



(12) 发明专利

(10) 授权公告号 CN 102439111 B

(45) 授权公告日 2015.02.11

(21) 申请号 200980159451.7  
 (22) 申请日 2009.11.16  
 (30) 优先权数据  
 10-2009-0046425 2009.05.27 KR  
 10-2009-0104025 2009.10.30 KR  
 (85) PCT国际申请进入国家阶段日  
 2011.11.23  
 (86) PCT国际申请的申请数据  
 PCT/KR2009/006717 2009.11.16  
 (87) PCT国际申请的公布数据  
 W02010/137779 KO 2010.12.02  
 (73) 专利权人 SK 化学株式会社  
 地址 韩国京畿道  
 (72) 发明人 李俊烨 田顺玉 陆庚修 金娱永  
 (74) 专利代理机构 北京信慧永光知识产权代理  
 有限责任公司 11290  
 代理人 梁兴龙 张淑珍  
 (51) Int. Cl.  
 C09K 11/06 (2006.01)  
 C07F 9/28 (2006.01)  
 H01L 51/54 (2006.01)  
 H01L 27/32 (2006.01)

(56) 对比文件  
 CN 101504972 A, 2009.08.12, 说明书第4页第1段.  
 WO 2009/003898 A1, 2009.01.08, 说明书第25页表格化合物, 第7页第1-2段.  
 US 2009/0136779 A1, 2009.05.28, 说明书第4页22段, 第6页第38-39段, 第2页第15段.  
 US 2007/0224446 A1, 2007.09.27, 说明书第3页第38-42段.  
 US 2007/0262704 A1, 2007.11.15, 说明书第2页第16-19段.  
 WO 2009/003919 A1, 2009.01.08, 说明书4页第7行至第6页第41行.  
 WO 2006/033564 A, 2006.03.03, 全文.  
 Linda S. Sapochak 等. Inductive Effects of Diphenylphosphoryl Moieties on Carbazole Host Materials: Design Rules for Blue Electrophosphorescent Organic Light-Emitting Devices. 《J. Phys. Chem. C》. 2008, 第112卷 7989-7996, 参见7990页 Figure 1.  
 Zhuqi Chen 等. A highly efficient OLED based on terbium complexes. 《Organic Electronics》. 2009, 第10卷 939-947.

审查员 张慧慧

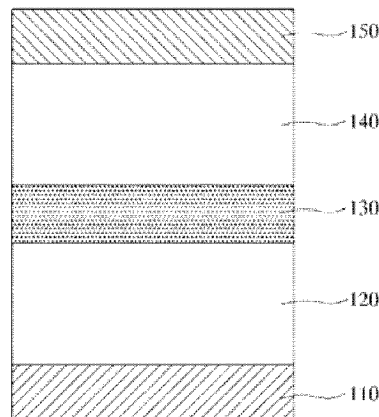
权利要求书2页 说明书47页 附图6页

(54) 发明名称  
 咔唑系氧化磷化合物和包含该化合物的有机电致发光器件

(57) 摘要

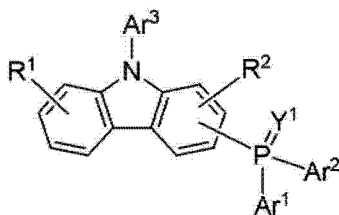
本发明涉及一种咔唑系氧化磷化合物和包含该化合物的有机电致发光器件。根据本发明, 提供的有机电致发光器件用的化合物能够改善作为有机电致发光器件用的已知化合物问题的热不稳定和低效率特性, 特别地, 通过使用有机电致发光器件用的咔唑系氧化磷化合物, 可以在纯蓝色磷光器件中实现优异的效率特性, 还提供有机电致发光器件。根据本发明的一个方面, 提供有机电致发光器件用的咔唑系氧化磷化合物, 还提供能够实

现热稳定性和高效率特性的包含该化合物的有机电致发光器件。



1. 一种由以下化学式 1 代表的有机电致发光器件用的化合物：

[ 化学式 1 ]



其中 Y<sup>1</sup> 代表氧原子、硫原子或硒原子，

Ar<sup>1</sup> 和 Ar<sup>2</sup> 是相同或不同的取代基，每一个代表具有 6 ~ 50 个环碳原子的取代或未取代的芳基或者具有 5 ~ 50 个环原子的取代或未取代的杂芳基，

Ar<sup>3</sup> 代表具有 6 ~ 50 个环碳原子的取代或未取代的芳基或者具有 5 ~ 50 个环原子的取代或未取代的杂芳基，和

R<sup>1</sup> 和 R<sup>2</sup> 独立地是氢原子，

其中在 Ar<sup>1</sup> 和 Ar<sup>2</sup> 上取代的基团是卤原子、氰基、硝基、具有 6 ~ 50 个环碳原子的芳基、具有 5 ~ 50 个环原子的杂芳基、具有 1 ~ 50 个碳原子的烷基、具有 3 ~ 50 个碳原子的环烷基、具有 1 ~ 50 个碳原子的硫基或者具有 1 ~ 50 个碳原子的甲硅烷基，并且在 Ar<sup>3</sup> 上取代的基团是卤原子、氰基、硝基、具有 6 ~ 50 个环碳原子的芳基、具有 5 ~ 50 个环原子的杂芳基、具有 3 ~ 50 个碳原子的环烷基、具有 1 ~ 50 个碳原子的硫基或者具有 1 ~ 50 个碳原子的甲硅烷基。

2. 如权利要求 1 所述的化合物，其中 Y<sup>1</sup> 代表氧原子，

Ar<sup>1</sup> 和 Ar<sup>2</sup> 是相同或不同的取代基，每一个代表具有 6 ~ 34 个碳原子的取代或未取代的苯基、取代或未取代的联苯基、取代或未取代的三联苯基、取代或未取代的萘基、取代或未取代的蒽基或者取代或未取代的茈萘基，

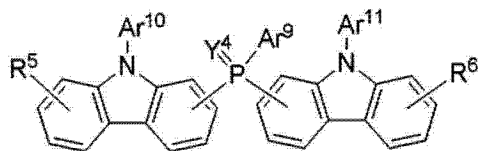
Ar<sup>3</sup> 代表具有 6 ~ 34 个碳原子的取代或未取代的苯基、取代或未取代的联苯基、取代或未取代的三联苯基、取代或未取代的萘基、取代或未取代的蒽基或者取代或未取代的茈萘基，和

其中在 Ar<sup>1</sup> 和 Ar<sup>2</sup> 上取代的基团是卤原子、氰基、硝基、具有 6 ~ 34 个环碳原子的芳基、具有 5 ~ 34 个环原子的杂芳基、具有 1 ~ 34 个碳原子的烷基、具有 3 ~ 34 个碳原子的环烷基、具有 1 ~ 34 个碳原子的硫基或具有 1 ~ 34 个碳原子的甲硅烷基，并且在 Ar<sup>3</sup> 上取代的基团是卤原子、氰基、硝基、具有 6 ~ 34 个环碳原子的芳基、具有 5 ~ 34 个环原子的杂芳基、具有 3 ~ 34 个碳原子的环烷基、具有 1 ~ 34 个碳原子的硫基或具有 1 ~ 34 个碳原子的甲硅烷基。

3. 如权利要求 1 所述的化合物，其中 Y<sup>1</sup> 代表氧原子，Ar<sup>1</sup> 和 Ar<sup>2</sup> 每一个代表苯基，和 Ar<sup>3</sup> 代表苯基。

4. 一种由以下化学式 3 代表的有机电致发光器件用的化合物：

[ 化学式 3 ]



其中  $Y^4$  代表氧原子、硫原子或硒原子，

$Ar^9$  代表具有 6 ~ 50 个环碳原子的取代或未取代的芳基或者具有 5 ~ 50 个环原子的取代或未取代的杂芳基，

$Ar^{10}$  和  $Ar^{11}$  是相同或不同的取代基，每一个代表具有 6 ~ 50 个环碳原子的取代或未取代的芳基或者具有 5 ~ 50 个环原子的取代或未取代的杂芳基，和

$R^5$  和  $R^6$  独立地是氢原子，

其中在  $Ar^9 \sim Ar^{11}$  上取代的基团是卤原子、氰基、硝基、具有 6 ~ 50 个环碳原子的芳基、具有 5 ~ 50 个环原子的杂芳基、具有 1 ~ 50 个碳原子的烷基、具有 3 ~ 50 个碳原子的环烷基、具有 1 ~ 50 个碳原子的硫基或者具有 1 ~ 50 个碳原子的甲硅烷基。

5. 如权利要求 4 所述的化合物，其中  $Y^4$  代表氧原子，

$Ar^9$  代表具有 6 ~ 34 个碳原子的取代或未取代的苯基、取代或未取代的联苯基、取代或未取代的三联苯基、取代或未取代的萘基、取代或未取代的蒽基或者取代或未取代的茈萘基，

$Ar^{10}$  和  $Ar^{11}$  是相同或不同的取代基，每一个代表具有 6 ~ 34 个碳原子的取代或未取代的苯基、取代或未取代的联苯基、取代或未取代的三联苯基、取代或未取代的萘基、取代或未取代的蒽基或者取代或未取代的茈萘基，和

其中在  $Ar^9 \sim Ar^{11}$  上取代的基团是卤原子、氰基、硝基、具有 6 ~ 34 个环碳原子的芳基、具有 5 ~ 34 个环原子的杂芳基、具有 1 ~ 34 个碳原子的烷基、具有 3 ~ 34 个碳原子的环烷基、具有 1 ~ 34 个碳原子的硫基或具有 1 ~ 34 个碳原子的甲硅烷基。

6. 一种有机电致发光器件，包括：

第一电极；

第二电极；和

形成在第一电极和第二电极之间的具有至少一个发光层的单一有机层或多个有机层，其中所述有机层包含权利要求 1 ~ 5 中任一项所述的有机电致发光器件用的化合物。

7. 如权利要求 6 所述的有机电致发光器件，其中所述发光层包含权利要求 1 ~ 5 中任一项所述的有机电致发光器件用的化合物。

8. 如权利要求 6 所述的有机电致发光器件，其中所述有机层包括空穴输送层，所述空穴输送层包含权利要求 1 ~ 5 中任一项所述的有机电致发光器件用的化合物。

## 咪唑系氧化膦化合物和包含该化合物的有机电致发光器件

### 技术领域

[0001] 本发明涉及一种咪唑系氧化膦化合物,其能够改善常规有机电致发光器件的热稳定性并增大有机电致发光器件的效率特性,尤其是纯蓝色磷光器件,还涉及一种包含该化合物的有机电致发光器件。

### 背景技术

[0002] 与诸如液晶显示器 (LCD)、等离子体显示面板 (PDP)、场发射显示器 (FED) 等其他平板显示装置相比,有机电致发光器件具有更简单的结构、各种加工优势、更高的亮度、优异的视角、更快的响应速度和更低的工作电压,因而正在进行多种尝试以将它们用作诸如壁挂电视等平板显示装置或用作显示器、照明装置、广告牌等背光单元的光源。

[0003] 通常,当将直流电压施加到有机电致发光器件上时,从阳极注入的空穴和从阴极注入的电子复合形成电子-空穴对,即,激子,其后激子返回到稳定的基态,并且相应的能量转移到发光材料,从而转换成光。

[0004] 在努力提高有机电致发光器件的效率和稳定性时,C. W. Tang 等人, Eastman Kodak (C. W. Tang, S. A. Vanslyke, Applied Physics Letters, vol. 51, pp. 913, 1987) 报道称,通过在两个相对电极之间形成串联的有机薄膜而制作在低电压下操作的有机电致发光器件,并且正在对多层薄膜结构的有机电致发光器件用的有机材料进行深入研究。这种串联有机电致发光器件的寿命与薄膜和材料的稳定性密切相关。例如,当材料的热稳定性降低时,材料可能会在高温或工作温度下结晶,从而不希望地缩短了器件的寿命。

[0005] 各种已知的化合物用作有机电致发光器件的常规主体材料。这些包括三嗪系化合物、噁二唑系化合物、苯并咪唑系化合物、苯基吡啶系化合物和硅系化合物。然而,由于在有机电致发光器件中不能实现优异的效率特性,所以这类化合物存在问题,并且能够在蓝色磷光器件中表现出优异特性的主体材料相当有限。因此,发展解决这类问题的新型化合物是必需的。

[0006] 作为新型的主体材料,新型的氧化膦系化合物已有报道。然而,使用这种化合物,很难获得高效率。

[0007] 韩国专利公开 No. 10-2006-0109524 披露了一种芳基氧化膦系化合物、芳基硫化膦系化合物或芳基硒化膦系化合物以及使用它们的有机电致发光器件,但是由于在纯蓝色磷光器件中不能实现高效率,所以存在问题。

[0008] Applied Physics Letter (Appl. Phys. Lett. 92, 083308, 2008) 披露了一种使用具有芴结构的氧化膦化合物的蓝色磷光器件,但该器件的量子效率只有约 9%,从而不希望地造成低器件效率。

[0009] 因此,有鉴于现有技术中的上述问题完成了本发明,本发明意图研发一种新型的主体材料,即,具有咪唑结构的氧化膦化合物,并将其作为有机电致发光器件的主体材料。

### 发明内容

[0010] 技术问题

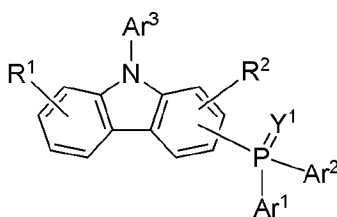
[0011] 为了解决常规有机电致发光器件的热不稳定和低效率的问题,本发明采用了咪唑系氧化磷化合物,其表现出高的热稳定性和优异的空穴输送特性,从而可以应用于空穴输送层,也可作为从红色磷光到蓝色磷光的任何发光层用的主体材料,还可以在纯蓝色磷光器件中实现高效率特性,因此,本发明的目的是提供一种咪唑系氧化磷化合物和包含该化合物的有机电致发光器件。

[0012] 技术方案

[0013] 因此,本发明提供一种由以下化学式 1 代表的有机电致发光器件用的化合物:

[0014] [化学式 1]

[0015]



[0016] 其中 Y<sup>1</sup> 代表氧原子、硫原子或硒原子,

[0017] Ar<sup>1</sup> 和 Ar<sup>2</sup> 是相同或不同的取代基,每一个代表具有 6 ~ 50 个环碳原子的取代或未取代的芳基或者具有 5 ~ 50 个环原子的取代或未取代的杂芳基,

[0018] Ar<sup>3</sup> 代表具有 6 ~ 50 个环碳原子的取代或未取代的芳基或者具有 5 ~ 50 个环原子的取代或未取代的杂芳基,和

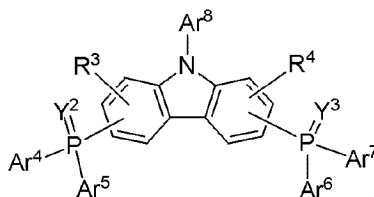
[0019] R<sup>1</sup> 和 R<sup>2</sup> 中的部分或全部独立地是氢原子,或者 R<sup>1</sup> 和 R<sup>2</sup> 是相同或不同的取代基,每一个代表卤原子、氰基、硝基、具有 6 ~ 50 个环碳原子的取代或未取代的芳基、具有 5 ~ 50 个环原子的取代或未取代的杂芳基、具有 1 ~ 50 个碳原子的取代或未取代的烷基、具有 3 ~ 50 个碳原子的取代或未取代的环烷基、具有 1 ~ 50 个碳原子的取代或未取代的硫基或者具有 1 ~ 50 个碳原子的取代或未取代的甲硅烷基,其中具有 6 ~ 50 个环碳原子的取代或未取代的芳基、具有 5 ~ 50 个环原子的取代或未取代的杂芳基或者具有 3 ~ 50 个碳原子的取代或未取代的环烷基独立地形成或与相邻基团形成饱和或不饱和的环,

[0020] 其中适于在 Ar<sup>1</sup> ~ Ar<sup>3</sup>、R<sup>1</sup> 或 R<sup>2</sup> 上取代的基团是卤原子、氰基、硝基、具有 6 ~ 50 个环碳原子的芳基、具有 5 ~ 50 个环原子的杂芳基、具有 1 ~ 50 个碳原子的烷基、具有 3 ~ 50 个碳原子的环烷基、具有 1 ~ 50 个碳原子的硫基或者具有 1 ~ 50 个碳原子的甲硅烷基。

[0021] 此外,本发明提供一种由以下化学式 2 代表的有机电致发光器件用的化合物:

[0022] [化学式 2]

[0023]



[0024] 其中 Y<sup>2</sup> 和 Y<sup>3</sup> 是相同或不同的取代基,每一个代表氧原子、硫原子或硒原子,

[0025] Ar<sup>4</sup> ~ Ar<sup>7</sup> 是相同或不同的取代基,每一个代表具有 6 ~ 50 个环碳原子的取代或

未取代的芳基或者具有 5 ~ 50 个环原子的取代或未取代的杂芳基，

[0026]  $Ar^8$  代表具有 6 ~ 50 个环碳原子的取代或未取代的芳基或者具有 5 ~ 50 个环原子的取代或未取代的杂芳基，和

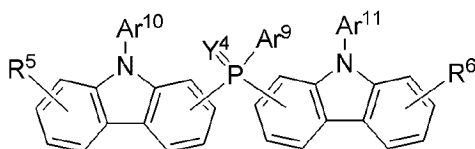
[0027]  $R^3$  和  $R^4$  中的部分或全部独立地是氢原子，或者  $R^3$  和  $R^4$  是相同或不同的取代基，每一个代表卤原子、氰基、硝基、具有 6 ~ 50 个环碳原子的取代或未取代的芳基、具有 5 ~ 50 个环原子的取代或未取代的杂芳基、具有 1 ~ 50 个碳原子的取代或未取代的烷基、具有 3 ~ 50 个碳原子的取代或未取代的环烷基、具有 1 ~ 50 个碳原子的取代或未取代的硫基或者具有 1 ~ 50 个碳原子的取代或未取代的甲硅烷基，其中具有 6 ~ 50 个环碳原子的取代或未取代的芳基、具有 5 ~ 50 个环原子的取代或未取代的杂芳基或者具有 3 ~ 50 个碳原子的取代或未取代的环烷基独立地形成或与相邻基团形成饱和或不饱和的环，

[0028] 其中适于在  $Ar^4 \sim Ar^8$ 、 $R^3$  或  $R^4$  上取代的基团是卤原子、氰基、硝基、具有 6 ~ 50 个环碳原子的芳基、具有 5 ~ 50 个环原子的杂芳基、具有 1 ~ 50 个碳原子的烷基、具有 3 ~ 50 个碳原子的环烷基、具有 1 ~ 50 个碳原子的硫基或者具有 1 ~ 50 个碳原子的甲硅烷基。

[0029] 此外，本发明提供一种由以下化学式 3 代表的有机电致发光器件用的化合物：

[0030] [化学式 3]

[0031]



[0032] 其中  $Y^4$  代表氧原子、硫原子或硒原子，

[0033]  $Ar^9$  代表具有 6 ~ 50 个环碳原子的取代或未取代的芳基或者具有 5 ~ 50 个环原子的取代或未取代的杂芳基，

[0034]  $Ar^{10}$  和  $Ar^{11}$  是相同或不同的取代基，每一个代表具有 6 ~ 50 个环碳原子的取代或未取代的芳基或者具有 5 ~ 50 个环原子的取代或未取代的杂芳基，和

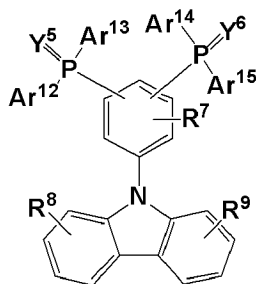
[0035]  $R^5$  和  $R^6$  中的部分或全部独立地是氢原子，或者  $R^5$  和  $R^6$  是相同或不同的取代基，每一个代表卤原子、氰基、硝基、具有 6 ~ 50 个环碳原子的取代或未取代的芳基、具有 5 ~ 50 个环原子的取代或未取代的杂芳基、具有 1 ~ 50 个碳原子的取代或未取代的烷基、具有 3 ~ 50 个碳原子的取代或未取代的环烷基、具有 1 ~ 50 个碳原子的取代或未取代的硫基或者具有 1 ~ 50 个碳原子的取代或未取代的甲硅烷基，其中具有 6 ~ 50 个环碳原子的取代或未取代的芳基、具有 5 ~ 50 个环原子的取代或未取代的杂芳基或者具有 3 ~ 50 个碳原子的取代或未取代的环烷基独立地形成或与相邻基团形成饱和或不饱和的环，

[0036] 其中适于在  $Ar^9 \sim Ar^{11}$ 、 $R^5$  或  $R^6$  上取代的基团是卤原子、氰基、硝基、具有 6 ~ 50 个环碳原子的芳基、具有 5 ~ 50 个环原子的杂芳基、具有 1 ~ 50 个碳原子的烷基、具有 3 ~ 50 个碳原子的环烷基、具有 1 ~ 50 个碳原子的硫基或者具有 1 ~ 50 个碳原子的甲硅烷基。

[0037] 此外，本发明提供一种由以下化学式 4 代表的有机电致发光器件用的化合物：

[0038] [化学式 4]

[0039]



