



(12)发明专利申请

(10)申请公布号 CN 106573911 A

(43)申请公布日 2017.04.19

(21)申请号 201580039162.9

(74)专利代理机构 北京林达刘知识产权代理事
务所(普通合伙) 11277

(22)申请日 2015.06.04

代理人 刘新宇 李茂家

(30)优先权数据

2014-120362 2014.06.11 JP

(51)Int.Cl.

G07D 401/10(2006.01)

(85)PCT国际申请进入国家阶段日

G09K 11/06(2006.01)

2017.01.17

H01L 51/50(2006.01)

(86)PCT国际申请的申请数据

PCT/JP2015/066251 2015.06.04

(87)PCT国际申请的公布数据

W02015/190400 JA 2015.12.17

(71)申请人 保土谷化学工业株式会社

地址 日本东京都

(72)发明人 林秀一 北原秀良 桦泽直朗

崔圣根 金是仁 申幼娜 金志泳

权利要求书3页 说明书134页 附图11页

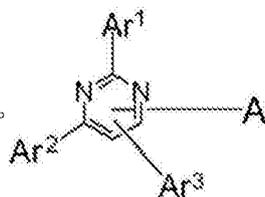
(54)发明名称

嘧啶衍生物和有机电致发光器件

(57)摘要

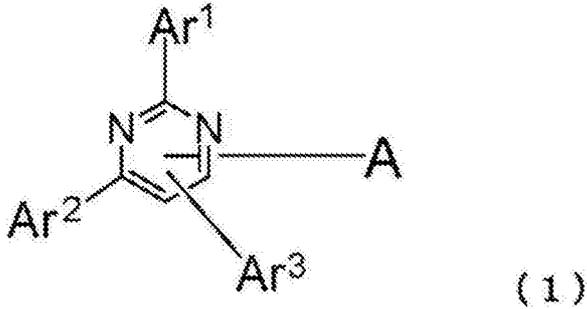
根据本发明,提供了:由下式(1)表示的嘧啶衍生物;和包含一对电极和夹在其间的至少一个有机层的有机电致发光元件,其特征在于,所述嘧啶衍生物用作所述至少一个有机层中的构成材料。该嘧啶衍生物是用于具有高效率和高耐久性的有机电致发光元件的材料,具有注入或输送电子的优异能力,具有空穴阻挡能力,并具有优

异的性能。



(1)

1. 一种嘧啶衍生物,其由下列通式(1)表示:



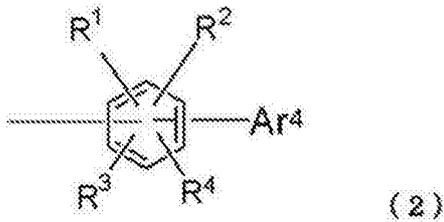
其中,

Ar¹表示芳族烃基、稠合多环芳族基、或芳族杂环基,

Ar²和Ar³可以相同或不同,且各自表示氢原子、芳族烃基、稠合多环芳族基、或芳族杂环基,

Ar²和Ar³不同时为氢原子,并且

A表示由下列结构式(2)表示的一价基团:



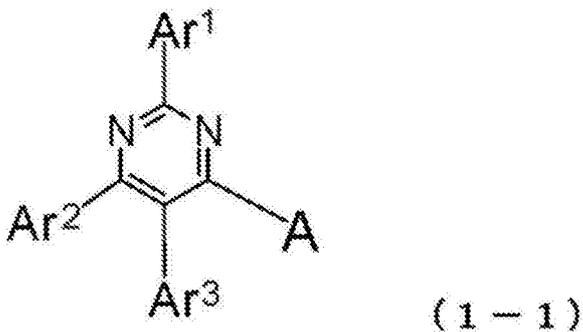
其中,

Ar⁴表示芳族杂环基,

R¹至R⁴可以相同或不同,且各自表示氢原子、氘原子、氟原子、氯原子、氰基、三氟甲基、具有1至6个碳原子的烷基、芳族烃基、稠合多环芳族基、或芳族杂环基,并且

R¹至R⁴以及Ar⁴可以经由单键、亚甲基、氧原子或硫原子相互键合而形成环。

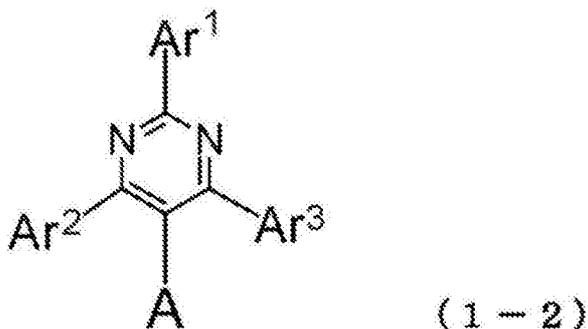
2. 根据权利要求1所述的嘧啶衍生物,其中所述嘧啶衍生物由下列通式(1-1)表示:



其中,

Ar¹至Ar³以及A具有如通式(1)所定义的含义。

3. 根据权利要求1所述的嘧啶衍生物,其中所述嘧啶衍生物由下列通式(1-2)表示:

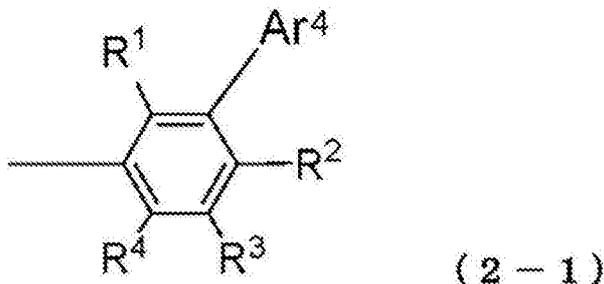


其中,

Ar¹至Ar³以及A具有如通式(1)所定义的含义。

4. 根据权利要求1所述的嘧啶衍生物, 其中,

A是由下列结构式(2-1)表示的一价基团:

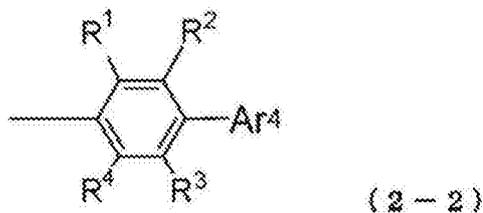


其中,

Ar⁴以及R¹至R⁴具有如结构式(2)所定义的含义。

5. 根据权利要求1所述的嘧啶衍生物, 其中,

A是由下列结构式(2-2)表示的一价基团:



其中,

Ar⁴以及R¹至R⁴具有如结构式(2)所定义的含义。

6. 根据权利要求1所述的嘧啶衍生物, 其中,

Ar¹表示芳族烃基或稠合多环芳族基, 和

Ar²和Ar³可以相同或不同, 并且各自表示氢原子、芳族烃基或稠合多环芳族基。

7. 根据权利要求1所述的嘧啶衍生物, 其中,

Ar⁴为吡啶基、嘧啶基、喹啉基、异喹啉基、吲哚基、氮杂茚基、二氮杂茚基、喹喔啉基、苯并咪唑基、二氮杂萘基、菲咯啉基、吡啶基、氮杂螺二茚基或二氮杂螺二茚基。

8. 根据权利要求1所述的嘧啶衍生物, 其中,

Ar²是具有取代基的苯基。

9. 根据权利要求8所述的嘧啶衍生物, 其中,

Ar²是具有取代基的苯基, 和

所述取代基是芳族烃基或稠合多环芳族基。

10. 根据权利要求9所述的嘧啶衍生物,其中,
Ar²是具有取代基的苯基,和
所述取代基是芳族烃基。
11. 根据权利要求9所述的嘧啶衍生物,其中,
Ar²是具有取代基的苯基,和
所述取代基是稠合多环芳族基。
12. 根据权利要求1所述的嘧啶衍生物,其中,
Ar³是氢原子。
13. 根据权利要求1所述的嘧啶衍生物,其中,
Ar¹是具有取代基的苯基。
14. 根据权利要求13所述的嘧啶衍生物,其中,
Ar¹是具有取代基的苯基,和
所述取代基是稠合多环芳族基。
15. 根据权利要求1所述的嘧啶衍生物,其中,
Ar¹是稠合多环芳族基。
16. 根据权利要求1所述的嘧啶衍生物,其中,
Ar¹是未取代的苯基。
17. 一种有机电致发光器件,其包括:
一对电极,和
夹在其间的至少一个有机层,
其中根据权利要求1所述的嘧啶衍生物用作所述至少一个有机层的构成材料。
18. 根据权利要求17所述的有机电致发光器件,其中
使用所述嘧啶衍生物的有机层是电子输送层。
19. 根据权利要求17所述的有机电致发光器件,其中
使用所述嘧啶衍生物的有机层是空穴阻挡层。
20. 根据权利要求17所述的有机电致发光器件,其中
使用所述嘧啶衍生物的有机层是发光层。
21. 根据权利要求17所述的有机电致发光器件,其中
使用所述嘧啶衍生物的有机层是电子注入层。

噻啉衍生物和有机电致发光器件

技术领域

[0001] 本发明涉及适用于有机电致发光器件的化合物和该器件。更具体地,本发明涉及噻啉衍生物,以及使用该衍生物的有机电致发光器件(下文将简称为有机EL器件)。

背景技术

[0002] 有机EL器件是自发光器件,并且因此比液晶器件更亮,可视性更好,并且能够更清楚地显示。因此,已经对有机EL器件进行了积极的研究。

[0003] 1987年,Eastman Kodak的C.W.Tang等人开发了在不同材料之间共享各种作用的层压结构器件,从而赋予使用有机材料的有机EL器件实际的适用性。他们将能够输送电子的荧光体和能够输送空穴的有机物质层层压。在将电子和空穴的电荷注入到荧光体的层中进行发光时,所述器件在10V以下的电压下,能够实现 $1,000\text{cd/m}^2$ 以上的高亮度(参照专利文献1和专利文献2)。

[0004] 已经进行了许多改进以使有机EL器件投入实际使用。例如,通过在多种类型的材料之间共享各种作用,并在基板上具有依次设置的阳极、空穴注入层、空穴输送层、发光层、电子输送层、电子注入层和阴极,实现了高效率 and 耐久性。

[0005] 为了进一步提高发光效率,已经尝试利用三重态激子,并且已经考虑使用磷光发光化合物。此外,已经开发了利用通过热激活延迟荧光(TADF)的发光的器件。通过使用热激活延迟荧光材料的器件,实现了5.3%的外部量子效率。

[0006] 发光层也可以通过用荧光化合物、磷光发光化合物或发射延迟荧光的材料掺杂通常称为基质材料的电荷输送化合物来制备。有机EL器件中的有机材料的选择极大地影响器件的特性,如效率和耐久性。

[0007] 对于有机EL器件,从两个电极注入的电荷在发光层中重新结合以获得发光,并且空穴和电子的电荷如何有效地传递到发光层上是重要的。电子注入性质增强,并且电子迁移率增加以增加空穴和电子重新结合的概率。此外,在发光层内产生的激子被限制。通过这样做,可以获得高的发光效率。因此,电子输送材料的作用如此重要,以至于需要具有高的电子注入性、允许显著的电子迁移率、具有高空穴阻挡性能和对空穴具有高耐久性的电子输送材料。

[0008] 从器件寿命的观点来看,材料的耐热性和非晶性也是重要的。具有低耐热性的材料即使在低温下也由于在器件驱动期间产生的热而热分解,并且材料劣化。在具有低非晶性的材料中,薄膜的结晶甚至在短时间内发生,并且器件劣化。因此,对所使用的材料需要高的耐热性和良好的非晶性。

[0009] 代表性的发光材料三(8-羟基喹啉)铝(以下简称为Alq)通常也用作电子输送材料。然而,其空穴阻挡性能不足。

[0010] 防止一些空穴通过发光层并增加发光层中电荷重新结合的可能性的措施是插入空穴阻挡层。作为空穴阻挡材料,提出了例如三唑衍生物(参见专利文献3)、浴铜灵(以下简称为BCP)和铝混合配体配合物[铝(III)双(2-甲基-8-喹啉)-4-苯基苯酚盐(以下简称为

BA1q)]的方案。

[0011] 作为具有优异的空穴阻挡性的电子输送材料,提出了3-(4-联苯基)-4-苯基-5-(4-叔丁基苯基)-1,2,4-三唑(以下简称为TAZ)(参照专利文献4)的方案。

[0012] TAZ具有6.6eV的大功函数并具有高的空穴阻挡能力。因此,TAZ层压在通过真空沉积、涂布等制备的荧光发光层或磷光发光层的阴极侧,并且用作具有电子输送性的空穴阻挡层。由此,TAZ有助于提高有机EL器件的效率。

[0013] 然而,TAZ输送电子的性质低。因此,在制备有机EL器件时,有必要将TAZ与具有更高电子输送性的电子输送材料组合。

[0014] BCP也具有6.7eV的大功函数并具有高的空穴阻挡能力。然而,其玻璃化转变点(Tg)低至83°C,因此其作为薄膜时的稳定性差。

[0015] 也就是说,上述材料的器件寿命都不足,或者阻挡空穴的功能不足。因此,为了改进有机EL器件的器件特性,需要电子注入/输送性能和空穴阻挡能力优异并且具有长的器件寿命的有机化合物。

[0016] 现有技术文献

[0017] 专利文献

[0018] 专利文献1:日本特开平8-48656号

[0019] 专利文献2:日本专利第3194657号

[0020] 专利文献3:日本专利第2734341号

[0021] 专利文献4:W02003/060956

[0022] 专利文献5:W02014/009310

发明内容

[0023] 发明要解决的问题

[0024] 本发明的目的是提供一种有机化合物,作为用于高效率、高耐久性的有机EL器件的材料,其电子注入/输送性能优异,具有空穴阻挡能力并且特性优异。

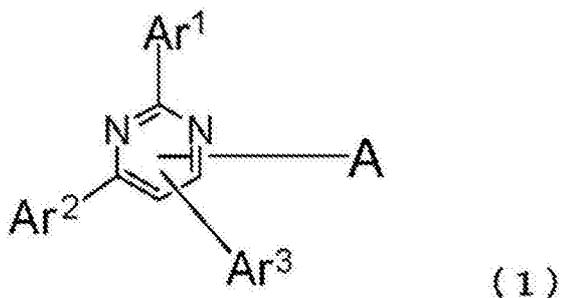
[0025] 本发明的另一个目的是提供一种使用该化合物的具有高效率、高耐久性和长寿命的有机EL器件。

[0026] 用于解决问题的方案

[0027] 为了达到上述目的,本发明人注意到,具有电子亲和性的嘧啶环的氮原子具有与金属配位的能力,并且还导致优异的耐热性。基于这些事实,他们设计并化学合成了具有嘧啶环结构的化合物。此外,使用该化合物,他们实验性地生产了各种有机EL器件,并且广泛地评价器件的特性。结果,他们完成了本发明。

[0028] 根据本发明,提供由下列通式(1)表示的嘧啶衍生物,

[0029]



[0030] 其中,

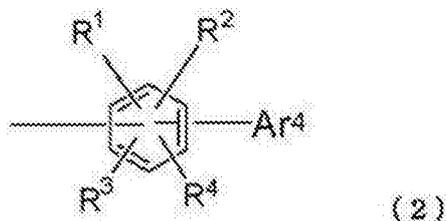
[0031] Ar¹表示芳族烃基、稠合多环芳族基、或芳族杂环基,

[0032] Ar²和Ar³可以相同或不同,且各自表示氢原子、芳族烃基、稠合多环芳族基、或芳族杂环基,

[0033] Ar²和Ar³不同时为氢原子,并且

[0034] A表示由下列结构式(2)表示的一价基团:

[0035]



[0036] 其中,

[0037] Ar⁴表示芳族杂环基,

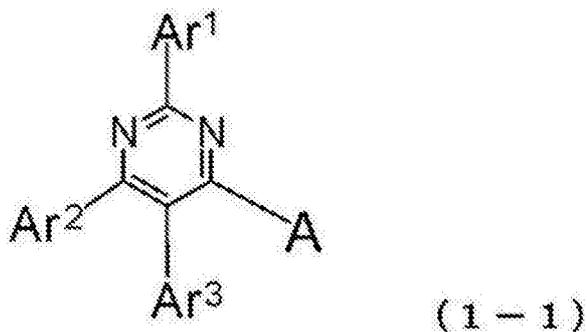
[0038] R¹至R⁴可以相同或不同,且各自表示氢原子、氘原子、氟原子、氯原子、氰基、三氟甲基、具有1至6个碳原子的烷基、芳族烃基、稠合多环芳族基、或芳族杂环基,并且

[0039] R¹至R⁴和Ar⁴可以经由单键、亚甲基、氧原子或硫原子相互键合而形成环。

[0040] 对于本发明的嘧啶衍生物,优选以下:

[0041] 1) 嘧啶衍生物是由下列通式(1-1)表示的嘧啶衍生物:

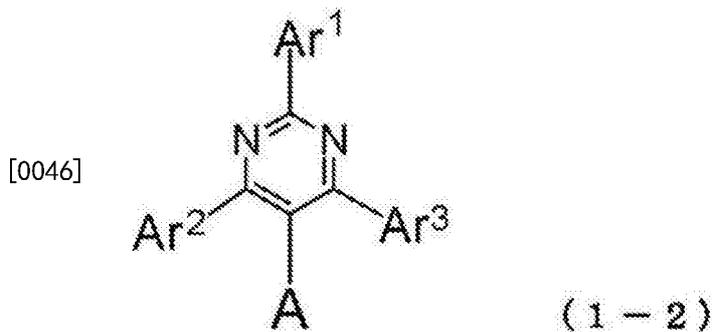
[0042]



[0043] 其中,

[0044] Ar¹至Ar³和A具有上述通式(1)中所定义的含义。

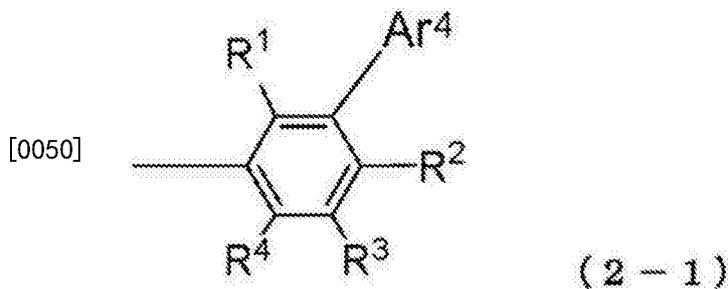
[0045] 2) 嘧啶衍生物是由下列通式(1-2)表示的嘧啶衍生物:



[0047] 其中,

[0048] Ar^1 至 Ar^3 和A具有上述通式(1)中所定义的含义。

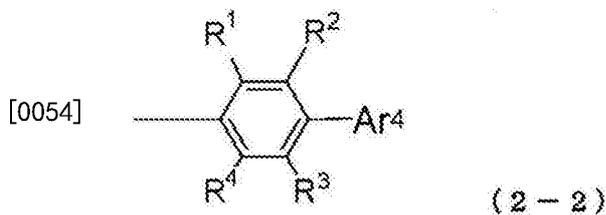
[0049] 3) A是由下列结构式(2-1)表示的一价基团:



[0051] 其中,

[0052] Ar^4 以及 R^1 至 R^4 具有如上述结构式(2)所定义的含义。

[0053] 4) A是由下列结构式(2-2)表示的一价基团:



[0055] 其中,

[0056] Ar^4 以及 R^1 至 R^4 具有如上述结构式(2)所定义的含义。

[0057] 5) Ar^1 表示芳族烃基或稠合多环芳族基,以及 Ar^2 和 Ar^3 可以相同或不同,并且各自表示氢原子、芳族烃基或稠合多环芳族基。

[0058] 6) Ar^4 是吡啶基、嘧啶基、喹啉基、异喹啉基、吲哚基、氮杂茛基、二氮杂茛基、喹喔啉基、苯并咪唑基、二氮杂萘基、菲咯啉基、吡啶基、氮杂螺二茛基(azaspirobifluorenyl group)或二氮杂螺二茛基(diazaspirobifluorenyl group)。

[0059] 7) Ar^2 是具有取代基的苯基。

[0060] 8) Ar^2 是具有取代基的苯基,和所述取代基是芳族烃基或稠合多环芳族基。

[0061] 9) Ar^2 是具有取代基的苯基,和所述取代基是芳族烃基。

[0062] 10) Ar^2 是具有取代基的苯基,和所述取代基是稠合多环芳族基。

[0063] 11) Ar^3 是氢原子。

[0064] 12) Ar^1 是具有取代基的苯基。

[0065] 13) Ar^1 是具有取代基的苯基,和所述取代基为稠合多环芳族基。

[0066] 14) Ar^1 是稠合多环芳族基。

[0067] 15) Ar¹是未取代的苯基。

[0068] 此外,根据本发明,提供了一种有机EL器件,其包括一对电极和夹在其间的至少一个有机层,其中所述噻啉衍生物用作所述至少一个有机层的构成材料。

[0069] 在本发明的有机EL器件中,优选地,使用噻啉衍生物的有机层为电子输送层、空穴阻挡层、发光层或电子注入层。

[0070] 发明的效果

[0071] 本发明的噻啉衍生物是一种新化合物,具有以下性质:

[0072] (1) 电子注入特性令人满意。

[0073] (2) 电子迁移率高。

[0074] (3) 空穴阻挡能力优异。

[0075] (4) 薄膜状态稳定。

[0076] (5) 耐热性优异。

[0077] 此外,本发明的有机EL器件具有以下性质:

[0078] (6) 发光效率高。

[0079] (7) 发光开始电压低。

[0080] (8) 实际驱动电压低。

[0081] (9) 寿命长。

[0082] 本发明的噻啉衍生物具有高的电子注入和移动速率。因此,利用具有使用本发明的噻啉衍生物制备的电子注入层和/或电子输送层的有机EL器件,提高了从电子输送层到发光层的电子输送效率,从而提高发光效率。并且,降低了驱动电压,从而增强所得的有机EL器件的耐久性。

[0083] 本发明的噻啉衍生物具有优异的阻断空穴的能力,电子输送性能优异,并且在薄膜状态下是稳定的。因此,具有使用本发明的噻啉衍生物制备的空穴阻挡层的有机EL器件具有高的发光效率,驱动电压降低,并且电流耐性改善,使得有机EL器件的最大发光亮度增加。

[0084] 本发明的噻啉衍生物具有优异的电子输送性,并且具有宽的带隙。因此,本发明的噻啉衍生物用作基质材料,在其上承载称为掺杂剂的荧光发射物质、磷光发射物质或延迟荧光发射物质,以便形成发光层。这使得可以实现在降低的电压下驱动并且具有改进的发光效率的特征的有机EL器件。

[0085] 如上所述,本发明的噻啉衍生物可用作有机EL器件的电子注入层、电子输送层、空穴阻挡层或发光层的构成材料。使用本发明的有机EL器件,可以限制在发光层内产生的激子,并且可以进一步增加空穴和电子的重新结合的可能性,以获得高发光效率。此外,驱动电压如此之低,因而可以实现高耐久性。

附图说明

[0086] [图1] 是实施例1的化合物(化合物74)的¹H-NMR图示。

[0087] [图2] 是实施例2的化合物(化合物84)的¹H-NMR图示。

[0088] [图3] 是实施例3的化合物(化合物89)的¹H-NMR图示。

[0089] [图4] 是实施例4的化合物(化合物130)的¹H-NMR图示。

- [0090] [图5]是实施例5的化合物(化合物131)的¹H-NMR图示。
- [0091] [图6]是实施例6的化合物(化合物92)的¹H-NMR图示。
- [0092] [图7]是实施例7的化合物(化合物136)的¹H-NMR图示。
- [0093] [图8]是实施例8的化合物(化合物125)的¹H-NMR图示。
- [0094] [图9]是实施例9的化合物(化合物138)的¹H-NMR图示。
- [0095] [图10]是实施例10的化合物(化合物78)的¹H-NMR图示。
- [0096] [图11]是实施例11的化合物(化合物76)的¹H-NMR图示。
- [0097] [图12]是实施例12的化合物(化合物126)的¹H-NMR图示。
- [0098] [图13]是实施例13的化合物(化合物124)的¹H-NMR图示。
- [0099] [图14]是实施例14的化合物(化合物123)的¹H-NMR图示。
- [0100] [图15]是实施例15的化合物(化合物146)的¹H-NMR图示。
- [0101] [图16]是实施例16的化合物(化合物98)的¹H-NMR图示。
- [0102] [图17]是实施例17的化合物(化合物153)的¹H-NMR图示。
- [0103] [图18]是实施例18的化合物(化合物155)的¹H-NMR图示。
- [0104] [图19]是实施例19的化合物(化合物82)的¹H-NMR图示。
- [0105] [图20]是实施例20的化合物(化合物182)的¹H-NMR图示。
- [0106] [图21]是实施例21的化合物(化合物227)的¹H-NMR图示。
- [0107] [图22]是实施例22的化合物(化合物234)的¹H-NMR图示。
- [0108] [图23]是实施例23的化合物(化合物235)的¹H-NMR图示。
- [0109] [图24]是显示实施例1至20的有机EL器件和比较例1的有机EL器件的EL器件构造的图。
- [0110] 附图标记说明
- [0111] 1 玻璃基板
- [0112] 2 透明阳极
- [0113] 3 空穴注入层
- [0114] 4 空穴输送层
- [0115] 5 发光层
- [0116] 6 空穴阻挡层
- [0117] 7 电子输送层
- [0118] 8 电子注入层
- [0119] 9 阴极

具体实施方式

- [0120] 本发明的嘧啶衍生物是具有嘧啶环结构的新型化合物,并且由下列通式(1)表示。

与由Ar¹至Ar³表示的芳族烃基、稠合多环芳族基或芳族杂环基任选地具有的取代基所示的相同的取代基。取代基可以采用的模式与示例性取代基的模式相同。

[0158] (R¹至R⁴)

[0159] 由R¹至R⁴表示的具有1至6个碳原子的烷基可以例示甲基、乙基、正丙基、异丙基、正丁基、2-甲基丙基、叔丁基、正戊基、3-甲基丁基、叔戊基、正己基、异己基和叔己基。具有1至6个碳原子的烷基可以是直链或支链的。

[0160] 由R¹至R⁴表示的具有1至6个碳原子的烷基可以是未取代的,但也可具有取代基。取代基可以例示如下:

[0161] 氕原子;

[0162] 氰基;

[0163] 硝基;

[0164] 卤素原子,例如氟原子、氯原子、溴原子或碘原子;

[0165] 具有1至6个碳原子的烷氧基,例如甲氧基、乙氧基或丙氧基;

[0166] 烯基,例如乙烯基或烯丙基;

[0167] 芳氧基,例如苯氧基或甲苯氧基;

[0168] 芳族烷氧基,例如苄氧基或苯乙氧基;

[0169] 芳族烃基或稠合多环芳族基,例如苯基、联苯基、三联苯基、萘基、蒽基、菲基、芴基、茚基、芘基、花基、荧蒽基或苯并[9,10]菲基;和

[0170] 芳族杂环基,例如吡啶基、嘧啶基、三嗪基、噁吩基、呋喃基、吡咯基、喹啉基、异喹啉基、苯并呋喃基、苯并噁吩基、吡啶基、咪唑基、苯并咪唑基、苯并噻唑基、喹喔啉基、苯并咪唑基、吡唑基、二苯并呋喃基、二苯并噻吩基、吩噻嗪基、吩噻嗪基、咪唑基、吡啶基、或吩噻嗪基。

[0171] 具有1至6个碳原子的烷氧基可以是直链或支链的。任何上述取代基可以进一步被上述示例性取代基取代。上述取代基可以彼此独立地存在,但也可以经由单键、取代或未取代的亚甲基、氧原子或硫原子彼此键合形成环。

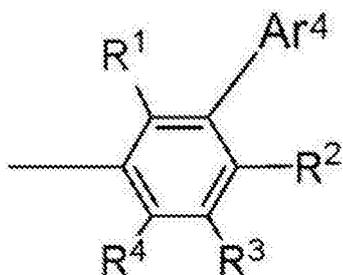
[0172] 由R¹至R⁴表示的芳族烃基或稠合多环式芳族基团可例示出苯基、联苯基、三联苯基、四联苯基、苯乙炔基、萘基、蒽基、芴基、菲基、芴基、茚基、芘基、花基、荧蒽基、苯并[9,10]菲基和螺二芴基。

[0173] 由R¹至R⁴表示的芳族杂环基可以例示出三嗪基、吡啶基、嘧啶基、呋喃基、吡咯基、噁吩基、喹啉基、异喹啉基、苯并呋喃基、苯并噁吩基、吡啶基、咪唑基、苯并咪唑基、苯并噻唑基、喹喔啉基、苯并咪唑基、吡唑基、二苯并呋喃基、二苯并噻吩基、氮杂芴基、二氮杂芴基、二氮杂萘基、菲咯啉基、吡啶基、咪唑基、氮杂二苯并芴基、二氮杂螺二芴基等。

[0174] 由R¹至R⁴表示的芳族烃基、稠合多环芳族基或芳族杂环基可以是未取代的,或可以具有取代基。取代基可以例示出与由Ar¹至Ar³表示的芳族烃基、稠合多环芳族基或芳族杂环基任选地具有的取代基相同的取代基。取代基可以采用的模式与示例性取代基的模式相同。

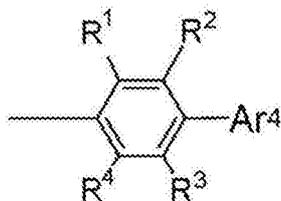
[0175] <优选实施方式>

[0176] 在本发明中,从容易合成的观点出发,优选基团A与嘧啶环的6位键合的化合物,如下述通式(1-1)所示。



[0209]

(2-1)



(2-2)

[0210] 优选的Ar⁴可例举含氮杂环基,例如三嗪基、吡啶基、嘧啶基、吡咯基、喹啉基、异喹啉基、吲哚基、咪唑基、苯并噁唑基、苯并噻唑基、喹喔啉基、苯并咪唑基、吡唑基、氮杂茚基、二氮杂茚基、二氮杂萘基、菲咯啉基、吡啶基、咪唑基、氮杂螺二茚基和二氮杂螺联茚。

[0211] 作为更优选的Ar⁴,可以例举三嗪基、吡啶基、嘧啶基、喹啉基、异喹啉基、吲哚基、喹喔啉基、氮杂茚基、二氮杂茚基、苯并咪唑基、二氮杂萘基、菲咯啉基、吡啶基、氮杂螺二茚基和二氮杂螺二茚基。

[0212] 作为最优选的Ar⁴,可以列举吡啶基、嘧啶基、喹啉基、异喹啉基、吲哚基、氮杂茚基、二氮杂茚基、喹喔啉基、苯并咪唑基、二氮杂萘基、菲咯啉基、吡啶基、氮杂螺二茚基和二氮杂螺二茚基。

[0213] 作为吡啶基,优选吡啶-3-基。

[0214] 作为优选的R¹至R⁴,可以例举氢原子、氘原子、氟原子、氯原子、氰基、三氟甲基、具有1至6个碳原子的烷基、芳族烃基或稠合多环芳族基。作为更优选的R¹至R⁴,可以列举氢原子、氘原子、氟原子、氯原子、氰基、三氟甲基或具有1至6个碳原子的烷基。作为特别优选的R¹至R⁴,可以列举氢原子或氘原子。

[0215] <制造方法>

[0216] 本发明的嘧啶衍生物例如可以通过以下方法生产:进行2,4,6-三氯嘧啶与具有相当于4位的基团的芳基硼酸或芳基硼酸酯之间的铃木偶联反应。然后,加入具有相应的杂芳基作为取代基的苯基硼酸或苯基硼酸酯,进行铃木偶联反应。通过进行这样的两个阶段的铃木偶联反应,将相应的基团引入嘧啶环的4位中,并将具有相应的杂芳基作为取代基的苯基引入6位中。此外,使用具有对应于2位的基团的芳基硼酸或芳基硼酸酯进行铃木偶联反应,由此将相应的基团引入嘧啶环的2位中。以这种方式,可产生本发明的嘧啶衍生物。

[0217] 在上述制造方法中,可以适当改变将各基团引入嘧啶环的2位、4位和6位中的顺序。

[0218] 此外,在该制造方法中,可以使用在不同位置具有取代的卤素原子如氯基团的嘧啶,例如可使用2,4,5-三氯嘧啶代替2,4,6-三氯嘧啶。在这种情况下,可以生产取代位置不同的嘧啶衍生物。

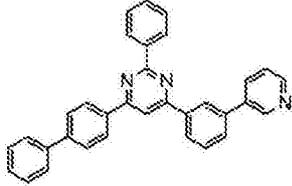
[0219] 所得化合物的纯化可以例如通过使用柱色谱法的纯化,使用硅胶、活性炭、活性粘

土等的吸附纯化,使用溶剂的重结晶或结晶,升华纯化等来进行。化合物的鉴定可以通过NMR分析来进行。作为物理性质值,可以测量功函数和玻璃化转变点(Tg)。

[0220] 功函数用作空穴阻挡性质的指数。可以通过在ITO基板上制备100nm薄膜并使用电离电位测量装置(PYS-202,由Sumitomo Heavy Industries,Ltd.生产)在样品上测量功函数。

[0221] 玻璃化转变点(Tg)用作薄膜状态下稳定性的指标。玻璃化转变点(Tg)可以例如使用粉末以高灵敏度差示扫描量热计(DSC3100S,由Bruker AXS K.K.生产)来测量。

[0222] 在本发明的嘧啶衍生物中,优选的化合物的具体实例如下所示,但本发明绝不限于这些化合物。

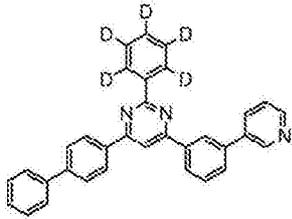


式(1-1)

A: 式(2-1)

Ar³: H

(化合物 1)



