



(12) 发明专利申请

(10) 申请公布号 CN 113166129 A

(43) 申请公布日 2021.07.23

(21) 申请号 201980070241.4

(74) 专利代理机构 北京品源专利代理有限公司
11332

(22) 申请日 2019.10.23

代理人 吕琳 田英爱

(30) 优先权数据

10-2018-0126915 2018.10.23 KR

(51) Int.Cl.

G07D 409/12 (2006.01)

(85) PCT国际申请进入国家阶段日

G07D 407/12 (2006.01)

2021.04.23

G07D 333/76 (2006.01)

(86) PCT国际申请的申请数据

H01L 51/00 (2006.01)

PCT/KR2019/013993 2019.10.23

H01L 51/50 (2006.01)

(87) PCT国际申请的公布数据

W02020/085797 K0 2020.04.30

(71) 申请人 德山新勒克斯有限公司

地址 韩国忠清南道天安市

(72) 发明人 金宥利 朴钟光 李允硕 朴勇旭
吴贤智

权利要求书9页 说明书47页 附图2页

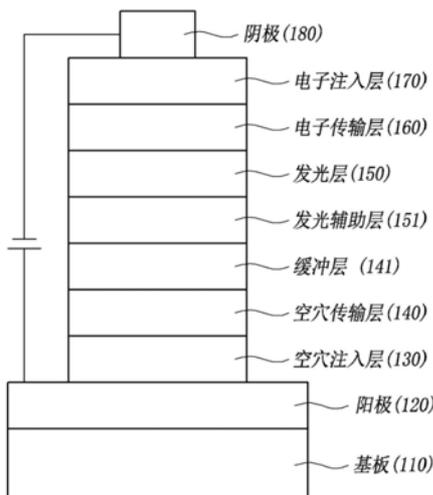
(54) 发明名称

用于有机电子元件的化合物,使用该化合物的有机电子元件及其电子设备

(57) 摘要

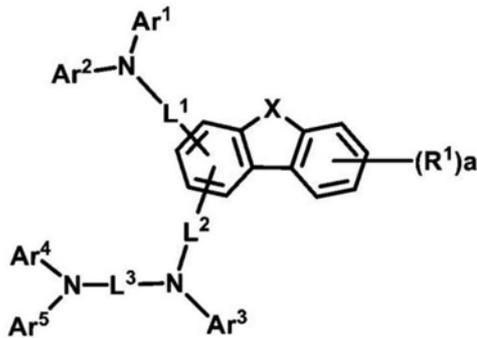
本发明涉及有机电子元件用化合物,使用该化合物的有机电子元件及其电子设备。根据本发明,可以实现元件的高发光效率,低驱动电压和高耐热性,并且可以提高元件的色纯度和寿命。

100



1. 由以下化学式1表示的化合物:

<化学式1>



在所述化学式1中,

1) X是O或S;

2) Ar¹至Ar⁵彼此相同或不同,各自独立地选自由C₆-C₆₀芳基;含有至少一个O、N、S、Si和P的杂原子的C₂-C₂₀杂环基;C₃-C₆₀脂肪族环和C₆-C₆₀芳族环的稠合环基;C₁-C₆₀烷基;C₂-C₂₀烯基;C₂-C₂₀炔基;C₁-C₃₀烷氧基;C₆-C₃₀芳氧基和-L'(R_a)(R_b)所组成的组中;

3) R¹选自由氘;三重氢;卤素;氰基;硝基;C₆-C₆₀芳基;含有至少一个O、N、S、Si和P的杂原子的C₂-C₂₀杂环基;C₃-C₆₀脂肪族环和C₆-C₆₀芳族环的稠合环基;C₁-C₅₀烷基;C₂-C₂₀烯基;C₂-C₂₀炔基;C₁-C₃₀烷氧基;C₆-C₃₀芳氧基和-L'(R_a)(R_b)所组成的组中,当a为2或更大时,R¹彼此相同或不同,并且多个R¹彼此键合以形成环;

4) a是0到4的整数;

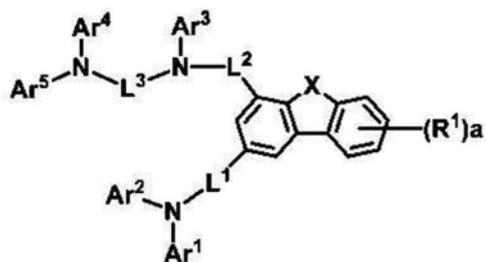
5) L¹至L³彼此相同或不同,各自独立地选自由单键;C₆-C₆₀芳基;C₃-C₆₀脂族环基;含有至少一个O、N、S、Si和P的杂原子的C₂-C₆₀杂环基;以及由其组合所组成的组中;

6) 所述L¹选自由单键;C₆-C₆₀芳基;C₃-C₆₀脂族环基;含有至少一个O、N、S、Si和P的杂原子的C₂-C₆₀杂环基;以及由其组合所组成的组中,所述R_a和R_b各自独立地选自由C₆-C₆₀芳基;苄基;C₃-C₆₀脂族环基;含有至少一个O、N、S、Si和P的杂原子的C₂-C₆₀杂环基;以及由其组合所组成的组中;

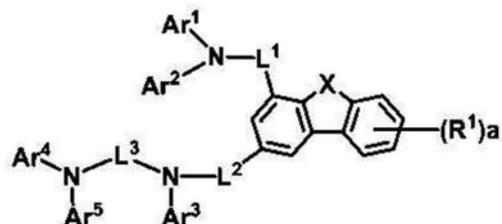
7) 所述Ar¹至Ar⁵和R¹中,所述脂族烷基,芳基、杂环基、稠环基、烷基、烯基、炔基、烷氧基、芳氧基和硅烷基各自进一步被一个或多个选自由重氢;硝基;腈基;卤素;氨基;未取代或被C₁-C₂₀烷基或C₆-C₂₀芳基取代的硅烷基;硅氧烷基;C₁-C₂₀烷硫基;C₁-C₂₀烷氧基;C₁-C₂₀烷基;C₂-C₂₀烯基;C₂-C₂₀炔基;C₆-C₂₀芳基;被重氢取代的C₆-C₂₀芳基;C₂-C₂₀杂环基;C₃-C₂₀环烷基;C₇-C₂₀芳基烷基和C₈-C₂₀芳基烯基所组成的组中的取代基取代,并且这些取代基彼此键合形成环,在此,术语“环”包括饱和或不饱和环,并且是由C₃-C₆₀脂族环或C₆-C₆₀芳族环或C₂-C₆₀杂环或其组合组成的稠合环。

2. 根据权利要求1所述的化合物,其特征在于,由所述化学式1表示的化合物由以下化学式2或化学式3之一表示:

<化学式2>

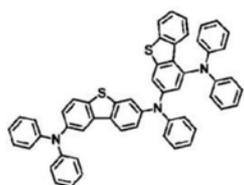


<化学式7>

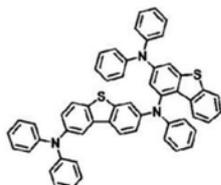


在所述化学式4至化学式7中,Ar¹至Ar⁵、R¹、L¹至L³、X和a与权利要求1中所定义的相同。

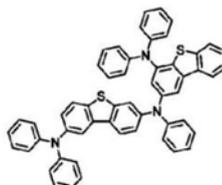
4. 根据权利要求1所述的化合物,其特征在于,所述化学式1的化合物是以下化合物中的任何一种:



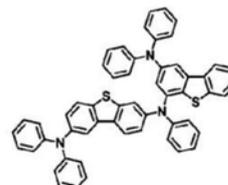
P-1



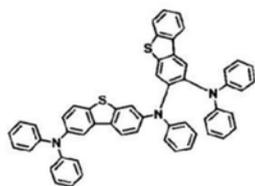
P-2



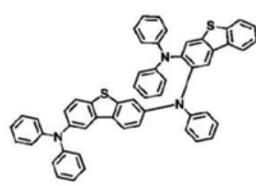
P-3



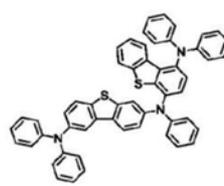
P-4



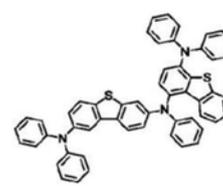
P-5



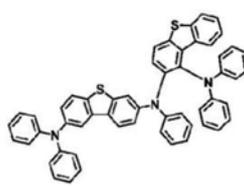
P-6



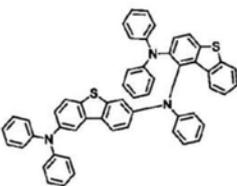
P-7



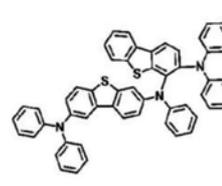
P-8



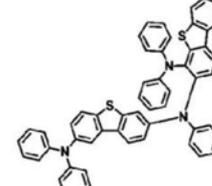
P-9



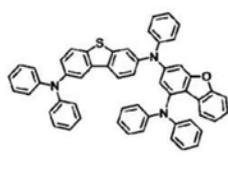
P-10



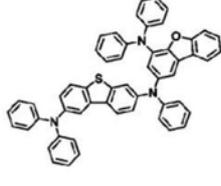
P-11



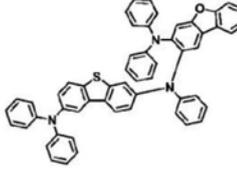
P-12



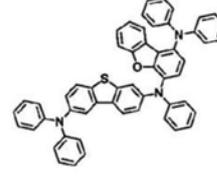
P-13



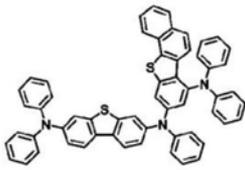
P-14



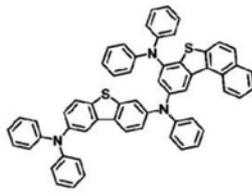
P-15



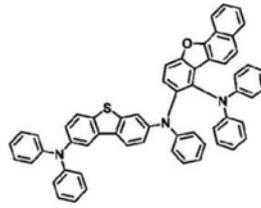
P-16



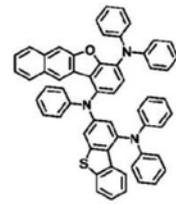
P-17



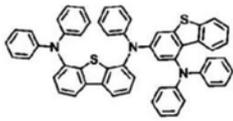
P-18



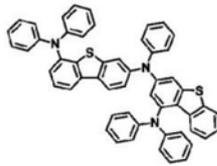
P-19



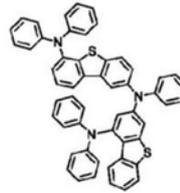
P-20



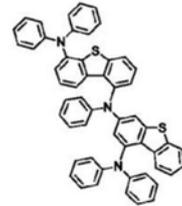
P-21



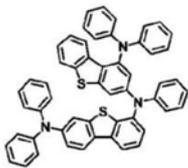
P-22



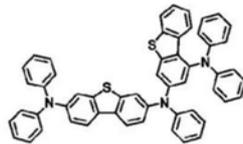
P-23



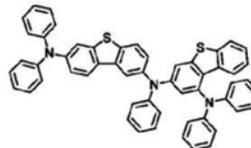
P-24



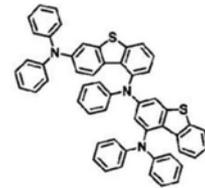
P-25



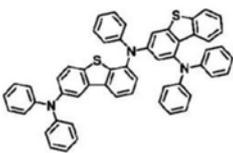
P-26



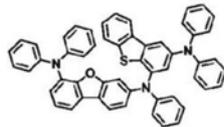
P-27



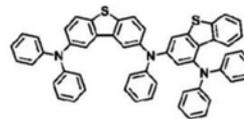
P-28



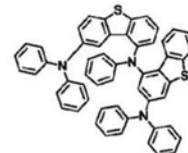
P-29



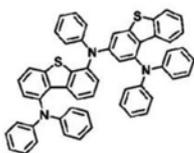
P-30



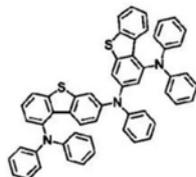
P-31



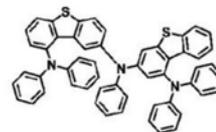
P-32



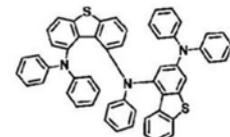
P-33



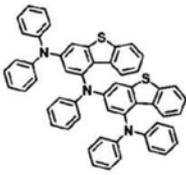
P-34



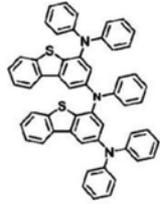
P-35



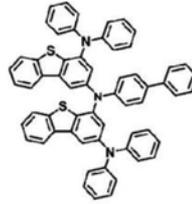
P-36



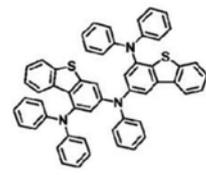
P-37



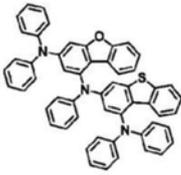
P-38



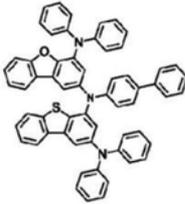
P-39



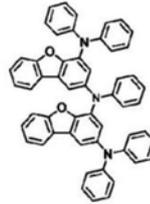
P-40



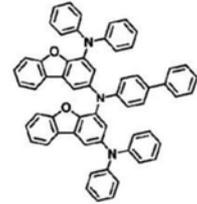
P-41



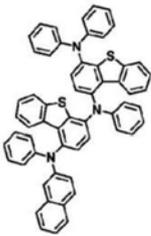
P-42



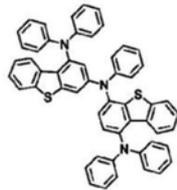
P-43



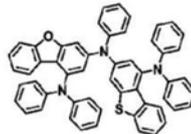
P-44



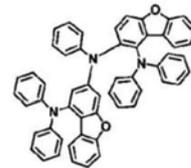
P-45



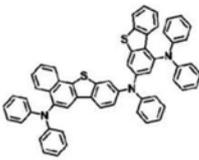
P-46



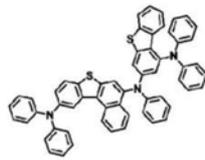
P-47



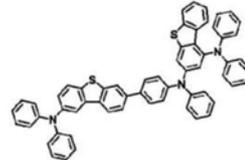
P-48



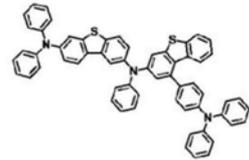
P-49



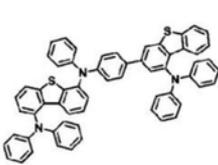
P-50



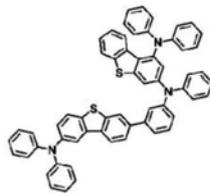
P-51



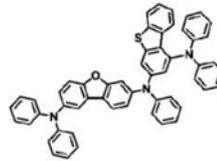
P-52



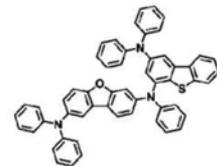
P-53



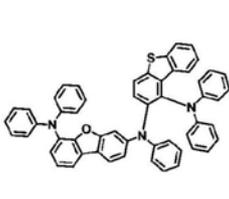
P-54



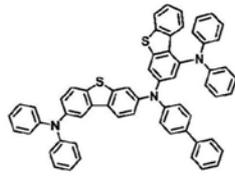
P-55



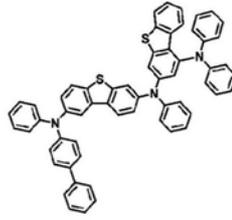
P-56



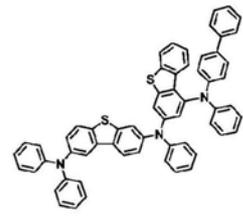
P-57



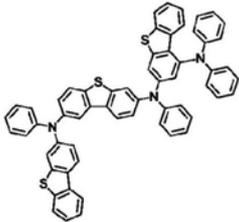
P-58



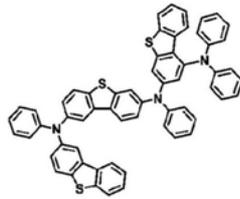
P-59



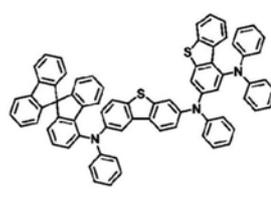
P-60



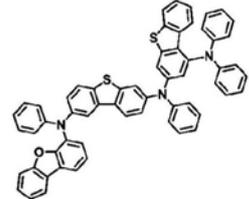
P-61



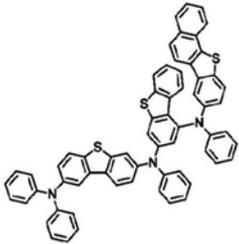
P-62



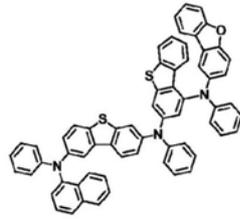
P-63



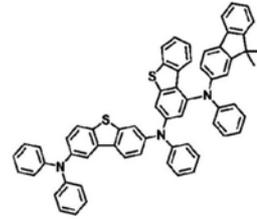
P-64



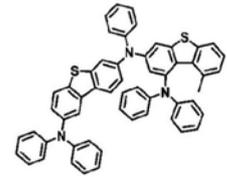
P-65



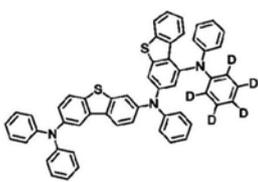
P-66



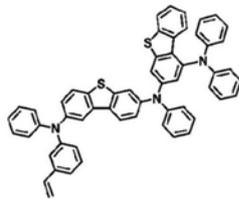
P-67



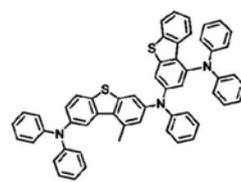
P-68



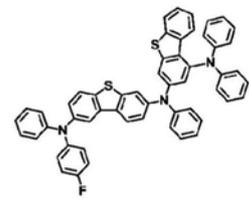
P-69



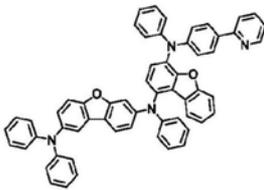
P-70



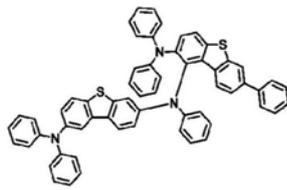
P-71



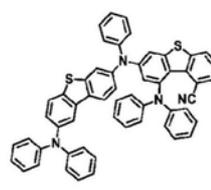
P-72



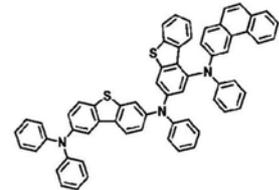
P-73



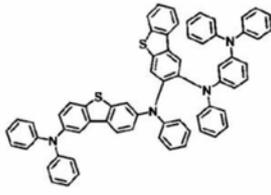
P-74



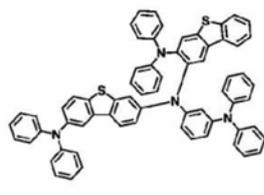
P-75



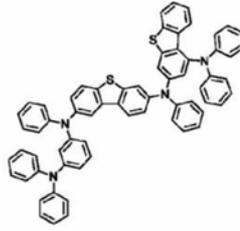
P-76



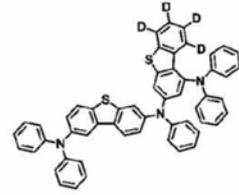
P-77



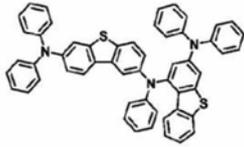
P-78



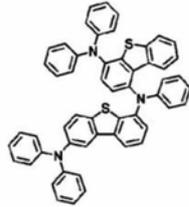
P-79



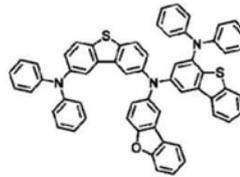
P-80



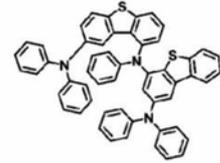
P-81



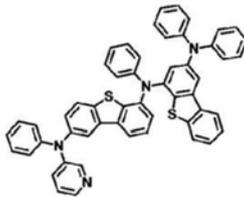
P-82



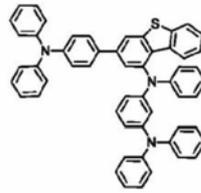
P-83



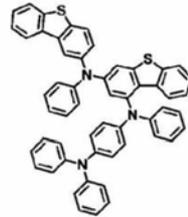
P-84



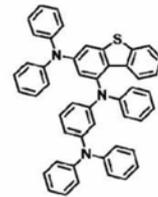
P-85



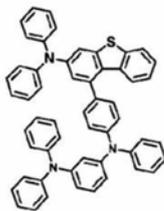
P-86



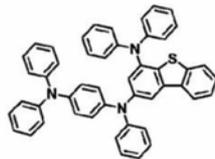
P-87



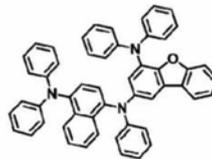
P-88



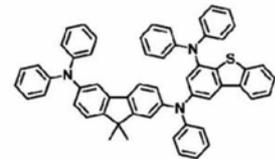
P-89



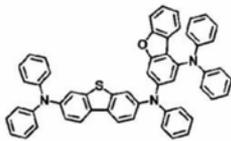
P-90



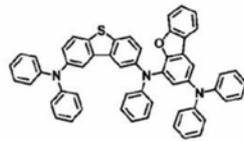
P-91



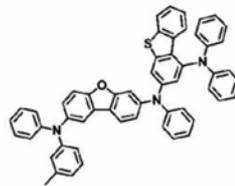
P-92



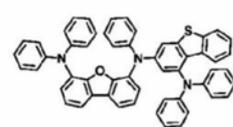
P-93



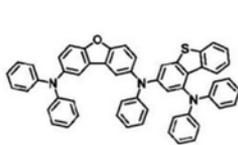
P-94



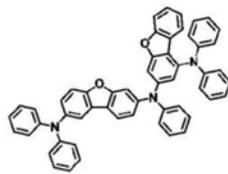
P-95



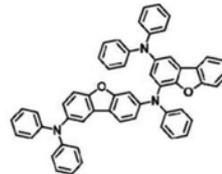
P-96



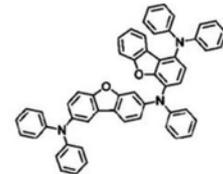
P-97



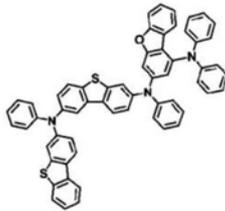
P-98



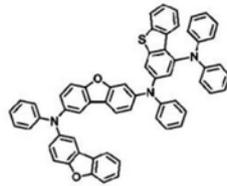
P-99



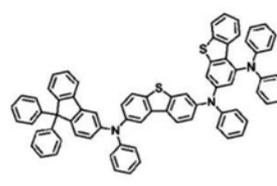
P-100



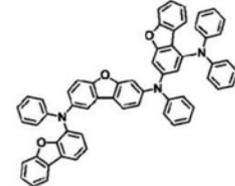
P-101



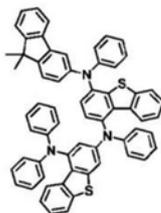
P-102



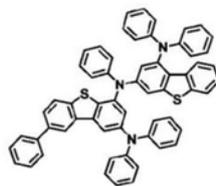
P-103



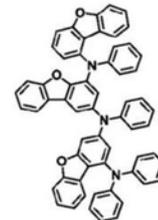
P-104



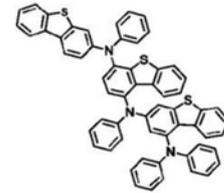
P-105



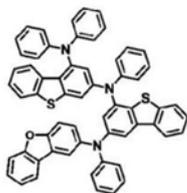
P-106



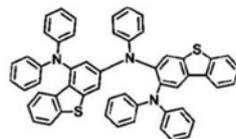
P-107



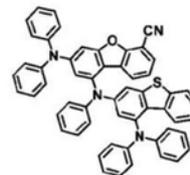
P-108



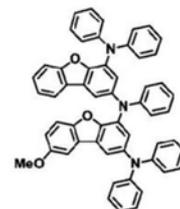
P-109



P-110



P-111



P-112

5. 一种有机电子元件,其特征在于,包括:第一电极;第二电极;以及位于所述第一电极和第二电极之间的有机材料层,所述有机材料层是包含权利要求1至4中任一项所述的化合物的有机电子元件。

6. 根据权利要求5所述的有机电子元件,其特征在于,所述有机材料层包括空穴注入层、空穴传输层、发光辅助层、发光层、电子传输辅助层、电子传输层和电子注入层中的至少一层,

所述化合物以权利要求1至4中任一项所述的化合物的一种单独化合物或两种或更多种化合物的混合物的形式包含在空穴注入层、空穴传输层、发光辅助层、发光层、电子传输辅助层、电子传输层和电子注入层中的至少一层中。

7. 根据权利要求5所述的有机电子元件,其特征在于,

所述有机材料层包括发光辅助层和空穴传输层中的至少一层,

所述化合物以权利要求1至4中任一项所述的化合物的一种单独化合物或两种或更多

种化合物的混合物的形式包含在发光辅助层和空穴传输层中的至少一层中。

8. 根据权利要求5所述的有机电子元件,其特征在于,所述有机材料层通过旋涂工艺、喷嘴印刷工艺、喷墨印刷工艺、狭缝涂布工艺、浸涂工艺或卷对卷工艺中的至少一种形成。

9. 一种电子设备,其特征在于,包括:包含权利要求5所述的有机电子元件的显示设备;和用于驱动所述显示设备的控制单元。

10. 根据权利要求9所述的电子设备,其特征在于,所述有机电子元件是有机电致发光元件、有机太阳能电池、有机感光体、有机晶体管 and 单色或白色照明用元件中的一种。