[0040] 其中  $Y^5$  和  $Y^6$  是相同或不同的取代基, 每一个代表氧原子、硫原子或硒原子,

[0041]  $Ar^{12} \sim Ar^{15}$  是相同或不同的取代基, 每一个代表具有 6 ~ 50 个环碳原子的取代或未取代的芳基或者具有 5 ~ 50 个环原子的取代或未取代的杂芳基, 和

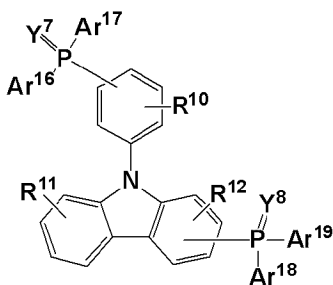
[0042]  $R^7 \sim R^9$  中的部分或全部独立地是氢原子, 或者  $R^7 \sim R^9$  是相同或不同的取代基, 每一个代表卤原子、氰基、硝基、具有 6 ~ 50 个环碳原子的取代或未取代的芳基、具有 5 ~ 50 个环原子的取代或未取代的杂芳基、具有 1 ~ 50 个碳原子的取代或未取代的烷基、具有 3 ~ 50 个碳原子的取代或未取代的环烷基、具有 1 ~ 50 个碳原子的取代或未取代的硫基或者具有 1 ~ 50 个碳原子的取代或未取代的甲硅烷基, 其中具有 6 ~ 50 个环碳原子的取代或未取代的芳基、具有 5 ~ 50 个环原子的取代或未取代的杂芳基或者具有 3 ~ 50 个碳原子的取代或未取代的环烷基独立地形成或与相邻基团形成饱和或不饱和的环,

[0043] 其中适于在  $Ar^{12} \sim Ar^{15}$  和  $R^7 \sim R^9$  上取代的基团是卤原子、氰基、硝基、具有 6 ~ 50 个环碳原子的芳基、具有 5 ~ 50 个环原子的杂芳基、具有 1 ~ 50 个碳原子的烷基、具有 3 ~ 50 个碳原子的环烷基、具有 1 ~ 50 个碳原子的硫基或者具有 1 ~ 50 个碳原子的甲硅烷基。

[0044] 此外, 本发明提供一种由以下化学式 5 代表的有机电致发光器件用的化合物:

[0045] [化学式 5]

[0046]



[0047] 其中  $Y^7$  和  $Y^8$  是相同或不同的取代基, 每一个代表氧原子、硫原子或硒原子,

[0048]  $Ar^{16} \sim Ar^{19}$  是相同或不同的取代基, 每一个代表具有 6 ~ 50 个环碳原子的取代或未取代的芳基或者具有 5 ~ 50 个环原子的取代或未取代的杂芳基, 和

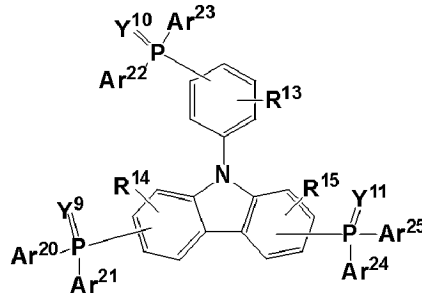
[0049]  $R^{10} \sim R^{12}$  中的部分或全部独立地是氢原子, 或者  $R^{10} \sim R^{12}$  是相同或不同的取代基, 每一个代表卤原子、氰基、硝基、具有 6 ~ 50 个环碳原子的取代或未取代的芳基、具有 5 ~ 50 个环原子的取代或未取代的杂芳基、具有 1 ~ 50 个碳原子的取代或未取代的烷基、具有 3 ~ 50 个碳原子的取代或未取代的环烷基、具有 1 ~ 50 个碳原子的取代或未取代的硫基或者具有 1 ~ 50 个碳原子的取代或未取代的甲硅烷基, 其中具有 6 ~ 50 个环碳原子的取代或未取代的芳基、具有 5 ~ 50 个环原子的取代或未取代的杂芳基或者具有 3 ~ 50 个碳原子的取代或未取代的环烷基独立地形成或与相邻基团形成饱和或不饱和的环,

[0050] 其中适于在  $\text{Ar}^{16} \sim \text{Ar}^{19}$  和  $\text{R}^{10} \sim \text{R}^{12}$  上取代的基团是卤原子、氰基、硝基、具有 6 ~ 50 个环碳原子的芳基、具有 5 ~ 50 个环原子的杂芳基、具有 1 ~ 50 个碳原子的烷基、具有 3 ~ 50 个碳原子的环烷基、具有 1 ~ 50 个碳原子的硫基或者具有 1 ~ 50 个碳原子的甲硅烷基。

[0051] 此外,本发明提供一种由以下化学式 6 代表的有机电致发光器件用的化合物:

[0052] [化学式 6]

[0053]



[0054] 其中  $\text{Y}^9 \sim \text{Y}^{11}$  是相同或不同的取代基,每一个代表氧原子、硫原子或硒原子,

[0055]  $\text{Ar}^{20} \sim \text{Ar}^{25}$  是相同或不同的取代基,每一个代表具有 6 ~ 50 个环碳原子的取代或未取代的芳基或者具有 5 ~ 50 个环原子的取代或未取代的杂芳基,和

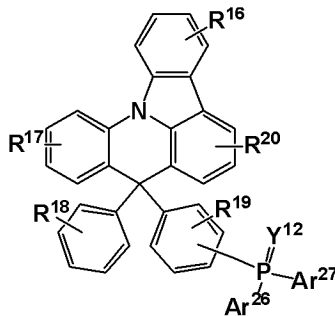
[0056]  $\text{R}^{13} \sim \text{R}^{15}$  中的部分或全部独立地是氢原子,或者  $\text{R}^{13} \sim \text{R}^{15}$  是相同或不同的取代基,每一个代表卤原子、氰基、硝基、具有 6 ~ 50 个环碳原子的取代或未取代的芳基、具有 5 ~ 50 个环原子的取代或未取代的杂芳基、具有 1 ~ 50 个碳原子的取代或未取代的烷基、具有 3 ~ 50 个碳原子的取代或未取代的环烷基、具有 1 ~ 50 个碳原子的取代或未取代的硫基或者具有 1 ~ 50 个碳原子的取代或未取代的甲硅烷基,其中具有 6 ~ 50 个环碳原子的取代或未取代的芳基、具有 5 ~ 50 个环原子的取代或未取代的杂芳基或者具有 3 ~ 50 个碳原子的取代或未取代的环烷基独立地形成或与相邻基团形成饱和或不饱和的环,

[0057] 其中适于在  $\text{Ar}^{20} \sim \text{Ar}^{25}$  和  $\text{R}^{13} \sim \text{R}^{15}$  上取代的基团是卤原子、氰基、硝基、具有 6 ~ 50 个环碳原子的芳基、具有 5 ~ 50 个环原子的杂芳基、具有 1 ~ 50 个碳原子的烷基、具有 3 ~ 50 个碳原子的环烷基、具有 1 ~ 50 个碳原子的硫基或者具有 1 ~ 50 个碳原子的甲硅烷基。

[0058] 此外,本发明提供一种由以下化学式 7 代表的有机电致发光器件用的化合物:

[0059] [化学式 7]

[0060]



[0061] 其中  $\text{Y}^{12}$  代表氧原子、硫原子或硒原子,

[0062]  $\text{Ar}^{26}$  和  $\text{Ar}^{27}$  是相同或不同的取代基,每一个代表具有 6 ~ 50 个环碳原子的取代或

未取代的芳基或者具有 5 ~ 50 个环原子的取代或未取代的杂芳基, 和

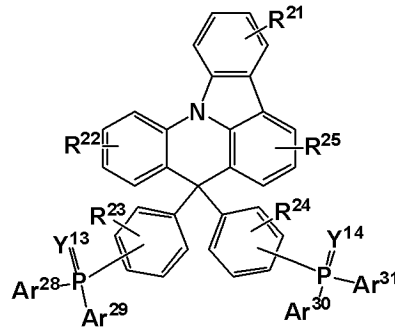
[0063]  $R^{16} \sim R^{20}$  中的部分或全部独立地是氢原子, 或者  $R^{16} \sim R^{20}$  是相同或不同的取代基, 每一个代表卤原子、氰基、硝基、具有 6 ~ 50 个环碳原子的取代或未取代的芳基、具有 5 ~ 50 个环原子的取代或未取代的杂芳基、具有 1 ~ 50 个碳原子的取代或未取代的烷基、具有 3 ~ 50 个碳原子的取代或未取代的环烷基、具有 1 ~ 50 个碳原子的取代或未取代的硫基或者具有 1 ~ 50 个碳原子的取代或未取代的甲硅烷基, 其中具有 6 ~ 50 个环碳原子的取代或未取代的芳基、具有 5 ~ 50 个环原子的取代或未取代的杂芳基或者具有 3 ~ 50 个碳原子的取代或未取代的环烷基独立地形成或与相邻基团形成饱和或不饱和的环,

[0064] 其中适于在  $Ar^{26}$ 、 $Ar^{27}$  和  $R^{16} \sim R^{20}$  上取代的基团是卤原子、氰基、硝基、具有 6 ~ 50 个环碳原子的芳基、具有 5 ~ 50 个环原子的杂芳基、具有 1 ~ 50 个碳原子的烷基、具有 3 ~ 50 个碳原子的环烷基、具有 1 ~ 50 个碳原子的硫基或者具有 1 ~ 50 个碳原子的甲硅烷基。

[0065] 此外, 本发明提供一种由以下化学式 8 代表的有机电致发光器件用的化合物:

[0066] [化学式 8]

[0067]



[0068] 其中  $Y^{13}$  和  $Y^{14}$  是相同或不同的取代基, 每一个代表氧原子、硫原子或硒原子,

[0069]  $Ar^{28} \sim Ar^{31}$  是相同或不同的取代基, 每一个代表具有 6 ~ 50 个环碳原子的取代或未取代的芳基或者具有 5 ~ 50 个环原子的取代或未取代的杂芳基, 和

[0070]  $R^{21} \sim R^{25}$  中的部分或全部独立地是氢原子, 或者  $R^{21} \sim R^{25}$  是相同或不同的取代基, 每一个代表卤原子、氰基、硝基、具有 6 ~ 50 个环碳原子的取代或未取代的芳基、具有 5 ~ 50 个环原子的取代或未取代的杂芳基、具有 1 ~ 50 个碳原子的取代或未取代的烷基、具有 3 ~ 50 个碳原子的取代或未取代的环烷基、具有 1 ~ 50 个碳原子的取代或未取代的硫基或者具有 1 ~ 50 个碳原子的取代或未取代的甲硅烷基, 其中具有 6 ~ 50 个环碳原子的取代或未取代的芳基、具有 5 ~ 50 个环原子的取代或未取代的杂芳基或者具有 3 ~ 50 个碳原子的取代或未取代的环烷基独立地形成或与相邻基团形成饱和或不饱和的环,

[0071] 其中适于在  $Ar^{28} \sim Ar^{31}$  和  $R^{21} \sim R^{25}$  上取代的基团是卤原子、氰基、硝基、具有 6 ~ 50 个环碳原子的芳基、具有 5 ~ 50 个环原子的杂芳基、具有 1 ~ 50 个碳原子的烷基、具有 3 ~ 50 个碳原子的环烷基、具有 1 ~ 50 个碳原子的硫基或者具有 1 ~ 50 个碳原子的甲硅烷基。

[0072] 此外, 本发明提供一种有机电致发光器件, 包括:

[0073] 第一电极;

[0074] 第二电极; 和

[0075] 形成在第一电极和第二电极之间的具有至少一个发光层的单一有机层或多个有机层，

[0076] 其中所述有机层包含上述的有机电致发光器件用的化合物。

[0077] 这样，所述发光层可以包含根据本发明的有机电致发光器件用的化合物。此外，所述有机层可以包括空穴输送层，所述空穴输送层包含根据本发明的有机电致发光器件用的化合物。

#### 附图说明

[0078] 图 1 是显示根据本发明的有机电致发光器件的结构示意图；

[0079] 图 2 是显示根据本发明实施例 1 的有机电致发光器件的效率特性的示图；

[0080] 图 3 是显示根据本发明实施例 2 的有机电致发光器件的效率特性的示图；

[0081] 图 4 是显示根据本发明实施例 3 的有机电致发光器件的效率特性的示图；

[0082] 图 5 是显示根据本发明实施例 4 的有机电致发光器件的效率特性的示图；

[0083] 图 6 是显示根据本发明实施例 5 的有机电致发光器件的效率特性的示图；

[0084] 图 7 是显示根据本发明实施例 6 的有机电致发光器件的效率特性的示图；

[0085] 图 8 是显示根据本发明实施例 7 的有机电致发光器件的效率特性的示图；

[0086] 图 9 是显示根据本发明实施例 8 的有机电致发光器件的效率特性的示图；

[0087] 图 10 是显示根据本发明实施例 9 的有机电致发光器件的效率特性的示图；

[0088] 图 11 是显示根据本发明比较例 1 的有机电致发光器件的效率特性的示图；和

[0089] 图 12 是显示根据本发明比较例 2 的有机电致发光器件的效率特性的示图。

#### 具体实施方式

[0090] 下面，结合化学式或附图，详细说明根据本发明优选实施方案的唑系氧化磷化合物和包含该化合物的有机电致发光 (EL) 器件。

[0091] 在本发明中，目的是克服常规有机 EL 器件的低效率问题，因而研发了具有唑结构的氧化磷化合物，并将其应用于有机 EL 器件的发光层的主体材料。

[0092] 唑结构具有为 3.2eV 的三重态能隙，并且可被应用于从红色磷光到蓝色磷光的任何发光层，还具有极优异的热稳定性，从而在器件的稳定性方面具有优势。此外，唑结构可能具有极好的空穴输送特性，并因而可被用作空穴输送层的材料。

[0093] 氧化磷结构具有优异的电子输送特性，并且在器件的稳定性方面具有优势。

[0094] 因此，唑结构和氧化磷结构是具有优异的电子和空穴输送特性以及高的三重态能量的两个单元，它们的组合实现了适用于发光层的主体材料的优异特性。

[0095] 在本发明中，具有氧化磷结构和唑结构的唑系氧化磷化合物被用作有机 EL 器件的发光层的主体。唑结构用于调整有机材料的三重态能量，氧化磷结构起到改善电子输送特性的作用。因此，根据本发明的化合物通过利用唑结构的高三重态能量而适用于磷光材料的主体，并且由于唑结构的空穴输送特性和氧化磷结构的电子输送特性而可以用作具有高电荷迁移率的主体材料。

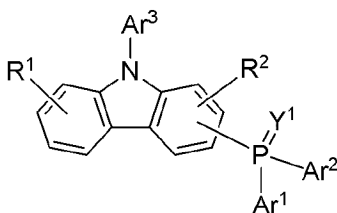
[0096] 下面说明根据本发明的唑系氧化磷和包含它的有机 EL 器件。

[0097] 本发明提供一种由以下化学式 1 代表的有机 EL 器件用的化合物，包括唑系氧

化膦化合物、咪唑系硫化膦化合物或咪唑系硒化膦化合物（下面简称作咪唑系氧化膦化合物）。

[0098] [化学式 1]

[0099]



[0100] 在化学式 1 中, Y<sup>1</sup> 代表氧原子、硫原子或硒原子,

[0101] Ar<sup>1</sup> 和 Ar<sup>2</sup> 是相同或不同的取代基, 每一个代表具有 6 ~ 50 个环碳原子的取代或未取代的芳基或者具有 5 ~ 50 个环原子的取代或未取代的杂芳基,

[0102] Ar<sup>3</sup> 代表具有 6 ~ 50 个环碳原子的取代或未取代的芳基或者具有 5 ~ 50 个环原子的取代或未取代的杂芳基, 和

[0103] R<sup>1</sup> 和 R<sup>2</sup> 中的部分或全部独立地是氢原子, 或者 R<sup>1</sup> 和 R<sup>2</sup> 是相同或不同的取代基, 每一个代表卤原子、氰基、硝基、具有 6 ~ 50 个环碳原子的取代或未取代的芳基、具有 5 ~ 50 个环原子的取代或未取代的杂芳基、具有 1 ~ 50 个碳原子的取代或未取代的烷基、具有 3 ~ 50 个碳原子的取代或未取代的环烷基、具有 1 ~ 50 个碳原子的取代或未取代的硫基或者具有 1 ~ 50 个碳原子的取代或未取代的甲硅烷基, 其中具有 6 ~ 50 个环碳原子的取代或未取代的芳基、具有 5 ~ 50 个环原子的取代或未取代的杂芳基或者具有 3 ~ 50 个碳原子的取代或未取代的环烷基独立地形成或与相邻基团形成饱和或不饱和的环,

[0104] 其中适于在 Ar<sup>1</sup> ~ Ar<sup>3</sup>、R<sup>1</sup> 或 R<sup>2</sup> 上取代的基团是卤原子、氰基、硝基、具有 6 ~ 50 个环碳原子的芳基、具有 5 ~ 50 个环原子的杂芳基、具有 1 ~ 50 个碳原子的烷基、具有 3 ~ 50 个碳原子的环烷基、具有 1 ~ 50 个碳原子的硫基或者具有 1 ~ 50 个碳原子的甲硅烷基。

[0105] 根据本发明, 可以提供一种有机 EL 器件用的化合物, 其中在化学式 1 中, Y<sup>1</sup> 代表氧原子,

[0106] Ar<sup>1</sup> 和 Ar<sup>2</sup> 是相同或不同的取代基, 每一个代表具有 6 ~ 34 个碳原子的取代或未取代的苯基、取代或未取代的联苯基、取代或未取代的三联苯基、取代或未取代的萘基、取代或未取代的蒽基或者取代或未取代的苝基,

[0107] Ar<sup>3</sup> 代表具有 6 ~ 34 个碳原子的取代或未取代的苯基、取代或未取代的联苯基、取代或未取代的三联苯基、取代或未取代的萘基、取代或未取代的蒽基或者取代或未取代的苝基, 和

[0108] R<sup>1</sup> 和 R<sup>2</sup> 中的部分或全部独立地是氢原子, 或者 R<sup>1</sup> 和 R<sup>2</sup> 是相同或不同的取代基, 每一个代表卤原子、氰基、硝基、具有 6 ~ 34 个碳原子的取代或未取代的苯基、取代或未取代的联苯基、取代或未取代的三联苯基、取代或未取代的萘基、取代或未取代的蒽基或者取代或未取代的苝基, 其中具有 6 ~ 34 个碳原子的取代或未取代的苯基、取代或未取代的联苯基、取代或未取代的三联苯基、取代或未取代的萘基、取代或未取代的蒽基或者取代或未取代的苝基独立地形成或与相邻基团形成饱和或不饱和的环,

[0109] 其中适于在 Ar<sup>1</sup> ~ Ar<sup>3</sup>、R<sup>1</sup> 或 R<sup>2</sup> 上取代的基团是卤原子、氰基、硝基、具有 6 ~ 34 个环碳原子的芳基、具有 5 ~ 34 个环原子的杂芳基、具有 1 ~ 34 个碳原子的烷基、具有 3 ~

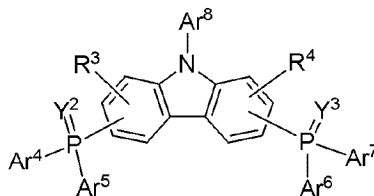
34 个碳原子的环烷基、具有 1 ~ 34 个碳原子的硫基或具有 1 ~ 34 个碳原子的甲硅烷基。

[0110] 此外,根据本发明,可以提供一种有机 EL 器件用的化合物,其中在化学式 1 中, Y<sup>1</sup> 代表氧原子, Ar<sup>1</sup> 和 Ar<sup>2</sup> 每一个代表苯基, Ar<sup>3</sup> 代表苯基, 和 R<sup>1</sup> 和 R<sup>2</sup> 每一个代表苯基。

[0111] 此外,本发明提供一种由以下化学式 2 代表的有机 EL 器件用的化合物。

[0112] [化学式 2]

[0113]



[0114] 在化学式 2 中, Y<sup>2</sup> 和 Y<sup>3</sup> 是相同或不同的取代基, 每一个代表氧原子、硫原子或硒原子,

[0115] Ar<sup>4</sup> ~ Ar<sup>7</sup> 是相同或不同的取代基, 每一个代表具有 6 ~ 50 个环碳原子的取代或未取代的芳基或者具有 5 ~ 50 个环原子的取代或未取代的杂芳基,

[0116] Ar<sup>8</sup> 代表具有 6 ~ 50 个环碳原子的取代或未取代的芳基或者具有 5 ~ 50 个环原子的取代或未取代的杂芳基, 和

[0117] R<sup>3</sup> 和 R<sup>4</sup> 中的部分或全部独立地是氢原子, 或者 R<sup>3</sup> 和 R<sup>4</sup> 是相同或不同的取代基, 每一个代表卤原子、氰基、硝基、具有 6 ~ 50 个环碳原子的取代或未取代的芳基、具有 5 ~ 50 个环原子的取代或未取代的杂芳基、具有 1 ~ 50 个碳原子的取代或未取代的烷基、具有 3 ~ 50 个碳原子的取代或未取代的环烷基、具有 1 ~ 50 个碳原子的取代或未取代的硫基或者具有 1 ~ 50 个碳原子的取代或未取代的甲硅烷基, 其中具有 6 ~ 50 个环碳原子的取代或未取代的芳基、具有 5 ~ 50 个环原子的取代或未取代的杂芳基或者具有 3 ~ 50 个碳原子的取代或未取代的环烷基独立地形成或与相邻基团形成饱和或不饱和的环,

