

(19) 日本国特許庁 (JP)

(12) 特 許 公 報 (B2)

(11) 特許番号

特許第6679092号

(P6679092)

(45) 発行日 令和2年4月15日 (2020.4.15)

(24) 登録日 令和2年3月23日 (2020.3.23)

(51) Int.Cl.

F I

C O 7 D 491/052 (2006.01)

C O 7 D 491/052 C S P

C O 7 D 495/04 (2006.01)

C O 7 D 495/04 1 1 1

C O 7 F 9/6561 (2006.01)

C O 7 F 9/6561 Z

C O 9 K 11/06 (2006.01)

C O 9 K 11/06 6 9 O

H O 1 L 51/50 (2006.01)

H O 5 B 33/14 B

請求項の数 16 (全 301 頁) 最終頁に続く

(21) 出願番号 特願2018-535280 (P2018-535280)
 (86) (22) 出願日 平成29年1月26日 (2017.1.26)
 (65) 公表番号 特表2019-505513 (P2019-505513A)
 (43) 公表日 平成31年2月28日 (2019.2.28)
 (86) 国際出願番号 PCT/KR2017/000982
 (87) 国際公開番号 W02017/131483
 (87) 国際公開日 平成29年8月3日 (2017.8.3)
 審査請求日 平成30年7月20日 (2018.7.20)
 (31) 優先権主張番号 10-2016-0010112
 (32) 優先日 平成28年1月27日 (2016.1.27)
 (33) 優先権主張国・地域又は機関
 韓国 (KR)

(73) 特許権者 500239823
 エルジー・ケム・リミテッド
 大韓民国 07336 ソウル, ヨンドウ
 ンポグ, ヨイーデロ 128
 (74) 代理人 110000877
 龍華国際特許業務法人
 (72) 発明者 チャ、ヨンブム
 大韓民国・ソウル・ヨンドウンポグ・ヨ
 イーデロ・128 エルジー・ケム・リミ
 テッド内
 (72) 発明者 ホン、スン キル
 大韓民国・ソウル・ヨンドウンポグ・ヨ
 イーデロ・128 エルジー・ケム・リミ
 テッド内

最終頁に続く

(54) 【発明の名称】 スピロ型化合物およびこれを含む有機電子素子

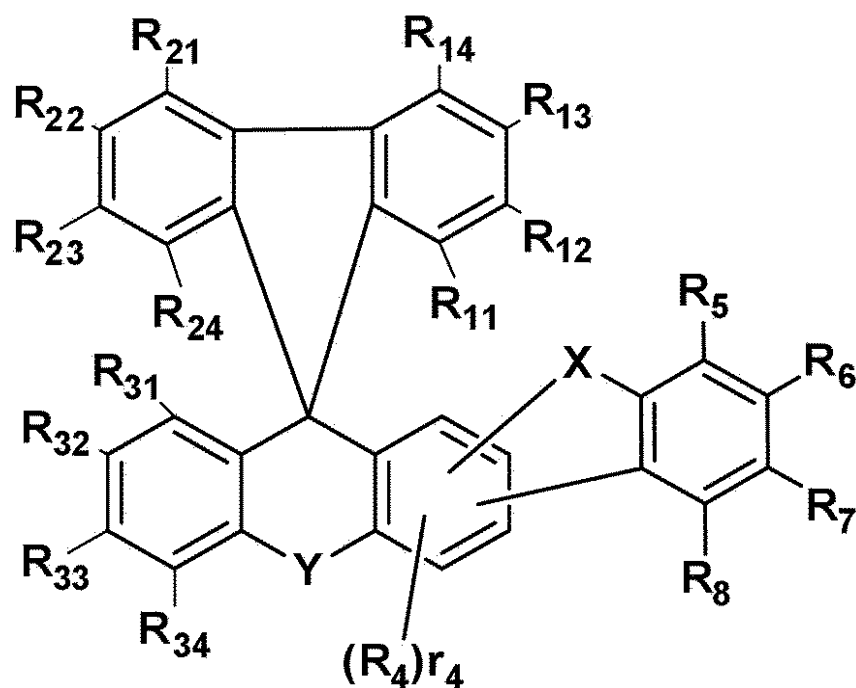
(57) 【特許請求の範囲】

【請求項 1】

下記化学式 1 で表されるスピロ型化合物：

〔化学式 1〕

【化 1】



前記化学式 1 において、

Xは、NR₉であり、

Yは、OまたはSであり、

R_9 は、 $\overline{-L_1 A r_1}$ であり、

L₁ は、直接結合であり、

R₅ ~ R₈ は、互いに同一または異なり、それぞれ独立に、水素であるか、互いに隣接する基と互いに結合して環を形成してもよく、

A r₁ は、アリール基またはヘテロアリール基であって、前記アリール基および前記ヘテロアリール基は、ハロゲン基、シアノ基、アルキル基、アリール基、アリール基で置換されたアミン基、カルバゾール基、ホスフィンオキシド基、アリール基で置換されたトリアジン基、アリール基で置換されたピリミジン基、およびアリール基で置換されたピリジン基からなる群から選択された置換基で置換または非置換であり、

$R_{4,1}, R_{1,1} \sim R_{1,4}, R_{2,1} \sim R_{2,4}$, および $R_{3,1} \sim R_{3,4}$ は、水素であり、

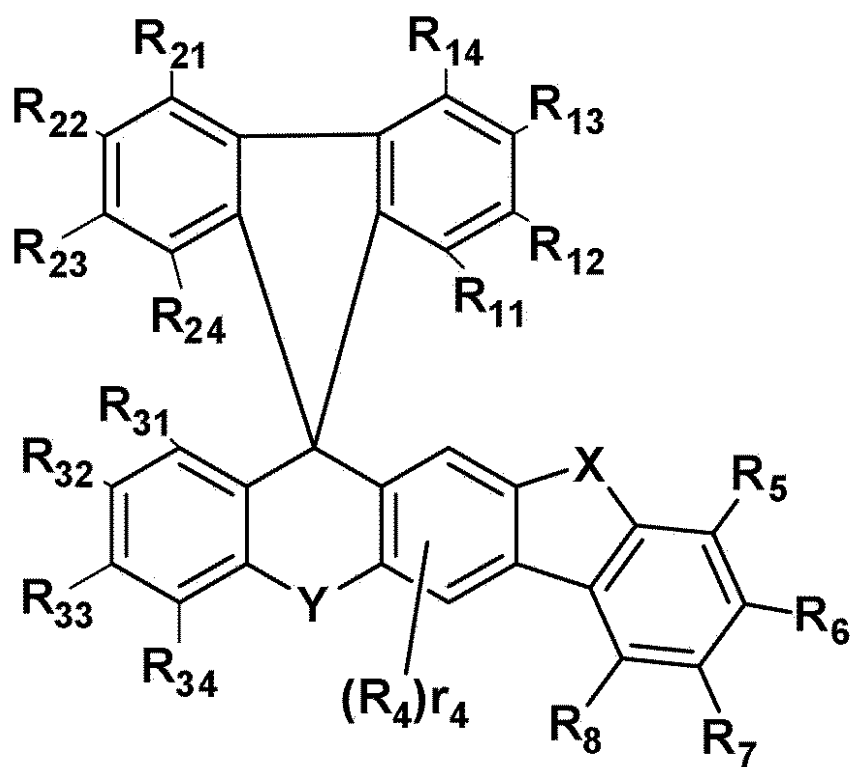
r_4 は、1 または 2 の整数である。

【請求項 2】

前記化学式 1 は、下記化学式 2～5 のうちのいずれか 1 つで表される請求項 1 に記載のスピロ型化合物：

[化学式 2]

【化 2】

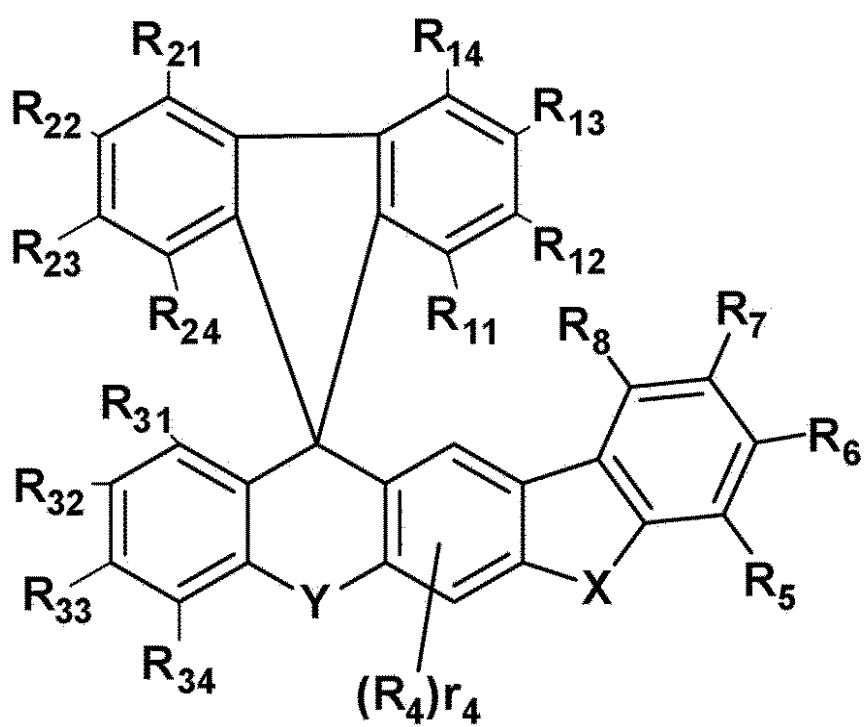


10

20

〔化学式 3〕

【化 3】

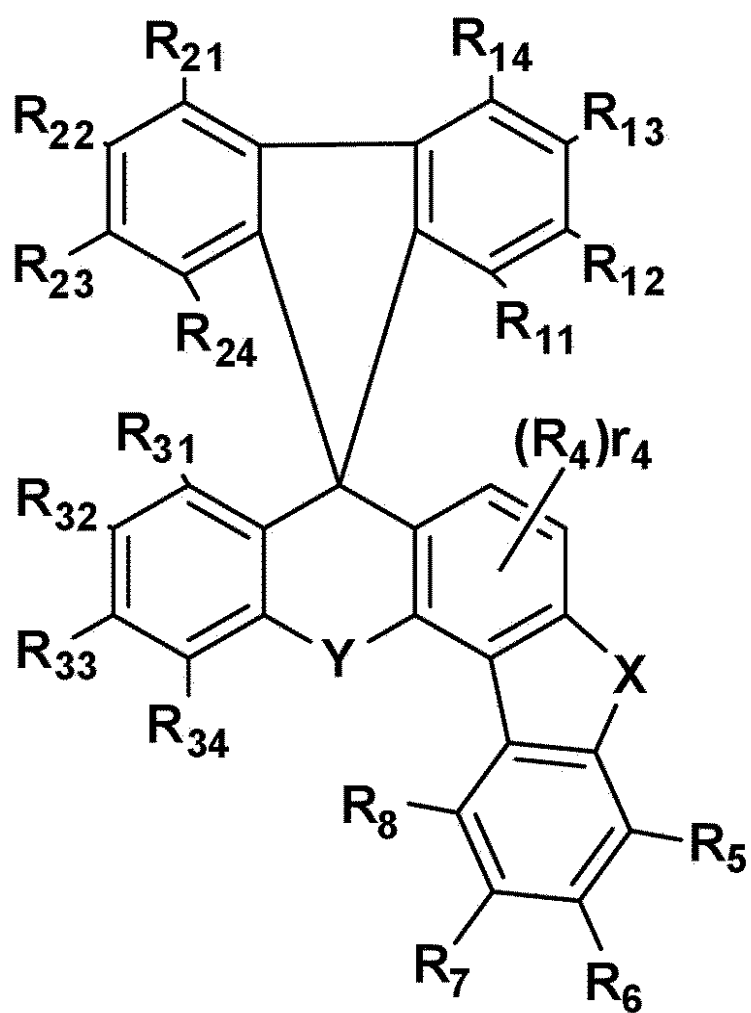


30

40

〔化学式 4〕

【化 4】



〔化学式 5〕

10

20

30

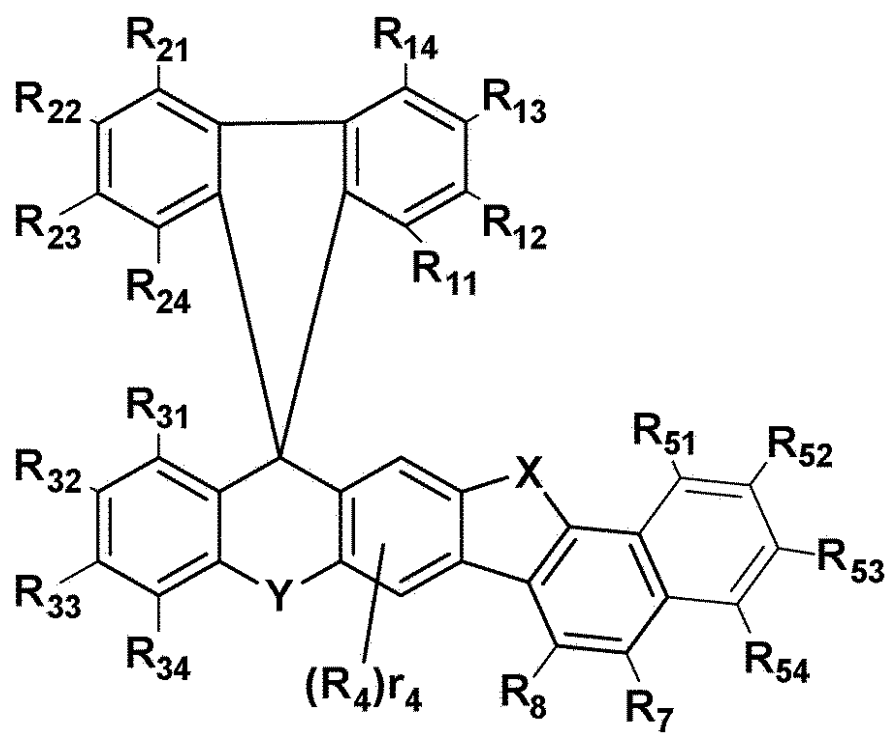
10



30

[化学式 6]

【化 6】

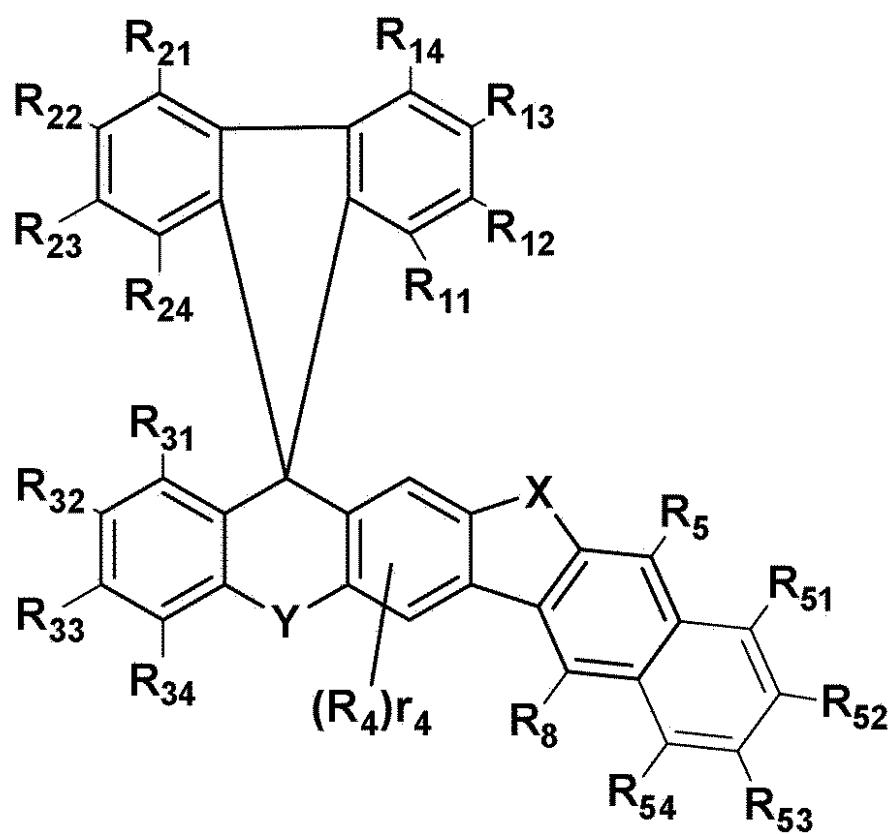


10

20

〔化学式 7〕

【化 7】

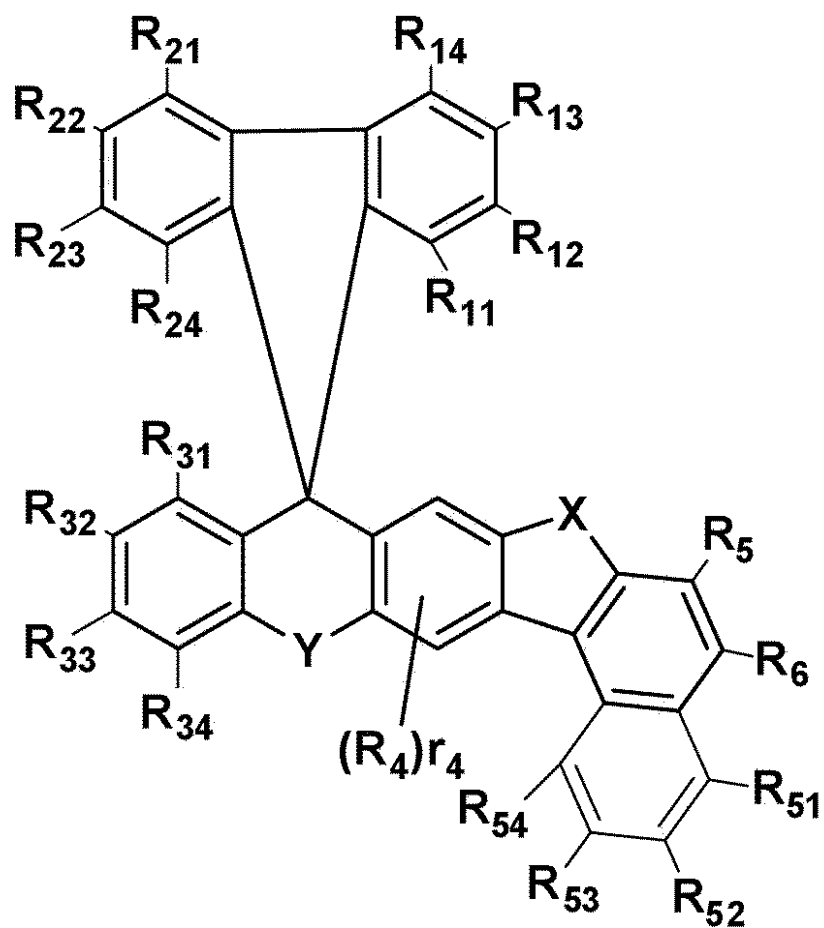


30

40

〔化学式 8〕

【化 8】

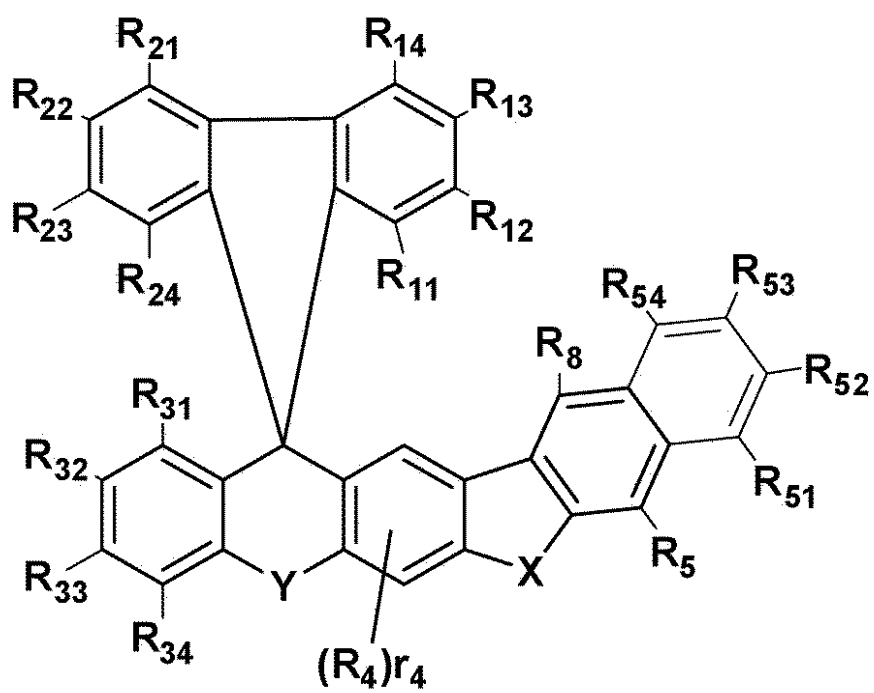


10

20

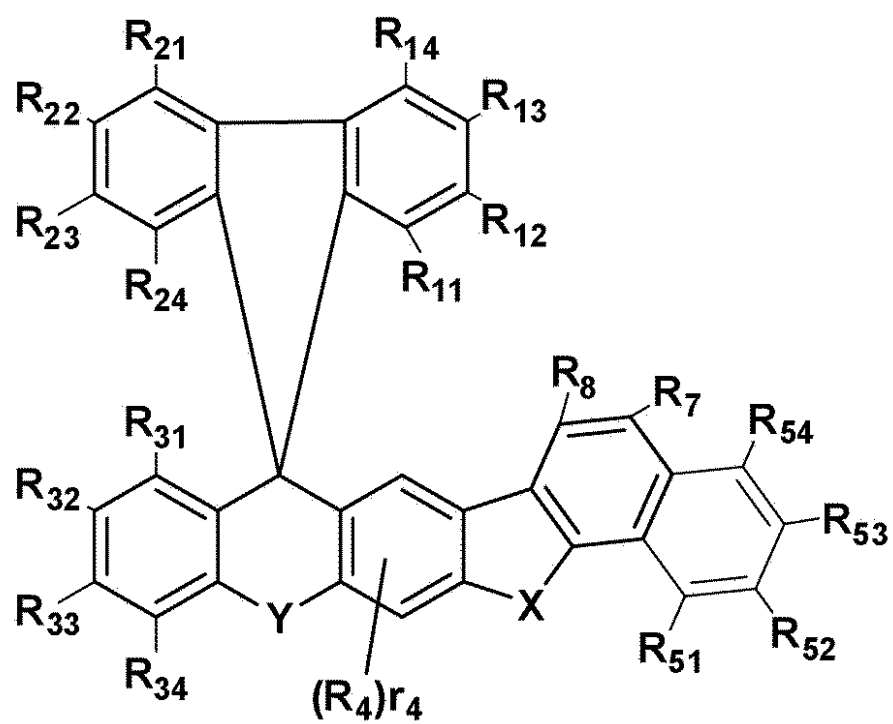
[化学式 9]

【化 1 0】



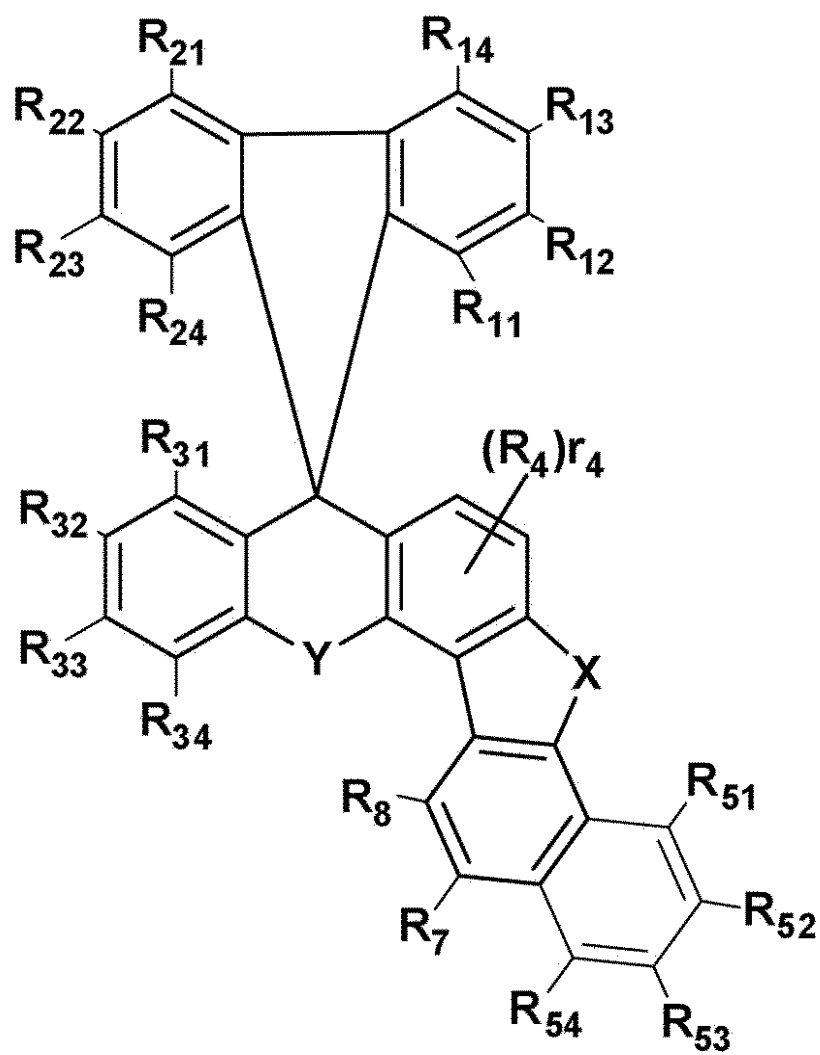
[化学式 1 1]

【化 1 1】



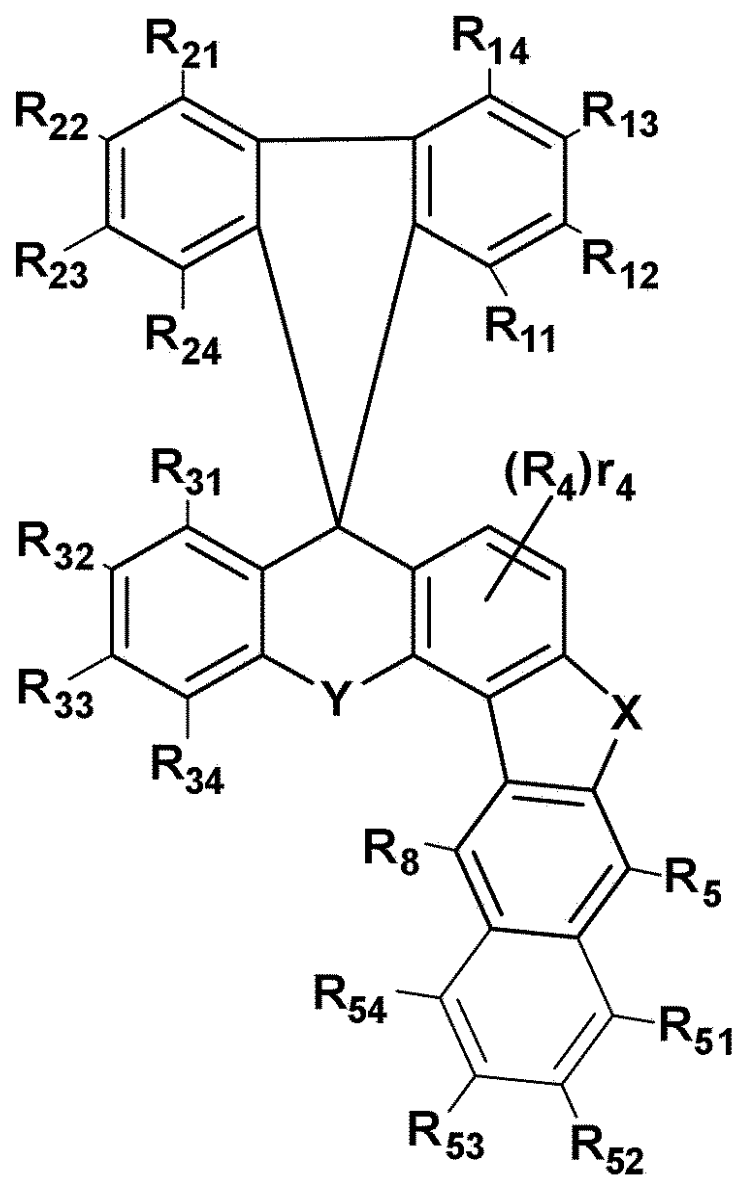
〔化学式 1 2〕

【化 1 2】



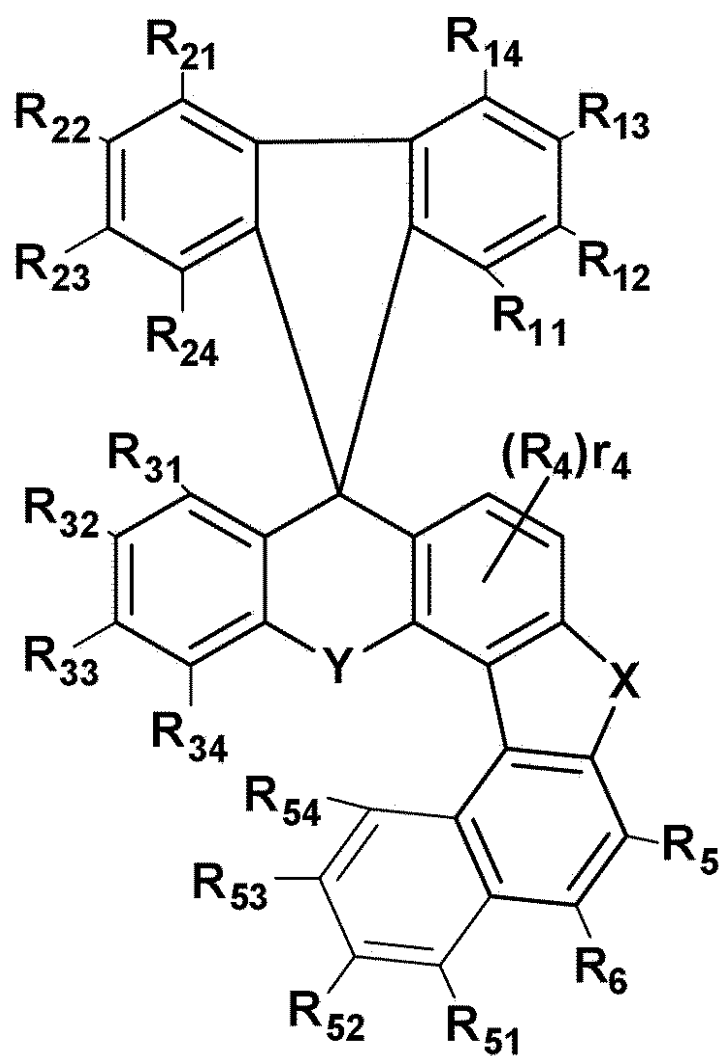
[化学式 1 3]

【化 1 3】



〔化学式 1 4〕

【化 1 4】



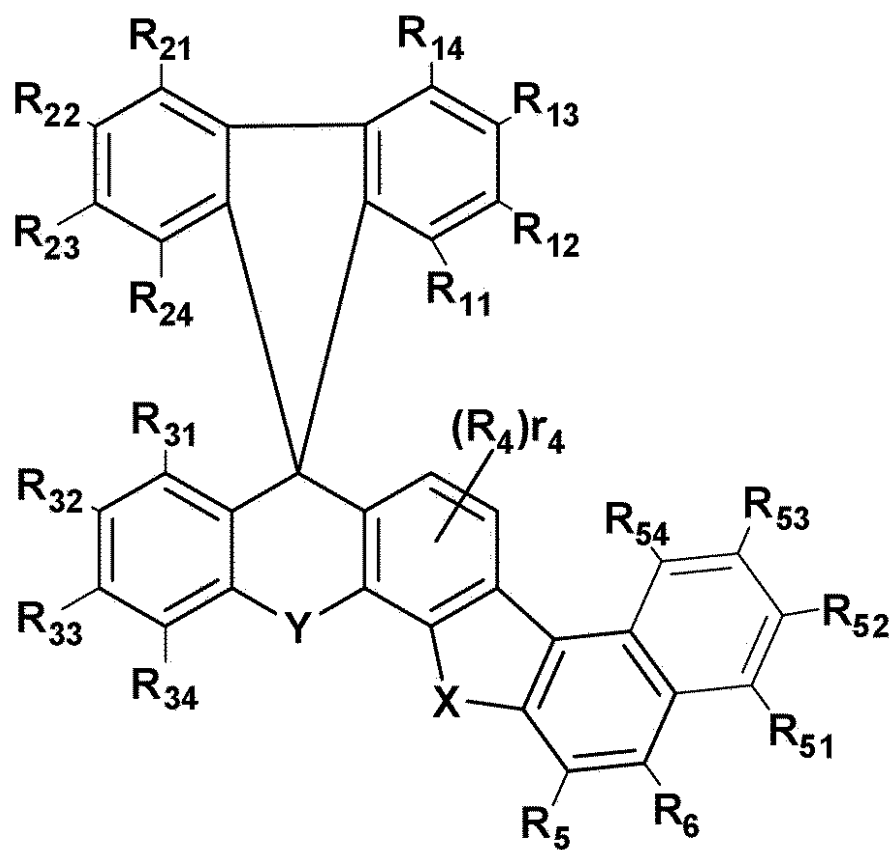
[化学式 1 5]

10

20

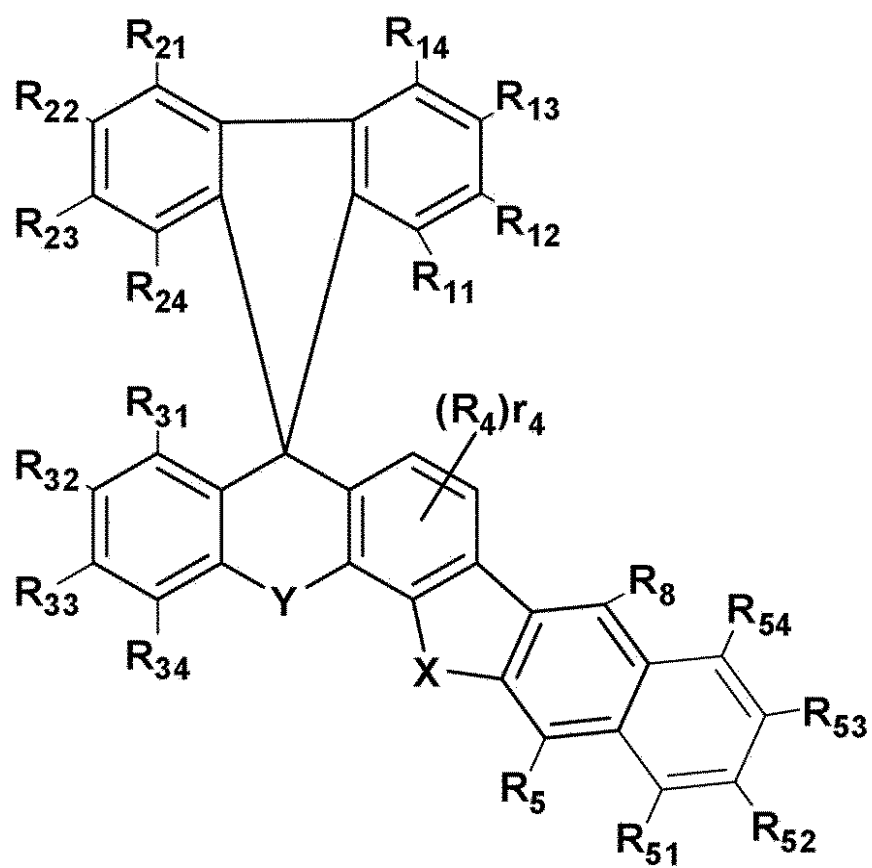
30

【化 1 5】



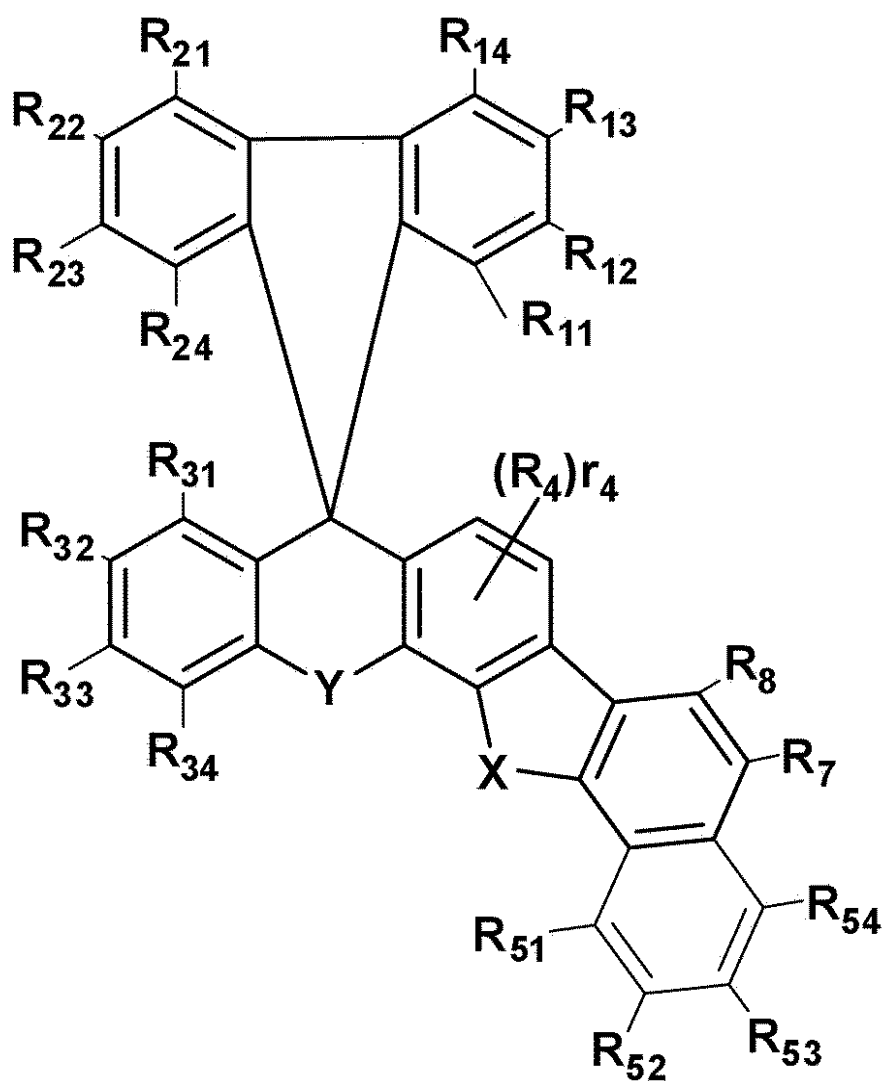
〔化学式 1 6〕

【化 1 6】



[化学式 17]

【化 17】



前記化学式 6 ～ 17 において、

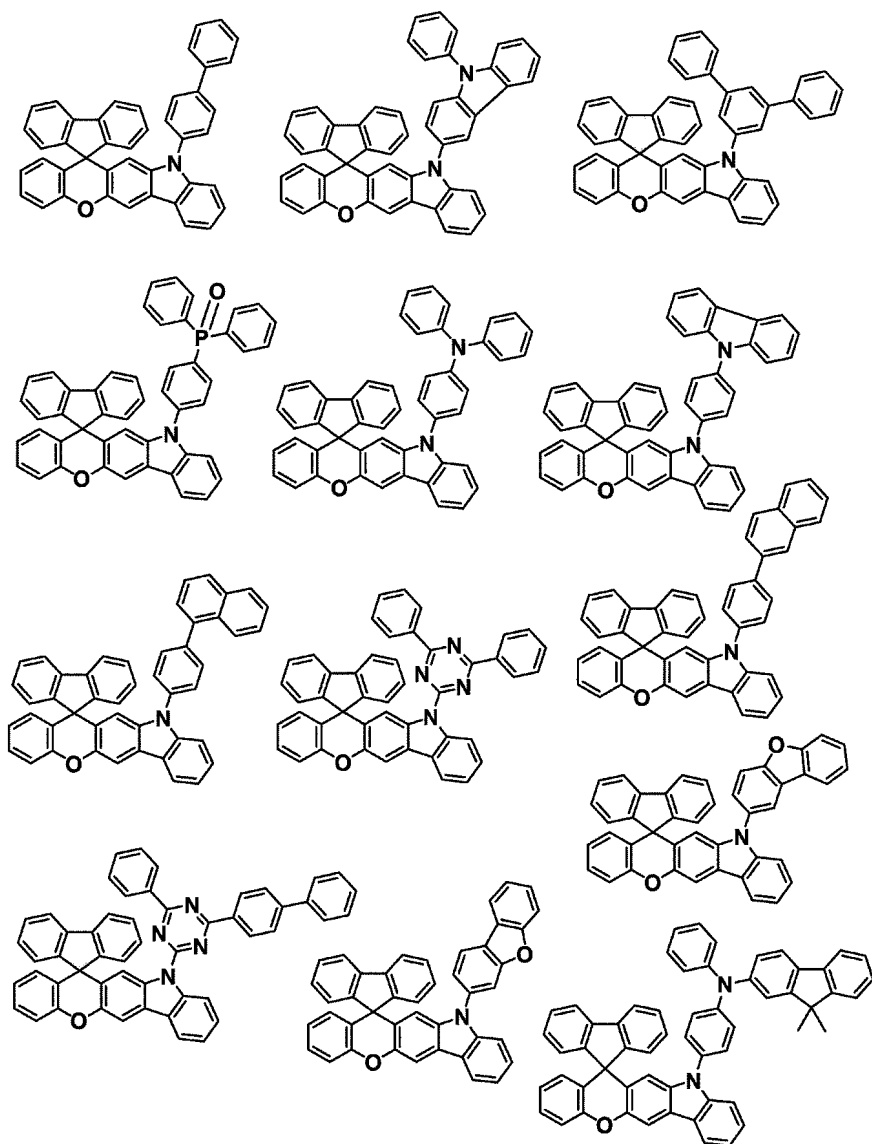
X、Y、 $R_4 \sim R_9$ 、 $R_{11} \sim R_{14}$ 、 $R_{21} \sim R_{24}$ 、 $R_{31} \sim R_{34}$ 、および r_4 の定義は、前記化学式 1 で定義したものと同一であり、

