



(12)发明专利申请

(10)申请公布号 CN 107922311 A

(43)申请公布日 2018.04.17

(21)申请号 201780002876.1

(74)专利代理机构 北京市柳沈律师事务所

(22)申请日 2017.04.24

11105

代理人 牟科 刘国军

(30)优先权数据

10-2016-0050517 2016.04.26 KR

10-2017-0050859 2017.04.20 KR

(51)Int.Cl.

G07C 211/54(2006.01)

G07D 487/04(2006.01)

G07D 495/04(2006.01)

G07D 491/048(2006.01)

G07D 209/56(2006.01)

G09K 11/06(2006.01)

H01L 51/00(2006.01)

H01L 51/50(2006.01)

(85)PCT国际申请进入国家阶段日

2018.02.22

(86)PCT国际申请的申请数据

PCT/KR2017/004320 2017.04.24

(87)PCT国际申请的公布数据

W02017/188676 KO 2017.11.02

(71)申请人 德山新勒克斯有限公司

地址 韩国忠清南道

(72)发明人 朴正焕 金元三 文成允 李允硕

韩升勋 崔乘源 李定昱 金璿起

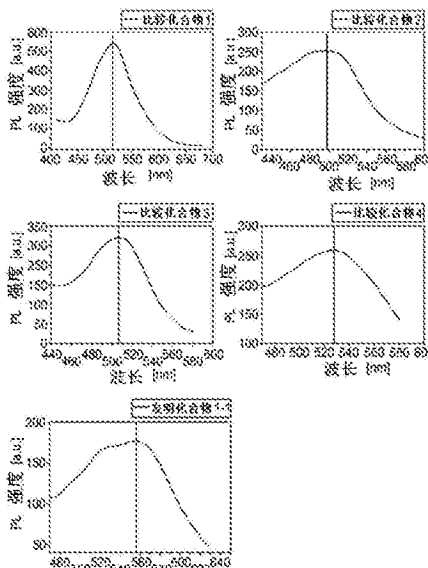
权利要求书9页 说明书45页 附图3页

(54)发明名称

有机电气元件用化合物、利用其的有机电气元件及其电子装置

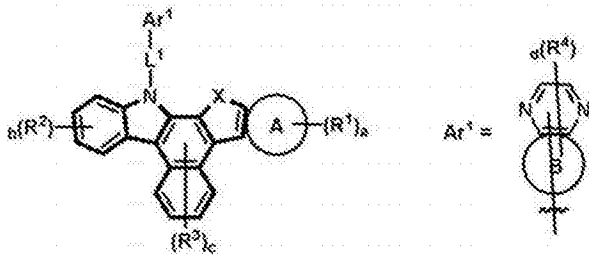
(57)摘要

提供有机电气元件、其电子装置,其中上述有机电气元件,将根据本发明的化合物的混合物用作为磷光主体物质,从而可实现有机电气元件的高的发光效率、低的驱动电压,而且能够很大地提高元件的寿命。



1. 一种化合物,由下述化学式(1)表示:

化学式(1)



{在上述化学式(1)中,

1) A为C₁₀的芳基,

2) B为选自由以下化学式B-1至B-16组成的组,

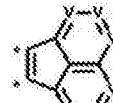
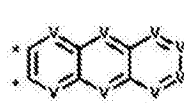
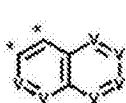
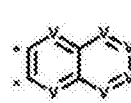
B-1

B-2

B-3

B-4

B-5



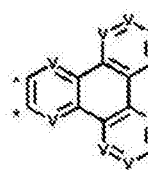
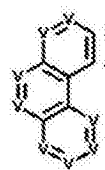
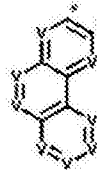
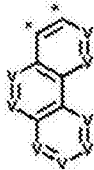
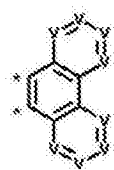
B-6

B-7

B-8

B-9

B-10



B-11

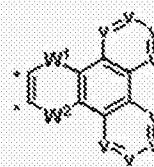
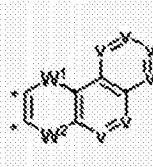
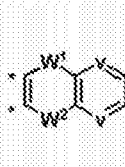
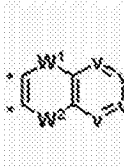
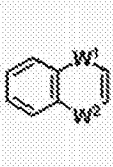
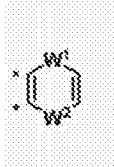
B-12

B-13

B-14

B-15

B-16



上述化学式B-1至B-16中的“*”表示与包含2个N的吡嗪环相结合从而形成稠环的结合部分,

3) W¹及W²分别独立地为单键、S或O,

4) V为N或C,

5) X为O或S,

6) a为0至6的整数,b及c为0至4的整数,d为0至11的整数,

7) R¹、R²、R³及R⁴相互相同或相异,相互独立地选自由氢;重氢;卤素;氰基;硝基;C₆-C₆₀的芳基;苄基;含有选自O、N、S、Si和P中至少一种杂原子的C₂-C₆₀的杂环基;C₃-C₆₀的脂肪族环和C₆-C₆₀的芳香族环的稠环基;C₁-C₅₀的烷基;C₂-C₂₀的烯基;C₂-C₂₀的炔基;C₁-C₃₀的烷氧基;C₆-C₃₀的芳氧基;以及-L'-N(R^a)(R^b);组成的组,

或,上述a、b及c为2以上的情况下,分别作为复数相互相同或相异,多个R¹之间或多个R²之间或多个R³之间可相互结合而形成环,

8) L'为选自由单键;C₆-C₆₀的亚芳基;亚苄基;C₃-C₆₀的脂肪族环和C₆-C₆₀的芳香族环的

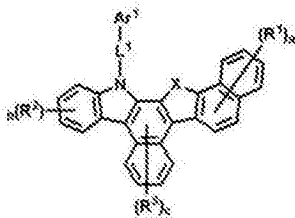
稠环基；以及C₂-C₆₀的杂环基；组成的组，在上述R^a及R^b相互独立地选自由C₆-C₆₀的芳基；苄基；C₃-C₆₀的脂肪族环和C₆-C₆₀的芳香族环的稠环基；以及含有选自O、N、S、Si和P中至少一种杂原子的C₂-C₆₀的杂环基；组成的组，

9) L¹分别独立地选自由单键；C₆-C₆₀的亚芳基；亚苄基；C₃-C₆₀的脂肪族环和C₆-C₆₀的芳香族环的稠环基；以及C₂-C₆₀的杂环基；组成的组，

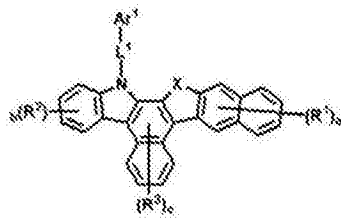
其中，上述芳基、苄基、亚芳基、杂环基、稠环基、烷氧基、烯基、烷氧基、芳氧基能够分别被选自由重氢；卤素；被C₁-C₂₀烷基或C₆-C₂₀芳基取代或未取代的硅烷基；硅氧烷基；硼基；锆基；镉基；氰基；硝基；-L¹-N(R^a)(R^b)；C₁-C₂₀的烷硫基；C₁-C₂₀的烷氧基；C₁-C₂₀的烷基；C₂-C₂₀的烯基；C₂-C₂₀的炔基；C₆-C₂₀的芳基；被重氢取代的C₆-C₂₀的芳基；苄基；C₂-C₂₀的杂环基；C₃-C₂₀的环烷基；C₇-C₂₀的芳烷基；以及C₈-C₂₀的芳烯基；组成的组中的一种以上取代基所取代，而且，这些取代基可相互结合形成环，其中‘环’是指碳数为3至60的脂肪族环或碳数为6至60的芳香族环或碳数为2至60的杂环或由它们组合而成的稠环，并包含饱和或不饱和环。

2. 根据权利要求1所述的化合物，其中，上述化学式(1)由以下化学式2至化学式4中的一个表示，

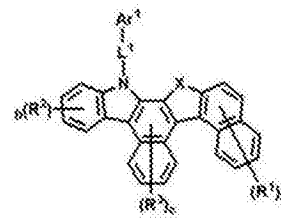
〈化学式2〉



〈化学式3〉



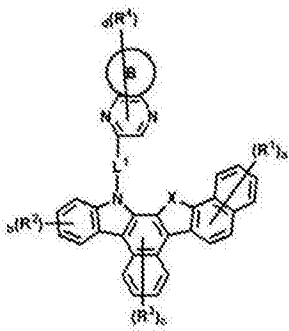
〈化学式4〉



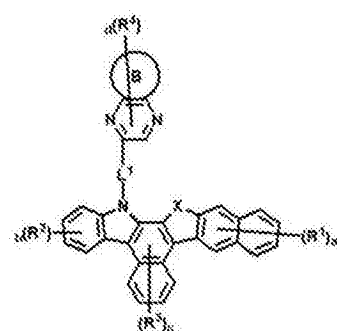
在上述化学式2至化学式4中，X、L¹、Ar¹、R¹、R²、R³、a、b、c被定义成与权利要求1中的定义相同。

3. 根据权利要求1所述的化合物，其中，上述化学式(1)由以下化学式5至化学式7中的一个表示，

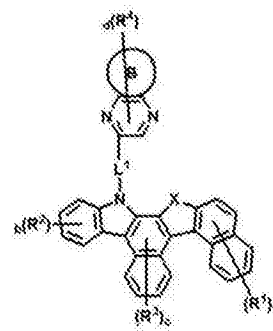
〈化学式5〉



〈化学式6〉

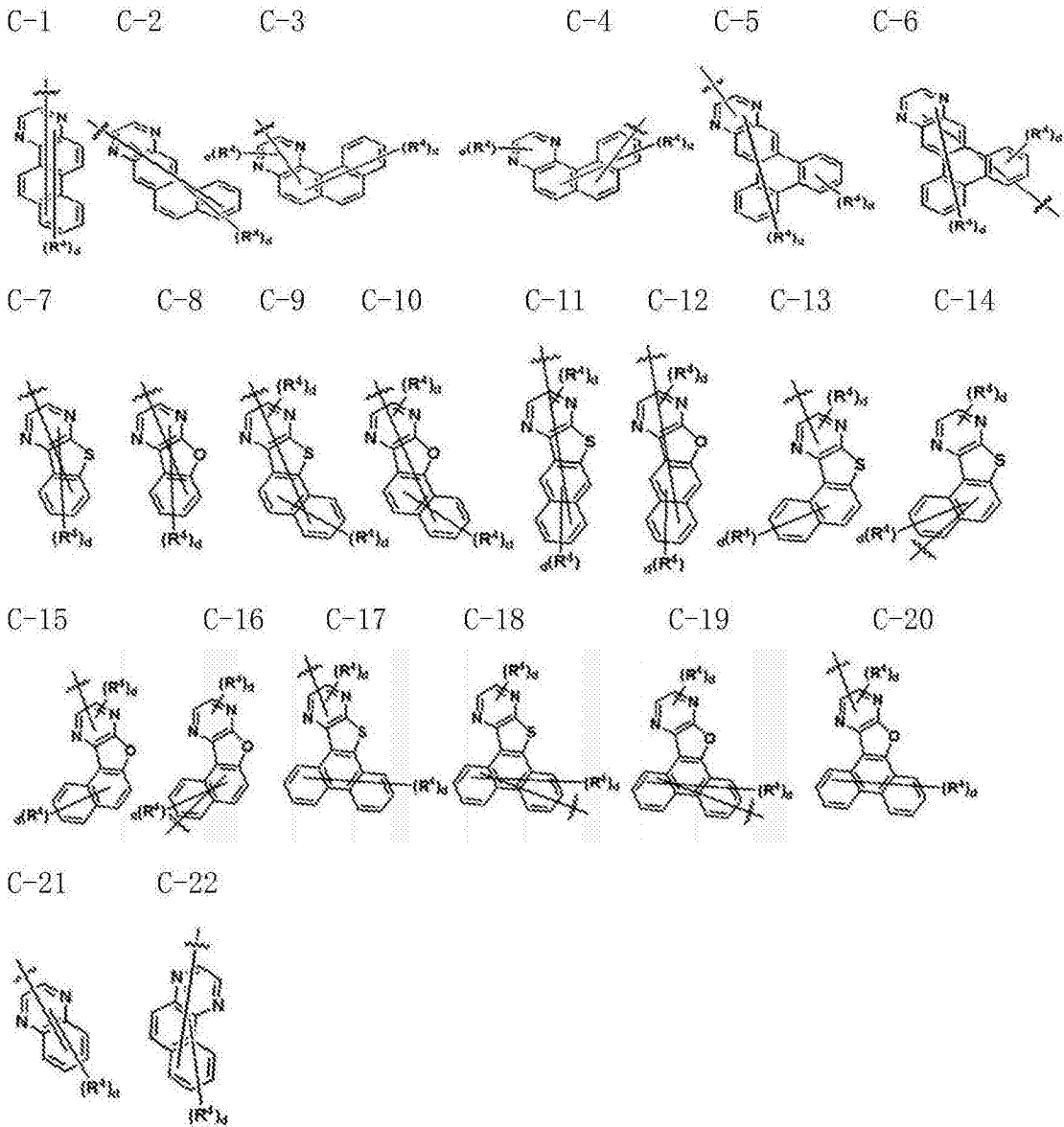


〈化学式7〉



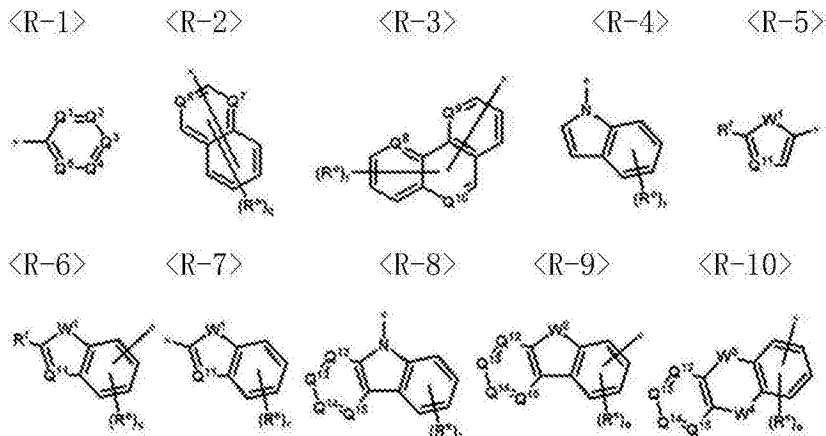
在上述化学式5至化学式7中，X、L¹、Ar¹、R¹、R²、R³、R⁴、a、b、c、d、B被定义成与权利要求1中的定义相同。

4. 根据权利要求1所述的化合物，其中，在上述化学式(1)中包含的上述吡啶的化学式结构Ar¹为下述化学式C-1至化学式C-22中的任意一种，



在上述化学式C-1至C-22中, R^4 被定义成与权利要求1中的定义相同, d 为0至11的整数中的任意一个。

5. 根据权利要求1所述的化合物, 其中, 在上述化学式(1)中的 R^4 以下述化学式R-1至R-10中的任意一种来表示,



在上述化学式R-1至R-10中,

1) Q^1 至 Q^{15} 相互独立地选自由 CR^g 或N,

2) W^1 为S、O或 NR^h ,

3) W^2 至 W^4 为S、O、 NR^h 或 CR^iR^j ,

4) R^e 为选自由氢;重氢;卤素;被 C_1 - C_{20} 烷基或 C_6 - C_{20} 芳基取代或未取代的硅烷基;硅氧烷基;硼基;锆基;氰基;硝基; C_1 - C_{20} 的烷硫基; C_1 - C_{20} 的烷氧基; C_1 - C_{20} 的烷基; C_2 - C_{20} 的烯基; C_2 - C_{20} 的炔基; C_6 - C_{20} 的芳基;被重氢取代的 C_6 - C_{20} 的芳基;苄基;含有选自O、N、S、Si和P中至少一种杂原子的 C_2 - C_{20} 的杂环基; C_3 - C_{20} 的环烷基; C_7 - C_{20} 的芳烷基;以及 C_8 - C_{20} 的芳烯基;组成的组,或者由相邻的基之间能够相互结合而形成环,

5) R^f 及 R^g 相互独立地选自由氢;重氢; C_6 - C_{20} 的芳基;苄基; C_3 - C_{20} 的脂肪族环和 C_6 - C_{20} 的芳香族环的稠环基;含有选自O、N、S、Si和P中至少一种杂原子的 C_2 - C_{20} 的杂环基; C_1 - C_{20} 的烷基; C_2 - C_{20} 的烯基; C_2 - C_{20} 的炔基;以及 C_1 - C_{30} 的烷氧;组成的组,

6) R^h , R^i 及 R^j 相互独立地选自由 C_6 - C_{20} 的芳基;含有选自O、N、S、Si和P中至少一种杂原子的 C_2 - C_{20} 的杂环基; C_1 - C_{20} 的烷基; C_2 - C_{20} 的烯基; C_1 - C_{30} 的烷氧;以及苄基;组成的组, R^i 及 R^j 相互结合,从而可与其相结合的C一并形成螺环(spiro)化合物,

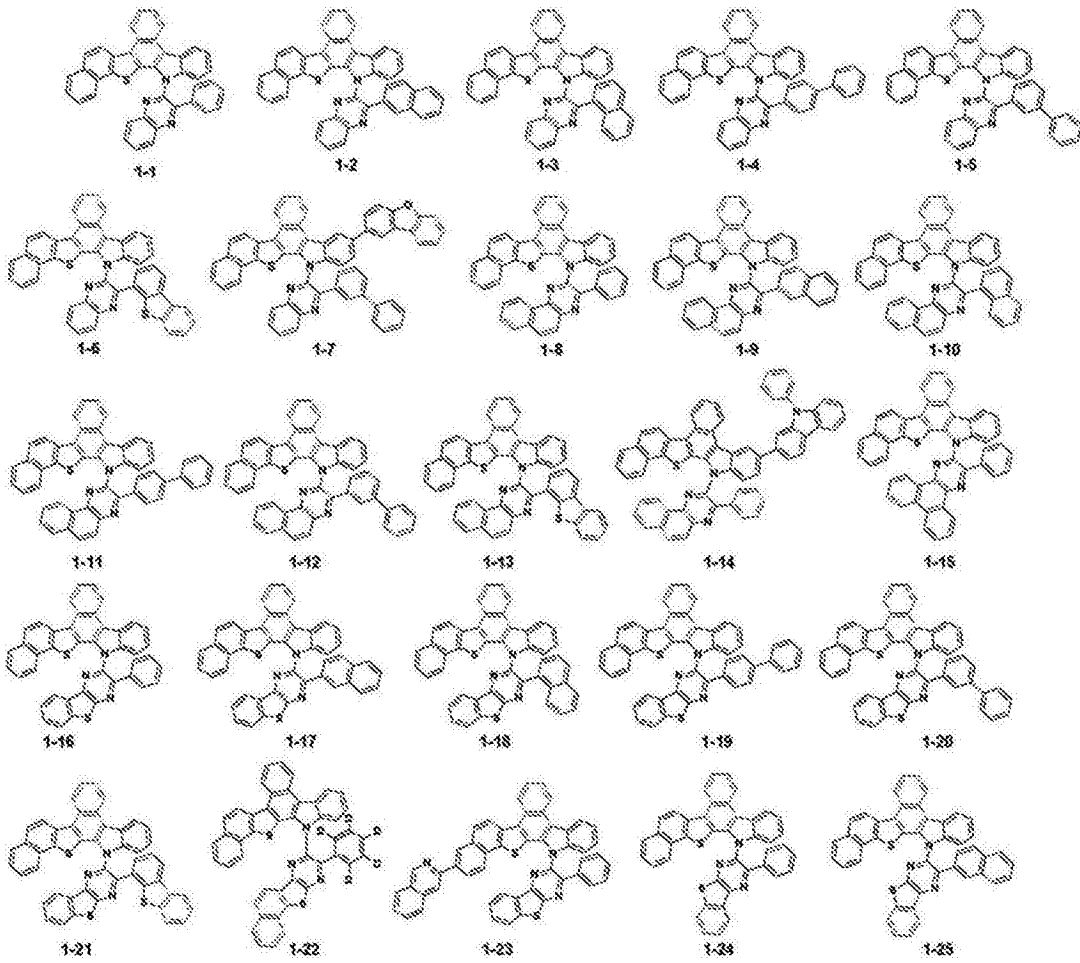
7) q相互独立地为0至5的整数,

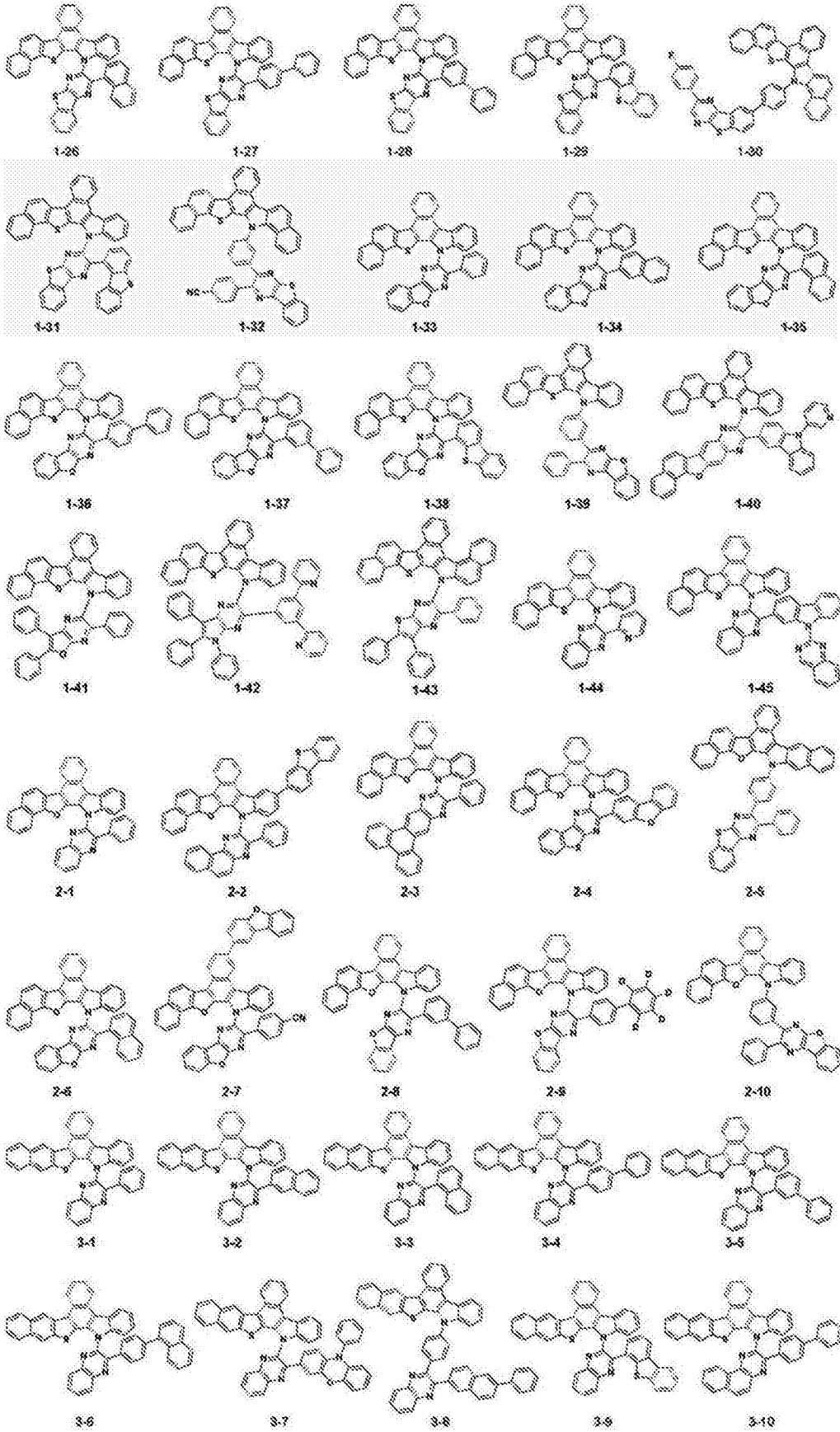
8) r相互独立地为0至4的整数,

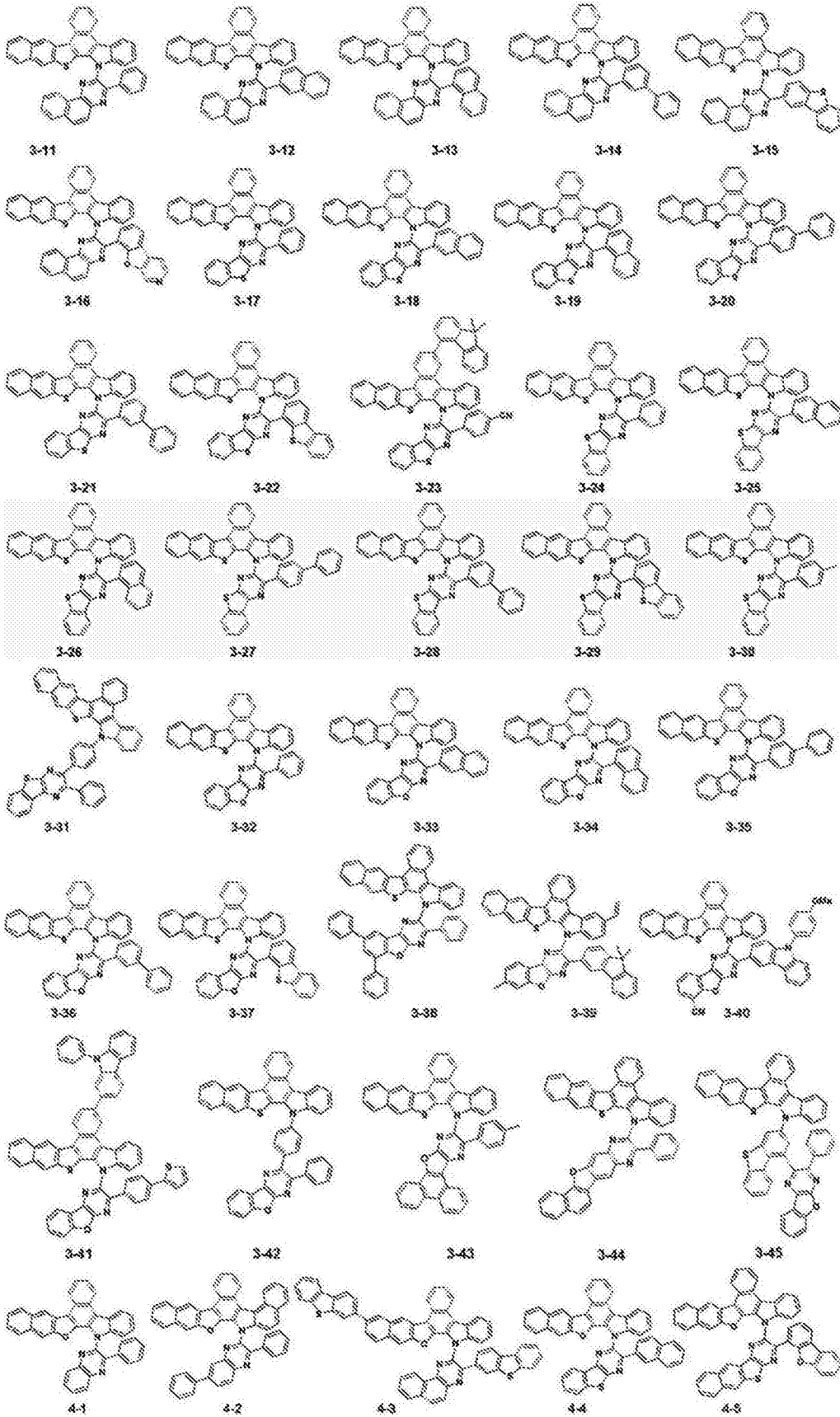
9) s相互独立地为0至3的整数,

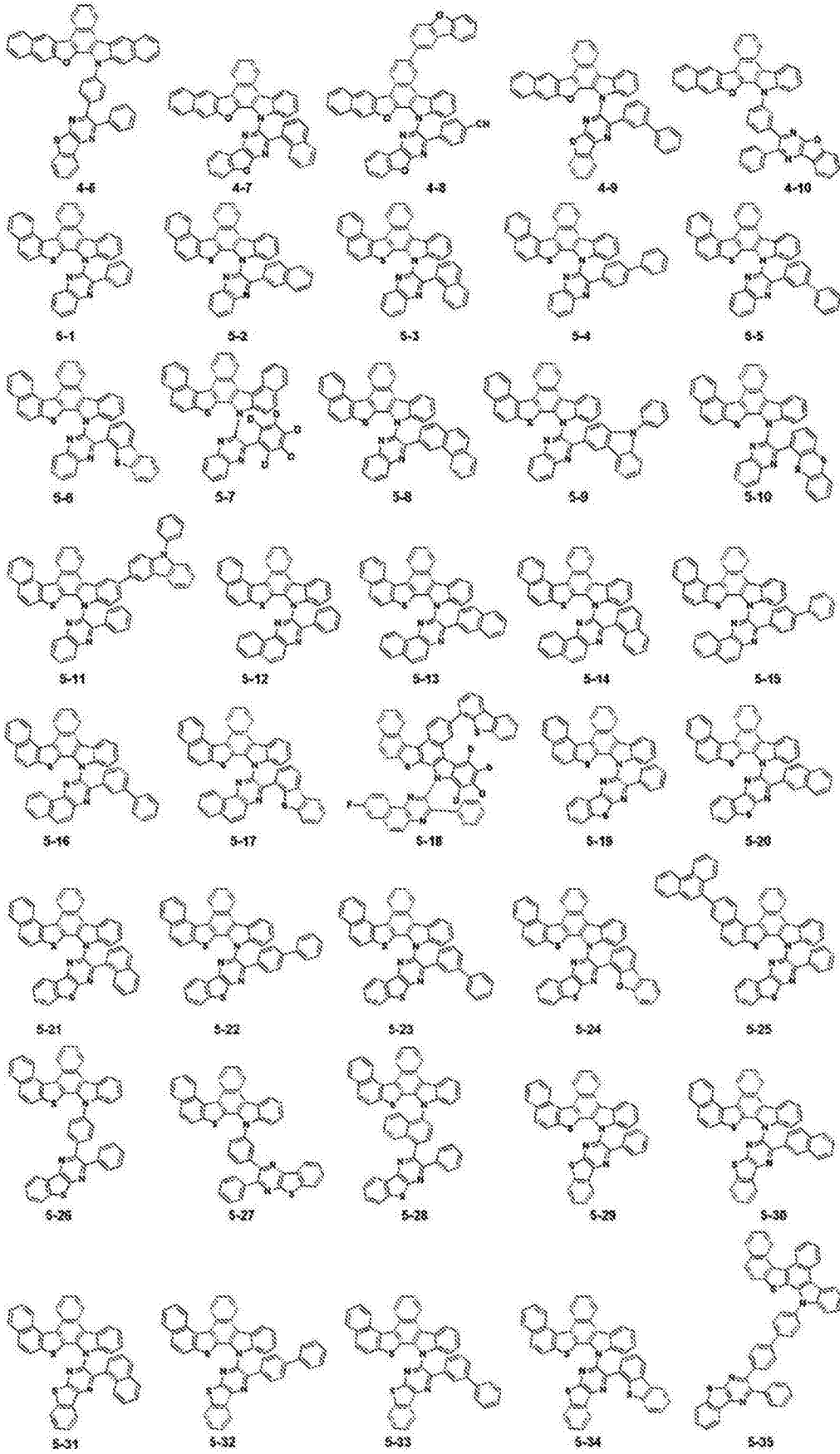
q、r及s分别为2以上的整数的情况下, R^e 相互相同或相异,*表示结合部分。