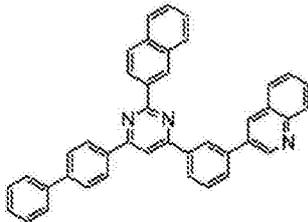
式(1-1)

A: 式(2-1)

Ar³: H

(化合物 2)

[0223]

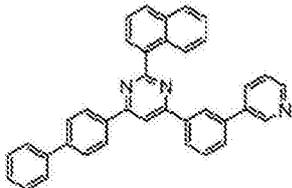


式(1-1)

A: 式(2-1)

Ar³: H

(化合物 3)

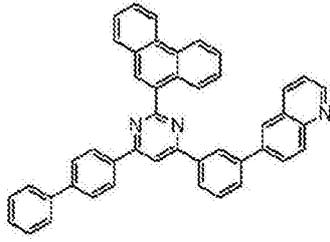


式(1-1)

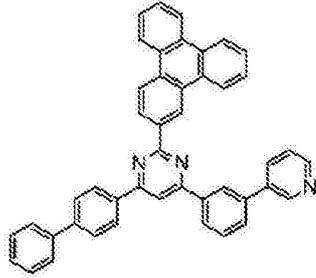
A: 式(2-1)

Ar³: H

(化合物 4)

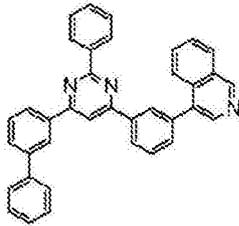


式(1-1)
A: 式(2-1)
Ar³: H (化合物 5)

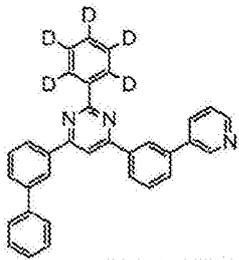


式(1-1)
A: 式(2-1)
Ar³: H (化合物 6)

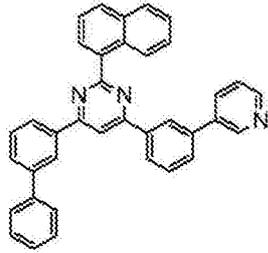
[0224]



式(1-1)
A: 式(2-1)
Ar³: H (化合物 7)



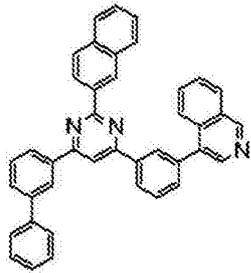
式(1-1)
A: 式(2-1)
Ar³: H (化合物 8)



式(1-1)

A: 式(2-1)

Ar³: H (化合物 9)

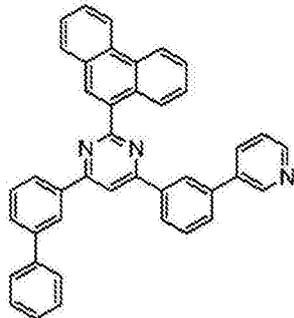


[0225]

式(1-1)

A: 式(2-1)

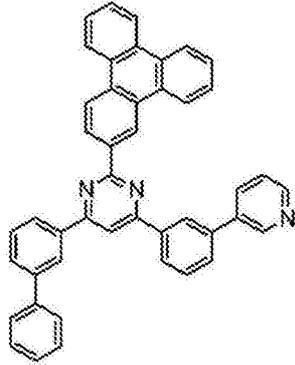
Ar³: H (化合物 10)



式(1-1)

A: 式(2-1)

Ar³: H (化合物 11)



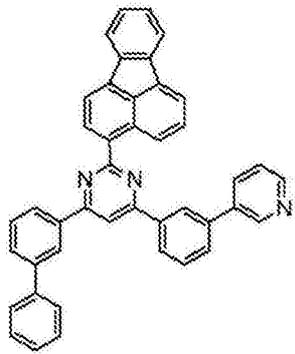
式(1-1)

A: 式(2-1)

Ar³: H

(化合物 12)

[0226]

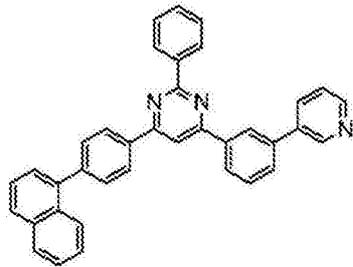


式(1-1)

A: 式(2-1)

Ar³: H

(化合物 13)

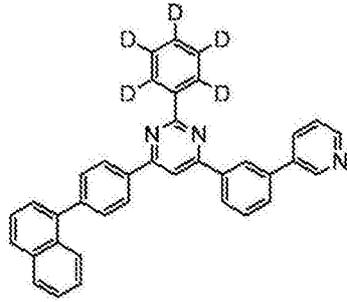


式(1-1)

A: 式(2-1)

Ar³: H

(化合物 14)



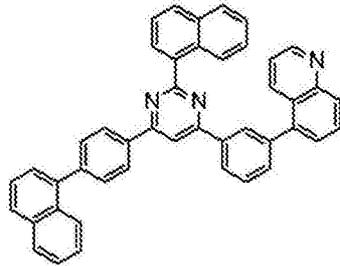
式(1-1)

A: 式(2-1)

Ar³: H

(化合物 15)

[0227]

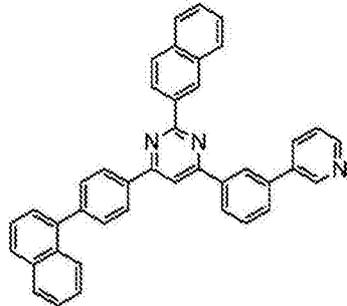


式(1-1)

A: 式(2-1)

Ar³: H

(化合物 16)

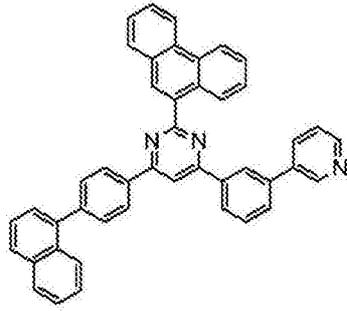


式(1-1)

A: 式(2-1)

Ar³: H

(化合物 17)

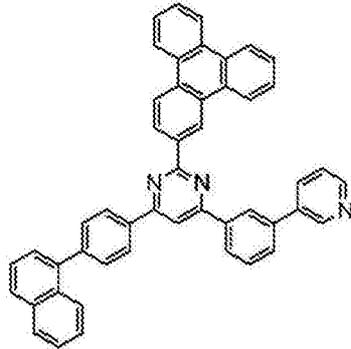


式(1-1)

A: 式(2-1)

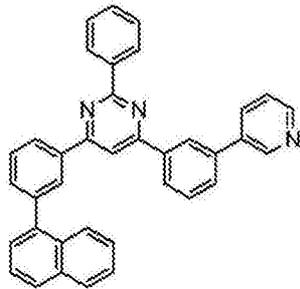
Ar³: H (化合物 18)

[0228]



式(1-1)

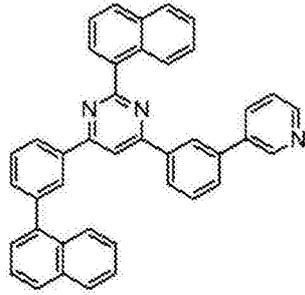
A: 式(2-1)

Ar³: H (化合物 19)

式(1-1)

A: 式(2-1)

Ar³: H (化合物 20)

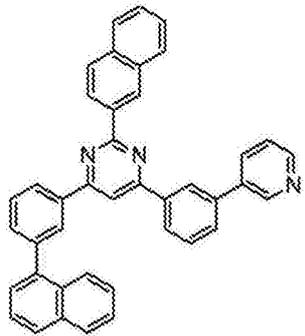


式(1-1)

A: 式(2-1)

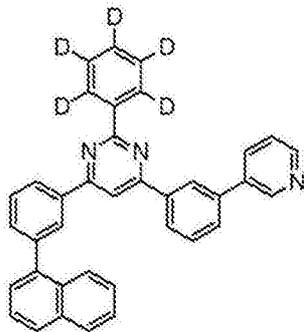
Ar³: H (化合物 21)

[0229]



式(1-1)

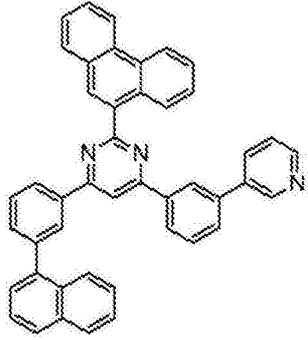
A: 式(2-1)

Ar³: H (化合物 22)

式(1-1)

A: 式(2-1)

Ar³: H (化合物 23)

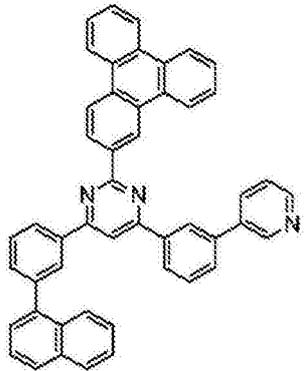


式(1-1)

A: 式(2-1)

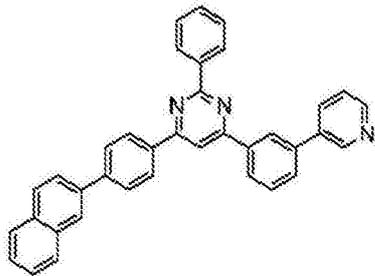
Ar³: H (化合物 24)

[0230]



式(1-1)

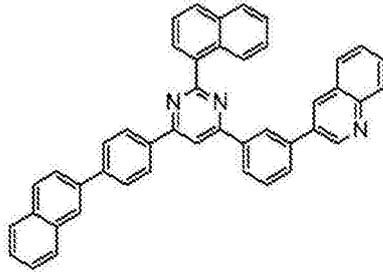
A: 式(2-1)

Ar³: H (化合物 25)

式(1-1)

A: 式(2-1)

Ar³: H (化合物 26)



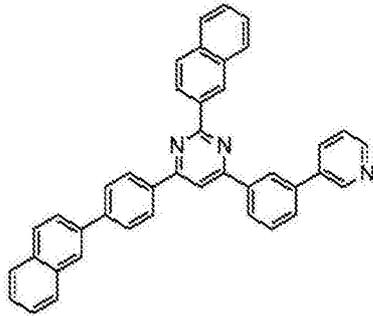
式(1-1)

A: 式(2-1)

Ar³: H

(化合物 27)

[0231]

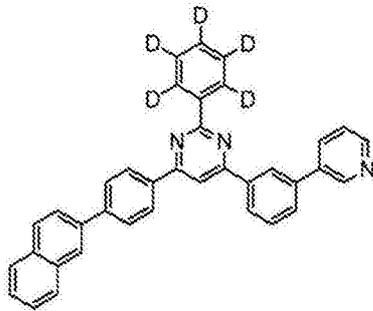


式(1-1)

A: 式(2-1)

Ar³: H

(化合物 28)

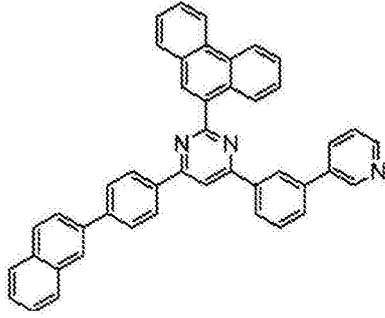


式(1-1)

A: 式(2-1)

Ar³: H

(化合物 29)



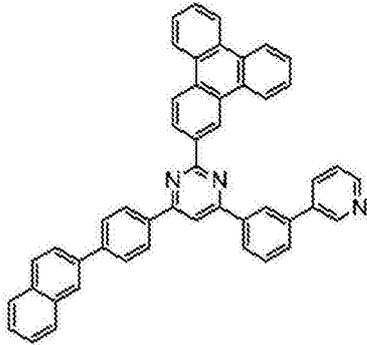
式(1-1)

A: 式(2-1)

Ar³: H

(化合物 30)

[0232]

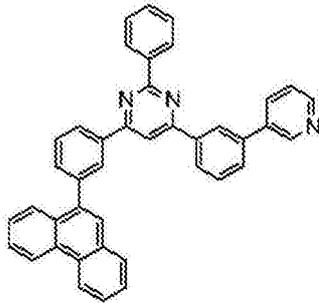


式(1-1)

A: 式(2-1)

Ar³: H

(化合物 31)

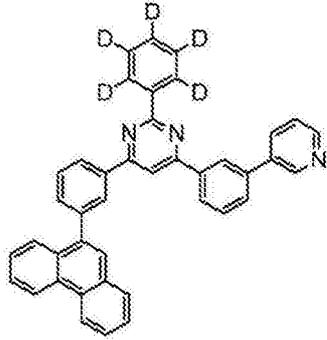


式(1-1)

A: 式(2-1)

Ar³: H

(化合物 32)



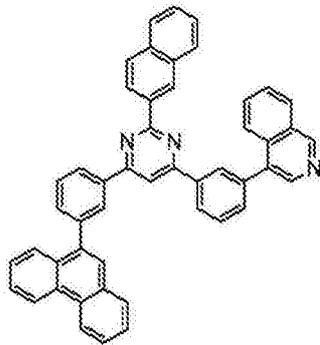
式(1-1)

A: 式(2-1)

Ar³: H

(化合物 33)

[0233]

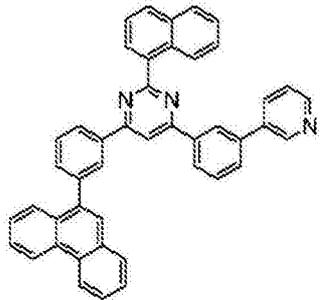


式(1-1)

A: 式(2-1)

Ar³: H

(化合物 34)

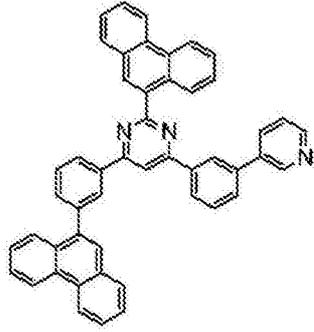


式(1-1)

A: 式(2-1)

Ar³: H

(化合物 35)



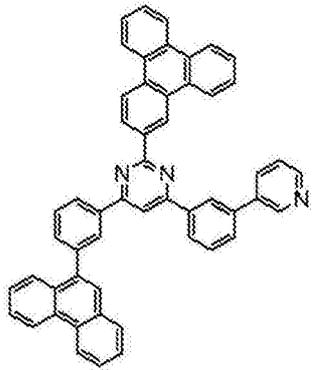
式(1-1)

A: 式(2-1)

Ar³: H

(化合物 36)

[0234]

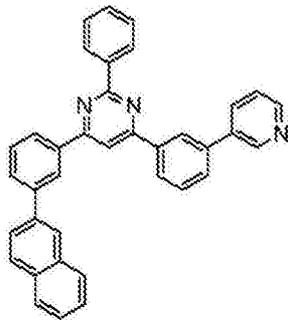


式(1-1)

A: 式(2-1)

Ar³: H

(化合物 37)

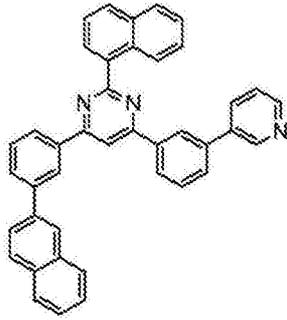


式(1-1)

A: 式(2-1)

Ar³: H

(化合物 38)

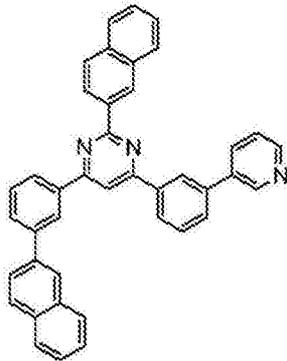


式(1-1)

A: 式(2-1)

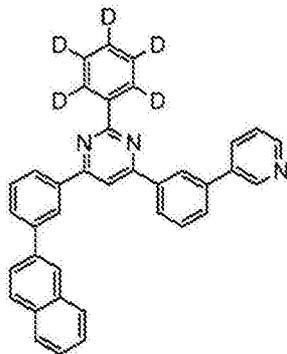
Ar³: H (化合物 39)

[0235]



式(1-1)

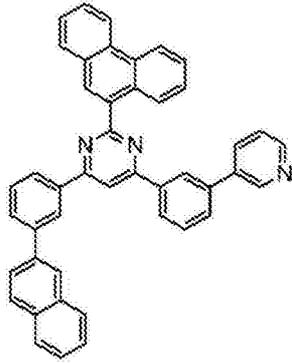
A: 式(2-1)

Ar³: H (化合物 40)

式(1-1)

A: 式(2-1)

Ar³: H (化合物 41)



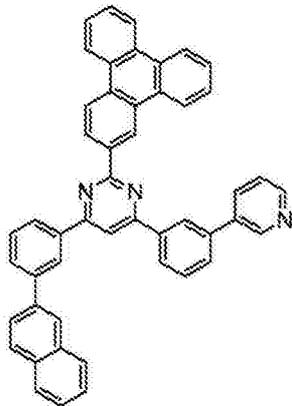
式(1-1)

A: 式(2-1)

Ar³: H

(化合物 42)

[0236]

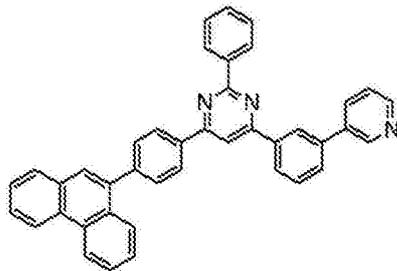


式(1-1)

A: 式(2-1)

Ar³: H

(化合物 43)

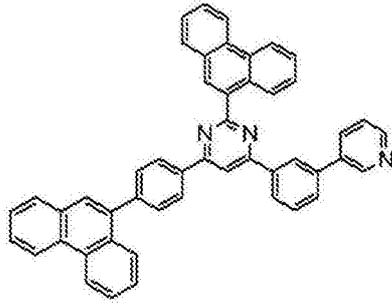


式(1-1)

A: 式(2-1)

Ar³: H

(化合物 44)



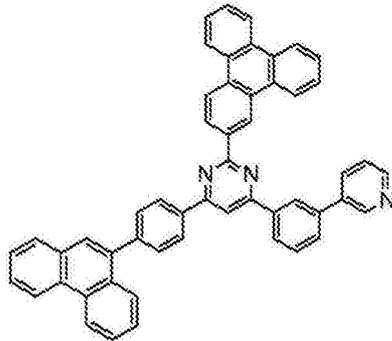
式(1-1)

A: 式(2-1)

Ar³: H

(化合物 48)

[0238]

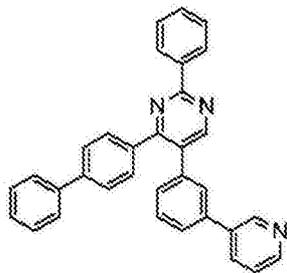


式(1-1)

A: 式(2-1)

Ar³: H

(化合物 49)

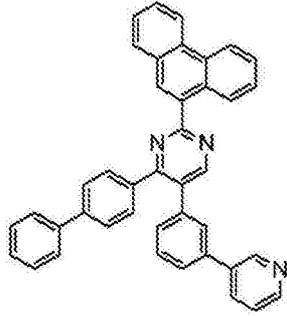


式(1-2)

A: 式(2-1)

Ar³: H

(化合物 50)



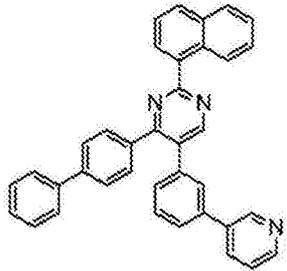
式(1-2)

A: 式(2-1)

Ar³: H

(化合物 51)

[0239]

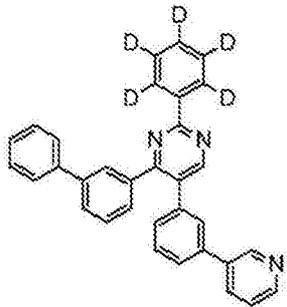


式(1-2)

A: 式(2-1)

Ar³: H

(化合物 52)

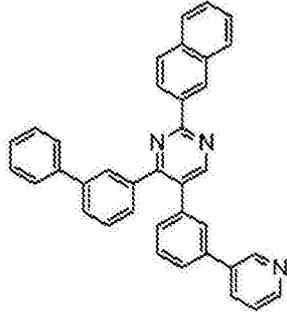


式(1-2)

A: 式(2-1)

Ar³: H

(化合物 53)



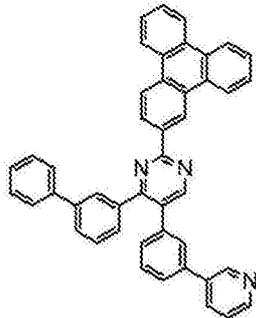
式(1-2)

A: 式(2-1)

Ar³: H

(化合物 54)

[0240]

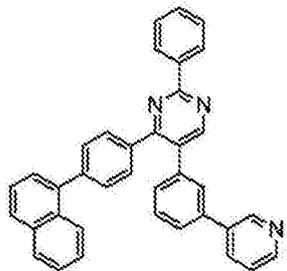


式(1-2)

A: 式(2-1)

Ar³: H

(化合物 55)

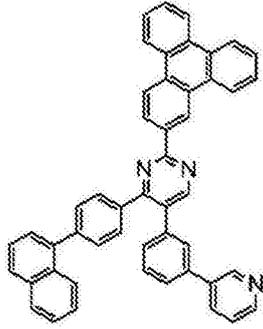


式(1-2)

A: 式(2-1)

Ar³: H

(化合物 56)



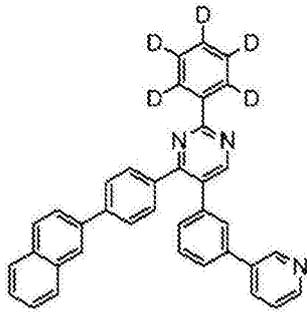
式(1-2)

A: 式(2-1)

Ar³: H

(化合物 57)

[0241]

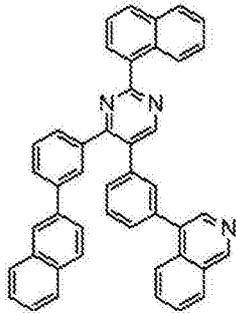


式(1-2)

A: 式(2-1)

Ar³: H

(化合物 58)

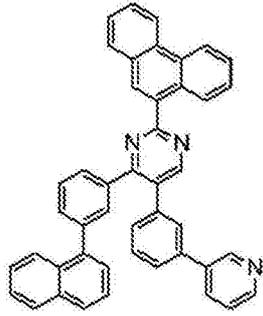


式(1-2)

A: 式(2-1)

Ar³: H

(化合物 59)

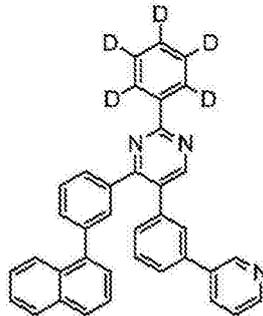


式(1-2)

A: 式(2-1)

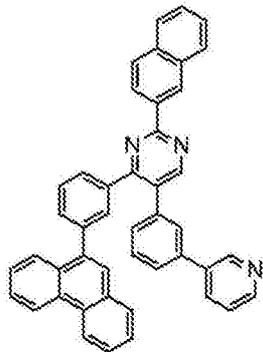
Ar³: H (化合物 60)

[0242]



式(1-2)

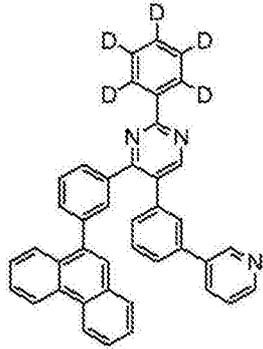
A: 式(2-1)

Ar³: H (化合物 61)

式(1-2)

A: 式(2-1)

Ar³: H (化合物 62)

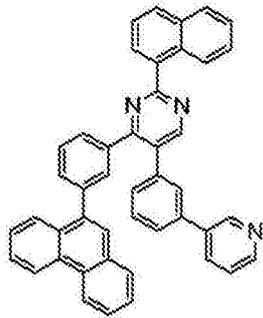


式(1-2)

A: 式(2-1)

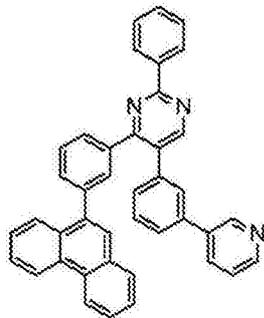
Ar³: H (化合物 63)

[0243]



式(1-2)

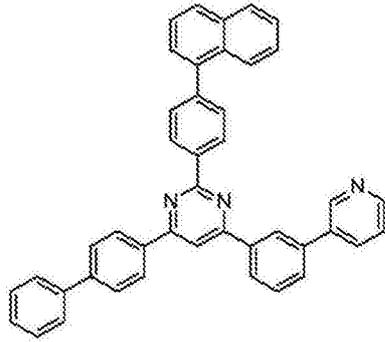
A: 式(2-1)

Ar³: H (化合物 64)

式(1-2)

A: 式(2-1)

Ar³: H (化合物 65)



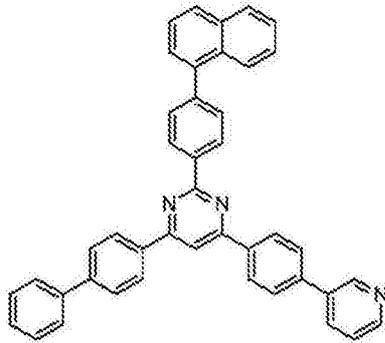
式(1-1)

A: 式(2-1)

Ar³: H

(化合物 66)

[0244]

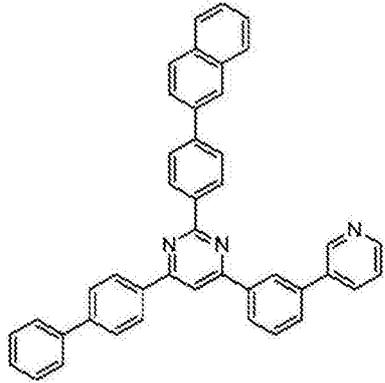


式(1-1)

A: 式(2-2)

Ar³: H

(化合物 67)

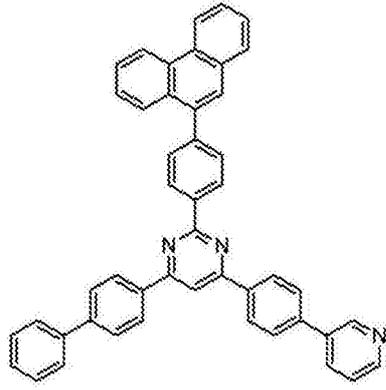


式(1-1)

A: 式(2-1)

Ar³: H

(化合物 68)



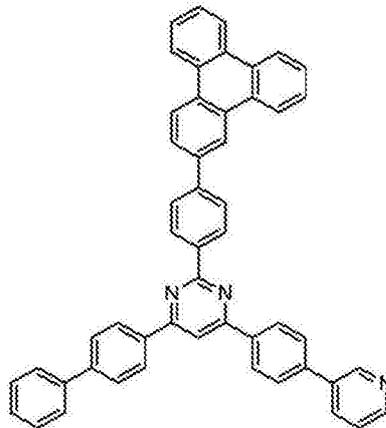
式(1-1)

A: 式(2-2)

Ar³: H

(化合物 69)

[0245]

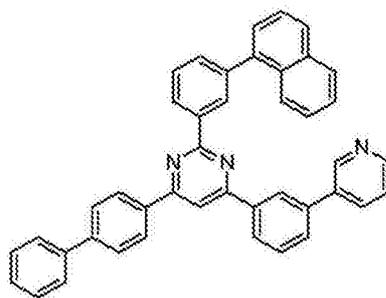


式(1-1)

A: 式(2-2)

Ar³: H

(化合物 70)

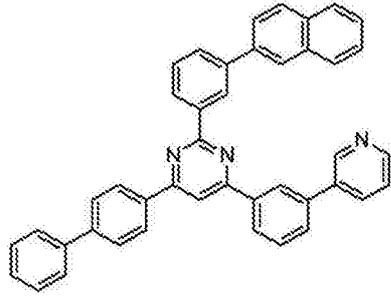


式(1-1)

A: 式(2-1)

Ar³: H

(化合物 71)



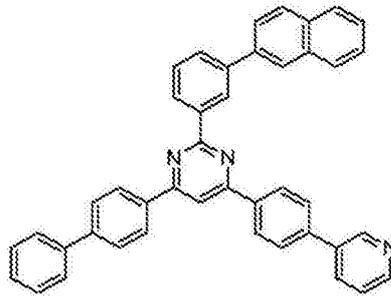
式(1-1)

A: 式(2-1)

Ar³: H

(化合物 72)

[0246]

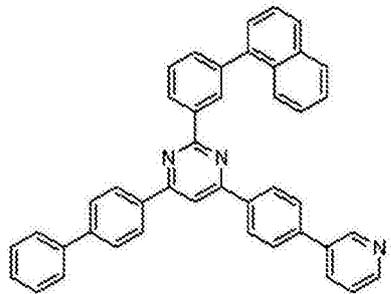


式(1-1)

A: 式(2-2)

Ar³: H

(化合物 73)

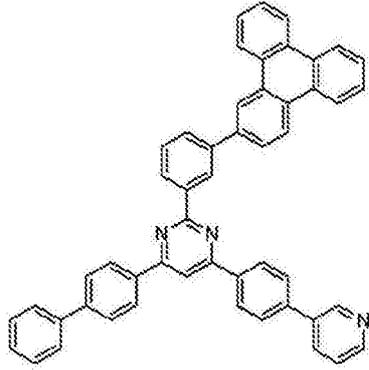


式(1-1)

A: 式(2-2)

Ar³: H

(化合物 74)



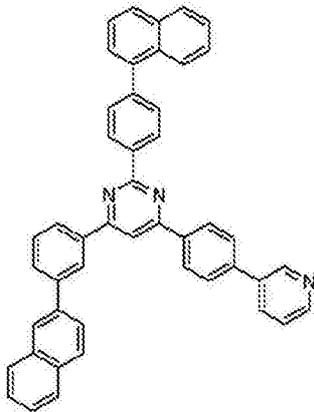
式(1-1)

A: 式(2-2)

Ar³: H

(化合物 75)

[0247]

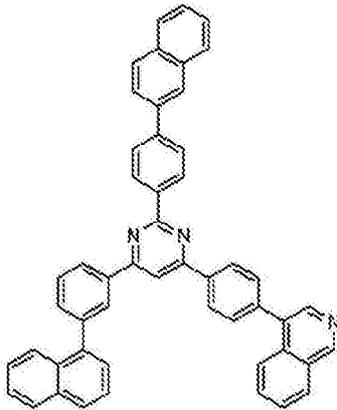


式(1-1)

A: 式(2-2)

Ar³: H

(化合物 76)

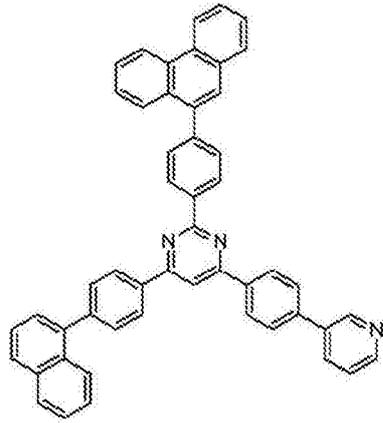


式(1-1)

A: 式(2-2)

Ar³: H

(化合物 77)



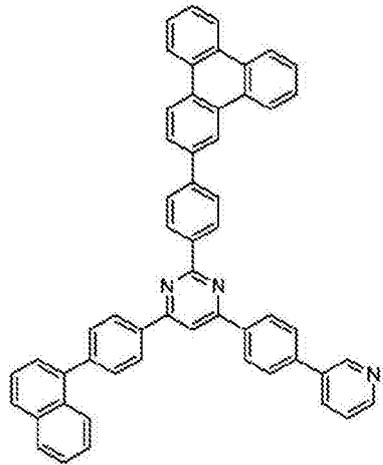
式(1-1)

A: 式(2-2)

Ar³: H

(化合物 78)

[0248]

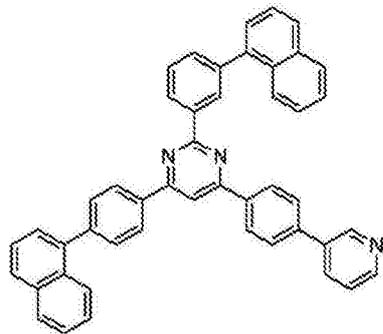


式(1-1)

A: 式(2-2)

Ar³: H

(化合物 79)

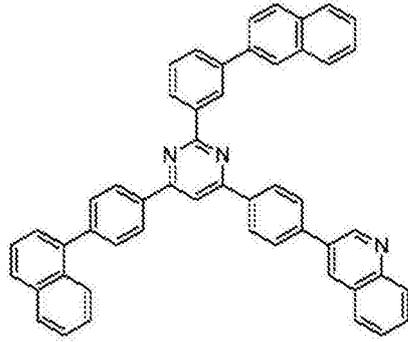


式(1-1)

A: 式(2-2)

Ar³: H

(化合物 80)



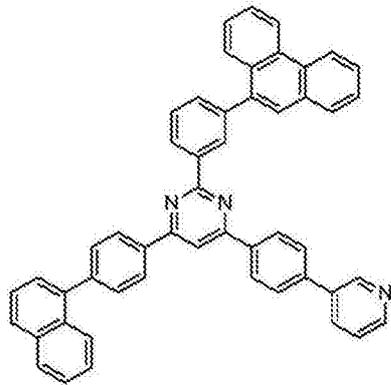
式(1-1)

A: 式(2-2)

Ar³: H

(化合物 81)

[0249]