$R_{51} \sim R_{54}$ は、水素である。

【請求項 4】

前記化学式 1 は、下記化合物の中から選択されるいずれか 1 つである、請求項 1 に記載のスピロ型化合物：

【化 1 8】

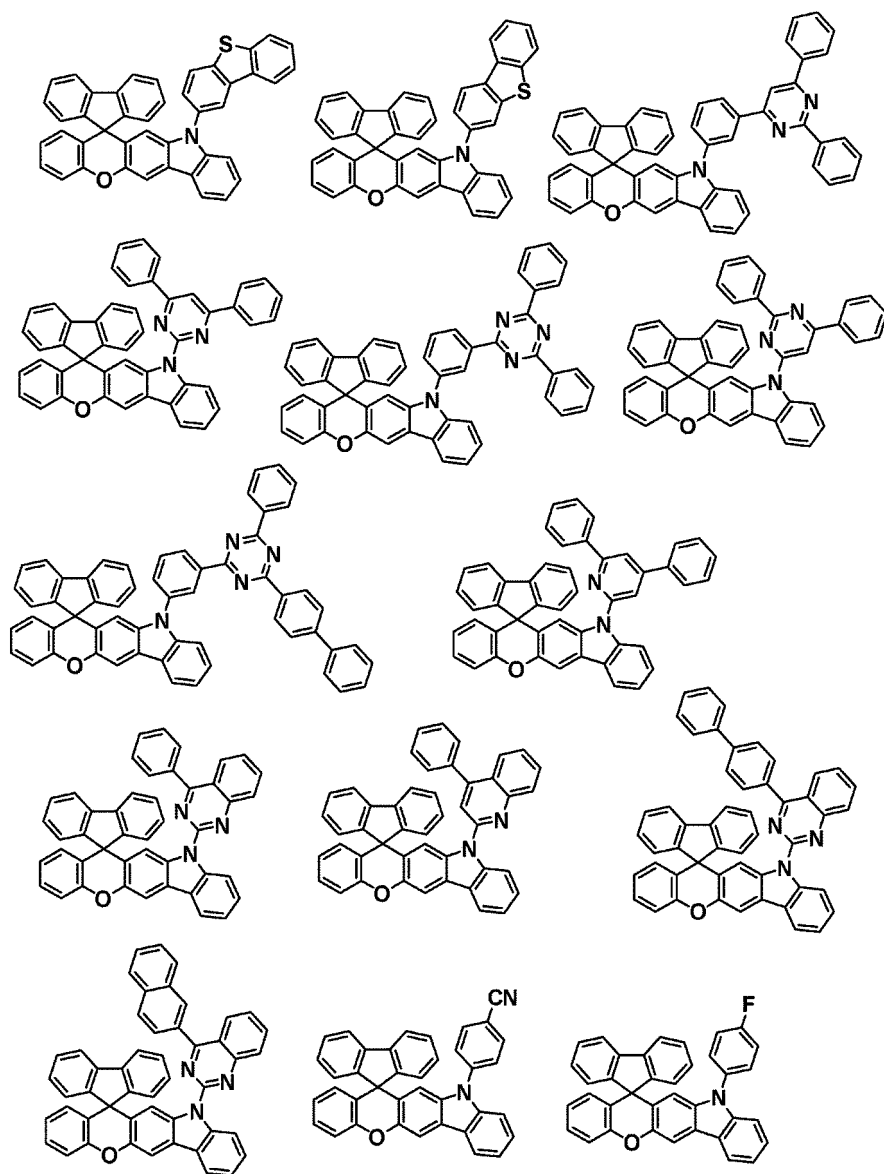


10

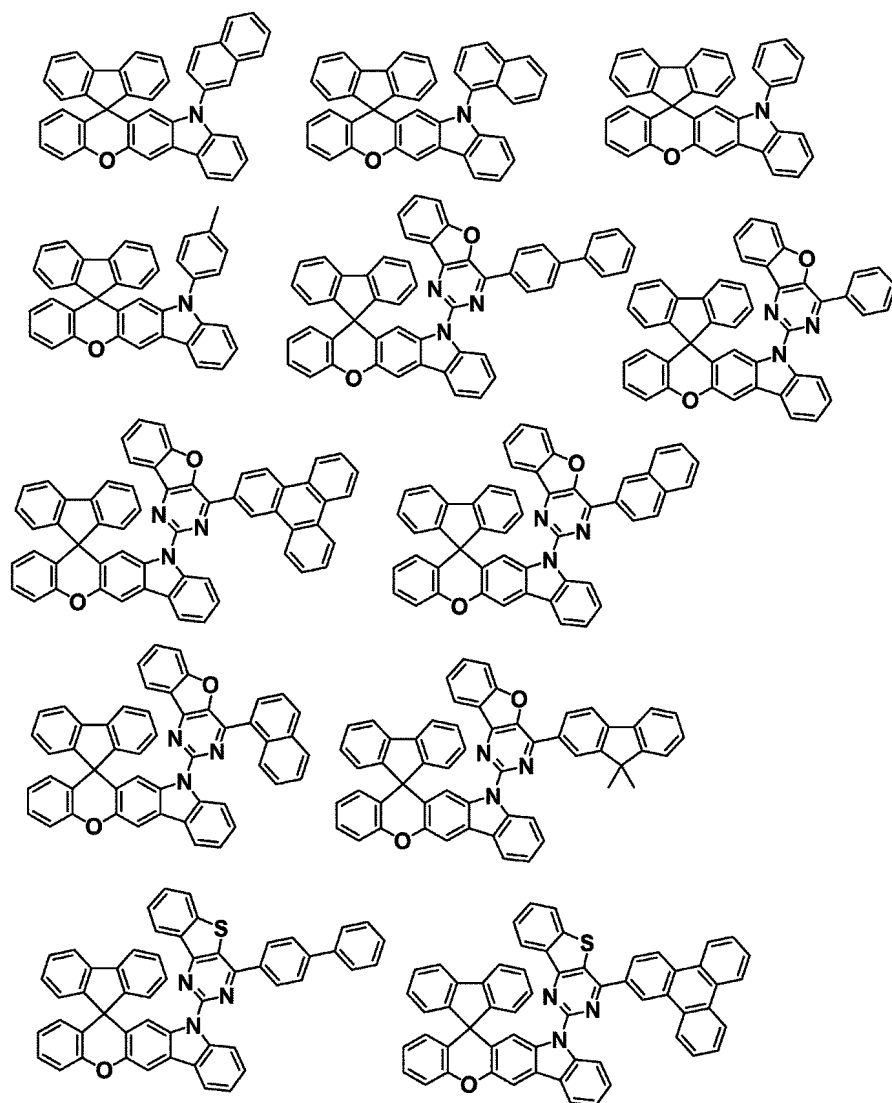
20

30

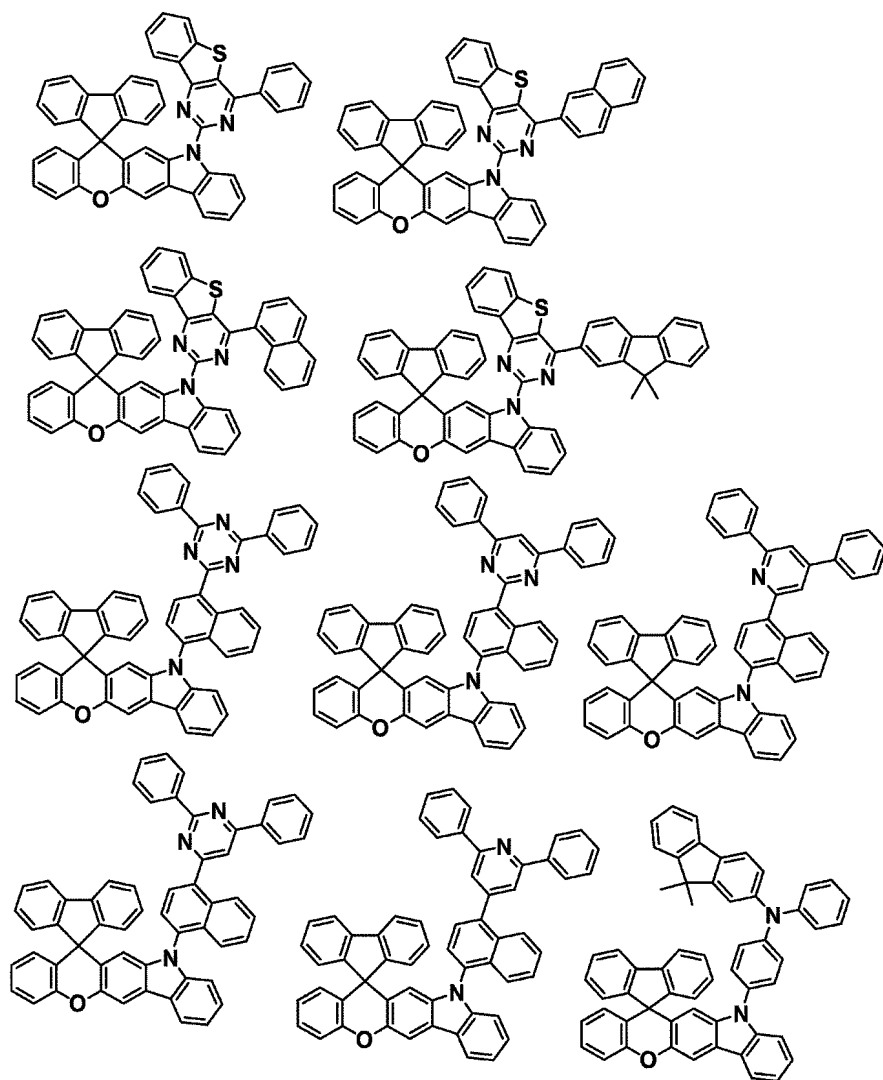
【化 1 9】



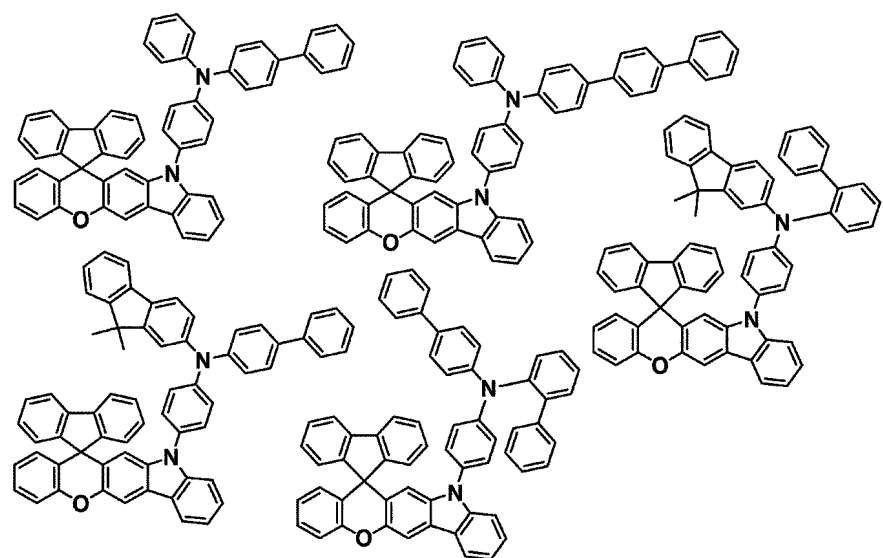
【化 20】



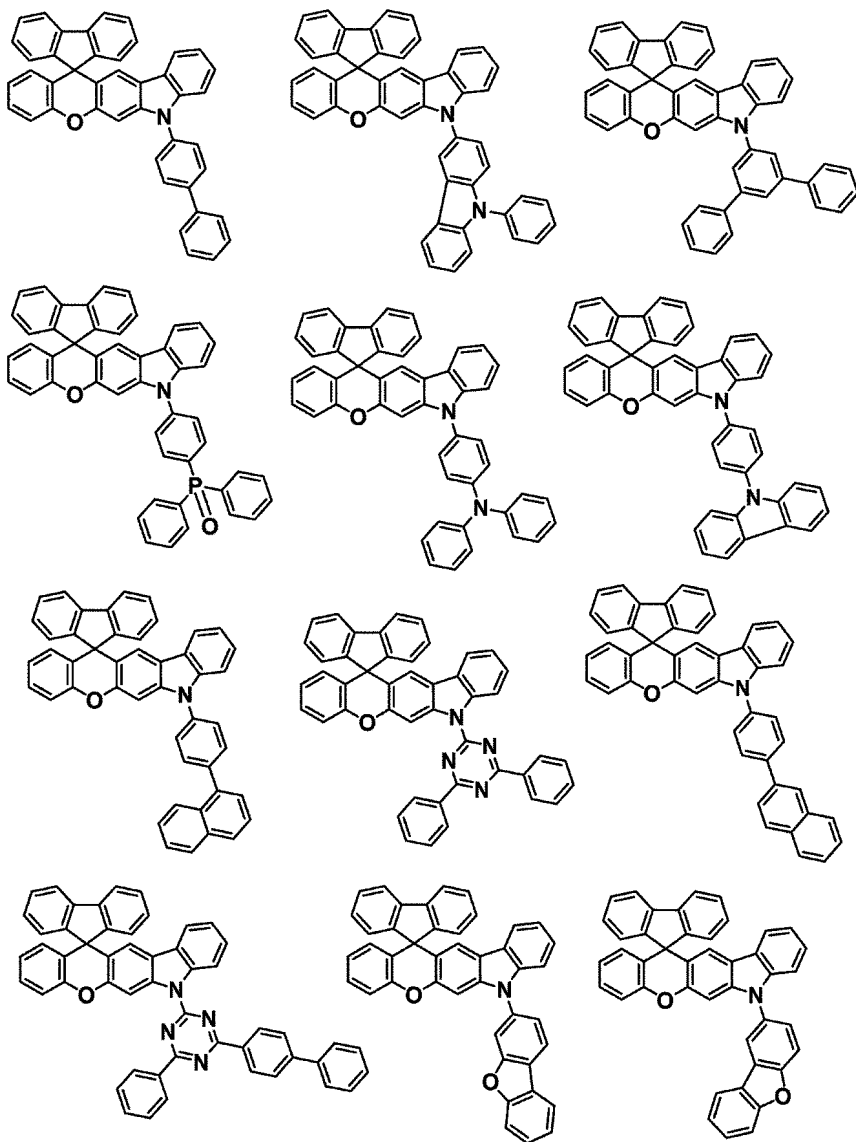
【化 2 1】



【化 2 2】



【化 2 3】

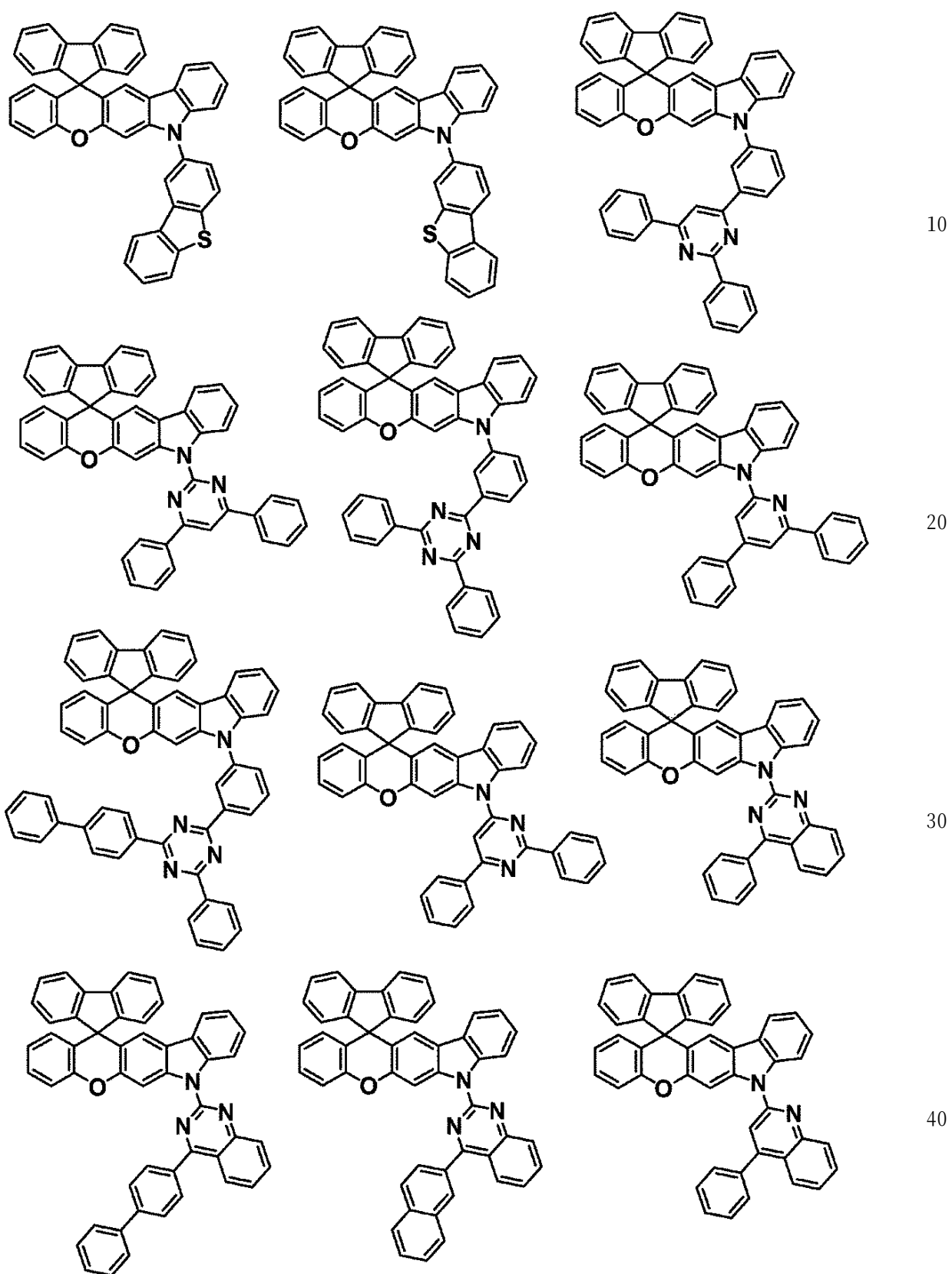


10

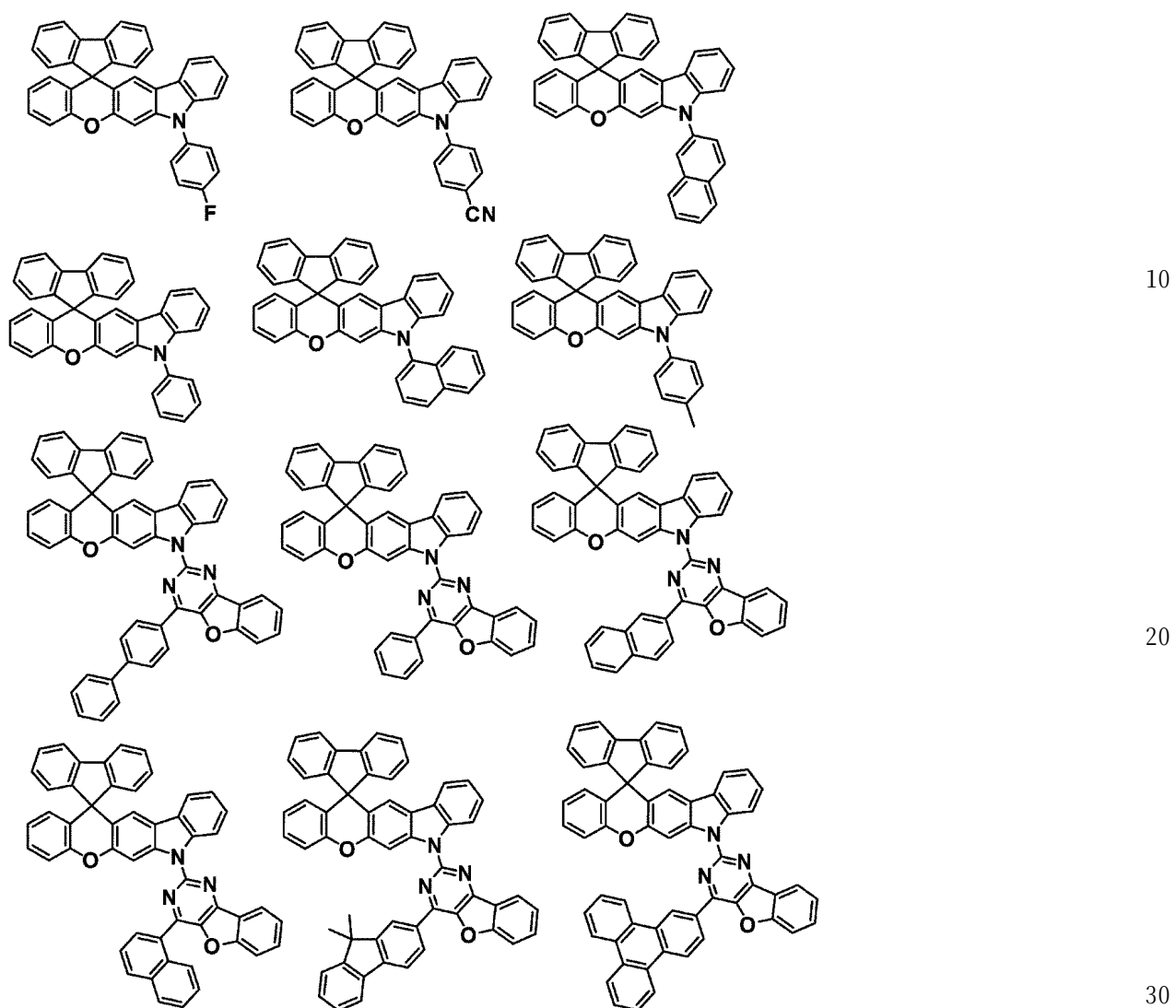
20

30

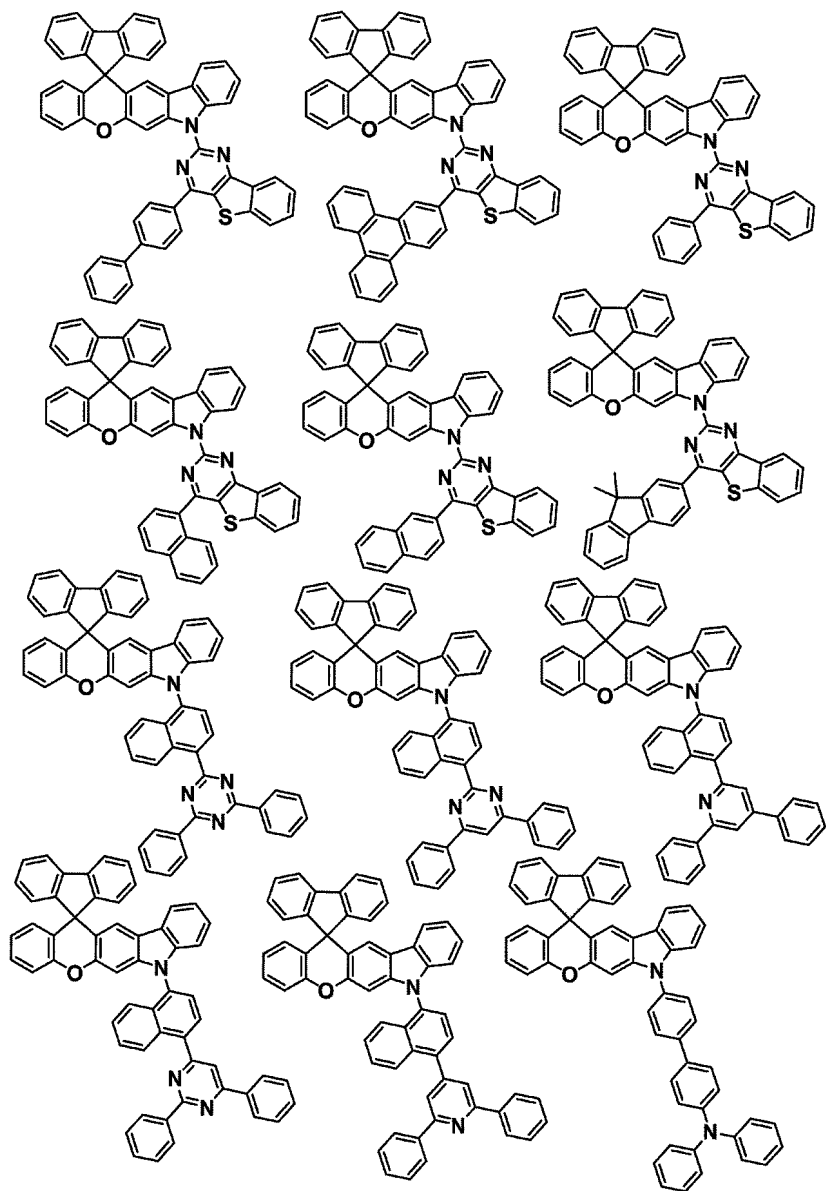
【化 2 4】



【化 2 5】



【化 2 6】

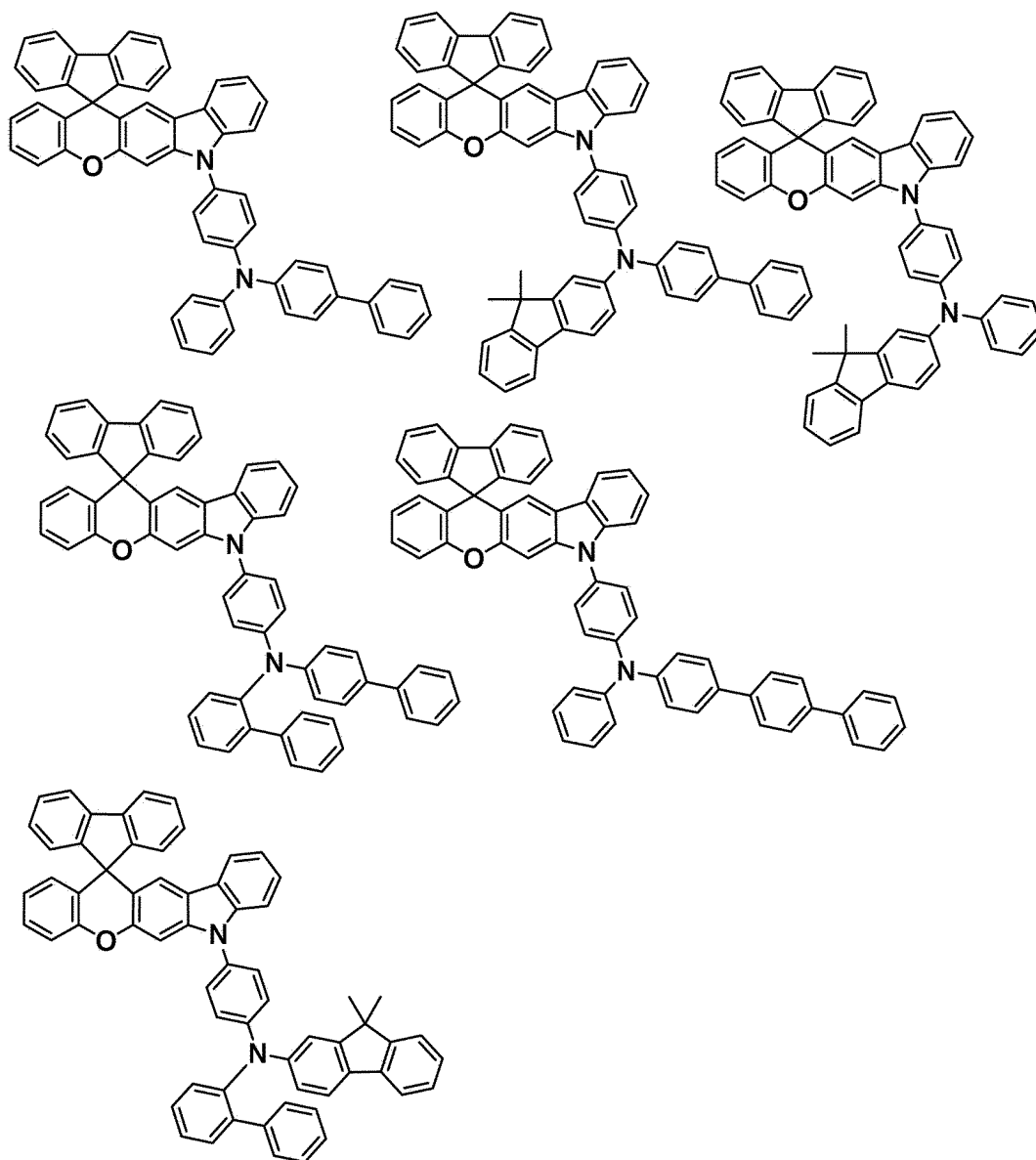


10

20

30

【化 2 7】

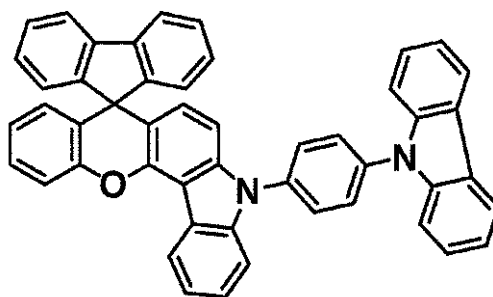
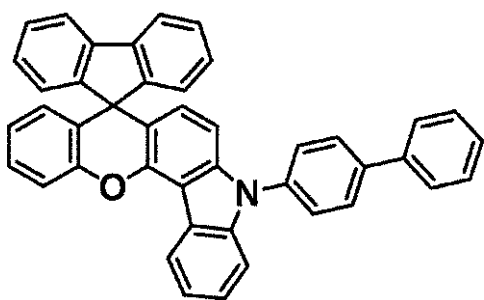


10

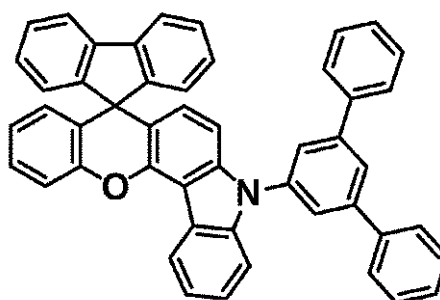
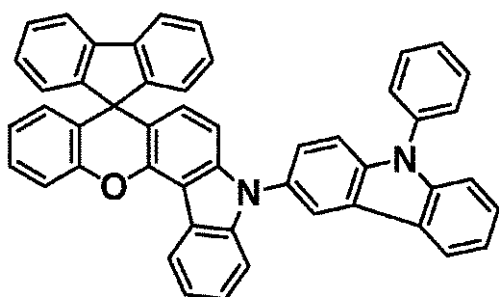
20

30

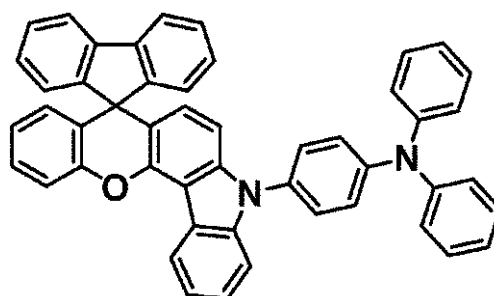
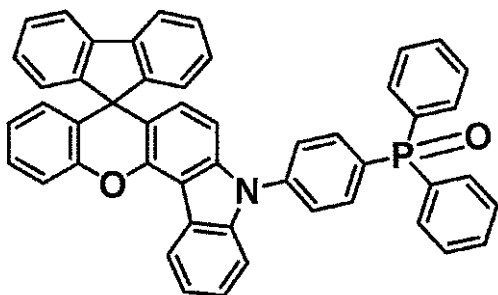
【化 2 8】



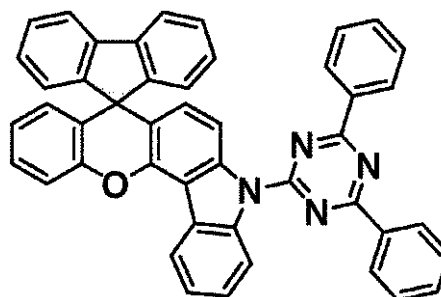
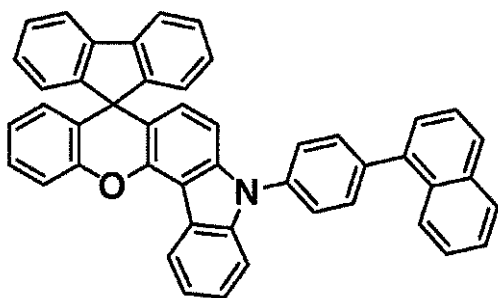
10



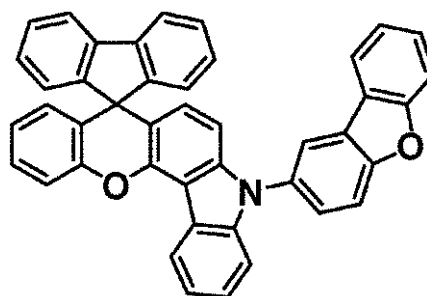
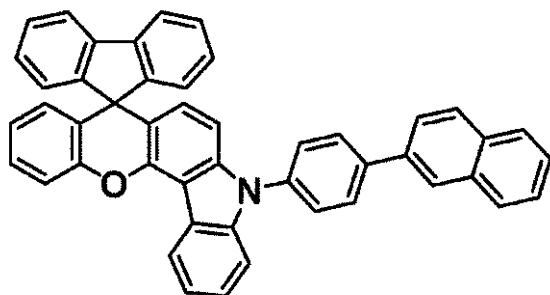
20



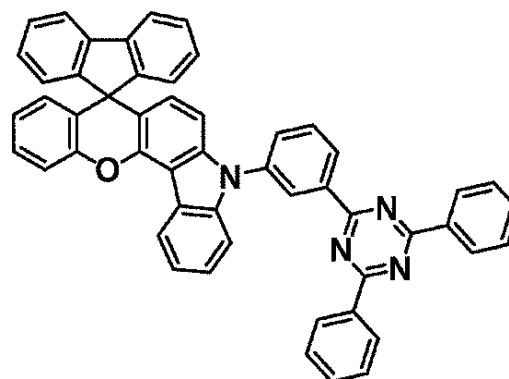
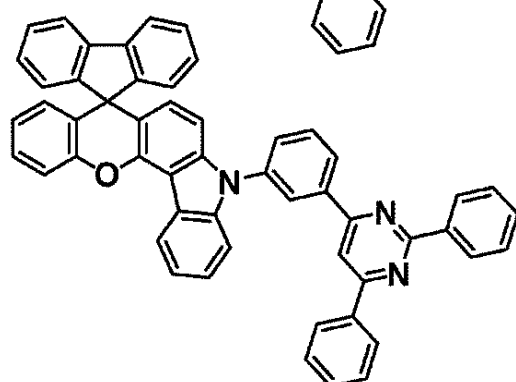
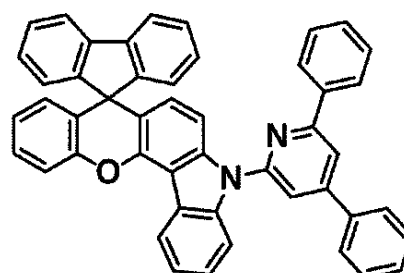
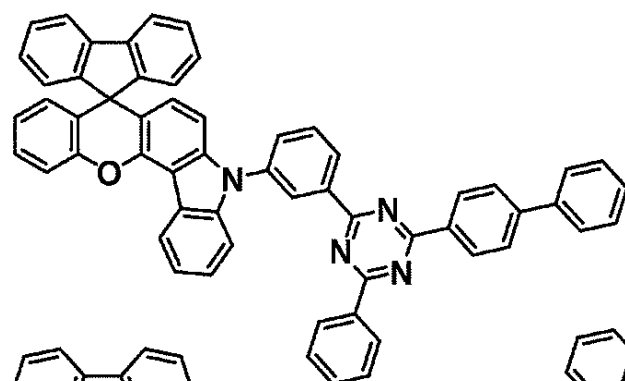
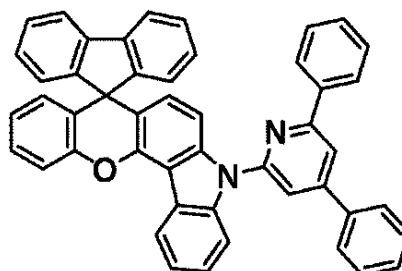
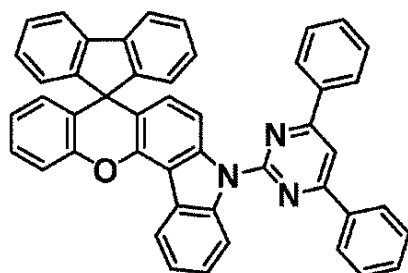
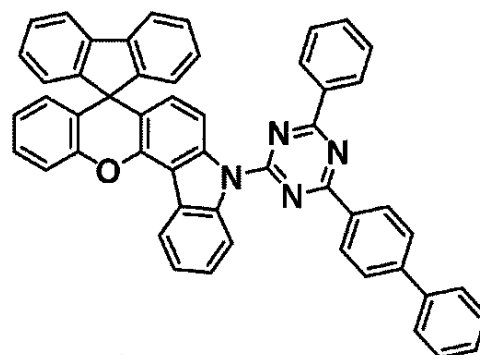
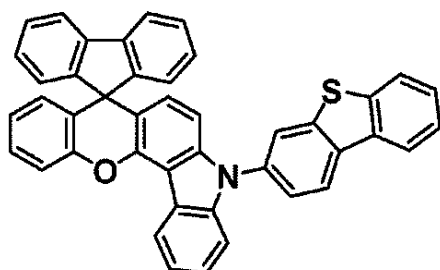
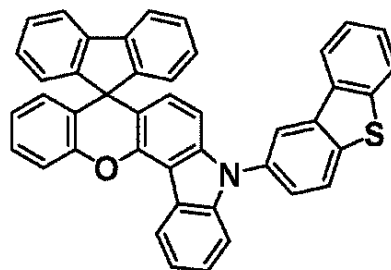
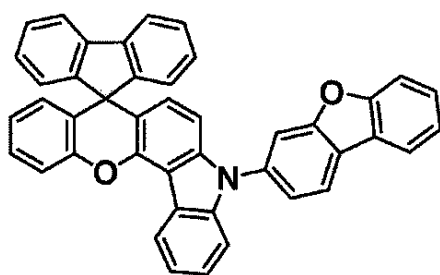
30



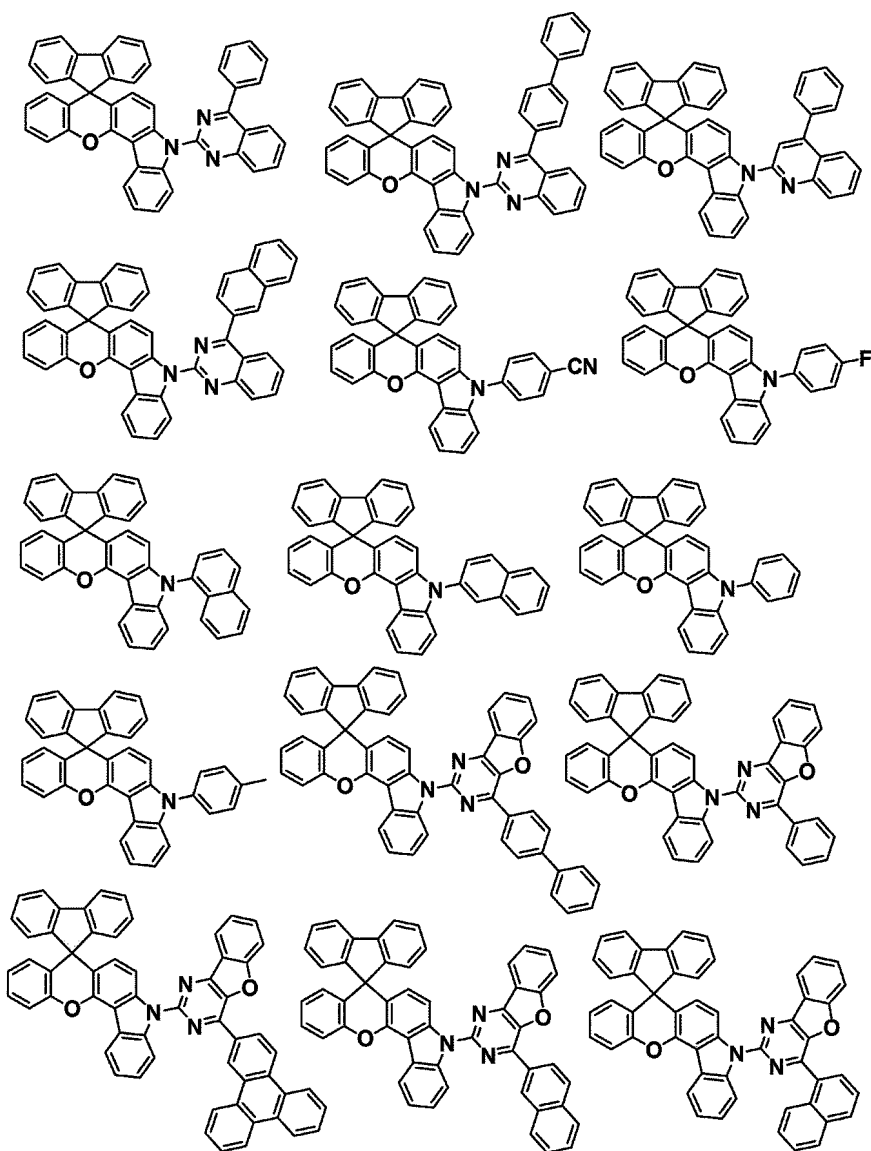
40



【化 2 9】



【化 3 0】

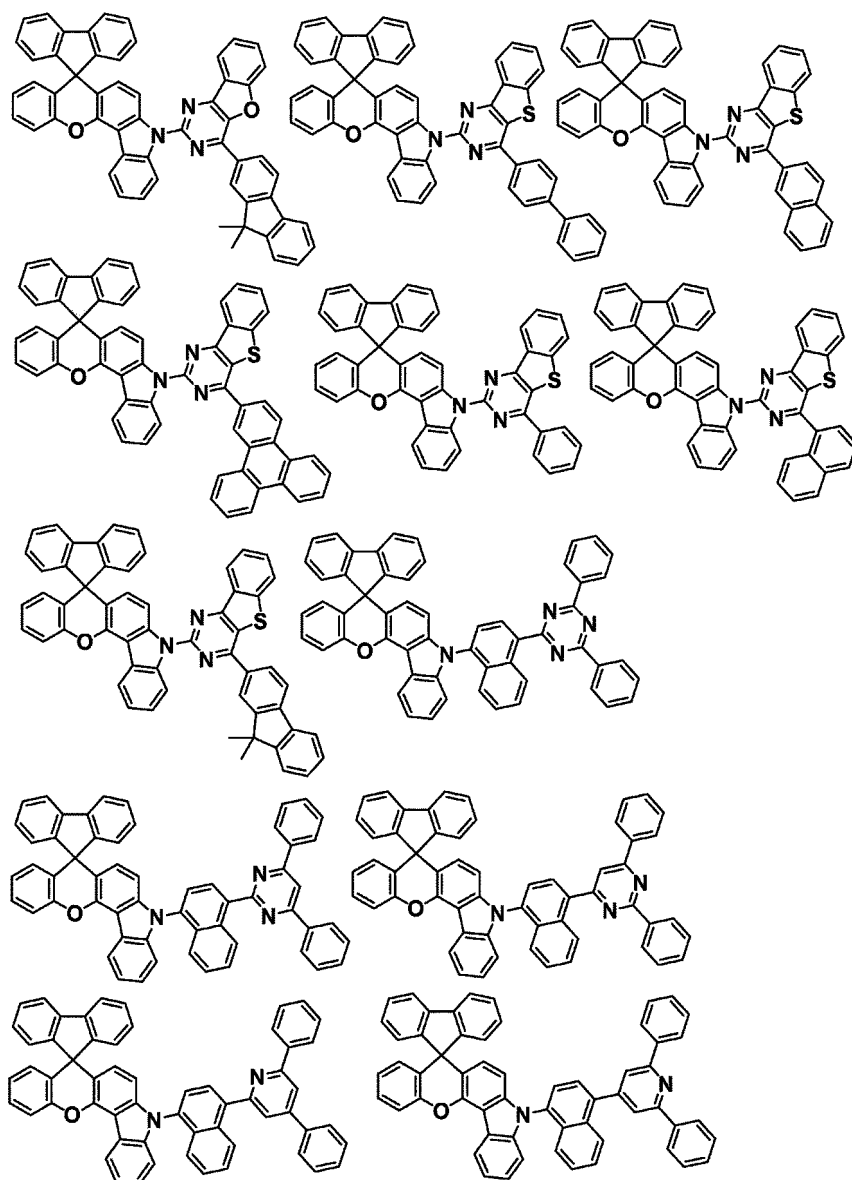


10

20

30

【化 3 1】

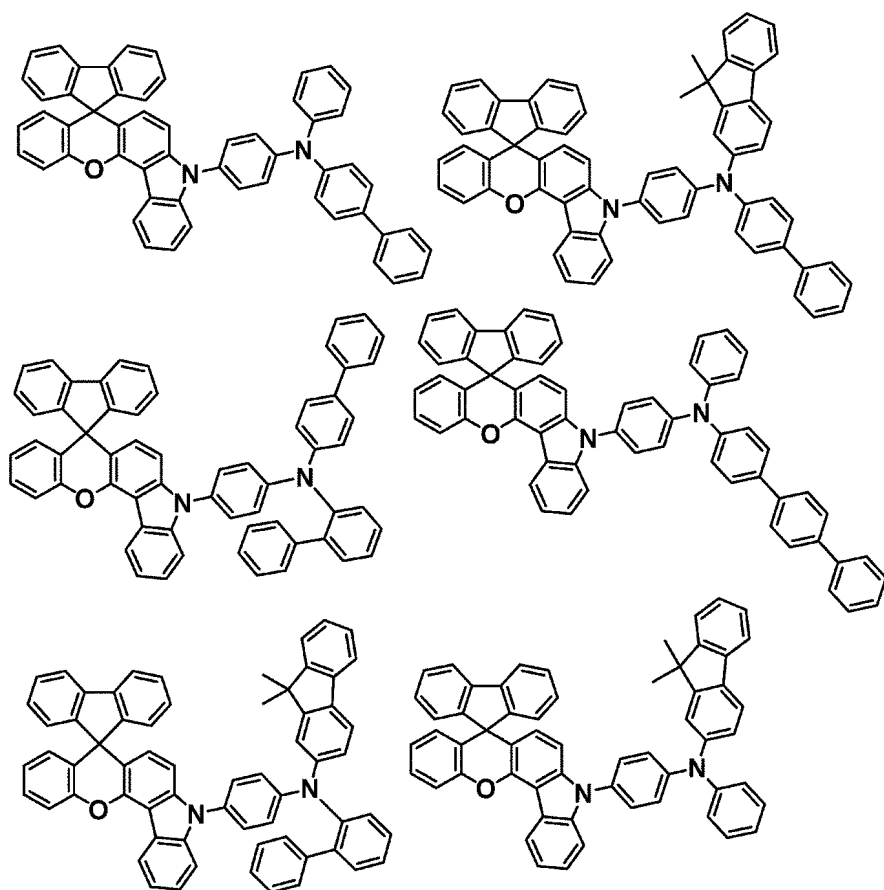


10

20

30

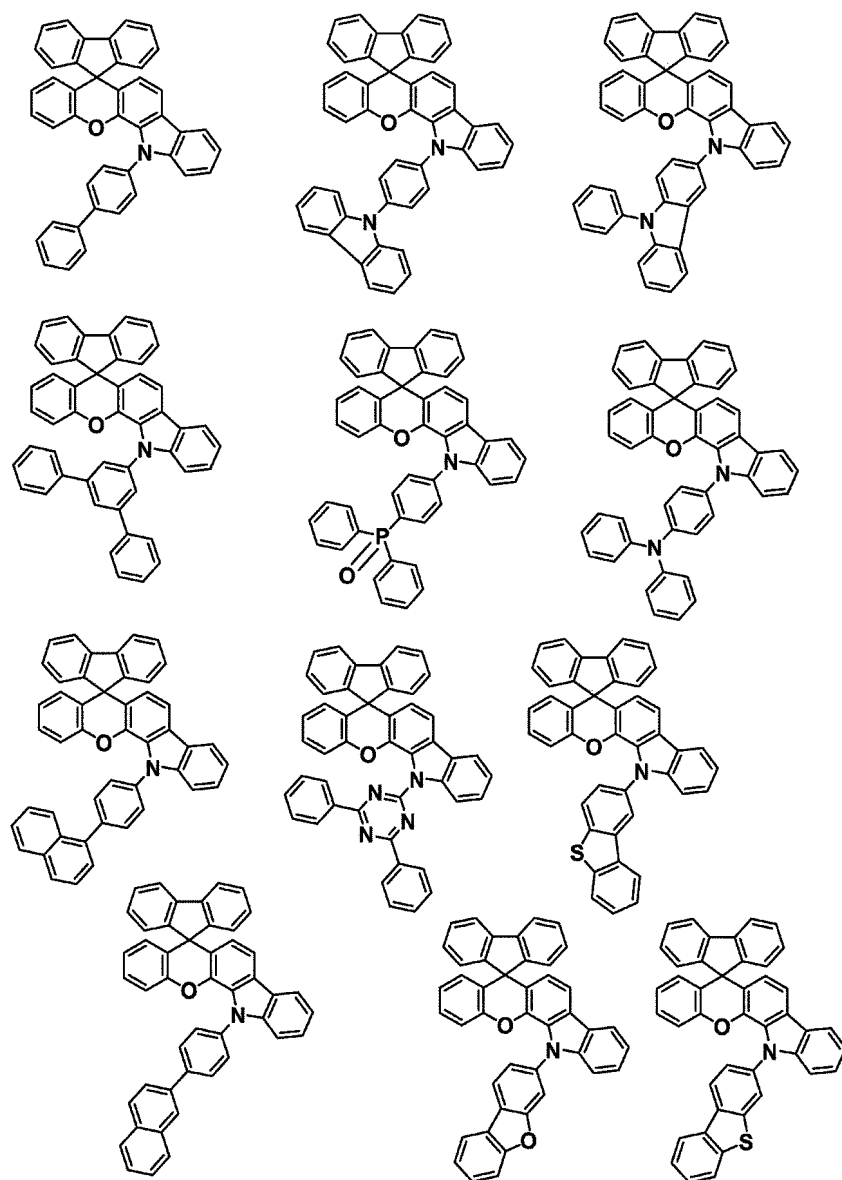
【化 3 2】



10

20

【化 3 3】

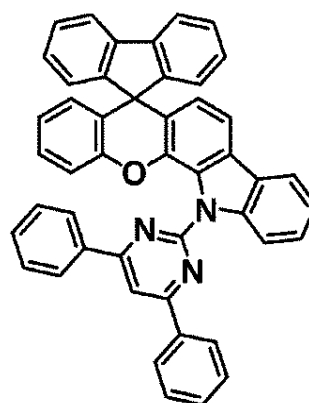
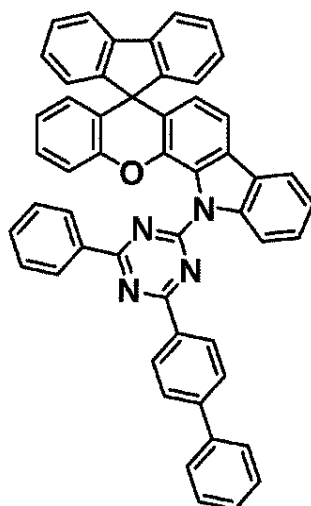
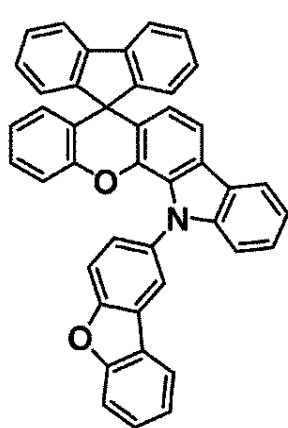


10

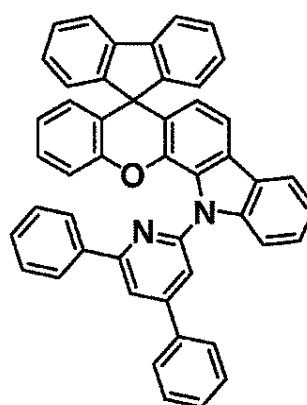
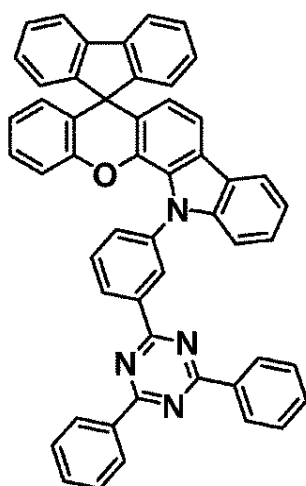
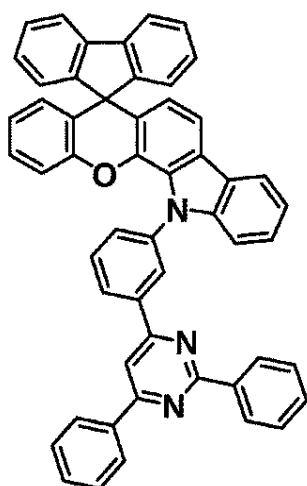
20

30

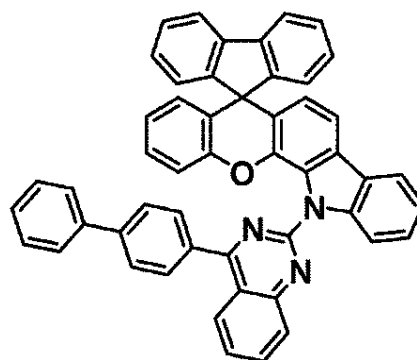
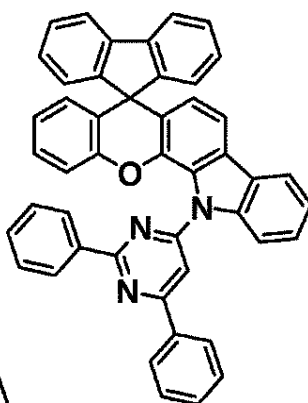
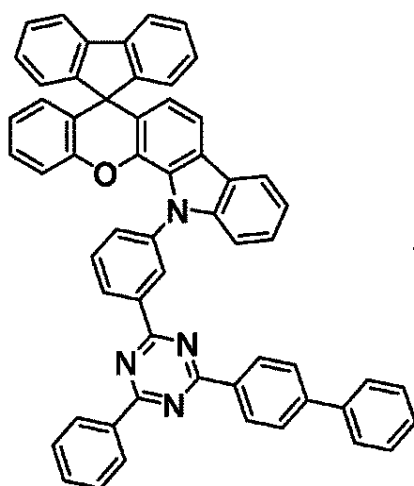
【化 3 4】



