



(12) 发明专利申请

(10) 申请公布号 CN 114679908 A

(43) 申请公布日 2022. 06. 28

(21) 申请号 202180005587.3

(22) 申请日 2021.06.21

(30) 优先权数据

2020-108518 2020.06.24 JP

(85) PCT国际申请进入国家阶段日

2022.03.28

(86) PCT国际申请的申请数据

PCT/JP2021/023489 2021.06.21

(87) PCT国际申请的公布数据

WO2021/261461 JA 2021.12.30

(71) 申请人 出光兴产株式会社

地址 日本国东京都

(72) 发明人 安川圭一 中野裕美 松本尚人

荻原俊成

(74) 专利代理机构 上海立群专利代理事务所

(普通合伙) 31291

专利代理师 陈亦欧 毛立群

(51) Int.Cl.

C07D 495/04 (2006.01)

C07D 491/048 (2006.01)

C07D 519/00 (2006.01)

C09K 11/06 (2006.01)

H01L 51/50 (2006.01)

H01L 51/54 (2006.01)

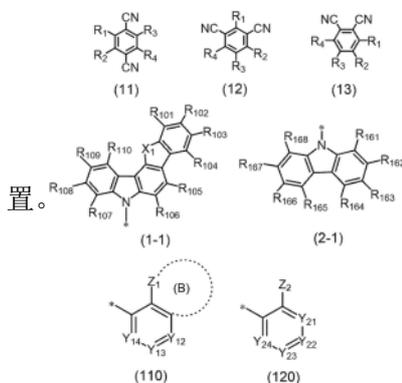
权利要求书19页 说明书147页 附图4页

(54) 发明名称

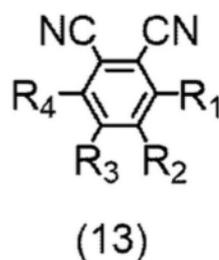
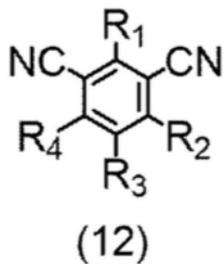
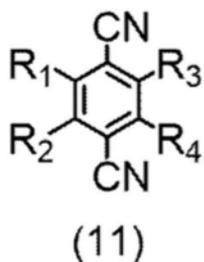
化合物、用于有机电致发光元件的材料、有机电致发光元件及电子设备

(57) 摘要

本发明提供一种化合物,以式(11)~(13)中的任一个表示。R₁~R₄分别独立地为以式(1-1)等表示的基团D₁或以式(2-1)等表示的基团D₂,R₁~R₄中的至少1个为基团D₁,R₁~R₄中的至少1个为基团D₂,在式(1-1)以及(2-1)的情况下,X₁为O原子或S原子,R₁₀₁~R₁₁₀以及R₁₆₁~R₁₆₈分别独立地为H原子或取代基等,其中,在至少1个基团D₁中,R₁₀₁~R₁₁₀中的至少1个为以式(110)或式(120)表示的基团,Z₁为C原子等,环(B)为芳香族烃环等,Y₁₂~Y₁₄分别独立地为CR_{10A}等,Y₂₁~Y₂₄分别独立地为CR_{20A}等,Z₂为芳基等,*表示键合位



1. 一种化合物,其特征在于,
以下述通式(11)~(13)中的任一个表示,
[化1]



在所述通式(11)~(13)中,

$R_1 \sim R_4$ 分别独立地为,

以下述通式(1-1)~(1-6)中的任一个表示的基团 D_1 、或者

以下述通式(2-1)~(2-4)中的任一个表示的基团 D_2 ,

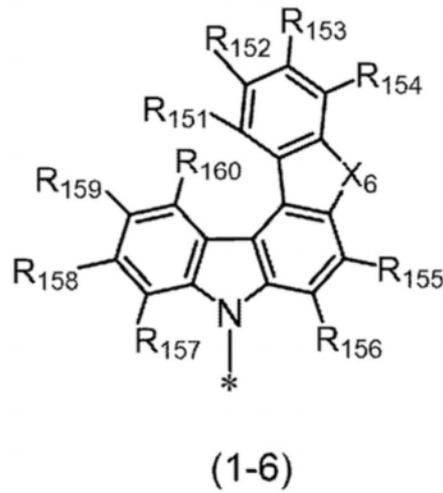
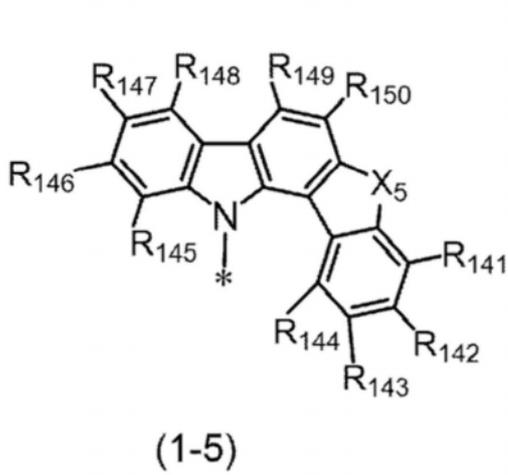
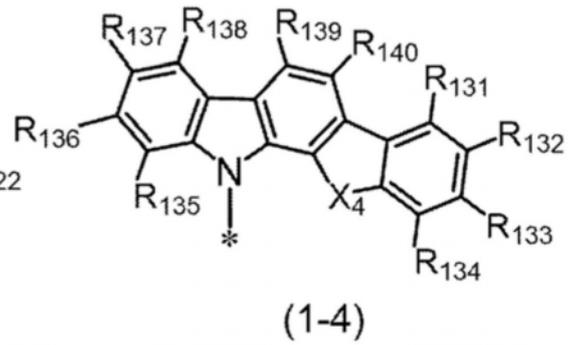
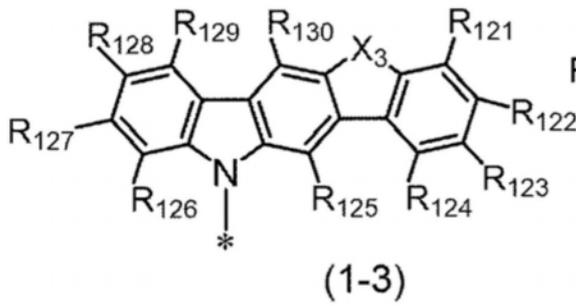
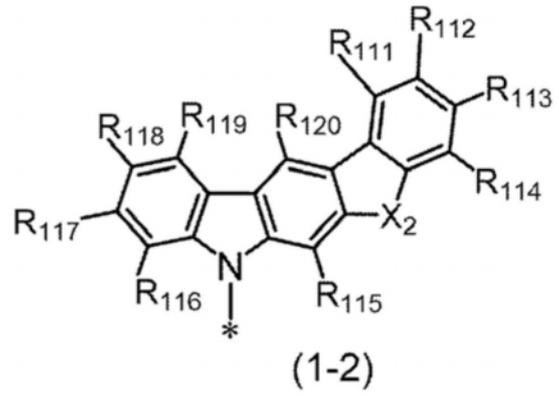
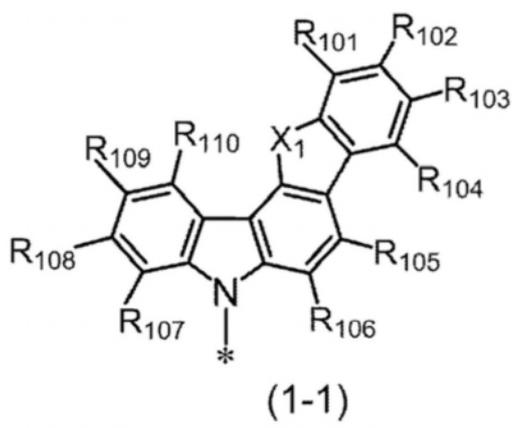
$R_1 \sim R_4$ 中至少1个为基团 D_1 ,

$R_1 \sim R_4$ 中至少1个为基团 D_2 ,

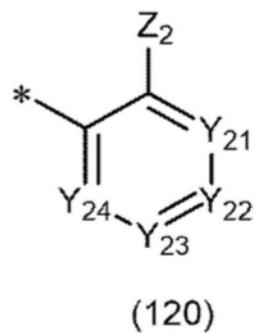
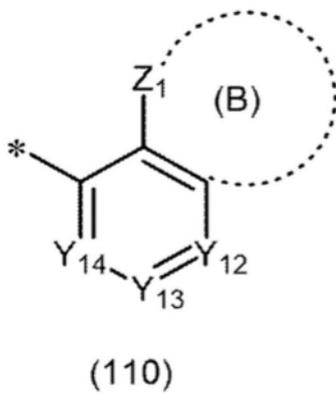
在存在多个基团 D_1 的情况下,多个基团 D_1 彼此相同或不同,

在存在多个基团 D_2 的情况下,多个基团 D_2 彼此相同或不同,

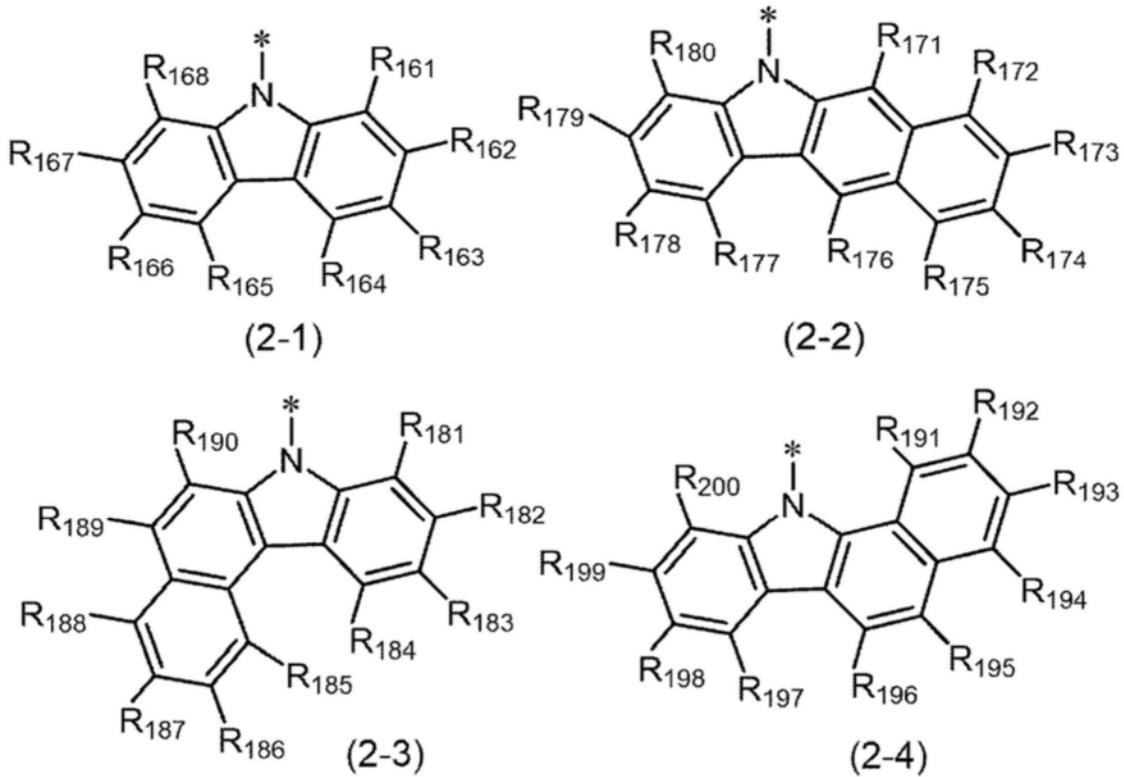
[化2]



[化3]



[化4]



在所述通式 (1-1) ~ (1-6) 中, $X_1 \sim X_6$ 分别独立地为氧原子或硫原子,

$R_{101} \sim R_{160}$ 分别独立地为氢原子、取代基、以所述通式 (110) 表示的基团或以所述通式 (120) 表示的基团,

其中, 在至少 1 个基团 D_1 中, $R_{101} \sim R_{160}$ 中的至少 1 个为以所述通式 (110) 表示的基团或以所述通式 (120) 表示的基团,

在所述通式 (110) 中,

Z_1 为环 (B) 的构成原子, 且为碳原子或氮原子,

包含 Z_1 的环 (B) 为取代或未取代的成环碳数为 6~30 的芳香族烃环、或者取代或未取代的成环碳数为 5~30 的杂环,

$Y_{12} \sim Y_{14}$ 分别独立地为氮原子或 CR_{10A} ,

R_{10A} 分别独立地为氢原子或取代基, 或者多个 R_{10A} 中相邻的 2 个以上构成的组中的 1 组以上互相键合而形成环, 或者环 (B) 与和环 (B) 相邻的 1 个 R_{10A} 互相键合而形成环, 或者环 (B) 与多个 R_{10A} 中相邻的 2 个以上构成的组中的 1 组以上互相键合而形成环,

在所述通式 (120) 中,

Z_2 为,

取代或未取代的成环碳数为 6~30 的芳基、或者

取代或未取代的成环原子数为 5~30 的杂环基,

$Y_{21} \sim Y_{24}$ 分别独立地为氮原子或 CR_{20A} ,

R_{20A} 分别独立地为氢原子或取代基, 或者

多个 R_{20A} 中相邻的 2 个以上构成的组中的 1 组以上互相键合而形成环,

多个 R_{10A} 彼此相同或不同,

多个 R_{20A} 彼此相同或不同,

在所述通式 (2-1) ~ (2-4) 中, $R_{161} \sim R_{168}$ 以及 $R_{171} \sim R_{200}$ 分别独立地为氢原子或取代基,
所述通式 (1-1) ~ (1-6) 中的以所述通式 (110) 表示的基团以及以所述通式 (120) 表示的基团以外的作为取代基的 $R_{101} \sim R_{160}$ 、所述通式 (110) 中的作为取代基的 R_{10A} 、所述通式 (120) 中的作为取代基的 R_{20A} 、还有所述通式 (2-1) ~ (2-4) 中的作为取代基的 $R_{161} \sim R_{168}$ 以及 $R_{171} \sim R_{200}$ 分别独立地为,

卤素原子、

氰基、

取代或未取代的成环碳数为6~30的芳基、

取代或未取代的成环原子数为5~30的杂环基、

取代或未取代的碳数为1~30的烷基、

取代或未取代的碳数为1~30的卤代烷基、

取代或未取代的碳数为2~30的烯基、

取代或未取代的碳数为2~30的炔基、

取代或未取代的碳数为3~30的烷基甲硅烷基、

取代或未取代的成环碳数为6~60的芳基甲硅烷基、

取代或未取代的成环碳数为6~60的芳基磷酰基、

羟基、

取代或未取代的碳数为1~30的烷氧基、

取代或未取代的成环碳数为6~30的芳氧基、

以 $-N(Rz)_2$ 表示的基团、

硫醇基、

取代或未取代的碳数为1~30的烷硫基、

取代或未取代的成环碳数为7~30的芳烷基、

取代锆基、

取代氧化磷基、

硝基、

取代硼基、或者

取代或未取代的成环碳数为6~30的芳硫基、

Rz 为,

取代或未取代的成环碳数为6~30的芳基、

取代或未取代的成环原子数为5~30的杂环基、或者

取代或未取代的碳数为1~30的烷基、

$-N(Rz)_2$ 中的2个 Rz 相同或不同,

在所述通式 (1-1) ~ (1-6) 中,*分别独立地表示与所述通式 (11) ~ (13) 中的六元环的碳原子键合的位置,

在所述通式 (110) 中,*表示与所述通式 (1-1) ~ (1-6) 中的六元环的碳原子键合的位置,

在所述通式 (120) 中,*表示与所述通式 (1-1) ~ (1-6) 中的六元环的碳原子键合的位置,

在所述通式(2-1)~(2-4)中,*分别独立地表示与所述通式(11)~(13)中的六元环的碳原子键合的位置。

2.如权利要求1所述的化合物,其特征在于,

在选择3个基团 D_1 作为 $R_1\sim R_4$ 的基团时,该所选择的3个基团 D_1 全部由所述通式(1-1)~(1-6)中的1个通式表示,且为包含取代基在内彼此相同的基团,

在选择2个基团 D_1 作为 $R_1\sim R_4$ 的基团时,该所选择的2个基团 D_1 全部由所述通式(1-1)~(1-6)中的1个通式表示,且为包含取代基在内彼此相同的基团。

3.如权利要求1或2所述的化合物,其特征在于,

在选择3个基团 D_2 作为 $R_1\sim R_4$ 的基团时,该所选择的3个基团 D_2 全部由所述通式(2-1)~(2-4)中的1个通式表示,且为包含取代基在内彼此相同的基团,

在选择2个基团 D_2 作为 $R_1\sim R_4$ 的基团时,该所选择的2个基团 D_2 全部由所述通式(2-1)~(2-4)中的1个通式表示,且为包含取代基在内彼此相同的基团。

4.如权利要求1~3的任一项所述的化合物,其特征在于,

所述通式(1-1)中的 $R_{107}\sim R_{110}$ 中的任1个为以所述通式(110)表示的基团或以通式(120)表示的基团,或者

所述通式(1-2)中的 $R_{116}\sim R_{119}$ 中的任1个为以所述通式(110)表示的基团或以通式(120)表示的基团,或者

所述通式(1-3)中的 $R_{126}\sim R_{129}$ 中的任1个为以所述通式(110)表示的基团或以通式(120)表示的基团,或者

所述通式(1-4)中的 $R_{135}\sim R_{138}$ 中的任1个为以所述通式(110)表示的基团或以通式(120)表示的基团,或者

所述通式(1-5)中的 $R_{145}\sim R_{148}$ 中的任1个为以所述通式(110)表示的基团或以通式(120)表示的基团,或者

所述通式(1-6)中的 $R_{157}\sim R_{160}$ 中的任1个为以所述通式(110)表示的基团或以通式(120)表示的基团。

5.如权利要求1~4的任一项所述的化合物,其特征在于,

所述基团 D_2 为以所述通式(2-1)表示的基团。

6.如权利要求1~5的任一项所述的化合物,其特征在于,

$R_1\sim R_4$ 中仅1个为所述基团 D_1 。

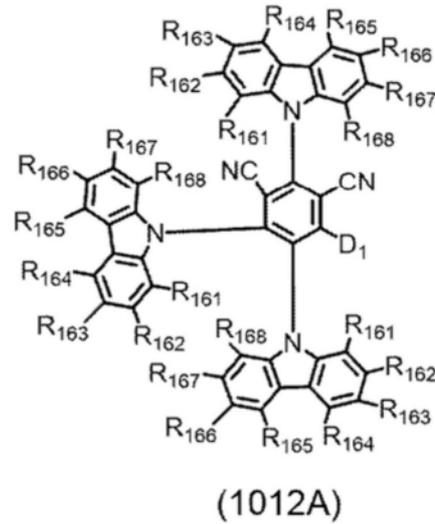
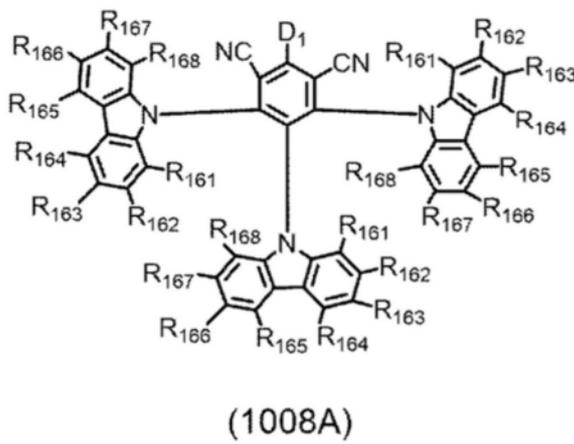
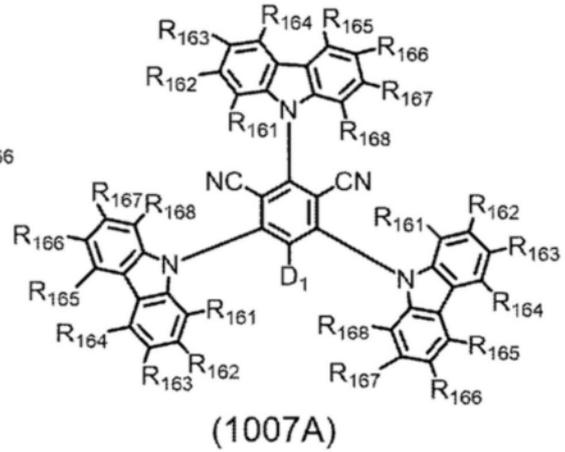
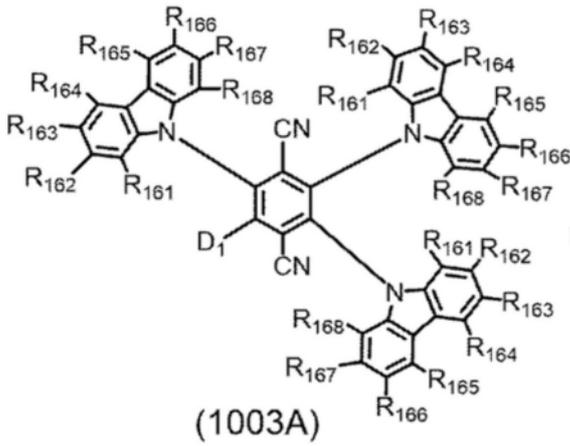
7.如权利要求1~5的任一项所述的化合物,其特征在于,

$R_1\sim R_4$ 中仅2个为所述基团 D_1 。

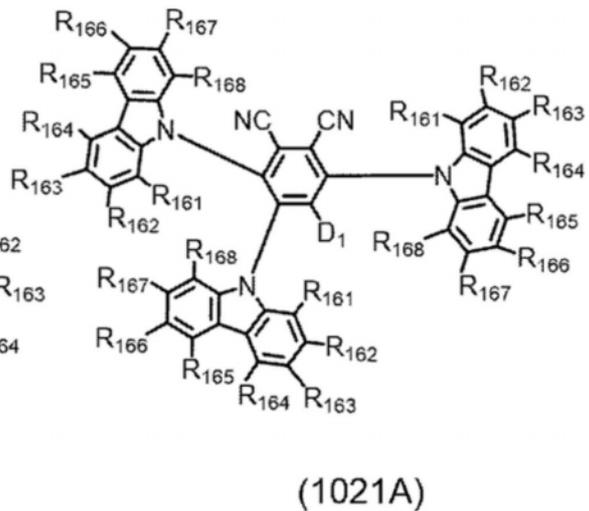
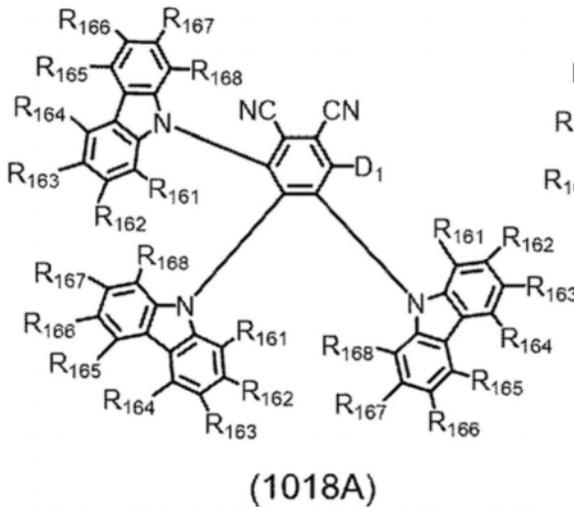
8.如权利要求1~6的任一项所述的化合物,其特征在于,

所述化合物以下述通式(1003A)、通式(1007A)、通式(1008A)、通式(1012A)、通式(1018A)以及通式(1021A)中的任一个表示,

[化5]



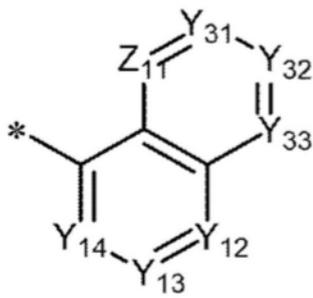
[化6]



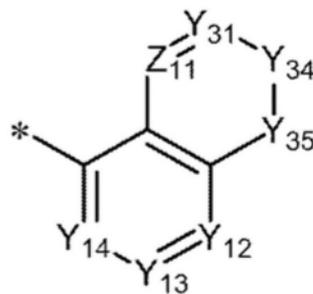
在所述通式(1003A)、通式(1007A)、通式(1008A)、通式(1012A)、通式(1018A)以及通式(1021A)中, D_1 与以所述通式(1-1)~(1-6)中的任一个表示的基团 D_1 同义, $R_{161} \sim R_{168}$ 分别独立地与所述通式(2-1)中的 $R_{161} \sim R_{168}$ 同义。

9. 如权利要求1~8的任一项所述的化合物, 其特征在于, 所述基团 D_1 为以所述通式(1-4)或(1-5)表示的基团。

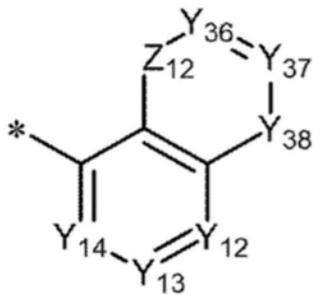
10. 如权利要求1~9的任一项所述的化合物,其特征在于,
所述基团 D_2 中的 $R_{161} \sim R_{168}$ 以及 $R_{171} \sim R_{200}$ 为氢原子。
11. 如权利要求1~10的任一项所述的化合物,其特征在于,
 $R_1 \sim R_4$ 中的1个为基团 D_1 的情况下,在1个基团 D_1 中, $R_{101} \sim R_{160}$ 中仅1个为以所述通式(110)表示的基团或以所述通式(120)表示的基团,
 $R_1 \sim R_4$ 中的2个为基团 D_1 的情况下,在各自的基团 D_1 中, $R_{101} \sim R_{160}$ 中仅1个为以所述通式(110)表示的基团或以通式(120)表示的基团,
 $R_1 \sim R_4$ 中的3个为基团 D_1 的情况下,在各自的基团 D_1 中, $R_{101} \sim R_{160}$ 中仅1个为以所述通式(110)表示的基团或以通式(120)表示的基团。
12. 如权利要求1~11的任一项所述的化合物,其特征在于,
在至少1个基团 D_1 中, $R_{101} \sim R_{160}$ 中的至少1个为以所述通式(110)表示的基团。
13. 如权利要求1~12的任一项所述的化合物,其特征在于,
 $R_1 \sim R_4$ 中的1个为基团 D_1 的情况下,在1个基团 D_1 中, $R_{101} \sim R_{160}$ 中仅1个为以所述通式(110)表示的基团,
 $R_1 \sim R_4$ 中的2个为基团 D_1 的情况下,在各自的基团 D_1 中, $R_{101} \sim R_{160}$ 中仅1个为以所述通式(110)表示的基团,
 $R_1 \sim R_4$ 中的3个为基团 D_1 的情况下,在各自的基团 D_1 中, $R_{101} \sim R_{160}$ 中仅1个为以所述通式(110)表示的基团。
14. 如权利要求1~13的任一项所述的化合物,其特征在于,
所述通式(110)中的 Z_1 为碳原子。
15. 如权利要求1~14的任一项所述的化合物,其特征在于,
以所述通式(110)表示的基团为以下述通式(111)~(117)中的任一个表示的基团,
[化7]



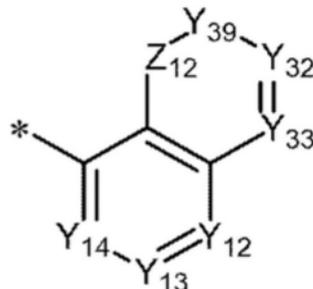
(111)



(112)



(113)



(114)

在所述通式 (111) 中,

$Y_{12} \sim Y_{14}$ 分别独立地为氮原子或 CR_{10A} ,

Z_{11} 以及 $Y_{31} \sim Y_{33}$ 分别独立地为氮原子或 CR_{30A} ,

R_{10A} 以及 R_{30A} 分别独立地为氢原子或取代基, 或者 1 个或多个 R_{30A} 以及 1 个或多个 R_{10A} 构成的组中相邻的 2 个以上构成的组中的 1 组以上互相键合而形成环,

作为取代基的 R_{10A} 以及作为取代基的 R_{30A} 分别独立地与所述通式 (110) 中的作为取代基的 R_{10A} 同义,

在所述通式 (112) 中,

$Y_{12} \sim Y_{14}$ 分别独立地为氮原子或 CR_{10A} ,

Z_{11} 以及 Y_{31} 分别独立地为氮原子或 CR_{30A} ,

Y_{34} 以及 Y_{35} 分别独立地为 NR_{30B} 、氧原子、硫原子或 $CR_{30C}R_{30D}$,

R_{10A} 、 R_{30A} 、 R_{30B} 、 R_{30C} 以及 R_{30D} 分别独立地为氢原子或取代基, 或者一个或多个 R_{10A} 、一个或多个 R_{30A} 、一个或多个 R_{30B} 、一个或多个 R_{30C} 以及一个或多个 R_{30D} 构成的组中相邻的 2 个以上构成的组中的 1 组以上互相键合而形成环,

作为取代基的 R_{10A} 、还有作为取代基的 R_{30A} 、 R_{30B} 、 R_{30C} 以及 R_{30D} 分别独立地与所述通式 (110) 中的作为取代基的 R_{10A} 同义,

在所述通式 (113) 中,

$Y_{12} \sim Y_{14}$ 分别独立地为氮原子或 CR_{10A} ,

Z_{12} 为 NR_{30B} 或 $CR_{30C}R_{30D}$,

Y_{38} 为 NR_{30B} 、氧原子、硫原子或 $CR_{30C}R_{30D}$,

Y_{36} 以及 Y_{37} 分别独立地为氮原子或 CR_{30A} ,

R_{10A} 、 R_{30A} 、 R_{30B} 、 R_{30C} 以及 R_{30D} 分别独立地为氢原子或取代基, 或者一个或多个 R_{10A} 、一个或

多个 R_{30A} 、一个或多个 R_{30B} 、一个或多个 R_{30C} 以及一个或多个 R_{30D} 构成的组中相邻的2个以上构成的组中的1组以上互相键合而形成环，

作为取代基的 R_{10A} 、还有作为取代基的 R_{30A} 、 R_{30B} 、 R_{30C} 以及 R_{30D} 分别独立地与所述通式(110)中的作为取代基的 R_{10A} 同义，

在所述通式(114)中，

$Y_{12} \sim Y_{14}$ 分别独立地为氮原子或 CR_{10A} ，

Z_{12} 为 NR_{30B} 或 $CR_{30C}R_{30D}$ ，

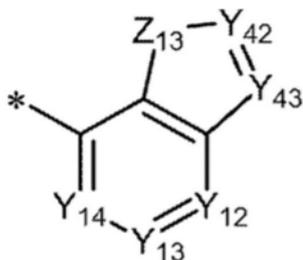
Y_{39} 为 NR_{30B} 、氧原子、硫原子或 $CR_{30C}R_{30D}$ ，

Y_{32} 以及 Y_{33} 分别独立地为氮原子或 CR_{30A} ，

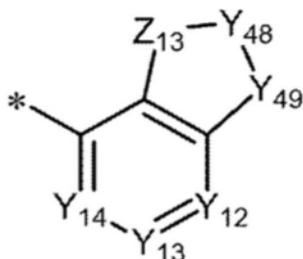
R_{10A} 、 R_{30A} 、 R_{30B} 、 R_{30C} 以及 R_{30D} 分别独立地为氢原子或取代基，或者一个或多个 R_{10A} 、一个或多个 R_{30A} 、一个或多个 R_{30B} 、一个或多个 R_{30C} 以及一个或多个 R_{30D} 构成的组中相邻的2个以上构成的组中的1组以上互相键合而形成环，

作为取代基的 R_{10A} 、还有作为取代基的 R_{30A} 、 R_{30B} 、 R_{30C} 以及 R_{30D} 分别独立地与所述通式(110)中的作为取代基的 R_{10A} 同义，

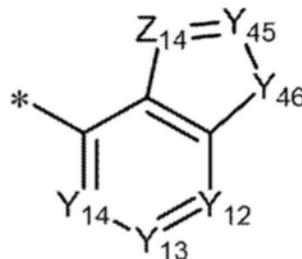
[化8]



(115)



(116)



(117)

在所述通式(115)中，

$Y_{12} \sim Y_{14}$ 分别独立地为氮原子或 CR_{10A} ，

Z_{13} 为 NR_{30B} 或 $CR_{30C}R_{30D}$ ，

Y_{42} 以及 Y_{43} 分别独立地为氮原子或 CR_{30A} ，

R_{10A} 、 R_{30A} 、 R_{30B} 、 R_{30C} 以及 R_{30D} 分别独立地为氢原子或取代基，或者一个或多个 R_{10A} 、一个或多个 R_{30A} 、一个或多个 R_{30B} 、一个或多个 R_{30C} 以及一个或多个 R_{30D} 构成的组中相邻的2个以上构成的组中的1组以上互相键合而形成环，

作为取代基的 R_{10A} 、还有作为取代基的 R_{30A} 、 R_{30B} 、 R_{30C} 以及 R_{30D} 分别独立地与所述通式(110)中的作为取代基的 R_{10A} 同义，

在所述通式(116)中，

$Y_{12} \sim Y_{14}$ 分别独立地为氮原子或 CR_{10A} ，

Z_{13} 为 NR_{30B} 或 $CR_{30C}R_{30D}$ ，

Y_{48} 以及 Y_{49} 分别独立地为 NR_{30B} 、氧原子、硫原子或 $CR_{30C}R_{30D}$ ，

R_{10A} 、 R_{30A} 、 R_{30B} 、 R_{30C} 以及 R_{30D} 分别独立地为氢原子或取代基，或者一个或多个 R_{10A} 、一个或多个 R_{30A} 、一个或多个 R_{30B} 、一个或多个 R_{30C} 以及一个或多个 R_{30D} 构成的组中相邻的2个以上构成的组中的1组以上互相键合而形成环，

作为取代基的 R_{10A} 、还有作为取代基的 R_{30B} 、 R_{30C} 以及 R_{30D} 分别独立地与所述通式(110)中的作为取代基的 R_{10A} 同义，

在所述通式(117)中，

$Y_{12} \sim Y_{14}$ 分别独立地为氮原子或 CR_{10A} ，

Z_{14} 以及 Y_{45} 分别独立地为氮原子或 CR_{30A} ，

Y_{46} 为 NR_{30B} 、氧原子、硫原子或 $CR_{30C}R_{30D}$ ，

R_{10A} 、 R_{30A} 、 R_{30B} 、 R_{30C} 以及 R_{30D} 分别独立地为氢原子或取代基，或者一个或多个 R_{10A} 、一个或多个 R_{30A} 、一个或多个 R_{30B} 、一个或多个 R_{30C} 以及一个或多个 R_{30D} 构成的组中相邻的2个以上构成的组中的1组以上互相键合而形成环，

作为取代基的 R_{10A} 、还有作为取代基的 R_{30A} 、 R_{30B} 、 R_{30C} 以及 R_{30D} 分别独立地与所述通式(110)中的作为取代基的 R_{10A} 同义，

在所述通式(111)～(117)中，存在多个 R_{10A} 的情况下，多个 R_{10A} 彼此相同或不同，存在多个 R_{30A} 的情况下，多个 R_{30A} 彼此相同或不同，存在多个 R_{30B} 的情况下，多个 R_{30B} 彼此相同或不同，存在多个 R_{30C} 的情况下，多个 R_{30C} 彼此相同或不同，存在多个 R_{30D} 的情况下，多个 R_{30D} 彼此相同或不同。

16. 如权利要求1～15的任一项所述的化合物，其特征在于，

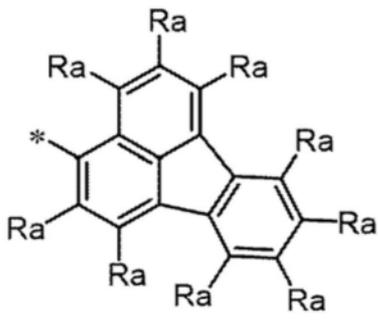
所述通式(110)中的 $Y_{12} \sim Y_{14}$ 为 CR_{10A} ，

所述通式(120)中的 $Y_{21} \sim Y_{24}$ 为 CR_{20A} 。

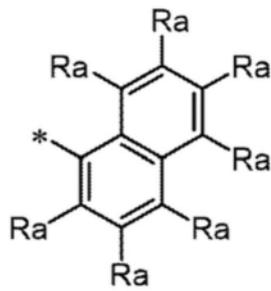
17. 如权利要求1～16的任一项所述的化合物，其特征在于，

以所述通式(110)表示的基团为以下述通式(b1)～(b14)中的任一个表示的基团，

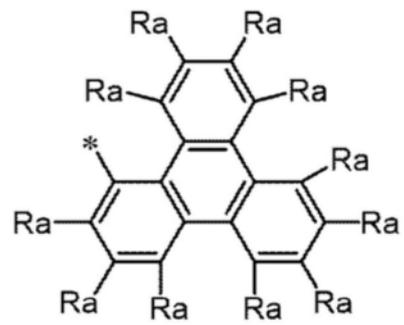
[化9]



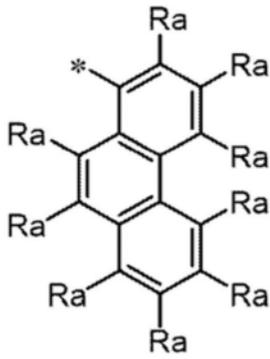
(b1)



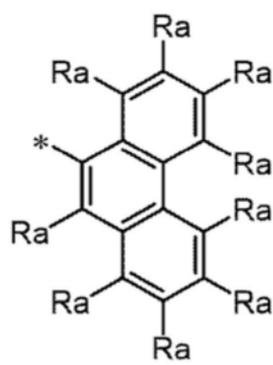
(b2)



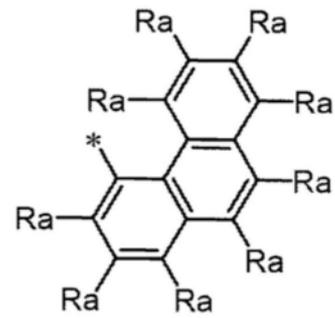
(b3)



(b4)

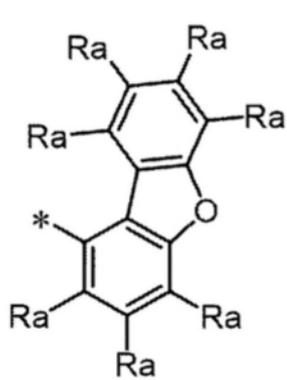


(b5)

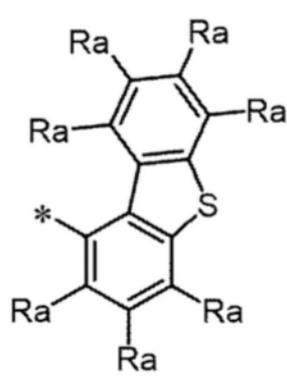


(b6)

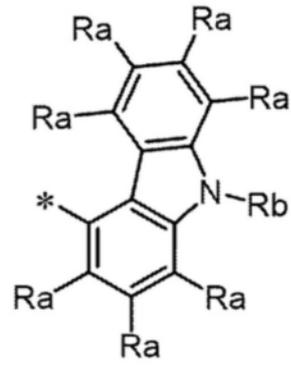
[化10]



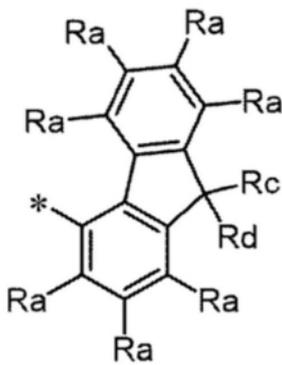
(b7)



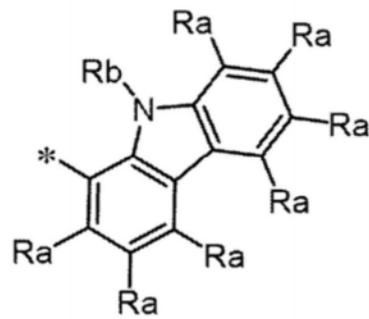
(b8)



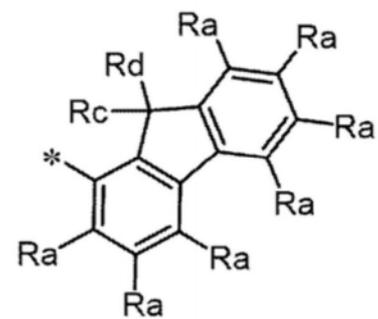
(b9)



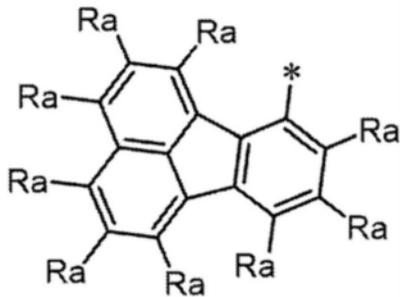
(b10)



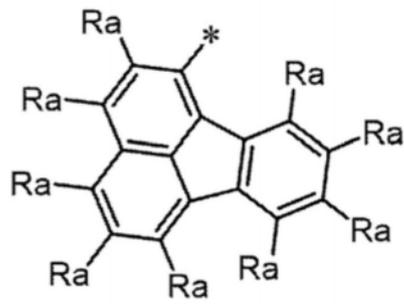
(b11)



(b12)



(b13)



(b14)

在所述通式 (b1) ~ (b14) 中, Ra 为氢原子或取代基, 或者相邻的 Ra 构成的组中的 1 组以上的组互相键合而形成环,

多个 Ra 彼此相同或不同,

Rb 为氢原子或取代基,

Rc 以及 Rd 分别独立地为氢原子或取代基, 或者 Rc 以及 Rd 构成的组互相键合而形成环, 作为取代基的 Ra、Rb、Rc 以及 Rd 与所述通式 (110) 中的作为取代基的 R_{10A} 同义。

18. 如权利要求 17 所述的化合物, 其特征在于,

相邻的 Ra 构成的组中的 1 组以上的组不互相键合形成环,

Rc 以及 Rd 构成的组不互相键合形成环。

19. 如权利要求 1~18 的任一项所述的化合物, 其特征在于,

以所述通式 (110) 表示的基团为,

取代或未取代的萘基、
取代或未取代的菲基、
取代或未取代的蒽基、
取代或未取代的苯并菲基、
取代或未取代的苯并蒽基、
取代或未取代的三亚苯基、
取代或未取代的芴基、
取代或未取代的苯并芴基、
取代或未取代的二苯并芴基、
取代或未取代的荧蒽基、
取代或未取代的二苯并呋喃基、
取代或未取代的二苯并噻吩基、或者
取代或未取代的咪唑基。

20. 如权利要求1~11的任一项所述的化合物,其特征在於,
在至少1个基团 D_1 中, $R_{101} \sim R_{160}$ 中的至少1个为以所述通式 (120) 表示的基团。

21. 如权利要求20所述的化合物,其特征在於,

$R_1 \sim R_4$ 中的1个为基团 D_1 的情况下,在1个基团 D_1 中, $R_{101} \sim R_{160}$ 中仅1个为以所述通式 (120) 表示的基团,

$R_1 \sim R_4$ 中的2个为基团 D_1 的情况下,在各自的基团 D_1 中, $R_{101} \sim R_{160}$ 中仅1个为以所述通式 (120) 表示的基团,

$R_1 \sim R_4$ 中的3个为基团 D_1 的情况下,在各自的基团 D_1 中, $R_{101} \sim R_{160}$ 中仅1个为以所述通式 (120) 表示的基团。

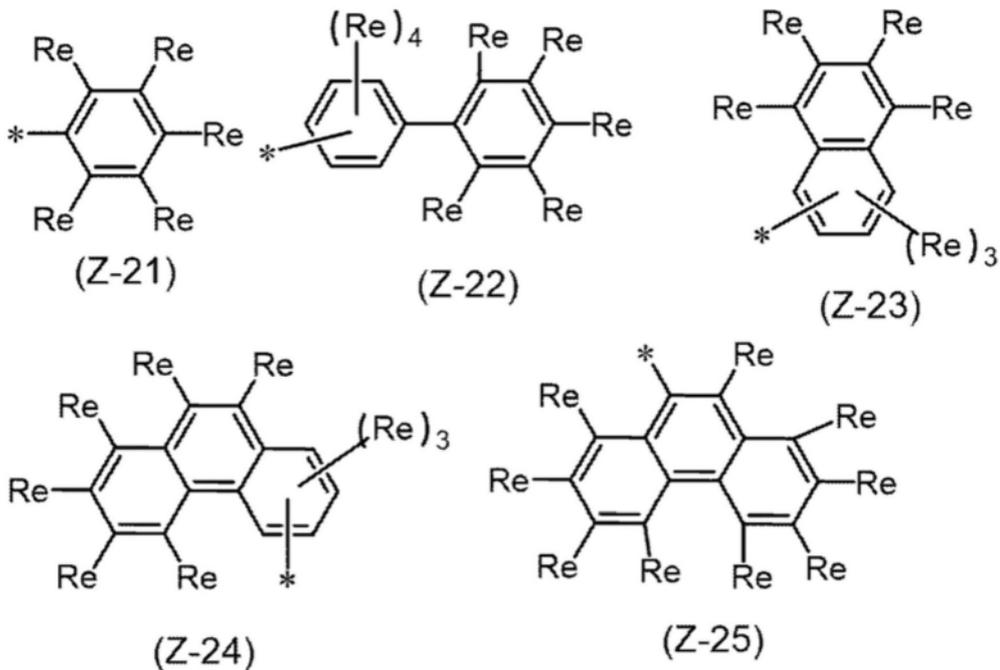
22. 如权利要求20或21所述的化合物,其特征在於,

所述通式 (120) 中的 Z_2 为,

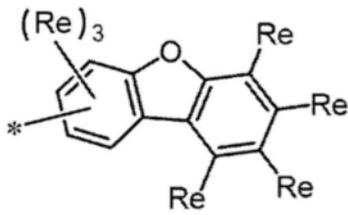
取代或未取代的苯基、
取代或未取代的萘基、
取代或未取代的蒽基、
取代或未取代的菲基、
取代或未取代的芘基、
取代或未取代的蒹基、
取代或未取代的苯并菲基、
取代或未取代的苯并蒹基、
取代或未取代的苯并蒽基、
取代或未取代的三亚苯基、
取代或未取代的芴基、
取代或未取代的9,9-二甲基芴基、
取代或未取代的苯并芴基、
取代或未取代的二苯并芴基、

取代或未取代的联苯基、
 取代或未取代的三联苯基、
 取代或未取代的四联苯基、
 取代或未取代的蒽基、
 取代或未取代的二苯并呋喃基、
 取代或未取代的二苯并噻吩基、
 取代或未取代的咪唑基、
 取代或未取代的吡啶基、
 取代或未取代的嘧啶基、或者
 取代或未取代的三嗪基。

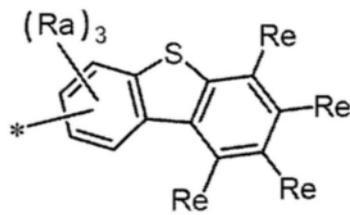
23. 如权利要求20~22的任一项所述的化合物,其特征在于,
 所述通式(120)中的 Z_2 为以下述通式(Z21)~(Z31)中的任一个表示的基团,
 [化11]



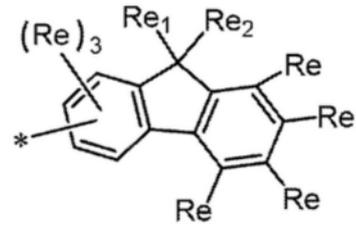
[化12]



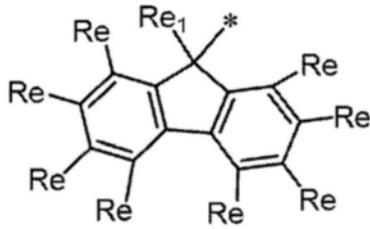
(Z-26)



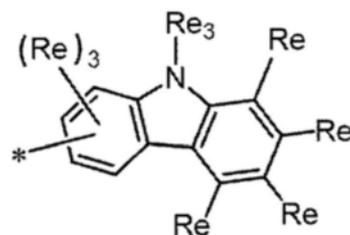
(Z-27)



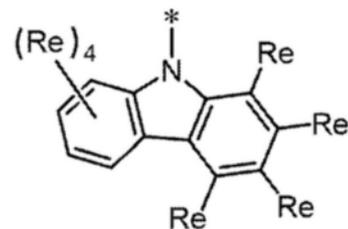
(Z-28)



(Z-29)



(Z-30)



(Z-31)

在所述通式 (Z-21) ~ (Z-31) 中, Re 为氢原子或取代基, 或者相邻的 Re 构成的组中的 1 组以上的组互相键合而形成环, 多个 Re 彼此相同或不同,

Re₁ 以及 Re₂ 分别独立地为氢原子或取代基, 或者 Re₁ 以及 Re₂ 构成的组互相键合而形成环,

Re₃ 为氢原子或取代基,

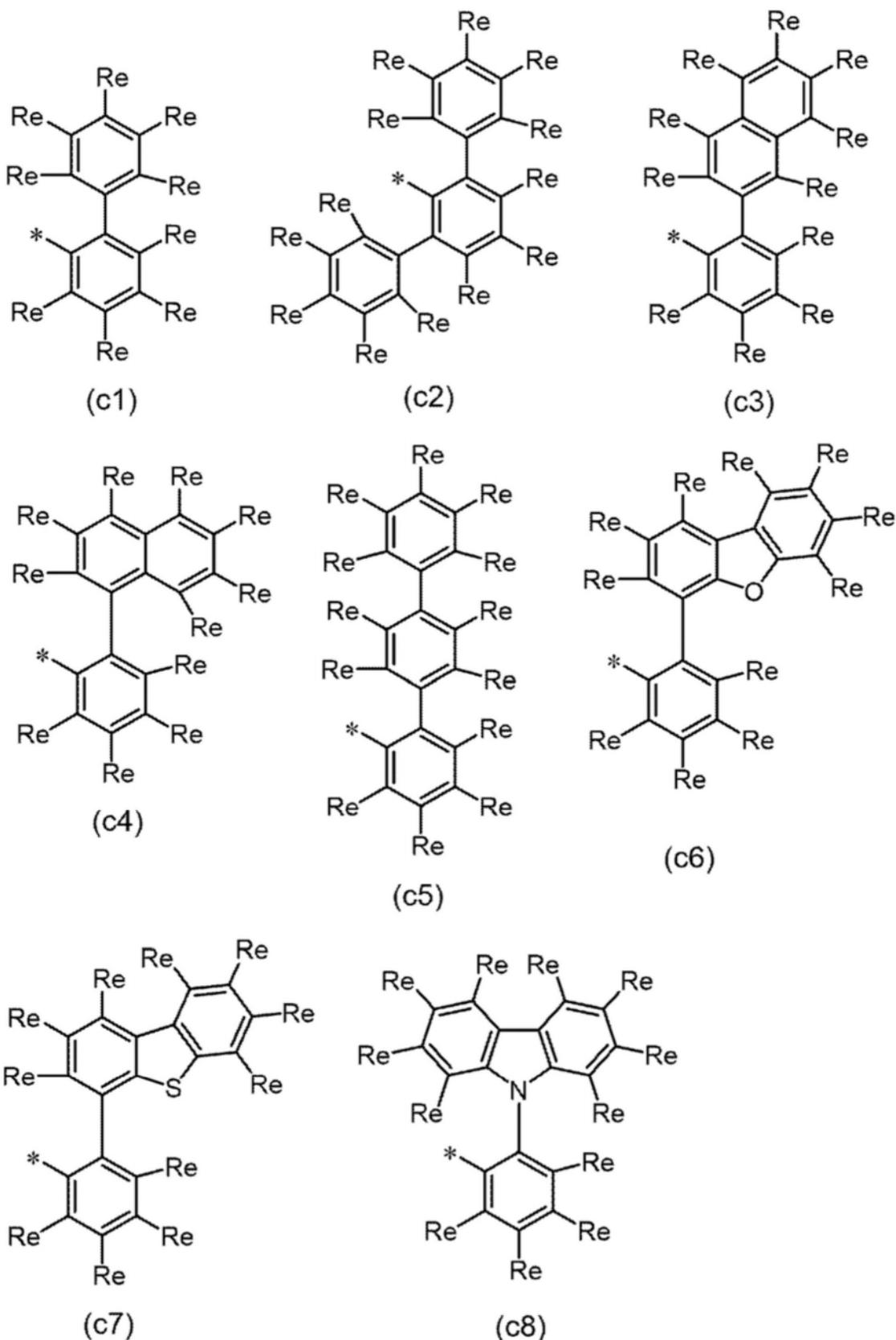
作为取代基的 Re、Re₁、Re₂ 以及 Re₃ 分别独立地与所述通式 (120) 中的作为取代基的 R_{20A} 同义, * 分别独立地表示与所述通式 (120) 中的六元环的碳原子键合的位置。

24. 如权利要求 20~23 的任一项所述的化合物, 其特征在于,

在权利要求 21 或 22 所述的化合物中,

以所述通式 (120) 表示的基团为以下述通式 (c1) ~ (c8) 中的任一个表示的基团,

[化 13]



在所述通式 (c1) ~ (c8) 中, Re 为氢原子或取代基,
 多个 Re 彼此相同或不同,
 作为取代基的 Re 与所述通式 (120) 中的作为取代基的 R_{20A} 同义。

25. 如权利要求1~24的任一项所述的化合物,其特征在于,所述基团D₁中的X₁~X₆为氧原子。

26. 如权利要求1~24的任一项所述的化合物,其特征在于,所述基团D₁中的X₁~X₆为硫原子。

27. 如权利要求1~26的任一项所述的化合物,其特征在于,所述化合物为以所述通式(11)表示的化合物。

28. 如权利要求1~26的任一项所述的化合物,其特征在于,所述化合物为以所述通式(12)表示的化合物。

29. 如权利要求1~26的任一项所述的化合物,其特征在于,所述化合物为以所述通式(13)表示的化合物。

30. 如权利要求1~29的任一项所述的化合物,其特征在于,R₁₀₁~R₁₆₀、R₁₆₁~R₁₆₈、R₁₇₁~R₂₀₀、R_{10A}以及R_{20A}分别独立地为,氢原子、

卤素原子、

取代或未取代的成环碳数为6~14的芳基、

取代或未取代的成环原子数为5~14的杂环基、

取代或未取代的碳数为1~6的烷基、

取代或未取代的碳数为1~30的卤代烷基、

取代或未取代的碳数为3~6的烷基甲硅烷基、

取代或未取代的碳数为1~6的烷氧基、

取代或未取代的成环碳数为6~14的芳氧基、

以-N(Rz)₂表示的基团、

取代或未取代的碳数为1~6的烷硫基、或者

取代或未取代的成环碳数为6~14的芳硫基。

31. 如权利要求1~30的任一项所述的化合物,其特征在于,R₁₀₁~R₁₆₀、R₁₆₁~R₁₆₈、R₁₇₁~R₂₀₀、R_{10A}以及R_{20A}分别独立地为,氢原子、

卤素原子、

未取代的成环碳数为6~14的芳基、

未取代的成环原子数为5~14的杂环基、

未取代的碳数为1~6的烷基、

未取代的碳数为1~30的卤代烷基、

未取代的碳数为3~6的烷基甲硅烷基、

未取代的碳数为1~6的烷氧基、

未取代的成环碳数为6~14的芳氧基、

未取代的碳数为2~12的烷基氨基、

未取代的碳数为1~6的烷硫基、或者

未取代的成环碳数为6~14的芳硫基。

32. 如权利要求1~31的任一项所述的化合物,其特征在于,

$R_{101} \sim R_{160}$ 、 $R_{161} \sim R_{168}$ 、 $R_{171} \sim R_{200}$ 、 R_{10A} 以及 R_{20A} 分别独立地为，
氢原子、

未取代的成环碳数为6~14的芳基、

未取代的成环原子数为5~14的杂环基、或者

未取代的碳数为1~6的烷基。

33. 如权利要求1~32的任一项所述的化合物，其特征在于，

$R_{101} \sim R_{160}$ 中，以所述通式 (110) 表示的基团以及以 (120) 表示的基团以外为氢原子，且

$R_{161} \sim R_{168}$ 以及 $R_{171} \sim R_{200}$ 为氢原子。

34. 如权利要求1~33的任一项所述的化合物，其特征在于，

R_{10A} 以及 R_{20A} 为氢原子，

所述环 (B) 为未取代的成环碳数为6~30的芳香族烃环、或者未取代的成环碳数为5~30的杂环，

Z_2 为未取代的成环碳数为6~30的芳基、或者未取代的成环原子数为5~30的杂环基。

35. 一种用于有机电致发光元件的材料，其特征在于，包含权利要求1~34的任一项所述的化合物。

36. 一种有机电致发光元件，其特征在于，具有：

阳极；

阴极；

第一有机层，包含在所述阳极与所述阴极之间，

所述第一有机层包含第一化合物，

所述第一化合物为权利要求1~34的任一项所述的化合物。

37. 如权利要求36所述的有机电致发光元件，其特征在于，

所述第一有机层为发光层。

38. 如权利要求36或37所述的有机电致发光元件，其特征在于，

所述第一有机层包含所述第一化合物，还包含第二化合物，

所述第二化合物为荧光发光性的化合物。

39. 如权利要求38所述的有机电致发光元件，其特征在于，

所述第一化合物的单重态能量 $S_1(\text{Mat1})$ 与所述第二化合物的单重态能量 $S_1(\text{Mat2})$ 满足下述数学式 (数1) 的关系。

$$S_1(\text{Mat1}) > S_1(\text{Mat2}) \quad (\text{数1})$$

40. 如权利要求38或39所述的有机电致发光元件，其特征在于，

所述第一有机层包含所述第一化合物以及所述第二化合物，还包含第三化合物，

所述第一化合物的单重态能量 $S_1(\text{Mat1})$ 与所述第三化合物的单重态能量 $S_1(\text{Mat3})$ 满足下述数学式 (数2) 的关系。

$$S_1(\text{Mat3}) > S_1(\text{Mat1}) \quad (\text{数2})$$

41. 如权利要求36或37所述的有机电致发光元件，其特征在于，

所述第一有机层包含所述第一化合物，还包含第四化合物，

所述第一化合物的单重态能量 $S_1(\text{Mat1})$ 与所述第四化合物的单重态能量 $S_1(\text{Mat4})$ 满足下述数学式 (数3) 的关系。

$S_1(\text{Mat4}) > S_1(\text{Mat1})$ (数3)

42. 如权利要求36~41的任一项所述的有机电致发光元件,其特征在于,所述第一有机层不包含金属络合物。

43. 如权利要求36~42的任一项所述的有机电致发光元件,其特征在于,所述第一化合物为延迟荧光性的化合物。

44. 一种电子设备,其特征在于,搭载有权利要求36~43的任一项所述的有机电致发光元件。

化合物、用于有机电致发光元件的材料、有机电致发光元件及电子设备

技术领域

[0001] 本发明涉及化合物、用于有机电致发光元件的材料、有机电致发光元件以及电子设备。

背景技术

[0002] 若向有机电致发光元件(以下有时称为“有机EL元件”)施加电压,则空穴从阳极被注入发光层,而电子从阴极被注入发光层。然后,在发光层中,被注入的空穴与电子复合,形成激子。这时,根据电子自旋的统计定理,单重态激子以25%的比例生成,以及三重态激子以75%的比例生成。

[0003] 使用来自单重态激子的发光的荧光型有机EL元件正应用于手机以及电视机等全彩显示器,但内量子效率25%被称为极限。因此,正在进行用于提高有机EL元件的性能的研究。

[0004] 此外,期待除单重态激子以外还利用三重态激子,从而使有机EL元件更有效地发光。在这样的背景下,提出有利用了热活化延迟荧光(以下有时简称为“延迟荧光”)的高效的荧光型有机EL元件并进行研究。

[0005] 例如,对TADF (Thermally Activated Delayed Fluorescence,热活化延迟荧光)机制(mechanism)进行研究。该TADF机制是在使用单重态能级与三重态能级的能量差(ΔST)较小的材料的情况下,利用在热作用下产生从三重态激子向单重态激子的逆系间窜越的现象的机制。关于热活化延迟荧光,例如记载于“安达千波矢编,《有机半导体的器件物性》,讲谈社,2012年4月1日发行,261~268页”。

[0006] 作为示出热活化延迟荧光性(TADF特性)的化合物,例如已知有在分子内供体部位与受体部位键合的化合物。

[0007] 例如,专利文献1中公开有在二氰基苯上咪唑等被取代为苯并咪喃并咪唑、苯并噻吩并咪唑等而得的化合物等。

[0008] 现有技术文献

[0009] 专利文献

[0010] 专利文献1:国际公开第2020/022378号公报

发明内容

[0011] 发明要解决的技术问题

[0012] 为了提高显示器等电子设备的性能,期望进一步提高有机EL元件的性能。

[0013] 作为有机EL元件的性能,可例举发光效率。作为用于提高发光效率的要素,可例举使用光致发光量子产率(PLQY:photoluminescence quantum yield)较高的化合物。

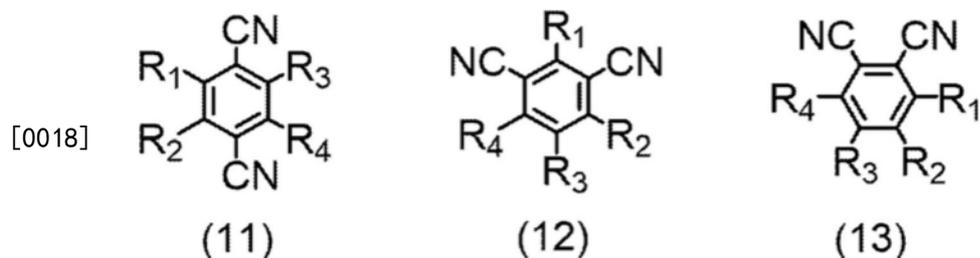
[0014] 本发明的目的在于提供一种能够提供高性能的有机电致发光元件的化合物。特别地,本发明的目的在于提供一种PLQY较高的化合物。此外,本发明的目的还在于提供一种包

含PLQY较高的化合物的用于有机电致发光元件的材料以及有机电致发光元件、和搭载有该有机电致发光元件的电子设备。

[0015] 用于解决上述技术问题的方案

[0016] 根据本发明的一方案,可提供以下述通式(11)~(13)中的任一个表示的化合物。

[0017] [化1]



[0019] (在所述通式(11)~(13)中,

[0020] $R_1 \sim R_4$ 分别独立地为,

[0021] 以下述通式(1-1)~(1-6)中的任一个表示的基团 D_1 、或者

[0022] 以下述通式(2-1)~(2-4)中的任一个表示的基团 D_2 ,

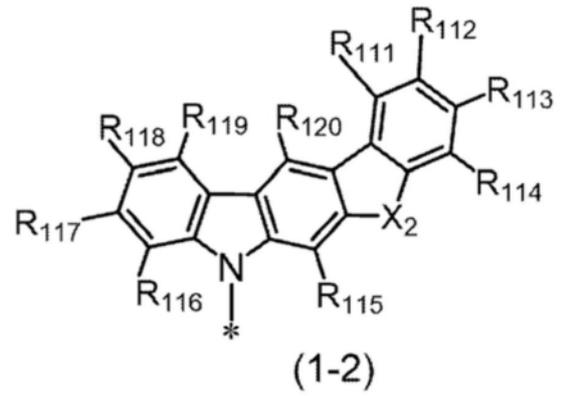
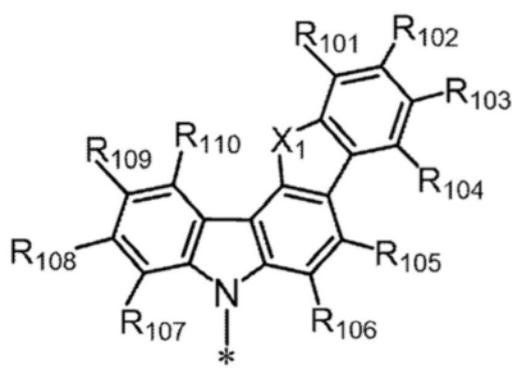
[0023] $R_1 \sim R_4$ 中至少1个为基团 D_1 ,

[0024] $R_1 \sim R_4$ 中至少1个为基团 D_2 ,

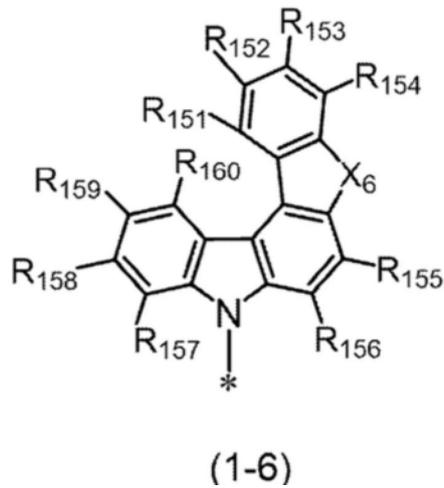
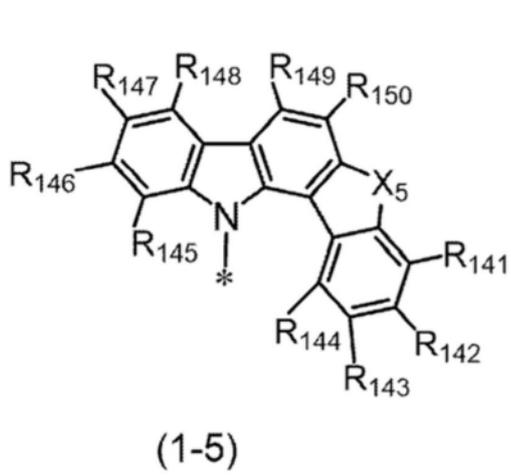
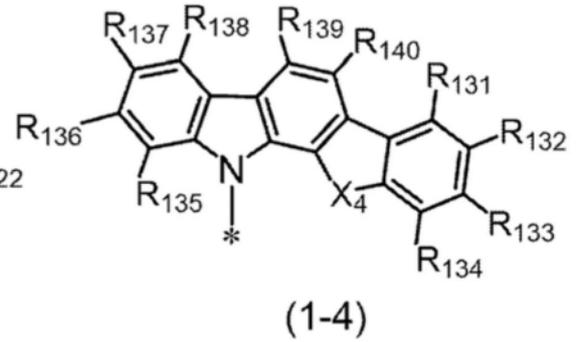
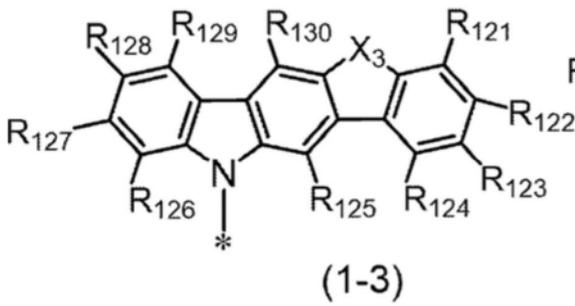
[0025] 在存在多个基团 D_1 的情况下,多个基团 D_1 彼此相同或不同,

[0026] 在存在多个基团 D_2 的情况下,多个基团 D_2 彼此相同或不同。)

[0027] [化2]

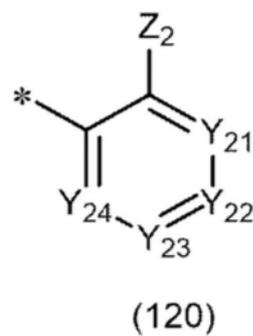
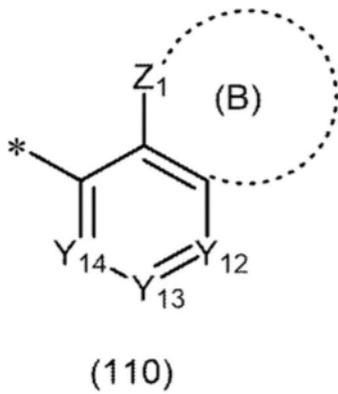


[0028]

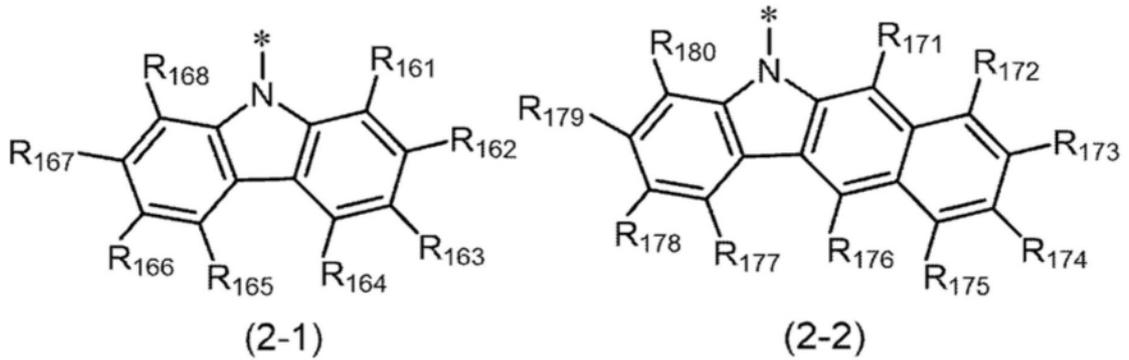


[0029] [化3]

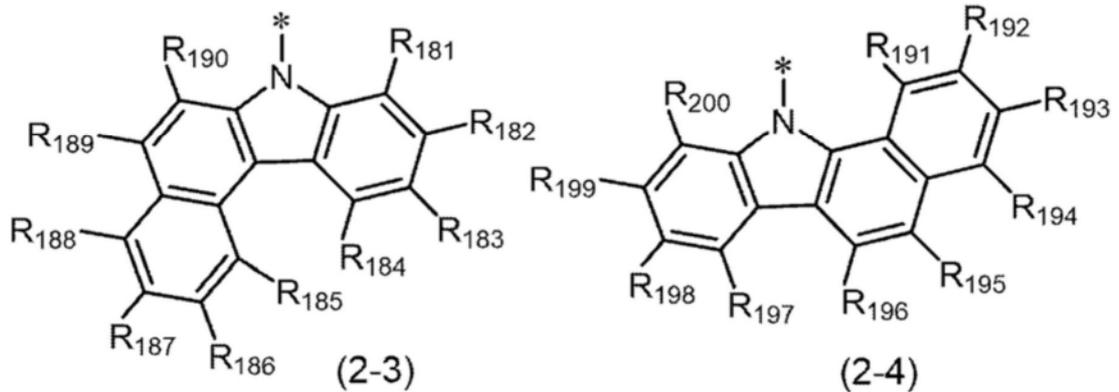
[0030]



[0031] [化4]



[0032]

[0033] (在所述通式(1-1)~(1-6)中, $X_1 \sim X_6$ 分别独立地为氧原子或硫原子,[0034] $R_{101} \sim R_{160}$ 分别独立地为氢原子、取代基、以所述通式(110)表示的基团或以所述通式(120)表示的基团,[0035] 其中,在至少1个基团 D_1 中, $R_{101} \sim R_{160}$ 中的至少1个为以所述通式(110)表示的基团或以所述通式(120)表示的基团,

[0036] 在所述通式(110)中,

[0037] Z_1 为环(B)的构成原子,且为碳原子或氮原子,[0038] 包含 Z_1 的环(B)为取代或未取代的成环碳数为6~30的芳香族烃环、或者取代或未取代的成环碳数为5~30的杂环,[0039] $Y_{12} \sim Y_{14}$ 分别独立地为氮原子或 CR_{10A} ,[0040] R_{10A} 分别独立地为氢原子或取代基,或者多个 R_{10A} 中相邻的2个以上构成的组中的1组以上互相键合而形成环,或者环(B)与和环(B)相邻的1个 R_{10A} 互相键合而形成环,或者环(B)与多个 R_{10A} 中相邻的2个以上构成的组中的1组以上互相键合而形成环,

[0041] 在所述通式(120)中,

[0042] Z_2 为,

[0043] 取代或未取代的成环碳数为6~30的芳基、或者

[0044] 取代或未取代的成环原子数为5~30的杂环基,

[0045] $Y_{21} \sim Y_{24}$ 分别独立地为氮原子或 CR_{20A} ,[0046] R_{20A} 分别独立地为氢原子或取代基,或者[0047] 多个 R_{20A} 中相邻的2个以上构成的组中的1组以上互相键合而形成环,[0048] 多个 R_{10A} 彼此相同或不同,[0049] 多个 R_{20A} 彼此相同或不同,

- [0050] 在所述通式 (2-1) ~ (2-4) 中, $R_{161} \sim R_{168}$ 以及 $R_{171} \sim R_{200}$ 分别独立地为氢原子或取代基,
- [0051] 所述通式 (1-1) ~ (1-6) 中的以所述通式 (110) 表示的基团以及以所述通式 (120) 表示的基团以外的作为取代基的 $R_{101} \sim R_{160}$ 、所述通式 (110) 中的作为取代基的 R_{10A} 、所述通式 (120) 中的作为取代基的 R_{20A} 、还有所述通式 (2-1) ~ (2-4) 中的作为取代基的 $R_{161} \sim R_{168}$ 以及 $R_{171} \sim R_{200}$ 分别独立地为,
- [0052] 卤素原子、
- [0053] 氰基、
- [0054] 取代或未取代的成环碳数为6~30的芳基、
- [0055] 取代或未取代的成环原子数为5~30的杂环基、
- [0056] 取代或未取代的碳数为1~30的烷基、
- [0057] 取代或未取代的碳数为1~30的卤代烷基、
- [0058] 取代或未取代的碳数为2~30的烯基、
- [0059] 取代或未取代的碳数为2~30的炔基、
- [0060] 取代或未取代的碳数为3~30的烷基甲硅烷基、
- [0061] 取代或未取代的成环碳数为6~60的芳基甲硅烷基、
- [0062] 取代或未取代的成环碳数为6~60的芳基磷酰基、
- [0063] 羟基、
- [0064] 取代或未取代的碳数为1~30的烷氧基、
- [0065] 取代或未取代的成环碳数为6~30的芳氧基、
- [0066] 以 $-N(Rz)_2$ 表示的基团、
- [0067] 硫醇基、
- [0068] 取代或未取代的碳数为1~30的烷硫基、
- [0069] 取代或未取代的成环碳数为7~30的芳烷基、
- [0070] 取代锆基、
- [0071] 取代氧化膦基、
- [0072] 硝基、
- [0073] 取代硼基、或者
- [0074] 取代或未取代的成环碳数为6~30的芳硫基,
- [0075] Rz 为,
- [0076] 取代或未取代的成环碳数为6~30的芳基、
- [0077] 取代或未取代的成环原子数为5~30的杂环基、或者
- [0078] 取代或未取代的碳数为1~30的烷基,
- [0079] $-N(Rz)_2$ 中的2个 Rz 相同或不同,
- [0080] 在所述通式 (1-1) ~ (1-6) 中,*分别独立地表示与所述通式 (11) ~ (13) 中的六元环的碳原子键合的位置,
- [0081] 在所述通式 (110) 中,*表示与所述通式 (1-1) ~ (1-6) 中的六元环的碳原子键合的位置,
- [0082] 在所述通式 (120) 中,*表示与所述通式 (1-1) ~ (1-6) 中的六元环的碳原子键合的

位置，

[0083] 在所述通式(2-1)～(2-4)中,*分别独立地表示与所述通式(11)～(13)中的六元环的碳原子键合的位置。)

[0084] 根据本发明的一方案,提供一种包含上述本发明的一方案的化合物的用于有机电致发光元件的材料。

[0085] 根据本发明的一方案,提供一种有机电致发光元件,具有:

[0086] 阳极;

[0087] 阴极;

[0088] 第一有机层,包含在所述阳极与所述阴极之间,

[0089] 所述第一有机层包含第一化合物,

[0090] 所述第一化合物是上述本发明的一方案的化合物。

[0091] 根据本发明的一方案,提供一种电子设备,搭载有上述本发明的一方案的有机电致发光元件。

[0092] 根据本发明的一方案,能够提供一种化合物,该化合物能够提供高性能的有机电致发光元件。特别地,能够提供一种PLQY较高的化合物。此外,根据本发明的一方案,能够提供一种包含PLQY较高的化合物的用于有机电致发光元件的材料或有机电致发光元件。此外,根据本发明的一方案,能够提供一种搭载有该有机电致发光元件的电子设备。

附图说明

[0093] 图1是示出本发明的第三实施方式的有机电致发光元件的一例的概略构成的图。

[0094] 图2是测量过渡PL的装置的概略图。

[0095] 图3是示出过渡PL的衰减曲线的一例的图。

[0096] 图4是示出本发明的第三实施方式的有机电致发光元件的一例的发光层中的第一化合物以及第二化合物的能级和能量转移的关系的图。

[0097] 图5是示出本发明的第四实施方式的有机电致发光元件的一例的发光层中的第一化合物、第二化合物以及第三化合物的能级和能量转移的关系的图。

[0098] 图6是示出本发明的第五实施方式的有机电致发光元件的一例的发光层中的第一化合物以及第四化合物的能级和能量转移的关系的图。

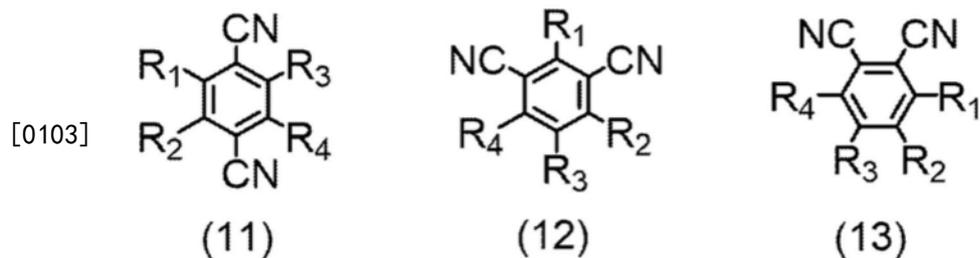
具体实施方式

[0099] (第一实施方式)

[0100] (化合物)

[0101] 本实施方式的化合物是以下述通式(11)～(13)中的任一个表示的化合物。

[0102] [化5]



[0104] (在所述通式 (11) ~ (13) 中,

[0105] $R_1 \sim R_4$ 分别独立地为,

[0106] 以下述通式 (1-1) ~ (1-6) 中的任一个表示的基团 D_1 、或者

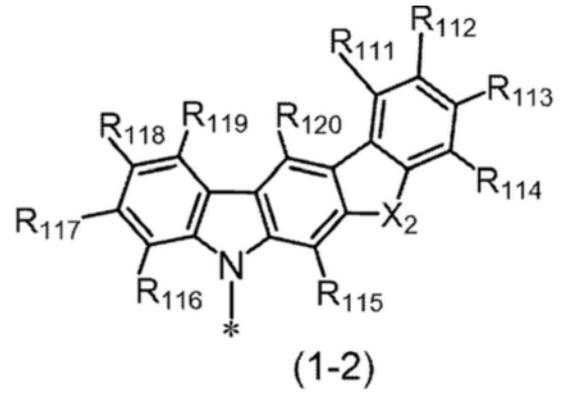
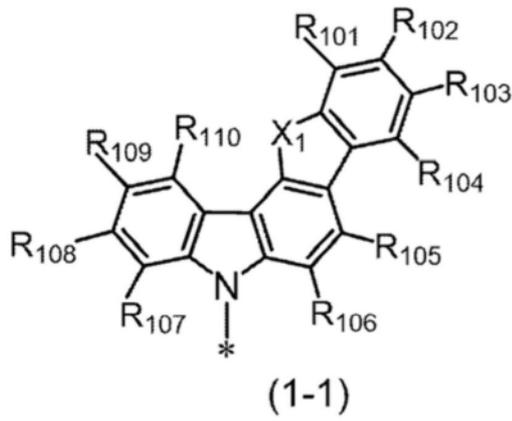
[0107] 以下述通式 (2-1) ~ (2-4) 中的任一个表示的基团 D_2 ,

[0108] $R_1 \sim R_4$ 中至少 1 个为基团 D_1 ,

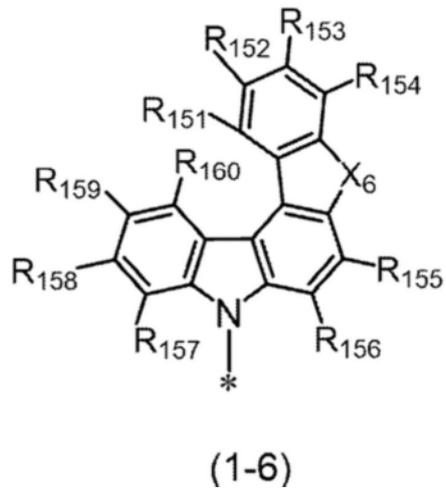
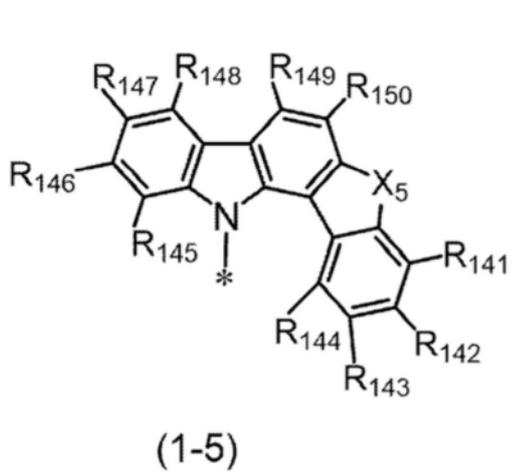
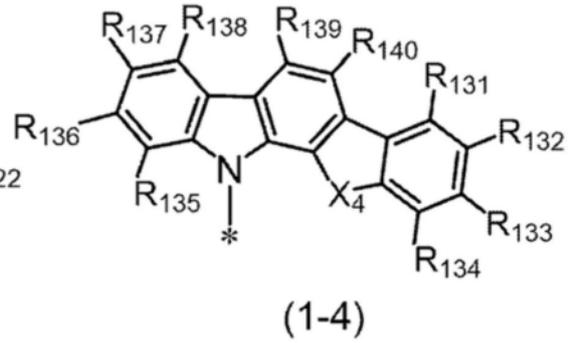
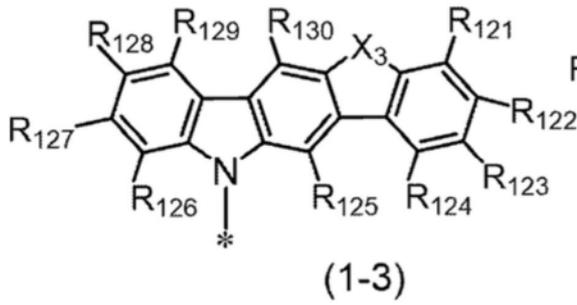
[0109] $R_1 \sim R_4$ 中至少 1 个为基团 D_2 ,