用于有机电子元件的化合物,使用该化合物的有机电子元件及其电子设备

技术领域

[0001] 本发明涉及一种用于有机电子元件的化合物,使用该化合物的有机电子元件及其电子设备。

背景技术

[0002] 通常,有机发光现象是指通过使用有机材料将电能转换成光能的现象。利用有机发光现象的有机电子元件通常具有包括阳极,阴极和介于其间的有机材料层的结构。在许多情况下,有机材料层可以形成为由不同材料构成的多层结构,以便提高有机电子元件的效率和稳定性,例如,可以由空穴注入层、空穴传输层、发光层、电子传输层及电子注入层等构成。

[0003] 在有机电子元件中,用于有机材料层的材料可以根据其功能分为发光材料和电荷传输材料,例如,空穴注入材料、空穴传输材料、电子传输材料、电子注入材料等。

[0004] 另外,发光材料可以根据其分子量分类为高分子型和低分子型,并且根据发光机制,可以将发光材料分类为源自电子单重态激发态的荧光材料和源自电子三重态激发态的磷光材料。另外,根据发光颜色,可以将发光材料分类为蓝色,绿色和红色发光材料以及实现更好的自然色所必需的黄色和橙色发光材料。

[0005] 另一方面,当仅一种材料用作发光材料时,由于分子间的相互作用,最大发光波长移至长波长,并且由于色纯度降低或发光衰减效应导致元件效率降低,因此可以将主体/掺杂剂用作发光材料,以提高色纯度并通过能量转移来提高发光效率。其原理是,当在发光层中混合能带隙小于形成发光层的主体的能带隙的少量掺杂剂时,在发光层中产生的激子被传输到掺杂剂以高效地发光。此时,由于主体的波长根据掺杂剂的波长移动,所以可以根据所使用的掺杂剂的种类来获得期望波长的光。

[0006] 当前,便携式显示器市场正朝着大面积显示器发展。由于便携式显示器具有电池,该电池是有限的电源,因此需要比现有便携式显示器所需的功率消耗更有效的功率消耗。除了有效的功耗之外,还必须解决发光效率和寿命的问题。

[0007] 效率、寿命、驱动电压等相互关联。当效率提高时,驱动电压相对降低,并且随着驱动电压降低,由于在驱动期间产生的焦耳热(Joule heating)导致的有机材料的结晶减少,结果,寿命趋于增加。然而,简单地改善有机材料层不能最大化效率。这是因为,当实现每个有机材料层之间的能级和T1值,材料的固有特性(迁移率、界面特性等)的最佳组合时,可以同时获得长寿命和高效率。因此,需要开发具有高热稳定性并且可以有效地在发光层中实现电荷平衡(charge balance)的发光材料。

[0008] 也就是说,为了充分发挥有机电子元件的优异特性,元件中构成有机材料层的材料,例如空穴注入材料、空穴传输材料、发光材料、电子传输材料、电子注入材料、发光辅助层材料等,应该先以稳定且有效的材料来支撑,但是还没有充分实现用于有机电子元件的稳定且有效的有机材料层材料的开发。

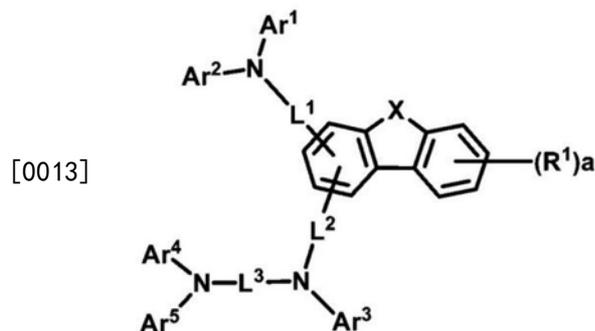
发明内容

[0009] 技术问题

[0010] 本发明的目的是提供能够改善元件的高发光效率、低驱动电压、高耐热性、色纯度和寿命的化合物,以及使用该化合物的有机电子元件及其电子设备。

[0011] 技术方案

[0012] 一方面,本发明提供由以下化学式表示的化合物。



[0014] 另一方面,本发明提供使用由所述化学式表示的化合物的有机电子元件及其电子设备。

[0015] 发明效果

[0016] 通过使用根据本发明的化合物,可以实现元件的高发光效率、低驱动电压和高耐热性,并且可以改善元件的色纯度和寿命。

附图说明

[0017] 图1是根据本发明实施例的有机发光元件的截面图。

[0018] 图2是根据本发明实施例的电子设备的示例图。

具体实施方式

[0019] 在下文中,将参考附图详细描述本发明的实施例。

[0020] 在对各附图的结构要素附加附图标记的过程中,要留意相同的结构要素即使显示于不同的附图上,也尽可能地赋予相同的附图标记。并且,在对本发明进行说明的过程中,在判断相关的公知结构或功能的具体说明会模糊本发明的要旨的情况下,将省略详细说明。

[0021] 当描述本发明的结构要素时,可以在本文中使用第一、第二、A、B、(a)、(b)等术语。这些术语仅用于与其他结构要素相区分,相关结构要素的本质、次序或顺序等不会因这些术语而受到限制。如果在说明书中描述了一个结构要素“连接”、“结合”或“联接”到另一结构要素,则结构要素既可以直接连接或联接到另一结构要素,也可以理解为在各结构要素之“连接”、“结合”或“联接”有其他结构要素。

[0022] 当一个组件(例如层、膜、区域或板)被称为在另一个组件“上”或在另一个组件“之上”时,应当理解,这不仅可以包括在另一组件“直接上方”的情况,而且还可以包括在中间存在另一组件的情况。相反,应该理解,当一个组件在另一部分“直接上方”时,这意味着中间没有其他部分。

[0023] 除非另有说明,否则本说明书和所附权利要求书中使用的术语如下。

[0024] 除非另有说明,否则本说明书所使用的术语“卤代”或“卤素”包括氟(F)、氯(Cl)、溴(Br)和碘(I)。

[0025] 除非另有说明,否则本说明书所使用的术语“烷”或“烷基”具有通过单键连接的1至60个碳原子,并意指饱和脂肪族官能团的自由基,包括直链烷基、支链烷基、环烷基(脂环族)、烷基取代的环烷基、环烷基取代的烷基。

[0026] 除非另有说明,否则本说明书所使用的术语“卤代烷基”或“卤素烷基”是指其中卤素被取代的烷基。

[0027] 除非另有说明,否则本说明书所使用的术语“烯基”或“炔基”各自具有双键或三键,包括直链或支链基团,并且具有2至60个碳原子,但不限于此。

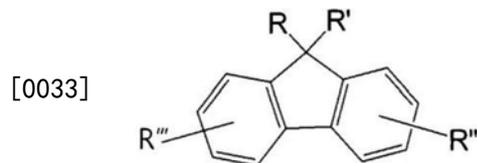
[0028] 除非另有说明,否则本说明书所使用的术语“环烷基”是指形成具有3至60个碳原子的环的烷基,但不限于此。

[0029] 本说明书所使用的术语“烷氧”或“烷氧基”是指与氧自由基键合的烷基,除非另有说明,具有1至60个碳原子,但不限于此。

[0030] 本说明书所使用的术语“链烯氧基(alkenoxy)”、“链烯氧基(alkenoxy)”、“链烯氧基(alkenyloxy)”或“链烯氧基(alkenyloxy)”是指与氧自由基连接的链烯基,除非另有说明,具有2至60个碳原子,但不限于此。

[0031] 除非另有说明,否则本说明书所使用的术语“芳基”和“亚芳基”各自具有6至60个碳原子,但不限于此。在本发明中,芳基或亚芳基包括单环型、集合环、稠合的多环体系化合物等,例如,芳基可指苯基,联苯基的一价官能团,萘基的一价官能团,苄基和取代的苄基。

[0032] 除非另有说明,否则本说明书所使用的术语“苄基”或“亚苄基”分别是指苄基的一价或二价官能团,“取代的苄基”或“取代的亚苄基”是指取代的苄基的一价或二价官能团,“取代的苄基”是指以下取代基R、R'、R''、R'''中的至少一个是除氢以外的官能团,并且包括R和R'彼此键合并与它们所键合的碳形成螺环化合物的情况。



[0034] 另外,R、R'、R''和R'''分别独立地为具有1至20个碳原子的烷基、具有1至20个碳原子的烯基、具有6至30个碳原子的芳基、具有3至30个碳原子的杂环基。例如,芳基可以是苯基、联苯基、萘、蒽或菲,杂环基可以是吡咯、呋喃、噻吩、吡啶、咪唑、三唑、吡啶、嘧啶、哒嗪、吡嗪、三嗪、吡啶、苯并呋喃、喹啉或喹喔啉。例如,取代的苄基或取代的亚苄基可以分别是9,9-二甲基苄基、9,9-二苯基苄基和9,9'-螺双[9H-苄基]的一价或二价官能团。

[0035] 本说明书所用的术语“集合环(ring assemblies)”是指两个或多个环系(单环或共轭环系)通过单键或双键彼此直接键合,并且这种环之间的直接键合数比该化合物中环系的总数少一个。在集合环中,相同或不同的环系可以通过单键或双键彼此直接连接。

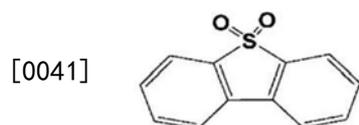
[0036] 由于本说明书中芳基包括集合环,因此芳基包括联苯和三联苯,其中作为单芳环的苯环通过单键连接。另外,由于芳基还包括其中与芳族单环共轭的芳族环系通过单键连接的化合物,例如,与作为芳族单环的苯环共轭的芳族环系苄基还包括通过单键连接以形成共轭 π 电子体系(conjugated pi electron system)的化合物。

[0037] 本说明书所用的术语“稠合的多环体系”是指共享至少两个原子的稠合的(fused)环形式,包括其中两个或更多个烃类的环体系被稠合的形式,以及其中至少一个杂环体系(包括至少一个杂原子)被稠合的形式。这些稠合的多环体系可以是芳族环、杂芳族环、脂族环或这些环的组合。

[0038] 本说明书所用的术语“螺环化合物”具有“螺环接(spiro union)”,并且螺环接是指由仅共享一个原子的两个环形成的连接。此时,两个环共享的原子称为螺原子,根据一个化合物中螺原子的数量,它们分别称为单螺环、双螺环和三螺环化合物。

[0039] 本说明书所用的术语“杂环基”包括例如“杂芳基”或“杂亚芳基”等的芳族环和非芳族环,并且除非另有说明,否则是指包含一个或多个杂原子的具有2至60个碳原子的环,但不限于此。除非另有说明,本说明书所用的术语“杂原子”是指N、O、S、P或Si,杂环基是指含有杂原子的单环、集合环、稠合的多环体系、螺环化合物等。

[0040] 另外,“杂环基”也可以包括含有SO₂的环来代替形成环的碳。例如,“杂环基”包括以下化合物。



[0042] 本说明书所用的术语“环”包括单环和多环,包括烃环以及含有至少一个杂原子的杂环,并且包括芳族和非芳族环。

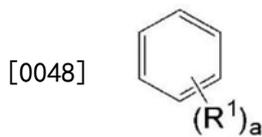
[0043] 本说明书所用的术语“多环”包括例如联苯、三联苯等的集合环(ring assemblies)、稠合(fused)的多环体系和螺环化合物,包括芳族和非芳族,并且包括烃环以及含有至少一个杂原子的杂环。

[0044] 另外,当前缀被连续命名时,这意味着取代基以首先描述的顺序列出。例如,芳基烷氧基是指被芳基取代的烷氧基,烷氧基羰基是指被烷氧基取代的羰基,芳基羰基烯基是指被芳基羰基取代的烯基,其中芳基羰基是被芳基取代的羰基。

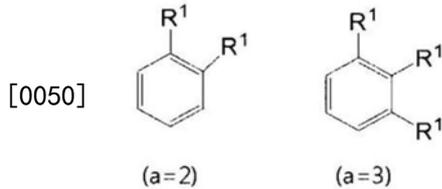
[0045] 除非另有说明,则本说明书所用的术语“取代或未取代的”中的术语“取代”是指被一个或多个选自由氘、卤素、氨基、腈基、硝基,C₁-C₂₀烷基、C₁-C₂₀烷氧基、C₁-C₂₀烷基胺基、C₁-C₂₀烷基噻吩基、C₆-C₂₀芳基噻吩基、C₂-C₂₀烯基、C₂-C₂₀炔基、C₃-C₂₀环烷基、C₆-C₂₀芳基、被氘取代的C₆-C₂₀芳基、C₈-C₂₀的芳基烯基、硅烷基、硼基、锆基和C₂-C₂₀杂环基(包含至少一个选自O、N、S、Si和P的杂原子)组成的组中的取代基取代,但不限于这些取代基

[0046] 在本说明书中,对应于作为每个符号及其取代基的实例的芳基、亚芳基、杂环基等的“官能团名称”可以描述为“反映价数的官能团的名称”,但是也可以描述为“母体化合物名称”。例如,在作为芳基类型的“菲”的情况下,一价基团为“菲(基)”,二价基团为“亚菲(基)”,以区分价数来描述基团的名称,但是无论价数如何,都可以将其描述为母体化合物名称“菲”。类似地,在嘧啶的情况下,无论价数如何,均被描述为“嘧啶”,或在一价情况下被描述为嘧啶(基),在二价情况下被描述为亚嘧啶(基),由此可以被描述为相应价数的“名称”。因此,在本说明书中,当将取代基的类型描述为母体化合物的名称时,其可以表示通过解键与母体化合物的碳原子和/或杂原子键合的氢原子而形成的n价的“基团”。

[0047] 此外,除非明确说明,本说明书中使用的化学式与以下化学式的指数定义所用的取代基定义相同。



[0049] 其中,当a为0时,不存在取代基 R^1 ;当a为1时,一个取代基 R^1 与形成苯环的任何一个碳键合;当a为2或3时,各自如下键合,此时 R^1 可以相同或不同;当a为4至6的整数时,其以类似方式键合至苯环的碳,而键合至形成苯环的碳的氢的标记被省略。



[0051] 在本说明书中,取代基彼此键合以形成环是指:彼此键合的多个取代基通过共享碳原子,作为杂原子的O、N、S、Si和P中的至少一个原子来形成饱和或不饱和环。例如,在萘的情况下,可以被认为是在任一苯环上取代的相邻的甲基和丁二烯基共享一个碳原子来形成不饱和环,或乙烯基和亚丙烯基共享一个碳原子来形成不饱和环。另外,在芴的情况下,其本身可以被认为是具有13个碳原子的芳基,但是也可以被认为是在联苯基上取代的两个甲基彼此键合以共享一个碳以形成环。

[0052] 图1是根据本发明一实施例的有机电子元件的示例性视图。

[0053] 参考图1,根据本发明的有机电子元件100包括基板110上形成的第一电极120、第二电极180,以及第一电极120和第二电极180之间的有机材料层,所述有机材料层包含根据本发明的化合物。此时,第一电极120可以是阳极(正电极),第二电极180可以是阴极(负电极),在倒置型的有机电子元件的情况下,第一电极可以是阴极,第二电极可以是阳极。

[0054] 有机材料层可以在第一电极120上依次包括空穴注入层130、空穴传输层140、发光层150、电子传输层160和电子注入层170。在这种情况下,可以省略这些层中的至少一层,或者可以进一步包括空穴阻挡层、电子阻挡层、发光辅助层151、缓冲层141等,并且电子传输层160等可以用作空穴阻挡层。

[0055] 虽然未示出,但是根据本发明的有机电子元件还可以包括保护层或光效率改善层(Capping layer),该保护层或光效率改善层形成在第一电极和第二电极中的至少一面中与所述有机材料层相对的一面上。

[0056] 应用于所述有机材料层的根据本发明的化合物可用作诸如空穴注入层130、空穴传输层140、电子传输层160、电子注入层170、发光层150、光效率改善层、发光辅助层等的材料。

[0057] 另一方面,即便是相同的核,根据在哪个位置使哪个取代基结合而导致带隙(band gap)、电气特性、界面特性等不同。因此,核的选择和与其相结合的子(sub)取代体的组合也非常重要。尤其,当各有机材料层之间的能级及T1值、材料的固有特性(迁移率、界面特性等)等形成最优化组合时,才能同时实现长寿命和高效率。

[0058] 如上所述,为了解决近来的有机电致发光元件中的空穴输送层中的发光问题,优选在空穴输送层与发光层之间形成发光辅助层,并且需要形成与每个发光层(R、G、B)相对应的不同的发光辅助层。换句话说,发光辅助层包括红色发光层、绿色发光层,与蓝色发光

层对应的红色发光辅助层,绿色发光辅助层和在蓝色发光辅助层中的红色发光辅助层。另一方面,在发光辅助层的情况下,必须掌握空穴传输层与发光层(主体)之间的相关性,因此即使使用类似的芯,如果所使用的有机材料层不同,也将很难推断其特性。

[0059] 因此,通过使用根据本发明的化学式1的化合物来形成发光层,空穴传输层和/或发光辅助层,使每个有机材料层之间的能级和T1值以及该材料的固有性质(迁移率,界面特性等)最优化,从而可以同时提高有机电子元件的寿命和效率。

[0060] 根据本发明一实施例的有机电致发光元件可以使用各种沉积方法(deposition)来制造。可以使用诸如物理气相沉积(PVD,physical vapor deposition)或化学气相沉积(CVD,Chemical Vapor Deposition)之类的沉积方法来制造。例如,通过在基板上沉积金属或具有导电性的金属氧化物或它们的合金来形成阳极120,并在其上形成包括空穴注入层130、空穴传输层140、发光层150、电子传输层160及电子注入层170的有机材料层之后,可以通过在其上沉积可用作阴极180的材料来完成制备。另外,可以在空穴传输层140和发光层150之间另外形成发光辅助层151。

[0061] 此外,有机材料层可以通过使用各种高分子材料,经溶液工艺或溶剂法(solvent process),例如旋涂工艺、喷嘴印刷工艺、喷墨印刷工艺、狭缝涂布工艺、浸涂工艺、卷对卷工艺、刮涂工艺、丝网印刷工艺,或热转印方法等的方法以较少的层数来制备。由于可以通过各种方法形成根据本发明的有机材料层,因此本发明的范围不受形成有机材料层的方法的限制。

[0062] 根据所使用的材料,根据本发明的有机电子元件可以是顶部发射型,底部发射型或双面发射型。

[0063] 白色有机电致发光器件(WOLED,White Organic Light Emitting Device)易于实现高分辨率,并具有优异的可加工性,同时具有能够使用现有的LCD彩色滤色器技术进行制造的优势。在这方面,已经提出了主要用作背光装置白色有机发光器件的各种结构,并实现专利化。代表性地,可以具有以下方式:将R(红色)、G(绿色)和B(蓝色)发光单元彼此平行(并排)排列的方式;R、G、B发光层上下堆叠的堆叠(stacking)方式;一种颜色转换材料(CCM,color conversion material)方式,该方式使用蓝色有机发光层进行电致发光,并使用其发出的光对无机荧光体进行光致发光(photo-luminescence)。本发明可适用于这种白色有机电致发光器件(WOLED)。

[0064] 另外,根据本发明的有机电子元件可以是有机电致发光器件(OLED)、有机太阳能电池、有机光导体(OPC)、有机晶体管(有机TFT)以及单色或白色照明用元件中的一种。

[0065] 图2是根据本发明另一实施例的电子设备的示例图。

[0066] 电子设备200可以包括:显示设备210,其包括上述本发明的有机电子元件230;以及控制单元220,用于控制该显示设备。在这种情况下,电子设备可以是当前或将来的有线或无线通信终端,并且包括所有电子设备,例如移动电话等的移动通信终端、PDA、电子词典、PMP、遥控器、导航、游戏机、各种电视和各种计算机。

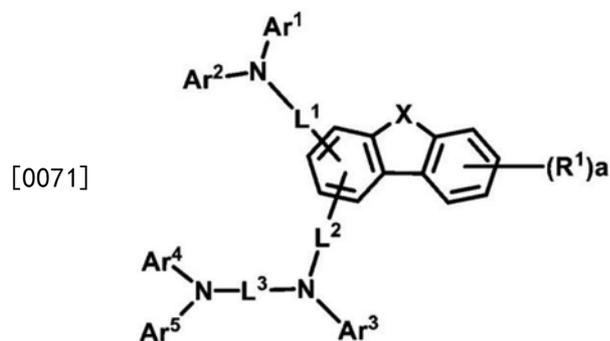
[0067] 控制单元220将驱动电压和/或信号施加到有机电子元件,例如,控制单元220可以包括多个栅极线、驱动栅极线的栅极驱动电路、多个数据线、驱动数据线的栅极驱动电路、以及控制栅极驱动电路和数据驱动电路的控制器。

[0068] 控制器将各种控制信号提供给数据驱动电路和栅极驱动电路,以控制数据驱动电

路和栅极驱动电路。

[0069] 在下文中,将描述根据本发明一方面的化合物。根据本发明的一方面的化合物由下化学式1表示。

[0070] <化学式1>



[0072] 在下文中,将描述化学式1中描述的X、Ar¹至Ar⁵、R¹、a和L¹至L³。

[0073] X是O或S。

[0074] 通过将上述元素用作化学式1中的X,化学式1的化合物可以提供具有高发光效率、低驱动电压、高耐热性、优异的色纯度和长寿命的元件。

[0075] Ar¹至Ar⁵彼此相同或不同,各自独立地选自由C₆-C₆₀芳基;含有至少一个O、N、S、Si和P的杂原子的C₂-C₂₀杂环基;C₃-C₆₀脂肪族环和C₆-C₆₀芳族环的稠合环基;C₁-C₆₀烷基;C₂-C₂₀烯基;C₂-C₂₀炔基;C₁-C₃₀烷氧基;C₆-C₃₀芳氧基和-L'-N(R_a)(R_b)所组成的组中。

[0076] 当Ar¹至Ar⁵为芳基时,Ar¹至Ar⁵可以分别独立地为C₆-C₄₀芳基、C₆-C₃₀芳基、C₆-C₂₅芳基或C₆-C₂₀芳基,例如,Ar¹至Ar⁵各自独立地选自由苯、萘、蒽、菲、并四苯、苯并蒽、三亚苯基、联苯、三联苯和取代或未取代的苄所组成的组中。当Ar¹至Ar⁵如上所述时,化学式1的化合物可以提供具有高发光效率、低驱动电压、高耐热性、优异的色纯度和长寿命的元件。

[0077] 当Ar¹至Ar⁵为杂环基时,Ar¹至Ar⁵可以为C₂-C₃₀杂环基或C₂-C₁₅杂环基,例如,Ar¹至Ar⁵各自独立地选自由吡咯、吡唑、咪唑、三唑、呋喃、噻吩、吡啶、哒嗪、嘧啶、吡嗪、三嗪、吡啶、喹啉、喹啶、二苯并噻吩和二苯并呋喃所组成的组中。当Ar¹至Ar⁵为如上所述时,化学式1的化合物可以提供具有高发光效率、低驱动电压、高耐热性、优异的色纯度和长寿命的元件。

[0078] R¹选自由氘;三重氢;卤素;氰基;硝基;C₆-C₆₀芳基;含有至少一个O、N、S、Si和P的杂原子的C₂-C₂₀杂环基;C₃-C₆₀脂肪族环和C₆-C₆₀芳族环的稠合环基;C₁-C₅₀烷基;C₂-C₂₀烯基;C₂-C₂₀炔基;C₁-C₃₀烷氧基;C₆-C₃₀芳氧基和-L'-N(R_a)(R_b)所组成的组中,或当a为2或更大时,R¹可以彼此相同或不同,并且多个R¹可以彼此键合以形成环。

[0079] 当R¹为烷基时,R¹可以为C₁-C₃₀烷基、C₁-C₂₀烷基或C₁-C₁₀烷基,例如,烷基可以是C₁-C₁₀直链烷基、支链烷基、环烷基、烷基取代的环烷基或环烷基取代的烷基。当R¹为如上所述时,化学式1的化合物可以提供具有高发光效率、低驱动电压、高耐热性、优异的色纯度和长寿命的元件。

[0080] 当R¹为芳基时,R¹可以为C₆-C₄₀芳基、C₆-C₃₀芳基、C₆-C₂₅芳基或C₆-C₂₀芳基,例如,R¹可以选自由苯、萘、蒽、菲、并四苯、苯并蒽、三亚苯基、联苯、三联苯和取代或未取代的苄所组成的组中。当R¹为如上所述时,化学式1的化合物可以提供具有高发光效率、低驱动电压、

高耐热性、优异的色纯度和长寿命的元件。

[0081] 当 R^1 为烷氧基时, R^1 可以为 C_1-C_{30} 烷氧基、 C_1-C_{20} 烷氧基或 C_1-C_{10} 烷氧基,例如,烷基可以是 C_1-C_9 直链烷基、支链烷基、环烷基、烷基取代的环烷基或带有氧自由基的环烷基取代的烷基。当 R^1 为如上所述时,化学式1的化合物可以提供具有高发光效率、低驱动电压、高耐热性、优异的色纯度和长寿命的元件。

[0082] a 是0到4的整数。 a 是在化学式1的稠合苯环中被取代的 R^1 的系数,当 a 为0时,则表示稠合苯环的氢未被取代为 R^1 。当 a 为1至4的整数时,则表示稠合苯环中取代的 R^1 的数目为 a ,并且当 R^1 为两个以上时,多个 R^1 可以彼此相同或不同。

[0083] L^1 至 L^3 彼此相同或不同,并且可各自独立地选自由单键; C_6-C_{60} 芳基; C_3-C_{60} 脂族环基;含有至少一个O、N、S、Si和P的杂原子的 C_2-C_{60} 杂环基;以及由其组合所组成的组中。

