
112	D1	D1	甲基	甲基	D1
113	D1	D1	甲基	D1	D1
114	D2	D2	甲基	D2	甲基
115	D2	D2	甲基	甲基	D2
116	D2	D2	甲基	D2	D2
117	D3	D3	甲基	D3	甲基
118	D3	D3	甲基	甲基	D3
119	D3	D3	甲基	D3	D3
120	D4	D4	甲基	D4	甲基
121	D4	D4	甲基	甲基	D4
122	D4	D4	甲基	D4	D4
123	D5	D5	甲基	D5	甲基
124	D5	D5	甲基	甲基	D5
125	D5	D5	甲基	D5	D5
126	D6	D6	甲基	D6	甲基
127	D6	D6	甲基	甲基	D6
128	D6	D6	甲基	D6	D6
129	D7	D7	甲基	D7	甲基
130	D7	D7	甲基	甲基	D7
131	D7	D7	甲基	D7	D7
132	D8	D8	甲基	D8	甲基
133	D8	D8	甲基	甲基	D8
134	D8	D8	甲基	D8	D8
135	D9	D9	甲基	D9	甲基
136	D9	D9	甲基	甲基	D9
137	D9	D9	甲基	D9	D9
138	D10	D10	甲基	D10	甲基
139	D10	D10	甲基	甲基	D10
140	D10	D10	甲基	D10	D10
141	D11	D11	甲基	D11	甲基
142	D11	D11	甲基	甲基	D11
143	D11	D11	甲基	D11	D11
144	D12	D12	甲基	D12	甲基
145	D12	D12	甲基	甲基	D12
146	D12	D12	甲基	D12	D12
147	D13	D13	甲基	D13	甲基
148	D13	D13	甲基	甲基	D13
149	D13	D13	甲基	D13	D13
150	D14	D14	甲基	D14	甲基

[0078] [表1-4]

[0079]

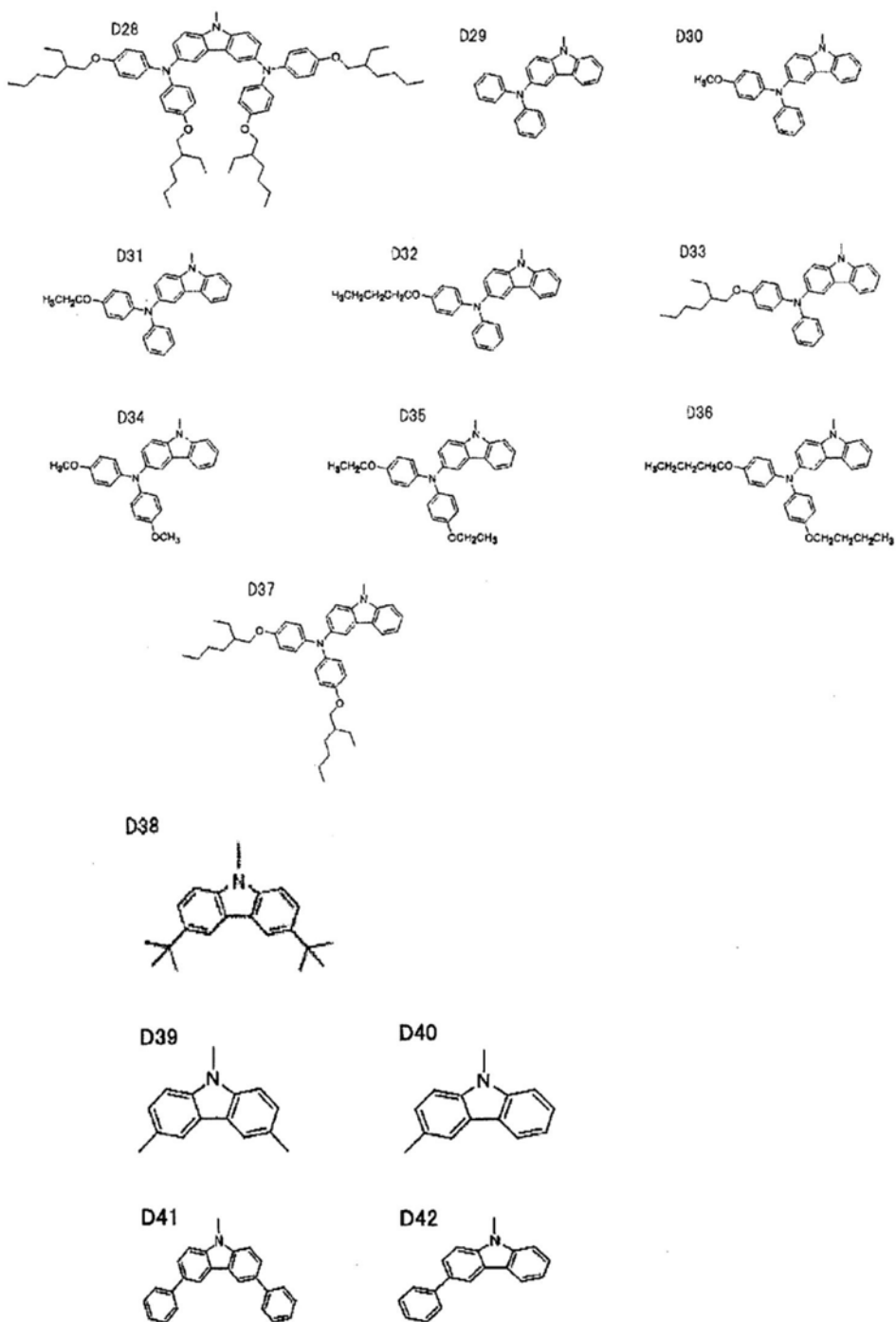
化合物 编号	R ¹	R ²	R ³	R ⁴	R ⁵
151	D14	D14	甲基	甲基	D14
152	D14	D14	甲基	D14	D14
153	D15	D15	甲基	D15	甲基
154	D15	D15	甲基	甲基	D15
155	D15	D15	甲基	D15	D15
156	D16	D16	甲基	D16	甲基
157	D16	D16	甲基	甲基	D16
158	D16	D16	甲基	D16	D16
159	D17	D17	甲基	D17	甲基
160	D17	D17	甲基	甲基	D17
161	D17	D17	甲基	D17	D17
162	D18	D18	甲基	D18	甲基
163	D18	D18	甲基	甲基	D18
164	D18	D18	甲基	D18	D18
165	D19	D19	甲基	D19	甲基
166	D19	D19	甲基	甲基	D19
167	D19	D19	甲基	D19	D19
168	D20	D20	甲基	D20	甲基
169	D20	D20	甲基	甲基	D20
170	D20	D20	甲基	D20	D20
171	D21	D21	甲基	D21	甲基
172	D21	D21	甲基	甲基	D21
173	D21	D21	甲基	D21	D21
174	D22	D22	甲基	D22	甲基
175	D22	D22	甲基	甲基	D22
176	D22	D22	甲基	D22	D22
177	D23	D23	甲基	D23	甲基
178	D23	D23	甲基	甲基	D23
179	D23	D23	甲基	D23	D23
180	D24	D24	甲基	D24	甲基
181	D24	D24	甲基	甲基	D24
182	D24	D24	甲基	D24	D24
183	D25	D25	甲基	D25	甲基
184	D25	D25	甲基	甲基	D25
185	D25	D25	甲基	D25	D25
186	D26	D26	甲基	D26	甲基
187	D26	D26	甲基	甲基	D26
188	D26	D26	甲基	D26	D26
189	D27	D27	甲基	D27	甲基
190	D27	D27	甲基	甲基	D27
191	D27	D27	甲基	D27	D27
192	D28	D28	甲基	D28	甲基
193	D28	D28	甲基	甲基	D28
194	D28	D28	甲基	D28	D28
195	D29	D29	甲基	D29	甲基
196	D29	D29	甲基	甲基	D29
197	D29	D29	甲基	D29	D29
198	D30	D30	甲基	D30	甲基
199	D30	D30	甲基	甲基	D30
200	D30	D30	甲基	D30	D30

[0080] [表1-5]

[0081]

化合物 编号	R ¹	R ²	R ³	R ⁴	R ⁵
201	D31	D31	甲基	D31	甲基
202	D31	D31	甲基	甲基	D31
203	D31	D31	甲基	D31	D31
204	D32	D32	甲基	D32	甲基
205	D32	D32	甲基	甲基	D32
206	D32	D32	甲基	D32	D32
207	D33	D33	甲基	D33	甲基
208	D33	D33	甲基	甲基	D33
209	D33	D33	甲基	D33	D33
210	D34	D34	甲基	D34	甲基
211	D34	D34	甲基	甲基	D34
212	D34	D34	甲基	D34	D34
213	D35	D35	甲基	D35	甲基
214	D35	D35	甲基	甲基	D35
215	D35	D35	甲基	D35	D35
216	D36	D36	甲基	D36	甲基
217	D36	D36	甲基	甲基	D36
218	D36	D36	甲基	D36	D36
219	D37	D37	甲基	D37	甲基
220	D37	D37	甲基	甲基	D37
221	D37	D37	甲基	D37	D37
222	D1	D1	异丙基	D1	异丙基
223	D1	D1	异丙基	异丙基	D1
224	D1	D1	异丙基	D1	D1
225	D2	D2	异丙基	D2	异丙基
226	D2	D2	异丙基	异丙基	D2
227	D2	D2	异丙基	D2	D2
228	D3	D3	异丙基	D3	异丙基
229	D3	D3	异丙基	异丙基	D3
230	D3	D3	异丙基	D3	D3
231	D4	D4	异丙基	D4	异丙基
232	D4	D4	异丙基	异丙基	D4
233	D4	D4	异丙基	D4	D4
234	D5	D5	异丙基	D5	异丙基
235	D5	D5	异丙基	异丙基	D5
236	D5	D5	异丙基	D5	D5
237	D6	D6	异丙基	D6	异丙基
238	D6	D6	异丙基	异丙基	D6
239	D6	D6	异丙基	D6	D6
240	D7	D7	异丙基	D7	异丙基
241	D7	D7	异丙基	异丙基	D7
242	D7	D7	异丙基	D7	D7
243	D8	D8	异丙基	D8	异丙基
244	D8	D8	异丙基	异丙基	D8
245	D8	D8	异丙基	D8	D8
246	D9	D9	异丙基	D9	异丙基
247	D9	D9	异丙基	异丙基	D9
248	D9	D9	异丙基	D9	D9
249	D10	D10	异丙基	D10	异丙基
250	D10	D10	异丙基	异丙基	D10

[0082] [表1-6]



[0083]

[0084] [表1-7]

[0085]

化合物 编号	R ¹	R ²	R ³	R ⁴	R ⁵
301	D27	D27	异丙基	异丙基	D27
302	D27	D27	异丙基	D27	D27
303	D28	D28	异丙基	D28	异丙基
304	D28	D28	异丙基	异丙基	D28
305	D28	D28	异丙基	D28	D28
306	D29	D29	异丙基	D29	异丙基
307	D29	D29	异丙基	异丙基	D29
308	D29	D29	异丙基	D29	D29
309	D30	D30	异丙基	D30	异丙基
310	D30	D30	异丙基	异丙基	D30
311	D30	D30	异丙基	D30	D30
312	D31	D31	异丙基	D31	异丙基
313	D31	D31	异丙基	异丙基	D31
314	D31	D31	异丙基	D31	D31
315	D32	D32	异丙基	D32	异丙基
316	D32	D32	异丙基	异丙基	D32
317	D32	D32	异丙基	D32	D32
318	D33	D33	异丙基	D33	异丙基
319	D33	D33	异丙基	异丙基	D33
320	D33	D33	异丙基	D33	D33
321	D34	D34	异丙基	D34	异丙基
322	D34	D34	异丙基	异丙基	D34
323	D34	D34	异丙基	D34	D34
324	D35	D35	异丙基	D35	异丙基
325	D35	D35	异丙基	异丙基	D35
326	D35	D35	异丙基	D35	D35
327	D36	D36	异丙基	D36	异丙基
328	D36	D36	异丙基	异丙基	D36
329	D36	D36	异丙基	D36	D36
330	D37	D37	异丙基	D37	异丙基
331	D37	D37	异丙基	异丙基	D37
332	D37	D37	异丙基	D37	D37
333	D1	D1	tBu	D1	tBu
334	D1	D1	tBu	tBu	D1
335	D1	D1	tBu	D1	D1
336	D2	D2	tBu	D2	tBu
337	D2	D2	tBu	tBu	D2
338	D2	D2	tBu	D2	D2
339	D3	D3	tBu	D3	tBu
340	D3	D3	tBu	tBu	D3
341	D3	D3	tBu	D3	D3
342	D4	D4	tBu	D4	tBu
343	D4	D4	tBu	tBu	D4
344	D4	D4	tBu	D4	D4
345	D5	D5	tBu	D5	tBu
346	D5	D5	tBu	tBu	D5
347	D5	D5	tBu	D5	D5
348	D6	D6	tBu	D6	tBu
349	D6	D6	tBu	tBu	D6
350	D6	D6	tBu	D6	D6

[0086] [表1-8]

[0087]

化合物 编号	R ¹	R ²	R ³	R ⁴	R ⁵
351	D7	D7	tBu	D7	tBu
352	D7	D7	tBu	tBu	D7
353	D7	D7	tBu	D7	D7
354	D8	D8	tBu	D8	tBu
355	D8	D8	tBu	tBu	D8
356	D8	D8	tBu	D8	D8
357	D9	D9	tBu	D9	tBu
358	D9	D9	tBu	tBu	D9
359	D9	D9	tBu	D9	D9
360	D10	D10	tBu	D10	tBu
361	D10	D10	tBu	tBu	D10
362	D10	D10	tBu	D10	D10
363	D11	D11	tBu	D11	tBu
364	D11	D11	tBu	tBu	D11
365	D11	D11	tBu	D11	D11
366	D12	D12	tBu	D12	tBu
367	D12	D12	tBu	tBu	D12
368	D12	D12	tBu	D12	D12
369	D13	D13	tBu	D13	tBu
370	D13	D13	tBu	tBu	D13
371	D13	D13	tBu	D13	D13
372	D14	D14	tBu	D14	tBu
373	D14	D14	tBu	tBu	D14
374	D14	D14	tBu	D14	D14
375	D15	D15	tBu	D15	tBu
376	D15	D15	tBu	tBu	D15
377	D15	D15	tBu	D15	D15
378	D16	D16	tBu	D16	tBu
379	D16	D16	tBu	tBu	D16
380	D16	D16	tBu	D16	D16
381	D17	D17	tBu	D17	tBu
382	D17	D17	tBu	tBu	D17
383	D17	D17	tBu	D17	D17
384	D18	D18	tBu	D18	tBu
385	D18	D18	tBu	tBu	D18
386	D18	D18	tBu	D18	D18
387	D19	D19	tBu	D19	tBu
388	D19	D19	tBu	tBu	D19
389	D19	D19	tBu	D19	D19
390	D20	D20	tBu	D20	tBu
391	D20	D20	tBu	tBu	D20
392	D20	D20	tBu	D20	D20
393	D21	D21	tBu	D21	tBu
394	D21	D21	tBu	tBu	D21
395	D21	D21	tBu	D21	D21
396	D22	D22	tBu	D22	tBu
397	D22	D22	tBu	tBu	D22
398	D22	D22	tBu	D22	D22
399	D23	D23	tBu	D23	tBu
400	D23	D23	tBu	tBu	D23

[0088] [表1-9]

[0089]

化合物 编号	R ¹	R ²	R ³	R ⁴	R ⁵
401	D23	D23	tBu	D23	D23
402	D24	D24	tBu	D24	tBu
403	D24	D24	tBu	tBu	D24
404	D24	D24	tBu	D24	D24
405	D25	D25	tBu	D25	tBu
406	D25	D25	tBu	tBu	D25
407	D25	D25	tBu	D25	D25
408	D26	D26	tBu	D26	tBu
409	D26	D26	tBu	tBu	D26
410	D26	D26	tBu	D26	D26
411	D27	D27	tBu	D27	tBu
412	D27	D27	tBu	tBu	D27
413	D27	D27	tBu	D27	D27
414	D28	D28	tBu	D28	tBu
415	D28	D28	tBu	tBu	D28
416	D28	D28	tBu	D28	D28
417	D29	D29	tBu	D29	tBu
418	D29	D29	tBu	tBu	D29
419	D29	D29	tBu	D29	D29
420	D30	D30	tBu	D30	tBu
421	D30	D30	tBu	tBu	D30
422	D30	D30	tBu	D30	D30
423	D31	D31	tBu	D31	tBu
424	D31	D31	tBu	tBu	D31
425	D31	D31	tBu	D31	D31
426	D32	D32	tBu	D32	tBu
427	D32	D32	tBu	tBu	D32
428	D32	D32	tBu	D32	D32
429	D33	D33	tBu	D33	tBu
430	D33	D33	tBu	tBu	D33
431	D33	D33	tBu	D33	D33
432	D34	D34	tBu	D34	tBu
433	D34	D34	tBu	tBu	D34
434	D34	D34	tBu	D34	D34
435	D35	D35	tBu	D35	tBu
436	D35	D35	tBu	tBu	D35
437	D35	D35	tBu	D35	D35
438	D36	D36	tBu	D36	tBu
439	D36	D36	tBu	tBu	D36
440	D36	D36	tBu	D36	D36
441	D37	D37	tBu	D37	tBu
442	D37	D37	tBu	tBu	D37
443	D37	D37	tBu	D37	D37
444	D1	D1	甲氧基	D1	甲氧基
445	D1	D1	甲氧基	甲氧基	D1
446	D1	D1	甲氧基	D1	D1
447	D2	D2	甲氧基	D2	甲氧基
448	D2	D2	甲氧基	甲氧基	D2
449	D2	D2	甲氧基	D2	D2
450	D3	D3	甲氧基	D3	甲氧基

[0090] [表1-10]

[0091]

化合物 编号	R ¹	R ²	R ³	R ⁴	R ⁵
451	D3	D3	甲氧基	甲氧基	D3
452	D3	D3	甲氧基	D3	D3
453	D4	D4	甲氧基	D4	甲氧基
454	D4	D4	甲氧基	甲氧基	D4
455	D4	D4	甲氧基	D4	D4
456	D5	D5	甲氧基	D5	甲氧基
457	D5	D5	甲氧基	甲氧基	D5
458	D5	D5	甲氧基	D5	D5
459	D6	D6	甲氧基	D6	甲氧基
460	D6	D6	甲氧基	甲氧基	D6
461	D6	D6	甲氧基	D6	D6
462	D7	D7	甲氧基	D7	甲氧基
463	D7	D7	甲氧基	甲氧基	D7
464	D7	D7	甲氧基	D7	D7
465	D8	D8	甲氧基	D8	甲氧基
466	D8	D8	甲氧基	甲氧基	D8
467	D8	D8	甲氧基	D8	D8
468	D9	D9	甲氧基	D9	甲氧基
469	D9	D9	甲氧基	甲氧基	D9
470	D9	D9	甲氧基	D9	D9
471	D10	D10	甲氧基	D10	甲氧基
472	D10	D10	甲氧基	甲氧基	D10
473	D10	D10	甲氧基	D10	D10
474	D11	D11	甲氧基	D11	甲氧基
475	D11	D11	甲氧基	甲氧基	D11
476	D11	D11	甲氧基	D11	D11
477	D12	D12	甲氧基	D12	甲氧基
478	D12	D12	甲氧基	甲氧基	D12
479	D12	D12	甲氧基	D12	D12
480	D13	D13	甲氧基	D13	甲氧基
481	D13	D13	甲氧基	甲氧基	D13
482	D13	D13	甲氧基	D13	D13
483	D14	D14	甲氧基	D14	甲氧基
484	D14	D14	甲氧基	甲氧基	D14
485	D14	D14	甲氧基	D14	D14
486	D15	D15	甲氧基	D15	甲氧基
487	D15	D15	甲氧基	甲氧基	D15
488	D15	D15	甲氧基	D15	D15
489	D16	D16	甲氧基	D16	甲氧基
490	D16	D16	甲氧基	甲氧基	D16
491	D16	D16	甲氧基	D16	D16
492	D17	D17	甲氧基	D17	甲氧基
493	D17	D17	甲氧基	甲氧基	D17
494	D17	D17	甲氧基	D17	D17
495	D18	D18	甲氧基	D18	甲氧基
496	D18	D18	甲氧基	甲氧基	D18
497	D18	D18	甲氧基	D18	D18
498	D19	D19	甲氧基	D19	甲氧基
499	D19	D19	甲氧基	甲氧基	D19
500	D19	D19	甲氧基	D19	D19

[0092] [表1-11]

[0093]

化合物 编号	R ¹	R ²	R ³	R ⁴	R ⁵
501	D20	D20	甲氧基	D20	甲氧基
502	D20	D20	甲氧基	甲氧基	D20
503	D20	D20	甲氧基	D20	D20
504	D21	D21	甲氧基	D21	甲氧基
505	D21	D21	甲氧基	甲氧基	D21
506	D21	D21	甲氧基	D21	D21
507	D22	D22	甲氧基	D22	甲氧基
508	D22	D22	甲氧基	甲氧基	D22
509	D22	D22	甲氧基	D22	D22
510	D23	D23	甲氧基	D23	甲氧基
511	D23	D23	甲氧基	甲氧基	D23
512	D23	D23	甲氧基	D23	D23
513	D24	D24	甲氧基	D24	甲氧基
514	D24	D24	甲氧基	甲氧基	D24
515	D24	D24	甲氧基	D24	D24
516	D25	D25	甲氧基	D25	甲氧基
517	D25	D25	甲氧基	甲氧基	D25
518	D25	D25	甲氧基	D25	D25
519	D26	D26	甲氧基	D26	甲氧基
520	D26	D26	甲氧基	甲氧基	D26
521	D26	D26	甲氧基	D26	D26
522	D27	D27	甲氧基	D27	甲氧基
523	D27	D27	甲氧基	甲氧基	D27
524	D27	D27	甲氧基	D27	D27
525	D28	D28	甲氧基	D28	甲氧基
526	D28	D28	甲氧基	甲氧基	D28
527	D28	D28	甲氧基	D28	D28
528	D29	D29	甲氧基	D29	甲氧基
529	D29	D29	甲氧基	甲氧基	D29
530	D29	D29	甲氧基	D29	D29
531	D30	D30	甲氧基	D30	甲氧基
532	D30	D30	甲氧基	甲氧基	D30
533	D30	D30	甲氧基	D30	D30
534	D31	D31	甲氧基	D31	甲氧基
535	D31	D31	甲氧基	甲氧基	D31
536	D31	D31	甲氧基	D31	D31
537	D32	D32	甲氧基	D32	甲氧基
538	D32	D32	甲氧基	甲氧基	D32
539	D32	D32	甲氧基	D32	D32
540	D33	D33	甲氧基	D33	甲氧基
541	D33	D33	甲氧基	甲氧基	D33
542	D33	D33	甲氧基	D33	D33
543	D34	D34	甲氧基	D34	甲氧基
544	D34	D34	甲氧基	甲氧基	D34
545	D34	D34	甲氧基	D34	D34
546	D35	D35	甲氧基	D35	甲氧基
547	D35	D35	甲氧基	甲氧基	D35
548	D35	D35	甲氧基	D35	D35
549	D36	D36	甲氧基	D36	甲氧基
550	D36	D36	甲氧基	甲氧基	D36

[0094] [表1-12]

[0095]