[0118] 其中适于在 Ar<sup>4</sup> ~ Ar<sup>8</sup>、R<sup>3</sup> 或 R<sup>4</sup> 上取代的基团是卤原子、氰基、硝基、具有 6 ~ 50 个环碳原子的芳基、具有 5 ~ 50 个环原子的杂芳基、具有 1 ~ 50 个碳原子的烷基、具有 3 ~ 50 个碳原子的环烷基、具有 1 ~ 50 个碳原子的硫基或者具有 1 ~ 50 个碳原子的甲硅烷基。

[0119] 根据本发明, 可以提供一种有机 EL 器件用的化合物, 其中在化学式 2 中, Y<sup>2</sup> 和 Y<sup>3</sup> 代表氧原子,

[0120] Ar<sup>4</sup> ~ Ar<sup>7</sup> 是相同或不同的取代基, 每一个代表具有 6 ~ 34 个碳原子的取代或未取代的苯基、取代或未取代的联苯基、取代或未取代的三联苯基、取代或未取代的萘基、取代或未取代的蒽基或者取代或未取代的芘基,

[0121] Ar<sup>8</sup> 代表具有 6 ~ 34 个碳原子的取代或未取代的苯基、取代或未取代的联苯基、取代或未取代的三联苯基、取代或未取代的萘基、取代或未取代的蒽基或者取代或未取代的芘基, 和

[0122] R<sup>3</sup> 和 R<sup>4</sup> 中的部分或全部独立地是氢原子, 或者 R<sup>3</sup> 和 R<sup>4</sup> 是相同或不同的取代基, 每一个代表卤原子、氰基、硝基、具有 6 ~ 34 个碳原子的取代或未取代的苯基、取代或未取代的联苯基、取代或未取代的三联苯基、取代或未取代的萘基、取代或未取代的蒽基或者取代或未取代的芘基, 其中具有 6 ~ 34 个碳原子的取代或未取代的苯基、取代或未取代的联苯基、取代或未取代的三联苯基、取代或未取代的萘基、取代或未取代的蒽基或者取代或未取

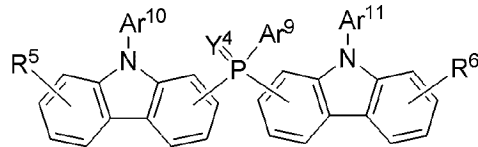
代的茈基独立地形成或与相邻基团形成饱和或不饱和的环，

[0123] 其中适于在  $Ar^4 \sim Ar^8$ 、 $R^3$  或  $R^4$  上取代的基团是卤原子、氰基、硝基、具有 6 ~ 34 个环碳原子的芳基、具有 5 ~ 34 个环原子的杂芳基、具有 1 ~ 34 个碳原子的烷基、具有 3 ~ 34 个碳原子的环烷基、具有 1 ~ 34 个碳原子的硫基或具有 1 ~ 34 个碳原子的甲硅烷基。

[0124] 此外，本发明提供一种由以下化学式 3 代表的有机 EL 器件用的化合物。

[0125] [化学式 3]

[0126]



[0127] 在化学式 3 中， $Y^4$  代表氧原子、硫原子或硒原子，

[0128]  $Ar^9$  代表具有 6 ~ 50 个环碳原子的取代或未取代的芳基或者具有 5 ~ 50 个环原子的取代或未取代的杂芳基，

[0129]  $Ar^{10}$  和  $Ar^{11}$  是相同或不同的取代基，每一个代表具有 6 ~ 50 个环碳原子的取代或未取代的芳基或者具有 5 ~ 50 个环原子的取代或未取代的杂芳基，和

[0130]  $R^5$  和  $R^6$  中的部分或全部独立地是氢原子，或者  $R^5$  和  $R^6$  是相同或不同的取代基，每一个代表卤原子、氰基、硝基、具有 6 ~ 50 个环碳原子的取代或未取代的芳基、具有 5 ~ 50 个环原子的取代或未取代的杂芳基、具有 1 ~ 50 个碳原子的取代或未取代的烷基、具有 3 ~ 50 个碳原子的取代或未取代的环烷基、具有 1 ~ 50 个碳原子的取代或未取代的硫基或者具有 1 ~ 50 个碳原子的取代或未取代的甲硅烷基，其中具有 6 ~ 50 个环碳原子的取代或未取代的芳基、具有 5 ~ 50 个环原子的取代或未取代的杂芳基或者具有 3 ~ 50 个碳原子的取代或未取代的环烷基独立地形成或与相邻基团形成饱和或不饱和的环，

[0131] 其中适于在  $Ar^9 \sim Ar^{11}$ 、 $R^5$  或  $R^6$  上取代的基团是卤原子、氰基、硝基、具有 6 ~ 50 个环碳原子的芳基、具有 5 ~ 50 个环原子的杂芳基、具有 1 ~ 50 个碳原子的烷基、具有 3 ~ 50 个碳原子的环烷基、具有 1 ~ 50 个碳原子的硫基或者具有 1 ~ 50 个碳原子的甲硅烷基。

[0132] 根据本发明，可以提供一种有机 EL 器件用的化合物，其中在化学式 3 中， $Y^4$  代表氧原子，

[0133]  $Ar^9$  代表具有 6 ~ 34 个碳原子的取代或未取代的苯基、取代或未取代的联苯基、取代或未取代的三联苯基、取代或未取代的萘基、取代或未取代的蒽基或者取代或未取代的茈基，

[0134]  $Ar^{10}$  和  $Ar^{11}$  是相同或不同的取代基，每一个代表具有 6 ~ 34 个碳原子的取代或未取代的苯基、取代或未取代的联苯基、取代或未取代的三联苯基、取代或未取代的萘基、取代或未取代的蒽基或者取代或未取代的茈基，和

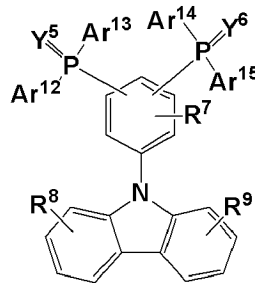
[0135]  $R^5$  和  $R^6$  中的部分或全部独立地是氢原子，或者  $R^5$  和  $R^6$  是相同或不同的取代基，每一个代表卤原子、氰基、硝基、具有 6 ~ 34 个碳原子的取代或未取代的苯基、取代或未取代的联苯基、取代或未取代的三联苯基、取代或未取代的萘基、取代或未取代的蒽基或者取代或未取代的茈基，其中具有 6 ~ 34 个碳原子的取代或未取代的苯基、取代或未取代的联苯基、取代或未取代的三联苯基、取代或未取代的萘基、取代或未取代的蒽基或者取代或未取代的茈基独立地形成或与相邻基团形成饱和或不饱和的环，

[0136] 其中适于在  $\text{Ar}^9 \sim \text{Ar}^{11}$ 、 $\text{R}^5$  和  $\text{R}^6$  上取代的基团是卤原子、氰基、硝基、具有 6 ~ 34 个环碳原子的芳基、具有 5 ~ 34 个环原子的杂芳基、具有 1 ~ 34 个碳原子的烷基、具有 3 ~ 34 个碳原子的环烷基、具有 1 ~ 34 个碳原子的硫基或具有 1 ~ 34 个碳原子的甲硅烷基。

[0137] 此外,本发明提供一种由以下化学式 4 代表的有机 EL 器件用的化合物。

[0138] [化学式 4]

[0139]



[0140] 在化学式 4 中,  $\text{Y}^5$  和  $\text{Y}^6$  是相同或不同的取代基, 每一个代表氧原子、硫原子或硒原子,

[0141]  $\text{Ar}^{12} \sim \text{Ar}^{15}$  是相同或不同的取代基, 每一个代表具有 6 ~ 50 个环碳原子的取代或未取代的芳基或者具有 5 ~ 50 个环原子的取代或未取代的杂芳基, 和

[0142]  $\text{R}^7 \sim \text{R}^9$  中的部分或全部独立地是氢原子, 或者  $\text{R}^7 \sim \text{R}^9$  是相同或不同的取代基, 每一个代表卤原子、氰基、硝基、具有 6 ~ 50 个环碳原子的取代或未取代的芳基、具有 5 ~ 50 个环原子的取代或未取代的杂芳基、具有 1 ~ 50 个碳原子的取代或未取代的烷基、具有 3 ~ 50 个碳原子的取代或未取代的环烷基、具有 1 ~ 50 个碳原子的取代或未取代的硫基或者具有 1 ~ 50 个碳原子的取代或未取代的甲硅烷基, 其中具有 6 ~ 50 个环碳原子的取代或未取代的芳基、具有 5 ~ 50 个环原子的取代或未取代的杂芳基或者具有 3 ~ 50 个碳原子的取代或未取代的环烷基独立地形成或与相邻基团形成饱和或不饱和的环,

[0143] 其中适于在  $\text{Ar}^{12} \sim \text{Ar}^{15}$  和  $\text{R}^7 \sim \text{R}^9$  上取代的基团是卤原子、氰基、硝基、具有 6 ~ 50 个环碳原子的芳基、具有 5 ~ 50 个环原子的杂芳基、具有 1 ~ 50 个碳原子的烷基、具有 3 ~ 50 个碳原子的环烷基、具有 1 ~ 50 个碳原子的硫基或者具有 1 ~ 50 个碳原子的甲硅烷基。

[0144] 根据本发明, 可以提供一种有机 EL 器件用的化合物, 其中在化学式 4 中,  $\text{Y}^5$  和  $\text{Y}^6$  代表氧原子,

[0145]  $\text{Ar}^{12} \sim \text{Ar}^{15}$  是相同或不同的取代基, 每一个代表具有 6 ~ 34 个碳原子的取代或未取代的苯基、取代或未取代的联苯基、取代或未取代的三联苯基、取代或未取代的萘基、取代或未取代的蒽基或者取代或未取代的茈萘基, 和

[0146]  $\text{R}^7 \sim \text{R}^9$  中的部分或全部独立地是氢原子, 或者  $\text{R}^7 \sim \text{R}^9$  是相同或不同的取代基, 每一个代表卤原子、氰基、硝基、具有 6 ~ 34 个碳原子的取代或未取代的苯基、取代或未取代的联苯基、取代或未取代的三联苯基、取代或未取代的萘基、取代或未取代的蒽基或者取代或未取代的茈萘基, 其中具有 6 ~ 34 个碳原子的取代或未取代的苯基、取代或未取代的联苯基、取代或未取代的三联苯基、取代或未取代的萘基、取代或未取代的蒽基或者取代或未取代的茈萘基独立地形成或与相邻基团形成饱和或不饱和的环,

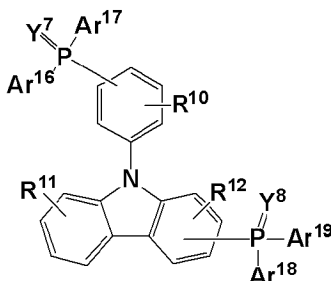
[0147] 其中适于在  $\text{Ar}^{12} \sim \text{Ar}^{15}$  和  $\text{R}^7 \sim \text{R}^9$  上取代的基团是卤原子、氰基、硝基、具有 6 ~

34 个环碳原子的芳基、具有 5 ~ 34 个环原子的杂芳基、具有 1 ~ 34 个碳原子的烷基、具有 3 ~ 34 个碳原子的环烷基、具有 1 ~ 34 个碳原子的硫基或具有 1 ~ 34 个碳原子的甲硅烷基。

[0148] 此外,本发明提供一种由以下化学式 5 代表的有机 EL 器件用的化合物。

[0149] [化学式 5]

[0150]



[0151] 在化学式 5 中,  $Y^7$  和  $Y^8$  是相同或不同的取代基, 每一个代表氧原子、硫原子或硒原子,

[0152]  $Ar^{16} \sim Ar^{19}$  是相同或不同的取代基, 每一个代表具有 6 ~ 50 个环碳原子的取代或未取代的芳基或者具有 5 ~ 50 个环原子的取代或未取代的杂芳基, 和

[0153]  $R^{10} \sim R^{12}$  中的部分或全部独立地是氢原子, 或者  $R^{10} \sim R^{12}$  是相同或不同的取代基, 每一个代表卤原子、氰基、硝基、具有 6 ~ 50 个环碳原子的取代或未取代的芳基、具有 5 ~ 50 个环原子的取代或未取代的杂芳基、具有 1 ~ 50 个碳原子的取代或未取代的烷基、具有 3 ~ 50 个碳原子的取代或未取代的环烷基、具有 1 ~ 50 个碳原子的取代或未取代的硫基或者具有 1 ~ 50 个碳原子的取代或未取代的甲硅烷基, 其中具有 6 ~ 50 个环碳原子的取代或未取代的芳基、具有 5 ~ 50 个环原子的取代或未取代的杂芳基或者具有 3 ~ 50 个碳原子的取代或未取代的环烷基独立地形成或与相邻基团形成饱和或不饱和的环,

[0154] 其中适于在  $Ar^{16} \sim Ar^{19}$  和  $R^{10} \sim R^{12}$  上取代的基团是卤原子、氰基、硝基、具有 6 ~ 50 个环碳原子的芳基、具有 5 ~ 50 个环原子的杂芳基、具有 1 ~ 50 个碳原子的烷基、具有 3 ~ 50 个碳原子的环烷基、具有 1 ~ 50 个碳原子的硫基或者具有 1 ~ 50 个碳原子的甲硅烷基。

[0155] 根据本发明, 可以提供一种有机 EL 器件用的化合物, 其中在化学式 5 中,  $Y^7$  和  $Y^8$  每一个代表氧原子,

[0156]  $Ar^{16} \sim Ar^{19}$  是相同或不同的取代基, 每一个代表具有 6 ~ 34 个碳原子的取代或未取代的苯基、取代或未取代的联苯基、取代或未取代的三联苯基、取代或未取代的萘基、取代或未取代的蒽基或者取代或未取代的苝基, 和

[0157]  $R^{10} \sim R^{12}$  中的部分或全部独立地是氢原子, 或者  $R^{10} \sim R^{12}$  是相同或不同的取代基, 每一个代表卤原子、氰基、硝基、具有 6 ~ 34 个碳原子的取代或未取代的苯基、取代或未取代的联苯基、取代或未取代的三联苯基、取代或未取代的萘基、取代或未取代的蒽基或者取代或未取代的苝基, 其中具有 6 ~ 34 个碳原子的取代或未取代的苯基、取代或未取代的联苯基、取代或未取代的三联苯基、取代或未取代的萘基、取代或未取代的蒽基或者取代或未取代的苝基独立地形成或与相邻基团形成饱和或不饱和的环,

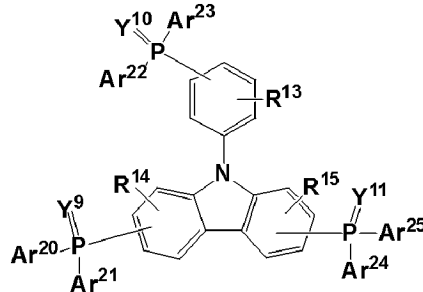
[0158] 其中适于在  $Ar^{16} \sim Ar^{19}$  和  $R^{10} \sim R^{12}$  上取代的基团是卤原子、氰基、硝基、具有 6 ~

34 个环碳原子的芳基、具有 5 ~ 34 个环原子的杂芳基、具有 1 ~ 34 个碳原子的烷基、具有 3 ~ 34 个碳原子的环烷基、具有 1 ~ 34 个碳原子的硫基或具有 1 ~ 34 个碳原子的甲硅烷基。

[0159] 此外,本发明提供一种由以下化学式 6 代表的有机 EL 器件用的化合物。

[0160] [化学式 6]

[0161]



[0162] 在化学式 6 中,  $Y^9 \sim Y^{11}$  是相同或不同的取代基, 每一个代表氧原子、硫原子或硒原子,

[0163]  $Ar^{20} \sim Ar^{25}$  是相同或不同的取代基, 每一个代表具有 6 ~ 50 个环碳原子的取代或未取代的芳基或者具有 5 ~ 50 个环原子的取代或未取代的杂芳基, 和

[0164]  $R^{13} \sim R^{15}$  中的部分或全部独立地是氢原子, 或者  $R^{13} \sim R^{15}$  是相同或不同的取代基, 每一个代表卤原子、氰基、硝基、具有 6 ~ 50 个环碳原子的取代或未取代的芳基、具有 5 ~ 50 个环原子的取代或未取代的杂芳基、具有 1 ~ 50 个碳原子的取代或未取代的烷基、具有 3 ~ 50 个碳原子的取代或未取代的环烷基、具有 1 ~ 50 个碳原子的取代或未取代的硫基或者具有 1 ~ 50 个碳原子的取代或未取代的甲硅烷基, 其中具有 6 ~ 50 个环碳原子的取代或未取代的芳基、具有 5 ~ 50 个环原子的取代或未取代的杂芳基或者具有 3 ~ 50 个碳原子的取代或未取代的环烷基独立地形成或与相邻基团形成饱和或不饱和的环,

[0165] 其中适于在  $Ar^{20} \sim Ar^{25}$  和  $R^{13} \sim R^{15}$  上取代的基团是卤原子、氰基、硝基、具有 6 ~ 50 个环碳原子的芳基、具有 5 ~ 50 个环原子的杂芳基、具有 1 ~ 50 个碳原子的烷基、具有 3 ~ 50 个碳原子的环烷基、具有 1 ~ 50 个碳原子的硫基或者具有 1 ~ 50 个碳原子的甲硅烷基。

[0166] 根据本发明, 可以提供一种有机 EL 器件用的化合物, 其中在化学式 6 中,  $Y^9 \sim Y^{11}$  每一个代表氧原子,

[0167]  $Ar^{20} \sim Ar^{25}$  是相同或不同的取代基, 每一个代表具有 6 ~ 34 个碳原子的取代或未取代的苯基、取代或未取代的联苯基、取代或未取代的三联苯基、取代或未取代的萘基、取代或未取代的蒽基或者取代或未取代的茈萘基, 和

[0168]  $R^{13} \sim R^{15}$  中的部分或全部独立地是氢原子, 或者  $R^{13} \sim R^{15}$  是相同或不同的取代基, 每一个代表卤原子、氰基、硝基、具有 6 ~ 34 个碳原子的取代或未取代的苯基、取代或未取代的联苯基、取代或未取代的三联苯基、取代或未取代的萘基、取代或未取代的蒽基或者取代或未取代的茈萘基, 其中具有 6 ~ 34 个碳原子的取代或未取代的苯基、取代或未取代的联苯基、取代或未取代的三联苯基、取代或未取代的萘基、取代或未取代的蒽基或者取代或未取代的茈萘基独立地形成或与相邻基团形成饱和或不饱和的环,

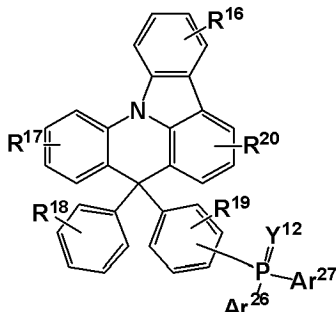
[0169] 其中适于在  $Ar^{20} \sim Ar^{25}$  和  $R^{13} \sim R^{15}$  上取代的基团是卤原子、氰基、硝基、具有 6 ~

34 个碳原子的芳基、具有 5 ~ 34 个环原子的杂芳基、具有 1 ~ 34 个碳原子的烷基、具有 3 ~ 34 个碳原子的环烷基、具有 1 ~ 34 个碳原子的硫基或具有 1 ~ 34 个碳原子的甲硅烷基。

[0170] 此外,本发明提供一种由以下化学式 7 代表的有机 EL 器件用的化合物。

[0171] [化学式 7]

[0172]



[0173] 在化学式 7 中,  $Y^{12}$  代表氧原子、硫原子或硒原子,

[0174]  $Ar^{26}$  和  $Ar^{27}$  是相同或不同的取代基, 每一个代表具有 6 ~ 50 个环碳原子的取代或未取代的芳基或者具有 5 ~ 50 个环原子的取代或未取代的杂芳基, 和

[0175]  $R^{16} \sim R^{20}$  中的部分或全部独立地是氢原子, 或者  $R^{16} \sim R^{20}$  是相同或不同的取代基, 每一个代表卤原子、氰基、硝基、具有 6 ~ 50 个环碳原子的取代或未取代的芳基、具有 5 ~ 50 个环原子的取代或未取代的杂芳基、具有 1 ~ 50 个碳原子的取代或未取代的烷基、具有 3 ~ 50 个碳原子的取代或未取代的环烷基、具有 1 ~ 50 个碳原子的取代或未取代的硫基或者具有 1 ~ 50 个碳原子的取代或未取代的甲硅烷基, 其中具有 6 ~ 50 个环碳原子的取代或未取代的芳基、具有 5 ~ 50 个环原子的取代或未取代的杂芳基或者具有 3 ~ 50 个碳原子的取代或未取代的环烷基独立地形成或与相邻基团形成饱和或不饱和的环,

[0176] 其中适于在  $Ar^{26}$ 、 $Ar^{27}$  和  $R^{16} \sim R^{20}$  上取代的基团是卤原子、氰基、硝基、具有 6 ~ 50 个环碳原子的芳基、具有 5 ~ 50 个环原子的杂芳基、具有 1 ~ 50 个碳原子的烷基、具有 3 ~ 50 个碳原子的环烷基、具有 1 ~ 50 个碳原子的硫基或者具有 1 ~ 50 个碳原子的甲硅烷基。