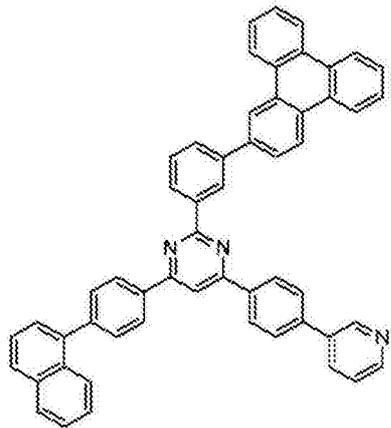


式(1-1)

A: 式(2-2)

Ar³: H

(化合物 82)

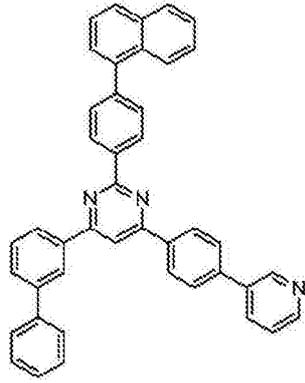


式(1-1)

A: 式(2-2)

Ar³: H

(化合物 83)



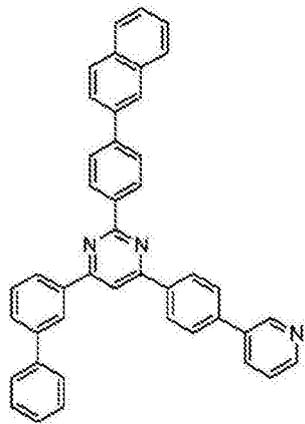
式(1-1)

A: 式(2-2)

Ar³: H

(化合物 84)

[0250]

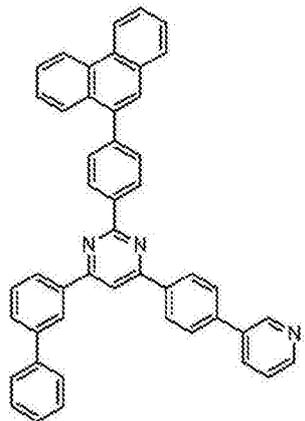


式(1-1)

A: 式(2-2)

Ar³: H

(化合物 85)

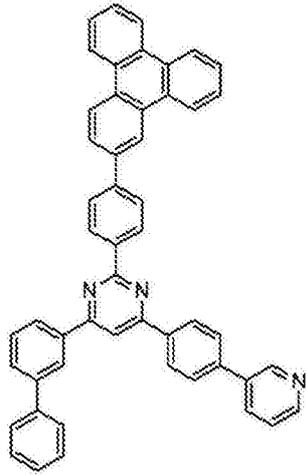


式(1-1)

A: 式(2-2)

Ar³: H

(化合物 86)



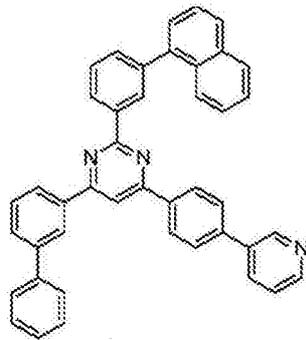
式(1-1)

A: 式(2-2)

Ar³: H

(化合物 87)

[0251]

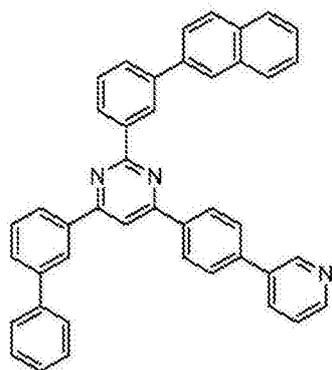


式(1-1)

A: 式(2-2)

Ar³: H

(化合物 88)

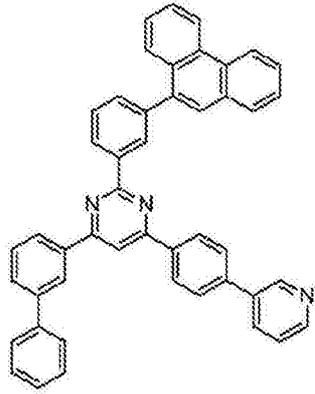


式(1-1)

A: 式(2-2)

Ar³: H

(化合物 89)



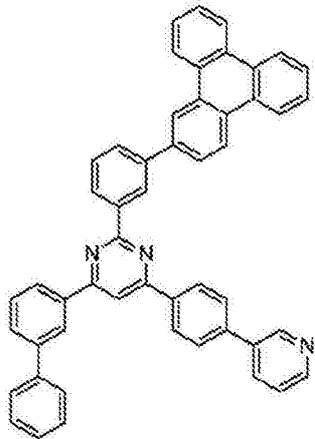
式(1-1)

A: 式(2-2)

Ar³: H

(化合物 90)

[0252]

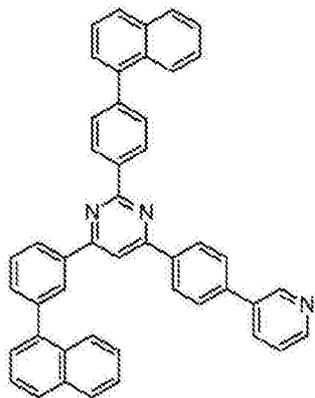


式(1-1)

A: 式(2-2)

Ar³: H

(化合物 91)

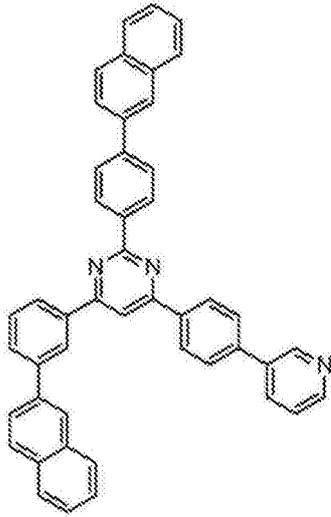


式(1-1)

A: 式(2-2)

Ar³: H

(化合物 92)



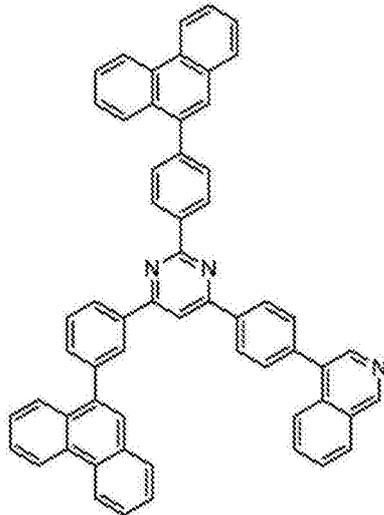
式(1-1)

A: 式(2-2)

Ar³: H

(化合物 93)

[0253]

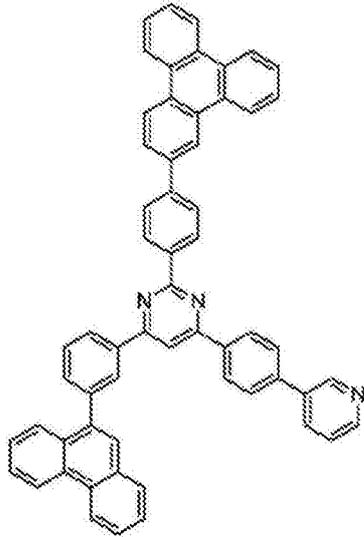


式(1-1)

A: 式(2-2)

Ar³: H

(化合物 94)



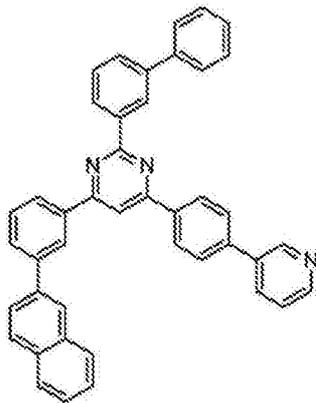
式(1-1)

A: 式(2-2)

Ar³: H

(化合物 95)

[0254]

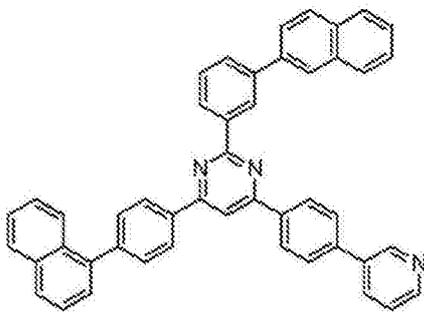


式(1-1)

A: 式(2-2)

Ar³: H

(化合物 96)

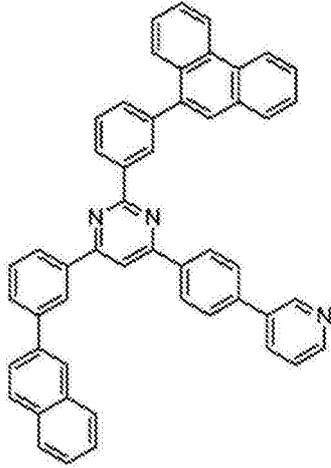


式(1-1)

A: 式(2-2)

Ar³: H

(化合物 97)



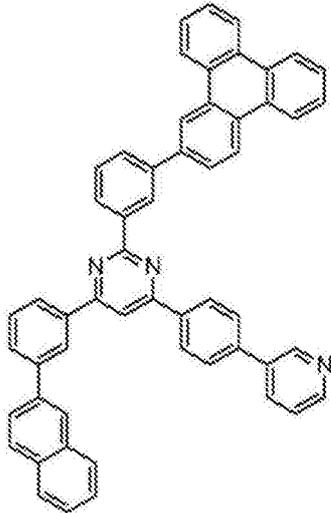
式(1-1)

A: 式(2-2)

Ar³: H

(化合物 98)

[0255]

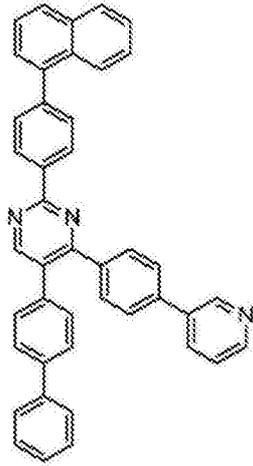


式(1-1)

A: 式(2-2)

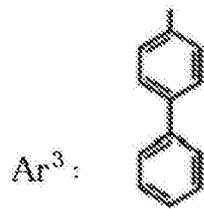
Ar³: H

(化合物 99)



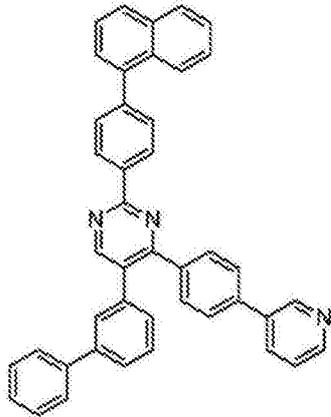
式(1-1)

A: 式(2-2)



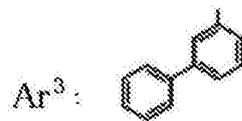
[0256]

(化合物 100)

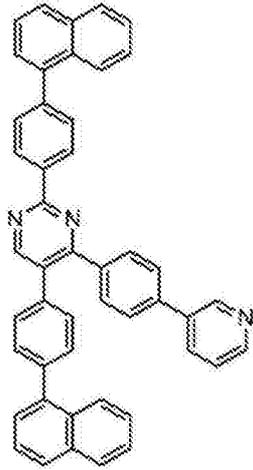


式(1-1)

A: 式(2-2)

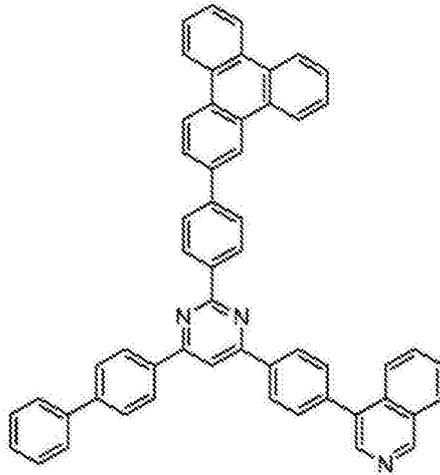
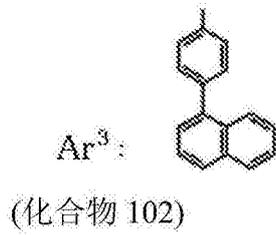


(化合物 101)

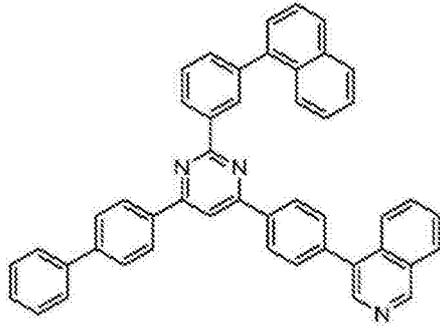


式(1-1)
A: 式(2-2)

[0257]



式(1-1)
A: 式(2-2)
Ar³: H (化合物 103)



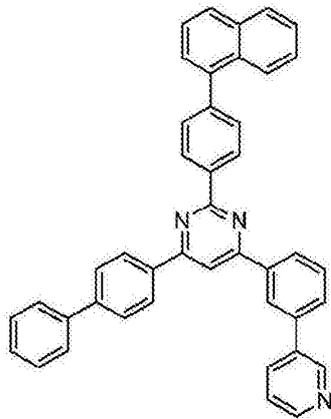
式(1-1)

A: 式(2-2)

Ar³: H

(化合物 104)

[0258]

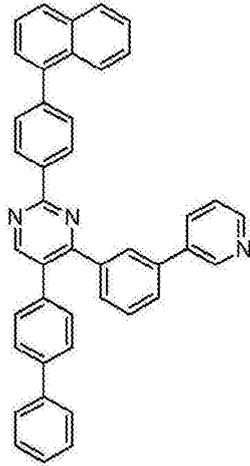


式(1-1)

A: 式(2-1)

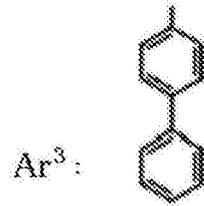
Ar³: H

(化合物 105)

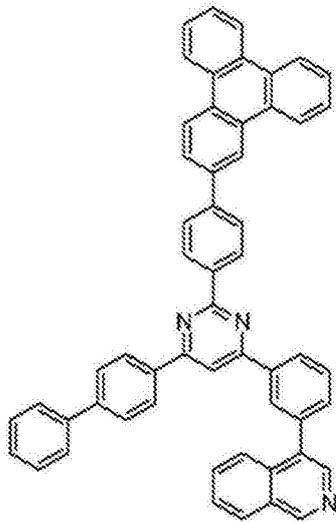


式(1-1)
A: 式(2-1)

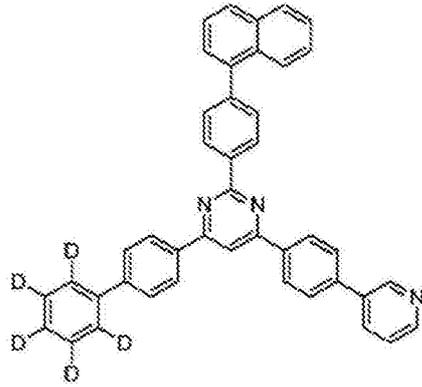
[0259]



(化合物 106)



式(1-1)
A: 式(2-1)
Ar³: H (化合物 107)



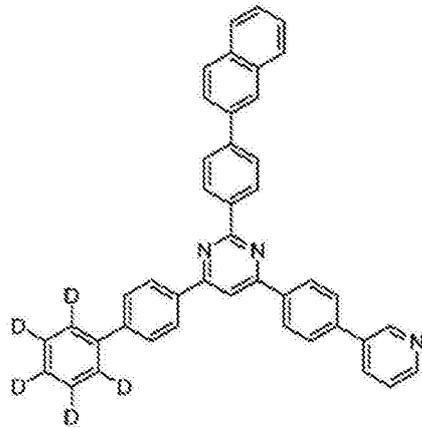
式(1-1)

A: 式(2-2)

Ar³: H

(化合物 108)

[0260]

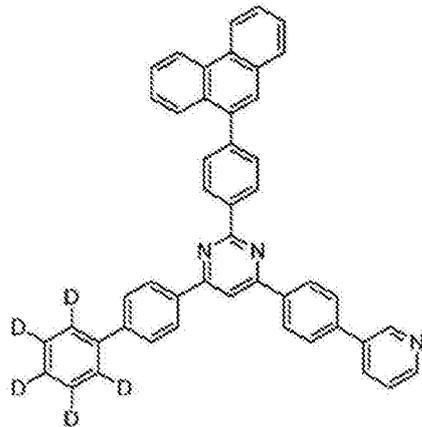


式(1-1)

A: 式(2-2)

Ar³: H

(化合物 109)

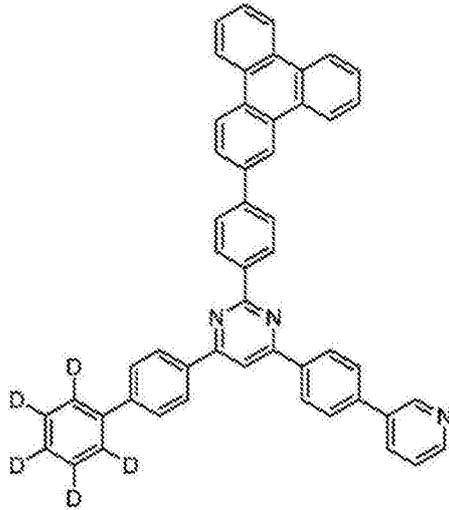


式(1-1)

A: 式(2-2)

Ar³: H

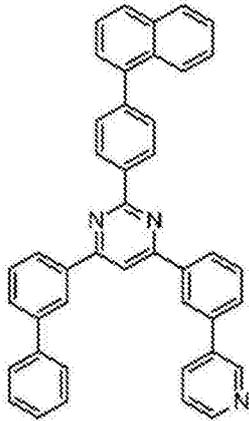
(化合物 110)



式(1-1)

A: 式(2-2)

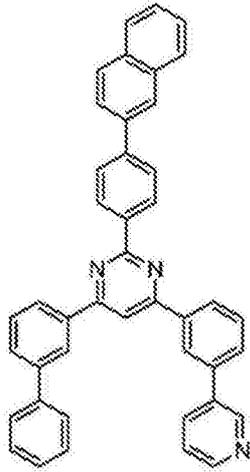
[0261] Ar³: H (化合物 111)



式(1-1)

A: 式(2-1)

Ar³: H (化合物 112)

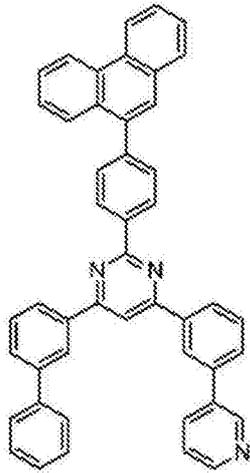


式(1-1)

A: 式(2-1)

Ar³: H (化合物 113)

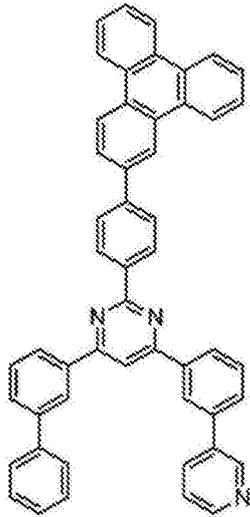
[0262]



式(1-1)

A: 式(2-1)

Ar³: H (化合物 114)



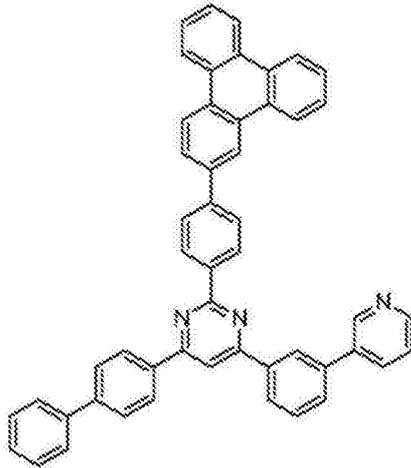
式(1-1)

A: 式(2-1)

Ar³: H

(化合物 115)

[0263]

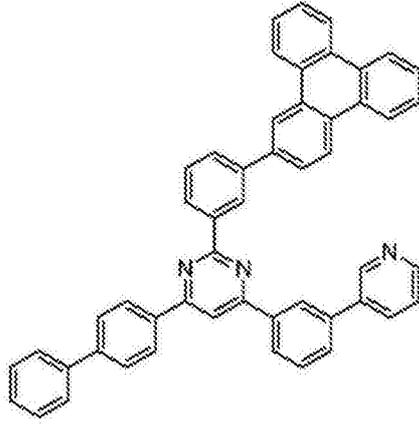


式(1-1)

A: 式(2-1)

Ar³: H

(化合物 116)



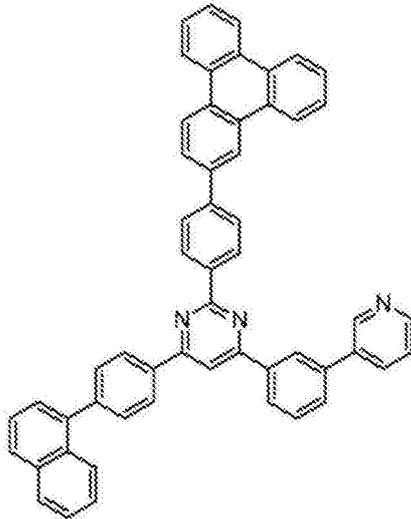
式(1-1)

A: 式(2-1)

Ar³: H

(化合物 117)

[0264]

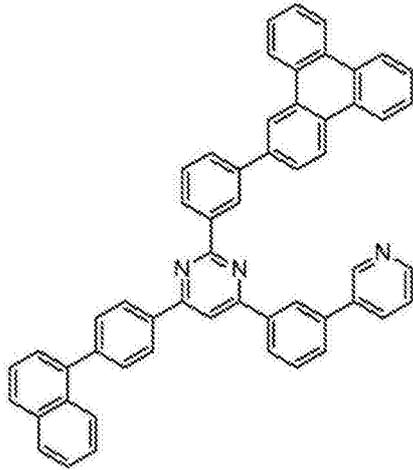


式(1-1)

A: 式(2-1)

Ar³: H

(化合物 118)



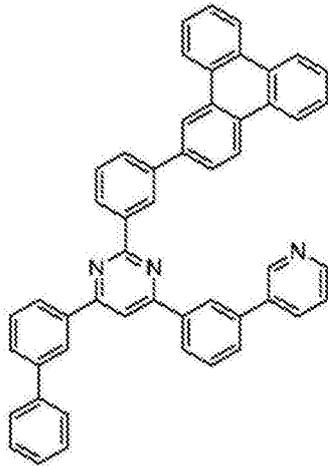
式(1-1)

A: 式(2-1)

Ar³: H

(化合物 119)

[0265]

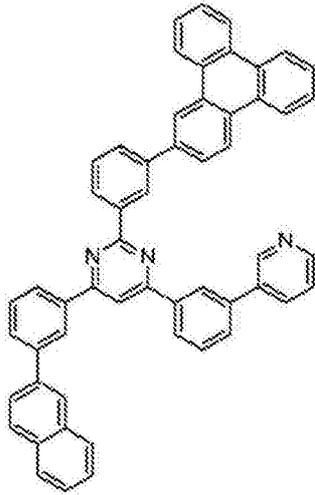


式(1-1)

A: 式(2-1)

Ar³: H

(化合物 120)



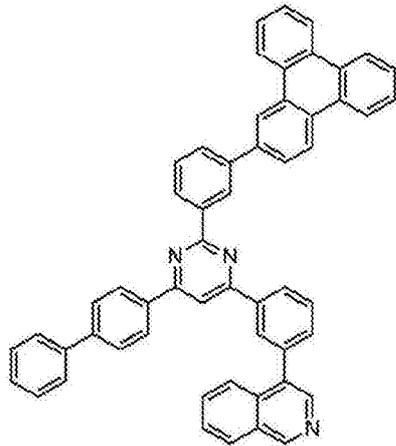
式(1-1)

A: 式(2-1)

Ar³: H

(化合物 121)

[0266]

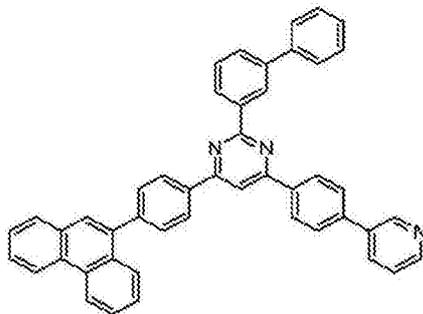


式(1-1)

A: 式(2-1)

Ar³: H

(化合物 122)

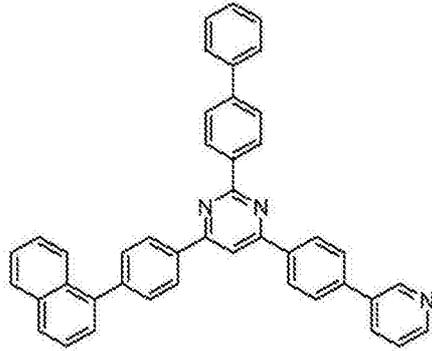


式(1-1)

A: 式(2-2)

Ar³: H

(化合物 123)



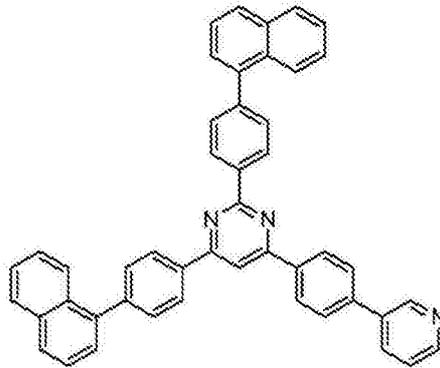
式(1-1)

A: 式(2-2)

Ar³: H

(化合物 124)

[0267]

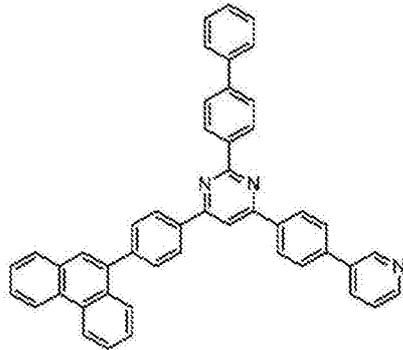


式(1-1)

A: 式(2-2)

Ar³: H

(化合物 125)

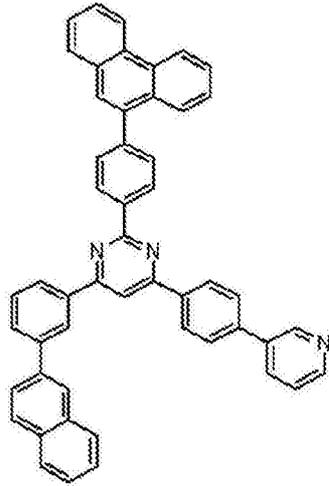


式(1-1)

A: 式(2-2)

Ar³: H

(化合物 126)



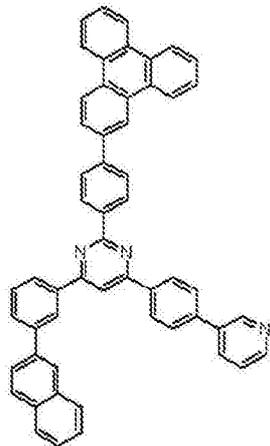
式(1-1)

A: 式(2-2)

Ar³: H

(化合物 127)

[0268]

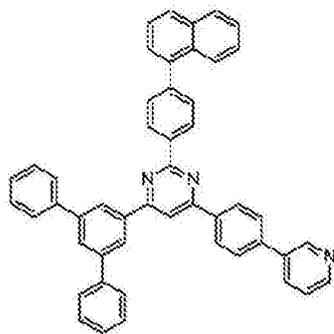


式(1-1)

A: 式(2-2)

Ar³: H

(化合物 128)

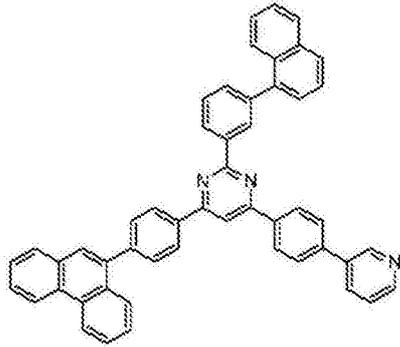


式(1-1)

A: 式(2-2)

Ar³: H

(化合物 129)



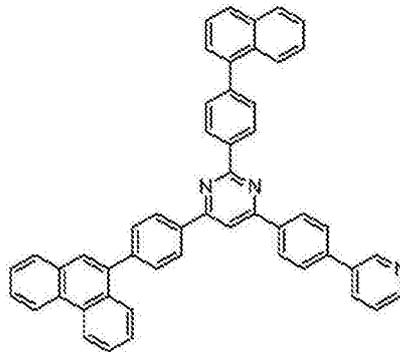
式(1-1)

A: 式(2-2)

Ar³: H

(化合物 130)

[0269]

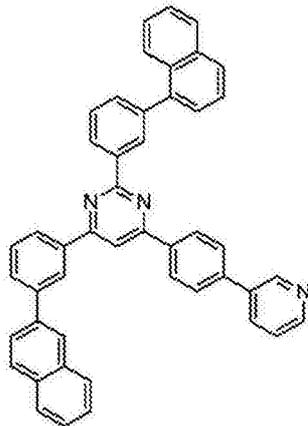


式(1-1)

A: 式(2-2)

Ar³: H

(化合物 131)

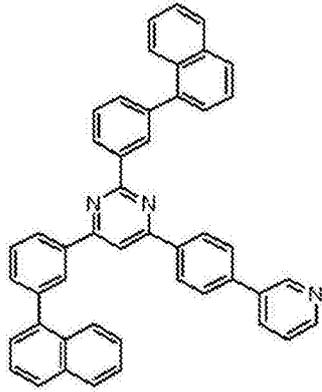


式(1-1)

A: 式(2-2)

Ar³: H

(化合物 132)



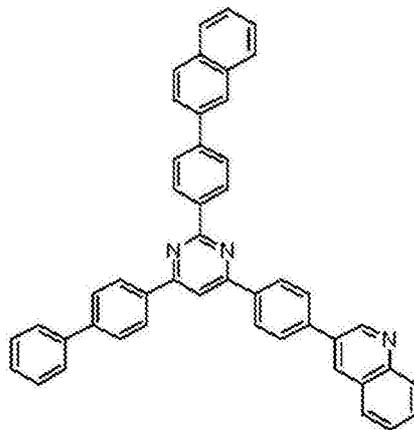
式(1-1)

A: 式(2-2)

Ar³: H

(化合物 133)

[0270]

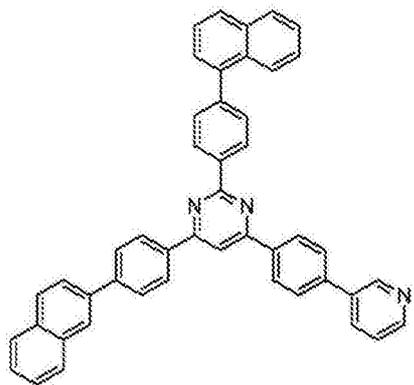


式(1-1)

A: 式(2-2)

Ar³: H

(化合物 134)

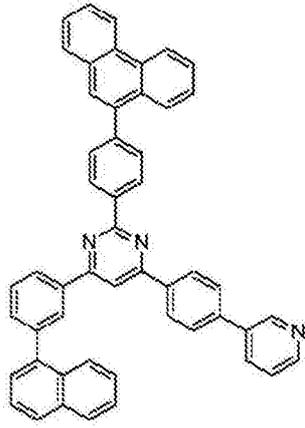


式(1-1)

A: 式(2-2)

Ar³: H

(化合物 135)



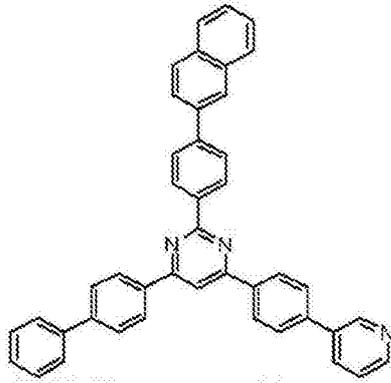
式(1-1)

A: 式(2-2)

Ar³: H

(化合物 136)

[0271]

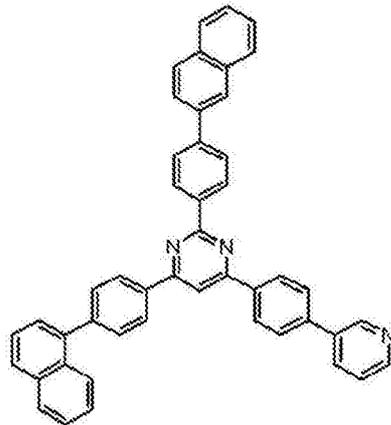


式(1-1)

A: 式(2-2)

Ar³: H

(化合物 137)

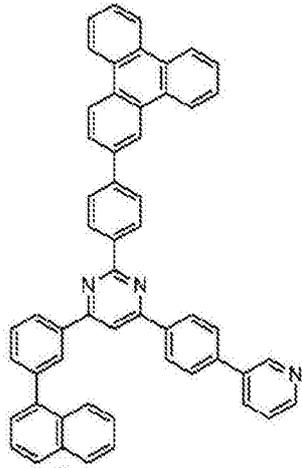


式(1-1)

A: 式(2-2)

Ar³: H

(化合物 138)



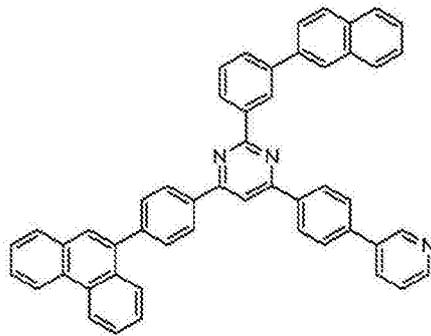
式(1-1)

