



(19)中華民國智慧財產局

(12)發明說明書公告本

(11)證書號數：TW I884357 B

(45)公告日：中華民國 114 (2025) 年 05 月 21 日

(21)申請案號：111104273

(22)申請日：中華民國 111 (2022) 年 02 月 07 日

(51)Int. Cl. : C07D487/06 (2006.01)

C09K11/06 (2006.01)

H10K50/00 (2023.01)

(30)優先權：2021/02/04 世界智慧財產權組織 PCT/JP2021/004053

2021/07/28 日本 2021-123021

(71)申請人：日商九州有機光材股份有限公司(日本) KYULUX, INC. (JP)

日本

(72)發明人：巴里札巴利 烏瑪瑪赫舒 BALIJAPALLI, UMAMAHESH (IN)；鈴木善丈 SUZUKI, YOSHITAKE (JP)；山根侑 YAMANE, YU (JP)；伊吾热衣木江赛达力木 IBRAYIM, SAIDALIMU (CN)；山下正貴 YAMASHITA, MASATAKA (JP)；崔伸炯 CHOI, SHINHYUNG (KR)；比嘉琢哉 HIGA, TAKUYA (JP)

(74)代理人：陳長文

(56)參考文獻：

TW 201544507A

CN 109776535A

JP 2005-281136A

審查人員：陳建安

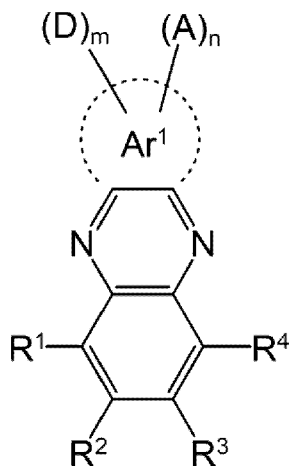
申請專利範圍項數：15 項 圖式數：1 共 97 頁

(54)名稱

化合物、發光材料及有機發光元件

(57)摘要

下述通式所表示之化合物具有優異之發光特性。Ar¹ 表示苯環、萘環、菲環等；D 表示 5H-吡啶并[3,2,1-de]喹啉-5-基等；A 表示氰基、苯基、嘧啶基、三唑基等；m 表示 1 或 2；n 表示 0 ~ 2；R¹ ~ R⁴ 表示 H、芳基、氰基等。



指定代表圖：

符號簡單說明：

1:基材

2:陽極

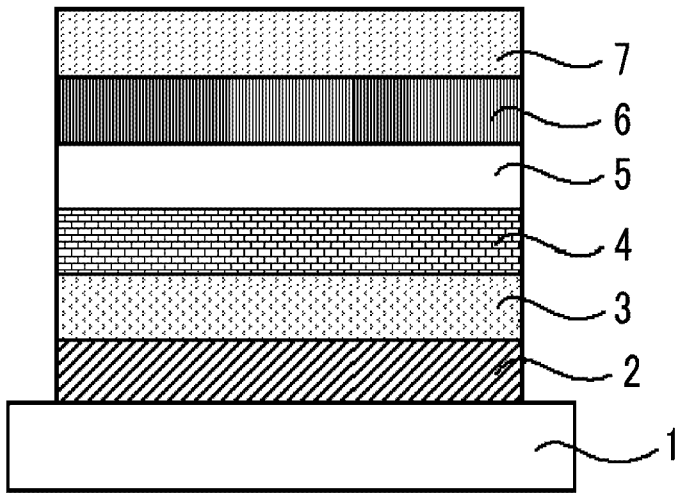
3:空穴注入層

4:空穴傳輸層

5:發光層

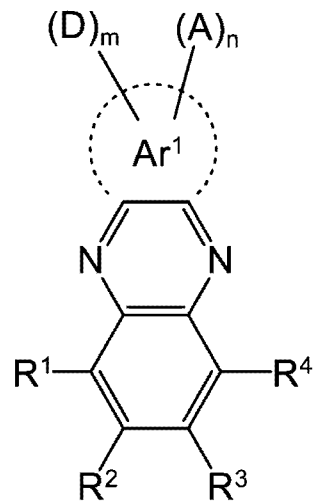
6:電子傳輸層

7:陰極



【圖1】

特徵化學式：





I884357

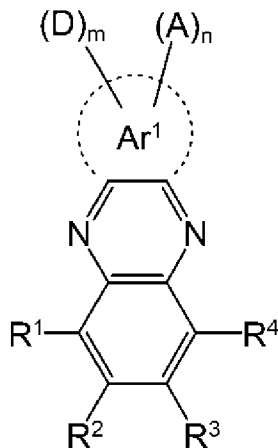
【發明摘要】

【中文發明名稱】

化合物、發光材料及有機發光元件

【中文】

下述通式所表示之化合物具有優異之發光特性。Ar¹表示苯環、萘環、菲環等；D表示5H-吡啶并[3,2,1-de]吡啶-5-基等；A表示氰基、苯基、嘧啶基、三唑基等；m表示1或2；n表示0~2；R¹~R⁴表示H、芳基、氰基等。



【指定代表圖】

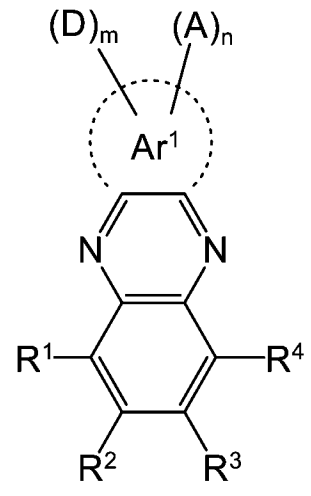
圖1

【代表圖之符號簡單說明】

- 1: 基材
- 2: 陽極
- 3: 空穴注入層
- 4: 空穴傳輸層
- 5: 發光層
- 6: 電子傳輸層

7:陰極

【特徵化學式】



【發明說明書】

【中文發明名稱】

化合物、發光材料及有機發光元件

【技術領域】

【0001】本發明係有關一種具有良好的發光特性之化合物。又，本發明還有關一種使用了該化合物之發光材料及有機發光元件。

【先前技術】

【0002】有機發光元件為使用了有機材料之發光元件，能夠藉由塗佈來製造，並且由於不使用稀有元素，因此近年來備受關注。其中，由於有機電致發光元件（有機EL元件）輻射自發光且不需要背光，因此具有能夠製成輕量且柔性的元件等優點。又，亦具有響應性快且可見性高等特徵，並且作為下一代光源而備受期待。因此，在積極地進行與對以有機電致發光元件為代表之有機發光元件有用的材料的開發相關之研究。尤其，在積極地進行與發光材料相關之研究（例如，非專利文獻1）。

[先前技術文獻]

[專利文獻]

【0003】[非專利文獻1]Chem. Soc. Rev., 2017,46,915

【發明內容】

[發明所欲解決之問題]

【0004】另一方面，關於有機發光元件的發光特性，仍有改善的空間，需要進一步提高發光特性。

因此，本發明人等為了開發有助於提高有機發光元件的發光特性之新穎化合物而進行了苦心探討。

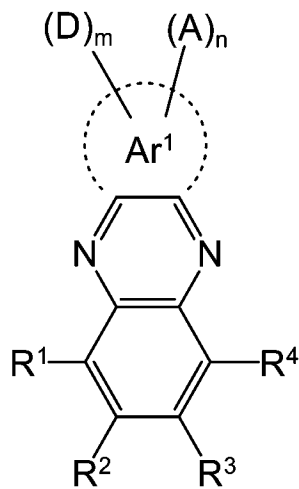
[解決問題之技術手段]

【0005】進行了苦心探討之結果，本發明人等發現了使具有特徵結構之基團與特定的骨架鍵結而獲得之化合物為對發光元件有用的化合物。本發明為依據該種見解而提出者，並且具有以下結構。

【0006】[1]一種化合物，其係由下述通式（1）表示。

通式（1）

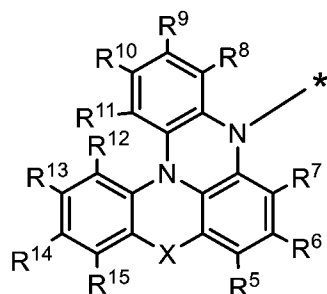
[化學式1]



[在通式（1）中，Ar¹表示環狀結構，並且表示苯環、萘環、蔥環或菲環。D表示下述通式（2）所表示之基團。A表示選自包括氰基、苯基、嘧啶基、三唑基及烷基之群組中的一個基團或兩個以上組合而獲得之基團（其中，除了取代烷基以外）。m為1或2，n為0、1或2。在m為2時，兩個D可以相同亦可以不同。在n為2時，兩個A可以相同亦可以不同。R¹~R⁴分別獨立地表示氫原子、氬原子或選自包括烷基、芳基、雜芳基及氰基之群組中的一個基團或兩個以上組合而獲得之基團。R¹和R²、R³和R⁴可以彼此鍵結而形成選自包括苯環、萘環及吡啶環之群組中的環狀結構，所形成之環狀結構可以經選自包括烷基、芳基、雜芳基及氰基之群組中的一個基團或兩個以上組合而獲得之基團取代。]

通式 (2)

[化學式2]

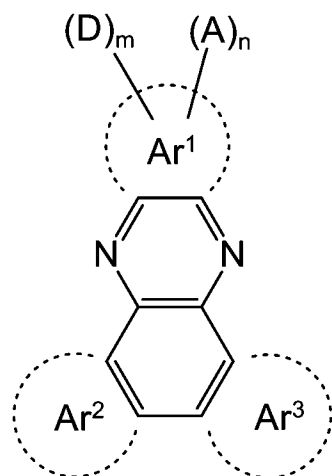


[在通式 (2) 中， $R^5 \sim R^{15}$ 分別獨立地表示氫原子、氬原子或取代基。 R^5 和 R^6 、 R^6 和 R^7 、 R^8 和 R^9 、 R^9 和 R^{10} 、 R^{10} 和 R^{11} 、 R^{11} 和 R^{12} 、 R^{12} 和 R^{13} 、 R^{13} 和 R^{14} 、 R^{14} 和 R^{15} 可以彼此鍵結而形成環狀結構。 X 表示單鍵、氧原子或硫原子。 $*$ 表示鍵結位置。]

[2]如[1]所述之化合物，其係由下述通式 (3) 表示。

通式 (3)

[化學式3]

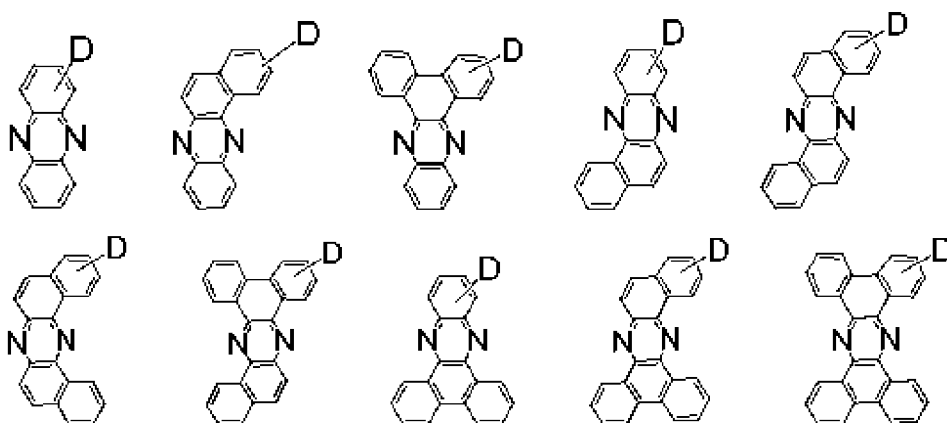


[在通式 (3) 中， Ar^1 表示環狀結構，並且表示苯環、萘環、蔥環或菲環。 D 表示前述通式 (2) 所表示之基團。 A 表示選自包括氰基、苯基、嘧啶基、三唑基及烷基之群組中的一個基團或兩個以上組合而獲得之基團 (其中，除了取代烷基以外)。 m 為 1 或 2， n 為 0、1 或 2。在 m 為 2 時，兩

個D可以相同亦可以不同。在n為2時，兩個A可以相同亦可以不同。Ar²、Ar³可以分別獨立地形成選自包括苯環、萘環及吡啶環之群組中的環狀結構，所形成之環狀結構可以經選自包括烷基、芳基、雜芳基及氰基之群組中的一個基團或兩個以上組合而獲得之基團取代。]

[3]如[1]所述之化合物，其係具有下述中的任一個骨架。

[化學式4]

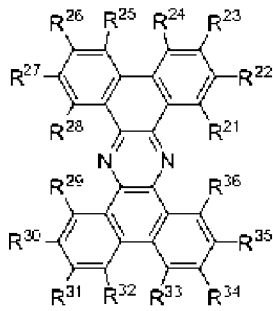


[上述各骨架可以在通式(1)的範圍內具有取代基，但是環與骨架不會進一步縮合。]

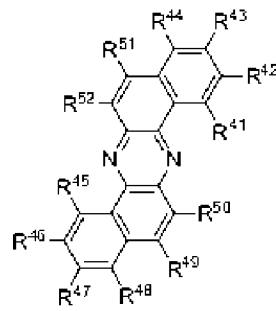
[4]如[1]所述之化合物，其係由下述通式(4a)~(4f)中的任一個表示。

[化學式5]

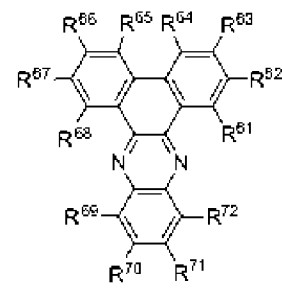
通式 (4a)



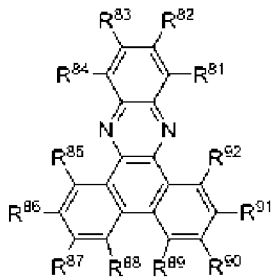
通式 (4b)



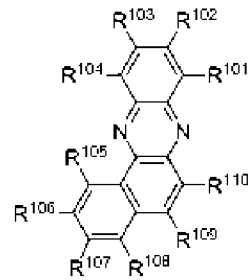
通式 (4c)



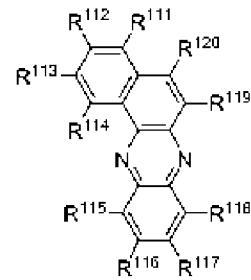
通式 (4d)



通式 (4e)



通式 (4f)



[在通式 (4a) ~ (4f) 中， $R^{21} \sim R^{28}$ 、 $R^{41} \sim R^{44}$ 、 R^{51} 、 R^{52} 、 $R^{61} \sim R^{68}$ 、 $R^{81} \sim R^{84}$ 、 $R^{101} \sim R^{104}$ 、 $R^{111} \sim R^{114}$ 、 R^{119} 、 R^{120} 分別獨立地表示氫原子、氘原子、D 或 A。其中， $R^{21} \sim R^{28}$ 中的 1 個或 2 個為 D 且 0 ~ 2 個為 A， $R^{41} \sim R^{44}$ 、 R^{51} 及 R^{52} 中的 1 個或 2 個為 D 且 0 ~ 2 個為 A， $R^{61} \sim R^{68}$ 中的 1 個或 2 個為 D 且 0 ~ 2 個為 A， $R^{81} \sim R^{84}$ 中的 1 個或 2 個為 D 且 0 ~ 2 個為 A， $R^{101} \sim R^{104}$ 中的 1 個或 2 個為 D 且 0 ~ 2 個為 A， $R^{111} \sim R^{114}$ 、 R^{119} 及 R^{120} 中的 1 個或 2 個為 D 且 0 ~ 2 個為 A。 $R^{29} \sim R^{36}$ 、 $R^{45} \sim R^{50}$ 、 $R^{69} \sim R^{72}$ 、 $R^{85} \sim R^{92}$ 、 $R^{105} \sim R^{110}$ 、 $R^{115} \sim R^{118}$ 分別獨立地表示氫原子、氘原子或選自包括烷基、芳基及氰基之群組中的一個基團或兩個以上組合而獲得之基團。]

[5] 如 [1] 至 [4] 之任一項所述之化合物，其中， n 為 0。

[6] 一種發光材料，其係由 [1] 至 [5] 之任一項所述之化合物組成。

[7] 一種膜，其係包含 [1] 至 [5] 之任一項所述之化合物。

[8] 一種有機半導體元件，其係包含 [1] 至 [5] 之任一項所述之化合物。

[9]一種有機發光元件，其係包含[1]至[5]之任一項所述之化合物。

[10]如[9]所述之有機發光元件，其中，前述元件具有包含前述化合物之層，前述層還包含主體材料。

[11]如[10]所述之有機發光元件，其中，包含前述化合物之層除了前述主體材料以外還包含延遲螢光材料，前述延遲螢光材料的最低激發單重態能量低於前述主體材料且高於前述化合物。

[12]如[9]所述之有機發光元件，其中，前述元件具有包含前述化合物之層，前述層還包含具有與前述化合物不同之結構之發光材料。

[13]如[9]至[11]之任一項所述之有機發光元件，其中，前述元件中所包含之材料中來自前述化合物的發光量最大。

[14]如[12]所述之有機發光元件，其中，來自前述發光材料的發光量多於來自前述化合物的發光量。

[15]如[9]至[14]之任一項所述之有機發光元件，其係輻射延遲螢光。

[發明效果]

【0007】 本發明的化合物為對發光元件有用的化合物。本發明的化合物能夠用作發光材料，並且能夠使用本發明的化合物來製造有機發光元件。使用了本發明的化合物之有機發光元件的發光效率（尤其，在高濃度下的發光效率）、元件耐久性、色純度的提高等中的至少一個以上的特性優異。

【圖式簡單說明】

【0008】 圖1係表示有機電致發光元件的層結構例之概略剖視圖。

【實施方式】

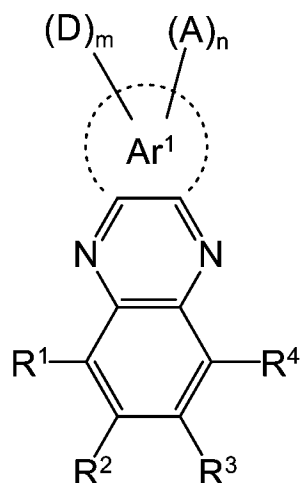
【0009】在以下中，對本發明的內容進行詳細說明。以下所記載之構成要件的說明有時依據本發明的代表性實施態樣或具體例而進行的，但是本發明並不限定於該種實施態樣或具體例。再者，在本說明書中，使用“~”所表示之數值範圍表示包含“~”的前後中所記載之數值作為下限值及上限值之範圍。又，存在於本發明中所使用之化合物的分子內之氫原子的一部分或全部能夠取代為氘原子（ ^2H 、氘D）。在本說明書的化學結構式中，氫原子表示為H或者省略其表示。例如，在省略表示與苯環的環骨架構成碳原子鍵結之原子時，設為在省略表示之部位H與環骨架構成碳原子鍵結者。在本說明書中，“取代基”這一術語表示除了氫原子及氘原子以外的原子或原子團。另一方面，“經取代或未經取代的”這一術語表示氫原子可以經氘原子或取代基取代。

【0010】[通式（1）所表示之化合物]

本發明的化合物為下述通式（1）所表示之化合物。

【0011】[化學式6]

通式（1）



【0012】在通式（1）中，Ar¹表示環狀結構，並且表示苯環、萘環、蔥環或菲環。例如，在Ar¹表示苯環之情況下，成為苯環與吡啶環縮

合而成之喹啉結構。在 Ar^1 表示萘環時，可以使1,2-萘環、2,3-萘環中的任一個與吡啶環縮合。在1,2-萘環與吡啶環縮合時，萘環的1位和2位的碳原子分別與構成吡啶環之2位和3位的碳原子共享。在 Ar^1 表示蔥環時，2,3-蔥環與吡啶環縮合。在 Ar^1 表示菲環時，可以使1,2-菲環、2,3-菲環、3,4-菲環、9,10-菲環中的任一個與吡啶環縮合。在本發明的較佳態樣中，苯環、2,3-萘環、9,10-菲環中的任一個與吡啶環縮合。在本發明的更佳的一態樣中，2,3-萘環、9,10-菲環中的任一個與吡啶環縮合。例如，可以使2,3-萘環縮合，亦可以使9,10-菲環縮合。

【0013】 在 Ar^1 所表示之環狀結構中， m 個D和 n 個A作為取代基與環骨架鍵結。在 Ar^1 表示萘環、蔥環或菲環時，D和A可以與構成該等環之任一個苯環鍵結。又， m 個D和 n 個A僅與任一個苯環鍵結，並且亦可以使D和A均不與其他苯環鍵結。或者，可以使 m 個D和 n 個A中的一部分與一個苯環鍵結而其餘部分與另一個苯環鍵結。在本發明的較佳的一態樣中， n 為0， m 個D僅與一個苯環鍵結。在本發明的另一較佳的一態樣中， n 為0， m 個D的一部分與一個苯環鍵結而其餘部分與另一個苯環鍵結。在 Ar^1 表示萘環、蔥環或菲環時，在本發明的較佳的一態樣中，D和A均不與和吡啶環直接縮合之苯環鍵結而使 m 個D和 n 個A僅與其餘部分的苯環（亦即，不和吡啶環直接縮合的苯環）鍵結。在 Ar^1 表示萘環、蔥環或菲環時，在本發明的較佳的一態樣中， n 為0，D不與和吡啶環直接縮合之苯環鍵結而使 m 個D僅與其餘部分的苯環（亦即，不和吡啶環直接縮合的苯環）鍵結。

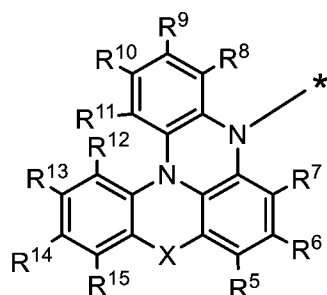
【0014】 在通式（1）中， m 為1或2， n 為0、1或2。在 m 為2時，兩個D可以相同亦可以不同。又，兩個D可以與相同的苯環鍵結，亦可以與不

同之苯環鍵結。在 n 為2時，兩個A可以相同亦可以不同。又，兩個A可以與相同的苯環鍵結，亦可以與不同之苯環鍵結。在本發明的較佳的一態樣中， n 為0。例如， m 為1， n 為0。例如， m 為2， n 為0。在 Ar^1 表示萘環、蔥環或菲環且 n 為1或2時，在本發明的一態樣中，A不與鍵結有D之苯環鍵結，D不與鍵結有A之苯環鍵結。

【0015】在通式（1）中，D表示下述通式（2）所表示之基團。

通式（2）

[化學式7]



【0016】在通式（2）中，X表示單鍵、氧原子或硫原子。在本發明的較佳的一態樣中，X為單鍵。在本發明的較佳的一態樣中，X為氧原子。X可以為氧原子或硫原子。

在通式（2）中，*表示鍵結位置。

在通式（2）中， $R^5 \sim R^{15}$ 分別獨立地表示氫原子、氬原子或取代基。關於取代基，例如可以從取代基組A進行選擇，亦可以從取代基組B進行選擇，亦可以從取代基組C進行選擇，亦可以從取代基組D進行選擇，亦可以從取代基組E進行選擇。在本發明的較佳的一態樣中，取代基表示選自包括烷基（例如，碳數1~20）、芳基（例如，碳數6~22）及氰基之群組中的一個基團或兩個以上組合而獲得之基團。例如，取代基可以為氰基或可以選自包括氰基及烷基之群組中的一個基團或兩個以上組

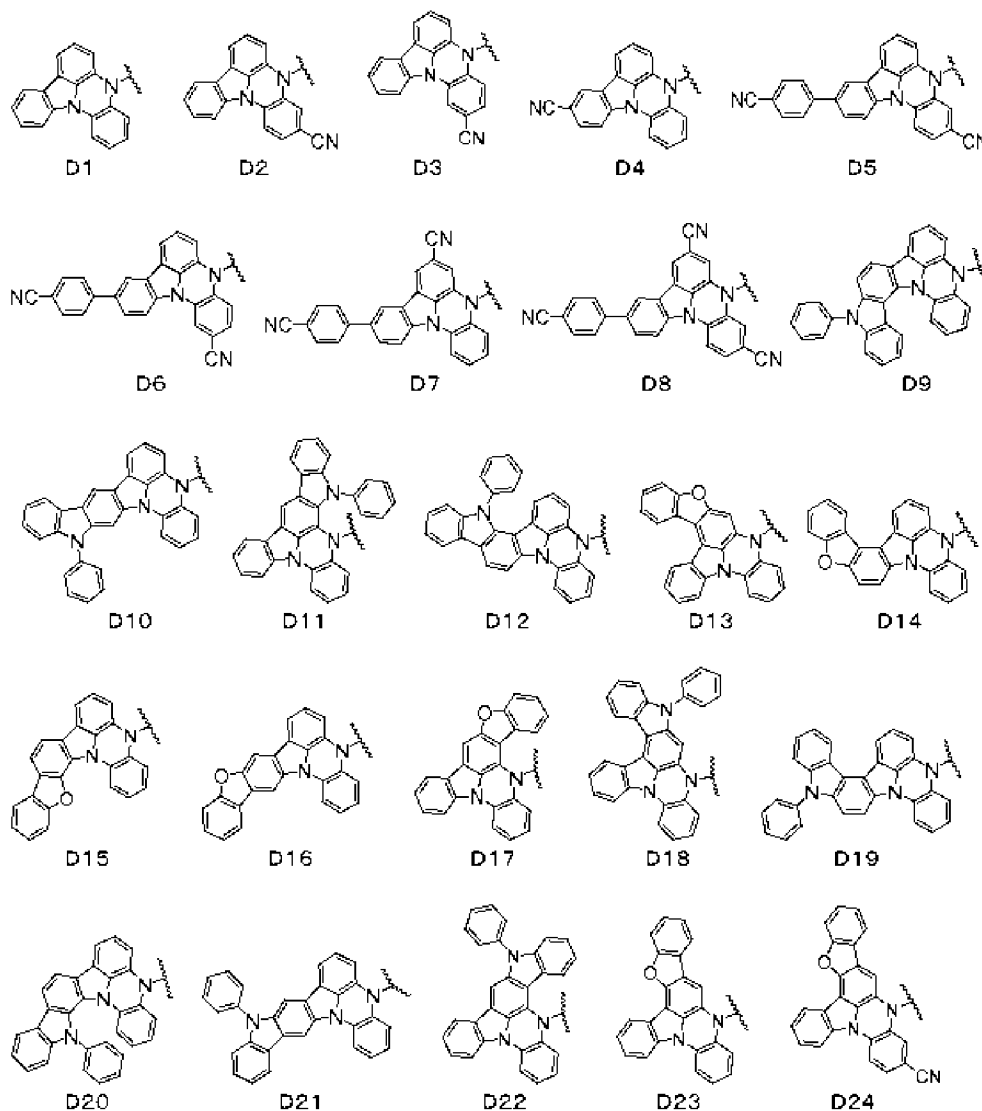
合而獲得之基團取代的芳基。在 $R^5 \sim R^{15}$ 中的兩個以上表示取代基時，該等兩個以上的取代基可以相同亦可以不同。 $R^5 \sim R^{15}$ 中的6~11個為氫原子或氬原子為較佳，例如可以8~11個為氫原子或氬原子。 $R^5 \sim R^{15}$ 可以全部為氫原子或氬原子。或者，可以8~10個為氫原子或氬原子。例如，可以8個為氫原子或氬原子，亦可以9個為氫原子或氬原子，亦可以10個為氫原子或氬原子。