[0084] 当 L^1 至 L^3 为芳基时, L^1 至 L^3 各自独立地为 C_6-C_{40} 芳基、 C_6-C_{30} 芳基、 C_6-C_{25} 芳基或 C_6-C_{20} 芳基,例如, L^1 至 L^3 各自独立地选自由苯、萘、蒽、菲、并四苯、苯并蒽、三亚苯基、联苯、三联苯和取代或未取代的芴所组成的组中。当 L^1 至 L^3 为如上所述时,化学式1的化合物可以提供具有高发光效率、低驱动电压、高耐热性、优异的色纯度和长寿命的元件。

[0085] 当 L^1 至 L^3 为杂环基时, L^1 至 L^3 可以为 C_2-C_{30} 杂环基或 C_2-C_{15} 杂环基,例如, L^1 至 L^3 可以各自独立地选自由吡咯、吡唑、咪唑、三唑、呋喃、噻吩、吡啶、哒嗪、嘧啶、吡嗪、三嗪、吡啶、喹啉、喹啉、二苯并噻吩和二苯并呋喃所组成的组。当 L^1 至 L^3 为如上所述时,化学式1的化合物可以提供具有高发光效率、低驱动电压、高耐热性、优异的色纯度和长寿命的元件。

[0086] L^1 可以选自由单键; C_6-C_{60} 芳基; C_3-C_{60} 脂族环基;含有至少一个O、N、S、Si和P的杂原子的 C_2-C_{60} 杂环基;以及由其组合所组成的组中。

[0087] 当 L^1 为芳基时, L^1 可以为 C_6-C_{40} 芳基、 C_6-C_{30} 芳基、 C_6-C_{25} 芳基或 C_6-C_{20} 芳基,例如, L^1 可以选自由苯、萘、蒽、菲、并四苯、苯并蒽、三亚苯基、联苯、三联苯和取代或未取代的芴所组成的组中。当 L^1 为如上所述时,化学式1的化合物可以提供具有高发光效率、低驱动电压、高耐热性、优异的色纯度和长寿命的元件。

[0088] R_a 和 R_b 可以各自独立地选自由 C_6-C_{60} 芳基;芴基; C_3-C_{60} 脂族环基;含有至少一个O、N、S、Si和P的杂原子的 C_2-C_{60} 杂环基;以及由其组合所组成的组中。

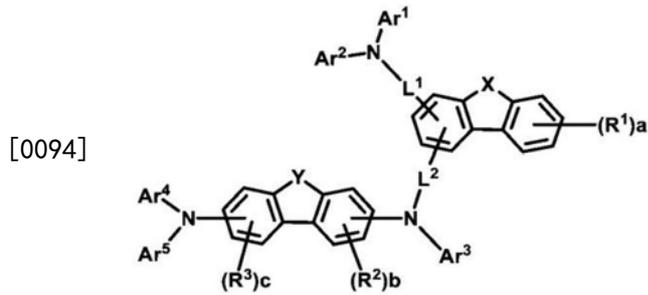
[0089] R_a 和 R_b 为芳基时, R_a 和 R_b 各自独立地为 C_6-C_{40} 芳基、 C_6-C_{30} 芳基、 C_6-C_{25} 芳基或 C_6-C_{20} 芳基,例如, R_a 和 R_b 选自由苯、萘、蒽、菲、并四苯、苯并蒽、三亚苯基、联苯、三联苯和取代或未取代的芴所组成的组。当 R_a 和 R_b 为如上所述时,化学式1的化合物可以提供具有高发光效率、低驱动电压、高耐热性、优异的色纯度和长寿命的元件。

[0090] 在 Ar^1 至 Ar^5 和 R^1 中,脂族烷基、芳基、杂环基、稠环基、烷基、烯基、炔基、烷氧基、芳氧基和硅烷基各自可以进一步被一个或多个选自由重氢;硝基;腈基;卤素;氨基;未取代或被 C_1-C_{20} 烷基或 C_6-C_{20} 芳基取代的硅烷基;硅氧烷基; C_1-C_{20} 烷硫基; C_1-C_{20} 烷氧基; C_1-C_{20} 烷基; C_2-C_{20} 烯基; C_2-C_{20} 炔基; C_6-C_{20} 芳基;被重氢取代的 C_6-C_{20} 芳基; C_2-C_{20} 杂环基; C_3-C_{20} 环烷基; C_7-C_{20} 芳基烷基和 C_8-C_{20} 芳基烯基所组成的组中的取代基取代,并且这些取代基可以彼此键合形成环。在此,术语“环”包括饱和或不饱和环,并且是由 C_3-C_{60} 脂族环或 C_6-C_{60} 芳族环或 C_2-C_{60} 杂环或其组合组成的稠合环。

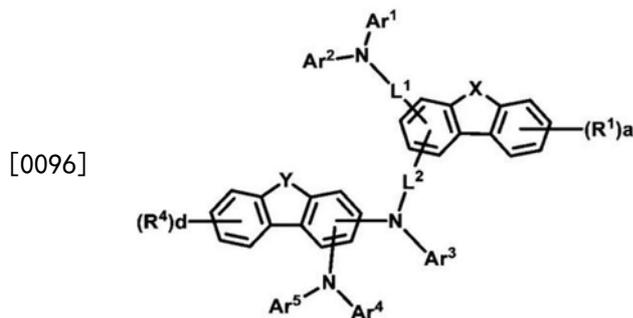
[0091] 当化学式1的化合物用于有机电子元件的有机材料层中时,可以制造具有优异的发光效率和寿命的有机电子元件。

[0092] 由化学式1表示的化合物可以由以下化学式2或化学式3中的任何一个表示。

[0093] <化学式2>



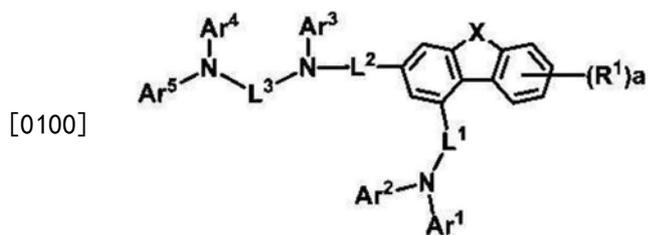
[0095] <化学式3>



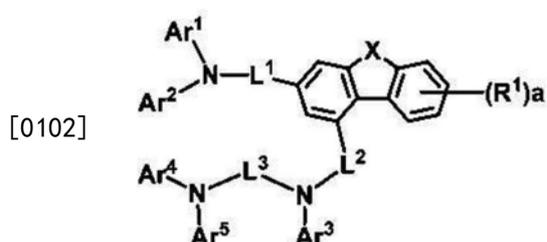
[0097] 在化学式2和化学式3中, Y为O或S, 并且 R^2 至 R^4 彼此相同或不同, R^2 至 R^4 分别与在以上化学式1相关的部分中定义的 R^1 相同, b和c分别独立地为0到3的整数, d为0到4的整数, Ar^1 至 Ar^5 、 R^1 、 L^1 至 L^2 、X和a与在以上化学式1相关的部分中定义的那些相同。如同化学式2和化学式3, 当化学式1的化合物具有包含至少两个二苯并噻吩和/或二苯并呋喃的结构时, 可以提供实现高发光效率、低驱动电压、高耐热性、优异的色纯度和长寿命的元件。

[0098] 由化学式1表示的化合物可以由以下化学式4至化学式15中的任一个表示。

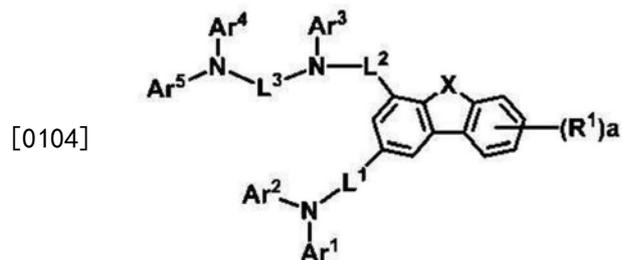
[0099] <化学式4>



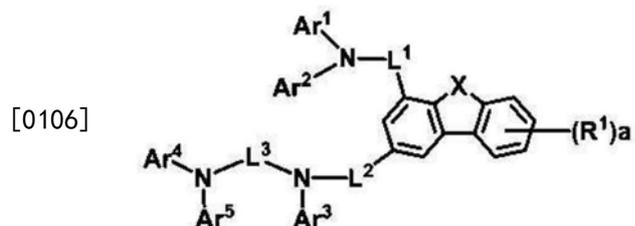
[0101] <化学式5>



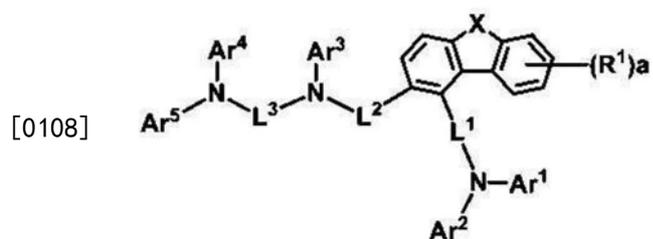
[0103] <化学式6>



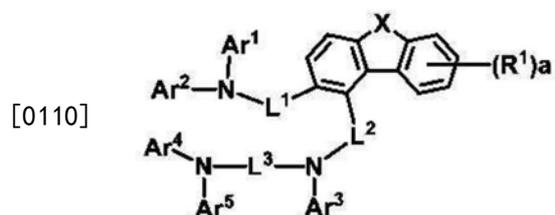
[0105] <化学式7>



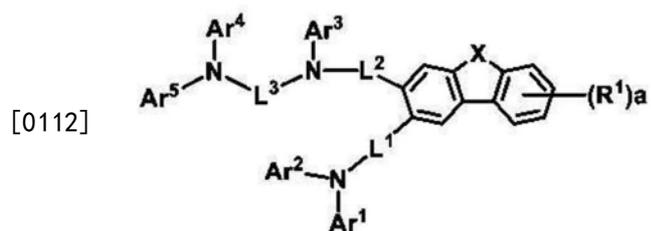
[0107] <化学式8>



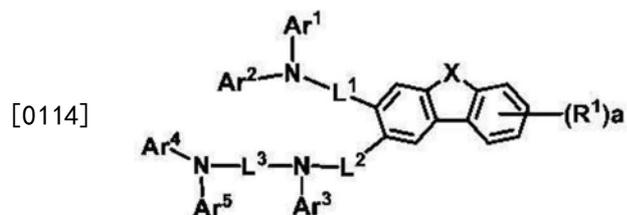
[0109] <化学式9>



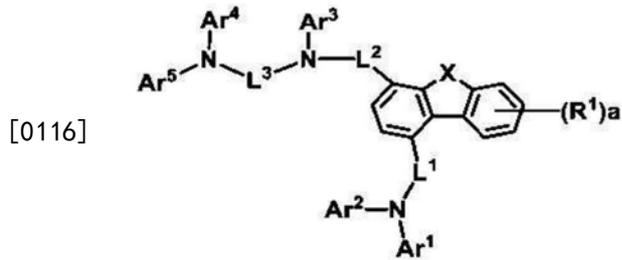
[0111] <化学式10>



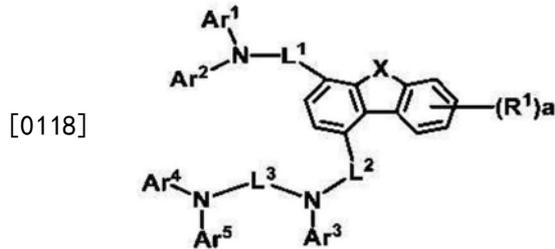
[0113] <化学式11>



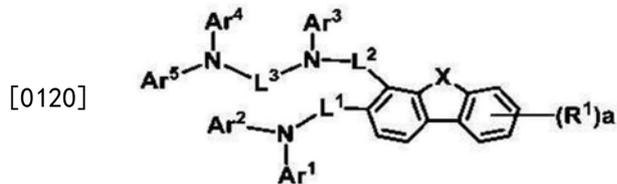
[0115] <化学式12>



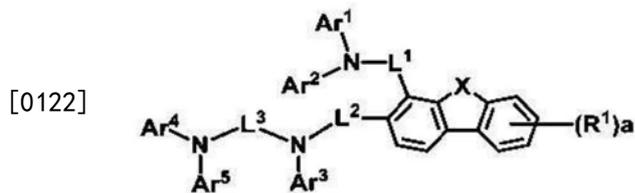
[0117] <化学式13>



[0119] <化学式14>



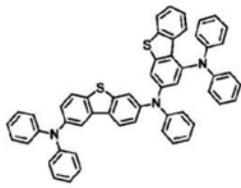
[0121] <化学式15>



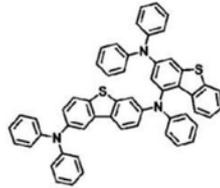
[0123] 在化学式4至化学式15中, Ar¹至Ar⁵、R¹、L¹至L³、X和a与在以上化学式1相关的部分中定义的那些相同。

[0124] 由化学式1表示的化合物可以是例如由化学式4至化学式7中的任何一个表示的化合物。当使用由化学式4至7中的任何一个表示的化合物时,可以提供具有更优异的发光效率和长寿命的元件。

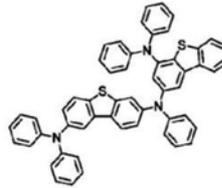
[0125] 具体地,由化学式1表示的化合物可以是以下化合物中的任何一种,但不限于此。



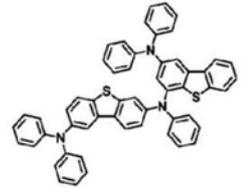
P-1



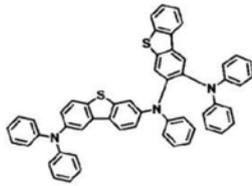
P-2



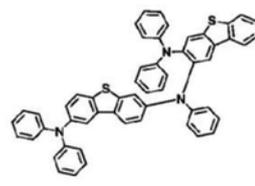
P-3



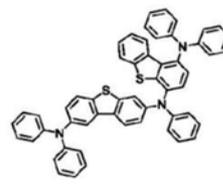
P-4



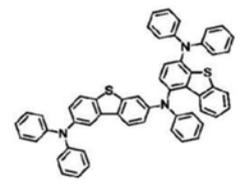
P-5



P-6

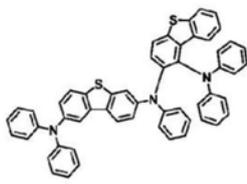


P-7

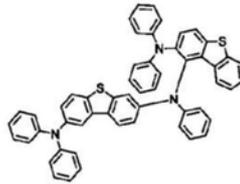


P-8

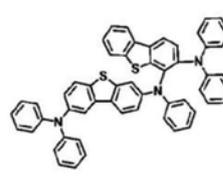
[0126]



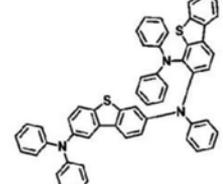
P-9



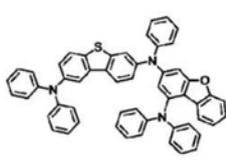
P-10



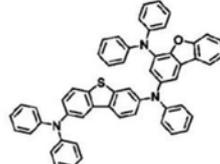
P-11



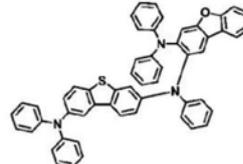
P-12



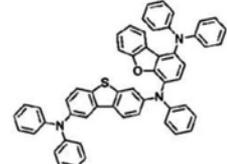
P-13



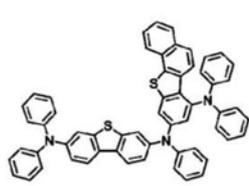
P-14



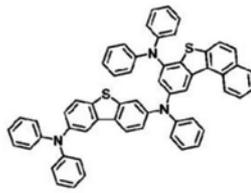
P-15



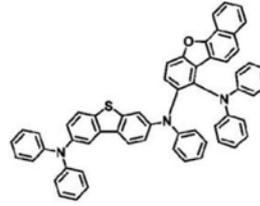
P-16



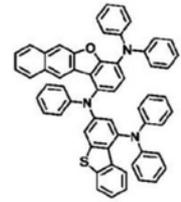
P-17



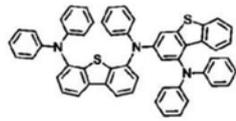
P-18



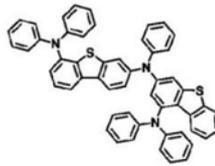
P-19



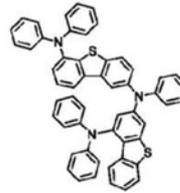
P-20



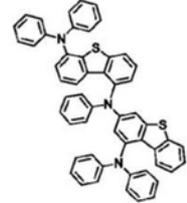
P-21



P-22

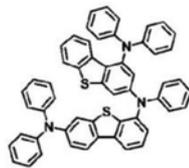


P-23

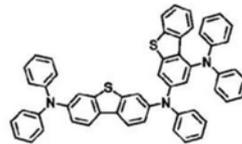


P-24

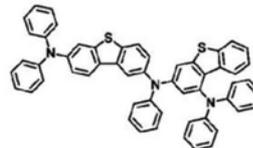
[0127]



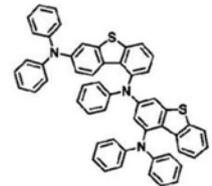
P-25



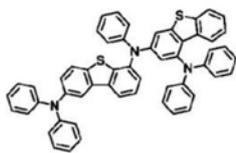
P-26



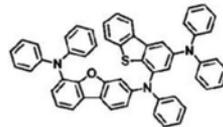
P-27



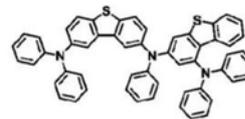
P-28



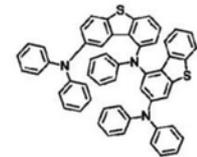
P-29



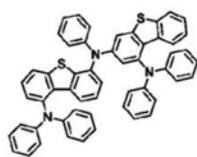
P-30



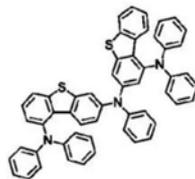
P-31



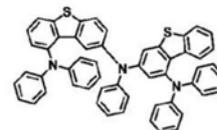
P-32



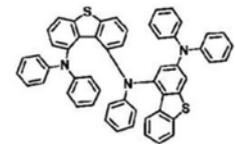
P-33



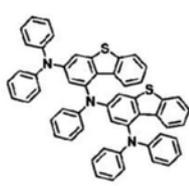
P-34



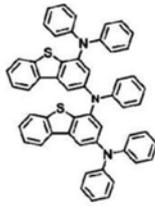
P-35



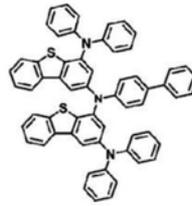
P-36



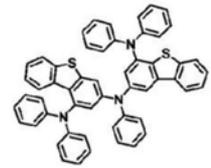
P-37



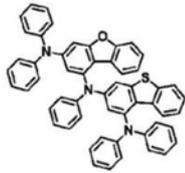
P-38



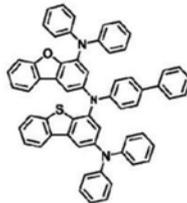
P-39



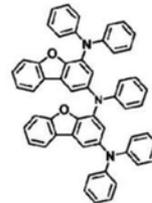
P-40



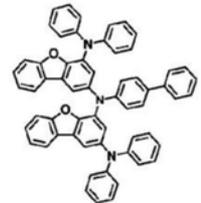
P-41



P-42

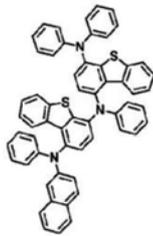


P-43

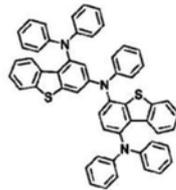


P-44

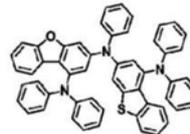
[0128]



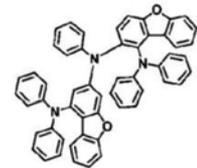
P-45



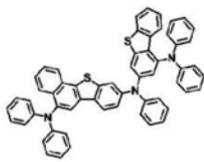
P-46



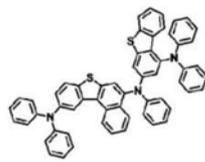
P-47



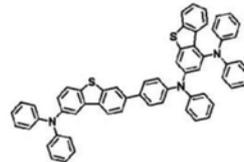
P-48



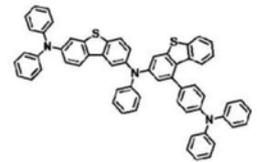
P-49



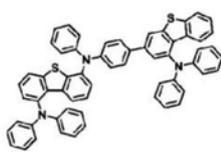
P-50



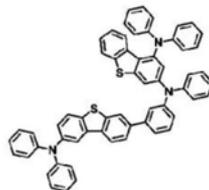
P-51



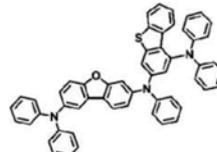
P-52



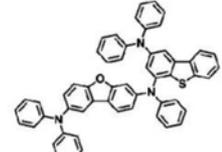
P-53



P-54

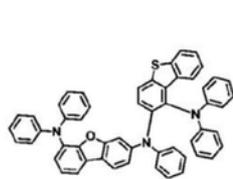


P-55

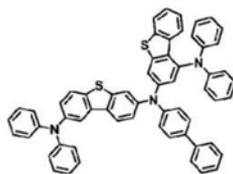


P-56

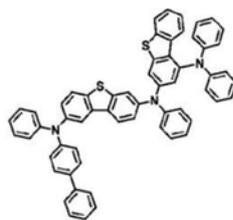
[0129]



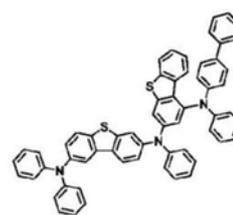
P-57



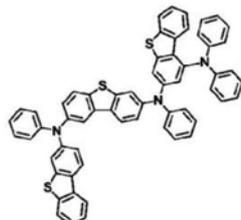
P-58



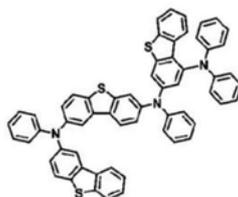
P-59



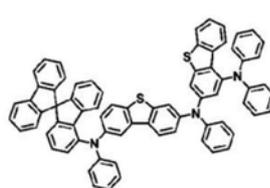
P-60



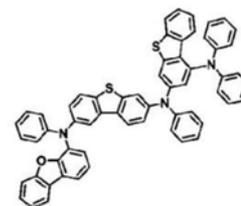
P-61



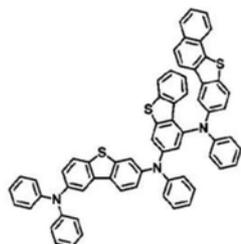
P-62



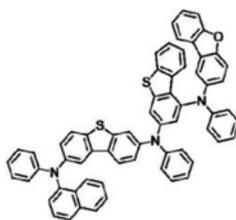
P-63



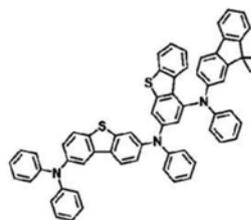
P-64



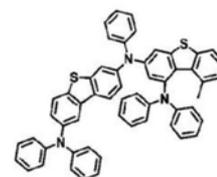
P-65



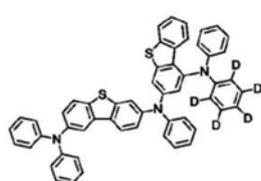
P-66



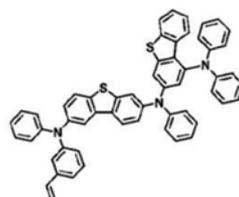
P-67



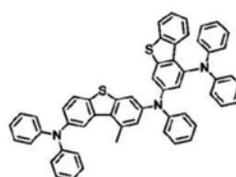
P-68



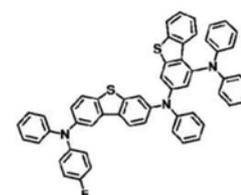
P-69



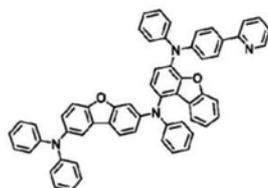
P-70



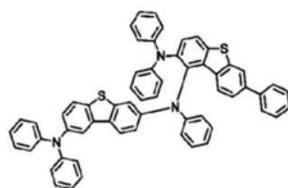
P-71



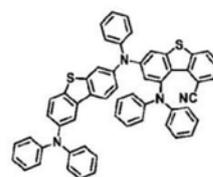
P-72



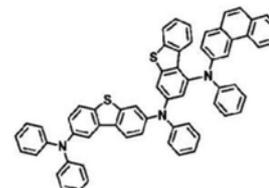
P-73



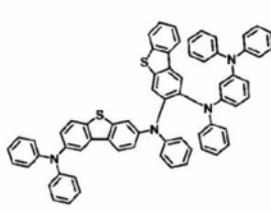
P-74



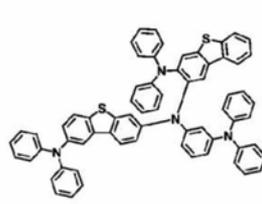
P-75



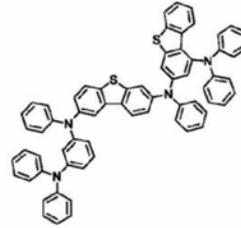
P-76



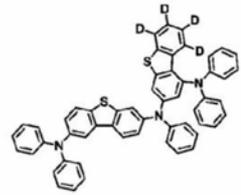
P-77



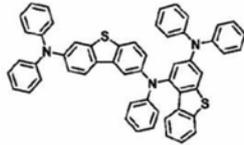
P-78



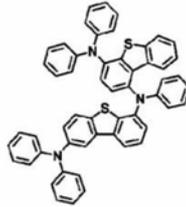
P-79



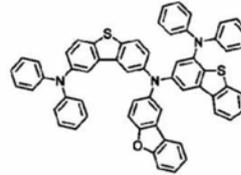
P-80



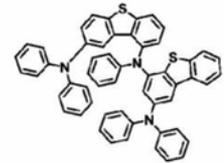
P-81



P-82

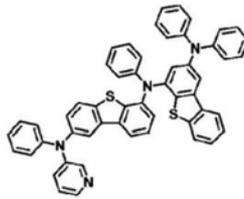


P-83

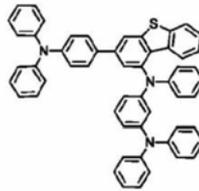


P-84

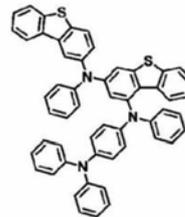
[0130]



