



(21)申請案號：099125932

(22)申請日：中華民國 99 (2010) 年 08 月 04 日

(51)Int. Cl. : C07D471/04 (2006.01)

H01L51/54 (2006.01)

(30)優先權：2009/08/05 日本

2009-182019

(71)申請人：保土谷化學工業股份有限公司(日本)HODOGAYA CHEMICAL CO., LTD. (JP)
日本

(72)發明人：橫山紀昌 YOKOYAMA, NORIMASA (JP)；林秀一 HAYASHI, SHUICHI (JP)；樺澤直朗 KABASAWA, NAOAKI (JP)；神田大三 KANDA, DAIZOU (JP)；草野重 KUSANO, SHIGERU (JP)

(74)代理人：周良謀；周良吉

(56)參考文獻：

TW 200815403A

TW 200902678A

審查人員：陳依微

申請專利範圍項數：8 項 圖式數：14 共 77 頁

(54)名稱

具有被取代之蒽環構造及吡啶吡啶環構造的化合物及有機電致發光元件

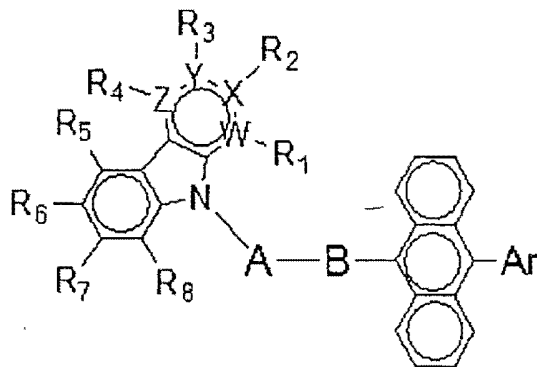
COMPOUND HAVING SUBSTITUTED ANTHRACENE RING STRUCTURE AND PYRIDOINDOLE RING STRUCTURE, AND ORGANIC ELECTROLUMINESCENT DEVICE

(57)摘要

本發明之目的在於提供一種具有電子之注入及傳輸性能優異、具有電洞阻擋能力、薄膜狀態下之穩定性高等優異特性之有機化合物來作為高效率、高耐久性的有機電致發光元件用材料，並進一步使用該化合物提供一種高效率、高耐久性之有機電致發光元件。

該化合物係以通式(1)所表示之具有被取代之蒽環構造及吡啶吡啶環構造的化合物；該有機電致發光元件具有一對電極以及夾持於其間之至少一層有機層，該有機電致發光元件的特徵為該化合物係用作為至少一層有機層的構成材料。

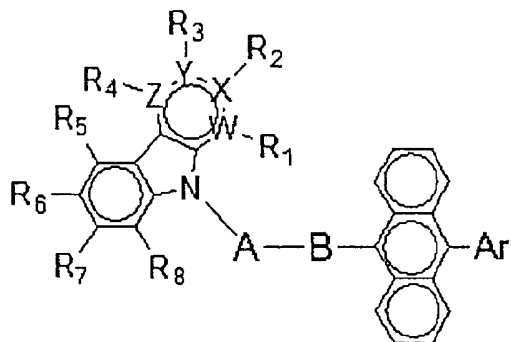
[化 1]



(1)

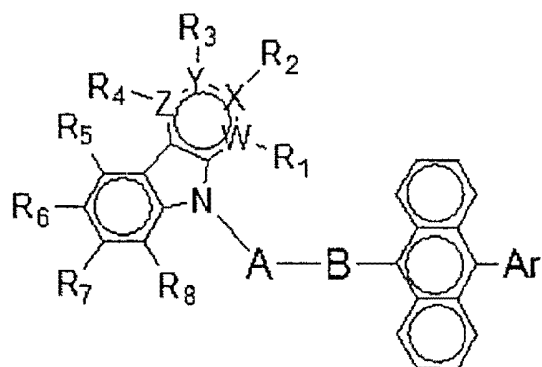
An organic compound, which has excellent characteristics in electron injecting and transporting performance, having a hole-blocking ability and having high stability in a thin film state, is provided as a material for an organic electroluminescent device of high efficiency and high durability, and the organic electroluminescent device of high efficiency and high durability is provided using this compound.

The compound having a substituted anthracene ring and pyridoindole ring structure is represented by a general formula (1), and the organic electroluminescent device having a pair of electrodes and at least one organic layer sandwiched therebetween is characterized in that the compound is used as a constitutive material of at least one organic layer in the organic electroluminescent device. [Formula 1]



(1)

[化1]



(1)

六、發明說明：

【發明所屬之技術領域】

本發明係關於一種適用於各種顯示裝置之自發光元件(即，有機電致發光元件)的化合物及該元件，詳細而言，係關於一種具有被取代之蔥環構造與吡啶吡啶環構造之化合物，以及使用該化合物之有機電致發光元件。

【先前技術】

有機電致發光元件係自發光性元件，故較液晶元件明亮且視覺辨認性優異，可進行鮮明的顯示，因此被廣泛地研究。

於1987年，伊士曼柯達(Eastman Kodak)公司之C.W.Tang等人藉由開發將各種功能分擔於各材料之積層構造元件，而將利用有機材料之有機電致發光元件實用化。他們積層了可傳輸電子之螢光體與可傳輸電洞之有機物，並將兩者之電荷注入至螢光體層中而使其發光，藉此以10V以下之電壓即可獲得 1000 cd/m^2 以上之高亮度(例如，參照專利文獻1及專利文獻2)。

至今為止，為了將有機電致發光元件實用化而進行大量改良，將各種功能進一步細分化，藉由於基板上依序設置陽極、電洞注入層、電洞傳輸層、發光層、電子傳輸層、電子注入層、陰極而成之電致發光元件，達成高效率以及耐久性(例如，參照非專利文獻1)。

此外，為了進一步提高發光效率而嘗試利用三重態激子，並研究磷光發光體的利用(例如，參照非專利文獻2)。

發光層亦可於通常稱為主體材料之電荷傳輸性化合物中摻雜螢光體或磷光發光體而製作。如上述講習會預稿集中所記載般，有機電致發光元件中之有機材料的選擇，會對該元件之效率或耐久性等各特性造成較大的影響。

於有機電致發光元件中，自兩電極注入之電荷於發光層中再結合而獲得發光，但由於電洞移動速度較電子移動速度快，因此存在電洞之一部分會穿過發光層而引起效率下降之問題。因此謀

求電子移動速度快之電子傳輸材料。

作為代表性發光材料之參(8-羥基喹啉)鋁(以下，簡稱為 Alq₃)通常亦用作為電子傳輸材料，但其功函數為 5.8 eV，故無法稱其具有電洞阻擋性能。

作為防止電洞之一部分穿過發光層、而使發光層中之電荷再結合之機率提高的對策，有插入電洞阻擋層之方法。作為電洞阻擋材料，至今為止，提出有三唑衍生物(例如，參照專利文獻 3)或 2,9-二甲基-4,7-二苯基-1,10-鄰二氮雜菲(bathocuproine)(以下，簡稱為 BCP)、鋁之混合配位體錯合物(BAlq)(例如，參照非專利文獻 2)等。

例如，作為電洞阻擋性優異的電子傳輸材料，提出有 3-(4-聯苯基)-4-苯基-5-(4-第三丁基苯基)-1,2,4-三唑(以下，簡稱為 TAZ)(例如，參照專利文獻 3)。

TAZ 之功函數較大，為 6.6 eV，且電洞阻擋能力高，因此可用作藉由真空蒸鍍或塗布等而製作之螢光發光層或磷光發光層之積層於陰極側的電子傳輸性電洞阻擋層，並對於有機電致發光元件之高效率化有貢獻(例如，參照非專利文獻 3)。

然而，TAZ 具有電子傳輸性低之問題，因此必須與電子傳輸性更高之電子傳輸材料組合，以製作有機電致發光元件(例如，參照非專利文獻 4)。

此外，關於 BCP，雖其功函數較大，為 6.7 eV，且電洞阻擋能力高，但其玻璃轉移溫度(Tg)較低，為 83°C，因此薄膜缺乏穩定性，無法稱其充分發揮作為電洞阻擋層的功能。

不論何種材料，膜穩定性均不足、或阻擋電洞之功能不充分。為了改善有機電致發光元件之元件特性，而謀求電子之注入及傳輸性能以及電洞阻擋能力優異、且在薄膜狀態下穩定性高的有機化合物。

先前技術文件

專利文獻

專利文獻 1：日本專利公開公報第平 8-48656 號

專利文獻 2：日本專利公報第 3194657 號

專利文獻 3：日本專利公報第 2734341 號

非專利文獻

非專利文獻 1：應用物理學會第 9 次講習會預稿集第 55~61 頁(2001)

非專利文獻 2：應用物理學會第 9 次講習會預稿集第 23~31 頁(2001)

非專利文獻 3：第 50 次應用物理學關係連合講演會 28p-A-6 講演預稿集第 1413 頁(2003)

非專利文獻 4：應用物理學會有機分子及生物電子學分科會會誌第 11 卷第 1 期第 13~19 頁(2000)

非專利文獻 5：J. Chem. Soc., Perkin Trans. 1, 1505 (1999)

非專利文獻 6：J. Org. Chem., 60, 7508 (1995)

非專利文獻 7：Synth. Commun., 11, 513 (1981)

【發明內容】

[發明所欲解決之課題]

本發明之目的在於提供一種具有電子之注入及傳輸性能優異、具有電洞阻擋能力、薄膜狀態下之穩定性高等優異特性之有機化合物來作為高效率、高耐久性的有機電致發光元件用材料，並進一步使用該化合物提供一種高效率、高耐久性之有機電致發光元件。

作為本發明所欲提供之有機化合物應具備之物理特性，可列舉：(1)電子之注入特性良好、(2)電子之移動速度快、(3)電洞阻擋能力優異、(4)薄膜狀態穩定、以及(5)耐熱性優異。又，作為本發明所欲提供之有機電致發光元件應具備之物理特性，可列舉：(1)發光效率以及電力效率高、(2)發光起始電壓低、以及(3)實用驅動電壓低。

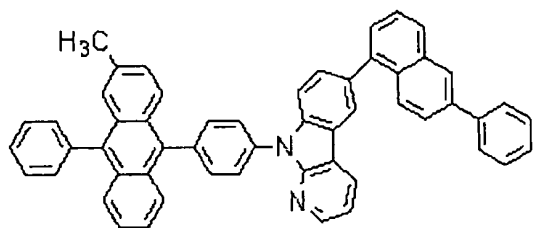
[解決課題的方式]

【實施方式】

本發明之具有被取代之蔥環構造及吡啶吡啶環構造的化合物係新穎化合物，該等化合物例如可以藉由下述方式合成。首先，利用鈀觸媒使相當之鹵化苯胺基吡啶進行環化反應而合成吡啶吡啶環(例如，參照非專利文獻 5)，並與各種芳香族羰基化合物、縮合多環芳香族化合物、或者芳香族雜環化合物的鹵化物縮合，則可以合成相當之具有吡啶吡啶環的化合物。進而，藉由使相當之具有吡啶吡啶環的化合物與以已知的方法合成之具有蔥環構造之硼酸或硼酸酯(例如，參照非專利文獻 6)進行 Suzuki 偶合反應等交叉偶合反應(例如，參照非專利文獻 7)，則可以合成具有被取代之蔥環構造及吡啶吡啶環構造的化合物係新穎化合物。

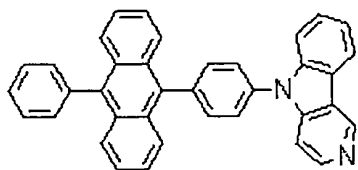
以通式(1)所表示之具有被取代之蔥環構造及吡啶吡啶環構造的化合物之中，較佳化合物之具體例列示如下，但本發明並不限定於該等化合物。

[化2]



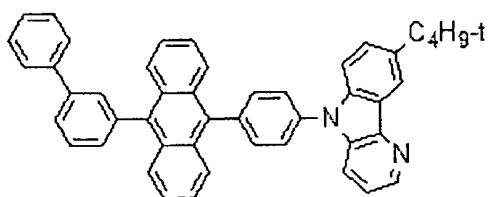
(化合物 2)

[化3]



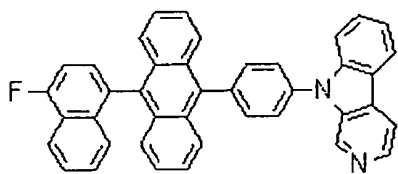
(化合物 3)

[化4]



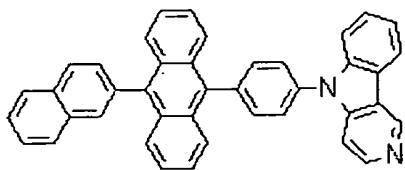
(化合物 4)

[化5]



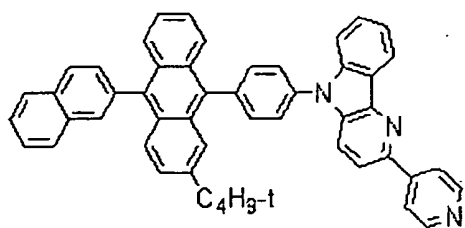
(化合物 5)

[化6]



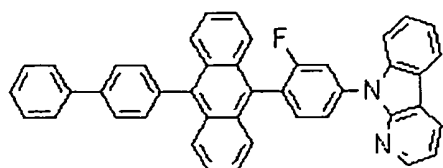
(化合物 6)

[化7]



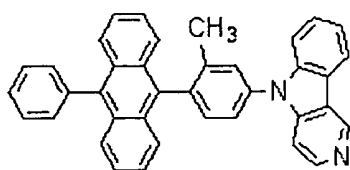
(化合物 7)

[化8]



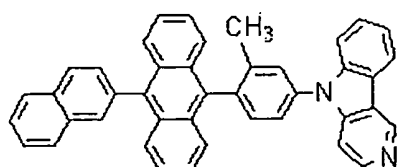
(化合物 8)

[化9]



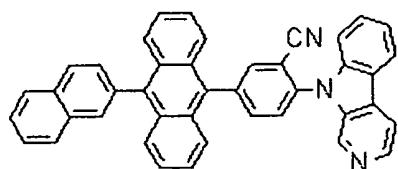
(化合物 9)

[化10]



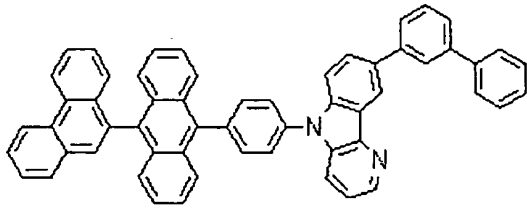
(化合物 10)

[化11]



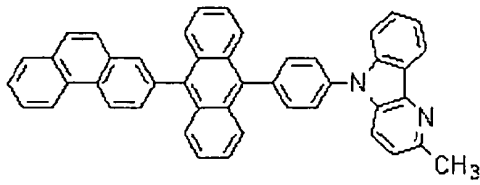
(化合物 11)

[化12]



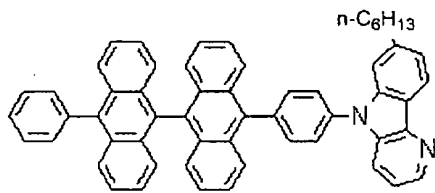
(化合物 1 2)

[化13]



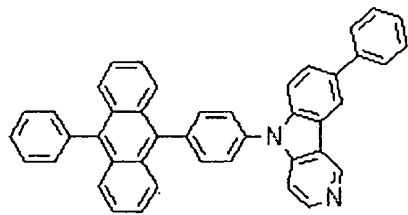
(化合物 1 3)

[化14]



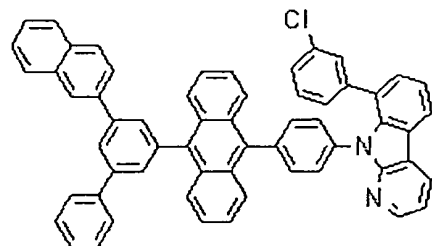
(化合物 1 4)

[化15]



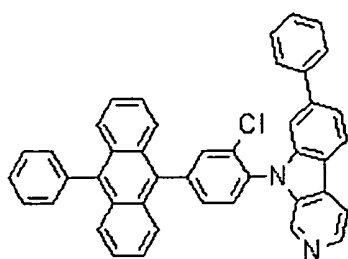
(化合物 1 5)

[化16]



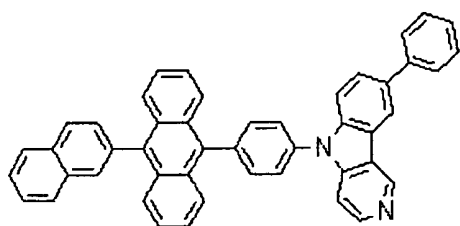
(化合物 1 6)

[化17]



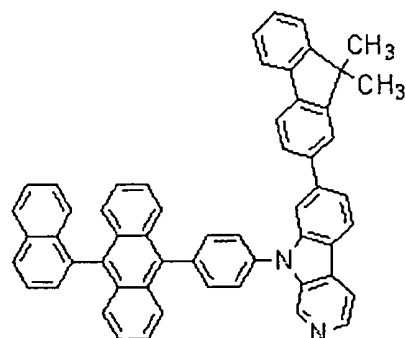
(化合物 17)

[化18]



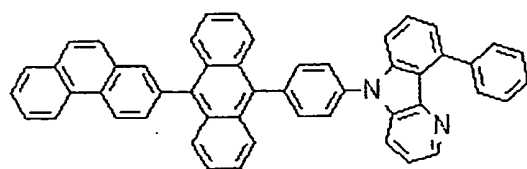
(化合物 18)

[化19]



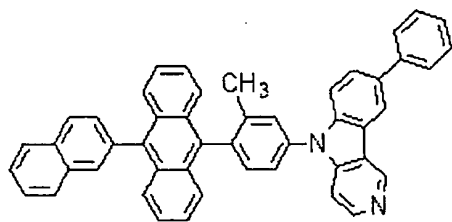
(化合物 19)

[化20]



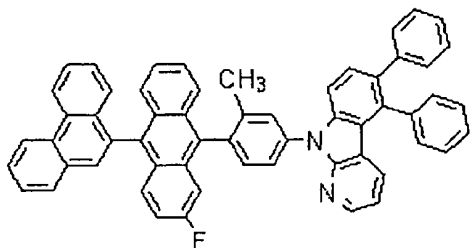
(化合物 20)

[化21]



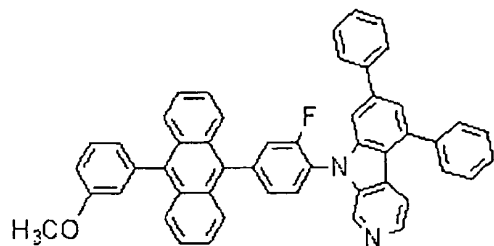
(化合物 2 1)

[化22]



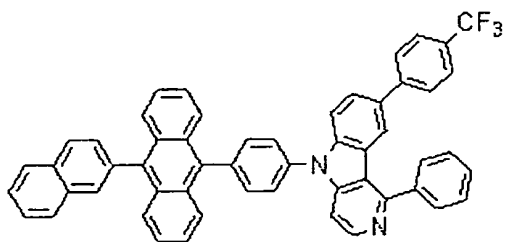
(化合物 2 2)

[化23]



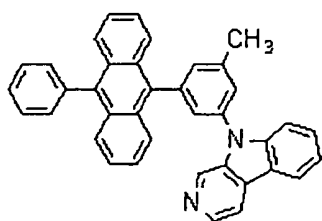
(化合物 2 3)

[化24]



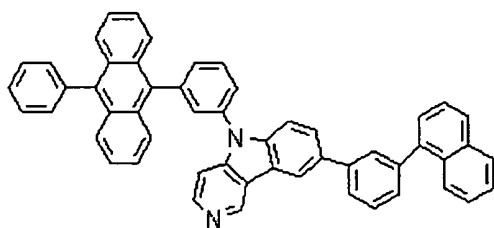
(化合物 2 4)

[化25]



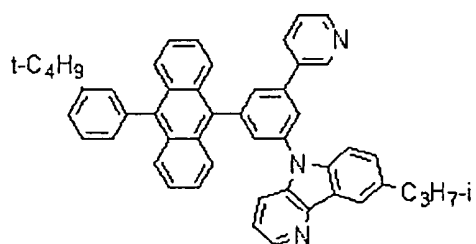
(化合物 2 5)

[化26]



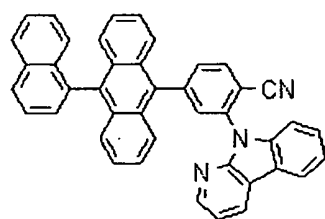
(化合物 2 6)

[化27]



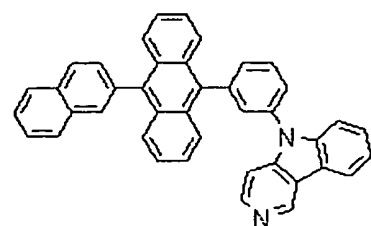
(化合物 2 7)

[化28]



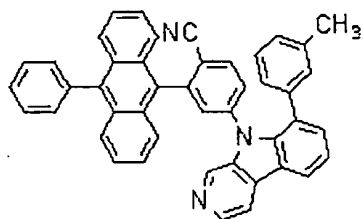
(化合物 2 8)

[化29]



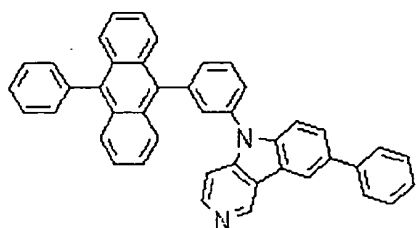
(化合物 29)

[化30]



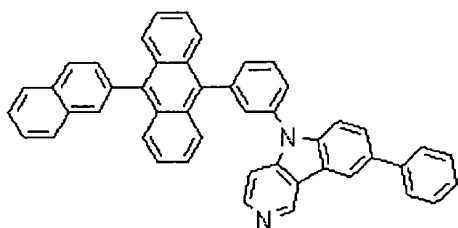
(化合物 30)

[化31]



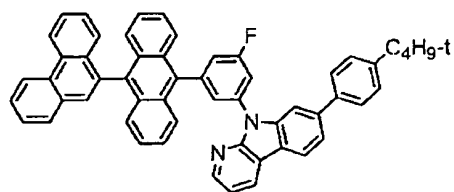
(化合物 31)