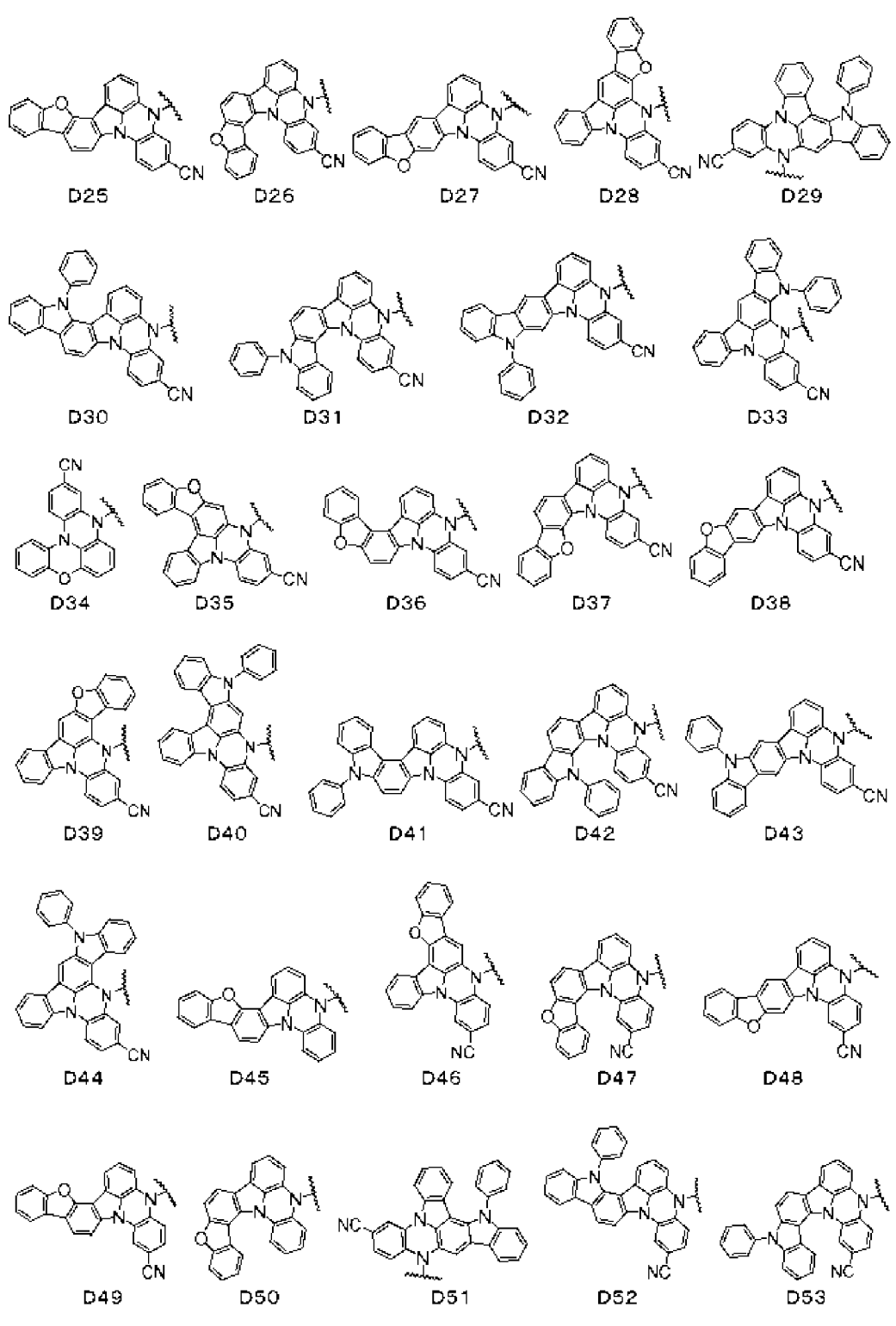
R^5 和 R^6 、 R^6 和 R^7 、 R^8 和 R^9 、 R^9 和 R^{10} 、 R^{10} 和 R^{11} 、 R^{11} 和 R^{12} 、 R^{12} 和 R^{13} 、 R^{13} 和 R^{14} 、 R^{14} 和 R^{15} 可以彼此鍵結而形成環狀結構。環狀結構可以為芳香環、雜芳香環、脂肪族烴環、脂肪族雜環中的任一個，並且亦可以為該等縮合而成之環。較佳為芳香環或雜芳香環。作為芳香環，可以舉出苯環。雜芳香環表示顯示包含雜原子作為環骨架構成原子之芳香性之環，5~7員環為較佳，例如能夠採用5員環者或者6員環者。在本發明的一態樣中，作為雜芳香環，能夠採用呋喃環、噻吩環、吡咯環。在本發明的較佳的一態樣中，環狀結構為經取代或未經取代的苯并呋喃的呋喃環、經取代或未經取代的苯并噻吩的噻吩環、經取代或未經取代的吲哚的吡咯環。在此所述之苯并呋喃、苯并噻吩、吲哚可以為未經取代，亦可以經從取代基組A進行選擇之取代基取代，亦可以經從取代基組B進行選擇之取代基取代，亦可以經從取代基組C進行選擇之取代基取代，亦可以經從取代基組D進行選擇之取代基取代，亦可以經從取代基組E進行選擇之取代基取代。經取代或未經取代的芳基與構成吲哚的吡咯環之氮原子鍵結為較佳，作為其取代基，例如可以舉出從取代基組A~E中的任一組進行選擇之取代基。在 R^5 和 R^6 、 R^6 和 R^7 、 R^8 和 R^9 、 R^9 和 R^{10} 、 R^{10} 和 R^{11} 、 R^{11} 和 R^{12} 、 R^{12} 和 R^{13} 、 R^{13} 和 R^{14} 、 R^{14} 和 R^{15} 中，0~2組彼此鍵結而形成環狀結構為較

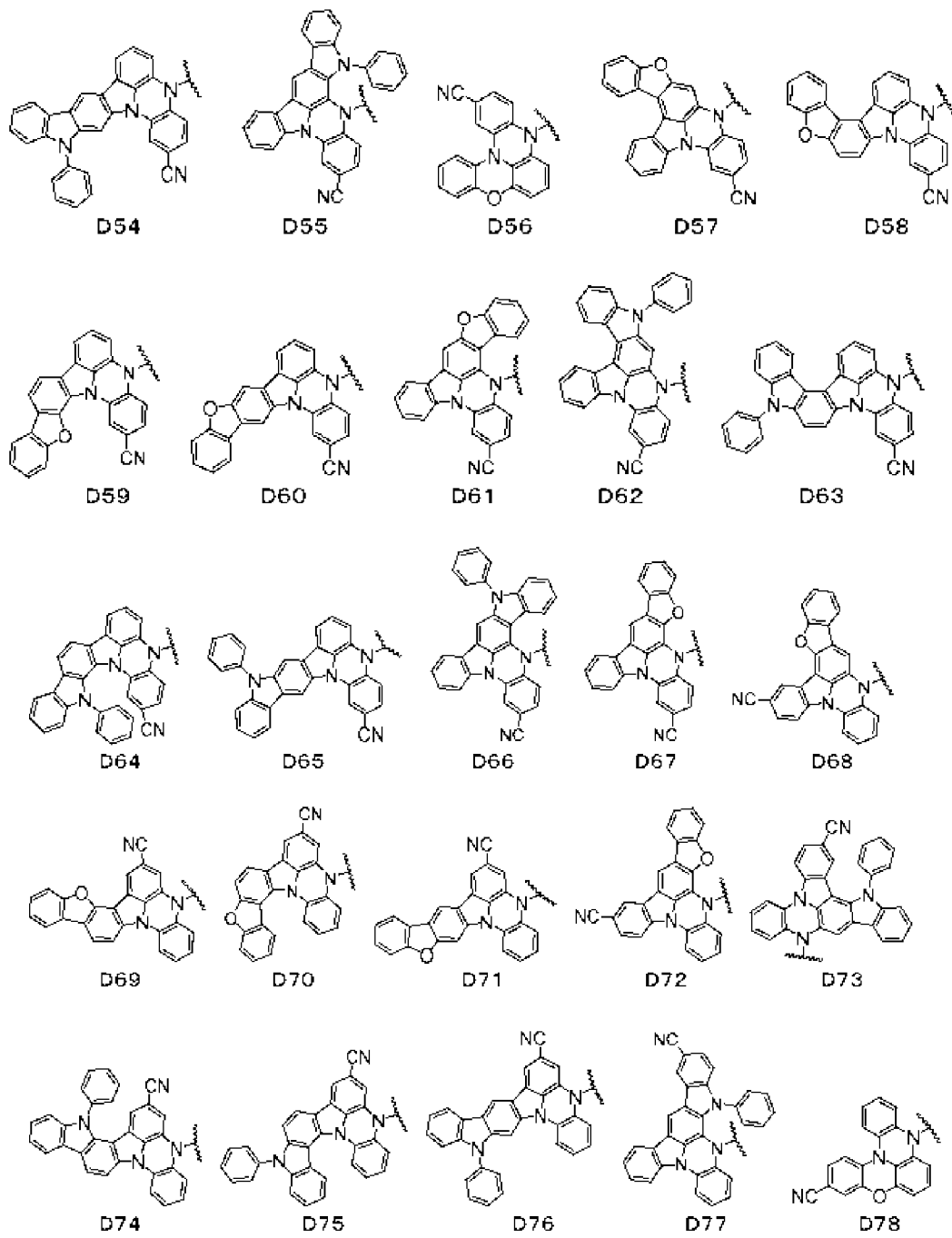
佳，0組或1組彼此鍵結而形成環狀結構為更佳。可以1組或2組彼此鍵結而形成環狀結構。又，可以僅1組彼此鍵結而形成環狀結構。又，彼此鍵結而形成環狀結構的可以為0組。

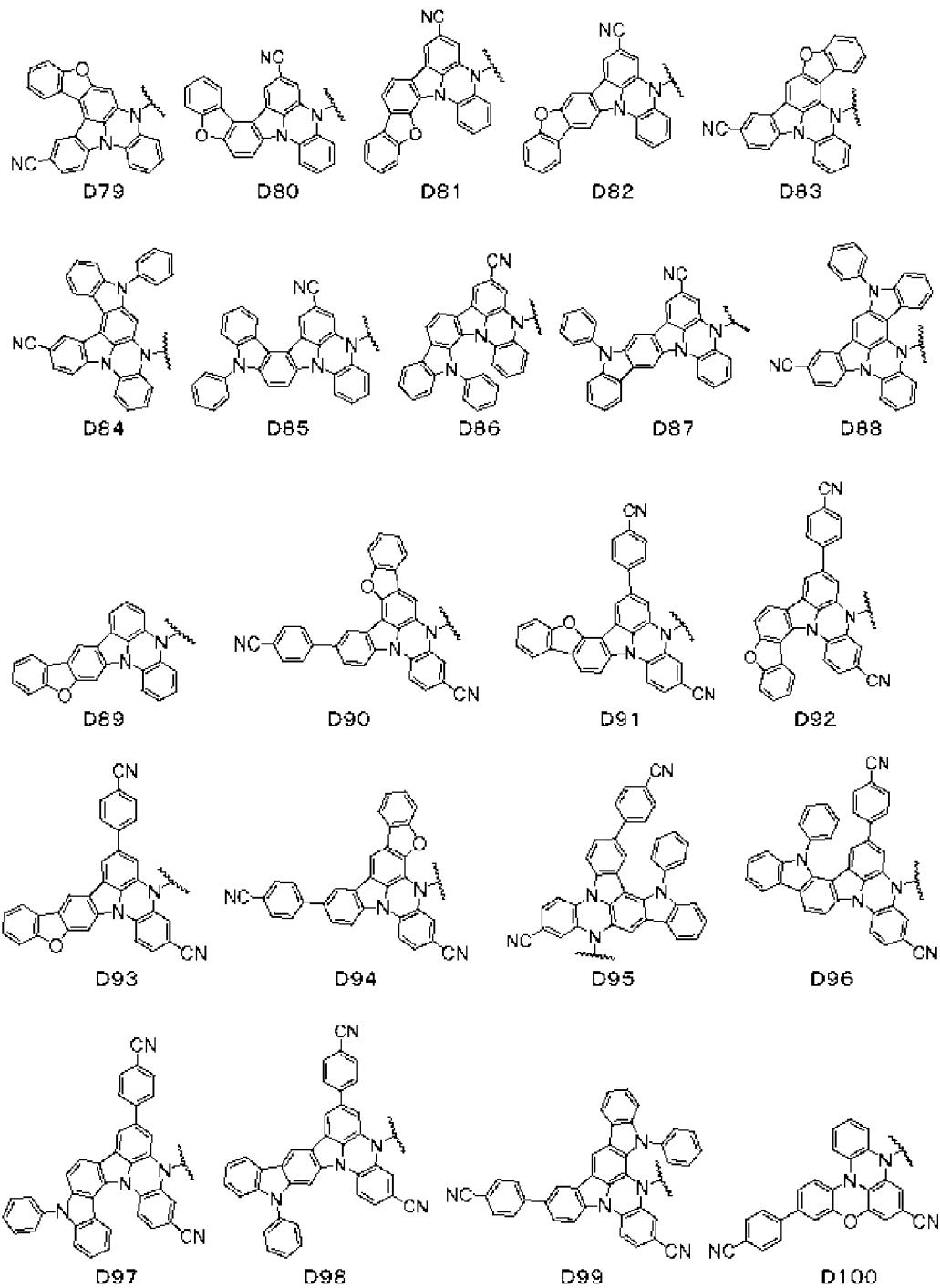
【0017】在以下中，示出在通式(1)中能夠採用之D的具體例。在通式(1)中能夠採用之D亦可以為包含下述結構之基團。例如，亦可以為經具有下述結構之基團取代之苯基或環(例如，苯環)與下述結構中的苯環縮合而成之基團。在本發明中能夠採用之D不被以下具體例做限定性地解釋。再者，在以下具體例中，波浪線表示鍵結位置。

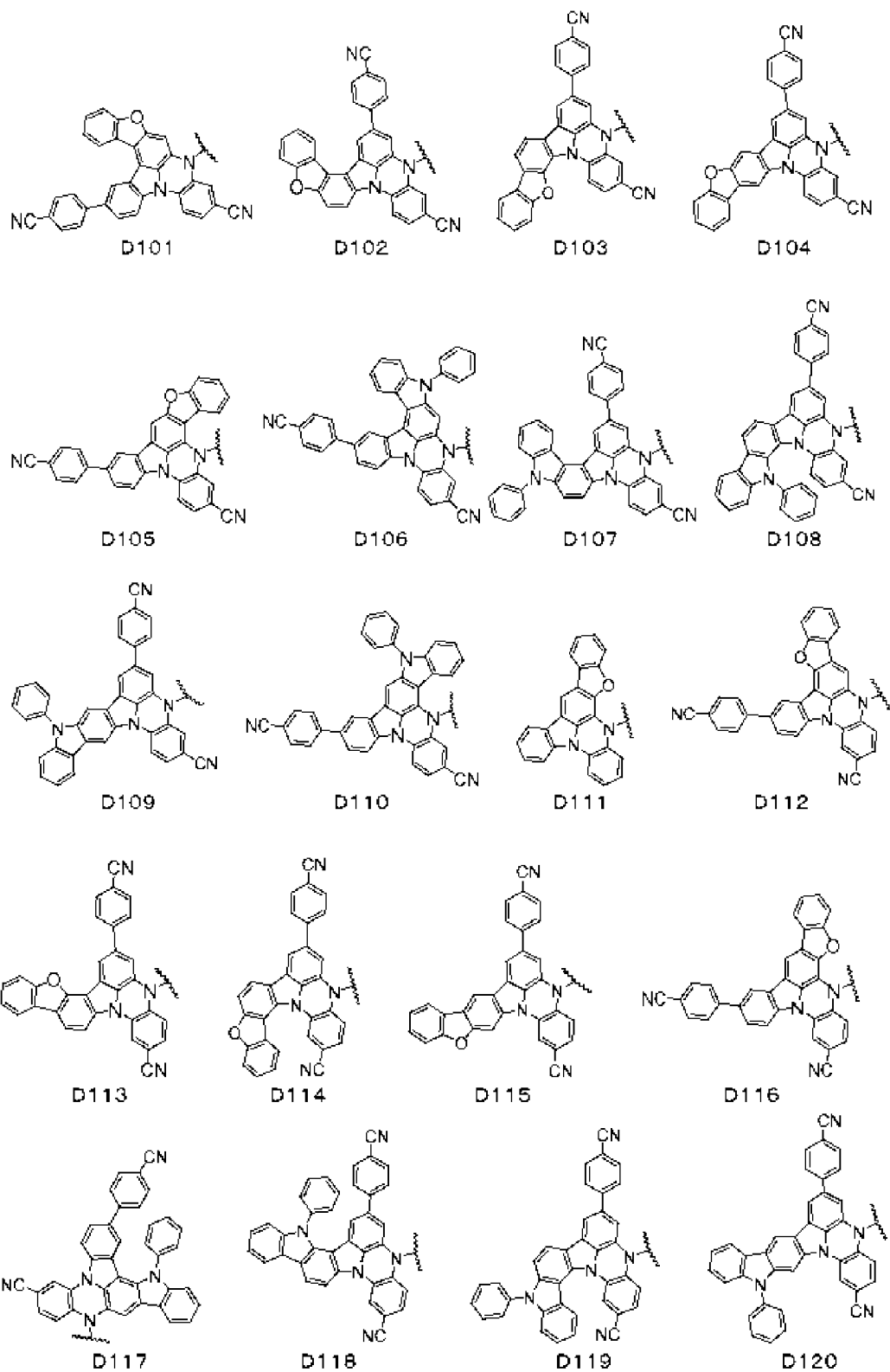
[化學式8]

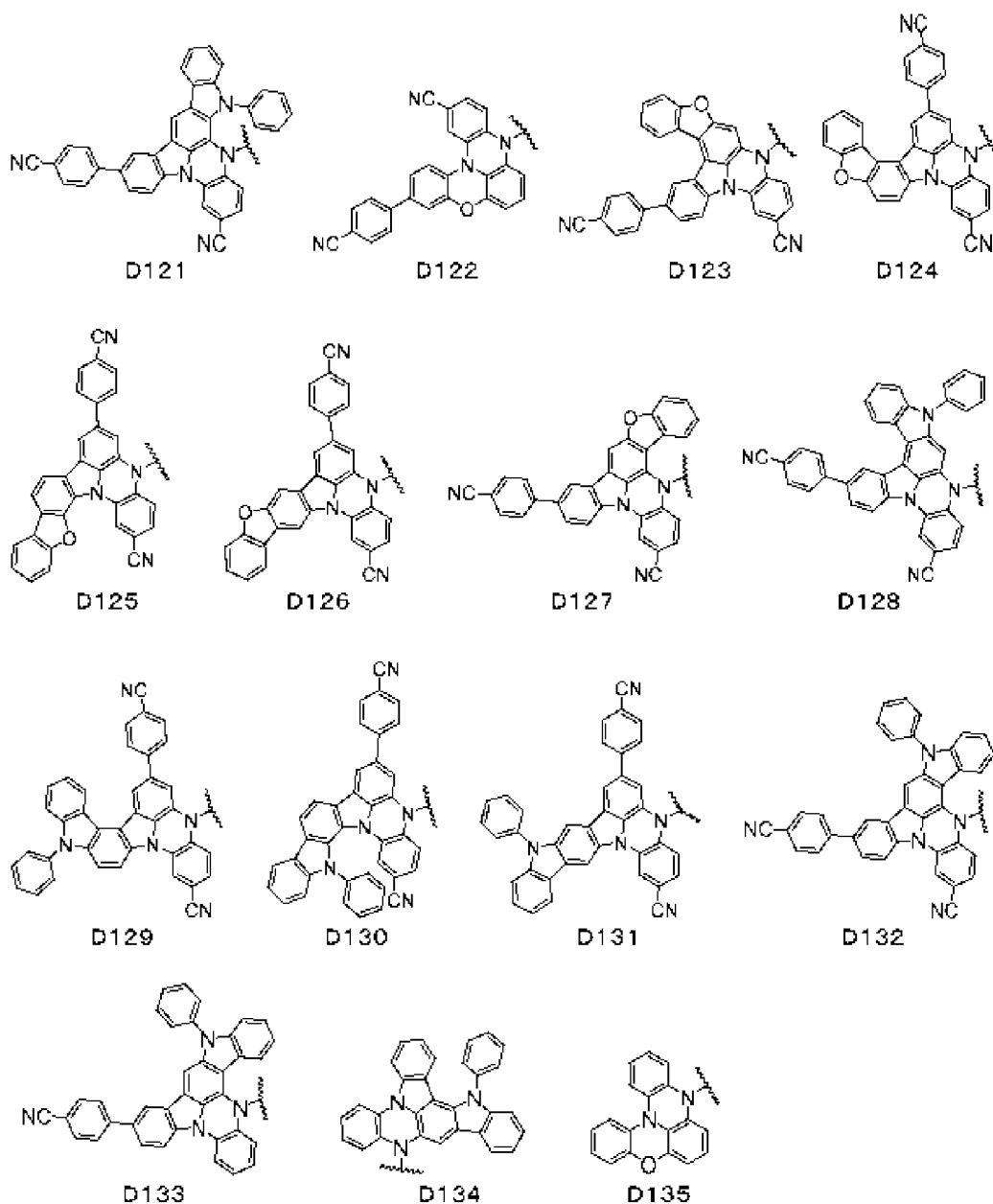












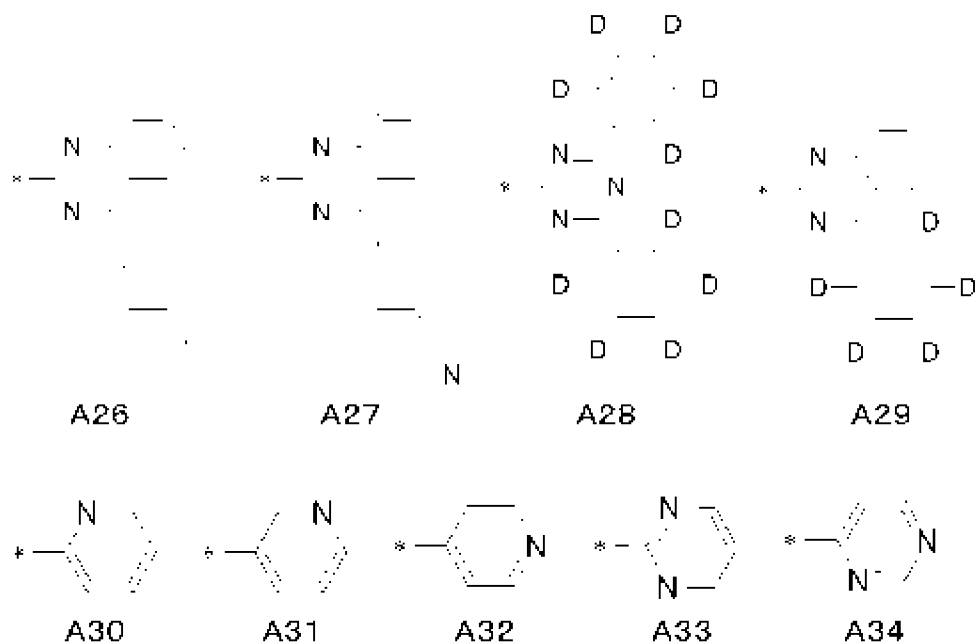
【0018】 在通式（1）中，A表示選自包括氰基、苯基、嘧啶基、三唑基及烷基之群組中的一個基團或兩個以上組合而獲得之基團（其中，除了取代烷基以外）。亦即，A為氰基、經取代或未經取代的苯基、經取代或未經取代的嘧啶基或者經取代或未經取代的三唑基，並且苯基、嘧啶基及三唑基的取代基為選自包括氰基、苯基、嘧啶基、三唑基及烷基之群組中的一個基團或兩個以上組合而獲得之基團，可以使苯環與苯基及嘧啶基縮環。

在本發明的較佳態樣中，A為氰基或經氰基取代之苯基。在本發明的一態樣中，A為經取代或未經取代的嘧啶基或者經取代或未經取代的三唑基，較佳為被經取代或未經取代的苯基取代之嘧啶基或者被經取代或未經取代的苯基取代之三唑基。在本發明的一態樣中，A為被經取代或未經取代的嘧啶基取代之苯基或者被經取代或未經取代的三唑基取代之苯基。

【0019】 在以下中，示出在通式（1）中能夠採用之A的具體例。在通式（1）中能夠採用之A亦可以為包含下述結構之基團。例如，亦可以為經具有下述結構之基團取代之苯基或環（例如，苯環）與下述結構中的苯環縮合而成之基團。在本發明中能夠採用之A不被以下具體例做限定性地解釋。再者，在以下具體例中，*表示鍵結位置。又，省略甲基。例如，A15為具有兩個4-甲基苯基之基團。

[化學式9]





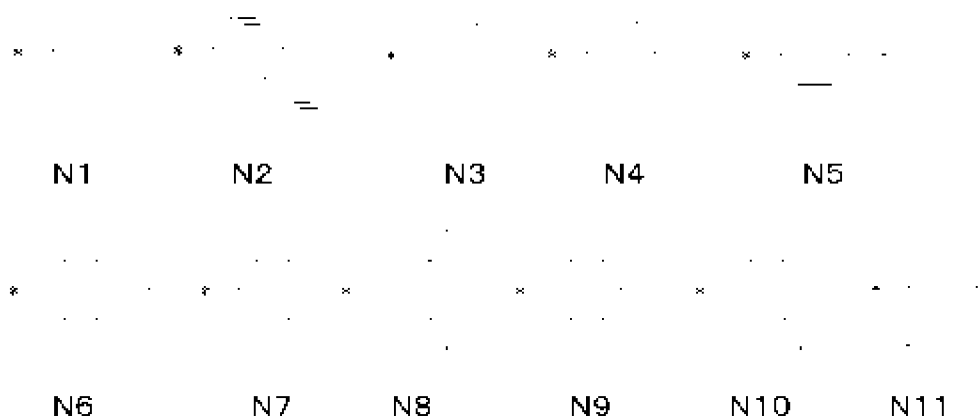
【0020】 $R^1 \sim R^4$ 分別獨立地表示氫原子、氬原子或選自包括烷基、芳基、雜芳基及氰基之群組中的一個基團或兩個以上組合而獲得之基團。亦即， $R^1 \sim R^4$ 分別獨立地為氫原子、氬原子、經取代或未經取代的烷基、經取代或未經取代的芳基、經取代或未經取代的雜芳基或者氰基，烷基、芳基及雜芳基的取代基為選自包括烷基、芳基、雜芳基及氰基之群組中的一個基團或兩個以上組合而獲得之基團。在本發明的一態樣中，取代基為可以經芳基取代的烷基或可以經烷基取代的芳基。在本發明的一態樣中，取代基為氰基或經氰基取代之芳基或雜芳基。在 $R^1 \sim R^4$ 中的兩個以上為取代基時，該等取代基可以相同亦可以不同。 $R^1 \sim R^4$ 可以全部為氫原子或氬原子。

在本發明的較佳的一態樣中， $R^1 \sim R^4$ 分別獨立地為氫原子、氬原子或可以經烷基、氰基取代的芳基或吡啶基，較佳為氫原子、氬原子或可以經烷基、氰基取代的苯基或吡啶基。例如，可以選擇氫原子、氬原子、烷基苯基、氰基苯基、苯基或吡啶基，或者例如可以選擇氫原子、氬原子、烷基苯基或苯基。

R^1 和 R^2 、 R^3 和 R^4 可以彼此鍵結而形成選自包括苯環、萘環及吡啶環之群組中的環狀結構，所形成之環狀結構可以經選自包括烷基、芳基及氰基之群組中的一個基團或兩個以上組合而獲得之基團取代。在本發明的一態樣中， R^1 和 R^2 、 R^3 和 R^4 中的1組彼此鍵結而形成苯環、萘環及吡啶環。在本發明的一態樣中， R^1 和 R^2 、 R^3 和 R^4 這兩者彼此鍵結而形成苯環、萘環及吡啶環。此時， R^1 和 R^2 所形成之環與 R^3 和 R^4 所形成之環可以相同亦可以不同。在本發明的一態樣中， R^1 和 R^2 、 R^3 和 R^4 中的任一個均沒有彼此鍵結而形成環。在本發明的一態樣中，所形成之環狀結構為苯環或萘環。在本發明的一態樣中，所形成之環狀結構為吡啶環。與苯環、萘環及吡啶環鍵結之氫原子可以經氬原子或取代基取代，作為在此所述之取代基，可以舉出選自包括烷基、芳基、雜芳基及氰基之群組中的一個基團或兩個以上組合而獲得之基團。在本發明的一態樣中，取代基為可以經芳基取代的烷基或可以經烷基取代的芳基。在本發明的一態樣中，取代基為氰基或經氰基取代之芳基。與苯環、萘環及吡啶環鍵結之氫原子可以不經取代。

【0021】 在以下中，例示出上述可以經烷基取代的芳基的具體例。其中，在本發明中能夠採用之可以經烷基取代的芳基不被以下具體例做限定性地解釋。在以下具體例中，*表示鍵結位置。又，省略甲基。例如，N4為4-甲基苯基。其中，較佳為N5、N8、N10、N11。