A: 式(2-2)

Ar³: H

(化合物 139)

[0272]

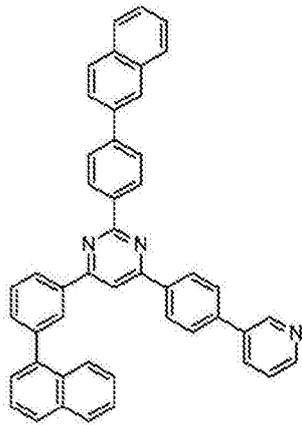


式(1-1)

A: 式(2-2)

Ar³: H

(化合物 140)

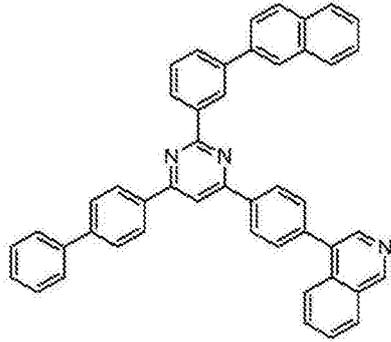


式(1-1)

A: 式(2-2)

Ar³: H

(化合物 141)



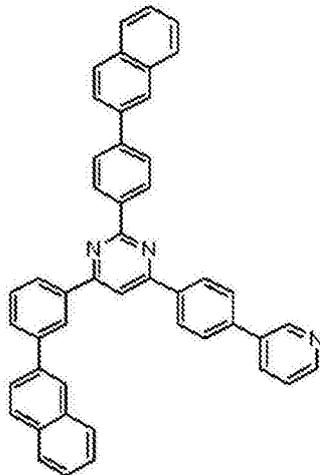
式(1-1)

A: 式(2-2)

Ar³: H

(化合物 142)

[0273]

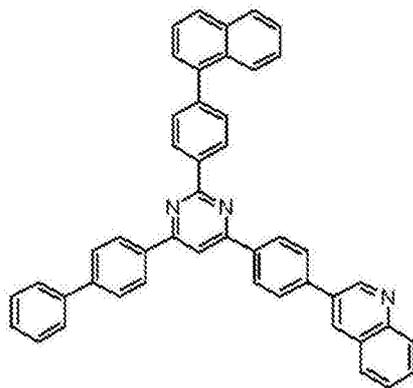


式(1-1)

A: 式(2-2)

Ar³: H

(化合物 143)

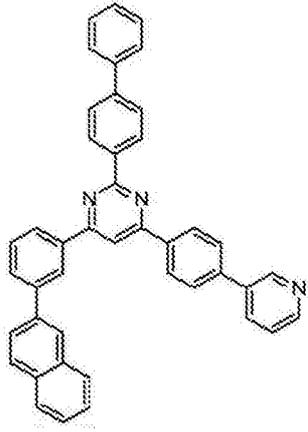


式(1-1)

A: 式(2-2)

Ar³: H

(化合物 144)



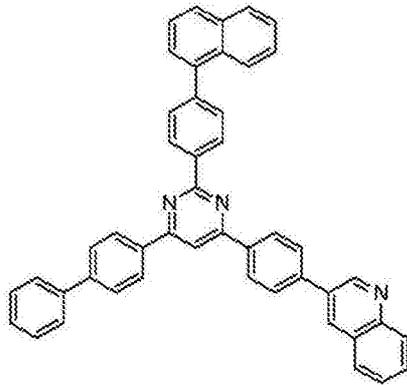
式(1-1)

A: 式(2-2)

Ar³: H

(化合物 145)

[0274]

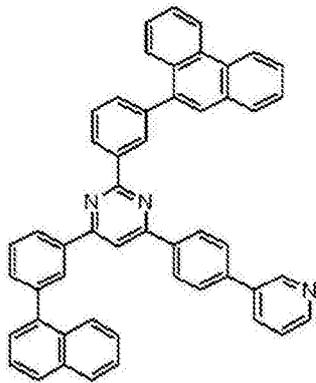


式(1-1)

A: 式(2-2)

Ar³: H

(化合物 146)

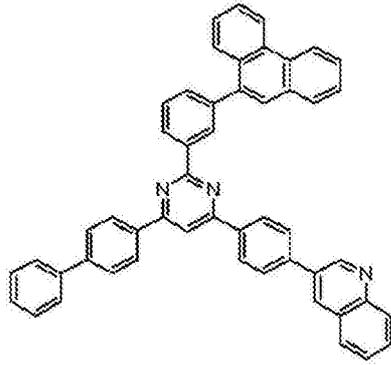


式(1-1)

A: 式(2-2)

Ar³: H

(化合物 147)



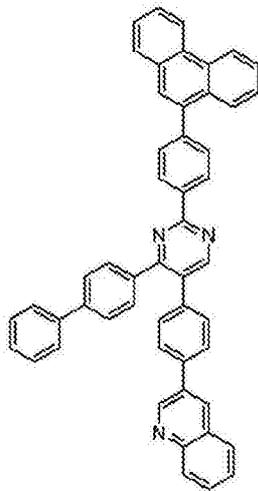
式(1-1)

A: 式(2-2)

Ar³: H

(化合物 148)

[0275]

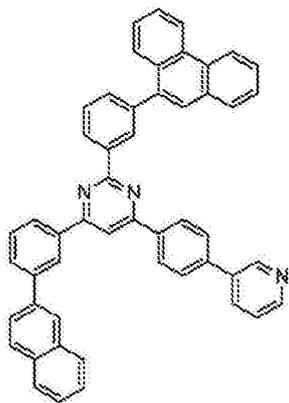


式(1-2)

A: 式(2-2)

Ar³: H

(化合物 149)

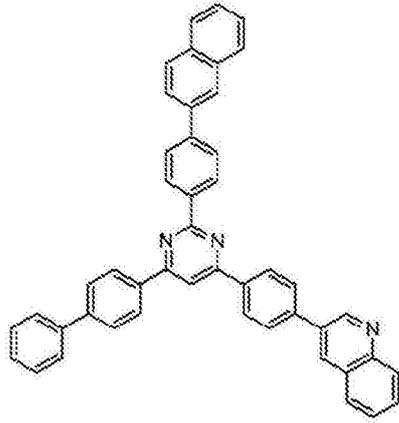


式(1-1)

A: 式(2-2)

Ar³: H

(化合物 150)



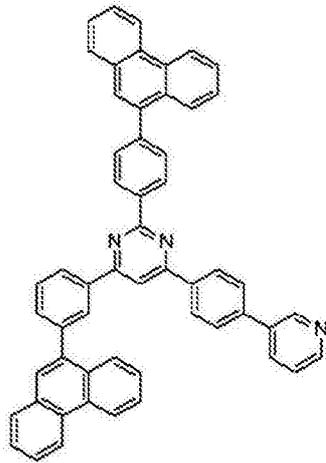
式(1-1)

A: 式(2-2)

Ar³: H

(化合物 151)

[0276]

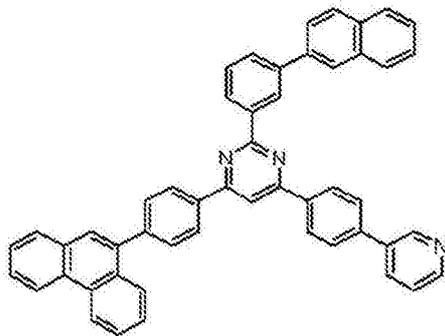


式(1-1)

A: 式(2-2)

Ar³: H

(化合物 152)

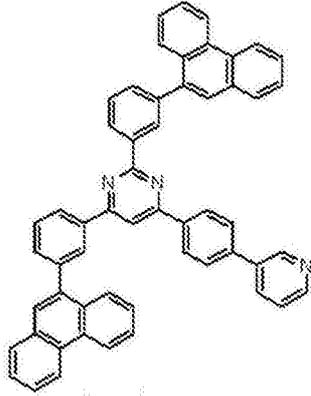


式(1-1)

A: 式(2-2)

Ar³: H

(化合物 153)



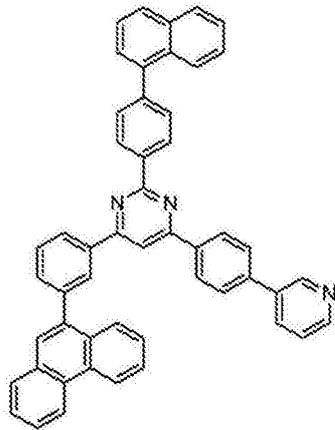
式(1-1)

A: 式(2-2)

Ar³: H

(化合物 154)

[0277]

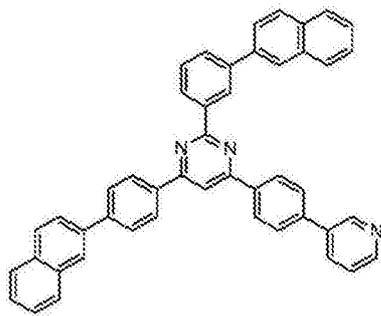


式(1-1)

A: 式(2-2)

Ar³: H

(化合物 155)

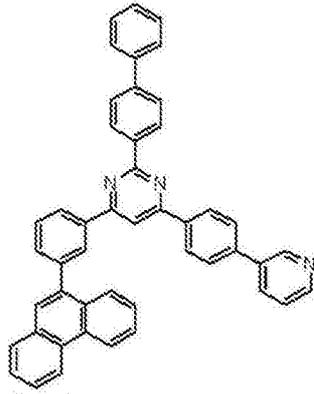


式(1-1)

A: 式(2-2)

Ar³: H

(化合物 156)



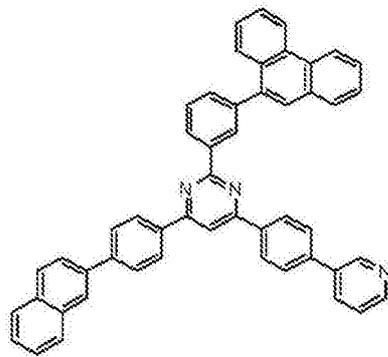
式(1-1)

A: 式(2-2)

Ar³: H

(化合物 157)

[0278]

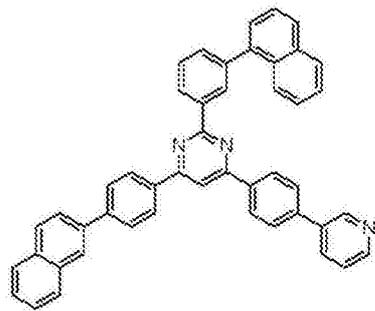


式(1-1)

A: 式(2-2)

Ar³: H

(化合物 158)

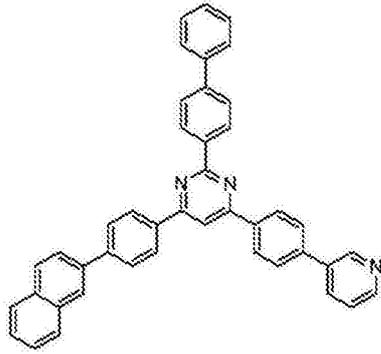


式(1-1)

A: 式(2-2)

Ar³: H

(化合物 159)



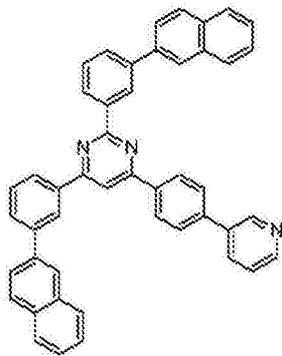
式(1-1)

A: 式(2-2)

Ar³: H

(化合物 160)

[0279]

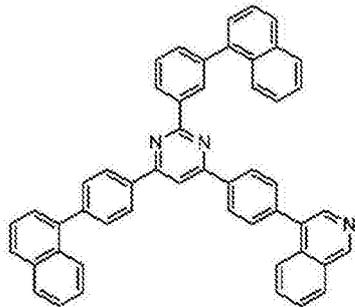


式(1-1)

A: 式(2-2)

Ar³: H

(化合物 161)

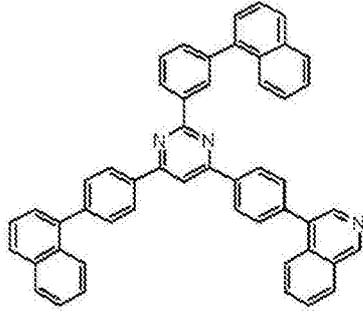


式(1-1)

A: 式(2-2)

Ar³: H

(化合物 162)



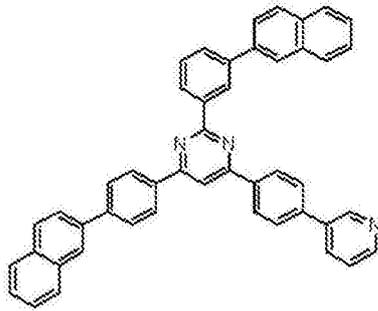
式(1-1)

A: 式(2-2)

Ar³: H

(化合物 163)

[0280]

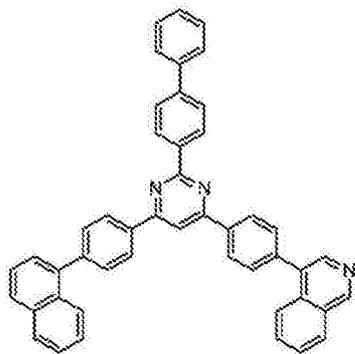


式(1-1)

A: 式(2-2)

Ar³: H

(化合物 164)

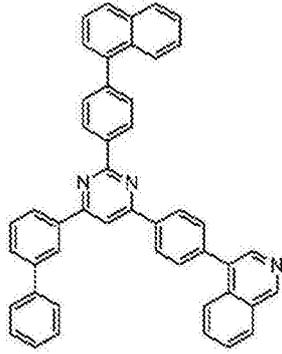


式(1-1)

A: 式(2-2)

Ar³: H

(化合物 165)



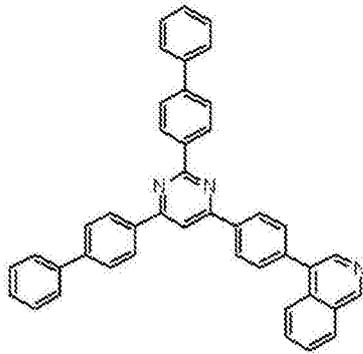
式(1-1)

A: 式(2-2)

Ar³: H

(化合物 166)

[0281]

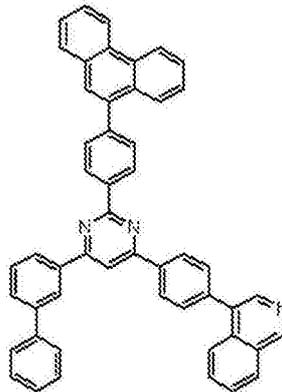


式(1-1)

A: 式(2-2)

Ar³: H

(化合物 167)

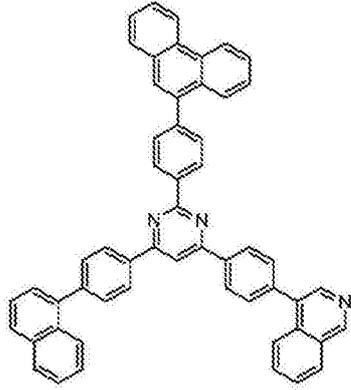


式(1-1)

A: 式(2-2)

Ar³: H

(化合物 168)



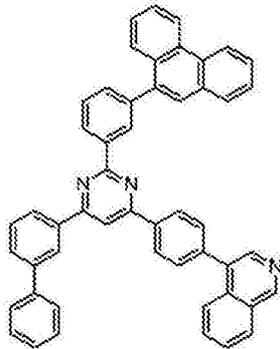
式(1-1)

A: 式(2-2)

Ar³: H

(化合物 169)

[0282]

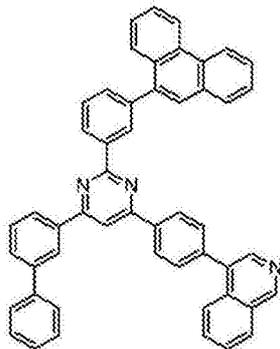


式(1-1)

A: 式(2-2)

Ar³: H

(化合物 170)

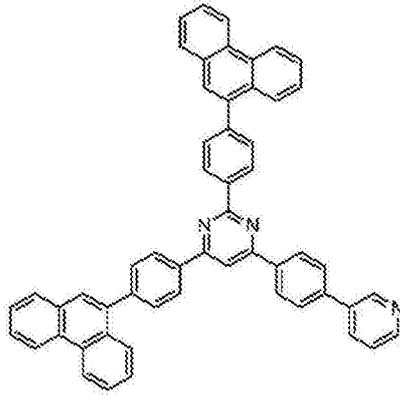


式(1-1)

A: 式(2-2)

Ar³: H

(化合物 171)



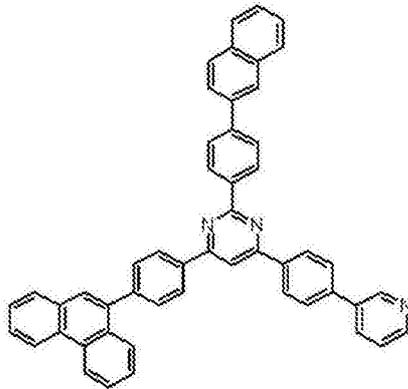
式(1-1)

A: 式(2-2)

Ar³: H

(化合物 172)

[0283]

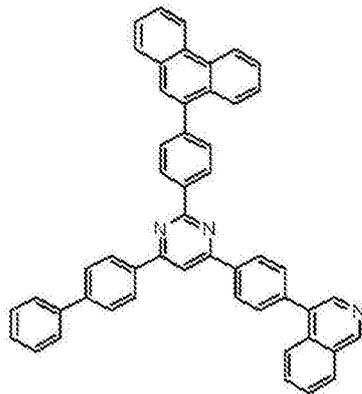


式(1-1)

A: 式(2-2)

Ar³: H

(化合物 173)

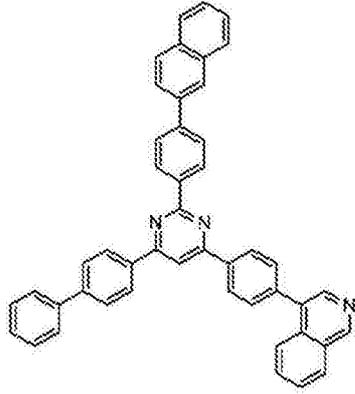


式(1-1)

A: 式(2-2)

Ar³: H

(化合物 174)



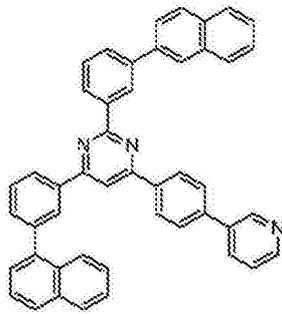
式(1-1)

A: 式(2-2)

Ar³: H

(化合物 175)

[0284]

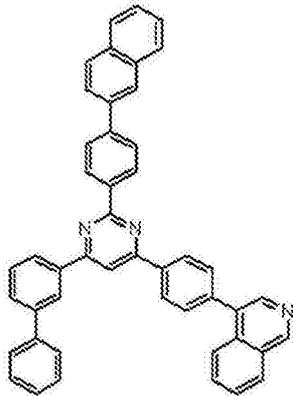


式(1-1)

A: 式(2-2)

Ar³: H

(化合物 176)

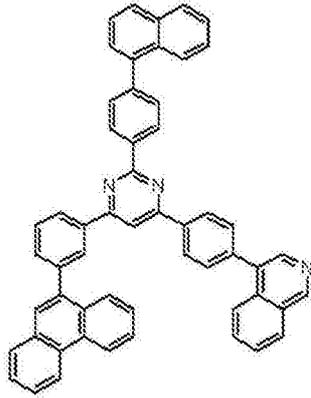


式(1-1)

A: 式(2-2)

Ar³: H

(化合物 177)



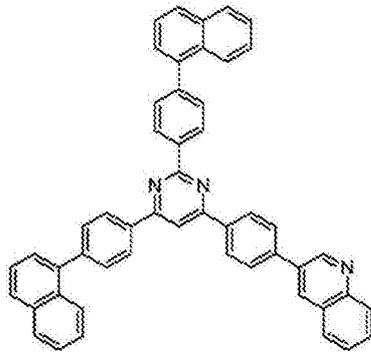
式(1-1)

A: 式(2-2)

Ar³: H

(化合物 178)

[0285]

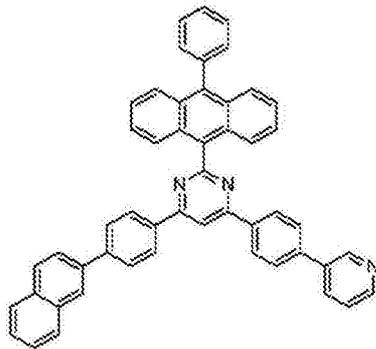


式(1-1)

A: 式(2-2)

Ar³: H

(化合物 179)

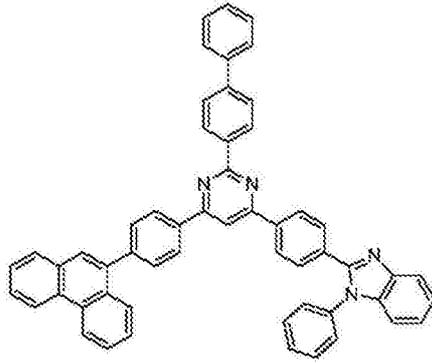


式(1-1)

A: 式(2-2)

Ar³: H

(化合物 180)



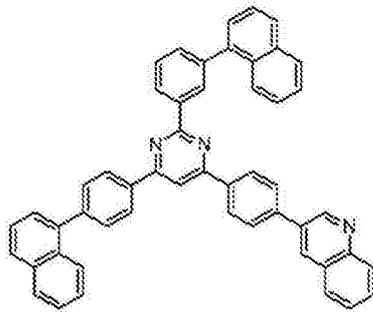
式(1-1)

A: 式(2-2)

Ar³: H

(化合物 181)

[0286]

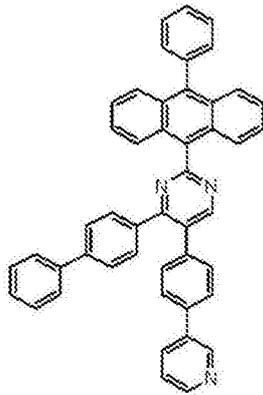


式(1-1)

A: 式(2-2)

Ar³: H

(化合物 182)

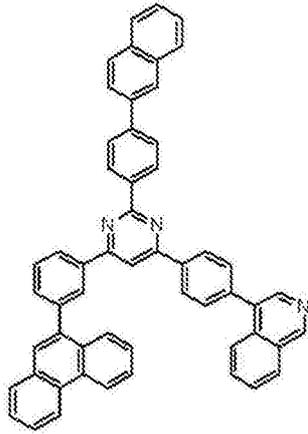


式(1-2)

A: 式(2-2)

Ar³: H

(化合物 183)



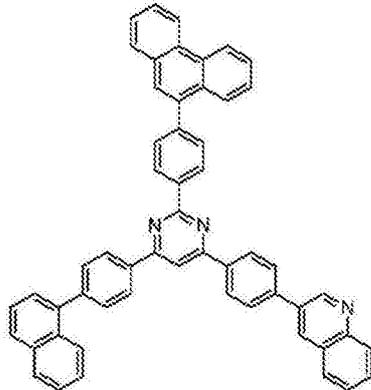
式(1-1)

A: 式(2-2)

Ar³: H

(化合物 184)

[0287]

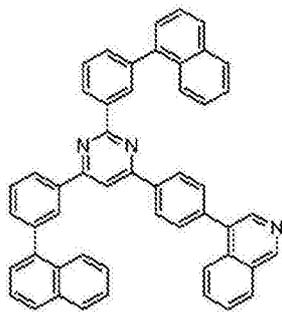


式(1-1)

A: 式(2-2)

Ar³: H

(化合物 185)

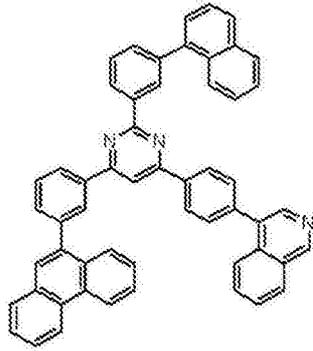


式(1-1)

A: 式(2-2)

Ar³: H

(化合物 186)

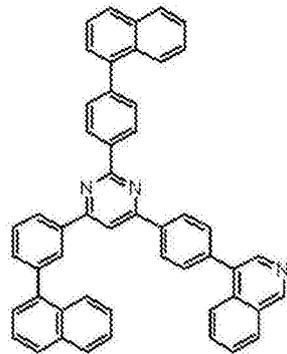


式(1-1)

A: 式(2-2)

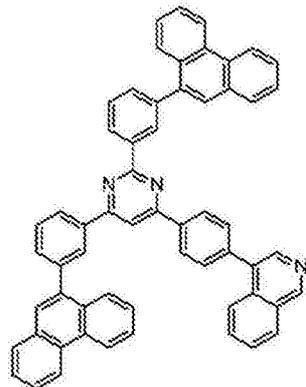
Ar³: H (化合物 187)

[0288]



式(1-1)

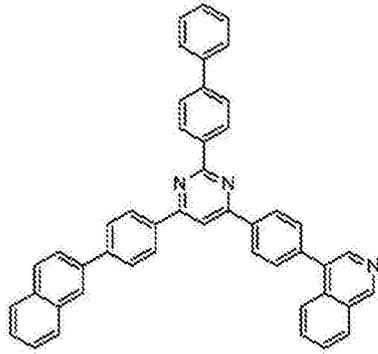
A: 式(2-2)

Ar³: H (化合物 188)

式(1-1)

A: 式(2-2)

Ar³: H (化合物 189)



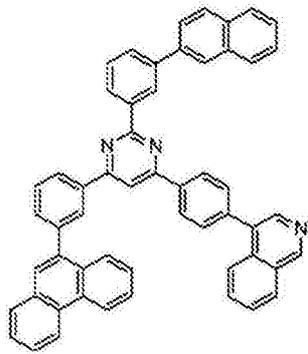
式(1-1)

A: 式(2-2)

Ar³: H

(化合物 190)

[0289]

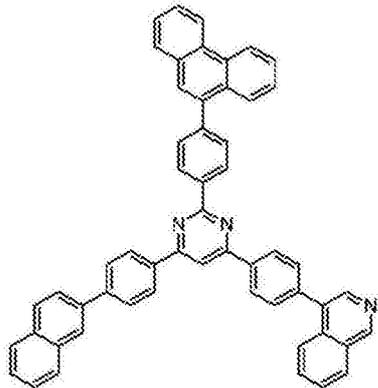


式(1-1)

A: 式(2-2)

Ar³: H

(化合物 191)

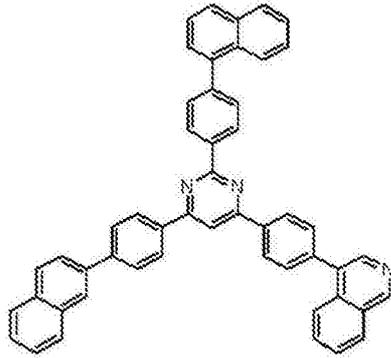


式(1-1)

A: 式(2-2)

Ar³: H

(化合物 192)



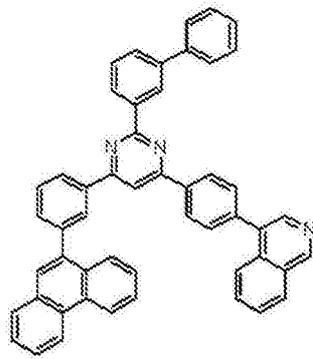
式(1-1)

A: 式(2-2)

Ar³: H

(化合物 193)

[0290]

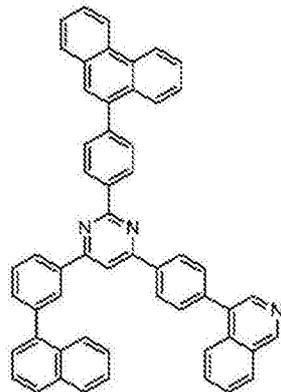


式(1-1)

A: 式(2-2)

Ar³: H

(化合物 194)

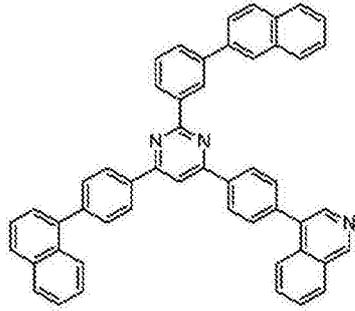


式(1-1)

A: 式(2-2)

Ar³: H

(化合物 195)



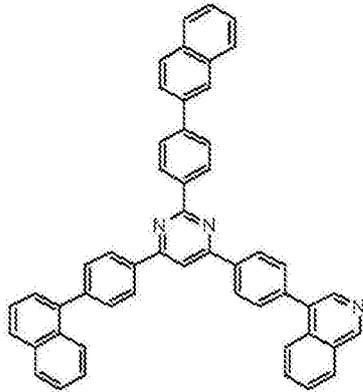
式(1-1)

A: 式(2-2)

Ar³: H

(化合物 196)

[0291]

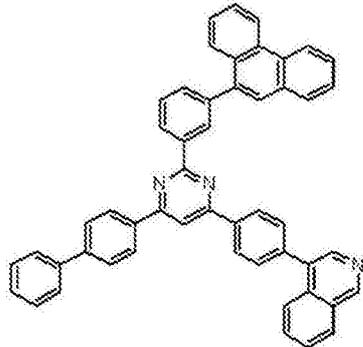


式(1-1)

A: 式(2-2)

Ar³: H

(化合物 197)

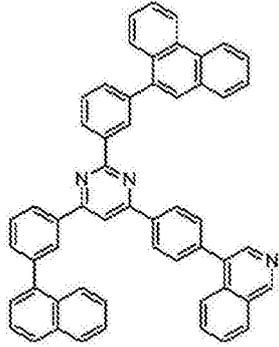


式(1-1)

A: 式(2-2)

Ar³: H

(化合物 198)

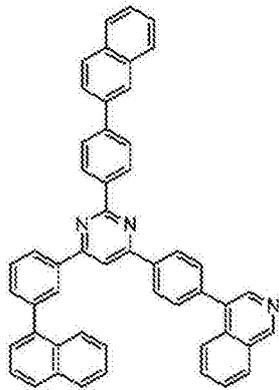


式(1-1)

A: 式(2-2)

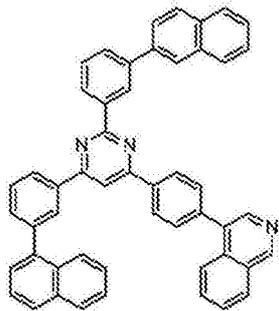
Ar³: H (化合物 199)

[0292]



式(1-1)

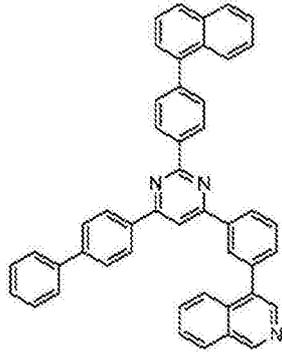
A: 式(2-2)

Ar³: H (化合物 200)

式(1-1)

A: 式(2-2)

Ar³: H (化合物 201)



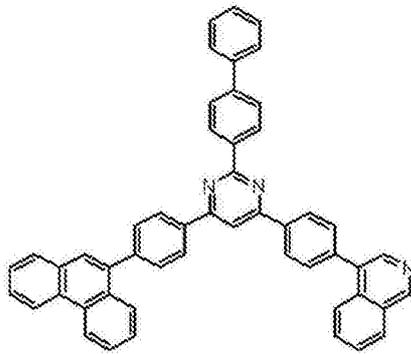
式(1-1)

A: 式(2-1)

Ar³: H

(化合物 202)

[0293]

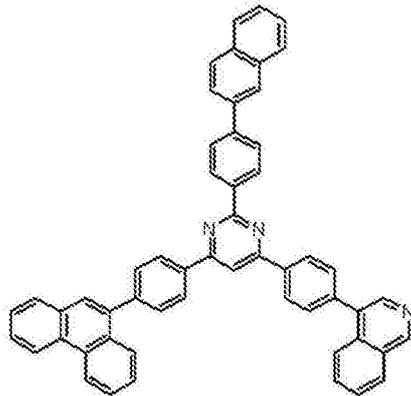


式(1-1)

A: 式(2-2)

Ar³: H

(化合物 203)

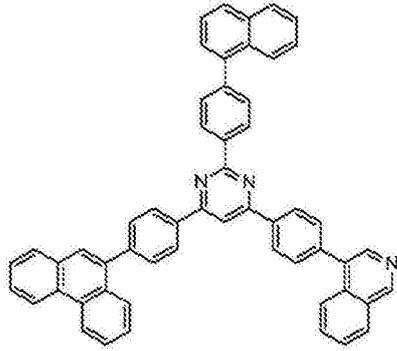


式(1-1)

A: 式(2-2)

Ar³: H

(化合物 204)



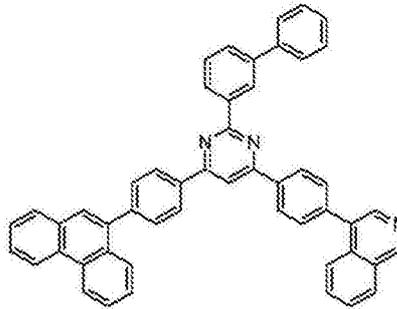
式(1-1)

A: 式(2-2)

Ar³: H

(化合物 205)

[0294]

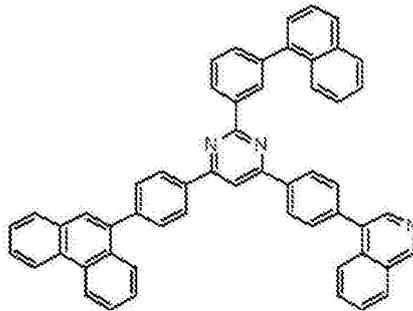


式(1-1)

