

[19] 中华人民共和国国家知识产权局



[12] 发明专利申请公开说明书

[21] 申请号 200480004828.9

[51] Int. Cl.
C09K 11/06 (2006.01)
H05B 33/14 (2006.01)

[43] 公开日 2006 年 3 月 29 日

[11] 公开号 CN 1753967A

[22] 申请日 2004.2.18
[21] 申请号 200480004828.9
[30] 优先权
 [32] 2003. 2. 20 [33] JP [31] 042625/2003
 [32] 2003.11.18 [33] JP [31] 387855/2003
[86] 国际申请 PCT/JP2004/001796 2004.2.18
[87] 国际公布 WO2004/074399 日 2004.9.2
[85] 进入国家阶段日期 2005.8.22
[71] 申请人 出光兴产株式会社
 地址 日本东京都
[72] 发明人 富田诚司 岩隈俊裕 荒金崇士
 山道桂子 细川地潮

[74] 专利代理机构 中国专利代理(香港)有限公司
 代理人 刘维升 王景朝

权利要求书 2 页 说明书 48 页

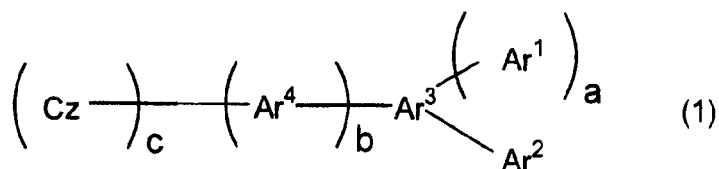
[54] 发明名称

用于有机电致发光设备的材料及使用该材料的
有机电致发光设备

[57] 摘要

具有不良对称性的具有特定结构的用于有机电致发光设备的材料。有机电致发光设备包括阴极、阳极、和夹在阴极与阳极之间并包括至少一个层的有机薄膜层，其中有机薄膜层中的至少一个层包含上述用于有机电致发光设备的材料。得到的有机电致发光设备具有优异的发光效率，没有像素缺陷，并且耐热性优良。

1. 一种用于有机电致发光设备的材料，其包括由以下通式(1)表示的化合物：



5

其中：

Cz 表示咔唑基，具有 18-60 个碳原子的芳基咔唑基，氮杂咔唑基，具有 18-60 个碳原子的芳基氮杂咔唑基，吡啶基，吩噻嗪基或 dibenzoazevinyl 基团，这些基团每一个都可以具有取代基；

10 Ar¹ 和 Ar² 彼此独立地表示取代或未取代的具有 6-60 个碳原子的芳基或者取代或未取代的具有 3-60 个碳原子的杂环基；

Ar³ 表示具有 6-60 个碳原子的芳族烃基或取代或未取代的具有 3-60 个碳原子的杂环基；

15 Ar⁴ 表示取代或未取代的苯残基，取代或未取代的噻吩残基，取代或未取代的三唑残基，取代或未取代的茛残基，或取代或未取代的螺二茛残基；

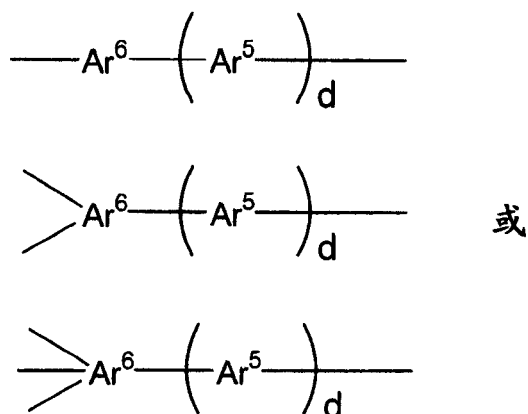
a 表示 0 或 1 的整数，b 表示 0-4 的整数，c 表示 1-3 的整数；当存在多个 Cz 和当存在多个 Ar⁴ 时，它们彼此可以相同或不同。

20 前提条件是，当 a=0 和 c=1 时，不包括其中 Ar³ 和 Ar⁴ 同时表示苯残基，且 Ar² 表示苯基咔唑基或咔唑基的情况；

另外，当 a=1、b=0 和 c=1 时，不包括其中 Ar³ 表示苯残基，且 Ar¹ 和 Ar² 同时表示苯基咔唑基的情况；

还有，当 b=0 和 c=1 时，不包括其中 Ar³ 表示苯残基，且 Ar¹、Ar² 和 Cz 都表示咔唑基或苯基咔唑基的情况。

25 2. 根据权利要求 1 用于有机电致发光设备的材料，其中，所述 Ar⁴ 由下式表示：



其中: Ar^5 和 Ar^6 彼此独立地表示与 Ar^4 相同的基团, d 表示 0-3 的整数, 且当存在多个 Ar^5 时, 它们可以彼此相同或不同。

3. 根据权利要求 1 用于有机电致发光设备的材料, 其中 $a=0$ 。

5 4. 根据权利要求 1 用于有机电致发光设备的材料, 其中 $a=0$ 且 $b=0$ 。

5. 根据权利要求 1 用于有机电致发光设备的材料, 其中 $a=0$, $b=0$ 且 c 表示 2 或 3 的整数。

6. 根据权利要求 1 用于有机电致发光设备的材料, 其中所述由通式
10 (1) 表示的化合物在有机电致发光设备中起到宿主材料的作用。

7. 一种有机电致发光设备, 其包括阳极, 阴极和至少一个夹在阳极和阴极之间的包括发光层的有机薄膜层, 其中至少一个有机薄膜层包括根据权利要求 1 用于有机电致发光设备的材料。

8. 根据权利要求 7 的有机电致发光设备, 其中 $a=0$ 。

15 9. 根据权利要求 7 的有机电致发光设备, 其中 $a=0$ 且 $b=0$ 。

10. 根据权利要求 7 的有机电致发光设备, 其中 $a=0$, $b=0$ 且 c 表示 2 或 3 的整数。

11. 根据权利要求 7 的有机电致发光设备, 其中所述发光层由宿主材料和磷光材料组成, 和其中所述宿主材料包括根据权利要求 1 用于
20 有机电致发光设备的材料。

12. 根据权利要求 7 的有机电致发光设备, 其中将还原性掺杂剂加入到介于所述阴极与所述有机薄膜层之间的边界区中。

13. 根据权利要求 7 的有机电致发光设备, 其进一步包括在所述发光层和所述阴极之间的电子注入层, 和其中所述电子注入层包括具有
25 氮原子的环状化合物的衍生物。

用于有机电致发光设备的材料及使 用该材料的有机电致发光设备

5 技术领域

本发明涉及用于有机电致发光(“电致发光”在下文中将称作“EL”)设备的材料和使用该材料的有机 EL 设备。更具体而言,本发明涉及用于有机 EL 设备的材料,其发光效率高,像素缺陷极少,且耐热性优良。此外,本发明还涉及使用上述材料的有机 EL 设备。

10

背景技术

有机电致发光(“电致发光”在下文中有时也将称作“EL”)设备是一种自发光设备,它利用的原理是,当施加电场时,荧光材料通过从阳极注入的空穴与从阴极注入的电子的重组能而发光。自从 Eastman
15 Kodak Company 的 C. W. Tang 报道了在低电压下驱动的薄片型有机 EL 设备(C. W. Tang 和 S. A. Vanslyke, Applied Physics Letters, 第 51 卷, 913 页, 1987), 人们对使用有机材料作为组成材料的有机 EL 设备进行了诸多研究。Tang 等人使用的压层结构利用三(8-羟基喹啉醇)铝作为发光层, 三苯基二胺衍生物作为空穴传输层。这种压层结
20 构的优点是可以增加把空穴注入到发光层中的效率, 可以增加通过阻断和重组从阴极注入的电子而形成的激发粒子的形成效率, 以及可以包围在发光层中形成的激发粒子。作为有机 EL 设备的结构, 众所周知的有, 具有空穴传输(注入)层和电子传输以及发光层的两层结构, 和具有空穴传输(注入)层、发光层和电子传输(注入)层的三层结构。为
25 了增加薄片型设备中注入的空穴与电子的重组效率, 人们研究了设备的结构和形成设备的方法。

作为有机 EL 设备的发光材料, 众所周知的有螯合络合物, 如三(8-羟基喹啉醇合)铝, 香豆素衍生物, 四苯基丁二烯衍生物, 二苯乙烯亚芳基衍生物和噻二唑衍生物。据报道, 通过使用这些发光材料, 可以
30 获得在蓝光到红光的可见光区域的光, 并且预计能开发出显示彩色图像的设备(例如, 日本未审专利申请公开 Heisei 8(1996)-239655, Heisei 7(1995)-138561 和 Heisei 3(1991)-200289)。

近来,有人提出,将有机磷光材料与发光材料一起用于有机 EL 设备的发光层中(例如, D. F. O'Brien, M. A. Baldo 等人,“电致磷光设备中改进的能量转移”, Applied Physics Letters, 第 74 卷, 第 3 期, 442-444 页, 1999 年 1 月 18 日; 和 M. A. Baldo 等人,“基
5 于电致磷光的非常高效的绿色有机发光设备” Applied Physics Letters, 第 75 卷, 第 1 期, 4-6 页, 1999 年 7 月 5 日)。

如上所述, 高效发光是通过利用有机 EL 设备的发光层中被激发到单线态(singlet state)和三线态(triplet state)的有机磷光材料实现的。由于电子和空穴在有机 EL 设备中重组时自旋的多重性差异, 单
10 线态受激准分子和三线态受激准分子被认为是以 1:3 的相对量形成的。因此预计, 利用磷光发光材料时, 其发光效率会达到单独利用荧光时设备的 3-4 倍那么多。

在诸如上述的那些有机 EL 设备中, 使用其中比如阳极、有机发光层、电子传输层(空穴阻挡层)、电子注入层、和阴极这种各层依次成
15 层的结构, 使得发光在激发到三线态的条件下或者从受激准分子到三线态时的发光不会骤停(例如美国专利 6097147, 和 PCT 国际专利申请公开 WO 01/41512)。在这些专利文献中, 使用 4,4-N,N-二咔唑联苯作为宿主化合物。然而, 它们的问题是, 这些宿主化合物由于玻璃化温度为 110℃或更低, 因此有结晶的倾向, 另外, 因为它过于对称, 因此
20 在有机 EL 设备的耐热试验中形成短路或像素缺陷。

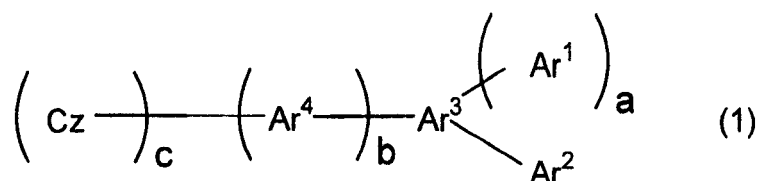
而且, 已经发现, 当在存在外来杂质的位置或者在电极的突出部位会出现晶体生长现象, 并且除了耐热试验之前的主要阶段, 其他阶段中也会形成缺陷。还有就是, 使用具有 3 级对称性的咔唑衍生物作为
25 宿主化合物。但是, 该化合物太过对称, 无法逃避汽相沉积时在存在外来杂质的位置或者在电极的突出部位出现晶体生长的情况, 或者无法逃避除了耐热试验之前的主要阶段, 在其他阶段中也会形成缺陷的情况。

发明内容

30 本发明已经克服了上述问题。本发明的目的是提供用于有机 EL 设备的材料, 其具有优异的发光效率, 没有像素缺陷, 且耐热性优良。本发明的另一个目的是提供使用该材料的有机 EL 设备。

为了克服上述问题,经过深入的研究,本发明人发现,使用对称性差的化合物为材料制成的有机 EL 设备能够实现上述目的。在此发现基础上完成了本发明。

5 本发明提供一种用于有机 EL 设备的材料,其包括由以下通式(1)表示的化合物:



其中: Cz 表示咔唑基,具有 18-60 个碳原子的芳基咔唑基,氮杂咔唑基,具有 18-60 个碳原子的芳基氮杂咔唑基,吡啶基,吩噻嗪基或 dibenzoazevinyl 基团,这些基团每一个都可以具有取代基; Ar¹ 和 Ar² 彼此独立地表示取代或未取代的具有 6-60 个碳原子的芳基或者取代或未取代的具有 3-60 个碳原子的杂环基; Ar³ 表示具有 6-60 个碳原子的芳族烃基或取代或未取代的具有 3-60 个碳原子的杂环基; Ar⁴ 表示取代或未取代的苯残基,取代或未取代的噻吩残基,取代或未取代的三唑残基,取代或未取代的芴残基,或取代或未取代的螺二芴残基; a 表示 0 或 1 的整数, b 表示 0-4 的整数, c 表示 1-3 的整数; 当存在多个 Cz 和当存在多个 Ar⁴ 时,它们彼此可以相同或不同。

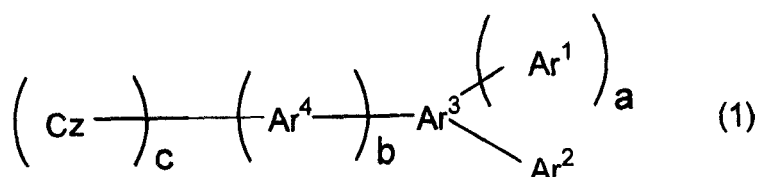
前提条件是,当 a=0 和 c=1 时,不包括其中 Ar³ 和 Ar⁴ 同时表示苯残基,且 Ar² 表示苯基咔唑基或咔唑基的情况; 另外,当 a=1、b=0 和 c=1 时,不包括其中 Ar³ 表示苯残基,且 Ar¹ 和 Ar² 同时表示苯基咔唑基的情况; 还有,当 b=0 和 c=1 时,不包括其中 Ar³ 表示苯残基,且 Ar¹、Ar² 和 Cz 都表示咔唑基或苯基咔唑基的情况。

25 本发明还涉及一种有机 EL 设备,其包括阴极,阳极和夹在阴极与阳极之间并包括至少一个层的有机薄膜层,其中有机薄膜层中的至少一个层包含上述用于有机 EL 设备的材料。

实施本发明的优选实施方案

本发明提供一种用于有机 EL 设备的材料,其包括由以下通式(1)

表示的化合物:



通式(1)中, Cz表示卟啉基, 具有18-60个碳原子的芳基卟啉基, 氮杂卟啉基, 具有18-60个碳原子的芳基氮杂卟啉基, 吡啶基, 吩噻嗪基或dibenzoazeviny基团, 这些基团每一个都可以具有取代基;

在芳基卟啉基或芳基氮杂卟啉基中芳基位上的基团包括, 苯基, 1-萘基, 2-萘基, 1-蒎基, 2-蒎基, 9-蒎基, 1-菲基, 2-菲基, 3-菲基, 4-菲基, 9-菲基, 1-并四苯基, 2-并四苯基, 9-并四苯基, 1-芘基, 2-芘基, 4-芘基, 2-联苯基, 3-联苯基, 4-联苯基, 对三联苯-4-基, 对三联苯-3-基, 对三联苯-2-基, 间三联苯-4-基, 间三联苯-3-基, 间三联苯-2-基, 邻甲苯基, 间甲苯基, 对甲苯基, 对叔丁基苯基, 对(2-苯基丙基)苯基, 3-甲基-2-萘基, 4-甲基-1-萘基, 4-甲基-1-蒎基, 4'-甲基联苯-基, 4''-叔丁基-对三联苯-4-基, 等。上述基团中优选的实例包括苯基, 联苯基, 甲苯基, 异丙基苯基, 叔丁基苯基等。

通式(1)中, Ar^1 和 Ar^2 彼此独立地表示取代或未取代的具有6-60个碳原子的芳基或者取代或未取代的具有3-60个碳原子的杂环基。优选, Ar^1 和 Ar^2 彼此独立地表示取代或未取代的具有6-20个碳原子的芳基或者取代或未取代的具有3-20个碳原子的杂环基。更优选, Ar^1 和 Ar^2 彼此独立地表示苯基, 联苯基, 萘基, 菲基, 吡啶基, 噻吩基或三嗪基。

上述芳基的实例包括苯基, 1-萘基, 2-萘基, 1-蒎基, 2-蒎基, 9-蒎基, 1-菲基, 2-菲基, 3-菲基, 4-菲基, 9-菲基, 1-并四苯基, 2-并四苯基, 9-并四苯基, 1-芘基, 2-芘基, 4-芘基, 2-联苯基, 3-联苯基, 4-联苯基, 对三联苯-4-基, 对三联苯-3-基, 对三联苯-2-基, 间三联苯-4-基, 间三联苯-3-基, 间三联苯-2-基, 邻甲苯基, 间甲苯基, 对甲苯基, 对叔丁基苯基, 对(2-苯基丙基)苯基, 3-甲基-2-萘基, 4-甲基-1-萘基, 4-甲基-1-蒎基, 4'-甲基联苯-基, 4''-叔丁