[化學式10]

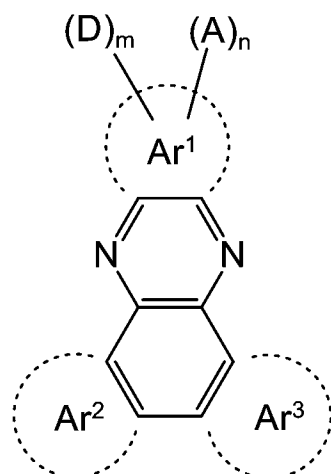


【0022】作為通式(1)的 $R^1 \sim R^4$ ，更佳為N5和第三丁基，特佳為N5。

通式(1)所表示之化合物可以為下述通式(3)所表示之化合物。

通式(3)

[化學式11]



【0023】在通式(3)中， Ar^1 表示環狀結構，並且表示苯環、萘環、蔥環或菲環。 D 表示前述通式(2)所表示之基團。 A 表示選自包括氰基、苯基、嘧啶基、三唑基及烷基之群組中的一個基團或兩個以上組合而獲得之基團(其中，除了取代烷基以外)。 m 為1或2， n 為0、1或2。在 m 為2時，兩個 D 可以相同亦可以不同。在 n 為2時，兩個 A 可以相同亦可以不同。 Ar^2 、 Ar^3 可以分別獨立地形成選自包括苯環、萘環及吡啶環之群組中的環狀結構，所形成之環狀結構可以經選自包括烷基、芳基、雜芳基及氰

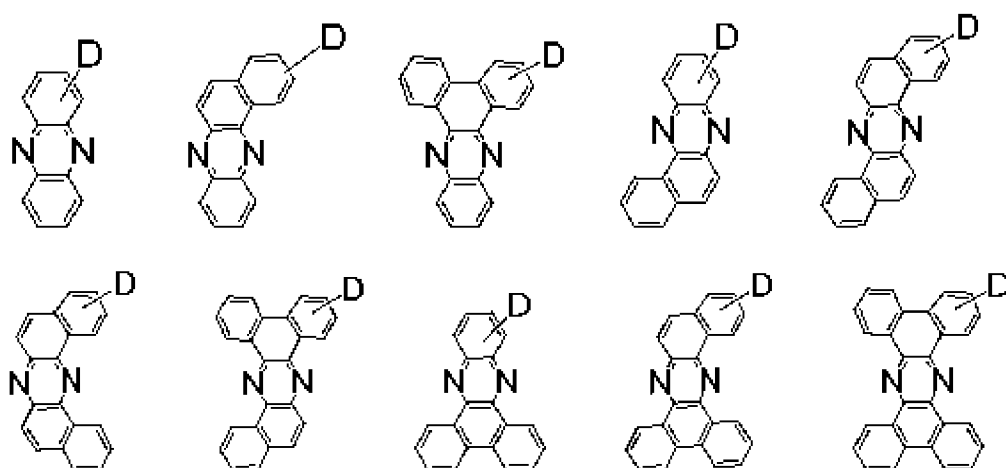
基之群組中的一個基團或兩個以上組合而獲得之基團取代。

關於通式(3)的 Ar^1 、D、A、m及n的詳細內容和較佳範圍，能夠參照上述通式(1)的對應之記載。關於 Ar^2 、 Ar^3 所表示之苯環、萘環及吡啶環的詳細內容和較佳範圍，能夠參照上述通式(1)中之 R^1 和 R^2 、 R^3 和 R^4 彼此鍵結而形成之苯環、萘環及吡啶環的記載。

【0024】在本發明的一態樣中，通式(3)的D為經取代或未經取代的5H-吡啶并[3,2,1-de]啡啶-5-基，A為氰基、苯基、嘧啶基、三唑基或苯并脛基，n為0或1， Ar^2 、 Ar^3 分別獨立地為苯環、萘環、吡啶環或經氰基取代之苯環。

【0025】通式(1)所表示之化合物例如具有下述中的任一個環骨架為較佳。下述骨架中的至少一個氫原子可以經氘原子或通式(1)的範圍內的取代基取代。其中，其他環不會縮合。再者，由於在通式(1)中一定存在D，因此在下述環骨架中僅記載了一個D。

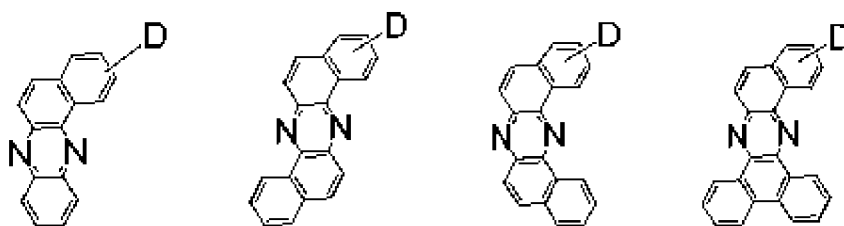
【0026】 [化學式12]



【0027】在本發明的較佳的一態樣中，通式(1)所表示之化合物具有下述環骨架組1中的任一個環骨架。

[化學式13]

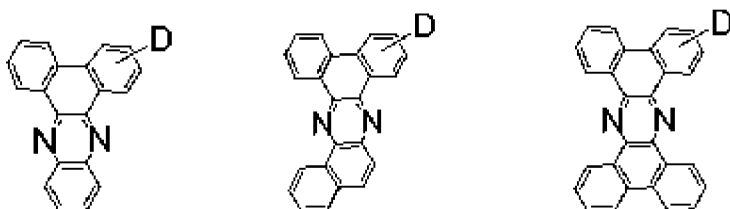
(環骨架組1)



【0028】 在本發明的較佳的一態樣中，通式(1)所表示之化合物具有下述環骨架組2中的任一個環骨架。

[化學式14]

(環骨架組2)

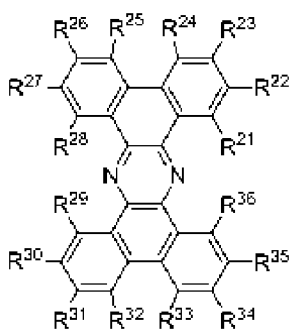


【0029】 在環骨架組1及環骨架組2中，在較佳的一態樣中，A不存在於分子內。在本發明的一態樣中，與芳香環鍵結的為氫原子、氬原子、未經取代的烷基或可以經烷基取代的芳基，該芳香環與環骨架組1及環骨架組2中之吡咻環的下方縮合。在本發明的較佳的一態樣中，與芳香環鍵結的為氫原子、氬原子或未經取代的烷基，該芳香環與環骨架組1及環骨架組2中之吡咻環的下方縮合。

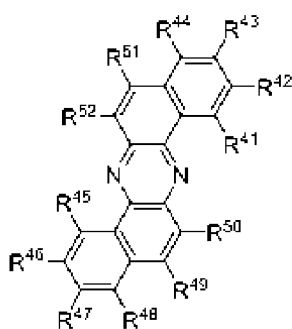
【0030】 通式(1)所表示之化合物可以為下述通式(4a)~(4f)中的任一個所表示之化合物。

[化學式15]

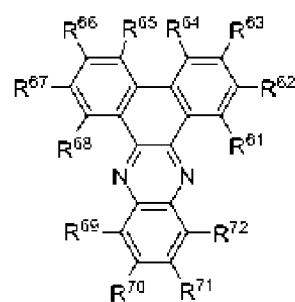
通式 (4a)



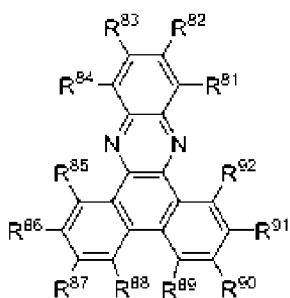
通式 (4b)



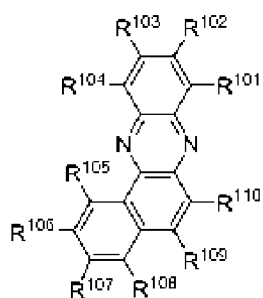
通式 (4c)



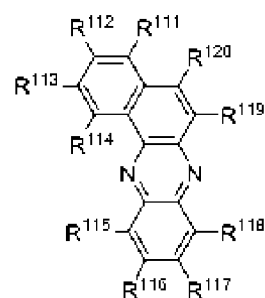
通式 (4d)



通式 (4e)



通式 (4f)



【0031】在通式 (4a) ~ (4f) 中， $R^{21} \sim R^{28}$ 、 $R^{41} \sim R^{44}$ 、 R^{51} 、 R^{52} 、 $R^{61} \sim R^{68}$ 、 $R^{81} \sim R^{84}$ 、 $R^{101} \sim R^{104}$ 、 $R^{111} \sim R^{114}$ 、 R^{119} 、 R^{120} 分別獨立地表示氫原子、氬原子、D 或 A。其中， $R^{21} \sim R^{28}$ 中的 1 個或 2 個為 D 且 0 ~ 2 個為 A， $R^{41} \sim R^{44}$ 、 R^{51} 及 R^{52} 中的 1 個或 2 個為 D 且 0 ~ 2 個為 A， $R^{61} \sim R^{68}$ 中的 1 個或 2 個為 D 且 0 ~ 2 個為 A， $R^{81} \sim R^{84}$ 中的 1 個或 2 個為 D 且 0 ~ 2 個為 A， $R^{101} \sim R^{104}$ 中的 1 個或 2 個為 D 且 0 ~ 2 個為 A， $R^{111} \sim R^{114}$ 、 R^{119} 及 R^{120} 中的 1 個或 2 個為 D 且 0 ~ 2 個為 A。 $R^{29} \sim R^{36}$ 、 $R^{45} \sim R^{50}$ 、 $R^{69} \sim R^{72}$ 、 $R^{85} \sim R^{92}$ 、 $R^{105} \sim R^{110}$ 、 $R^{115} \sim R^{118}$ 分別獨立地表示氫原子、氬原子或選自包括烷基、芳基及氰基之群組中的一個基團或兩個以上組合而獲得之基團。在通式 (4a) ~ (4f) 中，環與所記載之環骨架不會進一步縮合。

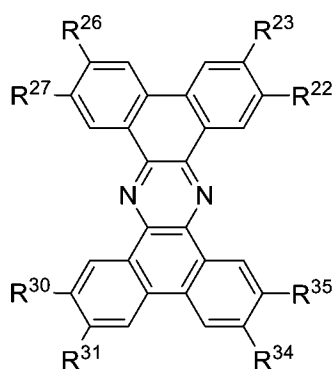
關於通式 (4a) ~ (4f) 的詳細內容和較佳範圍，能夠參照通式 (1) 的對應之記載。在本發明的一態樣中，選擇通式 (4a) 所表示之化

合物。在本發明的一態樣中，選擇通式（4b）所表示之化合物。在本發明的一態樣中，選擇通式（4c）所表示之化合物。在本發明的一態樣中，選擇通式（4d）所表示之化合物。在本發明的一態樣中，選擇通式（4e）所表示之化合物。在本發明的一態樣中，選擇通式（4f）所表示之化合物。

【0032】在以下表1~12中，例示出通式（1）所表示之化合物的具體例。在表1和表2中，示出通式（4a'）所表示之化合物的具體例，在表3和表4中，示出通式（4b'）所表示之化合物的具體例，在表5和表6中，示出通式（4c'）所表示之化合物的具體例，在表7和表8中，示出通式（4d'）所表示之化合物的具體例，在表9和表10中，示出通式（4e'）所表示之化合物的具體例，在表11和表12中，示出通式（4f'）所表示之化合物的具體例。其中，本發明中能夠使用之通式（1）所表示之化合物不應被該等具體例做限定性地解釋。

[表1]

通式（4a'）



No.	R ²²	R ²³	R ²⁶ ,R ²⁷ ,R ³⁰ , R ³¹ ,R ³⁴ ,R ³⁵
1	D1	H	H
2	D2	H	H
3	D3	H	H
4	D4	H	H
5	D5	H	H
6	D6	H	H
7	D7	H	H
8	D8	H	H
9	D9	H	H
10	D10	H	H
11	D11	H	H
12	D12	H	H
13	D13	H	H
14	D14	H	H
15	D15	H	H
16	D16	H	H
17	D17	H	H
18	D18	H	H
19	D19	H	H
20	D20	H	H
21	D21	H	H
22	D22	H	H
23	D23	H	H
24	D24	H	H
25	D25	H	H
26	D26	H	H
27	D27	H	H
28	D28	H	H
29	D29	H	H
30	D30	H	H
31	D31	H	H
32	D32	H	H
33	D33	H	H
34	D34	H	H
35	D35	H	H
36	D36	H	H
37	D37	H	H
38	D38	H	H
39	D39	H	H
40	D40	H	H

No.	R ²²	R ²³	R ²⁶ ,R ²⁷ ,R ³⁰ , R ³¹ ,R ³⁴ ,R ³⁵
41	D41	H	H
42	D42	H	H
43	D43	H	H
44	D44	H	H
45	D45	H	H
46	D46	H	H
47	D47	H	H
48	D48	H	H
49	D49	H	H
50	D50	H	H
51	H	D1	H
52	H	D2	H
53	H	D3	H
54	H	D4	H
55	H	D5	H
56	H	D6	H
57	H	D7	H
58	H	D8	H
59	H	D9	H
60	H	D10	H
61	H	D11	H
62	H	D12	H
63	H	D13	H
64	H	D14	H
65	H	D15	H
66	H	D16	H
67	H	D17	H
68	H	D18	H
69	H	D19	H
70	H	D20	H
71	H	D21	H
72	H	D22	H
73	H	D23	H
74	H	D24	H
75	H	D25	H
76	H	D26	H
77	H	D27	H
78	H	D28	H
79	H	D29	H
80	H	D30	H

No.	R ²²	R ²³	R ²⁶ ,R ²⁷ ,R ³⁰ , R ³¹ ,R ³⁴ ,R ³⁵
81	H	D31	H
82	H	D32	H
83	H	D33	H
84	H	D34	H
85	H	D35	H
86	H	D36	H
87	H	D37	H
88	H	D38	H
89	H	D39	H
90	H	D40	H
91	H	D41	H
92	H	D42	H
93	H	D43	H
94	H	D44	H
95	H	D45	H
96	H	D46	H
97	H	D47	H
98	H	D48	H
99	H	D49	H
100	H	D50	H

【0033】 在以下表2中，以表的形式進一步例示出通式（4a'）所表示之化合物。在表2中，對進一步取代之化合物編號確定之結構的一部分

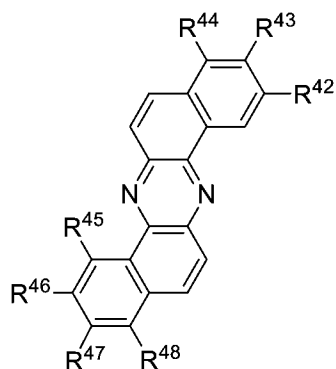
而獲得之結構進一步賦予化合物編號。例如，在表2中，化合物101~150（在表中表示為No.101~150）表示進一步用與化合物1~50的 R^{22} （在表中表示為R22）對應之取代基取代化合物1~50的 R^{27} （在表中表示為R27）之化合物。化合物101為用作為化合物1的 R^{22} 之D1進一步取代化合物1的 R^{27} 而獲得之化合物，化合物102為用作為化合物2的 R^{22} 之D2進一步取代化合物2的 R^{27} 而獲得之化合物。以該種要領確定表2中所記載之各化合物和表4、表6、表8、表10、表12中所記載之各化合物的結構。在表2、表4、表6、表8、表10、表12中，分配有編號之各化合物單獨確定結構，在本說明書中逐一具體地揭示。再者，表中的“t-Bu”表示第三丁基（tert-butyl group）。

【0034】 [表2]

經取代之基團				取代之基團			新化合物編號			
將在 No.	1	~	50	的 R27 中	導入與 R22 相同的基團	者設為	No.	101	~	150
將在 No.	51	~	100	的 R26 中	導入與 R23 相同的基團	者設為	No.	151	~	200
將在 No.	1	~	200	的 R30 中	導入 N1	者設為	No.	201	~	400
將在 No.	1	~	200	的 R31 中	導入 N1	者設為	No.	401	~	600
將在 No.	1	~	100	的 R34 中	導入 N1	者設為	No.	601	~	700
將在 No.	1	~	100	的 R35 中	導入 N1	者設為	No.	701	~	800
將在 No.	1	~	200	的 R30 和 R35 中	導入 N1	者設為	No.	801	~	1000
將在 No.	1	~	200	的 R31 和 R34 中	導入 N1	者設為	No.	1001	~	1200
將在 No.	1	~	200	的 R30 中	導入 A4	者設為	No.	1201	~	1400
將在 No.	1	~	200	的 R31 中	導入 A4	者設為	No.	1401	~	1600
將在 No.	1	~	100	的 R34 中	導入 A4	者設為	No.	1601	~	1700
將在 No.	1	~	100	的 R35 中	導入 A4	者設為	No.	1701	~	1800
將在 No.	1	~	200	的 R30 和 R35 中	導入 A4	者設為	No.	1801	~	2000
將在 No.	1	~	200	的 R31 和 R34 中	導入 A4	者設為	No.	2001	~	2200
將在 No.	1	~	200	的 R30 中	導入 N5	者設為	No.	2201	~	2400
將在 No.	1	~	200	的 R31 中	導入 N5	者設為	No.	2401	~	2600
將在 No.	1	~	100	的 R34 中	導入 N5	者設為	No.	2601	~	2700
將在 No.	1	~	100	的 R35 中	導入 N5	者設為	No.	2701	~	2800
將在 No.	1	~	200	的 R30 和 R35 中	導入 N5	者設為	No.	2801	~	3000
將在 No.	1	~	200	的 R31 和 R34 中	導入 N5	者設為	No.	3001	~	3200
將在 No.	1	~	200	的 R30 和 R35 中	導入 N8	者設為	No.	16201	~	16400
將在 No.	1	~	200	的 R31 和 R34 中	導入 N8	者設為	No.	16401	~	16600
將在 No.	1	~	200	的 R30 和 R35 中	導入 N10	者設為	No.	16601	~	16800
將在 No.	1	~	200	的 R31 和 R34 中	導入 N10	者設為	No.	16801	~	17000
將在 No.	1	~	200	的 R30 和 R35 中	導入 t-Bu	者設為	No.	17001	~	17200
將在 No.	1	~	200	的 R31 和 R34 中	導入 t-Bu	者設為	No.	17201	~	17400
將在 No.	1	~	100	的 R26 中	導入 N5	者設為	No.	17401	~	17500
將在 No.	1	~	100	的 R27 中	導入 N5	者設為	No.	17501	~	17600
將在 No.	1	~	100	的 R26 中	導入 N8	者設為	No.	17601	~	17700
將在 No.	1	~	100	的 R27 中	導入 N8	者設為	No.	17701	~	17800
將在 No.	1	~	100	的 R26 中	導入 N9	者設為	No.	17801	~	17900
將在 No.	1	~	100	的 R27 中	導入 N9	者設為	No.	17901	~	18000
將在 No.	1	~	100	的 R26 中	導入 t-Bu	者設為	No.	18001	~	18100
將在 No.	1	~	100	的 R27 中	導入 t-Bu	者設為	No.	18101	~	18200

【0035】 [表3]

通式 (4b')



No.	R ⁴²	R ⁴³	R ⁴⁴ ~R ⁴⁸
3201	D1	H	H
3202	D2	H	H
3203	D3	H	H
3204	D4	H	H
3205	D5	H	H
3206	D6	H	H
3207	D7	H	H
3208	D8	H	H
3209	D9	H	H
3210	D10	H	H
3211	D11	H	H
3212	D12	H	H
3213	D13	H	H
3214	D14	H	H
3215	D15	H	H
3216	D16	H	H
3217	D17	H	H
3218	D18	H	H
3219	D19	H	H
3220	D20	H	H
3221	D21	H	H
3222	D22	H	H
3223	D23	H	H
3224	D24	H	H
3225	D25	H	H
3226	D26	H	H
3227	D27	H	H
3228	D28	H	H
3229	D29	H	H
3230	D30	H	H
3231	D31	H	H
3232	D32	H	H
3233	D33	H	H
3234	D34	H	H
3235	D35	H	H
3236	D36	H	H
3237	D37	H	H
3238	D38	H	H
3239	D39	H	H
3240	D40	H	H

No.	R ⁴²	R ⁴³	R ⁴⁴ ~R ⁴⁸
3241	D41	H	H
3242	D42	H	H
3243	D43	H	H
3244	D44	H	H
3245	D45	H	H
3246	D46	H	H
3247	D47	H	H
3248	D48	H	H
3249	D49	H	H
3250	D50	H	H
3251	H	D1	H
3252	H	D2	H
3253	H	D3	H
3254	H	D4	H
3255	H	D5	H
3256	H	D6	H
3257	H	D7	H
3258	H	D8	H
3259	H	D9	H
3260	H	D10	H
3261	H	D11	H
3262	H	D12	H
3263	H	D13	H
3264	H	D14	H
3265	H	D15	H
3266	H	D16	H
3267	H	D17	H
3268	H	D18	H
3269	H	D19	H
3270	H	D20	H
3271	H	D21	H
3272	H	D22	H
3273	H	D23	H
3274	H	D24	H
3275	H	D25	H
3276	H	D26	H
3277	H	D27	H
3278	H	D28	H
3279	H	D29	H
3280	H	D30	H

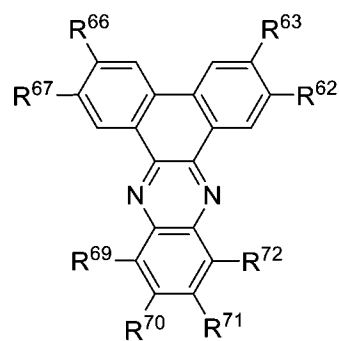
No.	R ⁴²	R ⁴³	R ⁴⁴ ~R ⁴⁸
3281	H	D31	H
3282	H	D32	H
3283	H	D33	H
3284	H	D34	H
3285	H	D35	H
3286	H	D36	H
3287	H	D37	H
3288	H	D38	H
3289	H	D39	H
3290	H	D40	H
3291	H	D41	H
3292	H	D42	H
3293	H	D43	H
3294	H	D44	H
3295	H	D45	H
3296	H	D46	H
3297	H	D47	H
3298	H	D48	H
3299	H	D49	H
3300	H	D50	H

【0036】 [表4]

經取代之基團				取代之基團		新化合物編號				
將在 No.	3201	~	3250	的 R43 中	導入與 R42 相同的基團	者設為	No.	3301	~	3350
將在 No.	3251	~	3300	的 R44 中	導入與 R43 相同的基團	者設為	No.	3351	~	3400
將在 No.	3201	~	3400	的 R45 中	導入 N1	者設為	No.	3401	~	3600
將在 No.	3201	~	3400	的 R46 中	導入 N1	者設為	No.	3601	~	3800
將在 No.	3201	~	3400	的 R47 中	導入 N1	者設為	No.	3801	~	4000
將在 No.	3201	~	3400	的 R48 中	導入 N1	者設為	No.	4001	~	4200
將在 No.	3201	~	3400	的 R45 中	導入 A4	者設為	No.	4201	~	4400
將在 No.	3201	~	3400	的 R46 中	導入 A4	者設為	No.	4401	~	4600
將在 No.	3201	~	3400	的 R47 中	導入 A4	者設為	No.	4601	~	4800
將在 No.	3201	~	3400	的 R48 中	導入 A4	者設為	No.	4801	~	5000
將在 No.	3201	~	3400	的 R45 中	導入 N5	者設為	No.	5001	~	5200
將在 No.	3201	~	3400	的 R46 中	導入 N5	者設為	No.	5201	~	5400
將在 No.	3201	~	3400	的 R47 中	導入 N5	者設為	No.	5401	~	5600
將在 No.	3201	~	3400	的 R48 中	導入 N5	者設為	No.	5601	~	5800

【0037】 [表5]

通式 (4c')



No.	R ⁶²	R ⁶³	R ⁶⁶ ,R ⁶⁷ R ⁶⁹ ~R ⁷²
5801	D1	H	H
5802	D2	H	H
5803	D3	H	H
5804	D4	H	H
5805	D5	H	H
5806	D6	H	H
5807	D7	H	H
5808	D8	H	H
5809	D9	H	H
5810	D10	H	H
5811	D11	H	H
5812	D12	H	H
5813	D13	H	H
5814	D14	H	H
5815	D15	H	H
5816	D16	H	H
5817	D17	H	H
5818	D18	H	H
5819	D19	H	H
5820	D20	H	H
5821	D21	H	H
5822	D22	H	H
5823	D23	H	H
5824	D24	H	H
5825	D25	H	H
5826	D26	H	H
5827	D27	H	H
5828	D28	H	H
5829	D29	H	H
5830	D30	H	H
5831	D31	H	H
5832	D32	H	H
5833	D33	H	H
5834	D34	H	H
5835	D35	H	H
5836	D36	H	H
5837	D37	H	H
5838	D38	H	H
5839	D39	H	H
5840	D40	H	H

No.	R ⁶²	R ⁶³	R ⁶⁶ ,R ⁶⁷ R ⁶⁹ ~R ⁷²
5841	D41	H	H
5842	D42	H	H
5843	D43	H	H
5844	D44	H	H
5845	D45	H	H
5846	D46	H	H
5847	D47	H	H
5848	D48	H	H
5849	D49	H	H
5850	D50	H	H
5851	H	D1	H
5852	H	D2	H
5853	H	D3	H
5854	H	D4	H
5855	H	D5	H
5856	H	D6	H
5857	H	D7	H
5858	H	D8	H
5859	H	D9	H
5860	H	D10	H
5861	H	D11	H
5862	H	D12	H
5863	H	D13	H
5864	H	D14	H
5865	H	D15	H
5866	H	D16	H
5867	H	D17	H
5868	H	D18	H
5869	H	D19	H
5870	H	D20	H
5871	H	D21	H
5872	H	D22	H
5873	H	D23	H
5874	H	D24	H
5875	H	D25	H
5876	H	D26	H
5877	H	D27	H
5878	H	D28	H
5879	H	D29	H
5880	H	D30	H

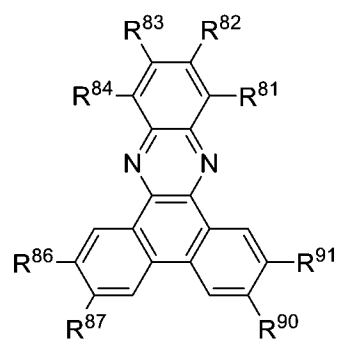
No.	R ⁶²	R ⁶³	R ⁶⁶ ,R ⁶⁷ R ⁶⁹ ~R ⁷²
5881	H	D31	H
5882	H	D32	H
5883	H	D33	H
5884	H	D34	H
5885	H	D35	H
5886	H	D36	H
5887	H	D37	H
5888	H	D38	H
5889	H	D39	H
5890	H	D40	H
5891	H	D41	H
5892	H	D42	H
5893	H	D43	H
5894	H	D44	H
5895	H	D45	H
5896	H	D46	H
5897	H	D47	H
5898	H	D48	H
5899	H	D49	H
5900	H	D50	H

【0038】 [表6]