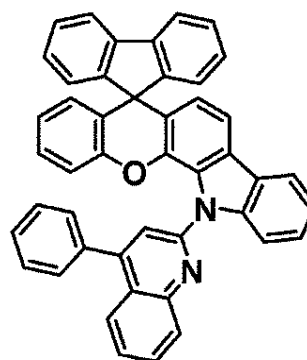
10



20

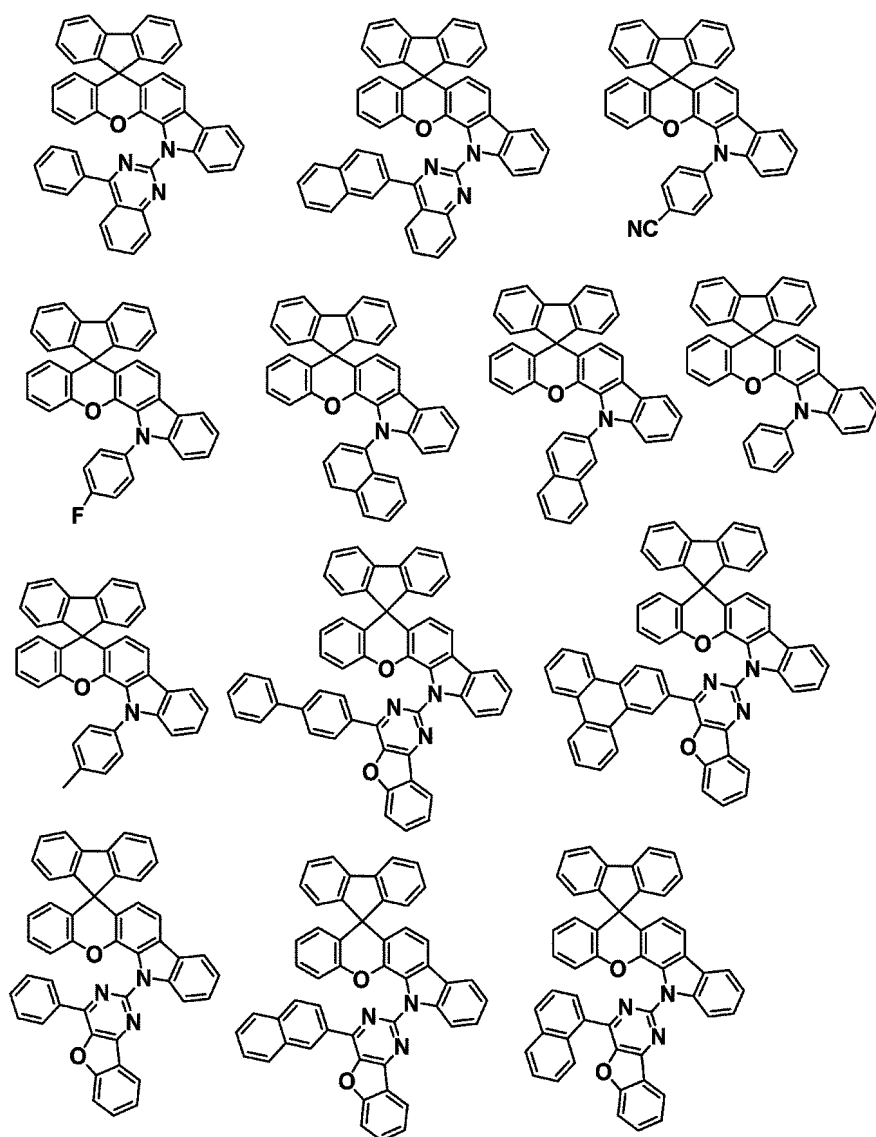


30



40

【化 3 5】

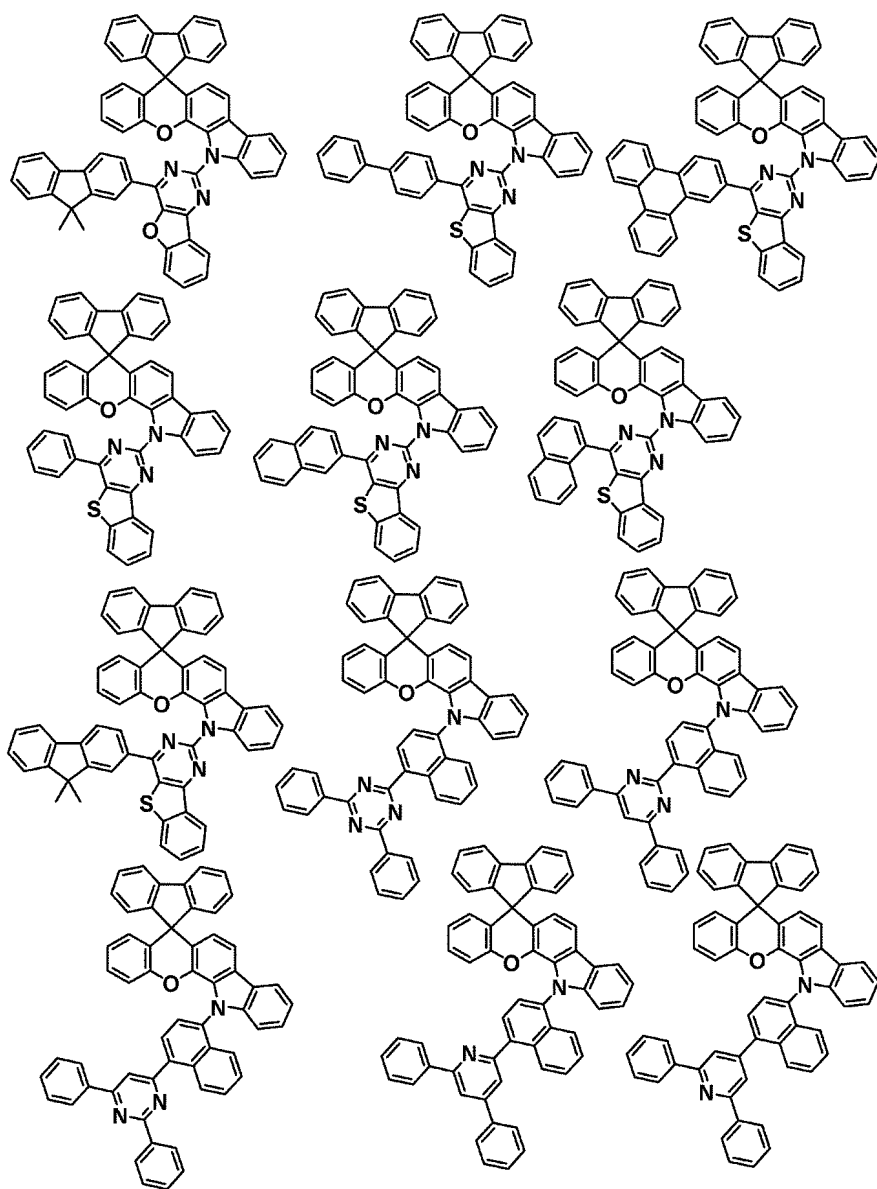


10

20

30

【化 3 6】

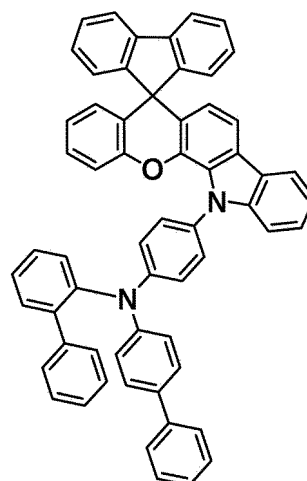
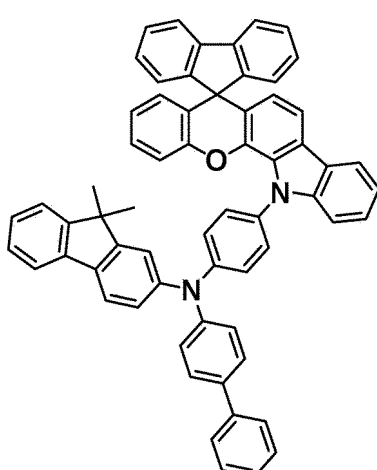
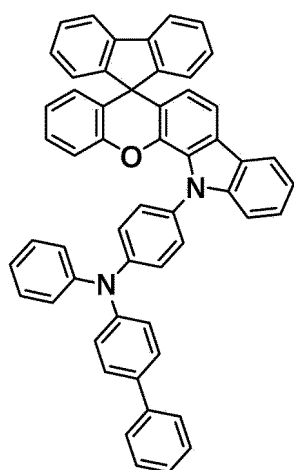


10

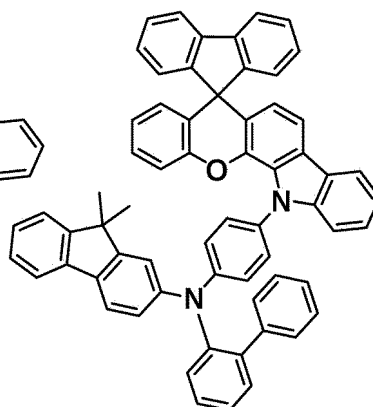
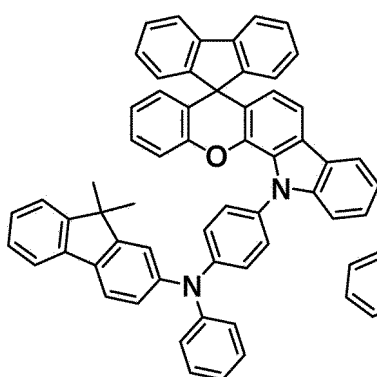
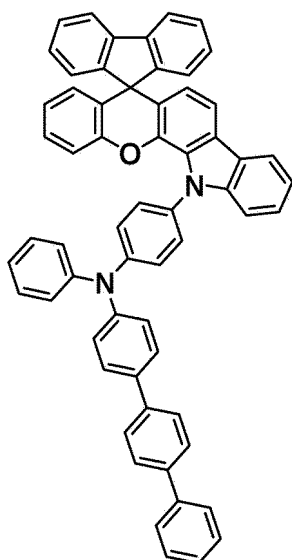
20

30

【化 3 7】



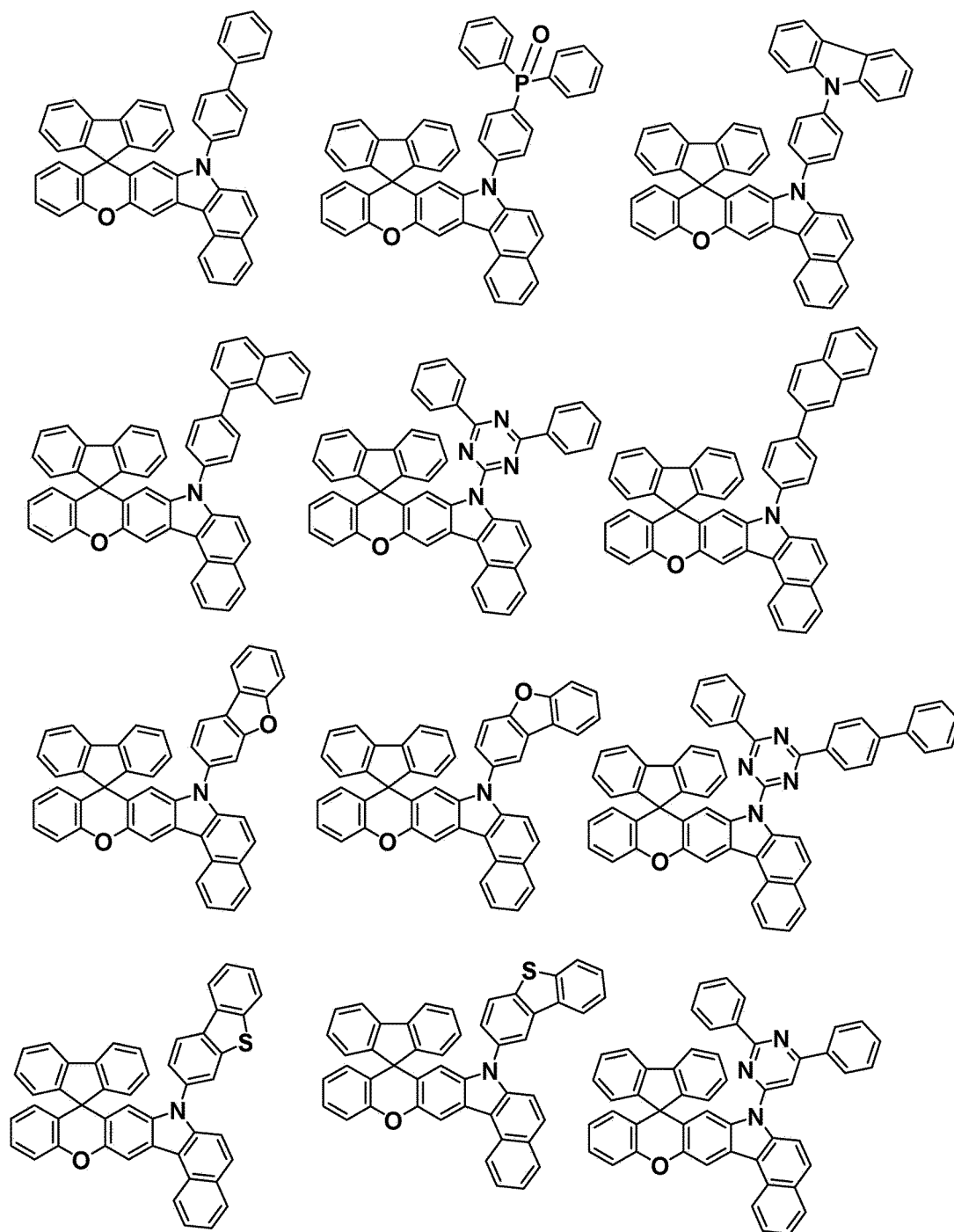
10



20

30

【化 3 8】



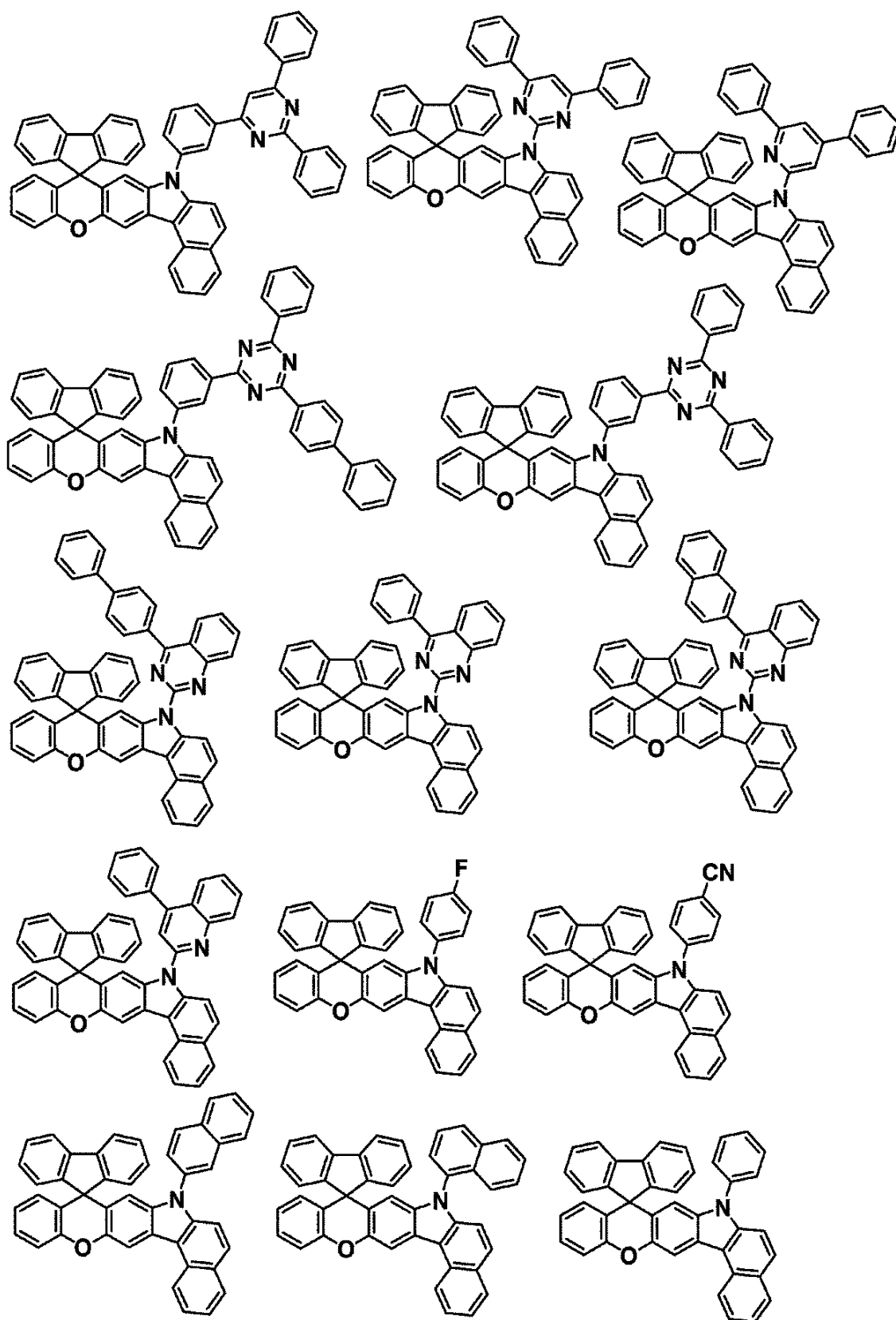
10

20

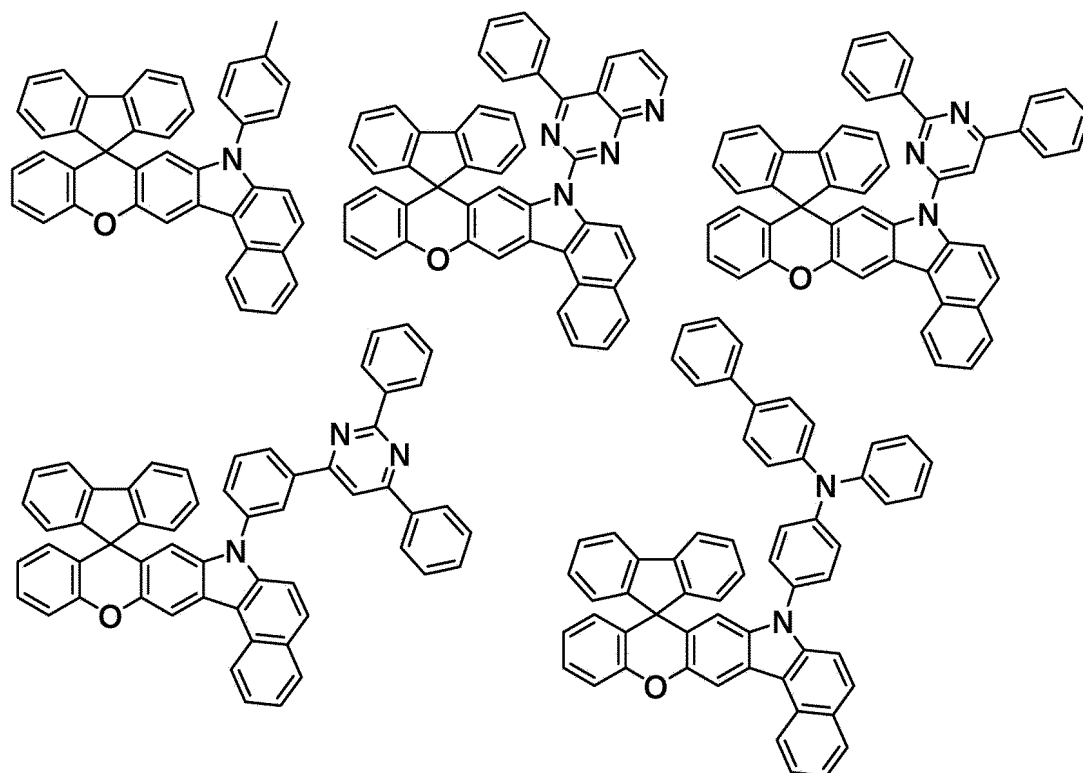
30

40

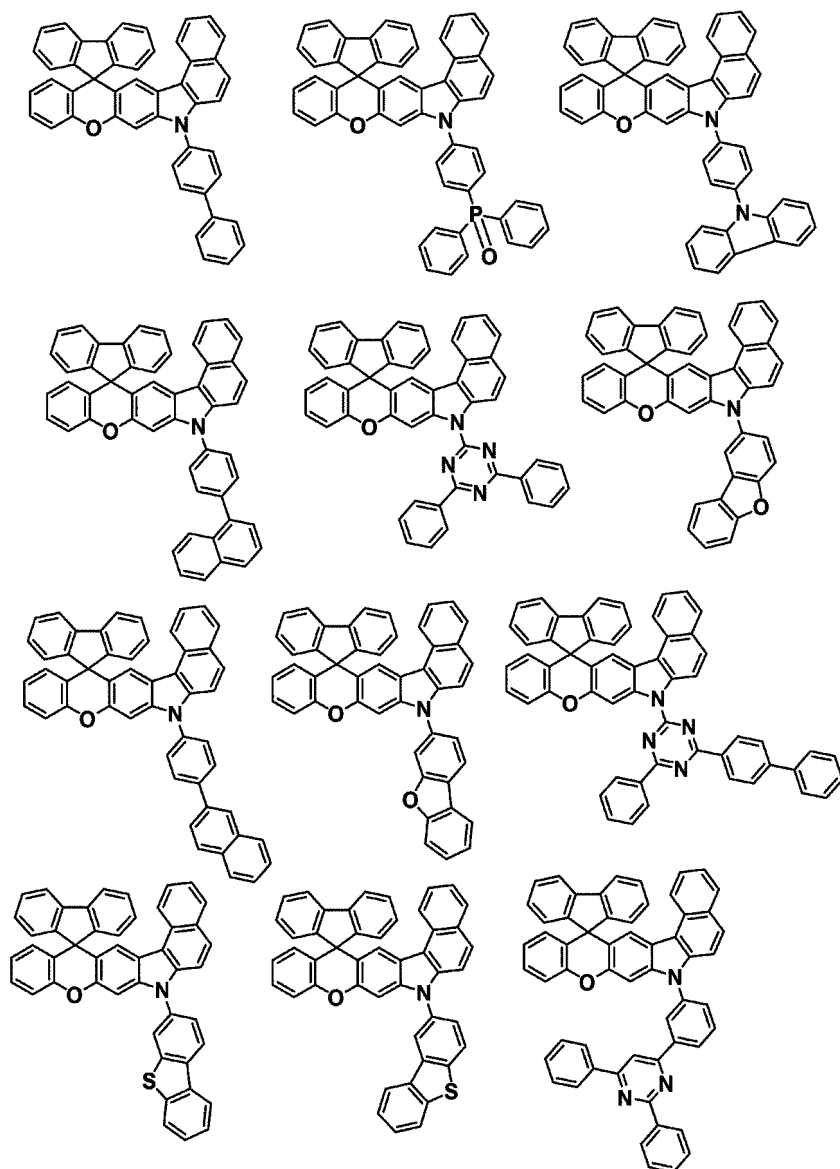
【化 3 9】



【化 4 0】



【化 4 1】

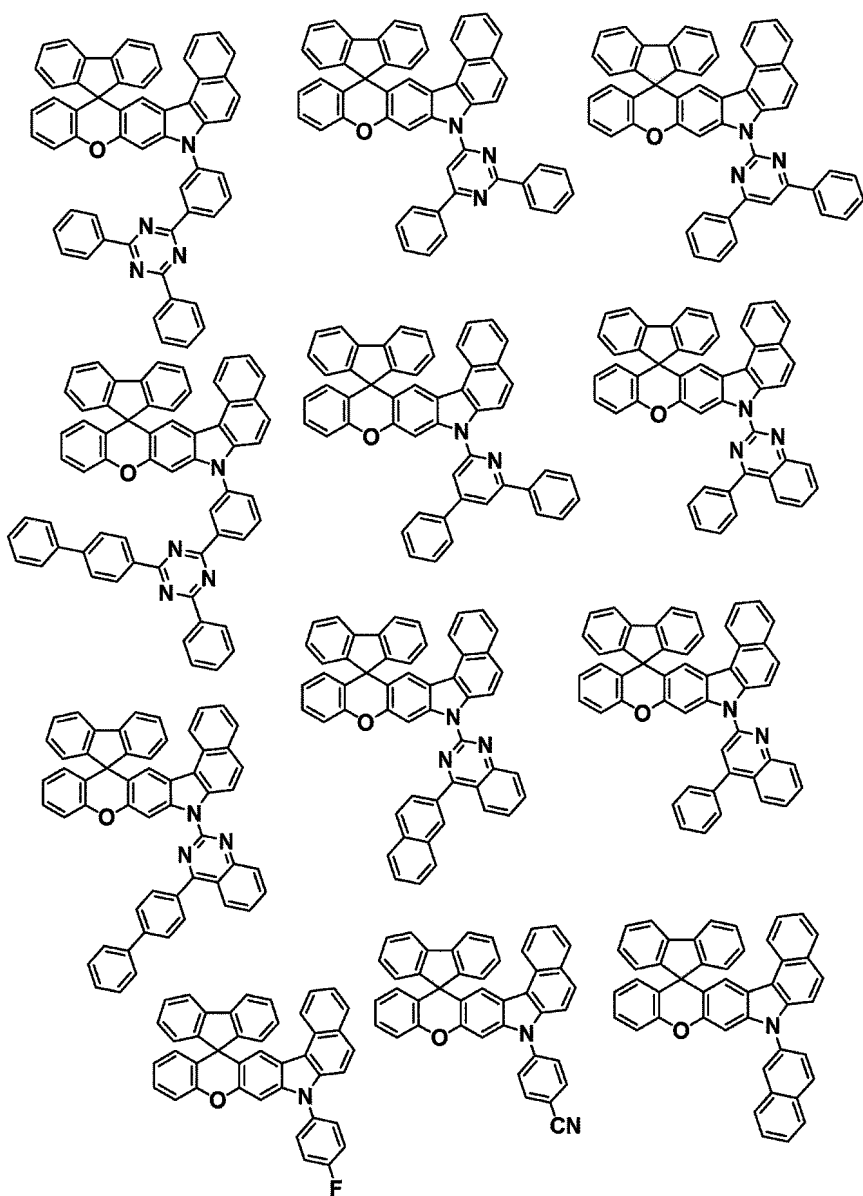


10

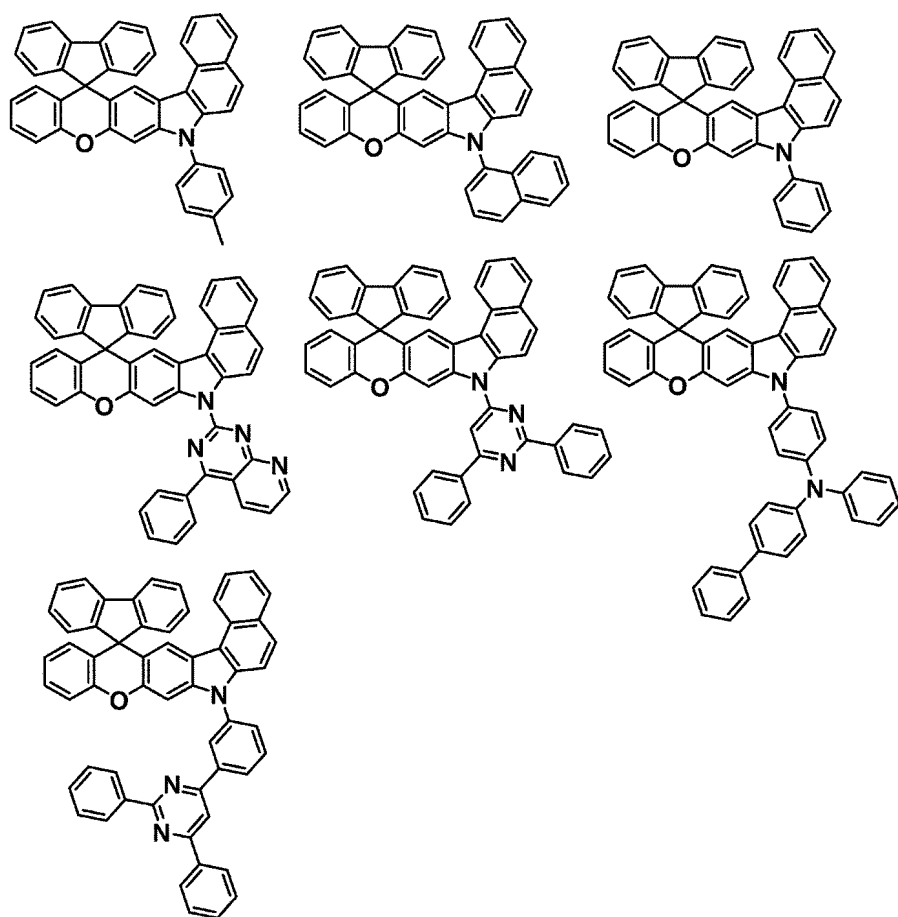
20

30

【化 4 2】



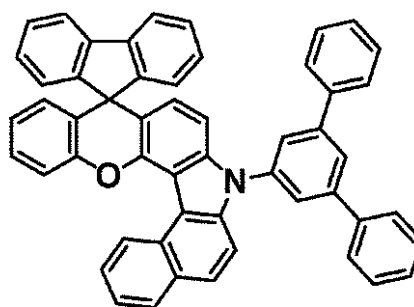
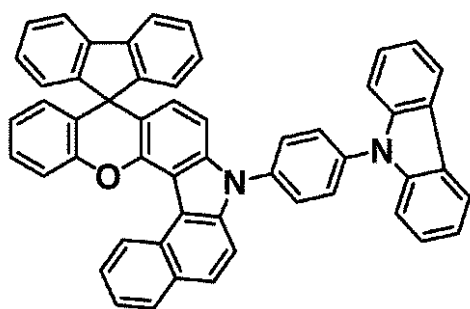
【化 4 3】



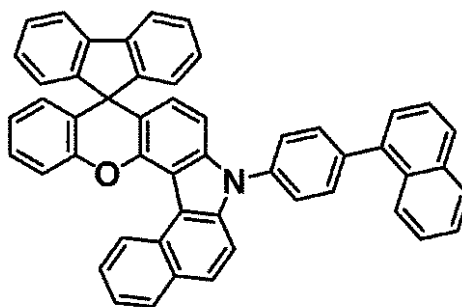
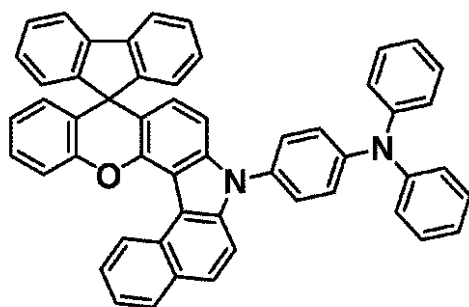
10

20

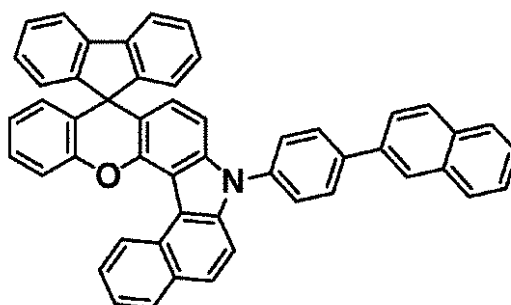
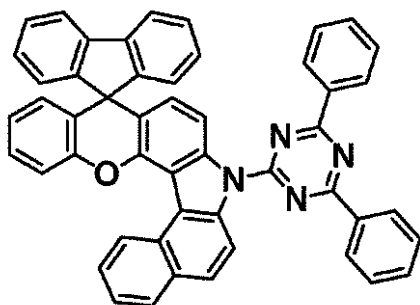
【化 4 4】



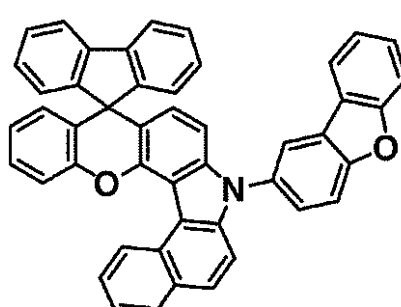
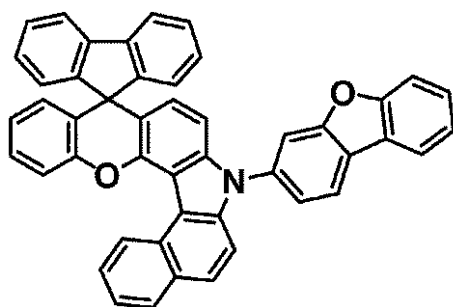
10



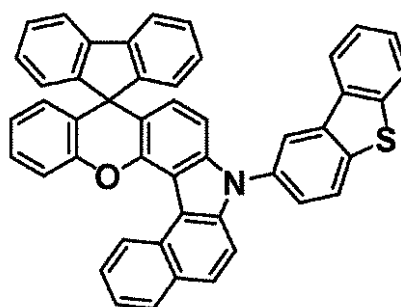
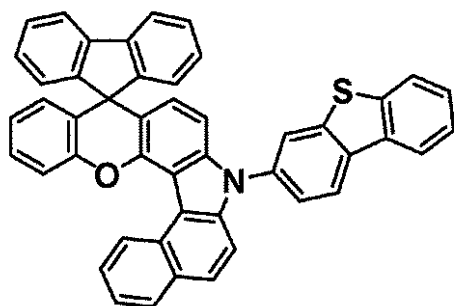
20



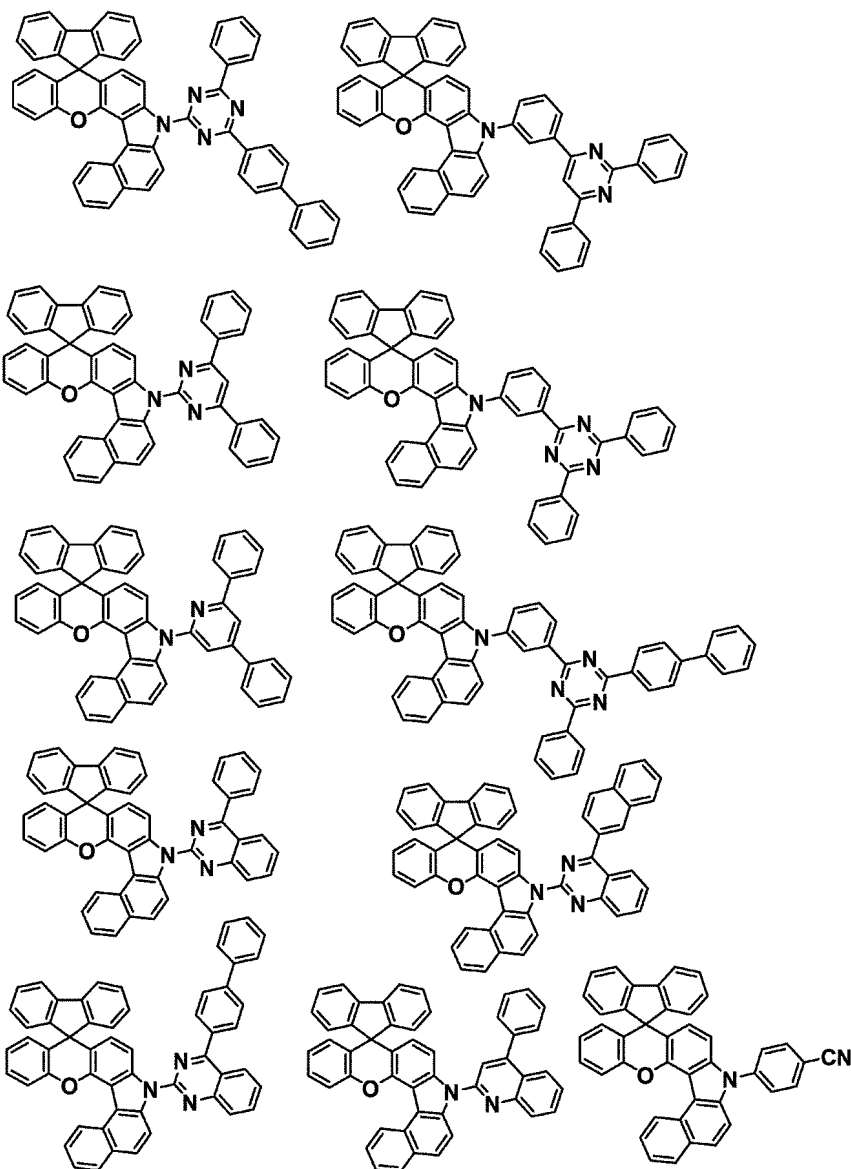
30



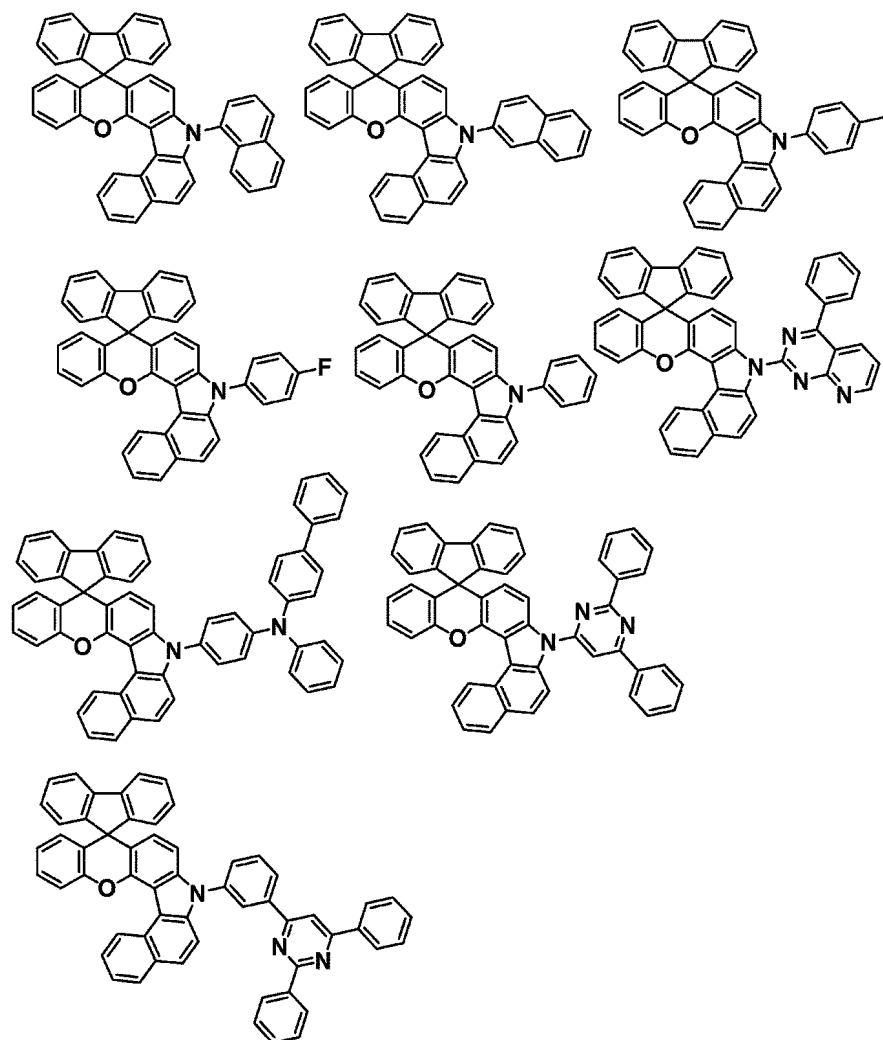
40



【化 4 5】



【化 4 6】

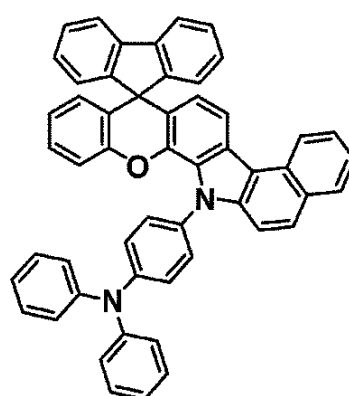
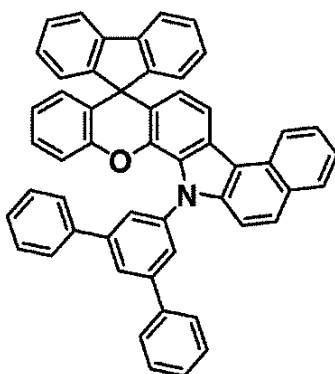
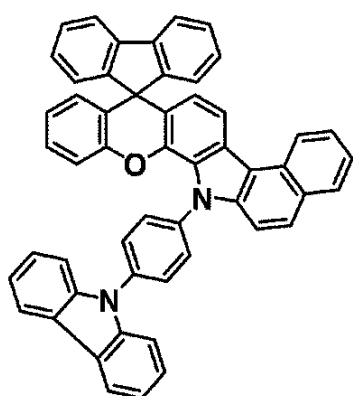


10

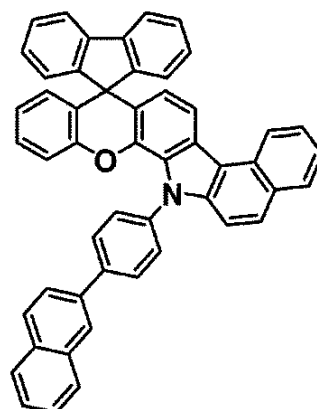
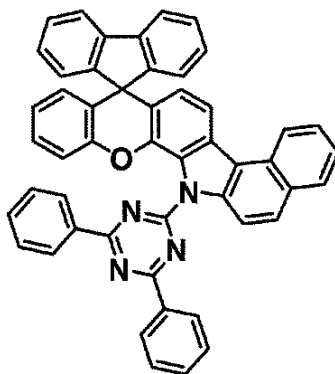
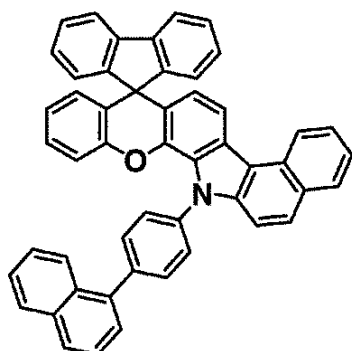
20

30

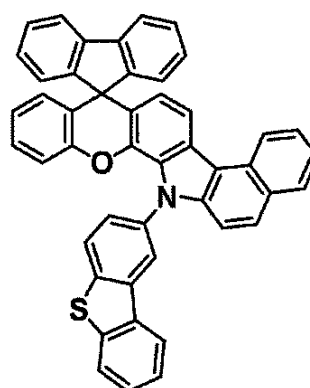
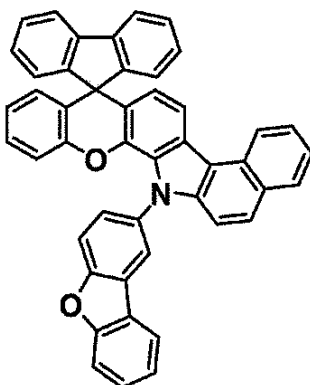
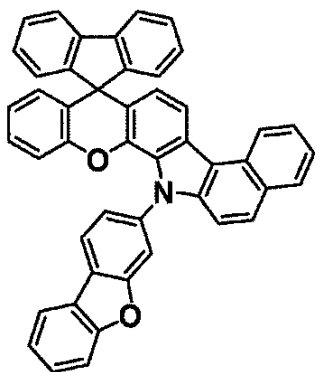
【化 4 7】



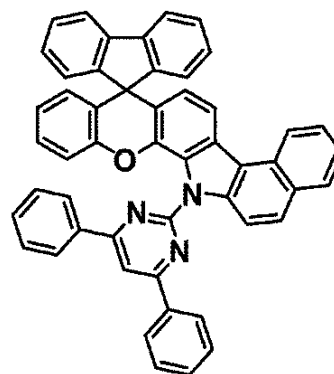
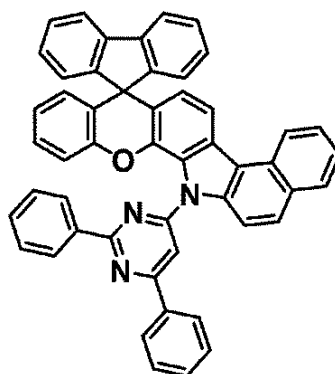
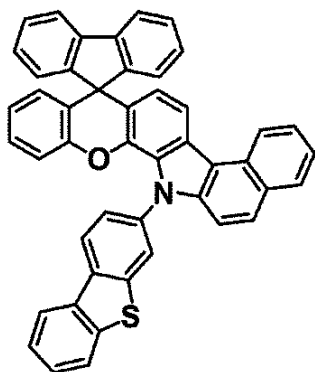
10



20

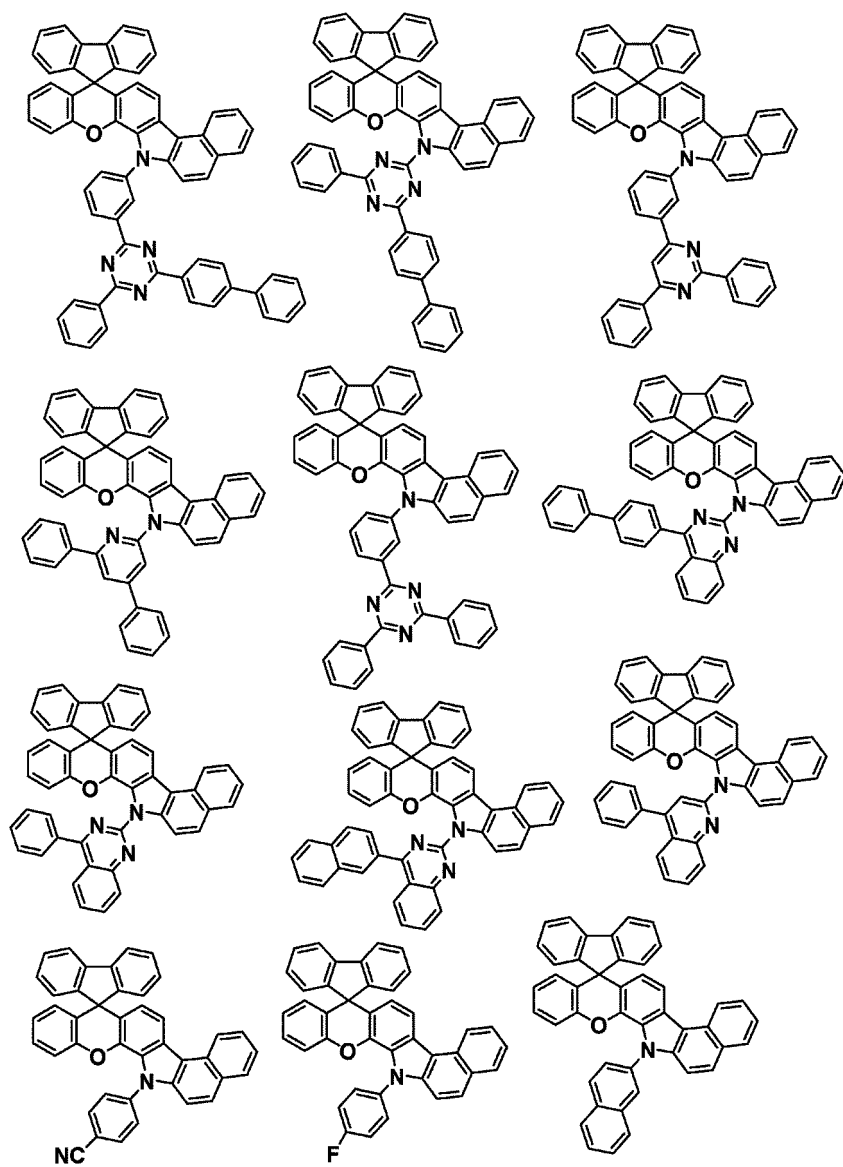


30



40

【化 4 8】

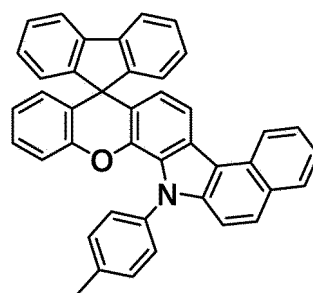
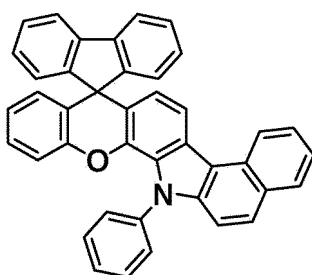
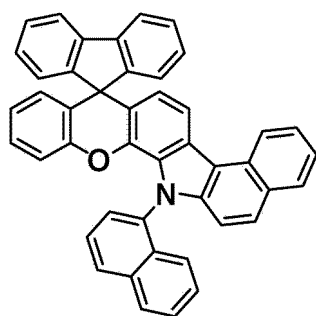