基-对三联苯-4-基, 等。上述芳基中优选的实例包括苯基, 萘基, 苊基, 联苯基, 三联苯基, 甲苯基, 异丙基苯基等。

上述杂环基的实例包括，1-吡咯基，2-吡咯基，3-吡咯基，吡嗪基，2-吡啶基，3-吡啶基，4-吡啶基，1-𫫇啉基，2-𫫇啉基，3-𫫇啉基，4-𫫇啉基，5-𫫇啉基，6-𫫇啉基，7-𫫇啉基，1-异𫫇啉基，2-异𫫇啉基，3-异𫫇啉基，4-异𫫇啉基，5-异𫫇啉基，6-异𫫇啉基，7-异𫫇啉基，2-呋喃基，3-呋喃基，2-苯并呋喃基，3-苯并呋喃基，4-苯并呋喃基，5-苯并呋喃基，6-苯并呋喃基，7-苯并呋喃基，1-异苯并呋喃基，3-异苯并呋喃基，4-异苯并呋喃基，5-异苯并呋喃基，6-异苯并呋喃基，7-异苯并呋喃基，2-喹啉基，3-喹啉基，4-喹啉基，5-喹啉基，6-喹啉基，7-喹啉基，8-喹啉基，1-异喹啉基，3-异喹啉基，4-异喹啉基，5-异喹啉基，6-异喹啉基，7-异喹啉基，8-异喹啉基，2-喹喔啉基，5-喹喔啉基，6-喹喔啉基，1-咔唑基，2-咔唑基，3-咔唑基，4-咔唑基，9-咔唑基，1-菲啶基，2-菲啶基，3-菲啶基，4-菲啶基，6-菲啶基，7-菲啶基，8-菲啶基，9-菲啶基，10-菲啶基，1-吡啶基，2-吡啶基，3-吡啶基，4-吡啶基，9-吡啶基，1，7-菲咯啉-2-基，1，7-菲咯啉-3-基，1，7-菲咯啉-4-基，1，7-菲咯啉-5-基，1，7-菲咯啉-6-基，1，7-菲咯啉-8-基，1，7-菲咯啉-9-基，1，7-菲咯啉-10-基，1，8-菲咯啉-2-基，1，8-菲咯啉-3-基，1，8-菲咯啉-4-基，1，8-菲咯啉-5-基，1，8-菲咯啉-6-基，1，8-菲咯啉-7-基，1，8-菲咯啉-9-基，1，8-菲咯啉-10-基，1，9-菲咯啉-2-基，1，9-菲咯啉-3-基，1，9-菲咯啉-4-基，1，9-菲咯啉-5-基，1，9-菲咯啉-6-基，1，9-菲咯啉-7-基，1，9-菲咯啉-8-基，1，9-菲咯啉-10-基，1，10-菲咯啉-2-基，1，10-菲咯啉-3-基，1，10-菲咯啉-4-基，1，10-菲咯啉-5-基，2，9-菲咯啉-1-基，2，9-菲咯啉-3-基，2，9-菲咯啉-4-基，2，9-菲咯啉-5-基，2，9-菲咯啉-6-基，2，9-菲咯啉-7-基，2，9-菲咯啉-8-基，2，9-菲咯啉-10-基，2，8-菲咯啉-1-基，2，8-菲咯啉-3-基，2，8-菲咯啉-4-基，2，8-菲咯啉-5-基，2，8-菲咯啉-6-基，2，8-菲咯啉-7-基，2，8-菲咯啉-9-基，2，8-菲咯啉-10-基，2，7-菲咯啉-1-基，2，7-菲咯啉-3-基，2，7-菲咯啉-4-基，2，7-菲咯啉-5-基，2，7-菲咯啉-6-基，2，7-菲咯啉-8-基，2，7-菲咯啉-9-基，2，7-菲咯啉-10-基，1-吩嗪基，2-吩嗪基，1-吩噻嗪基，2-吩噻嗪基，3-吩噻嗪基，4-吩噻嗪基，10-吩噻嗪基

1-吩噻嗪基, 2-吩噻嗪基, 3-吩噻嗪基, 4-吩噻嗪基, 10-吩噻嗪基, 2-噁唑基, 4-噁唑基, 5-噁唑基, 2-噁二唑基, 5-噁二唑基, 3-咪唑基, 2-噻唑基, 3-噻唑基, 2-甲基吡咯-1-基, 2-甲基吡咯-3-基, 2-甲基吡咯-4-基, 2-甲基吡咯-5-基, 3-甲基吡咯-1-基, 3-甲基吡咯-2-基, 3-甲基吡咯-4-基, 3-甲基吡咯-5-基, 2-叔丁基吡咯-4-基, 3-(2-苯丙基)吡咯-1-基, 2-甲基-1-咪唑基, 4-甲基-1-咪唑基, 2-甲基-3-咪唑基, 4-甲基-3-咪唑基, 2-叔丁基-1-咪唑基, 4-叔丁基-1-咪唑基, 2-叔丁基-3-咪唑基, 4-叔丁基-3-咪唑基, 芳基呋唑基, 氮杂呋唑基, 芳基氮杂呋唑基, 吩噻嗪基, 二苯并 azenyl 基, 等。上述杂环基的优选实例包括呋唑基, 芳基呋唑基, 氮杂呋唑基, 芳基氮杂呋唑基, 吡啶基, 吩噻嗪基, 二苯并 azenyl 基, 苯并咪唑基, 苯并噻唑基, 苯并-N-烯丙基咪唑基, 等。

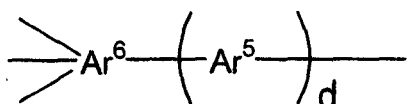
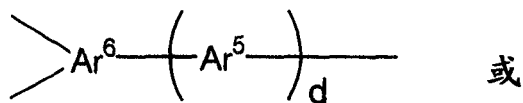
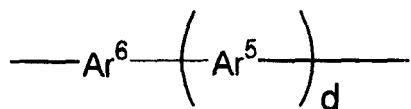
通式(1)中, Ar^3 表示具有 6-60 个碳原子的芳族烃基或取代或未取代的具有 3-60 个碳原子的杂环基; 优选, Ar^3 表示取代或未取代的具有 6-20 个碳原子的芳族烃基或者取代或未取代的具有 3-20 个碳原子的杂环基。更优选, Ar^3 表示苯、联苯、萘、菲、吡啶、嘧啶和三嗪的残基, 其中, 最优选苯残基。

所述芳族烃基的具体实例相当于从上述由 Ar^1 和 Ar^2 表示的芳基的具体实例上脱除氢原子得到的二价或三价化合物, 优选实例类似。

所述杂环基的具体实例相当于从上述由 Ar^1 和 Ar^2 表示的杂环基的具体实例上脱除氢原子得到的二价或三价化合物, 优选实例类似。

通式(1)中, Ar^4 表示取代或未取代的苯残基, 取代或未取代的噻吩残基, 取代或未取代的三唑残基, 取代或未取代的茚残基, 或取代或未取代的螺二茚残基; 在其中茚残基、噻吩残基或螺二茚残基具有多个取代基的情况中, 所述取代基可以彼此连接形成环结构。

另外, $-(Ar^4)_6-$ 的实例包括以下结构:



其中, Ar^5 和 Ar^6 彼此独立地表示与 Ar^4 相同的基团, d 表示 0-3 的整数, 且当存在多个 Ar^5 时, 它们可以彼此相同或不同。

通式(1)中, a 表示 0 或 1 的整数, b 表示 0-4 的整数, c 表示 1-3 的整数。当存在多个 Cz 和当存在多个 Ar^4 时, 它们彼此可以相同或不同。

前提条件是, 当 $a=0$ 和 $c=1$ 时, 不包括其中 Ar^3 和 Ar^4 同时表示苯残基, 且 Ar^2 表示苯基吡唑基或吡唑基的情况; 另外, 当 $a=1$ 、 $b=0$ 和 $c=1$ 时, 不包括其中 Ar^3 表示苯残基, 且 Ar^1 和 Ar^2 同时表示苯基吡唑基的情况; 还有, 当 $b=0$ 和 $c=1$ 时, 不包括其中 Ar^3 表示苯残基, 且 Ar^1 、 Ar^2 和 Cz 都表示吡唑基或苯基吡唑基的情况。

通式(1)中, 优选 $a=0$, 和 $a=0$ 且 $b=0$, 或者 $a=0$ 、 $b=0$ 且 c 表示 2 或 3 的整数。

上述 Cz 或 $\text{Ar}^1\text{--Ar}^6$ 的典型取代基各自独立地包括卤原子, 羟基, 氨基, 硝基, 氰基, 烷基, 烯基, 环烷基, 烷氧基, 芳族烃基, 芳族杂环基, 芳烷基, 芳氧基, 芳氧基羰基, 氟烷基, 氟芳基, 羧基, 等。

卤原子的实例包括氟原子, 氯原子, 溴原子和碘原子。

氨基是由 $\text{--NX}^1\text{X}^2$ 表示的基团。 X^1 和 X^2 各自独立地表示的原子或基团的实例包括, 氢原子, 甲基, 乙基, 丙基, 异丙基, 正丁基, 仲丁基, 异丁基, 叔丁基, 正戊基, 正己基, 正庚基, 正辛基, 羟甲基, 1-羟乙基, 2-羟乙基, 2-羟基异丁基, 1,2-二羟基乙基, 1,3-二羟基异丙基, 2,3-二羟基叔丁基, 1,2,3-三羟基丙基, 氟甲基, 1-氟乙基, 2-氟乙基, 2-氟异丁基, 1,2-二氟乙基, 1,3-二氟异丙基, 2,3-二氟叔丁基, 1,2,3-三氟丙基, 溴甲基, 1-溴乙基, 2-溴乙基, 2-溴异丁基,

- 1, 2-二溴乙基, 1, 3-二溴异丙基, 2, 3-二溴叔丁基, 1, 2, 3-三溴丙基, 碘甲基, 1-碘乙基, 2-碘乙基, 2-碘异丁基, 1, 2-二碘乙基, 1, 3-二碘异丙基, 2, 3-二碘叔丁基, 1, 2, 3-三碘丙基, 氟甲基, 1-氟基乙基, 2-氟基乙基, 2-氟基异丁基, 1, 2-二氟基乙基, 1, 3-二氟基异丙基, 2, 3-二氟基叔丁基, 1, 2, 3-三氟基丙基, 氰甲基, 1-氰基乙基, 2-氰基乙基, 2-氰基异丁基, 1, 2-二氰基乙基, 1, 3-二氰基异丙基, 2, 3-二氰基叔丁基, 1, 2, 3-三氰基丙基, 硝基甲基, 1-硝基乙基, 2-硝基乙基, 2-硝基异丁基, 1, 2-二硝基乙基, 1, 3-二硝基异丙基, 2, 3-二硝基叔丁基, 1, 2, 3-三硝基丙基, 苯基, 1-萘基, 2-萘基, 1-蒎基, 2-蒎基, 9-蒎基, 1-菲基, 2-菲基, 3-菲基, 4-菲基, 9-菲基, 1-并四苯基, 2-并四苯基, 9-并四苯基, 4-苯乙烯基苯基, 1-茛基, 2-茛基, 4-茛基, 2-联苯基, 3-联苯基, 4-联苯基, 对三联苯-4-基, 对三联苯-3-基, 对三联苯-2-基, 间三联苯-4-基, 间三联苯-3-基, 间三联苯-2-基, 邻甲苯基, 间甲苯基, 对甲苯基, 对叔丁基苯基, 对(2-苯基丙基)苯基, 3-甲基-2-萘基, 4-甲基-1-萘基, 4-甲基-1-蒎基, 4'-甲基联苯-基, 4''-叔丁基-对三联苯-4-基, 2-吡咯基, 3-吡咯基, 吡嗪基 (pyradinyl), 2-吡啶基, 3-吡啶基, 4-吡啶基, 2-吡啶基, 3-吡啶基, 4-吡啶基, 5-吡啶基, 6-吡啶基, 7-吡啶基, 1-异吡啶基, 3-异吡啶基, 4-异吡啶基, 5-异吡啶基, 6-异吡啶基, 7-异吡啶基, 2-呋喃基, 3-呋喃基, 2-苯并呋喃基, 3-苯并呋喃基, 4-苯并呋喃基, 5-苯并呋喃基, 6-苯并呋喃基, 7-苯并呋喃基, 1-异苯并呋喃基, 3-异苯并呋喃基, 4-异苯并呋喃基, 5-异苯并呋喃基, 6-异苯并呋喃基, 7-异苯并呋喃基, 2-噻吩基, 3-噻吩基, 4-噻吩基, 5-噻吩基, 6-噻吩基, 7-噻吩基, 8-噻吩基, 1-异噻吩基, 3-异噻吩基, 4-异噻吩基, 5-异噻吩基, 6-异噻吩基, 7-异噻吩基, 8-异噻吩基, 2-噻吩基, 5-噻吩基, 6-噻吩基, 1-呋喃基, 2-呋喃基, 3-呋喃基, 4-呋喃基, 6-呋喃基, 7-呋喃基, 8-呋喃基, 9-呋喃基, 10-呋喃基, 1-吡啶基, 2-吡啶基, 3-吡啶基, 4-吡啶基, 9-吡啶基, 1, 7-菲咯啉-2-基, 1, 7-菲咯啉-3-基, 1, 7-菲咯啉-4-基, 1, 7-菲咯啉-5-基, 1, 7-菲咯啉-6-基, 1, 7-菲咯啉-8-基, 1, 7-菲咯啉-9-基, 1, 7-菲咯啉-10-基, 1, 8-菲咯啉-2-基, 1, 8-菲咯啉-3-基, 1, 8-菲咯啉-4-基, 1, 8-菲咯啉-5-基, 1, 8-菲咯啉-6-

基, 1,8-菲咯啉-7-基, 1,8-菲咯啉-9-基, 1,8-菲咯啉-10-基, 1,9-菲咯啉-2-基, 1,9-菲咯啉-3-基, 1,9-菲咯啉-4-基, 1,9-菲咯啉-5-基, 1,9-菲咯啉-6-基, 1,9-菲咯啉-7-基, 1,9-菲咯啉-8-基, 1,9-菲咯啉-10-基, 1,10-菲咯啉-2-基, 1,10-菲咯啉-3-基, 1,10-菲咯啉-4-基, 1,10-菲咯啉-5-基, 2,9-菲咯啉-1-基, 2,9-菲咯啉-3-基, 2,9-菲咯啉-4-基, 2,9-菲咯啉-5-基, 2,9-菲咯啉-6-基, 2,9-菲咯啉-7-基, 2,9-菲咯啉-8-基, 2,9-菲咯啉-10-基, 2,8-菲咯啉-1-基, 2,8-菲咯啉-3-基, 2,8-菲咯啉-4-基, 2,8-菲咯啉-5-基, 2,8-菲咯啉-6-基, 2,8-菲咯啉-7-基, 2,8-菲咯啉-9-基, 2,8-菲咯啉-10-基, 2,7-菲咯啉-1-基, 2,7-菲咯啉-3-基, 2,7-菲咯啉-4-基, 2,7-菲咯啉-5-基, 2,7-菲咯啉-6-基, 2,7-菲咯啉-8-基, 2,7-菲咯啉-9-基, 2,7-菲咯啉-10-基, 1-吩嗪基, 2-吩嗪基, 1-吩噻嗪基, 2-吩噻嗪基, 3-吩噻嗪基, 4-吩噻嗪基, 1-吩恶嗪基, 2-吩恶嗪基, 3-吩恶嗪基, 4-吩恶嗪基, 2-恶唑基, 4-恶唑基, 5-恶唑基, 2-恶二唑基, 5-恶二唑基, 3-呋咱基, 2-噻嗯基, 3-噻嗯基, 2-甲基吡咯-1-基, 2-甲基吡咯-3-基, 2-甲基吡咯-4-基, 2-甲基吡咯-5-基, 3-甲基吡咯-1-基, 3-甲基吡咯-2-基, 3-甲基吡咯-4-基, 3-甲基吡咯-5-基, 2-叔丁基吡咯-4-基, 3-(2-苯丙基)吡咯-1-基, 2-甲基-1-吡啶基, 4-甲基-1-吡啶基, 2-甲基-3-吡啶基, 4-甲基-3-吡啶基, 2-叔丁基-1-吡啶基, 4-叔丁基-1-吡啶基, 2-叔丁基-3-吡啶基和 4-叔丁基-3-吡啶基。

上述烷基的实例包括, 甲基, 乙基, 丙基, 异丙基, 正丁基, 仲丁基, 异丁基, 叔丁基, 正戊基, 正己基, 正庚基, 正辛基, 羟甲基, 1-羟乙基, 2-羟乙基, 2-羟基异丁基, 1,2-二羟基乙基, 1,3-二羟基异丙基, 2,3-二羟基叔丁基, 1,2,3-三羟基丙基, 氯甲基, 1-氯乙基, 2-氯乙基, 2-氯异丁基, 1,2-二氯乙基, 1,3-二氯异丙基, 2,3-二氯叔丁基, 1,2,3-三氯丙基, 溴甲基, 1-溴乙基, 2-溴乙基, 2-溴异丁基, 1,2-二溴乙基, 1,3-二溴异丙基, 2,3-二溴叔丁基, 1,2,3-三溴丙基, 碘甲基, 1-碘乙基, 2-碘乙基, 2-碘异丁基, 1,2-二碘乙基, 1,3-二碘异丙基, 2,3-二碘叔丁基, 1,2,3-三碘丙基, 氟甲基, 1-氟基乙基, 2-氟基乙基, 2-氟基异丁基, 1,2-二氟基乙基, 1,3-二氟基异丙基, 2,3-二氟基叔丁基, 1,2,3-三氟基丙基, 氟甲基, 1-氟基乙基, 2-氟基乙基, 2-氟基异丁基, 1,2-二氟基乙基, 1,3-二氟基异丙基

基, 2, 3-二氰基叔丁基, 1, 2, 3-三氰基丙基, 硝基甲基, 1-硝基乙基, 2-硝基乙基, 2-硝基异丁基, 1, 2-二硝基乙基, 1, 3-二硝基异丙基, 2, 3-二硝基叔丁基, 1, 2, 3-三硝基丙基。

上述烯基的实例包括, 乙烯基, 芳基, 1-丁烯基, 2-丁烯基, 3-丁烯基, 1, 3-丁二烯基, 1-甲基乙烯基, 苯乙烯基, 2, 2-二苯基乙烯基, 1, 2-二苯基乙烯基, 1-甲基烯丙基, 1, 1-二甲基烯丙基, 2-甲基烯丙基, 1-苯基烯丙基, 2-苯基烯丙基, 3-苯基烯丙基, 3, 3-二苯基烯丙基, 1, 2-二甲基烯丙基, 1-苯基-1-丁烯基和 3-苯基-1-丁烯基。