[0177] 根据本发明, 可以提供一种有机 EL 器件用的化合物, 其中在化学式 7 中,  $Y^{12}$  代表氧原子,

[0178]  $Ar^{26}$  和  $Ar^{27}$  是相同或不同的取代基, 每一个代表具有 6 ~ 34 个碳原子的取代或未取代的苯基、取代或未取代的联苯基、取代或未取代的三联苯基、取代或未取代的萘基、取代或未取代的蒽基或者取代或未取代的苝基, 和

[0179]  $R^{16} \sim R^{20}$  中的部分或全部独立地是氢原子, 或者  $R^{16} \sim R^{20}$  是相同或不同的取代基, 每一个代表卤原子、氰基、硝基、具有 6 ~ 34 个碳原子的取代或未取代的苯基、取代或未取代的联苯基、取代或未取代的三联苯基、取代或未取代的萘基、取代或未取代的蒽基或者取代或未取代的苝基, 其中具有 6 ~ 34 个碳原子的取代或未取代的苯基、取代或未取代的联苯基、取代或未取代的三联苯基、取代或未取代的萘基、取代或未取代的蒽基或者取代或未取代的苝基独立地形成或与相邻基团形成饱和或不饱和的环,

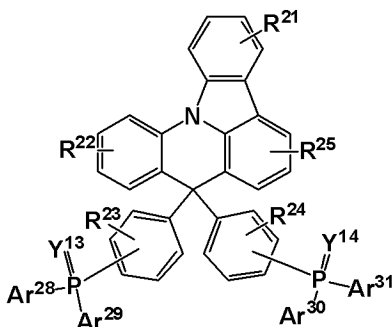
[0180] 其中适于在  $Ar^{26}$ 、 $Ar^{27}$  和  $R^{16} \sim R^{20}$  上取代的基团是卤原子、氰基、硝基、具有 6 ~ 34 个碳原子的芳基、具有 5 ~ 34 个环原子的杂芳基、具有 1 ~ 34 个碳原子的烷基、具有 3 ~

34 个碳原子的环烷基、具有 1 ~ 34 个碳原子的硫基或具有 1 ~ 34 个碳原子的甲硅烷基。

[0181] 此外,本发明提供一种由以下化学式 8 代表的有机 EL 器件用的化合物。

[0182] [化学式 8]

[0183]



[0184] 在化学式 8 中,  $Y^{13}$  和  $Y^{14}$  是相同或不同的取代基, 每一个代表氧原子、硫原子或硒原子,

[0185]  $Ar^{28} \sim Ar^{31}$  是相同或不同的取代基, 每一个代表具有 6 ~ 50 个碳原子的取代或未取代的芳基, 或具有 5 ~ 50 个环原子的取代或未取代的杂芳基, 和

[0186]  $R^{21} \sim R^{25}$  中的部分或全部独立地是氢原子, 或者  $R^{21} \sim R^{25}$  是相同或不同的取代基, 每一个代表卤原子、氰基、硝基、具有 6 ~ 50 个环碳原子的取代或未取代的芳基、具有 5 ~ 50 个环原子的取代或未取代的杂芳基、具有 1 ~ 50 个碳原子的取代或未取代的烷基、具有 3 ~ 50 个碳原子的取代或未取代的环烷基、具有 1 ~ 50 个碳原子的取代或未取代的硫基或者具有 1 ~ 50 个碳原子的取代或未取代的甲硅烷基, 其中具有 6 ~ 50 个环碳原子的取代或未取代的芳基、具有 5 ~ 50 个环原子的取代或未取代的杂芳基或者具有 3 ~ 50 个碳原子的取代或未取代的环烷基独立地形成或与相邻基团形成饱和或不饱和的环,

[0187] 其中适于在  $Ar^{28} \sim Ar^{31}$  和  $R^{21} \sim R^{25}$  上取代的基团是卤原子、氰基、硝基、具有 6 ~ 50 个环碳原子的芳基、具有 5 ~ 50 个环原子的杂芳基、具有 1 ~ 50 个碳原子的烷基、具有 3 ~ 50 个碳原子的环烷基、具有 1 ~ 50 个碳原子的硫基或者具有 1 ~ 50 个碳原子的甲硅烷基。

[0188] 根据本发明, 可以提供一种有机 EL 器件用的化合物, 其中在化学式 8 中,  $Y^{13}$  和  $Y^{14}$  每一个代表氧原子,

[0189]  $Ar^{28} \sim Ar^{31}$  是相同或不同的取代基, 每一个代表具有 6 ~ 34 个碳原子的取代或未取代的苯基、取代或未取代的联苯基、取代或未取代的三联苯基、取代或未取代的萘基、取代或未取代的蒽基或者取代或未取代的茈基, 和

[0190]  $R^{21} \sim R^{25}$  中的部分或全部独立地是氢原子, 或者  $R^{21} \sim R^{25}$  是相同或不同的取代基, 每一个代表卤原子、氰基、硝基、具有 6 ~ 34 个碳原子的取代或未取代的苯基、取代或未取代的联苯基、取代或未取代的三联苯基、取代或未取代的萘基、取代或未取代的蒽基或者取代或未取代的茈基, 其中具有 6 ~ 34 个碳原子的取代或未取代的苯基、取代或未取代的联苯基、取代或未取代的三联苯基、取代或未取代的萘基、取代或未取代的蒽基或者取代或未取代的茈基独立地形成或与相邻基团形成饱和或不饱和的环,

[0191] 其中适于在  $Ar^{28} \sim Ar^{31}$  和  $R^{21} \sim R^{25}$  上取代的基团是卤原子、氰基、硝基、具有 6 ~ 34 个环碳原子的芳基、具有 5 ~ 34 个环原子的杂芳基、具有 1 ~ 34 个碳原子的烷基、具有

3 ~ 34 个碳原子的环烷基、具有 1 ~ 34 个碳原子的硫基或具有 1 ~ 34 个碳原子的甲硅烷基。

[0192] 在  $Ar^1 \sim Ar^{31}$  和  $R^1 \sim R^{25}$  上的具有 6 ~ 50 个环碳原子的取代或未取代的芳基的具体例子包括苯基、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、p- 三联苯 -4- 基、p- 三联苯 -3- 基、p- 三联苯 -2- 基、m- 三联苯 -4- 基、m- 三联苯 -3- 基、m- 三联苯 -2- 基、o- 甲苯基、m- 甲苯基、p- 甲苯基、p- 叔丁基苯基、p-(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- 甲基联苯基或 4- 叔丁基 -p- 三联苯 -4- 基。

[0193] 在  $Ar^1 \sim Ar^{31}$  和  $R^1 \sim R^{25}$  上的具有 5 ~ 50 个环原子的芳香族杂环基团的具体例子包括 1- 吡咯基、2- 吡咯基、3- 吡咯基、吡嗪基、嘧啶基、哒嗪基、2- 吡啶基、3- 吡啶基、4- 吡啶基、1- 咪唑基、2- 咪唑基、3- 咪唑基、4- 咪唑基、5- 咪唑基、6- 咪唑基、7- 咪唑基、1- 异咪唑基、2- 异咪唑基、3- 异咪唑基、4- 异咪唑基、5- 异咪唑基、6- 异咪唑基、7- 异咪唑基、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、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- 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- 吩噁嗪基、2- 吩噁嗪基、3- 吩噁嗪基、4- 吩噁嗪基、10- 吩噁嗪基、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- 噻吩基、3- 噻吩基、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- 苯基丙基) 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- 咪唑基或 4- 叔丁基 -3- 咪唑基。

[0194] 在  $R^1 \sim R^{25}$  上, 具有 1 ~ 50 个碳原子的取代或未取代的烷基和具有 3 ~ 50 个碳原子的取代或未取代的环烷基的具体例子包括甲基、乙基、n-丙基、n-戊基、n-丁基、n-己基、n-庚基、n-辛基、n-癸基、n-二十烷基、异丙基、仲丁基、异丁基、叔丁基、羟基甲基、1-羟基乙基、2-羟基乙基、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、氰基甲基、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、环丙基、环丁基、环戊基、环己基、4-甲基环己基、1-金刚烷基、2-金刚烷基、1-降冰片基、2-降冰片基等。

[0195] 在  $R^1 \sim R^{25}$  上, 具有 1 ~ 50 个碳原子的取代或未取代的硫基的具体例子包括甲硫基、乙硫基、丙硫基、丁硫基、戊硫基、己硫基、三(异丙基)硫基、三(异丁基)硫基、三(叔丁基)硫基、三(2-丁基)硫基、苯硫基、萘硫基、联苯硫基、(3-甲基苯基)硫基、(4-甲基萘基)硫基、(2-甲基联苯基)硫基等。

[0196] 在  $R^1 \sim R^{25}$  上, 具有 1 ~ 50 个碳原子的取代或未取代的甲硅烷基的具体例子包括三甲基甲硅烷基、三乙基甲硅烷基、三丁基甲硅烷基、三(异丙基)甲硅烷基、三(异丁基)甲硅烷基、三(叔丁基)甲硅烷基、三(2-丁基)甲硅烷基、三苯基甲硅烷基、三萘基甲硅烷基、三联苯基甲硅烷基、三(3-甲基苯基)甲硅烷基、三(4-甲基萘基)甲硅烷基、三(2-甲基联苯基)甲硅烷基、苯基甲基甲硅烷基、苯基乙基甲硅烷基、萘基甲基甲硅烷基、萘基乙基甲硅烷基、联苯基甲基甲硅烷基、3-甲基苯基甲基甲硅烷基、苯基(异丙基)甲硅烷基、萘基(异丙基)甲硅烷基或联苯基(异丙基)甲硅烷基。

[0197] 作为根据本发明的有机 EL 器件用的化合物例子的化合物 1 ~ 194 的结构式示于下表 1 ~ 22, 但本发明不限于这些化合物。

[0198] 表 1

[0199]

化合物	结构式	化合物	结构式
1		2	
3		4	
5		6	
7		8	
9		10	

[0200] 表 2

[0201]

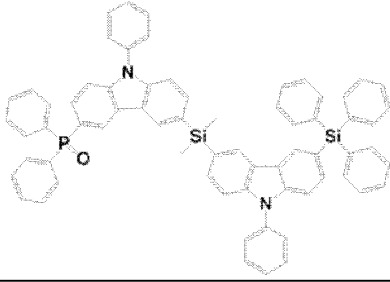
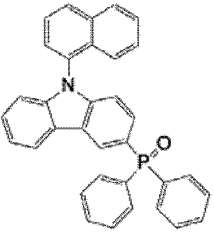
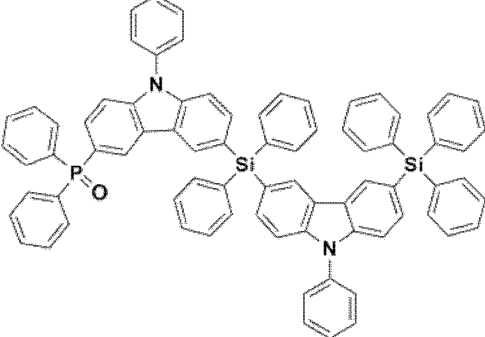
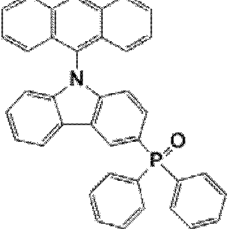
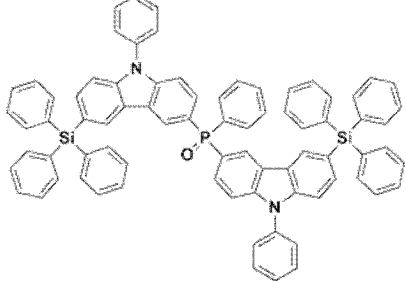
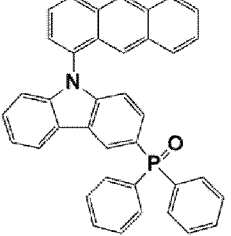
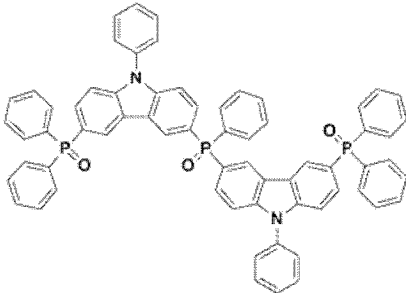
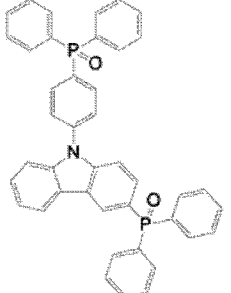
化合物	结构式	化合物	结构式
11		12	
13		14	
15		16	
17		18	

[0202] 表 3

[0203]

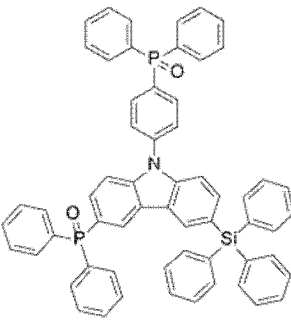
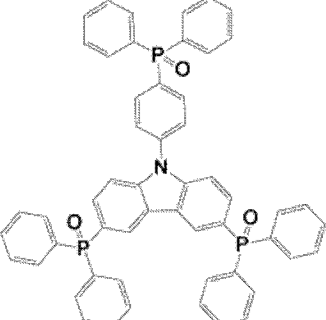
化合物	结构式	化合物	结构式
19		20	

[0204]

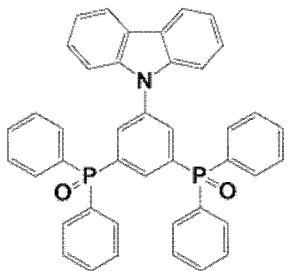
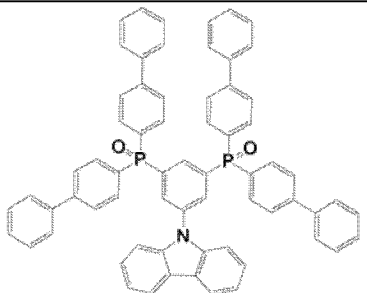
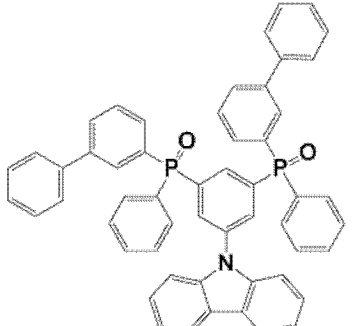
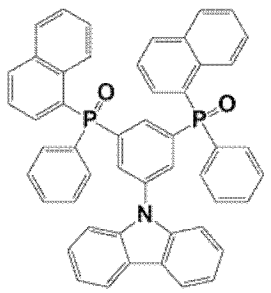
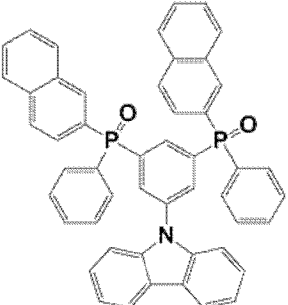
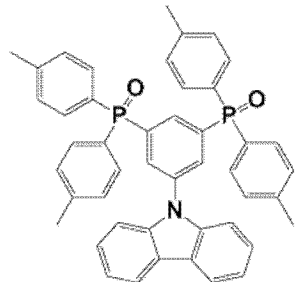
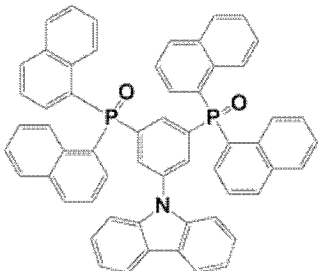
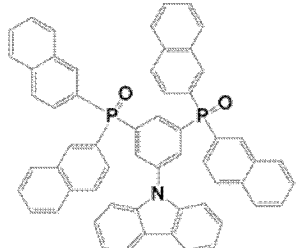
21		22	
23		24	
25		26	
27		28	

[0205] 表 4

[0206]

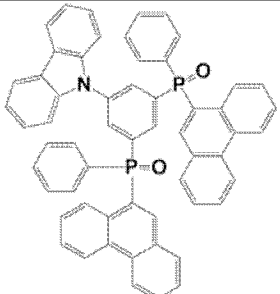
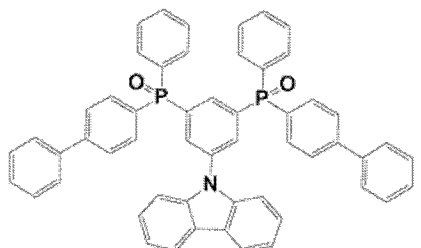
化合物	结构式	化合物	结构式
29		30	

[0207]

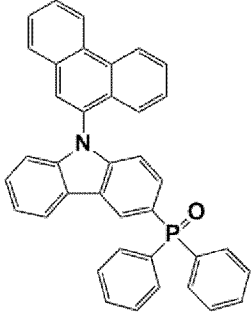
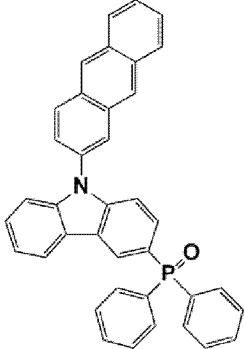
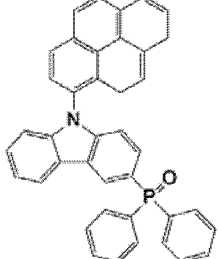
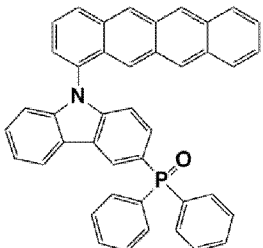
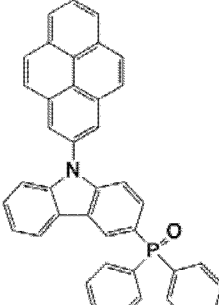
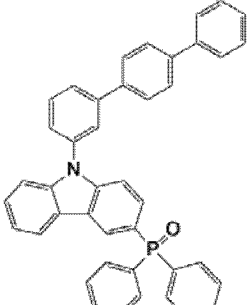
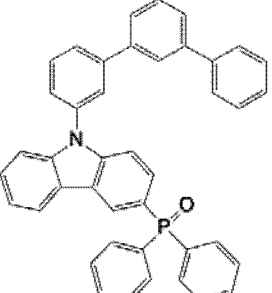
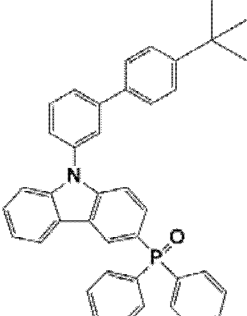
31		32	
33		34	
35		36	
37		38	

[0208] 表 5

[0209]

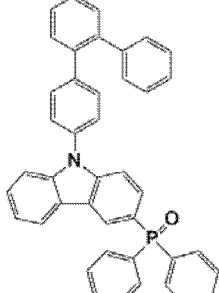
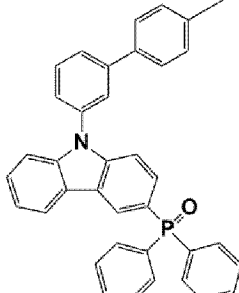
化合物	结构式	化合物	结构式
39		40	

[0210]

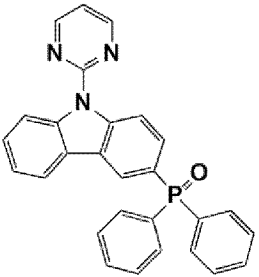
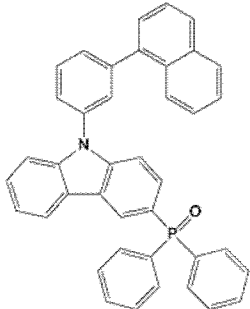
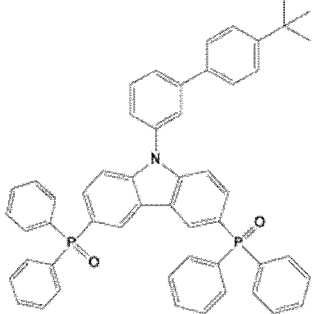
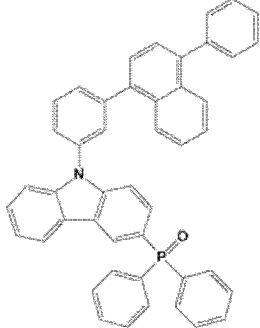
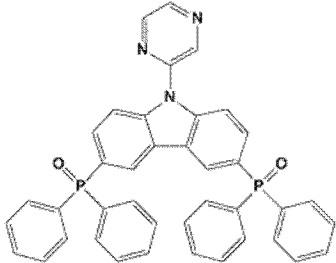
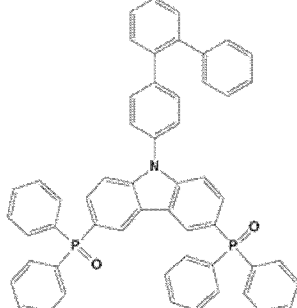
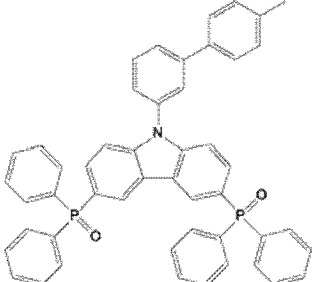
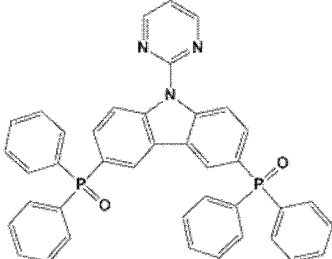
41		42	
43		44	
45		46	
47		48	