化合物 编号	R ¹	R ²	R ³	R ⁴	R ⁵
551	D36	D36	甲氧基	D36	D36
552	D37	D37	甲氧基	D37	甲氧基
553	D37	D37	甲氧基	甲氧基	D37
554	D37	D37	甲氧基	D37	D37
555	D1	D1	甲基	H	D1
556	D2	D2	甲基	H	D2
557	D3	D3	甲基	H	D3
558	D4	D4	甲基	H	D4
559	D5	D5	甲基	H	D5
560	D6	D6	甲基	H	D6
561	D7	D7	甲基	H	D7
562	D8	D8	甲基	H	D8
563	D9	D9	甲基	H	D9
564	D10	D10	甲基	H	D10
565	D11	D11	甲基	H	D11
566	D12	D12	甲基	H	D12
567	D13	D13	甲基	H	D13
568	D14	D14	甲基	H	D14
569	D15	D15	甲基	H	D15
570	D16	D16	甲基	H	D16
571	D17	D17	甲基	H	D17
572	D18	D18	甲基	H	D18
573	D19	D19	甲基	H	D19
574	D20	D20	甲基	H	D20
575	D21	D21	甲基	H	D21
576	D22	D22	甲基	H	D22
577	D23	D23	甲基	H	D23
578	D24	D24	甲基	H	D24
579	D25	D25	甲基	H	D25
580	D26	D26	甲基	H	D26
581	D27	D27	甲基	H	D27
582	D28	D28	甲基	H	D28
583	D29	D29	甲基	H	D29
584	D30	D30	甲基	H	D30
585	D31	D31	甲基	H	D31
586	D32	D32	甲基	H	D32
587	D33	D33	甲基	H	D33
588	D34	D34	甲基	H	D34
589	D35	D35	甲基	H	D35
590	D36	D36	甲基	H	D36
591	D37	D37	甲基	H	D37
592	D1	D1	H	甲基	D1
593	D2	D2	H	甲基	D2
594	D3	D3	H	甲基	D3
595	D4	D4	H	甲基	D4
596	D5	D5	H	甲基	D5
597	D6	D6	H	甲基	D6
598	D7	D7	H	甲基	D7
599	D8	D8	H	甲基	D8
600	D9	D9	H	甲基	D9

[0096] [表1-13]

[0097]

化合物 编号	R ¹	R ²	R ³	R ⁴	R ⁵
601	D10	D10	H	甲基	D10
602	D11	D11	H	甲基	D11
603	D12	D12	H	甲基	D12
604	D13	D13	H	甲基	D13
605	D14	D14	H	甲基	D14
606	D15	D15	H	甲基	D15
607	D16	D16	H	甲基	D16
608	D17	D17	H	甲基	D17
609	D18	D18	H	甲基	D18
610	D19	D19	H	甲基	D19
611	D20	D20	H	甲基	D20
612	D21	D21	H	甲基	D21
613	D22	D22	H	甲基	D22
614	D23	D23	H	甲基	D23
615	D24	D24	H	甲基	D24
616	D25	D25	H	甲基	D25
617	D26	D26	H	甲基	D26
618	D27	D27	H	甲基	D27
619	D28	D28	H	甲基	D28
620	D29	D29	H	甲基	D29
621	D30	D30	H	甲基	D30
622	D31	D31	H	甲基	D31
623	D32	D32	H	甲基	D32
624	D33	D33	H	甲基	D33
625	D34	D34	H	甲基	D34
626	D35	D35	H	甲基	D35
627	D36	D36	H	甲基	D36
628	D37	D37	H	甲基	D37
629	D1	D1	H	D1	甲基
630	D2	D2	H	D2	甲基
631	D3	D3	H	D3	甲基
632	D4	D4	H	D4	甲基
633	D5	D5	H	D5	甲基
634	D6	D6	H	D6	甲基
635	D7	D7	H	D7	甲基
636	D8	D8	H	D8	甲基
637	D9	D9	H	D9	甲基
638	D10	D10	H	D10	甲基
639	D11	D11	H	D11	甲基
640	D12	D12	H	D12	甲基
641	D13	D13	H	D13	甲基
642	D14	D14	H	D14	甲基
643	D15	D15	H	D15	甲基
644	D16	D16	H	D16	甲基
645	D17	D17	H	D17	甲基
646	D18	D18	H	D18	甲基
647	D19	D19	H	D19	甲基
648	D20	D20	H	D20	甲基
649	D21	D21	H	D21	甲基
650	D22	D22	H	D22	甲基

[0098] [表1-14]

[0099]

化合物 编号	R ¹	R ²	R ³	R ⁴	R ⁵
651	D23	D23	H	D23	甲基
652	D24	D24	H	D24	甲基
653	D25	D25	H	D25	甲基
654	D26	D26	H	D26	甲基
655	D27	D27	H	D27	甲基
656	D28	D28	H	D28	甲基
657	D29	D29	H	D29	甲基
658	D30	D30	H	D30	甲基
659	D31	D31	H	D31	甲基
660	D32	D32	H	D32	甲基
661	D33	D33	H	D33	甲基
662	D34	D34	H	D34	甲基
663	D35	D35	H	D35	甲基
664	D36	D36	H	D36	甲基
665	D37	D37	H	D37	甲基
666	D1	D1	甲氧基	H	D1
667	D2	D2	甲氧基	H	D2
668	D3	D3	甲氧基	H	D3
669	D4	D4	甲氧基	H	D4
670	D5	D5	甲氧基	H	D5
671	D6	D6	甲氧基	H	D6
672	D7	D7	甲氧基	H	D7
673	D8	D8	甲氧基	H	D8
674	D9	D9	甲氧基	H	D9
675	D10	D10	甲氧基	H	D10
676	D11	D11	甲氧基	H	D11
677	D12	D12	甲氧基	H	D12
678	D13	D13	甲氧基	H	D13
679	D14	D14	甲氧基	H	D14
680	D15	D15	甲氧基	H	D15
681	D16	D16	甲氧基	H	D16
682	D17	D17	甲氧基	H	D17
683	D18	D18	甲氧基	H	D18
684	D19	D19	甲氧基	H	D19
685	D20	D20	甲氧基	H	D20
686	D21	D21	甲氧基	H	D21
687	D22	D22	甲氧基	H	D22
688	D23	D23	甲氧基	H	D23
689	D24	D24	甲氧基	H	D24
690	D25	D25	甲氧基	H	D25
691	D26	D26	甲氧基	H	D26
692	D27	D27	甲氧基	H	D27
693	D28	D28	甲氧基	H	D28
694	D29	D29	甲氧基	H	D29
695	D30	D30	甲氧基	H	D30
696	D31	D31	甲氧基	H	D31
697	D32	D32	甲氧基	H	D32
698	D33	D33	甲氧基	H	D33
699	D34	D34	甲氧基	H	D34
700	D35	D35	甲氧基	H	D35

[0100] [表1-15]

[0101]

化合物 编号	R ¹	R ²	R ³	R ⁴	R ⁵
701	D36	D36	甲氧基	H	D36
702	D37	D37	甲氧基	H	D37
703	D1	D1	H	甲氧基	D1
704	D2	D2	H	甲氧基	D2
705	D3	D3	H	甲氧基	D3
706	D4	D4	H	甲氧基	D4
707	D5	D5	H	甲氧基	D5
708	D6	D6	H	甲氧基	D6
709	D7	D7	H	甲氧基	D7
710	D8	D8	H	甲氧基	D8
711	D9	D9	H	甲氧基	D9
712	D10	D10	H	甲氧基	D10
713	D11	D11	H	甲氧基	D11
714	D12	D12	H	甲氧基	D12
715	D13	D13	H	甲氧基	D13
716	D14	D14	H	甲氧基	D14
717	D15	D15	H	甲氧基	D15
718	D16	D16	H	甲氧基	D16
719	D17	D17	H	甲氧基	D17
720	D18	D18	H	甲氧基	D18
721	D19	D19	H	甲氧基	D19
722	D20	D20	H	甲氧基	D20
723	D21	D21	H	甲氧基	D21
724	D22	D22	H	甲氧基	D22
725	D23	D23	H	甲氧基	D23
726	D24	D24	H	甲氧基	D24
727	D25	D25	H	甲氧基	D25
728	D26	D26	H	甲氧基	D26
729	D27	D27	H	甲氧基	D27
730	D28	D28	H	甲氧基	D28
731	D29	D29	H	甲氧基	D29
732	D30	D30	H	甲氧基	D30
733	D31	D31	H	甲氧基	D31
734	D32	D32	H	甲氧基	D32
735	D33	D33	H	甲氧基	D33
736	D34	D34	H	甲氧基	D34
737	D35	D35	H	甲氧基	D35
738	D36	D36	H	甲氧基	D36
739	D37	D37	H	甲氧基	D37
740	D1	D1	H	D1	甲氧基
741	D2	D2	H	D2	甲氧基
742	D3	D3	H	D3	甲氧基
743	D4	D4	H	D4	甲氧基
744	D5	D5	H	D5	甲氧基
745	D6	D6	H	D6	甲氧基
746	D7	D7	H	D7	甲氧基
747	D8	D8	H	D8	甲氧基
748	D9	D9	H	D9	甲氧基
749	D10	D10	H	D10	甲氧基
750	D11	D11	H	D11	甲氧基

[0102] [表1-16]

[0103]

化合物 编号	R ¹	R ²	R ³	R ⁴	R ⁵
751	D12	D12	H	D12	甲氧基
752	D13	D13	H	D13	甲氧基
753	D14	D14	H	D14	甲氧基
754	D15	D15	H	D15	甲氧基
755	D16	D16	H	D16	甲氧基
756	D17	D17	H	D17	甲氧基
757	D18	D18	H	D18	甲氧基
758	D19	D19	H	D19	甲氧基
759	D20	D20	H	D20	甲氧基
760	D21	D21	H	D21	甲氧基
761	D22	D22	H	D22	甲氧基
762	D23	D23	H	D23	甲氧基
763	D24	D24	H	D24	甲氧基
764	D25	D25	H	D25	甲氧基
765	D26	D26	H	D26	甲氧基
766	D27	D27	H	D27	甲氧基
767	D28	D28	H	D28	甲氧基
768	D29	D29	H	D29	甲氧基
769	D30	D30	H	D30	甲氧基
770	D31	D31	H	D31	甲氧基
771	D32	D32	H	D32	甲氧基
772	D33	D33	H	D33	甲氧基
773	D34	D34	H	D34	甲氧基
774	D35	D35	H	D35	甲氧基
775	D36	D36	H	D36	甲氧基
776	D37	D37	H	D37	甲氧基
777	D1	D1	吗啉	D1	D1
778	D2	D2	吗啉	D2	D2
779	D3	D3	吗啉	D3	D3
780	D4	D4	吗啉	D4	D4
781	D5	D5	吗啉	D5	D5
782	D6	D6	吗啉	D6	D6
783	D7	D7	吗啉	D7	D7
784	D8	D8	吗啉	D8	D8
785	D9	D9	吗啉	D9	D9
786	D10	D10	吗啉	D10	D10
787	D11	D11	吗啉	D11	D11
788	D12	D12	吗啉	D12	D12
789	D13	D13	吗啉	D13	D13
790	D14	D14	吗啉	D14	D14
791	D15	D15	吗啉	D15	D15
792	D16	D16	吗啉	D16	D16
793	D17	D17	吗啉	D17	D17
794	D18	D18	吗啉	D18	D18
795	D19	D19	吗啉	D19	D19
796	D20	D20	吗啉	D20	D20
797	D21	D21	吗啉	D21	D21
798	D22	D22	吗啉	D22	D22
799	D23	D23	吗啉	D23	D23
800	D24	D24	吗啉	D24	D24

[0104] [表1-17]

[0105]

化合物 编号	R ¹	R ²	R ³	R ⁴	R ⁵
801	D25	D25	吗啉	D25	D25
802	D26	D26	吗啉	D26	D26
803	D27	D27	吗啉	D27	D27
804	D28	D28	吗啉	D28	D28
805	D29	D29	吗啉	D29	D29
806	D30	D30	吗啉	D30	D30
807	D31	D31	吗啉	D31	D31
808	D32	D32	吗啉	D32	D32
809	D33	D33	吗啉	D33	D33
810	D34	D34	吗啉	D34	D34
811	D35	D35	吗啉	D35	D35
812	D36	D36	吗啉	D36	D36
813	D37	D37	吗啉	D37	D37
814	D38	D38	H	D38	H
815	D38	D38	H	H	D38
816	D38	D38	H	D38	D38
817	D38	D38	甲基	D38	甲基
818	D38	D38	甲基	甲基	038
819	D38	D38	甲基	D38	D38
820	D3S	D38	异丙基	D38	异丙基
821	D38	D38	异丙基	异丙基	D38
822	D38	D38	异丙基	D38	D38
823	D38	D38	tBu	D38	tBu
824	D38	D38	tBu	tBu	D38
825	D38	D38	tBu	D38	D38
826	D38	D38	甲氧基	D38	甲氧基
827	D38	D38	甲氧基	甲氧基	D38
828	D38	D38	甲氧基	D38	D38
829	D38	D38	甲基	H	D38
830	D38	D38	H	甲基	D38
831	D38	D38	H	D38	甲基
832	D38	D38	甲氧基	H	D38
833	D38	D38	H	甲氧基	D38
834	D38	D38	H	D38	甲氧基
835	D38	D38	吗啉	D38	D38
836	D39	D39	H	D39	H
837	D39	D39	H	H	D39
838	D39	D39	H	D39	D39
839	D39	D39	甲基	D39	甲基
840	D39	D39	甲基	甲基	D39
841	D39	D39	甲基	D39	D39
842	D39	D39	异丙基	D39	异丙基
843	D39	D39	异丙基	异丙基	D39
844	D39	D39	异丙基	D39	D39
845	D39	D39	tBu	D39	tBu
846	D39	D39	tBu	tBu	D39
847	D39	D39	tBu	D39	D39
848	D39	D39	甲氧基	D39	甲氧基
849	D39	D39	甲氧基	甲氧基	D39
850	D39	D39	甲氧基	D39	D39

[0106] [表1-18]

[0107]

化合物 编号	R ¹	R ²	R ³	R ⁴	R ⁵
851	D39	D39	甲基	H	D39
852	D39	D39	H	甲基	D39
853	D39	D39	H	D39	甲基
854	D39	D39	甲氧基	H	D39
855	D39	D39	H	甲氧基	D39
856	D39	D39	H	D39	甲氧基
857	D39	D39	吗啉	D39	D39
858	D40	D40	H	D40	H
859	D40	D40	H	H	D40
860	D40	D40	H	D40	D40
861	D40	D40	甲基	D40	甲基
862	D40	D40	甲基	甲基	D40
863	D40	D40	甲基	D40	D40
864	D40	D40	异丙基	D40	异丙基
865	D40	D40	异丙基	异丙基	D40
866	D40	D40	异丙基	D40	D40
867	D40	D40	tBu	D40	tBu
868	D40	D40	tBu	tBu	D40
869	D40	D40	tBu	D40	D40
870	D40	D40	甲氧基	D40	甲氧基
871	D40	D40	甲氧基	甲氧基	D40
872	D40	D40	甲氧基	D40	D40
873	D40	D40	甲基	H	D40
874	D40	D40	H	甲基	D40
875	D40	D40	H	D40	甲基
876	D40	D40	甲氧基	H	D40
877	D40	D40	H	甲氧基	D40
878	D40	D40	H	D40	甲氧基
879	D40	D40	吗啉	D40	D40
880	D41	D41	H	D41	H
881	D41	D41	H	H	D41
882	D41	D41	H	D41	D41
883	D41	D41	甲基	D41	甲基
884	D41	D41	甲基	甲基	D41
885	D41	D41	甲基	D41	D41
886	D41	D41	异丙基	D41	异丙基
887	D41	D41	异丙基	异丙基	D41
888	D41	D41	异丙基	D41	D41
889	D41	D41	tBu	D41	tBu
890	D41	D41	tBu	tBu	D41
891	D41	D41	tBu	D41	D41
892	D41	D41	甲氧基	D41	甲氧基
893	D41	D41	甲氧基	甲氧基	D41
894	D41	D41	甲氧基	D41	D41
895	D41	D41	甲基	H	D41
896	D41	D41	H	甲基	D41
897	D41	D41	H	D41	甲基
898	D41	D41	甲氧基	H	D41
899	D41	D41	H	甲氧基	D41
900	D41	D41	H	D41	甲氧基
901	D41	D41	吗啉	D41	D41

[0108] 关于通式(1)所表示的化合物的分子量,例如意欲在将包含通式(1)所表示的化合物的有机层利用蒸镀法制膜而加以利用的情况下,优选1500以下,更优选1200以下,进一步优选1000以下,进一步更优选800以下。分子量的下限值是通式(1)所表示的最小化合物的

分子量。

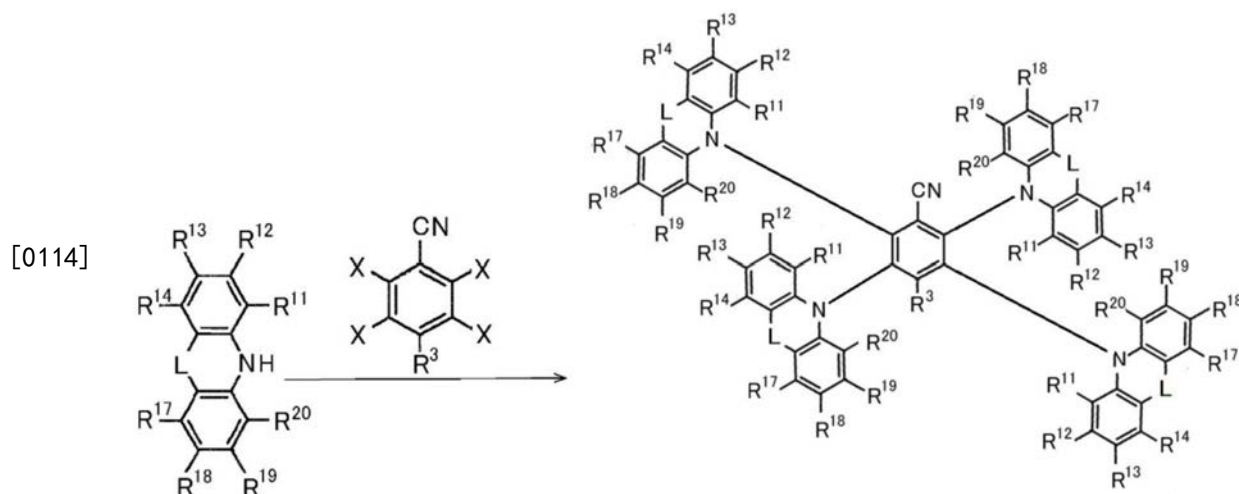
[0109] 通式(1)所表示的化合物不论分子量如何均可以利用涂布法成膜。如果使用涂布法,那么即使是分子量相对大的化合物也能够成膜。

[0110] [通式(1)所表示的化合物的合成方法]

[0111] 以通式(1)所表示的化合物为新颖化合物。

[0112] 通式(1)所表示的化合物可以通过将已知的反应加以组合来合成。例如,通式(1)的 R^1 、 R^2 、 R^4 、 R^5 为经取代或未经取代的9-咔唑基、经取代或未经取代的10-吩噻嗪基、或者经取代或未经取代的10-吩噻嗪基的化合物能够通过使以下的杂芳香族化合物和氰基苯衍生物进行反应来合成。

[0113] [化7]



[0115] 关于所述反应式中的 R^3 的说明,可以参照通式(1)中的对应的说明。 $R^{11} \sim R^{14}$ 、 $R^{17} \sim R^{20}$ 分别独立地表示氢原子或取代基。L表示单键、氧原子或硫原子。X表示卤素原子,可以列举氟原子、氯原子、溴原子、碘原子,优选氟原子、溴原子、碘原子。

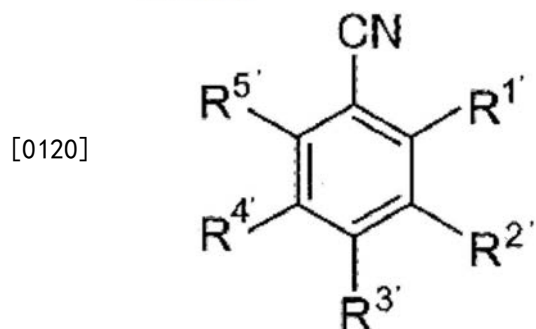
[0116] 所述反应应用了公知的偶联反应,可以适当选择公知的反应条件使用。关于所述反应的详情,可以将后述合成例作为参考。另外,通式(1)所表示的化合物也可以通过组合其它公知的合成反应来合成。

[0117] [延迟荧光体]

[0118] 本发明的延迟荧光体具有下述通式(1')所表示的结构。

[0119] [化8]

通式(1')



[0121] 通式(1')中, $R^{1'}$ 、 $R^{2'}$ 、 $R^{4'}$ 及 $R^{5'}$ 中的3个以上分别独立地表示经取代或未经取代的9-

咪唑基、经取代或未经取代的10-吩噻嗪基、或者经取代或未经取代的10-吩噻嗪基。其余表示氢原子或取代基,但该取代基不是经取代或未经取代的9-咪唑基、经取代或未经取代的10-吩噻嗪基、经取代或未经取代的10-吩噻嗪基、或者氰基。构成所述9-咪唑基、所述10-吩噻嗪基及所述10-吩噻嗪基的各环骨架的1个以上的碳原子可以被氮原子取代。 R^3 分别独立地表示氢原子或取代基,但该取代基不是经取代或未经取代的9-咪唑基、经取代或未经取代的10-吩噻嗪基、经取代或未经取代的10-吩噻嗪基、或者氰基。

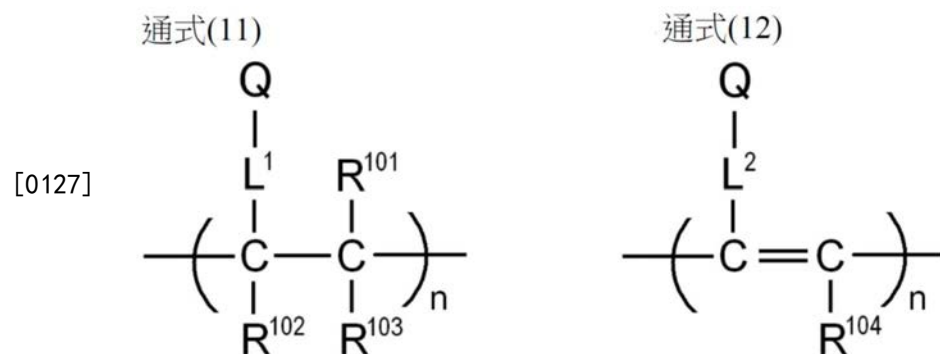
[0122] 关于 $R^{1'}$ ~ $R^{5'}$ 的说明与优选的范围、具体例,可以参照所述关于通式(1)所表示的化合物中的 R^1 ~ R^5 的说明与优选的范围、具体例。但是, $R^{3'}$ 所可取的取代基的例中,除 R^3 所可取的取代基外,也可以列举碳数6~40的经取代或未经取代的芳基、碳数3~40的经取代或未经取代的杂芳基(经取代或未经取代的9-咪唑基、经取代或未经取代的10-吩噻嗪基、经取代或未经取代的10-吩噻嗪基除外)、碳数2~10的炔基、碳数5~20的三烷基甲硅烷基炔基。

[0123] 也可以想到应用本发明,将分子内包含多个通式(1)所表示的结构的化合物用作发光材料。另外,也可以想到将包含多个通式(1')所表示的结构的化合物用作延迟荧光体。

[0124] 例如,可以想到使通式(1)或通式(1')所表示的结构中预先存在聚合性基并使该聚合性基聚合而获得聚合物,将该聚合物用作发光材料或延迟荧光体。具体来说,可以想到准备通式(1)中的 R^1 ~ R^5 的任一个、或通式(1')的 $R^{1'}$ ~ $R^{5'}$ 的任一个包含聚合性官能基的单体,使其均聚或者与其它单体一起共聚,由此获得具有重复单元的聚合物,并将该聚合物用作发光材料或延迟荧光体。或者,也可想到通过使具有通式(1)所表示的结构的化合物彼此进行偶联,从而获得二聚物或三聚物,并将它们用作发光材料或延迟荧光体。

[0125] 作为具有包含通式(1)或通式(1')所表示的结构的重复单元的聚合物的例子,可以列举包含下述通式(11)或(12)所表示的结构的聚合物。

[0126] [化9]