上述环烷基的实例包括环丙基, 环丁基, 环戊基, 环己基和 4-甲基环己基。

上述烷氧基由-OY表示。由Y表示的基团的实例包括, 甲基, 乙基, 丙基, 异丙基, 正丁基, 仲丁基, 异丁基, 叔丁基, 正戊基, 正己基, 正庚基, 正辛基, 羟甲基, 1-羟乙基, 2-羟乙基, 2-羟基异丁基, 1, 2-二羟基乙基, 1, 3-二羟基异丙基, 2, 3-二羟基叔丁基, 1, 2, 3-三羟基丙基, 氯甲基, 1-氯乙基, 2-氯乙基, 2-氯异丁基, 1, 2-二氯乙基, 1, 3-二氯异丙基, 2, 3-二氯叔丁基, 1, 2, 3-三氯丙基, 溴甲基, 1-溴乙基, 2-溴乙基, 2-溴异丁基, 1, 2-二溴乙基, 1, 3-二溴异丙基, 2, 3-二溴叔丁基, 1, 2, 3-三溴丙基, 碘甲基, 1-碘乙基, 2-碘乙基, 2-碘异丁基, 1, 2-二碘乙基, 1, 3-二碘异丙基, 2, 3-二碘叔丁基, 1, 2, 3-三碘丙基, 氨基甲基, 1-氨基乙基, 2-氨基乙基, 2-氨基异丁基, 1, 2-二氨基乙基, 1, 3-二氨基异丙基, 2, 3-二氨基叔丁基, 1, 2, 3-三氨基丙基, 氰甲基, 1-氰基乙基, 2-氰基乙基, 2-氰基异丁基, 1, 2-二氰基乙基, 1, 3-二氰基异丙基, 2, 3-二氰基叔丁基, 1, 2, 3-三氰基丙基, 硝基甲基, 1-硝基乙基, 2-硝基乙基, 2-硝基异丁基, 1, 2-二硝基乙基, 1, 3-二硝基异丙基, 2, 3-二硝基叔丁基, 1, 2, 3-三硝基丙基。

上述芳族烃基的实例包括, 苯基, 1-萘基, 2-萘基, 1-蒎基, 2-蒎基, 9-蒎基, 1-菲基, 2-菲基, 3-菲基, 4-菲基, 9-菲基, 1-并四苯基, 2-并四苯基, 9-并四苯基, 1-芘基, 2-芘基, 4-芘基, 2-联苯基, 3-联苯基, 4-联苯基, 对三联苯-4-基, 对三联苯-3-基, 对三联苯-2-基, 间三联苯-4-基, 间三联苯-3-基, 间三联苯-2-基, 邻甲苯基, 间甲苯基, 对甲苯基, 对叔丁基苯基, 对(2-苯基丙基)苯基, 3-甲基-2-萘基, 4-甲基-1-萘基, 4-甲基-1-蒎基, 4'-甲基联苯-基,

4''-叔丁基-对三联苯-4-基。

上述芳族杂环基的实例包括, 1-吡咯基, 2-吡咯基, 3-吡咯基, 吡嗪基, 2-吡啶基, 3-吡啶基, 4-吡啶基, 1-吡啶基, 2-吡啶基, 3-吡啶基, 4-吡啶基, 5-吡啶基, 6-吡啶基, 7-吡啶基, 1-异吡啶基, 2-异吡啶基, 3-异吡啶基, 4-异吡啶基, 5-异吡啶基, 6-异吡啶基, 7-异吡啶基, 2-咪唑基, 3-咪唑基, 2-苯并咪唑基, 3-苯并咪唑基, 4-苯并咪唑基, 5-苯并咪唑基, 6-苯并咪唑基, 7-苯并咪唑基, 1-异苯并咪唑基, 3-异苯并咪唑基, 4-异苯并咪唑基, 5-异苯并咪唑基, 6-异苯并咪唑基, 7-异苯并咪唑基, 2-噻吩基, 3-噻吩基, 4-噻吩基, 5-噻吩基, 6-噻吩基, 7-噻吩基, 8-噻吩基, 1-异噻吩基, 3-异噻吩基, 4-异噻吩基, 5-异噻吩基, 6-异噻吩基, 7-异噻吩基, 8-异噻吩基, 2-噻唑基, 5-噻唑基, 6-噻唑基, 1-呋喃基, 2-呋喃基, 3-呋喃基, 4-呋喃基, 6-呋喃基, 7-呋喃基, 8-呋喃基, 9-呋喃基, 10-呋喃基, 1-吡啶基, 2-吡啶基, 3-吡啶基, 4-吡啶基, 9-吡啶基, 1, 7-菲咯啉-2-基, 1, 7-菲咯啉-3-基, 1, 7-菲咯啉-4-基, 1, 7-菲咯啉-5-基, 1, 7-菲咯啉-6-基, 1, 7-菲咯啉-8-基, 1, 7-菲咯啉-9-基, 1, 7-菲咯啉-10-基, 1, 8-菲咯啉-2-基, 1, 8-菲咯啉-3-基, 1, 8-菲咯啉-4-基, 1, 8-菲咯啉-5-基, 1, 8-菲咯啉-6-基, 1, 8-菲咯啉-7-基, 1, 8-菲咯啉-9-基, 1, 8-菲咯啉-10-基, 1, 9-菲咯啉-2-基, 1, 9-菲咯啉-3-基, 1, 9-菲咯啉-4-基, 1, 9-菲咯啉-5-基, 1, 9-菲咯啉-6-基, 1, 9-菲咯啉-7-基, 1, 9-菲咯啉-8-基, 1, 9-菲咯啉-10-基, 1, 10-菲咯啉-2-基, 1, 10-菲咯啉-3-基, 1, 10-菲咯啉-4-基, 1, 10-菲咯啉-5-基, 2, 9-菲咯啉-1-基, 2, 9-菲咯啉-3-基, 2, 9-菲咯啉-4-基, 2, 9-菲咯啉-5-基, 2, 9-菲咯啉-6-基, 2, 9-菲咯啉-7-基, 2, 9-菲咯啉-8-基, 2, 9-菲咯啉-10-基, 2, 8-菲咯啉-1-基, 2, 8-菲咯啉-3-基, 2, 8-菲咯啉-4-基, 2, 8-菲咯啉-5-基, 2, 8-菲咯啉-6-基, 2, 8-菲咯啉-7-基, 2, 8-菲咯啉-9-基, 2, 8-菲咯啉-10-基, 2, 7-菲咯啉-1-基, 2, 7-菲咯啉-3-基, 2, 7-菲咯啉-4-基, 2, 7-菲咯啉-5-基, 2, 7-菲咯啉-6-基, 2, 7-菲咯啉-8-基, 2, 7-菲咯啉-9-基, 2, 7-菲咯啉-10-基, 1-吩嗪基, 2-吩嗪基, 1-吩噻嗪基, 2-吩噻嗪基, 3-吩噻嗪基, 4-吩噻嗪基, 10-吩噻嗪基, 1-吩恶嗪基, 2-吩恶嗪基, 3-吩恶嗪基, 4-吩恶嗪基, 10-吩恶嗪基,

2-噁唑基, 4-噁唑基, 5-噁唑基, 2-噁二唑基, 5-噁二唑基, 3-呋咱基, 2-噻唑基, 3-噻唑基, 2-甲基吡咯-1-基, 2-甲基吡咯-3-基, 2-甲基吡咯-4-基, 2-甲基吡咯-5-基, 3-甲基吡咯-1-基, 3-甲基吡咯-2-基, 3-甲基吡咯-4-基, 3-甲基吡咯-5-基, 2-叔丁基吡咯-4-基, 3-(2-苯丙基)吡咯-1-基, 2-甲基-1-吡啶基, 4-甲基-1-吡啶基, 2-甲基-3-吡啶基, 4-甲基-3-吡啶基, 2-叔丁基-1-吡啶基, 4-叔丁基-1-吡啶基, 2-叔丁基-3-吡啶基和 4-叔丁基-3-吡啶基。

上述芳烷基的实例包括, 苄基, 1-苯乙基, 2-苯乙基, 1-苯基异丙基, 2-苯基异丙基, 苯基叔丁基, α -萘基甲基, 1- α -萘基乙基, 2- α -萘基乙基, 1- α -萘基异丙基, 2- α -萘基异丙基, β -萘基甲基, 1- β -萘基乙基, 2- β -萘基乙基, 1- β -萘基异丙基, 2- β -萘基异丙基, 1-吡咯基甲基, 2-(1-吡咯基)乙基, 对甲基苄基, 间甲基苄基, 邻甲基苄基, 对氯苄基, 间氯苄基, 邻氯苄基, 对溴苄基, 间溴苄基, 邻溴苄基, 对碘苄基, 间碘苄基, 邻碘苄基, 对羟基苄基, 间羟基苄基, 邻羟基苄基, 对氨基苄基, 间氨基苄基, 邻氨基苄基, 邻硝基苄基, 间硝基苄基, 对硝基苄基, 对氰基苄基, 间氰基苄基, 邻氰基苄基, 1-羟基-2-苯基异丙基和 1-氯-2-苯基异丙基。

上述芳氧基由-OZ 表示。由 Z 表示的基团的实例包括, 苯基, 1-萘基, 2-萘基, 1-蒎基, 2-蒎基, 9-蒎基, 1-菲基, 2-菲基, 3-菲基, 4-菲基, 9-菲基, 1-并四苯基, 2-并四苯基, 9-并四苯基, 1-芘基, 2-芘基, 4-芘基, 2-联苯基, 3-联苯基, 4-联苯基, 对三联苯-4-基, 对三联苯-3-基, 对三联苯-2-基, 间三联苯-4-基, 间三联苯-3-基, 间三联苯-2-基, 邻甲苯基, 间甲苯基, 对甲苯基, 对叔丁基苯基, 对(2-苯基丙基)苯基, 3-甲基-2-萘基, 4-甲基-1-萘基, 4-甲基-1-蒎基, 4'-甲基联苯-基, 4''-叔丁基-对三联苯-4-基, 2-吡咯基, 3-吡咯基, 吡嗪基, 2-吡啶基, 3-吡啶基, 4-吡啶基, 2-吡啶基, 3-吡啶基, 4-吡啶基, 5-吡啶基, 6-吡啶基, 7-吡啶基, 1-异吡啶基, 3-异吡啶基, 4-异吡啶基, 5-异吡啶基, 6-异吡啶基, 7-异吡啶基, 2-呋喃基, 3-呋喃基, 2-苯并呋喃基, 3-苯并呋喃基, 4-苯并呋喃基, 5-苯并呋喃基, 6-苯并呋喃基, 7-苯并呋喃基, 1-异苯并呋喃基, 3-异苯并呋喃基, 4-异苯并呋喃基, 5-异苯并呋喃基, 6-异苯并呋喃基, 7-异苯并呋喃基, 2-喹啉基, 3-喹啉基, 4-喹啉基, 5-喹啉基, 6-喹

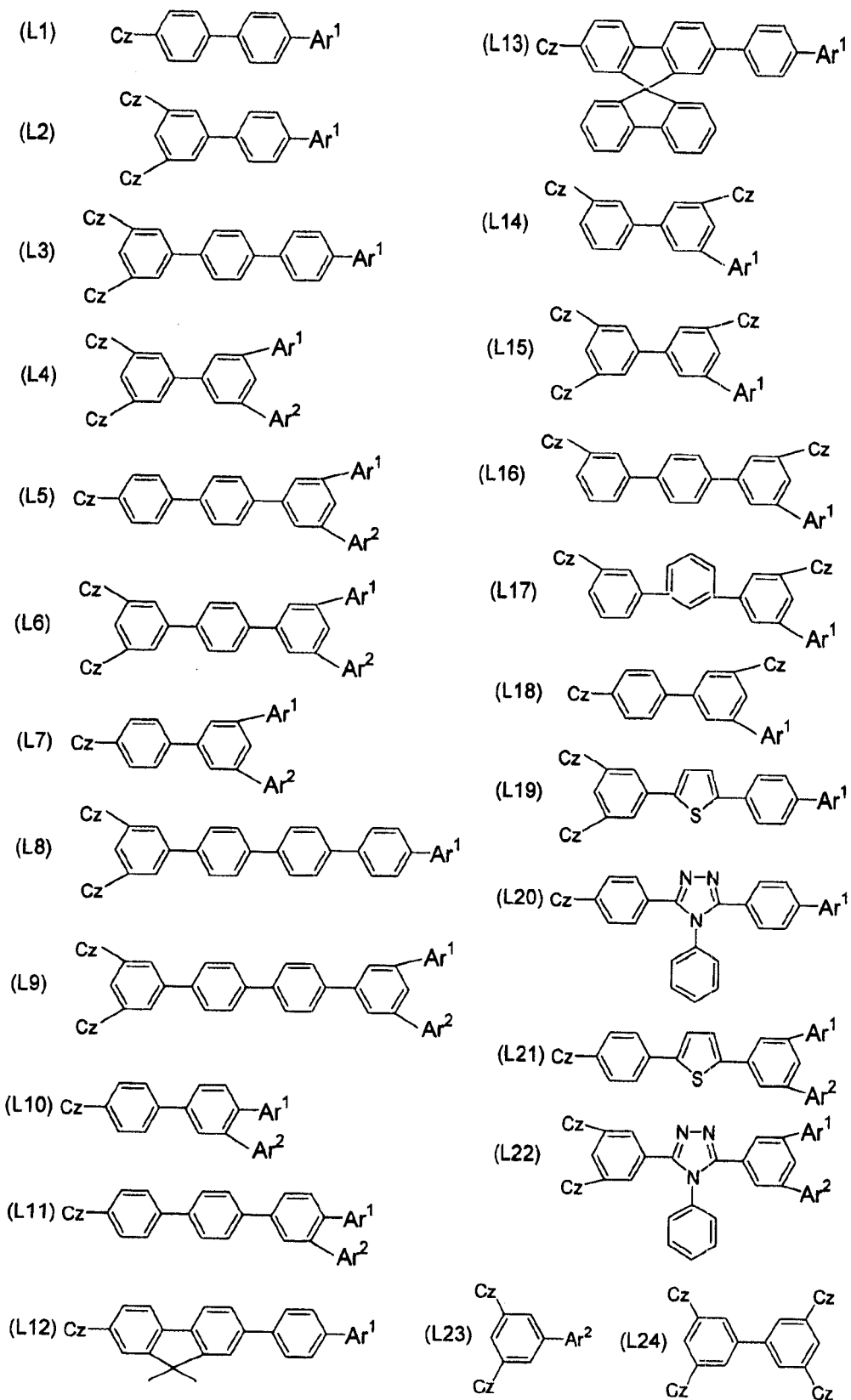
啉基, 7-喹啉基, 8-喹啉基, 1-异喹啉基, 3-异喹啉基, 4-异喹啉基,
 5-异喹啉基, 6-异喹啉基, 7-异喹啉基, 8-异喹啉基, 2-喹喔啉基,
 5-喹喔啉基, 6-喹喔啉基, 1-咔唑基, 2-咔唑基, 3-咔唑基, 4-咔唑
 基, 1-菲啶基, 2-菲啶基, 3-菲啶基, 4-菲啶基, 6-菲啶基, 7-菲啶
 基, 8-菲啶基, 9-菲啶基, 10-菲啶基, 1-吡啶基, 2-吡啶基, 3-吡啶
 基, 4-吡啶基, 9-吡啶基, 1, 7-菲咯啉-2-基, 1, 7-菲咯啉-3-基, 1, 7-
 菲咯啉-4-基, 1, 7-菲咯啉-5-基, 1, 7-菲咯啉-6-基, 1, 7-菲咯啉-8-
 基, 1, 7-菲咯啉-9-基, 1, 7-菲咯啉-10-基, 1, 8-菲咯啉-2-基, 1, 8-
 菲咯啉-3-基, 1, 8-菲咯啉-4-基, 1, 8-菲咯啉-5-基, 1, 8-菲咯啉-6-
 基, 1, 8-菲咯啉-7-基, 1, 8-菲咯啉-9-基, 1, 8-菲咯啉-10-基, 1, 9-
 菲咯啉-2-基, 1, 9-菲咯啉-3-基, 1, 9-菲咯啉-4-基, 1, 9-菲咯啉-5-
 基, 1, 9-菲咯啉-6-基, 1, 9-菲咯啉-7-基, 1, 9-菲咯啉-8-基, 1, 9-
 菲咯啉-10-基, 1, 10-菲咯啉-2-基, 1, 10-菲咯啉-3-基, 1, 10-菲咯
 啉-4-基, 1, 10-菲咯啉-5-基, 2, 9-菲咯啉-1-基, 2, 9-菲咯啉-3-基,
 2, 9-菲咯啉-4-基, 2, 9-菲咯啉-5-基, 2, 9-菲咯啉-6-基, 2, 9-菲咯
 啉-7-基, 2, 9-菲咯啉-8-基, 2, 9-菲咯啉-10-基, 2, 8-菲咯啉-1-基,
 2, 8-菲咯啉-3-基, 2, 8-菲咯啉-4-基, 2, 8-菲咯啉-5-基, 2, 8-菲咯
 啉-6-基, 2, 8-菲咯啉-7-基, 2, 8-菲咯啉-9-基, 2, 8-菲咯啉-10-基,
 2, 7-菲咯啉-1-基, 2, 7-菲咯啉-3-基, 2, 7-菲咯啉-4-基, 2, 7-菲咯
 啉-5-基, 2, 7-菲咯啉-6-基, 2, 7-菲咯啉-8-基, 2, 7-菲咯啉-9-基,
 2, 7-菲咯啉-10-基, 1-吩嗪基, 2-吩嗪基, 1-吩噻嗪基, 2-吩噻嗪基,
 3-吩噻嗪基, 4-吩噻嗪基, 1-吩恶嗪基, 2-吩恶嗪基, 3-吩恶嗪基,
 4-吩恶嗪基, 2-噁唑基, 4-噁唑基, 5-噁唑基, 2-噁二唑基, 5-噁二
 唑基, 3-咪唑基, 2-噻唑基, 3-噻唑基, 2-甲基吡咯-1-基, 2-甲基吡
 咯-3-基, 2-甲基吡咯-4-基, 2-甲基吡咯-5-基, 3-甲基吡咯-1-基,
 3-甲基吡咯-2-基, 3-甲基吡咯-4-基, 3-甲基吡咯-5-基, 2-叔丁基
 吡咯-4-基, 3-(2-苯丙基)吡咯-1-基, 2-甲基-1-吡啶基, 4-甲基-1-
 吡啶基, 2-甲基-3-吡啶基, 4-甲基-3-吡啶基, 2-叔丁基-1-吡啶基,
 4-叔丁基-1-吡啶基, 2-叔丁基-3-吡啶基和 4-叔丁基-3-吡啶基。