A: 式(2-2)

Ar³: H

(化合物 206)

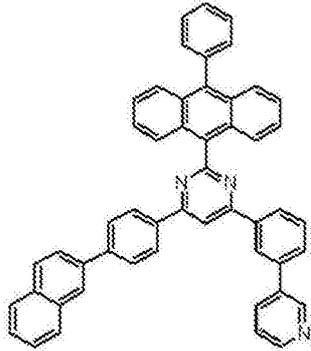


式(1-1)

A: 式(2-2)

Ar³: H

(化合物 207)



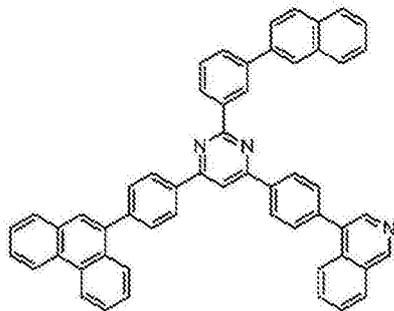
式(1-1)

A: 式(2-1)

Ar³: H

(化合物 208)

[0295]

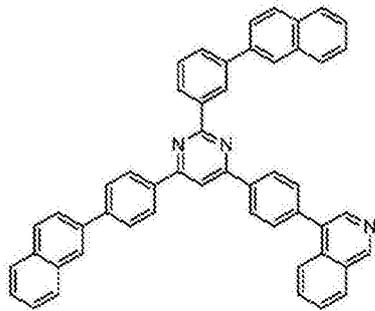


式(1-1)

A: 式(2-2)

Ar³: H

(化合物 209)

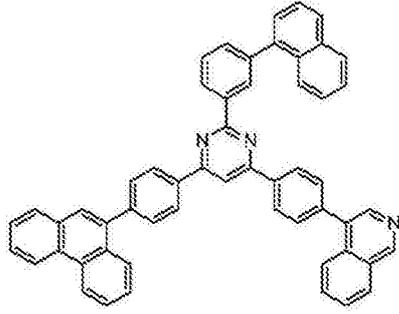


式(1-1)

A: 式(2-2)

Ar³: H

(化合物 210)



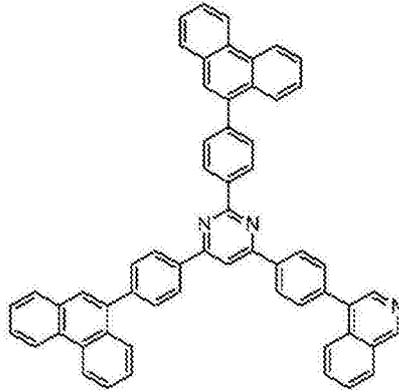
式(1-1)

A: 式(2-2)

Ar³: H

(化合物 211)

[0296]

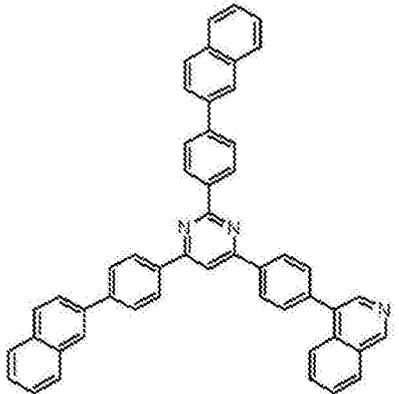


式(1-1)

A: 式(2-2)

Ar³: H

(化合物 212)

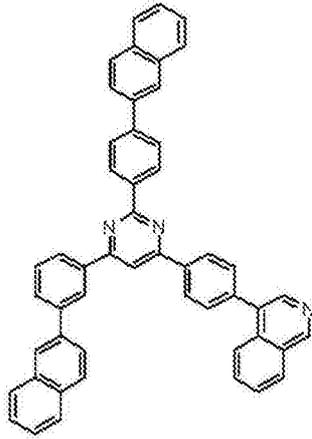


式(1-1)

A: 式(2-2)

Ar³: H

(化合物 213)



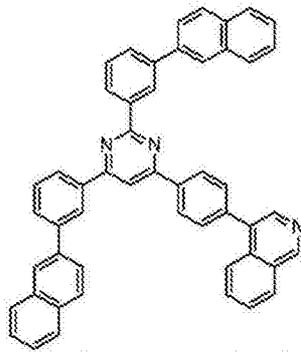
式(1-1)

A: 式(2-2)

Ar³: H

(化合物 214)

[0297]

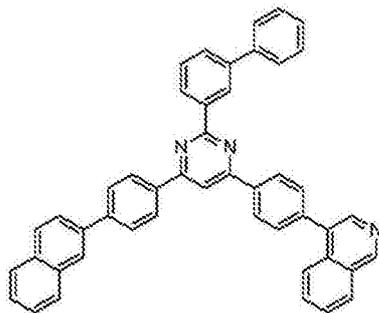


式(1-1)

A: 式(2-2)

Ar³: H

(化合物 215)

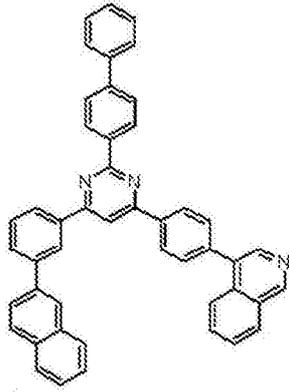


式(1-1)

A: 式(2-2)

Ar³: H

(化合物 216)



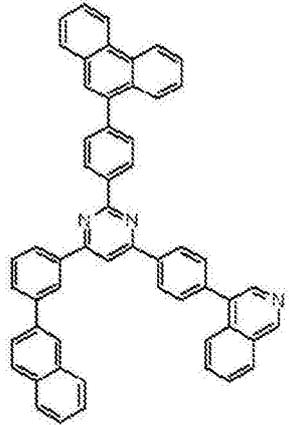
式(1-1)

A: 式(2-2)

Ar³: H

(化合物 217)

[0298]

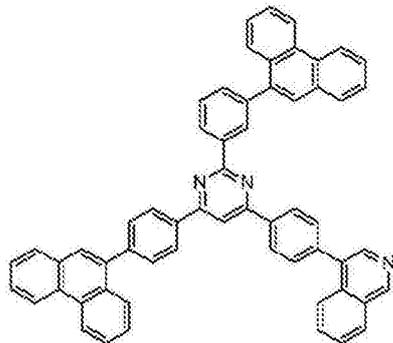


式(1-1)

A: 式(2-2)

Ar³: H

(化合物 218)

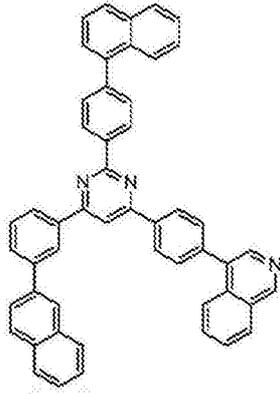


式(1-1)

A: 式(2-2)

Ar³: H

(化合物 219)



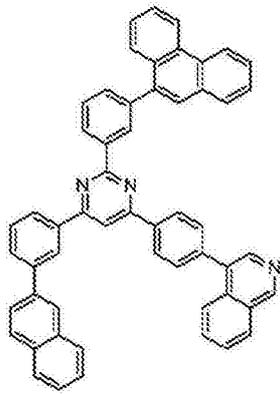
式(1-1)

A: 式(2-2)

Ar³: H

(化合物 220)

[0299]

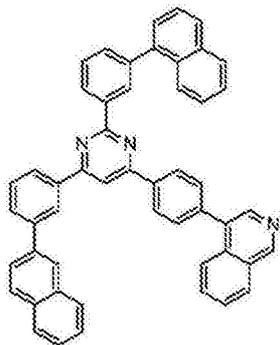


式(1-1)

A: 式(2-2)

Ar³: H

(化合物 221)

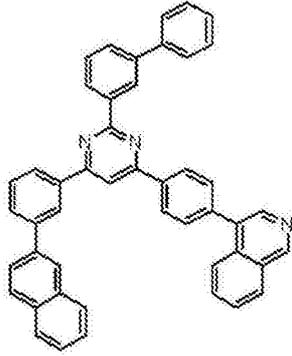


式(1-1)

A: 式(2-2)

Ar³: H

(化合物 222)

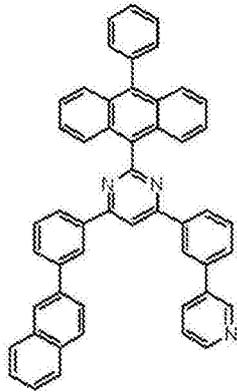


式(1-1)

A: 式(2-2)

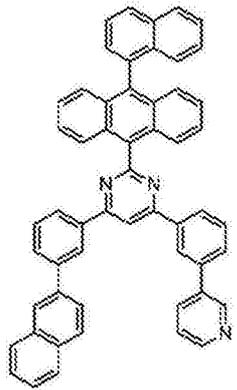
Ar³: H (化合物 223)

[0300]



式(1-1)

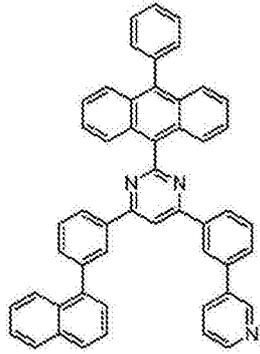
A: 式(2-1)

Ar³: H (化合物 224)

式(1-1)

A: 式(2-1)

Ar³: H (化合物 225)



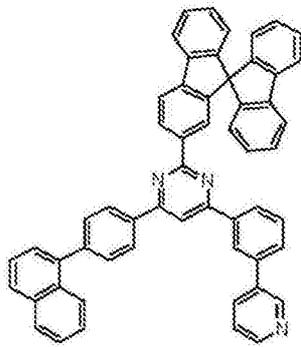
式(1-1)

A: 式(2-1)

Ar³: H

(化合物 226)

[0301]

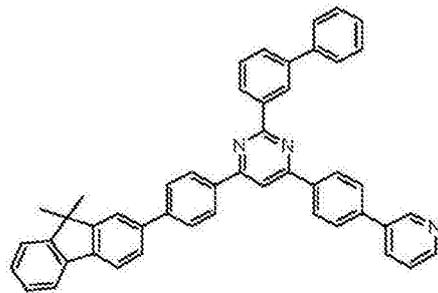


式(1-1)

A: 式(2-1)

Ar³: H

(化合物 227)

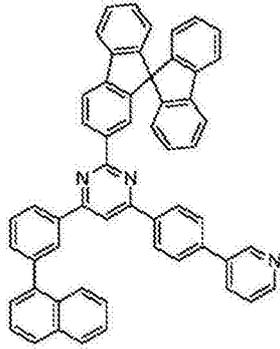


式(1-1)

A: 式(2-2)

Ar³: H

(化合物 228)



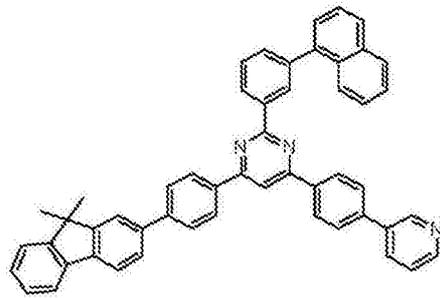
式(1-1)

A: 式(2-2)

Ar³: H

(化合物 229)

[0302]

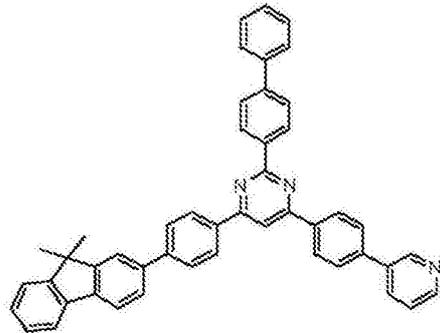


式(1-1)

A: 式(2-2)

Ar³: H

(化合物 230)

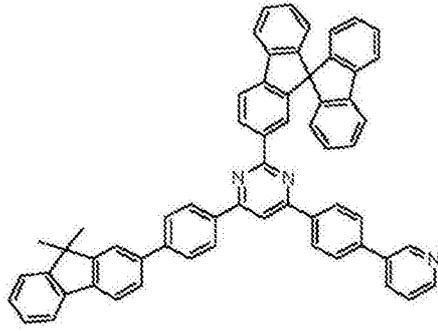


式(1-1)

A: 式(2-2)

Ar³: H

(化合物 231)



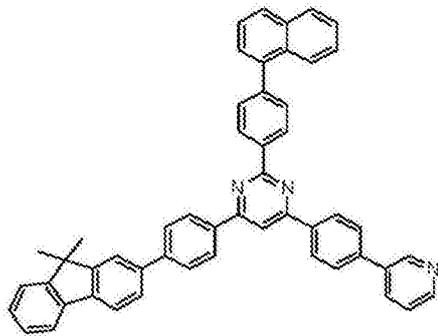
式(1-1)

A: 式(2-2)

Ar³: H

(化合物 232)

[0303]

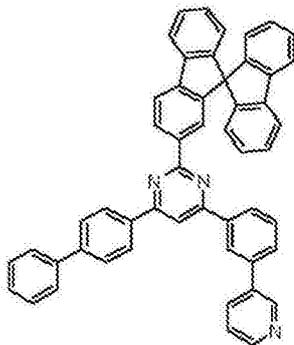


式(1-1)

A: 式(2-2)

Ar³: H

(化合物 233)

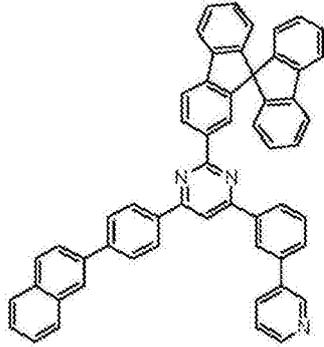


式(1-1)

A: 式(2-1)

Ar³: H

(化合物 234)



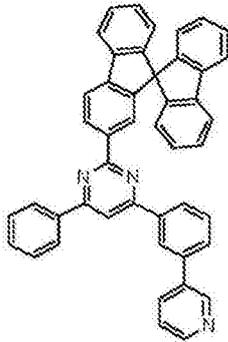
式(1-1)

A: 式(2-1)

Ar³: H

(化合物 235)

[0304]

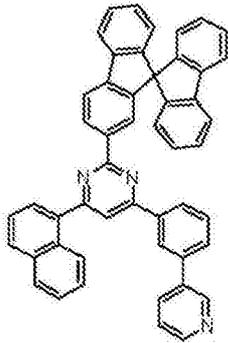


式(1-1)

A: 式(2-1)

Ar³: H

(化合物 236)

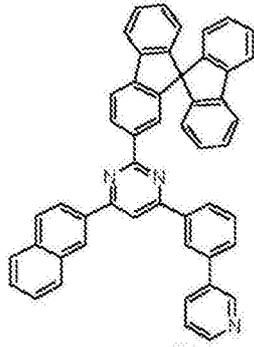


式(1-1)

A: 式(2-1)

Ar³: H

(化合物 237)



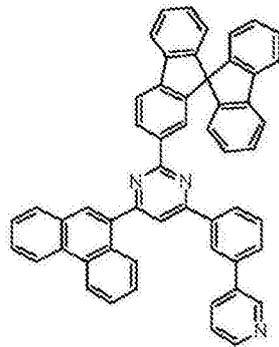
式(1-1)

A: 式(2-1)

Ar³: H

(化合物 238)

[0305]

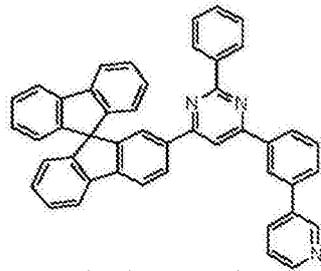


式(1-1)

A: 式(2-1)

Ar³: H

(化合物 239)

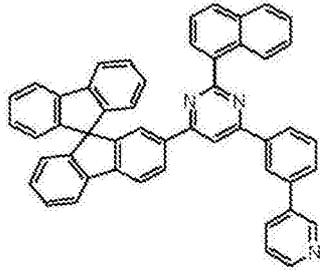


式(1-1)

A: 式(2-1)

Ar³: H

(化合物 240)



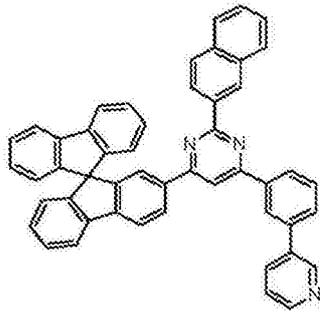
式(1-1)

A: 式(2-1)

Ar³: H

(化合物 241)

[0306]

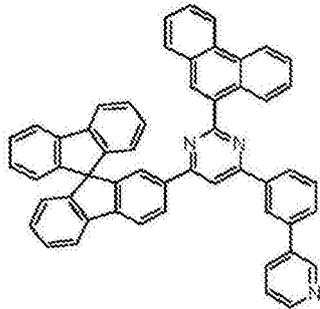


式(1-1)

A: 式(2-1)

Ar³: H

(化合物 242)

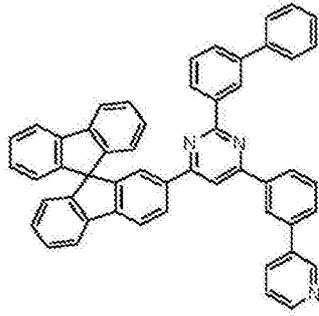


式(1-1)

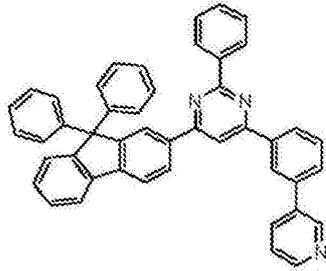
A: 式(2-1)

Ar³: H

(化合物 243)

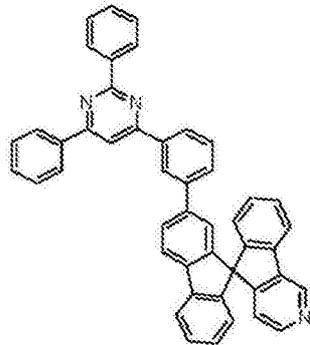


式(1-1)
A: 式(2-1)
Ar³: H (化合物 244)

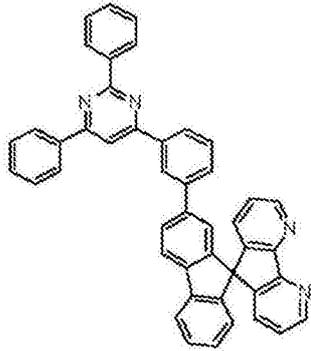


[0307]

式(1-1)
A: 式(2-1)
Ar³: H (化合物 245)

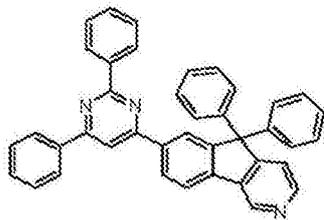


式(1-1)
A: 式(2-1)
Ar³: H (化合物 246)

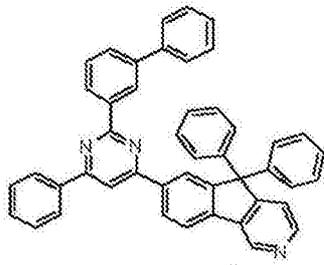


式(1-1)
A: 式(2-1)
Ar³: H (化合物 247)

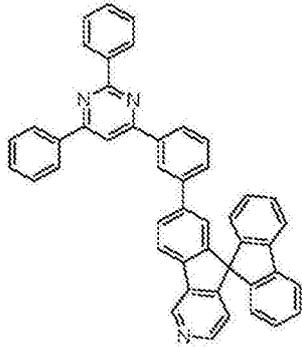
[0308]



式(1-1)
A: 式(2-2)
Ar³: H (化合物 248)

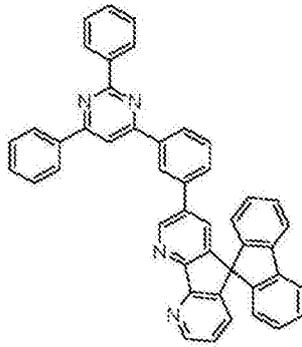


式(1-1)
A: 式(2-2)
Ar³: H (化合物 249)

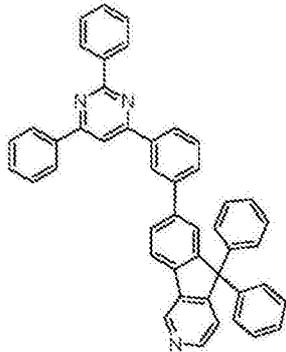


式(1-1)
A: 式(2-1)
Ar³: H (化合物 250)

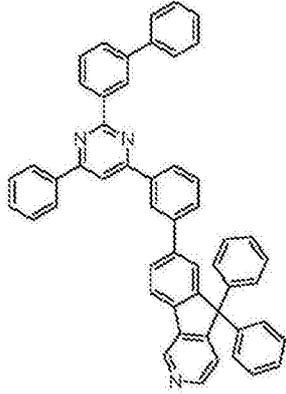
[0309]



式(1-1)
A: 式(2-1)
Ar³: H (化合物 251)



式(1-1)
A: 式(2-1)
Ar³: H (化合物 252)



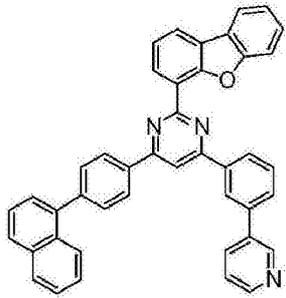
式(1-1)

A: 式(2-1)

Ar³: H

(化合物 253)

[0310]

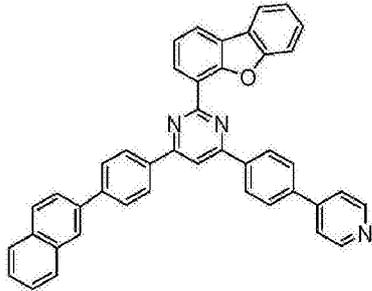


式(1-1)

A: 式(2-1)

Ar³: H

(化合物 254)

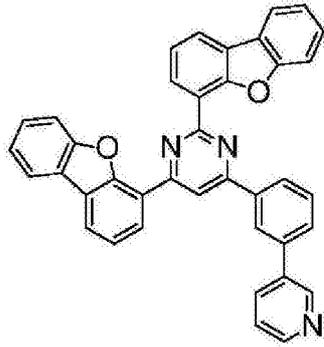


式(1-1)

A: 式(2-2)

Ar³: H

(化合物 255)



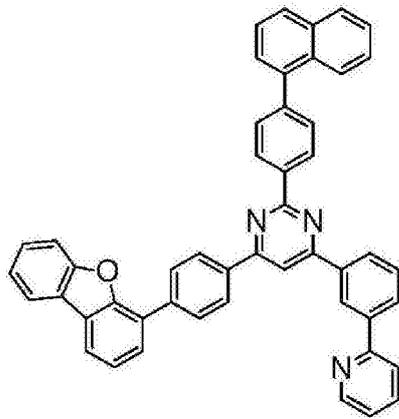
式(1-1)

A: 式(2-1)

Ar³: H

(化合物 256)

[0311]

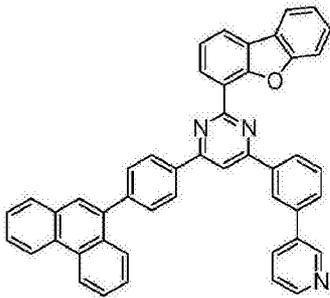


式(1-1)

A: 式(2-1)

Ar³: H

(化合物 257)

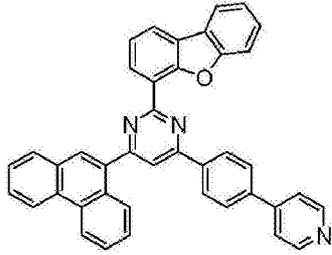


式(1-1)

A: 式(2-1)

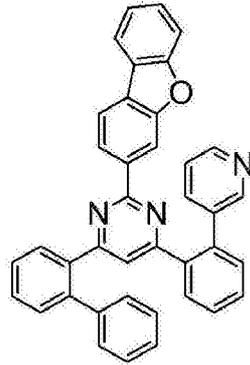
Ar³: H

(化合物 258)



式(1-1)

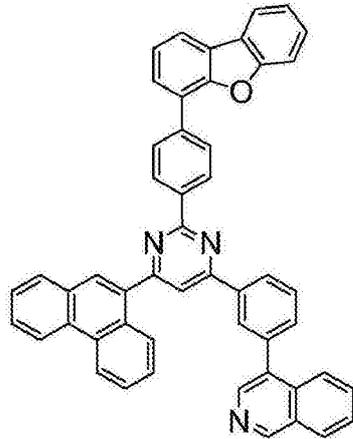
A: 式(2-2)

Ar³: H (化合物 259)

[0312]

式(1-1)

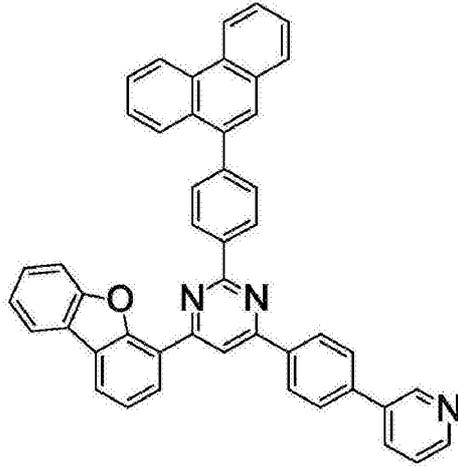
A: -

Ar³: H (化合物 260)

式(1-1)

A: 式(2-1)

Ar³: H (化合物 261)



式(1-1)

A: 式(2-2)

Ar³: H

(化合物 262)

[0313]



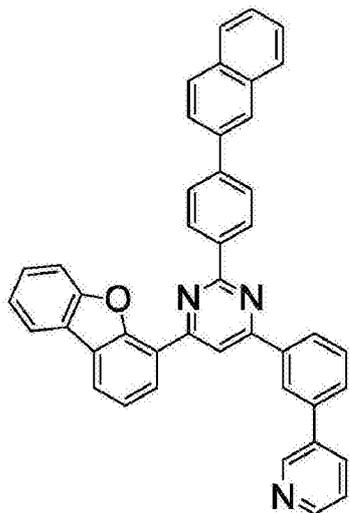
式(1-1)

A: -

Ar³: H

(化合物 263)

[0314]



式(1-1)

A: 式(2-1)

Ar³: H

(化合物 264)

[0315] <有机EL器件>

[0316] 具有设置在一对电极之间的至少一个有机层的有机EL器件(以下有时称为本发明的有机EL器件)具有层状结构,例如如图24所示,其中所述有机层是使用上述本发明的咪唑衍生物形成的。也就是说,在本发明的有机EL器件中,例如,阳极2、空穴注入层3、空穴输送层4、发光层5、空穴阻挡层6、电子输送层7、电子注入层8和阴极9依次设置在基板上。

[0317] 本发明的有机EL器件不限于这样的结构,但例如可以具有设置在空穴输送层4与发光层5之间的电子阻挡层(未显示)。在该多层结构中,可以省略一些有机层。例如,可以是阳极2与空穴输送层4之间的空穴注入层3、发光层5与电子输送层7之间的空穴阻挡层6、以及电子输送层7与阴极9之间的电子注入层8被省略,并且在基板1上依次设置阳极2、空穴输送层4、发光层5、电子输送层7和阴极9的构型。

[0318] 阳极2可以由本身公知的电极材料构成,并且例如使用具有大的功函数的电极材料如ITO或金。

[0319] 空穴注入层3可以由本身公知的具有空穴注入性质的材料构成,并且可以例如使用以下材料中的任一种形成:

[0320] 以铜酞菁为代表的卟啉化合物;

[0321] 星型的三苯胺衍生物;

[0322] 三苯胺三聚物和四聚物,例如在分子中有其中、3个以上的三苯胺结构通过单键连接在一起的结构或者不含杂原子的二价基团的芳基胺化合物;

[0323] 受体型杂环化合物,例如六氰基氮杂苯并菲;和

[0324] 涂层型聚合物材料。

[0325] 空穴注入层3(薄膜)可以通过气相沉积法或任何其他公知的方法如旋涂法或喷墨法形成。以下说明的各种层可以通过公知的方法如气相沉积、旋涂或喷墨来类似地形成膜。

[0326] 空穴输送层4可以由本身公知的具有空穴输送性的材料构成,并且可以例如使用以下材料中的任一种形成:

[0327] 联苯胺衍生物,例如,

[0328] N,N'-二苯基-N,N'-二(间甲基)联苯胺

[0329] (以下简称为TPD),

[0330] N,N'-二苯基-N,N'-二(α -萘基)联苯胺

[0331] (以下简称为NPD),和

[0332] N,N,N',N'-四联苯基联苯胺;

[0333] 1,1-双[(二-4-甲基氨基)苯基]环己烷

[0334] (以下简称为TAPC);和

[0335] 各种三苯胺三聚体和四聚体。

[0336] 上述空穴输送材料可以单独用于膜形成,但是也可以与用于膜形成的其它材料混合。允许形成具有层叠结构的空穴输送层,所述层叠结构为使用上述材料中的任一种而形成的各层被层叠的层叠结构、使用上述材料的混合物而形成的层被层叠的层叠结构、或者使用上述材料中的任一种而形成的层和使用上述材料的混合物而形成的层被层叠的层叠结构。

[0337] 此外,在本发明中,还可以形成同时用作空穴注入层3和空穴输送层4的层。这种空穴注入/输送层可以使用涂布型聚合物材料形成,如聚(3,4-亚乙基二氧噻吩)(以下简称为PEDOT)/聚(苯乙烯磺酸盐)(以下简称为PSS)。

[0338] 在形成空穴注入层3或空穴输送层4时,用于该层的材料通常进一步用六氯铋酸三溴苯基铵或轴烯(radialene)衍生物进行P-掺杂(参见专利文献5),并且可以用于该层,或者除了通常的材料之外,在其部分结构中具有联苯胺衍生物(如TPD)结构的聚合物化合物也可以用于该层。

[0339] 电子阻挡层(未显示)可以使用具有电子阻挡作用的公知化合物形成。公知的电子阻挡化合物可以例示如下:

[0340] 咪唑衍生物,例如,

[0341] 4,4',4''-三(N-咪唑基)三苯胺

[0342] (以下简称为TCTA),

[0343] 9,9-双[4-(咪唑-9-基)苯基]芴,

[0344] 1,3-双(咪唑-9-基)苯(以下简称为mCP),和

[0345] 2,2-双(4-咪唑-9-基苯基)金刚烷

[0346] (以下简称为Ad-Cz);和

[0347] 具有三苯基甲硅烷基和三芳基胺结构的化合物,例如,

[0348] 9-[4-(咪唑-9-基)苯基]-9-[4-(三苯基甲硅烷基)苯基]-9H-芴。

[0349] 上述用于电子阻挡层的材料可以单独用于膜形成,但也可以与用于膜形成的其它材料混合。允许形成电子阻挡层,所述电子阻挡层具有使用上述材料中的任一种而形成的各层被层叠的层叠结构、使用上述材料的混合物而形成的层被层叠的层叠结构、或者使用上述材料中的任一种而形成的层和通过使用上述材料的混合物而形成的层被层叠的层叠结构。

[0350] 除了本发明的噻啉衍生物之外,发光层5可以使用公知的材料形成。公知的材料可以例示以下:

- [0351] 羟基喹啉衍生物的金属配合物,包括Alq₃;
- [0352] 各种金属配合物;
- [0353] 蒽衍生物;
- [0354] 双苯乙烯基苯衍生物;
- [0355] 芘衍生物;
- [0356] 噻唑衍生物;和
- [0357] 聚对亚苯基亚乙烯基衍生物。
- [0358] 发光层5可以由基质材料和掺杂材料构成。作为基质材料,除了本发明的噻唑衍生物和上述发光材料之外,还可以使用噻唑衍生物、苯并咪唑衍生物和聚二烷基茈衍生物。
- [0359] 可用作掺杂材料的是例如喹吡啉酮、香豆素、红荧烯、茈及其衍生物;苯并吡喃衍生物;罗丹明衍生物;和氨基苯乙烯基衍生物。
- [0360] 上述用于发光层的材料可以单独用于膜形成,但也可以与用于成膜的其它材料混合。允许形成具有层叠结构的发光层,所述层叠结构为使用上述材料中的任一种而形成的各层被层叠的层叠结构、使用所述材料的混合物而形成的层被层叠的层叠结构、或者使用所述材料中的任一种而形成的层和使用所述材料的混合物而形成的层被层叠的层叠结构。
- [0361] 此外,可以使用磷光发光体作为发光材料。作为磷光发光体,可以使用含有铱、铂等的金属配合物形式的磷光发光体。具体来说,
- [0362] 绿色磷光发光体如Ir(ppy)₃;
- [0363] 蓝色磷光发光体如FIrpic或者FIr6;
- [0364] 红色磷光发光体如Btp₂Ir(acac)等。作为在这种情况下使用的基质材料的空穴注入/输送基质材料,除了本发明的噻唑衍生物之外,还可以使用:
- [0365] 咔唑衍生物,例如,
- [0366] 4,4'-二(N-咔唑基)联苯(以下简称为CBP),
- [0367] TCTA,和
- [0368] mCP。电子输送基质材料的实例如下:
- [0369] p-双(三苯基甲硅烷基)苯(以下简称为UGH2);和
- [0370] 2,2',2''-(1,3,5-亚苯基)-三(1-苯基-1H-苯并咪唑)(以下简称为TPBI)。
- [0371] 通过使用任何这样的材料,可以制备高性能有机EL器件。
- [0372] 用磷光发光材料掺杂基质材料优选是通过在基于整个发光层的1-30重量%的范围内共沉积进行,以避免浓度猝灭。
- [0373] 可以使用发射延迟荧光的材料,如CDCB衍生物,例如PIC-TRZ、CC2TA、PXZ-TRZ、4CzIPN等作为发光材料。
- [0374] 除了本发明的噻唑衍生物以外,空穴阻挡层6还可以使用公知的具有空穴阻挡性的化合物来形成。具有空穴阻挡性的公知化合物可以列举如下:
- [0375] 菲咯啉衍生物,例如浴铜灵(以下简称为BCP);
- [0376] 羟基喹啉衍生物的金属配合物,例如BA1q;
- [0377] 各种稀土配合物;
- [0378] 噻唑衍生物;
- [0379] 三唑衍生物;和