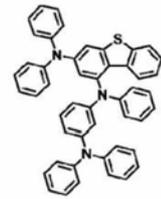
P-85



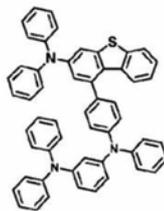
P-86



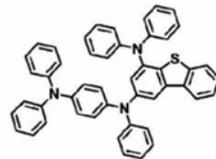
P-87



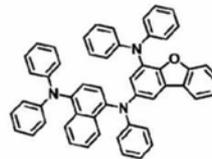
P-88



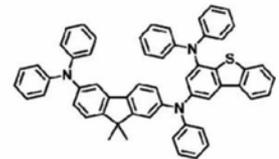
P-89



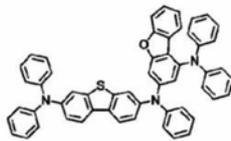
P-90



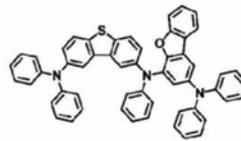
P-91



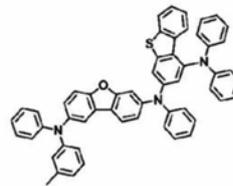
P-92



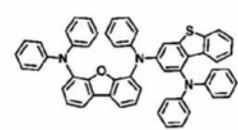
P-93



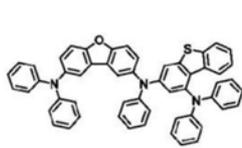
P-94



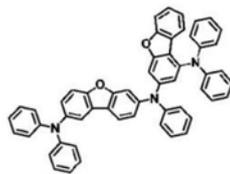
P-95



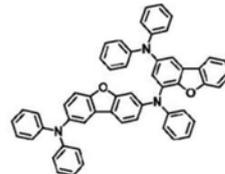
P-96



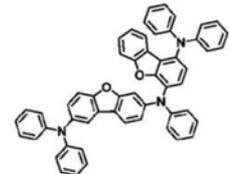
P-97



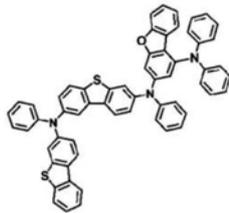
P-98



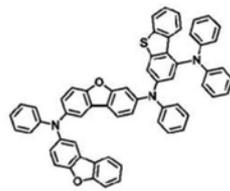
P-99



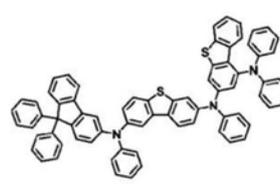
P-100



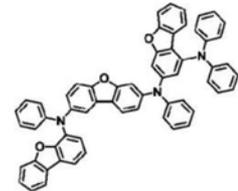
P-101



P-102

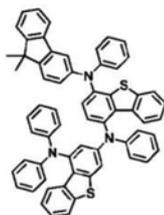


P-103

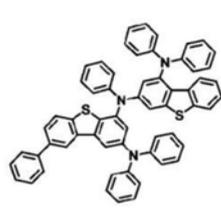


P-104

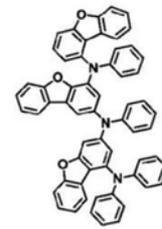
[0131]



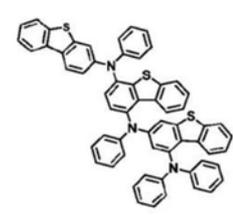
P-105



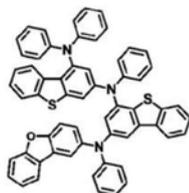
P-106



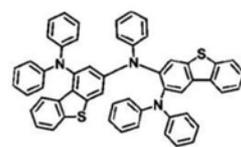
P-107



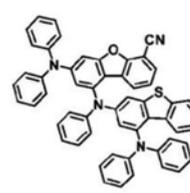
P-108



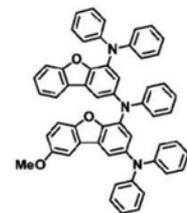
P-109



P-110



P-111



P-112

[0132] 作为另一实施例,本发明提供一种有机电子元件,其包含由化学式1表示的化合物。

[0133] 有机电子元件可以包括第一电极;第二电极;以及位于第一电极和第二电极之间的有机材料层。有机材料层可以包括由化学式1表示的化合物。由化学式1表示的化合物可以包含在有机材料层的空穴注入层、空穴传输层、发光辅助层、发光层、电子传输层和电子注入层中的至少之一中。特别地,由化学式1表示的化合物可以包含在发光辅助层或空穴传输层中。

[0134] 即,由化学式1表示的化合物可以用作用于空穴注入层、空穴传输层、发光辅助层、发光层、电子传输层或电子注入层的材料。特别地,由化学式1表示的化合物可以用作发光辅助层或空穴传输层的材料。具体地,提供一种有机电子元件,其在有机材料层中包含由化学式1表示的化合物之一,更具体地,提供一种有机电子元件,其在有机材料层中包含由各个化学式(1-1至1-112)表示的化合物。

[0135] 在另一实施例中,提供了一种有机电子元件,其特征在于,在有机材料层的空穴注

入层、空穴传输层、发光辅助层、发光层、电子传输层和电子注入层中的至少一层中,该化合物单独包含,或该化合物以彼此不同的两种或更多种的组合包含,或者该化合物与另一种化合物以两种或更多种组合包含。

[0136] 在另一实施例中,该化合物单独包含的层、或该化合物以彼此不同的两种或更多种的组合包含的层、或该化合物与另一种化合物以两种或更多种组合包含的层、可以是发光辅助层和空穴传输层中的至少一个或多个层。

[0137] 换句话说,每一层可以单独包含对应于化学式1的化合物,或包含两种或更多种化学式1的化合物的混合物,或包含化学式1的化合物和不对应于本发明的化合物的混合物。在此,不对应于本发明的化合物可以为单一化合物,也可以为两种以上的化合物。在这种情况下,当该化合物与另一种化合物以两种或更多种组合包含时,该另一种化合物可以是每个有机材料层的已知化合物,或者可以是将来要开发的化合物。此时,有机材料层中包含的化合物可以仅由相同类型的化合物组成,但是可以是两种或更多种由化学式1表示的不同类型的化合物的混合物。

[0138] 例如,在有机材料层中,可以以99:1至1:99的摩尔比混合化合物中具有不同结构的两种化合物。

[0139] 在本发明的另一实施例中,本发明提供一种有机电子元件,其还包括光效率改善层,该光效率改善层形成在第一电极的与有机材料层相对的一侧或在第二电极的与有机材料层相对的一侧的至少一侧上。

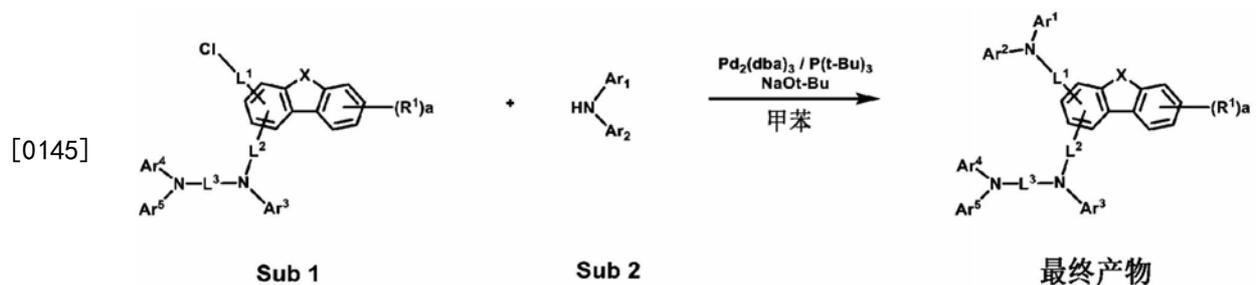
[0140] 在下文中,将详细描述根据本发明的由化学式1表示的化合物的合成例和有机电子元件的制备例,但是本发明不限于以下实施例。

[0141] [合成例]

[0142] 如以下反应式1所示,通过使Sub 1和Sub 2反应来合成根据本发明的由化学式1表示的化合物(最终产物,final products),但不限于此。

[0143] 在以下反应式1所示,X、R¹、Ar¹至r⁵、L¹至L³和a与上述与化学式1有关的部分中所述的那些相同。在本说明书的合成例中描述的Pd₂(dba)₃为三(二亚苄基丙酮)二钯(0)。

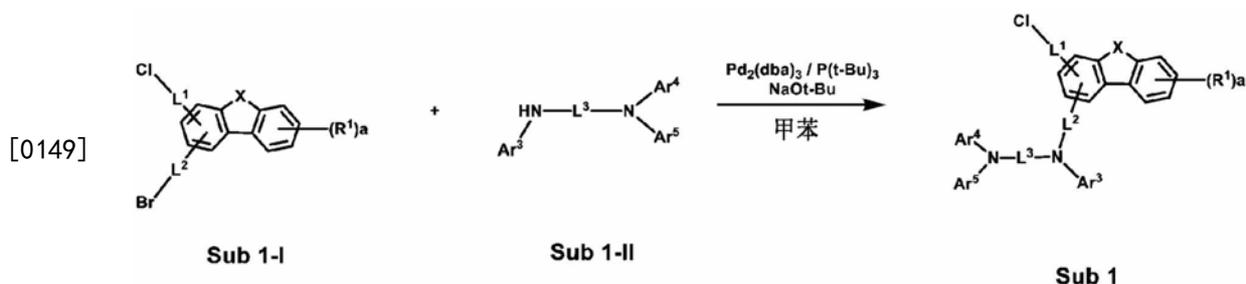
[0144] <反应式1>



[0146] I. Sub 1的合成示例

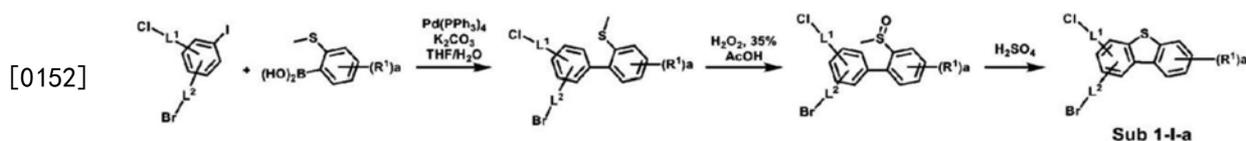
[0147] 反应式1的Sub 1可以通过以下反应式2的反应路线来合成,但不限于此。

[0148] <反应式2>

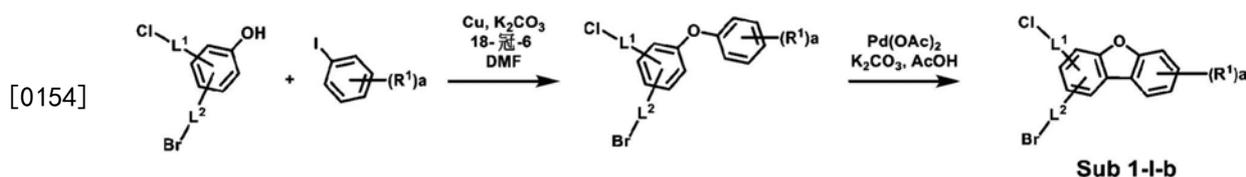


[0150] 反应式2的Sub 1-I可以通过以下反应式3至4的反应路线来合成,但不限于此。

[0151] <反应式3>

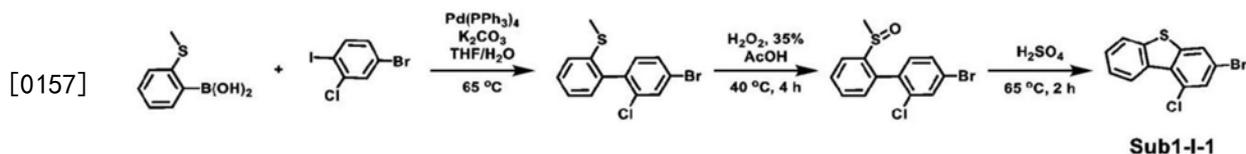


[0153] <反应式4>



[0155] 1.Sub 1-1合成例

[0156] (1) Sub 1-I-1合成

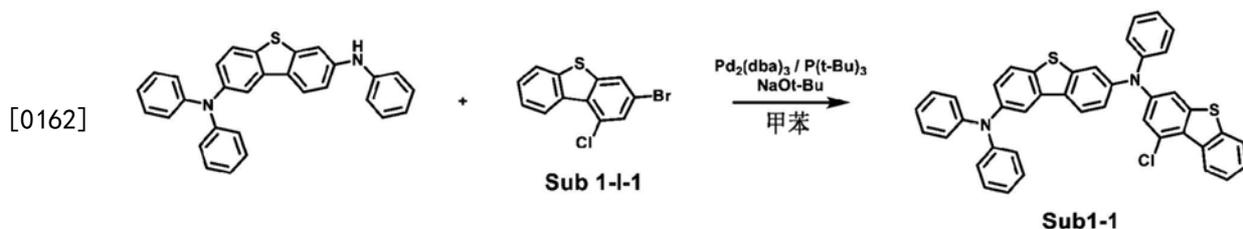


[0158] 1) 在圆底烧瓶中将(2-(甲硫基)苯基)硼酸(31.5g, 187.6mmol)溶解在600mL THF(四氢呋喃)中之后,加入4-溴-2-氯碘苯(62g, 187.6mmol)、Pd(PPh₃)₄(6.5g, 5.6mmol)、K₂CO₃(51.8g, 375.2mmol)和200mL水,并在80°C下搅拌。反应完成后,将混合物用CH₂Cl₂和水萃取,有机层经MgSO₄干燥并浓缩,然后将得到的化合物进行硅胶柱色谱(silicagel column),并进行重结晶,从而获得50g的(4'-溴-2'-氯代-[1,1'-联苯]-2-基)(甲基)硫烷(收率:85%)。

[0159] 2) 在圆底烧瓶中将(4'-溴-2'-氯代-[1,1'-联苯]-2-基)(甲基)硫烷(50g, 159.4mmol)溶解在700mL的AcOH中,然后加入H₂O₂(13.7mL, 159.4mmol)并在室温下搅拌。反应完成后,除去溶剂,用1M NaOH中和,用EA(乙酸乙酯)萃取并重结晶,得到48.3g的4'-溴-2'-氯-2-(甲基亚磺酰基)-1,1'-联苯(收率:92%)。

[0160] 3) 将4'-溴-2'-氯-2-(甲基亚磺酰基)-1,1'-联苯(48.3g, 146.4mmol)加入到500g H₂SO₄中,并在65°C下搅拌。反应完成后,使用NaOH水溶液中和后,将所得化合物进行硅胶柱色谱,并进行重结晶,得到40.1g的Sub 1-I-1(收率:92%)。

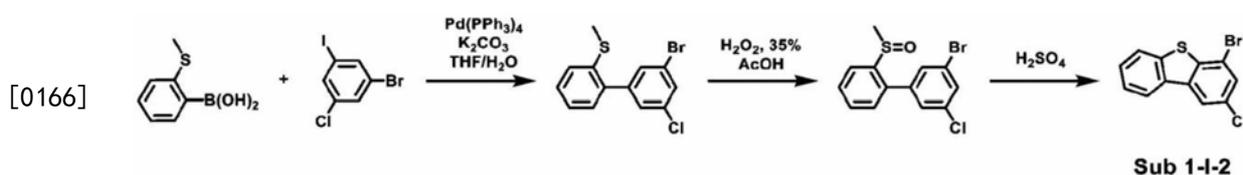
[0161] (2) Sub 1-1合成



[0163] 在圆底烧瓶中将Sub 1-I-1 (4.7g, 15.8mmol) 溶解在甲苯 (60ml) 中后, 加入 N^2, N^2, N^7 -三苯基二苯并[b,d]噻吩-2,7-二胺 (7g, 15.8mmol)、 $Pd_2(dba)_3$ (0.43g, 0.5mmol)、50% $P(t-Bu)_3$ (0.9ml, 0.4mmol)、 $NaOt-Bu$ (2.3g, 47.4mmol) 并在 $65^\circ C$ 下搅拌。反应完成后, 将混合物用 CH_2Cl_2 和水萃取, 有机层经 $MgSO_4$ 干燥并浓缩, 然后将得到的化合物进行硅胶柱色谱 (silicagel column), 并进行重结晶, 从而获得7.8g的Sub 1-1 (收率: 75%)。

[0164] 2. Sub 1-4合成例

[0165] (1) Sub 1-I-2合成

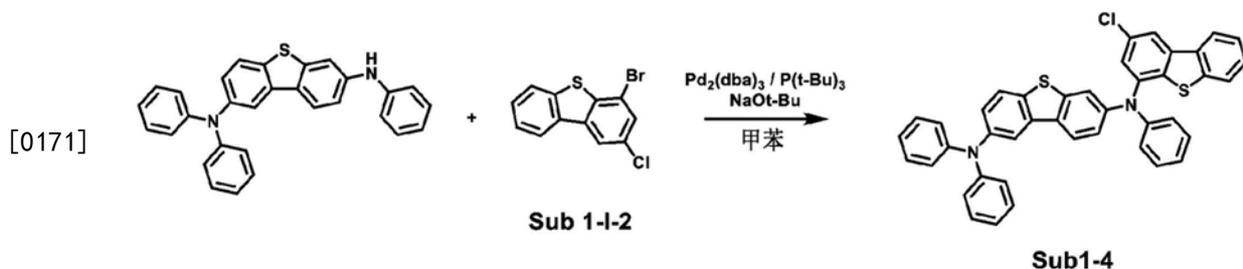


[0167] 1) 在圆底烧瓶中将 (2- (甲硫基) 苯基) 硼酸 (37.8g, 225.1mmol) 溶解在900mL THF (四氢呋喃) 中后, 加入3-溴-5-氯碘苯 (75g, 236.3mmol)、 $Pd(PPh_3)_4$ (7.8g, 6.75mmol)、 K_2CO_3 (62.2g, 450.2mmol) 和300mL水, 并在 $80^\circ C$ 下搅拌。反应完成后, 将混合物用 CH_2Cl_2 和水萃取, 有机层经 $MgSO_4$ 干燥并浓缩, 然后将得到的化合物进行硅胶柱色谱 (silicagel column), 并进行重结晶, 从而获得58g的 (3'-溴-5'-氯-[1,1'-联苯]-2-基) (甲基) 硫烷 (收率: 82%)。

[0168] 2) 在圆底烧瓶中将 (3'-溴-5'-氯-[1,1'-联苯]-2-基) (甲基) 硫烷 (58g, 184.9mmol) 溶解于1000mL的AcOH中, 然后加入 H_2O_2 (15.9mL, 184.9mmol), 并在室温下搅拌。反应完成后, 除去溶剂, 用1M NaOH中和, 用EA (乙酸乙酯) 萃取并重结晶, 得到57.9g的3'-溴-5'-氯-2-(甲基亚磺酰基)-1,1'-联苯 (收率: 95%)。

[0169] 3) 将3'-溴-5'-氯-2-(甲基亚磺酰基)-1,1'-联苯 (57.9g, 175.6mmol) 加入到600g H_2SO_4 中, 并在 $65^\circ C$ 下搅拌。反应完成后, 使用NaOH水溶液中和后, 将所得化合物进行硅胶柱色谱, 并进行重结晶, 得到45g的Sub1-I-2 (收率: 87%)。

[0170] (2) Sub 1-4合成

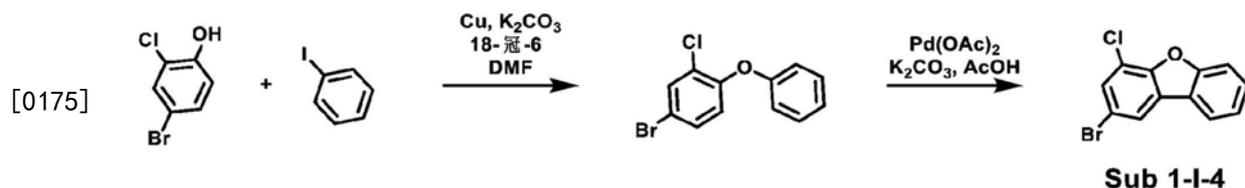


[0172] 在圆底烧瓶中将Sub 1-I-2 (9.4g, 31.6mmol) 溶于甲苯 (100ml) 中后, 加入 N^2, N^2, N^7 -三苯基二苯并[b,d]噻吩-2,7-二胺 (14g, 31.65mmol)、 $Pd_2(dba)_3$ (0.87g, 0.9mmol)、50% $P(t-Bu)_3$ (0.8ml, 1.9mmol)、 $NaOt-Bu$ (9.12g, 94.9mmol), 并在 $65^\circ C$ 下搅拌。反应完成后, 将混合物用 CH_2Cl_2 和水萃取, 有机层经 $MgSO_4$ 干燥并浓缩, 然后将得到的化合物进行硅胶柱色

谱(silicagel column),并进行重结晶,从而获得15.1g的Sub 1-4产物(收率:72%)。

[0173] 3.Sub 1-14合成例

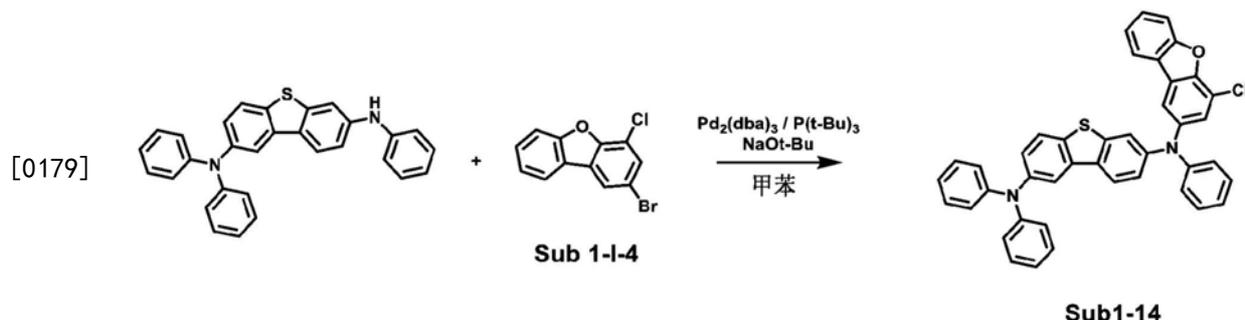
[0174] (1) Sub 1-I-4合成



[0176] 1) 在圆底烧瓶中将4-溴-2-氯苯酚(15g,73.5mmol)溶解在400mL DMF中后,加入碘苯(16.8g,80.9mmol)、K₂CO₃(20.3g,147.1mmol)、Cu(2.3g,36.8mmol)和二苯并-18-冠-6(1.6g,4.4mmol)后,并在120℃下搅拌。反应完成后,将混合物用CH₂Cl₂和水萃取,有机层经MgSO₄干燥并浓缩,然后将得到的化合物进行硅胶柱色谱(silicagel column),得到16.5g的4-溴-2-氯-1-苯氧基苯产物(收率:79%)。

[0177] 2) 在4-溴-2-氯-1-苯氧基苯(16g,56.4mmol)中添加Pd(OAc)₂(0.63g,2.8mol)、K₂CO₃(7.8g,56.4mmol)、400mL乙酸,并在120℃下搅拌48小时。反应完成后,将混合物用EA(乙酸乙酯)和水萃取,有机层经MgSO₄干燥并浓缩,然后将得到的化合物进行硅胶柱色谱(silicagel column),得到6.7g的Sub 1-I-4产物(收率:42%)。

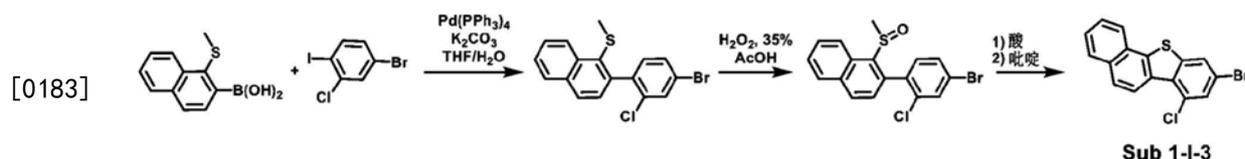
[0178] (2) Sub 1-14合成



[0180] 在圆底烧瓶中将Sub 1-I-4(6.4g,22.6mmol)溶解在甲苯(60ml)中后,加入N²,N²,N⁷-三苯基二苯并[b,d]噻吩-2,7-二胺(10g,22.6mmol)、Pd₂(dba)₃(0.6g,0.7mmol)、50%P(t-Bu)₃(0.6ml,1.4mmol)、NaOt-Bu(4.4g,45.2mmol)并在65℃下搅拌。反应完成后,将混合物用CH₂Cl₂和水萃取,有机层经MgSO₄干燥并浓缩,然后将得到的化合物进行硅胶柱色谱(silicagel column),并进行重结晶,得到10.2g的Sub 1-14产物(收率:70%)。