經取代之基團			取代之基團		新化合物編號		
將在 No.	5801 ~ 5850	的 R67 中	導入與 R62 相同的基團	者設為	No.	5901 ~ 5950	
將在 No.	5851 ~ 5900	的 R66 中	導入與 R63 相同的基團	者設為	No.	5951 ~ 6000	
將在 No.	5801 ~ 6000	的 R69 中	導入 N1	者設為	No.	6001 ~ 6200	
將在 No.	5801 ~ 6000	的 R70 中	導入 N1	者設為	No.	6201 ~ 6400	
將在 No.	5801 ~ 5900	的 R71 中	導入 N1	者設為	No.	6401 ~ 6500	
將在 No.	5801 ~ 5900	的 R72 中	導入 N1	者設為	No.	6501 ~ 6600	
將在 No.	5801 ~ 6000	的 R69 中	導入 A4	者設為	No.	6601 ~ 6800	
將在 No.	5801 ~ 6000	的 R70 中	導入 A4	者設為	No.	6801 ~ 7000	
將在 No.	5801 ~ 5900	的 R71 中	導入 A4	者設為	No.	7001 ~ 7100	
將在 No.	5801 ~ 5900	的 R72 中	導入 A4	者設為	No.	7101 ~ 7200	
將在 No.	5801 ~ 6000	的 R69 中	導入 N5	者設為	No.	7201 ~ 7400	
將在 No.	5801 ~ 6000	的 R70 中	導入 N5	者設為	No.	7401 ~ 7600	
將在 No.	5801 ~ 5900	的 R71 中	導入 N5	者設為	No.	7601 ~ 7700	
將在 No.	5801 ~ 5900	的 R72 中	導入 N5	者設為	No.	7701 ~ 7800	
將在 No.	5801 ~ 6000	的 R69 和 R72 中	導入 N1	者設為	No.	18201 ~ 18400	
將在 No.	5801 ~ 6000	的 R70 和 R71 中	導入 N1	者設為	No.	18401 ~ 18600	
將在 No.	5801 ~ 6000	的 R69 和 R72 中	導入 N5	者設為	No.	18601 ~ 18800	
將在 No.	5801 ~ 6000	的 R70 和 R71 中	導入 N5	者設為	No.	18801 ~ 19000	
將在 No.	5801 ~ 6000	的 R69 和 R72 中	導入 N7	者設為	No.	19001 ~ 19200	
將在 No.	5801 ~ 6000	的 R70 和 R71 中	導入 N7	者設為	No.	19201 ~ 19400	
將在 No.	5801 ~ 6000	的 R69 和 R72 中	導入 N8	者設為	No.	19401 ~ 19600	
將在 No.	5801 ~ 6000	的 R70 和 R71 中	導入 N8	者設為	No.	19601 ~ 19800	
將在 No.	5801 ~ 6000	的 R69 和 R72 中	導入 N9	者設為	No.	19801 ~ 20000	
將在 No.	5801 ~ 6000	的 R70 和 R71 中	導入 N9	者設為	No.	20001 ~ 20200	
將在 No.	5801 ~ 6000	的 R69 和 R72 中	導入 N10	者設為	No.	20201 ~ 20400	
將在 No.	5801 ~ 6000	的 R70 和 R71 中	導入 N10	者設為	No.	20401 ~ 20600	
將在 No.	5801 ~ 6000	的 R69 和 R72 中	導入 N11	者設為	No.	20601 ~ 20800	
將在 No.	5801 ~ 6000	的 R70 和 R71 中	導入 N11	者設為	No.	20801 ~ 21000	
將在 No.	5801 ~ 5900	的 R66,R69,R72 中	導入 N5	者設為	No.	21001 ~ 21100	
將在 No.	5801 ~ 5900	的 R66,R70,R71 中	導入 N5	者設為	No.	21101 ~ 21200	
將在 No.	5801 ~ 5900	的 R67,R69,R72 中	導入 N5	者設為	No.	21201 ~ 21300	
將在 No.	5801 ~ 5900	的 R67,R70,R71 中	導入 N5	者設為	No.	21301 ~ 21400	
將在 No.	5801 ~ 5900	的 R66,R69,R72 中	導入 N8	者設為	No.	21401 ~ 21500	
將在 No.	5801 ~ 5900	的 R66,R70,R71 中	導入 N8	者設為	No.	21501 ~ 21600	
將在 No.	5801 ~ 5900	的 R67,R69,R72 中	導入 N8	者設為	No.	21601 ~ 21700	
將在 No.	5801 ~ 5900	的 R67,R70,R71 中	導入 N8	者設為	No.	21701 ~ 21800	
將在 No.	5801 ~ 5900	的 R66,R69,R72 中	導入 N10	者設為	No.	21801 ~ 21900	
將在 No.	5801 ~ 5900	的 R66,R70,R71 中	導入 N10	者設為	No.	21901 ~ 22000	
將在 No.	5801 ~ 5900	的 R67,R69,R72 中	導入 N10	者設為	No.	22001 ~ 22100	
將在 No.	5801 ~ 5900	的 R67,R70,R71 中	導入 N10	者設為	No.	22101 ~ 22200	
將在 No.	5801 ~ 5900	的 R66 中	導入 t-Bu	，之後在			
		R69,R72 中	導入 N5	者設為	No.	22201 ~ 22300	
將在 No.	5801 ~ 5900	的 R66 中	導入 t-Bu	，之後在			
		R70,R71 中	導入 N5	者設為	No.	22301 ~ 22400	
將在 No.	5801 ~ 5900	的 R67 中	導入 t-Bu	，之後在			
		R69,R72 中	導入 N5	者設為	No.	22401 ~ 22500	
將在 No.	5801 ~ 5900	的 R67 中	導入 t-Bu	，之後在			
		R70,R71 中	導入 N5	者設為	No.	22501 ~ 22600	

【0039】 [表7]

通式 (4d')



No.	R ⁸¹	R ⁸²	R ⁸³ ,R ⁸⁴ ,R ⁸⁶ R ⁸⁷ ,R ⁹⁰ ,R ⁹¹
7801	D1	H	H
7802	D2	H	H
7803	D3	H	H
7804	D4	H	H
7805	D5	H	H
7806	D6	H	H
7807	D7	H	H
7808	D8	H	H
7809	D9	H	H
7810	D10	H	H
7811	D11	H	H
7812	D12	H	H
7813	D13	H	H
7814	D14	H	H
7815	D15	H	H
7816	D16	H	H
7817	D17	H	H
7818	D18	H	H
7819	D19	H	H
7820	D20	H	H
7821	D21	H	H
7822	D22	H	H
7823	D23	H	H
7824	D24	H	H
7825	D25	H	H
7826	D26	H	H
7827	D27	H	H
7828	D28	H	H
7829	D29	H	H
7830	D30	H	H
7831	D31	H	H
7832	D32	H	H
7833	D33	H	H
7834	D34	H	H
7835	D35	H	H
7836	D36	H	H
7837	D37	H	H
7838	D38	H	H
7839	D39	H	H
7840	D40	H	H

No.	R ⁸¹	R ⁸²	R ⁸³ ,R ⁸⁴ ,R ⁸⁶ R ⁸⁷ ,R ⁹⁰ ,R ⁹¹
7841	D41	H	H
7842	D42	H	H
7843	D43	H	H
7844	D44	H	H
7845	D45	H	H
7846	D46	H	H
7847	D47	H	H
7848	D48	H	H
7849	D49	H	H
7850	D50	H	H
7851	H	D1	H
7852	H	D2	H
7853	H	D3	H
7854	H	D4	H
7855	H	D5	H
7856	H	D6	H
7857	H	D7	H
7858	H	D8	H
7859	H	D9	H
7860	H	D10	H
7861	H	D11	H
7862	H	D12	H
7863	H	D13	H
7864	H	D14	H
7865	H	D15	H
7866	H	D16	H
7867	H	D17	H
7868	H	D18	H
7869	H	D19	H
7870	H	D20	H
7871	H	D21	H
7872	H	D22	H
7873	H	D23	H
7874	H	D24	H
7875	H	D25	H
7876	H	D26	H
7877	H	D27	H
7878	H	D28	H
7879	H	D29	H
7880	H	D30	H

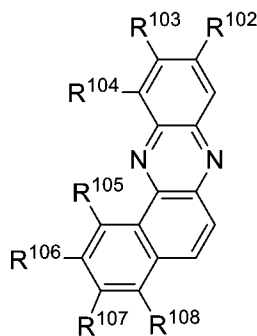
No.	R ⁸¹	R ⁸²	R ⁸³ ,R ⁸⁴ ,R ⁸⁶ R ⁸⁷ ,R ⁹⁰ ,R ⁹¹
7881	H	D31	H
7882	H	D32	H
7883	H	D33	H
7884	H	D34	H
7885	H	D35	H
7886	H	D36	H
7887	H	D37	H
7888	H	D38	H
7889	H	D39	H
7890	H	D40	H
7891	H	D41	H
7892	H	D42	H
7893	H	D43	H
7894	H	D44	H
7895	H	D45	H
7896	H	D46	H
7897	H	D47	H
7898	H	D48	H
7899	H	D49	H
7900	H	D50	H

【0040】 [表8]

經取代之基團				取代之基團			新化合物編號			
將在 No.	7801	~	7850	的 R84 中	導入與 R81 相同的基團	者設為	No.	7901	~	7950
將在 No.	7851	~	7900	的 R83 中	導入與 R82 相同的基團	者設為	No.	7951	~	8000
將在 No.	7801	~	8000	的 R90 中	導入 N1	者設為	No.	8001	~	8200
將在 No.	7801	~	8000	的 R91 中	導入 N1	者設為	No.	8201	~	8400
將在 No.	7801	~	7900	的 R87 中	導入 N1	者設為	No.	8401	~	8500
將在 No.	7801	~	7900	的 R86 中	導入 N1	者設為	No.	8501	~	8600
將在 No.	7801	~	8000	的 R90 和 R87 中	導入 N1	者設為	No.	8601	~	8800
將在 No.	7801	~	8000	的 R91 和 R86 中	導入 N1	者設為	No.	8801	~	9000
將在 No.	7801	~	8000	的 R90 中	導入 A4	者設為	No.	9001	~	9200
將在 No.	7801	~	8000	的 R91 中	導入 A4	者設為	No.	9201	~	9400
將在 No.	7801	~	7900	的 R87 中	導入 A4	者設為	No.	9401	~	9500
將在 No.	7801	~	7900	的 R86 中	導入 A4	者設為	No.	9501	~	9600
將在 No.	7801	~	8000	的 R90 和 R87 中	導入 A4	者設為	No.	9601	~	9800
將在 No.	7801	~	8000	的 R91 和 R86 中	導入 A4	者設為	No.	9801	~	10000
將在 No.	7801	~	8000	的 R90 中	導入 N5	者設為	No.	10001	~	10200
將在 No.	7801	~	8000	的 R91 中	導入 N5	者設為	No.	10201	~	10400
將在 No.	7801	~	7900	的 R87 中	導入 N5	者設為	No.	10401	~	10500
將在 No.	7801	~	7900	的 R86 中	導入 N5	者設為	No.	10501	~	10600
將在 No.	7801	~	8000	的 R90 和 R87 中	導入 N5	者設為	No.	10601	~	10800
將在 No.	7801	~	8000	的 R91 和 R86 中	導入 N5	者設為	No.	10801	~	11000

【0041】 [表9]

通式 (4e')



No.	R ¹⁰²	R ¹⁰³	R ¹⁰⁴ ~R ¹⁰⁸
11001	D1	H	H
11002	D2	H	H
11003	D3	H	H
11004	D4	H	H
11005	D5	H	H
11006	D6	H	H
11007	D7	H	H
11008	D8	H	H
11009	D9	H	H
11010	D10	H	H
11011	D11	H	H
11012	D12	H	H
11013	D13	H	H
11014	D14	H	H
11015	D15	H	H
11016	D16	H	H
11017	D17	H	H
11018	D18	H	H
11019	D19	H	H
11020	D20	H	H
11021	D21	H	H
11022	D22	H	H
11023	D23	H	H
11024	D24	H	H
11025	D25	H	H
11026	D26	H	H
11027	D27	H	H
11028	D28	H	H
11029	D29	H	H
11030	D30	H	H
11031	D31	H	H
11032	D32	H	H
11033	D33	H	H
11034	D34	H	H
11035	D35	H	H
11036	D36	H	H
11037	D37	H	H
11038	D38	H	H
11039	D39	H	H
11040	D40	H	H

No.	R ¹⁰²	R ¹⁰³	R ¹⁰⁴ ~R ¹⁰⁸
11041	D41	H	H
11042	D42	H	H
11043	D43	H	H
11044	D44	H	H
11045	D45	H	H
11046	D46	H	H
11047	D47	H	H
11048	D48	H	H
11049	D49	H	H
11050	D50	H	H
11051	H	D1	H
11052	H	D2	H
11053	H	D3	H
11054	H	D4	H
11055	H	D5	H
11056	H	D6	H
11057	H	D7	H
11058	H	D8	H
11059	H	D9	H
11060	H	D10	H
11061	H	D11	H
11062	H	D12	H
11063	H	D13	H
11064	H	D14	H
11065	H	D15	H
11066	H	D16	H
11067	H	D17	H
11068	H	D18	H
11069	H	D19	H
11070	H	D20	H
11071	H	D21	H
11072	H	D22	H
11073	H	D23	H
11074	H	D24	H
11075	H	D25	H
11076	H	D26	H
11077	H	D27	H
11078	H	D28	H
11079	H	D29	H
11080	H	D30	H

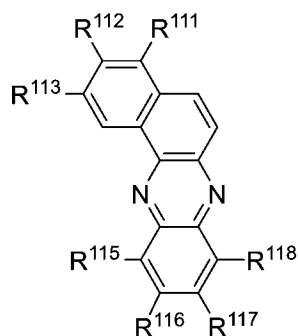
No.	R ¹⁰²	R ¹⁰³	R ¹⁰⁴ ~R ¹⁰⁸
11081	H	D31	H
11082	H	D32	H
11083	H	D33	H
11084	H	D34	H
11085	H	D35	H
11086	H	D36	H
11087	H	D37	H
11088	H	D38	H
11089	H	D39	H
11090	H	D40	H
11091	H	D41	H
11092	H	D42	H
11093	H	D43	H
11094	H	D44	H
11095	H	D45	H
11096	H	D46	H
11097	H	D47	H
11098	H	D48	H
11099	H	D49	H
11100	H	D50	H

【0042】 [表10]

經取代之基團				取代之基團		新化合物編號				
將在 No.	11001	~	11050	的 R103 中	導入與 R102 相同的基團	者設為	No.	11101	~	11150
將在 No.	11051	~	11100	的 R104 中	導入與 R103 相同的基團	者設為	No.	11151	~	11200
將在 No.	11001	~	11200	的 R105 中	導入 N1	者設為	No.	11201	~	11400
將在 No.	11001	~	11200	的 R106 中	導入 N1	者設為	No.	11401	~	11600
將在 No.	11001	~	11200	的 R107 中	導入 N1	者設為	No.	11601	~	11800
將在 No.	11001	~	11200	的 R108 中	導入 N1	者設為	No.	11801	~	12000
將在 No.	11001	~	11200	的 R105 中	導入 A4	者設為	No.	12001	~	12200
將在 No.	11001	~	11200	的 R106 中	導入 A4	者設為	No.	12201	~	12400
將在 No.	11001	~	11200	的 R107 中	導入 A4	者設為	No.	12401	~	12600
將在 No.	11001	~	11200	的 R108 中	導入 A4	者設為	No.	12601	~	12800
將在 No.	11001	~	11200	的 R105 中	導入 N5	者設為	No.	12801	~	13000
將在 No.	11001	~	11200	的 R106 中	導入 N5	者設為	No.	13001	~	13200
將在 No.	11001	~	11200	的 R107 中	導入 N5	者設為	No.	13201	~	13400
將在 No.	11001	~	11200	的 R108 中	導入 N5	者設為	No.	13401	~	13600

【0043】 [表11]

通式 (4f')



No.	R ¹¹²	R ¹¹³	R ¹¹¹ , R ¹¹⁵ ~R ¹¹⁸
13601	D1	H	H
13602	D2	H	H
13603	D3	H	H
13604	D4	H	H
13605	D5	H	H
13606	D6	H	H
13607	D7	H	H
13608	D8	H	H
13609	D9	H	H
13610	D10	H	H
13611	D11	H	H
13612	D12	H	H
13613	D13	H	H
13614	D14	H	H
13615	D15	H	H
13616	D16	H	H
13617	D17	H	H
13618	D18	H	H
13619	D19	H	H
13620	D20	H	H
13621	D21	H	H
13622	D22	H	H
13623	D23	H	H
13624	D24	H	H
13625	D25	H	H
13626	D26	H	H
13627	D27	H	H
13628	D28	H	H
13629	D29	H	H
13630	D30	H	H
13631	D31	H	H
13632	D32	H	H
13633	D33	H	H
13634	D34	H	H
13635	D35	H	H
13636	D36	H	H
13637	D37	H	H
13638	D38	H	H
13639	D39	H	H
13640	D40	H	H

No.	R ¹¹²	R ¹¹³	R ¹¹¹ , R ¹¹⁵ ~R ¹¹⁸
13641	D41	H	H
13642	D42	H	H
13643	D43	H	H
13644	D44	H	H
13645	D45	H	H
13646	D46	H	H
13647	D47	H	H
13648	D48	H	H
13649	D49	H	H
13650	D50	H	H
13651	H	D1	H
13652	H	D2	H
13653	H	D3	H
13654	H	D4	H
13655	H	D5	H
13656	H	D6	H
13657	H	D7	H
13658	H	D8	H
13659	H	D9	H
13660	H	D10	H
13661	H	D11	H
13662	H	D12	H
13663	H	D13	H
13664	H	D14	H
13665	H	D15	H
13666	H	D16	H
13667	H	D17	H
13668	H	D18	H
13669	H	D19	H
13670	H	D20	H
13671	H	D21	H
13672	H	D22	H
13673	H	D23	H
13674	H	D24	H
13675	H	D25	H
13676	H	D26	H
13677	H	D27	H
13678	H	D28	H
13679	H	D29	H
13680	H	D30	H

No.	R ¹¹²	R ¹¹³	R ¹¹¹ , R ¹¹⁵ ~R ¹¹⁸
13681	H	D31	H
13682	H	D32	H
13683	H	D33	H
13684	H	D34	H
13685	H	D35	H
13686	H	D36	H
13687	H	D37	H
13688	H	D38	H
13689	H	D39	H
13690	H	D40	H
13691	H	D41	H
13692	H	D42	H
13693	H	D43	H
13694	H	D44	H
13695	H	D45	H
13696	H	D46	H
13697	H	D47	H
13698	H	D48	H
13699	H	D49	H
13700	H	D50	H

【0044】 [表12]

經取代之基團				取代之基團			新化合物編號			
將在 No.	13601	~	13650	的 R113 中	導入與 R112 相同的基團	者設為	No.	13701	~	13750
將在 No.	13651	~	13700	的 R111 中	導入與 R113 相同的基團	者設為	No.	13751	~	13800
將在 No.	13601	~	13800	的 R115 中	導入 N1	者設為	No.	13801	~	14000
將在 No.	13601	~	13800	的 R116 中	導入 N1	者設為	No.	14001	~	14200
將在 No.	13601	~	13800	的 R117 中	導入 N1	者設為	No.	14201	~	14400
將在 No.	13601	~	13800	的 R118 中	導入 N1	者設為	No.	14401	~	14600
將在 No.	13601	~	13800	的 R115 中	導入 A4	者設為	No.	14601	~	14800
將在 No.	13601	~	13800	的 R116 中	導入 A4	者設為	No.	14801	~	15000
將在 No.	13601	~	13800	的 R117 中	導入 A4	者設為	No.	15001	~	15200
將在 No.	13601	~	13800	的 R118 中	導入 A4	者設為	No.	15201	~	15400
將在 No.	13601	~	13800	的 R115 中	導入 N5	者設為	No.	15401	~	15600
將在 No.	13601	~	13800	的 R116 中	導入 N5	者設為	No.	15601	~	15800
將在 No.	13601	~	13800	的 R117 中	導入 N5	者設為	No.	15801	~	16000
將在 No.	13601	~	13800	的 R118 中	導入 N5	者設為	No.	16001	~	16200

【0045】 又，揭示有將存在於化合物1~22600的分子內之氫原子全部取代為氬原子者作為化合物1d~22600d。再者，在上述所例示之化合物中存在旋轉異構物之情況下，在本說明書中還揭示有旋轉異構物的混合物和分離之各旋轉異構物。

【0046】 在本發明的一態樣中，選擇具有線對稱結構之化合物作為通式（1）所表示之化合物。在本發明的一態樣中，選擇具有非對稱結構之化合物作為通式（1）所表示之化合物。

在本發明的一態樣中，選擇化合物1~3200及1d~3200d作為通式（1）所表示之化合物。在本發明的一態樣中，選擇化合物3201~5800及3201d~5800d作為通式（1）所表示之化合物。在本發明的一態樣中，選擇化合物5801~7800及5801d~7800d作為通式（1）所表示之化合物。在本發明的一態樣中，選擇化合物7801~11000及7801d~11000d作為通式（1）所表示之化合物。在本發明的一態樣中，選擇化合物11001~13600及11001d~13600d作為通式（1）所表示之化合物。在本發明的一

態樣中，選擇化合物13601~16200及13601d~16200d作為通式(1)所表示之化合物。在本發明的一態樣中，選擇化合物16201~18200及16201d~18200d作為通式(1)所表示之化合物。在本發明的一態樣中，選擇化合物18201~22600及18201d~22600d作為通式(1)所表示之化合物。

【0047】通式(1)所表示之化合物可以為受體基團不與通式(1)的骨架鍵結者。在此所述之受體基團為哈米特的 σ_p 值為正的基團。通式(1)所表示之化合物可以為不具有哈米特的 σ_p 值為0.2以上的基團者。

【0048】例如，在意圖藉由蒸鍍法將包含通式(1)所表示之化合物之有機層形成為膜而使用之情況下，通式(1)所表示之化合物的分子量為1500以下為較佳，1200以下為更佳，1000以下為進一步較佳，900以下為更進一步較佳。分子量的下限值為通式(1)所表示之化合物組的最小化合物的分子量。

通式(1)所表示之化合物與分子量無關地可以藉由塗佈法進行成膜。只要使用塗佈法，則即使為分子量相對大的化合物亦能夠進行成膜。通式(1)所表示之化合物具有容易溶解於有機溶劑中等優點。因此，通式(1)所表示之化合物容易適用塗佈法且容易純化以提高純度。

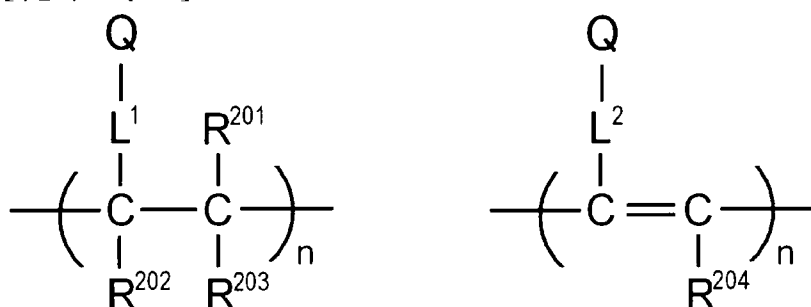
【0049】應用本發明，亦可以考慮將在分子內包含複數個通式(1)所表示之結構之化合物用作發光材料。

例如，可以考慮預先使聚合性基存在於通式(1)所表示之結構中，並將藉由使該聚合性基聚合而獲得之聚合物用作發光材料。具體而言，可以考慮準備在通式(1)所表示之結構中的任一個(例如， Ar^1 、D、A、 $R^1 \sim R^4$ 中的任一個)中包含聚合性官能基之單體，藉由使其單獨聚合或者

使其與其他單體共聚而獲得具有重複單元之聚合物，並將該聚合物用作發光材料。或者，亦可以考慮藉由使通式（1）所表示之化合物彼此耦合而獲得二聚體或三聚體，並將該等用作發光材料。

【0050】作為具有包含通式（1）所表示之結構之重複單元之聚合物的例，可以舉出包含下述兩個通式中的任一個所表示之結構之聚合物。

[化學式16]



【0051】在上述通式中，Q表示包含通式（1）所表示之結構之基團，L¹及L²表示連接基。連接基的碳數較佳為0~20，更佳為1~15，進一步較佳為2~10。連接基為具有-X¹¹-L¹¹-所表示之結構者為較佳。其中，X¹¹表示氧原子或硫原子，氧原子為較佳。L¹¹表示連接基，經取代或未經取代的伸烷基或者經取代或未經取代的伸芳基為較佳，碳數1~10的經取代或未經取代的伸烷基或者經取代或未經取代的伸苯基為更佳。

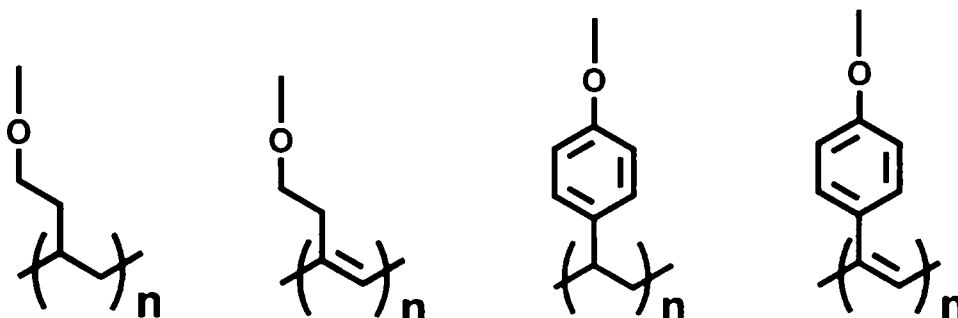
R²⁰¹、R²⁰²、R²⁰³及R²⁰⁴分別獨立地表示取代基。較佳為碳數1~6的經取代或未經取代的烷基、碳數1~6的經取代或未經取代的烷氧基、鹵素原子，更佳為碳數1~3的未經取代的烷基、碳數1~3的未經取代的烷氧基、氟原子、氯原子，進一步較佳為碳數1~3的未經取代的烷基、碳數1~3的未經取代的烷氧基。

L¹及L²所表示之連接基能夠與構成Q之通式（1）所表示之結構中的任一個位置（例如，Ar¹、D、A、R¹~R⁴中的任一個）鍵結。可以兩個以

上的連接基與一個Q連接而形成交聯結構或網狀結構。

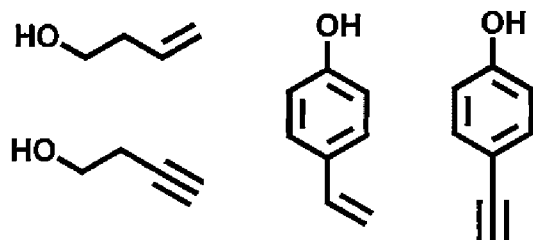
【0052】 作為重複單元的具體的結構例，可以舉出下述式所表示之結構。

[化學式17]



【0053】 具有包含該等式之重複單元之聚合物能夠藉由如下來合成：向通式（1）所表示之結構中的任一個（例如， Ar^1 、 D 、 A 、 $R^1 \sim R^4$ 中的任一個）中導入羥基，將其作為連接子使下述化合物進行反應而導入聚合性基，並使該聚合性基聚合。

[化學式18]



【0054】 在分子內包含通式（1）所表示之結構之聚合物可以為僅由具有通式（1）所表示之結構之重複單元組成之聚合物，亦可以為包含具有除此以外的結構之重複單元之聚合物。又，聚合物中所包含之具有通式（1）所表示之結構之重複單元可以為單獨一種，亦可以為兩種以上。作為不具有通式（1）所表示之結構的重複單元，可以舉出從通常的共聚中所使用之單體衍生者。例如，可以舉出從乙烯、苯乙烯等具有乙烯性不飽和鍵之單體衍生之重複單元。

【0055】 通式(1)所表示之化合物不包含金屬原子為較佳。例如，作為通式(1)所表示之化合物，能夠選擇由選自包括碳原子、氫原子、氟原子、氮原子、氧原子及硫原子之群組中的原子組成之化合物。例如，作為通式(1)所表示之化合物，能夠選擇由選自包括碳原子、氫原子、氟原子、氮原子及氧原子之群組中的原子組成之化合物。例如，作為通式(1)所表示之化合物，能夠選擇由選自包括碳原子、氫原子、氟原子、氮原子及硫原子之群組中的原子組成之化合物。例如，作為通式(1)所表示之化合物，能夠選擇由選自包括碳原子、氫原子、氟原子及氮原子之群組中的原子組成之化合物。例如，作為通式(1)所表示之化合物，能夠選擇由選自包括碳原子、氫原子及氮原子之群組中的原子組成之化合物。

【0056】 在本說明書中，“烷基”可以為直鏈狀、支鏈狀、環狀中的任一個。又，可以混合存在直鏈部分、環狀部分及支鏈部分中的兩種以上。烷基的碳數例如能夠設為1以上、2以上、4以上。又，碳數能夠設為30以下、20以下、10以下、6以下、4以下。作為烷基的具體例，可以舉出甲基、乙基、正丙基、異丙基、正丁基、異丁基、第三丁基、正戊基、異戊基、正己基、異己基、2-乙基己基、正庚基、異庚基、正辛基、異辛基、正壬基、異壬基、正癸基、異癸基、環戊基、環己基、環庚基。取代基的烷基可以進一步經芳基取代。