[化32]



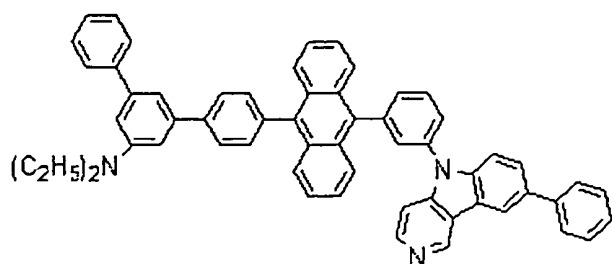
(化合物 32)

[化33]



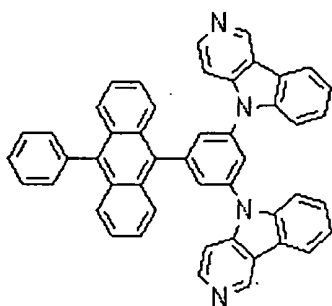
(化合物 33)

[化34]



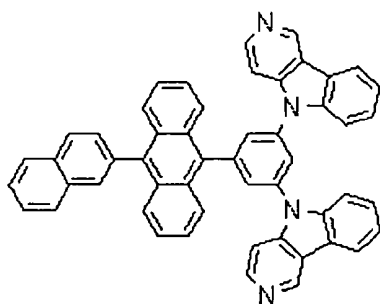
(化合物 3 4)

[化35]



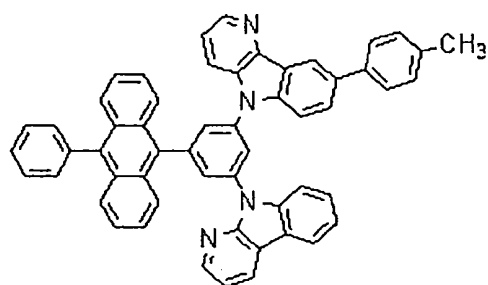
(化合物 3 5)

[化36]



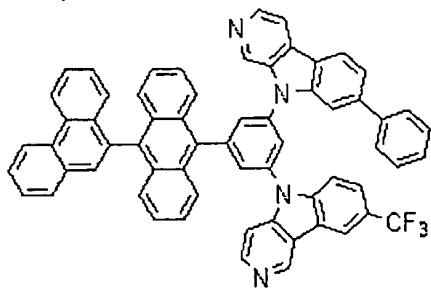
(化合物 3 6)

[化37]



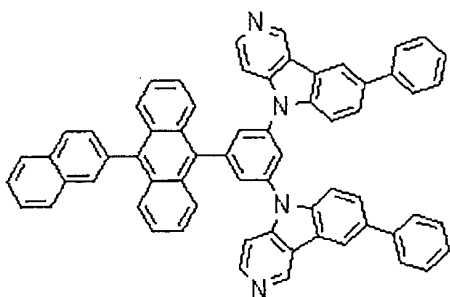
(化合物 3 7)

[化38]



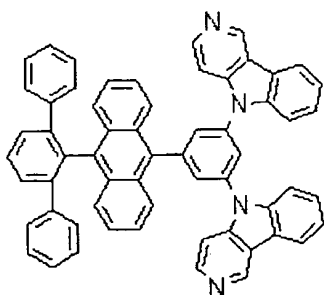
(化合物 3 8)

[化39]



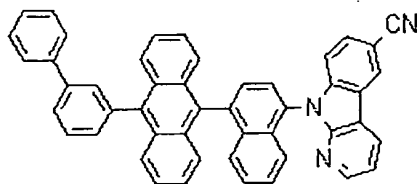
(化合物 3 9)

[化40]



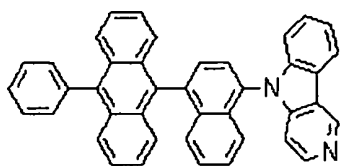
(化合物 4 0)

[化41]



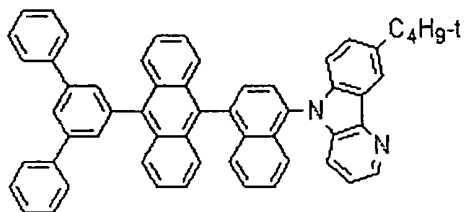
(化合物 4 1)

[化42]



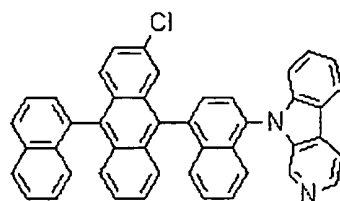
(化合物 4 2)

[化43]



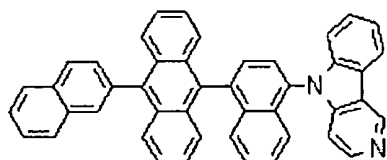
(化合物 4 3)

[化44]



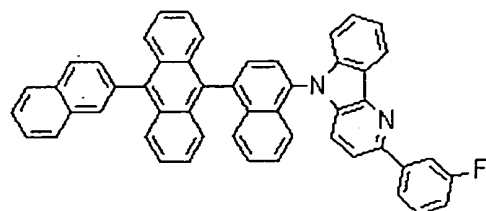
(化合物 4 4)

[化45]



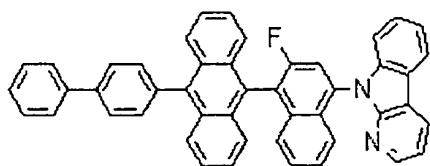
(化合物 4 5)

[化46]



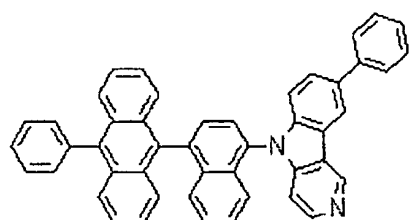
(化合物 4 6)

[化47]



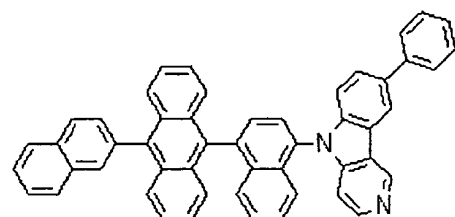
(化合物 4 7)

[化48]



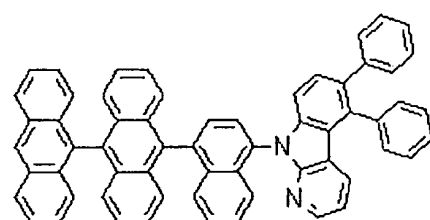
(化合物 4 8)

[化49]



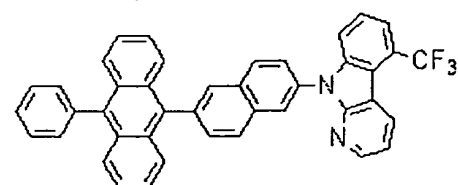
(化合物 4 9)

[化50]



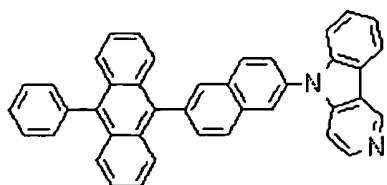
(化合物 5 0)

[化51]



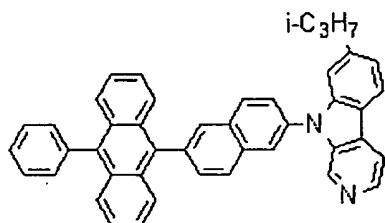
(化合物 5 1)

[化52]



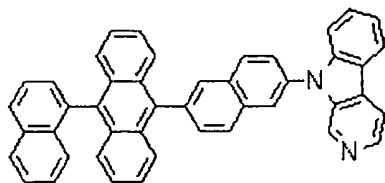
(化合物 5 2)

[化53]



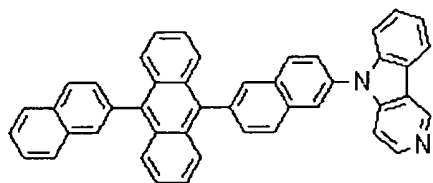
(化合物 5 3)

[化54]



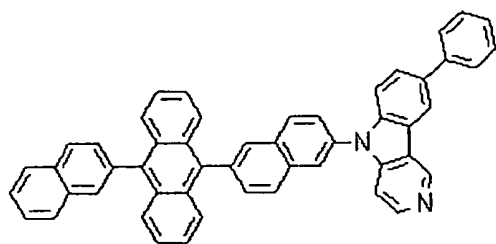
(化合物 5 4)

[化55]



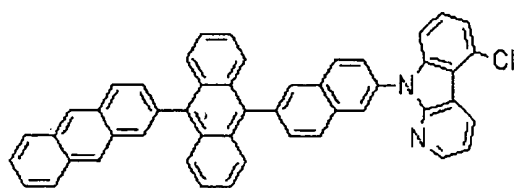
(化合物 5 5)

[化56]



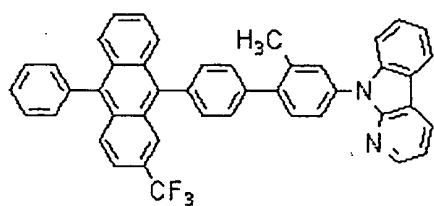
(化合物 5 6)

[化57]



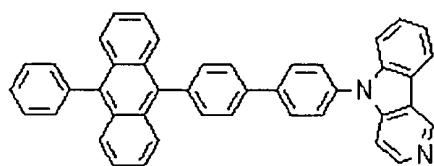
(化合物 57)

[化58]



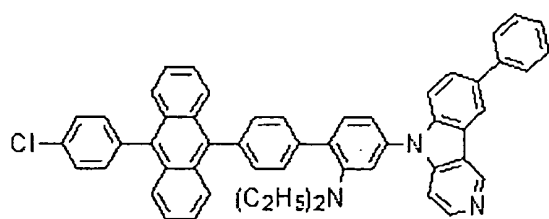
(化合物 58)

[化59]



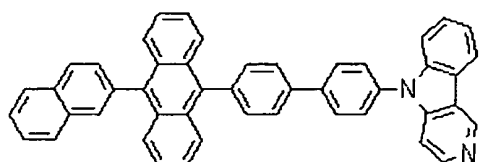
(化合物 59)

[化60]



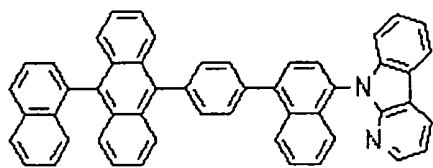
(化合物 60)

[化61]



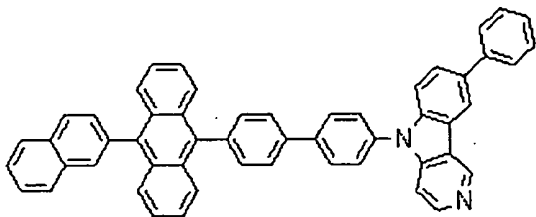
(化合物 61)

[化62]



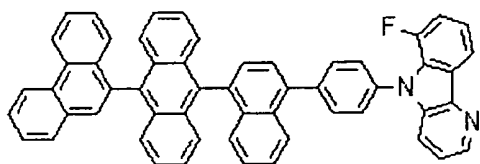
(化合物 6 2)

[化63]



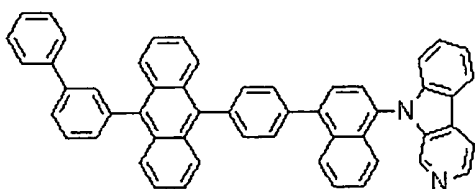
(化合物 6 3)

[化64]



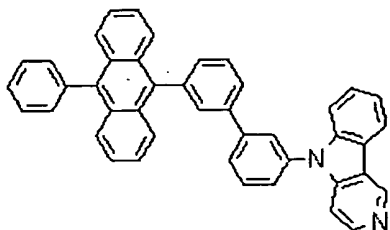
(化合物 6 4)

[化65]



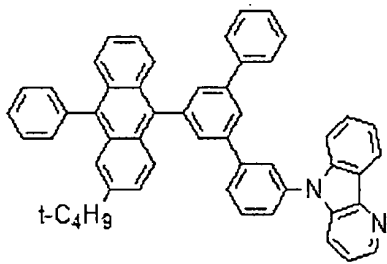
(化合物 6 5)

[化66]



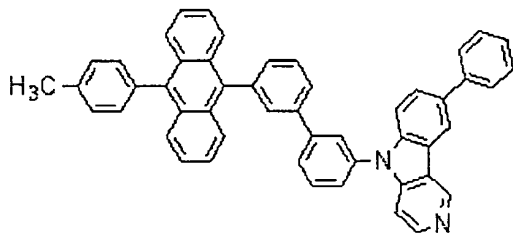
(化合物 6 6)

[化67]



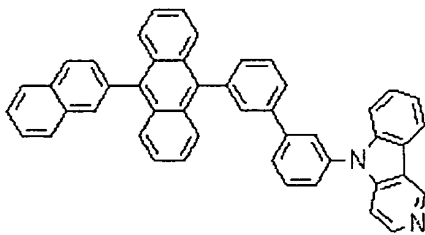
(化合物 6 7)

[化68]



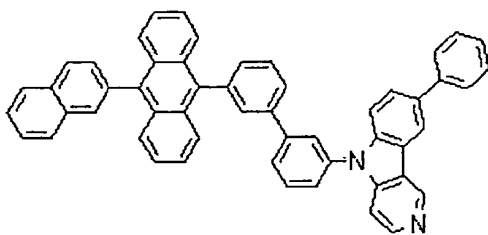
(化合物 6 8)

[化69]



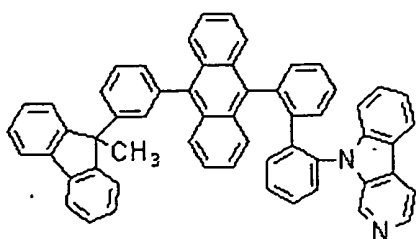
(化合物 6 9)

[化70]



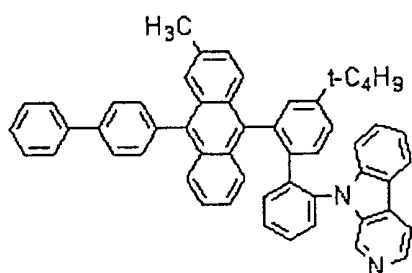
(化合物 7 0)

[化71]



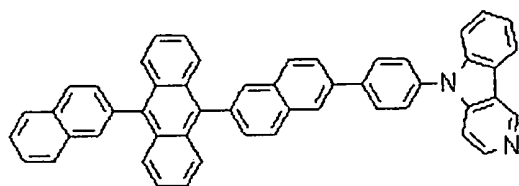
(化合物 7 1)

[化72]



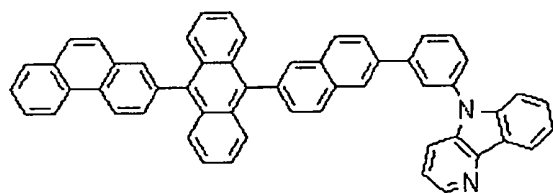
(化合物 7 2)

[化73]



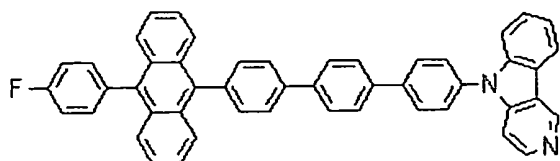
(化合物 7 3)

[化74]



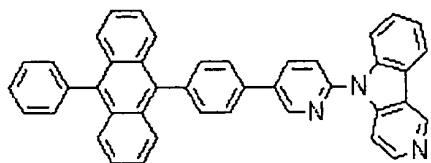
(化合物 7 4)

[化75]



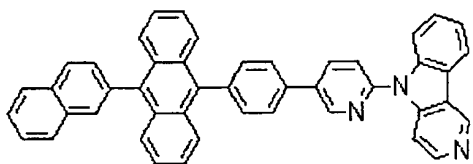
(化合物 7 5)

[化76]



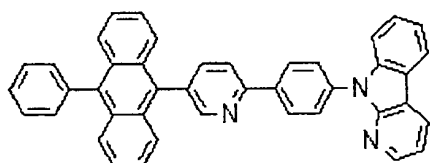
(化合物 7 6)

[化77]



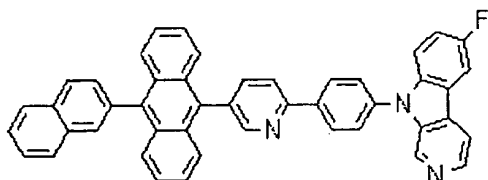
(化合物 7 7)

[化78]



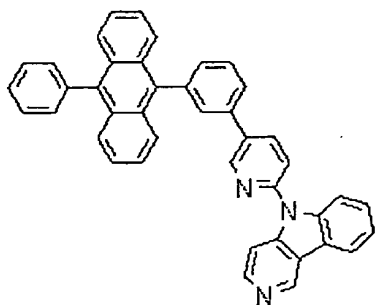
(化合物 7 8)

[化79]



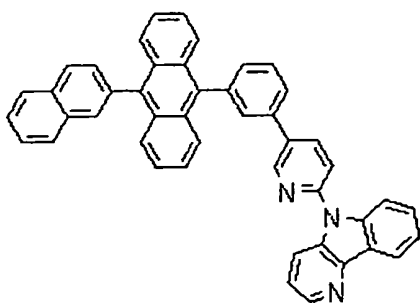
(化合物 7 9)

[化80]



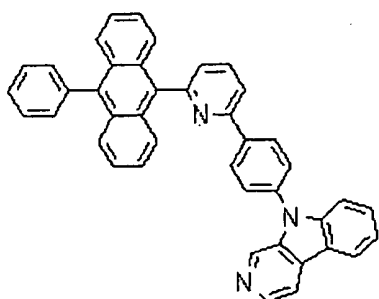
(化合物 8 0)

[化81]



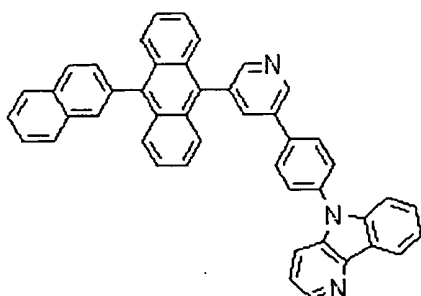
(化合物 8 1)

[化82]



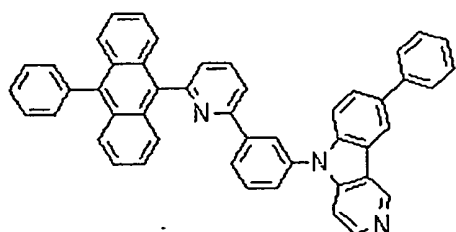
(化合物 8 2)

[化83]



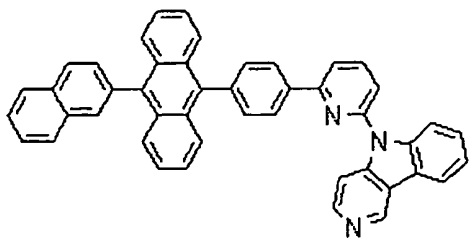
(化合物 8 3)

[化84]



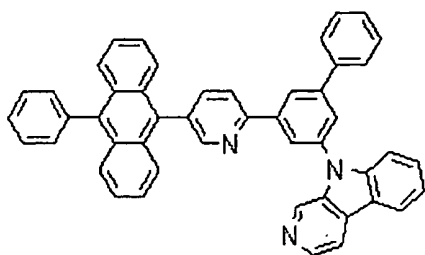
(化合物 8 4)

[化89]



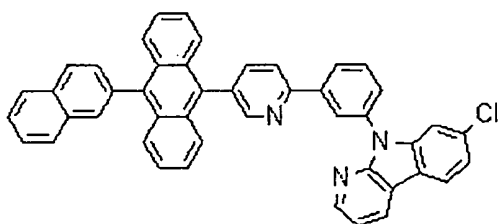
(化合物 89)

[化90]



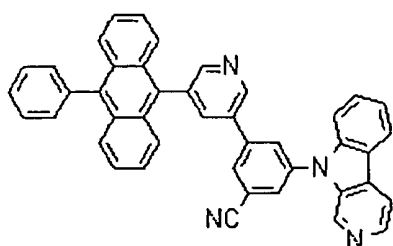
(化合物 90)

[化91]



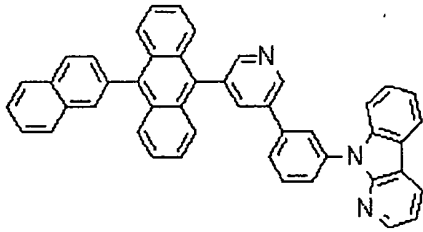
(化合物 91)

[化92]



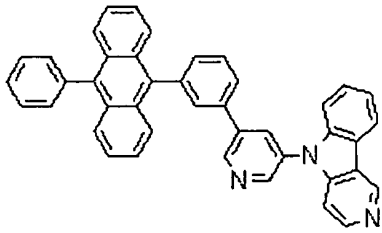
(化合物 92)

[化93]



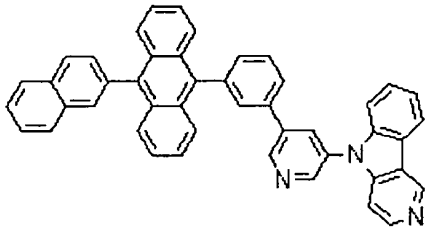
(化合物 9 3)

[化94]



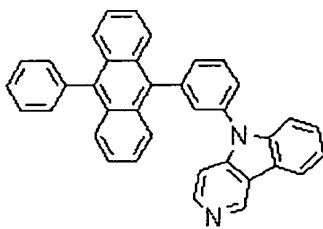
(化合物 9 4)

[化95]



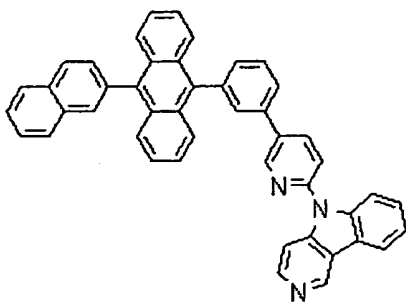
(化合物 9 5)

[化96]



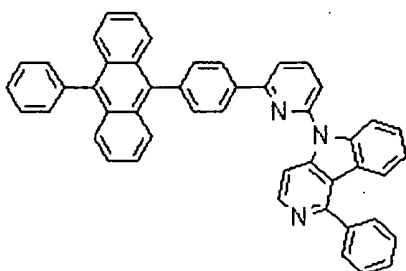
(化合物 9 6)

