



(12) 发明专利申请

(10) 申请公布号 CN 119118848 A

(43) 申请公布日 2024.12.13

(21) 申请号 202411242596.6

C07D 333/76 (2006.01)

(22) 申请日 2022.03.30

C07D 307/91 (2006.01)

(30) 优先权数据

C07C 211/54 (2006.01)

2021-062123 2021.03.31 JP

H10K 85/60 (2023.01)

H10K 50/15 (2023.01)

(62) 分案原申请数据

202280007471.8 2022.03.30

(71) 申请人 出光兴产株式会社

地址 日本

(72) 发明人 羽毛田匡 田中将太 高桥佑典

深见拓人 泽藤司

(74) 专利代理机构 中科专利商标代理有限责任

公司 11021

专利代理师 王铭浩

(51) Int. Cl.

C07C 211/61 (2006.01)

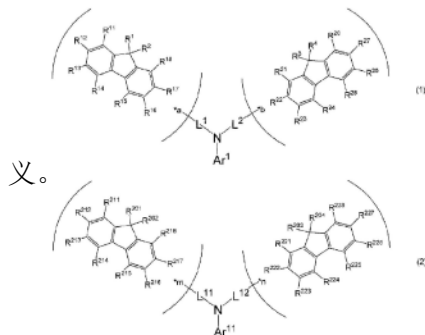
权利要求书5页 说明书159页 附图2页

(54) 发明名称

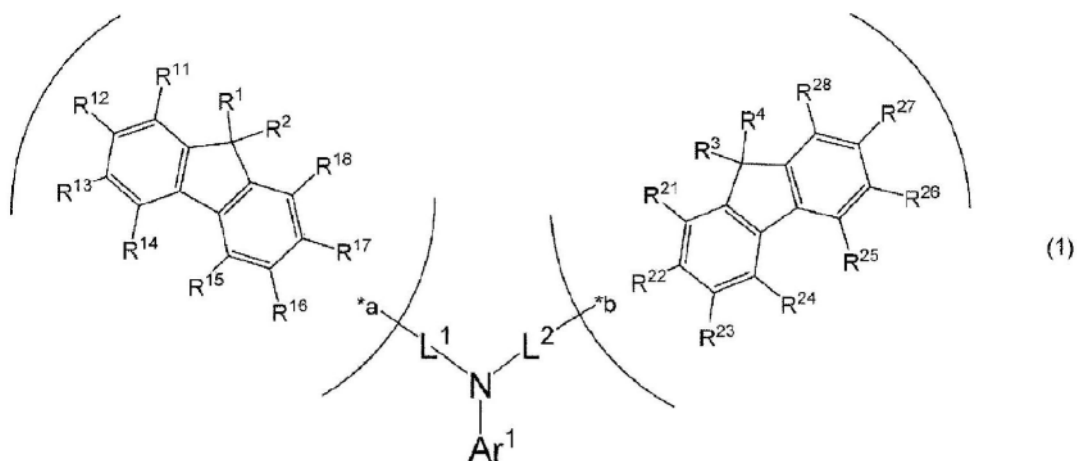
化合物、有机电致发光元件用材料、有机电致发光元件和电子设备

(57) 摘要

本申请涉及化合物、有机电致发光元件用材料、有机电致发光元件和电子设备。本申请提供下述式(1)或者(2)所示的化合物、包含该化合物的有机电致发光元件、以及包含该有机电致发光元件的电子设备。式中的符号如说明书中所定



1. 下述式 (1) 所示的化合物,



式 (1) 中,

R^1 和 R^2 中的一者为甲基、另一者为未取代的苯基,

R^1 与 R^2 相互不键合因而不形成环结构,

R^3 和 R^4 中的一者为甲基、另一者为未取代的苯基,

R^3 与 R^4 相互不键合因而不形成环结构,

$R^{11} \sim R^{18}$ 和 $R^{21} \sim R^{28}$ 为氢原子,

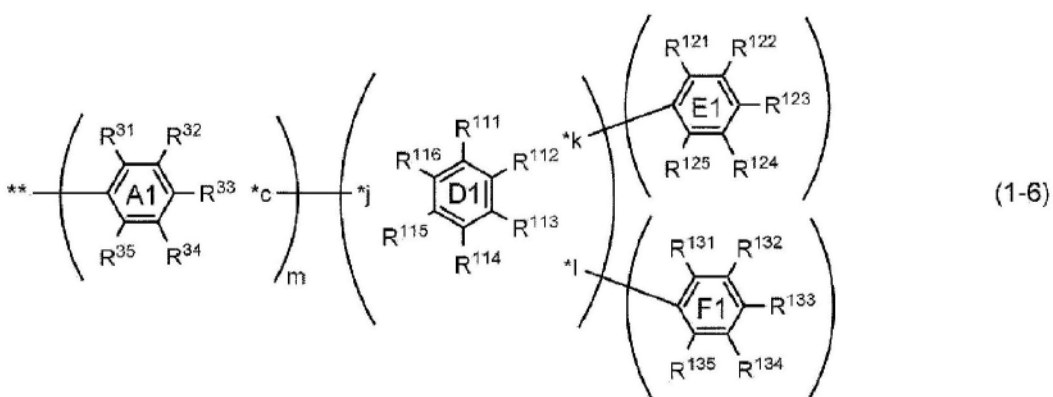
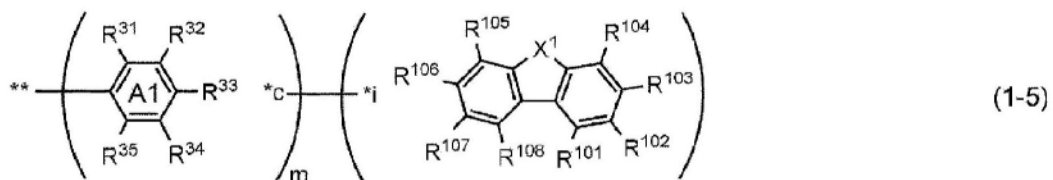
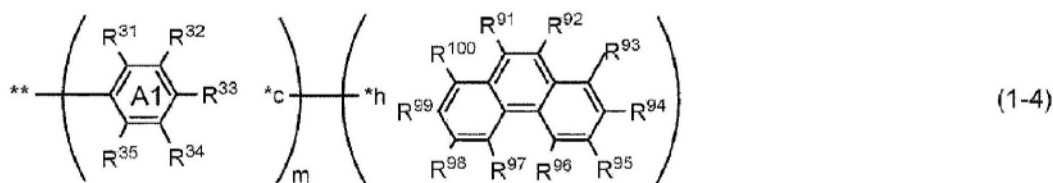
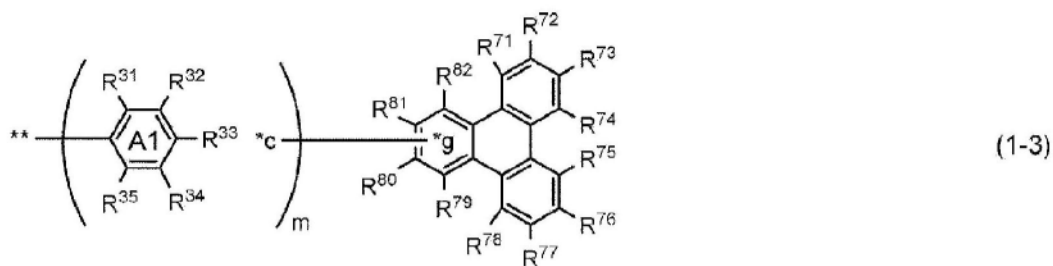
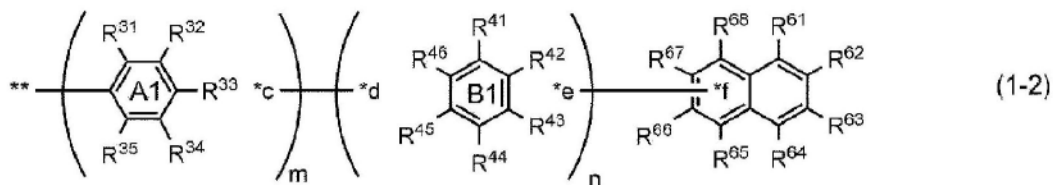
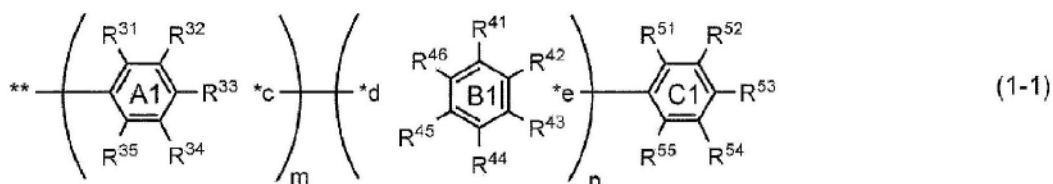
其中,

选自 R^{12} 和 R^{17} 中的 1 个为与 *a 键合的单键,

选自 R^{22} 和 R^{27} 中的 1 个为与 *b 键合的单键,

L^1 和 L^2 各自独立地为单键、或者取代或未取代的亚苯基,

Ar^1 为式 (1-1) ~ (1-6) 中任一式所示的基团,



式 (1-1) ~ (1-6) 中,

$\text{R}^{31} \sim \text{R}^{35}$ 、 $\text{R}^{41} \sim \text{R}^{46}$ 、 $\text{R}^{51} \sim \text{R}^{55}$ 、 $\text{R}^{61} \sim \text{R}^{68}$ 、 $\text{R}^{71} \sim \text{R}^{82}$ 、 $\text{R}^{91} \sim \text{R}^{100}$ 、 $\text{R}^{101} \sim \text{R}^{108}$ 、 $\text{R}^{111} \sim \text{R}^{116}$ 、 $\text{R}^{121} \sim \text{R}^{125}$ 和 $\text{R}^{131} \sim \text{R}^{135}$ 各自独立地为氢原子、取代或未取代的碳数1~20的烷基、取代或未取代的成环碳数3~20的环烷基、卤素原子、氰基、硝基、取代或未取代的成环碳数6~30的芳基、或者取代或未取代的成环原子数5~30的杂环基,

X^1 为氧原子、硫原子、或者 CR^aR^b ,

R^a 和 R^b 各自独立地为氢原子、甲基、或者取代或未取代的苯基, R^a 与 R^b 任选相互键合而形成取代或未取代的环,

其中,

选自 $R^{31} \sim R^{35}$ 中的1个为与* c键合的单键,

选自 $R^{41} \sim R^{46}$ 中的1个为与* d键合的单键,选自 $R^{41} \sim R^{46}$ 中的另1个为与* e键合的单键,

选自 $R^{65} \sim R^{68}$ 中的1个为与* f键合的单键,

选自 $R^{79} \sim R^{82}$ 中的1个为与* g键合的单键,

选自 R^{91} 和 $R^{97} \sim R^{100}$ 中的1个为与* h键合的单键,

选自 $R^{105} \sim R^{108}$ 中的1个为与* i键合的单键,

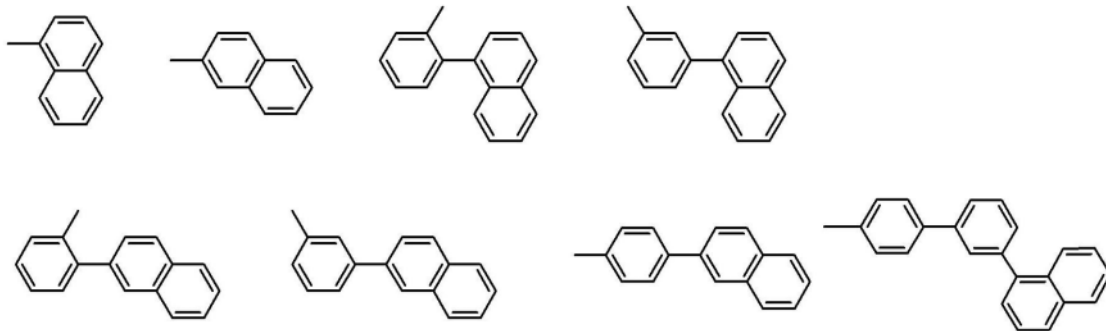
选自 $R^{111} \sim R^{116}$ 中的1个为与* j键合的单键,选自 $R^{111} \sim R^{116}$ 中的另1个为与* k键合的单键,选自 $R^{111} \sim R^{116}$ 中的此外的另1个为与* l键合的单键,

选自并非所述单键的 $R^{31} \sim R^{35}$ 中的相邻的2个、选自并非所述任何一个单键的 $R^{41} \sim R^{46}$ 中的相邻的2个、选自 $R^{51} \sim R^{55}$ 中的相邻的2个、选自并非所述单键的 $R^{61} \sim R^{68}$ 中的相邻的2个、选自并非所述单键的 $R^{71} \sim R^{82}$ 中的相邻的2个、选自并非所述单键的 $R^{91} \sim R^{100}$ 中的相邻的2个、选自并非所述单键的 $R^{101} \sim R^{108}$ 中的相邻的2个、选自并非所述任何一个单键的 $R^{111} \sim R^{116}$ 中的相邻的2个、选自 $R^{121} \sim R^{125}$ 中的相邻的2个、选自 $R^{131} \sim R^{135}$ 中的相邻的2个相互不键合因而不形成环结构,

苯环A1与苯环B1、苯环A1与苯环C1、苯环A1与苯环D1、苯环A1与苯环E1、苯环A1与苯环F1、苯环B1与苯环C1、苯环D1与苯环E1、以及苯环D1与苯环F1不交联,

* * 表示与中心氮原子N的键合位置,

所述式(1-2)所示的基团为选自下述式的取代或未取代的基团,



式(1-1)中,m为0且n为1、或者m为1且n为1,

式(1-3)~(1-6)中,m为0或1,n为0或1,

式(1-1)中,* c与中心氮原子N键合,

式(1-3)~(1-6)中,在m为0时,* c与中心氮原子N键合,

式(1-1)排除对联苯基。

2.如权利要求1所述的化合物,其中,

L^1 和 L^2 为单键。

3.如权利要求1或2所述的化合物,其中,

Ar^1 为式(1-1)、(1-2)、(1-5)和(1-6)中任一式所示的基团。

4.如权利要求1~3中任一项所述的化合物,其中,

$R^{31} \sim R^{35}$ 、 $R^{41} \sim R^{46}$ 、 $R^{51} \sim R^{55}$ 、 $R^{61} \sim R^{68}$ 、 $R^{71} \sim R^{82}$ 、 $R^{91} \sim R^{100}$ 、 $R^{101} \sim R^{108}$ 、 $R^{111} \sim R^{116}$ 、 $R^{121} \sim R^{125}$ 和 $R^{131} \sim R^{135}$ 各自独立地为氢原子、取代或未取代的碳数1~20的烷基、取代或未取代的成环碳数6~30的芳基、或者取代或未取代的成环原子数5~30的杂环基。

5. 如权利要求1~4中任一项所述的化合物,其中,并非与*c键合的单键的 $R^{31} \sim R^{35}$ 均为氢原子。
6. 如权利要求1~5中任一项所述的化合物,其中,并非与*d键合的单键且并非与*e键合的单键的 $R^{41} \sim R^{46}$ 均为氢原子。
7. 如权利要求1~6中任一项所述的化合物,其中, $R^{51} \sim R^{55}$ 均为氢原子。
8. 如权利要求1~7中任一项所述的化合物,其中, $R^{61} \sim R^{64}$ 和并非与*f键合的单键的 $R^{65} \sim R^{68}$ 均为氢原子。
9. 如权利要求1~8中任一项所述的化合物,其中, $R^{71} \sim R^{78}$ 和并非与*g键合的单键的 $R^{79} \sim R^{82}$ 均为氢原子。
10. 如权利要求1~9中任一项所述的化合物,其中, $R^{92} \sim R^{96}$ 、以及并非与*h键合的单键的 R^{91} 和 $R^{97} \sim R^{100}$ 均为氢原子。
11. 如权利要求1~10中任一项所述的化合物,其中, $R^{101} \sim R^{104}$ 和并非与*i键合的单键的 $R^{105} \sim R^{108}$ 均为氢原子。
12. 如权利要求1~11中任一项所述的化合物,其中,并非与*j键合的单键且并非与*k键合的单键且并非与*l键合的单键的 $R^{111} \sim R^{116}$ 、 $R^{121} \sim R^{125}$ 和 $R^{131} \sim R^{135}$ 均为氢原子。
13. 如权利要求1~12中任一项所述的化合物,其中,所述式(1)所示的化合物包含至少1个氘原子。
14. 一种有机电致发光元件用材料,其含有权利要求1~13中任一项所述的化合物。
15. 一种有机电致发光元件,所述有机电致发光元件具有阴极、阳极和位于该阴极与该阳极之间的有机层,该有机层包含发光层,该有机层的至少1层包含权利要求1~13中任一项所述的化合物。
16. 如权利要求15所述的有机电致发光元件,其中,所述有机层包含位于所述阳极与所述发光层之间的空穴传输区域,该空穴传输区域包含所述化合物。
17. 如权利要求16所述的有机电致发光元件,其中,所述空穴传输区域包含阳极侧的第1空穴传输层和阴极侧的第2空穴传输层,该第1空穴传输层包含所述化合物,或者该第2空穴传输层包含所述化合物,或者该第1空穴传输层和该第2空穴传输层均包含所述化合物。
18. 如权利要求17所述的有机电致发光元件,其中,所述第1空穴传输层包含所述化合物。
19. 如权利要求17或18所述的有机电致发光元件,其中,所述第2空穴传输层与所述发光层相邻。
20. 如权利要求16所述的有机电致发光元件,其中,所述空穴传输区域从阳极侧起依次包含第1空穴传输层、第2空穴传输层和第3空穴传

输层,

仅选自第1~第3空穴传输层中的1层包含所述化合物,或者仅选自第1~第3空穴传输层中的2层包含所述化合物,或者第1~第3空穴传输层的所有层包含所述化合物。

21.如权利要求20所述的有机电致发光元件,其中,
所述发光层与所述第3空穴传输层直接相接。

22.如权利要求15~21中任一项所述的有机电致发光元件,其中,
所述发光层包含荧光掺杂剂材料。

23.如权利要求15~21中任一项所述的有机电致发光元件,其中,
所述发光层包含磷光掺杂剂材料。

24.一种电子设备,其包含权利要求15~23中任一项所述的有机电致发光元件。

化合物、有机电致发光元件用材料、有机电致发光元件和电子设备

[0001] 本申请是申请日为2022年3月30日、申请号为202280007471.8、发明名称为“化合物、有机电致发光元件用材料、有机电致发光元件和电子设备”的申请的分案申请。

技术领域

[0002] 本发明涉及化合物、有机电致发光元件用材料、有机电致发光元件和包含该有机电致发光元件的电子设备。

背景技术

[0003] 一般而言,有机电致发光元件(以下有时也记为“有机EL元件”)由阳极、阴极、以及夹在阳极与阴极之间的有机层构成。若在两电极间施加电压,则将电子从阴极侧注入发光区域、将空穴从阳极侧注入发光区域,所注入的电子与空穴在发光区域中发生复合而生成激发态,激发态恢复到基态时放出光。因此,开发高效地将电子或空穴传输至发光区域并使电子与空穴容易复合的材料在得到高性能有机EL元件方面是重要的。

[0004] 专利文献1~4中公开了用作有机电致发光元件用材料的化合物。

[0005] 现有技术文献

[0006] 专利文献

[0007] 专利文献1:美国专利第10840455号说明书

[0008] 专利文献2:美国专利申请公开第2019/0148650号说明书

[0009] 专利文献3:国际公开第2019/139419号

[0010] 专利文献4:国际公开第2014/034795号

发明内容

[0011] 发明要解决的问题

[0012] 以往,已经报道了大量有机EL元件用的化合物,但是依然寻求进一步使有机EL元件的性能提高的化合物。

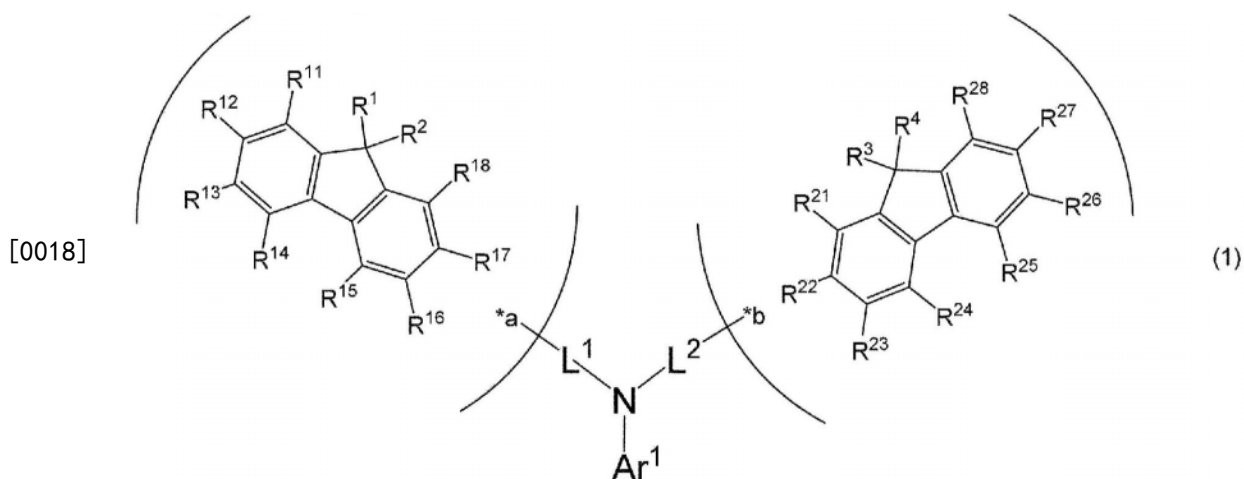
[0013] 本发明是为了解决上述问题而做出的,目的在于提供进一步改善有机EL元件的性能的化合物、进一步改善了元件性能的有机EL元件、包含这样的有机EL元件的电子设备。

[0014] 用于解决问题的手段

[0015] 本发明人对于包含专利文献1~4所述的化合物的有机EL元件的性能反复进行了深入研究,结果发现,包含下述式(1)所示的化合物的有机EL元件、以及包含下述式(2)所示的化合物的有机EL元件其性能得到进一步改善。

[0016] 在一个方案中,本发明提供下述式(1)所示的化合物。

[0017] [化学式1]



[0019] 式(1)中,

[0020] R^1 和 R^2 中的一者为甲基,另一者为未取代的苯基,

[0021] R^1 与 R^2 不相互键合因而不形成环结构。

[0022] R^3 和 R^4 中的一者为甲基,另一者为未取代的苯基,

[0023] R^3 与 R^4 不相互键合因而不形成环结构。

[0024] $R^{11} \sim R^{18}$ 和 $R^{21} \sim R^{28}$ 为氢原子。

[0025] 其中,

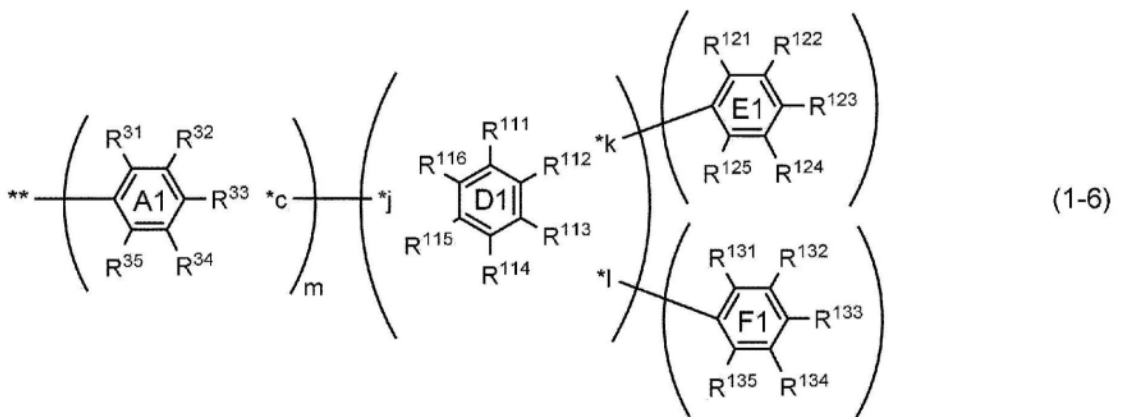
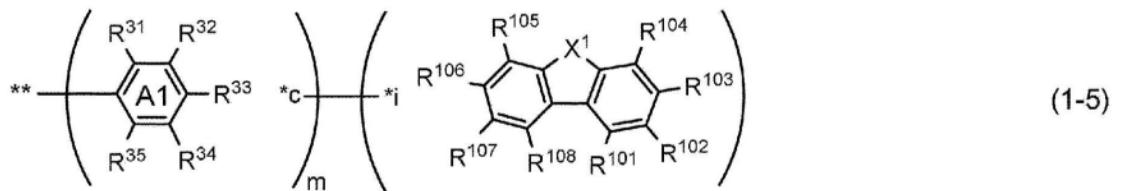
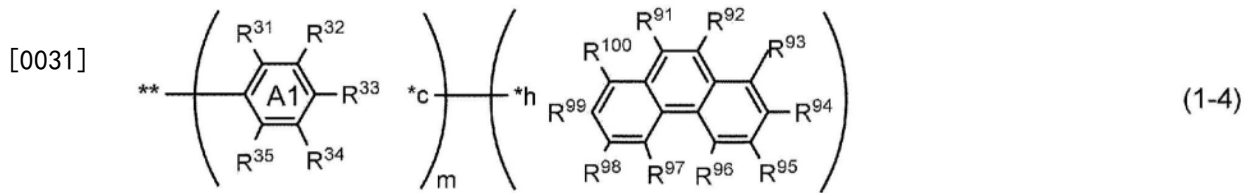
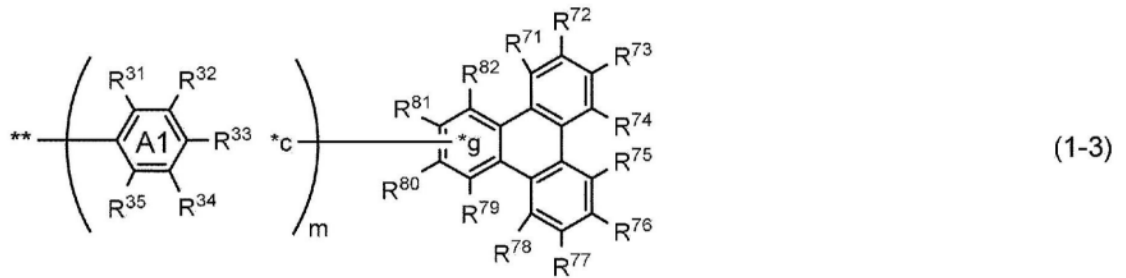
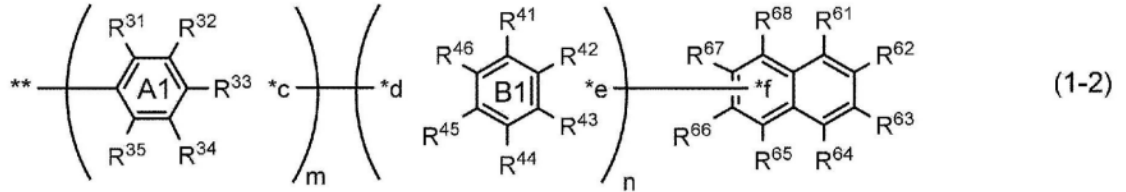
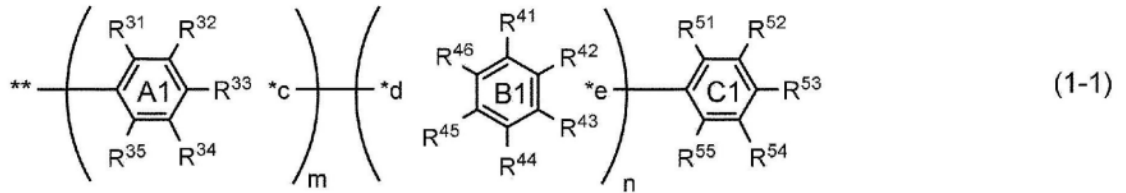
[0026] 选自 $R^{11} \sim R^{18}$ 中的1个为与*a键合的单键,

[0027] 选自 $R^{21} \sim R^{28}$ 中的1个为与*b键合的单键。

[0028] L^1 和 L^2 各自独立地为单键、或者取代或未取代的亚苯基。

[0029] Ar^1 为式(1-1)~(1-6)中的任一式所示的基团。

[0030] [化学式2]



[0032] 式(1-1) ~ (1-6)中,

[0033] $\text{R}^{31} \sim \text{R}^{35}$ 、 $\text{R}^{41} \sim \text{R}^{46}$ 、 $\text{R}^{51} \sim \text{R}^{55}$ 、 $\text{R}^{61} \sim \text{R}^{68}$ 、 $\text{R}^{71} \sim \text{R}^{82}$ 、 $\text{R}^{91} \sim \text{R}^{100}$ 、 $\text{R}^{101} \sim \text{R}^{108}$ 、 $\text{R}^{111} \sim \text{R}^{116}$ 、 $\text{R}^{121} \sim \text{R}^{125}$ 和 $\text{R}^{131} \sim \text{R}^{135}$ 各自独立地为氢原子、取代或未取代的碳数1~50的烷基、取代或未取代

的成环碳数3~50的环烷基、卤素原子、氰基、硝基、取代或未取代的成环碳数6~50的芳基、或者取代或未取代的成环原子数5~50的杂环基。

[0034] X^1 为氧原子、硫原子、或者CRaRb,

[0035] R^a 和 R^b 各自独立地为氢原子、甲基、或者取代或未取代的苯基, R^a 与 R^b 可以相互键合而形成取代或未取代的环。

[0036] 其中,

[0037] 选自 $R^{31} \sim R^{35}$ 中的1个为与* c键合的单键,

[0038] 选自 $R^{41} \sim R^{46}$ 中的1个为与* d键合的单键,选自 $R^{41} \sim R^{46}$ 中的另1个为与* e键合的单键,

[0039] 选自 $R^{65} \sim R^{68}$ 中的1个为与* f键合的单键,

[0040] 选自 $R^{79} \sim R^{82}$ 中的1个为与* g键合的单键,

[0041] 选自 R^{91} 和 $R^{97} \sim R^{100}$ 中的1个为与* h键合的单键,

[0042] 选自 $R^{105} \sim R^{108}$ 中的1个为与* i键合的单键,

[0043] 选自 $R^{111} \sim R^{116}$ 中的1个为与* i键合的单键,选自 $R^{111} \sim R^{116}$ 中的另1个为与* k键合的单键,选自 $R^{111} \sim R^{116}$ 中的此外的另1个为与* l键合的单键,

[0044] 选自并非上述单键的 $R^{31} \sim R^{35}$ 中的相邻的2个、选自并非上述任一单键的 $R^{41} \sim R^{46}$ 中的相邻的2个、选自 $R^{51} \sim R^{55}$ 中的相邻的2个、选自并非上述单键的 $R^{61} \sim R^{68}$ 中的相邻的2个、选自并非上述单键的 $R^{71} \sim R^{82}$ 中的相邻的2个、选自并非上述单键的 $R^{91} \sim R^{100}$ 中的相邻的2个、选自并非上述单键的 $R^{101} \sim R^{108}$ 中的相邻的2个、选自并非上述任一单键的 $R^{111} \sim R^{116}$ 中的相邻的2个、选自 $R^{121} \sim R^{125}$ 中的相邻的2个、选自 $R^{131} \sim R^{135}$ 中的相邻的2个不相互键合因而不形成环结构,

[0045] 苯环A1与苯环B1、苯环A1与苯环C1、苯环A1与苯环D1、苯环A1与苯环E1、苯环A1与苯环F1、苯环B1与苯环C1、苯环D1与苯环E1、以及苯环D1与苯环F1不交联,

[0046] * *表示与中心氮原子N的键合位置,

[0047] m为0或1,n为0或1,

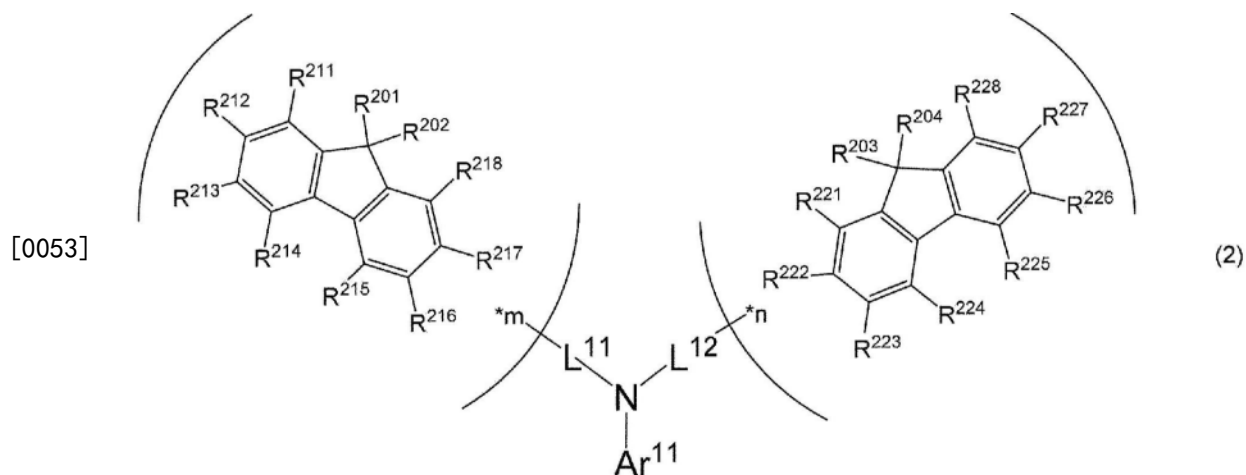
[0048] 式(1-1)和(1-2)中,在m为0且n为0时,* e与中心氮原子N键合,在m为0且n为1时,* c与中心氮原子N键合,在m为1且n为0时,* e与选自 $R^{31} \sim R^{35}$ 中的1个键合,

[0049] 式(1-3)~(1-6)中,在m为0时,* c与中心氮原子N键合,

[0050] 在 R^{12} 或 R^{17} 为与* a键合的单键、 R^{22} 或 R^{27} 为与* b键合的单键的情况下,式(1-1)排除对联苯基。

[0051] 在另一方案中,本发明提供下述式(2)所示的化合物。

[0052] [化学式3]



[0054] 式(2)中,

[0055] 选自 $R^{201} \sim R^{204}$ 中的1个为甲基,选自 $R^{201} \sim R^{204}$ 中的另3个为未取代的苯基,

[0056] R^{201} 与 R^{202} 不相互键合因而不形成环结构,

[0057] R^{203} 与 R^{204} 不相互键合因而不形成环结构。

[0058] $R^{211} \sim R^{218}$ 和 $R^{221} \sim R^{228}$ 为氢原子。

[0059] 其中,

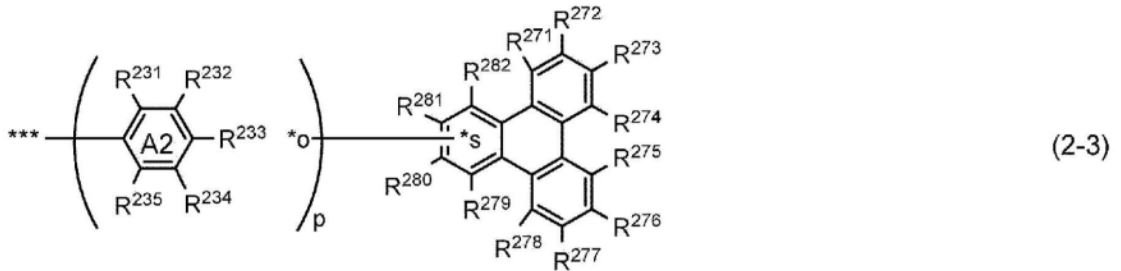
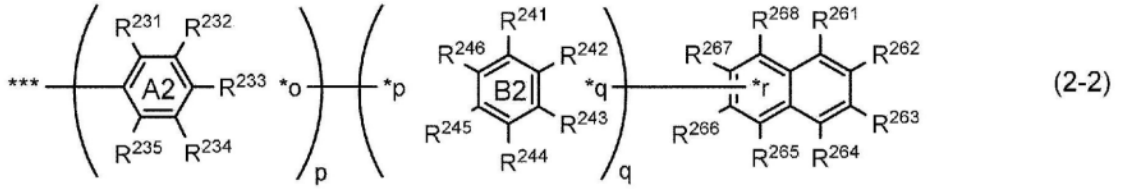
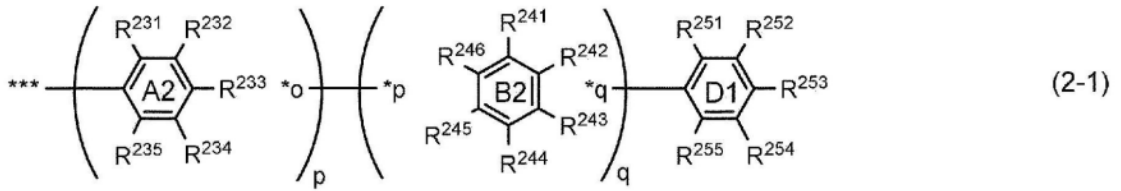
[0060] 选自 $R^{211} \sim R^{218}$ 中的1个为与 $*m$ 键合的单键,

[0061] 选自 $R^{221} \sim R^{228}$ 中的1个为与 $*n$ 键合的单键。

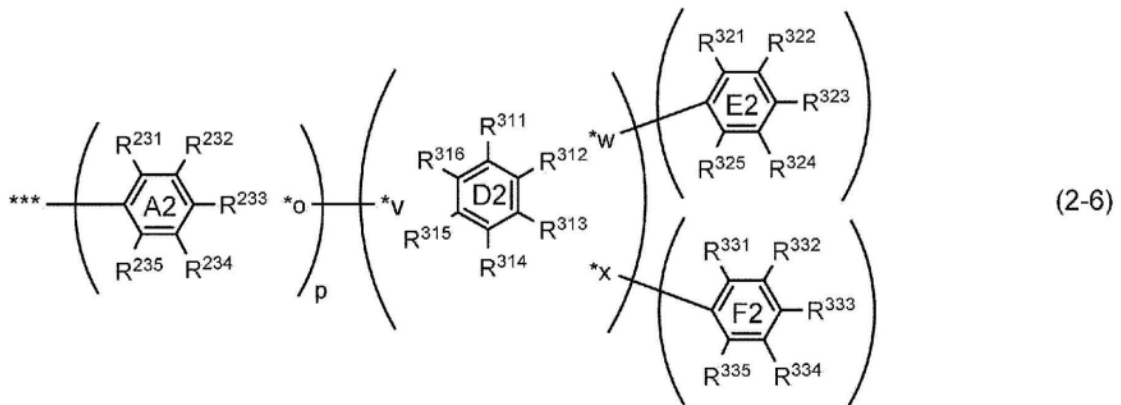
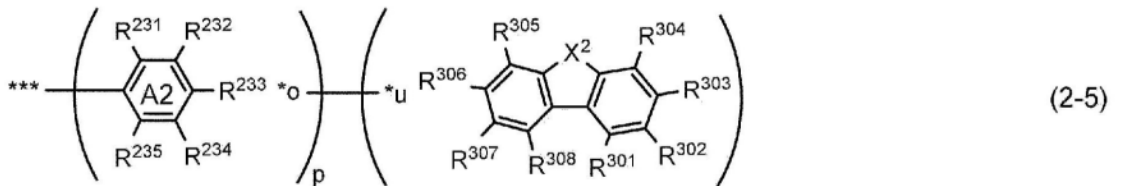
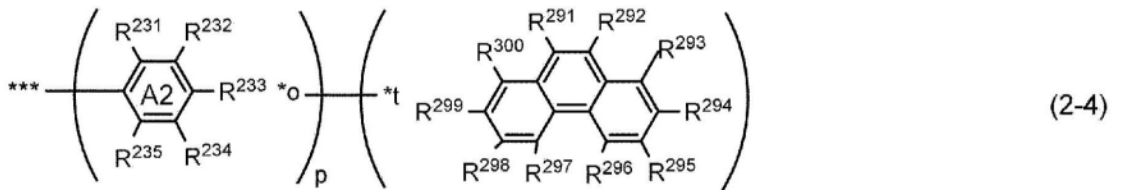
[0062] L^{11} 和 L^{12} 各自独立地为单键、或者取代或未取代的亚苯基。

[0063] Ar^{11} 为式(2-1)~(2-6)中的任一式所示的基团。

[0064] [化学式4]



[0065]



[0066] 式(2-1) ~ (2-6)中,

[0067] $R^{231} \sim R^{235}$ 、 $R^{241} \sim R^{246}$ 、 $R^{251} \sim R^{255}$ 、 $R^{261} \sim R^{268}$ 、 $R^{271} \sim R^{282}$ 、 $R^{291} \sim R^{300}$ 、 $R^{301} \sim R^{308}$ 、 $R^{311} \sim R^{316}$ 、 $R^{321} \sim R^{325}$ 和 $R^{331} \sim R^{335}$ 各自独立地为氢原子、取代或未取代的碳数1~50的烷基、取代或未取代的成环碳数3~50的环烷基、卤素原子、氰基、硝基、取代或未取代的成环碳数6~50

的芳基、或者取代或未取代的成环原子数5~50的杂环基。

[0068] X^2 为氧原子、硫原子、或者 CR^cR^d ,

[0069] R^c 和 R^d 各自独立地为氢原子、或者甲基, R^c 与 R^d 不相互键合因而不形成环结构。

[0070] 其中,

[0071] 选自 $R^{231} \sim R^{235}$ 中的1个为与*o键合的单键,

[0072] 选自 $R^{241} \sim R^{246}$ 中的1个为与*p键合的单键,选自 $R^{241} \sim R^{246}$ 中的另1个为与*q键合的单键,

[0073] 选自 $R^{265} \sim R^{268}$ 中的1个为与*r键合的单键,

[0074] 选自 $R^{279} \sim R^{282}$ 中的1个为与*s键合的单键,

[0075] 选自 R^{291} 和 $R^{297} \sim R^{300}$ 中的1个为与*t键合的单键,

[0076] 选自 $R^{305} \sim R^{308}$ 中的1个为与*u键合的单键,

[0077] 选自 $R^{311} \sim R^{316}$ 中的1个为与*v键合的单键,选自 $R^{311} \sim R^{316}$ 中的另1个为与*w键合的单键,选自 $R^{311} \sim R^{316}$ 中的此外的另1个为与*x键合的单键,

[0078] 选自并非上述单键的 $R^{231} \sim R^{235}$ 中的相邻的2个、选自并非上述任一单键的 $R^{241} \sim R^{246}$ 中的相邻的2个、选自 $R^{251} \sim R^{255}$ 中的相邻的2个、选自并非上述单键的 $R^{261} \sim R^{268}$ 中的相邻的2个、选自并非上述单键的 $R^{271} \sim R^{282}$ 中的相邻的2个、选自并非上述单键的 $R^{291} \sim R^{300}$ 中的相邻的2个、选自并非上述单键的 $R^{301} \sim R^{308}$ 中的相邻的2个、选自并非上述任一单键的 $R^{311} \sim R^{316}$ 中的相邻的2个、选自 $R^{321} \sim R^{325}$ 中的相邻的2个、选自 $R^{331} \sim R^{335}$ 中的相邻的2个不相互键合因而不形成环结构,

[0079] 苯环A2与苯环B2、苯环A2与苯环C2、苯环A2与苯环D2、苯环A2与苯环E2、苯环A2与苯环F2、苯环B2与苯环C2、苯环D2与苯环E2、以及苯环D2与苯环F2不交联,

[0080] ***表示与中心氮原子N的键合位置,

[0081] p为0或1,q为0或1,

[0082] 式(2-1)和(2-2)中,在p为0且q为0时,*q与中心氮原子N键合,在p为0且q为1时,*o与中心氮原子N键合,在p为1且q为0时,*q与选自R231~R235中的1个键合,

[0083] 式(2-3)~(2-6)中,在p为0时,*o与中心氮原子N键合,

[0084] 式(2-5)中,在 X^2 为 CR^cR^d 、p为0时,选自 L^{11} 和 L^{12} 中的至少1个为取代或未取代的亚苯基,

[0085] 式(2-5)中,在 X^2 为氧原子、p为1时,选自 $R^{306} \sim R^{308}$ 中的1个为与*u键合的单键,

[0086] 在 R^{212} 或 R^{217} 为与*m键合的单键、 R^{222} 或 R^{227} 为与*n键合的单键的情况下,式(2-1)排除对联苯基。

[0087] 在此外的另一方案中,本发明提供一种有机电致发光元件用材料,其具有选自上述式(1)所示的化合物和式(2)所示的化合物中的至少1种。

[0088] 在此外的另一方案中,本发明提供一种有机电致发光元件,其具有阴极、阳极、以及位于该阴极与该阳极之间的有机层,该有机层包含发光层,该有机层的至少1层包含选自上述式(1)所示的化合物和上述式(2)所示的化合物中的至少1种。

[0089] 在此外的另一方案中,本发明提供包含上述有机电致发光元件的电子设备。

[0090] 发明的效果

[0091] 包含上述式(1)所示的化合物的有机EL元件显示出改善了的元件性能。另外,包含

上述式(2)所示的化合物的有机EL元件显示出改善了元件性能。

附图说明

[0092] 图1是表示本发明的一个方案涉及的有机EL元件的层构成的一例的示意图。

[0093] 图2是表示本发明的一个方案涉及的有机EL元件的层构成的另一例的示意图。

[0094] 图3是表示本发明的一个方案涉及的有机EL元件的层构成的此外的另一例的示意图。

具体实施方式

[0095] [定义]

[0096] 在本说明书中,氢原子意味着包含中子数不同的同位素、即氕(protium)、氘(deuterium)和氚(tritium)。

[0097] 在本说明书中,在化学结构式中,没有明确显示“R”等符号和表示氘原子的“D”的可键合位置设为键合有氢原子、即氕原子、氘原子或氚原子。

[0098] 在本说明书中,成环碳数是指原子以环状键合的结构的化合物(例如单环化合物、稠环化合物、桥环化合物、碳环化合物和杂环化合物)的构成该环自身的原子之中的碳原子的数量。该环被取代基取代时,取代基中所含的碳不包括在成环碳数中。下文中记载的“成环碳数”只要没有另行记载就同样设定。例如,苯环的成环碳数为6,萘环的成环碳数为10,吡啶环的成环碳数为5,呋喃环的成环碳数为4。另外,例如9,9'-二苯基芴基的成环碳数为13,9,9'-螺双芴基的成环碳数为25。

[0099] 另外,在苯环上作为取代基例如取代有烷基时,该烷基的碳数不包括在苯环的成环碳数中。因此,取代有烷基的苯环的成环碳数为6。另外,在萘环上作为取代基例如取代有烷基时,该烷基的碳数不包括在萘环的成环碳数中。因此,取代有烷基的萘环的成环碳数为10。

[0100] 在本说明书中,成环原子数是指原子以环状键合的结构(例如单环、稠环和集合环)的化合物(例如单环化合物、稠环化合物、桥环化合物、碳环化合物和杂环化合物)的构成该环自身的原子的数量。不构成环的原子(例如对构成环的原子的键进行封端的氢原子)、该环被取代基取代时的取代基中所含的原子不包括在成环原子数中。下文中记载的“成环原子数”只要没有另行记载就同样设定。例如,吡啶环的成环原子数为6,喹啉环的成环原子数为10,呋喃环的成环原子数为5。例如,键合于吡啶环的氢原子或构成取代基的原子的数量不包括在吡啶成环原子数的数量中。因此,键合有氢原子或取代基的吡啶环的成环原子数为6。另外,例如喹啉环的碳原子上键合的氢原子或构成取代基的原子不包括在喹啉环的成环原子数的数量中。因此,键合有氢原子或取代基的喹啉环的成环原子数为10。

[0101] 在本说明书中,“取代或未取代的碳数XX~YY的ZZ基”这样的表述中的“碳数XX~YY”表示ZZ基为未取代时的碳数,发生了取代时的取代基的碳数不包括在内。在此,“YY”大于“XX”,“XX”是指1以上的整数,“YY”是指2以上的整数。

[0102] 在本说明书中,“取代或未取代的原子数XX~YY的ZZ基”这样的表述中的“原子数XX~YY”表示ZZ基为未取代时的原子数,发生了取代时的取代基的原子数不包括在内。在

此,“YY”大于“XX”,“XX”是指1以上的整数,“YY”是指2以上的整数。

[0103] 在本说明书中,未取代的ZZ基是表示“取代或未取代的ZZ基”为“未取代的ZZ基”的情况,取代的ZZ基表示“取代或未取代的ZZ基”为“取代的ZZ基”的情况。

[0104] 在本说明书中,表述为“取代或未取代的ZZ基”时的“未取代”是指ZZ基中的氢原子未与取代基发生置换。“未取代的ZZ基”中的氢原子为氕原子、氘原子或氚原子。

[0105] 另外,在本说明书中,表述为“取代或未取代的ZZ基”时的“取代”是指,ZZ基中的1个以上的氢原子与取代基发生了置换。表述为“被AA基取代的BB基”时的“取代”也同样地是指BB基中的1个以上的氢原子与AA基发生了置换。

[0106] “本说明书中记载的取代基”

[0107] 以下对本说明书中记载的取代基进行说明。只要没有另行记载,则本说明书中记载的各取代基如下定义。

[0108] 本说明书中记载的“未取代的芳基”的成环碳数只要本说明书中没有另行记载,则为6~50,优选为6~30,更优选为6~18。

[0109] 本说明书中记载的“未取代的杂环基”的成环原子数只要本说明书中没有另行记载,则为5~50,优选为5~30,更优选为5~18。

[0110] 本说明书中记载的“未取代的烷基”的碳数只要本说明书中没有另行记载,则为1~50,优选为1~20,更优选为1~6。

[0111] 本说明书中记载的“未取代的烯基”的碳数只要本说明书中没有另行记载,则为2~50,优选为2~20,更优选为2~6。

[0112] 本说明书中记载的“未取代的炔基”的碳数只要本说明书中没有另行记载,则为2~50,优选为2~20,更优选为2~6。

[0113] 本说明书中记载的“未取代的环烷基”的成环碳数只要本说明书中没有另行记载,则为3~50,优选为3~20,更优选为3~6。

[0114] 本说明书中记载的“未取代的亚芳基”的成环碳数只要本说明书中没有另行记载,则为6~50,优选为6~30,更优选为6~18。

[0115] 本说明书中记载的“未取代的二价杂环基”的成环原子数只要本说明书中没有另行记载,则为5~50,优选为5~30,更优选为5~18。

[0116] 本说明书中记载的“未取代的亚烷基”的碳数只要本说明书中没有另行记载,则为1~50,优选为1~20,更优选为1~6。

[0117] • “取代或未取代的芳基”

[0118] 作为本说明书中记载的“取代或未取代的芳基”的具体例(具体例组G1),可以举出以下的未取代的芳基(具体例组G1A)和取代的芳基(具体例组G1B)等。(在此,未取代的芳基是指“取代或未取代的芳基”为“未取代的芳基”的情况,取代的芳基是指“取代或未取代的芳基”为“取代的芳基”的情况。)在本说明书中,仅表述为“芳基”时,包括“未取代的芳基”和“取代的芳基”这两者。

[0119] “取代的芳基”是指“未取代的芳基”的1个以上的氢原子与取代基发生了置换后的基团。作为“取代的芳基”,例如可以举出下述具体例组G1A的“未取代的芳基”的1个以上的氢原子与取代基发生了置换后的基团、以及下述具体例组G1B的取代的芳基的例子等。需要说明的是,在此列举的“未取代的芳基”的例子以及“取代的芳基”的例子仅为一例,本说明

书中记载的“取代的芳基”中也包括下述具体例组G1B的“取代的芳基”中的芳基自身的碳原子上键合的氢原子进一步与取代基发生了置换后的基团、以及下述具体例组G1B的“取代的芳基”中的取代基的氢原子进一步与取代基发生了置换后的基团。

[0120] • 未取代的芳基(具体例组G1A)：

[0121] 苯基、

[0122] 对联苯基、

[0123] 间联苯基、

[0124] 邻联苯基、

[0125] 对三联苯-4-基、

[0126] 对三联苯-3-基、

[0127] 对三联苯-2-基、

[0128] 间三联苯-4-基、

[0129] 间三联苯-3-基、

[0130] 间三联苯-2-基、

[0131] 间三联苯-3'-基、

[0132] 邻三联苯-4-基、

[0133] 邻三联苯-3-基、

[0134] 邻三联苯-2-基、

[0135] 1-萘基、

[0136] 2-萘基、

[0137] 蒽基、

[0138] 苯并蒽基、

[0139] 菲基、

[0140] 苯并菲基、非那烯基、

[0141] 芘基、

[0142] 蒾基、

[0143] 苯并蒾基、

[0144] 三亚苯基、

[0145] 苯并三亚苯基、

[0146] 并四苯基、

[0147] 并五苯基、

[0148] 芴基、

[0149] 9,9'-螺双芴基、

[0150] 苯并芴基、

[0151] 二苯并芴基、

[0152] 荧蒽基、

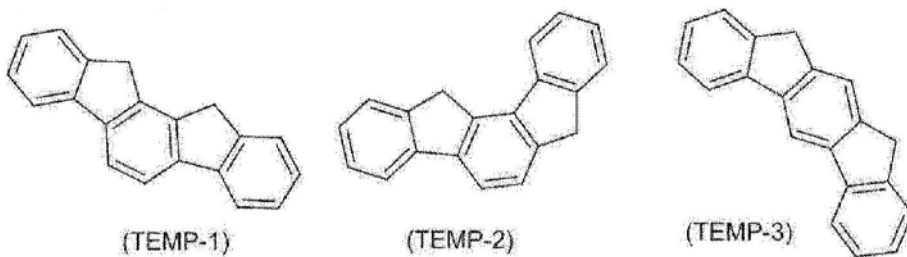
[0153] 苯并荧蒽基、

[0154] 茈基、以及

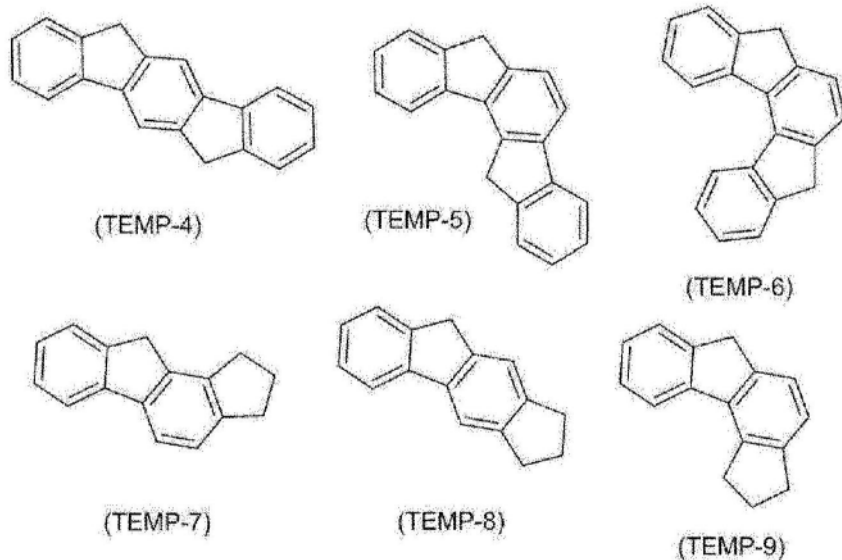
[0155] 从下述通式(TEMP-1) ~ (TEMP-15)所示的环结构除去1个氢原子由此衍生的一价

芳基。

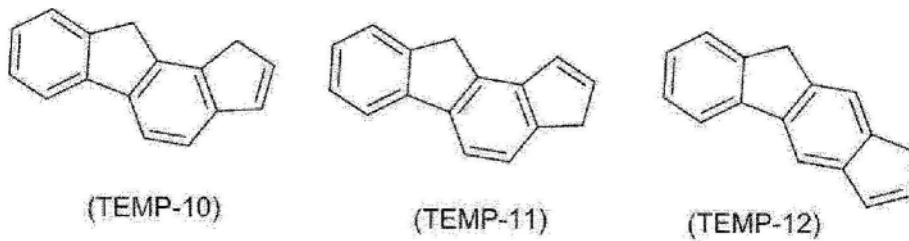
[0156] [化学式5]



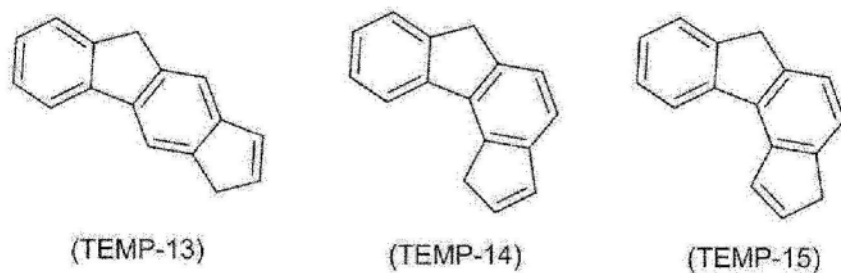
[0157]



[0158] [化学式6]



[0159]



[0160] • 取代的芳基(具体例组G1B)：

[0161] 邻甲苯基、

[0162] 间甲苯基、

[0163] 对甲苯基、

[0164] 对二甲苯基、

[0165] 间二甲苯基、

- [0166] 邻二甲苯基、
- [0167] 对异丙基苯基、
- [0168] 间异丙基苯基、
- [0169] 邻异丙基苯基、
- [0170] 对叔丁基苯基、
- [0171] 间叔丁基苯基、
- [0172] 邻叔丁基苯基、
- [0173] 3,4,5-三甲基苯基、
- [0174] 9,9-二甲基苻基、
- [0175] 9,9-二苯基苻基
- [0176] 9,9-双(4-甲基苯基)苻基、
- [0177] 9,9-双(4-异丙基苯基)苻基、
- [0178] 9,9-双(4-叔丁基苯基)苻基、
- [0179] 氰基苯基、
- [0180] 三苯基甲硅烷基苯基、
- [0181] 三甲基甲硅烷基苯基、
- [0182] 苯基萘基、
- [0183] 萘基苯基以及
- [0184] 从上述通式(TEMP-1) ~ (TEMP-15)所示的环结构衍生的一价基团的1个以上的氢原子与取代基发生了置换后的基团。
- [0185] • “取代或未取代的杂环基”
- [0186] 本说明书中记载的“杂环基”是成环原子中包含至少1个杂原子的环状的基团。作为杂原子的具体例,可以举出氮原子、氧原子、硫原子、硅原子、磷原子和硼原子。
- [0187] 本说明书中记载的“杂环基”是单环的基团或者稠环的基团。
- [0188] 本说明书中记载的“杂环基”是芳香族杂环基或者非芳香族杂环基。
- [0189] 作为本说明书中记载的“取代或未取代的杂环基”的具体例(具体例组G2),可以举出以下的未取代的杂环基(具体例组G2A)以及取代的杂环基(具体例组G2B)等。(在此,未取代的杂环基是指“取代或未取代的杂环基”为“未取代的杂环基”的情况,取代的杂环基是指“取代或未取代的杂环基”为“取代的杂环基”的情况。)在本说明书中,仅表述为“杂环基”时包括“未取代的杂环基”和“取代的杂环基”这两者。
- [0190] “取代的杂环基”是指“未取代的杂环基”的1个以上的氢原子与取代基发生了置换后的基团。“取代的杂环基”的具体例可以举出下述具体例组G2A的“未取代的杂环基”的氢原子发生了取代后的基团、以及下述具体例组G2B的取代的杂环基的例子等。需要说明的是,在此列举的“未取代的杂环基”的例子、“取代的杂环基”的例子仅为一例,本说明书中记载的“取代的杂环基”中还包括具体例组G2B的“取代的杂环基”中的杂环基自身的成环原子上键合的氢原子进一步与取代基发生了置换后的基团、以及具体例组G2B的“取代的杂环基”中的取代基的氢原子进一步与取代基发生了置换后的基团。
- [0191] 具体例组G2A例如包括以下的包含氮原子的未取代的杂环基(具体例组G2A1)、包含氧原子的未取代的杂环基(具体例组G2A2)、包含硫原子的未取代的杂环基(具体例组

G2A3) 以及从下述通式 (TEMP-16) ~ (TEMP-33) 所示的环结构除去1个氢原子由此衍生的一价杂环基(具体例组G2A4)。

[0192] 具体例组G2B例如包括以下的包含氮原子的取代的杂环基(具体例组G2B1)、包含氧原子的取代的杂环基(具体例组G2B2)、包含硫原子的取代的杂环基(具体例组G2B3)以及从下述通式 (TEMP-16) ~ (TEMP-33) 所示的环结构衍生的一价杂环基的1个以上的氢原子与取代基发生了置换后的基团(具体例组G2B4)。

[0193] • 包含氮原子的未取代的杂环基(具体例组G2A1):

[0194] 吡咯基、

[0195] 咪唑基、

[0196] 吡啶基、

[0197] 三唑基、

[0198] 四唑基、

[0199] 噁唑基、

[0200] 异噁唑基、

[0201] 噁二唑基、

[0202] 噻唑基、

[0203] 异噻唑基、

[0204] 噻二唑基、

[0205] 吡啶基、

[0206] 哒嗪基、

[0207] 嘧啶基、

[0208] 吡嗪基、

[0209] 三嗪基、

[0210] 吡啶基、

[0211] 异吡啶基、

[0212] 吡嗪基、

[0213] 喹啉基、

[0214] 喹啉基、

[0215] 异喹啉基、

[0216] 噌啉基、

[0217] 酞嗪基、

[0218] 喹啉基、

[0219] 喹啉基、

[0220] 苯并咪唑基、

[0221] 吡啶基、

[0222] 菲咯啉基、

[0223] 菲啶基、

[0224] 吡啶基、

[0225] 吩嗪基、

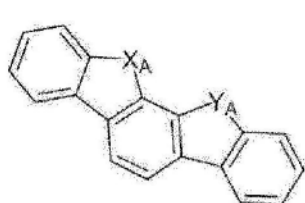
- [0226] 咪唑基、
- [0227] 苯并咪唑基、
- [0228] 吗啉基、
- [0229] 吩噻嗪基、
- [0230] 吩噻嗪基、
- [0231] 氮杂咪唑基以及二氮杂咪唑基。
- [0232] • 包含氧原子的未取代的杂环基(具体例组G2A2): 呋喃基、
- [0233] 噁唑基、
- [0234] 异噁唑基、
- [0235] 噁二唑基、
- [0236] 咕吨基、
- [0237] 苯并呋喃基、
- [0238] 异苯并呋喃基、
- [0239] 二苯并呋喃基、
- [0240] 萘并苯并呋喃基、
- [0241] 苯并噁唑基、
- [0242] 苯并异噁唑基、
- [0243] 吩噻嗪基、
- [0244] 吗啉基、
- [0245] 二萘并呋喃基、
- [0246] 氮杂二苯并呋喃基、
- [0247] 二氮杂二苯并呋喃基、
- [0248] 氮杂萘并苯并呋喃基以及
- [0249] 二氮杂萘并苯并呋喃基。
- [0250] • 包含硫原子的未取代的杂环基(具体例组G2A3):
- [0251] 噻吩基、
- [0252] 噻唑基、
- [0253] 异噻唑基、
- [0254] 噻二唑基、
- [0255] 苯并噻吩基(benzothienyl)、
- [0256] 异苯并噻吩基(isobenzothienyl)、
- [0257] 二苯并噻吩基(dibenzothienyl)、
- [0258] 萘并苯并噻吩基(naphthobenzothienyl)、
- [0259] 苯并噻唑基、
- [0260] 苯并异噻唑基、
- [0261] 吩噻嗪基、
- [0262] 二萘并噻吩基(dinaphthothienyl)、
- [0263] 氮杂二苯并噻吩基(azadibenzothienyl)、
- [0264] 二氮杂二苯并噻吩基(diazadibenzothienyl)、

[0265] 氮杂萘并苯并噻吩基 (azanaphthobenzothieryl)、以及

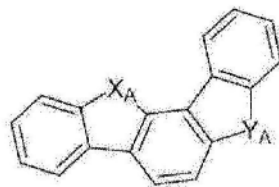
[0266] 二氮杂萘并苯并噻吩基 (diazanaphthobenzothieryl)。

[0267] • 从下述通式 (TEMP-16) ~ (TEMP-33) 所示的环结构除去1个氢原子由此衍生的一价杂环基 (具体例组G2A4) :

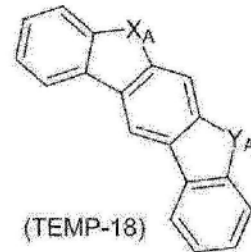
[0268] [化学式7]



(TEMP-16)

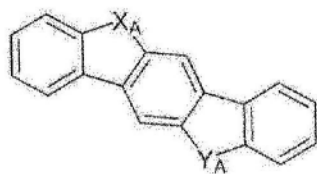


(TEMP-17)

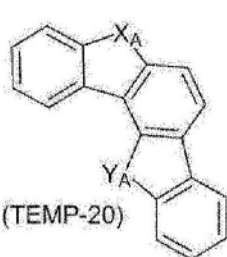


(TEMP-18)

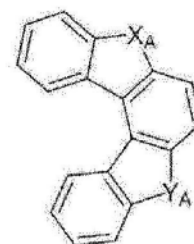
[0269]



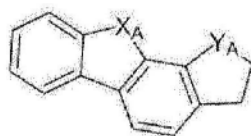
(TEMP-19)



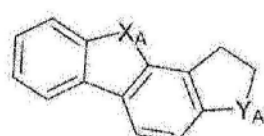
(TEMP-20)



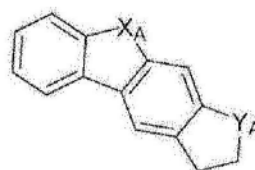
(TEMP-21)



(TEMP-22)

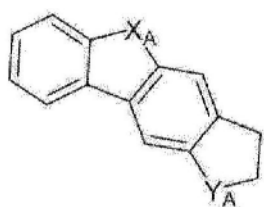


(TEMP-23)

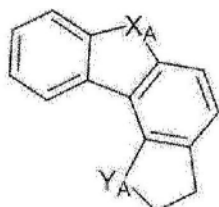


(TEMP-24)

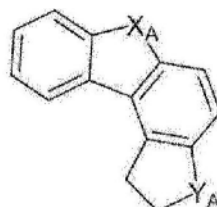
[0270] [化学式8]



(TEMP-25)

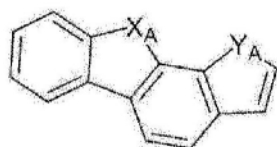


(TEMP-26)

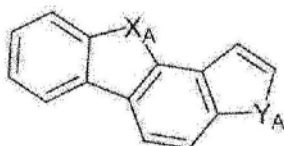


(TEMP-27)

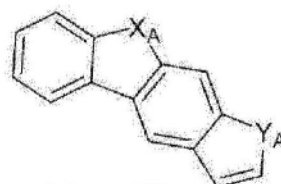
[0271]



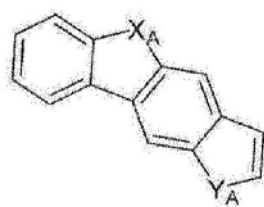
(TEMP-28)



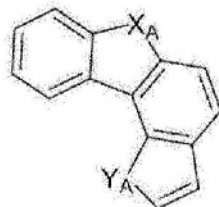
(TEMP-29)



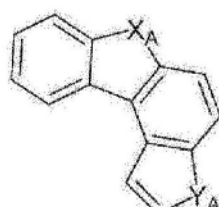
(TEMP-30)



(TEMP-31)



(TEMP-32)



(TEMP-33)

[0272] 在上述通式 (TEMP-16) ~ (TEMP-33) 中, X_A 和 Y_A 各自独立地为氧原子、硫原子、NH 或 CH_2 。其中, X_A 和 Y_A 之中至少 1 个为氧原子、硫原子或 NH。

[0273] 在上述通式 (TEMP-16) ~ (TEMP-33) 中, X_A 和 Y_A 的至少任一个为 NH 或 CH_2 时, 从上述通式 (TEMP-16) ~ (TEMP-33) 所示的环结构衍生的一价杂环基包括从这些 NH 或 CH_2 除去 1 个氢原子而得到的一价基团。

[0274] • 包含氮原子的取代的杂环基 (具体例组 G2B1) :

[0275] (9-苯基) 咪唑基、

[0276] (9-联苯基) 咪唑基、

[0277] (9-苯基) 苯基咪唑基、

[0278] (9-萘基) 咪唑基、

[0279] 二苯基咪唑-9-基、

[0280] 苯基咪唑-9-基、

[0281] 甲基苯并咪唑基、

[0282] 乙基苯并咪唑基、

[0283] 苯基三嗪基、

[0284] 联苯基三嗪基、

[0285] 二苯基三嗪基、

[0286] 苯基喹唑啉基以及

[0287] 联苯基喹唑啉基。

[0288] • 包含氧原子的取代的杂环基 (具体例组 G2B2) :

[0289] 苯基二苯并呋喃基、

- [0290] 甲基二苯并呋喃基、
- [0291] 叔丁基二苯并呋喃基以及
- [0292] 螺[9H-咕吨-9,9' - [9H]芴]的一价残基。
- [0293] • 包含硫原子的取代的杂环基(具体例组G2B3) :
- [0294] 苯基二苯并噻吩基、
- [0295] 甲基二苯并噻吩基、
- [0296] 叔丁基二苯并噻吩基和
- [0297] 螺[9H-噻吨-9,9' - [9H]芴]的一价残基。
- [0298] • 从上述通式(TEMP-16) ~ (TEMP-33)所示的环结构衍生的一价杂环基的1个以上的氢原子与取代基发生了置换后的基团(具体例组G2B4) :
- [0299] 上述“一价杂环基的1个以上的氢原子”是指,选自该一价杂环基的成环碳原子上键合的氢原子、 X_A 和 Y_A 的至少任一个为NH时的氮原子上键合的氢原子以及 X_A 和 Y_A 中的一者为 CH_2 时的亚甲基的氢原子中的1个以上的氢原子。
- [0300] • “取代或未取代的烷基”
- [0301] 作为本说明书中记载的“取代或未取代的烷基”的具体例(具体例组G3),可以举出以下的未取代的烷基(具体例组G3A)和取代的烷基(具体例组G3B)。(在此,未取代的烷基是指“取代或未取代的烷基”为“未取代的烷基”的情况,取代的烷基是指“取代或未取代的烷基”为“取代的烷基”的情况。)以下,仅表述为“烷基”时,包括“未取代的烷基”和“取代的烷基”这两者。
- [0302] “取代的烷基”是指“未取代的烷基”中的1个以上的氢原子与取代基发生了置换后的基团。作为“取代的烷基”的具体例,可以举出下述的“未取代的烷基”(具体例组G3A)中的1个以上的氢原子与取代基发生了置换后的基团以及取代的烷基(具体例组G3B)的例子等。在本说明书中,“未取代的烷基”中的烷基是指链状的烷基。因此,“未取代的烷基”包括作为直链的“未取代的烷基”以及作为支链状的“未取代的烷基”。需要说明的是,在此列举的“未取代的烷基”的例子、“取代的烷基”的例子仅为一例,本说明书中记载的“取代的烷基”还包括具体例组G3B的“取代的烷基”中的烷基自身的氢原子进一步与取代基发生了置换后的基团以及具体例组G3B的“取代的烷基”中的取代基的氢原子进一步与取代基发生了置换后的基团。
- [0303] • 未取代的烷基(具体例组G3A) :
- [0304] 甲基、
- [0305] 乙基、
- [0306] 正丙基、
- [0307] 异丙基、
- [0308] 正丁基、
- [0309] 异丁基、
- [0310] 仲丁基、以及
- [0311] 叔丁基。
- [0312] • 取代的烷基(具体例组G3B) :
- [0313] 七氟丙基(包括异构体)、

[0314] 五氟乙基、

[0315] 2,2,2-三氟乙基以及

[0316] 三氟甲基。

[0317] • “取代或未取代的烯基”

[0318] 作为本说明书中记载的“取代或未取代的烯基”的具体例(具体例组G4),可以举出以下的未取代的烯基(具体例组G4A)以及取代的烯基(具体例组G4B)等。(在此,未取代的烯基是指“取代或未取代的烯基”为“未取代的烯基”的情况,“取代的烯基”是指“取代或未取代的烯基”为“取代的烯基”的情况。)在本说明书中,仅仅表述为“烯基”时,包括“未取代的烯基”和“取代的烯基”这两者。

[0319] “取代的烯基”是指“未取代的烯基”中的1个以上的氢原子与取代基发生了置换后的基团。作为“取代的烯基”的具体例,可以举出下述的“未取代的烯基”(具体例组G4A)具有取代基的基团以及取代的烯基(具体例组G4B)的例子等。需要说明的是,在此列举的“未取代的烯基”的例子、“取代的烯基”的例子仅为一例,本说明书中记载的“取代的烯基”还包括具体例组G4B的“取代的烯基”中的烯基自身的氢原子进一步与取代基发生了置换后的基团以及具体例组G4B的“取代的烯基”中的取代基的氢原子进一步与取代基发生了置换后的基团。

[0320] • 未取代的烯基(具体例组G4A):

[0321] 乙烯基、

[0322] 烯丙基、

[0323] 1-丁烯基、

[0324] 2-丁烯基以及

[0325] 3-丁烯基。

[0326] • 取代的烯基(具体例组G4B):

[0327] 1,3-丁二烯基、

[0328] 1-甲基乙烯基、

[0329] 1-甲基烯丙基、

[0330] 1,1-二甲基烯丙基、

[0331] 2-甲基烯丙基以及

[0332] 1,2-二甲基烯丙基。

[0333] • “取代或未取代的炔基”

[0334] 作为本说明书中记载的“取代或未取代的炔基”的具体例(具体例组G5),可以举出以下的未取代的炔基(具体例组G5A)等。(在此,未取代的炔基是指“取代或未取代的炔基”为“未取代的炔基”的情况。)以下仅表述为“炔基”时,包括“未取代的炔基”和“取代的炔基”这两者。

[0335] “取代的炔基”是指“未取代的炔基”中的1个以上的氢原子与取代基发生了置换后的基团。作为“取代的炔基”的具体例,可以举出下述的“未取代的炔基”(具体例组G5A)中的1个以上的氢原子与取代基发生了置换后的基团等。

[0336] • 未取代的炔基(具体例组G5A):

[0337] 乙炔基

[0338] • “取代或未取代的环烷基”

[0339] 作为本说明书中记载的“取代或未取代的环烷基”的具体例(具体例组G6),可以举出以下的未取代的环烷基(具体例组G6A)以及取代的环烷基(具体例组G6B)等。(在此,未取代的环烷基是指“取代或未取代的环烷基”为“未取代的环烷基”的情况,取代的环烷基是指“取代或未取代的环烷基”为“取代的环烷基”的情况。)在本说明书中,仅表述为“环烷基”时,包括“未取代的环烷基”和“取代的环烷基”这两者。