“烯基”可以為直鏈狀、支鏈狀、環狀中的任一個。又，可以混合存在直鏈部分、環狀部分及支鏈部分中的兩種以上。烯基的碳數例如能夠設為2以上、4以上。又，碳數能夠設為30以下、20以下、10以下、6以下、4以下。作為烯基的具體例，可以舉出乙烯基、正丙烯基、異丙烯基、正

丁烯基、異丁烯基、正戊烯基、異戊烯基、正己烯基、異己烯基、2-乙基己烯基。取代基的烯基可以進一步經取代基取代。

“芳基”及“雜芳基”可以為單環，亦可以為兩個以上的環縮合而成之縮合環。在為縮合環之情況下，所縮合之環的數量為2~6為較佳，例如能夠從2~4中進行選擇。作為環的具體例，可以舉出苯環、吡啶環、嘧啶環、三吡啶環、萘環、蔥環、菲環、聯三伸苯環、喹啉環、吡啶環、喹啉環、噻啶環，亦可以為該等縮合而成之環。作為芳基或雜芳基的具體例，可以舉出苯基、1-萘基、2-萘基、1-蔥基、2-蔥基、9-蔥基、2-吡啶基、3-吡啶基、4-吡啶基。芳基的環骨架構成原子數為6~40為較佳，6~20為更佳，可以在6~14的範圍內進行選擇或者在6~10的範圍內進行選擇。雜芳基的環骨架構成原子數為4~40為較佳，5~20為更佳，可以在5~14的範圍內進行選擇或者在5~10的範圍內進行選擇。“伸芳基”及“雜芳基”能夠設為將芳基及雜芳基的說明中之價數從1替換為2者。

【0057】 在本說明書中，“取代基組A”表示選自包括羥基、鹵素原子（例如，氟原子、氯原子、溴原子、碘原子）、烷基（例如，碳數1~40）、烷氧基（例如，碳數1~40）、烷硫基（例如，碳數1~40）、芳基（例如，碳數6~30）、芳氧基（例如，碳數6~30）、芳硫基（例如，碳數6~30）、雜芳基（例如，環骨架構成原子數5~30）、雜芳氧基（例如，環骨架構成原子數5~30）、雜芳硫基（例如，環骨架構成原子數5~30）、醯基（例如，碳數1~40）、烯基（例如，碳數1~40）、炔基（例如，碳數1~40）、烷氧羰基（例如，碳數1~40）、芳氧羰基（例如，碳數1~40）、雜芳氧羰基（例如，碳數1~40）、甲矽烷基（例如，碳數1~40的三烷基甲矽烷基）及硝基之群組中的一個基團或兩

個以上組合而獲得之基團。

在本說明書中，“取代基組B”表示選自包括烷基（例如，碳數1～40）、烷氧基（例如，碳數1～40）、芳基（例如，碳數6～30）、芳氧基（例如，碳數6～30）、雜芳基（例如，環骨架構成原子數5～30）、雜芳氧基（例如，環骨架構成原子數5～30）、二芳胺基（例如，碳數0～20）之群組中的一個基團或兩個以上組合而獲得之基團。

在本說明書中，“取代基組C”表示選自包括烷基（例如，碳數1～20）、芳基（例如，碳數6～22）、雜芳基（例如，環骨架構成原子數5～20）、二芳胺基（例如，碳數12～20）之群組中的一個基團或兩個以上組合而獲得之基團。

在本說明書中，“取代基組D”表示選自包括烷基（例如，碳數1～20）、芳基（例如，碳數6～22）及雜芳基（例如，環骨架構成原子數5～20）之群組中的一個基團或兩個以上組合而獲得之基團。

在本說明書中，“取代基組E”表示選自包括烷基（例如，碳數1～20）及芳基（例如，碳數6～22）之群組中的一個基團或兩個以上組合而獲得之基團。

在本說明書中，關於記載為“取代基”或“經取代或未經取代的”時的取代基，例如可以從取代基組A進行選擇，亦可以從取代基組B進行選擇，亦可以從取代基組C進行選擇，亦可以從取代基組D進行選擇，亦可以從取代基組E進行選擇。

【0058】 在某一實施形態中，通式（1）所表示之化合物為發光材料。

在某一實施形態中，通式（1）所表示之化合物為能夠發出延遲螢光

之化合物。

在本揭示的某一實施形態中，在用熱或電子機構激發通式（1）所表示之化合物時，能夠在UV區域、可視光譜中的藍色、綠色、黃色、橙色、紅色區域（例如，約420nm～約500nm、約500nm～約600nm或約600nm～約700nm）或近紅外線區域中發出光。

在本揭示的某一實施形態中，在用熱或電子機構激發通式（1）所表示之化合物時，能夠在可視光譜中的紅色或橙色區域（例如，約620nm～約780nm、約650nm）中發出光。

在本揭示的某一實施形態中，在用熱或電子機構激發通式（1）所表示之化合物時，能夠在可視光譜中的橙色或黃色區域（例如，約570nm～約620nm、約590nm、約570nm）中發出光。

在本揭示的某一實施形態中，在用熱或電子機構激發通式（1）所表示之化合物時，能夠在可視光譜中的綠色區域（例如，約490nm～約575nm、約510nm）中發出光。

在本揭示的某一實施形態中，在用熱或電子機構激發通式（1）所表示之化合物時，能夠在可視光譜中的藍色區域（例如，約400nm～約490nm、約475nm）中發出光。

在本揭示的某一實施形態中，在用熱或電子機構激發通式（1）所表示之化合物時，能夠在紫外光譜區域（例如，280～400nm）中發出光。

在本揭示的某一實施形態中，在用熱或電子機構激發通式（1）所表示之化合物時，能夠在紅外光譜區域（例如，780nm～2 μ m）中發出光。

在本揭示的某一實施形態中，能夠製作使用了通式（1）所表示之化合物之有機半導體元件。例如，能夠製作使用了通式（1）所表示之化合

物之CMOS（互補型金屬氧化膜半導體）等。在本揭示的某一實施形態中，能夠使用通式（1）所表示之化合物來製作有機電致發光元件或固體攝像元件（例如，CMOS圖像感測器）等有機發光元件。

【0059】關於小分子的化學庫的電子的特性，能夠使用基於公知的ab initio之量子化學計算來計算出。例如，作為基底，使用6-31G*及貝克的3參數、使用了作為Lee-Yang-Parr雜化泛函已知之函數組之依賴時間的密度泛函理論來解析Hartree-Fock方程式（TD-DFT/B3LYP/6-31G*），並篩選具有特定的閾值以上的HOMO及特定的閾值以下的LUMO之分子碎片（部分）。

藉此，例如在具有-6.5eV以上的HOMO能量（例如，離子化電位）時，能夠選擇供體部分（“D”）。又，例如在具有-0.5eV以下的LUMO能量（例如，電子親和力）時，能夠選擇受體部分（“A”）。橋接部分（“B”）例如為能夠將受體和供體部分嚴格地限制為特定的立體結構之強共軛系統，從而防止產生供體及受體部分的 π 共軛系統之間的重複。

在某一實施形態中，化合物庫使用以下特性中的一個以上來進行篩選。

1. 特定波長附近之發光
2. 計算出之特定能階以上的三重態
3. 特定值以下的 ΔE_{ST} 值
4. 特定值以上的量子產率
5. HOMO能階
6. LUMO能階

在某一實施形態中，77K下之最低的單重態激發狀態與最低的三重態

激發狀態之差 (ΔE_{ST}) 小於約0.5eV、小於約0.4eV、小於約0.3eV、小於約0.2eV或小於約0.1eV。在某一實施形態中， ΔE_{ST} 值小於約0.09eV、小於約0.08eV、小於約0.07eV、小於約0.06eV、小於約0.05eV、小於約0.04eV、小於約0.03eV、小於約0.02eV或小於約0.01eV。

在某一實施形態中，通式(1)所表示之化合物表示超過25%的、例如約30%、約35%、約40%、約45%、約50%、約55%、約60%、約65%、約70%、約75%、約80%、約85%、約90%、約95%或其以上的量子產率。

【0060】 [通式(1)所表示之化合物的合成方法]

通式(1)所表示之化合物為新穎化合物。

關於通式(1)所表示之化合物，能夠藉由組合已知的反應來合成。例如，能夠藉由利用閉環反應或者利用取代反應來合成。關於具體的合成條件，能夠參照後述合成例。

【0061】 [使用了通式(1)所表示之化合物之結構物]

在某一實施形態中，與和通式(1)所表示之化合物組合，使同化合物分散，和同化合物共價鍵，塗佈同化合物，承載同化合物或和同化合物集合之一個以上的材料(例如，小分子、聚合物、金屬、金屬錯體等)一起使用而形成固體狀的薄膜或層。例如，能夠使通式(1)所表示之化合物與電活性材料組合而形成薄膜。在一些情況下，可以使通式(1)所表示之化合物與空穴傳輸聚合物組合。在一些情況下，可以使通式(1)所表示之化合物與電子傳輸聚合物組合。在一些情況下，可以使通式(1)所表示之化合物與空穴傳輸聚合物及電子傳輸聚合物組合。在一些情況下，可以使通式(1)所表示之化合物與具有空穴傳輸部和電子傳輸部這

兩者之共聚物組合。藉由如上所述的實施形態，能夠使固體狀的薄膜或在層內形成之電子和/或空穴與通式(1)所表示之化合物相互作用。

【0062】 [薄膜的形成]

在某一實施形態中，包含本發明的通式(1)所表示之化合物之薄膜能夠藉由濕式步驟形成。在濕式步驟中，將包含本發明的化合物之組成物溶解而獲得之溶液塗佈於表面上，在去除溶劑之後形成薄膜。作為濕式步驟，可以舉出旋塗法、狹縫塗佈法、噴墨法(噴塗法)、凹版印刷法、膠版印刷法、柔版印刷法，但是並不限定於該等。在濕式步驟中，選擇使用適當的有機溶劑，該有機溶劑能夠溶解包含本發明的化合物之組成物。在某一實施形態中，向組成物中所包含之化合物中導入提高在有機溶劑中之溶解性之取代基(例如，烷基)。

在某一實施形態中，包含本發明的化合物之薄膜能夠藉由乾式步驟形成。在某一實施形態中，作為乾式步驟，能夠採用真空蒸鍍法，但是並不限定於此。在採用真空蒸鍍法之情況下，可以使構成薄膜之化合物從單獨的蒸鍍源進行共蒸鍍，亦可以從混合了化合物之單一的蒸鍍源進行共蒸鍍。在使用單一的蒸鍍源之情況下，可以使用混合了化合物的粉末之混合粉，亦可以使用壓縮了該混合粉之壓縮成形體，亦可以使用將各化合物進行加熱熔融並冷卻之混合物。在某一實施形態中，藉由在單一的蒸鍍源中所包含之複數個化合物的蒸鍍速度(重量減少速度)一致或幾乎一致之條件下進行共蒸鍍，能夠形成與蒸鍍源中所包含之複數個化合物的組成比對應之組成比的薄膜。只要以與所形成之薄膜的組成比相同的組成比混合複數個化合物以設為蒸鍍源，則能夠容易形成具有所期望的組成比之薄膜。在某一實施形態中，能夠確定要共蒸鍍之各化合物成為相同的重量減少率

之溫度，並將該溫度用作共蒸鍍時的溫度。

【0063】 [通式 (1) 所表示之化合物的使用的例]

通式 (1) 所表示之化合物用作有機發光元件的材料。尤其，較佳地用於有機發光二極體等中。

有機發光二極體：

本發明的一態樣與作為有機發光元件的發光材料的、本發明的通式 (1) 所表示之化合物的使用相關。在某一實施形態中，本發明的通式 (1) 所表示之化合物能夠有效地用作有機發光元件的發光層中之發光材料。在某一實施形態中，通式 (1) 所表示之化合物包含發出延遲螢光之延遲螢光 (延遲螢光體)。在某一實施形態中，本發明提供具有通式 (1) 所表示之結構之延遲螢光體。在某一實施形態中，本發明與作為延遲螢光體的通式 (1) 所表示之化合物的使用相關。在某一實施形態中，在本發明中，通式 (1) 所表示之化合物能夠用作主體材料，並且能夠與一個以上的發光材料一起使用，發光材料可以為螢光材料、磷光材料或 TADF。在某一實施形態中，通式 (1) 所表示之化合物亦能夠用作空穴傳輸材料。在某一實施形態中，通式 (1) 所表示之化合物能夠用作電子傳輸材料。在某一實施形態中，本發明與從通式 (1) 所表示之化合物產生延遲螢光之方法相關。在某一實施形態中，包含化合物作為發光材料之有機發光元件發出延遲螢光，並且顯示高光輻射效率。

在某一實施形態中，發光層包含通式 (1) 所表示之化合物，通式 (1) 所表示之化合物與基材平行地取向。在某一實施形態中，基材為薄膜形成表面。在某一實施形態中，通式 (1) 所表示之化合物相對於薄膜形成表面的取向影響藉由排列之化合物所發出之光的傳播方向或者決定該

方向。在某一實施形態中，對藉由通式(1)所表示之化合物所發出之光之傳播方向進行排列以改善來自發光層之光提取效率。

本發明的一態樣與有機發光元件相關。在某一實施形態中，有機發光元件包括發光層。在某一實施形態中，發光層包含通式(1)所表示之化合物作為發光材料。在某一實施形態中，有機發光元件為有機光致發光元件(有機PL元件)。在某一實施形態中，有機發光元件為有機電致發光元件(有機EL元件)。在某一實施形態中，通式(1)所表示之化合物輔助發光層中所包含之其他發光材料的光輻射(作為所謂之輔助摻雜劑)。在某一實施形態中，發光層中所包含之通式(1)所表示之化合物處於其最低的激發單重態能階，並且包含在發光層中所包含之主體材料的最低激發單重態能階與發光層中所包含之其他發光材料的最低激發單重態能階之間。

在某一實施形態中，有機光致發光元件包括至少一個發光層。在某一實施形態中，有機電致發光元件至少包括陽極、陰極及前述陽極與前述陰極之間的有機層。在某一實施形態中，有機層至少包括發光層。在某一實施形態中，有機層僅包括發光層。在某一實施形態中，有機層除了發光層以外還包括一個以上的有機層。作為有機層的例，可以舉出空穴傳輸層、空穴注入層、電子障壁層、空穴障壁層、電子注入層、電子傳輸層及激子障壁層。在某一實施形態中，空穴傳輸層可以為具有空穴注入功能之空穴注入傳輸層，電子傳輸層可以為具有電子注入功能之電子注入傳輸層。將有機電致發光元件的例示於圖1中。

【0064】發光層：

在某一實施形態中，發光層為分別從陽極及陰極注入之空穴及電子

再鍵結而形成激子之層。在某一實施形態中，層發出光。

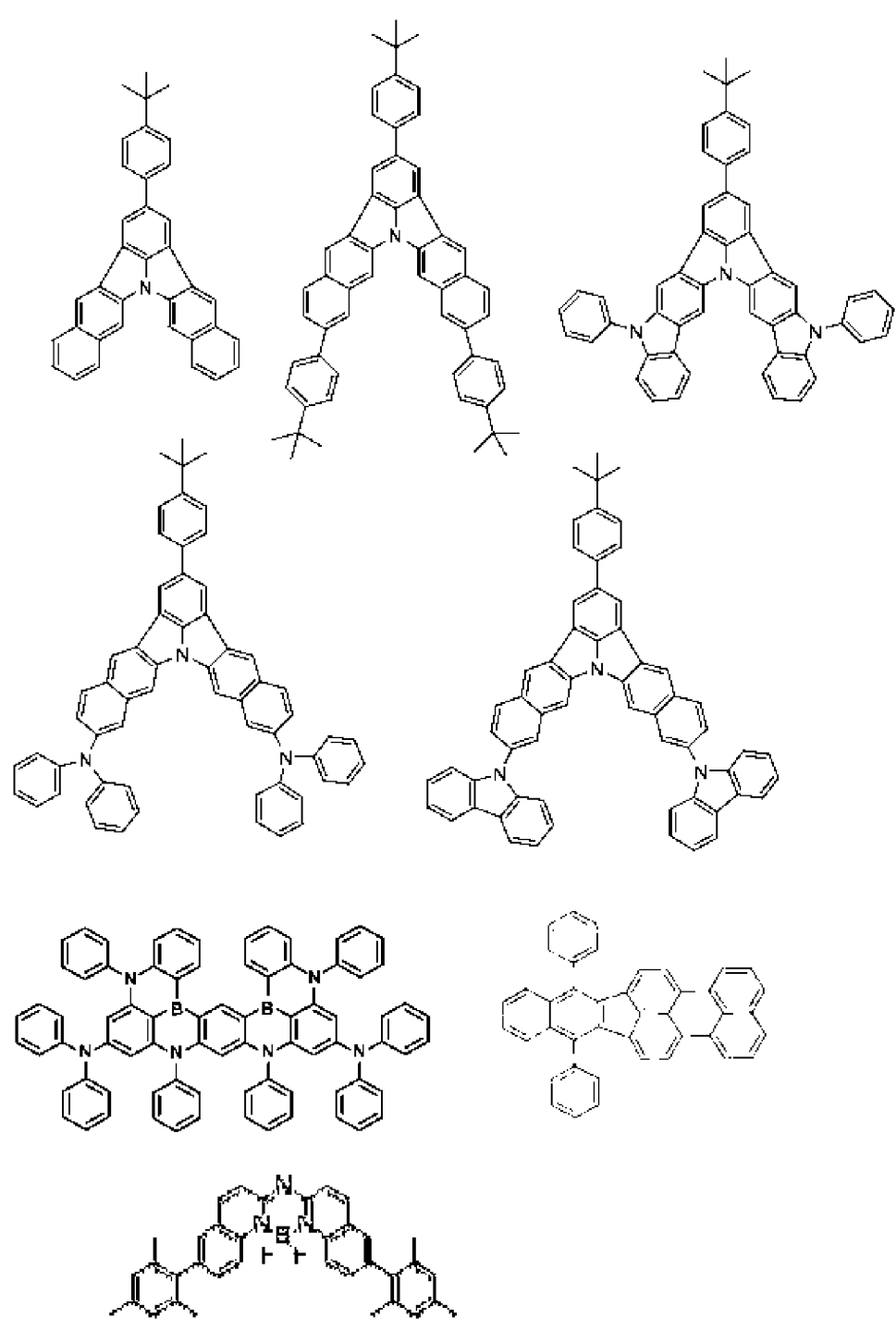
在某一實施形態中，僅使用發光材料作為發光層。在某一實施形態中，發光層包含發光材料和主體材料。在某一實施形態中，發光材料為通式(1)所表示之化合物。在某一實施形態中，為了提高有機電致發光元件及有機光致發光元件的光輻射效率，將在發光材料中所產生之單重態激子及三重態激子限制在發光材料內。在某一實施形態中，在發光層中，除了發光材料以外還使用主體材料。在某一實施形態中，主體材料為有機化合物。在某一實施形態中，有機化合物具有激發單重態能量及激發三重態能量，其至少一個高於本發明的發光材料的該等。在某一實施形態中，本發明的發光材料中所產生之單重態激子及三重態激子被限制在本發明的發光材料的分子中。在某一實施形態中，為了提高光輻射效率，單重態及三重態的激子被充分地限制。在某一實施形態中，儘管仍然可以獲得高光輻射效率，但是單重態激子及三重態激子無法被充分地限制，亦即能夠實現高光輻射效率之主體材料能夠無特別限定地用於本發明中。在某一實施形態中，在本發明的元件的發光層中的發光材料中產生光輻射。在某一實施形態中，輻射光包含螢光及延遲螢光這兩者。在某一實施形態中，輻射光包含來自主體材料的輻射光。在某一實施形態中，輻射光由來自主體材料的輻射光組成。在某一實施形態中，輻射光包含來自通式(1)所表示之化合物的輻射光和來自主體材料的輻射光。在某一實施形態中，可以使用TADF分子和主體材料。在某一實施形態中，TADF為輔助摻雜劑，激發單重態能量低於發光層中的主體材料，並且激發單重態能量高於發光層中的發光材料。

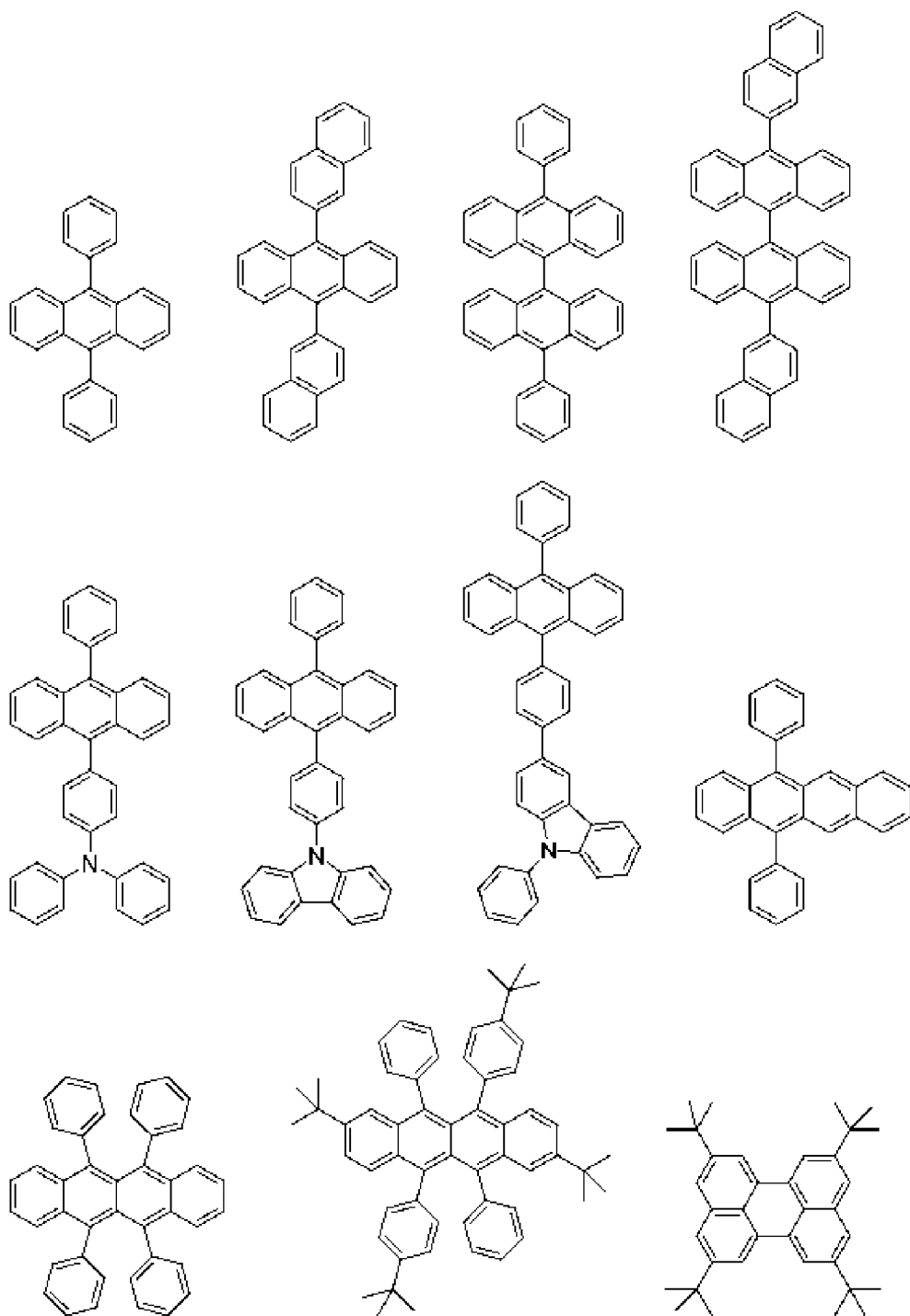
【0065】 在將通式(1)所表示之化合物用作輔助摻雜劑時，可以採

用各種化合物作為發光材料（較佳為螢光材料）。作為該種發光材料，能夠使用蔥衍生物、稠四苯衍生物、稠四苯衍生物、芘衍生物、芘衍生物、蒽衍生物、紅螢烯衍生物、香豆素衍生物、吡喃衍生物、芘衍生物、萸衍生物、蔥基（Anthryl）衍生物、吡咯亞甲基衍生物、聯三苯衍生物、伸聯三苯（terphenylene）衍生物、熒蔥衍生物、胺衍生物、喹吖酮衍生物、嘔二唑衍生物、丙二腈衍生物、吡喃衍生物、呋唑衍生物、久洛尼定衍生物、噻唑衍生物、具有金屬（Al，Zn）之衍生物等。該等例示骨架可以具有取代基，亦可以不具有取代基。又，可以組合該等例示骨架彼此。

在以下中，例示出能夠與具有通式（1）所表示之結構之輔助摻雜劑組合使用之發光材料。

【0066】 [化學式19]