[0211] 表 6

[0212]

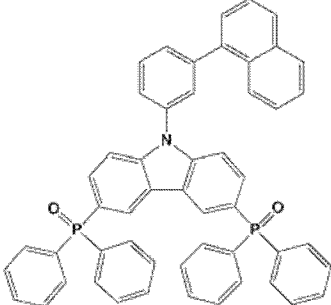
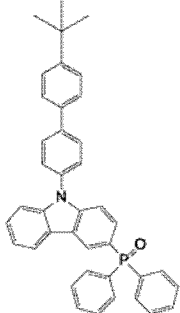
化合物	结构式	化合物	结构式
49		50	

[0213]

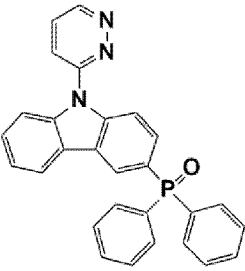
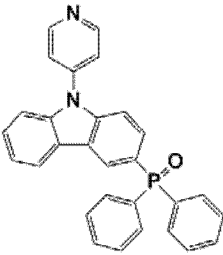
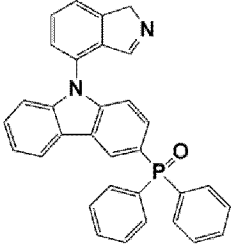
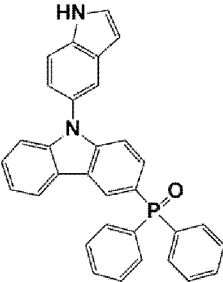
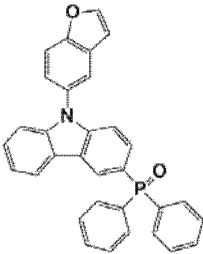
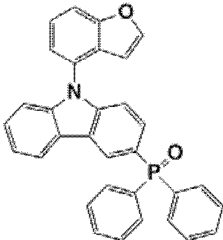
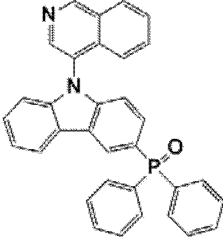
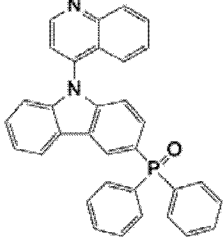
51		52	
53		54	
55		56	
57		58	

[0214] 表 7

[0215]

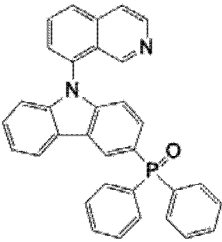
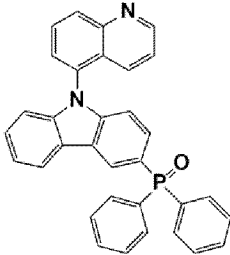
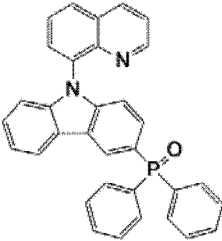
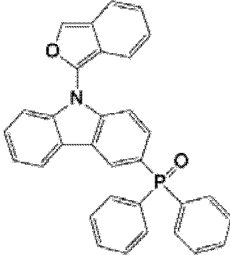
化合物	结构式	化合物	结构式
59		60	

[0216]

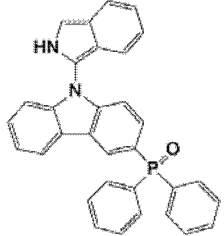
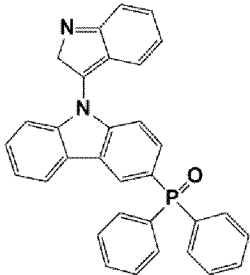
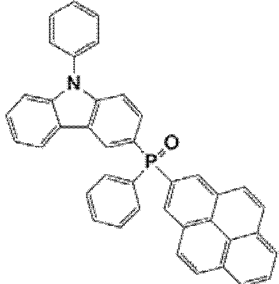
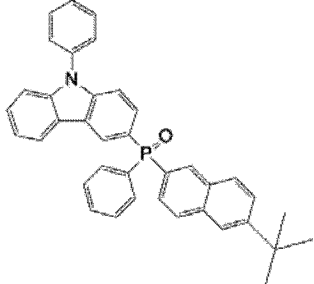
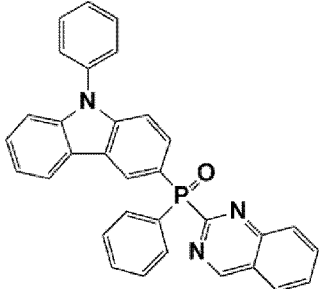
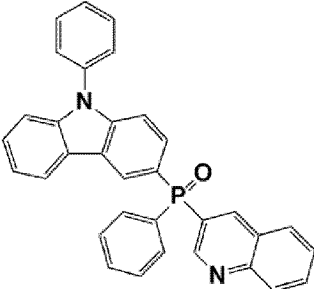
61		62	
63		64	
65		66	
67		68	

[0217] 表 8

[0218]

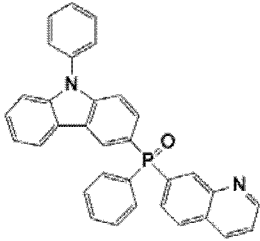
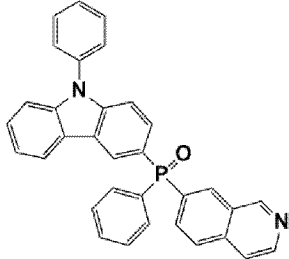
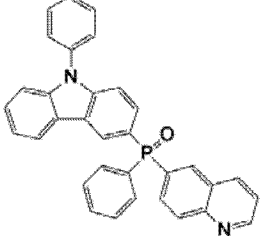
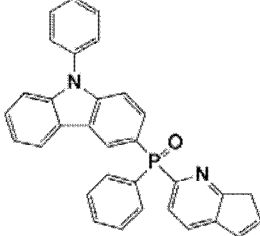
化合物	结构式	化合物	结构式
69		70	
71		72	

[0219]

73		74	
75		76	
77		78	

[0220] 表 9

[0221]

化合物	结构式	化合物	结构式
79		80	
81		82	

[0222]

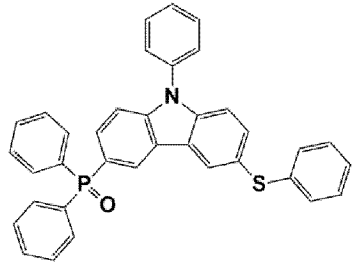
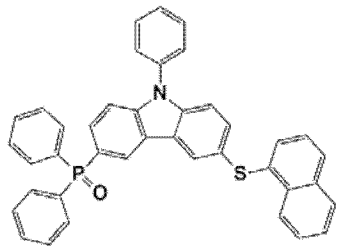
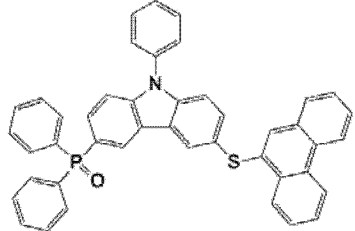
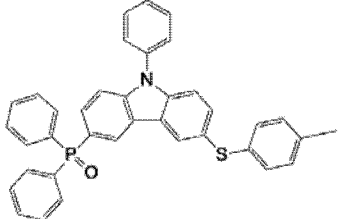
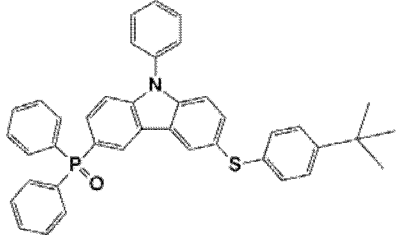
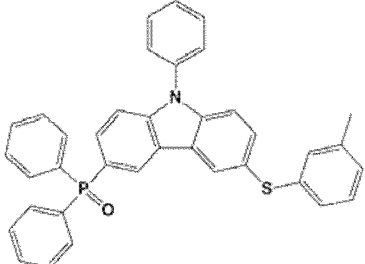
83		84	
85		86	
87		88	

[0223] 表 10

[0224]

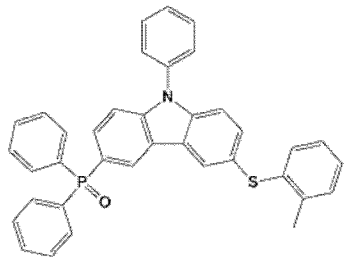
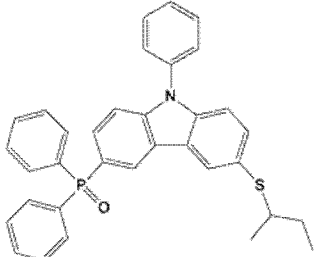
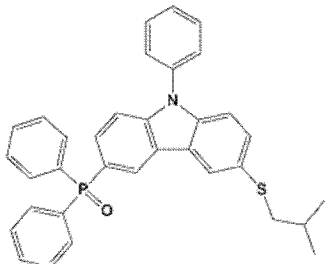
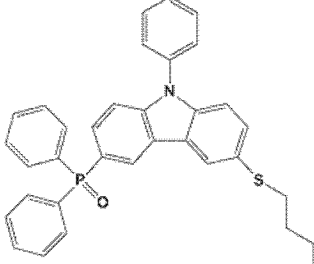
化合物	结构式	化合物	结构式
89		90	
91		92	

[0225]

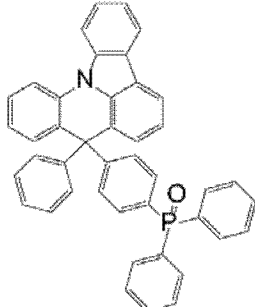
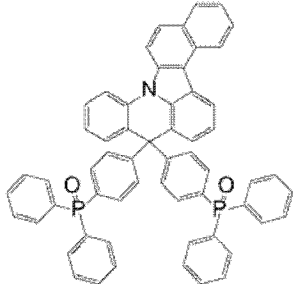
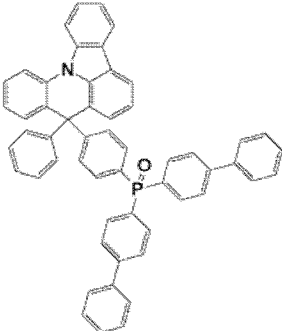
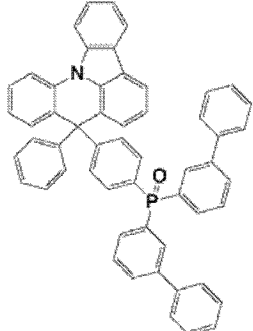
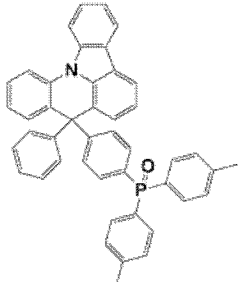
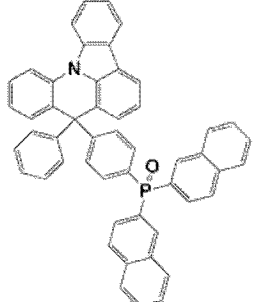
93		94	
95		96	
97		98	

[0226] 表 11

[0227]

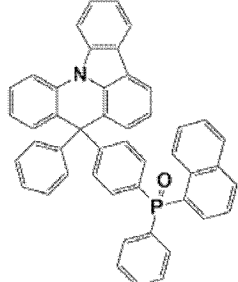
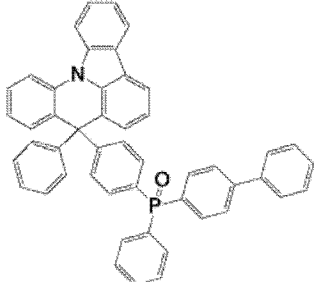
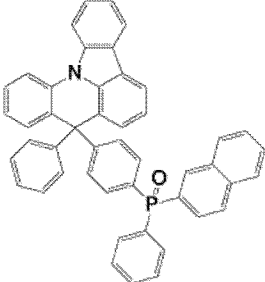
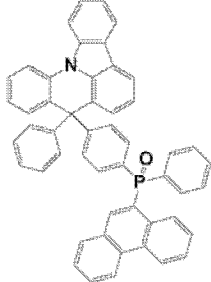
化合物	结构式	化合物	结构式
99		100	
101		102	

[0228]

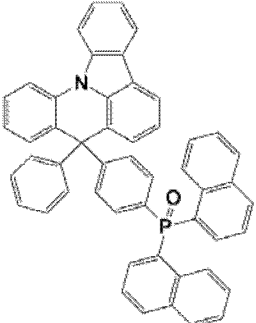
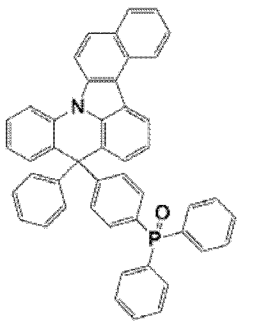
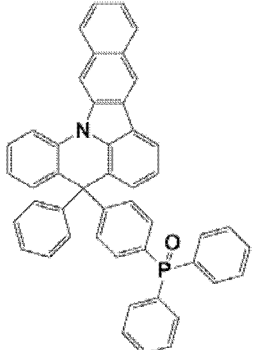
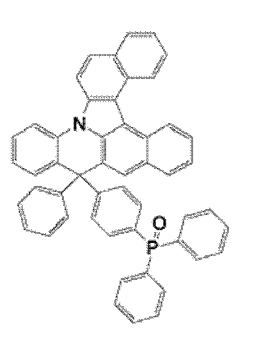
103		104	
105		106	
107		108	

[0229] 表 12

[0230]

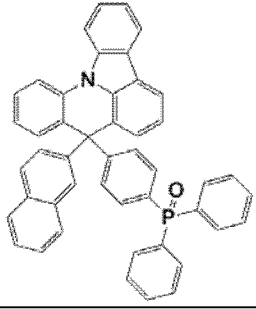
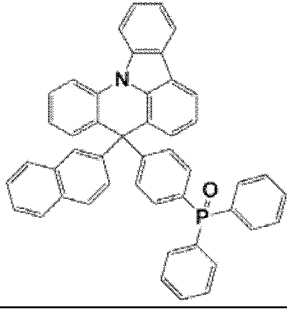
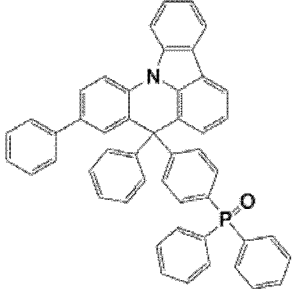
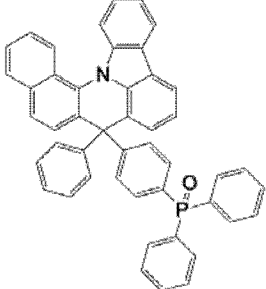
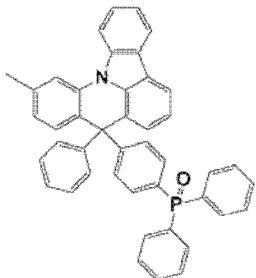
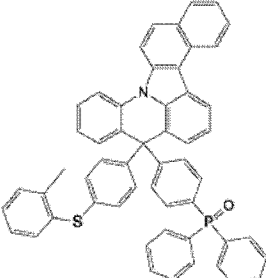
化合物	结构式	化合物	结构式
109		110	
111		112	

[0231]

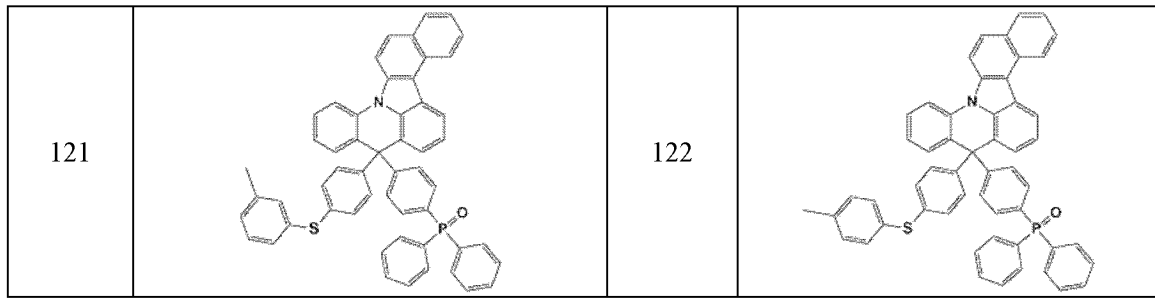
113		114	
115		116	

[0232] 表 13

[0233]

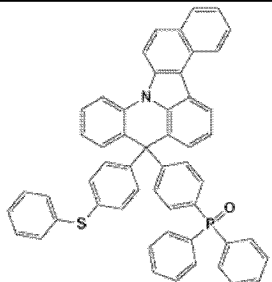
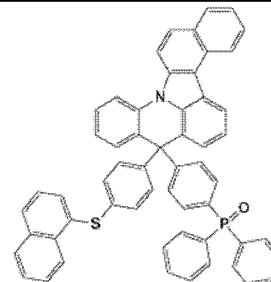
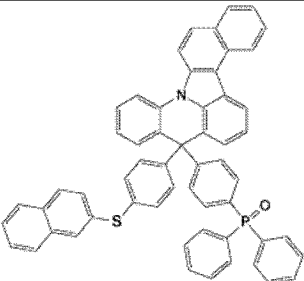
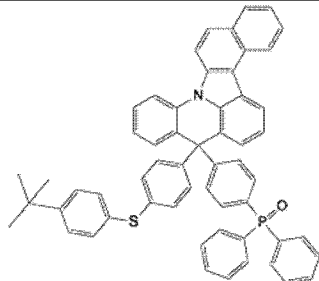
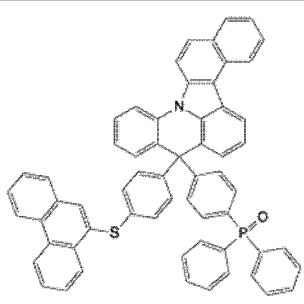
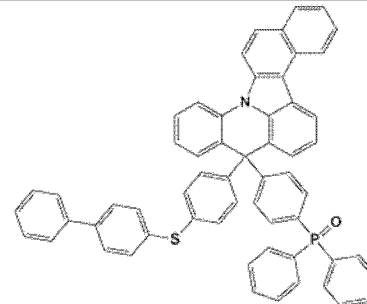
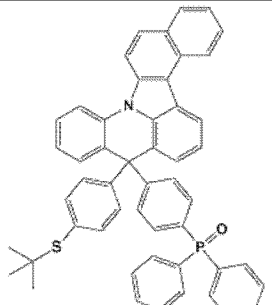
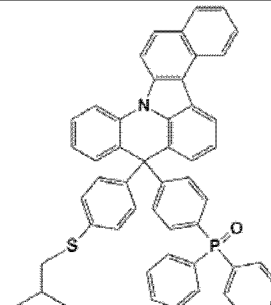
化合物	结构式	化合物	结构式
117		118	
119		120	
121		122	

[0234]



[0235] 表 14

[0236]

化合物	结构式	化合物	结构式
123		124	
125		126	
127		128	
129		130	

[0237] 表 15

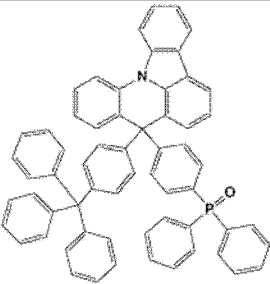
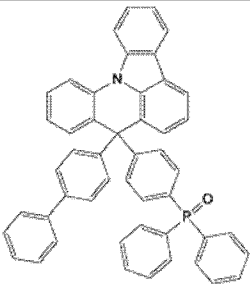
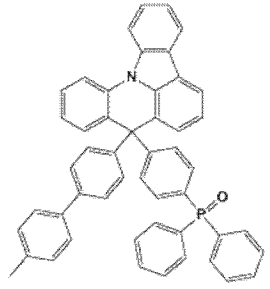
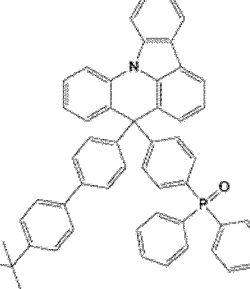
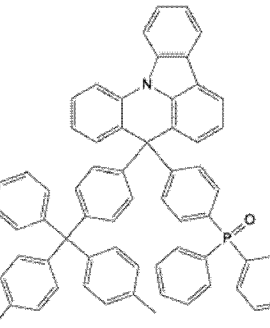
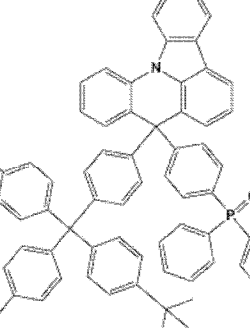
[0238]