[化97]



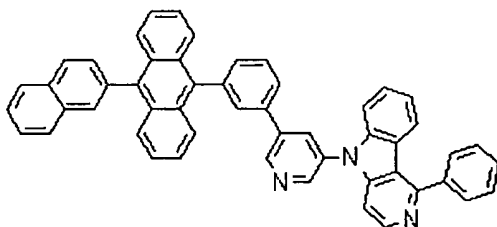
(化合物 9 7)

[化98]



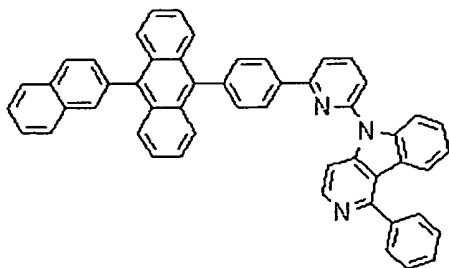
(化合物 9 8)

[化99]



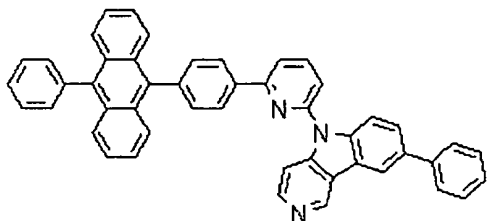
(化合物 9 9)

[化100]



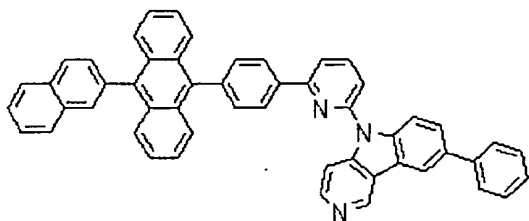
(化合物 1 0 0)

[化101]



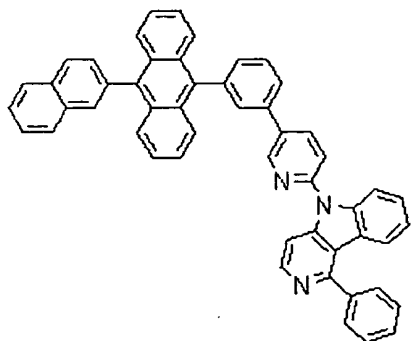
(化合物 101)

[化102]



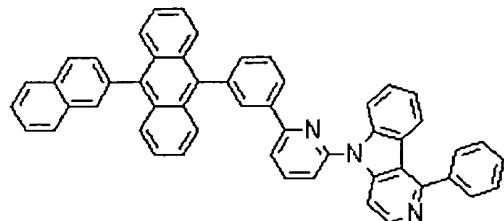
(化合物 102)

[化103]



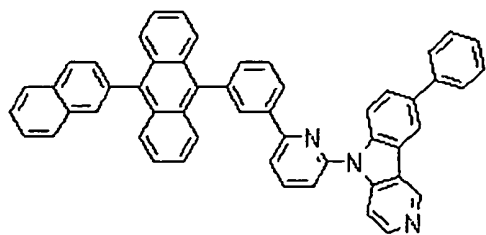
(化合物 103)

[化104]



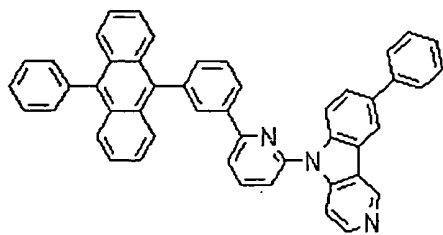
(化合物 104)

[化105]



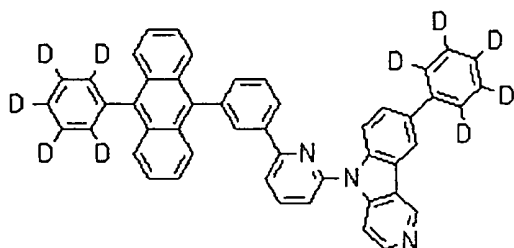
(化合物 105)

[化106]



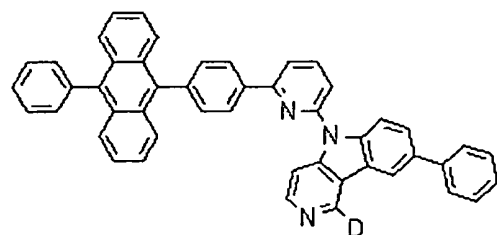
(化合物 106)

[化107]



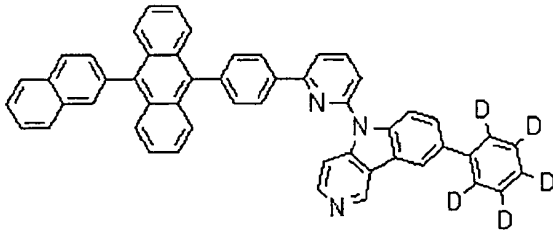
(化合物 107)

[化108]



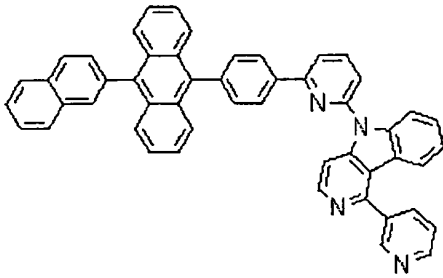
(化合物 108)

[化109]



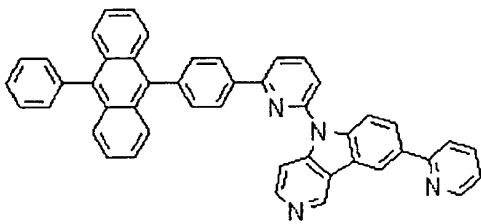
(化合物 109)

[化110]



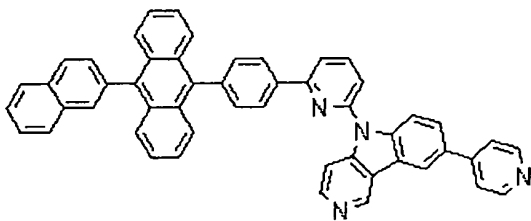
(化合物 110)

[化111]



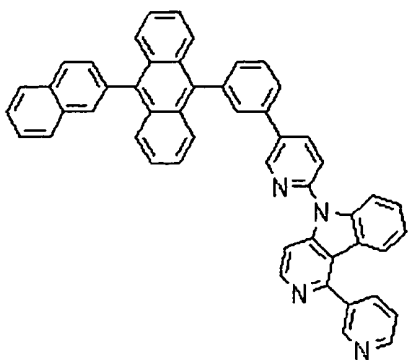
(化合物 111)

[化112]



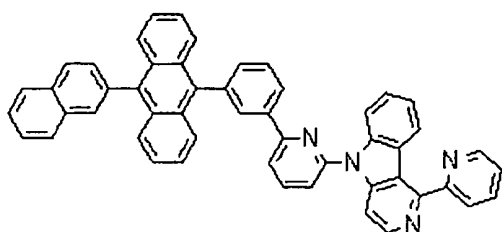
(化合物 112)

[化113]



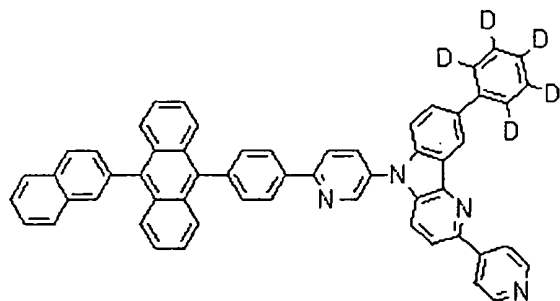
(化合物 1 1 3)

[化114]



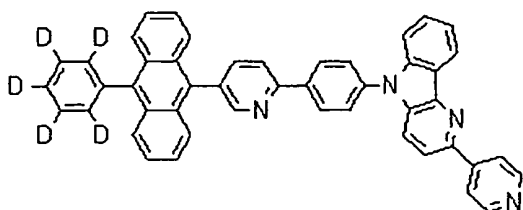
(化合物 1 1 4)

[化115]



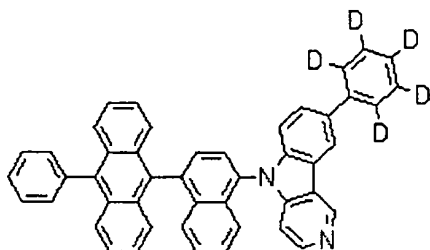
(化合物 1 1 5)

[化116]



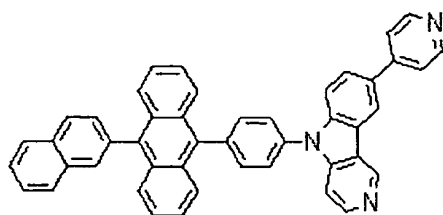
(化合物 1 1 6)

[化117]



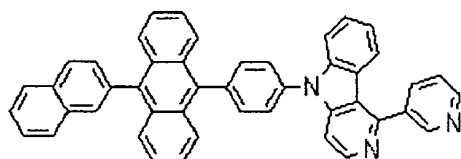
(化合物 1 1 7)

[化118]



(化合物 1 1 8)

[化119]



(化合物 1 1 9)

藉由利用管柱層析法之精製、利用矽膠、活性碳、活性白土等的吸附精製、利用溶劑之再結晶或晶析法等進行了該等化合物之精製。藉由 NMR 分析進行了化合物的鑑定。作為物性值，進行了玻璃轉移溫度(Tg)以及熔點的測定。熔點係蒸鍍性之指標，而玻璃轉移溫度(Tg)係薄膜狀態之穩定性的指標。

熔點以及玻璃轉移溫度係使用粉體、利用 Bruker—AXS 製造之高靈敏度示差掃描熱量計 DSC3100S 進行了測定。

又，功函數係於氧化銦錫(ITO, indium tin oxide)基板上製作 100nm 之薄膜，並使用理研計器製造之大氣中光電子分光裝置 AC-3 型進行了測定。功函數係電洞阻擋能力之指標。

又，在高溫條件下的穩定性係將粉體在真空條件下進行封管，於設定在預定溫度下之恆溫器內靜置一星期，將前後之樣品利用高速液相層析儀等分析裝置測定了純度，並對前後之樣品評

估了純度的變化。在高溫條件下的穩定性係在製作有機 EL 元件時或者驅動時之耐久性的指標。

作為本發明之有機 EL 元件的構造，可列舉：於基板上依序由陽極、電洞注入層、電洞傳輸層、發光層、電洞阻擋層、電子傳輸層、以及陰極所構成之構造；又，於陽極與電洞傳輸層之間具有電洞注入層之構造；以及，於電子傳輸層與陰極之間具有電子注入層之構造。該等多層構造中可省略幾層有機層，例如亦可為於基板上依序具有陽極、電洞傳輸層、發光層、電子傳輸層、以及陰極的構造。

作為有機 EL 元件之陽極，使用如 ITO 或金一般的功函數較大的電極材料。作為電洞注入層，除銅酞青之外，亦可使用星爆型三苯胺衍生物、各種三苯胺四聚物等材料或塗布型高分子材料。

在電洞傳輸層中可以使用 N,N'-二苯基-N,N'-二(間甲苯基)-聯苯胺(以下，簡稱為 TPD)、或 N,N'-二苯基-N,N'-二(α -萘基)-聯苯胺(以下，簡稱為 NPD)、N,N,N',N'-四聯苯基聯苯胺等聯苯胺衍生物、各種三苯胺四聚物等。又，作為電洞之注入及傳輸層，可以使用聚 3,4-伸乙二氧基噻吩(以下，簡稱為 PEDOT)/聚苯乙烯磺酸酯(以下，簡稱為 PSS)等塗布型高分子材料。

作為本發明之有機 EL 元件之發光層、電洞阻擋層、電子傳輸層，除了本發明之具有被取代之蔥環構造及吡啶吡啶環構造的化合物之外，亦可使用鋁之錯合物、噻唑衍生物、噁唑衍生物、呋唑衍生物、聚二烷基萘衍生物、2,9-二甲基-4,7-二苯基-1,10-鄰二氮雜菲(bathocuproine; BCP)等啡啉衍生物、或者 3-(4-聯苯基)-4-苯基-5-(4-三級丁基苯基)-1,2,4-三唑(3-(4-biphenyl)-4-phenyl-5-(4-tert-butylphenyl)-1,2,4-triazole; TAZ)等三唑衍生物等具有電洞阻擋作用的衍生物。

藉由將鋁之錯合物、苯乙烯衍生物等習知之發光材料用於發光層，並使用本發明之具有被取代之蔥環構造及吡啶吡啶環構造的化合物作為電洞阻擋層或電子傳輸層，則可以製作高性能之有

機 EL 元件。又，作為發光層之主體材料，例如可以使用喹吡酮、 α -萘喃酮、紅螢烯等螢光體。作為磷光發光體，使用苯基吡啶的銦錯合物 Ir(ppy)_3 等綠色磷光發光體、 FIrpic 、 FIr6 等藍色磷光發光體、 $\text{Btp}_2\text{Ir(acac)}$ 等紅色磷光發光體；而作為此時的主體材料，則可以使用 4,4'-二(N-咔唑基)聯苯(4,4'-di(N-carbazolyl)-biphenyl；以下簡稱為 CBP)、4,4',4''-三(N-咔唑基)三苯胺(4,4',4''-tri(N-carbazolyl)triphenylamine；以下簡稱為 TCTA)、或者 1,3-雙(咔唑-9-基)苯(1,3-Bis(carbazol-9-yl)benzene；以下簡稱為 mCP)等咔唑衍生物作為電洞注入與傳輸性的主體材料，或使用 2,2',2''-(1,3,5-伸苯基)-參(1-苯基-1H-苯并咪唑) (2,2',2''-(1,3,5-phenylene)-tris(1-phenyl-1H-benzimidazole；以下簡稱為 TPBI)等作為電子傳輸性的主體材料，從而可以製作高性能之有機 EL 元件。

進而，可以對本發明之具有被取代之蔥環構造及吡啶吡啶環構造的化合物，進行習知之電子傳輸性材料的多層重疊或者共蒸鍍，而用作電子傳輸層。

本發明之有機 EL 元件可以具有電子注入層。作為電子注入層，可以使用氟化鋰等。作為陰極，可以使用如鋁一般的功函數低的電極材料、或者如鋁鎂一般的功函數更低的合金作為電極材料。

以下，藉由實施例具體說明本發明之實施形態，但只要不超出本發明的主旨，本發明並不限定於以下實施例。

[實施例 1]

<5-[3-甲基-4-(10-苯基蔥-9-基)苯基]-5H-吡啶[4,3-b]吡啶(化合物 9)的合成>

在氮氣取代後的反應容器中，添加 5-(4-溴-3-甲基苯基)-5H-吡啶[4,3-b]吡啶 3.3 g、9-(4,4,5,5-四甲基-[1,3,2]二噁硼烷-2-基)-10-苯基蔥 3.7 g、肆(三苯膦)鈹 0.57 g、2M 碳酸鉀水溶液 24ml、甲苯 80ml、乙醇 20ml，並進行加熱，持續攪拌並回流 16 小時。冷卻至室溫並添加甲苯 100ml 與水 100ml 之後，進行攪拌，將有機層分液。以無水硫酸鎂將有機層脫水之

後，藉由於減壓之下進行濃縮，而獲得粗產物。將粗產物以管柱層析法(載體：NH 矽膠，洗提液：甲苯/己烷)進行精製，而獲得 5-[3-甲基-4-(10-苯基蔥-9-基)苯基]-5H-吡啶[4,3-b]吡啶(化合物 9)2.8 g (產率 56%)的淡黃色粉體。

使用 NMR 對所獲得之淡黃色粉體鑑定構造。將 $^1\text{H-NMR}$ 的測定結果顯示於圖 1 中。

藉由 $^1\text{H-NMR}(\text{CDCl}_3)$ 檢測出以下 26 個氫的訊號。 $\delta(\text{ppm})=9.45(1\text{H})$ 、 $8.63(1\text{H})$ 、 $8.27(1\text{H})$ 、 $7.77(2\text{H})$ 、 $7.71(1\text{H})$ 、 $7.50-7.67(1\text{H})$ 、 $7.44(3\text{H})$ 、 $7.39(2\text{H})$ 、 $2.06(3\text{H})$ 。

[實施例 2]

<5-[3-甲基-4-(10-(萘-2-基)蔥-9-基)苯基]-5H-吡啶[4,3-b]吡啶(化合物 10)的合成>

在氫氣取代後的反應容器中，添加 5-(4-溴-3-甲基苯基)-5H-吡啶[4,3-b]吡啶 2.4 g、9-(4,4,5,5-四甲基-[1,3,2]二噁硼烷-2-基)-10-(萘-2-基)蔥 3.7 g、肆(三苯膦)鈦 0.41 g、2M 碳酸鉀水溶液 18ml、甲苯 64ml、乙醇 16ml，並進行加熱，持續攪拌並回流 16 小時。冷卻至室溫並添加甲苯 100ml 與水 100ml 之後，進行攪拌，將有機層分液。以無水硫酸鎂將有機層脫水之後，藉由於減壓之下進行濃縮，而獲得粗產物。將粗產物以管柱層析法(載體：NH 矽膠，洗提液：甲苯/環己烷)進行精製，而獲得 5-[3-甲基-4-(10-(萘-2-基)蔥-9-基)苯基]-5H-吡啶[4,3-b]吡啶(化合物 10)2.6 g (產率 65%)的淡黃色粉體。

使用 NMR 對所獲得之淡黃色粉體鑑定構造。將 $^1\text{H-NMR}$ 的測定結果顯示於圖 2 中。

藉由 $^1\text{H-NMR}(\text{CDCl}_3)$ 檢測出以下 28 個氫的訊號。 $\delta(\text{ppm})=9.46(1\text{H})$ 、 $8.63(1\text{H})$ 、 $8.28(1\text{H})$ 、 $8.10(1\text{H})$ 、 $8.03(2\text{H})$ 、 $7.94(1\text{H})$ 、 $7.79(2\text{H})$ 、 $7.72(1\text{H})$ 、 $7.57-7.70(10\text{H})$ 、 $7.45(3\text{H})$ 、 $7.37(2\text{H})$ 、 $2.08(3\text{H})$ 。

[實施例 3]

<5-[4-(10-苯基蔥-9-基)萘-1-基]-5H-吡啶[4,3

—b) 吡啶(化合物 42)的合成>

在氮氣取代後的反應容器中，添加 5-(4-溴萘-1-基)-5H-吡啶[4,3-b]吡啶 3.1 g、10-苯基蔥-9-硼酸 3.0 g、肆(三苯膦)鈦 0.48 g、2M 碳酸鉀水溶液 21ml、甲苯 70ml、乙醇 18ml，並進行加熱，持續攪拌並回流 6 小時。冷卻至室溫，藉由過濾採集析出物。將析出物加熱溶解於鄰二氯苯，藉由過濾將不溶物除去之後，藉由於減壓之下將濾液濃縮，而獲得粗產物。將粗產物藉由鄰二氯苯/乙酸乙酯之再結晶進行精製，而獲得 5-[4-(10-苯基蔥-9-基)萘-1-基]-5H-吡啶[4,3-b]吡啶(化合物 42) 1.6 g (產率 36%)的黃色粉體。

使用 NMR 對所獲得之黃色粉體鑑定構造。將 $^1\text{H-NMR}$ 的測定結果顯示於圖 3 中。

藉由 $^1\text{H-NMR}(\text{CDCl}_3)$ 檢測出以下 26 個氫的訊號。 $\delta(\text{ppm}) = 9.53(1\text{H})$ 、 $8.58(1\text{H})$ 、 $8.35(1\text{H})$ 、 $7.87(1\text{H})$ 、 $7.80(3\text{H})$ 、 $7.66(2\text{H})$ 、 $7.61(2\text{H})$ 、 $7.54(4\text{H})$ 、 $7.47(1\text{H})$ 、 $7.29-7.40(9\text{H})$ 、 $7.20(1\text{H})$ 。

[實施例 4]

<5-[4-{10-(萘-2-基)蔥-9-基}萘-1-基]-5H-吡啶[4,3-b]吡啶(化合物 45)的合成>

在氮氣取代後的反應容器中，添加 5-(4-溴萘-1-基)-5H-吡啶[4,3-b]吡啶 3.2 g、9-(4,4,5,5-四甲基-[1,3,2]二噁硼烷-2-基)-10-(萘-2-基)蔥 4.4 g、肆(三苯膦)鈦 0.50 g、2M 碳酸鉀水溶液 21ml、甲苯 70ml、乙醇 18ml，並進行加熱，持續攪拌並回流 9 小時。冷卻至室溫，並添加甲苯 100ml 與水 100ml 之後，進行攪拌，將有機層分液。以無水硫酸鎂將有機層脫水之後，藉由於減壓之下進行濃縮，而獲得粗產物。將粗產物藉由甲苯/己烷之再結晶進行精製，而獲得 5-[4-{10-(萘-2-基)蔥-9-基}萘-1-基]-5H-吡啶[4,3-b]吡啶(化合物 45) 1.7 g (產率 33%)的黃色粉體。

使用 NMR 對所獲得之黃色粉體鑑定構造。將 $^1\text{H-NMR}$ 的測定結果顯示於圖 4 中。

藉由 $^1\text{H-NMR}(\text{CDCl}_3)$ 檢測出以下 28 個氫的訊號。 $\delta(\text{ppm}) = 9.53(1\text{H})$ 、 $8.58(1\text{H})$ 、 $8.35(1\text{H})$ 、 $8.10(3\text{H})$ 、 $7.96(1\text{H})$ 、 $7.88(1\text{H})$ 、 $7.83(3\text{H})$ 、 $7.68-7.74(1\text{H})$ 、 $7.63(2\text{H})$ 、 $7.57(2\text{H})$ 、 $7.53(1\text{H})$ 、 $7.46(1\text{H})$ 、 $7.30-7.40(9\text{H})$ 、 $7.19(1\text{H})$ 。

[實施例 5]