10

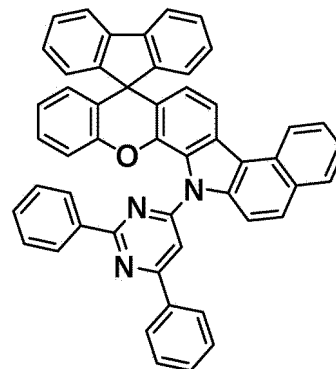
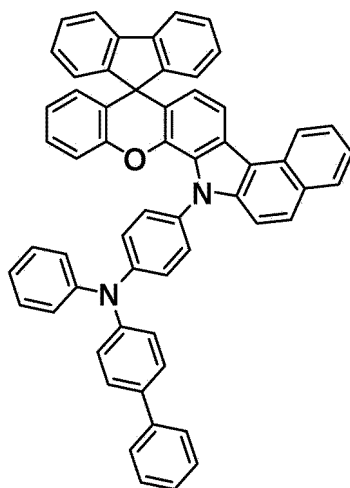
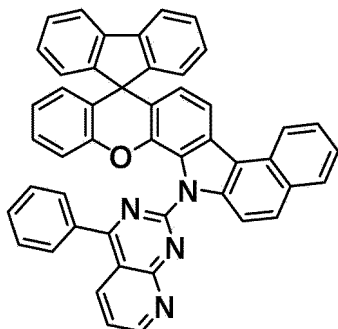
20

30

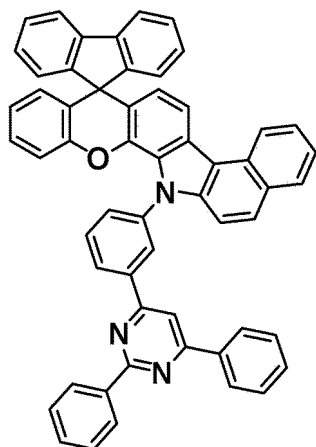
【化 4 9】



10

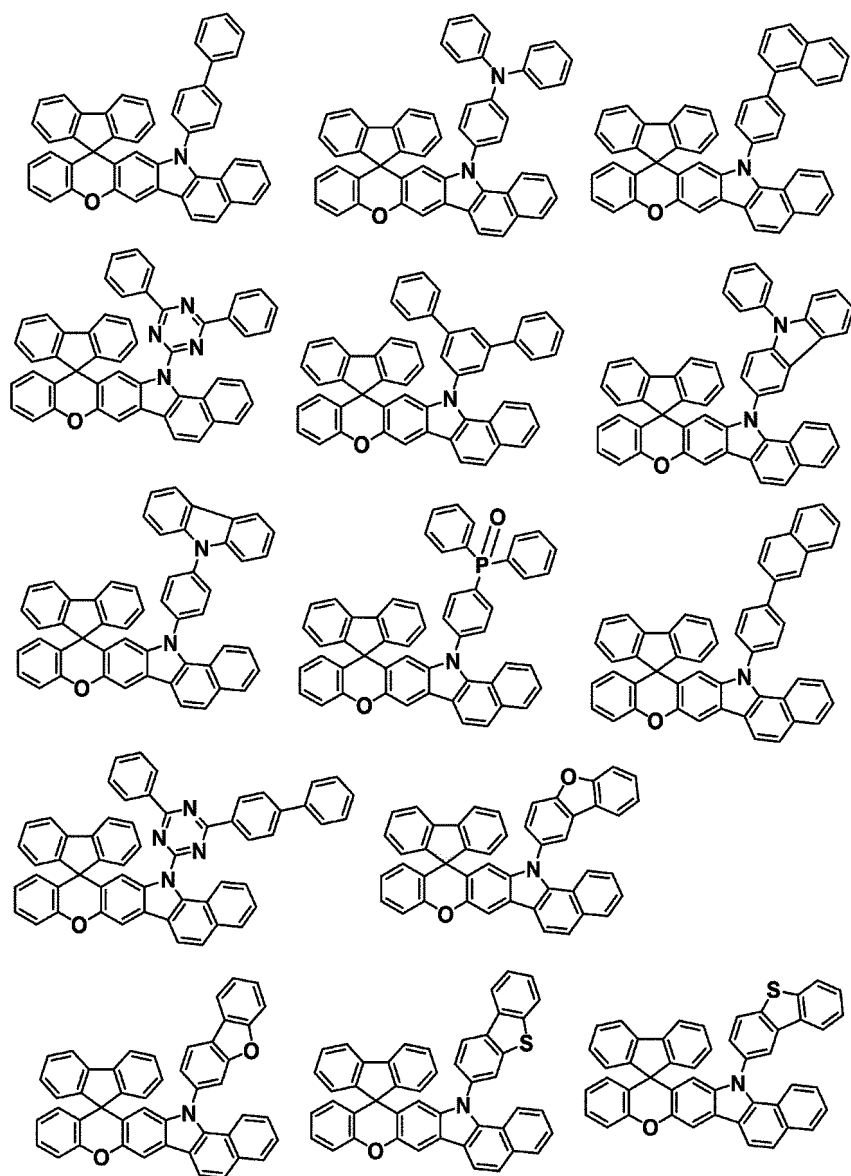


20



30

【化 5 0】

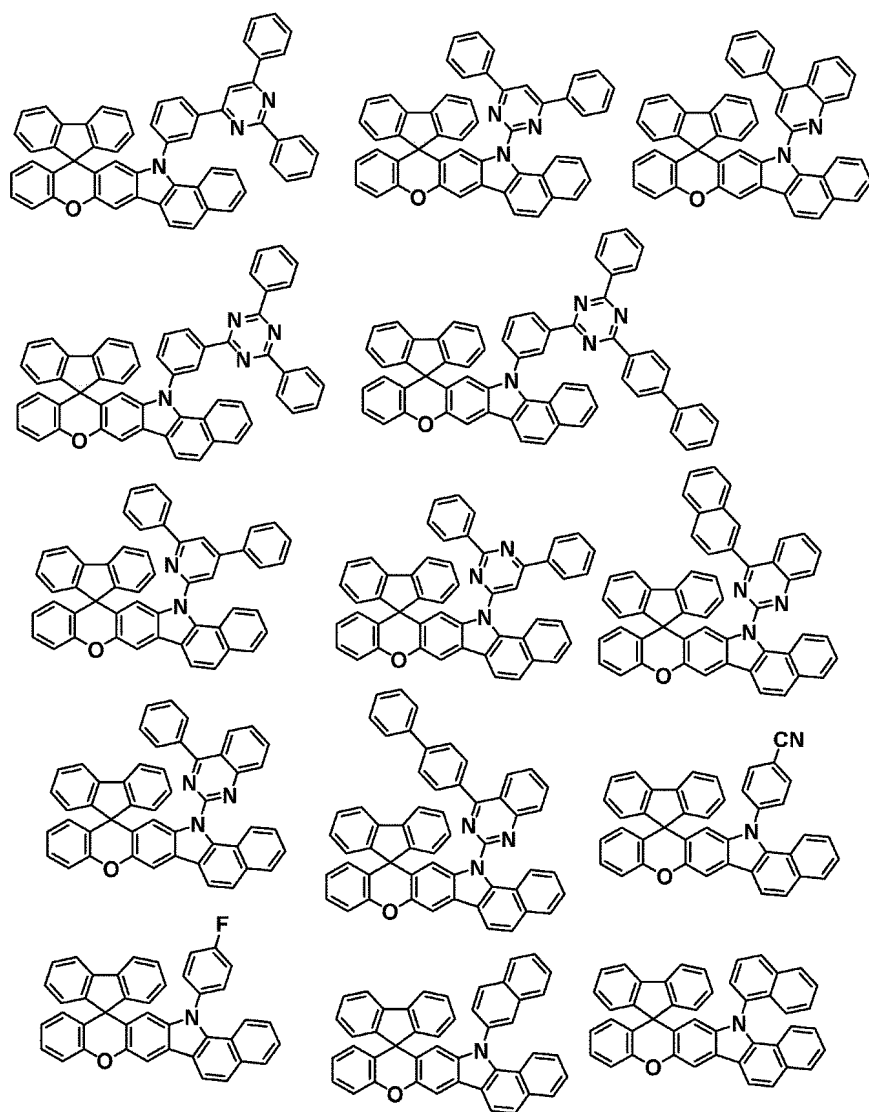


10

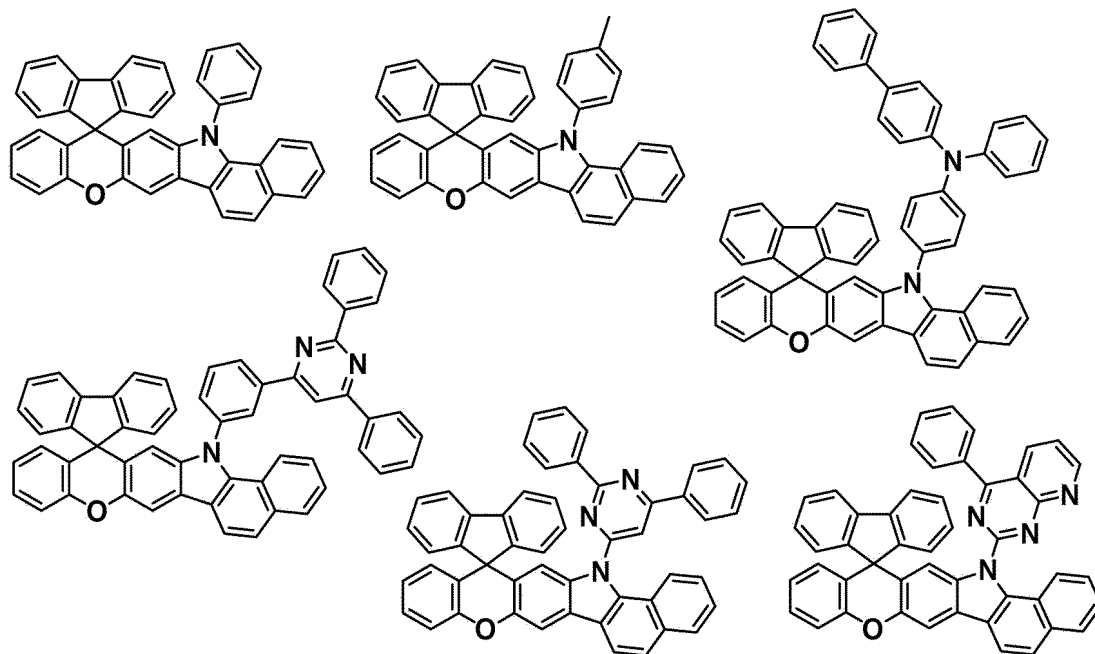
20

30

【化 5 1】



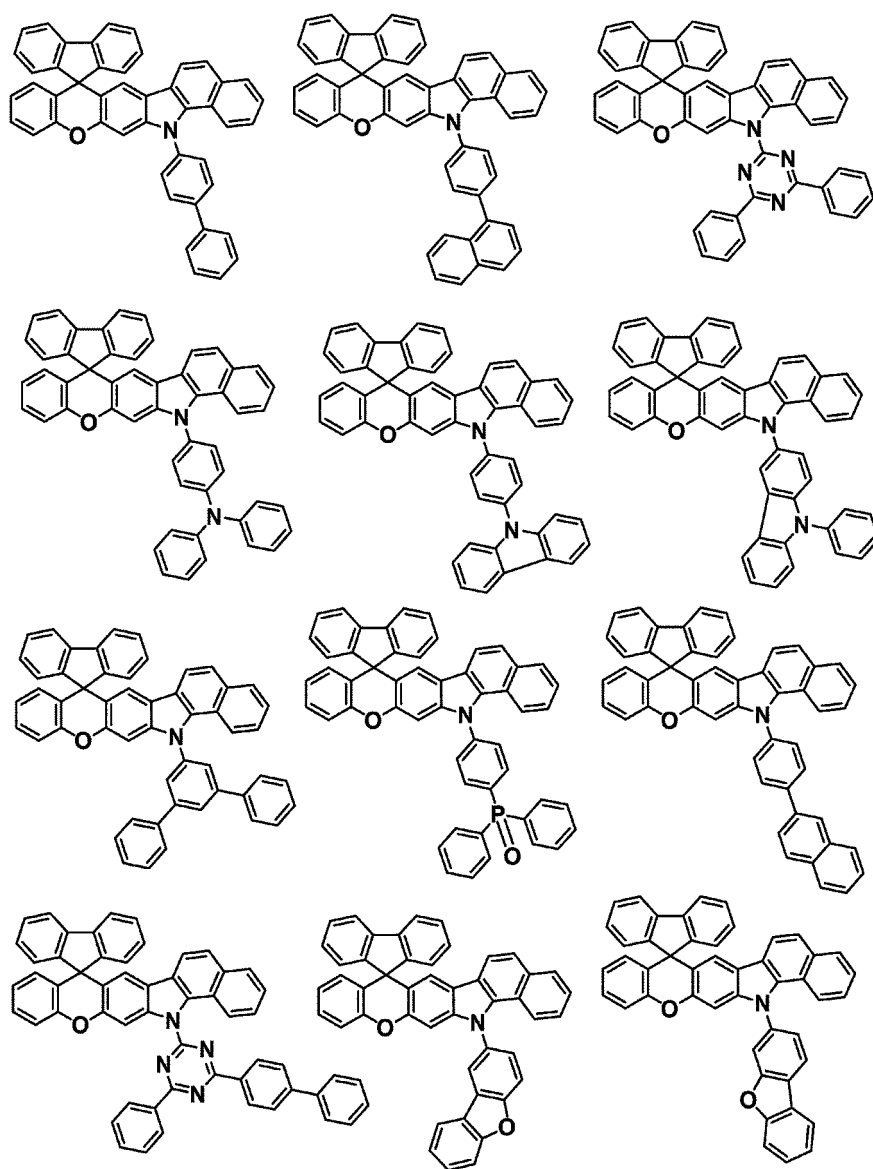
【化 5 2】



10

20

【化 5 3】

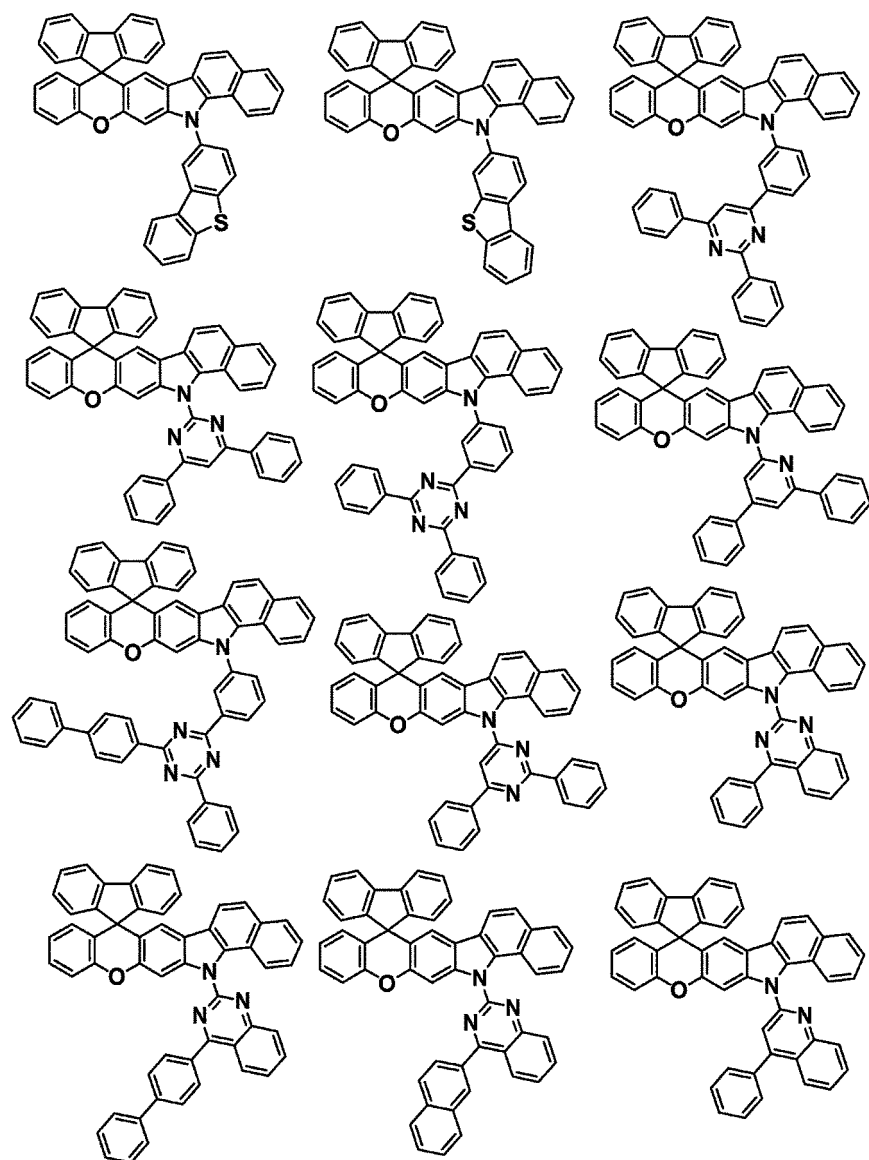


10

20

30

【化 5 4】

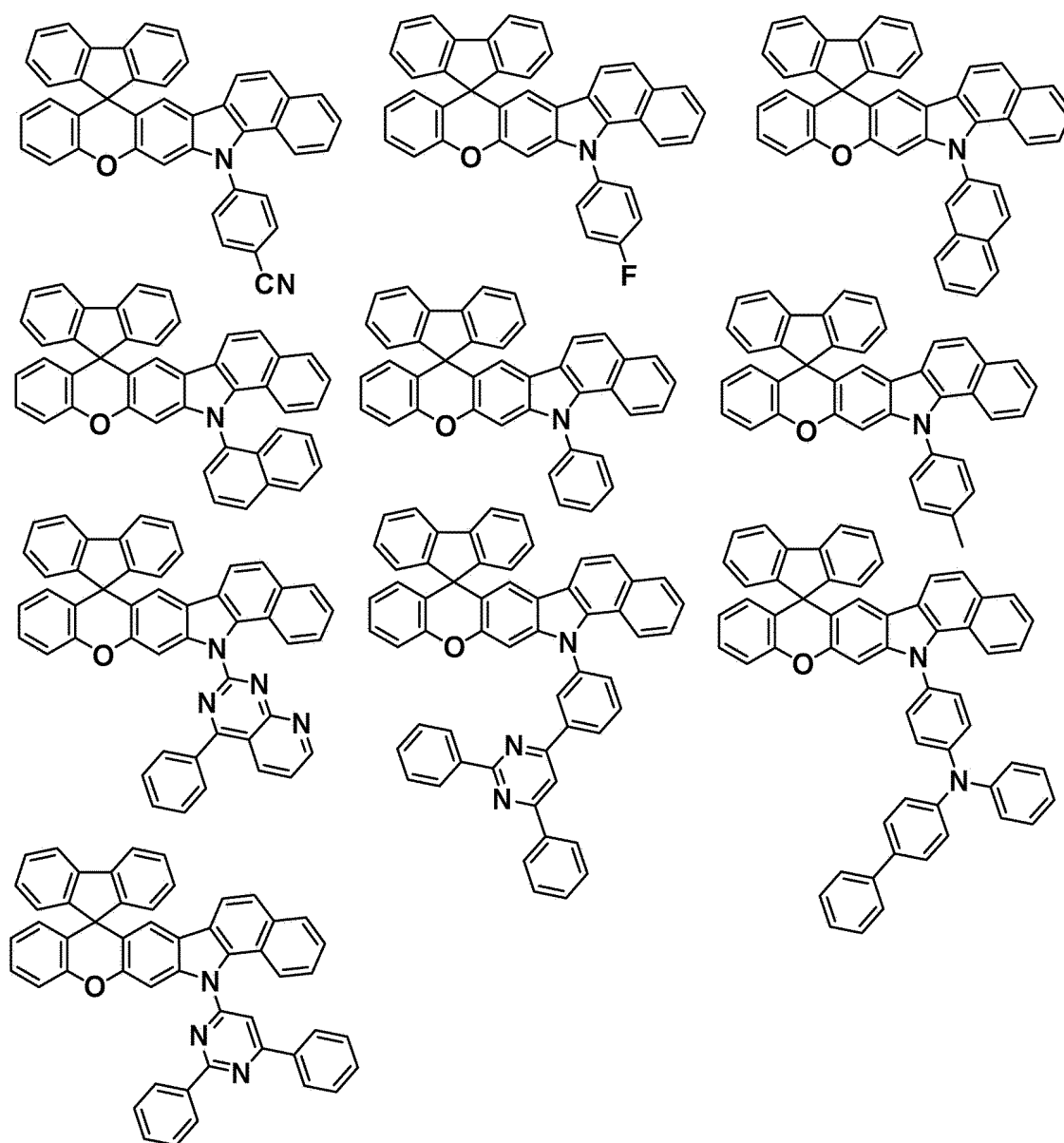


10

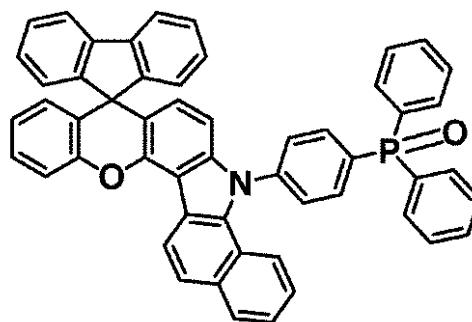
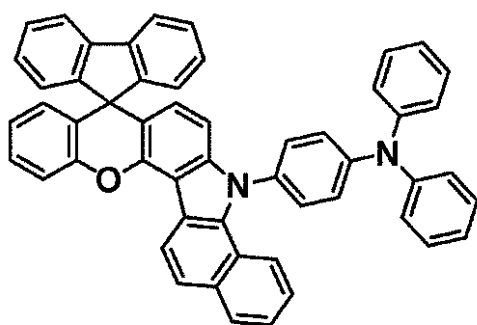
20

30

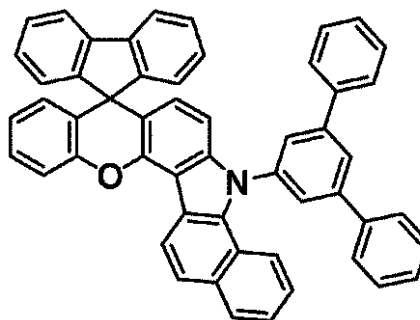
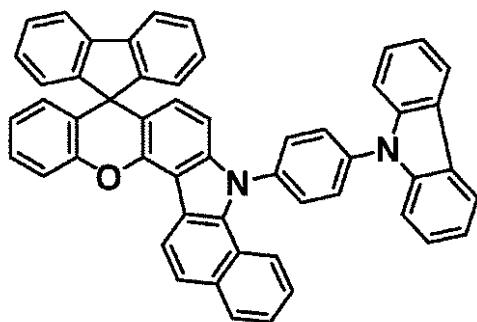
【化 5 5】



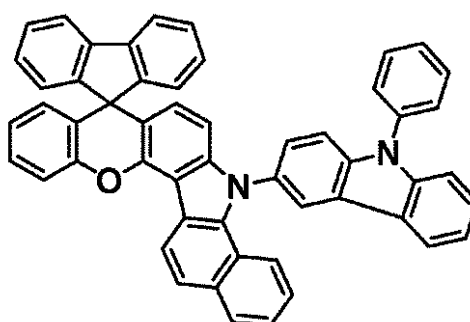
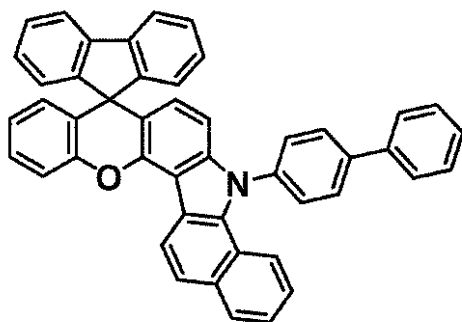
【化 5 6】



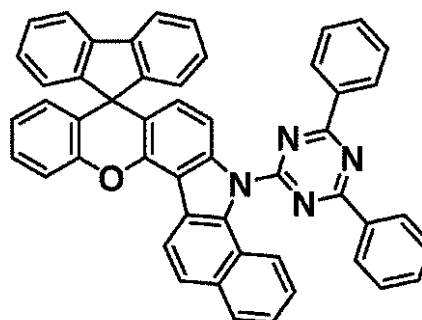
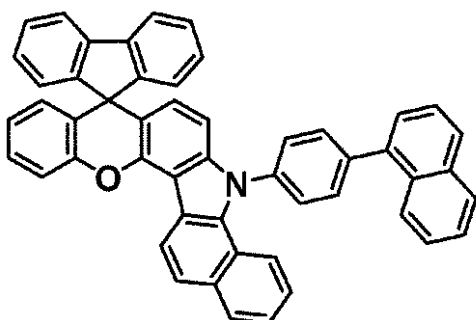
10



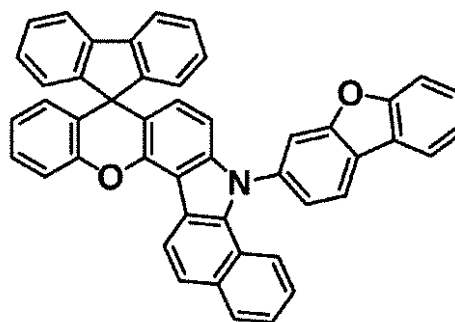
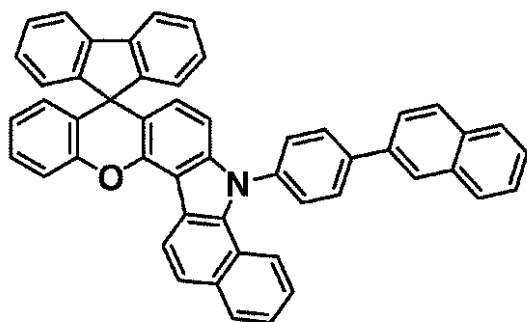
20



30



40

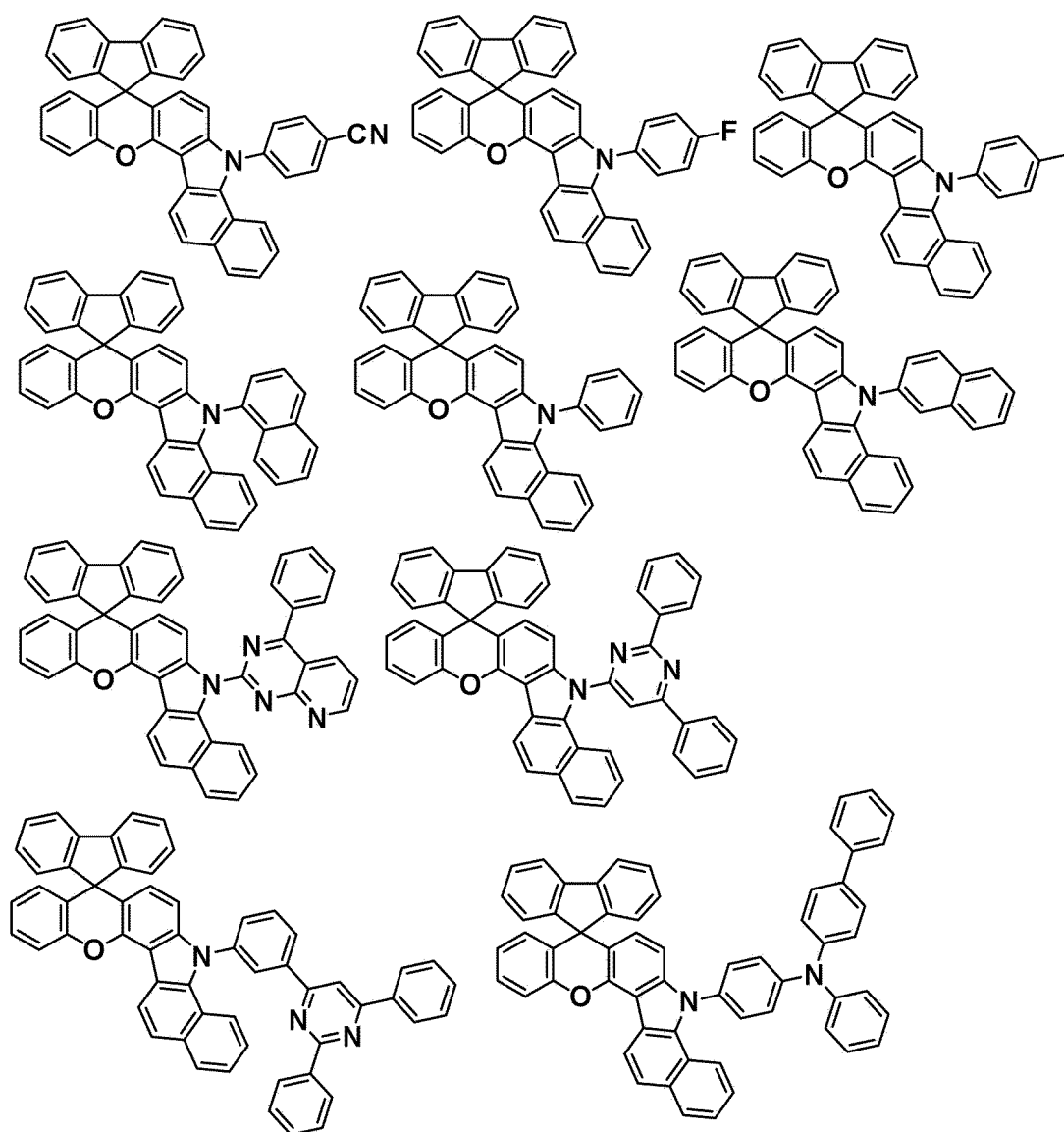


The image displays 12 chemical structures of fluorophore derivatives, arranged in a 4x3 grid. Each structure is based on a fluorene-9,9'-diol core, which is a polycyclic aromatic hydrocarbon with two hydroxyl groups at the 9 and 9' positions. The structures are modified with various substituents at the 2-position of the fluorene system, leading to different photophysical properties.

- Structure 1 (top left):** 2-(benzo[1,2-b:4,5-b']difluoren-2-yl)fluorene-9,9'-diol. It features a fluorene-9,9'-diol core with a fluorenyl group attached at the 2-position.
- Structure 2 (top middle):** 2-(benzo[1,2-b:4,5-b']difluoren-2-yl)fluorene-9,9'-diol. It features a fluorene-9,9'-diol core with a fluorenyl group attached at the 2-position.
- Structure 3 (top right):** 2-(benzo[1,2-b:4,5-b']difluoren-2-yl)fluorene-9,9'-diol. It features a fluorene-9,9'-diol core with a fluorenyl group attached at the 2-position.
- Structure 4 (second row, left):** 2-(1,3-phenylene)-5,5'-bis(phenyl)-2,2'-bipyridine-4,4'-diyl fluorene-9,9'-diol. It features a fluorene-9,9'-diol core with a 1,3-phenylene group attached at the 2-position.
- Structure 5 (second row, middle):** 2-(1,3-phenylene)-5,5'-bis(phenyl)-2,2'-bipyridine-4,4'-diyl fluorene-9,9'-diol. It features a fluorene-9,9'-diol core with a 1,3-phenylene group attached at the 2-position.
- Structure 6 (second row, right):** 2-(1,3-phenylene)-5,5'-bis(phenyl)-2,2'-bipyridine-4,4'-diyl fluorene-9,9'-diol. It features a fluorene-9,9'-diol core with a 1,3-phenylene group attached at the 2-position.
- Structure 7 (third row, left):** 2-(1,3-phenylene)-5,5'-bis(phenyl)-2,2'-bipyridine-4,4'-diyl fluorene-9,9'-diol. It features a fluorene-9,9'-diol core with a 1,3-phenylene group attached at the 2-position.
- Structure 8 (third row, middle):** 2-(1,3-phenylene)-5,5'-bis(phenyl)-2,2'-bipyridine-4,4'-diyl fluorene-9,9'-diol. It features a fluorene-9,9'-diol core with a 1,3-phenylene group attached at the 2-position.
- Structure 9 (third row, right):** 2-(1,3-phenylene)-5,5'-bis(phenyl)-2,2'-bipyridine-4,4'-diyl fluorene-9,9'-diol. It features a fluorene-9,9'-diol core with a 1,3-phenylene group attached at the 2-position.
- Structure 10 (bottom row, left):** 2-(1,3-phenylene)-5,5'-bis(phenyl)-2,2'-bipyridine-4,4'-diyl fluorene-9,9'-diol. It features a fluorene-9,9'-diol core with a 1,3-phenylene group attached at the 2-position.
- Structure 11 (bottom row, middle):** 2-(1,3-phenylene)-5,5'-bis(phenyl)-2,2'-bipyridine-4,4'-diyl fluorene-9,9'-diol. It features a fluorene-9,9'-diol core with a 1,3-phenylene group attached at the 2-position.
- Structure 12 (bottom row, right):** 2-(1,3-phenylene)-5,5'-bis(phenyl)-2,2'-bipyridine-4,4'-diyl fluorene-9,9'-diol. It features a fluorene-9,9'-diol core with a 1,3-phenylene group attached at the 2-position.

30

【化 5 8】

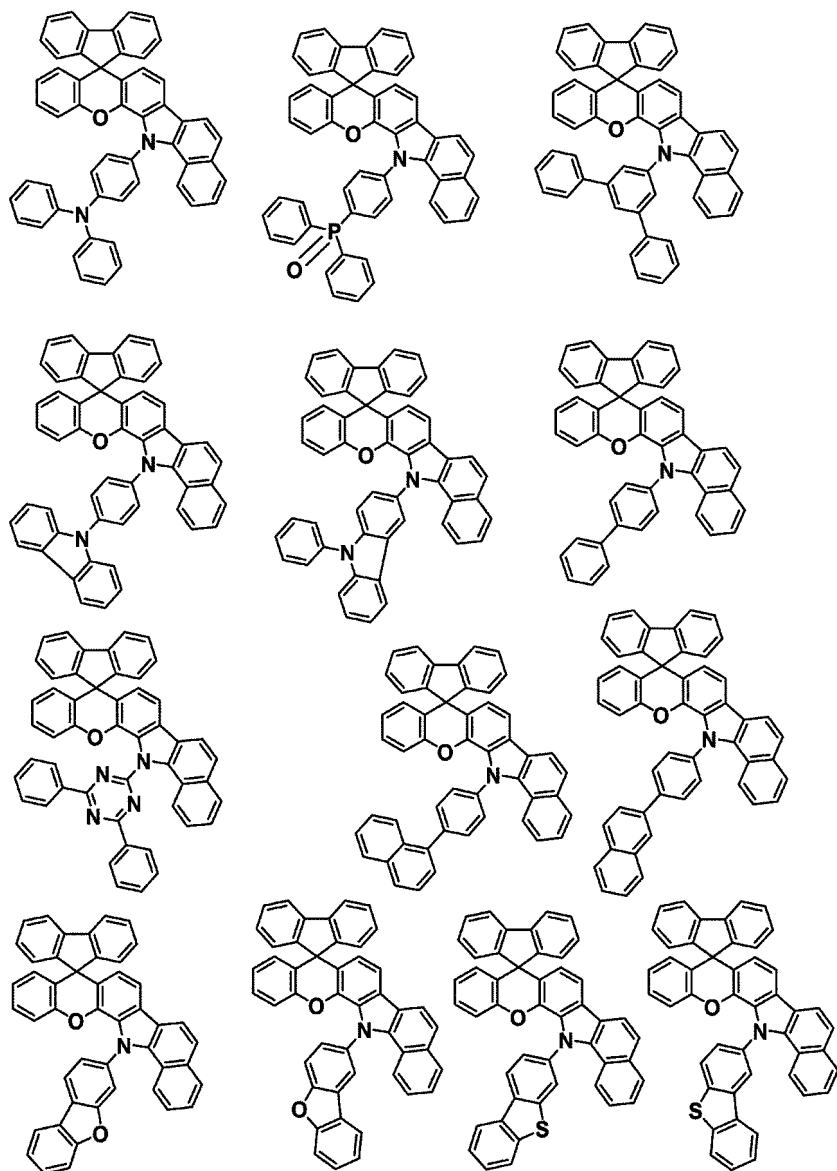


10

20

30

【化 5 9】

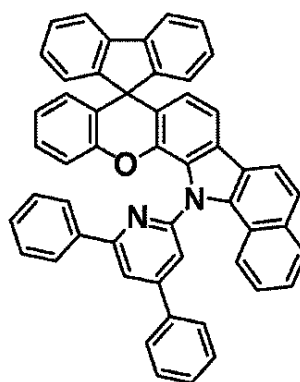
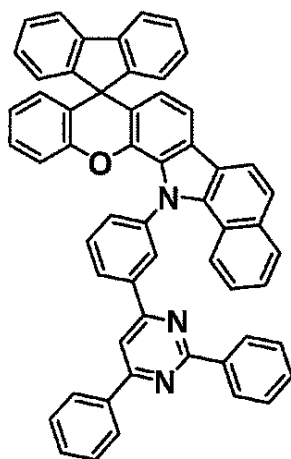
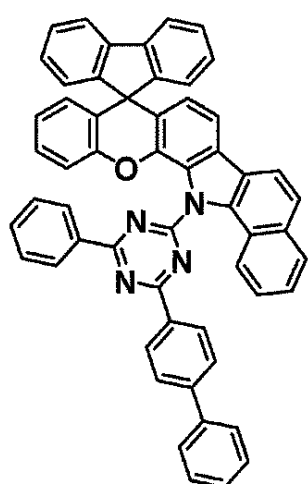


10

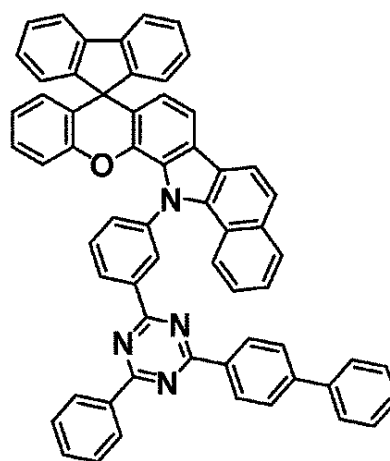
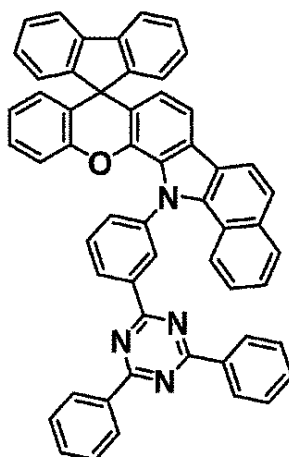
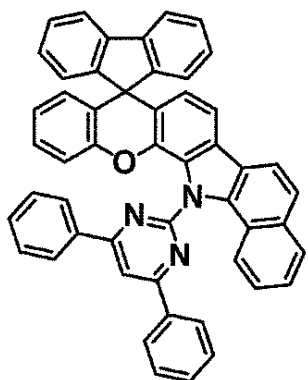
20

30

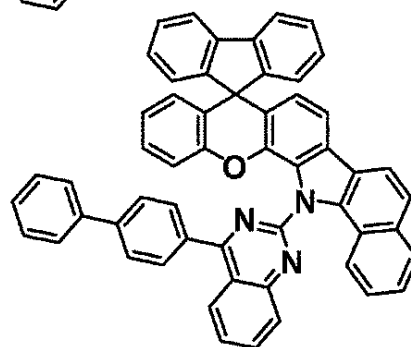
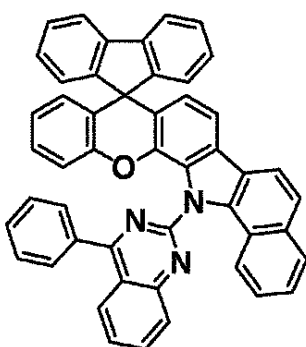
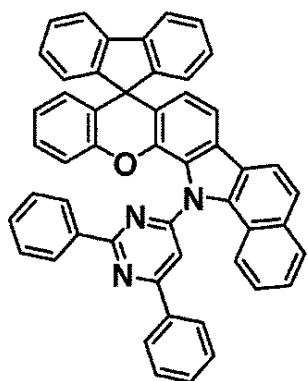
【化 6 0】



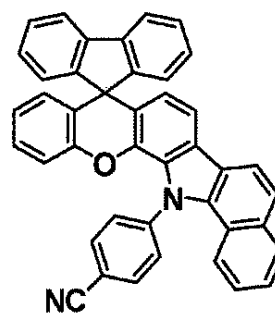
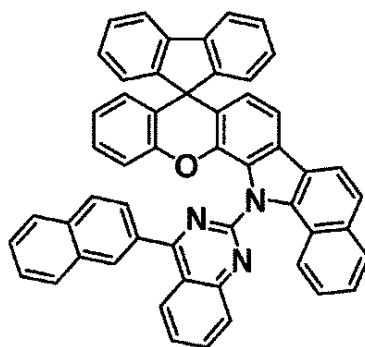
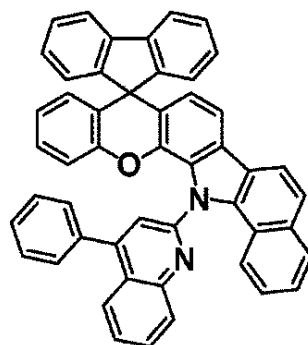
10



20

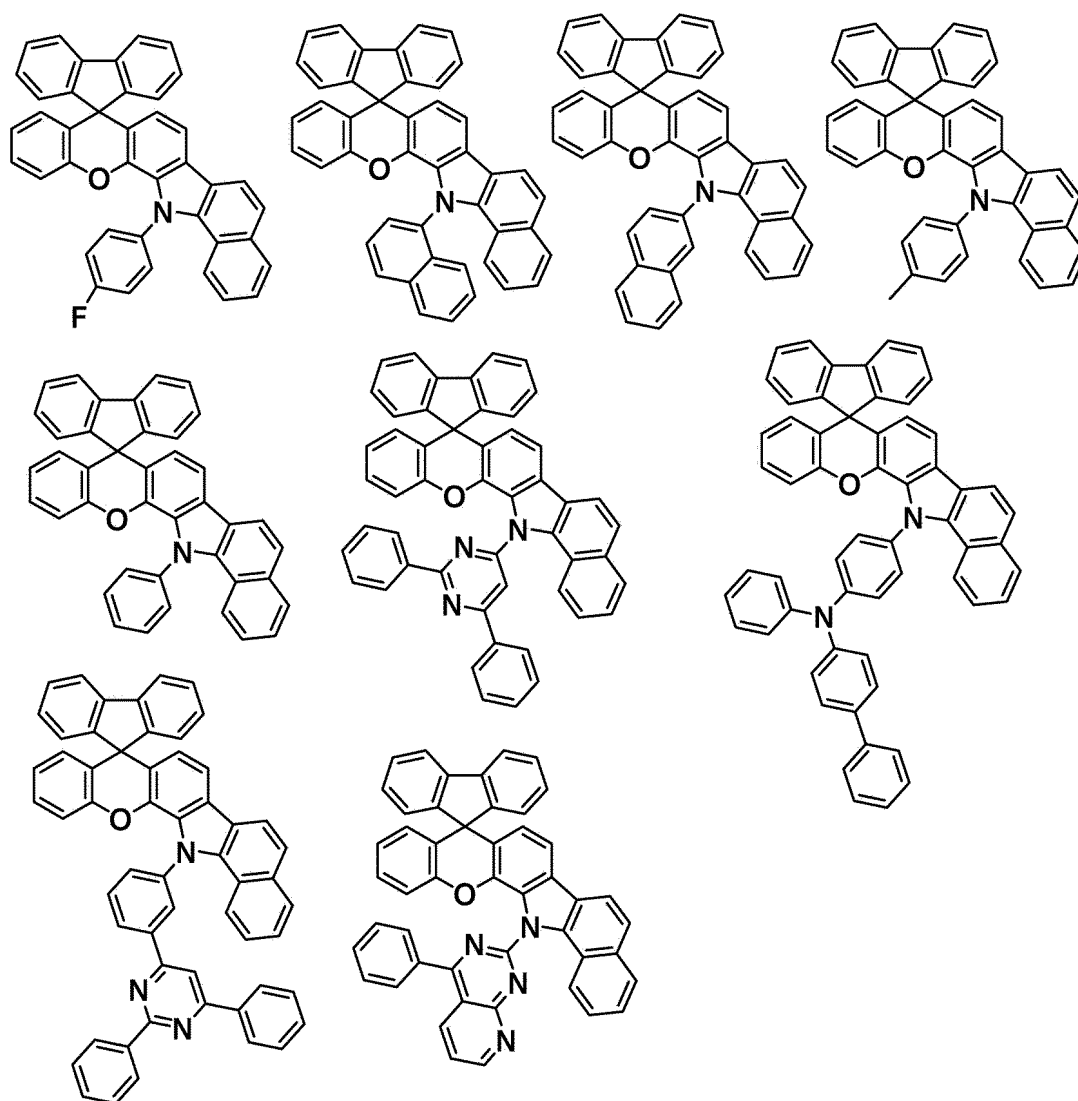


30



40

【化 6 1】

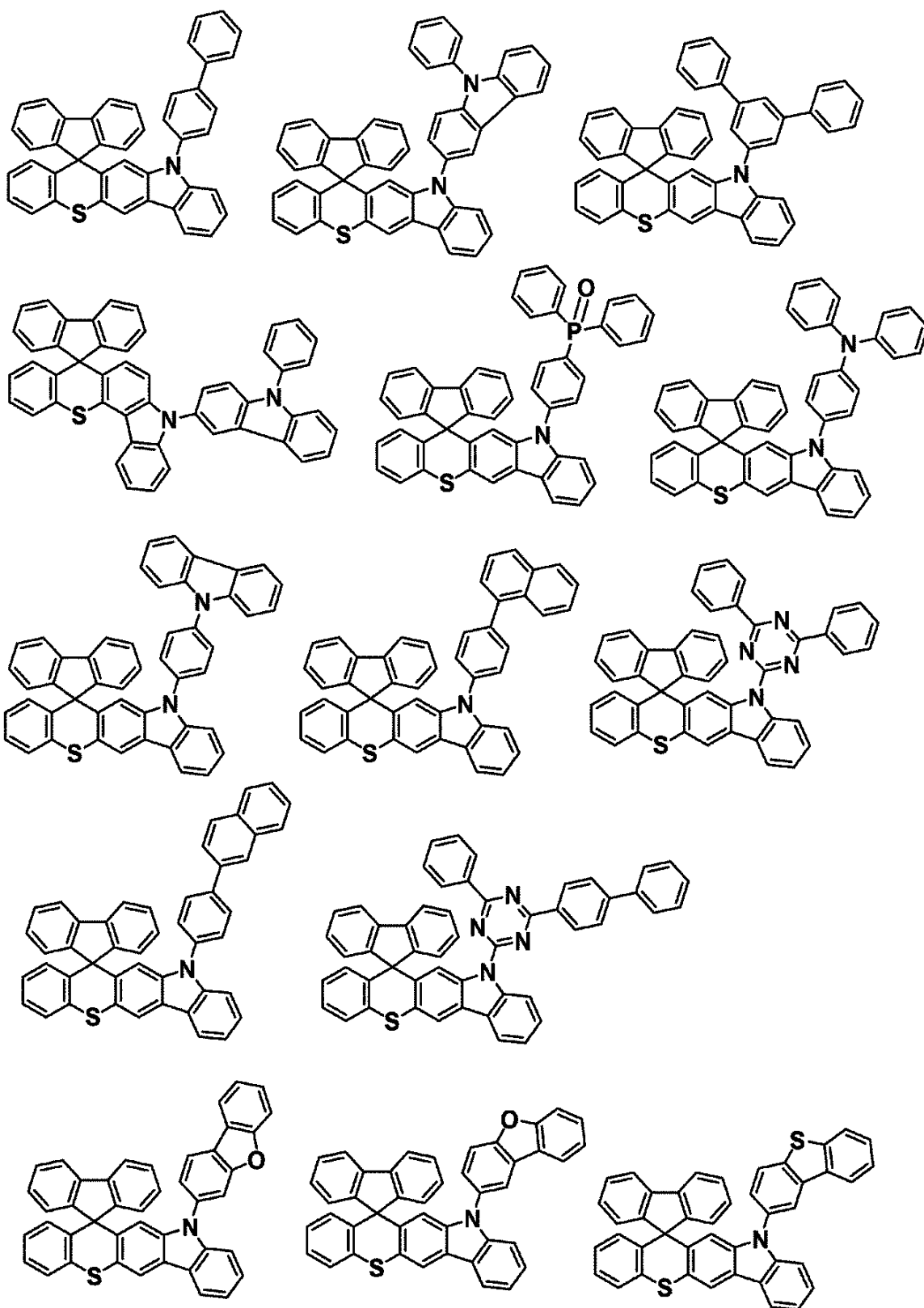


10

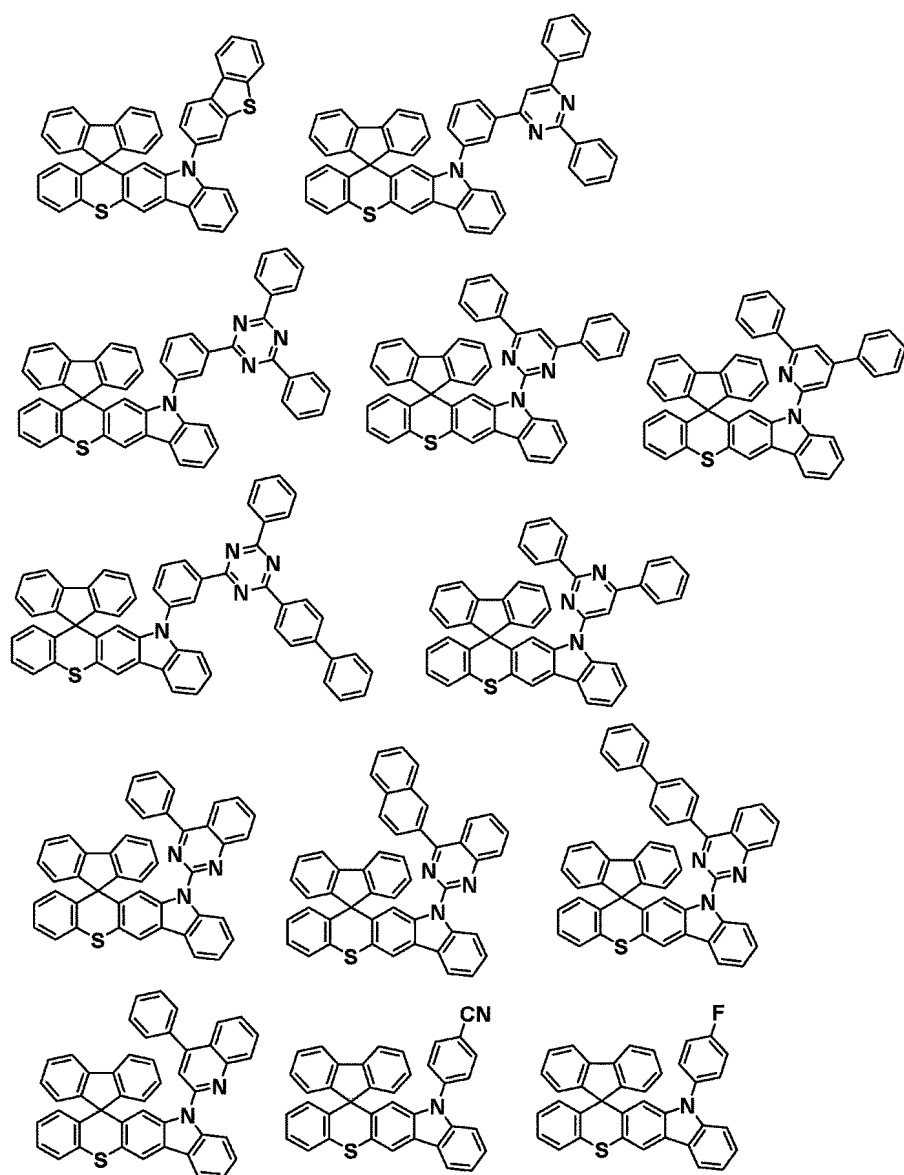
20

30

【化 6 2】



【化 6 3】

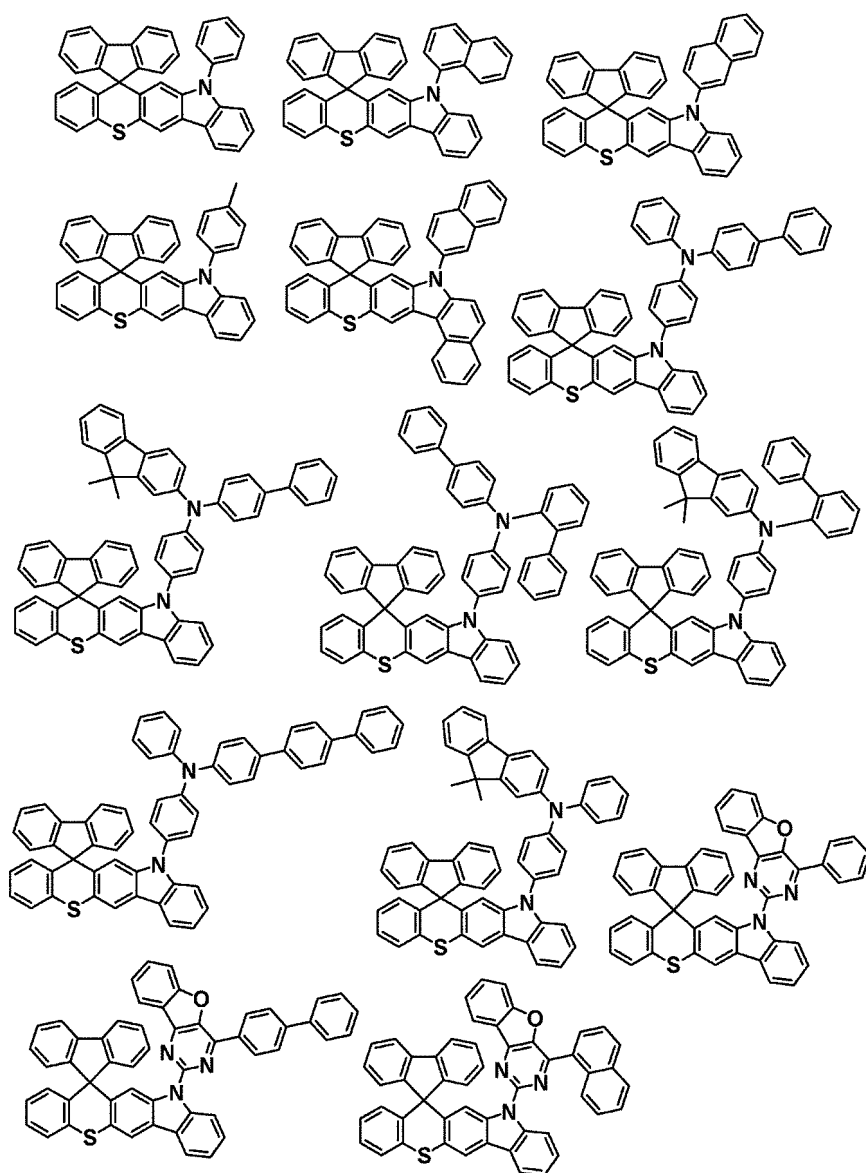


10

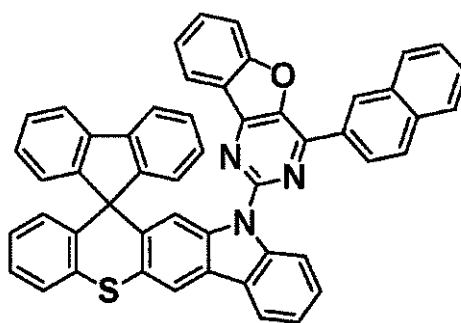
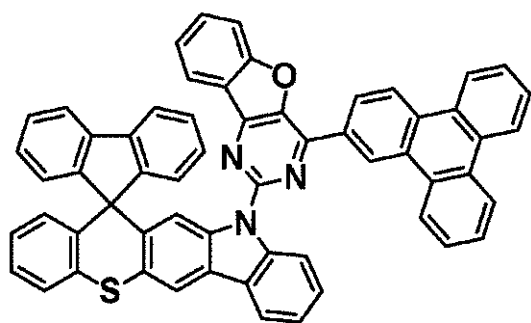
20