[0340] “取代的环烷基”是指“未取代的环烷基”中的1个以上的氢原子与取代基发生了置换后的基团。作为“取代的环烷基”的具体例,可以举出下述的“未取代的环烷基”(具体例组G6A)中的1个以上的氢原子与取代基发生了置换后的基团以及取代的环烷基(具体例组G6B)的例子等。需要说明的是,在此列举的“未取代的环烷基”的例子、“取代的环烷基”的例子仅为一例,本说明书中记载的“取代的环烷基”还包括具体例组G6B的“取代的环烷基”中的环烷基自身的碳原子上键合的1个以上的氢原子与取代基发生了置换后的基团以及具体例组G6B的“取代的环烷基”中的取代基的氢原子进一步与取代基发生了置换后的基团。

[0341] • 未取代的环烷基(具体例组G6A):

[0342] 环丙基、

[0343] 环丁基、

[0344] 环戊基、

[0345] 环己基、

[0346] 1-金刚烷基、

[0347] 2-金刚烷基、

[0348] 1-降冰片基以及

[0349] 2-降冰片基。

[0350] • 取代的环烷基(具体例组G6B):

[0351] 4-甲基环己基。

[0352] • “-Si(R₉₀₁)(R₉₀₂)(R₉₀₃)所示的基团”

[0353] 作为本说明书中记载的-Si(R₉₀₁)(R₉₀₂)(R₉₀₃)所示的基团的具体例(具体例组G7),可以举出

[0354] -Si(G1)(G1)(G1)、

[0355] -Si(G1)(G2)(G2)、

[0356] -Si(G1)(G1)(G2)、

[0357] -Si(G2)(G2)(G2)、

[0358] -Si(G3)(G3)(G3)、以及

[0359] -Si(G6)(G6)(G6)

[0360] 。此处,

[0361] G1为具体例组G1中记载的“取代或未取代的芳基”。

[0362] G2为具体例组G2中记载的“取代或未取代的杂环基”。

[0363] G3为具体例组G3中记载的“取代或未取代的烷基”。

[0364] G6为具体例组G6中记载的“取代或未取代的环烷基”。

[0365] -Si(G1)(G1)(G1)中的多个G1相互相同或者不同。

- [0366] -Si(G1)(G2)(G2)中的多个G2相互相同或者不同。
- [0367] -Si(G1)(G1)(G2)中的多个G1相互相同或者不同。
- [0368] -Si(G2)(G2)(G2)中的多个G2相互相同或者不同。
- [0369] -Si(G3)(G3)(G3)中的多个G3相互相同或者不同。
- [0370] -Si(G6)(G6)(G6)中的多个G6相互相同或者不同。
- [0371] • “-O-(R₉₀₄)所示的基团”
- [0372] 作为本说明书中记载的-O-(R₉₀₄)所示的基团的具体例(具体例组G8),可以举出
- [0373] -O(G1)、
- [0374] -O(G2)、
- [0375] -O(G3)以及
- [0376] -O(G6)。
- [0377] 此处,
- [0378] G1为具体例组G1中记载的“取代或未取代的芳基”。
- [0379] G2为具体例组G2中记载的“取代或未取代的杂环基”。
- [0380] G3为具体例组G3中记载的“取代或未取代的烷基”。
- [0381] G6为具体例组G6中记载的“取代或未取代的环烷基”。
- [0382] • “-S-(R₉₀₅)所示的基团”
- [0383] 作为本说明书中记载的-S-(R₉₀₅)所示的基团的具体例(具体例组G9),可以举出
- [0384] -S(G1)、
- [0385] -S(G2)、
- [0386] -S(G3)以及
- [0387] -S(G6)。
- [0388] 此处,
- [0389] G1为具体例组G1中记载的“取代或未取代的芳基”。
- [0390] G2为具体例组G2中记载的“取代或未取代的杂环基”。
- [0391] G3为具体例组G3中记载的“取代或未取代的烷基”。
- [0392] G6为具体例组G6中记载的“取代或未取代的环烷基”。
- [0393] • “-N(R₉₀₆)(R₉₀₇)所示的基团”
- [0394] 作为本说明书中记载的-N(R₉₀₆)(R₉₀₇)所示的基团的具体例(具体例组G10),可以举出
- [0395] -N(G1)(G1)、
- [0396] -N(G2)(G2)、
- [0397] -N(G1)(G2)、
- [0398] -N(G3)(G3)以及
- [0399] -N(G6)(G6)。
- [0400] 此处,
- [0401] G1为具体例组G1中记载的“取代或未取代的芳基”。
- [0402] G2为具体例组G2中记载的“取代或未取代的杂环基”。
- [0403] G3为具体例组G3中记载的“取代或未取代的烷基”。

[0404] G6为具体例组G6中记载的“取代或未取代的环烷基”。

[0405] -N(G1) (G1) 中的多个G1相互相同或者不同。

[0406] -N(G2) (G2) 中的多个G2相互相同或者不同。

[0407] -N(G3) (G3) 中的多个G3相互相同或者不同。

[0408] -N(G6) (G6) 中的多个G6相互相同或者不同。

[0409] • “卤素原子”

[0410] 作为本说明书中记载的“卤素原子”的具体例(具体例组G11),可以举出氟原子、氯原子、溴原子以及碘原子等。

[0411] • “取代或未取代的氟烷基”

[0412] 本说明书中记载的“取代或未取代的氟烷基”是指“取代或未取代的烷基”中的构成烷基的碳原子上键合的至少1个氢原子与氟原子发生了置换后的基团,也包括“取代或未取代的烷基”中的构成烷基的碳原子上键合的全部氢原子经氟原子置换后的基团(全氟基团)。“未取代的氟烷基”的碳数只要本说明书中没有另行记载,则为1~50,优选为1~30,更优选为1~18。“取代的氟烷基”是指“氟烷基”的1个以上的氢原子与取代基发生了置换后的基团。需要说明的是,本说明书中记载的“取代的氟烷基”中也包括“取代的氟烷基”中的烷基链的碳原子上键合的1个以上的氢原子进一步与取代基发生了置换后的基团以及“取代的氟烷基”中的取代基的1个以上的氢原子进一步与取代基发生了置换后的基团。作为“未取代的氟烷基”的具体例,可以举出上述“烷基”(具体例组G3)中的1个以上的氢原子与氟原子发生了置换后的基团的例子等。

[0413] • “取代或未取代的卤烷基”

[0414] 本说明书中记载的“取代或未取代的卤烷基”是指“取代或未取代的烷基”中的构成烷基的碳原子上键合的至少1个氢原子与卤素原子发生了置换后的基团,也包括“取代或未取代的烷基”中的构成烷基的碳原子上键合的全部氢原子经卤素原子取代后的基团。“未取代的卤烷基”的碳数只要本说明书中没有另行记载,则为1~50,优选为1~30,更优选为1~18。“取代的卤烷基”是指“卤烷基”的1个以上的氢原子与取代基发生了置换后的基团。需要说明的是,本说明书中记载的“取代的卤烷基”还包括“取代的卤烷基”中的烷基链的碳原子上键合的1个以上的氢原子进一步与取代基发生了置换后的基团以及“取代的卤烷基”中的取代基的1个以上的氢原子进一步与取代基发生了置换后的基团。作为“未取代的卤烷基”的具体例,可以举出上述“烷基”(具体例组G3)中的1个以上的氢原子与卤素原子发生了置换后的基团的例子等。卤烷基有时称为卤代烷基。

[0415] • “取代或未取代的烷氧基”

[0416] 作为本说明书中记载的“取代或未取代的烷氧基”的具体例,为-O(G3)所示的基团,在此,G3为具体例组G3中记载的“取代或未取代的烷基”。“未取代的烷氧基”的碳数只要本说明书中没有另行记载,则为1~50,优选为1~30,更优选为1~18。

[0417] • “取代或未取代的烷硫基”

[0418] 作为本说明书中记载的“取代或未取代的烷硫基”的具体例,为-S(G3)所示的基团,在此,G3为具体例组G3中记载的“取代或未取代的烷基”。“未取代的烷硫基”的碳数只要本说明书中没有另行记载,则为1~50,优选为1~30,更优选为1~18。

[0419] • “取代或未取代的芳氧基”

[0420] 作为本说明书中记载的“取代或未取代的芳氧基”的具体例,为-O(G1)所示的基团,在此,G1为具体例组G1中记载的“取代或未取代的芳基”。“未取代的芳氧基”的成环碳数只要本说明书中没有另行记载,则为6~50,优选为6~30,更优选为6~18。

[0421] • “取代或未取代的芳硫基”

[0422] 作为本说明书中记载的“取代或未取代的芳硫基”的具体例,为-S(G1)所示的基团,在此,G1为具体例组G1中记载的“取代或未取代的芳基”。“未取代的芳硫基”的成环碳数只要本说明书中没有另行记载,则为6~50,优选为6~30,更优选为6~18。

[0423] • “取代或未取代的三烷基甲硅烷基”

[0424] 作为本说明书中记载的“三烷基甲硅烷基”的具体例,为-Si(G3)(G3)(G3)所示的基团,在此,G3为具体例组G3中记载的“取代或未取代的烷基”。-Si(G3)(G3)(G3)中的多个G3相互相同或不同。“三烷基甲硅烷基”的各烷基的碳数只要本说明书中没有另行记载,则为1~50,优选为1~20,更优选为1~6。

[0425] • “取代或未取代的芳烷基”

[0426] 作为本说明书中记载的“取代或未取代的芳烷基”的具体例,为-(G3)-(G1)所示的基团,在此,G3为具体例组G3中记载的“取代或未取代的烷基”,G1为具体例组G1中记载的“取代或未取代的芳基”。因此,“芳烷基”为“烷基”的氢原子与作为取代基的“芳基”发生了置换后的基团,为“取代的烷基”的一个方案。“未取代的芳烷基”为取代有“未取代的芳基”的“未取代的烷基”,“未取代的芳烷基”的碳数只要本说明书中没有另行记载,则为7~50,优选为7~30,更优选为7~18。

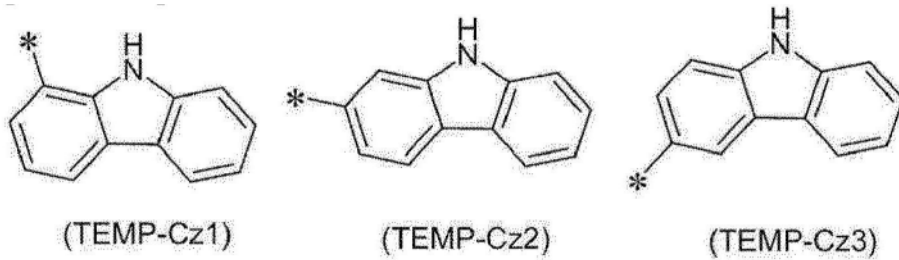
[0427] 作为“取代或未取代的芳烷基”的具体例,可以举出苜基、1-苯基乙基、2-苯基乙基、1-苯基异丙基、2-苯基异丙基、苜基叔丁基、 α -萘基甲基、1- α -萘基乙基、2- α -萘基乙基、1- α -萘基异丙基、2- α -萘基异丙基、 β -萘基甲基、1- β -萘基乙基、2- β -萘基乙基、1- β -萘基异丙基以及2- β -萘基异丙基等。

[0428] 本说明书中记载的取代或未取代的芳基只要本说明书中没有另行记载,则优选为苯基、对联苯基、间联苯基、邻联苯基、对三联苯-4-基、对三联苯-3-基、对三联苯-2-基、间三联苯-4-基、间三联苯-3-基、间三联苯-2-基、邻三联苯-4-基、邻三联苯-3-基、邻三联苯-2-基、1-萘基、2-萘基、苜基、苜基、蒽基、菲基、苜基、蒽基、三亚苯基、苜基、9,9'-螺双苜基、9,9-二甲基苜基以及9,9-二苜基苜基等。

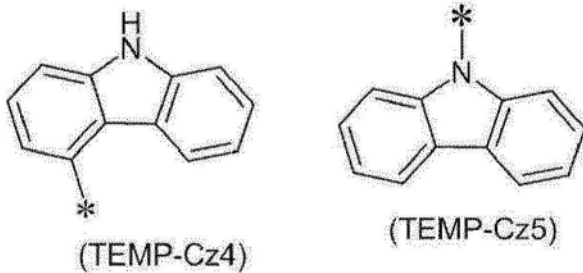
[0429] 本说明书中记载的取代或未取代的杂环基只要本说明书中没有另行记载,则优选为吡啶基、嘧啶基、三嗪基、喹啉基、异喹啉基、喹唑啉基、苯并咪唑基、菲咯啉基、咪唑基(1-咪唑基、2-咪唑基、3-咪唑基、4-咪唑基或9-咪唑基)、苯并咪唑基、氮杂咪唑基、二氮杂咪唑基、二苜并咪唑基、萘并苜并咪唑基、氮杂二苜并咪唑基、二氮杂二苜并咪唑基、二苜并噻吩基、萘并苜并噻吩基、氮杂二苜并噻吩基、二氮杂二苜并噻吩基、(9-苜基)咪唑基((9-苜基)咪唑-1-基、(9-苜基)咪唑-2-基、(9-苜基)咪唑-3-基或(9-苜基)咪唑-4-基)、(9-联苜基)咪唑基、(9-苜基)苜基咪唑基、二苜基咪唑-9-基、苜基咪唑-9-基、苜基三嗪基、联苜基三嗪基、二苜基三嗪基、苜基二苜并咪唑基以及苜基二苜并噻吩基等。

[0430] 在本说明书中,咪唑基只要本说明书中没有另行记载,则具体而言为以下任一个基团。

[0431] [化学式9]

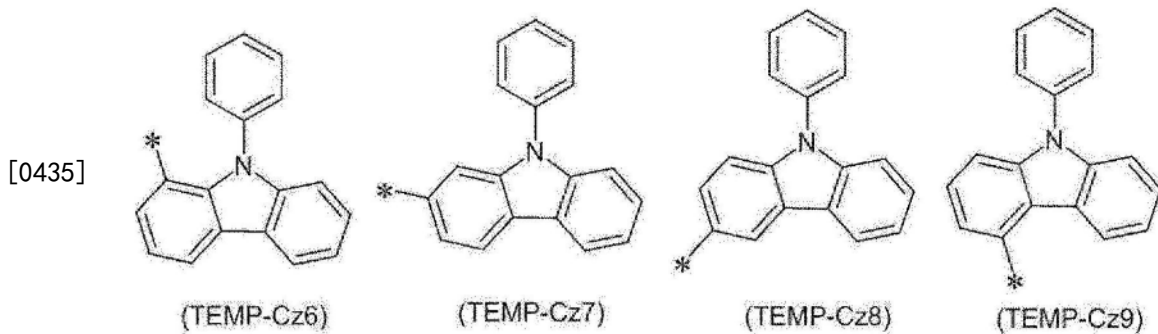


[0432]



[0433] 在本说明书中, (9-苯基) 咔唑基只要本说明书中没有另行记载, 则具体而言为以下任一个基团。

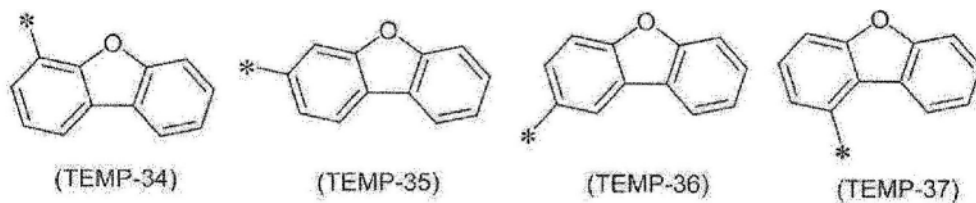
[0434] [化学式10]



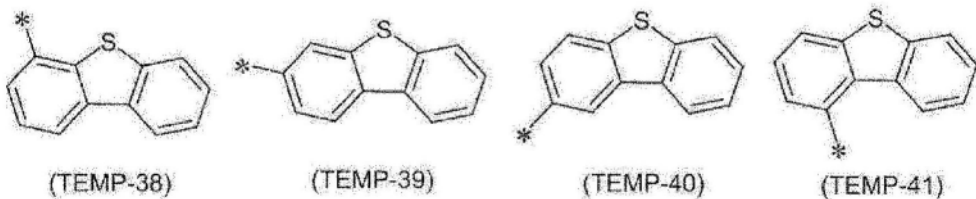
[0436] 上述通式 (TEMP-Cz1) ~ (TEMP-Cz9) 中, *表示键合位置。

[0437] 在本说明书中, 二苯并呋喃基以及二苯并噻吩基只要本说明书中没有另行记载, 则具体而言为以下任一个基团。

[0438] [化学式11]



[0439]



[0440] 上述通式 (TEMP-34) ~ (TEMP-41) 中, *表示键合位置。

[0441] 本说明书中记载的取代或未取代的烷基只要本说明书中没有另行记载, 则优选为

甲基、乙基、丙基、异丙基、正丁基、异丁基以及叔丁基等。

[0442] • “取代或未取代的亚芳基”

[0443] 本说明书中记载的“取代或未取代的亚芳基”只要没有另行记载,就是从上述“取代或未取代的芳基”除去芳基环上的1个氢原子由此衍生的二价基团。作为“取代或未取代的亚芳基”的具体例(具体例组G12),可以举出从具体例组G1中记载的“取代或未取代的芳基”除去芳基环上的1个氢原子由此衍生的二价基团等。

[0444] • “取代或未取代的二价杂环基”

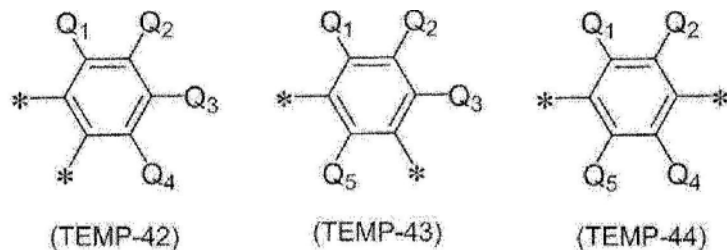
[0445] 本说明书中记载的“取代或未取代的二价杂环基”只要没有另行记载,就是从上述“取代或未取代的杂环基”除去杂环上的1个氢原子由此衍生的二价基团。作为“取代或未取代的二价杂环基”的具体例(具体例组G13),可以举出从具体例组G2中记载的“取代或未取代的杂环基”除去杂环上的1个氢原子由此衍生的二价基团等。

[0446] • “取代或未取代的亚烷基”

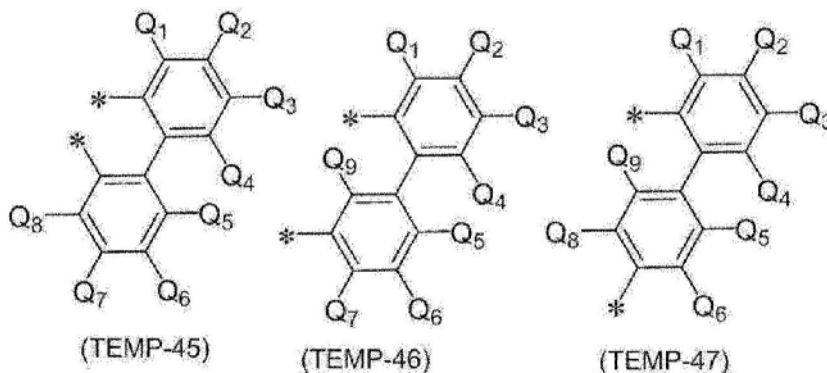
[0447] 本说明书中记载的“取代或未取代的亚烷基”只要没有另行记载,就是从上述“取代或未取代的烷基”除去烷基链上的1个氢原子由此衍生的二价基团。作为“取代或未取代的亚烷基”的具体例(具体例组G14),可以举出从具体例组G3中记载的“取代或未取代的烷基”除去烷基链上的1个氢原子由此衍生的二价基团等。

[0448] 本说明书中记载的取代或未取代的亚芳基只要本说明书中没有另行记载,则优选为下述通式(TEMP-42)~(TEMP-68)中的任一基团。

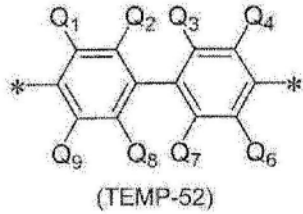
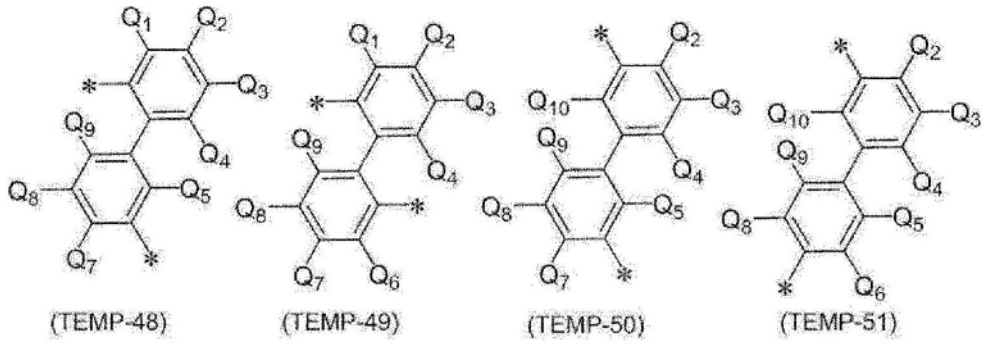
[0449] [化学式12]



[0450]



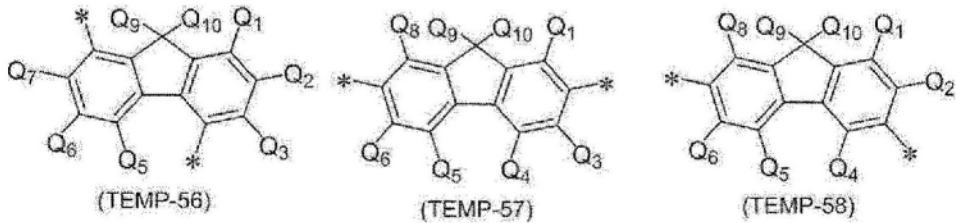
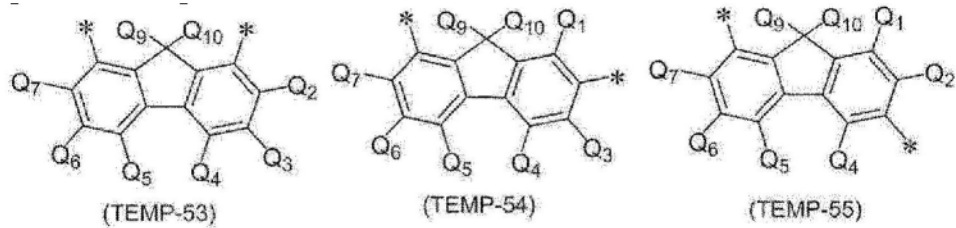
[0451] [化学式13]



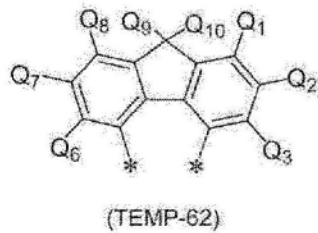
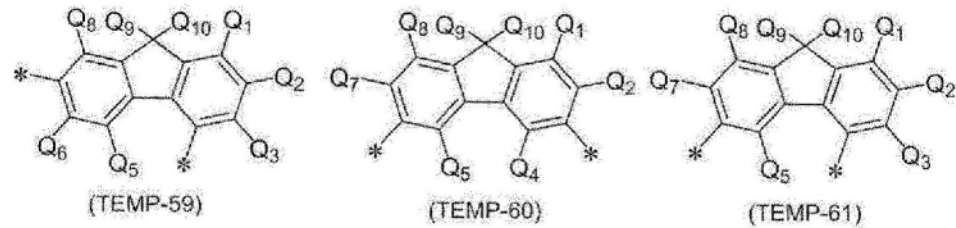
[0453] 上述通式 (TEMP-42) ~ (TEMP-52) 中, $Q_1 \sim Q_{10}$ 各自独立地为氢原子或取代基。

[0454] 上述通式 (TEMP-42) ~ (TEMP-52) 中, *表示键合位置。

[0455] [化学式14]



[0456]

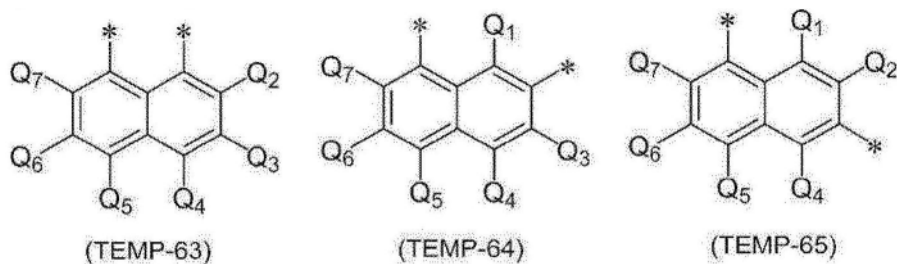


[0457] 上述通式 (TEMP-53) ~ (TEMP-62) 中, $Q_1 \sim Q_{10}$ 各自独立地为氢原子或取代基。

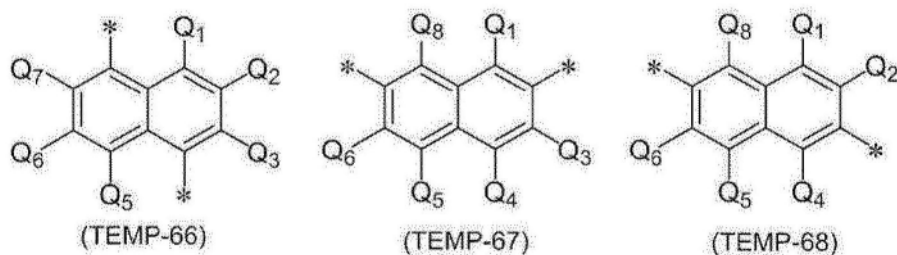
[0458] 式 Q_9 和 Q_{10} 可以经由单键相互键合而形成环。

[0459] 上述通式 (TEMP-53) ~ (TEMP-62) 中,*表示键合位置。

[0460] [化学式15]



[0461]

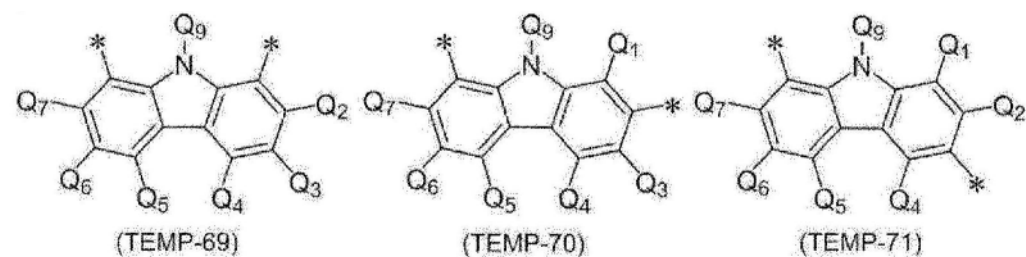


[0462] 上述通式 (TEMP-63) ~ (TEMP-68) 中, $Q_1 \sim Q_8$ 各自独立地为氢原子或取代基。

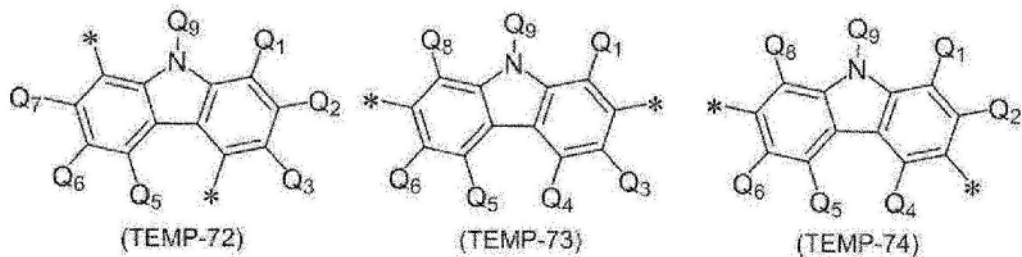
[0463] 上述通式 (TEMP-63) ~ (TEMP-68) 中,*表示键合位置。

[0464] 本说明书中记载的取代或未取代的二价杂环基只要本说明书中没有另行记载,则优选为下述通式 (TEMP-69) ~ (TEMP-102) 中的任一基团。

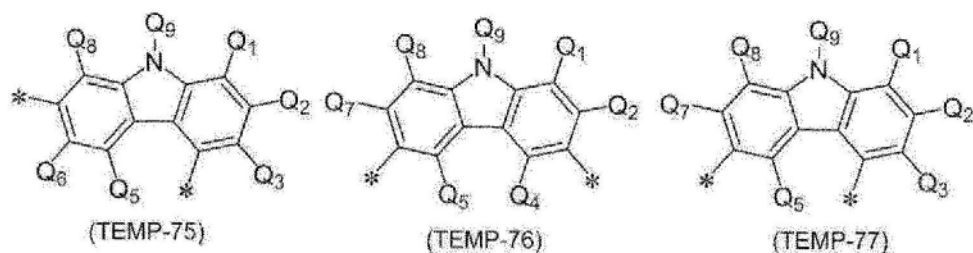
[0465] [化学式16]



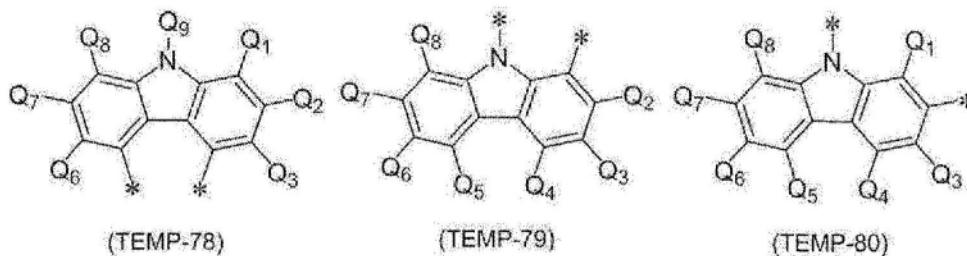
[0466]



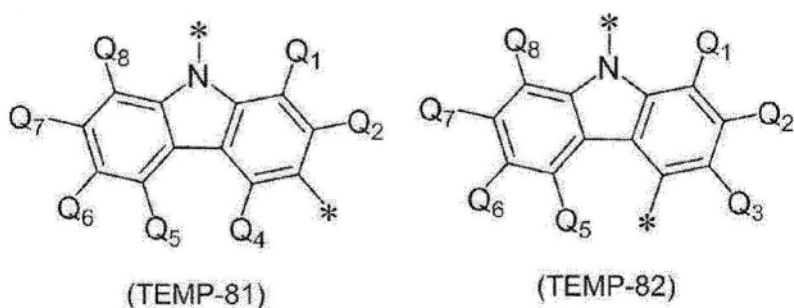
[0467] [化学式17]



[0468]



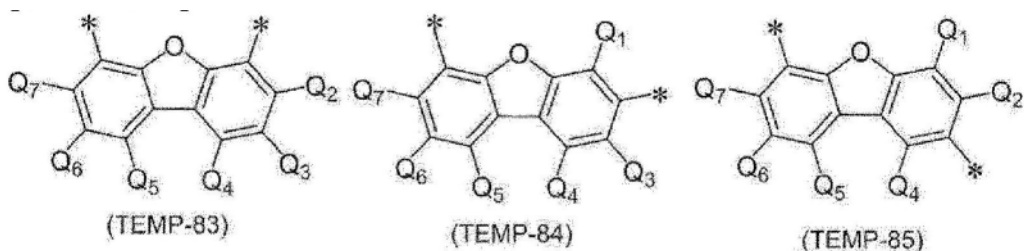
[0469] [化学式18]



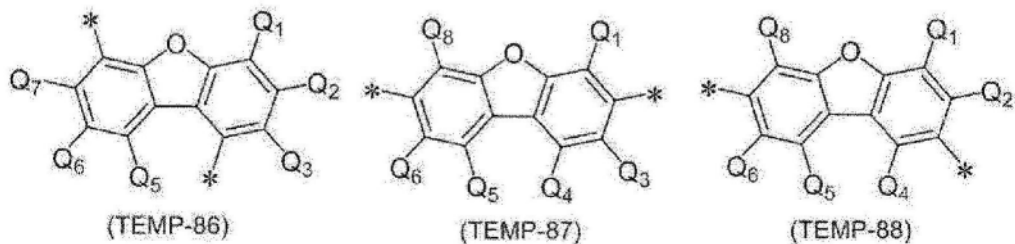
[0470]

[0471] 上述通式 (TEMP-69) ~ (TEMP-82) 中, $Q_1 \sim Q_9$ 各自独立地为氢原子或取代基。

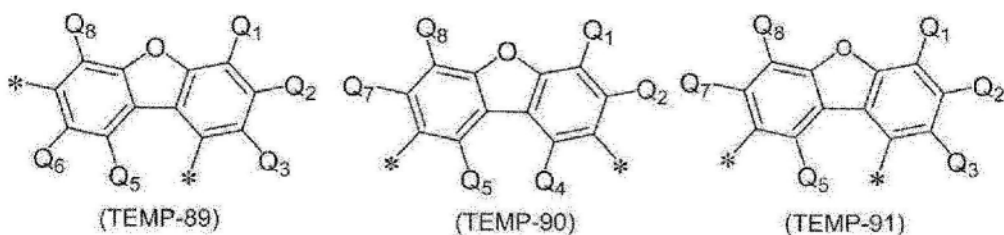
[0472] [化学式19]



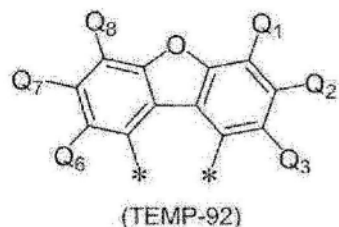
[0473]



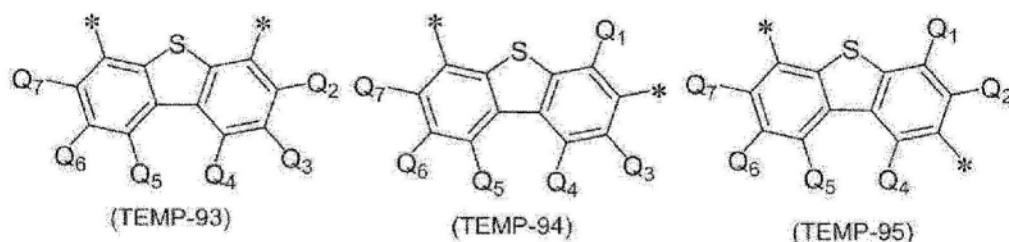
[0474] [化学式20]



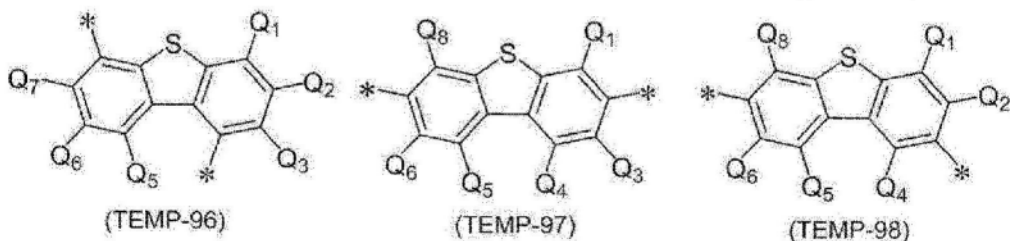
[0475]



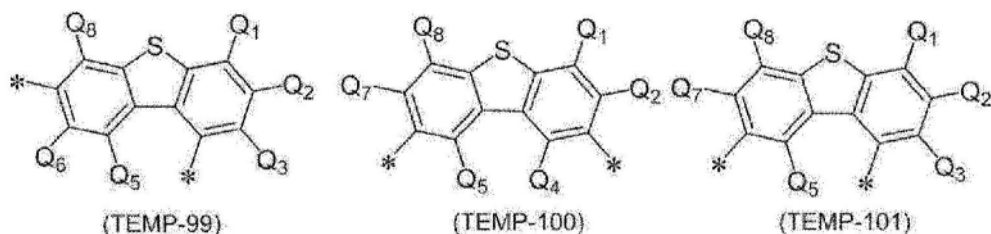
[0476] [化学式21]



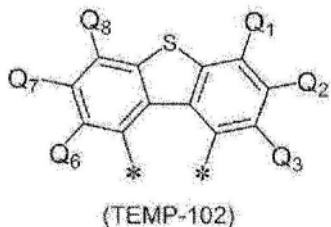
[0477]



[0478] [化学式22]



[0479]

[0480] 上述通式 (TEMP-83) ~ (TEMP-102) 中, $Q_1 \sim Q_8$ 各自独立地为氢原子或取代基。

[0481] 以上是对“本说明书中记载的取代基”的说明。

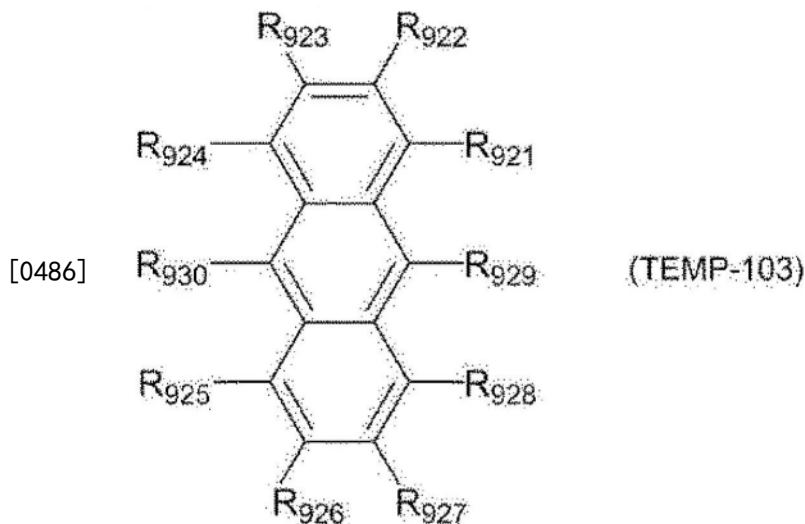
[0482] • “键合而形成环的情况”

[0483] 在本说明书中,表述为“由…相邻的2个以上组成的组中的1组以上相互键合而形成取代或未取代的单环、或者相互键合而形成取代或未取代的稠环、或者不相互键合”的情

况,是指“由…相邻的2个以上组成的组中的1组以上相互键合而形成取代或未取代的单环”的情况、“由…相邻的2个以上组成的组中的1组以上相互键合而形成取代或未取代的稠环”的情况和“由…相邻的2个以上组成的组中的1组以上不相互键合”的情况。

[0484] 以下,对于本说明书中的“由…相邻的2个以上组成的组中的1组以上相互键合而形成取代或未取代的单环”的情况以及“由…相邻的2个以上组成的组中的1组以上相互键合而形成取代或未取代的稠环”的情况(以下有时将这些情况合称为“键合而形成环的情况”)进行说明。以母骨架为蒽环的下述通式(TEMP-103)所示的蒽化合物的情况为例进行说明。

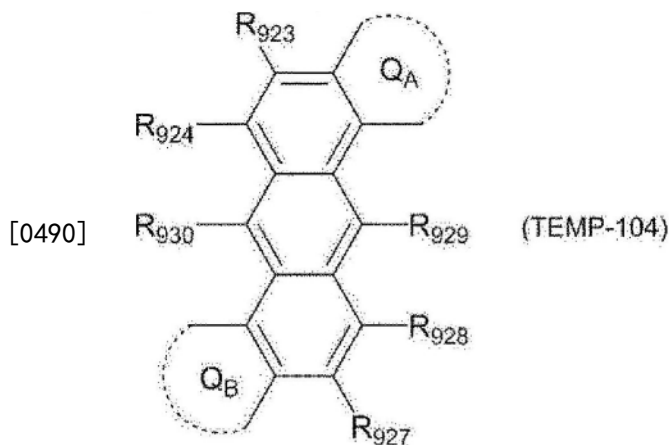
[0485] [化学式23]



[0487] 例如,在由 $R_{921} \sim R_{930}$ 之中的“相邻的2个以上组成的组中的1组以上相互键合而形成环”的情况中,由作为1组的相邻的2个组成的组是指, R_{921} 与 R_{922} 的组、 R_{922} 与 R_{923} 的组、 R_{923} 与 R_{924} 的组、 R_{924} 与 R_{930} 的组、 R_{930} 与 R_{925} 的组、 R_{925} 与 R_{926} 的组、 R_{926} 与 R_{927} 的组、 R_{927} 与 R_{928} 的组、 R_{928} 与 R_{929} 的组、以及 R_{929} 与 R_{921} 的组。

[0488] 上述“1组以上”是指,由上述相邻的2个以上组成的组中的2组以上可以同时形成环。例如,在 R_{921} 与 R_{922} 相互键合而形成环 Q_A 而且同时 R_{925} 与 R_{926} 相互键合而形成环 Q_B 时,上述通式(TEMP-103)所示的蒽化合物由下述通式(TEMP-104)表示。

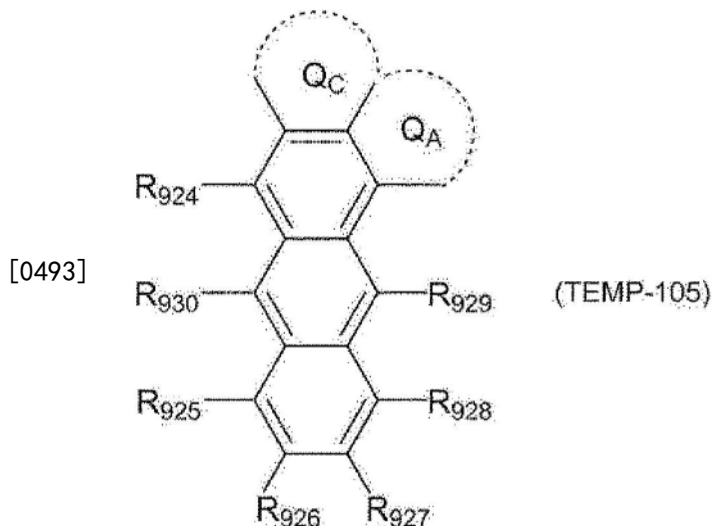
[0489] [化学式24]



[0491] “由相邻的2个以上组成的组”形成环的情况不仅包括如前述例子那样由相邻的“2

个”组成的组发生键合的情况,还包括由相邻的“3个以上”组成的组发生键合的情况。例如,是指 R_{921} 与 R_{922} 相互键合而形成环 Q_A ,并且 R_{922} 与 R_{923} 相互键合而形成环 Q_C ,由相互相邻的3个(R_{921} 、 R_{922} 和 R_{923})组成的组相互键合而形成环并耦合于萸母骨架的情况,这种情况下,上述通式(TEMP-103)所示的萸化合物由下述通式(TEMP-105)表示。在下述通式(TEMP-105)中,环 Q_A 和环 Q_C 共有 R_{922} 。

[0492] [化学式25]



[0494] 所形成的“单环”或“稠环”中,作为仅所形成的环的结构,可以为饱和的环也可以为不饱和的环。即便是“由相邻的2个组成的组中的1组”形成“单环”或“稠环”的情况下,该“单环”或“稠环”也可以形成饱和的环或不饱和的环。例如,在上述通式(TEMP-104)中所形成的环 Q_A 和环 Q_B 各自为“单环”或“稠环”。另外,在上述通式(TEMP-105)中所形成的环 Q_A 以及环 Q_C 为“稠环”。上述通式(TEMP-105)的环 Q_A 与环 Q_C 通过环 Q_A 与环 Q_C 耦合而形成了稠环。上述通式(TEMP-104)的环 Q_A 如果为苯环,则环 Q_A 为单环。上述通式(TEMP-104)的环 Q_A 如果为萘环,则环 Q_A 为稠环。

[0495] “不饱和的环”是指芳香族烃环或芳香族杂环。“饱和的环”是指脂肪族烃环或非芳香族杂环。

[0496] 作为芳香族烃环的具体例,可以举出具体例组G1中作为具体例举出的基团被氢原子封端而成的结构。

[0497] 作为芳香族杂环的具体例,可以举出具体例组G2中作为具体例举出的芳香族杂环基被氢原子封端而成的结构。

[0498] 作为脂肪族烃环的具体例,可以举出具体例组G6中作为具体例举出的基团被氢原子封端而成的结构。

[0499] “形成环”是指,仅由母骨架的多个原子形成环,或者由母骨架的多个原子与另外的1个以上的任选元素形成环。例如,上述通式(TEMP-104)所示的 R_{921} 与 R_{922} 相互键合而形成的环 Q_A 是指由 R_{921} 所键合的萸骨架的碳原子、 R_{922} 所键合的萸骨架的碳原子与1个以上的任选元素形成环。作为具体例,在由 R_{921} 与 R_{922} 形成环 Q_A 的情况之中,在由 R_{921} 所键合的萸骨架的碳原子、 R_{922} 所键合的萸骨架的碳原子和4个碳原子形成单环的不饱和的环的情况下,由 R_{921} 与 R_{922} 形成的环为苯环。

[0500] 在此,“任选元素”只要本说明书中没有另行记载,则优选为选自由碳元素、氮元

素、氧元素以及硫元素组成的组中的至少1种元素。在任选元素中(例如碳元素或氮元素的情况下),不形成环的键可以被氢原子等封端,也可以被后述的“任选取代基”所取代。在包含碳元素以外的任选元素时,所形成的环为杂环。

[0501] 构成单环或稠环的“1个以上的任选元素”只要本说明书中没有另行记载,则优选为2个以上且15个以下,更优选为3个以上且12个以下,进一步优选为3个以上且5个以下。

[0502] 本说明书中只要没有另行记载,则“单环”以及“稠环”之中优选为“单环”。

[0503] 本说明书中只要没有另行记载,则“饱和的环”以及“不饱和的环”之中优选为“不饱和的环”。

[0504] 本说明书中只要没有另行记载,则“单环”优选为苯环。

[0505] 本说明书中只要没有另行记载,则“不饱和的环”优选为苯环。

[0506] “由相邻的2个以上组成的组中的1组以上”“相互键合而形成取代或未取代的单环”的情况下或者“相互键合而形成取代或未取代的稠环”的情况下,本说明书中只要没有另行记载,则优选为由相邻的2个以上组成的组中的1组以上相互键合而形成由母骨架的多个原子和1个以上且15个以下的选自由碳元素、氮元素、氧元素以及硫元素组成的组中的至少1种元素形成的取代或未取代的“不饱和的环”。

[0507] 上述的“单环”或“稠环”具有取代基时的取代基例如为后述的“任选取代基”。上述的“单环”或“稠环”具有取代基时的取代基的具体例为在上述的“本说明书中记载的取代基”的项中所描述过的取代基。

[0508] 上述的“饱和的环”或“不饱和的环”具有取代基时的取代基例如为后述的“任选取代基”。上述的“单环”或“稠环”具有取代基时的取代基的具体例为在上述的“本说明书中记载的取代基”的项中所描述过的取代基。

[0509] 以上是对于“由相邻的2个以上组成的组中的1组以上相互键合而形成取代或未取代的单环”的情况以及“由相邻的2个以上组成的组中的1组以上相互键合而形成取代或未取代的稠环”的情况(“键合而形成环的情况”)的说明。

[0510] • 表述为“取代或未取代的”时的取代基

[0511] 在本说明书中的一个实施方式中,上述表述为“取代或未取代的”时的取代基(在本说明书中,有时称为“任选取代基”。)例如为选自由未取代的碳数1~50的烷基、

[0512] 未取代的碳数2~50的烯基、

[0513] 未取代的碳数2~50的炔基、

[0514] 未取代的成环碳数3~50的环烷基、

[0515] $-\text{Si}(\text{R}_{901})(\text{R}_{902})(\text{R}_{903})$ 、

[0516] $-\text{O}(\text{R}_{904})$ 、

[0517] $-\text{S}(\text{R}_{905})$ 、

[0518] $-\text{N}(\text{R}_{906})(\text{R}_{907})$ 、

[0519] 卤素原子、氰基、硝基、

[0520] 未取代的成环碳数6~50的芳基以及

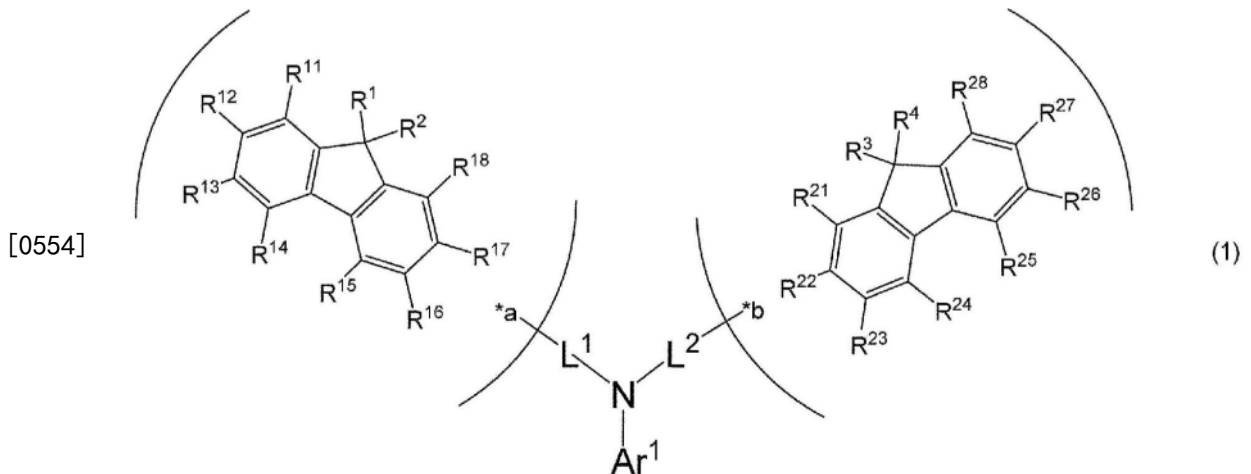
[0521] 未取代的成环原子数5~50的杂环基

[0522] 组成的组中的基团等,

[0523] 此处, $\text{R}_{901} \sim \text{R}_{907}$ 各自独立地为

- [0524] 氢原子、
- [0525] 取代或未取代的碳数1~50的烷基、
- [0526] 取代或未取代的成环碳数3~50的环烷基、
- [0527] 取代或未取代的成环碳数6~50的芳基、或者
- [0528] 取代或未取代的成环原子数5~50的杂环基。
- [0529] 在 R_{901} 存在有2个以上的情况下,2个以上的 R_{901} 相互相同或者不同,
- [0530] 在 R_{902} 存在有2个以上的情况下,2个以上的 R_{902} 相互相同或者不同,
- [0531] 在 R_{903} 存在有2个以上的情况下,2个以上的 R_{903} 相互相同或者不同,
- [0532] 在 R_{904} 存在有2个以上的情况下,2个以上的 R_{904} 相互相同或者不同,
- [0533] 在 R_{905} 存在有2个以上的情况下,2个以上的 R_{905} 相互相同或者不同,
- [0534] 在 R_{906} 存在有2个以上的情况下,2个以上的 R_{906} 相互相同或者不同,
- [0535] 在 R_{907} 存在有2个以上的情况下,2个以上的 R_{907} 相互相同或者不同。
- [0536] 在一个实施方式中,上述表述为“取代或未取代的”时的取代基为选自由
- [0537] 碳数1~50的烷基、
- [0538] 成环碳数6~50的芳基以及
- [0539] 成环原子数5~50的杂环基
- [0540] 组成的组中的基团。
- [0541] 在一个实施方式中,上述表述为“取代或未取代的”时的取代基为选自由
- [0542] 碳数1~18的烷基、
- [0543] 成环碳数6~18的芳基以及
- [0544] 成环原子数5~18的杂环基
- [0545] 组成的组中的基团。
- [0546] 上述任选取代基的各基团的具体例是在上述的“本说明书中记载的取代基”的项中所描述的取代基的具体例。
- [0547] 在本说明书中只要没有另行记载,则可以由相邻的任选取代基彼此形成“饱和的环”或“不饱和的环”,优选形成取代或未取代的饱和的五元环、取代或未取代的饱和的六元环、取代或未取代的不饱和的五元环或者取代或未取代的不饱和的六元环,更优选形成苯环。
- [0548] 在本说明书中只要没有另行记载,则任选取代基可以还具有取代基。作为任选取代基进一步具有的取代基,则与上述任选取代基同样。
- [0549] 在本说明书中,使用“AA~BB”表示的数值范围是指以“AA~BB”的前面记载的数值AA作为下限值、以“AA~BB”的后面记载的数值BB作为上限值而包含的范围。
- [0550] 以下,对本发明的化合物进行说明。
- [0551] 本发明的一个方案涉及的化合物由下述式(1)表示。
- [0552] 其中,以下有时仅将式(1)和后述的包含于式(1)中的式子所示的本发明的化合物称为“发明化合物(1)”。另外,本发明的另一方案涉及的化合物由后述的式(2)表示。以下有时仅将后述的式(2)和包含于后述的式(2)中的式子所示的本发明的化合物称为“发明化合物(2)”。此外,意思是“发明化合物(1)”和“发明化合物(2)”这两者的情况下,有时将这些仅称为“发明化合物”。

[0553] [化学式26]



[0555] 以下,对式(1)和后述的包含于式(1)中的式子中的符号进行说明。需要说明的是,相同的符号具有相同的含义。

[0556] 式(1)中,

[0557] R^1 和 R^2 中的一者为甲基,另一者为未取代的苯基,

[0558] R^1 与 R^2 不相互键合因而不形成环结构。

[0559] R^3 和 R^4 中的一者为甲基,另一者为未取代的苯基,

[0560] R^3 与 R^4 不相互键合因而不形成环结构。

[0561] $R^{11} \sim R^{18}$ 和 $R^{21} \sim R^{28}$ 为氢原子。

[0562] 其中,

[0563] 选自 $R^{11} \sim R^{18}$ 中的1个为与*a键合的单键、

[0564] 选自 $R^{21} \sim R^{28}$ 中的1个为与*b键合的单键。

[0565] 优选选自 R^{12} 、 R^{13} 、 R^{14} 、 R^{15} 、 R^{16} 和 R^{17} 中的1个为与*a键合的单键,更优选选自 R^{12} 和 R^{17} 中的1个为与*a键合的单键。

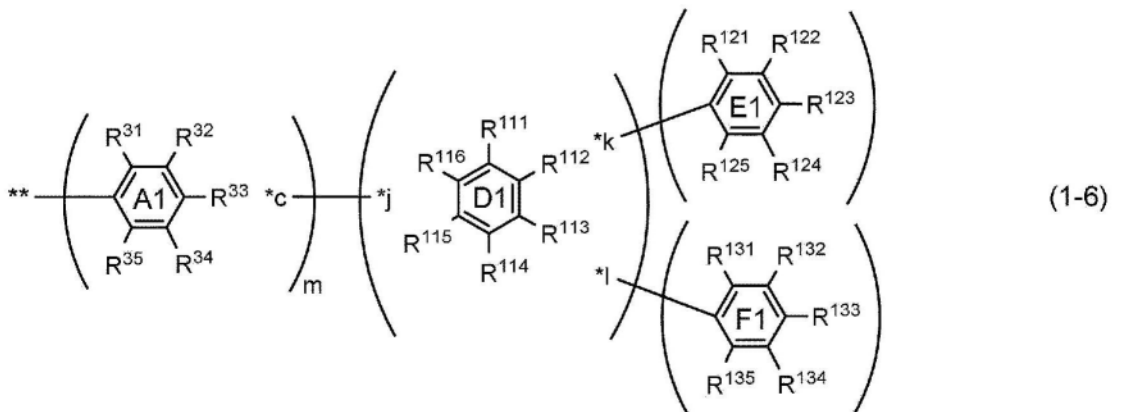
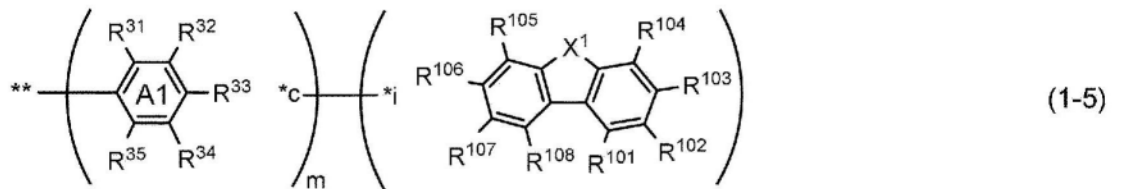
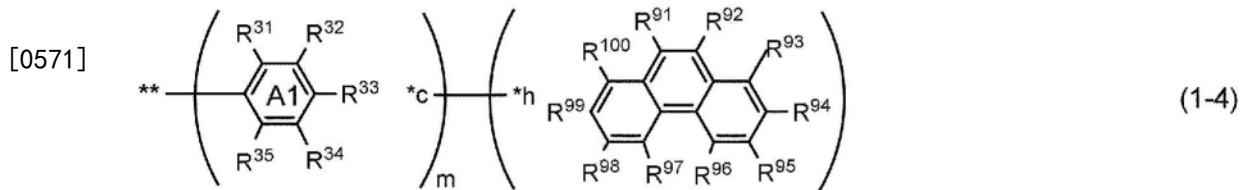
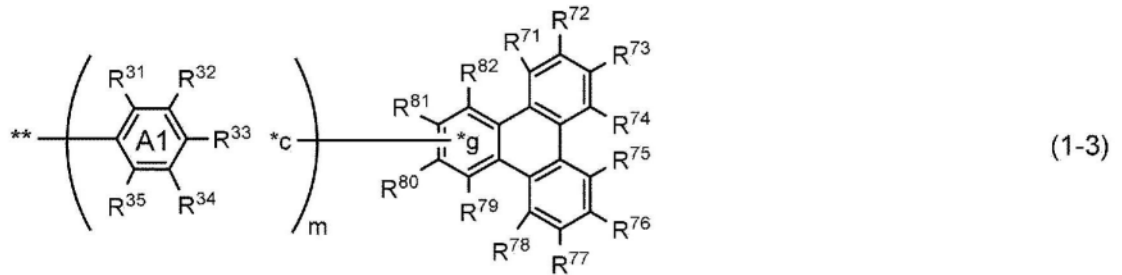
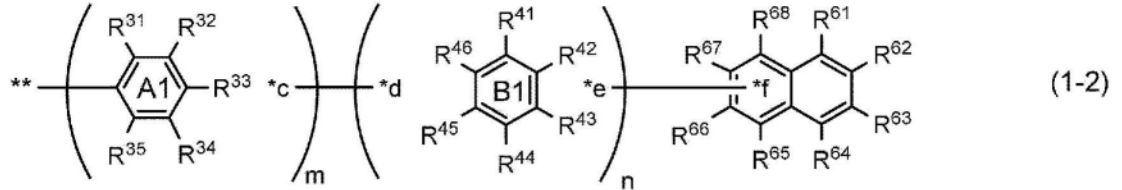
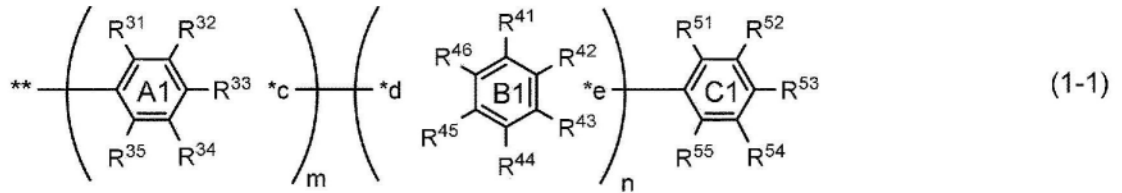
[0566] 优选选自 R^{22} 、 R^{23} 、 R^{24} 、 R^{25} 、 R^{26} 和 R^{27} 中的1个为与*b键合的单键,更优选选自 R^{22} 和 R^{27} 中的1个为与*b键合的单键。

[0567] L^1 和 L^2 各自独立地为单键、或者取代或未取代的亚苯基。

[0568] L^1 和 L^2 优选为单键。

[0569] Ar^1 为式(1-1)~(1-6)中的任一式所示的基团。

[0570] [化学式27]



[0572] 式(1-1) ~ (1-6)中,

[0573] R³¹ ~ R³⁵, R⁴¹ ~ R⁴⁶, R⁵¹ ~ R⁵⁵, R⁶¹ ~ R⁶⁸, R⁷¹ ~ R⁸², R⁹¹ ~ R¹⁰⁰, R¹⁰¹ ~ R¹⁰⁸, R¹¹¹ ~ R¹¹⁶, R¹²¹ ~ R¹²⁵和R¹³¹ ~ R¹³⁵各自独立地为氢原子、取代或未取代的碳数1 ~ 50的烷基、取代或未取代

的成环碳数3~50的环烷基、卤素原子、氰基、硝基、取代或未取代的成环碳数6~50的芳基、或者取代或未取代的成环原子数5~50的杂环基。

[0574] $R^{31} \sim R^{35}$ 、 $R^{41} \sim R^{46}$ 、 $R^{51} \sim R^{55}$ 、 $R^{61} \sim R^{68}$ 、 $R^{71} \sim R^{82}$ 、 $R^{91} \sim R^{100}$ 、 $R^{101} \sim R^{108}$ 、 $R^{111} \sim R^{116}$ 、 $R^{121} \sim R^{125}$ 和 $R^{131} \sim R^{135}$ 各自独立地优选为氢原子、取代或未取代的碳数1~50的烷基、取代或未取代的成环碳数3~50的环烷基、取代或未取代的成环碳数6~50的芳基、或者取代或未取代的成环原子数5~50的杂环基,更优选为氢原子、取代或未取代的碳数1~50的烷基、取代或未取代的成环碳数6~50的芳基、或者取代或未取代的成环原子数5~50的杂环基,进一步优选为氢原子。

[0575] $R^{31} \sim R^{35}$ 、 $R^{41} \sim R^{46}$ 、 $R^{51} \sim R^{55}$ 、 $R^{61} \sim R^{68}$ 、 $R^{71} \sim R^{82}$ 、 $R^{91} \sim R^{100}$ 、 $R^{101} \sim R^{108}$ 、 $R^{111} \sim R^{116}$ 、 $R^{121} \sim R^{125}$ 和 $R^{131} \sim R^{135}$ 表示的上述取代或未取代的碳数1~50的烷基的详情与在上文中的“本说明书中记载的取代基”的项中的记载相同。

[0576] $R^{31} \sim R^{35}$ 、 $R^{41} \sim R^{46}$ 、 $R^{51} \sim R^{55}$ 、 $R^{61} \sim R^{68}$ 、 $R^{71} \sim R^{82}$ 、 $R^{91} \sim R^{100}$ 、 $R^{101} \sim R^{108}$ 、 $R^{111} \sim R^{116}$ 、 $R^{121} \sim R^{125}$ 和 $R^{131} \sim R^{135}$ 表示的上述未取代的烷基优选为甲基、乙基、正丙基、异丙基、正丁基、异丁基、仲丁基、或者叔丁基,更优选为甲基、乙基、异丙基、或者叔丁基,进一步优选为甲基或者叔丁基。

[0577] $R^{31} \sim R^{35}$ 、 $R^{41} \sim R^{46}$ 、 $R^{51} \sim R^{55}$ 、 $R^{61} \sim R^{68}$ 、 $R^{71} \sim R^{82}$ 、 $R^{91} \sim R^{100}$ 、 $R^{101} \sim R^{108}$ 、 $R^{111} \sim R^{116}$ 、 $R^{121} \sim R^{125}$ 和 $R^{131} \sim R^{135}$ 表示的上述取代或未取代的成环碳数3~50的环烷基的详情与在上文中的“本说明书中记载的取代基”的项中的记载相同。

[0578] $R^{31} \sim R^{35}$ 、 $R^{41} \sim R^{46}$ 、 $R^{51} \sim R^{55}$ 、 $R^{61} \sim R^{68}$ 、 $R^{71} \sim R^{82}$ 、 $R^{91} \sim R^{100}$ 、 $R^{101} \sim R^{108}$ 、 $R^{111} \sim R^{116}$ 、 $R^{121} \sim R^{125}$ 和 $R^{131} \sim R^{135}$ 表示的上述未取代的环烷基优选为环丙基、环丁基、环戊基、环己基、1-金刚烷基、2-金刚烷基、1-降冰片基、或者2-降冰片基,更优选为环丙基、环丁基、环戊基、或者环己基,进一步优选为环戊基或者环己基。

[0579] $R^{31} \sim R^{35}$ 、 $R^{41} \sim R^{46}$ 、 $R^{51} \sim R^{55}$ 、 $R^{61} \sim R^{68}$ 、 $R^{71} \sim R^{82}$ 、 $R^{91} \sim R^{100}$ 、 $R^{101} \sim R^{108}$ 、 $R^{111} \sim R^{116}$ 、 $R^{121} \sim R^{125}$ 和 $R^{131} \sim R^{135}$ 表示的上述卤素原子的详情与在上文中的“本说明书中记载的取代基”的项中的记载相同,优选为氟原子。

[0580] $R^{31} \sim R^{35}$ 、 $R^{41} \sim R^{46}$ 、 $R^{51} \sim R^{55}$ 、 $R^{61} \sim R^{68}$ 、 $R^{71} \sim R^{82}$ 、 $R^{91} \sim R^{100}$ 、 $R^{101} \sim R^{108}$ 、 $R^{111} \sim R^{116}$ 、 $R^{121} \sim R^{125}$ 和 $R^{131} \sim R^{135}$ 表示的上述取代或未取代的成环碳数6~50的芳基的详情与在上文中的“本说明书中记载的取代基”中的记载相同。

[0581] $R^{31} \sim R^{35}$ 、 $R^{41} \sim R^{46}$ 、 $R^{51} \sim R^{55}$ 、 $R^{61} \sim R^{68}$ 、 $R^{71} \sim R^{82}$ 、 $R^{91} \sim R^{100}$ 、 $R^{101} \sim R^{108}$ 、 $R^{111} \sim R^{116}$ 、 $R^{121} \sim R^{125}$ 和 $R^{131} \sim R^{135}$ 表示的上述未取代的芳基优选为苯基、联苯基、萘基、或者菲基,更优选为苯基、联苯基、或者萘基,进一步优选为苯基。

[0582] $R^{31} \sim R^{35}$ 、 $R^{41} \sim R^{46}$ 、 $R^{51} \sim R^{55}$ 、 $R^{61} \sim R^{68}$ 、 $R^{71} \sim R^{82}$ 、 $R^{91} \sim R^{100}$ 、 $R^{101} \sim R^{108}$ 、 $R^{111} \sim R^{116}$ 、 $R^{121} \sim R^{125}$ 和 $R^{131} \sim R^{135}$ 表示的上述取代或未取代的成环原子数5~50的杂环基的详情与在上文中的“本说明书中记载的取代基”中的记载相同。

[0583] 该未取代的杂环基优选为二苯并呋喃基、或者二苯并噻吩基。

[0584] X^1 为氧原子、硫原子、或者 CR^aR^b ,

[0585] R^a 和 R^b 各自独立地为氢原子、甲基、或者取代或未取代的苯基, R^a 与 R^b 可以相互键合而形成取代或未取代的环。

[0586] 在本发明的一个方案中, X^1 优选为氧原子。在另一方案中, X^1 优选为硫原子。在此外

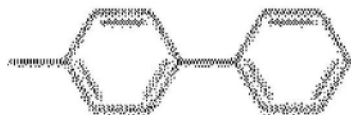
与 * c 键合的单键。

[0608] 另外,在 R^{12} 或 R^{17} 为与 * a 键合的单键、 R^{22} 或 R^{27} 为与 * b 键合的单键、m 为 0 且 n 为 1 时,式 (1-1) 中, R^{46} 为与 * d 键合的单键,选自 R^{41} 、 R^{42} 、 R^{44} 和 R^{45} 中的 1 个为与 * e 键合的单键,优选选自 R^{41} 和 R^{45} 中的 1 个为与 * e 键合的单键。

[0609] 需要说明的是,对联苯基是指下述式。

[0610] [化学式 28]

[0611]



[0612] 式 (1-1) 和 (1-2) 中,在本发明的一个方案中,优选 m 为 0 且 n 为 0,在另一方案中,优选 m 为 0 且 n 为 1,在此外的另一方案中,优选 m 为 1 且 n 为 0,在此外的另一方案中,优选 m 为 1 且 n 为 1。

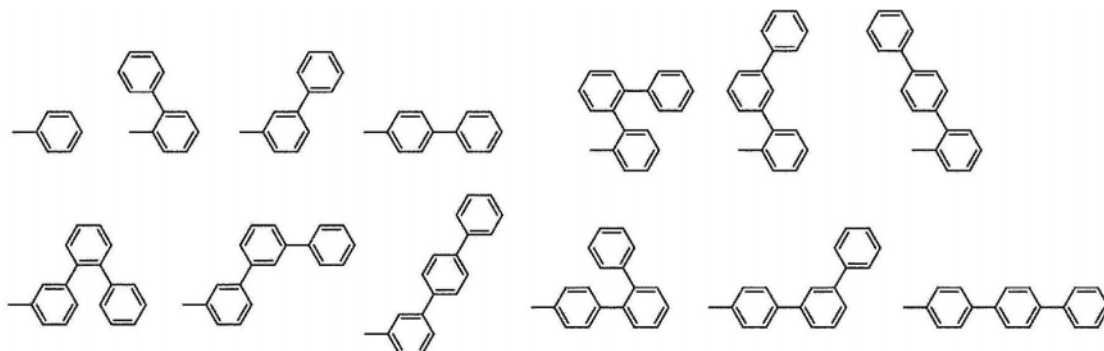
[0613] 式 (1-1) 中,优选 m 或者 n 为 0。

[0614] 式 (1-3) ~ (1-6) 中,在本发明的一个方案中,优选 m 为 0,在另一方案中,优选 m 为 1。

[0615] 式 (1-1) 所示的基团更优选为选自下述式的取代或未取代的基团。

[0616] [化学式 29]

[0617]

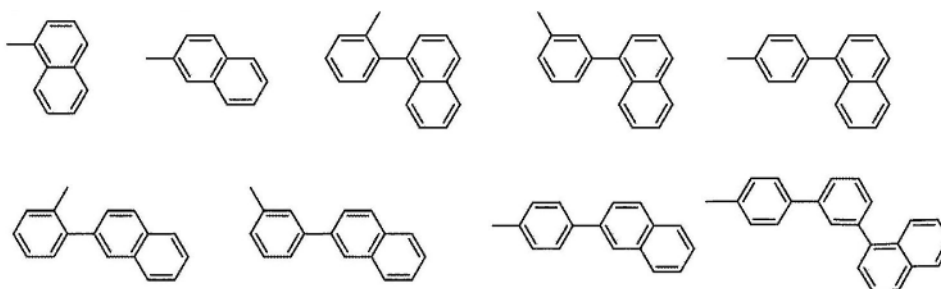


[0618] (式中,省略了任意的取代基。)

[0619] 式 (1-2) 所示的基团优选为选自下述式的取代或未取代的基团。

[0620] [化学式 30]

[0621]

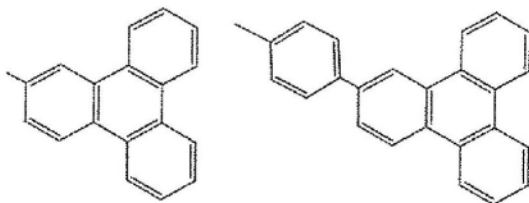


[0622] (式中,省略了任意的取代基。)

[0623] 式 (1-3) 所示的基团优选为选自下述式的取代或未取代的基团。

[0624] [化学式 31]

[0625]

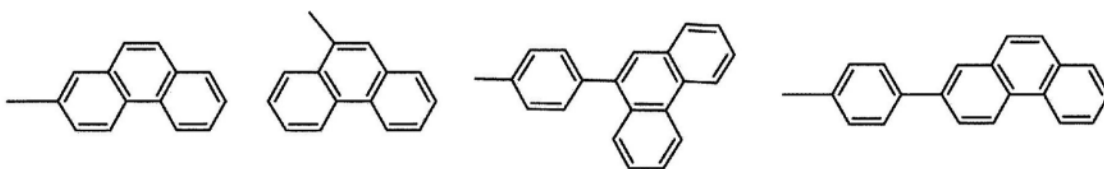


[0626] (式中,省略了任意的取代基。)

[0627] 式(1-4)所示的基团优选为选自下述式的未取代的基团。

[0628] [化学式32]

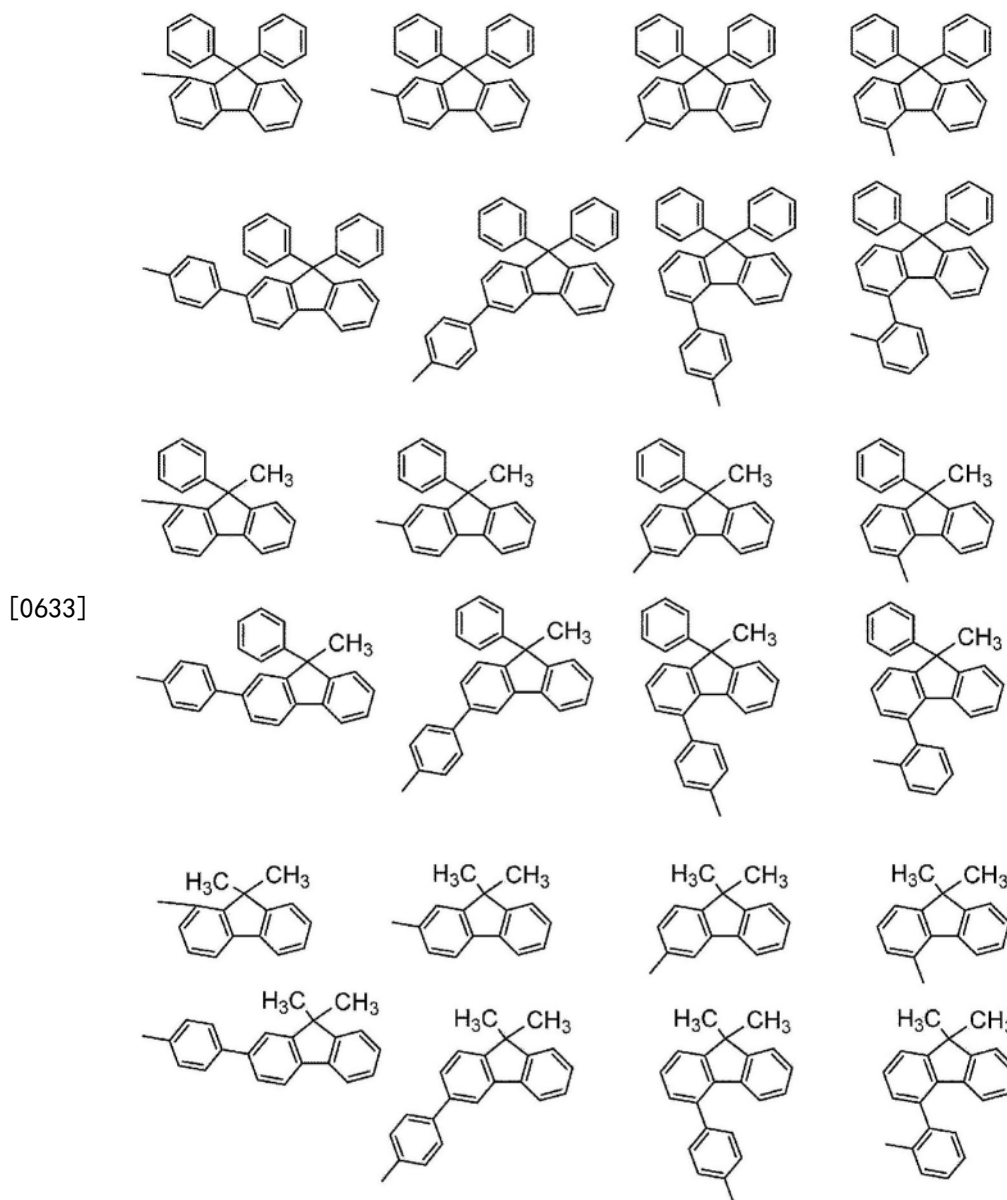
[0629]