<5-[6-(10-苯基蔥-9-基)萘-2-基]-5H-吡啶[4,3-b]吡啶(化合物 52)的合成>

在氮氣取代後的反應容器中，添加 5-(6-溴萘-2-基)-5H-吡啶[4,3-b]吡啶 2.7 g、9-(4,4,5,5-四甲基-[1,3,2]二噁硼烷-2-基)-10-苯基蔥 3.3 g、肆(三苯膦)鈹 0.42 g、2 M 碳酸鉀水溶液 18ml、甲苯 60ml、乙醇 15ml，並進行加熱，持續攪拌並回流 12 小時。冷卻至室溫，藉由過濾採集析出物。將析出物加熱溶解於鄰二氯苯，藉由過濾將不溶物除去之後，藉由於減壓之下將濾液濃縮，而獲得粗產物。將粗產物藉由鄰二氯苯/乙酸乙酯之再結晶進行精製，而獲得 5-[6-(10-苯基蔥-9-基)萘-2-基]-5H-吡啶[4,3-b]吡啶(化合物 52) 1.5 g (產率 38%) 的褐白色粉體。

使用 NMR 對所獲得之褐白色粉體鑑定構造。將 $^1\text{H-NMR}$ 的測定結果顯示於圖 5 中。

藉由 $^1\text{H-NMR}(\text{CDCl}_3)$ 檢測出以下 26 個氫的訊號。 $\delta(\text{ppm}) = 9.46(1\text{H})$ 、 $8.59(1\text{H})$ 、 $8.29(1\text{H})$ 、 $8.22(1\text{H})$ 、 $8.18(2\text{H})$ 、 $8.14(1\text{H})$ 、 $7.76(6\text{H})$ 、 $7.52-7.65(7\text{H})$ 、 $7.45(2\text{H})$ 、 $7.37(4\text{H})$ 。

[實施例 6]

<5-[6-{10-(萘-2-基)蔥-9-基}萘-2-基]-5H-吡啶[4,3-b]吡啶(化合物 55)的合成>

在氮氣取代後的反應容器中，添加 5-(6-溴萘-2-基)-5H-吡啶[4,3-b]吡啶 3.6 g、9-(4,4,5,5-四甲基-[1,3,2]二噁硼烷-2-基)-10-(萘-2-基)蔥 5.0 g、肆(三苯膦)鈹 0.56 g、2M 碳酸鉀水溶液 24ml、甲苯 80ml、乙醇 20ml，並進行加熱，持續攪拌並回流 12 小時。冷卻至室溫之後，藉由過濾採集析

出物。將析出物加熱溶解於鄰二氯苯，藉由過濾將不溶物除去之後，藉由於減壓之下將濾液濃縮，而獲得粗產物。將粗產物藉由鄰二氯苯/乙酸乙酯之再結晶進行精製，而獲得 5-[6-{10-(萘-2-基)蔥-9-基}萘-2-基]-5H-吡啶[4,3-b]吡啶(化合物 5) 2.3 g (產率 40%)的黃綠色粉體。

使用 NMR 對所獲得之黃綠色粉體鑑定構造。將 $^1\text{H-NMR}$ 的測定結果顯示於圖 6 中。

藉由 $^1\text{H-NMR}(\text{CDCl}_3)$ 檢測出以下 28 個氫的訊號。 $\delta(\text{ppm})=9.46(1\text{H})、8.60(1\text{H})、8.29(1\text{H})、8.23(1\text{H})、8.19(3\text{H})、8.11(1\text{H})、8.05(1\text{H})、8.03(1\text{H})、7.95(1\text{H})、7.78(6\text{H})、7.64(4\text{H})、7.56(1\text{H})、7.45(2\text{H})、7.36(4\text{H})$ 。

[實施例 7]

<5-[4'-(10-萘基蔥-9-基)聯苯-4-基]-5H-吡啶[4,3-b]吡啶(化合物 59)的合成>

在氮氣取代後的反應容器中，添加 5-(4'-溴聯苯-4-基)-5H-吡啶[4,3-b]吡啶 3.5 g、9-(4,4,5,5-四甲基-[1,3,2]二噁硼烷-2-基)-10-萘基蔥 4.7 g、肆(三苯膦)鈾 0.51 g、2M 碳酸鉀水溶液 22ml、甲苯 112ml、乙醇 28ml，並進行加熱，持續攪拌並回流 8 小時。冷卻至室溫，藉由過濾採集析出物。將析出物加熱溶解於鄰二氯苯，藉由過濾將不溶物除去之後，藉由於減壓之下將濾液濃縮，而獲得粗產物。將粗產物藉由進行甲苯之加熱同時分散洗淨而進行精製，從而獲得 5-[4'-(10-萘基蔥-9-基)聯苯-4-基]-5H-吡啶[4,3-b]吡啶(化合物 59) 3.1 g (產率 62%)的黃白色粉體。

使用 NMR 對所獲得之黃白色粉體鑑定構造。將 $^1\text{H-NMR}$ 的測定結果顯示於圖 7 中。

藉由 $^1\text{H-NMR}(\text{CDCl}_3)$ 檢測出以下 28 個氫的訊號。 $\delta(\text{ppm})=9.43(1\text{H})、8.58(1\text{H})、8.26(1\text{H})、8.03(2\text{H})、7.94(2\text{H})、7.81(2\text{H})、7.72(4\text{H})、7.63(4\text{H})、7.50-7.58(5\text{H})、7.35-7.43(6\text{H})$ 。

[實施例 8]

<5-[4'-{10-(萘-2-基)蔥-9-基}聯苯-4-基]-5H-吡啶[4,3-b]吡啶(化合物 61)的合成>

在氮氣取代後的反應容器中，添加 5-(4'-溴聯苯-4-基)-5H-吡啶[4,3-b]吡啶 3.2 g、9-(4,4,5,5-四甲基-[1,3,2]二噁硼烷-2-基)-10-(萘-2-基)蔥 5.2 g、肆(三苯膦)鈹 0.47 g、2M 碳酸鉀水溶液 20ml、甲苯 104ml、乙醇 26ml，並進行加熱，持續攪拌並回流 8 小時。冷卻至室溫之後，藉由過濾採集析出物。將析出物加熱溶解於鄰二氯苯，藉由過濾將不溶物除去之後，藉由於減壓之下將濾液濃縮，而獲得粗產物。將粗產物藉由進行甲苯之加熱同時分散洗淨而進行精製，從而獲得 5-[4'-{10-(萘-2-基)蔥-9-基}聯苯-4-基]-5H-吡啶[4,3-b]吡啶(化合物 61) 2.5 g (產率 49%)的黃白色粉體。

使用 NMR 對所獲得之黃白色粉體鑑定構造。將 $^1\text{H-NMR}$ 的測定結果顯示於圖 8 中。

藉由 $^1\text{H-NMR}(\text{CDCl}_3)$ 檢測出以下 30 個氫的訊號。 $\delta(\text{ppm}) = 9.43(1\text{H})$ 、 $8.58(1\text{H})$ 、 $8.26(1\text{H})$ 、 $8.09(1\text{H})$ 、 $8.02(4\text{H})$ 、 $7.94(3\text{H})$ 、 $7.83(2\text{H})$ 、 $7.76(2\text{H})$ 、 $7.71(2\text{H})$ 、 $7.52-7.67(7\text{H})$ 、 $7.37-7.43(4\text{H})$ 、 $7.34(2\text{H})$ 。

[實施例 9]

<5-[6-[3-{10-(萘-2-基)蔥-9-基}苯基]吡啶-2-基]-5H-吡啶[4,3-b]吡啶(化合物 87)的合成>

在氮氣取代後的反應容器中，添加 5-[6-(3-溴苯基)吡啶-2-基]-5H-吡啶[4,3-b]吡啶 2.7 g、9-(4,4,5,5-四甲基-[1,3,2]二噁硼烷-2-基)-10-(萘-2-基)蔥 2.2 g、肆(三苯膦)鈹 0.32g、2M 碳酸鉀水溶液 8ml、甲苯 16ml、乙醇 4ml，並進行加熱，持續攪拌並回流 9 小時。冷卻至室溫之後，藉由過濾採集析出物。將析出物加熱溶解於鄰二氯苯，藉由過濾將不溶物除去之後，藉由於減壓之下將濾液濃縮，而獲得粗產物。將粗產物藉由進行乙酸乙酯之加熱同時分散洗淨而進行精製，從而獲得 5-[6-[3-{10-(萘-2-基)蔥-9-基}苯基]吡啶-2-基]

—5H—吡啶[4, 3-b]吡啶(化合物 87) 1.6 g (產率 47%)的黃白色粉體。

使用 NMR 對所獲得之黃白色粉體鑑定構造。將 $^1\text{H-NMR}$ 的測定結果顯示於圖 9 中。

藉由 $^1\text{H-NMR}(\text{CDCl}_3)$ 檢測出以下 29 個氫的訊號。 $\delta(\text{ppm}) = 9.39(1\text{H})、8.56(1\text{H})、8.42(1\text{H})、8.26(1\text{H})、8.20(1\text{H})、8.09(1\text{H})、7.97-8.04(4\text{H})、7.93(1\text{H})、7.79-7.89(5\text{H})、7.74(2\text{H})、7.58-7.65(5\text{H})、7.51(1\text{H})、7.31-7.42(5\text{H})$ 。

[實施例 10]

<5- [6-[4-{10-(萘-2-基)蔥-9-基}苯基]吡啶-2-基]—5H—吡啶[4, 3-b]吡啶(化合物 89)的合成>

在氮氣取代後的反應容器中，添加 5- [6-(4-溴苯基)吡啶-2-基]—5H—吡啶[4, 3-b]吡啶 3.0g、9-(4, 4, 5, 5-四甲基-[1, 3, 2]二噁硼烷-2-基)-10-(萘-2-基)蔥 3.9g、肆(三苯膦)鈹 0.43g、2M 碳酸鉀水溶液 19ml、甲苯 60ml、乙醇 15ml，並進行加熱，持續攪拌並回流 11 小時。冷卻至室溫之後，藉由過濾採集析出物。將析出物加熱溶解於鄰二氯苯，藉由過濾將不溶物除去之後，藉由於減壓之下將濾液濃縮，而獲得粗產物。將粗產物藉由進行乙酸乙酯之加熱同時分散洗淨而進行精製，從而獲得 5- [6-[4-{10-(萘-2-基)蔥-9-基}苯基]吡啶-2-基]—5H—吡啶[4, 3-b]吡啶(化合物 89) 2.0g (產率 42%)的黃白色粉體。

使用 NMR 對所獲得之黃白色粉體鑑定構造。將 $^1\text{H-NMR}$ 的測定結果顯示於圖 10 中。

藉由 $^1\text{H-NMR}(\text{CDCl}_3)$ 檢測出以下 29 個氫的訊號。 $\delta(\text{ppm}) = 9.43(1\text{H})、8.65(1\text{H})、8.40(2\text{H})、8.25(1\text{H})、8.13(1\text{H})、8.09(1\text{H})、7.99-8.04(4\text{H})、7.92(2\text{H})、7.80(2\text{H})、7.74(2\text{H})、7.57-7.69(7\text{H})、7.45(1\text{H})、7.31-7.37(4\text{H})$ 。

[實施例 11]

<5- [4-(10-苯基蔥-9-基)苯基]—5H—吡啶[4, 3-b]

吡啶(化合物 3)的合成>

在氮氣取代後的反應容器中，添加 5-(4-溴苯基)-5H-吡啶[4, 3-b]吡啶 2.5 g、9-(4, 4, 5, 5-四甲基-[1, 3, 2]二噁硼烷-2-基)-10-苯基蔥 3.8 g、肆(三苯膦)鈹 0.45 g、2M 碳酸鉀水溶液 40ml、甲苯 240ml、乙醇 60ml，並進行加熱，持續攪拌並回流 16 小時。冷卻至室溫之後，藉由過濾採集析出物。將析出物加熱溶解於鄰二氯苯，藉由過濾將不溶物除去之後，藉由於減壓之下將濾液濃縮，而獲得粗產物。將粗產物藉由進行甲苯之加熱同時分散洗淨而進行精製，從而獲得 5-[4-(10-苯基蔥-9-基)苯基]-5H-吡啶[4, 3-b]吡啶(化合物 3) 1.9 g (產率 49%) 的黃白色粉體。

使用 NMR 對所獲得之黃白色粉體鑑定構造。

藉由 $^1\text{H-NMR}(\text{CDCl}_3)$ 檢測出以下 24 個氫的訊號。 $\delta(\text{ppm}) = 9.45(1\text{H})$ 、 $8.62(1\text{H})$ 、 $8.28(1\text{H})$ 、 $7.81(4\text{H})$ 、 $7.76(4\text{H})$ 、 $7.71(1\text{H})$ 、 $7.63(2\text{H})$ 、 $7.58(3\text{H})$ 、 $7.51(2\text{H})$ 、 $7.38-7.46(5\text{H})$ 。

[實施例 12]

<5-[4-{10-(萘-2-基)蔥-9-基}苯基]-5H-吡啶[4, 3-b]吡啶(化合物 6)的合成>

在氮氣取代後的反應容器中，添加 5-(4-溴苯基)-5H-吡啶[4, 3-b]吡啶 3.0 g、9-(4, 4, 5, 5-四甲基-[1, 3, 2]二噁硼烷-2-基)-10-(萘-2-基)蔥 4.0 g、肆(三苯膦)鈹 0.54 g、2 M 碳酸鉀水溶液 46ml、甲苯 240ml、乙醇 60ml，並進行加熱，持續攪拌並回流 10 小時。冷卻至室溫之後，藉由過濾採集析出物。將析出物加熱溶解於鄰二氯苯，藉由過濾將不溶物除去之後，藉由於減壓之下將濾液濃縮，而獲得粗產物。將粗產物藉由進行甲苯之加熱同時分散洗淨而進行精製，從而獲得 5-[4-{10-(萘-2-基)蔥-9-基}苯基]-5H-吡啶[4, 3-b]吡啶(化合物 6) 1.3 g (產率 26%) 的黃色粉體。

使用 NMR 對所獲得之黃色粉體鑑定構造。

藉由 $^1\text{H-NMR}(\text{CDCl}_3)$ 檢測出以下 26 個氫的訊號。 $\delta(\text{ppm}) =$

9.46(1H)、8.64(1H)、8.29(1H)、8.11(1H)、8.05(1H)、8.01(1H)、7.94(1H)、7.83(4H)、7.79(4H)、7.73(1H)、7.57—7.65(5H)、7.46(3H)、7.37(2H)。

[實施例 13]

<5-[4-(10-苯基蔥-9-基)苯基]-8-苯基-5H-吡啶[4,3-b]吡啶(化合物 15)的合成>

在氮氣取代後的反應容器中，添加 5-(4-溴苯基)-8-苯基-5H-吡啶[4,3-b]吡啶 3.5 g、10-苯基蔥-9-硼酸 3.1 g、肆(三苯膦)鈹 0.30 g、2M 碳酸鉀水溶液 21ml、甲苯 56ml、乙醇 14ml，並進行加熱，持續攪拌並回流 12 小時。冷卻至室溫並添加甲苯 100ml 與水 100ml 之後，進行攪拌，將有機層分液。以無水硫酸鎂將有機層脫水之後，藉由於減壓之下進行濃縮，而獲得粗產物。將粗產物以管柱層析法(載體：NH 矽膠，洗提液：甲苯)進行精製，而獲得 5-[4-(10-苯基蔥-9-基)苯基]-8-苯基-5H-吡啶[4,3-b]吡啶(化合物 15) 3.3 g (產率 66%)的黃白色粉體。

使用 NMR 對所獲得之黃白色粉體鑑定構造。

藉由 $^1\text{H-NMR}(\text{CDCl}_3)$ 檢測出以下 28 個氫的訊號。 $\delta(\text{ppm})=9.50(1\text{H})、8.65(1\text{H})、8.48(1\text{H})、7.83(5\text{H})、7.77(7\text{H})、7.63(2\text{H})、7.58(2\text{H})、7.52(4\text{H})、7.45(2\text{H})、7.39(3\text{H})$ 。

[實施例 14]

<5-[4-{10-(萘-2-基)蔥-9-基}苯基]-8-苯基-5H-吡啶[4,3-b]吡啶(化合物 18)的合成>

在氮氣取代後的反應容器中，添加 5-(4-溴苯基)-8-苯基-5H-吡啶[4,3-b]吡啶 3.2 g、10-(萘-2-基)蔥-9-硼酸 3.4 g、肆(三苯膦)鈹 0.28 g、2M 碳酸鉀水溶液 18ml、甲苯 52ml、乙醇 13ml，並進行加熱，持續攪拌並回流 11 小時。冷卻至室溫並添加甲苯 100ml 與水 100ml 之後，進行攪拌，將有機層分液。以無水硫酸鎂將有機層脫水之後，藉由於減壓之下進行濃縮，而獲得粗產物。將粗產物以管柱層析法(載體：NH 矽膠，洗提液：甲

苯)進行精製，而獲得 5-〔4-〔10-(萘-2-基)蔥-9-基〕苯基〕-8-苯基-5H-吡啶[4,3-b]吡啶(化合物 18) 3.7 g (產率 74%) 的黃色粉體。

使用 NMR 對所獲得之黃色粉體鑑定構造。

藉由 $^1\text{H-NMR}(\text{CDCl}_3)$ 檢測出以下 30 個氫的訊號。 $\delta(\text{ppm})=9.51(1\text{H})、8.65(1\text{H})、8.49(1\text{H})、8.11(1\text{H})、8.05(1\text{H})、8.02(1\text{H})、7.94(1\text{H})、7.81(12\text{H})、7.62(4\text{H})、7.53(2\text{H})、7.46(2\text{H})、7.39(3\text{H})。$

[實施例 15]

<5-〔3-(10-苯基蔥-9-基)苯基〕-8-苯基-5H-吡啶[4,3-b]吡啶(化合物 31)的合成>

在氮氣取代後的反應容器中，添加 5-(3-溴苯基)-8-苯基-5H-吡啶[4,3-b]吡啶 3.2 g、10-苯基蔥-9-硼酸 3.1 g、肆(三苯膦)鈹 0.31 g、2M 碳酸鉀水溶液 21ml、甲苯 56ml、乙醇 14ml，並進行加熱，持續攪拌並回流 7 小時。冷卻至室溫並添加甲苯 100ml 與水 100ml 之後，進行攪拌，將有機層分液。以無水硫酸鎂將有機層脫水之後，藉由於減壓之下進行濃縮，而獲得粗產物。將粗產物藉由甲苯/己烷之再結晶而進行精製，從而獲得 5-〔3-(10-苯基蔥-9-基)苯基〕-8-苯基-5H-吡啶[4,3-b]吡啶(化合物 31) 3.6 g (產率 72%) 的黃色粉體。

使用 NMR 對所獲得之黃色粉體鑑定構造。

藉由 $^1\text{H-NMR}(\text{CDCl}_3)$ 檢測出以下 28 個氫的訊號。 $\delta(\text{ppm})=9.43(1\text{H})、8.55(1\text{H})、8.40(1\text{H})、7.90(1\text{H})、7.81(3\text{H})、7.74(4\text{H})、7.68(4\text{H})、7.61(2\text{H})、7.56(1\text{H})、7.43-7.50(7\text{H})、7.37(3\text{H})。$

[實施例 16]

<5-〔3-〔10-(萘-2-基)蔥-9-基〕苯基〕-8-苯基-5H-吡啶[4,3-b]吡啶(化合物 32)的合成>

在氮氣取代後的反應容器中，添加 5-(3-溴苯基)-8-苯基-5H-吡啶[4,3-b]吡啶 3.2 g、10-(萘-2-基)蔥-9-硼酸 3.4 g、肆(三苯膦)鈹 0.28 g、2M 碳酸鉀水溶液 20ml、甲苯 52ml、乙醇 13ml，並進行加熱，持續攪拌並回流 7 小時。冷卻至室溫並

添加甲苯 100ml 與水 100ml 之後，進行攪拌，將有機層分液。以無水硫酸鎂將有機層脫水之後，藉由於減壓之下進行濃縮，而獲得粗產物。將粗產物藉由甲苯/甲醇之再結晶而進行精製，從而獲得 5- [3- {10- (萘-2-基) 蔥-9-基} 苯基]-8- 苯基-5H-吡啶[4, 3-b] 吡啶(化合物 32) 2.2 g (產率 44%) 的黃色粉體。

使用 NMR 對所獲得之黃色粉體鑑定構造。

藉由 $^1\text{H-NMR}(\text{CDCl}_3)$ 檢測出以下 30 個氫的訊號。 $\delta(\text{ppm}) = 9.44(1\text{H})$ 、 $8.57(1\text{H})$ 、 $8.42(1\text{H})$ 、 $8.08(1\text{H})$ 、 $8.02(1\text{H})$ 、 $7.91(2\text{H})$ 、 $7.85(2\text{H})$ 、 $7.82(1\text{H})$ 、 $7.75(4\text{H})$ 、 $7.70(4\text{H})$ 、 $7.60(3\text{H})$ 、 $7.43-7.51(6\text{H})$ 、 $7.36(3\text{H})$ 。

[實施例 17]

<3, 5- 雙(5H-吡啶[4, 3-b] 吡啶-5-基)-(10- 苯基蔥-9-基) 苯(化合物 35) 的合成>

在氮氣取代後的反應容器中，添加 3, 5- 雙{5H-吡啶[4, 3-b] 吡啶-5-基}-溴苯 3.7 g、9-(4, 4, 5, 5-四甲基-[1, 3, 2]二噁硼烷-2-基)-10- 苯基蔥 2.9 g、肆(三苯膦)鈹 0.44 g、2 M 碳酸鉀水溶液 19ml、甲苯 72ml、乙醇 18ml，並進行加熱，持續攪拌並回流 21 小時。冷卻至室溫並添加甲苯 100ml 與水 100ml 之後，進行攪拌，將有機層分液。以無水硫酸鎂將有機層脫水之後，藉由於減壓之下進行濃縮，而獲得粗產物。將粗產物藉由管柱層析法(載體：NH 矽膠，洗提液：甲苯/乙酸乙酯)精製，從而獲得 3, 5- 雙(5H-吡啶[4, 3-b] 吡啶-5-基)-(10- 苯基蔥-9-基) 苯(化合物 35) 2.9 g (產率 58%) 的黃色粉體。

使用 NMR 對所獲得之黃色粉體鑑定構造。

藉由 $^1\text{H-NMR}(\text{CDCl}_3)$ 檢測出以下 30 個氫的訊號。 $\delta(\text{ppm}) = 9.41(2\text{H})$ 、 $8.60(2\text{H})$ 、 $8.24(2\text{H})$ 、 $8.05(1\text{H})$ 、 $7.95(2\text{H})$ 、 $7.91(2\text{H})$ 、 $7.77(4\text{H})$ 、 $7.53-7.64(9\text{H})$ 、 $7.48(2\text{H})$ 、 $7.43(4\text{H})$ 。