[0181] 4.Sub 1-17合成例

[0182] (1) Sub 1-I-3合成



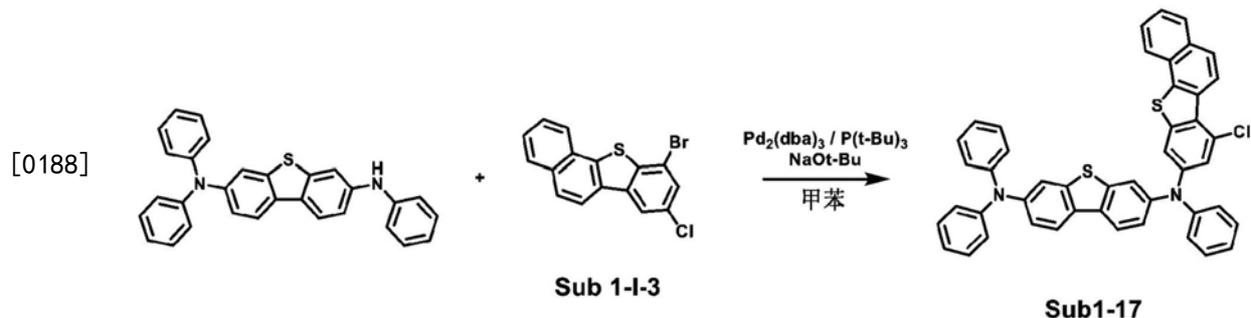
[0184] 1) 在圆底烧瓶中将(2-(甲磺基)苯基)硼酸(30g,137.6mmol)溶于300mL THF(四氢呋喃)中后,加入4-溴-2-氯碘苯(43.7g,137.6mmol)、Pd(PPh₃)₄(4.8g,4.1mmol)、K₂CO₃(57g,412.7mmol)和100mL水并在80℃搅拌。反应完成后,将混合物用CH₂Cl₂和水萃取,有机层经MgSO₄干燥并浓缩,然后将得到的化合物进行硅胶柱色谱(silicagel column),并进行

重结晶,得到37.5g的(2-(4-溴-2-氯苯基)萘-1-基)(甲基)硫烷(收率:75%)。

[0185] 2) 在圆底烧瓶中将(2-(4-溴-2-氯苯基)萘-1-基)(甲基)硫烷(37g,101.7mmol)溶于300mL AcOH中后,加入 H_2O_2 (8.7mL,101.7mmol),并在室温下搅拌。反应完成后,除去溶剂,用1M NaOH中和,用EA(乙酸乙酯)萃取,并重结晶,得到35.5g的2-(4-溴-2-氯苯基)-1-(甲基亚磺酰基)萘(收率:92%)。

[0186] 3) 将2-(4-溴-2-氯苯基)-1-(甲基亚磺酰基)萘(35g,92.2mmol)加入到300g三氟甲基磺酸中,并在65°C下搅拌。反应完成后,加入吡啶并回流30分钟,并将所得化合物进行硅胶柱色谱(silicagel column),并进行重结晶,得到26g的Sub 1-I-3(收率:81%)。

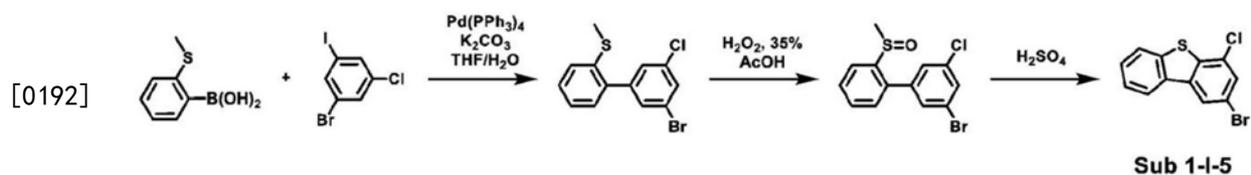
[0187] (2) Sub 1-17合成



[0189] 在圆底烧瓶中将Sub 1-I-3(10g,28.9mmol)溶于甲苯(100ml)中后,加入 N^3,N^3,N^7 -三苯基二苯并[b,d]噻吩-3,7-二胺(12.8g,28.9mmol)、 $Pd_2(dba)_3$ (0.79g,0.9mmol)、50%P(t-Bu)₃(0.7ml,1.7mmol)、NaOt-Bu(8.3g,86.8mmol),并在65°C下搅拌。反应完成后,将混合物用 CH_2Cl_2 和水萃取,有机层经 $MgSO_4$ 干燥并浓缩,然后将得到的化合物进行硅胶柱色谱(silicagel column),并进行重结晶,得到16g的Sub 1-17(收率:78%)。

[0190] 5.Sub 1-48合成例

[0191] (1) Sub 1-I-5合成

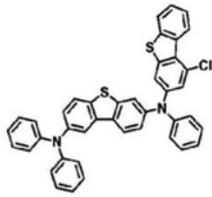


[0193] 1) 在圆底烧瓶中将(2-(甲基硫基)苯基)硼酸(50g,297.6mmol)溶于1000mL THF(四氢呋喃)中后,加入5-溴-3-氯碘代苯(94.4g,297.6mmol)、 $Pd(PPh_3)_4$ (10.3g,8.9mmol)、 K_2CO_3 (123.44g,892.8mmol)和300mL水,并在80°C下搅拌。反应完成后,将混合物用 CH_2Cl_2 和水萃取,有机层经 $MgSO_4$ 干燥并浓缩,然后将得到的化合物进行硅胶柱色谱(silicagel column),并进行重结晶,得到74g的(5'-溴-3'-氯-[1,1'-联苯]-2-基)(甲基)硫烷(收率:79%)。

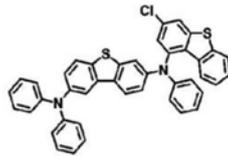
[0194] 2) 在圆底烧瓶中将(5'-溴-3'-氯-[1,1'-联苯]-2-基)(甲基)硫烷(74g,235.9mmol)溶于1000mL的AcOH中后,加入 H_2O_2 (20.3mL,235.9mmol)并在室温下搅拌。反应完成后,除去溶剂,用1M NaOH中和,用EA(乙酸乙酯)萃取并重结晶,得到71.5g的5'-溴-3'-氯-2-(甲基亚磺酰基)-1,1'-联苯(收率:92%)。

[0195] 3) 将5'-溴-3'-氯-2-(甲基亚磺酰基)-1,1'-联苯加入到800g的 H_2SO_4 中,并在65°C下搅拌。反应完成后,使用NaOH水溶液中和,并将所得化合物进行硅胶柱色谱(silicagel

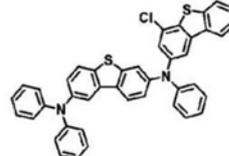
[0218]



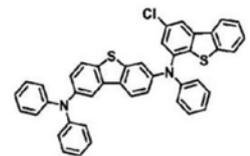
Sub1-1



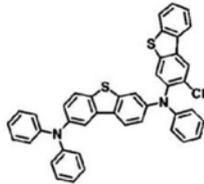
Sub1-2



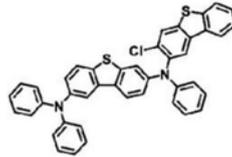
Sub1-3



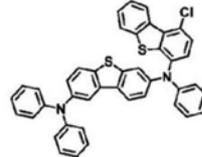
Sub1-4



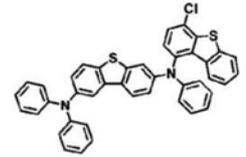
Sub1-5



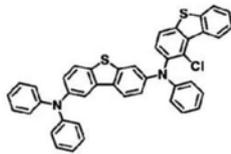
Sub1-6



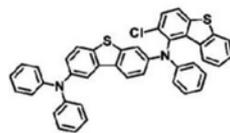
Sub1-7



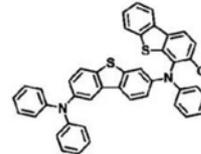
Sub1-8



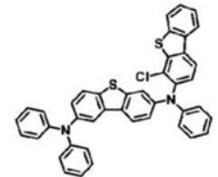
Sub1-9



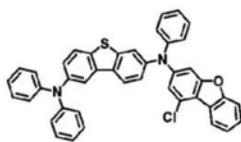
Sub1-10



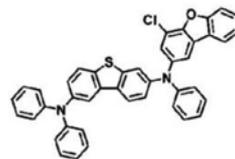
Sub1-11



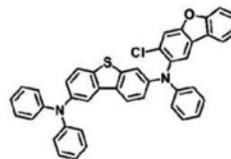
Sub1-12



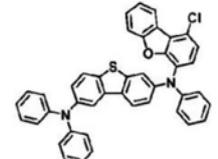
Sub1-13



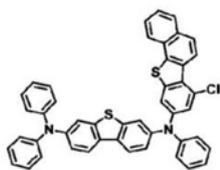
Sub1-14



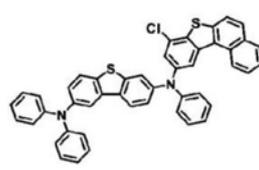
Sub1-15



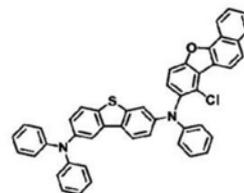
Sub1-16



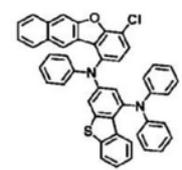
Sub1-17



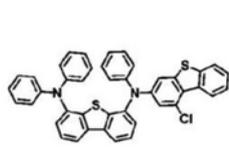
Sub1-18



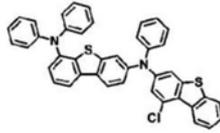
Sub1-19



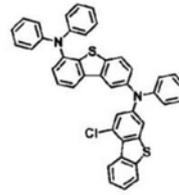
Sub1-20



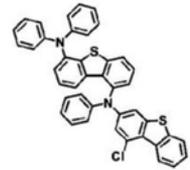
Sub1-21



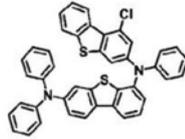
Sub1-22



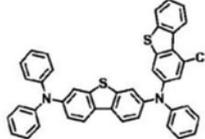
Sub1-23



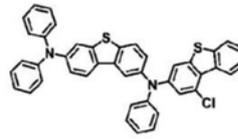
Sub1-24



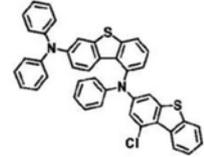
Sub1-25



Sub1-26

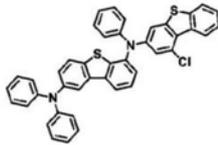


Sub1-27

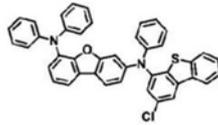


Sub1-28

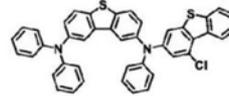
[0219]



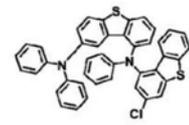
Sub1-29



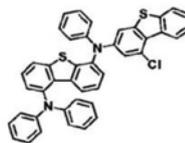
Sub1-30



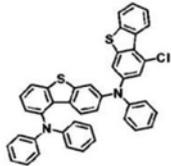
Sub1-31



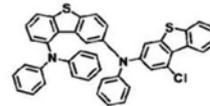
Sub1-32



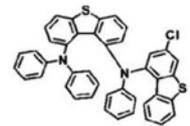
Sub1-33



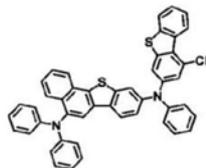
Sub1-34



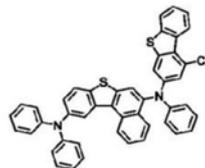
Sub1-35



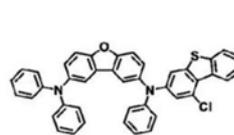
Sub1-36



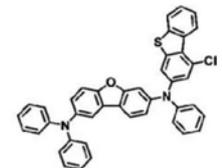
Sub1-37



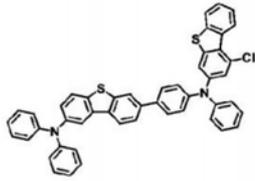
Sub1-38



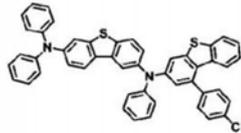
Sub1-39



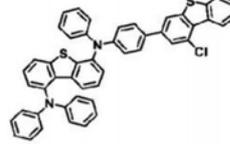
Sub1-40



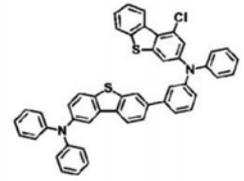
Sub1-41



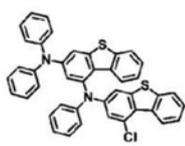
Sub1-42



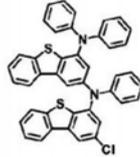
Sub1-43



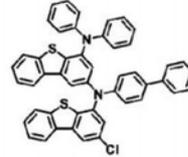
Sub1-44



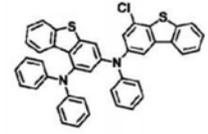
Sub1-45



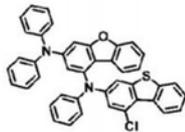
Sub1-46



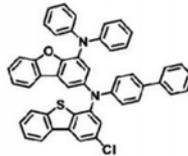
Sub1-47



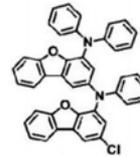
Sub1-48



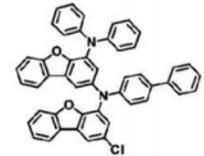
Sub1-49



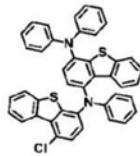
Sub1-50



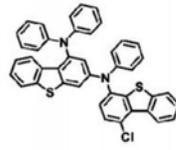
Sub1-51



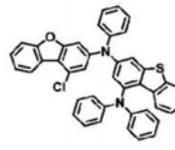
Sub1-52



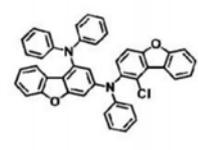
Sub1-53



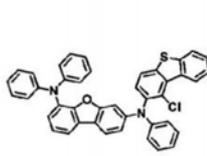
Sub1-54



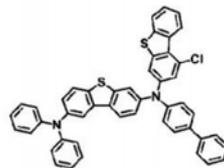
Sub1-55



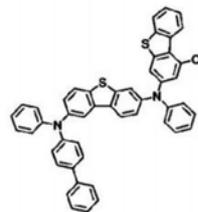
Sub1-56



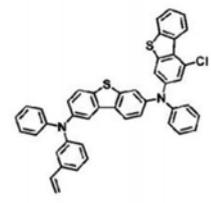
Sub1-57



Sub1-58

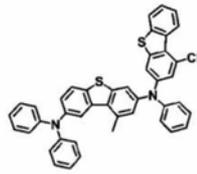


Sub1-59

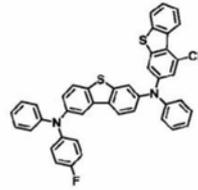


Sub1-60

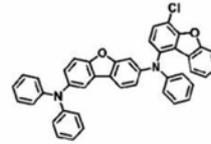
[0220]



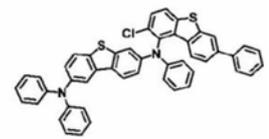
Sub1-61



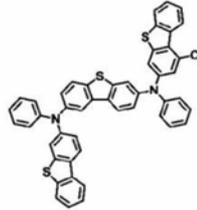
Sub1-62



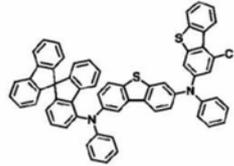
Sub1-63



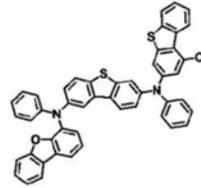
Sub1-64



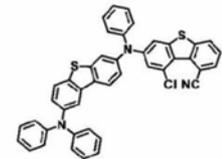
Sub1-65



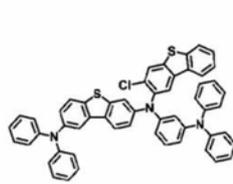
Sub1-66



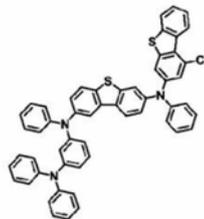
Sub1-67



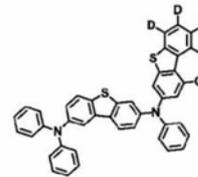
Sub1-68



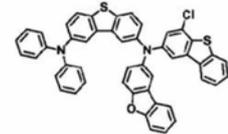
Sub1-69



Sub1-70

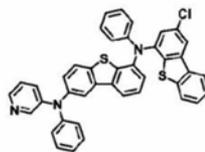


Sub1-71

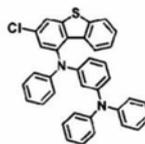


Sub1-72

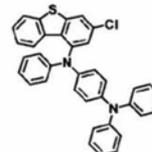
[0221]



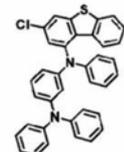
Sub1-73



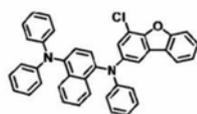
Sub1-74



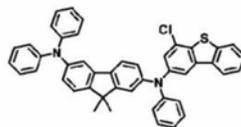
Sub1-75



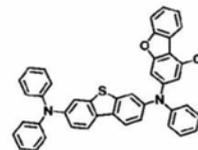
Sub1-76



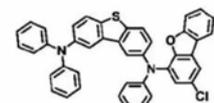
Sub1-77



Sub1-78

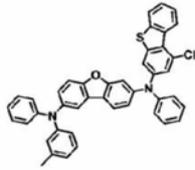


Sub1-79

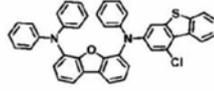


Sub1-80

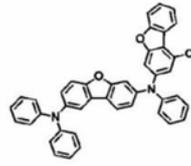
[0222]



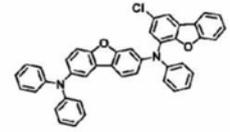
Sub1-81



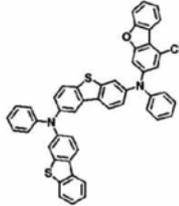
Sub1-82



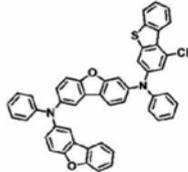
Sub1-83



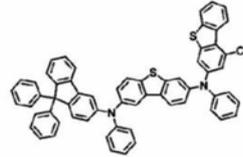
Sub1-84



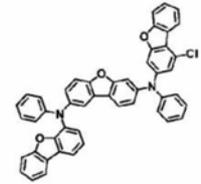
Sub1-85



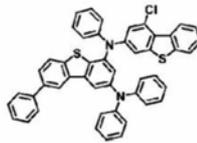
Sub1-86



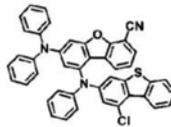
Sub1-87



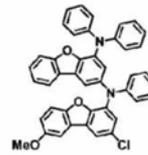
Sub1-88



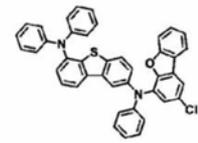
Sub1-89



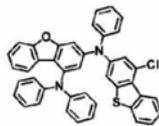
Sub1-90



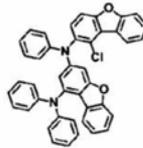
Sub1-91



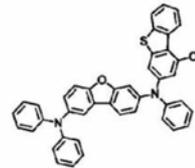
Sub1-92



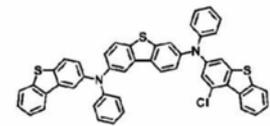
Sub1-93



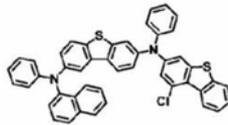
Sub1-94



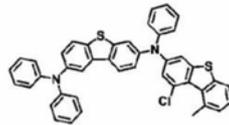
Sub1-95



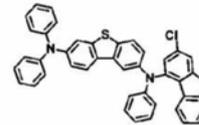
Sub1-96



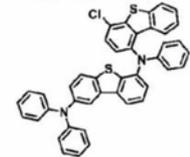
Sub1-97



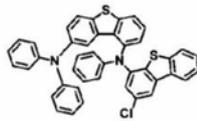
Sub1-98



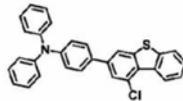
Sub1-99



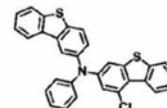
Sub1-100



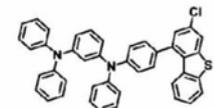
Sub1-101



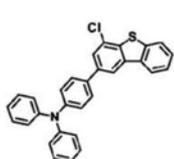
Sub1-102



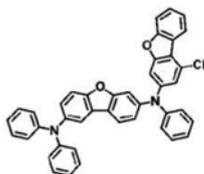
Sub1-103



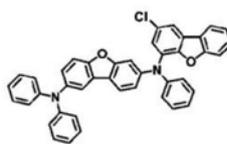
Sub1-104



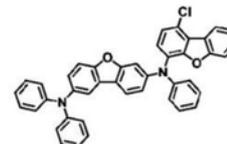
Sub1-105



Sub1-106

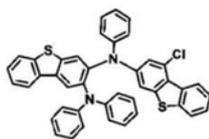


Sub1-107

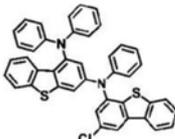


Sub1-108

[0223]



Sub1-109



Sub1-110

[0224]

[表1]

化合物	FD-MS	化合物	FD-MS
Sub 1-1	m/z=658.13 (C ₄₂ H ₂₇ ClN ₂ S ₂ =659.26)	Sub 1-2	m/z=658.13 (C ₄₂ H ₂₇ ClN ₂ S ₂ =659.26)
Sub 1-3	m/z=658.13 (C ₄₂ H ₂₇ ClN ₂ S ₂ =659.26)	Sub 1-4	m/z=658.13 (C ₄₂ H ₂₇ ClN ₂ S ₂ =659.26)
Sub 1-5	m/z=658.13 (C ₄₂ H ₂₇ ClN ₂ S ₂ =659.26)	Sub 1-6	m/z=658.13 (C ₄₂ H ₂₇ ClN ₂ S ₂ =659.26)
Sub 1-7	m/z=658.13 (C ₄₂ H ₂₇ ClN ₂ S ₂ =659.26)	Sub 1-8	m/z=658.13 (C ₄₂ H ₂₇ ClN ₂ S ₂ =659.26)
Sub 1-9	m/z=658.13 (C ₄₂ H ₂₇ ClN ₂ S ₂ =659.26)	Sub 1-10	m/z=658.13 (C ₄₂ H ₂₇ ClN ₂ S ₂ =659.26)
Sub 1-11	m/z=658.13 (C ₄₂ H ₂₇ ClN ₂ S ₂ =659.26)	Sub 1-12	m/z=658.13 (C ₄₂ H ₂₇ ClN ₂ S ₂ =659.26)
Sub 1-13	m/z=642.15 (C ₄₂ H ₂₇ ClN ₂ OS=643.26)	Sub 1-14	m/z=642.15 (C ₄₂ H ₂₇ ClN ₂ OS=643.26)
Sub 1-15	m/z=642.15 (C ₄₂ H ₂₇ ClN ₂ OS=643.26)	Sub 1-16	m/z=642.15 (C ₄₂ H ₂₇ ClN ₂ OS=643.26)
Sub 1-17	m/z=708.15 (C ₄₆ H ₂₉ ClN ₂ S ₂ =709.32)	Sub 1-18	m/z=708.15 (C ₄₆ H ₂₉ ClN ₂ S ₂ =709.32)
Sub 1-19	m/z=692.17 (C ₄₆ H ₂₉ ClN ₂ OS=693.26)	Sub 1-20	m/z=692.17 (C ₄₆ H ₂₉ ClN ₂ OS=693.26)
Sub 1-21	m/z=658.13 (C ₄₂ H ₂₇ ClN ₂ S ₂ =659.26)	Sub 1-22	m/z=658.13 (C ₄₂ H ₂₇ ClN ₂ S ₂ =659.26)
Sub 1-23	m/z=658.13 (C ₄₂ H ₂₇ ClN ₂ S ₂ =659.26)	Sub 1-24	m/z=658.13 (C ₄₂ H ₂₇ ClN ₂ S ₂ =659.26)
Sub 1-25	m/z=658.13 (C ₄₂ H ₂₇ ClN ₂ S ₂ =659.26)	Sub 1-26	m/z=658.13 (C ₄₂ H ₂₇ ClN ₂ S ₂ =659.26)
Sub 1-27	m/z=658.13 (C ₄₂ H ₂₇ ClN ₂ S ₂ =659.26)	Sub 1-28	m/z=658.13 (C ₄₂ H ₂₇ ClN ₂ S ₂ =659.26)
Sub 1-29	m/z=658.13 (C ₄₂ H ₂₇ ClN ₂ S ₂ =659.26)	Sub 1-30	m/z=642.15 (C ₄₂ H ₂₇ ClN ₂ OS=643.20)
Sub 1-31	m/z=658.13 (C ₄₂ H ₂₇ ClN ₂ S ₂ =659.26)	Sub 1-32	m/z=658.13 (C ₄₂ H ₂₇ ClN ₂ S ₂ =659.26)
Sub 1-33	m/z=658.13 (C ₄₂ H ₂₇ ClN ₂ S ₂ =659.26)	Sub 1-34	m/z=658.13 (C ₄₂ H ₂₇ ClN ₂ S ₂ =659.26)
Sub 1-35	m/z=658.13 (C ₄₂ H ₂₇ ClN ₂ S ₂ =659.26)	Sub 1-36	m/z=658.13 (C ₄₂ H ₂₇ ClN ₂ S ₂ =659.26)

[0225]

[0226]