[0110] 在存在多个基团 D_1 的情况下, 多个基团 D_1 彼此相同或不同, 在存在多个基团 D_2 的情况下, 多个基团 D_2 彼此相同或不同。)

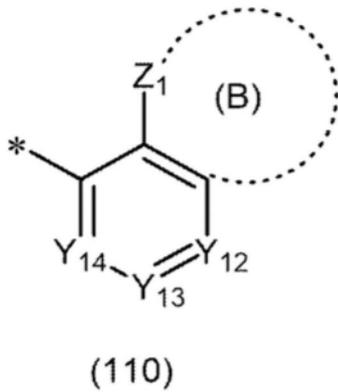
[0111] [化6]



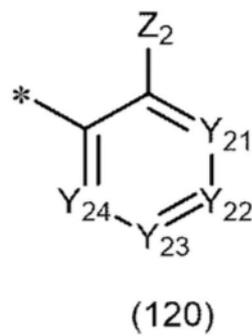
[0112]



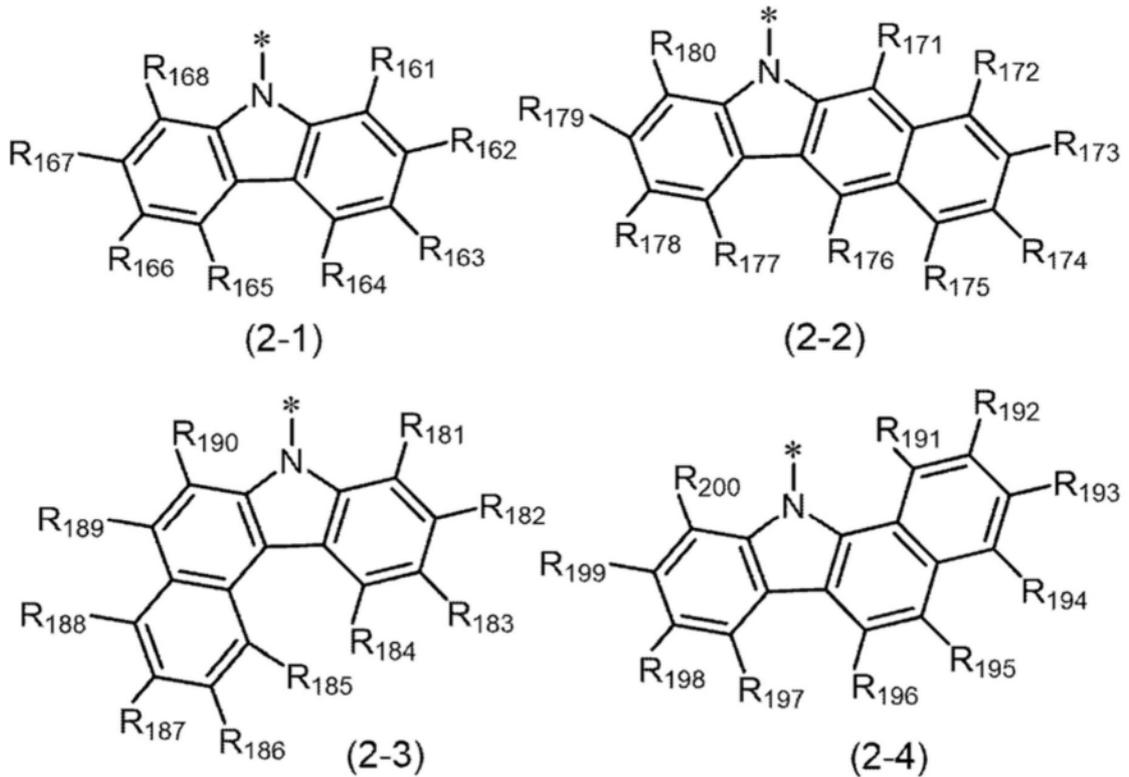
[0113] [化7]



[0114]



[0115] [化8]



[0116]

[0117] (在所述通式(1-1)~(1-6)中, $X_1 \sim X_6$ 分别独立地为氧原子或硫原子,[0118] $R_{101} \sim R_{160}$ 分别独立地为氢原子、取代基、以所述通式(110)表示的基团或以所述通式(120)表示的基团,[0119] 其中,在至少1个基团 D_1 中, $R_{101} \sim R_{160}$ 中的至少1个为以所述通式(110)表示的基团或以所述通式(120)表示的基团,

[0120] 在所述通式(110)中,

[0121] Z_1 为环(B)的构成原子,且为碳原子或氮原子,[0122] 包含 Z_1 的环(B)为取代或未取代的成环碳数为6~30的芳香族烃环、或者取代或未取代的成环碳数为5~30的杂环,[0123] $Y_{12} \sim Y_{14}$ 分别独立地为氮原子或 CR_{10A} ,[0124] R_{10A} 分别独立地为氢原子或取代基,或者多个 R_{10A} 中相邻的2个以上构成的组中的1组以上互相键合而形成环,或者环(B)与和环(B)相邻的1个 R_{10A} 互相键合而形成环,或者环(B)与多个 R_{10A} 中相邻的2个以上构成的组中的1组以上互相键合而形成环,

[0125] 在所述通式(120)中,

[0126] Z_2 为,

[0127] 取代或未取代的成环碳数为6~30的芳基、或者

[0128] 取代或未取代的成环原子数为5~30的杂环基,

[0129] $Y_{21} \sim Y_{24}$ 分别独立地为氮原子或 CR_{20A} ,[0130] R_{20A} 分别独立地为氢原子或取代基,或者[0131] 多个 R_{20A} 中相邻的2个以上构成的组中的1组以上互相键合而形成环,[0132] 多个 R_{10A} 彼此相同或不同,[0133] 多个 R_{20A} 彼此相同或不同,

- [0134] 在所述通式 (2-1) ~ (2-4) 中, $R_{161} \sim R_{168}$ 以及 $R_{171} \sim R_{200}$ 分别独立地为氢原子或取代基,
- [0135] 所述通式 (1-1) ~ (1-6) 中的以所述通式 (110) 表示的基团以及以所述通式 (120) 表示的基团以外的作为取代基的 $R_{101} \sim R_{160}$ 、所述通式 (110) 中的作为取代基的 R_{10A} 、所述通式 (120) 中的作为取代基的 R_{20A} 、还有所述通式 (2-1) ~ (2-4) 中的作为取代基的 $R_{161} \sim R_{168}$ 以及 $R_{171} \sim R_{200}$ 分别独立地为,
- [0136] 卤素原子、
- [0137] 氰基、
- [0138] 取代或未取代的成环碳数为6~30的芳基、
- [0139] 取代或未取代的成环原子数为5~30的杂环基、
- [0140] 取代或未取代的碳数为1~30的烷基、
- [0141] 取代或未取代的碳数为1~30的卤代烷基、
- [0142] 取代或未取代的碳数为2~30的烯基、
- [0143] 取代或未取代的碳数为2~30的炔基、
- [0144] 取代或未取代的碳数为3~30的烷基甲硅烷基、
- [0145] 取代或未取代的成环碳数为6~60的芳基甲硅烷基、
- [0146] 取代或未取代的成环碳数为6~60的芳基磷酰基、
- [0147] 羟基、
- [0148] 取代或未取代的碳数为1~30的烷氧基、
- [0149] 取代或未取代的成环碳数为6~30的芳氧基、
- [0150] 以 $-N(Rz)_2$ 表示的基团、
- [0151] 硫醇基、
- [0152] 取代或未取代的碳数为1~30的烷硫基、
- [0153] 取代或未取代的成环碳数为7~30的芳烷基、
- [0154] 取代锆基、
- [0155] 取代氧化膦基、
- [0156] 硝基、
- [0157] 取代硼基、或者
- [0158] 取代或未取代的成环碳数为6~30的芳硫基,
- [0159] Rz 为,
- [0160] 取代或未取代的成环碳数为6~30的芳基、
- [0161] 取代或未取代的成环原子数为5~30的杂环基、或者
- [0162] 取代或未取代的碳数为1~30的烷基,
- [0163] $-N(Rz)_2$ 中的2个 Rz 相同或不同,
- [0164] 在所述通式 (1-1) ~ (1-6) 中,*分别独立地表示与所述通式 (11) ~ (13) 中的六元环的碳原子键合的位置,
- [0165] 在所述通式 (110) 中,*表示与所述通式 (1-1) ~ (1-6) 中的六元环的碳原子键合的位置,
- [0166] 在所述通式 (120) 中,*表示与所述通式 (1-1) ~ (1-6) 中的六元环的碳原子键合的

位置，

[0167] 在所述通式(2-1)~(2-4)中,*分别独立地表示与所述通式(11)~(13)中的六元环的碳原子键合的位置。)

[0168] 本发明人等发现,像以所述通式(11)~(13)表示的化合物那样,通过将特定的取代基(以所述通式(110)或(120)表示的基团)导入在二氰基苯上进行取代的以所述通式(1-1)~(1-6)表示的基团 D_1 ,可得到PLQY较高的化合物。

[0169] 对于该理由,以本实施方式的化合物中基团 D_1 为以下述通式(1-4A)~(1-4C)表示的基团的情况为例进行说明。通式(1-4A)~(1-4C)为所述通式(1-4)的一例。

[0170] 以通式(1-4A)~(1-4C)表示的基团为将特定的取代基(以所述通式(110)或(120)表示的基团)导入苯并噻吩并咪唑而得的基团。

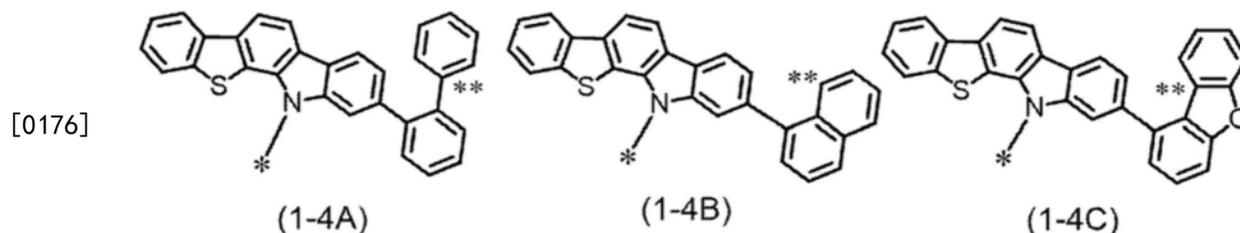
[0171] 以通式(1-4A)表示的基团成为苯基与“苯并噻吩并咪唑-苯结构”的苯环的邻位(**)键合的结构。像这样的结构成为导入至基团 D_1 的特定的取代基(1,1'-联苯-2-基)相对于苯并噻吩并咪唑平面扭曲的结构。

[0172] 以通式(1-4B)表示的基团中,碳原子位于“苯并噻吩并咪唑-苯结构”的苯环的邻位(**),该碳原子成为萘环的一构成原子。像这样的结构成为导入至基团 D_1 的特定的取代基(1-萘基)相对于苯并噻吩并咪唑平面扭曲的结构。

[0173] 以通式(1-4C)表示的基团中,碳原子位于“苯并噻吩并咪唑-苯结构”的苯环的邻位(**),该碳原子成为二苯并呋喃环的一构成原子。像这样的结构成为导入至基团 D_1 的特定的取代基(1-二苯并呋喃基)相对于苯并噻吩并咪唑平面扭曲的结构。

[0174] 认为这些扭曲的结构因位阻而产生。

[0175] [化9]



[0177] 另一方面,以下述通式(1-R1)~(1-R3)表示的基团为将不属于特定的取代基(以所述通式(110)或(120)表示的基团)的基团导入苯并噻吩并咪唑而得的基团。

[0178] 具有以通式(1-R1)~(1-R3)表示的基团的化合物分别相当于后述的比较例4~6。

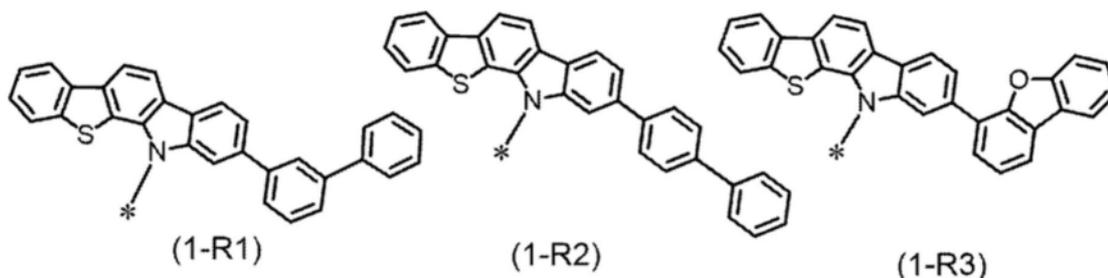
[0179] 由于以通式(1-R1)表示的基团具有苯基与“苯并噻吩并咪唑-苯结构”的苯环的间位键合的结构,因此与苯并噻吩并咪唑键合的基团(1,1'-联苯-3-基)的位阻较小,相对于苯并噻吩并咪唑平面难以扭曲。

[0180] 由于以通式(1-R2)表示的基团具有苯基与“苯并噻吩并咪唑-苯结构”的苯环的对位键合的结构,因此与苯并噻吩并咪唑键合的基团(1,1'-联苯-4-基)的位阻较小,相对于苯并噻吩并咪唑平面难以扭曲。

[0181] 以通式(1-R3)表示的基团中,氧原子位于“苯并噻吩并咪唑-苯结构”的苯环的邻位,该氧原子成为二苯并呋喃环的一构成原子。由于像这样的结构在与苯并噻吩并咪唑键合的基团(4-二苯并呋喃基)中的氧原子上(位于所述苯环的邻位的氧原子上)不存在氢原子或取代基,因此4-二苯并呋喃基相对于苯并噻吩并咪唑平面难以扭曲。

[0182] [化10]

[0183]



[0184] 像这样,认为本实施方式的化合物通过向基团 D_1 导入特定的取代基(以所述通式(110)或(120)表示的基团),使特定的取代基成为扭曲的结构,从而以所述通式(11)~(13)表示的化合物彼此的分子间相互作用降低。此外,认为通过该特定的取代基的存在,使分子间距离变得容易增大。其结果为,认为浓度猝灭得以抑制,可得到PLQY较高的化合物。

[0185] 因此,根据本实施方式,能够提供一种可提供高性能的有机EL元件的化合物,特别地能够提供PLQY较高的化合物。

[0186] 高性能是指发光效率、元件寿命、驱动电压以及亮度等中的一个以上得以改善。

[0187] 在本实施方式的化合物中,作为“在至少1个基团 D_1 中, $R_{101} \sim R_{160}$ 中的至少1个为以所述通式(110)表示的基团或以所述通式(120)表示的基团”,例如可例举以下这样的方案。

[0188] • $R_1 \sim R_4$ 中的1个为基团 D_1 ,该1个基团 D_1 中的 $R_{101} \sim R_{160}$ 中的至少1个为以通式(110)或通式(120)表示的基团的方案。
• $R_1 \sim R_4$ 中的2个为基团 D_1 ,该2个基团 D_1 中,一个基团 D_1 中的 $R_{101} \sim R_{160}$ 中的至少1个为以通式(110)或通式(120)表示的基团,且另一个基团 D_1 中的 $R_{101} \sim R_{160}$ 中的至少1个为以通式(110)或通式(120)表示的基团的方案。

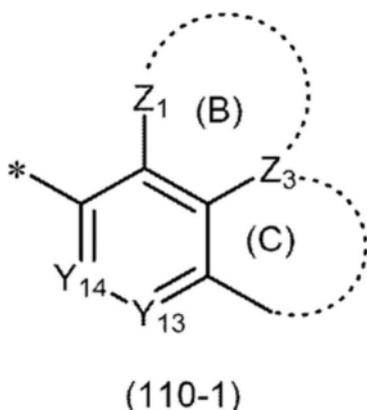
[0189] 在所述通式(110)中,作为“环(B)与和环(B)相邻的1个 R_{10A} 互相键合而形成环”的方案,例如可例举下述方案1。

[0190] (方案1)

[0191] 在所述通式(110)中,环(B)与 Y_{12} 中的 R_{10A} (与环(B)相邻的1个 R_{10A})互相键合而形成环(C),所述环(C)与所述通式(110)中的六元环缩合的方案。在该情况下,以所述通式(110)表示的基团以下述通式(110-1)表示。下述通式(110-1)中, Y_{12} 中的 R_{10A} 相当于“与环(B)相邻的1个 R_{10A} ”。

[0192] [化11]

[0193]

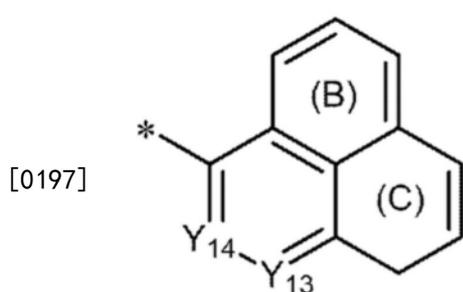


[0194] (在所述通式(110-1)中,环(B)、 Z_1 以及 $Y_{13} \sim Y_{14}$ 分别独立地与所述通式(110)中的环(B)、 Z_1 以及 $Y_{13} \sim Y_{14}$ 同义。 Z_3 为环(B)以及环(C)的构成原子,且表示碳原子、氮原子、硅原

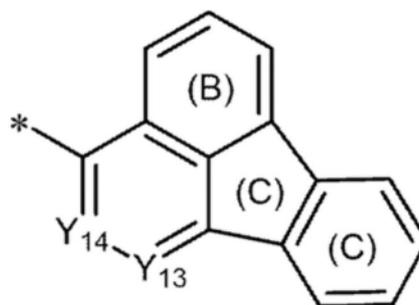
子或锗原子。环(C)为取代或未取代的成环碳数为6~30的芳香族烃环、或者取代或未取代的成环碳数为5~30的杂环。所述通式(110-1)中,环(B)以及环(C)共用 Z_3 。*表示与所述通式(1-1)~(1-6)中的六元环的碳原子键合的位置。)

[0195] 作为以所述通式(110-1)表示的基团,例如可例举以下述通式(110-1A)以及通式(110-1B)表示的基团。

[0196] [化12]



(110-1A)



(110-1B)

[0198] (在所述通式(110-1A)以及通式(110-1B)中, $Y_{13} \sim Y_{14}$ 分别独立地与所述通式(110)中的 $Y_{13} \sim Y_{14}$ 同义,(B)~(C)相当于所述通式(110-1)中的环(B)~环(C)。

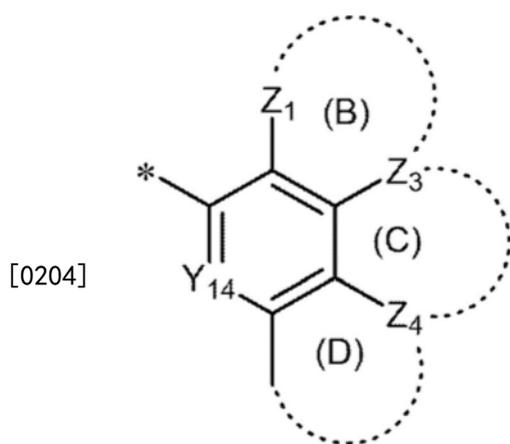
[0199] 所述通式(110-1)中的 Z_1 以及 Z_3 在所述通式(110-1A)以及通式(110-1B)中为碳原子。*表示与所述通式(1-1)~(1-6)中的六元环的碳原子键合的位置。)

[0200] 在所述通式(110)中,作为“环(B)与多个 R_{10A} 中相邻的2个以上构成的组中的1组以上互相键合而形成环”的方案,例如可例举下述方案2。

[0201] (方案2)

[0202] 在所述通式(110)中,环(B)与 Y_{12} 中的 R_{10A} 互相键合而形成环(C),且 Y_{12} 中的 R_{10A} 与 Y_{13} 中的 R_{10A} 互相键合而形成环(D),所述环(C)以及所述环(D)与所述通式(110)中的六元环缩合的方案。在该情况下,以所述通式(110)表示的基团以下述通式(110-2)表示。下述通式(110-2)中, Y_{12} 中的 R_{10A} 以及 Y_{13} 中的 R_{10A} 相当于“多个 R_{10A} ($Y_{12} \sim Y_{14}$ 中的3个 R_{10A})中相邻的1组”。

[0203] [化13]



(110-2)

[0205] (在所述通式(110-2)中,环(B)、环(C)、 Z_1 、 Z_3 以及 Y_{14} 分别独立地与所述通式(110-1)中的环(B)、环(C)、 Z_1 、 Z_3 以及 Y_{14} 同义,环(D)与所述通式(110-1)中的环(C)同义, Z_4 与所述通式(110-1)中的 Z_3 同义。环(B)以及环(C)共用 Z_3 ,环(C)以及环(D)共用 Z_4 。

[0206] 在所述通式(110-2)中,环(B)与 Y_{12} 中的 R_{10A} 以及 Y_{13} 中的 R_{10A} 互相键合而形成环(B)、环(C)以及环(D)。

[0207] *表示与所述通式(1-1)~(1-6)中的六元环的碳原子键合的位置。)

[0208] 在本实施方式的化合物中,在存在多个以所述通式(1-1)表示的基团(基团 D_1)作为 R_1 ~ R_4 的基团时,多个以通式(1-1)表示的基团优选为包含取代基在内彼此相同的基团,

[0209] 在存在多个以所述通式(1-2)表示的基团(基团 D_1)作为 R_1 ~ R_4 的基团时,多个以通式(1-2)表示的基团优选为包含取代基在内彼此相同的基团,

[0210] 在存在多个以所述通式(1-3)表示的基团(基团 D_1)作为 R_1 ~ R_4 的基团时,多个以通式(1-3)表示的基团优选为包含取代基在内彼此相同的基团,

[0211] 在存在多个以所述通式(1-4)表示的基团(基团 D_1)作为 R_1 ~ R_4 的基团时,多个以通式(1-4)表示的基团优选为包含取代基在内彼此相同的基团,

[0212] 在存在多个以所述通式(1-5)表示的基团(基团 D_1)作为 R_1 ~ R_4 的基团时,多个以通式(1-5)表示的基团优选为包含取代基在内彼此相同的基团,

[0213] 在存在多个以所述通式(1-6)表示的基团(基团 D_1)作为 R_1 ~ R_4 的基团时,多个以通式(1-6)表示的基团优选为包含取代基在内彼此相同的基团。

[0214] 在本实施方式的化合物中,优选为,在选择2个基团 D_1 作为 R_1 ~ R_4 的基团时,该所选择的2个基团 D_1 全部由所述通式(1-1)~(1-6)中的1个通式表示,且为包含取代基在内彼此相同的基团。

[0215] 例如,在选择2个以所述通式(1-1)表示的基团(基团 D_1)作为 R_1 以及 R_2 的基团的情况下,该2个以所述通式(1-1)表示的基团(R_1 以及 R_2 的基团)优选为包含取代基在内彼此相同的基团。

[0216] 在本实施方式的化合物中,优选为,在选择3个基团 D_1 作为 R_1 ~ R_4 的基团时,该所选择的3个基团 D_1 全部由所述通式(1-1)~(1-6)中的1个通式表示,且为包含取代基在内彼此相同的基团,

[0217] 例如,在选择3个以所述通式(1-1)表示的基团(基团 D_1)作为 R_1 ~ R_3 的基团的情况下,该3个以所述通式(1-1)表示的基团(R_1 ~ R_3 的基团)优选为包含取代基在内彼此相同的基团。

[0218] 在本实施方式的化合物中,优选为,在 R_1 ~ R_4 中的2个从以所述通式(1-1)~(1-6)表示的基团(基团 D_1)中选择、剩余2个从以所述通式(2-1)~(2-4)表示的基团(基团 D_2)中选择时,2个以所述通式(1-1)~(1-6)表示的基团均由所述通式(1-1)~(1-6)中的1个通式表示,且为包含取代基在内彼此相同的基团。

[0219] 此外,优选为,在 R_1 ~ R_4 中的3个从以所述通式(1-1)~(1-6)表示的基团(基团 D_1)中选择、剩余1个从以所述通式(2-1)~(2-4)表示的基团(基团 D_2)中选择时,该3个以所述通式(1-1)~(1-6)表示的基团均由所述通式(1-1)~(1-6)中的1个通式表示,且为包含取代基在内彼此相同的基团。

[0220] 例如,在选择3个以通式(1-1)表示的基团(基团 D_1)作为 R_1 ~ R_4 的基团时,所选择的

3个基团优选为以通式(1-1)表示的基团,且为包含取代基在内彼此相同的基团。

[0221] 在本实施方式的化合物中,在存在多个以所述通式(2-1)表示的基团(基团 D_2)作为 $R_1 \sim R_4$ 的基团时,多个以通式(2-1)表示的基团优选为包含取代基在内彼此相同的基团,

[0222] 在存在多个以所述通式(2-2)表示的基团(基团 D_2)作为 $R_1 \sim R_4$ 的基团时,多个以通式(2-2)表示的基团优选为包含取代基在内彼此相同的基团,

[0223] 在存在多个以所述通式(2-3)表示的基团(基团 D_2)作为 $R_1 \sim R_4$ 的基团时,多个以通式(2-3)表示的基团优选为包含取代基在内彼此相同的基团,

[0224] 在存在多个以所述通式(2-4)表示的基团(基团 D_2)作为 $R_1 \sim R_4$ 的基团时,多个以通式(2-4)表示的基团优选为包含取代基在内彼此相同的基团。

[0225] 在本实施方式的化合物中,优选为,在选择2个基团 D_2 作为 $R_1 \sim R_4$ 的基团时,该所选择的2个基团 D_2 全部由所述通式(2-1)~(2-4)中的1个通式表示,且为包含取代基在内彼此相同的基团。

[0226] 例如,在选择2个以所述通式(2-1)表示的基团(基团 D_2)作为 R_1 以及 R_2 的基团的情况下,该2个以所述通式(2-1)表示的基团(R_1 以及 R_2 的基团)优选为包含取代基在内彼此相同的基团。

[0227] 在本实施方式的化合物中,优选为,在选择3个基团 D_2 作为 $R_1 \sim R_4$ 的基团时,该所选择的3个基团 D_2 全部由所述通式(2-1)~(2-4)中的1个通式表示,且为包含取代基在内彼此相同的基团。

[0228] 例如,在选择3个以所述通式(2-1)表示的基团(基团 D_2)作为 $R_1 \sim R_3$ 的基团的情况下,该3个以所述通式(2-1)表示的基团($R_1 \sim R_3$ 的基团)优选为包含取代基在内彼此相同的基团。

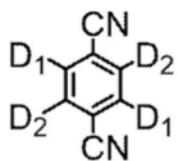
[0229] 在本实施方式的化合物中,优选为,在 $R_1 \sim R_4$ 中的2个从以所述通式(2-1)~(2-4)表示的基团(基团 D_2)中选择、剩余2个从以所述通式(1-1)~(1-6)表示的基团(基团 D_1)中选择时,2个以所述通式(2-1)~(2-4)表示的基团均由所述通式(2-1)~(2-4)中的1个通式表示,且为包含取代基在内彼此相同的基团。

[0230] 此外,优选为,在 $R_1 \sim R_4$ 中的3个从以所述通式(2-1)~(2-4)表示的基团(基团 D_2)中选择、剩余1个从以所述通式(1-1)~(1-6)表示的基团(基团 D_1)中选择时,该3个以所述通式(2-1)~(2-4)表示的基团均由所述通式(2-1)~(2-4)中的1个通式表示,且为包含取代基在内彼此相同的基团。

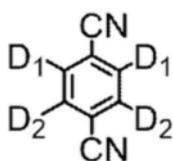
[0231] 例如,在选择3个以通式(2-1)表示的基团(基团 D_2)作为 $R_1 \sim R_4$ 的基团时,所选择的3个基团优选为以通式(2-1)表示的基团,且为包含取代基在内彼此相同的基团。

[0232] 本实施方式的化合物优选为以下述通式(1001)~(1023)中的任一个表示的化合物。

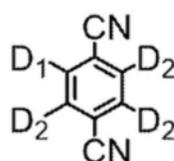
[0233] [化14]



(1001)

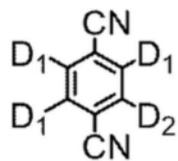


(1002)

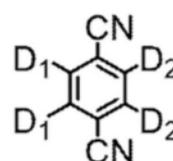


(1003)

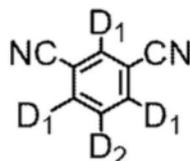
[0234]



(1004)

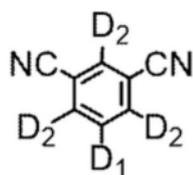


(1005)

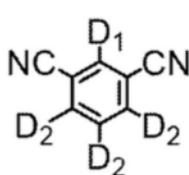


(1006)

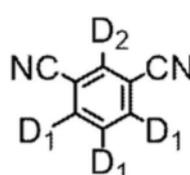
[0235] [化15]



(1007)

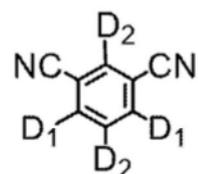


(1008)

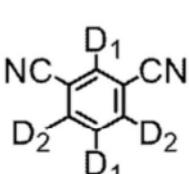


(1009)

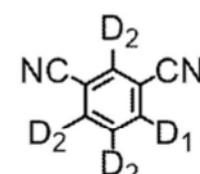
[0236]



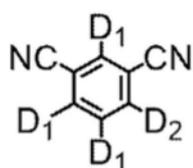
(1010)



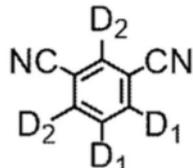
(1011)



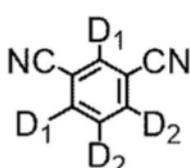
(1012)



(1013)

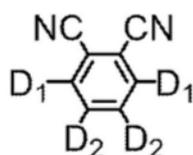


(1014)

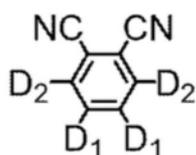


(1015)

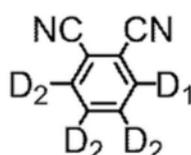
[0237] [化16]



(1016)

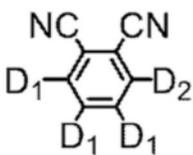


(1017)

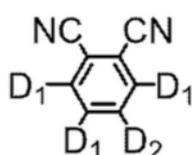


(1018)

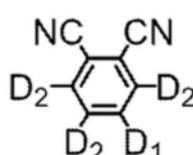
[0238]



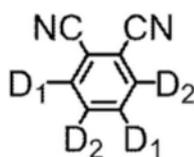
(1019)



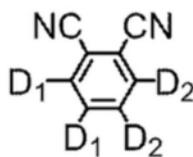
(1020)



(1021)



(1022)



(1023)

[0239] (在所述通式(1001)~(1023)中, D_1 分别独立地与以所述通式(1-1)~(1-6)中的任一个表示的基团 D_1 同义, D_2 分别独立地与以所述通式(2-1)~(2-4)中的任一个表示的基团 D_2 同义。)

[0240] 在本实施方式的化合物中,所述基团 D_2 优选为以所述通式(2-1)表示的基团。

[0241] 在本实施方式的化合物中,所述基团 D_1 优选为以所述通式(1-4)或(1-5)表示的基团。

[0242] 在本实施方式的化合物中,优选为, $R_1 \sim R_4$ 中的1个为基团 D_1 的情况下,在1个基团 D_1 中, $R_{101} \sim R_{160}$ 中仅1个为以所述通式(110)表示的基团或以所述通式(120)表示的基团。

[0243] 在本实施方式的化合物中,优选为, $R_1 \sim R_4$ 中的2个为基团 D_1 的情况下,在各个基团 D_1 中, $R_{101} \sim R_{160}$ 中仅1个为以所述通式(110)表示的基团或以通式(120)表示的基团。

[0244] 在本实施方式的化合物中,优选为, $R_1 \sim R_4$ 中的3个为基团 D_1 的情况下,在各个基团 D_1 中, $R_{101} \sim R_{160}$ 中仅1个为以所述通式(110)表示的基团或以通式(120)表示的基团。

[0245] 在本实施方式的化合物中,优选为,所述通式(1-1)中的 $R_{107} \sim R_{110}$ 中的任1个为以所述通式(110)表示的基团或以通式(120)表示的基团,或者

[0246] 所述通式(1-2)中的 $R_{116} \sim R_{119}$ 中的任1个为以所述通式(110)表示的基团或以通式(120)表示的基团,或者

[0247] 所述通式(1-3)中的 $R_{126} \sim R_{129}$ 中的任1个为以所述通式(110)表示的基团或以通式(120)表示的基团,或者

[0248] 所述通式(1-4)中的 $R_{135} \sim R_{138}$ 中的任1个为以所述通式(110)表示的基团或以通式(120)表示的基团,或者

[0249] 所述通式(1-5)中的 $R_{145} \sim R_{148}$ 中的任1个为以所述通式(110)表示的基团或以通式(120)表示的基团,或者

[0250] 所述通式(1-6)中的 $R_{157} \sim R_{160}$ 中的任1个为以所述通式(110)表示的基团或以通式(120)表示的基团。

[0251] 在本实施方式的化合物中,更优选为,所述通式(1-1)中的 $R_{108} \sim R_{110}$ 中的任1个为以所述通式(110)表示的基团或以通式(120)表示的基团,或者

[0252] 所述通式(1-2)中的 $R_{117} \sim R_{119}$ 中的任1个为以所述通式(110)表示的基团或以通式(120)表示的基团,或者

[0253] 所述通式(1-3)中的 $R_{127} \sim R_{129}$ 中的任1个为以所述通式(110)表示的基团或以通式(120)表示的基团,或者

[0254] 所述通式(1-4)中的 $R_{136} \sim R_{138}$ 中的任1个为以所述通式(110)表示的基团或以通式(120)表示的基团,或者

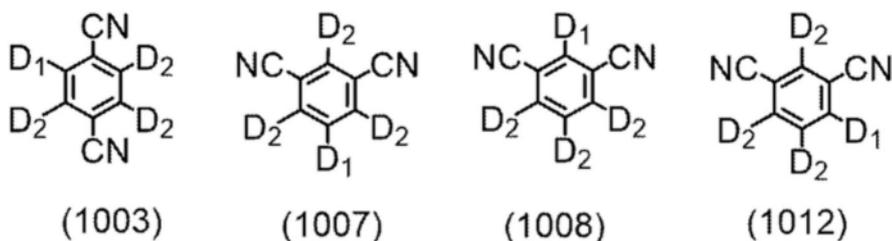
[0255] 所述通式(1-5)中的 $R_{146} \sim R_{148}$ 中的任1个为以所述通式(110)表示的基团或以通式(120)表示的基团,或者

[0256] 所述通式(1-6)中的 $R_{157} \sim R_{160}$ 中的任1个为以所述通式(110)表示的基团或以通式(120)表示的基团。

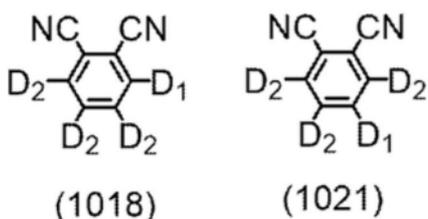
[0257] 在本实施方式的化合物中,优选 $R_1 \sim R_4$ 中仅1个为所述基团 D_1 。

[0258] 即,本实施方式的化合物优选为以下述通式(1003)、通式(1007)、通式(1008)、通式(1012)、通式(1018)以及通式(1021)中的任一个表示。

[0259] [化17]



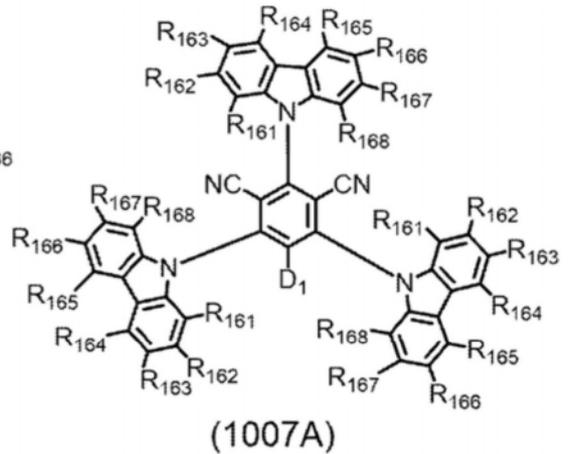
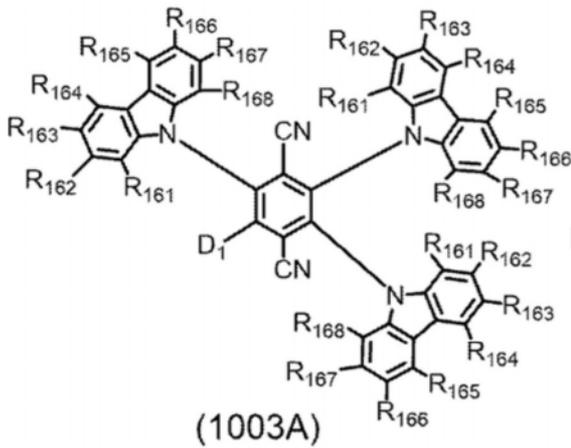
[0260]



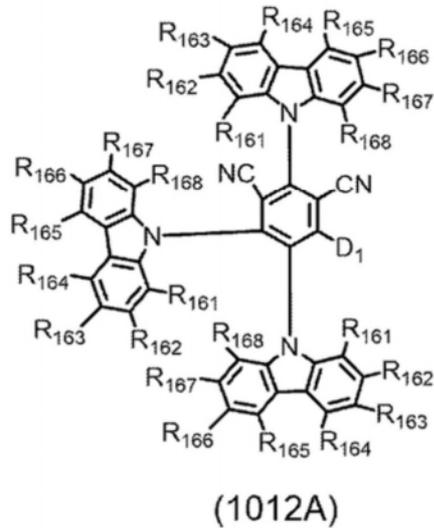
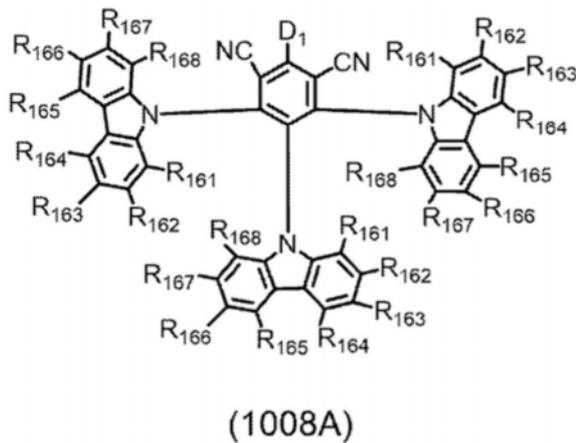
[0261] (在所述通式(1003)、通式(1007)、通式(1008)、通式(1012)、通式(1018)以及通式(1021)中, D_1 与以所述通式(1-1)~(1-6)中的任一个表示的基团 D_1 同义, D_2 分别独立地与以所述通式(2-1)~(2-4)中的任一个表示的基团 D_2 同义。)

[0262] 本实施方式的化合物优选为以下述通式(1003A)、通式(1007A)、通式(1008A)、通式(1012A)、通式(1018A)以及通式(1021A)中的任一个表示的化合物。

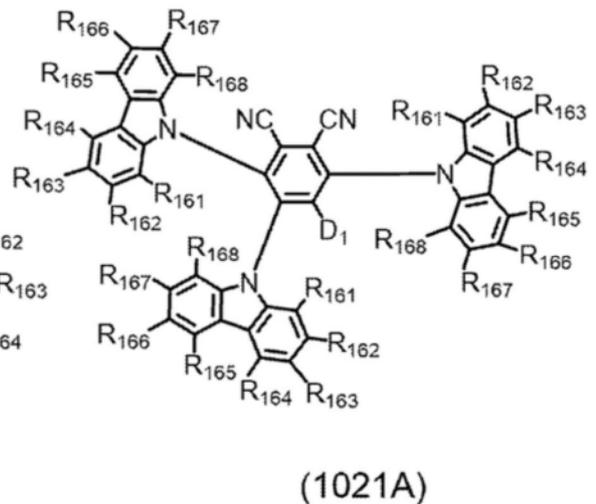
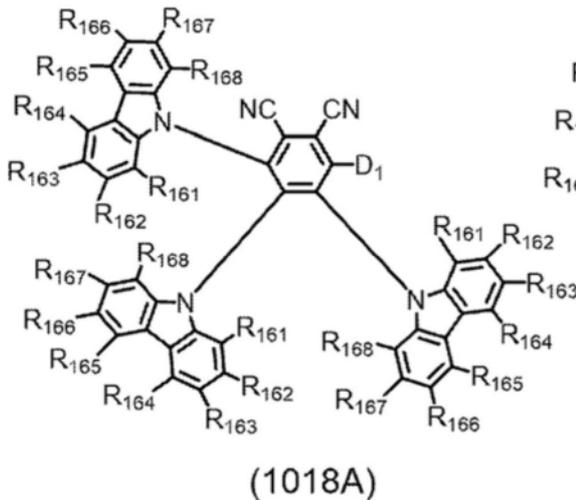
[0263] [化18]



[0264]



[0265] [化19]



[0266]

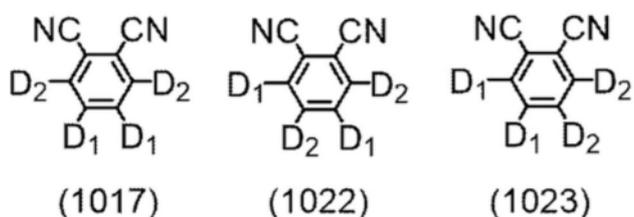
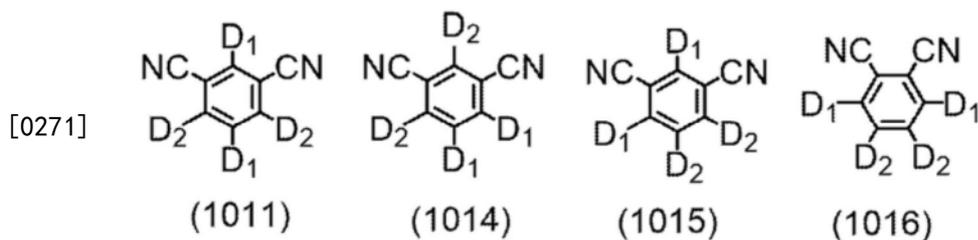
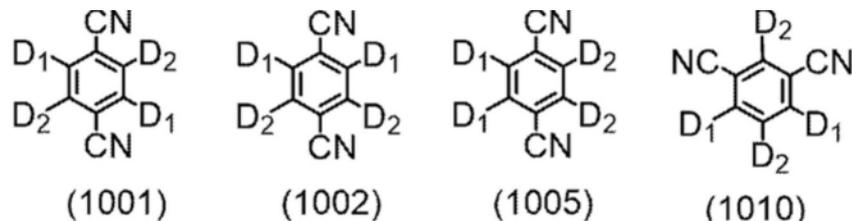
[0267] (在所述通式(1003A)、通式(1007A)、通式(1008A)、通式(1012A)、通式(1018A)以及通式(1021A)中, D_1 与以所述通式(1-1)~(1-6)中的任一个表示的基团 D_1 同义, $R_{161} \sim R_{168}$ 分别独立地与所述通式(2-1)中的 $R_{161} \sim R_{168}$ 同义。)

[0268] 在本实施方式的化合物中, 优选 $R_1 \sim R_4$ 中仅2个为所述基团 D_1 。

[0269] 即, 本实施方式的化合物优选为以下述通式(1001)、通式(1002)、通式(1005)、通

式(1010)、通式(1011)、通式(1014)~(1017)、通式(1022)以及通式(1023)中的任何一个表示。

[0270] [化20]



[0272] (在所述通式(1001)、通式(1002)、通式(1005)、通式(1010)、通式(1011)、通式(1014)~(1017)、通式(1022)以及通式(1023)中, D_1 分别独立地与以所述通式(1-1)~(1-6)中的任何一个表示的基团 D_1 同义, D_2 分别独立地与以所述通式(2-1)~(2-4)中的任何一个表示的基团 D_2 同义。)

[0273] 在本实施方式的化合物中,优选为,在至少1个基团 D_1 中, $R_{101} \sim R_{160}$ 中的至少1个为以所述通式(110)表示的基团。

[0274] 在本实施方式的化合物中,优选为, $R_1 \sim R_4$ 中的1个为基团 D_1 的情况下,在1个基团 D_1 中, $R_{101} \sim R_{160}$ 中仅1个为以所述通式(110)表示的基团。

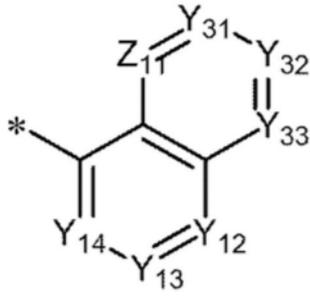
[0275] 在本实施方式的化合物中,优选为, $R_1 \sim R_4$ 中的2个为基团 D_1 的情况下,在各个基团 D_1 中, $R_{101} \sim R_{160}$ 中仅1个为以所述通式(110)表示的基团。

[0276] 在本实施方式的化合物中,优选为, $R_1 \sim R_4$ 中的3个为基团 D_1 的情况下,在各个基团 D_1 中, $R_{101} \sim R_{160}$ 中仅1个为以所述通式(110)表示的基团。

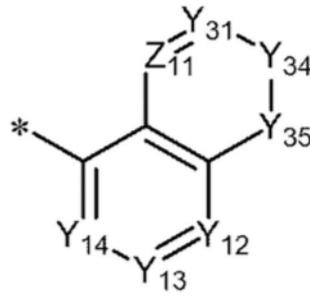
[0277] 在本实施方式的化合物中,所述通式(110)中的 Z_1 优选为碳原子。

[0278] 在本实施方式的化合物中,以所述通式(110)表示的基团优选为以下述通式(111)~(117)中的任何一个表示的基团。

[0279] [化21]

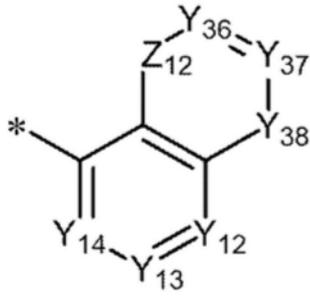


(111)

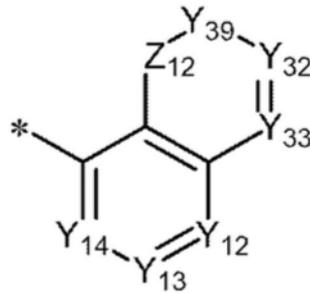


(112)

[0280]



(113)



(114)

[0281] (在所述通式 (111) 中,

[0282] $Y_{12} \sim Y_{14}$ 分别独立地为氮原子或 CR_{10A} ,[0283] Z_{11} 以及 $Y_{31} \sim Y_{33}$ 分别独立地为氮原子或 CR_{30A} ,[0284] R_{10A} 以及 R_{30A} 分别独立地为氢原子或取代基, 或者 1 个或多个 R_{30A} 以及 1 个或多个 R_{10A} 构成的组中相邻的 2 个以上构成的组中的 1 组以上互相键合而形成环,[0285] 作为取代基的 R_{10A} 以及作为取代基的 R_{30A} 分别独立地与所述通式 (110) 中的作为取代基的 R_{10A} 同义。)

[0286] (在所述通式 (112) 中,

[0287] $Y_{12} \sim Y_{14}$ 分别独立地为氮原子或 CR_{10A} ,[0288] Z_{11} 以及 Y_{31} 分别独立地为氮原子或 CR_{30A} ,[0289] Y_{34} 以及 Y_{35} 分别独立地为 NR_{30B} 、氧原子、硫原子或 $CR_{30C}R_{30D}$,[0290] R_{10A} 、 R_{30A} 、 R_{30B} 、 R_{30C} 以及 R_{30D} 分别独立地为氢原子或取代基, 或者一个或多个 R_{10A} 、一个或多个 R_{30A} 、一个或多个 R_{30B} 、一个或多个 R_{30C} 以及一个或多个 R_{30D} 构成的组中相邻的 2 个以上构成的组中的 1 组以上互相键合而形成环,[0291] 作为取代基的 R_{10A} 、还有作为取代基的 R_{30A} 、 R_{30B} 、 R_{30C} 以及 R_{30D} 分别独立地与所述通式 (110) 中的作为取代基的 R_{10A} 同义。)

[0292] (在所述通式 (113) 中,

[0293] $Y_{12} \sim Y_{14}$ 分别独立地为氮原子或 CR_{10A} ,[0294] Z_{12} 为 NR_{30B} 或 $CR_{30C}R_{30D}$,[0295] Y_{38} 为 NR_{30B} 、氧原子、硫原子或 $CR_{30C}R_{30D}$,[0296] Y_{36} 以及 Y_{37} 分别独立地为氮原子或 CR_{30A} ,[0297] R_{10A} 、 R_{30A} 、 R_{30B} 、 R_{30C} 以及 R_{30D} 分别独立地为氢原子或取代基, 或者一个或多个 R_{10A} 、一

个或多个 R_{30A} 、一个或多个 R_{30B} 、一个或多个 R_{30C} 以及一个或多个 R_{30D} 构成的组中相邻的2个以上构成的组中的1组以上互相键合而形成环，

[0298] 作为取代基的 R_{10A} 、还有作为取代基的 R_{30A} 、 R_{30B} 、 R_{30C} 以及 R_{30D} 分别独立地与所述通式(110)中的作为取代基的 R_{10A} 同义。)

[0299] (在所述通式(114)中，

[0300] $Y_{12} \sim Y_{14}$ 分别独立地为氮原子或 CR_{10A} ，

[0301] Z_{12} 为 NR_{30B} 或 $CR_{30C}R_{30D}$ ，

[0302] Y_{39} 为 NR_{30B} 、氧原子、硫原子或 $CR_{30C}R_{30D}$ ，

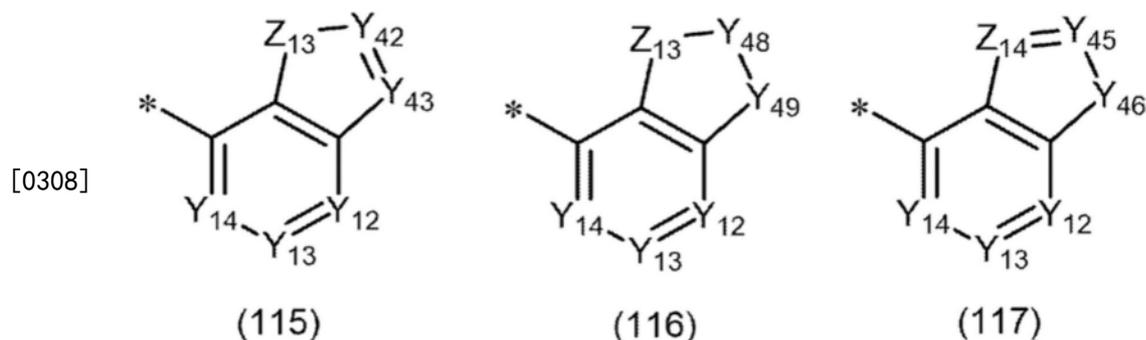
[0303] Y_{32} 以及 Y_{33} 分别独立地为氮原子或 CR_{30A} ，

[0304] R_{10A} 、 R_{30A} 、 R_{30B} 、 R_{30C} 以及 R_{30D} 分别独立地为氢原子或取代基，或者一个或多个 R_{10A} 、一个或多个 R_{30A} 、一个或多个 R_{30B} 、一个或多个 R_{30C} 以及一个或多个 R_{30D} 构成的组中相邻的2个以上构成的组中的1组以上互相键合而形成环，

[0305] 作为取代基的 R_{10A} 、还有作为取代基的 R_{30A} 、 R_{30B} 、 R_{30C} 以及 R_{30D} 分别独立地与所述通式(110)中的作为取代基的 R_{10A} 同义。)

[0306] 所述通式(111)~(114)中，“相邻的2个以上构成的组”中的“相邻”是指，在所述通式(111)的情况下，不仅 Z_{11} 以及 Y_{31} 、 Y_{31} 以及 Y_{32} 、 Y_{32} 以及 Y_{33} 、 Y_{12} 以及 Y_{13} 、还有 Y_{13} 以及 Y_{14} 被视为相邻，而且 Y_{12} 以及 Y_{33} 也被视为相邻。同样地，在所述通式(112)的情况下， Y_{12} 以及 Y_{35} 也被视为相邻，在所述通式(113)的情况下， Y_{12} 以及 Y_{38} 也被视为相邻，在所述通式(114)的情况下， Y_{12} 以及 Y_{33} 也被视为相邻。

[0307] [化22]



[0309] (在所述通式(115)中，

[0310] $Y_{12} \sim Y_{14}$ 分别独立地为氮原子或 CR_{10A} ，

[0311] Z_{13} 为 NR_{30B} 或 $CR_{30C}R_{30D}$ ，

[0312] Y_{42} 以及 Y_{43} 分别独立地为氮原子或 CR_{30A} ，

[0313] R_{10A} 、 R_{30A} 、 R_{30B} 、 R_{30C} 以及 R_{30D} 分别独立地为氢原子或取代基，或者一个或多个 R_{10A} 、一个或多个 R_{30A} 、一个或多个 R_{30B} 、一个或多个 R_{30C} 以及一个或多个 R_{30D} 构成的组中相邻的2个以上构成的组中的1组以上互相键合而形成环，

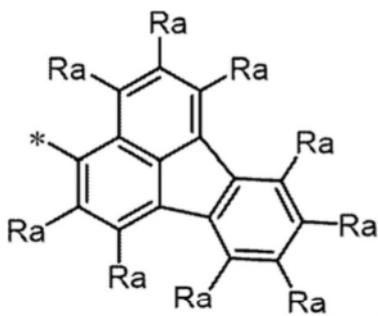
[0314] 作为取代基的 R_{10A} 、还有作为取代基的 R_{30A} 、 R_{30B} 、 R_{30C} 以及 R_{30D} 分别独立地与所述通式(110)中的作为取代基的 R_{10A} 同义。)

[0315] (在所述通式(116)中，

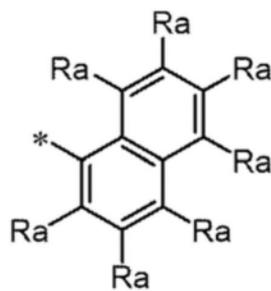
[0316] $Y_{12} \sim Y_{14}$ 分别独立地为氮原子或 CR_{10A} ，

[0317] Z_{13} 为 NR_{30B} 或 $CR_{30C}R_{30D}$ ，

- [0318] Y_{48} 以及 Y_{49} 分别独立地为 NR_{30B} 、氧原子、硫原子或 $CR_{30C}R_{30D}$,
- [0319] R_{10A} 、 R_{30B} 、 R_{30C} 以及 R_{30D} 分别独立地为氢原子或取代基,或者一个或多个 R_{10A} 、一个或多个 R_{30B} 、一个或多个 R_{30C} 以及一个或多个 R_{30D} 构成的组中相邻的2个以上构成的组中的1组以上互相键合而形成环,
- [0320] 作为取代基的 R_{10A} 、还有作为取代基的 R_{30B} 、 R_{30C} 以及 R_{30D} 分别独立地与所述通式(110)中的作为取代基的 R_{10A} 同义。)
- [0321] (在所述通式(117)中,
- [0322] $Y_{12} \sim Y_{14}$ 分别独立地为氮原子或 CR_{10A} ,
- [0323] Z_{14} 以及 Y_{45} 分别独立地为氮原子或 CR_{30A} ,
- [0324] Y_{46} 为 NR_{30B} 、氧原子、硫原子或 $CR_{30C}R_{30D}$,
- [0325] R_{10A} 、 R_{30A} 、 R_{30B} 、 R_{30C} 以及 R_{30D} 分别独立地为氢原子或取代基,或者一个或多个 R_{10A} 、一个或多个 R_{30A} 、一个或多个 R_{30B} 、一个或多个 R_{30C} 以及一个或多个 R_{30D} 构成的组中相邻的2个以上构成的组中的1组以上互相键合而形成环,
- [0326] 作为取代基的 R_{10A} 、还有作为取代基的 R_{30A} 、 R_{30B} 、 R_{30C} 以及 R_{30D} 分别独立地与所述通式(110)中的作为取代基的 R_{10A} 同义。)
- [0327] (在所述通式(111)~(117)中,存在多个 R_{10A} 的情况下,多个 R_{10A} 彼此相同或不同,存在多个 R_{30A} 的情况下,多个 R_{30A} 彼此相同或不同,存在多个 R_{30B} 的情况下,多个 R_{30B} 彼此相同或不同,存在多个 R_{30C} 的情况下,多个 R_{30C} 彼此相同或不同,存在多个 R_{30D} 的情况下,多个 R_{30D} 彼此相同或不同。)
- [0328] 所述通式(115)~(117)中,“相邻的2个以上构成的组”中的“相邻”是指,在所述通式(115)的情况下,不仅 Z_{13} 以及 Y_{42} 、 Y_{42} 以及 Y_{43} 、 Y_{12} 以及 Y_{13} 、还有 Y_{13} 以及 Y_{14} 被视为相邻,而且 Y_{12} 以及 Y_{43} 也被视为相邻。同样地,在所述通式(116)的情况下, Y_{12} 以及 Y_{49} 也被视为相邻,在所述通式(117)的情况下, Y_{12} 以及 Y_{46} 也被视为相邻。
- [0329] 在本实施方式的化合物中,以所述通式(110)表示的基团优选为以所述通式(111)、通式(115)以及通式(117)中的任一个表示的基团。
- [0330] 在本实施方式的化合物中,所述通式(110)中的 $Y_{12} \sim Y_{14}$ 优选为 CR_{10A} 。
- [0331] 在本实施方式的化合物中,所述通式(120)中的 $Y_{21} \sim Y_{24}$ 优选为 CR_{20A} 。
- [0332] 在本实施方式的化合物中,以所述通式(110)表示的基团优选为以下述通式(b1)~(b14)中的任一个表示的基团。
- [0333] [化23]



(b1)

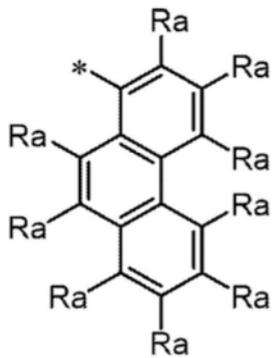


(b2)

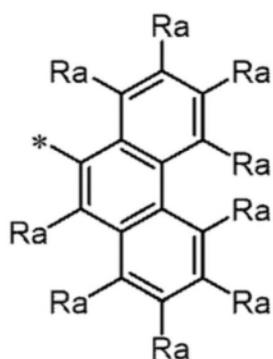


(b3)

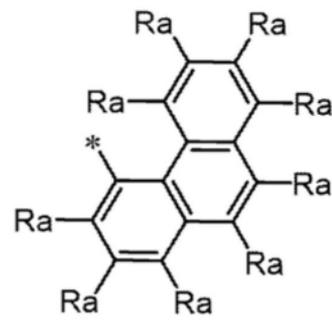
[0334]



(b4)

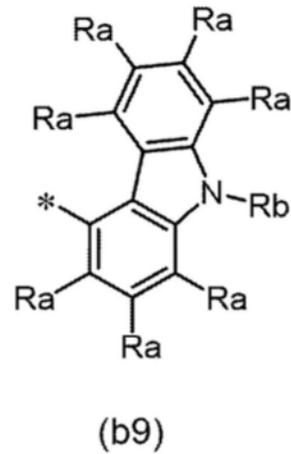
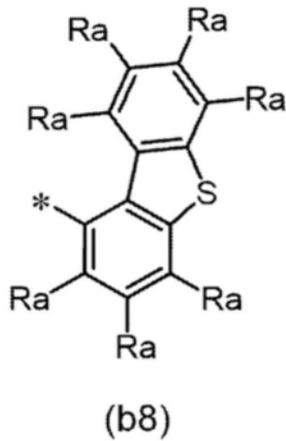
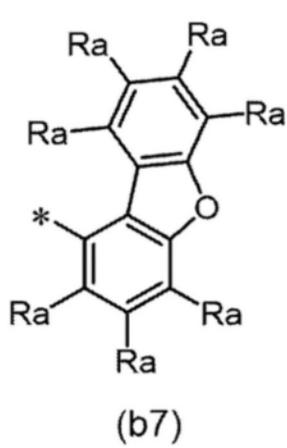


(b5)

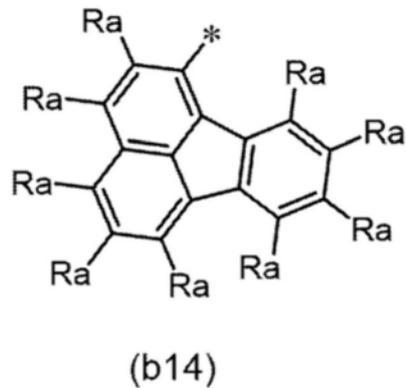
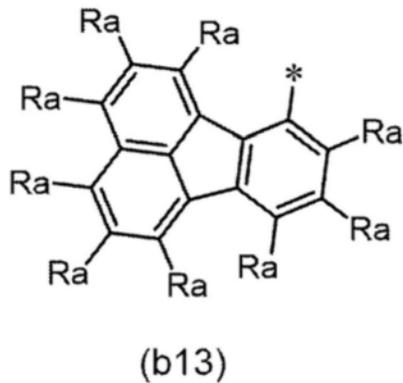
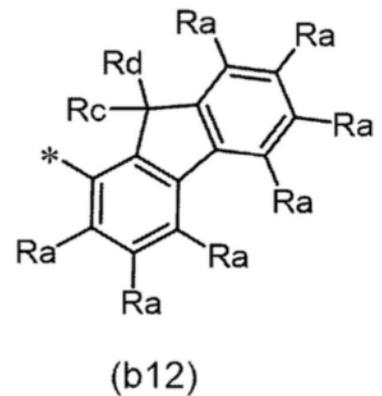
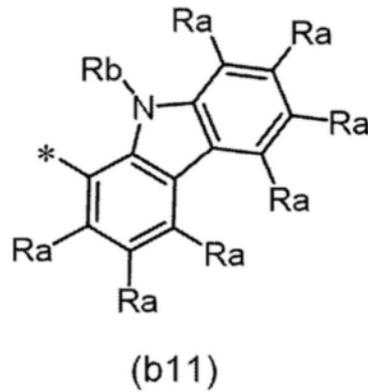
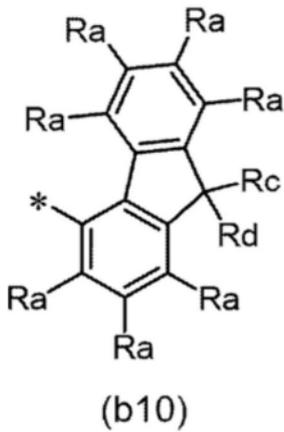


(b6)

[0335] [化24]



[0336]



[0337] (在所述通式 (b1) ~ (b14) 中, Ra 为氢原子或取代基, 或者相邻的 Ra 构成的组中的 1 组以上的组互相键合而形成环,

[0338] 多个 Ra 彼此相同或不同,

[0339] Rb 为氢原子或取代基,

[0340] Rc 以及 Rd 分别独立地为氢原子或取代基, 或者 Rc 以及 Rd 构成的组互相键合而形成环,

[0341] 作为取代基的 Ra、Rb、Rc 以及 Rd 与所述通式 (110) 中的作为取代基的 R_{10A} 同义。)

[0342] 所述通式 (b1) ~ (b14) 中, Ra 优选为氢原子、取代或未取代的成环碳数为 6~30 的芳基或者取代或未取代的碳数为 1~30 的烷基, 更优选为氢原子。

[0343] 所述通式 (b10) 以及 (b12) 中, 优选 Rc 以及 Rd 分别独立地为取代或未取代的成环碳

数为6~30的芳基或者取代或未取代的碳数为1~30的烷基,或者Rc以及Rd构成的组互相键合而形成环。

[0344] 所述通式 (b9) 以及 (b11) 中,Rb优选为取代或未取代的成环碳数为6~30的芳基、取代或未取代的碳数为1~30的烷基或者取代或未取代的成环原子数为5~30的杂环基。

[0345] 在所述通式 (b1) ~ (b14) 中,优选相邻的Ra构成的组中的1组以上的组不互相键合形成环。

[0346] 在所述通式 (b1) ~ (b14) 中,优选Rc以及Rd构成的组不互相键合形成环。

[0347] 在本实施方式的化合物中,以所述通式 (110) 表示的基团优选为取代或未取代的萘基、取代或未取代的菲基、取代或未取代的蒽基、取代或未取代的苯并菲基、取代或未取代的苯并蒽基、取代或未取代的三亚苯基、取代或未取代的芴基、取代或未取代的苯并芴基、取代或未取代的二苯并芴基、取代或未取代的荧蒹基、取代或未取代的二苯并咪喃基、取代或未取代的二苯并噻吩基、或者取代或未取代的咪唑基。

[0348] 在本实施方式的化合物中,优选为,在至少1个基团D₁中,R₁₀₁~R₁₆₀中的至少1个为以所述通式 (120) 表示的基团。

[0349] 在本实施方式的化合物中,优选为,R₁~R₄中的1个为基团D₁的情况下,在1个基团D₁中,R₁₀₁~R₁₆₀中仅1个为以所述通式 (120) 表示的基团。

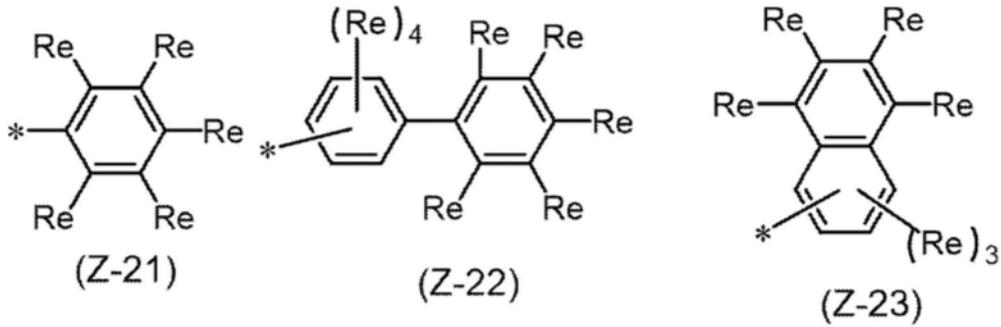
[0350] 在本实施方式的化合物中,优选为,R₁~R₄中的2个为基团D₁的情况下,在各个基团D₁中,R₁₀₁~R₁₆₀中仅1个为以所述通式 (120) 表示的基团。

[0351] 在本实施方式的化合物中,优选为,R₁~R₄中的3个为基团D₁的情况下,在各个基团D₁中,R₁₀₁~R₁₆₀中仅1个为以所述通式 (120) 表示的基团。

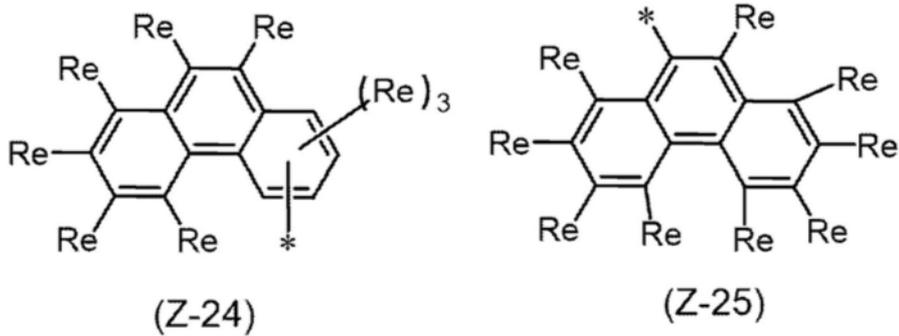
[0352] 在本实施方式的化合物中,所述通式 (120) 中的Z₂优选为取代或未取代的苯基、取代或未取代的萘基、取代或未取代的蒽基、取代或未取代的菲基、取代或未取代的芘基、取代或未取代的蒾基、取代或未取代的苯并菲基、取代或未取代的苯并蒾基、取代或未取代的苯并蒽基、取代或未取代的三亚苯基、取代或未取代的芴基、取代或未取代的9,9-二甲芴基、取代或未取代的苯并芴基、取代或未取代的二苯并芴基、取代或未取代的联苯基、取代或未取代的三联苯基、取代或未取代的四联苯基、取代或未取代的荧蒹基、取代或未取代的二苯并咪喃基、取代或未取代的二苯并噻吩基、取代或未取代的咪唑基、取代或未取代的吡啶基、取代或未取代的嘧啶基、或者取代或未取代的三嗪基。

[0353] 在本实施方式的化合物中,所述通式 (120) 中的Z₂优选为以下述通式 (Z21) ~ (Z31) 中的任一个表示的基团。

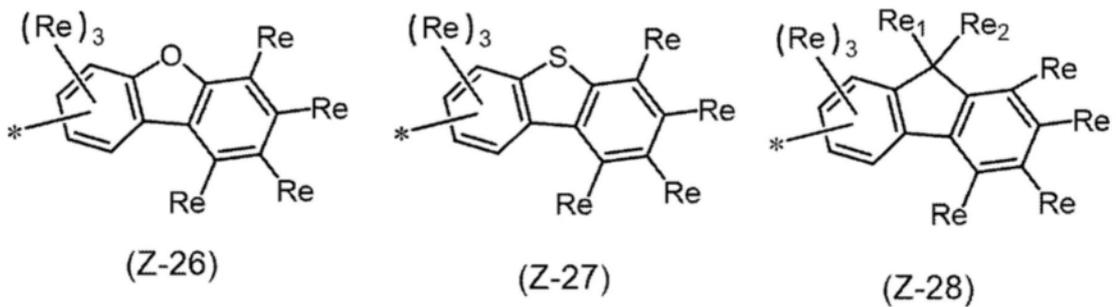
[0354] [化25]



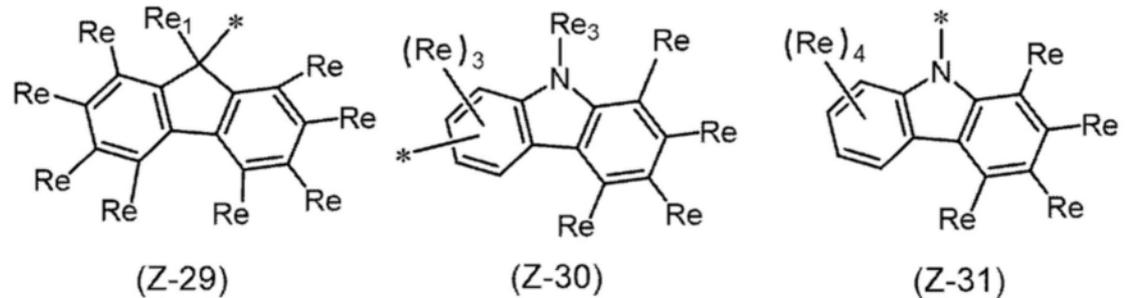
[0355]



[0356] [化26]



[0357]



[0358] (在所述通式(Z-21)~(Z-31)中,Re为氢原子或取代基,或者相邻的Re构成的组中的1组以上的组互相键合而形成环,多个Re彼此相同或不同,

[0359] Re_1 以及 Re_2 分别独立地为氢原子或取代基,或者 Re_1 以及 Re_2 构成的组互相键合而形成环,

[0360] Re_3 为氢原子或取代基,

[0361] 作为取代基的Re、 Re_1 、 Re_2 以及 Re_3 分别独立地与所述通式(120)中的作为取代基的 R_{20A} 同义。*分别独立地表示与所述通式(120)中的六元环的碳原子键合的位置。)

[0362] 所述通式(Z-21)~(Z-31)中,Re优选为氢原子、取代或未取代的成环碳数为6~30的芳基或者取代或未取代的碳数为1~30的烷基,更优选为氢原子。

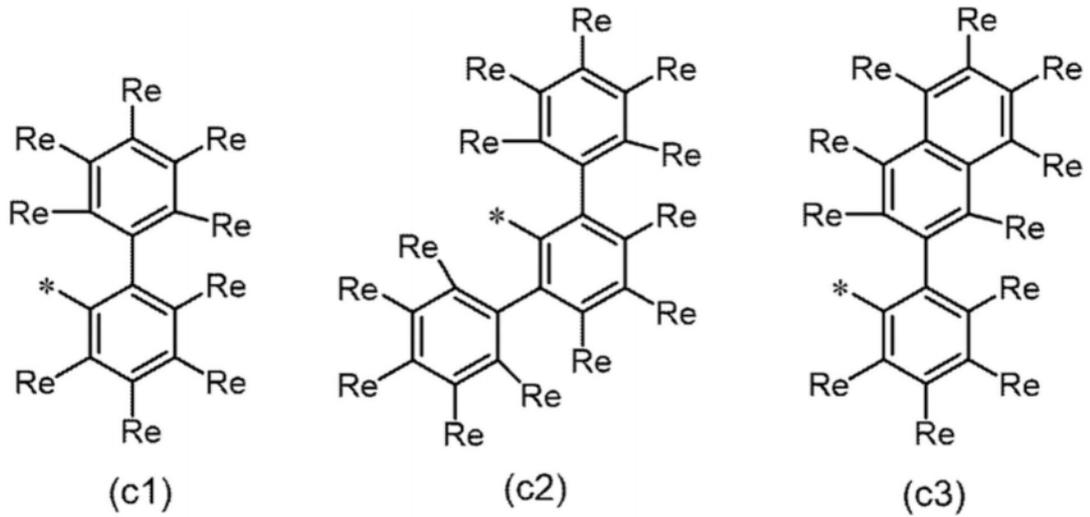
[0363] 所述通式(Z-28)~(Z-29)中,优选 Re_1 以及 Re_2 分别独立地为取代或未取代的成环

碳数为6~30的芳基或者取代或未取代的碳数为1~30的烷基,或者 Re_1 以及 Re_2 构成的组互相键合而形成环。

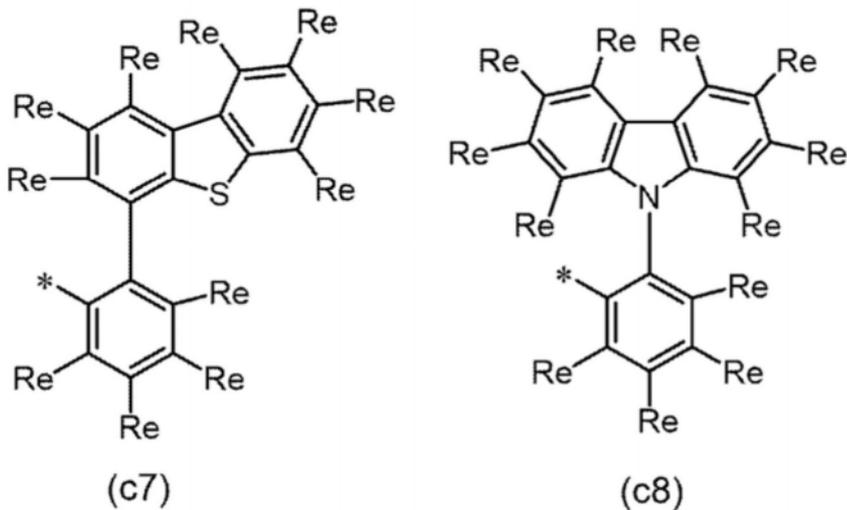
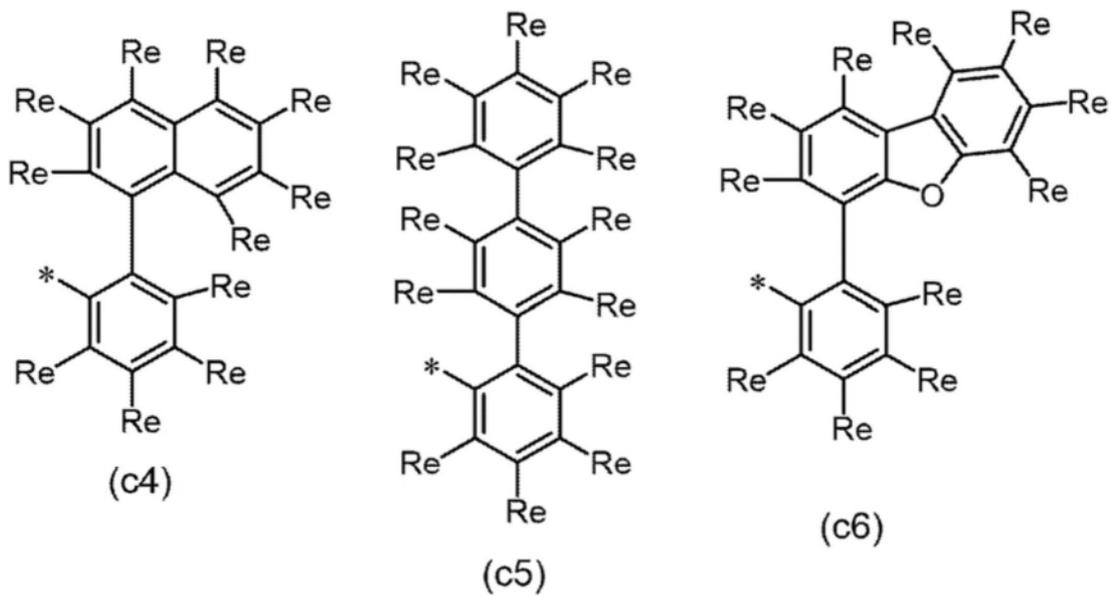
[0364] 所述通式(Z-30)中, Re_3 优选为取代或未取代的成环碳数为6~30的芳基、取代或未取代的碳数为1~30的烷基或者取代或未取代的成环原子数为5~30的杂环基。

[0365] 在本实施方式的化合物中,以所述通式(120)表示的基团优选为以下述通式(c1)~(c8)中的任一个表示的基团。

[0366] [化27]



[0367]



[0368] (在所述通式(c1)~(c8)中,Re为氢原子或取代基,多个Re彼此相同或不同,

[0369] 作为取代基的Re与所述通式(120)中的作为取代基的 R_{20A} 同义。)

[0370] 所述通式(c1)~(c8)中,Re优选为氢原子、取代或未取代的成环碳数为6~30的芳

基或者取代或未取代的碳数为1~30的烷基,更优选为氢原子。

[0371] 在本实施方式的化合物中,所述基团 D_1 中的 $X_1 \sim X_6$ 优选为氧原子。

[0372] 在本实施方式的化合物中,所述基团 D_1 中的 $X_1 \sim X_6$ 优选为硫原子。

[0373] 本实施方式的化合物优选为以所述通式(11)表示的化合物。

[0374] 本实施方式的化合物优选为以所述通式(12)表示的化合物。

[0375] 本实施方式的化合物优选为以所述通式(13)表示的化合物。

[0376] 在本实施方式的化合物中,优选 $R_{101} \sim R_{160}$ 、 $R_{161} \sim R_{168}$ 、 $R_{171} \sim R_{200}$ 、 R_{10A} 以及 R_{20A} 分别独立地为氢原子、卤素原子、氰基、未取代的成环碳数为6~30的芳基、未取代的成环原子数为5~30的杂环基、未取代的碳数为1~30的烷基、未取代的碳数为1~30的卤代烷基、未取代的碳数为2~30的烯基、未取代的碳数为2~30的炔基、未取代的碳数为3~30的烷基甲硅烷基、未取代的成环碳数为6~30的芳基甲硅烷基、未取代的成环碳数为6~60的芳基磷酰基、羟基、未取代的碳数为1~30的烷氧基、未取代的成环碳数为6~30的芳氧基、以 $-N(Rz)_2$ 表示的基团、硫醇基、未取代的碳数为1~30的烷硫基、未取代的成环碳数为7~30的芳烷基、取代锶基、取代氧化膦基、硝基、取代硼基、或者未取代的成环碳数为6~30的芳硫基。

[0377] 在本实施方式的化合物中, $-N(Rz)_2$ 中的Rz优选为未取代的成环碳数为6~30的芳基、未取代的成环原子数为5~30的杂环基、或者未取代的碳数为1~30的烷基。

[0378] 在本实施方式的化合物中,优选 $R_{101} \sim R_{160}$ 、 $R_{161} \sim R_{168}$ 、 $R_{171} \sim R_{200}$ 、 R_{10A} 以及 R_{20A} 分别独立地为氢原子、卤素原子、取代或未取代的成环碳数为6~14的芳基、取代或未取代的成环原子数为5~14的杂环基、取代或未取代的碳数为1~6的烷基、取代或未取代的碳数为1~30的卤代烷基、取代或未取代的碳数为3~6的烷基甲硅烷基、取代或未取代的碳数为1~6的烷氧基、取代或未取代的成环碳数为6~14的芳氧基、以 $-N(Rz)_2$ 表示的基团、取代或未取代的碳数为1~6的烷硫基、或者取代或未取代的成环碳数为6~14的芳硫基。

[0379] 在本实施方式的化合物中,优选 $R_{101} \sim R_{160}$ 、 $R_{161} \sim R_{168}$ 、 $R_{171} \sim R_{200}$ 、 R_{10A} 以及 R_{20A} 分别独立地为氢原子、卤素原子、未取代的成环碳数为6~14的芳基、未取代的成环原子数为5~14的杂环基、未取代的碳数为1~6的烷基、未取代的碳数为1~30的卤代烷基、未取代的碳数为3~6的烷基甲硅烷基、未取代的碳数为1~6的烷氧基、未取代的成环碳数为6~14的芳氧基、未取代的碳数为2~12的烷基氨基、未取代的碳数为1~6的烷硫基、或者未取代的成环碳数为6~14的芳硫基。