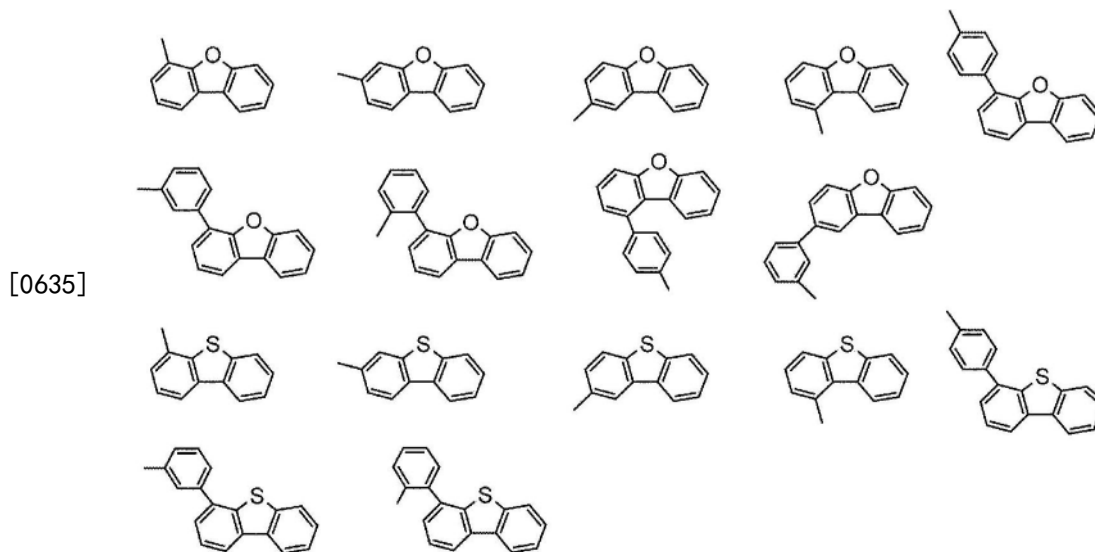
[0630] (式中,省略了任意的取代基。)

[0631] 式(1-5)所示的基团优选为选自下述式的取代或未取代的基团。

[0632] [化学式33]



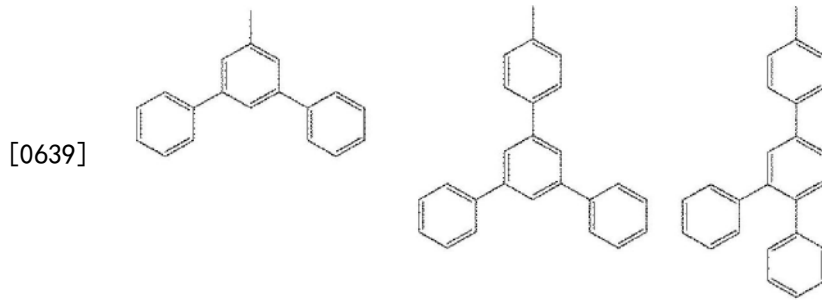
[0634] [化学式34]



[0636] (式中,省略了任选的取代基。)

[0637] 式(1-6)所示的基团优选为选自下述式的取代或未取代的基团。

[0638] [化学式35]



[0640] (式中,省略了任选的取代基。)

[0641] Ar^1 优选为式(1-1)、(1-2)、(1-5)、和(1-6)中的任一式所示的基团,更优选为式(1-1)所示的基团。

[0642] 作为本发明的一个方案,

[0643] (1-1)并非与*c键合的单键的 $R^{31} \sim R^{35}$ 可以均为氢,

[0644] (1-2)并非与*d键合的单键且并非与*e键合的单键的 $R^{41} \sim R^{46}$ 可以均为氢原子,

[0645] (1-3) $R^{51} \sim R^{55}$ 可以均为氢原子,

[0646] (1-4) $R^{61} \sim R^{64}$ 、以及并非与*f键合的单键的 $R^{65} \sim R^{68}$ 可以均为氢原子,

[0647] (1-5) $R^{71} \sim R^{78}$ 、以及并非与*g键合的单键的 $R^{79} \sim R^{82}$ 可以均为氢原子,

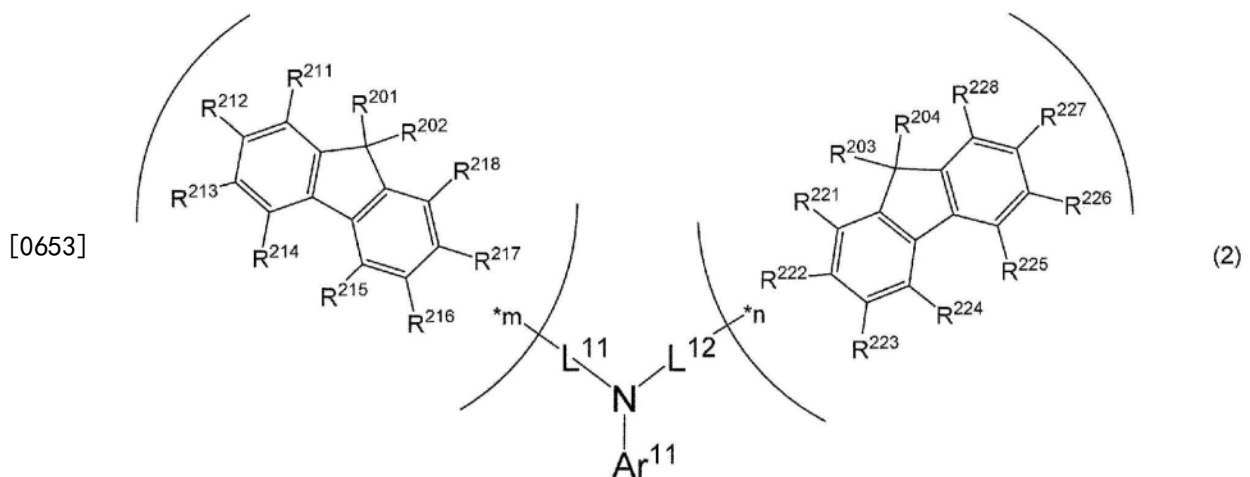
[0648] (1-6) $R^{92} \sim R^{96}$ 、以及并非与*h键合的单键的 R^{91} 和 $R^{97} \sim R^{100}$ 可以均为氢原子,

[0649] (1-7) $R^{101} \sim R^{104}$ 、以及并非与*i键合的单键的 $R^{105} \sim R^{108}$ 可以均为氢原子,

[0650] (1-8)并非与*j键合的单键、并非与*k键合的单键且并非与*l键合的单键的 $R^{111} \sim R^{116}$ 、 $R^{121} \sim R^{125}$ 和 $R^{131} \sim R^{135}$ 可以均为氢原子。

[0651] 本发明的另一方案涉及的化合物由下述式(2)表示。

[0652] [化学式36]

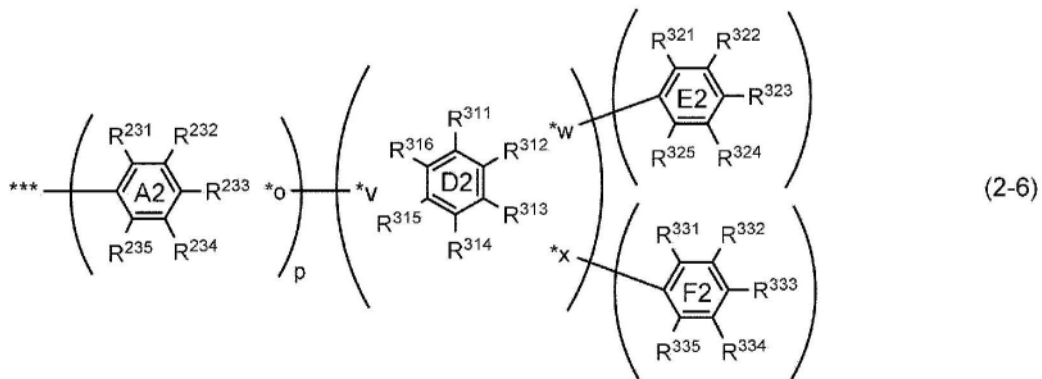
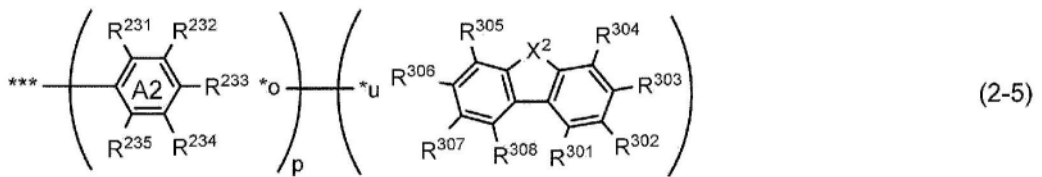
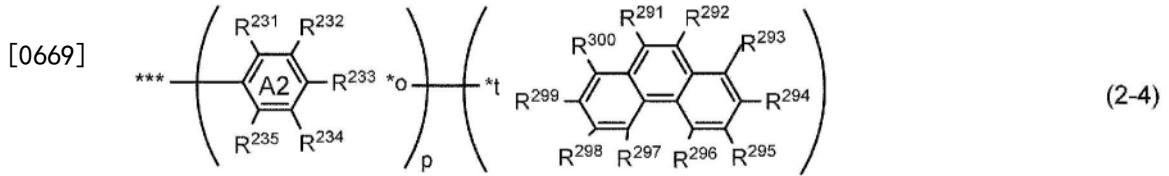
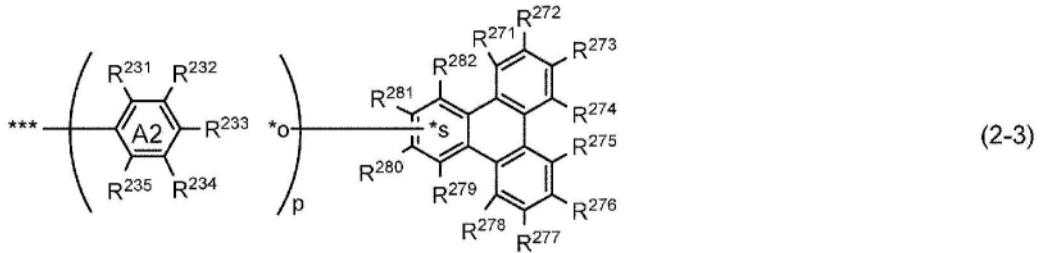
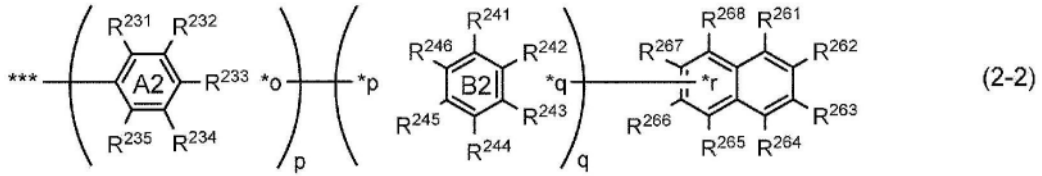
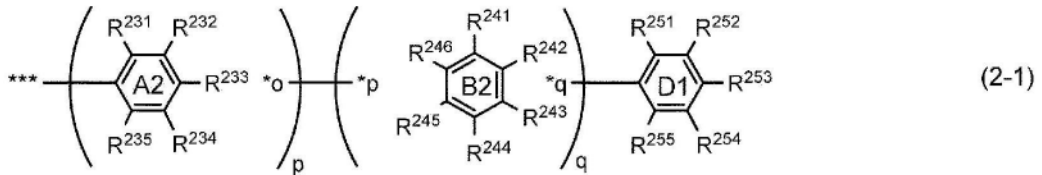


[0654] 以下,对式(2)和后述的包含于式(2)中的式子中的符号进行说明。需要说明的是,相同的符号具有相同的含义。

[0655] 式(2)中,

[0656] 选自 $R^{201} \sim R^{204}$ 中的1个为甲基,选自 $R^{201} \sim R^{204}$ 中的另3个为未取代的苯基,

- [0657] R^{201} 与 R^{202} 不相互键合因而不形成环结构,
- [0658] R^{203} 与 R^{204} 不相互键合因而不形成环结构。
- [0659] $R^{211} \sim R^{218}$ 和 $R^{221} \sim R^{228}$ 为氢原子。
- [0660] 其中,
- [0661] 选自 $R^{211} \sim R^{218}$ 中的1个为与* m键合的单键,
- [0662] 选自 $R^{221} \sim R^{228}$ 中的1个为与* n键合的单键。
- [0663] 优选选自 R^{212} 、 R^{213} 、 R^{214} 、 R^{215} 、 R^{216} 和 R^{217} 中的1个为与* m键合的单键,更优选选自 R^{212} 和 R^{217} 中的1个为与* m键合的单键。
- [0664] 优选选自 R^{222} 、 R^{223} 、 R^{224} 、 R^{225} 、 R^{226} 和 R^{227} 中的1个为与* n键合的单键,更优选选自 R^{222} 和 R^{227} 中的1个为与* n键合的单键。
- [0665] L^{11} 和 L^{12} 各自独立地为单键、或者取代或未取代的亚苯基。
- [0666] L^{11} 和 L^{12} 优选为单键。
- [0667] Ar^{11} 为式(2-1)~(2-6)中的任一式所示的基团。
- [0668] [化学式37]



[0670] 式(2-1) ~ (2-6)中,

[0671] $R^{231} \sim R^{235}$ 、 $R^{241} \sim R^{246}$ 、 $R^{251} \sim R^{255}$ 、 $R^{261} \sim R^{268}$ 、 $R^{271} \sim R^{282}$ 、 $R^{291} \sim R^{300}$ 、 $R^{301} \sim R^{308}$ 、 $R^{311} \sim R^{316}$ 、 $R^{321} \sim R^{325}$ 和 $R^{331} \sim R^{335}$ 各自独立地为氢原子、取代或未取代的碳数1~50的烷基、取代或未取代的成环碳数3~50的环烷基、卤素原子、氰基、硝基、取代或未取代的成环碳数6~50的芳基、或者取代或未取代的成环原子数5~50的杂环基。

[0672] $R^{231} \sim R^{235}$ 、 $R^{241} \sim R^{246}$ 、 $R^{251} \sim R^{255}$ 、 $R^{261} \sim R^{268}$ 、 $R^{271} \sim R^{282}$ 、 $R^{291} \sim R^{300}$ 、 $R^{301} \sim R^{308}$ 、

$R^{311} \sim R^{316}$ 、 $R^{321} \sim R^{325}$ 和 $R^{331} \sim R^{335}$ 各自独立地优选为氢原子、取代或未取代的碳数1~50的烷基、取代或未取代的成环碳数3~50的环烷基、取代或未取代的成环碳数6~50的芳基、或者取代或未取代的成环原子数5~50的杂环基,更优选为氢原子、取代或未取代的碳数1~50的烷基、取代或未取代的成环碳数6~50的芳基、或者取代或未取代的成环原子数5~50的杂环基,进一步优选为氢原子。

[0673] $R^{231} \sim R^{235}$ 、 $R^{241} \sim R^{246}$ 、 $R^{251} \sim R^{255}$ 、 $R^{261} \sim R^{268}$ 、 $R^{271} \sim R^{282}$ 、 $R^{291} \sim R^{300}$ 、 $R^{301} \sim R^{308}$ 、 $R^{311} \sim R^{316}$ 、 $R^{321} \sim R^{325}$ 和 $R^{331} \sim R^{335}$ 表示的各基团的详情与针对 $R^{31} \sim R^{35}$ 、 $R^{41} \sim R^{46}$ 、 $R^{51} \sim R^{55}$ 、 $R^{61} \sim R^{68}$ 、 $R^{71} \sim R^{82}$ 、 $R^{91} \sim R^{100}$ 、 $R^{101} \sim R^{108}$ 、 $R^{111} \sim R^{116}$ 、 $R^{121} \sim R^{125}$ 和 $R^{131} \sim R^{135}$ 所记载的对应基团的详情相同,优选基团等也均相同。

[0674] X^2 为氧原子、硫原子、或者 CR^cR^d ,

[0675] R^c 和 R^d 各自独立地为氢原子、或者甲基, R^c 与 R^d 不相互键合因而不形成环结构。

[0676] 在本发明的一个方案中, X^2 优选为氧原子。在另一方案中, X^2 优选为硫原子。在此外的另一方案中, X^2 优选为 CR^cR^d , R^c 和 R^d 优选为甲基、或者取代或未取代的苯基。

[0677] 选自 $R^{231} \sim R^{235}$ 中的1个为与*o键合的单键,

[0678] 选自 $R^{241} \sim R^{246}$ 中的1个为与*p键合的单键,选自 $R^{241} \sim R^{246}$ 中的另1个为与*q键合的单键,

[0679] 选自 $R^{265} \sim R^{268}$ 中的1个为与*r键合的单键,

[0680] 选自 $R^{279} \sim R^{282}$ 中的1个为与*s键合的单键,

[0681] 选自 R^{291} 和 $R^{297} \sim R^{300}$ 中的1个为与*t键合的单键,

[0682] 选自 $R^{305} \sim R^{308}$ 中的1个为与*u键合的单键,

[0683] 选自 $R^{311} \sim R^{316}$ 中的1个为与*v键合的单键,选自 $R^{311} \sim R^{316}$ 中的另1个为与*w键合的单键,选自 $R^{311} \sim R^{316}$ 中的此外的另1个为与*x键合的单键。

[0684] 选自并非上述单键的 $R^{231} \sim R^{235}$ 中的相邻的2个、选自并非上述任一单键的 $R^{241} \sim R^{246}$ 中的相邻的2个、选自并非上述任一单键的 $R^{251} \sim R^{255}$ 中的相邻的2个、选自并非上述任一单键的 $R^{261} \sim R^{268}$ 中的相邻的2个、选自并非上述任一单键的 $R^{271} \sim R^{282}$ 中的相邻的2个、选自并非上述任一单键的 $R^{291} \sim R^{300}$ 中的相邻的2个、选自并非上述任一单键的 $R^{301} \sim R^{308}$ 中的相邻的2个、选自并非上述任一单键的 $R^{311} \sim R^{316}$ 中的相邻的2个、选自 $R^{321} \sim R^{325}$ 中的相邻的2个、选自 $R^{331} \sim R^{335}$ 中的相邻的2个不相互键合因而不形成环结构。

[0685] 苯环A2与苯环B2、苯环A2与苯环C2、苯环A2与苯环D2、苯环A2与苯环E2、苯环A2与苯环F2、苯环B2与苯环C2、苯环D2与苯环E2、以及苯环D2与苯环F2不交联。

[0686] ***表示与中心氮原子N的键合位置,

[0687] p为0或1,q为0或1,

[0688] 式(2-1)和(2-2)中,在p为0且q为0时,*q与中心氮原子N键合,在p为0且q为1时,*o与中心氮原子N键合,在p为1且q为0时,*q与选自 $R^{231} \sim R^{235}$ 中的1个键合,

[0689] 式(2-3)~(2-6)中,在p为0时,*o与中心氮原子N键合,

[0690] 式(2-5)中,在 X^2 为 CR^cR^d 、p为0时,选自 L^{11} 和 L^{12} 中的至少1个为取代或未取代的亚苯基,

[0691] 式(2-5)中,在 X^2 为氧原子、p为1时,选自 $R^{306} \sim R^{308}$ 中的1个为与*u键合的单键,

[0692] 在 R^{21^2} 或 R^{21^7} 为与*m键合的单键、 R^{22^2} 或 R^{22^7} 为与*n键合的单键的情况下,式(2-

1) 排除对联苯基。

[0693] 即,在 R^{212} 或 R^{217} 为与* m键合的单键、 R^{222} 或 R^{227} 为与* n键合的单键、m为1且n为0时,式(2-1)中,选自 R^{231} 、 R^{232} 、 R^{234} 和 R^{235} 中的1个为与* o键合的单键,优选选自 R^{231} 和 R^{235} 中的1个为与* o键合的单键。

[0694] 另外,在 R^{212} 或 R^{217} 为与* m键合的单键、 R^{222} 或 R^{227} 为与* n键合的单键、m为0且n为1时,式(2-1)中, R^{246} 为与* p键合的单键,选自 R^{241} 、 R^{242} 、 R^{244} 和 R^{245} 中的1个为与* q键合的单键,优选选自 R^{241} 和 R^{245} 中的1个为与* q键合的单键。

[0695] 式(2-1)和(2-2)中,在本发明的一个方案中,优选m为0且n为0,在另一方案中,优选m为0且n为1,在此外的另一方案中,优选m为1且n为0,在此外的另一方案中,优选m为1且n为1。

[0696] 式(2-1)中,优选m或者n为0。

[0697] 式(1-3)~(1-6)中,在本发明的一个方案中,m优选为0,在另一方案中,优选m为1。

[0698] 式(2-1)所示的优选基团与式(1-1)所示的优选基团相同。

[0699] 式(2-2)所示的优选基团与式(1-2)所示的优选基团相同。

[0700] 式(2-3)所示的优选基团与式(1-3)所示的优选基团相同。

[0701] 式(2-4)所示的优选基团与式(1-4)所示的优选基团相同。

[0702] 式(2-5)所示的优选基团与式(1-5)所示的优选基团相同。

[0703] 式(1-6)所示的优选基团与式(1-6)所示的优选基团相同。

[0704] Ar^{11} 优选为式(2-1)、(2-2)、(2-5)和(2-6)中的任一式所示的基团,更优选为式(2-1)所示的基团。

[0705] 作为本发明的一个方案,

[0706] (2-1)并非与* o键合的单键的 $R^{231} \sim R^{235}$ 可以均为氢原子,

[0707] (2-2)并非与* p键合的单键且并非与* q键合的单键的 $R^{241} \sim R^{246}$ 可以均为氢原子,

[0708] (2-3) $R^{251} \sim R^{255}$ 可以均为氢原子,

[0709] (2-4) $R^{261} \sim R^{264}$ 、以及并非与* r键合的单键的 $R^{265} \sim R^{268}$ 可以均为氢原子,

[0710] (2-5) $R^{271} \sim R^{278}$ 、以及并非与* s键合的单键的 $R^{279} \sim R^{282}$ 可以均为氢原子,

[0711] (2-6) $R^{292} \sim R^{296}$ 、以及并非与* t键合的单键的 R^{291} 和 $R^{297} \sim R^{300}$ 可以均为氢原子,

[0712] (2-7) $R^{301} \sim R^{304}$ 、以及并非与* u键合的单键的 $R^{305} \sim R^{308}$ 可以均为氢原子,

[0713] (2-8)并非与* v键合的单键、并非与* w键合的单键且并非与* x键合的单键的 $R^{311} \sim R^{316}$ 、 $R^{321} \sim R^{325}$ 和 $R^{331} \sim R^{335}$ 可以均为氢原子。

[0714] 如上所述,在本说明书中使用的“氢原子”包括氕原子、氘原子、以及氚原子。因此,发明化合物可以包含天然来源的氘原子。

[0715] 另外,可以通过使原料化合物的一部分或者全部使用经氘代的化合物而向发明化合物中刻意导入氘原子。因此,在本发明的一个方案中,发明化合物包含至少1个氘原子。即,发明化合物(1)可以为式(1)所示的化合物,该化合物中所包含的氢原子的至少一个为氘原子,发明化合物(2)可以为式(2)所示的化合物,该化合物中所包含的氢原子的至少一个为氘原子。

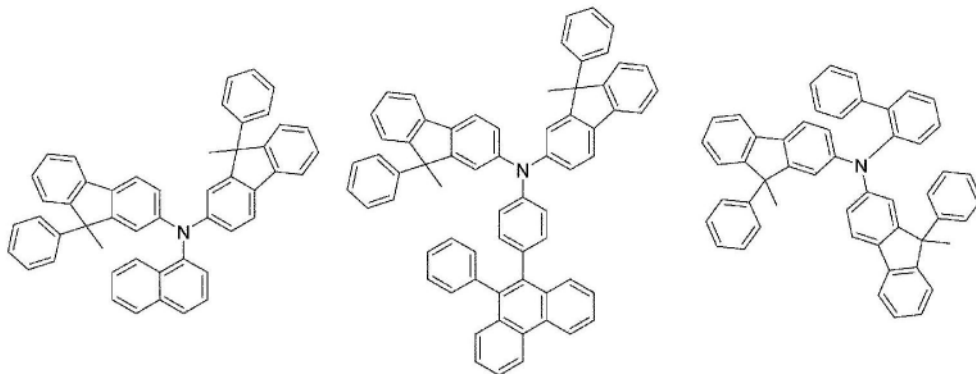
[0716] 在式(1)所示的化合物中,

- [0717] 选自 R^1 和 R^2 中的任一个表示的甲基、未取代的苯基所具有的氢原子；
- [0718] R^3 和 R^4 中的任一个表示的甲基、未取代的苯基所具有的氢原子；
- [0719] $R^{11} \sim R^{18}$ 和 $R^{21} \sim R^{28}$ 中的任一个表示的氢原子；
- [0720] L^1 和 L^2 中的任一个表示的取代或未取代的亚苯基所具有的氢原子；
- [0721] $R^{31} \sim R^{35}$ 、 $R^{41} \sim R^{46}$ 、 $R^{51} \sim R^{55}$ 、 $R^{61} \sim R^{68}$ 、 $R^{71} \sim R^{82}$ 、 $R^{91} \sim R^{100}$ 、 $R^{101} \sim R^{108}$ 、 $R^{111} \sim R^{116}$ 、 $R^{121} \sim R^{125}$ 和 $R^{131} \sim R^{135}$ 中的任一个表示的氢原子； $R^{31} \sim R^{35}$ 、 $R^{41} \sim R^{46}$ 、 $R^{51} \sim R^{55}$ 、 $R^{61} \sim R^{68}$ 、 $R^{71} \sim R^{82}$ 、 $R^{91} \sim R^{100}$ 、 $R^{101} \sim R^{108}$ 、 $R^{111} \sim R^{116}$ 、 $R^{121} \sim R^{125}$ 和 $R^{131} \sim R^{135}$ 中的任一个表示的取代或未取代的烷基、环烷基、芳基、杂环基所具有的氢原子；
- [0722] R^a 和 R^b 中的任一个表示的氢原子； R^a 和 R^b 中的任一个表示的甲基、取代或未取代的苯基所具有的氢原子
- [0723] 中的至少一个氢原子可以为氘原子。
- [0724] 在式(2)所示的化合物中，
- [0725] 选自 $R^{201} \sim R^{204}$ 中的任一个表示的甲基、未取代的苯基所具有的氢原子；
- [0726] $R^{211} \sim R^{218}$ 和 $R^{221} \sim R^{228}$ 中的任一个表示的氢原子；
- [0727] L^{11} 和 L^{12} 中的任一个表示的取代或未取代的亚苯基所具有的氢原子；
- [0728] $R^{231} \sim R^{235}$ 、 $R^{241} \sim R^{246}$ 、 $R^{251} \sim R^{255}$ 、 $R^{261} \sim R^{268}$ 、 $R^{271} \sim R^{282}$ 、 $R^{291} \sim R^{300}$ 、 $R^{301} \sim R^{308}$ 、 $R^{311} \sim R^{316}$ 、 $R^{321} \sim R^{325}$ 和 $R^{331} \sim R^{335}$ 中的任一个表示的氢原子； $R^{231} \sim R^{235}$ 、 $R^{241} \sim R^{246}$ 、 $R^{251} \sim R^{255}$ 、 $R^{261} \sim R^{268}$ 、 $R^{271} \sim R^{282}$ 、 $R^{291} \sim R^{300}$ 、 $R^{301} \sim R^{308}$ 、 $R^{311} \sim R^{316}$ 、 $R^{321} \sim R^{325}$ 和 $R^{331} \sim R^{335}$ 中的任一个表示的取代或未取代的烷基、环烷基、芳基、杂环基所具有的氢原子；
- [0729] R^c 和 R^d 中的任一个表示的氢原子； R^c 和 R^d 中的任一个表示的甲基、取代或未取代的苯基所具有的氢原子
- [0730] 中的至少一个氢原子可以为氘原子。
- [0731] 发明化合物的氘代率依赖于使用的原料化合物的氘代率。即便使用规定的氘代率的原料，也可能以天然来源的一定的比例包含氘同位素。因此，对于下述所示的发明化合物的氘代率的方案而言，相对于仅对化学式中表示的氘原子的数量进行计数而求出的比例，包括考虑了天然来源的微量的同位素的比率。
- [0732] 发明化合物的氘代率优选为1%以上、更优选为3%以上、进一步优选为5%以上、更进一步优选为10%以上、更进一步优选为50%以上。
- [0733] 发明化合物可以为包含经氘代的化合物和未经氘代的化合物的混合物、具有不同氘代率的2种以上的化合物的混合物。这样的混合物的氘代率优选为1%以上，更优选为3%以上，进一步优选为5%以上，更进一步优选为10%以上，更进一步优选为50%以上，并且小于100%。
- [0734] 另外，发明化合物中的氘原子数相对于全部氢原子数的各自的比例优选为1%以上，更优选为3%以上，进一步优选为5%以上，更进一步优选为10%以上，并且为100%以下。
- [0735] 上述各式的定义中所包含的表述为“取代或未取代的”时的取代基(任选的取代基)的详情与在“表述为“取代或未取代的”时的取代基”中的记载相同。
- [0736] 对于发明化合物，本领域技术人员可以参考后述的合成例和公知的合成方法容易地制造。

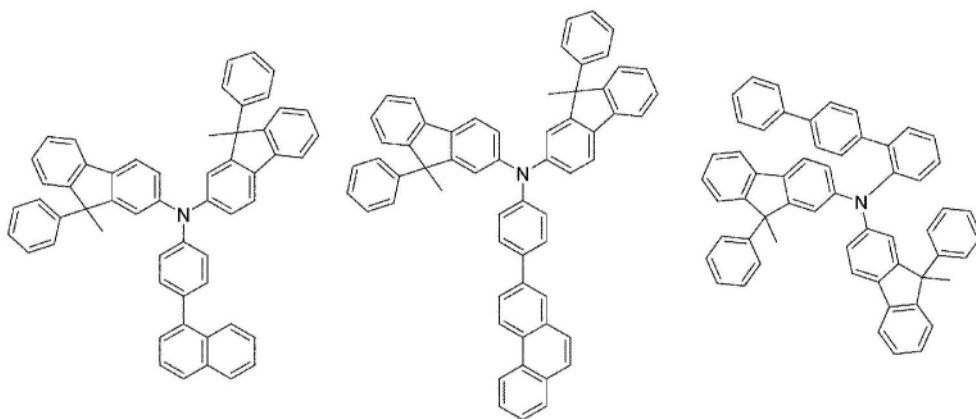
[0737] 以下示出发明化合物的具体例,不限于以下的例示化合物。

[0738] 下述具体例中,D表示氬原子。

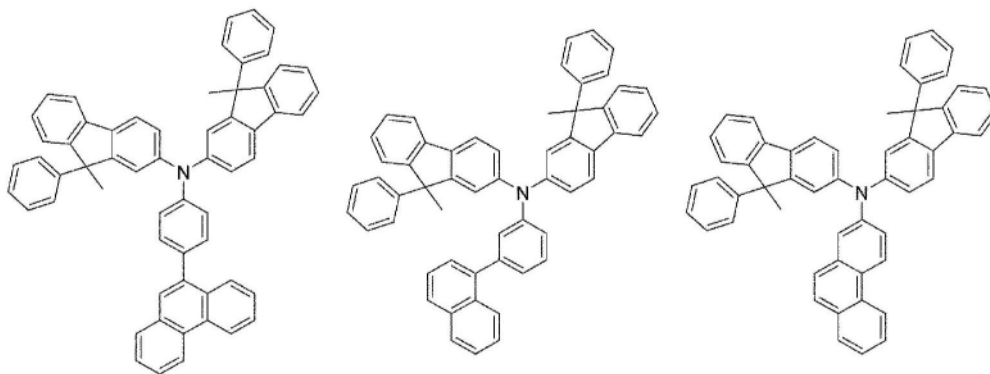
[0739] [化学式38]

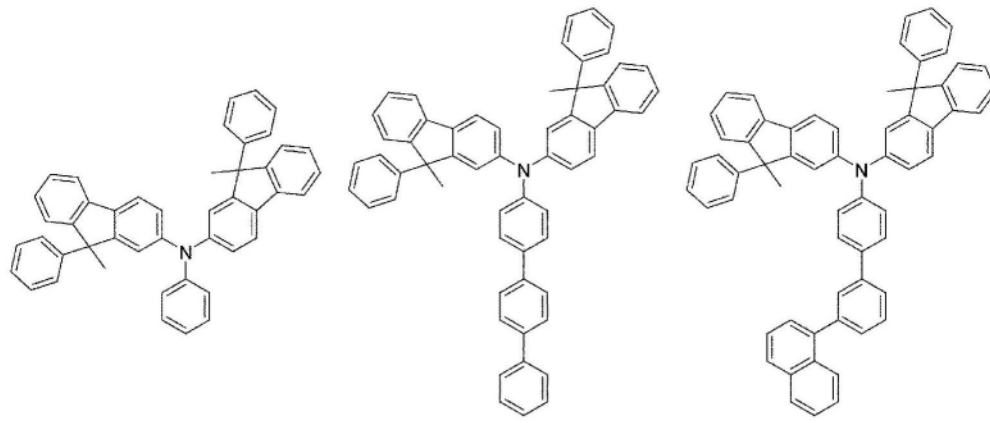


[0740]

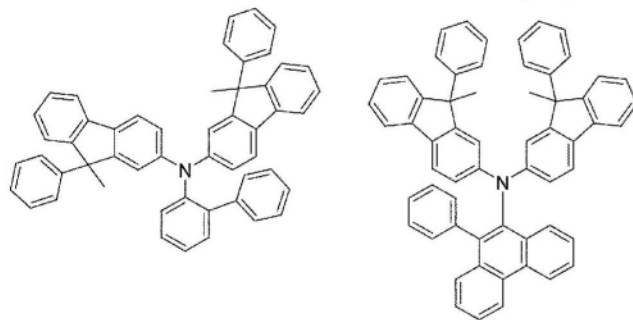
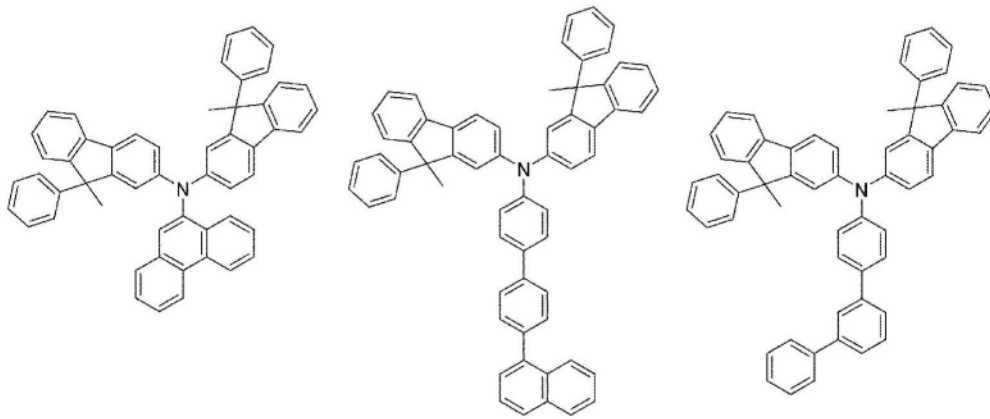


[0741] [化学式39]

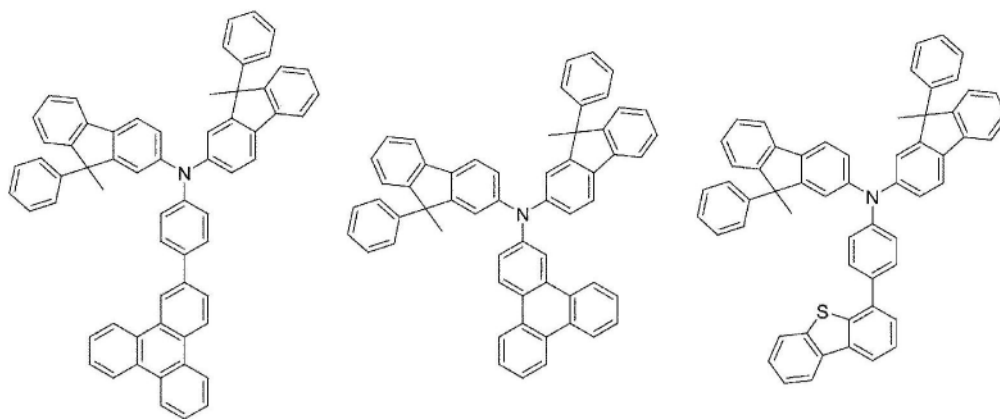




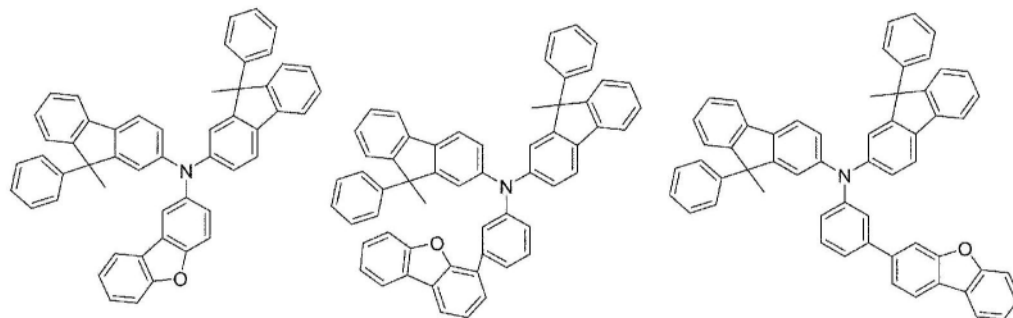
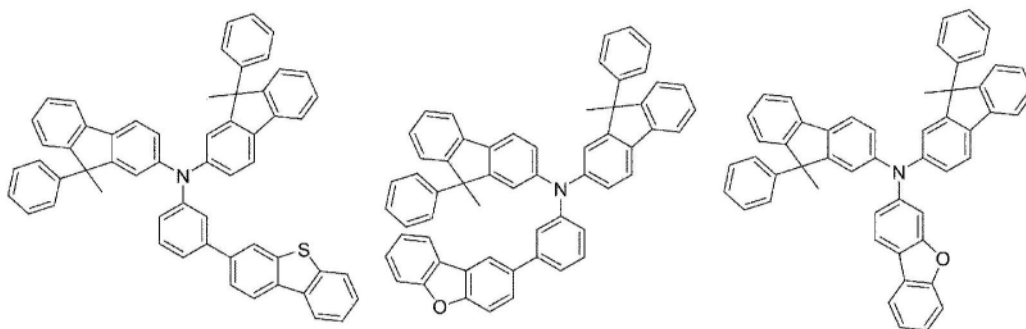
[0742]



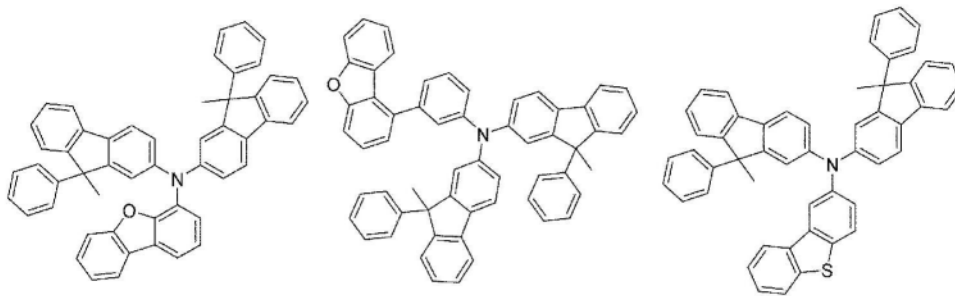
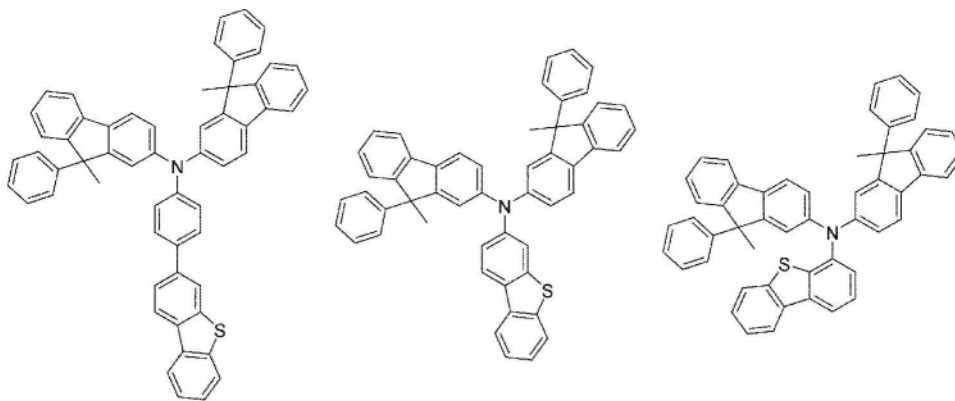
[0743] [化学式40]



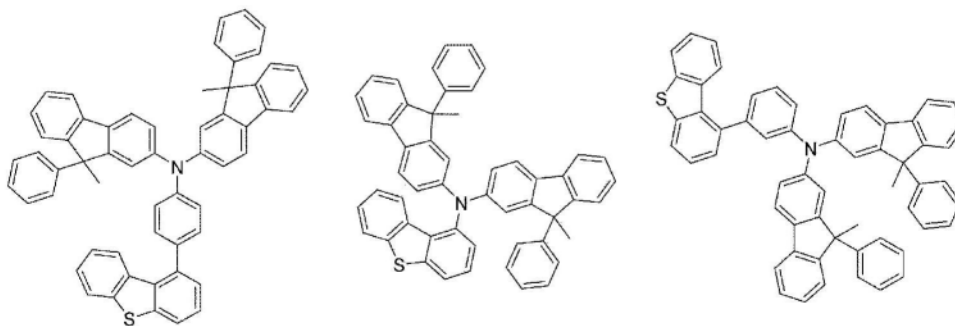
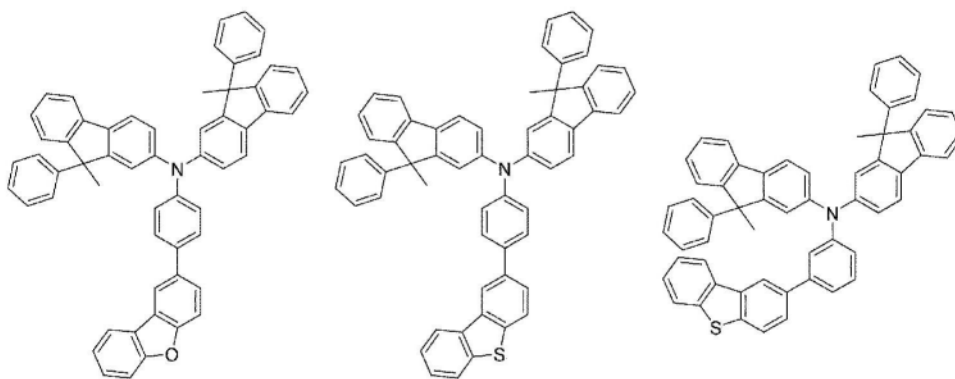
[0744]



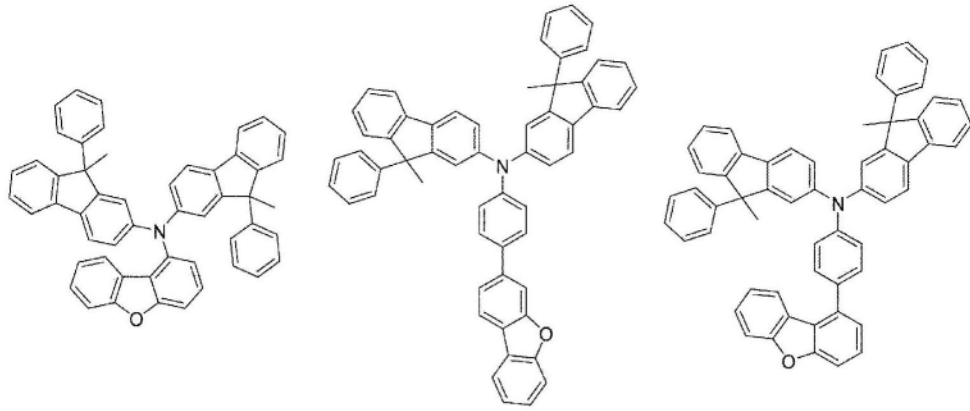
[0745] [化学式41]



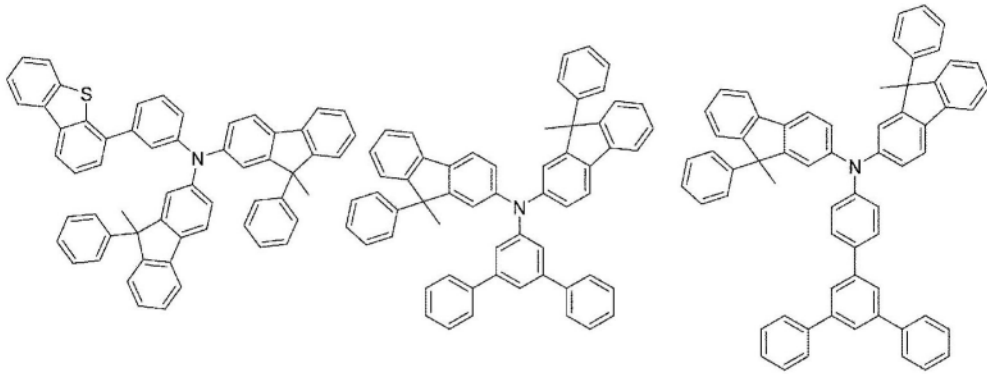
[0746]



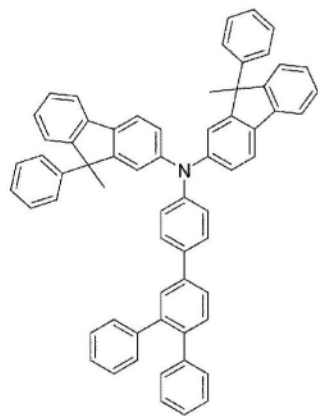
[0747] [化学式42]

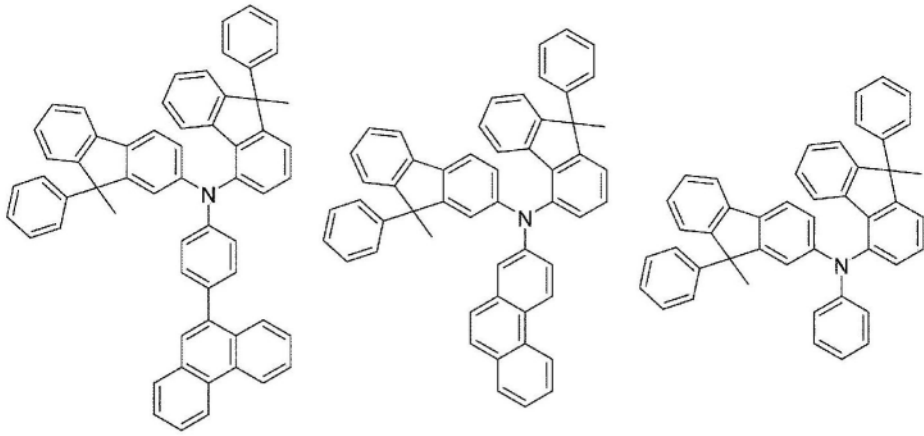


[0748]

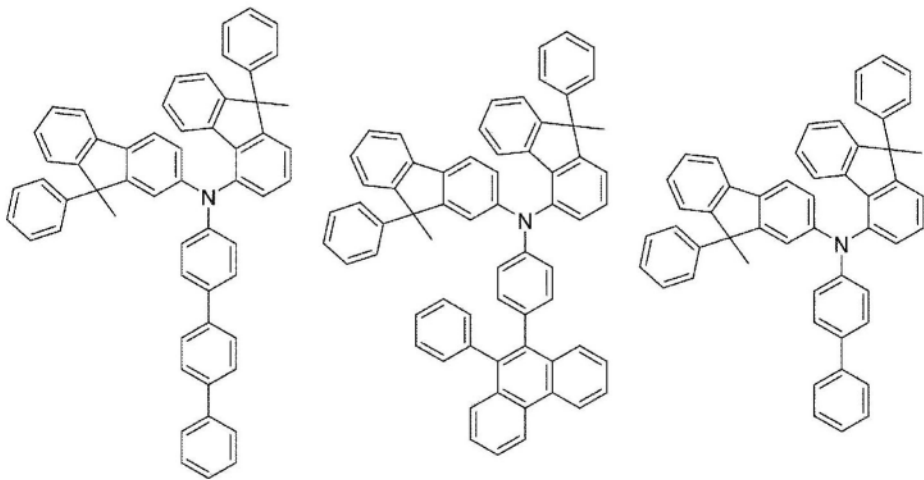
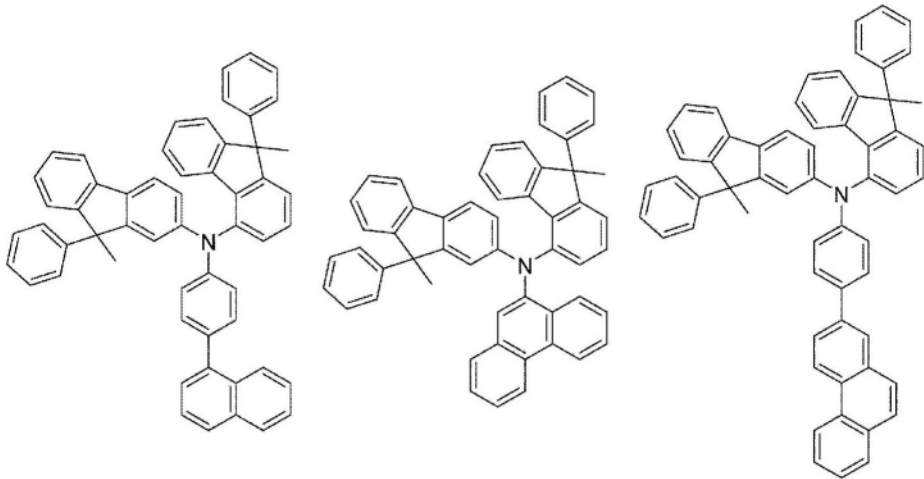


[0749] [化学式43]

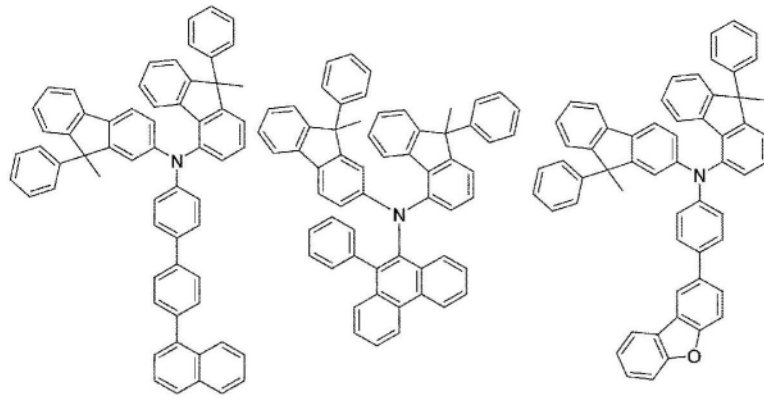




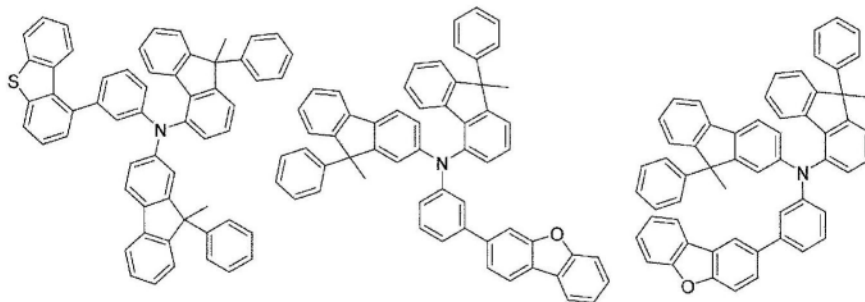
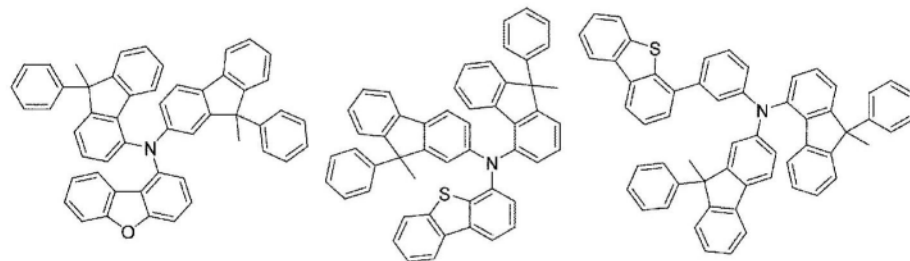
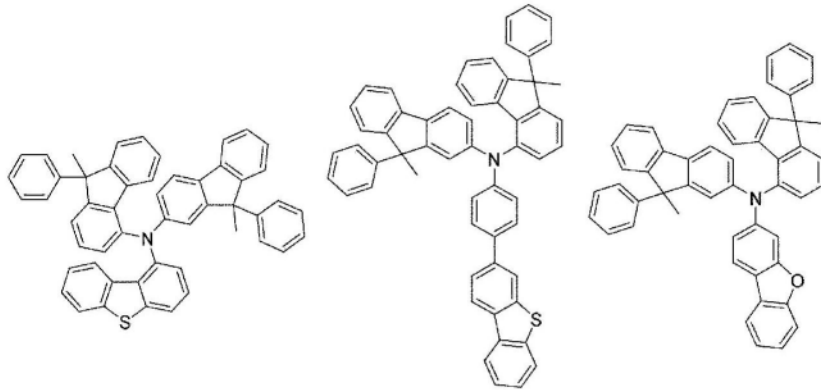
[0750]



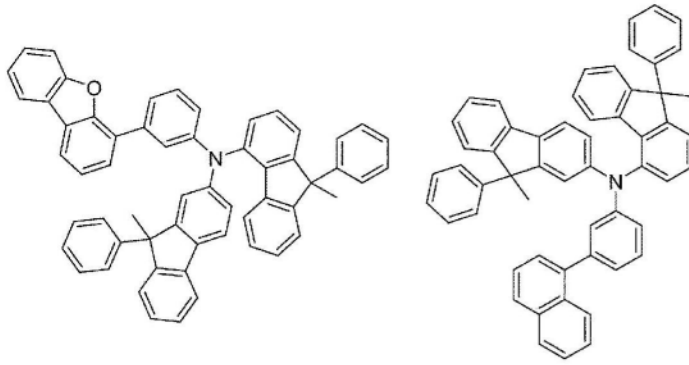
[0751] [化学式44]



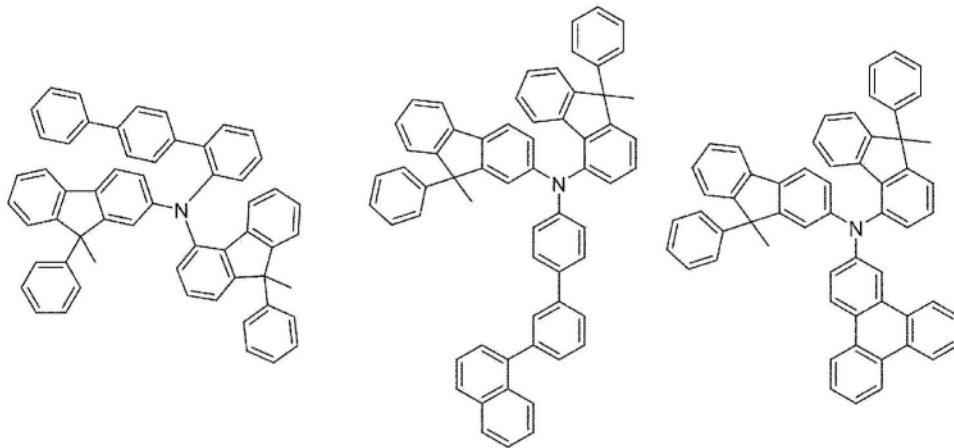
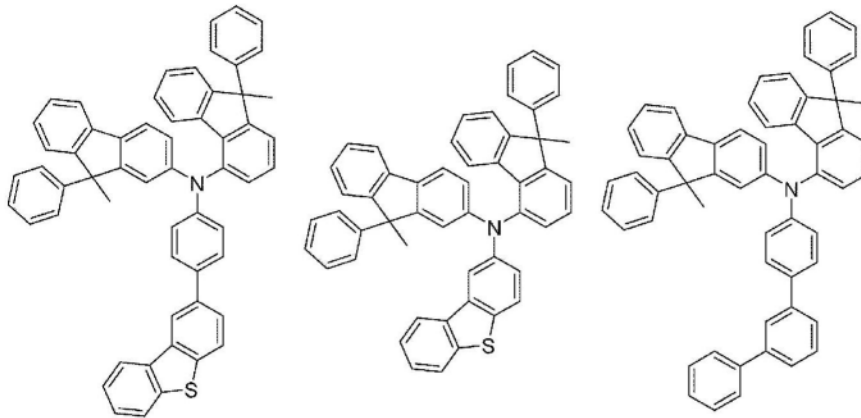
[0752]



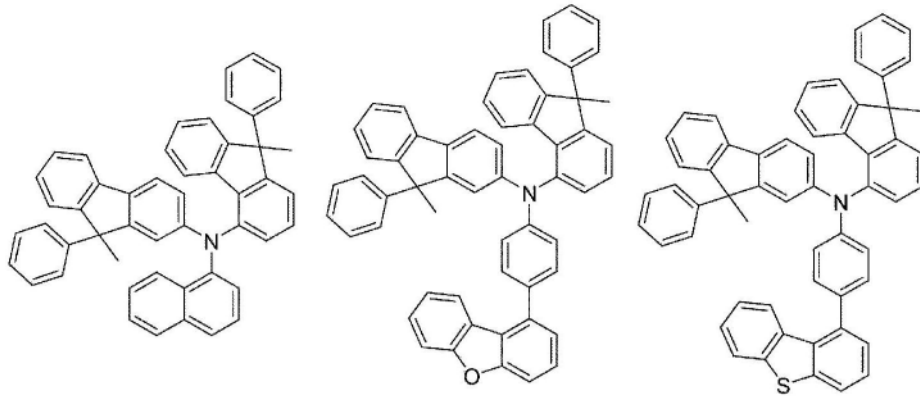
[0753] [化学式45]



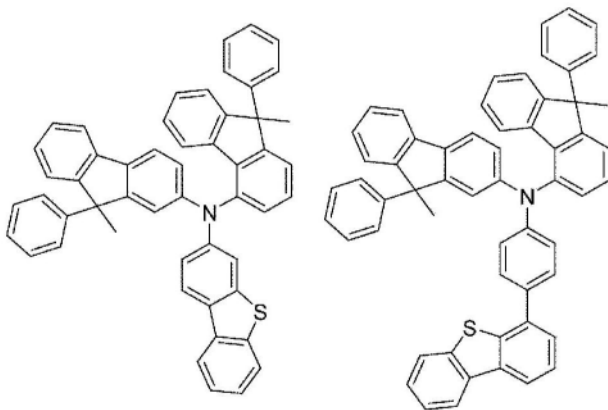
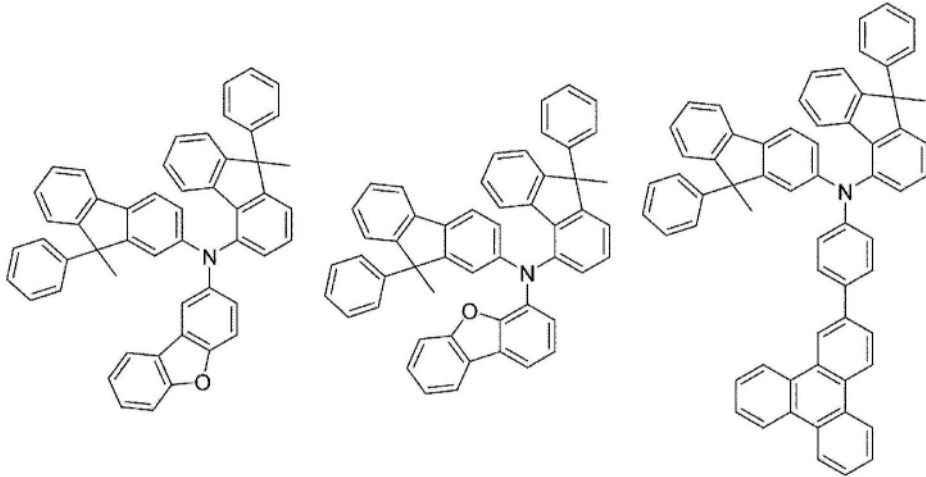
[0754]



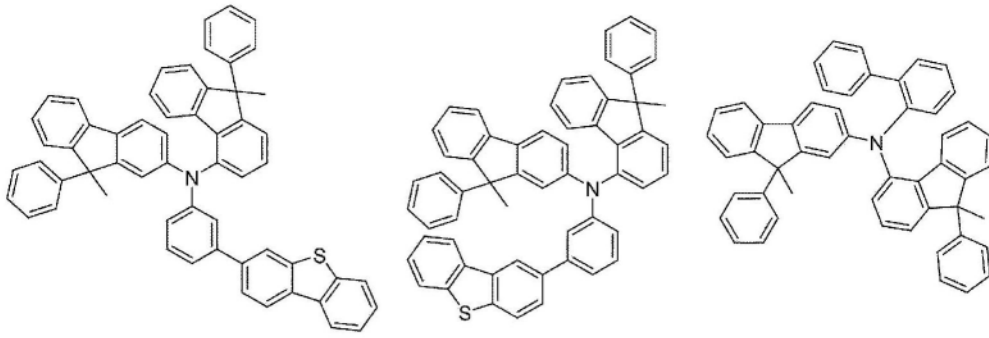
[0755] [化学式46]



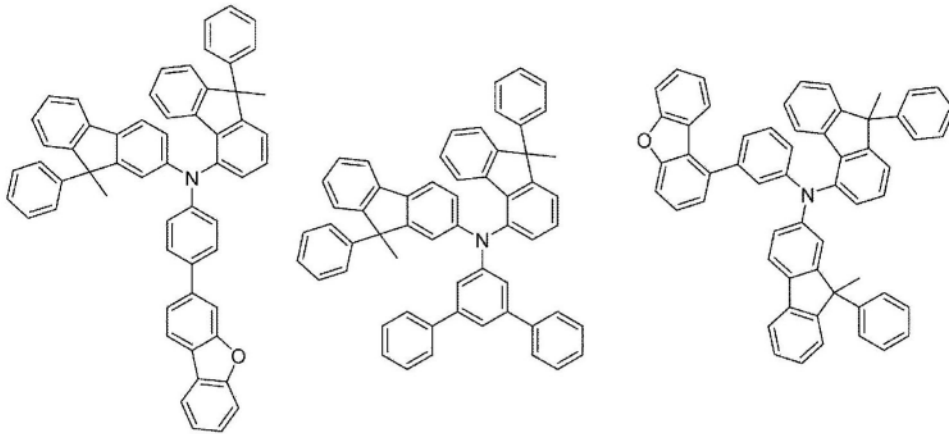
[0756]



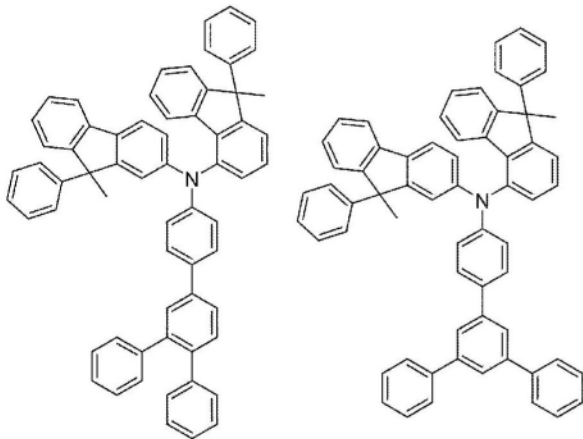
[0757] [化学式47]

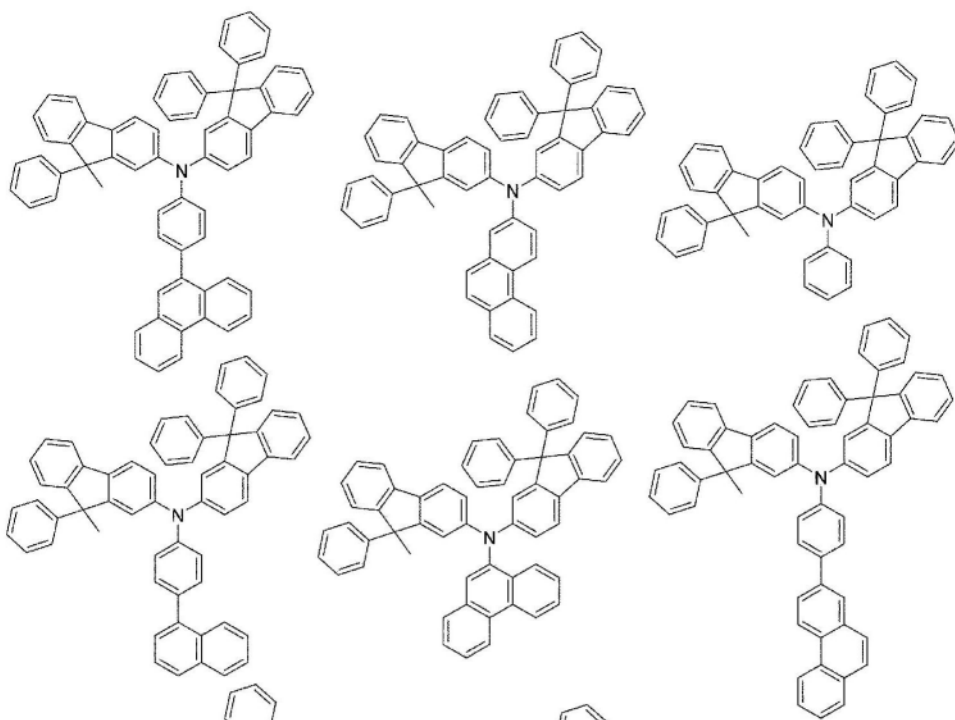


[0758]

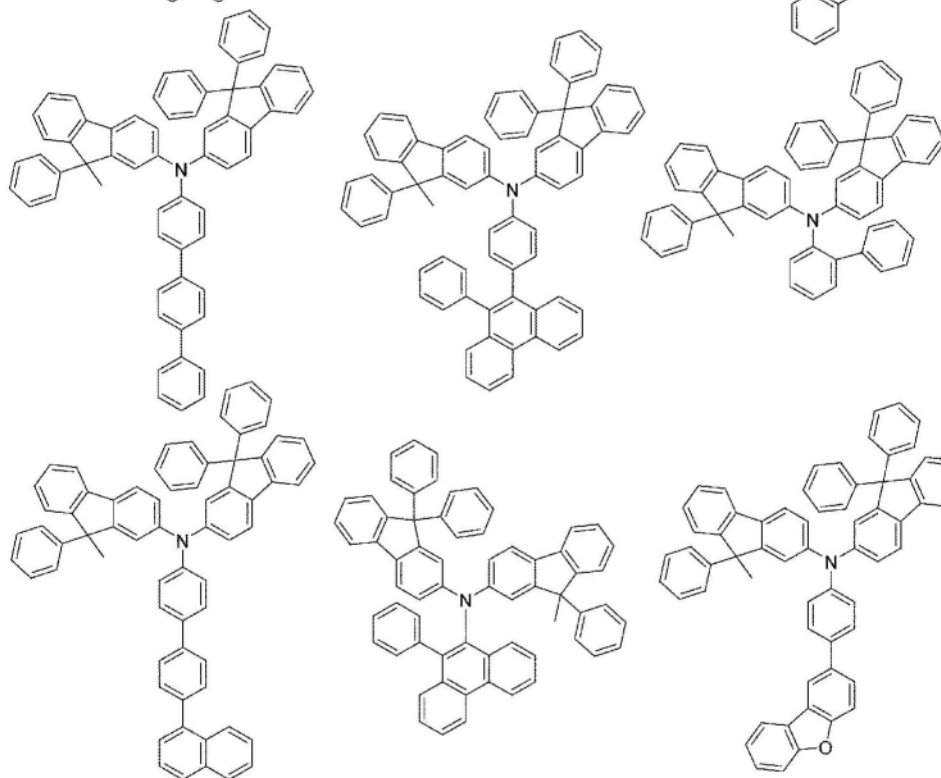


[0759] [化学式48]

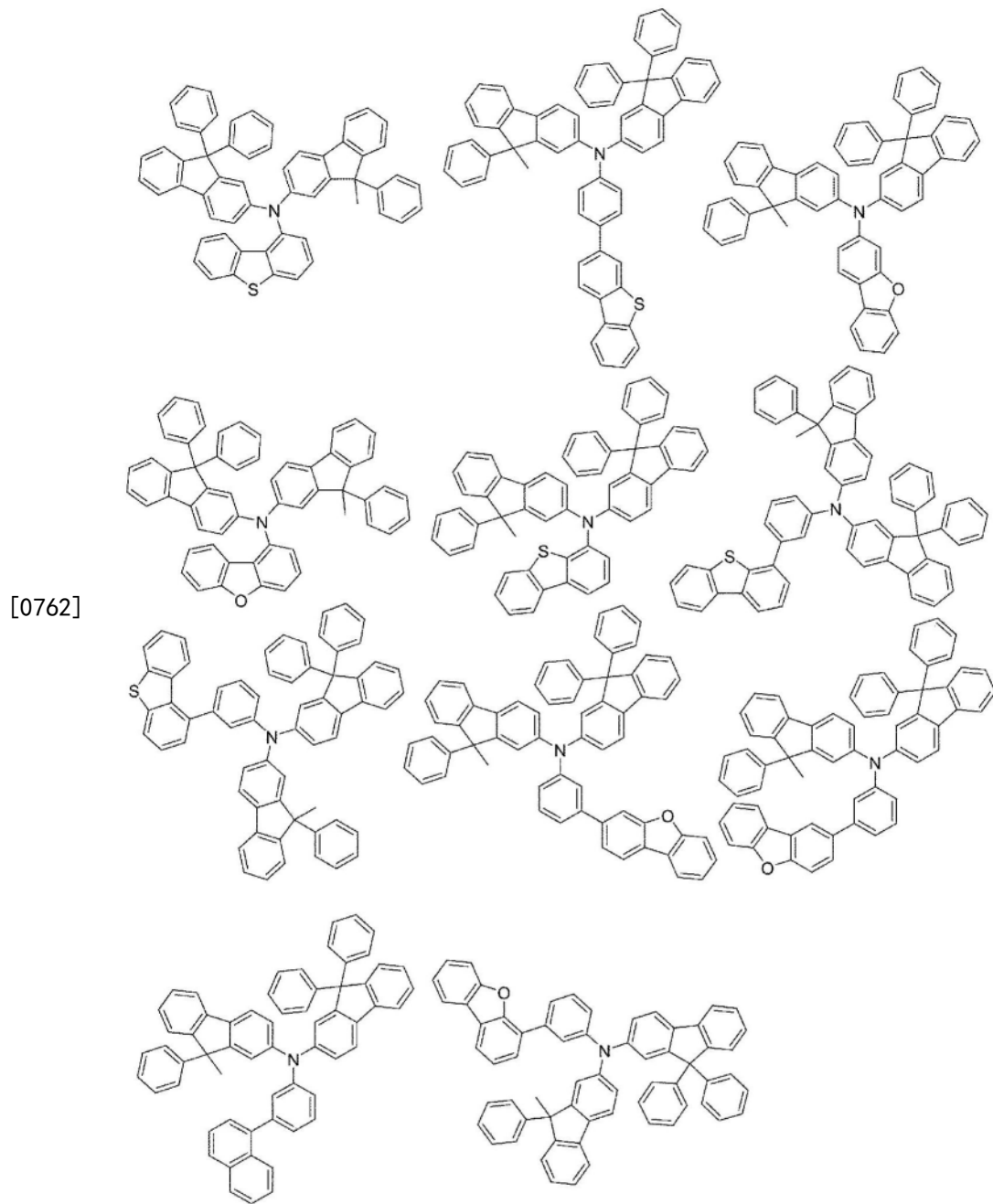


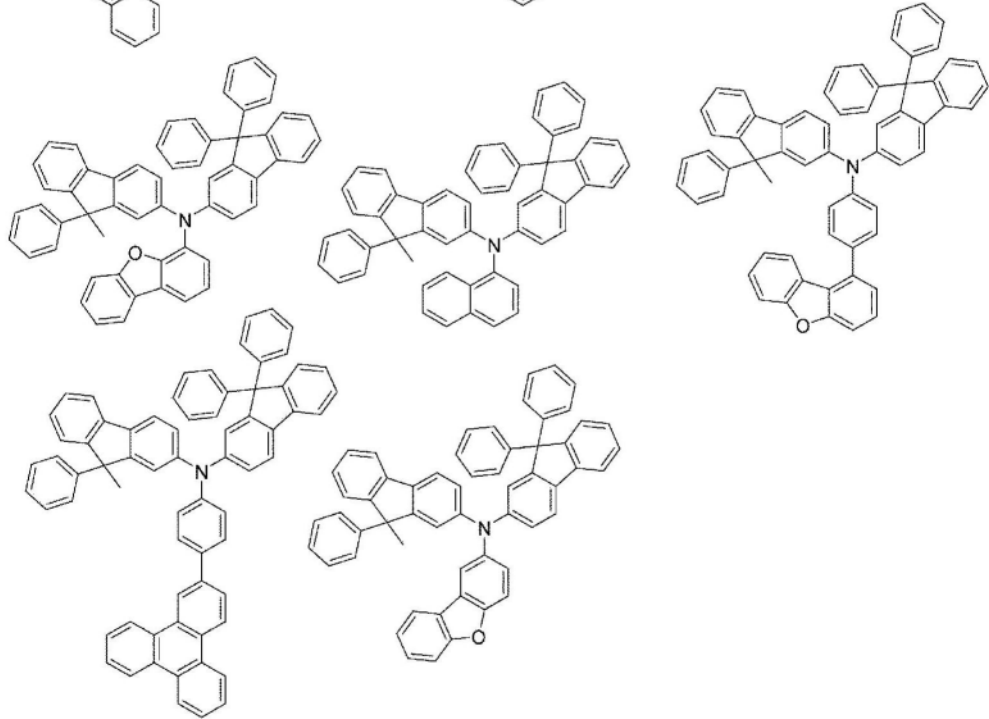
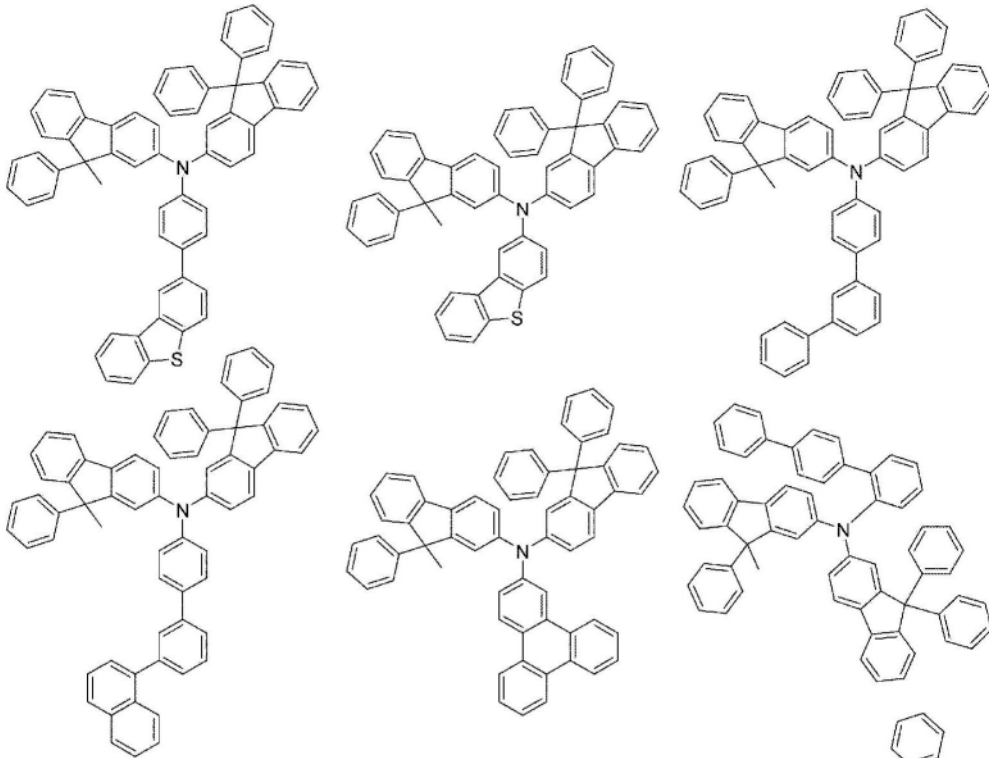