化合物	结构式	化合物	结构式
131		132	
133		134	
135		136	
137		138	

[0239] 表 16

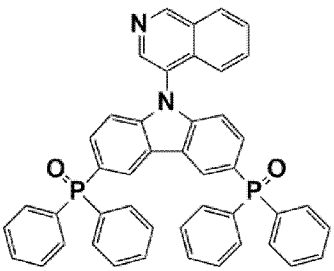
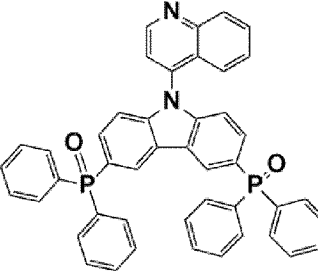
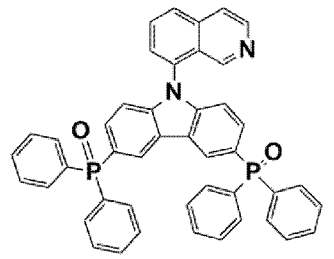
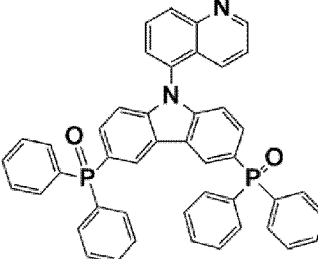
[0240]

化合物	结构式	化合物	结构式
139		140	

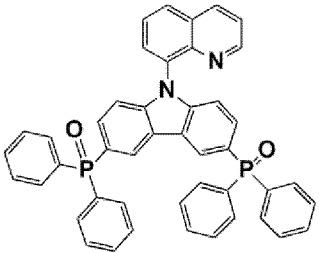
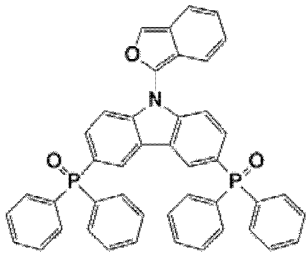
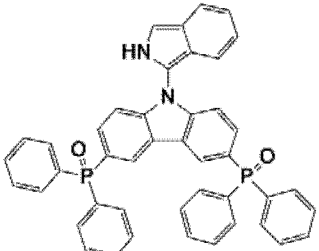
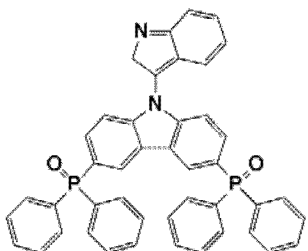
141		142	
[0241] 143		144	
145		146	

[0242] 表 17

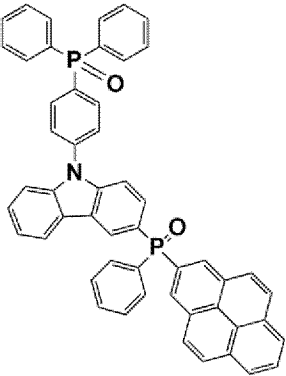
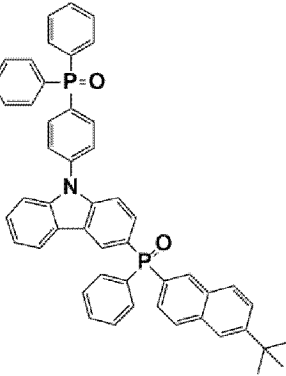
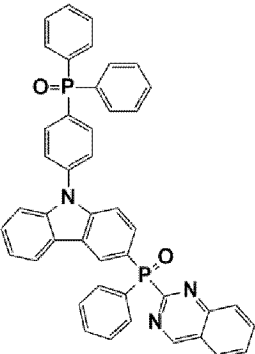
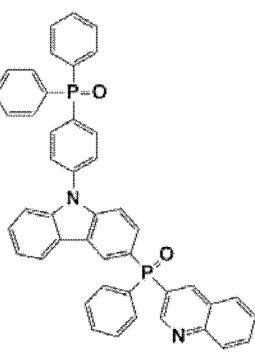
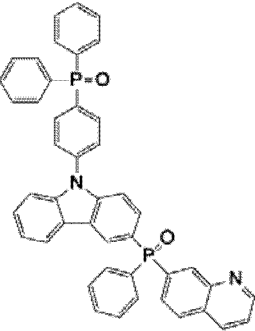
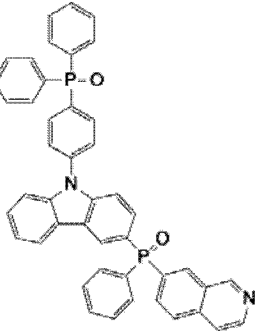
[0243]

化合物	结构式	化合物	结构式
147		148	
149		150	

[0244]

151		152	
153		154	

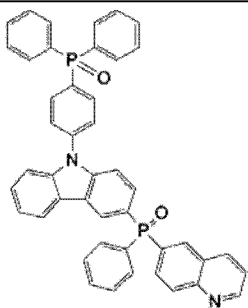
[0245] 表 18

化合物	结构式	化合物	结构式
155		156	
157		158	
159		160	

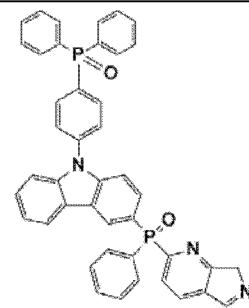
[0246]

[0247]

161



162



[0248] 表 19

[0249]

化合物	结构式	化合物	结构式
163		164	
165		166	
167		168	
169		170	

[0250] 表 20

[0251]

化合物	结构式	化合物	结构式
171		172	
173		174	
175		176	
177		178	

[0252] 表 21

[0253]

化合物	结构式	化合物	结构式
179		180	
181		182	
183		184	
185		186	

[0254] 表 22

[0255]

化合物	结构式	化合物	结构式
187		188	
189		190	
191		192	
193		194	

[0256] 下面参考附图说明根据本发明的有机 EL 器件。

[0257] 图 1 示意性地示出根据本发明的有机 EL 器件的结构。包含化学式 1 ~ 8 代表的化合物的有机 EL 器件可以各种结构体现。

[0258] 如图 1 所示,根据本发明的有机 EL 器件包括第一电极 110 ;第二电极 150 ;插在第一电极和第二电极之间的具有至少一个发光层 130 的单一有机层或多个有机层 120, 130, 140, 其中有机层 120, 130, 140 可以包含上述化学式 1 ~ 8 的化合物中的部分或全部。

[0259] 多个有机层的数量可以是 10 个以下, 优选 8 个以下。如果有机层的数量超过 10 个, 则难以形成有机 EL 器件的有机层并且没有经济效益。

[0260] 如图 1 中代表性示出的, 根据本发明实施方案的有机 EL 器件被配置成使得发光层 130、空穴输送层 120 和电子输送层 140 设置在作为第一电极的阳极 110 和作为第二电极的阴极 150 之间。除了发光层 130、空穴输送层 120 或电子输送层 140 之外, 电子注入层、空穴

注入层、空穴阻挡层、电子阻挡层中的部分或全部可以单独地形成,从而能够使有机 EL 器件的发光效率提高。

[0261] 有机 EL 器件优选支撑在透明基板上。透明基板材料没有特别有限,只要具有良好的机械强度、热稳定性和透明度。具体例子包括玻璃、透明塑料膜等。

[0262] 根据本发明的有机 EL 器件的阳极材料可以包括功函数为 4eV 以上的金属、合金、导电化合物或其混合物。具体例子包括金属金或者诸如 CuI、ITO(氧化铟锡)、SnO<sub>2</sub> 和 ZnO 等透明导电材料。阳极膜的厚度可以为 10 ~ 200nm。

[0263] 根据本发明的有机 EL 器件的阴极材料可以包括功函数小于 4eV 的金属、合金、导电化合物或其混合物。具体例子包括 Na、Na-K 合金、Ca、Mg、Li、Li 合金、In、Al、Mg 合金、Al 合金等。此外,可以使用 Al/AlO<sub>2</sub>、Al/Li、Mg/Ag 或 Mg/In。阴极膜的厚度可以为 10 ~ 200nm。为了提高有机 EL 器件的发光效率,一个或多个电极应该具有 10% 以上的透光率。电极的表面电阻优选为几百 Ω/mm 以下。电极的厚度可以为 10nm ~ 1 μm, 优选 10 ~ 400nm。可以通过利用诸如化学气相沉积 (CVD) 或物理气相沉积 (PVD) 等气相沉积法或溅射法将上述电极材料形成薄膜而获得这些电极。

[0264] 此外,除了根据本发明的化学式 1 ~ 8 的化合物之外,空穴输送材料和空穴注入材料可以任选地选自导光材料中通常用作空穴输送材料的材料以及已知可用于形成有机 EL 器件的空穴输送层或空穴注入层的材料。其例子包括卟啉化合物的衍生物,包括 N,N'-二苯基-N,N'-二(3-甲基苯基)-4,4'-二氨基联苯 (TPD)、N,N'-二苯基-N,N'-二萘基-4,4'-二氨基联苯、N,N,N',N'-四-p-甲苯基-4,4'-二氨基联苯、N,N,N',N'-四苯基-4,4'-二氨基联苯、1,10,15,20-四苯基-21H,23H-卟啉铜 (II) 等;三芳基胺衍生物,包括在主链或侧链上具有芳香族叔胺的聚合物、1,1-双(4-二-p-甲苯基氨基苯基)环己烷、N,N,N-三(p-甲苯基)胺、4,4',4'-三[N-(3-甲基苯基)-N-苯基氨基]三苯基胺等;咪唑衍生物,包括 N-苯基咪唑和聚乙烯咪唑;酞菁衍生物,包括非金属酞菁、铜酞菁等;星爆式胺衍生物;烯胺二苯乙烯衍生物;芳香族叔胺和苯乙烯基胺化合物的衍生物;和聚硅烷。

[0265] 电子输送层用的已知材料包括例如 AlQ<sub>3</sub>、2,5-二芳基硅杂环戊二烯衍生物 (PyPySPyPy)、全氟化合物 (PF-6P)、八取代的环辛四烯化合物 (COT) 等,它们可以混合。

[0266] 在根据本发明的有机 EL 器件中,电子注入层、电子输送层、空穴注入层和空穴输送层可以包含一种或多种上述化合物的单一层形式设置或者以包含不同种化合物的叠置多层形式设置。

[0267] 根据本发明的有机 EL 器件中使用的其他发光材料可以包括已知的发光材料,例如,荧光发光材料、荧光增白剂、激光染料、有机闪烁剂和荧光分析试剂。具体例子包括聚芳族化合物,包括 AlQ<sub>3</sub>、葱、菲、芘、稠二萘、芘、晕苯、红荧烯和喹吖啶酮;低聚苯化合物,包括四联苯;液体闪烁用的闪烁剂,包括 1,4-双(2-甲基苯乙烯基)苯、1,4-双(4-甲基苯乙烯基)苯、1,4-双(4-甲基-5-苯基-2-噁唑基)苯、1,4-双(5-苯基-2-噁唑基)苯、2,5-双(5-叔丁基-2-苯并噁唑基)噻吩、1,4-二苯基-1,3-丁二烯、1,6-二苯基-1,3,5-己三烯、1,1,4,4-四苯基-1,3-丁二烯等;喹啉衍生物的金属配合物;香豆素染料;二氰基亚甲基吡喃染料;二氰基亚甲基硫代吡喃染料;聚次甲基染料;氧代苯并葱染料;咕吨染料;羰基苯乙烯基染料;茈染料;噁嗪化合物;二苯乙烯衍生物;螺环化合物;噁二唑化合物等。

[0268] 根据本发明的有机 EL 器件的各层可以使用诸如真空沉积、旋转涂布或流延等已

知方法以薄膜的形式设置,或者可以使用用于此的材料制备。各层的膜厚度没有特别限制,并且可以根据材料的性质适宜地确定,通常可以设置为 2nm ~ 5000nm。

[0269] 因为根据本发明的化学式 1 ~ 8 的化合物可以进行真空沉积,所以薄膜形成方法简单,并且可以很容易地获得几乎没有针孔的均匀薄膜。

[0270] 在图 1 中,根据本发明的另一个实施方案,发光层 130 可以包含化学式 1 ~ 8 代表的有机 EL 器件用的化合物。

[0271] 在图 1 中,根据本发明的进一步实施方案,可以设置有机 EL 器件,其中有机层 120, 130, 140 可以包括空穴输送层 120,其中空穴输送层 120 可以包含化学式 1 ~ 8 代表的有机 EL 器件用的化合物。

[0272] 通过下面的实施例更详细地说明根据本发明的有机 EL 器件用的化合物和包含该化合物的有机 EL 器件的制备,但是实施例只是说明性的,本发明的范围不限于此。

[0273] [ 实施例 ]

[0274] 根据本发明,制备有机 EL 器件用的化合物,并使用该化合物制作有机 EL 器件。以下制备例和实施例用于说明本发明,而不能解释为限制本发明。

[0275] [ 制备例 ]

[0276] 制备例 1. 合成中间体

[0277] 将 2.5g 咪唑、2g 溴苯和 0.064g 醋酸钨催化剂溶解在 40mL 甲苯中,将得到的溶液加热到 60℃。然后,缓慢滴加 1.5g 丁醇钠和 0.385g 三叔丁基膦溶解在甲苯中的溶液。混合物在稳定的 100℃ 下回流。反应完成后,反应混合物用二氯甲烷和蒸馏水萃取,干燥溶剂。过滤得到的固体,纯化,得到中间体 9- 苯基咪唑化合物。

[0278] 制备例 2. 合成中间体

[0279] 将 2g 9- 苯基咪唑和 1.46g N- 溴琥珀酰亚胺溶解在 N, N- 二甲基甲酰胺中,将得到的溶液溴化,得到 3- 溴 -9- 苯基咪唑化合物中间体。按此方法,合成 3,6- 二溴 -9- 苯基咪唑化合物。

[0280] 制备例 3. 合成中间体

[0281] 将 1.4g 咪唑、2.2g 1,4- 二溴苯和 0.042g 醋酸钨催化剂溶解在 30mL 甲苯中,将得到的溶液加热到 60℃。然后,缓慢滴加 0.977g 丁醇钠和 0.257g 三叔丁基膦溶解在甲苯中的溶液。混合物在稳定的 100℃ 下回流。反应完成后,反应混合物用二氯甲烷和蒸馏水萃取,干燥溶剂。过滤得到的固体,纯化,得到中间体 4- 溴苯基 -9- 咪唑化合物。

[0282] 制备例 4. 合成中间体

[0283] 向 4.58g 制备例 2 的中间体 3,6- 二溴 -9- 苯基咪唑中加入 60mL 四氢呋喃,温度调节到 -78℃。然后,缓慢滴加 1.26mL 丁基锂。在保持该温度的同时将混合物搅拌 2 小时,缓慢滴加 3.71g 氯三苯基硅烷,其后混合物的温度升至室温。反应完成后,加入 1 : 10 比例的三乙胺和甲醇,搅拌反应混合物,萃取,然后干燥溶剂。过滤得到的固体,纯化,得到白色中间体 3- 溴 -9- 苯基 -6- ( 三苯基甲硅烷基 ) -9- 咪唑。

[0284] 制备例 5. 合成中间体

[0285] 将 2g 制备例 3 的中间体 4- 溴苯基 -9- 咪唑和 1.1g N- 溴琥珀酰亚胺溶解在 N, N- 二甲基甲酰胺中,将得到的溶液溴化,从而合成中间体 3- 溴 -9- (4- 溴苯基 ) 咪唑化合物。

[0286] 制备例 6. 合成中间体

[0287] 将 2g 制备例 1 的中间体 9- 苯基 - 咪唑和 5.12g N- 溴琥珀酰亚胺溶解在 N,N- 二甲基甲酰胺中, 将得到的溶液溴化, 从而合成中间体 3,6- 二溴 -9-(4- 溴苯基) 咪唑化合物。

[0288] 制备例 7. 合成中间体

[0289] 将 0.5g 碘 -3,5- 二溴苯、0.19g 咪唑、铜催化剂、18- 冠 -6 和碳酸钾溶解在二氯苯中, 在加热到 150℃ 的同时使得到的溶液反应。反应完成后, 过滤出铜粉, 反应混合物用蒸馏水和二氯甲烷萃取。干燥有机溶剂, 使用柱纯化得到的粉末, 从而合成中间体 9-(3,5- 二溴苯基) -9- 咪唑。

[0290] 制备例 8. 合成中间体

[0291] 将 1.672g 咪唑、1.6mL 1- 溴 -2- 碘苯、2.7646g 碳酸钾, 95mg 碘化铜和 25mL 二甲苯在氮气气氛中回流。将混合物冷却到室温, 用乙酸乙酯萃取, 用无水硫酸镁干燥, 除去水分, 减压下除去溶剂。使用己烷溶剂进行硅胶柱分离, 从而得到化合物, 然后从中减压下除去溶剂, 然后真空干燥, 得到目标白色固体中间体 9-(2- 溴苯基) -9H- 咪唑。

[0292] 制备例 9. 合成中间体

[0293] 将 0.8g 制备例 8 的中间体 9-(2- 溴苯基) -9H- 咪唑溶解在 10mL 纯化的四氢呋喃中, 将得到的溶液冷却到 -78℃, 缓慢滴加 0.99mL 丁基锂。混合物在该温度下搅拌 40min, 然后在室温下再搅拌 3 小时。反应用氯化铵水溶液终止, 反应混合物用乙醚萃取。有机层用无水硫酸镁脱水, 然后除去有机溶剂。得到的固体在乙醇中分散, 搅拌 1 天, 过滤, 真空干燥, 从而得到中间体材料。将这样得到的固体在 10mL 乙酸中分散, 加入 10 滴浓硫酸, 其后混合物回流 4 小时。过滤得到的固体, 用乙醇洗涤, 真空干燥, 得到 8-(4- 溴苯基) -8- 苯基 -8H- 吡啶并 [3,2,1-de] 吡啶化合物。

[0294] 制备例 10. 合成中间体

[0295] 将 1.0g 制备例 8 的中间体 9-(2- 溴苯基) -9H- 咪唑溶解在 10mL 纯化的四氢呋喃中, 将得到的溶液冷却到 -78℃, 缓慢滴加 1.613mL 丁基锂。混合物在该温度下搅拌 30min, 加入 1.05g 4- 溴二苯甲酮。混合物在该温度下搅拌 40min, 然后在室温下再搅拌 3 小时。反应用氯化铵水溶液终止, 反应混合物用乙醚萃取。有机层用无水硫酸镁脱水, 然后除去有机溶剂。得到的固体在乙醇中分散, 搅拌 1 天, 过滤, 真空干燥, 从而得到中间体材料。将这样得到的固体在 10mL 乙酸中分散, 加入 10 滴浓硫酸, 其后混合物回流 4 小时。过滤得到的固体, 用乙醇洗涤, 真空干燥, 得到 8-(4- 溴苯基) -8- 苯基 -8H- 吡啶并 [3,2,1-de] 吡啶化合物。

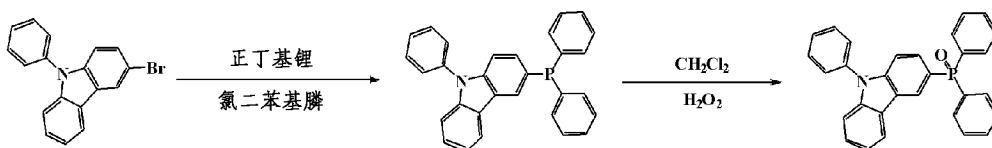
[0296] 制备例 11. 合成中间体

[0297] 将 6.96g 制备例 8 的中间体 9-(2- 溴苯基) -9H- 咪唑溶解在 10mL 纯化的四氢呋喃中, 将得到的溶液冷却到 -78℃, 缓慢滴加 8.64mL 丁基锂。混合物在该温度下搅拌 30min, 加入 6.12g 4,4'- 二溴二苯甲酮。混合物在该温度下搅拌 40min, 然后在室温下再搅拌 3 小时。反应用氯化铵水溶液终止, 反应混合物用乙醚萃取。有机层用无水硫酸镁脱水, 然后除去有机溶剂。得到的固体在乙醇中分散, 搅拌 1 天, 过滤, 真空干燥, 从而得到中间体材料。将这样得到的固体在 10mL 乙酸中分散, 加入 10 滴浓硫酸, 其后混合物回流 4 小时。过滤得到的固体, 用乙醇洗涤, 真空干燥, 得到 8,8- 双 (4- 溴苯基) -8H- 吡啶并 [3,2,1-de] 吡啶

化合物。

[0298] 制备例 12. 合成化合物 1

[0299]



[0300] 通过使磷酰氯与溴 (N- 苯基咔唑) 反应, 然后进行氧化来合成该化合物。

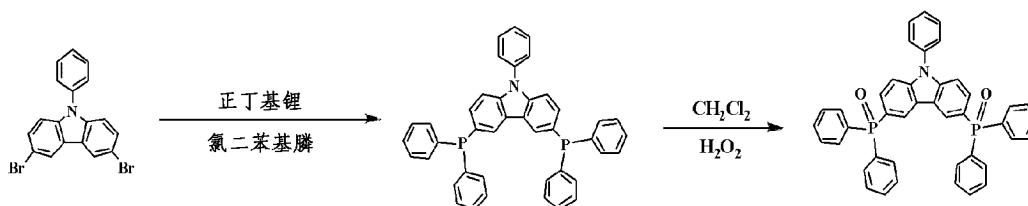
[0301] 将 30mL 四氢呋喃加到 2g 3- 溴 -9- 苯基咔唑中, 温度调节到  $-78^{\circ}\text{C}$ 。然后, 缓慢滴加 0.8mL 丁基锂。在保持该温度的同时, 将混合物搅拌 2 小时, 缓慢滴加 1.5mL 氯二苯基磷, 其后混合物的温度升至室温。反应完成后, 加入甲醇, 搅拌反应混合物, 萃取, 然后干燥溶剂。向得到的固体中加入二氯甲烷, 在搅拌混合物的同时, 加入少量过氧化氢, 得到 3-(二苯基磷酰基)-9- 苯基咔唑 (PP01), 白色氧化磷, 对应于具有所示化学式代表的结构的化合物 1。玻璃化转变温度为  $74^{\circ}\text{C}$ , 沸点为  $201^{\circ}\text{C}$ 。