[0380] 在本实施方式的化合物中,优选 $R_{101} \sim R_{160}$ 、 $R_{161} \sim R_{168}$ 、 $R_{171} \sim R_{200}$ 、 R_{10A} 以及 R_{20A} 分别独立地为氢原子、未取代的成环碳数为6~14的芳基、未取代的成环原子数为5~14的杂环基、或者未取代的碳数为1~6的烷基。

[0381] 在本实施方式的化合物中,优选为, R_{10A} 以及 R_{20A} 为氢原子,所述环(B)为未取代的成环碳数为6~30的芳香族烃环、或者未取代的成环碳数为5~30的杂环, Z_2 为未取代的成环碳数为6~30的芳基、或者未取代的成环原子数为5~30的杂环基。

[0382] 在本实施方式的化合物中,还优选分子内的氢原子中的1个以上为氘原子。

[0383] 在本实施方式的化合物中,还优选所述基团 D_1 中的 $R_{101} \sim R_{160}$ 中1个以上为氢原子,该氢原子全部为氘原子。

[0384] 在本实施方式的化合物中,还优选所述基团 D_1 中的 $R_{101} \sim R_{160}$ 中1个以上为氢原子,该氢原子全部为氘原子。

[0385] 在本实施方式的化合物中,还优选所述基团 D_1 中的 $R_{101} \sim R_{160}$ 中以所述通式(110)表示的基团或以通式(120)表示的基团以外为氢原子,该氢原子为氘原子。

[0386] 在本实施方式的化合物中,优选为,在所述基团 D_1 中的 $R_{101} \sim R_{160}$ 中的任1个以上为取代基(包括以所述通式(110)表示的基团或以通式(120)表示的基团),且该取代基具有1个以上的氢原子的情况下,该氢原子全部为氘原子,或者该氢原子内的任1个以上为氘原子,或者该氢原子全部为氘原子。

[0387] 在本实施方式的化合物中,还优选所述基团 D_2 中的 $R_{161} \sim R_{168}$ 以及 $R_{171} \sim R_{200}$ 中1个以上为氢原子,该氢原子全部为氘原子。

[0388] 在本实施方式的化合物中,还优选所述基团 D_2 中的 $R_{161} \sim R_{168}$ 以及 $R_{171} \sim R_{200}$ 中1个以上为氢原子,该氢原子全部为氘原子。

[0389] 在本实施方式的化合物中,还优选所述基团 D_2 中的 $R_{161} \sim R_{168}$ 以及 $R_{171} \sim R_{200}$ 为氢原子,该氢原子为氘原子。

[0390] 在本实施方式的化合物中,优选为,在所述基团 D_2 中的 $R_{161} \sim R_{168}$ 以及 $R_{171} \sim R_{200}$ 中的任1个以上为取代基,且该取代基具有1个以上的氢原子的情况下,该氢原子全部为氘原子,或者该氢原子内的任1个以上为氘原子,或者该氢原子全部为氘原子。

[0391] 在本实施方式的化合物中,优选为, $R_{101} \sim R_{160}$ 中以所述通式(110)表示的基团以及以(120)表示的基团以外为氢原子,且 $R_{161} \sim R_{168}$ 以及 $R_{171} \sim R_{200}$ 为氢原子。

[0392] 在本实施方式的化合物中,还优选为, $R_{101} \sim R_{160}$ 中以所述通式(110)表示的基团以及以(120)表示的基团以外为氢原子,该氢原子为氘原子,且 $R_{161} \sim R_{168}$ 以及 $R_{171} \sim R_{200}$ 为氢原子,该氢原子为氘原子。

[0393] 在本实施方式的化合物(以所述通式(11)~(13)中的任一个表示的化合物)中,优选为,“取代或未取代的”这样的情况下的取代基分别独立地为,

[0394] 卤素原子、

[0395] 氰基、

[0396] 未取代的成环碳数为6~30的芳基、

[0397] 未取代的成环原子数为5~30的杂环基、

[0398] 未取代的碳数为1~30的烷基、

[0399] 未取代的碳数为1~30的卤代烷基、

[0400] 未取代的碳数为2~30的烯基、

[0401] 未取代的碳数为2~30的炔基、

[0402] 未取代的碳数为3~30的烷基甲硅烷基、

[0403] 未取代的成环碳数为6~60的芳基甲硅烷基、

[0404] 未取代的成环碳数为6~60的芳基磷酰基、

[0405] 羟基、

[0406] 未取代的碳数为1~30的烷氧基、

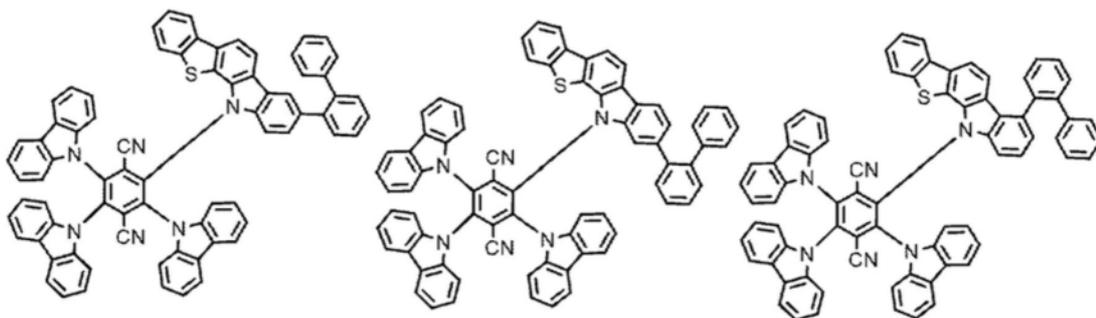
[0407] 未取代的成环碳数为6~30的芳氧基、

[0408] 以 $-N(R_z)_2$ 表示的基团、

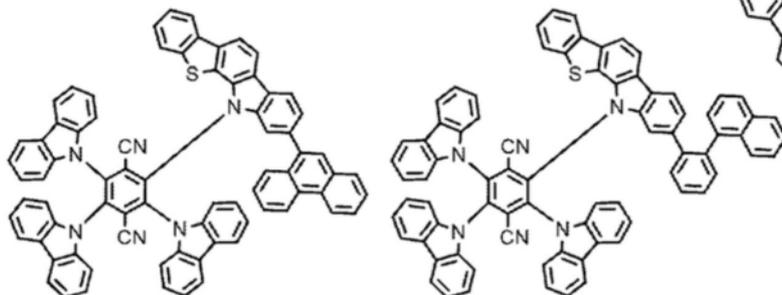
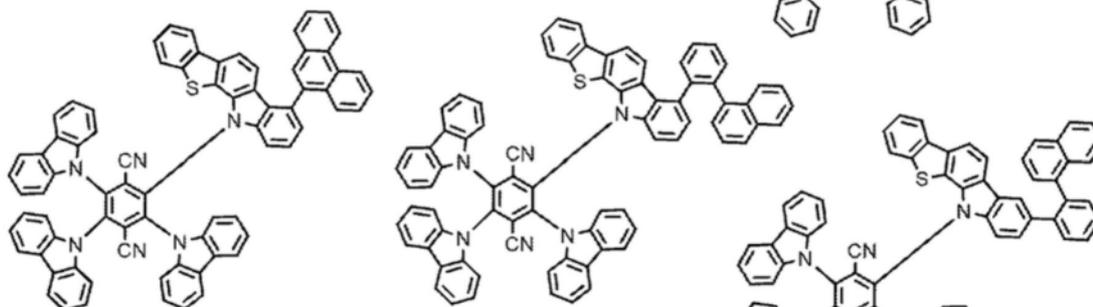
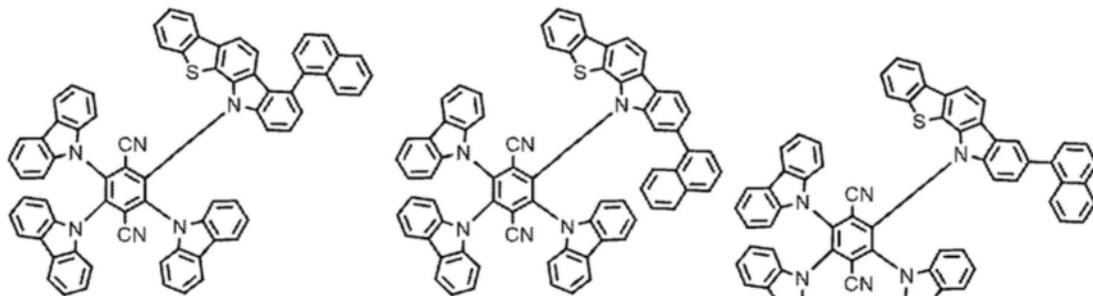
[0409] 硫醇基、

[0410] 未取代的碳数为1~30的烷硫基、

- [0411] 未取代的成环碳数为7~30的芳烷基、
- [0412] 取代锆基、
- [0413] 取代氧化磷基、
- [0414] 硝基、
- [0415] 取代硼基、或者
- [0416] 未取代的成环碳数为6~30的芳硫基，
- [0417] Rz为，
- [0418] 未取代的成环碳数为6~30的芳基、
- [0419] 未取代的成环原子数为5~30的杂环基、或者
- [0420] 未取代的碳数为1~30的烷基。
- [0421] 所述-N(Rz)₂中的2个Rz相同或不同。
- [0422] • 本实施方式的化合物的制造方法
- [0423] 本实施方式的化合物例如能够通过后述的实施例所记载的方法制造。本实施方式的化合物能够通过仿照后述的实施例中说明的反应，使用与目标物匹配的已知的替代反应和原料来制造。
- [0424] • 本实施方式的化合物的具体例
- [0425] 作为本实施方式的化合物的具体例，例如可例举以下的化合物。其中，本发明并不受这些化合物的具体例的限定。
- [0426] [化28]

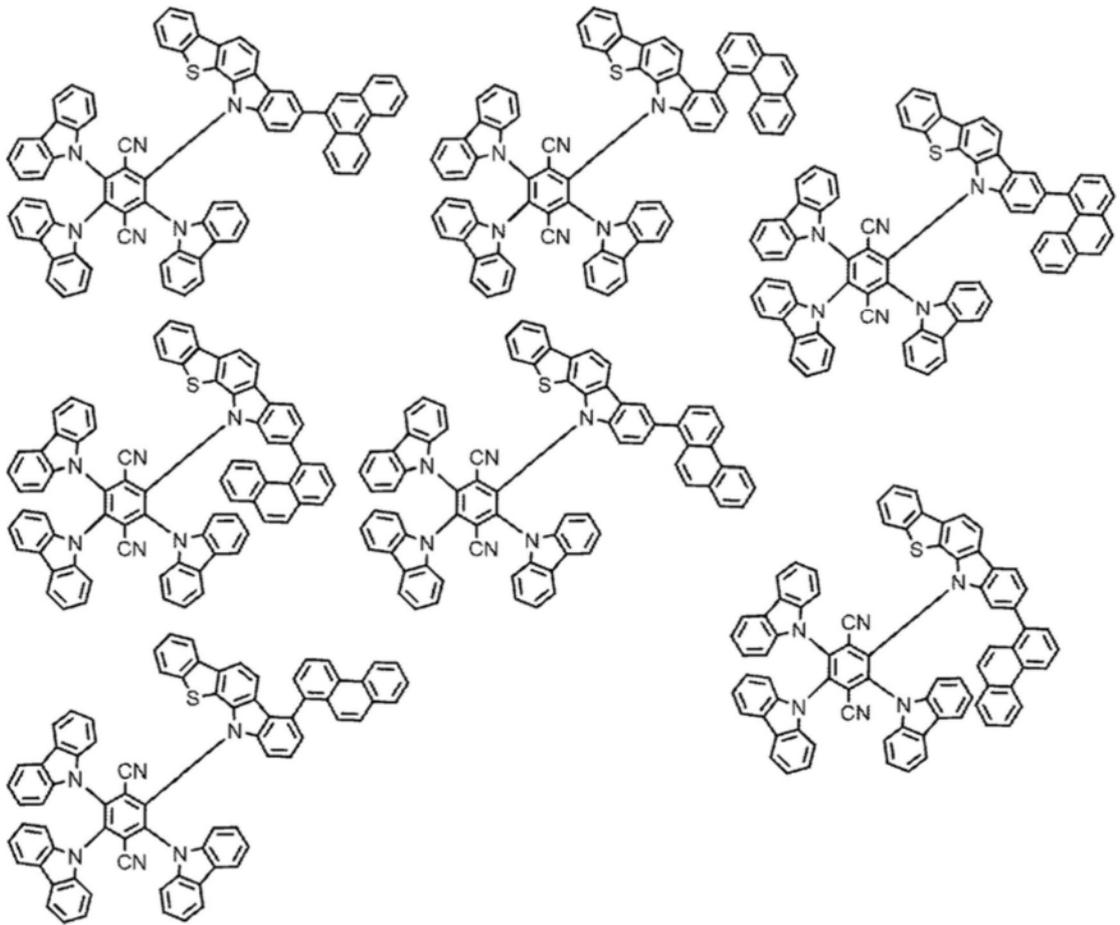


[0427]

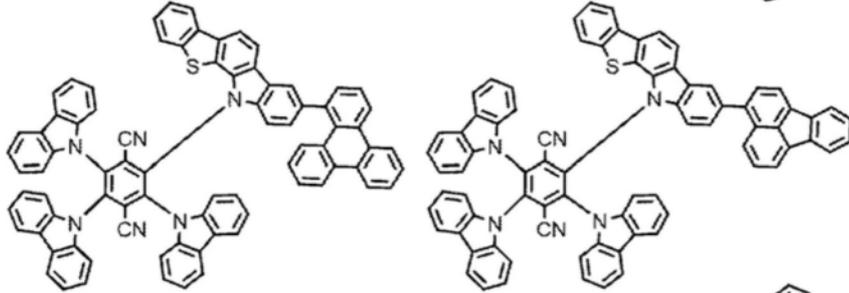
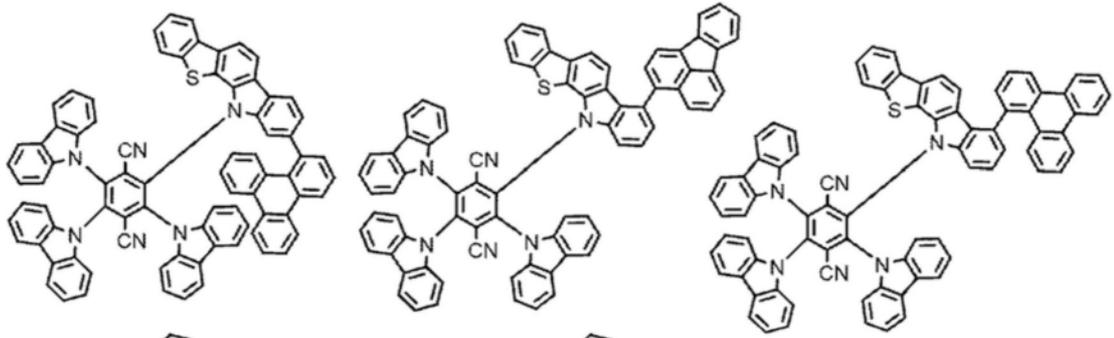


[0428] [化29]

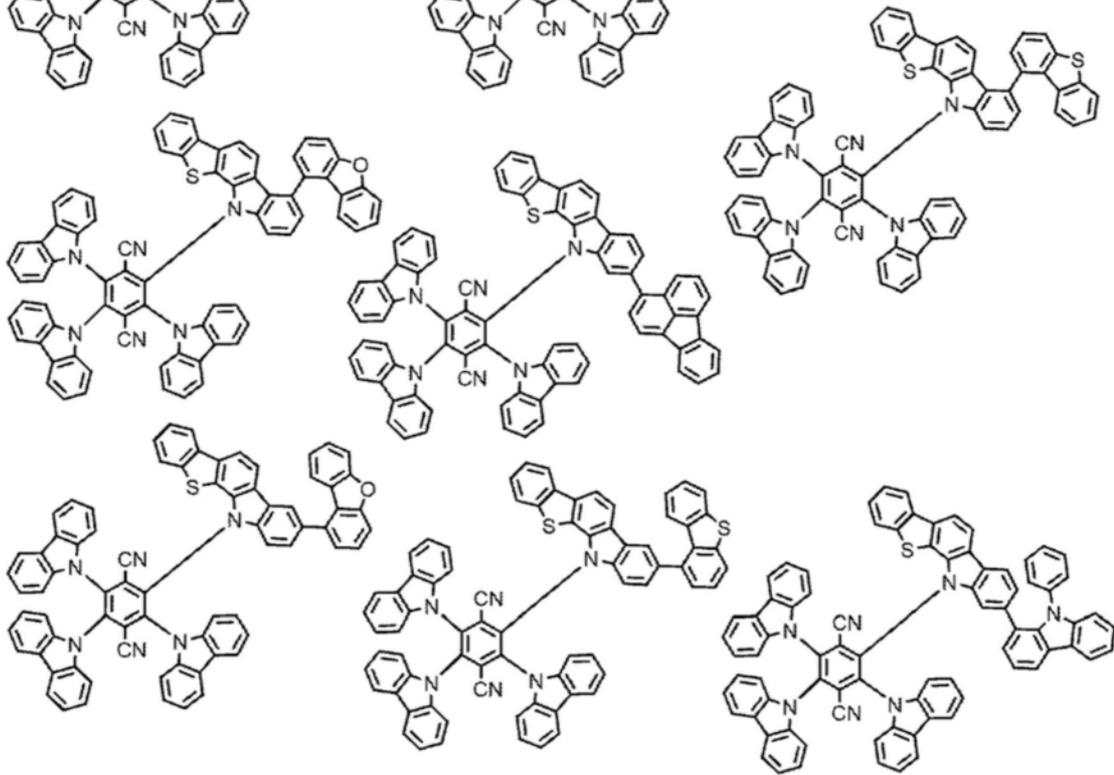
[0429]



[0430] [化30]

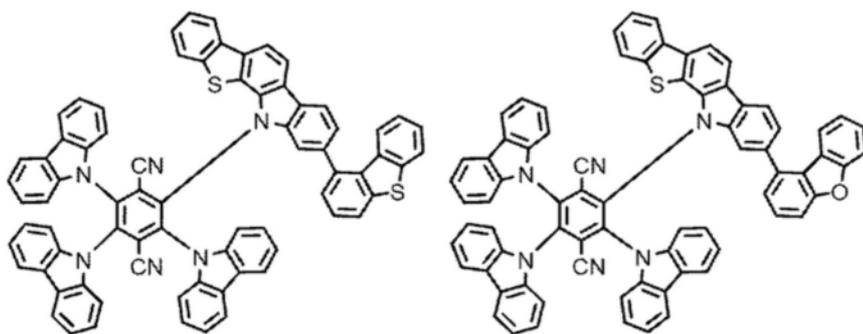


[0431]

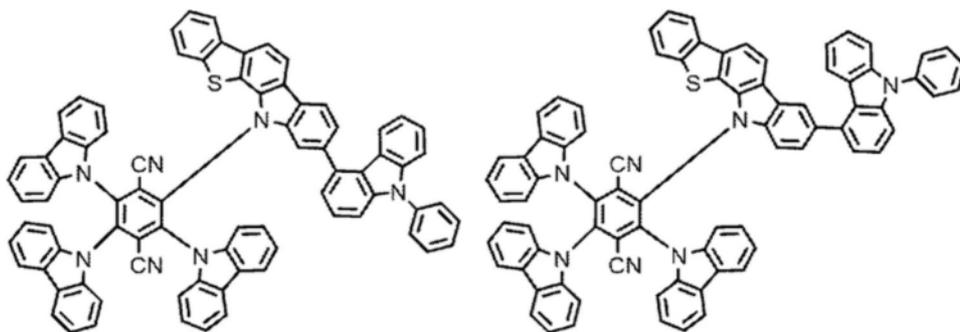


[0432] [化31]

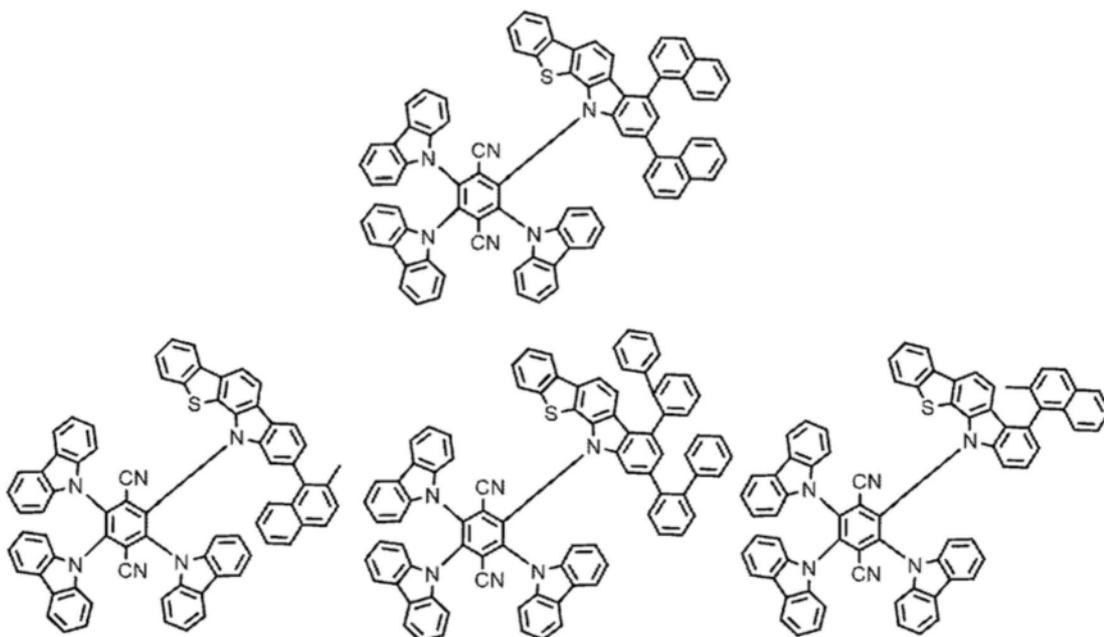
[0433]



[0434] [化32]



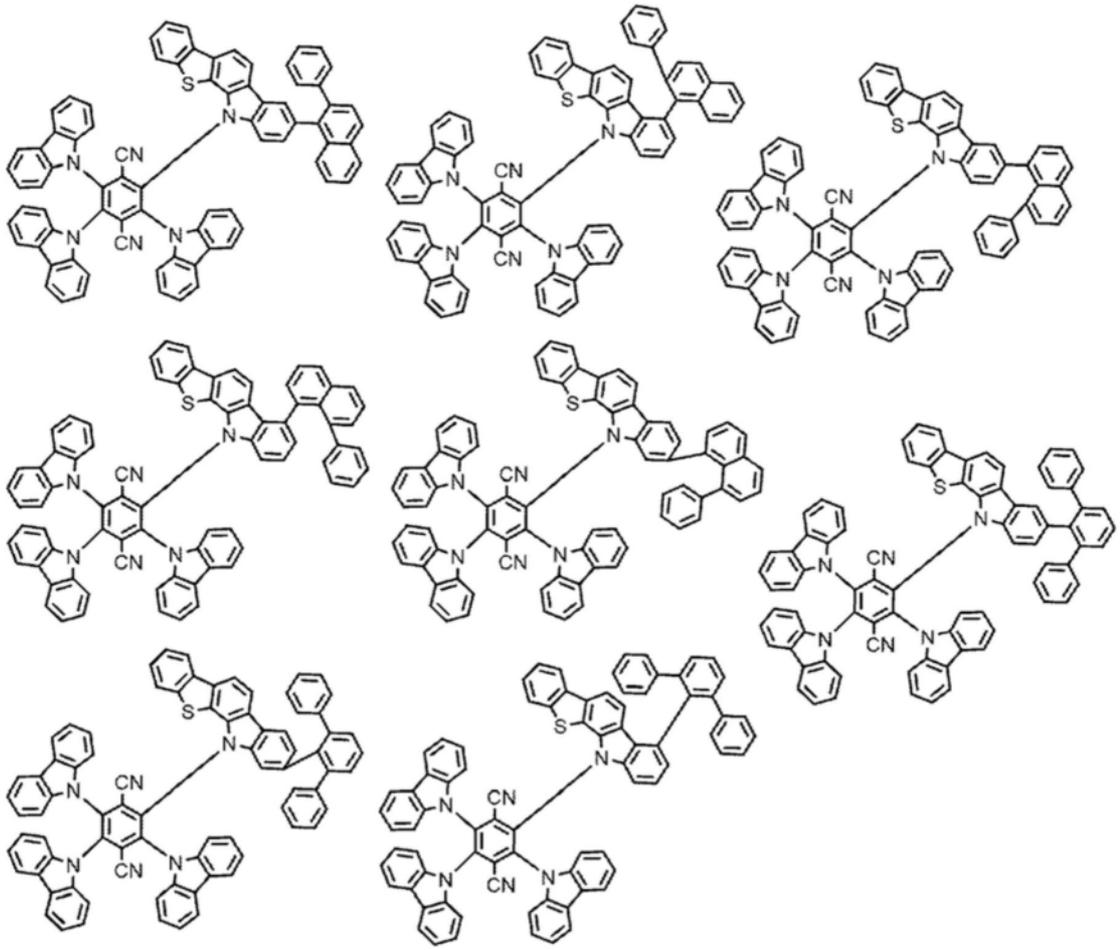
[0435]



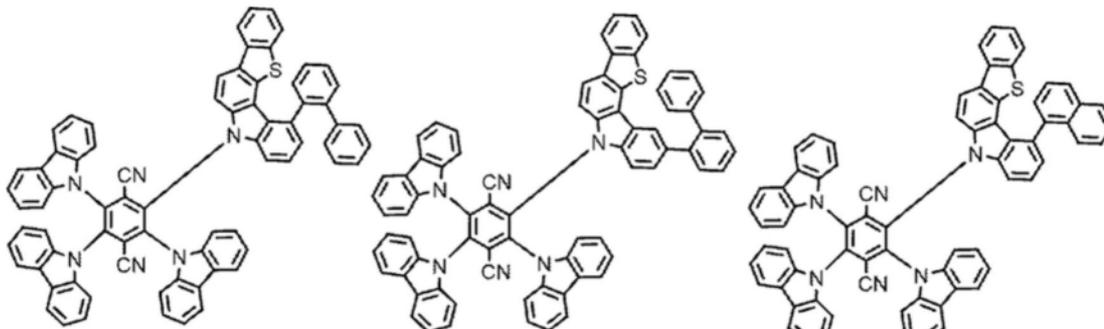
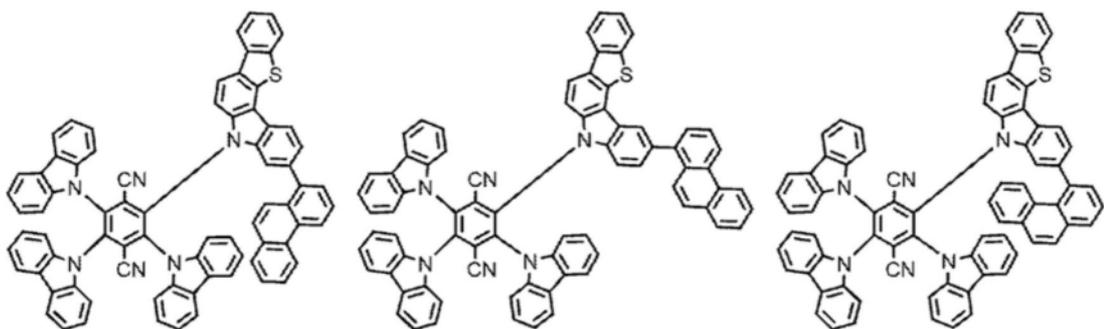
[0436] [化33]



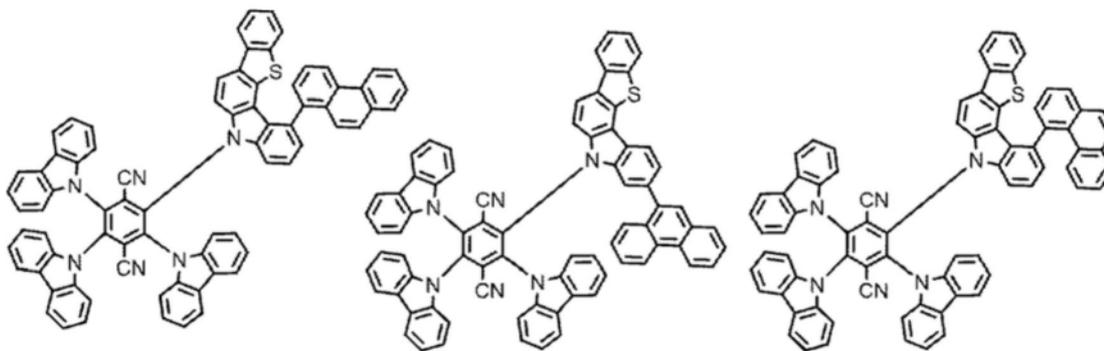
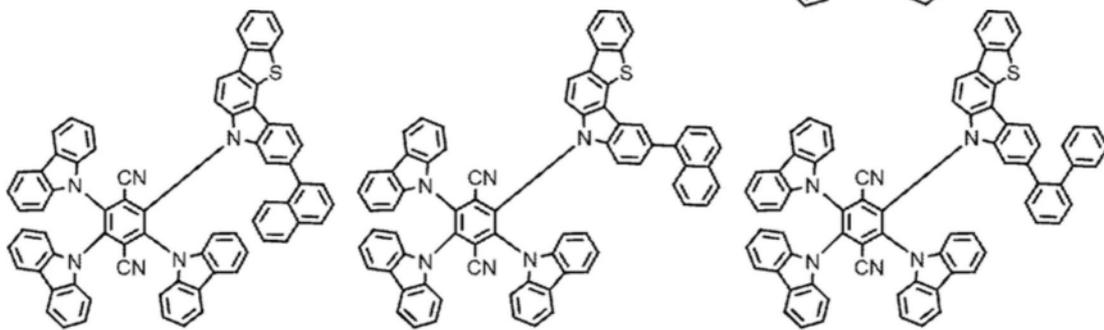
[0437]



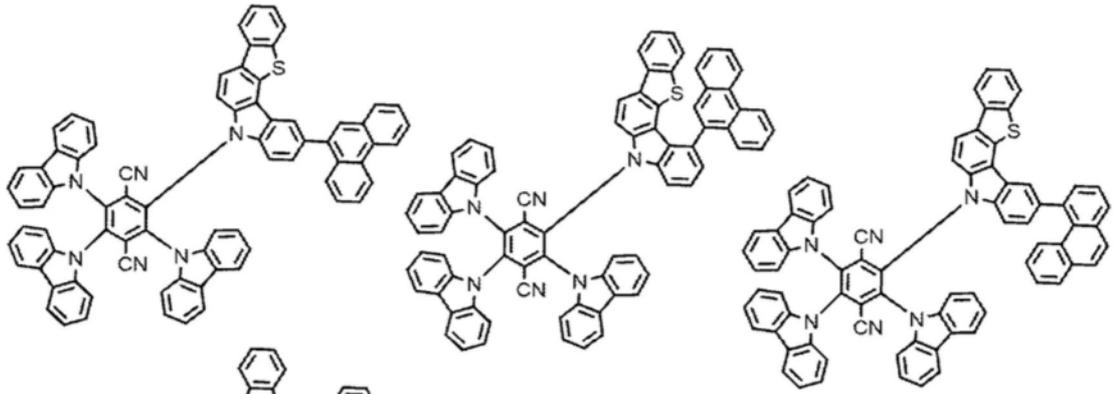
[0438] [化34]



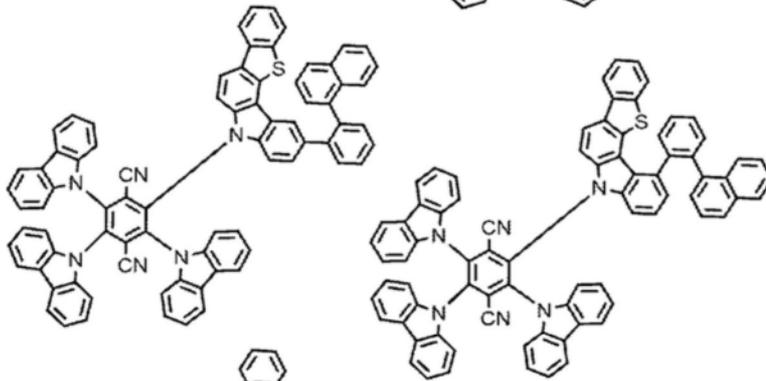
[0439]



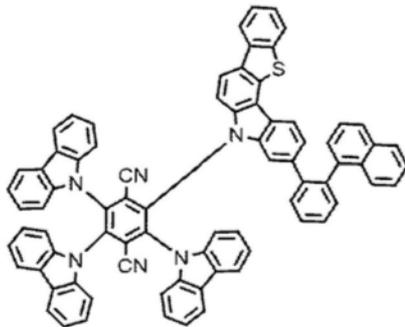
[0440] [化35]

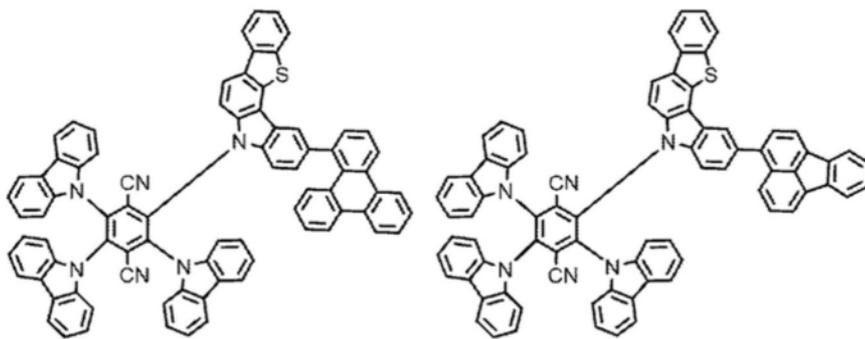


[0441]

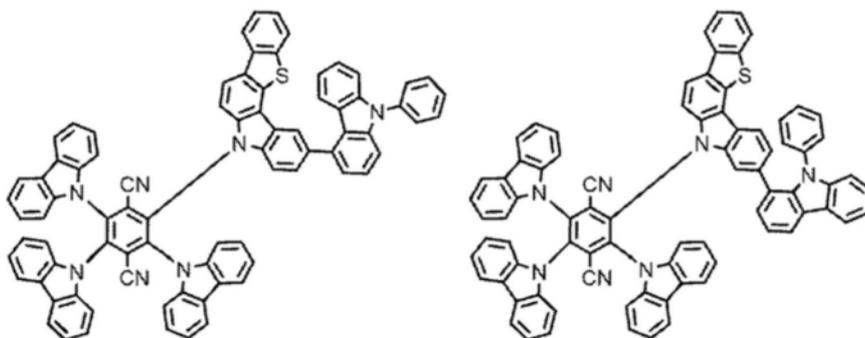
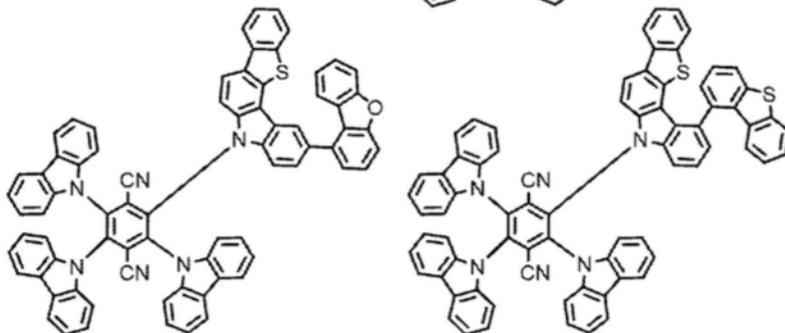
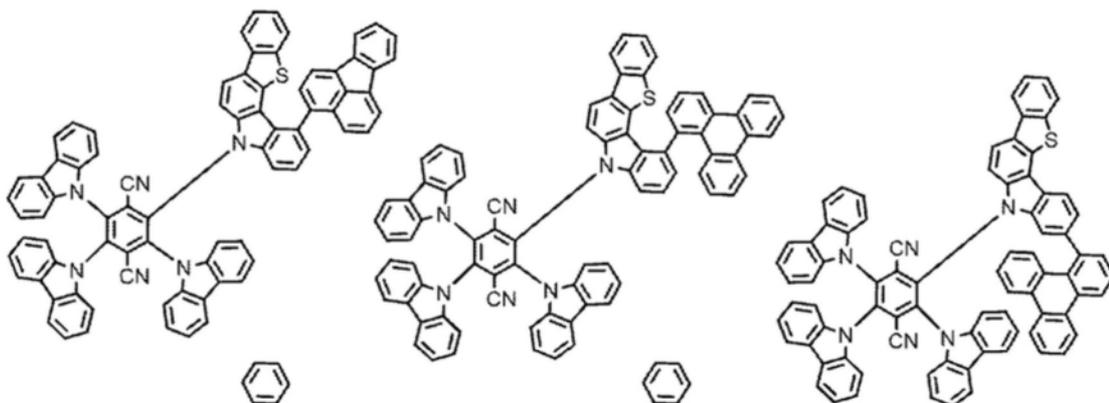


[0442] [化36]

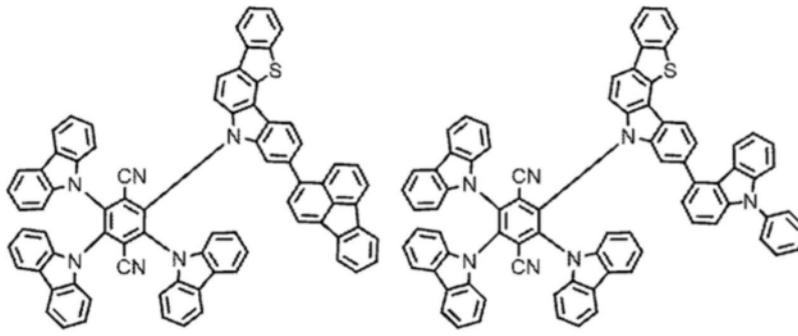




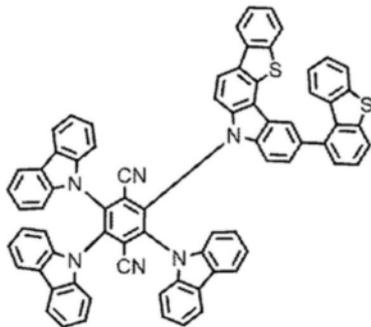
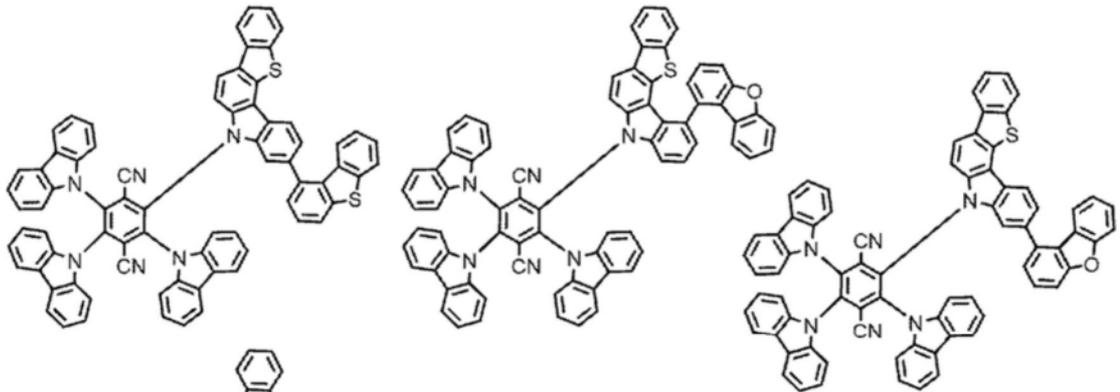
[0443]



[0444] [化37]



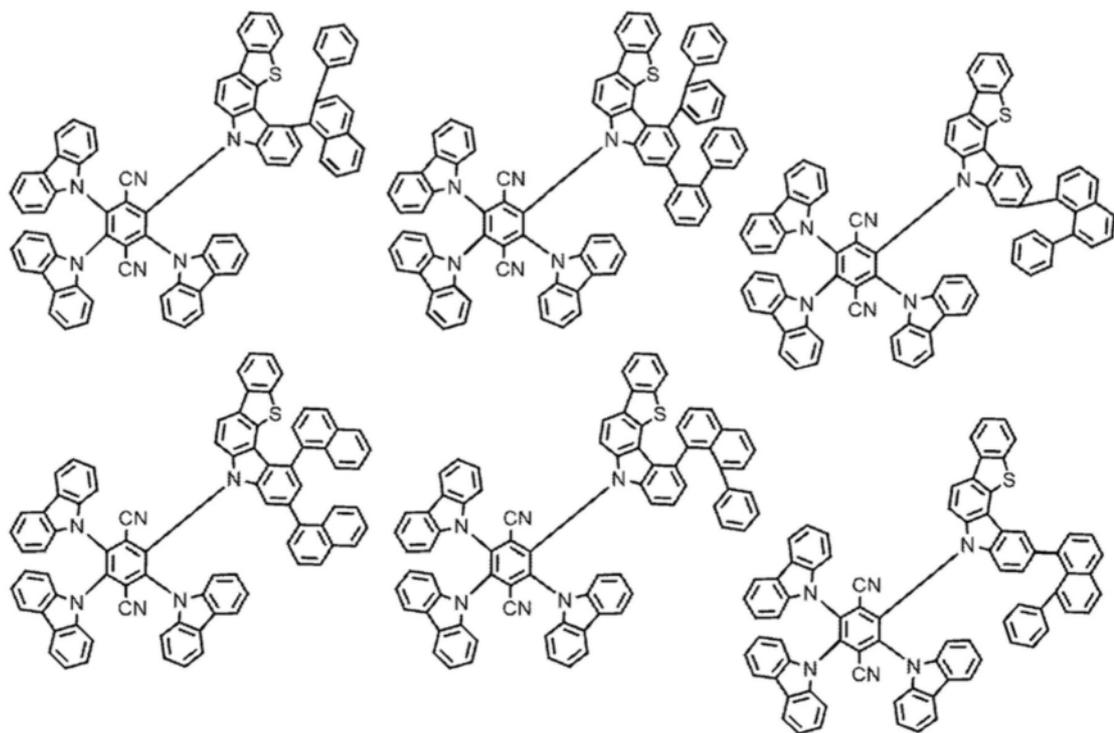
[0445]



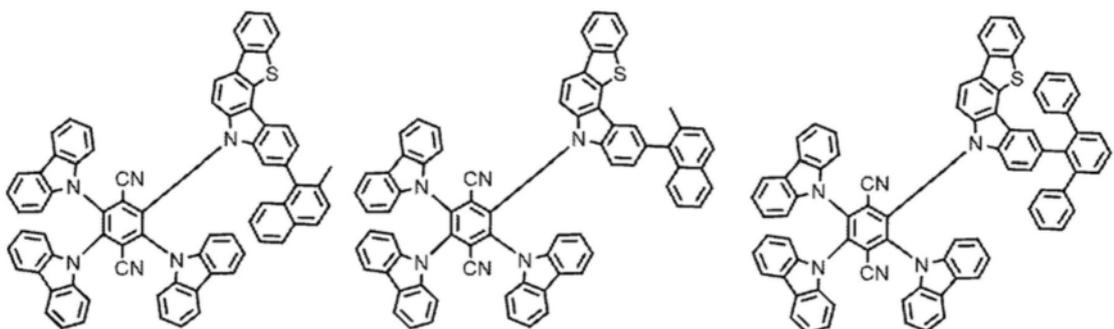
[0446]

[化38]

[0447]

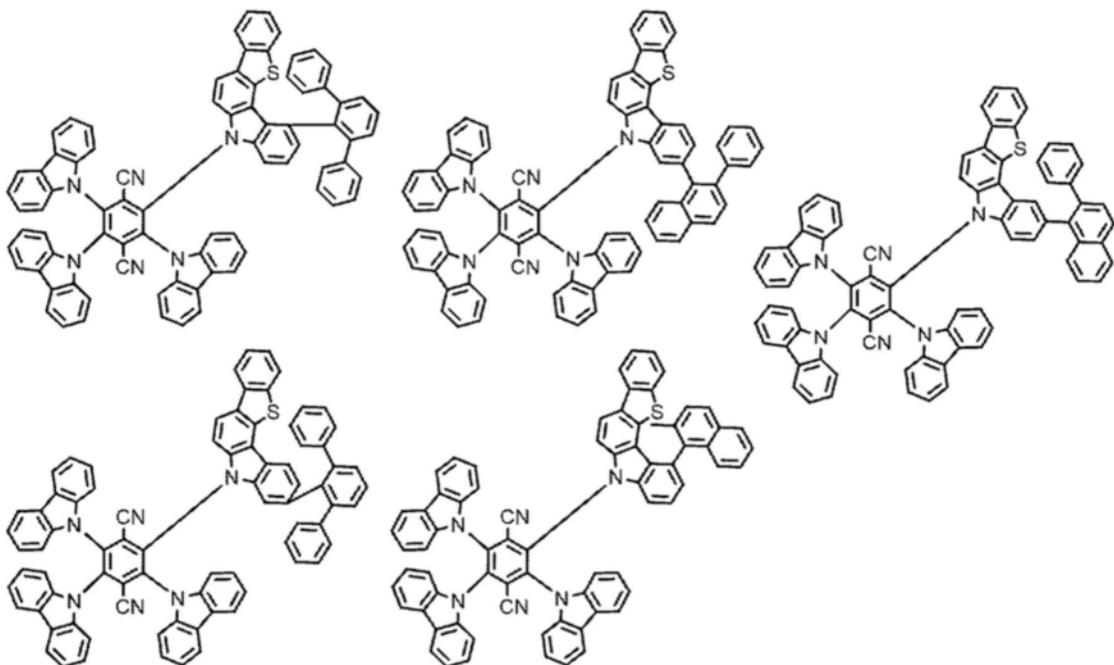


[0448]

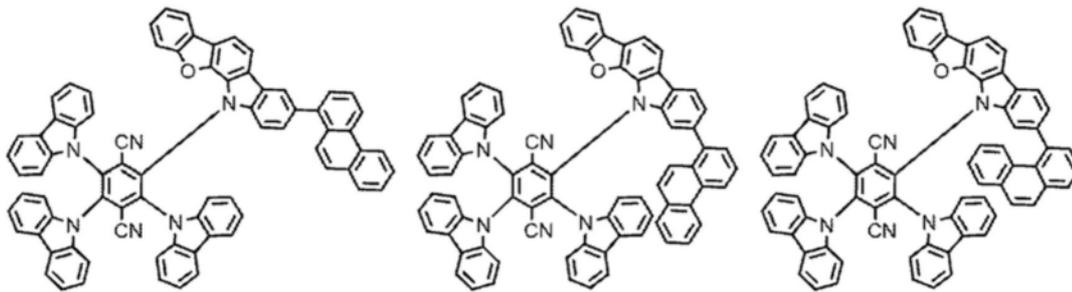


[化39]

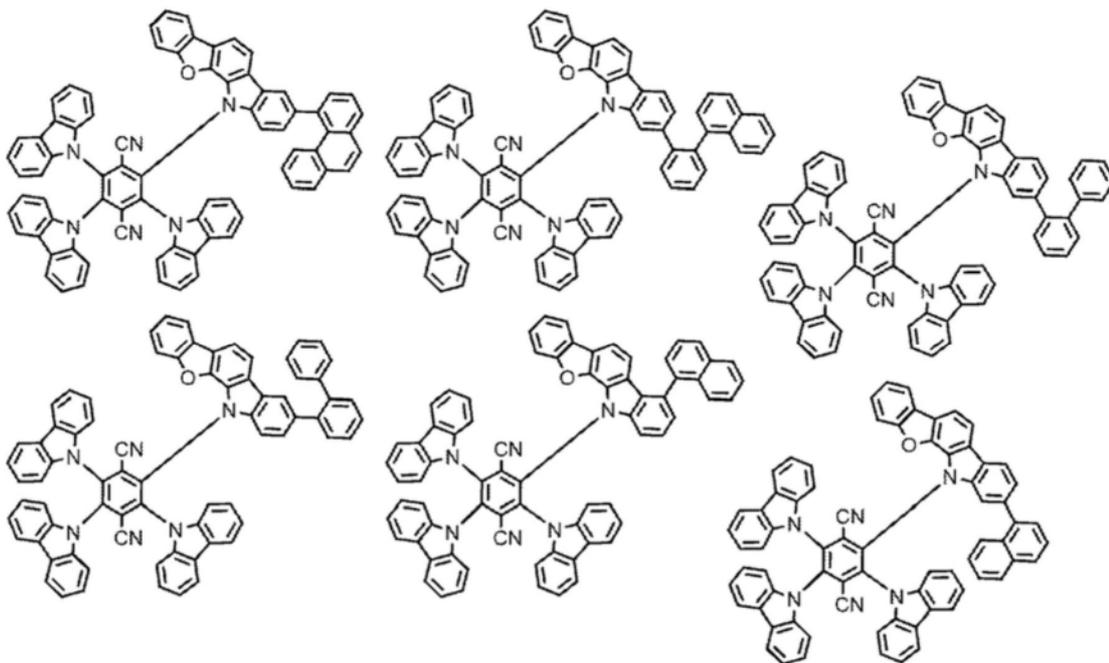
[0449]



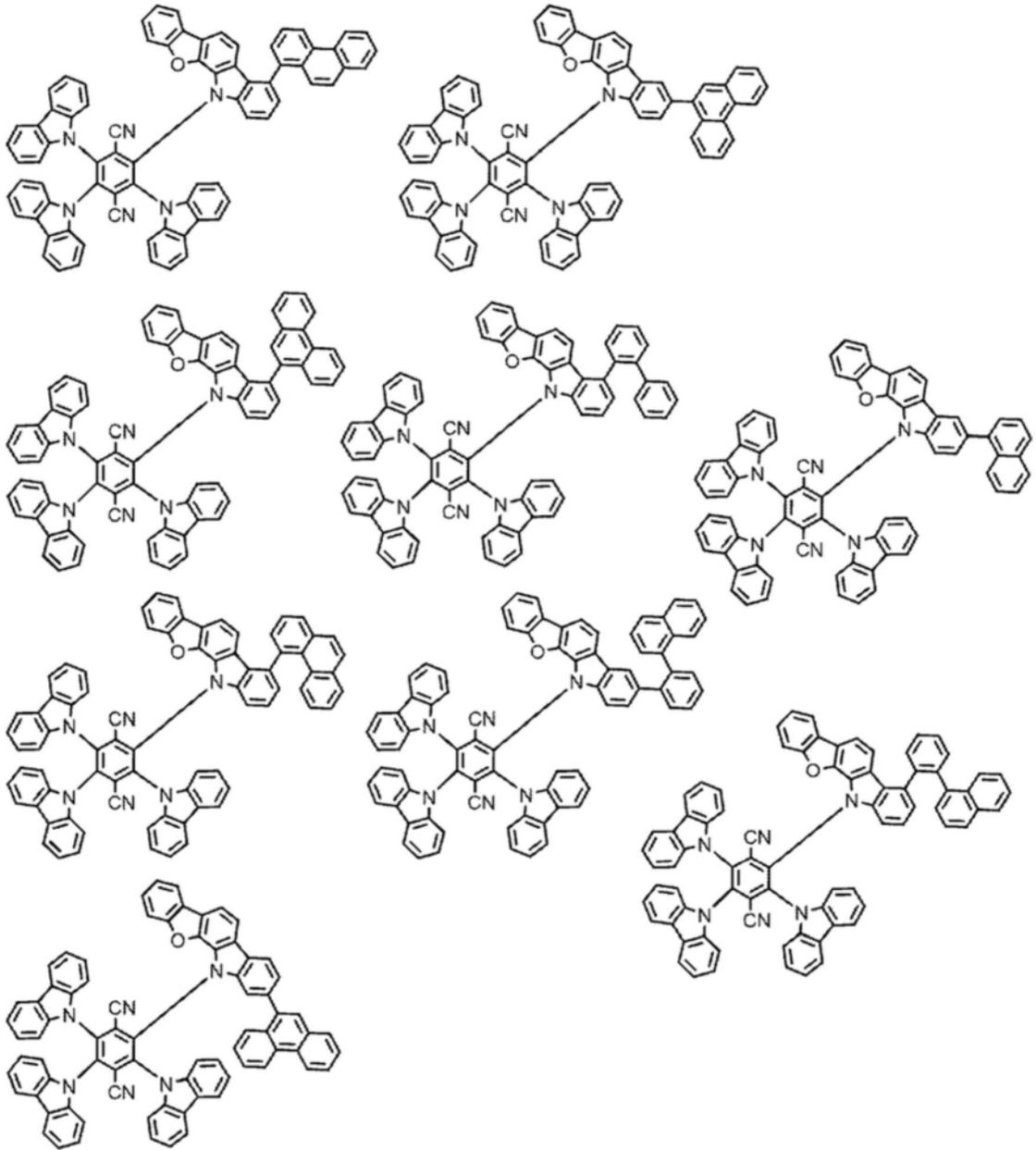
[0450] [化40]



[0451]

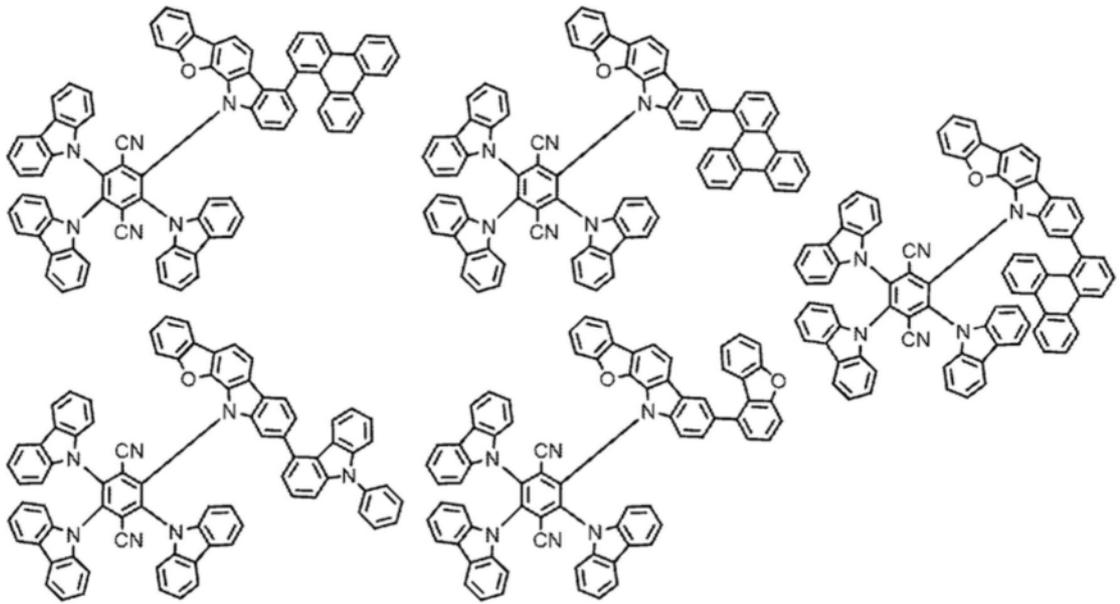


[0452] [化41]

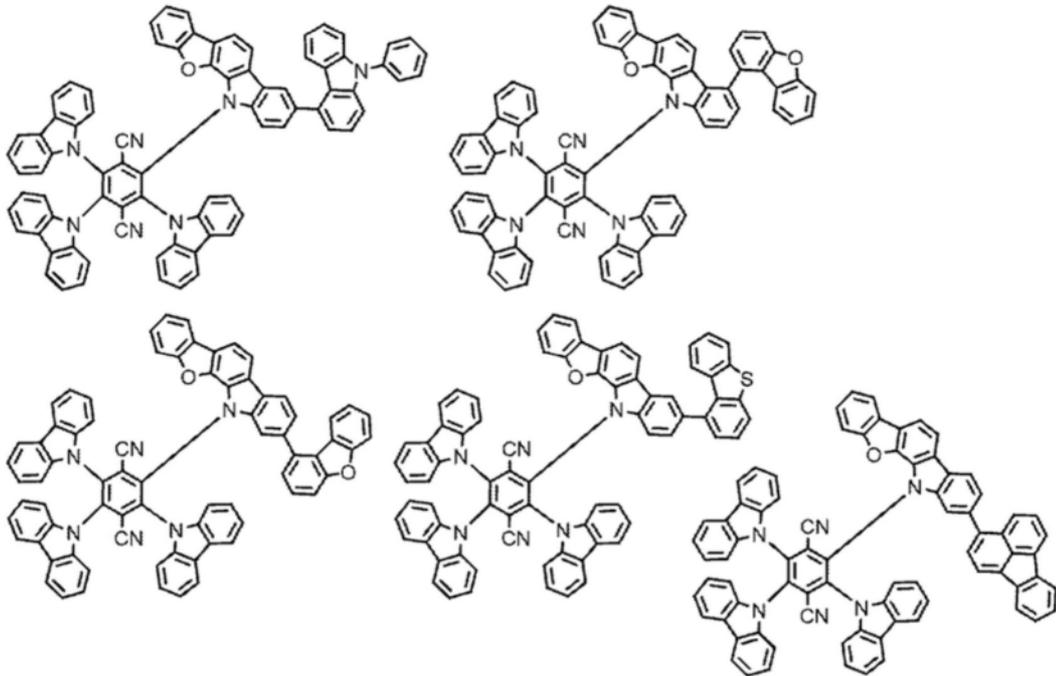


[0453]

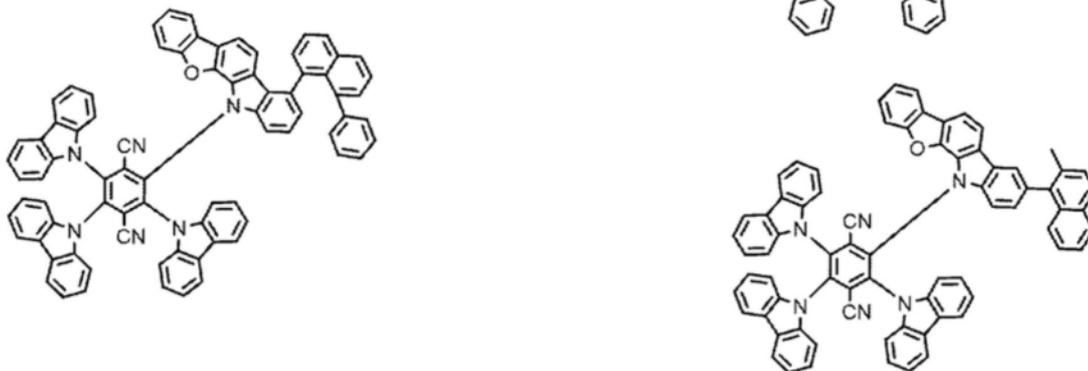
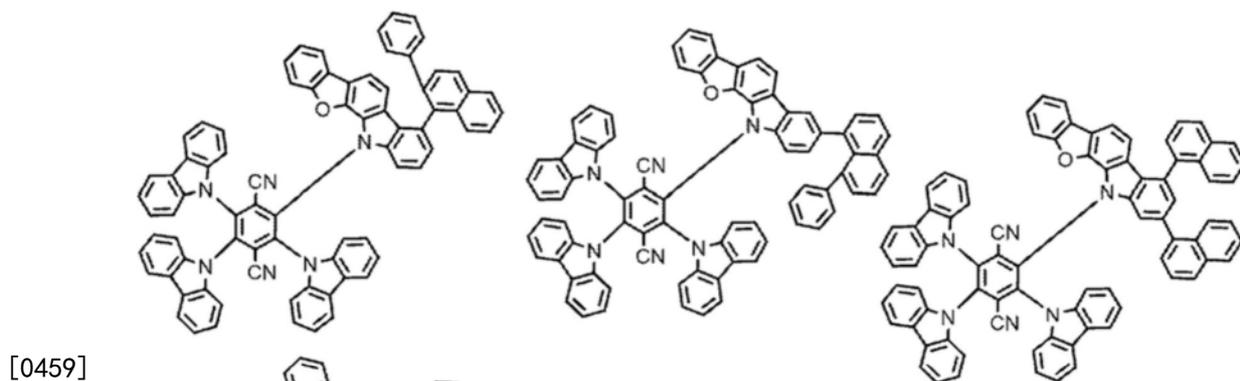
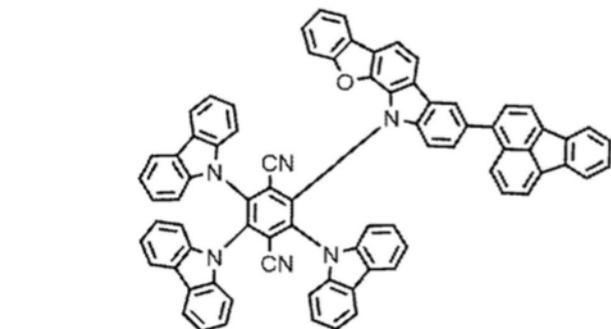
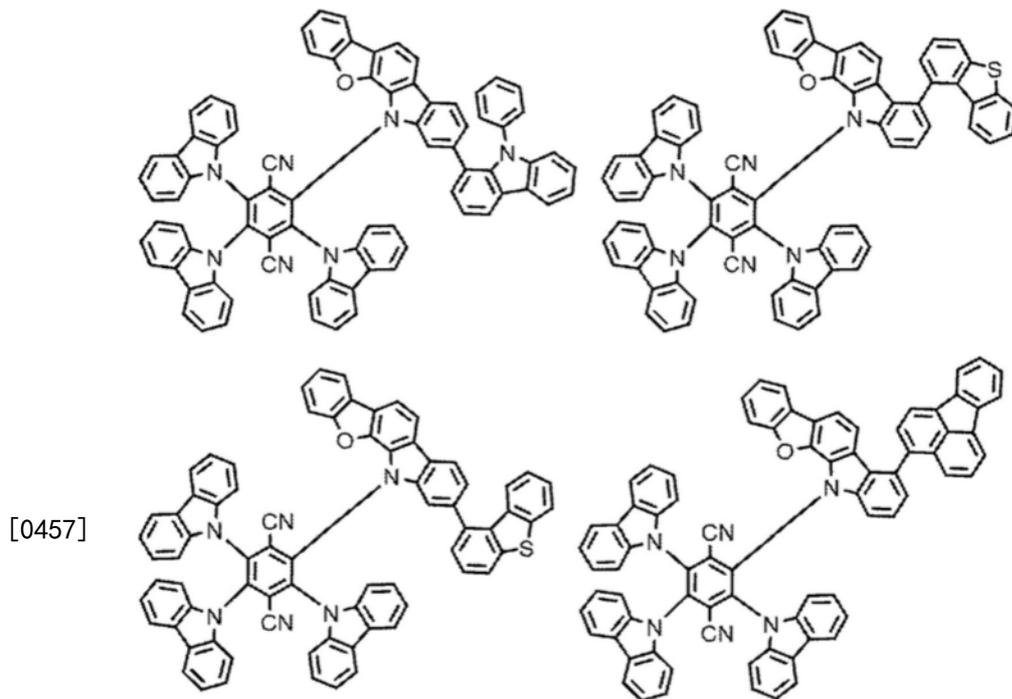
[0454] [化42]



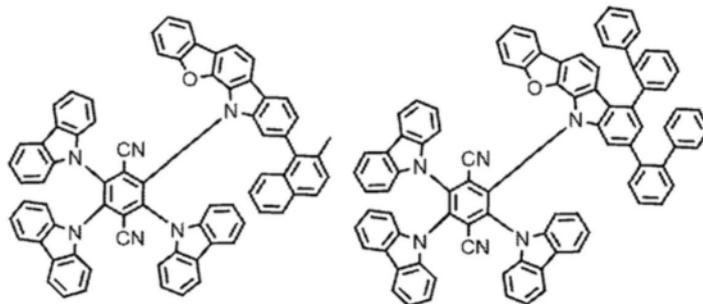
[0455]



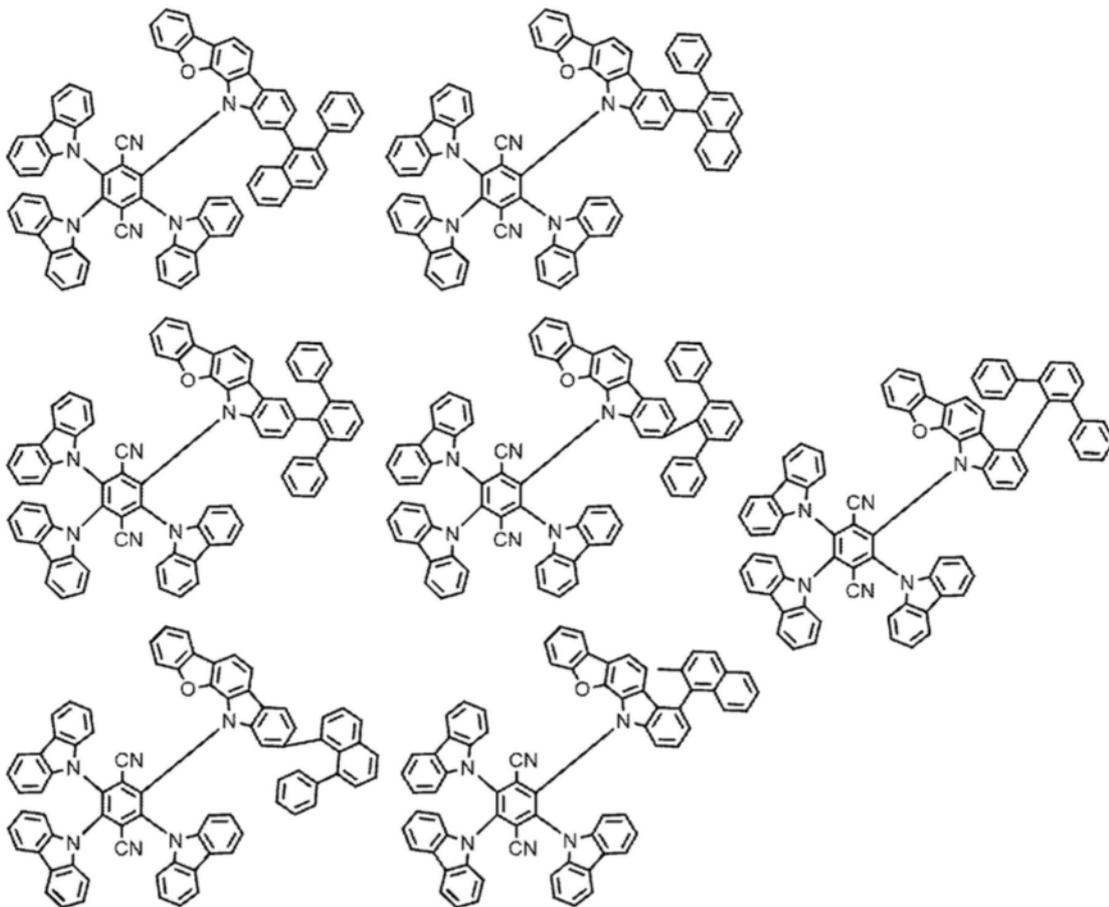
[0456] [化43]



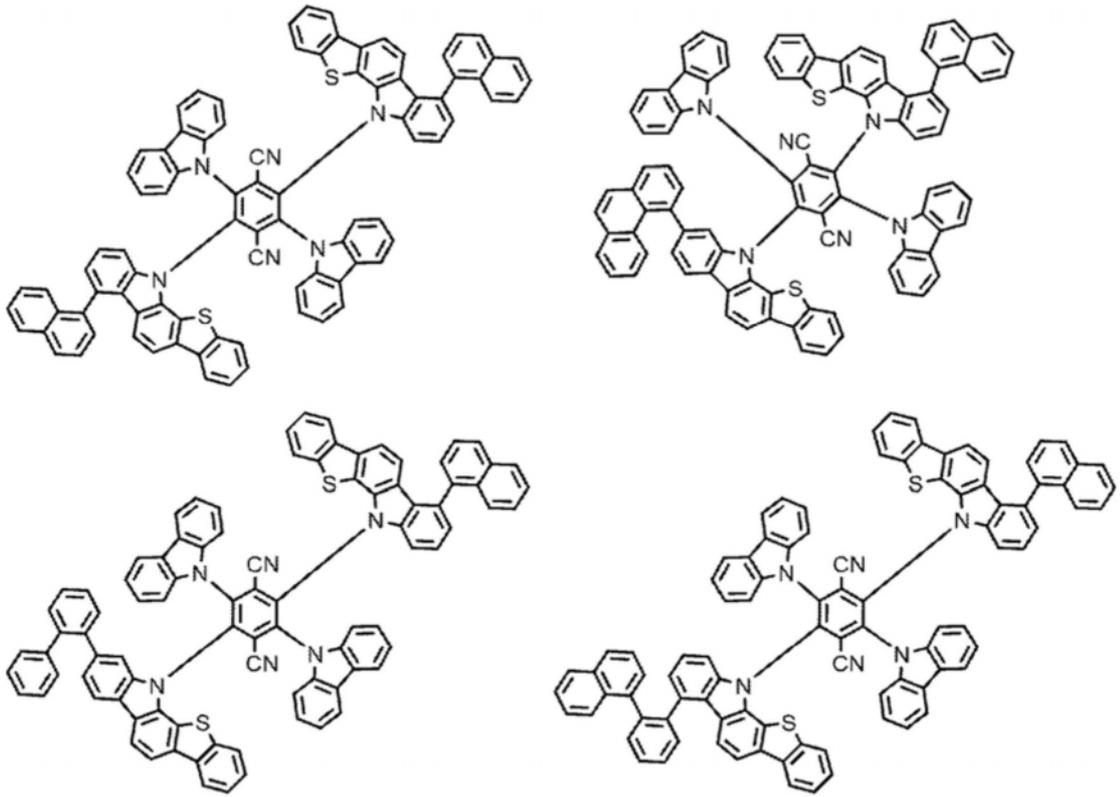
[0460] [化45]



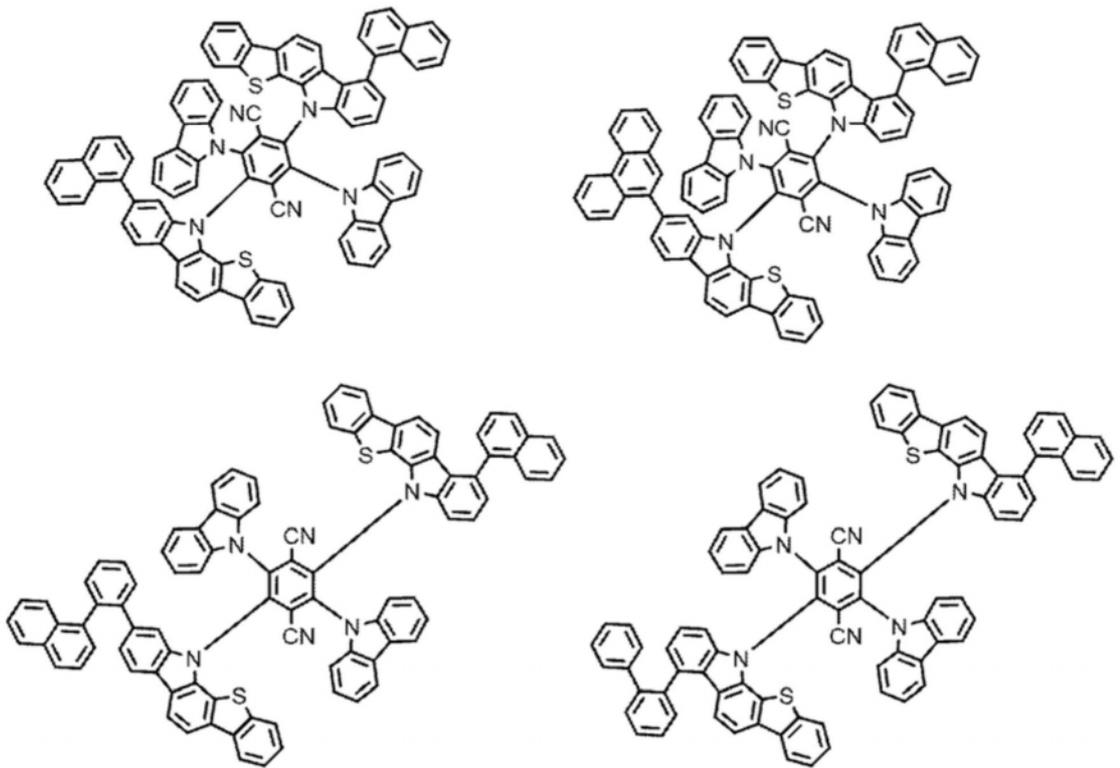
[0461]



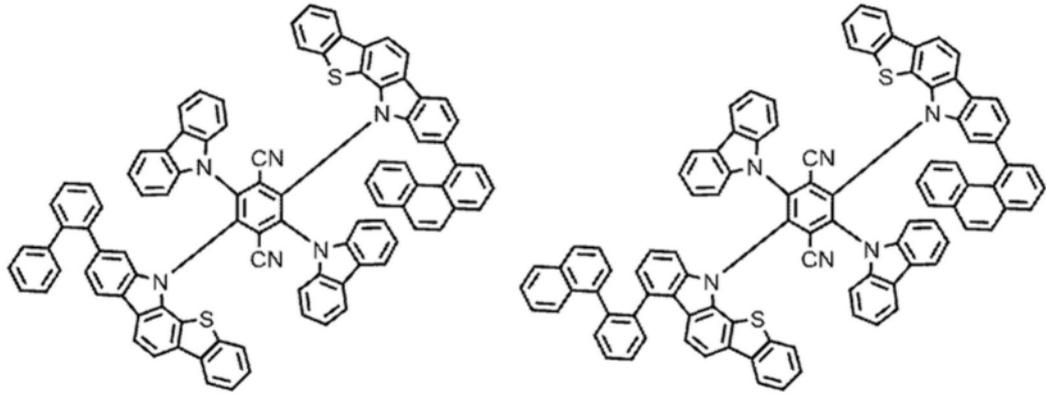
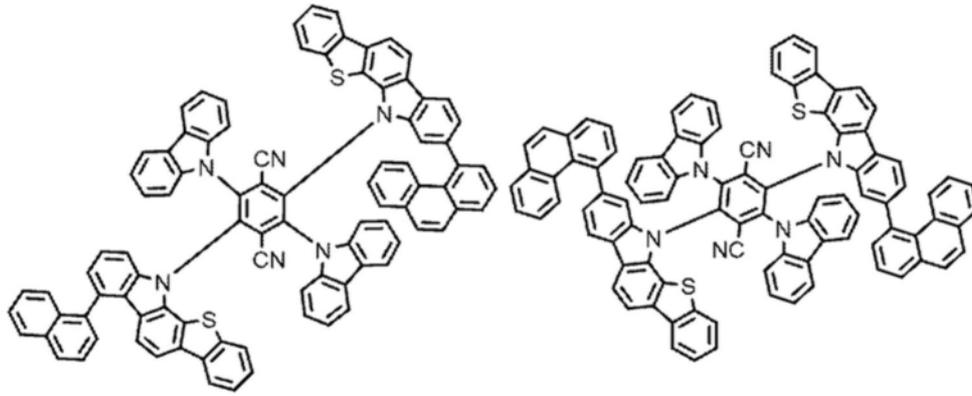
[0462] [化46]



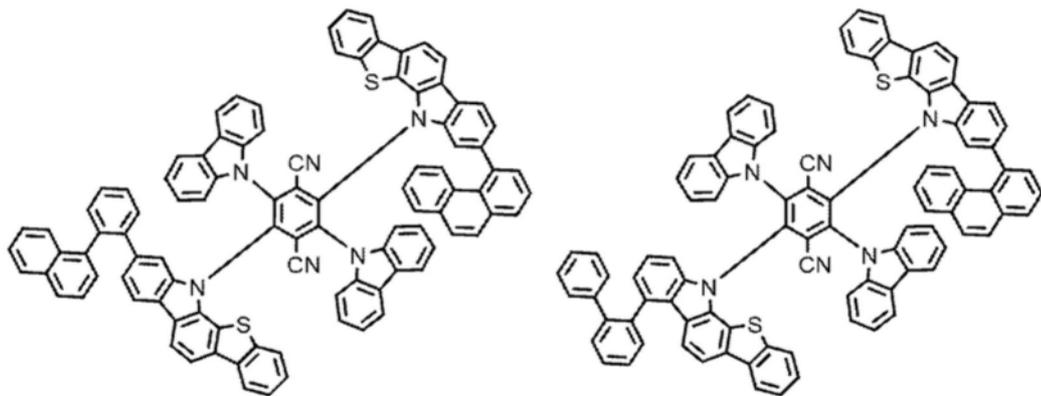
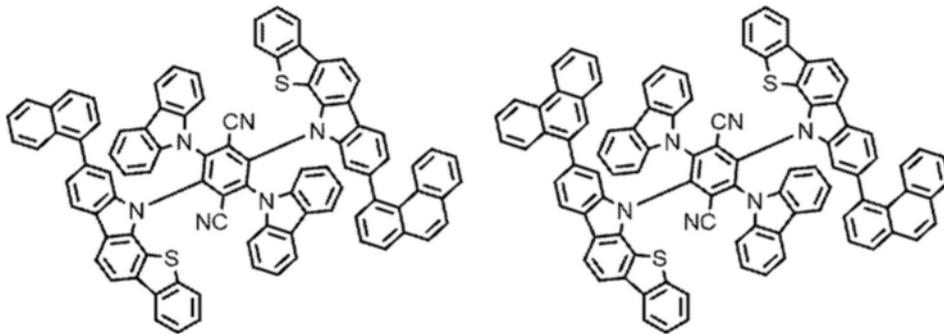
[0463]



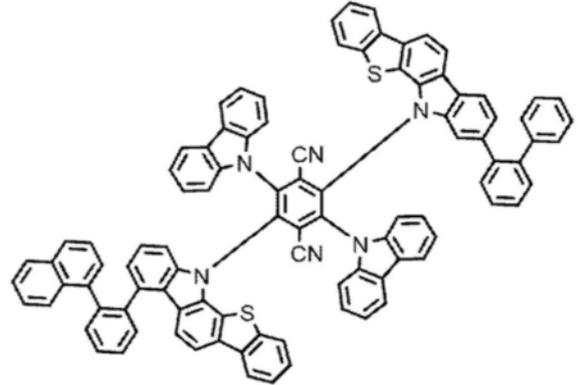
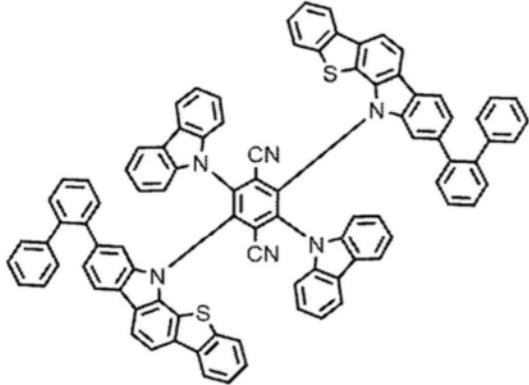
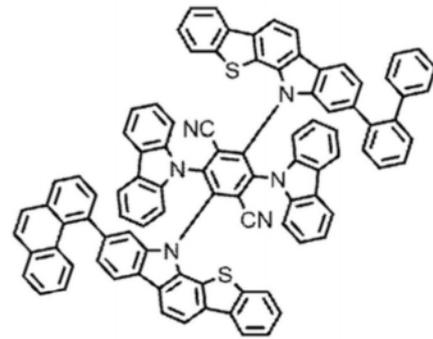
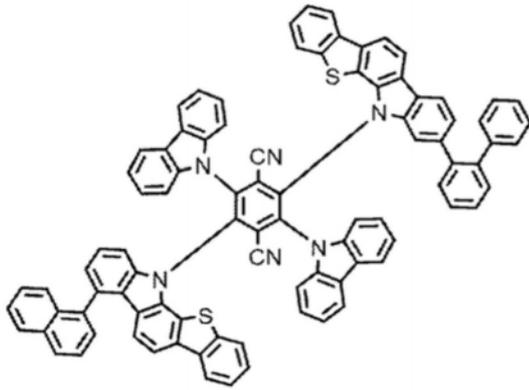
[0464] [化47]



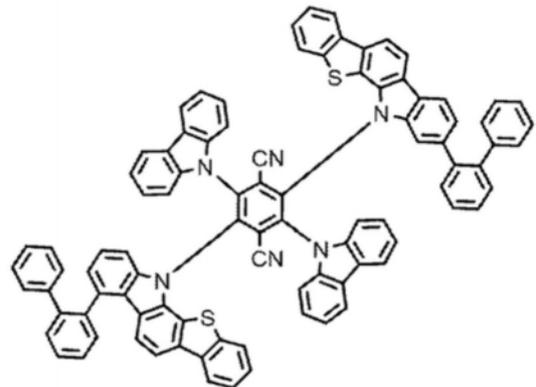
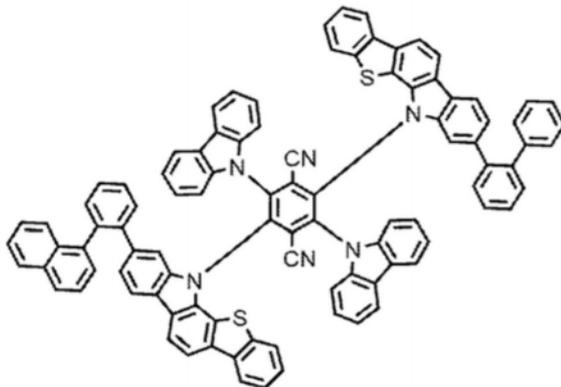
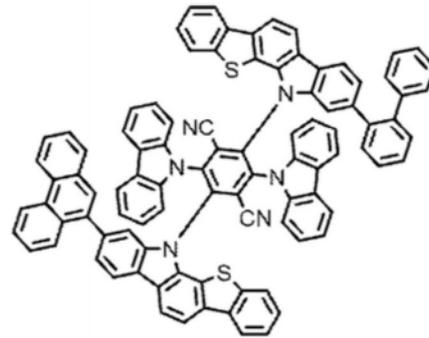
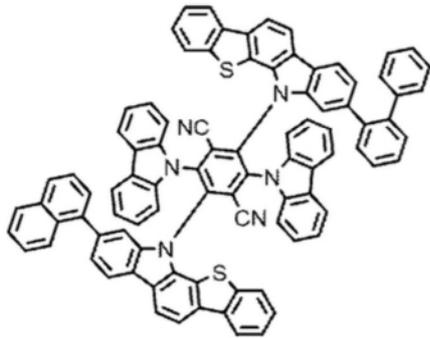
[0465]