[實施例 18]

<3, 5- 雙(5H-吡啶[4, 3-b] 吡啶-5-基)-{10- (萘-2-基) 蔥-9-基} 苯(化合物 36) 的合成>

在氮氣取代後的反應容器中，添加 3,5-雙{5H-吡啶[4,3-b]吡啶-5-基}-溴苯 3.5 g、9-(4,4,5,5-四甲基-[1,3,2]二噁硼烷-2-基)-10-(萘-2-基)蔥 3.1 g、肆(三苯膦)鈹 0.41 g、2M 碳酸鉀水溶液 21ml、甲苯 72ml、乙醇 18ml，並進行加熱，持續攪拌並回流 17 小時。冷卻至室溫並添加甲苯 100ml 與水 100ml 之後，進行攪拌，將有機層分液。以無水硫酸鎂將有機層脫水之後，藉由於減壓之下進行濃縮，而獲得粗產物。將粗產物藉由管柱層析法(載體：NH 矽膠，洗提液：甲苯)精製，從而獲得 3,5-雙(5H-吡啶[4,3-b]吡啶-5-基)-{10-(萘-2-基)蔥-9-基}苯(化合物 36) 1.2 g (產率 24%)的黃色粉體。

使用 NMR 對所獲得之黃色粉體鑑定構造。

藉由 $^1\text{H-NMR}(\text{CDCl}_3)$ 檢測出以下 32 個氫的訊號。 $\delta(\text{ppm})=9.43(2\text{H})$ 、 $8.60(2\text{H})$ 、 $8.25(2\text{H})$ 、 $7.92-8.10(9\text{H})$ 、 $7.78(4\text{H})$ 、 $7.55-7.64(9\text{H})$ 、 $7.39-7.45(4\text{H})$ 。

[實施例 19]

<5-{5-[4-(10-苯基蔥-9-基)苯基]吡啶-2-基}-5H-吡啶[4,3-b]吡啶(化合物 76)的合成>

在氮氣取代後的反應容器中，添加 5-[5-(4-溴苯基)吡啶-2-基]-5H-吡啶[4,3-b]吡啶 1.8 g、10-苯基蔥-9-硼酸 1.3 g、肆(三苯膦)鈹 0.26 g、2M 碳酸鉀水溶液 7ml、甲苯 32 ml、乙醇 8ml，並進行加熱，持續攪拌並回流 14 小時。冷卻至室溫並添加甲苯 100ml 與水 100ml 之後，進行攪拌，將有機層分液。以無水硫酸鎂將有機層脫水之後，藉由於減壓之下進行濃縮，而獲得粗產物。將粗產物藉由鄰二氯苯之再結晶而進行精製，從而獲得 5-{5-[4-(10-苯基蔥-9-基)苯基]吡啶-2-基}-5H-吡啶[4,3-b]吡啶(化合物 76) 1.0 g (產率 39%)的黃色粉體。

使用 NMR 對所獲得之黃色粉體鑑定構造。

藉由 $^1\text{H-NMR}(\text{CDCl}_3)$ 檢測出以下 27 個氫的訊號。 $\delta(\text{ppm})=9.42(1\text{H})$ 、 $9.14(1\text{H})$ 、 $8.64(1\text{H})$ 、 $8.32(1\text{H})$ 、 $8.24(1\text{H})$ 、 $7.92-7.97(3\text{H})$ 、 $7.84(1\text{H})$ 、 $7.73-7.80(5\text{H})$ 、 $7.68(2\text{H})$ 、 $7.56-7.63(4\text{H})$ 、 $7.50(2$

H)、7.35–7.45(5H)。

[實施例 20]

<5- {5- [3-(10- 苯基蔥-9-基) 苯基] 吡啶-2-基} -5H-吡啶[4, 3-b] 吡啶(化合物 80)的合成>

在氮氣取代後的反應容器中，添加 5- [5-(3- 溴苯基) 吡啶-2-基] -5H-吡啶[4, 3-b] 吡啶 1.0 g、10- 苯基蔥-9- 硼酸 1.0 g、肆(三苯膦)鈦 0.15 g、2M 碳酸鉀水溶液 4ml、甲苯 16 ml、乙醇 4ml，並進行加熱，持續攪拌並回流 8 小時。冷卻至室溫並添加甲苯 100ml 與水 100ml 之後，進行攪拌，將有機層分液。以無水硫酸鎂將有機層脫水之後，藉由於減壓之下進行濃縮，而獲得粗產物。將粗產物藉由管柱層析法(載體：NH 矽膠，洗提液：甲苯)進行精製，從而獲得 5- {5- [3-(10- 苯基蔥-9-基) 苯基] 吡啶-2-基} -5H-吡啶[4, 3-b] 吡啶(化合物 80) 1.1 g (產率 77%)的黃色粉體。

使用 NMR 對所獲得之黃色粉體鑑定構造。

藉由 $^1\text{H-NMR}(\text{CDCl}_3)$ 檢測出以下 27 個氫的訊號。 $\delta(\text{ppm}) = 9.38(1\text{H})$ 、 $9.06(1\text{H})$ 、 $8.58(1\text{H})$ 、 $8.23(1\text{H})$ 、 $8.19(1\text{H})$ 、 $7.88(2\text{H})$ 、 $7.83(1\text{H})$ 、 $7.72-7.82(6\text{H})$ 、 $7.70(1\text{H})$ 、 $7.48-7.65(7\text{H})$ 、 $7.33-7.42(5\text{H})$ 。

[實施例 21]

<5- {6- [3-(10- 苯基蔥-9-基) 苯基] 吡啶-2-基} -5H-吡啶[4, 3-b] 吡啶(化合物 86)的合成>

在氮氣取代後的反應容器中，添加 5- [6-(3- 溴苯基) 吡啶-2-基] -5H-吡啶[4, 3-b] 吡啶 2.5 g、9-(4, 4, 5, 5- 四甲基-[1, 3, 2]二噁硼烷-2-基)-10- 苯基蔥 2.7 g、肆(三苯膦)鈦 0.21 g、2M 碳酸鉀水溶液 9ml、甲苯 16ml、乙醇 4ml，並進行加熱，持續攪拌並回流 15 小時。冷卻至室溫，藉由過濾採集析出物。將析出物加熱溶解於鄰二氯苯，藉由過濾將不溶物除去之後，藉由於減壓之下將濾液濃縮，而獲得粗產物。將粗產物藉由鄰二氯苯/乙酸乙酯之再結晶進行精製，而獲得 5- {6- [3-(10- 苯基

蔥-9-基)苯基]吡啶-2-基}-5H-吡啶[4,3-b]吡啶(化合物 86) 2.2 g (產率 61%)的黃色粉體。

使用 NMR 對所獲得之黃色粉體鑑定構造。

藉由 $^1\text{H-NMR}(\text{CDCl}_3)$ 檢測出以下 27 個氫的訊號。 $\delta(\text{ppm})=9.38(1\text{H})$ 、 $8.55(1\text{H})$ 、 $8.41(1\text{H})$ 、 $8.23(1\text{H})$ 、 $8.19(1\text{H})$ 、 $7.99(1\text{H})$ 、 $7.96(1\text{H})$ 、 $7.85(2\text{H})$ 、 $7.76-7.80(3\text{H})$ 、 $7.72(2\text{H})$ 、 $7.61(3\text{H})$ 、 $7.56(2\text{H})$ 、 $7.49(3\text{H})$ 、 $7.33-7.40(5\text{H})$ 。

[實施例 22]

<5-{6-[4-(10-苯基蔥-9-基)苯基]吡啶-2-基}-5H-吡啶[4,3-b]吡啶(化合物 88)的合成>

在氮氣取代後的反應容器中，添加 5-[6-(4-溴苯基)吡啶-2-基]-5H-吡啶[4,3-b]吡啶 2.4 g、9-(4,4,5,5-四甲基-[1,3,2]二噁硼烷-2-基)-10-苯基蔥 3.4 g、肆(三苯膦)鈦 0.35 g、2M 碳酸鉀水溶液 15ml、甲苯 48ml、乙醇 12ml，並進行加熱，持續攪拌並回流 12 小時。冷卻至室溫，藉由過濾採集析出物。將析出物加熱溶解於鄰二氯苯，藉由過濾將不溶物除去之後，藉由於減壓之下將濾液濃縮，而獲得粗產物。將粗產物藉由鄰二氯苯/乙酸乙酯之再結晶進行精製，而獲得 5-{6-[4-(10-苯基蔥-9-基)苯基]吡啶-2-基}-5H-吡啶[4,3-b]吡啶(化合物 88) 2.2 g (產率 64%)的黃白色粉體。

使用 NMR 對所獲得之黃白色粉體鑑定構造。

藉由 $^1\text{H-NMR}(\text{CDCl}_3)$ 檢測出以下 27 個氫的訊號。 $\delta(\text{ppm})=9.42(1\text{H})$ 、 $8.64(1\text{H})$ 、 $8.39(2\text{H})$ 、 $8.24(1\text{H})$ 、 $8.12(1\text{H})$ 、 $7.99-8.03(2\text{H})$ 、 $7.90(1\text{H})$ 、 $7.71-7.76(4\text{H})$ 、 $7.57-7.66(7\text{H})$ 、 $7.49(2\text{H})$ 、 $7.44(1\text{H})$ 、 $7.35(4\text{H})$ 。

[實施例 23]

<5-[3-(10-苯基蔥-9-基)苯基]-5H-吡啶[4,3-b]吡啶(化合物 96)的合成>

在氮氣取代後的反應容器中，添加 5-(3-溴苯基)-5H-吡啶[4,3-b]吡啶 1.7 g、9-(4,4,5,5-四甲基-[1,3,2]二噁

硼烷-2-基)-10-苯基蔥 2.0 g、肆(三苯磷)鈹 0.30 g、2M 碳酸鉀水溶液 26ml、甲苯 160ml、乙醇 40ml，並進行加熱，持續攪拌並回流 20 小時。冷卻至室溫並添加甲苯 100ml 與水 100ml 之後，進行攪拌，將有機層分液。以無水硫酸鎂將有機層脫水之後，藉由於減壓之下進行濃縮，而獲得粗產物。將粗產物藉由甲苯/己烷之再結晶而進行精製，從而獲得 5-[3-(10-苯基蔥-9-基)苯基]-5H-吡啶[4,3-b]吡啶(化合物 96) 1.1 g (產率 42%) 的黃白色粉體。

使用 NMR 對所獲得之黃白色粉體鑑定構造。

藉由 $^1\text{H-NMR}(\text{CDCl}_3)$ 檢測出以下 24 個氫的訊號。 $\delta(\text{ppm}) = 9.39(1\text{H})$ 、 $8.54(1\text{H})$ 、 $8.22(1\text{H})$ 、 $7.89(1\text{H})$ 、 $7.80(3\text{H})$ 、 $7.73(3\text{H})$ 、 $7.55-7.67(5\text{H})$ 、 $7.36-7.52(9\text{H})$ 。

[實施例 24]

藉由高靈敏度示差掃描熱量計(Bruker-AXS 製造之 DSC3100 S)，針對本發明之化合物求取熔點以及玻璃轉移溫度。

	熔點	玻璃轉移溫度
本發明實施例 1 之化合物(化合物 9)	286°C	132°C
本發明實施例 2 之化合物(化合物 10)	316°C	157°C
本發明實施例 3 之化合物(化合物 42)	376°C	164°C
本發明實施例 4 之化合物(化合物 45)	317°C	182°C
本發明實施例 5 之化合物(化合物 52)	398°C	無
本發明實施例 6 之化合物(化合物 55)	434°C	140°C
本發明實施例 7 之化合物(化合物 59)	404°C	無
本發明實施例 8 之化合物(化合物 61)	409°C	無
本發明實施例 9 之化合物(化合物 87)	269°C	150°C
本發明實施例 10 之化合物(化合物 89)	310°C	159°C
本發明實施例 11 之化合物(化合物 3)	299°C	130°C
本發明實施例 12 之化合物(化合物 6)	280°C	155°C
本發明實施例 13 之化合物(化合物 15)	330°C	148°C
本發明實施例 14 之化合物(化合物 18)	312°C	164°C

本發明實施例 15 之化合物(化合物 31)	292°C	134°C
本發明實施例 16 之化合物(化合物 32)	306°C	152°C
本發明實施例 17 之化合物(化合物 35)	359°C	173°C
本發明實施例 18 之化合物(化合物 36)	412°C	192°C
本發明實施例 19 之化合物(化合物 76)	339°C	140°C
本發明實施例 20 之化合物(化合物 80)	165°C	138°C
本發明實施例 21 之化合物(化合物 86)	286°C	132°C
本發明實施例 22 之化合物(化合物 88)	331°C	149°C
本發明實施例 23 之化合物(化合物 96)	265°C	115°C

本發明之化合物具有 100°C 以上的玻璃轉移溫度、或者無法確認其玻璃轉移溫度。這表示本發明之化合物的薄膜狀態穩定。

[實施例 25]

使用本發明之化合物，於 ITO 基板上製作膜厚為 100nm 之蒸鍍膜，藉由大氣中光電子分光裝置(理研計器製造之 AC-3 型)測定功函數。

	功函數
本發明實施例 1 之化合物(化合物 9)	5.89 eV
本發明實施例 2 之化合物(化合物 10)	5.94 eV
本發明實施例 3 之化合物(化合物 42)	5.91 eV
本發明實施例 4 之化合物(化合物 45)	5.96 eV
本發明實施例 5 之化合物(化合物 52)	5.96 eV
本發明實施例 6 之化合物(化合物 55)	5.90 eV
本發明實施例 7 之化合物(化合物 59)	5.90 eV
本發明實施例 8 之化合物(化合物 61)	5.91 eV
本發明實施例 9 之化合物(化合物 87)	5.89 eV
本發明實施例 10 之化合物(化合物 89)	5.80 eV
本發明實施例 11 之化合物(化合物 3)	5.89 eV
本發明實施例 12 之化合物(化合物 6)	6.34 eV
本發明實施例 13 之化合物(化合物 15)	5.92 eV
本發明實施例 14 之化合物(化合物 18)	5.91 eV

本發明實施例 15 之化合物(化合物 31)	5.99 eV
本發明實施例 16 之化合物(化合物 32)	6.01 eV
本發明實施例 17 之化合物(化合物 35)	6.24 eV
本發明實施例 18 之化合物(化合物 36)	6.36 eV
本發明實施例 19 之化合物(化合物 76)	5.89 eV
本發明實施例 20 之化合物(化合物 80)	5.99 eV
本發明實施例 21 之化合物(化合物 86)	5.92 eV
本發明實施例 22 之化合物(化合物 88)	5.92 eV
本發明實施例 23 之化合物(化合物 96)	5.96 eV

如上所示，本發明之化合物具有較 NPD、TPD 等一般電洞傳輸材料所具有之功函數 5.4 eV 更大之功函數值，而具有較大之電洞阻擋能力。

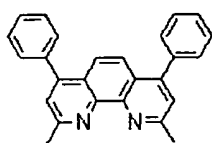
[實施例 26]

使用本發明之化合物進行了耐熱試驗，以確認其在高溫條件下的穩定性。耐熱試驗係以下述方式進行。亦即，分別在玻璃製試管中放入本發明之化合物 10mg，使用隔膜泵使其呈真空之後，將玻璃製試管的末端密封。將密封後的玻璃製試管放置於恆溫器中，該恆溫器係設定為 300°C—350°C 的預定溫度，靜置一週之後，解除密封，將其作為試驗後的樣品。對耐熱試驗之前後的樣品進行 HPLC 測定(測定條件：管柱；GL Sciences 股份公司製造之 Inertsil ODS-SP、內徑 4.6mm、長度 250mm、洗提液：乙腈/0.05% (v/v)三氟乙酸水溶液=8/2 (v/v)、流速；1.0ml/分、管柱溫度；40°C、測定波長；254nm)，利用資料處理裝置，從得到的 HPLC 圖譜算出各樣品中之本發明之化合物的 HPLC 純度(波峰面積百分比、%)。將耐熱試驗前後之樣品的純度下降為波峰面積百分比未達 5%者標示為「○(具有耐熱性)」，將 5%以上者標示為「×(不具耐熱性)」。各樣品的耐熱試驗的結果如下所示。

	耐熱試驗的結果	[試驗溫度]
本發明實施例 1 之化合物(化合物 9)	○	[300°C]
本發明實施例 3 之化合物(化合物 42)	○	[350°C]
本發明實施例 4 之化合物(化合物 45)	○	[330°C]
本發明實施例 5 之化合物(化合物 52)	○	[350°C]
本發明實施例 6 之化合物(化合物 55)	○	[350°C]
本發明實施例 8 之化合物(化合物 61)	○	[350°C]
本發明實施例 9 之化合物(化合物 87)	○	[330°C]
本發明實施例 10 之化合物(化合物 89)	○	[340°C]
本發明實施例 22 之化合物(化合物 88)	○	[340°C]
BCP (比較化合物)	×	[300°C]

如上所示，本發明之化合物在高溫條件下，其純度下降為波峰面積百分比未達 5%，穩定地存在。另一方面，比較化合物的 BCP (下述構造式的化合物 120) 的純度下降為波峰面積百分比 5% 以上，可了解本發明之化合物具有優異之耐熱性。

[化120]



(化合物 120)

[實施例 27]

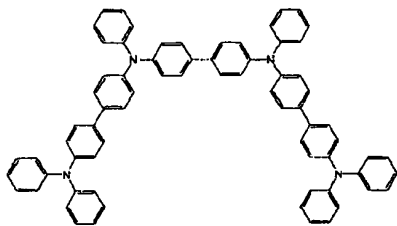
如圖 11 所示，如下製作了有機 EL 元件：於預先形成有作為透明陽極 2 之 ITO 電極的玻璃基板 1 上，依序蒸鍍電洞注入層 3、電洞傳輸層 4、發光層 5、電洞阻擋層 6、電子傳輸層 7、電子注入層 8、以及陰極(鋁電極)9。

具體而言，藉由有機溶劑清洗了成膜有膜厚為 150 nm 之 ITO 的玻璃基板 1 之後，藉由氧電漿處理清洗了表面。之後，將此具有 ITO 電極的玻璃基板安裝於真空蒸鍍機內，並減壓至 0.001 Pa 以下。接著，以覆蓋透明陽極 2 的方式，將下述構造式的化合物 121 以蒸鍍速度 6 nm/min 形成為膜厚 20 nm，作為電洞注入層 3。在此電洞注入層 3 之上，將下述構造式的化合物 122 以蒸鍍速度 6

nm/min 形成為膜厚 40 nm，作為電洞傳輸層 4。在此電洞傳輸層 4 之上，將下述構造式的化合物 123 與下述構造式的化合物 124 以蒸鍍速度比為化合物 123：化合物 124=5：95 的蒸鍍速度進行二元蒸鍍，形成了膜厚 30 nm，作為發光層 5。在此發光層 5 之上，將本發明實施例 1 之化合物(化合物 9)以蒸鍍速度 6 nm/min 形成為膜厚 30 nm，作為電洞阻擋層 6 兼電子傳輸層 7。在此該電洞阻擋層 6 兼電子傳輸層 7 之上，將氟化鋰以蒸鍍速度 0.6 nm/min 形成為膜厚 0.5 nm，作為電子注入層 8。最後，蒸鍍膜厚 150 nm 之鋁，而形成了陰極 9。對所製作之有機 EL 元件於大氣中、常溫下進行了特性測定。

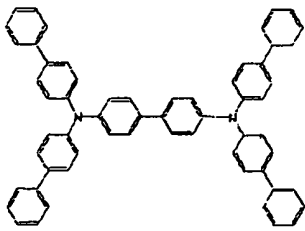
對使用本發明實施例 1 之化合物(化合物 9)所製作之有機 EL 元件施加直流電壓，測定了其發光特性，將測定結果匯總顯示於表 1 中。

[化121]



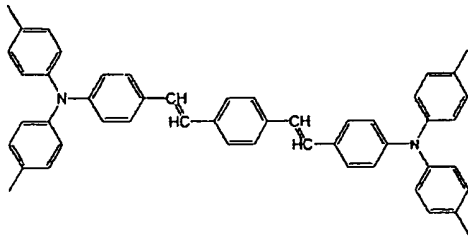
(化合物 1 2 1)

[化122]



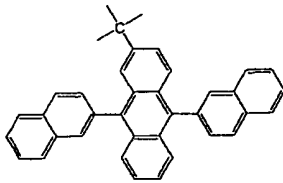
(化合物 1 2 2)

[化123]



(化合物 1 2 3)

[化124]



(化合物 1 2 4)

[實施例 28]

除了以本發明實施例 2 之化合物(化合物 10)取代實施例 27 中之本發明實施例 1 之化合物(化合物 9)作為電洞阻擋層 6 兼電子傳輸層 7 之材料、將其形成為膜厚 30 nm 以外，以相同之條件製作了有機 EL 元件。對所製作之有機 EL 元件，於大氣中、常溫下進行了特性測定。對所製作之有機 EL 元件施加直流電壓，測定其發光特性，將測定結果匯總顯示於表 1 中。

[實施例 29]

除了以本發明實施例 3 之化合物(化合物 42)取代實施例 27 中之本發明實施例 1 之化合物(化合物 9)作為電洞阻擋層 6 兼電子傳輸層 7 之材料、將其形成為膜厚 30 nm 以外，以相同之條件製作了有機 EL 元件。對所製作之有機 EL 元件，於大氣中、常溫下進行了特性測定。對所製作之有機 EL 元件施加直流電壓，測定其發

光特性，將測定結果匯總顯示於表 1 中。

[實施例 30]

除了以本發明實施例 4 之化合物(化合物 45)取代實施例 27 中之本發明實施例 1 之化合物(化合物 9)作為電洞阻擋層 6 兼電子傳輸層 7 之材料、將其形成為膜厚 30 nm 以外，以相同之條件製作了有機 EL 元件。對所製作之有機 EL 元件，於大氣中、常溫下進行了特性測定。對所製作之有機 EL 元件施加直流電壓，測定其發光特性，將測定結果匯總顯示於表 1 中。

[實施例 31]