[0760]

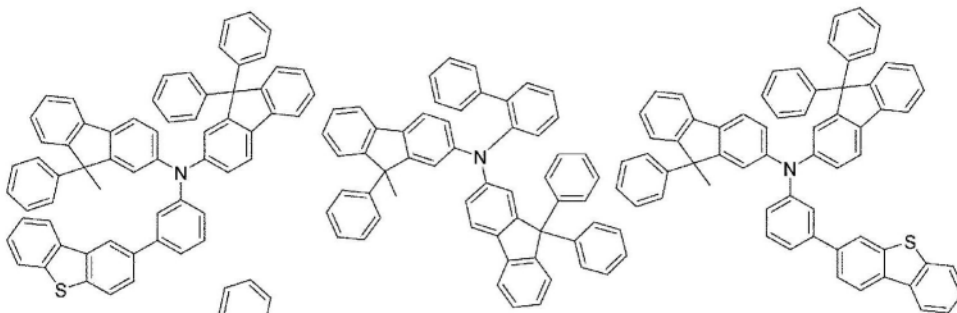
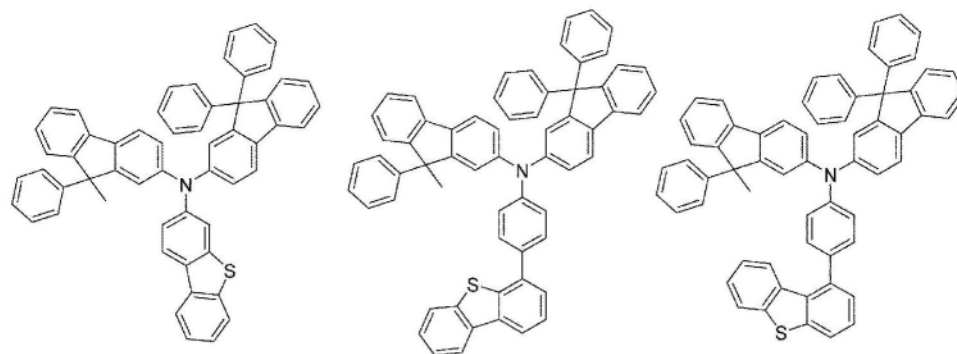


[0761] [化学式49]

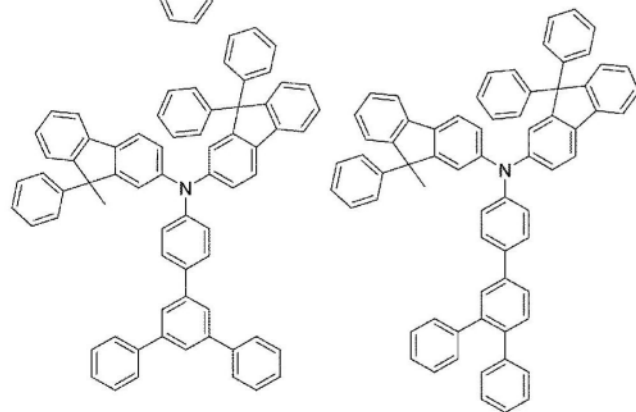
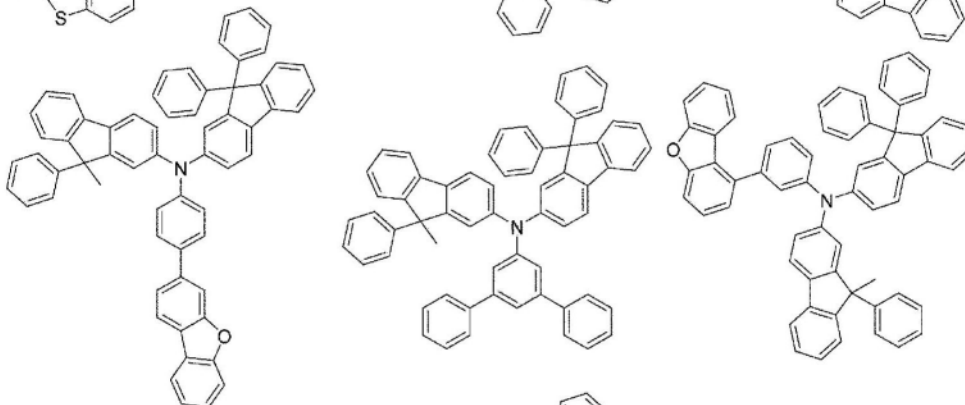




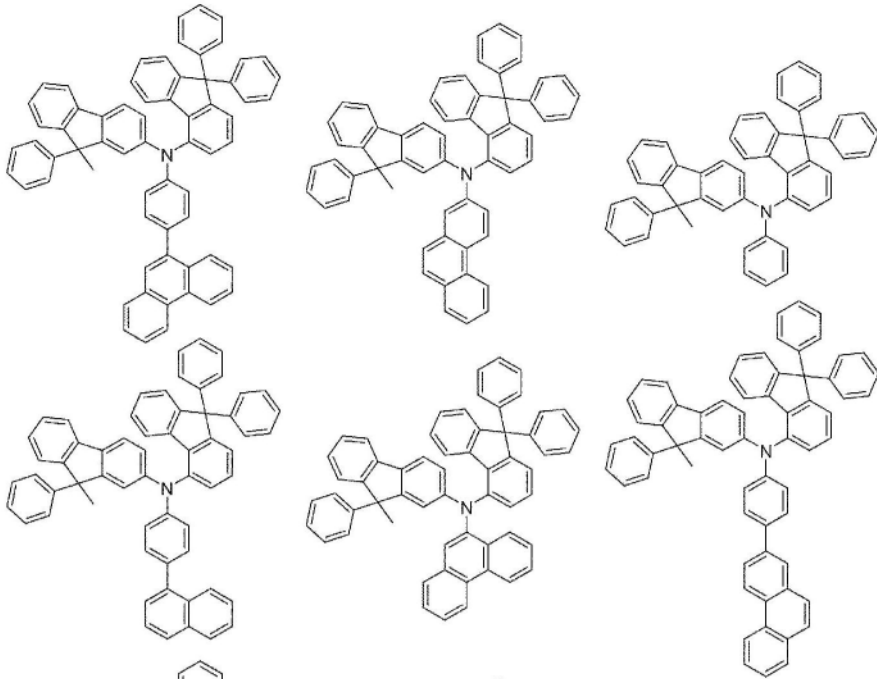
[0765] [化学式51]



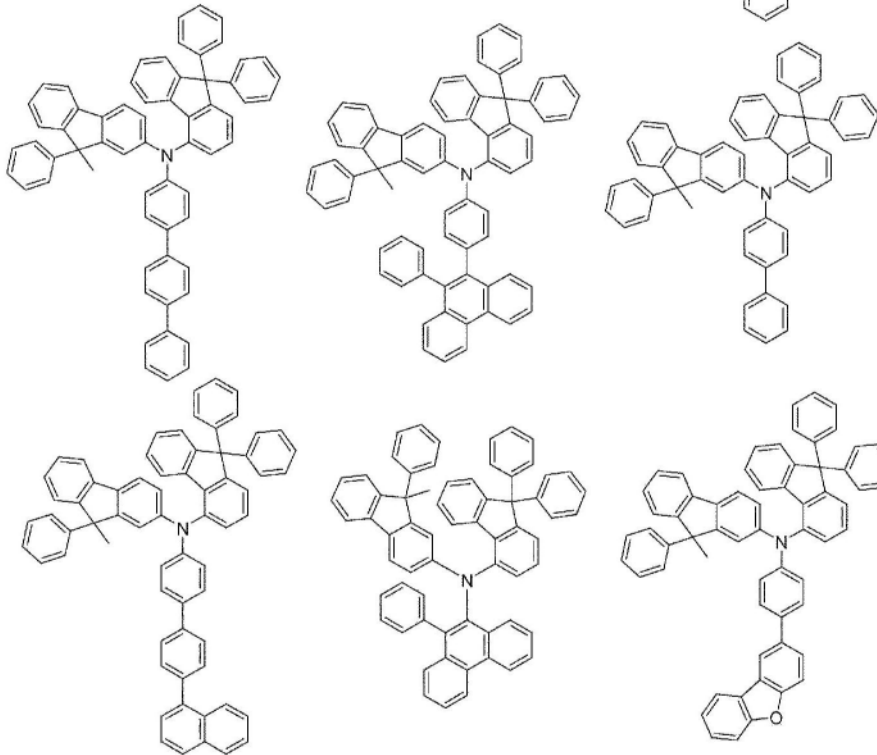
[0766]



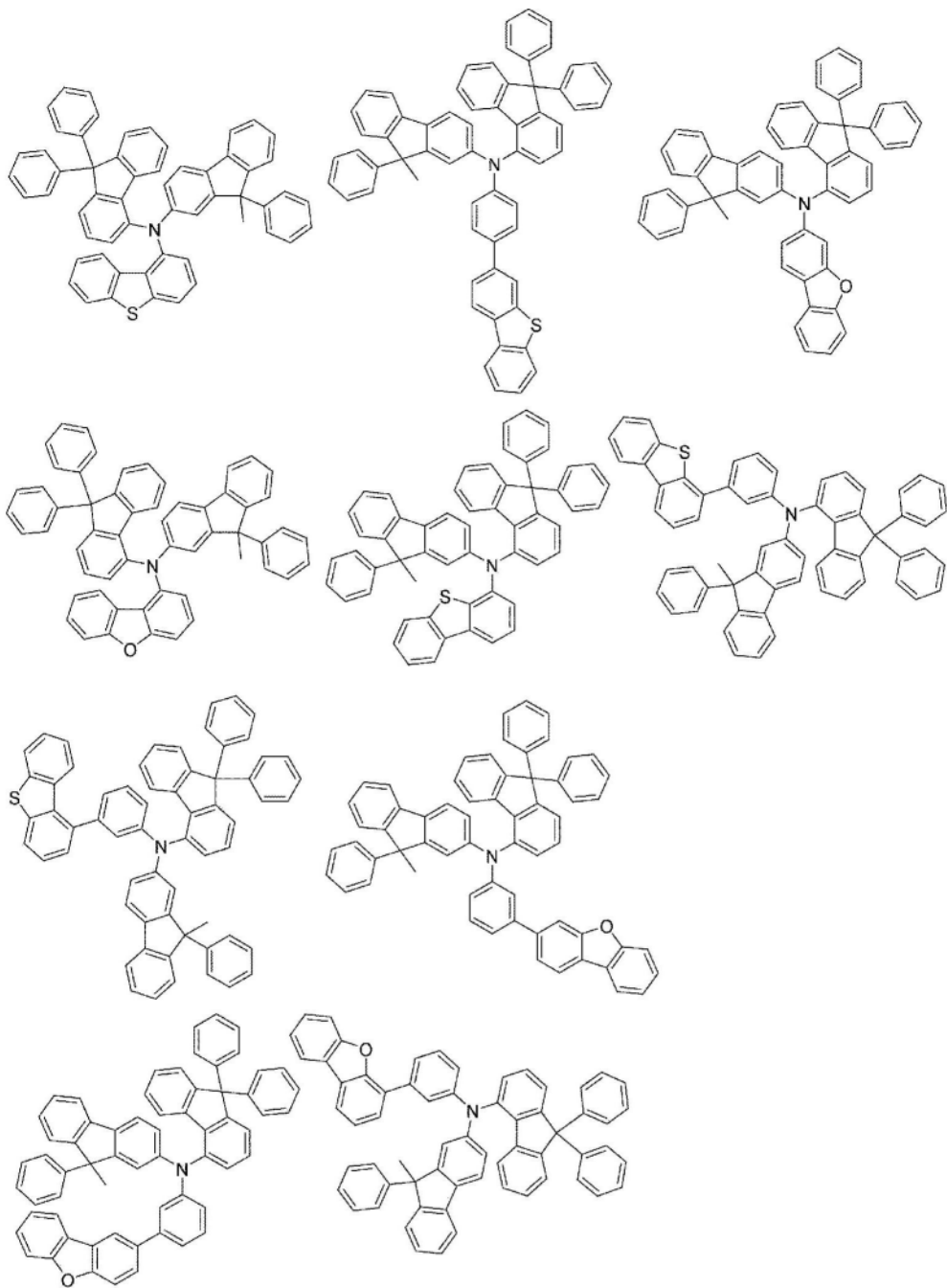
[0767] [化学式52]



[0768]

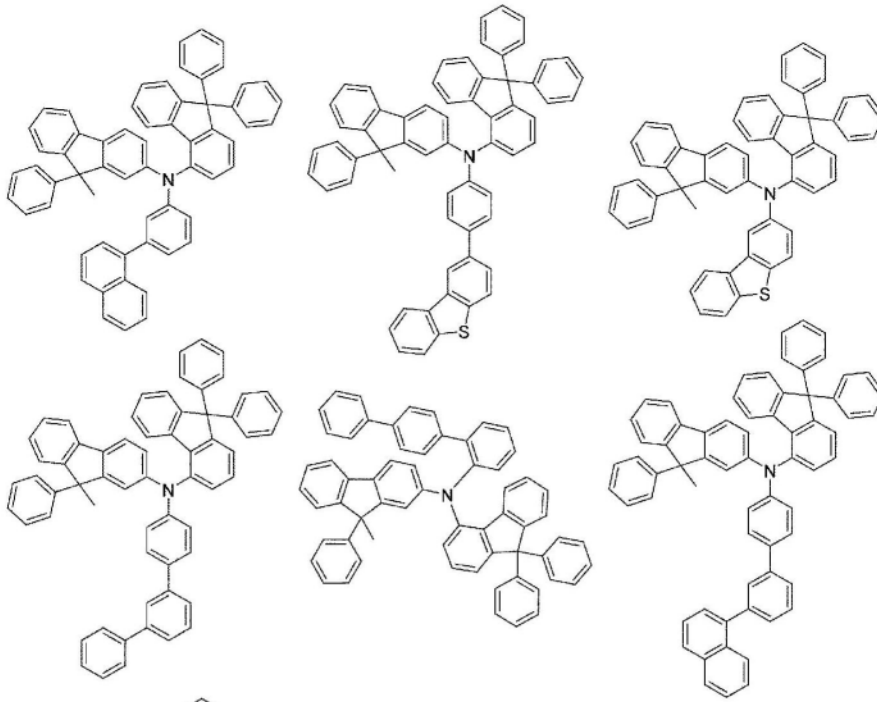


[0769] [化学式53]

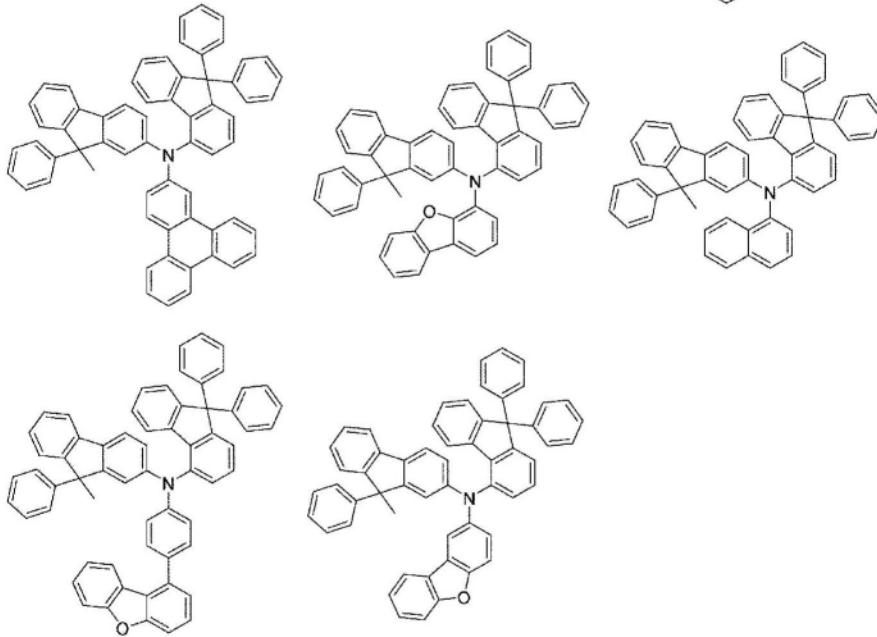


[0770]

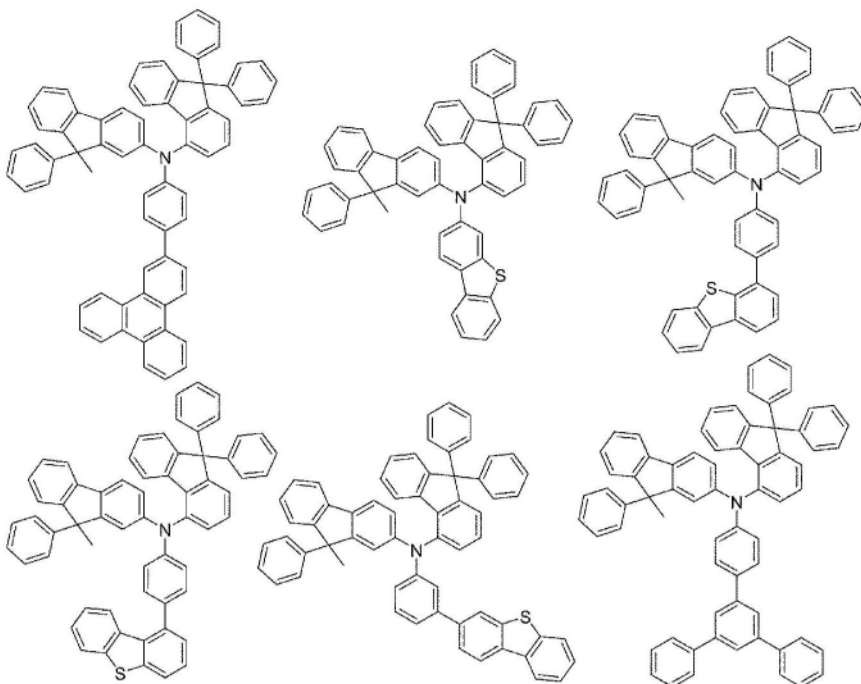
[0771] [化学式54]



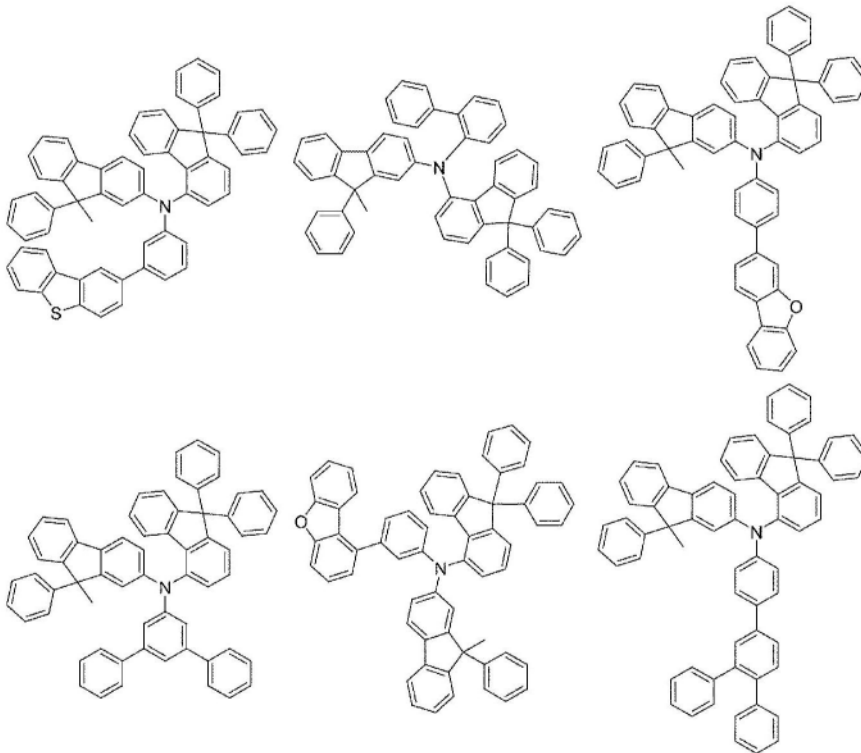
[0772]



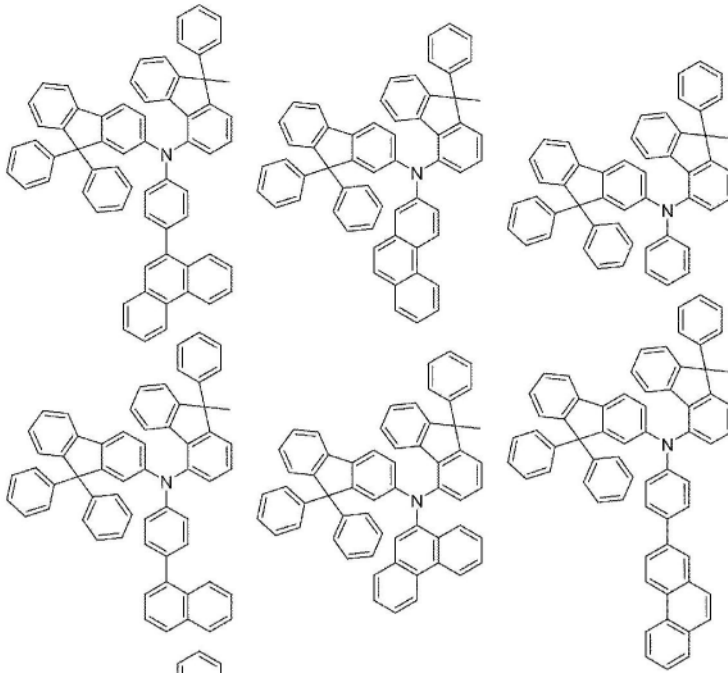
[0773] [化学式55]



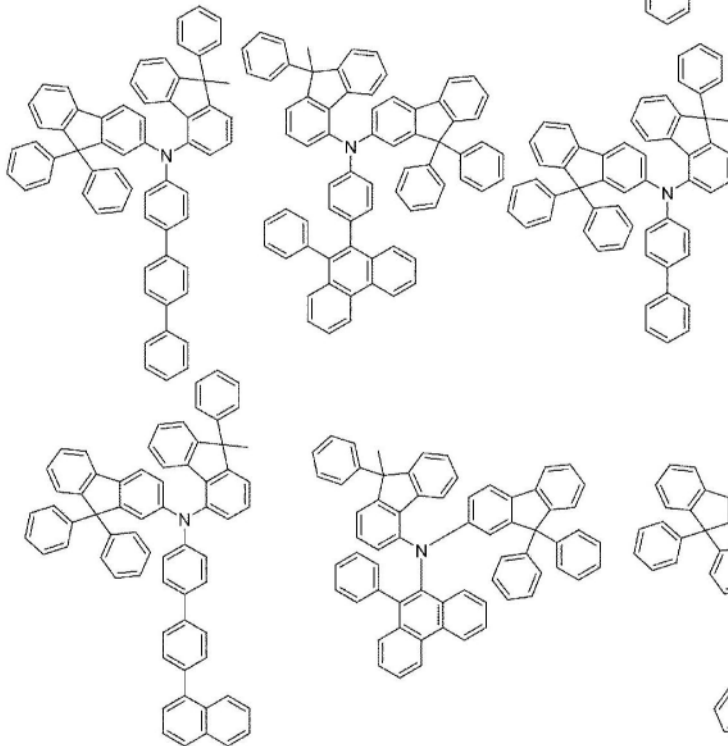
[0774]



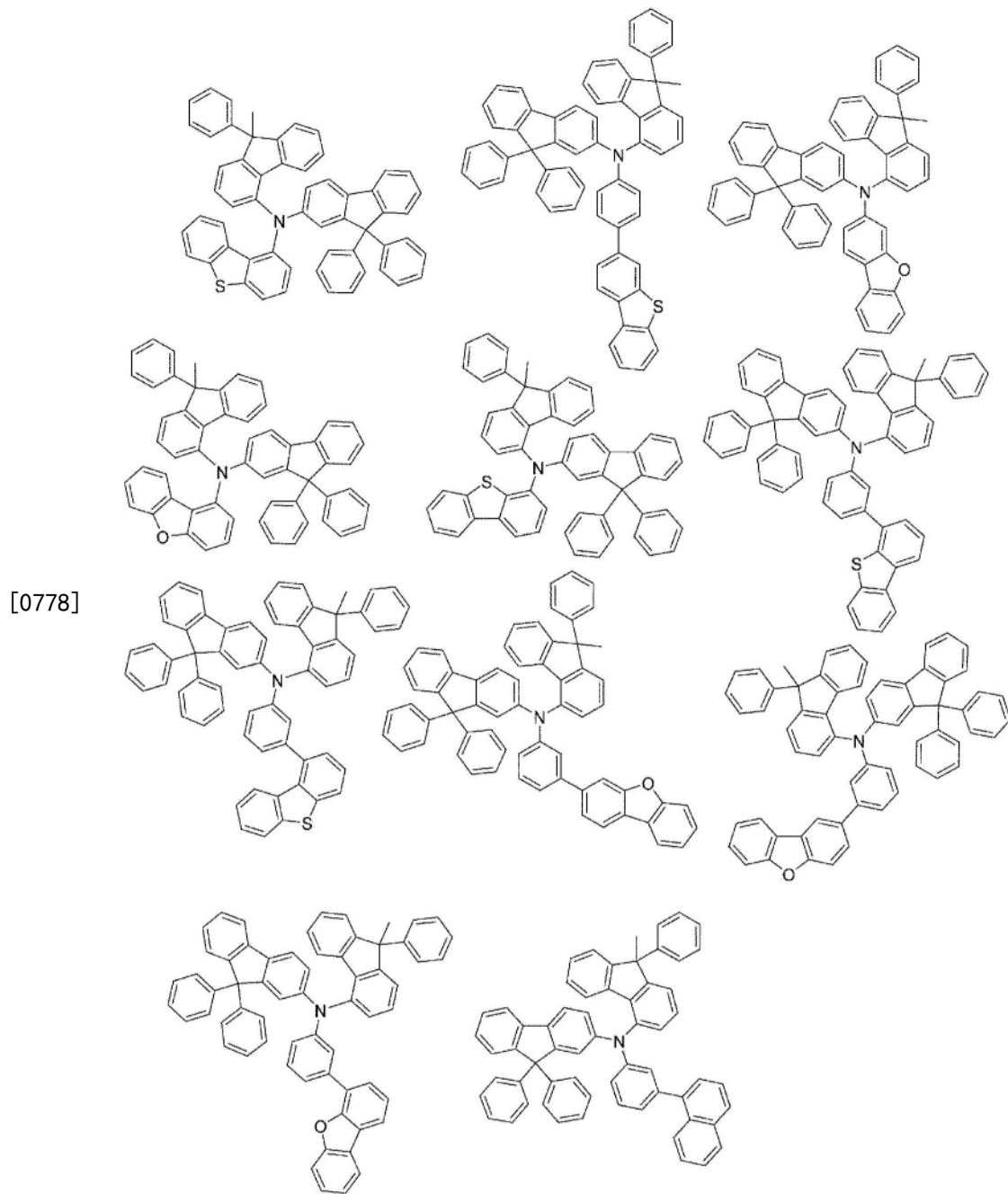
[0775] [化学式56]

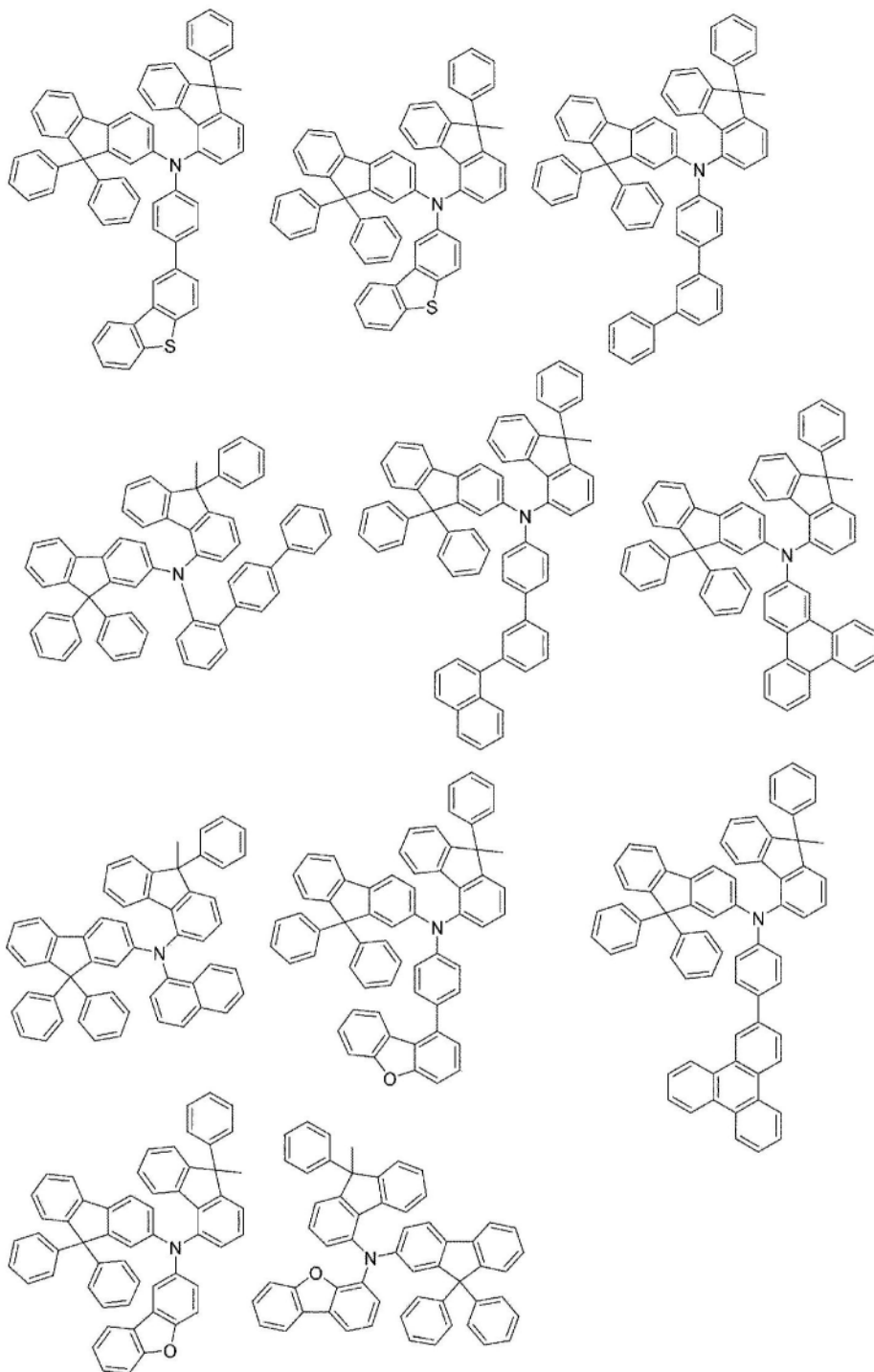


[0776]



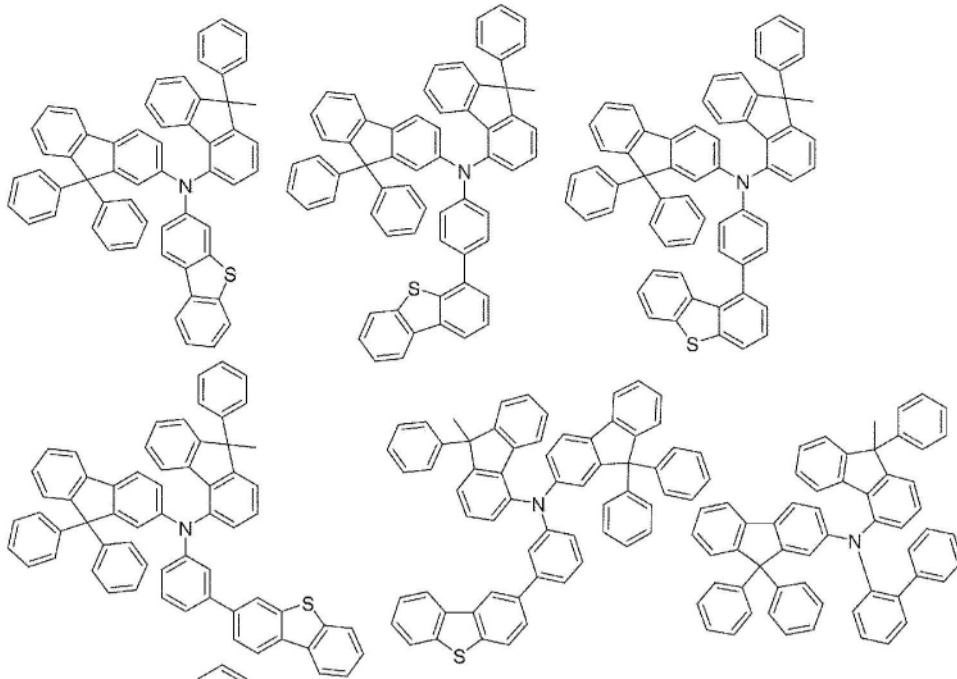
[0777] [化学式57]



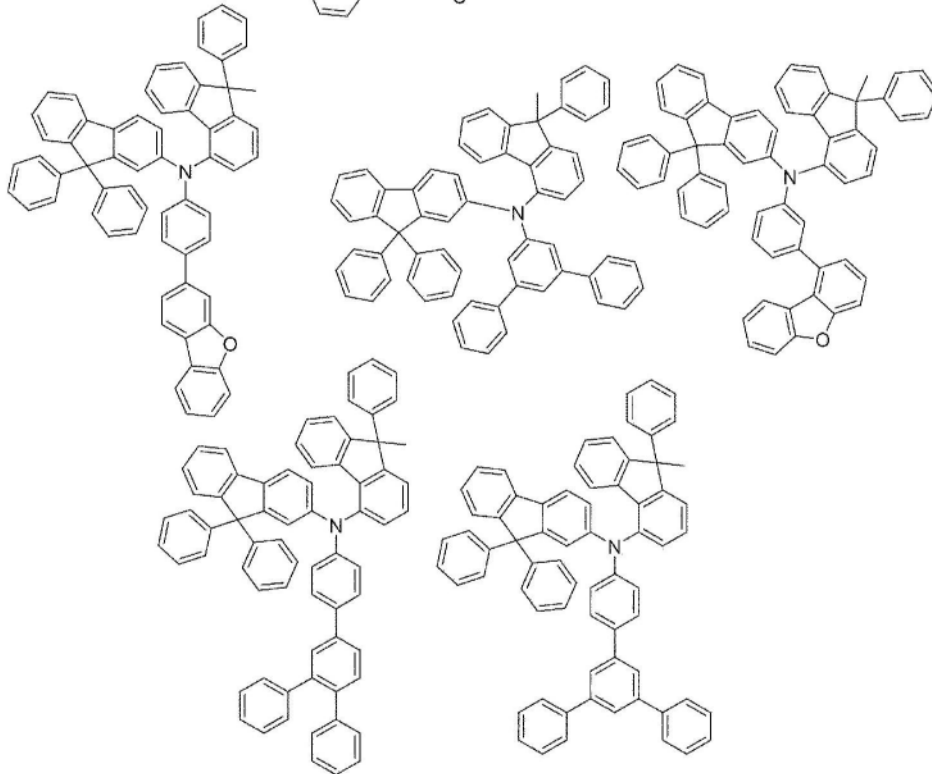


[0780]

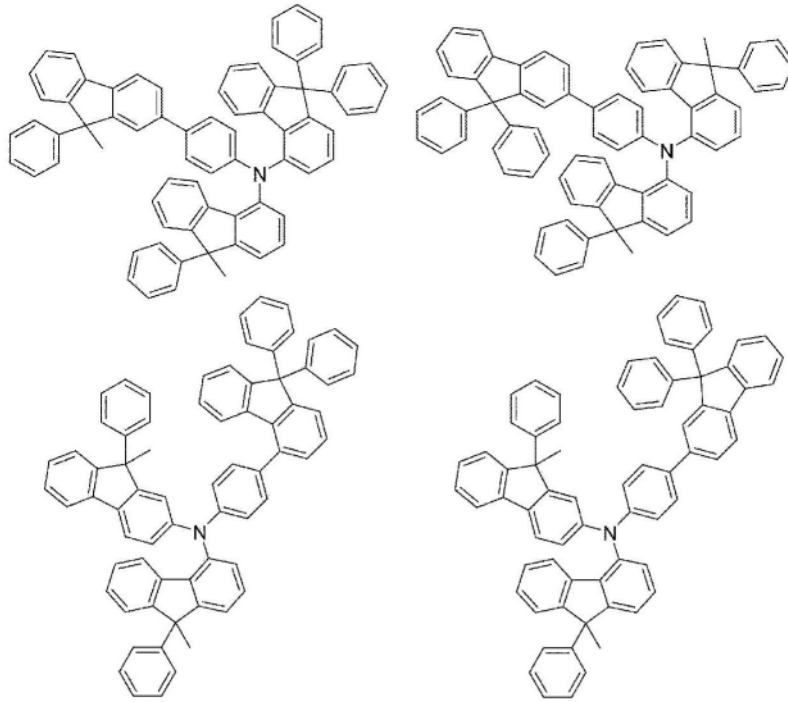
[0781] [化学式59]



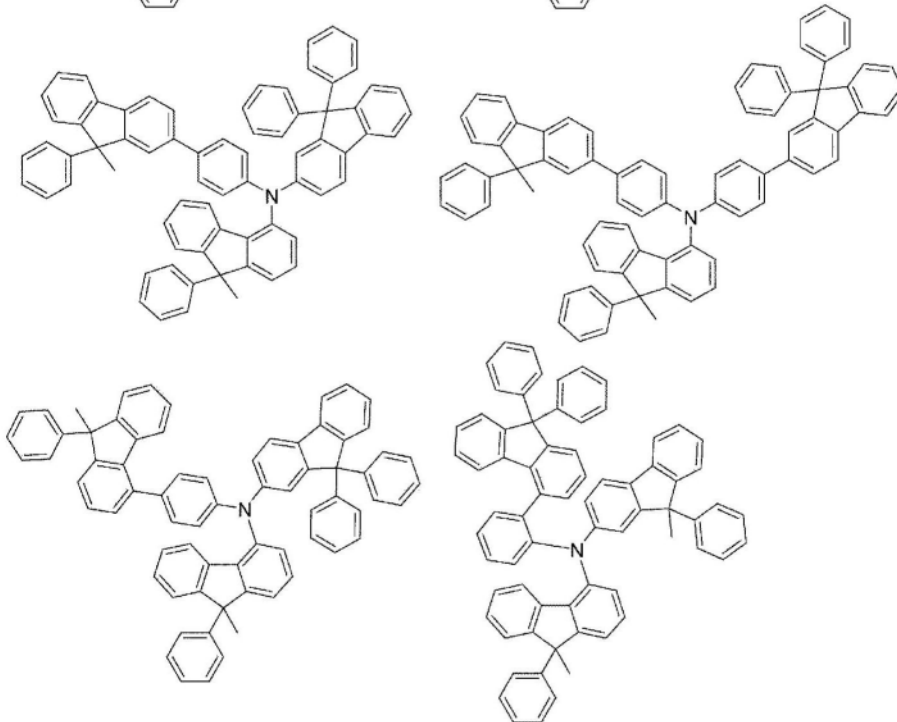
[0782]



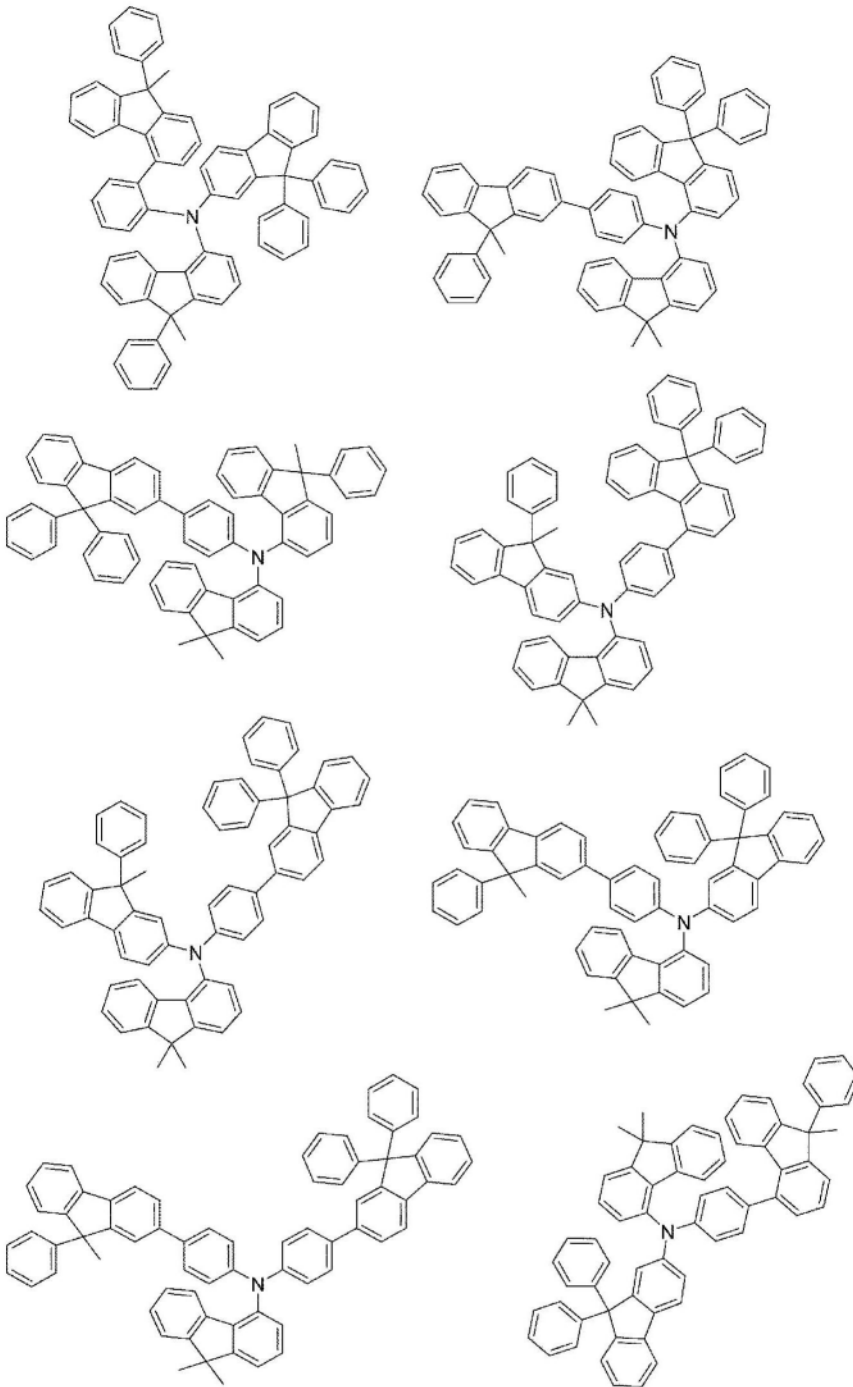
[0783] [化学式60]



[0784]

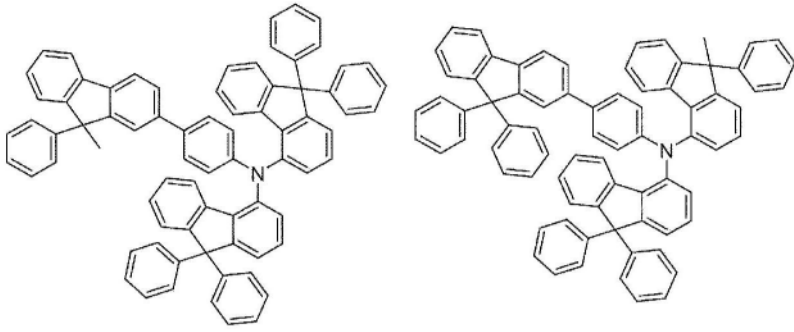
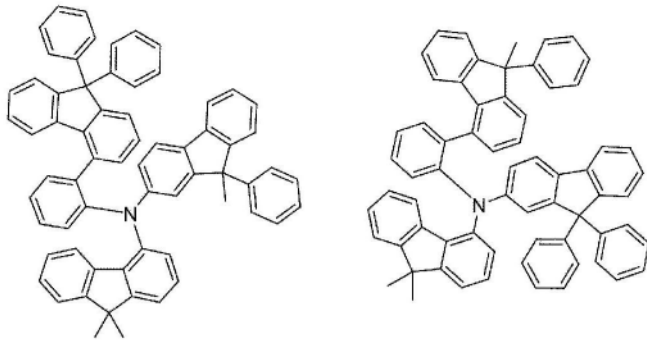


[0785] [化学式61]

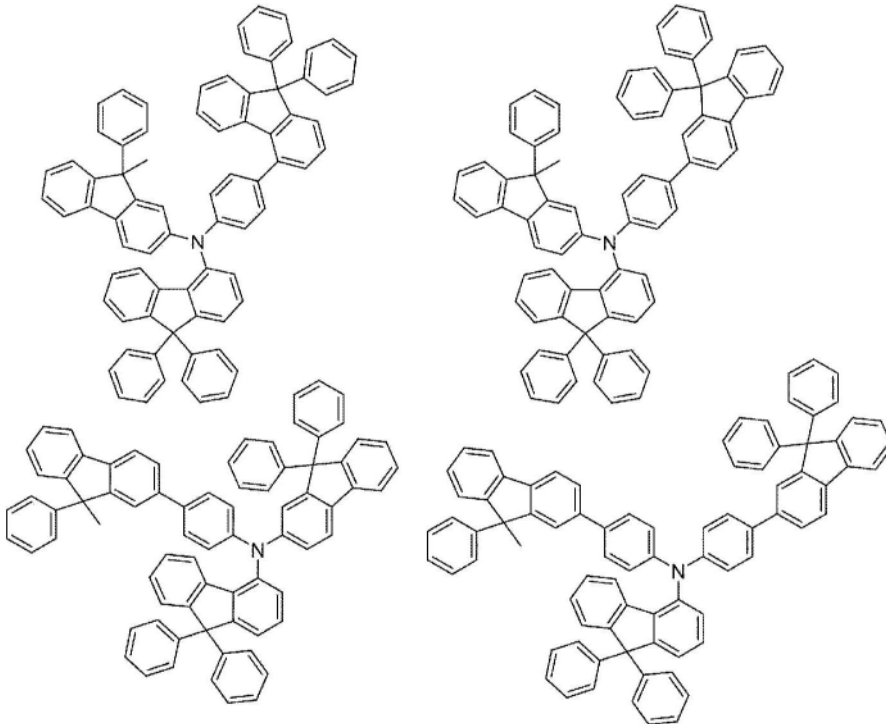


[0786]

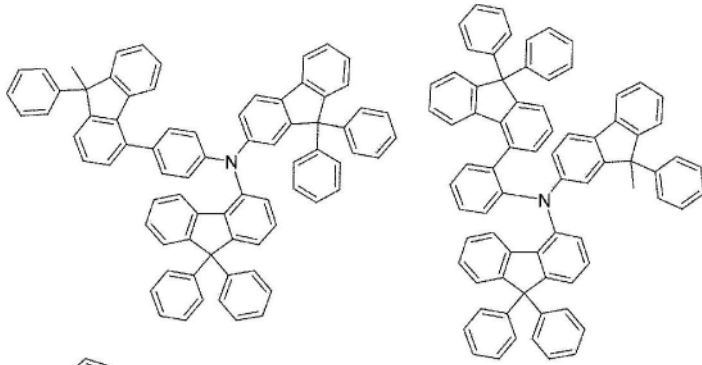
[0787] [化学式62]



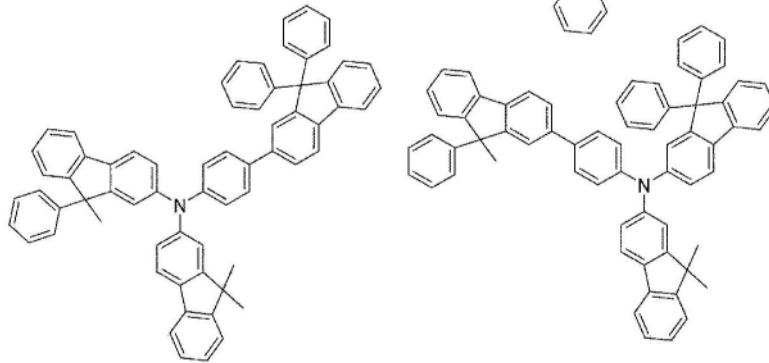
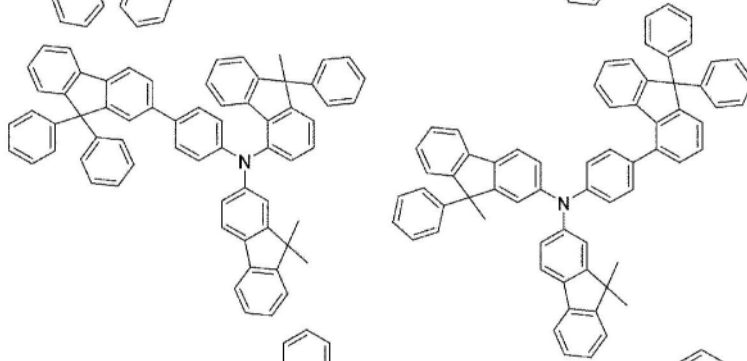
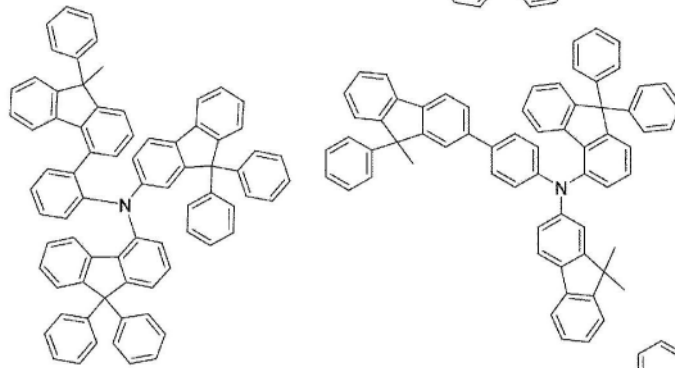
[0788]



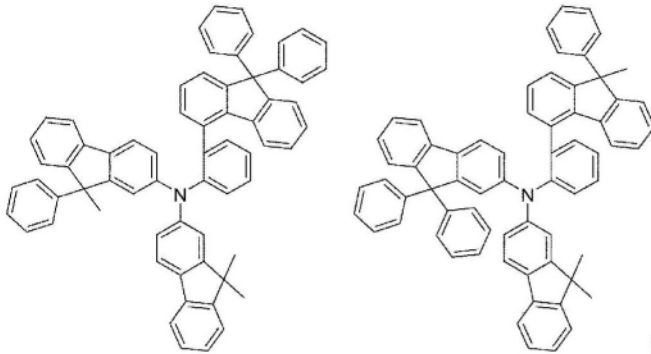
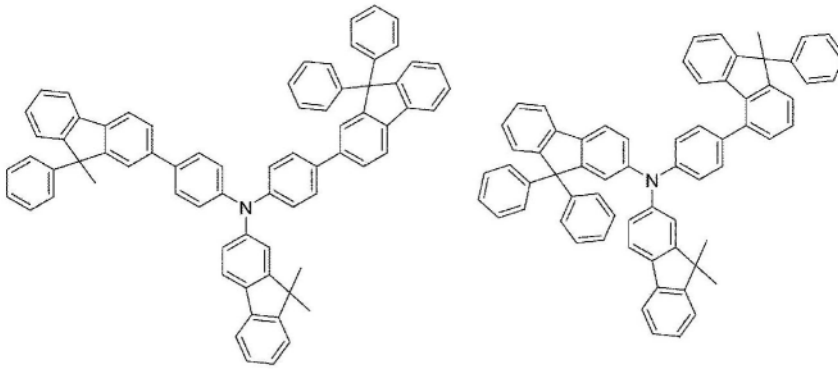
[0789] [化学式63]



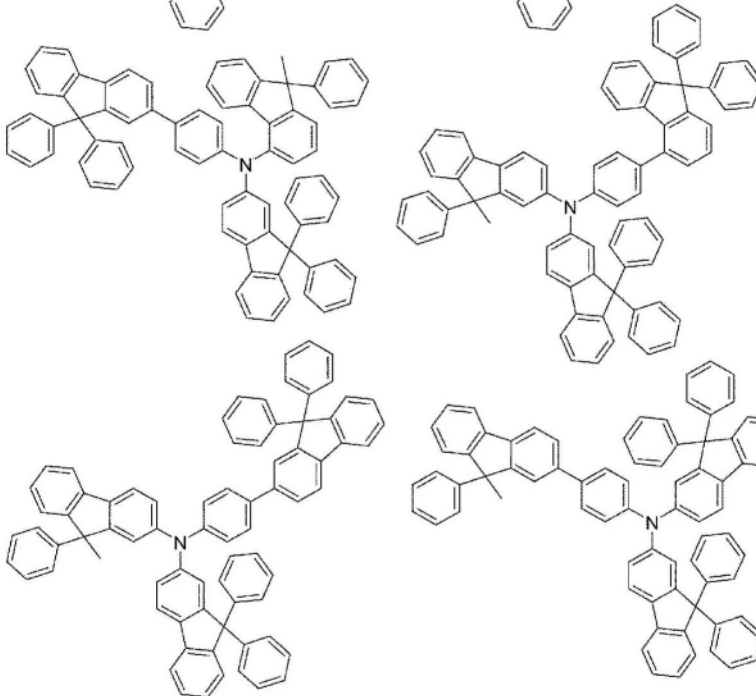
[0790]



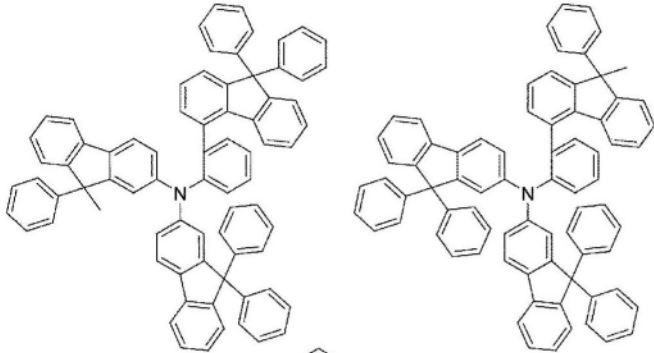
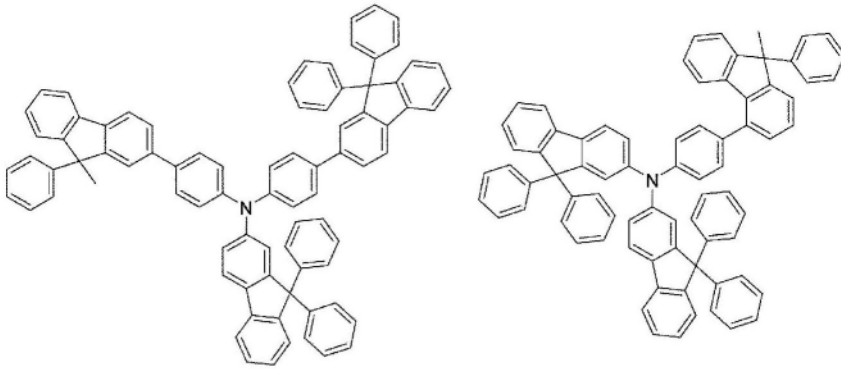
[0791] [化学式64]



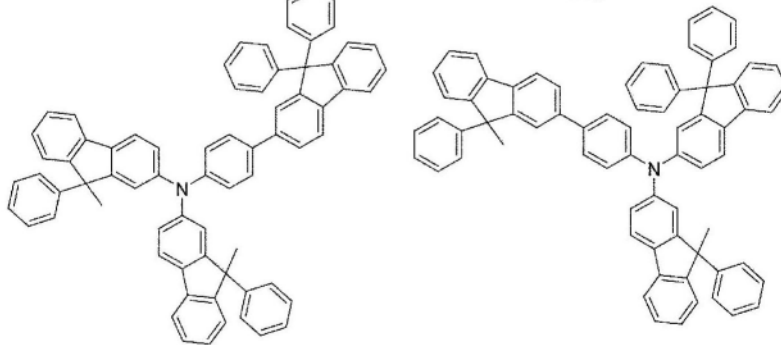
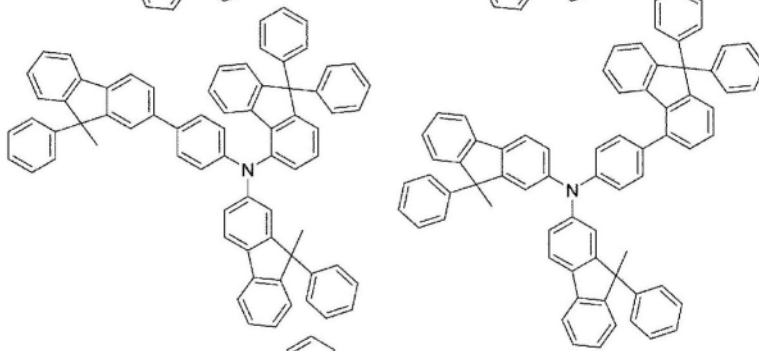
[0792]



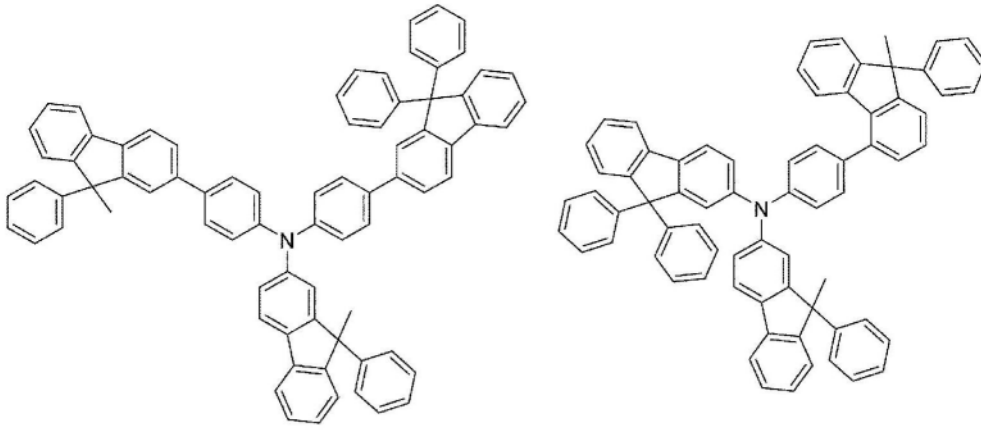
[0793] [化学式65]



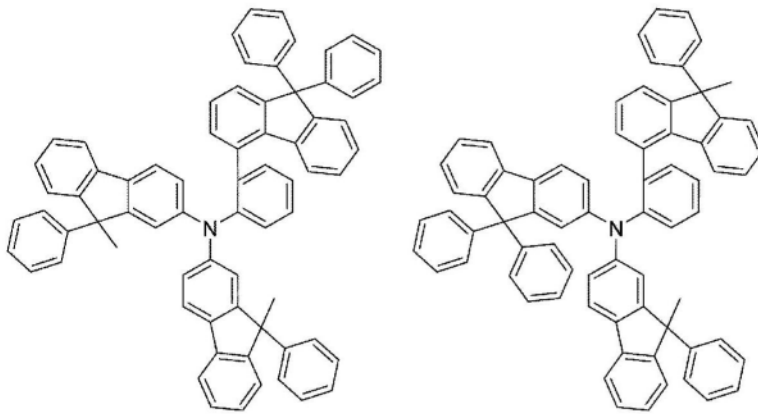
[0794]



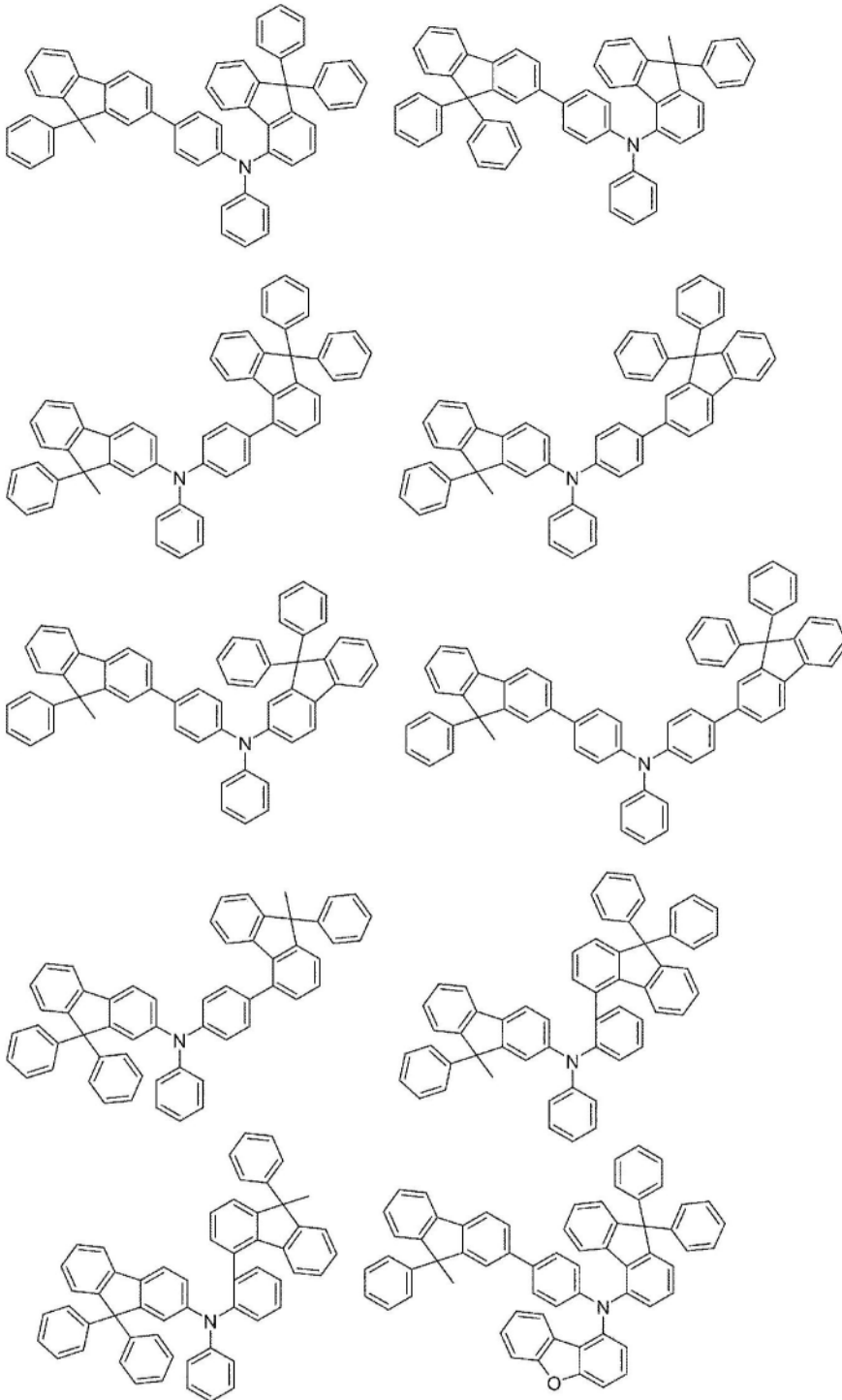
[0795] [化学式66]

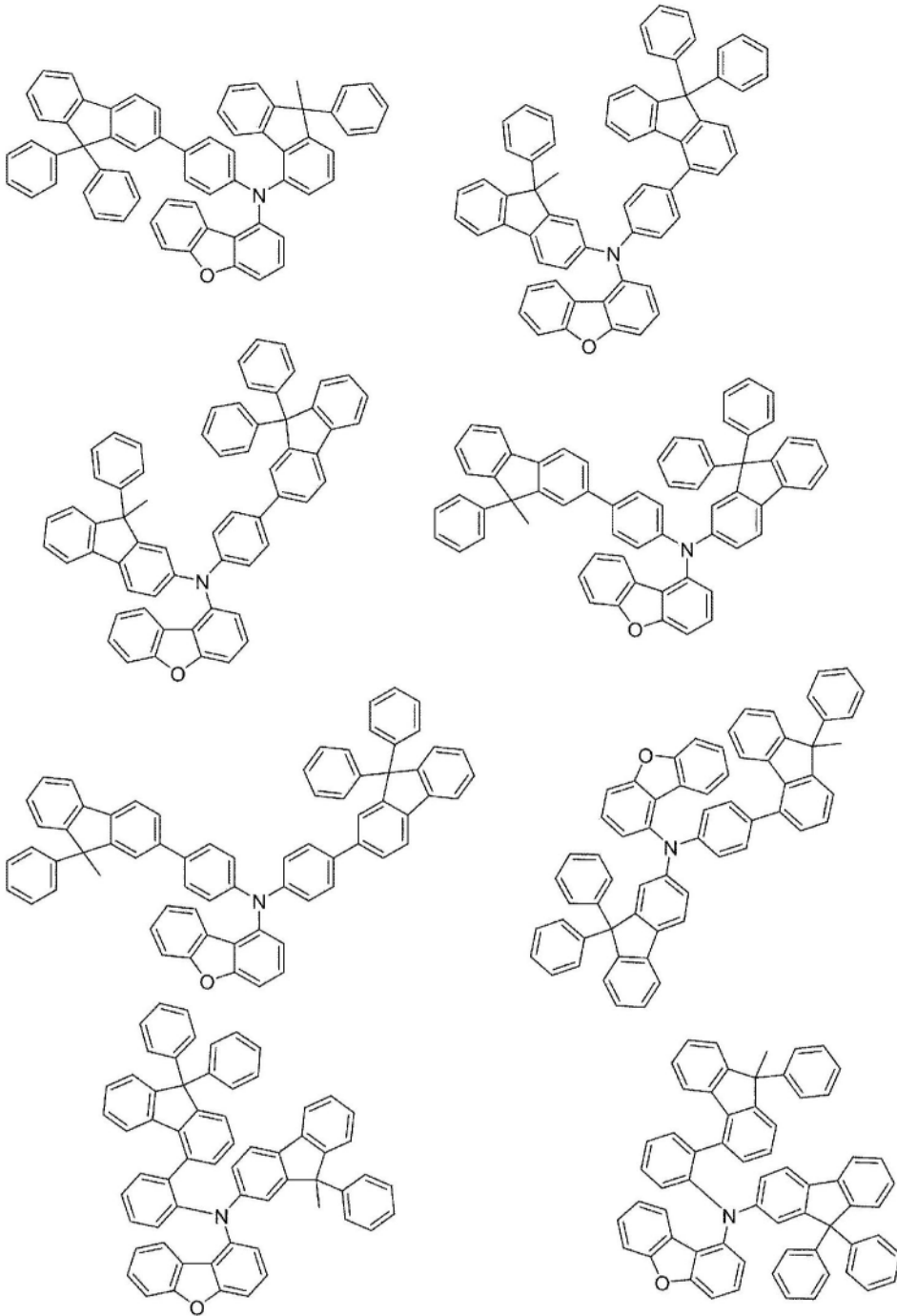


[0796]



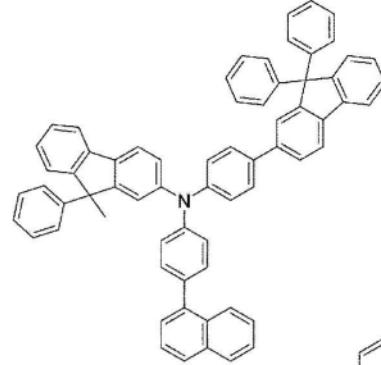
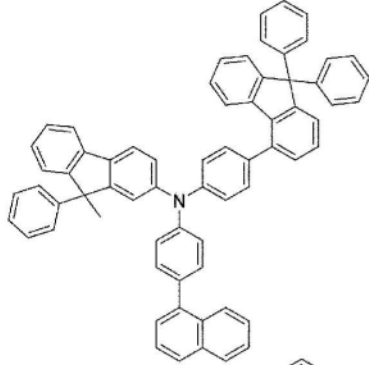
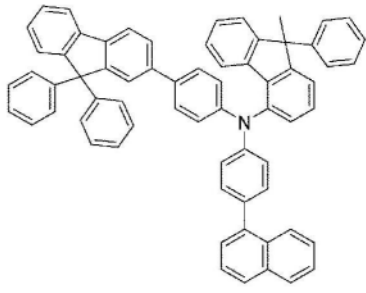
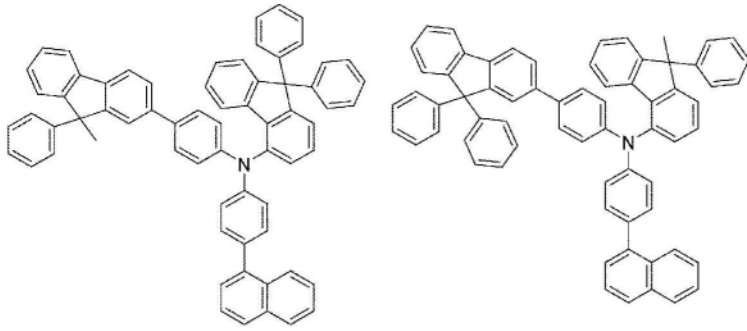
[0797] [化学式67]



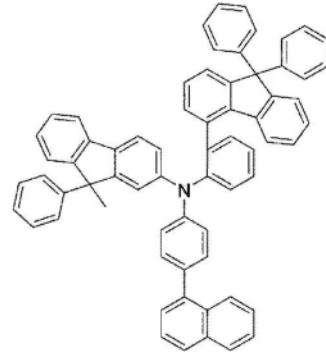
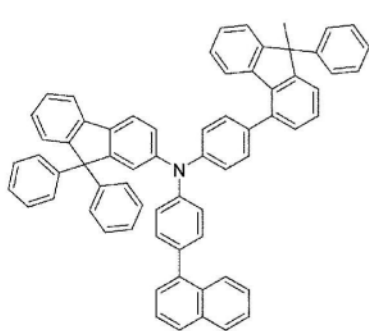
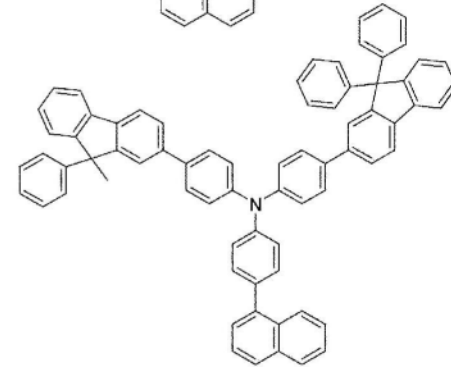
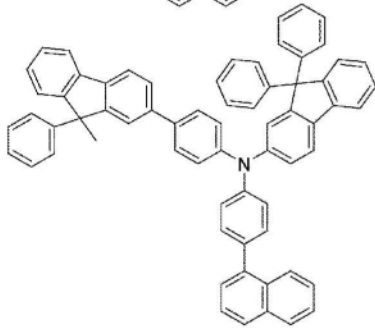