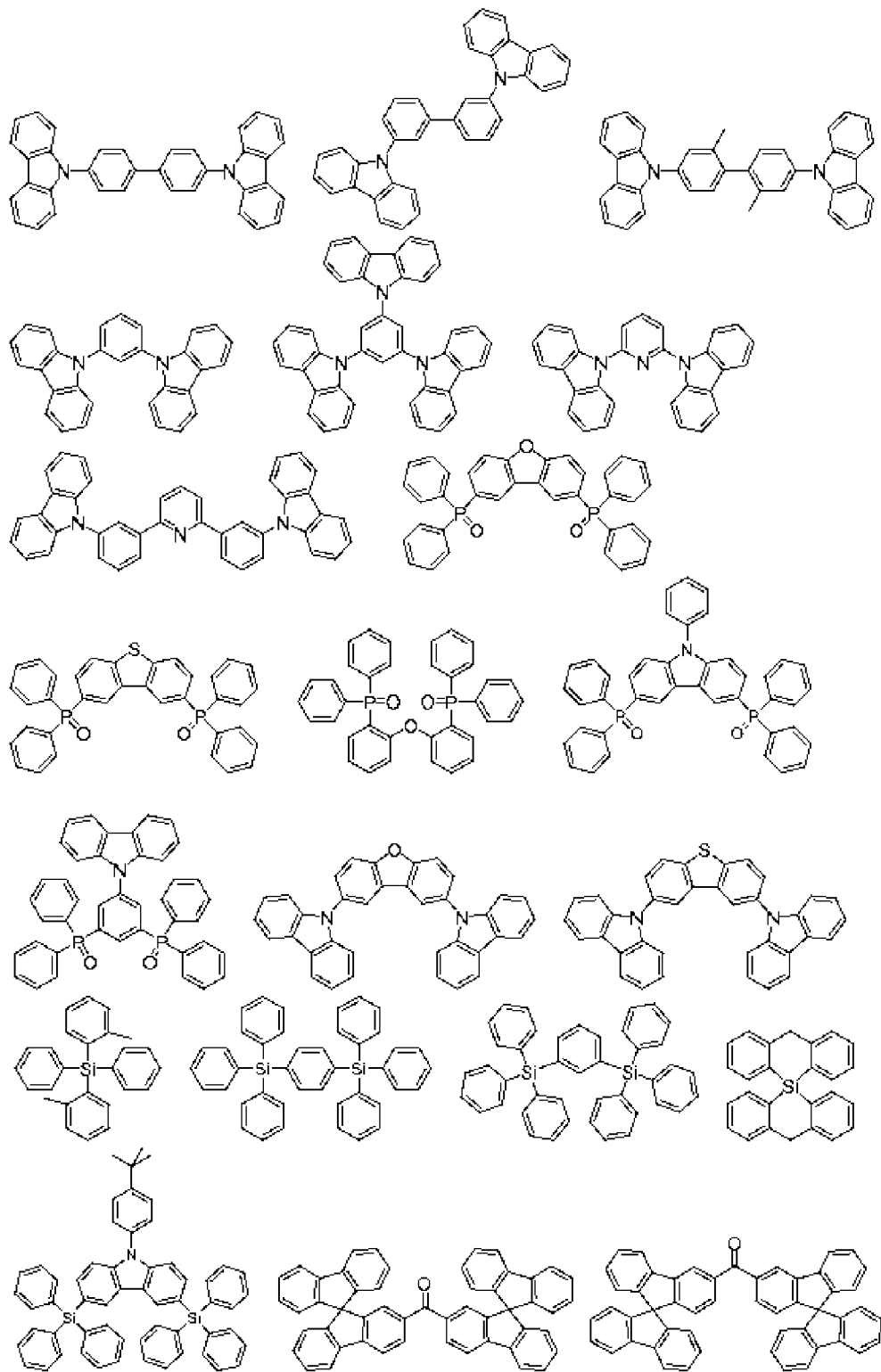
一起使用之發光材料。

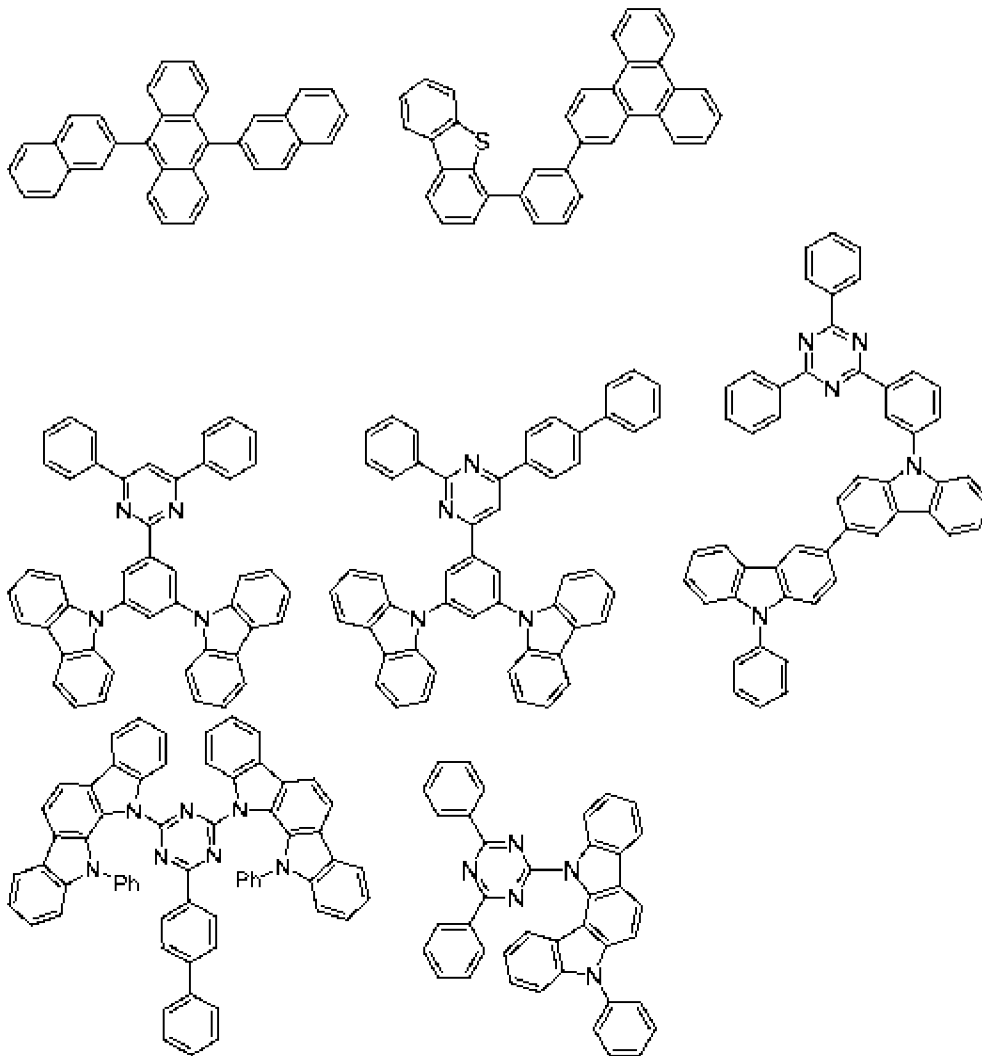
【0068】 在某一實施形態中，在使用主體材料時，作為發光層中所包含之發光材料的本發明的化合物的量為0.1重量%以上。在某一實施形態中，在使用主體材料時，作為發光層中所包含之發光材料的本發明的化合物的量為1重量%以上。在某一實施形態中，在使用主體材料時，作為發光層中所包含之發光材料的本發明的化合物的量為50重量%以下。在某一實施形態中，在使用主體材料時，作為發光層中所包含之發光材料的本發明的化合物的量為20重量%以下。在某一實施形態中，在使用主體材料時，作為發光層中所包含之發光材料的本發明的化合物的量為10重量%以下。

在某一實施形態中，發光層的主體材料為具有空穴傳輸功能及電子傳輸功能之有機化合物。在某一實施形態中，發光層的主體材料為防止輻射光的波長增加之有機化合物。在某一實施形態中，發光層的主體材料為具有高的玻璃轉移溫度之有機化合物。

【0069】 在一些實施形態中，主體材料選自包括以下之群組：

[化學式20]





在某一實施形態中，發光層包含兩種以上的結構不同之TADF分子。例如，激發單重態能階按主體材料、第1TADF分子、第2TADF分子的順序高，並且能夠設為包含該等三種材料之發光層。此時，第1TADF分子和第2TADF分子的最低激發單重態能階與77K的最低激發三重態能階之差 ΔE_{ST} 均為0.3eV以下為較佳，0.25eV以下為更佳，0.2eV以下為更佳，0.15eV以下為更佳，0.1eV以下為進一步較佳，0.07eV以下為更進一步較佳，0.05eV以下為又進一步較佳，0.03eV以下為再進一步較佳，0.01eV以下為特佳。發光層中之第1TADF分子的濃度大於第2TADF分子的濃度為較佳。又，發光層中之主體材料的濃度大於第2TADF分子的濃度為較佳。發光層中之第1TADF分子的濃度可以大於主體材料的濃度，亦可以

第 59 頁(發明說明書)

小於主體材料的濃度，亦可以相同。在某一實施形態中，可以將發光層內的組成設為如下：將主體材料設為10~70重量%，將第1TADF分子設為10~80重量%，將第2TADF分子設為0.1~30重量%。在某一實施形態中，可以將發光層內的組成設為如下：將主體材料設為20~45重量%，將第1TADF分子設為50~75重量%，將第2TADF分子設為5~20重量%。在某一實施形態中，基於第1TADF分子和主體材料的共蒸鍍膜（該共蒸鍍膜中之第1TADF分子的濃度=A重量%）的光激發之發光量子產率 ϕ_{PL1} （A）與基於第2TADF分子和主體材料的共蒸鍍膜（該共蒸鍍膜中之第2TADF分子的濃度=A重量%）的光激發之發光量子產率 ϕ_{PL2} （A）滿足 ϕ_{PL1} （A）> ϕ_{PL2} （A）的關係式。在某一實施形態中，基於第2TADF分子和主體材料的共蒸鍍膜（該共蒸鍍膜中之第2TADF分子的濃度=B重量%）的光激發之發光量子產率 ϕ_{PL2} （B）與基於第2TADF分子的單獨膜的光激發之發光量子產率 ϕ_{PL2} （100）滿足 ϕ_{PL2} （B）> ϕ_{PL2} （100）的關係式。在某一實施形態中，發光層能夠包含三種結構不同之TADF分子。本發明的化合物可以為發光層中所包含之複數個TADF化合物中的任一個。

在某一實施形態中，發光層能夠由選自包括主體材料、輔助摻雜劑及發光材料之群組中的材料構成。在某一實施形態中，發光層不包含金屬元素。在某一實施形態中，發光層能夠由材料構成，該材料僅由選自包括碳原子、氫原子、氟原子、氮原子、氧原子及硫原子之群組中的原子構成。或者，發光層亦能夠由材料構成，該材料僅由選自包括碳原子、氫原子、氟原子、氮原子及氧原子之群組中的原子構成。或者，發光層亦能夠由材料構成，該材料僅由選自包括碳原子、氫原子、氮原子及氧原子之群

組中的原子構成。

在發光層包含除了本發明的化合物以外的TADF材料時，該TADF材料可以為公知的延遲螢光材料。作為較佳延遲螢光材料，包含WO2013/154064號公報的0008～0048段及0095～0133段、WO2013/011954號公報的0007～0047段及0073～0085段、WO2013/011955號公報的0007～0033段及0059～0066段、WO2013/081088號公報的0008～0071段及0118～0133段、日本特開2013-256490號公報的0009～0046段及0093～0134段、日本特開2013-116975號公報的0008～0020段及0038～0040段、WO2013/133359號公報的0007～0032段及0079～0084段、WO2013/161437號公報的0008～0054段及0101～0121段、日本特開2014-9352號公報的0007～0041段及0060～0069段、日本特開2014-9224號公報的0008～0048段及0067～0076段、日本特開2017-119663號公報的0013～0025段、日本特開2017-119664號公報的0013～0026段、日本特開2017-222623號公報的0012～0025段、日本特開2017-226838號公報的0010～0050段、日本特開2018-100411號公報的0012～0043段、WO2018/047853號公報的0016～0044段中所記載之通式中所包含之化合物、尤其為示例性化合物且能夠輻射延遲螢光者。又，其中，能夠較佳地採用日本特開2013-253121號公報、WO2013/133359號公報、WO2014/034535號公報、WO2014/115743號公報、WO2014/122895號公報、WO2014/126200號公報、WO2014/136758號公報、WO2014/133121號公報、WO2014/136860號公報、WO2014/196585號公報、WO2014/189122號公報、WO2014/168101號公報、WO2015/008580號公報、WO2014/203840號公報、WO2015/002213

號公報、WO2015/016200號公報、WO2015/019725號公報、WO2015/072470號公報、WO2015/108049號公報、WO2015/080182號公報、WO2015/072537號公報、WO2015/080183號公報、日本特開2015-129240號公報、WO2015/129714號公報、WO2015/129715號公報、WO2015/133501號公報、WO2015/136880號公報、WO2015/137244號公報、WO2015/137202號公報、WO2015/137136號公報、WO2015/146541號公報、WO2015/159541號公報中所記載之發光材料且能夠輻射延遲螢光者。再者，在該段中所記載之上述公報作為本說明書的一部分而引用於此。

【0070】在以下中，對除了有機電致發光元件的各構件及發光層以外的各層進行說明。

【0071】基材：

在一些實施形態中，本發明的有機電致發光元件被基材保持，該基材並無特別限定，只要使用通常在有機電致發光元件中通常使用之、例如由玻璃、透明塑膠、石英及矽形成之任一材料即可。

【0072】陽極：

在一些實施形態中，有機電致發光裝置的陽極由金屬、合金、導電性化合物或該等組合製造。在一些實施形態中，前述金屬、合金或導電性化合物具有高的功函數（ 4eV 以上）。在一些實施形態中，前述金屬為Au。在一些實施形態中，導電性的透明材料可以從CuI、氧化銦錫（ITO）、 SnO_2 及ZnO進行選擇。在一些實施形態中，使用IDIXO（ $\text{In}_2\text{O}_3\text{-ZnO}$ ）等能夠形成透明的導電膜之非晶材料。在一些實施形態中，前述陽極為薄膜。在一些實施形態中，前述薄膜藉由蒸鍍或濺鍍來製

作。在一些實施形態中，藉由光微影方法對前述薄膜進行圖案化。在一些實施形態中，在圖案不需要高精度（例如，約 $100\mu\text{m}$ 以上）的情況下，該圖案可以使用較佳形狀的遮罩對電極材料進行蒸鍍或濺鍍而形成。在一些實施形態中，在能夠塗佈有機導電性化合物等塗佈材料時，可以使用印刷法或塗佈法等濕膜形成方法。在一些實施形態中，在輻射光穿過陽極時，陽極具有超過10%的透射率，該陽極每單位面積具有幾百歐姆以下的片電阻。在一些實施形態中，陽極的厚度為 $10\sim 1,000\text{nm}$ 。在一些實施形態中，陽極的厚度為 $10\sim 200\text{nm}$ 。在一些實施形態中，陽極的厚度依據所使用之材料而發生變動。

【0073】陰極：

在一些實施形態中，前述陰極由具有低的功函數之金屬（ 4eV 以下）（稱為電子注入金屬）、合金、導電性化合物或其組合等電極材料製作。在一些實施形態中，前述電極材料可以從鈉、鈉-鉀合金、鎂、鋰、鎂-銅混合物、鎂-銀混合物、鎂-鋁混合物、鎂-銻混合物、鋁-氧化鋁（ Al_2O_3 ）混合物、銻、鋰-鋁混合物及稀土元素進行選擇。在一些實施形態中，可以使用電子注入金屬與具有高於電子注入金屬的功函數之穩定的金屬亦即第2金屬的混合物。在一些實施形態中，前述混合物可以從鎂-銀混合物、鎂-鋁混合物、鎂-銻混合物、鋁-氧化鋁（ Al_2O_3 ）混合物、鋰-鋁混合物及鋁進行選擇。在一些實施形態中，前述混合物提高電子注入特性及對氧化之耐性。在一些實施形態中，陰極藉由蒸鍍或濺鍍將電極材料形成為薄膜來製造。在一些實施形態中，前述陰極每單位面積具有幾百歐姆以下的片電阻。在一些實施形態中，前述陰極的厚度為 $10\text{nm}\sim 5\mu\text{m}$ 。在一些實施形態中，前述陰極的厚度為 $50\sim 200\text{nm}$ 。在一些實施形態中，有機電致發

光元件的陽極及陰極中的任一個為透明或半透明，以使輻射光透射。在一些實施形態中，透明或半透明的電致發光元件提高光輻射亮度。

在一些實施形態中，藉由由針對前述陽極所述之導電性的透明的材料形成前述陰極來形成透明或半透明的陰極。在一些實施形態中，元件包含陽極和陰極，但是均為透明或半透明。

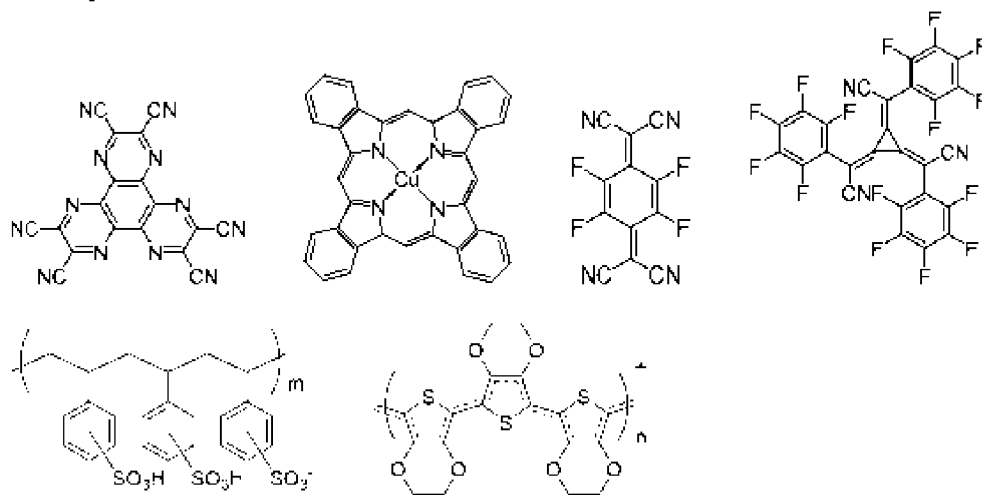
【0074】 注入層：

注入層為電極與有機層之間的層。在一些實施形態中，前述注入層減少驅動電壓，並且增強光輻射亮度。在一些實施形態中，前述注入層包括空穴注入層和電子注入層。前述注入層能夠配置於陽極與發光層或空穴傳輸層之間以及陰極與發光層或電子傳輸層之間。在一些實施形態中，存在注入層。在一些實施形態中，不存在注入層。

在以下，舉出能夠用作空穴注入材料之較佳化合物例。

【0075】 [化學式21]

$M \circ O_3$.



【0076】 接著，舉出能夠用作電子注入材料之較佳化合物例。

[化學式22]



【0077】 障壁層：

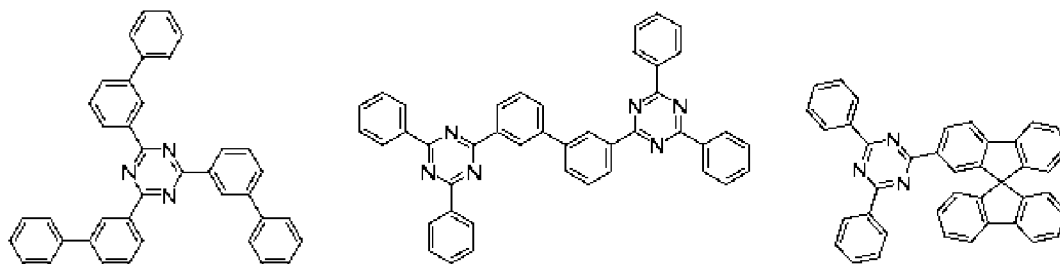
障壁層為能夠阻止存在於發光層中之電荷（電子或空穴）和/或激子向發光層的外側擴散之層。在一些實施形態中，電子障壁層存在於發光層與空穴傳輸層之間以阻止電子穿過發光層而到達空穴傳輸層。在一些實施形態中，空穴障壁層存在於發光層與電子傳輸層之間以阻止空穴穿過發光層而到達電子傳輸層。在一些實施形態中，障壁層阻止激子向發光層的外側擴散。在一些實施形態中，電子障壁層及空穴障壁層構成激子障壁層。本說明書中所使用之術語“電子障壁層”或“激子障壁層”包括具有電子障壁層的功能及激子障壁層的功能這兩者之層。

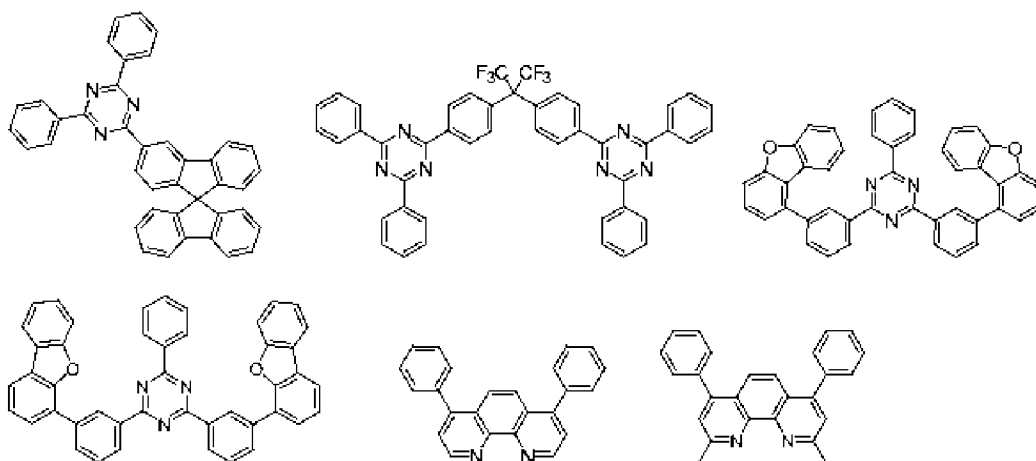
【0078】 空穴障壁層：

空穴障壁層作為電子傳輸層而發揮作用。在一些實施形態中，在電子的傳輸期間，空穴障壁層阻止空穴到達電子傳輸層。在一些實施形態中，空穴障壁層提高發光層中之電子與空穴的再鍵結的機率。用於空穴障壁層中之材料可以為與針對電子傳輸層所述者相同的材料。

在以下，舉出能夠用於空穴障壁層中之較佳化合物例。

【0079】 [化學式23]



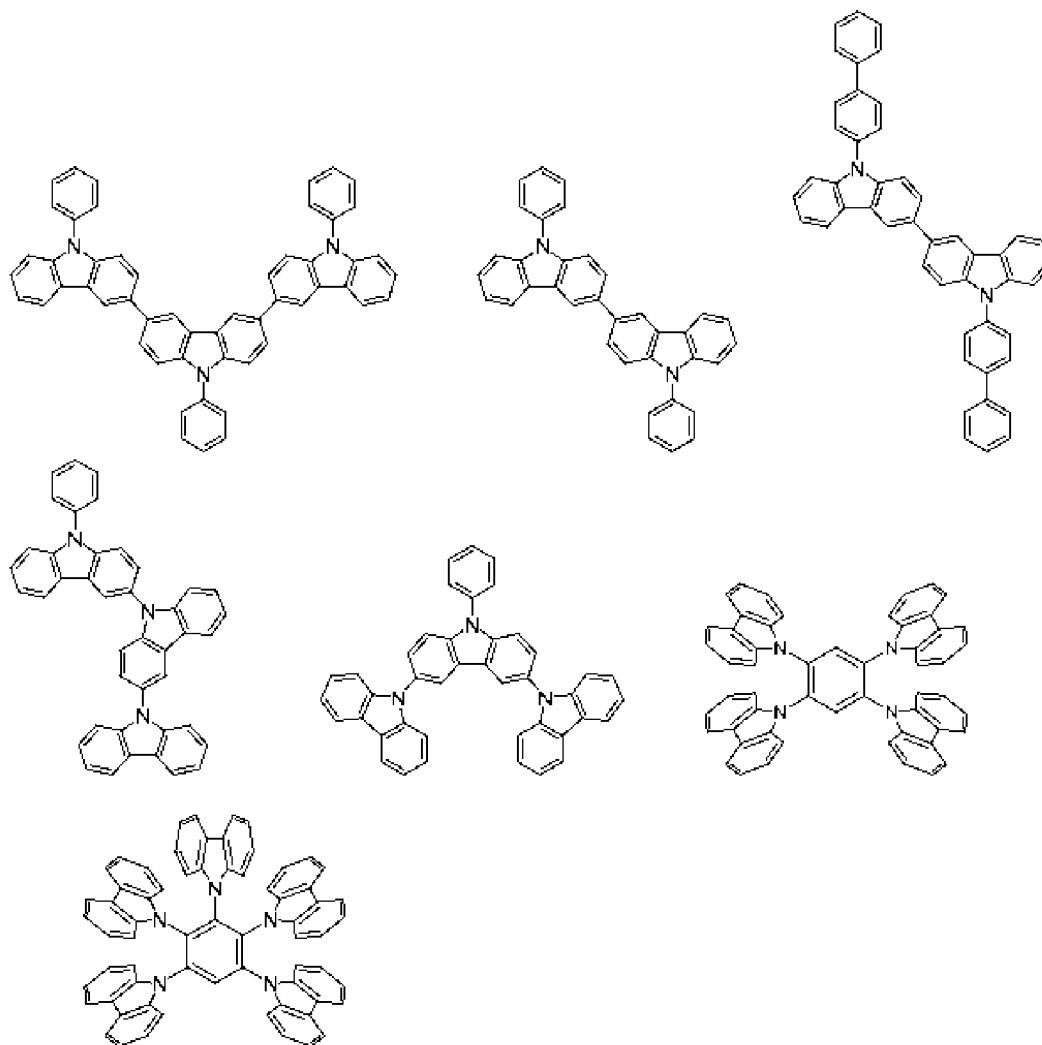


【0080】 電子障壁層：

電子障壁層傳輸空穴。在一些實施形態中，在空穴的傳輸期間，電子障壁層阻止電子到達空穴傳輸層。在一些實施形態中，電子障壁層提高發光層中之電子與空穴的再鍵結的機率。用於電子障壁層中之材料可以為與針對空穴傳輸層所述者相同的材料。

在以下，舉出能夠用作電子障壁材料之較佳化合物的具體例。

【0081】 [化學式24]



【0082】 激子障壁層：

激子障壁層阻止藉由發光層中之空穴與電子的再鍵結而產生之激子擴散至電子傳輸層。在一些實施形態中，激子障壁層能夠有效地限制（confinement）發光層中之激子。在一些實施形態中，提高裝置的光輻射效率。在一些實施形態中，激子障壁層在陽極側和陰極側中的任一側與發光層相鄰及與其兩側的發光層相鄰。在一些實施形態中，在激子障壁層存在於陽極側時，該層可以存在於空穴傳輸層與發光層之間並與該發光層相鄰。在一些實施形態中，在激子障壁層存在於陰極側時，該層可以存在於發光層與陰極之間並與該發光層相鄰。在一些實施形態中，空穴注入層、電子障壁層或相同的層存在於陽極與和陽極側的發光層相鄰之激子障

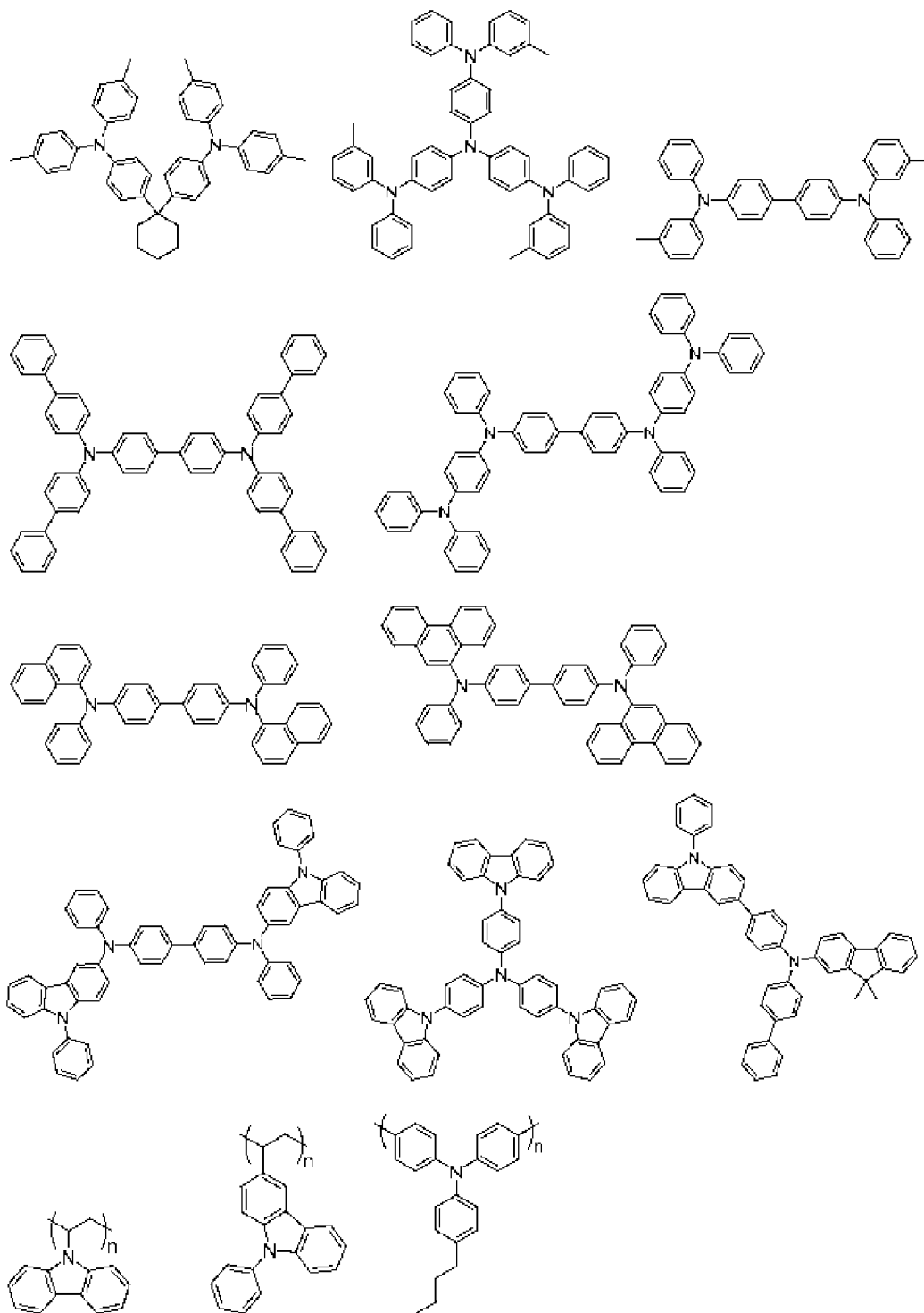
壁層之間。在一些實施形態中，空穴注入層、電子障壁層、空穴障壁層或相同的層存在於陰極與和陰極側的發光層相鄰之激子障壁層之間。在一些實施形態中，激子障壁層包含激發單重態能量和激發三重態能量，其至少一個分別高於發光材料的激發單重態能量和激發三重態能量。