[0380] 三嗪衍生物。

[0381] 空穴阻挡材料可以单独用于膜形成,但也可以与用于膜形成的其它材料混合。允许形成具有层叠结构的空穴阻挡层,所述层叠结构为使用上述材料中的任一种而形成的各层被层叠的层叠结构、使用上述材料的混合物而形成的层被层叠的层叠结构、或者使用上述材料中的任一种而形成的层和使用上述材料的混合物而形成的层被层叠的层叠结构。

[0382] 上述公知的具有空穴阻挡性的材料也可以用于下述的电子输送层7的形成。即,通过使用上述公知的具有空穴阻挡性的材料,可以形成同时作为空穴阻挡层6和电子输送层7的层。

[0383] 除了本发明的嘧啶衍生物之外,电子输送层7使用公知的具有电子输送性的化合物形成。具有电子输送性质的公知化合物可以例示如下:

[0384] 包括Alq₃和BA1q的羟基喹啉衍生物的金属配合物;

[0385] 各种金属配合物;

[0386] 三唑衍生物;

[0387] 三嗪衍生物;

[0388] 噁二唑衍生物;

[0389] 吡啶衍生物;

[0390] 苯并咪唑衍生物;

[0391] 噻二唑衍生物;

[0392] 噻衍生物;

[0393] 碳二亚胺衍生物;

[0394] 喹啉衍生物;

[0395] 吡啶并咪唑衍生物;

[0396] 菲咯啉衍生物;和

[0397] 噻咯衍生物。

[0398] 电子输送材料可以单独用于膜形成,但也可以与用于膜形成的其它材料混合。允许形成具有层叠结构的电子输送层,所述层叠结构为使用上述材料中的任一种而形成的各层被层叠的层叠结构、使用上述材料的混合物而形成的层被层叠的层叠结构、或者使用上述材料中的任一种而形成的层和使用上述材料的混合物而形成的层被层叠的层叠结构。

[0399] 除了本发明的嘧啶衍生物之外,电子注入层8可以使用本身公知的材料形成。这种材料的实例如下:

[0400] 碱金属盐如氟化锂和氟化铯;

[0401] 碱土金属盐如氟化镁;

[0402] 羟基喹啉衍生物的金属配合物如羟基喹啉锂;和

[0403] 金属氧化物如氧化铝。

[0404] 在优选选择电子输送层和阴极时,可以省略电子注入层8。

[0405] 此外,在电子注入层7或电子输送层8中,除了通常的材料之外,通常用于该层的材料进一步用金属如铯来N-掺杂,并且可以用于该层。

[0406] 关于阴极9,使用具有低功函数的电极材料如铝,或者具有低功函数的合金如镁-银合金、镁-铟合金或铝-镁合金作为电极材料。

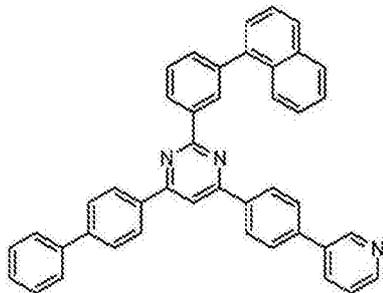
[0407] 实施例

[0408] 通过实施例更具体地描述本发明的实施方式,但是本发明决不限于以下实施例,除非本发明超出其要旨。

[0409] <实施例1:化合物74的合成>

[0410] 4-(联苯-4-基)-2-{3-(萘-1-基)苯基}-6-{4-(吡啶-3-基)苯基}嘧啶的合成:

[0411]



式(1-1)

A: 式(2-2)

Ar³: H (化合物 74)

[0412] 向氮气吹扫的反应容器中加入

[0413] 3-(萘-1-基)苯基硼酸 5.0g,

[0414] 2-氯-4-(联苯-4-基)-6-{4-(吡啶-3-基)苯基}嘧啶 7.0g,

[0415] 四三苯基磷 0.96g,

[0416] 碳酸钾 6.9g,

[0417] 甲苯 35ml,

[0418] 1,4-二噁烷 70ml,和

[0419] 水 35ml。

[0420] 将混合物加热,并在85℃下搅拌12小时。将混合物冷却至室温,然后通过液体分离收集有机层。然后,将有机层减压浓缩,得到粗产物。通过柱色谱(载体:硅胶,洗脱液:庚烷/二氯甲烷/THF)纯化粗产物,然后使用氯苯/二氯甲烷混合溶剂通过重结晶进行纯化,得到3.1g(收率32%)作为白色粉末的4-(联苯-4-基)-2-{3-(萘-1-基)苯基}-6-{4-(吡啶-3-基)苯基}嘧啶(化合物74)。

[0421] 关于所得的白色粉末,使用NMR鉴定其结构。其¹H-NMR测量结果示于图1。在¹H-NMR(THF-d₈)中,检测到以下29个氢的信号。

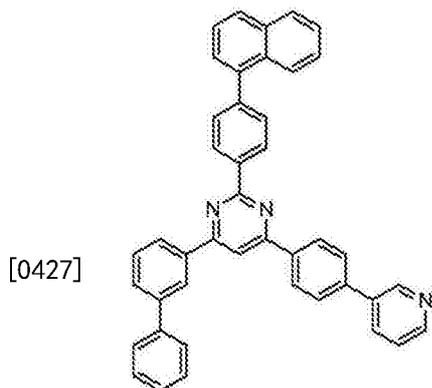
[0422] δ(ppm) = 8.97-8.84 (3H)

[0423] 8.60-8.45 (6H)

[0424] 8.08-7.32 (20H)

[0425] <实施例2:化合物84的合成>

[0426] 4-(联苯-3-基)-2-{4-(萘-1-基)苯基}-6-{4-(吡啶-3-基)苯基}嘧啶:



式(1-1)

A: 式(2-2)

Ar³: H (化合物 84)

[0428] 在实施例1中,

[0429] 使用4-(萘-1-基)苯基硼酸代替3-(萘-1-基)苯基硼酸,和

[0430] 使用2-氯-4-(联苯-3-基)-6-[4-(吡啶-3-基)苯基]嘧啶代替2-氯-4-(联苯-4-基)-6-[4-(吡啶-3-基)苯基]嘧啶,

[0431] 并在相同条件下进行反应。结果,得到3.8g(产率39%)作为白色粉末的4-(联苯-3-基)-2-[4-(萘-1-基)苯基]-6-[4-(吡啶-3-基)苯基]嘧啶(化合物84)。

[0432] 关于所得的白色粉末,使用NMR鉴定其结构。其¹H-NMR测量结果示于图2。在¹H-NMR(THF-d₈)中,检测到以下29个氢的信号。

[0433] δ(ppm) = 8.99 (1H)

[0434] 8.93 (2H)

[0435] 8.72 (1H)

[0436] 8.65 (2H)

[0437] 8.59 (1H)

[0438] 8.52 (1H)

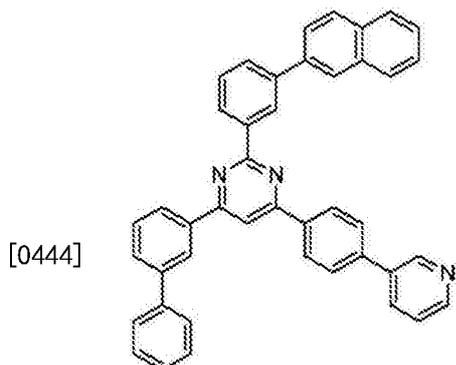
[0439] 8.49 (1H)

[0440] 8.09 (1H)

[0441] 8.04-7.34 (19H)

[0442] <实施例3:化合物89的合成>

[0443] 4-(联苯-3-基)-2-[3-(萘-2-基)苯基]-6-[4-(吡啶-3-基)苯基]嘧啶:



式(1-1)

A: 式(2-2)

Ar³: H (化合物 89)

[0445] 在实施例1中,

[0446] 使用3-(萘-2-基)苯基硼酸代替3-(萘-1-基)苯基硼酸,和使用2-氯-4-(联苯-3-基)-6-{4-(吡啶-3-基)苯基}嘧啶代替2-氯-4-(联苯-4-基)-6-{4-(吡啶-3-基)苯基}嘧啶,

[0447] 并在相同条件下进行反应。结果得到5.8g(收率59%)作为黄色粉末的4-(联苯-3-基)-2-{3-(萘-2-基)苯基}-6-{4-(吡啶-3-基)苯基}嘧啶(化合物89)。

[0448] 关于所得的黄色粉末,使用NMR鉴定其结构。其¹H-NMR测量结果示于图3。在¹H-NMR(THF-d₈)中,检测到以下29个氢的信号。

[0449] δ(ppm) = 9.21 (1H)

[0450] 8.98 (1H)

[0451] 8.80 (1H)

[0452] 8.74 (1H)

[0453] 8.64 (2H)

[0454] 8.59 (1H)

[0455] 8.53 (1H)

[0456] 8.46 (1H)

[0457] 8.29 (1H)

[0458] 8.08 (1H)

[0459] 8.00-7.76 (10H)

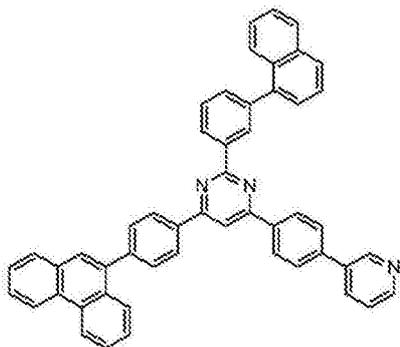
[0460] 7.72-7.62 (2H)

[0461] 7.55-6.34 (6H)

[0462] <实施例4:化合物130的合成>

[0463] 2-{3-(萘-1-基)苯基}-4-{4-(菲-9-基)苯基}-6-{4-(吡啶-3-基)苯基}嘧啶:

[0464]



式(1-1)

A: 式(2-2)

Ar³: H (化合物 130)

[0465] 在实施例1中,

[0466] 使用2-氯-4- {4- (菲-9-基) 苯基} -6- {4- (吡啶-3-基) 苯基} 嘧啶代替2-氯-4- (联苯-4-基) -6- {4- (吡啶-3-基) 苯基} 嘧啶,

[0467] 并在相同条件下进行反应。结果,得到9.3g (产率35%) 作为黄色粉末的2- {3- (萘-1-基) 苯基} -4- {4- (菲-9-基) 苯基} -6- {4- (吡啶-3-基) 苯基} 嘧啶 (化合物130)。

[0468] 关于所得的黄色粉末,使用NMR鉴定其结构。其¹H-NMR测量结果示于图4。在¹H-NMR (CDCl₃) 中,检测到以下33个氢的信号。

[0469] δ (ppm) = 8.98-8.84 (3H)

[0470] 8.84 (1H)

[0471] 8.78 (1H)

[0472] 8.68 (1H)

[0473] 8.47-8.44 (4H)

[0474] 8.19 (1H)

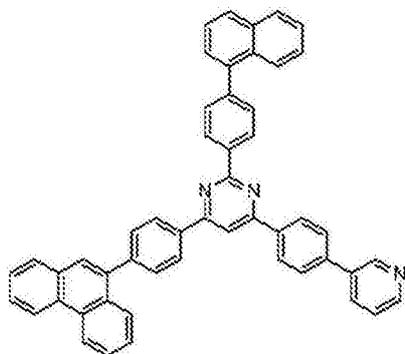
[0475] 8.06-7.93 (6H)

[0476] 7.81-7.41 (16H)

[0477] <实施例5:化合物131的合成>

[0478] 2- {4- (萘-1-基) 苯基} -4- {4- (菲-9-基) 苯基} -6- {4- (吡啶-3-基) 苯基} 嘧啶:

[0479]



式(1-1)

A: 式(2-2)

Ar³: H (化合物 131)

[0480] 在实施例1中,

- [0481] 使用4-(萘-1-基)苯基硼酸代替3-(萘-1-基)苯基硼酸,和
 [0482] 使用2-氯-4-{4-(菲-9-基)苯基}-6-{4-(吡啶-3-基)苯基}嘧啶代替2-氯-4-(联苯-4-基)-6-{4-(吡啶-3-基)苯基}嘧啶,
 [0483] 并在相同条件下进行反应。结果得到22.6g(产率85%)作为黄色粉末的2-{4-(萘-1-基)苯基}-4-{4-(菲-9-基)苯基}-6-{4-(吡啶-3-基)苯基}嘧啶(化合物131)。
 [0484] 关于所得的黄色粉末,使用NMR鉴定其结构。其¹H-NMR测量结果示于图5。在¹H-NMR(CDC1₃)中,检测到以下33个氢的信号。

[0485] δ (ppm) = 9.00 (1H)

[0486] 8.94 (2H)

[0487] 8.85 (1H)

[0488] 8.78 (1H)

[0489] 8.69 (1H)

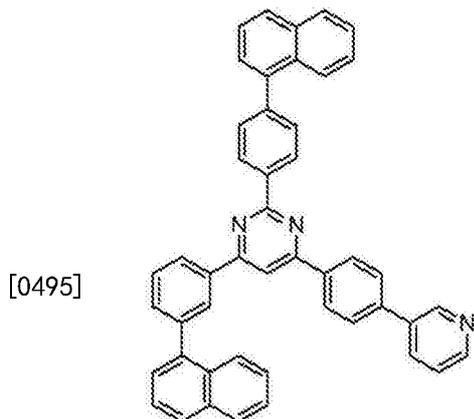
[0490] 8.55-8.51 (4H)

[0491] 8.23 (1H)

[0492] 8.23-7.44 (22H)

[0493] <实施例6:化合物92的合成>

[0494] 2-{4-(萘-1-基)苯基}-4-{3-(萘-1-基)苯基}-6-{4-(吡啶-3-基)苯基}嘧啶:



式(1-1)

A: 式(2-2)

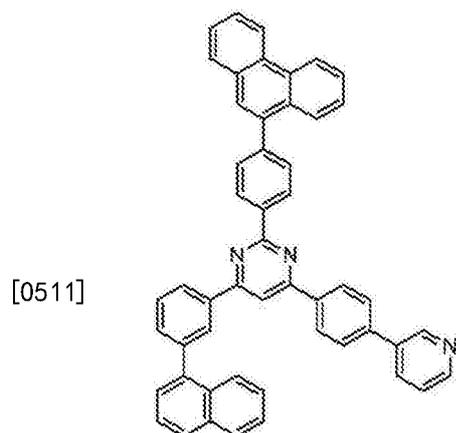
Ar³: H (化合物 92)

- [0496] 在实施例1中,
 [0497] 使用4-(萘-1-基)苯基硼酸代替3-(萘-1-基)苯基硼酸,和
 [0498] 使用2-氯-4-{3-(萘-1-基)苯基}-6-{4-(吡啶-3-基)苯基}嘧啶代替2-氯-4-(联苯-4-基)-6-{4-(吡啶-3-基)苯基}嘧啶,
 [0499] 并在相同条件下进行反应。结果,得到6g(产率74%)作为黄色粉末的2-{4-(萘-1-基)苯基}-4-{3-(萘-1-基)苯基}-6-{4-(吡啶-3-基)苯基}嘧啶(化合物92)。
 [0500] 关于所得的黄色粉末,使用NMR鉴定其结构。其¹H-NMR测量结果示于图6。在¹H-NMR(CDC1₃)中,检测到以下31个氢的信号。

[0501] δ (ppm) = 8.98 (1H)

[0502] 8.87 (2H)

- [0503] 8.67 (1H)
 [0504] 8.48-8.46 (4H)
 [0505] 8.16 (1H)
 [0506] 8.04-7.82 (7H)
 [0507] 7.80 (2H)
 [0508] 7.76-7.42 (13H)
 [0509] <实施例7:化合物136的合成>
 [0510] 2- {4- (菲-9-基) 苯基} -4- {3- (萘-1-基) 苯基} -6- {4- (吡啶-3-基) 苯基} 嘧啶:



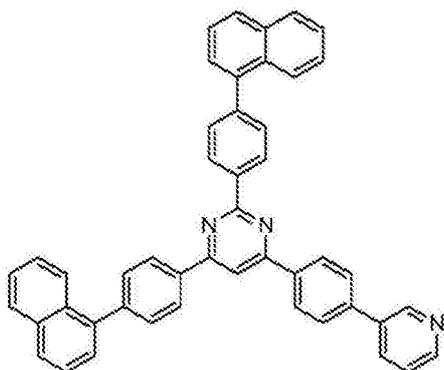
式(1-1)

A: 式(2-2)

Ar³: H (化合物 136)

- [0512] 在实施例1中,
 [0513] 使用4- (菲-9-基) 苯基硼酸代替3- (萘-1-基) 苯基硼酸,和
 [0514] 使用2-氯-4- {3- (萘-1-基) 苯基} -6- {4- (吡啶-3-基) 苯基} 嘧啶代替2-氯-4- (联苯-4-基) -6- {4- (吡啶-3-基) 苯基} 嘧啶,
 [0515] 并在相同条件下进行反应。结果得到2g (产率26%) 作为黄色粉末的2- {4- (菲-9-基) 苯基} -4- {3- (萘-1-基) 苯基} -6- {4- (吡啶-3-基) 苯基} 嘧啶 (化合物136)。
 [0516] 关于所得的黄色粉末,使用NMR鉴定其结构。其¹H-NMR测量结果示于图7。在¹H-NMR (CDCl₃) 中,检测到以下33个氢的信号。
 [0517] δ (ppm) = 8.98 (1H)
 [0518] 8.90 (2H)
 [0519] 8.83 (1H)
 [0520] 8.78 (1H)
 [0521] 8.68 (1H)
 [0522] 8.50-8.45 (4H)
 [0523] 8.17 (1H)
 [0524] 8.04-7.94 (6H)
 [0525] 7.83-7.41 (16H)
 [0526] <实施例8:化合物125的合成>
 [0527] 2- {4- (萘-1-基) 苯基} -4- {4- (萘-1-基) 苯基} -6- {4- (吡啶-3-基) 苯基} 嘧啶:

[0528]



式(1-1)

A: 式(2-2)

Ar³: H (化合物 125)

[0529] 在实施例1中,

[0530] 使用4-(萘-1-基)苯基硼酸代替3-(萘-1-基)苯基硼酸,和

[0531] 使用2-氯-4-{4-(萘-1-基)苯基}-6-{4-(吡啶-3-基)苯基}嘧啶代替2-氯-4-(联苯-4-基)-6-{4-(吡啶-3-基)苯基}嘧啶,

[0532] 并在相同条件下进行反应。结果,得到21.6g(产率80%)作为黄色粉末的2-{4-(萘-1-基)苯基}-4-{4-(萘-1-基)苯基}-6-{4-(吡啶-3-基)苯基}嘧啶(化合物125)。

[0533] 关于所得的黄色粉末,使用NMR鉴定其结构。其¹H-NMR测量结果示于图8。在¹H-NMR(THF-d₈)中,检测到以下31个氢的信号。

[0534] δ(ppm) = 9.00 (1H)

[0535] 8.95 (2H)

[0536] 8.68 (1H)

[0537] 8.54-8.48 (4H)

[0538] 8.22 (1H)

[0539] 8.21-7.91 (7H)

[0540] 7.82 (2H)

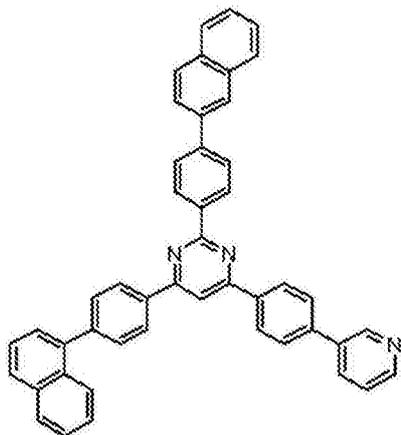
[0541] 7.79-7.72 (4H)

[0542] 7.64-7.42 (9H)

[0543] <实施例9:化合物138的合成>

[0544] 2-{4-(萘-2-基)苯基}-4-{4-(萘-1-基)苯基}-6-{4-(吡啶-3-基)苯基}嘧啶:

[0545]



式(1-1)

A: 式(2-2)

Ar³: H (化合物 138)

[0546] 在实施例1中,

[0547] 使用4-(萘-2-基)苯基硼酸代替3-(萘-1-基)苯基硼酸,和

[0548] 使用2-氯-4-{4-(萘-1-基)苯基}-6-{4-(吡啶-3-基)苯基}嘧啶代替2-氯-4-(联苯-4-基)-6-{4-(吡啶-3-基)苯基}嘧啶,

[0549] 并在相同条件下进行反应。结果得到3.5g(产率43%)作为黄色粉末的2-{4-(萘-2-基)苯基}-4-{4-(萘-1-基)苯基}-6-{4-(吡啶-3-基)苯基}嘧啶(化合物138)。

[0550] 关于所得的黄色粉末,使用NMR鉴定其结构。其¹H-NMR测量结果示于图9。在¹H-NMR(CDC1₃)中,检测到以下31个氢的信号。

[0551] δ(ppm) = 9.00 (1H)

[0552] 8.92 (2H)

[0553] 8.68 (1H)

[0554] 8.53-8.48 (4H)

[0555] 8.20 (2H)

[0556] 8.03-7.81 (12H)

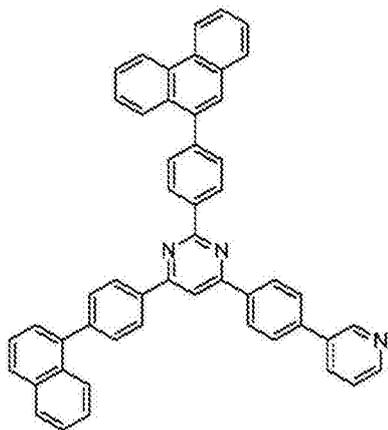
[0557] 7.77 (2H)

[0558] 7.63-7.42 (7H)

[0559] <实施例10:化合物78的合成>

[0560] 2-{4-(萘-9-基)苯基}-4-{4-(萘-1-基)苯基}-6-{4-(吡啶-3-基)苯基}嘧啶:

[0561]



式(1-1)

A: 式(2-2)

Ar³: H

(化合物 78)

[0562] 在实施例1中,

[0563] 使用4-(菲-9-基)苯基硼酸代替3-(萘-1-基)苯基硼酸,和

[0564] 使用2-氯-4-{4-(萘-1-基)苯基}-6-{4-(吡啶-3-基)苯基}嘧啶代替2-氯-4-(联苯-4-基)-6-{4-(吡啶-3-基)苯基}嘧啶,

[0565] 并在相同条件下进行反应。结果,得到16.2g(产率56%)作为黄色粉末的2-{4-(菲-9-基)苯基}-4-{4-(萘-1-基)苯基}-6-{4-(吡啶-3-基)苯基}嘧啶(化合物78)。

[0566] 关于所得的黄色粉末,使用NMR鉴定其结构。其¹H-NMR测量结果示于图10。在¹H-NMR(CDC1₃)中,检测到以下33个氢的信号。

[0567] δ(ppm) = 9.00 (1H)

[0568] 8.95 (2H)

[0569] 8.83 (1H)

[0570] 8.76 (1H)

[0571] 8.69 (1H)

[0572] 8.52-8.48 (4H)

[0573] 8.22 (1H)

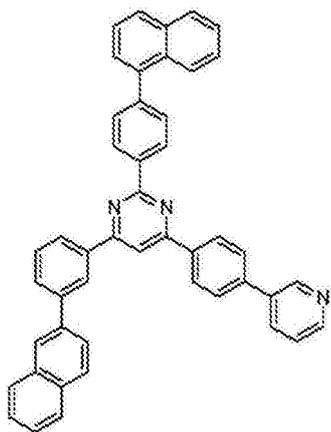
[0574] 8.08-7.91 (6H)

[0575] 7.86-7.42 (16H)

[0576] <实施例11:化合物76的合成>

[0577] 2-{4-(萘-1-基)苯基}-4-{3-(萘-2-基)苯基}-6-{4-(吡啶-3-基)苯基}嘧啶:

[0578]



式(1-1)

A: 式(2-2)

Ar³: H

(化合物 76)

[0579] 在实施例1中,

[0580] 使用4-(萘-1-基)苯基硼酸代替3-(萘-1-基)苯基硼酸,和

[0581] 使用2-氯-4-{3-(萘-2-基)苯基}-6-{4-(吡啶-3-基)苯基}嘧啶代替2-氯-4-(联苯-4-基)-6-{4-(吡啶-3-基)苯基}嘧啶,

[0582] 并在相同条件下进行反应。结果得到24.0g(产率52%)作为黄色粉末的2-{4-(萘-1-基)苯基}-4-{3-(萘-2-基)苯基}-6-{4-(吡啶-3-基)苯基}嘧啶(化合物76)。

[0583] 关于所得的黄色粉末,使用NMR鉴定其结构。其¹H-NMR测量结果示于图11。在¹H-NMR(CDCl₃)中,检测到以下31个氢的信号。

[0584] δ(ppm) = 9.00 (1H)

[0585] 8.90 (2H)

[0586] 8.68 (2H)

[0587] 8.53 (2H)

[0588] 8.37 (1H)

[0589] 8.21 (2H)

[0590] 8.08-7.81 (11H)

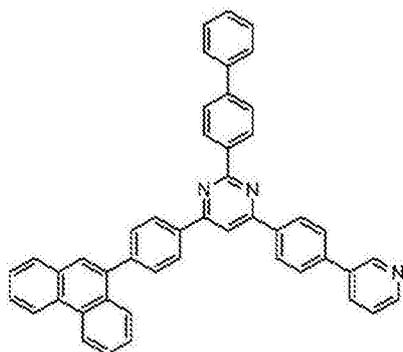
[0591] 7.78-7.71 (3H)

[0592] 7.64-7.42 (7H)

[0593] <实施例12:化合物126的合成>

[0594] 2-(联苯-4-基)-4-{4-(萘-9-基)苯基}-6-{4-(吡啶-3-基)苯基}嘧啶:

[0595]



式(1-1)

A: 式(2-2)

Ar³: H (化合物 126)

[0596] 在实施例1中,

[0597] 使用4-联苯基硼酸代替3-(萘-1-基)苯基硼酸,和

[0598] 使用2-氯-4-{4-(菲-9-基)苯基}-6-{4-(吡啶-3-基)苯基}嘧啶代替2-氯-4-(联苯-4-基)-6-{4-(吡啶-3-基)苯基}嘧啶,

[0599] 并在相同条件下进行反应。结果,得到6.5g(产率85%)作为黄色粉末的2-(联苯-4-基)-4-{4-(菲-9-基)苯基}-6-{4-(吡啶-3-基)苯基}嘧啶(化合物126)。

[0600] 关于所得的黄色粉末,使用NMR鉴定其结构。其¹H-NMR测量结果示于图12。在¹H-NMR(CDC1₃)中,检测到以下31个氢的信号。

[0601] δ(ppm) = 9.00 (1H)

[0602] 8.92-8.76 (4H)

[0603] 8.68 (1H)

[0604] 8.54-8.46 (4H)

[0605] 8.18 (1H)

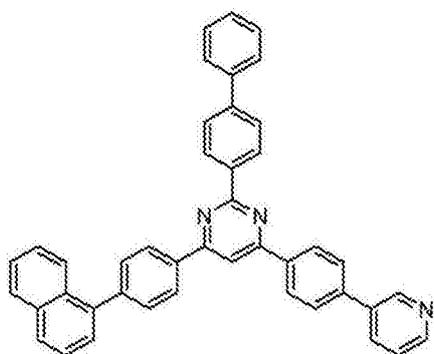
[0606] 8.05-7.94 (3H)

[0607] 7.88-7.38 (17H)

[0608] <实施例13:化合物124的合成>

[0609] 2-(联苯-4-基)-4-{4-(萘-1-基)苯基}-6-{4-(吡啶-3-基)苯基}嘧啶:

[0610]



式(1-1)

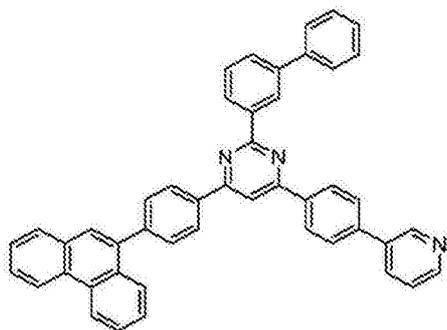
A: 式(2-2)

Ar³: H (化合物 124)

[0611] 在实施例1中,

- [0612] 使用4-联苯基硼酸代替3-(萘-1-基)苯基硼酸,和
- [0613] 使用2-氯-4-{4-(萘-1-基)苯基}-6-{4-(吡啶-3-基)苯基}嘧啶代替2-氯-4-(联苯-4-基)-6-{4-(吡啶-3-基)苯基}嘧啶,
- [0614] 并在相同条件下进行反应。结果,得到17.6g(产率64%)黄色粉末2-(联苯-4-基)-4-{4-(萘-1-基)苯基}-6-{4-(吡啶-3-基)苯基}嘧啶(化合物124)。
- [0615] 关于所得的黄色粉末,使用NMR鉴定其结构。其¹H-NMR测量结果示于图13。在¹H-NMR(THF-d₈)中,检测到以下29个氢的信号。
- [0616] δ (ppm) = 9.00 (1H)
- [0617] 8.89 (2H)
- [0618] 8.67 (1H)
- [0619] 8.51-8.48 (4H)
- [0620] 8.17 (1H)
- [0621] 8.03-7.93 (4H)
- [0622] 7.86-7.81 (4H)
- [0623] 7.78-7.72 (4H)
- [0624] 7.63-7.38 (8H)
- [0625] <实施例14:化合物123的合成>
- [0626] 2-(联苯-3-基)-4-{4-(菲-9-基)苯基}-6-{4-(吡啶-3-基)苯基}嘧啶:

[0627]



式(1-1)

A: 式(2-2)

Ar³: H (化合物 123)

- [0628] 在实施例1中,
- [0629] 使用3-联苯基硼酸代替3-(萘-1-基)苯基硼酸,和
- [0630] 使用2-氯-4-{4-(菲-9-基)苯基}-6-{4-(吡啶-3-基)苯基}嘧啶代替2-氯-4-(联苯-4-基)-6-{4-(吡啶-3-基)苯基}嘧啶,
- [0631] 并在相同条件下进行反应。结果,得到3.0g(产率38%)作为黄色粉末2-(联苯-3-基)-4-{4-(菲-9-基)苯基}-6-{4-(吡啶-3-基)苯基}嘧啶(化合物123)。
- [0632] 关于所得的黄色粉末,使用NMR鉴定其结构。其¹H-NMR测量结果示于图14。在¹H-NMR(CDC1₃)中,检测到以下31个氢的信号。
- [0633] δ (ppm) = 9.02 (2H)
- [0634] 8.86-8.76 (3H)
- [0635] 8.69 (1H)

[0636] 8.52-8.48 (4H)

[0637] 8.21 (1H)

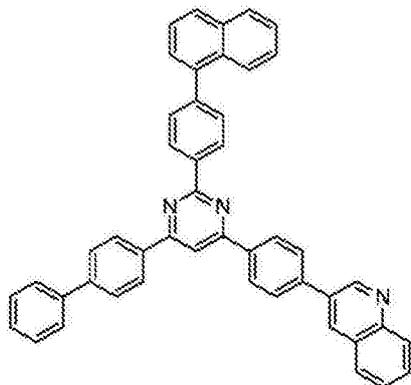
[0638] 8.05-7.93 (3H)

[0639] 7.89-7.40 (17H)

[0640] <实施例15:化合物146的合成>

[0641] 2- {4- (萘-1-基) 苯基} -4- (联苯-4-基) -6- {4- (喹啉-3-基) 苯基} 嘧啶:

[0642]



式(1-1)

A: 式(2-2)

Ar³: H (化合物 146)

[0643] 在实施例1中,

[0644] 使用4- (萘-1-基) 苯基硼酸代替3- (萘-1-基) 苯基硼酸, 和

[0645] 使用2-氯-4- (联苯-4-基) -6- {4- (喹啉-3-基) 苯基} 嘧啶代替2-氯-4- (联苯-4-基) -6- {4- (吡啶-3-基) 苯基} 嘧啶,

[0646] 并在相同条件下进行反应。结果得到1.2g (产率15%) 作为黄色粉末的2- {4- (萘-1-基) 苯基} -4- (联苯-4-基) -6- {4- (喹啉-3-基) 苯基} 嘧啶 (化合物146)。

[0647] 关于所得的黄色粉末, 使用NMR鉴定其结构。其¹H-NMR测量结果示于图15。在¹H-NMR (CDCl₃) 中, 检测到以下31个氢的信号。

[0648] δ (ppm) = 9.34 (1H)

[0649] 8.91 (2H)

[0650] 8.62-8.52 (4H)

[0651] 8.37 (1H)

[0652] 8.22 (1H)

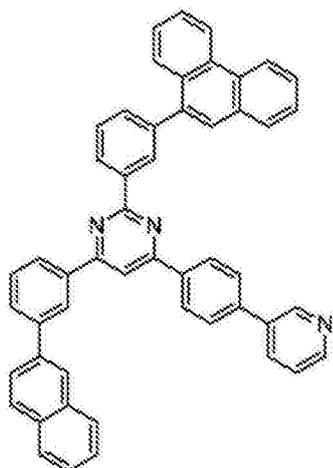
[0653] 8.14-7.90 (5H)

[0654] 7.86-7.40 (17H)