[0800]

[0801] [化学式69]

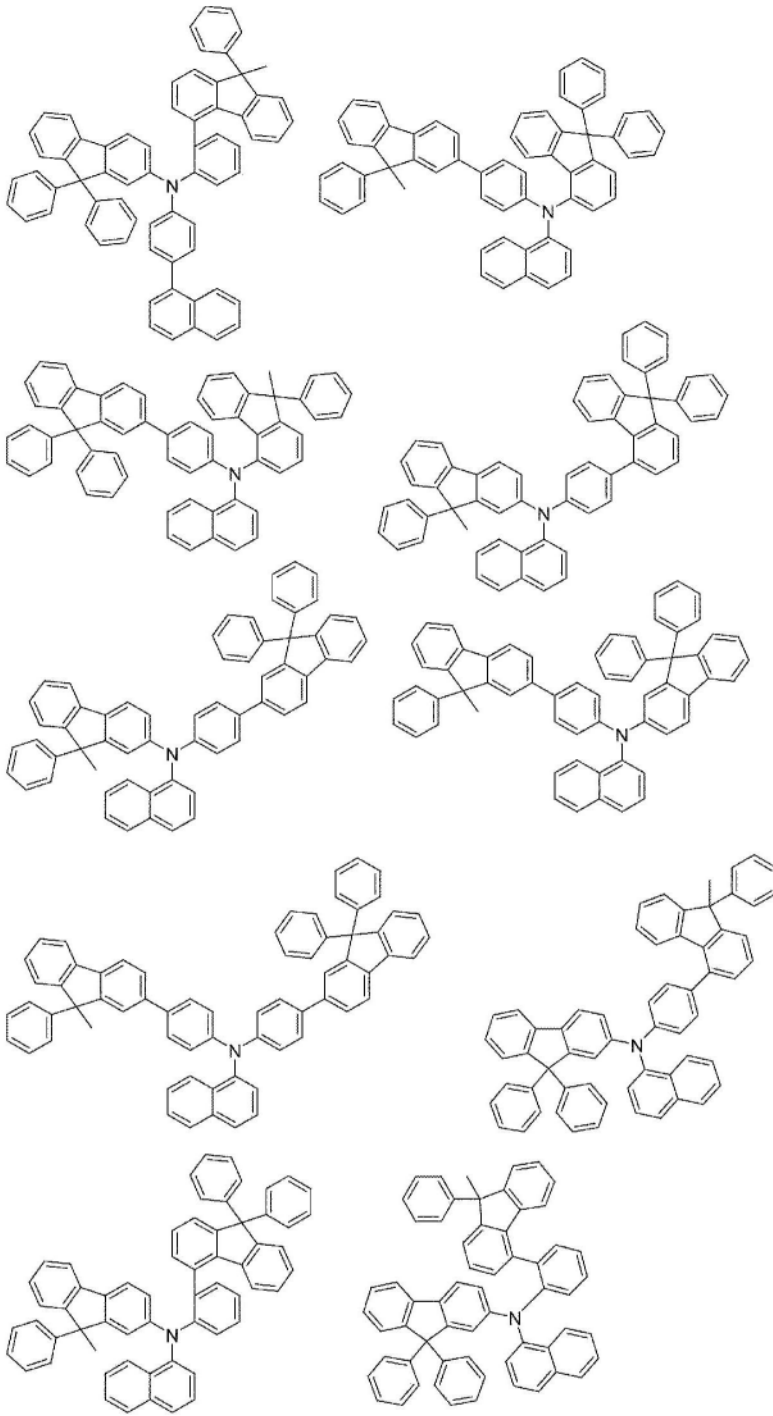


[0802]



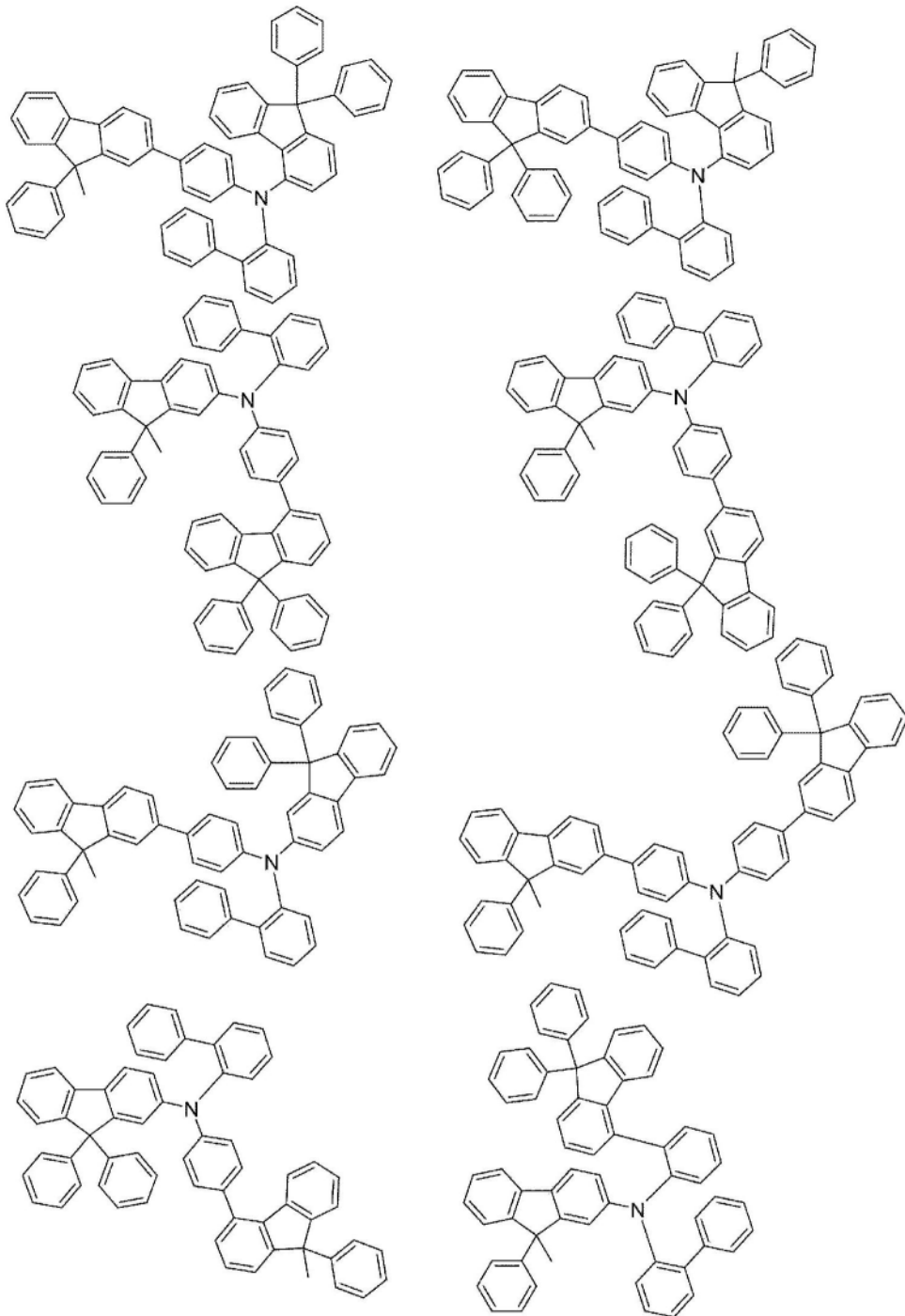
[0803] [化学式70]

[0804]

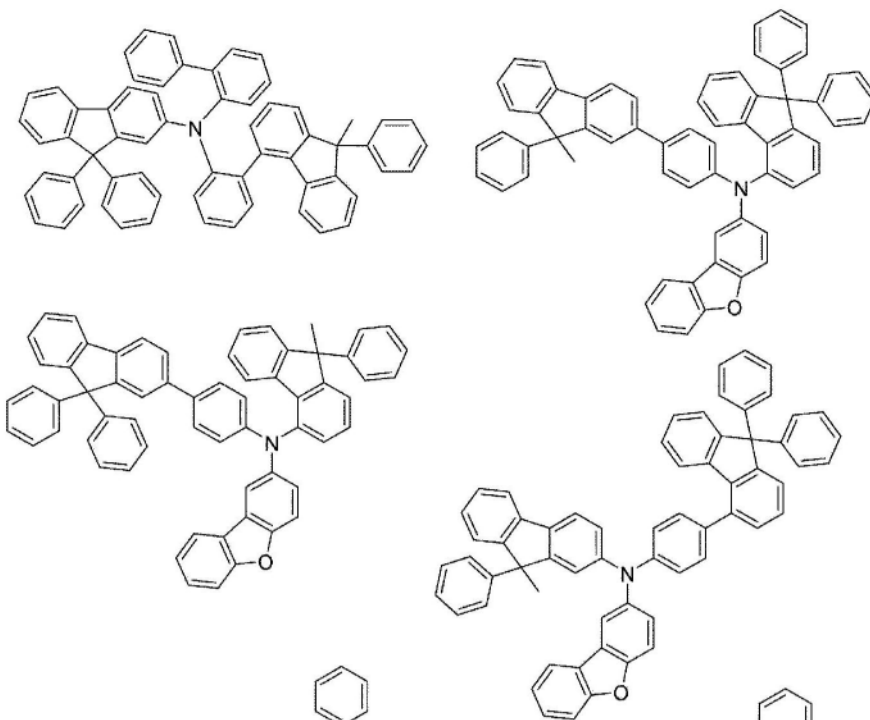


[0805] [化学式71]

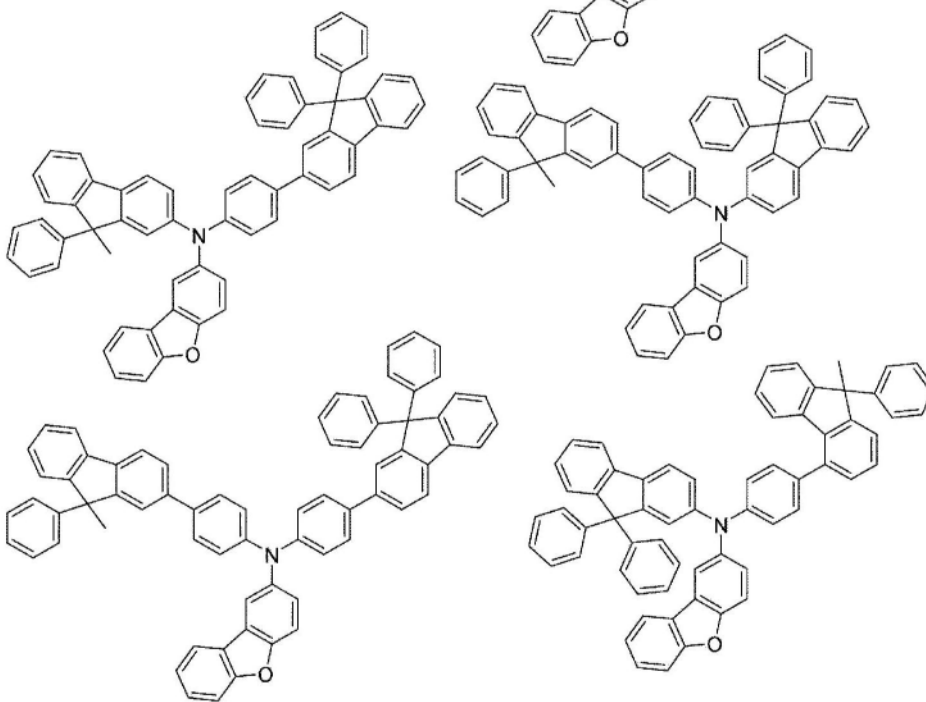
[0806]



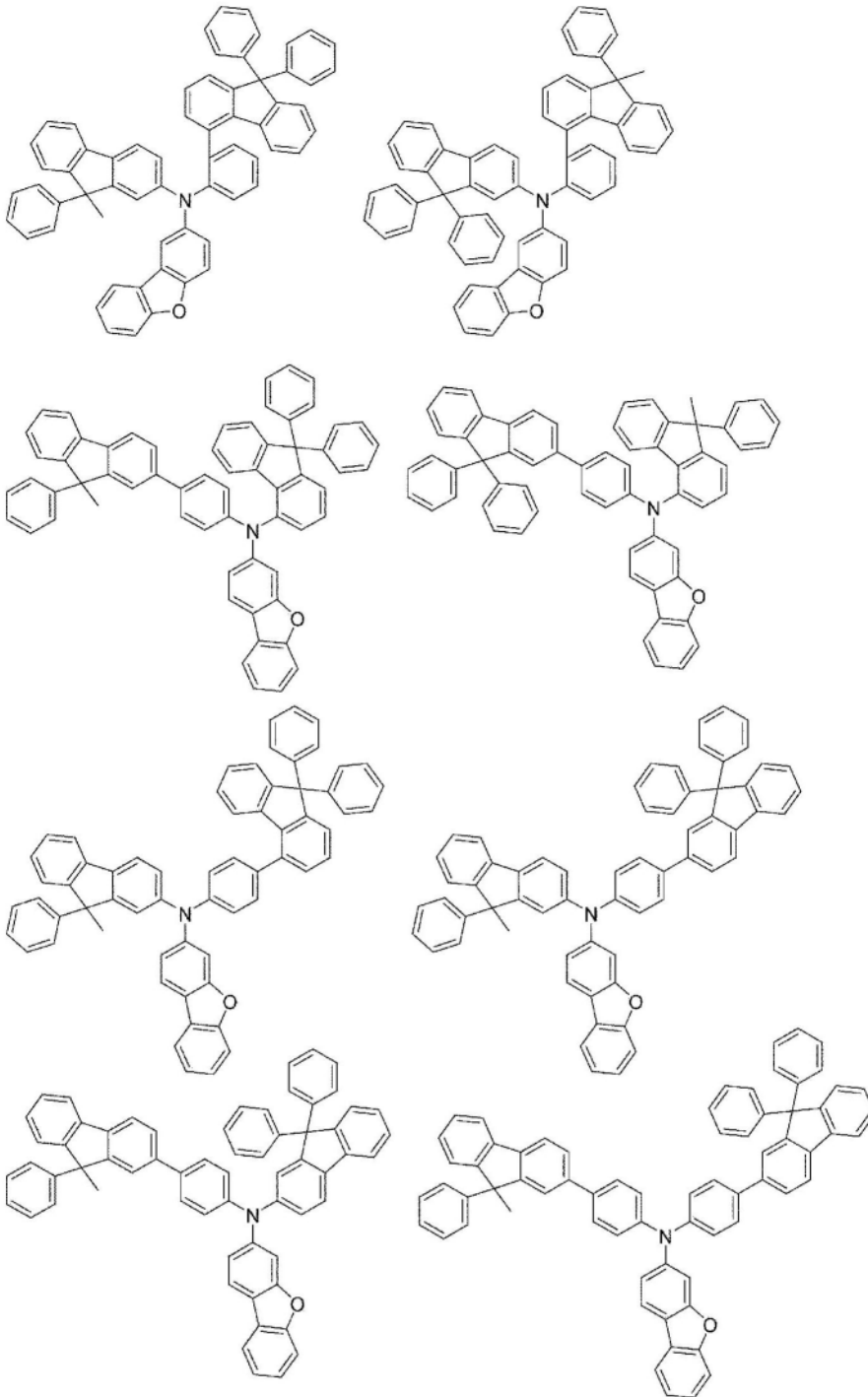
[0807] [化学式72]



[0808]

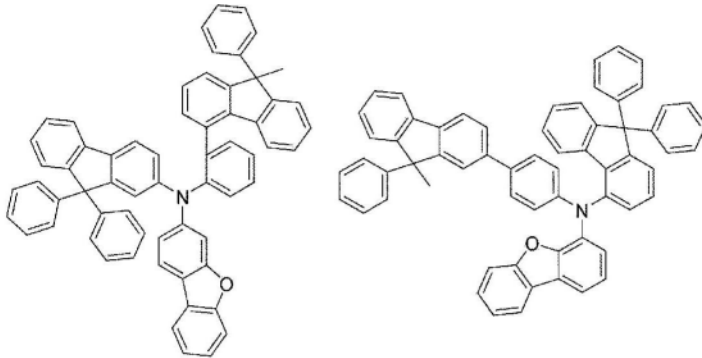
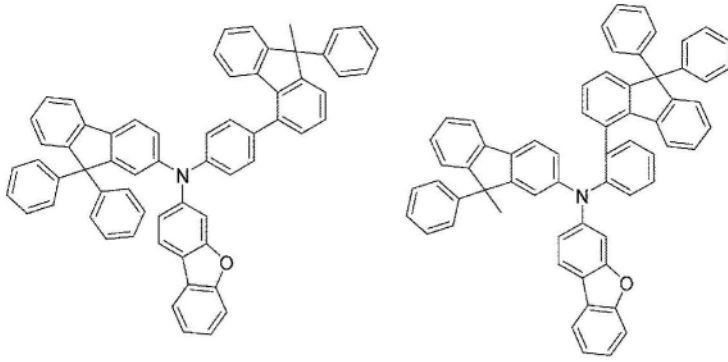


[0809] [化学式73]

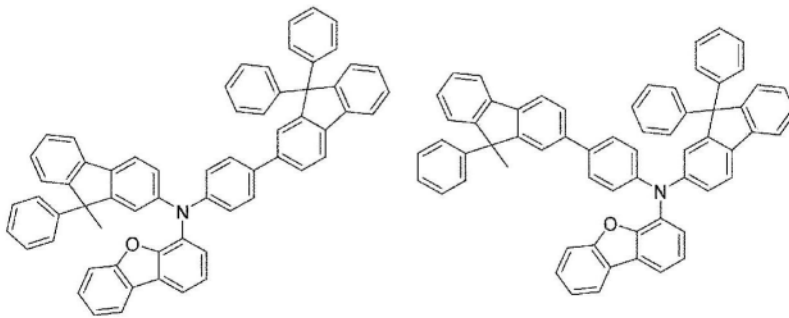
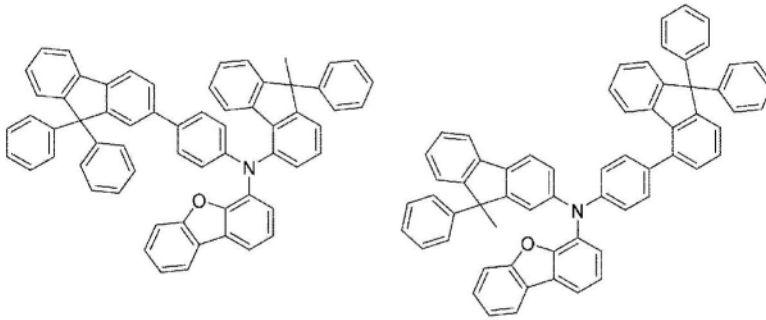


[0810]

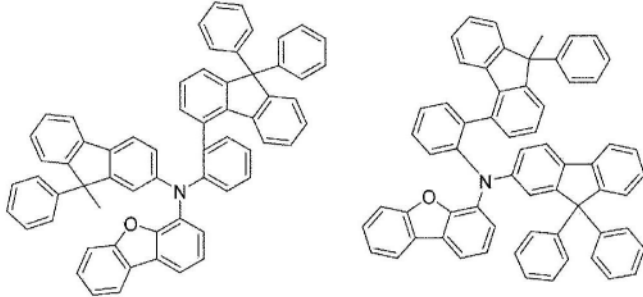
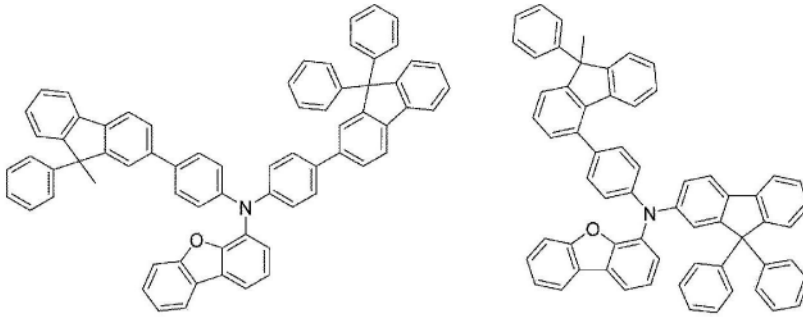
[0811] [化学式74]



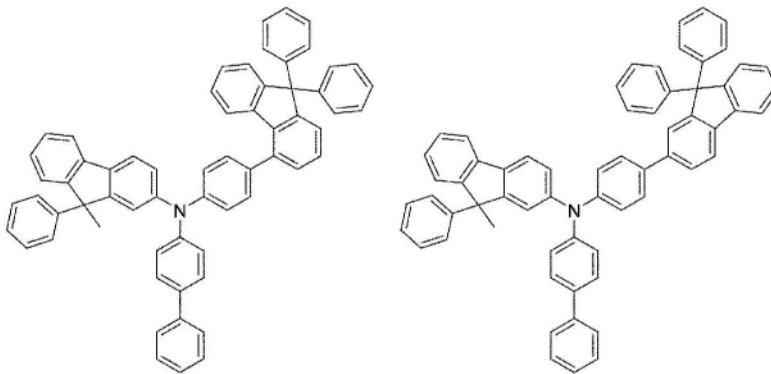
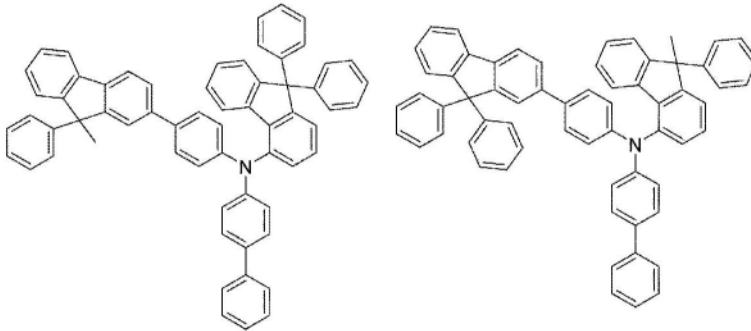
[0812]



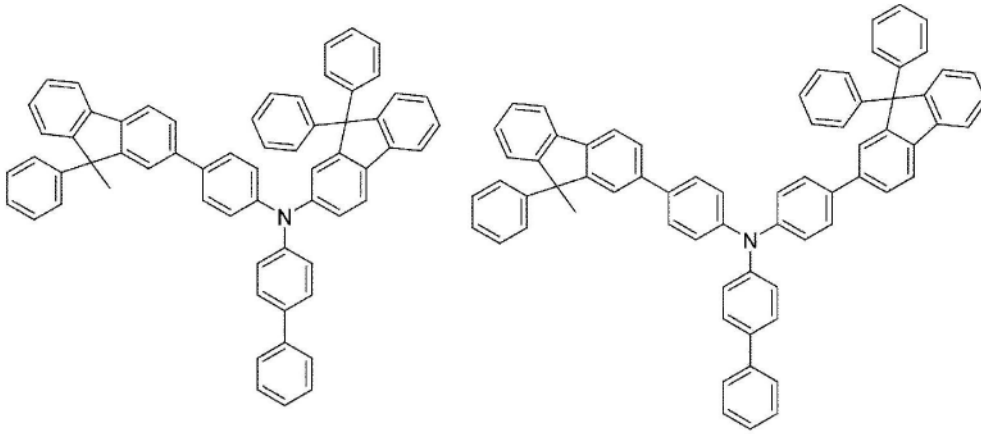
[0813] [化学式75]



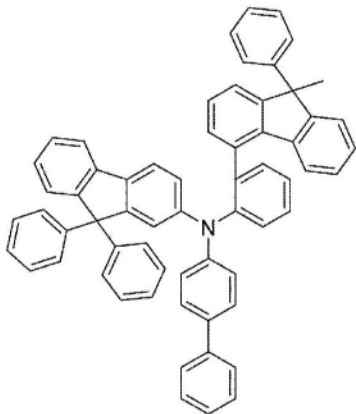
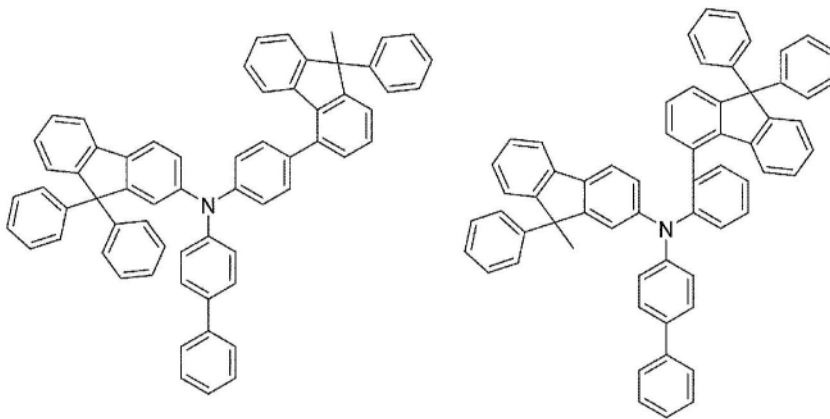
[0814]



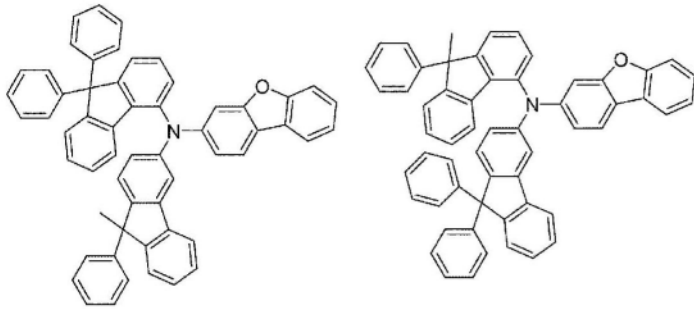
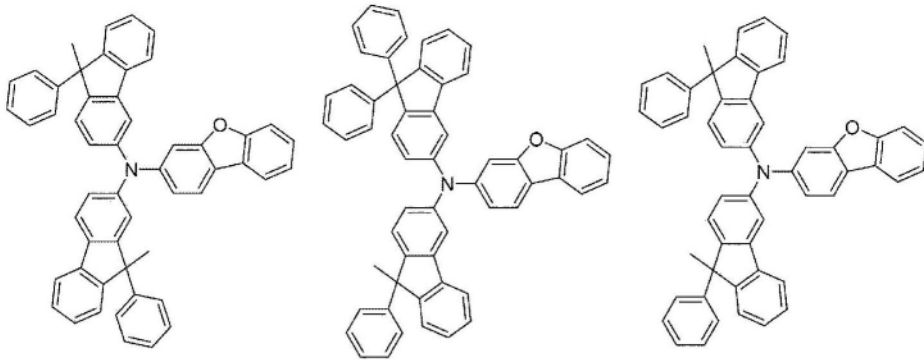
[0815] [化学式76]



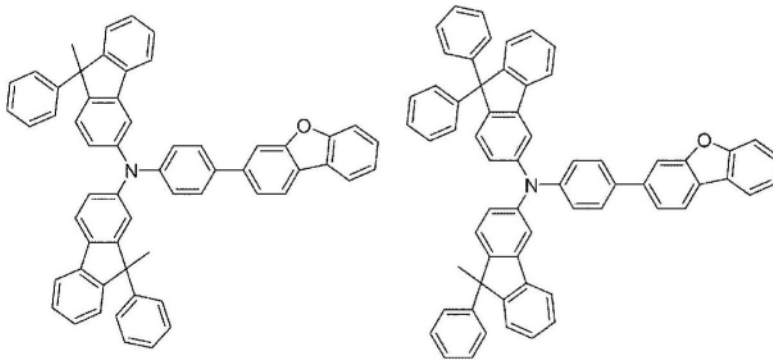
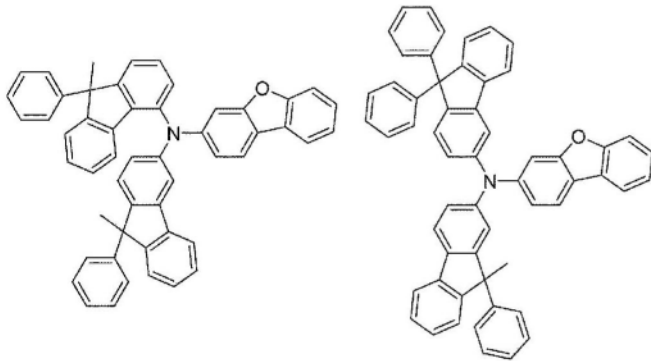
[0816]



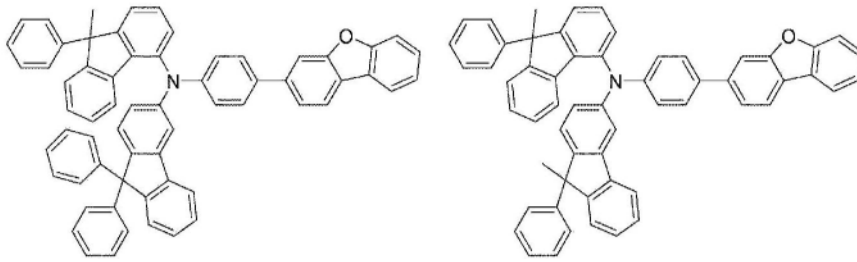
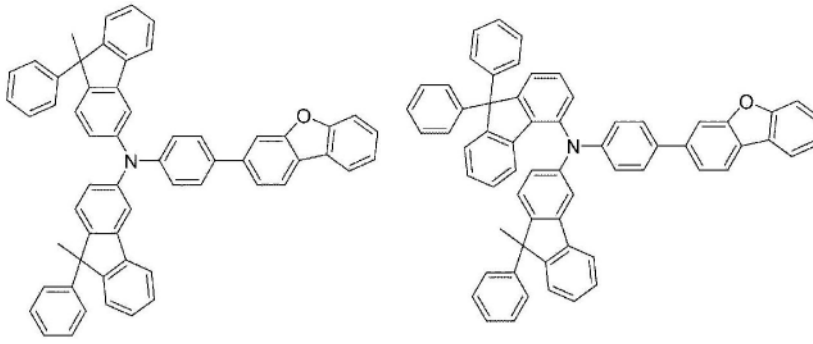
[0817] [化学式77]



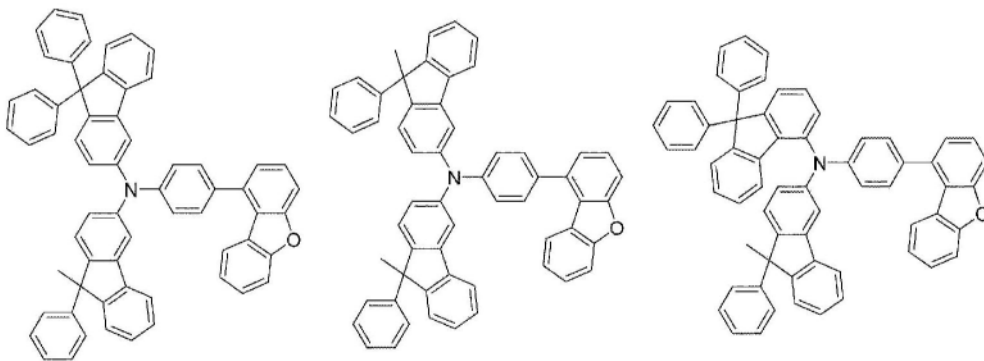
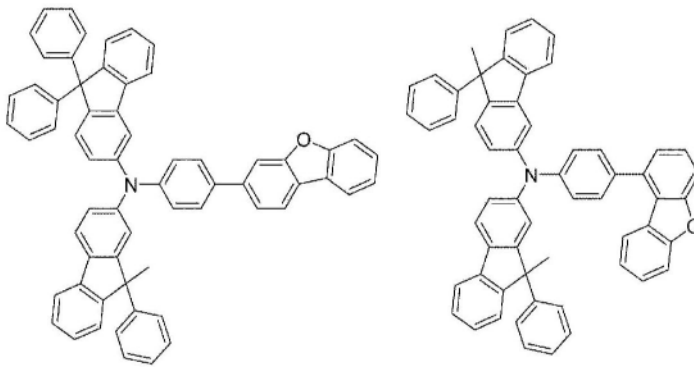
[0818]



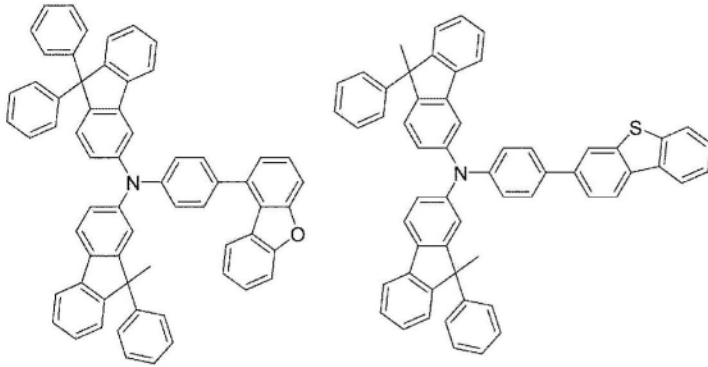
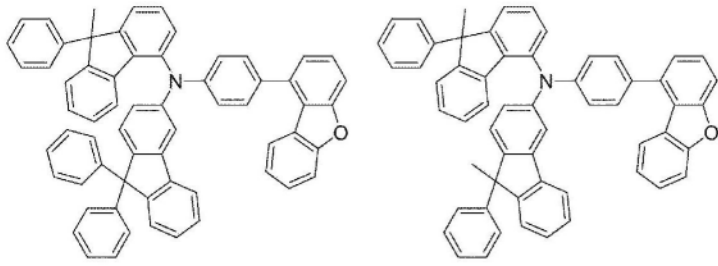
[0819] [化学式78]



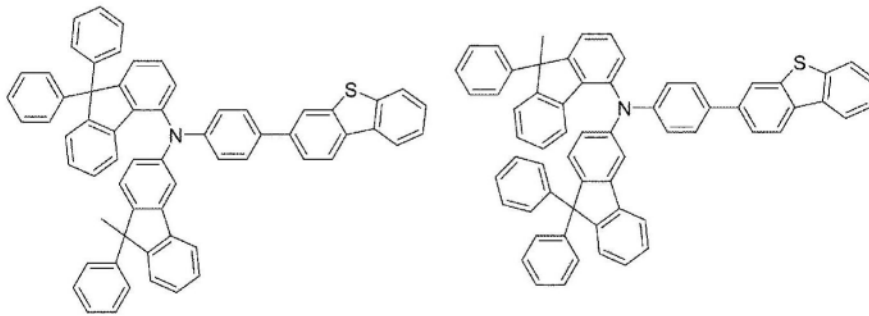
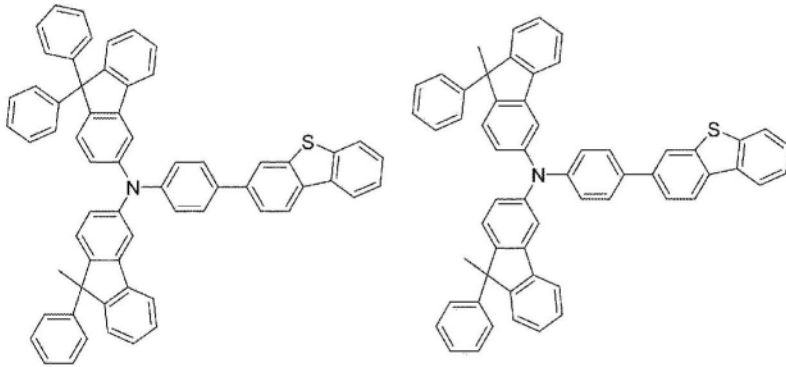
[0820]



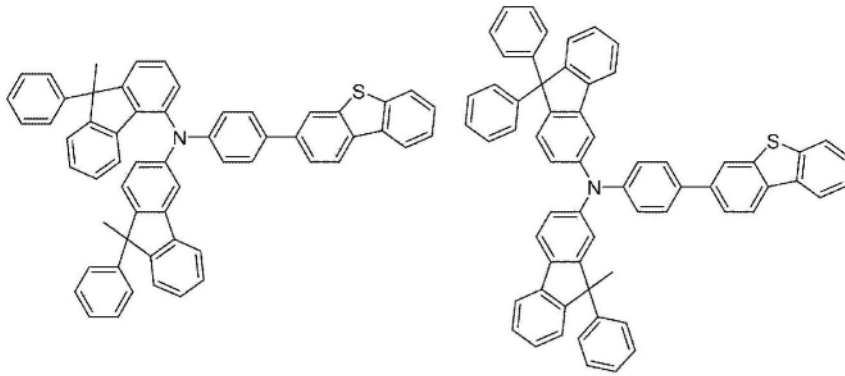
[0821] [化学式79]



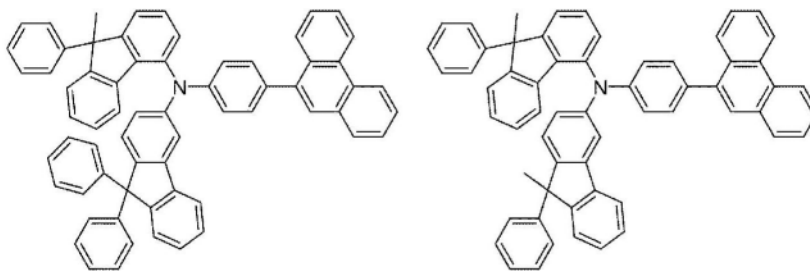
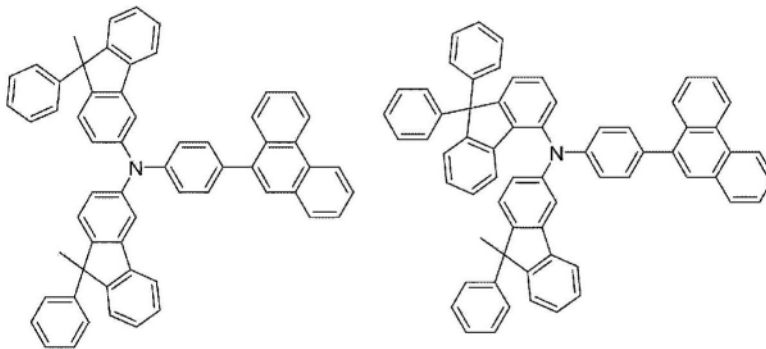
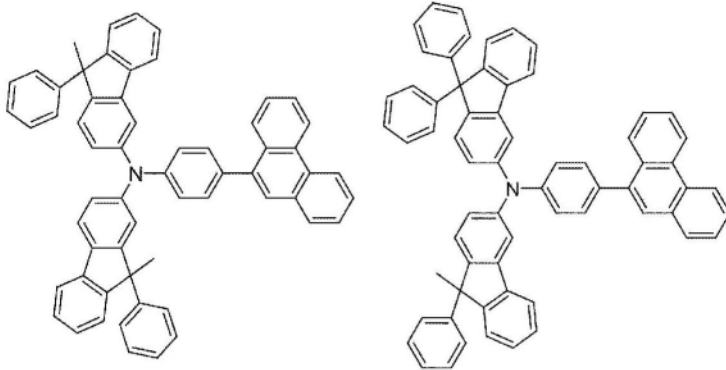
[0822]



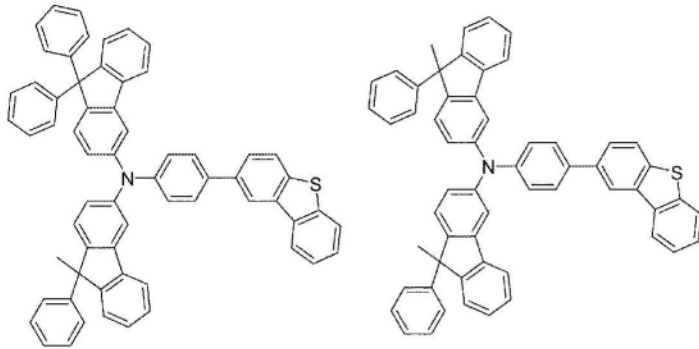
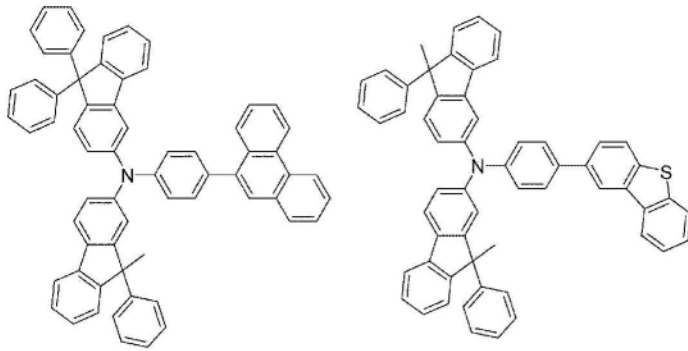
[0823] [化学式80]



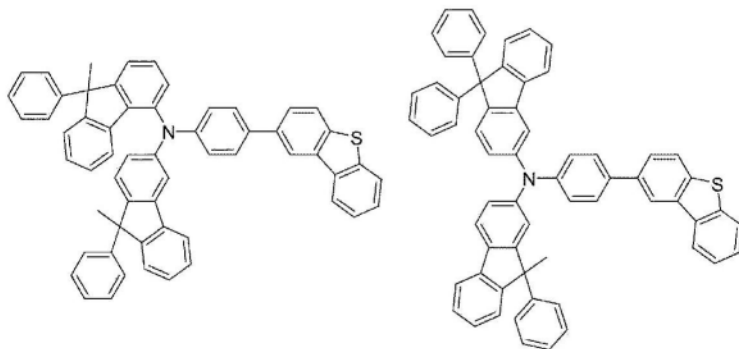
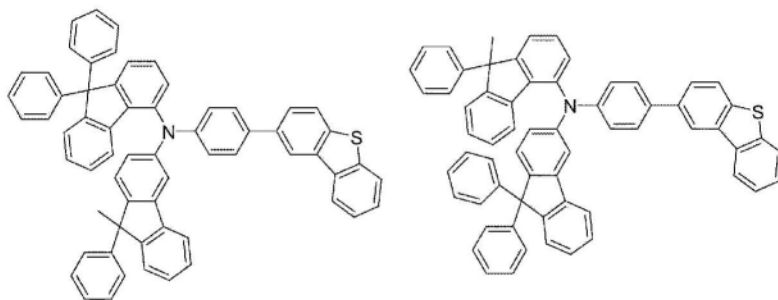
[0824]



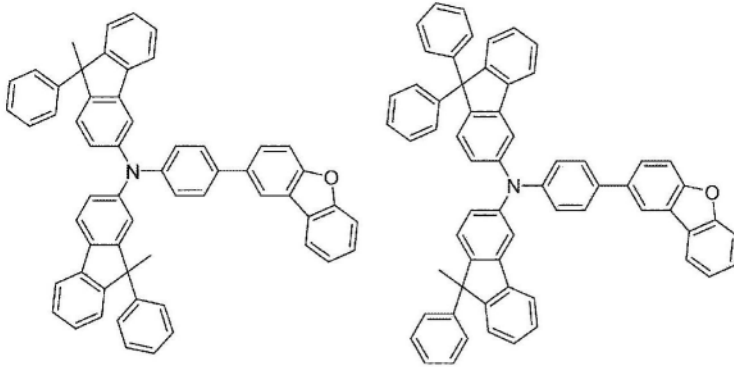
[0825] [化学式81]



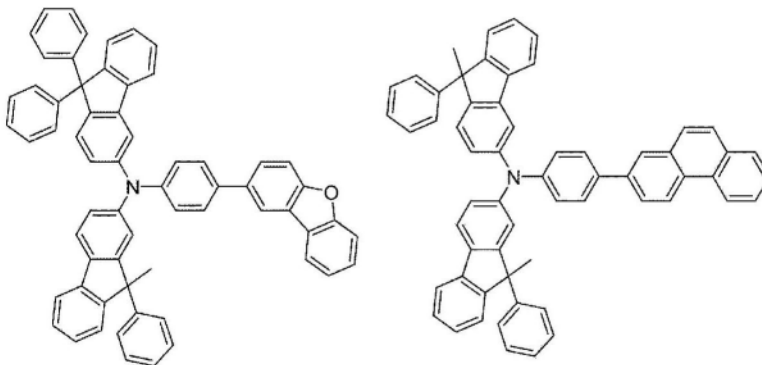
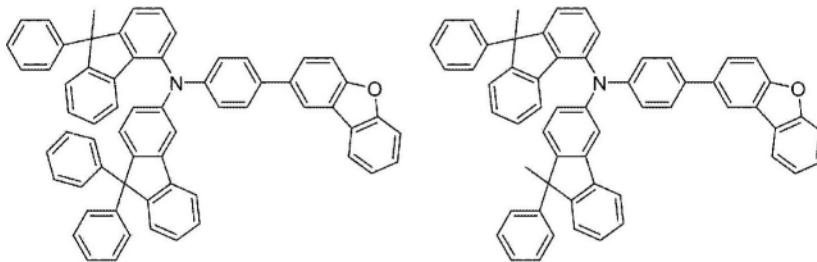
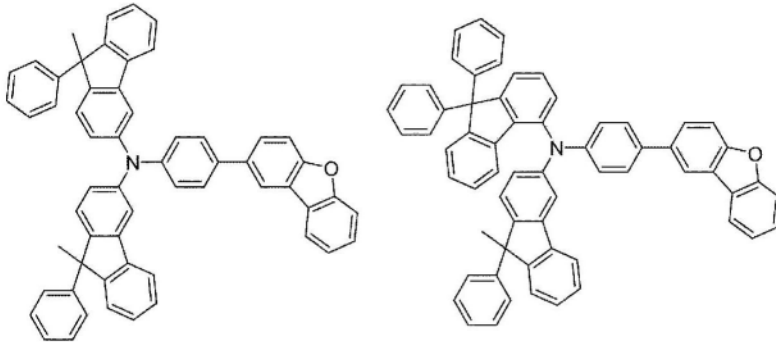
[0826]



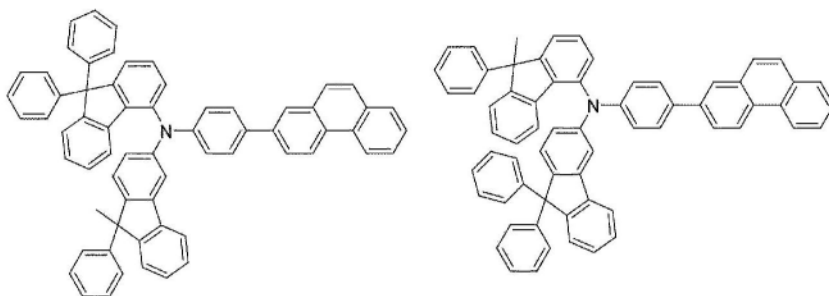
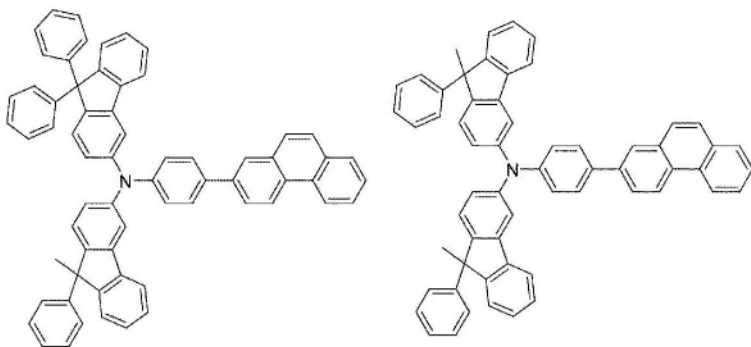
[0827] [化学式82]



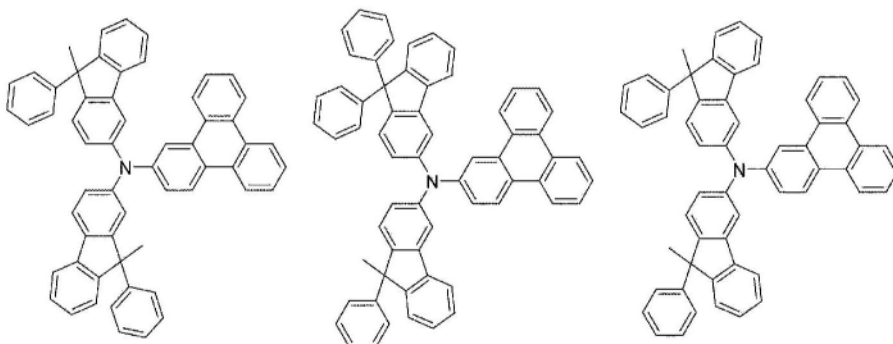
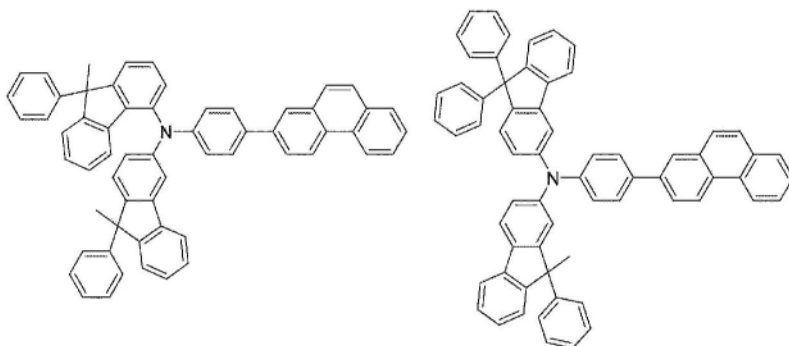
[0828]



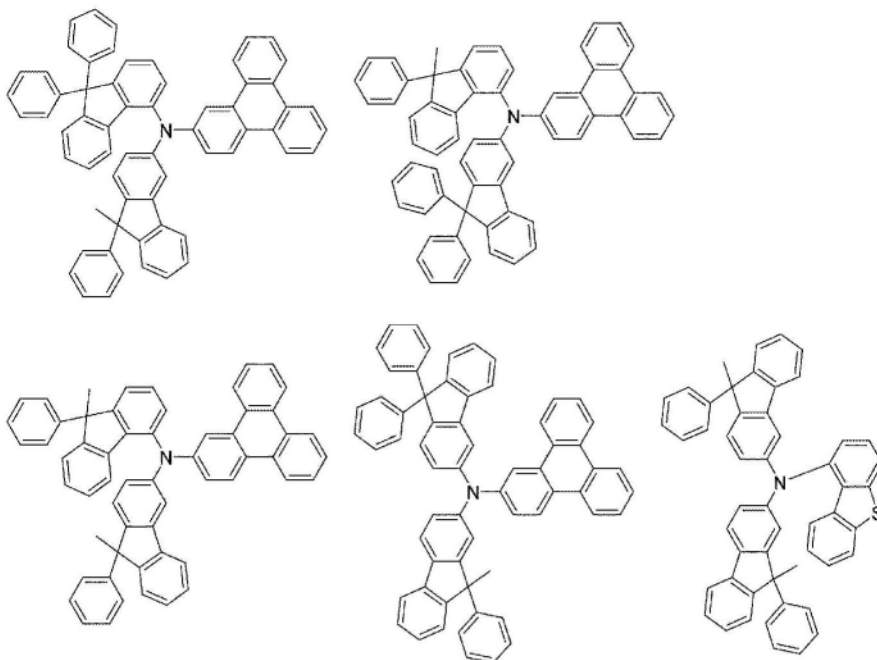
[0829] [化学式83]



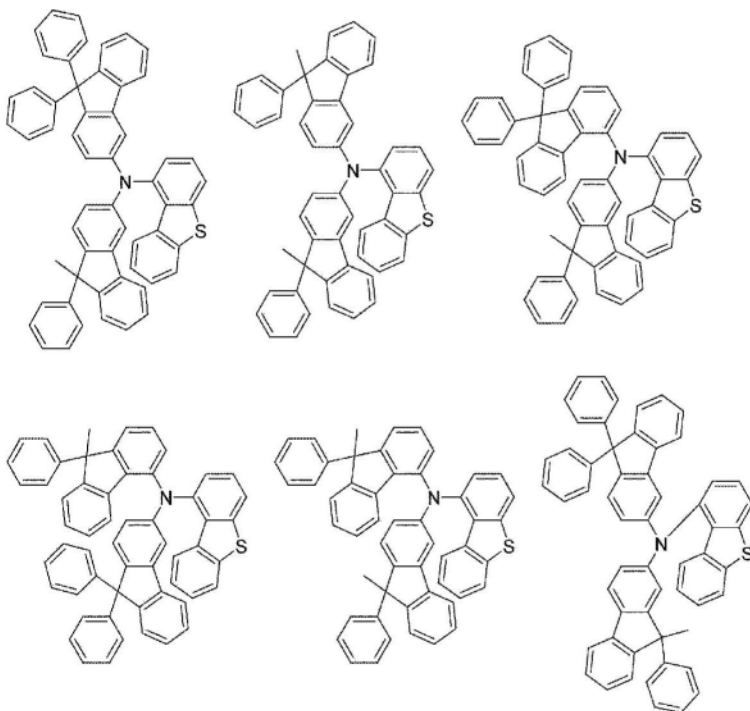
[0830]



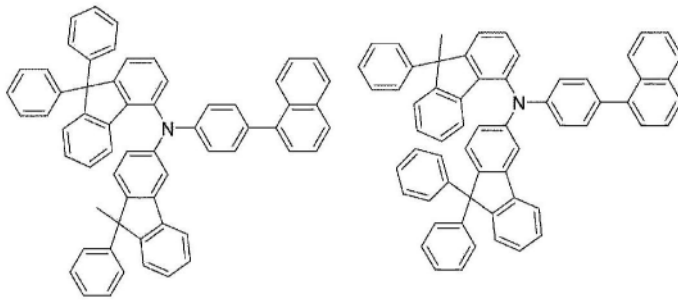
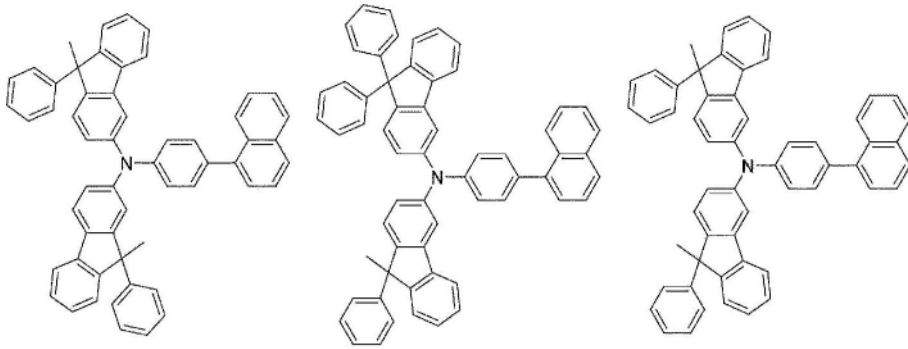
[0831] [化学式84]



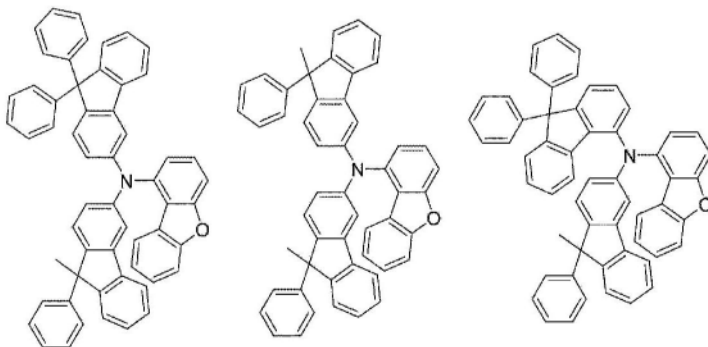
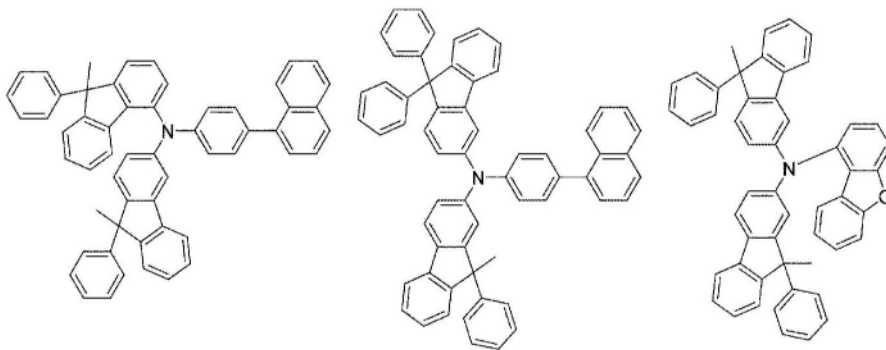
[0832]



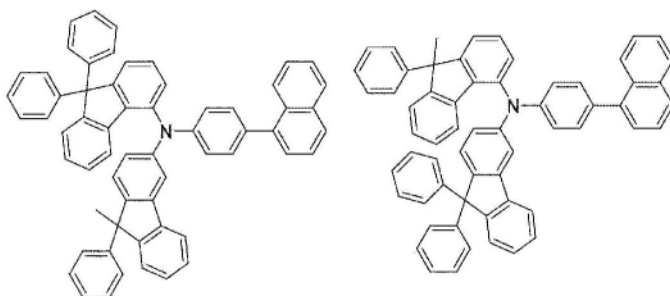
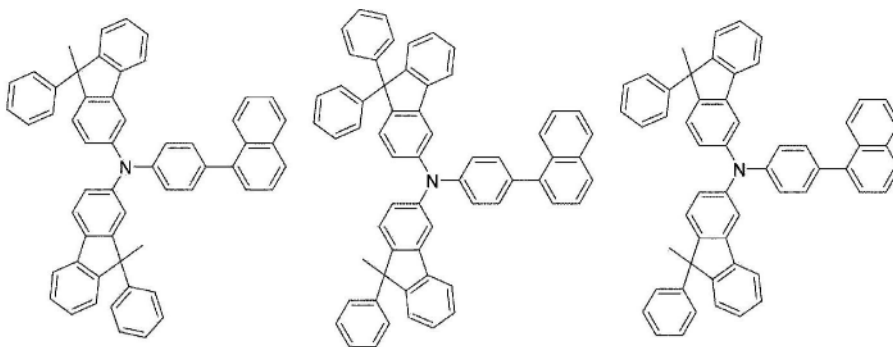
[0833] [化学式85]



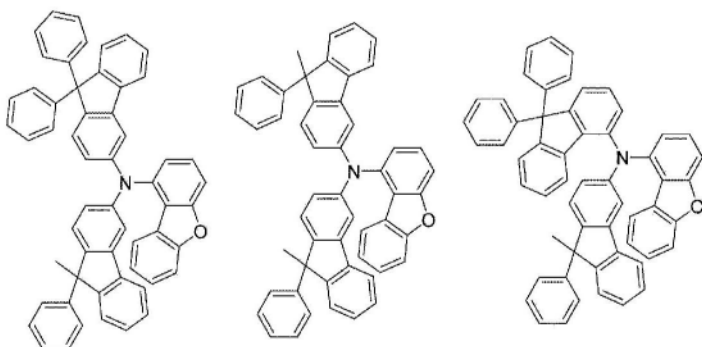
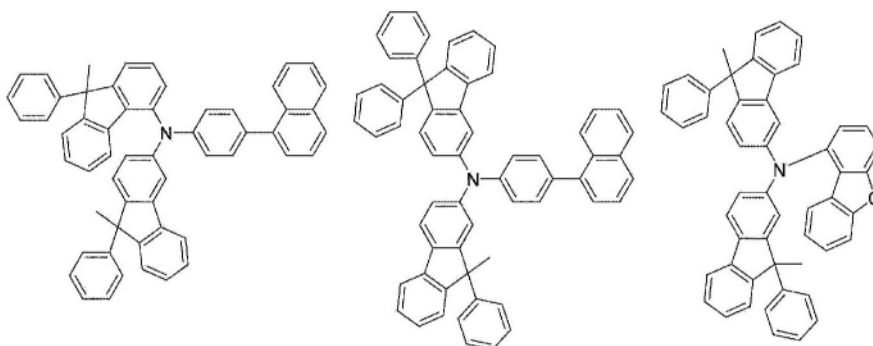
[0834]



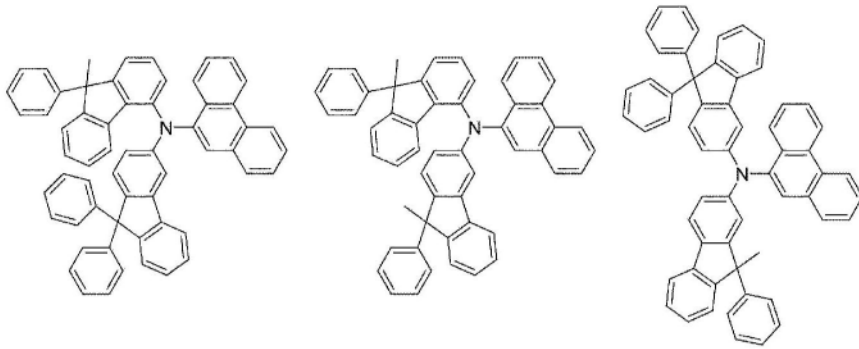
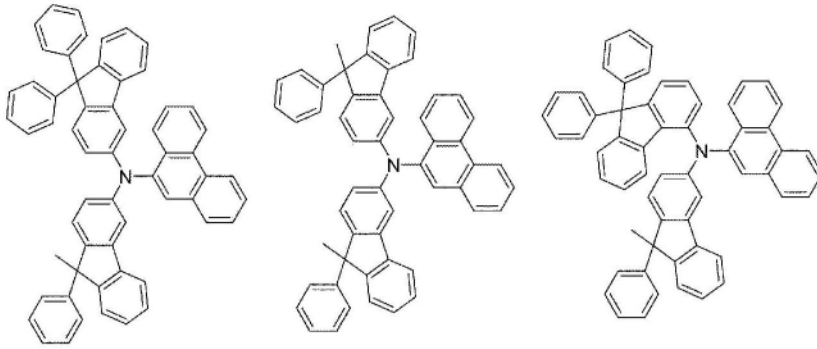
[0835] [化学式86]



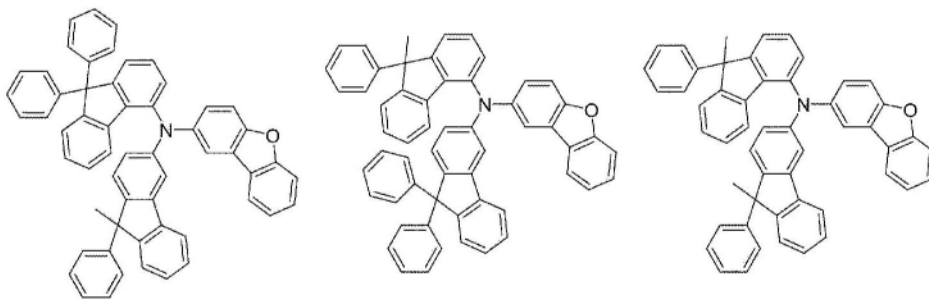
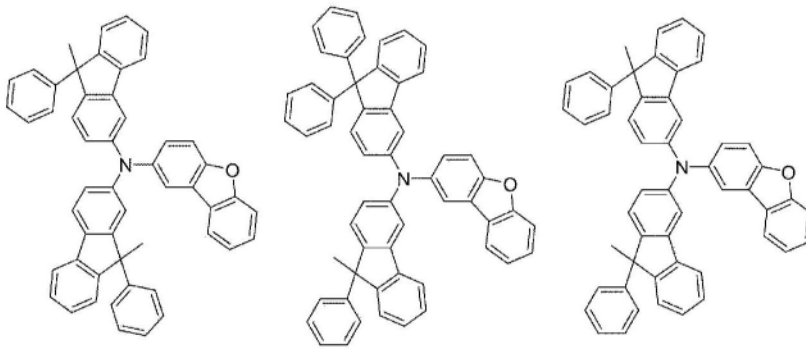
[0836]



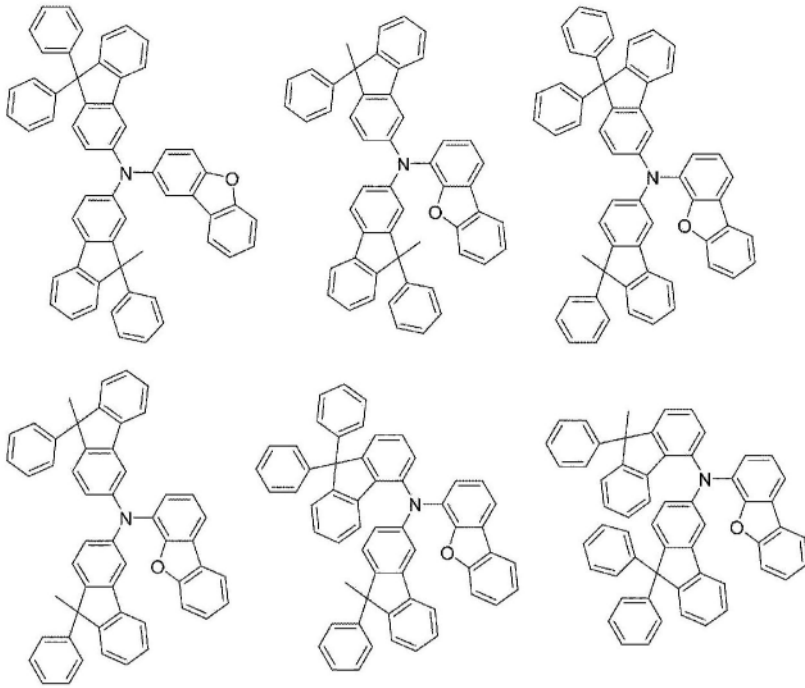
[0837] [化学式87]



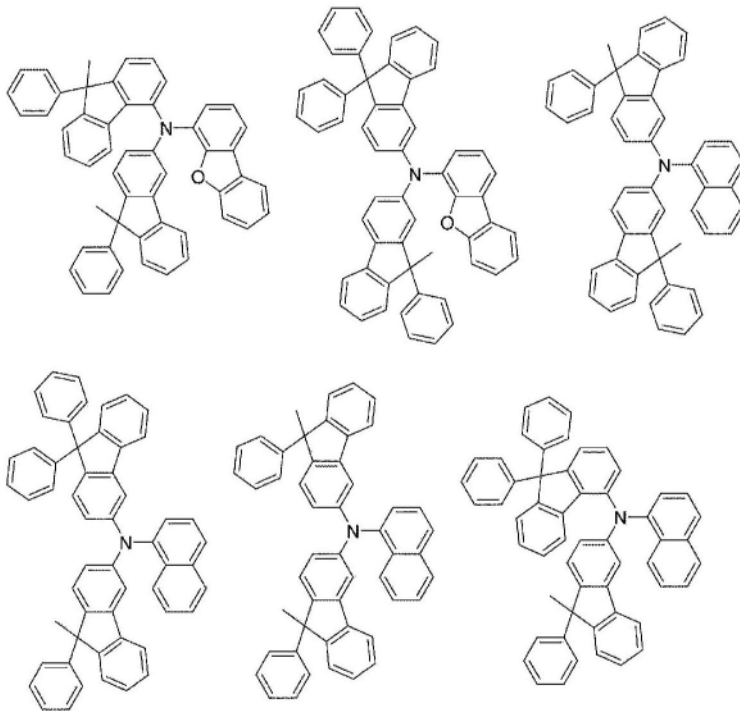
[0838]



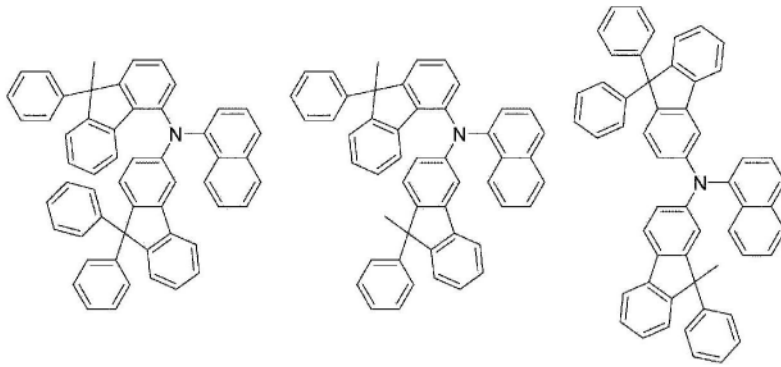
[0839] [化学式88]



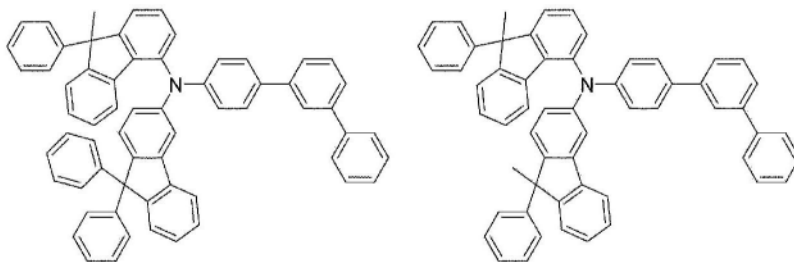
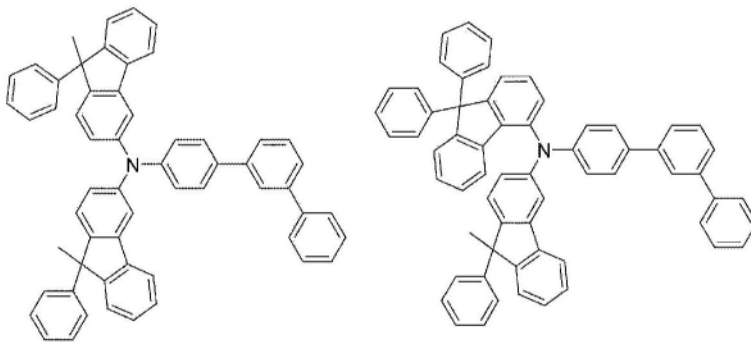
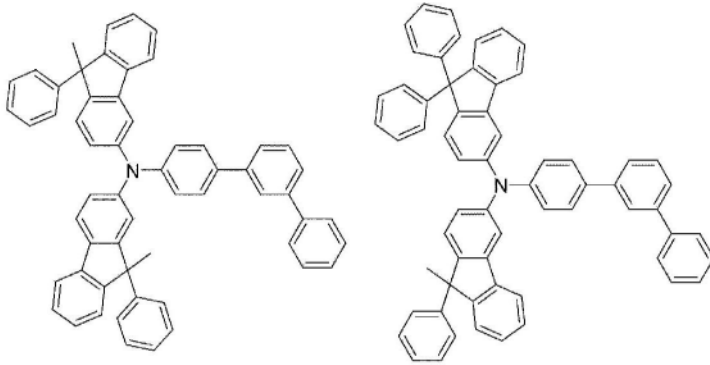
[0840]



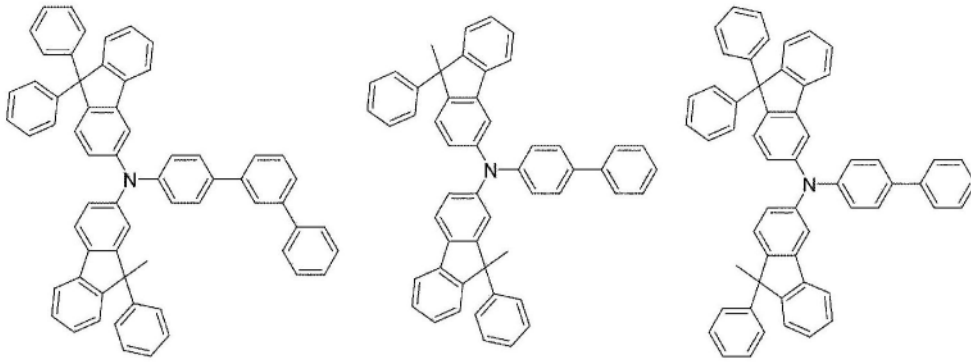
[0841] [化学式89]



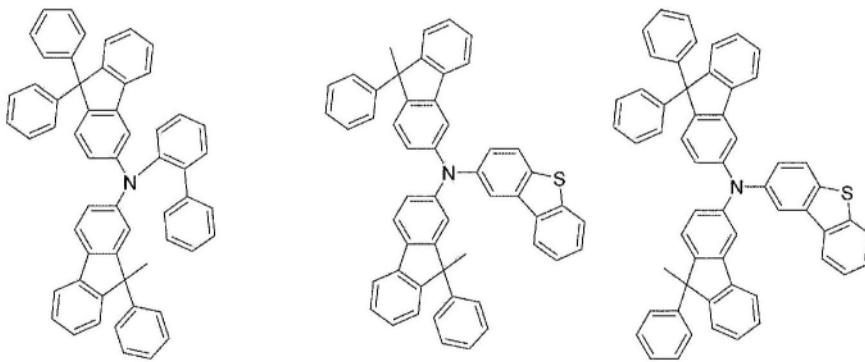
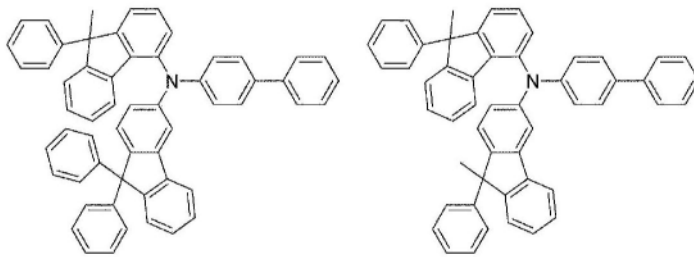
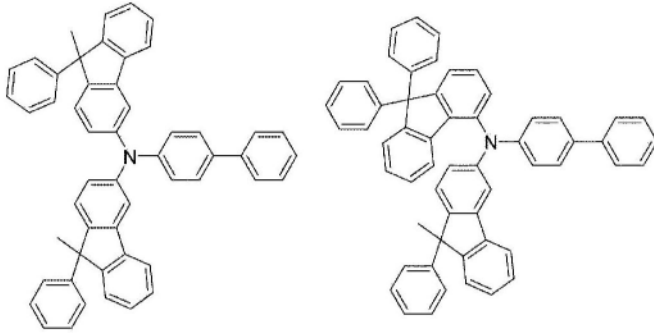
[0842]