[0302] 进行核磁共振分析和质谱分析, 分析结果如下。

[0303]  $^1\text{H NMR}$ - $^1\text{H}$  (200MHz,  $\text{CDCl}_3$ ) :  $\delta$  8.59-8.53 (d, 1H), 8.12-8.08 (d, 1H), 7.78-7.68 (m, 5H), 7.62-7.42 (m, 14H), 7.35-7.31 (d, 1H)。MS (FAB)  $m/z$  443.48 [ $(\text{M}+1)^+$ ]。

[0304] 制备例 13. 合成化合物 2

[0305]



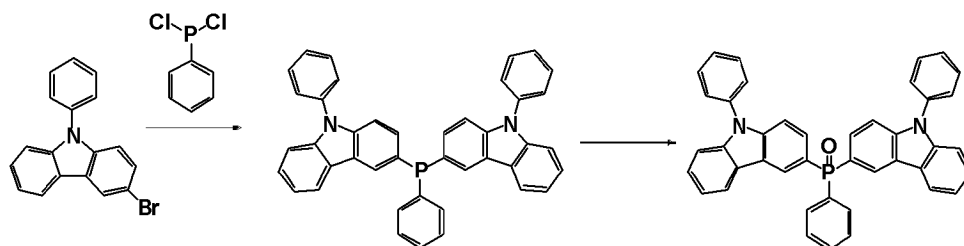
[0306] 将 30mL 四氢呋喃加到 2g 3,6- 二溴 -9- 苯基 - 咔唑中, 温度调节到  $-78^{\circ}\text{C}$ 。然后, 缓慢滴加 0.84mL 丁基锂。在保持该温度的同时, 将混合物搅拌 2 小时, 缓慢滴加 2.42g 氯二苯基磷, 其后混合物的温度升至室温。反应完成后, 加入甲醇, 搅拌反应混合物, 萃取, 然后干燥溶剂。向得到的固体中加入二氯甲烷, 在搅拌混合物的同时, 加入少量过氧化氢, 得到具有化合物 2 的结构 3,6- 双 (二苯基磷酰基)-9- 苯基咔唑 (PP02), 白色氧化磷。玻璃化转变温度为  $123^{\circ}\text{C}$ , 沸点为  $255^{\circ}\text{C}$ 。

[0307] 进行核磁共振分析和质谱分析, 分析结果如下。

[0308]  $^1\text{H NMR}$ - $^1\text{H}$  (200MHz,  $\text{CDCl}_3$ ) :  $\delta$  8.48-8.41 (d, 3H), 7.76-7.64 (m, 8H), 7.59-7.54 (m, 7H), 7.52-7.42 (m, 13H)。MS (FAB)  $m/z$  643.65 [ $(\text{M}+1)^+$ ]。

[0309] 制备例 14. 合成化合物 3

[0310]



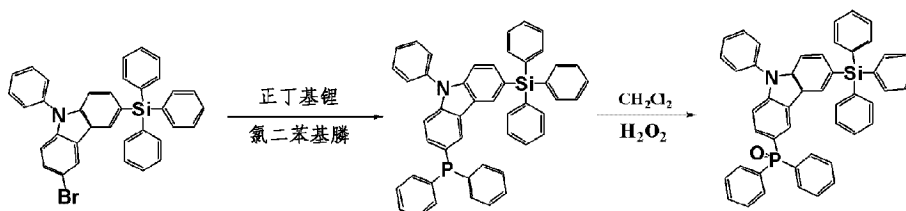
[0311] 将 30mL 四氢呋喃加到 2g 3-溴-9-苯基咪唑中, 温度调节到  $-78^{\circ}\text{C}$ 。然后, 缓慢滴加 1.6mL 丁基锂。在保持该温度的同时, 将混合物搅拌 2 小时, 缓慢滴加 3.0mL 二氯苯基膦, 其后混合物的温度升至室温。反应完成后, 加入甲醇, 搅拌反应混合物, 萃取, 然后干燥溶剂。向得到的固体中加入二氯甲烷, 在搅拌混合物的同时, 加入少量过氧化氢, 得到 3, 3'-(苯基膦酰基) 双(9-苯基-9-咪唑), 白色氧化膦, 对应于具有所示化学式代表的结构的化合物 3。

[0312] 进行核磁共振分析和质谱分析, 分析结果如下。

[0313]  $^1\text{H NMR}$ - $^1\text{H}$  (200MHz,  $\text{CDCl}_3$ ):  $\delta$  8.59-8.53 (d, 2H), 8.12-8.08 (m, 4H), 7.89-7.80 (d, 2H), 7.62-7.42 (m, 15H), 7.35-7.31 (m, 4H)。MS (FAB)  $m/z$  608.67  $[(M+1)^+]$ 。

[0314] 制备例 15. 合成化合物 9

[0315]



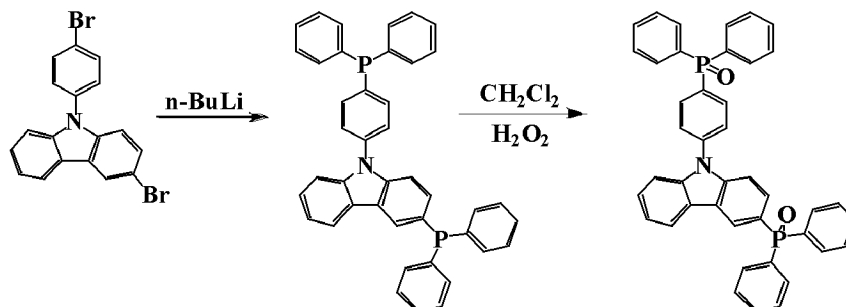
[0316] 将 30mL 四氢呋喃加到 2.57g 3-溴-9-苯基-6-(三苯基甲硅烷基)-9-咪唑中, 温度调节到  $-78^{\circ}\text{C}$ 。然后, 缓慢滴加 0.57mL 丁基锂。在保持该温度的同时, 将混合物搅拌 2 小时, 缓慢滴加 1.06mL 氯二苯基膦, 其后混合物的温度升至室温。反应完成后, 加入甲醇, 搅拌反应混合物, 萃取, 然后干燥溶剂。向得到的固体中加入二氯甲烷, 在搅拌混合物的同时, 加入少量过氧化氢, 得到具有化合物 9 的结构的 3-(二苯基膦酰基)-9-苯基-6-(三苯基甲硅烷基)-9-咪唑 (PP023), 白色氧化膦。玻璃化转变温度为  $97.5^{\circ}\text{C}$ 。

[0317] 进行核磁共振分析和质谱分析, 分析结果如下。

[0318]  $^1\text{H NMR}$ - $^1\text{H}$  (200MHz,  $\text{CDCl}_3$ ):  $\delta$  8.59-8.32 (d, 3H), 7.73-7.67 (m, 5H), 7.63-7.58 (m, 8H), 7.56-7.40 (m, 13H), 7.36-7.33 (m, 7H)。MS (FAB)  $m/z$  701.86  $[(M+1)^+]$ 。

[0319] 制备例 16. 合成化合物 28

[0320]



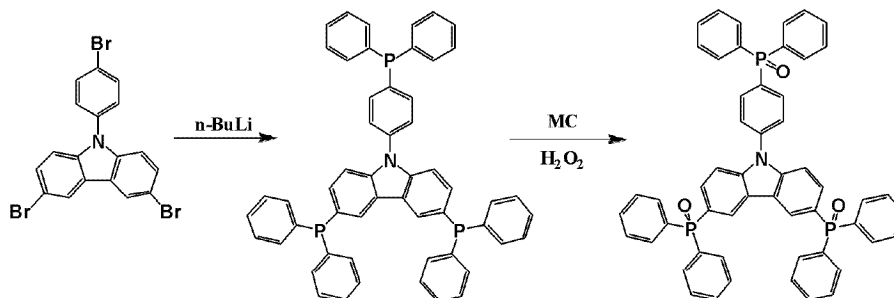
[0321] 将 30mL 四氢呋喃加到 2.5g 3-溴-9-(4-溴苯基)咪唑中, 温度调节到  $-78^{\circ}\text{C}$ 。然后, 缓慢滴加 1.44mL 丁基锂。在保持该温度的同时, 将混合物搅拌 2 小时, 缓慢滴加 2.66mL 氯二苯基膦, 其后混合物的温度升至室温。反应完成后, 加入甲醇, 搅拌反应混合物, 萃取, 然后干燥溶剂。向得到的固体中加入二氯甲烷, 在搅拌混合物的同时, 加入少量过氧化氢, 得到具有化合物 28 的结构的 3-(二苯基膦酰基)-9-(4-二苯基膦酰基)苯基咪唑 (PP021), 白色氧化膦。玻璃化转变温度为  $111^{\circ}\text{C}$ 。

[0322] 进行核磁共振分析和质谱分析,分析结果如下。

[0323] NMR-<sup>1</sup>H(200MHz, CDCl<sub>3</sub>) : δ 8.59-8.53(d, 1H), 8.11-7.97(d, 3H), 7.93-7.71(m, 10H), 7.67(m, 3H), 7.60-7.45(m, 12H), 7.36-7.26(m, 2H)。MS(FAB)m/z 643[(M+1)<sup>+</sup>]。

[0324] 制备例 17. 合成化合物 30

[0325]



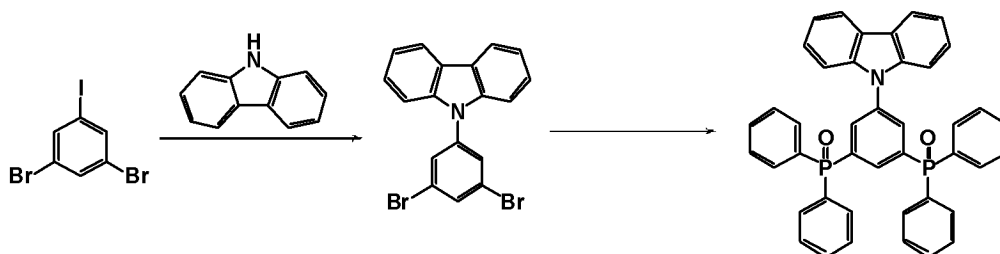
[0326] 将 30mL 四氢呋喃加到 2g 3,6-二溴-9-(4-溴苯基)咔唑中,温度调节到 -78℃。然后,缓慢滴加 2.5mL 丁基锂。在保持该温度的同时,将混合物搅拌 2 小时,缓慢滴加 5.06g 氯二苯基膦,其后混合物的温度升至室温。反应完成后,加入甲醇,搅拌反应混合物,萃取,然后干燥溶剂。向得到的固体中加入二氯甲烷,在搅拌混合物的同时,加入少量过氧化氢,得到具有以上结构的 3,6-双(二苯基膦酰基)-9-(4-二苯基膦酰基)-9-咔唑 (PPO3),白色氧化膦。

[0327] 进行核磁共振分析和质谱分析,分析结果如下。

[0328] NMR-<sup>1</sup>H(200MHz, CDCl<sub>3</sub>) : δ 7.98-7.94(d, 3H), 7.77-7.64(m, 14H), 7.63-7.54(m, 3H), 7.52-7.45(m, 20H)。MS(FAB)m/z 843.8[(M+1)<sup>+</sup>]。

[0329] 制备例 18. 合成化合物 31

[0330]



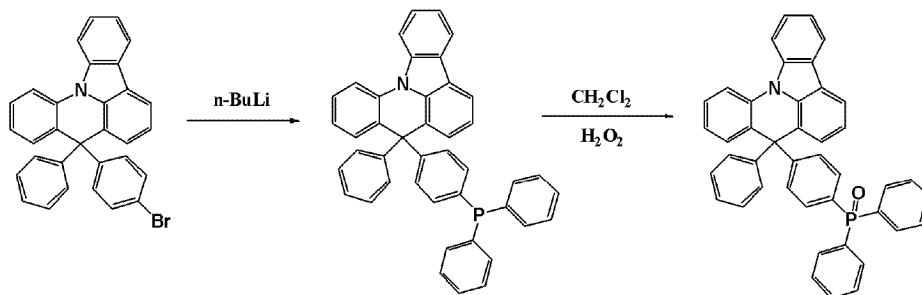
[0331] 将 30mL 四氢呋喃加到 2g 9-(3,5-二溴苯基)-9-咔唑中,温度调节到 -78℃。然后,缓慢滴加 1.14mL 丁基锂。在保持该温度的同时,将混合物搅拌 2 小时,缓慢滴加 2.32g 氯二苯基膦,其后混合物的温度升至室温。反应完成后,加入甲醇,搅拌反应混合物,萃取,然后干燥溶剂。向得到的固体中加入二氯甲烷,在搅拌混合物的同时,加入少量过氧化氢,得到具有以上结构的 9-(3,5-双(二苯基膦酰基)苯基)-9-咔唑,白色氧化膦。

[0332] 进行核磁共振分析和质谱分析,分析结果如下。

[0333] NMR-<sup>1</sup>H(200MHz, CDCl<sub>3</sub>) : δ 8.55-8.52(d, 1H), 8.12-8.10(d, 1H), 7.94-7.95(d, 1H), 7.80-7.75(m, 8H), 7.63-7.42(m, 20H)。MS(FAB)m/z 643.65[(M+1)<sup>+</sup>]。

[0334] 制备例 19. 合成化合物 103

[0335]



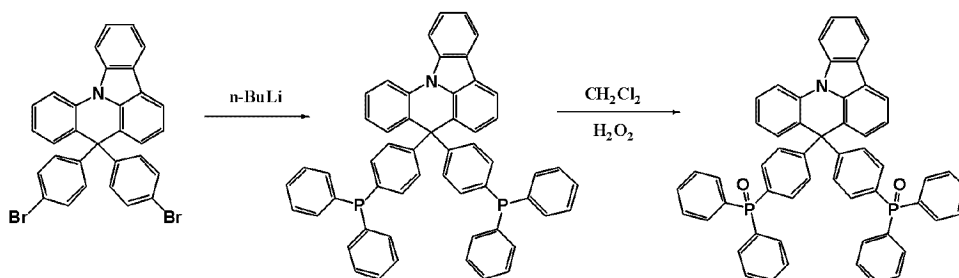
[0336] 将 30mL 四氢呋喃加到 1g 8-(4-溴苯基)-8H-吲哚并 [3,2,1] 吡啶中, 温度调节到  $-78^{\circ}\text{C}$ 。然后, 缓慢滴加 1.069mL 丁基锂。在保持该温度的同时, 将混合物搅拌 2 小时, 缓慢滴加 0.589g 氯二苯基膦, 其后混合物的温度升至室温。反应完成后, 加入甲醇, 搅拌反应混合物, 萃取, 然后干燥溶剂。向得到的固体中加入二氯甲烷, 在搅拌混合物的同时, 加入少量过氧化氢, 得到具有以上结构的 8-(4-二苯基膦酰基) 苯基)-8H-吲哚并 [3,2,1] 吡啶, 白色氧化膦。

[0337] 进行核磁共振分析和质谱分析, 分析结果如下。

[0338] NMR- $^1\text{H}$  (200MHz,  $\text{CDCl}_3$ ) :  $\delta$  8.48-8.46 (d, 1H), 8.21-8.18 (d, 1H), 7.98-7.93 (m, 4H), 7.77-7.65 (m, 3H), 7.55-7.23 (m, 20H), 7.13-7.10 (d, 1H)。MS (FAB)  $m/z$  607.68 [ $(\text{M}+1)^+$ ]。

[0339] 制备例 20. 合成化合物 132

[0340]



[0341] 将 30mL 四氢呋喃加到 1g 8,8-双(4-溴苯基)-8H-吲哚并 [3,2,1] 吡啶中, 温度调节到  $-78^{\circ}\text{C}$ 。然后, 缓慢滴加 1.627mL 丁基锂。在保持该温度的同时, 将混合物搅拌 2 小时, 缓慢滴加 0.895g 氯二苯基膦, 其后混合物的温度升至室温。反应完成后, 加入甲醇, 搅拌反应混合物, 萃取, 然后干燥溶剂。向得到的固体中加入二氯甲烷, 在搅拌混合物的同时, 加入少量过氧化氢, 得到具有以上结构的 8,8-双(4-二苯基膦酰基) 苯基)-8H-吲哚并 [3,2,1] 吡啶, 白色氧化膦。

[0342] 进行核磁共振分析和质谱分析, 分析结果如下。

[0343] NMR- $^1\text{H}$  (200MHz,  $\text{CDCl}_3$ ) :  $\delta$  8.48-8.46 (d, 1H), 8.21-8.18 (d, 1H), 7.98-7.93 (m, 13H), 7.55-7.10 (m, 23H), 7.13-7.10 (d, 1H)。MS (FAB)  $m/z$  807.85 [ $(\text{M}+1)^+$ ]。

[0344] 实施例 1

[0345] 在根据本发明的制备例 12 中, 合成具有咪唑结构的二苯基氧化膦化合物 (化合物 1), 作为具有咪唑结构和氧化膦结构的化合物。

[0346] 化合物 1 表现出为 3.02eV 的三重态能量, HOMO 能级为 6.16eV, LUMO 能级为 2.6eV。为了将该化合物作为主体使用, 使用作为蓝色掺杂剂的 FCNIr 形成蓝色磷光器件。使用表 1 中的化合物 1, 制作有机 EL 器件。器件的结构是 ITO/DNTPD (60nm)/NPD (20nm)/mCP (10nm)/

化合物 1 :FCNIr (30nm, 15% )/Bphen (20nm)/LiF/Al。

[0347] 按以下方式制作器件。具体而言,在纯水和异丙醇中超声处理 30min 来洗涤 ITO 基板,使用短波长紫外光处理 ITO 基板的表面,然后在  $1 \times 10^{-6}$  torr 的压力下将有机材料气相沉积在其上。以 0.1nm/s 的速率气相沉积 DNTPD、NPD、mCP 和 Bphen,从而形成具有相应厚度的各膜,将化合物 1 与 FCNIr 掺杂剂一起气相沉积。这样,以 0.1nm/s 的速率气相沉积化合物 1,以 0.015nm/s 的速率气相沉积 FCNIr。以 0.1nm/s 的速率将 LiF 形成至厚度 1nm,以 0.5nm/s 的沉积速率将 Al 形成至厚度 100nm。使用 CaO 干燥剂和防护玻璃罩密封这样得到的器件。

[0348] 这样制作的蓝色有机 EL 器件的量子效率和色坐标示于表 23。根据 Forrest 的文献描述 (G. Gu 和 S. R. Forrest, IEEE Journal of Selected Topics in Quantum Electronics, Vol. 4, No. 1, January/February 1998, p. 83-99),测量实施例 1 ~ 9 以及比较例 1 和 2 的量子效率。本发明中制作的蓝色有机 EL 器件表现出为 11.1% 的最大量子效率。量子效率绘制于图 2。色坐标为 (0.14, 0.15)。

#### [0349] 实施例 2

[0350] 使用作为已知的蓝色掺杂剂的 FCNIr 形成包含本发明中合成的化合物 2 的蓝色磷光器件。该化合物表现出为 3.03eV 的三重态能量, HOMO 能级为 6.31eV, LUMO 能级为 2.77eV。器件的结构是 ITO/DNTPD (60nm)/NPD (20nm)/mCP (10nm)/ 化合物 2 :FCNIr (30nm, 15% )/Bphen (20nm)/LiF/Al。按与实施例 1 中相同方式制作器件,除了使用化合物 2 代替化合物 1。

[0351] 本发明中制作的蓝色有机 EL 器件表现出为 18.4% 的最大量子效率。量子效率绘制于图 3。色坐标为 (0.14, 0.15)。

#### [0352] 实施例 3

[0353] 使用作为已知的蓝色掺杂剂的 FCNIr 形成包含本发明中合成的化合物 3 的蓝色磷光器件。。该化合物表现出为 3.0eV 的三重态能量, HOMO 能级为 5.92eV, LUMO 能级为 2.4eV。器件的结构是 ITO/DNTPD (60nm)/NPD (20nm)/mCP (10nm)/ 化合物 3 :FCNIr (30nm, 15% )/Bphen (20nm)/LiF/Al。按与实施例 1 中相同方式制作器件,除了使用化合物 3 代替化合物 1。

[0354] 本发明中制作的蓝色有机 EL 器件表现出为 7.95% 的最大量子效率。量子效率绘制于图 4。色坐标为 (0.14, 0.17)。

#### [0355] 实施例 4

[0356] 使用作为已知的蓝色掺杂剂的 FCNIr 形成包含本发明中合成的化合物 9 的蓝色磷光器件。该化合物表现出为 3.02eV 的三重态能量, HOMO 能级为 5.92eV, LUMO 能级为 2.4eV。器件的结构是 ITO/DNTPD (60nm)/NPD (20nm)/mCP (10nm)/ 化合物 9 :FCNIr (30nm, 15% )/Bphen (20nm)/LiF/Al。按与实施例 1 中相同方式制作器件,除了使用化合物 9 代替化合物 1。