[0128] 通式(11)或(12)中,Q表示包含通式(1)或通式(1')所表示的结构的基, L^1 及 L^2 表示连结基。连结基的碳数优选0~20,更优选1~15,进一步优选2~10。连结基优选具有 $-X^{11}-L^{11}-$ 所表示的结构。这里, X^{11} 表示氧原子或硫原子,优选氧原子。 L^{11} 表示连结基,优选经取代或未经取代的亚烷基、或者经取代或未经取代的亚芳基,更优选碳数1~10的经取代或未经取代的亚烷基、或者经取代或未经取代的亚苯基。

[0129] 通式(11)或(12)中, R^{101} 、 R^{102} 、 R^{103} 及 R^{104} 分别独立地表示取代基。优选碳数1~6的经取代或未经取代的烷基、碳数1~6的经取代或未经取代的烷氧基、卤素原子,更优选碳数1~3的未经取代的烷基、碳数1~3的未经取代的烷氧基、氟原子、氯原子,进一步优选碳数1

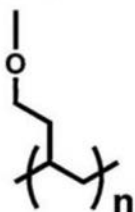
~3的未经取代的烷基、碳数1~3的未经取代的烷氧基。

[0130] L^1 及 L^2 所表示的连结基能够键结在构成Q的通式(1)的结构的 $R^1 \sim R^5$ 的任一个、通式(1')的 $R^{1'} \sim R^{5'}$ 的任一个。也可以对于1个Q连结2个以上的连结基而形成交联结构或网状结构。

[0131] 作为重复单元的具体结构例,可以列举下述式(13)~(16)所表示的结构。

[0132] [化10]

式(13)

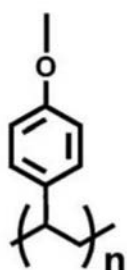


式(14)

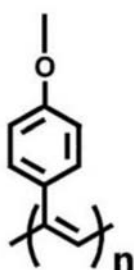


[0133]

式(15)

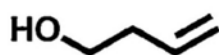


式(16)

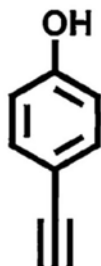


[0134] 具有包含这些式(13)~(16)的重复单元的聚合物可以通过以下方式合成:预先在通式(1)的结构的 $R^1 \sim R^5$ 的任一个、或者通式(1')的结构的 $R^{1'} \sim R^{5'}$ 导入羟基,将其作为连接基使下述化合物反应而导入聚合性基,并使该聚合性基聚合。

[0135] [化11]



[0136]



[0137] 分子内包含通式(1)或通式(1')所表示的结构的聚合物可以是仅由具有通式(1)或通式(1')所表示的结构的重复单元构成的聚合物,也可以是包含具有其以外的结构的重复单元的聚合物。另外,聚合物中所含的具有通式(1)或通式(1')所表示的结构的重复单元可以是单一种,也可以是2种以上。作为不具有通式(1)或通式(1')所表示的结构的重复单

元,可以列举通常从用于共聚合的单体衍生的重复单元。例如可以列举从乙烯、苯乙烯等具有乙烯性不饱和键的单体衍生的重复单元。

[0138] [有机发光元件]

[0139] 本发明的通式(1)所表示的化合物作为有机发光元件的发光材料有用。因此,本发明的通式(1)所表示的化合物能够在有机发光元件的发光层有效地用作发光材料。另外,本发明的通式(1)所表示的化合物也可以用作主体或辅助掺杂剂。

[0140] 在通式(1)所表示的化合物中包含放射延迟荧光的延迟荧光材料(延迟荧光体)。即,本发明也提供具有通式(1)所表示的结构延迟荧光体的发明、将通式(1)所表示的化合物用作延迟荧光体的发明、及使用通式(1)所表示的化合物发出延迟荧光的方法的发明。将这种化合物用作发光材料的有机发光元件具有放射延迟荧光且发光效率高的特征。如果有机电致发光元件为例对其原理进行说明,那么如以下所述。

[0141] 在有机电致发光元件中,从正负两电极向发光材料中注入载子,生成激发状态的发光材料并使其发光。通常,在载子注入型有机电致发光元件的情况下,产生的激子中被激发为激发单重态的有25%,其余75%被激发为激发三重态。因此,利用作为来自激发三重态的发光磷光时能量的利用效率高。然而,由于激发三重态的寿命较长,所以会产生激发态的饱和或因激发三重态的激子间的相互作用导致的能量失活,一般来说,多数情况下磷光的量子产率不高。另一方面,延迟荧光材料通过系间跨越等使能量向激发三重态跃迁后,通过三重态-三重态湮灭或热能的吸收而向激发单重态逆系间跨越,放射荧光。认为在有机电致发光元件中,尤其是基于热能的吸收的热活化型延迟荧光材料特别有用。在将延迟荧光材料用于有机电致发光元件的情况下,激发单重态的激子像通常那样放射荧光。另一方面,激发三重态的激子吸收器件所发出的热而向激发单重态系间跨越,放射荧光。这时,由于是源自激发单重态的发光,所以是和荧光相同波长的发光,并且通过从激发三重态向激发单重态的逆系间跨越,产生的光的寿命(发光寿命)比普通荧光或磷光长,所以作为比这些延迟的荧光被观察到。可以将其定义为延迟荧光。如果使用这种热活性化型激子迁移机制,那么通过在载子注入后经过热能的吸收,能够将通常仅产生25%的激发单重态的化合物的比率提高至25%以上。如果使用即便在未达100℃的低温度下也发出强荧光及延迟荧光的化合物,那么利用器件的热便会充分地产生从激发三重态向激发单重态的系间跨越,放射延迟荧光,所以能够飞跃性地提高发光效率。

[0142] 通过使用本发明的通式(1)所表示的化合物作为发光层的发光材料,能够提供有机光致发光元件(有机PL元件)或有机电致发光元件(有机EL元件)等优异的有机发光元件。有机光致发光元件具有在衬底上至少形成了发光层的结构。另外,有机电致发光元件具有至少形成了阳极、阴极、以及阳极和阴极之间的有机层的结构。有机层至少包含发光层,可以仅由发光层构成,也可以除发光层以外具有1层以上的有机层。作为这种其它有机层,可以列举空穴传输层、空穴注入层、电子阻挡层、空穴阻挡层、电子注入层、电子传输层、激子阻挡层等。空穴传输层也可以是具有空穴注入功能的空穴注入传输层,电子传输层也可以是具有电子注入功能的电子注入传输层。将具体的有机电致发光元件的结构例示于图1。图1中,1表示衬底,2表示阳极,3表示空穴注入层,4表示空穴传输层,5表示发光层,6表示电子传输层,7表示阴极。

[0143] 以下,对有机电致发光元件的各构件及各层进行说明。另外,衬底和发光层的说明

也适用于有机光致发光元件的衬底与发光层。

[0144] (衬底)

[0145] 本发明的有机电致发光元件优选被衬底支撑。关于该衬底没有特别限制,只要以往惯用于有机电致发光元件即可,例如可以使用包含玻璃、透明塑料、石英、硅等的衬底。

[0146] (阳极)

[0147] 作为有机电致发光元件中的阳极,优选使用以功函数大(4eV以上)的金属、合金、导电性化合物及这些的混合物作为电极材料的阳极。作为这种电极材料的具体例,可以列举Au等金属、CuI、氧化铟锡(ITO)、 SnO_2 、ZnO等导电性透明材料。另外,也可以使用IDIXO(In_2O_3 -ZnO)等为非晶质且能够制作透明导电膜的材料。阳极可以通过蒸镀或溅镀等方法使这些电极材料形成薄膜,并利用光刻法形成所需形状图案,或在不怎么需要图案精度的情况下(约100 μm 以上),也可以在所述电极材料的蒸镀或溅镀时经由所需形状的遮罩形成图案。或者,在使用像有机导电性化合物那样能够涂布的材料的情况下,也可以使用印刷方式、涂布方式等湿式成膜法。在从该阳极提取光的情况下,理想为将透过率设为大于10%,另外,阳极的薄片电阻优选数百 Ω/\square 以下。进而膜厚也因材料而异,通常是在10~1000nm、优选10~200nm的范围内选择。

[0148] (阴极)

[0149] 另一方面,作为阴极,使用以功函数小(4eV以下)的金属(称为电子注入性金属)、合金、导电性化合物及这些的混合物作为电极材料的阴极。作为这些电极材料的具体例,可以列举:钠、钠-钾合金、镁、锂、镁/铜混合物、镁/银混合物、镁/铝混合物、镁/铟混合物、铝/氧化铝(Al_2O_3)混合物、铟/锂/铝混合物、稀土金属等。这些中,就电子注入性及对氧化等的耐久性的方面来说,优选电子注入性金属和作为功函数的值大于其且稳定的金属的第二金属的混合物,例如镁/银混合物、镁/铝混合物、镁/铟混合物、铝/氧化铝(Al_2O_3)混合物、锂/铝混合物、铝等。阴极可以通过利用蒸镀或溅镀等方法使这些电极材料形成薄膜来制作。另外,阴极的薄片电阻优选数百 Ω/\square 以下,膜厚通常是在10nm~5 μm 、优选50~200nm的范围内选择。另外,为了使发出的光透过,只要有机电致发光元件的阳极或阴极的任一透明或半透明,那么发光亮度会提高而适宜。

[0150] 另外,通过将阳极的说明中所列举的导电性透明材料用于阴极,能够制作透明或半透明的阴极,通过应用其,能够制作阳极和阴极两者具有透过性的元件。

[0151] (发光层)

[0152] 发光层是通过使分别从阳极及阴极注入的空穴及电子再结合而产生激子后发光的层,也可以将发光材料单独用于发光层,但优选包含发光材料和主体材料。作为发光材料,可以使用选自通式(1)所表示的本发明的化合物群中的1种或2种以上。为了使本发明的有机电致发光元件及有机光致发光元件表现高发光效率,重要的是将发光材料中产生的单重态激子及三重态激子封入至发光材料中。因此,优选在发光层中除了发光材料以外还使用主体材料。作为主体材料,可以使用激发单重态能量、激发三重态能量的至少一个具有高于本发明的发光材料的值的有机化合物。其结果,能够将本发明的发光材料中产生的单重态激子及三重态激子封入至本发明的发光材料的分子中,能够充分地发挥其发光效率。但是,也有即便无法充分地封入单重态激子及三重态激子也能够获得高发光效率的情况,所以只要似乎能够实现高发光效率的主体材料,那么就可以没有特别限制地用于本发明。在

本发明的有机发光元件或有机电致发光元件中,发光是从发光层所包含的本发明的发光材料产生的。该发光包含荧光发光及延迟荧光发光两者。但是,发光的一部分或局部也可以有来自主体材料的发光。

[0153] 在使用主体材料的情况下,作为发光材料的本发明的化合物在发光层中含有的量优选0.1重量%以上,更优选1重量%以上,另外,优选50重量%以下,更优选20重量%以下,进一步优选10重量%以下。

[0154] 作为发光层中的主体材料,优选具有空穴传输能力、电子传输能力且防止发光的波长变长而且具有高玻璃转移温度的有机化合物。

[0155] (注入层)

[0156] 注入层是指为了降低驱动电压或提高发光亮度而设置在电极和有机层间的层,有空穴注入层和电子注入层,也可以存在于阳极和发光层或空穴传输层之间、及阴极和发光层或电子传输层之间。注入层可以视需要设置。

[0157] (阻挡层)

[0158] 阻挡层是能够阻挡存在于发光层中的电荷(电子或空穴)及/或激子向发光层外扩散的层。电子阻挡层可以配置在发光层及空穴传输层之间,阻挡电子向空穴传输层迁移并通过发光层。同样地,空穴阻挡层可以配置在发光层及电子传输层之间,阻挡空穴向电子传输层迁移并通过发光层。阻挡层另外可以用于阻挡激子向发光层的外侧扩散。即,电子阻挡层、空穴阻挡层也可以分别兼具作为激子阻挡层的功能。本说明书中所说的电子阻挡层或激子阻挡层是以包含以一层具有电子阻挡层及激子阻挡层的功能的层的含义使用。

[0159] (空穴阻挡层)

[0160] 空穴阻挡层广义来说具有电子传输层的功能。空穴阻挡层具有传输电子且阻挡空穴到达电子传输层的作用,由此可以提高发光层中的电子和空穴的再结合概率。作为空穴阻挡层的材料,可以视需要使用后述电子传输层的材料。

[0161] (电子阻挡层)

[0162] 电子阻挡层广义来说具有传输空穴的功能。电子阻挡层具有传输空穴且阻挡电子到达空穴传输层的作用,由此可以提高发光层中的电子和空穴再结合的概率。

[0163] (激子阻挡层)

[0164] 激子阻挡层是指用来阻挡在发光层内因空穴和电子再结合而产生的激子扩散至电荷传输层的层,通过插入本层,能够将激子有效率地封入至发光层内,能够提高元件的发光效率。激子阻挡层可以和发光层相邻地插入至阳极侧、阴极侧的任一侧,也可以同时插入至两侧。即,在阳极侧具有激子阻挡层的情况下,能够和发光层相邻地将该层插入空穴传输层和发光层之间,在插入至阴极侧的情况下,可以和发光层相邻地将该层插入至发光层和阴极之间。另外,在阳极和与发光层的阳极侧相邻的激子阻挡层之间可以具有空穴注入层或电子阻挡层等,在阴极和与发光层的阴极侧相邻的激子阻挡层之间可以具有电子注入层、电子传输层、空穴阻挡层等。在配置阻挡层的情况下,优选用作阻挡层的材料的激发单重态能量及激发三重态能量的至少任一个高于发光材料的激发单重态能量及激发三重态能量。

[0165] (空穴传输层)

[0166] 空穴传输层包含具有传输空穴的功能的空穴传输材料,空穴传输层可以设置单层

或多层。

[0167] 作为空穴传输材料,是具有空穴的注入或传输、电子的障壁性的任一种的材料,可以是有机物、无机物的任一种。作为可以使用的公知的空穴传输材料,例如可以列举:三唑衍生物、噁二唑衍生物、咪唑衍生物、呋唑衍生物、吡唑并咪唑衍生物、聚芳基烷烃衍生物、吡唑啉衍生物及吡唑啉酮衍生物、苯二胺衍生物、芳基胺衍生物、经氨基取代的查耳酮衍生物、噁唑衍生物、苯乙烯基蒽衍生物、茚酮衍生物、脞衍生物、茈衍生物、硅氮烷衍生物、苯胺系共聚合物、以及导电性高分子低聚物、尤其是噻吩低聚物等,优选使用卟啉化合物、芳香族三级胺化合物及苯乙烯胺化合物,更优选使用芳香族三级胺化合物。

[0168] (电子传输层)

[0169] 电子传输层包含具有传输电子的功能的材料,电子传输层可以设置单层或多层。

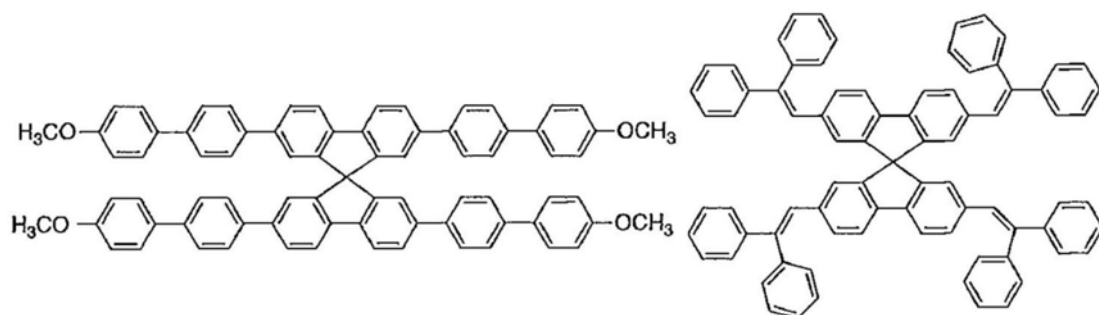
[0170] 作为电子传输材料(也有兼作空穴阻挡材料的情况),只要具有将从阴极注入的电子传递至发光层的功能即可。作为可以使用的电子传输层,例如可以列举:经硝基取代的茚衍生物、二苯基对苯醌衍生物、噻喃二氧化物衍生物、碳二酰亚胺、亚茚基甲烷衍生物、蒽醌二甲烷及蒽酮衍生物、噁二唑衍生物等。进而,在所述噁二唑衍生物中,将噁二唑环的氧原子取代为硫原子的噻二唑衍生物、具有作为拉电子基为人所知的喹喔啉环的喹喔啉衍生物也可以用作电子传输材料。也可以使用进而将这些材料导入至高分子链、或以这些材料作为高分子的主链的高分子材料。

[0171] 在制作有机电致发光元件时,可以将通式(1)所表示的化合物仅用于1层有机层(例如电子传输层),也可以用于多层有机层。这时,各有机层所使用的通式(1)所表示的化合物相互可以相同也可以不同。例如,除了在电子传输层或发光层以外,也可以在所述注入层、阻挡层、空穴阻挡层、电子阻挡层、激子阻挡层、空穴传输层等使用通式(1)所表示的化合物。这些层的制膜方法没有特别限定,可以利用干式制程、湿式制程的任一种制作。

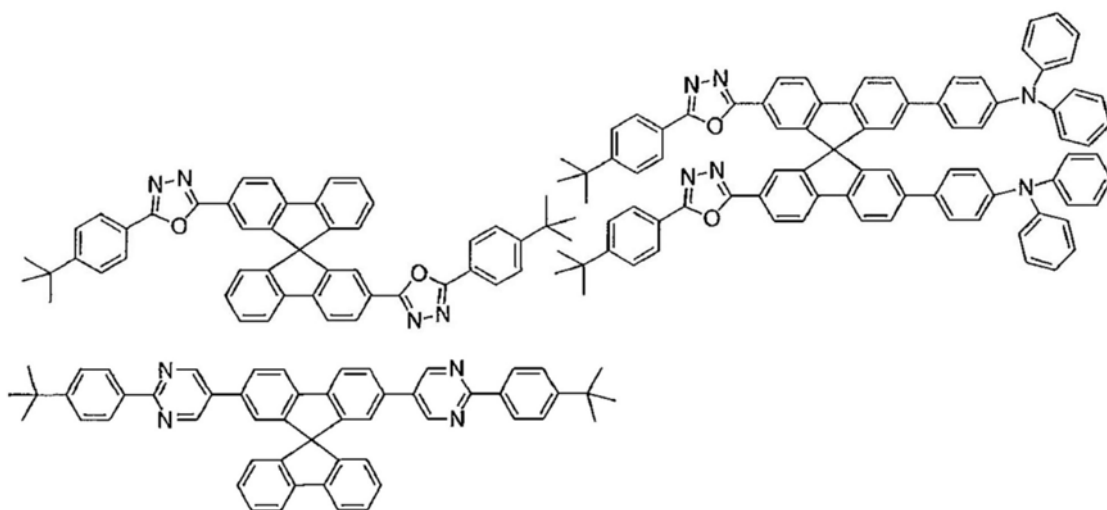
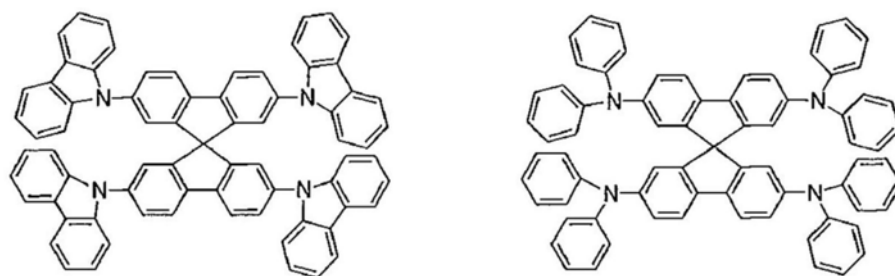
[0172] 以下具体例示可以用于有机电致发光元件的优选材料。但本发明中可以使用的材料并不受以下的例示化合物限定地解释。另外,即便是作为具有特定功能的材料而例示的化合物,也能够转用作具有其它功能的材料。另外,以下的例示化合物的结构式中的 R 、 R' 、 $R_1 \sim R_{10}$ 分别独立地表示氢原子或取代基。 X 表示形成环骨架的碳原子或杂原子, n 表示3~5的整数, Y 表示取代基, m 表示0以上的整数。

[0173] 首先,列举也可以用作发光层的主体材料的优选化合物。

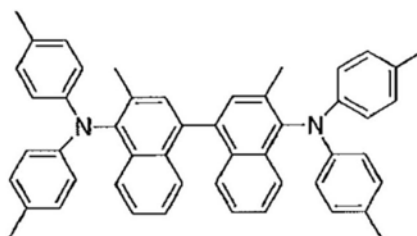
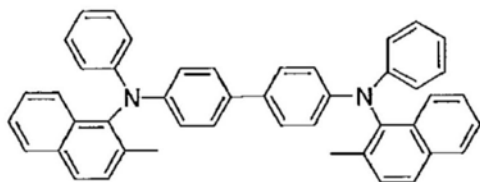
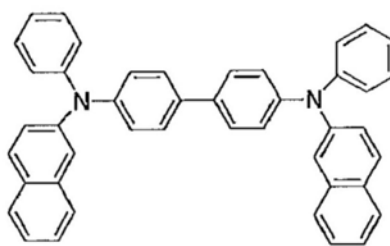
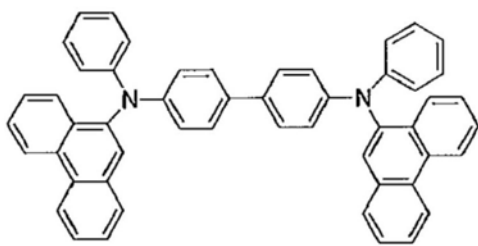
[0174] [化12]



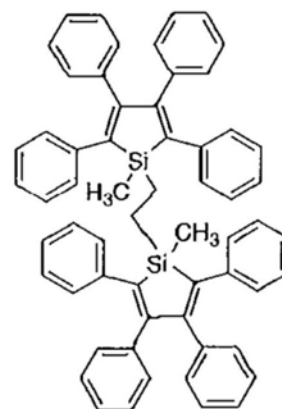
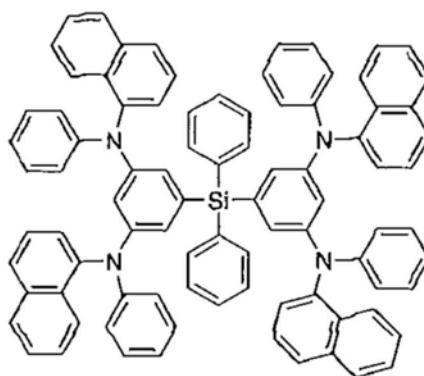
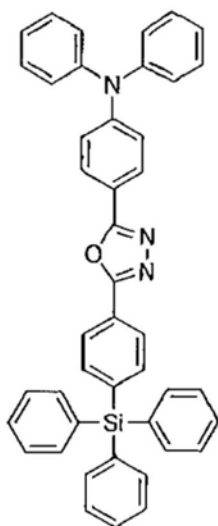
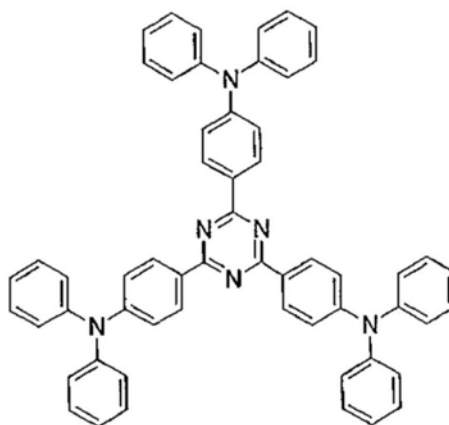
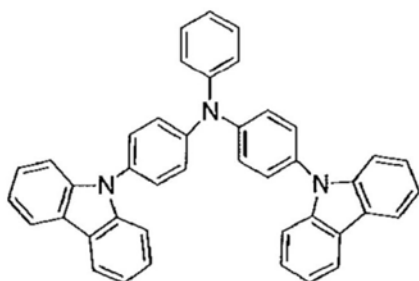
[0175]