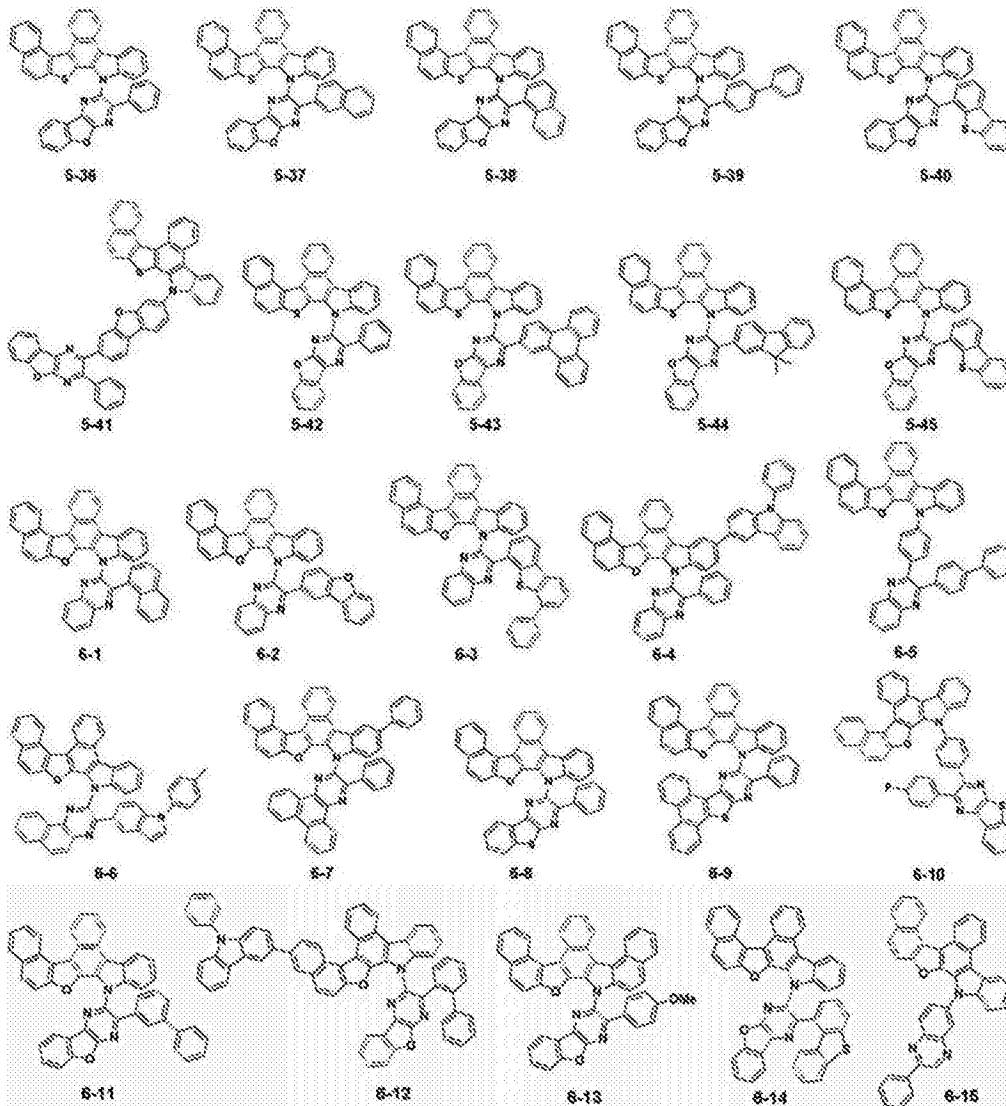
6. 根据权利要求1所述的化合物,其中,其为下述化合物中的一种,











7. 一种有机电气元件,包括第一电极、第二电极、及上述第一电极和第二电极之间的有机层,其中,上述有机层含有权利要求1至权利要求6的任一项所述的化合物。

8. 根据权利要求7所述的有机电气元件,其中,上述有机层的空穴注入层、空穴输送层、发光辅助层、电子输送辅助层、电子输送层及发光层中的至少一个层包含上述化合物,上述化合物包含一种单独的化合物或作为混合物的成分包含两种以上的化合物。

9. 根据权利要求7所述的有机电气元件,其中,上述化合物用作上述发光层的磷光主体材料。

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

11. 一种电子装置,其中,包括:

显示装置,包括权利要求7的有机电气元件;以及
控制部,用于驱动上述显示装置。

12. 根据权利要求11所述的电子装置,其中,上述有机电气元件为下列中的一个:有机电致发光元件、有机太阳能电池、有机感光体、有机晶体管、及单色或白色照明用元件。

有机电气元件用化合物、利用其的有机电气元件及其电子装置

技术领域

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

背景技术

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

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

[0004] 由于包含有杂原子的多环化合物的情况下,根据物质结构的特性差异非常大,从而作为有机电气元件的材料适用于多样的层。尤其根据环的个数及稠合位置、杂原子的种类和排列,带隙(HOMO,LUMO)、电气特性、化学特性、物性等具有相异的特征,因此进行着对于利用其的多样的有机电气元件的层的适用开发。作为其代表性例,在下述专利文献1至专利文献4中揭示了对于多环化合物中的5环化合物的异形(hetero)的种类及排列、取代基种类、稠合位置等的性能。

[0005] [专利文献1]:美国授权专利5843607

[0006] [专利文献2]:日本公开专利1999-162650

[0007] [专利文献3]:韩国公开专利2008-0085000

[0008] [专利文献4]:美国公开专利2010-0187977

[0009] [专利文献5]:韩国公开专利2011-0018340

[0010] [专利文献6]:韩国公开专利2009-0057711

[0011] 专利文献1及专利文献2使用了5环化合物中杂原子仅以氮(N)而构成的吡啶并咪唑核,揭示了使用取代或非取代于吡啶并咪唑的N的芳基的实施例。但是上述现有发明1的情况下,仅存在作为取代基,烷基、氨基、烷氧基等进行取代或非取代的单纯的芳基,从而在证明多环化合物的取代基效果方面是非常不足的,且仅记载有作为空穴输送材料的使用,而对于用作为磷光主体材料则没有进行记载。

[0012] 专利文献3及专利文献4中虽然记载有在与上述专利文献1及专利文献2相同的5环化合物中杂原子为N的吡啶并咪唑核,被分别包括芳基与N的吡啶、咪啶、三嗪等进行取代的化合物,但仅记载有对于磷光绿色主体物质的使用例,而对于取代于吡啶并咪唑核的其他杂环化合物的性能则没有进行记载。虽然专利文献5中记载有5环化合物中杂原子为氮(N)、氧(O)、硫(S)、碳等的化合物,但在性能测量数据中仅存在使用了均相互相同的同形杂原子的实施例,因此无法确认包含异形杂原子的5环化合物的性能特性。

[0013] 因此,上述专利文献中没有记载对于包含同形杂原子的5环化合物具有的低的电荷载子移动率及低的氧化稳定性的解决方案。

[0014] 通常5环环化合物分子层叠时,随着相邻的 π -电子增多而具有强的电气的相互作用,这与电荷载子移动率有密切的关系,尤其N-N型的同形的5环环化合物的分子在层叠时,分子间的排列顺序具有边对面形态,而反之,杂原子相互相异的异形的5环环化合物则具有分子的堆积结构以逆向相向的 π -层叠结构(antiparallelcofacial π -stacking structure),使得分子间的排列顺序具有面对面形态。且揭示了因作为此层叠结构的原因的被非对称配置的杂原子N取代的取代基的立体效果,而引起相对高的载子移动率及高的氧化稳定性。(Org.Lett.2008,10,1199)

[0015] 在专利文献6中揭示有对于7环以上的多样的多环环化合物,作为荧光主体物质而使用的例子。

[0016] 如同上述内容,对于多环环化合物的稠合位置及环的个数、根据杂原子的排列、种类的特性变化,还处于未实现充分开发的状态。尤其利用磷光发光掺杂物材料的磷光有机电气元件中,主体物质的LUMO、及HOMO能级作为对于有机电气元件的效率及寿命影响非常大的因素,其根据是否能够在发光层内有效地调节电子及空穴的注入而实现防止因在发光层内的电荷平衡调节、掺杂物猝灭(quenching)及在空穴输送层表面中的发光导致的效率降低及寿命降低。荧光及磷光发光用主体物质的情况下,近期正在研究利用TADF(Thermal activated delayed fluorescent)、激发复合物(exciplex)等的有机电气元件的效率增加及寿命增加等,尤其在寻求从主体物质到掺杂物质的能量传递方法方面进行着很多的研究。

[0017] 在寻求对于TADF(Thermal activated delayed fluorescent)、激发复合物的发光层内能量传递方面,虽然有各种方法,但是以PL寿命(TRTP)测量法可以容易地进行确认。TRTP(Time resolved transient PL)测量法作为将脉冲光源照射于主体薄膜之后,对根据时间的光谱的减少(Decay time)进行观察的方式,是能够通过对于能量传递及发光延迟时间的观察来寻求能量传递的方式的测量方法。上述TRTP测量是能够区分荧光与磷光及能够区分在混合的主体物质中的能量传递方式、激发复合物能量传递方式、TADF能量传递方式等的测量法。

[0018] 根据这样的从主体物质向掺杂物质的能量传递方式,存在影响效率及寿命的多样的因素,且根据物质,能量传递方式相异,因此目前为止上处于未能充分开发稳定且有效的有机电气元件用的主体材料的状态。从而需要继续开发新的材料,尤其迫切需要对于发光层的主体物质的开发。

发明内容

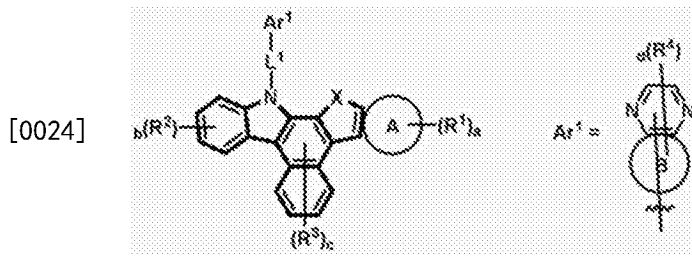
[0019] 技术课题

[0020] 现在,就OLED元件而言,以降低消耗电力,且提高色纯度的方向进行开发。本发明作为用于降低消耗电力的方法,旨在提供导入电子特性优秀的Sub的化合物的同时,利用这样的化合物来提供元件的低的驱动电压、高的发光效率、能够提高色纯度及寿命的化合物,且利用其的有机电气元件和其电子装置。

[0021] 技术方案

[0022] 本发明提供由以下化学式(1)表示的化合物。

[0023] 化学式(1)



[0025] 并且,本发明提供利用由上述化学式(1)表示的化合物的有机电气元件及其电子装置。

[0026] 技术效果

[0027] 根据本发明,作为有机电气元件的材料,利用在现有的核追加稠合芳香族环,且导入ET特性强的sub取代基的特定化合物,从而提高电子输送能力及热稳定性,且易于从ETL进行电子注,使得具有容易实现发光层内的电荷均衡的LUMO能级,从而能够提高有机电气元件的发光效率、耐热性、寿命等,且降低驱动电压。

附图说明

[0028] 图1为本发明的有机电致发光元件的例示图。

[0029] 附图标记的说明

[0030]	100:有机电气元件	110:基板
[0031]	120:第一电极	130:空穴注入层
[0032]	140:空穴输送层	141:缓冲层
[0033]	150:发光层	151:发光辅助层
[0034]	160:电子输送层	170:电子注入层
[0035]	180:第二电极	

[0036] 图2示出比较化合物1至4及本发明化合物1-1的PL结果。

[0037] 图3示出化合物1-1的¹HNMR结果。

[0038] 图4示出化合物1-1的¹³CNMR结果。

具体实施方式

[0039] 以下,参照附图对本发明的实施例进行详细说明。在对本发明进行说明的过程中,在判断相关的公知结构或功能的具体说明会模糊本发明的要旨的情况下,将省略详细说明。

[0040] 并且,在说明本发明的结构要素的过程中,可使用第一、第二、A、B、(a)、(b)等术语。这种术语仅用于与其他结构要素相互区别,相关结构要素的本质、次序或顺序等不会因这种术语而受到限制。在一个结构要素与另一结构要素“连接”、“结合”或“联接”的情况下,其结构要素既可以与另一结构要素直接连接或联接,但也可以理解为在各结构要素之间“连接”、“结合”或“联接”有其他结构要素。

[0041] 如在本说明书及添加的保护范围中所进行的使用,只要没有标注不同的意思,以下术语的意义如下。

[0042] 在本说明书中所使用的术语“卤代”或“卤素”只要没有不同的说明,就是氟(F)、溴

(Br)、氯(Cl)或碘(I)。

[0043] 在本发明中所使用的术语“烷”或“烷基”，就具有1至60的碳数的单键，并意味着包含直链烷基、分子链烷基、环烷基(脂环族)、被烷取代的环烷基、被环烷基所取代的烷基的饱和脂肪族官能团的自由基。

[0044] 在本发明中所使用的术语“卤烷基”或“卤素烷基”，除非另行说明，否则表示被卤素所取代的烷基。

[0045] 在本发明中所使用的术语“杂烷基”表示构成烷基的碳原子中的至少一个被杂原子所替代。

[0046] 在本发明中所使用的术语“烯基”或“炔基”只要没有别的说明，就分别具有2至60的碳数的双键或三键，并包含直链型或侧链型链基，但并不局限于此。

[0047] 在本发明中所使用的术语“环烷基”只要没有其他说明，就意味着形成具有3至60的碳数的环的烷，但并不局限于此。

[0048] 在本发明中所使用的术语“烷氧基”、“烷氧”或“烷氧基”意味着附着有氧自由基的烷基，只要没有其他说明，就具有1至60的碳数，但并不局限于此。

[0049] 在本发明中所使用的术语“烯氧基(alkenoxy)”、“烯氧基(alkenoxy)”、“烯基氧基(alkenyloxy)”或“烯基氧基(alkenyloxy)”表示附着有氧自由基的炔基，除非另行说明，否则具有2至60的碳数，但不受此限定。

[0050] 在本发明中所使用的术语“芳氧基”或“芳氧”意味着附着有氧自由基的芳基，只要没有其他说明，就具有6至60的碳数，但并不局限于此。

[0051] 在本发明中所使用的术语“芳基”及“亚芳香基”只要没有别的说明，就分别具有6至60的碳数，但并不局限于此。在本发明中，芳基或亚芳香基意味着单环或多重环的芳香族，并包括相邻的取代基相结合或参与反应来形成的芳香族环。例如，芳基可以为苯基、联苯基、茚基、螺茚基及螺二茚基。

[0052] 前缀“芳”或“ar”意味着被芳基所取代的自由基。例如，芳基烷基为被芳基所取代的烷基，芳烯基为被芳基所取代的烯基，而被芳基所取代的自由基具有本说明书所述的碳数。

[0053] 并且，在前缀连续命名的情况下，意味着首先按所记载的顺序罗列取代基。例如，在芳烷氧基的情况下，意味着被芳基所取代的烷氧基，在烷氧羰基的情况下，意味着被烷氧基所取代的羰基，并且，在芳基烯基的情况下，意味着被芳基羰基所取代的烯基，其中，芳基羰基为被芳基所取代的羰基。

[0054] 在本发明中所使用的术语“杂烷基”，除非另行说明，否则表示包含至少一个杂原子的烷基。在本发明中所使用的术语“杂芳基”或“杂亚芳基”只要没有别的说明，就意味着分别包含至少一种的杂原子的碳数2至60的芳基或亚芳香基，但并不局限于此，可以包含单环及多环中的至少一种，并由相邻的官能团结合而成。

[0055] 在本发明中所使用的术语“杂环基”只要没有别的说明，就包含至少一种杂原子，具有2至60的碳数，包含单环及多环中的至少一种，并包含杂环脂肪族环及杂环芳香族环。可以由相邻的官能团结合而成。

[0056] 在本说明书中所使用的术语“杂原子”只要没有别的说明，就表示N、O、S、P或Si。

[0057] 并且，“杂环基”除了形成环的碳，还可以包括包含SO₂的环。例如，“杂环基”包括下

列化合物。

[0058]



[0059] 只要没有其他说明,在本发明中所使用的术语“脂肪族”意味着碳数1至60的脂肪烃,“脂肪族环”意味着碳数3至60的脂肪族碳氢化合物环。

[0060] 只要没有其他说明,在本发明中所使用的术语“环”意味着碳数3至60的脂肪族环或碳数6至60的芳香族环或碳数2至60的杂环或由它们的组合组成的稠环,并包含饱和或不饱和环。

[0061] 除了上述的杂环化合物之外,除此之外的其他杂环化合物或杂环基还包含至少一种杂原子,但并不局限于此。

[0062] 除非另行说明,在本发明中所使用的术语“羰基”由-COR'表示,在此情况下,R'为氢、碳素1至20的烷基、碳素6至30的芳基、碳素3至30的环烷基、碳素2至20的炔基、碳素2至20的炔基或它们的组合。

[0063] 除非另行说明,否则在本发明中所使用的术语“乙醚”由-R-O-R'表示,在此情况下,R或R'相互独立地分别为氢、碳素1至20的烷基、碳素6至30的芳基、碳素3至30的环烷基、碳素2至20的炔基、碳素2至20的炔基或它们的组合。

[0064] 并且,只要没有明确的说明,在本发明中所使用的术语“取代或非取代”中,“取代”意味着被选自由重氢、卤素、氨基、腈基、硝基、C₁-C₂₀的烷基、C₁-C₂₀的烷氧基、C₁-C₂₀的烷基胺、C₁-C₂₀的烷基噁吩、C₆-C₂₀的芳噁吩、C₂-C₂₀的烯基、C₂-C₂₀的炔基、C₃-C₂₀的环烷基、C₆-C₂₀的芳基、苄基、被重氢所取代的C₆-C₂₀的芳基、C₈-C₂₀的芳烯基、硅烷基、硼基、锆基及包含选自由O、N、S、Si及P组成的组的至少一种杂原子的C₂-C₂₀的杂环基组成的组的至少一种取代基所取代,但并不局限于这些取代基。

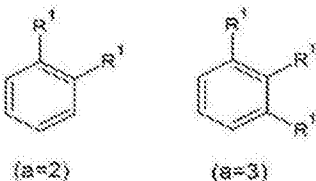
[0065] 并且,只要没有明确的说明,在本说明书中所使用的化学式能够以与以下化学式的指数定义的取代基的定义相同地适用。

[0066]



[0067] 其中,在a为0的整数的情况下,取代基R¹不存在,即,a为0的情况下,意味着形成苯环的碳均结合有氢,在此情况下可省略对于结合于碳的氢的表示,而记载化学式或化合物。并且,在a为1的整数的情况下,一个取代基R¹与用于形成苯环的碳中的一个碳相结合,在a为2或3的整数的情况下,分别以如下方式相结合,在a为4至6的整数的情况下,以类似的方式与苯环的碳相结合,a为2以上的整数的情况下,R¹可相互相同或相异。

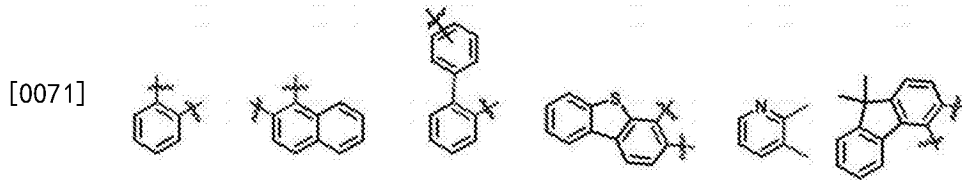
[0068]



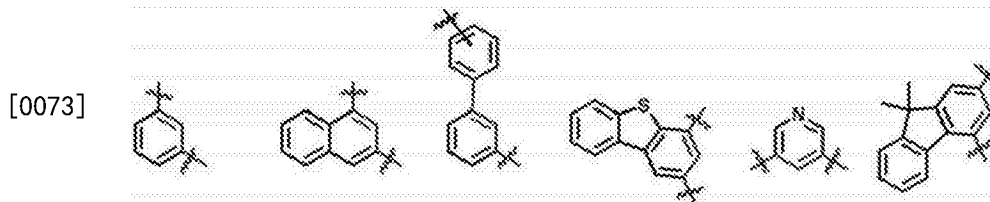
[0069] 另外,若没有明示性的说明,在本发明中所使用的术语“邻位(ortho)”、“间位(meta)”、“对位(para)”意味着所有取代基的取代位置,邻位(ortho)表示取代基的位置直

接相邻的化合物,作为一例在苯的情况下,则意味着1,2位置,间位 (meta) 表示紧相邻的取代位置的下一个取代位置,若以苯作为例示,则意味着1,3位置,对位 (para) 作为间位 (meta) 的下一个取代位置,若以苯作为例示,则意味着1,4位置。对于详细的取代位置的例子的说明如下,且可确认到邻位- (ortho-)、间位- (meta-) 以非线性的型,对位- (para-) 以线性的型被进行取代。

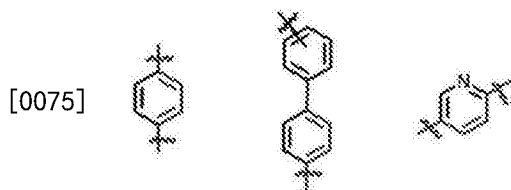
[0070] [邻位-位置的例示]



[0072] [间位-位置的例示]



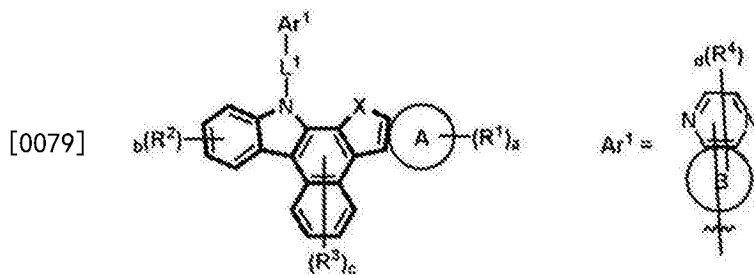
[0074] [间位-位置的例示]



[0076] 以下,对根据本发明的一侧面的化合物及包括其的有机电气元件进行说明。

[0077] 本发明提供以下述化学式 (1) 表示的化合物。

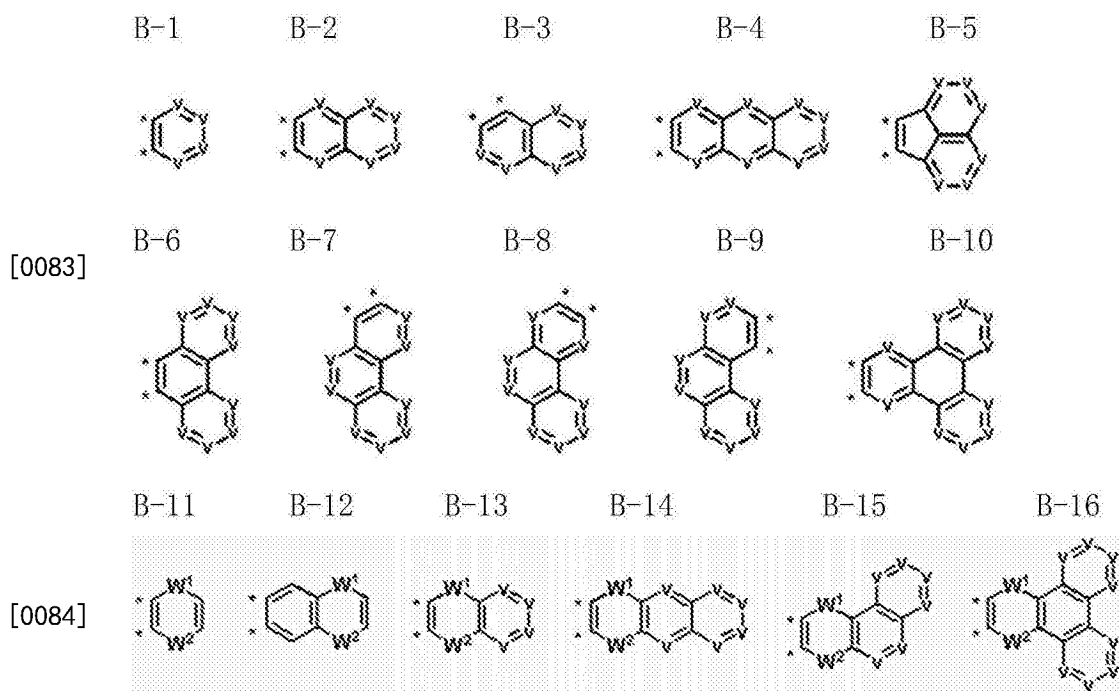
[0078] 化学式 (1)