30

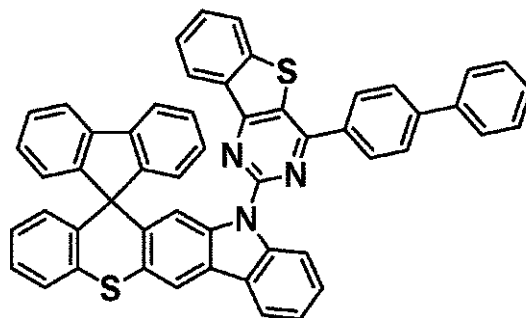
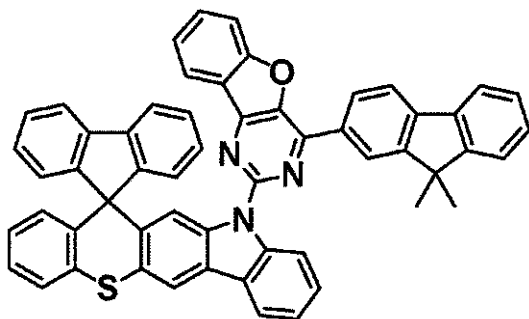
【化 6 4】



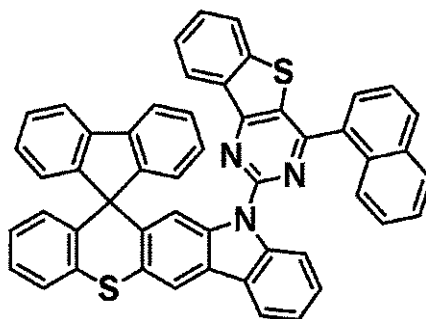
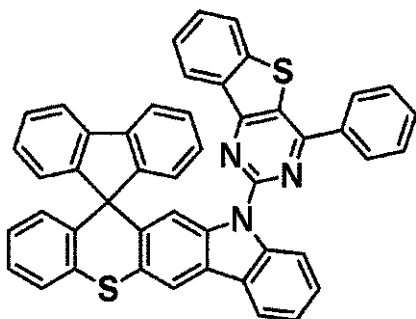
【化 6 5】



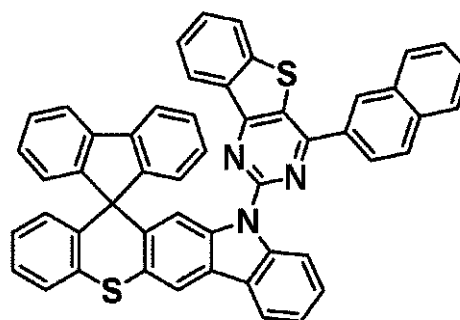
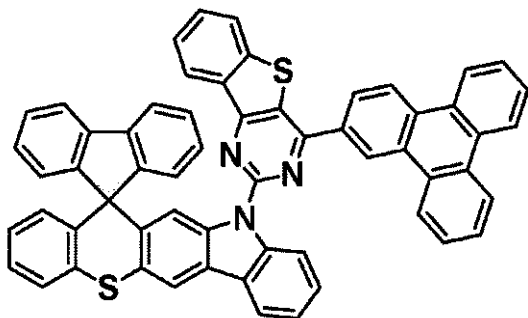
10



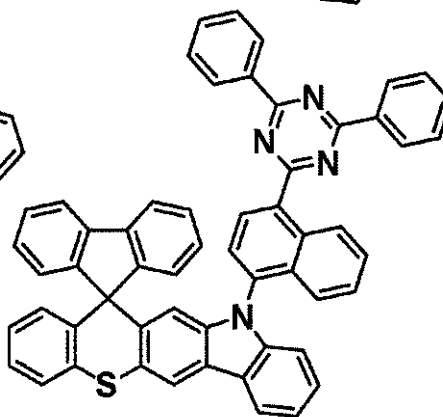
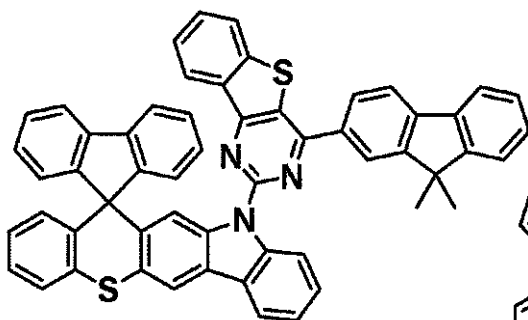
20



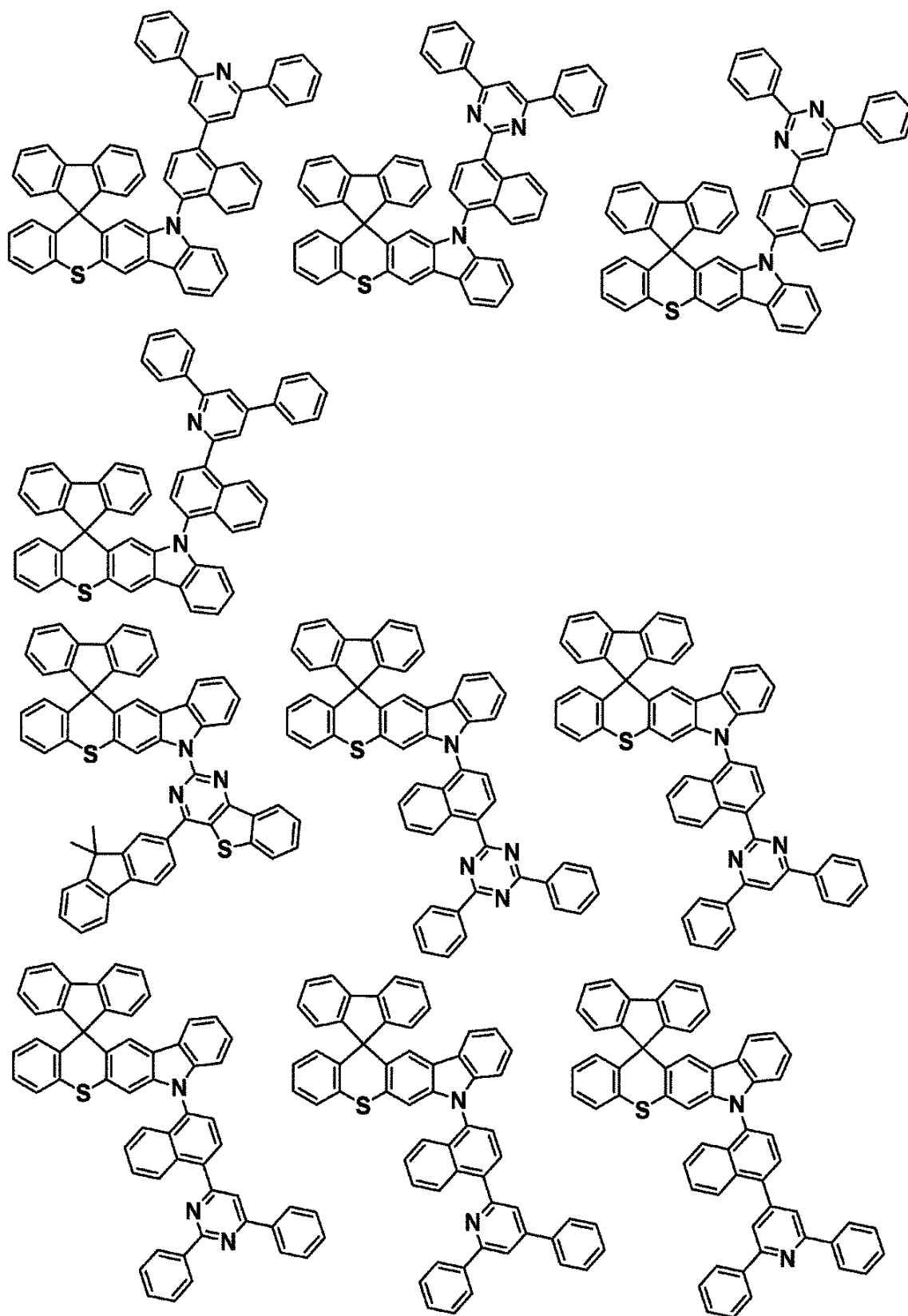
30



40



【化 6 6】



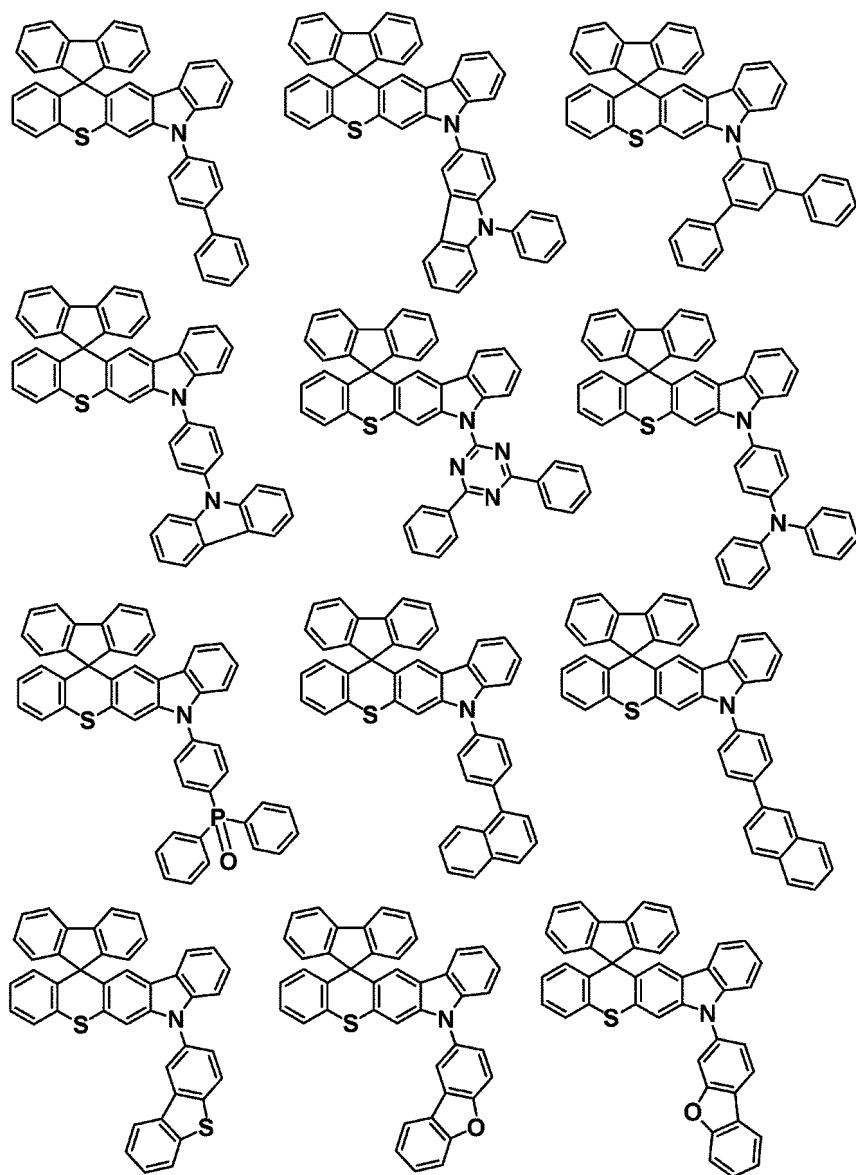
10

20

30

40

【化 6 7】

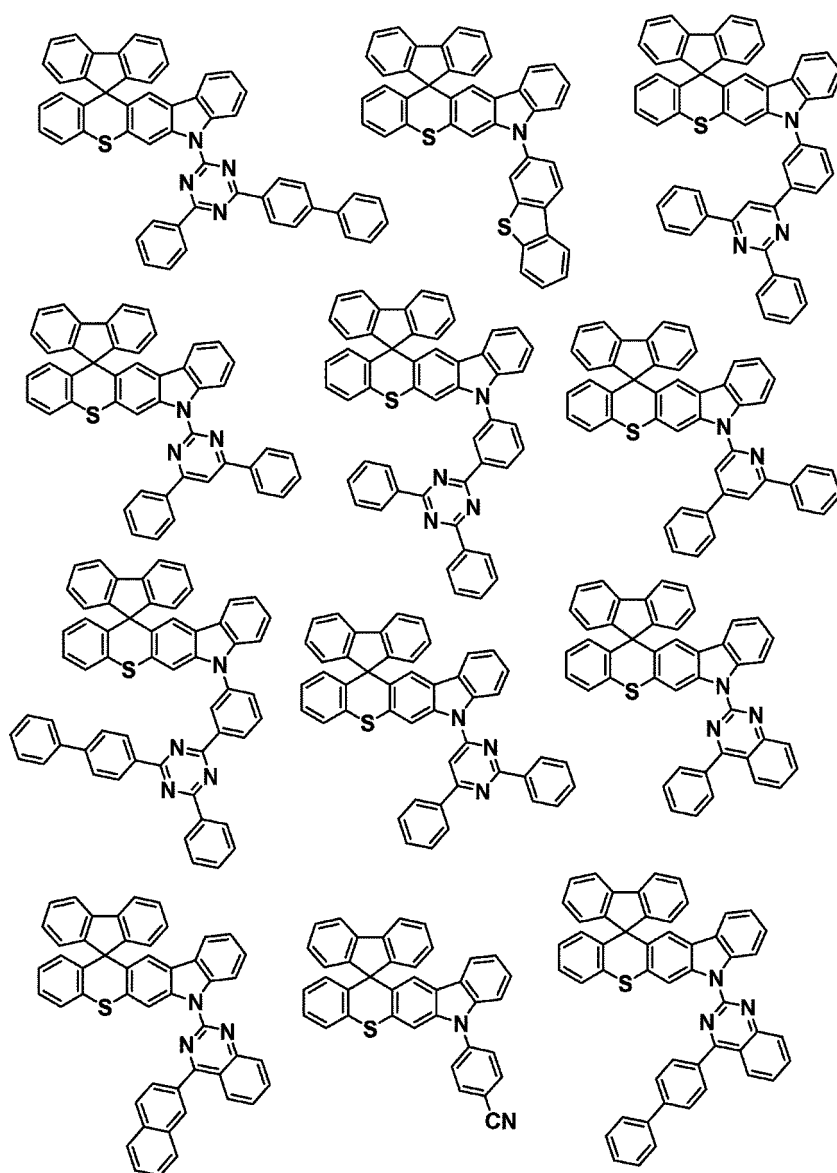


10

20

30

【化 6 8】

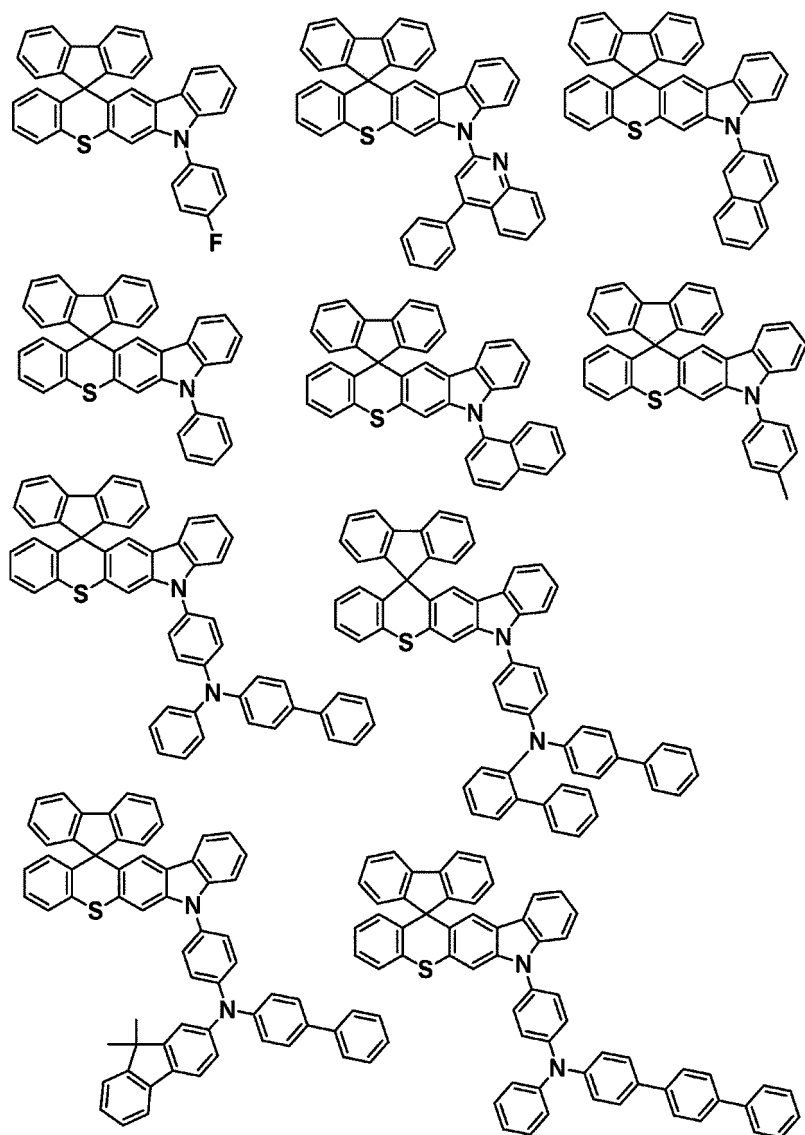


10

20

30

【化 6 9】

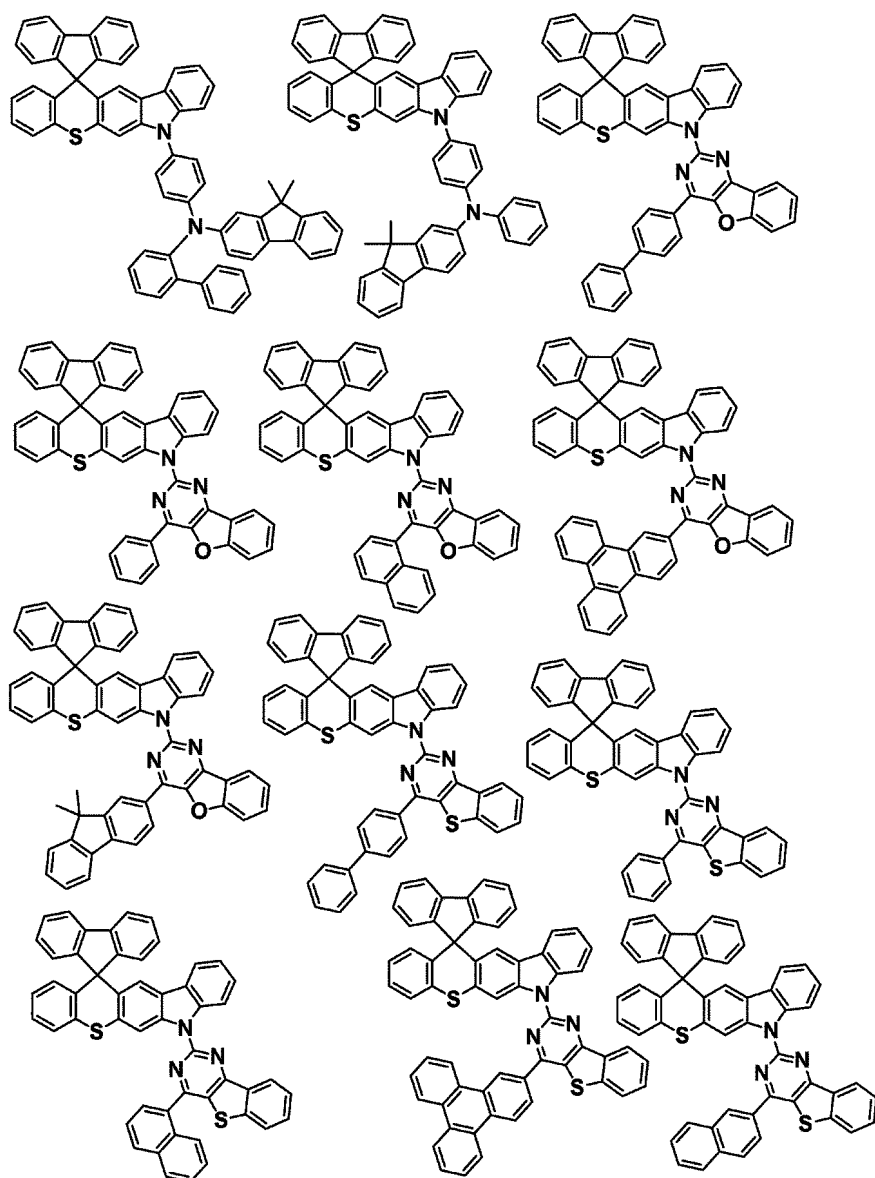


10

20

30

【化 7 0】

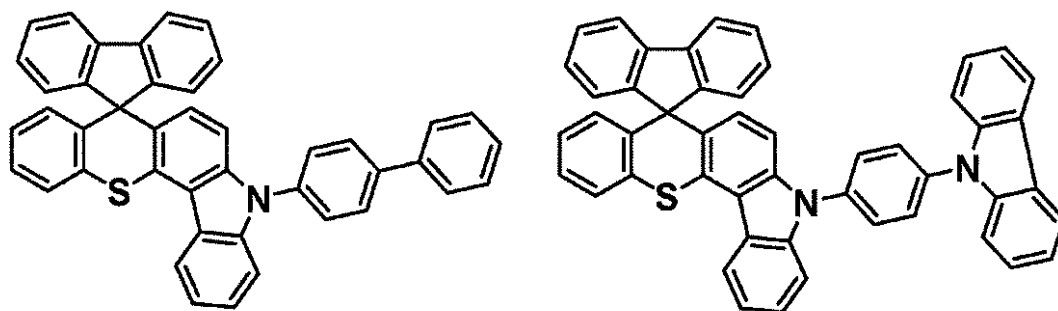


10

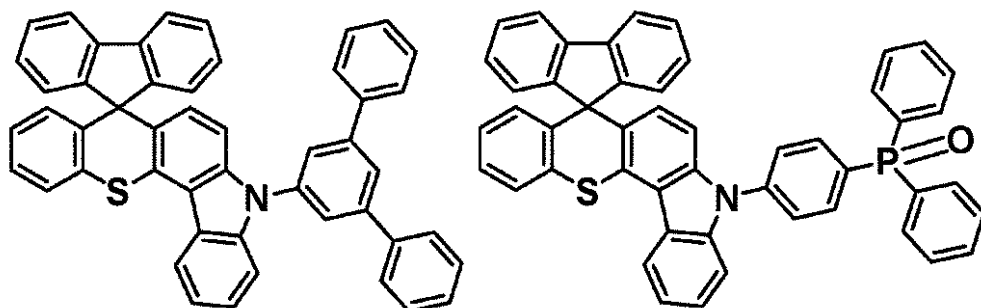
20

30

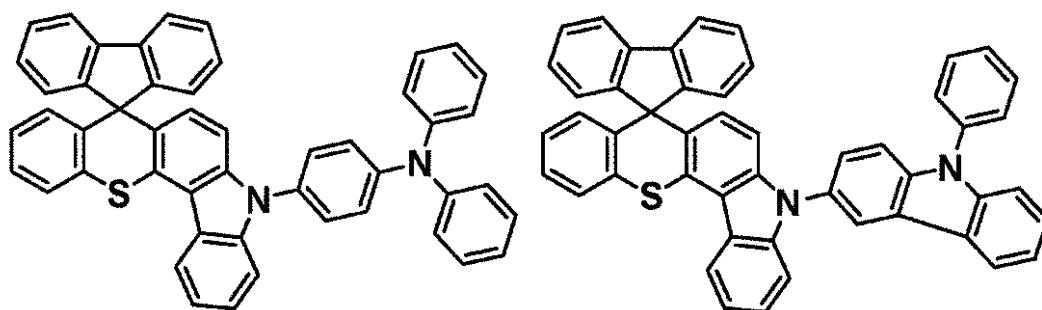
【化 7 1】



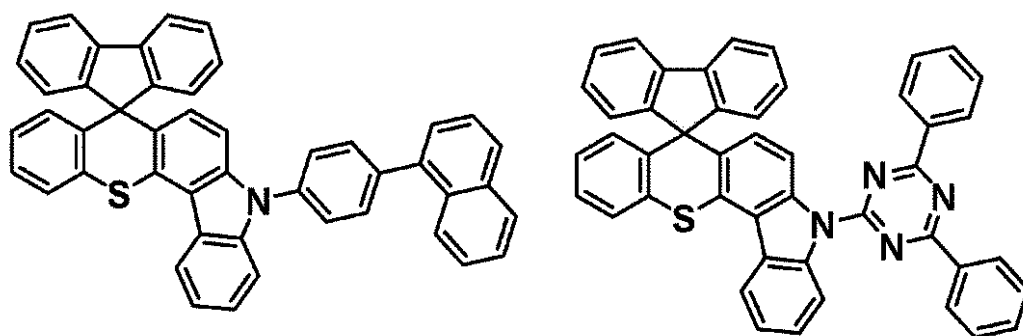
10



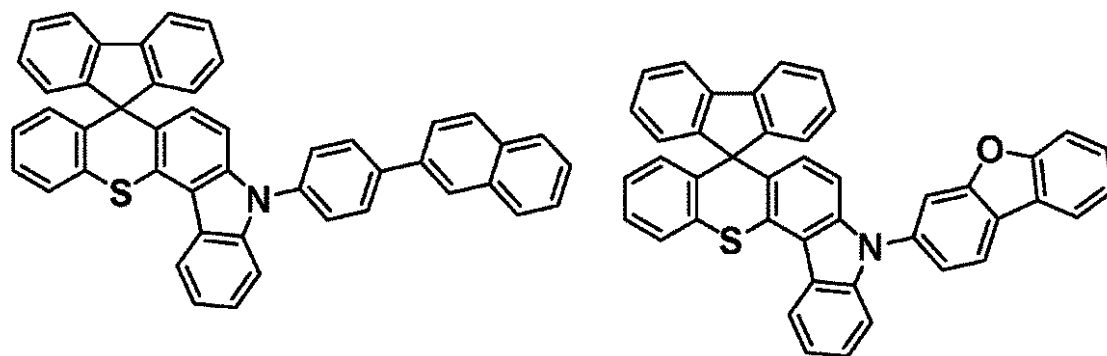
20



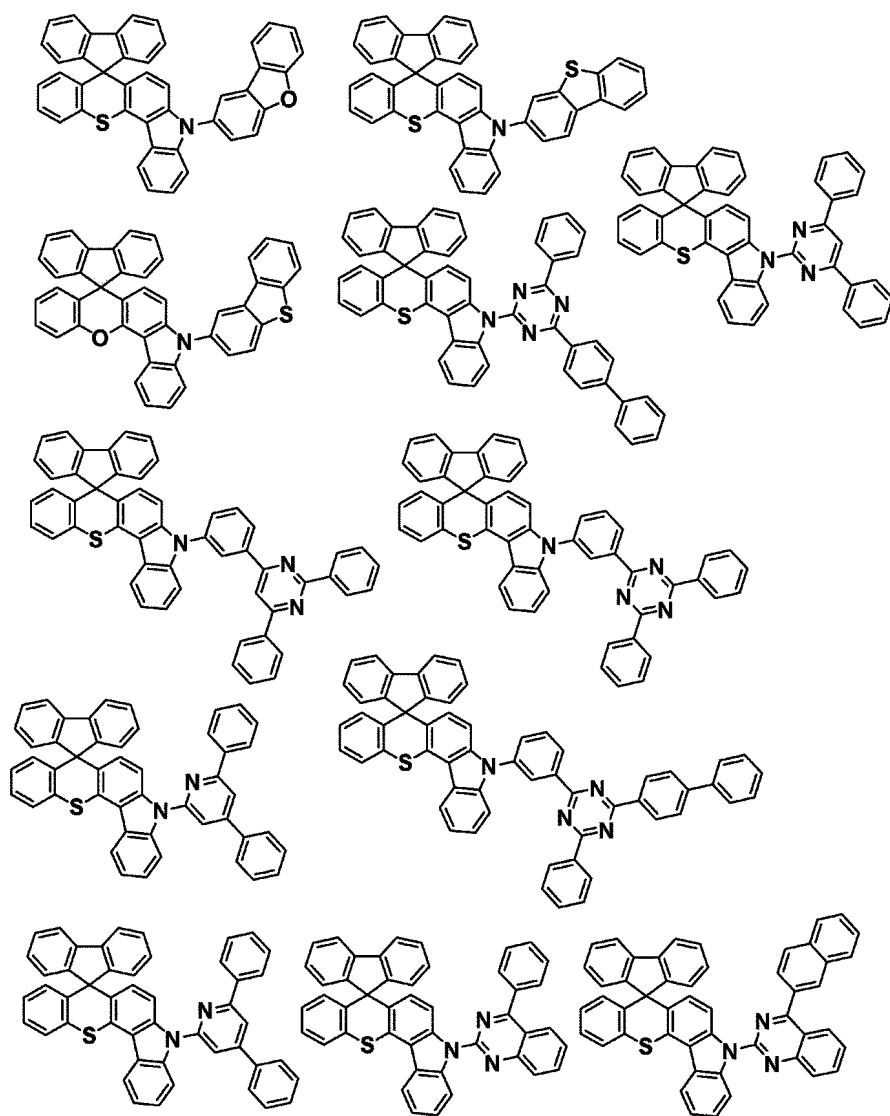
30



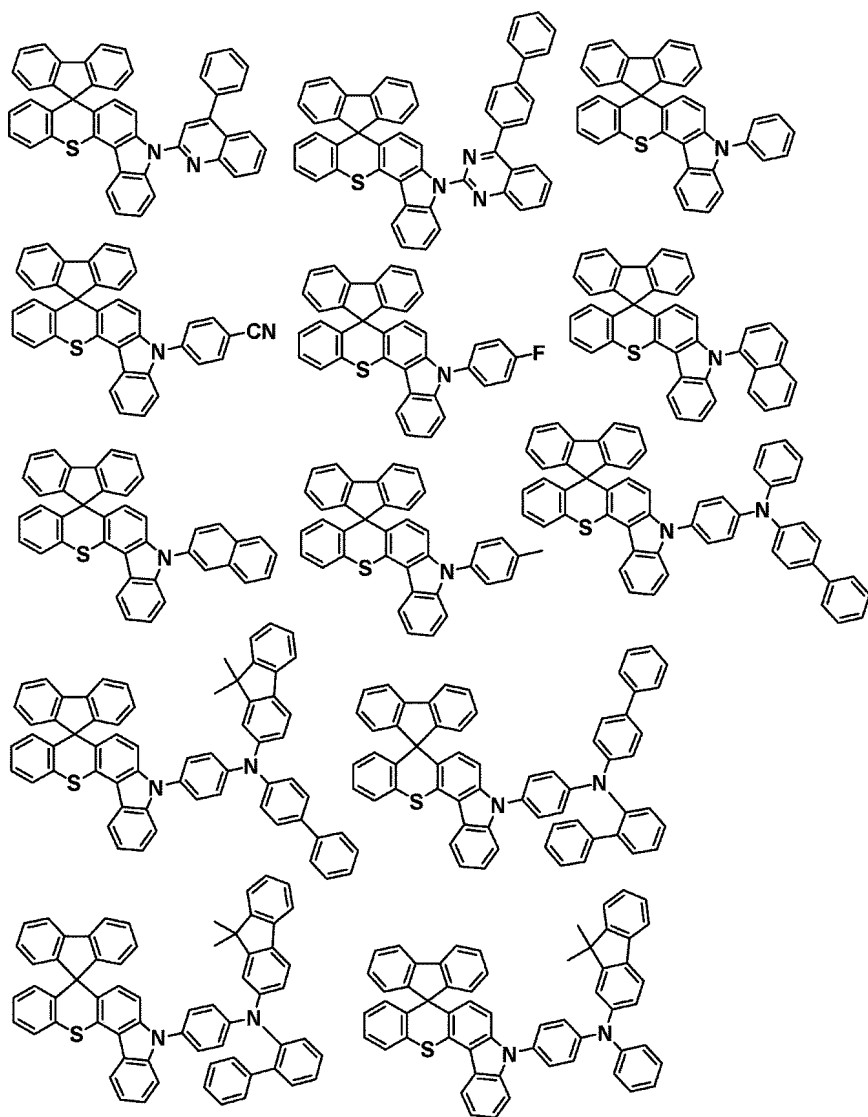
40



【化 7 2】



【化 7 3】

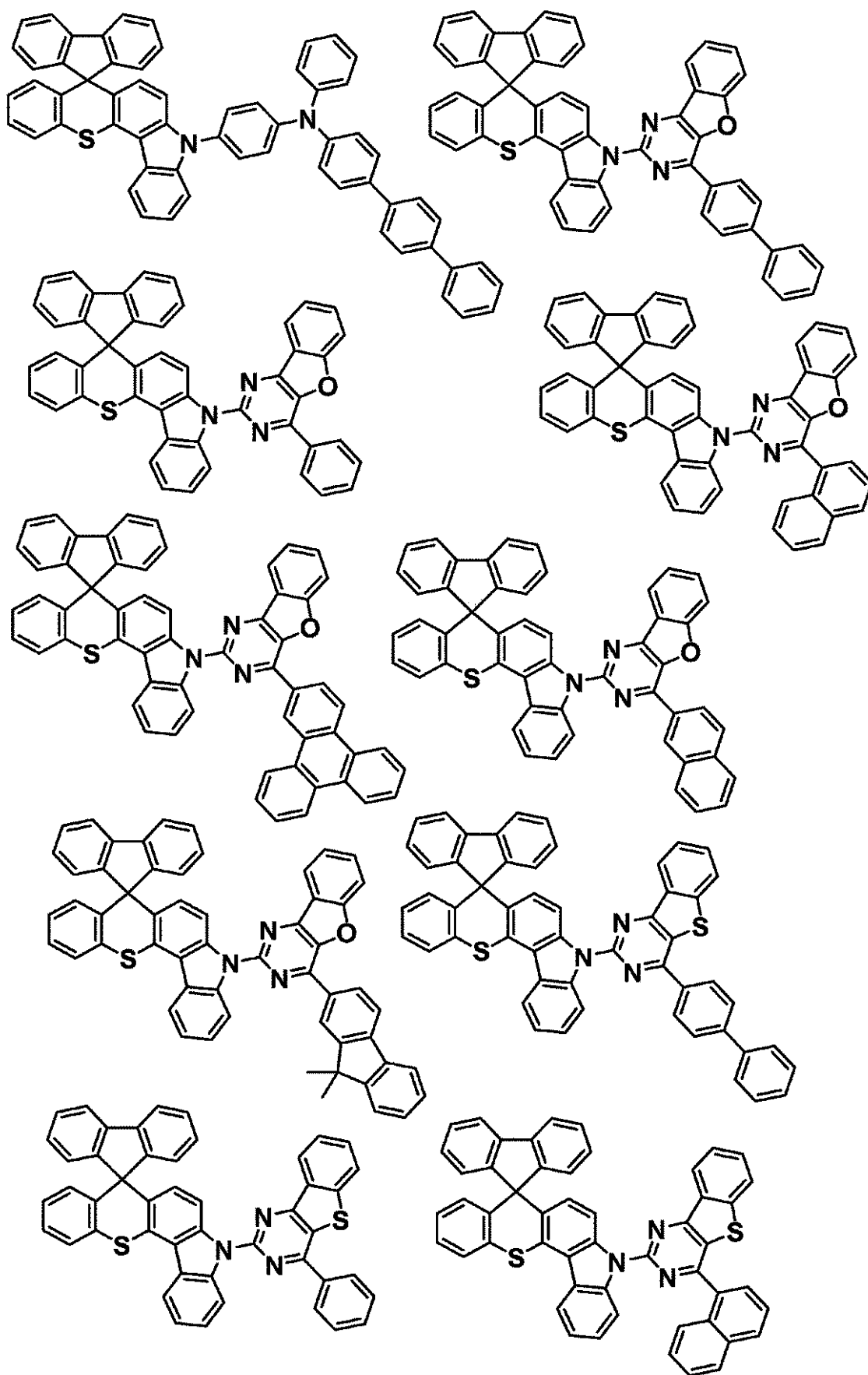


10

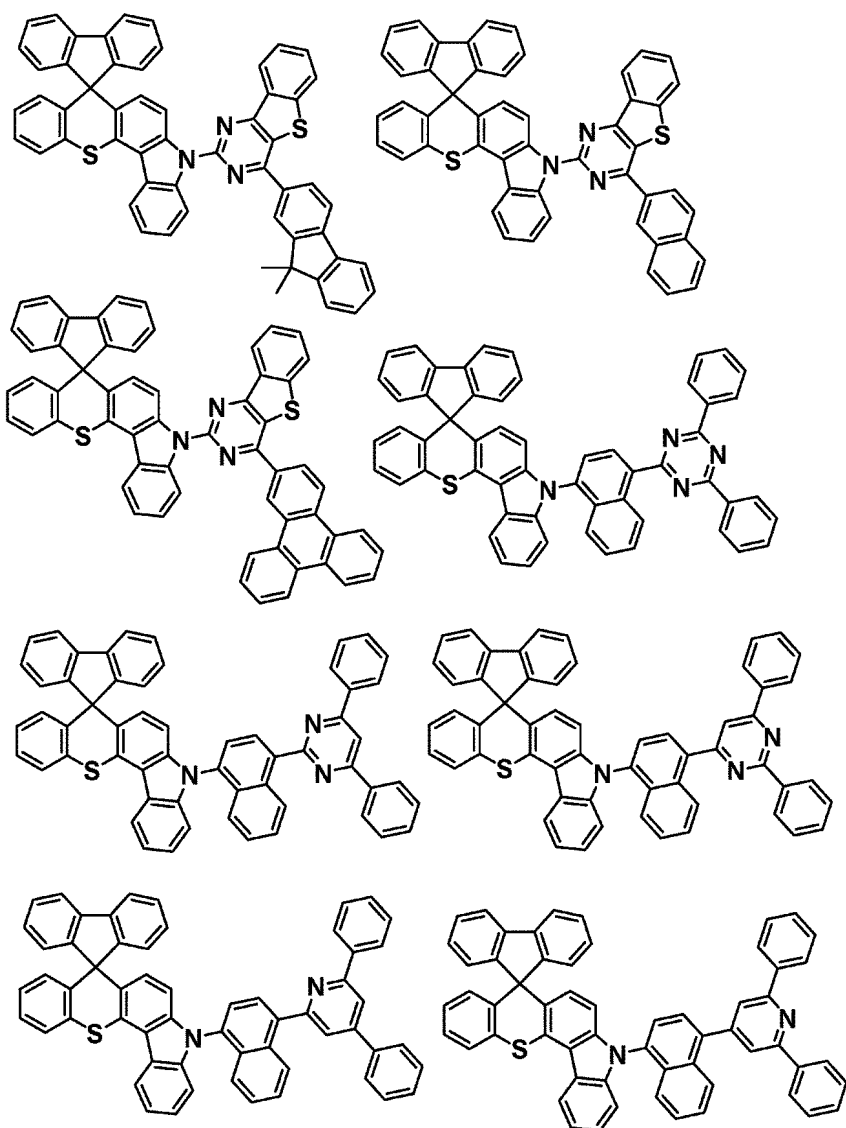
20

30

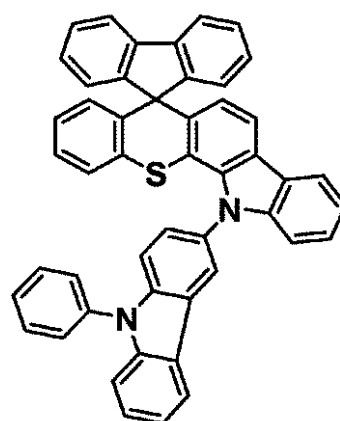
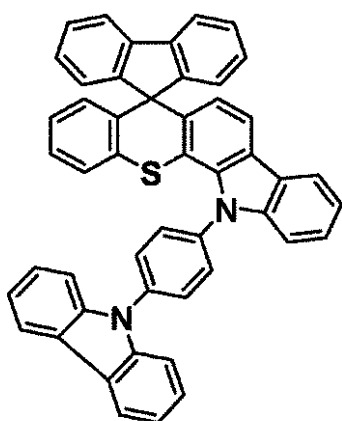
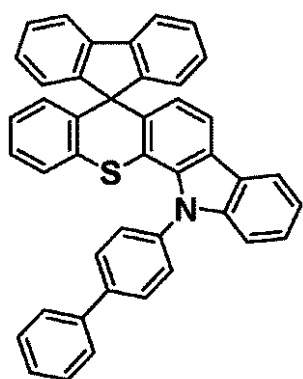
【化 7 4】



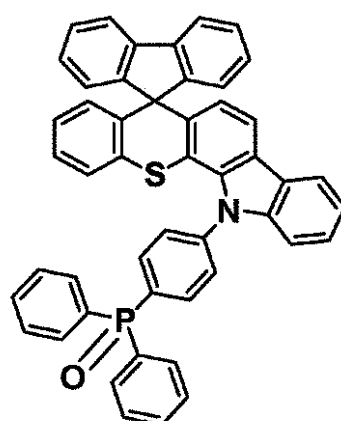
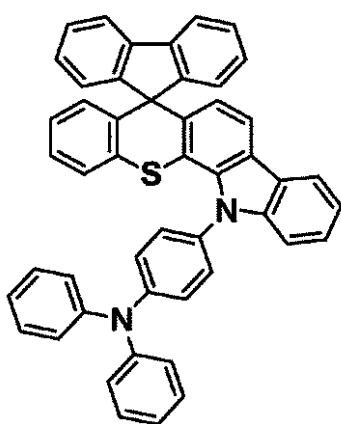
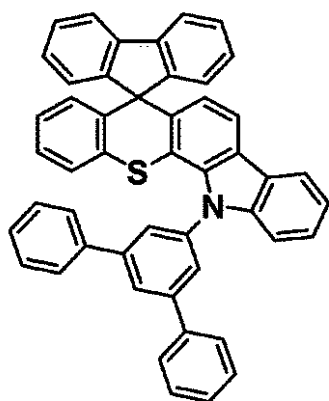
【化 7 5】