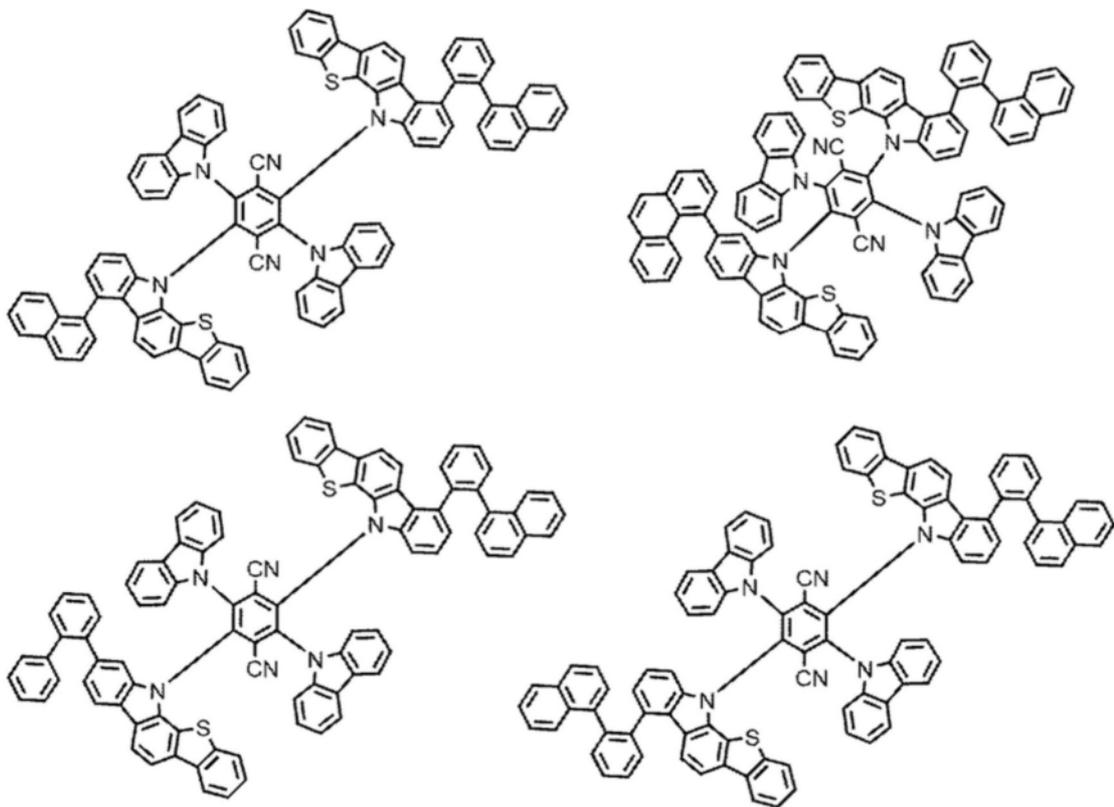
[0466] [化48]



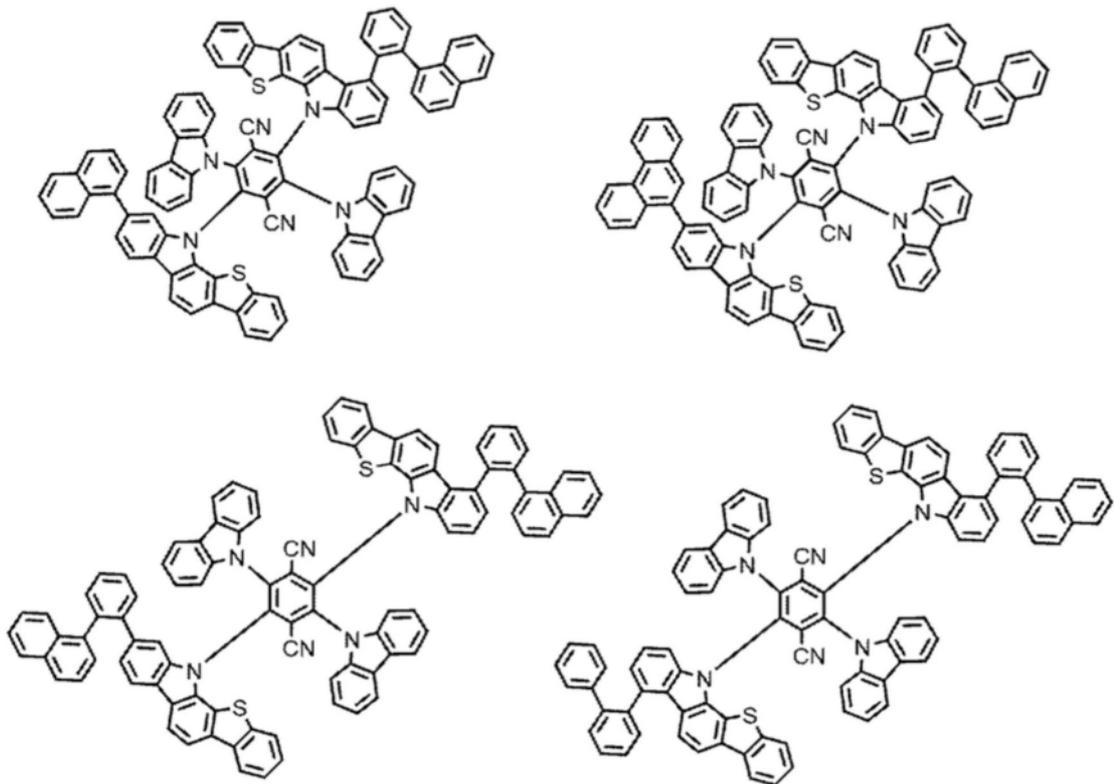
[0467]



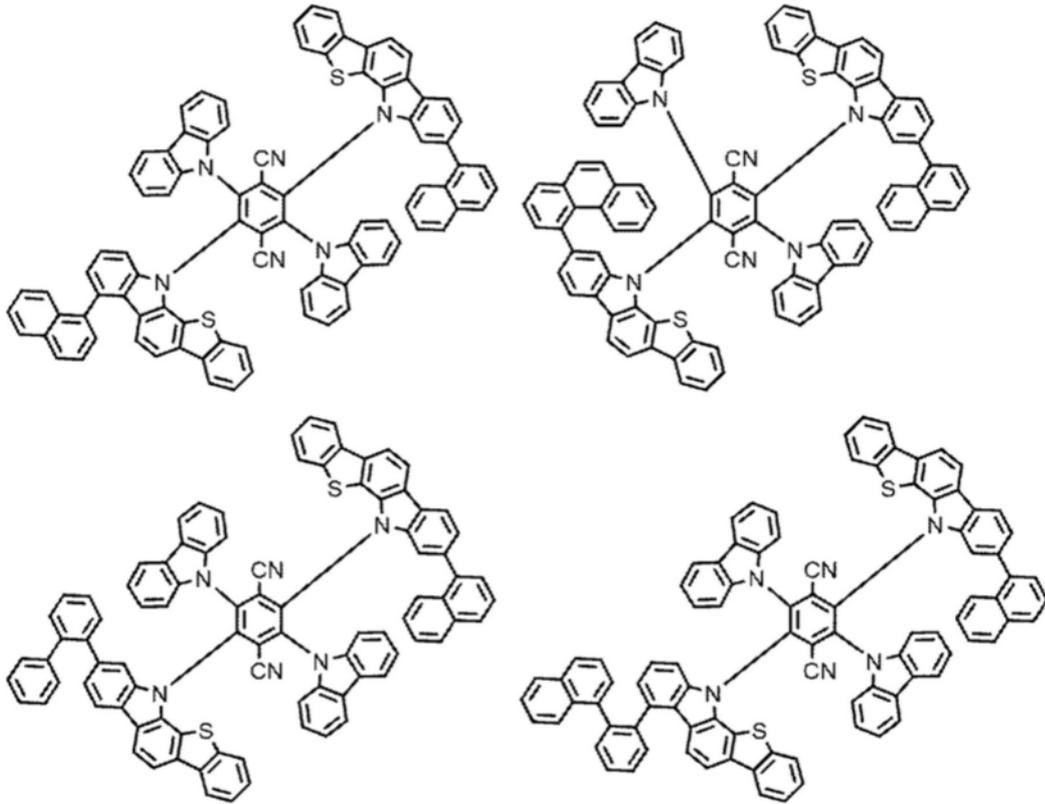
[0468] [化49]



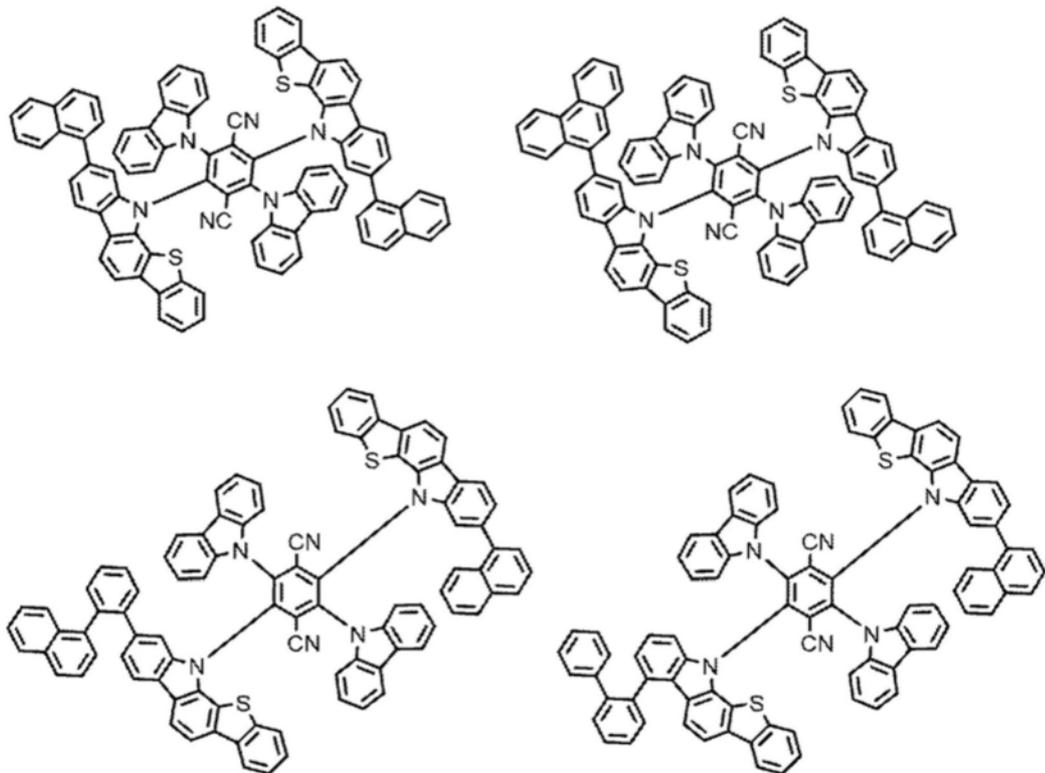
[0469]



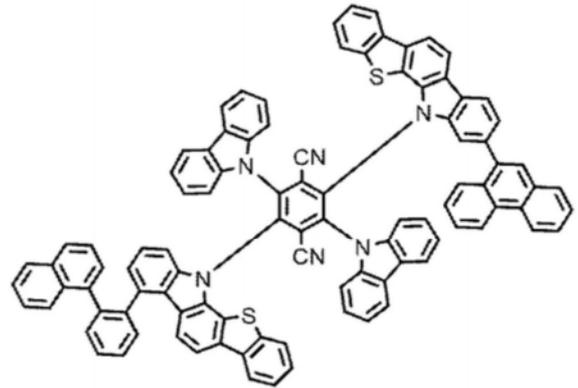
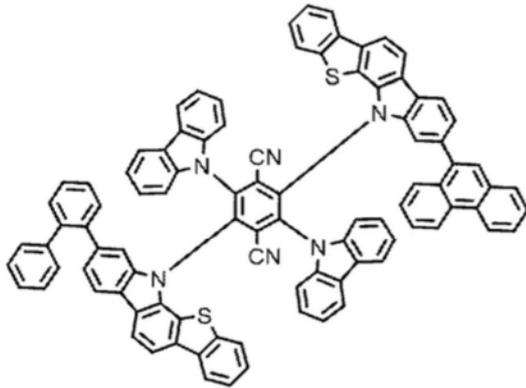
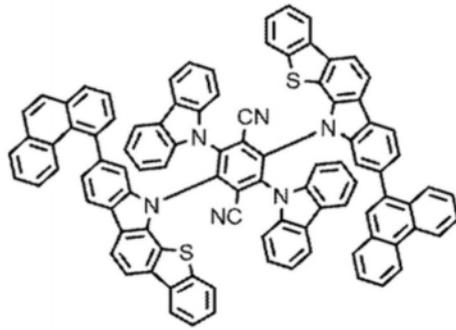
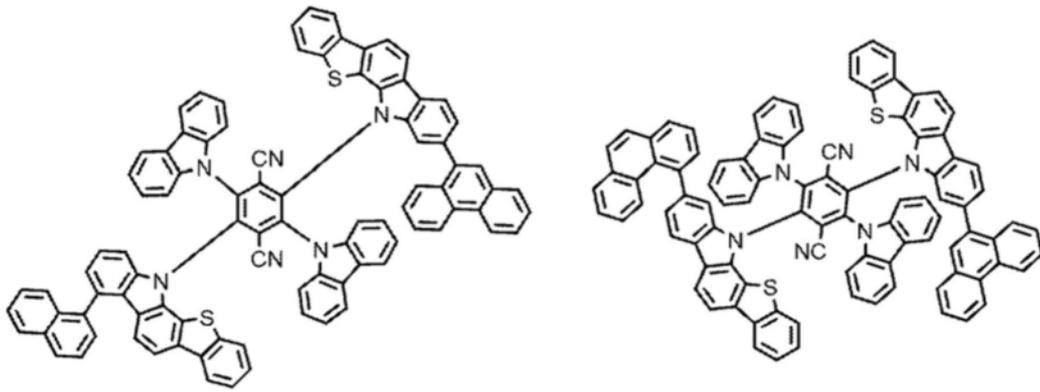
[0470] [化50]



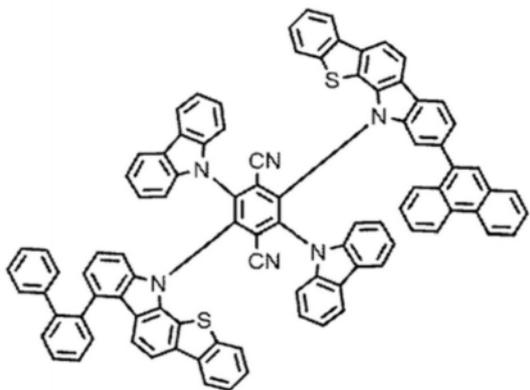
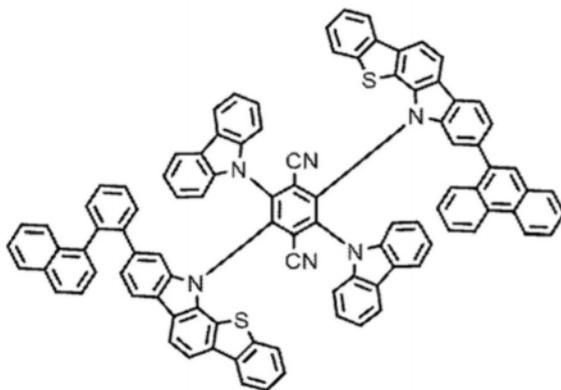
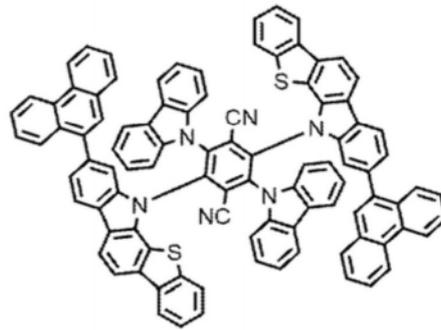
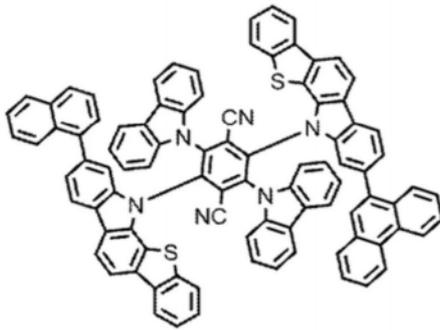
[0471]



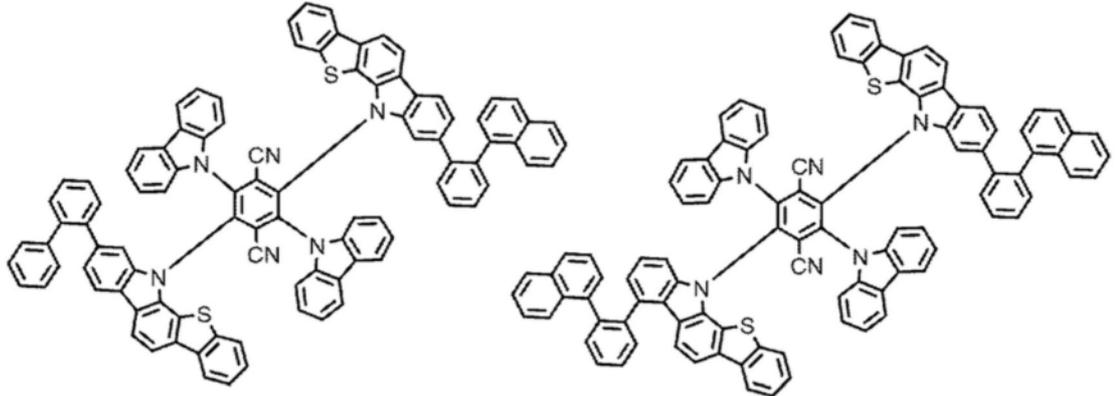
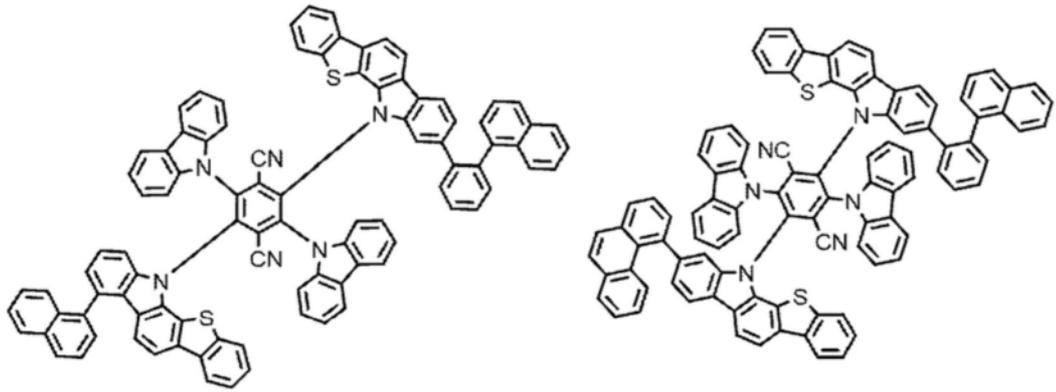
[0472] [化51]



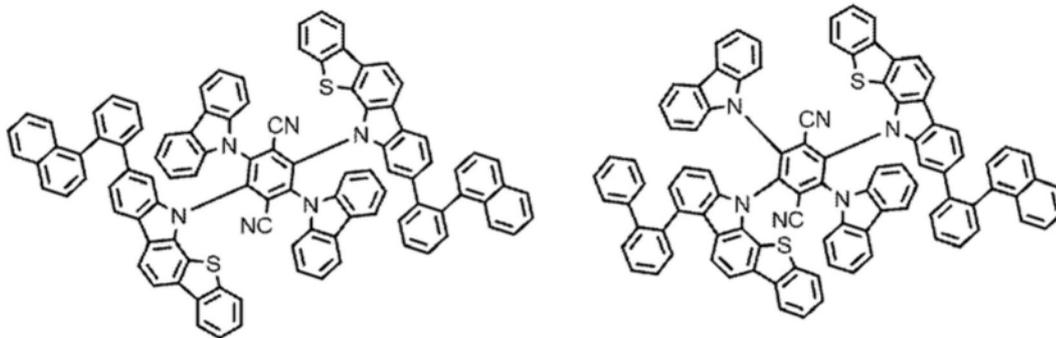
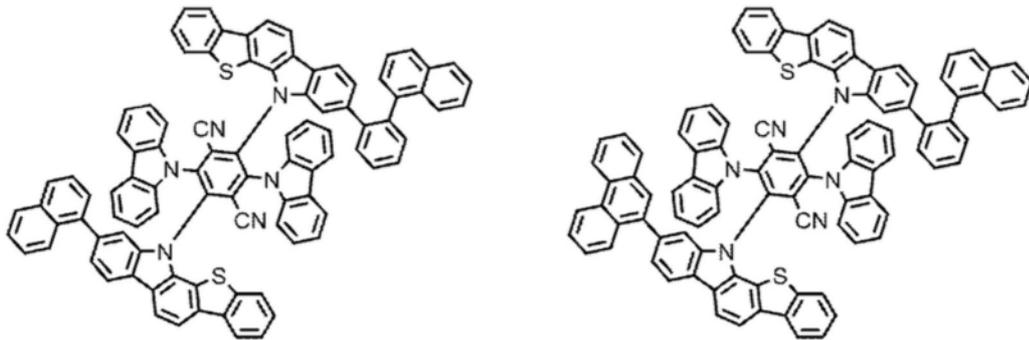
[0473]



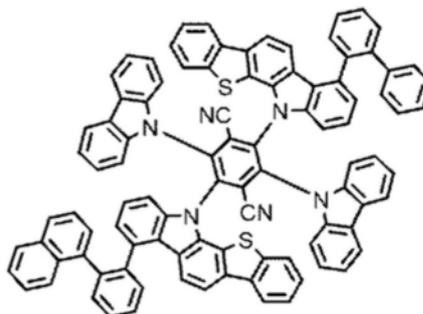
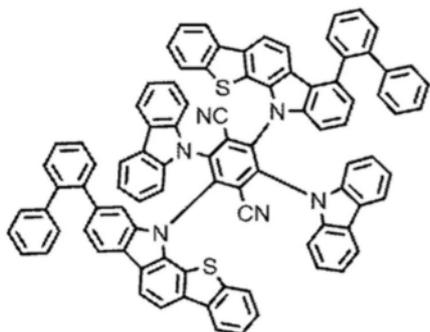
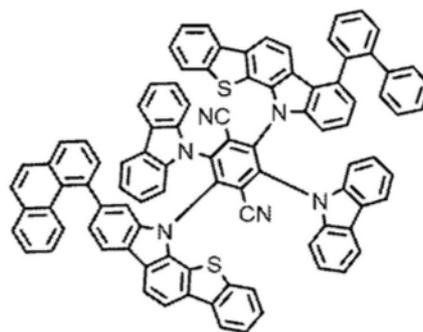
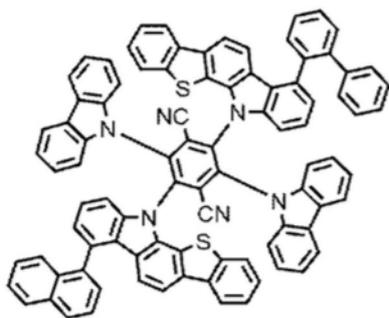
[0474] [化52]



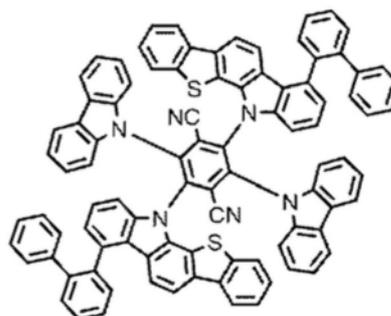
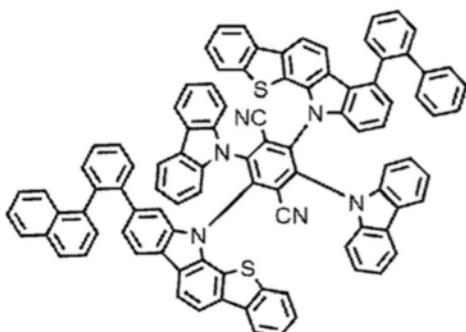
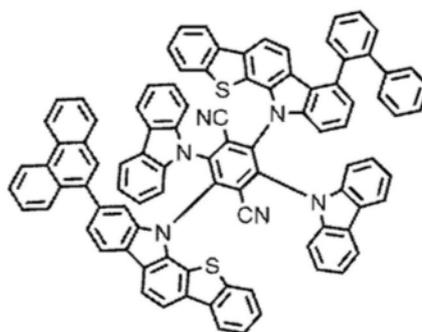
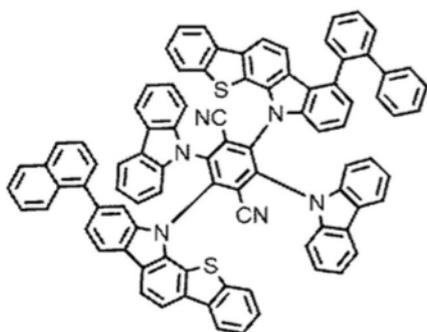
[0475]



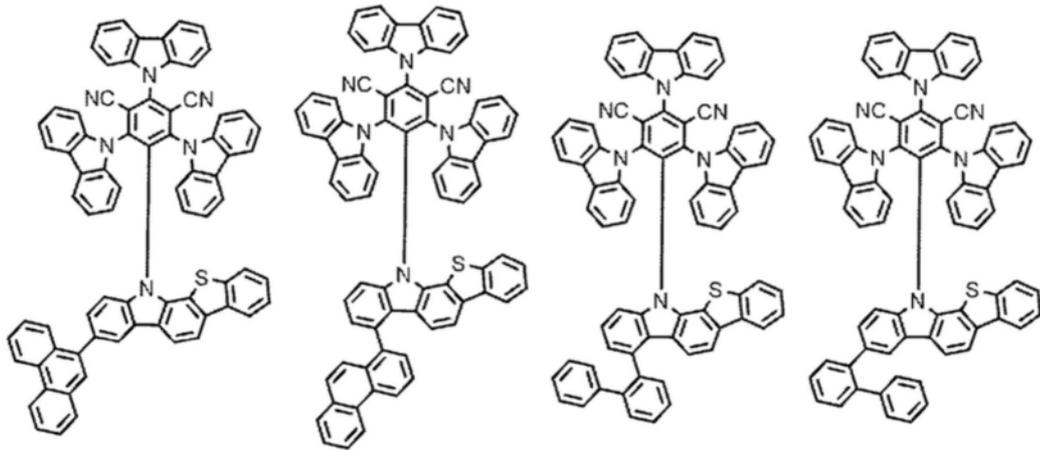
[0476] [化53]



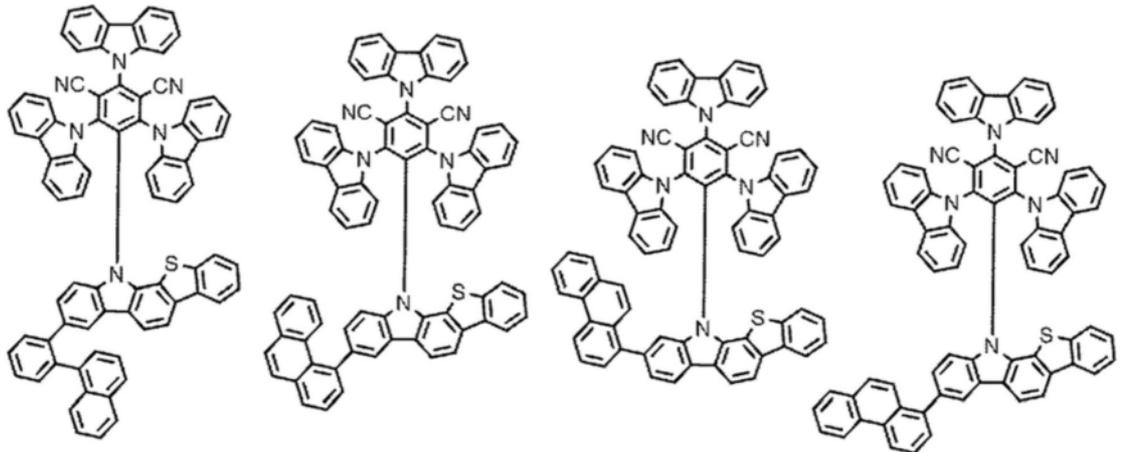
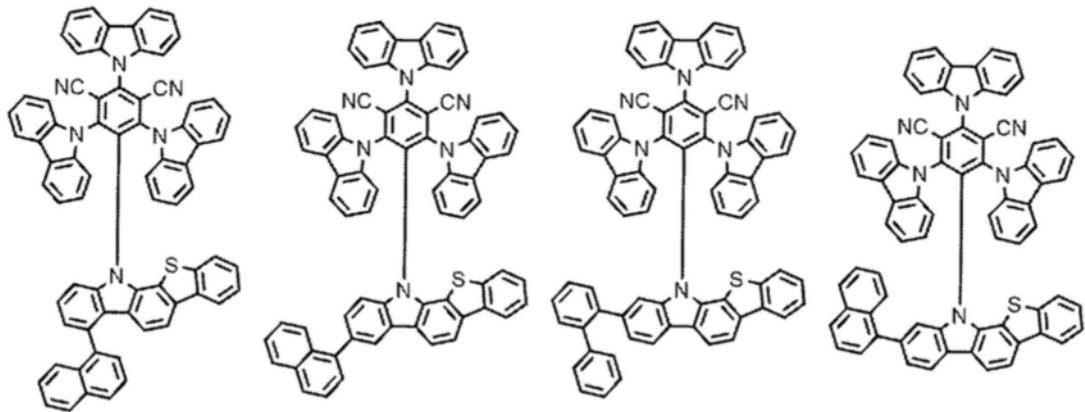
[0477]



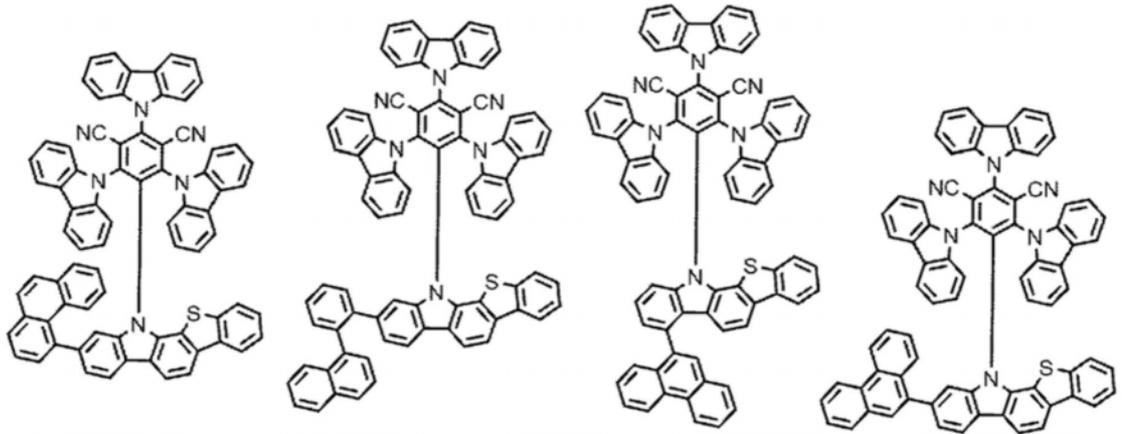
[0478] [化54]



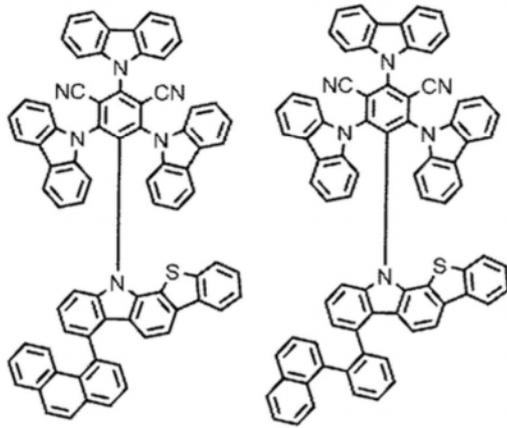
[0479]



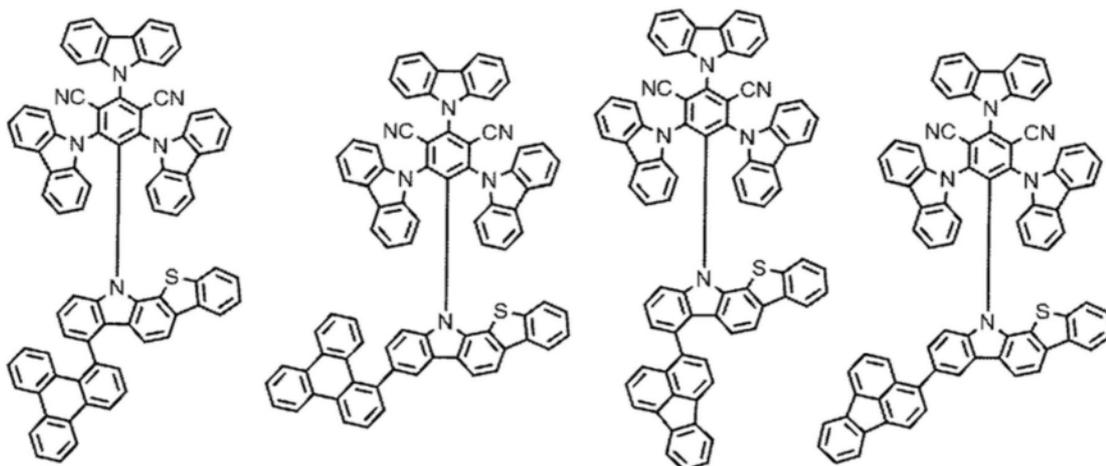
[0480] [化55]



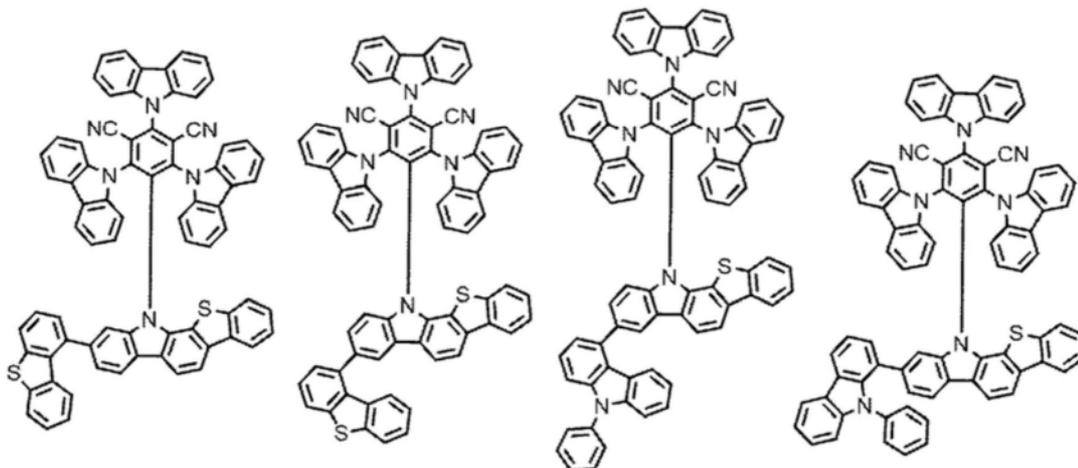
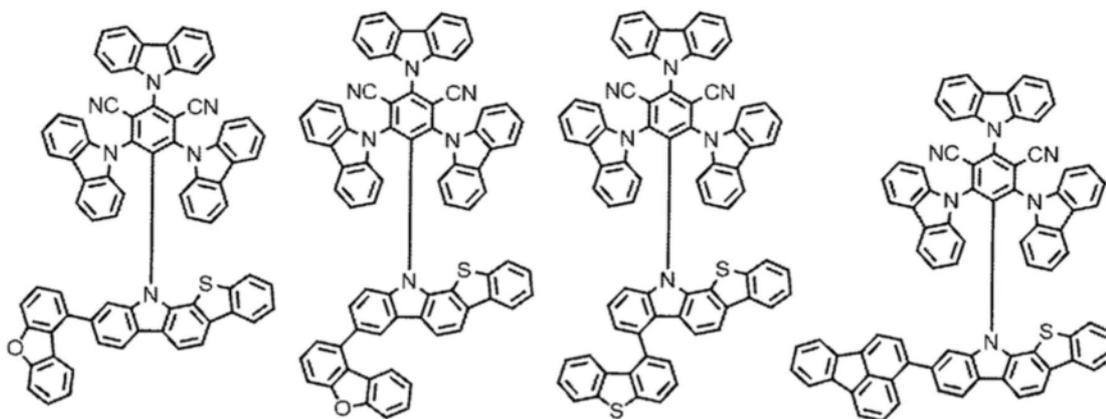
[0481]



[0482] [化56]

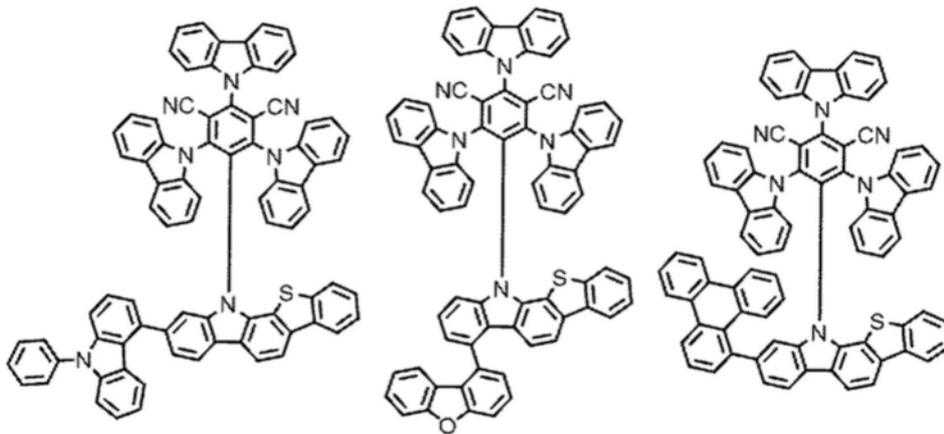


[0483]

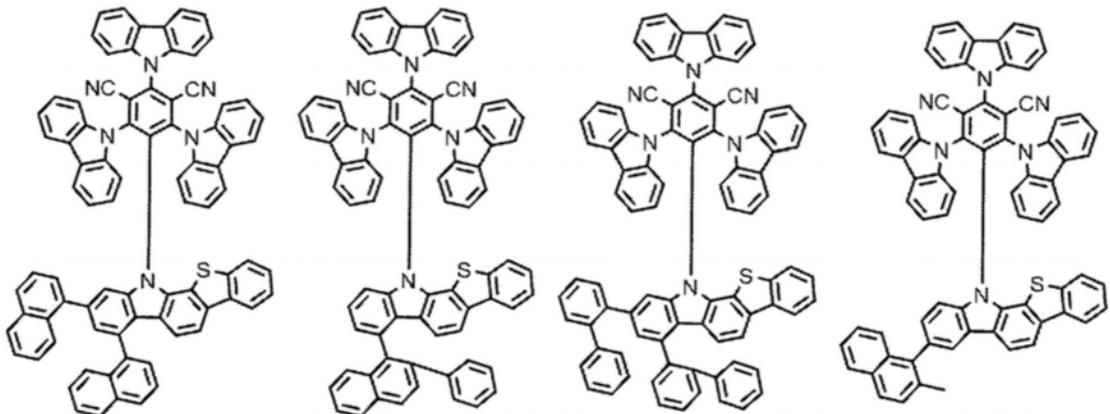


[0484] [化57]

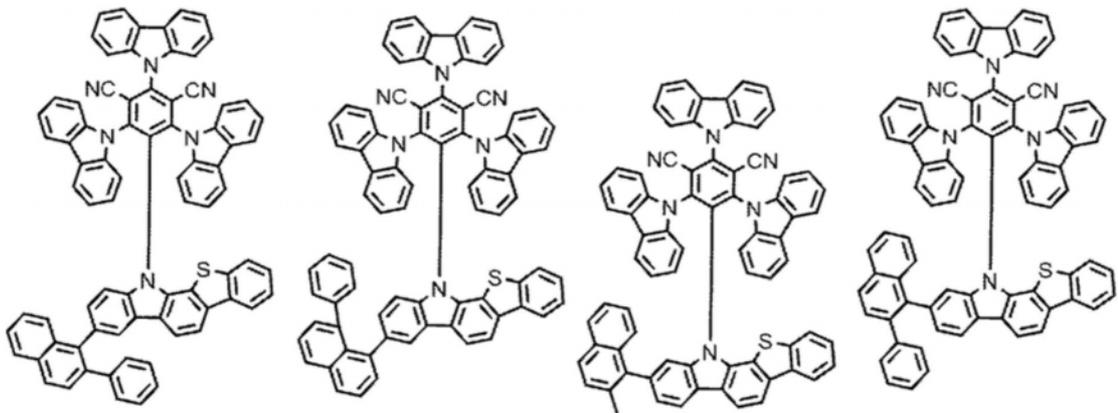
[0485]



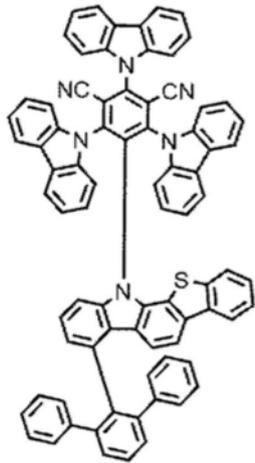
[0486] [化58]



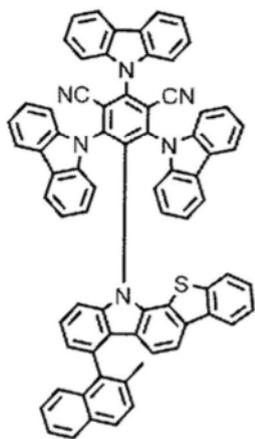
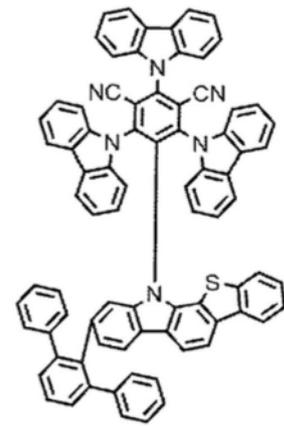
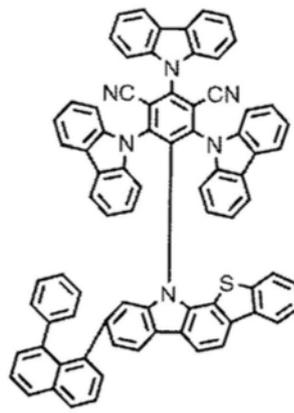
[0487]



[0488] [化59]

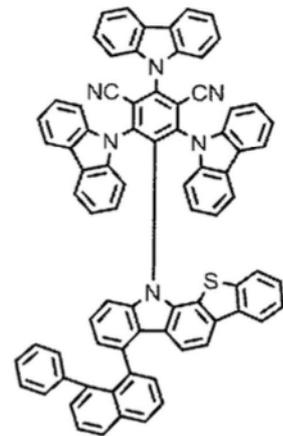
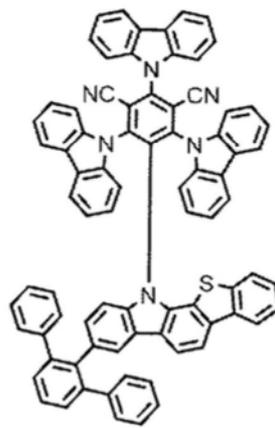


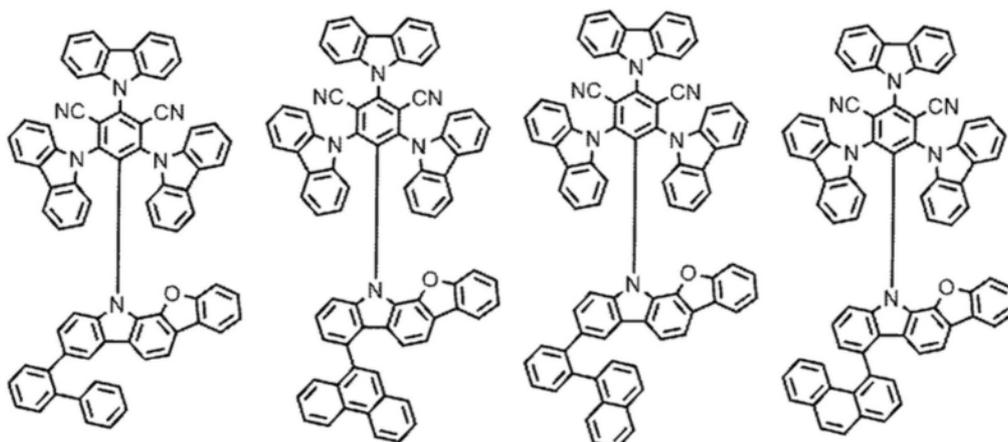
[0489]



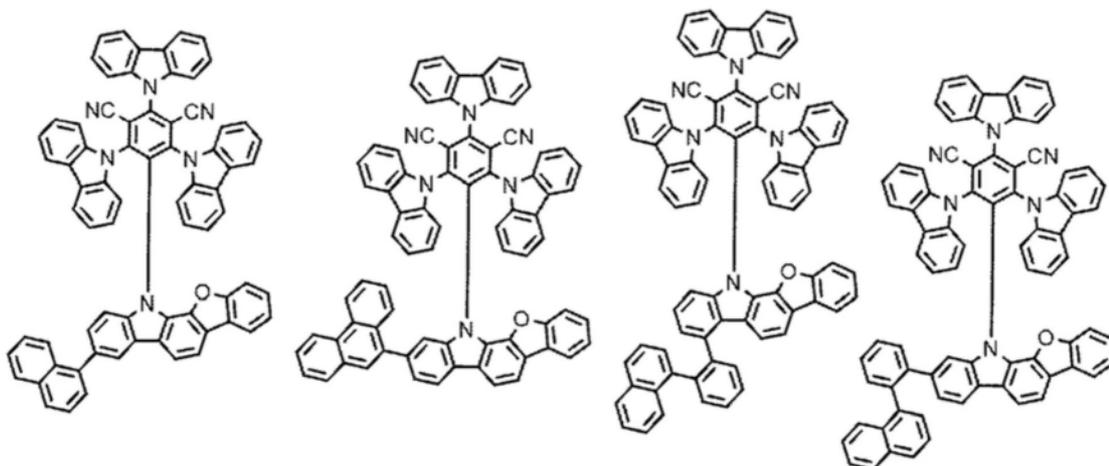
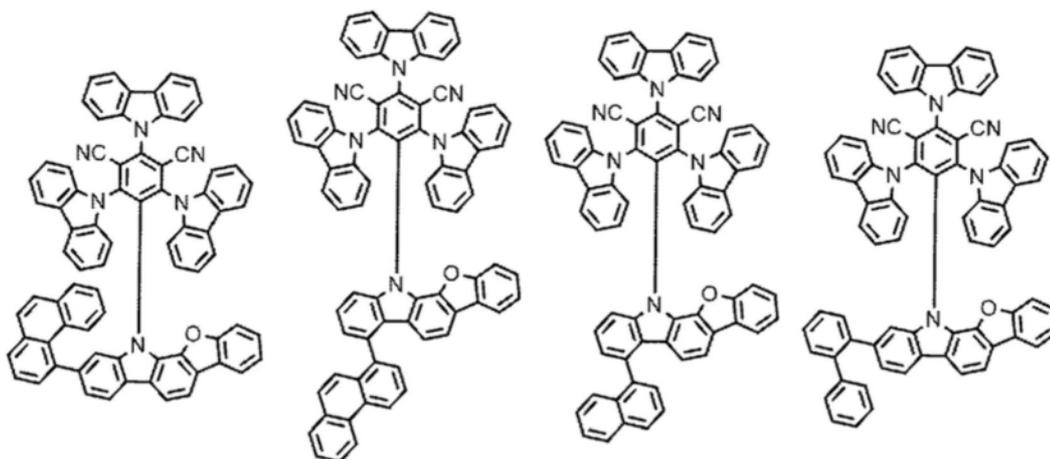
[0490]

[化60]

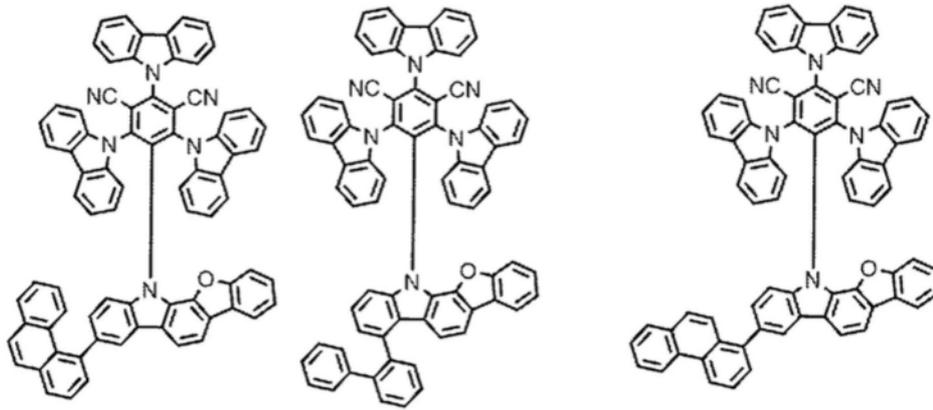
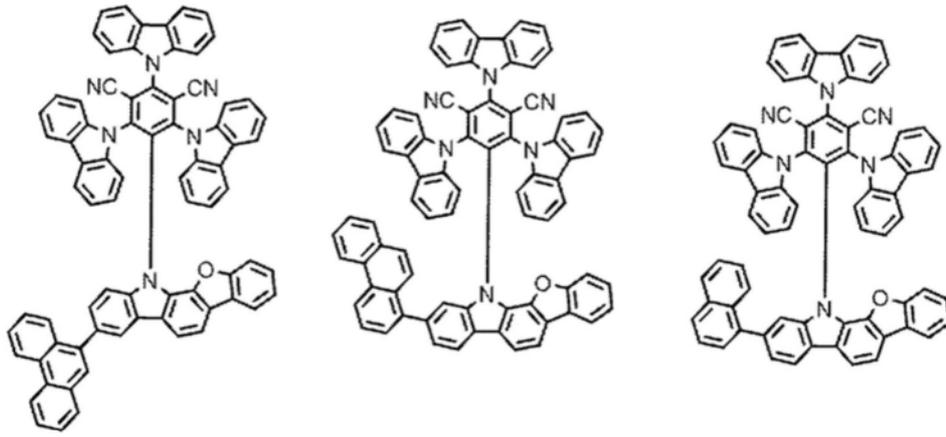


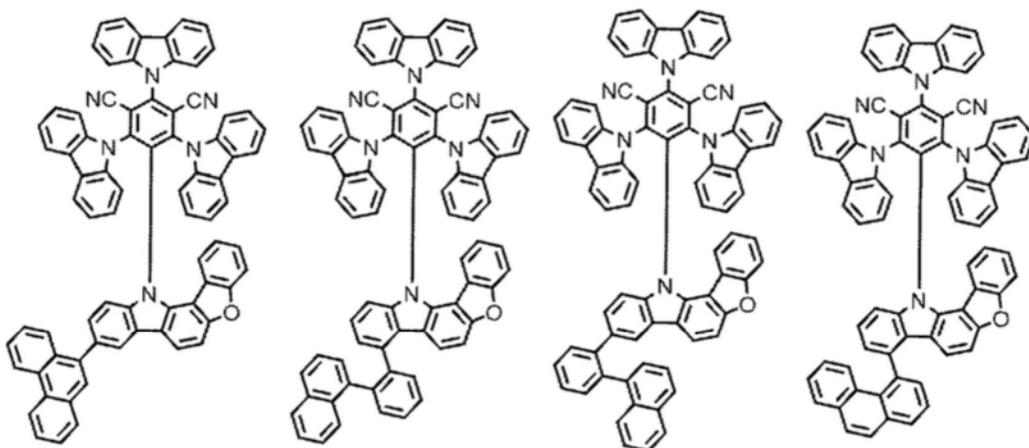


[0491]

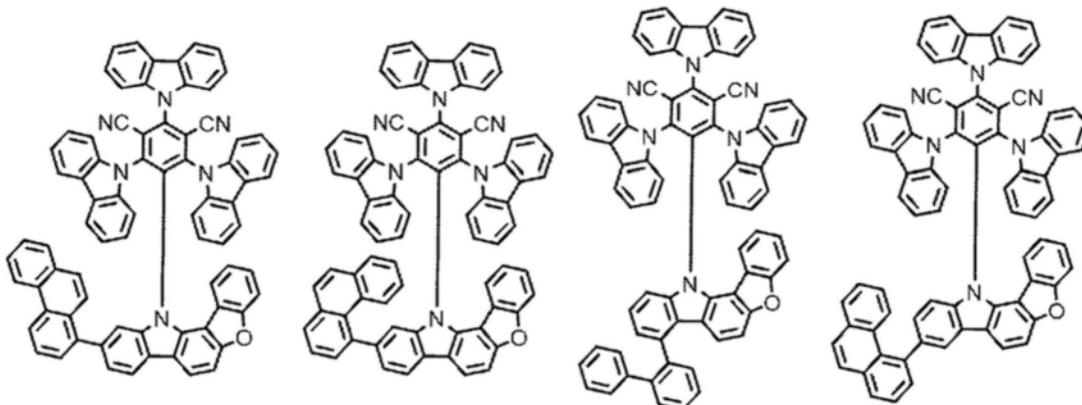
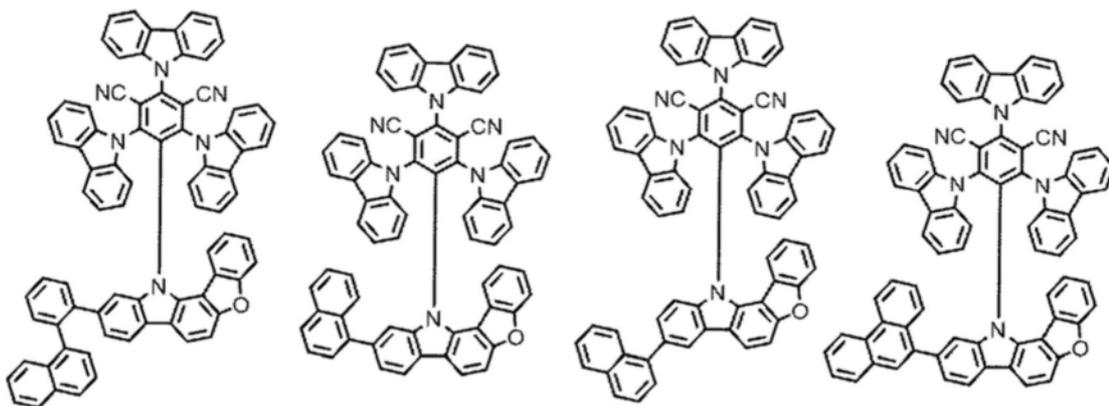


[0492] [化61]

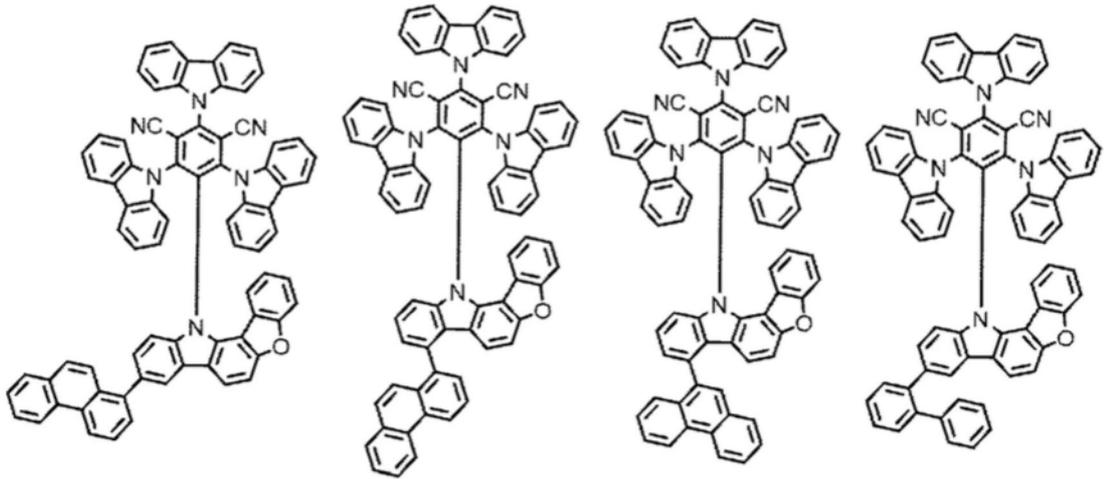




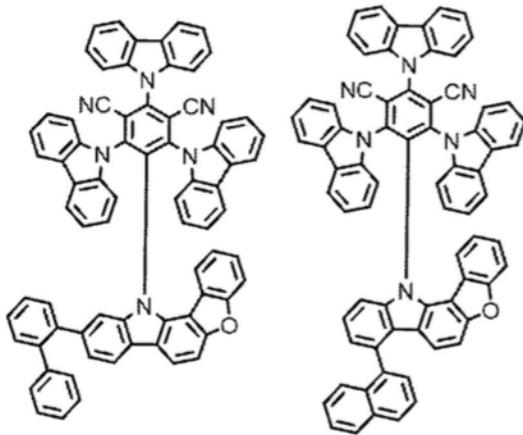
[0495]



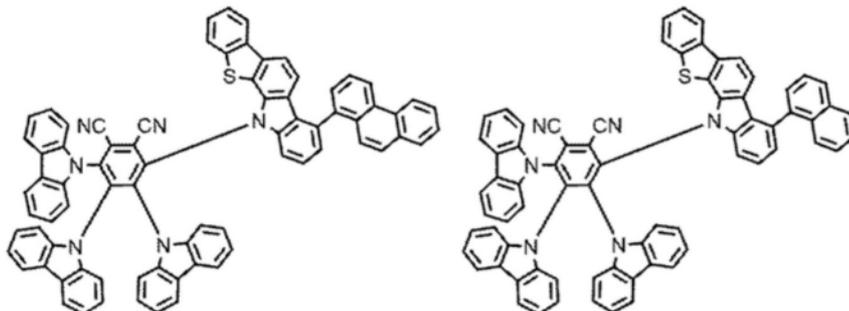
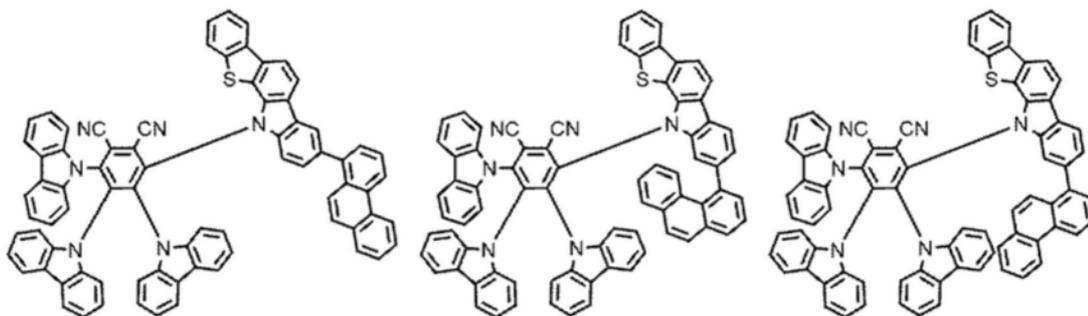
[0496] [化63]



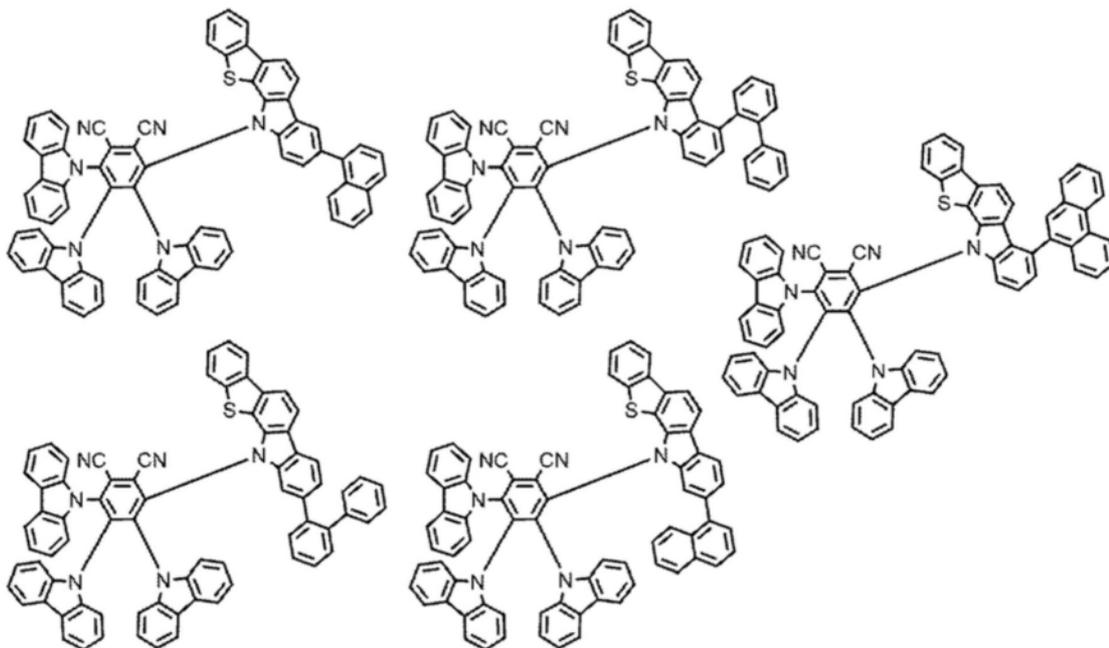
[0497]



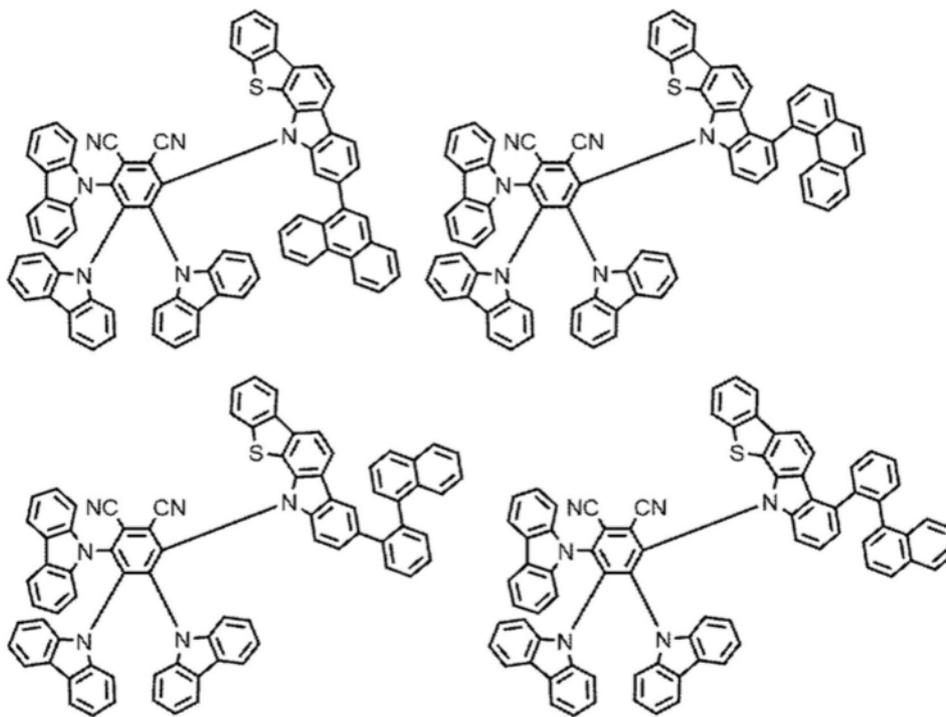
[0498] [化64]



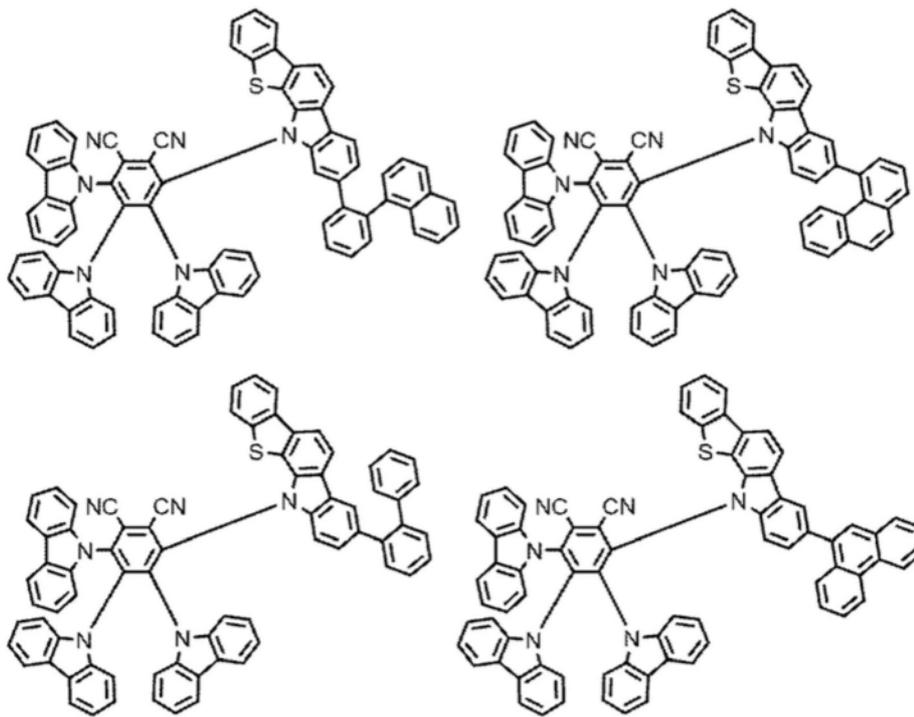
[0499]



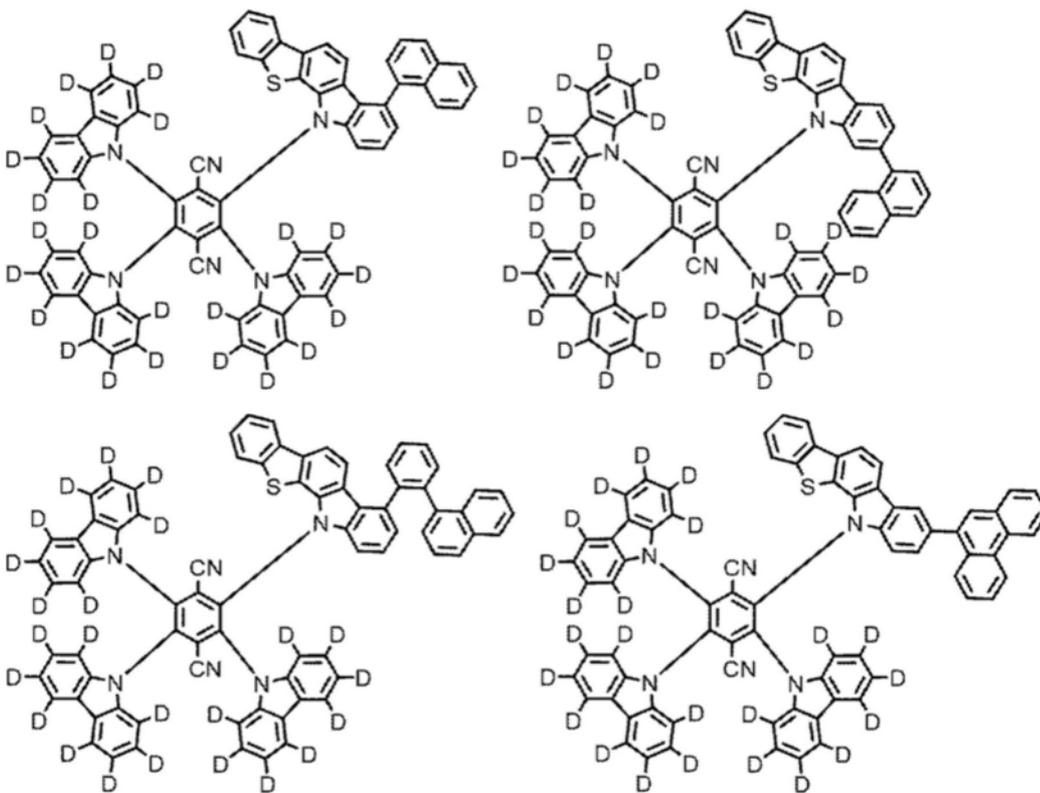
[0500] [化65]



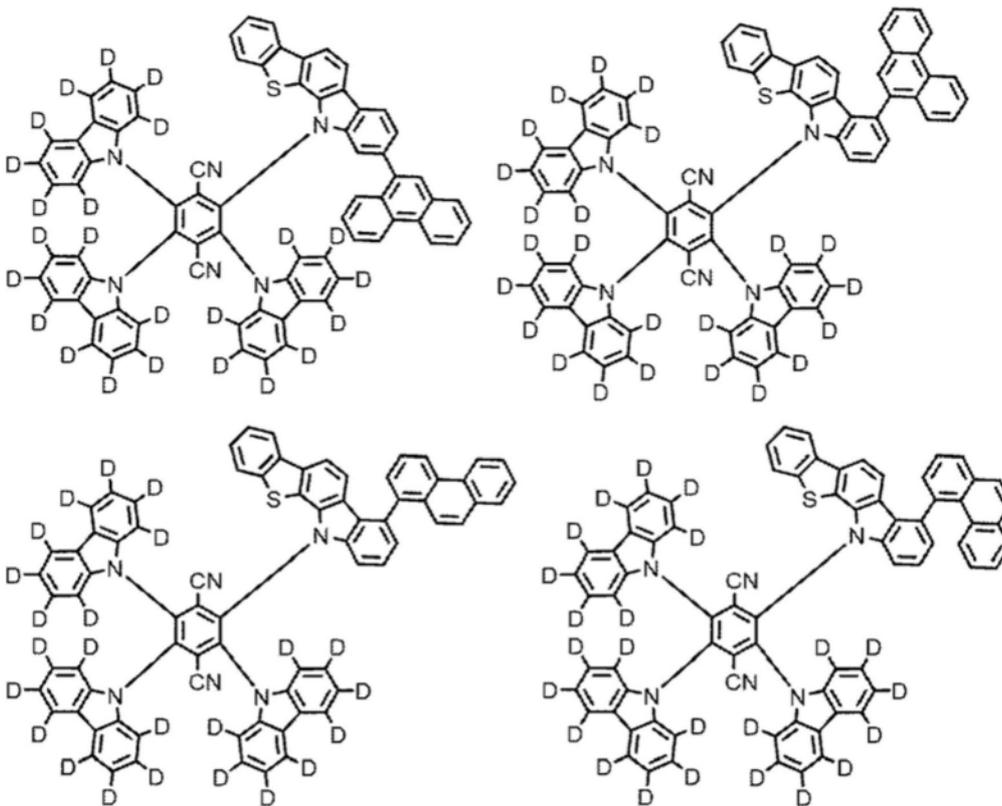
[0501]



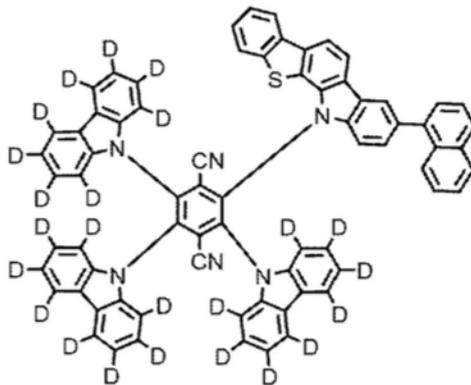
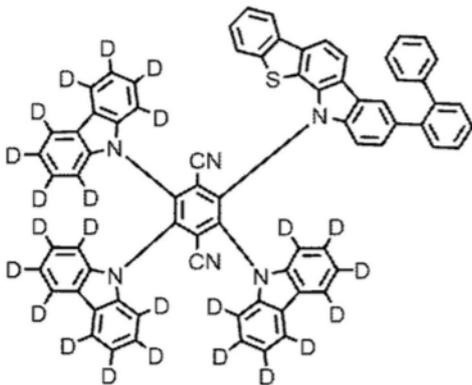
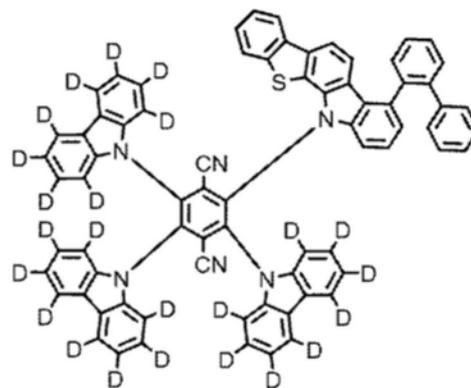
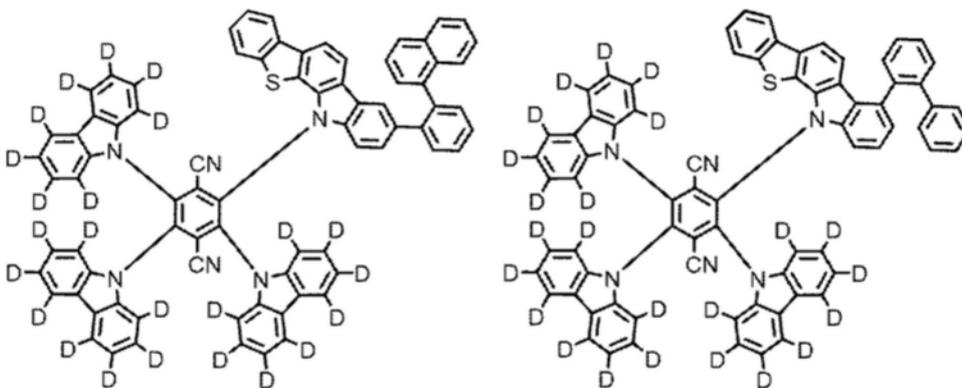
[0502] [化66]



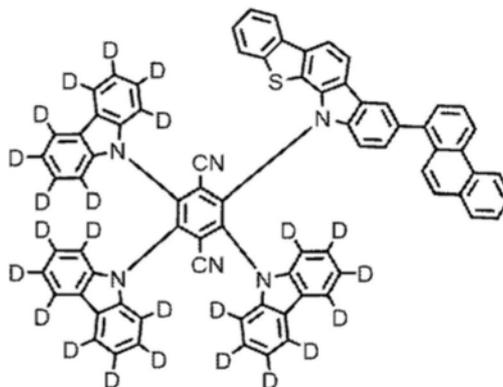
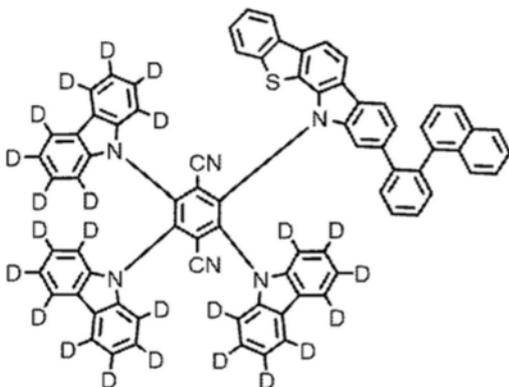
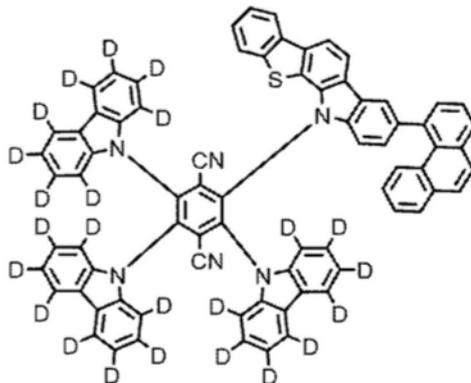
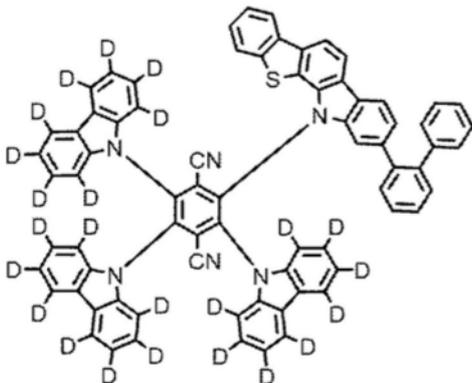
[0503]



[0504] [化67]

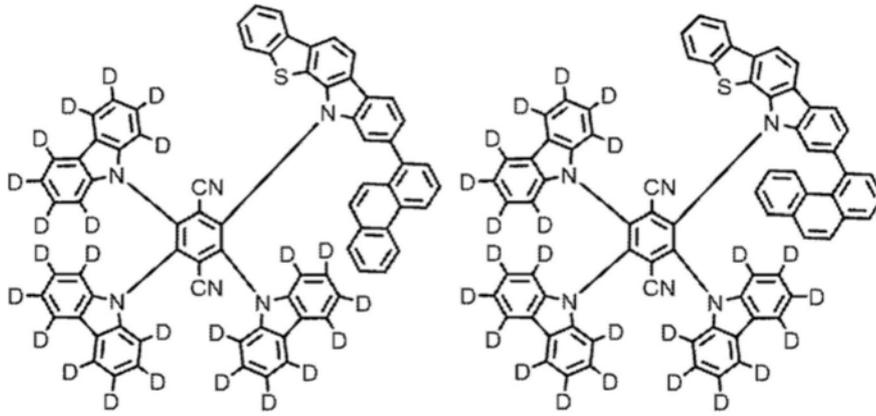


[0505]

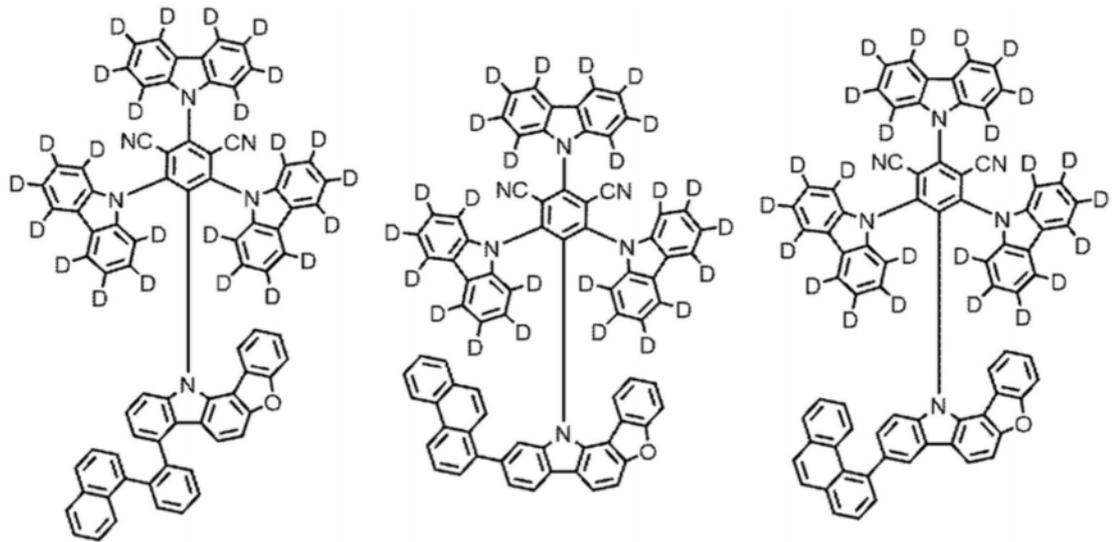


[0506] [化68]

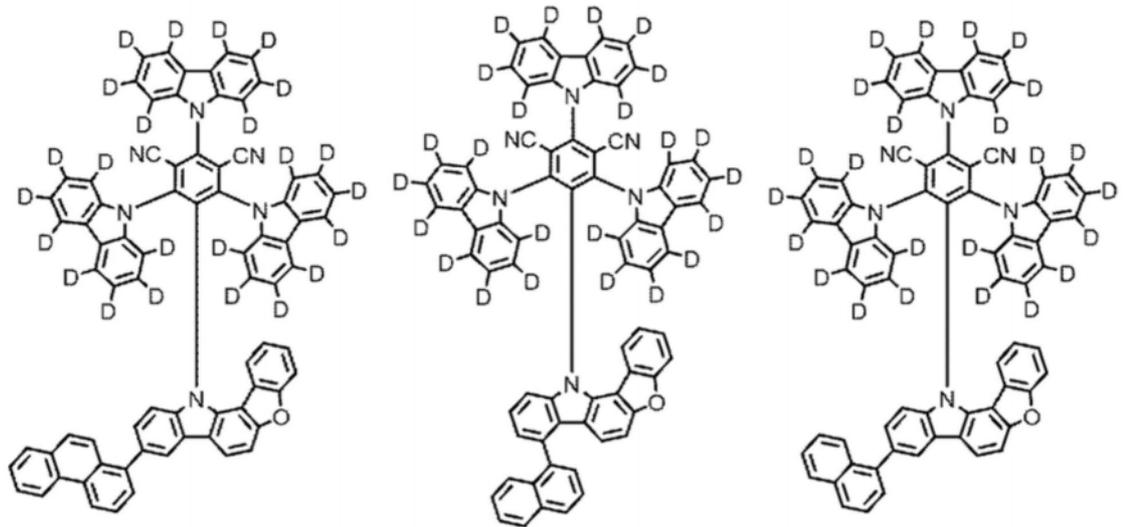
[0507]