[0080] {在上述化学式 (1) 中,

[0081] 1) A为C₁₀的芳基,

[0082] 2) B为选自由以下化学式B-1至B-16组成的组,



[0085] 上述化学式B-1至B-16中的“*”表示与包含2个N的吡嗪(pyrazine)环相结合从而形成稠环的结合部分,

[0086] 3) W^1 及 W^2 分别独立地为单键、S或O,

[0087] 4) V为N或C,

[0088] 5) X为O或S,

[0089] 6) a为0至6的整数,b及c为0至4的整数,d为0至11的整数,

[0090] 7) R^1 、 R^2 、 R^3 及 R^4 相互相同或相异,相互独立地选自自由氢;重氢;卤素;氰基;硝基; C_6 - C_{60} 的芳基;苄基;含有选自O、N、S、Si和P中至少一种杂原子的 C_2 - C_{60} 的杂环基; C_3 - C_{60} 的脂肪族环和 C_6 - C_{60} 的芳香族环的稠环基; C_1 - C_{50} 的烷基; C_2 - C_{20} 的烯基; C_2 - C_{20} 的炔基; C_1 - C_{30} 的烷氧基; C_6 - C_{30} 的芳氧基;以及 $-L'-N(R^a)(R^b)$;组成的组,

[0091] R^1 至 R^4 为芳基时,优选地为 C_6 - C_{30} 的芳基,更为优选地可以为 C_6 - C_{18} 的芳基。 R^1 至 R^4 为杂环基时,优选地为 C_2 - C_{40} 的杂环基,更为优选地可为 C_2 - C_{30} 的杂环基,更为优选地可为 C_2 - C_{20} 的杂环基。

[0092] 而且,上述a、b及c为2以上的情况下,分别作为复数相互相同或相异,多个 R^1 之间或多个 R^2 之间或多个 R^3 之间可相互结合而形成环。

[0093] 8) L' 为选自自由单键; C_6 - C_{60} 的亚芳基;亚苄基; C_3 - C_{60} 的脂肪族环和 C_6 - C_{60} 的芳香族环的稠环基;以及 C_2 - C_{60} 的杂环基;组成的组,在上述 R^a 及 R^b 相互独立地选自自由 C_6 - C_{60} 的芳基;苄基; C_3 - C_{60} 的脂肪族环和 C_6 - C_{60} 的芳香族环的稠环基;以及含有选自O、N、S、Si和P中至少一种杂原子的 C_2 - C_{60} 的杂环基;组成的组,

[0094] 9) L^1 分别相互独立地选自自由单键; C_6 - C_{60} 的亚芳基;亚苄基; C_3 - C_{60} 的脂肪族环和 C_6 - C_{60} 的芳香族环的稠环基;以及 C_2 - C_{60} 的杂环基;组成的组,

[0095] 其中,上述芳基、苄基、亚芳基、杂环基、稠环基、烷氧基、烯基、炔基、烷氧基、芳氧基能够分别被选自自由重氢;卤素;被 C_1 - C_{20} 烷基或 C_6 - C_{20} 芳基取代或未取代的硅烷基;硅氧烷基;硼基;锆基;氰基;硝基; $-L'-N(R^a)(R^b)$; C_1 - C_{20} 的烷硫基; C_1 - C_{20} 的烷氧基; C_1 - C_{20} 的烷基; C_2 - C_{20}

的烯基;C₂-C₂₀的炔基;C₆-C₂₀的芳基;被重氢取代的C₆-C₂₀的芳基;苄基;C₂-C₂₀的杂环基;C₃-C₂₀的环烷基;C₇-C₂₀的芳烷基;以及C₈-C₂₀的芳烯基;组成的组中的一种以上取代基所取代,而且,这些取代基可相互结合形成环,其中‘环’是指碳数为3至60的脂肪族环或碳数为6至60的芳香族环或碳数为2至60的杂环或由它们组合而成的稠环,并包含饱和或不饱和环。}

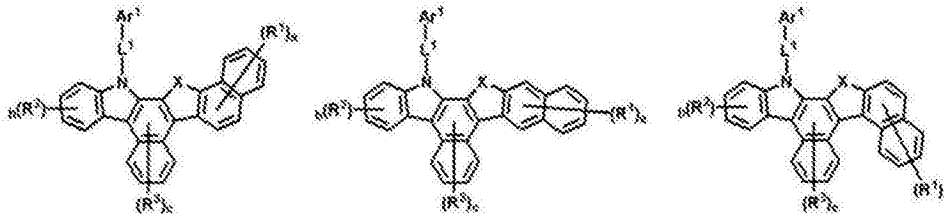
[0096] 在本发明中,上述化学式(1)包括化合物,其中上述化合物的特征在于,其以下述化学式2至化学式4中的任意一种来进行表示。

<化学式2>

<化学式3>

<化学式4>

[0097]



[0098] 在上述化学式2至化学式4中,X、L¹、Ar¹、R¹、R²、R³、a、b、c被定义成与在上述中的定义相同。

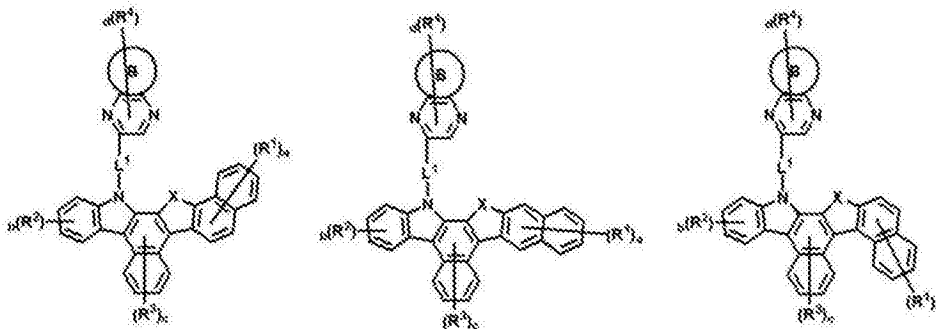
[0099] 而且,在本发明中,上述化学式(1)包括化合物,其中上述化合物的特征在于,其以下述化学式5至化学式7中的任意一种来进行表示。

<化学式5>

<化学式6>

<化学式7>

[0100]



[0101] 在上述化学式5至化学式7中,X、L¹、Ar¹、R¹、R²、R³、R⁴、a、b、c、d、B被定义成与在上述中的定义相同。

[0102] 在本发明的一实施例中,包括上述化学式(1)的上述吡嗪(pyrazine)的化学式结构Ar¹提供以下述化学式C-1至化学式C-20表示的化合物。

C-1

C-2

C-3

C-4

C-5

C-6

[0103]



C-7

C-8

C-9

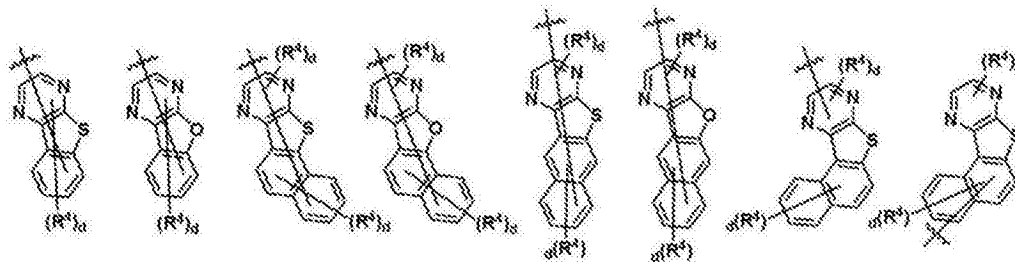
C-10

C-11

C-12

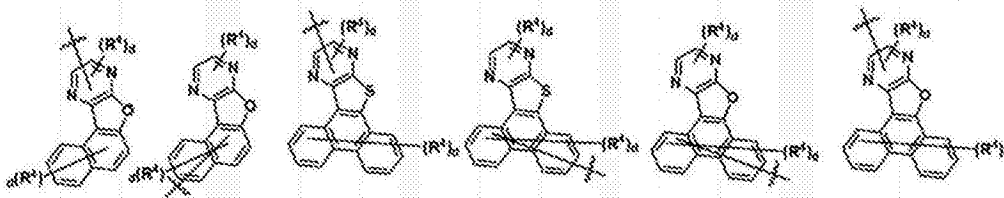
C-13

C-14

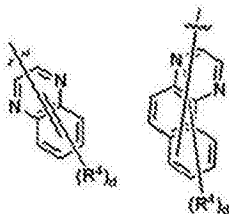


C-15 C-16 C-17 C-18 C-19 C-20

[0104]



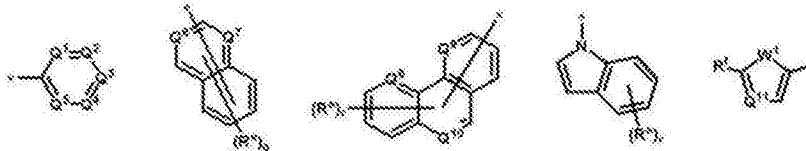
C-21 C-22



[0105] 在上述化学式C-1至C-22中, R⁴被定义成与在上述中的定义相同, d为0至11的整数中的任意一个。

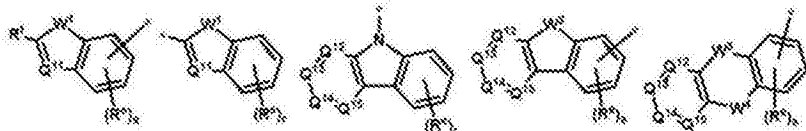
[0106] 本发明包括在上述化学式(1)中, R⁴以下述化学式R-1至R-10中的任意一种表示的化合物。

<R-1> <R-2> <R-3> <R-4> <R-5>



[0107]

<R-6> <R-7> <R-8> <R-9> <R-10>



[0108] 在上述化学式R-1至R-10中,

[0109] 1) Q¹至Q¹⁵相互独立地选自由CR^g或N,

[0110] 2) W¹为S、O或NR^h,

[0111] 3) W²至W⁴为S、O、NR^h或CRⁱR^j,

[0112] 4) R^e为选自自由氢;重氢;卤素;被C₁-C₂₀烷基或C₆-C₂₀芳基取代或未取代的硅烷基;硅氧烷基;硼基;锆基;氰基;硝基;C₁-C₂₀的烷硫基;C₁-C₂₀的烷氧基;C₁-C₂₀的烷基;C₂-C₂₀的烯基;C₂-C₂₀的炔基;C₆-C₂₀的芳基;被重氢取代的C₆-C₂₀的芳基;苄基;含有选自O、N、S、Si和P

中至少一种杂原子的C₂-C₂₀的杂环基;C₃-C₂₀的环烷基;C₇-C₂₀的芳烷基;以及C₈-C₂₀的芳烯基;组成的组,或者由相邻的基之间能够相互结合而形成环,

[0113] 5) R^f及R^g相互独立地选自由氢;重氢;C₆-C₂₀的芳基;苄基;C₃-C₂₀的脂肪族环和C₆-C₂₀的芳香族环的稠环基;含有选自O、N、S、Si和P中至少一种杂原子的C₂-C₂₀的杂环基;C₁-C₂₀的烷基;C₂-C₂₀的烯基;C₂-C₂₀的炔基;以及C₁-C₃₀的烷氧;组成的组,

[0114] 6) R^h, Rⁱ及R^j相互独立地选自由C₆-C₂₀的芳基;含有选自O、N、S、Si和P中至少一种杂原子的C₂-C₂₀的杂环基;C₁-C₂₀的烷基;C₂-C₂₀的烯基;C₁-C₃₀的烷氧;以及苄基;组成的组, Rⁱ及R^j相互结合,从而可与其相结合的C一并形成螺环(spiro)化合物,

[0115] 7) q相互独立地为0至5的整数,

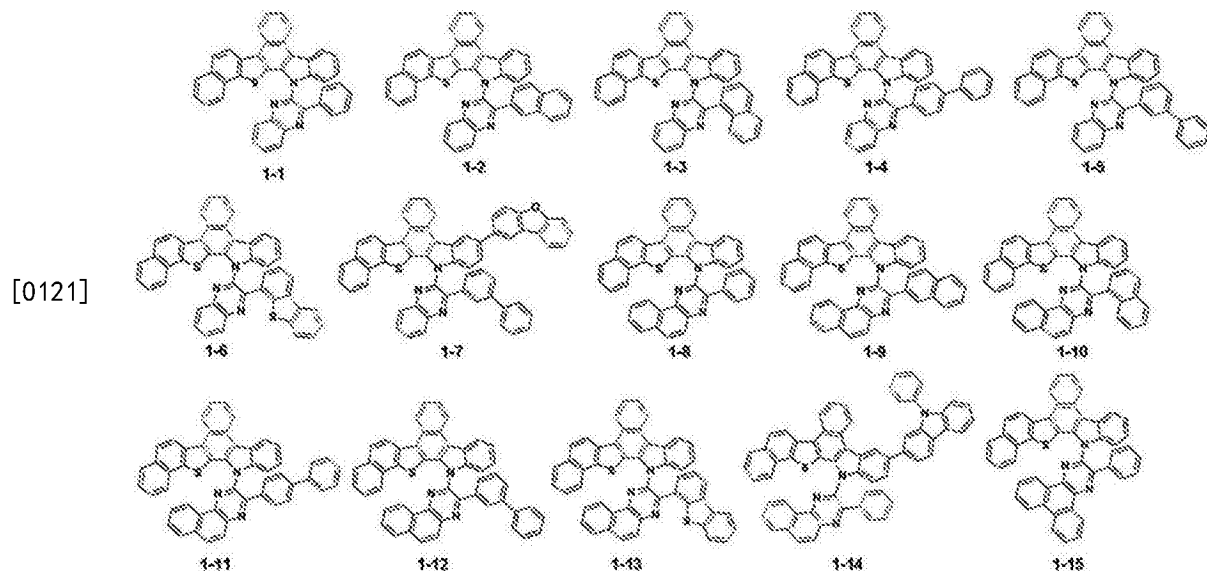
[0116] 8) r相互独立地为0至4的整数,

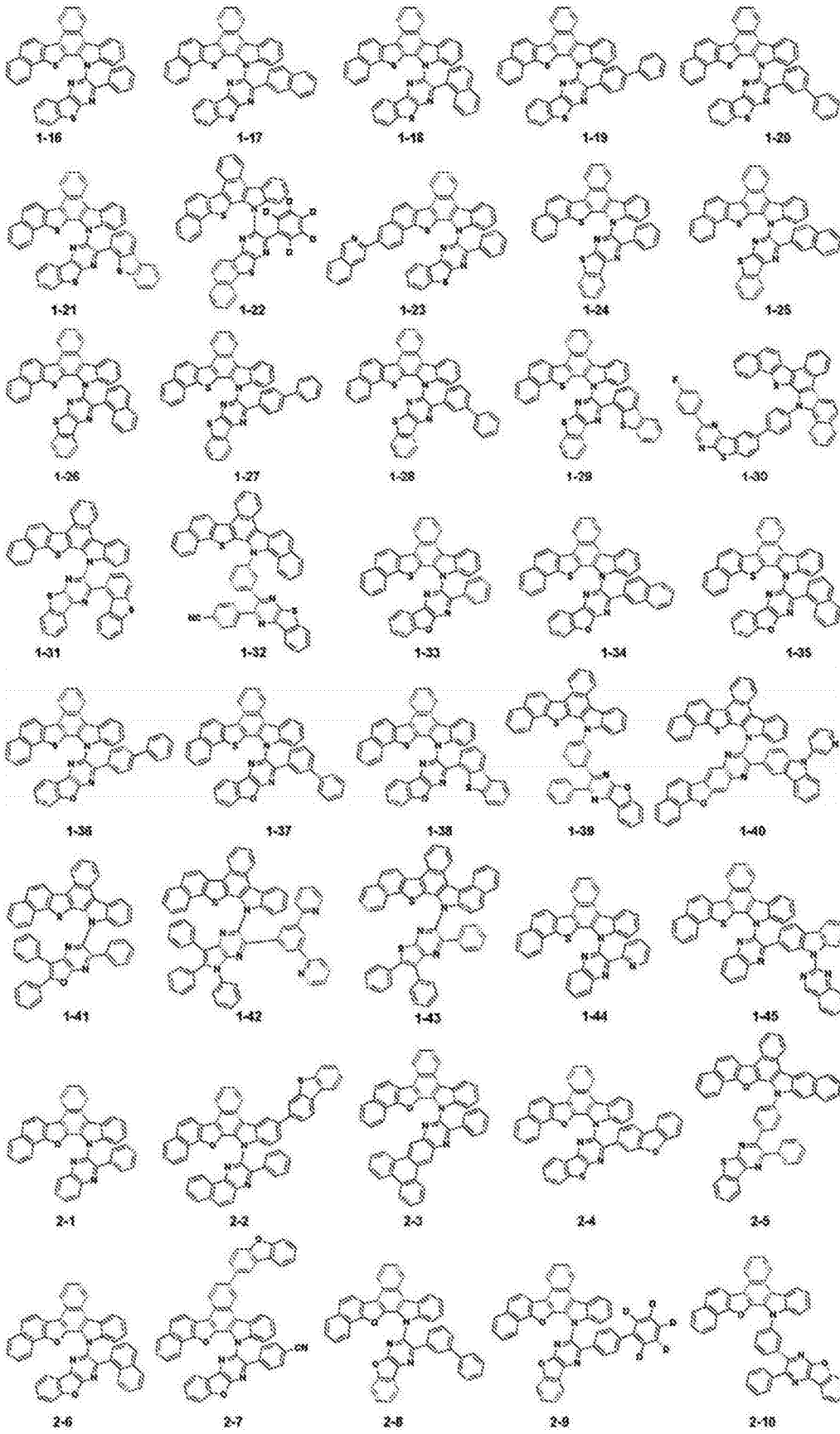
[0117] 9) s相互独立地为0至3的整数,

[0118] q、r及s分别为2以上的整数的情况下, R^e相互相同或相异,*表示结合部分。

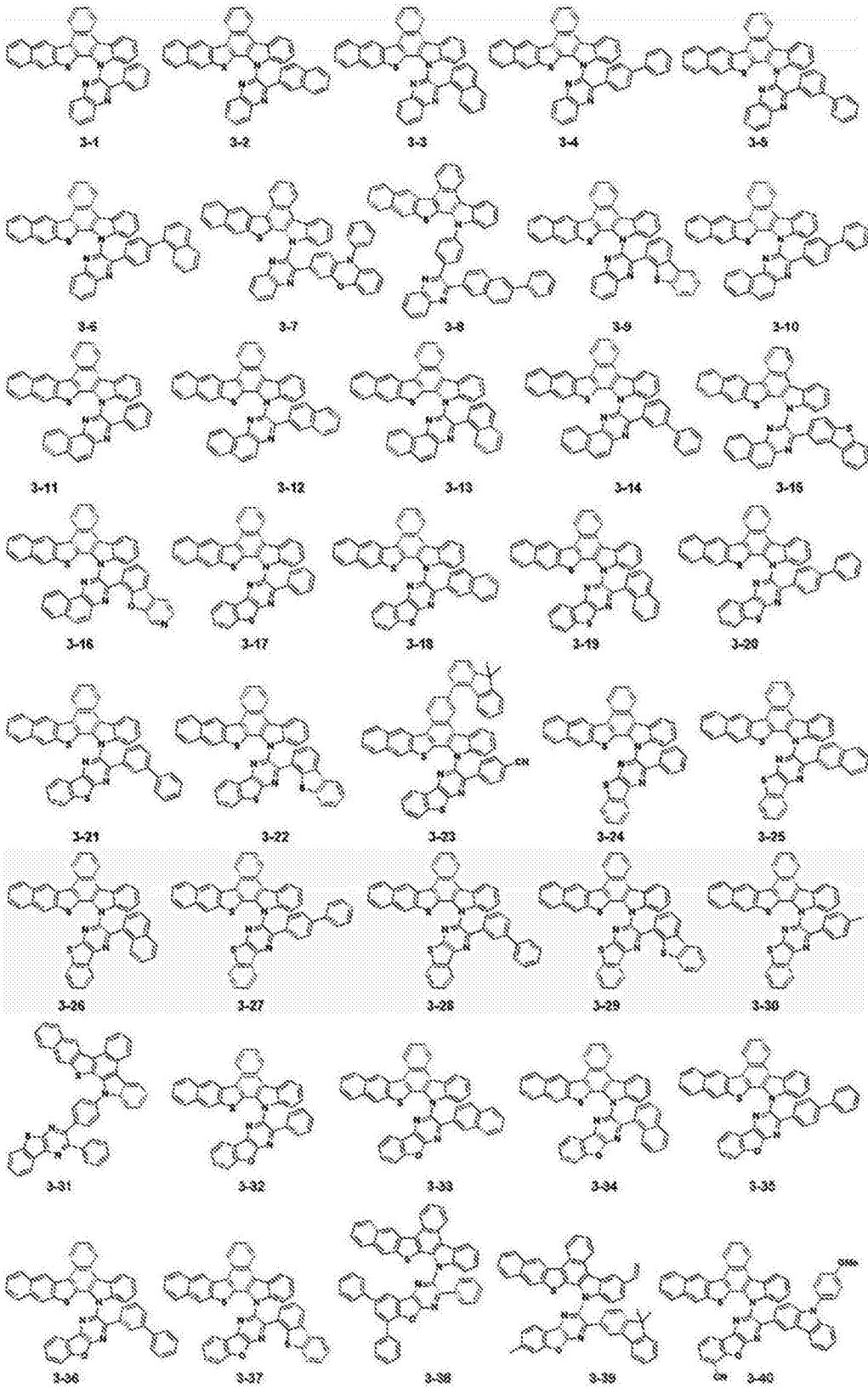
[0119] 上述R^e至R^j为芳基时,优选地为C₆-C₃₀的芳基,更为优选地可以为C₆-C₁₈的芳基, R^e至R^j为杂环基时,优选地为C₂-C₄₀的杂环基,更为优选地可为C₂-C₃₀的杂环基,更为优选地可为C₂-C₂₀的杂环基。

[0120] 具体地本发明的以上述化学式(1)表示的化合物包含下述化合物。

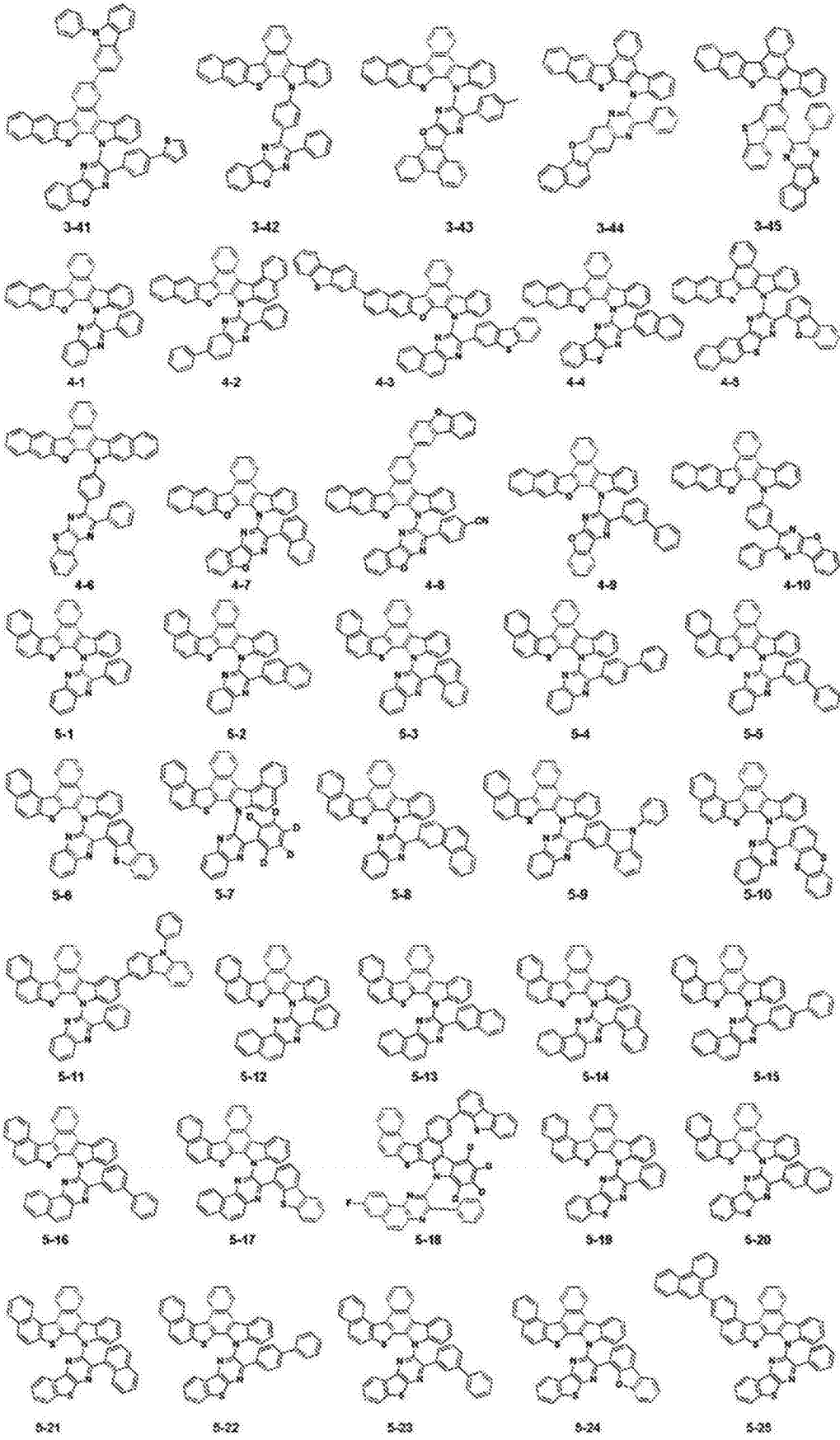




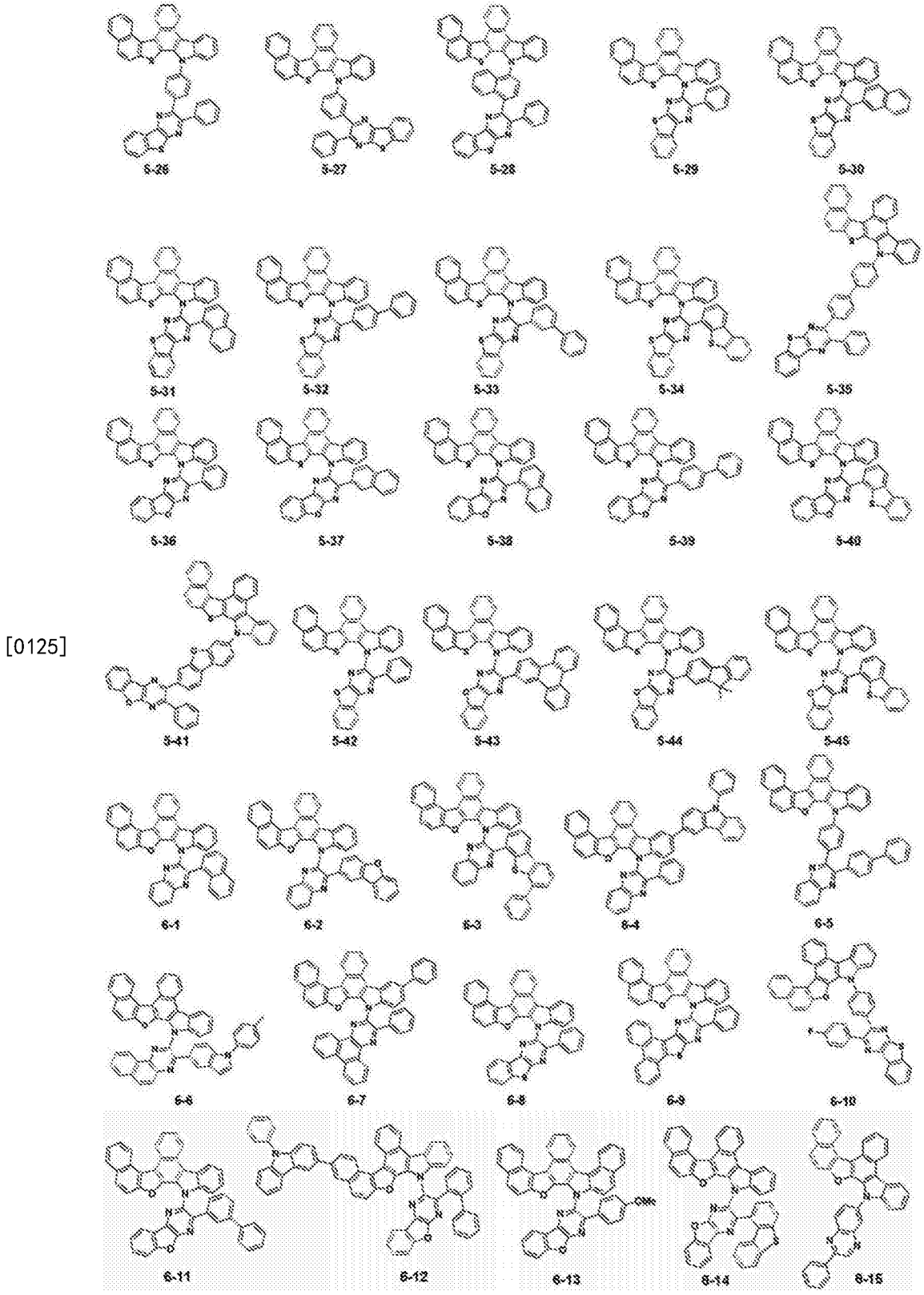
[0122]