除了以本發明實施例 5 之化合物(化合物 52)取代實施例 27 中之本發明實施例 1 之化合物(化合物 9)作為電洞阻擋層 6 兼電子傳輸層 7 之材料、將其形成為膜厚 30 nm 以外，以相同之條件製作了有機 EL 元件。對所製作之有機 EL 元件，於大氣中、常溫下進行了特性測定。對所製作之有機 EL 元件施加直流電壓，測定其發光特性，將測定結果匯總顯示於表 1 中。

[實施例 32]

除了以本發明實施例 6 之化合物(化合物 55)取代實施例 27 中之本發明實施例 1 之化合物(化合物 9)作為電洞阻擋層 6 兼電子傳輸層 7 之材料、將其形成為膜厚 30 nm 以外，以相同之條件製作了有機 EL 元件。對所製作之有機 EL 元件，於大氣中、常溫下進行了特性測定。對所製作之有機 EL 元件施加直流電壓，測定其發光特性，將測定結果匯總顯示於表 1 中。

[實施例 33]

除了以本發明實施例 7 之化合物(化合物 59)取代實施例 27 中之本發明實施例 1 之化合物(化合物 9)作為電洞阻擋層 6 兼電子傳輸層 7 之材料、將其形成為膜厚 30 nm 以外，以相同之條件製作了有機 EL 元件。對所製作之有機 EL 元件，於大氣中、常溫下進行了特性測定。對所製作之有機 EL 元件施加直流電壓，測定其發光特性，將測定結果匯總顯示於表 1 中。

[實施例 34]

除了以本發明實施例 8 之化合物(化合物 61)取代實施例 27 中之本發明實施例 1 之化合物(化合物 9)作為電洞阻擋層 6 兼電子傳輸層 7 之材料、將其形成為膜厚 30 nm 以外，以相同之條件製作了有機 EL 元件。對所製作之有機 EL 元件，於大氣中、常溫下進行了特性測定。對所製作之有機 EL 元件施加直流電壓，測定其發光特性，將測定結果匯總顯示於表 1 中。

[實施例 35]

除了以本發明實施例 9 之化合物(化合物 87)取代實施例 27 中之本發明實施例 1 之化合物(化合物 9)作為電洞阻擋層 6 兼電子傳輸層 7 之材料、將其形成為膜厚 30 nm 以外，以相同之條件製作了有機 EL 元件。對所製作之有機 EL 元件，於大氣中、常溫下進行了特性測定。對所製作之有機 EL 元件施加直流電壓，測定其發光特性，將測定結果匯總顯示於表 1 中。

[實施例 36]

除了以本發明實施例 10 之化合物(化合物 89)取代實施例 27 中之本發明實施例 1 之化合物(化合物 9)作為電洞阻擋層 6 兼電子傳輸層 7 之材料、將其形成為膜厚 30 nm 以外，以相同之條件製作了有機 EL 元件。對所製作之有機 EL 元件，於大氣中、常溫下進行了特性測定。對所製作之有機 EL 元件施加直流電壓，測定其發光特性，將測定結果匯總顯示於表 1 中。

[實施例 37]

除了以本發明實施例 21 之化合物(化合物 86)取代實施例 27 中之本發明實施例 1 之化合物(化合物 9)作為電洞阻擋層 6 兼電子傳輸層 7 之材料、將其形成為膜厚 30 nm 以外，以相同之條件製作了有機 EL 元件。對所製作之有機 EL 元件，於大氣中、常溫下進行了特性測定。對所製作之有機 EL 元件施加直流電壓，測定其發光特性，將測定結果匯總顯示於表 1 中。

[實施例 38]

除了以本發明實施例 22 之化合物(化合物 88)取代實施例 27 中之本發明實施例 1 之化合物(化合物 9)作為電洞阻擋層 6 兼電子

傳輸層 7 之材料、將其形成為膜厚 30 nm 以外，以相同之條件製作了有機 EL 元件。對所製作之有機 EL 元件，於大氣中、常溫下進行了特性測定。對所製作之有機 EL 元件施加直流電壓，測定其發光特性，將測定結果匯總顯示於表 1 中。

[比較例 1]

為了進行比較，以作為電子傳輸層 7 的 Alq_3 取代實施例 27 中之電洞阻擋層 6 兼電子傳輸層 7 之材料，以與實施例 27 相同之條件製作了有機 EL 元件。對所製作之有機 EL 元件，於大氣中、常溫下進行了特性測定。對所製作之有機 EL 元件施加直流電壓，測定其發光特性，將測定結果匯總顯示於表 1 中。

[表 1]

	化合物	電壓[V] (@10mA/cm ²)	亮度[cd/m ²] (@10mA/cm ²)	發光效率[cd/A] (@10mA/cm ²)	電力效率[lm/W] (@10mA/cm ²)
實施例27	化合物9	4.95	1038	10.38	6.57
實施例28	化合物10	4.35	1131	11.31	8.18
實施例29	化合物42	4.66	925	9.25	6.24
實施例30	化合物45	4.55	1190	11.90	8.23
實施例31	化合物52	5.55	960	9.60	5.45
實施例32	化合物55	5.21	1058	10.58	6.38
實施例33	化合物59	4.50	980	9.80	6.83
實施例34	化合物61	4.81	1290	12.90	8.40
實施例35	化合物87	5.05	1485	14.85	9.24
實施例36	化合物89	3.90	1180	11.80	9.50
實施例37	化合物86	4.28	960	9.60	7.04
實施例38	化合物88	3.78	1093	10.93	9.09
比較例1	Alq_3	5.80	820	8.25	4.40

如表 1 所示，相對於電流密度 10mA/cm² 時的 Alq_3 之驅動電壓 5.80 V，電流密度 10mA/cm² 時的實施例 27~38 之驅動電壓為 3.78~5.55 V，任一者之電壓均降低，而且在電流密度 10mA/cm² 時的亮度、發光效率、電力效率均有提昇。

以下顯示發光起始電壓之測定結果。

有機 EL 元件	化合物	發光起始電壓[V]
實施例 27	化合物 9	3.0
實施例 28	化合物 10	2.9
實施例 29	化合物 42	2.9
實施例 30	化合物 45	2.8
實施例 31	化合物 52	2.9
實施例 32	化合物 55	2.9
實施例 33	化合物 59	2.8
實施例 34	化合物 61	2.9
實施例 35	化合物 87	2.9
實施例 36	化合物 89	2.8
實施例 37	化合物 86	2.8
實施例 38	化合物 88	2.8
比較例 1	Alq ₃	3.2

由上結果可了解，相對於使用 Alq₃ 之比較例 1，在實施例 27~38 中，發光起始電壓降低。

[實施例 39]

如圖 13 所示，如下製作了有機 EL 元件：於預先形成有作為透明陽極 2 之 ITO 電極的玻璃基板 1 上，依序蒸鍍電洞傳輸層 4、發光層 5、電洞阻擋層 6、電子傳輸層 7、電子注入層 8、以及陰極(鋁電極)9。

具體而言，藉由有機溶劑清洗了成膜有膜厚為 150 nm 之 ITO 的玻璃基板 1 之後，藉由氧電漿處理清洗了表面。之後，將此具有 ITO 電極的玻璃基板安裝於真空蒸鍍機內，並減壓至 0.001Pa 以下。接著，以覆蓋透明陽極 2 的方式，將上述構造式的化合物 122 以蒸鍍速度 6 nm/min 形成為膜厚 60 nm，作為電洞傳輸層 4。在此電洞傳輸層 4 之上，將上述構造式的化合物 123 與下述構造式的化合物 124 以蒸鍍速度比為化合物 123：化合物 124=5：95 的蒸鍍速度進行二元蒸鍍，形成了膜厚 30 nm，作為發光層 5。在此發光層 5 之上，將本發明實施例 13 之化合物(化合物 15)以蒸鍍

速度 6 nm/min 形成為膜厚 30 nm，作為電洞阻擋層 6 兼電子傳輸層 7。在此該電洞阻擋層 6 兼電子傳輸層 7 之上，將氟化鋰以蒸鍍速度 0.6 nm/min 形成為膜厚 0.5 nm，作為電子注入層 8。最後，蒸鍍膜厚 150 nm 之鋁，而形成了陰極 9。對所製作之有機 EL 元件於大氣中、常溫下進行了特性測定。

對使用本發明實施例 13 之化合物(化合物 15)所製作之有機 EL 元件施加直流電壓，測定了其發光特性，將測定結果匯總顯示於表 2 中。

[實施例 40]

除了以本發明實施例 14 之化合物(化合物 18)取代實施例 39 中之本發明實施例 13 之化合物(化合物 15)作為電洞阻擋層 6 兼電子傳輸層 7 之材料、將其形成為膜厚 30 nm 以外，以相同之條件製作了有機 EL 元件。對所製作之有機 EL 元件，於大氣中、常溫下進行了特性測定。對所製作之有機 EL 元件施加直流電壓，測定其發光特性，將測定結果匯總顯示於表 2 中。

[實施例 41]

除了以本發明實施例 15 之化合物(化合物 31)取代實施例 39 中之本發明實施例 13 之化合物(化合物 15)作為電洞阻擋層 6 兼電子傳輸層 7 之材料、將其形成為膜厚 30 nm 以外，以相同之條件製作了有機 EL 元件。對所製作之有機 EL 元件，於大氣中、常溫下進行了特性測定。對所製作之有機 EL 元件施加直流電壓，測定其發光特性，將測定結果匯總顯示於表 2 中。

[實施例 42]

除了以本發明實施例 16 之化合物(化合物 32)取代實施例 39 中之本發明實施例 13 之化合物(化合物 15)作為電洞阻擋層 6 兼電子傳輸層 7 之材料、將其形成為膜厚 30 nm 以外，以相同之條件製作了有機 EL 元件。對所製作之有機 EL 元件，於大氣中、常溫下進行了特性測定。對所製作之有機 EL 元件施加直流電壓，測定其發光特性，將測定結果匯總顯示於表 2 中。

[實施例 43]

除了以本發明實施例 20 之化合物(化合物 80)取代實施例 39 中之本發明實施例 13 之化合物(化合物 15)作為電洞阻擋層 6 兼電子傳輸層 7 之材料、將其形成為膜厚 30 nm 以外，以相同之條件製作了有機 EL 元件。對所製作之有機 EL 元件，於大氣中、常溫下進行了特性測定。對所製作之有機 EL 元件施加直流電壓，測定其發光特性，將測定結果匯總顯示於表 2 中。

[實施例 44]

除了以本發明實施例 22 之化合物(化合物 88)取代實施例 39 中之本發明實施例 13 之化合物(化合物 15)作為電洞阻擋層 6 兼電子傳輸層 7 之材料、將其形成為膜厚 30 nm 以外，以相同之條件製作了有機 EL 元件。對所製作之有機 EL 元件，於大氣中、常溫下進行了特性測定。對所製作之有機 EL 元件施加直流電壓，測定其發光特性，將測定結果匯總顯示於表 2 中。

[比較例 2]

為了進行比較，以作為電子傳輸層 7 的 Alq_3 取代實施例 39 中之電洞阻擋層 6 兼電子傳輸層 7 之材料，以與實施例 39 相同之條件製作了有機 EL 元件。對所製作之有機 EL 元件，於大氣中、常溫下進行了特性測定。對所製作之有機 EL 元件施加直流電壓，測定其發光特性，將測定結果匯總顯示於表 2 中。

[表 2]

	化合物	電壓[V] (@10mA/cm ²)	亮度[cd/m ²] (@10mA/cm ²)	發光效率[cd/A] (@10mA/cm ²)	電力效率[lm/W] (@10mA/cm ²)
實施例39	化合物15	4.93	925	9.25	5.90
實施例40	化合物18	5.22	959	9.59	5.77
實施例41	化合物31	4.33	922	9.22	6.70
實施例42	化合物32	4.86	963	9.63	6.23
實施例43	化合物80	4.28	942	9.42	6.91
實施例44	化合物88	3.74	994	9.94	8.36
比較例2	Alq_3	5.26	734	7.34	4.38

如表 2 所示，相對於電流密度 10mA/cm² 時的 Alq_3 之驅動電壓 5.26 V，電流密度 10mA/cm² 時的實施例 39~44 之驅動電壓為 3.74~5.22 V，任一者之電壓均降低，而且在電流密度 10mA/cm²

時的亮度、發光效率、電力效率均有提昇。

以下顯示發光起始電壓之測定結果。

有機 EL 元件	化合物	發光起始電壓[V]
實施例 39	化合物 15	2.9
實施例 40	化合物 18	3.0
實施例 41	化合物 31	2.8
實施例 42	化合物 32	2.9
實施例 43	化合物 80	2.8
實施例 44	化合物 88	2.7
比較例 2	Alq ₃	3.1

由上述結果可了解，相對於使用 Alq₃ 之比較例 2，在實施例 39~44 中，發光起始電壓降低。

如上述吾人發現：本發明之有機 EL 元件與採用作為一般電子傳輸材料使用的 Alq₃ 之元件相較，其發光效率優越，且可達成實用驅動電壓的顯著下降。

[產業上之可利用性]

本發明之具有被取代之蔥環構造及吡啶吡啶環構造的化合物，其電子之注入特性良好、電洞阻擋能力優異、耐熱性優異、且薄膜狀態穩定，因此為優異的有機 EL 元件用化合物。藉由使用該化合物製作有機 EL 元件，可得到高的效率、並使驅動電壓下降、以及改善耐久性。例如，可推廣至家庭電氣產品或照明用途上。

【圖式簡單說明】

圖 1 係本發明實施例 1 之化合物(化合物 9)之 1H-NMR 圖表。

圖 2 係本發明實施例 2 之化合物(化合物 10)之 1H-NMR 圖表。

圖 3 係本發明實施例 3 之化合物(化合物 42)之 1H-NMR 圖表。

圖 4 係本發明實施例 4 之化合物(化合物 45)之 1H-NMR 圖

發明專利說明書

(本說明書格式、順序，請勿任意更動，※記號部分請勿填寫)

※申請案號：99125932

C07D 471/04 (2006.01)

※申請日：99.8.4

※IPC分類：H01L 51/54 (2006.01)

一、發明名稱：(中文/英文)

具有被取代之蔥環構造及吡啶吲哚環構造的化合物及有機電致發光元件

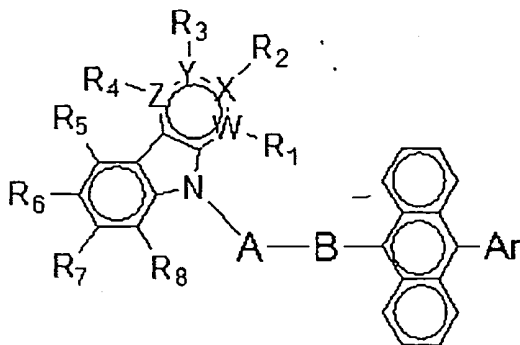
COMPOUND HAVING SUBSTITUTED ANTHRACENE RING STRUCTURE AND PYRIDOINDOLE RING STRUCTURE, AND ORGANIC ELECTROLUMINESCENT DEVICE

二、中文發明摘要：

本發明之目的在於提供一種具有電子之注入及傳輸性能優異、具有電洞阻擋能力、薄膜狀態下之穩定性高等優異特性之有機化合物來作為高效率、高耐久性的有機電致發光元件用材料，並進一步使用該化合物提供一種高效率、高耐久性之有機電致發光元件。

該化合物係以通式(1)所表示之具有被取代之蔥環構造及吡啶吲哚環構造的化合物；該有機電致發光元件具有一對電極以及夾持於其間之至少一層有機層，該有機電致發光元件的特徵為該化合物係用作為至少一層有機層的構成材料。

[化1]



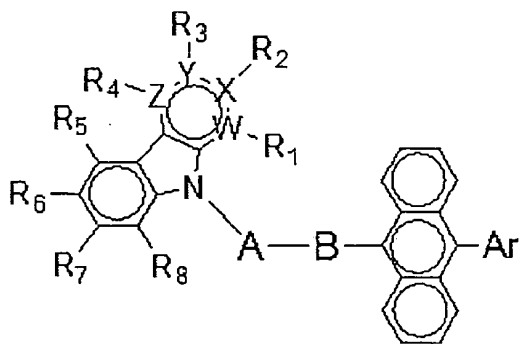
(1)

三、英文發明摘要：

An organic compound, which has excellent characteristics in electron injecting and transporting performance, having a hole-blocking ability and having high stability in a thin film state, is provided as a material for an organic electroluminescent device of high efficiency and high durability, and the organic electroluminescent device of high efficiency and high durability is provided using this compound.

The compound having a substituted anthracene ring and pyridoindole ring structure is represented by a general formula (1), and the organic electroluminescent device having a pair of electrodes and at least one organic layer sandwiched therebetween is characterized in that the compound is used as a constitutive material of at least one organic layer in the organic electroluminescent device.

[Formula 1]



(1)