上述烷氧基羰基由-COOY表示。由Y表示的基团的实例包括, 甲基,
 乙基, 丙基, 异丙基, 正丁基, 仲丁基, 异丁基, 叔丁基, 正戊基,
 正己基, 正庚基, 正辛基, 羟甲基, 1-羟乙基, 2-羟乙基, 2-羟基异

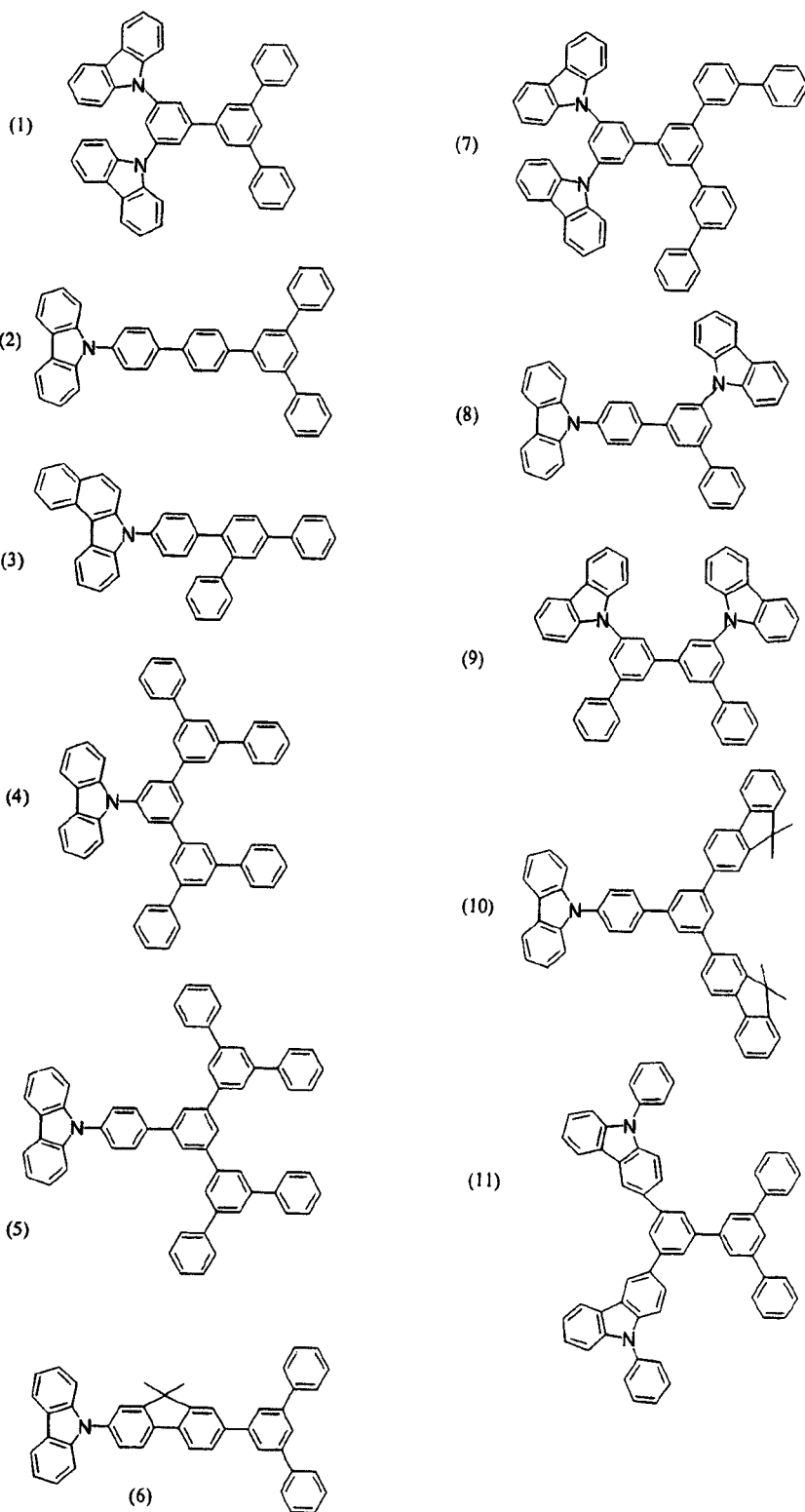
丁基, 1,2-二羟基乙基, 1,3-二羟基异丙基, 2,3-二羟基叔丁基, 1,2,3-三羟基丙基, 氟甲基, 1-氟乙基, 2-氟乙基, 2-氟异丁基, 1,2-二氟乙基, 1,3-二氟异丙基, 2,3-二氟叔丁基, 1,2,3-三氟丙基, 溴甲基, 1-溴乙基, 2-溴乙基, 2-溴异丁基, 1,2-二溴乙基, 1,3-二溴异丙基, 2,3-二溴叔丁基, 1,2,3-三溴丙基, 碘甲基, 1-碘乙基, 2-碘乙基, 2-碘异丁基, 1,2-二碘乙基, 1,3-二碘异丙基, 2,3-二碘叔丁基, 1,2,3-三碘丙基, 氨基甲基, 1-氨基乙基, 2-氨基乙基, 2-氨基异丁基, 1,2-二氨基乙基, 1,3-二氨基异丙基, 2,3-二氨基叔丁基, 1,2,3-三氨基丙基, 氰甲基, 1-氰基乙基, 2-氰基乙基, 2-氰基异丁基, 1,2-二氰基乙基, 1,3-二氰基异丙基, 2,3-二氰基叔丁基, 1,2,3-三氰基丙基, 硝基甲基, 1-硝基乙基, 2-硝基乙基, 2-硝基异丁基, 1,2-二硝基乙基, 1,3-二硝基异丙基, 2,3-二硝基叔丁基, 1,2,3-三硝基丙基。

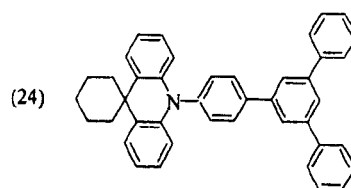
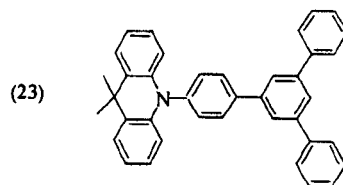
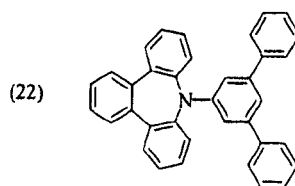
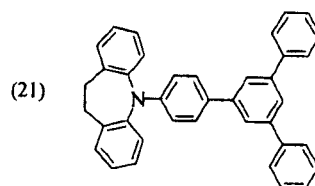
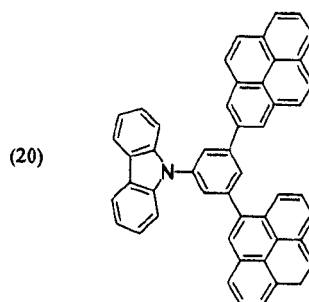
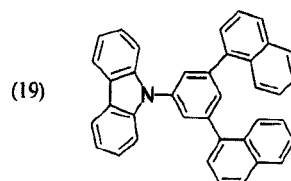
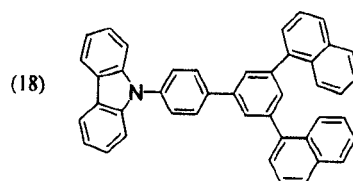
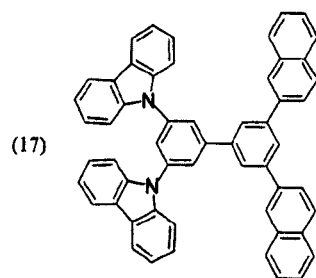
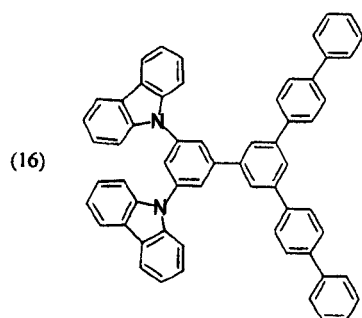
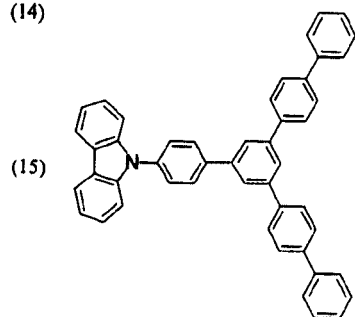
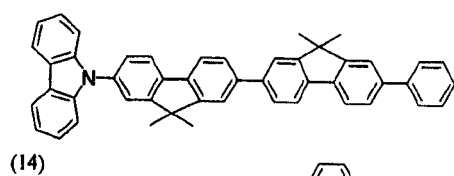
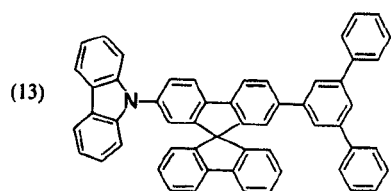
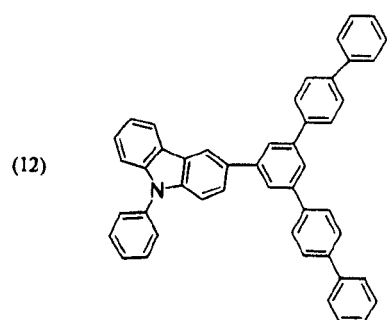
上述取代在可以彼此连接形成环。通过键连形成的二价基团的实例包括四亚甲基, 五亚甲基, 六亚甲基, 二苯基甲烷-2,2'-二基, 二苯基乙烷-3,3'-二基, 和二苯基丙烷-4,4'-二基。

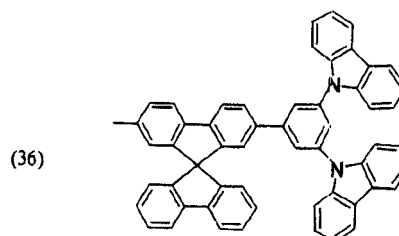
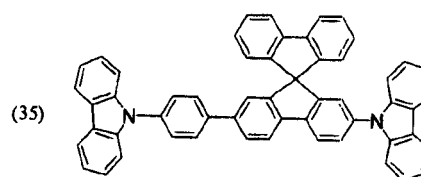
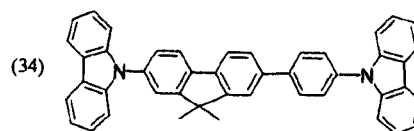
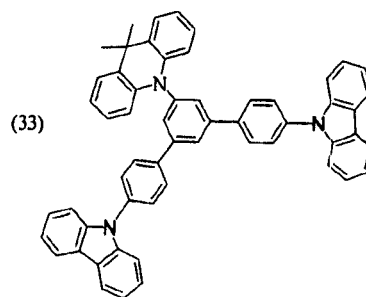
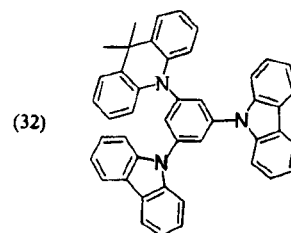
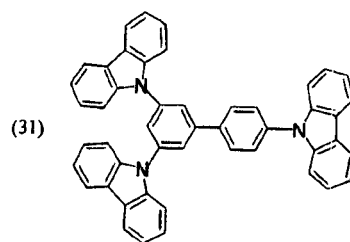
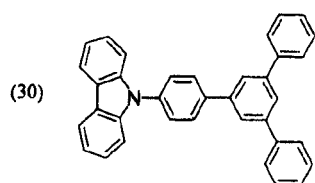
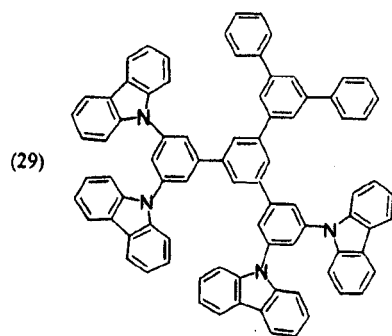
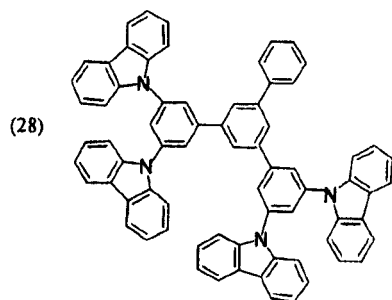
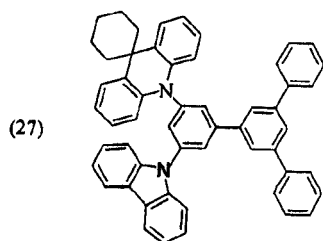
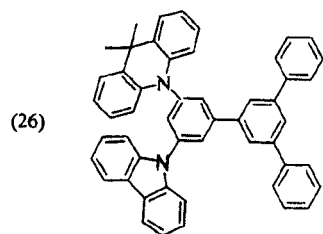
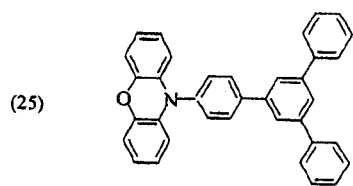
包括本发明由通式(1)表示的化合物的用于有机 EL 设备的材料的具体结构包括下面的结构。另外, 有一些结构其中 Cz 存在于相当于 Ar^1 或 Ar^2 的位置上, 这是因为 Ar^1 和 Ar^2 可以包含 Cz。此外, 在以下结构中, 苯基位和噻吩基位均可以被具有 6-10 个碳原子的烷基或芳基取代。

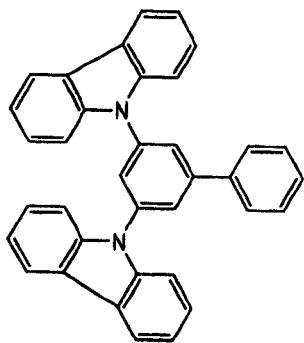


包括本发明由通式(1)表示的化合物的用于有机 EL 设备的材料的具体结构包括以下化合物，但并不并局限于此。

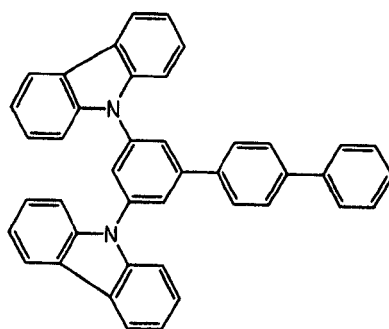




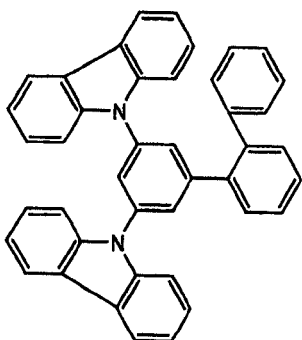




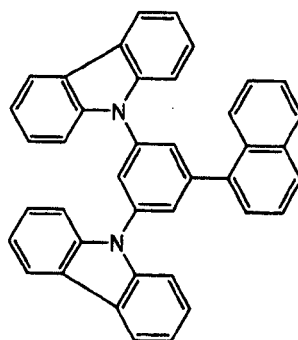
(37)



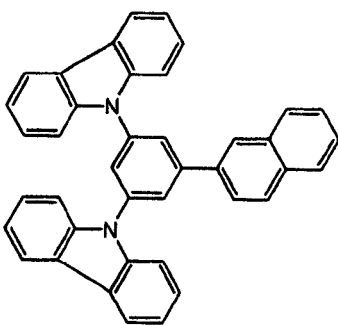
(38)



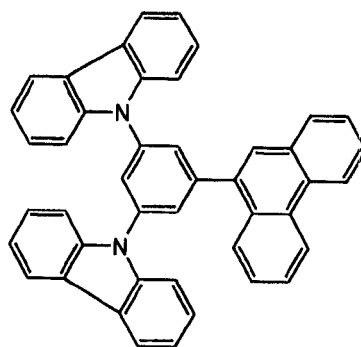
(39)



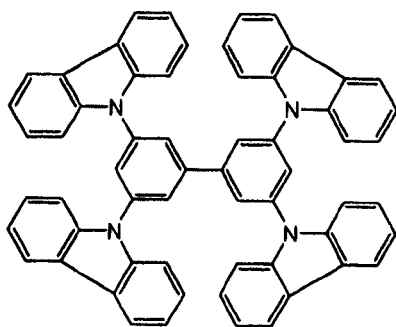
(40)



(41)



(42)



(43)

另外，由通式(1)表示的化合物优选为有机 EL 设备的宿主材料，传输电荷并具有 110℃或更高的玻璃化温度。而且，因为化合物能够激发绿光或红光混合发光，因此优选化合物的三线态能为 2.76eV 或更高。还有，因为化合物的玻璃化温度为 110℃或更高，并且因为化合物可以具有 2.82eV 或更高，甚至 2.85eV 或更高的三线态能，因此，设备的高温存贮性能将优良，且预计可以形成相对于 CBP 来说发光效能增强的发绿光 EL 设备。另外，为了激发绿光或红光混合发光，特别优选三线态能在 2.82-2.92eV 范围内。当三线态能超过 2.92eV 时，发光效能可能得不到增强。

10 接下来，将解释本发明的有机 EL 设备。

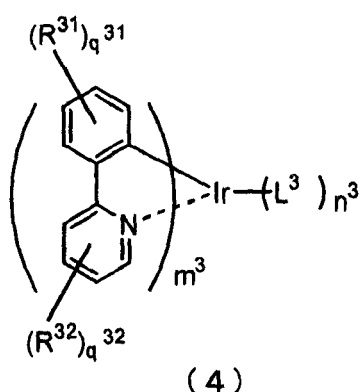
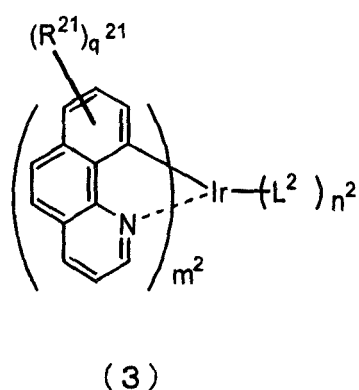
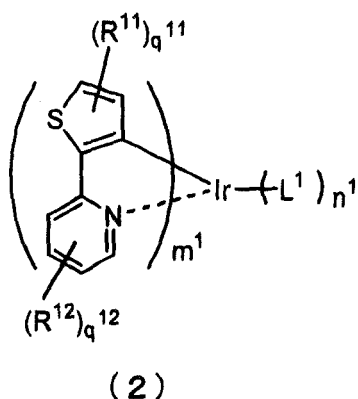
本发明的有机 EL 设备包括阴极，阳极和夹在阴极与阳极之间并包括至少一个发光层的有机薄膜层，其中有机薄膜层中的至少一个层包含根据本发明用于有机 EL 设备的材料。