Sub 1-37	m/z=708.15 (C ₄₆ H ₂₉ ClN ₂ S ₂ =709.32)	Sub 1-38	m/z=708.15 (C ₄₆ H ₂₉ ClN ₂ S ₂ =709.32)
Sub 1-39	m/z=642.15 (C ₄₂ H ₂₇ ClN ₂ OS=643.26)	Sub 1-40	m/z=642.15 (C ₄₂ H ₂₇ ClN ₂ OS=643.26)
Sub 1-41	m/z=734.16 (C ₄₈ H ₃₁ ClN ₂ S ₂ =735.36)	Sub 1-42	m/z=734.16 (C ₄₈ H ₃₁ ClN ₂ S ₂ =735.36)
Sub 1-43	m/z=734.16 (C ₄₈ H ₃₁ ClN ₂ S ₂ =735.36)	Sub 1-44	m/z=734.16 (C ₄₈ H ₃₁ ClN ₂ S ₂ =735.36)
Sub 1-45	m/z=658.13 (C ₄₂ H ₂₇ ClN ₂ S ₂ =659.26)	Sub 1-46	m/z=658.13 (C ₄₂ H ₂₇ ClN ₂ S ₂ =659.26)
Sub 1-47	m/z=734.16 (C ₄₈ H ₃₁ ClN ₂ S ₂ =735.36)	Sub 1-48	m/z=658.13 (C ₄₂ H ₂₇ ClN ₂ S ₂ =659.26)
Sub 1-49	m/z=642.15 (C ₄₂ H ₂₇ ClN ₂ OS=643.2)	Sub 1-50	m/z=718.18 (C ₄₈ H ₃₁ ClN ₂ OS=719.30)
Sub 1-51	m/z=626.18 (C ₄₂ H ₂₇ ClN ₂ O ₂ =627.14)	Sub 1-52	m/z=702.21 (C ₄₈ H ₃₁ ClN ₂ O ₂ =703.24)
Sub 1-53	m/z=658.13 (C ₄₂ H ₂₇ ClN ₂ S ₂ =659.26)	Sub 1-54	m/z=658.13 (C ₄₂ H ₂₇ ClN ₂ S ₂ =659.26)
Sub 1-55	m/z=642.15 (C ₄₂ H ₂₇ ClN ₂ OS=643.20)	Sub 1-56	m/z=626.18 (C ₄₂ H ₂₇ ClN ₂ O ₂ =627.14)
Sub 1-57	m/z=642.15 (C ₄₂ H ₂₇ ClN ₂ OS=643.20)	Sub 1-58	m/z=734.16 (C ₄₈ H ₃₁ ClN ₂ S ₂ =735.36)
Sub 1-59	m/z=734.16 (C ₄₈ H ₃₁ ClN ₂ S ₂ =735.36)	Sub 1-60	m/z=684.15 (C ₄₄ H ₂₉ ClN ₂ S ₂ =685.30)
Sub 1-61	m/z=672.15 (C ₄₃ H ₂₉ ClN ₂ S ₂ =673.29)	Sub 1-62	m/z=676.12 (C ₄₂ H ₂₆ ClFN ₂ S ₂ =677.25)
Sub 1-63	m/z=626.18 (C ₄₂ H ₂₇ ClN ₂ O ₂ =627.14)	Sub 1-64	m/z=734.16 (C ₄₈ H ₃₁ ClN ₂ S ₂ =735.36)
Sub 1-65	m/z=764.12 (C ₄₈ H ₂₉ ClN ₂ S ₃ =765.40)	Sub 1-66	m/z=896.21 (C ₆₁ H ₃₇ ClN ₂ S ₂ =897.55)
Sub 1-67	m/z=748.14 (C ₄₈ H ₂₉ ClN ₂ OS ₂ =749.34)	Sub 1-68	m/z=683.13 (C ₄₃ H ₂₆ ClN ₃ S ₂ =684.27)
Sub 1-69	m/z=825.20 (C ₅₄ H ₃₆ ClN ₃ S ₂ =826.47)	Sub 1-70	m/z=825.20 (C ₅₄ H ₃₆ ClN ₃ S ₂ =826.47)
Sub 1-71	m/z=662.16 (C ₄₂ H ₂₃ D ₄ ClN ₂ S ₂ =663.29)	Sub 1-72	m/z=748.14(C ₄₈ H ₂₉ ClN ₂ OS ₂ =749.34)
Sub 1-73	m/z=659.13 (C ₄₁ H ₂₆ ClN ₃ S ₂ =660.25)	Sub 1-74	m/z=552.14(C ₃₆ H ₂₅ ClN ₂ S=553.12)
Sub 1-75	m/z=552.14 (C ₃₆ H ₂₅ ClN ₂ S=553.12)	Sub 1-76	m/z=552.14(C ₃₆ H ₂₅ ClN ₂ S=553.12)
Sub 1-77	m/z=586.18 (C ₄₀ H ₂₇ ClN ₂ O=587.12)	Sub 1-78	m/z=668.21(C ₄₅ H ₃₃ ClN ₂ S=669.28)
Sub 1-79	m/z=642.15 (C ₄₂ H ₂₇ ClN ₂ OS=643.20)	Sub 1-80	m/z=642.15(C ₄₂ H ₂₇ ClN ₂ OS=643.20)
Sub 1-81	m/z=656.17 (C ₄₃ H ₂₉ ClN ₂ OS=657.23)	Sub 1-82	m/z=642.15(C ₄₂ H ₂₇ ClN ₂ OS=643.20)
Sub 1-83	m/z=626.18 (C ₄₂ H ₂₇ ClN ₂ O ₂ =627.14)	Sub 1-84	m/z=626.18(C ₄₂ H ₂₇ ClN ₂ O ₂ =627.14)
Sub 1-85	m/z=748.14 (C ₄₈ H ₂₉ ClN ₂ OS ₂ =749.34)	Sub 1-86	m/z=732.16(C ₄₈ H ₂₉ ClN ₂ O ₂ S=733.28)
Sub 1-87	m/z=898.22 (C ₆₁ H ₃₉ ClN ₂ S ₂ =899.57)	Sub 1-88	m/z=716.19(C ₄₈ H ₂₉ ClN ₂ O ₃ =717.22)
Sub 1-89	m/z=734.16 (C ₄₈ H ₃₁ ClN ₂ S ₂ =735.36)	Sub 1-90	m/z=667.15(C ₄₃ H ₂₆ ClN ₃ OS=668.21)
Sub 1-91	m/z=656.19 (C ₄₃ H ₂₉ ClN ₂ O ₃ =657.17)	Sub 1-92	m/z=642.15(C ₄₂ H ₂₇ ClN ₂ OS=643.20)
Sub 1-93	m/z=642.15 (C ₄₂ H ₂₇ ClN ₂ OS=643.20)	Sub 1-94	m/z=626.18(C ₄₂ H ₂₇ ClN ₂ O ₂ =627.14)
Sub 1-95	m/z=642.15 (C ₄₂ H ₂₇ ClN ₂ OS=643.20)	Sub 1-96	m/z=764.12 (C ₄₈ H ₂₉ ClN ₂ S ₃ =765.40)
Sub 1-97	m/z=708.15 (C ₄₆ H ₂₉ ClN ₂ S ₂ =709.32)	Sub 1-98	m/z=672.15 (C ₄₃ H ₂₉ ClN ₂ S ₂ =673.29)

[0227]

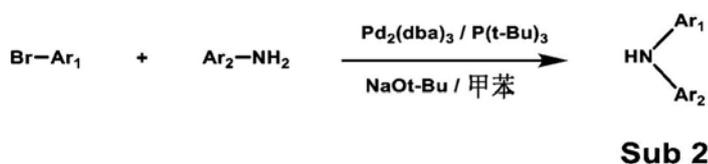
Sub 1-99	m/z=658.13 (C ₄₂ H ₂₇ ClN ₂ S ₂ =659.26)	Sub 1-100	m/z=658.13 (C ₄₂ H ₂₇ ClN ₂ S ₂ =659.26)
Sub 1-101	m/z=658.13 (C ₄₂ H ₂₇ ClN ₂ S ₂ =659.26)	Sub 1-102	m/z=461.10 (C ₃₀ H ₂₀ ClNS=462.01)
Sub 1-103	m/z=491.06 (C ₃₀ H ₁₈ ClNS ₂ =492.05)	Sub 1-104	m/z=628.17 (C ₄₂ H ₂₉ ClN ₂ S=629.22)
Sub 1-105	m/z=461.10 (C ₃₀ H ₂₀ ClNS=462.01)	Sub 1-106	m/z=626.18 (C ₄₂ H ₂₇ ClN ₂ O ₂ =627.14)
Sub 1-107	m/z=626.18 (C ₄₂ H ₂₇ ClN ₂ O ₂ =627.14)	Sub 1-108	m/z=626.18 (C ₄₂ H ₂₇ ClN ₂ O ₂ =627.14)
Sub 1-109	m/z=658.13 (C ₄₂ H ₂₇ ClN ₂ S ₂ =659.26)	Sub 1-110	m/z=658.13 (C ₄₂ H ₂₇ ClN ₂ S ₂ =659.26)

[0228] II. Sub 2的合成

[0229] 反应式1的Sub 2可以通过以下反应式5的反应路线来合成,但不限于此。

[0230] <反应式5>

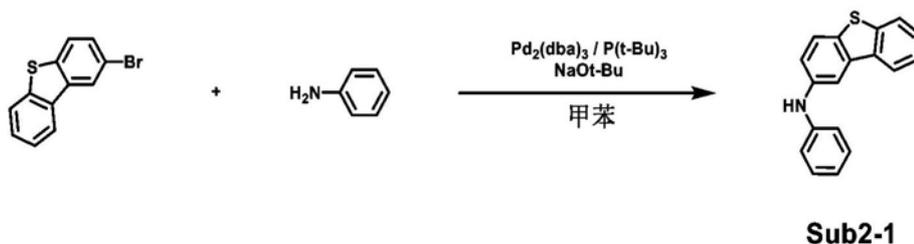
[0231]



[0232] 属于Sub 2的具体化合物的合成例如下。

[0233] 1. Sub 2-1的合成例

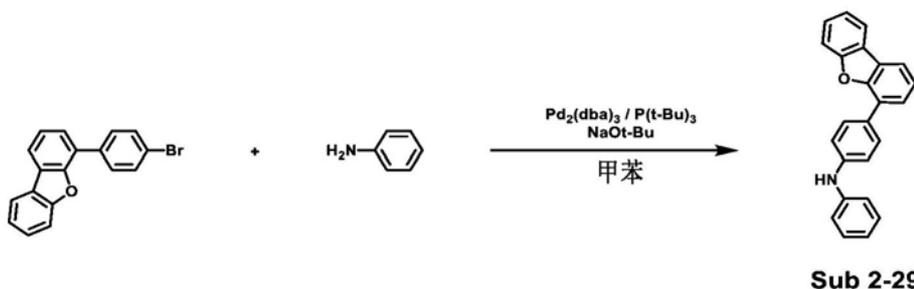
[0234]



[0235] 在起始物2-溴二苯并[b,d]噻吩(38.11g, 144.82mmol)中,加入苯胺(14.84g, 159.30mmol)、Pd₂(dba)₃(3.98g, 4.34mmol)、50%P(t-Bu)₃(5.6ml, 11.59mmol)、NaOt-Bu(41.76g, 434.47mmol)、甲苯(760ml),并在80℃下搅拌。反应完成后,将混合物用CH₂Cl₂和水萃取,有机层经MgSO₄干燥并浓缩,然后将得到的化合物进行硅胶柱色谱(silicagel column),并重结晶,得到30.7g的Sub 2-1产物(收率:77%)。

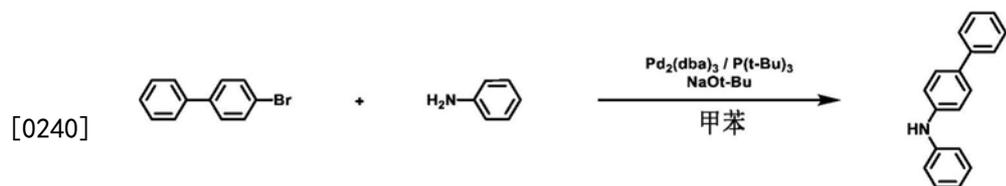
[0236] 2. Sub 2-29合成例

[0237]



[0238] 在起始物4-(4-溴苯基)二苯并[b,d]呋喃(20g, 61.8mmol)中,加入苯胺(5.8g, 61.8mmol)、Pd₂(dba)₃(1.7g, 1.85mmol)、50%P(t-Bu)₃(1.5ml, 3.71mmol)、NaOt-Bu(17.8g, 185.6mmol)、甲苯(200ml),并使用Sub 2-1合成方法获得17g的Sub 2-29产物(收率:82%)。

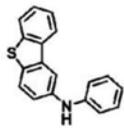
[0239] 3. Sub 2-34合成例

**Sub 2-34**

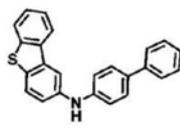
[0241] 在起始物4-溴-1,1'-联苯(23.65g,101.46mmol)中,加入苯胺(10.39g,111.60mmol)、 $\text{Pd}_2(\text{dba})_3$ (2.79g,3.04mmol)、50% $\text{P}(\text{t-Bu})_3$ (4.0ml,8.12mmol)、 NaOt-Bu (29.25g,304.38mmol)、甲苯(710ml),并使用Sub 2-1合成方法获得20.66g的Sub 2-34产物(收率:83%)。

[0242] 同时,属于Sub 2的化合物可以是以下化合物,但不限于此。表2显示了属于Sub 2的化合物的FD-MS值。

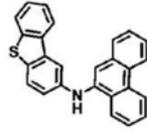
[0243]



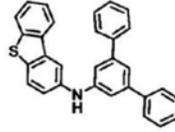
Sub 2-1



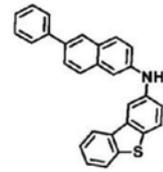
Sub 2-2



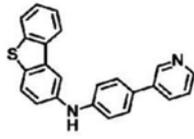
Sub 2-3



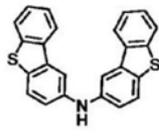
Sub 2-4



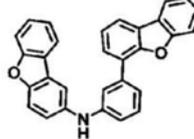
Sub 2-5



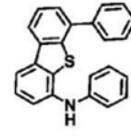
Sub 2-6



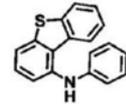
Sub 2-7



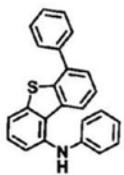
Sub 2-8



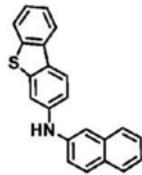
Sub 2-9



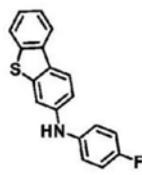
Sub 2-10



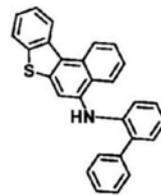
Sub 2-11



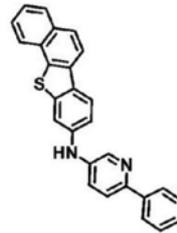
Sub 2-12



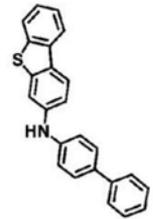
Sub 2-13



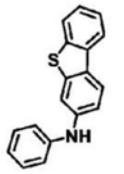
Sub 2-14



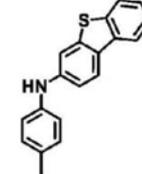
Sub 2-15



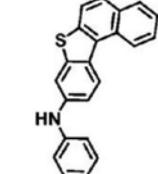
Sub 2-16



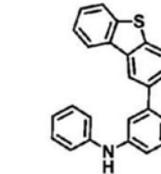
Sub2-17



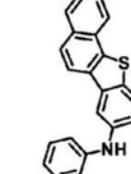
Sub2-18



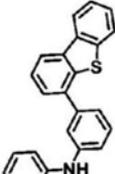
Sub2-19



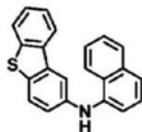
Sub2-20



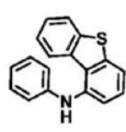
Sub2-21



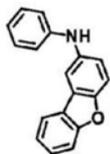
Sub2-22



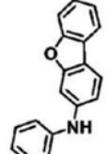
Sub2-23



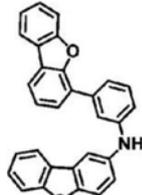
Sub2-24



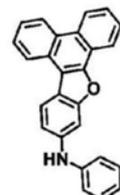
Sub2-25



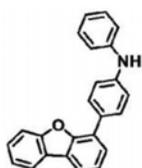
Sub2-26



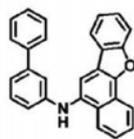
Sub2-27



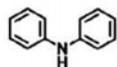
Sub2-28



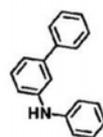
Sub2-29



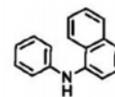
Sub2-30



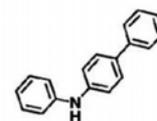
Sub2-31



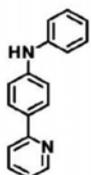
Sub2-32



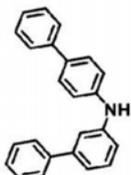
Sub2-33



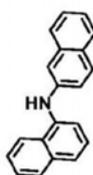
Sub2-34



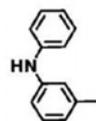
Sub2-35



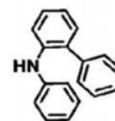
Sub2-36



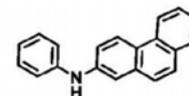
Sub2-37



Sub2-38

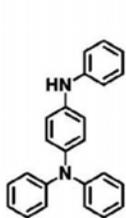


Sub2-39

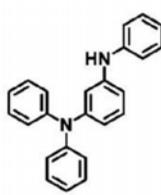


Sub2-40

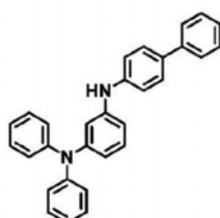
[0244]



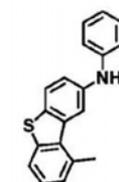
Sub2-41



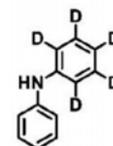
Sub2-42



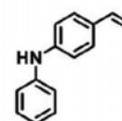
Sub2-43



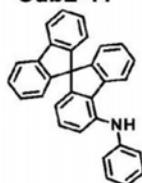
Sub2-44



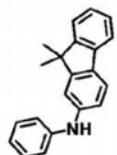
Sub2-45



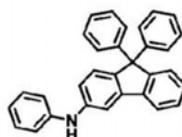
Sub2-46



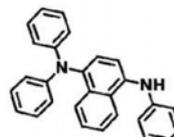
Sub2-47



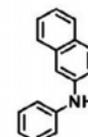
Sub2-48



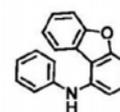
Sub2-49



Sub2-50



Sub2-51



Sub2-52

[0245]

[表2]

化合物	FD-MS	化合物	FD-MS
Sub 2-1	m/z=275.08 (C ₁₈ H ₁₃ NS=275.37)	Sub 2-2	m/z=351.11 (C ₂₄ H ₁₇ NS=351.47)
Sub 2-3	m/z=375.11 (C ₂₆ H ₁₇ NS=375.49)	Sub 2-4	m/z=427.14 (C ₃₀ H ₂₁ NS=427.57)
Sub 2-5	m/z=401.12 (C ₂₈ H ₁₉ NS=401.53)	Sub 2-6	m/z=352.10 (C ₂₃ H ₁₆ N ₂ S=352.46)
Sub 2-7	m/z=381.06 (C ₂₄ H ₁₅ NS ₂ =381.51)	Sub 2-8	m/z=457.10 (C ₃₀ H ₁₉ NS ₂ =457.61)
Sub 2-9	m/z=351.11 (C ₂₄ H ₁₇ NS=351.47)	Sub 2-10	m/z=275.08 (C ₁₈ H ₁₃ NS=275.37)

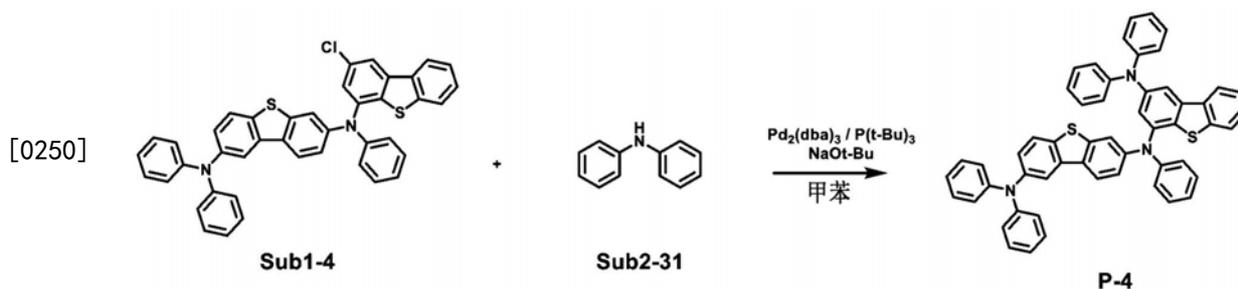
[0246]

[0247]

Sub 2-11	m/z=351.11 (C ₂₄ H ₁₇ NS=351.47)	Sub 2-12	m/z=325.09 (C ₂₂ H ₁₅ NS=325.43)
Sub 2-13	m/z=293.07 (C ₁₈ H ₁₂ FNS=293.36)	Sub 2-14	m/z=401.12 (C ₂₈ H ₁₉ NS=401.53)
Sub 2-15	m/z=402.12 (C ₂₇ H ₁₈ N ₂ S=402.52)	Sub 2-16	m/z=351.11 (C ₂₄ H ₁₇ NS=351.47)
Sub 2-17	m/z=275.08 (C ₁₈ H ₁₃ NS=275.37)	Sub 2-18	m/z=289.09 (C ₁₉ H ₁₅ NS=289.40)
Sub 2-19	m/z=325.09 (C ₂₂ H ₁₅ NS=325.43)	Sub 2-20	m/z=351.11 (C ₂₄ H ₁₇ NS=351.47)
Sub 2-21	m/z=325.09 (C ₂₂ H ₁₅ NS=325.43)	Sub 2-22	m/z=351.11 (C ₂₄ H ₁₇ NS=351.47)
Sub 2-23	m/z=325.09 (C ₂₂ H ₁₅ NS=325.43)	Sub 2-24	m/z=275.08 (C ₁₈ H ₁₃ NS=275.37)
Sub 2-25	m/z=259.10 (C ₁₈ H ₁₃ NO=259.31)	Sub 2-26	m/z=259.10 (C ₁₈ H ₁₃ NO=259.31)
Sub 2-27	m/z=425.14 (C ₃₀ H ₁₉ NO ₂ =425.49)	Sub 2-28	m/z=359.13 (C ₂₆ H ₁₇ NO=359.43)
Sub 2-29	m/z=335.13 (C ₂₄ H ₁₇ NO=335.41)	Sub 2-30	m/z=385.15 (C ₂₈ H ₁₉ N ₂ O=385.47)
Sub 2-31	m/z=169.09 (C ₃₁₂ H ₁₁ N=169.23)	Sub 2-32	m/z=245.12 (C ₁₈ H ₁₅ N=245.33)
Sub 2-33	m/z=219.10 (C ₁₆ H ₁₃ N=219.29)	Sub 2-34	m/z=245.12 (C ₁₈ H ₁₅ N=245.33)
Sub 2-35	m/z=246.12 (C ₁₇ H ₁₄ N ₂ =246.31)	Sub 2-36	m/z=321.15 (C ₂₄ H ₁₉ N=321.42)
Sub 2-37	m/z=269.12 (C ₂₀ H ₁₅ N ₃ =269.35)	Sub 2-38	m/z=183.10 (C ₁₃ H ₁₃ N=183.25)
Sub 2-39	m/z=245.12 (C ₁₈ H ₁₅ N=245.33)	Sub 2-40	m/z=269.12 (C ₂₀ H ₁₅ N ₂ S=269.35)
Sub 2-41	m/z=336.16 (C ₂₄ H ₂₀ N ₂ =336.44)	Sub 2-42	m/z=336.16 (C ₂₄ H ₂₀ N ₂ =336.44)
Sub 2-43	m/z=412.19 (C ₃₀ H ₂₄ N ₂ =412.54)	Sub 2-44	m/z=289.09 (C ₁₉ H ₁₅ NS=289.40)
Sub 2-45	m/z=174.12 (C ₁₂ H ₆ D ₅ N=174.26)	Sub 2-46	m/z=195.10 (C ₁₄ H ₁₃ N=195.27)
Sub 2-47	m/z=407.17 (C ₃₁ H ₂₁ N=407.52)	Sub 2-48	m/z=285.15 (C ₂₁ H ₁₉ N=285.39)
Sub 2-49	m/z=409.18 (C ₃₁ H ₂₃ N=409.53)	Sub 2-50	m/z=386.18 (C ₂₈ H ₂₂ N ₂ =386.50)
Sub 2-51	m/z=219.10 (C ₁₆ H ₁₃ N=219.29)	Sub 2-52	m/z=259.10 (C ₁₈ H ₁₃ NO=259.31)