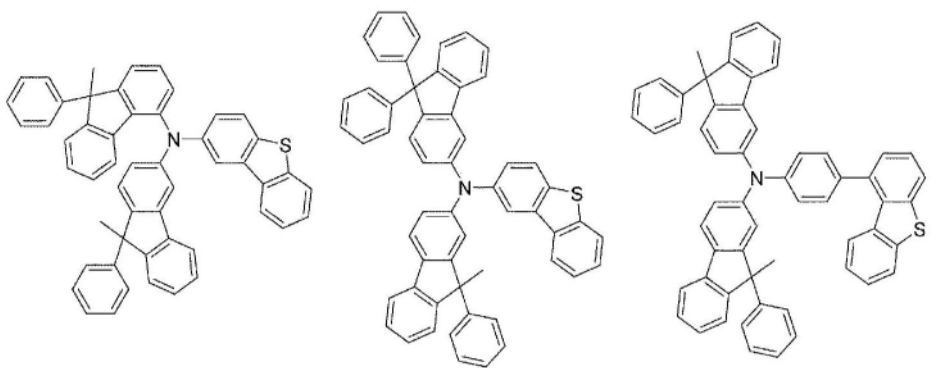
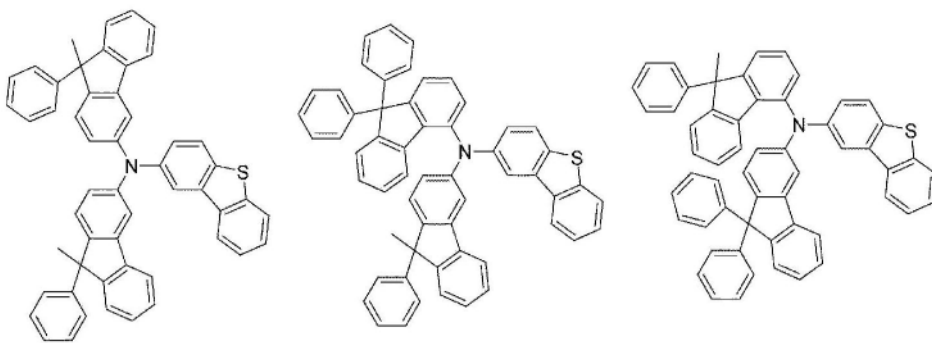
[0843] [化学式90]



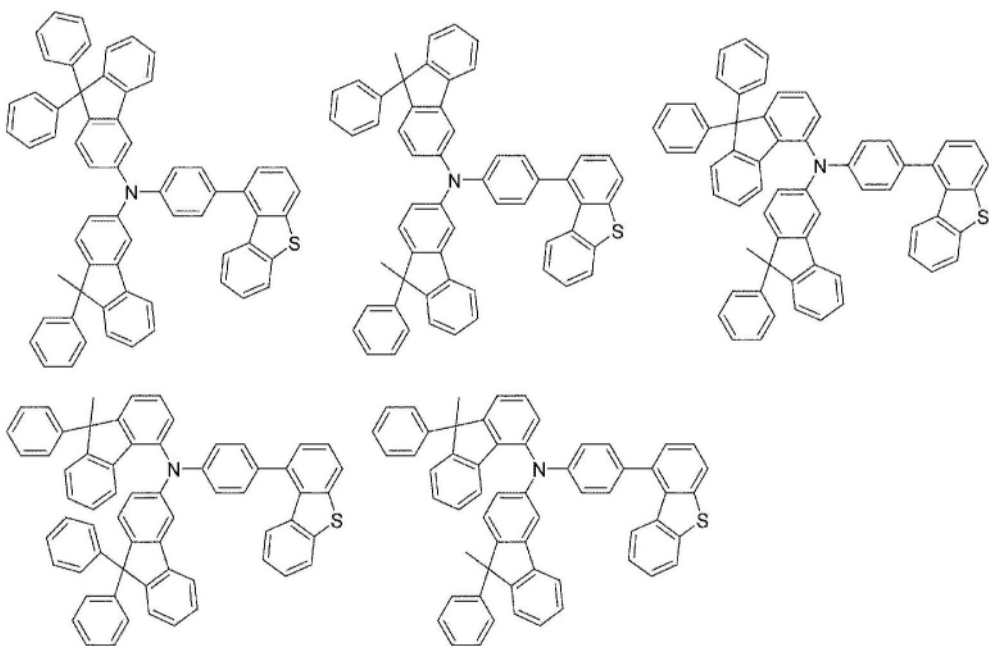
[0844]



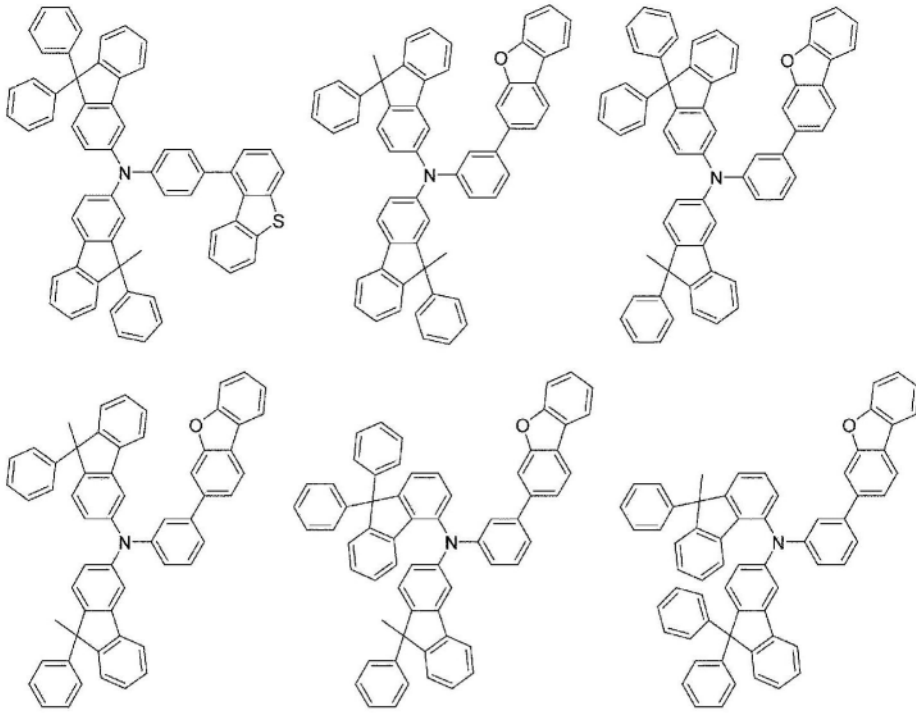
[0845] [化学式91]



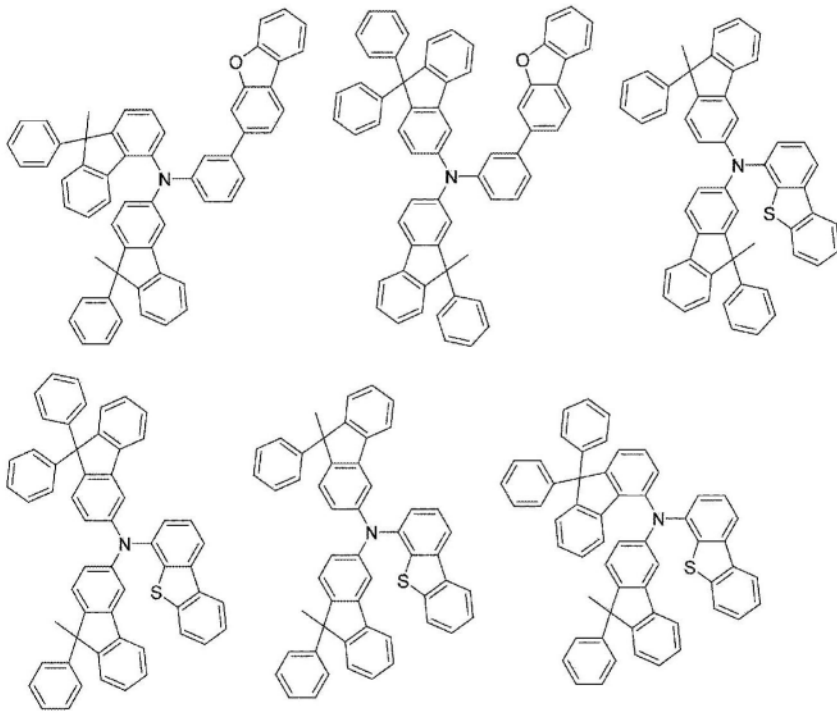
[0846]



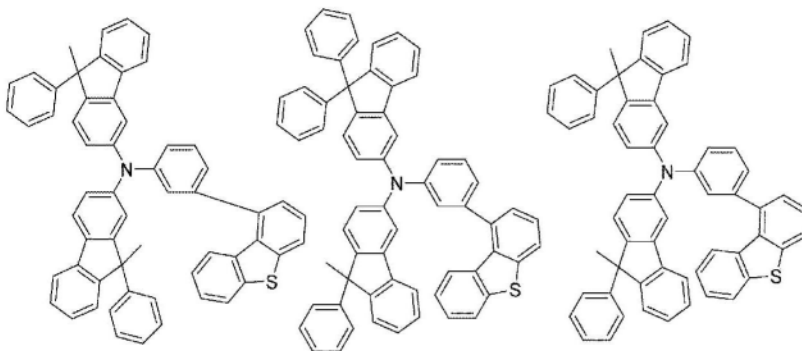
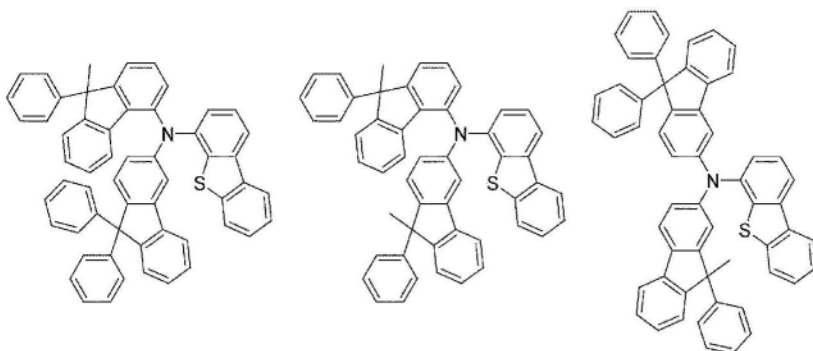
[0847] [化学式92]



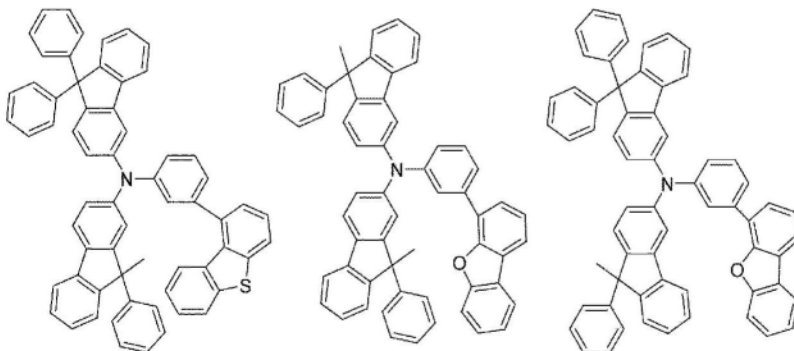
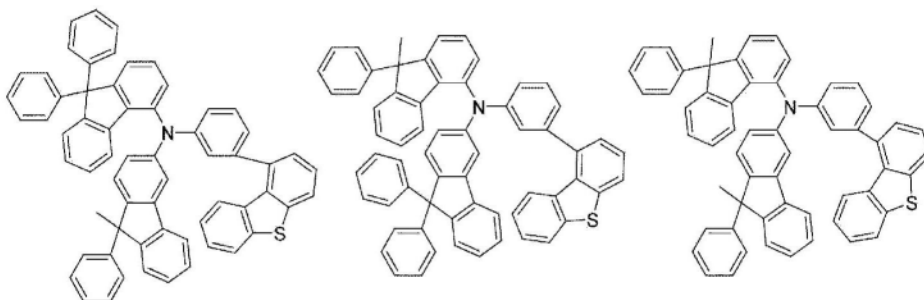
[0848]



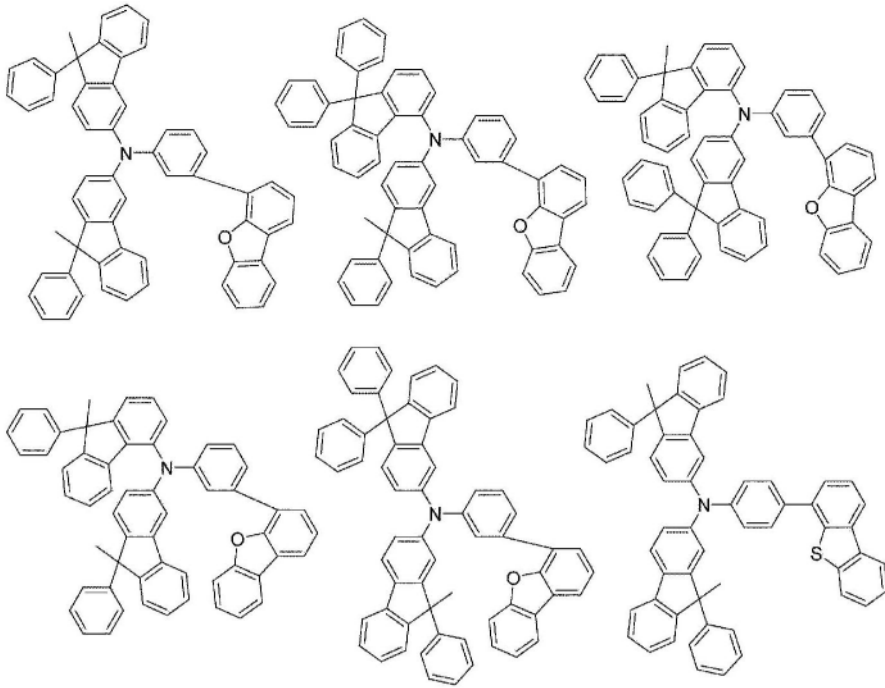
[0849] [化学式93]



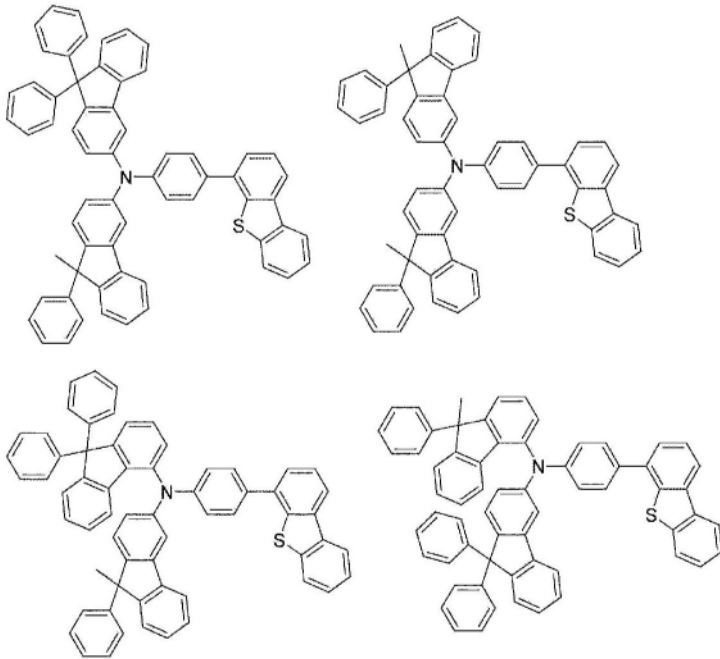
[0850]



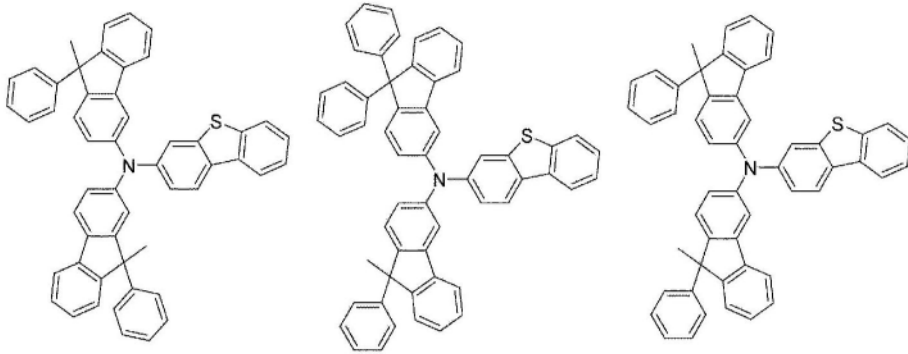
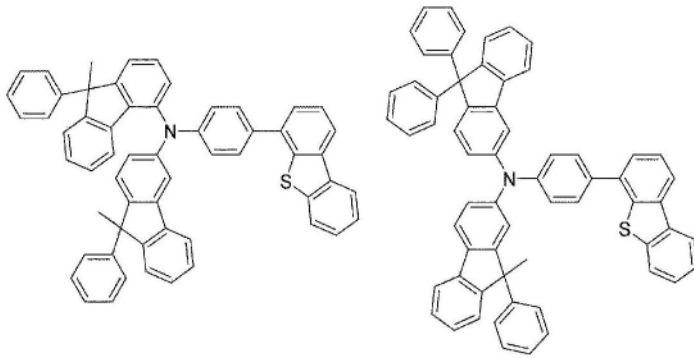
[0851] [化学式94]



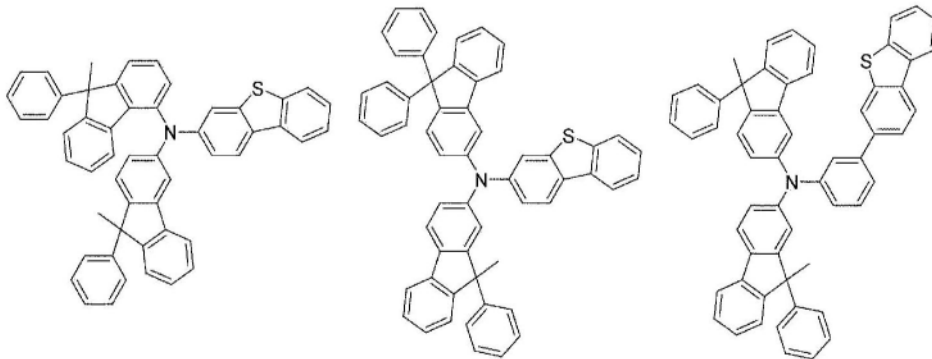
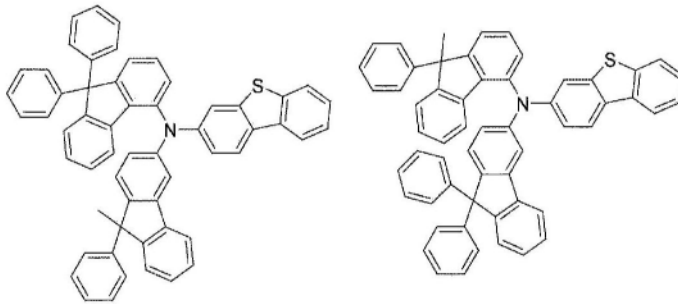
[0852]



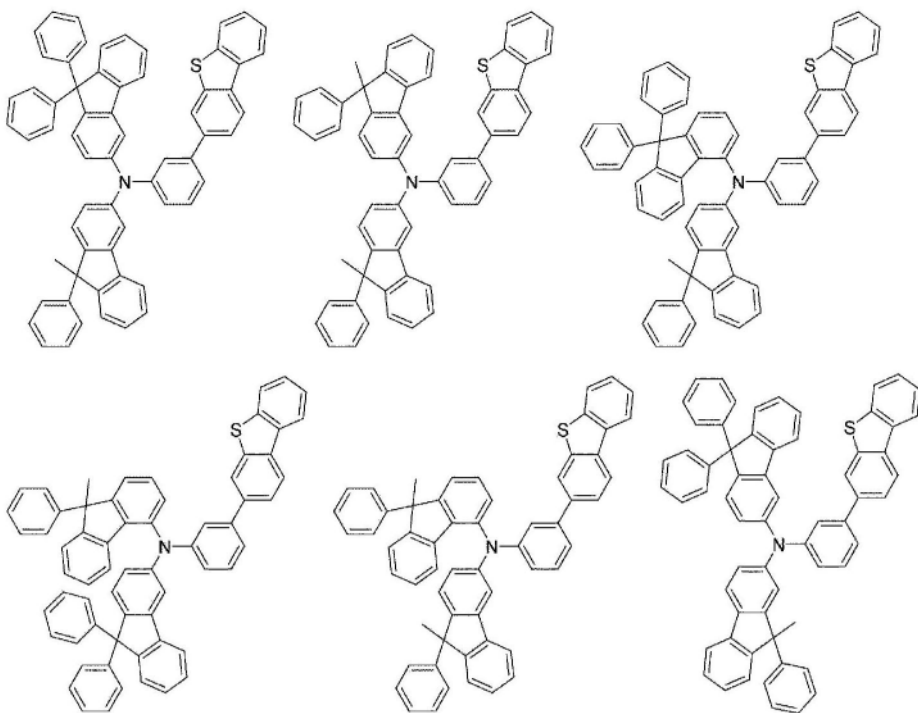
[0853] [化学式95]



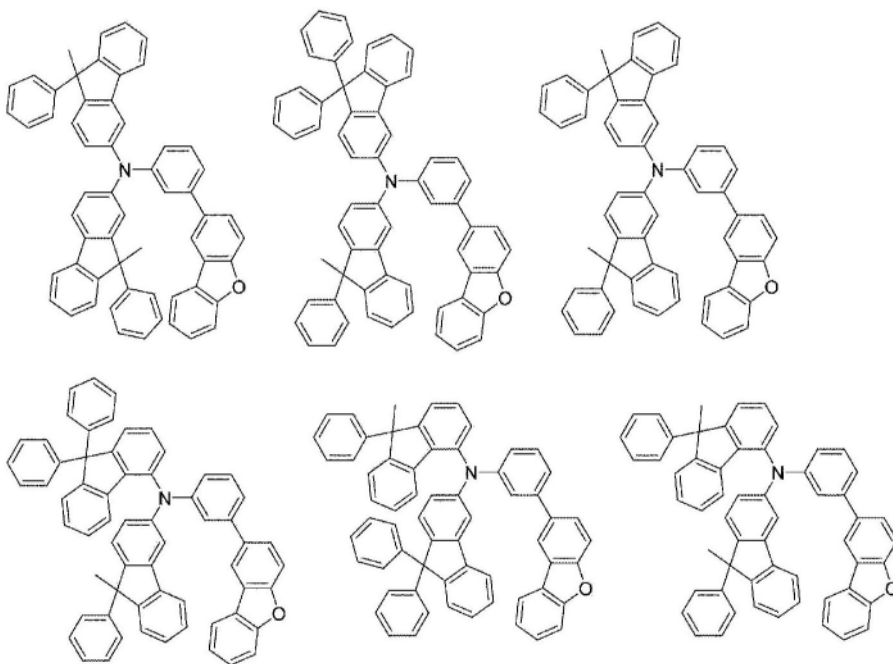
[0854]



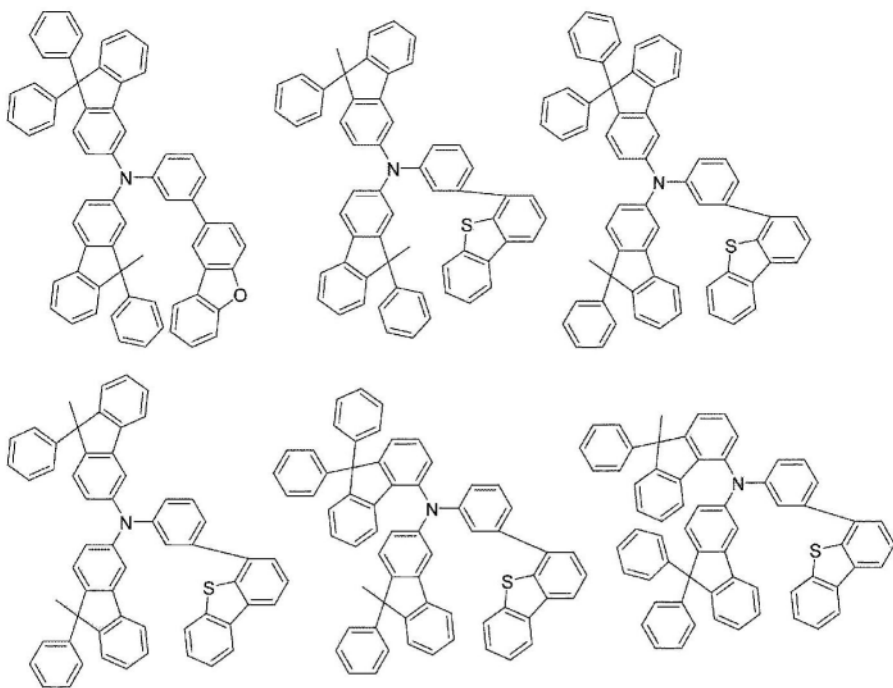
[0855] [化学式96]



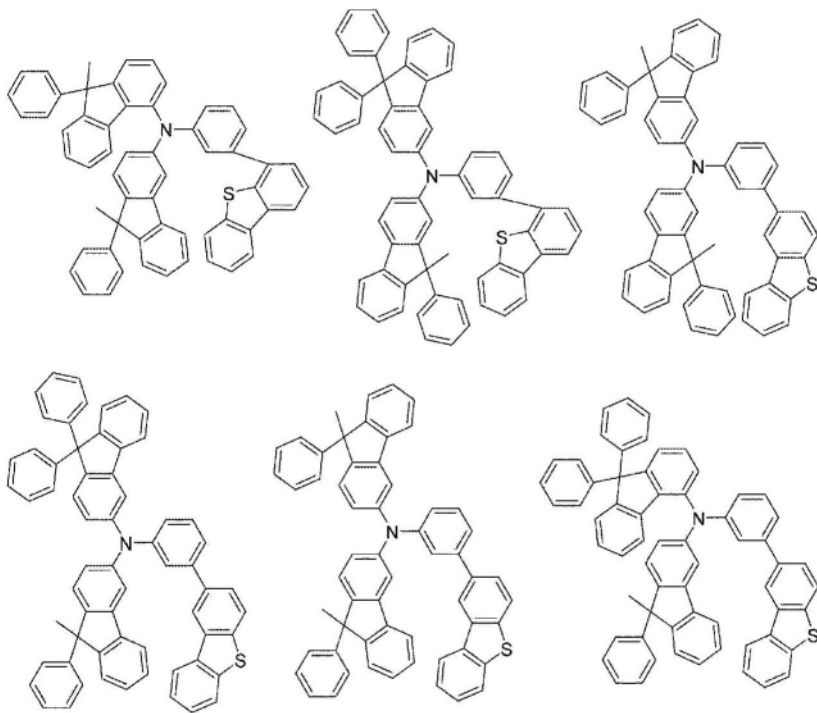
[0856]



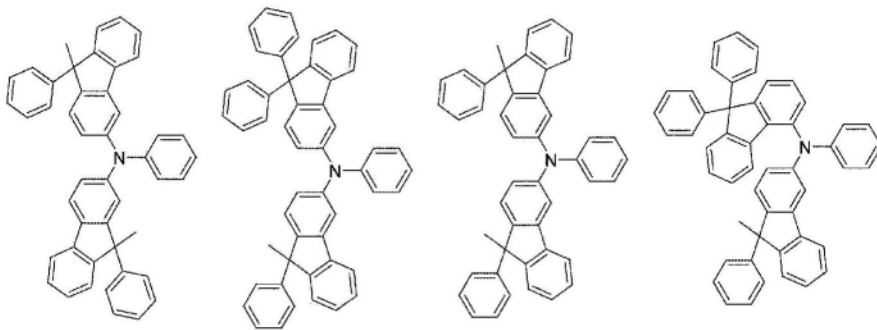
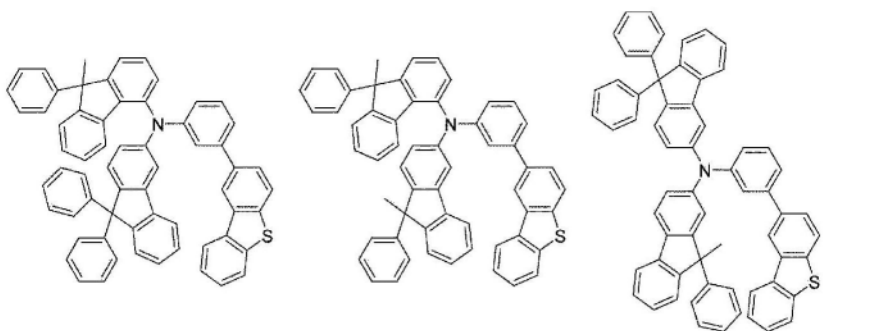
[0857] [化学式97]



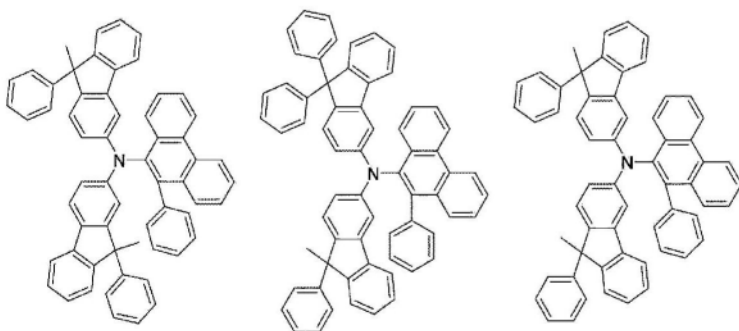
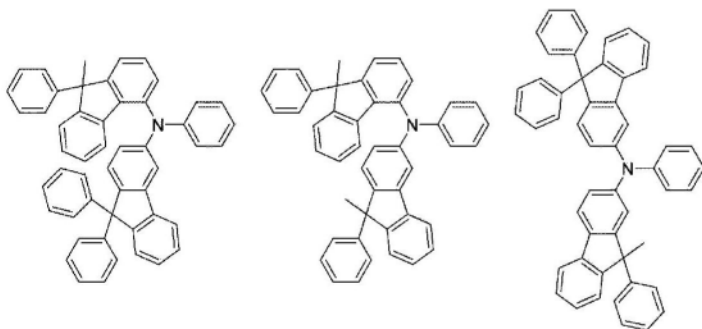
[0858]



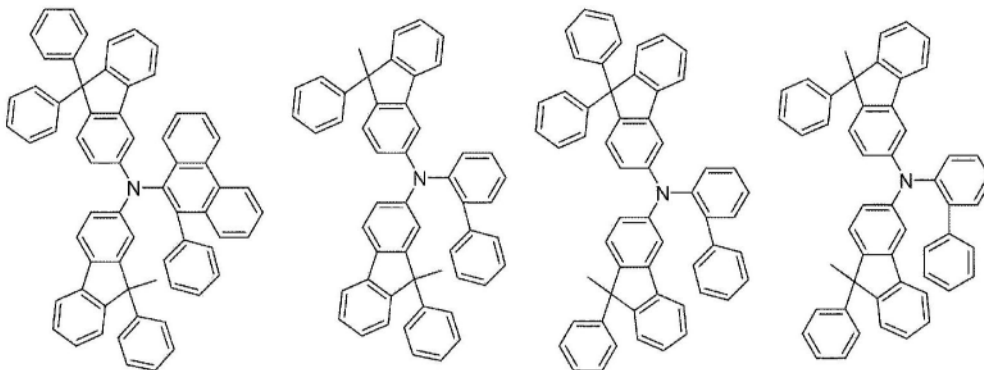
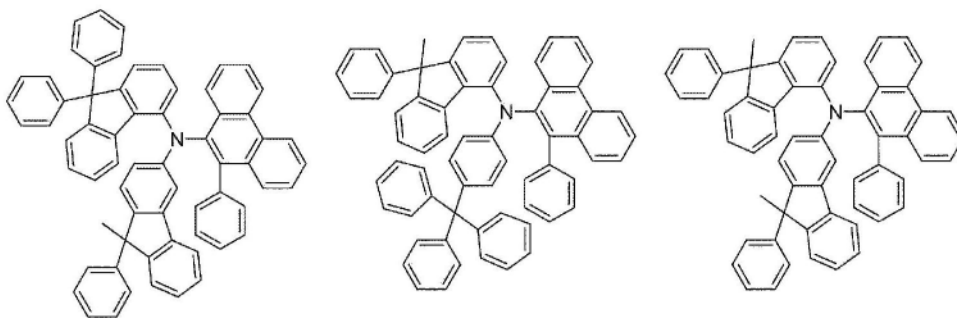
[0859] [化学式98]



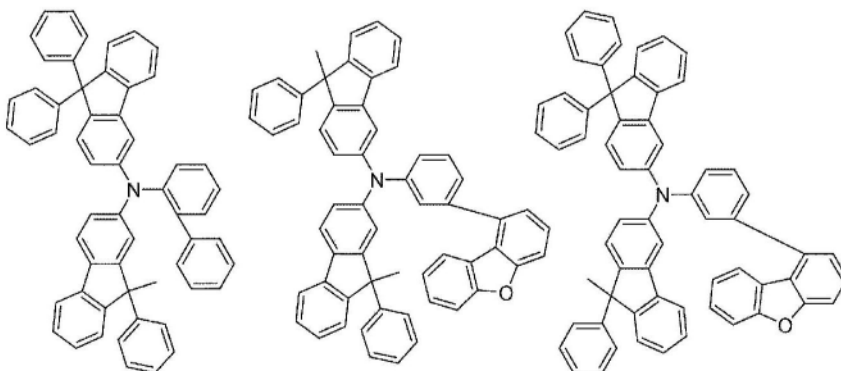
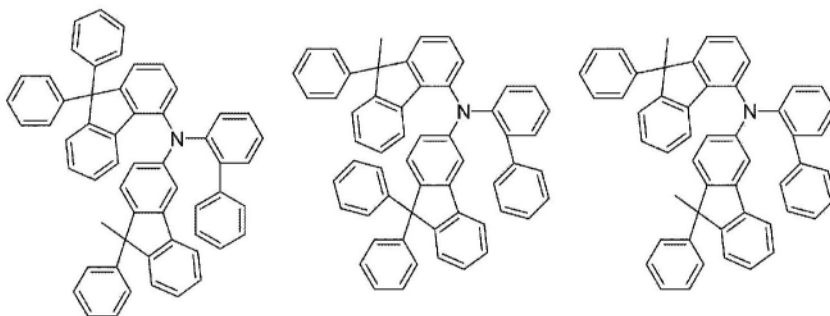
[0860]



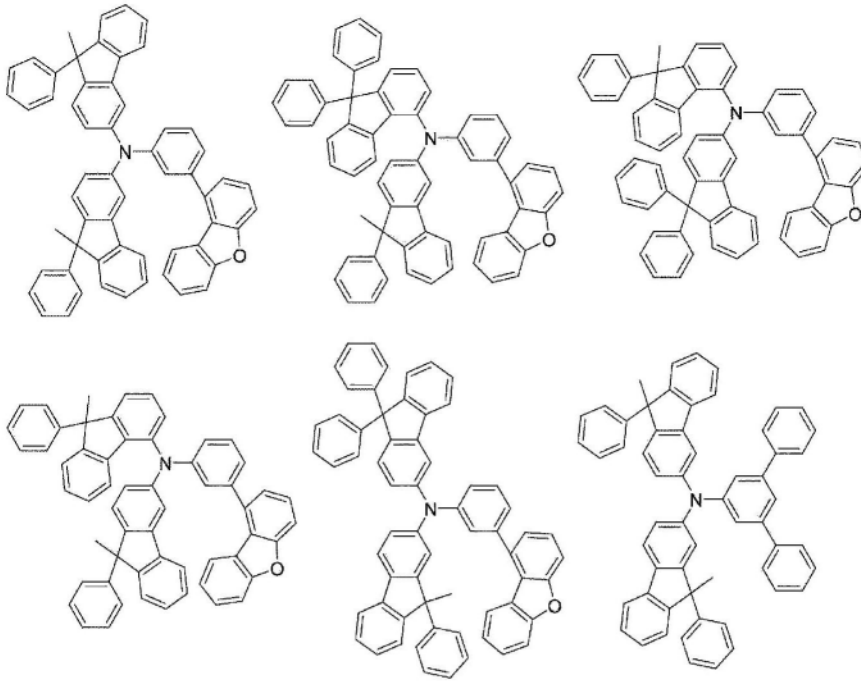
[0861] [化学式99]



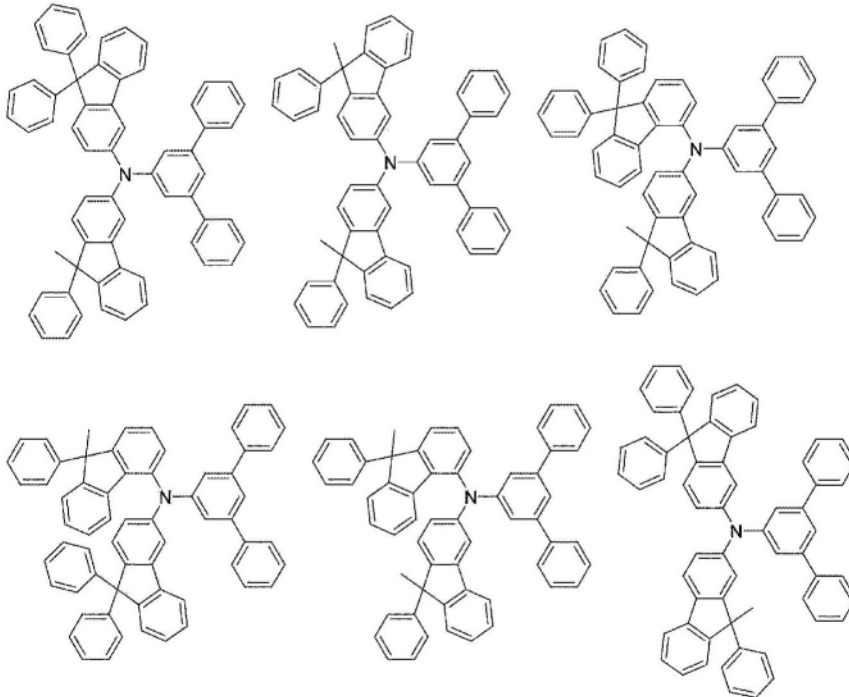
[0862]



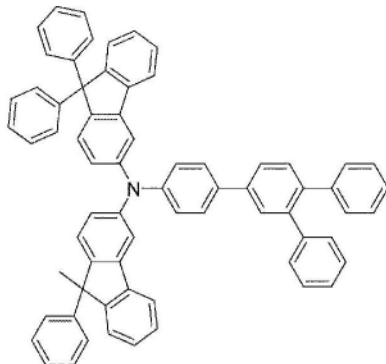
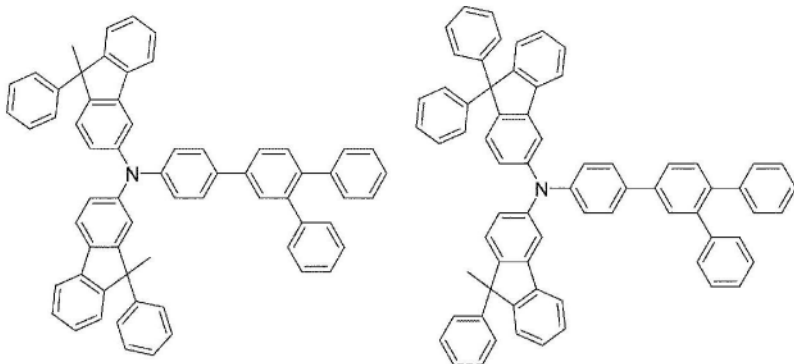
[0863] [化学式100]



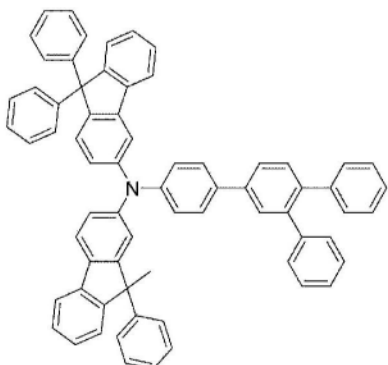
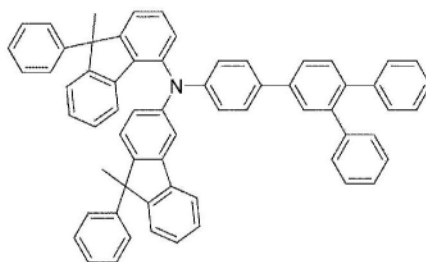
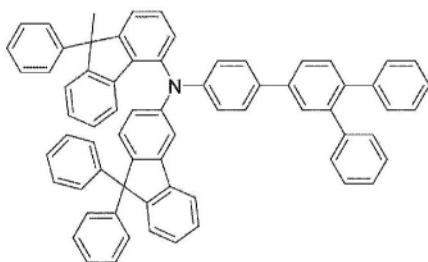
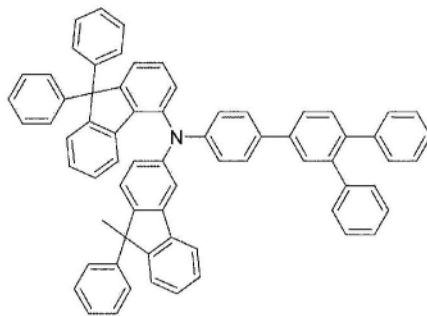
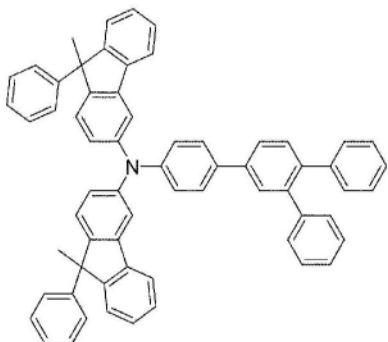
[0864]



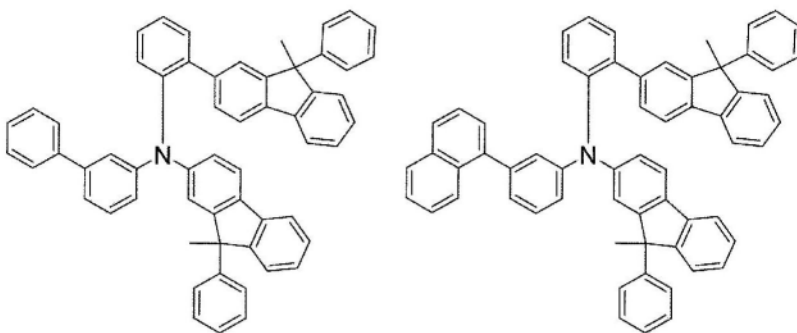
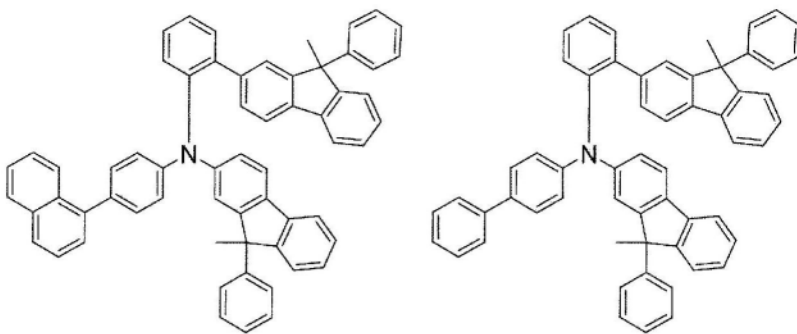
[0865] [化学式101]



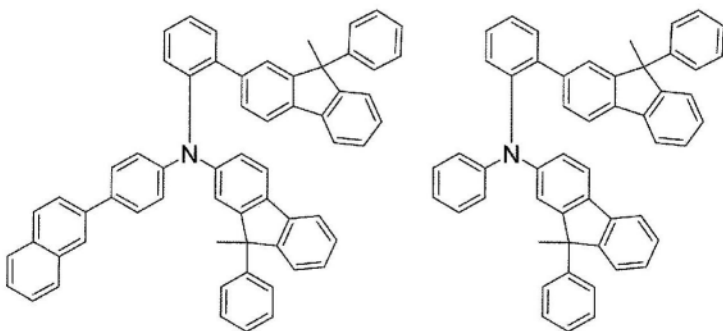
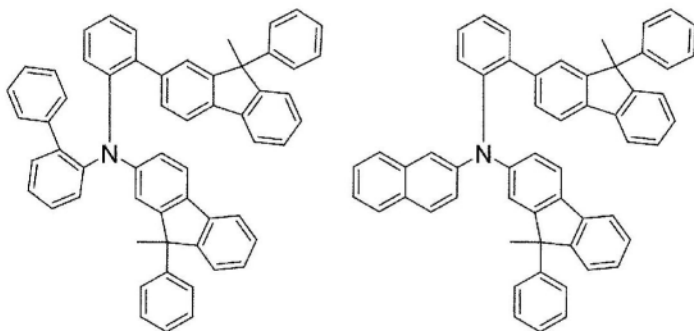
[0866]



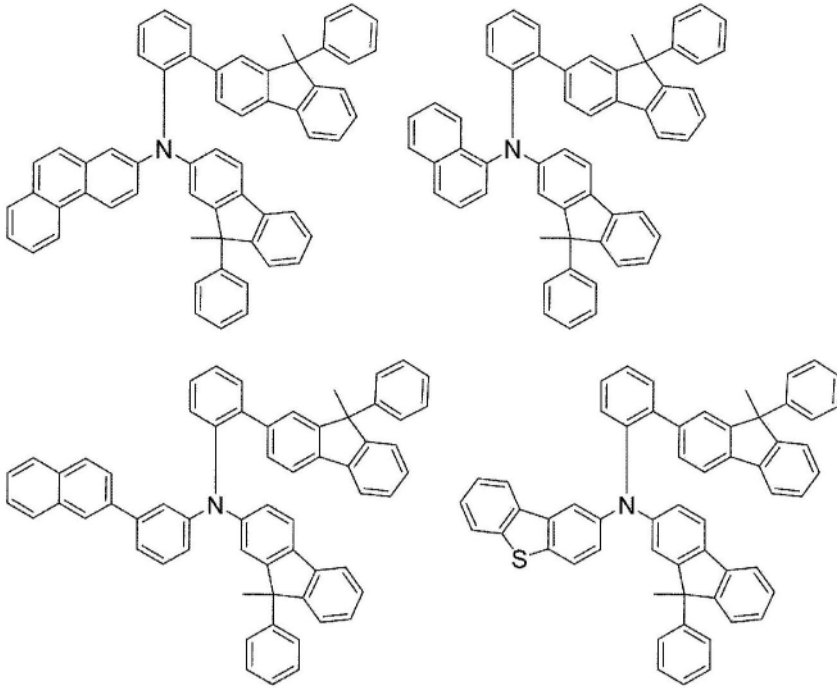
[0867] [化学式102]



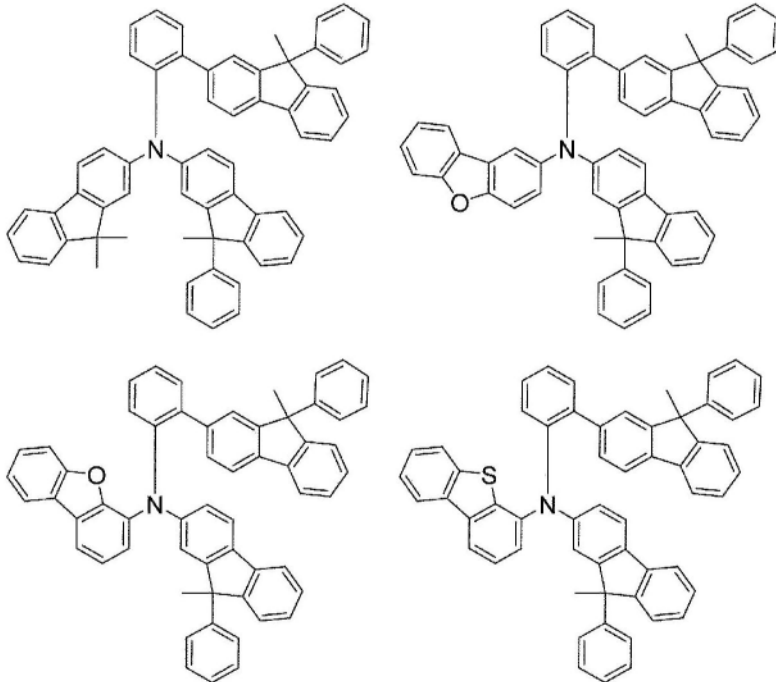
[0868]



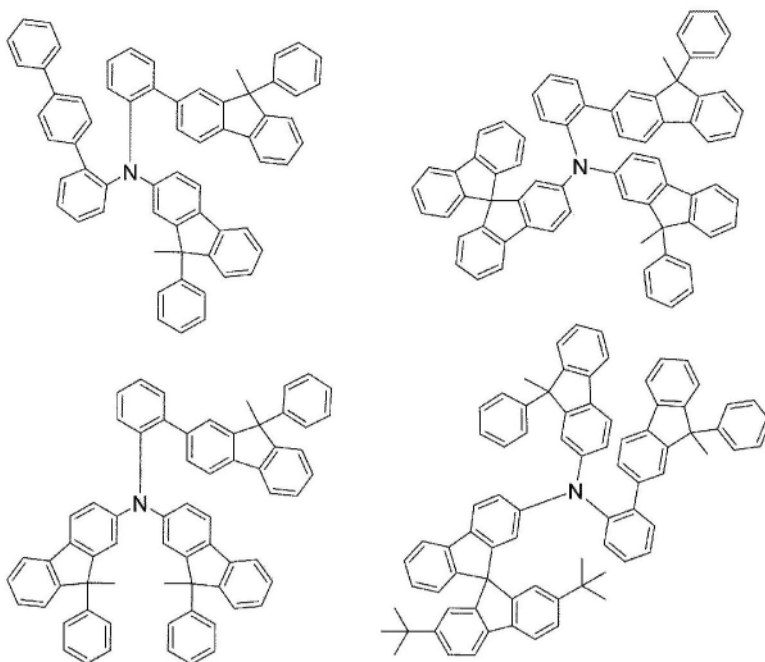
[0869] [化学式103]



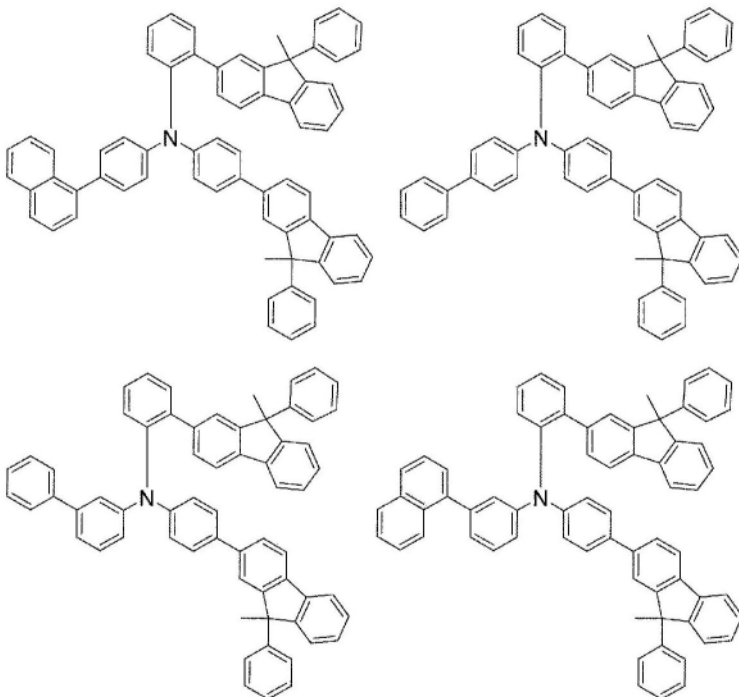
[0870]



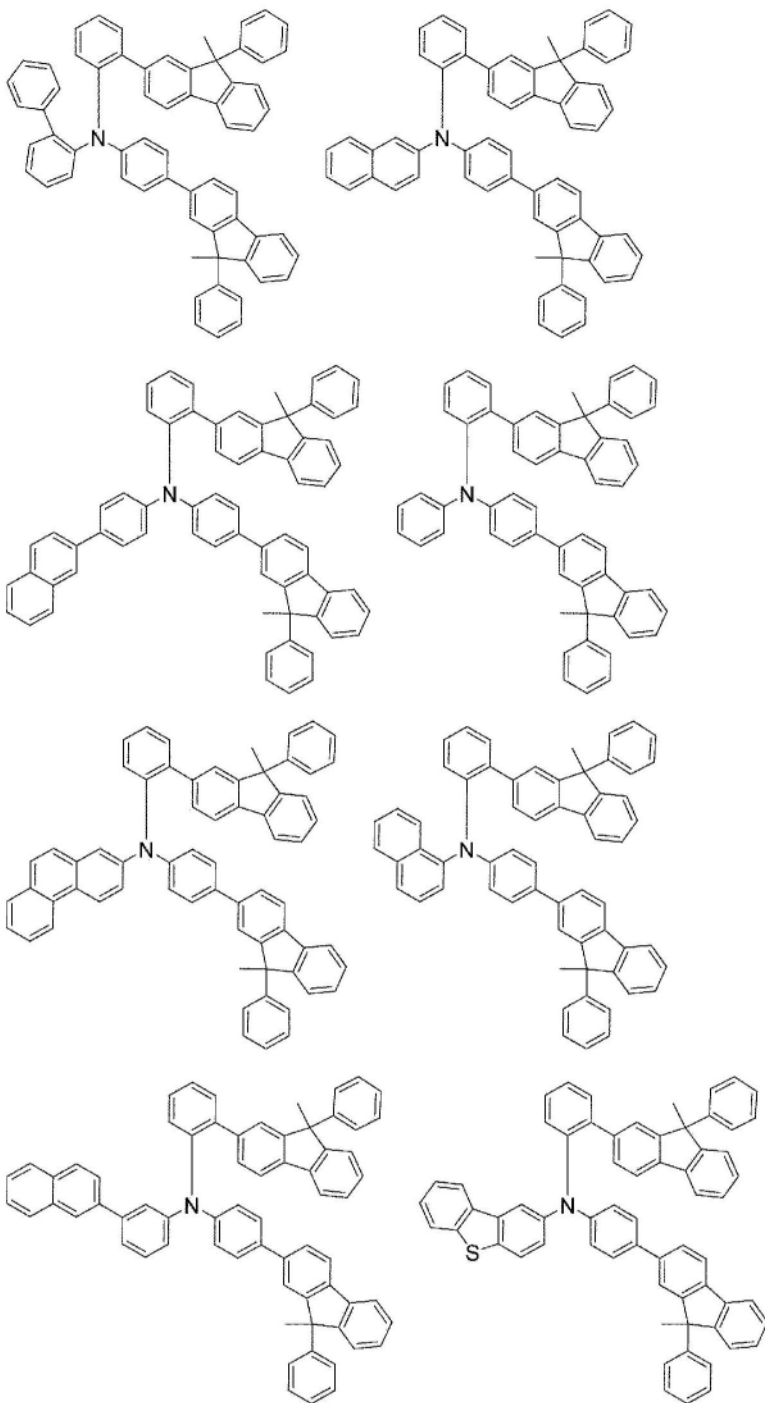
[0871] [化学式104]

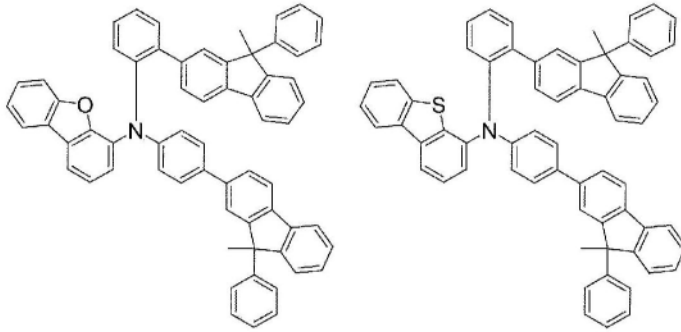
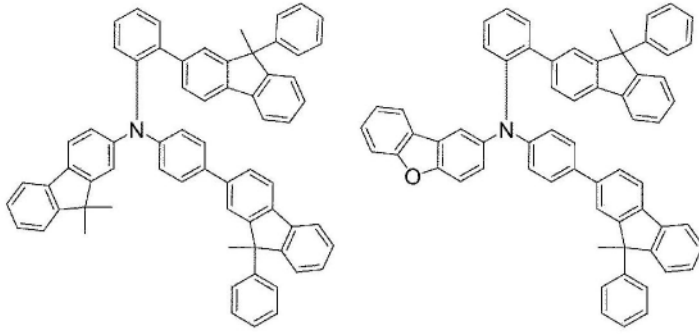


[0872]

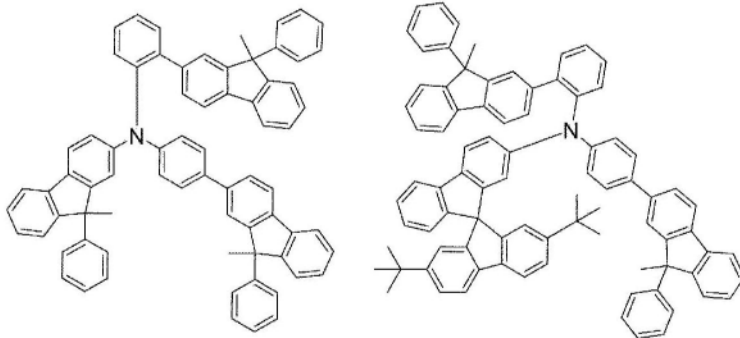
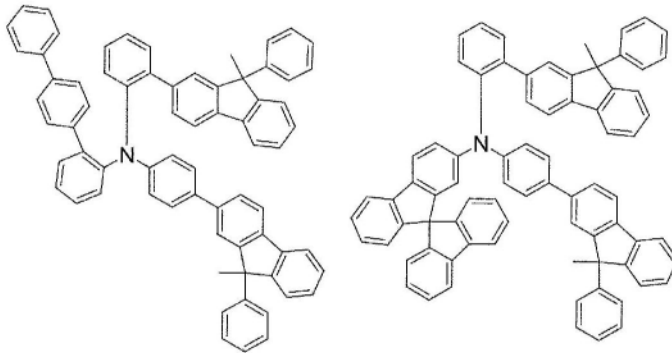


[0873] [化学式105]

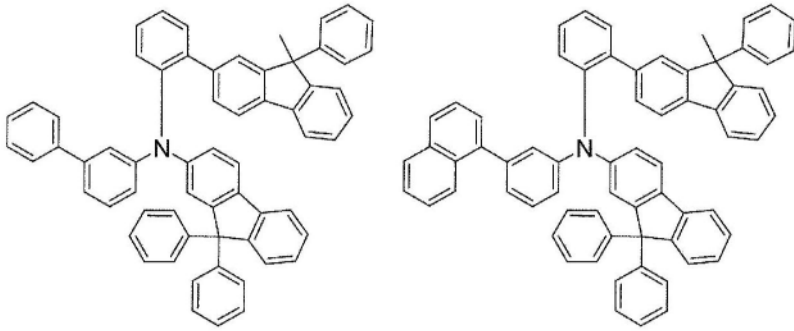
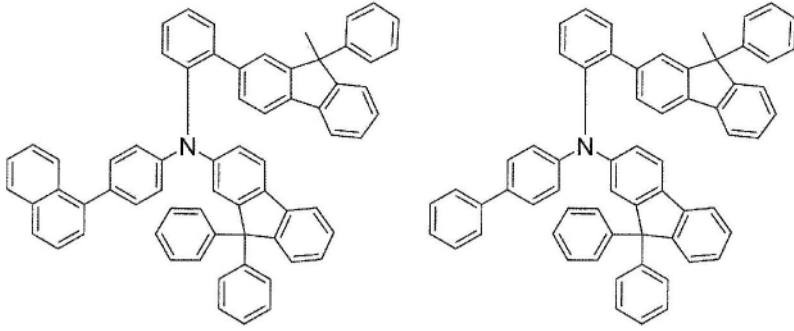




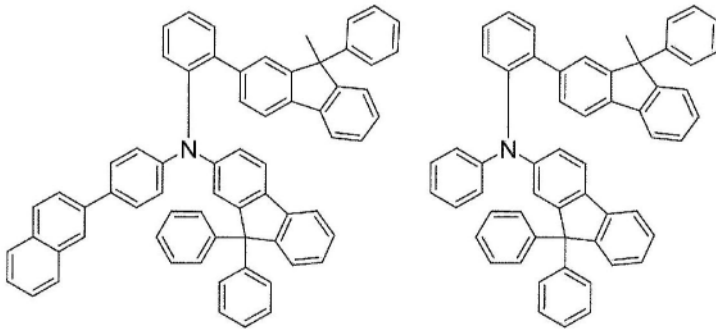
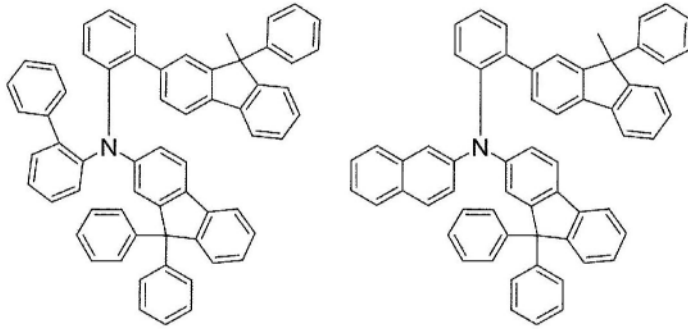
[0876]



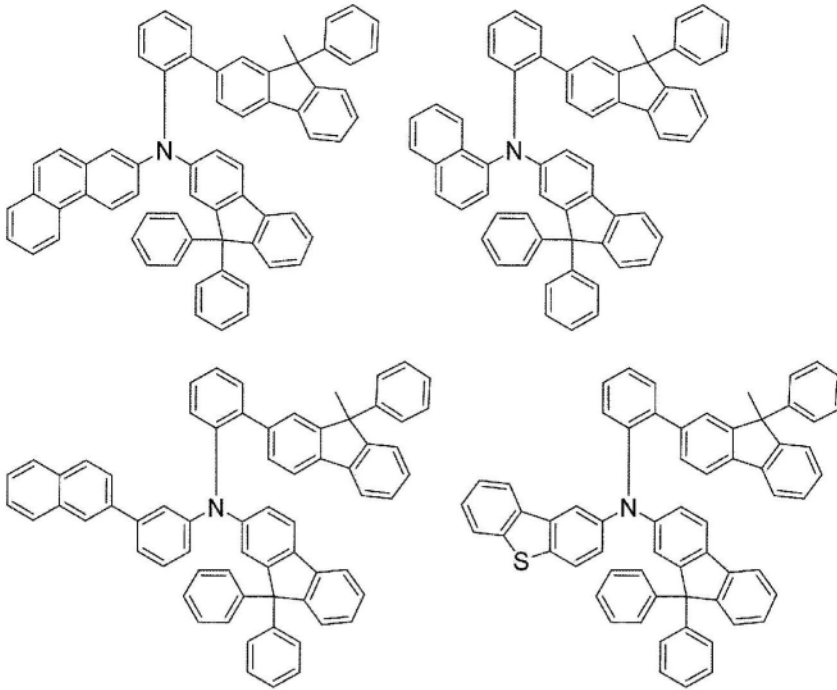
[0877] [化学式107]



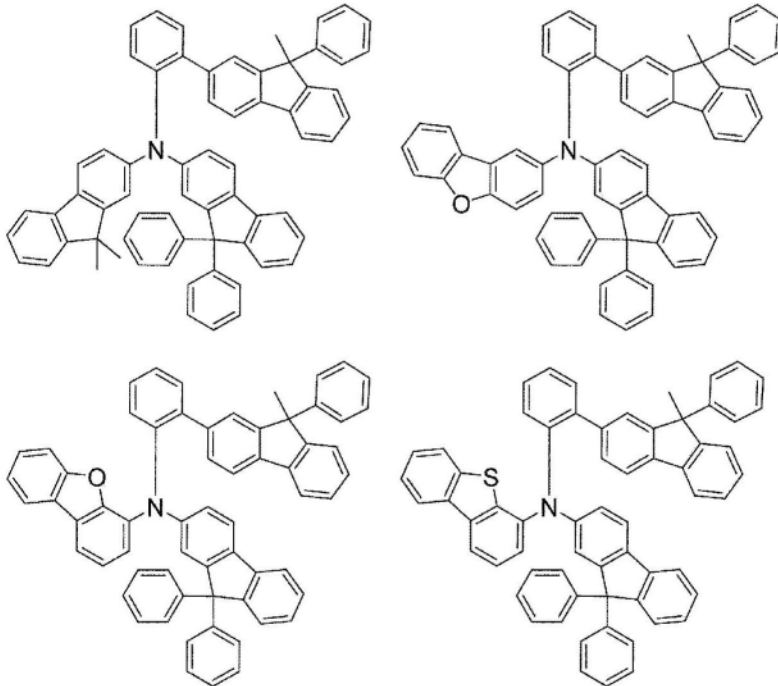
[0878]



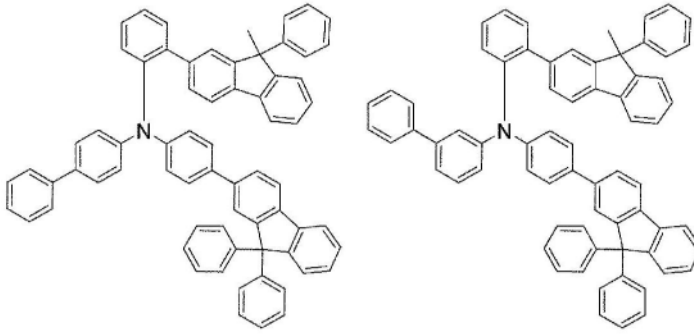
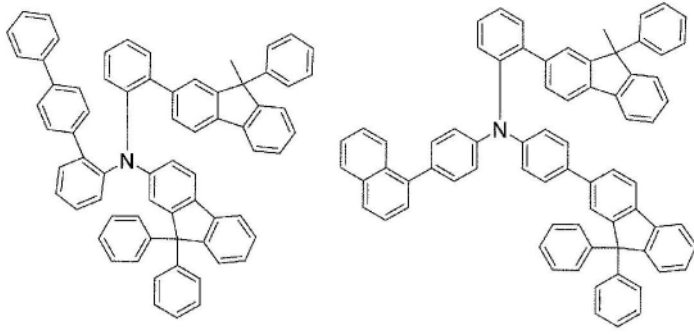
[0879] [化学式108]



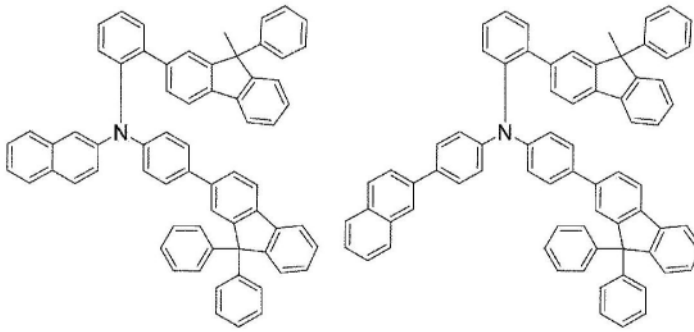
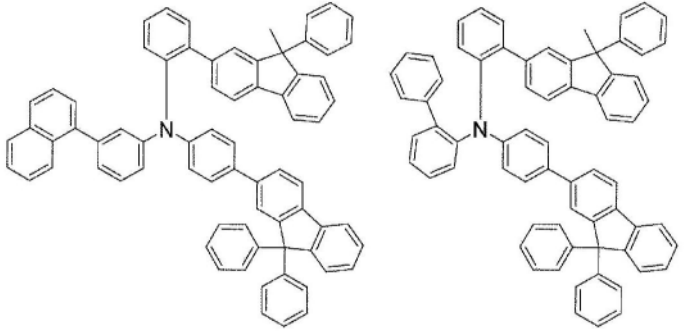
[0880]



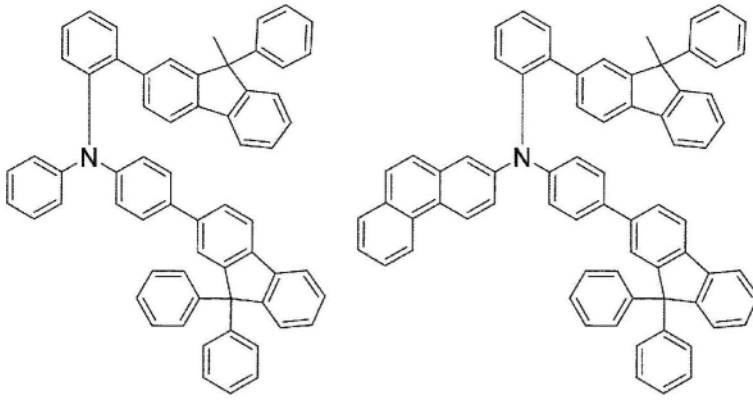
[0881] [化学式109]



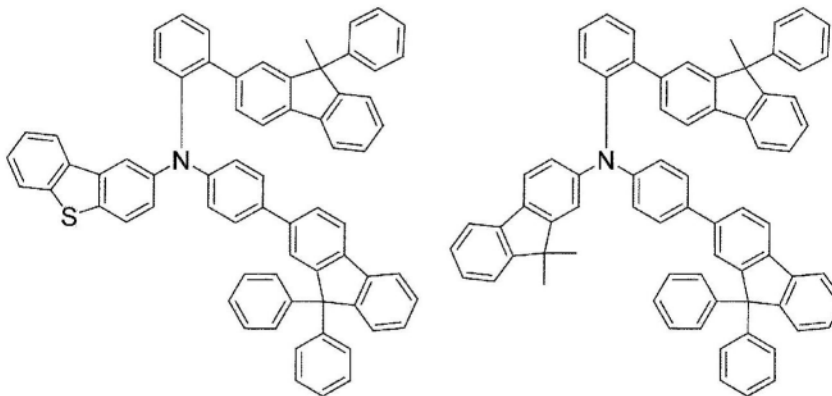
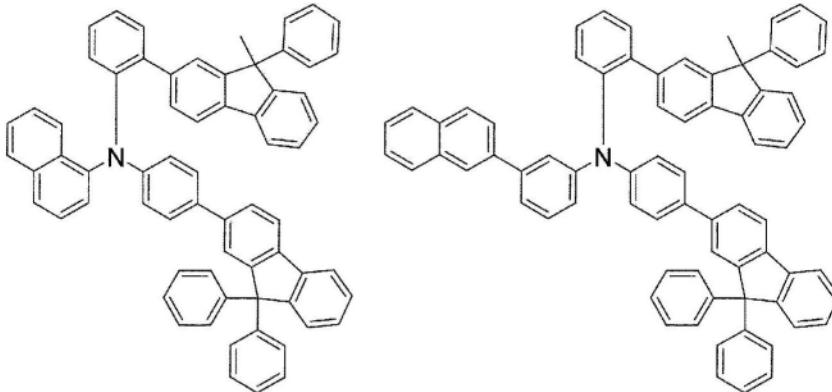
[0882]



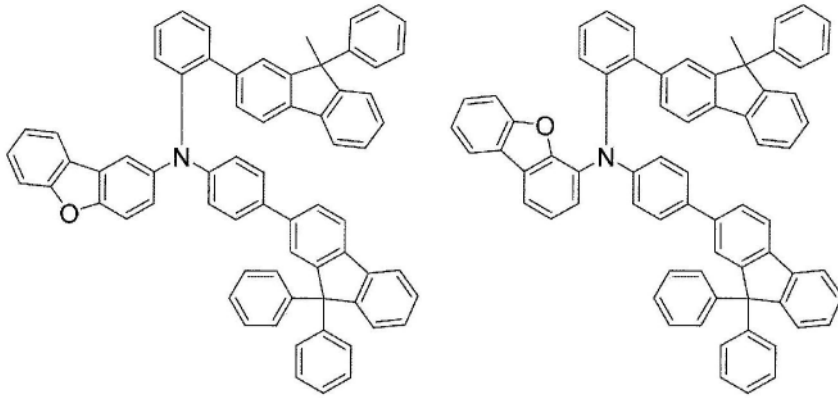
[0883] [化学式110]



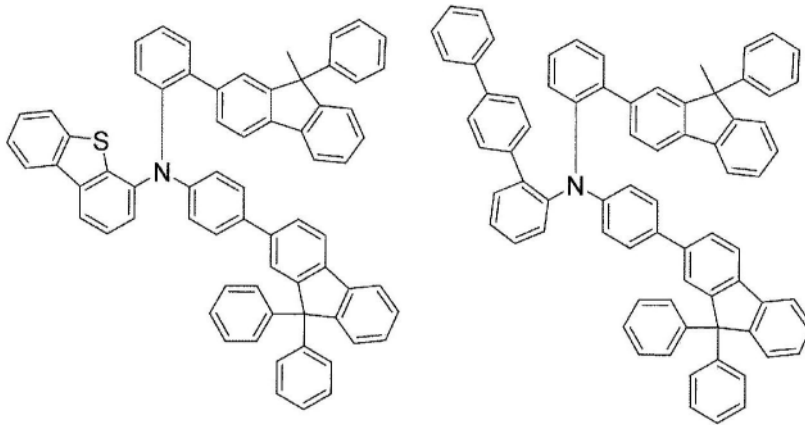
[0884]



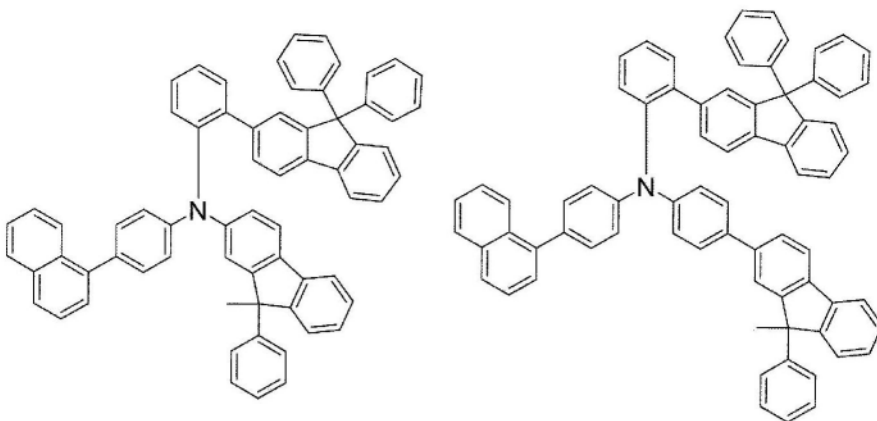
[0885] [化学式111]