[0123]



[0124]



[0126] 参照图1,本发明的一实施例的有机电气元件100包括:第一电极120、第二电极180、以及有机物层,形成于基板110上,有机物层在第一电极120和第二电极180之间包含化学式(1)表示的化合物。此时,第一电极120可以为阳极,第二电极180可以为阴极,在倒置型的情况下,第一电极可以为阴极,第二电极可以为阳极。

[0127] 有机物层可在第一电极120上依次包括空穴注入层130、空穴输送层140、发光层

150、电子输送层160及电子注入层170。此时,除了发光层150之外,剩余的层可以无需形成。还可以包括空穴阻挡层、电子阻挡层、发光辅助层151、电子输送辅助层、缓冲层141等,也可以由电子输送层160等执行空穴阻挡层的作用。

[0128] 并且,虽未图示,但本发明的一实施例的有机电气元件还可以包括形成于第一电极和第二电极中的至少一面中与上述有机物层相反的一面的保护层或光效率改善层。

[0129] 此外,即使是相同的母核,根据哪个位置上哪个取代基被键合,带隙 (band gap)、电气特性、界面特性等可能会有所不同,因此需要对核的选择以及与其键合的子(sub)取代体的组合进行研究,特别是,当各有机物层之间的能级和T1值,物质的固有特性(迁移率,界面特性等)实现最佳组合时,可以同时实现长寿命和高效率。

[0130] 本发明的一实施例的有机电致发光元件,可利用物理气相沉积 (physical vapor deposition) 方法来制备。例如,在基板上沉积金属或具有导电性的金属氧化物或它们的合金来形成阳极,在上述阳极的上部形成包含空穴注入层130、空穴输送层140、发光层150、电子输送层160及电子注入层170的有机物层后,在上述有机物层的上部沉积可用作阴极的物质来完成制备。

[0131] 并且,可在空穴输送层140与发光层150之间还形成有发光辅助层151,可在上述发光层150与电子输送层160之间还形成有电子输送辅助层。

[0132] 据此,本发明提供还包括光效率改善层的有机电气元件,在上述有机电气元件中,上述光效率改善层形成在上述第一电极的一侧面中的与上述有机物层相反的一侧或上述第二电极的一侧面中的与上述有机物层相反的一侧中的至少一个。

[0133] 并且,在本发明中,上述有机物层借助旋涂工序、喷嘴印刷工序、喷墨打印工序、狭缝涂布工序、浸涂工序、及卷对卷工序中的任意一种而形成,由于本发明的有机物层能够由多种方法形成,因此,本发明的保护范围不会因形成方法而受到限制。

[0134] 在本发明中上述化学式(1)的化合物包含于上述有机物层,空穴注入层、空穴输送层、发光辅助层及发光层中的至少一个层,上述化合物包含一种单独的化合物或作为混合物的成分包含两种以上的化合物。

[0135] 作为又一具体实施例,本发明提供在上述有机物层中上述发光层为磷光发光层的有机电气元件。例如,本发明的化合物可以用作发光层150,空穴输送层140和/或发光辅助层151,优选地为,发光层150的主体材料。更优选地,本发明的化合物可以用作磷光红色的主体的材料。

[0136] 本发明的一实施例的有机电气元件可根据所使用的材料分为前面发光型、后面发光型或双面发光型。

[0137] 白色有机发光二极管WOLED (White Organic Light Emitting Device) 既具有容易实现高分辨率,且工序性优秀的优点,又具有能够利用以往的液晶显示器 (LCD) 的彩色滤色器技术来制备的优点。正提出主要用于背光装置白色有机发光元件的多种结构,并实现专利化。代表性的有,以相互平面方式并列配置 (side-by-side) R (Red)、G (Green)、B (Blue) 发光部的方式;R、G、B发光层上下层叠的层叠 (stacking) 方式;利用经蓝色 (B) 有机发光层的电致发光和由此产生的光从而利用无机荧光体的光致发光 (photo-luminescence) 的色转换物质 (color conversion material, CCM) 方式等,本发明可适用于这种WOLED。

[0138] 另外,本发明提供包括显示装置及控制部的电子装置,上述显示装置包括上述有机电气元件,上述控制部驱动上述显示装置。

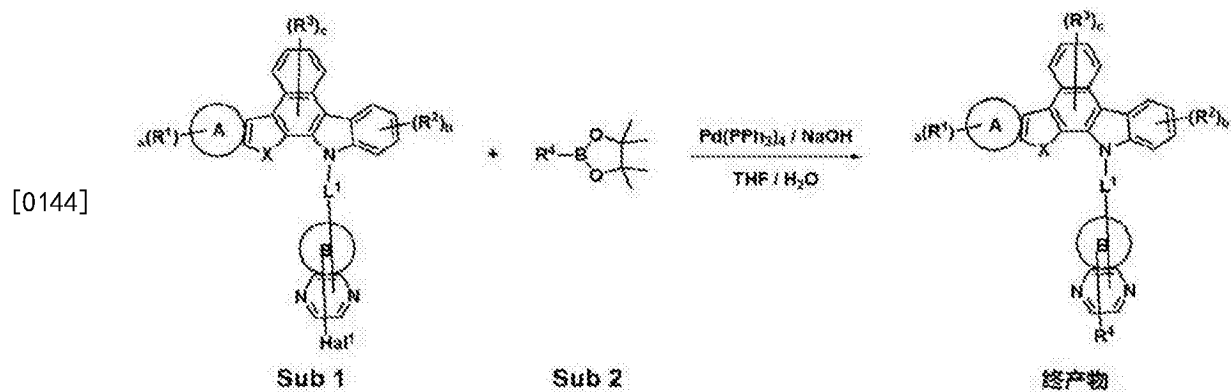
[0139] 在另一侧面,本发明提供电子装置,上述电子装置的特征在于,上述有机电气元件为有机电致发光元件、有机太阳能电池、有机感光体、有机晶体管、及单色或白色照明用元件中的至少一种。此时,电子装置可以为当前或未来的有无线通信终端,并包括手机等移动通信终端、PDA、电子词典、PMP、遥控器、导航仪、游戏机、各种TV、各种计算机等所有电子装置。

[0140] 以下,举出实施例来对本发明的上述以化学式(1)、(2)表示的化合物的合成例及本发明的有机电气元件的制备例进行具体说明,但本发明并不局限于以下的实施例。

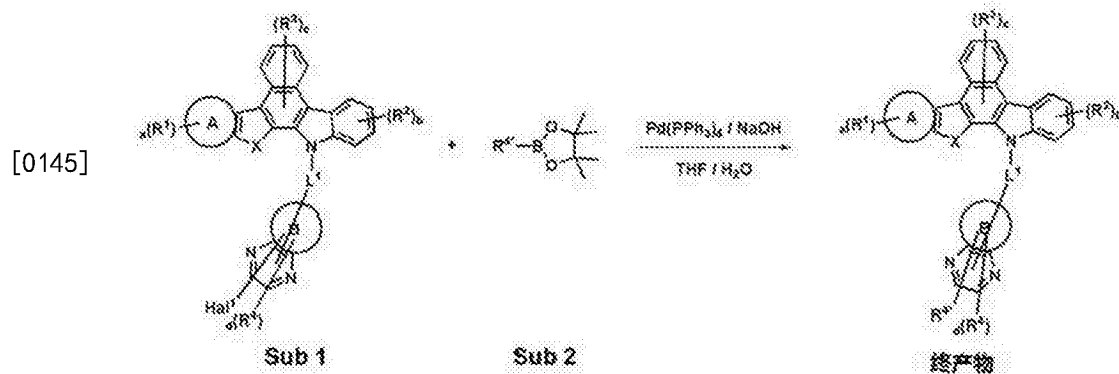
[0141] 合成例

[0142] 本发明的化合物(final products)如以下方式进行反应而制备,但不受此限定。

[0143] <反应式1>



或者



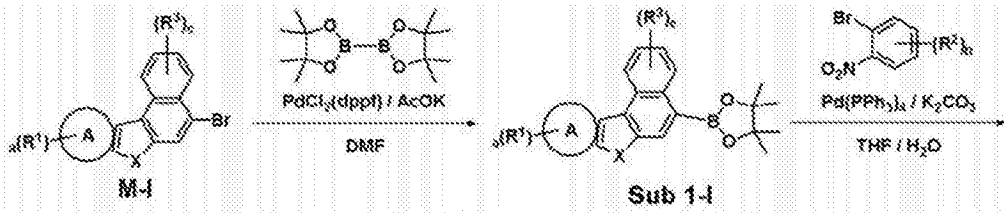
[0146] Hal¹=Cl, Br

[0147] R^{4'} 为与上述R⁴的定义相同,意指与R⁴相同或相异的取代基

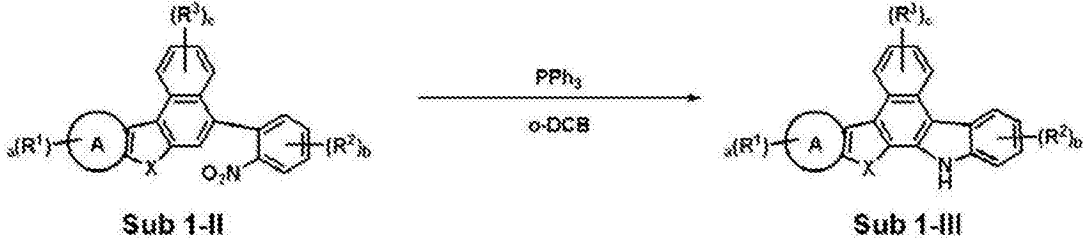
[0148] I. Sub1的合成

[0149] 反应式1的Sub1可通过以下反应式2及反应式3的反应途径来合成,但并不局限于此。

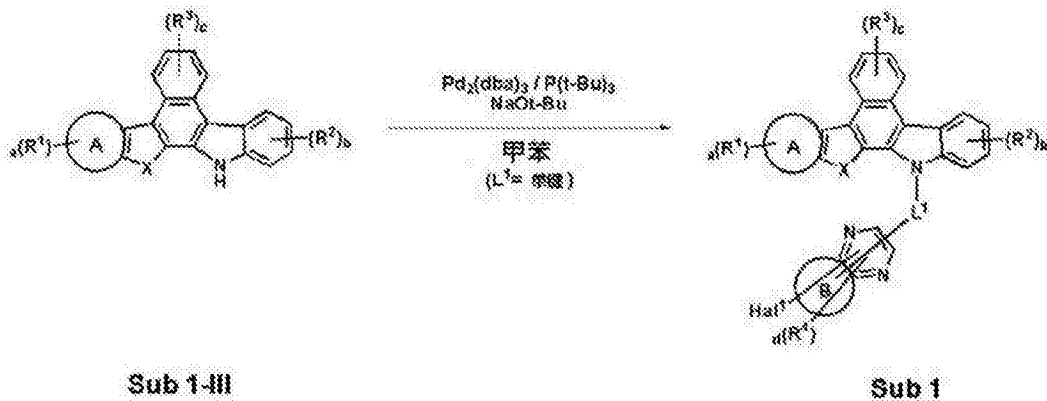
[0150] <反应式2>



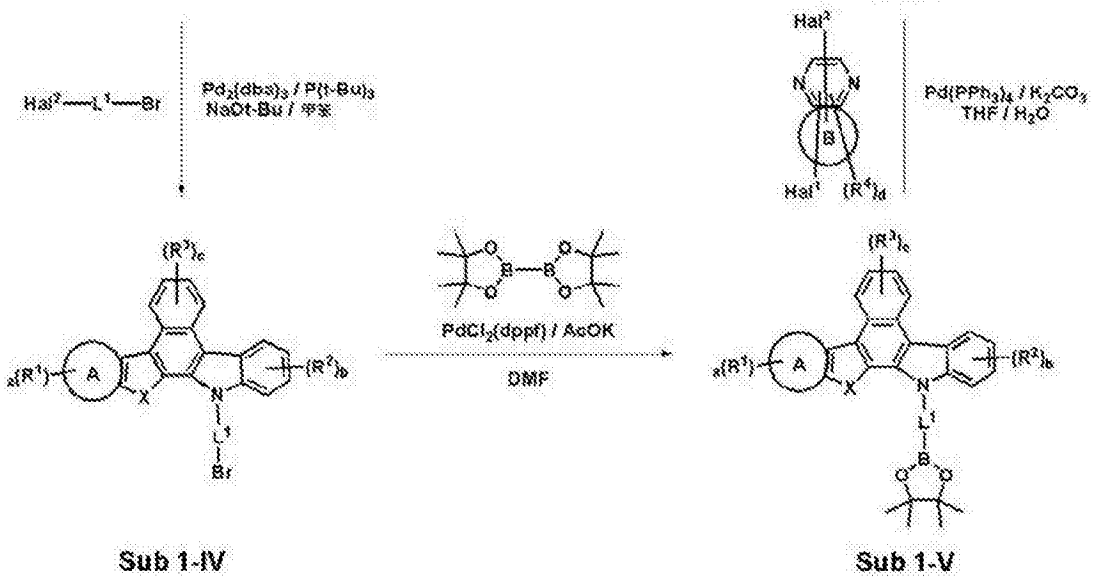
[0151]



[0152] <反应式3>



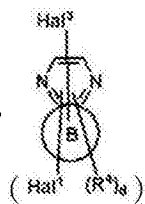
[0153]



[0154] Hal² = I, Br

[0155] Hal¹, Hal³ = Cl, Br

[0156] 在上述反应式1中,

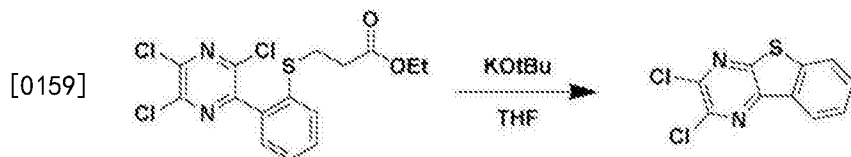


的反应物的情况下,参照如同下述的4个文献来进行

合成。

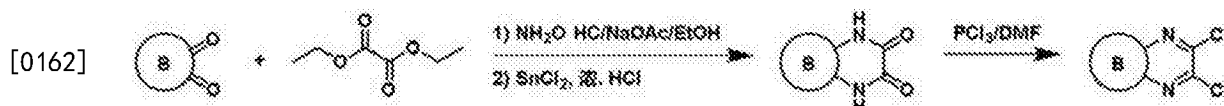
[0157] 1) 使用了由株式会社斗山申请的韩国授权专利第10-1488560号(2015年02月03日授权公告)中公开的合成方法。(参照反应式A)

[0158] <反应式A>



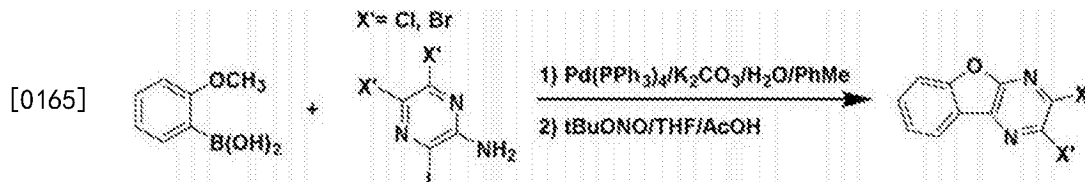
[0160] 2) 使用了由BASF申请的国际公开专利PCT-EP2015-068240号(最优先申请日2014年08月08日)中公开的合成方法。<参照反应式B>

[0161] <反应式B>



[0163] 3) 使用了由苏州大学(Soochow University)申请的中国公开专利第2016-10316704号(申请日2016年05月13日)中公开的合成方法。<参照反应式C>

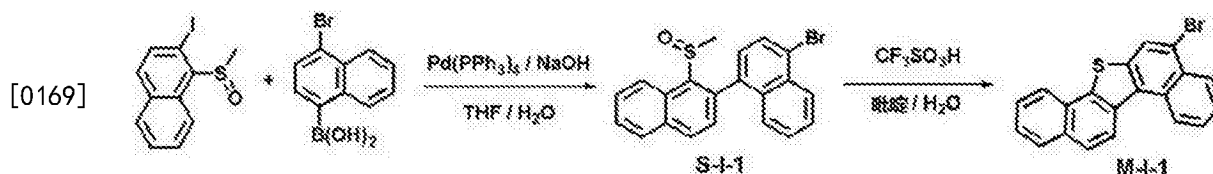
[0164] <反应式C>



[0166] 4) 使用了由LG Display株式会社申请的韩国公开专利第2015-0130953号(最优先申请日2014年12月05日)中公开的合成方法。<参照化合物6的合成>

[0167] 属于Sub1的化合物的合成例如下。

[0168] 1. M-I-1的合成



[0170] 1) S-I-1的合成

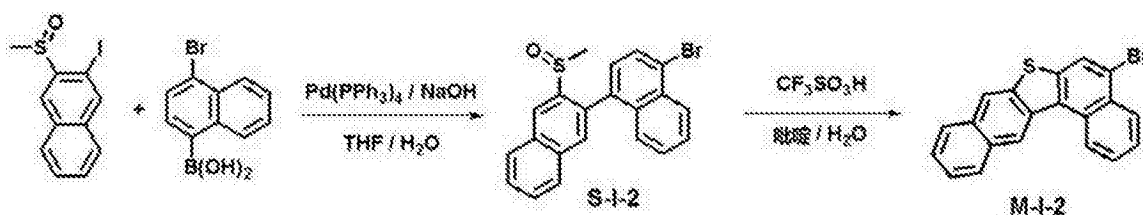
[0171] 将(4-溴萘-1-基)硼酸(28g, 111.6mmol)在圆底烧瓶中以THF(491ml)溶解后,添加2-碘-1-(甲基亚磺酰基)萘(35.28g, 111.6mmol)、Pd(PPh₃)₄(1.93g, 1.67mmol)、NaOH(6.70g, 167.40mmol)、水(246ml),在80℃下进行搅拌。反应完成后,以CH₂Cl₂和水萃取后,将有机层以MgSO₄干燥及浓缩,然后将所生成的化合物通过硅胶柱之后进行重结晶,从而获得生成物30g(收率:68%)。

[0172] 2) M-I-1的合成

[0173] 将在上述合成中获得的S-I-1(30g, 75.89mmol)与三氟甲磺酸(100.7ml, 1138.35mmol)一起添加到圆底烧瓶,并在室温下搅拌24小时之后,慢慢滴加吡啶水溶液(1329ml, 吡啶:H₂O=1:5),回流搅拌了30分钟。反应完成后,以CH₂Cl₂和水萃取后,将有机层以MgSO₄干燥及浓缩,然后将所生成的化合物通过硅胶柱之后进行重结晶,从而获得生成物21.8g(收率:79%)。

[0174] 2) M-I-2的合成

[0175]



[0176] 1) S-I-2的合成

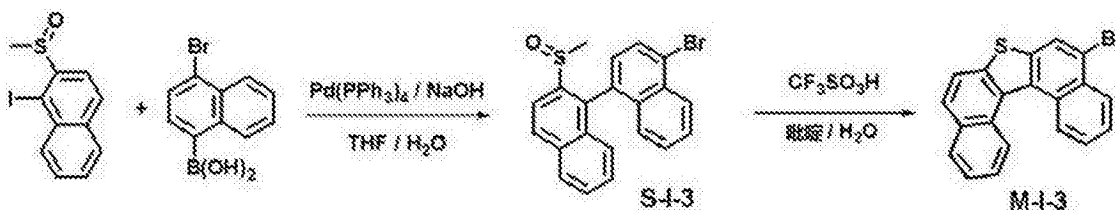
[0177] 将(4-溴萘-1-基)硼酸(29g, 115.59mmol)、THF(509ml)、2-碘-3-(甲基亚磺酰基)萘(36.54g, 115.59mmol)、Pd(PPh₃)₄(2g, 1.73mmol)、NaOH(6.94g, 173.38mmol)、水(254ml), 以与上述S-I-1的合成方法相同的方法来进行合成, 从而获得生成物30.16g(收率:66%)。

[0178] 2) M-I-2的合成

[0179] 将上述合成中获得的S-I-2(30g, 75.89mmol)、三氟甲磺酸(100.7ml, 1138.35mmol)、吡啶水溶液(1329.6ml, 吡啶:H₂O=1:5), 以与上述M-I-1的合成方法相同的方法来进行合成, 从而获得生成物20.1g(收率:73%)。

[0180] 3) M-I-3的合成

[0181]



[0182] 1) S-I-3的合成

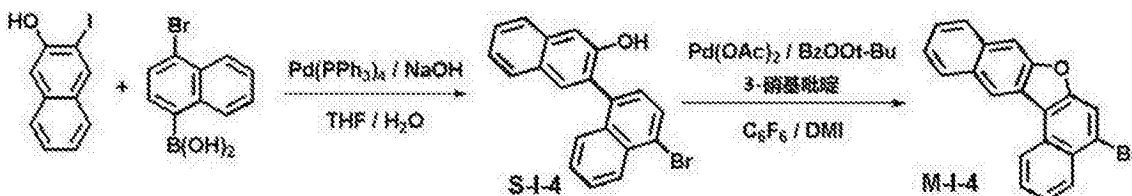
[0183] 将(4-溴萘-1-基)硼酸(31g, 123.56mmol)、THF(543ml)、1-碘-2-(甲基亚磺酰基)萘(31g, 123.56mmol)、Pd(PPh₃)₄(2.14g, 1.85mmol)、NaOH(7.41g, 185.34mmol)、水(272ml), 以与上述S-I-1的合成方法相同的方法来进行合成, 从而获得生成物30.77g(收率:63%)。

[0184] 2) M-I-3的合成

[0185] 将上述合成中获得的S-I-3(30g, 75.89mmol)、三氟甲磺酸(100.7ml, 1138.35mmol)、吡啶水溶液(1329.6ml, 吡啶:H₂O=1:5), 以与上述M-I-1的合成方法相同的方法来进行合成, 从而获得生成物20.7g(收率:75%)。

[0186] 4) M-I-4的合成

[0187]



[0188] 1) S-I-4的合成

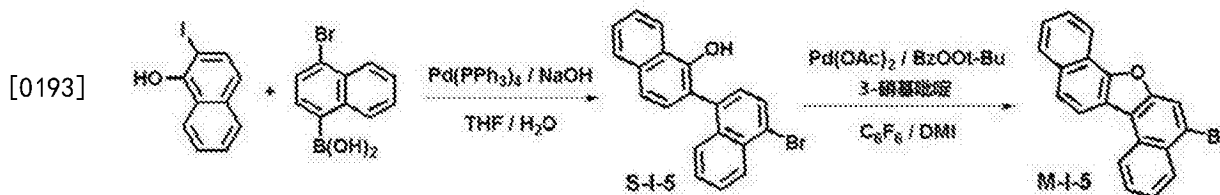
[0189] 将(4-溴萘-1-基)硼酸(34g, 135.52mmol)、THF(596ml)、3-碘萘-2-酚(36.60g, 135.52mmol)、Pd(PPh₃)₄(2.35g, 2.03mmol)、NaOH(8.13g, 203.28mmol)、水(298ml), 以与上

述S-I-1的合成方法相同的方法来进行合成,从而获得生成物30.29g(收率:64%)。

[0190] 2) M-I-4的合成

[0191] 将起始物质S-I-1(30g,85.90mmol)与Pd(OAc)₂(1.93g,8.59mmol)、3-硝基吡啶(1.07g,8.59mmol)一起添加到圆底烧瓶,以C₆F₆(128.9ml)、DMI(85.9ml)溶解后,添加过氧化苯甲酸叔丁酯(33.37g,171.81mmol),在90℃下进行搅拌。反应完成后,以CH₂Cl₂和水萃取后,将有机层以MgSO₄干燥及浓缩,然后将所生成的化合物通过硅胶柱之后进行重结晶,从而获得生成物21.18g(收率:71%)。

[0192] 5) M-I-5的合成



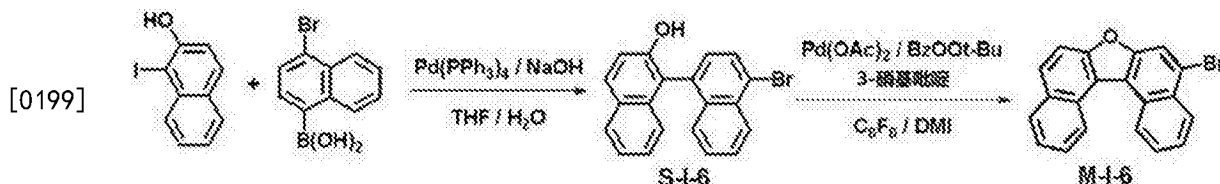
[0194] 1) S-I-5的合成

[0195] 将(4-溴萘-1-基)硼酸(35g,139.50mmol)、THF(614ml)、2-碘萘-1-酚(37.68g,139.50mmol)、Pd(PPh₃)₄(2.42g,2.09mmol)、NaOH(8.37g,209.26mmol)、水(307ml),以与上述S-I-1的合成方法相同的方法来进行合成,从而获得生成物30.21g(收率:62%)。

[0196] 2) M-I-5的合成

[0197] 将(S-I-5(30g,85.90mmol)、Pd(OAc)₂(1.93g,8.59mmol)、3-硝基吡啶(1.07g,8.59mmol)、C₆F₆(128.9ml)、DMI(85.9ml)、过氧化苯甲酸叔丁酯(33.37g,171.81mmol),以与上述M-I-4的合成方法相同的方法来进行合成,从而获得生成物22.07g(收率:74%)。

[0198] 6) M-I-6的合成



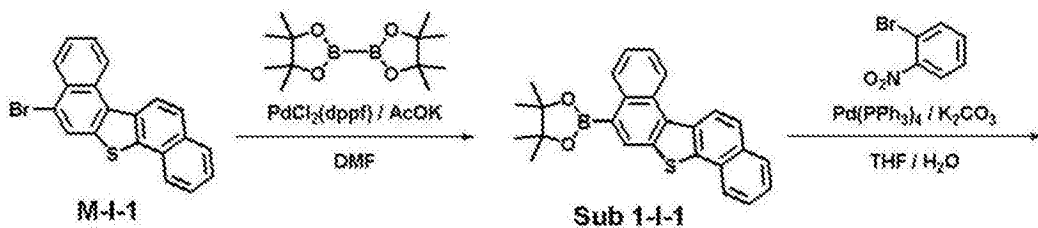
[0200] 1) S-I-6的合成

[0201] 将(4-溴萘-1-基)硼酸(35g,139.50mmol)、THF(614ml)、1-碘萘-2-酚(37.68g,139.50mmol)、Pd(PPh₃)₄(2.42g,2.09mmol)、NaOH(8.37g,209.26mmol)、水(307ml),以与上述S-I-1的合成方法相同的方法来进行合成,从而获得生成物31.67g(收率:65%)。

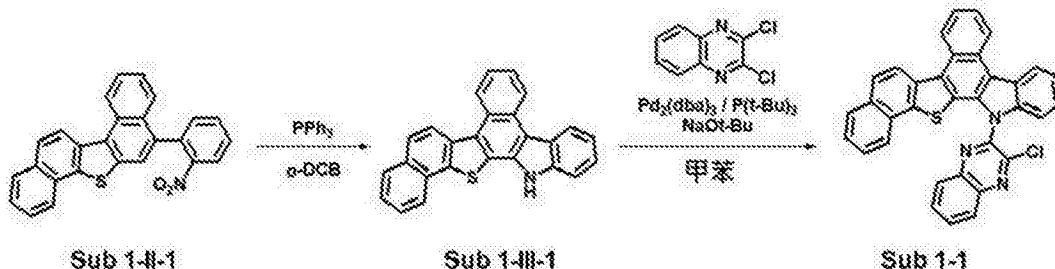
[0202] 2) M-I-6的合成

[0203] 将上述合成中获得的S-I-6(30g,85.90mmol)、Pd(OAc)₂(1.93g,8.59mmol)、3-硝基吡啶(1.07g,8.59mmol)、C₆F₆(128.9ml)、DMI(85.9ml)、过氧化苯甲酸叔丁酯(33.37g,171.81mmol),以与上述M-I-4的合成方法相同的方法来进行合成,从而获得生成物22.67g(收率:76%)。