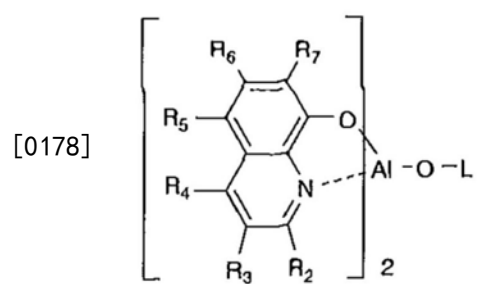


[0176] [化13]

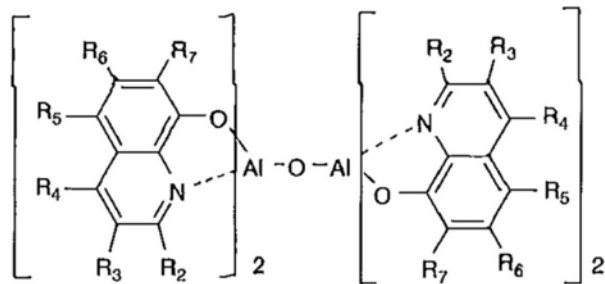


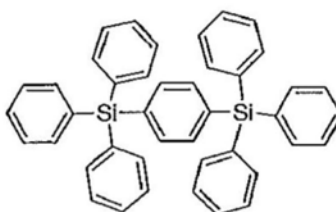
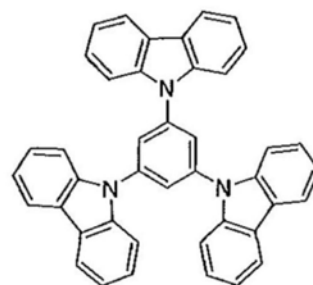
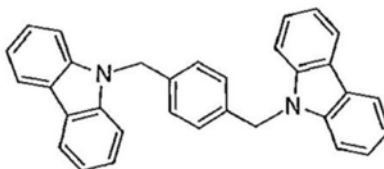
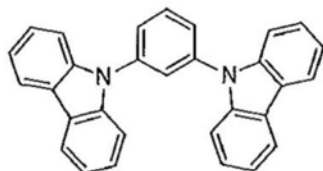
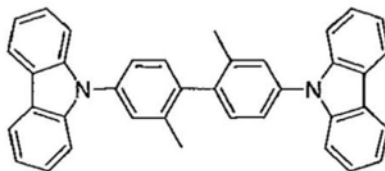
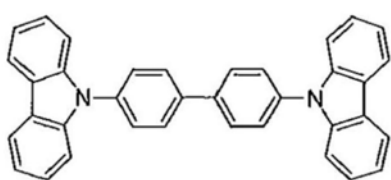
[0177]



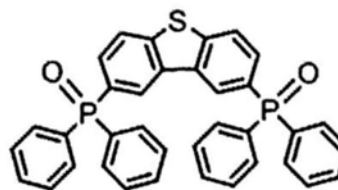
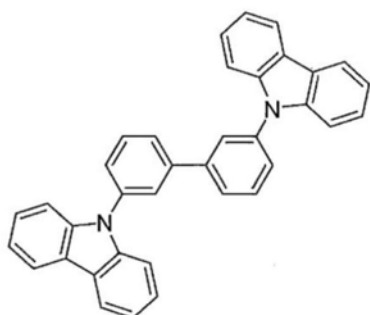
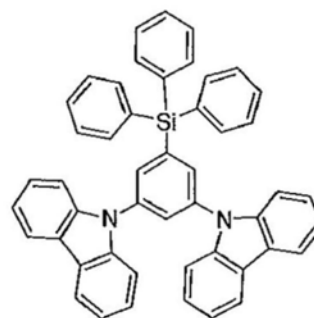
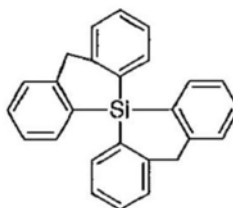
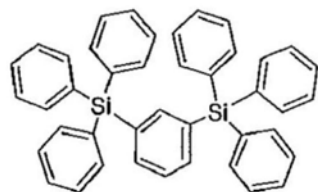


[0179] [化14]



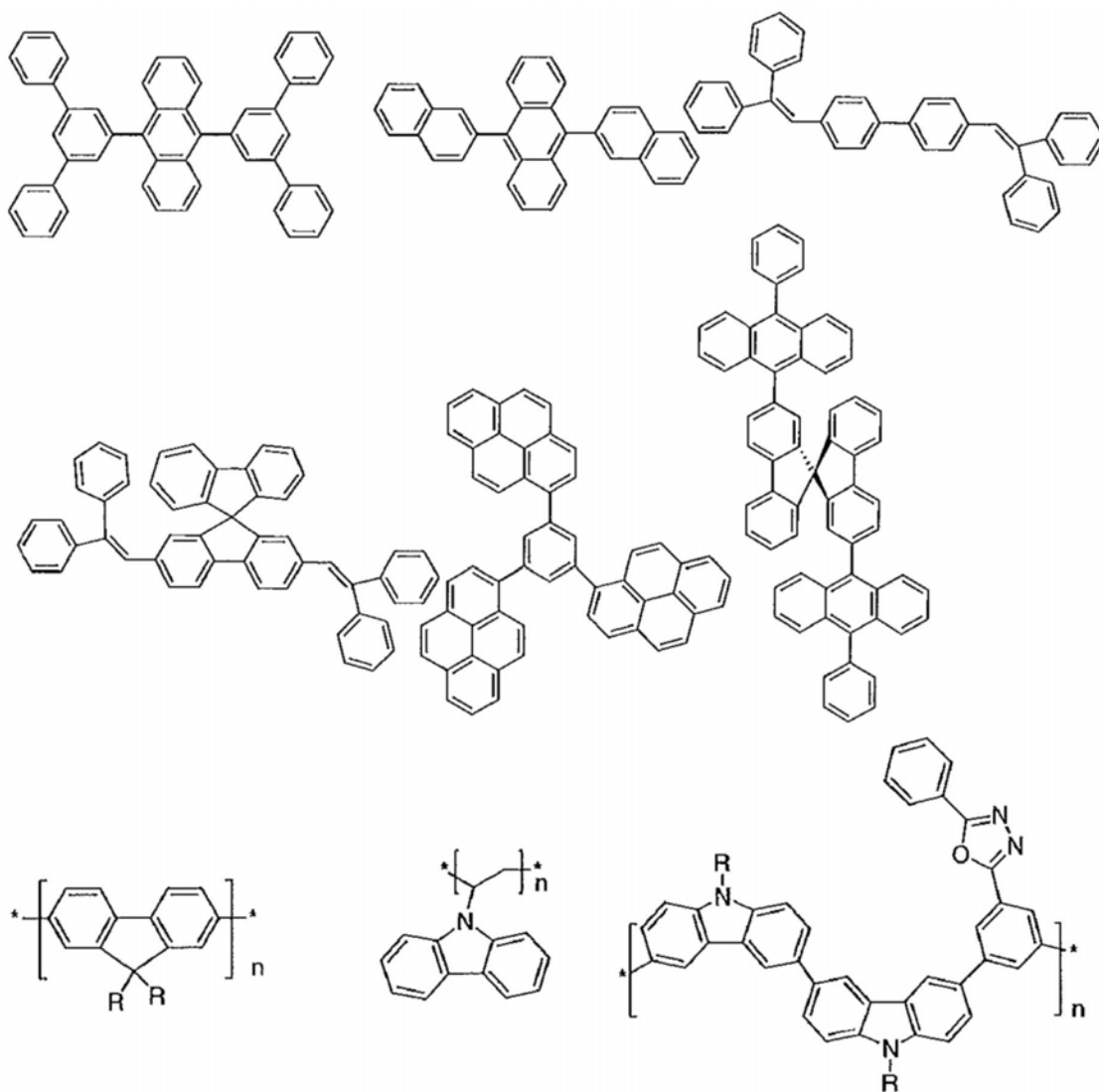


[0180]

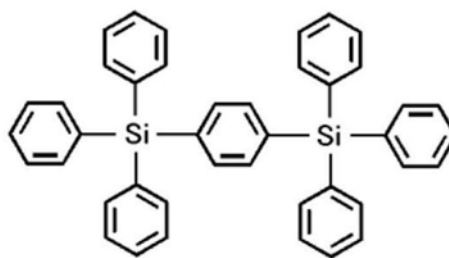
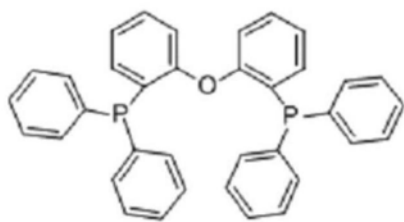


[0181] [化15]

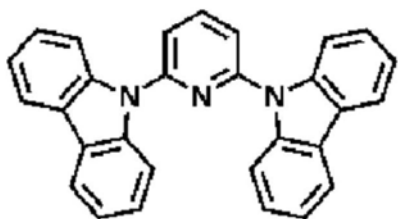
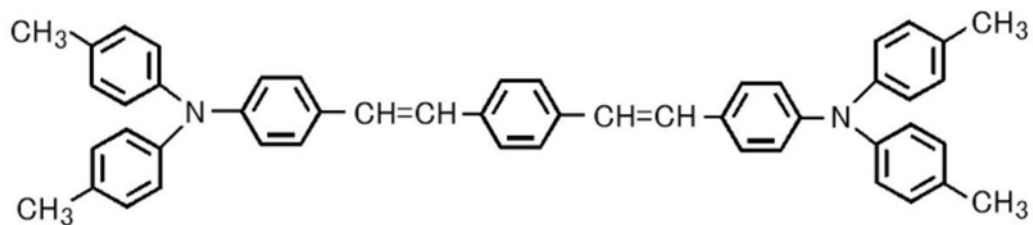
[0182]



[0183] [化16]

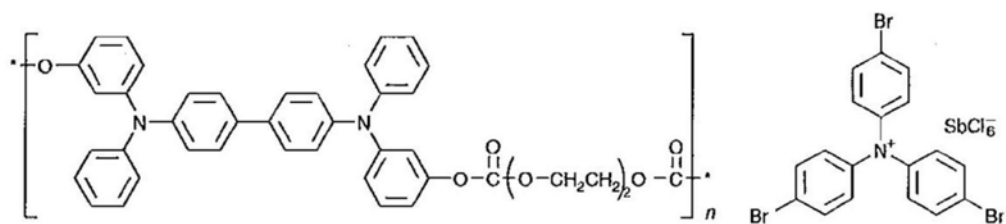
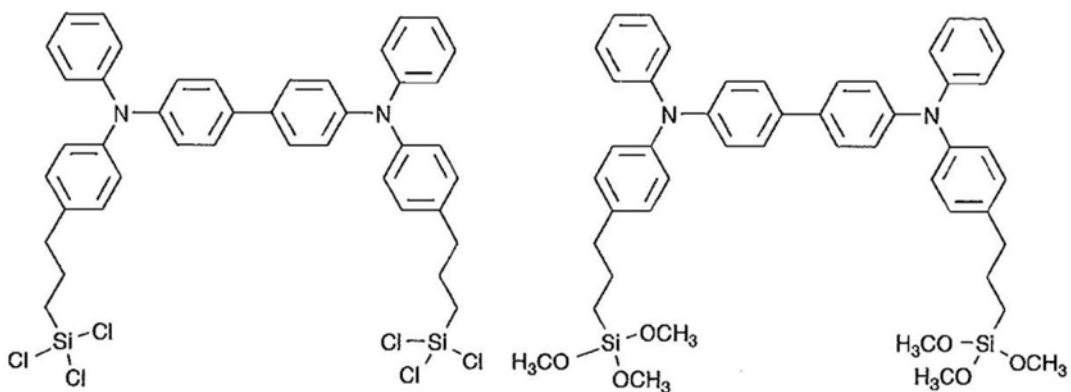


[0184]

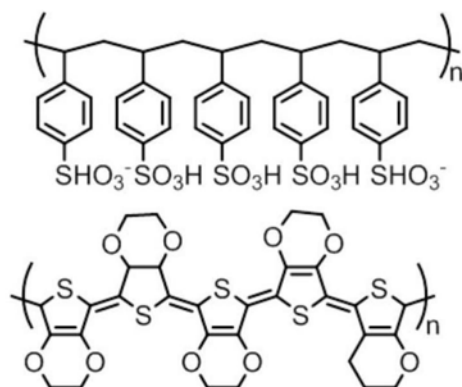
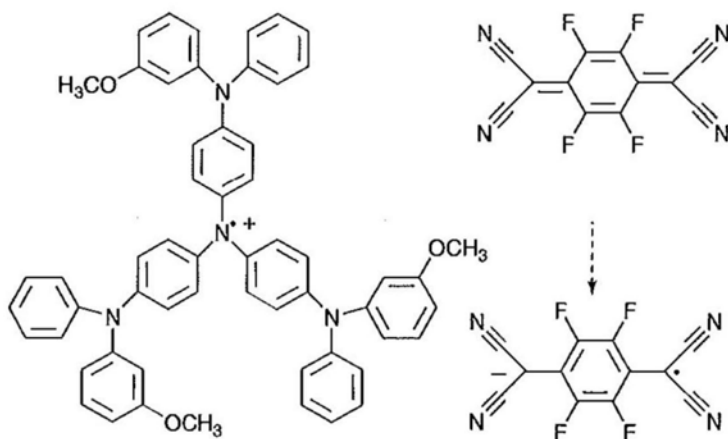


[0185] 列举可以用作空穴注入材料的优选化合物例。

[0186] [化17]

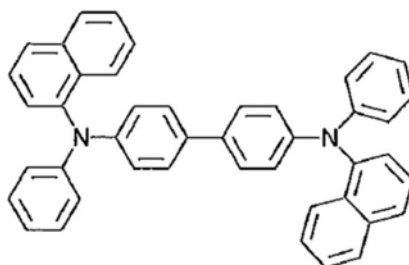
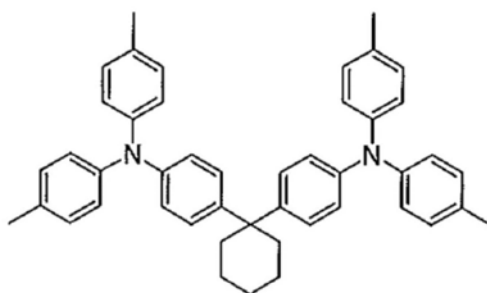


[0187]

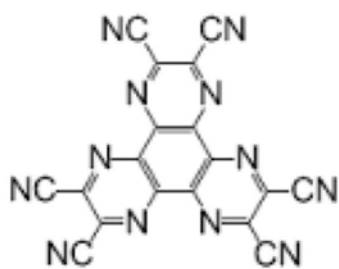
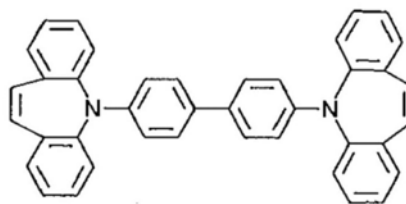
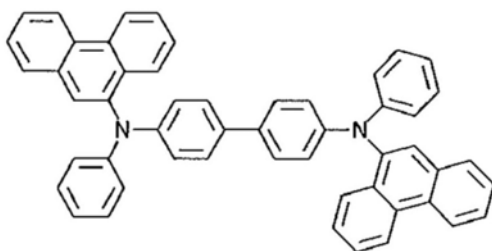
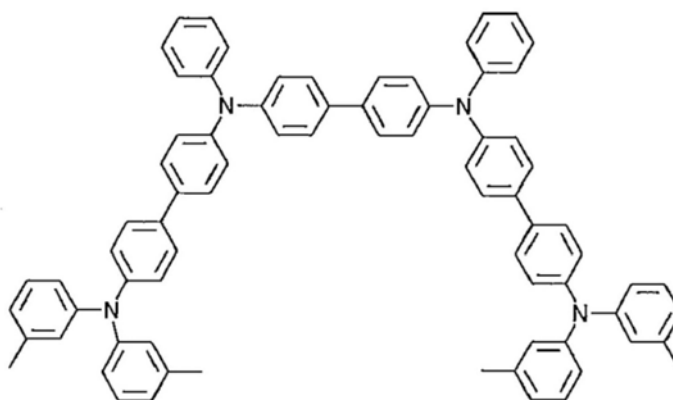


[0188] 其次,列举可以用作空穴传输材料的优选化合物例。

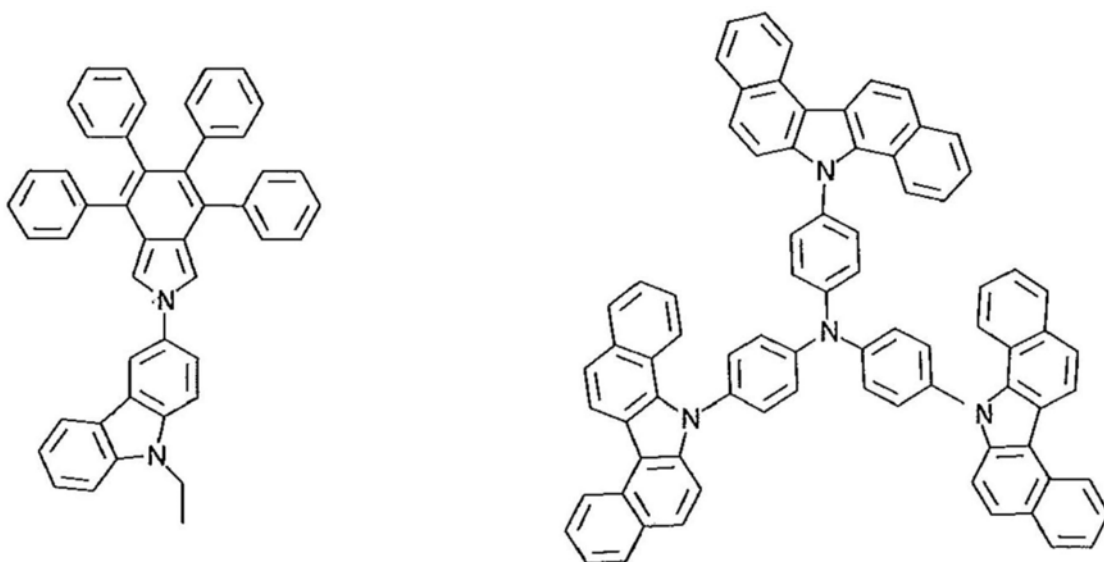
[0189] [化18]



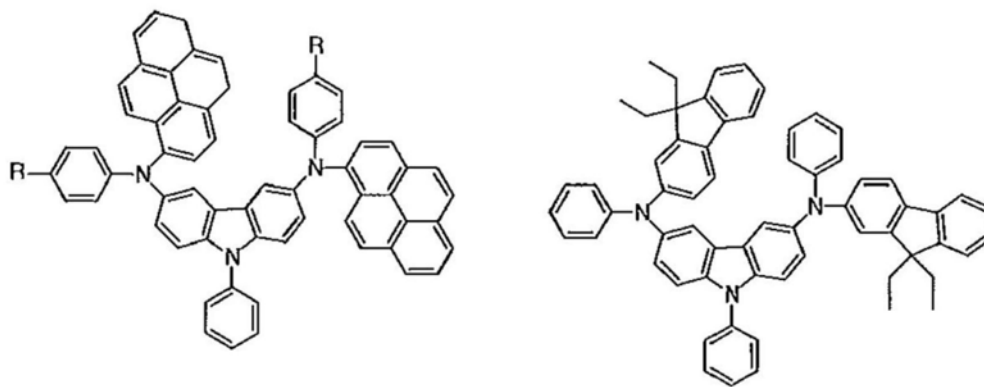
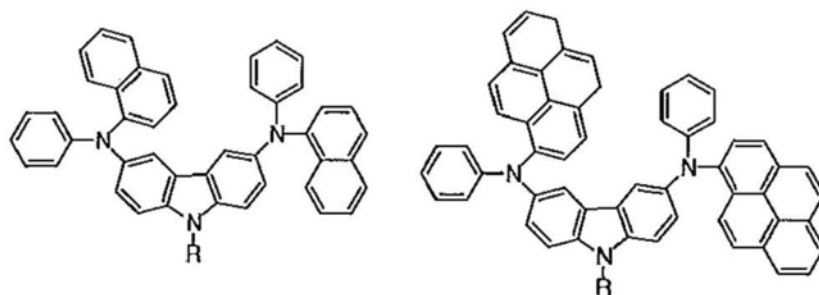
[0190]



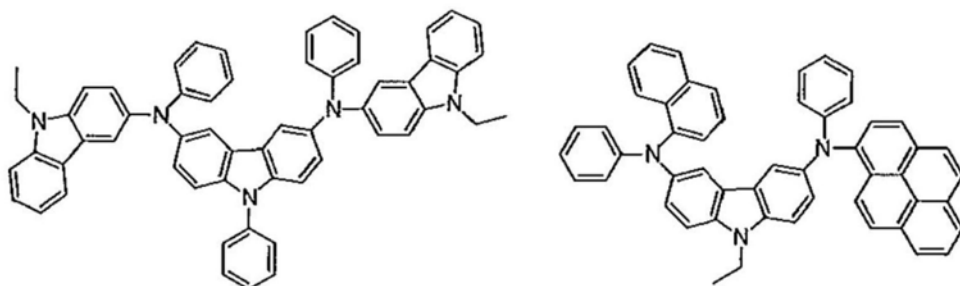
[0191] [化19]

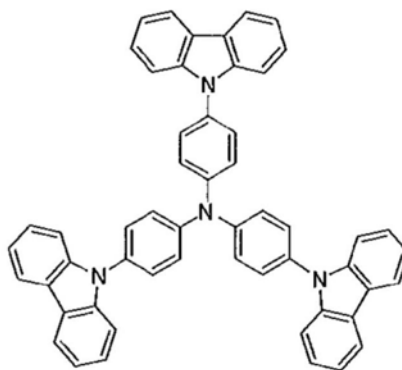
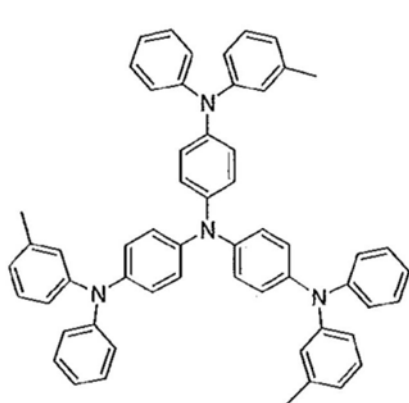


[0192]

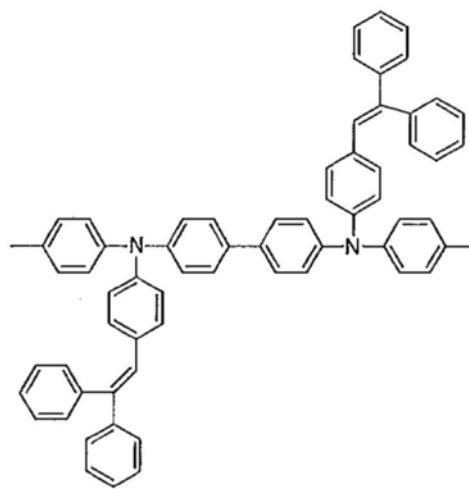
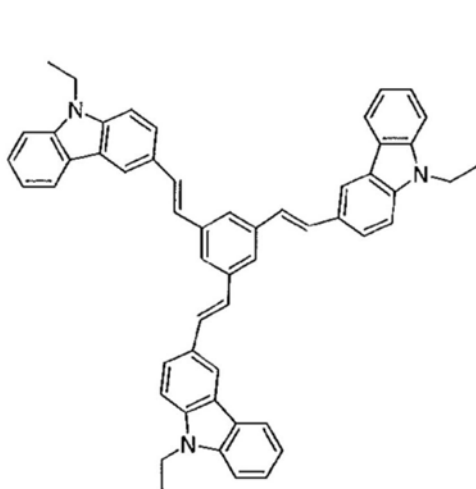
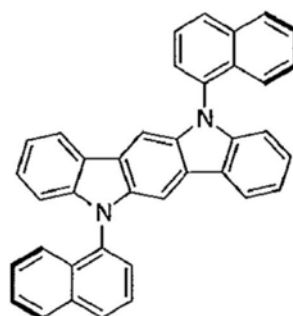
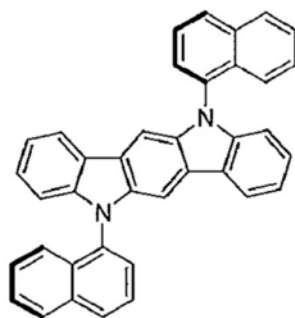