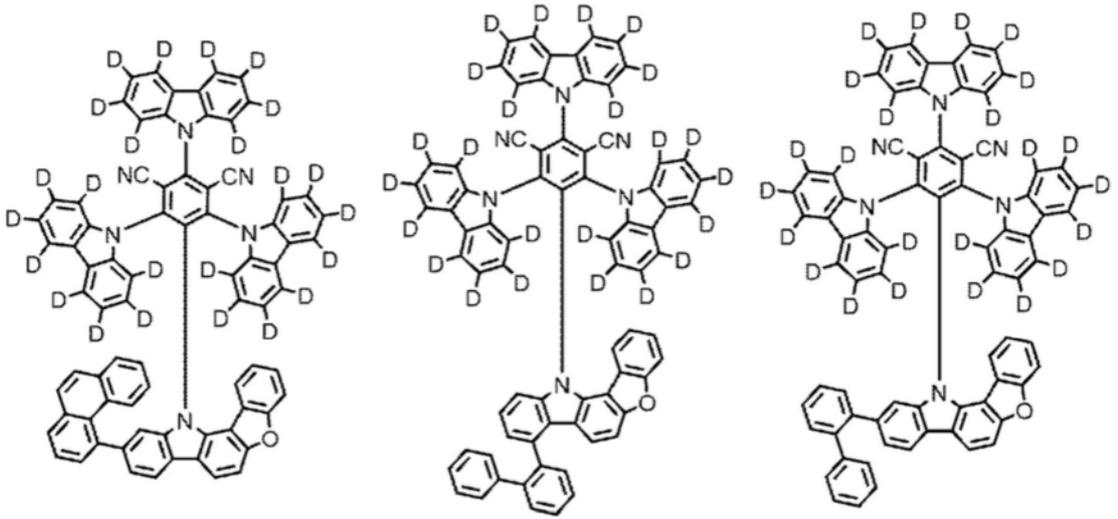
[0508] [化69]



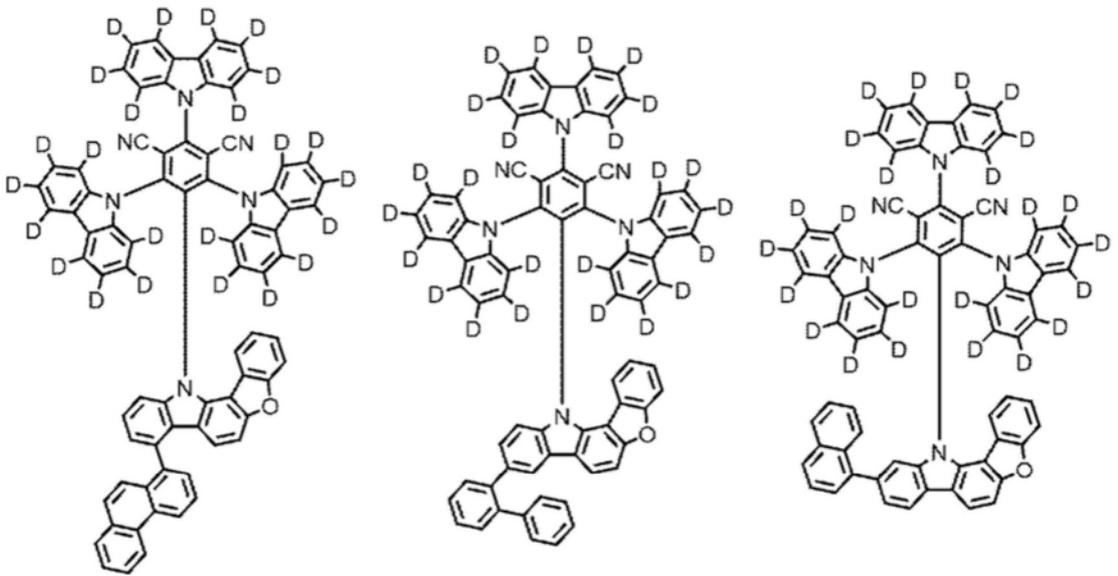
[0509]



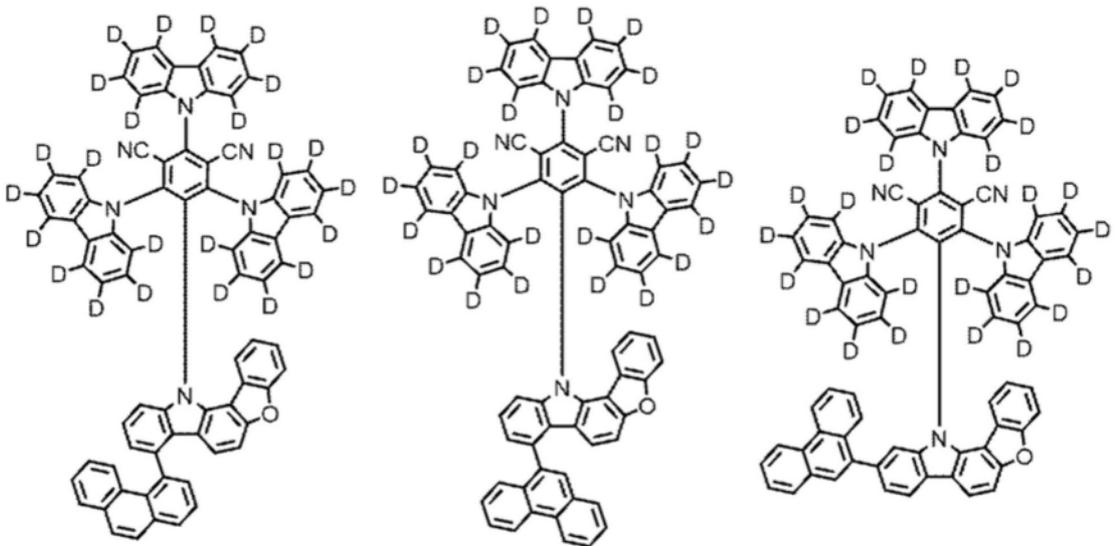
[0510] [化70]



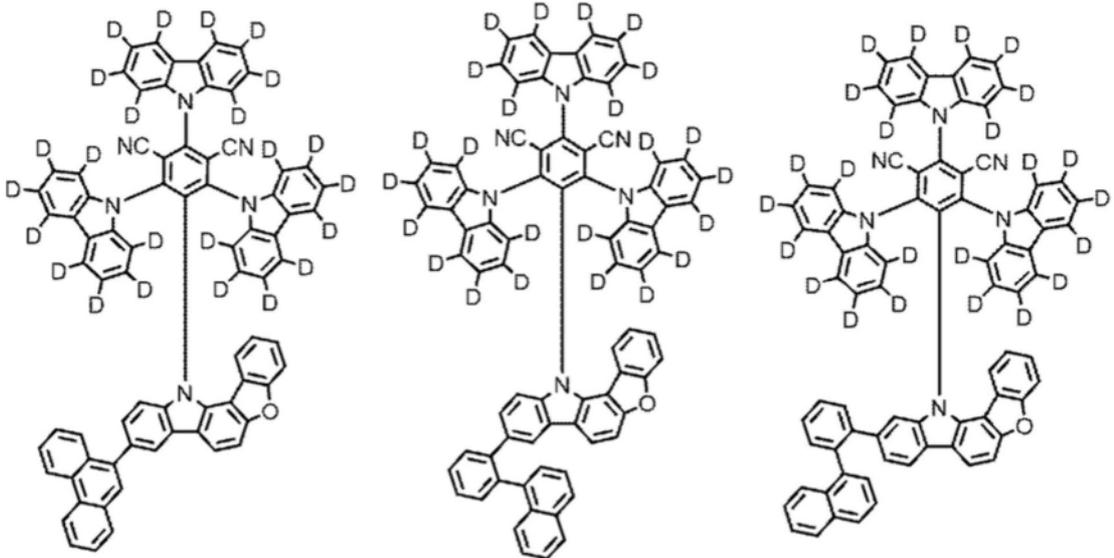
[0511]



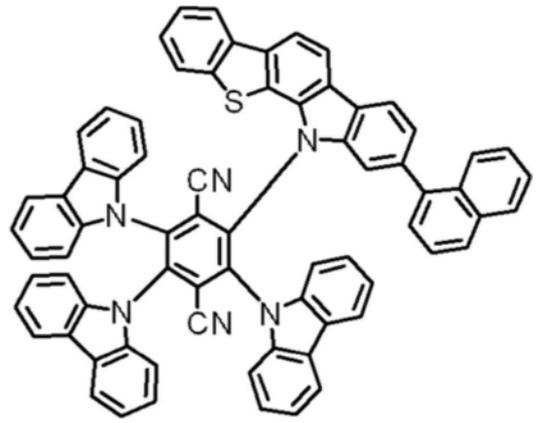
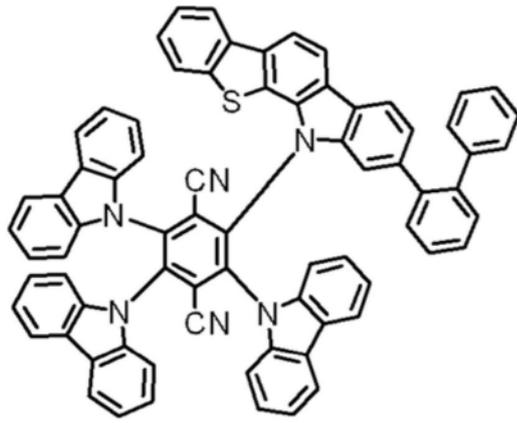
[0512] [化71]



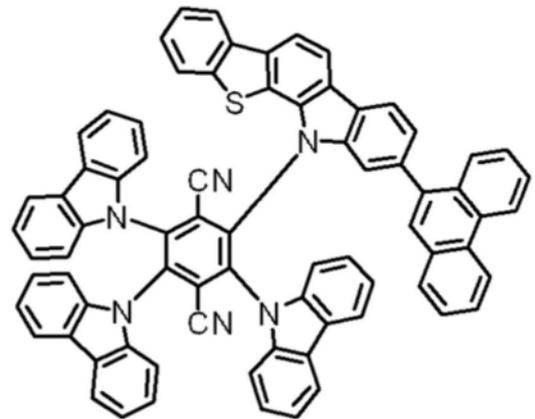
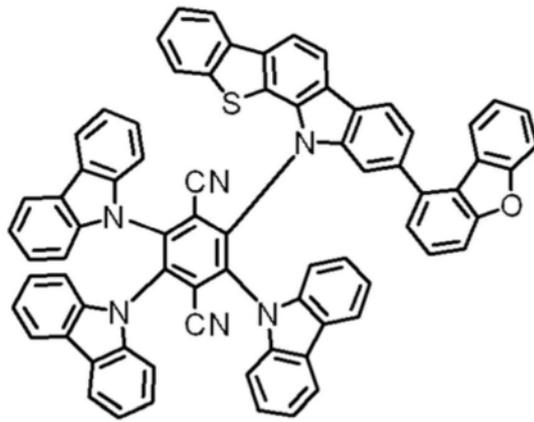
[0513]



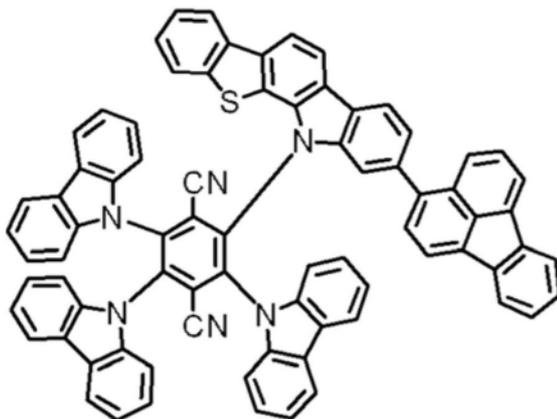
[0514] [化72]

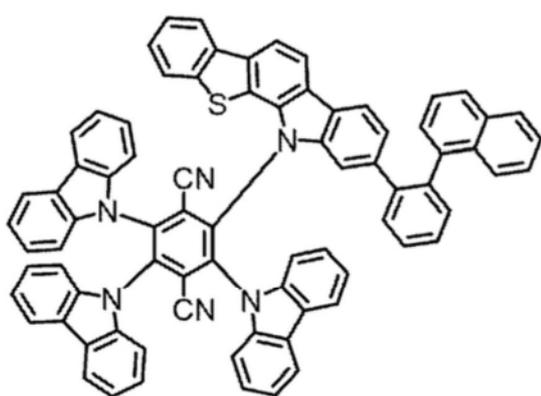


[0515]

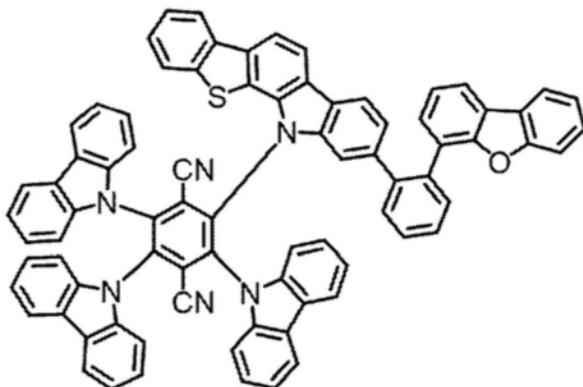
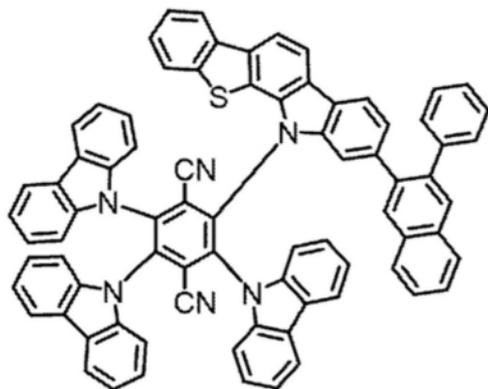
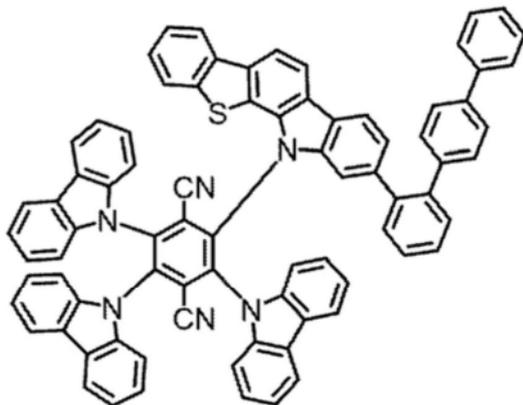


[0516] [化73]

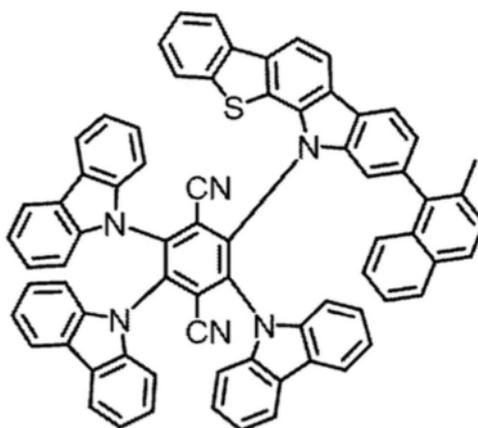
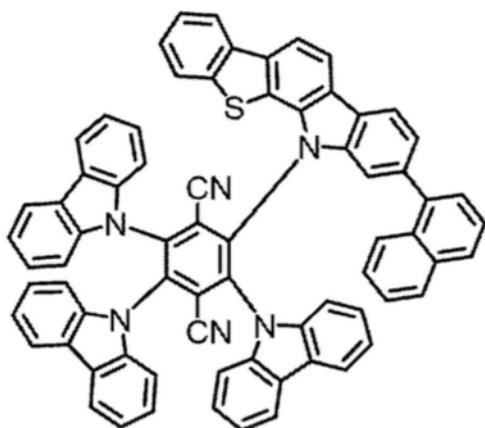




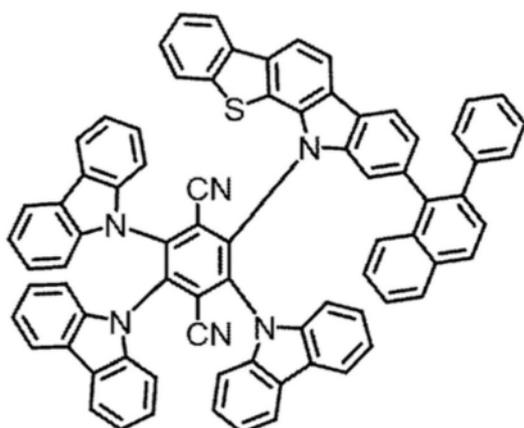
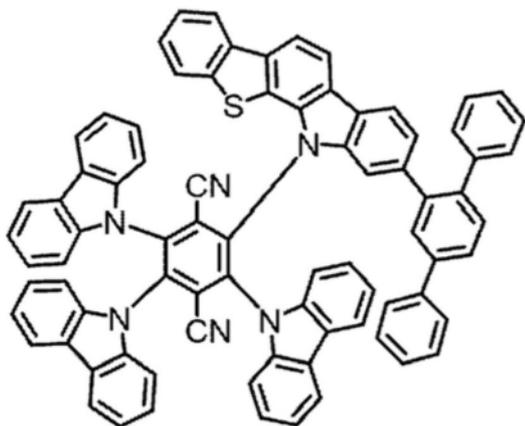
[0517]



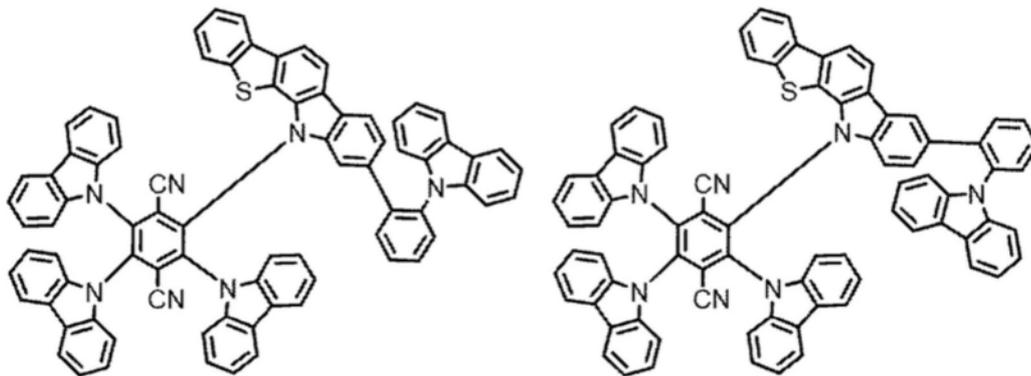
[0518] [化74]



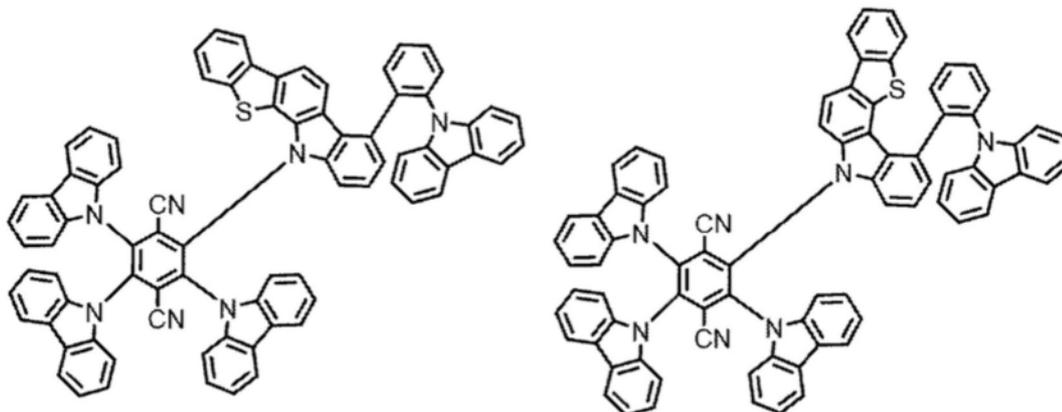
[0519]



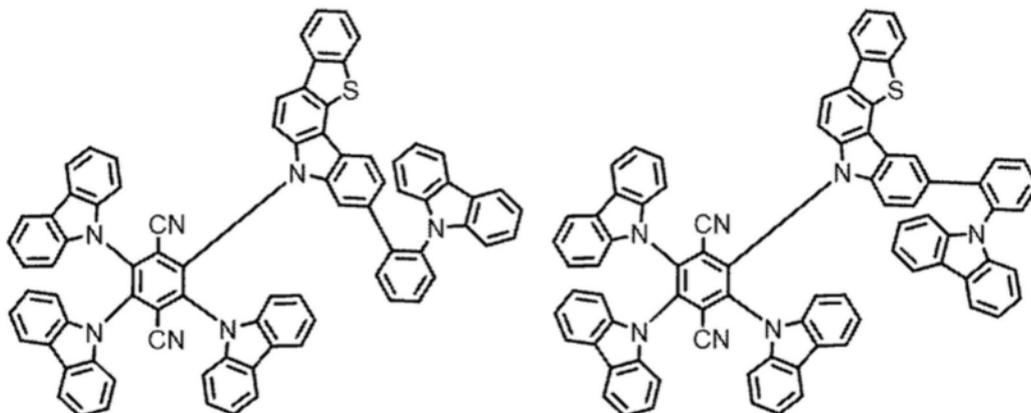
[0520] [化75]



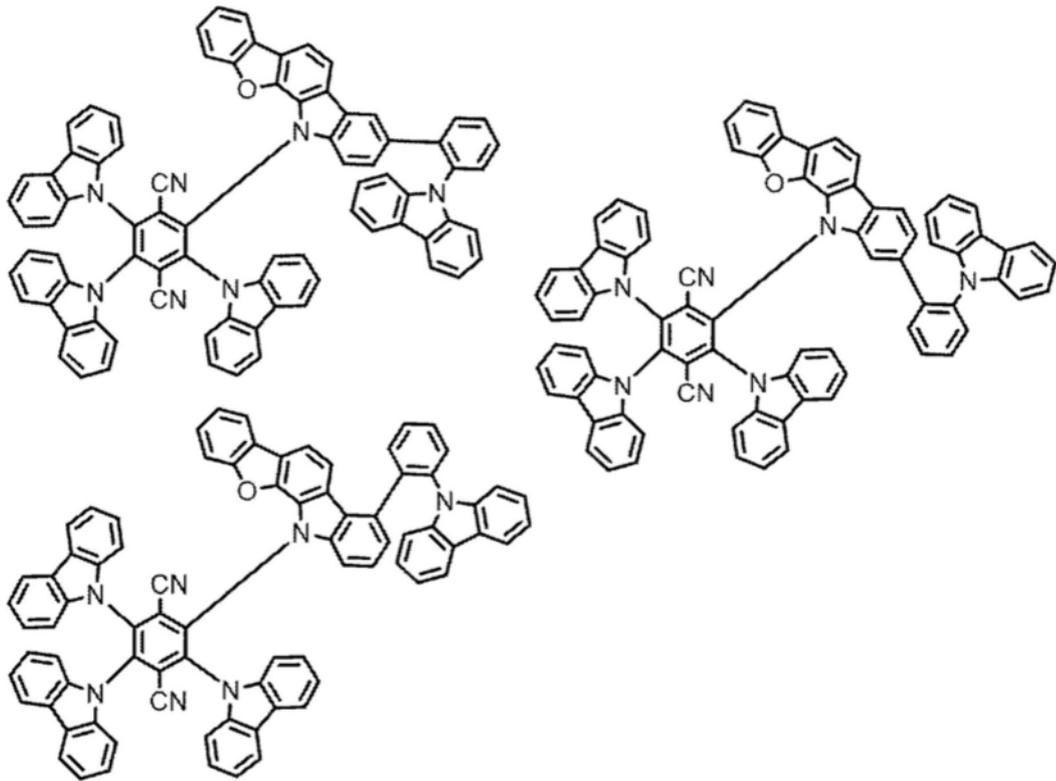
[0521]



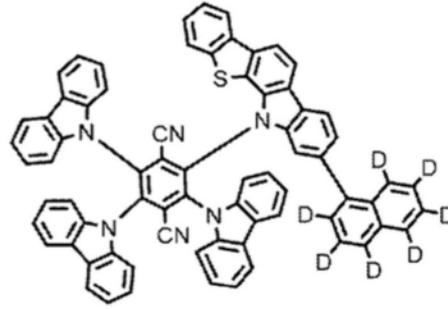
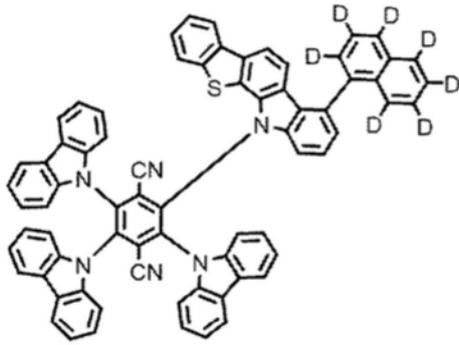
[0522] [化76]



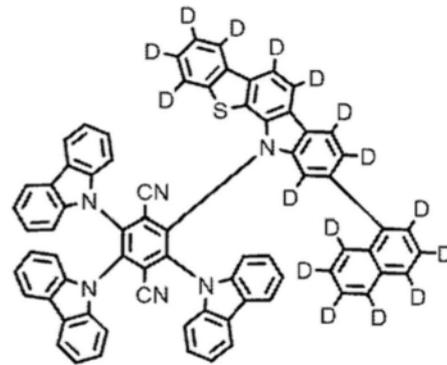
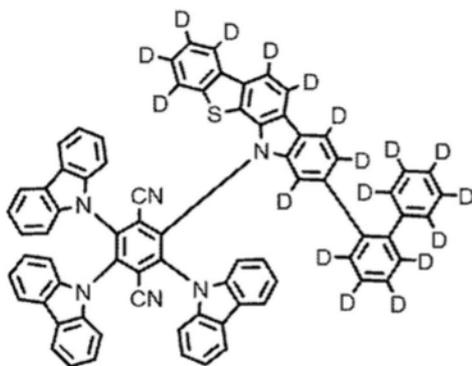
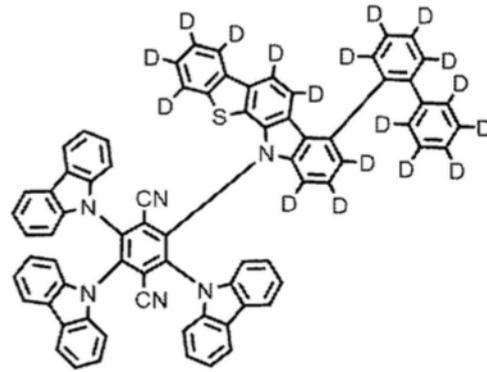
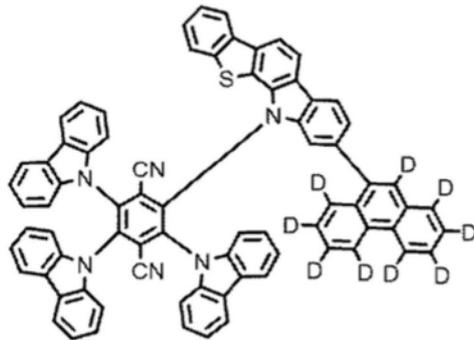
[0523]



[0524] [化77]

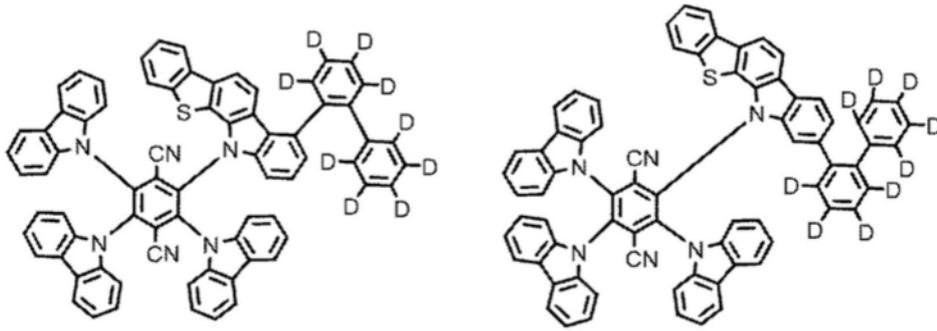


[0525]

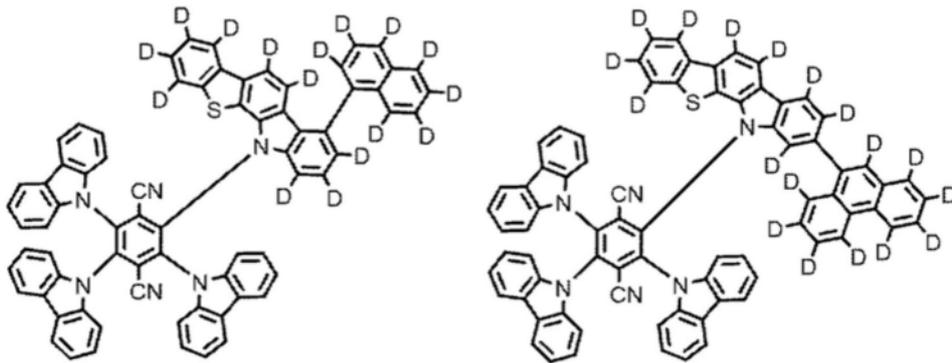


[0526]

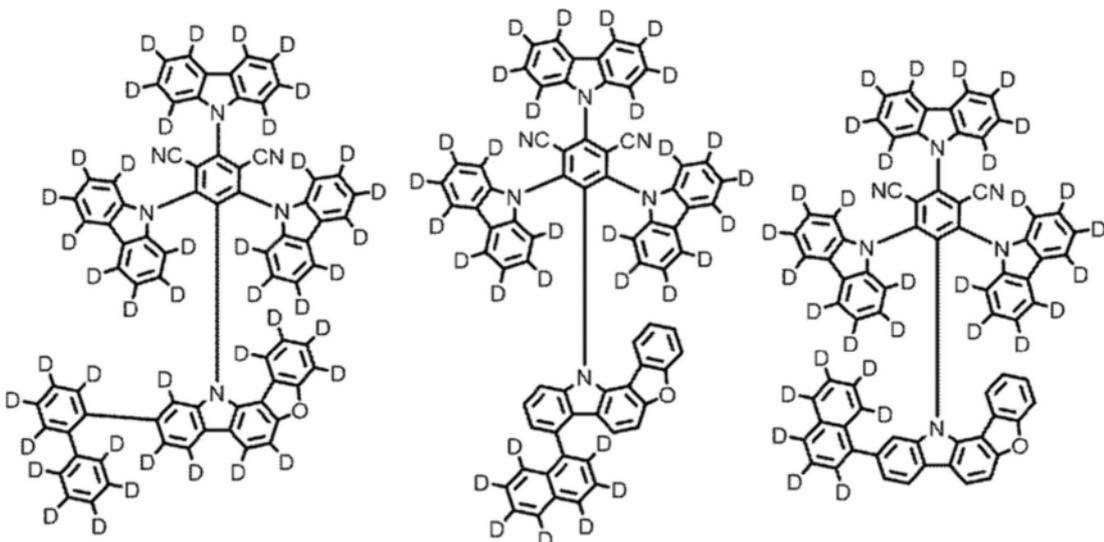
[化78]



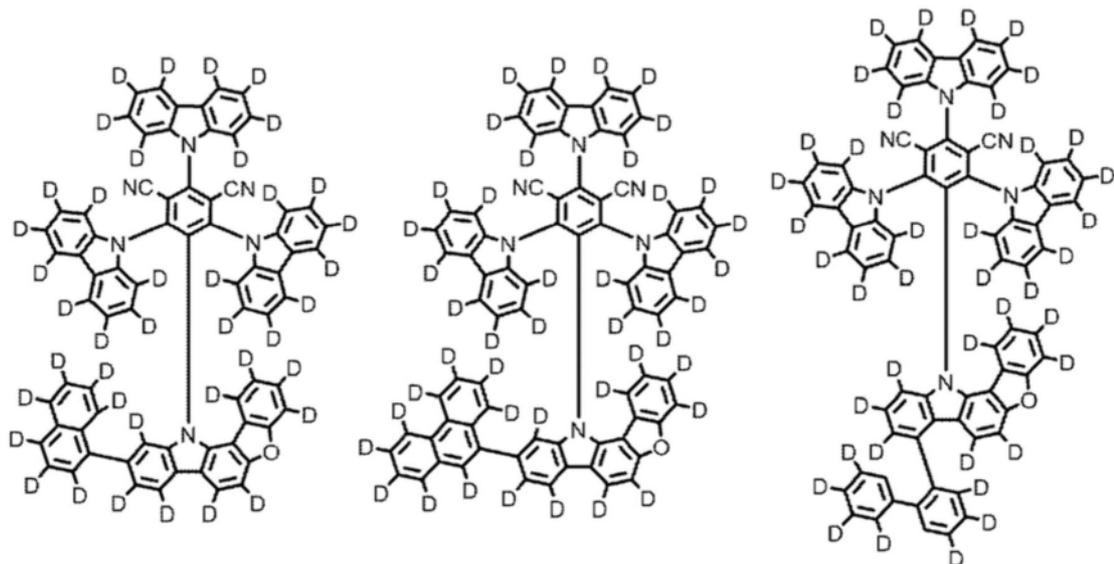
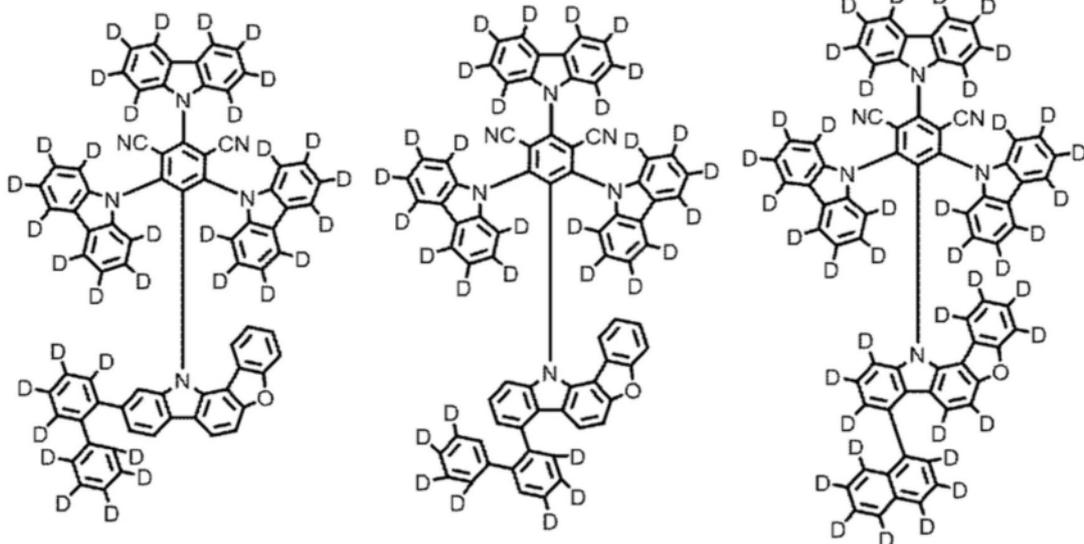
[0527]



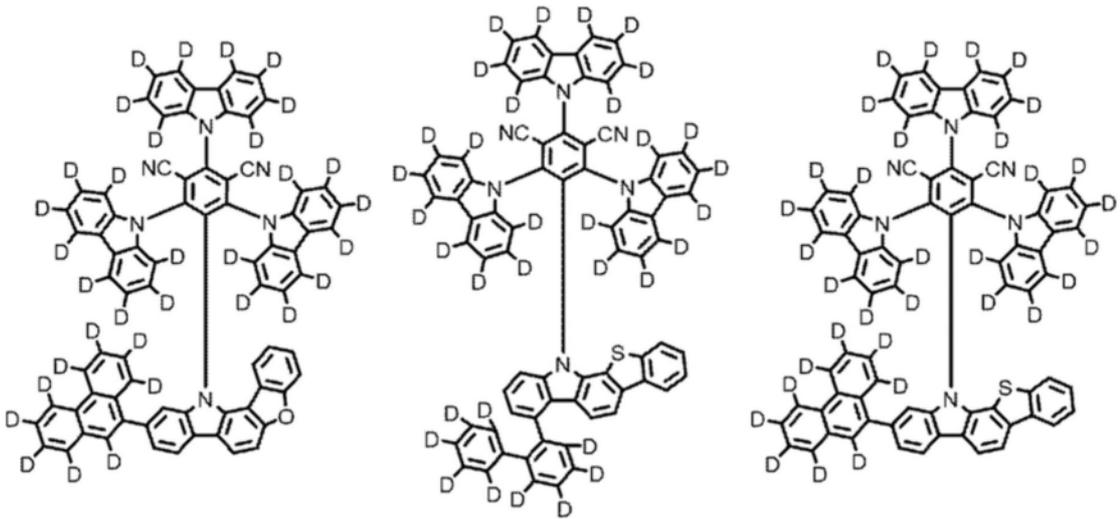
[0528] [化79]



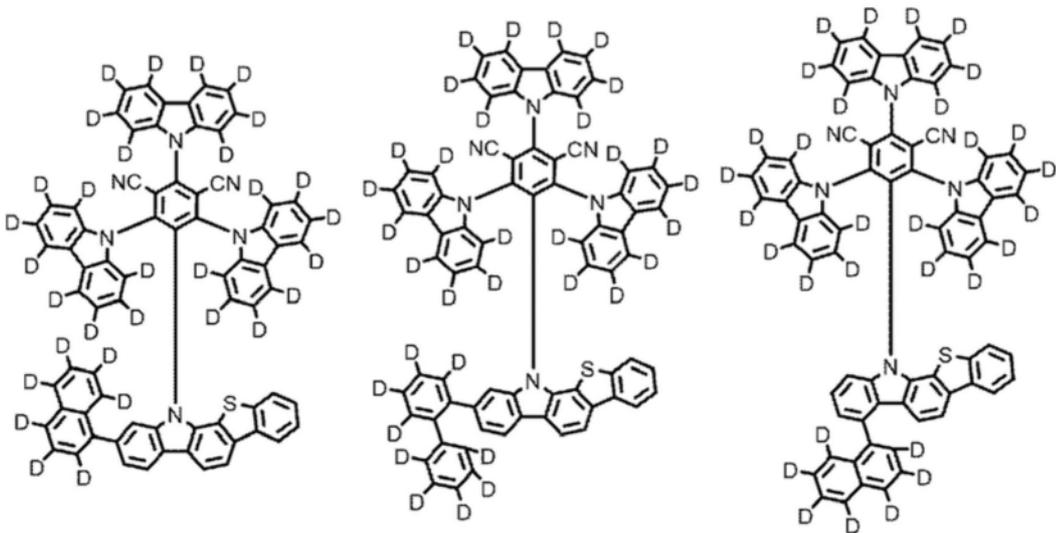
[0529]



[0530] [化80]



[0531]



[0532] (第二实施方式)

[0533] (用于有机EL元件的材料)

[0534] 第二实施方式的用于有机EL元件的材料包含第一实施方式的化合物(以通式(11)~(13)中的任一个表示的化合物中的至少任一种)。作为一方案,可例举仅包含第一实施方式的化合物的用于有机EL元件的材料,作为其他的一方案,可例举包含第一实施方式的化合物、与和第一实施方式的化合物不同的其他化合物的用于有机EL元件的材料。

[0535] 在本实施方式的用于有机EL元件的材料中,第一实施方式的化合物优选为主体材料。在该情况下,用于有机EL元件的材料可以包含作为主体材料的第一实施方式的化合物与例如掺杂剂材料等其他化合物。

[0536] 此外,在本实施方式的用于有机EL元件的材料中,第一实施方式的化合物优选为延迟荧光性材料。

[0537] 由于第二实施方式的用于有机EL元件的材料包含能够提供高性能的有机EL元件的化合物(第一实施方式的化合物),特别地,包含PLQY较高的第一实施方式的化合物,因此根据第二实施方式,能够提供一种可提供高性能的有机EL元件的用于有机EL元件的材料。

[0538] 另外,第二实施方式的用于有机EL元件的材料也可以还含有其他的化合物。在第二实施方式的用于有机EL元件的材料还包含其他的化合物的情况下,该其他的化合物可以

是固体也可以是液体。

[0539] (第三实施方式)

[0540] (有机EL元件)

[0541] 以下对第三实施方式的有机EL元件的构成进行说明。

[0542] 有机EL元件在阳极以及阴极的两个电极之间具备有机层。该有机层通常是由有机化合物构成的多个层层叠而成的。有机层可以还包含无机化合物。本实施方式的有机EL元件具有包含在阳极与阴极之间的第一有机层。第一有机层包含第一实施方式的化合物(以通式(11)~(13)中的任一个表示的化合物中的至少任一种)中的至少任一种。

[0543] 作为第一有机层,例如可例举从空穴注入层、空穴传输层、发光层、电子注入层、电子传输层、空穴阻挡层以及电子阻挡层等构成的组中选择的至少任一种层。

[0544] 第一有机层优选为发光层。

[0545] 本实施方式的有机EL元件的第一有机层为发光层。

[0546] 在本实施方式中,有机层可以仅由作为第一有机层的发光层构成,但也可以进一步具有从例如空穴注入层、空穴传输层、电子注入层、电子传输层、空穴阻挡层以及电子阻挡层等构成的组中选择的至少任一种层。

[0547] 图1中示出本实施方式的有机EL元件的一例的概略构成。

[0548] 有机EL元件1包含透光性的基板2、阳极3、阴极4、配置于阳极3与阴极4之间的有机层10。有机层10自阳极3侧依次层叠有空穴注入层6、空穴传输层7、作为第一有机层的发光层5、电子传输层8以及电子注入层9而构成。

[0549] 在本实施方式的有机EL元件1中,发光层5包含第一化合物。

[0550] 第一化合物是第一实施方式的化合物(以通式(11)~(13)中的任一个表示的化合物中的至少任一种)。

[0551] 发光层5优选为不包含磷光发光性材料(掺杂剂材料)。

[0552] 发光层5优选为不包含重金属络合物以及磷光发光性的稀土类金属络合物。在此,作为重金属络合物,例如可例举铈络合物、镱络合物以及铂络合物等。

[0553] 此外,发光层5还优选为不包含金属络合物。

[0554] 本实施方式的有机EL元件1的发光层5包含第一化合物(以通式(11)~(13)中的任一个表示的化合物中的至少任一种),还包含第二化合物。

[0555] 在该方案的情况下,第一化合物优选为主体材料(有时也称为基质材料),第二化合物优选为掺杂剂材料(有时也称为客体材料、发射体、发光材料)。

[0556] <第一化合物>

[0557] 第一化合物为第一实施方式的化合物。

[0558] 第一化合物优选为延迟荧光性的化合物。

[0559] • 延迟荧光性

[0560] 关于延迟荧光,在《有机半导体的器件物性》(安达千波矢编,讲谈社发行)的261~268页中有解说。在该文献中说明了,如果能够减小荧光发光材料的激发单重态状态与激发三重态状态的能量差 ΔE_{13} ,则通常迁移概率低的从激发三重态状态向激发单重态状态的逆能量转移高效地发生,产生热活化延迟荧光(Thermally Activated Delayed Fluorescence, TADF)。进而,以该文献中的图10.38说明了延迟荧光的发生机制。本实施方

式中的第一化合物优选为示出以这样的机制产生的热活化延迟荧光的化合物。

[0561] 通常,延迟荧光的发光能够通过过渡PL(Photo Luminescence:光致发光)测量来确认。

[0562] 还能够基于由过渡PL测量得到的衰减曲线解析延迟荧光的行为。过渡PL测量是指对试样照射脉冲激光使其激发,并测量停止照射后的PL发光的衰减行为(过渡特性)的方法。TADF材料中的PL发光分为来自最初PL激发生成的单重态激子的发光成分和来自经由三重态激子生成的单重态激子的发光成分。由最初的PL激发生成的单重态激子的寿命为纳秒级,非常短。因此,来自该单重态激子的发光在照射脉冲激光后迅速衰减。

[0563] 另一方面,延迟荧光是来自经由寿命长的三重态激子生成的单重态激子的发光,因此缓慢地衰减。像这样,来自最初PL激发生成的单重态激子的发光与来自经由三重态激子生成的单重态激子的发光之间存在较大的时间差。因此,能够求出源自延迟荧光的发光强度。

[0564] 图2中示出用于测量过渡PL的示例装置的概略图。对使用了图2的过渡PL的测量方法以及延迟荧光的行为解析的一例进行说明。

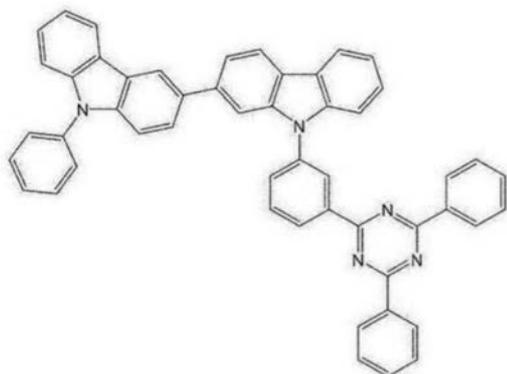
[0565] 图2的过渡PL测量装置100具备:脉冲激光部101,可照射规定波长的光;试样室102,收纳测量试样;分光器103,对从测量试样发射的光进行分光;条纹相机104,用于对二维像进行成像;个人计算机105,读取二维像进行解析。另外,过渡PL的测量并不限定于图2所记载的装置。

[0566] 收纳于试样室102的试样可通过使针对基质材料以12质量%的浓度掺杂有掺杂材料的薄膜在石英基板上成膜而得到。

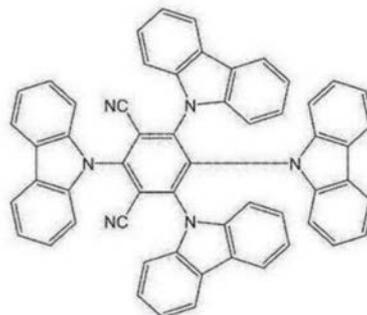
[0567] 对于收纳于试样室102的薄膜试样,从脉冲激光部101照射脉冲激光使掺杂材料激发。在相对于激发光的照射方向为90度的方向上提取发光,通过分光器103对提取到的光进行分光,在条纹相机104内对二维像进行成像。其结果为,能够得到纵轴对应于时间、横轴对应于波长、亮点对应于发光强度的二维图像。如果以规定的时间轴切割出该二维图像,则能够得到纵轴为发光强度、横轴为波长的发光光谱。此外,如果以波长轴切割出该二维图像,则能够得到纵轴为发光强度的对数、横轴为时间的衰减曲线(过渡PL)。

[0568] 例如,使用下述参考化合物H1作为基质材料,使用下述参考化合物D1作为掺杂材料,如上所述地制作薄膜试样A,进行了过渡PL测量。

[0569] [化81]



(参考化合物 H1)



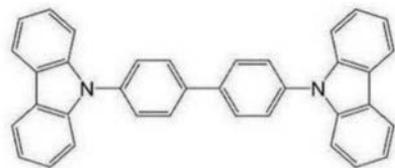
(参考化合物 D1)

[0570]

[0571] 在此,使用所述的薄膜试样A以及薄膜试样B对衰减曲线进行了解析。薄膜试样B使用下述参考化合物H2作为基质材料,使用所述参考化合物D1作为掺杂材料,如上所述地制作了薄膜试样。

[0572] 图3中示出由对薄膜试样A以及薄膜试样B测量的过渡PL得到的衰减曲线。

[0573] [化82]



[0574]

(参考化合物 H2)

[0575] 如上所述,通过过渡PL测量,能够得到以发光强度为纵轴、以时间为横轴的发光衰减曲线。基于该发光衰减曲线,能够推算从由光激发生成的单重态激发状态发出的荧光、与从经由三重态激发状态而通过逆能量转移生成的单重态激发状态发出的延迟荧光的荧光强度比。在延迟荧光性的材料中,相对于快速衰减的荧光的强度,缓慢衰减的延迟荧光的强度的比例在一定程度上较大。

[0576] 具体而言,作为来自延迟荧光性的材料的发光,存在Prompt发光(即时发光)与Delay发光(延迟发光)。Prompt发光(即时发光)是指,由该延迟荧光性的材料所吸收的波长的脉冲光(从脉冲激光照射的光)激发后,从该激发状态立即观察到的发光。Delay发光(延迟发光)是指,由该脉冲光激发后不能立即观察到而在其后观察到的发光。

[0577] Prompt发光与Delay发光的量与两者之比能够通过“《Nature》492,234-238,2012”(参考文献1)中所记载的方法同样的方法求出。另外,用于计算出Prompt发光和Delay发光的量的装置并不限于所述参考文献1中记载的装置或图2中记载的装置。

[0578] 此外,在本说明书中,在第一化合物的延迟荧光性的测量中使用通过以下所示的方法制作出的试样。例如,将第一化合物溶解在甲苯中,为了消除自吸收的影响,制备在激发波长下吸光度为0.05以下的稀溶液。此外,为了防止氧引起的消光,将试样溶液冻结排气后,在氩气气氛下封入带盖的池中,由此制成通过氩气饱和的无氧的试样溶液。

[0579] 用分光荧光光度计FP-8600(日本分光公司制)测量上述试样溶液的荧光光谱,此外在相同条件下测量9,10-二苯葱的乙醇溶液的荧光光谱。使用两个光谱的荧光面积强度,根据Morris等,《J.Phys.Chem.》,80(1976)969中的(1)式计算全荧光量子产率。

[0580] Prompt发光与Delay发光的量与两者之比能够通过“《Nature》492,234-238,2012”(参考文献1)中所记载的方法同样的方法求出。另外,用于计算出Prompt发光和Delay发光的量的装置并不限于所述参考文献1中记载的装置或图2中记载的装置。

[0581] 在本实施方式中,优选将测量对象化合物(第一化合物)的Prompt发光(即时发光)的量记作 X_p ,将Delay发光(延迟发光)的量记作 X_d 时, X_p/X_d 的值为0.05以上。

[0582] 本说明书中第一化合物以外的化合物的Prompt发光与Delay发光的量与两者之比的测量也与第一化合物的Prompt发光与Delay发光的量与两者之比的测量相同。

[0583] <第二化合物>

[0584] 本实施方式的第二化合物优选为荧光发光性的化合物。第二化合物可以是热活化

延迟荧光性的化合物,也可以是不呈热活化延迟荧光性的化合物。

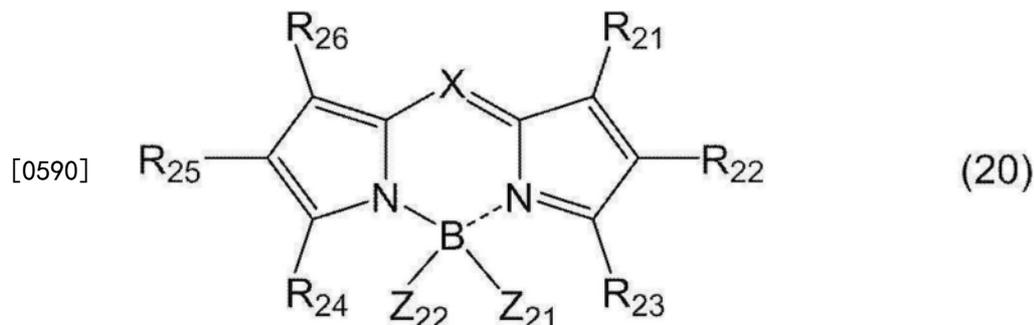
[0585] 本实施方式的第二化合物优选为不呈热活化延迟荧光性的化合物。本实施方式的第二化合物不为磷光发光性的金属络合物。本实施方式的第二化合物优选不为重金属络合物。此外,本实施方式的第二化合物优选不为金属络合物。

[0586] 作为本实施方式的第二化合物,能够使用荧光发光性材料。作为荧光发光性材料,具体而言,例如可例举双芳基氨基萘衍生物、芳基取代萘衍生物、双芳基氨基蒽衍生物、芳基取代蒽衍生物、双芳基氨基芘衍生物、芳基取代芘衍生物、双芳基氨基蒾衍生物、芳基取代蒾衍生物、双芳基氨基荧蒽衍生物、芳基取代荧蒽衍生物、茚并芘衍生物、茈并荧蒽衍生物、吡咯亚甲基硼配位化合物、具有吡咯亚甲基骨架的化合物、具有吡咯亚甲基骨架的化合物的金属络合物、二酮吡咯并吡咯衍生物、茈衍生物以及并四苯衍生物等。

[0587] • 以通式(20)表示的化合物

[0588] 在本实施方式中,第二化合物优选为以下述通式(20)表示的化合物。

[0589] [化83]



[0591] 在所述通式(20)中,

[0592] X为氮原子或与Y键合的碳原子,

[0593] Y为氢原子或取代基,

[0594] $R_{21} \sim R_{26}$ 分别独立地为氢原子或取代基,或者 R_{21} 以及 R_{22} 的组、 R_{22} 以及 R_{23} 的组、 R_{24} 以及 R_{25} 的组、还有 R_{25} 以及 R_{26} 的组中的任意1个以上的组互相键合而形成环,

[0595] 作为取代基的Y以及 $R_{21} \sim R_{26}$ 分别独立地从

[0596] 取代或未取代的碳数为1~30的烷基、

[0597] 取代或未取代的碳数为1~30的卤代烷基、

[0598] 取代或未取代的成环碳数为3~30的环烷基、

[0599] 取代或未取代的成环碳数为6~30的芳基、

[0600] 取代或未取代的碳数为1~30的烷氧基、

[0601] 取代或未取代的碳数为1~30的卤代烷氧基、

[0602] 取代或未取代的碳数为1~30的烷硫基、

[0603] 取代或未取代的成环碳数为6~30的芳氧基、

[0604] 取代或未取代的成环碳数为6~30的芳硫基、

[0605] 取代或未取代的碳数为2~30的烯基、

[0606] 取代或未取代的碳数为7~30的芳烷基、

[0607] 取代或未取代的成环原子数为5~30的杂芳基、

[0608] 卤素原子、

- [0609] 羧基、
- [0610] 取代或未取代的酯基、
- [0611] 取代或未取代的氨基甲酰基、
- [0612] 取代或未取代的氨基、
- [0613] 硝基、
- [0614] 氰基、
- [0615] 取代或未取代的甲硅烷基、以及
- [0616] 取代或未取代的硅氧烷基构成的组中选择，
- [0617] Z_{21} 以及 Z_{22} 分别独立地为取代基，或者 Z_{21} 以及 Z_{22} 互相键合而形成环，
- [0618] 作为取代基的 Z_{21} 以及 Z_{22} 分别独立地从
- [0619] 卤素原子、
- [0620] 取代或未取代的碳数为1~30的烷基、
- [0621] 取代或未取代的碳数为1~30的卤代烷基、
- [0622] 取代或未取代的成环碳数为6~30的芳基、
- [0623] 取代或未取代的碳数为1~30的烷氧基、
- [0624] 取代或未取代的碳数为1~30的卤代烷氧基、以及
- [0625] 取代或未取代的成环碳数为6~30的芳氧基构成的组中选择。
- [0626] 在第二化合物为荧光发光性的化合物的情况下，第二化合物优选示出最大峰波长为400nm以上700nm以下的发光。
- [0627] 在本说明书中，最大峰波长是指对于测量对象化合物以 10^{-6} 摩尔/升以上 10^{-5} 摩尔/升以下的浓度溶解的甲苯溶液，测量出的荧光光谱中的发光强度达到最大的荧光光谱的峰波长。测量装置使用分光荧光光度计(日立高新技术公司制，F-7000)。
- [0628] 第二化合物优选为示出红色的发光或绿色的发光。
- [0629] 在本说明书中，红色的发光是指，荧光光谱的最大峰波长在600nm以上660nm以下的范围内的发光。
- [0630] 在第二化合物为红色的荧光发光性的化合物的情况下，第二化合物的最大峰波长优选为600nm以上660nm以下，更优选为600nm以上640nm以下，进一步优选为610nm以上630nm以下。
- [0631] 在本说明书中，绿色的发光是指，荧光光谱的最大峰波长在500nm以上560nm以下的范围内的发光。
- [0632] 在第二化合物为绿色的荧光发光性的化合物的情况下，第二化合物的最大峰波长优选为500nm以上560nm以下，更优选为500nm以上540nm以下，进一步优选为510nm以上540nm以下。
- [0633] 在本说明书中，蓝色的发光是指，荧光光谱的最大峰波长在430nm以上480nm以下的范围内的发光。
- [0634] 在第二化合物为蓝色的荧光发光性的化合物的情况下，第二化合物的最大峰波长优选为430nm以上480nm以下，更优选为440nm以上480nm以下。
- [0635] 如下所述地进行从有机EL元件发出的光的最大峰波长的测量。
- [0636] 用分光发射亮度计CS-2000(柯尼卡美能达公司制)测量对有机EL元件施加电压以

使电流密度达到 $10\text{mA}/\text{cm}^2$ 时的分光发射亮度光谱。

[0637] 在得到的分光发射亮度光谱中,测量发光强度达到最大的发光光谱的峰波长,并将其作为最大峰波长(单位:nm)。

[0638] • 第二化合物的制造方法

[0639] 第二化合物能够通过公知的方法来制造。

[0640] • 第二化合物的制造方法

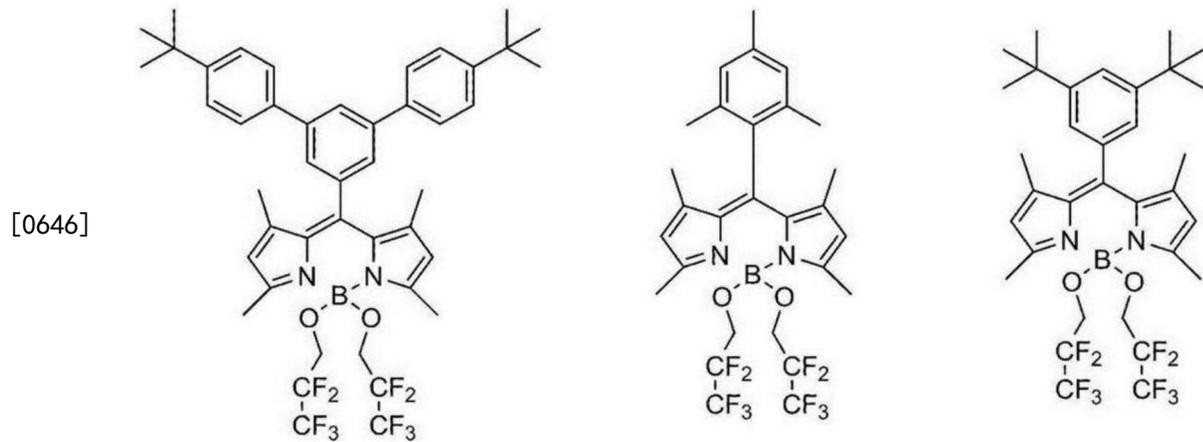
[0641] 第二化合物能够通过公知的方法来制造。

[0642] • 第二化合物的具体例

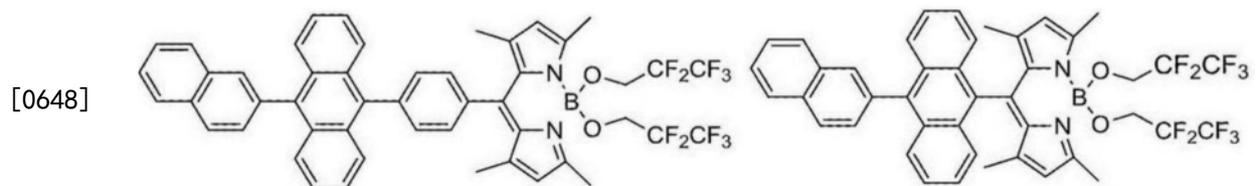
[0643] 以下示出本实施方式的第二化合物(以通式(20)表示的化合物)的具体例。其中,本发明并不受这些化合物的具体例的限定。

[0644] 另外,吡咯亚甲基骨架中的硼原子与氮原子的配位键有实线、虚线、箭头或省略等各种标记方法。在本说明书中,用实线表示,或用虚线表示,或省略记载。

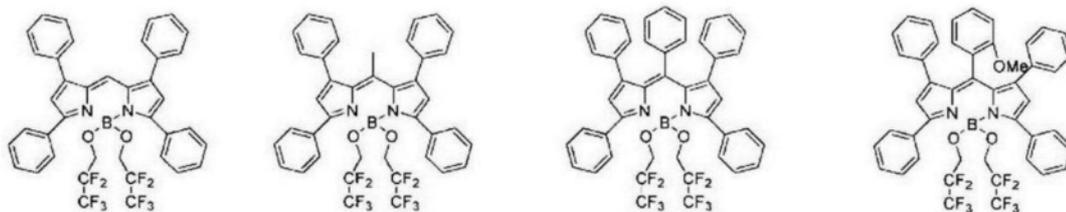
[0645] [化84]



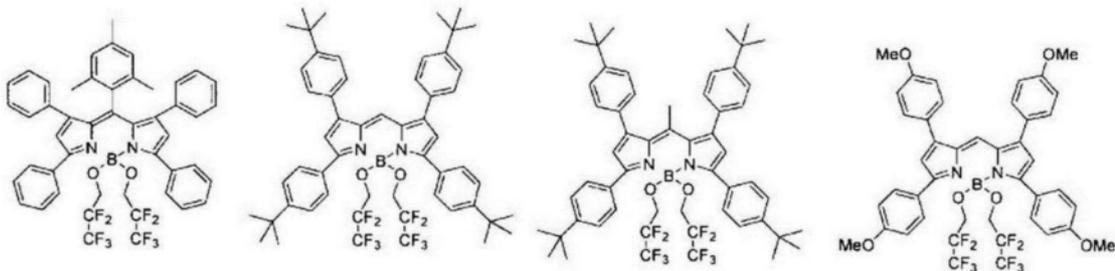
[0647] [化85]



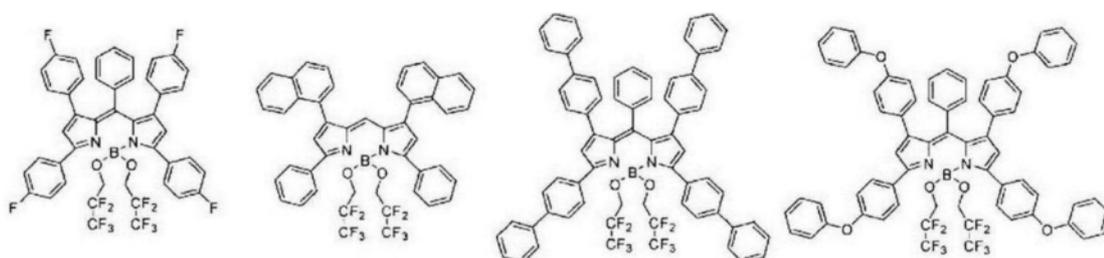
[0649] [化86]



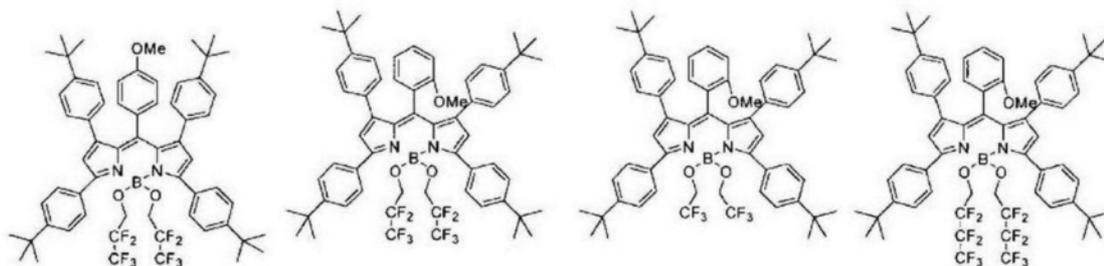
[0650]



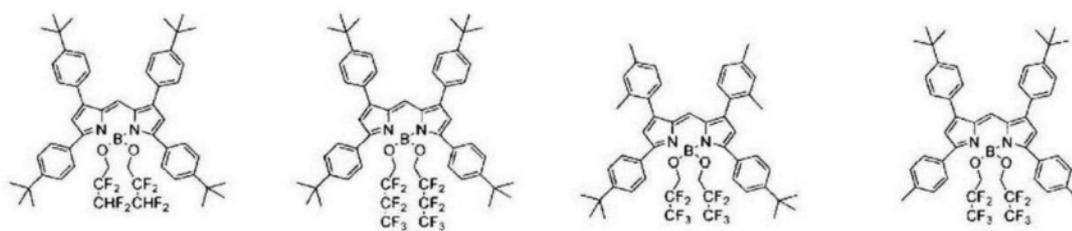
[0651] [化87]



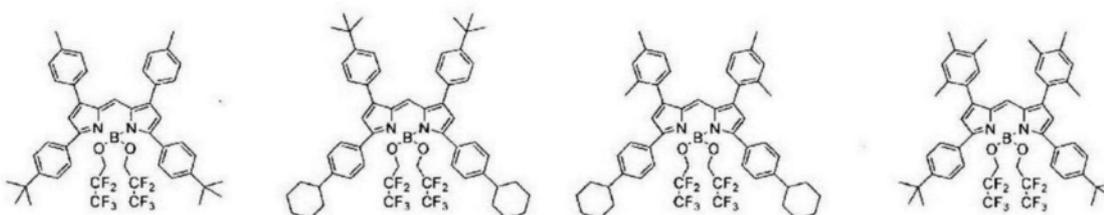
[0652]



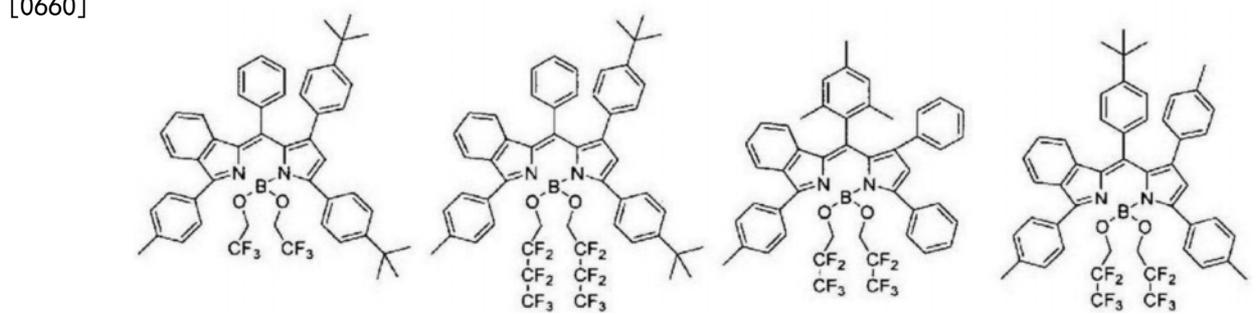
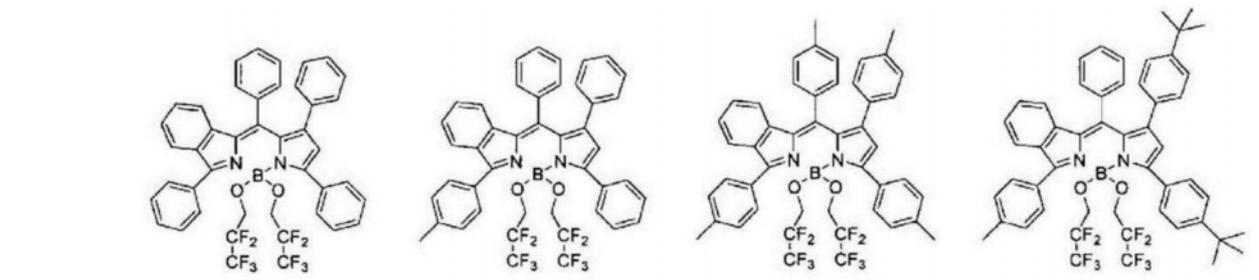
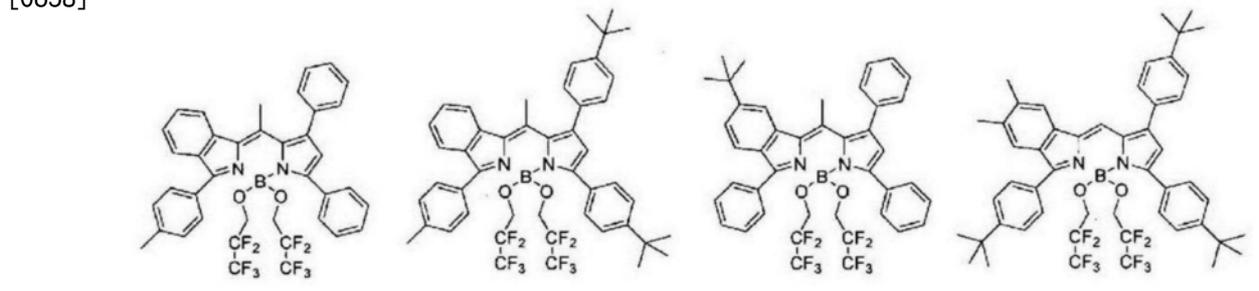
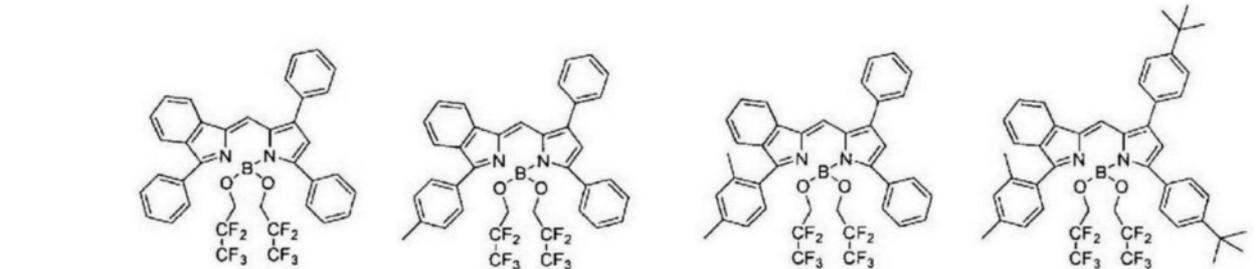
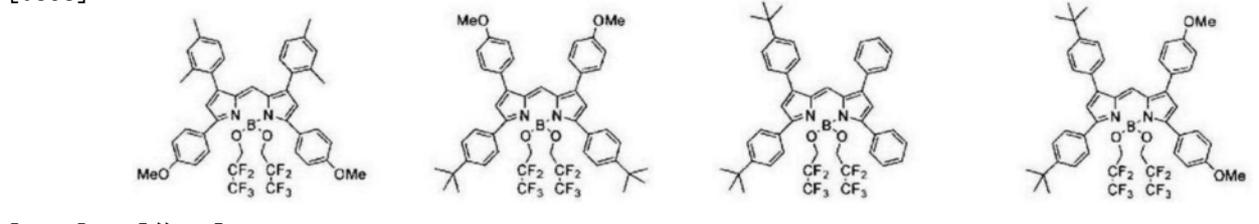
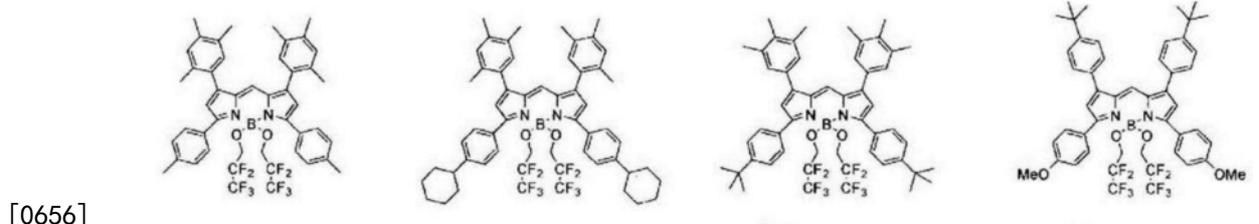
[0653] [化88]

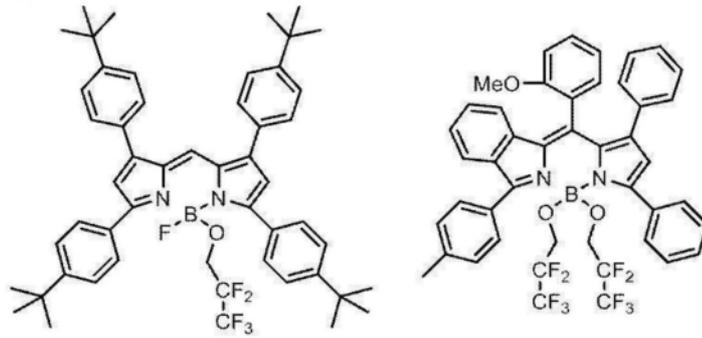


[0654]

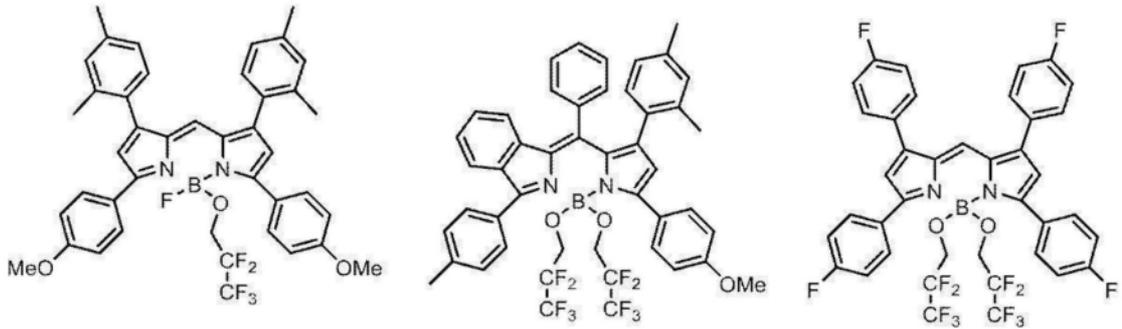


[0655] [化89]

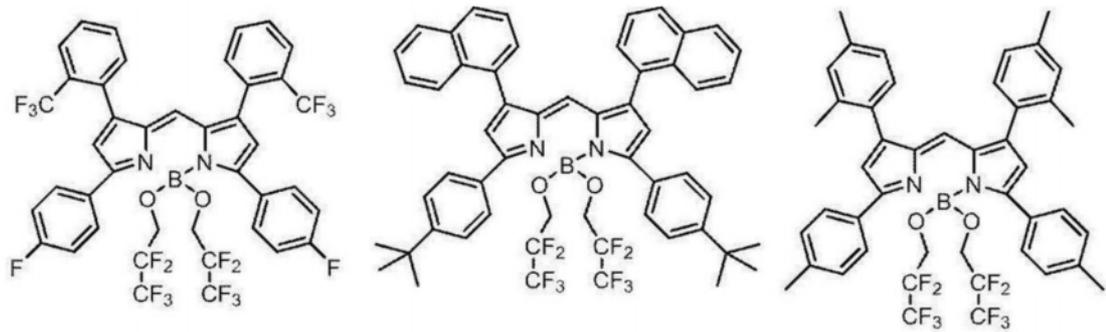




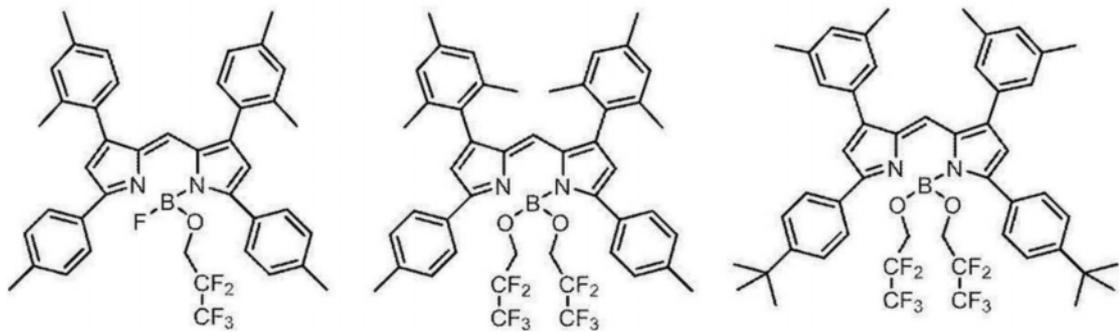
[0662]



[0663] [化93]

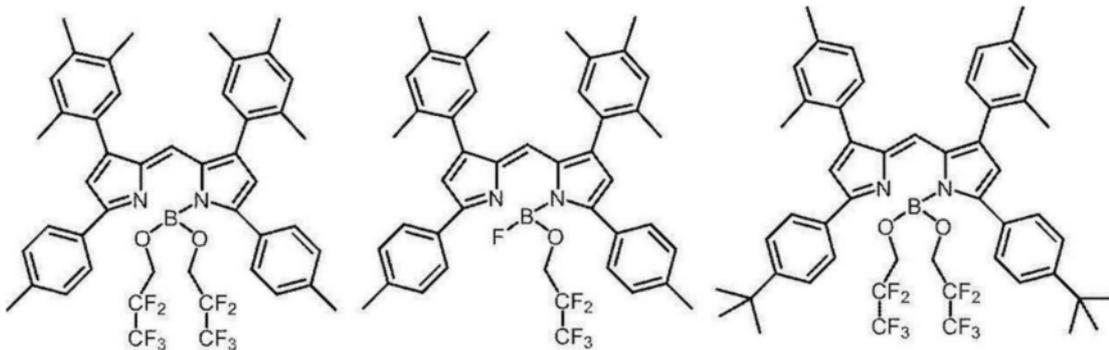


[0664]

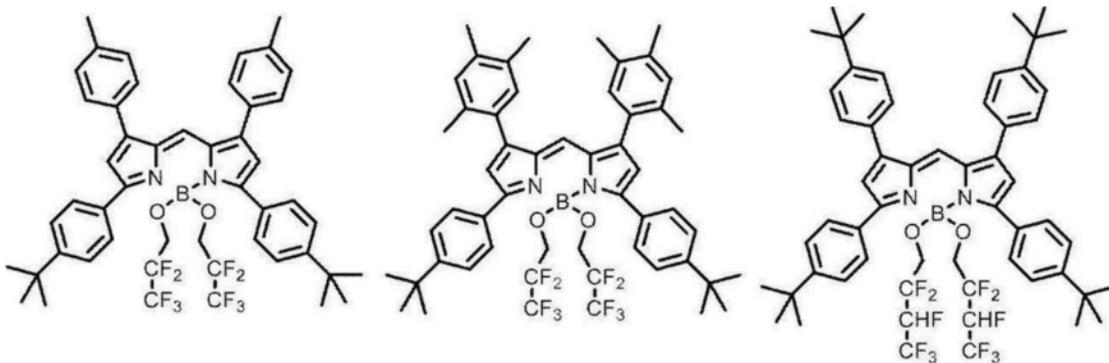


[0665] [化94]

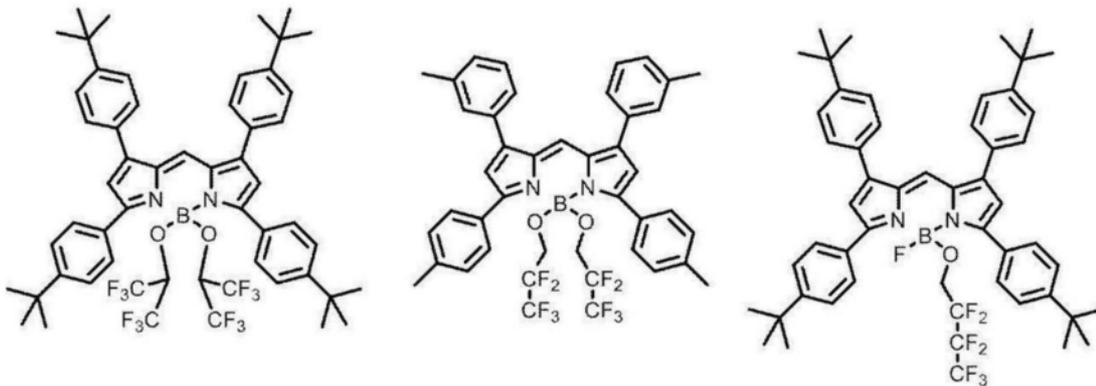
[0666]



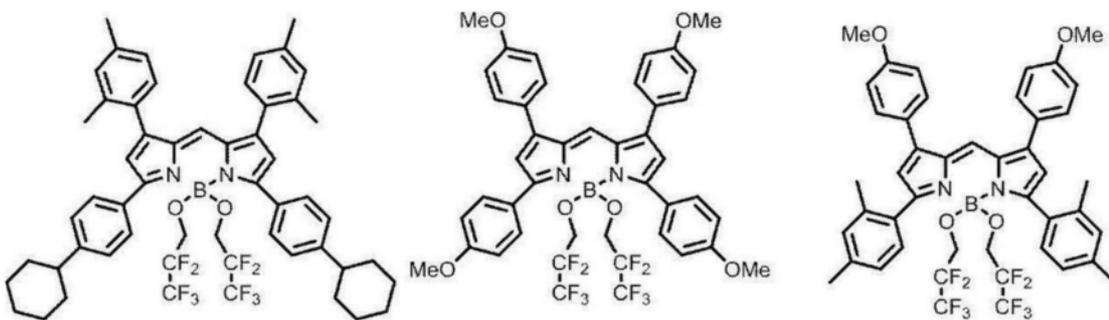
[0667] [化95]