[0204] 1.Sub1-1的合成例



[0205]



[0206] (1) Sub1-I-1的合成

[0207] 将起始物质M-I-1 (70g, 192.69mmol) 在圆底烧瓶中以DMF (1214ml) 溶解后, 添加双(频哪醇基)二硼 (53.83g, 211.96mmol)、Pd(dppf)Cl₂ (4.23g, 5.78mmol)、K₂OAc (56.73g, 578.08mmol), 在90℃下进行搅拌。反应完成后, 当反应结束时, 通过蒸馏来去除DMF, 以CH₂Cl₂和水萃取后。将有机层以MgSO₄干燥及浓缩, 然后将所生成的化合物通过硅胶柱之后进行重结晶, 从而获得生成物64.05g (收率: 81%)。

[0208] (2) Sub1-II-1的合成

[0209] 将在上述合成中获得的Sub1-I-1 (63.2g, 154.02mmol) 在圆底烧瓶中以THF (216ml) 溶解后, 添加1-溴-2-硝基苯 (34.22g, 169.42mmol)、Pd(PPh₃)₄ (4.23g, 4.62mmol)、K₂CO₃ (44.40g, 462.06mmol)、水 (108ml), 在80℃温度条件下进行搅拌。当反应结束时, 以CH₂Cl₂和水萃取后, 将有机层以MgSO₄干燥及浓缩, 然后将所生成的化合物通过硅胶柱之后进行重结晶, 从而获得生成物45.59g (收率: 73%)。

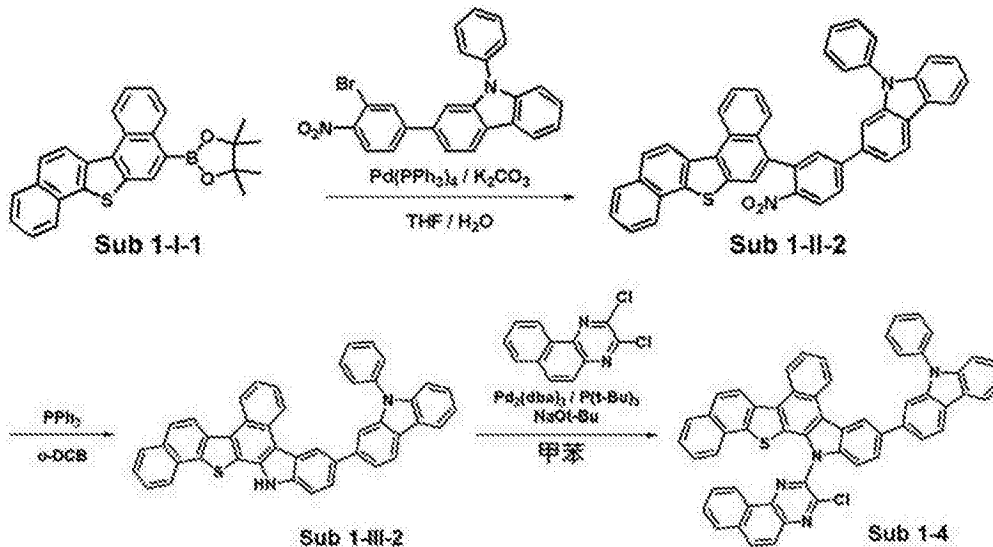
[0210] (3) Sub1-III-1的合成

[0211] 将在上述合成中获得的Sub1-II-1 (45.50, 112.22mmol) 在圆底烧瓶中以邻二氯苯 (o-dichlorobenzene) (224ml) 溶解后, 添加三苯基膦 (triphenylphosphine) (88.30g, 336.65mmol), 在200℃温度条件下进行搅拌。当反应结束时, 通过蒸馏来去除邻二氯苯 (o-dichlorobenzene), 以CH₂Cl₂和水萃取后。将有机层以MgSO₄干燥及浓缩, 然后将所生成的化合物通过硅胶柱之后进行重结晶, 从而获得生成物31.85g (收率: 76%)。

[0212] (4) Sub1-1的合成

[0213] 将在上述合成中获得的Sub1-III-1 (30g, 80.33mmol) 在圆底烧瓶中以甲苯 (843ml) 溶解后, 添加2,3-二氯喹啉 (15.99g, 80.33mmol)、Pd₂(dba)₃ (1.1g, 1.2mmol)、P(t-Bu)₃ (0.81g, 4.02mmol)、NaOt-Bu (11.58g, 120.49mmol), 在100℃温度条件下进行搅拌。当反应结束时, 以CH₂Cl₂和水萃取后, 将有机层以MgSO₄干燥及浓缩, 然后将所生成的化合物通过硅胶柱之后进行重结晶, 从而获得生成物17.65g (收率: 41%)。

[0214] 2.Sub1-4的合成例



[0215]

[0216] (1) Sub1-II-2的合成

[0217] 向在上述合成中获得的Sub1-I-1 (41g, 99.92mmol), 添加2-(3-溴-4-硝基苯基)-9-苯基-9H-吡唑 (44.29g, 99.92mmol)、Pd(PPh₃)₄ (3.46g, 3.00mmol)、K₂CO₃ (41.43g, 299.75mmol)、THF (440ml)、水 (220ml), 以与上述Sub1-II-1的合成方法相同的方法来进行合成, 从而获得生成物47.82g (收率: 74%)。

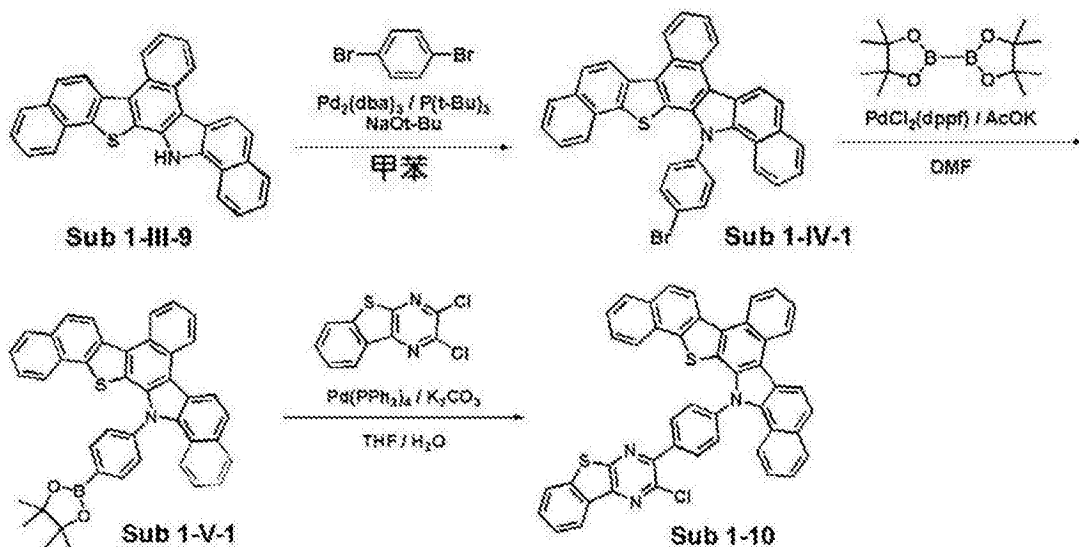
[0218] (2) Sub1-III-2的合成

[0219] 向在上述合成中获得的Sub1-II-2 (47g, 72.67mmol), 添加三苯基膦 (57.18g, 218.01mmol)、邻二氯苯 (145ml), 以与上述Sub1-III-1的合成方法相同的方法来进行合成, 从而获得生成物28.15g (收率: 63%)。

[0220] (3) Sub1-4的合成

[0221] 向在上述合成中获得的Sub1-III-2 (28g, 45.55mmol), 添加2,3-二氯苯并[f]喹喔啉 (12.48g, 50.10mmol)、Pd₂(dba)₃ (1.25g, 1.37mmol)、P(t-Bu)₃ (0.74g, 3.64mmol)、NaOt-Bu (13.13g, 136.64mmol)、甲苯 (228ml), 以与上述Sub1-1的合成方法相同的方法来进行合成, 从而获得生成物15.07g (收率: 40%)。

[0222] 3. Sub1-10的合成例



[0223]

[0224] (1) Sub1-IV-1的合成

[0225] 向在上述合成中获得的Sub1-III-9 (28g, 66.11mmol), 添加1,4-二溴苯 (17.16g, 72.72mmol)、Pd₂(dba)₃ (0.91g, 0.99mmol)、P(t-Bu)₃ (0.67g, 3.31mmol)、NaOt-Bu (9.53g, 99.17mmol)、甲苯 (694ml), 以与上述Sub1-1的合成方法相同的方法来进行合成, 从而获得生成物27.16g (收率: 71%)。

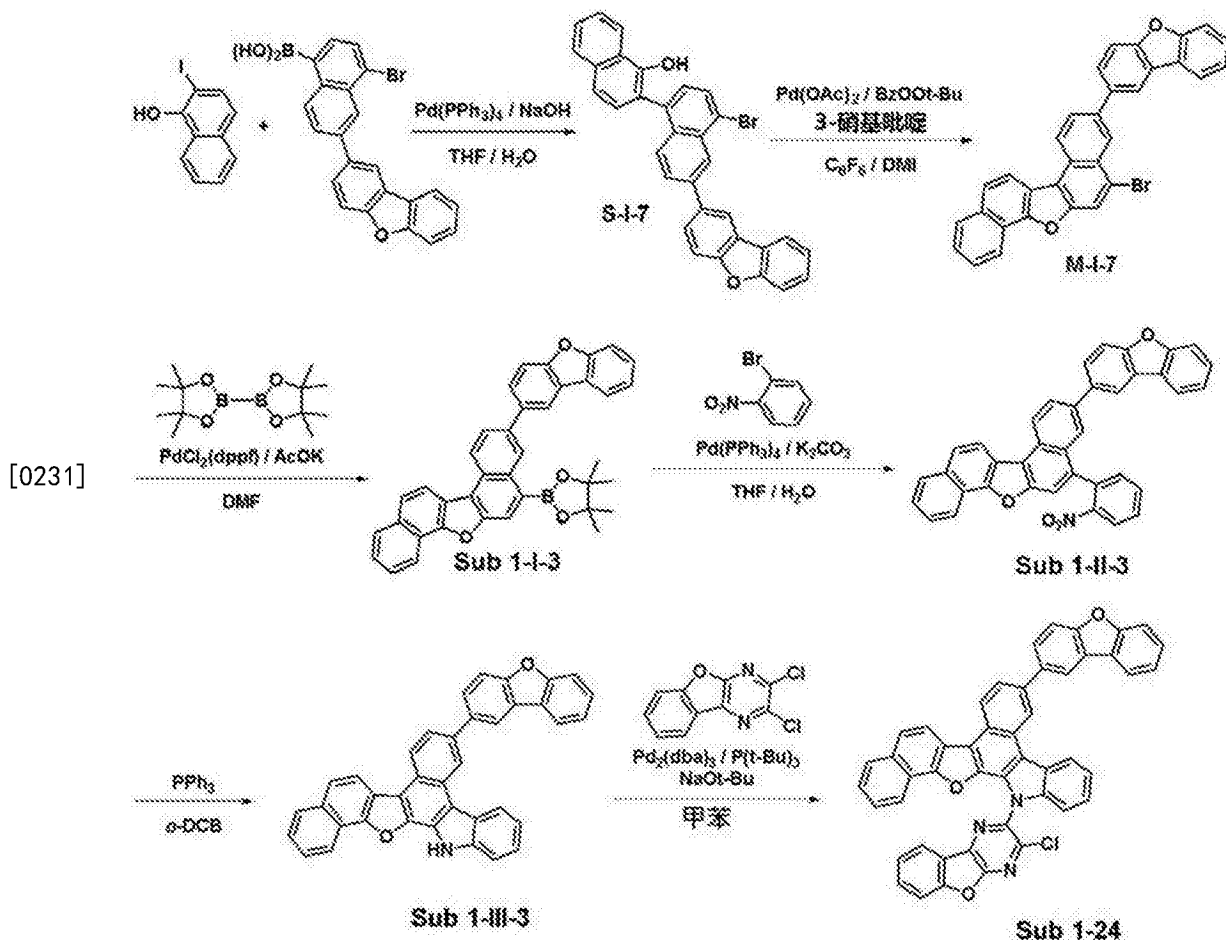
[0226] (2) Sub1-V-1的合成

[0227] 将在上述合成中获得的Sub1-IV-1 (27.16g, 46.95mmol) 在圆底烧瓶中以DMF (235ml) 溶解后, 添加双(频哪醇基)二硼 (13.11g, 51.64mmol)、Pd(dppf)Cl₂ (1.03g, 1.41mmol)、KOAc (13.82g, 140.84mmol), 在120℃温度条件下进行搅拌。反应完成后, 当反应结束时, 通过蒸馏来去除DMF, 以CH₂Cl₂和水萃取后。将有机层以MgSO₄干燥及浓缩, 然后将所生成的化合物通过硅胶柱之后进行重结晶, 从而获得生成物22.03g (收率: 75%)。

[0228] (3) Sub1-10的合成

[0229] 向在上述合成中获得的Sub1-V-1 (22.03g, 35.21mmol), 添加2,3-二氯苯并[4,5]噻吩并[2,3-b]吡嗪 (8.98g, 35.21mmol)、Pd(PPh₃)₄ (0.61g, 0.53mmol)、K₂CO₃ (7.30g, 52.82mmol)、THF (155ml)、水 (77.47ml), 以与上述Sub1-II-1的合成方法相同的方法来进行合成, 从而获得生成物9.61g (收率: 38%)。

[0230] 4. Sub1-24的合成例



[0232] 1) S-I-7的合成

[0233] 将(4-溴-6-(二苯并[b,d]呋喃-2-基)萘-1-基)硼酸 (100g, 239.77mmol)、THF

(1055m 1)、2-碘萘-1-酚(64.75g, 239.77mmol)、Pd(PPh₃)₄(4.16g, 3.60mmol)、NaOH(14.39g, 359.65mmol)、水(527ml), 以与上述SubS-I-1的合成方法相同的方法来进行合成, 从而获得生成物86.51g(收率:70%)。

[0234] 2) M-I-7的合成

[0235] 将起始物质S-I-7(86g, 166.86mmol)与Pd(OAc)₂(3.75g, 16.69mmol)、3-硝基吡啶(2.07g, 16.69mmol)一起添加到圆底烧瓶, 并以C₆F₆(250ml)、DMI(167ml)溶解后, 添加过氧化苯甲酸叔丁酯(64.82g, 333.71mmol), 在90℃下进行搅拌。反应完成后, 以CH₂Cl₂和水萃取后, 将有机层以MgSO₄干燥及浓缩, 然后将所生成的化合物通过硅胶柱之后进行重结晶, 从而获得生成物62.53g(收率:73%)。

[0236] 3) Sub1-I-3的合成

[0237] 将在上述合成中获得的M-I-7(62.50g, 121.74mmol)、DMF(609ml)、双(频哪醇基)二硼(34.01g, 133.91mmol)、Pd(dppf)Cl₂(2.67g, 3.65mmol)、KOAc(35.84g, 365.22mmol), 以与上述Sub1-V-1的合成方法相同的方法来进行合成, 从而获得生成物51.86g(收率:76%)。

[0238] 4) Sub1-II-3的合成

[0239] 向在上述合成中获得的Sub1-I-3(51.8g, 92.42mmol), 添加1-溴-2-硝基苯(18.67g, 92.42mmol)、Pd(PPh₃)₄(3.2g, 2.77mmol)、K₂CO₃(38.32g, 277.27mmol)、THF(407ml)、水(203ml), 以与上述Sub1-II-1的合成方法相同的方法来进行合成, 从而获得生成物43.13g(收率:84%)。

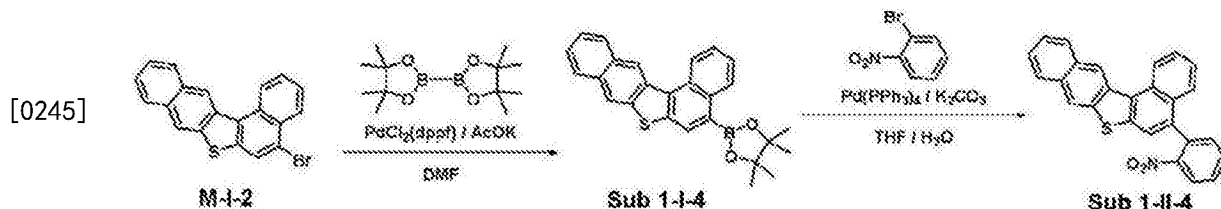
[0240] 5) Sub1-III-3的合成

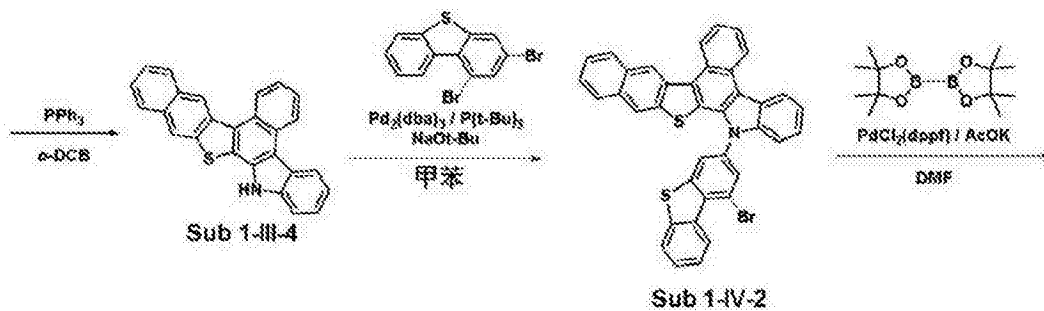
[0241] 向在上述合成中获得的Sub1-II-3(43g, 77.4mmol), 添加三苯基膦(60.9g, 232.19mmol)、邻二氯苯(155ml), 以与上述Sub1-III-1的合成方法相同的方法来进行合成, 从而获得生成物31.61g(收率:78%)。

[0242] 6) Sub1-24的合成

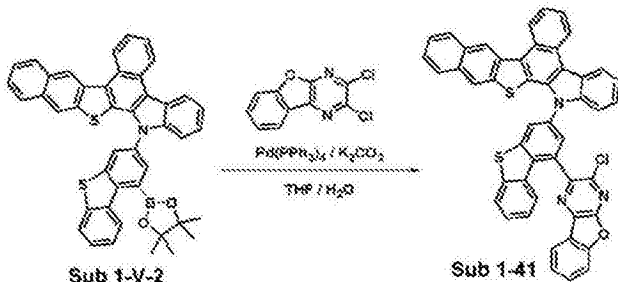
[0243] 向在上述合成中获得的Sub1-III-3(31.61g, 60.37mmol), 添加2,3-二氯苯并咪唑并[2,3-b]吡嗪(15.88g, 66.41mmol)、Pd₂(dba)₃(1.66g, 1.81mmol)、P(t-Bu)₃(0.98g, 4.83mmol)、NaOt-Bu(17.41g, 181.11mmol)、甲苯(302ml), 以与上述Sub1-1的合成方法相同的方法来进行合成, 从而获得生成物18.41g(收率:42%)。

[0244] 5. Sub1-41的合成例





[0246]



[0247] 1) Sub1-I-4

[0248] 将在上述合成中获得的M-I-2 (105g, 289.04mmol)、DMF (1445ml)、双(频哪醇基)二硼 (80.74g, 317.95mmol)、Pd(dppf)Cl₂ (6.34g, 8.67mmol)、KOAc (85.10g, 867.12mmol), 以与上述Sub1-V-1的合成方法相同的方法来进行合成, 从而获得生成物93.70g (收率: 79%)。

[0249] 2) Sub1-II-4的合成

[0250] 向在上述合成中获得的M-I-4 (93g, 226.64mmol), 添加1-溴-2-硝基苯 (45.78g, 226.64mmol)、Pd(PPh₃)₄ (7.86g, 6.80mmol)、K₂CO₃ (93.97g, 679.92mmol)、THF (997ml)、水 (498ml), 以与上述Sub1-II-1的合成方法相同的方法来进行合成, 从而获得生成物76.27g (收率: 83%)。

[0251] 3) Sub1-III-4的合成

[0252] 向在上述合成中获得的Sub1-II-4 (76g, 187.44mmol), 添加三苯基膦 (147.49g, 562.31mmol)、邻二氯苯 (375ml), 以与上述Sub1-III-1的合成方法相同的方法来进行合成, 从而获得生成物53.20g (收率: 76%)。

[0253] 4) Sub1-IV-2的合成

[0254] 向在上述合成中获得的Sub1-III-4 (53g, 141.91mmol), 添加1,3-二溴二苯并[b,d]噻吩 (48.54g, 141.91mmol)、Pd₂(dba)₃ (1.95g, 2.13mmol)、P(t-Bu)₃ (1.44g, 7.10mmol)、NaOt-Bu (20.46g, 212.87mmol)、甲苯 (1490ml), 以与上述Sub1-1的合成方法相同的方法来进行合成, 从而获得生成物32.42g (收率: 36%)。

[0255] 5) Sub1-V-2的合成

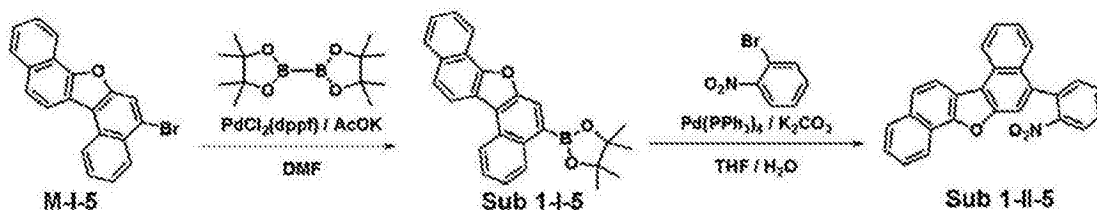
[0256] 将Sub1-IV-2 (32g, 50.42mmol)、DMF (252ml)、双(频哪醇基)二硼 (14.09g, 55.47mmol)、Pd(dppf)Cl₂ (1.11g, 1.51mmol)、KOAc (14.85g, 151.27mmol), 以与上述Sub1-V-1的合成方法相同的方法来进行合成, 从而获得生成物25.09g (收率: 73%)。

[0257] 6) Sub1-41的合成

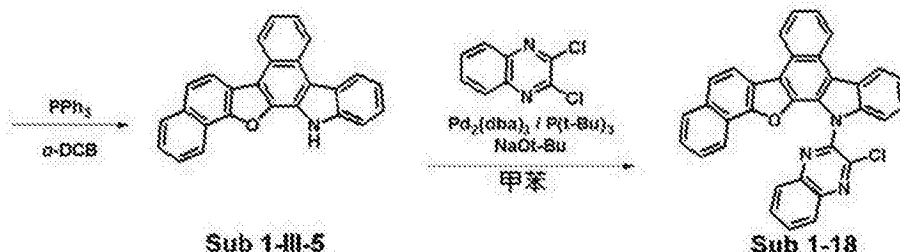
[0258] 向在上述合成中获得的Sub1-V-2 (25g, 36.67mmol), 添加2,3-二氯苯并呋喃并[2,3-b]吡嗪 (8.77g, 36.67mmol)、Pd(PPh₃)₄ (0.64g, 0.55mmol)、K₂CO₃ (7.60g, 55.01mmol)、THF (161ml)、水 (80ml), 以与上述Sub1-II-1的合成方法相同的方法来进行合成, 从而获得生成

物11.40g (收率:41%)。

[0259] 6. Sub1-18的合成例



[0260]



[0261] 1) Sub1-I-5的合成

[0262] 将在上述合成中获得的M-I-5 (19g, 54.72mmol)、DMF (274ml)、双(频哪醇基)二硼 (15.29g, 60.19mmol)、Pd(dppf)Cl₂ (1.20g, 1.64mmol)、KOAc (16.11g, 164.17mmol), 以与上述Sub1-V-1的合成方法相同的方法来进行合成, 从而获得生成物17.91g (收率:83%)。

[0263] 2) Sub1-II-5的合成

[0264] 向在上述合成中获得的Sub1-I-5 (17g, 43.12mmol), 添加1-溴-2-硝基苯 (8.71g, 43.12mmol)、Pd(PPh₃)₄ (1.49g, 1.29mmol)、K₂CO₃ (17.88g, 129.35mmol)、THF (189ml)、水 (95ml), 以与上述Sub1-II-1的合成方法相同的方法来进行合成, 从而获得生成物14.61g (收率:87%)。

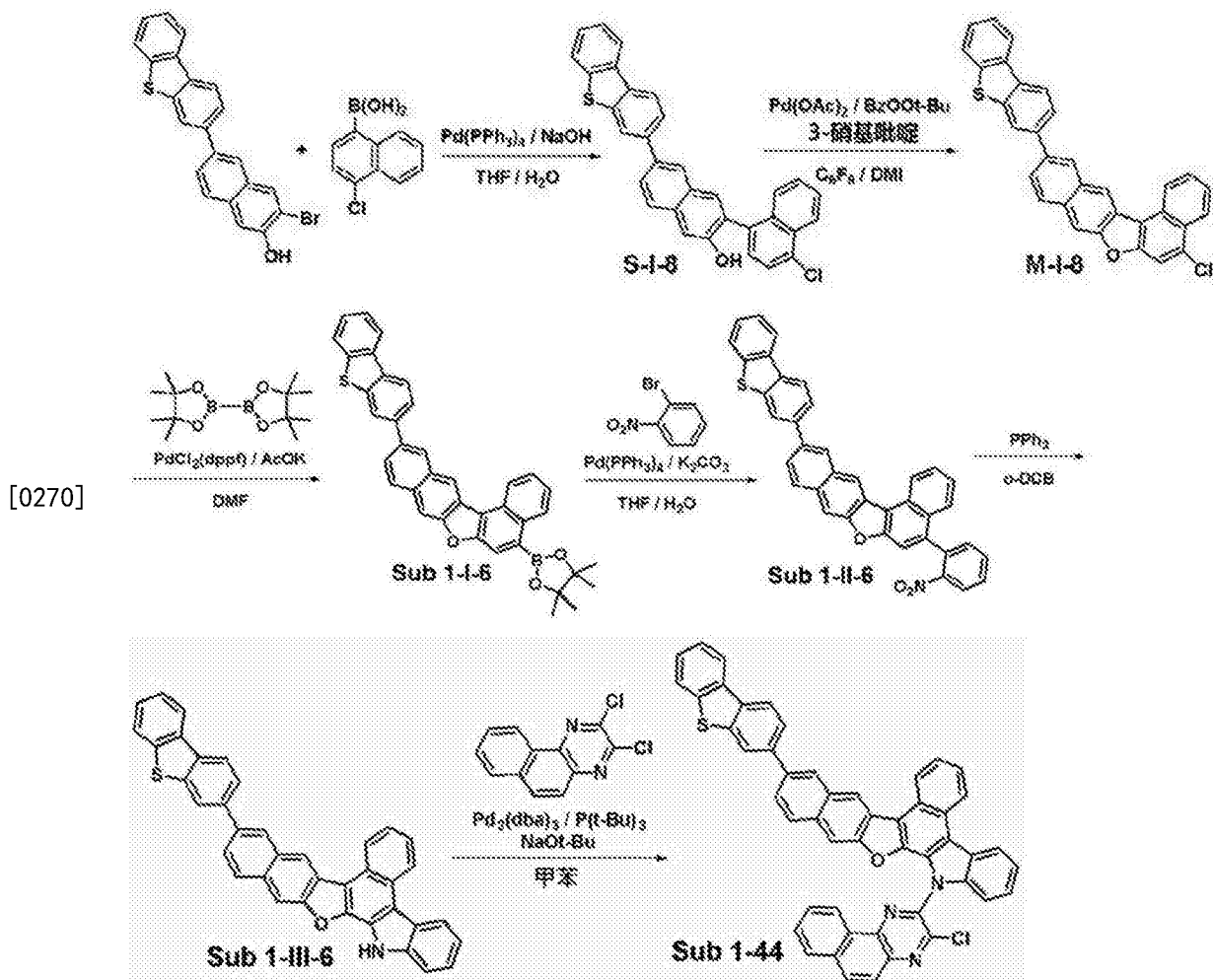
[0265] 3) Sub1-III-5的合成

[0266] 向在上述合成中获得的Sub1-II-5 (14.5g, 37.24mmol), 添加三苯基膦 (29.30g, 111.71mmol)、邻二氯苯 (74ml), 以与上述Sub1-III-1的合成方法相同的方法来进行合成, 从而获得生成物10.65g (收率:80%)。