[0193] [化20]

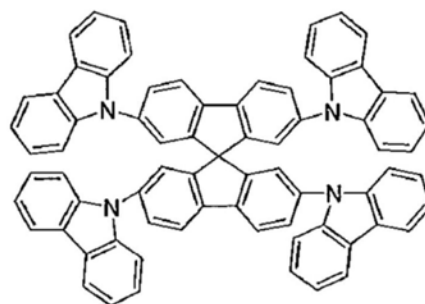
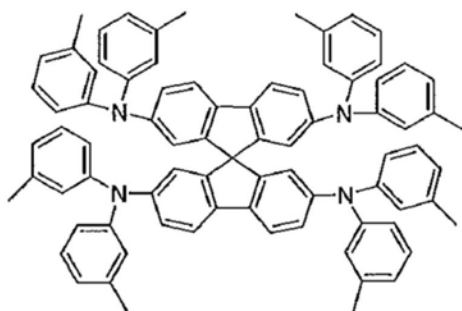
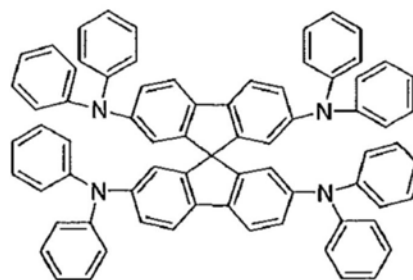
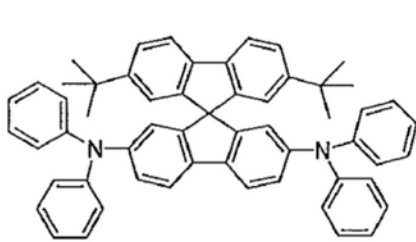




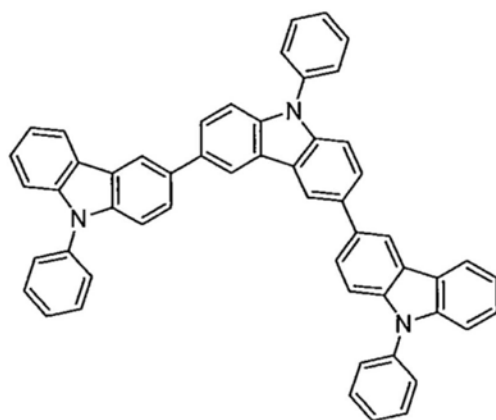
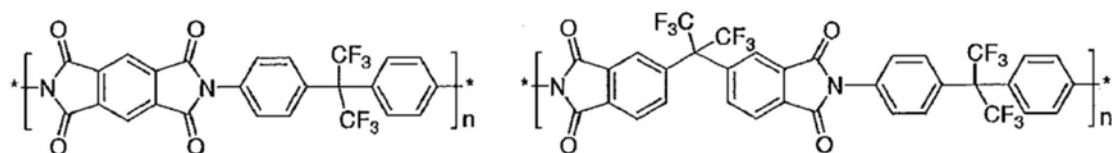
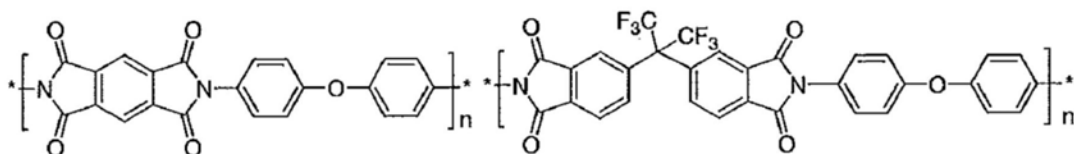
[0194]



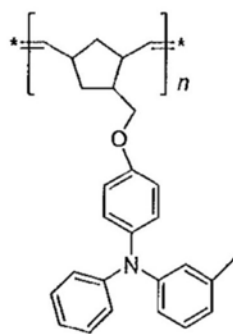
[0195] [化21]



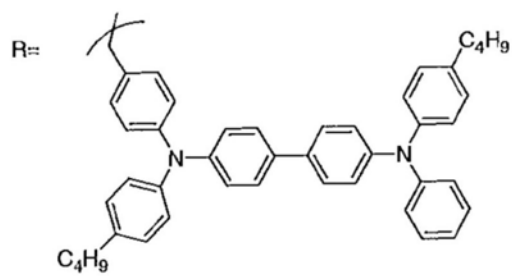
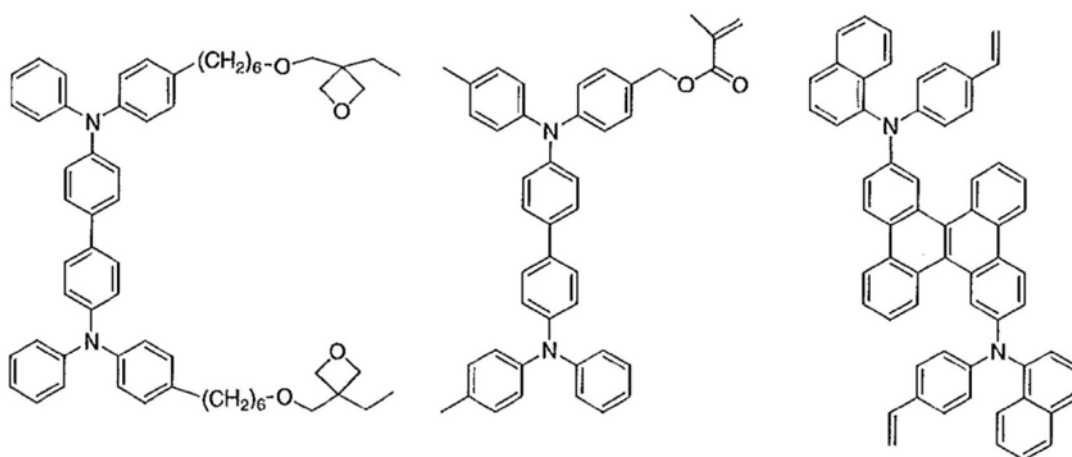
[0196]



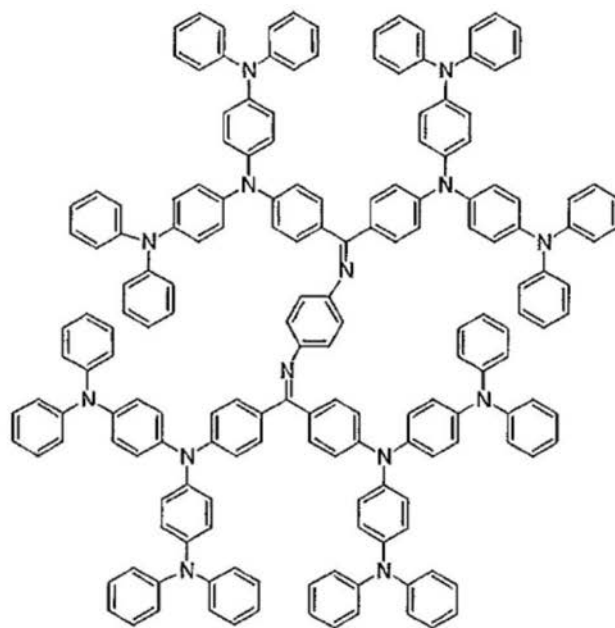
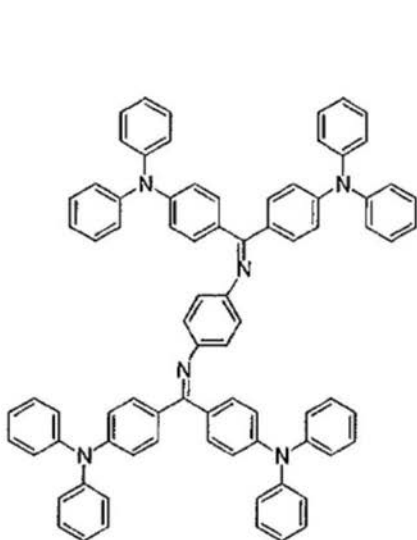
[0197] [化22]



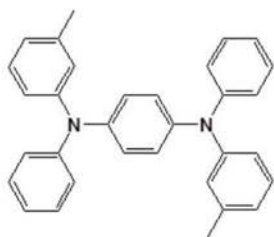
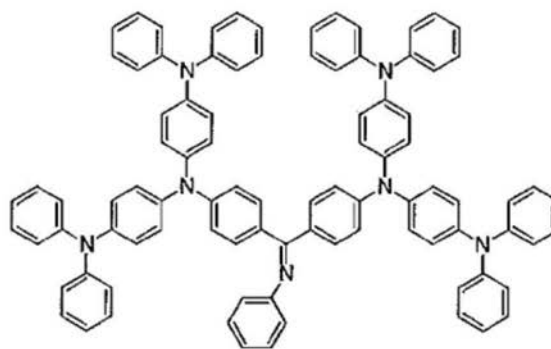
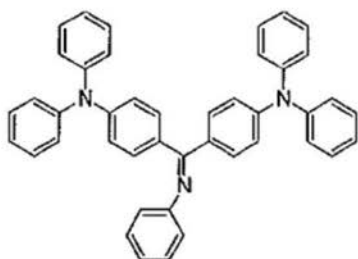
[0198]



[0199] [化23]

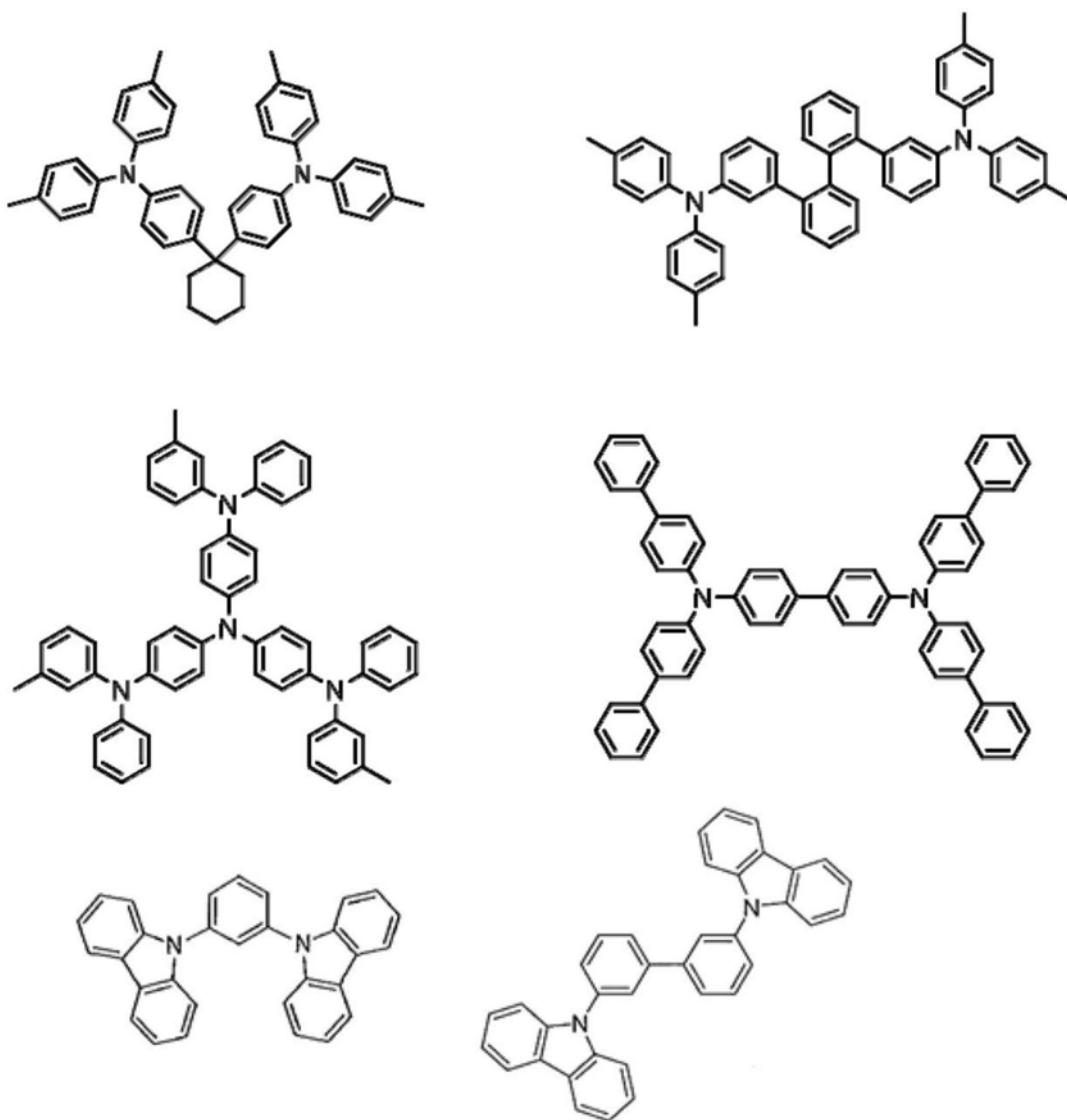


[0200]



[0201] 其次,列举可以用作电子阻挡材料的优选化合物例。

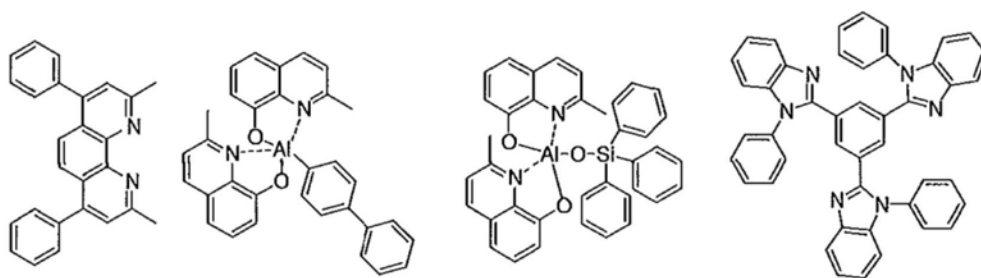
[0202] [化24]



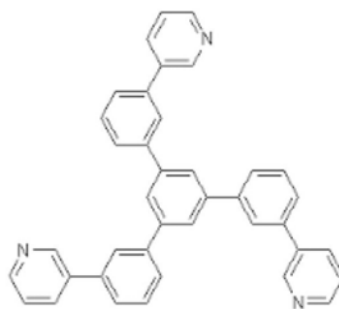
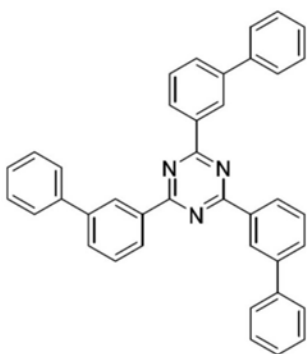
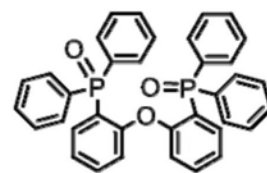
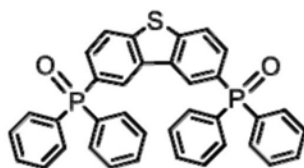
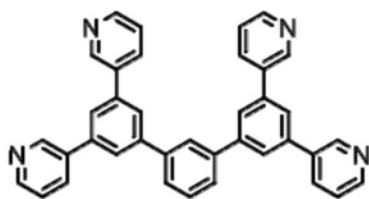
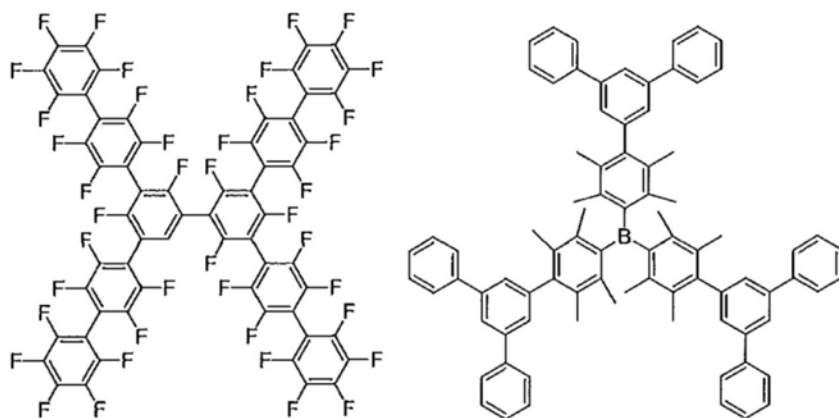
[0203]

[0204] 其次,列举可以用作空穴阻挡材料的优选化合物例。

[0205] [化25]

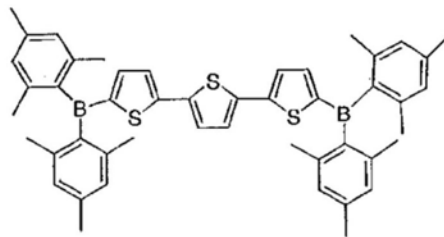
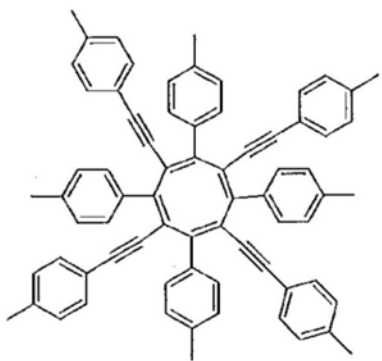


[0206]

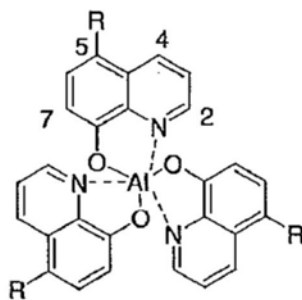
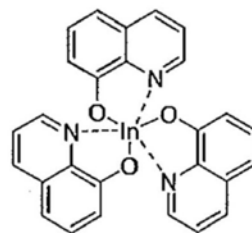
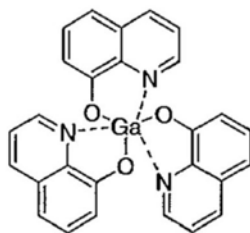
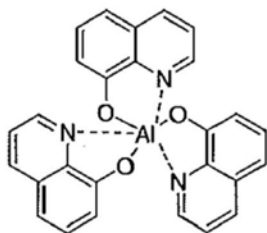


[0207] 其次,列举可以用作电子传输材料的优选化合物例。

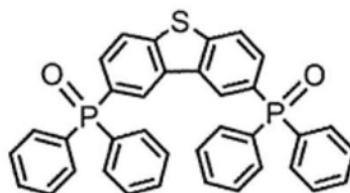
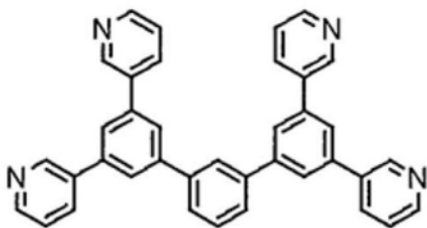
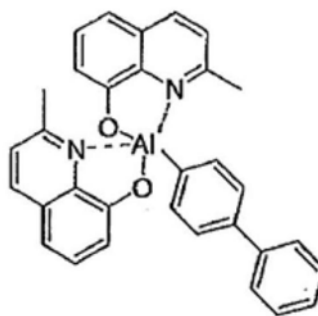
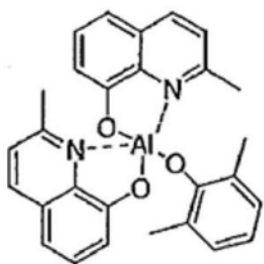
[0208] [化26-1]



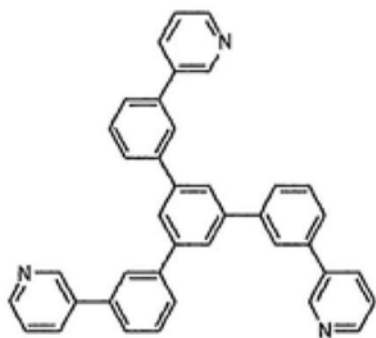
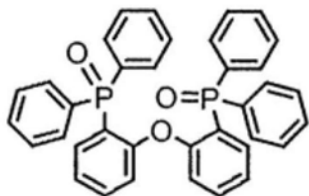
[0209]



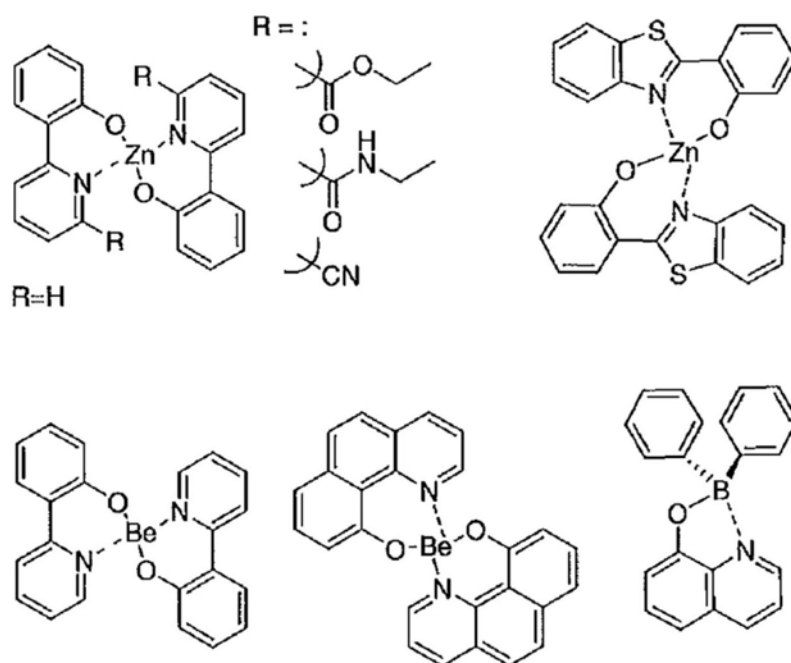
[0210] [化26-2]



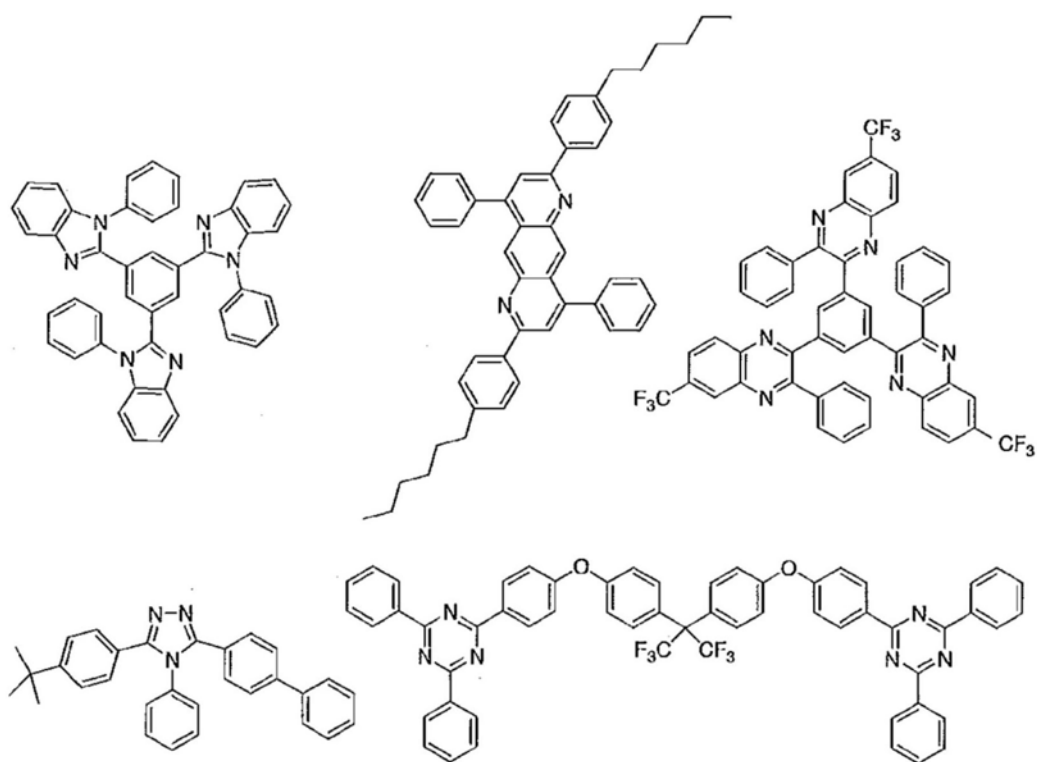
[0211]