15 多层型有机 EL 设备的典型结构包括，阳极/空穴传输层(空穴注入层)/发光层/阴极；阳极/发光层/电子传输层(电子注入层)/阴极；阳极/空穴传输层(空穴注入层)/发光层/电子传输层(电子注入层)/阴极；阳极/空穴传输层(空穴注入层)/发光层/空穴阻挡层/电子传输层(电子注入层)/阴极；等。

优选本发明有机 EL 设备中的发光层包括宿主材料和磷光材料。

20 作为磷光材料，优选铱络合物，钕络合物和铂络合物，更优选铱络合物和铂络合物，最优选呈原金属形式的铱络合物，这分别是因为磷光量子收率高且发光设备的外部量子效率可以得到进一步的提高。至于络合物的形式，优选金属络合物，由以下通式(2)-(4)表示的化合物，更优选由以下通式(2)和(3)表示的化合物。

25



通式(2)中, R^{11} 和 R^{12} 各自独立地表示烷基, 芳基, 氟烷基或氟芳基。优选它们各自独立地表示烷基, 芳基或氟烷基。更它们各自独立地表示烷基或氟烷基。 q^{11} 表示 0-2 的整数, 但优选 0 或 1, 更优选 0。 q^{12} 表示 0-4 的整数, 但优选 0 或 1, 更优选 0。当存在两个或以上的 q^{11} 或 q^{12} 时, 所述多个 q^{11} 或 q^{12} 可以彼此相同或不同, 并且可以键合形成缩合环。

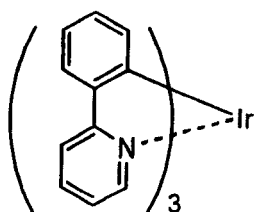
L^1 表示配体。该配体的实例包括形成呈原金属形式的铱金属络合物所需的配体等, 优选形成呈原金属形式的铱金属络合物所需的配体, 含氮原子的杂环配体, 二酮配体, 卤素配体和双吡啶(dipyridil)配体。更优选形成呈原金属形式的铱金属络合物所需的配体和双吡啶配体作为所述配体。 n^1 表示 0-5 的整数, 但优选 0。 m^1 表示 1、2 或 3, 但优选 3。就 n^1 和 m^1 表示的数的组合而言, 该组合要使由通式(2)表示的金属络合物形成中性络合物。

通式(3)中, R^{21} 、 n^2 、 m^2 和 L^2 各自分别与上述 R^{11} 、 n^1 、 m^1 和 L^1 相同。 q^{21} 表示 0-8 的整数, 但优选 0。当 q^{21} 是 2 或以上时, 它们可以彼此相同或不同。

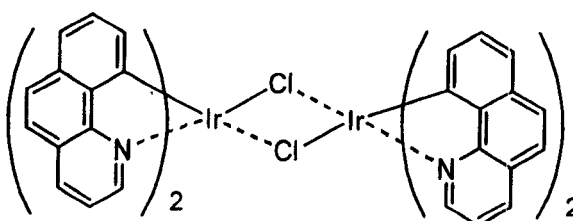
通式(4)中, R^{31} 、 R^{32} 、 q^{31} 、 q^{32} 、 n^3 、 m^3 和 L^3 各自分别与上述 R^{11} 、 R^{12} 、 q^{11} 、 q^{12} 、 n^1 、 m^1 和 L^1 相同。

优选以下铱络合物作为上述磷光材料。

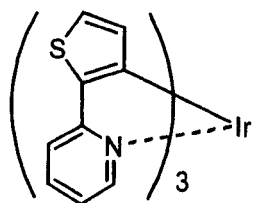
(I-1)



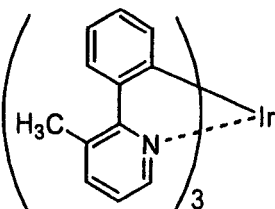
(I-2)



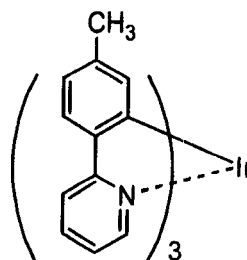
(I-3)



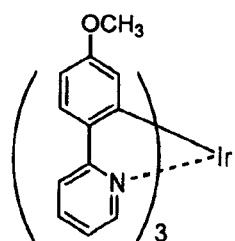
(I-4)



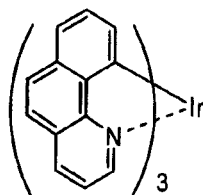
(I-5)



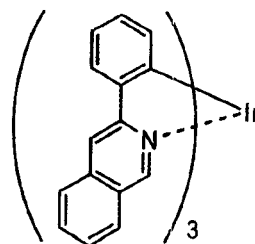
(I-6)



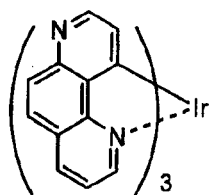
(I-7)



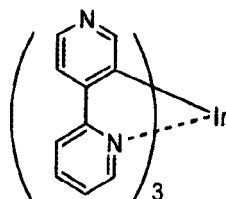
(I-8)



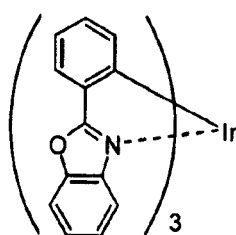
(I-9)



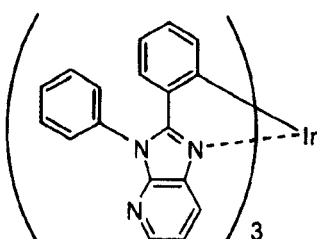
(I-10)



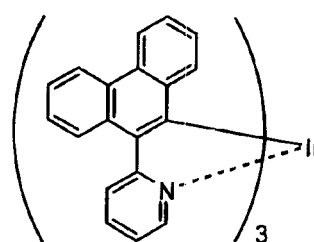
(I-11)



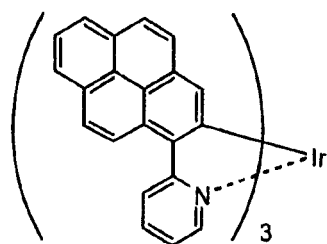
(I-12)



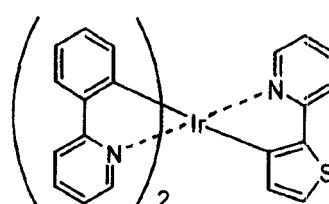
(I-13)



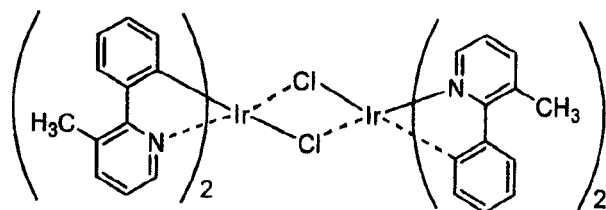
(I-14)



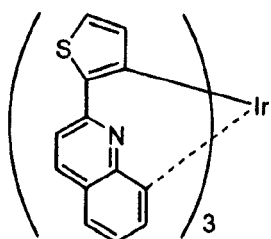
(I-15)



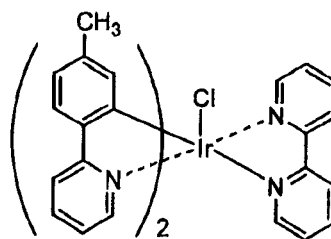
(I -16)



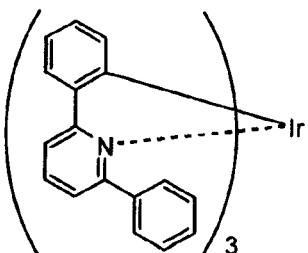
(I -17)



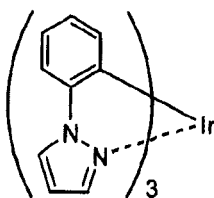
(I -18)



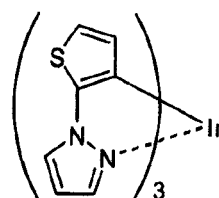
(I -19)



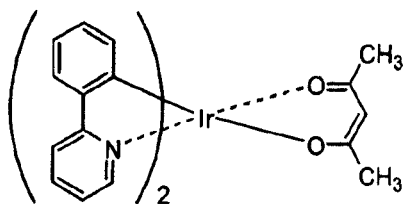
(I -20)



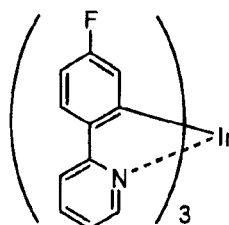
(I -21)



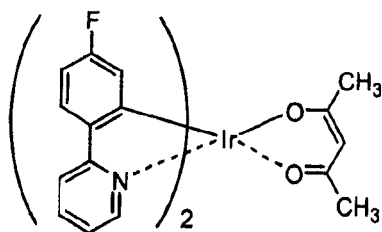
(I -22)



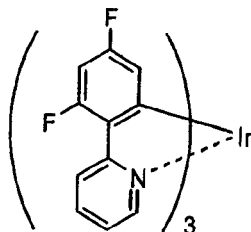
(I -23)



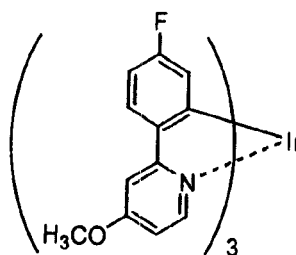
(I-24)



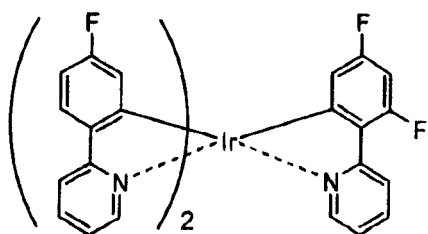
(I-25)



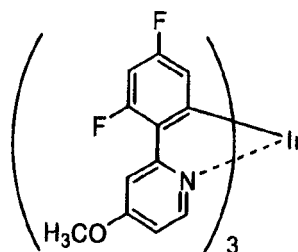
(I-26)



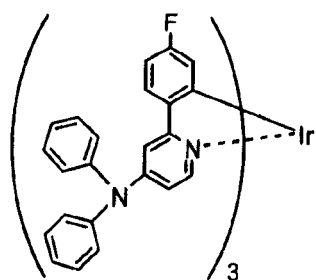
(I-27)



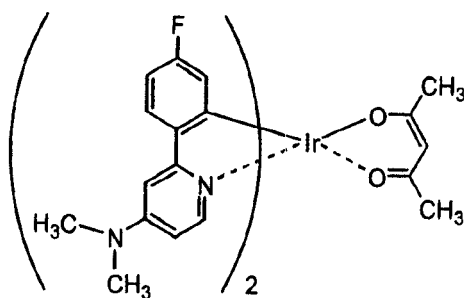
(I-28)



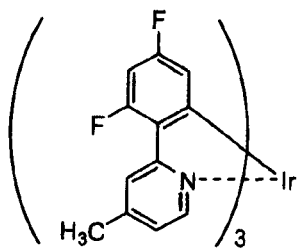
(I-29)



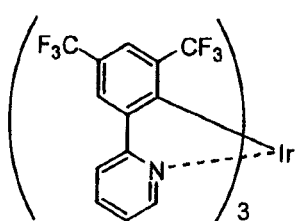
(I-30)



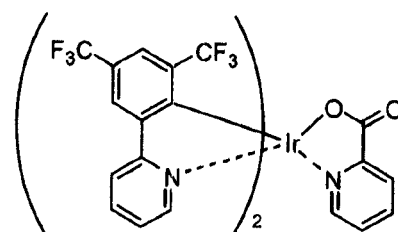
(I-31)



(I-32)



(I-33)



本发明中，优选在有机 EL 设备的阴极和有机薄膜层之间的边界区中加入还原性掺杂剂。

所述还原性掺杂剂的实例包括至少一种选自以下所述的化合物：碱金属，碱金属络合物，碱金属化合物，碱土金属，碱土金属络合物，碱土金属化合物，稀土金属，稀土金属络合物和稀土金属化合物。

碱金属的实例包括 Na(逸出功：2.36eV)，K(逸出功：2.28eV)，Rb(逸出功：2.16eV)和 Cs(逸出功：1.95eV)。优选逸出功为 2.9eV 或以下的碱金属。在这些碱金属当中，优选 K，Rb 和 Cs，更优选 Rb 和 Cs，最优选 Cs。

碱土金属的实例包括 Ca(逸出功：2.9eV)，Sr(逸出功：2.0-2.5eV)和 Ba(逸出功：2.52eV)。优选逸出功为 2.9eV 或以下的碱土金属。

稀土金属的实例包括 Sc，Y，Ce，Tb 和 Yb。优选逸出功为 2.9eV 或以下的稀土金属。

当使用以上金属中优选的金属时，因为这些金属具有大的还原能力，因此，通过将相对小量的所述金属加入到电子注入层中，可以提高发光亮度和有机 EL 设备的寿命。

上述碱金属化合物的实例包括碱金属氧化物如 Li_2O ， Cs_2O 和 K_2O ，碱金属氟化物如 LiF ， NaF ， CsF 和 KF 。在这些化合物当中，优选诸如 LiF 、 Li_2O 和 NaF 的碱金属氧化物和碱金属氟化物。

上述碱土金属化合物的实例包括 BaO ， SrO ， CaO 和其混合物，如 $\text{Ba}_x\text{Sr}_{1-x}\text{O}$ ($0 < x < 1$) 和 $\text{Ba}_x\text{Ca}_{1-x}\text{O}$ ($0 < x < 1$)。在这些化合物当中，优选 BaO ， SrO 和 CaO 。

上述稀土金属化合物的实例包括 YbF_3 ， ScF_3 ， ScO_3 ， Y_2O_3 ， Ce_2O_3 ， GdF_3 和 TbF_3 。在这些化合物当中，优选 YbF_3 ， ScF_3 和 TbF_3 。

对碱金属络合物、碱土金属络合物和稀土金属络合物没有特别的限定，只要所述络合物分别包含至少一种碱金属离子、碱土金属离子和稀土金属离子作为金属离子即可。作为配体，优选喹啉醇，苯并喹啉醇，吡啶醇，菲啶醇，羧苯基噻唑，羧苯基噻唑，羟基二芳基噻二唑，羟基二芳基噻二唑，羧苯基吡啶，羧苯基苯并咪唑，羟基苯并三唑，羟基咪唑，双吡啶，菲咯啉，酞菁染料，卟啉，环戊二烯， β -二酮，甲亚胺和这些化合物的衍生物。但是，所述配体并不限于上述配体。

至于还原性掺杂剂的加入形式,优选还原性掺杂剂的加入使得在上述边界区中形成一层或一个“岛”。关于还原性掺杂剂的加入方法地,优选将有机材料,即形成边界区的发光材料或电子注入材料汽化,同时根据耐热沉积法汽化沉积还原性掺杂剂,从而使还原性掺杂剂分散在有机材料中。分散体的浓度,以有机材料与还原性掺杂剂的摩尔量比表示,在100:1-1:100范围内,优选5:1-1:5。

当加入还原性掺杂剂以形成一个层时,在形成作为边界区的有机材料如发光材料和电子注入材料层之后,所述还原性掺杂剂根据耐热沉积法独立地汽化沉积形成厚度优选为0.1-15nm的层。

当加入还原性掺杂剂以形成一个岛时,在形成作为边界区的有机材料如发光材料和电子注入材料岛之后,所述还原性掺杂剂根据耐热沉积法独立地汽化沉积形成厚度优选为0.1-15nm的岛。

优选本发明有机EL设备电子注入层中主组分与还原性掺杂剂的相对摩尔量在5:1-1:5的范围内,更优选在2:1-1:2的范围内。

优选,本发明的有机EL设备在发光层和阴极之间具有电子注入层,且所述电子注入层包括含有氮原子的环化合物的衍生物作为主组分。

在分子中具有至少一个杂原子的芳族杂环化合物优选用于电子注入层的电子传输材料,特别优选含有氮原子的环化合物的衍生物。在含有氮原子的环化合物的衍生物中优选的特定化合物具有五元环吡咯骨架结构。所述芳族杂环化合物在基本骨架中除碳原子和氢原子之外具有2个或以上原子,并且它可以是单环或稠环。含有氮原子的环化合物的衍生物优选具有一个或多个选自氮原子、氧原子和硫原子的原子以及一个氮原子,更优选在其骨架结构中含有2个或以上氮原子的芳族杂环化合物。杂原子可以存在于稠合位置或非稠合位置上。含有2个或以上杂原子的杂环骨架结构的优选实例包括吡唑,咪唑,吡嗪,嘧啶,吡啶,嘌呤,酞嗪,茶啉,喹啉,喹唑啉,噌啉,喋啶,茶嵌间二氮杂苯(perimidin),菲咯啉,吡咯并亚胺唑,吡咯并三唑,吡唑并亚胺唑,吡唑并三唑,吡唑并嘧啶,吡唑并三嗪,咪唑并亚胺唑,咪唑并吡嗪,咪唑并吡啶,咪唑并吡嗪,三唑并吡啶,苯并咪唑,茶并亚胺唑,苯并噁唑,茶并噁唑,苯并噻唑,茶并噻唑,苯并三唑,四氮茛(tetrazaindene),三嗪,等。

在上述说明当中，具有稠合吡咯骨架结构的化合物，如咪唑并吡嗪，咪唑并吡啶，咪唑并吡嗪，苯并咪唑等，或具有三嗪骨架结构的化合物优选作为电忆與宿主材料，更优选稠合的咪唑并吡啶。