圖 1

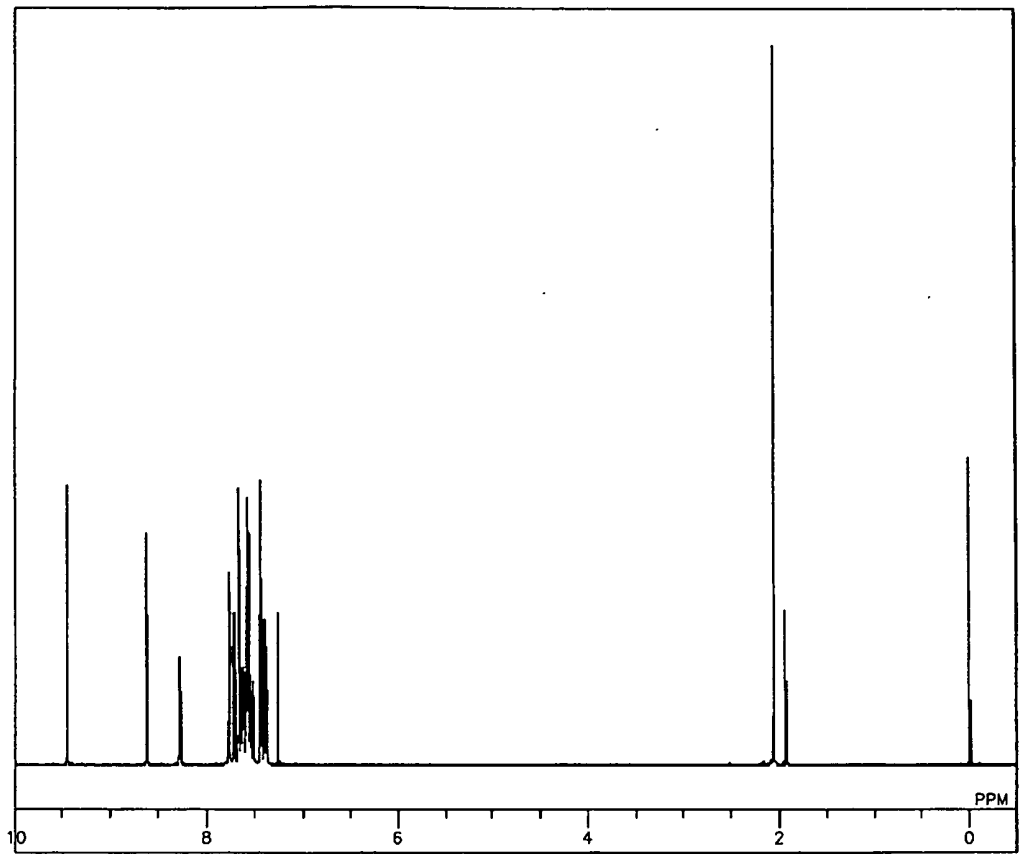


圖 2

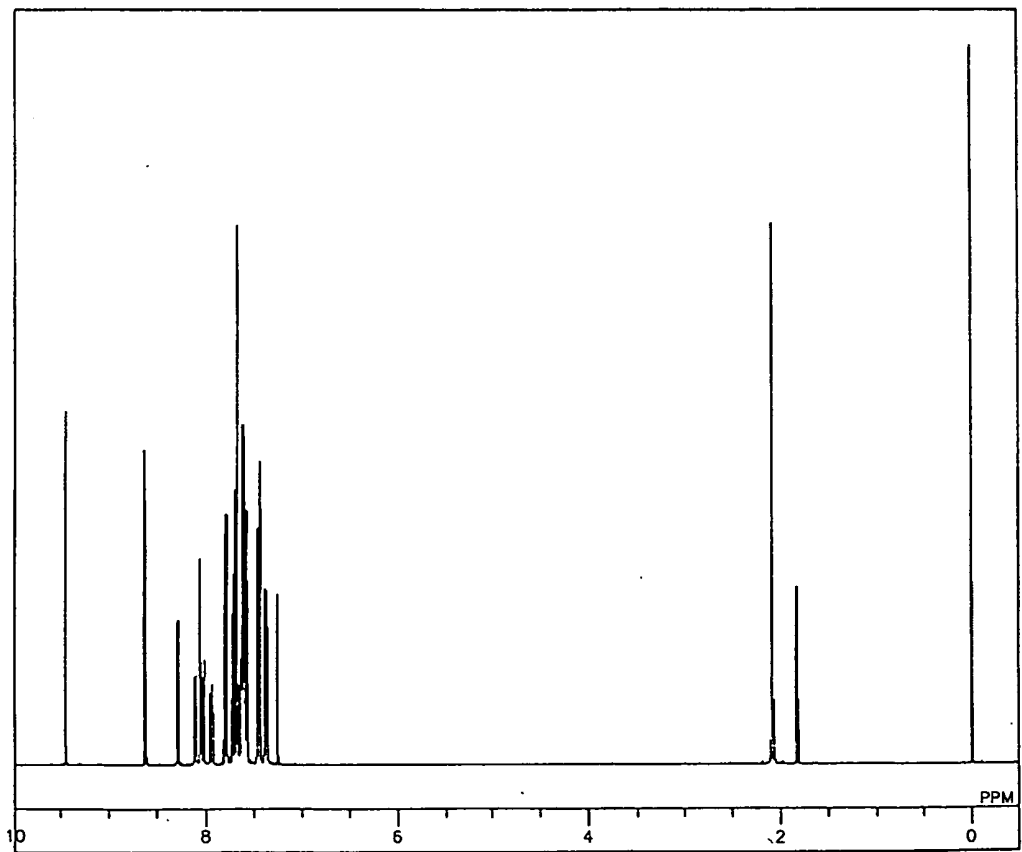


圖 3

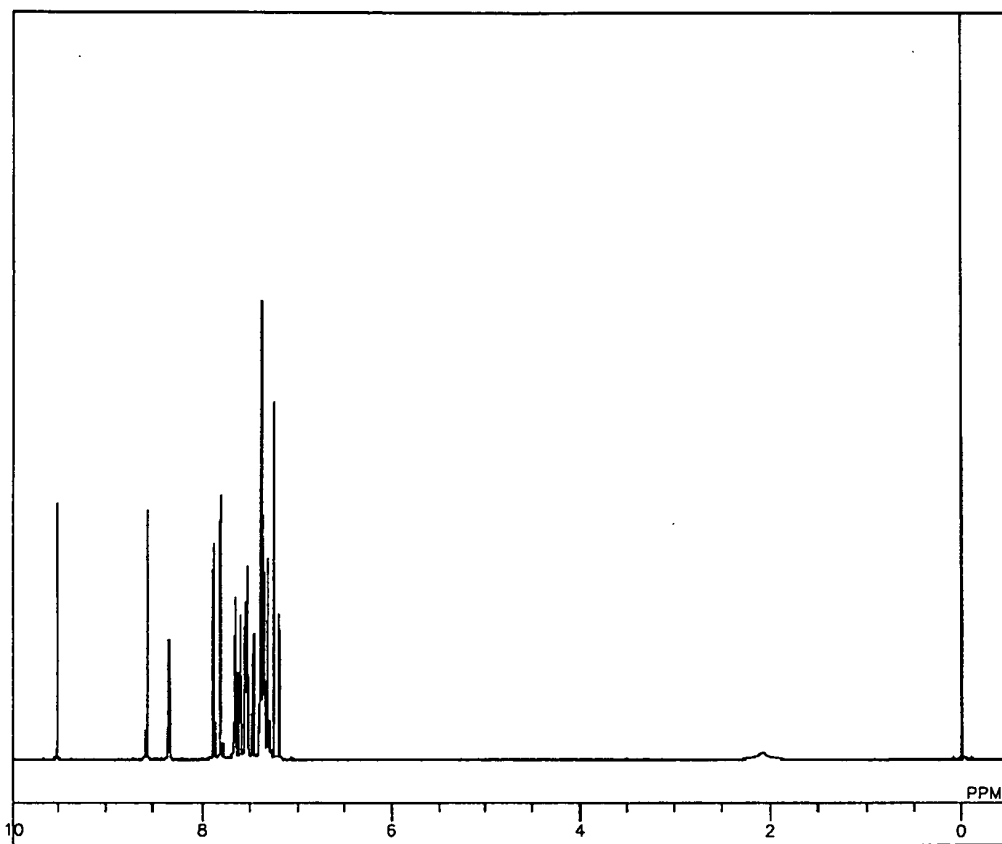


圖 4

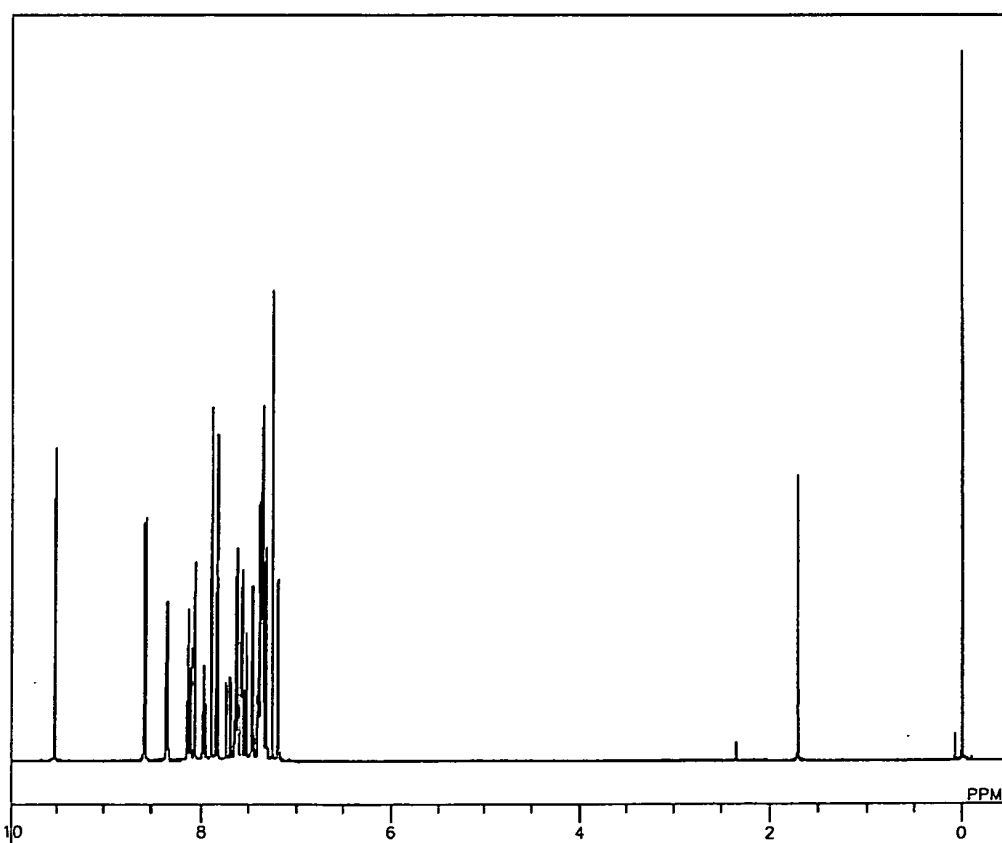


圖 5

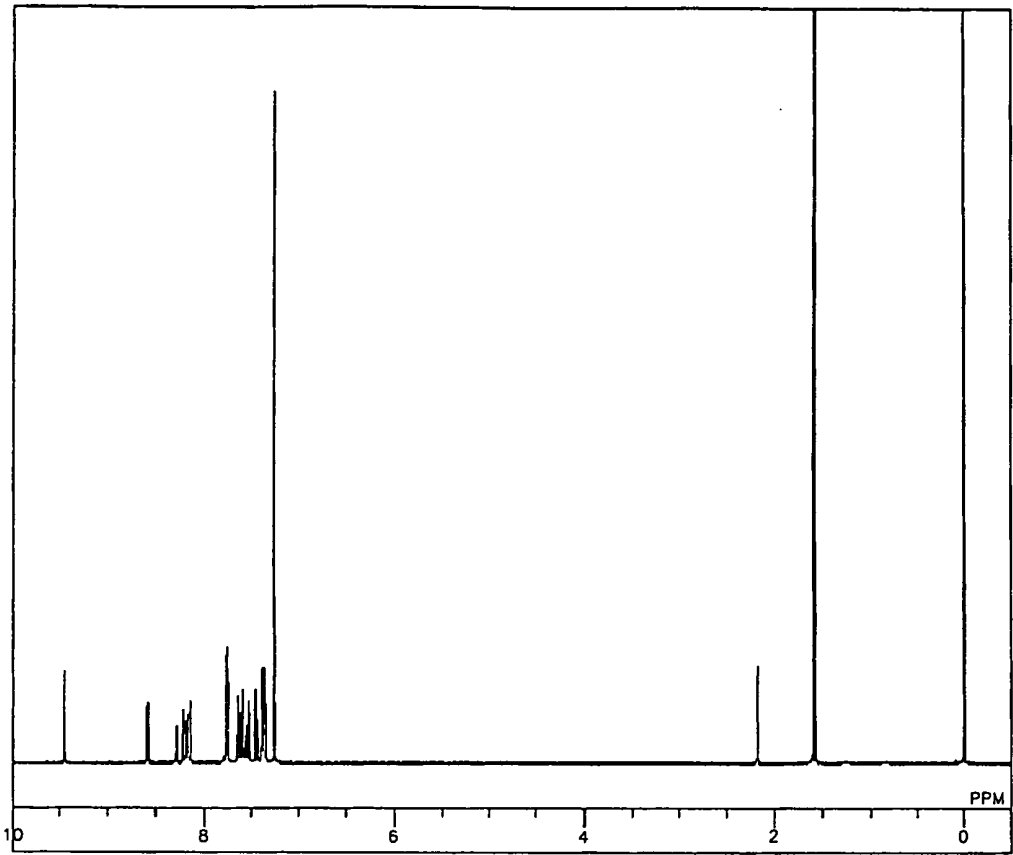


圖 6

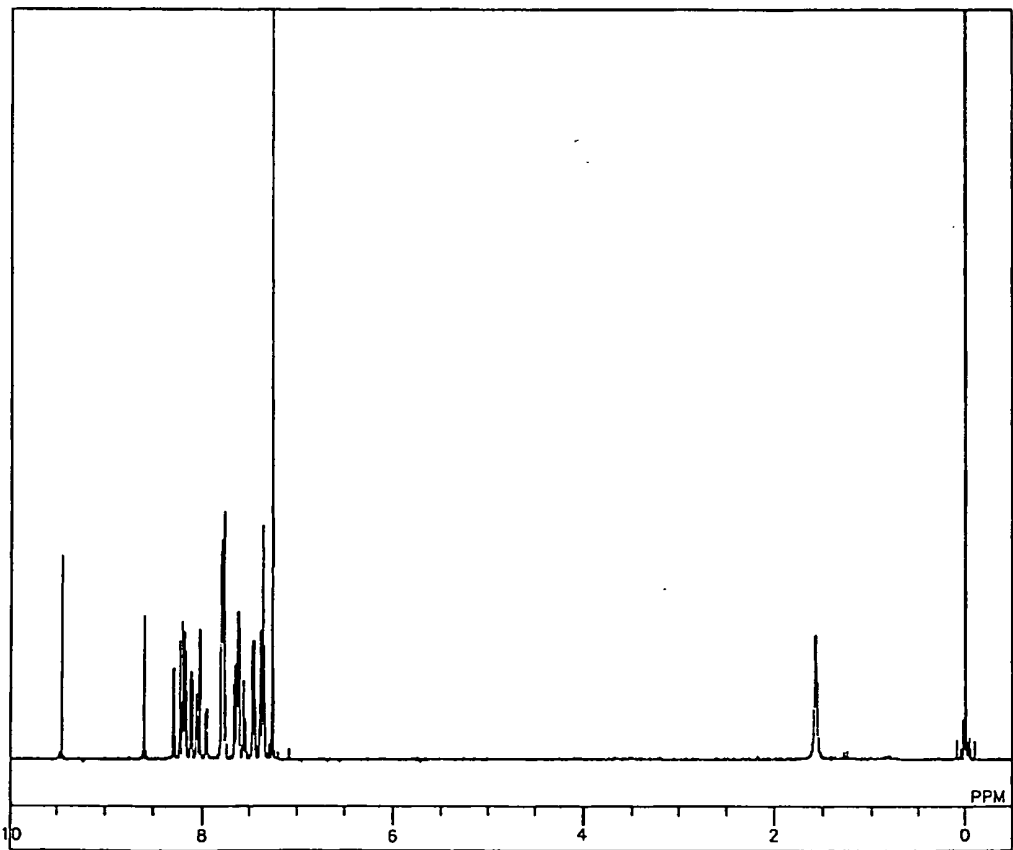


圖 7

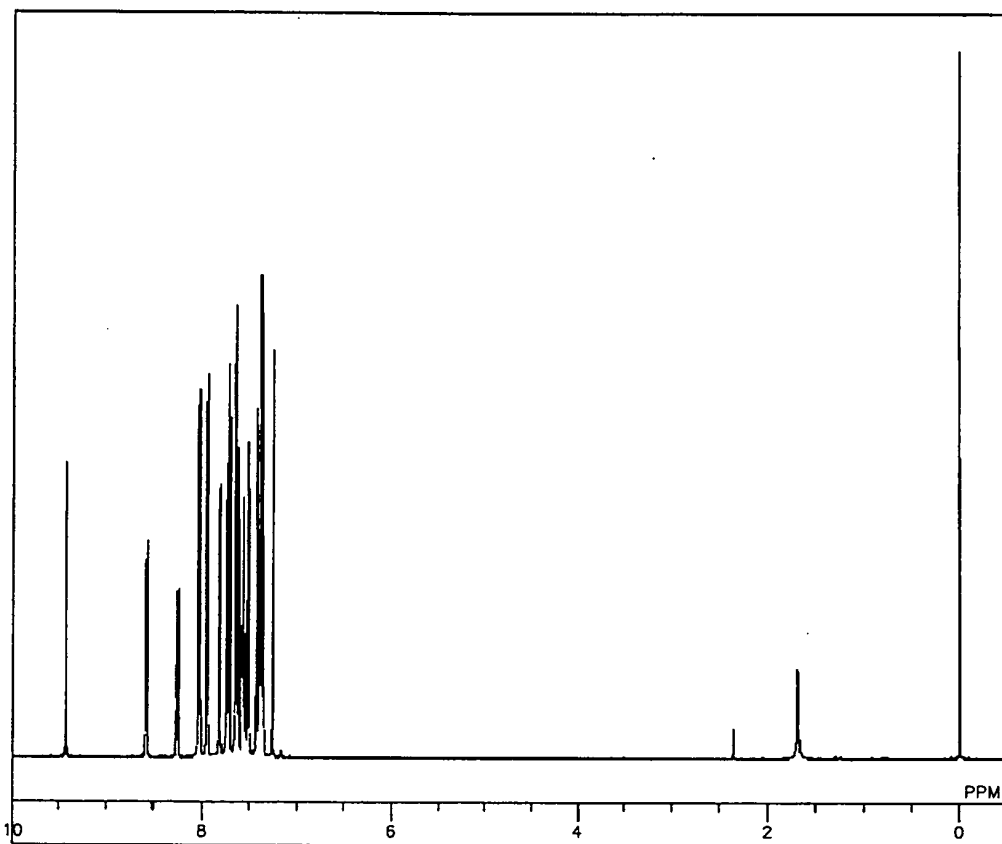


圖 8

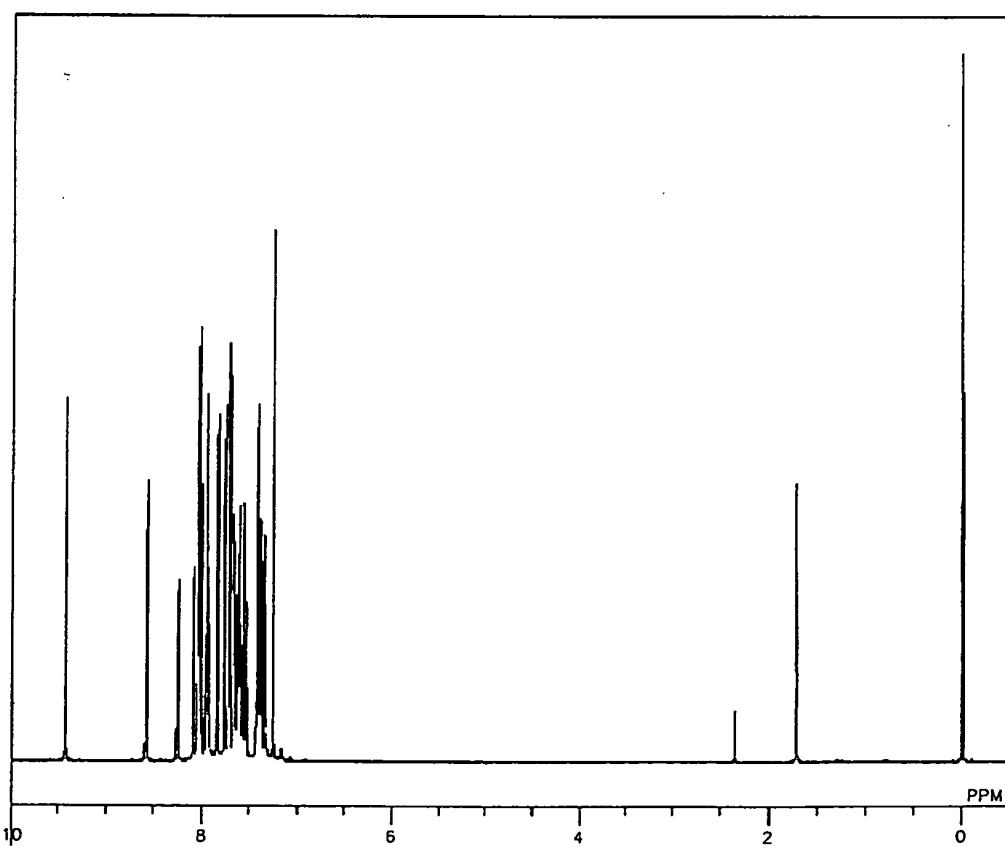


圖 9

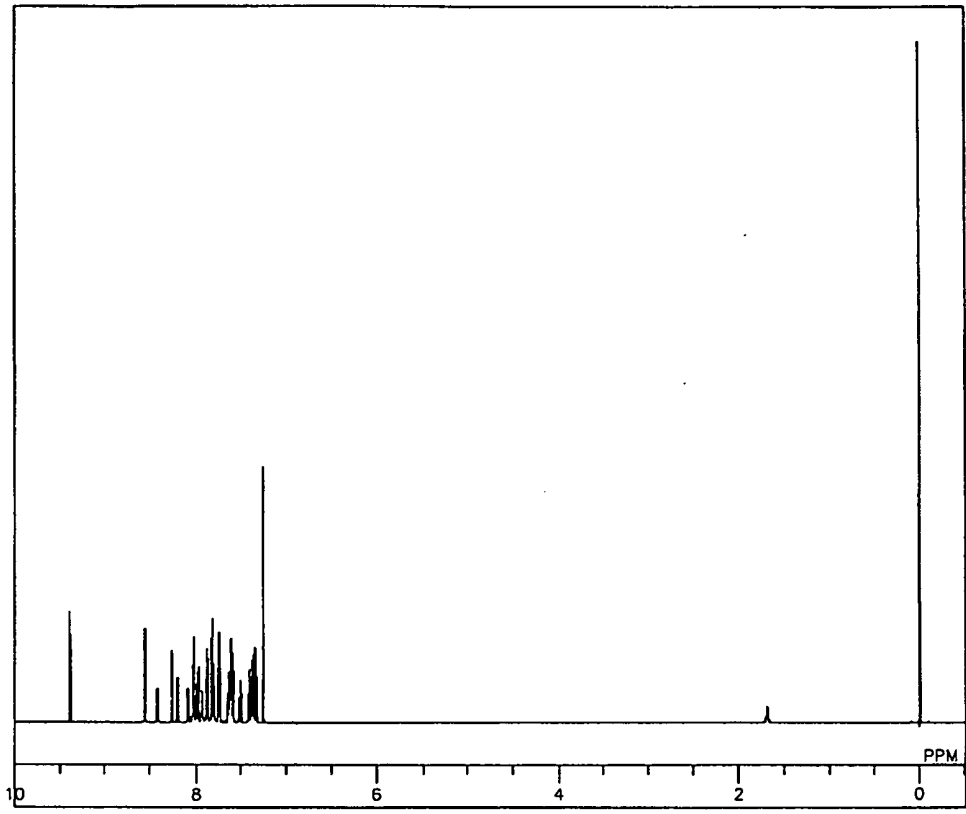


圖 10

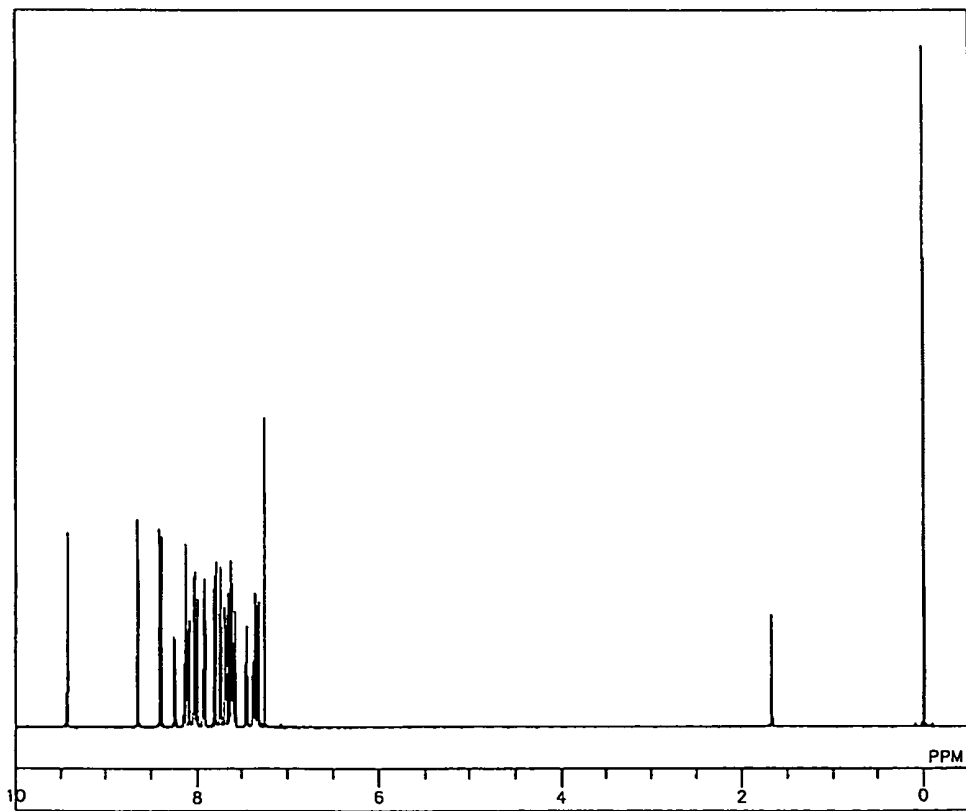


圖 11

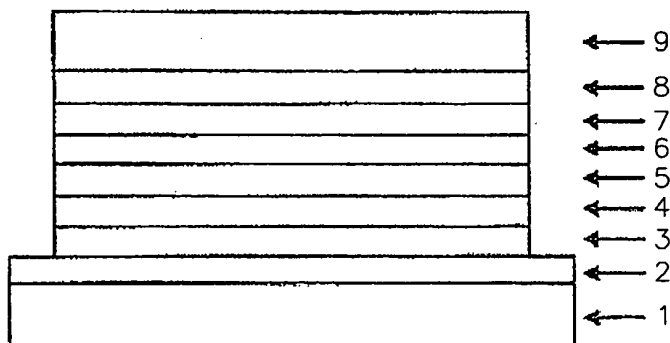


圖 12

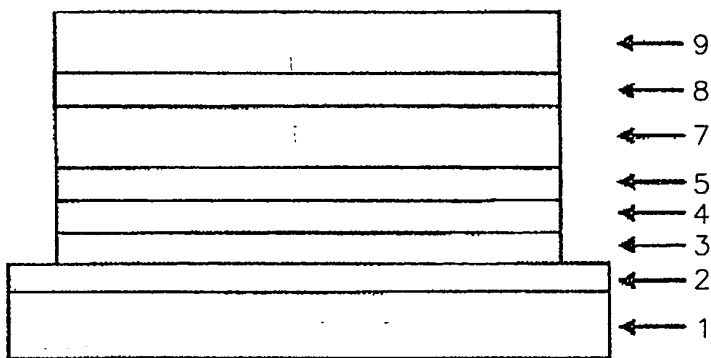


圖 13

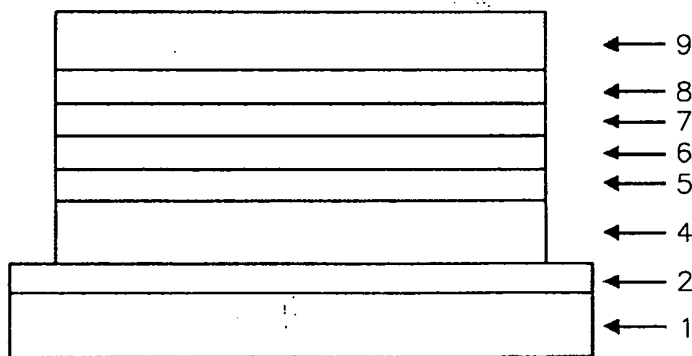
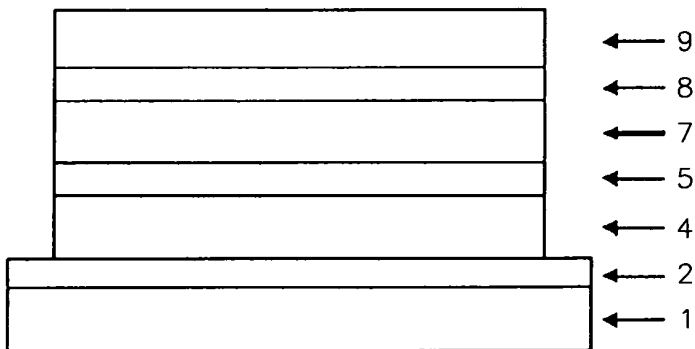