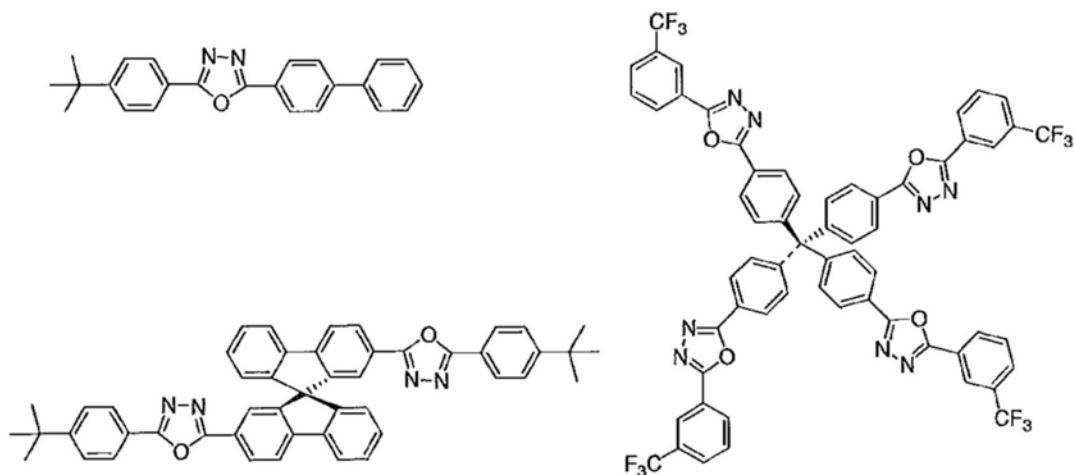
[0212] [化27]



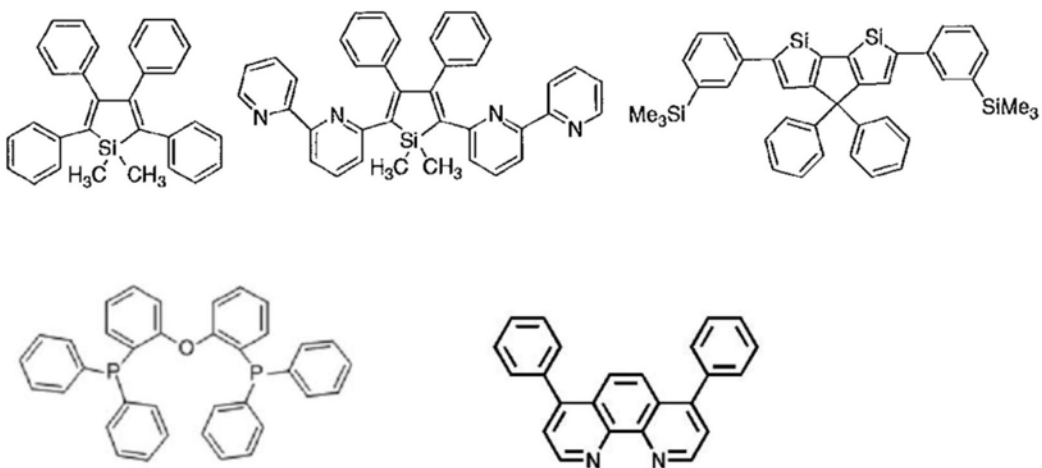
[0213]



[0214] [化28]

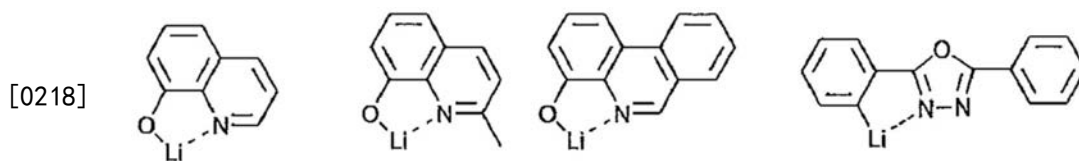


[0215]



[0216] 其次,列举可以用作电子注入材料的优选化合物例。

[0217] [化29]

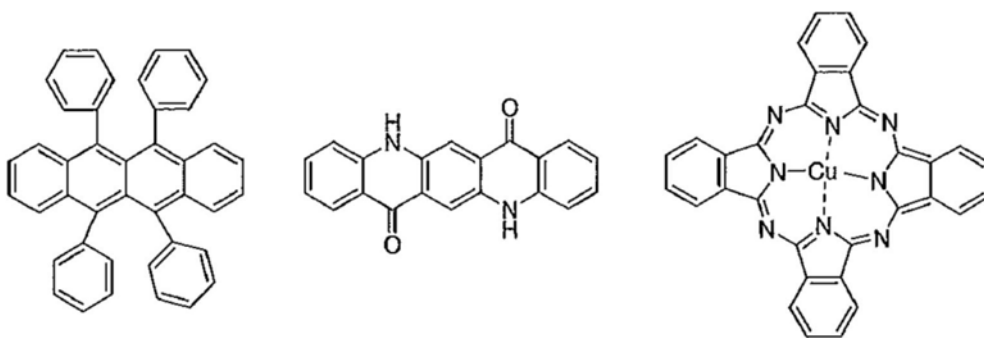


[0218]

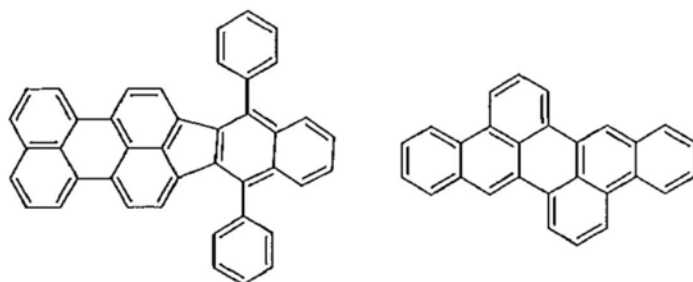
LiF

[0219] 列举作为可以进一步添加的材料所优选的化合物例。例如可以想到作为稳定化材料进行添加等。

[0220] [化30]



[0221]



[0222] 利用所述方法制作的有机电致发光元件通过在获得的元件的阳极和阴极之间施加电场而发光。此时,如果是由激发单重态能量产生的发光,那么和其能级对应的波长的光作为荧光发光及延迟荧光发光被确认到。另外,如果是由激发三重态能量产生的发光,那么和其能级对应的波长作为磷光被确认到。由于普通荧光和延迟荧光发光相比荧光寿命短,所以发光寿命可以区分为荧光和延迟荧光。

[0223] 另一方面,关于磷光,在本发明的化合物那样的普通有机化合物中,激发三重态能量不稳定,热失活的速度常数大,发光的速度常数小,所以会立即失活,在室温下几乎无法观测。为了测定普通有机化合物的激发三重态能量,可以通过观测极低温的条件下的发光来进行测定。

[0224] 这里,本发明的有机发光元件通过使有机层的至少1层包含本发明的通式(1)所表示的化合物,而于发光层或发光材料中顺利地传输电子或空穴,能够高效率地产生如所述的发光。另外,因高温导致的特性劣化或驱动时的特性经时性劣化得到抑制,能够获得高的热稳定性和长的元件寿命。

[0225] 本发明的有机电致发光元件可以应用于单一元件、包含配置为阵列状的构造的元件、阳极和阴极被配置为X-Y矩阵状的构造的任一种。根据本发明,通过使发光层含有通式(1)所表示的化合物,可以获得发光效率大为改善的有机发光元件。本发明的有机电致发光元件等有机发光元件可以进一步应用于各种用途。例如,能够使用本发明的有机电致发光元件制造有机电致发光显示装置,详细内容可以参照时任静士、安达千波矢、村田英幸合著的“有机EL显示器”(Ohmsha公司)。另外,本发明的有机电致发光元件尤其是也可以应用于需求大的有机电致发光照明或背光源。

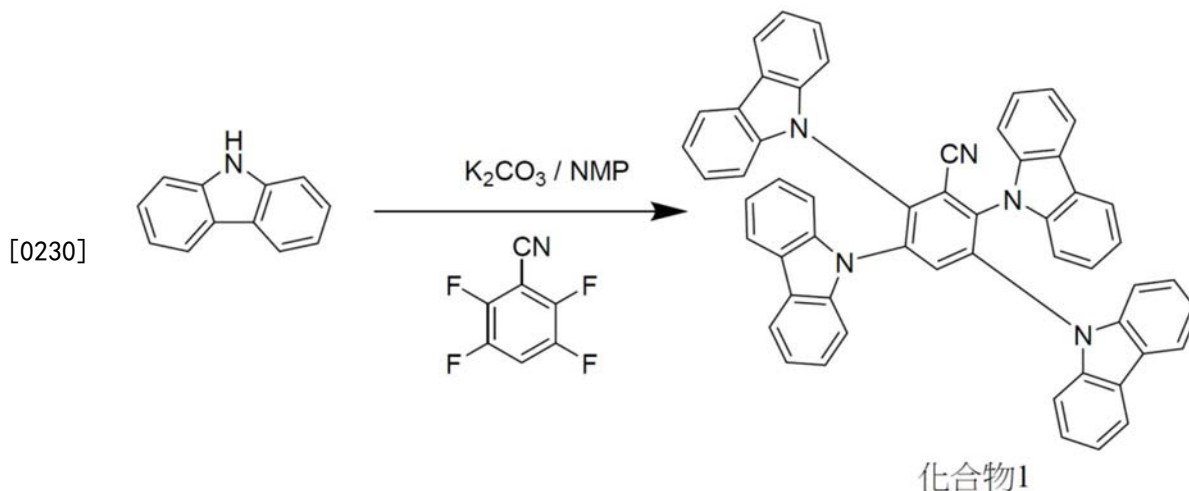
[0226] [实施例]

[0227] 以下列举合成例及实施例进一步具体地说明本发明的特征。以下所示的材料、处理内容、处理顺序等只要不脱离本发明的主旨,那么就可以进行适当变更。因此,本发明的范围不应受以下所示的具体限定地解释。另外,紫外线吸收光谱的测定是使用UV-2550(岛津制作所公司制造)或LAMBDA950-PKA(珀金埃尔默公司制造)进行的,发光光谱的测定是使

用Fluoromax-4 (HORIBA Jobin Yvon公司制造) 进行的,过渡衰减曲线的测定是使用Quantaurs-tau (Hamamatsu Photonics公司制造) 进行的。另外,在本实施例中,将发光寿命为0.05 μ s以上的荧光判定为延迟荧光。

[0228] (合成例1) 化合物1的合成

[0229] [化31]



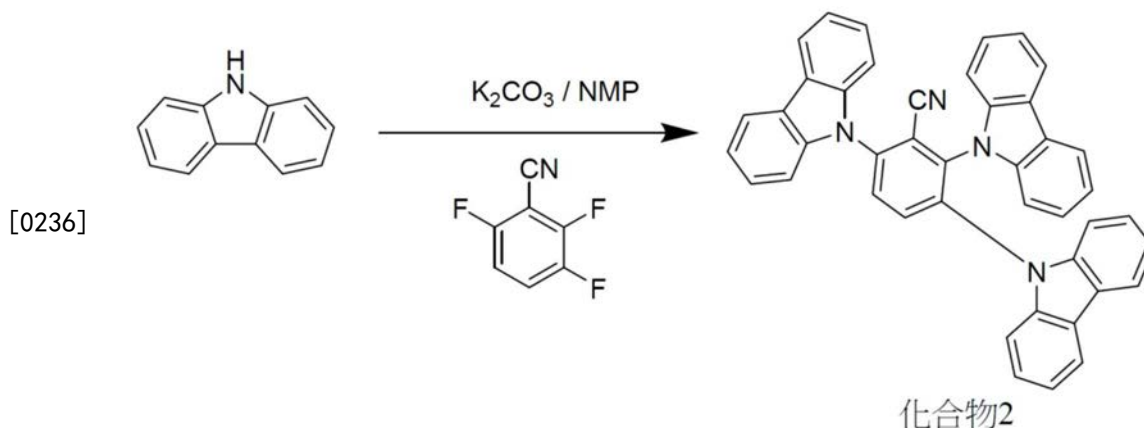
[0231] 将碳酸钾(8.14g, 58.9mmol)、9H-咔唑(6.57g, 39.3mmol)放入至经氮气置换的100mL的三口烧瓶中,进一步添加脱水N-甲基-2-吡咯烷酮45mL并在室温下搅拌1小时。在氮气气流下,向该混合物中添加2,3,5,6-四氟苯甲腈(1.37g, 7.85mmol),在80℃下搅拌12小时。通过抽吸过滤回收经反应而析出的固体,利用水和甲醇洗净。向洗净后的固体中添加甲醇并进行加热搅拌,通过抽吸过滤回收固体。利用乙酸乙酯进行再结晶,结果以产量3.28g、产率54.7%获得目标物的黄色固体。

[0232] $^1\text{H-NMR}$ (500MHz, CDCl_3 , δ): 8.45 (s, 1H), 7.80-7.77 (m, 8H), 7.36 (d, $J=8.0\text{Hz}$, 4H), 7.32-7.31 (m, 4H), 7.19 (td, $J=7.5\text{Hz}$, 1.0Hz, 4H), 7.15-7.10 (m, 12H)

[0233] ASAP质谱分析:理论值763.9,观测值763.9

[0234] (合成例2) 化合物2的合成

[0235] [化32]



[0237] 将碳酸钾(25.7g, 187mmol)、9H-咔唑(20.8g, 124mmol)放入至经氮气置换的300mL的三口烧瓶中,进一步添加脱水N-甲基-2-吡咯烷酮180mL并在室温下搅拌1小时。在氮气气流下,向该混合物中添加2,3,6-三氟苯甲腈(3.00g, 19.1mmol),在100℃下搅拌12小时。搅

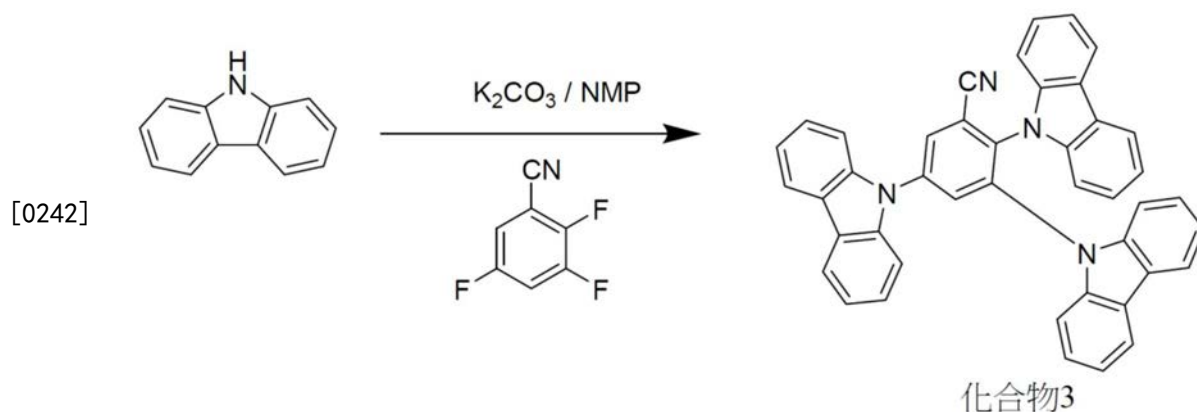
拌后,向该混合物中添加水而使固体析出,通过抽吸过滤回收析出的固体,利用水和甲醇洗净。向洗净后的固体中添加甲醇并进行加热搅拌,通过抽吸过滤回收固体。将所获得的固体溶解于加热后的氯仿中,利用以氯仿作为展开溶剂的硅胶柱色谱法进行精制,将获得的组分进行浓缩而获得固体。向所获得的固体中添加甲醇并进行加热搅拌,通过抽吸过滤回收固体。利用加热后的甲醇洗净该固体,由此以产量8.11g、产率71.1%获得目标物的淡黄色固体。

[0238] $^1\text{H-NMR}$ (500MHz, CDCl_3 , δ): 8.23 (d, $J=9.0\text{Hz}$, 1H), 8.20 (d, $J=7.5\text{Hz}$, 2H), 7.99 (d, $J=8.5\text{Hz}$, 1H), 7.78 (dd, $J=8.0\text{Hz}$, 2.0Hz, 2H), 7.75 (dd, $J=8.0\text{Hz}$, 2.0Hz, 2H), 7.60-7.54 (m, 4H), 7.41 (td, $J=8.5\text{Hz}$, 1.0Hz, 2H), 7.20-7.15 (m, 4H), 7.14-7.04 (m, 8H)

[0239] ASAP质谱分析:理论值598.7,观测值598.6

[0240] (合成例3) 化合物3的合成

[0241] [化33]



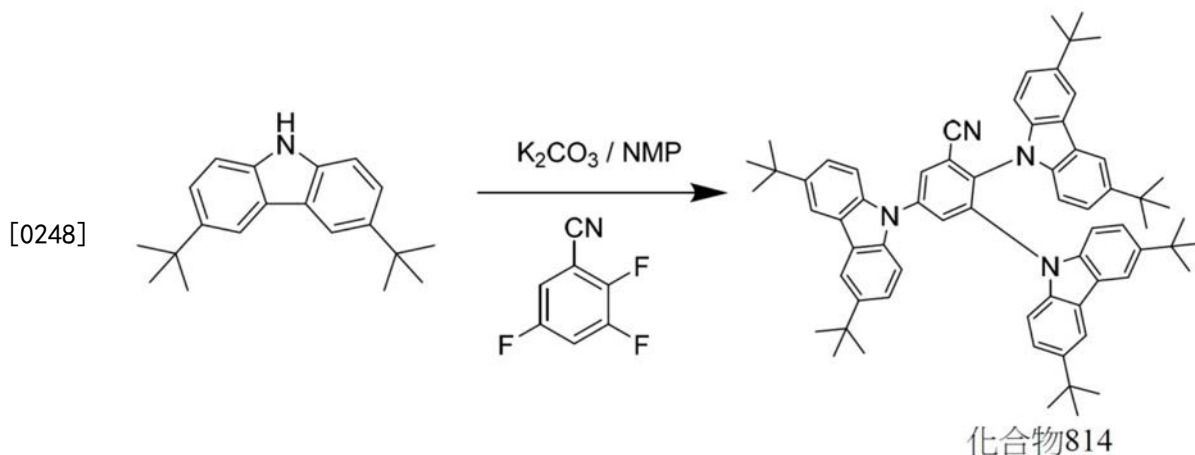
[0243] 将碳酸钾(42.9g, 310mmol)、9H-吡啶(34.6g, 207mmol)放入至经氮气置换的300mL的三口烧瓶中,进一步添加脱水N-甲基-2-吡咯烷酮180mL并在室温下搅拌1小时。在氮气气流下,向该混合物中添加2,3,5-三氟苯甲腈(5.00g, 31.8mmol),在100℃下搅拌12小时。搅拌后,向该混合物中添加水而使固体析出,通过抽吸过滤回收析出的固体,利用水和甲醇洗净。向洗净后的固体中添加甲醇并进行加热搅拌,通过抽吸过滤回收固体。将所获得的固体溶解于加热后的氯仿中,利用以氯仿作为展开溶剂的硅胶柱色谱法进行精制,将获得的组分进行浓缩而获得固体。向所获得的固体中添加甲醇并进行加热搅拌,通过抽吸过滤回收固体。利用加热后的甲醇洗净该固体,由此以产量14.2g、产率74.7%获得目标物的淡黄色固体。

[0244] $^1\text{H-NMR}$ (500MHz, CDCl_3 , δ): 8.30 (dd, $J=7.5\text{Hz}$, 2.5Hz, 2H), 8.18 (d, $J=7.5\text{Hz}$, 2H), 7.78-7.72 (m, 4H), 7.68 (d, $J=8.0\text{Hz}$, 2H), 7.52 (td, $J=7.5\text{Hz}$, 1.0Hz, 2H), 7.40 (td, $J=7.5\text{Hz}$, 1.0Hz, 2H), 7.19-7.16 (m, 2H), 7.14-7.09 (m, 6H), 7.09-7.01 (m, 4H)

[0245] ASAP质谱分析:理论值598.7,观测值598.6

[0246] (合成例4) 化合物814的合成

[0247] [化34]



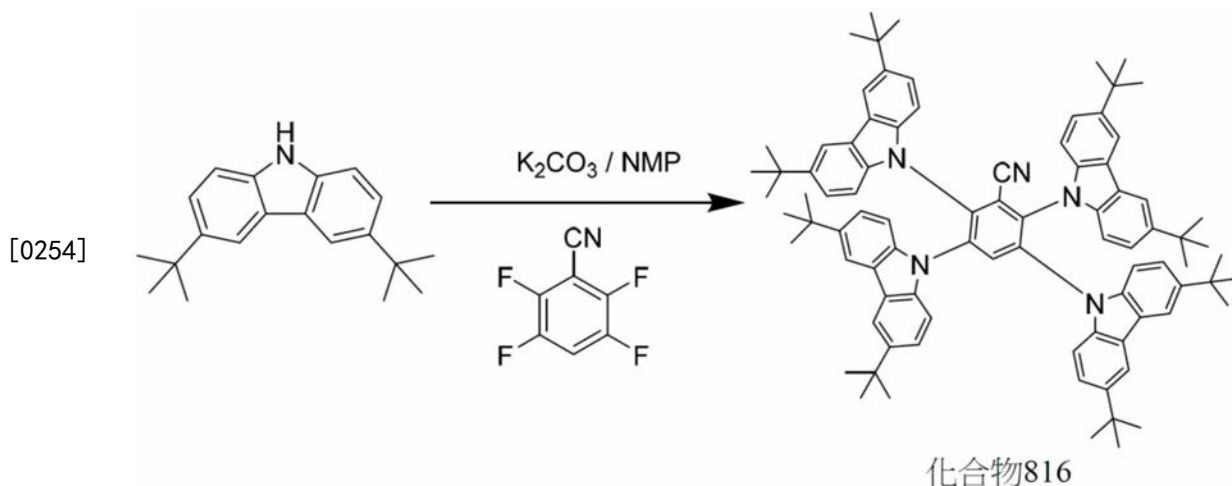
[0249] 将碳酸钾(2.33g, 16.9mmol)、3,6-二叔丁基-9H-咔唑(3.14g, 11.3mmol)放入至经氮气置换的300mL的三口烧瓶中,进一步添加脱水N-甲基-2-吡咯烷酮30mL并在室温下搅拌1小时。在氮气气流下,向该混合物中添加2,3,5-三氟苯甲腈(0.392g, 2.50mmol),在100℃下搅拌36小时。搅拌后,向该混合物中添加水而使固体析出,通过抽吸过滤回收析出的固体,利用水和己烷洗净。向洗净后的固体中添加己烷并进行加热搅拌后进行抽吸过滤,由此以产量1.55g、产率66.2%获得目标物的白色固体。