具有吡咯骨架结构的优选化合物由以下通式(5)表示：

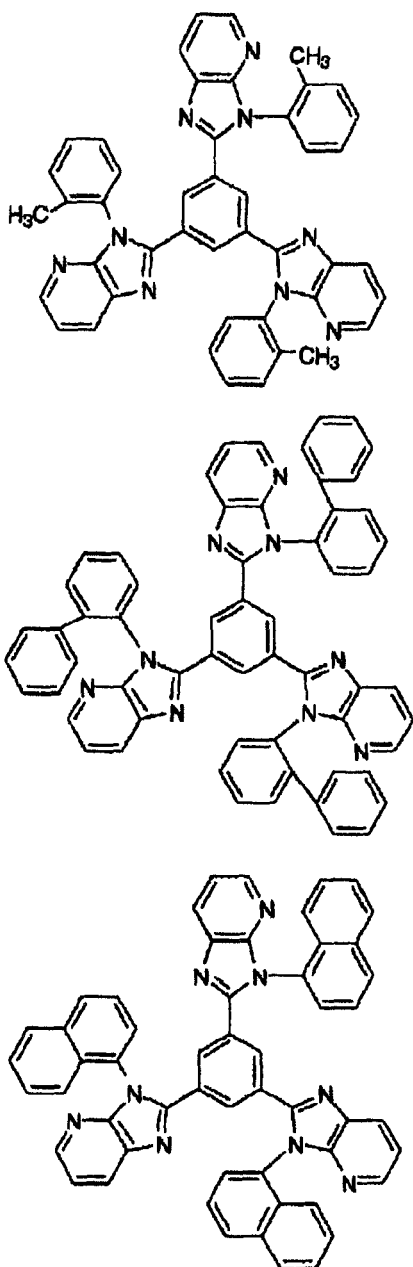
5



其中，R表示芳族基团；X表示氧、硫或N-Ra (Ra表示氢原子，脂肪族烃基，芳基或杂环基)；Q表示需要通过与N和X键合形成杂环的原子基团；另外，如果可能的话，R和X或R和Q可以键合形成环。

10

以下化合物优选作为上述含有氮原子的环化合物的衍生物。



此外,除了作为电子注入层组分的含有氮原子的环化合物的衍生物之外,优选电绝缘体或半导体用作无机化合物。包括电绝缘体或半导体的电子注入层能够有效防止电流的泄漏并提高电子注入性能。

- 5 关于电绝缘体,优选使用至少一种或多种选自以下所述的金属化合物:碱金属硫属化物,碱土金属硫属化物,碱金属卤化物和碱土金属卤化物。优选电子注入层包括这些碱金属硫属化物等,因为电子注入性能会得到进一步的提高。碱金属硫属化物的优选实例包括 Li_2O , LiO , Na_2S , Na_2Se , 和 NaO 。碱土金属硫属化物的优选实例包括 CaO , BaO , SrO , BeO , BaS 和 CaSe 。碱金属卤化物的优选实例包括 LiF , NaF , KF , LiCl , KCl 和 NaCl 。碱土金属卤化物的优选实例包括 CaF_2 , BaF_2 ,
- 10

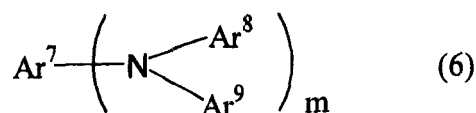
SrF₂, MgF₂ 和 BeF₂ 以及不同于上述氟化物的卤化物。

5 半导体的实例包括含有至少一种选自 Ba、Ca、Sr、Yb、Al、Ga、In、Li、Na、Cd、Mg、Si、Ta、Sb 和 Zn 的元素的氧化物，氮化物和氧化物-氮化物，其单独使用或两种或多种组合使用。优选组成电子注入层的无机化合物呈精细结晶或无定型绝缘薄膜形式。当电子注入层由上述无机化合物组成时，可以形成更均匀的薄膜，并且可以减少有缺陷的像素，如黑点。无机化合物的实例包括以上所述的碱金属硫属化物，碱土金属硫属化物，碱金属卤化物和碱土金属卤化物。

另外，还优选本发明中的电子注入层包含上述还原性掺杂剂。

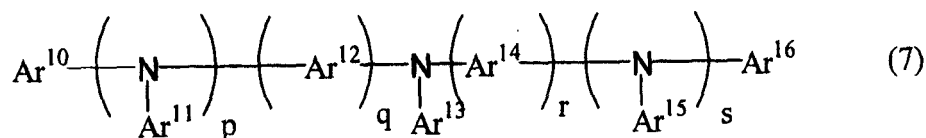
10 优选，本发明的有机 EL 设备在发光层和阳极之间具有空穴传输层，且所述空穴传输层包括芳胺衍生物作为主组分。另外，优选空穴传输层中空穴传输材料的三线态能落在 2.52-3.7eV 范围内，更优选 2.8-3.7eV。使用具有上述三线态能范围的空穴传输材料能够防止发光层激发能量的猝灭。

15 上述空穴传输材料优选由以下通式 (6) 和 (7) 表示：



其中，Ar⁷ 表示具有 6-40 个碳原子的芳族基团，Ar⁸ 和 Ar⁹ 各自独立地表示氢原子或具有 6-40 个碳原子的芳族基团，m 表示 1-6 的整数。

20

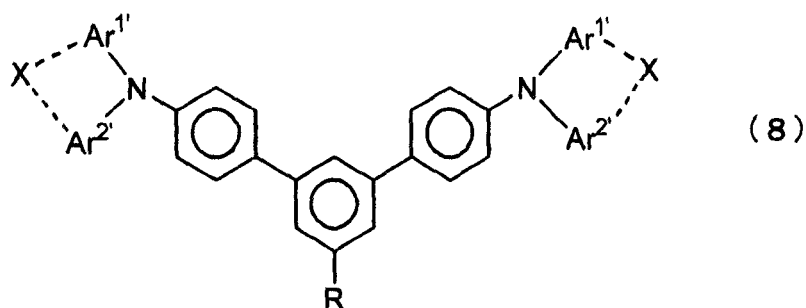


其中，Ar¹⁰ 和 Ar¹⁶ 各自独立地表示具有 6-40 个碳原子的芳族基团，Ar¹¹-Ar¹⁵ 各自独立地分别表示氢原子或具有 6-40 个碳原子的芳族基团，缩合数 p、q、r 和 s 分别表示 0 或 1。

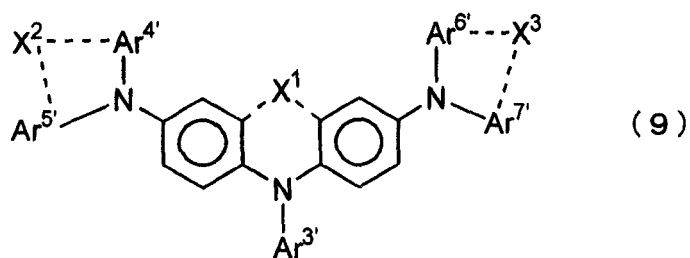
25 以上通式 (6) 和 (7) 中，在具有 6-40 个碳原子的芳族基团当中，具有 5-40 个核原子的芳基的优选实例包括苯基，萘基，苯邻甲内酰胺 (anthranil)，菲基，蒽基，蒹基，联苯基，三联苯基，吡咯基，呋

- 喃基, 噻吩基, 苯并噻吩基, 噁二唑基, 联苯苯邻甲内酰胺, 吲哚基, 咔唑基, 吡啶基, 苯并喹啉基, 茋基, 茋烯并茋基, 等。另外, 具有 5-40 个核原子的亚芳基的优选实例包括亚苯基, 亚萘基, 亚蒎基, 亚菲基, 亚芘基, 亚蒽基, 亚联苯基, 亚三联苯基, 吡咯亚基, 咪喃
- 5 亚基, 噻吩亚基, 苯并噻吩亚基, 噁二唑亚基(oxadiazolilane), 联苯 anthranilane, 吲哚亚基(indolilane), 咔唑亚基(carbazolilane), 吡啶亚基, 苯并喹啉亚基(benzoquinolilane), 茋基, 茋烯并茋基, 等。此外, 具有 6-40 个碳原子的芳族基团可以进一步被取代基取代。取代基的优选实例包括具有 1-6 个碳原
- 10 子的烷基(如乙基, 甲基, 异丙基, 正丙基, 仲丁基, 叔丁基, 戊基, 己基, 环戊基, 环己基等), 具有 1-6 个碳原子的烷氧基(如乙氧基, 甲氧基, 异丙氧基, 正丙氧基, 仲丁氧基, 叔丁氧基, 戊氧基, 己氧基, 环戊氧基, 环己氧基等), 具有 5-40 个核原子的芳基, 被具有 5-40 个核原子的芳基取代的氨基, 具有 5-40 个核原子的酯基, 具有含
- 15 1-6 个碳原子的烷基的酯基, 氰基, 硝基和卤素原子。

三线态能为 2.8eV 或以上的空穴传输材料的优选实例由以下通式 (8)-(10) 表示:

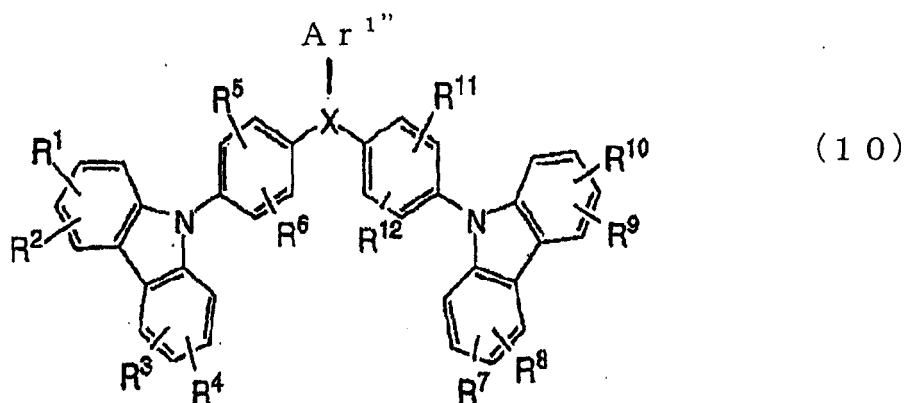


- 20 其中, $Ar^{1'}$ 和 $Ar^{2'}$ 彼此独立地表示含有 1-6 个碳原子的烷基或者是可以被烷氧基或苯基取代的含有 6-18 个核原子的芳基; R 表示含有 4-6 个碳原子的烷基, 含有 4-6 个碳原子的烷氧基, 或含有 6-18 个核原子的芳基; X 表示单键或由 -O- 或 -S- 表示的偶联键, 其可以存在或不存在。

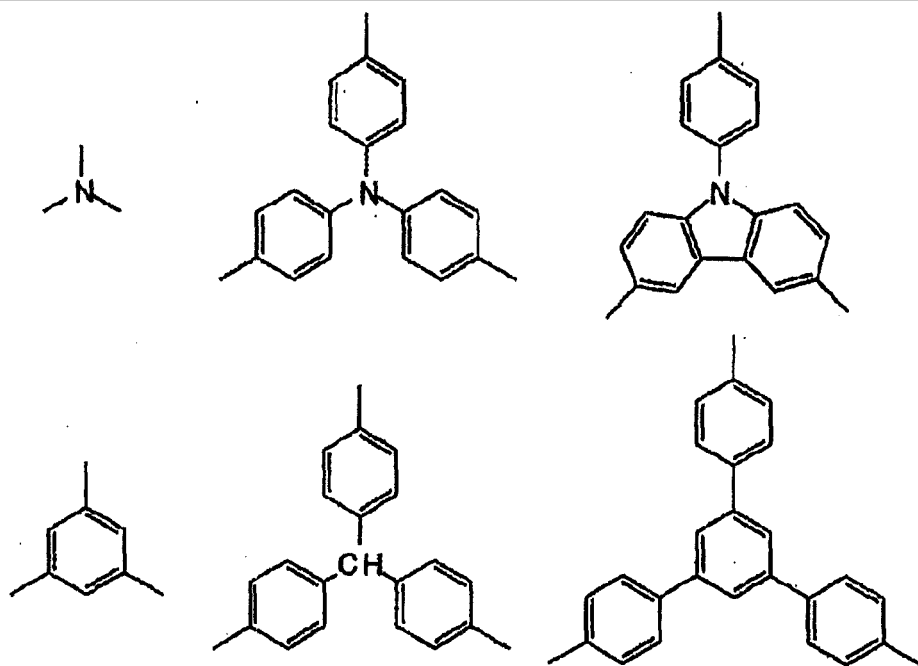


其中, $Ar^{3'}$ 表示取代或未取代的含有 6-18 个核原子的芳基; $Ar^{4'}$ - $Ar^{7'}$ 彼此独立地表示取代或未取代的含有 6-18 个核原子的亚芳基; X^1 表示单键或由 -O-、-S-、 $-(CH_2)_n$ (n 是 1-6 的整数)、或 $-C(CH_3)_2$ - 表示的偶联键; X^1 可以存在或不存在; X^2 和 X^3 彼此独立地表示单键或由 -O-、-S-、 $-(CH_2)_n$ (n 是 1-6 的整数)、或 $-C(CH_3)_2$ - 表示的偶联键; X^2 和 X^3 可以彼此相同或不同。

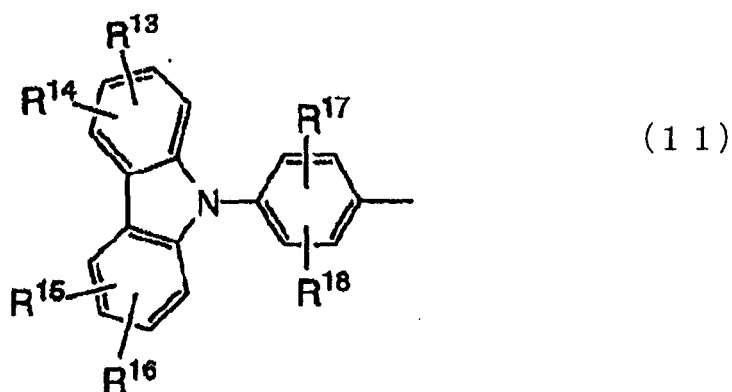
通式 (8) 和 (9) 中, 由 $Ar^{1'}$ - $Ar^{7'}$ 、 R 、 X 、和 X^1 - X^3 表示的各个基团和取代基的具体实例差不多与以上 Cz 和 Ar^1 - Ar^6 的实例相同。



其中, R^1 - R^{12} 各自独立地表示氢原子, 卤原子, 烷基, 芳烷基, 烯基, 氰基, 氨基, 酰基, 烷氧基羰基, 羧基, 烷氧基, 烷氨基, 芳烷氨基, 卤代烷基, 羟基, 芳氧基, 可以具有取代基的芳族烃环基或可以具有取代基的芳族杂环基, 相邻的取代基 R^1 和 R^2 、 R^3 和 R^4 、 R^5 和 R^6 、 R^7 和 R^8 、 R^9 和 R^{10} 以及 R^{11} 和 R^{12} 各自可以键合形成环; X 表示由以下结构表示的三价偶合基团:



且 $Ar^{1'}$ 表示可以带有取代基的芳族烃环基，可以带有取代基的芳族杂环基，或者由以下通式 (11) 表示：



5 其中， R^{13} – R^{18} 各自独立地表示氢原子，卤原子，烷基，芳烷基，烯基，氰基，氨基，酰基，烷氧基羰基，羧基，烷氧基，烷氨基，芳烷氨基，卤代烷基，羟基，芳氧基，可以具有取代基的芳族烃环基或可以具有取代基的芳族杂环基，相邻的取代基 R^{13} 和 R^{14} 、 R^{15} 和 R^{16} 、以及 R^{17} 和 R^{18} 各自可以键合形成环。

10 通式 (10) 中，由 $Ar^{1'}$ 、 R^1 – R^{18} 表示的各个基团和取代基的具体实例差不多与以上 Cz 和 Ar^1 – Ar^6 的实例相同。

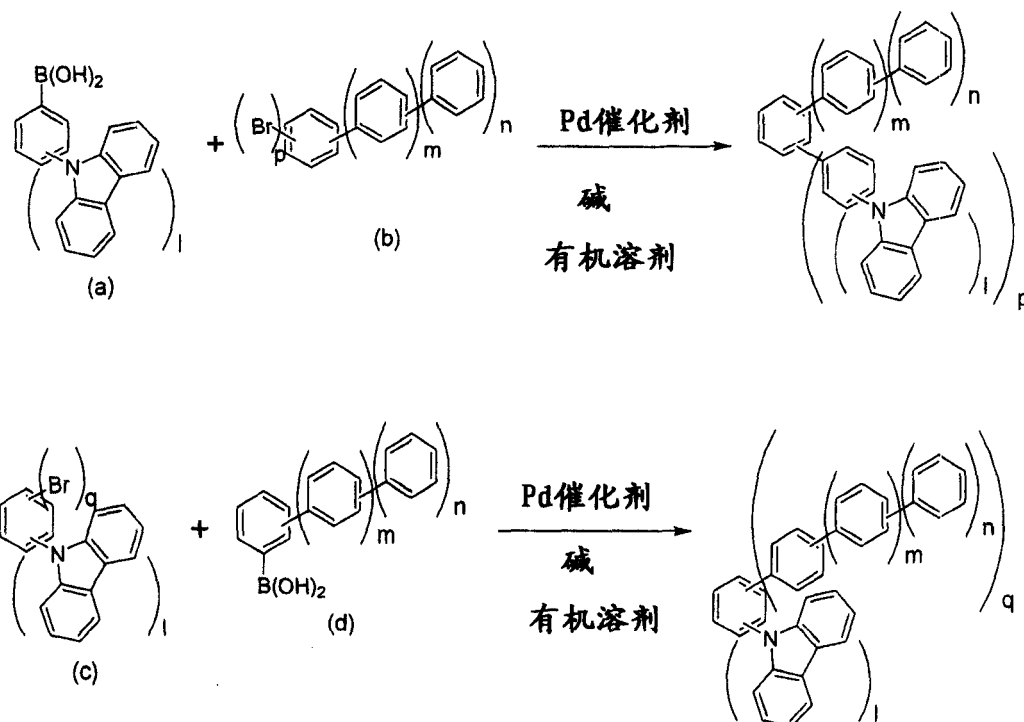
有机 EL 设备的阳极所起的作用是，将空穴注入到空穴传输层或发光层中。阳极的逸出功为 4.5 eV 或以上时是有效的。用于本发明的阳极材料的实例包括铟锡氧化物合金 (ITO)，氧化锡 (NESA)，金，银，铂