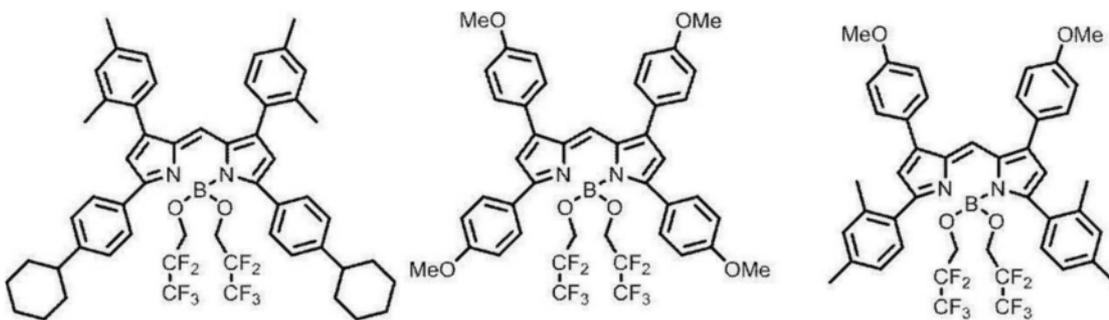
[0668]



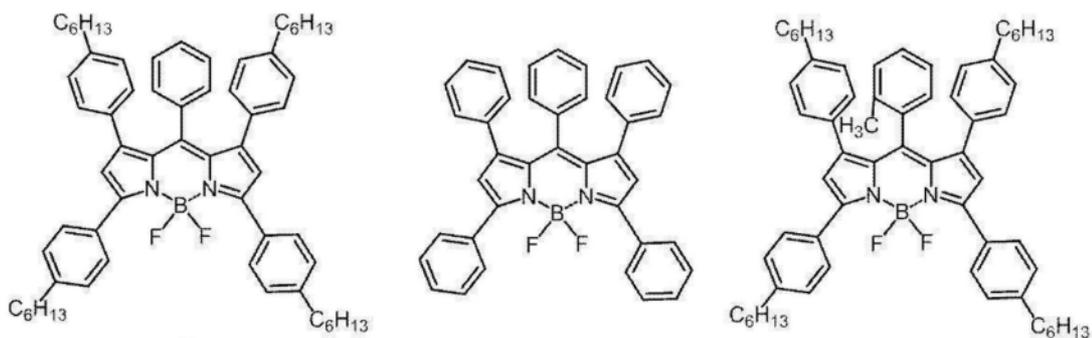
[0669] [化96]



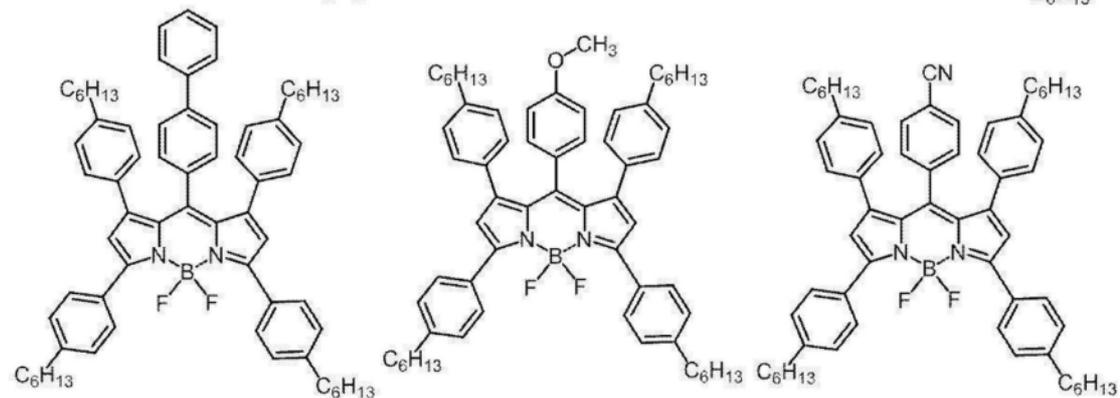
[0670]



[0671] [化97]

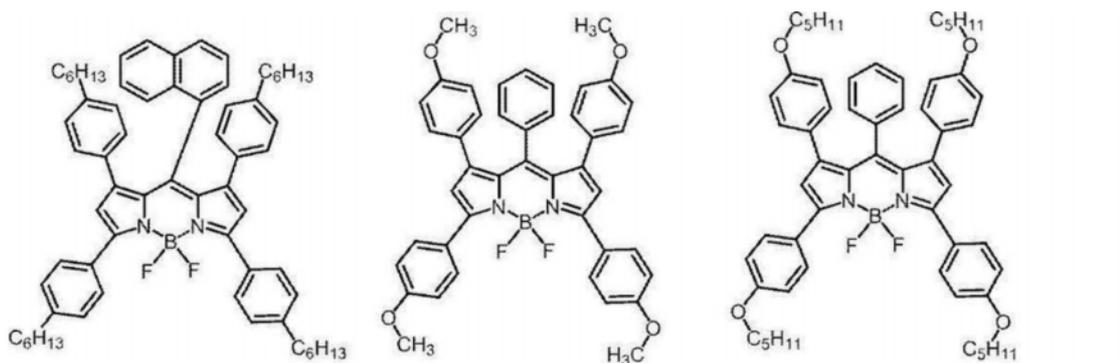


[0672]

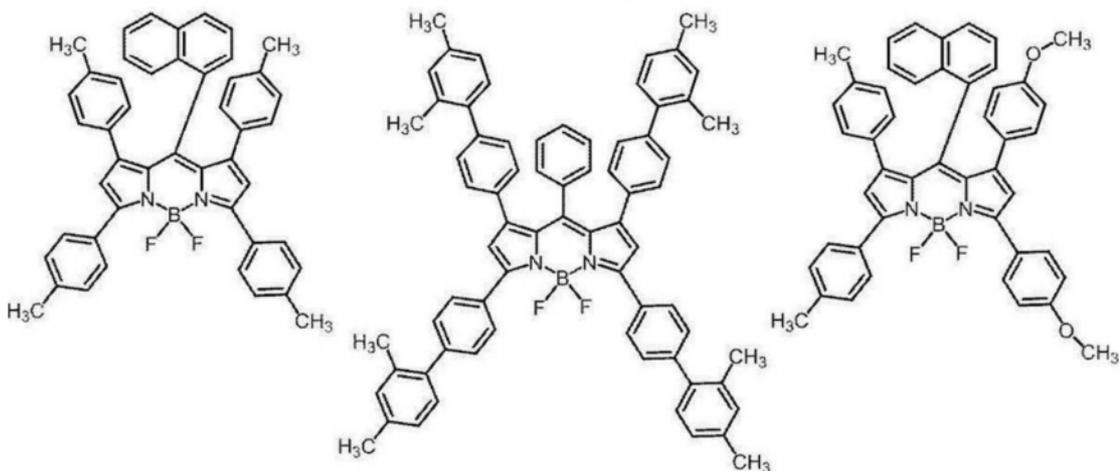


[0673]

[化98]

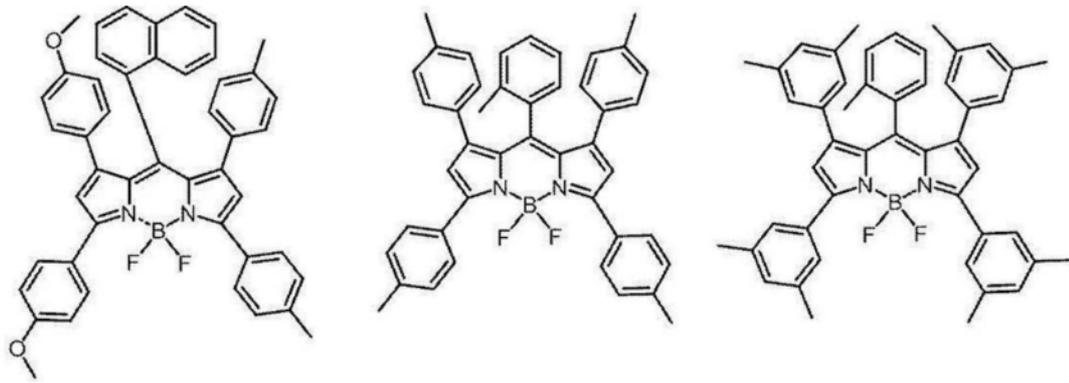


[0674]

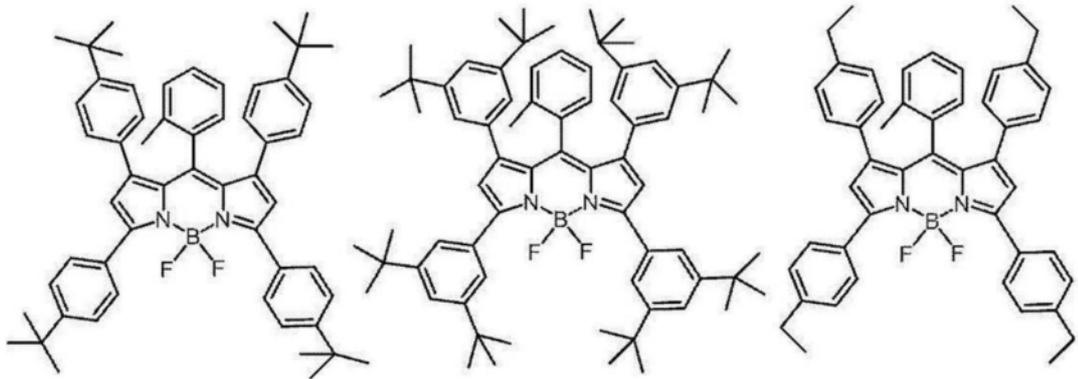


[0675]

[化99]

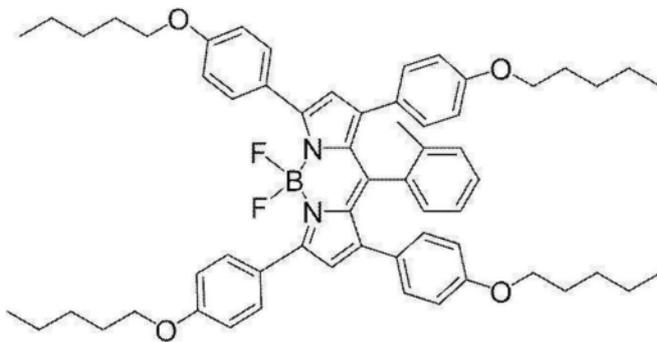


[0676]



[0677]

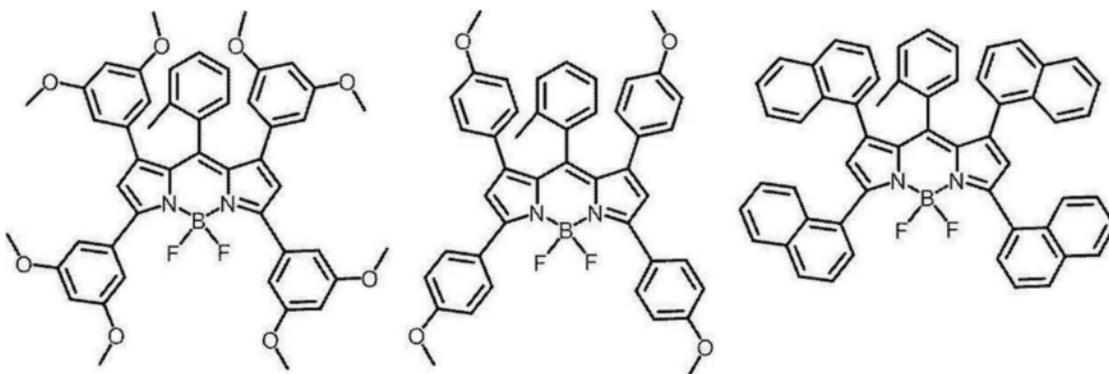
[化100]



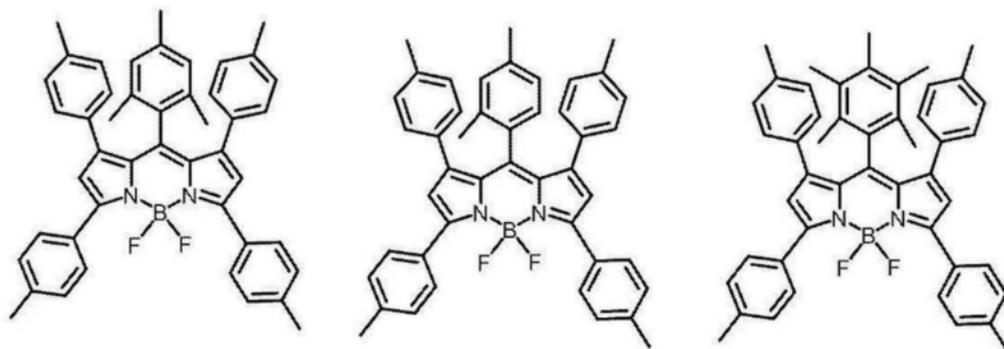
[0678]

[0679]

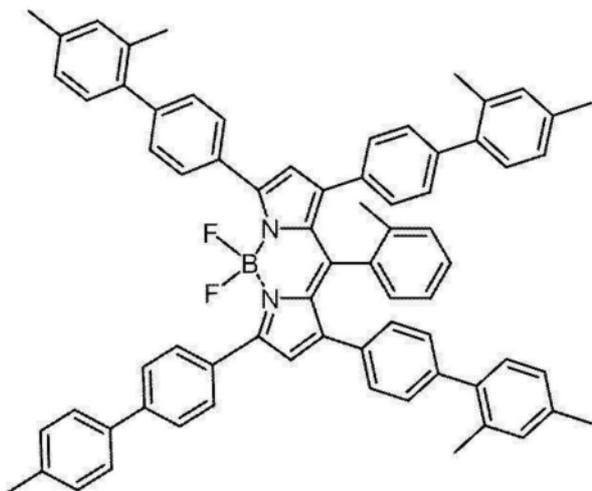
[化101]



[0680]

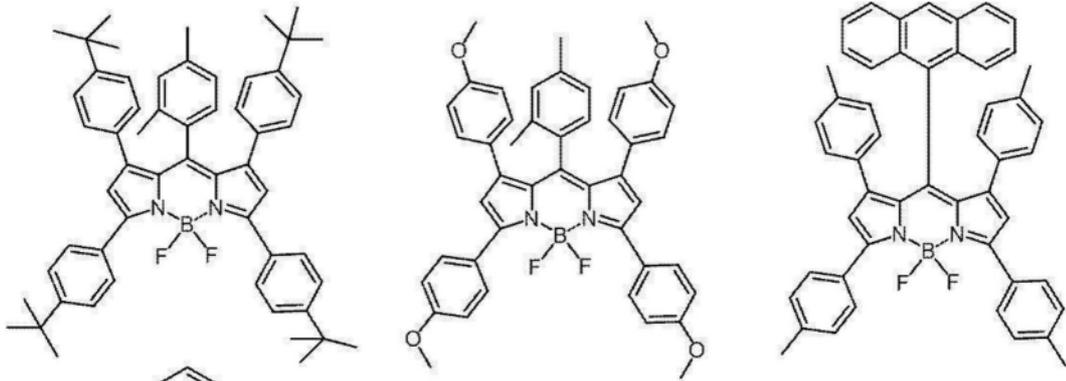


[0681] [化102]

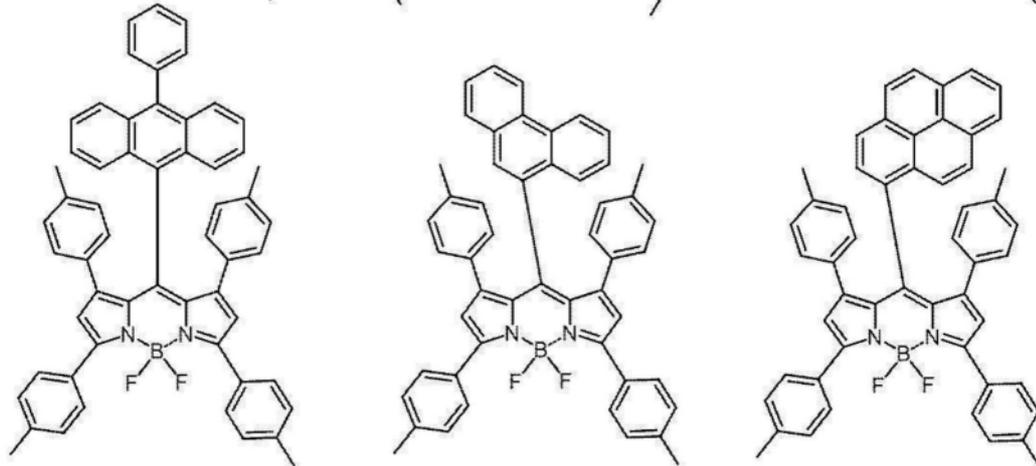


[0682]

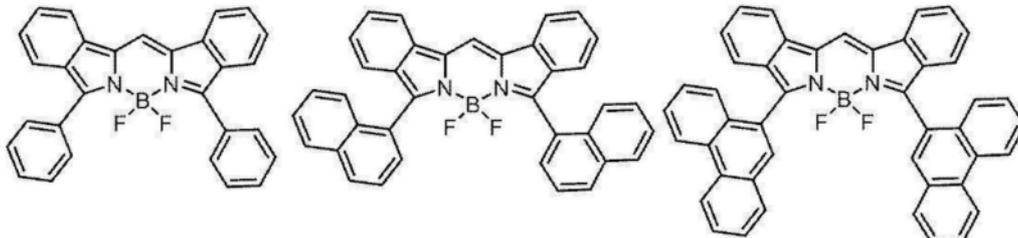
[0683] [化103]



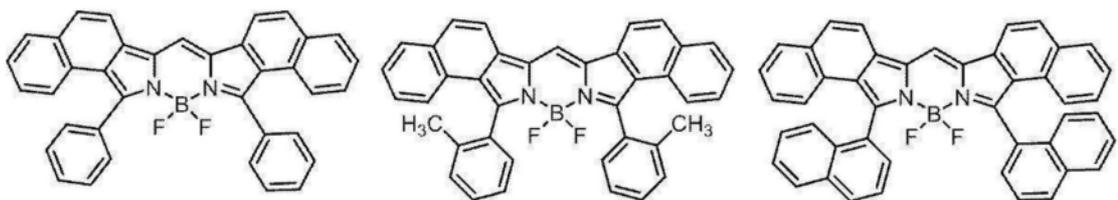
[0684]



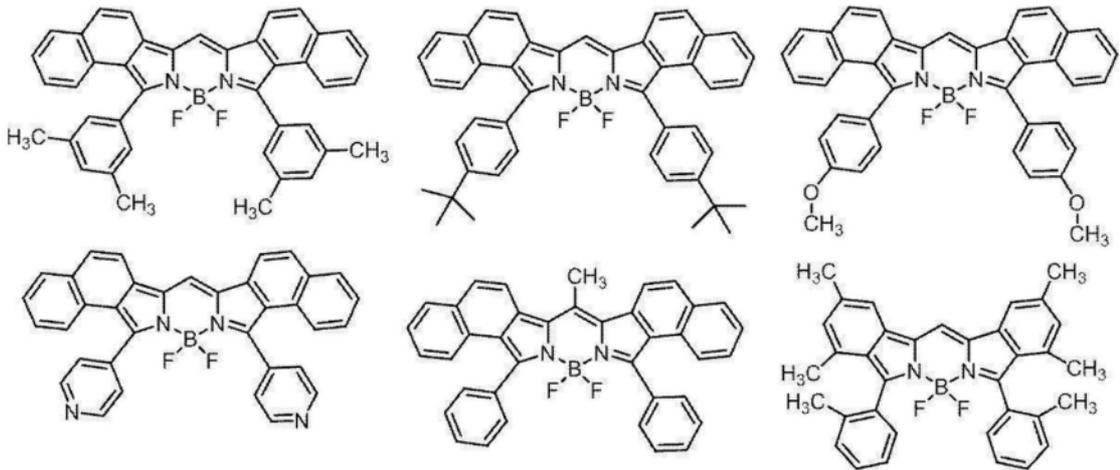
[0685] [化104]



[0686]

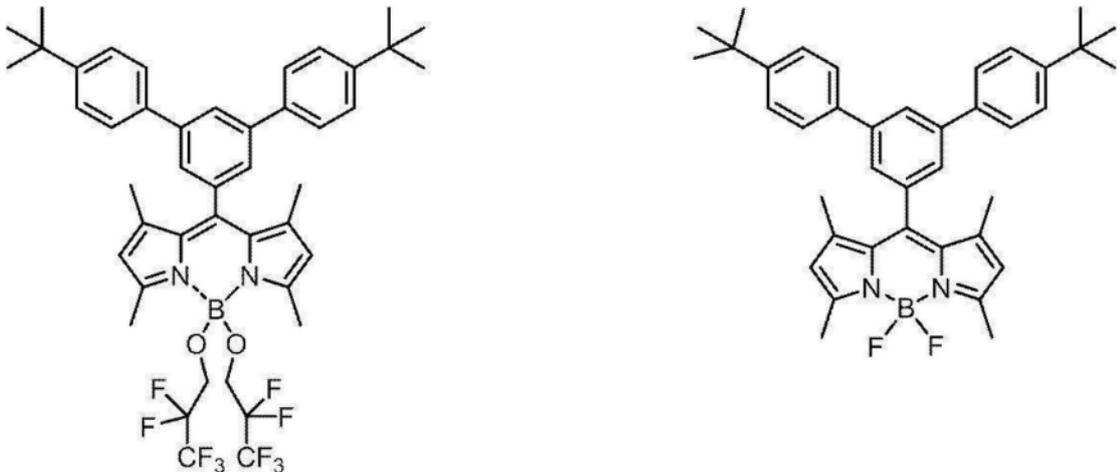


[0687] [化105]



[0688]

[0689] [化106]



[0690]

[0691] <发光层中的第一化合物以及第二化合物的关系>

[0692] 在本实施方式的有机EL元件1中,优选为第一化合物的单重态能量 $S_1(\text{Mat}1)$ 与第二化合物的单重态能量 $S_1(\text{Mat}2)$ 满足下述数学式(数1)的关系。

[0693] $S_1(\text{Mat}1) > S_1(\text{Mat}2) \cdots$ (数1)

[0694] 优选为第一化合物的77[K]时的能隙 $T_{77\text{K}}(\text{Mat}1)$ 大于第二化合物的77[K]时的能隙 $T_{77\text{K}}(\text{Mat}2)$ 。即,优选为满足下述数学式(数4)的关系。

[0695] $T_{77\text{K}}(\text{Mat}1) > T_{77\text{K}}(\text{Mat}2) \cdots$ (数4)

[0696] 优选为使本实施方式的有机EL元件1发光时,在发光层5中,主要是第二化合物进行发光。

[0697] • 三重态能量与77[K]时的能隙的关系

[0698] 在此,对三重态能量与77[K]时的能隙的关系进行说明。在本实施方式中,77[K]时的能隙与通常所定义的重态能量存在不同点。

[0699] 如下所述地进行三重态能量的测量。首先,将作为测量对象的化合物溶解于适当的溶剂中,将得到的溶液封入石英玻璃管内从而制备试样。对于该试样,在低温(77[K])下测量磷光光谱(设有纵轴:磷光发光强度,横轴:波长),对该磷光光谱的短波长侧的上升沿作切线,基于该切线与横轴的交点的波长值,根据规定的换算式计算出三重态能量。

[0700] 在此,本实施方式的化合物内,热活化延迟荧光性的化合物优选为 ΔST 较小的化

合物。如果 ΔST 较小,则即使在低温(77[K])状态下,也容易发生系间窜越以及逆系间窜越,激发单重态状态与激发三重态状态共存。其结果为,可以认为,与上述同样地测量的光谱包含来自激发单重态状态以及激发三重态状态这两者的发光,虽然难以区分来自哪种状态发光,但基本上三重态能量的值是支配性的。

[0701] 因此,在本实施方式中,测量方法与通常的三重态能量 T 相同,但为了在其严格意义上区分不同,将如下这样测量的值称为能隙 T_{77K} 。将作为测量对象的化合物以浓度达到 $10\mu\text{mol/L}$ 的方式溶解于EPA(二乙醚:异戊烷:乙醇=5:5:2(容积比))中,将该溶液放入石英池中作为测量试样。对于该测量试样,在低温(77[K])下测量磷光光谱(设有纵轴:磷光发光强度,横轴:波长),对该磷光光谱的短波长侧的上升沿作切线,基于该切线与横轴的交点的波长值 $\lambda_{\text{edge}}[\text{nm}]$,将根据以下的换算式(F1)计算出的能量作为77[K]时的能隙 T_{77K} 。

[0702] 换算式(F1): $T_{77K}[\text{eV}] = 1239.85/\lambda_{\text{edge}}$

[0703] 针对磷光光谱的短波长侧的上升沿的切线如下所示地画出。考虑该切线是从磷光光谱的短波长侧到光谱的极大值中最短波长侧的极大值在光谱曲线上移动时,朝向长波长侧曲线上的各点处的切线。该切线随着曲线的上升(即随着纵轴值的增大)而斜率增加。将在该斜率的值取极大值的点处画出的切线(即拐点处的切线)作为针对该磷光光谱的短波长侧的上升沿的切线。

[0704] 另外,具有光谱的最大峰强度的15%以下的峰强度的极大点不包含在上述的最短波长侧的极大值中,将在最接近于最短波长侧的极大值且斜率的值取极大值的点处画出的切线作为针对该磷光光谱的短波长侧的上升沿的切线。

[0705] 磷光的测量能够使用日立高新技术株式会社制的F-4500型分光荧光光度计主体。另外,测量装置并不限于此,可以通过组合冷却装置以及低温用容器、激发光源、受光装置来进行测量。

[0706] • 单重态能量 S_1

[0707] 作为使用溶液的单重态能量 S_1 的测量方法(有时称为溶液法),可例举下述的方法。

[0708] 制备作为测量对象的化合物的 $10\mu\text{mol/L}$ 甲苯溶液并放入石英池,在常温(300K)下测量该试样的吸收光谱(设有纵轴:吸收强度,横轴:波长)。针对该吸收光谱的长波长侧的下降沿作切线,将该切线与横轴的交点的波长值 $\lambda_{\text{edge}}[\text{nm}]$ 代入以下所示的换算式(F2)计算出单重态能量。

[0709] 换算式(F2): $S_1[\text{eV}] = 1239.85/\lambda_{\text{edge}}$

[0710] 作为吸收光谱测量装置,例如可例举日立公司制的分光光度计(装置名:U3310),但并不限于此。

[0711] 针对吸收光谱的长波长侧的下降沿的切线如下所示地画出。考虑该切线是从吸收光谱的极大值中最长波长侧的极大值起沿长波长方向在光谱曲线上移动时,曲线上的各点处的切线。该切线随着曲线的下降(即随着纵轴值的减小),重复地出现斜率减小而后增加的情况。将斜率的值在最长波长侧(其中,不包括吸光度达到0.1以下的情况)取极小值的点处画出的切线作为针对该吸收光谱的长波长侧的下降沿的切线。

[0712] 另外,吸光度的值为0.2以下的极大点不包含在上述最长波长侧的极大值中。

[0713] 在本实施方式中,将单重态能量 S_1 与77[K]时的能隙 T_{77K} 之差($S_1 - T_{77K}$)定义为 ΔST 。

[0714] 在本实施方式中,所述第一化合物的单重态能量 $S_1(\text{Mat}1)$ 与所述第一化合物的77[K]时的能隙 $T_{77\text{K}}(\text{Mat}1)$ 之差 $\Delta\text{ST}(\text{Mat}1)$ 优选为小于0.3eV,更优选为小于0.2eV,进一步优选为小于0.1eV。即, $\Delta\text{ST}(\text{Mat}1)$ 优选为满足下述数学式(数1A)~(数1C)中的任一关系。

[0715] $\Delta\text{ST}(\text{Mat}1) = S_1(\text{Mat}1) - T_{77\text{K}}(\text{Mat}1) < 0.3\text{eV}$ (数1A)

[0716] $\Delta\text{ST}(\text{Mat}1) = S_1(\text{Mat}1) - T_{77\text{K}}(\text{Mat}1) < 0.2\text{eV}$ (数1B)

[0717] $\Delta\text{ST}(\text{Mat}1) = S_1(\text{Mat}1) - T_{77\text{K}}(\text{Mat}1) < 0.1\text{eV}$ (数1C)

[0718] 优选本实施方式的有机EL元件1发红色光或者发绿色光。

[0719] 在本实施方式的有机EL元件1发绿色光的情况下,从有机EL元件1发出的光的最大峰波长优选为500nm以上560nm以下。

[0720] 在本实施方式的有机EL元件1发红色光的情况下,从有机EL元件1发出的光的最大峰波长优选为600nm以上660nm以下。

[0721] 在本实施方式的有机EL元件1发蓝色光的情况下,从有机EL元件1发出的光的最大峰波长优选为430nm以上480nm以下。

[0722] 如下所述地进行从有机EL元件发出的光的最大峰波长的测量。

[0723] 用分光发射亮度计CS-2000(柯尼卡美能达公司制)测量对有机EL元件施加电压以使电流密度达到 $10\text{mA}/\text{cm}^2$ 时的分光发射亮度光谱。

[0724] 在得到的分光发射亮度光谱中,测量发光强度达到最大的发光光谱的峰波长,并将其作为最大峰波长(单位:nm)。

[0725] • 发光层的膜厚

[0726] 本实施方式的有机EL元件1中的发光层5的膜厚优选为5nm以上50nm以下,更优选为7nm以上50nm以下,最优选为10nm以上50nm以下。若为5nm以上,则发光层形成以及色度的调整变得容易,若为50nm以下,则容易抑制驱动电压的上升。

[0727] • 发光层中的化合物的含有率

[0728] 发光层5中所含的第一化合物以及第二化合物的含有率优选为在例如以下的范围内。

[0729] 第一化合物的含有率优选为10质量%以上80质量%以下,更优选为10质量%以上60质量%以下,进一步优选为20质量%以上60质量%以下。

[0730] 第二化合物的含有率优选为0.01质量%以上10质量%以下,更优选为0.01质量%以上5质量%以下,进一步优选为0.01质量%以上1质量%以下。

[0731] 另外,本实施方式不排除发光层5中包含除第一化合物以及第二化合物以外的材料。

[0732] 发光层5可以仅包含1种第一化合物,也可以包含2种以上第一化合物。发光层5可以仅包含1种第二化合物,也可以包含2种以上第二化合物。

[0733] • TADF机制(mechanism)

[0734] 图4是示出发光层中的第一化合物以及第二化合物的能级的关系的一例的图。图4中, S_0 表示基态。 $S_1(\text{Mat}1)$ 表示第一化合物的最低激发单重态状态。 $T_1(\text{Mat}1)$ 表示第一化合物的最低激发三重态状态。 $S_1(\text{Mat}2)$ 表示第二化合物的最低激发单重态状态。 $T_1(\text{Mat}2)$ 表示第二化合物的最低激发三重态状态。

[0735] 图4中的自 $S_1(\text{Mat}1)$ 向 $S_1(\text{Mat}2)$ 的虚线的箭头表示从第一化合物的最低激发单重

态状态向第二化合物的福斯特 (Forster) 型能量转移。

[0736] 如图4所示,如果使用 ΔST (Mat1) 较小的化合物作为第一化合物,则最低激发三重态状态T1 (Mat1) 可通过热能向最低激发单重态状态S1 (Mat1) 逆系间窜越。并且,发生从第一化合物的最低激发单重态状态S1 (Mat1) 向第二化合物的福斯特型能量转移,生成最低激发单重态状态S1 (Mat2)。其结果为,能够观测到来自第二化合物的最低激发单重态状态S1 (Mat2) 的荧光发光。认为通过利用基于该TADF机制的延迟荧光,理论上也能够将内部效率提高至100%。

[0737] 第三实施方式的有机EL元件1在发光层5中包含作为第一化合物的第一实施方式的化合物(以通式(11)~(13)中的任一个表示的化合物中的至少任一种)与具有比第一化合物小的单重态能量的第二化合物。

[0738] 由于第三实施方式的有机EL元件包含能够提供高性能的有机EL元件的化合物(第一实施方式的化合物),特别地,包含PLQY较高的第一实施方式的化合物,因此根据第三实施方式,能够提供高性能的有机EL元件。

[0739] 第三实施方式的有机EL元件1能够用于显示装置以及发光装置等电子设备。

[0740] 进一步对有机EL元件1的构成进行说明。以下,有时省略附图标记的记载。

[0741] (基板)

[0742] 基板被用作有机EL元件的支承体。作为基板,能够使用例如玻璃、石英以及塑料等。此外,还可以使用挠性基板。挠性基板是指能够弯折的(柔性)基板,例如可例举塑料基板等。作为形成塑料基板材料,例如可例举聚碳酸酯、聚芳酯、聚醚砜、聚丙烯、聚酯、聚氟乙烯、聚氯乙烯、聚酰亚胺以及聚萘二甲酸乙二醇酯等。此外,还能够使用无机蒸镀膜。

[0743] (阳极)

[0744] 形成于基板上的阳极优选为使用功函数较大(具体为4.0eV以上)的金属、合金、导电性化合物以及它们的混合物等。具体而言,例如可例举氧化铟-氧化锡(ITO:Indium Tin Oxide)、含硅或氧化硅的氧化铟-氧化锡、氧化铟-氧化锌、含氧化钨以及氧化锌的氧化铟、石墨烯等。除此以外,还可例举金(Au)、铂(Pt)、镍(Ni)、钨(W)、铬(Cr)、钼(Mo)、铁(Fe)、钴(Co)、铜(Cu)、钯(Pd)、钛(Ti)或金属材料的氮化物(例如氮化钛)等。

[0745] 这些材料通常通过溅射法成膜。例如,对于氧化铟-氧化锌,能够通过使用相对于氧化铟加入1质量%以上10质量%以下的氧化锌的靶,利用溅射法形成。此外,例如,对于含氧化钨以及氧化锌的氧化铟,能够通过使用相对于氧化铟含有0.5质量%以上5质量%以下的氧化钨、0.1质量%以上1质量%以下的氧化锌的靶,利用溅射法形成。除此以外,还可以通过真空蒸镀法、涂布法、喷墨法、旋涂法等进行制作。

[0746] 形成于阳极上的EL层中,与阳极相接而形成的空穴注入层使用与阳极的功函数无关而容易注入空穴(空洞)的复合材料形成,因此,能够使用可作为电极材料材料(例如,金属、合金、导电性化合物以及它们的混合物,此外也包括属于元素周期表的第1族或第2族的元素)。

[0747] 还能够使用作为功函数较小的材料的、属于元素周期表的第1族或第2族的元素即锂(Li)以及铯(Cs)等碱金属、镁(Mg)、钙(Ca)以及锶(Sr)等碱土类金属和包含它们的合金(例如MgAg、AlLi)、铕(Eu)以及镱(Yb)等稀土类金属和包含它们的合金等。另外,在使用碱金属、碱土类金属以及包含它们的合金形成阳极的情况下,能够使用真空蒸镀法或溅射法。

进而,在使用银浆等的情况下,能够使用涂布法或喷墨法等。

[0748] (阴极)

[0749] 阴极优选为使用功函数较小(具体为3.8eV以下)的金属、合金、导电性化合物以及它们的混合物等。作为这样的阴极材料的具体例,可例举属于元素周期表的第1族或第2族的元素即锂(Li)以及铯(Cs)等碱金属、镁(Mg)、钙(Ca)以及锶(Sr)等碱土类金属和包含它们的合金(例如MgAg、AlLi)、铕(Eu)以及镱(Yb)等稀土类金属和包含它们的合金等。

[0750] 另外,在使用碱金属、碱土类金属、包含它们的合金形成阴极的情况下,能够使用真空蒸镀法或溅射法。此外,在使用银浆等的情况下,能够使用涂布法或喷墨法等。

[0751] 另外,通过设置电子注入层,能够与功函数的大小无关地使用Al、Ag、ITO、石墨烯、含硅或氧化硅的氧化铟-氧化锡等各种导电性材料形成阴极。这些导电性材料能够使用溅射法或喷墨法、旋涂法等进行成膜。

[0752] (空穴注入层)

[0753] 空穴注入层是包含空穴注入性高的物质的层。作为空穴注入性高的物质,能够使用钼氧化物、钛氧化物、钒氧化物、铼氧化物、钨氧化物、铬氧化物、锆氧化物、铪氧化物、钽氧化物、银氧化物、钨氧化物、锰氧化物等。

[0754] 此外,作为空穴注入性高的物质,还可例举作为低分子的有机化合物的4,4',4''-三(N,N-二苯基氨基)三苯胺(简称:TDATA)、4,4',4''-三[N-(3-甲基苯基)-N-苯基氨基]三苯胺(简称:MTDATA)、4,4'-双[N-(4-二苯基氨基苯基)-N-苯基氨基]联苯(简称:DPAB)、4,4'-双[N-{4-[N'-(3-甲基苯基)-N'-苯基氨基]苯基}-N-苯基氨基]联苯(简称:DNTPD)、1,3,5-三[N-(4-二苯基氨基苯基)-N-苯基氨基]苯(简称:DPA3B)、3-[N-(9-苯基咪唑-3-基)-N-苯基氨基]-9-苯基咪唑(简称:PCzPCA1)、3,6-双[N-(9-苯基咪唑-3-基)-N-苯基氨基]-9-苯基咪唑(简称:PCzPCA2)、3-[N-(1-萘基)-N-(9-苯基咪唑-3-基)氨基]-9-苯基咪唑(简称:PCzPCN1)等芳香族胺化合物等和二吡嗪并[2,3-f:20,30-h]喹啉啉-2,3,6,7,10,11-六甲腈(HAT-CN)。

[0755] 此外,作为空穴注入性高的物质,还能够使用高分子化合物(低聚物、树枝聚合物、聚合物等)。例如,可例举聚(N-乙烯基咪唑)(简称:PVK)、聚(4-乙烯基三苯胺)(简称:PVTTPA)、聚[N-(4-{N'-[4-(4-二苯基氨基)苯基]苯基-N'-苯基氨基}苯基)甲基丙烯酰胺](简称:PTPDMA)、聚[N,N'-双(4-丁基苯基)-N,N'-双(苯基)联苯胺](简称:Poly-TPD)等高分子化合物。此外,还能够使用聚(3,4-亚乙二氧基噻吩)/聚(苯乙烯磺酸)(PEDOT/PSS)、聚苯胺/聚(苯乙烯磺酸)(PAni/PSS)等添加酸的高分子化合物。

[0756] (空穴传输层)

[0757] 空穴传输层是包含空穴传输性高的物质的层。空穴传输层能够使用芳香族胺化合物、咪唑衍生物、噻衍生物等。具体而言,能够使用4,4'-双[N-(1-萘基)-N-苯基氨基]联苯(简称:NPB)或N,N'-双(3-甲基苯基)-N,N'-二苯基-[1,1'-联苯]-4,4'-二胺(简称:TPD)、4-苯基-4'-(9-苯基芴-9-基)三苯胺(简称:BAFLP)、4,4'-双[N-(9,9-二甲基芴-2-基)-N-苯基氨基]联苯(简称:DFLDPBi)、4,4',4''-三(N,N-二苯基氨基)三苯胺(简称:TDATA)、4,4',4''-三[N-(3-甲基苯基)-N-苯基氨基]三苯胺(简称:MTDATA)、4,4'-双[N-(螺-9,9'-二芴-2-基)-N-苯基氨基]联苯(简称:BSPB)等芳香族胺化合物等。此处所说的物质主要是具有 $10^{-6}\text{cm}^2/(\text{V}\cdot\text{s})$ 以上的空穴迁移率的物质。

[0758] 空穴传输层可以使用CBP、9-[4-(N-咔唑基)]苯基-10-苯基蒽(CzPA)、9-苯基-3-[4-(10-苯基-9-蒽基)苯基]-9H-咔唑(PCzPA)这样的咔唑衍生物、或t-BuDNA、DNA、DPAnth这样的蒽衍生物。还能够使用聚(N-乙炔基咔唑)(简称:PVK)或聚(4-乙炔基三苯胺)(简称:PVTPA)等高分子化合物。

[0759] 但是,只要是与电子相比空穴的传输性高的物质,也可以使用除此以外的物质。另外,包含空穴传输性高的物质的层不仅可以为单层,还可以是由上述物质形成的层层叠二层以上而得的层。

[0760] 在配置二层以上的空穴传输层的情况下,优选为在靠近发光层的一侧配置能隙更大的材料。作为这样的材料,可例举在后述的实施例中使用的HT-2。

[0761] (电子传输层)

[0762] 电子传输层是包含电子传输性高的物质的层。电子传输层能够使用1)铝络合物、铍络合物、锌络合物等金属络合物,2)咪唑衍生物、苯并咪唑衍生物、吡嗪衍生物、咪唑衍生物、菲咯啉衍生物等杂芳香族化合物,3)高分子化合物。具体而言,作为低分子的有机化合物,能够使用Alq₃、三(4-甲基-8-羟基喹啉)铝(简称:Almq₃)、双(10-羟基苯并[h]喹啉)铍(简称:BeBq₂)、BA1q、Znq、ZnPBO、ZnBTZ等金属络合物等。此外,除金属络合物以外,还能够使用2-(4-联苯基)-5-(4-叔丁基苯基)-1,3,4-噁二唑(简称:PBD)、1,3-双[5-(对叔丁基苯基)-1,3,4-噁二唑-2-基]苯(简称:OXD-7)、3-(4-叔丁基苯基)-4-苯基-5-(4-联苯基)-1,2,4-三唑(简称:TAZ)、3-(4-叔丁基苯基)-4-(4-乙基苯基)-5-(4-联苯基)-1,2,4-三唑(简称:p-EtTAZ)、红菲咯啉(简称:BPhen)、浴铜灵(简称:BCP)、4,4'-双(5-甲基苯并噁唑-2-基)芪(简称:BzOs)等杂芳香族化合物。本实施方案中,能够优选地使用苯并咪唑化合物。此处所说的物质主要是具有 $10^{-6}\text{cm}^2/(\text{V}\cdot\text{s})$ 以上的电子迁移率的物质。另外,只要是电子传输性比空穴传输性更高的物质,则也可以使用上述以外的物质作为电子传输层。此外,电子传输层可以由单层构成,也可以由上述物质形成的层层叠二层以上而构成。

[0763] 此外,电子传输层还能够使用高分子化合物。例如,能够使用聚[(9,9-二己基芴-2,7-二基)-共-(吡啶-3,5-二基)](简称:PF-Py)、聚[(9,9-二辛基芴-2,7-二基)-共-(2,2'-联吡啶-6,6'-二基)](简称:PF-BPy)等。

[0764] (电子注入层)

[0765] 电子注入层是包含电子注入性高的物质的层。在电子注入层能够使用锂(Li)、铯(Cs)、钙(Ca)、氟化锂(LiF)、氟化铯(CsF)、氟化钙(CaF₂)、锂氧化物(LiO_x)等这样的碱金属、碱土类金属或它们的化合物。除此以外,还可以使用使具有电子传输性的物质含有碱金属、碱土类金属或它们的化合物而得的物质,具体为使Alq中含有镁(Mg)而得的物质等。另外,在该情况下,能够更高效地从阴极进行电子注入。

[0766] 或者,在电子注入层还可以使用将有机化合物与供电子体(供体)混合而成的复合材料。这样的复合材料通过供电子体而在有机化合物中产生电子,因此电子注入性以及电子传输性优异。在该情况下,作为有机化合物,优选为产生的电子的传输优异的材料,具体能够使用例如构成上述的电子传输层的物质(金属络合物或杂芳香族化合物等)。作为供电子体,只要是对于有机化合物示出供电子性的物质即可。具体而言,优选为碱金属、碱土类金属或稀土类金属,可例举锂、铯、镁、钙、钪、镱等。此外,优选为碱金属氧化物或碱土类金属氧化物,可例举锂氧化物、钙氧化物、钡氧化物等。此外,还能够使用氧化镁这样的路易斯

碱。此外,还能够使用四硫富瓦烯(简称:TTF)等有机化合物。

[0767] (层形成方法)

[0768] 作为本实施方式的有机EL元件的各层的形成方法,除了上述中特别提到的以外并无限制,能够采用真空蒸镀法、溅射法、等离子体法、离子镀法等干式成膜法或旋涂法、浸渍法、流涂法、喷墨法等湿式成膜法等公知的方法。

[0769] (膜厚)

[0770] 本实施方式的有机EL元件的各有机层的膜厚除了上述中特别提到的以外并无限制,但通常若膜厚过薄,则容易产生针孔等缺陷,相反若过厚,则需要较高的施加电压而效率变差,因此通常优选为数nm~1 μ m的范围。

[0771] (第四实施方式)

[0772] 对第四实施方式的有机EL元件的构成进行说明。对第四实施方式的说明中与第三实施方式相同的构成要素标注相同的附图标记和名称等并省略或简化说明。此外,第四实施方式中,对于未特别提到的材料和化合物,能够使用与第三实施方式中说明的材料和化合物同样的材料和化合物。

[0773] 第四实施方式的有机EL元件在发光层还包含第三化合物这一点上与第三实施方式的有机EL元件不同。对于其他方面,与第三实施方式相同。

[0774] 即,在第四实施方式中,作为第一有机层的发光层,包含第一化合物、第二化合物与第三化合物。

[0775] 在该方案的情况下,第一化合物优选为主体材料,第二化合物优选为掺杂剂材料,第三化合物优选为主体材料。有时也将第一化合物以及第三化合物中的一个称为第一主体材料,另一个称为第二主体材料。

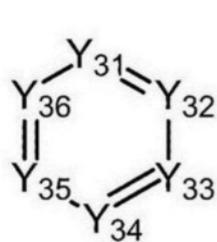
[0776] <第三化合物>

[0777] 第三化合物可以是延迟荧光性的化合物,也可以是不呈延迟荧光性的化合物。

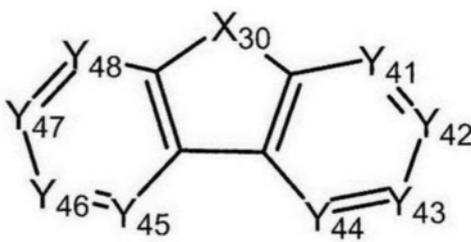
[0778] 作为第三化合物,虽然没有特别限定,但优选为胺化合物以外的化合物。此外,例如作为第三化合物,能够使用咪唑衍生物、二苯并呋喃衍生物、二苯并噻吩衍生物,但并不限定于这些衍生物。

[0779] 第三化合物也优选为在一个分子中包含以下述通式(31)表示的局部结构、以下述通式(32)表示的局部结构、以下述通式(33)表示的局部结构以及以下述通式(34)表示的局部结构中的至少任一种的化合物。

[0780] [化107]

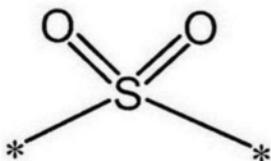


(31)

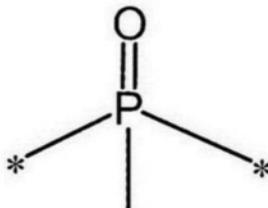


(32)

[0781]



(33)



(34)

[0782] 在所述通式(31)中,

[0783] $Y_{31} \sim Y_{36}$ 分别独立地为氮原子或与第三化合物的分子中的其他原子键合的碳原子,[0784] 其中, $Y_{31} \sim Y_{36}$ 中的至少任一个为与第三化合物的分子中的其他原子键合的碳原子,

[0785] 在所述通式(32)中,

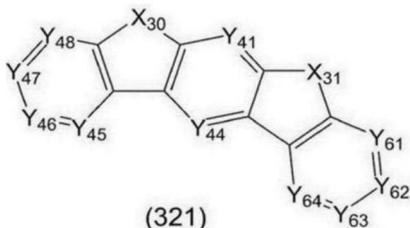
[0786] $Y_{41} \sim Y_{48}$ 分别独立地为氮原子或与第三化合物的分子中的其他原子键合的碳原子,[0787] 其中, $Y_{41} \sim Y_{48}$ 中的至少任一个为与第三化合物的分子中的其他原子键合的碳原子,[0788] X_{30} 为与第三化合物的分子中的其他原子键合的氮原子、或氧原子、或硫原子。

[0789] 所述通式(33)~(34)中,*分别独立地表示与第三化合物的分子中的其他原子或其他结构键合的部位。

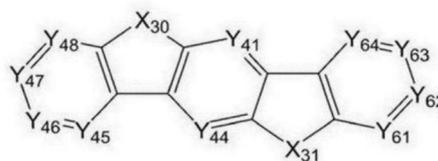
[0790] 在所述通式(32)中,也优选为 $Y_{41} \sim Y_{48}$ 中的至少2个为与第三化合物的分子中的其他原子键合的碳原子,构筑有包含该碳原子的环结构。

[0791] 例如,优选为以所述通式(32)表示的局部结构为从以下述通式(321)、通式(322)、通式(323)、通式(324)、通式(325)以及通式(326)表示的局部结构构成的组中选择的任一种局部结构。

[0792] [化108]



(321)

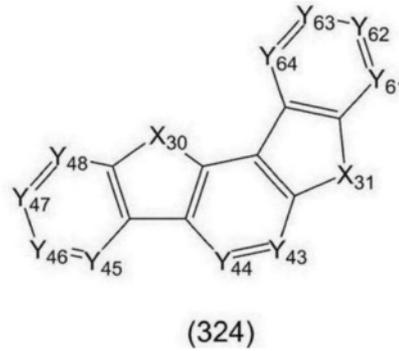
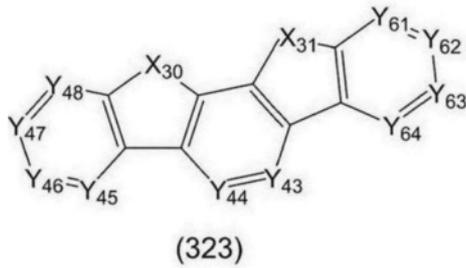


(322)

[0793]

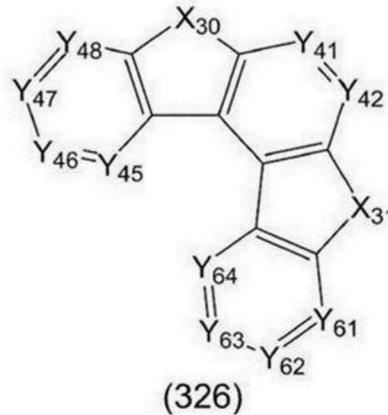
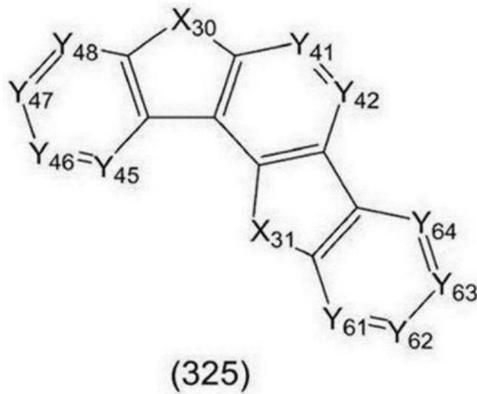
[0794] [化109]

[0795]



[0796] [化110]

[0797]



[0798] 在所述通式 (321) ~ (326) 中,

[0799] X₃₀ 分别独立地为与第三化合物的分子中的其他原子键合的氮原子、或氧原子、或硫原子,[0800] Y₄₁ ~ Y₄₈ 分别独立地为氮原子或与第三化合物的分子中的其他原子键合的碳原子,[0801] X₃₁ 分别独立地为与第三化合物的分子中的其他原子键合的氮原子、氧原子、硫原子、或与第三化合物的分子中的其他原子键合的碳原子,[0802] Y₆₁ ~ Y₆₄ 分别独立地为氮原子或与第三化合物的分子中的其他原子键合的碳原子。

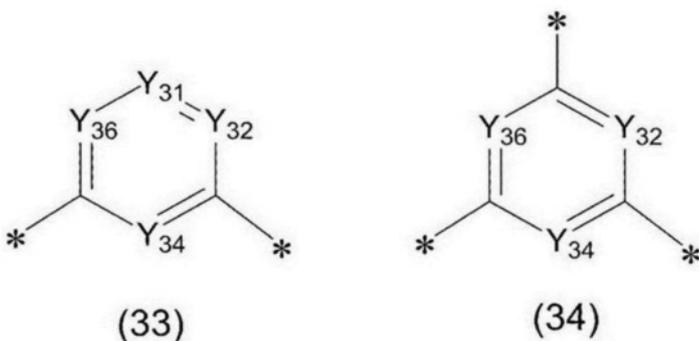
[0803] 在本实施方式中,第三化合物优选为具有以所述通式 (321) ~ (326) 中的所述通式 (323) 表示的局部结构。

[0804] 以所述通式 (31) 表示的局部结构优选作为从以下述通式 (33) 表示的基团以及以下述通式 (34) 表示的基团构成的组中选择的至少任一种基团而包含于第三化合物。

[0805] 第三化合物也优选为具有以下述通式 (33) 以及下述通式 (34) 表示的局部结构中的至少任一种局部结构。如下述通式 (33) 以及下述通式 (34) 表示的局部结构所示,键合部位互相位于间位,因此能够使第三化合物的77[K]时的能隙T_{77K}(Mat3) 保持得较高。

[0806] [化111]

[0807]



[0808] 在所述通式 (33) 中, Y_{31} 、 Y_{32} 、 Y_{34} 以及 Y_{36} 分别独立地为氮原子或 CR_{31} 。

[0809] 在所述通式 (34) 中, Y_{32} 、 Y_{34} 以及 Y_{36} 分别独立地为氮原子或 CR_{31} 。

[0810] 在所述通式 (33) 以及 (34) 中,

[0811] R_{31} 分别独立地为氢原子或取代基,

[0812] 作为取代基的 R_{31} 分别独立地从

[0813] 取代或未取代的成环碳数为 6~30 的芳基、

[0814] 取代或未取代的成环原子数为 5~30 的杂芳基、

[0815] 取代或未取代的碳数为 1~30 的烷基、

[0816] 取代或未取代的碳数为 1~30 的氟烷基、

[0817] 取代或未取代的成环碳数为 3~30 的环烷基、

[0818] 取代或未取代的碳数为 7~30 的芳烷基、

[0819] 取代或未取代的甲硅烷基、

[0820] 取代锆基、

[0821] 取代氧化膦基、

[0822] 卤素原子、

[0823] 氰基、

[0824] 硝基、以及

[0825] 取代或未取代的羧基构成的组中选择。

[0826] 其中, 所述 R_{31} 中的取代或未取代的成环碳数为 6~30 的芳基优选为非稠环。

[0827] 所述通式 (33) 以及所述通式 (34) 中, * 分别独立地表示与第三化合物的分子中的其他原子或其他结构键合的部位。

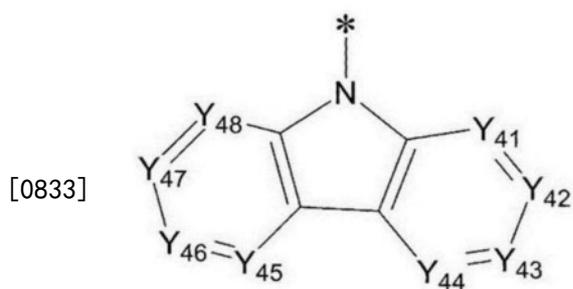
[0828] 在所述通式 (33) 中, 优选 Y_{31} 、 Y_{32} 、 Y_{34} 以及 Y_{36} 分别独立地为 CR_{31} , 多个 R_{31} 彼此相同或不同。

[0829] 此外, 在所述通式 (34) 中, 优选 Y_{32} 、 Y_{34} 以及 Y_{36} 分别独立地为 CR_{31} , 多个 R_{31} 彼此相同或不同。

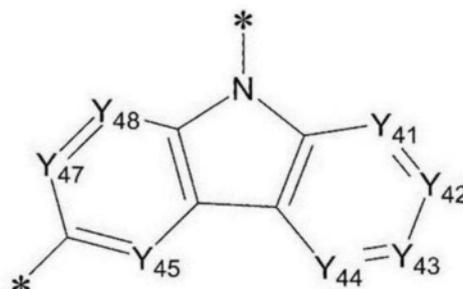
[0830] 取代锆基优选为以 $-Ge(R_{301})_3$ 表示。 R_{301} 分别独立地为取代基。取代基 R_{301} 优选为取代或未取代的碳数为 1~30 的烷基或者取代或未取代的成环碳数为 6~30 的芳基。多个 R_{301} 彼此相同或不同。

[0831] 以所述通式 (32) 表示的局部结构优选作为从以下述通式 (35)~(39) 以及下述通式 (30a) 表示的基团构成的组中选择的至少任一种基团而包含于第三化合物。

[0832] [化112]

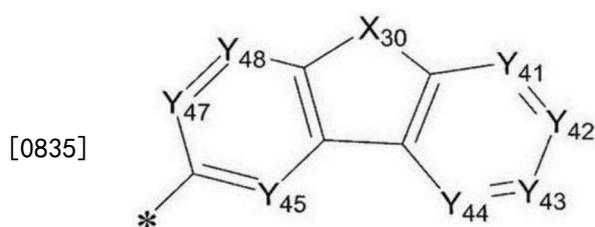


(35)

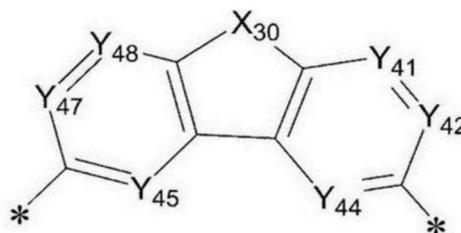


(36)

[0834] [化113]

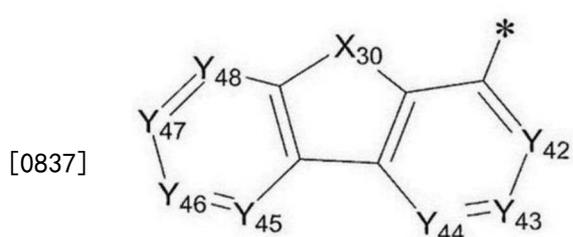


(37)

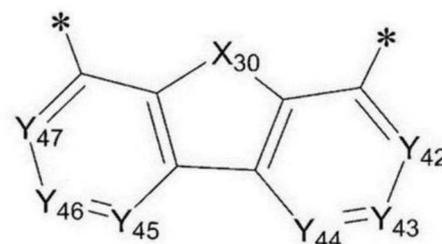


(38)

[0836] [化114]



(39)



(30a)

[0838] 在所述通式 (35) 中, $Y_{41} \sim Y_{48}$ 分别独立地为氮原子或 CR_{32} 。[0839] 在所述通式 (36) 以及 (37) 中, $Y_{41} \sim Y_{45}$ 、 Y_{47} 以及 Y_{48} 分别独立地为氮原子或 CR_{32} 。[0840] 在所述通式 (38) 中, Y_{41} 、 Y_{42} 、 Y_{44} 、 Y_{45} 、 Y_{47} 以及 Y_{48} 分别独立地为氮原子或 CR_{32} 。[0841] 在所述通式 (39) 中, $Y_{42} \sim Y_{48}$ 分别独立地为氮原子或 CR_{32} 。[0842] 在所述通式 (30a) 中, $Y_{42} \sim Y_{47}$ 分别独立地为氮原子或 CR_{32} 。

[0843] 在所述通式 (35) ~ (39) 以及 (30a) 中,

[0844] R_{32} 分别独立地为氢原子或取代基,[0845] 作为取代基的 R_{32} 从

[0846] 取代或未取代的成环碳数为 6~30 的芳基、

[0847] 取代或未取代的成环原子数为 5~30 的杂芳基、

[0848] 取代或未取代的碳数为 1~30 的烷基、

[0849] 取代或未取代的碳数为 1~30 的氟烷基、

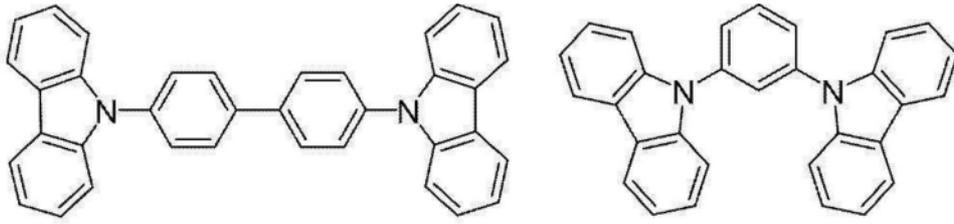
[0850] 取代或未取代的成环碳数为 3~30 的环烷基、

[0851] 取代或未取代的碳数为 7~30 的芳烷基、

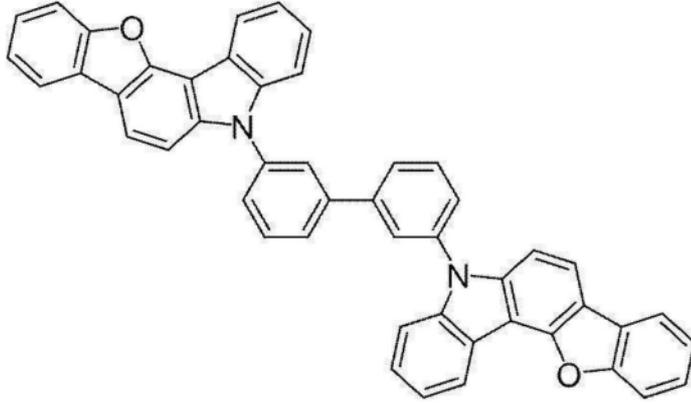
[0852] 取代或未取代的甲硅烷基、

- [0853] 取代锆基、
- [0854] 取代氧化膦基、
- [0855] 卤素原子、
- [0856] 氰基、
- [0857] 硝基、以及
- [0858] 取代或未取代的羧基构成的组中选择，
- [0859] 多个 R_{32} 彼此相同或不同。
- [0860] 在所述通式(37)~(39)以及(30a)中，
- [0861] X_{30} 为 NR_{33} 、氧原子或硫原子，
- [0862] R_{33} 从
- [0863] 取代或未取代的成环碳数为6~30的芳基、
- [0864] 取代或未取代的成环原子数为5~30的杂芳基、
- [0865] 取代或未取代的碳数为1~30的烷基、
- [0866] 取代或未取代的碳数为1~30的氟烷基、
- [0867] 取代或未取代的成环碳数为3~30的环烷基、
- [0868] 取代或未取代的碳数为7~30的芳烷基、
- [0869] 取代或未取代的甲硅烷基、
- [0870] 取代锆基、
- [0871] 取代氧化膦基、
- [0872] 氟原子、
- [0873] 氰基、
- [0874] 硝基、以及
- [0875] 取代或未取代的羧基构成的组中选择，
- [0876] 多个 R_{33} 彼此相同或不同。
- [0877] 其中，所述 R_{33} 中的取代或未取代的成环碳数为6~30的芳基优选为非稠环。
- [0878] 在所述通式(35)~(39)以及(30a)中，*分别独立地表示与第三化合物的分子中的其他原子或其他结构键合的部位。
- [0879] 在所述通式(35)中，优选 $Y_{41} \sim Y_{48}$ 分别独立地为 CR_{32} ，在所述通式(36)以及所述通式(37)中，优选 $Y_{41} \sim Y_{45}$ 、 Y_{47} 以及 Y_{48} 分别独立地为 CR_{32} ，在所述通式(38)中，优选 Y_{41} 、 Y_{42} 、 Y_{44} 、 Y_{45} 、 Y_{47} 以及 Y_{48} 分别独立地为 CR_{32} ，在所述通式(39)中，优选 $Y_{42} \sim Y_{48}$ 分别独立地为 CR_{32} ，在所述通式(30a)中，优选 $Y_{42} \sim Y_{47}$ 分别独立地为 CR_{32} ，多个 R_{32} 彼此相同或不同。
- [0880] 在第三化合物中， X_{30} 优选为氧原子或硫原子，更优选为氧原子。
- [0881] 在第三化合物中，优选 R_{31} 以及 R_{32} 分别独立地为氢原子或取代基，且作为取代基的 R_{31} 以及作为取代基的 R_{32} 分别独立地为从氟原子、氰基、取代或未取代的碳数为1~30的烷基、取代或未取代的成环碳数为6~30的芳基以及取代或未取代的成环原子数为5~30的杂芳基构成的组中选择的任一种基团。更优选 R_{31} 以及 R_{32} 为氢原子、氰基、取代或未取代的成环碳数为6~30的芳基或者取代或未取代的成环原子数为5~30的杂芳基。其中，在作为取代基的 R_{31} 以及作为取代基的 R_{32} 为取代或未取代的成环碳数为6~30的芳基的情况下，该芳基优选为非稠环。

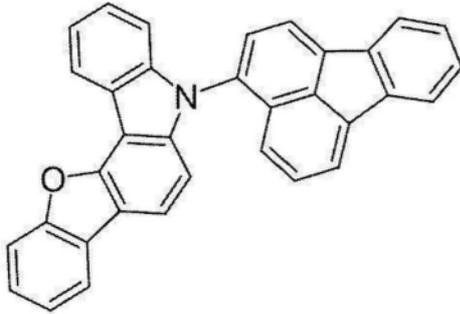
- [0882] 第三化合物也优选为芳香族烃化合物或芳香族杂环化合物。
- [0883] • 第三化合物的制造方法
- [0884] 第三化合物能够通过例如国际公开第2012/153780号以及国际公开第2013/038650号等中记载的方法进行制造。此外,例如能够通过使用与目标物匹配的已知的替代反应以及原料来制造第三化合物。
- [0885] 第三化合物中的取代基的例子例如如下所示,但本发明并不限于这些例子。
- [0886] 作为芳基(有时称为芳香族烃基)的具体例,可例举苯基、甲基苯基、二甲苯基、萘基、菲基、蒽基、蒾基、苯并[c]菲基、苯并[g]蒾基、苯并蒽基、三亚苯基、苈基、9,9-二甲基苈基、苯并苈基、二苯并苈基、联苯基、三联苯基、四联苯基、荧蒽基等,能够优选地例举苯基、联苯基、三联苯基、四联苯基、萘基、三亚苯基以及苈基等。
- [0887] 作为具有取代基的芳基,能够例举甲基苯基、二甲苯基以及9,9-二甲基苈基等。
- [0888] 如具体例所示,芳基包括稠合芳基以及非稠合芳基双方。
- [0889] 作为芳基,优选为苯基、联苯基、三联苯基、四联苯基、萘基、三亚苯基或苈基。
- [0890] 作为杂芳基(有时称为杂环基、杂芳香族环基或芳香族杂环基)的具体例,可例举吡咯基、吡唑基、吡嗪基、嘧啶基、哒嗪基、吡啶基、三嗪基、吡啶基、异吡啶基、咪唑基、苯并咪唑基、吡唑基、咪唑并[1,2-a]吡啶基、呋喃基、苯并呋喃基、异苯并呋喃基、二苯并呋喃基、氮杂二苯并呋喃基、噻吩基、苯并噻吩基、二苯并噻吩基、氮杂二苯并噻吩基、喹啉基、异喹啉基、喹啉基、喹唑啉基、萘啶基、咪唑基、氮杂咪唑基、菲啶基、吡啶基、菲咯啉基、吩嗪基、吩噻嗪基、吩噁嗪基、噁唑基、噁二唑基、呋咕基、苯并噁唑基、噻吩基、噻唑基、噻二唑基、苯并噻唑基、三唑基、四唑基等,能够优选地例举二苯并呋喃基、二苯并噻吩基、咪唑基、吡啶基、嘧啶基、三嗪基、氮杂二苯并呋喃基以及氮杂二苯并噻吩基等。
- [0891] 作为杂芳基,优选为二苯并呋喃基、二苯并噻吩基、咪唑基、吡啶基、嘧啶基、三嗪基、氮杂二苯并呋喃基或氮杂二苯并噻吩基,进一步优选为二苯并呋喃基、二苯并噻吩基、氮杂二苯并呋喃基或氮杂二苯并噻吩基。
- [0892] 在第三化合物中,取代甲硅烷基也优选为从取代或未取代的三烷基甲硅烷基、取代或未取代的芳基烷基甲硅烷基以及取代或未取代的三芳基甲硅烷基构成的组中选择。
- [0893] 作为取代或未取代的三烷基甲硅烷基的具体例,能够例举三甲基甲硅烷基以及三乙基甲硅烷基。
- [0894] 作为取代或未取代的芳基烷基甲硅烷基的具体例,能够例举二苯基甲基甲硅烷基、二甲苯基甲基甲硅烷基以及苯基二甲基甲硅烷基等。
- [0895] 作为取代或未取代的三芳基甲硅烷基的具体例,能够例举三苯基甲硅烷基以及三甲苯基甲硅烷基等。
- [0896] 在第三化合物中,取代氧化膦基也优选为取代或未取代的二芳基氧化膦基。
- [0897] 作为取代或未取代的二芳基氧化膦基的具体例,能够例举二苯基氧化膦基以及二甲苯基氧化膦基等。
- [0898] 在第三化合物中,作为取代羧基,例如可例举苯甲酰氧基等。
- [0899] 以下示出本实施方式的第三化合物的具体例。另外,本发明中的第三化合物并不限于这些具体例。
- [0900] [化115]



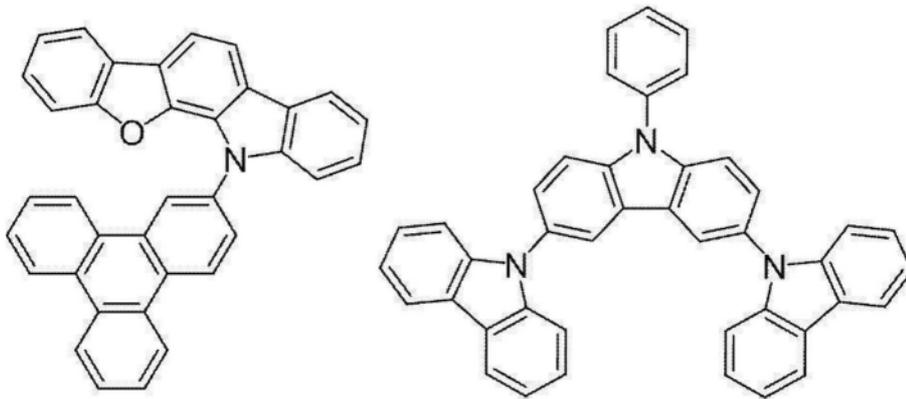
[0901]



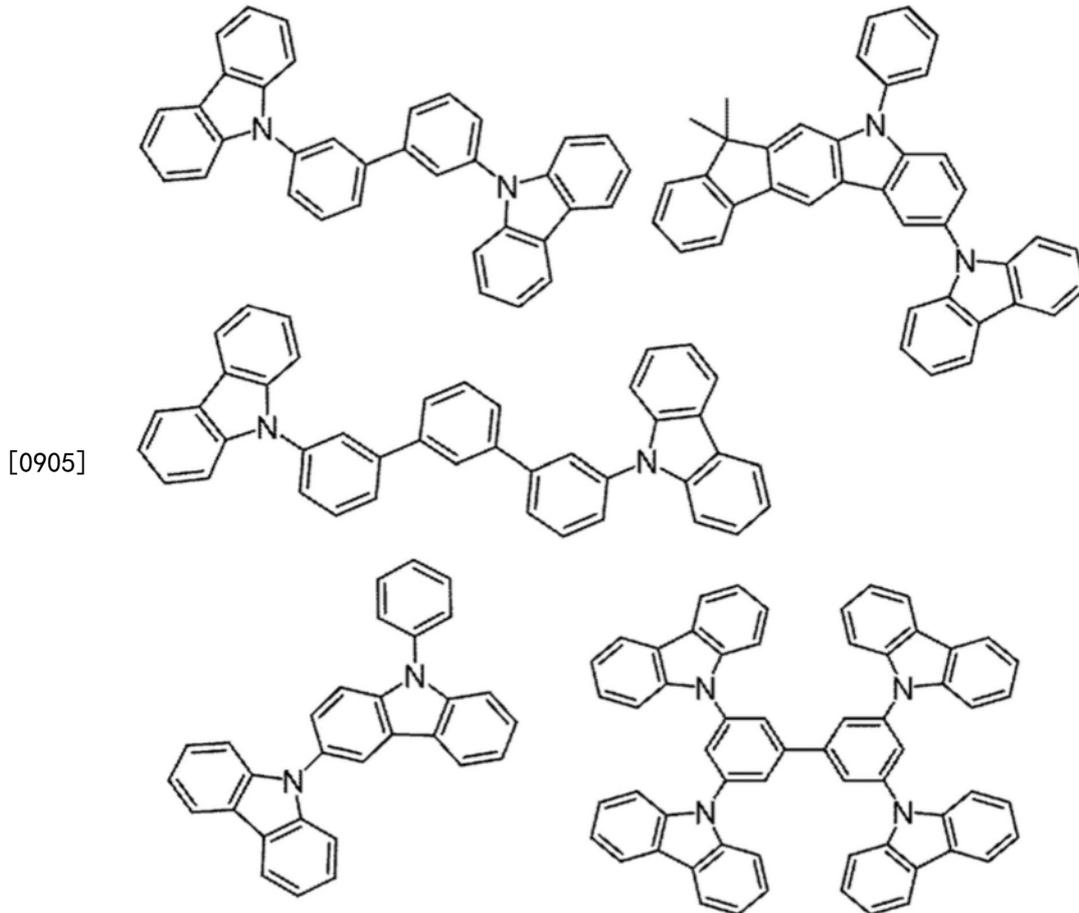
[0902] [化116]



[0903]



[0904] [化117]



[0906] <发光层中的第一化合物、第二化合物以及第三化合物的关系>

[0907] 在本实施方式的有机EL元件中,优选为第一化合物的单重态能量 $S_1(\text{Mat}1)$ 与第三化合物的单重态能量 $S_1(\text{Mat}3)$ 满足下述数学式(数2)的关系。

[0908] $S_1(\text{Mat}3) > S_1(\text{Mat}1)$ (数2)

[0909] 优选为第三化合物的77[K]时的能隙 $T_{77\text{K}}(\text{Mat}3)$ 大于第一化合物的77[K]时的能隙 $T_{77\text{K}}(\text{Mat}1)$ 。

[0910] 优选为第三化合物的77[K]时的能隙 $T_{77\text{K}}(\text{Mat}3)$ 大于第二化合物的77[K]时的能隙 $T_{77\text{K}}(\text{Mat}2)$ 。

[0911] 优选为第一化合物的单重态能量 $S_1(\text{Mat}1)$ 与第二化合物的单重态能量 $S_1(\text{Mat}2)$ 与第三化合物的单重态能量 $S_1(\text{Mat}3)$ 满足下述数学式(数2A)的关系。

[0912] $S_1(\text{Mat}3) > S_1(\text{Mat}1) > S_1(\text{Mat}2) \cdots$ (数2A)

[0913] 优选为第一化合物的77[K]时的能隙 $T_{77\text{K}}(\text{Mat}1)$ 与第二化合物的77[K]时的能隙 $T_{77\text{K}}(\text{Mat}2)$ 与第三化合物的77[K]时的能隙 $T_{77\text{K}}(\text{Mat}3)$ 满足下述数学式(数2B)的关系。

[0914] $T_{77\text{K}}(\text{Mat}3) > T_{77\text{K}}(\text{Mat}1) > T_{77\text{K}}(\text{Mat}2) \cdots$ (数2B)

[0915] 优选为使本实施方式的有机EL元件发光时,在发光层中,主要是荧光发光性的化合物进行发光。

[0916] 优选为本实施方式的有机EL元件与第三实施方式的有机EL元件同样地发红色光或发绿色光。

[0917] 从有机EL元件发出的光的最大峰波长能够通过第三实施方式的有机EL元件同

样的方法进行测量。

[0918] • 发光层中的化合物的含有率

[0919] 发光层中所含的第一化合物、第二化合物以及第三化合物的含有率优选为在例如以下的范围内。

[0920] 第一化合物的含有率优选为10质量%以上80质量%以下,更优选为10质量%以上60质量%以下,进一步优选为20质量%以上60质量%以下。

[0921] 第二化合物的含有率优选为0.01质量%以上10质量%以下,更优选为0.01质量%以上5质量%以下,进一步优选为0.01质量%以上1质量%以下。

[0922] 第三化合物的含有率优选为10质量%以上80质量%以下。

[0923] 发光层中的第一化合物、第二化合物以及第三化合物的合计含有率的上限为100质量%。另外,不排除本实施方式在发光层中包含除第一化合物、第二化合物以及第三化合物以外的材料。

[0924] 发光层可以仅包含1种第一化合物,也可以包含2种以上第一化合物。发光层可以仅包含1种第二化合物,也可以包含2种以上第二化合物。发光层可以仅包含1种第三化合物,也可以包含2种以上第三化合物。

[0925] 图5是示出发光层中的第一化合物、第二化合物以及第三化合物的能级的关系的一例的图。图5中,S0表示基态。S1 (Mat1) 表示第一化合物的最低激发单重态状态,T1 (Mat1) 表示第一化合物的最低激发三重态状态。S1 (Mat2) 表示第二化合物的最低激发单重态状态,T1 (Mat2) 表示第二化合物的最低激发三重态状态。S1 (Mat3) 表示第三化合物的最低激发单重态状态,T1 (Mat3) 表示第三化合物的最低激发三重态状态。图5中的从S1 (Mat1) 向S1 (Mat2) 的虚线的箭头表示自第一化合物的最低激发单重态状态向第二化合物的最低激发单重态状态的福斯特型能量转移。

[0926] 如图5所示,如果使用 ΔST (Mat1) 较小的化合物作为第一化合物,则最低激发三重态状态T1 (Mat1) 可通过热能向最低激发单重态状态S1 (Mat1) 逆系间窜越。并且,发生从第一化合物的最低激发单重态状态S1 (Mat1) 向第二化合物的福斯特型能量转移,生成最低激发单重态状态S1 (Mat2)。其结果为,能够观测到来自第二化合物的最低激发单重态状态S1 (Mat2) 的荧光发光。认为通过利用基于该TADF机制的延迟荧光,理论上也能够将内量子效率提高至100%。

[0927] 第四实施方式的有机EL元件在发光层中包含作为第一化合物的第一实施方式的化合物(以通式(11)~(13)中的任一个表示的化合物中的至少任一种)、具有比第一化合物小的单重态能量的第二化合物、与具有比第一化合物大的单重态能量的第三化合物。

[0928] 第四实施方式的有机EL元件包含能够提供高性能的有机EL元件的化合物(第一实施方式的化合物),特别地,包含PLQY较高的第一实施方式的化合物,因此根据第四实施方式,能够提供高性能的有机EL元件。

[0929] 第四实施方式的有机EL元件能够用于显示装置以及发光装置等电子设备。

[0930] (第五实施方式)

[0931] 对第五实施方式的有机EL元件的构成进行说明。对第五实施方式的说明中与第三实施方式以及第四实施方式同样的构成要素标注相同的附图标记和名称等并省略或简化说明。此外,第五实施方式中,对于未特别提到的材料和化合物,能够使用与第三实施方式

以及第四实施方式中说明的材料和化合物同样的材料和化合物。

[0932] 第五实施方式的有机EL元件在发光层包含第四化合物代替第二化合物这一点上与第三实施方式的有机EL元件不同。对于其他方面,与第三实施方式相同。

[0933] 在第五实施方式中,发光层包含第一化合物与第四化合物。

[0934] 在该方案的情况下,第一化合物优选为掺杂剂材料(有时也称为客体材料、发射体、发光材料),第四化合物优选为主体材料(有时也称为基质材料)。

[0935] 第四化合物可以是延迟荧光性的化合物,也可以是不呈延迟荧光性的化合物。

[0936] 作为第四化合物没有特别限定,例如能够使用第四实施方式的项中所记载的第三化合物。

[0937] <发光层中的第一化合物以及第四化合物的关系>

[0938] 在本实施方式的有机EL元件1中,优选为第一化合物的单重态能量 $S_1(\text{Mat}1)$ 与第四化合物的单重态能量 $S_1(\text{Mat}4)$ 满足下述数学式(数3)的关系。

[0939] $S_1(\text{Mat}4) > S_1(\text{Mat}1)$ (数3)

[0940] 优选为第四化合物的77[K]时的能隙 $T_{77\text{K}}(\text{Mat}4)$ 大于第一化合物的77[K]时的能隙 $T_{77\text{K}}(\text{Mat}1)$ 。即,优选为满足下述数学式(数5)的关系。

[0941] $T_{77\text{K}}(\text{Mat}4) > T_{77\text{K}}(\text{Mat}1) \cdots$ (数5)

[0942] 优选为使本实施方式的有机EL元件发光时,在发光层中,主要是第一化合物进行发光。

[0943] • 发光层中的化合物的含有率

[0944] 发光层中所含的第一化合物以及第四化合物的含有率优选为在例如以下的范围内。

[0945] 第一化合物的含有率优选为10质量%以上80质量%以下,更优选为10质量%以上60质量%以下,进一步优选为20质量%以上60质量%以下。

[0946] 第四化合物的含有率优选为20质量%以上90质量%以下,更优选为40质量%以上90质量%以下,进一步优选为40质量%以上80质量%以下。

[0947] 另外,本实施方式不排除发光层中包含除第一化合物以及第四化合物以外的材料。

[0948] 发光层可以仅包含1种第一化合物,也可以包含2种以上第一化合物。发光层可以仅包含1种第四化合物,也可以包含2种以上第四化合物。

[0949] 图6是示出发光层中的第一化合物以及第四化合物的能级的关系的一例的图。图6中, S_0 表示基态。 $S_1(\text{Mat}1)$ 表示第一化合物的最低激发单重态状态, $T_1(\text{Mat}1)$ 表示第一化合物的最低激发三重态状态。 $S_1(\text{Mat}4)$ 表示第四化合物的最低激发单重态状态, $T_1(\text{Mat}4)$ 表示第四化合物的最低激发三重态状态。如图6所示,如果使用 $\Delta ST(\text{Mat}1)$ 较小的材料作为第一化合物,则第一化合物的最低激发三重态状态 T_1 可通过热能向最低激发单重态状态 S_1 逆系间窜越。

[0950] 通过利用在该化合物中产生的逆系间窜越,在发光层不包含最低激发单重态状态 S_1 小于第一化合物的最低激发单重态状态 $S_1(\text{Mat}1)$ 的荧光掺杂剂的情况下,能够观测到来自第一化合物的最低激发单重态状态 $S_1(\text{Mat}1)$ 的发光。认为通过利用基于该TADF机制的延迟荧光,理论上也能够将内部效率提高至100%。

[0951] 第五实施方式的有机EL元件在发光层中包含作为第一化合物的第一实施方式的化合物(以通式(11)~(13)中的任一个表示的化合物中的至少任一种)、与具有比第一化合物大的单重态能量的第四化合物。