圖 14



四、指定代表圖：

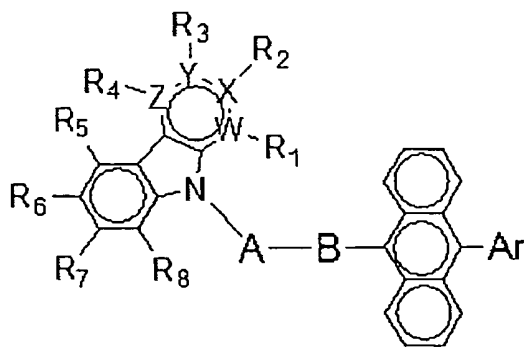
(一)本案指定代表圖為：無。

(二)本代表圖之元件符號簡單說明：

無

五、本案若有化學式時，請揭示最能顯示發明特徵的化學式：

[化1]

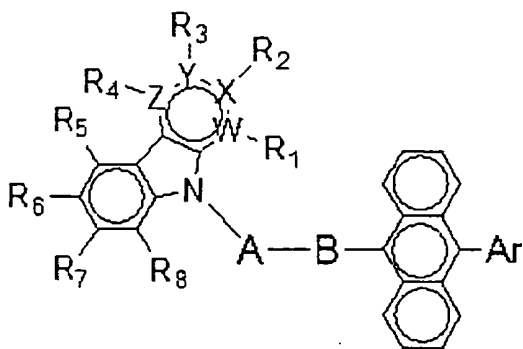


(1)

因此，本發明者等人為了達成上述目的，著眼於吡啶吡啶環構造具有高的電子傳輸能力、以及耐熱性優異，而設計出具有被取代之蔥環構造及吡啶吡啶環構造的化合物並進行化學合成，使用該化合物嘗試製作各種有機電致發光元件，並深入評價元件之特性，從而完成本發明。

即，本發明係一種以下述通式(1)所表示之具有被取代之蔥環構造及吡啶吡啶環構造的化合物；又，本發明係一種有機電致發光元件，其具有一對電極以及夾持於其間之至少一層有機層，本發明之有機電致發光元件的特徵為該化合物係用作為至少一層有機層的構成材料。

[化1]



(1)

(式中，Ar 表示被取代或未被取代之芳香族烴基、或者被取代或未被取代之縮合多環芳香族基；A 表示被取代或未被取代之芳香族烴的二價基、被取代或未被取代之芳香族雜環的二價基、或者被取代或未被取代之縮合多環芳香族的二價基；B 表示單鍵、或者被取代或未被取代之芳香族烴的二價基、被取代或未被取代之芳香族雜環的二價基、或被取代或未被取代之縮合多環芳香族的二價基；R₁~R₈可相同亦可不同，表示氫原子、重氫原子、氟原子、氯原子、氰基、可具有取代基之碳原子數為 1~6 之直鏈狀或支鏈狀烷基、被取代或未被取代之芳香族烴基、被取代或未被取代之芳香族雜環基、或者被取代或未被取代之縮合多環芳香族基；W、X、Y、Z 表示碳原子或氮原子。在此，W、X、Y、Z 中僅任一者為氮原子，且該氮原子不具有 R₁~R₄ 之取代基。)

作為通式(1)中之 Ar 所表示之「被取代或未被取代之芳香族烴基」或者「被取代或未被取代之縮合多環芳香族基」中的「芳香族烴基」或者「縮合多環芳香族基」，具體可列舉：苯基、聯苯基、聯三苯基、萘基、蒽基、菲基、萸基、茛基、以及芘基。

作為通式(1)中之 Ar 所表示之「被取代之芳香族烴基」或者「被取代之縮合多環芳香族基」中的「取代基」，具體可列舉：重氫原子、氟原子、氯原子、氫基、羥基、硝基、碳原子數為 1~6 之直鏈狀或支鏈狀烷基、環戊基、環己基、碳原子數為 1~6 之直鏈狀或支鏈狀烷氧基、被碳原子數為 1~6 之直鏈狀或支鏈狀烷基所取代之二烷基胺基、苯基、萘基、蒽基、萸基、苯乙烯基、吡啶基、吡啶吡啶基(pyridoindolyl)、喹啉基、苯并噁唑基等基團，該等取代基亦可進一步被取代。

作為通式(1)中之 $R_1 \sim R_8$ 所表示之「被取代或未被取代之芳香族烴基」、「被取代或未被取代之芳香族雜環基」、或者「被取代或未被取代之縮合多環芳香族基」中的「芳香族烴基」、「芳香族雜環基」、或者「縮合多環芳香族基」，具體可列舉：苯基、聯苯基、聯三苯基、聯四苯基(tetrakisphenyl)、苯乙烯基、萘基、蒽基、二氫萘基、萸基、菲基、茛基、芘基、吡啶基、三唑基(triazyl)、噁啶基、呋喃基、吡咯基、苯硫基、喹啉基、異喹啉基、苯并呋喃基、苯并苯硫基、吡啶基、咪唑基、苯并噁唑基、苯并噁唑基、喹噁啉基(quinoxalyl)、苯并咪唑基、吡唑基、二苯并呋喃基、二苯并噁吩基、吡啶基、啡啉基、吡啶基、及吡啶吡啶基。

作為通式(1)中之 $R_1 \sim R_8$ 所表示之「被取代之芳香族烴基」、「被取代之芳香族雜環基」、或者「被取代之縮合多環芳香族基」中的「取代基」，具體可列舉：重氫原子、氟原子、氯原子、三氟甲基、碳原子數為 1~6 之直鏈狀或支鏈狀烷基、苯基、聯苯基、聯三苯基、聯四苯基、苯乙烯基、萘基、萸基、菲基、茛基、芘基、及吡啶吡啶基，該等取代基可進一步被取代。

作為通式(1)中之 $R_1 \sim R_8$ 所表示之「可具有取代基之碳原子數為 1~6 之直鏈狀或支鏈狀烷基」中的「碳原子數為 1~6 之直鏈狀

或支鏈狀烷基」，具體可列舉：甲基、乙基、正丙基、異丙基、正丁基、異丁基、三級丁基、正戊基、異戊基、三級戊基、正己基、異己基、及三級己基。

作為通式(1)中之 $R_1 \sim R_8$ 所表示之「具有取代基之碳原子數為 1~6 之直鏈狀或支鏈狀烷基」中的「取代基」，具體可列舉：重氫原子、氟原子、氯原子、苯基、聯苯基、聯三苯基、聯四苯基、萘基、蒽基、菲基、茛基、芘基、及吡啶吡啶基，該等取代基可進一步被取代。

作為通式(1)中之 A 或 B 所表示之「被取代或未被取代之芳香族烴的二價基」、「被取代或未被取代之芳香族雜環的二價基」、或者「被取代或未被取代之縮合多環芳香族的二價基」中的「芳香族烴的二價基」、「芳香族雜環的二價基」、或者「縮合多環芳香族的二價基」，具體可列舉：伸苯基、伸聯苯基(biphenylene)、伸聯三苯基(terphenylene)、伸聯四苯基(tetrakisphenylene)、伸萘基、伸蒽基、伸菲基、伸蒾基、伸菲酚基(phenanthrolylene)、伸茛基(indenylene)、伸芘基(pyrenylene)、伸吡啶基(pyridinylene)、伸嘧啶基(pyrimidinylene)、伸喹啉基(quinolylene)、伸異喹啉基(isoquinolylene)、伸吡啶基(indolylene)、伸咔唑基(carbazolylene)、伸喹噁啉基(quinoxalylene)、伸苯并咪唑基(benzoimidazolylene)、伸吡唑基(pyrazolylene)、伸吡啶基(naphthyridinylene)、伸啡啉基(phenanthroliylene)、以及伸吡啶基(acridinylene)。

作為通式(1)中之 A 或 B 所表示之「被取代之芳香族烴的二價基」、「被取代之芳香族雜環的二價基」、或者「被取代之縮合多環芳香族的二價基」中的「取代基」，具體可列舉：重氫原子、氟原子、氯原子、三氟甲基、碳原子數為 1~6 之直鏈狀或支鏈狀烷基、苯基、聯苯基、聯三苯基、聯四苯基、苯乙烯基、萘基、蒽基、菲基、茛基、芘基、及吡啶吡啶基，該等取代基可進一步被取代。

以本發明之通式(1)所表示之具有被取代之蔥環構造及吡啶吡啶環構造的化合物係新穎化合物，與習知之電子傳輸材料相比，其電子移動快、具有優異之電洞阻擋能力、在高溫條件下熱穩定

性佳、且薄膜狀態穩定。

以本發明之通式(1)所表示之具有被取代之蔥環構造及吡啶吡啶環構造的化合物係可以用作有機電致發光元件(以下簡稱為有機 EL 元件)之電子注入層及/或電子傳輸層的構成材料。藉由使用與習知之材料相比電子之注入及移動速度快的材料，而發揮如下作用，亦即，從電子傳輸層向發光層傳輸電子的效率提高、而發光效率提高，並且驅動電壓下降、而有機電 EL 元件之耐久性提高。

以本發明之通式(1)所表示之具有被取代之蔥環構造及吡啶吡啶環構造的化合物也可以用作有機電致發光元件之電洞阻擋層的構成材料。藉由使用電洞阻擋能力優異、且與習知之材料相比電子傳輸性優異、且薄膜狀態之穩定性高的材料，而發揮如下作用，亦即，具有高發光效率、同時驅動電壓下降、電流耐性得到改善、並且有機 EL 元件之最大發光亮度提高。

以本發明之通式(1)所表示之具有被取代之蔥環構造及吡啶吡啶環構造的化合物亦可以用作有機 EL 元件之發光層的構成材料。藉由使用與習知之材料相比電子傳輸性優異、且帶隙寬的本發明之材料作為發光層之主體材料、並使其承載稱為摻雜劑之螢光發光體或磷光發光體、作為發光層，則而發揮如下作用，亦即，可實現驅動電壓下降、發光效率得到改善之有機 EL 元件。

由於本發明之有機 EL 元件使用與習知之電子傳輸材料相比電子移動快、具有優異之電洞阻擋能力、在高溫條件下熱穩定性佳、且薄膜狀態穩定之具有被取代之蔥環構造及吡啶吡啶環構造的化合物，故可以實現高效率與高耐久性。

[發明的效果]

本發明之具有被取代之蔥環構造及吡啶吡啶環構造的化合物可以用作有機 EL 元件之電子注入層、電子傳輸層、電洞阻擋層、或者發光層的構成材料，其電洞阻擋能力優異、薄膜狀態穩定性、且耐熱性優異。本發明之有機 EL 元件的發光效率以及電力效率高，因此可以降低元件的實用驅動電壓。可以降低發光起始電壓低、並改善耐久性。

表。

圖 5 係本發明實施例 5 之化合物(化合物 52)之 1H-NMR 圖

表。

圖 6 係本發明實施例 6 之化合物(化合物 55)之 1H-NMR 圖

表。

圖 7 係本發明實施例 7 之化合物(化合物 59)之 1H-NMR 圖

表。

圖 8 係本發明實施例 8 之化合物(化合物 61)之 1H-NMR 圖

表。

圖 9 係本發明實施例 9 之化合物(化合物 87)之 1H-NMR 圖

表。

圖 10 係本發明實施例 10 之化合物(化合物 89)之 1H-NMR 圖表。

圖 11 係顯示實施例 27~38 之 EL 元件構成之圖。

圖 12 係顯示比較例 1 之 EL 元件構成之圖。

圖 13 係顯示實施例 39~44 之 EL 元件構成之圖。

圖 14 係顯示比較例 2 之 EL 元件構成之圖。

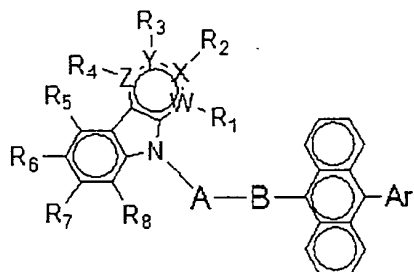
【主要元件符號說明】

- 1 . . . 玻璃基板
- 2 . . . 透明陽極
- 3 . . . 電洞注入層
- 4 . . . 電洞傳輸層
- 5 . . . 發光層
- 6 . . . 電洞阻擋層
- 7 . . . 電子傳輸層
- 8 . . . 電子注入層
- 9 . . . 陰極

七、申請專利範圍：

1. 一種具有被取代之蔥環構造及吡啶吲哚環構造的化合物，其係以下述通式(1)表示：

[化1]

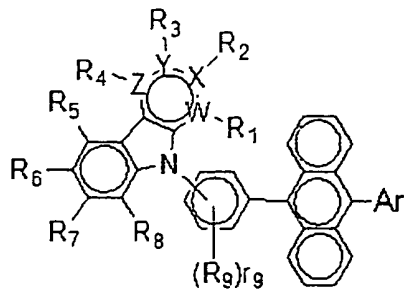


(1)

(式中，Ar 表示被取代或未被取代之芳香族烴基或者被取代或未被取代之縮合多環芳香族基，其取代基為重氫原子、氟原子、氯原子、氫基、羥基、硝基、碳原子數為 1~6 之直鏈狀或支鏈狀烷基、環戊基、環己基、碳原子數為 1~6 之直鏈狀或支鏈狀烷氧基、被碳原子數為 1~6 之直鏈狀或支鏈狀烷基所取代之二烷基胺基、苯基、萘基、蔥基、萘基、苯乙烯基、吡啶基、吡啶吲哚基(pyridoindolyl)、喹啉基、或苯并噻唑基；A 係被取代或未被取代之芳香族烴的二價基或者被取代或未被取代之縮合多環芳香族的二價基且 B 係單鍵，或者，A 係被取代或未被取代之芳香族雜環的二價基且 B 係被取代或未被取代之芳香族烴的二價基或者被取代或未被取代之縮合多環芳香族的二價基；R₁~R₈ 可相同亦可不同，表示氫原子、重氫原子、氟原子、氯原子、氫基、可具有取代基之碳原子數為 1~6 之直鏈狀或支鏈狀烷基、被取代或未被取代之芳香族烴基、被取代或未被取代之芳香族雜環基、或者被取代或未被取代之縮合多環芳香族基；W、X、Y、Z 表示碳原子或氮原子；在此，W、X、Y、Z 中僅任一者為氮原子，且該氮原子不具有 R₁~R₄ 之取代基)。

2. 如申請專利範圍第 1 項所述之具有被取代之蔥環構造及吡啶吲哚環構造的化合物，其係以下述通式(1')表示：

[化2]

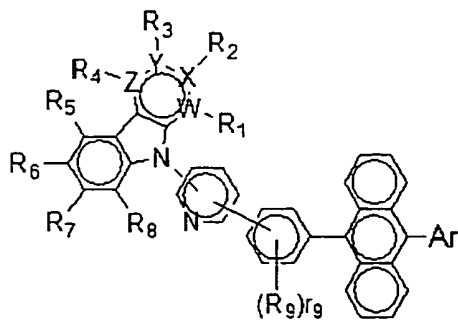


(1')

(式中，Ar 表示被取代或未被取代之芳香族烴基或者被取代或未被取代之縮合多環芳香族基，其取代基同前述； $R_1 \sim R_8$ 可相同亦可不同，表示氫原子、重氫原子、氟原子、氯原子、氫基、可具有取代基之碳原子數為 1~6 之直鏈狀或支鏈狀烷基、被取代或未被取代之芳香族烴基、被取代或未被取代之芳香族雜環基、或者被取代或未被取代之縮合多環芳香族基； R_9 表示重氫原子、氟原子、氯原子、可具有取代基之碳原子數為 1~6 之直鏈狀或支鏈狀烷基、被取代或未被取代之芳香族烴基、被取代或未被取代之芳香族雜環基、或者被取代或未被取代之縮合多環芳香族基； r_9 表示 0 或 1~4 之整數；具有複數個 R_9 的情況下，其相互可相同亦可不同；W、X、Y、Z 表示碳原子或氮原子；在此，W、X、Y、Z 中僅任一者為氮原子，且該氮原子不具有 $R_1 \sim R_4$ 之取代基)。

3. 如申請專利範圍第 1 項所述之具有被取代之蔥環構造及吡啶吡啶環構造的化合物，其係以下述通式(1'')表示：

[化3]



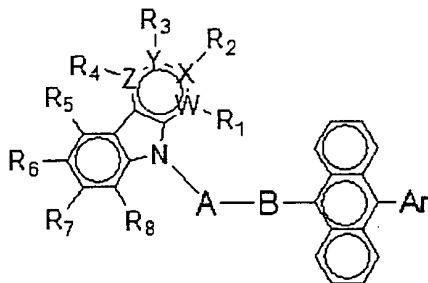
(1'')

(式中，Ar 表示被取代或未被取代之芳香族烴基或者被取代或未被取代之縮合多環芳香族基，其取代基同前述； $R_1 \sim R_8$ 可相同亦

可不同，表示氫原子、重氫原子、氟原子、氯原子、氫基、可具有取代基之碳原子數為 1~6 之直鏈狀或支鏈狀烷基、被取代或未被取代之芳香族烴基、被取代或未被取代之芳香族雜環基、或者被取代或未被取代之縮合多環芳香族基； R_9 表示重氫原子、氟原子、氯原子、可具有取代基之碳原子數為 1~6 之直鏈狀或支鏈狀烷基、被取代或未被取代之芳香族烴基、被取代或未被取代之芳香族雜環基、或者被取代或未被取代之縮合多環芳香族基； r_9 表示 0 或 1~4 之整數；具有複數個 R_9 的情況下，其相互可相同亦可不同；W、X、Y、Z 表示碳原子或氮原子；在此，W、X、Y、Z 中僅任一者為氮原子，且該氮原子不具有 R_1 ~ R_4 之取代基)。

4. 一種有機電致發光元件，其具有一對電極以及夾持於其間之至少一層有機層，其中該有機電致發光元件的特徵為：以下述通式(1)所表示之具有被取代之蔥環構造及吡啶吲哚環構造的化合物係用作為至少一層該有機層的構成材料，

[化4]



(1)

(式中，Ar 表示被取代或未被取代之芳香族烴基或者被取代或未被取代之縮合多環芳香族基，其取代基為重氫原子、氟原子、氯原子、氫基、羥基、硝基、碳原子數為 1~6 之直鏈狀或支鏈狀烷基、環戊基、環己基、碳原子數為 1~6 之直鏈狀或支鏈狀烷氧基、被碳原子數為 1~6 之直鏈狀或支鏈狀烷基所取代之二烷基胺基、苯基、萘基、蔥基、萘基、苯乙烯基、吡啶基、吡啶吲哚基(pyridoindolyl)、喹啉基、或苯并噻唑基；A 係被取代或未被取代之芳香族烴的二價基或者被取代或未被取代之縮合多環芳香族的二價基且 B 係單鍵，或者，A 係被取代或未被取代之芳香族雜環

的二價基且 B 係被取代或未被取代之芳香族烴的二價基或者被取代或未被取代之縮合多環芳香族的二價基； $R_1 \sim R_8$ 可相同亦可不同，表示氫原子、重氫原子、氟原子、氯原子、氫基、可具有取代基之碳原子數為 1~6 之直鏈狀或支鏈狀烷基、被取代或未被取代之芳香族烴基、被取代或未被取代之芳香族雜環基、或者被取代或未被取代之縮合多環芳香族基；W、X、Y、Z 表示碳原子或氮原子；在此，W、X、Y、Z 中僅任一者為氮原子，且該氮原子不具有 $R_1 \sim R_4$ 之取代基)。

5.如申請專利範圍第 4 項所述之有機電致發光元件，其中，該有機層係電子傳輸層，且以該通式(1)所表示之化合物係於該電子傳輸層中用作為至少一個構成材料。

6.如申請專利範圍第 4 項所述之有機電致發光元件，其中，該有機層係電洞阻擋層，且以該通式(1)所表示之化合物係於該電洞阻擋層中用作為至少一個構成材料。

7.如申請專利範圍第 4 項所述之有機電致發光元件，其中，該有機層係發光層，且以該通式(1)所表示之化合物係於該發光層中用作為至少一個構成材料。

8.如申請專利範圍第 4 項所述之有機電致發光元件，其中，該有機層係電子注入層，且以該通式(1)所表示之化合物係於該電子注入層中用作為至少一個構成材料。

八、圖式：