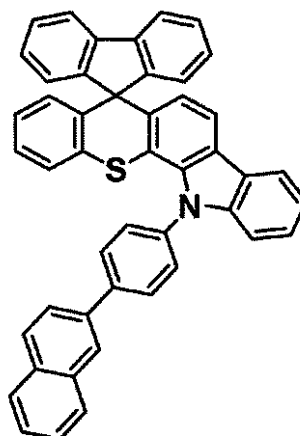
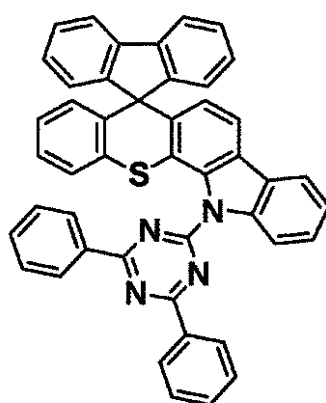
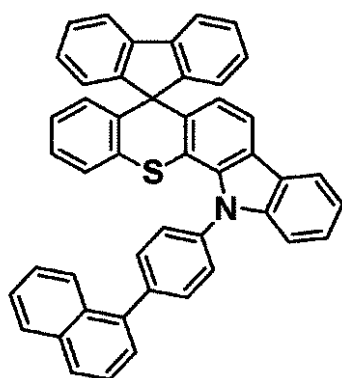
【化 7 6】



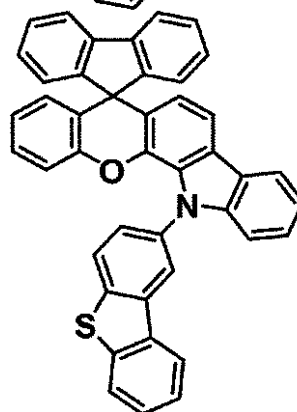
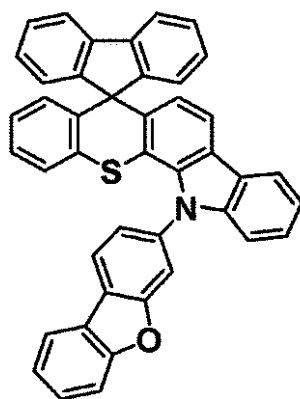
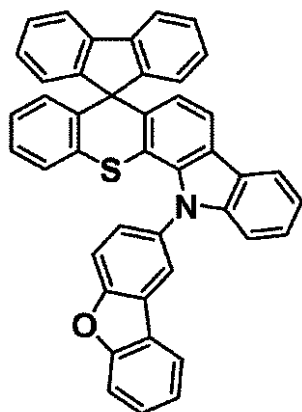
10



20

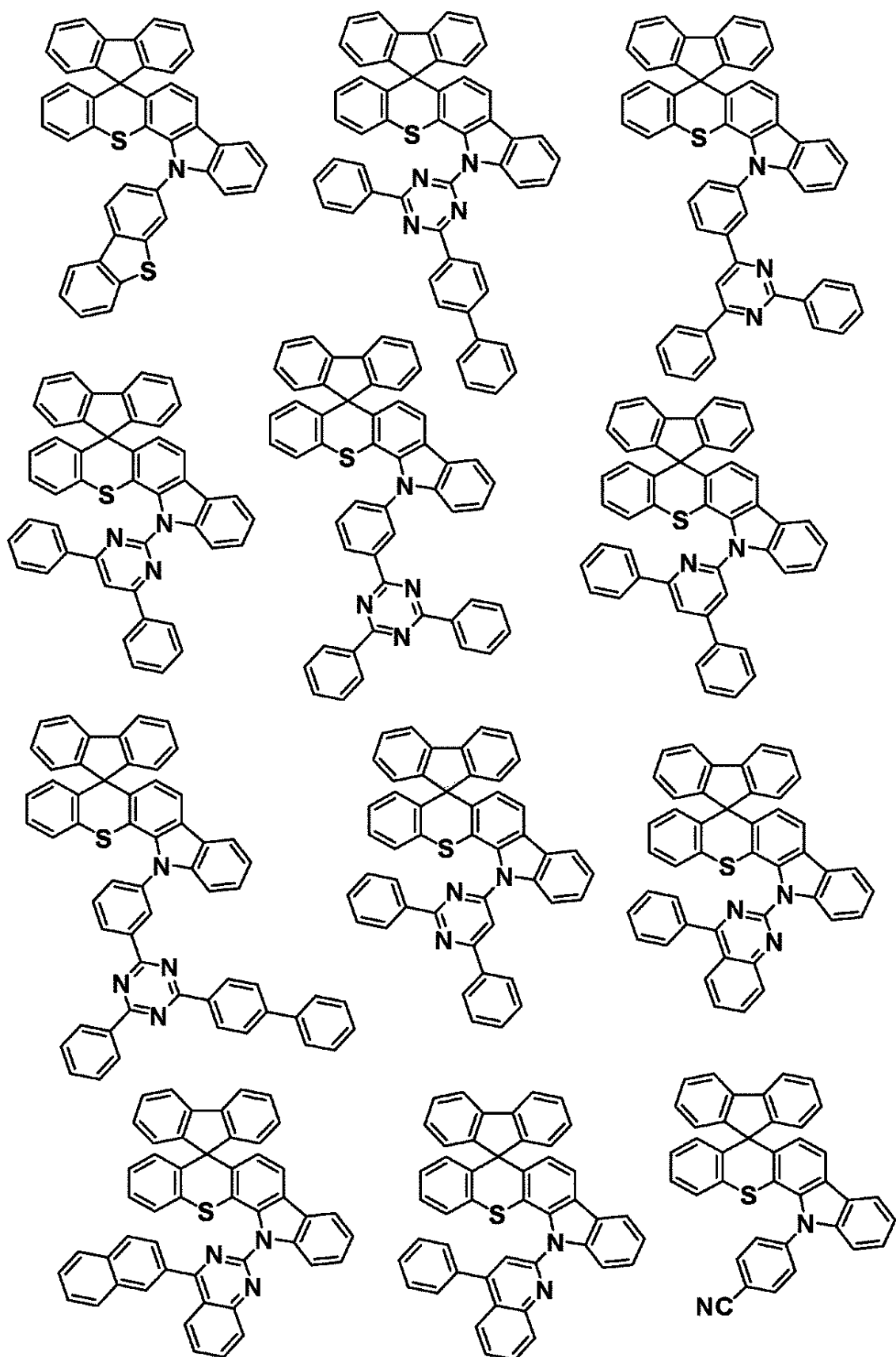


30

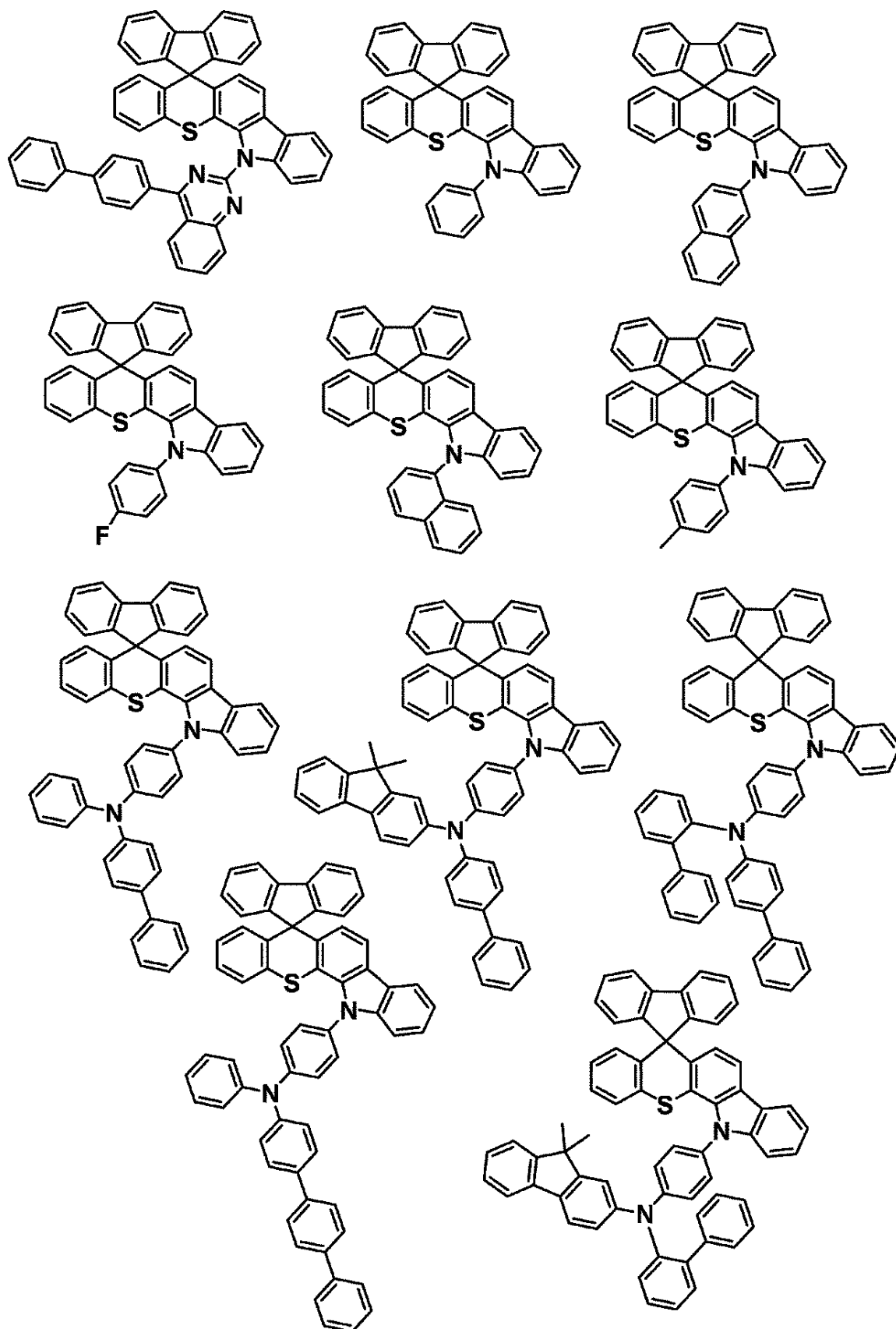


40

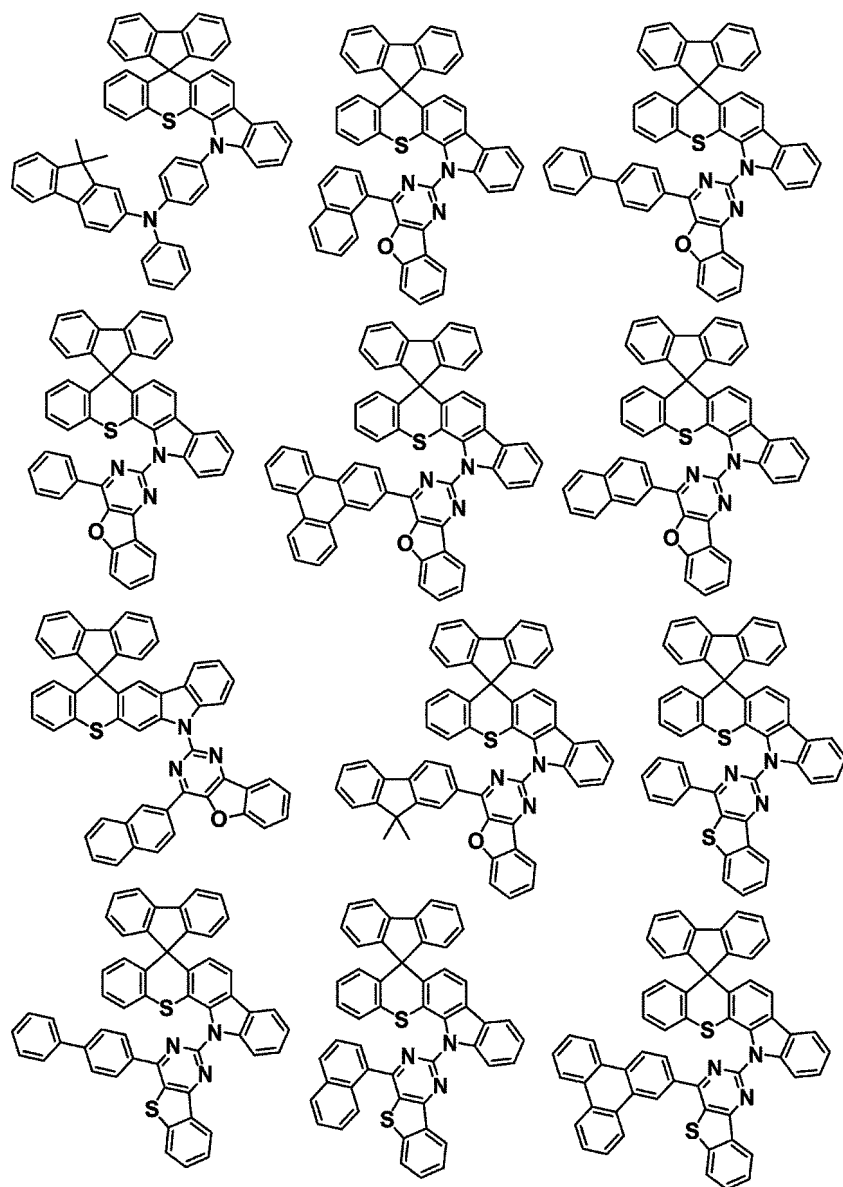
【化 77】



【化 7 8】



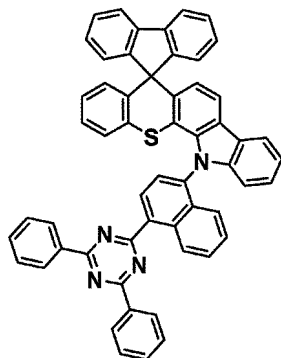
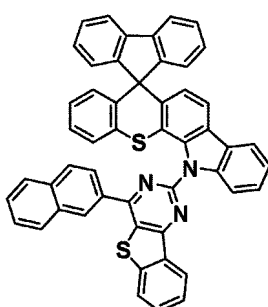
【化 7 9】



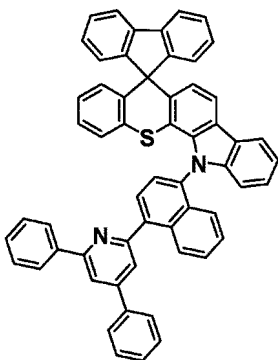
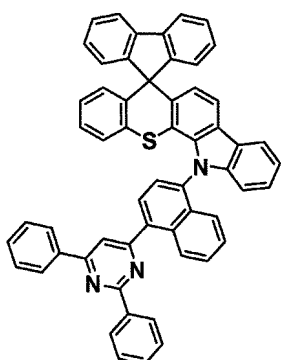
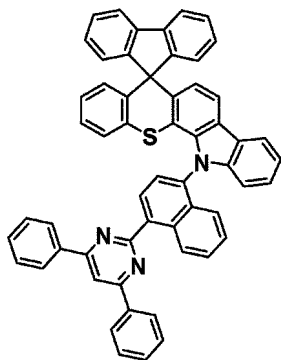
10

20

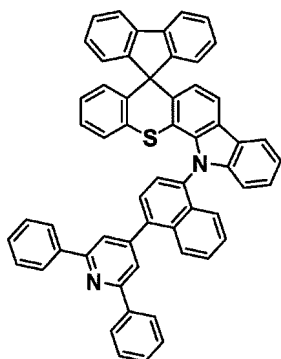
30



10

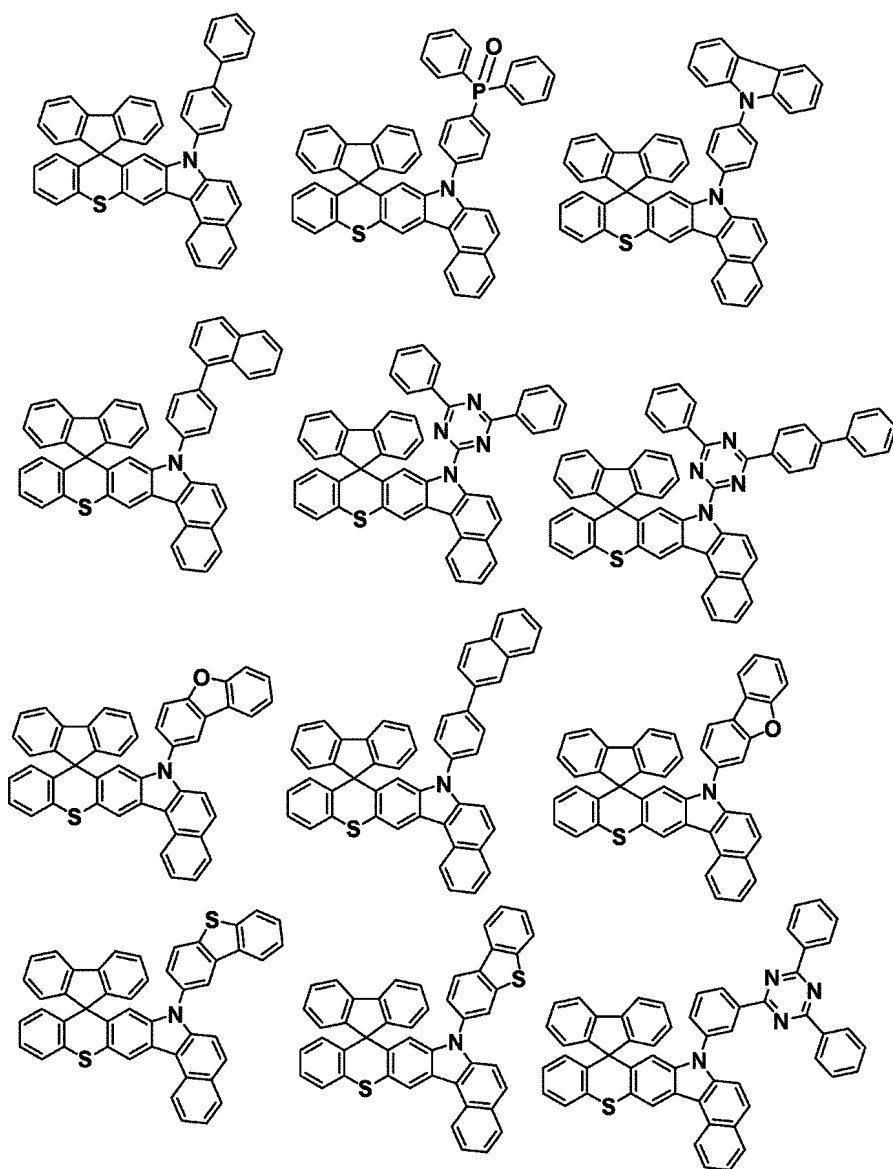


20



30

【化 8 1】

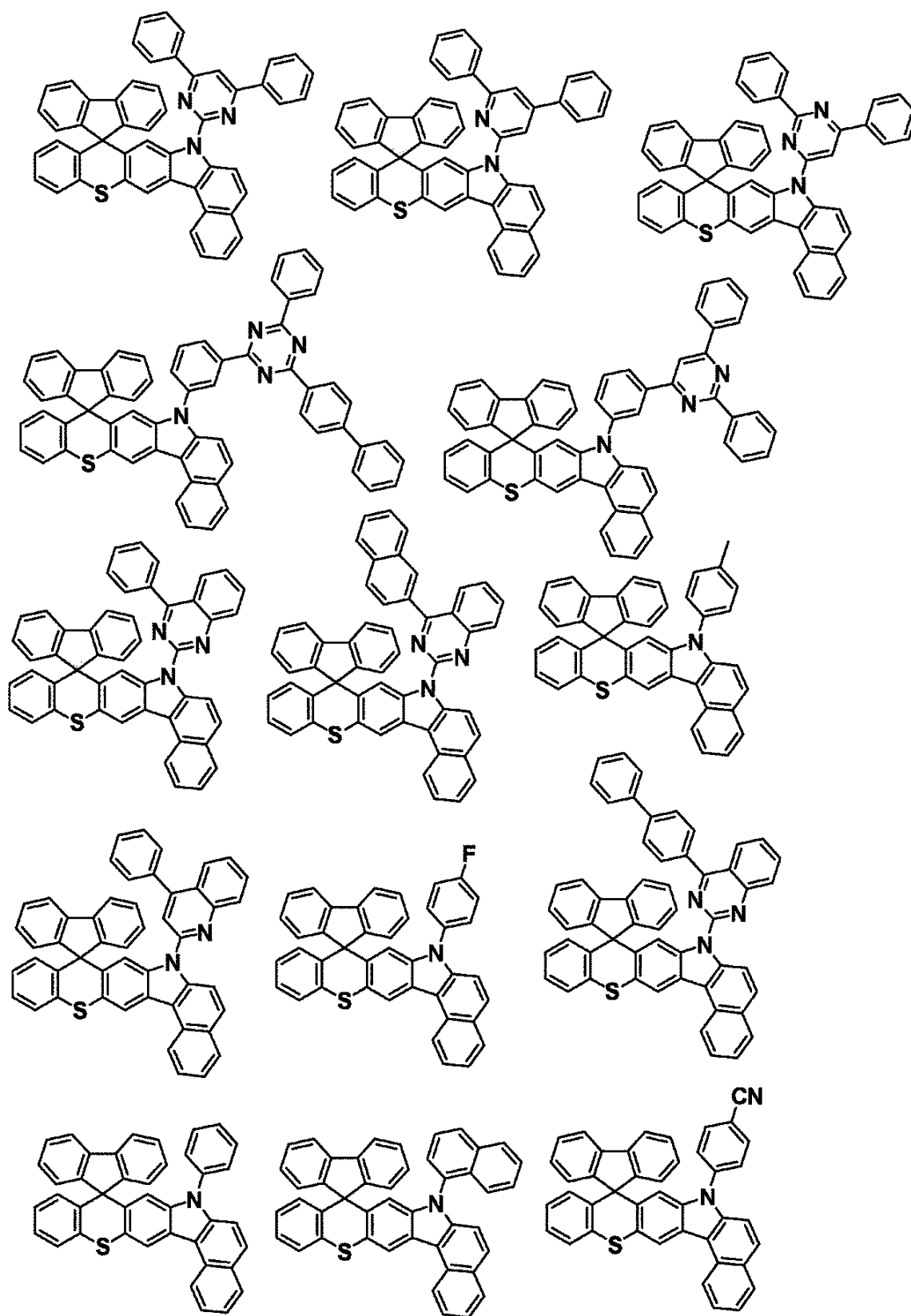


10

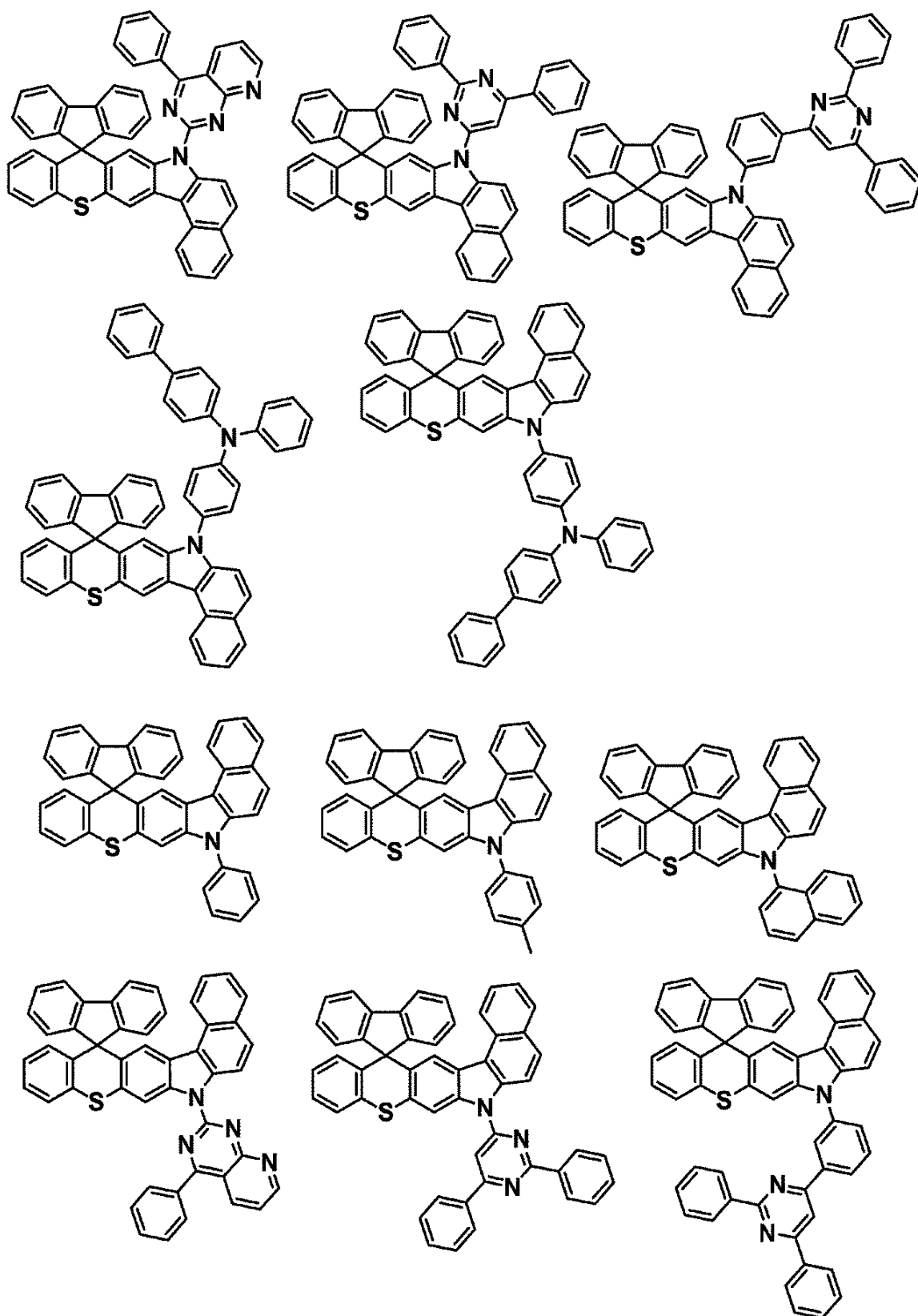
20

30

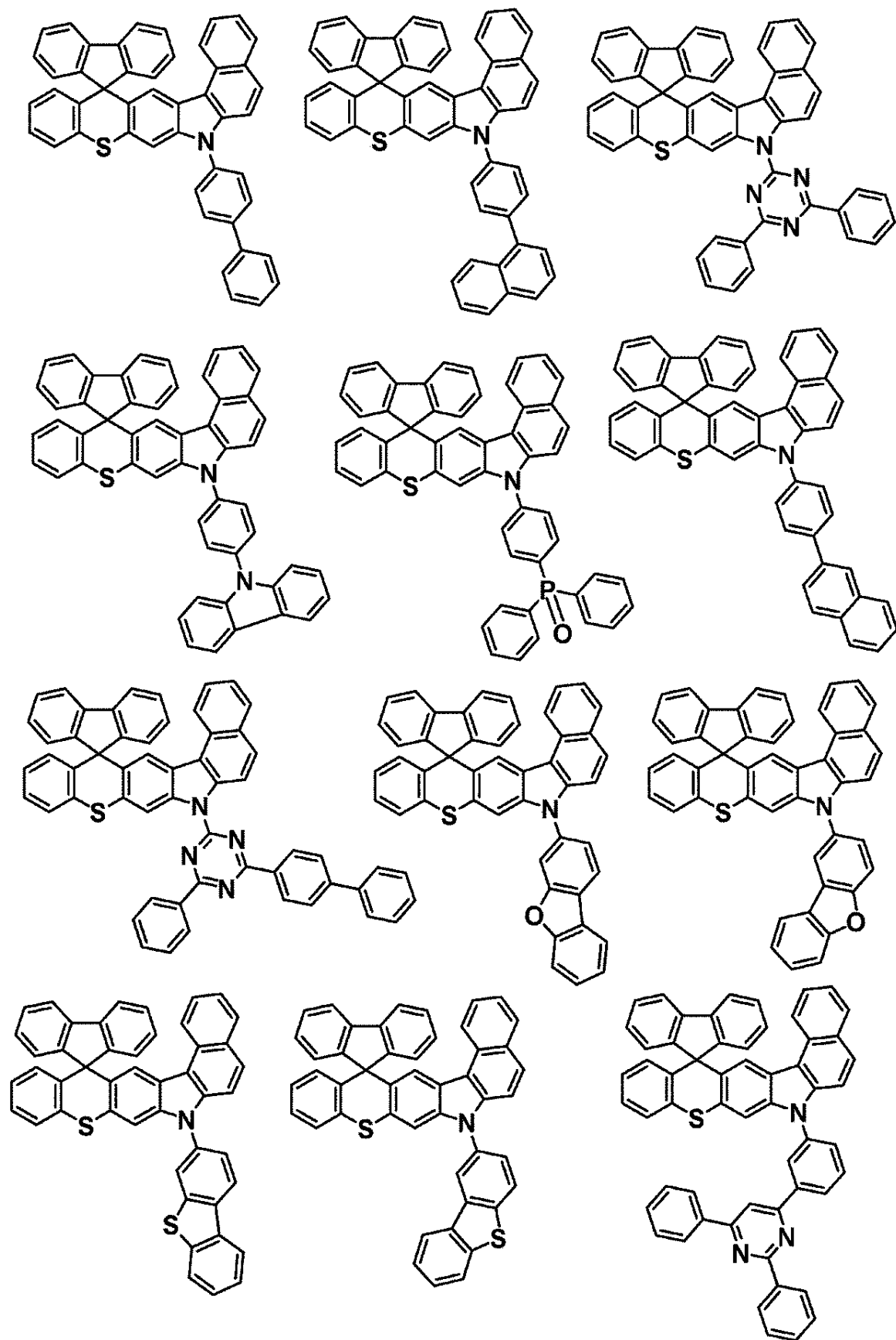
【化 8 2】



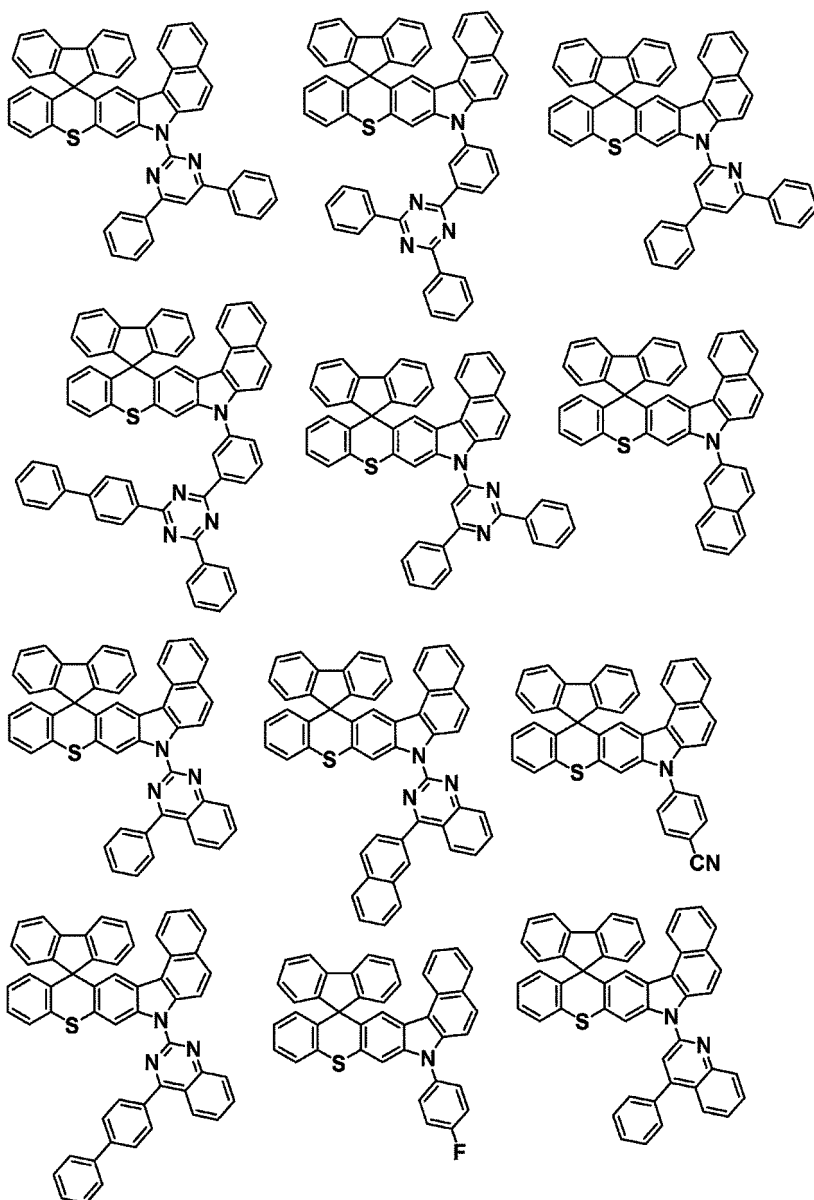
【化 8 3】



【化 8 4】



【化 8 5】

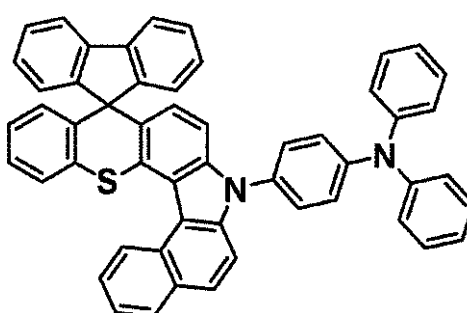
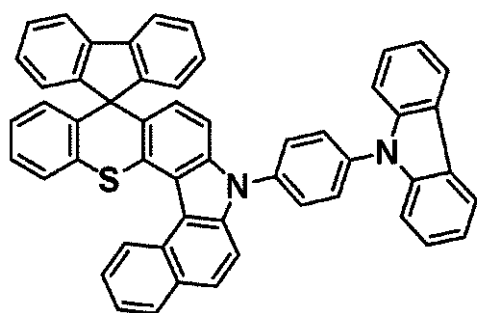


10

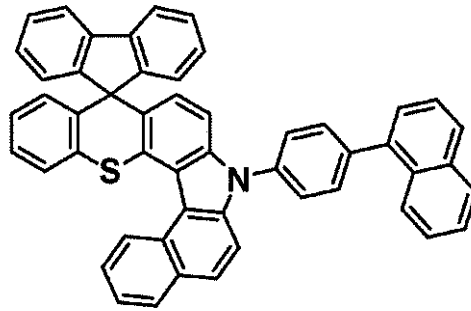
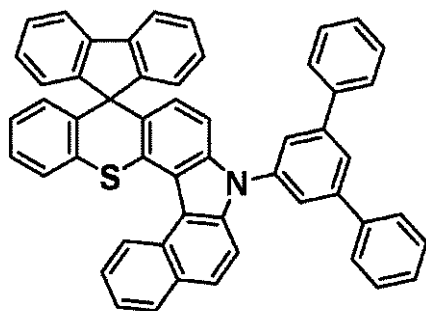
20

30

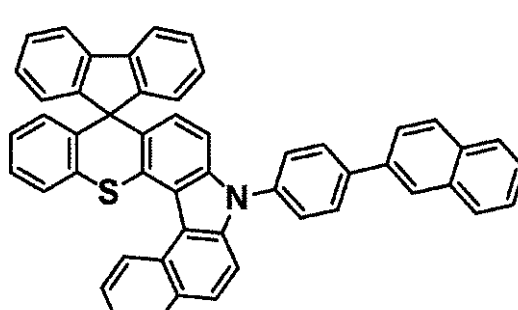
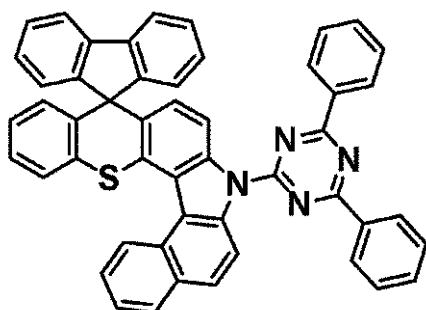
【化 8 6】



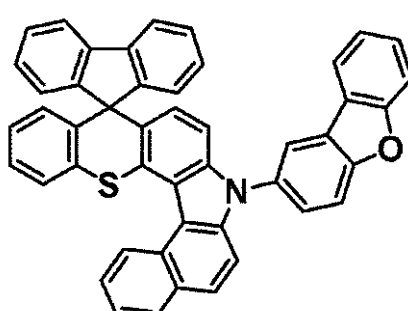
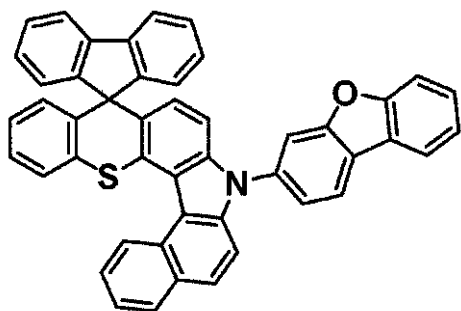
10



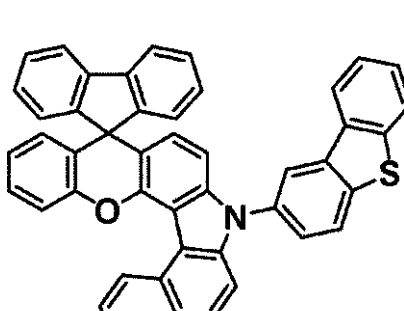
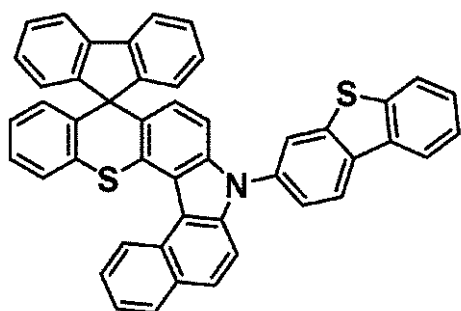
20



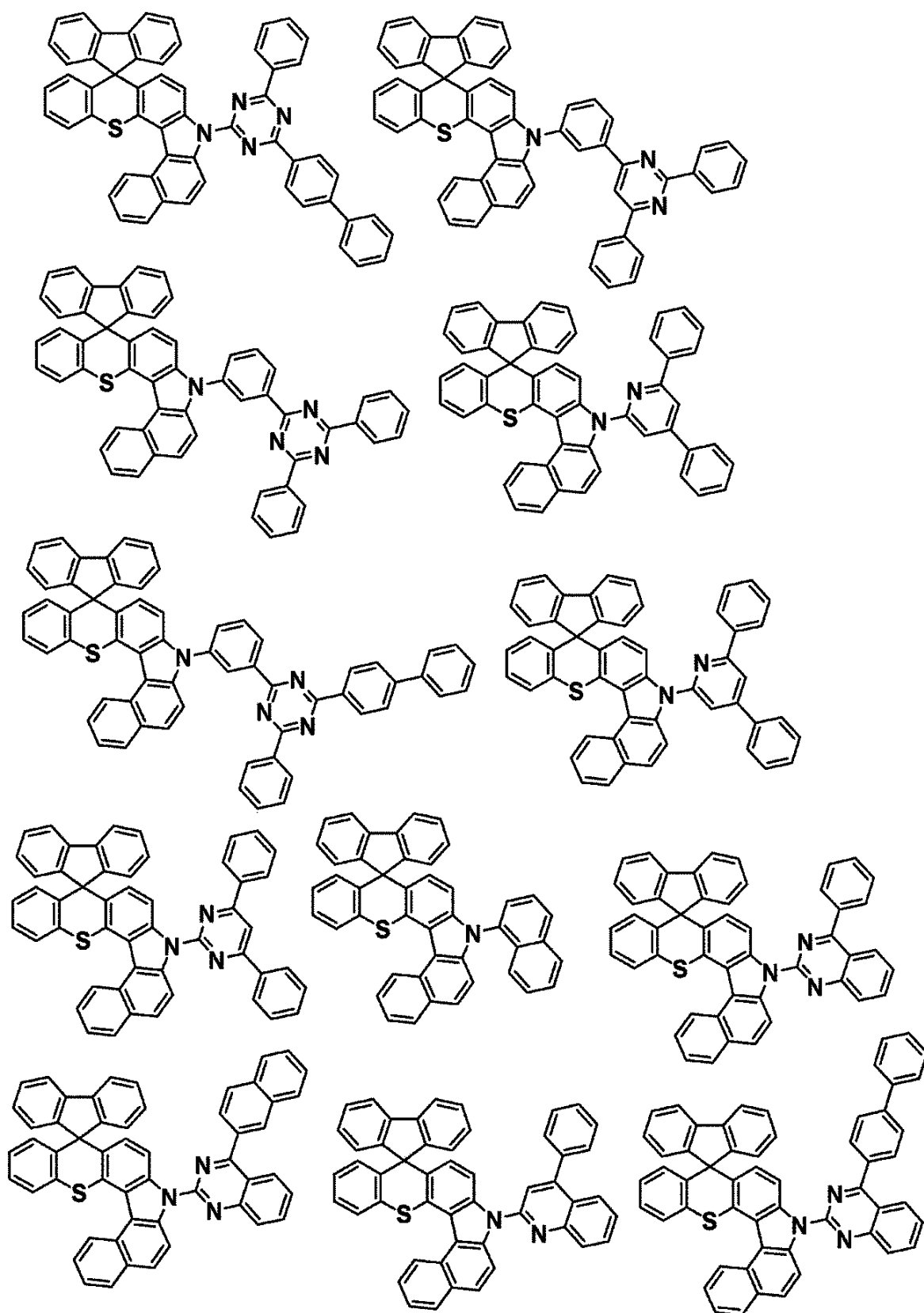
30



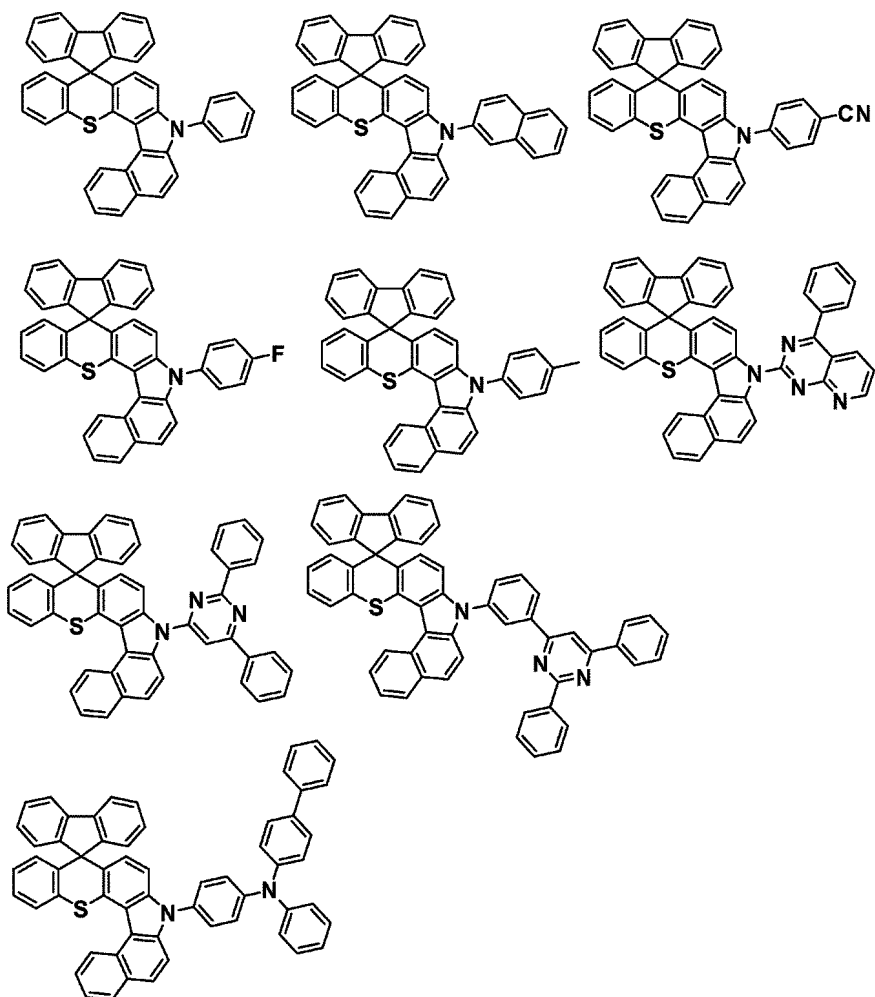
40



【化 8 7】



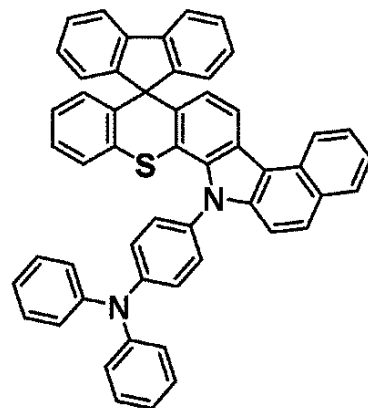
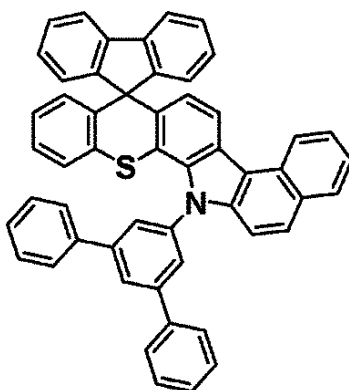
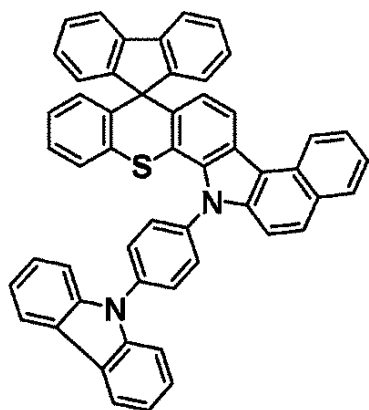
【化 8 8】



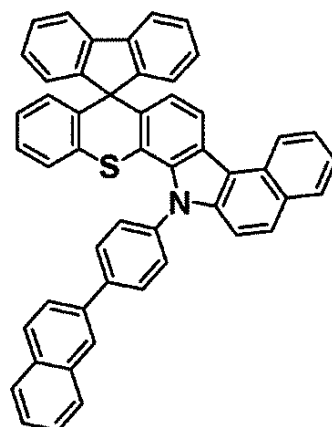
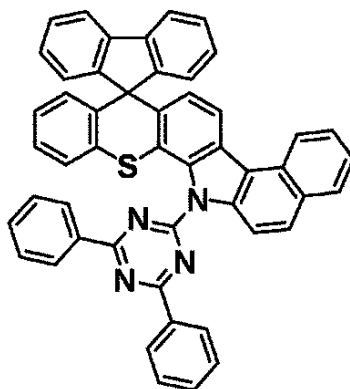
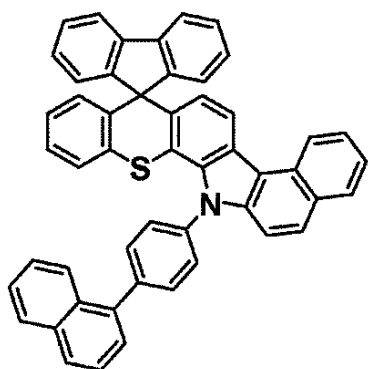
10

20

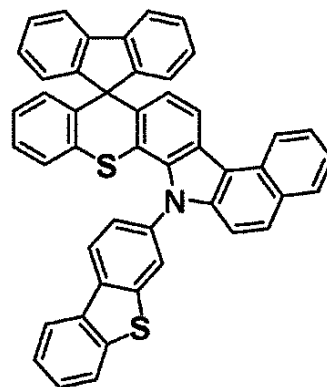
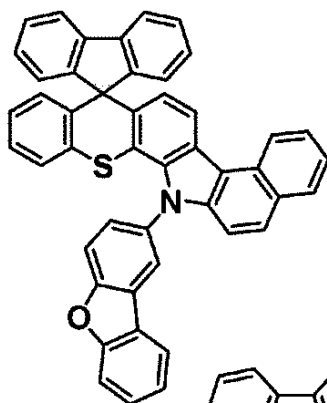
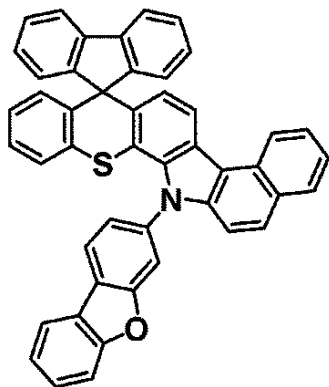
【化 8 9】