[0952] 第五实施方式的有机EL元件包含能够提供高性能的有机EL元件的化合物(第一实施方式的化合物),特别地,包含PLQY较高的第一实施方式的化合物,因此根据第五实施方式,能够提供高性能的有机EL元件。

[0953] 第五实施方式的有机EL元件能够用于显示装置以及发光装置等电子设备。

[0954] (第六实施方式)

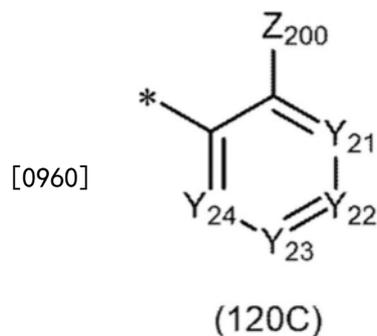
[0955] (化合物)

[0956] 第六实施方式的化合物为将第一实施方式的化合物(以所述通式(11)~(13)中的任一个表示的化合物)中的以所述通式(110)或(120)表示的基团取代为以下述通式(120C)表示的基团而得的化合物。即,第六实施方式的化合物与第一实施方式的化合物不同。

[0957] 具体而言,第六实施方式的化合物为将第一实施方式的所述通式(1-1)~(1-6)中的“ $R_{101} \sim R_{160}$ 分别独立地为氢原子、取代基、以所述通式(110)表示的基团或以所述通式(120)表示的基团,其中,在至少1个基团 D_1 中, $R_{101} \sim R_{160}$ 中的至少1个为以所述通式(110)表示的基团或以所述通式(120)表示的基团,”这一条件取代为“ $R_{101} \sim R_{160}$ 分别独立地为氢原子、取代基或以所述通式(120C)表示的基团,其中,在至少1个基团 D_1 中, $R_{101} \sim R_{160}$ 中的至少1个为以所述通式(120C)表示的基团,”这一条件而得的化合物。

[0958] 因此,在第六实施方式中,以与第一实施方式不同的“以下述通式(120C)表示的基团”为中心进行说明,对与第一实施方式同样的内容则简化或省略记载。

[0959] [化118]



[0961] (在所述通式(120C)中,

[0962] Z_{200} 为,

[0963] 取代或未取代的碳数为2~30的烷基、

[0964] 取代或未取代的碳数为1~30的卤代烷基、或者

[0965] 取代或未取代的碳数为3~30的三烷基甲硅烷基,

[0966] $Y_{21} \sim Y_{24}$ 分别独立地与所述通式(120)中的 $Y_{21} \sim Y_{24}$ 同义,其中,多个 R_{20A} 中相邻的2个以上构成的组中的1组以上不互相键合形成环,多个 R_{20A} 彼此相同或不同。

[0967] 在所述通式(120C)中,*表示与所述通式(1-1)~(1-6)中的六元环的碳原子键合的位置。)

[0968] • 第六实施方式的化合物的优选方案

[0969] 除了将第一实施方式的化合物中的以所述通式(120)表示的基团取代为以所述通

式(120C)表示的基团以外,第六实施方式的化合物的优选方案与第一实施方式的化合物的优选方案相同。例如,可例举以下的优选方案。

[0970] 在第六实施方式的化合物中,优选为,在选择3个基团 D_1 作为 $R_1 \sim R_4$ 的基团时,该所选择的3个基团 D_1 全部由所述通式(1-1)~(1-6)中的1个通式表示,且为包含取代基在内彼此相同的基团。

[0971] 在第六实施方式的化合物中,优选为,在选择2个基团 D_1 作为 $R_1 \sim R_4$ 的基团时,该所选择的2个基团 D_1 全部由所述通式(1-1)~(1-6)中的1个通式表示,且为包含取代基在内彼此相同的基团。

[0972] 在第六实施方式的化合物中,优选为,在选择2个基团 D_2 作为 $R_1 \sim R_4$ 的基团时,该所选择的2个基团 D_2 全部由所述通式(2-1)~(2-4)中的1个通式表示,且为包含取代基在内彼此相同的基团。

[0973] 在第六实施方式的化合物中,优选为,在选择3个基团 D_2 作为 $R_1 \sim R_4$ 的基团时,该所选择的3个基团 D_2 全部由所述通式(2-1)~(2-4)中的1个通式表示,且为包含取代基在内彼此相同的基团。

[0974] 在第六实施方式的化合物中,所述基团 D_2 优选为以所述通式(2-1)表示的基团。

[0975] 在第六实施方式的化合物中,所述基团 D_1 优选为以所述通式(1-4)或(1-5)表示的基团。

[0976] 在第六实施方式的化合物中,优选为, $R_1 \sim R_4$ 中的1个为基团 D_1 的情况下,在1个基团 D_1 中, $R_{101} \sim R_{160}$ 中仅1个为以所述通式(120C)表示的基团。

[0977] 在第六实施方式的化合物中,优选为, $R_1 \sim R_4$ 中的2个为基团 D_1 的情况下,在各个基团 D_1 中, $R_{101} \sim R_{160}$ 中仅1个为以所述通式(120C)表示的基团。

[0978] 在第六实施方式的化合物中,优选为, $R_1 \sim R_4$ 中的3个为基团 D_1 的情况下,在各个基团 D_1 中, $R_{101} \sim R_{160}$ 中仅1个为以所述通式(120C)表示的基团。

[0979] 在第六实施方式的化合物中,优选为,所述通式(1-1)中的 $R_{107} \sim R_{110}$ 中的任1个为以所述通式(120C)表示的基团,或者

[0980] 所述通式(1-2)中的 $R_{116} \sim R_{119}$ 中的任1个为以所述通式(120C)表示的基团,或者

[0981] 所述通式(1-3)中的 $R_{126} \sim R_{129}$ 中的任1个为以所述通式(120C)表示的基团,或者

[0982] 所述通式(1-4)中的 $R_{135} \sim R_{138}$ 中的任1个为以所述通式(120C)表示的基团,或者

[0983] 所述通式(1-5)中的 $R_{145} \sim R_{148}$ 中的任1个为以所述通式(120C)表示的基团,或者

[0984] 所述通式(1-6)中的 $R_{157} \sim R_{160}$ 中的任1个为以所述通式(120C)表示的基团。

[0985] 在第六实施方式的化合物中,优选 $R_1 \sim R_4$ 中仅1个为所述基团 D_1 。

[0986] 第六实施方式的化合物优选为以所述通式(1003A)、通式(1007A)、通式(1008A)、通式(1012A)、通式(1018A)以及通式(1021A)中的任一个表示的化合物。其中,所述通式(1003A)、通式(1007A)、通式(1008A)、通式(1012A)、通式(1018A)以及通式(1021A)中,在至少1个基团 D_1 中, $R_{101} \sim R_{160}$ 中的至少1个为以所述通式(120C)表示的基团。

[0987] 在第六实施方式的化合物中,优选 $R_1 \sim R_4$ 中仅2个为所述基团 D_1 。

[0988] 在第六实施方式的化合物中,所述通式(120C)中的 $Y_{21} \sim Y_{24}$ 优选为 CR_{20A} 。

[0989] 在第六实施方式的化合物中,所述通式(120C)中的 Z_{200} 优选为,

[0990] 取代或未取代的乙基、取代或未取代的正丙基、取代或未取代的异丙基、取代或未

取代的正丁基、取代或未取代的仲丁基、取代或未取代的异丁基、取代或未取代的叔丁基、取代或未取代的正戊基、取代或未取代的正己基、取代或未取代的正庚基、取代或未取代的正辛基、取代或未取代的正壬基、取代或未取代的正癸基、取代或未取代的正十一烷基、取代或未取代的正十二烷基、取代或未取代的正十三烷基、取代或未取代的正十四烷基、取代或未取代的正十五烷基、取代或未取代的正十六烷基、取代或未取代的正十七烷基、取代或未取代的正十八烷基、取代或未取代的新戊基、取代或未取代的戊基、取代或未取代的异戊基、取代或未取代的1-甲基戊基、取代或未取代的2-甲基戊基、取代或未取代的1-戊基己基、取代或未取代的1-丁基戊基、取代或未取代的1-庚基辛基、取代或未取代的3-甲基戊基、

[0991] 氟甲基、二氟甲基、三氟甲基、氟乙基、三氟甲基甲基、三氟乙基、五氟乙基、

[0992] 取代或未取代的三甲基甲硅烷基、取代或未取代的三乙基甲硅烷基、取代或未取代的三正丁基甲硅烷基、取代或未取代的三正辛基甲硅烷基、取代或未取代的三异丁基甲硅烷基、取代或未取代的二甲基乙基甲硅烷基、取代或未取代的二甲基异丙基甲硅烷基、取代或未取代的二甲基正丙基甲硅烷基、取代或未取代的二甲基正丁基甲硅烷基、取代或未取代的二甲基叔丁基甲硅烷基、取代或未取代的二乙基异丙基甲硅烷基、取代或未取代的乙烯基二甲基甲硅烷基、取代或未取代的丙基二甲基甲硅烷基、或者取代或未取代的三异丙基甲硅烷基。

[0993] 在第六实施方式的化合物中,所述基团 D_1 中的 $X_1 \sim X_6$ 优选为氧原子。

[0994] 在第六实施方式的化合物中,所述基团 D_1 中的 $X_1 \sim X_6$ 优选为硫原子。

[0995] 第六实施方式的化合物优选为以所述通式(11)表示的化合物。

[0996] 第六实施方式的化合物优选为以所述通式(12)表示的化合物。

[0997] 第六实施方式的化合物优选为以所述通式(13)表示的化合物。

[0998] 在第六实施方式的化合物中,优选 $R_{101} \sim R_{160}$ 、 $R_{161} \sim R_{168}$ 、 $R_{171} \sim R_{200}$ 以及 R_{20A} 分别独立地为氢原子、卤素原子、取代或未取代的成环碳数为6~14的芳基、取代或未取代的成环原子数为5~14的杂环基、取代或未取代的碳数为1~6的烷基、取代或未取代的碳数为1~30的卤代烷基、取代或未取代的碳数为3~6的烷基甲硅烷基、取代或未取代的碳数为1~6的烷氧基、取代或未取代的成环碳数为6~14的芳氧基、以 $-N(R_z)_2$ 表示的基团、取代或未取代的碳数为1~6的烷硫基、或者取代或未取代的成环碳数为6~14的芳硫基。

[0999] 在第六实施方式的化合物中,优选 $R_{101} \sim R_{160}$ 、 $R_{161} \sim R_{168}$ 、 $R_{171} \sim R_{200}$ 以及 R_{20A} 分别独立地为氢原子、卤素原子、未取代的成环碳数为6~14的芳基、未取代的成环原子数为5~14的杂环基、未取代的碳数为1~6的烷基、未取代的碳数为1~30的卤代烷基、未取代的碳数为3~6的烷基甲硅烷基、未取代的碳数为1~6的烷氧基、未取代的成环碳数为6~14的芳氧基、未取代的碳数为2~12的烷基氨基、未取代的碳数为1~6的烷硫基、或者未取代的成环碳数为6~14的芳硫基。

[1000] 在第六实施方式的化合物中,优选 $R_{101} \sim R_{160}$ 、 $R_{161} \sim R_{168}$ 、 $R_{171} \sim R_{200}$ 以及 R_{20A} 分别独立地为氢原子、未取代的成环碳数为6~14的芳基、未取代的成环原子数为5~14的杂环基、或者未取代的碳数为1~6的烷基。

[1001] 在第六实施方式的化合物中,优选 R_{20A} 为氢原子。

[1002] 在第六实施方式的化合物中,还优选分子内的氢原子中的1个以上为氘原子。

[1003] 在第六实施方式的化合物中,还优选所述基团 D_1 中的 $R_{101} \sim R_{160}$ 中1个以上为氢原子,该氢原子全部为氘原子。

[1004] 在本实施方式的化合物中,还优选所述基团 D_1 中的 $R_{101} \sim R_{160}$ 中1个以上为氢原子,该氢原子全部为氘原子。

[1005] 在第六实施方式的化合物中,还优选所述基团 D_1 中的 $R_{101} \sim R_{160}$ 中以所述通式(120C)表示的基团以外为氢原子,该氢原子为氘原子。

[1006] 在第六实施方式的化合物中,优选为,在所述基团 D_1 中的 $R_{101} \sim R_{160}$ 中的任1个以上为取代基(包括以通式(120C)表示的基团),且该取代基具有1个以上的氢原子的情况下,该氢原子全部为氘原子,或者该氢原子内的任1个以上为氘原子,或者该氢原子全部为氘原子。

[1007] 在第六实施方式的化合物中,还优选所述基团 D_2 中的 $R_{161} \sim R_{168}$ 以及 $R_{171} \sim R_{200}$ 中1个以上为氢原子,该氢原子全部为氘原子。

[1008] 在第六实施方式的化合物中,还优选所述基团 D_2 中的 $R_{161} \sim R_{168}$ 以及 $R_{171} \sim R_{200}$ 中1个以上为氢原子,该氢原子全部为氘原子。

[1009] 在第六实施方式的化合物中,还优选所述基团 D_2 中的 $R_{161} \sim R_{168}$ 以及 $R_{171} \sim R_{200}$ 为氢原子,该氢原子为氘原子。

[1010] 在第六实施方式的化合物中,优选为,在所述基团 D_2 中的 $R_{161} \sim R_{168}$ 以及 $R_{171} \sim R_{200}$ 中的任1个以上为取代基,且该取代基具有1个以上的氢原子的情况下,该氢原子全部为氘原子,或者该氢原子内的任1个以上为氘原子,或者该氢原子全部为氘原子。

[1011] 在第六实施方式的化合物中,优选为, $R_{101} \sim R_{160}$ 中以所述通式(120C)表示的基团以外为氢原子,且 $R_{161} \sim R_{168}$ 以及 $R_{171} \sim R_{200}$ 为氢原子。

[1012] 在第六实施方式的化合物中,还优选为, $R_{101} \sim R_{160}$ 中以所述通式(120C)表示的基团以外为氢原子,该氢原子为氘原子,且 $R_{161} \sim R_{168}$ 以及 $R_{171} \sim R_{200}$ 为氢原子,该氢原子为氘原子。

[1013] 在第六实施方式的化合物中,“取代或未取代的”这样的情况下的取代基分别独立地与第一实施方式的化合物中的“取代或未取代的”这样的情况下的取代基同义。

[1014] • 第六实施方式的化合物的制造方法

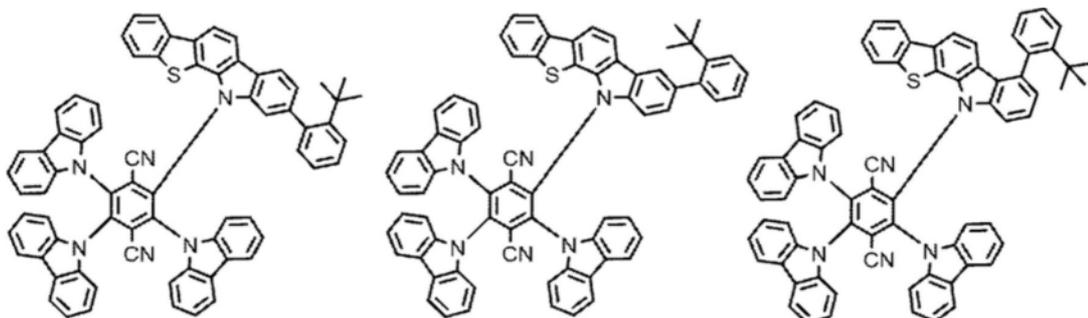
[1015] 第六实施方式的化合物能够通过公知的方法来制造。

[1016] • 第六实施方式的化合物的具体例

[1017] 作为第六实施方式的化合物的具体例,例如可例举以下的化合物。其中,本发明并不受这些化合物的具体例的限定。

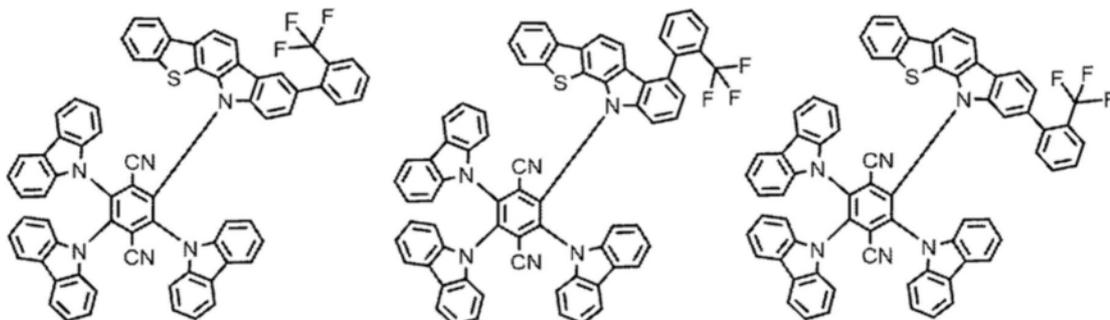
[1018] [化119]

[1019]

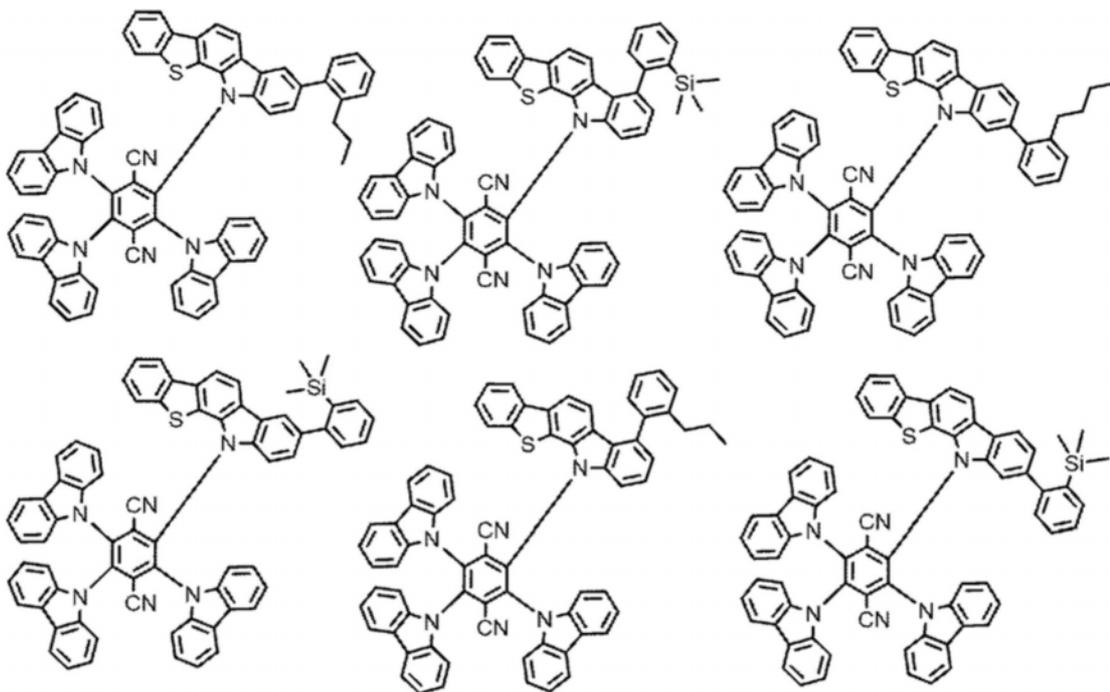


[1020]

[化120]

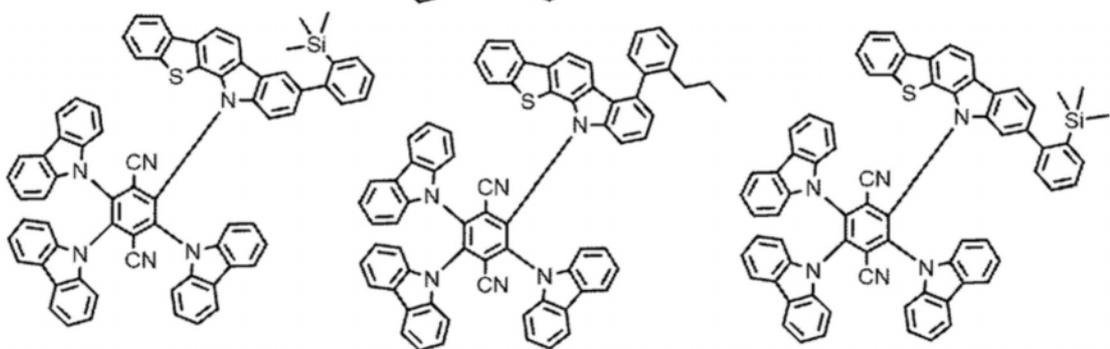


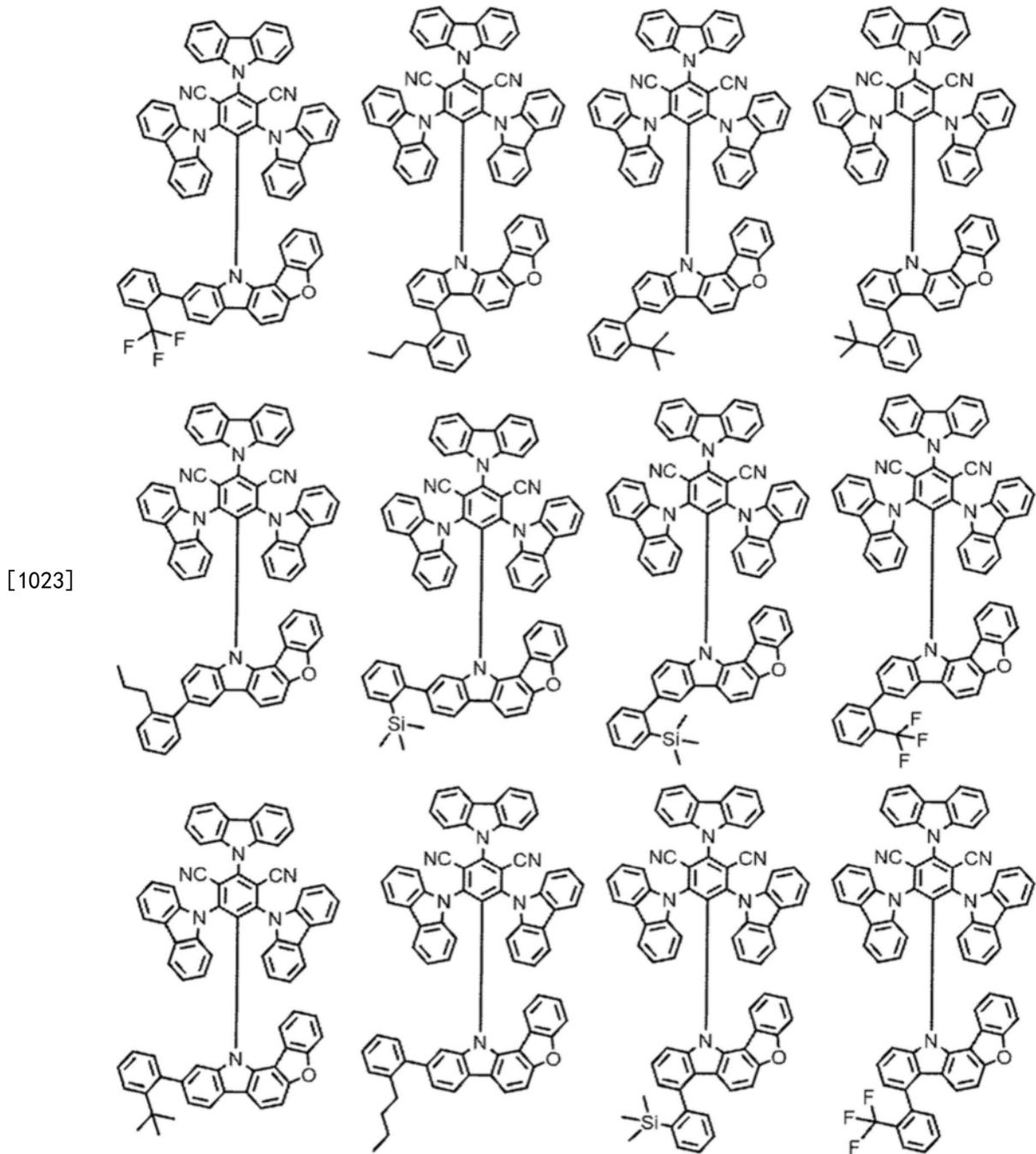
[1021]



[1022]

[化121]





[1030] 作为第七实施方式的一方案的有机EL元件的优选方案与第三实施方式、第四实施方式以及第五实施方式的有机EL元件的优选方案相同。例如,可例举以下的优选方案。

[1031] 在第七实施方式的有机EL元件中,所述第一有机层优选为发光层。

[1032] 在第七实施方式的有机EL元件中,优选为,所述第一有机层包含第一化合物C(第六实施方式的化合物),还包含第二化合物,所述第二化合物为荧光发光性的化合物。

[1033] 在第七实施方式的有机EL元件中,优选为所述第一化合物C的单重态能量 S_1 (Mat1')与所述第二化合物的单重态能量 S_1 (Mat2)满足下述数学式(数1')的关系。

[1034] $S_1(\text{Mat1}') > S_1(\text{Mat2})$ (数1')

[1035] 在第七实施方式的有机EL元件中,优选为,所述第一有机层包含所述第一化合物C(第六实施方式的化合物)以及所述第二化合物,还包含第三化合物,

[1036] 所述第一化合物C的单重态能量 S_1 (Mat1')与所述第三化合物的单重态能量 S_1 (Mat3)满足下述数学式(数2')的关系。

[1037] $S_1(\text{Mat3}) > S_1(\text{Mat1}')$ (数2')

[1038] 在第七实施方式的有机EL元件中,优选为,所述第一有机层包含所述第一化合物C(第六实施方式的化合物)以及所述第二化合物,还包含第三化合物,

[1039] 包含所述第一化合物C还有第四化合物,所述第一化合物C的单重态能量 S_1 (Mat1')与所述第四化合物的单重态能量 S_1 (Mat4)满足下述数学式(数3')的关系。

[1040] $S_1(\text{Mat4}) > S_1(\text{Mat1}')$ (数3')

[1041] 在第七实施方式的有机EL元件中,所述第一有机层优选为不包含金属络合物。

[1042] 在第七实施方式的有机EL元件中,优选为,包含所述第一化合物C(第六实施方式的化合物)以及所述第二化合物,还包含第三化合物,所述第一化合物C为延迟荧光性的化合物。

[1043] 另外,第七实施方式中的第二化合物、第三化合物以及第四化合物的具体例在第三实施方式所说明的第二化合物、第三化合物以及第四化合物的具体例中示出。

[1044] (第八实施方式)

[1045] [电子设备]

[1046] 本实施方式的电子设备搭载有上述实施方式中的任一个有机EL元件。作为电子设备,例如可例举显示装置以及发光装置等。作为显示装置,例如可例举显示部件(例如有机EL面板模块等)、电视机、手机、平板电脑以及个人计算机等。作为发光装置,例如可例举照明以及车辆用灯具等。

[1047] (实施方式的变形)

[1048] 另外,本发明并不限定于上述实施方式,在能够实现本发明的目的的范围内的变更、改良等包括在本发明内。

[1049] 例如,发光层并不仅限于1层,也可以层叠多层发光层。在有机EL元件具有多层发光层的情况下,只要至少1层发光层满足在上述实施方式中说明的条件即可。例如,其他发光层既可以是荧光发光型的发光层,也可以是利用了从三重态激发状态直接向基态的电子迁移所引起的发光的磷光发光型的发光层。

[1050] 此外,在有机EL元件具有多层发光层的情况下,这些发光层可以彼此相邻设置,也可以是多个发光单元隔着中间层层叠而成的所谓的串联型有机EL元件。

[1051] 此外,例如也可以在发光层的阳极侧以及阴极侧的至少一方相邻设置阻挡层。阻挡层优选与发光层相接地配置,阻止空穴、电子以及激子中的至少任一种。

[1052] 例如,在发光层的阴极侧相接地配置有阻挡层的情况下,该阻挡层传输电子,并且阻止空穴到达该阻挡层的阴极侧的层(例如电子传输层)。在有机EL元件包含电子传输层的情况下,优选为在发光层与电子传输层之间包含该阻挡层。

[1053] 此外,在发光层的阳极侧相接地配置有阻挡层的情况下,该阻挡层传输空穴,并且阻止电子到达该阻挡层的阳极侧的层(例如空穴传输层)。在有机EL元件包含空穴传输层的情况下,优选为在发光层与空穴传输层之间包含该阻挡层。

[1054] 此外,也可以使阻挡层与发光层相邻地设置,以使激发能量不会从发光层泄漏到其周边层。阻止在发光层生成的激子移动至该阻挡层的电极侧的层(例如电子传输层以及空穴传输层等)。

[1055] 优选发光层与阻挡层接合。

[1056] 除此以外,本发明的实施中的具体的结构以及形状等可以在能够实现本发明的目的的范围内采用其他结构等。

[1057] 在本说明书中,使用“~”表示的数值范围是指,将记载在“~”前的数值作为下限值,将记载在“~”后的数值作为上限值从而包括的范围。

[1058] 在本说明书中,R_x以及R_y互相键合而形成环是指,例如R_x以及R_y包含碳原子、氮原子、氧原子、硫原子或硅原子,R_x中所含的原子(碳原子、氮原子、氧原子、硫原子或硅原子)与R_y中所含的原子(碳原子、氮原子、氧原子、硫原子或硅原子)经由单键、双键、三键或二价的连接基团键合,形成成环原子数为5以上的环(具体而言,杂环或芳香族烃环)。x为数字、文字或数字与文字的组合。y为数字、文字或数字与文字的组合。

[1059] 作为二价的连接基团没有特别限制,例如可例举-O-、-CO-、-CO₂-、-S-、-SO-、-SO₂-、-NH-、-NRa-以及将这些连接基团的2个以上进行组合而得的基团等。

[1060] 作为杂环的具体例,可例举从后述的“对通式中的各取代基的说明”所例示的“杂芳基Sub₂”中去除化学键而得的环结构(杂环)。这些杂环可以具有取代基。

[1061] 作为芳香族烃环的具体例,可例举从后述的“对通式中的各取代基的说明”所例示的“芳基Sub₁”中去除化学键而得的环结构(芳香族烃环)。这些芳香族烃环可以具有取代基。

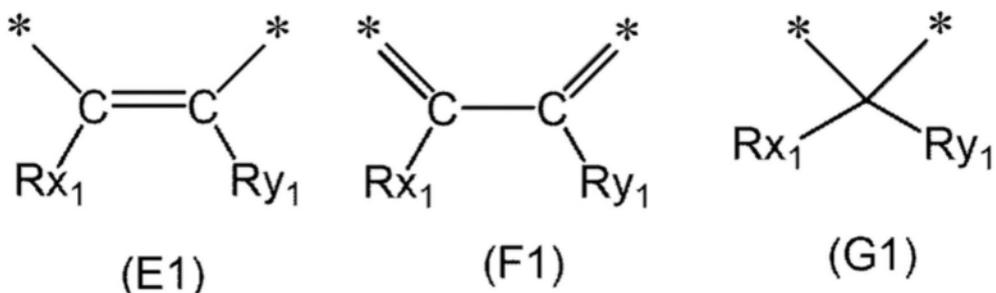
[1062] 作为Ra,例如可例举在后述的“对通式中的各取代基的说明”中所例示的取代或未取代的碳数为1~30的烷基Sub₃、取代或未取代的成环碳数为6~30的芳基Sub₁、取代或未取代的成环原子数为5~30的杂芳基Sub₂等。

[1063] 例如,R_x以及R_y互相键合而形成环是指:在以下述通式(E1)表示的分子结构中,R_{x₁}中所含的原子与R_{y₁}中所含的原子形成以通式(E2)表示的环(环结构)E;在以通式(F1)表示的分子结构中,R_{x₁}中所含的原子与R_{y₁}中所含的原子形成以通式(F2)表示的环F;在以通式(G1)表示的分子结构中,R_{x₁}中所含的原子与R_{y₁}中所含的原子形成以通式(G2)表示的环G;在以通式(H1)表示的分子结构中,R_{x₁}中所含的原子与R_{y₁}中所含的原子形成以通式(H2)表示的环H;在以通式(I1)表示的分子结构中,R_{x₁}中所含的原子与R_{y₁}中所含的原子形成以通式(I2)表示的环I。

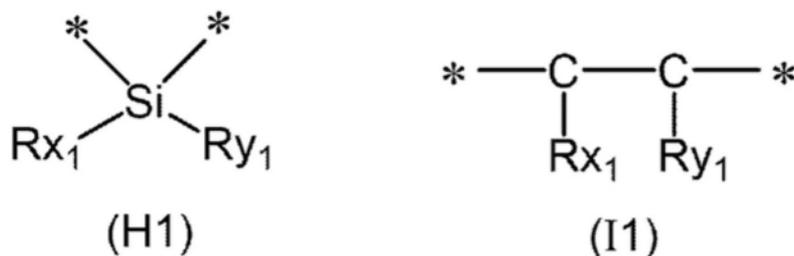
[1064] 通式(E1)~(I1)中,*分别独立地表示与一分子中的其他原子键合的位置。通式

(E1)中的2个*分别与通式(E2)中的2个*相对应,通式(F1)中的2个*分别与通式(F2)中的2个*相对应,通式(G1)中的2个*分别与通式(G2)中的2个*相对应,通式(H1)中的2个*分别与通式(H2)中的2个*相对应,通式(I1)中的2个*分别与通式(I2)中的2个*相对应。

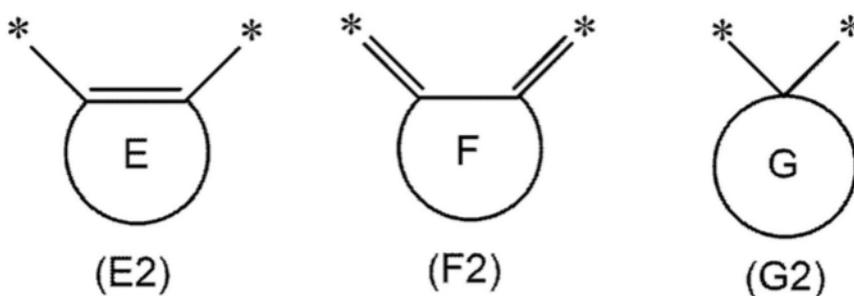
[1065] [化122]



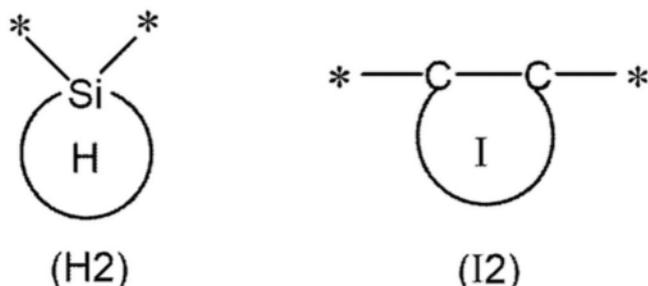
[1066]



[1067] [化123]



[1068]

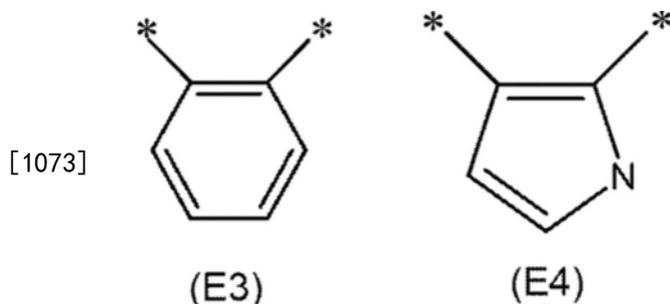


[1069] 在以通式(E2)~(I2)表示的分子结构中,E~I分别表示环结构(所述成环原子数为5以上的环)。通式(E2)~(I2)中,*分别独立地表示与一分子中的其他原子键合的位置。通式(E2)中的2个*分别与通式(E1)中的2个*相对应。对于通式(F2)~(I2)中的2个*,也同样分别与通式(F1)~(I1)中的2个*相对应。

[1070] 例如,在通式(E1)中,在 Rx_1 以及 Ry_1 互相键合而形成通式(E2)中的环E,且环E为未取代的苯环的情况下,以通式(E1)表示的分子结构成为以下述通式(E3)表示的分子结构。在此,通式(E3)中的2个*分别独立地与通式(E2)以及通式(E1)中的2个*相对应。

[1071] 例如,在通式(E1)中,在 R_{x_1} 以及 R_{y_1} 互相键合而形成通式(E2)中的环E,且环E为未取代的吡咯环的情况下,以通式(E1)表示的分子结构成为以下述通式(E4)表示的分子结构。在此,通式(E4)中的2个*分别独立地与通式(E2)以及通式(E1)中的2个*相对应。通式(E3)以及(E4)中,*分别独立地表示与一分子中的其他原子键合的位置。

[1072] [化124]



[1074] 本说明书中,成环碳数是指原子键合成环状的结构(例如单环化合物、稠环化合物、交联化合物、碳环化合物、杂环化合物)的构成该环自身的原子中的碳原子的数量。在该环被取代基取代的情况下,取代基中所含的碳不包含在成环碳数内。对于以下所记载的“成环碳数”,只要不特别说明则同样如此。例如,苯环的成环碳数为6,萘环的成环碳数为10,吡啶基的成环碳数为5,呋喃基的成环碳数为4。此外,在苯环或萘环上有例如烷基作为取代基进行取代的情况下,该烷基的碳数不包含在成环碳数的数量内。此外,在茛环上键合有例如茛环作为取代基的情况下(包括螺茛环),作为取代基的茛环的碳数不包含在成环碳数的数量内。

[1075] 本说明书中,成环原子数是指原子键合成环状的结构(例如单环、稠环、集合环)的化合物(例如单环化合物、稠环化合物、交联化合物、碳环化合物、杂环化合物)的构成该环自身的原子的数量。不构成环的原子和该环被取代基取代的情况下的取代基中所含的原子不包含在成环原子数内。对于以下所记载的“成环原子数”,只要没有特别说明则同样如此。例如,吡啶环的成环原子数为6,喹啉环的成环原子数为10,呋喃环的成环原子数为5。对于分别与吡啶环或喹啉环的碳原子键合的氢原子和构成取代基的原子,不包含在成环原子数的数量内。此外,在茛环上键合有例如茛环作为取代基的情况下(包括螺茛环),作为取代基的茛环的原子数不包含在成环原子数的数量内。

[1076] • 对本说明书中的通式中的各取代基的说明(各取代基的说明)

[1077] 本说明书中的芳基(有时称为芳香族烃基)例如为芳基 Sub_1 。作为芳基 Sub_1 ,成环碳数优选为6~30,更优选为6~20,进一步优选为6~14,更进一步优选为6~12。

[1078] 本说明书中的芳基 Sub_1 例如是从苯基、联苯基、三联苯基、萘基、蒽基、菲基、茛基、蒽基、蒽基、荧蒽基、苯并[a]蒽基、苯并[c]菲基、三亚苯基、苯并[k]荧蒽基、苯并[g]蒽基、苯并[b]三亚苯基、蒽基(picenyl)以及茛基(perylene)构成的组中选择的至少任一种基团。

[1079] 在上述芳基 Sub_1 中,优选为苯基、联苯基、萘基、菲基、三联苯基以及茛基。对于1-茛基、2-茛基、3-茛基以及4-茛基,优选9位的碳原子被后述的本说明书中的取代或未取代的烷基 Sub_3 、取代或未取代的芳基 Sub_1 取代。

[1080] 本说明书中的杂芳基(有时称为杂环基、杂芳香族环基或芳香族杂环基)例如为杂

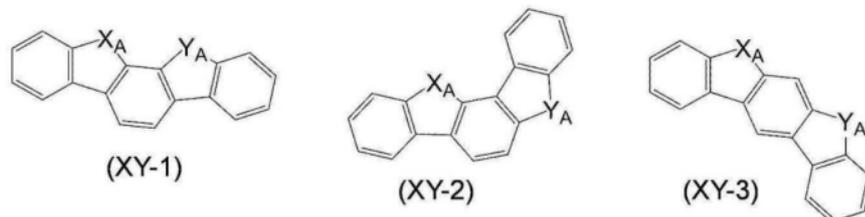
环基Sub₂。杂环基Sub₂是包含从氮、硫、氧、硅、硒原子以及锗原子构成的组中选择的至少任一种原子作为杂原子的基团。杂环基Sub₂优选为包含从氮、硫以及氧构成的组中选择的至少任一种原子作为杂原子的基团。作为杂环基Sub₂，成环原子数优选为5~30，更优选为5~20，进一步优选为5~14。

[1081] 本说明书中的杂环基Sub₂例如是从吡啶基、嘧啶基、吡嗪基、哒嗪基、三嗪基、喹啉基、异喹啉基、萘啶基、酞嗪基、喹喔啉基、喹唑啉基、菲啶基、吡啶基、菲咯啉基、吡咯基、咪唑基、吡唑基、三唑基、四唑基、吡唑基、苯并咪唑基、吡唑基、咪唑并吡啶基、苯并三唑基、咪唑基、呋喃基、噻吩基、噁唑基、噻唑基、异噁唑基、异噻唑基、噁二唑基、噻二唑基、苯并呋喃基、苯并噻吩基、苯并噁唑基、苯并噻唑基、苯并异噁唑基、苯并异噻唑基、苯并噁二唑基、苯并噻二唑基、二苯并呋喃基、二苯并噻吩基、哌啶基、吡咯烷基、哌嗪基、吗啉基、吩嗪基、吩噻嗪基以及吩噁嗪基构成的组中选择的至少任一种基团。

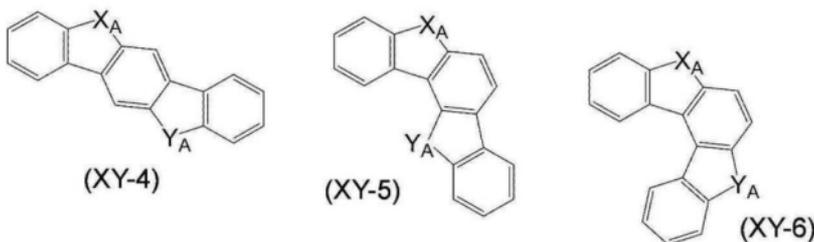
[1082] 在上述杂环基Sub₂中，更进一步优选为1-二苯并呋喃基、2-二苯并呋喃基、3-二苯并呋喃基、4-二苯并呋喃基、1-二苯并噻吩基、2-二苯并噻吩基、3-二苯并噻吩基、4-二苯并噻吩基、1-咪唑基、2-咪唑基、3-咪唑基、4-咪唑基以及9-咪唑基。对于1-咪唑基、2-咪唑基、3-咪唑基以及4-咪唑基，优选9位的氮原子被本说明书中的取代或未取代的芳基Sub₁、取代或未取代的杂环基Sub₂取代。

[1083] 此外，在本说明书中，杂环基Sub₂例如也可以是由以下述通式(XY-1)~(XY-18)表示的局部结构衍生的基团。

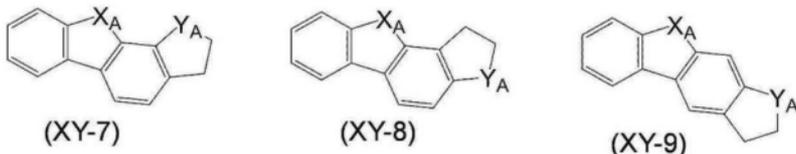
[1084] [化125]



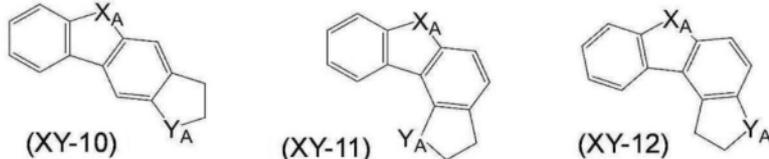
[1085]



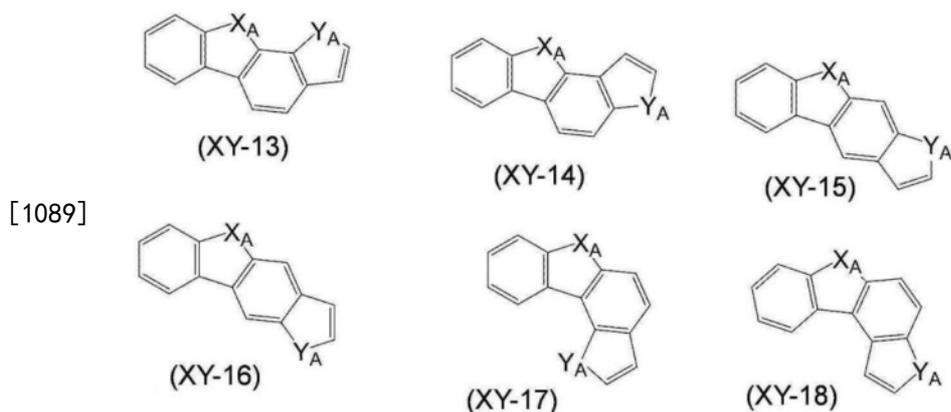
[1086] [化126]



[1087]



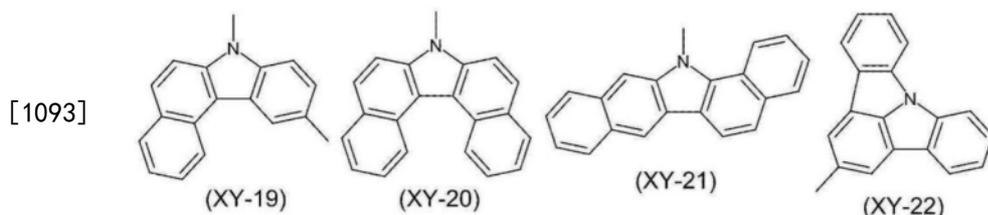
[1088] [化127]



[1090] 在所述通式 (XY-1) ~ (XY-18) 中, X_A 以及 Y_A 分别独立地为杂原子, 优选为氧原子、硫原子、硒原子、硅原子或锗原子。以所述通式 (XY-1) ~ (XY-18) 表示的局部结构在任意位置具有化学键而成为杂环基, 该杂环基可以具有取代基。

[1091] 此外, 在本说明书中, 杂环基 Sub_2 例如也可以是以下述通式 (XY-19) ~ (XY-22) 表示的基团。此外, 化学键的位置也可以适当变更。

[1092] [化128]



[1094] 本说明书中的烷基可以为直链烷基、支链烷基或环状烷基中的任一种。

[1095] 本说明书中的烷基例如为烷基 Sub_3 。

[1096] 本说明书中的直链烷基例如为直链烷基 Sub_{31} 。

[1097] 本说明书中的支链烷基例如为支链烷基 Sub_{32} 。

[1098] 本说明书中的环状烷基例如为环状烷基 Sub_{33} (也称为环烷基 Sub_{33})。

[1099] 烷基 Sub_3 例如是从直链烷基 Sub_{31} 、支链烷基 Sub_{32} 以及环状烷基 Sub_{33} 构成的组中选择的至少任一种基团。

[1100] 本说明书中的直链烷基 Sub_{31} 或支链烷基 Sub_{32} 的碳数优选为 1~30, 更优选为 1~20, 进一步优选为 1~10, 更进一步优选为 1~6。

[1101] 本说明书中的环烷基 Sub_{33} 的成环碳数优选为 3~30, 更优选为 3~20, 进一步优选为 3~10, 更进一步优选为 5~8。

[1102] 本说明书中的直链烷基 Sub_{31} 或支链烷基 Sub_{32} 例如是从甲基、乙基、正丙基、异丙基、正丁基、仲丁基、异丁基、叔丁基、正戊基、正己基、正庚基、正辛基、正壬基、正癸基、正十一烷基、正十二烷基、正十三烷基、正十四烷基、正十五烷基、正十六烷基、正十七烷基、正十八烷基、新戊基、戊基、异戊基、1-甲基戊基、2-甲基戊基、1-戊基己基、1-丁基戊基、1-庚基辛基以及 3-甲基戊基构成的组中选择的至少任一种基团。

[1103] 作为上述直链烷基 Sub_{31} 或支链烷基 Sub_{32} , 更进一步优选为甲基、乙基、丙基、异丙基、正丁基、仲丁基、异丁基、叔丁基、正戊基、正己基、戊基、异戊基以及新戊基。

[1104] 本说明书中的环烷基 Sub_{33} 例如是从环丙基、环丁基、环戊基、环己基、4-甲基环己

基、金刚烷基以及降冰片基构成的组中选择的至少任一种基团。在环烷基Sub₃₃中,更进一步优选为环戊基或环己基。

[1105] 本说明书中的卤代烷基例如为卤代烷基Sub₄, 卤代烷基Sub₄例如为烷基Sub₃被1个以上的卤素原子、优选为氟原子取代而得的烷基。

[1106] 本说明书中的卤代烷基Sub₄例如是从氟甲基、二氟甲基、三氟甲基、氟乙基、三氟甲基甲基、三氟乙基以及五氟乙基构成的组中选择的至少任一种基团。

[1107] 本说明书中的取代甲硅烷基例如为取代甲硅烷基Sub₅, 取代甲硅烷基Sub₅例如是从烷基甲硅烷基Sub₅₁以及芳基甲硅烷基Sub₅₂构成的组中选择的至少任一种基团。

[1108] 本说明书中的烷基甲硅烷基Sub₅₁例如是具有上述烷基Sub₃的三烷基甲硅烷基Sub₅₁₁。

[1109] 三烷基甲硅烷基Sub₅₁₁例如是从三甲基甲硅烷基、三乙基甲硅烷基、三正丁基甲硅烷基、三正辛基甲硅烷基、三异丁基甲硅烷基、二甲基乙基甲硅烷基、二甲基异丙基甲硅烷基、二甲基正丙基甲硅烷基、二甲基正丁基甲硅烷基、二甲基叔丁基甲硅烷基、二乙基异丙基甲硅烷基、乙烯基二甲基甲硅烷基、丙基二甲基甲硅烷基以及三异丙基甲硅烷基构成的组中选择的至少任一种基团。三烷基甲硅烷基Sub₅₁₁中的3个烷基Sub₃可以彼此相同也可以不同。

[1110] 本说明书中的芳基甲硅烷基Sub₅₂例如是从二烷基芳基甲硅烷基Sub₅₂₁、烷基二芳基甲硅烷基Sub₅₂₂以及三芳基甲硅烷基Sub₅₂₃构成的组中选择的至少任一种基团。

[1111] 二烷基芳基甲硅烷基Sub₅₂₁例如为具有2个上述烷基Sub₃、具有1个上述芳基Sub₁的二烷基芳基甲硅烷基。二烷基芳基甲硅烷基Sub₅₂₁的碳数优选为8~30。

[1112] 烷基二芳基甲硅烷基Sub₅₂₂例如为具有1个上述烷基Sub₃、具有2个上述芳基Sub₁的烷基二芳基甲硅烷基。烷基二芳基甲硅烷基Sub₅₂₂的碳数优选为13~30。

[1113] 三芳基甲硅烷基Sub₅₂₃例如为具有3个上述芳基Sub₁的三芳基甲硅烷基。三芳基甲硅烷基Sub₅₂₃的碳数优选为18~30。

[1114] 本说明书中的取代或未取代的烷基磺酰基例如为烷基磺酰基Sub₆, 烷基磺酰基Sub₆以-SO₂R_w表示。-SO₂R_w中的R_w表示取代或未取代的上述烷基Sub₃。

[1115] 本说明书中的芳烷基(有时称为芳基烷基)例如为芳烷基Sub₇。芳烷基Sub₇中的芳基例如包含上述芳基Sub₁以及上述杂芳基Sub₂中的至少一方。

[1116] 本说明书中的芳烷基Sub₇优选为具有芳基Sub₁的基团, 表示为-Z₃-Z₄。该Z₃例如为与上述烷基Sub₃相对应的亚烷基等。该Z₄例如为上述芳基Sub₁。在该芳烷基Sub₇中, 优选芳基部分的碳数为6~30(优选为6~20, 更优选为6~12)、烷基部分的碳数为1~30(优选为1~20, 更优选为1~10, 进一步优选为1~6)。该芳烷基Sub₇例如是从苄基、2-苯基丙烷-2-基、1-苯基乙基、2-苯基乙基、1-苯基异丙基、2-苯基异丙基、苯基叔丁基、 α -萘基甲基、1- α -萘基乙基、2- α -萘基乙基、1- α -萘基异丙基、2- α -萘基异丙基、 β -萘基甲基、1- β -萘基乙基、2- β -萘基乙基、1- β -萘基异丙基以及2- β -萘基异丙基构成的组中选择的至少任一种基团。

[1117] 本说明书中的烷氧基例如为烷氧基Sub₈, 烷氧基Sub₈表示为-OZ₁。该Z₁例如为上述烷基Sub₃。烷氧基Sub₈的碳数优选为1~30, 更优选为1~20。烷氧基Sub₈例如是从甲氧基、乙氧基、丙氧基、丁氧基、戊氧基以及己氧基构成的组中选择的至少任一种基团。

[1118] 本说明书中的卤代烷氧基例如为卤代烷氧基Sub₉, 卤代烷氧基Sub₉例如为上述烷

氧基Sub₈被1个以上的卤素原子、优选为氟原子取代而得的烷氧基。

[1119] 本说明书中的芳氧基(有时称为芳基烷氧基)例如为芳基烷氧基Sub₁₀。芳基烷氧基Sub₁₀中的芳基包含芳基Sub₁以及杂芳基Sub₂中的至少一方。

[1120] 本说明书中的芳基烷氧基Sub₁₀表示为-OZ₂。该Z₂例如是芳基Sub₁或杂芳基Sub₂。芳基烷氧基Sub₁₀的成环碳数优选为6~30,更优选为6~20。作为该芳基烷氧基Sub₁₀,例如可例举苯氧基。

[1121] 本说明书中的取代氨基例如为取代氨基Sub₁₁,取代氨基Sub₁₁例如是从芳基氨基Sub₁₁₁以及烷基氨基Sub₁₁₂构成的组中选择的至少任一种基团。

[1122] 芳基氨基Sub₁₁₁表示为-NHR_{V1}或-N(R_{V1})₂。该R_{V1}例如为芳基Sub₁。-N(R_{V1})₂中的2个R_{V1}相同或不同。

[1123] 烷基氨基Sub₁₁₂表示为-NHR_{V2}或-N(R_{V2})₂。该R_{V2}例如为烷基Sub₃。-N(R_{V2})₂中的2个R_{V2}相同或不同。

[1124] 本说明书中的烯基例如为烯基Sub₁₂,烯基Sub₁₂是直链或支链中的任一种,例如是从乙烯基、丙烯基、丁烯基、油烯基、二十碳五烯基、二十二碳六烯基、苯乙烯基、2,2-二苯基乙烯基、1,2,2-三苯基乙烯基以及2-苯基-2-丙烯基构成的组中选择的至少任一种基团。

[1125] 本说明书中的炔基例如为炔基Sub₁₃,炔基Sub₁₃可以是直链或支链中的任一种,例如是从乙炔基、丙炔基以及2-苯基乙炔基构成的组中选择的至少任一种基团。

[1126] 本说明书中的烷硫基例如为烷硫基Sub₁₄。

[1127] 烷硫基Sub₁₄表示为-SR_{V3}。该R_{V3}例如为烷基Sub₃。烷硫基Sub₁₄的碳数优选为1~30,更优选为1~20。

[1128] 本说明书中的芳硫基例如为芳硫基Sub₁₅。

[1129] 芳硫基Sub₁₅表示为-SR_{V4}。该R_{V4}例如为芳基Sub₁。芳硫基Sub₁₅的成环碳数优选为6~30,更优选为6~20。

[1130] 作为本说明书中的卤素原子,可例举氟原子、氯原子、溴原子以及碘原子等,优选为氟原子。

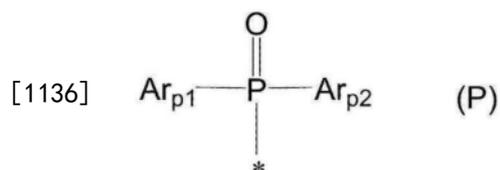
[1131] 本说明书中的取代膦基例如为取代膦基Sub₁₆,取代膦基Sub₁₆例如为苯基膦基。

[1132] 本说明书中的芳基羰基例如为芳基羰基Sub₁₇,芳基羰基Sub₁₇表示为-COY'。该Y'例如为芳基Sub₁。本说明书中的芳基羰基Sub₁₇例如是从苯基羰基、二苯基羰基、萘基羰基以及三苯基羰基构成的组中选择的至少任一种基团。

[1133] 本说明书中的酰基例如为酰基Sub₁₈,酰基Sub₁₈表示为-COR'。该R'例如为烷基Sub₃。本说明书中的酰基Sub₁₈例如是从乙酰基以及丙酰基构成的组中选择的至少任一种基团。

[1134] 本说明书中的取代磷酰基例如为取代磷酰基Sub₁₉,取代磷酰基Sub₁₉以下述通式(P)表示。

[1135] [化129]



[1137] 在所述通式(P)中, Ar_{P_1} 以及 Ar_{P_2} 是从上述烷基 Sub_3 以及上述芳基 Sub_1 构成的组中选择的任一种取代基。

[1138] 本说明书中的酯基例如为酯基 Sub_{20} , 酯基 Sub_{20} 例如是从烷基酯基以及芳基酯基构成的组中选择的至少任一种基团。

[1139] 本说明书中的烷基酯基例如为烷基酯基 Sub_{201} , 烷基酯基 Sub_{201} 表示为 $-C(=O)OR^E$ 。 R^E 例如为取代或未取代的上述烷基 Sub_3 。

[1140] 本说明书中的芳基酯基例如为芳基酯基 Sub_{202} , 芳基酯基 Sub_{202} 表示为 $-C(=O)OR^{Ar}$ 。 R^{Ar} 例如为取代或未取代的上述芳基 Sub_1 。

[1141] 本说明书中的硅氧烷基例如为硅氧烷基 Sub_{21} , 硅氧烷基 Sub_{21} 是经由醚键而得的硅化合物基团。硅氧烷基 Sub_{21} 例如为三甲基硅氧烷基。

[1142] 本说明书中的氨基甲酰基表示为 $-CONH_2$ 。

[1143] 本说明书中的取代氨基甲酰基例如为氨基甲酰基 Sub_{22} , 氨基甲酰基 Sub_{22} 表示为 $-CONH-Ar^C$ 或 $-CONH-R^C$ 。 Ar^C 例如是从取代或未取代的上述芳基 Sub_1 (优选成环碳数为6~10) 以及上述杂芳基 Sub_2 (优选成环原子数为5~14) 构成的组中选择的至少任一种基团。 Ar^C 可以是芳基 Sub_1 与杂芳基 Sub_2 键合而得的基团。

[1144] R^C 例如为取代或未取代的上述烷基 Sub_3 (优选碳数为1~6)。

[1145] 本说明书中, “成环碳”是指构成饱和环、不饱和环或芳香环的碳原子。“成环原子”是指构成杂环(包括饱和环、不饱和环以及芳香环)的碳原子以及杂原子。

[1146] 此外, 本说明书中, 氢原子包含中子数不同的同位素, 即氕(Protium)、氘(Deuterium)、氚(Tritium)。

[1147] 本说明书中, 设为化学结构式中的未明示出“R”等符号或表示氘原子的“D”的可键合位置处键合有氢原子, 即键合有氘原子、氘原子或氘原子。

[1148] 以下, 烷基 Sub_3 是指在“各取代基的说明”中说明的直链烷基 Sub_{31} 、支链烷基 Sub_{32} 以及环状烷基 Sub_{33} 中的任意1种以上的基团。

[1149] 同样地, 取代甲硅烷基 Sub_5 是指烷基甲硅烷基 Sub_{51} 以及芳基甲硅烷基 Sub_{52} 中的任意1种以上的基团。

[1150] 同样地, 取代氨基 Sub_{11} 是指芳基氨基 Sub_{111} 以及烷基氨基 Sub_{112} 中的任意1种以上的基团。

[1151] 在本说明书中, 作为“取代或未取代的”这样的情况下的取代基, 例如为取代基 R_{F1} , 取代基 R_{F1} 是从芳基 Sub_1 、杂芳基 Sub_2 、烷基 Sub_3 、卤代烷基 Sub_4 、取代甲硅烷基 Sub_5 、烷基磺酰基 Sub_6 、芳烷基 Sub_7 、烷氧基 Sub_8 、卤代烷氧基 Sub_9 、芳基烷氧基 Sub_{10} 、取代氨基 Sub_{11} 、烯基 Sub_{12} 、炔基 Sub_{13} 、烷硫基 Sub_{14} 、芳硫基 Sub_{15} 、取代膦基 Sub_{16} 、芳基羰基 Sub_{17} 、酰基 Sub_{18} 、取代磷酰基 Sub_{19} 、酯基 Sub_{20} 、硅氧烷基 Sub_{21} 、氨基甲酰基 Sub_{22} 、未取代的氨基、未取代的甲硅烷基、卤素原子、氰基、羟基、硝基以及羧基构成的组中选择的至少一种基团。

[1152] 在本说明书中, “取代或未取代的”这样的情况下的取代基 R_{F1} 还可以是二芳基硼基 ($Ar_{B1}Ar_{B2}B^-$)。作为该 Ar_{B1} 以及 Ar_{B2} 的例子, 可例举上述芳基 Sub_1 。 $Ar_{B1}Ar_{B2}B^-$ 中的 Ar_{B1} 以及 Ar_{B2} 相同或不同。

[1153] 作为取代基 R_{F1} 的具体例以及优选的基团, 可例举与“各取代基的说明”中的取代基(例如芳基 Sub_1 、杂芳基 Sub_2 、烷基 Sub_3 、卤代烷基 Sub_4 、取代甲硅烷基 Sub_5 、烷基磺酰基 Sub_6 、

芳烷基Sub₇、烷氧基Sub₈、卤代烷氧基Sub₉、芳基烷氧基Sub₁₀、取代氨基Sub₁₁、烯基Sub₁₂、炔基Sub₁₃、烷硫基Sub₁₄、芳硫基Sub₁₅、取代膦基Sub₁₆、芳基羰基Sub₁₇、酰基Sub₁₈、取代磷酰基Sub₁₉、酯基Sub₂₀、硅氧烷基Sub₂₁以及氨基甲酰基Sub₂₂)的具体例以及优选的基团同样的基团。

[1154] “取代或未取代的”这样的情况下的取代基R_{F1}可以被从芳基Sub₁、杂芳基Sub₂、烷基Sub₃、卤代烷基Sub₄、取代甲硅烷基Sub₅、烷基磺酰基Sub₆、芳烷基Sub₇、烷氧基Sub₈、卤代烷氧基Sub₉、芳基烷氧基Sub₁₀、取代氨基Sub₁₁、烯基Sub₁₂、炔基Sub₁₃、烷硫基Sub₁₄、芳硫基Sub₁₅、取代膦基Sub₁₆、芳基羰基Sub₁₇、酰基Sub₁₈、取代磷酰基Sub₁₉、酯基Sub₂₀、硅氧烷基Sub₂₁、氨基甲酰基Sub₂₂、未取代的氨基、未取代的甲硅烷基、卤素原子、氰基、羟基、硝基以及羧基构成的组中选择的至少一种基团(以下也称为取代基R_{F2})进一步取代。此外,这些多个取代基R_{F2}也可以互相键合而形成环。

[1155] “取代或未取代的”这样的情况下的“未取代”是指未被所述取代基R_{F1}取代,而键合有氢原子。

[1156] 另外,本说明书中,“取代或未取代的碳数为XX~YY的ZZ基”的表述中的“碳数为XX~YY”表示ZZ基为未取代的情况下的碳数,不含取代的情况下的取代基R_{F1}的碳数。

[1157] 本说明书中,“取代或未取代的原子数为XX~YY的ZZ基”的表述中的“原子数为XX~YY”表示ZZ基为未取代的情况下的原子数,不含取代的情况下的取代基R_{F1}的原子数。

[1158] 在本说明书中说明的化合物或其局部结构中,对于“取代或未取代的”这样的情况,也与前述同样。

[1159] 本说明书中,在取代基彼此互相键合而构筑环的情况下,该环的结构为饱和环、不饱和环、芳香族烃环或杂环。

[1160] 本说明书中,作为连接基团中的芳香族烃基,例如可例举从上述的一价芳基Sub₁去除1个以上的原子而得到的二价以上的基团。

[1161] 本说明书中,作为连接基团中的杂环基,例如可例举从上述的一价杂芳基Sub₂去除1个以上的原子而得到的二价以上的基团。

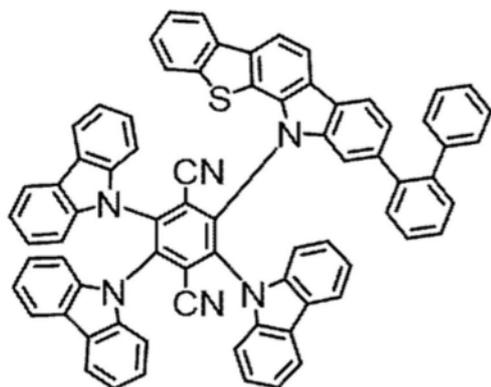
[1162] [实施例]

[1163] <化合物>

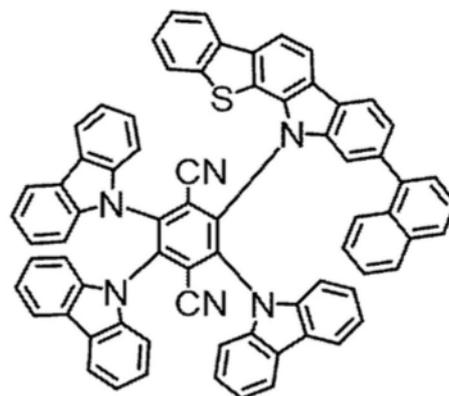
[1164] 实施例1~3的化合物的结构如下所示。实施例1~3的化合物根据合成实施例1~3来合成。

[1165] 化合物TADF1以及TADF3分别用于制造实施例1A以及实施例2A的有机EL元件。

[1166] [化130]

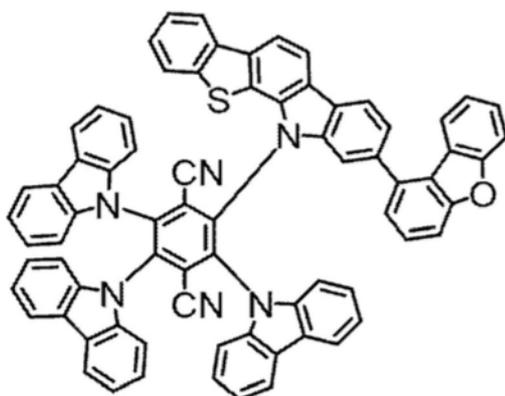


TADF1



TADF2

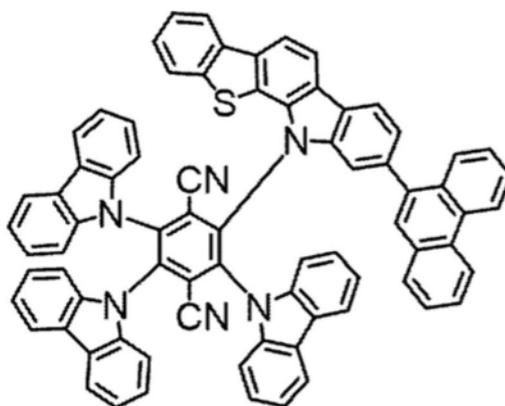
[1167]



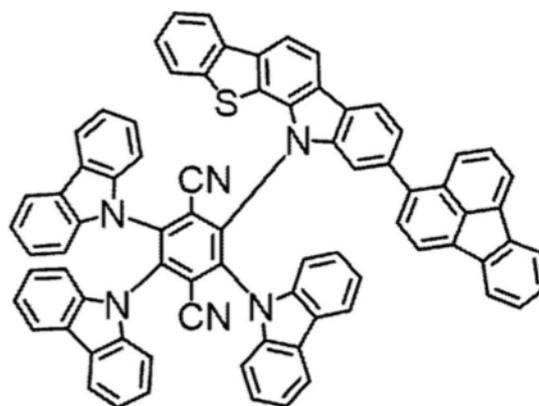
TADF3

[1168] 根据合成实施例4~5合成的化合物的结构如下所示。

[1169] [化131]



TADF4

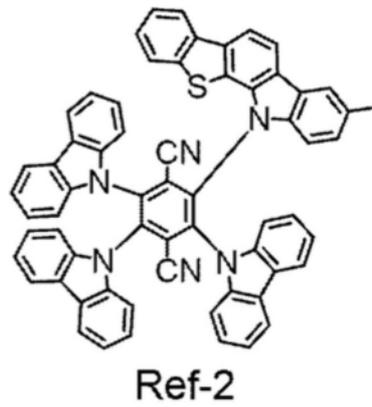
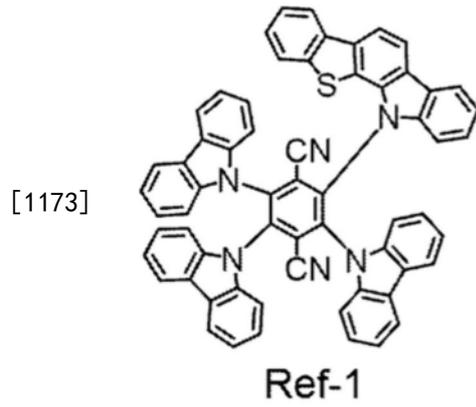


TADF5

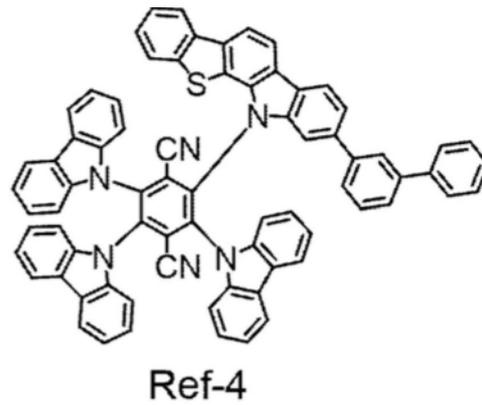
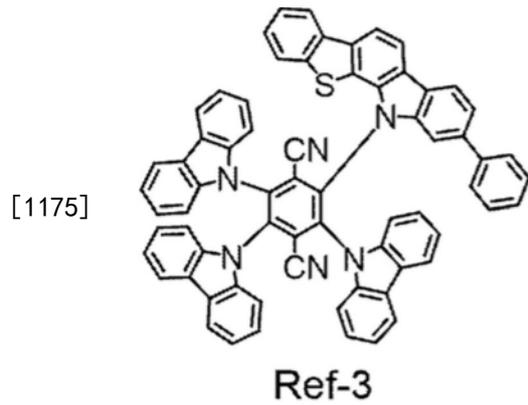
[1170]

[1171] 比较例1~6的化合物的结构如下所示。化合物Ref-3用于制造比较例1B的有机EL元件。

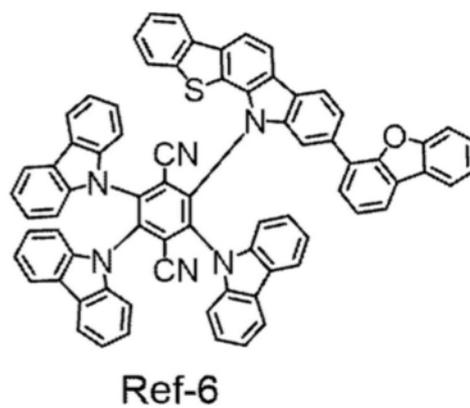
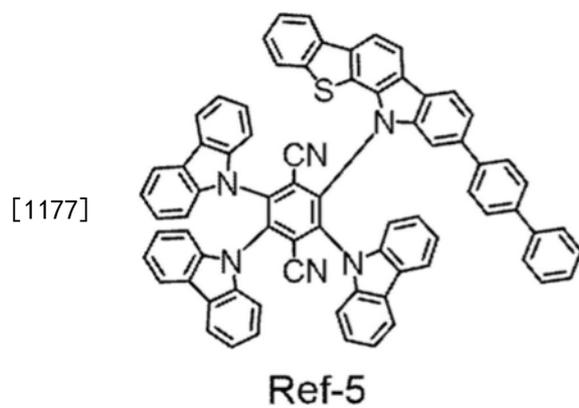
[1172] [化132]



[1174] [化133]



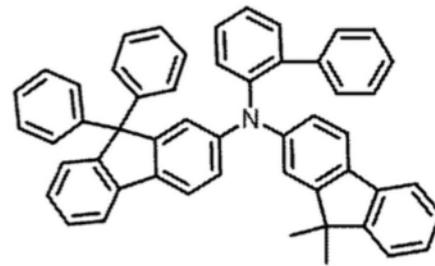
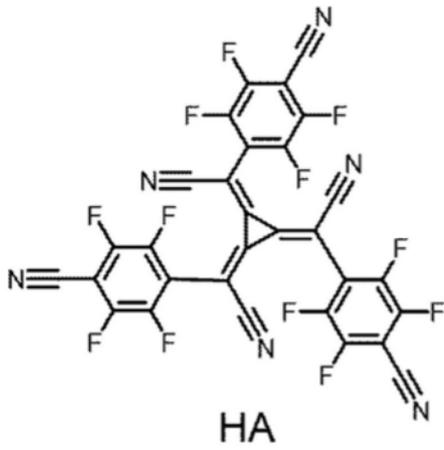
[1176] [化134]



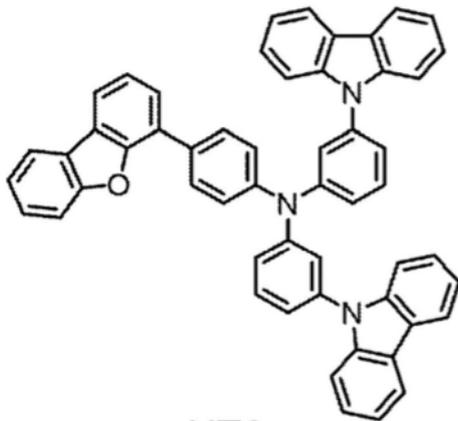
[1178] 用于制造实施例1A~2A以及比较例1B的有机EL元件的、其他化合物的结构如下所示。

[1179] [化135]

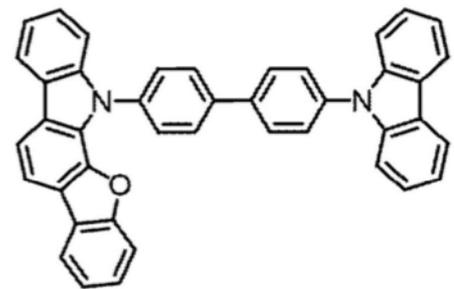
[1180]



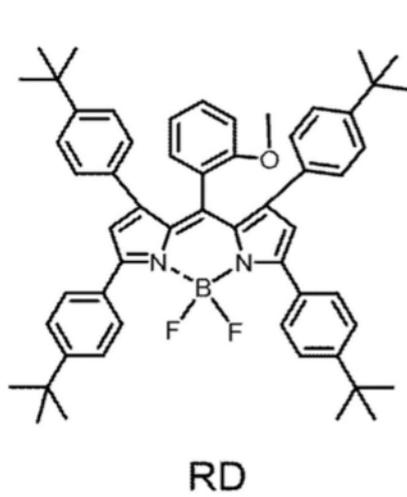
[1181] [化136]



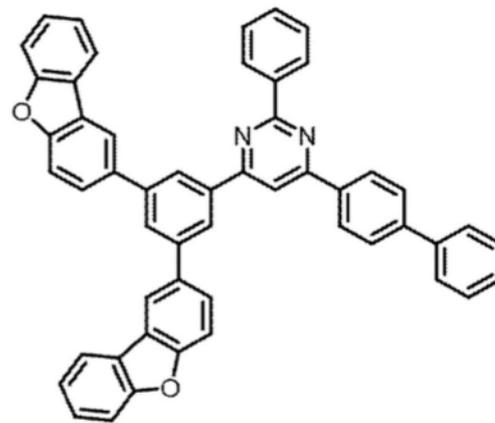
[1182]



[1183] [化137]

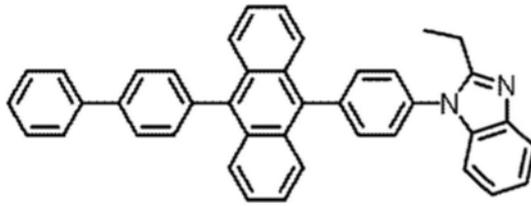


[1184]



[1185] [化138]

[1186]



ET2

[1187] <有机EL元件的制作>

[1188] 如下所述地制作有机EL元件并进行了评价。

[1189] (实施例1A)

[1190] 将25mm×75mm×1.1mm厚的带ITO透明电极(阳极)的玻璃基板(吉奥马科技株式会社制)在异丙醇中进行5分钟的超声波清洗后,进行1分钟的UV臭氧清洗。ITO的膜厚设为130nm。

[1191] 将清洗后的带透明电极线的所述玻璃基板安装于真空蒸镀装置的基板架,先以在形成有透明电极线的一侧的面上覆盖透明电极的方式共蒸镀化合物HT1与化合物HA,形成膜厚为10nm的空穴注入层。将空穴注入层中的化合物HT1的浓度设为97质量%,化合物HA的浓度设为3质量%。

[1192] 接着,在空穴注入层上蒸镀化合物HT1,在空穴注入层上形成膜厚为200nm的第一空穴传输层。

[1193] 接着,在该第一空穴传输层上蒸镀化合物HT2,形成膜厚为10nm的第二空穴传输层(有时也称为电子阻挡层)。

[1194] 接着,在该第二空穴传输层上对作为第一化合物的化合物TADF1、作为第二化合物的化合物RD与作为第三化合物的化合物HOST进行共蒸镀,形成膜厚为25nm的发光层。将发光层中的化合物TADF1的浓度设为25质量%,化合物RD的浓度设为1质量%,化合物HOST的浓度设为74质量%。

[1195] 接着,在该发光层上蒸镀化合物ET1,形成膜厚为10nm的第一电子传输层(有时也称为空穴阻挡层)。

[1196] 接着,在该第一电子传输层上蒸镀化合物ET2,形成膜厚为30nm的第二电子传输层。

[1197] 接着,在该第二电子传输层上蒸镀氟化锂(LiF),形成膜厚为1nm的电子注入性电极(阴极)。

[1198] 然后,在该电子注入性电极上蒸镀金属铝(Al),形成膜厚为80nm的金属Al阴极。

[1199] 若概略地示出实施例1A的有机EL元件的元件构成,则如下所示。

[1200] ITO(130)/HT1:HA(10,97%:3%)/HT1(200)/HT2(10)/HOST:TADF1:RD(25,74%:25%:1%)/ET1(10)/ET2(30)/LiF(1)/Al(80)

[1201] 另外,括号内的数字表示膜厚(单位:nm)。

[1202] 在同一个括号内,百分比表示的数字(97%:3%)示出空穴注入层中的化合物HT1以及化合物HA的比例(质量%),百分比表示的数字(74%:25%:1%)示出发光层中的化合物HOST、化合物TADF1以及化合物RD的比例(质量%)。

[1203] (实施例2A以及比较例1B)

[1204] 除了使实施例1A的发光层中的化合物TADF1被表1所记载的化合物取代以外,与实施例1A同样地制作实施例2A以及比较例1B的有机EL元件。

[1205] <有机EL元件的评价>

[1206] 对实施例1A~2A以及比较例1B中制作出的有机EL元件进行了以下的评价。将结果示出在表1。另外,虽然比较例1B中使用的化合物Ref-3不符合第一化合物的通式,但为了方便起见而标记在与实施例1A的化合物TADF1相同的列中。

[1207] • 外量子效率EQE

[1208] 用分光发射亮度计CS-2000(柯尼卡美能达株式会社制)测量对元件施加电压以使电流密度达到 $0.1\text{mA}/\text{cm}^2$ 或 $10\text{mA}/\text{cm}^2$ 时的分光发射亮度光谱。根据得到的分光发射亮度光谱,假定进行了朗伯(Lambertian)发射,从而计算出外量子效率EQE(单位:%)。

[1209] 以下,将电流密度为 $0.1\text{mA}/\text{cm}^2$ 时的外量子效率EQE(%)称为“低电流时的EQE(%)”。将电流密度为 $10\text{mA}/\text{cm}^2$ 时的外量子效率EQE(%)称为“高电流时的EQE(%)”。

[1210] 使用下述数学式(数100),将使比较例1B的“低电流时的EQE(%)”为100时的各例的“低电流时的EQE(%)”作为“低电流时的EQE(相对值:%)”求出。

[1211] 各例的低电流时的EQE(相对值:%) = (各例的低电流时的EQE(%)/比较例1B的低电流时的EQE(%)) × 100(数100)

[1212] 使用下述数学式(数101),将使比较例1B的“高电流时的EQE(%)”为100时的各例的“高电流时的EQE(%)”作为“高电流时的EQE(相对值:%)”求出。

[1213] 各例的高电流时的EQE(相对值:%) = (各例的高电流时的EQE(%)/比较例1B的高电流时的EQE(%)) × 100(数101)

[1214] • 色度 CIE_x 、 CIE_y 以及最大峰波长 λ_p

[1215] 使用分光发射亮度计CS-2000(柯尼卡美能达株式会社制)测量对元件施加电压以使电流密度达到 $10\text{mA}/\text{cm}^2$ 时的分光发射亮度光谱。根据得到的分光发射亮度光谱计算出色度 CIE_x 、 CIE_y 以及最大峰波长 λ_p (单位:nm)。

[1216] [表1]

	发光层			评价				
	第一化合物	第二化合物	第三化合物	EQE		CIE_x	CIE_y	λ_p [nm]
				低电流时 (相对值:%)	高电流时 (相对值:%)			
[1217] 实施例1A	TADF1	RD	HOST	107	103	0.66	0.34	622
实施例2A	TADF3	RD	HOST	102	106	0.66	0.34	622
比较例1B	Ref-3	RD	HOST	100	100	0.67	0.33	623

[1218] 实施例1A~2A的有机EL元件与比较例1B的有机EL元件相比,无论是在低电流时(电流密度为 $0.1\text{mA}/\text{cm}^2$)还是在高电流时(电流密度为 $10\text{mA}/\text{cm}^2$)时,外量子效率EQE均提高。

[1219] <化合物的评价>

[1220] (甲苯溶液的制备)