[0250] $^1\text{H-NMR}$ (500MHz, CDCl_3 , δ): 8.28 (dd, $J=14\text{Hz}$, 2.5Hz, 2H), 8.18 (d, $J=1.7\text{Hz}$, 2H), 7.65 (d, $J=8.6\text{Hz}$, 2H), 7.59-7.56 (m, 6H), 6.93 (dd, $J=8.5\text{Hz}$, 2.0Hz, 2H), 6.88 (dd, $J=8.5\text{Hz}$, 2.0Hz, 2H), 6.86 (dd, $J=8.5\text{Hz}$, 2.0Hz, 2H), 6.76 (dd, $J=8.5\text{Hz}$, 2.0Hz, 2H), 1.49 (s, 18H), 1.34 (d, 36H)

[0251] ASAP质谱分析:理论值935.4,观测值935.2

[0252] (合成例5) 化合物816的合成

[0253] [化35]



[0255] 将碳酸钾(3.46g, 25.0mmol)、3,6-二叔丁基-9H-咔唑(4.67g, 16.7mmol)放入至经氮气置换的100mL的三口烧瓶中,进一步添加脱水N-甲基-2-吡咯烷酮30mL并在室温下搅拌1小时。在氮气气流下,向该混合物中添加2,3,5,6-四氟苯甲腈(0.450g, 2.57mmol),在95℃下搅拌12小时。搅拌后,通过抽吸过滤回收析出的固体,利用水和己烷洗净。向洗净后的固体中添加己烷并进行加热搅拌后进行抽吸过滤,由此以产量2.65g、产率85.2%获得目标物

的黄色固体。

[0256] ^1H NMR (500MHz, CDCl_3 , δ): 8.43 (s, 1H), 7.61 (d, $J=7.0\text{Hz}$, 8H), 7.09-6.99 (m, 16H), 1.37 (s, 72H)

[0257] ASAP质谱分析:理论值1212,观测值1212

[0258] (实施例1) 使用化合物1的有机光致发光元件的制备和评价

[0259] 于Ar氛围的手套箱中制备化合物1的甲苯溶液 (浓度 $1 \times 10^{-5}\text{mol/L}$)。

[0260] 关于化合物1的甲苯溶液,将使用300nm激发光测得的发光光谱和吸收光谱示于图2,将通入氩气后使用340nm激发光测得的过渡衰减曲线示于图3。图2中,实线表示发光光谱,虚线表示吸收光谱。光致发光量子效率在通入氩气前的甲苯溶液中为12.0%,在通入氩气后的甲苯溶液中为45.4%。另外,根据图3,确认到衰减快的荧光成分和衰减慢的延迟荧光成分,衰减快的荧光成分的发光寿命为1.65ns (纳秒),延迟荧光成分的发光寿命为70 μs 。

[0261] 根据这些结果,可以确认化合物1是能够放射延迟荧光的化合物,具有高发光效率。

[0262] (实施例2) 使用化合物2的有机光致发光元件的制备和评价

[0263] 使用化合物2代替化合物1,在和实施例1相同的条件下制备甲苯溶液 (浓度 $1 \times 10^{-5}\text{mol/L}$)。

[0264] 关于化合物2的甲苯溶液,将使用337nm激发光测得的发光光谱和吸收光谱示于图4,将通入氩气后使用340nm激发光测得的过渡衰减曲线示于图5。图4中,实线表示发光光谱,虚线表示吸收光谱。光致发光量子效率在通入氩气前的甲苯溶液中为10.0%,在通入氩气后的甲苯溶液中为13.7%。另外,从图5中确认到衰减快的荧光成分和衰减慢的延迟荧光成分,衰减快的荧光成分的发光寿命为2.8ns,延迟荧光成分的发光寿命为17 μs 。

[0265] 根据这些结果,可确认化合物2是能够放射延迟荧光的化合物,具有高发光效率。

[0266] (实施例3) 使用化合物3的有机光致发光元件的制备和评价

[0267] 使用化合物3代替化合物1,在和实施例1相同的条件下制备甲苯溶液 (浓度 $1 \times 10^{-5}\text{mol/L}$)。

[0268] 关于化合物3的甲苯溶液,将使用337nm激发光测得的发光光谱和吸收光谱示于图6,将通入氩气后使用340nm激发光测得的过渡衰减曲线示于图7。图6中,实线表示发光光谱,虚线表示吸收光谱。光致发光量子效率在通入氩气前的甲苯溶液中为17.8%,在通入氩气后的甲苯溶液中为21.0%。另外,从图7中确认到衰减快的荧光成分和衰减慢的延迟荧光成分,衰减快的荧光成分的发光寿命为6.6ns,延迟荧光成分的发光寿命为96 μs 。

[0269] 根据这些结果,可确认化合物3是能够放射延迟荧光的化合物,具有高的发光效率。

[0270] (实施例4) 使用化合物814的有机光致发光元件的制备和评价

[0271] 使用化合物814代替化合物1,在和实施例1相同的条件下制备甲苯溶液 (浓度 $1 \times 10^{-5}\text{mol/L}$)。

[0272] 关于化合物814的甲苯溶液,将使用337nm激发光测得的发光光谱示于图8,将通入氩气的后使用340nm激发光测得的过渡衰减曲线示于图9。光致发光量子效率在通入氩气前的甲苯溶液中为27.4%,在通入氩气后的甲苯溶液中为37.4%。另外,从图9中确认到衰减快的荧光成分和衰减慢的延迟荧光成分,衰减快的荧光成分的发光寿命为6.7ns,延迟荧光

成分的发光寿命为2.5 μ s。

[0273] 根据这些结果,可确认化合物814是能够放射延迟荧光的化合物,具有高的发光效率。

[0274] (实施例5)使用化合物816的有机光致发光元件的制备和评价

[0275] 使用化合物816代替化合物1,在和实施例1相同的条件下制备甲苯溶液(浓度 1×10^{-5} mol/L)。

[0276] 关于化合物816的甲苯溶液,将使用337nm激发光测得的发光光谱和吸收光谱示于图10,将通入氩气后使用340nm激发光测得的过渡衰减曲线示于图11。图10中,实线表示发光光谱,虚线表示吸收光谱。光致发光量子效率在通入氩气前的甲苯溶液中为13.1%,在通入氩气后的甲苯溶液中为39.4%。另外,从图11中确认到衰减快的荧光成分和衰减慢的延迟荧光成分,衰减快的荧光成分的发光寿命为2.2ns,延迟荧光成分的发光寿命为6.3 μ s。

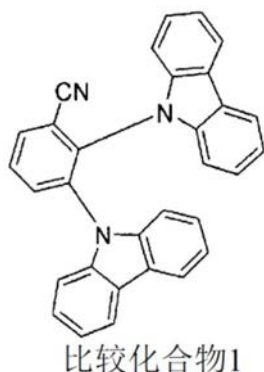
[0277] 根据这些结果,可确认化合物816是能够放射延迟荧光的化合物,具有高发光效率。

[0278] (比较例1)使用比较化合物1的有机光致发光元件的制备和评价

[0279] 使用下述式所表示的比较化合物1代替化合物1,在和实施例1相同的条件下制备甲苯溶液(浓度 1×10^{-5} mol/L)。

[0280] [化36]

[0281]



比较化合物1

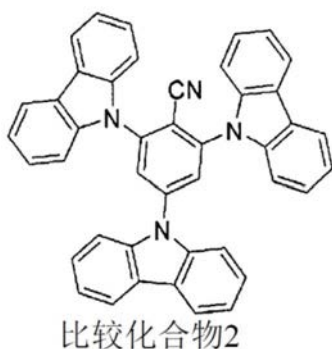
[0282] 关于比较化合物1的甲苯溶液,将通入氩气后使用280nm激发光测得的过渡衰减曲线示于图12。光致发光量子效率在通入氩气前的甲苯溶液中为17.0%,在通入氩气后的甲苯溶液中为35.1%。从图12中没有确认到延迟荧光成分,只观测到衰减快的荧光成分(发光寿命:10.9ns)。

[0283] (比较例2)使用比较化合物2的有机光致发光元件的制备和评价

[0284] 使用下述式所表示的比较化合物2代替化合物1,在和实施例1相同的条件下制备甲苯溶液(浓度 1×10^{-5} mol/L)。

[0285] [化37]

[0286]



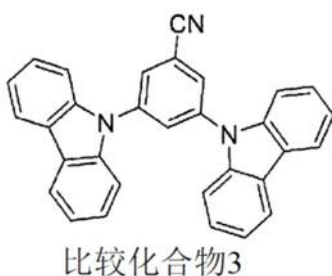
[0287] 关于比较化合物2的甲苯溶液,将通入氩气后使用280nm激发光测得的过渡衰减曲线示于图13。光致发光量子效率在通入氩气前的甲苯溶液中为14.4%,在通入氩气后的甲苯溶液中为18.9%。从图13中没有确认到延迟荧光成分,只观测到衰减快的荧光成分(发光寿命:3.75ns)。

[0288] (比较例3) 使用比较化合物1的有机光致发光元件的制备和评价

[0289] 使用下述式所表示的比较化合物3代替化合物1,在和实施例1相同的条件下制备甲苯溶液(浓度 1×10^{-5} mol/L)。

[0290] [化38]

[0291]



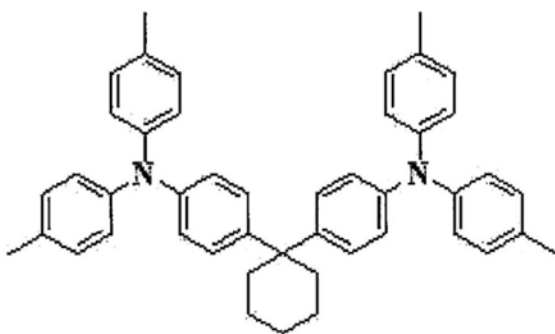
[0292] 关于比较化合物3的甲苯溶液,将通入氩气后使用280nm激发光测得的过渡衰减曲线示于图14。光致发光量子效率在通入氩气前的甲苯溶液中为8.60%,在通入氩气后的甲苯溶液中为10.7%。从图14中没有确认到延迟荧光成分,只观测到衰减快的荧光成分(发光寿命:3.94ns)。

[0293] (实施例6) 使用化合物1的有机电致发光元件的制备和评价

[0294] 在形成了膜厚100nm的包含铟-锡氧化物(ITO)的阳极的玻璃衬底上,利用真空蒸镀法以真空度 5×10^{-4} Pa积层各薄膜。首先,在ITO上形成厚度10nm的HAT-CN(Hexaazatriphenylene carbonitrile,六氮杂苯并菲腈),在其上形成厚度30nm的TAPC(1,1-Bis-(4-bis(4-methyl-phenyl)-amino-phenyl)-cyclohexane,1,1-双(4-双(4-甲基苯基)氨基苯基)环己烷),在其上形成厚度10nm的mCP(1,3-bis(carbazol-9-yl) benzene,1,3-双(咔唑-9-基)苯)。接着,将化合物1和PPT(Pyridinium p-toluenesulfonate,吡啶对甲苯磺酸盐)从不同的蒸镀源进行共蒸镀,形成厚度30nm的层而制成发光层。此时,将化合物1的浓度设为15重量%。接着,将PPT形成为40nm的厚度,进而真空蒸镀氟化锂(LiF)0.8nm,然后将铝(Al)蒸镀至100nm的厚度,由此形成了阴极,制成有机电致发光元件。

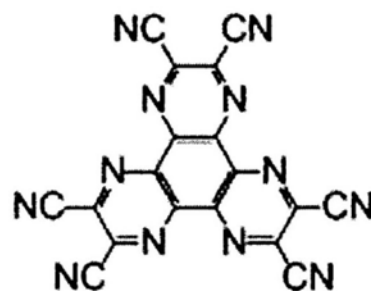
[0295] 将所制造的有机电致发光元件的发光光谱示于图15。为CIE(0.16,0.19)。另外,将亮度-外部量子效率特性示于图16。确认出达到外部量子效率20%。

[0296] [化39]

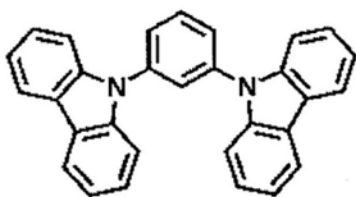


[0297]

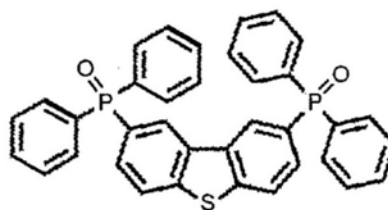
TAPC



HAT-CN



mCP



PPT

[0298] [工业上的可利用性]

[0299] 本发明的化合物作为发光材料有用。因此，本发明的化合物可以有效地用作有机电致发光元件等有机发光元件用发光材料。本发明的化合物的中也包含放射延迟荧光的化合物，所以也能够提供发光效率高的有机发光元件。因此，本发明的工业上的可利用性高。

[0300] [符号说明]

[0301]	1	衬底
[0302]	2	阳极
[0303]	3	空穴注入层
[0304]	4	空穴传输层
[0305]	5	发光层
[0306]	6	电子传输层
[0307]	7	阴极