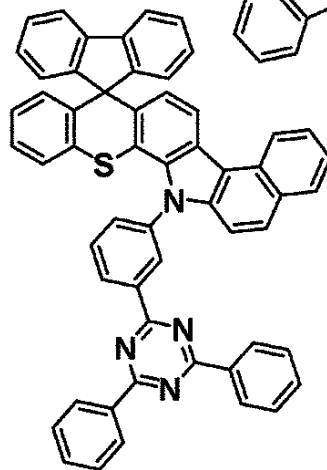
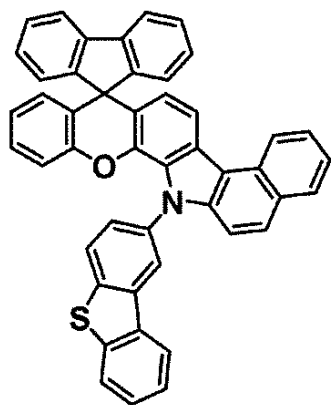
10



20

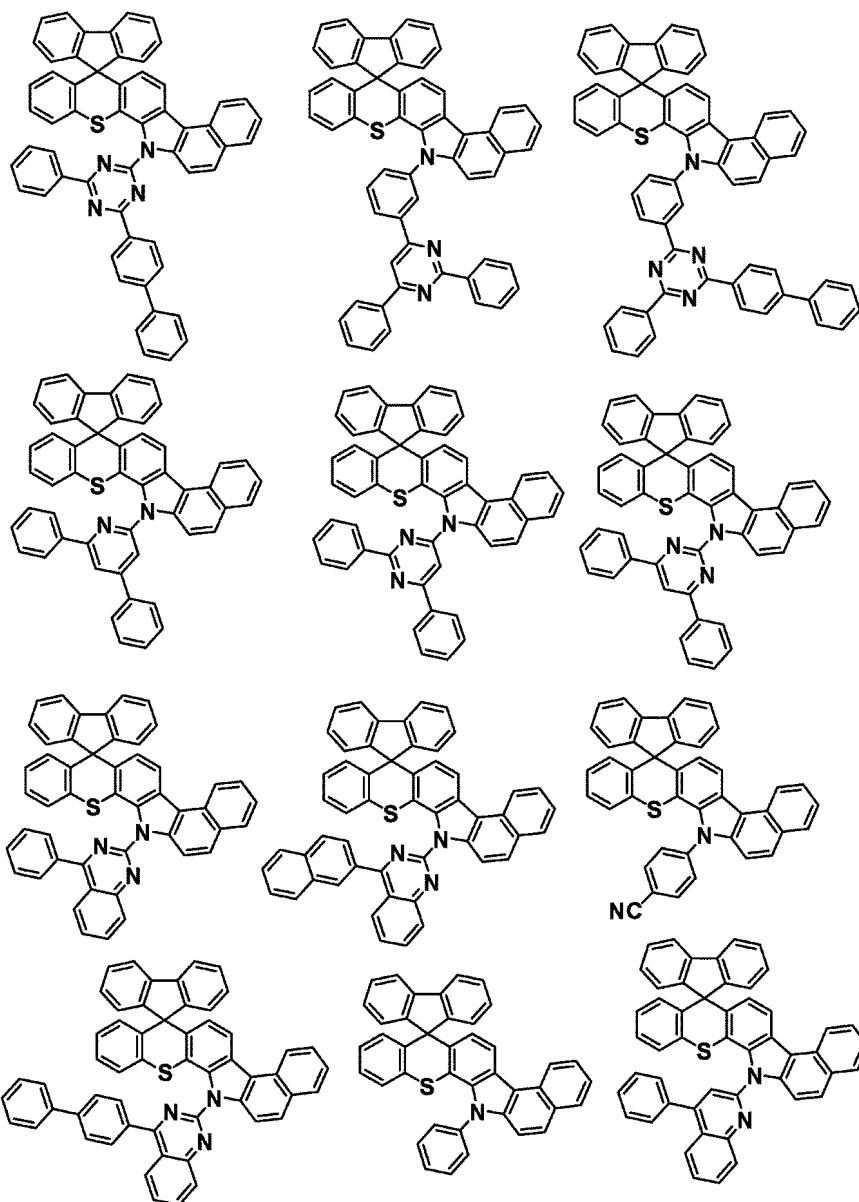


30



40

【化 9 0】

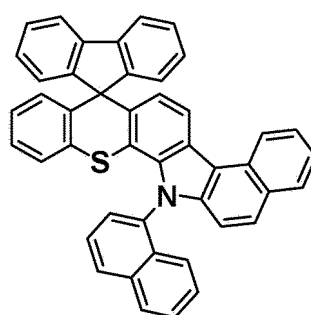
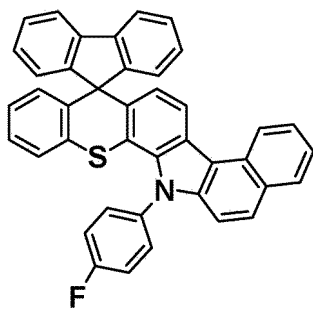
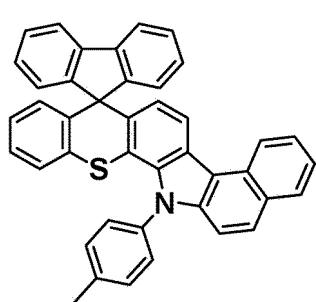


10

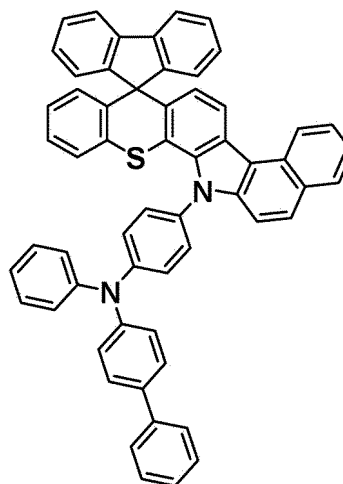
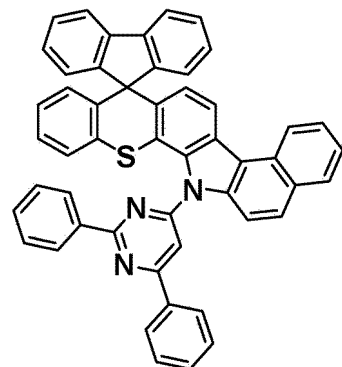
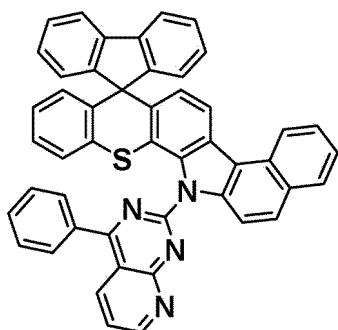
20

30

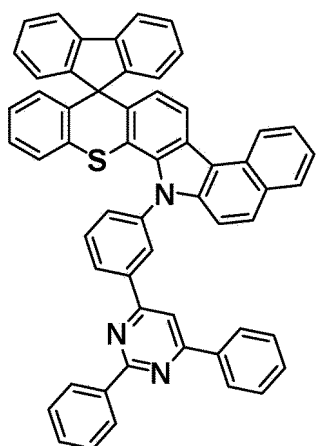
【化 9 1】



10

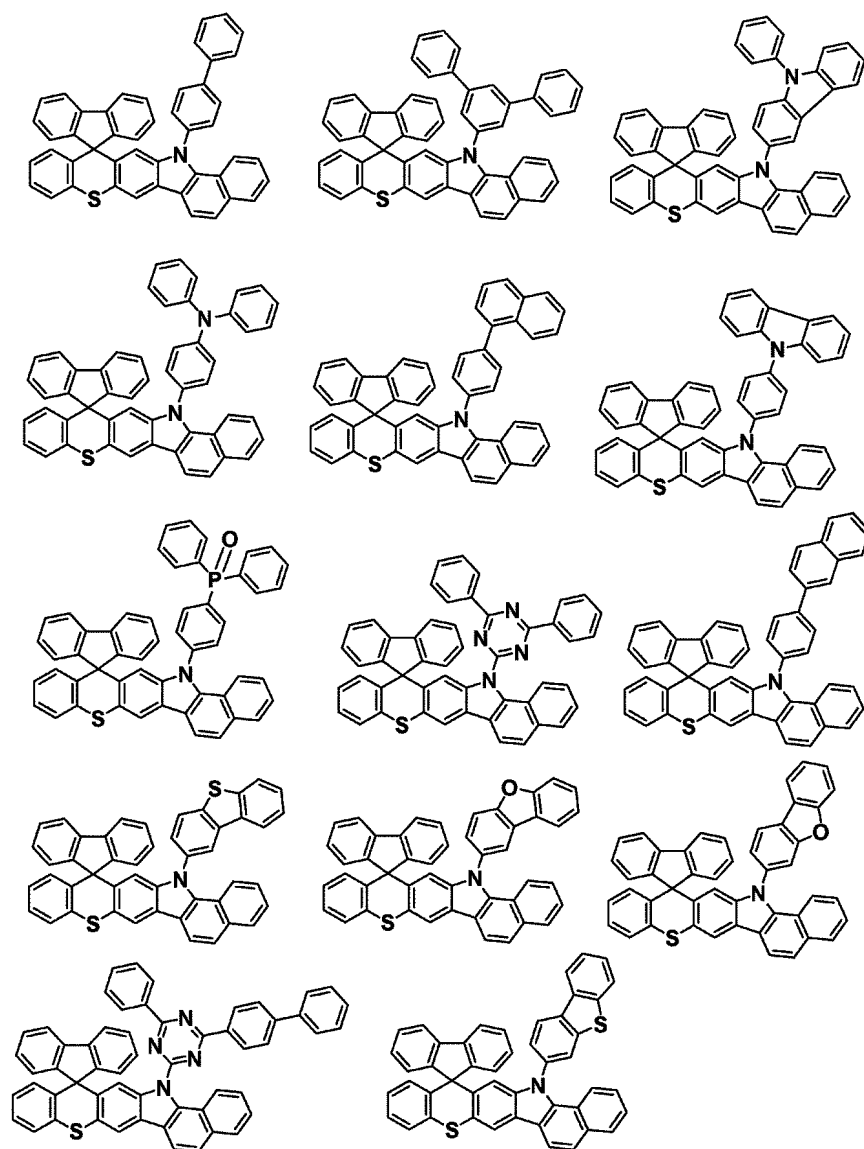


20



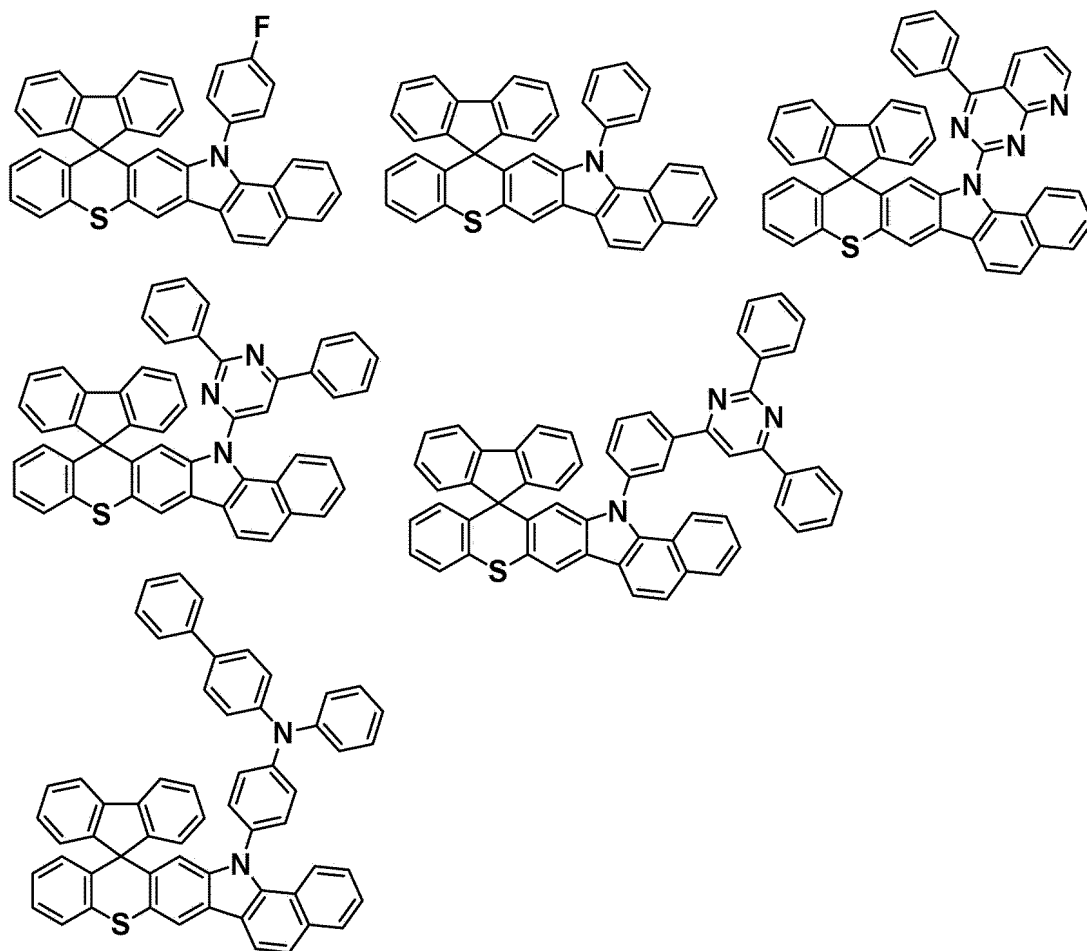
30

【化 9 2】



30

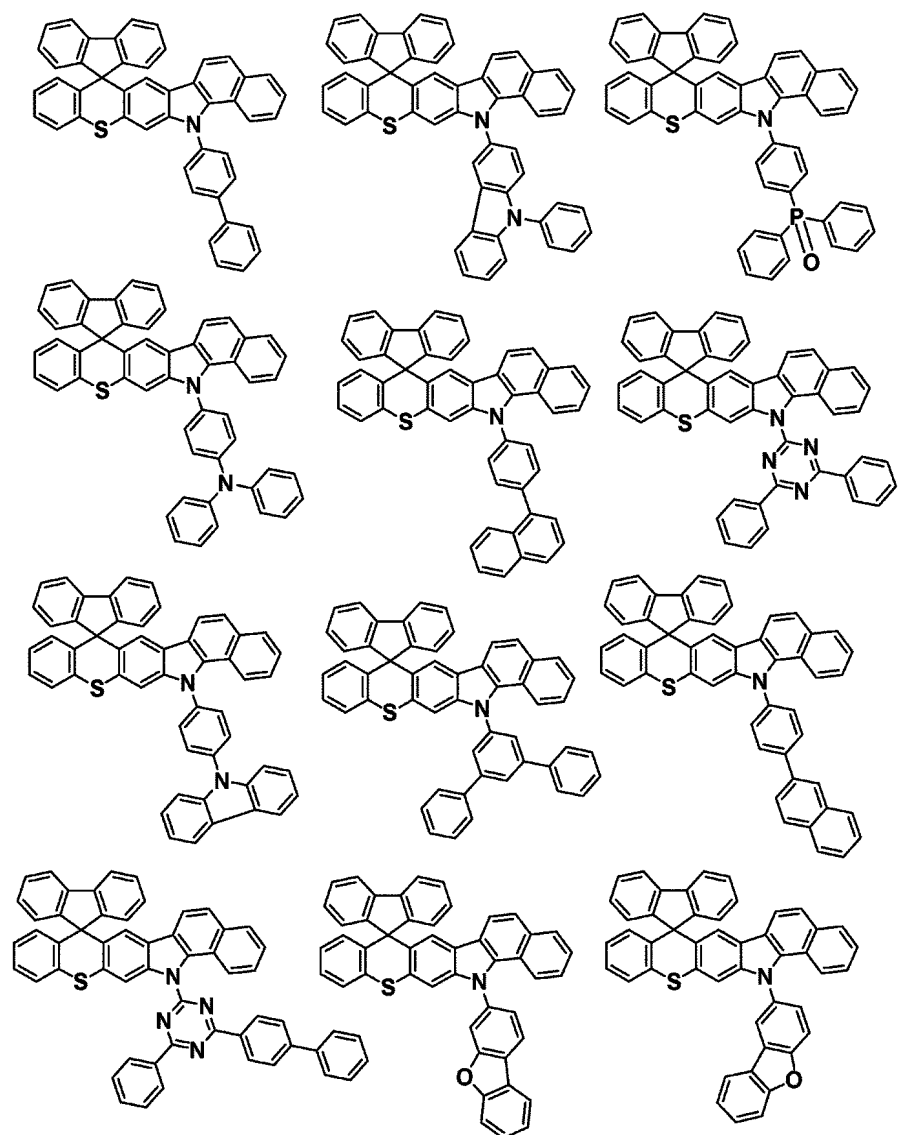
【化 9 4】



10

20

【化 9 5】

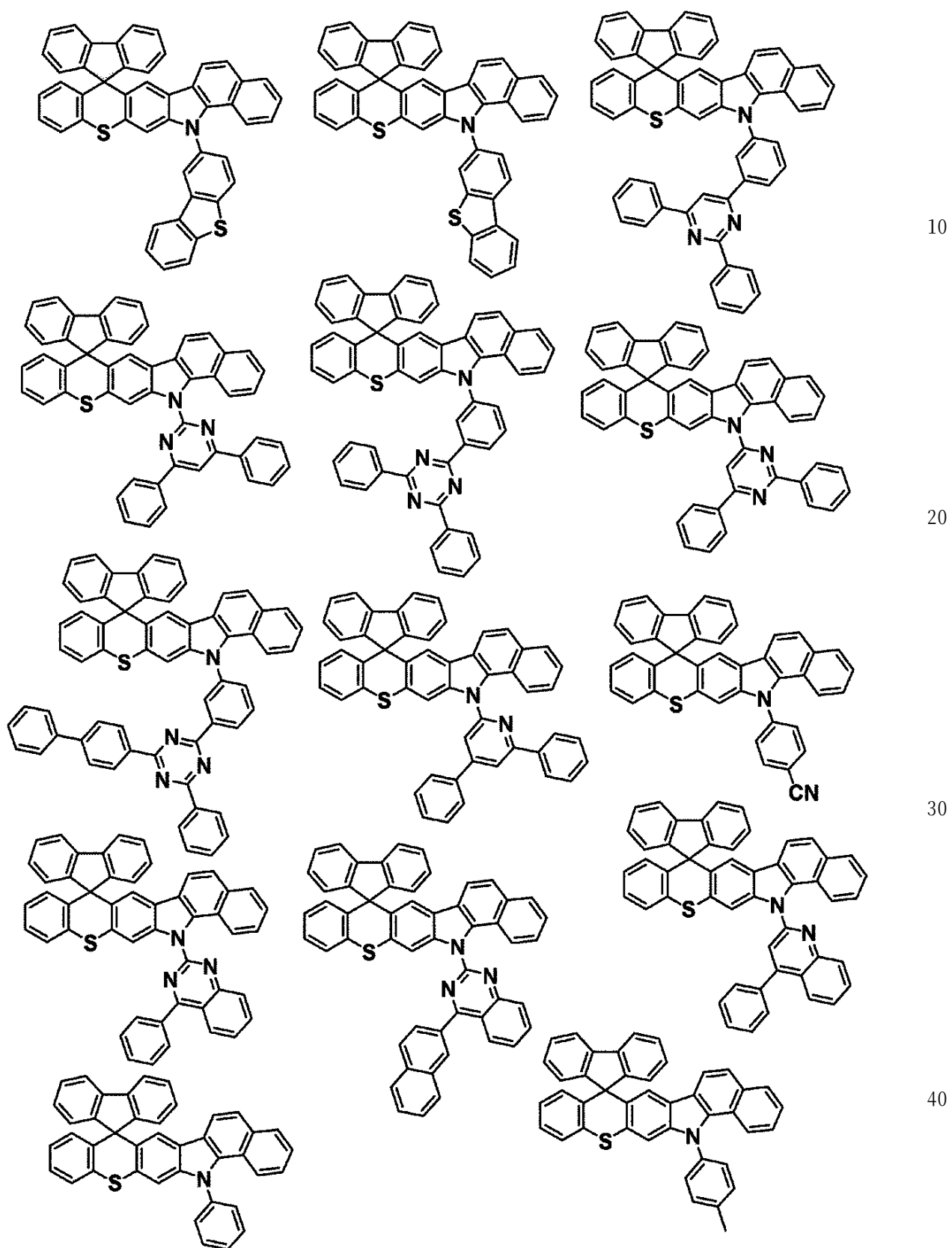


10

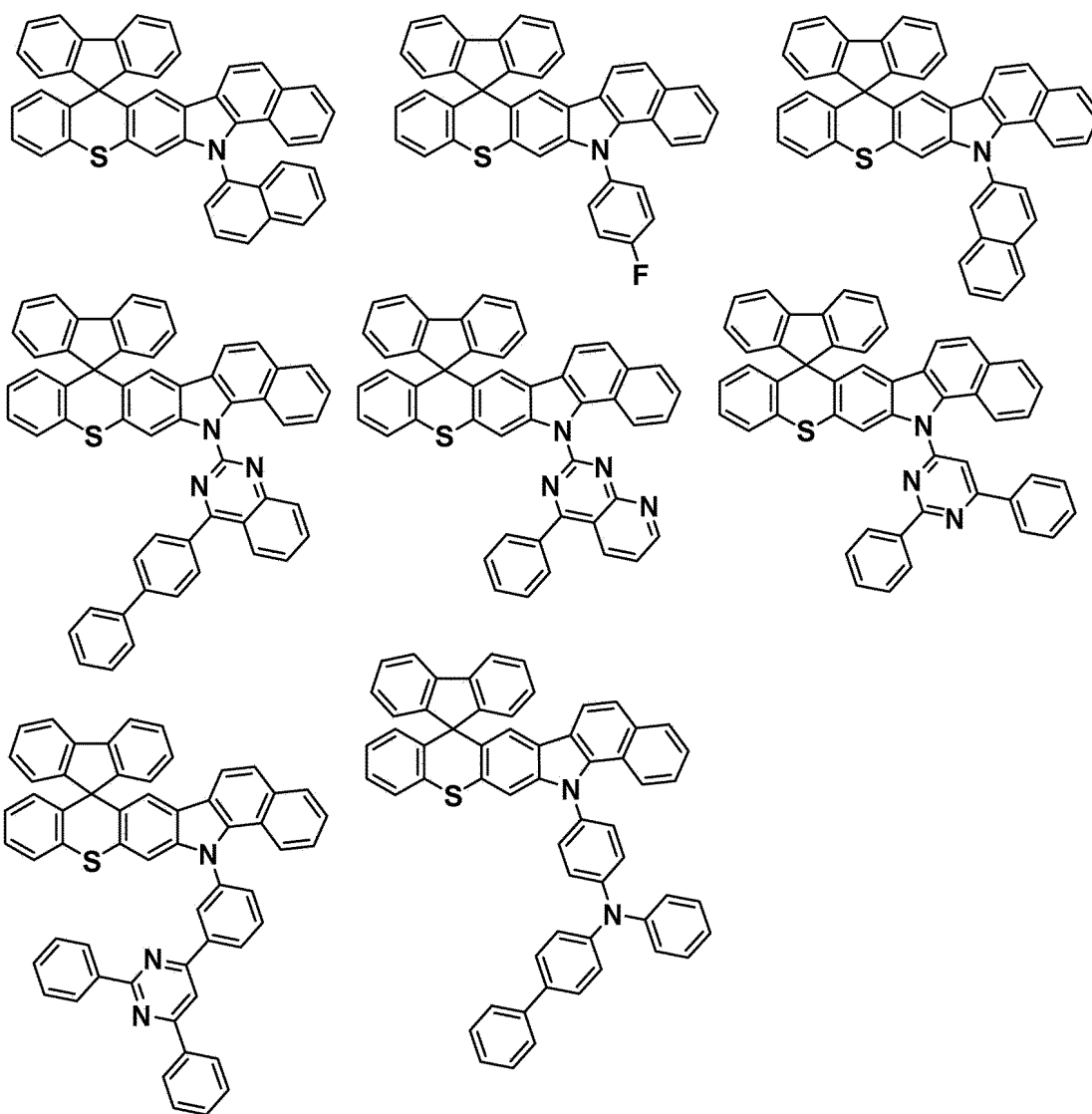
20

30

【化 9 6】



【化 9 7】

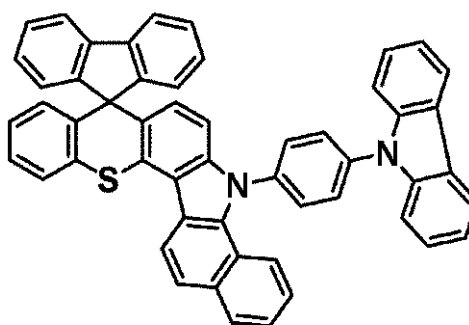
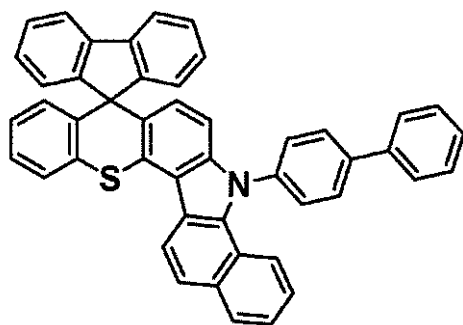


10

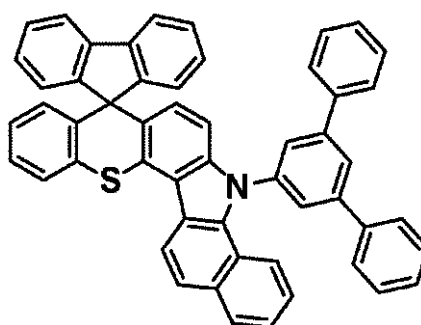
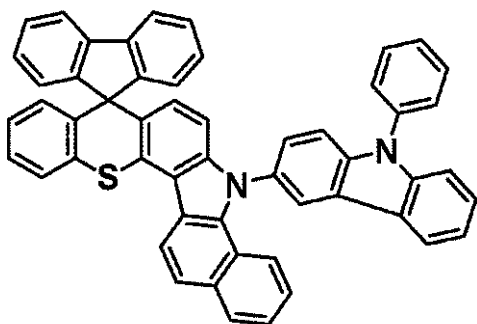
20

30

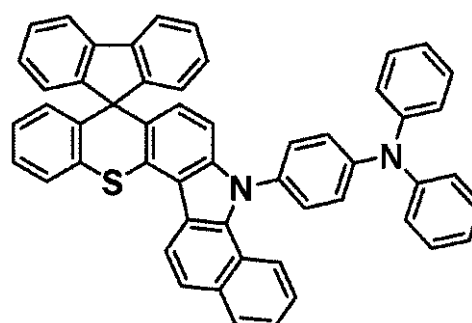
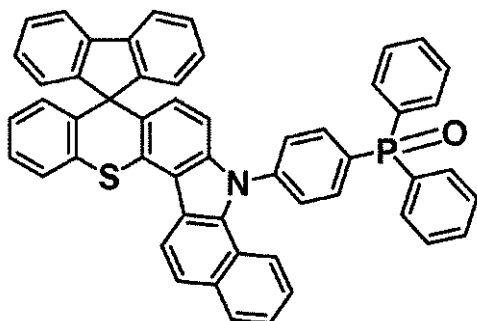
【化 9 8】



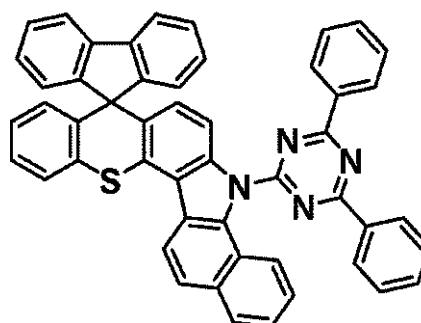
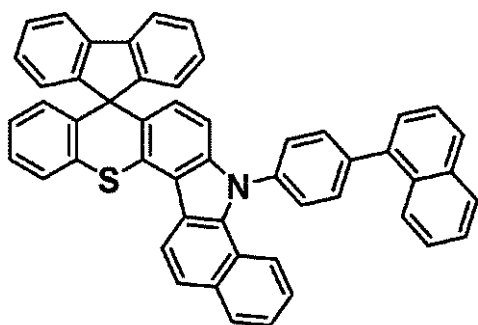
10



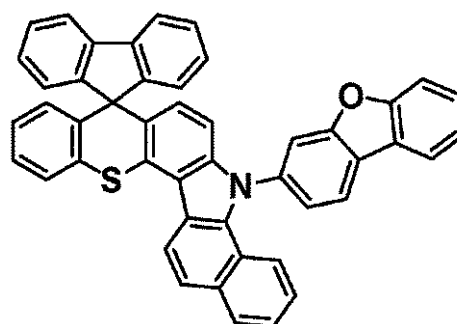
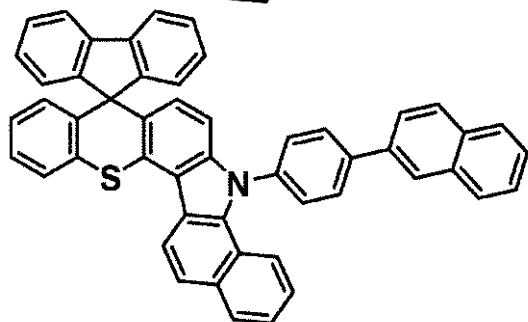
20



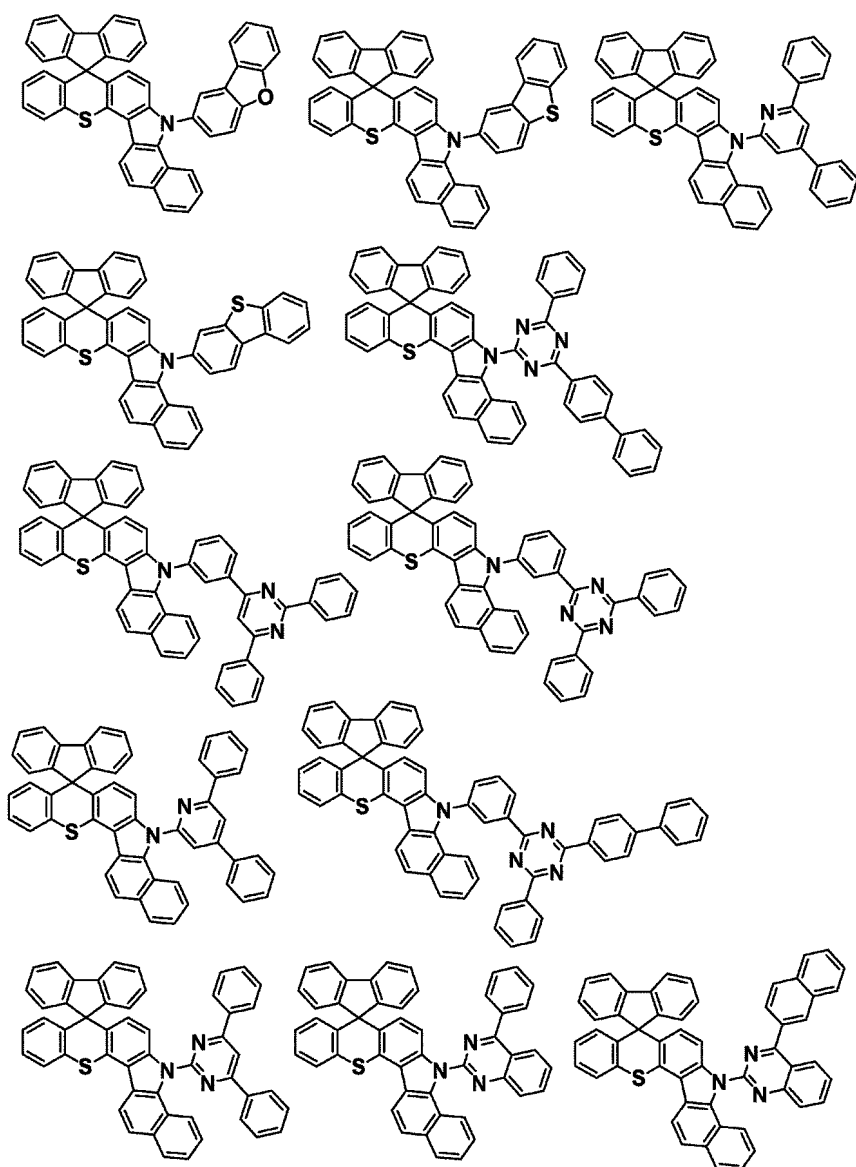
30



40



【化 9 9】

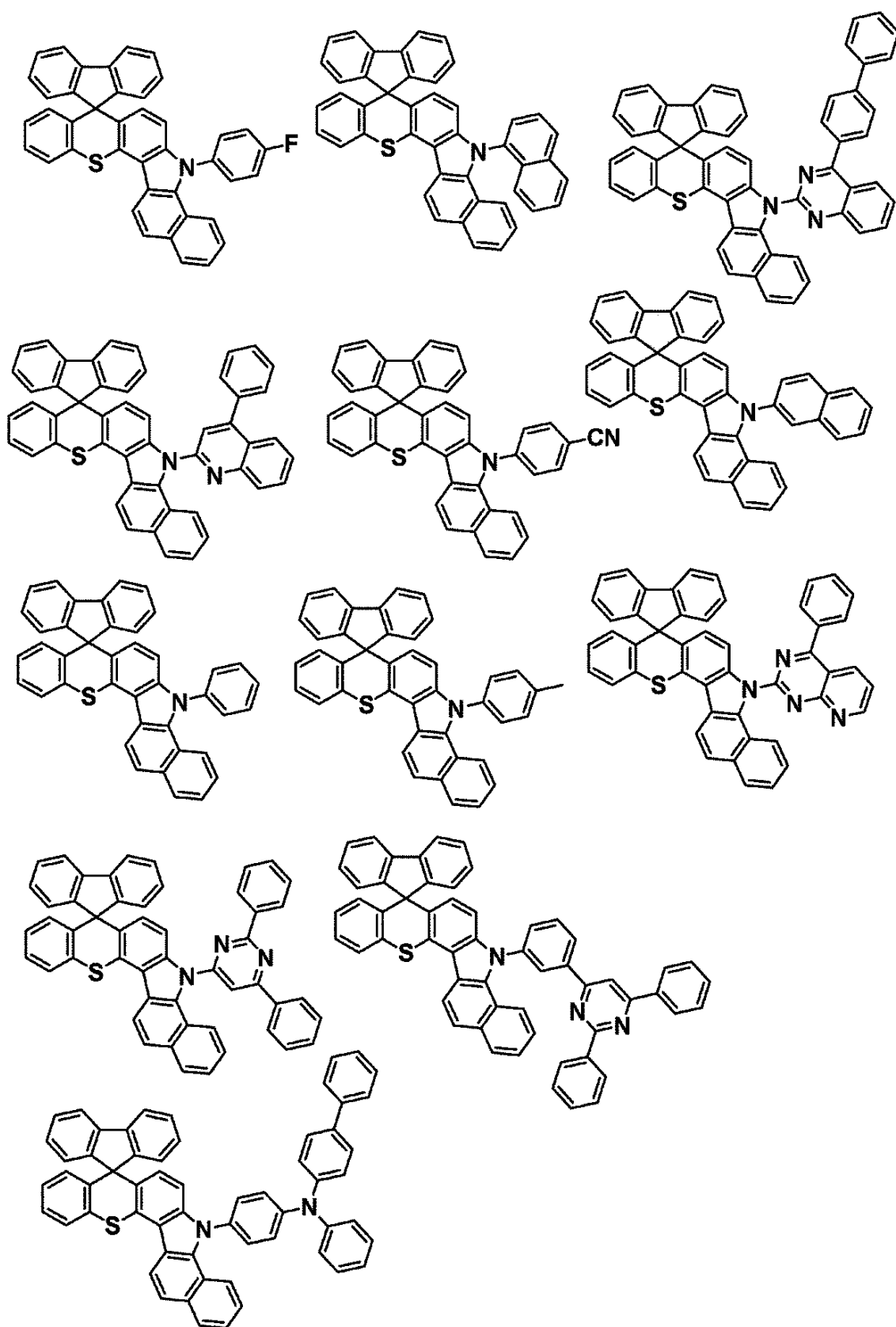


10

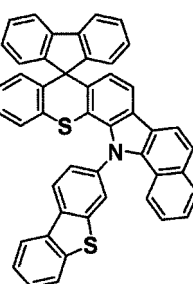
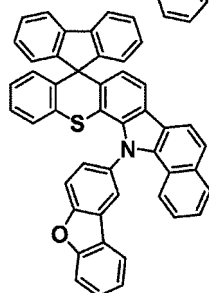
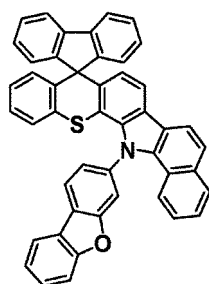
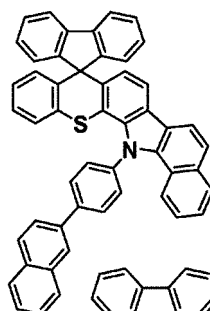
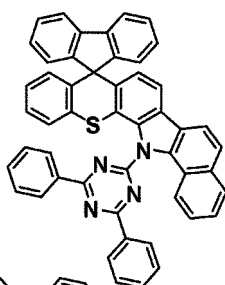
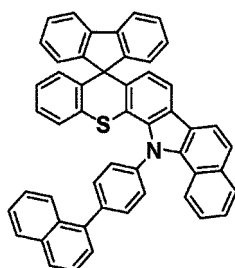
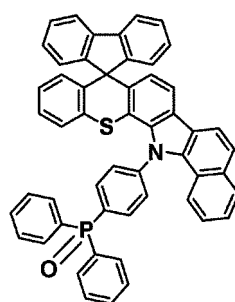
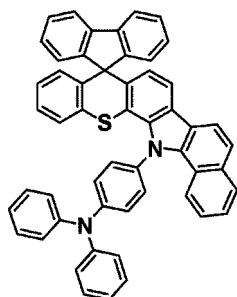
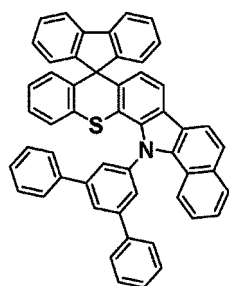
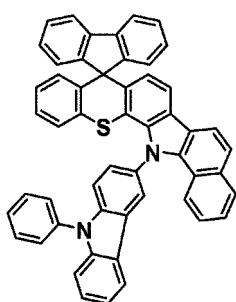
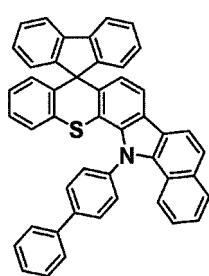
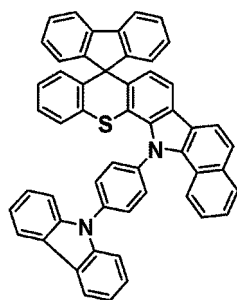
20

30

【化 1 0 0】



【化 1 0 1】

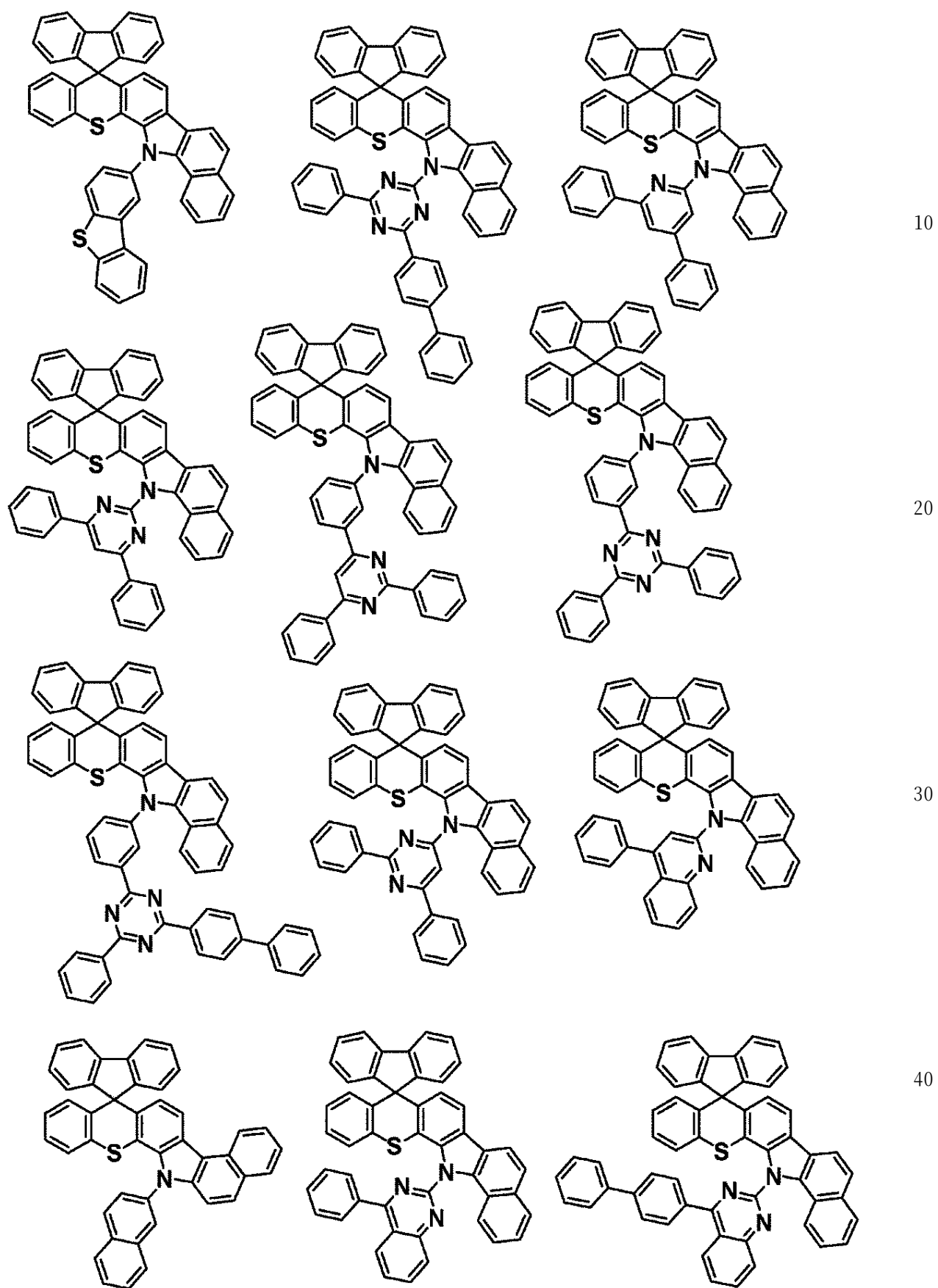


10

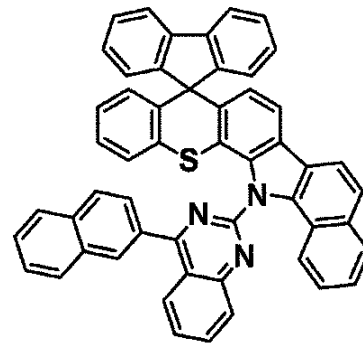
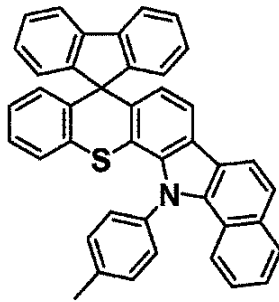
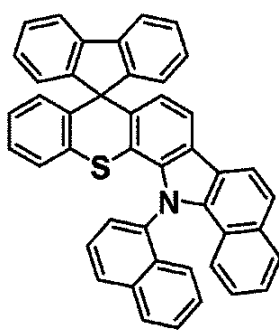
20

30

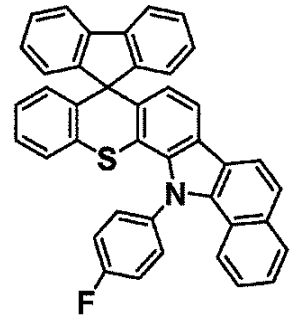
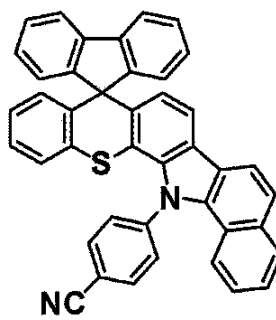
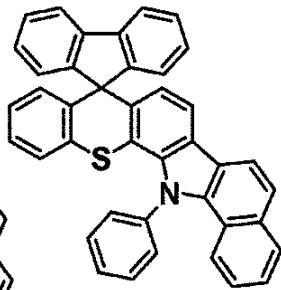
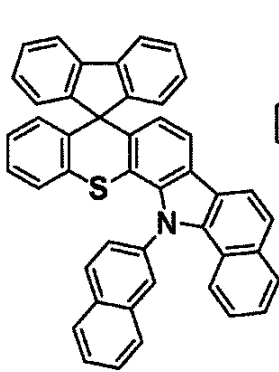
【化 1 0 2】



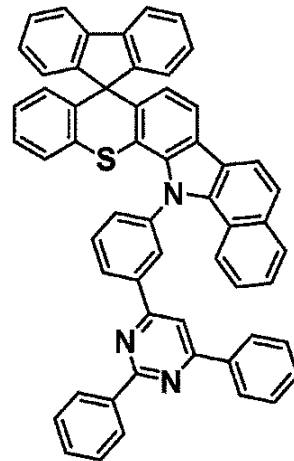
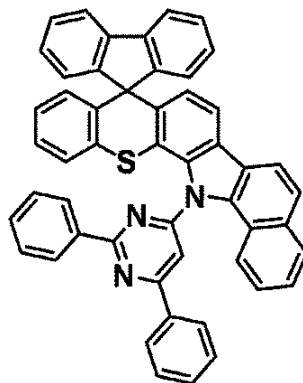
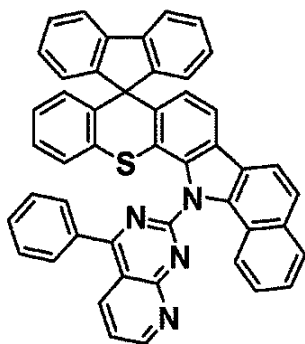
【化 1 0 3】



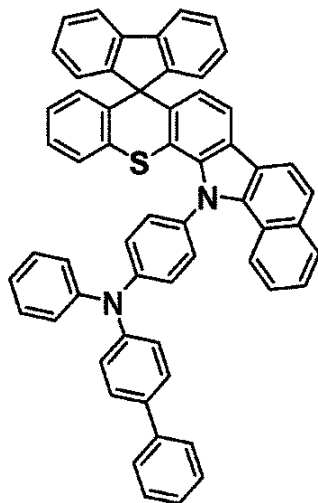
10



20



30



40

【請求項 5】

第 1 電極と、前記第 1 電極に対向して備えられた第 2 電極と、前記第 1 電極と前記第 2 電極との間に備えられた 1 層以上の有機物層とを含む有機電子素子であって、前記有機物層のうちの 1 層以上は、請求項 1～4 のいずれか 1 項に記載のスピロ型化合物を含むものである有機電子素子。

50

【請求項 6】

前記有機物層は、発光層を含み、前記発光層は、前記スピロ型化合物を含むものである、請求項 5 に記載の有機電子素子。

【請求項 7】

前記有機物層は、正孔注入層または正孔輸送層を含み、前記正孔注入層または正孔輸送層は、前記スピロ型化合物を含むものである、請求項 5 に記載の有機電子素子。

【請求項 8】

前記有機物層は、電子注入層または電子輸送層を含み、前記電子輸送層または電子注入層は、前記スピロ型化合物を含むものである、請求項 5 に記載の有機電子素子。

【請求項 9】

前記有機物層は、電子阻止層または正孔阻止層を含み、前記電子阻止層または正孔阻止層は、前記スピロ型化合物を含むものである、請求項 5 に記載の有機電子素子。

【請求項 10】

前記有機電子素子は、発光層、正孔注入層、正孔輸送層、電子注入層、電子輸送層、電子阻止層、および正孔阻止層からなる群より選択される 1 層または 2 層以上をさらに含むものである、請求項 5 に記載の有機電子素子。

【請求項 11】

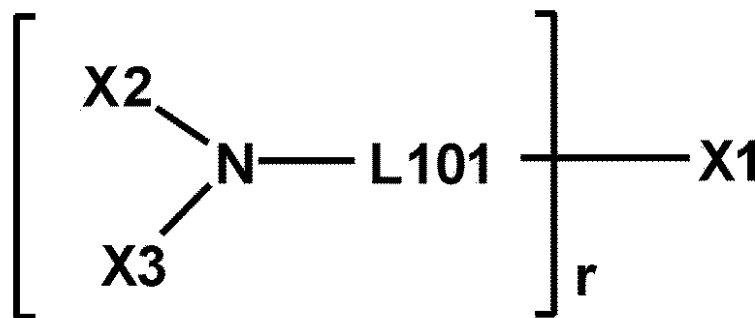
前記有機電子素子は、有機発光素子、有機燐光素子、有機太陽電池、有機感光体（OPC）、および有機トランジスタからなる群より選択される、請求項 5 に記載の有機電子素子。