[1221] 将化合物TADF1溶解在甲苯中,以使浓度达到 $5\mu\text{mol}/\text{L}$,制备化合物TADF1的甲苯溶

液。其后,将制备后的溶液进行5分钟的氮气鼓泡,并进行密闭以使外部空气不混入。

[1222] 对于化合物TADF2~TADF3以及Ref-1~Ref-6,也分别与化合物TADF1同样地制备甲苯溶液。其后,将制备后的溶液进行5分钟的氮气鼓泡,并进行密闭以使外部空气不混入。

[1223] (荧光量子产率(PLQY)的测量)

[1224] 对于制备出的化合物TADF1~TADF3以及Ref-1~Ref-6的甲苯溶液,分别使用绝对PL(Photoluminescence:光致发光)量子产率测量装置Quantaaurus-QY(滨松光子学株式会社制)测量PLQY。

[1225] 将测量结果示出在表2。

[1226] (化合物的最大峰波长)

[1227] 制备作为测量对象的化合物的5 μ mol/L甲苯溶液并放入石英池,在常温(300K)下测量该试样的荧光光谱(设有纵轴:荧光发光强度,横轴:波长)。在本实施例中,通过日立公司制的分光光度计(装置名:F-7000)测量荧光光谱。另外,荧光光谱测量装置并不限定于在此使用的装置。在荧光光谱中,将发光强度为最大的荧光光谱的峰波长作为最大峰波长。

[1228] 将测量结果示出在表2。

[1229] (热活化延迟荧光性)

[1230] • 化合物TADF1的延迟荧光性

[1231] 延迟荧光性通过利用图2所示的装置测量过渡PL来确认。将所述化合物TADF1溶解在甲苯中,为了消除自吸收的影响,制备在激发波长下吸光度为0.05以下的稀溶液。此外,为了防止氧引起的消光,将试样溶液冻结排气后在氩气气氛下封入带盖的池中,由此制成通过氩气饱和的无氧的试样溶液。

[1232] 用分光荧光光度计FP-8600(日本分光公司制)测量上述试样溶液的荧光光谱,此外在相同条件下测量9,10-二苯葱的乙醇溶液的荧光光谱。使用两个光谱的荧光面积强度,根据Morris等,《J.Phys.Chem.》,80(1976)969中的(1)式计算出全荧光量子产率。

[1233] 在被所述化合物TADF1吸收的波长的脉冲光(从脉冲激光照射的光)激发后,存在从该激发状态立即观察到的Prompt发光(即时发光)和该激发后不能立即观察到而在其后观察到的Delay发光(延迟发光)。本实施例中的延迟荧光发光是指Delay发光(延迟发光)的量相对于Prompt发光(即时发光)的量为5%以上。具体而言,表示将Prompt发光(即时发光)的量记作 X_p 、将Delay发光(延迟发光)的量记作 X_d 时, X_d/X_p 的值为0.05以上。

[1234] Prompt发光与Delay发光的量与两者之比能够通过“《Nature》492,234-238,2012”(参考文献1)中所记载的方法同样的方法求出。另外,用于计算出Prompt发光和Delay发光的量的装置并不限定于所述参考文献1中记载的装置或图2中记载的装置。

[1235] 对于化合物TADF1,确认到Delay发光(延迟发光)的量相对于Prompt发光(即时发光)的量为5%以上。

[1236] 具体而言,对于化合物TADF1,确认到 X_d/X_p 的值为0.05以上。

[1237] • 化合物TADF2~3以及比较化合物Ref-1~Ref-6的延迟荧光性

[1238] 除了分别使用化合物TADF2~3以及比较化合物Ref-1~Ref-6来代替化合物TADF1以外,与上述同样地确认了化合物TADF2~3以及比较化合物Ref-1~Ref-6的延迟荧光性。

[1239] 对于化合物TADF2~3以及比较化合物Ref-1~Ref-6, X_d/X_p 的值均为0.05以上。

[1240] (单重态能量 S_1)

[1241] 化合物TADF2~3以及比较化合物Ref-1~Ref-6的单重态能量 S_1 通过所述的溶液法来测量。将测量结果示出在表2。

[1242] (ΔST)

[1243] 测量化合物TADF2~3以及比较化合物Ref-1~Ref-6的 T_{77K} ，根据该结果与上述的单重态能量 S_1 的值确认 ΔST 。

[1244] 利用上述的“三重态能量与77[K]时的能隙的关系”中所记载的能隙 T_{77K} 的测量方法测量化合物TADF2~3以及比较化合物Ref-1~Ref-6的 T_{77K} 。

[1245] 将测量结果示出在表2。

[1246] [表2]

	种类	S_1 [eV]	ΔST [eV]	主峰波长 [nm]	PLQY	
[1247]	实施例1	TADF1	2.34	<0.01	539	0.48
	实施例2	TADF2	2.34	<0.01	538	0.48
	实施例3	TADF3	2.34	<0.01	538	0.58
	比较例1	Ref-1	2.34	<0.01	539	0.39
	比较例2	Ref-2	2.32	<0.01	545	0.27
	比较例3	Ref-3	2.34	<0.01	539	0.38
	比较例4	Ref-4	2.34	<0.01	540	0.40
	比较例5	Ref-5	2.34	<0.01	540	0.33
	比较例6	Ref-6	2.34	<0.01	541	0.39

[1248] • 表中的说明

[1249] “<0.01”表示小于0.01eV。

[1250] 如表2所示，根据实施例1~3的化合物TADF1~TADF3，与比较化合物Ref-1~Ref-6相比，PLQY得到提高。

[1251] 实施例1~3的化合物TADF1~TADF3与比较例1~6的化合物Ref-1~Ref-6的不同点仅在于有无以通式(110)或(120)表示的基团。因此，可知通过以通式(110)或(120)表示的基团，PLQY提高。

[1252] 特别地，根据实施例1与比较例4、5的对比可知，相对于具有通式(120)的化合物TADF1，与通式(120)类似但 Z_2 的键合位置不同的化合物Ref-4以及Ref-5的PLQY较差。

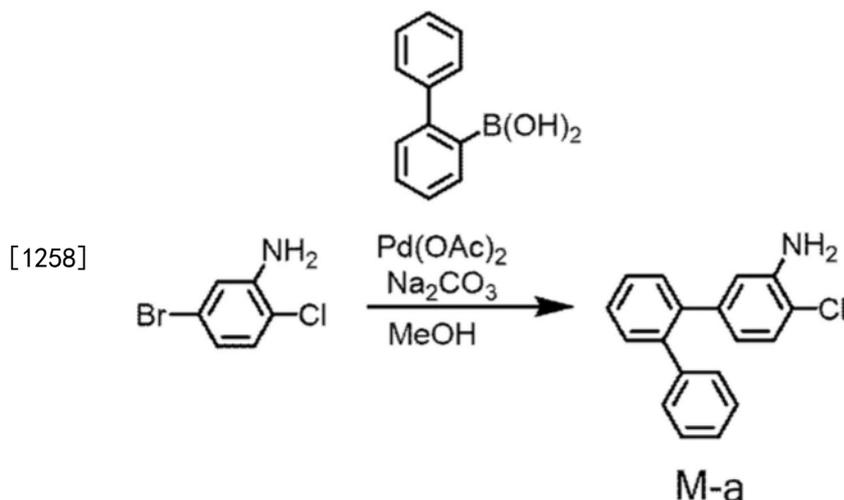
[1253] 此外，特别地，根据实施例3与比较例6的对比可知，相对于具有1-二苯并咪唑基作为通式(110)的化合物TADF3，具有同样是二苯并咪唑基但不属于通式(110)的4-二苯并咪唑基的化合物Ref-6的PLQY较差。

[1254] <化合物的合成>

[1255] {合成实施例1}

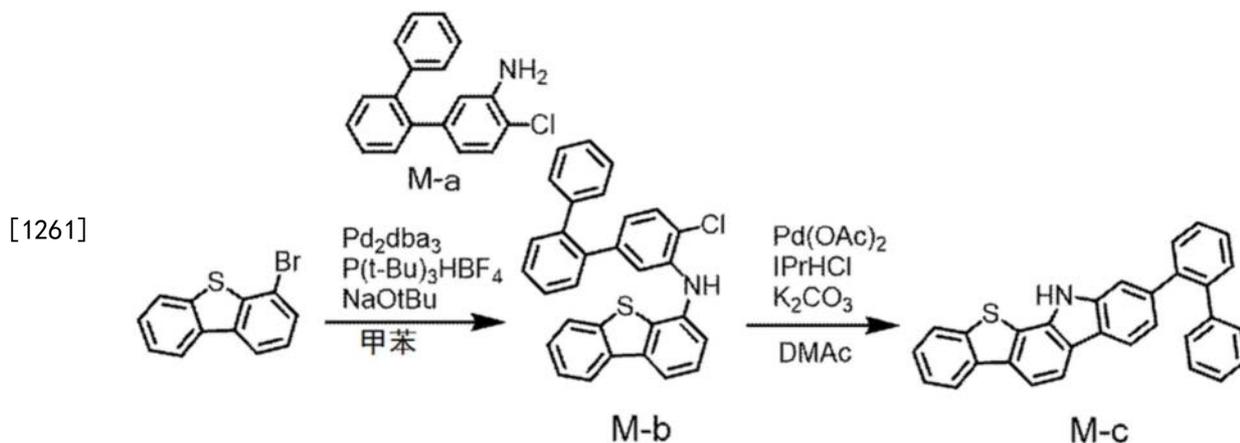
[1256] 在以下说明化合物TADF1的合成方法。

[1257] [化139]



[1259] 在氮气气氛下,在300mL的三口烧瓶中,加入5-溴-2-氯-苯胺(10g,49mmol)、2-联苯硼酸(9.7g,49mmol)、乙酸钯(0.11g,0.5mmol)、碳酸钠(10g,98mmol)以及100mL甲醇,在80℃下搅拌6小时。向反应混合物中加入100mL离子交换水,通过硅胶柱色谱法对析出的固体进行纯化,得到13.3g白色固体。通过GC-MS(Gas Chromatograph Mass Spectrometer:气相色谱-质谱仪)的分析,鉴定为化合物M-a(收率97%)。

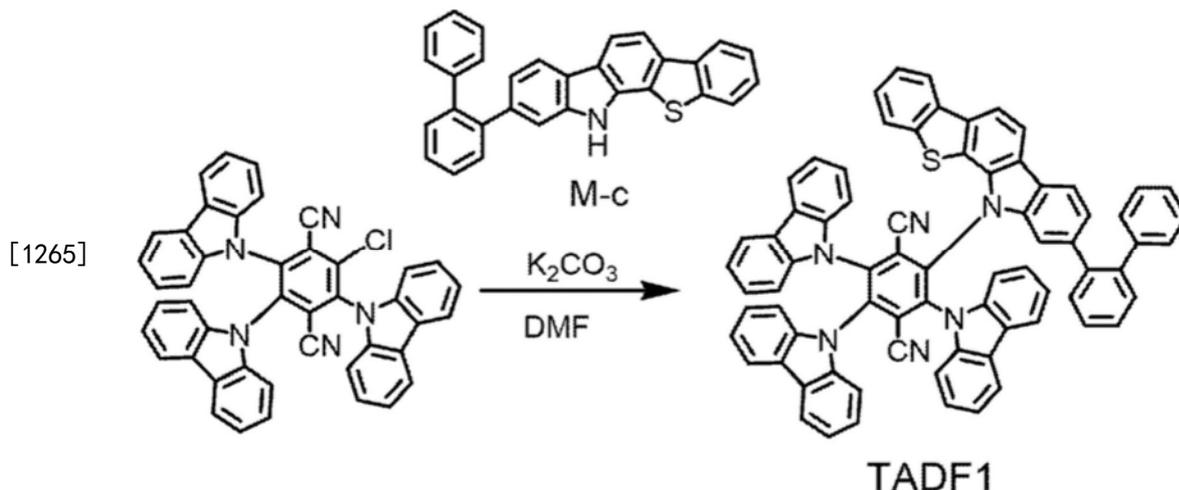
[1260] [化140]



[1262] 在氮气气氛下,在200mL的三口烧瓶中,加入4-溴二苯并噻吩(10g,38mmol)、化合物M-a(11g,38mmol)、三(二亚苄基丙酮)二钯(Pd_2dba_3)(0.35g,0.38mmol)、四氟硼酸三叔丁基膦($\text{P}(\text{t-Bu})_3\text{HBF}_4$)(0.44g,1.5mmol)、叔丁醇钠(NaOtBu)(5.5g,57mmol)以及120mL甲苯,在60℃下加热搅拌4小时后冷却至室温(25℃)。通过硅胶柱色谱法纯化反应溶液,得到16g白色固体。通过GC-MS的分析,鉴定为化合物M-b(收率91%)。

[1263] 在氮气气氛下,在200mL的三口烧瓶中,加入化合物M-b(16g,35mmol)、1,3-双(2,6-二异丙基苯基)氯化咪唑(IPrHCl)(0.30g,0.70mmol)、乙酸钯(II)($\text{Pd}(\text{OAc})_2$)(78mg,0.35mmol)、碳酸钾(9.7g,70mmol)以及100mL的N,N-二甲基乙酰胺(DMAc),在160℃下搅拌3小时后冷却至室温(25℃)。通过硅胶柱色谱法纯化反应溶液,得到10.6g白色固体。通过GC-MS的分析,鉴定为化合物M-c(收率72%)。

[1264] [化141]

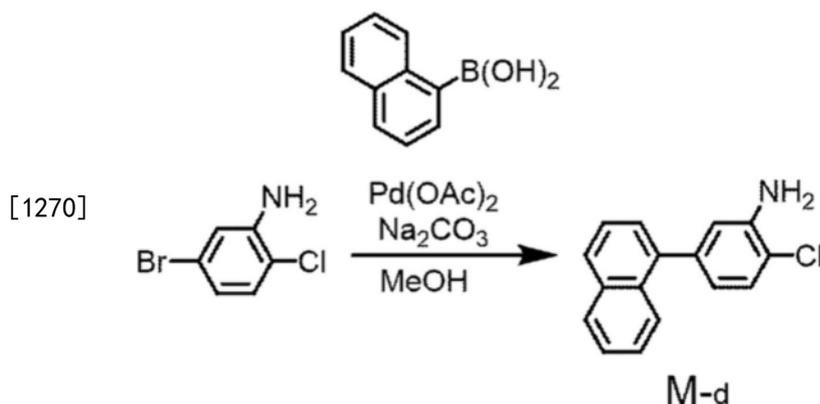


[1266] 在氮气气氛下,在50mL的三口烧瓶中,加入1,4-苯二甲腈,2,3,5-三-9H-咔唑-9-基-6-氯-(3.0g,4.6mmol)、化合物M-c(2.4g,5.5mmol)、碳酸钾(1.1g,8.2mmol)以及20mL的DMF,在120℃下搅拌4小时。向反应混合物中加入10ml饱和氯化铵水溶液,通过硅胶柱色谱法对析出的固体进行纯化,得到4.2g红色固体。通过ASAP-MS(Atmospheric Pressure Solid Analysis Probe Mass Spectrometry:大气压固体分析探针质谱法)的分析,鉴定为TADF1(收率88%)。

[1267] (合成实施例2)

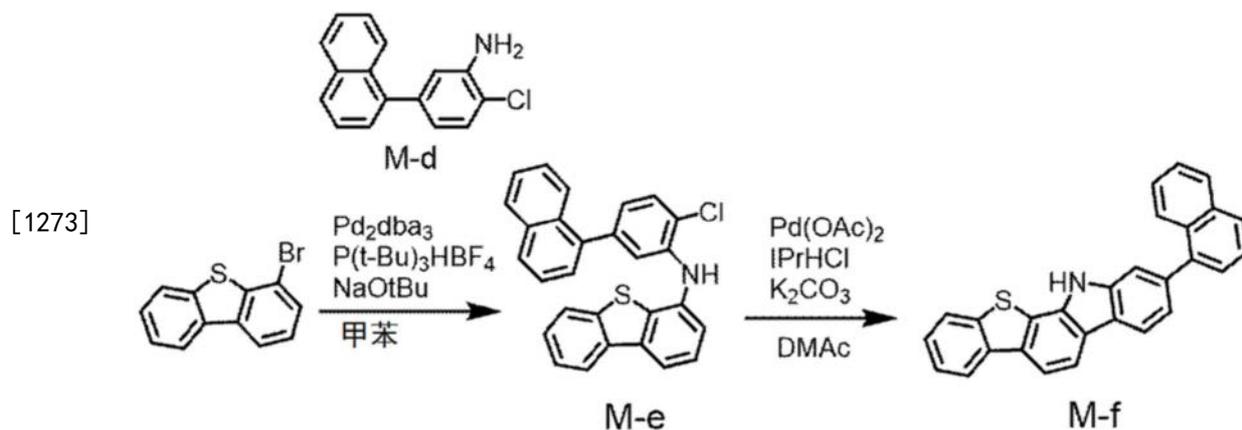
[1268] 在以下说明化合物TADF2的合成方法。

[1269] [化142]



[1271] 在氮气气氛下,在300mL的三口烧瓶中,加入5-溴-2-氯-苯胺(10g,49mmol)、1-萘硼酸(8.4g,49mmol)、乙酸钯(0.11g,0.5mmol)、碳酸钠(10g,98mmol)以及100mL甲醇,在80℃下搅拌6小时。向反应混合物中加入100mL离子交换水,通过硅胶柱色谱法对析出的固体进行纯化,得到9.6g白色固体。通过GC-MS的分析,鉴定为化合物M-d(收率77%)。

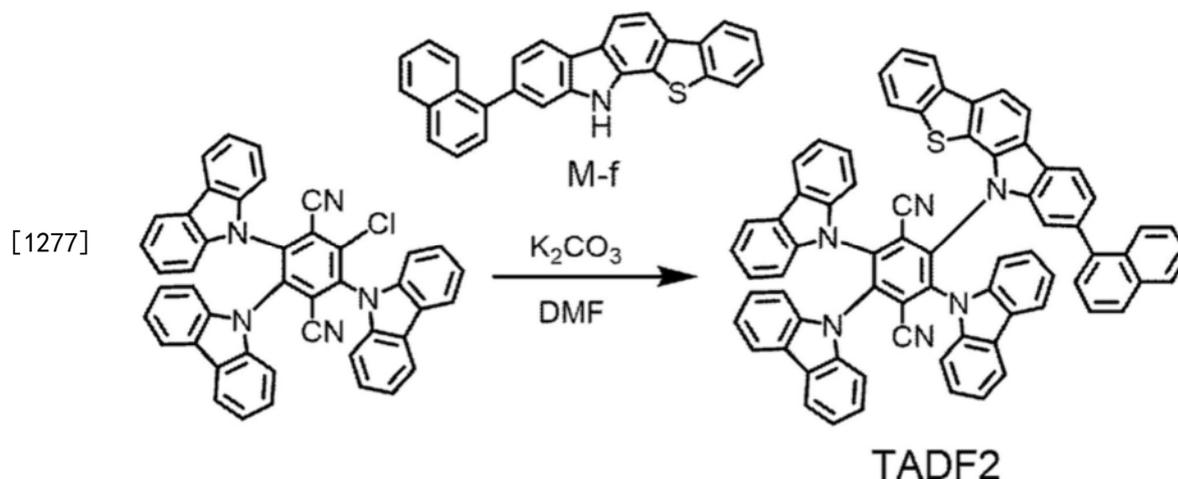
[1272] [化143]



[1274] 在氮气气氛下,在200mL的三口烧瓶中,加入4-溴二苯并噻吩(9.2g,35mmol)、化合物M-d(9.6g,35mmol)、三(二亚苄基丙酮)二钯(0) (Pd_2dba_3) (0.32g,0.35mmol)、四氟硼酸三叔丁基膦 ($\text{P}(\text{t-Bu})_3\text{HBF}_4$) (0.41g,1.4mmol)、叔丁醇钠(NaOtBu) (5.0g,53mmol)以及100mL甲苯,在60℃下加热搅拌4小时后冷却至室温(25℃)。通过硅胶柱色谱法纯化反应溶液,得到14g白色固体。通过GC-MS的分析,鉴定为化合物M-e(收率94%)。

[1275] 在氮气气氛下,在200mL的三口烧瓶中,加入化合物M-e(14g,33mmol)、1,3-双(2,6-二异丙基苯基)氯化咪唑 (IPrHCl) (0.30g,0.70mmol)、乙酸钯(II) ($\text{Pd}(\text{OAc})_2$) (78mg,0.35mmol)、碳酸钾(9.7g,70mmol)以及100mL的N,N-二甲基乙酰胺(DMAc),在160℃下搅拌3小时后冷却至室温(25℃)。通过硅胶柱色谱法纯化反应溶液,得到11.2g白色固体。通过GC-MS的分析,鉴定为化合物M-f(收率85%)。

[1276] [化144]

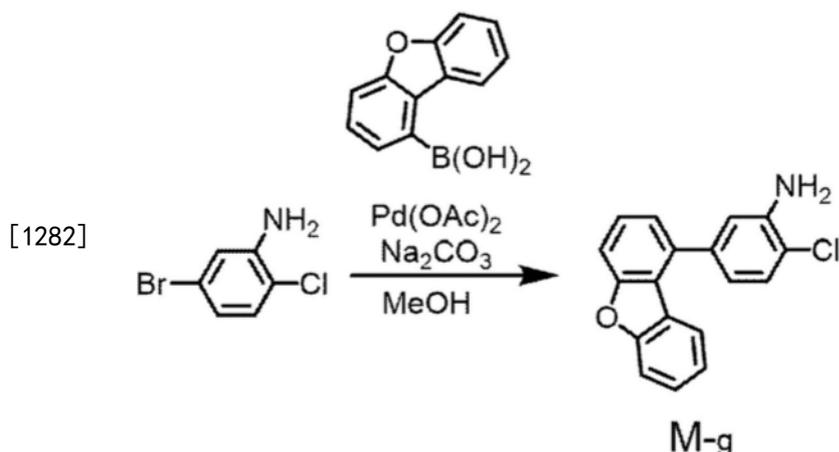


[1278] 在氮气气氛下,在50mL的三口烧瓶中,加入1,4-苯二甲腈,2,3,5-三-9H-咪唑-9-基-6-氯-(3.0g,4.6mmol)、化合物M-f(2.2g,5.5mmol)、碳酸钾(1.1g,8.2mmol)以及20mL的DMF,在120℃下搅拌4小时。向反应混合物中加入10ml饱和氯化铵水溶液,通过硅胶柱色谱法对析出的固体进行纯化,得到3.8g红色固体。通过ASAP-MS的分析,鉴定为TADF2(收率80%)。

[1279] (合成实施例3)

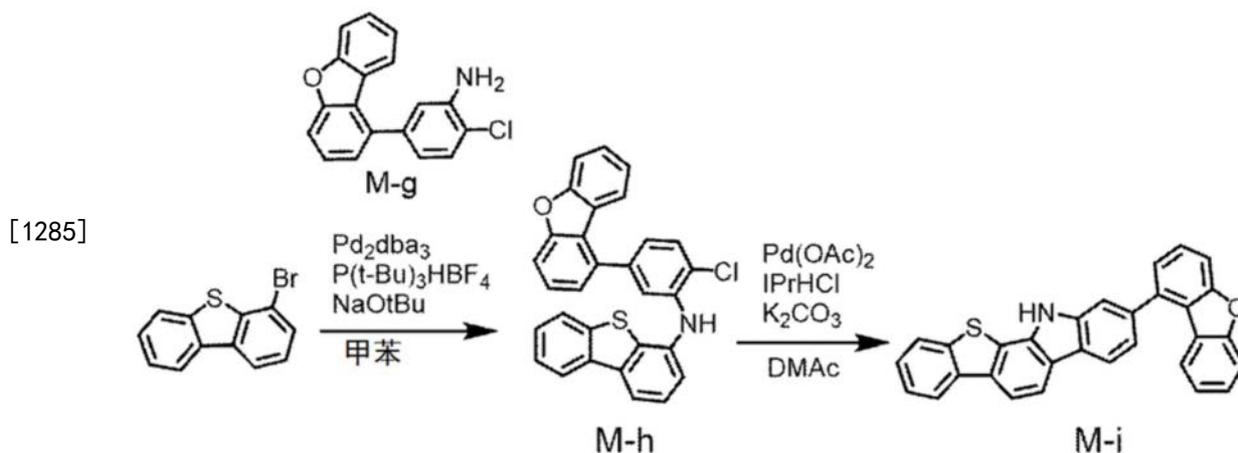
[1280] 在以下说明化合物TADF3的合成方法。

[1281] [化145]



[1283] 在氮气气氛下,在300mL的三口烧瓶中,加入5-溴-2-氯-苯胺(10g,49mmol)、1-二苯并呋喃硼酸(10.4g,49mmol)、乙酸钯(0.11g,0.5mmol)、碳酸钠(10g,98mmol)以及100mL甲醇,在80℃下搅拌8小时。向反应混合物中加入100mL离子交换水,通过硅胶柱色谱法对析出的固体进行纯化,得到13.7g白色固体。通过GC-MS的分析,鉴定为化合物M-g(收率95%)。

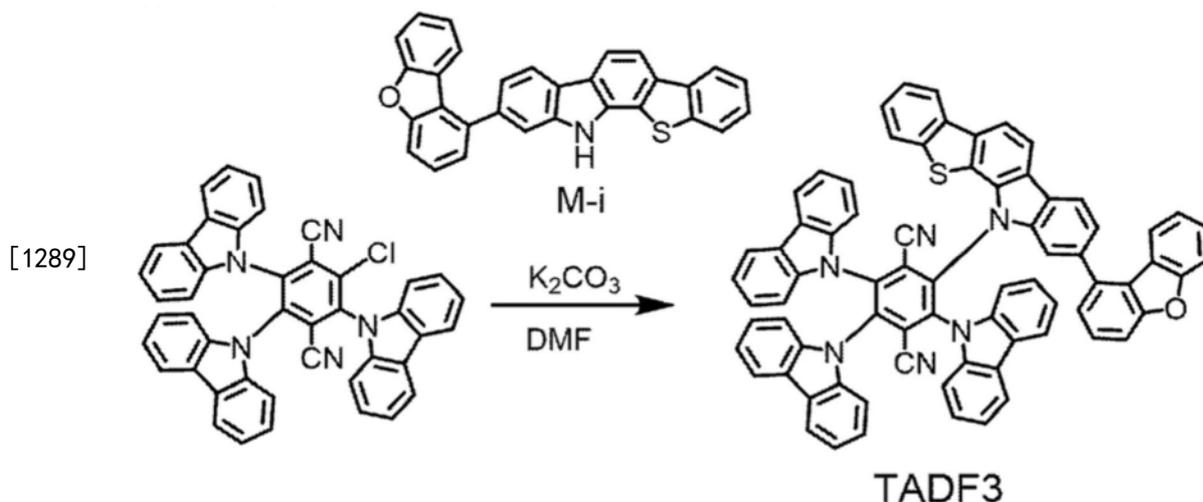
[1284] [化146]



[1286] 在氮气气氛下,在200mL的三口烧瓶中,加入4-溴二苯并噻吩(10g,38mmol)、化合物M-g(11.2g,38mmol)、三(二亚苄基丙酮)二钯(0)(Pd_2dba_3)(0.35g,0.38mmol)、四氟硼酸三叔丁基膦($\text{P}(\text{t-Bu})_3\text{HBF}_4$)(0.44g,1.5mmol)、叔丁醇钠(NaOtBu)(5.5g,57mmol)以及120mL甲苯,在60℃下加热搅拌4小时后冷却至室温(25℃)。通过硅胶柱色谱法纯化反应溶液,得到17.7g白色固体。通过GC-MS的分析,鉴定为化合物M-h(收率98%)。

[1287] 在氮气气氛下,在200mL的三口烧瓶中,加入化合物M-h(17.7g,37.2mmol)、1,3-双(2,6-二异丙基苯基)氯化咪唑(IPrHCl)(0.32g,0.74mmol)、乙酸钯(II)($\text{Pd}(\text{OAc})_2$)(84mg,0.37mmol)、碳酸钾(10.2g,74mmol)以及100mL的N,N-二甲基乙酰胺(DMAc),在160℃下搅拌3小时后冷却至室温(25℃)。通过硅胶柱色谱法纯化反应溶液,得到14.4g白色固体。通过GC-MS的分析,鉴定为化合物M-i(收率88%)。

[1288] [化147]

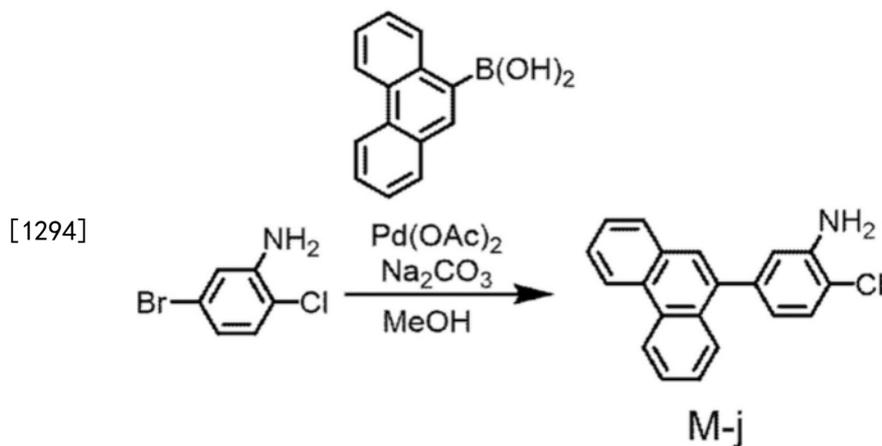


[1290] 在氮气气氛下,在50mL的三口烧瓶中,加入1,4-苯二甲腈,2,3,5-三-9H-咪唑-9-基-6-氯-(3.0g,4.6mmol)、化合物M-i (2.4g,5.5mmol)、碳酸钾(1.1g,8.2mmol)以及20mL的DMF,在120℃下搅拌4小时。向反应混合物中加入10ml饱和氯化铵水溶液,通过硅胶柱色谱法对析出的固体进行纯化,得到3.5g红色固体。通过ASAP-MS的分析,鉴定为TADF3(收率71%)。

[1291] (合成实施例4)

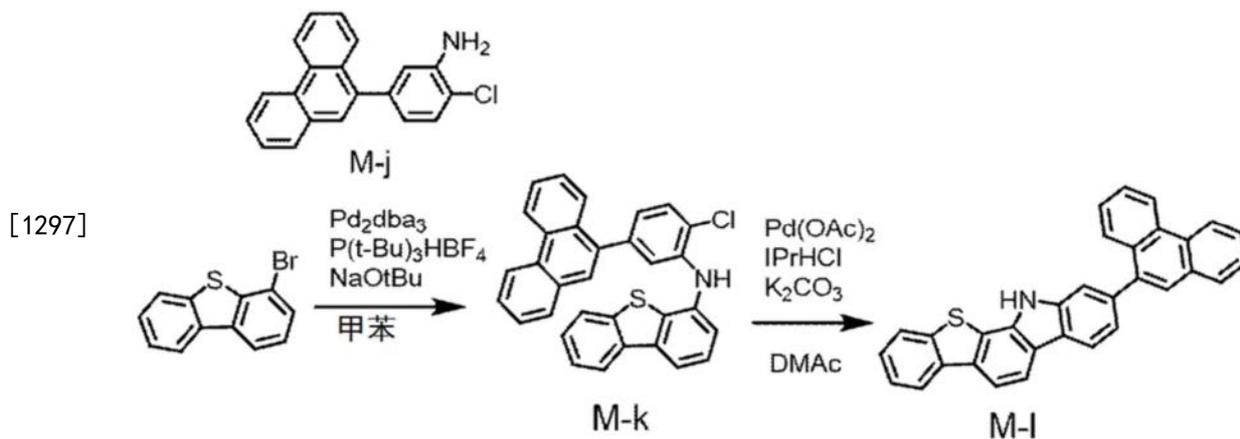
[1292] 在以下说明化合物TADF4的合成方法。

[1293] [化148]



[1295] 在氮气气氛下,在300mL的三口烧瓶中,加入5-溴-2-氯-苯胺(10g,49mmol)、9-菲硼酸(10.8g,49mmol)、乙酸钯(0.11g,0.5mmol)、碳酸钠(10g,98mmol)以及100mL甲醇,在80℃下搅拌6小时。向反应混合物中加入100mL离子交换水,通过硅胶柱色谱法对析出的固体进行纯化,得到13.4g白色固体。通过GC-MS的分析,鉴定为化合物M-j(收率90%)。

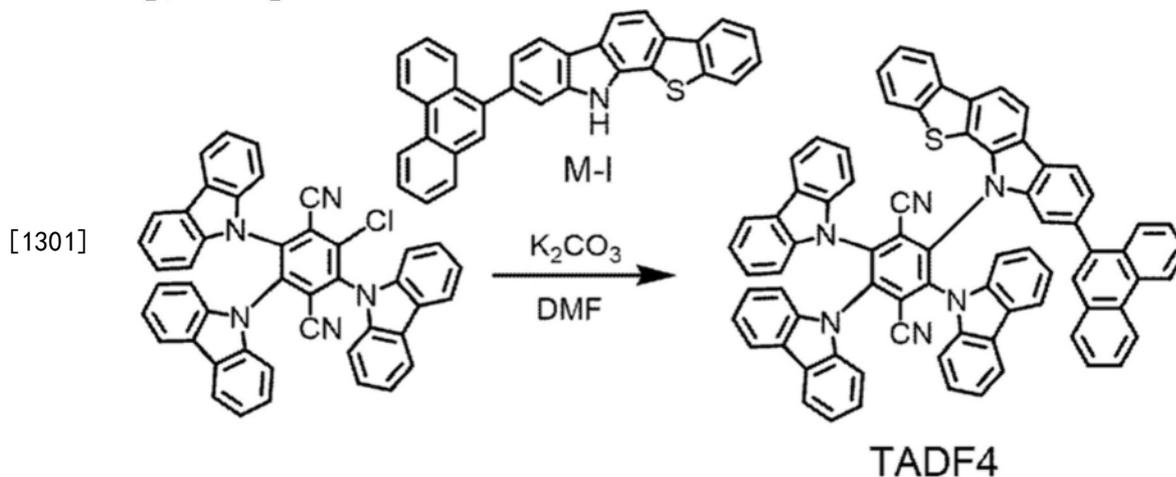
[1296] [化149]



[1298] 在氮气气氛下,在200mL的三口烧瓶中,加入4-溴二苯并噻吩(10g,38mmol)、化合物M-j(11.6g,38mmol)、三(二亚苄基丙酮)二钯(0) (Pd_2dba_3) (0.35g,0.38mmol)、四氟硼酸三叔丁基膦 ($\text{P}(\text{t-Bu})_3\text{HBF}_4$) (0.44g,1.5mmol)、叔丁醇钠 (NaOtBu) (5.5g,57mmol) 以及120mL 甲苯,在60℃下加热搅拌4小时后冷却至室温(25℃)。通过硅胶柱色谱法纯化反应溶液,得到16.4g白色固体。通过GC-MS的分析,鉴定为化合物M-k(收率89%)。

[1299] 在氮气气氛下,在200mL的三口烧瓶中,加入化合物M-k(16.4g,33.8mmol)、1,3-双(2,6-二异丙基苯基)氯化咪唑 (IPrHCl) (0.29g,0.68mmol)、乙酸钯(II) ($\text{Pd}(\text{OAc})_2$) (77mg,0.34mmol)、碳酸钾(9.4g,68mmol) 以及100mL的N,N-二甲基乙酰胺(DMAc),在160℃下搅拌3小时后冷却至室温(25℃)。通过硅胶柱色谱法纯化反应溶液,得到10.5g白色固体。通过GC-MS的分析,鉴定为化合物M-l(收率69%)。

[1300] [化150]

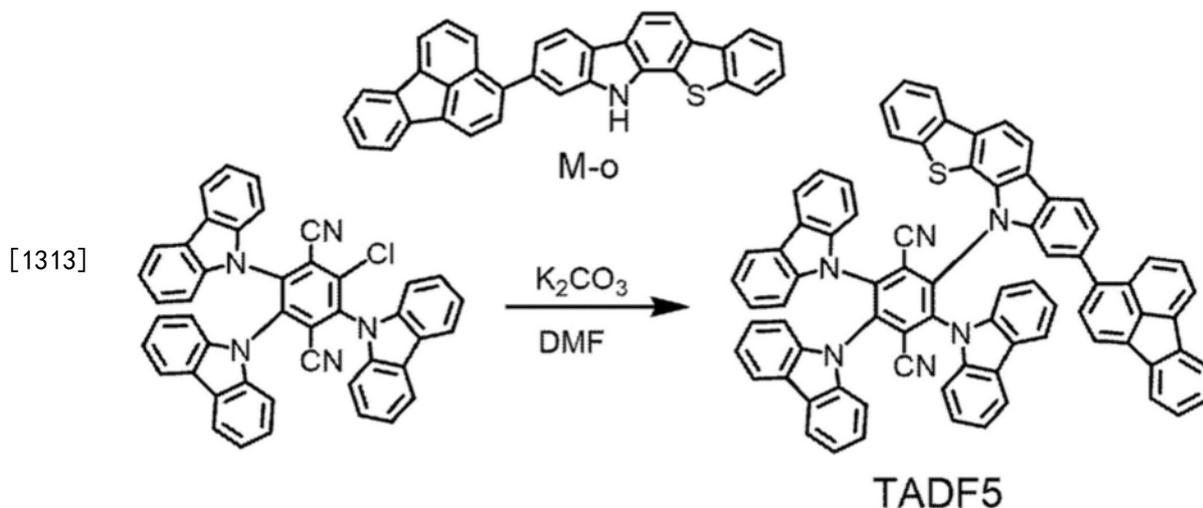


[1302] 在氮气气氛下,在50mL的三口烧瓶中,加入1,4-苯二甲腈,2,3,5-三-9H-咪唑-9-基-6-氯-(3.0g,4.6mmol)、化合物M-l(2.5g,5.5mmol)、碳酸钾(1.1g,8.2mmol) 以及20mL的DMF,在120℃下搅拌4小时。向反应混合物中加入10ml饱和氯化铵水溶液,通过硅胶柱色谱法对析出的固体进行纯化,得到4.1g红色固体。通过ASAP-MS的分析,鉴定为TADF4(收率84%)。

[1303] (合成实施例5)

[1304] 在以下说明化合物TADF5的合成方法。

[1305] [化151]



[1314] 在氮气气氛下,在50mL的三口烧瓶中,加入1,4-苯二甲腈,2,3,5-三-9H-吡啶-9-基-6-氯- (3.0g,4.6mmol)、化合物M-o (2.6g,5.5mmol)、碳酸钾 (1.1g,8.2mmol) 以及20mL的DMF,在120℃下搅拌4小时。向反应混合物中加入10ml饱和氯化铵水溶液,通过硅胶柱色谱法对析出的固体进行纯化,得到3.0g红色固体。通过ASAP-MS的分析,鉴定为TADF5 (收率66%)。

[1315] (比较合成例1)

[1316] 比较化合物Ref-1根据W02020/022378A1中记载的合成实施例21来合成。

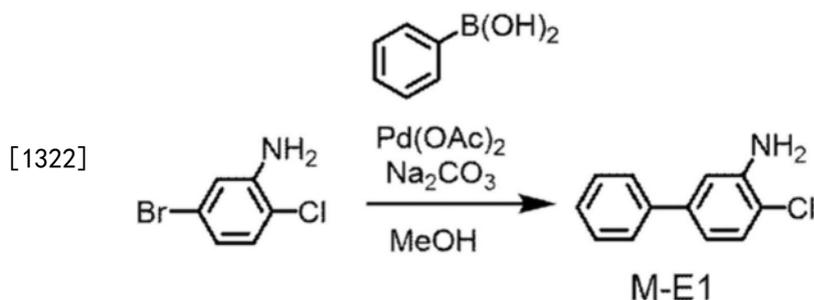
[1317] (比较合成例2)

[1318] 比较化合物Ref-2根据W02020/022378A1中记载的合成实施例22来合成。

[1319] (比较合成例3)

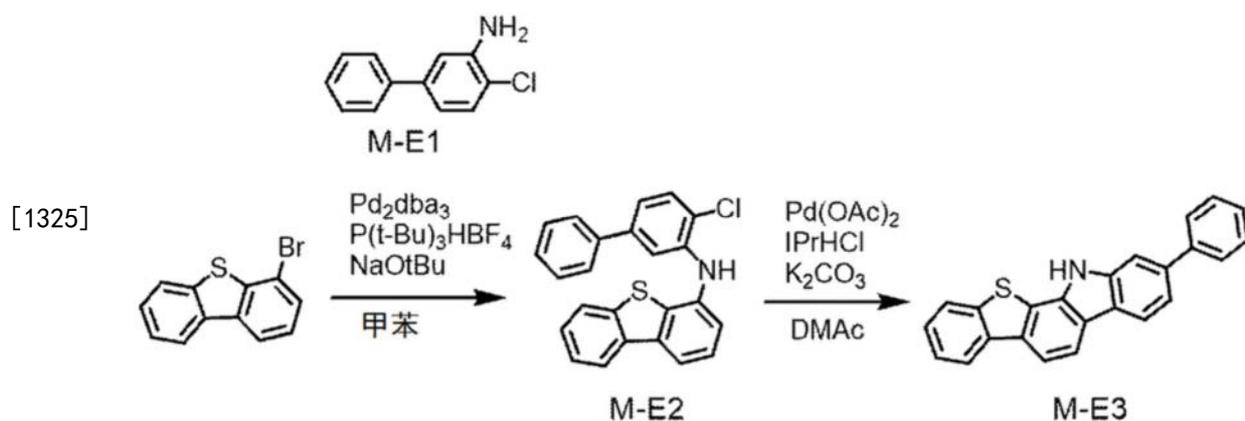
[1320] 在以下说明比较化合物Ref-3的合成方法。

[1321] [化154]



[1323] 在氮气气氛下,在500mL的三口烧瓶中,加入5-溴-2-氯-苯胺 (50g,242mmol)、苯硼酸 (32.5g,266mmol)、乙酸钡 (1.4g,6.2mmol)、碳酸钠 (50g,484mmol) 以及250mL甲醇,在80℃下搅拌6小时。向反应混合物中加入100mL离子交换水,通过硅胶柱色谱法对析出的固体进行纯化,得到39.5g白色固体。通过GC-MS的分析,鉴定为化合物M-E1 (收率80%)。

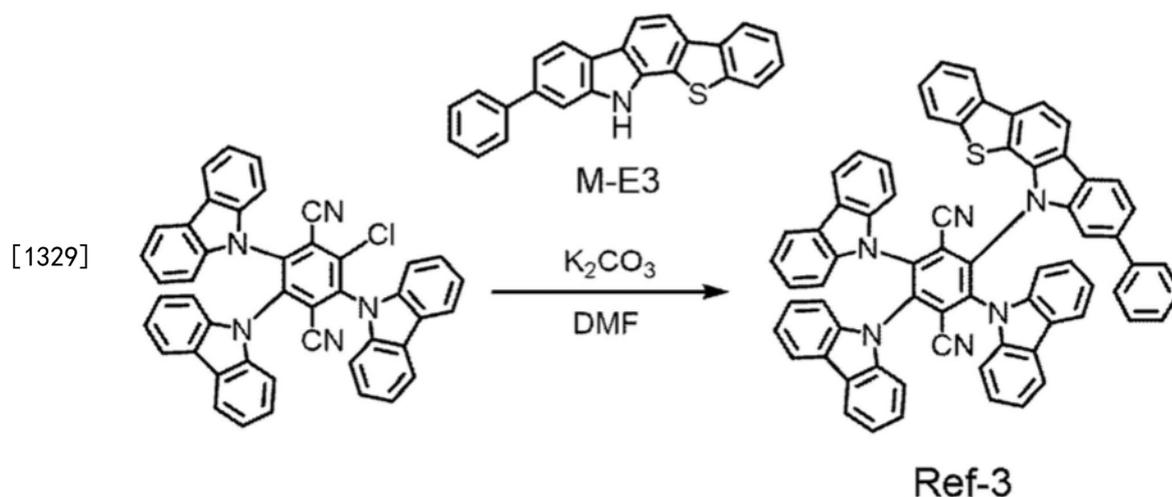
[1324] [化155]



[1326] 在氮气气氛下,在200mL的三口烧瓶中,加入4-溴二苯并噻吩(12.9g,49.1mmol)、化合物M-E1(10g,49.1mmol)、三(二亚苄基丙酮)二钯(0)(Pd₂dba₃)(0.67g,0.74mmol)、四氟硼酸三叔丁基膦(P(t-Bu)₃HBF₄)(0.85g,2.95mmol)、叔丁醇钠(NaOtBu)(7.1g,73.7mmol)以及130mL甲苯,在60℃下加热搅拌7小时后冷却至室温(25℃)。通过硅胶柱色谱法纯化反应溶液,得到18g白色固体。通过GC-MS的分析,鉴定为化合物M-E2(收率93%)。

[1327] 在氮气气氛下,在200mL的三口烧瓶中,加入化合物M-E2(10g,26mmol)、1,3-双(2,6-二异丙基苯基)氯化咪唑(IPrHCl)(0.22g,0.52mmol)、乙酸钯(II)(Pd(OAc)₂)(58mg,0.26mmol)、碳酸钾(7.1g,52mmol)以及90mL的N,N-二甲基乙酰胺(DMAc),在160℃下搅拌3小时后冷却至室温(25℃)。通过硅胶柱色谱法纯化反应溶液,得到7.9g白色固体。通过GC-MS的分析,鉴定为化合物M-E3(收率87%)。

[1328] [化156]

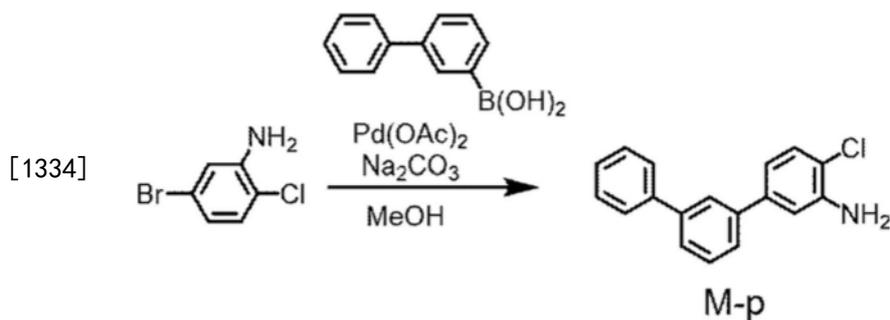


[1330] 在氮气气氛下,在50mL的三口烧瓶中,加入1,4-苯二甲腈,2,3,5-三-9H-咪唑-9-基-6-氯-(3.0g,4.6mmol)、化合物M-E3(1.9g,5.5mmol)、碳酸钾(1.1g,8.2mmol)以及11mL的DMF,在120℃下搅拌4小时。向反应混合物中加入10ml饱和氯化铵水溶液,通过硅胶柱色谱法对析出的固体进行纯化,得到2.3g红色固体。通过ASAP-MS的分析,鉴定为比较化合物Ref-3(收率52%)。

[1331] (比较合成例4)

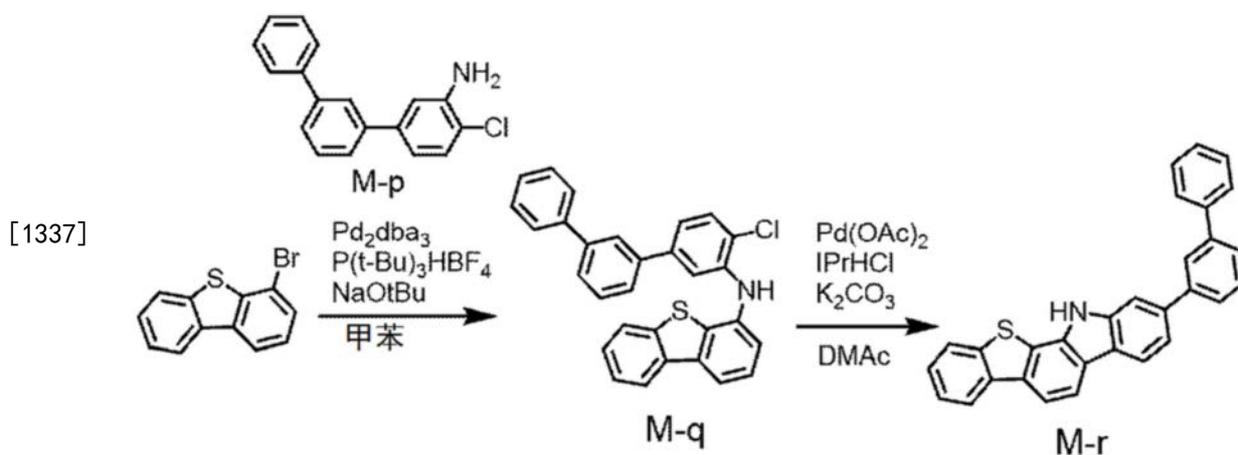
[1332] 在以下说明比较化合物Ref-4的合成方法。

[1333] [化157]



[1335] 在氮气气氛下,在300mL的三口烧瓶中,加入5-溴-2-氯-苯胺(10g,49mmol)、3-联苯硼酸(9.7g,49mmol)、乙酸钯(0.11g,0.5mmol)、碳酸钠(10g,98mmol)以及100mL甲醇,在80℃下搅拌7小时。向反应混合物中加入100mL离子交换水,通过硅胶柱色谱法对析出的固体进行纯化,得到13.0g白色固体。通过GC-MS的分析,鉴定为化合物M-p(收率95%)。

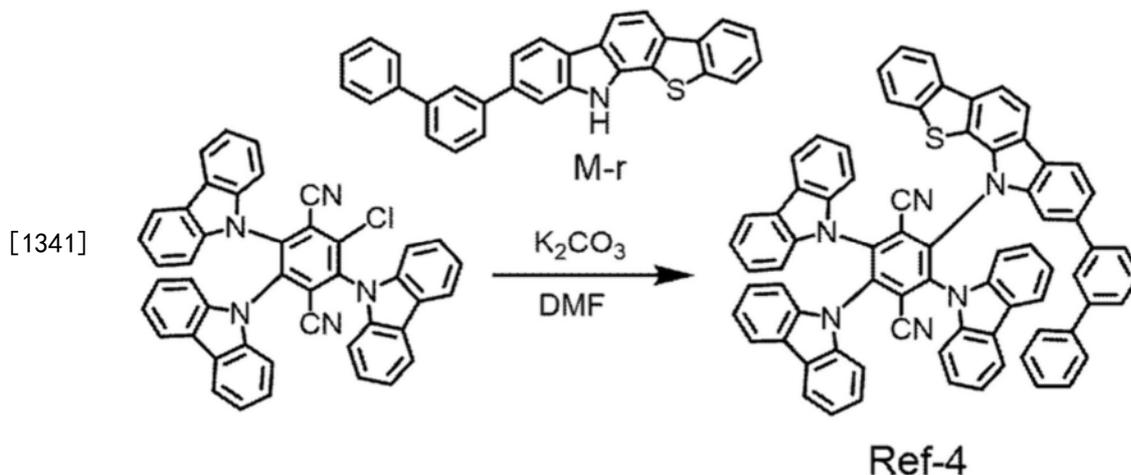
[1336] [化158]



[1338] 在氮气气氛下,在200mL的三口烧瓶中,加入4-溴二苯并噻吩(10g,38mmol)、化合物M-p(11g,38mmol)、三(二亚苄基丙酮)二钯(0)(Pd₂dba₃) (0.35g,0.38mmol)、四氟硼酸三叔丁基膦(P(t-Bu)₃HBF₄) (0.44g,1.5mmol)、叔丁醇钠(NaOtBu) (5.5g,57mmol)以及120mL甲苯,在60℃下加热搅拌4小时后冷却至室温(25℃)。通过硅胶柱色谱法纯化反应溶液,得到15.6g白色固体。通过GC-MS的分析,鉴定为化合物M-q(收率89%)。

[1339] 在氮气气氛下,在200mL的三口烧瓶中,加入化合物M-q(15g,32mmol)、1,3-双(2,6-二异丙基苯基)氯化咪唑(IPrHCl) (0.27g,0.64mmol)、乙酸钯(II)(Pd(OAc)₂) (72mg,0.32mmol)、碳酸钾(8.8g,64mmol)以及100mL的N,N-二甲基乙酰胺(DMAc),在160℃下搅拌3小时后冷却至室温(25℃)。通过硅胶柱色谱法纯化反应溶液,得到12.8g白色固体。通过GC-MS的分析,鉴定为化合物M-r(收率94%)。

[1340] [化159]

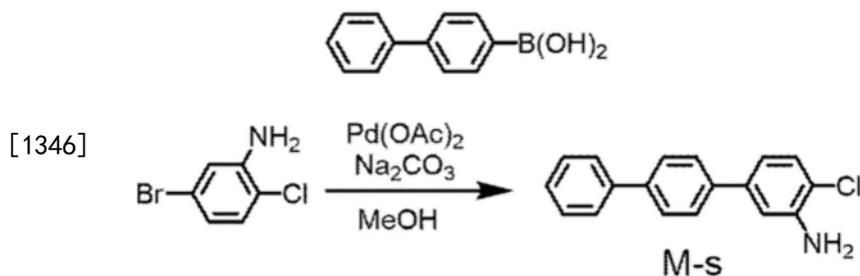


[1342] 在氮气气氛下,在50mL的三口烧瓶中,加入1,4-苯二甲腈,2,3,5-三-9H-咪唑-9-基-6-氯- (3.0g,4.6mmol)、化合物M-r (2.4g,5.5mmol)、碳酸钾 (1.1g,8.2mmol) 以及20mL的DMF,在120℃下搅拌4小时。向反应混合物中加入10ml饱和氯化铵水溶液,通过硅胶柱色谱法对析出的固体进行纯化,得到3.7g红色固体。通过ASAP-MS的分析,鉴定为比较化合物Ref-4 (收率77%)。

[1343] (比较合成例5)

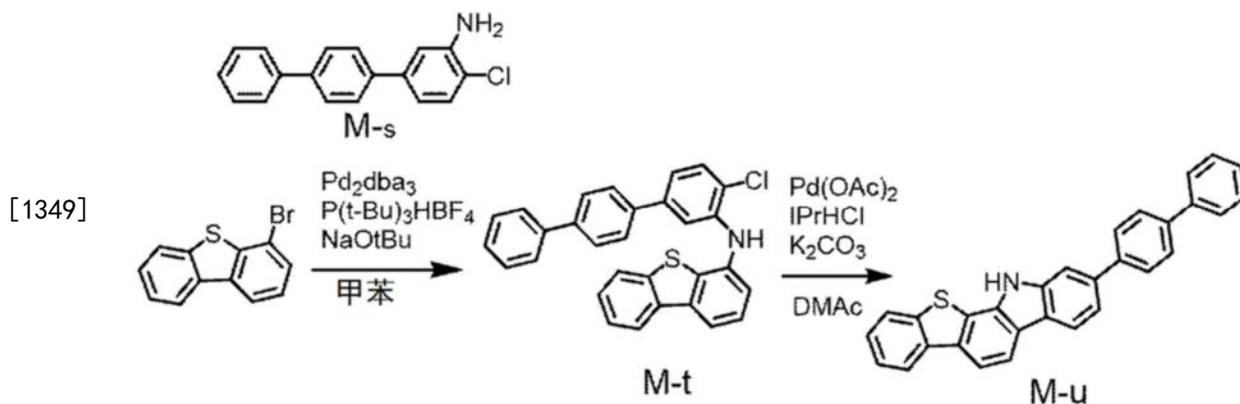
[1344] 在以下说明比较化合物Ref-5的合成方法。

[1345] [化160]



[1347] 在氮气气氛下,在300mL的三口烧瓶中,加入5-溴-2-氯-苯胺 (10g,49mmol)、4-联苯硼酸 (9.7g,49mmol)、乙酸钯 (0.11g,0.5mmol)、碳酸钠 (10g,98mmol) 以及100mL甲醇,在80℃下搅拌7小时。向反应混合物中加入100mL离子交换水,通过硅胶柱色谱法对析出的固体进行纯化,得到12.3g白色固体。通过GC-MS的分析,鉴定为化合物M-s (收率90%)。

[1348] [化161]

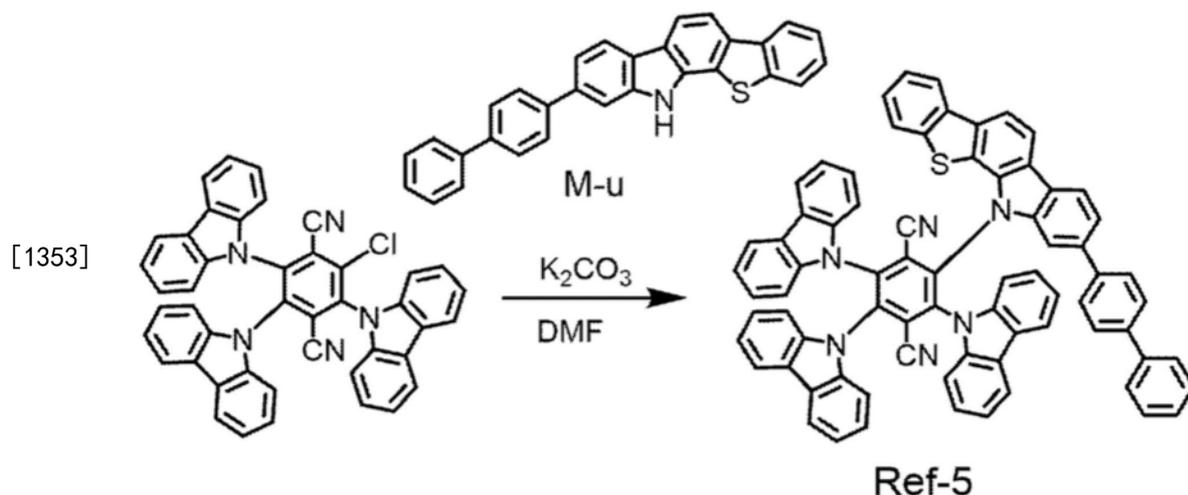


[1350] 在氮气气氛下,在200mL的三口烧瓶中,加入4-溴二苯并噻吩 (10g,38mmol)、化合

物M-s (11g, 38mmol)、三(二亚苄基丙酮)二钯(0) (Pd_2dba_3) (0.35g, 0.38mmol)、四氟硼酸三叔丁基膦 ($\text{P}(\text{t-Bu})_3\text{HBF}_4$) (0.44g, 1.5mmol)、叔丁醇钠 (NaOtBu) (5.5g, 57mmol) 以及120mL甲苯, 在60℃下加热搅拌4小时后冷却至室温(25℃)。通过硅胶柱色谱法纯化反应溶液, 得到12.4g白色固体。通过GC-MS的分析, 鉴定为化合物M-t (收率71%)。

[1351] 在氮气气氛下, 在200mL的三口烧瓶中, 加入化合物M-t (12g, 26mmol)、1,3-双(2,6-二异丙基苯基)氯化咪唑 (IPrHCl) (0.22g, 0.52mmol)、乙酸钯(II) ($\text{Pd}(\text{OAc})_2$) (59mg, 0.26mmol)、碳酸钾 (7.2g, 52mmol) 以及100mL的N,N-二甲基乙酰胺 (DMAc), 在160℃下搅拌3小时后冷却至室温(25℃)。通过硅胶柱色谱法纯化反应溶液, 得到9.4g白色固体。通过GC-MS的分析, 鉴定为化合物M-u (收率85%)。

[1352] [化162]

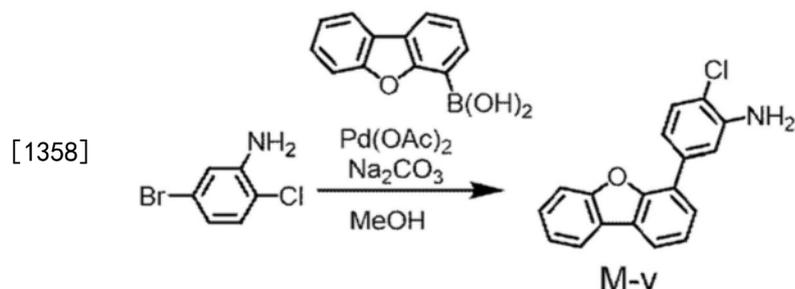


[1354] 在氮气气氛下, 在50mL的三口烧瓶中, 加入1,4-苯二甲腈, 2,3,5-三-9H-咪唑-9-基-6-氯- (3.0g, 4.6mmol)、化合物M-u (2.4g, 5.5mmol)、碳酸钾 (1.1g, 8.2mmol) 以及20mL的DMF, 在120℃下搅拌4小时。向反应混合物中加入10ml饱和氯化铵水溶液, 通过硅胶柱色谱法对析出的固体进行纯化, 得到2.6g红色固体。通过ASAP-MS的分析, 鉴定为比较化合物Ref-5 (收率55%)。

[1355] (比较合成例6)

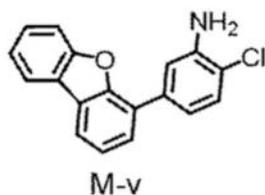
[1356] 在以下说明比较化合物Ref-6的合成方法。

[1357] [化163]

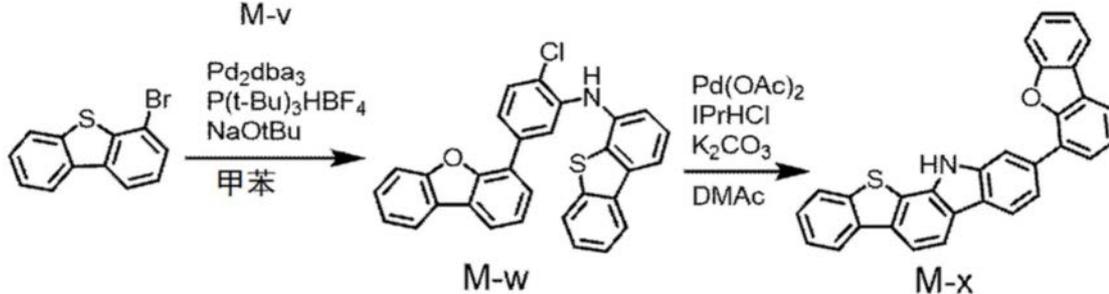


[1359] 在氮气气氛下, 在300mL的三口烧瓶中, 加入5-溴-2-氯-苯胺 (10g, 49mmol)、4-二苯并咪喃硼酸 (10.4g, 49mmol)、乙酸钯 (0.11g, 0.5mmol)、碳酸钠 (10g, 98mmol) 以及100mL甲醇, 在80℃下搅拌7小时。向反应混合物中加入100mL离子交换水, 通过硅胶柱色谱法对析出的固体进行纯化, 得到12.7g白色固体。通过GC-MS的分析, 鉴定为化合物M-v (收率88%)。

[1360] [化164]



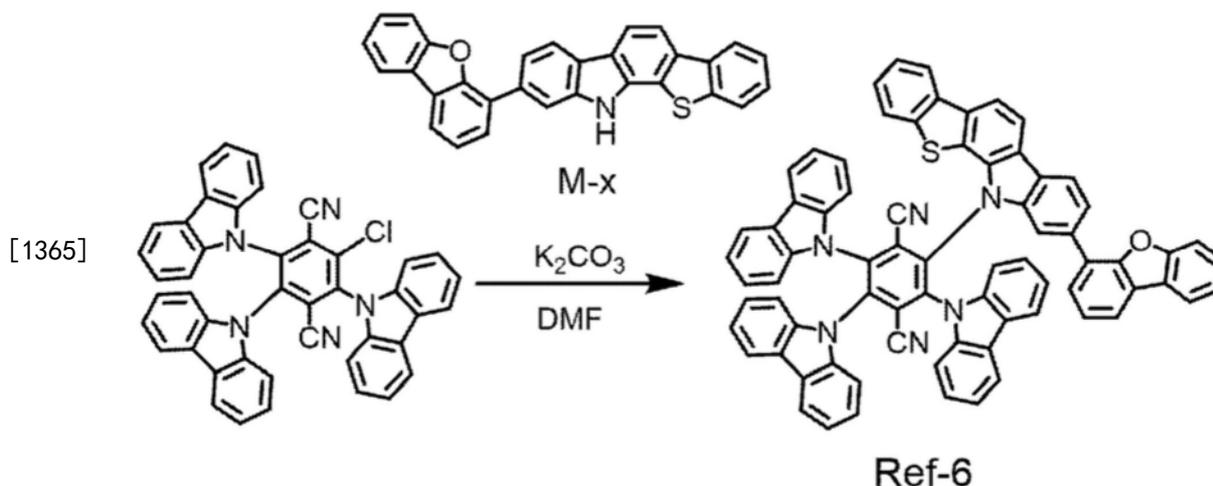
[1361]



[1362] 在氮气气氛下,在200mL的三口烧瓶中,加入4-溴二苯并噻吩(10g,38mmol)、化合物M-v(11.2g,38mmol)、三(二亚苄基丙酮)二钯(0) (Pd_2dba_3) (0.35g,0.38mmol)、四氟硼酸三叔丁基膦 ($\text{P}(\text{t-Bu})_3\text{HBF}_4$) (0.44g,1.5mmol)、叔丁醇钠 (NaOtBu) (5.5g,57mmol) 以及120mL 甲苯,在60℃下加热搅拌7小时后冷却至室温(25℃)。通过硅胶柱色谱法纯化反应溶液,得到13.2g白色固体。通过GC-MS的分析,鉴定为化合物M-w(收率73%)。

[1363] 在氮气气氛下,在200mL的三口烧瓶中,加入化合物M-w(13g,27mmol)、1,3-双(2,6-二异丙基苯基)氯化咪唑 (IPrHCl) (0.23g,0.54mmol)、乙酸钯(II) ($\text{Pd}(\text{OAc})_2$) (61mg,0.27mmol)、碳酸钾(7.5g,54mmol) 以及100mL的N,N-二甲基乙酰胺(DMAc),在160℃下搅拌3小时后冷却至室温(25℃)。通过硅胶柱色谱法纯化反应溶液,得到8.2g白色固体。通过GC-MS的分析,鉴定为化合物M-x(收率69%)。

[1364] [化165]



[1366] 在氮气气氛下,在50mL的三口烧瓶中,加入1,4-苯二甲腈,2,3,5-三-9H-咪唑-9-基-6-氯-(3.0g,4.6mmol)、化合物M-x(2.4g,5.5mmol)、碳酸钾(1.1g,8.2mmol) 以及20mL的DMF,在120℃下搅拌4小时。向反应混合物中加入10ml饱和氯化铵水溶液,通过硅胶柱色谱法对析出的固体进行纯化,得到3.6g红色固体。通过ASAP-MS的分析,鉴定为比较化合物Ref-6(收率74%)。

[1367] 附图标记说明

- [1368] 1 有机EL元件
- [1369] 2 基板
- [1370] 3 阳极
- [1371] 4 阴极
- [1372] 5 发光层
- [1373] 6 空穴注入层
- [1374] 7 空穴传输层
- [1375] 8 电子传输层
- [1376] 9 电子注入层。

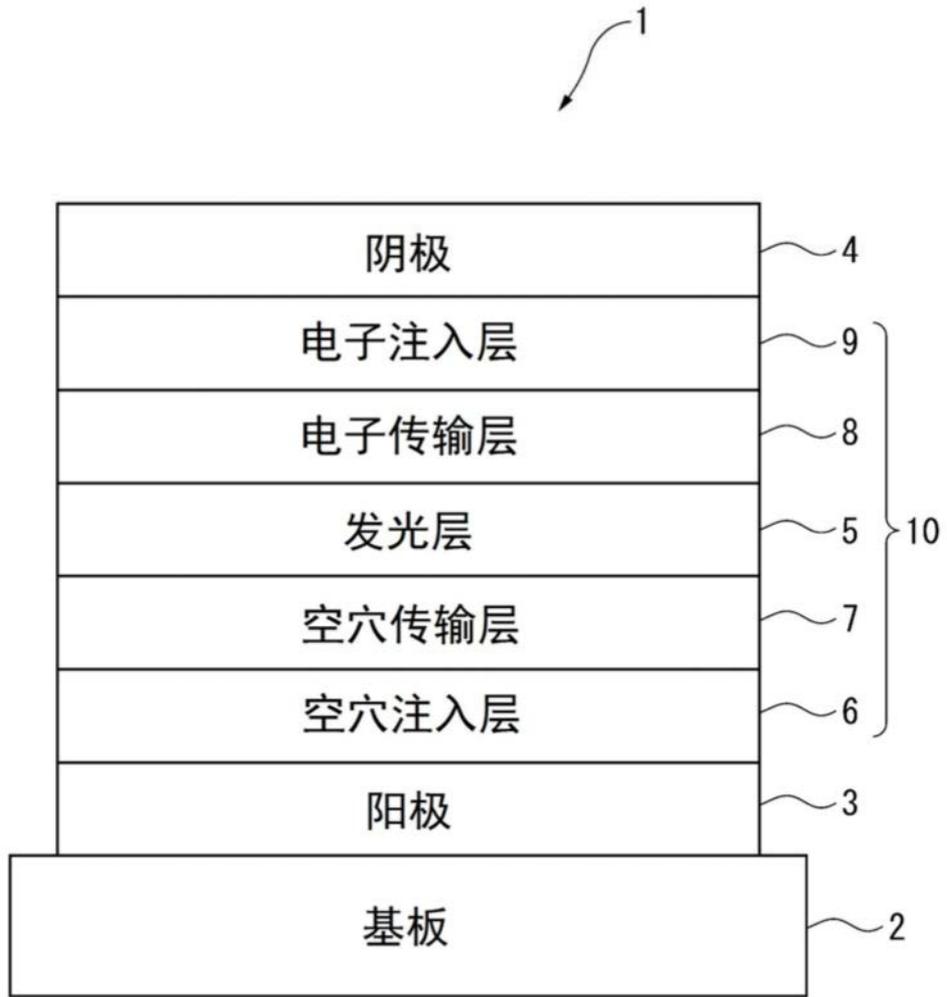


图1

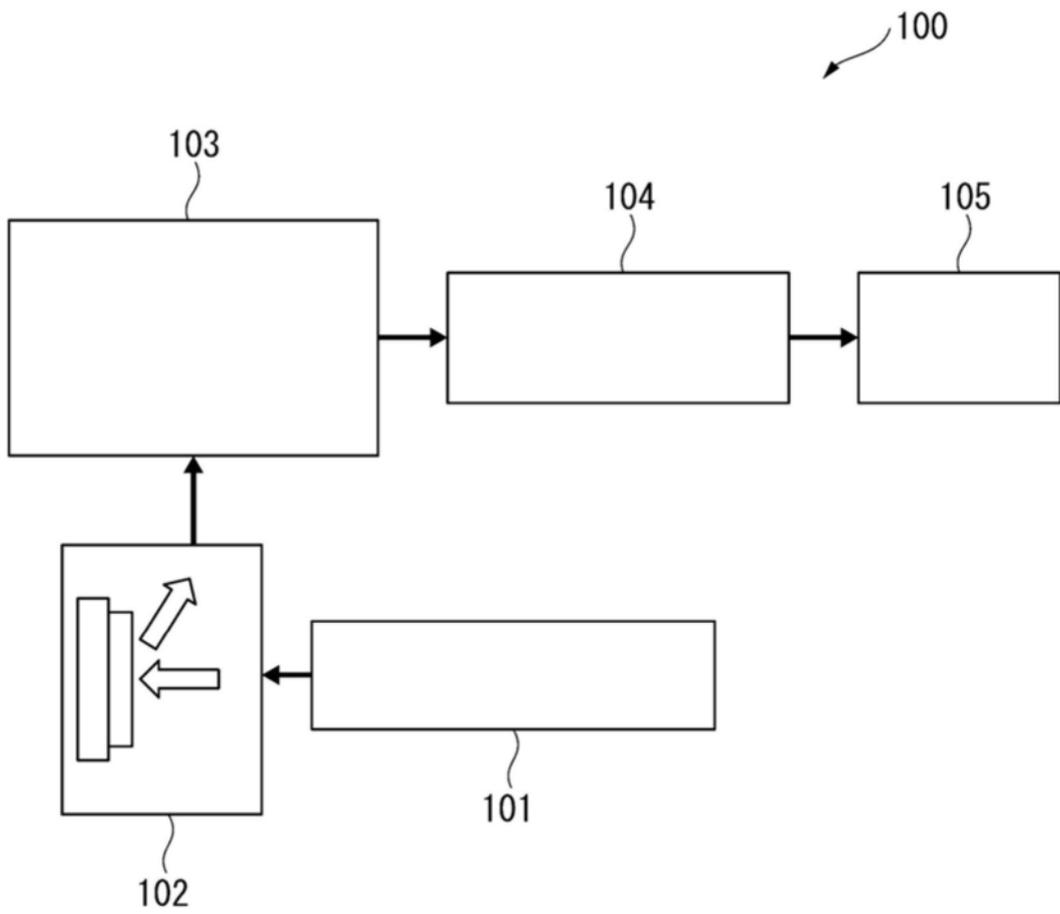


图2

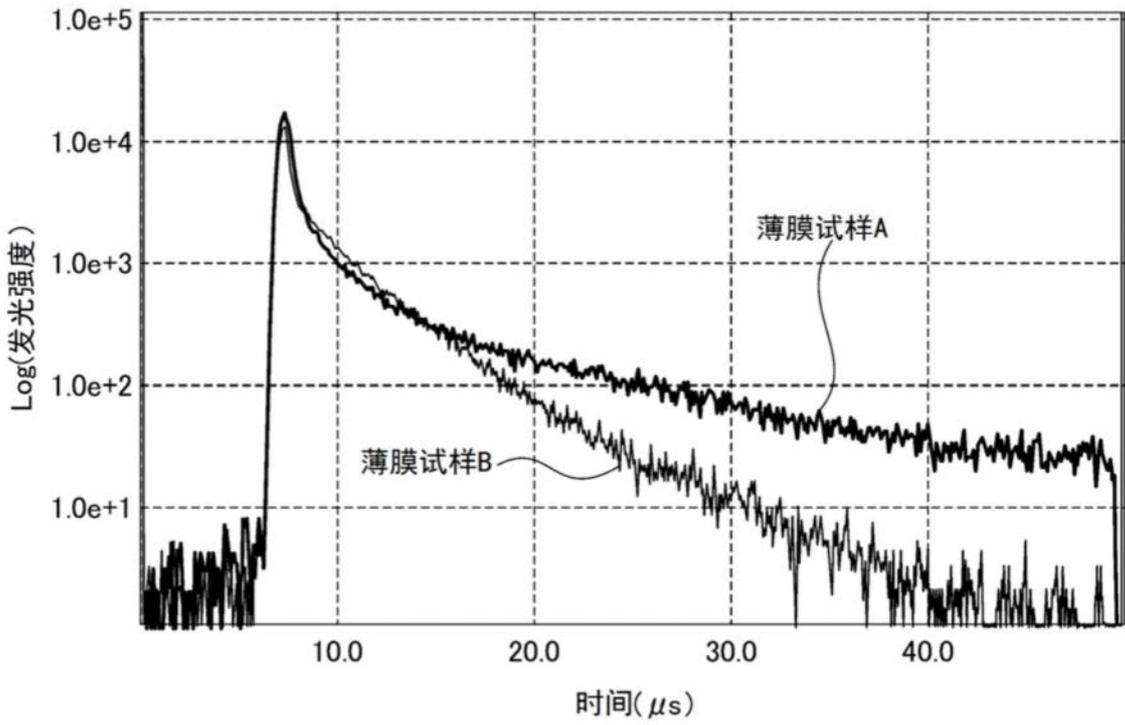


图3

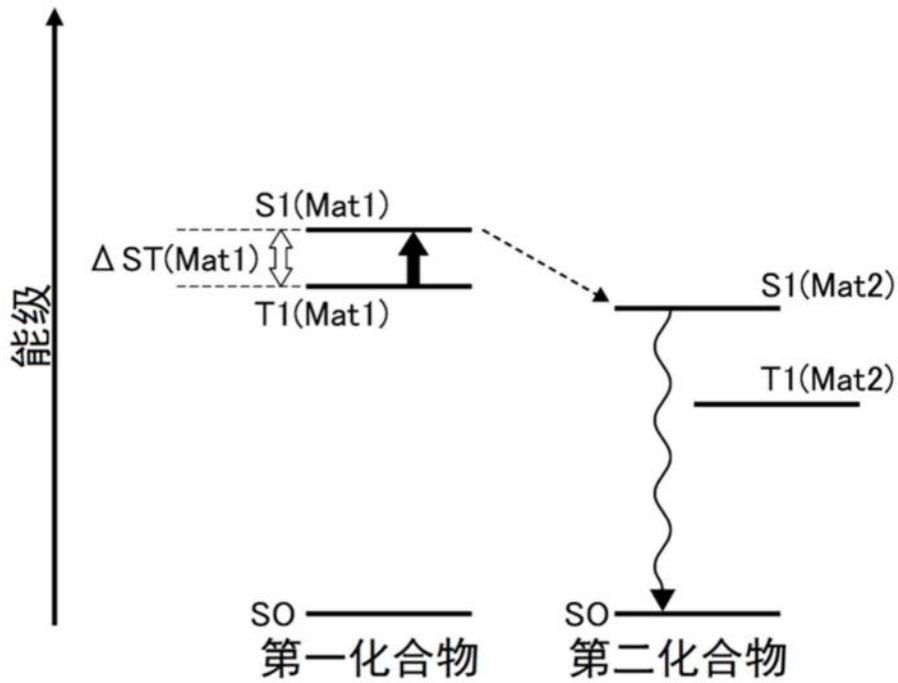


图4

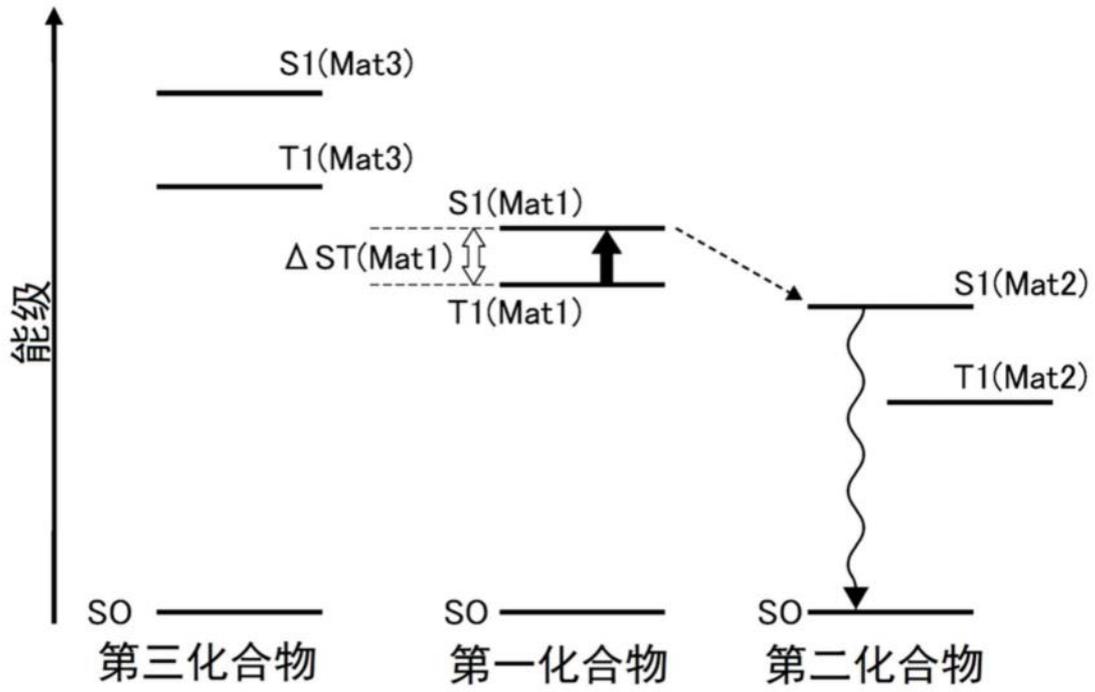


图5

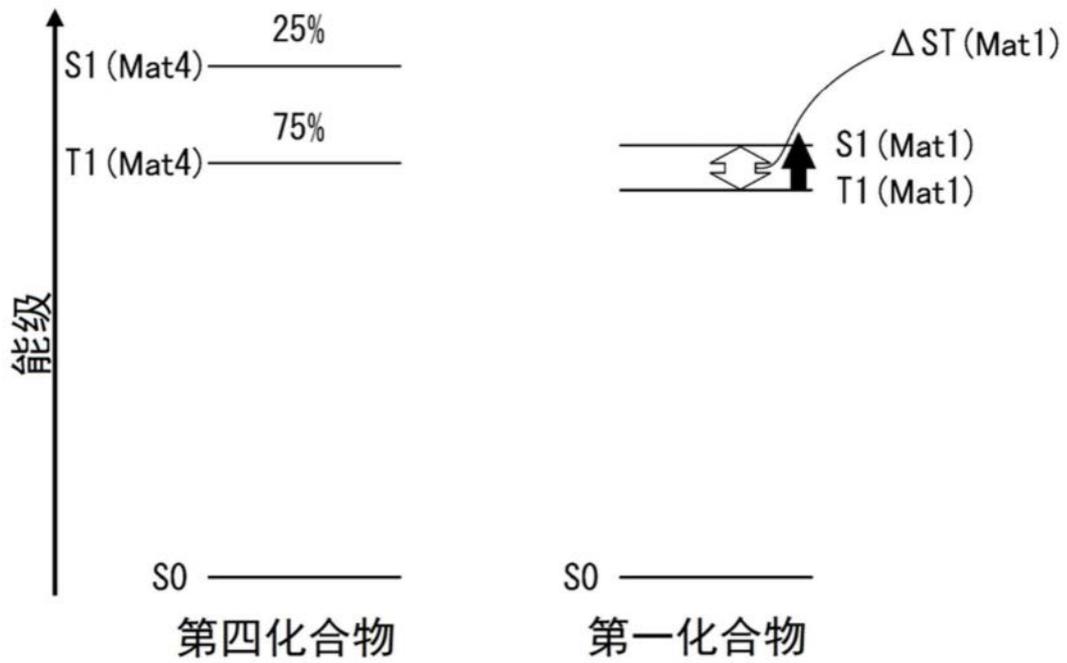


图6