[0655] <实施例16: 化合物98的合成>

[0656] 2- {3- (菲-9-基) 苯基} -4- {3- (萘-2-基) 苯基} -6- {4- (吡啶-3-基) 苯基} 嘧啶:

[0657]



式(1-1)

A: 式(2-2)

Ar³: H (化合物 98)

[0658] 在实施例1中,

[0659] 使用3-(菲-9-基)苯基硼酸代替3-(萘-1-基)苯基硼酸,和

[0660] 使用2-氯-4-{3-(萘-2-基)苯基}-6-{4-(吡啶-3-基)苯基}嘧啶代替2-氯-4-(联苯-4-基)-6-{4-(吡啶-3-基)苯基}嘧啶,

[0661] 并在相同条件下进行反应。结果得到5.0g(产率57%)作为黄色粉末的2-{3-(菲-9-基)苯基}-4-{3-(萘-2-基)苯基}-6-{4-(吡啶-3-基)苯基}嘧啶(化合物98)。

[0662] 关于所得的黄色粉末,使用NMR鉴定其结构。其¹H-NMR测量结果示于图16。在¹H-NMR(CDC1₃)中,检测到以下33个氢的信号。

[0663] δ(ppm) = 8.98-8.78 (5H)

[0664] 8.68-8.62 (2H)

[0665] 8.45 (2H)

[0666] 8.32 (1H)

[0667] 8.17 (2H)

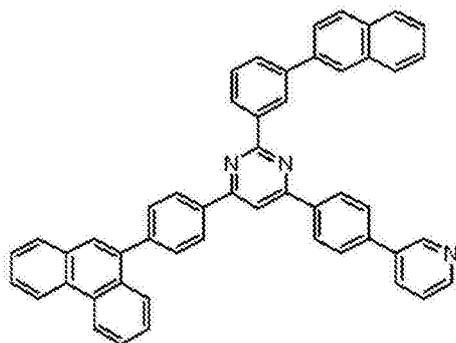
[0668] 8.03 (1H)

[0669] 8.00-7.39 (20H)

[0670] <实施例17:化合物153的合成>

[0671] 2-{3-(萘-2-基)苯基}-4-{4-(菲-9-基)苯基}-6-{4-(吡啶-3-基)苯基}嘧啶:

[0672]



式(1-1)

A: 式(2-2)

Ar³: H (化合物 153)

[0673] 在实施例1中,

[0674] 使用3-(萘-2-基)苯基硼酸代替3-(萘-1-基)苯基硼酸,和

[0675] 使用2-氯-4-{4-(菲-9-基)苯基}-6-{4-(吡啶-3-基)苯基}嘧啶代替2-氯-4-(联苯-4-基)-6-{4-(吡啶-3-基)苯基}嘧啶,

[0676] 并在相同条件下进行反应。结果得到15.4g(产率73%)作为黄色粉末的2-{3-(萘-2-基)苯基}-4-{4-(菲-9-基)苯基}-6-{4-(吡啶-3-基)苯基}嘧啶(化合物153)。

[0677] 关于所得的黄色粉末,使用NMR鉴定其结构。其¹H-NMR测量结果示于图17。在¹H-NMR(CDC1₃)中,检测到以下33个氢的信号。

[0678] δ(ppm) = 9.15 (1H)

[0679] 9.00 (1H)

[0680] 8.83 (2H)

[0681] 8.78 (1H)

[0682] 8.68 (1H)

[0683] 8.53-8.47 (4H)

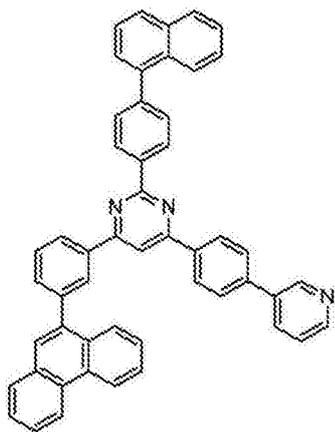
[0684] 8.22 (2H)

[0685] 8.04-7.42 (21H)

[0686] <实施例18:化合物155的合成>

[0687] 2-{4-(萘-1-基)苯基}-4-{3-(菲-9-基)苯基}-6-{4-(吡啶-3-基)苯基}嘧啶:

[0688]



式(1-1)

A: 式(2-2)

Ar³: H (化合物 155)

[0689] 在实施例1中,

[0690] 使用4-(萘-1-基)苯基硼酸代替3-(萘-1-基)苯基硼酸,和

[0691] 使用2-氯-4-{3-(菲-9-基)苯基}-6-{4-(吡啶-3-基)苯基}嘧啶代替2-氯-4-(联苯-4-基)-6-{4-(吡啶-3-基)苯基}嘧啶,

[0692] 并在相同条件下进行反应。结果得到2.5g(产率42%)作为黄色粉末的2-{4-(萘-1-基)苯基}-4-{3-(菲-9-基)苯基}-6-{4-(吡啶-3-基)苯基}嘧啶(化合物155)。

[0693] 关于所得的黄色粉末,使用NMR鉴定其结构。其¹H-NMR测量结果示于图18。在¹H-NMR(CDC1₃)中,检测到以下33个氢的信号。

[0694] δ(ppm) = 8.97 (1H)

[0695] 8.97-8.76 (4H)

[0696] 8.67 (1H)

[0697] 8.52-8.46 (4H)

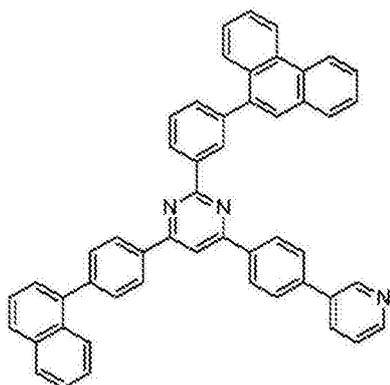
[0698] 8.17 (1H)

[0699] 8.01-7.43 (22H)

[0700] <实施例19:化合物82的合成>

[0701] 2-{3-(菲-9-基)苯基}-4-{4-(萘-1-基)苯基}-6-{4-(吡啶-3-基)苯基}嘧啶:

[0702]



式(1-1)

A: 式(2-2)

Ar³: H (化合物 82)

[0703] 在实施例1中,

[0704] 使用3-(菲-9-基)苯基硼酸代替3-(萘-1-基)苯基硼酸,和

[0705] 使用2-氯-4-{4-(萘-1-基)苯基}-6-{4-(吡啶-3-基)苯基}嘧啶代替2-氯-4-(联苯-4-基)-6-{4-(吡啶-3-基)苯基}嘧啶,

[0706] 并在相同条件下进行反应。结果得到6.3g(产率72%)作为黄色粉末的2-{3-(菲-9-基)苯基}-4-{4-(萘-1-基)苯基}-6-{4-(吡啶-3-基)苯基}嘧啶(化合物82)。

[0707] 关于所得的黄色粉末,使用NMR鉴定其结构。其¹H-NMR测量结果示于图19。在¹H-NMR(CDC1₃)中,检测到以下33个氢的信号。

[0708] δ(ppm) = 8.97-8.88 (3H)

[0709] 8.87-8.76 (2H)

[0710] 8.66 (1H)

[0711] 8.49-8.42 (4H)

[0712] 8.20 (1H)

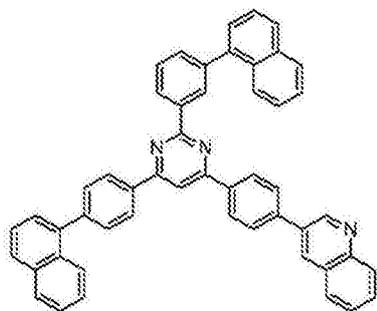
[0713] 8.08-7.84 (7H)

[0714] 7.83-7.40 (15H)

[0715] <实施例20:化合物182的合成>

[0716] 2-{3-(萘-1-基)苯基}-4-{4-(萘-1-基)苯基}-6-{4-(喹啉-3-基)苯基}嘧啶:

[0717]



式(1-1)

A: 式(2-2)

Ar³: H (化合物 182)

[0718] 在实施例1中,

[0719] 使用2-氯-4-{4-(萘-1-基)苯基}-6-{4-(喹啉-3-基)苯基}嘧啶代替2-氯-4-(联苯-4-基)-6-{4-(吡啶-3-基)苯基}嘧啶,

[0720] 并在相同条件下进行反应。结果得到1.5g(产率23%)作为黄色粉末的2-{3-(萘-1-基)苯基}-4-{4-(萘-1-基)苯基}-6-{4-(喹啉-3-基)苯基}嘧啶(化合物182)。

[0721] 关于所得的黄色粉末,使用NMR鉴定其结构。其¹H-NMR测量结果示于图20。在¹H-NMR(THF-d₈)中,检测到以下33个氢的信号。

[0722] δ (ppm) = 9.33 (1H)

[0723] 8.94 (2H)

[0724] 8.59-8.42 (5H)

[0725] 8.23-8.17 (2H)

[0726] 8.04-7.90 (9H)

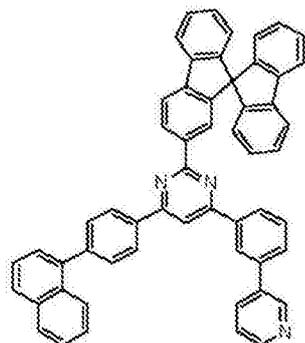
[0727] 7.82-7.72 (5H)

[0728] 7.64-7.45 (9H)

[0729] <实施例21:化合物227的合成>

[0730] 2-(9,9'-螺二[9H-芴]-2-基)-4-{4-(萘-1-基)苯基}-6-{3-(吡啶-3-基)苯基}嘧啶:

[0731]



式(1-1)

A: 式(2-1)

Ar³: H (化合物 227)

[0732] 在实施例1中,

[0733] 使用9,9'-螺二[9H-芴]-2-硼酸代替3-(萘-1-基)苯基硼酸,和

[0734] 使用2-氯-4-{4-(萘-1-基)苯基}-6-{3-(吡啶-3-基)苯基}嘧啶代替

[0735] 2-氯-4-(联苯-4-基)-6-{4-(吡啶-3-基)苯基}嘧啶,

[0736] 并在相同条件下进行反应。结果得到1.3g(产率20%)作为黄色粉末的2-(9,9'-螺二[9H-芴]-2-基)-4-{4-(萘-1-基)苯基}-6-{3-(吡啶-3-基)苯基}嘧啶(化合物227)。

[0737] 关于所得的黄色粉末,使用NMR鉴定其结构。其¹H-NMR测量结果示于图21。在¹H-NMR(CDC1₃)中,检测到以下35个氢的信号。

[0738] δ (ppm) = 8.95 (1H)

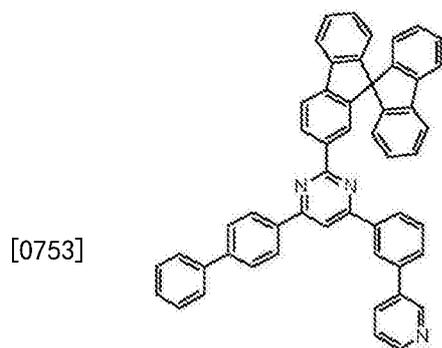
[0739] 8.86 (1H)

[0740] 8.70 (1H)

[0741] 8.42 (1H)

[0742] 8.30 (2H)

- [0743] 8.22 (1H)
 [0744] 8.12-8.03 (3H)
 [0745] 8.01-7.89 (7H)
 [0746] 7.74 (1H)
 [0747] 7.67-7.37 (11H)
 [0748] 7.20-7.10 (3H)
 [0749] 6.83 (2H)
 [0750] 6.78 (1H)
 [0751] <实施例22:化合物234的合成>
 [0752] 2-(9,9'-螺二[9H-芴]-2-基)-4-(联苯-4-基)-6-{3-(吡啶-3-基)苯基}嘧啶:



式(1-1)

A: 式(2-1)

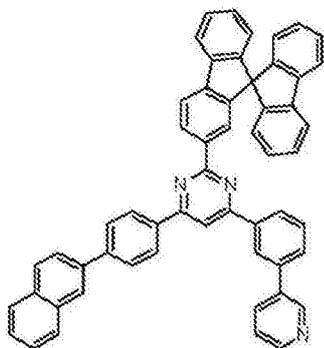
Ar³: H (化合物 234)

- [0754] 在实施例1中,
 [0755] 使用9,9'-螺二[9H-芴]-2-硼酸代替3-(萘-1-基)苯基硼酸,和
 [0756] 使用2-氯-4-(联苯-4-基)-6-{3-(吡啶-3-基)苯基}嘧啶代替2-氯-4-(联苯-4-基)-6-{4-(吡啶-3-基)苯基}嘧啶,
 [0757] 并在相同条件下进行反应。结果得到1.5g(产率25%)作为白色粉末的2-(9,9'-螺二[9H-芴]-2-基)-4-(联苯-4-基)-6-{3-(吡啶-3-基)苯基}嘧啶(化合物234)。
 [0758] 关于所得的白色粉末,使用NMR鉴定其结构。其¹H-NMR测量结果示于图22。在¹H-NMR(CDC1₃)中,检测到以下33个氢的信号。
 [0759] δ(ppm) = 8.96 (1H)
 [0760] 8.86 (1H)
 [0761] 8.72 (1H)
 [0762] 8.39 (1H)
 [0763] 8.26 (2H)
 [0764] 8.17 (1H)
 [0765] 8.12-7.89 (7H)
 [0766] 7.78-7.60 (6H)
 [0767] 7.53-7.25 (7H)
 [0768] 7.21-7.10 (3H)
 [0769] 6.83-6.75 (3H)

[0770] <实施例23:化合物235的合成>

[0771] 2-(9,9'-螺二[9H-芴]-2-基)-4-[4-(萘-2-基)苯基]-6-[3-(吡啶-3-基)苯基]嘧啶:

[0772]



式(1-1)

A: 式(2-1)

Ar³: H (化合物 235)

[0773] 在实施例1中,

[0774] 使用9,9'-螺二[9H-芴]-2-硼酸代替3-(萘-1-基)苯基硼酸,和

[0775] 使用2-氯-4-[4-(萘-2-基)苯基]-6-[3-(吡啶-3-基)苯基]嘧啶代替2-氯-4-(联苯-4-基)-6-[4-(吡啶-3-基)苯基]嘧啶,

[0776] 并在相同条件下进行反应。结果得到2.0g(产率32%)作为白色粉末的2-(9,9'-螺二[9H-芴]-2-基)-4-[4-(萘-2-基)苯基]-6-[3-(吡啶-3-基)苯基]嘧啶(化合物235)。

[0777] 关于所得的白色粉末,使用NMR鉴定其结构。其¹H-NMR测量结果示于图23。在¹H-NMR(CDC1₃)中,检测到以下35个氢的信号。

[0778] δ(ppm) = 8.96 (1H)

[0779] 8.85 (1H)

[0780] 8.71 (1H)

[0781] 8.41 (1H)

[0782] 8.30 (2H)

[0783] 8.19 (1H)

[0784] 8.12 (1H)

[0785] 8.79-7.39 (21H)

[0786] 7.20-7.11 (3H)

[0787] 6.83 (2H)

[0788] 6.78 (1H)

[0789] <功函数的测量>

[0790] 使用本发明的各化合物,在ITO基板上制作膜厚为100nm的气相沉积膜,使用电离电位测量装置(PYS-202,由Sumitomo Heavy Industries,Ltd.生产)测量其功函数。

	<u>功函数</u>
实施例 1 的化合物(化合物 74)	6.63 eV
实施例 2 的化合物(化合物 84)	6.60 eV
实施例 3 的化合物(化合物 89)	6.39 eV
[0791] 实施例 4 的化合物(化合物 130)	6.50 eV
实施例 5 的化合物(化合物 131)	6.50 eV
实施例 6 的化合物(化合物 92)	6.51 eV
实施例 7 的化合物(化合物 136)	6.47 eV
实施例 8 的化合物(化合物 125)	6.50 eV
实施例 9 的化合物(化合物 138)	6.47 eV
实施例 10 的化合物(化合物 78)	6.48 eV
实施例 11 的化合物(化合物 76)	6.55 eV
实施例 12 的化合物(化合物 126)	6.56 eV
实施例 13 的化合物(化合物 124)	6.50 eV
实施例 14 的化合物(化合物 123)	6.53 eV
实施例 15 的化合物(化合物 146)	6.53 eV
[0792] 实施例 16 的化合物(化合物 98)	6.48 eV
实施例 17 的化合物(化合物 153)	6.46 eV
实施例 18 的化合物(化合物 155)	6.51 eV
实施例 19 的化合物(化合物 82)	6.46 eV
实施例 20 的化合物(化合物 182)	6.54 eV
实施例 21 的化合物(化合物 227)	6.55 eV
实施例 22 的化合物(化合物 234)	6.55 eV
实施例 23 的化合物(化合物 235)	6.54 eV

[0793] 如上所述,本发明的化合物显示出比通常的空穴输送材料如NPD或TPD所示的5.5eV的功函数更大的值,因此发现其具有高空穴阻挡能力。

[0794] <玻璃化转变点的测量>

[0795] 通过高灵敏度差示扫描量热计 (DSC3100S, 由Bruker AXS K.K. 生产) 测量实施例4至23中得到的化合物的玻璃化转变点。

玻璃化转变点

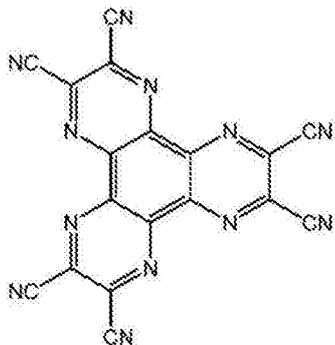
	实施例 4 的化合物(化合物 130)	129°C
[0796]	实施例 5 的化合物(化合物 131)	138°C
	实施例 6 的化合物(化合物 92)	108°C
	实施例 7 的化合物(化合物 136)	128°C
	实施例 8 的化合物(化合物 125)	117°C
	实施例 9 的化合物(化合物 138)	111°C
	实施例 10 的化合物(化合物 78)	138°C
	实施例 11 的化合物(化合物 76)	103°C
	实施例 12 的化合物(化合物 126)	129°C
	实施例 13 的化合物(化合物 124)	107°C
	实施例 14 的化合物(化合物 123)	116°C
	实施例 15 的化合物(化合物 146)	114°C
[0797]	实施例 16 的化合物(化合物 98)	116°C
	实施例 17 的化合物(化合物 153)	116°C
	实施例 18 的化合物(化合物 155)	132°C
	实施例 19 的化合物(化合物 82)	131°C
	实施例 20 的化合物(化合物 182)	114°C
	实施例 21 的化合物(化合物 227)	150°C
	实施例 22 的化合物(化合物 234)	143°C
	实施例 23 的化合物(化合物 235)	146°C

[0798] 本发明的化合物具有100°C以上,特别是140°C以上的玻璃化转变点,表明本发明的化合物在薄膜状态下是稳定的。

[0799] <有机EL器件实施例1>

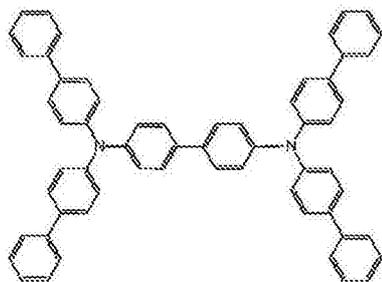
[0800] 将空穴注入层3、空穴输送层4、发光层5、空穴阻挡层6、电子输送层7、电子注入层8和阴极(铝电极)9以此顺序气相沉积在预先形成为玻璃基板1上的透明阳极2的ITO电极上,以制备如图24所示的有机EL器件。

[0801] 具体地,将在其上形成有150nm厚的ITO膜的玻璃基板1在异丙醇中超声清洗20分钟,然后在加热至200℃的热板上干燥10分钟。然后,对具有ITO的玻璃基板进行15分钟的UV/臭氧处理。然后,将装有ITO的玻璃基板安装在真空沉积机内,并将压力降低至0.001Pa以下。然后,将下文所示的结构式表示的化合物即HIM-1的膜形成为5nm厚度的膜,作为空穴注入层3,以覆盖透明阳极2。在空穴注入层3上,将下文所示的结构式表示的化合物即HIM-1的膜形成为65nm厚度的膜,作为空穴输送层4。在空穴输送层4上,将下文所示的结构式表示的EMD-1和下文所示的结构式表示的EMH-1以“EMD-1:EMH-1=5:95”这样的气相沉积速率进行二元气相沉积,由此形成膜厚度为20nm的发光层5。在该发光层5上,将实施例1的化合物(化合物74)和下文所述的结构式表示的化合物ETM-1以“实施例1的化合物(化合物74):ETM-1=50:50”这样的气相沉积速率进行二元气相沉积,由此形成同时用作空穴阻挡层6和电子输送层7的膜,膜厚度为30nm。在空穴阻挡层6/电子输送层7上,形成膜厚为1nm的氟化锂膜作为电子注入层8。最后,将铝气相沉积至膜厚度为100nm以形成阴极9。

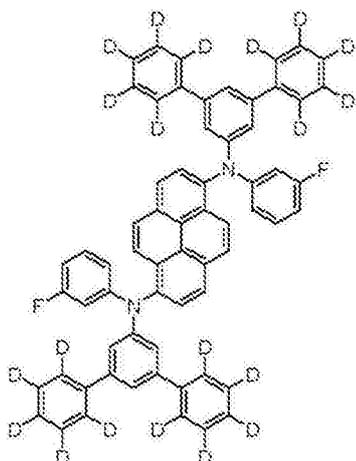


[0802]

(HIM-1)

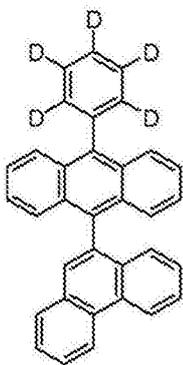


(HTM-1)

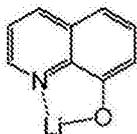


(EMD-1)

[0803]



(EMH-1)



(ETM-1)

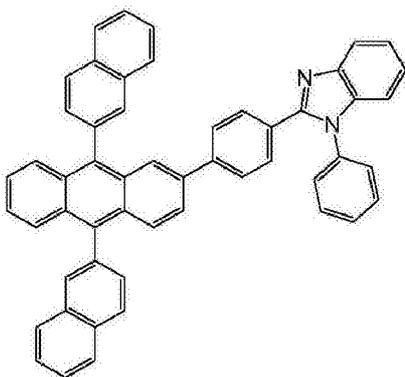
[0804] <有机EL器件实施例2至20>

[0805] 除了使用实施例2至20的各化合物代替实施例1的化合物(化合物74)作为空穴阻挡层6/电子输送层7用的材料以外,在与有机EL器件实施例1相同的条件下制作有机EL器件,如表1所示。

[0806] <有机EL器件比较例1>

[0807] 为了进行比较,除了使用由以下的结构式表示的化合物ETM-2(参见专利文献4)代替实施例1的化合物(化合物74)作为空穴阻挡层6/电子输送层7用的材料以外,在与有机EL器件实施例1相同的条件下制作有机EL器件。

[0808]



(ETM-2)

[0809] 在常温下大气中当施加直流电压时,测量有机EL器件实施例1至20和有机EL器件比较例1中制作的有机EL器件的发光特性。测量结果示于表1中。

[0810] 测量在有机EL器件实施例1至20和有机EL器件比较例1中制作的有机EL器件的器件寿命。具体地,器件寿命被测量为:将发光开始时的发光亮度(初始亮度)设定为 $2000\text{cd}/\text{m}^2$,进行恒定电流驱动直到发光亮度衰减到 $1900\text{cd}/\text{m}^2$ (对应于95%,其中初始亮度取作100%:95%衰减)的时间。结果示于表1。

[0811] 表1

[0812]

有机 EL 器件实施例/比较例	空穴阻挡层/电子输送层	电压[V] (在 10mA/cm ² 下)	亮度[cd/m ²] (在 10mA/cm ² 下)	发光效率 [cd/A] (在 10mA/cm ² 下)	电力效率 [lm/W] (在 10mA/cm ² 下)	器件寿命 95% 衰减(小时)
实施例 1	化合物 74/ETM-1	3.89	719	7.22	5.84	181
实施例 2	化合物 84/ETM-1	3.75	733	7.36	6.18	179
实施例 3	化合物 89/ETM-1	3.97	725	7.27	5.76	208
实施例 4	化合物 130/ETM-1	3.66	795	7.98	6.85	138
实施例 5	化合物 131/ETM-1	3.79	766	7.67	6.35	128
实施例 6	化合物 92/ETM-1	3.75	795	7.98	6.69	156
实施例 7	化合物 136/ETM-1	3.94	734	7.37	5.88	208
实施例 8	化合物 125/ETM-1	3.70	751	7.54	6.41	216
实施例 9	化合物 138/ETM-1	3.77	740	7.42	6.18	226
实施例 10	化合物 78/ETM-1	3.84	710	7.11	5.82	187
实施例 11	化合物 76/ETM-1	3.83	769	7.70	6.33	208
实施例 12	化合物 126/ETM-1	3.66	789	7.92	6.80	152
实施例 13	化合物 124/ETM-1	3.66	761	7.64	6.56	204
实施例 14	化合物 123/ETM-1	3.67	812	8.14	6.98	142
实施例 15	化合物 146/ETM-1	3.71	753	7.57	6.42	201
实施例 16	化合物 98/ETM-1	3.93	734	7.36	5.90	181
实施例 17	化合物 153/ETM-1	3.87	820	8.23	6.70	180
实施例 18	化合物 155/ETM-1	3.77	804	8.06	6.71	166
实施例 19	化合物 82/ETM-1	3.82	780	7.81	6.43	190
实施例 20	化合物 182/ETM-1	3.73	684	6.86	5.79	276
比较例 1	ETM-2/ETM-1	3.84	635	6.35	5.20	55

[0813] 如表1所示,当流过电流密度为10mA/cm²的电流时的发光效率,在有机EL器件比较例1中显示为6.35cd/A的值,但在有机EL器件实施例1至20中显示为6.86至8.23cd/A的大幅增加的值。

[0814] 在有机EL器件比较例1中的功率效率为5.20lm/W,而在有机EL器件实施例1至20中的功率效率为5.76至6.98lm/W,显示出大的增加。

[0815] 在有机EL器件比较例1中,器件寿命(95%衰减)特别地为55小时,但在有机EL器件实施例1至20中为128至276小时,显示出显著的延长。可实现这种显著延长的寿命,可能是因为与用于有机EL器件的常规材料相比,本发明的噻啉衍生物在薄膜状态下是稳定的,并且具有优异的耐热性。此外,推测这样的效果是由本发明的噻啉衍生物优异的载体平衡引

起的。

[0816] 此外,有机EL器件实施例1至20中的驱动电压的值与有机EL器件比较例1中的值一样低,或者低于有机EL器件比较例1中的值。

[0817] 如上所述,发现本发明的有机EL器件的发光效率和功率效率优异,并且发现与使用一般的电子输送材料化合物ETM-2的器件相比,能够实现具有长寿命的有机EL器件。

[0818] 工业适用性

[0819] 本发明的嘧啶衍生物电子注入特性良好,空穴阻挡能力优异,薄膜状态稳定,因此作为用于有机EL器件的化合物优异。使用该化合物制备的有机EL器件可提供高效率,可降低驱动电压,并且可提高耐久性。因此,本发明的有机EL器件可以用于例如家用电器和照明。