和铜。作为阴极，优选具有低逸出功的材料，这样的话，电子可以注入到电子注入层中或发光层中。对于阴极材料没有特别的限定。阴极材料的实例包括铟，铝，镁，镁-铟合金，镁-铝合金，铝-锂合金，铝-铟-锂合金，和镁-银合金。

- 5 用于形成本发明有机 EL 设备各层的方法没有特别的限定。可以使用通用的方法，如真空汽相沉积法，和旋涂法。用于本发明有机 EL 设备的有机薄膜层可以根据真空汽相沉积法、分子束外延法 (MBE 法)、或者，使用通过把由上述通式 (1) 表示的化合物溶于溶剂中所形成的溶液，根据通用的涂层法，如浸渍法、旋涂法、铸造法、棒涂法及辊涂法来形成。
- 10

本发明有机 EL 设备中，对于有机薄膜层中各层的厚度没有特别的限定。通常，过薄的层倾向于具有缺陷如针孔，而过厚的层则需要较高的施用电压，导致效率降低。因此，优选厚度在几个纳米到 1 微米范围内。

- 15 由通式 (1) 表示的化合物的合成方法的实例包括，使由通式 (a) 表示的化合物与由通式 (b) 表示的化合物在有机溶剂中，在碱的存在下使用钯催化剂反应的方法，使由通式 (c) 表示的化合物与由通式 (d) 表示的化合物在有机溶剂中，在碱的存在下使用钯催化剂反应的方法，等，在以下通式 (a)-(d) 中， l 、 m 、 n 、 p 和 q 各自独立地表示大致选择能满足通式 (1) 的整数。
- 20



可以使用不参与上述反应的任意溶剂作为所述有机溶剂,例如芳族烃基溶剂如苯, 甲苯, 二甲苯等或醚基溶剂如 1,2-二甲氧基乙烷, 四氢呋喃等。

5 用于上述反应的碱的典型实例包括无机碱如碳酸钠、碳酸钾、碳酸氢钠、碳酸氢钾、氢氧化钠、氢氧化钾等, 有机碱如三乙胺、吡啶等。在上述实例中, 优选碳酸钠。另外, 为了溶解无机碱, 可以共存在水。

钯催化剂的典型实例包括四(三苯基膦)钯, 二氯二(三苯基膦)钯, 乙酸-三苯基膦钯, 等。优选的实例是四(三苯基膦)钯等。

10 下面将更具体地参考实施例与合成实施例对本发明进行描述。但是, 本发明并不局限于这些实施例。

实施例

根据以下方法测定化合物的三线态能隙和单线态能隙。

15 (1) 三线态能隙的测量

测量最低激发的三线态能级 T1。测定样品的磷光光谱(10 微摩尔/升 EPA 溶液(二乙醚: 异戊烷: 乙醇=5: 5: 2, 体积比); 77K; 石英池; SPEX 公司制造的 FLUOROLOG II)。在磷光光谱的短波长侧作出切线延长线, 得到切线与横坐标的交叉点上的波长(发光端点)。将所得波长转化为

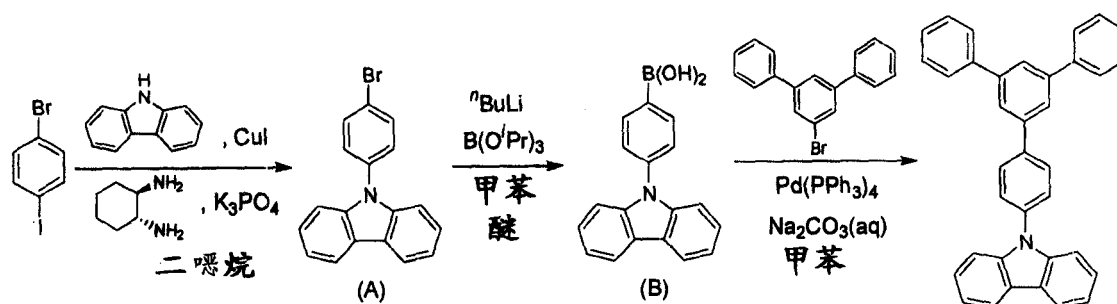
能量。

(2) 单线态能隙的测量

测量激发的单线态能。使用样品的甲苯溶液(10^{-5} 摩尔/升), 通过 HITACHI Co. Ltd. 制造的用于紫外和可见光吸收的分光计得到吸收光谱。在光谱的长波长侧作出切线延长线, 得到切线与横坐标的交叉点上的波长(吸收端点)。将所得波长转化为能量。

合成实施例 1 (化合物 (30) 的合成)

化合物 (30) 的合成路线如下所示。



(1) 中间体 (A) 的合成

将 25.4 克 (90 毫摩尔) 4-溴碘苯, 10.0 克 (60 毫摩尔) 吡啶, 0.1 克 (0.5 毫摩尔) 碘化铜以及 26.7 克 (126 毫摩尔) 磷酸钾悬浮到 70 毫升 1, 4-二氧六环中, 并加入 0.7 毫升 (6 毫摩尔) 顺-1, 2-环己烷二胺, 所得溶液在氩气保护下加热回流 15 小时。将反应后的溶液冷却到室温。向溶液中加入二氯甲烷和水, 所得混合溶液分离成两层。有机层依次用 5% 的盐酸水溶液和水洗涤, 并用无水硫酸钠干燥。减压蒸馏脱除有机溶剂之后, 向残余物中加入 50 毫升乙醇。通过过滤分离出形成的晶体, 并顺次用乙醇和正己烷洗涤, 得到 17.8 克 (收率 92%) 中间体 (A)。

(2) 中间体 (B) 的合成

将 8.1 克 (25 毫摩尔) 中间体 (A) 溶于 50 毫升甲苯和 50 毫升乙醚中, 在氩气保护和 -40°C 的温度下, 向所得溶液中加入 21 毫升 (32 毫摩尔) 正丁基锂的己烷溶液 (1.6M), 所得溶液在 $-40 - 0^{\circ}\text{C}$ 的温度下搅拌 1 小时。当反应溶液冷却到 -70°C 后, 滴加通过用 25 毫升乙醚稀释 17 毫升 (74 毫摩尔) 硼酸三异丙基酯得到的溶液, 将温度升高到室温, 使

溶液搅拌 6 小时。向所得反应溶液中滴加 70 毫升 5% 的盐酸，得到的溶液在室温下搅拌 45 小时。当反应后的溶液分离成两层后，用饱和氯化钠溶液洗涤有机层，并用无水硫酸钠干燥。减压蒸馏脱除有机溶剂直到有机溶剂的量降低到原始量的 1/5。形成的晶体通过过滤分离出来并依次用甲苯与正己烷的混合溶剂和正己烷洗涤，得到 4.0 克中间体 (B) (收率：56%)。

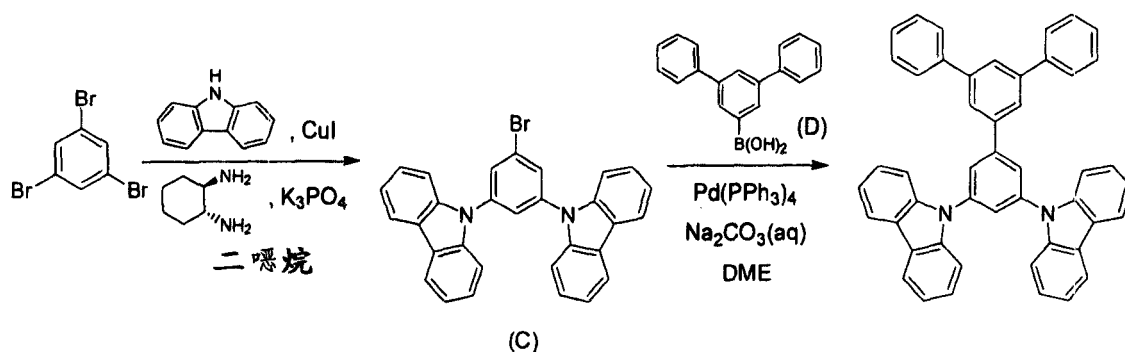
(3) 目标化合物 (30) 的合成

将 2.0 克 (7.0 毫摩尔) 中间体 (B)，2.2 克 (7.0 毫摩尔) 溴代-3,5-二苯基苯和 0.16 克 (0.14 毫摩尔) 四(三苯基膦)钯悬浮到 21 毫升甲苯中，并加入把 2.2 克 (21 毫摩尔) 碳酸钠溶于 11 毫升水形成的溶液，所得溶液在氩气保护下加热回流 9 小时。当反应后的溶液分离成两层后，用饱和氯化钠溶液洗涤有机层并用无水硫酸钠干燥。减压蒸馏脱除有机溶剂，并向残余物中加入 12 毫升乙酸乙酯。形成的晶体通过过滤分离出来，并用乙酸乙酯洗涤，得到 2.6 克晶体 (收率：78%)。根据 90 MHz ^1H -NMR 和场解析质谱 (FD-MS) 证实，得到的晶体是目标化合物。根据 FD-MS 测定的结果如下：

FDMS，对 $\text{C}_{36}\text{H}_{25}\text{N}$ 的计算值：471；测定值： $m/z=471 (\text{M}^+, 100)$

合成实施例 2 (化合物 (1) 的合成)

化合物 (1) 的合成路线如下所示。



(1) 中间体 (C) 的合成

将 5.0 克 (16 毫摩尔) 1,3,5-三溴苯，8.8 克 (52 毫摩尔) 吡啶，0.3 克 (1.6 毫摩尔) 碘化亚铜以及 13.8 克 (65 毫摩尔) 磷酸钾悬浮到 50 毫升 1,4-二氧六环中，并加入 1.9 毫升 (16 毫摩尔) 顺-1,2-环己烷二胺，

所得溶液在氩气保护下加热回流 19 小时。将反应后的溶液冷却到室温。向溶液中加入二氯甲烷和水, 所得混合溶液分离成两层。有机层用水洗涤, 并用无水硫酸钠干燥。减压蒸馏脱除有机溶剂直到有机溶剂的量降低到原始量的 1/5 之后, 通过过滤分离出形成的晶体, 并用乙酸乙酯洗涤。得到的残余物通过硅胶柱色谱纯化, 得到 1.8 克中间体 (C) (收率 23%)。

(2) 中间体 (D) 的合成

将 10.0 克 (32 毫摩尔) 溴代-3, 5-二苯基苯溶于 50 毫升甲苯和 50 毫升乙醚中, 在氩气保护和 $-16 - 42^{\circ}\text{C}$ 的温度下, 加入 27 毫升 (42 毫摩尔) 正丁基锂的己烷溶液 (1.6M), 所得溶液在 $-42 - 0^{\circ}\text{C}$ 的温度下搅拌 1 小时。当反应溶液冷却到 -70°C 后, 滴加通过用 25 毫升乙醚稀释 22 毫升 (97 毫摩尔) 硼酸三异丙基酯得到的溶液。所得溶液在 -70°C 搅拌 1 小时后, 将温度升高到室温, 使溶液搅拌 6 小时。向所得反应溶液中滴加 70 毫升 5% 的盐酸, 得到的溶液在室温下搅拌 45 小时。当反应后的溶液分离成两层后, 有机层依次用 3% 的盐酸和饱和氯化钠溶液洗涤, 并用无水硫酸钠干燥。减压蒸馏脱除有机溶剂直到有机溶剂的量降低到原始量的 1/5。然后, 加入 10 毫升正己烷, 形成的晶体通过过滤分离出来并依次用甲苯与正己烷的混合溶剂和正己烷洗涤, 得到 7.0 克中间体 (D) (收率: 78%)。

(3) 目标化合物 (1) 的合成

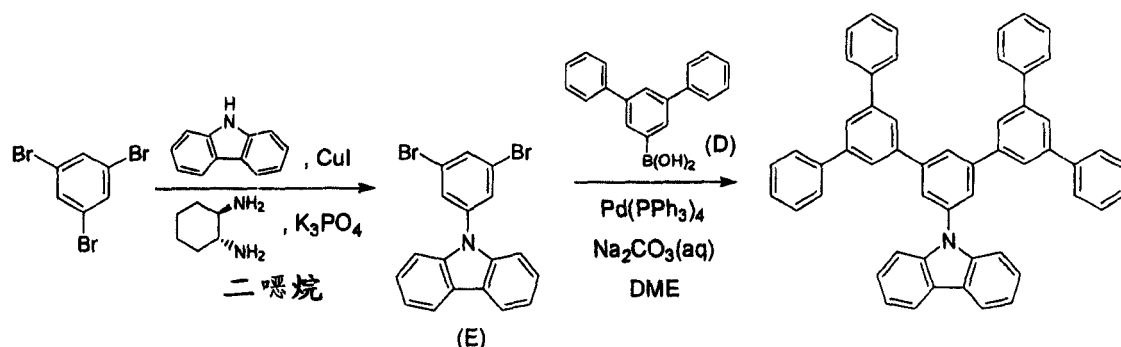
将 1.8 克 (3.6 毫摩尔) 中间体 (C), 0.99 克 (3.6 毫摩尔) 中间体 (D) 和 0.08 克 (0.07 毫摩尔) 四 (三苯基膦) 钯悬浮到 21 毫升 1, 2-二甲氧基乙烷中, 并加入把 1.1 克 (11 毫摩尔) 碳酸钠溶于 5 毫升水形成的溶液, 所得溶液在氩气保护下加热回流 9 小时。将反应溶液冷却到室温并通过过滤分离出沉淀出的晶体, 依次用水、甲醇和乙酸乙酯洗涤, 最终得到 1.9 克粗晶体。该晶体通过减压升华纯化, 得到 1.6 克纯化晶体 (收率: 68%)。

根据 90 MHz $^1\text{H-NMR}$ 和 FD-MS 证实, 得到的晶体是目标化合物。根据 FD-MS 测定的结果如下:

FDMS, 对 $\text{C}_{48}\text{H}_{32}\text{N}_2$ 的计算值: 636; 测定值: $m/z=636 (\text{M}^+, 100)$

合成实施例 3 (化合物 (4) 的合成)

化合物(4)的合成路线如下所示。



(1) 中间体(E)的合成

- 5 将 5.0 克 (16 毫摩尔) 1, 3, 5-三溴苯, 5.3 克 (32 毫摩尔) 吡唑, 0.3 克 (1.6 毫摩尔) 碘化亚铜以及 13.8 克 (65 毫摩尔) 磷酸钾悬浮到 50 毫升 1, 4-二氧六环中, 并加入 1.9 毫升 (16 毫摩尔) 顺-1, 2-环己烷二胺, 所得溶液在氩气保护下加热回流 9 小时。将反应后的溶液冷却到室温。向溶液中加入二氯甲烷和水, 所得混合溶液分离成两层。有机层用水
- 10 洗涤, 并用无水硫酸钠干燥。减压蒸馏脱除有机溶剂直到有机溶剂的量降低到原始量的约 1/5 之后, 通过过滤分离出形成的晶体, 并用乙酸乙酯洗涤。得到的残余物通过硅胶柱色谱纯化, 得到 2.0 克中间体 (E) (收率 31%)。

(2) 目标化合物(4)的合成

- 15 将 1.8 克 (4.5 毫摩尔) 中间体 (E), 2.5 克 (3.6 毫摩尔) 中间体 (D) 和 0.16 克 (0.13 毫摩尔) 四(三苯基膦)钯悬浮到 27 毫升 1, 2-二甲氧基乙烷中, 并加入把 2.9 克 (11 毫摩尔) 碳酸钠溶于 14 毫升水形成的溶液, 所得溶液在氩气保护下加热回流 18 小时。将反应溶液冷却到室温并通过过滤分离出沉淀出的晶体, 依次用水、甲醇和乙酸乙酯洗涤,
- 20 最终得到 3.3 克粗晶体。该晶体通过减压升华纯化, 得到 2.9 克纯化晶体 (收率: 92%)。

根据 90 MHz ^1H -NMR 和 FD-MS 证实, 得到的晶体是目标化合物。根据 FD-MS 测定的结果如下:

FDMS, 对 $\text{C}_{54}\text{H}_{37}\text{N}$ 的计算值: 699; 测定值: $m/z=699$ (M^+ , 100)

25

合成实施例 4 (化合物(37)的合成)

(1) 中间体 (C) 的合成

在氩气抽排气氛中, 将 118 克 1, 3, 5-三溴苯(得自 TOKYO KASEI Co. Ltd.), 125 克咔唑(得自 Sigma-Aldrich Corporation), 7 克碘化铜(得自 Wako Pure Chemical Industries, Ltd.), 317 克磷酸三钾(得自 Wako Pure Chemical Industries, Ltd.), 43 克顺-1, 2-环己烷二胺(得自 TOKYO KASEI Co. Ltd.) 和 1.2 升 1, 4-二氧六环(得自 Wako Pure Chemical Industries, Ltd.) 置于容量为 3 升的烧瓶中, 混合溶液在 104℃ 下搅拌 15 小时。

反应后, 将溶液自然冷却到室温, 加入 1 升水, 另外加入 3 升二氯甲烷进行萃取。萃取液用无水硫化镁干燥, 然后减压浓缩。所得残余物减压过滤, 母液用硅胶柱色谱纯化, 得到 92 克 3, 5-二(咔唑-9-基)-1-溴苯(中间体 (C))。