[0267] 4) Sub1-18的合成

[0268] 向在上述合成中获得的Sub1-III-5 (10.5g, 29.38mmol), 添加2,3-二氯喹啉 (5.85g, 29.38mmol)、Pd₂(dba)₃ (0.40g, 0.44mmol)、P(t-Bu)₃ (0.30g, 1.47mmol)、NaOt-Bu (4.23g, 44.07mmol)、甲苯 (308ml), 以与上述Sub1-1的合成方法相同的方法来进行合成, 从而获得生成物11g (收率:72%)。

[0269] 7. Sub1-44的合成例



[0271] 1) S-I-8的合成

[0272] 将(4-氯萘-1-基)硼酸(31.07g, 150.5mmol)、THF(662ml)、3-溴-6-(二苯并[b,d]噻吩-3-基)萘-2-酚(61g, 150.5mmol)、Pd(PPh₃)₄(2.61g, 2.26mmol)、NaOH(9.03g, 225.75mmol)、水(331ml), 以与上述SubS-I-1的合成方法相同的方法来进行合成, 从而获得生成物51.31g(收率:70%)。

[0273] 2) M-I-8的合成

[0274] 将S-I-8(51g, 104.72mmol)、Pd(OAc)₂(2.35g, 10.47mmol)、3-硝基吡啶(1.30g, 10.47mmol)以C₆F₆(157.1ml), DMI(104ml)溶解后, 添加后过氧化苯甲酸叔丁酯(40.68g, 209.44mmol), 以与上述M-I-8的合成方法相同的方法来进行合成, 从而获得生成物36.57g(收率:72%)。

[0275] 3) Sub1-I-6的合成

[0276] 将上述合成中获得的M-I-8(36g, 74.23mmol)、DMF(371ml)、双(频哪醇基)二硼(20.73g, 81.65mmol)、Pd(dppf)Cl₂(1.63g, 2.23mmol)、KOAc(21.85g, 222.68mmol), 以与上述Sub1-V-1的合成方法相同的方法来进行合成, 从而获得生成物34.23g(收率:80%)。

[0277] 4) Sub1-II-6的合成

[0278] 向在上述合成中获得的Sub1-I-6(34g, 58.97mmol), 添加1-溴-2-硝基苯(11.91g, 58.97mmol)、Pd(PPh₃)₄(2.04g, 1.77mmol)、K₂CO₃(24.45g, 176.92mmol)、THF(259ml)、水(129ml), 以与上述Sub1-II-1的合成方法相同的方法来进行合成, 从而获得生成物27.64g

(收率:82%)。

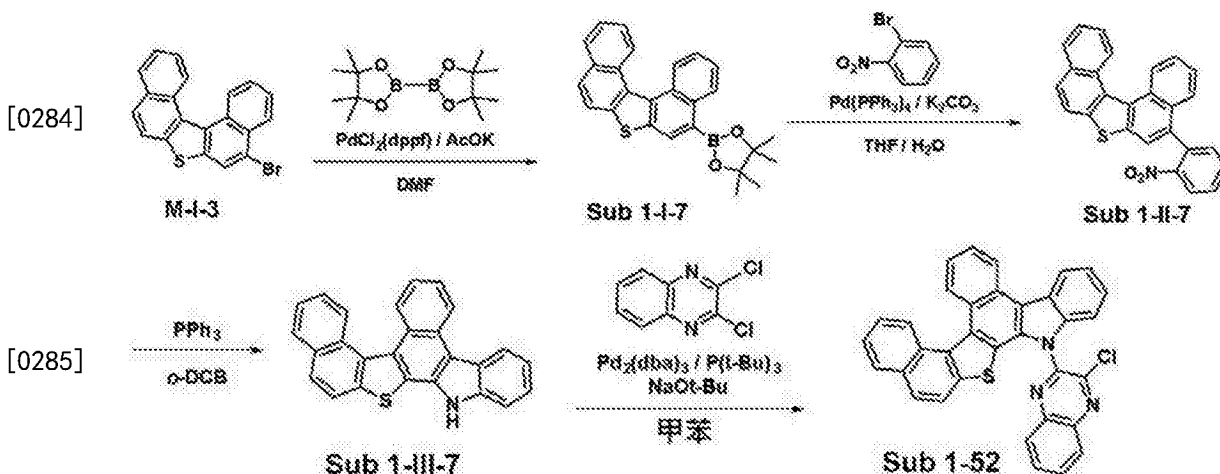
[0279] 5) Sub1-III-6的合成

[0280] 向在上述合成中获得的Sub1-II-6 (27.5g, 48.11mmol), 添加三苯基膦 (37.85g, 144.32mmol)、邻二氯苯 (96ml), 以与上述Sub1-III-1的合成方法相同的方法来进行合成, 从而获得生成物20.25g (收率:78%)。

[0281] 6) Sub1-44的合成

[0282] 向在上述合成中获得的Sub1-III-6 (20g, 37.06mmol), 添加2,3-二氯苯并[f]喹啉 (9.23g, 37.06mmol)、Pd₂(dba)₃ (0.51g, 0.56mmol)、P(t-Bu)₃ (0.37g, 1.85mmol)、NaOt-Bu (5.34g, 55.59mmol)、甲苯 (389ml), 以与上述Sub1-1的合成方法相同的方法来进行合成, 从而获得生成物11.15g (收率:40%)。

[0283] 8. Sub1-52的合成例



[0286] 1) Sub1-I-7

[0287] 将在上述合成中获得的M-I-3 (22g, 60.56mmol)、DMF (302ml)、双(频哪醇基)二硼 (16.92g, 66.62mmol)、Pd(dppf)Cl₂ (1.33g, 1.82mmol)、KOAc (17.83g, 181.68mmol), 以与上述Sub1-V-1的合成方法相同的方法来进行合成, 从而获得生成物20.38g (收率:82%)。

[0288] 2) Sub1-II-7的合成

[0289] 向在上述合成中获得的Sub1-I-7 (19.5g, 47.52mmol), 添加1-溴-2-硝基苯 (9.6g, 47.52mmol)、Pd(PPh₃)₄ (1.65g, 1.43mmol)、K₂CO₃ (19.70g, 142.56mmol)、THF (209ml)、水 (105ml), 以与上述Sub1-II-1的合成方法相同的方法来进行合成, 从而获得生成物16.38g (收率:85%)。

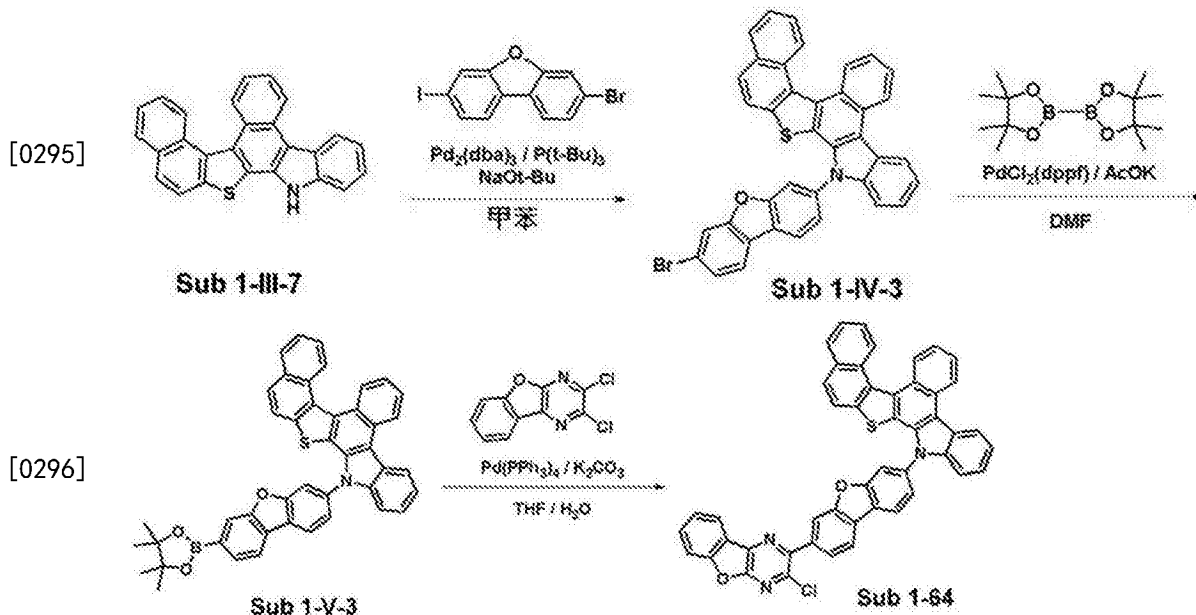
[0290] 3) Sub1-III-7的合成

[0291] 向在上述合成中获得的Sub1-II-7 (16g, 39.46mmol), 添加三苯基膦 (31.05g, 118.38mmol)、邻二氯苯 (79ml), 以与上述Sub1-III-1的合成方法相同的方法来进行合成, 从而获得生成物12.08g (收率:82%)。

[0292] 4) Sub1-52的合成

[0293] 向在上述合成中获得的Sub1-III-7 (12g, 32.13mmol), 添加2,3-二氯喹啉 (6.40g, 32.13mmol)、Pd₂(dba)₃ (0.44g, 0.48mmol)、P(t-Bu)₃ (0.33g, 1.61mmol)、NaOt-Bu (4.63g, 48.20mmol)、甲苯 (337ml), 以与上述Sub1-1的合成方法相同的方法来进行合成, 从而获得生成物11.71g (收率:68%)。

[0294] 9. Sub1-64的合成例



[0297] 1) Sub1-IV-3的合成

[0298] 向在上述合成中获得的Sub1-III-7 (39g, 104.43mmol), 添加3-溴-7-碘二苯并[b, d]呋喃(38.95g, 104.43mmol)、Pd₂(dba)₃ (1.43g, 1.57mmol)、P(t-Bu)₃ (1.06g, 5.22mmol)、NaO t-Bu (15.05g, 156.64mmol)、甲苯(1096ml), 以与上述Sub1-1的合成方法相同的方法来进行合成, 从而获得生成物38.76g (收率: 60%)。

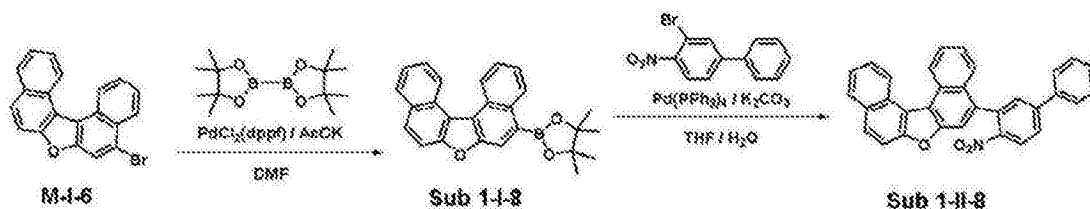
[0299] 2) Sub1-V-3的合成

[0300] 将在上述合成中获得的Sub1-IV-3 (38.5g, 62.24mmol)、DMF (311ml)、双(频哪醇基)二硼(17.39g, 68.47mmol)、Pd(dppf)Cl₂ (1.37g, 1.87mmol)、KOAc (18.33g, 186.73mmol), 以与上述Sub1-V-1的合成方法相同的方法来进行合成, 从而获得生成物31.49g (收率: 76%)。

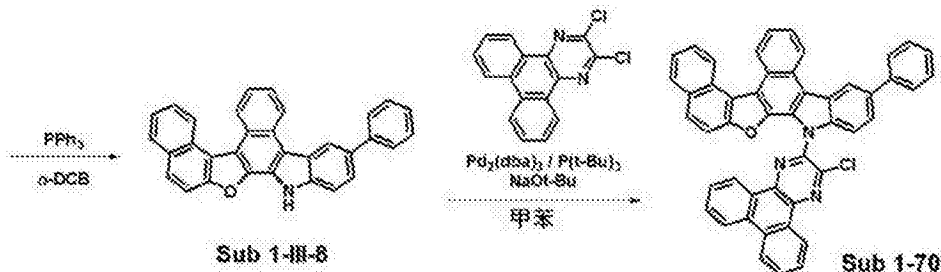
[0301] 3) Sub1-64的合成

[0302] 向在上述合成中获得的Sub1-V-3 (31g, 46.57mmol), 添加2,3-二氯苯并呋喃并[2, 3-b]吡嗪(11.13g, 46.57mmol)、Pd(PPh₃)₄ (0.81g, 0.70mmol)、K₂CO₃ (9.66g, 69.86mmol)、THF (205ml)、水(102ml), 以与上述Sub1-II-1的合成方法相同的方法来进行合成, 从而获得生成物11.06g (收率: 32%)。

[0303] 10. Sub1-的合成例



[0304]



[0305] 1) Sub1-I-8

[0306] 将在上述合成中获得的M-I-6 (20g, 57.60mmol)、DMF (288ml)、双(频哪醇基)二硼 (16.09g, 63.36mmol)、Pd(dppf)Cl₂ (1.26g, 1.73mmol)、KOAc (16.96g, 172.81mmol), 与上述Sub1-V-1的合成方法相同的方法来进行合成, 从而获得生成物17.94g (收率: 79%)。

[0307] 2) Sub1-II-8的合成

[0308] 向在上述合成中获得的Sub1-I-8 (17g, 43.12mmol), 添加3-溴-4-硝基-1,1'-联苯 (11.99g, 43.12mmol)、Pd(PPh₃)₄ (1.49g, 1.29mmol)、K₂CO₃ (17.88g, 129.35mmol)、THF (189ml)、水 (94ml), 与上述Sub1-II-1的合成方法相同的方法来进行合成, 从而获得生成物15.45g (收率: 77%)。

[0309] 2) Sub1-III-8的合成

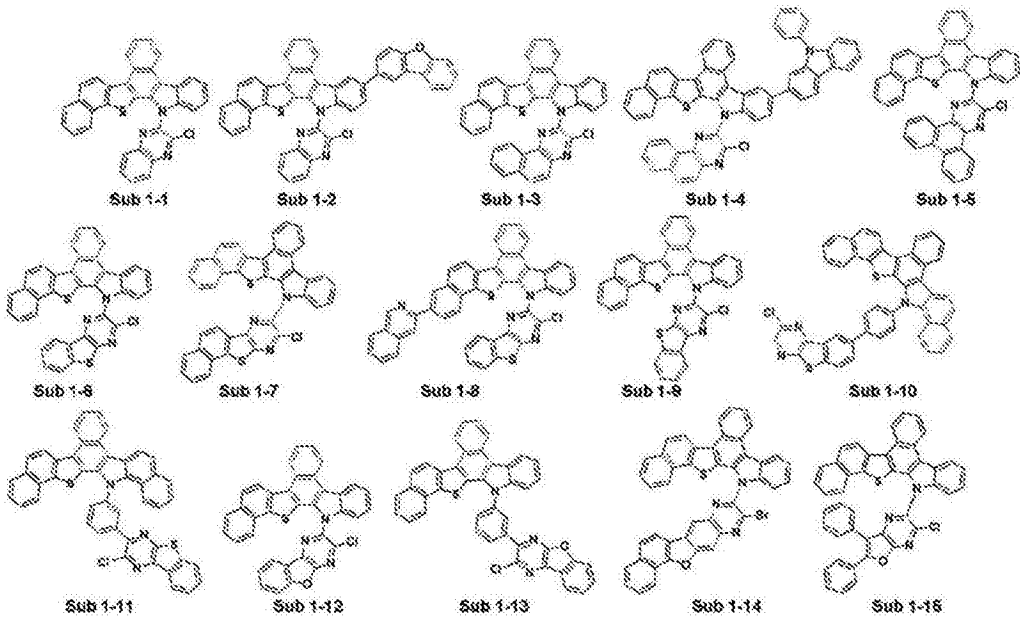
[0310] 向在上述合成中获得的Sub1-II-8 (15g, 32.22mmol), 添加三苯基膦 (25.36g, 96.67mmol)、邻二氯苯 (64ml), 与上述Sub1-III-1的合成方法相同的方法来进行合成, 从而获得生成物11.73g (收率: 84%)。

[0311] 3) Sub1-70的合成

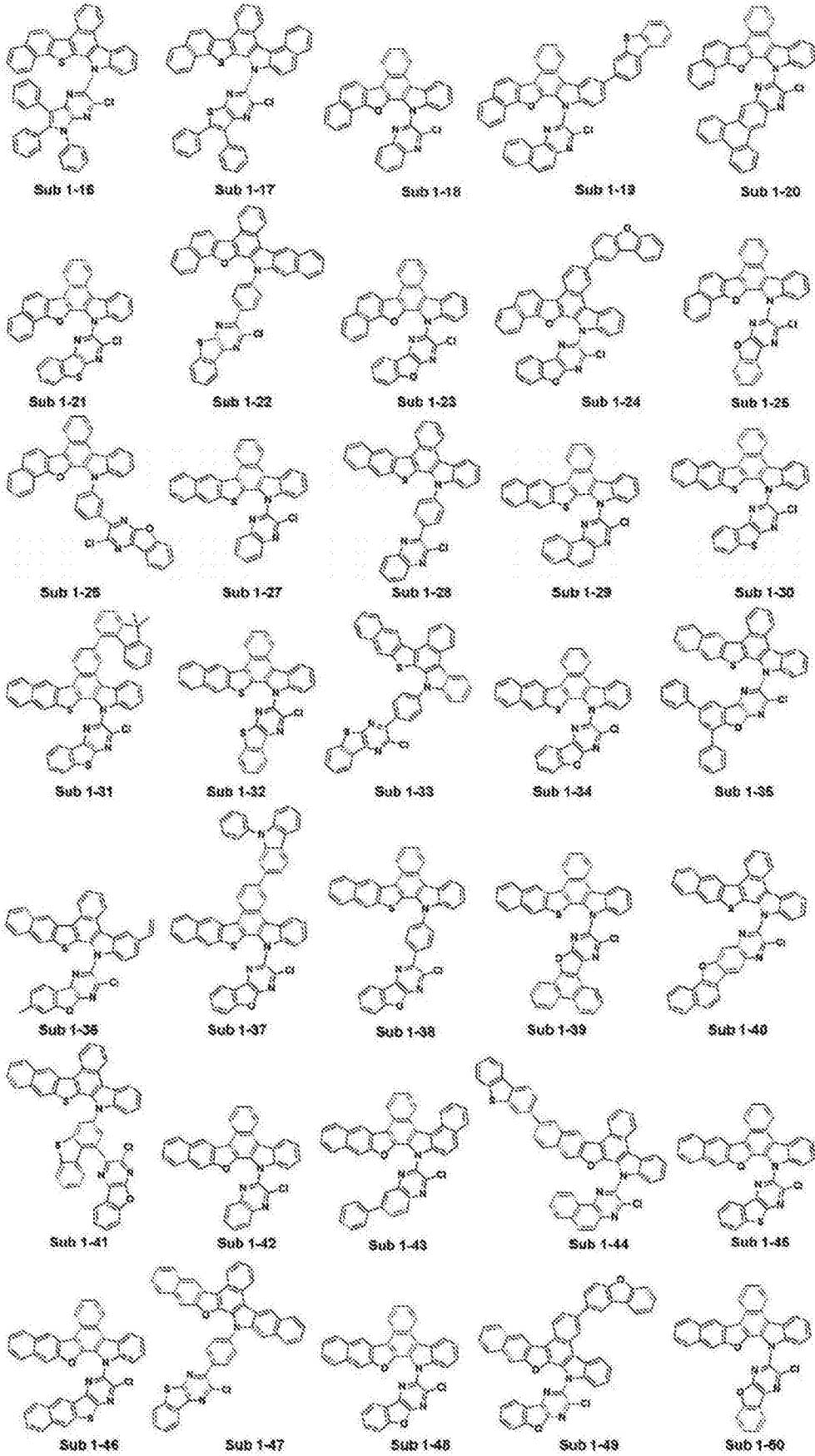
[0312] 向在上述合成中获得的Sub1-III-8 (11g, 25.37mmol), 添加2,3-二氯二苯并[f,h]喹喔啉 (7.59g, 25.37mmol)、Pd₂(dba)₃ (0.35g, 0.38mmol)、P(t-Bu)₃ (0.26g, 1.27mmol)、NaOt-Bu (3.66g, 38.06mmol)、甲苯 (266ml), 与上述Sub1-1的合成方法相同的方法来进行合成, 从而获得生成物11.13g (收率: 63%)。

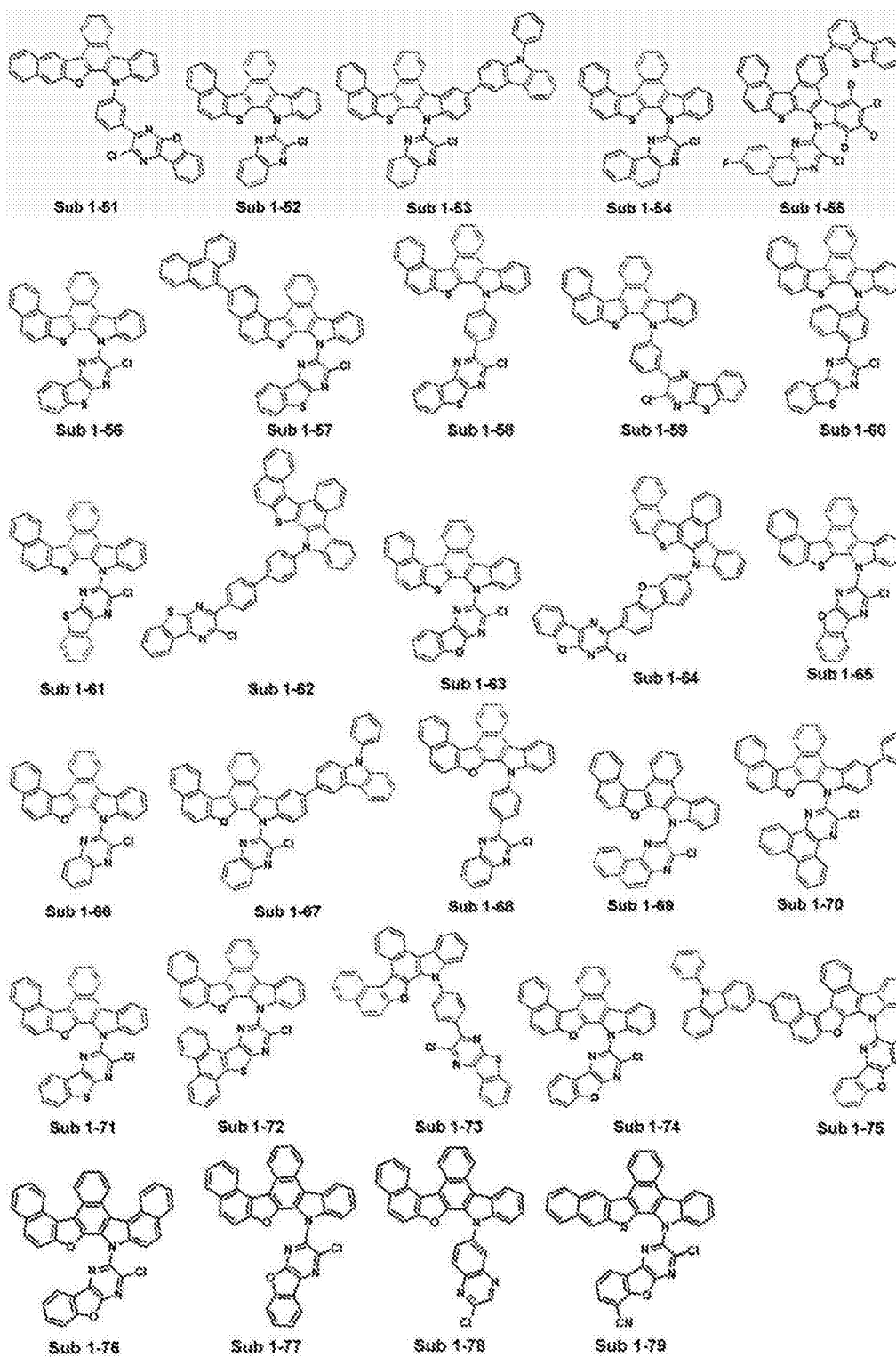
[0313] Sub1的例示

[0314]



[0315]





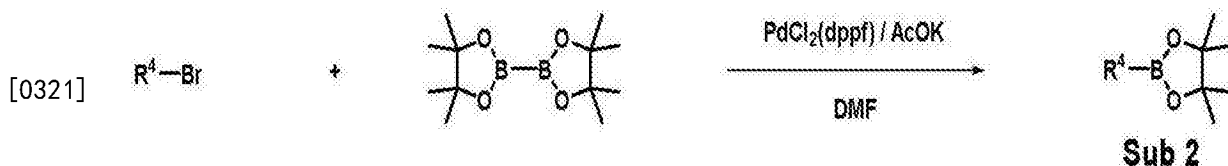
[0317] [表1]

[0318]

化合物	FD-MS	化合物	FD-MS
Sub 1-1	m/z=541.05 (C ₃₂ H ₁₆ ClN ₃ S ₂ =542.07)	Sub 1-4	m/z=782.14 (C ₅₀ H ₂₇ ClN ₄ S ₂ =783.36)
Sub 1-10	m/z=717.11 (C ₄₆ H ₂₄ ClN ₃ S ₂ =718.29)	Sub 1-18	m/z=519.11 (C ₃₄ H ₁₈ ClN ₃ O=519.99)
Sub 1-24	m/z=725.15 (C ₄₈ H ₂₄ ClN ₃ O ₃ =726.19)	Sub 1-41	m/z=757.10 (C ₄₈ H ₂₄ ClN ₃ OS ₂ =758.31)
Sub 1-44	m/z=751.15 (C ₅₀ H ₂₆ ClN ₃ OS=752.29)	Sub 1-52	m/z=535.09 (C ₃₄ H ₁₈ ClN ₃ S=536.05)
Sub 1-64	m/z=741.13 (C ₄₈ H ₂₄ ClN ₃ O ₂ S=742.25)	Sub 1-70	m/z=695.18 (C ₄₈ H ₂₆ ClN ₃ O=696.21)

[0319] II. Sub2的合成

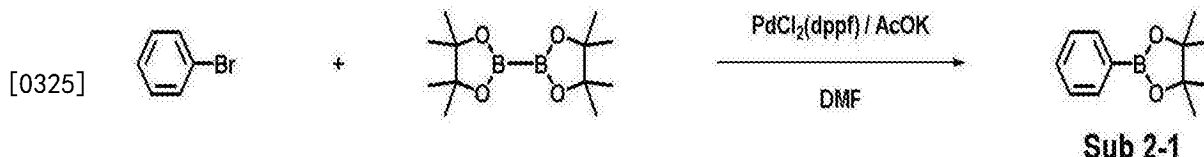
[0320] 反应式1的Sub2可通过以下反应式的反应途径来合成,但并不局限于此。



[0322] 属于Sub2的化合物的合成例如下。

[0323] 1. Sub2-1的合成例

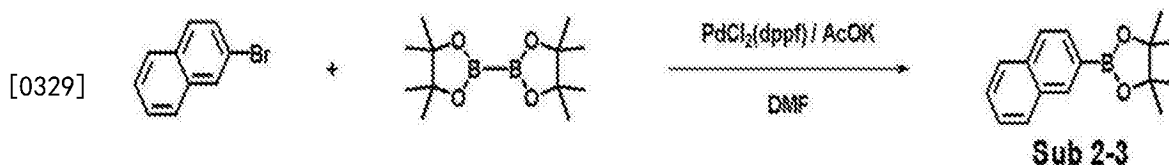
[0324] <反应式24>



[0326] 将起始物质溴苯 (29.16g, 185.72mmol) 在圆底烧瓶中以DMF (930ml) 溶解后, 添加双(频哪醇基)二硼 (51.88g, 204.29mmol)、Pd (dppf) Cl₂ (4.55g, 5.57mmol)、K₂OAc (54.68g, 557.16mmol), 在90℃下进行搅拌。当反应结束时, 通过蒸馏来去除DMF, 以CH₂Cl₂和水萃取后。将有机层以MgSO₄干燥及浓缩, 然后将所生成的化合物通过硅胶柱之后进行重结晶, 从而获得生成物31.84g (收率: 84%)。