【0083】空穴傳輸層：

空穴傳輸層包含空穴傳輸材料。在一些實施形態中，空穴傳輸層為單層。在一些實施形態中，空穴傳輸層具有複數個層。

在一些實施形態中，空穴傳輸材料具有空穴的注入或傳輸特性及電子的障壁特性中的一個特性。在一些實施形態中，空穴傳輸材料為有機材料。在一些實施形態中，空穴傳輸材料為無機材料。作為本發明中能夠使用之公知的空穴傳輸材料的例，並無限定，但是可以舉出三唑衍生物、噁二唑誘導劑、咪唑衍生物、呋唑衍生物、吡啶并呋唑衍生物、聚芳基烷烴誘導劑、吡啶啉衍生物、吡啶啉酮衍生物、苯二胺衍生物、烯丙胺衍生物、胺基取代查耳酮衍生物、噁唑衍生物、苯乙烯基蔥誘導劑、萘酮衍生物、脞衍生物、芪衍生物、矽氮烷衍生物、苯胺共聚物及導電性高分子寡聚物（尤其噻吩寡聚物）或其組合。在一些實施形態中，空穴傳輸材料可以從吡啶化合物、芳香族三級胺化合物及苯乙烯胺化合物進行選擇。在一些實施形態中，空穴傳輸材料為芳香族三級胺化合物。在以下，舉出能夠用作空穴傳輸材料之較佳化合物的具體例。

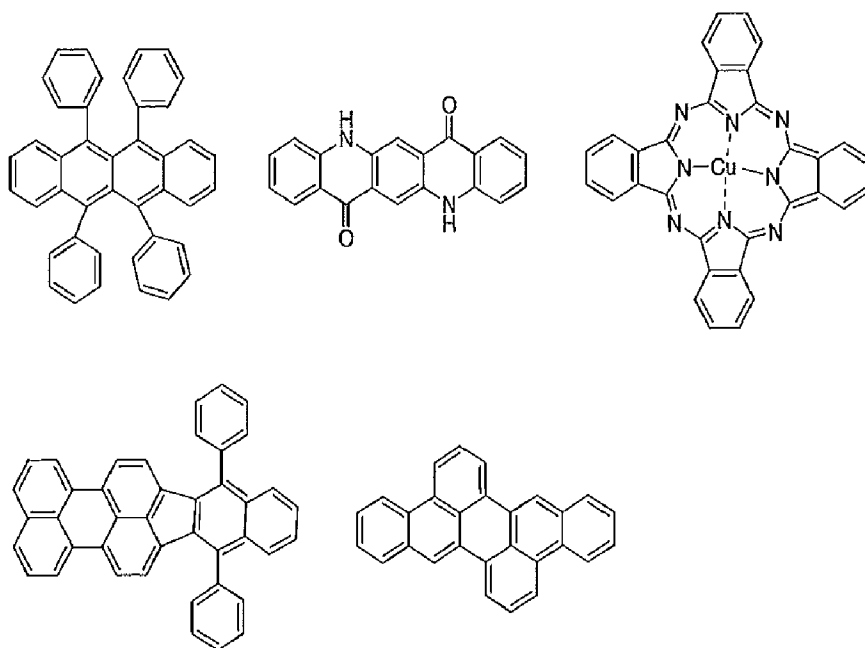
【0084】 [化學式25]



【0085】 電子傳輸層：

電子傳輸層包含電子傳輸材料。在一些實施形態中，電子傳輸層為單層。在一些實施形態中，電子傳輸層具有複數個層。

在一些實施形態中，電子傳輸材料只要具有將從陰極注入之電子傳輸至發光層之功能即可。在一些實施形態中，電子傳輸材料還作為空穴障



【0089】具體地例示出能夠用於有機電致發光元件中之較佳材料，但是能夠用於本發明中之材料不被以下的示例性化合物做限定性地解釋。又，即使為作為具有特定功能之材料例示出之化合物，亦能夠轉用為具有其他功能之材料。

【0090】裝置：

在一些實施形態中，發光層併入裝置中。例如，裝置包括OLED閥、OLED燈、電視用顯示器、電腦用監視器、移動電話及平板，但是並不限定於該等。

在一些實施形態中，電子裝置包括OLED，該OLED具有包括陽極、陰極及該陽極與該陰極之間的發光層之至少一個有機層。

在一些實施形態中，本說明書中所記載的結構物能夠併入OLED或光電子裝置等各種感光性或光活化裝置中。在一些實施形態中，前述結構物能夠用於促進裝置內的電荷轉移或能量轉移和/或用作空穴傳輸材料。作為前述裝置，例如可以舉出有機發光二極體（OLED）、有機積體電路（OIC）、有機場效電晶體（O-FET）、有機薄膜電晶體（O-TFT）、有

機發光電晶體（O-LET）、有機太陽能電池（O-SC）、有機光學檢測裝置、有機感光器、有機場淬滅（field-quench）裝置（O-FQD）、發光電化學電池（LEC）或有機雷射二極體（O-laser）。

【0091】 閥或燈：

在一些實施形態中，電子裝置包括OLED，該OLED具有包括陽極、陰極、該陽極與該陰極之間的發光層之至少一個有機層。

在一些實施形態中，裝置包括不同顏色之OLED。在一些實施形態中，裝置包括包含OLED的組合之陣列。在一些實施形態中，OLED的前述組合為三種顏色的組合（例如，RGB）。在一些實施形態中，OLED的前述組合為既不是紅色亦不是綠色亦不是藍色的顏色（例如，橙色及黃綠色）的組合。在一些實施形態中，OLED的前述組合為兩種顏色、四種顏色或其以上的顏色的組合。

在一些實施形態中，裝置為OLED燈，該OLED燈具備：

電路板，具備具有安裝面之第1面和與第1面對的第2面，並且劃分至少一個開口部；

至少一個OLED，其為前述安裝面上的至少一個OLED，該至少一個OLED包括包含陽極、陰極及該陽極與該陰極之間的發光層之至少一個有機層且具有發光結構；

電路板用殼體；及

至少一個連接器，配置於前述殼體的端部，並且前述殼體及前述連接器劃分適合安裝於照明設備上之封裝。

在一些實施形態中，前述OLED燈具有複數個OLED，該複數個OLED安裝於電路板上以使光向複數個方向輻射。在一些實施形態中，向

第1方向發射之一部分的光偏振而向第2方向輻射。在一些實施形態中，使用反射器將向第1方向發射之光偏振。

【0092】 顯示器或屏幕：

在一些實施形態中，本發明的發光層能夠用於屏幕或顯示器中。在一些實施形態中，本發明之化合物並無限定，但是使用真空蒸發、沉積、蒸鍍或化學蒸鍍（CVD）等步驟沉積於基材上。在一些實施形態中，前述基材為用於提供具有獨特縱橫比的像素之兩面蝕刻中的照相板結構。前述屏幕（並且，亦稱為遮罩）可以用於OLED顯示器的製造步驟中。藉由設計相對應之原圖圖案，能夠在垂直方向上配置像素之間的非常陡峭的窄連接桿以及在水平方向上配置大範圍的傾斜開口部。藉此，能夠在優化TFT背板上的化學蒸鍍的同時，構成高解析度顯示器所需之像素的精細的圖案。

藉由像素的內部圖案化，能夠在水平方向及垂直方向上構成各種縱橫比的三維像素開口部。進而，像素區域中的被圖像化之“條紋”或半色調圓的使用保護特定區域中之蝕刻，直至將該等特定圖案底切並從基材移除。此時，所有像素區域以相同的蝕刻速度進行處理，但是其深度依據半色調圖案而發生變化。藉由變更半色調圖案的尺寸及間隔，能夠進行像素內的保護率各種不同之蝕刻，能夠進行形成陡峭的垂直傾斜時所需的局部深度蝕刻。

蒸鍍遮罩用較佳材料為因鋼。因鋼為在鋼廠冷軋成長的薄型片狀之金屬合金。因鋼無法作為鍍遮罩電沉積到旋轉心軸上。用於在蒸鍍用遮罩內形成開口區域的適當且低成本的方法為基於濕式化學蝕刻之方法。

在一些實施形態中，屏幕或顯示圖案為基材上的像素矩陣。在一些

實施形態中，屏幕或顯示圖案使用微影（例如，光微影及電子束微影）進行加工。在一些實施形態中，屏幕或顯示圖案使用濕式化學蝕刻進行加工。在又一實施形態中，屏幕或顯示圖案使用電漿蝕刻進行加工。

【0093】 裝置之製造方法：

關於OLED顯示器，通常形成大型母板，接著以單元面板單位切割該母板來製造。通常，母板上的各單元面板藉由如下形成：在基底基材上形成具有活性層和源極/汲極電極之薄膜電晶體（TFT），在前述TFT上塗佈平坦化膜以依序經時形成像素電極、發光層、對電極及封裝層，並從前述母板進行切割。

關於OLED顯示器，通常形成大型母板，接著以單元面板單位切割該母板來製造。通常，母板上的各單元面板藉由如下形成：在基底基材上形成具有活性層和源極/汲極電極之薄膜電晶體（TFT），在前述TFT上塗佈平坦化膜以依序經時形成像素電極、發光層、對電極及封裝層，並從前述母板進行切割。

【0094】 在本發明的其他態樣中，提供一種有機發光二極體（OLED）顯示器之製造方法，該方法包括：

在母板的基底基材上形成障壁層之步驟；

在前述障壁層上以單元面板單位形成複數個顯示單元之步驟；

在前述單元面板的顯示單元的各自上形成封裝層之步驟；及

在前述單元面板之間的界面部上塗佈有機薄膜之步驟。

在一些實施形態中，障壁層例如為由SiNx形成之無機薄膜，障壁層的端部被由聚醯亞胺或丙烯酸形成之有機薄膜被覆。在一些實施形態中，有機薄膜輔助母板以單元面板單位被軟切。

在一些實施形態中，薄膜電晶體（TFT）層具有發光層、閘電極及源極/汲極電極。複數個顯示單元的各自可以具有薄膜電晶體（TFT）層、形成於TFT層上之平坦化膜及形成於平坦化膜上之發光單元，塗佈於前述界面部上之有機薄膜由與前述平坦化膜的材料相同的材料形成，並且與前述平坦化膜的形成同時形成。在一些實施形態中，前述發光單元藉由鈍化層、它們之間的平坦化膜及被覆並保護發光單元之封裝層與TFT層連接。在前述製造方法的一些實施形態中，前述有機薄膜不與顯示單元連接，亦不與封裝層連接。

【0095】 前述有機薄膜和平坦化膜的各自可以包含聚醯亞胺及丙烯酸中的任一個。在一些實施形態中，前述障壁層可以為無機薄膜。在一些實施形態中，前述基底基材可以由聚醯亞胺形成。前述方法還可以包括在由聚醯亞胺形成之基底基材的一個表面上形成障壁層之前，在該基底基材的另一個表面上安裝由玻璃材料形成之載子基材之步驟和在沿界面部切割之前，從基底基材分離前述載子基材之步驟。在一些實施形態中，前述OLED顯示器為柔性顯示器。

在一些實施形態中，前述鈍化層為配置於TFT層上以被覆TFT層之有機薄膜。在一些實施形態中，前述平坦化膜為形成於鈍化層上之有機薄膜。在一些實施形態中，與形成於障壁層的端部之有機薄膜相同地，前述平坦化膜由聚醯亞胺或丙烯酸形成。在一些實施形態中，在製造OLED顯示器時，前述平坦化膜及有機薄膜同時形成。在一些實施形態中，前述有機薄膜可以形成於障壁層的端部，藉此，該有機薄膜的一部分直接與基底基材接觸，而該有機薄膜的其餘部分在包圍障壁層的端部的同時，與障壁層接觸。

【0096】 在一些實施形態中，前述發光層具有像素電極、對電極及配置於該像素電極與該對電極之間的有機發光層。在一些實施形態中，前述像素電極與TFT層的源極/汲極電極連接。

在一些實施形態中，在通過TFT層而向像素電極施加電壓時，在像素電極與對電極之間形成適當的電壓，藉此有機發光層輻射光，從而形成圖像。以下，將具有TFT層和發光單元之圖像形成單元稱為顯示單元。

在一些實施形態中，被覆顯示單元並防止外部的水分的滲透之封裝層可以形成為有機薄膜和無機薄膜交替積層而成之薄膜狀封裝結構。在一些實施形態中，前述封裝層具有複數個薄膜積層而成之薄膜狀封裝結構。在一些實施形態中，塗佈於界面部上之有機薄膜與複數個顯示單元的各自隔開間隔而配置。在一些實施形態中，前述有機薄膜以如下態樣形成：一部分的有機薄膜直接與基底基材接觸，而有機薄膜的其餘部分在包圍障壁層的端部的同時，與障壁層接觸。

【0097】 在一實施形態中，OLED顯示器為柔性，並且使用由聚醯亞胺形成之柔軟的基底基材。在一些實施形態中，前述基底基材形成於由玻璃材料形成之載子基材上，接著分離該載子基材。

在一些實施形態中，障壁層形成於載子基材的相反的一側的基底基材的表面上。在一實施形態中，依據各單元面板的尺寸對前述障壁層進行圖案化。例如，在母板的所有表面上形成基底基材的同時，依據各單元面板的尺寸形成障壁層，藉此在單元面板的障壁層之間的界面部上形成凹槽。各單元面板能夠沿前述凹槽切割。

【0098】 在一些實施形態中，前述製造方法還包括沿界面部切割之步驟，其中，凹槽形成於障壁層上，至少一部分的有機薄膜形成於凹槽

中，該凹槽不會穿透到基底基材中。在一些實施形態中，形成各單元面板的TFT層，作為無機薄膜之鈍化層和作為有機薄膜之平坦化膜配置於TFT層上以被覆TFT層。例如，在形成聚醯亞胺或丙烯酸製的平坦化膜的同時，界面部的凹槽例如被聚醯亞胺或丙烯酸製的有機薄膜被覆。這防止如下：在各單元面板在界面部上沿凹槽切割時，由於將所產生之衝擊吸收到有機薄膜而產生龜裂。亦即，在所有障壁層由於沒有有機薄膜而完全暴露之情況下，在各單元面板在界面部上沿凹槽切割時，所產生之衝擊被傳遞到障壁層，藉此產生龜裂之風險增加。然而，在一實施形態中，障壁層之間的界面部的凹槽被有機薄膜被覆以吸收在沒有有機薄膜的情況下能夠傳遞到障壁層之衝擊，因此可以軟切各單元面板以防止在障壁層中產生龜裂。在一實施形態中，被覆界面部的凹槽之有機薄膜及平坦化膜彼此隔開間隔而配置。例如，在有機薄膜及平坦化膜彼此連接為一個層之情況下，外部的水分有可能通過平坦化膜和有機薄膜的殘留部分而浸入到顯示單元中，因此有機薄膜及平坦化膜彼此隔開間隔而配置，以有機薄膜與顯示單元隔開間隔而配置。

【0099】 在一些實施形態中，顯示單元藉由發光單元的形成而形成，封裝層配置於顯示單元上以被覆顯示單元。藉此，在完全製造母板之後，從基底基材分離承載基底基材之載子基材。在一些實施形態中，若向載子基材輻射雷射光束，則載子基材由於載子基材與基底基材之間的熱膨脹係數的不同而從基底基材分離。

在一些實施形態中，母板以單元面板單位切割。在一些實施形態中，母板使用切割器沿單元面板之間的界面部切割。在一些實施形態中，母板所沿著切割之界面部的凹槽被有機薄膜被覆，因此在切割期間，該有

機薄膜吸收衝擊。在一些實施形態中，在切割期間，能夠防止在障壁層中產生龜裂。

在一些實施形態中，前述方法減少產品的不良率並穩定其品質。

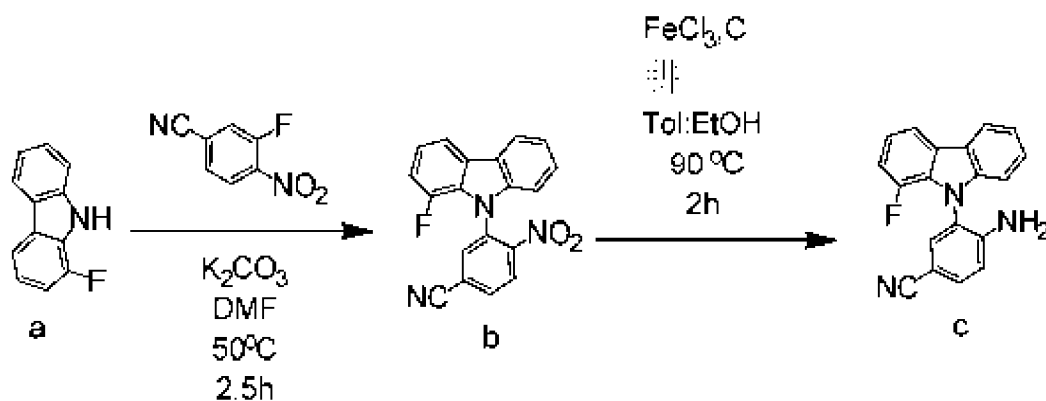
其他態樣為OLED顯示器，該OLED顯示器具有形成於基底基材上之障壁層、形成於障壁層上之顯示單元、形成於顯示單元上之封裝層及塗佈於障壁層的端部之有機薄膜。

[實施例]

【0100】 在以下，舉出合成例和實施例對本發明的特徵進一步進行具體說明。關於以下所示之材料、處理內容、處理步驟等，只要不脫離本發明的主旨，則能夠適當變更。因此，本發明的範圍不應被以下所示之具體例做限定性地解釋。再者，關於發光特性的評價，使用源表（TEKTRONIX, INC.製：2400系列）、半導體參數・分析器（Agilent Technologies Japan,Ltd.製：E5273A）、光功率計測定裝置（Newport Corporation 製：1930C）、光學光譜儀（Ocean Photonics. 製：USB2000）、分光輻射計（TOPCON CORPORATION,製：SR-3）及條紋照相（Hamamatsu Photonics K.K.製C4334型）進行。

【0101】 （合成例1）化合物53的合成

[化學式28]



【0102】在氮氣流下，在碳酸鉀的存在下，在二甲基甲醯胺（30mL）中，在50°C下使3-氟-4-硝基苜腈（1.38g，10.0mmol）、1-氟吡啶（0.93g，5.0mmol）反應了2.5小時。之後，返回至室溫，並用水停止了反應。過濾所析出之固體，並使過濾物溶解於乙酸乙酯中，用硫酸鎂進行乾燥之後，減壓蒸餾了溶劑。藉由矽膠管柱層析法（乙酸乙酯/己烷=4/1）及再沉澱（乙酸乙酯/己烷）純化所獲得之反應混合物，從而獲得了黃色固體的化合物b（1.67g，產率99%）。

^1H NMR（400MHz, CDCl_3, δ ）: 8.29（d, $J=10\text{Hz}$, 1H）, 8.11（d, $J=10\text{Hz}$, 1H）, 8.0（s, 1H）, 7.95（d, $J=10\text{Hz}$, 1H）, 7.89（d, $J=10\text{Hz}$, 1H）, 7.44（t, $J=10\text{Hz}$, 1H）, 7.35（t, $J=10\text{Hz}$, 1H）, 7.24（m, 1H）, 7.12（t, $J=10.0\text{Hz}$, 1H）, 7.07（t, $J=10.0\text{Hz}$, 1H）。

MS（ASAP）: 331.08（ $\text{M}+\text{H}^+$ ）. Calcd for $\text{C}_{50}\text{H}_{37}\text{N}_5$: 332.17.

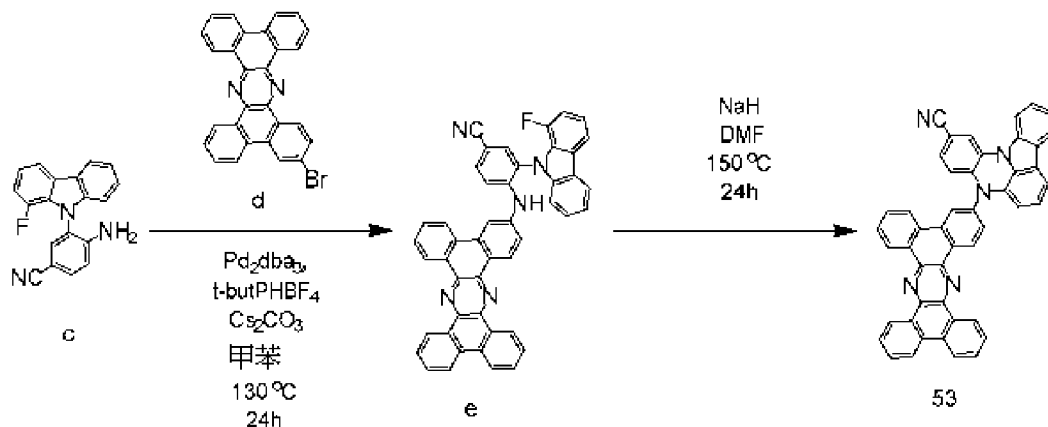
【0103】在氮氣流下，使化合物b（1.38g，10.0mmol）、活性碳（0.18g，15.0mmol）及氯化鐵（0.135g，0.5mmol）溶解於甲苯（150mL）與乙醇（150mL）的混合溶劑中，並加入了胼水溶液（4ml，125mmol）。將反應混合物在90°C下反應2小時之後，返回至室溫，並進行了矽藻土過濾。減壓蒸餾溶劑，並加入水和乙酸乙酯進行提取操作之後，分離了有機層。用硫酸鎂進行乾燥，並藉由減壓蒸餾去除了溶劑。使過濾物溶解於乙酸乙酯中，用硫酸鎂進行乾燥之後，減壓蒸餾了溶劑。藉由矽膠管柱層析法（乙酸乙酯/己烷=1/1）及再沉澱（乙酸乙酯/己烷）純化所獲得之反應混合物，從而獲得了白色固體的化合物c（1.35g，產率90%）。

^1H NMR（400MHz, CDCl_3, δ ）: 8.21（d, $J=10\text{Hz}$, 1H）, 8.02

(m,1H) ,7.40 (t, $J=10\text{Hz}$,1H) ,7.26 (d, $J=10\text{Hz}$,2H) ,7.18 (m,3H) ,6.97 (d, $J=10\text{Hz}$,1H) ,7.93 (d, $J=10.0\text{Hz}$,1H) ,5.48 (s,1H) .

MS (ASAP) :301.10 ($M+H^+$) .Calcd for $C_{50}H_{37}N_5$:302.17.

【0104】 [化學式29]



【0105】 在氮氣流下，在甲苯（200mL）中，在 130°C 下使化合物c（0.75g，2.5mmol）、化合物d（1.0g，2.17mmol）、三（第三丁基）鏷四氟硼酸鹽（95mg，0.325mmol）、碳酸銫（1.41g，4.34mmol）及三二亞苄基丙酮雙鈣（100mg，0.168mmol）反應了24小時。藉由在室溫下向水中注入反應溶液來停止反應。加入二氯甲烷，藉由提取操作分離有機層之後，用硫酸鎂進行乾燥，並藉由減壓蒸餾去除了溶劑。藉由管柱層析法（甲苯）純化所獲得之殘渣，從而獲得了黃色固體的化合物e（0.7g，63%）。

^1H NMR (400MHz, CDCl_3,δ) :9.46 (m,3H) ,9.32 (d, $J=10\text{Hz}$,1H) ,8.87 (t, $J=10\text{Hz}$,3H) ,8.54 (m,1H) ,8.46 (s,1H) ,8.25 (d, $J=10\text{Hz}$,1H) ,8.10 (d, $J=10.0\text{Hz}$,1H) ,7.97 (s,1H) ,7.88 (m,8H) ,7.70 (d, $J=10.0\text{Hz}$,1H) ,7.46 (t, $J=10.0\text{Hz}$,1H) ,7.28 (m,3H) .

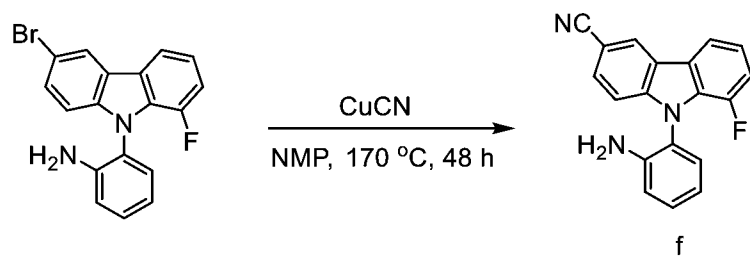
MS (ASAP) :679.22 ($M+H^+$) .Calcd for $C_{50}H_{37}N_5$:680.35.

【0106】 在二甲基甲醯胺（50mL）中，在150°C下使化合物e（0.7g，1.02mmol）和氫化鈉（45mg，1.1mmol）反應24小時。將反應溶液返回至室溫，過濾出加入水後所獲得之固體之後，進行清洗，並使其溶解於甲苯中，用硫酸鎂進行乾燥之後，藉由減壓蒸餾濃縮了溶劑。藉由管柱層析法（甲苯）及再沉澱（氯仿/甲醇）純化所獲得之殘渣，從而獲得了黃色固體的化合物53（0.27g，57%）。

MS (ASAP) :659.21 (M+H⁺) .Calcd for C₅₀H₃₇N₅:660.09.

【0107】 （合成例2）化合物3054的合成

[化學式30]

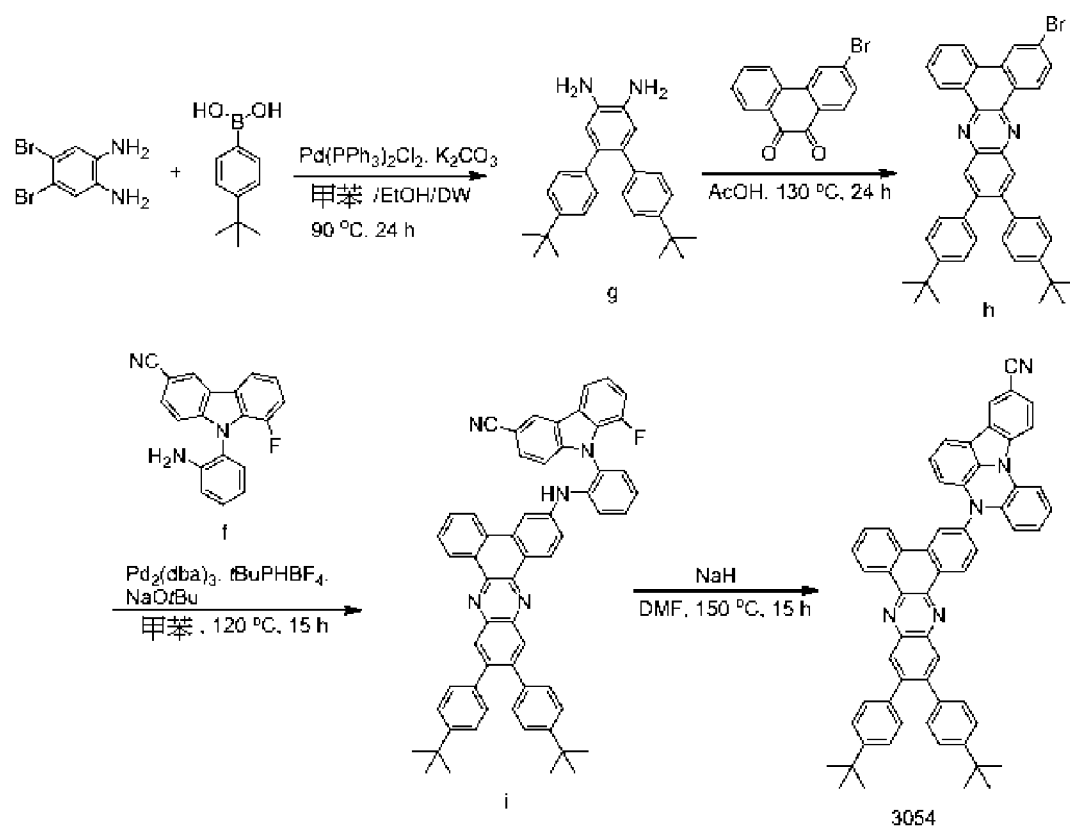


【0108】 在氮氣流下，向2-（6-溴-1-氟-9H-吡啶-9-基）胺基苯（19.0g，53.5mmol）、氰化銅（I）（14.4g，161mmol）的混合物中加入N-甲基-2-吡咯啉酮（NMP、900mL），並在170°C下攪拌了48小時。將反應溶液返回至室溫，加入水並進行了過濾。藉由矽膠管柱層析法（己烷:乙酸乙酯=4:1）純化粗生成物，從而獲得了12.0g（39.8mmol，產率74%）的白色固體的化合物f。

¹H-NMR（400MHz,DMSO-*d*₆）:δ8.87（s,1H）,8.21-8.17（m,1H）,7.33-7.28（m,2H）,7.25（t,J=8Hz,1H）,7.14（d,J=8Hz,1H）,6.93（d,J=8Hz,1H）,6.67（t,J=8Hz,1H）,5.05（s,1H）.