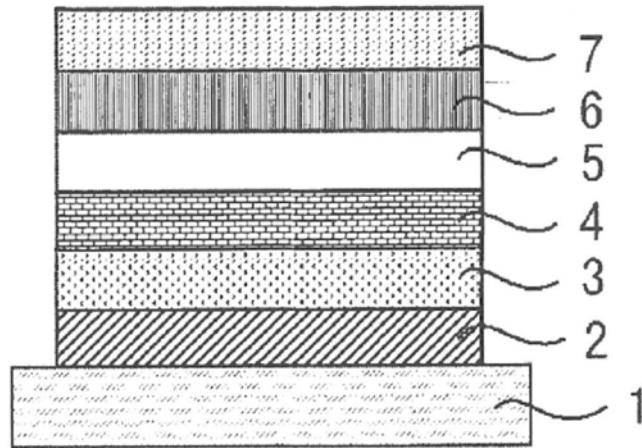


图1

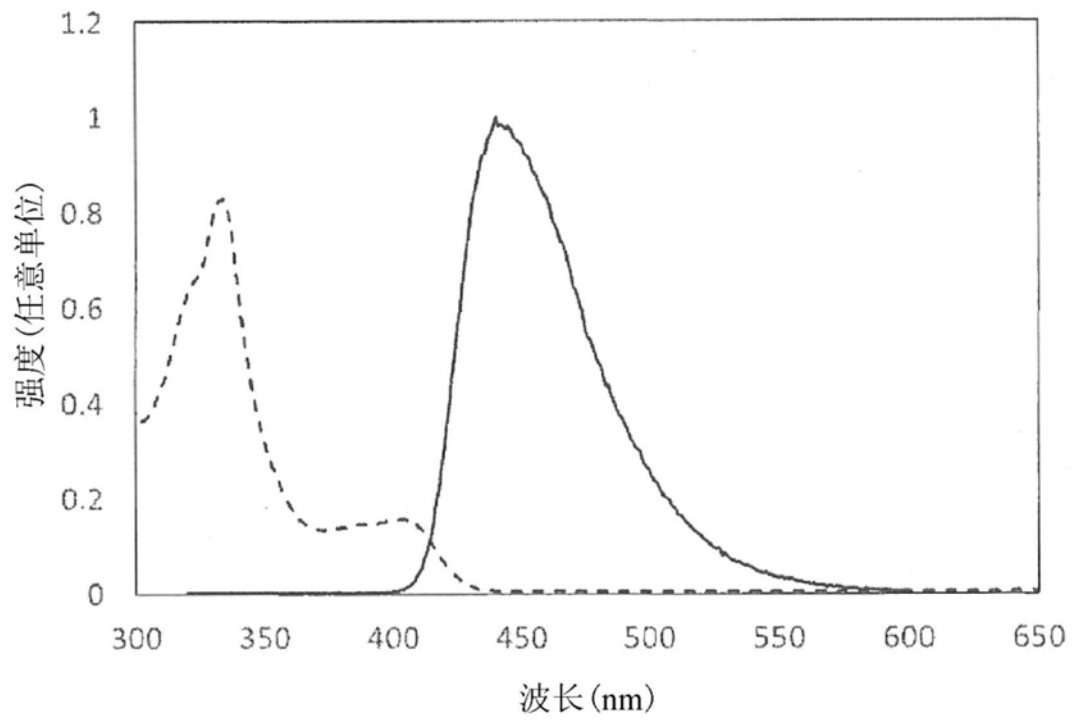


图2

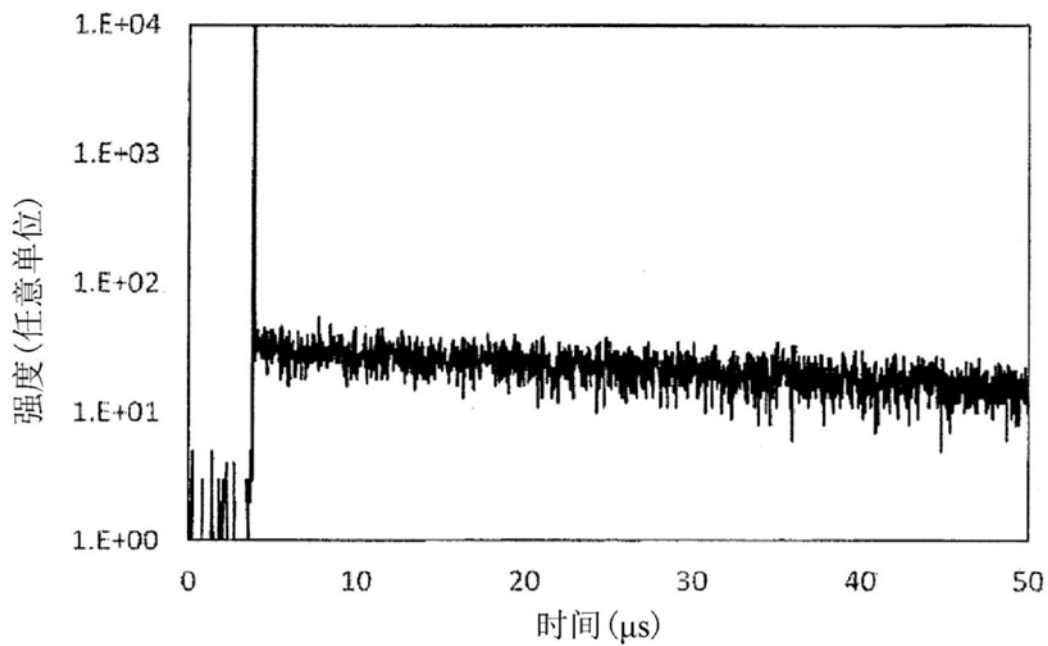


图3

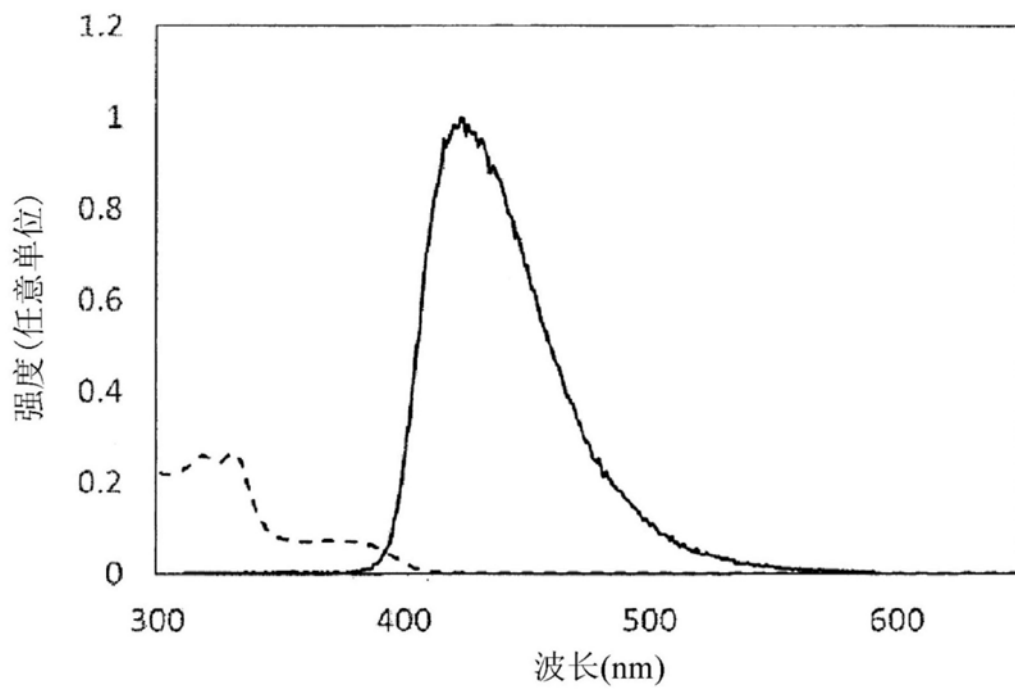


图4

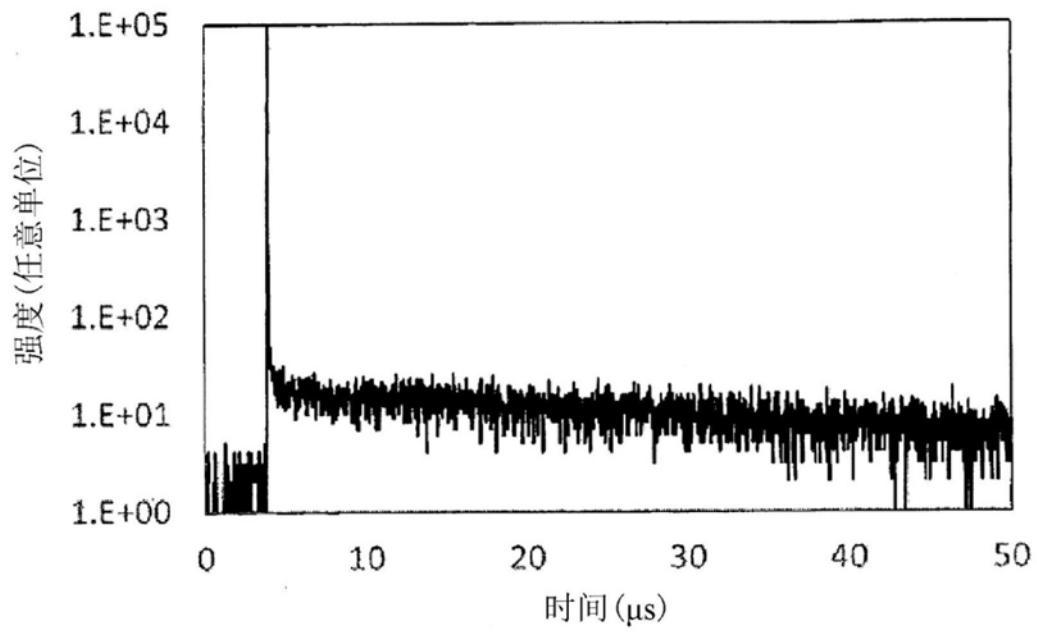


图5

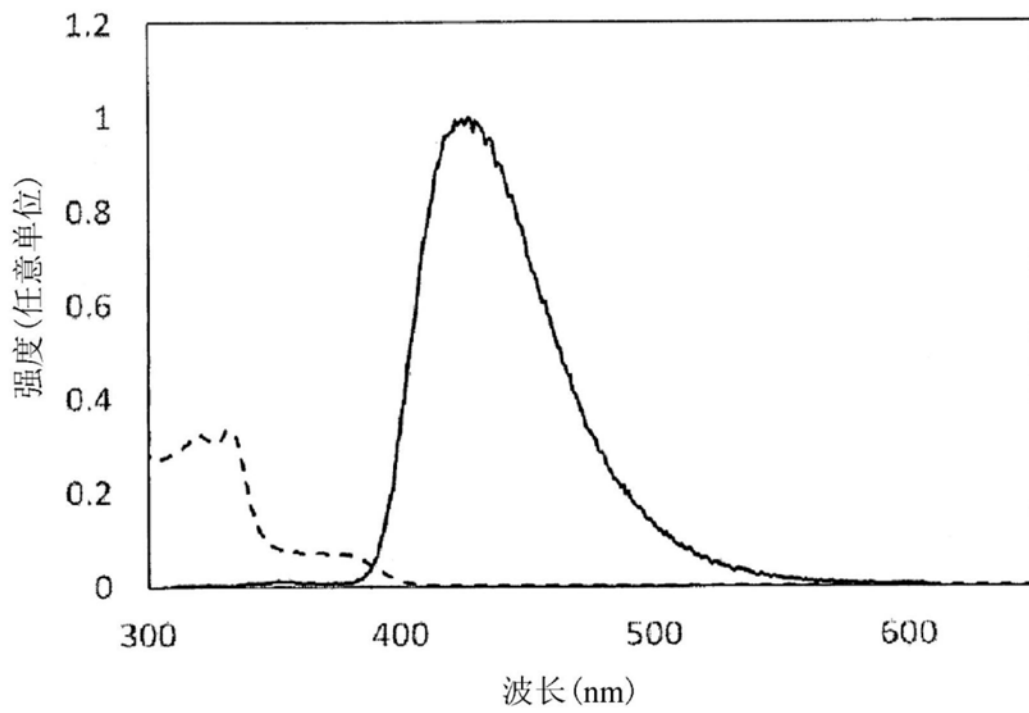


图6

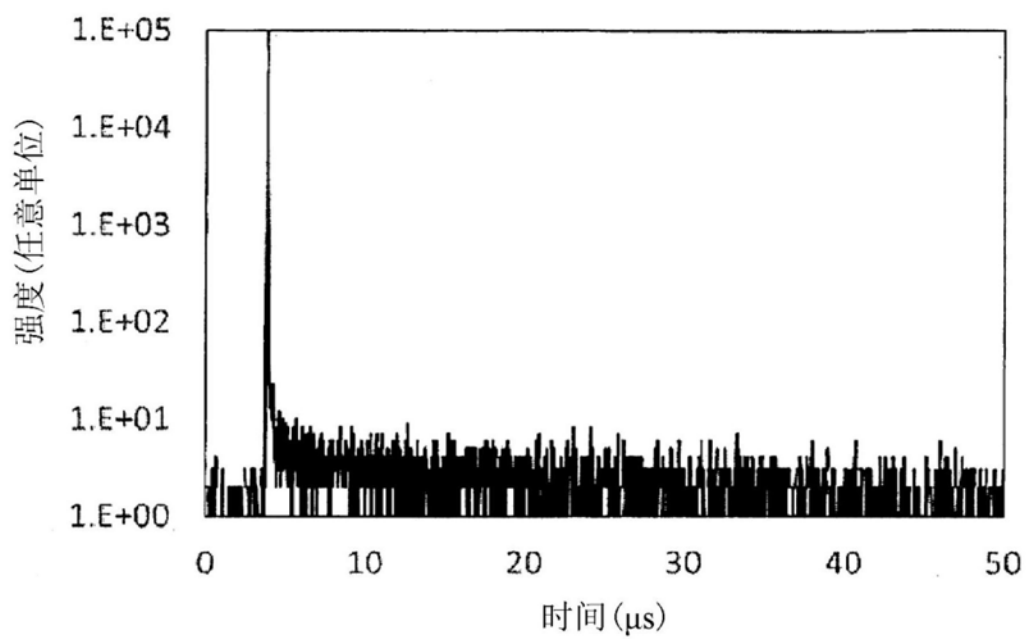


图7

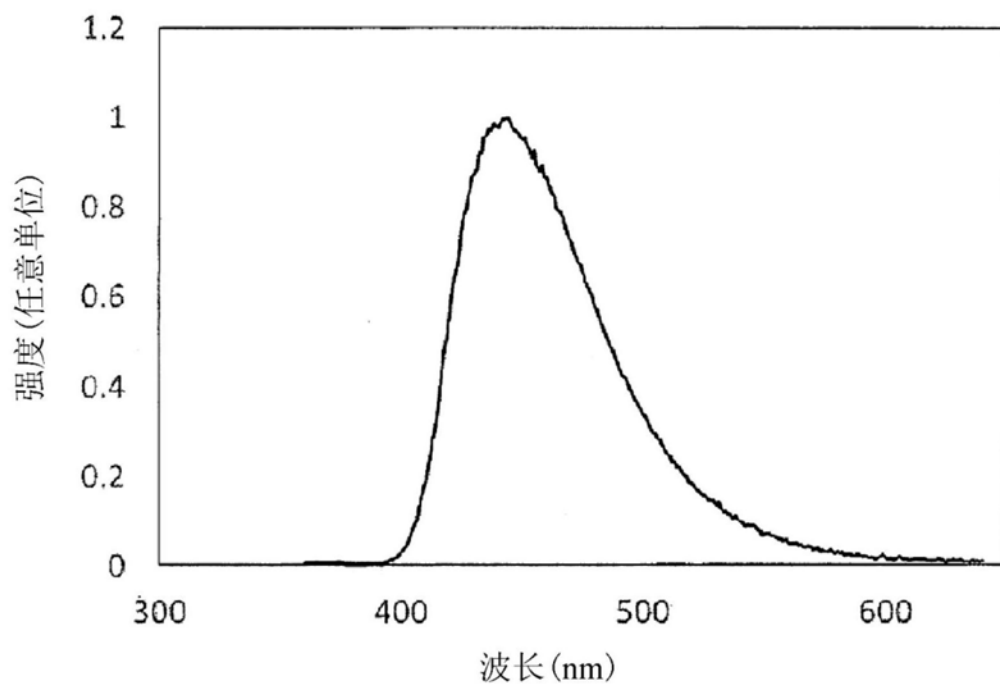


图8

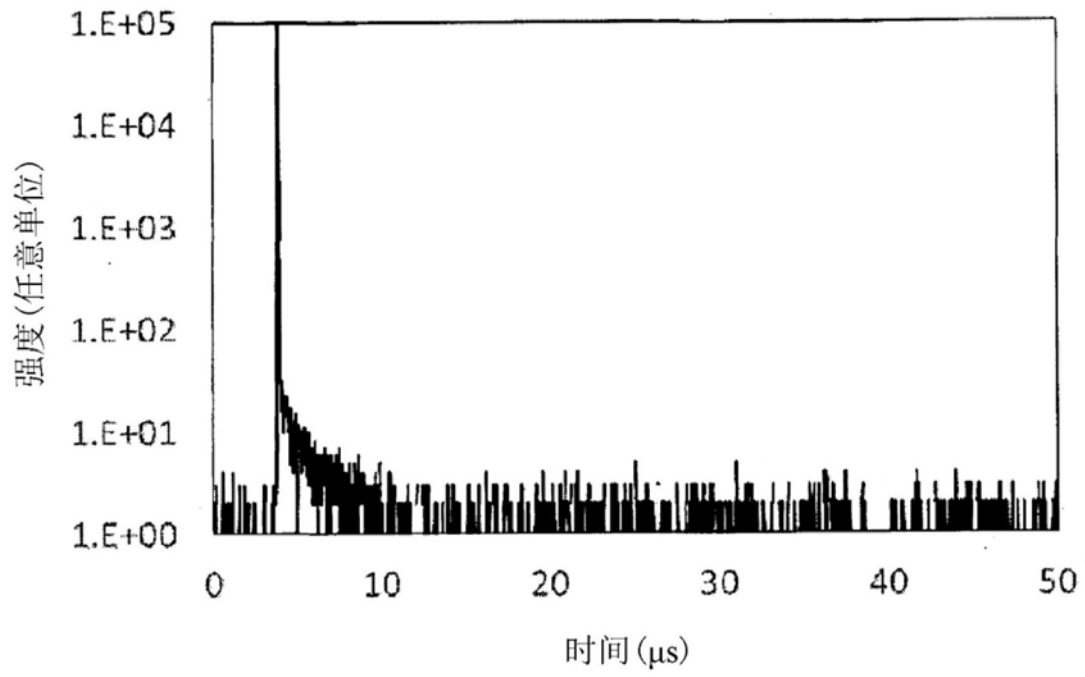


图9

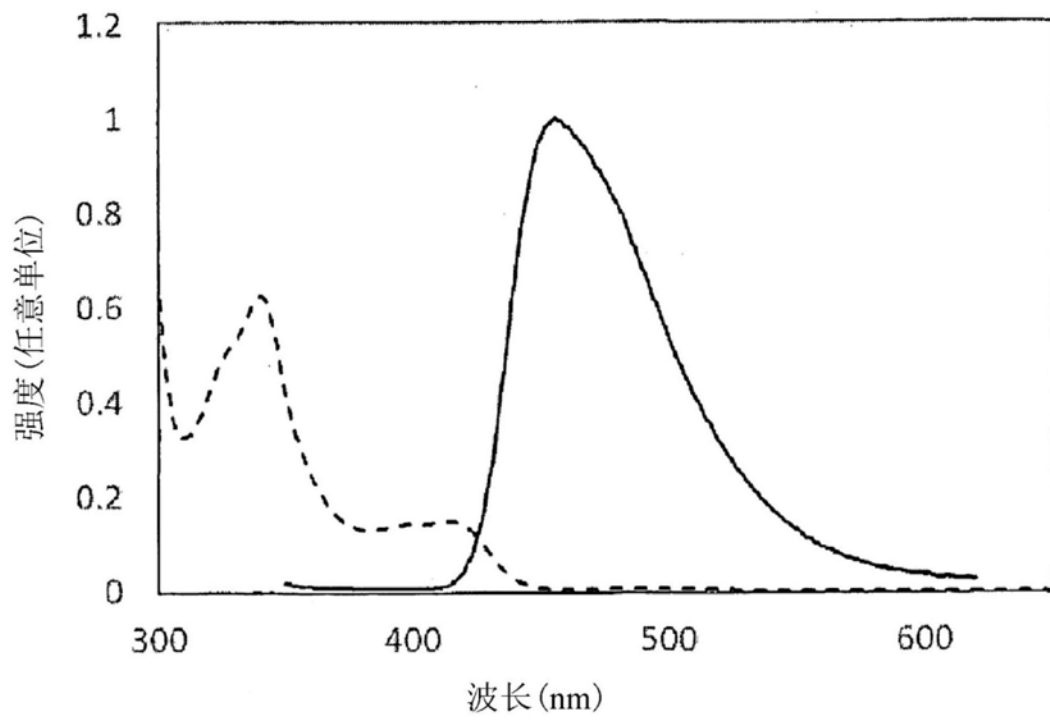


图10

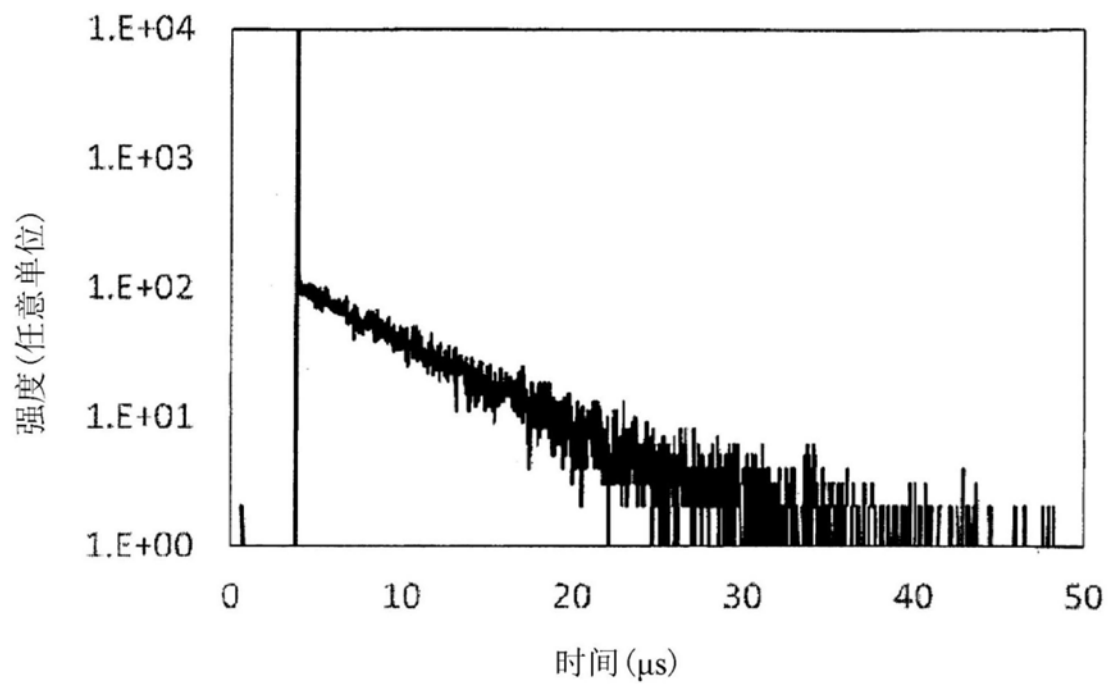


图11

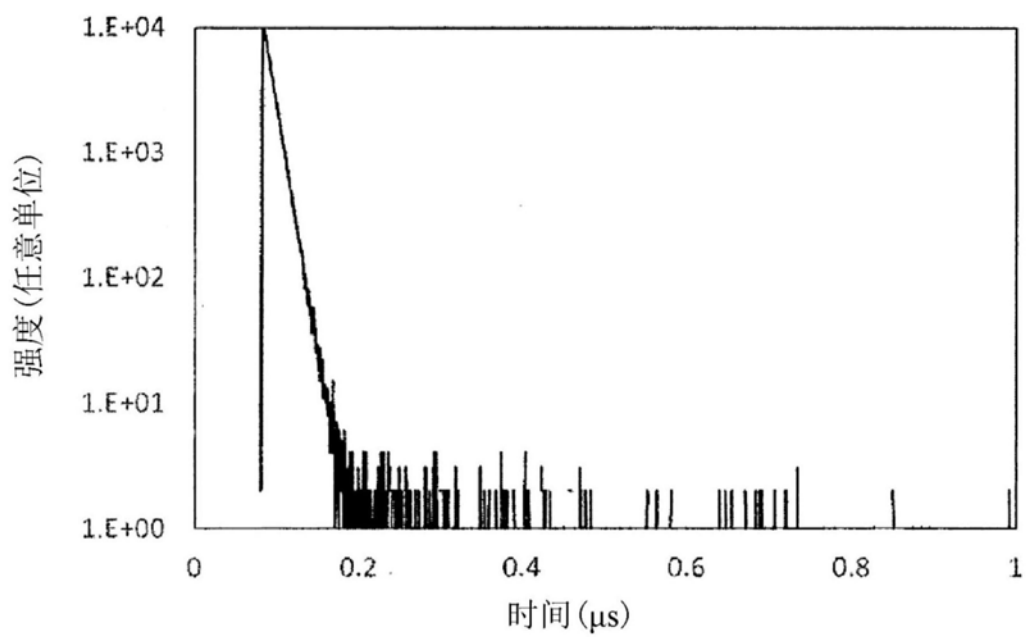


图12

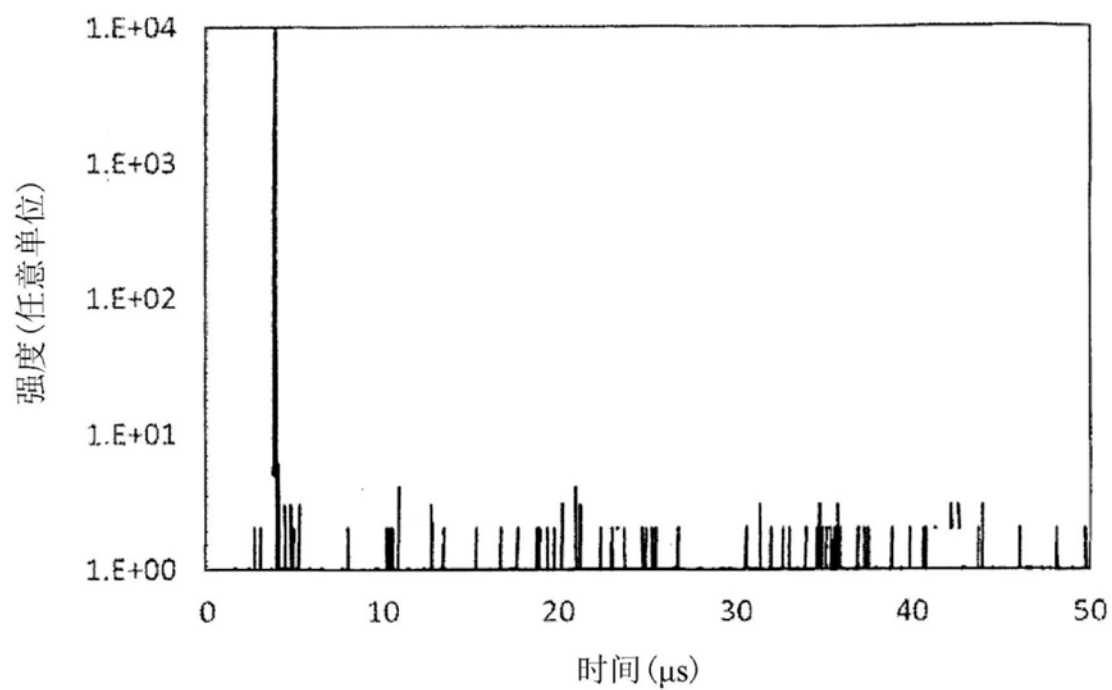


图13

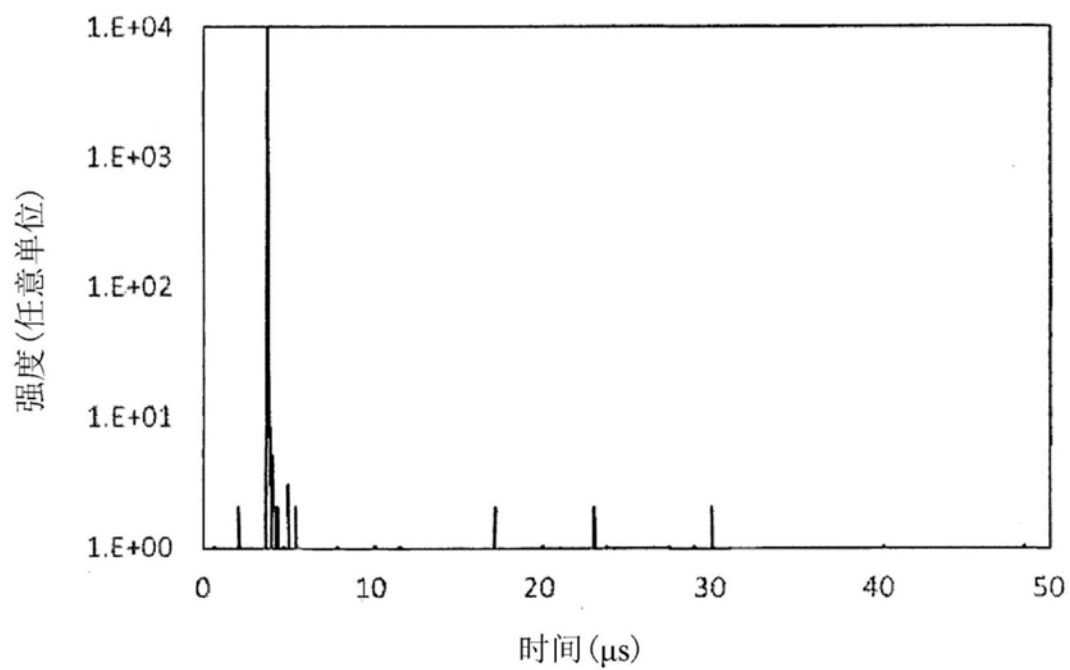


图14

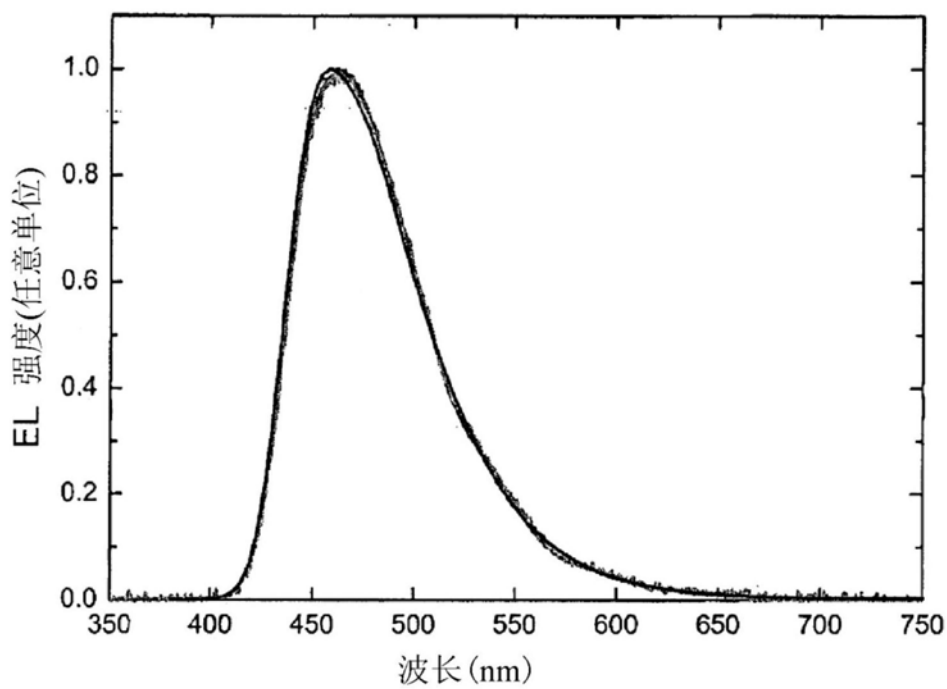


图15

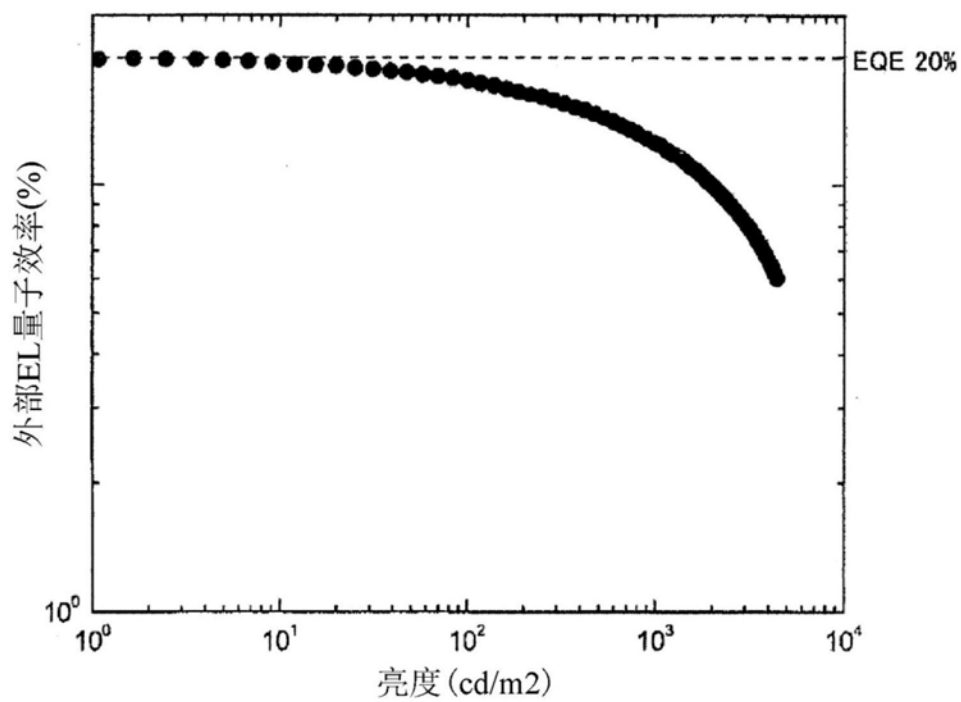


图16