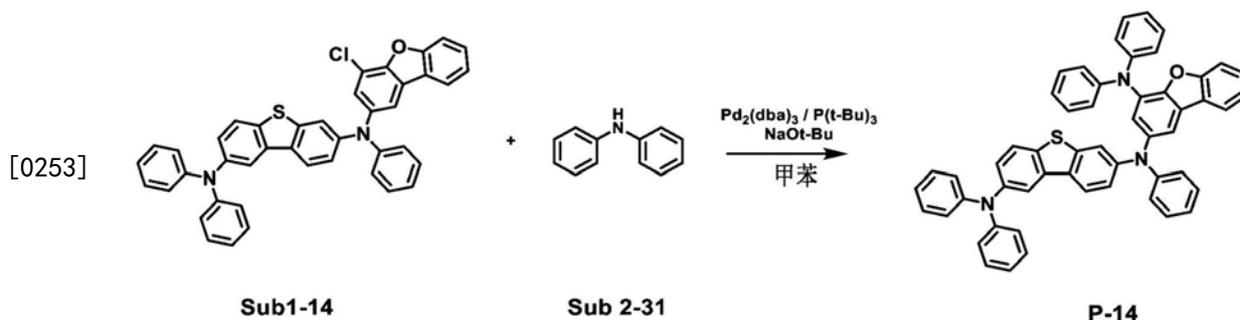
[0248] III. 最终产物 (Final products) 合成示例

[0249] 1. P-4合成例



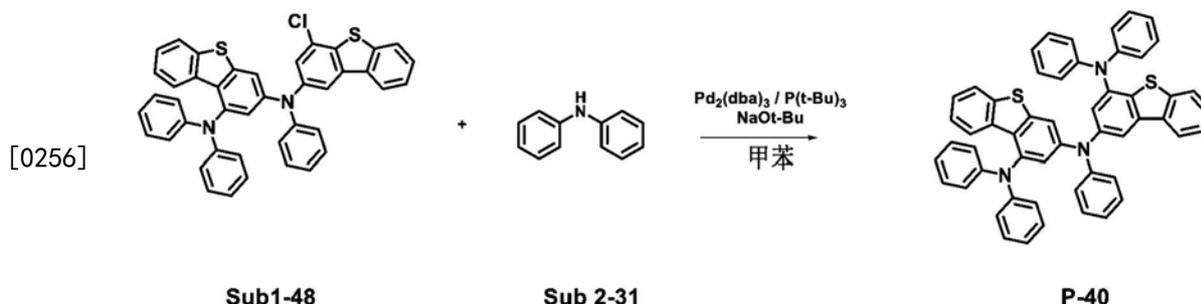
[0251] 在圆底烧瓶中将Sub 1-4 (12.1g, 18.4mmol) 溶于甲苯 (40ml) 中之后, 加入Sub 2-31 (3.1g, 18.4mmol)、Pd₂(dba)₃ (0.5g, 0.6mmol)、50%P (t-Bu)₃ (0.45ml, 1.1mmol)、NaOt-Bu (3.53g, 36.7mmol), 并在110°C下搅拌。反应完成后, 将混合物用CH₂Cl₂和水萃取, 有机层经MgSO₄干燥并浓缩, 然后将得到的化合物进行硅胶柱色谱 (silicagel column), 并升华纯化, 得到10.9g的P-4产物 (收率: 71%)。

[0252] 2. P-14合成例



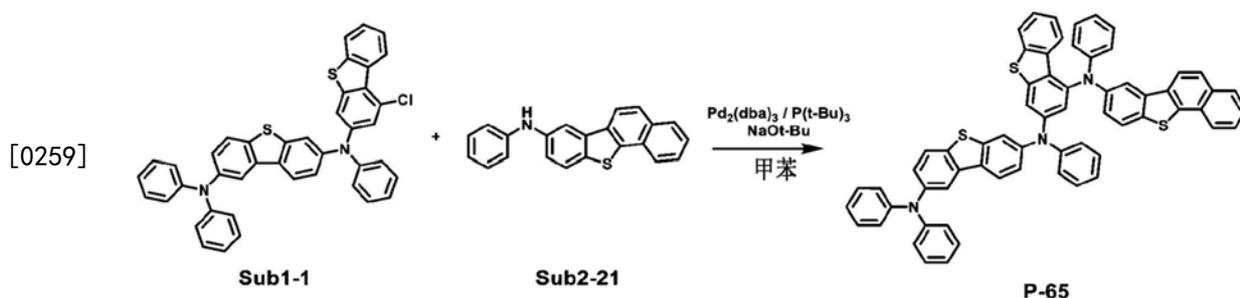
[0254] 在圆底烧瓶中将Sub 1-14 (5.0g, 7.8mmol) 溶于甲苯 (20ml) 中之后, 加入Sub 2-31 (1.3g, 7.8mmol)、 $\text{Pd}_2(\text{dba})_3$ (0.2g, 0.2mmol)、50% $\text{P}(\text{t-Bu})_3$ (0.2ml, 0.5mmol)、 NaOt-Bu (1.5g, 15.5mmol), 并在 120°C 下搅拌。反应完成后, 将混合物用 CH_2Cl_2 和水萃取, 有机层经 MgSO_4 干燥并浓缩, 然后将得到的化合物进行硅胶柱色谱 (silicagel column), 并升华纯化, 得到4.5g的P-14产物 (收率: 75%)。

[0255] 3.P-40合成例



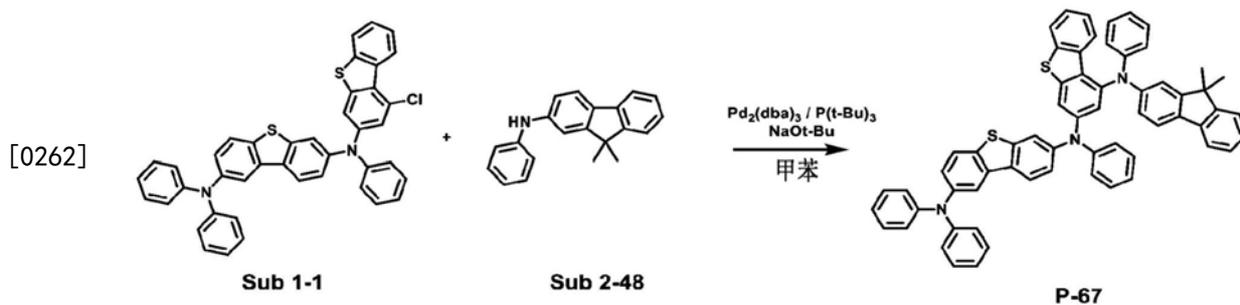
[0257] 在圆底烧瓶中将Sub 1-48 (10.0g, 13.3mmol) 溶解在甲苯 (30ml) 中后, 加入Sub 2-31 (2.3g, 13.3mmol)、 $\text{Pd}_2(\text{dba})_3$ (0.37g, 0.4mmol)、50% $\text{P}(\text{t-Bu})_3$ (0.3ml, 0.8mmol)、 NaOt-Bu (2.6g, 26.7mmol), 并在 110°C 下搅拌。反应完成后, 将混合物用 CH_2Cl_2 和水萃取, 有机层经 MgSO_4 干燥并浓缩, 然后将得到的化合物进行硅胶柱色谱 (silicagel column), 并升华纯化, 得到7.7g的P-40产物 (收率: 73%)。

[0258] 4.P-65合成例



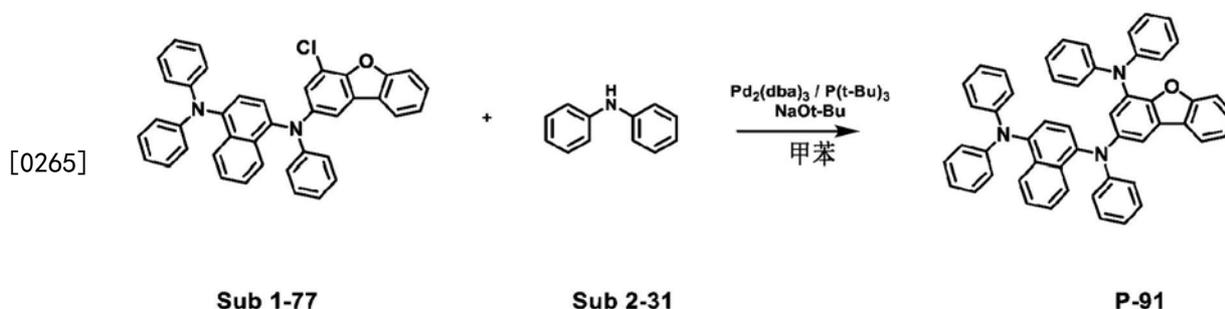
[0260] 在圆底烧瓶中将Sub 1-1 (4.9g, 15.2mmol) 溶解在甲苯 (30ml) 中后, 加入Sub2-21 (10g, 15.2mmol)、 $\text{Pd}_2(\text{dba})_3$ (0.4g, 0.5mmol)、50% $\text{P}(\text{t-Bu})_3$ (0.37ml, 0.9mmol)、 NaOt-Bu (2.2g, 22.8mmol), 并在 110°C 下搅拌。反应完成后, 将混合物用 CH_2Cl_2 和水萃取, 有机层经 MgSO_4 干燥并浓缩, 然后将得到的化合物进行硅胶柱色谱 (silicagel column), 并升华纯化, 得到10.8g的P-65产物 (收率: 75%)。

[0261] 5.P-67合成例



[0263] 在圆底烧瓶中将Sub 1-1 (6.0g, 9.1mmol) 溶解在甲苯 (20ml) 中后, 加入Sub 2-48 (2.6g, 9.1mmol)、 $\text{Pd}_2(\text{dba})_3$ (0.25g, 0.3mmol)、50% $\text{P}(\text{t-Bu})_3$ (0.22ml, 0.5mmol)、 NaOt-Bu (1.7g, 18.2mmol), 并在110℃下搅拌。反应完成后, 将混合物用 CH_2Cl_2 和水萃取, 有机层经 MgSO_4 干燥并浓缩, 然后将得到的化合物进行硅胶柱色谱 (silicagel column), 并升华纯化, 得到5.9g的P-67产物 (收率: 71%)。

[0264] 6.P-91合成例



[0266] 在圆底烧瓶中将Sub 1-77 (7.0g, 11.9mmol) 溶解在甲苯 (30ml) 中后, 加入Sub 2-31 (2.0g, 11.9mmol)、 $\text{Pd}_2(\text{dba})_3$ (0.3g, 0.4mmol)、50% $\text{P}(\text{t-Bu})_3$ (0.3ml, 0.7mmol)、 NaOt-Bu (2.3g, 23.8mmol), 并在110℃下搅拌。反应完成后, 将混合物用 CH_2Cl_2 和水萃取, 有机层经 MgSO_4 干燥并浓缩, 然后将得到的化合物进行硅胶柱色谱 (silicagel column), 并升华纯化, 得到11.9g的P-91产物 (收率: 70%)。

[0267] 同时, 根据上述合成例制备的本发明的化合物P-1至P-112的FD-MS值示于下表3中。

[0268] [表3]

[0269]

化合物	FD-MS	化合物	FD-MS
P-1	m/z=791.24 (C ₅₄ H ₃₇ N ₃ S ₂ =792.03)	P-2	m/z=791.24 (C ₅₄ H ₃₇ N ₃ S ₂ =792.03)
P-3	m/z=791.24 (C ₅₄ H ₃₇ N ₃ S ₂ =792.03)	P-4	m/z=791.24 (C ₅₄ H ₃₇ N ₃ S ₂ =792.03)
P-5	m/z=791.24 (C ₅₄ H ₃₇ N ₃ S ₂ =792.03)	P-6	m/z=791.24 (C ₅₄ H ₃₇ N ₃ S ₂ =792.03)
P-7	m/z=791.24 (C ₅₄ H ₃₇ N ₃ S ₂ =792.03)	P-8	m/z=791.24 (C ₅₄ H ₃₇ N ₃ S ₂ =792.03)
P-9	m/z=791.24 (C ₅₄ H ₃₇ N ₃ S ₂ =792.03)	P-10	m/z=791.24 (C ₅₄ H ₃₇ N ₃ S ₂ =792.03)
P-11	m/z=791.24 (C ₅₄ H ₃₇ N ₃ S ₂ =792.03)	P-12	m/z=791.24 (C ₅₄ H ₃₇ N ₃ S ₂ =792.03)
P-13	m/z=775.27 (C ₅₄ H ₃₇ N ₃ OS=775.97)	P-14	m/z=775.27 (C ₅₄ H ₃₇ N ₃ OS=775.97)
P-15	m/z=775.27 (C ₅₄ H ₃₇ N ₃ OS=775.97)	P-16	m/z=775.27 (C ₅₄ H ₃₇ N ₃ OS=775.97)
P-17	m/z=841.26 (C ₅₈ H ₃₉ N ₃ S ₂ =842.09)	P-18	m/z=841.26 (C ₅₈ H ₃₉ N ₃ S ₂ =842.09)
P-19	m/z=825.28 (C ₅₈ H ₃₉ N ₃ OS=826.03)	P-20	m/z=825.28 (C ₅₈ H ₃₉ N ₃ OS=826.03)
P-21	m/z=791.24 (C ₅₄ H ₃₇ N ₃ S ₂ =792.03)	P-22	m/z=791.24 (C ₅₄ H ₃₇ N ₃ S ₂ =792.03)
P-23	m/z=791.24 (C ₅₄ H ₃₇ N ₃ S ₂ =792.03)	P-24	m/z=791.24 (C ₅₄ H ₃₇ N ₃ S ₂ =792.03)
P-25	m/z=791.24 (C ₅₄ H ₃₇ N ₃ S ₂ =792.03)	P-26	m/z=791.24 (C ₅₄ H ₃₇ N ₃ S ₂ =792.03)
P-27	m/z=791.24 (C ₅₄ H ₃₇ N ₃ S ₂ =792.03)	P-28	m/z=791.24 (C ₅₄ H ₃₇ N ₃ S ₂ =792.03)
P-29	m/z=791.24 (C ₅₄ H ₃₇ N ₃ S ₂ =792.03)	P-30	m/z=775.27 (C ₅₄ H ₃₇ N ₃ OS=775.97)
P-31	m/z=791.24 (C ₅₄ H ₃₇ N ₃ S ₂ =792.03)	P-32	m/z=791.24 (C ₅₄ H ₃₇ N ₃ S ₂ =792.03)
P-33	m/z=791.24 (C ₅₄ H ₃₇ N ₃ S ₂ =792.03)	P-34	m/z=791.24 (C ₅₄ H ₃₇ N ₃ S ₂ =792.03)
P-35	m/z=791.24 (C ₅₄ H ₃₇ N ₃ S ₂ =792.03)	P-36	m/z=791.24 (C ₅₄ H ₃₇ N ₃ S ₂ =792.03)
P-37	m/z=791.24 (C ₅₄ H ₃₇ N ₃ S ₂ =792.03)	P-38	m/z=791.24 (C ₅₄ H ₃₇ N ₃ S ₂ =792.03)
P-39	m/z=867.27 (C ₆₀ H ₄₁ N ₃ S ₂ =868.13)	P-40	m/z=791.24 (C ₅₄ H ₃₇ N ₃ S ₂ =792.03)
P-41	m/z=775.27 (C ₅₄ H ₃₇ N ₃ OS=775.97)	P-42	m/z=851.30 (C ₆₀ H ₄₁ N ₃ OS=852.07)
P-43	m/z=759.29 (C ₅₄ H ₃₇ N ₃ O ₂ =759.91)	P-44	m/z=835.32 (C ₆₀ H ₄₁ N ₃ O ₂ =836.01)
P-45	m/z=841.26 (C ₅₈ H ₃₉ N ₃ S ₂ =842.09)	P-46	m/z=791.24 (C ₅₄ H ₃₇ N ₃ S ₂ =792.03)
P-47	m/z=775.27 (C ₅₄ H ₃₇ N ₃ OS=775.97)	P-48	m/z=759.29 (C ₅₄ H ₃₇ N ₃ O ₂ =759.91)
P-49	m/z=841.26 (C ₅₈ H ₃₉ N ₃ S ₂ =842.09)	P-50	m/z=841.26 (C ₅₈ H ₃₉ N ₃ S ₂ =842.09)
P-51	m/z=867.27 (C ₆₀ H ₄₁ N ₃ S ₂ =868.13)	P-52	m/z=867.27 (C ₆₀ H ₄₁ N ₃ S ₂ =868.13)
P-53	m/z=867.27 (C ₆₀ H ₄₁ N ₃ S ₂ =868.13)	P-54	m/z=867.27 (C ₆₀ H ₄₁ N ₃ S ₂ =868.13)

P-55	m/z=775.27 (C ₅₄ H ₃₇ N ₃ OS=775.97)	P-56	m/z=775.27 (C ₅₄ H ₃₇ N ₃ OS=775.97)
P-57	m/z=775.27 (C ₅₄ H ₃₇ N ₃ OS=775.97)	P-58	m/z=867.27 (C ₆₀ H ₄₁ N ₃ S ₂ =868.13)
P-59	m/z=867.27 (C ₆₀ H ₄₁ N ₃ S ₂ =868.13)	P-60	m/z=867.27 (C ₆₀ H ₄₁ N ₃ S ₂ =868.13)
P-61	m/z=897.23 (C ₆₀ H ₃₉ N ₃ S ₃ =898.17)	P-62	m/z=897.23 (C ₆₀ H ₃₉ N ₃ S ₃ =898.17)
P-63	m/z=1029.32 (C ₇₃ H ₄₇ N ₃ S ₂ =1030.32)	P-64	m/z=881.25 (C ₆₀ H ₃₉ N ₃ OS ₂ =882.11)
P-65	m/z=947.25 (C ₆₄ H ₄₁ N ₃ S ₃ =948.23)	P-66	m/z=931.27 (C ₆₄ H ₄₁ N ₃ OS ₂ =932.17)
P-67	m/z=907.31 (C ₆₃ H ₄₅ N ₃ S ₂ =908.19)	P-68	m/z=805.26 (C ₅₅ H ₃₉ N ₃ S ₂ =806.06)
P-69	m/z=796.27 (C ₅₄ H ₃₂ D ₅ N ₃ S ₂ =797.06)	P-70	m/z=817.26 (C ₅₆ H ₃₉ N ₃ S ₂ =818.07)
P-71	m/z=805.26 (C ₅₅ H ₃₉ N ₃ S ₂ =806.06)	P-72	m/z=809.23 (C ₅₄ H ₃₆ FN ₃ S ₂ =810.02)
P-73	m/z=836.32 (C ₅₉ H ₄₀ N ₄ O ₂ =837.00)	P-74	m/z=867.27 (C ₆₀ H ₄₁ N ₃ S ₂ =868.13)
P-75	m/z=816.24 (C ₅₅ H ₃₆ N ₄ S ₂ =817.04)	P-76	m/z=891.27 (C ₆₂ H ₄₁ N ₃ S ₂ =892.15)
P-77	m/z=958.32 (C ₆₆ H ₄₆ N ₄ S ₂ =959.24)	P-78	m/z=958.32 (C ₆₆ H ₄₆ N ₄ S ₂ =959.24)
P-79	m/z=958.32 (C ₆₆ H ₄₆ N ₄ S ₂ =959.24)	P-80	m/z=795.27 (C ₅₄ H ₃₃ D ₄ N ₃ S ₂ =796.06)
P-81	m/z=791.24 (C ₅₄ H ₃₇ N ₃ S ₂ =792.03)	P-82	m/z=791.24 (C ₅₄ H ₃₇ N ₃ S ₂ =792.03)
P-83	m/z=881.25 (C ₆₀ H ₃₉ N ₃ OS ₂ =882.11)	P-84	m/z=791.24 (C ₅₄ H ₃₇ N ₃ S ₂ =792.03)
P-85	m/z=792.24 (C ₅₃ H ₃₆ N ₄ S ₂ =793.02)	P-86	m/z=761.29 (C ₅₄ H ₃₉ N ₃ S=761.99)
P-87	m/z=791.24 (C ₅₄ H ₃₇ N ₃ S ₂ =792.03)	P-88	m/z=685.26 (C ₄₈ H ₃₅ N ₃ S=685.89)
P-89	m/z=761.29 (C ₅₄ H ₃₉ N ₃ S=761.99)	P-90	m/z=685.26 (C ₄₈ H ₃₅ N ₃ S=685.89)
P-91	m/z=719.29 (C ₅₂ H ₃₇ N ₃ O=719.89)	P-92	m/z=801.32 (C ₅₇ H ₄₃ N ₃ S=802.05)
P-93	m/z=775.27 (C ₅₄ H ₃₇ N ₃ OS=775.97)	P-94	m/z=775.27 (C ₅₄ H ₃₇ N ₃ OS=775.97)
P-95	m/z=789.28 (C ₅₅ H ₃₉ N ₃ OS=790.00)	P-96	m/z=775.27 (C ₅₄ H ₃₇ N ₃ OS=775.97)
P-97	m/z=775.27 (C ₅₄ H ₃₇ N ₃ OS=775.97)	P-98	m/z=759.29 (C ₅₄ H ₃₇ N ₃ O ₂ =759.91)
P-99	m/z=759.29 (C ₅₄ H ₃₇ N ₃ O ₂ =759.91)	P-100	m/z=759.29 (C ₅₄ H ₃₇ N ₃ O ₂ =759.91)
P-101	m/z=881.25 (C ₆₀ H ₃₉ N ₃ OS ₂ =882.11)	P-102	m/z=865.28 (C ₆₀ H ₃₉ N ₃ O ₂ S=866.05)
P-103	m/z=1031.34 (C ₇₃ H ₄₉ N ₃ S ₂ =1032.34)	P-104	m/z=849.30 (C ₆₀ H ₃₉ N ₃ O ₃ =849.99)
P-105	m/z=907.31 (C ₆₃ H ₄₅ N ₃ S ₂ =908.19)	P-106	m/z=867.27 (C ₆₀ H ₄₁ N ₃ S ₂ =868.13)
P-107	m/z=849.30 (C ₆₀ H ₃₉ N ₃ O ₃ =849.99)	P-108	m/z=897.23 (C ₆₀ H ₃₉ N ₃ S ₃ =898.17)
P-109	m/z=881.25 (C ₆₀ H ₃₉ N ₃ OS ₂ =882.11)	P-110	m/z=791.24 (C ₅₄ H ₃₇ N ₃ S ₂ =792.03)
P-111	m/z=800.26 (C ₅₅ H ₃₆ N ₄ OS=800.98)	P-112	m/z=789.30 (C ₅₅ H ₃₉ N ₃ O ₃ =789.94)

[0270]

[0271] 在P-1至P-112的化合物中,未描述具体合成例的其余化合物也可以使用下表4所示的Sub 1和Sub 2化合物,通过与上述合成方法相似的方法来合成。当表4的Sub 1列中描述的每种化合物与Sub 2列中描述的化合物反应时,可以合成产物列中描述的化合物,但是合成方法不限于此。

[0272] [表4]

[0273]

Sub 1	Sub 2	最终产物	Sub 1	Sub 2	最终产物	Sub 1	Sub 2	最终产物
-------	-------	------	-------	-------	------	-------	-------	------

Sub 1-1	Sub 2-31	P-1	Sub 1-47	Sub 2-31	P-39	Sub 1-5	Sub 2-42	P-77
Sub 1-2	Sub 2-31	P-2	Sub 1-48	Sub 2-31	P-40	Sub 1-6	Sub 2-31	P-78
Sub 1-3	Sub 2-31	P-3	Sub 1-49	Sub 2-31	P-41	Sub 1-70	Sub 2-31	P-79
Sub 1-4	Sub 2-31	P-4	Sub 1-50	Sub 2-31	P-42	Sub 1-71	Sub 2-31	P-80
Sub 1-5	Sub 2-31	P-5	Sub 1-51	Sub 2-31	P-43	Sub 1-99	Sub 2-31	P-81
Sub 1-6	Sub 2-31	P-6	Sub 1-52	Sub 2-31	P-44	Sub 1-100	Sub 2-31	P-82
Sub 1-7	Sub 2-31	P-7	Sub 1-53	Sub 2-51	P-45	Sub 1-72	Sub 2-31	P-83
Sub 1-8	Sub 2-31	P-8	Sub 1-54	Sub 2-31	P-46	Sub 1-101	Sub 2-31	P-84
Sub 1-9	Sub 2-31	P-9	Sub 1-93	Sub 2-31	P-47	Sub 1-73	Sub 2-31	P-85
Sub 1-10	Sub 2-31	P-10	Sub 1-94	Sub 2-31	P-48	Sub 1-102	Sub 2-42	P-86
Sub 1-11	Sub 2-31	P-11	Sub 1-37	Sub 2-31	P-49	Sub 1-103	Sub 2-41	P-87
Sub 1-12	Sub 2-31	P-12	Sub 1-38	Sub 2-31	P-50	Sub 1-76	Sub 2-31	P-88
Sub 1-13	Sub 2-31	P-13	Sub 1-41	Sub 2-31	P-51	Sub 1-104	Sub 2-31	P-89
Sub 1-14	Sub 2-31	P-14	Sub 1-42	Sub 2-31	P-52	Sub 1-105	Sub 2-31	P-90
Sub 1-15	Sub 2-31	P-15	Sub 1-43	Sub 2-31	P-53	Sub 1-77	Sub 2-31	P-91
Sub 1-16	Sub 2-31	P-16	Sub 1-44	Sub 2-31	P-54	Sub 1-78	Sub 2-31	P-92
Sub 1-17	Sub 2-31	P-17	Sub 1-40	Sub 2-31	P-55	Sub 1-79	Sub 2-31	P-93
Sub 1-18	Sub 2-31	P-18	Sub 1-95	Sub 2-31	P-56	Sub 1-80	Sub 2-31	P-94
Sub 1-19	Sub 2-31	P-19	Sub 1-57	Sub 2-31	P-57	Sub 1-81	Sub 2-31	P-95
Sub 1-20	Sub 2-31	P-20	Sub 1-58	Sub 2-31	P-58	Sub 1-82	Sub 2-31	P-96
Sub 1-21	Sub 2-31	P-21	Sub 1-59	Sub 2-34	P-59	Sub 1-39	Sub 2-31	P-97
Sub 1-22	Sub 2-31	P-22	Sub 1-1	Sub 2-34	P-60	Sub 1-106	Sub 2-31	P-98
Sub 1-23	Sub 2-31	P-23	Sub 1-65	Sub 2-31	P-61	Sub 1-107	Sub 2-31	P-99
Sub 1-24	Sub 2-31	P-24	Sub 1-96	Sub 2-31	P-62	Sub 1-108	Sub 2-31	P-100
Sub 1-25	Sub 2-31	P-25	Sub 1-66	Sub 2-31	P-63	Sub 1-85	Sub 2-31	P-101
Sub 1-26	Sub 2-31	P-26	Sub 1-67	Sub 2-31	P-64	Sub 1-86	Sub 2-31	P-102
Sub 1-27	Sub 2-31	P-27	Sub 1-1	Sub 2-21	P-65	Sub 1-87	Sub 2-31	P-103
Sub 1-28	Sub 2-31	P-28	Sub 1-97	Sub 2-25	P-66	Sub 1-88	Sub 2-31	P-104
Sub 1-29	Sub 2-31	P-29	Sub 1-1	Sub 2-48	P-67	Sub 1-54	Sub 2-48	P-105
Sub 1-30	Sub 2-31	P-30	Sub 1-98	Sub 2-31	P-68	Sub 1-89	Sub 2-31	P-106
Sub 1-31	Sub 2-31	P-31	Sub 1-1	Sub 2-45	P-69	Sub 1-51	Sub 2-52	P-107
Sub 1-32	Sub 2-31	P-32	Sub 1-60	Sub 2-31	P-70	Sub 1-54	Sub 2-17	P-108
Sub 1-33	Sub 2-31	P-33	Sub 1-61	Sub 2-31	P-71	Sub 1-110	Sub 2-31	P-109
Sub 1-34	Sub 2-31	P-34	Sub 1-62	Sub 2-31	P-72	Sub 1-109	Sub 2-31	P-110
Sub 1-35	Sub 2-31	P-35	Sub 1-63	Sub 2-35	P-73	Sub 1-90	Sub 2-31	P-111
Sub 1-36	Sub 2-31	P-36	Sub 1-64	Sub 2-31	P-74	Sub 1-91	Sub 2-31	P-112
Sub 1-45	Sub 2-31	P-37	Sub 1-68	Sub 2-31	P-75			
Sub 1-46	Sub 2-31	P-38	Sub 1-1	Sub 2-40	P-76			