MS (ASAP) :302.48 (M+H⁺) .Calcd for C₁₉H₁₂FN₃:301.10.

【0109】 [化學式31]



【0110】 在氮氣流下，向4,5-二溴-1,2-苯二胺（4.0g，15mmol）、4-第三丁基苯基硼酸（6.7g，38mmol）的甲苯（130mL）、乙醇（10mL）、水（20mL）溶液中加入碳酸鉀（8.3g，60mmol）、雙（三苯膦）鈀（II）二氯化物（0.26g，0.4mmol），並在 90°C 下攪拌了24小時。將反應溶液返回至室溫，用氯仿提取之後，用無水硫酸鎂進行了乾燥。蒸餾溶劑，並藉由矽膠管柱層析法純化，從而獲得了4.5g（12mmol，產率80%）的白色固體的化合物g。

MS (ASAP): 373 ($\text{M}+\text{H}^+$). Calcd for $\text{C}_{26}\text{H}_{32}\text{N}_2$: 372.

【0111】 在氮氣流下，向化合物g（5.00g，13.4mmol）、3-溴菲-9,10-二酮（3.85g，13.4mmol）的混合物中加入乙酸（200mL），並在 130°C 下攪拌了24小時。將反應溶液返回至室溫，加入甲醇並進行了濾過。用甲醇、氯仿清洗粗生成物，從而獲得了白色黃色固體的化合物h

(7.5g, 12mmol, 產率90%)。

MS (ASAP):623 (M+H⁺). Calcd for C₄₀H₃₅BrN₂:622.

【0112】在氮氣流下，向化合物h (3.8g, 6.1mmol)，化合物f (2.0g, 6.7mmol)的甲苯 (160mL)溶液中加入三-第三丁基磷四氟硼酸鹽 (0.56g, 1.2mmol)、碳酸銫 (4.0g, 12mmol)及三(二亞苺基丙酮)二鈦(0) (0.56g, 0.61mmol)，並在120°C下攪拌了15小時。將反應溶液返回至室溫，用氯仿提取之後，用無水硫酸鎂進行了乾燥。蒸餾溶劑，並藉由矽膠管柱層析法(己烷:甲苯=3:7)純化，從而獲得了黃色固體的化合物i (1.0g, 1.2mmol, 產率19%)。

¹H-NMR (400MHz, CDCl₃) :δ9.390 (dd, J=7.2Hz, 3.2Hz, 2H), 9.187 (d, J=8.8Hz, 1H), 8.418 (s, 1H), 8.335-8.300 (m, 3H), 8.030 (s, 1H), 7.903 (dd, J=8.0Hz, 1.2Hz, 1H), 7.760-7.718 (m, 3H), 7.695 (dd, J=8.0Hz, 1.2Hz, 1H), 7.557 (td, J=8.8Hz, 1.6Hz, 1H), 7.450 (d, J=7.6Hz, 1H), 7.331-7.212 (m, 13H), 5.705 (s, 1H), 1.334 (s, 18H)。

MS (ASAP):844.30 (M+H⁺). Calcd for C₅₉H₄₆FN₅:843.37。

ASAP MS光譜分析:C₅₉H₄₆FN₅:理論值843.37, 觀測值844.30[M+H⁺]

【0113】將50mL的N,N-二甲基甲醯胺中的NaH (28mg, 0.69mmol)與化合物i (0.53g, 0.63mmol)的混合物在150°C下攪拌了15小時。將該混合物返回至室溫，加入水進行淬滅，過濾所析出之固體，並進行了甲醇清洗。藉由矽膠管柱層析法純化該所獲得之固體，從而獲得了化合物3054 (0.45g, 0.55mmol, 產率87%)。

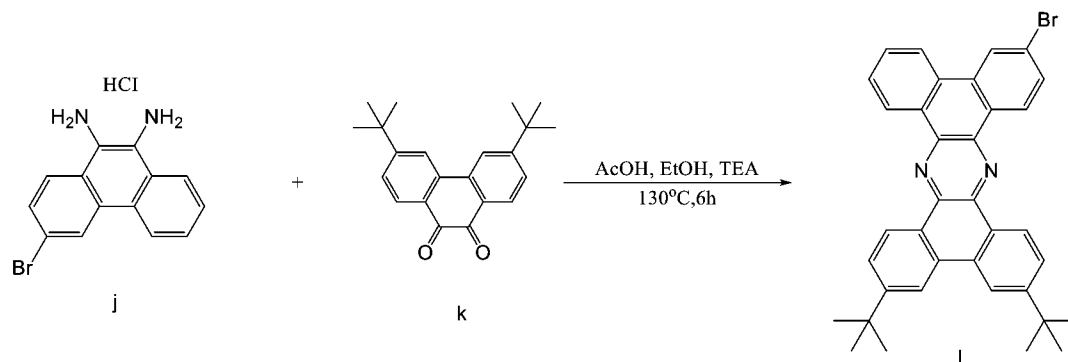
¹H-NMR (400MHz, CDCl₃) :δ9.725 (d, J=8.0Hz, 1H), 9.484

(d, J=8.8Hz, 1H) , 8.635 (s, 1H) , 8.524 (d, J=9.2Hz, 1H) , 8.418 (d, J=3.2Hz, 2H) , 8.353 (s, 1H) , 8.084 (d, J=9.2Hz, 1H) , 7.833-7.755 (m, 4H) , 7.722 (d, J=8.4Hz, 1H) , 7.336 (d, J=8.4Hz, 4H) , 7.275-7.259 (m, 5H) , 6.902-6.746 (m, 3H) , 6.304 (d, J=8.4Hz, 1H) , 5.946 (d, J=7.6Hz, 1H) , 1.352 (s, 18H) 。

MS (ASAP) : 824.52 (M+H⁺) . Calcd for C₅₉H₄₅N₅: 823.37 。

【0114】 (合成例2) 化合物17254的合成

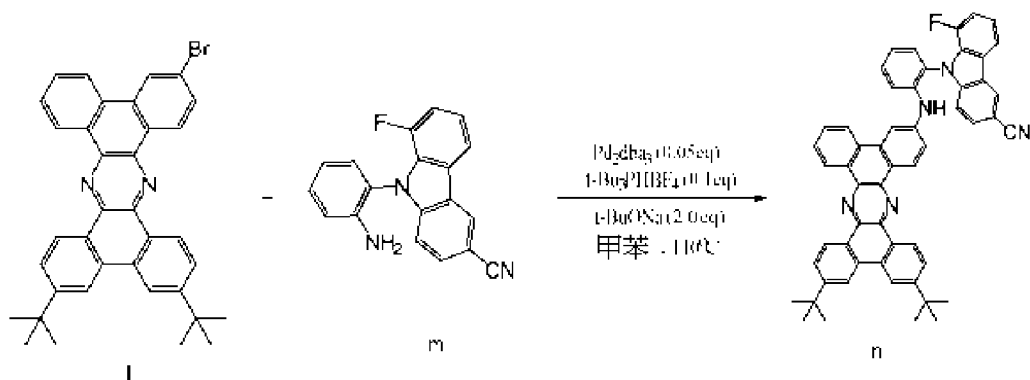
[化學式32]



【0115】 在氮氣流下，將化合物j (1.83g , 5.74mmol) 、化合物k (1.85g , 5.74mmol) 、三乙胺 (3.4mL) 的乙酸 (100mL) 及乙醇 (25mL) 在130°C下攪拌了6小時。將該混合物返回至室溫之後，過濾了所析出之固體。對其殘留物進行甲醇清洗，從而獲得了化合物1 (2.25g , 3.95mmol 、產率70%) 。

MS (ASAP) : 570. Calcd for C₃₆H₃₁BrN₂: 570 。

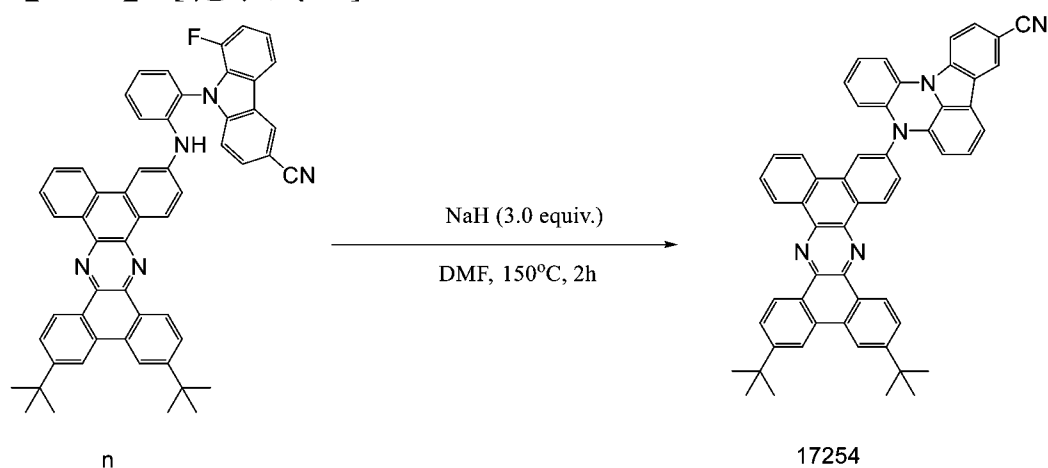
【0116】 [化學式33]



【0117】 在氮氣流下，向化合物1（2.0g，3.4mmol）、化合物m（1.2g，3.8mmol）、 $t\text{Bu}_3\text{PHBF}_4$ （0.1g，0.34mmol）、 $t\text{BuONa}$ （0.8g，6.8mmol）的甲苯（300mL）溶液中加入 Pd_2dba_3 （0.16g，0.17mmol），並整夜進行了加熱回流。將其反應溶液返回至室溫之後，加入水進行淬滅，並用二氯甲烷提取。藉由蒸餾器蒸餾溶劑，並藉由矽膠管柱層析法純化，從而獲得了化合物n（2.2g、2.8mmol、產率82%）。

MS（ASAP）:791.Calcd for $\text{C}_{55}\text{H}_{42}\text{FN}_5$:791。

【0118】 [化學式34]



【0119】 在氮氣流下，向化合物n（2.0g，2.5mmol）的N,N-二甲基甲醯胺（200mL）溶液中加入NaH（0.3g，7.6mmol），並在150°C下攪拌了2小時。將其反應溶液返回至室溫之後，加入水進行淬滅，並過濾了所析出之固體。對其殘留物進行甲醇清洗，進一步藉由矽膠管柱層析法純

化，從而獲得了化合物17254（0.8g、1.03mmol、產率42%）。

MS（ASAP）：771. Calcd for $C_{55}H_{41}N_5$:771。

【0120】（實施例1）薄膜的製作和評價

藉由真空蒸鍍法，在真空度小於 1×10^{-3} Pa的條件下在石英基板上蒸鍍化合物53，以100nm厚度形成僅由化合物53組成之薄膜，並設為實施例1的純淨薄膜。與此不同，藉由真空蒸鍍法，在真空度小於 1×10^{-3} Pa的條件下在石英基板上從不同之蒸鍍源蒸鍍化合物53和mCBP，以100nm的厚度形成化合物53的濃度為20重量%之薄膜，並設為實施例1的摻雜薄膜。在實施例1的摻雜薄膜中，在發光峰值波長為594nm下觀測到即時螢光和比其更延遲而發光之延遲螢光。延遲螢光的壽命 τ_2 為5.1 μ 秒鐘，確認到具有優異之特性。

使用化合物3054、化合物17254、其他通式（1）所表示之化合物來代替化合物53以獲得各純淨薄膜和各摻雜薄膜，從而能夠確認特性。通式（1）所表示之化合物在高濃度的摻雜薄膜中實現高的PLQY。因此，藉由用於有機發光元件中，能夠提供發光效率高且耐久性良好的元件。

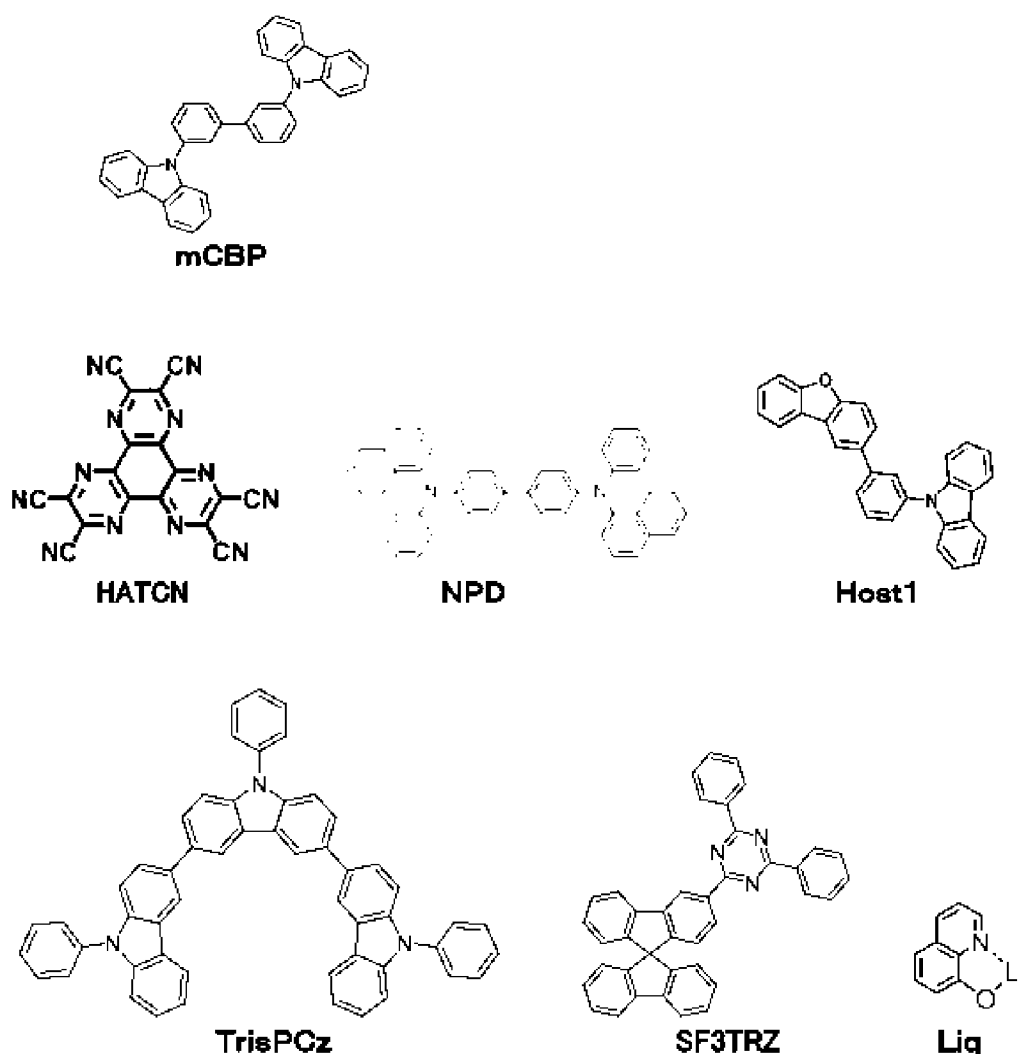
【0121】（實施例2）有機電致發光元件的製作和評價

藉由真空蒸鍍法，在形成有由膜厚100nm的氧化銦錫（ITO）組成之陽極之玻璃基材上，以真空度 1×10^{-6} Pa積層了各薄膜。首先，在ITO上形成10nm厚度的HATCN，在其上形成30nm厚度的NPD。接著，在其上形成10nm厚度的TrisPCz，進一步在其上形成5nm厚度的Host1。接著，將化合物53及Host1分別從不同之蒸鍍源進行共蒸鍍，從而形成了30nm厚度的發光層。此時，化合物53的濃度設為35重量%。在其上形成10nm厚度的SF3TRZ，將SF3TRZ和Liq從不同之蒸鍍源進行共蒸鍍而進一步在其上

形成30nm厚度。此時，SF3TRZ:Liq（重量比）設為7:3。進而，將Liq形成為2nm厚度，接著將鋁（Al）蒸鍍為100nm厚度，從而形成了陰極。藉由以上步驟，製作了實施例1的有機電致發光元件。

又，使用化合物3054、化合物17254、其他通式（1）所表示之化合物來代替化合物53，並藉由相同的步驟來製作各有機電致發光元件，從而能夠確認效果。

【0122】 [化學式35]



【符號說明】

【0123】

- 1: 基材
- 2: 陽極
- 3: 空穴注入層
- 4: 空穴傳輸層
- 5: 發光層
- 6: 電子傳輸層
- 7: 陰極

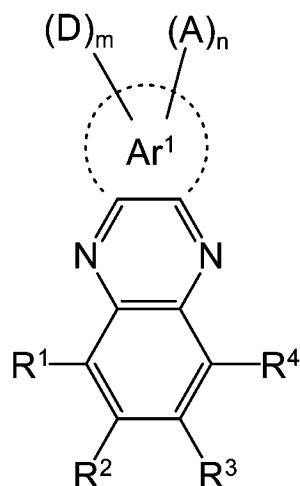
【發明申請專利範圍】

【請求項1】

一種化合物，其係由下述通式（1）表示，

通式（1）

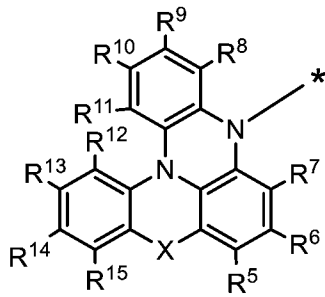
[化學式1]



在通式（1）中，Ar¹表示環狀結構，並且表示苯環、萘環、蔥環或菲環，D表示下述通式（2）所表示之基團，A表示選自包括氰基、苯基、嘧啶基、三唑基及烷基之群組中的一個基團或兩個以上組合而獲得之基團，其中，除了取代烷基以外，m為1或2，n為0、1或2，在m為2時，兩個D可以相同亦可以不同，在n為2時，兩個A可以相同亦可以不同，R¹~R⁴分別獨立地表示氫原子、氬原子或選自包括烷基、芳基、雜芳基及氰基之群組中的一個基團或兩個以上組合而獲得之基團，R¹和R²、R³和R⁴可以彼此鍵結而形成選自包括苯環、萘環及吡啶環之群組中的環狀結構，所形成之環狀結構可以經選自包括烷基、芳基、雜芳基及氰基之群組中的一個基團或兩個以上組合而獲得之基團取代，

通式（2）

[化學式2]



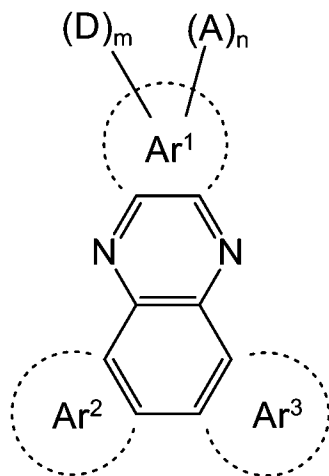
在通式(2)中， $R^5 \sim R^{15}$ 分別獨立地表示氫原子、氖原子或取代基， R^5 和 R^6 、 R^6 和 R^7 、 R^8 和 R^9 、 R^9 和 R^{10} 、 R^{10} 和 R^{11} 、 R^{11} 和 R^{12} 、 R^{12} 和 R^{13} 、 R^{13} 和 R^{14} 、 R^{14} 和 R^{15} 可以彼此鍵結而形成環狀結構，X表示單鍵、氧原子或硫原子，*表示鍵結位置。

【請求項2】

如請求項1所述之化合物，其係由下述通式(3)表示，

通式(3)

[化學式3]



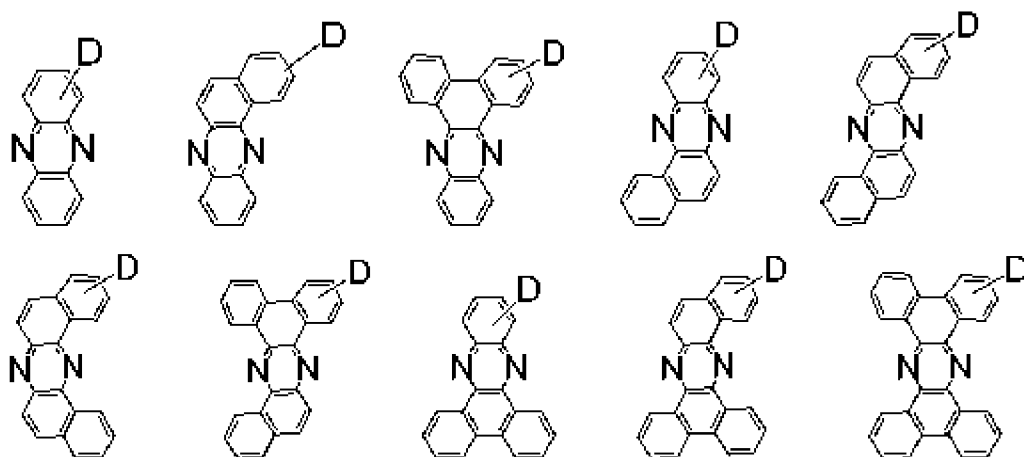
在通式(3)中， Ar^1 表示環狀結構，並且表示苯環、萘環、蔥環或菲環，D表示前述通式(2)所表示之基團，A表示選自包括氘基、苯基、嘧啶基、三唑基及烷基之群組中的一個基團或兩個以上組合而獲得之基團，其中，除了取代烷基以外，m為1或2，n為0、1或2，在m為2時，兩個D可以相同亦可以不同，在n為2時，兩個A可以相同亦可以不同， Ar^2 、

Ar³可以分別獨立地形成選自包括苯環、萘環及吡啶環之群組中的環狀結構，所形成之環狀結構可以經選自包括烷基、芳基、雜芳基及氰基之群組中的一個基團或兩個以上組合而獲得之基團取代。

【請求項3】

如請求項1所述之化合物，其係具有下述中的任一個骨架，

[化學式4]



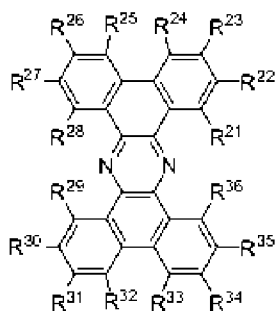
上述各骨架可以在通式(1)的範圍內具有取代基，但是環與骨架不會進一步縮合。

【請求項4】

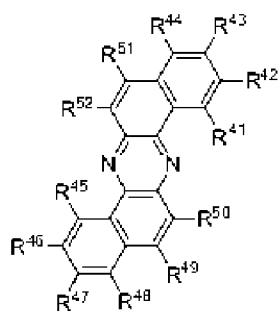
如請求項1所述之化合物，其係由下述通式(4a)~(4f)中的任一個表示，

[化學式5]

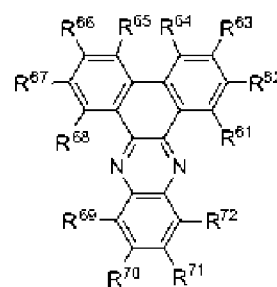
通式 (4a)



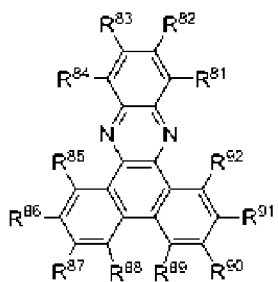
通式 (4b)



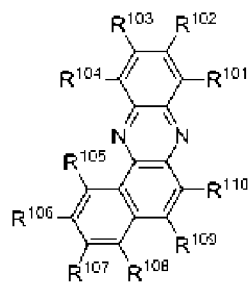
通式 (4c)



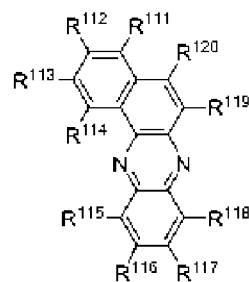
通式 (4d)



通式 (4e)



通式 (4f)



在通式 (4a) ~ (4f) 中， $R^{21} \sim R^{28}$ 、 $R^{41} \sim R^{44}$ 、 R^{51} 、 R^{52} 、 $R^{61} \sim R^{68}$ 、 $R^{81} \sim R^{84}$ 、 $R^{101} \sim R^{104}$ 、 $R^{111} \sim R^{114}$ 、 R^{119} 、 R^{120} 分別獨立地表示氫原子、氘原子、D 或 A，其中， $R^{21} \sim R^{28}$ 中的 1 個或 2 個為 D 且 0 ~ 2 個為 A， $R^{41} \sim R^{44}$ 、 R^{51} 及 R^{52} 中的 1 個或 2 個為 D 且 0 ~ 2 個為 A， $R^{61} \sim R^{68}$ 中的 1 個或 2 個為 D 且 0 ~ 2 個為 A， $R^{81} \sim R^{84}$ 中的 1 個或 2 個為 D 且 0 ~ 2 個為 A， $R^{101} \sim R^{104}$ 中的 1 個或 2 個為 D 且 0 ~ 2 個為 A， $R^{111} \sim R^{114}$ 、 R^{119} 及 R^{120} 中的 1 個或 2 個為 D 且 0 ~ 2 個為 A， $R^{29} \sim R^{36}$ 、 $R^{45} \sim R^{50}$ 、 $R^{69} \sim R^{72}$ 、 $R^{85} \sim R^{92}$ 、 $R^{105} \sim R^{110}$ 、 $R^{115} \sim R^{118}$ 分別獨立地表示氫原子、氘原子或選自包括烷基、芳基及氰基之群組中的一個基團或兩個以上組合而獲得之基團。

【請求項5】

如請求項1至請求項4之任一項所述之化合物，其中
n 為 0。

【請求項6】

一種發光材料，其係由請求項1至請求項5之任一項所述之化合物組

成。

【請求項7】

一種膜，其係包含請求項1至請求項5之任一項所述之化合物。

【請求項8】

一種有機半導體元件，其係包含請求項1至請求項5之任一項所述之化合物。

【請求項9】

一種有機發光元件，其係包含請求項1至請求項5之任一項所述之化合物。

【請求項10】

如請求項9所述之有機發光元件，其中

前述元件具有包含前述化合物之層，前述層還包含主體材料。

【請求項11】

如請求項10所述之有機發光元件，其中

包含前述化合物之層除了前述主體材料以外還包含延遲螢光材料，前述延遲螢光材料的最低激發單重態能量低於前述主體材料且高於前述化合物。

【請求項12】

如請求項9所述之有機發光元件，其中

前述元件具有包含前述化合物之層，前述層還包含具有與前述化合物不同之結構之發光材料。

【請求項13】

如請求項9所述之有機發光元件，其中

前述元件中所包含之材料中來自前述化合物的發光量最大。

【請求項14】

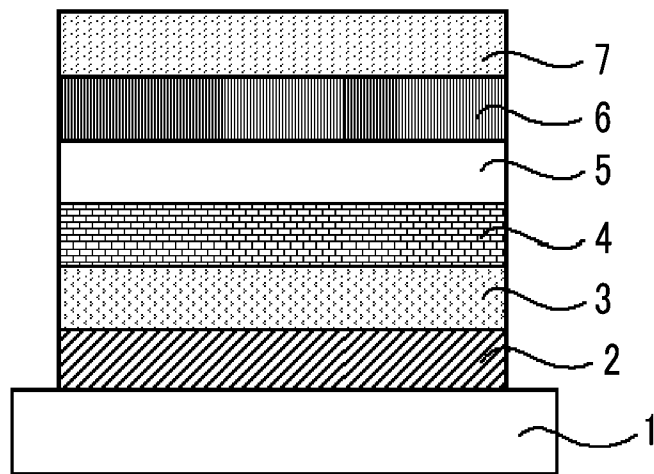
如請求項12所述之有機發光元件，其中

來自前述發光材料的發光量多於來自前述化合物的發光量。

【請求項15】

如請求項9至請求項14之任一項所述之有機發光元件，其係輻射延遲
螢光。

【發明圖式】



【圖1】