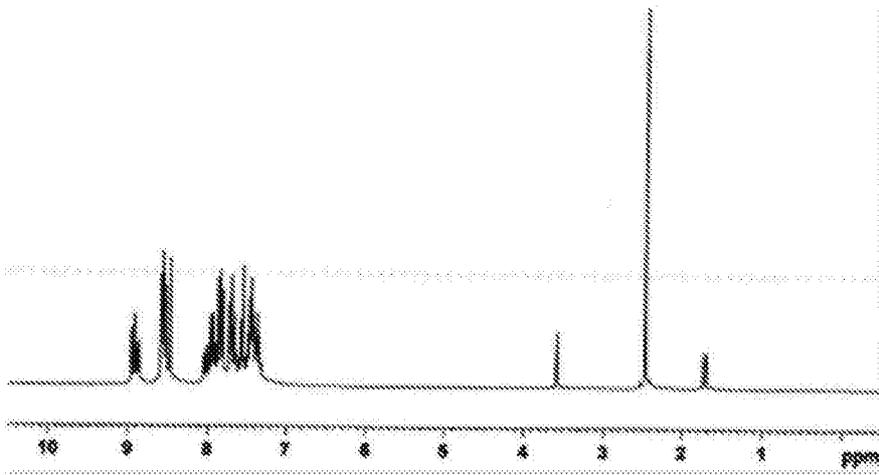


图1

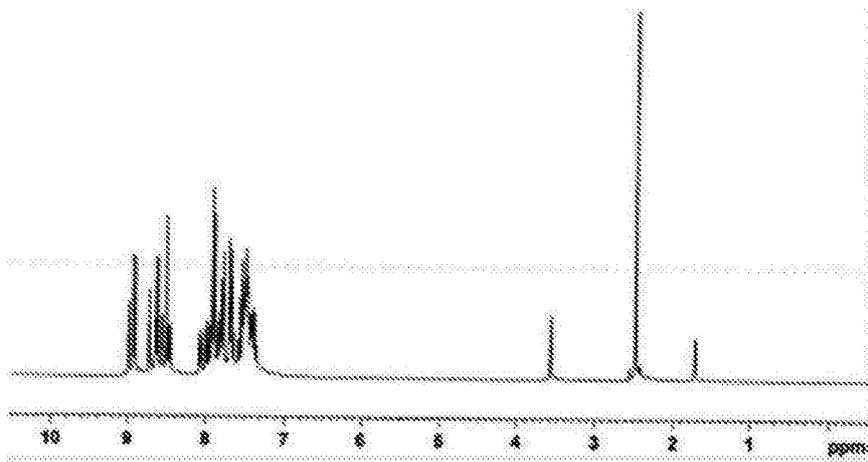


图2

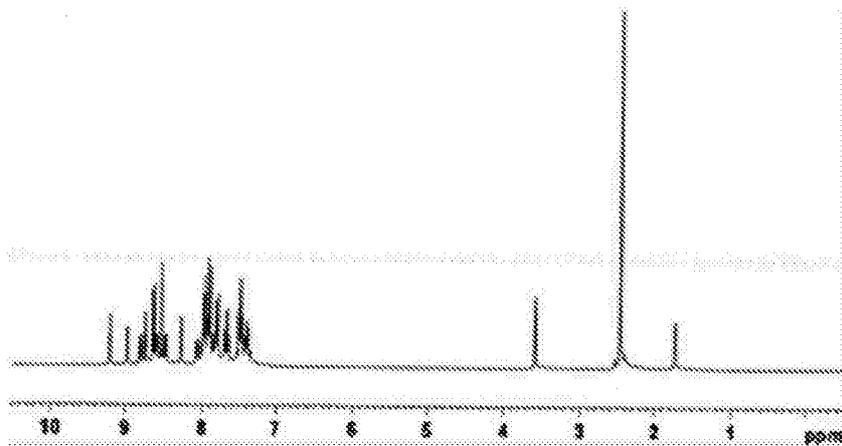


图3

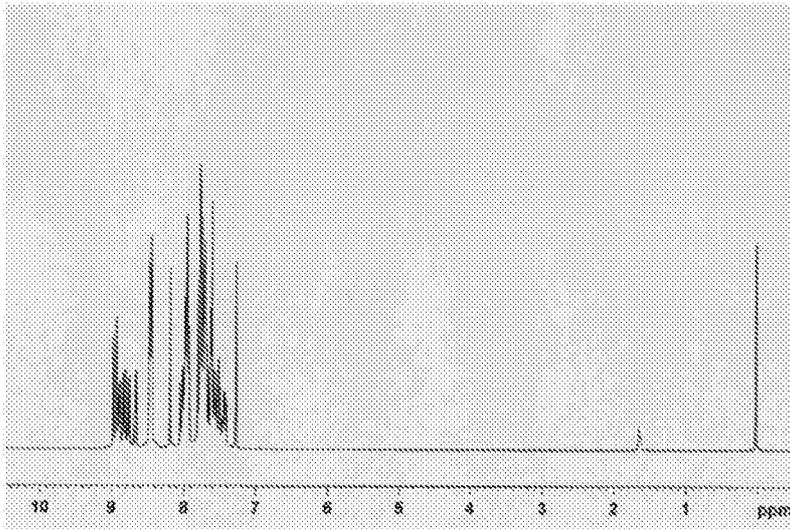


图4

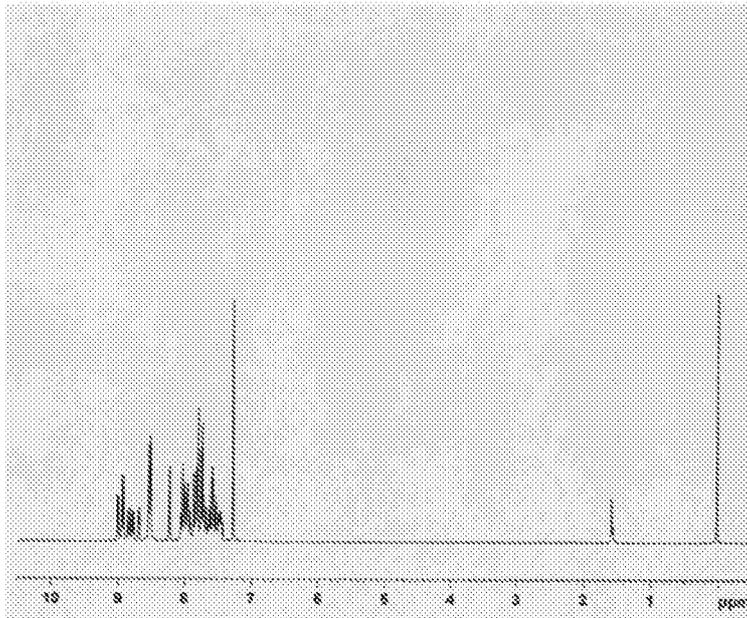


图5

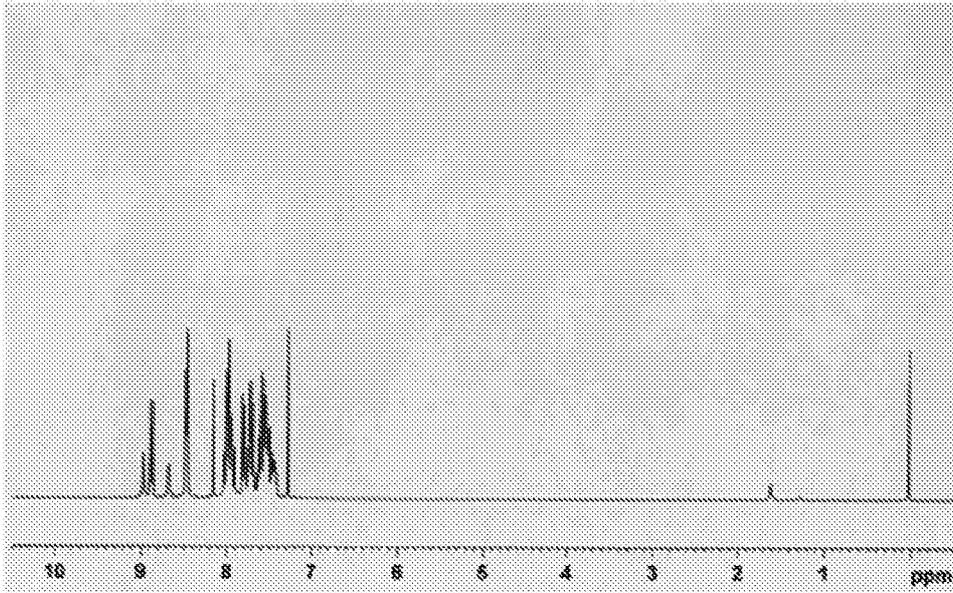


图6

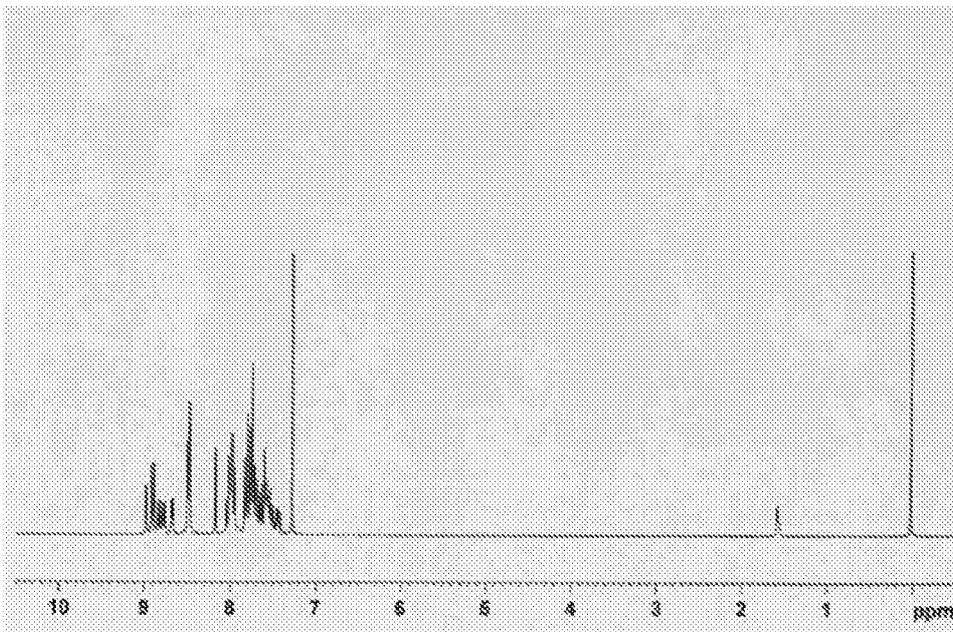


图7

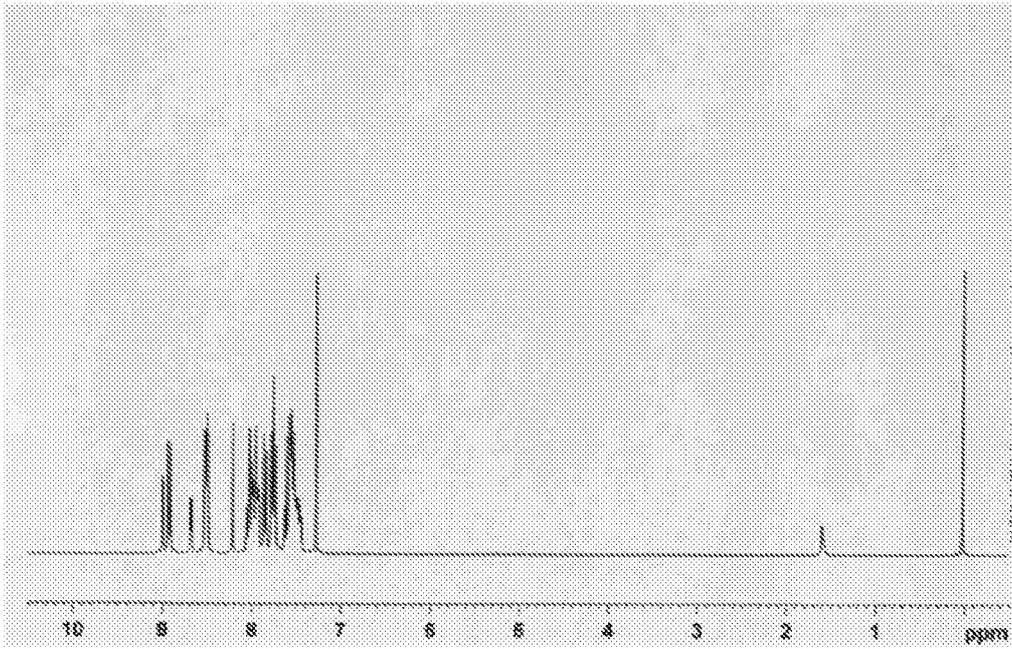


图8

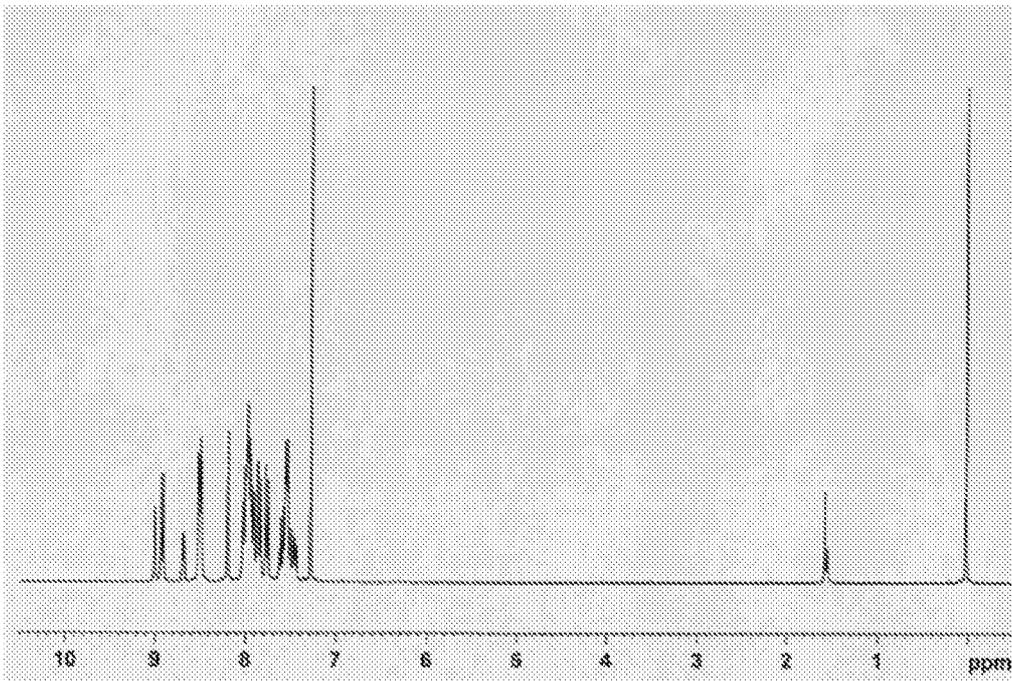


图9

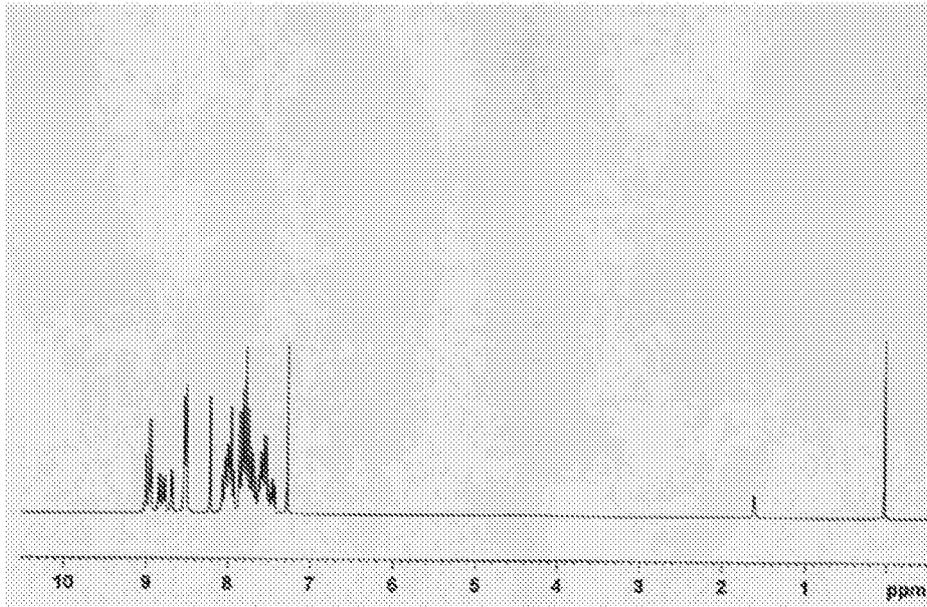


图10

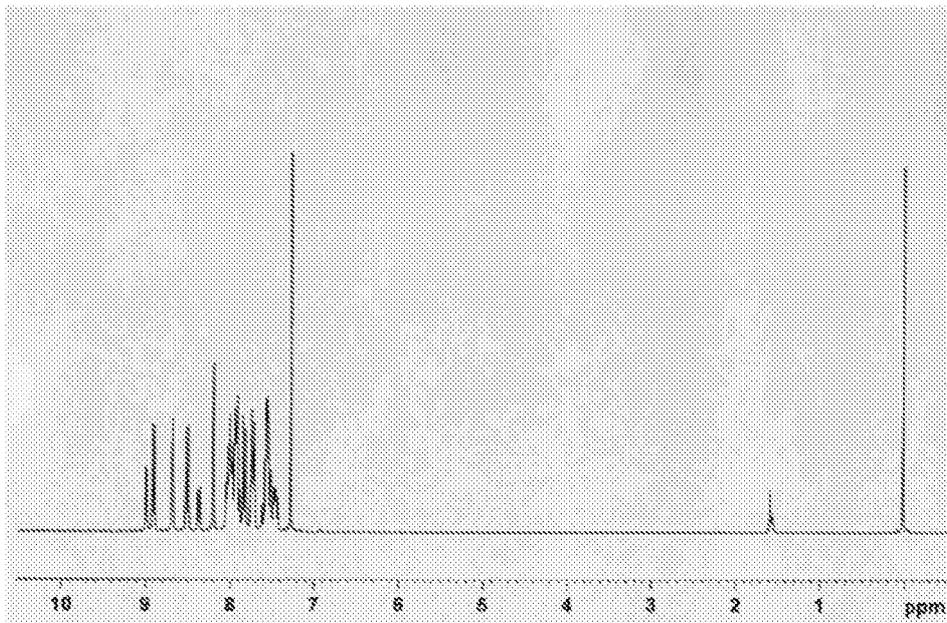


图11

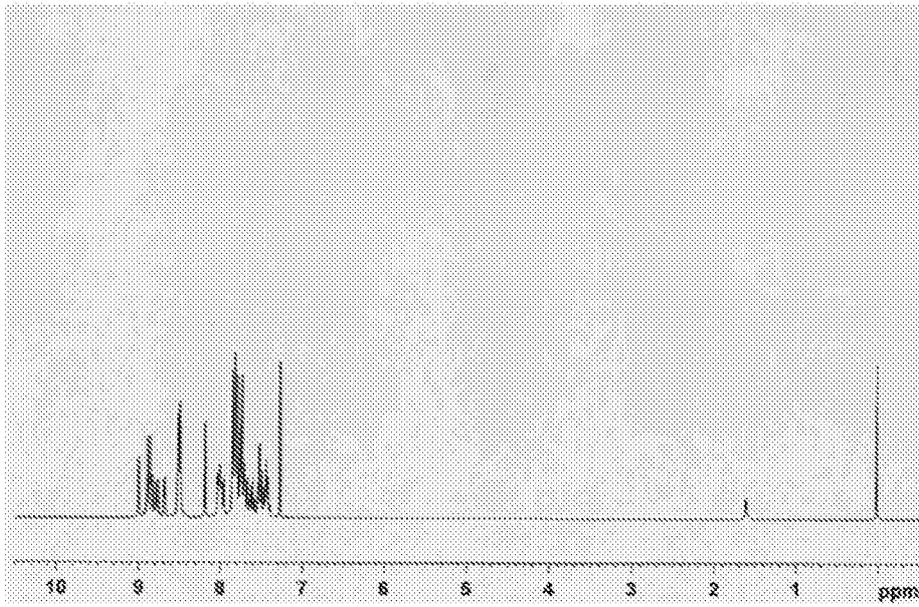


图12

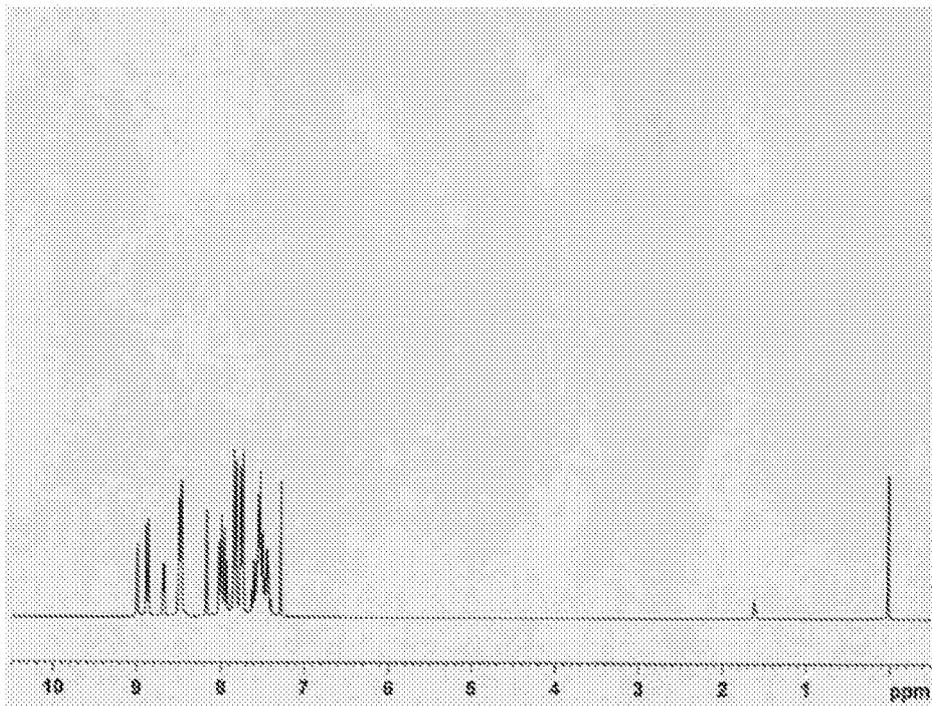


图13

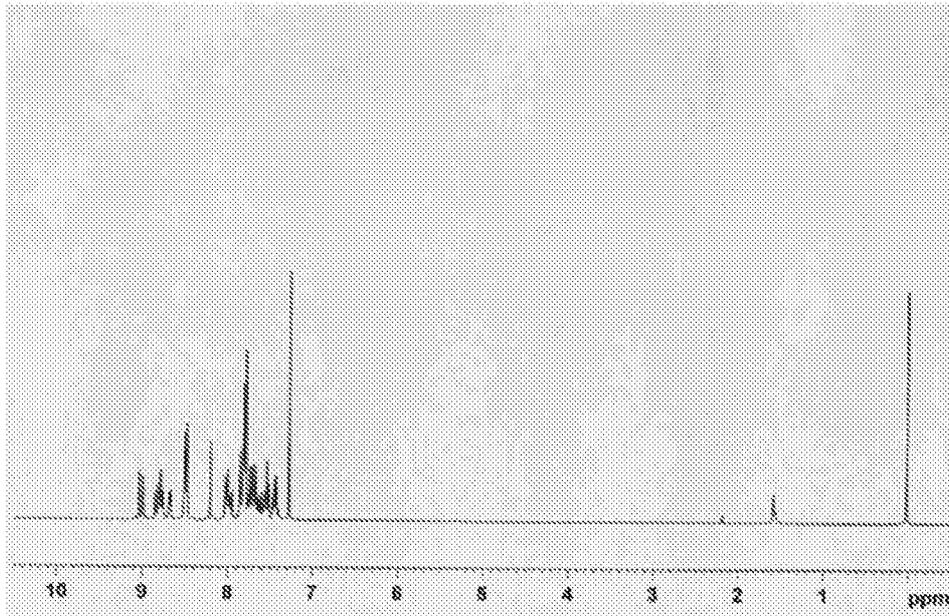


图14

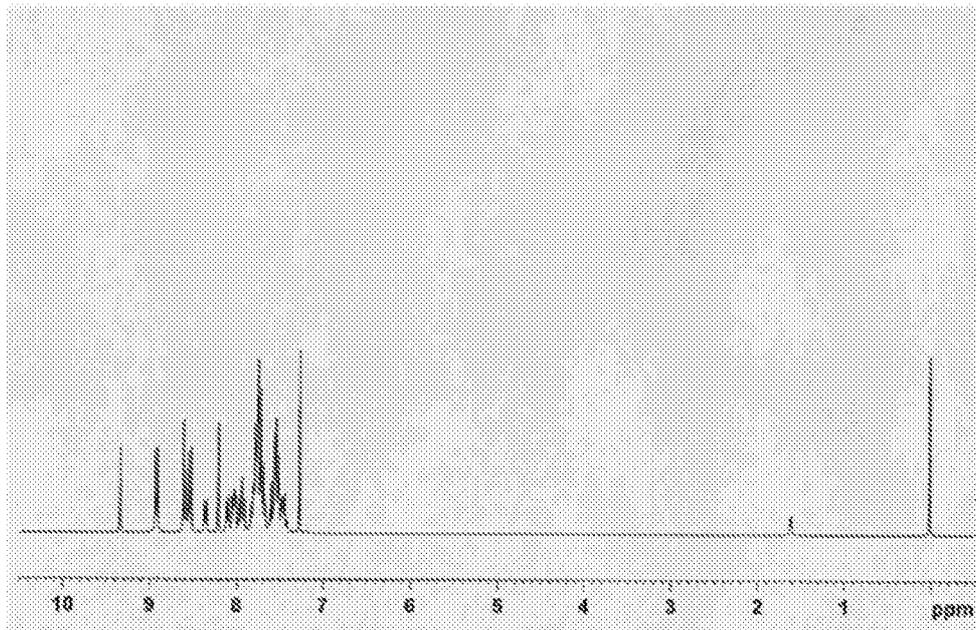


图15

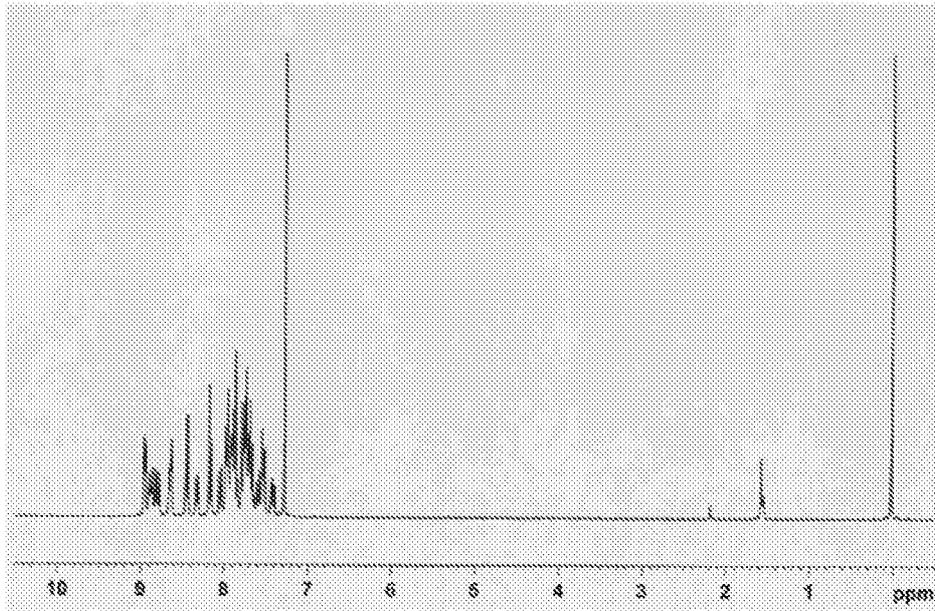


图16

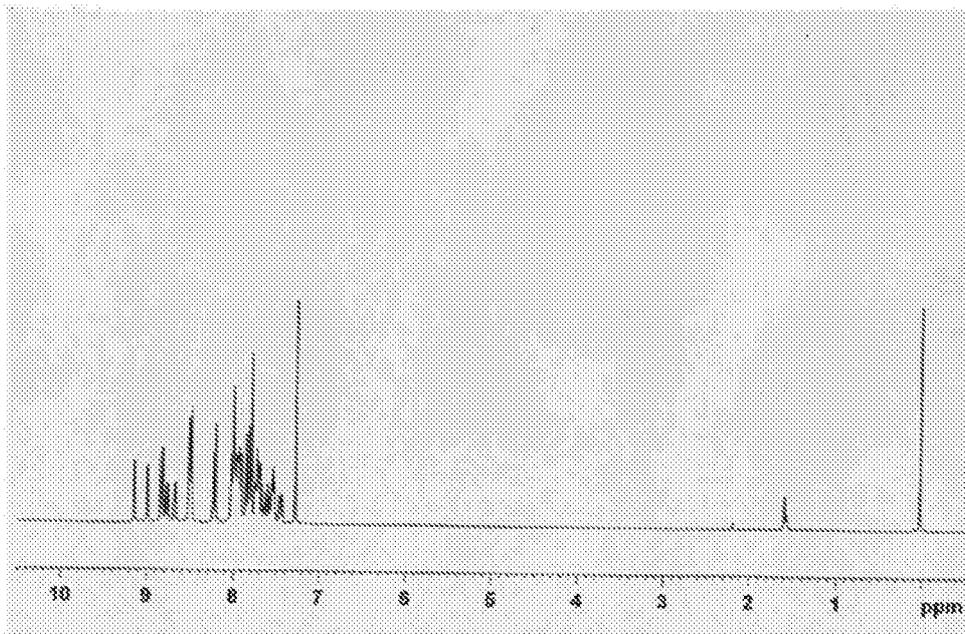


图17

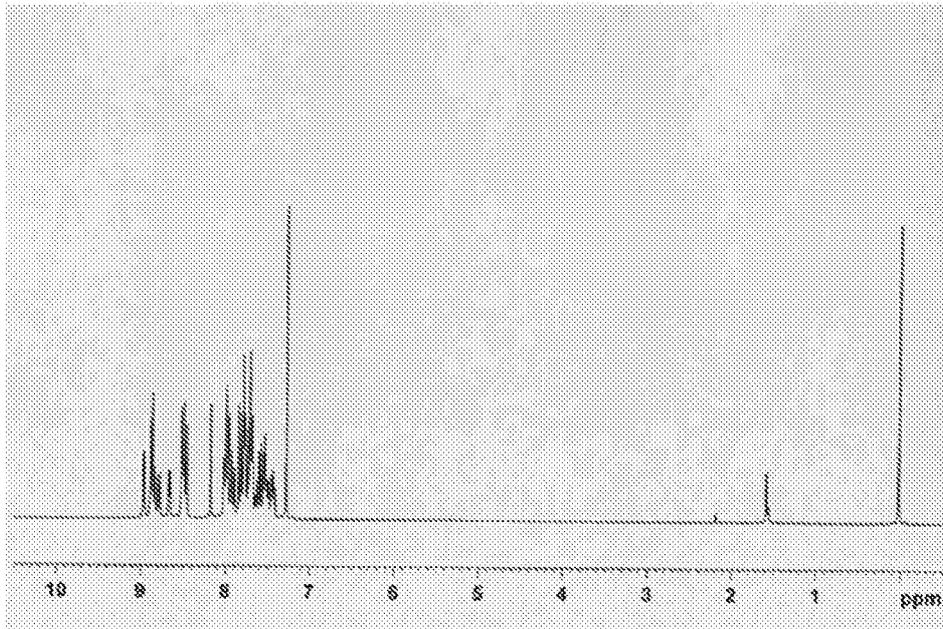


图18

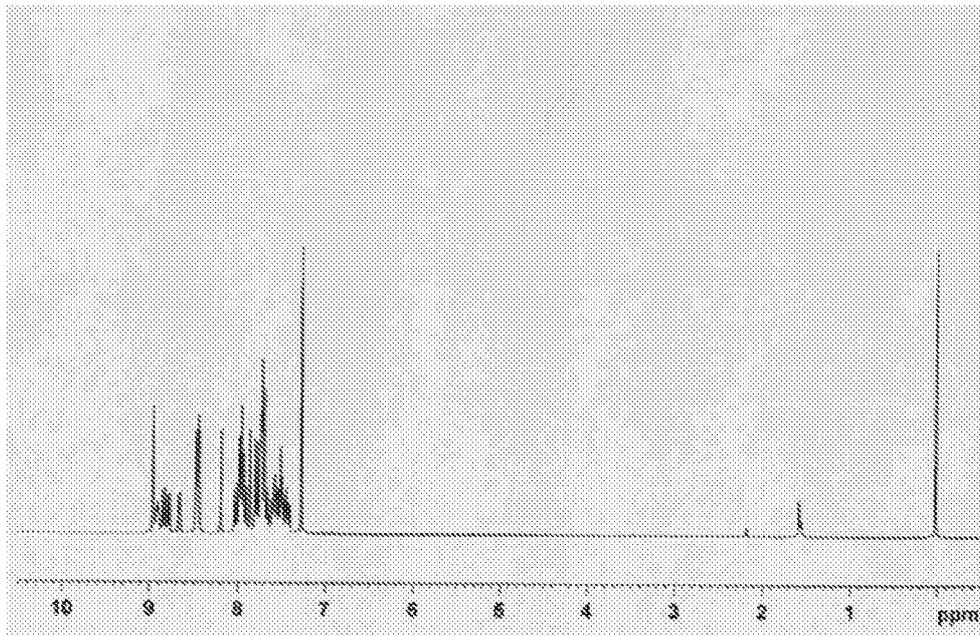


图19

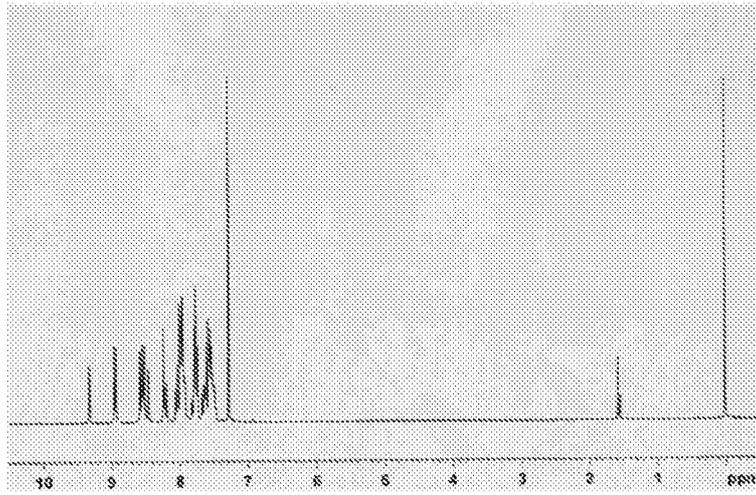


图20

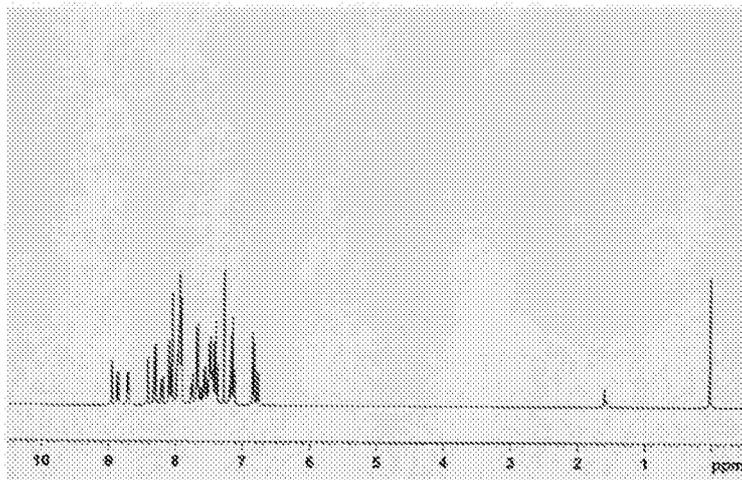


图21

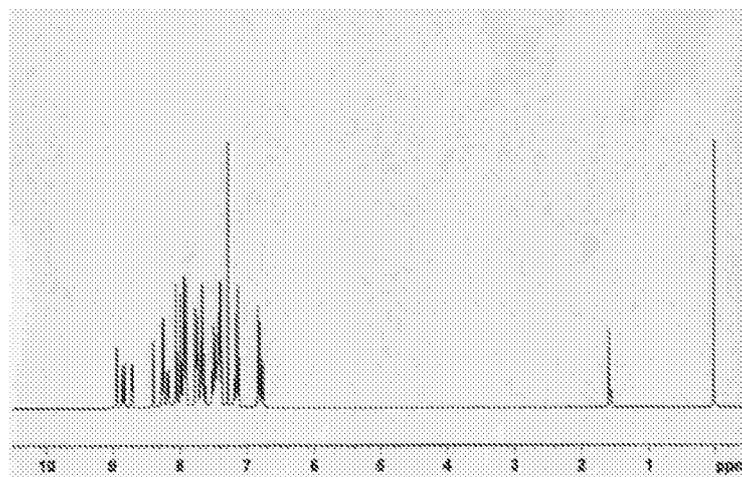


图22

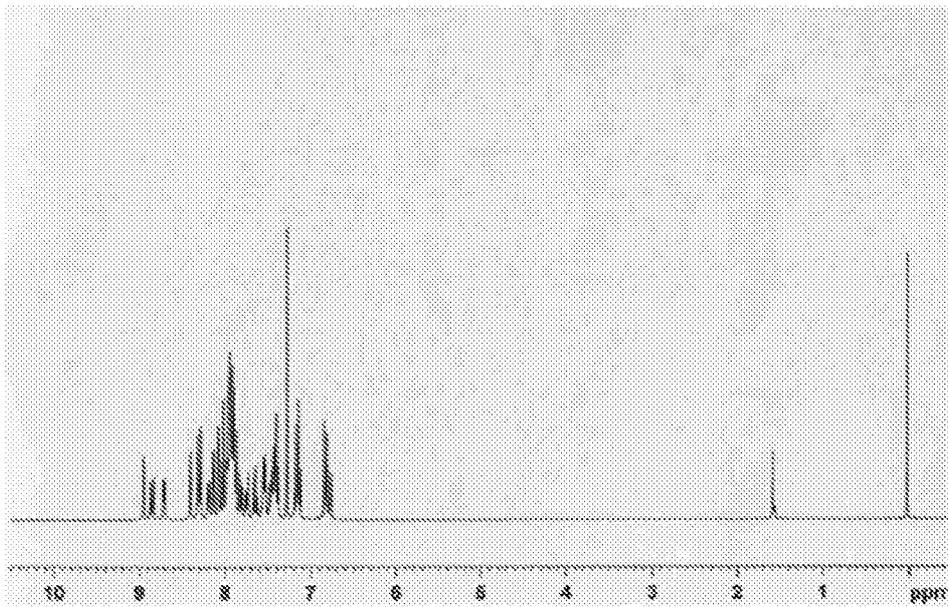


图23

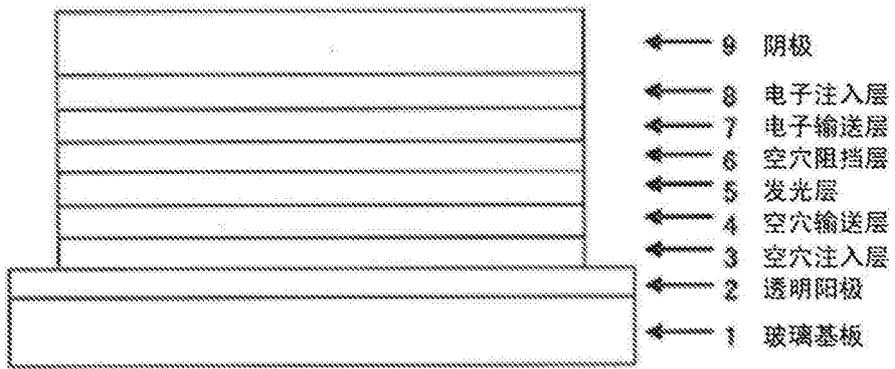


图24