(2) 目标化合物 (37) 的合成

把 10 克上述中间体 (C)、2.8 克苯基硼酸(得自 Aldrich Corporation)、0.5 克四(三苯基膦)钯(0)(得自 N. E. CHEMCAT Co. Ltd.)、130 毫升二甲氧基乙烷(得自 Wako Pure Chemical Industries, Ltd.) 和 6.5 克碳酸钠(得自 Wako Pure Chemical Industries, Ltd.) 溶于 30 毫升水而制得水溶液, 在氩气抽排气氛中, 将上述水溶液加入到容量为 500 毫升的烧瓶中, 溶液在 78℃ 的温度下搅拌 26 小时。反应后, 将溶液自然冷却到室温, 通过过滤取出沉淀的晶体。将该晶体加热并溶于甲苯中, 所得溶液加热过滤。然后, 将母液浓缩, 并通过过滤取出沉淀的晶体。该晶体再次用甲苯结晶, 得到 4.7 克白色粉末(收率: 47%)。

根据 FD-MS 的测量结果, 发现对于 $C_{36}H_{24}N_2=484$ 的中心峰值 $m/z=484$, 所述白色粉末被确定为目标化合物 (37)。

合成实施例 5 (化合物 (38) 的合成)

把 8.4 克上述合成实施例 4 (1) 中的中间体 (C)、3.9 克 4-联苯硼酸(得自 Aldrich Corporation)、0.4 克四(三苯基膦)钯(0)(得自 N. E. CHEMCAT Co. Ltd.)、110 毫升二甲氧基乙烷(得自 Wako Pure Chemical Industries, Ltd.)、和 5.7 克碳酸钠(得自 Wako Pure Chemical Industries, Ltd.) 溶于 27 毫升水而制得水溶液, 在氩气抽排气氛

中, 将上述水溶液加入到容量为 500 毫升的烧瓶中, 溶液在 78℃ 的温度下搅拌 16 小时。

反应后, 将溶液自然冷却到室温, 通过过滤取出沉淀的晶体。将该晶体加热并溶于甲苯中, 所得溶液加热过滤。然后, 将母液浓缩, 并
5 通过过滤取出沉淀的晶体。该晶体再次用甲苯结晶, 得到 6.3 克白色粉末(收率: 63%)。

根据 FD-MS 的测量结果, 发现对于 $C_{42}H_{28}N_2=560$ 的中心峰值 $m/z=560$, 所述白色粉末被确定为目标化合物(38)。

10 合成实施例 6(化合物(39)的合成)

把 8.7 克上述合成实施例 4(1) 中的中间体(C)、3.9 克 2-联苯硼酸(得自 Aldrich Corporation)、0.4 克四(三苯基膦)钯(0)(得自 N. E. CHEMCAT Co. Ltd.)、110 毫升二甲氧基乙烷(得自 Wako Pure Chemical Industries, Ltd.)、和 5.7 克碳酸钠(得自 Wako Pure Chemical
15 Industries, Ltd.)溶于 27 毫升水而制得水溶液, 在氩气抽排气氛中, 将上述水溶液加入到容量为 500 毫升的烧瓶中, 溶液在 78℃ 的温度下搅拌 14 小时。

反应后, 将溶液自然冷却到室温, 通过过滤取出沉淀的晶体。将该晶体加热并溶于甲苯中, 所得溶液加热过滤。然后, 将母液浓缩, 并
20 通过过滤取出沉淀的晶体。该晶体再次用甲苯结晶, 得到 5.6 克白色粉末(收率: 56%)。

根据 FD-MS 的测量结果, 发现对于 $C_{42}H_{28}N_2=560$ 的中心峰值 $m/z=560$, 所述白色粉末被确定为目标化合物(39)。

25 合成实施例 7(化合物(40)的合成)

把 9.1 克上述合成实施例 4(1) 中的中间体(C)、3.5 克 1-萘硼酸(得自 Aldrich Corporation)、0.4 克四(三苯基膦)钯(0)(得自 N. E. CHEMCAT Co. Ltd.)、120 毫升二甲氧基乙烷(得自 Wako Pure Chemical Industries, Ltd.)、和 6.0 克碳酸钠(得自 Wako Pure Chemical
30 Industries, Ltd.)溶于 27 毫升水而制得水溶液, 在氩气抽排气氛中, 将上述水溶液加入到容量为 500 毫升的烧瓶中, 溶液在 78℃ 的温度下搅拌 14 小时。

反应后,将溶液自然冷却到室温,通过过滤取出沉淀的晶体。将该晶体加热并溶于甲苯中,所得溶液加热过滤。然后,将母液浓缩,并通过过滤取出沉淀的晶体。该晶体再次用甲苯结晶,得到 6.3 克白色粉末(收率: 63%)。

- 5 根据 FD-MS 的测量结果,发现对于 $C_{40}H_{26}N_2=534$ 的中心峰值 $m/z=534$,所述白色粉末被确定为目标化合物(40)。

合成实施例 8(化合物(41)的合成)

- 10 把 9.1 克上述合成实施例 4(1) 中的中间体(C)、3.5 克 2-萘硼酸(得自 Aldrich Corporation)、0.4 克四(三苯基膦)钯(0)(得自 N. E. CHEMCAT Co. Ltd.)、120 毫升二甲氧基乙烷(得自 Wako Pure Chemical Industries, Ltd.)、和 6.0 克碳酸钠(得自 Wako Pure Chemical Industries, Ltd.)溶于 27 毫升水而制得水溶液,在氩气抽排气氛中,将上述水溶液加入到容量为 500 毫升的烧瓶中,溶液在 78℃ 的温
15 度下搅拌 15 小时。

反应后,将溶液自然冷却到室温,通过过滤取出沉淀的晶体。将该晶体加热并溶于甲苯中,所得溶液加热过滤。然后,将母液浓缩,并通过过滤取出沉淀的晶体。该晶体再次用甲苯结晶,得到 5.3 克白色粉末(收率: 53%)。

- 20 根据 FD-MS 的测量结果,发现对于 $C_{40}H_{26}N_2=534$ 的中心峰值 $m/z=534$,所述白色粉末被确定为目标化合物(41)。

合成实施例 9(化合物(42)的合成)

- 25 把 9.1 克上述合成实施例 4(1) 中的中间体(C)、4.2 克 9-菲硼酸(得自 Aldrich Corporation)、0.4 克四(三苯基膦)钯(0)(得自 N. E. CHEMCAT Co. Ltd.)、110 毫升二甲氧基乙烷(得自 Wako Pure Chemical Industries, Ltd.)、和 5.5 克碳酸钠(得自 Wako Pure Chemical Industries, Ltd.)溶于 26 毫升水而制得水溶液,在氩气抽排气氛中,将上述水溶液加入到容量为 500 毫升的烧瓶中,溶液在 78℃ 的温
30 度下搅拌 14 小时。

反应后,将溶液自然冷却到室温,通过过滤取出沉淀的晶体。将该晶体加热并溶于甲苯中,所得溶液加热过滤。然后,将母液浓缩,并

通过过滤取出沉淀的晶体。该晶体再次用甲苯结晶，得到 6.8 克白色粉末(收率：68%)。

根据 FD-MS 的测量结果，发现对于 $C_{44}H_{28}N_2=584$ 的中心峰值 $m/z=584$ ，所述白色粉末被确定为目标化合物(42)。

5

合成实施例 10(化合物(43)的合成)

(1) 中间体(F)的合成

在氩气抽排气氛中，把 9.0 克上述合成实施例 4(1)中的中间体(C)、100 毫升无水甲苯(得自 Wako Pure Chemical Industries, Ltd.)、和 100 毫升无水乙醚(得自 Wako Pure Chemical Industries, Ltd.)置于容量为 300 毫升的烧瓶中，将溶液用冰冷却到 -10°C ，随后滴加入 14.8 克 1.6M 的丁基锂(得自 Kanto Chemical Company)，并将所得溶液再搅拌 2 小时。

然后，加入 10.4 克硼酸三异丙酯(得自 TOKYO KASEI CO. Ltd.)，使所得溶液返回到室温并搅拌 12 小时。

之后，将溶液进一步用冰冷却，然后，在 10°C 或更低的温度下，加入通过把 14 毫升浓盐酸加入到 100 毫升水中而制成的稀盐酸，随后分离有机层。在用无水硫酸镁干燥之后，真空浓缩。将所得粘稠液溶于 30 毫升四氢呋喃(THF)中，加入己烷，沉淀出结晶。

通过过滤分离沉淀出的晶体，得到 5.9 克 3,5-二(咔唑-9-基)苯硼酸(中间体(F))。

(2) 目标化合物(43)的合成

将 5.6 克上述合成实施例 4(1)得到的中间体(C)、5.6 克上述(1)项得到的中间体(F)、0.3 克四(三苯基膦)钯(0)(得自 N. E. CHEMCAT Co. Ltd.)、110 毫升二甲氧基乙烷(得自 Wako Pure Chemical Industries, Ltd.)、和 3.6 克碳酸钠(得自 Wako Pure Chemical Industries, Ltd.)溶于 17 毫升水而制得水溶液，将上述水溶液加入到容量为 500 毫升的烧瓶中，溶液在 78°C 的温度下搅拌 15 小时。

反应后，将溶液自然冷却到室温，通过过滤取出沉淀的晶体。将该晶体加热并溶于甲苯中，所得溶液加热过滤。然后，将母液浓缩，并通过过滤取出沉淀的晶体。该晶体再次用甲苯结晶，得到 4.5 克白色粉末(收率：48%)。

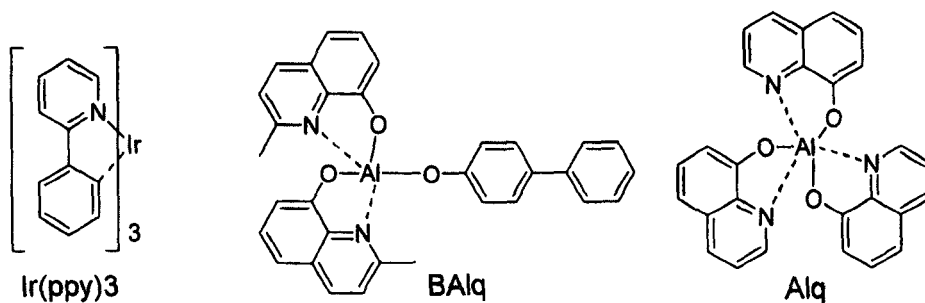
根据 FD-MS 的测量结果,发现对于 $C_{60}H_{38}N_4=815$ 的中心峰值 $m/z=815$,所述白色粉末被确定为目标化合物(43)。

实施例 1(有机 EL 设备的制备)

- 5 在异丙醇中,用超声波将尺寸为 25mmX75mm、厚度为 0.7mm 具有 ITO 透明电极的玻璃基材(由 GEOMATEC 公司制造)清洗 5 分钟,然后暴露于紫外光生成臭氧下 30 分钟。将清洗过的具有透明电极的玻璃基材绑在真空汽相沉积装置的基材架上。在清洗过的基材具有透明电极的一侧表面上,通过一定的方式形成厚度为 10nm 的酞菁铜膜(下面称作
- 10 “CuPc 膜”),使得形成的膜覆盖所述透明电极。在形成的 CuPc 膜上,形成厚度为 30nm 的 4,4'-二-[N-(4-联苯基)-N-(4-联苯基)氨基]联苯(下文称为“TBAB 膜”)。所形成的 TBAB 膜用作空穴传输层。在形成的 TBAB 膜上,用化合物(1)形成 40nm 厚的以上制备的化合物(1)的膜作为宿主材料,并形成发光层。与此同时,加入三(2-苯基吡啶)Ir(下文中称为“(I-1)”)作为发磷光的 Ir 金属络合物掺杂剂。该膜用作发
- 15 光层。发光层中(I-1)的量为 5 重量%。在以上形成的膜上,形成如下所示的(1,1'-二苯基)-4-醇合二(2-甲基-8-喹啉醇合)铝(下文称为“BA1q 膜”),厚度为 10nm。BA1q 膜起到空穴阻挡层的作用。在该膜上,形成厚度为 20nm 的如下所示的 8-羟基喹啉铝络合物膜(下文称为
- 20 “Alq 膜”)。Alq 膜起到电子注入层的作用。之后,汽相沉积碱金属卤化物 LiF 形成厚度为 0.2nm 的膜。在形成的该膜上,汽相沉积铝形成厚度为 150nm 的薄膜。所述 Al/LiF 膜起到阴极的作用。通过上述方式制备得到有机 EL 设备。

- 25 分别测量用于发光层的宿主材料的三线态能隙和单线态能隙以及其玻璃化温度,结果示于表 1。

- 通过使电流通过而检测以上制备的设备。在 5.2V 电压、 $0.24\text{mA}/\text{cm}^2$ 电流密度下,亮度为 $104\text{cd}/\text{m}^2$ 时,发出绿光。彩色坐标为 (0.32, 0.61), 电流效率为 $42.6\text{cd}/\text{A}$ 。另外,在 105°C 下贮存 500 小时后,电流效率为 $41.6\text{cd}/\text{A}$,发光表面均匀,没有出现任何缺陷,表现出的校正比(正
- 30 相电流/反相电流)为 1×10^5 或更高。这些结果示于表 2 中。



实施例 2-5

根据与实施例 1 所述相同的方式制备有机 EL 设备，不同之处是使用表 1 所示化合物代替化合物 (1)，并根据与实施例 1 所述相同的方法测量三线态能、单线态能、电压、电流密度、亮度、电流效率和色度。结果示于表 1 和表 2。另外，在 105℃ 下贮存 500 小时后，实施例 2-5 中有机 EL 设备的所有发光表面都均匀而没有出现任何缺陷，显示出的校正比(正相电流/反相电流)为 1×10^5 或更高。

10 对比实施例 1

用与实施例 1 所述相同的方式制备有机 EL 设备，不同之处是使用 CBP (4, 4'-N, N'-二咔唑基联苯) 代替化合物 (1) 作为发光层的宿主材料。以类似的方式，对对比实施例 1 中得到的设备进行三线态能隙、单线态能隙、玻璃化温度、电压、电流密度、亮度、电流效率和色度的测量。结果示于表 1 和表 2。尽管制备了 10 种设备，但所有的设备从一开始就很容易在发光表面上显示出有缺陷形成。另外，非常多地出现了显示短路迹象的电流泄漏，校正比(正相电流/反相电流)为 1×10^4 或更低。此外，在 105℃ 下贮存 500 小时后，在发光表面上出现缺陷，校正比为 1×10^3 或更低。而且，亮度仅有几个 cd/m^2 ，这意味着很明显的降解。

表 1

	光发射层中的 的宿主材料	三线态能隙	单线态能隙	玻璃转化温度
		(eV)	(eV)	(°C)
实施例1	(1)	2.9	3.7	128
实施例2	(4)	2.9	3.7	125
实施例3	(38)	2.7	3.57	123.4
实施例4	(42)	2.64	3.57	130.5
实施例5	(43)	2.88	3.57	181.9
对比实施 例1	CBP	2.81	3.6	105

表 2-1

	光发射层中的 的宿主材料	电压	电流密度	亮度	电流效率
		(V)	(mA/cm²)	(cd/m²)	(cd/A)
实施例1	(1)	5.2	0.24	104	42.6
实施例2	(4)	5.8	0.27	99	36.1
实施例3	(38)	5.5	0.3	99.1	39.7
实施例4	(42)	6.1	0.3	102.5	32.4
实施例5	(43)	5.9	0.3	105.8	38.5
对比实施 例1	CBP	6	0.28	103	32.1

5

表 2-2

	在105℃下贮存500小时后的 电流效率	色度	光发射颜色
	(cd/A)	(x,y)	
实施例1	41.6	(0.32,0.61)	绿色
实施例2	35.4	(0.32,0.61)	绿色
实施例3	39.6	(0.32,0.61)	绿色
实施例4	32.4	(0.32,0.61)	绿色
实施例5	38.5	(0.32,0.61)	绿色
对比实施 例1	15.7	(0.32,0.61)	绿色

如表 2 所示可以看出，使用本发明用于有机 EL 设备的材料的有机 EL 设备甚至在提高的温度下贮存后依然发出具有增强电流效率的绿光。还可以看出，因为本发明用于有机 EL 设备的材料具有高的玻璃化温度，和由于其对称性低，因此，甚至在提高的温度下贮存后，显示

10

的电流效率也几乎没有降低，校正比异乎寻常地高达 1×10^5 或更高。此外，从对比实施例 1 可以看出，硬的咔唑基团呈良好对称排列的化合物如 CBP，很容易在发光表面上造成缺陷，并且在提高的温度下贮存后，显示出电流效率降低的现象。因此，很明显，从抑制发光表面上的缺陷角度来看，本发明有机 EL 设备中具有 m -三联苯结构的不良对称性化合物是有效的。

工业实用性

如上面所详细讨论的，使用本发明通式 (1) 所表示的化合物作为用于有机电致发光设备的材料会使有机电致发光设备个有提高的电流效率，不会产生任何像素缺陷，且耐热性优良。因此，本发明的有机 EL 设备尤其可用于，比如各种电子设备的光源的应用场合。

专利名称(译)	用于有机电致发光设备的材料及使用该材料的有机电致发光设备		
公开(公告)号	CN1753967A	公开(公告)日	2006-03-29
申请号	CN200480004828.9	申请日	2004-02-18
[标]申请(专利权)人(译)	出光兴产株式会社		
申请(专利权)人(译)	出光兴产株式会社		
当前申请(专利权)人(译)	出光兴产株式会社		
[标]发明人	富田诚司 岩隈俊裕 荒金崇士 山道桂子 细川地潮		
发明人	富田诚司 岩隈俊裕 荒金崇士 山道桂子 细川地潮		
IPC分类号	C09K11/06 H05B33/14		
代理人(译)	刘维升 王景朝		
优先权	2003042625 2003-02-20 JP 2003387855 2003-11-18 JP		
外部链接	Espacenet SIPO		

摘要(译)

具有不良对称性的具有特定结构的用于有机电致发光设备的材料。有机电致发光设备包括阴极、阳极、和夹在阴极与阳极之间并包括至少一个层的有机薄膜层，其中有机薄膜层中的至少一个层包含上述用于有机电致发光设备的材料。得到的有机电致发光设备具有优异的发光效率，没有像素缺陷，并且耐热性优良。