[0274] 所述合成例是化学式1表示的化合物中的一些示例性化合物的合成例。所述反应基于布赫瓦尔德-哈特维希反应,铃木交叉偶联反应,宫浦硼酸化反应,铃木交叉偶联反应,分子内酸诱导的环化反应(J.mater.Chem.1999,9,2095.),钯(II)催化的氧化环化反应(Org.Lett.2011,13,5504),PPh₃介导的还原环化反应(J.Org.Chem.2005,70,5014.),格氏反应和循环脱水反应。本领域技术人员将容易理解,即使键合了化学式1中定义的其他取代

基(X、Ar¹至Ar⁵、R¹、a和L¹至L³)，除了特定合成实施例中指定的取代基之外，该反应仍可进行。

[0275] 有机电子元件的制备和评价

[0276] [实施例1]红色有机电致发光元件(发光辅助层)

[0277] 根据常规方法，使用本发明的化合物作为发光辅助层材料来制造有机电致发光元件。首先，通过在玻璃基板上形成的ITO(氧化铟锡)层(阳极)上真空沉积4,4',4''-三[2-萘基(苯基)氨基]三苯胺(以下称2-TNATA)至60nm的厚度来形成空穴注入层。然后，在所述空穴注入层上真空沉积N,N'-双(1-萘基)-N,N'-双苯基-(1,1'-联苯)-4,4'-二胺(以下称为NPB)至60nm的厚度来形成空穴传输层。随后，在所述空穴传输层上真空沉积本发明的化合物P-1至20nm的厚度来形成发光辅助层后，在所述发光辅助层上将4,4'-N,N'-二咔唑-联苯(以下称CBP)作为主体材料，双-(1-苯基异喹啉基)铱(III)乙酰丙酮化物(以下称为(piq)₂Ir(acac))作为掺杂剂，以95:5的重量比进行掺杂，并真空沉积至30nm的厚度以形成发光层。随后，在所述发光层上真空沉积(1,1'-二苯基)-4-羰基双(2-甲基-8-羟基喹啉)铝(以下称BALq)至10nm的厚度以形成空穴阻挡层，并在所述空穴阻挡层上真空沉积双(10-羟基苯并[h]喹啉基)铍(以下称BeBq₂)至50nm的厚度以形成电子传输层。之后，将作为碱金属卤化物的LiF沉积至0.2nm的厚度以形成电子注入层，然后将Al沉积至150nm的厚度以形成阴极，从而制造有机电致发光元件。

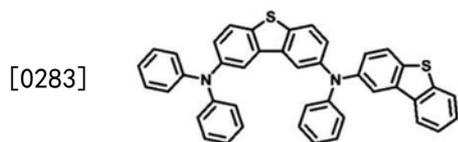
[0278] [实施例2]至[实施例17]红色有机电致发光元件(发光辅助层)

[0279] 除了使用下表5中所述的本发明的化合物P-3至P-98来代替本发明的化合物P-1作为发光辅助层材料以外，以与实施例1相同的方法来制造有机电致发光元件。

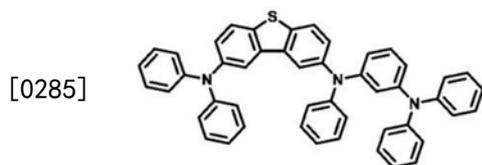
[0280] [比较例2]至[比较例3]

[0281] 除了使用下表5中所述的比较化合物1至3来代替本发明的化合物P-1作为发光辅助层材料以外，以与实施例1相同的方法来制造有机电致发光元件。

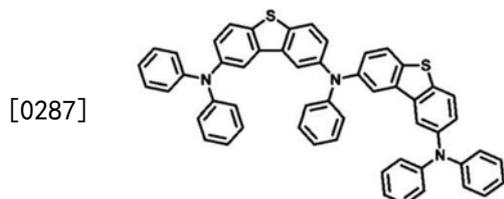
[0282] <比较化合物1>



[0284] <比较化合物2>



[0286] <比较化合物3>



[0288] 在根据本发明的实施例1至17和比较例1至3制造的有机电致发光元件中，通过施

加正向偏置直流电压,使用photoresearch公司的PR-650来测量电致发光(EL)特性,并通过McScience公司制造的寿命测量设备在2500cd/m²的亮度下测量T95寿命,测量结果示于下表5中。

[0289] [表5]

	化合物	电压 (V)	电流密度 (mA/cm ²)	亮度 (cd/m ²)	效率 (cd/A)	寿命 T95 (hr)	CIE	
							x	y
比较例(1)	比较化合物1	6.9	37.3	2500.0	9.6	108.3	0.63	0.30
比较例(2)	比较化合物2	6.6	18.1	2500.0	13.8	124.8	0.63	0.32
比较例(3)	比较化合物3	6.4	12.4	2500.0	20.0	136.7	0.62	0.33
实施例(1)	化合物(P-1)	5.9	8.5	2500.0	29.5	160.3	0.61	0.32
实施例(2)	化合物(P-3)	5.9	8.6	2500.0	28.9	158.7	0.61	0.30
实施例(3)	化合物(P-7)	6.0	9.4	2500.0	26.6	157.4	0.62	0.35
实施例(4)	化合物(P-13)	6.1	9.0	2500.0	27.8	163.7	0.64	0.34
实施例(5)	化合物(P-31)	6.2	9.3	2500.0	27.0	154.1	0.63	0.34
实施例(6)	化合物(P-37)	6.1	10.0	2500.0	24.9	153.2	0.61	0.35
实施例(7)	化合物(P-40)	6.2	10.1	2500.0	24.7	150.7	0.64	0.34
实施例(8)	化合物(P-45)	6.2	10.8	2500.0	23.2	149.2	0.60	0.35
实施例(9)	化合物(P-46)	6.3	10.4	2500.0	24.0	147.5	0.63	0.33
实施例(10)	化合物(P-47)	6.3	11.2	2500.0	22.2	144.6	0.61	0.32
实施例(11)	化合物(P-49)	6.1	9.5	2500.0	26.4	151.8	0.64	0.34
实施例(12)	化合物(P-51)	6.1	9.8	2500.0	25.5	150.4	0.62	0.32
实施例(13)	化合物(P-55)	6.0	9.1	2500.0	27.5	165.7	0.65	0.31
实施例(14)	化合物(P-56)	6.0	9.3	2500.0	27.0	164.9	0.61	0.32
实施例(15)	化合物(P-72)	6.2	11.6	2500.0	21.6	139.4	0.65	0.31
实施例(16)	化合物(P-88)	6.3	12.2	2500.0	20.4	136.9	0.63	0.32
实施例(17)	化合物(P-98)	6.2	10.3	2500.0	24.3	167.4	0.60	0.32

[0291] 从表5的结果可以看出,当通过使用本发明的有机电致发光元件用材料作为发光辅助层材料来制造红色有机电致发光元件时,与使用比较化合物1至3的比较例相比,该元件的电性能得以改善。首先,使用其中三个胺基键合的比较化合物2至3的比较例2至3的元件结果优于具有其中两个胺基键合的结构比较化合物1。尽管与比较化合物相似,但是可以看出,使用在二苯并噻吩或二苯并呋喃的同一环上取代两个胺基的本发明化合物来制备的实施例1至17的元件结果更优异。

[0292] 详细地,可以看出,其中三个胺基键合的比较化合物2至3显示出比其中两个胺基键合的结构比较化合物1更好的元件特性。这不会过度增加引入的胺的数量,并且通过在适当的范围内引入胺,可以控制空穴传输层或发光辅助层的HOMO(最高占据分子轨道)能级,得到与发光层的最合适的HOMO能级差,并且由于电荷平衡的增加,因此在发光层内部更好地进行发光。

[0293] 另外,当将比较化合物3与本发明的化合物进行比较时,键合三个胺基是相同的,但是与比较化合物不同,其中两个胺基键合到二苯并噻吩或二苯并呋喃的同一环上的本发

明化合物显示出显著高的结果。

[0294] 这些结果可以通过比较化合物3和本发明化合物的HOMO值来解释。参照下表6,可以看出本发明的化合物P-1和P-38具有比比较化合物3更深的HOMO值。

[0295] [表6]

[0296]	比较化合物3	P-1	P-38
HOMO (eV)	4.784	4.890	4.871

[0297] 可以判断由于深的HOMO能级,本发明的化合物具有更强的空穴特性,并且增加了空穴以及电子的稳定性,从而可以在发光辅助层中更有效地传输空穴。结果,可以认为发光层中的电荷平衡增加,从而提高了元件整体的驱动电压,效率和寿命。

[0298] [实施例18]绿色有机电致发光元件(发光辅助层)

[0299] 通过在玻璃基板上形成的ITO(氧化铟锡)层(阳极)上真空沉积2-TNATA至60nm的厚度来形成空穴注入层。然后,在所述空穴注入层上真空沉积NPB至60nm的厚度来形成空穴传输层。随后,在所述空穴传输层上真空沉积本发明的化合物P-5至20nm的厚度来形成发光辅助层。之后,在所述发光辅助层上将CBP作为主体材料,三(2-苯基吡啶)-铱(以下称为Ir(ppy)₃)作为掺杂剂,以95:5的重量比进行掺杂,并真空沉积至30nm的厚度以形成发光层。随后,在所述发光层上真空沉积BA1q至10nm的厚度以形成空穴阻挡层,在所述空穴阻挡层上真空沉积BeBq₂至50nm的厚度以形成电子传输层。之后,将作为碱金属卤化物的LiF沉积至0.2nm的厚度以形成电子注入层,然后将Al沉积至150nm的厚度以形成阴极,从而制造有机电致发光元件。

[0300] [实施例19]至[实施例34]绿色有机电致发光元件(发光辅助层)

[0301] 除了使用下表5中所述的本发明的化合物P-15至P-112来代替本发明的化合物P-5作为发光辅助层材料以外,以与实施例18相同的方法来制造有机电致发光元件。

[0302] [比较例4]至[比较例6]

[0303] 除了使用下表5所示的比较化合物1至3代替本发明的化合物P-5作为发光辅助层材料以外,以与实施例18相同的方法来制造有机电致发光元件。

[0304] 在根据本发明的实施例18至34和比较例4至6制造的有机电致发光元件中,通过施加正向偏置直流电压,使用photoresearch公司的PR-650来测量电致发光(EL)特性,并通过McScience公司制造的寿命测量设备在5000cd/m²的亮度下测量T95寿命,测量结果示于下表7中。

[0305] [表7]

[0306]

	化合物	电压 (V)	电流密度 (mA/cm ²)	亮度 (cd/m ²)	效率 (cd/A)	寿命 T95 (hr)	CIE	
							x	y
比较例(4)	比较化合物1	5.9	15.7	5000.0	31.9	114.8	0.30	0.63
比较例(5)	比较化合物2	5.8	14.3	5000.0	34.9	119.5	0.33	0.65
比较例(6)	比较化合物3	5.7	13.1	5000.0	38.1	123.2	0.34	0.62
实施例(18)	化合物(P-5)	4.8	7.9	5000.0	63.3	133.4	0.31	0.64
实施例(19)	化合物(P-15)	4.9	7.8	5000.0	64.1	135.2	0.30	0.61
实施例(20)	化合物(P-16)	4.9	7.7	5000.0	64.7	135.1	0.35	0.60
实施例(21)	化合物(P-20)	5.2	7.6	5000.0	66.0	137.8	0.33	0.64
实施例(22)	化合物(P-37)	5.1	7.5	5000.0	66.6	138.6	0.35	0.64
实施例(23)	化合物(P-38)	5.1	7.3	5000.0	68.4	140.6	0.33	0.62
实施例(24)	化合物(P-39)	5.2	7.4	5000.0	67.2	139.2	0.31	0.61
实施例(25)	化合物(P-41)	5.2	7.1	5000.0	70.1	147.5	0.32	0.64
实施例(26)	化合物(P-42)	5.3	7.2	5000.0	69.6	141.6	0.34	0.62
实施例(27)	化合物(P-43)	5.4	6.8	5000.0	73.4	145.7	0.34	0.64
实施例(28)	化合物(P-44)	5.4	7.0	5000.0	71.7	143.2	0.34	0.64
实施例(29)	化合物(P-63)	5.0	7.9	5000.0	63.1	132.4	0.31	0.61
实施例(30)	化合物(P-92)	5.1	8.0	5000.0	62.2	129.9	0.31	0.62
实施例(31)	化合物(P-100)	5.0	7.6	5000.0	65.6	135.9	0.32	0.64
实施例(32)	化合物(P-106)	5.4	7.7	5000.0	64.9	134.1	0.34	0.62
实施例(33)	化合物(P-107)	5.4	7.0	5000.0	71.3	142.3	0.32	0.63
实施例(34)	化合物(P-112)	5.3	6.9	5000.0	72.4	143.2	0.33	0.64

[0307] 从上面表7的结果可以看出,当通过使用本发明的用于有机电致发光元件的材料作为发光辅助层材料来制造绿色有机电致发光元件时,与使用比较化合物1至3的比较例相比,可以降低有机电致发光元件的驱动电压,并且可以提高发光效率和寿命。如表5所述,其中两个胺基键合到二苯并噻吩或二苯并呋喃的同一环上的本发明化合物的化学和物理性质可能与比较化合物的化学和物理性质显着不同,因此可以得出改进的元件结果。

[0308] 同时,可以看出,使用本发明的化合物作为发光辅助层材料的红色有机电致发光元件和绿色有机电致发光元件的元件特性根据本发明化合物的胺基的键合位置而变化,如下表8所示。

[0309] [表8]

[0310]

	A	B
结构		

[0311] 参考以上表5和表7,可以看出,在红色有机电致发光元件中,具有A型胺基键合位

点的化合物具有更好的元件特性,而在绿色有机电致发光元件中,具有B型胺基键合位点的化合物表现出比A型更高的效率和寿命。结果是,即使核是相似的化合物,该化合物的物理性质,如空穴特性,光效率特性,能级(LUMO、HOMO能级;T1能级),空穴注入和迁移率特性以及电子阻挡特性根据取代基的键合位置而变化,这可能导致完全不同的元件结果。

[0312] [实施例35]绿色有机电致发光元件(空穴传输层)

[0313] 通过在玻璃基板上形成的ITO(氧化铟锡)层(阳极)上真空沉积2-TNATA至60nm的厚度来形成空穴注入层。然后,在所述空穴注入层上真空沉积本发明的化合物P-2至60nm的厚度来形成空穴传输层。随后,在所述空穴传输层上将CBP作为主体材料,Ir(ppy)₃作为掺杂剂,以90:10的重量比进行掺杂,并真空沉积至30nm的厚度以形成发光层。随后,在所述发光层上真空沉积BA1q至10nm的厚度以形成空穴阻挡层,在所述空穴阻挡层上真空沉积BeBq₂至50nm的厚度以形成电子传输层。之后,将作为碱金属卤化物的LiF沉积至0.2nm的厚度以形成电子注入层,然后将Al沉积至150nm的厚度以形成阴极,从而制造有机电致发光元件。

[0314] [实施例36]至[实施例46]绿色有机电致发光元件(空穴传输层)

[0315] 除了使用下表9中所述的本发明的化合物P-4至P-105来代替本发明的化合物P-2作为空穴传输层材料以外,以与实施例35相同的方法来制造有机电致发光元件。

[0316] [比较例36]至[比较例46]绿色有机电致发光元件(空穴传输层)

[0317] 除了使用下表9所示的比较化合物1至3代替本发明的化合物P-2作为空穴传输层材料以外,以与实施例35相同的方法来制造有机电致发光元件。

[0318] 在根据本发明的实施例35至46和比较例7至9制造的有机电致发光元件中,通过施加正向偏置直流电压,使用photoresearch公司的PR-650来测量电致发光(EL)特性,并通过McScience公司制造的寿命测量设备在5000cd/m²的亮度下测量T95寿命,测量结果示于下表9中。

[0319] [表9]

[0320]

	化合物	电压 (V)	电流密度 (mA/cm ²)	亮度 (cd/m ²)	效率 (cd/A)	寿命 T95 (hr)	CIE	
							x	y
化合物(7)	比较化合物1	5.9	10.2	5000.0	24.4	79.1	0.31	0.64
化合物(8)	比较化合物2	5.8	37.3	5000.0	27.9	82.8	0.34	0.63
化合物(9)	比较化合物3	5.8	12.4	5000.0	35.6	120.9	0.32	0.61
实施例(35)	化合物(P-2)	5.1	5.6	5000.0	44.7	142.2	0.30	0.60
实施例(36)	化合物(P-4)	5.1	5.7	5000.0	43.7	139.6	0.33	0.64
实施例(37)	化合物(P-16)	5.3	5.9	5000.0	42.6	148.6	0.30	0.62
实施例(38)	化合物(P-30)	5.2	6.0	5000.0	41.4	152.1	0.33	0.63
实施例(39)	化合物(P-38)	5.2	6.1	5000.0	40.9	142.4	0.31	0.61
实施例(40)	化合物(P-42)	5.3	6.2	5000.0	40.1	144.3	0.31	0.64
实施例(41)	化合物(P-52)	5.4	6.3	5000.0	39.6	136.4	0.32	0.64
实施例(42)	化合物(P-67)	5.3	6.5	5000.0	38.4	140.0	0.33	0.62
实施例(43)	化合物(P-70)	5.4	6.4	5000.0	38.9	138.6	0.34	0.64
实施例(44)	化合物(P-90)	5.5	7.0	5000.0	35.5	126.3	0.34	0.64
实施例(45)	化合物(P-99)	5.4	6.9	5000.0	36.2	156.8	0.31	0.61
实施例(46)	化合物(P-105)	5.4	6.6	5000.0	37.8	132.1	0.35	0.63

[0321] 从表9的结果可以看出,当通过使用本发明的有机电致发光元件用材料作为空穴传输层的材料来制造绿色有机电致发光元件时,与使用比较化合物1至3的比较例相比,可以降低有机电致发光元件的驱动电压,并且可以提高发光效率和寿命。首先,可以看出,与其中两个胺基键合的比较化合物1相比,其中三个胺基键合的比较化合物2至3的元件特性由于低驱动电压,高发光效率和寿命而得到改善。

[0322] 另外,如表5所述,其中两个胺基键合在二苯并噻吩或二苯并呋喃的同一环上的本发明化合物可能具有与比较例化合物明显不同的化学和物理性质,从而导致改进的元件结果。

[0323] 在空穴传输层的情况下,需要掌握与发光层(主体)的相关性,即使使用类似的芯,对于本领域技术人员而言,也很难推断出在使用根据本发明的化合物的空穴传输层中表现出的特性。

[0324] 另外,在上述元件制造的评价结果中,描述了其中仅将本发明的化合物施加到空穴传输层和发光辅助层之一上的元件特性,但是可以通过施加空穴传输层和发光辅助层两者来使用本发明的化合物。

[0325] 以上描述仅是对本发明的示例性说明,本领域技术人员将理解,可以在不脱离本发明的本质特性的情况下进行各种变形。因此,本说明书中公开的实施例并非旨在限制本发明,而是用于描述本发明,并且本发明的思想和范围不受这些实施例的限制。

[0326] 本发明的保护范围应该由权利要求书来解释,并且在与其等同的范围内的所有描述都应当被解释为包括在本发明的范围内。

[0327] 相关申请的交叉引用

[0328] 本专利申请要求基于2018年10月23日在韩国提交的专利申请第10-2018-0126915号的优先权的权益。另外,该基础申请的公开内容通过引用整体并入本申请中。

100

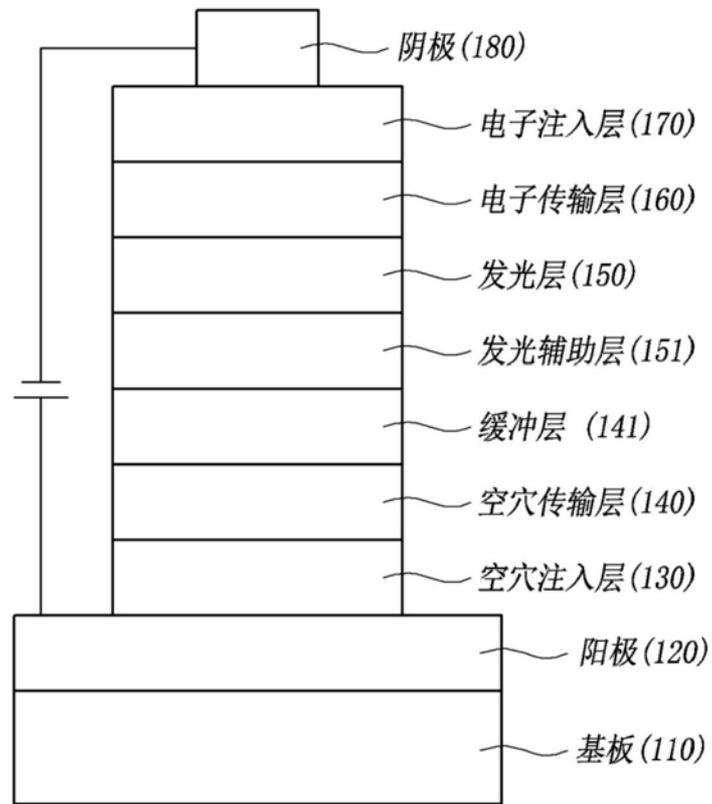


图1

200

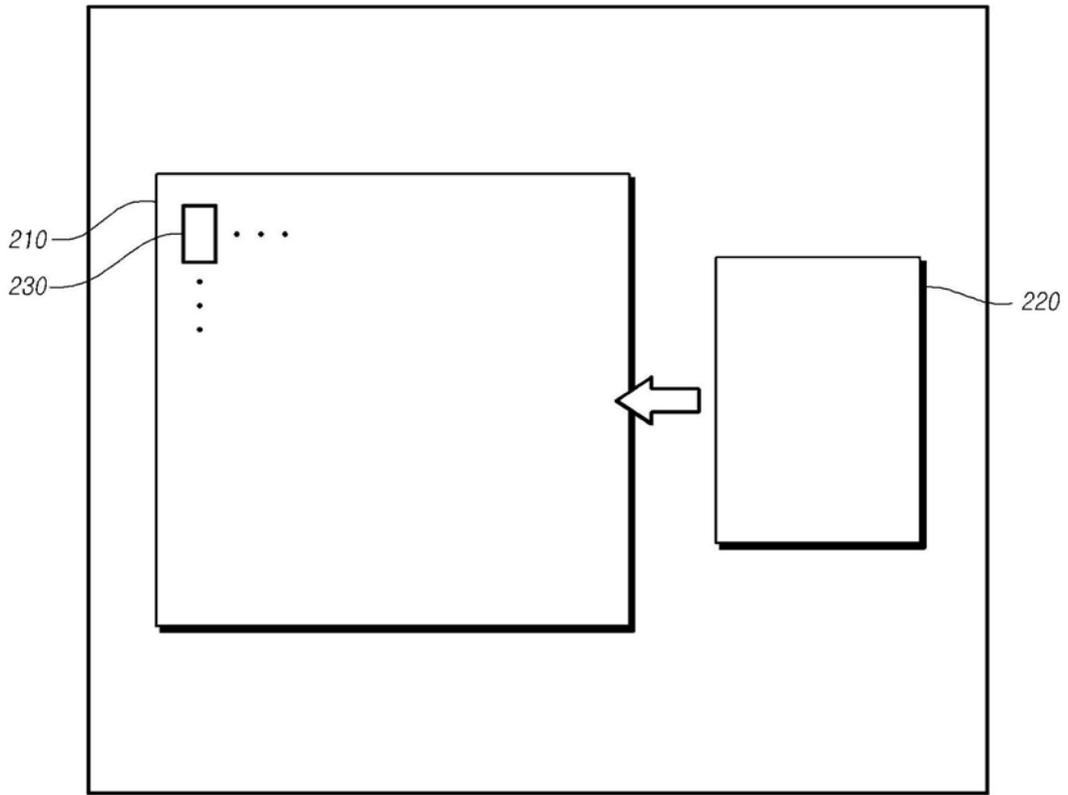


图2