[0357] 本发明中制作的蓝色有机 EL 器件表现出为 6.91% 的最大量子效率。量子效率绘制于图 5。色坐标为 (0.14, 0.17)。

#### [0358] 实施例 5

[0359] 使用作为已知的蓝色掺杂剂的 FCNIr 形成包含本发明中合成的化合物 28 (PP021)

的蓝色磷光器件。该化合物表现出为 3.01eV 的三重态能量, HOMO 能级为 6.18eV, LUMO 能级为 2.61eV。器件的结构是 ITO/DNTPD(60nm)/NPD(20nm)/mCP(10nm)/化合物 28: FCNIr(30nm, 15%)/Bphen(20nm)/LiF/Al。按与实施例 1 中相同方式制作器件, 除了使用化合物 28 代替化合物 1。

[0360] 本发明中制作的蓝色有机 EL 器件表现出为 17.4% 的最大量子效率。量子效率绘制于图 6。色坐标为 (0.14, 0.15)。

#### [0361] 实施例 6

[0362] 使用作为已知的蓝色掺杂剂的 FCNIr 形成包含本发明中合成的化合物 30 (PP03) 的蓝色磷光器件。该化合物表现出为 3.03eV 的三重态能量, HOMO 能级为 6.23eV, LUMO 能级为 2.65eV。器件的结构是 ITO/DNTPD(60nm)/NPD(20nm)/mCP(10nm)/化合物 30: FCNIr(30nm, 15%)/Bphen(20nm)/LiF/Al。按与实施例 1 中相同方式制作器件, 除了使用化合物 30 代替化合物 1。

[0363] 本发明中制作的蓝色有机 EL 器件表现出为 18.6% 的最大量子效率。量子效率绘制于图 7。色坐标为 (0.15, 0.15)。

#### [0364] 实施例 7

[0365] 使用作为已知的蓝色掺杂剂的 FCNIr 形成包含本发明中合成的化合物 31 (PP04) 的蓝色磷光器件。该化合物表现出为 3.01eV 的三重态能量, HOMO 能级为 6.22eV, LUMO 能级为 2.59eV。器件的结构是 ITO/DNTPD(60nm)/NPD(20nm)/mCP(10nm)/化合物 31: FCNIr(30nm, 15%)/Bphen(20nm)/LiF/Al。按与实施例 1 中相同方式制作器件, 除了使用化合物 31 代替化合物 1。

[0366] 本发明中制作的蓝色有机 EL 器件表现出为 16.8% 的最大量子效率。量子效率绘制于图 8。色坐标为 (0.14, 0.15)。

#### [0367] 实施例 8

[0368] 使用作为已知的蓝色掺杂剂的 FCNIr 形成包含本发明中合成的化合物 103 的蓝色磷光器件。该化合物表现出为 2.96eV 的三重态能量, HOMO 能级为 6.03eV, LUMO 能级为 2.59eV。器件的结构是 ITO/DNTPD(60nm)/NPD(20nm)/mCP(10nm)/化合物 103: FCNIr(30nm, 15%)/Bphen(20nm)/LiF/Al。按与实施例 1 中相同方式制作器件, 除了使用化合物 103 代替化合物 1。

[0369] 本发明中制作的蓝色有机 EL 器件表现出为 14.5% 的最大量子效率。量子效率绘制于图 9。色坐标为 (0.15, 0.17)。

#### [0370] 实施例 9

[0371] 使用作为已知的蓝色掺杂剂的 FCNIr 形成包含本发明中合成的化合物 132 的蓝色磷光器件。该化合物表现出为 2.97eV 的三重态能量, HOMO 能级为 6.01eV, LUMO 能级为 2.63eV。器件的结构是 ITO/DNTPD(60nm)/NPD(20nm)/mCP(10nm)/化合物 132: FCNIr(30nm, 15%)/Bphen(20nm)/LiF/Al。按与实施例 1 中相同方式制作器件, 除了使用化合物 132 代替化合物 1。

[0372] 本发明中制作的蓝色有机 EL 器件表现出为 15.2% 的最大量子效率。量子效率绘制于图 10。色坐标为 (0.15, 0.16)。

#### [0373] 比较例 1

[0374] 制作具有结构 ITO/DNTPD(60nm)/NPD(20nm)/mCP(10nm)/mCP:FCNIr(30nm, 15%)/BCP(5nm)/Alq<sub>3</sub>(20nm)/LiF/Al 的代表性已知器件。按与实施例 1 中相同方式制作器件,除了使用蓝色磷光材料 mCP 代替化合物 1 作为发光层的主体材料,并且使用 BCP/Alq<sub>3</sub> 代替 Bphen 作为电子输送层的材料。

[0375] 该蓝色磷光器件表现出为 6.87% 的低量子效率。量子效率绘制于图 11。色坐标为 (0.15,0.22)。

[0376] 比较例 2

[0377] 制作具有结构 ITO/DNTPD(60nm)/NPD(20nm)/mCP(10nm)/mCP:FCNIr(30nm, 15%)/Bphen(20nm)/LiF/Al 的代表性已知器件。按与实施例 1 中相同方式制作器件,除了使用 mCP 代替化合物 1。

[0378] 该蓝色磷光器件表现出为 9.06% 的低量子效率。量子效率绘制于图 12。色坐标为 (0.14,0.16)。

[0379] 表 23

[0380] 比较例和实施例的器件特性的比较

[0381]

	量子效率 (%)	色坐标
实施例 1	11.1	(0.14,0.15)
实施例 2	18.4	(0.14,0.15)
实施例 3	7.95	(0.14,0.17)
实施例 4	6.91	(0.14,0.17)
实施例 5	17.4	(0.14,0.15)
实施例 6	18.6	(0.15,0.15)
实施例 7	16.8	(0.14,0.15)
实施例 8	14.5	(0.15,0.17)
实施例 9	15.2	(0.15,0.16)
比较例 1	6.87	(0.15,0.22)
比较例 2	9.06	(0.14,0.16)

[0382] 工业实用性

[0383] 如上所述,本发明采用了唑系氧化磷化合物,从而可以提供有机 EL 器件,解决了常规有机 EL 器件的热不稳定和低效率的问题,此外在纯蓝色磷光器件中实现了优异的效率特性。

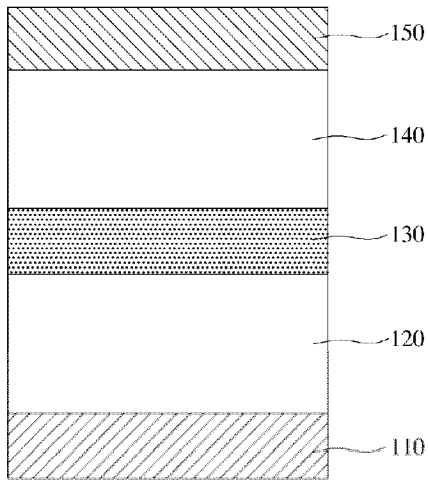


图 1

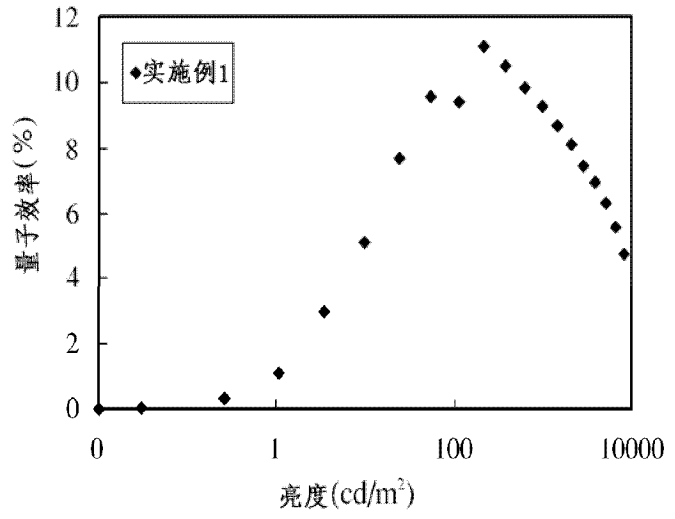


图 2

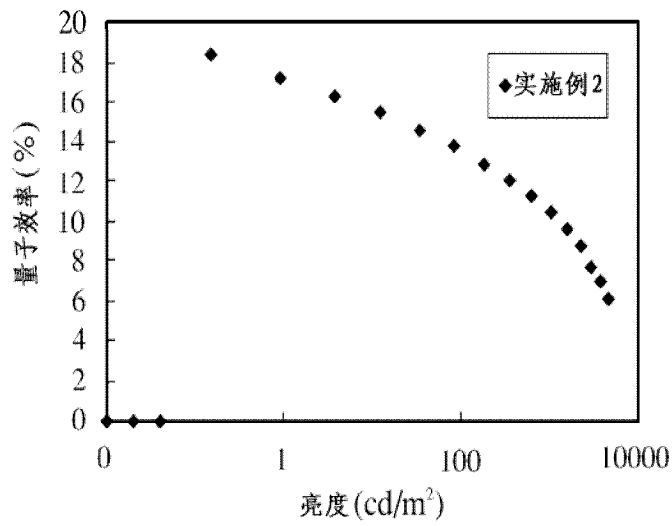


图 3

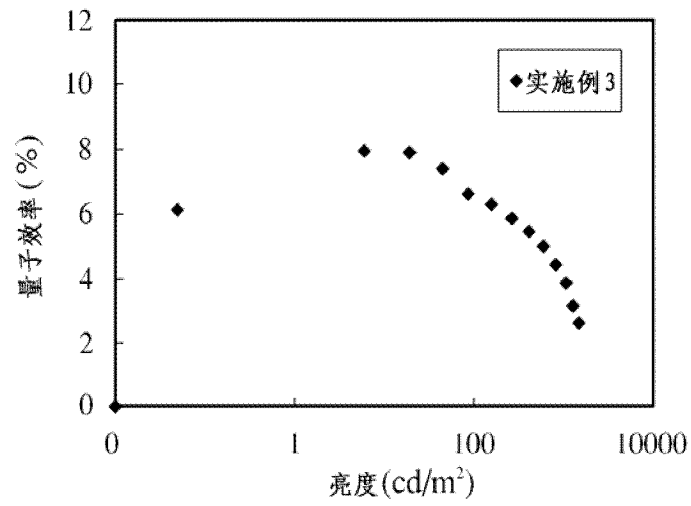


图 4

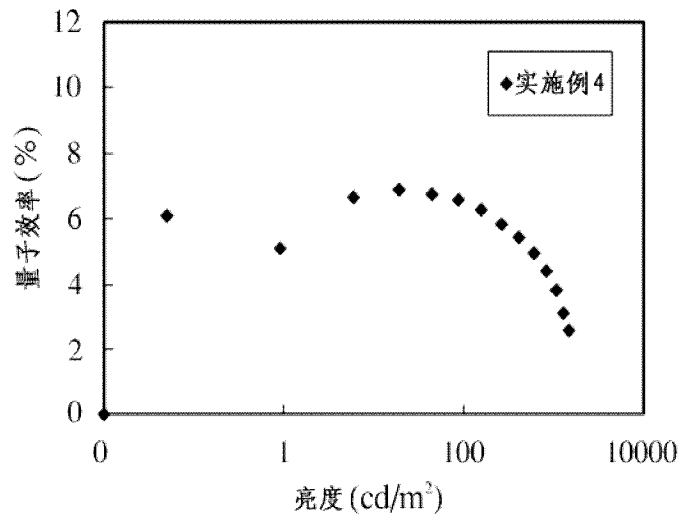


图 5

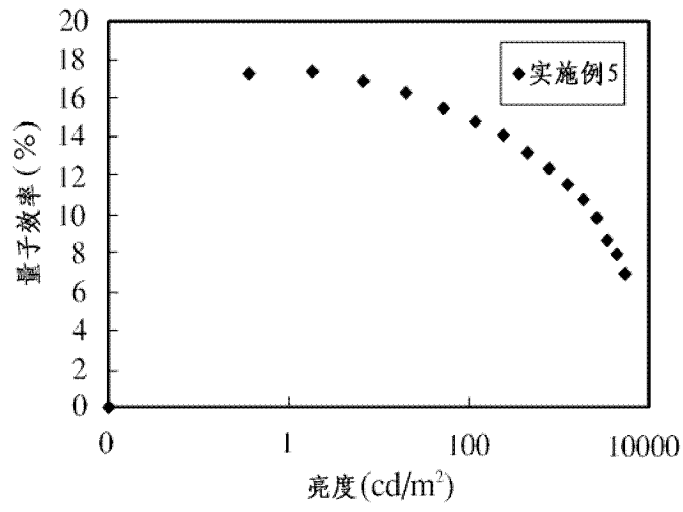


图 6

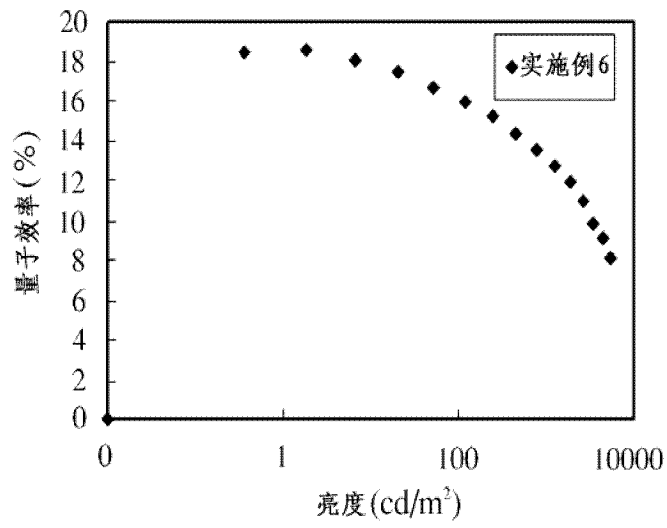


图 7

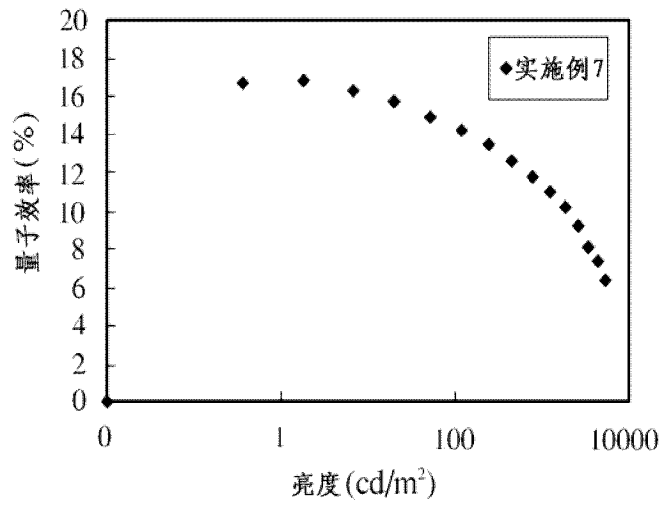


图 8

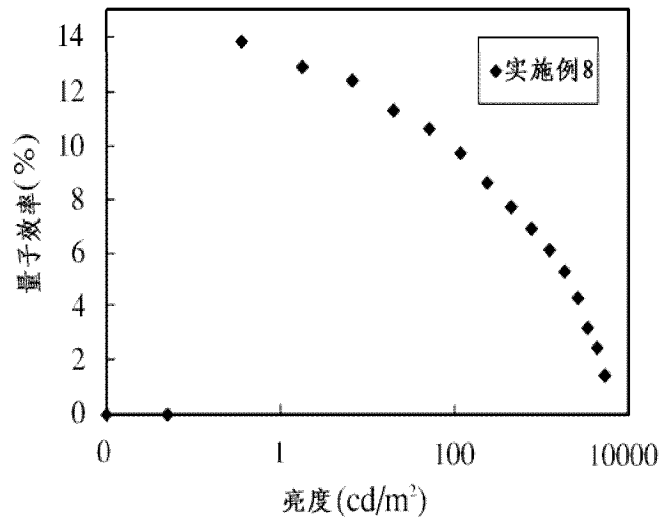


图 9

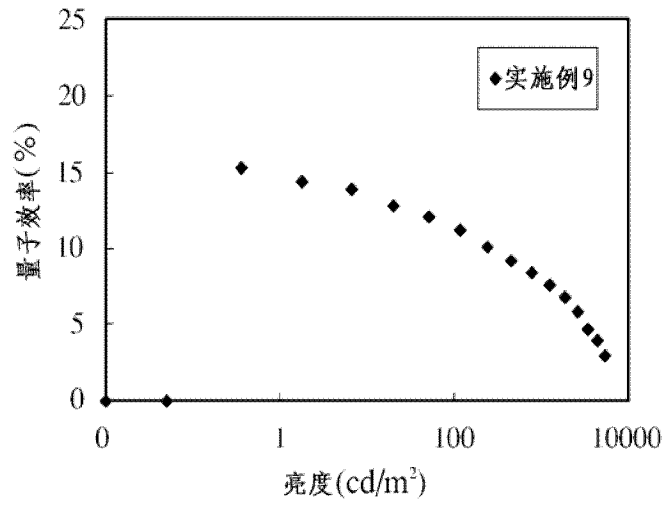


图 10

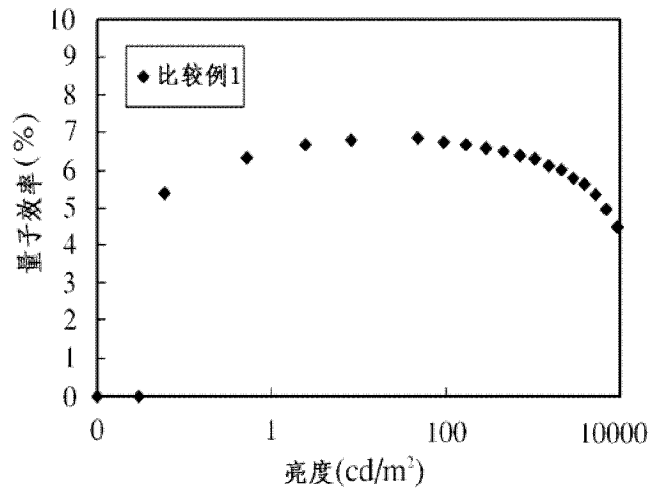


图 11

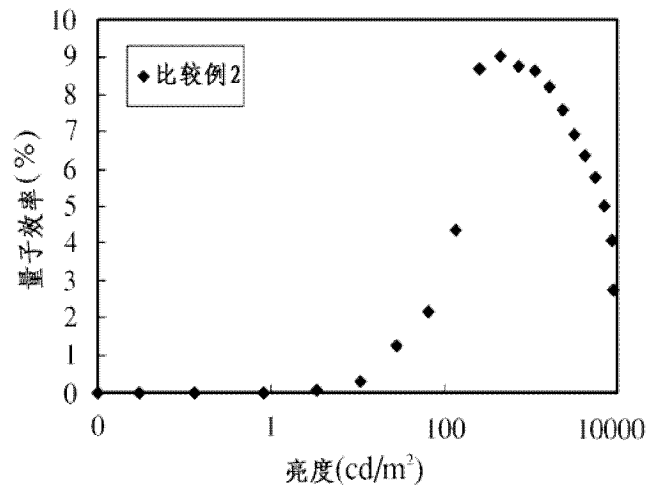


图 12

专利名称(译)	咪唑系氧化磷化合物和包含该化合物的有机电致发光器件		
公开(公告)号	<a href="#">CN102439111B</a>	公开(公告)日	2015-02-11
申请号	CN200980159451.7	申请日	2009-11-16
[标]申请(专利权)人(译)	檀国大学校产学协力团		
申请(专利权)人(译)	檀国大学校产学协力团		
当前申请(专利权)人(译)	SK化学株式会社		
[标]发明人	李俊焯 田顺玉 陆庚修 金娱永		
发明人	李俊焯 田顺玉 陆庚修 金娱永		
IPC分类号	C09K11/06 C07F9/28 H01L51/54 H01L27/32		
CPC分类号	C09K2211/1022 C09K2211/1011 H01L51/0072 C07F9/5728 C09K2211/1029 H01L51/0085 H01L51/0094 C09K2211/1007 H05B33/14 C09K11/06 C09K2211/1088 C09K2211/1014 C09K2211/1044 H01L51/0081 H01L51/5016 H01L51/5012		
代理人(译)	梁兴龙 张淑珍		
审查员(译)	张慧慧		
优先权	1020090104025 2009-10-30 KR 1020090046425 2009-05-27 KR		
其他公开文献	CN102439111A		
外部链接	<a href="#">Espacenet</a> <a href="#">SIPO</a>		

摘要(译)

本发明涉及一种咪唑系氧化磷化合物和包含该化合物的有机电致发光器件。根据本发明，提供的有机电致发光器件用的化合物能够改善作为有机电致发光器件用的已知化合物问题的热不稳定和低效率特性，特别地，通过使用有机电致发光器件用的咪唑系氧化磷化合物，可以在纯蓝色磷光器件中实现优异的效率特性，还提供有机电致发光器件。根据本发明的一个方面，提供有机电致发光器件用的咪唑系氧化磷化合物，还提供能够实现热稳定性和高效率特性的包含该化合物的有机电致发光器件。