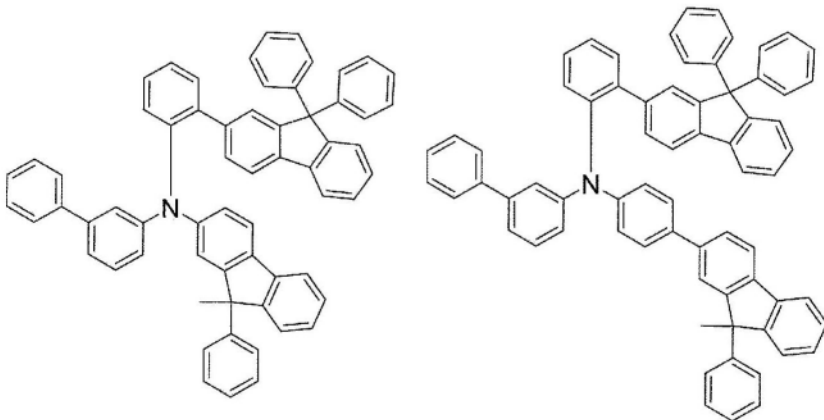
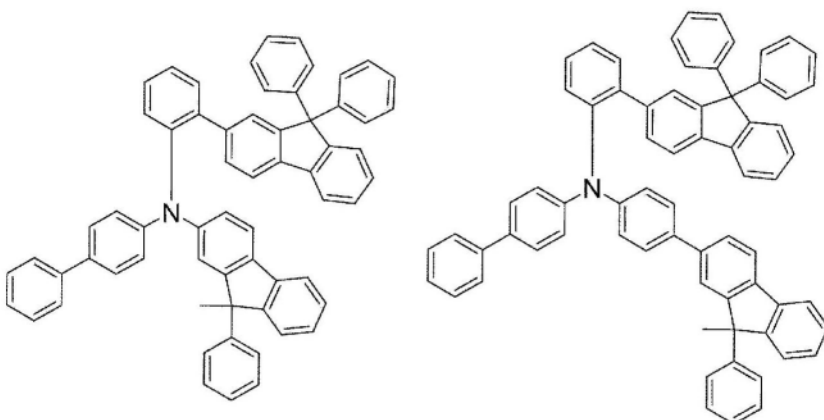
[0886]



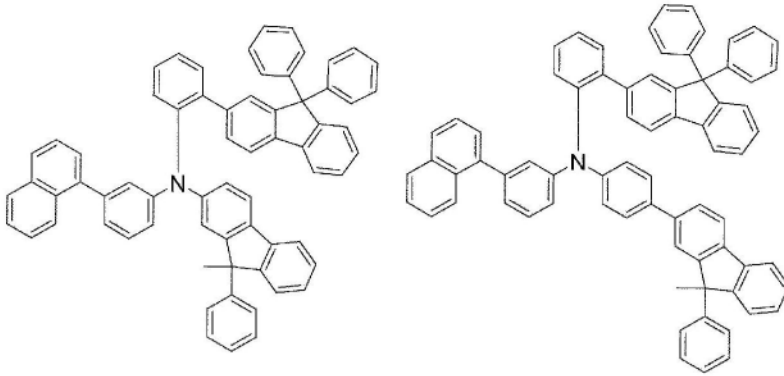
[0887] [化学式112]



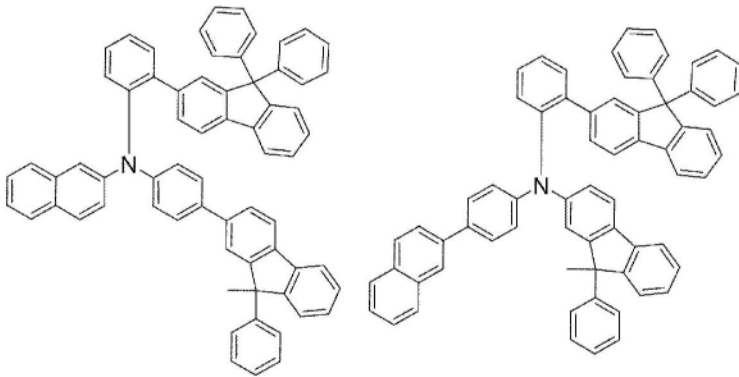
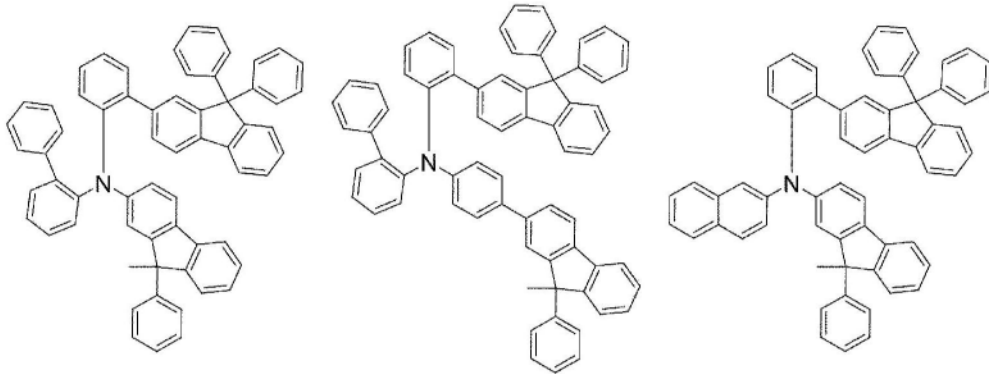
[0888]



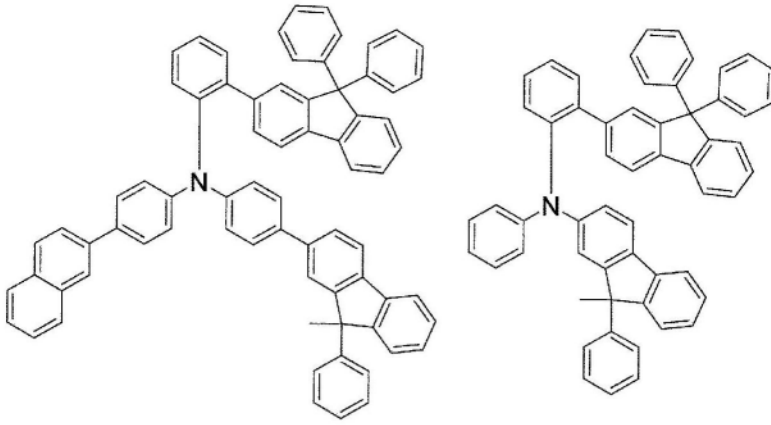
[0889] [化学式113]



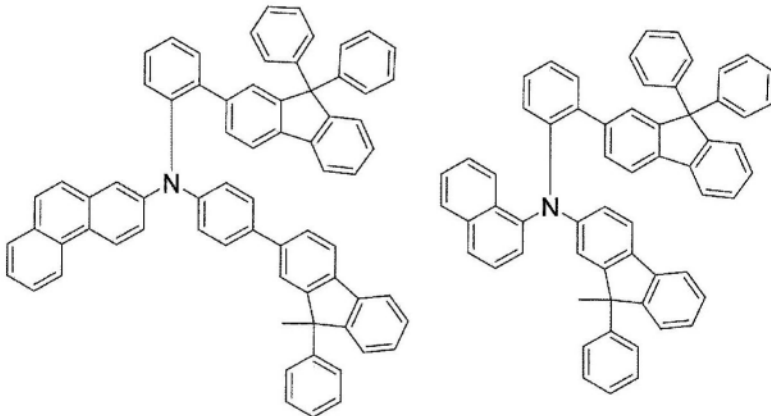
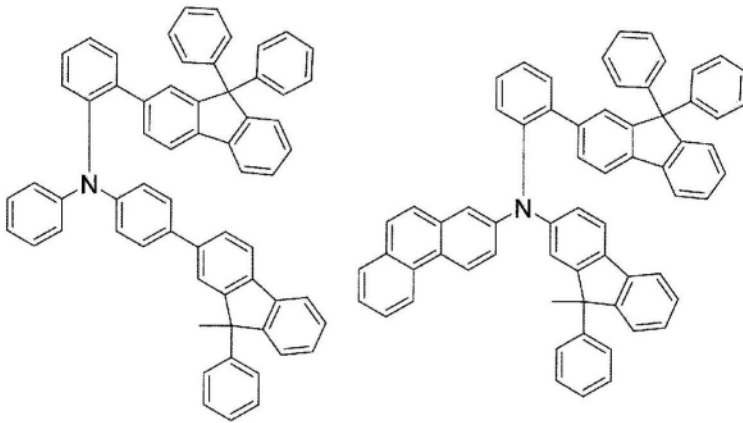
[0890]



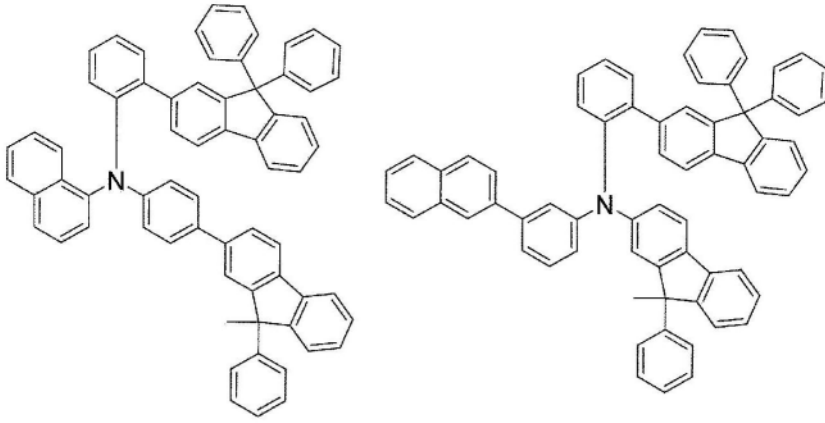
[0891] [化学式114]



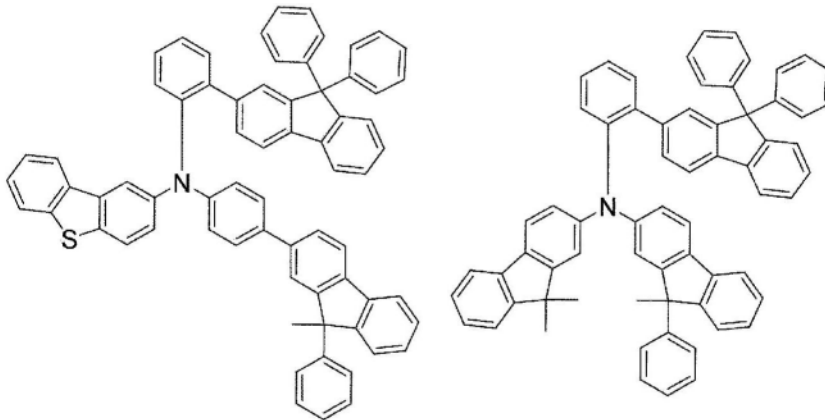
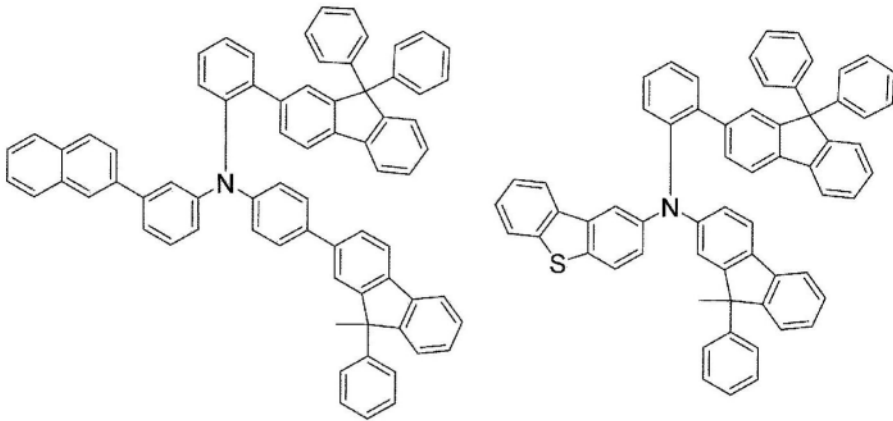
[0892]



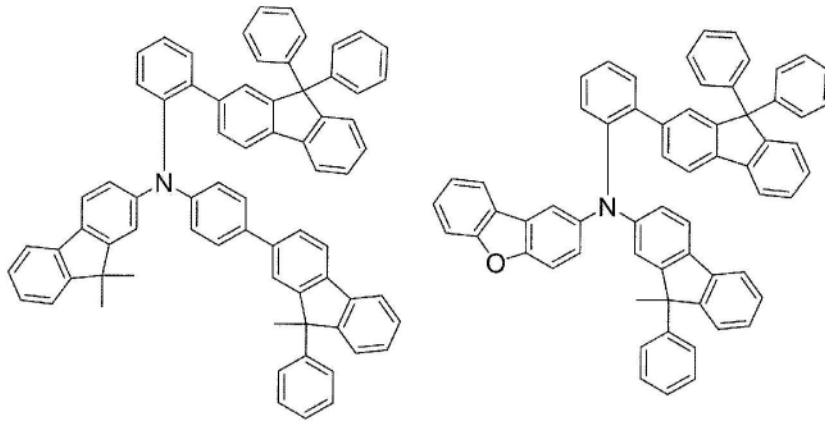
[0893] [化学式115]



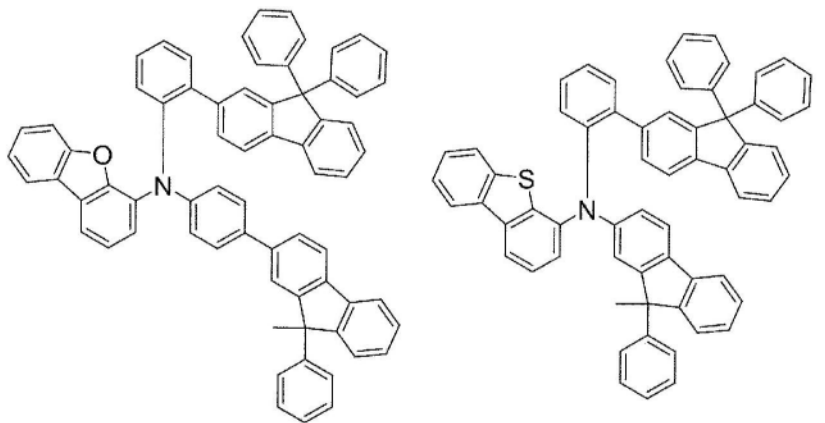
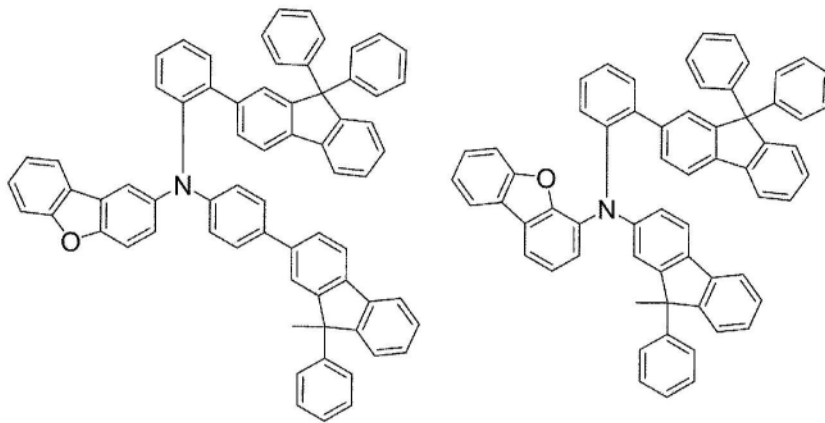
[0894]



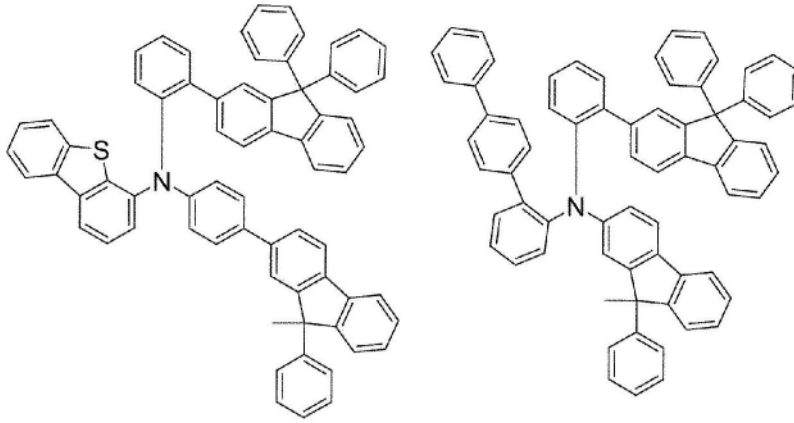
[0895] [化学式116]



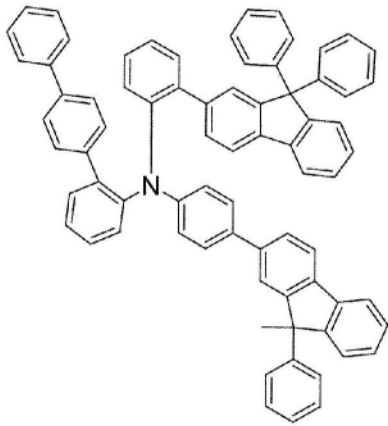
[0896]



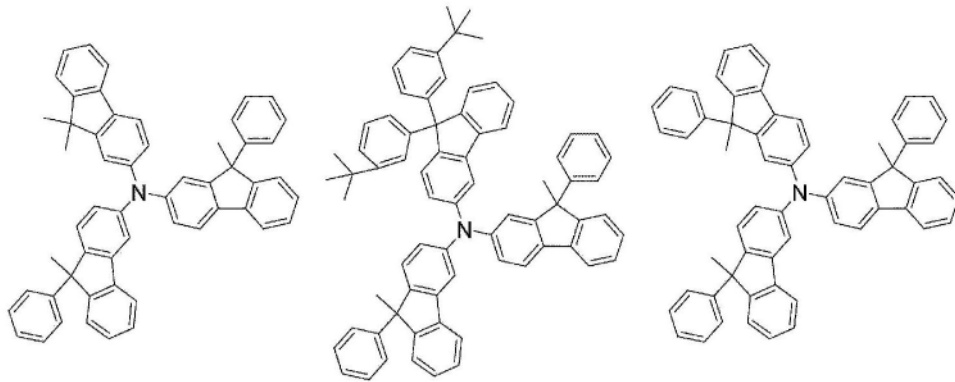
[0897] [化学式117]



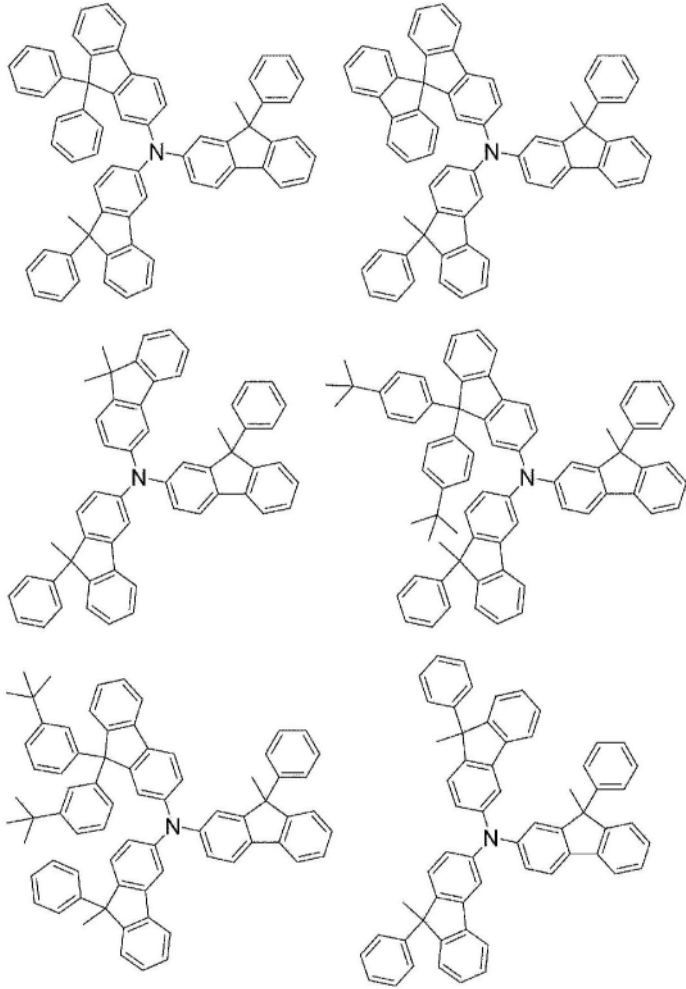
[0898]



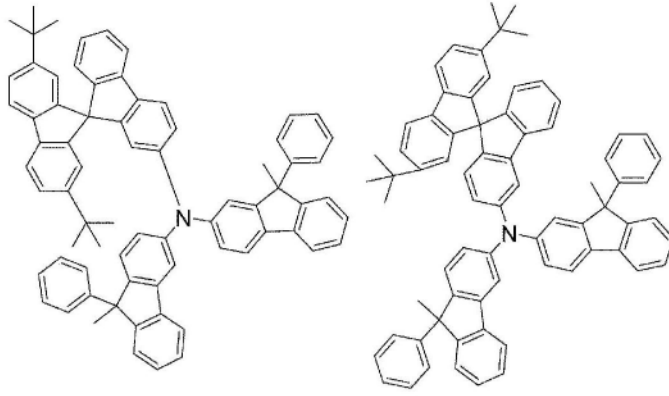
[0899] [化学式118]



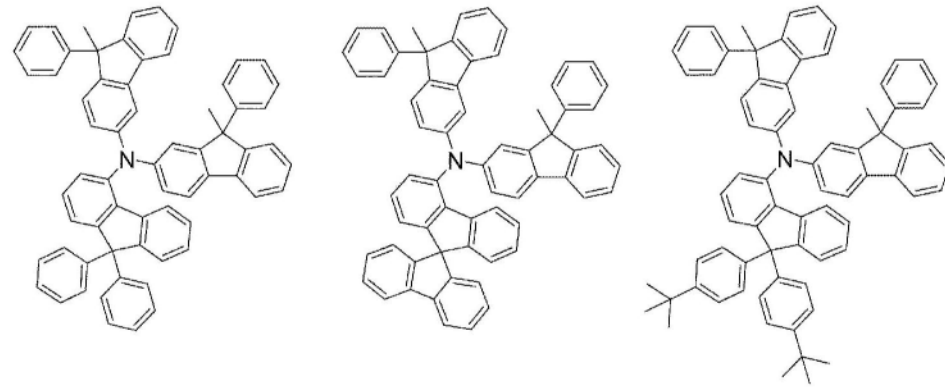
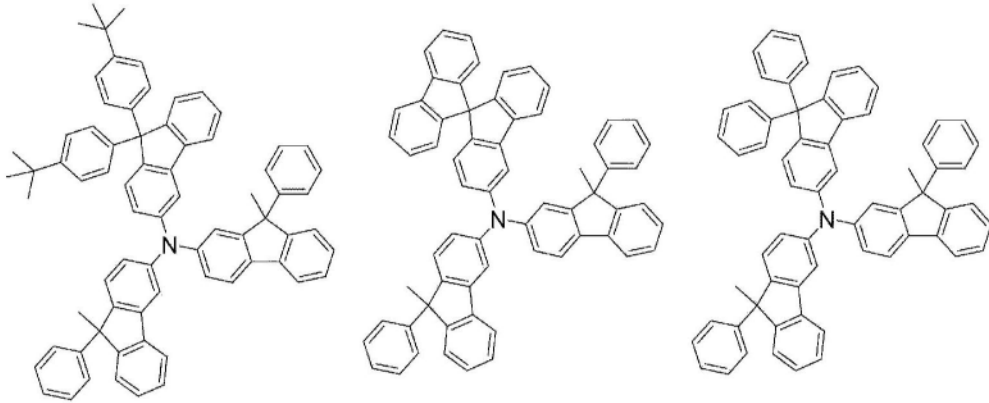
[0900]



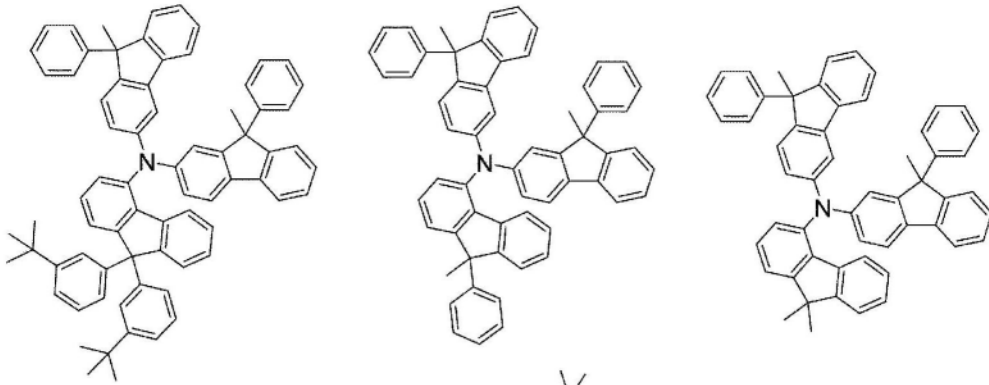
[0901] [化学式119]



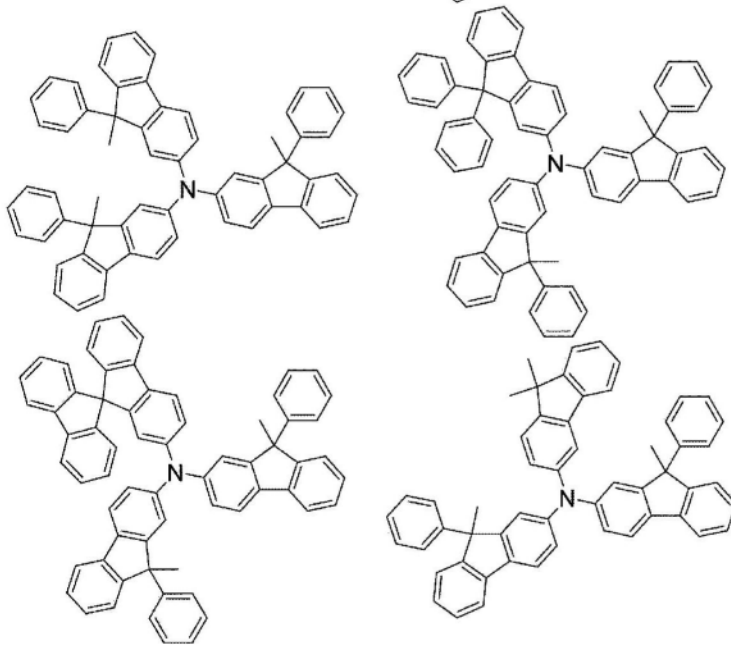
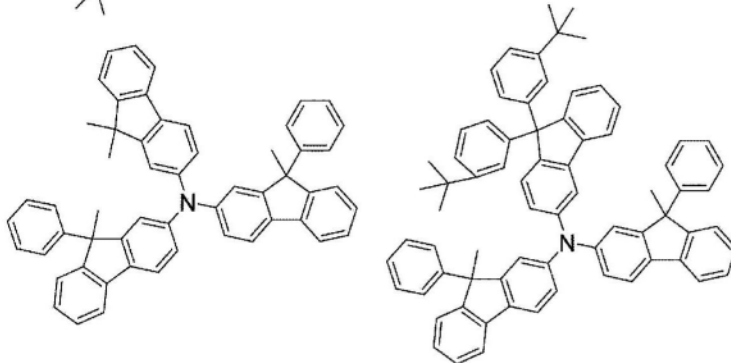
[0902]



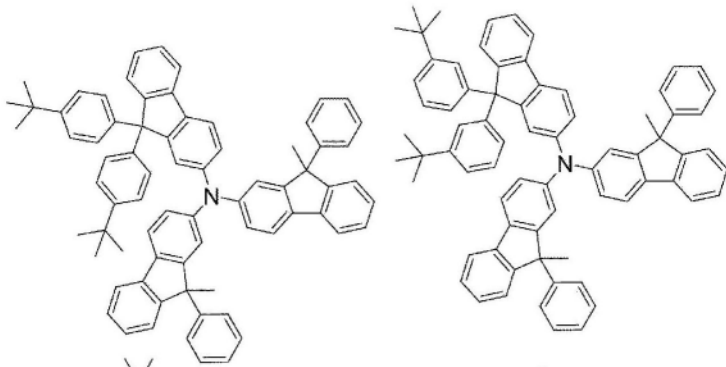
[0903] [化学式120]



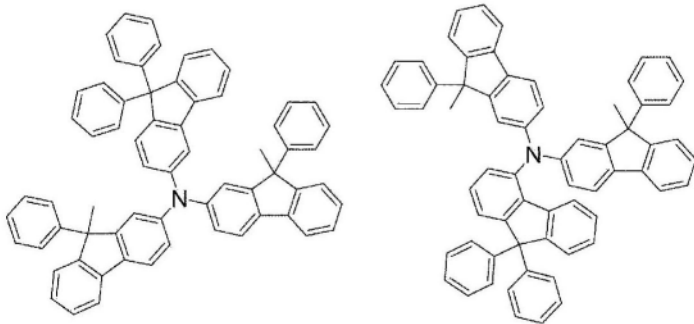
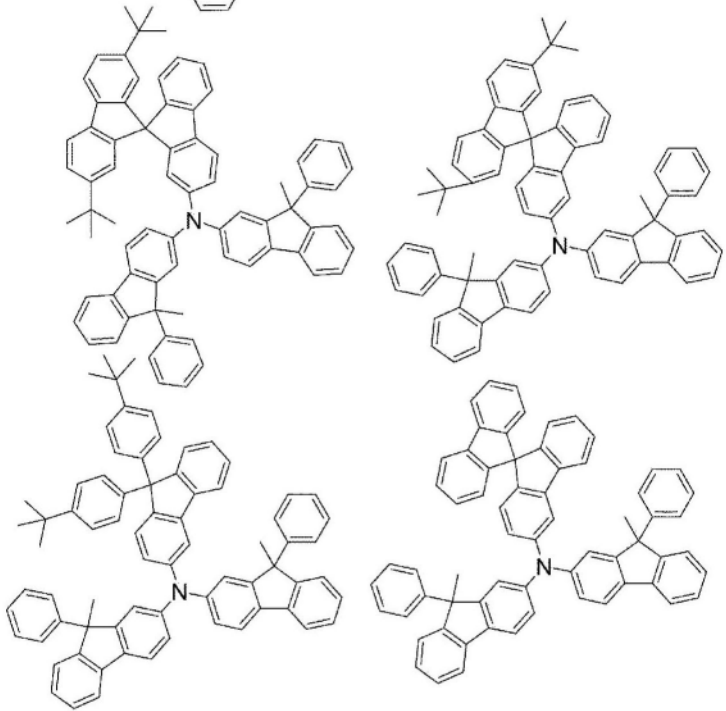
[0904]



[0905] [化学式121]

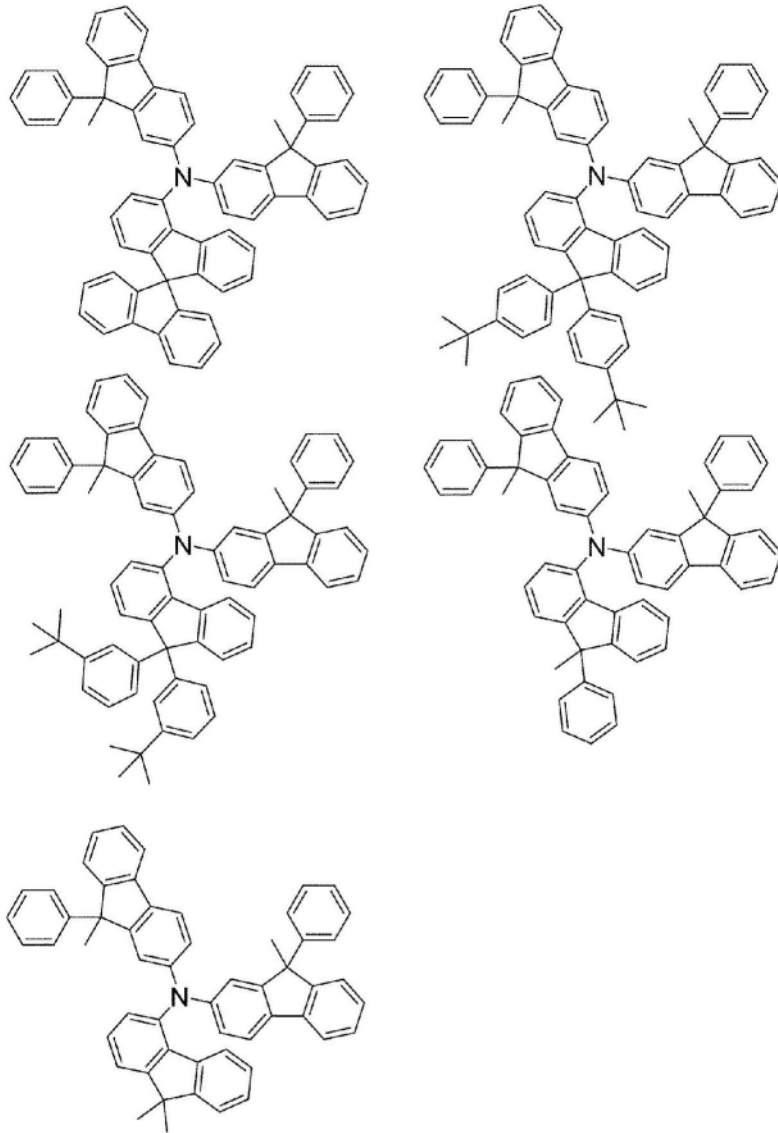


[0906]

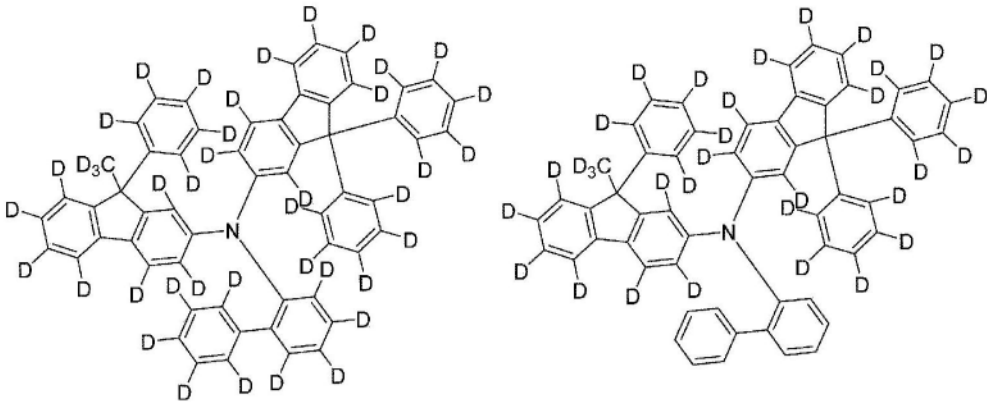


[0907] [化学式122]

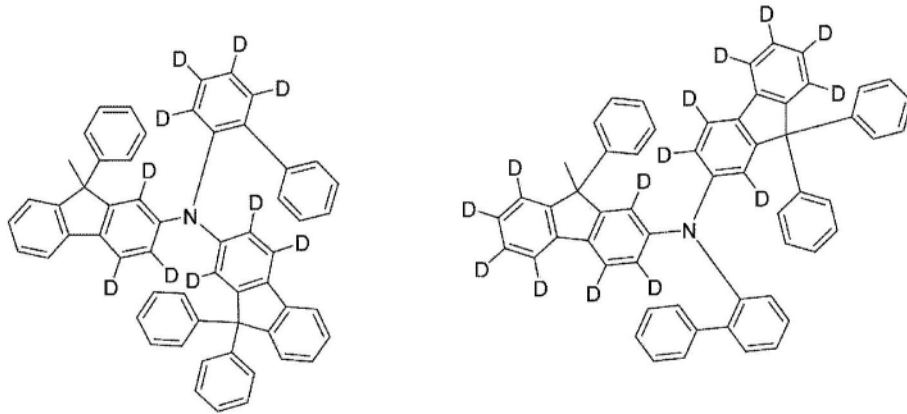
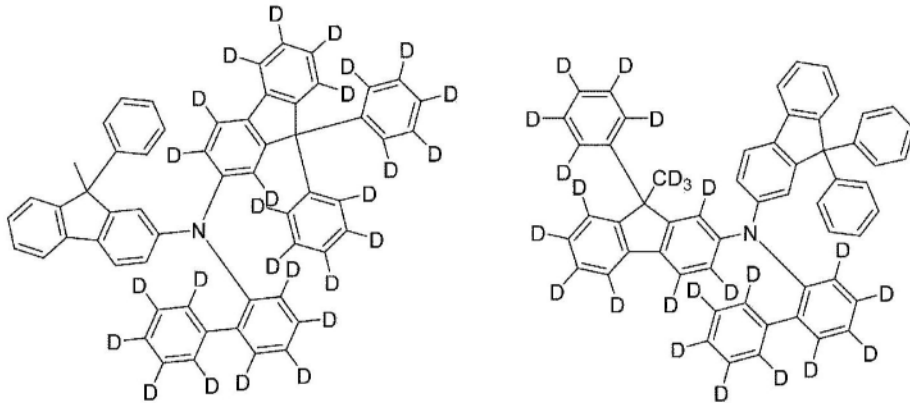
[0908]



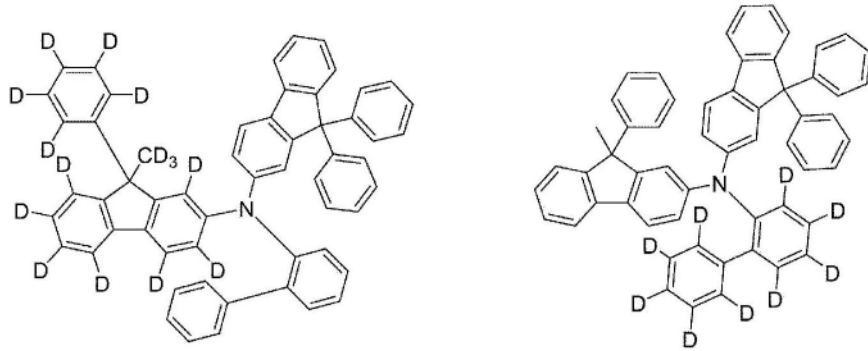
[0909] [化学式123]



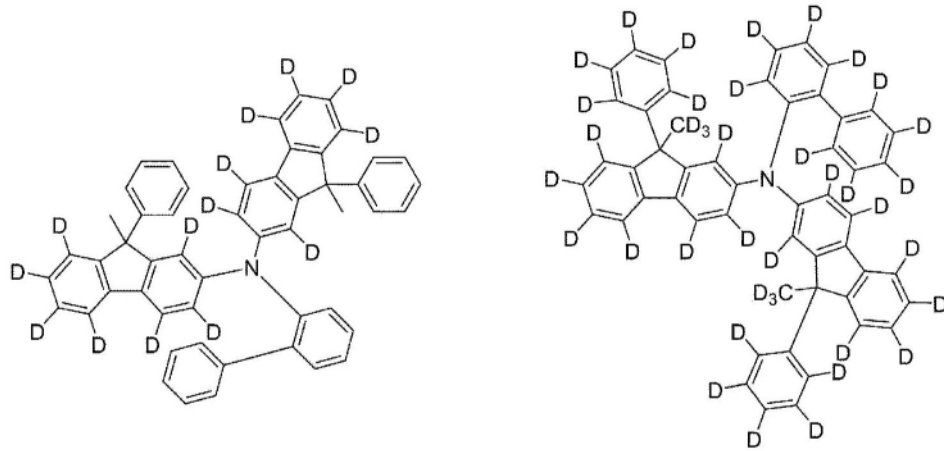
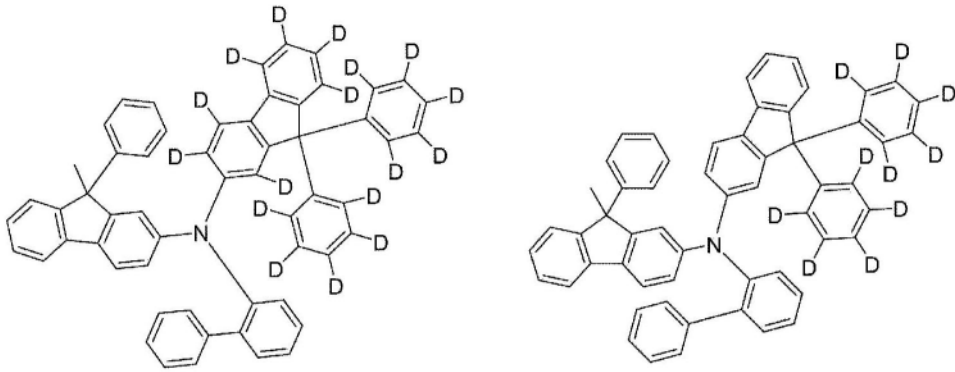
[0910]



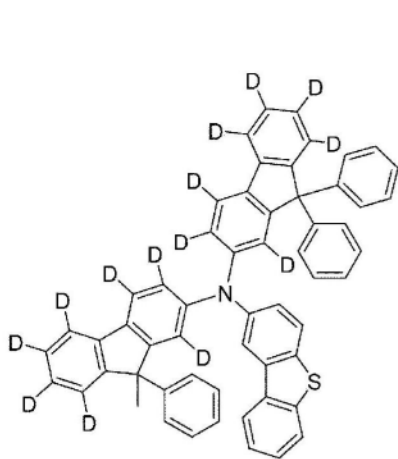
[0911] [化学式124]



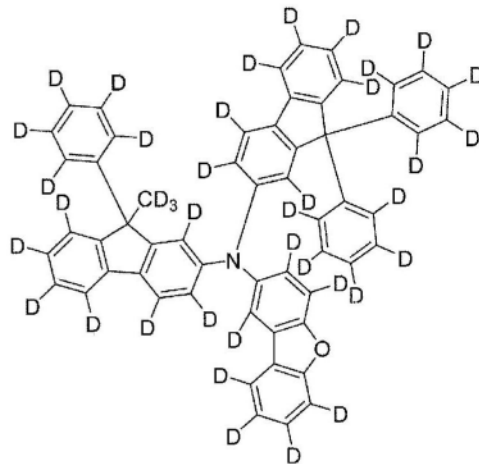
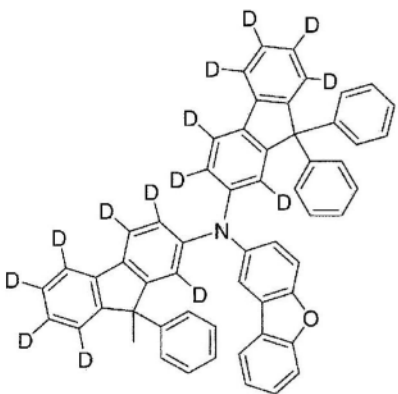
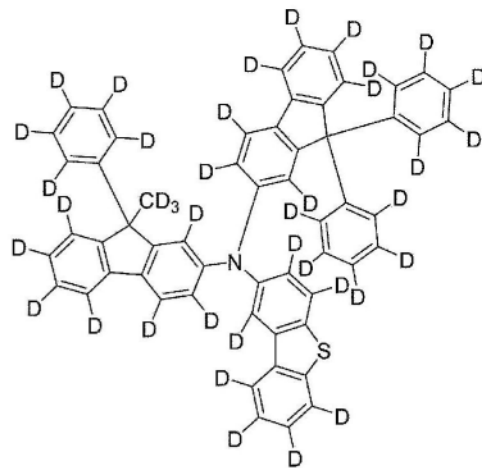
[0912]



[0913] [化学式125]



[0914]



[0915] 有机EL元件用材料

[0916] 本发明的有机EL元件用材料包含发明化合物。有机EL元件用材料中的发明化合物的含量为1质量%以上(包括100%在内),优选为10质量%以上(包括100%在内),更优选为50质量%以上(包括100%在内),进一步优选为80质量%以上(包括100%在内),特别优选为90质量%以上(包括100%在内)。本发明的有机EL元件用材料在有机EL元件的制造中 useful。

[0917] 有机EL元件

[0918] 本发明的有机EL元件包含阳极、阴极、和配置于该阳极与阴极之间的有机层。该有机层包含发光层,该有机层的至少一层包含发明化合物。

[0919] 作为包含发明化合物的有机层的例子,可以举出设置于阳极与发光层之间的空穴传输区域(空穴注入层、空穴传输层、电子阻挡层、激子阻挡层等)、发光层、间隔层、设置于阴极与发光层之间的电子传输区域(电子注入层、电子传输层、空穴阻挡层等)等,但不限于此。发明化合物优选为荧光或磷光EL元件的空穴传输区域或发光层的材料,更优选为空穴传输区域的材料,进一步优选为空穴注入层、空穴传输层、电子阻挡层、或者激子阻挡层的材料,特别优选用作空穴注入层或空穴传输层的材料。

[0920] 本发明的有机EL元件可以为荧光或磷光发光型的单色发光元件,也可以为荧光/磷光混合型的白色发光元件,可以为具有单个发光单元的简易型,也可以为具有多个发光单元的串联型,其中,优选为荧光发光型的元件。此处,“发光单元”是指:包含有机层,其中至少一层为发光层且所注入的空穴与电子通过发生复合由此发光的最小单位。

[0921] 例如,作为简易型有机EL元件的典型元件构成,可以举出以下的元件构成。

[0922] (1) 阳极/发光单元/阴极

[0923] 另外,上述发光单元也可以为具有多个磷光发光层或荧光发光层的多层型,这种情况下,在各发光层之间也可以出于防止在磷光发光层中生成的激子扩散至荧光发光层的的目的而具有间隔层。以下示出简易型发光单元的典型层构成。括弧内的层是任选的。

[0924] (a) (空穴注入层/) 空穴传输层/荧光发光层/电子传输层(/电子注入层)

[0925] (b) (空穴注入层/) 空穴传输层/磷光发光层/电子传输层(/电子注入层)

[0926] (c) (空穴注入层/) 空穴传输层/第1荧光发光层/第2荧光发光层/电子传输层(/电子注入层)

[0927] (d) (空穴注入层/) 空穴传输层/第1磷光发光层/第2磷光发光层/电子传输层(/电子注入层)

[0928] (e) (空穴注入层/) 空穴传输层/磷光发光层/间隔层/荧光发光层/电子传输层(/电子注入层)

[0929] (f) (空穴注入层/) 空穴传输层/第1磷光发光层/第2磷光发光层/间隔层/荧光发光层/电子传输层(/电子注入层)

[0930] (g) (空穴注入层/) 空穴传输层/第1磷光发光层/间隔层/第2磷光发光层/间隔层/荧光发光层/电子传输层(/电子注入层)

[0931] (h) (空穴注入层/) 空穴传输层/磷光发光层/间隔层/第1荧光发光层/第2荧光发光层/电子传输层(/电子注入层)

[0932] (i) (空穴注入层/) 空穴传输层/电子阻挡层/荧光发光层/电子传输层(/电子注入层)

[0933] (j) (空穴注入层/) 空穴传输层/电子阻挡层/磷光发光层/电子传输层(/电子注入层)

[0934] (k) (空穴注入层/) 空穴传输层/激子阻挡层/荧光发光层/电子传输层(/电子注入层)

[0935] (l) (空穴注入层/) 空穴传输层/激子阻挡层/磷光发光层/电子传输层(/电子注入层)

[0936] (m) (空穴注入层/) 第1空穴传输层/第2空穴传输层/荧光发光层/电子传输层(/电子注入层)

[0937] (n) (空穴注入层/) 第1空穴传输层/第2空穴传输层/磷光发光层/电子传输层(/电子注入层)

[0938] (o) (空穴注入层/) 第1空穴传输层/第2空穴传输层/荧光发光层/第1电子传输层/第2电子传输层(/电子注入层)

[0939] (p) (空穴注入层/) 第1空穴传输层/第2空穴传输层/磷光发光层/第1电子传输层/第2电子传输层(/电子注入层)

[0940] (q) (空穴注入层/) 空穴传输层/荧光发光层/空穴阻挡层/电子传输层(/电子注入层)

[0941] (r) (空穴注入层/) 空穴传输层/磷光发光层/空穴阻挡层/电子传输层(/电子注入层)

[0942] (s) (空穴注入层/)空穴传输层/荧光发光层/激子阻挡层/电子传输层(/电子注入层)

[0943] (t) (空穴注入层/)空穴传输层/磷光发光层/激子阻挡层/电子传输层(/电子注入层)

[0944] (m) (空穴注入层/)第1空穴传输层/第2空穴传输层/第3空穴传输层/第1荧光发光层/第2荧光发光层/第1电子传输层/第2电子传输层(/电子注入层)

[0945] (n) (空穴注入层/)第1空穴传输层/第2空穴传输层/第3空穴传输层/荧光发光层/第1电子传输层/第2电子传输层(/电子注入层)

[0946] 上述各磷光或荧光发光层可以设为分别显示相互不同的发光色的发光层。具体而言,在上述发光单元(f)中,可以举出(空穴注入层/)空穴传输层/第1磷光发光层(红色发光)/第2磷光发光层(绿色发光)/间隔层/荧光发光层(蓝色发光)/电子传输层这样的层构成等。

[0947] 需要说明的是,在各发光层与空穴传输层或间隔层之间可以适当设置电子阻挡层。另外,在各发光层与电子传输层之间可以适当设置空穴阻挡层。通过设置电子阻挡层、空穴阻挡层,由此可以将电子或空穴封闭在发光层内而提高发光层中的电荷的复合概率,从而提高发光效率。

[0948] 作为串联型有机EL元件的典型元件构成,可以举出以下的元件构成。

[0949] (2) 阳极/第1发光单元/中间层/第2发光单元/阴极

[0950] 此处,作为上述第1发光单元和第2发光单元,例如可以各自独立地选自上述的发光单元。

[0951] 上述中间层通常也被称作中间电极、中间导电层、电荷产生层、电子提取层、连接层、中间绝缘层,可以使用向第1发光单元供给电子、向第2发光单元供给空穴的公知的材料构成。

[0952] 图1是表示本发明的有机EL元件的构成的一例的示意图。有机EL元件1具有基板2、阳极3、阴极4、和配置于该阳极3与阴极4之间的发光单元10。发光单元10具有发光层5。在发光层5与阳极3之间具有空穴传输区域6(空穴注入层、空穴传输层等),在发光层5与阴极4之间具有电子传输区域7(电子注入层、电子传输层等)。另外,分别地可以在发光层5的阳极3侧设置电子阻挡层(未图示),在发光层5的阴极4侧设置空穴阻挡层(未图示)。由此,可以将电子、空穴封闭在发光层5中而进一步提高发光层5中的激子的生成效率。

[0953] 图2是表示本发明的有机EL元件的另一构成的示意图。有机EL元件11具有基板2、阳极3、阴极4、和配置于该阳极3与阴极4之间的发光单元20。发光单元20具有发光层5。配置于阳极3与发光层5之间的空穴传输区域由空穴注入层6a、第1空穴传输层6b和第2空穴传输层6c形成。另外,配置于发光层5与阴极4之间的电子传输区域由第1电子传输层7a和第2电子传输层7b形成。

[0954] 图3是表示本发明的有机EL元件的另一构成的示意图。有机EL元件12具有基板2、阳极3、阴极4、以及配置于该阳极3与阴极4之间的发光单元30。发光单元30具有发光层5。配置于阳极3与发光层5之间的空穴传输区域由空穴注入层6a、第1空穴传输层6b、第2空穴传输层6c、以及第3空穴传输层6d形成。另外,配置于发光层5与阴极4之间的电子传输区域由第1电子传输层7a和第2电子传输层7b形成。

[0955] 需要说明的是,在本发明中,将与荧光掺杂剂材料(荧光发光材料)组合的主体称为荧光主体,将与磷光掺杂剂材料组合的主体称为磷光主体。荧光主体和磷光主体并非仅根据分子结构进行区分。即,磷光主体是指,形成含有磷光掺杂剂的磷光发光层的材料,并不意味着不能用作形成荧光发光层的材料。对于荧光主体也是同样的。

[0956] 基板

[0957] 基板用作有机EL元件的支撑体。作为基板,例如可以使用玻璃、石英、塑料等的板。另外,也可以使用挠性基板。作为挠性基板,例如可以举出由聚碳酸酯、聚芳酯、聚醚砜、聚丙烯、聚酯、聚氟乙烯、聚氯乙烯形成的塑料基板等。另外,也可以使用无机蒸镀膜。

[0958] 阳极

[0959] 形成于基板上的阳极优选使用功函数大的(具体而言4.0eV以上)金属、合金、导电性化合物、和它们的混合物等。具体而言,例如可以举出:氧化铟-氧化锡(ITO:Indium Tin Oxide,铟锡氧化物)、含有硅或氧化硅的氧化铟-氧化锡、氧化铟-氧化锌、含有氧化钨和氧化锌的氧化铟、石墨烯等。此外,可以举出金(Au)、铂(Pt)、镍(Ni)、钨(W)、铬(Cr)、钼(Mo)、铁(Fe)、钴(Co)、铜(Cu)、钯(Pd)、钛(Ti)、或者上述金属的氮化物(例如氮化钛)等。

[0960] 通常通过溅射法将这些材料成膜。例如,氧化铟-氧化锌可以通过使用相对于氧化铟添加1~10wt%的氧化锌而成的靶利用溅射法形成,含有氧化钨和氧化锌的氧化铟可以通过使用相对于氧化铟含有氧化钨0.5~5wt%、氧化锌0.1~1wt%的靶利用溅射法形成。此外,也可以通过真空蒸镀法、涂布法、喷墨法、旋涂法等进行制作。

[0961] 与阳极相邻地形成的空穴注入层使用与阳极的功函数无关地容易进行空穴注入的材料形成,因此,可以使用通常用作电极材料的材料(例如金属、合金、导电性化合物和它们的混合物、属于元素周期表的第一族或第二族的元素)。

[0962] 也可以使用作为功函数小的材料的属于元素周期表的第一族或第二族的元素、即锂(Li)、铯(Cs)等碱金属、和镁(Mg)、钙(Ca)、锶(Sr)等碱土金属、和包含它们的合金(例如MgAg、AlLi)、铕(Eu)、镱(Yb)等稀土金属和包含它们的合金等。需要说明的是,在使用碱金属、碱土金属、和包含它们的合金形成阳极时,可以使用真空蒸镀法、溅射法。此外,在使用银浆等时,可以使用涂布法、喷墨法等。

[0963] 空穴注入层

[0964] 空穴注入层是包含空穴注入性高的材料(空穴注入性材料)的层,形成于阳极与发光层之间、或者在存在的情况下形成于空穴传输层与阳极之间。

[0965] 作为发明化合物以外的空穴注入性材料,可以使用钼氧化物、钛氧化物、钒氧化物、铈氧化物、钆氧化物、铬氧化物、锆氧化物、铪氧化物、钽氧化物、银氧化物、钨氧化物、锰氧化物等。

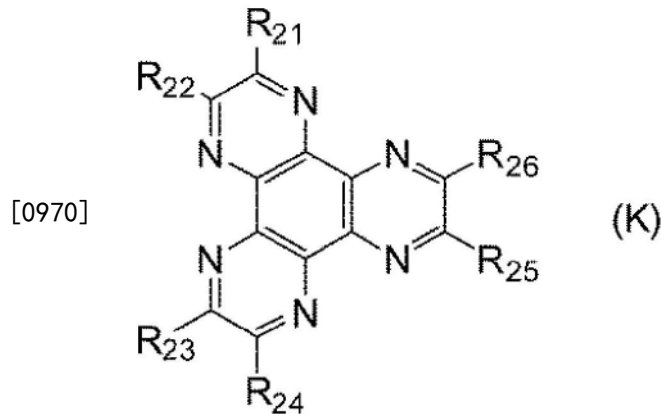
[0966] 作为空穴注入层材料,也可以举出作为低分子有机化合物的4,4',4''-三(N,N-二苯基氨基)三苯胺(简称:TDATA)、4,4',4''-三[N-(3-甲基苯基)-N-苯基氨基]三苯胺(简称:MTDATA)、4,4'-双[N-(4-二苯基氨基苯基)-N-苯基氨基]联苯(简称:DPAB)、4,4'-双[N-{4-[N'-(3-甲基苯基)-N'-苯基氨基]苯基}-N-苯基氨基]联苯(简称:DNTPD)、1,3,5-三[N-(4-二苯基氨基苯基)-N-苯基氨基]苯(简称:DPA3B)、3-[N-(9-苯基咪唑-3-基)-N-苯基氨基]-9-苯基咪唑(简称:PCzPCA1)、3,6-双[N-(9-苯基咪唑-3-基)-N-苯基氨基]-9-苯基咪唑(简称:PCzPCA2)、3-[N-(1-萘基)-N-(9-苯基咪唑-3-基)氨基]-9-苯基咪唑(简称:PCzPCN1)等

芳香族胺化合物等。

[0967] 也可以使用高分子化合物(低聚物、树状高分子、聚合物等)。例如可以举出:聚(N-乙基基咪唑)(简称:PVK)、聚(4-乙基基三苯胺)(简称:PVTTPA)、聚[N-(4-{N'-[4-(4-二苯基氨基)苯基]苯基-N'-苯基氨基}苯基)甲基丙烯酰胺](简称:PTPDMA)、聚[N,N'-双(4-丁基苯基)-N,N'-双(苯基)联苯胺](简称:Poly-TPD)等高分子化合物。另外,也可以使用聚(3,4-亚乙二氧基噻吩)/聚(苯乙烯磺酸)(PEDOT/PSS)、聚苯胺/聚(苯乙烯磺酸)(PAni/PSS)等添加了酸的高分子化合物。

[0968] 此外,也优选使用下述式(K)所示的六氮杂苯并菲(HAT)化合物等受主材料。

[0969] [化学式126]



[0971] (上述式中, $R_{21} \sim R_{26}$ 各自独立地表示氰基、 $-\text{CONH}_2$ 、羧基、或者 $-\text{COOR}_{27}$ (R_{27} 表示碳数1~20的烷基或者碳数3~20的环烷基)。另外,选自 R_{21} 和 R_{22} 、 R_{23} 和 R_{24} 以及 R_{25} 和 R_{26} 中的相邻的2个可以相互键合而形成 $-\text{C}-\text{O}-\text{C}-$ 所示的基团。)

[0972] 作为 R_{27} ,可以举出甲基、乙基、正丙基、异丙基、正丁基、异丁基、叔丁基、环戊基、环己基等。

[0973] 空穴传输层

[0974] 空穴传输层是包含空穴传输性高的材料(空穴传输性材料)的层,形成于阳极与发光层之间、或者在空穴注入层存在的情况下形成于空穴注入层与发光层之间。可以将发明化合物单独或与下述的化合物组合而用于空穴传输层。

[0975] 空穴传输层可以为单层结构,也可以为包含2个以上的层的多层结构。例如,空穴传输层可以为包含第1空穴传输层(阳极侧)和第2空穴传输层(阴极侧)的2层结构。即,上述空穴传输区域可以包含阳极侧的第1空穴传输层和阴极侧的第2空穴传输层。另外,空穴传输层可以为从阳极侧起依次包含第1空穴传输层、第2空穴传输层和第3空穴传输层的3层结构。即,可以在第2空穴传输层与发光层之间配置第3空穴传输层。

[0976] 在本发明的一个方案中,上述单层结构的空穴传输层优选与发光层相邻,另外,优选上述多层结构中的最接近阴极的空穴传输层、例如上述2层结构的第2空穴传输层与发光层相邻。另外,优选例如上述3层结构的第3空穴传输层与发光层相邻。

[0977] 在本发明的另一方案中,在上述单层结构的空穴传输层与发光层之间、或者在上述多层结构中的最接近发光层的空穴传输层与发光层之间,可以夹有后述的电子阻挡层等。

[0978] 在上述2层结构的空穴传输层中,发明化合物可以包含在第1空穴传输层和第2空

穴传输层中的一者中,也可以包含在这两者中。

[0979] 在本发明的一个方案中,发明化合物优选仅包含在第1空穴传输层中,在另一方案中,发明化合物优选仅包含在第2空穴传输层中,在此外的另一方案中,发明化合物优选包含在第1空穴传输层和第2空穴传输层中。

[0980] 在上述3层结构的空穴传输层中,可以第1~第3空穴传输层之中的至少一个包含发明化合物。即,发明化合物可以仅包含于选自第1~第3空穴传输层中的1层(仅第1空穴传输层、仅第2空穴传输层、或者仅第3空穴传输层)、仅包含于选自第1~第3空穴传输层中的2层(仅第1空穴传输层和第2空穴传输层、仅第1空穴传输层和第3空穴传输层、或者仅第2空穴传输层和第3空穴传输层)、或者包含于第1~第3空穴传输层中的所有层。

[0981] 在本发明的一个方案中,在上述第1空穴传输层和上述第2空穴传输层中的一者或这两者中所包含的发明化合物从制造成本的观点出发,优选为气体。

[0982] 在本发明的另一方案中,上述第1~第3空穴传输层之中的至少一层中所包含的发明化合物从制造成本的观点出发,优选为气体。

[0983] 上述气体是指,发明化合物中所有的氢原子为氘原子的发明化合物。

[0984] 因此,本发明包含上述第1空穴传输层和上述第2空穴传输层中的一者或这两者包含实质上仅由气体构成的发明化合物的有机EL元件。“实质上仅由气体构成的发明化合物”是指,相对于发明化合物的总量,气体的含有比例为90摩尔%以上,优选为95摩尔%以上,更优选为99摩尔%以上(各自包括100%在内)。

[0985] 作为发明化合物以外的空穴传输层材料,例如可以使用芳香族胺化合物、咪唑衍生物、噻衍生物等。

[0986] 作为芳香族胺化合物,例如可以举出:4,4'-双[N-(1-萘基)-N-苯基氨基]联苯(简称:NPB)、N,N'-双(3-甲基苯基)-N,N'-二苯基-[1,1'-联苯]-4,4'-二胺(简称:TPD)、4-苯基-4'-(9-苯基芴-9-基)三苯胺(简称:BAFLP)、4,4'-双[N-(9,9-二甲基芴-2-基)-N-苯基氨基]联苯(简称:DFLDPBi)、4,4',4''-三(N,N-二苯基氨基)三苯胺(简称:TDATA)、4,4',4''-三[N-(3-甲基苯基)-N-苯基氨基]三苯胺(简称:MTDATA)、以及4,4'-双[N-(螺-9,9'-双芴-2-基)-N-苯基氨基]联苯(简称:BSPB)。上述化合物具有 10^{-6} cm²/Vs以上的空穴迁移率。

[0987] 作为咪唑衍生物,例如可以举出4,4'-二(9-咪唑基)联苯(简称:CBP)、9-[4-(9-咪唑基)苯基]-10-苯基蒽(简称:CzPA)、以及9-苯基-3-[4-(10-苯基-9-蒽基)苯基]-9H-咪唑(简称:PCzPA)。

[0988] 作为蒽衍生物,例如可以举出2-叔丁基-9,10-二(2-萘基)蒽(简称:t-BuDNA)、9,10-二(2-萘基)蒽(简称:DNA)、以及9,10-二苯基蒽(简称:DPAnth)。

[0989] 也可以使用聚(N-乙烯基咪唑)(简称:PVK)、聚(4-乙烯基三苯胺)(简称:PVTPA)等高分子化合物。

[0990] 其中,只要是空穴传输性高于电子传输性的化合物则可以使用上述以外的化合物。

[0991] 发光层的掺杂剂材料

[0992] 发光层是包含发光性高的材料(掺杂剂材料)的层,可以使用各种材料。例如,可以使用荧光发光材料、磷光发光材料作为掺杂剂材料。荧光发光材料是利用单重激发态发光的化合物,磷光发光材料是利用三重激发态发光的化合物。

[0993] 作为可以用于发光层的蓝色系的荧光发光材料,可以使用茈萘生物、苯乙烯基胺衍生物、茈萘衍生物、茈萘衍生物、茈萘衍生物、茈萘衍生物、二胺衍生物、三芳基胺衍生物等。具体而言,可以举出N,N'-双[4-(9H-吡啶-9-基)苯基]-N,N'-二苯基茈萘-4,4'-二胺(简称:YGA2S)、4-(9H-吡啶-9-基)-4'-(10-苯基-9-茈萘基)三苯胺(简称:YGAPA)、4-(10-苯基-9-茈萘基)-4'-(9-苯基-9H-吡啶-3-基)三苯胺(简称:PCBAPA)等。

[0994] 作为可以用于发光层的绿色系的荧光发光材料,可以使用芳香族胺衍生物等。具体而言,可以举出N-(9,10-二苯基-2-茈萘基)-N,9-二苯基-9H-吡啶-3-胺(简称:2PCAPA)、N-[9,10-双(1,1'-联苯-2-基)-2-茈萘基]-N,9-二苯基-9H-吡啶-3-胺(简称:2PCABPhA)、N-(9,10-二苯基-2-茈萘基)-N,N',N'-三苯基-1,4-苯二胺(简称:2DPAPA)、N-[9,10-双(1,1'-联苯-2-基)-2-茈萘基]-N,N',N'-三苯基-1,4-苯二胺(简称:2DPABPhA)、N-[9,10-双(1,1'-联苯-2-基)]-N-[4-(9H-吡啶-9-基)苯基]-N-苯基茈萘-2-胺(简称:2YGABPhA)、N,N,9-三苯基茈萘-9-胺(简称:DPhAPhA)等。

[0995] 作为可以用于发光层的红色系的荧光发光材料,可以使用并四苯衍生物、二胺衍生物等。具体而言,可以举出N,N,N',N'-四(4-甲基苯基)并四苯-5,11-二胺(简称:p-mPhTD)、7,14-二苯基-N,N,N',N'-四(4-甲基苯基)茈萘并[1,2-a]茈萘-3,10-二胺(简称:p-mPhAFD)等。

[0996] 在本发明的一个方案中,优选发光层包含荧光发光材料(荧光掺杂剂材料)。

[0997] 作为可以用于发光层的蓝色系的磷光发光材料,可以使用铈络合物、铈络合物、铂络合物等金属络合物。具体而言,可以举出双[2-(4',6'-二氟苯基)吡啶-N,C2']铈(III)四(1-吡啶基)硼酸盐(简称:FIr6)、双[2-(4',6'-二氟苯基)吡啶-N,C2']铈(III)吡啶甲酸盐(简称:FIrpic)、双[2-(3',5'-双三氟甲基苯基)吡啶-N,C2']铈(III)吡啶甲酸盐(简称:Ir(CF₃ppy)₂(pic))、双[2-(4',6'-二氟苯基)吡啶-N,C2']铈(III)乙酰丙酮盐(简称:FIracac)等。

[0998] 作为可以用于发光层的绿色系的磷光发光材料,可使用铈络合物等。可以举出三(2-苯基吡啶-N,C2')铈(III)(简称:Ir(ppy)₃)、双(2-苯基吡啶-N,C2')铈(III)乙酰丙酮盐(简称:Ir(ppy)₂(acac))、双(1,2-二苯基-1H-苯并咪唑)合铈(III)乙酰丙酮盐(简称:Ir(pbi)₂(acac))、双(苯并[h]喹啉)铈(III)乙酰丙酮盐(简称:Ir(bzq)₂(acac))等。

[0999] 作为可以用于发光层的红色系的磷光发光材料,可使用铈络合物、铂络合物、铈络合物、铈络合物等金属络合物。具体而言,可以举出双[2-(2'-苯并[4,5- α]噻吩基)吡啶-N,C3']铈(III)乙酰丙酮盐(简称:Ir(btp)₂(acac))、双(1-苯基异喹啉-N,C2')铈(III)乙酰丙酮盐(简称:Ir(piq)₂(acac))、(乙酰丙酮根)双[2,3-双(4-氟苯基)喹啉]合铈(III)(简称:Ir(Fdpq)₂(acac))、2,3,7,8,12,13,17,18-八乙基-21H,23H-卟啉铂(II)(简称:PtOEP)等有机金属络合物。

[1000] 另外,三(乙酰丙酮根)(单菲咯啉)铈(III)(简称:Tb(acac)₃(Phen))、三(1,3-二苯基-1,3-丙二酮基)(单菲咯啉)铈(III)(简称:Eu(DBM)₃(Phen))、三[1-(2-噻吩甲酰基)-3,3,3-三氟丙酮合](单菲咯啉)铈(III)(简称:Eu(TTA)₃(Phen))等稀土金属络合物由于是来自稀土金属离子的发光(不同多重度间的电子跃迁),因此可以用作磷光发光材料。

[1001] 在本发明的一个方案中,优选发光层包含磷光发光材料(磷光掺杂剂材料)。

[1002] 发光层的主体材料

[1003] 发光层可以设为将上述掺杂剂材料分散在其他材料(主体材料)中的构成。优选使用最低未占轨道能级(LUMO能级)比掺杂剂材料高、最高已占轨道能级(HOMO能级)比掺杂剂材料低的材料。

[1004] 作为主体材料,例如使用

[1005] (1) 铝络合物、铍络合物、或者锌络合物等金属络合物、

[1006] (2) 噁二唑衍生物、苯并咪唑衍生物、或者菲咯啉衍生物等杂环化合物、

[1007] (3) 咪唑衍生物、噻衍生物、菲衍生物、芘衍生物、或者蒽衍生物等稠合芳香族化合物、

[1008] (4) 三芳基胺衍生物或稠合多环芳香族胺衍生物等芳香族胺化合物。

[1009] 例如,可以使用:三(8-羟基喹啉)铝(III)(简称:Alq)、三(4-甲基-8-羟基喹啉)铝(III)(简称:Almq3)、双(10-羟基苯并[h]喹啉)铍(II)(简称:BeBq2)、双(2-甲基-8-羟基喹啉)(4-苯基苯酚)合铝(III)(简称:BA1q)、双(8-羟基喹啉)锌(II)(简称:Znq)、双[2-(2-苯并噻唑基)苯酚]合铝(III)(简称:ZnPB0)、双[2-(2-苯并噻唑基)苯酚]合锌(II)(简称:ZnBTZ)等金属络合物;

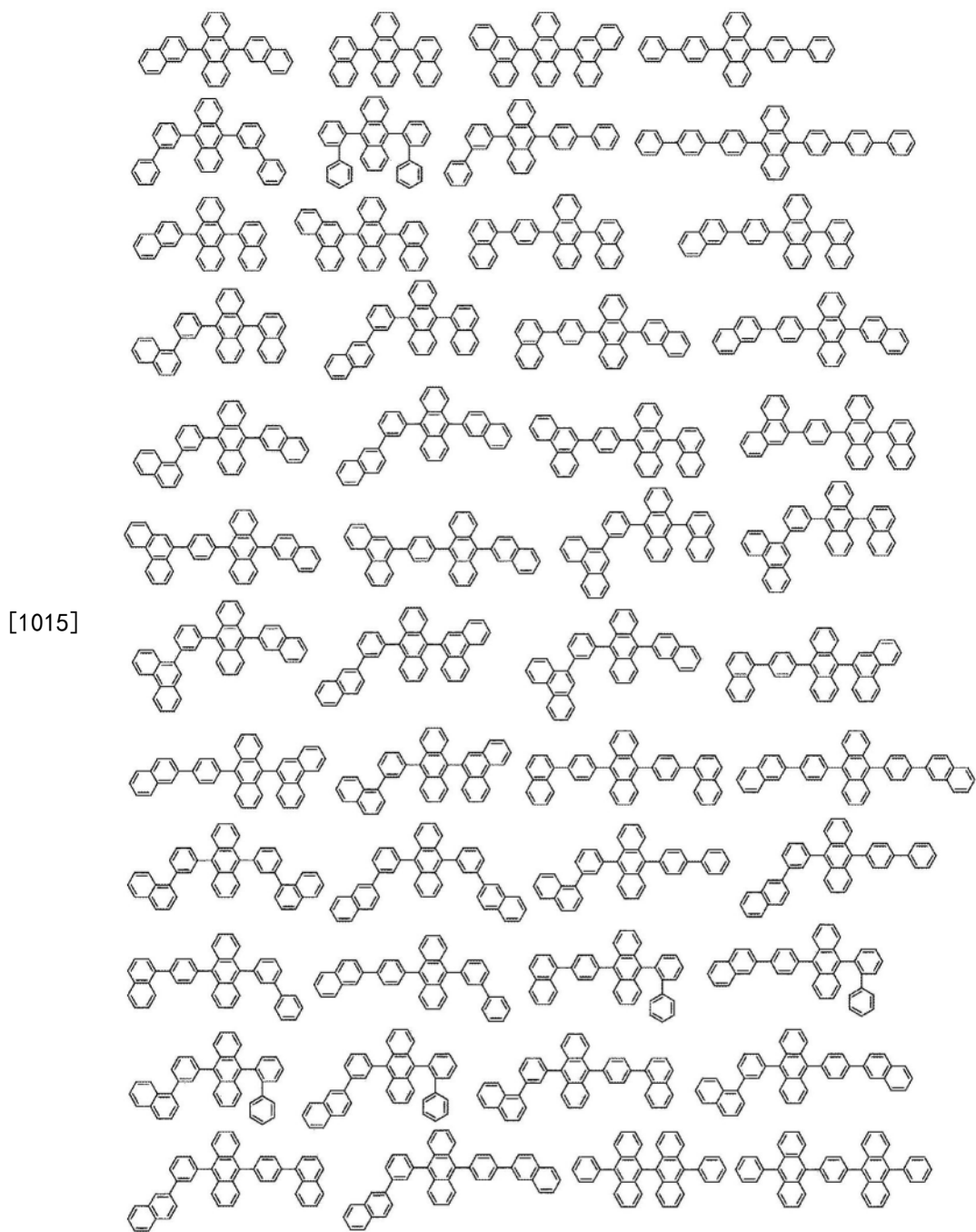
[1010] 2-(4-联苯基)-5-(4-叔丁基苯基)-1,3,4-噁二唑(简称:PBD)、1,3-双[5-(对叔丁基苯基)-1,3,4-噁二唑-2-基]苯(简称:OXD-7)、3-(4-联苯基)-4-苯基-5-(4-叔丁基苯基)-1,2,4-三唑(简称:TAZ)、2,2',2''-(1,3,5-苯三基)三(1-苯基-1H-苯并咪唑)(简称:TPBI)、红菲咯啉(简称:BPhen)、浴铜灵(简称:BCP)等杂环化合物;