[0327] 2. Sub2-3的合成例

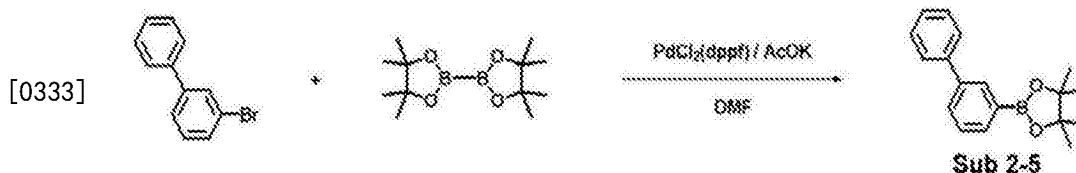
[0328] <反应式25>



[0330] 向起始物质2-溴萘 (21.53g, 103.97mmol), 添加双(频哪醇基)二硼 (29.04g, 114.37mmol)、Pd (dppf) Cl₂ (2.55g, 3.12mmol)、K₂OAc (30.61g, 311.92mmol)、DMF (520ml), 以与上述Sub2-1的合成方法相同的方法来进行合成, 从而获得生成物21.14g (收率: 80%)。

[0331] 3. Sub2-5的合成例

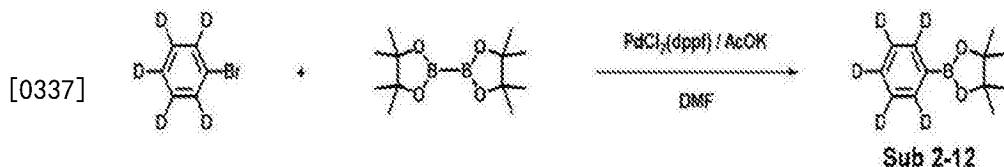
[0332] <反应式26>



[0334] 向起始物质3-溴-1,1'-联苯 (16.24g, 69.67mmol), 添加双(频哪醇基)二硼 (19.46g, 76.63mmol)、Pd (dppf) Cl₂ (1.71g, 2.09mmol)、K₂OAc (20.51g, 209.00mmol)、DMF (350ml), 以与上述Sub2-1的合成方法相同的方法来进行合成, 从而获得生成物15.81g (收率: 81%)。

[0335] 4. Sub2-12的合成例

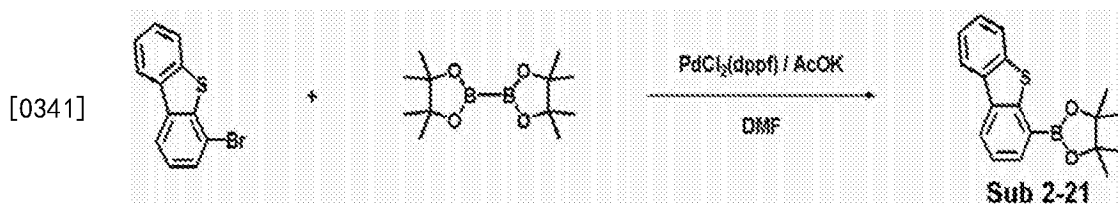
[0336] <反应式27>



[0338] 向起始物质1-溴苯-2,3,4,5,6-d₅ (10.85g, 66.96mmol), 添加双(频哪醇基)二硼 (18.70g, 73.65mmol)、Pd(dppf)Cl₂ (1.64g, 2.01mmol)、K₂OAc (19.71g, 200.88mmol)、DMF (335ml), 以与上述Sub2-1的合成方法相同的方法来进行合成, 从而获得生成物10.22g (收率: 73%)。

[0339] 5. Sub2-21的合成例

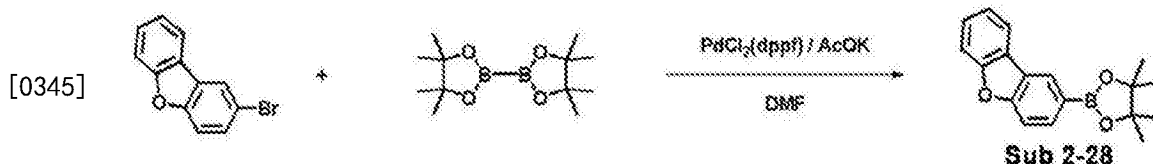
[0340] <反应式28>



[0342] 向起始物质4-溴二苯并[b,d]噻吩 (14.23g, 54.08mmol), 添加双(频哪醇基)二硼 (15.11g, 59.48mmol)、Pd(dppf)Cl₂ (1.32g, 1.62mmol)、K₂OAc (15.92g, 162.23mmol)、DMF (270ml), 以与上述Sub2-1的合成方法相同的方法来进行合成, 从而获得生成物13.76g (收率: 82%)。

[0343] 6. Sub2-28的合成例

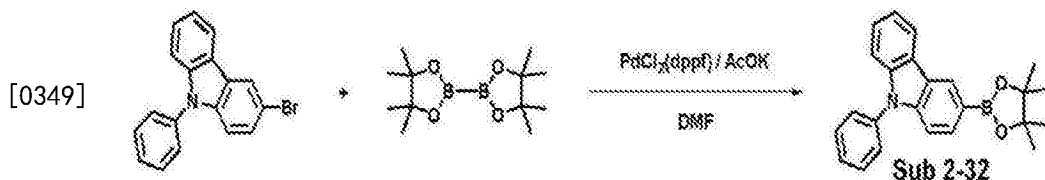
[0344] <反应式29>



[0346] 向起始物质2-溴二苯并[b,d]呋喃 (16.35g, 66.17mmol), 添加双(频哪醇基)二硼 (18.48g, 72.79mmol)、Pd(dppf)Cl₂ (1.62g, 1.99mmol)、K₂OAc (19.48g, 198.51mmol)、DMF (330ml), 以与上述Sub2-1的合成方法相同的方法来进行合成, 从而获得生成物16.74g (收率: 86%)。

[0347] 7. Sub2-32的合成例

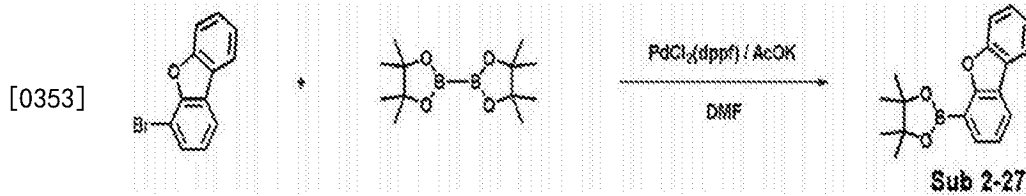
[0348] <反应式30>



[0350] 向起始物质3-溴-9-苯基-9H-吡啶 (12.17g, 37.77mmol), 添加双(频哪醇基)二硼 (10.55g, 41.55mmol)、Pd(dppf)Cl₂ (0.93g, 1.13mmol)、K₂OAc (11.12g, 113.31mmol)、DMF (190ml), 以与上述Sub2-1的合成方法相同的方法来进行合成, 从而获得生成物10.46g (收率: 75%)。

[0351] 8. Sub2-27的合成例

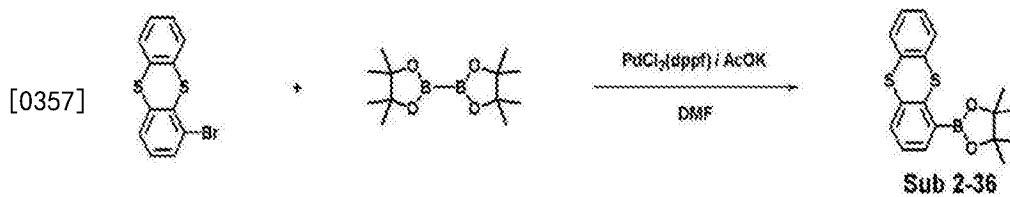
[0352] <反应式31>



[0354] 向起始物质1-溴二苯并[b,d]呋喃(16.78g,67.91mmol),添加双(频哪醇基)二硼(18.97g,74.70mmol)、Pd(dppf)Cl₂(1.66g,2.04mmol)、K₂OAc(19.99g,203.73mmol)、DMF(340ml),以与上述Sub2-1的合成方法相同的方法来进行合成,从而获得生成物15.98g(收率:80%)。

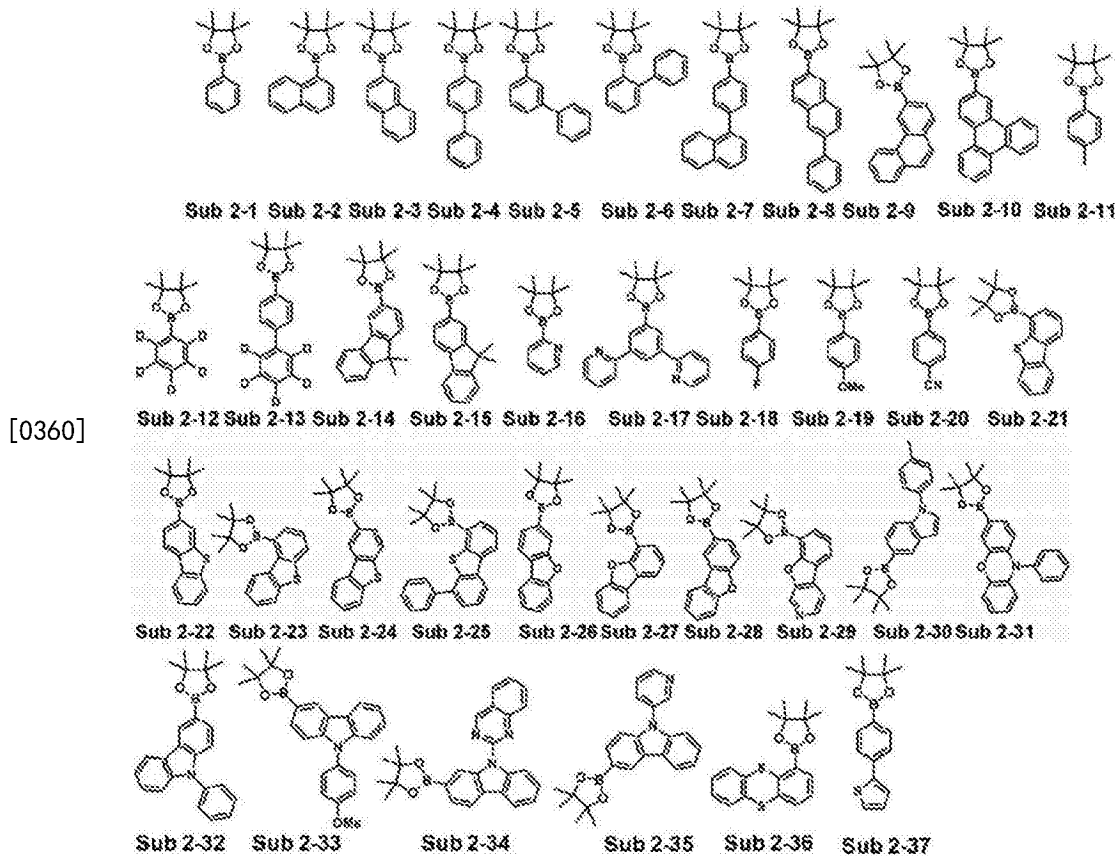
[0355] 9.Sub2-36的合成例

[0356] <反应式32>



[0358] 向起始物质1-溴噻蒽(13.31g,45.09mmol),添加双(频哪醇基)二硼(12.59g,49.60mmol)、Pd(dppf)Cl₂(1.10g,1.35mmol)、K₂OAc(13.27g,135.26mmol)、DMF(225ml),以与上述Sub2-1的合成方法相同的方法来进行合成,从而获得生成物10.34g(收率:67%)。

[0359] 所属于Sub2的化合物可以为如下的化合物,但不限于此,表2表示所属于Sub2的部分化合物的FD-MS值。



[0360]

[0361] [表2]

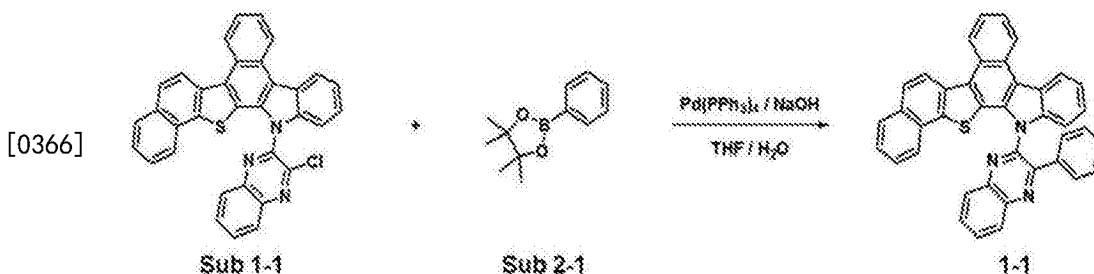
[0362]

化合物	FD-MS	化合物	FD-MS
Sub 2-1	m/z=204.13 (C ₁₂ H ₁₇ BO ₂ =204.08)	Sub 2-3	m/z=254.15 (C ₁₆ H ₁₉ BO ₂ =254.14)
Sub 2-5	m/z=280.16 (C ₁₈ H ₂₁ BO ₂ =280.17)	Sub 2-12	m/z=209.16 (C ₁₂ H ₁₂ D ₅ BO ₂ =209.11)
Sub 2-21	m/z=310.12 (C ₁₈ H ₁₉ BO ₂ S=310.22)	Sub 2-28	m/z=294.14 (C ₁₈ H ₁₉ BO ₃ =294.16)
Sub 2-32	m/z=369.19 (C ₂₄ H ₂₄ BN ₂ O ₂ =369.27)	Sub 2-27	m/z=294.14 (C ₁₈ H ₁₉ BO ₃ =294.16)
Sub 2-36	m/z=342.09 (C ₁₈ H ₁₉ BO ₂ S ₂ =342.28)		

[0363] III. 最终生成物的合成

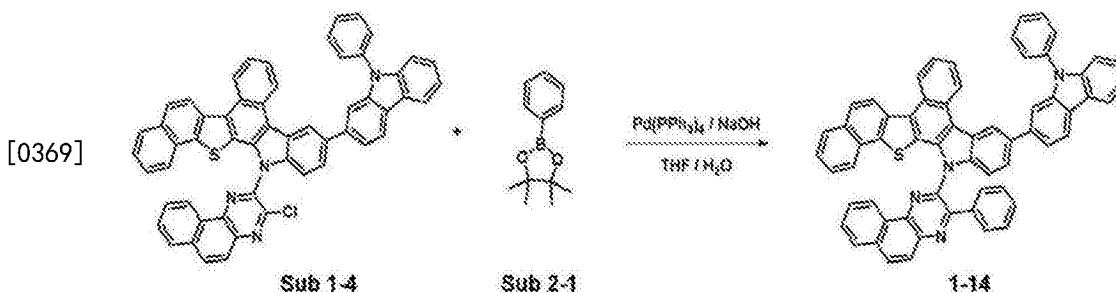
[0364] 将Sub1 (1当量) 圆底烧瓶中以THF溶解后, 添加Sub2 (1当量)、Pd(PPh₃)₄ (0.04当量)、NaOH (3当量)、水, 在70℃下进行搅拌。反应完成后, 以CH₂Cl₂和水萃取后, 将有机层以MgSO₄干燥及浓缩, 然后将所生成的化合物通过硅胶柱之后进行重结晶, 获得最终生成物。

[0365] 1-1的合成例



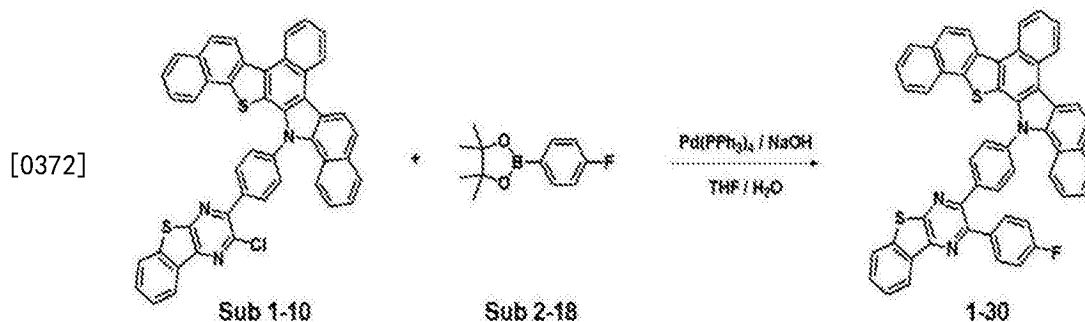
[0367] 将Sub1-1 (9g, 16.79mmol) 在圆底烧瓶中以THF (74ml) 溶解后, 添加Sub2-1 (3.43g, 16.79mmol)、Pd(PPh₃)₄ (0.78g, 0.67mmol)、NaOH (2.01g, 50.37mmol)、水 (37ml), 在70℃温度条件下进行搅拌。当反应结束时, 以CH₂Cl₂和水萃取后, 将有机层以MgSO₄干燥及浓缩, 然后将所生成的化合物通过硅胶柱之后进行重结晶, 从而获得生成物7.47g (收率: 77%)。

[0368] 1-14的合成例



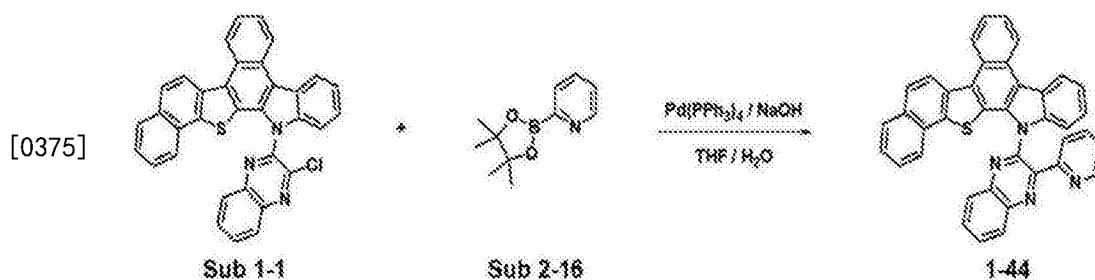
[0370] 将 (Sub1-4 (9g, 10.88mmol)、THF (48ml)、Sub2-1 (2.22g, 10.88mmol)、Pd(PPh₃)₄ (0.5g, 0.44mmol)、NaOH (1.31g, 32.63mmol)、水 (24ml), 以与上述Sub1-1的合成方法相同的方法来进行合成, 从而获得生成物6.71g (收率: 71%)。

[0371] 1-30的合成例



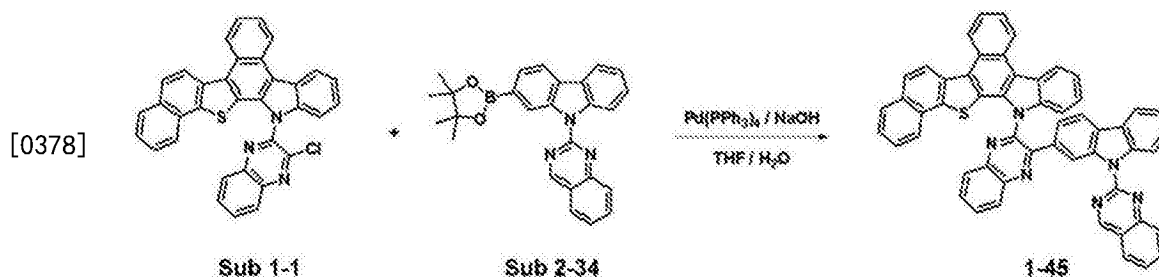
[0373] 将Sub1-10 (11g, 15.31mmol)、THF (67ml)、Sub2-18 (3.4g, 15.31mmol)、Pd (PPh₃)₄ (0.71g, 0.61mmol)、NaOH (1.84g, 45.94mmol)、水 (34ml), 以与上述Sub1-1的合成方法相同的方法来进行合成, 从而获得生成物7.51g (收率: 63%)。

[0374] 1-44的合成例



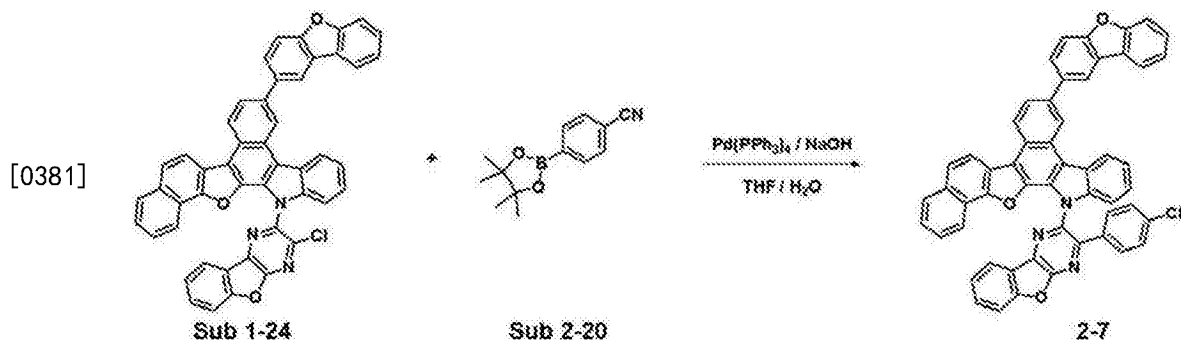
[0376] 将Sub1-1 (11g, 20.52mmol)、THF (90ml)、Sub2-16 (4.21g, 20.52mmol)、Pd (PPh₃)₄ (0.95g, 0.82mmol)、NaOH (2.46g, 61.56mmol)、水 (45ml), 以与上述Sub1-1的合成方法相同的方法来进行合成, 从而获得生成物7.72g (收率: 65%)。

[0377] 1-45的合成例



[0379] 将Sub1-1 (11g, 20.52mmol)、THF (90ml)、Sub2-34 (8.65g, 20.52mmol)、Pd (PPh₃)₄ (0.95g, 0.82mmol)、NaOH (2.46g, 61.56mmol)、水 (45ml), 以与上述Sub1-1的合成方法相同的方法来进行合成, 从而获得生成物9.95g (收率: 61%)。

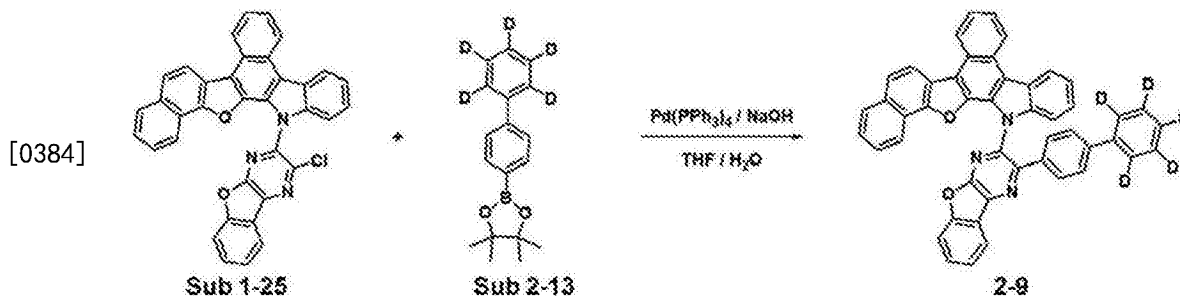
[0380] 2-7的合成例



[0382] 将Sub1-24 (11g, 15.15mmol)、THF (66ml)、Sub2-20 (3.47g, 15.15mmol)、Pd (PPh₃)₄

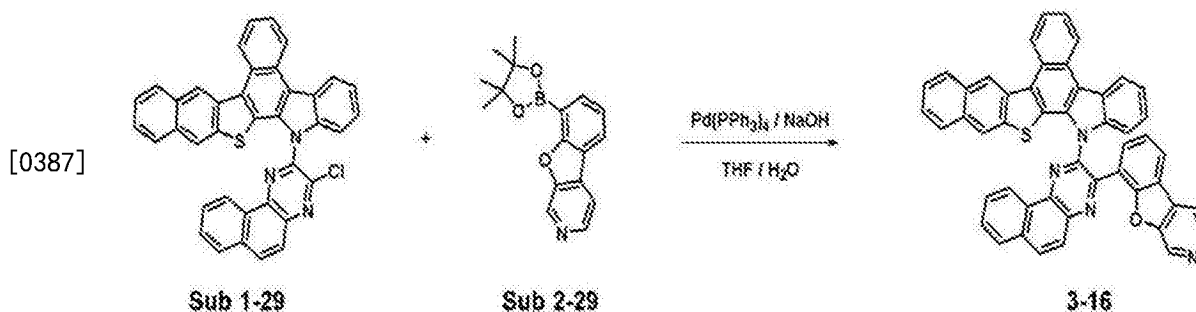
(0.7g, 0.61mmol)、NaOH(1.82g, 45.44mmol)、水(33ml), 与上述Sub1-1的合成方法相同的方法来进行合成, 从而获得生成物7.69g(收率: 64%)。

[0383] 2-9的合成例



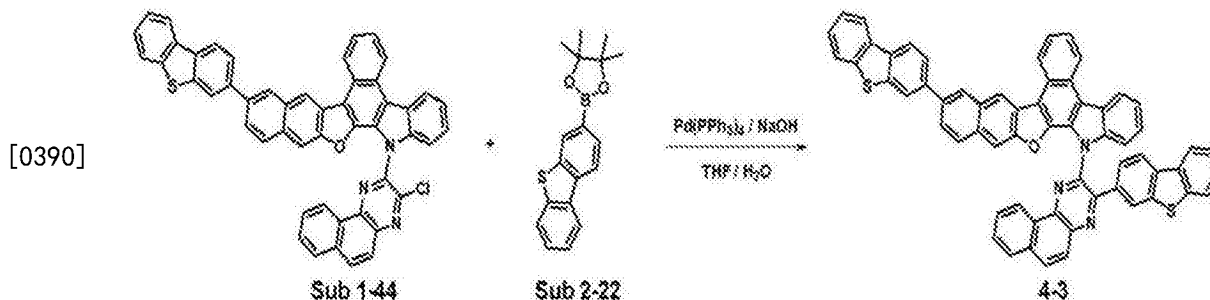
[0385] 将Sub1-25(11g, 19.64mmol)、THF(86ml)、Sub2-13(5.6g, 19.64mmol)、Pd(PPh₃)₄(0.91g, 0.79mmol)、NaOH(2.36g, 58.93mmol)、水(43ml), 与上述Sub1-1的合成方法相同的方法来进行合成, 从而获得生成物9.92g(收率: 74%)。

[0386] 3-16的合成例



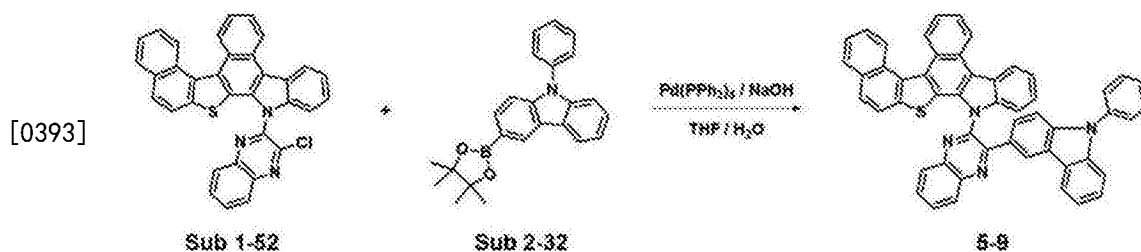
[0388] 将Sub1-29(11g, 18.77mmol)、THF(82ml)、Sub2-29(5.54g, 18.77mmol)、Pd(PPh₃)₄(0.87g, 0.75mmol)、NaOH(2.25g, 56.30mmol)、水(41ml), 与上述Sub1-1的合成方法相同的方法来进行合成, 从而获得生成物8.5g(收率: 63%)。

[0389] 4-3的合成例



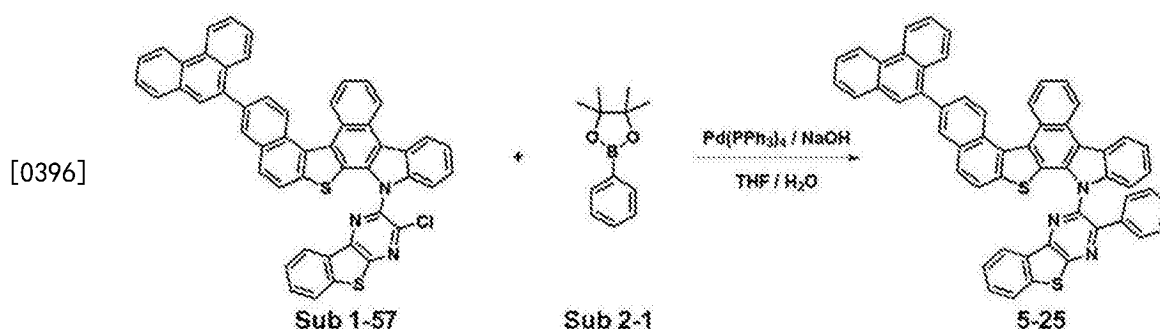
[0391] 将Sub1-44(11g, 14.62mmol)、THF(64ml)、Sub2-22(4.54g, 14.62mmol)、Pd(PPh₃)₄(0.68g, 0.58mmol)、NaOH(1.75g, 43.87mmol)、水(32ml), 与上述Sub1-1的合成方法相同的方法来进行合成, 从而获得生成物8.03g(收率: 61%)。