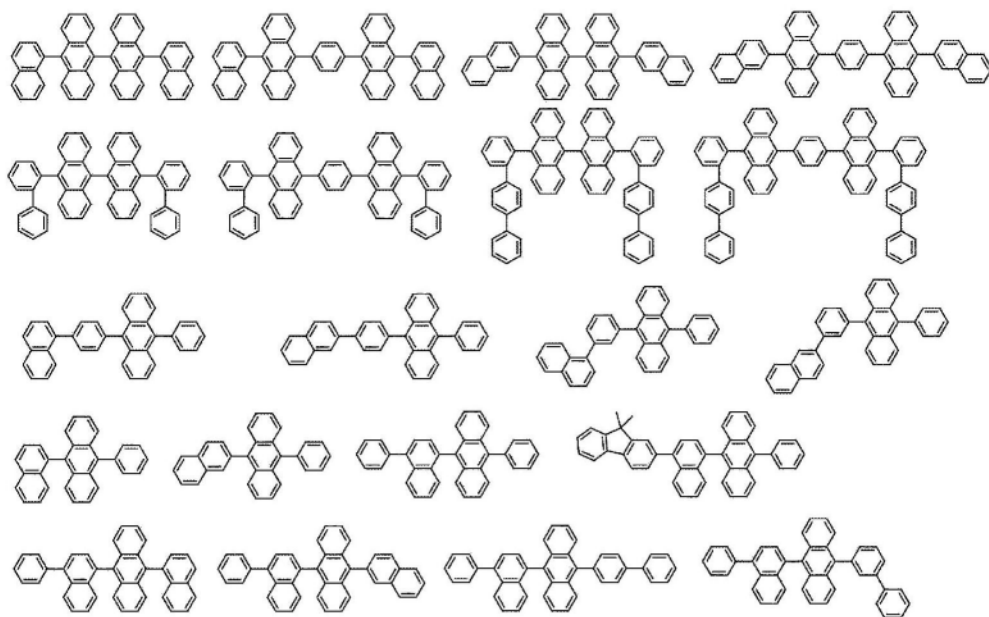
[1011] 9-[4-(10-苯基-9-蒽基)苯基]-9H-咪唑(简称:CzPA)、3,6-二苯基-9-[4-(10-苯基-9-蒽基)苯基]-9H-咪唑(简称:DPCzPA)、9,10-双(3,5-二苯基苯基)蒽(简称:DPPA)、9,10-二(2-萘基)蒽(简称:DNA)、2-叔丁基-9,10-二(2-萘基)蒽(简称:t-BuDNA)、9,9'-联蒽(简称:BANT)、9,9'-(苈-3,3'-二基)二菲(简称:DPNS)、9,9'-(苈-4,4'-二基)二菲(简称:DPNS2)、3,3',3''-(苯-1,3,5-三基)三芘(简称:TPB3)、9,10-二苯基蒽(简称:DPAnth)、6,12-二甲氧基-5,11-二苯基蒽等稠合芳香族化合物;和

[1012] N,N-二苯基-9-[4-(10-苯基-9-蒽基)苯基]-9H-咪唑-3-胺(简称:CzA1PA)、4-(10-苯基-9-蒽基)三苯胺(简称:DPhPA)、N,9-二苯基-N-[4-(10-苯基-9-蒽基)苯基]-9H-咪唑-3-胺(简称:PCAPA)、N,9-二苯基-N-{4-[4-(10-苯基-9-蒽基)苯基]苯基}-9H-咪唑-3-胺(简称:PCAPBA)、N-(9,10-二苯基-2-蒽基)-N,9-二苯基-9H-咪唑-3-胺(简称:2PCAPA)、4,4'-双[N-(1-萘基)-N-苯基氨基]联苯(简称:NPB或 α -NPD)、N,N'-双(3-甲基苯基)-N,N'-二苯基-[1,1'-联苯]-4,4'-二胺(简称:TPD)、4,4'-双[N-(9,9-二甲基芴-2-基)-N-苯基氨基]联苯(简称:DFLDPBi)、4,4'-双[N-(螺-9,9'-双芴-2-基)-N-苯基氨基]联苯(简称:BSPB)等芳香族胺化合物。主体材料可以使用两种以上。

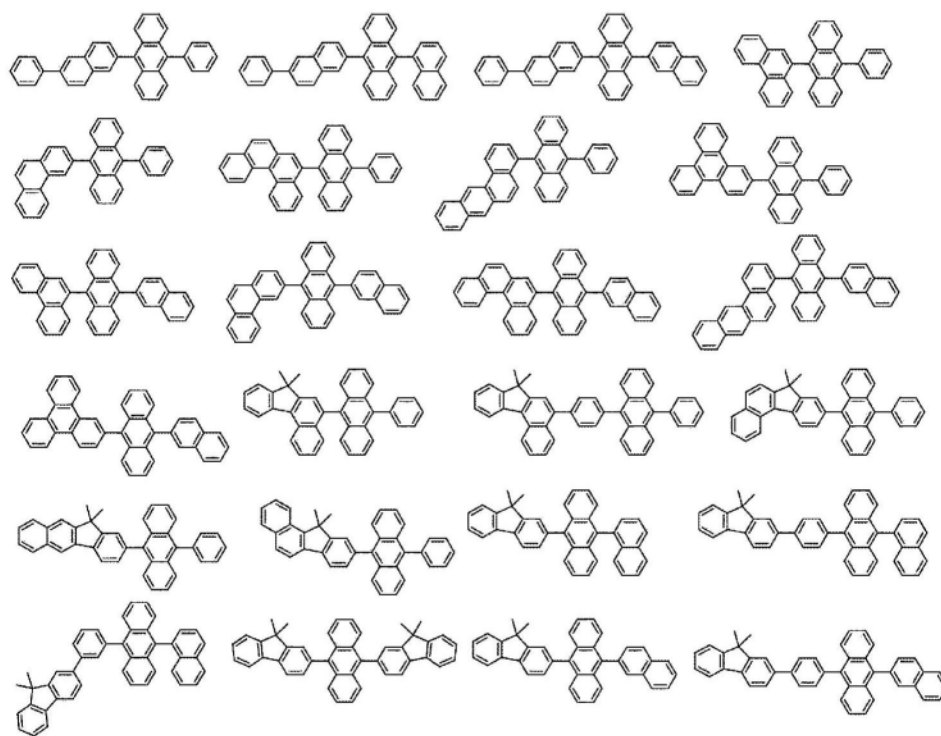
[1013] 尤其,在蓝色荧光元件的情况下,优选使用下述的蒽化合物作为主体材料。

[1014] [化学式127]



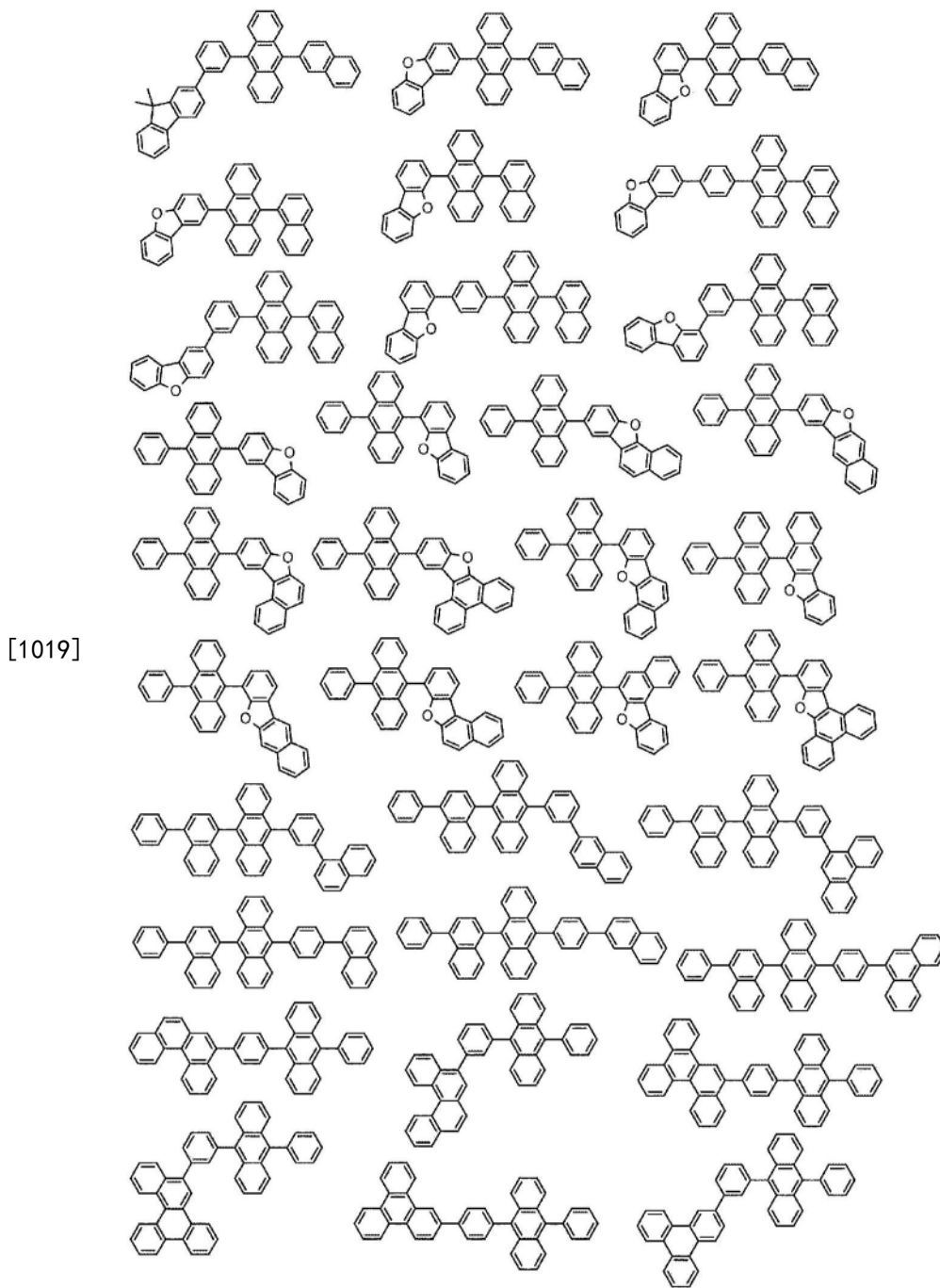


[1017]



[1018]

[化学式129]



[1020] 电子传输层

[1021] 电子传输层是包含电子传输性高的材料(电子传输性材料)的层,形成于发光层与阴极之间、或者在电子注入层存在的情况下形成于电子注入层与发光层之间。

[1022] 电子传输层可以是单层结构,也可以是包含2个以上的层的多层结构。例如,电子传输层可以是包含第1电子传输层(阳极侧)和第2电子传输层(阴极侧)的2层结构。在本发明的一个方案中,上述单层结构的电子传输层优选与发光层相邻,或者上述多层结构中的最接近阳极的电子传输层、例如上述2层结构的第1电子传输层优选与发光层相邻。在本发明的另一方案中,在上述单层结构的电子传输层与发光层之间、或者在上述多层结构中的最接近发光层的电子传输层与发光层之间,可以夹有后述的空穴阻挡层等。

[1023] 电子传输层例如可以使用

[1024] (1) 铝络合物、铍络合物、锌络合物等金属络合物、

[1025] (2) 咪唑衍生物、苯并咪唑衍生物、吡嗪衍生物、咪唑衍生物、菲咯啉衍生物等杂芳香族化合物、

[1026] (3) 高分子化合物。

[1027] 作为金属络合物,例如可以举出:三(8-羟基喹啉)铝(III)(简称:Alq)、三(4-甲基-8-羟基喹啉)铝(简称:Almq₃)、双(10-羟基苯并[h]喹啉)铍(简称:BeBq₂)、双(2-甲基-8-羟基喹啉)(4-苯基苯酚)合铝(III)(简称:BA1q)、双(8-羟基喹啉)锌(II)(简称:Znq)、双[2-(2-苯并噁唑基)苯酚]合锌(II)(简称:ZnPBO)、双[2-(2-苯并噁唑基)苯酚]合锌(II)(简称:ZnBTZ)。

[1028] 作为杂芳香族化合物,例如可以举出:2-(4-联苯基)-5-(4-叔丁基苯基)-1,3,4-噁二唑(简称:PBD)、1,3-双[5-(对叔丁基苯基)-1,3,4-噁二唑-2-基]苯(简称:OXD-7)、3-(4-叔丁基苯基)-4-苯基-5-(4-联苯基)-1,2,4-三唑(简称:TAZ)、3-(4-叔丁基苯基)-4-(4-乙基苯基)-5-(4-联苯基)-1,2,4-三唑(简称:p-EtTAZ)、红菲咯啉(简称:BPhen)、浴铜灵(简称:BCP)、4,4'-双(5-甲基苯并噁唑-2-基)芪(简称:BzOs)。

[1029] 作为高分子化合物,例如可以举出聚[(9,9-二己基芴-2,7-二基)-co-(吡啶-3,5-二基)](简称:PF-Py)、聚[(9,9-二辛基芴-2,7-二基)-co-(2,2'-联吡啶-6,6'-二基)](简称:PF-BPy)。

[1030] 上述材料是具有 $10^{-6}\text{cm}^2/\text{Vs}$ 以上的电子迁移率的材料。需要说明的是,只要是电子传输性高于空穴传输性的材料,则可以将上述以外的材料用于电子传输层。

[1031] 电子注入层

[1032] 电子注入层是包含电子注入性高的材料的层。电子注入层可以使用锂(Li)、铯(Cs)等碱金属、镁(Mg)、钙(Ca)、锶(Sr)等碱土金属、铕(Eu)、镱(Yb)等稀土金属、和包含这些金属的化合物。作为这样的化合物,可以举出例如:碱金属氧化物、碱金属卤化物、含碱金属的有机络合物、碱土金属氧化物、碱土金属卤化物、含碱土金属的有机络合物、稀土金属氧化物、稀土金属卤化物、和含稀土金属的有机络合物。另外,也可以混合使用多种这些化合物。

[1033] 此外,可以使用在具有电子传输性的材料中含有碱金属、碱土金属或者它们的化合物而成的材料,具体而言可以使用使Alq中含有镁(Mg)而成的材料等。需要说明的是,此时,可以更高效地进行来自阴极的电子注入。

[1034] 或者,电子注入层也可以使用将有机化合物和供电子体(供体)混合而成的复合材料。这样的复合材料由于有机化合物从供电子体接受电子,因此电子注入性和电子传输性优异。此时,作为有机化合物,优选为所接受的电子的传输优异的材料,具体而言,可以使用例如上述的构成电子传输层的材料(金属络合物、杂芳香族化合物等)。作为供电子体,只要是对有机化合物表现出供电子性的材料即可。具体而言,优选碱金属、碱土金属和稀土金属,可以举出锂、铯、镁、钙、钪、镱等。另外,优选碱金属氧化物、碱土金属氧化物,可以举出锂氧化物、钙氧化物、钡氧化物等。另外,也可以使用氧化镁这样的路易斯碱。另外,也可以使用四硫富瓦烯(简称:TTF)等有机化合物。

[1035] 阴极

[1036] 阴极优选使用功函数小的(具体而言3.8eV以下)金属、合金、导电性化合物和它们

的混合物等。作为这样的阴极材料的具体例,可以举出属于元素周期表的第一族或第二族的元素、即锂(Li)、铯(Cs)等碱金属、以及镁(Mg)、钙(Ca)、锶(Sr)等碱土金属和包含它们的合金(例如MgAg、AlLi)、铕(Eu)、镱(Yb)等稀土金属和包含它们的合金等。

[1037] 需要说明的是,在使用碱金属、碱土金属、包含它们的合金形成阴极时,可以使用真空蒸镀法、溅射法。另外,在使用银浆等时,可以使用涂布法、喷墨法等。

[1038] 需要说明的是,通过设置电子注入层,可以与功函数的大小无关地使用Al、Ag、ITO、石墨烯、含有硅或氧化硅的氧化铟-氧化锡等各种各样的导电性材料形成阴极。这些导电性材料可以使用溅射法、喷墨法、旋涂法等进行成膜。

[1039] 绝缘层

[1040] 有机EL元件由于对超薄膜施加电场,因而容易产生因泄漏、短路导致的像素缺陷。为了防止这种情况,也可以在一对电极间插入由绝缘性的薄膜层形成的绝缘层。

[1041] 作为可用于绝缘层的材料,例如可以举出氧化铝、氟化锂、氧化锂、氟化铯、氧化铯、氧化镁、氟化镁、氧化钙、氟化钙、氮化铝、氧化钛、氧化硅、氧化锗、氮化硅、氮化硼、氧化钼、氧化钨、氧化钽等。需要说明的是,也可以使用它们的混合物、层叠物。

[1042] 间隔层

[1043] 对于上述间隔层而言,例如将荧光发光层和磷光发光层层叠的情况下,是指出于不使在磷光发光层中生成的激子扩散至荧光发光层、或者调整载流子平衡的目的,而设置于荧光发光层与磷光发光层之间的层。另外,间隔层也可以设置于多个磷光发光层之间。

[1044] 间隔层由于设置于发光层间,因此优选为兼具电子传输性和空穴传输性的材料。另外,为了防止相邻的磷光发光层内的三重态能量的扩散,三重态能量优选为2.6eV以上。作为用于间隔层的材料,可以举出与上述的用于空穴传输层的材料同样的材料。

[1045] 阻挡层

[1046] 也可以将电子阻挡层、空穴阻挡层、激子阻挡层等阻挡层与发光层相邻地设置。电子阻挡层是指,防止电子从发光层泄漏至空穴传输层的层,空穴阻挡层是指防止空穴从发光层泄漏至电子传输层的层。激子阻挡层具有防止在发光层中生成的激子扩散至周边的层而将激子封闭在发光层内的功能。

[1047] 上述有机EL元件的各层可以通过以往公知的蒸镀法、涂布法等形成。例如可以利用真空蒸镀法、分子束蒸镀法(MBE法)等蒸镀法,或者使用了形成层的化合物的溶液的、基于浸涂法、旋涂法、流延法、棒涂法、辊涂法等涂布法的公知方法形成。

[1048] 各层的膜厚没有特别限制,通常而言若膜厚过薄则容易产生针孔等缺陷,反之若过厚则需要高驱动电压、效率变差,因此通常为5nm~10 μ m,更优选为10nm~0.2 μ m。

[1049] 在本发明的具有2层结构或3层结构的空穴传输层的有机EL元件中,第1空穴传输层的厚度与第2空穴传输层的厚度的合计优选为30nm以上且150nm以下,更优选为40nm以上且130nm以下。

[1050] 另外,在本发明的一个方案中,2层结构或3层结构的第2空穴传输层的厚度优选为5nm以上,更优选为20nm以上,进一步优选为25nm以上,特别优选为35nm以上,另外,优选为100nm以下。

[1051] 另外,在本发明的一个方案中,与发光层相邻的空穴传输层的厚度优选为5nm以上,更优选为10nm以上,另外,优选为20nm以下,更优选为17nm以下。

[1052] 另外,在本发明的另一方案中,与发光层相邻的空穴传输层的厚度优选为5nm以上,更优选为20nm以上,进一步优选为25nm以上,特别优选为30nm以上,另外,优选为100nm以下。

[1053] 另外,在本发明的具有2层结构或3层结构的空穴传输层的有机EL元件中,第2空穴传输层的膜厚D2与第1空穴传输层的膜厚D1之比优选为 $0.3 < D2/D1 < 4.0$,更优选为 $0.5 < D2/D1 < 3.5$,进一步优选为 $0.75 < D2/D1 < 3.0$ 。

[1054] 作为本发明的有机EL元件的优选实施方式,例如可以举出

[1055] (1) 具有2层构成的空穴传输层的有机EL元件

[1056] • 第2空穴传输层包含发明化合物、第1空穴传输层不包含发明化合物的第1实施方式;

[1057] • 第1空穴传输层和第2空穴传输层均包含发明化合物的第2实施方式;

[1058] • 第1空穴传输层包含发明化合物、第2空穴传输层不包含发明化合物的第3实施方式;

[1059] (2) 具有3层构成的空穴传输层的有机EL元件

[1060] • 第1空穴传输层包含发明化合物、第2和第3空穴传输层不包含发明化合物的第4实施方式;

[1061] • 第2空穴传输层包含发明化合物、第1和第3空穴传输层不包含发明化合物的第5实施方式;

[1062] • 第3空穴传输层包含发明化合物、第1和第2空穴传输层不包含发明化合物的第6实施方式;

[1063] • 第1和第2空穴传输层包含发明化合物、第3空穴传输层不包含发明化合物的第7实施方式;

[1064] • 第1和第3空穴传输层包含发明化合物、第2空穴传输层不包含发明化合物的第8实施方式;

[1065] • 第2和第3空穴传输层包含发明化合物、第1空穴传输层不包含发明化合物的第10实施方式;

[1066] • 第1~第3空穴传输层均包含发明化合物的第10实施方式;等等。

[1067] 上述有机EL元件可以用于有机EL面板模块等的显示部件、电视、移动电话、个人计算机等的显示装置、以及照明、车辆用灯具的发光装置等电子设备。

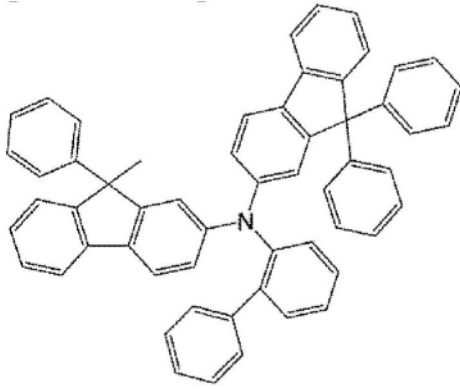
[1068] 实施例

[1069] 以下,使用实施例对本发明进行进一步的详细说明,本发明不限于以下的实施例。

[1070] 实施例1的有机EL元件的制造中使用的发明化合物

[1071] [化学式130]

[1072]

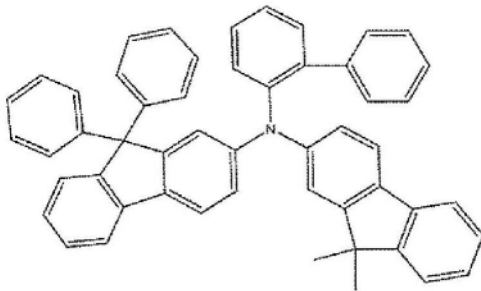


化合物1

[1073] 比较例1的有机EL元件的制造中使用的比较化合物

[1074] [化学式131]

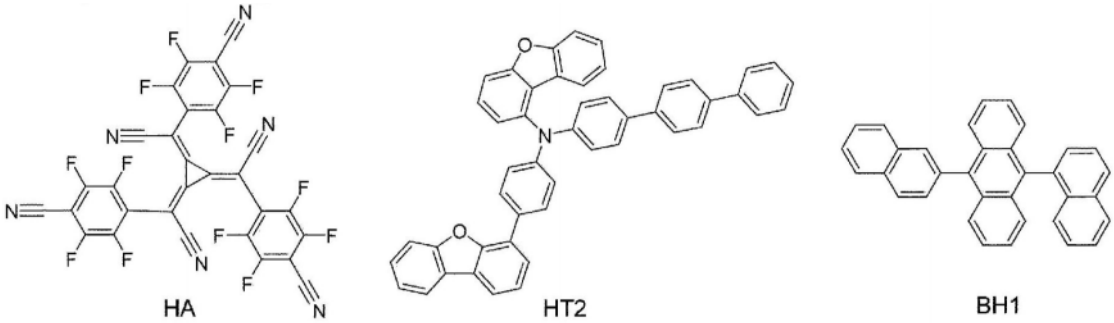
[1075]



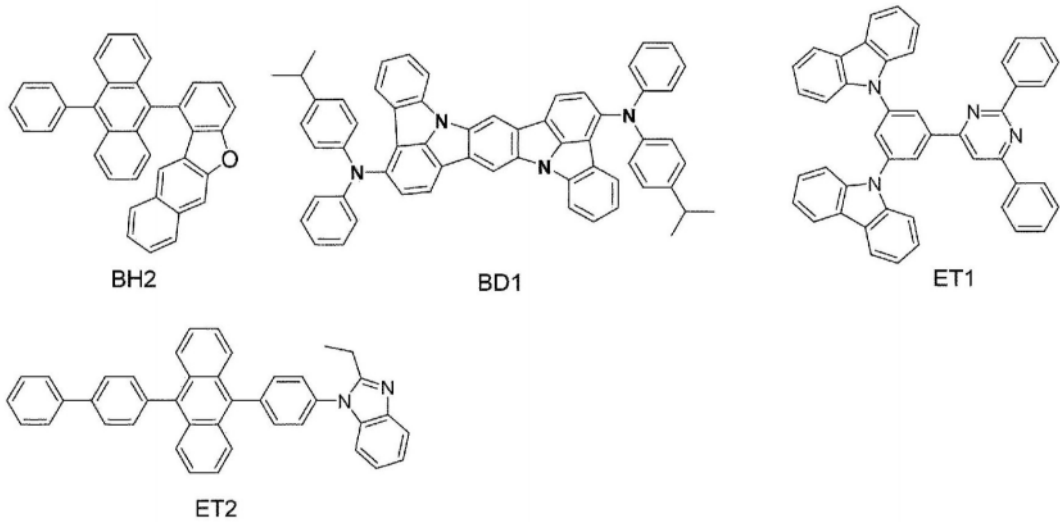
比较化合物1

[1076] 实施例1和比较例1的有机EL元件的制造中使用的其他化合物

[1077] [化学式132]



[1078]



[1079] 有机EL元件(I)的制作

[1080] 实施例1

[1081] 将25mm×75mm×1.1mm的带ITO透明电极(阳极)的玻璃基板(Geomatec株式会社制)在异丙醇中进行5分钟超声波清洗后,进行30分钟UV臭氧清洗。ITO的膜厚设为130nm。

[1082] 将清洗后的带透明电极的上述玻璃基板安装于真空蒸镀装置的基板架,首先在形成有透明电极的一侧的面上以覆盖透明电极的方式共蒸镀化合物1和化合物HA,形成了膜厚10nm的空穴注入层。化合物1与化合物HA的质量比(化合物1:HA)为97:3。

[1083] 接着,在空穴注入层上蒸镀化合物1,形成了膜厚75nm的第1空穴传输层。

[1084] 接着,在该第1空穴传输层上蒸镀化合物HT2,形成了膜厚15nm的第2空穴传输层。

[1085] 接着,在该第2空穴传输层上形成了膜厚20nm的BH(主体材料):BD1(掺杂剂材料)膜。该BH:BD1膜发挥作为发光层的功能。发光层中所包含的BH[化学式化合物BH1和BH2(均为主体材料)]以质量比计为1:1,BD1的浓度相对于发光层整体为2质量%。

[1086] 接着,在该发光层之上蒸镀化合物ET1而形成了膜厚3nm的第1电子传输层。

[1087] 接着,在该第1电子传输层上共蒸镀化合物ET2和Liq,形成了膜厚30nm的第2电子传输层。化合物ET2与Liq的质量比(ET2:Liq)为67:33。

[1088] 接着,在该第2电子传输层上共蒸镀LiF和Yb,形成了膜厚1nm的电子注入性电极。LiF与Yb的质量比(LiF:Yb)为50:50。

[1089] 然后,在该电子注入性电极上蒸镀金属Al而形成了膜厚50nm的金属阴极。

[1090] 以下示出如此所得到的实施例1的有机EL元件(I)的层构成。

[1091] ITO(130)/化合物1:HA=97:3(10)/化合物1(75)/HT2(15)/BH1:BH2:BD=50:50:2(25)/ET1(3)/ET2:Liq=67:33(30)/LiF:Yb=50:50(1)/Al(50)

[1092] 在上述层构成中,括弧内的数字为膜厚(nm),比以质量比计。

[1093] 外部量子效率(EQE)的测定

[1094] 将所得到的有机EL元件(I)在室温下以电流密度10mA/cm²进行直流恒电流驱动。使用亮度计(Minolta公司制分光亮度放射计CS-1000)测定亮度,根据其结果求出外部量子效率(%)。结果示于表1。

[1095] 比较例1

[1096] 除了代替化合物1而将空穴注入层和第1空穴传输层材料改变为下述表1所示的化合物以外,与实施例1同样地制作有机EL元件(I),测定了外部量子效率(EQE)。结果示于表1。

[1097] [表1]

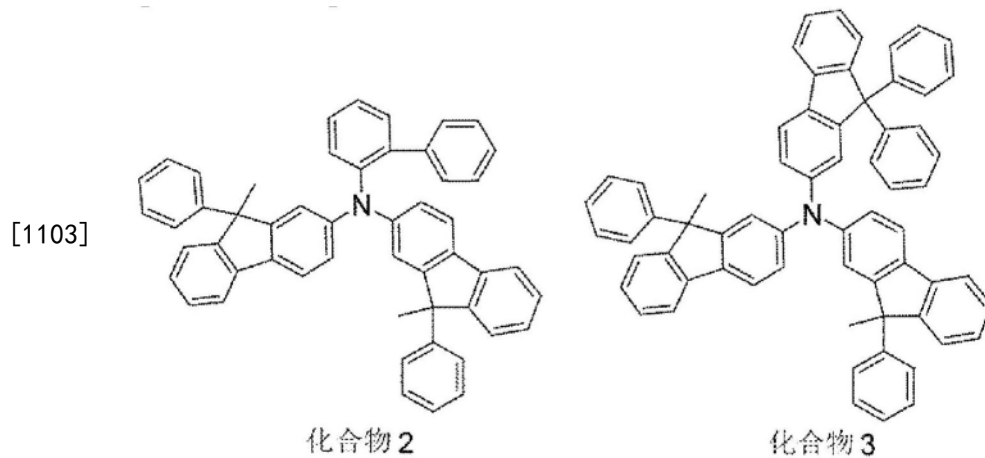
[1098] 表1

	空穴注入层和 第1空穴传输层 材料	EQE(%) @10mA/cm ²
[1099]	实施例1	化合物1
	比较例1	比较化合物1

[1100] 根据表1的结果明确可知,包含发明化合物(化合物1)的有机EL元件相较于包含比较化合物1的有机EL元件,外部量子效率更优异。

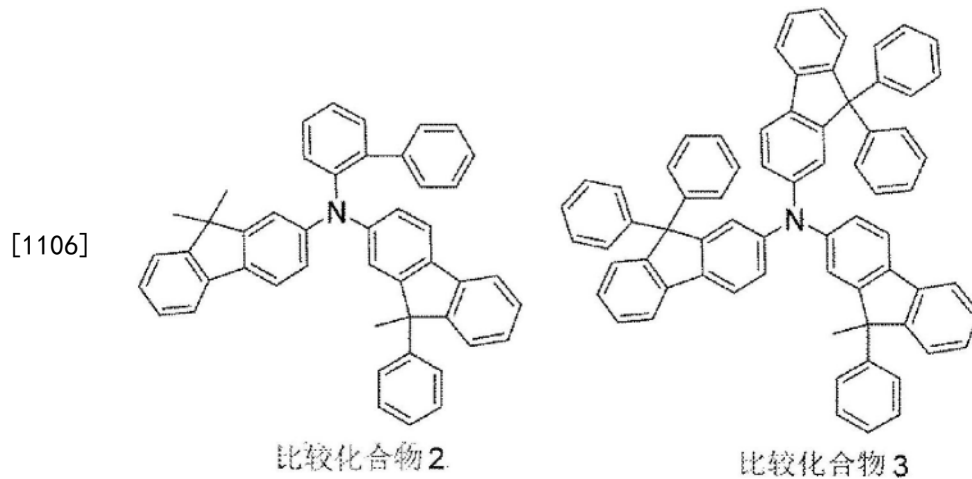
[1101] 实施例2和3的有机EL元件(II)的制造中使用的发明化合物

[1102] [化学式133]



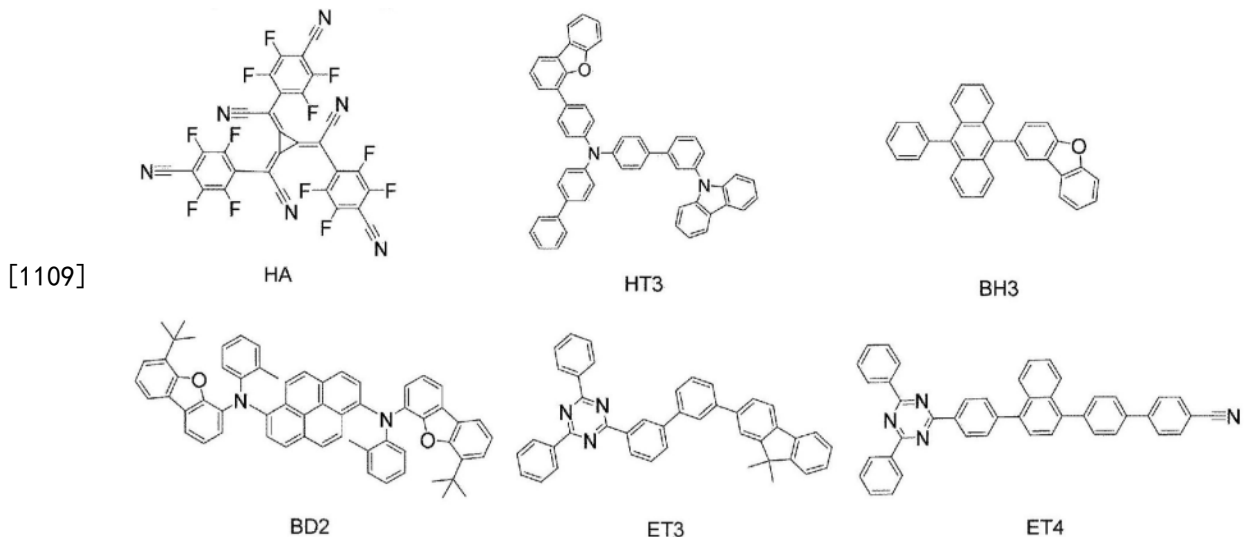
[1104] 比较例2和3的有机EL元件(II)的制造中使用的比较化合物

[1105] [化学式134]



[1107] 有机EL元件(II)的制造中使用的其他化合物

[1108] [化学式135]



[1110] 有机EL元件(II)的制作

[1111] 实施例2

[1112] 将25mm×75mm×1.1mm的带ITO透明电极(阳极)的玻璃基板(Geomatec株式会社)在异丙醇中进行5分钟超声波清洗后,进行30分钟UV臭氧清洗。ITO的膜厚设为130nm。

[1113] 将清洗后的带透明电极的上述玻璃基板安装于真空蒸镀装置的基板架,首先在形成有透明电极的一侧的面上以覆盖透明电极的方式共蒸镀化合物2和化合物HA,形成了膜厚10nm的空穴注入层。化合物2与化合物HA的质量比(化合物2:HA)为97:3。

[1114] 接着,在空穴注入层上蒸镀化合物2,形成了膜厚80nm的第一空穴传输层。

[1115] 接着,在该第1空穴传输层上蒸镀化合物HT3,形成了膜厚10nm的第2空穴传输层。

[1116] 接着,在该第2空穴传输层上共蒸镀化合物BH3(主体材料)和化合物BD2(掺杂剂材料),形成了膜厚25nm的发光层。化合物BH3与化合物BD2的质量比(BH3:BD2)为96:4。

[1117] 接着,在该发光层之上蒸镀化合物ET3而形成了膜厚5nm的第1电子传输层。

[1118] 接着,在该第1电子传输层上共蒸镀化合物ET4和Liq,形成了膜厚20nm的第2电子传输层。化合物ET4与Liq的质量比(ET4:Liq)为50:50。

[1119] 接着,在该第2电子传输层上蒸镀LiF,形成了膜厚1nm的电子注入性电极。

[1120] 然后,在该电子注入性电极上蒸镀金属A1而形成了膜厚50nm的金属阴极。

[1121] 以下示出如此所得到的实施例2的有机EL元件(II)的层构成。

[1122] ITO(130)/化合物2:HA=97:3(10)/化合物2(80)/HT3(10)/BH3:

[1123] BD2=96:4(25)/ET3(5)/ET4:Liq=50:50(20)/LiF(1)/A1(50)

[1124] 在上述层构成中,括弧内的数字为膜厚(nm),比以质量比计。

[1125] 95%寿命的测定

[1126] 将所得到的有机EL元件(II)以电流密度50mA/cm²进行直流恒电流驱动,测定亮度减少至初始亮度的95%为止的时间(h),将其作为95%寿命(LT95)。结果示于表2。

[1127] 实施例3、以及比较例2和3

[1128] 除了代替化合物2而将空穴注入层和第1空穴传输层材料改变为下述表2所示的化合物以外,与实施例2同样地制作有机EL元件(II),测定了95%寿命。结果示于表2。

[1129] [表2]

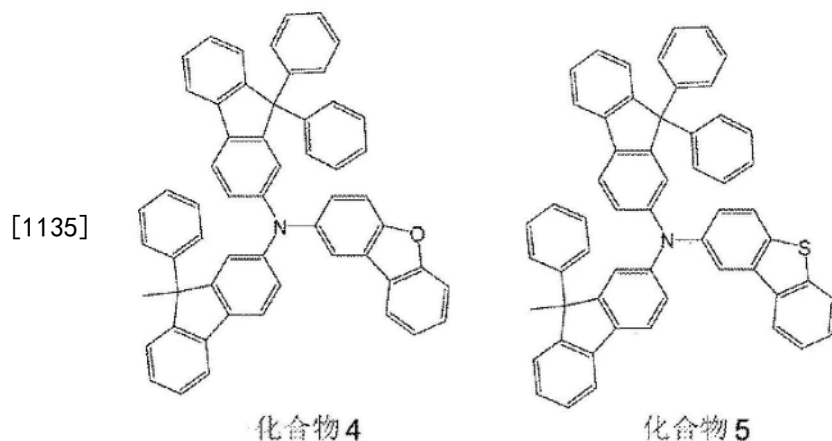
[1130] 表2

	空穴注入层和 第1空穴传输层 材料	LT95(h) @50mA/cm ²
[1131] 实施例 2	化合物 2	140
实施例 3	化合物 3	144
比较例 2	比较化合物 2	87
比较例 3	比较化合物 1	122

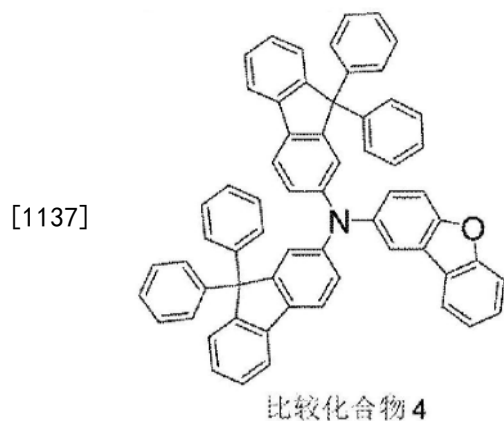
[1132] 根据表2的结果可知,包含发明化合物(化合物2和3)的有机EL元件相较于包含比较化合物2和3的有机EL元件,寿命更长。

[1133] 实施例4和5的有机EL元件(III)的制造中使用的发明化合物

[1134] [化学式136]

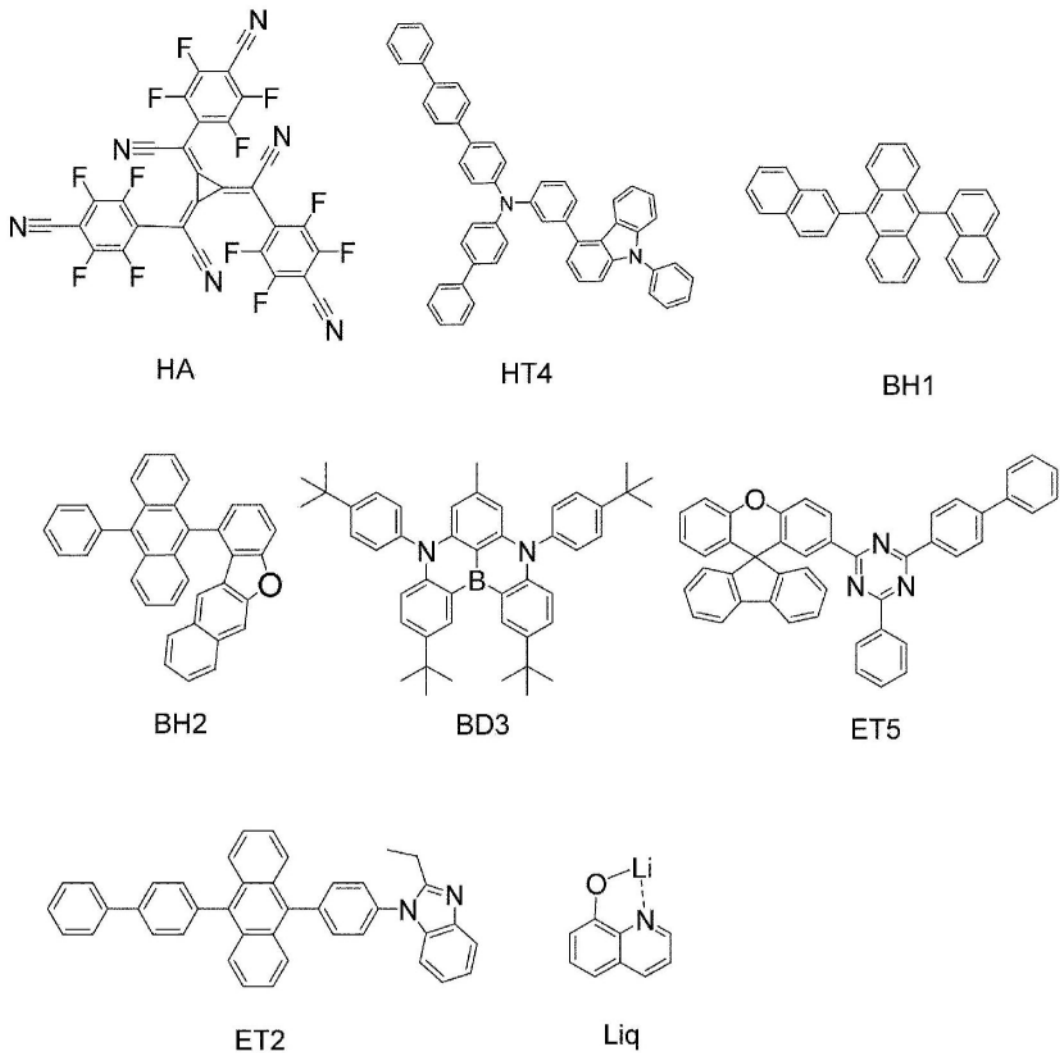


[1136] 比较例4的有机EL元件(III)的制造中使用的比较化合物[化学式137]



[1138] 有机EL元件(III)的制造中使用的其他化合物

[1139] [化学式138]



[1141] 有机EL元件(III)的制作

[1142] 实施例4

[1143] 将 $25\text{mm} \times 75\text{mm} \times 1.1\text{mm}$ 的带ITO透明电极(阳极)的玻璃基板(Geomatec株式会社制)在异丙醇中进行5分钟超声波清洗后,进行30分钟UV臭氧清洗。ITO的膜厚设为 130nm 。

[1144] 将清洗后的带透明电极的上述玻璃基板安装于真空蒸镀装置的基板架,首先在形成有透明电极的一侧的面上以覆盖透明电极的方式共蒸镀化合物4和化合物HA,形成了膜厚 10nm 的空穴注入层。化合物4与化合物HA的质量比(化合物4:HA)为 $97:3$ 。

[1145] 接着,在空穴注入层上蒸镀化合物4,形成了膜厚 75nm 的第1空穴传输层。

[1146] 接着,在该第1空穴传输层上蒸镀化合物HT4,形成了膜厚 15nm 的第2空穴传输层。

[1147] 接着,在该第2空穴传输层上形成了膜厚 20nm 的BH(主体材料):BD3(掺杂剂材料)膜。该BH:BD3膜发挥作为发光层的功能。发光层中所包含的BH[化学式化合物BH1和BH2(均为主体材料)]以质量比计为 $3:2$,BD3的浓度相对于发光层整体为 2% 。

[1148] 接着,在该发光层之上蒸镀化合物ET5而形成了膜厚 3nm 的第1电子传输层。

[1149] 接着,在该第1电子传输层上共蒸镀化合物ET2和Liq,形成了膜厚 30nm 的第2电子传输层。化合物ET2与Liq的质量比(ET2:Liq)为 $50:50$ 。

[1150] 接着,在该第2电子传输层上共蒸镀LiF和Yb,形成了膜厚 1nm 的电子注入性电极。LiF与Yb的质量比(LiF:Yb)为 $50:50$ 。

[1151] 然后,在该电子注入性电极上蒸镀金属Al而形成了膜厚50nm的金属阴极。

[1152] 以下示出如此所得到的实施例4的有机EL元件(III)的层构成。

[1153] IT0(130)/化合物4:HA=97:3(10)/化合物4(75)/HT4(15)/BH1:BH2:BD3=60:40:2(20)/ET5(3)/ET2:Liq=50:50(30)/LiF:Yb=50:50(1)/Al(50)

[1154] 在上述层构成中,括弧内的数字为膜厚(nm),比以质量比计。

[1155] 外部量子效率(EQE)的测定

[1156] 所得到的有机EL元件(III)的外部量子效率(%)与实施例1同样地求出。结果示于表3。

[1157] 实施例5和比较例4

[1158] 除了代替化合物4而将空穴注入层和第1空穴传输层材料改变为下述表3所示的化合物以外,与实施例4同样地制作有机EL元件(III),测定外部量子效率(EQE)。结果示于表3。

[1159] [表3]

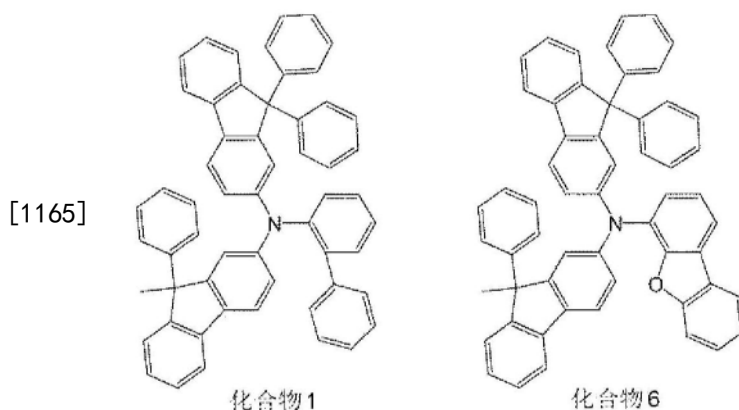
[1160] 表3

	空穴注入层和第1空穴传输层材料	EQE(%) @10mA/cm ²
[1161] 实施例4	化合物4	10.26
实施例5	化合物5	10.31
比较例4	比较化合物4	9.44

[1162] 根据表3的结果明确可知,包含发明化合物(化合物4和5)的有机EL元件相较于包含比较化合物4的有机EL元件,外部量子效率更优异。

[1163] 实施例6和7的有机EL元件(IV)的制造中使用的发明化合物

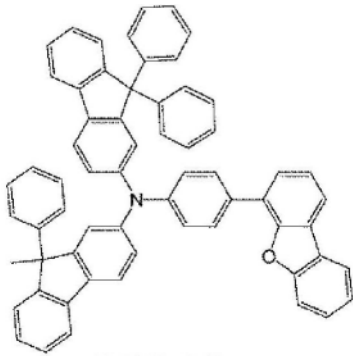
[1164] [化学式139]



[1166] 比较例5的有机EL元件(IV)的制造中使用的比较化合物

[1167] [化学式1401]

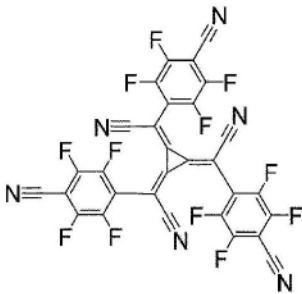
[1168]



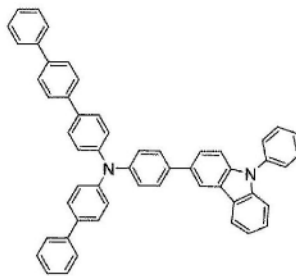
比较化合物 5

[1169] 有机EL元件(IV)的制造中使用的其他化合物

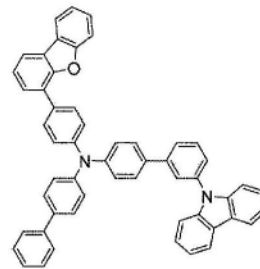
[1170] [化学式141]



HA

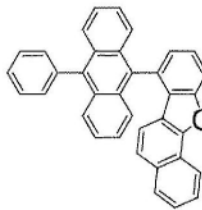


HT5

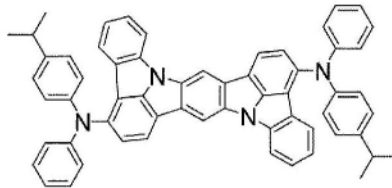


HT3

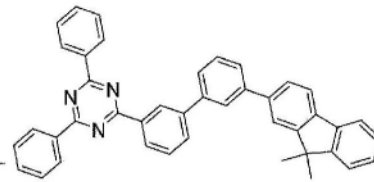
[1171]



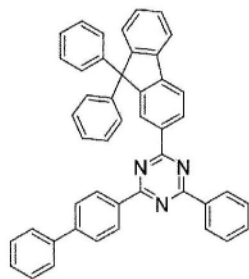
BH2



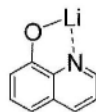
BD1



ET3



ET6



Liq

[1172] 有机EL元件(IV)的制作

[1173] 实施例6

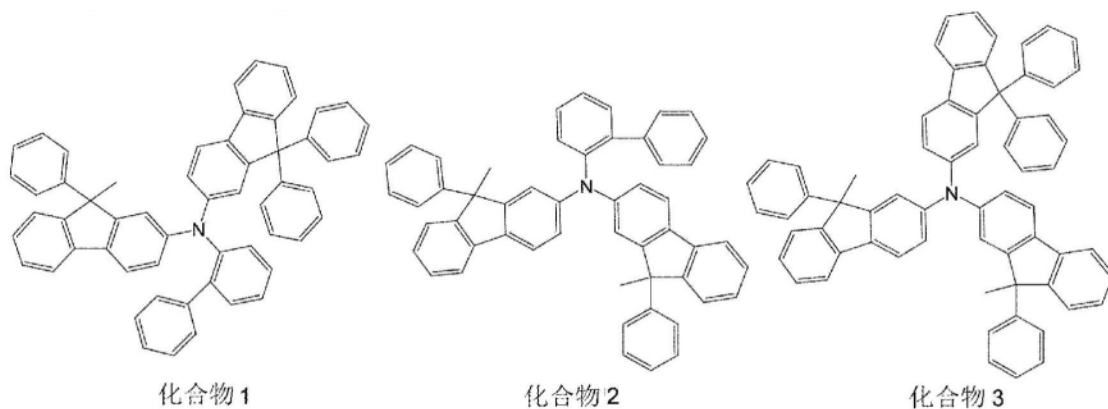
[1174] 将25mm×75mm×1.1mm的带ITO透明电极(阳极)的玻璃基板(Geomatec株式会社)在异丙醇中进行5分钟超声波清洗后,进行30分钟UV臭氧清洗。ITO的膜厚设为130nm。

[1175] 将清洗后的带透明电极的上述玻璃基板安装于真空蒸镀装置的基板架,首先在形成有透明电极的一侧的面上以覆盖透明电极的方式共蒸镀化合物HT5和化合物HA,形成了膜厚10nm的空穴注入层。化合物HT5与化合物HA的质量比(化合物HT5:HA)为97:3。

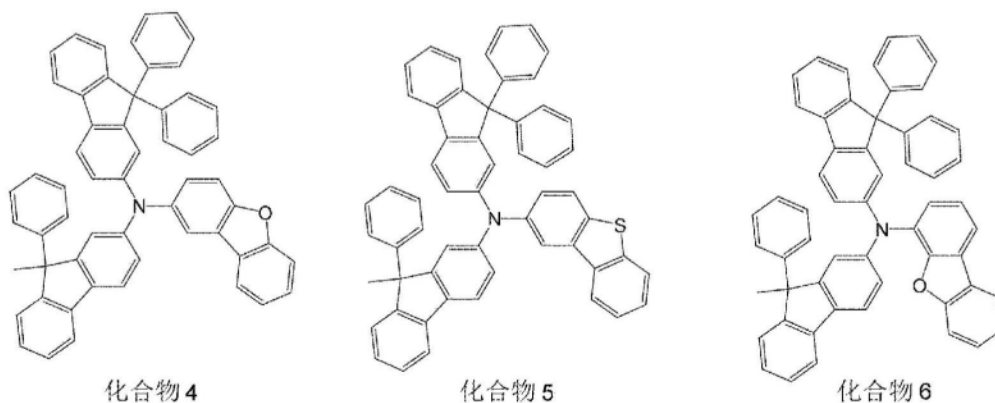
- [1176] 接着,在空穴注入层上蒸镀化合物HT5,形成了膜厚40nm的第1空穴传输层。
- [1177] 接着,在该第1空穴传输层上蒸镀化合物1,形成了膜厚40nm的第2空穴传输层。
- [1178] 接着,在该第2空穴传输层上蒸镀化合物HT3,形成了膜厚5nm的第3空穴传输层。
- [1179] 接着,在该第3空穴传输层上共蒸镀化合物BH4(主体材料)和化合物BD1(掺杂剂材料),形成了膜厚20nm的发光层。化合物BH4与化合物BD1的质量比(BH4:BD1)为99:1。
- [1180] 接着,在该发光层之上蒸镀化合物ET3而形成了膜厚5nm的第1电子传输层。
- [1181] 接着,在该第1电子传输层上共蒸镀化合物ET6和Liq,形成了膜厚25nm的第2电子传输层。化合物ET6与Liq的质量比(ET6:Liq)为50:50。
- [1182] 接着,在该第2电子传输层上蒸镀Yb,形成了膜厚1nm的电子注入性电极。
- [1183] 然后,在该电子注入性电极上蒸镀金属A1而形成了膜厚50nm的金属阴极。
- [1184] 以下示出如此所得到的实施例6的有机EL元件(IV)的层构成。
- [1185] ITO(130)/HT5:HA=97:3(10)/HT5(40)/化合物1(40)/HT3(5)/BH4:
- [1186] BD1=99:1(20)/ET3(5)/ET6:Liq=50:50(25)/Yb(1)/A1(50)
- [1187] 在上述层构成中,括弧内的数字为膜厚(nm),比以质量比计。
- [1188] 外部量子效率(EQE)的测定
- [1189] 所得到的有机EL元件(IV)的外部量子效率(%)与实施例1同样地求出。结果示于表4。
- [1190] 实施例7和比较例5
- [1191] 除了代替化合物1而将第2空穴传输层材料改变为下述表4所示的化合物以外,与实施例6同样地制作有机EL元件(IV),测定外部量子效率(EQE)。结果示于表4。
- [1192] [表4]
- [1193] 表4

	第2空穴传输层 材料	EQE(%) @10mA/cm ²
[1194] 实施例6	化合物1	10.92
实施例7	化合物6	11.36
比较例5	比较化合物5	9.88

- [1195] 根据表4的结果明确可知,包含发明化合物(化合物1和6)的有机EL元件相较于包含比较化合物5的有机EL元件,外部量子效率更优异。
- [1196] 在合成例中合成的发明化合物
- [1197] [化学式142]



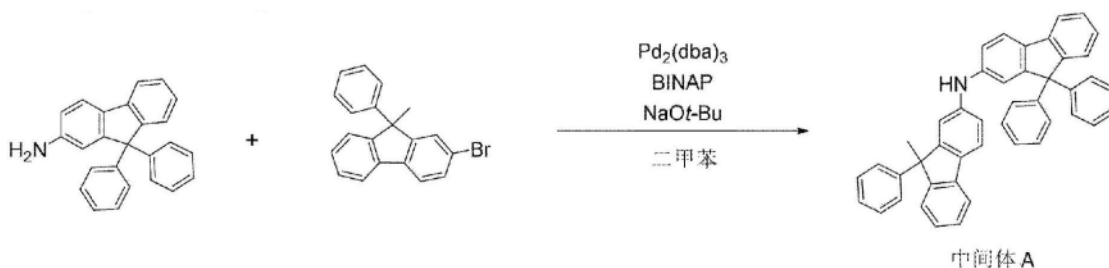
[1198]



[1199] 中间体合成例1:中间体A的合成

[1200] [化学式143]

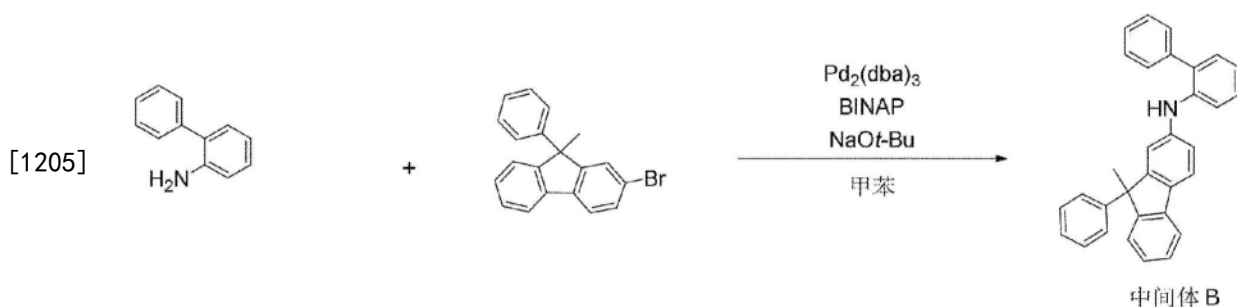
[1201]



[1202] 在氩气氛下,将2-氨基-9,9-二苯基芴29.2g (87.6mmol)、2-溴-9-甲基-9-苯基-9H-芴28.8g (85.9mmol)、三(二亚苄基丙酮)二钯(0) 1.57g (1.71mmol)、BINAP 2.14g (3.44mmol)、叔丁醇钠20.6g (214mmol)、二甲苯580mL的混合物在120℃搅拌5小时。将反应液冷却至室温后,进行减压浓缩。将所得到的残渣利用硅胶柱色谱和重结晶进行精制,得到了15.1g的作为白色固体的中间体A。产率为30%。

[1203] 中间体合成例2:中间体B的合成

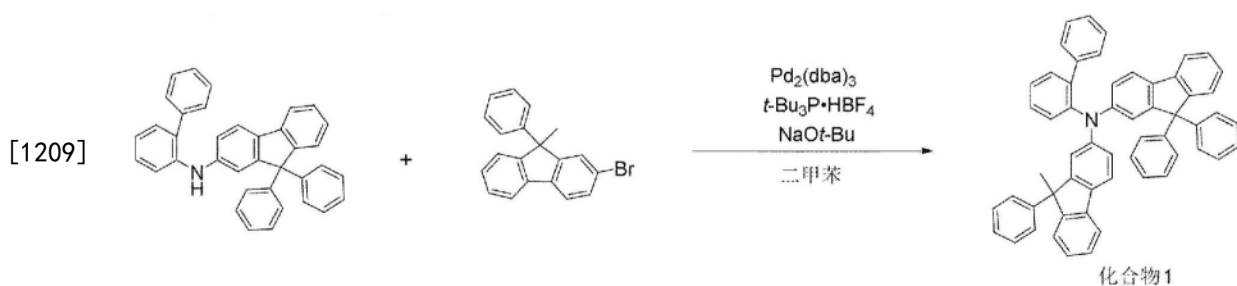
[1204] [化学式144]



[1206] 在氩气氛下,将2-氨基联苯6.77g (40.0mmol)、2-溴-9-甲基-9-苯基-9H-芴13.4g (40.0mmol)、三(二亚苄基丙酮)二钯(0)0.730g (0.797mmol)、BINAP 1.00g (1.61mmol)、叔丁醇钠4.23g (44.0mmol)、甲苯200mL的混合物在90℃搅拌7小时。将反应液冷却至室温后,进行减压浓缩。将所得到的残渣利用硅胶柱色谱进行精制,得到了16.6g的作为白色固体的中间体B。产率为97%。

[1207] 合成例1:化合物1的合成

[1208] [化学式145]

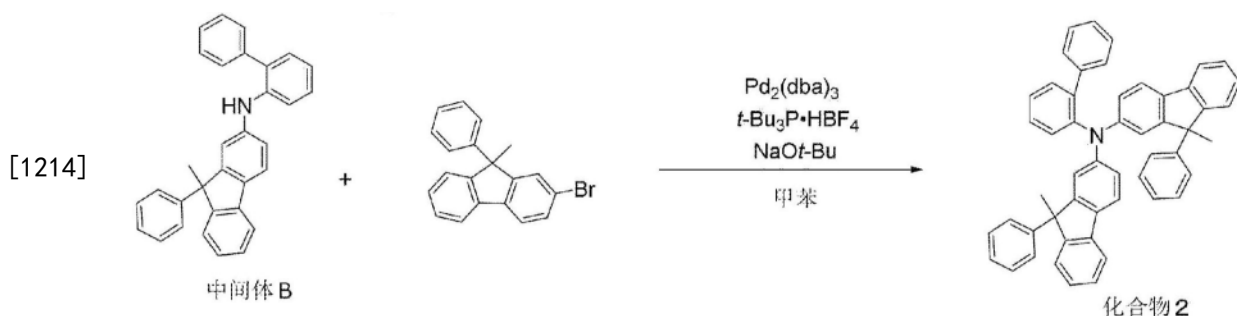


[1210] 在氩气氛下,将N-[1,1'-联苯]-2-基-9,9-二苯基-9H-芴-2-胺7.28g (15.0mmol)、2-溴-9-甲基-9-苯基-9H-芴6.03g (18.0mmol)、三(二亚苄基丙酮)二钯(0)0.275g (0.30mmol)、三叔丁基磷四氟硼酸盐0.348g (1.20mmol)、叔丁醇钠2.02g (21.0mmol)、二甲苯150mL的混合物在120℃搅拌7小时。将反应液冷却至室温后,进行减压浓缩。将所得到的残渣利用硅胶柱色谱和重结晶进行精制,得到了5.20g的白色固体。产率为47%。

[1211] 所得到的物质进行质谱分析的结果,为化合物1,相对于分子量739.96, $m/e=740$ 。

[1212] 合成例2:化合物2的合成

[1213] [化学式146]

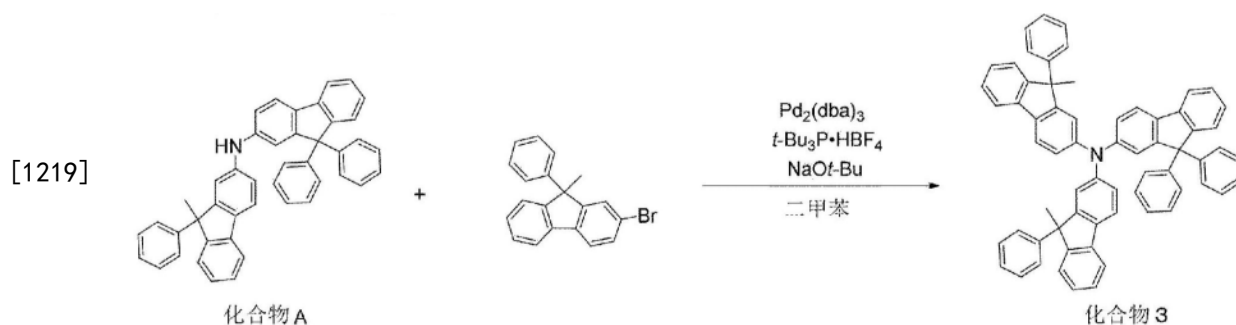


[1215] 在合成例1中,代替N-[1,1'-联苯]-2-基-9,9-二苯基-9H-芴-2-胺而使用中间体B,代替二甲苯而使用甲苯,通过同样的操作得到了白色固体。产率为46%。

[1216] 所得到的物质进行质谱分析的结果(相对于分子量677.89, $m/e=678$),为化合物2。

[1217] 合成例3:化合物3的合成

[1218] [化学式147]

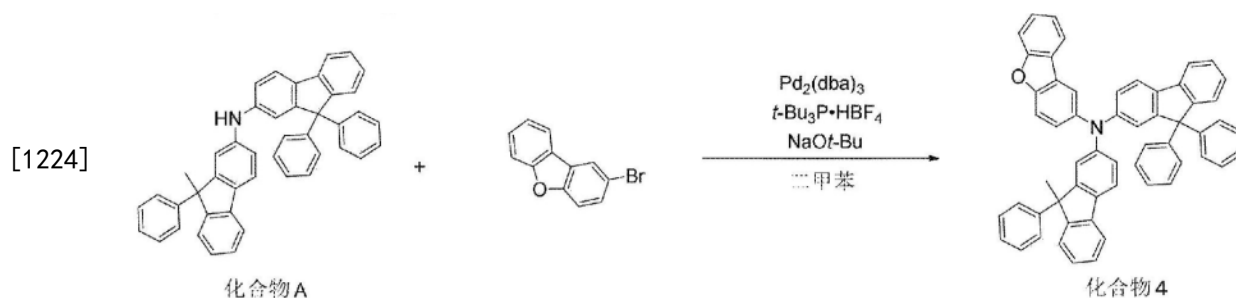


[1220] 在合成例1中,代替N-[1,1'-联苯]-2-基-9,9-二苯基-9H-芴-2-胺而使用中间体A,通过同样的操作得到了白色固体。产率为44%。

[1221] 所得到的物质进行质谱分析的结果(相对于分子量842.10, $m/e=842$),为化合物3。

[1222] 合成例4:化合物4的合成

[1223] [化学式148]

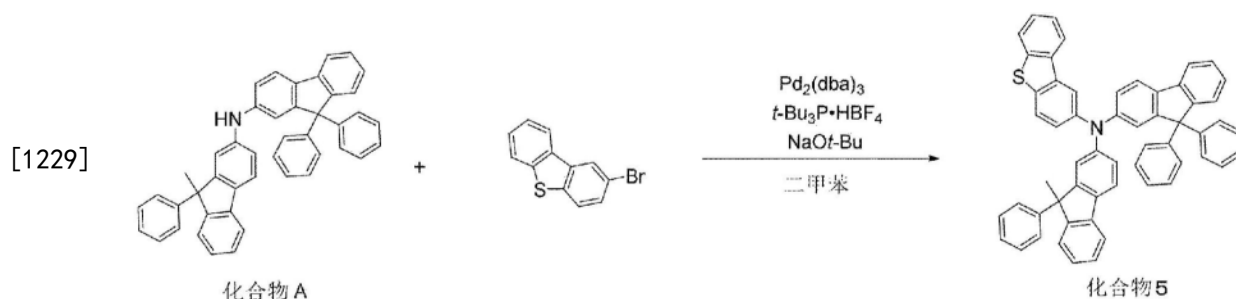


[1225] 在合成例1中,代替N-[1,1'-联苯]-2-基-9,9-二苯基-9H-芴-2-胺而使用中间体A,代替2-溴-9-甲基-9-苯基-9H-芴而使用2-溴二苯并呋喃,通过同样的操作得到了白色固体。产率为39%。

[1226] 所得到的物质进行质谱分析的结果(相对于分子量753.95, $m/e=754$),为化合物4。

[1227] 合成例5:化合物5的合成

[1228] [化学式149]



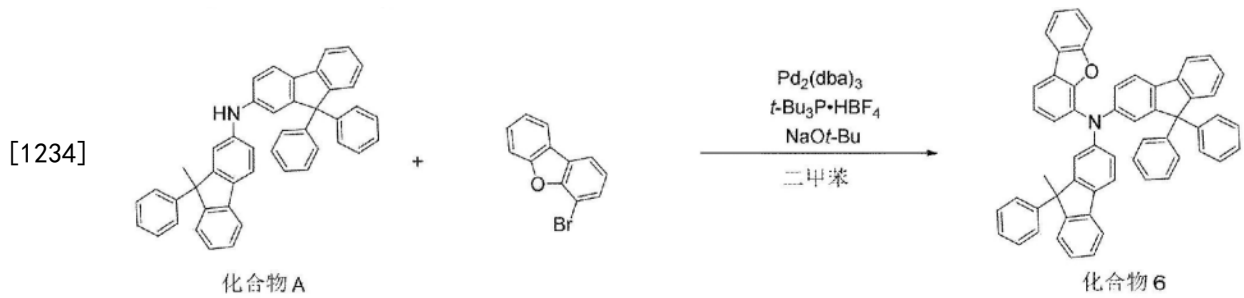
[1230] 在合成例1中,代替N-[1,1'-联苯]-2-基-9,9-二苯基-9H-芴-2-胺而使用中间体A,代替2-溴-9-甲基-9-苯基-9H-芴而使用2-溴二苯并噻吩,通过同样的操作得到了白色固体。产率为43%。

[1231] 所得到的物质进行质谱分析的结果(相对于分子量770.01, $m/e=770$),为化合物

5。

[1232] 合成例6:化合物6的合成

[1233] [化学式150]



[1235] 在合成例1中,代替N-[1,1'-联苯]-2-基-9,9-二苯基-9H-芴-2-胺而使用中间体A,代替2-溴-9-甲基-9-苯基-9H-芴而使用4-溴二苯并呋喃,通过同样的操作得到了白色固体。产率为48%。

[1236] 所得到的物质进行质谱分析的结果(相对于分子量753.95, $m/e=754$),为化合物6。

[1237] 符号说明

- | | | |
|--------|----------|---------------|
| [1238] | 1、11、12 | 有机EL元件 |
| [1239] | 2 | 基板 |
| [1240] | 3 | 阳极 |
| [1241] | 4 | 阴极 |
| [1242] | 5 | 发光层 |
| [1243] | 6 | 空穴传输区域(空穴传输层) |
| [1244] | 6a | 空穴注入层 |
| [1245] | 6b | 第1空穴传输层 |
| [1246] | 6c | 第2空穴传输层 |
| [1247] | 6d | 第3空穴传输层 |
| [1248] | 7 | 电子传输区域(电子传输层) |
| [1249] | 7a | 第1电子传输层 |
| [1250] | 7b | 第2电子传输层 |
| [1251] | 10、20、30 | 发光单元 |

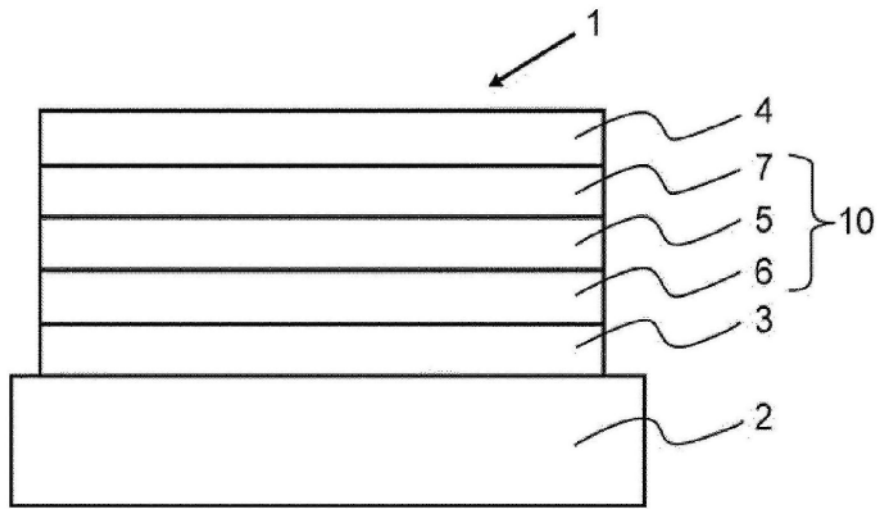


图1

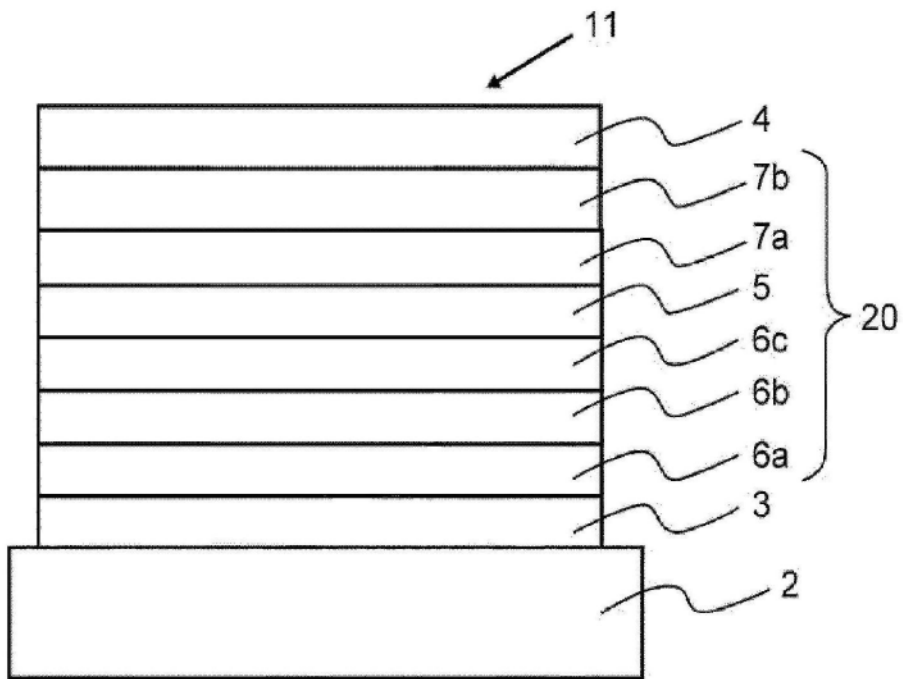


图2

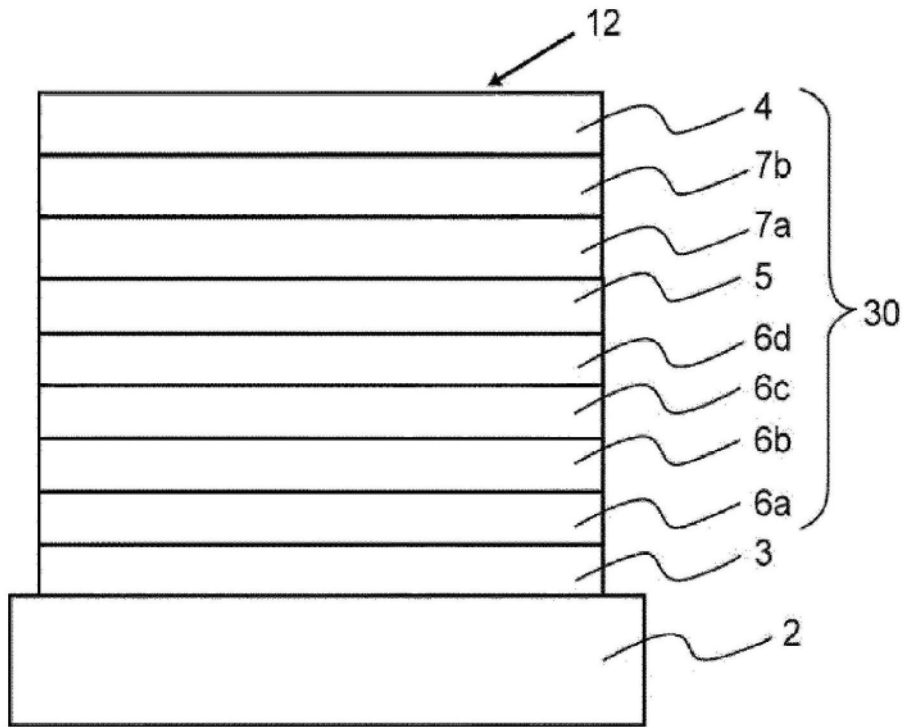


图3