[0392] 5-9的合成例



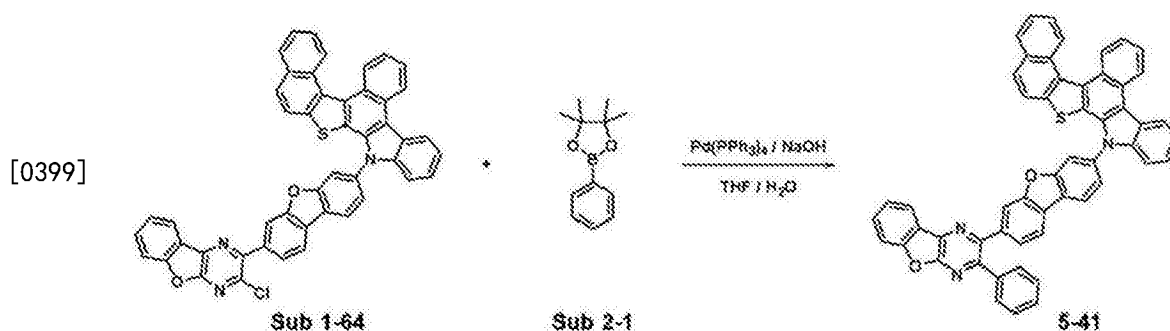
[0394] 将Sub1-52 (11g, 20.52mmol)、THF (90ml)、Sub2-32 (7.58g, 20.52mmol)、Pd (PPh₃)₄ (0.95g, 0.82mmol)、NaOH (2.46g, 61.56mmol)、水 (45ml), 以与上述Sub1-1的合成方法相同的方法来进行合成, 从而获得生成物10.98g (收率: 72%)。

[0395] 5-25的合成例



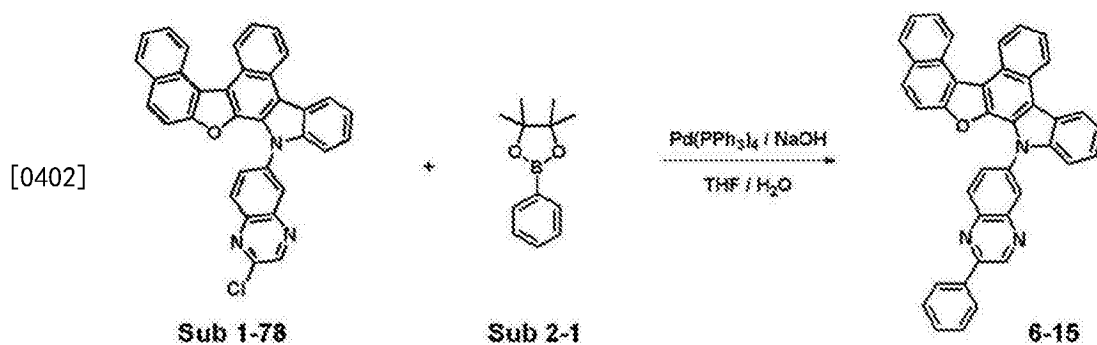
[0397] 将Sub1-57 (11g, 14.32mmol)、THF (63ml)、Sub2-1 (2.92g, 14.32mmol)、Pd (PPh₃)₄ (0.66g, 0.57mmol)、NaOH (1.72g, 42.95mmol)、水 (31ml), 以与上述Sub1-1的合成方法相同的方法来进行合成, 从而获得生成物8.35g (收率: 72%)。

[0398] 5-41的合成例



[0400] 将Sub1-64 (11g, 14.82mmol)、THF (65ml)、Sub2-1 (3.02g, 14.82mmol)、Pd (PPh₃)₄ (0.69g, 0.59mmol)、NaOH (1.78g, 44.46mmol)、水 (32ml), 以与上述Sub1-1的合成方法相同的方法来进行合成, 从而获得生成物8.83g (收率: 76%)。

[0401] 6-15的合成例



[0403] 将Sub1-78 (11g, 21.15mmol)、THF (93ml)、Sub2-1 (4.32g, 21.15mmol)、Pd (PPh₃)₄ (0.98g, 0.85mmol)、NaOH (2.54g, 63.46mmol)、水 (46ml), 以与上述Sub1-1的合成方法相同的方法来进行合成, 从而获得生成物9.27g (收率: 78%)。

[0404] [表3]

[0405]

化合物	FD-MS	化合物	FD-MS
1-1	m/z = 577.16 (C ₄₀ H ₂₃ N ₃ S = 577.71)	1-2	m/z = 627.18 (C ₄₄ H ₂₅ N ₃ S = 627.77)
1-4	m/z = 868.27 (C ₆₂ H ₃₆ N ₄ S = 869.06)	1-6	m/z = 683.15 (C ₂₆ H ₂₅ N ₃ S ₂ = 683.85)
1-8	m/z = 627.18 (C ₄₄ H ₂₅ N ₃ S = 627.77)	1-14	m/z = 868.27 (C ₆₂ H ₃₆ N ₄ S = 869.06)
1-16	m/z = 633.13 (C ₄₂ H ₂₃ N ₃ S ₂ = 633.79)	1-26	m/z = 683.15 (C ₂₆ H ₂₅ N ₃ S ₂ = 683.85)
1-30	m/z = 777.17 (C ₅₂ H ₂₈ FN ₃ S ₂ = 777.94)	1-34	m/z = 667.17 (C ₄₆ H ₂₅ N ₃ OS = 667.79)
1-39	m/z = 693.19 (C ₄₈ H ₂₇ N ₃ -OS = 693.82)	1-44	m/z = 578.16 (C ₃₉ H ₂₂ N ₄ S = 578.69)
1-45	m/z = 794.23 (C ₅₄ H ₃₀ N ₆ S = 794.94)	2-1	m/z = 561.18 (C ₄₀ H ₂₃ N ₃ O = 561.64)
2-4	m/z = 707.17 (C ₄₈ H ₂₅ N ₃ -O ₂ S = 707.81)	2-5	m/z = 743.20 (C ₅₂ H ₂₉ N ₃ -OS = 743.88)
2-7	m/z = 792.22 (C ₅₅ H ₂₈ N ₄ -O ₃ = 792.85)	2-9	m/z = 682.24 (C ₄₈ H ₂₂ D ₅ N ₃ O ₂ = 682.79)
3-1	m/z = 577.16 (C ₄₀ H ₂₃ N ₃ S = 577.71)	3-2	m/z = 627.18 (C ₄₄ H ₂₅ N ₃ S = 627.77)
3-4	m/z = 653.19 (C ₄₆ H ₂₇ N ₃ S = 653.80)	3-15	m/z = 733.16 (C ₅₀ H ₂₇ N ₃ S ₂ = 733.91)
3-16	m/z = 718.18 (C ₄₉ H ₂₆ N ₃ OS = 718.83)	3-19	m/z = 683.15 (C ₂₆ H ₂₅ N ₃ S ₂ = 683.85)
3-36	m/z = 693.19 (C ₄₈ H ₂₇ N ₃ -OS = 693.82)	3-44	m/z = 717.19 (C ₅₀ H ₂₇ N ₃ -OS = 717.85)
3-45	m/z = 799.18 (C ₅₄ H ₂₉ N ₃ -OS ₂ = 799.97)	4-1	m/z = 561.18 (C ₄₀ H ₂₃ N ₃ O = 561.64)
4-2	m/z = 687.23 (C ₅₀ H ₂₉ N ₃ O = 687.80)	4-3	m/z = 899.21 (C ₆₂ H ₃₃ N ₃ OS ₂ = 900.09)
4-9	m/z = 677.21 (C ₄₈ H ₂₇ N ₃ O ₂ = 677.76)	5-1	m/z = 577.16 (C ₄₀ H ₂₃ N ₃ S = 577.71)
5-2	m/z = 627.18 (C ₄₄ H ₂₅ N ₃ S = 627.77)	5-7	m/z = 632.21 (C ₄₄ H ₂₀ D ₅ N ₃ S = 632.80)
5-8	m/z = 677.19 (C ₄₈ H ₂₇ N ₃ S = 677.83)	5-9	m/z = 742.22 (C ₅₂ H ₃₀ N ₄ S = 742.90)
5-11	m/z = 818.25 (C ₅₈ H ₃₄ N ₄ S = 819.00)	5-24	m/z = 723.14 (C ₄₈ H ₂₅ N ₃ OS ₂ = 723.87)
5-25	m/z = 809.20 (C ₅₆ H ₃₁ N ₃ S ₂ = 810.01)	5-26	m/z = 709.16 (C ₄₈ H ₂₇ N ₃ S ₂ = 709.89)
5-31	m/z = 683.15 (C ₂₆ H ₂₅ N ₃ S ₂ = 683.85)	5-41	m/z = 783.20 (C ₅₄ H ₂₇ N ₃ O ₂ S = 783.91)
5-42	m/z = 617.16 (C ₄₂ H ₂₃ N ₃ OS = 617.73)	5-44	m/z = 733.22 (C ₅₁ H ₃₁ N ₃ OS = 733.89)
6-1	m/z = 611.20 (C ₄₄ H ₂₅ N ₃ O = 611.70)	6-2	m/z = 651.19 (C ₄₆ H ₂₅ N ₃ O ₂ = 651.73)
6-3	m/z = 743.20 (C ₅₂ H ₂₉ N ₃ OS = 743.88)	6-5	m/z = 713.25 (C ₅₂ H ₃₁ N ₃ O = 713.84)
6-7	m/z = 737.25 (C ₅₄ H ₃₁ N ₃ O = 737.86)	6-12	m/z = 918.30 (C ₆₆ H ₃₈ N ₄ O ₂ = 919.06)
6-15	m/z = 561.18 (C ₄₀ H ₂₃ N ₃ O = 561.64)		

[0406] 另外, 虽然在上述中说明了以化学式 (1) 表示的本发明的示例性的合成例, 这些均是基于Buchwald-Hartwig交联反应、Miyaura硼基化反应、Suzuki交联反应、分子内酸诱导的环化反应 (J. mater. Chem. 1999, 9, 2095.)、Pd (II)-催化氧化环化反应 (Org. Lett. 2011, 13, 5504)、Grignard反应、环脱水反应、PPh₃-介导的还原环化反应 (J. Org. Chem. 2005, 70, 5014.) 等的, 因此所属领域的技术人员也可以很容易地理解, 除了在具体合成例中明示的取代基之外, 即使与在化学式1中定义的另外的取代基 (R1、R2、R3、R4、L1、L2、Ar1等的取代基) 进行结合, 上述反应也是会进行的。

[0407] 有机电气元件的制造评价

[0408] [实施例1]红色有机电致发光元件(磷光主体)

[0409] 使用合成中获得的化合物作为发光层的发光主体材料,并根据通常的方法来制备了有机电致发光元件。首先,在形成于玻璃基板的ITO层(阳极)上真空蒸镀N1-(萘-2-基)-N4,N4-二(4-(萘-2-基(苯基)氨基)苯基)-N1-苯基苯-1,4-二胺(以下,简称为“2-TNATA”)膜来形成60nm厚度的空穴注入层。然后,在上述空穴注入层上作为空穴输送化合物,真空蒸镀60nm厚度的4,4-二(N-(1-萘基)-N-苯基氨基联苯(以下简称为“NPD”)来形成空穴输送层。在空穴输送层上使用上述发明的化合物1-1作为主体,使用 $(\text{piq})_2\text{Ir}(\text{acac})$ [二-(1-苯基异喹啉基)(乙酰丙酮)合铱(III)]作为掺杂物质,并以95:5的重量比进行掺杂,以30nm的厚度真空蒸镀了发光层。然后,在上述发光层上以5nm的厚度真空沉积(1,1'-二苯基-4-羟基)二(2-甲基-8-羟基喹啉)铝(以下,简称为“BA1q”)来形成空穴阻挡层,在上述空穴阻挡层上以40nm的厚度真空沉积二(10-羟基苯并[h]喹啉)铍(以下,简称为“BeBq₂”)来形成电子输送层。然后,以0.2nm的厚度沉积作为卤化碱金属的LiF来形成电子注入层,接着,以150nm的厚度沉积铝(A1)来形成阴极,制备出有机电致发光元件。

[0410] [实施例2]至[实施例44]红色有机电致发光元件

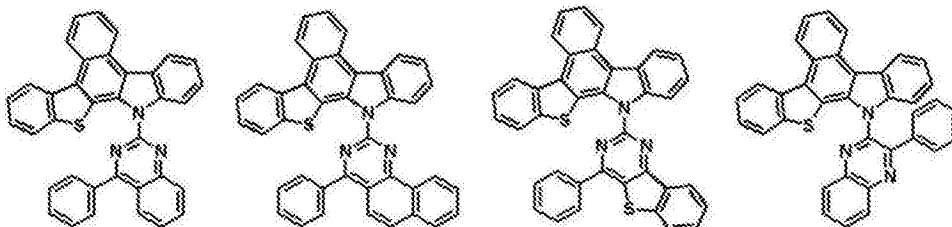
[0411] 除了使用以下表4所记载的本发明的实施例的化合物1-1来代替本发明的化合物作为发光层的基质材料之外,与上述实施例1相同的方法制成了有机电致发光元件。

[0412] [比较例1]至[比较例4]

[0413] 除了使用比较化合物1至比较化合物4中的一种来代替本发明的实施例的化合物1-1作为发光层的主体材料之外,与上述实施例1相同的方法制成了有机电致发光元件。

比较化合物1 比较化合物2 比较化合物3 比较化合物4

[0414]



[0415] 向通过本发明的实施例1至实施例44及比较例1至比较例4来制备的有机电致发光元件施加正向偏压直流电压,并利用美国photoresearch公司的PR-650来测定的电发光(EL)特性,在2500cd/m²基准亮度中,通过由韩国脉科学(mcscience)公司制作的寿命测定装置来测定了T95寿命。其结果如以下表4所示。

[0416] [表4]

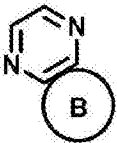
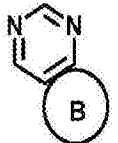
[0417]

	化合物	驱动电压 (v)	电流密度 (mA/cm ²)	亮度 (cd/m ²)	效率 (cd/A)	寿命 T(95)	CIE	
							X	Y
比较例(1)	比较化合物 1	6.1	26.9	2500	10.3	112.1	0.65	0.32
比较例(2)	比较化合物 2	6.0	24.0	2500	13.8	110.8	0.66	0.33
比较例(3)	比较化合物 3	5.8	22.9	2500	11.4	108.3	0.65	0.33
比较例(4)	比较化合物 4	5.6	18.5	2500	18.2	119.7	0.66	0.32
实施例(1)	化合物 1-1	5.2	14.6	2500	26.1	162.7	0.68	0.33
实施例(2)	化合物 1-2	5.2	14.5	2500	26.2	163.1	0.68	0.33
实施例(3)	化合物 1-4	5.2	14.2	2500	26.6	162.2	0.68	0.33
实施例(4)	化合物 1-6	5.2	14.4	2500	26.3	160.2	0.68	0.32
实施例(5)	化合物 1-8	5.2	14.1	2500	26.7	158.1	0.68	0.33
实施例(6)	化合物 1-16	5.1	14.1	2500	26.7	158.4	0.68	0.33
实施例(7)	化合物 1-26	5.1	14.0	2500	26.9	159.0	0.68	0.33
实施例(8)	化合物 1-34	5.2	13.2	2500	28.0	158.8	0.68	0.32
实施例(9)	化合物 1-39	5.2	13.6	2500	27.4	158.4	0.68	0.32
实施例(10)	化合物 1-44	5.2	14.2	2500	26.6	158.2	0.68	0.33
实施例(11)	化合物 5-1	5.2	13.9	2500	27.0	157.7	0.68	0.32
实施例(12)	化合物 5-2	5.2	14.1	2500	26.7	156.5	0.68	0.32
实施例(13)	化合物 5-7	5.2	14.4	2500	26.3	156.3	0.68	0.32
实施例(14)	化合物 5-8	5.2	14.2	2500	26.6	154.1	0.68	0.33
实施例(15)	化合物 5-9	5.2	13.8	2500	27.1	153.4	0.68	0.33
实施例(16)	化合物 5-11	5.2	14.5	2500	26.2	152.8	0.68	0.33
实施例(17)	化合物 5-24	5.1	14.7	2500	26.0	152.7	0.68	0.33
实施例(18)	化合物 5-26	5.1	14.4	2500	26.4	151.9	0.68	0.33
实施例(19)	化合物 5-31	5.1	14.2	2500	26.7	151.5	0.68	0.33
实施例(20)	化合物 5-42	5.2	13.7	2500	27.3	151.4	0.68	0.33
实施例(21)	化合物 5-44	5.2	14.0	2500	26.8	149.2	0.68	0.33
实施例(22)	化合物 3-1	5.3	14.2	2500	26.6	153.0	0.68	0.33
实施例(23)	化合物 3-2	5.3	14.6	2500	26.1	150.8	0.68	0.33
实施例(24)	化合物 3-4	5.3	14.4	2500	26.4	151.4	0.68	0.33
实施例(25)	化合物 3-15	5.3	14.5	2500	26.3	149.5	0.68	0.32
实施例(26)	化合物 3-19	5.2	14.2	2500	26.6	143.8	0.68	0.32
实施例(27)	化合物 3-36	5.3	14.0	2500	26.9	144.2	0.68	0.32
实施例(28)	化合物 3-44	5.3	14.1	2500	26.7	139.2	0.68	0.33
实施例(29)	化合物 3-45	5.3	14.0	2500	26.9	141.7	0.68	0.33
实施例(30)	化合物 2-1	5.3	14.6	2500	26.1	145.9	0.68	0.33
实施例(31)	化合物 2-4	5.2	14.4	2500	26.4	140.2	0.68	0.32

[0418]	实施例(32)	化合物 2-5	5.2	14.3	2500	26.5	139.4	0.68	0.33
	实施例(33)	化合物 2-9	5.3	14.0	2500	26.9	139.9	0.68	0.33
	实施例(34)	化合物 6-1	5.4	14.5	2500	26.2	138.8	0.68	0.33
	实施例(35)	化合物 6-2	5.4	14.5	2500	26.3	133.1	0.68	0.32
	实施例(36)	化合物 6-3	5.4	14.6	2500	26.1	134.2	0.68	0.32
	实施例(37)	化合物 6-5	5.4	14.4	2500	26.4	131.6	0.68	0.33
	实施例(38)	化合物 6-7	5.3	14.7	2500	26.0	135.3	0.68	0.33
	实施例(39)	化合物 6-9	5.2	14.8	2500	25.9	133.5	0.68	0.33
	实施例(40)	化合物 6-12	5.4	14.5	2500	26.3	131.4	0.68	0.32
	实施例(41)	化合物 6-15	5.6	15.0	2500	25.7	129.2	0.68	0.33
	实施例(42)	化合物 4-1	5.5	15.5	2500	25.1	133.1	0.68	0.33
	实施例(43)	化合物 4-2	5.5	16.4	2500	24.2	130.5	0.68	0.33
	实施例(44)	化合物 4-9	5.5	14.8	2500	25.9	130.2	0.68	0.32

[0419] 从上述表4的测量结果可知,将根据本发明的一实施例的化合物用作为发光层的磷光红色主体材料的实施例1至实施例44的情况下,相较于比较例1至比较例4,驱动电压、发光效率、寿命及色纯度显著得到了改善。

[0420] 现在本发明人正在进行降低消耗电力,提高效率及色纯度的研究,因此需要电子移动特性优秀的sub取代基。因此,欲导入相比于用作为现有的磷光红色主体的稠合咪啉型的取代基,电子移动特性优秀的稠合吡嗪型取代基,且实际上导入了如同于比较化合物4的形态的特定取代基(稠合吡嗪型),从而确认到由于电子移动特性优秀从而效率得到了提升,且表现出驱动电压降低的结果。

	稠合吡嗪型(本发明)	稠合咪啉型
[0421]	 <p>喹啉啉、苯并喹啉啉、二苯并喹啉啉、苯并噻吩并吡嗪、苯并呋喃并吡嗪等</p>	 <p>喹唑啉、苯并喹唑啉、二苯并喹唑啉、苯并噻吩并咪啉、苯并呋喃并咪啉等</p>
	(B环的定义与上述权利要求1的B环相同)	

[0422] 若比较比较例1-3与比较例4可确认到,相较于作为N的取代位置不同的sub取代基而结合有稠合咪啉的比较化合物1-3,作为sub取代基而具有喹啉啉(稠合吡嗪)的比较例4效率得到了提高,且驱动电压也显著得到改善。这说明虽然是相同的核,但由于与特定取代基结合而使得能量带隙不同,且引起高的电子迁移率。

[0423] 即,作为sub取代基来导入稠合吡嗪而非稠合咪啉的本发明的化合物的情况下,随着LUMO能级降低,使得从ETL到发光层的电子注入变得容易,且提高在发光层内的电荷均衡,因此判断为驱动电压与寿命得到改善。

[0424] 而且随着在6环杂环核心的特定位置,还稠合有一个苯,使得共轭长度变长,向掺杂剂的电荷移动变得容易,因此判断在效率方面表现出优秀的结果。这是因为在核的特定位置形成苯环的情况下可确认到,PL波长更红移,(比较化合物4、发明化合物1-1的PL数据比较:从527nm到555nm形成长波长化)

[0425] 使主体的波长长波长化,从而向掺杂物的电荷移动变得容易,可确认到效率及色纯度得到提高。

[0426] 结果,随着在稠合吡嗪型取代基的效果(高的电荷载子移动率、提高驱动电压)及核的特定位置,还形成有追加的苯环(7环),而具有最为适合的HOMO/LUMO、T1值及能量带隙,以便使从主体到掺杂物的电荷移动通畅,使得元件整体的性能得到了提高。

[0427] <比较化合物1至4及本发明化合物1-1的PL数据>

[0428] [表5]

[0429]

	比较化合物1	比较化合物2	比较化合物3	比较化合物4	发明化合物1-1
PL (nm)	515	497	507	527	555

[0430] 参照图4

[0431] 以上的说明仅为例示,只要是本发明所属技术领域的普通技术人员,就能在不脱离本发明的本质特性的范围内进行多种变形。因此,本说明书所公开的实施例并不用于限定本发明,而是用于说明本发明,本发明的思想和范围不会因这种实施例而受到限制。本发明的保护范围应根据发明要求保护范围来解释,与其等同范围内的所有技术应解释为包括在本发明的保护范围。

100

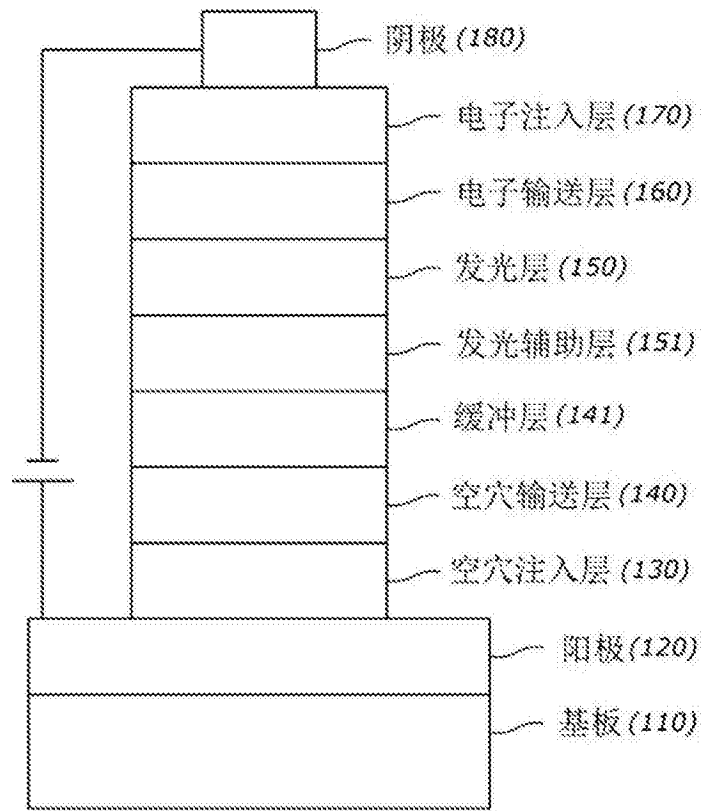


图1

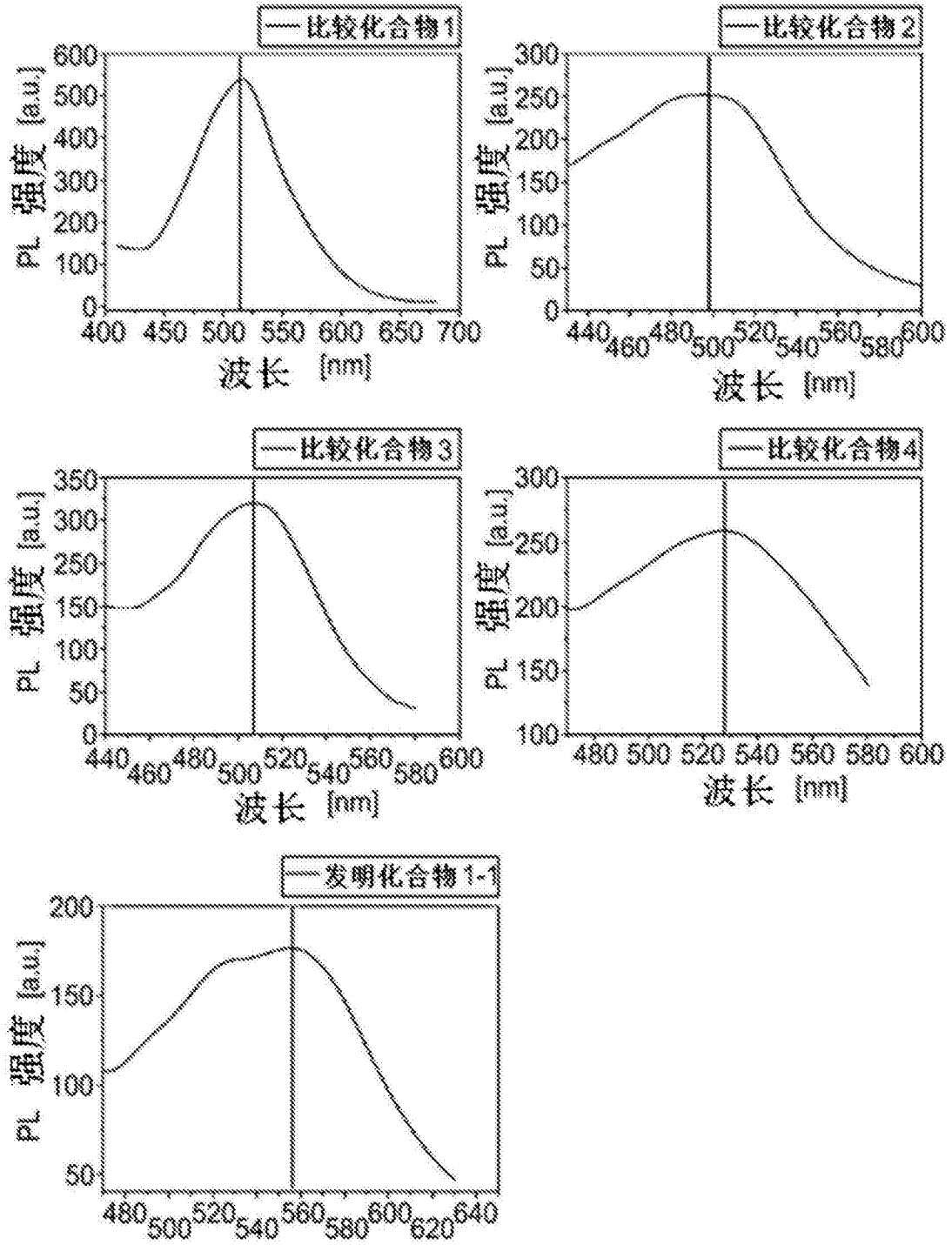


图2