【請求項 12】

前記有機物層は、発光層を含み、前記発光層は、下記化学式 A-1 で表される化合物を含むものである、請求項 5 に記載の有機電子素子：

[化学式 A-1]

【化 104】



前記化学式 A-1 において、

X1 は、置換もしくは非置換の 1 価以上のベンゾフルオレン基；置換もしくは非置換の 1 価以上のフルオランテン基；置換もしくは非置換の 1 価以上のピレン基；または置換もしくは非置換の 1 価以上のクリセン基であり、

L101 は、直接結合；置換もしくは非置換のアリーレン基；または置換もしくは非置換のヘテロアリーレン基であり、

X2 および X3 は、互いに同一または異なり、それぞれ独立に、置換もしくは非置換のアリール基；置換もしくは非置換のシリル基；置換もしくは非置換のアルキル基；置換もしくは非置換のアラルキル基；または置換もしくは非置換のヘテロアリール基であるか、互いに結合して置換もしくは非置換の環を形成してもよく、

r は、1 以上の整数であり、

r が 2 以上の場合、括弧内の置換基は、互いに同一または異なる。

【請求項 13】

前記 L101 は、直接結合であり、X1 は、置換もしくは非置換の 2 価のピレン基であ

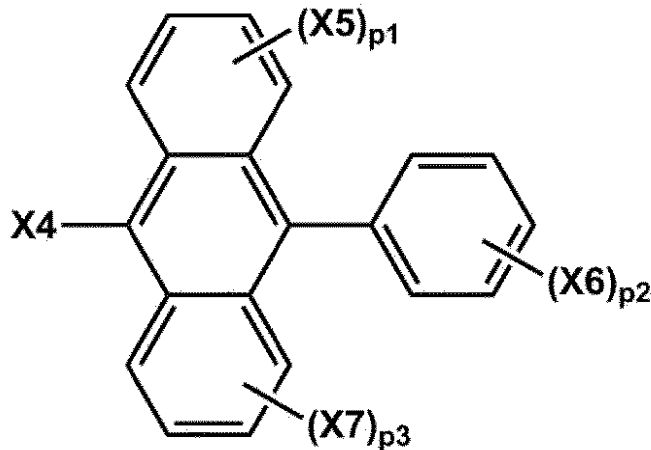
り、X 2 および X 3 は、互いに同一または異なり、それぞれ独立に、ゲルマニウム基で置換もしくは非置換のアリール基であり、r は、2 である、請求項 1 2 に記載の有機電子素子。

【請求項 1 4】

前記有機物層は、発光層を含み、前記発光層は、下記化学式 A-2 で表される化合物を含むものである、請求項 5 に記載の有機電子素子：

〔化学式 A-2〕

【化 1 0 5】



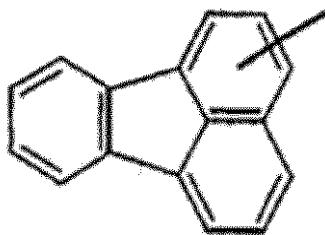
10

20

前記化学式 A-2 において、

X 4 は、1-ナフチル基、2-ナフチル基、1-アントラセニル基、2-アントラセニル基、1-フェナントリル基、2-フェナントリル基、3-フェナントリル基、4-フェナントリル基、9-フェナントリル基、1-ナフタセニル基、2-ナフタセニル基、9-ナフタセニル基、1-ピレニル基、2-ピレニル基、4-ピレニル基、3-メチル-2-ナフチル基、4-メチル-1-ナフチル基、または下記化学式

【化 1 0 6】



30

であり、

X 6 は、フェニル基、1-ナフチル基、2-ナフチル基、1-アントラセニル基、2-アントラセニル基、1-フェナントリル基、2-フェナントリル基、3-フェナントリル基、4-フェナントリル基、9-フェナントリル基、1-ナフタセニル基、2-ナフタセニル基、9-ナフタセニル基、1-ピレニル基、2-ピレニル基、4-ピレニル基、2-ビフェニル基、2-ビフェニル基、3-ビフェニル基、4-ビフェニル基、p-ターフェニル-4-イル基、p-ターフェニル-3-イル基、p-ターフェニル-2-イル基、m-ターフェニル-4-イル基、m-ターフェニル-3-イル基、m-ターフェニル-2-イル基、o-トリル基、m-トリル基、p-トリル基、p-tert-ブチルフェニル基、p-(2-フェニルプロピル)フェニル基、3-メチル-2-ナフチル基、4-メチル-1-ナフチル基、4-メチル-1-アントラセニル基、4'-メチルビフェニル基、4''-tert-ブチル-p-ターフェニル-4-イル基、または 3-フルオランテニル基であり、

40

X 5 および X 7 は、互いに同一または異なり、それぞれ独立に、水素；置換もしくは非置換のアルキル基；置換もしくは非置換のアルコキシ基；置換もしくは非置換のアリール

50

基；または置換もしくは非置換のヘテロアリール基であり、

p 2 は、1 ～ 5 の整数であり、

p 1 および p 3 はそれぞれ、1 ～ 4 の整数であり、

前記 p 1 ～ p 3 がそれぞれ 2 以上の場合、括弧内の置換基は、互いに同一または異なる。

【請求項 1 5】

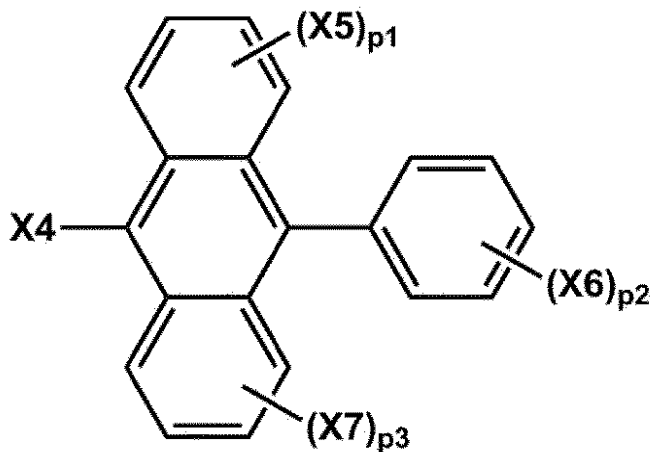
前記 X 4 は、1-ナフチル基であり、X 6 は、2-ナフチル基である、請求項 1 4 に記載の有機電子素子。

【請求項 1 6】

前記発光層は、下記化学式 A-2 で表される化合物をさらに含むものである、請求項 1 2 に記載の有機電子素子：

[化学式 A-2]

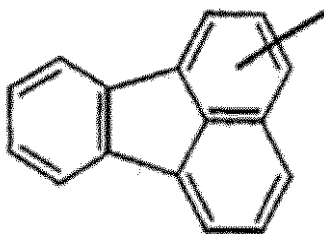
【化 1 0 7】



前記化学式 A-2 において、

X 4 は、1-ナフチル基、2-ナフチル基、1-アントラセニル基、2-アントラセニル基、1-フェナントリル基、2-フェナントリル基、3-フェナントリル基、4-フェナントリル基、9-フェナントリル基、1-ナフタセニル基、2-ナフタセニル基、9-ナフタセニル基、1-ピレニル基、2-ピレニル基、4-ピレニル基、3-メチル-2-ナフチル基、4-メチル-1-ナフチル基、または下記化学式

【化 1 0 8】



であり、

X 6 は、フェニル基、1-ナフチル基、2-ナフチル基、1-アントラセニル基、2-アントラセニル基、1-フェナントリル基、2-フェナントリル基、3-フェナントリル基、4-フェナントリル基、9-フェナントリル基、1-ナフタセニル基、2-ナフタセニル基、9-ナフタセニル基、1-ピレニル基、2-ピレニル基、4-ピレニル基、2-ビフェニル基、2-ビフェニル基、3-ビフェニル基、4-ビフェニル基、p-ターフェニル-4-イル基、p-ターフェニル-3-イル基、p-ターフェニル-2-イル基、m-ターフェニル-4-イル基、m-ターフェニル-3-イル基、m-ターフェニル-2-イル基、o-トリル基、m-トリル基、p-トリル基、p-tert-ブチルフェニル基、p-(2-フェニルプロピル)フェニル基、3-メチル-2-ナフチル基、4-メチ

ル-1-ナフチル基、4-メチル-1-アントラセニル基、4'-メチルビフェニル基、4"-t-ブチル-p-ターフェニル-4-イル基、または3-フルオランテニル基であり、

X5およびX7は、互いに同一または異なり、それぞれ独立に、水素；置換もしくは非置換のアルキル基；置換もしくは非置換のアルコキシ基；置換もしくは非置換のアリール基；または置換もしくは非置換のヘテロアリール基であり、

p2は、1～5の整数であり、

p1およびp3はそれぞれ、1～4の整数であり、

前記p1～p3がそれぞれ2以上の場合、括弧内の置換基は、互いに同一または異なる。

10

【発明の詳細な説明】

【技術分野】

【0001】

本明細書は、2016年1月27日付で韓国特許庁に出願された韓国特許出願第10-2016-0010112号の出願日の利益を主張し、その内容のすべては本明細書に組み込まれる。

【0002】

本明細書は、スピロ型化合物およびこれを含む有機電子素子に関する。

【背景技術】

【0003】

20

有機電子素子の代表例には有機発光素子がある。一般的に、有機発光現象とは、有機物質を用いて電気エネルギーを光エネルギーに変換させる現象をいう。有機発光現象を利用する有機発光素子は、通常、陽極および陰極と、それらの間に有機物層とを含む構造を有する。ここで、有機物層は、有機発光素子の効率と安定性を高めるために、それぞれ異なる物質で構成された多層の構造からなる場合が多く、例えば、正孔注入層、正孔輸送層、発光層、電子輸送層、電子注入層などからなる。このような有機発光素子の構造において、2つの電極の間に電圧をかけると、陽極からは正孔が、陰極からは電子が有機物層に注入され、注入された正孔と電子が接した時、エキシトン(exciton)が形成され、このエキシトンが再び基底状態に落ちる時に光を発する。

【0004】

30

前記のような有機発光素子のための新たな材料の開発が要求され続けている。

【発明の概要】

【発明が解決しようとする課題】

【0005】

本明細書は、スピロ型化合物およびこれを含む有機電子素子を提供する。

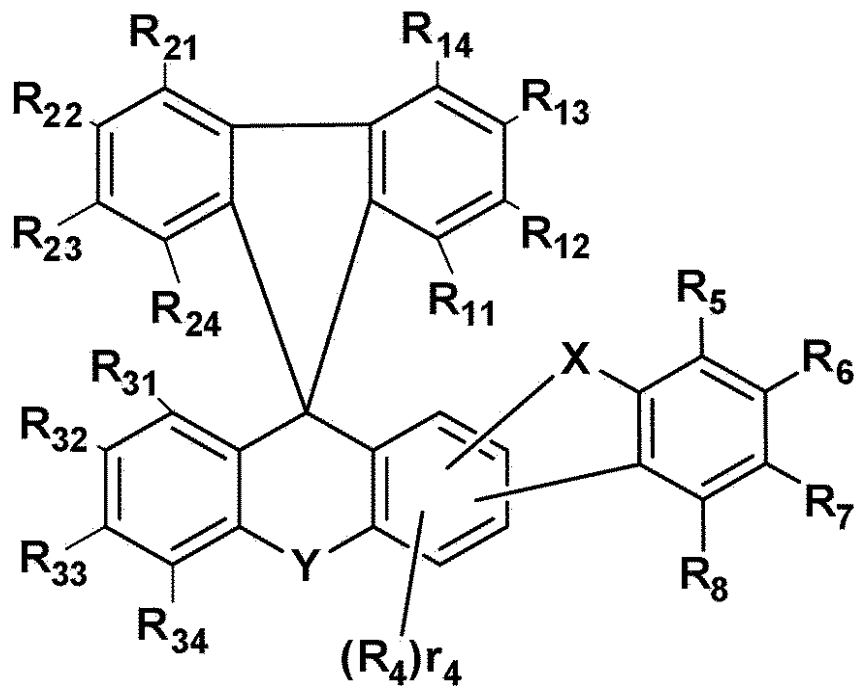
【課題を解決するための手段】

【0006】

本明細書は、下記化学式1で表されるスピロ型化合物を提供する。

[化学式1]

【化 1】



前記化学式 1 において、

X は、 NR_9 、O、S、または $\text{CR}_{101}\text{R}_{102}$ であり、

Y は、O、S、 $\text{CR}_{103}\text{R}_{104}$ 、または $\text{SiR}_{105}\text{R}_{106}$ であり、

R_9 は、 $-\text{L}_1\text{Ar}_1$ であり、

L_1 は、直接結合；置換もしくは非置換のアリーレン基；または置換もしくは非置換のヘテロアリーレン基であり、

$\text{R}_4 \sim \text{R}_8$ 、 $\text{R}_{11} \sim \text{R}_{14}$ 、 $\text{R}_{21} \sim \text{R}_{24}$ 、 $\text{R}_{31} \sim \text{R}_{34}$ 、 $\text{R}_{101} \sim \text{R}_{106}$ および Ar_1 は、互いに同一または異なり、それぞれ独立に、水素；重水素；ハロゲン基；シアノ基；ニトロ基；ヒドロキシ基；カルボニル基；エステル基；イミド基；アミノ基；置換もしくは非置換のシリル基；置換もしくは非置換のホウ素基；置換もしくは非置換のアルキル基；置換もしくは非置換のシクロアルキル基；置換もしくは非置換のアルコキシ基；置換もしくは非置換のアリールオキシ基；置換もしくは非置換のアルキルチオキシ基；置換もしくは非置換のアリールチオキシ基；置換もしくは非置換のアルキルスルホキシ基；置換もしくは非置換のアリールスルホキシ基；置換もしくは非置換のアルケニル基；置換もしくは非置換のアミン基；置換もしくは非置換のアルキルアミン基；置換もしくは非置換のアリールアミン基；置換もしくは非置換のヘテロアリールアミン基；置換もしくは非置換のホスフィンオキシド基；置換もしくは非置換のアリール基；または置換もしくは非置換のヘテロアリール基であるか、互いに隣接する基と互いに結合して環を形成してもよく、

r_4 は、1 または 2 の整数であり、

r_4 が 2 の場合、 R_4 は、互いに同一または異なる。

【0007】

また、本明細書は、第 1 電極と、前記第 1 電極に対向して備えられた第 2 電極と、前記第 1 電極と前記第 2 電極との間に備えられた 1 層以上の有機物層とを含む有機電子素子であって、前記有機物層のうちの 1 層以上は、前述のスピロ型化合物を含むものである有機電子素子を提供する。

【発明の効果】

【0008】

本明細書の一実施態様に係るスピロ型化合物は、有機発光素子を含めた有機電気素子に

使用され、有機電気素子の駆動電圧を低下させ、光効率を向上させ、化合物の熱的安定性によって素子の寿命特性を向上させることができる。

【図面の簡単な説明】

【0009】

【図1】本明細書の一実施態様に係る有機発光素子10を示すものである。

【図2】本明細書のもう一つの実施態様に係る有機発光素子11を示すものである。

【発明を実施するための形態】

【0010】

以下、本明細書についてより詳細に説明する。

【0011】

本明細書は、前記化学式1で表されるスピロ型化合物を提供する。

【0012】

前記化学式1のスピロ型化合物は、コア構造に多様な置換体を導入することにより、有機発光素子で使用される有機物層への使用に適した特性を有することができる。

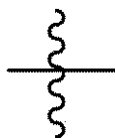
【0013】

本明細書において、置換基の例示は以下に説明するが、これに限定されるものではない。

【0014】

本明細書において、

【化2】



は、連結される部位を意味する。

【0015】

前記「置換」という用語は、化合物の炭素原子に結合した水素原子が他の置換基に変わることを意味し、置換される位置は、水素原子の置換される位置すなわち、置換基が置換可能な位置であれば限定せず、2以上置換される場合、2以上の置換基は、互いに同一でも異なってもよい。

【0016】

本明細書において、「置換もしくは非置換の」という用語は、重水素；ハロゲン基；シアノ基；ニトロ基；ヒドロキシ基；カルボニル基；エステル基；イミド基；アミノ基；アルキル基；シクロアルキル基；アルケニル基；アミン基；ホスフィンオキシド基；アリール基；シリル基；およびN、O、S、Se、およびSi原子のうちの1個以上を含むヘテロ環基からなる群より選択された1または2以上の置換基で置換されているか、前記例示された置換基のうちの2以上の置換基が連結された置換基で置換されるか、またはいずれの置換基も有しないことを意味する。

【0017】

本明細書において、カルボニル基の炭素数は特に限定されないが、炭素数1～50のものが好ましい。具体的には、下記のような構造の化合物になってもよいが、これに限定されるものではない。

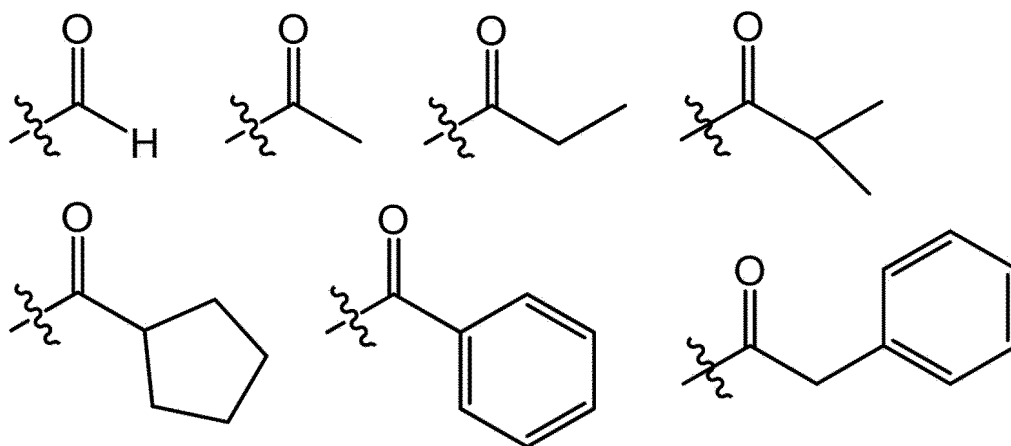
10

20

30

40

【化 3】

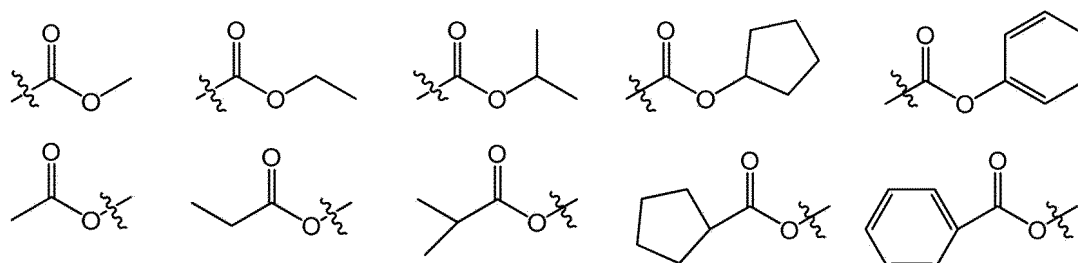


10

【0018】

本明細書において、エステル基の炭素数は特に限定されないが、炭素数1～50のものが好ましい。具体的には、下記構造式の化合物になってもよいが、これに限定されるものではない。

【化 4】

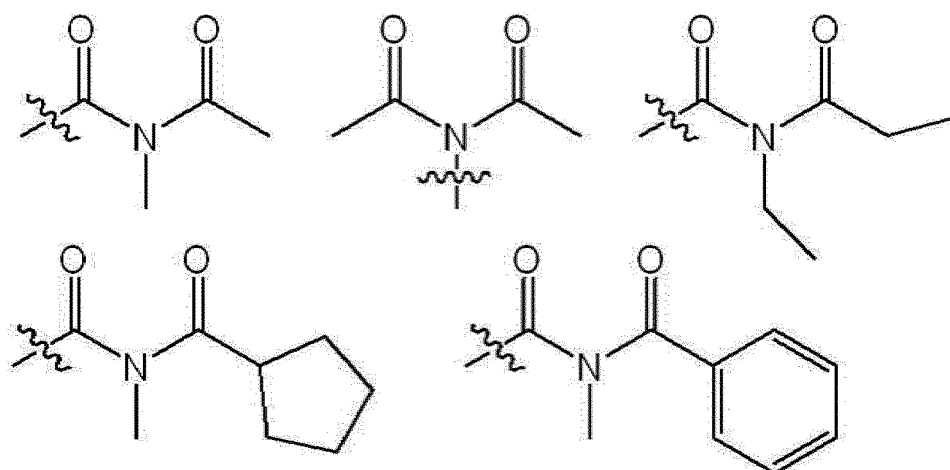


20

【0019】

本明細書において、イミド基の炭素数は特に限定されないが、炭素数1～50のものが好ましい。具体的には、下記のような構造の化合物になってもよいが、これに限定されるものではない。

【化 5】



40

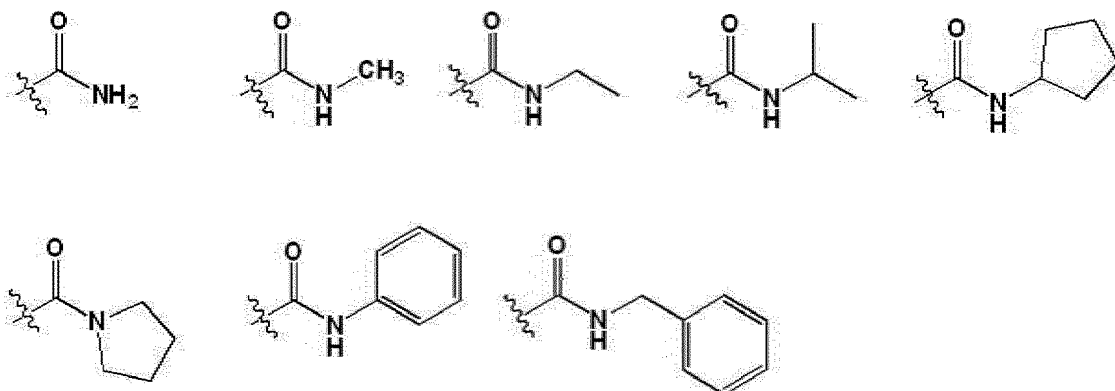
【0020】

本明細書において、アミノ基は、アミノ基の窒素が水素、炭素数1～30の直鎖、分枝鎖もしくは環鎖アルキル基、または炭素数6～30のアリール基で置換されていてもよい

50

。具体的には、下記構造式の化合物になってもよいが、これに限定されるものではない。

【化 6】



10

【0021】

本明細書において、アルキル基は、直鎖もしくは分枝鎖であってもよく、炭素数は特に限定されないが、1～50のものが好ましい。具体例としては、メチル、エチル、プロピル、*n*-プロピル、イソプロピル、ブチル、*n*-ブチル、イソブチル、*tert*-ブチル、*sec*-ブチル、1-メチルブチル、1-エチルブチル、ペンチル、*n*-ペンチル、イソペンチル、ネオペンチル、*tert*-ペンチル、ヘキシル、*n*-ヘキシル、1-メチルペンチル、2-メチルペンチル、4-メチル-2-ペンチル、3, 3-ジメチルブチル、2-エチルブチル、ヘプチル、*n*-ヘプチル、1-メチルヘキシル、シクロペンチルメチル、シクロヘキシルメチル、オクチル、*n*-オクチル、*tert*-オクチル、1-メチルヘプチル、2-エチルヘキシル、2-プロピルペンチル、*n*-ノニル、2, 2-ジメチルヘプチル、1-エチルプロピル、1, 1-ジメチルプロピル、イソヘキシル、4-メチルヘキシル、5-メチルヘキシルなどがあるが、これらに限定されない。

20

【0022】

本明細書において、シクロアルキル基は特に限定されないが、炭素数3～60のものが好ましく、具体的には、シクロプロピル、シクロブチル、シクロペンチル、3-メチルシクロペンチル、2, 3-ジメチルシクロペンチル、シクロヘキシル、3-メチルシクロヘキシル、4-メチルシクロヘキシル、2, 3-ジメチルシクロヘキシル、3, 4, 5-トリメチルシクロヘキシル、4-*tert*-ブチルシクロヘキシル、シクロヘプチル、シクロオクチルなどがあるが、これらに限定されない。

30

【0023】

本明細書において、アルコキシ基は、直鎖、分枝鎖もしくは環鎖であってもよい。アルコキシ基の炭素数は特に限定されないが、炭素数1～20のものが好ましい。具体的には、メトキシ、エトキシ、*n*-プロポキシ、イソプロポキシ、*i*-プロピルオキシ、*n*-ブトキシ、イソブトキシ、*tert*-ブトキシ、*sec*-ブトキシ、*n*-ペンチルオキシ、ネオペンチルオキシ、イソペンチルオキシ、*n*-ヘキシルオキシ、3, 3-ジメチルブチルオキシ、2-エチルブチルオキシ、*n*-オクチルオキシ、*n*-ノニルオキシ、*n*-デシルオキシ、ベンジルオキシ、*p*-メチルベンジルオキシなどになってもよいが、これらに

40

【0024】

本明細書において、アルケニル基は、直鎖もしくは分枝鎖であってもよく、炭素数は特に限定されないが、2～40のものが好ましい。具体例としては、ビニル、1-プロペニル、イソプロペニル、1-ブテニル、2-ブテニル、3-ブテニル、1-ペンテニル、2-ペンテニル、3-ペンテニル、3-メチル-1-ブテニル、1, 3-ブタジエニル、アリル、1-フェニルビニル-1-イル、2-フェニルビニル-1-イル、2, 2-ジフェニルビニル-1-イル、2-フェニル-2-(ナフチル-1-イル)ビニル-1-イル、2, 2-ビス(ジフェニル-1-イル)ビニル-1-イル、スチルベニル基、スチレニル基などがあるが、これらに限定されない。

50

【0025】

本明細書において、シリル基は、Siを含み、前記Si原子がラジカルとして直接連結される置換基であり、 $-SiR_{201}R_{202}R_{203}$ で表され、 $R_{201} \sim R_{203}$ は、互いに同一または異なり、それぞれ独立に、水素；重水素；ハロゲン基；アルキル基；アルケニル基；アルコキシ基；シクロアルキル基；アリール基；およびヘテロ環基のうちの少なくとも1つからなる置換基であってもよい。シリル基の具体例としては、トリメチルシリル基、トリエチルシリル基、t-ブチルジメチルシリル基、ビニルジメチルシリル基、プロピルジメチルシリル基、トリフェニルシリル基、ジフェニルシリル基、フェニルシリル基などがあるが、これらに限定されるものではない。

【0026】

10

本明細書において、ホウ素基は、 $-BR_{204}R_{205}$ であってもよいし、前記 R_{204} および R_{205} は、同一または異なり、それぞれ独立に、水素；重水素；ハロゲン；置換もしくは非置換の炭素数3～30の単環もしくは多環のシクロアルキル基；置換もしくは非置換の炭素数1～30の直鎖もしくは分枝鎖のアルキル基；置換もしくは非置換の炭素数6～30の単環もしくは多環のアリール基；および置換もしくは非置換の炭素数2～30の単環もしくは多環のヘテロ環基からなる群より選択されてもよい。

【0027】

本明細書において、アリール基が単環式アリール基の場合、炭素数は特に限定されないが、炭素数6～50のものが好ましい。具体的には、単環式アリール基としては、フェニル基、ビフェニル基、ターフェニル基、クォーターフェニル基などになってもよいが、これらに限定されるものではない。

20

【0028】

前記アリール基が多環式アリール基の場合、炭素数は特に限定されないが、炭素数10～50のものが好ましい。具体的には、多環式アリール基としては、ナフチル基、アントラセニル基、フェナントリル基、ピレニル基、ペリレニル基、クリセニル基、フルオレニル基などになってもよいが、これらに限定されるものではない。

【0029】

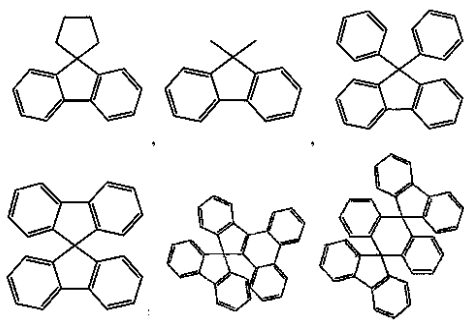
本明細書において、前記フルオレニル基は置換されていてもよいし、隣接した置換基が互いに結合して環を形成してもよい。

【0030】

30

前記フルオレニル基が置換される場合、

【化7】



40

などになってもよいが、これらに限定されるものではない。

【0031】

本明細書において、ヘテロアリール基は、異種原子としてN、O、S、Si、およびSeのうちの1個以上を含むヘテロ環基であって、炭素数は特に限定されないが、炭素数2～60のものが好ましい。ヘテロアリール基の例としては、チオフェン基、フラン基、ピロール基、イミダゾール基、チアゾール基、オキサゾール基、オキサジアゾール基、トリアゾール基、ピリジル基、ビピリジル基、ピリミジル基、トリアジン基、アクリジル基、ピリダジン基、ピラジニル基、キノリニル基、キナゾリン基、キノキサリニル基、フタラジニル基、ピリドピリミジニル基、ピリドピラジニル基、ピラジノピラジニル基、イソキ

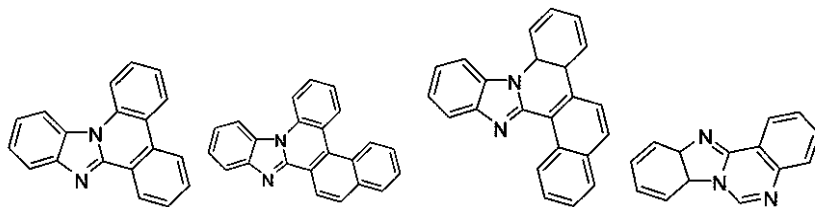
50

ノリン基、インドール基、カルバゾール基、ベンズオキサゾール基、ベンズイミダゾール基、ベンゾチアゾール基、ベンゾカルバゾール基、ベンゾチオフェン基、ジベンゾチオフェン基、ベンゾフラニル基、フェナントロリン基 (phenanthroline)、チアゾリル基、イソオキサゾリル基、オキサジアゾリル基、チアジアゾリル基、およびジベンゾフラニル基などがあるが、これらにのみ限定されるものではない。

【0032】

本明細書において、前記縮合構造は、当該置換基に芳香族炭素水素環が縮合された構造であってもよい。例えば、ベンズイミダゾールの縮合環として、

【化8】



などになってもよいが、これらに限定されるものではない。

【0033】

本明細書において、「隣接した」基は、当該置換基が置換された原子と直接連結された原子に置換された置換基、当該置換基と立体構造的に最も近く位置した置換基、または当該置換基が置換された原子に置換された他の置換基を意味することができる。例えば、ベンゼン環におけるオルト (ortho) 位に置換された2個の置換基、および脂肪族環における同一炭素に置換された2個の置換基は、互いに「隣接した」基と解釈されてもよい。

【0034】

本明細書において、隣接した基が互いに結合して環を形成することの意味は、前述のように隣接した基が互いに結合して、5員～8員の炭化水素環もしくは5員～8員のヘテロ環を形成することを意味し、単環もしくは多環であってもよいし、脂肪族、芳香族、またはこれらの縮合された形態であってもよいし、これを限定しない。

【0035】

本明細書において、炭化水素環またはヘテロ環は、1価の基のものを除き、前述のシクロアルキル基、アリール基、またはヘテロアリール基の例示の中から選択されてもよいし、単環もしくは多環、脂肪族または芳香族、またはこれらの縮合された形態であってもよいが、これらにのみ限定されるものではない。

【0036】

本明細書において、アミン基は、アミノ基 ($-NH_2$) の少なくとも1つの水素原子が他の置換体で置換された1価のアミンを意味し、 $-NR_{107}R_{108}$ で表され、 R_{107} および R_{108} は、互いに同一または異なり、それぞれ独立に、水素；重水素；ハロゲン基；アルキル基；アルケニル基；アルコキシ基；シクロアルキル基；アリール基；およびヘテロ環基のうちの少なくとも1つからなる置換基であってもよい（ただし、 R_{107} および R_{108} のうちの少なくとも1つは水素でない）。例えば、 $-NH_2$ ；モノアルキルアミン基；ジアルキルアミン基；N-アルキルアリールアミン基；モノアリールアミン基；ジアリールアミン基；N-アリールヘテロアリールアミン基；N-アルキルヘテロアリールアミン基、モノヘテロアリールアミン基、およびジヘテロアリールアミン基からなる群より選択されてもよいし、炭素数は特に限定されないが、1～30のものが好ましい。アミン基の具体例としては、メチルアミン基、ジメチルアミン基、エチルアミン基、ジエチルアミン基、フェニルアミン基、ナフチルアミン基、ビフェニルアミン基、アントラセニルアミン基、9-メチルアントラセニルアミン基、ジフェニルアミン基、ジトリルアミン基、N-フェニルトリルアミン基、トリフェニルアミン基、N-フェニルビフェニルアミン基；N-フェニルナフチルアミン基；N-ビフェニルナフチルアミン基；N-ナフチルフルオレニルアミン基；N-フェニルフェナントレニルアミン基；N-ビフェニル

フェナントレニルアミン基；N-フェニルフルオレニルアミン基；N-フェニルターフェニルアミン基；N-フェナントレニルフルオレニルアミン基；N-ビフェニルフルオレニルアミン基などがあるが、これらに限定されるものではない。

【0037】

本明細書において、ホスフィンオキシド基は、具体的には、ジフェニルホスフィンオキシド基、ジナフチルホスフィンオキシドなどがあるが、これらに限定されるものではない。

【0038】

本明細書において、アリールオキシ基、アリールチオキシ基、アリールスルホキシ基、N-アリールアルキルアミン基、およびN-アリールヘテロアリールアミン基中のアリール基は、前述のアリール基の例示の通りである。具体的には、アリールオキシ基としては、フェノキシ基、p-トリルオキシ基、m-トリルオキシ基、3,5-ジメチルフェノキシ基、2,4,6-トリメチルフェノキシ基、p-tert-ブチルフェノキシ基、3-ビフェニルオキシ基、4-ビフェニルオキシ基、1-ナフチルオキシ基、2-ナフチルオキシ基、4-メチル-1-ナフチルオキシ基、5-メチル-2-ナフチルオキシ基、1-アントラセニルオキシ基、2-アントラセニルオキシ基、9-アントラセニルオキシ基、1-フェナントリルオキシ基、3-フェナントリルオキシ基、9-フェナントリルオキシ基などがあり、アリールチオキシ基としては、フェニルチオキシ基、2-メチルフェニルチオキシ基、4-tert-ブチルフェニルチオキシ基などがあり、アリールスルホキシ基としては、ベンゼンスルホキシ基、p-トルエンスルホキシ基などがあるが、これらに限定されるものではない。

【0039】

本明細書において、アリールアミン基の例としては、置換もしくは非置換のモノアリールアミン基、置換もしくは非置換のジアリールアミン基、または置換もしくは非置換のトリアリールアミン基がある。前記アリールアミン基中のアリール基は、単環式アリール基であってもよく、多環式アリール基であってもよい。前記アリール基が2以上を含むアリールアミン基は、単環式アリール基、多環式アリール基、または単環式アリール基と多環式アリール基を同時に含んでもよい。例えば、前記アリールアミン基中のアリール基は、前述のアリール基の例示の中から選択されてもよい。

【0040】

本明細書において、ヘテロアリールアミン基の例としては、置換もしくは非置換のモノヘテロアリールアミン基、置換もしくは非置換のジヘテロアリールアミン基、または置換もしくは非置換のトリヘテロアリールアミン基がある。前記ヘテロアリール基が2以上を含むヘテロアリールアミン基は、単環式ヘテロアリール基、多環式ヘテロアリール基、または単環式ヘテロアリール基と多環式ヘテロアリール基を同時に含んでもよい。例えば、前記ヘテロアリールアミン基中のヘテロアリール基は、前述のヘテロアリール基の例示の中から選択されてもよい。

【0041】

本明細書において、芳香族環基は、単環もしくは多環であってもよいし、1価でないものを除き、前記アリール基の例示の中から選択されてもよい。

【0042】

本明細書において、2～4価の芳香族環基は、単環もしくは多環であってもよいし、前記アリール基に結合位置が2～4つあるもの、すなわち、2～4価の基を意味する。これらは、それぞれ2～4価の基であることを除けば、前述のアリール基の説明が適用可能である。

【0043】

本明細書において、アリーレン基は、アリール基に結合位置が2つあるもの、すなわち2価の基を意味する。これらは、それぞれ2価の基であることを除けば、前述のアリール基の説明が適用可能である。

【0044】

本明細書において、ヘテロアリーレン基は、ヘテロアリアル基に結合位置が2つあるもの、すなわち2価の基を意味する。これらは、それぞれ2価の基であることを除けば、前述のヘテロアリアル基の説明が適用可能である。

【0045】

本明細書の一実施態様において、Xは、NR₉、O、S、またはCR₁₀₁R₁₀₂である。

【0046】

本明細書の一実施態様において、Xは、NR₉である。

【0047】

本明細書の一実施態様において、Xは、Oである。

10

【0048】

本明細書の一実施態様において、Xは、Sである。

【0049】

本明細書の一実施態様において、Xは、CR₁₀₁R₁₀₂である。

【0050】

本明細書の一実施態様において、Yは、O、S、CR₁₀₃R₁₀₄、またはSiR₁₀₅R₁₀₆である。

【0051】

本明細書の一実施態様において、Yは、Oである。

【0052】

本明細書の一実施態様において、Yは、Sである。

20

【0053】

本明細書の一実施態様において、Yは、CR₁₀₃R₁₀₄である。

【0054】

本明細書の一実施態様において、Yは、SiR₁₀₅R₁₀₆である。

【0055】

本明細書の一実施態様において、R₉は、-L₁Ar₁である。

【0056】

本明細書の一実施態様において、L₁は、直接結合；置換もしくは非置換のアリーレン基；または置換もしくは非置換のヘテロアリーレン基である。

30

【0057】

本明細書の一実施態様において、L₁は、直接結合である。

【0058】

本明細書の一実施態様において、L₁は、置換もしくは非置換のアリーレン基である。

【0059】

本明細書の一実施態様において、L₁は、置換もしくは非置換のフェニレン基、置換もしくは非置換のビフェニレン基、置換もしくは非置換のナフチレン基、置換もしくは非置換のターフェニレン基、置換もしくは非置換のフェナントリレン基、置換もしくは非置換のトリフェニレン基、または置換もしくは非置換のフルオレニレン基である。

【0060】

本明細書の一実施態様において、L₁は、フェニレン基である。

40

【0061】

本明細書の一実施態様において、L₁は、ビフェニレン基である。

【0062】

本明細書の一実施態様において、L₁は、ナフチレン基である。

【0063】

本明細書の一実施態様において、L₁は、ターフェニレン基である。

【0064】

本明細書の一実施態様において、L₁は、置換もしくは非置換のヘテロアリーレン基である。

50

【0065】

本明細書の一実施態様において、 L_1 は、置換もしくは非置換の2価のピリジン基、置換もしくは非置換の2価のピリミジン基、置換もしくは非置換の2価のトリアジン基、置換もしくは非置換の2価のカルバゾール基、置換もしくは非置換の2価のジベンゾカルバゾール基、置換もしくは非置換の2価のジベンゾチオフェン基、置換もしくは非置換の2価のジベンゾフラン基、置換もしくは非置換の2価のキノリン基、置換もしくは非置換の2価のキナゾリン基、または置換もしくは非置換の2価のキノキサリン基である。

【0066】

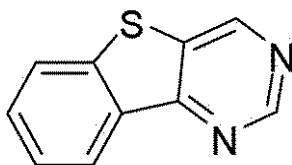
本明細書の一実施態様において、 L_1 は、2価のピリジン基、2価のピリミジン基、2価のトリアジン基、2価のカルバゾール基、2価のジベンゾカルバゾール基、2価のジベンゾチオフェン基、2価のジベンゾフラン基、2価のキノリン基、2価のキナゾリン基、または2価のキノキサリン基である。

10

【0067】

本明細書の一実施態様において、 L_1 は、置換もしくは非置換の2価の

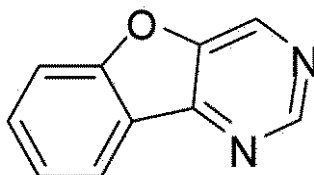
【化9】



20

または置換もしくは非置換の2価の

【化10】



30

である。

【0068】

本明細書の一実施態様において、 $R_4 \sim R_8$ 、 $R_{11} \sim R_{14}$ 、 $R_{21} \sim R_{24}$ 、 $R_{31} \sim R_{34}$ 、 $R_{101} \sim R_{106}$ および Ar_1 は、互いに同一または異なり、それぞれ独立に、水素；重水素；ハロゲン基；シアノ基；ニトロ基；ヒドロキシ基；カルボニル基；エステル基；イミド基；アミノ基；置換もしくは非置換のシリル基；置換もしくは非置換のホウ素基；置換もしくは非置換のアルキル基；置換もしくは非置換のシクロアルキル基；置換もしくは非置換のアルコキシ基；置換もしくは非置換のアリールオキシ基；置換もしくは非置換のアルキルチオキシ基；置換もしくは非置換のアリールチオキシ基；置換もしくは非置換のアルキルスルホキシ基；置換もしくは非置換のアリールスルホキシ基；置換もしくは非置換のアルケニル基；置換もしくは非置換のアミン基；置換もしくは非置換のアルキルアミン基；置換もしくは非置換のアリールアミン基；置換もしくは非置換のヘテロアリールアミン基；置換もしくは非置換のホスフィンオキシド基；置換もしくは非置換のアリール基；または置換もしくは非置換のヘテロアリール基であるか、互いに隣接する基と互いに結合して環を形成してもよい。

40

【0069】

本明細書の一実施態様において、 Ar_1 は、置換もしくは非置換の炭素数6～50のアリール基である。

【0070】

本明細書の一実施態様において、 Ar_1 は、置換もしくは非置換のフェニル基、置換も

50

しくは非置換のビフェニル基、置換もしくは非置換のターフェニル基、置換もしくは非置換のナフチル基、置換もしくは非置換のアントラセニル基、置換もしくは非置換のフェナントリル基、置換もしくは非置換のトリフェニル基、または置換もしくは非置換のフルオレニル基である。

【0071】

本明細書の一実施態様において、 Ar_1 は、ハロゲン基、シアノ基、アルキル基、またはアリール基で置換もしくは非置換のフェニル基である。

【0072】

本明細書の一実施態様において、 Ar_1 は、ハロゲン基、シアノ基、メチル基、エチル基、tert-ブチル基、イソプロピル基、フェニル基、ビフェニル基、またはナフチル基で置換もしくは非置換のフェニル基である。

10

【0073】

本明細書の一実施態様において、 Ar_1 は、フェニル基である。

【0074】

本明細書の一実施態様において、 Ar_1 は、ハロゲン基、シアノ基、アルキル基、またはアリール基で置換もしくは非置換のビフェニル基である。

【0075】

本明細書の一実施態様において、 Ar_1 は、ハロゲン基、シアノ基、メチル基、エチル基、tert-ブチル基、イソプロピル基、フェニル基、ビフェニル基、またはナフチル基で置換もしくは非置換のビフェニル基である。

20

【0076】

本明細書の一実施態様において、 Ar_1 は、ビフェニル基である。

【0077】

本明細書の一実施態様において、 Ar_1 は、ハロゲン基、シアノ基、アルキル基、またはアリール基で置換もしくは非置換のターフェニル基である。

【0078】

本明細書の一実施態様において、 Ar_1 は、ハロゲン基、シアノ基、メチル基、エチル基、tert-ブチル基、イソプロピル基、フェニル基、ビフェニル基、またはナフチル基で置換もしくは非置換のターフェニル基である。

【0079】

本明細書の一実施態様において、 Ar_1 は、ターフェニル基である。

30

【0080】

本明細書の一実施態様において、 Ar_1 は、ハロゲン基、シアノ基、アルキル基、またはアリール基で置換もしくは非置換のナフチル基である。

【0081】

本明細書の一実施態様において、 Ar_1 は、ハロゲン基、シアノ基、メチル基、エチル基、tert-ブチル基、イソプロピル基、フェニル基、ビフェニル基、またはナフチル基で置換もしくは非置換のナフチル基である。

【0082】

本明細書の一実施態様において、 Ar_1 は、ナフチル基である。

40

【0083】

本明細書の一実施態様において、 Ar_1 は、ハロゲン基、シアノ基、アルキル基、またはアリール基で置換もしくは非置換のトリフェニル基である。

【0084】

本明細書の一実施態様において、 Ar_1 は、ハロゲン基、シアノ基、メチル基、エチル基、tert-ブチル基、イソプロピル基、フェニル基、ビフェニル基、またはナフチル基で置換もしくは非置換のトリフェニル基である。

【0085】

本明細書の一実施態様において、 Ar_1 は、トリフェニル基である。

【0086】

50

本明細書の一実施態様において、 Ar_1 は、ハロゲン基、シアノ基、アルキル基、またはアリール基で置換もしくは非置換のフルオレニル基である。

【0087】

本明細書の一実施態様において、 Ar_1 は、ハロゲン基、シアノ基、メチル基、エチル基、tert-ブチル基、イソプロピル基、フェニル基、ビフェニル基、またはナフチル基で置換もしくは非置換のフルオレニル基である。

【0088】

本明細書の一実施態様において、 Ar_1 は、フルオレニル基である。

【0089】

本明細書の一実施態様において、 Ar_1 は、置換もしくは非置換の炭素数6～50のヘテロアリール基である。

10

【0090】

本明細書の一実施態様において、 Ar_1 は、置換もしくは非置換のピリジン基、置換もしくは非置換のピリミジン基、置換もしくは非置換のトリアジン基、置換もしくは非置換のカルバゾール基、置換もしくは非置換のジベンゾカルバゾール基、置換もしくは非置換のジベンゾフラン基、置換もしくは非置換のジベンゾチオフェン基、置換もしくは非置換のキノリン基、置換もしくは非置換のキナゾリン基、または置換もしくは非置換のキノキサリン基である。

【0091】

本明細書の一実施態様において、 Ar_1 は、アリール基が置換もしくは非置換のピリジン基である。

20

【0092】

本明細書の一実施態様において、 Ar_1 は、フェニル基、ビフェニル基、ターフェニル基、ナフチル基、トリフェニル基、フェナントリル基、またはフルオレニル基が置換もしくは非置換のピリジン基である。

【0093】

本明細書の一実施態様において、 Ar_1 は、ピリジン基である。

【0094】

本明細書の一実施態様において、 Ar_1 は、アリール基が置換もしくは非置換のピリミジン基である。

30

【0095】

本明細書の一実施態様において、 Ar_1 は、フェニル基、ビフェニル基、ターフェニル基、ナフチル基、トリフェニル基、フェナントリル基、またはフルオレニル基が置換もしくは非置換のピリミジン基である。

【0096】

本明細書の一実施態様において、 Ar_1 は、ピリミジン基である。

【0097】

本明細書の一実施態様において、 Ar_1 は、アリール基が置換もしくは非置換のトリアジン基である。

【0098】

40

本明細書の一実施態様において、 Ar_1 は、フェニル基、ビフェニル基、ターフェニル基、ナフチル基、トリフェニル基、フェナントリル基、またはフルオレニル基が置換もしくは非置換のトリアジン基である。

【0099】

本明細書の一実施態様において、 Ar_1 は、トリアジン基である。

【0100】

本明細書の一実施態様において、 Ar_1 は、アリール基が置換もしくは非置換のカルバゾール基である。

【0101】

本明細書の一実施態様において、 Ar_1 は、フェニル基、ビフェニル基、ターフェニル

50

基、ナフチル基、トリフェニル基、フェナントリル基、またはフルオレニル基が置換もしくは非置換のカルバゾール基である。

【0102】

本明細書の一実施態様において、 Ar_1 は、カルバゾール基である。

【0103】

本明細書の一実施態様において、 Ar_1 は、アリール基が置換もしくは非置換のジベンゾカルバゾール基である。

【0104】

本明細書の一実施態様において、 Ar_1 は、フェニル基、ビフェニル基、ターフェニル基、ナフチル基、トリフェニル基、フェナントリル基、またはフルオレニル基が置換もしくは非置換のジベンゾカルバゾール基である。

10

【0105】

本明細書の一実施態様において、 Ar_1 は、ジベンゾカルバゾール基である。

【0106】

本明細書の一実施態様において、 Ar_1 は、アリール基が置換もしくは非置換のジベンゾチオフエン基である。

【0107】

本明細書の一実施態様において、 Ar_1 は、フェニル基、ビフェニル基、ターフェニル基、ナフチル基、トリフェニル基、フェナントリル基、またはフルオレニル基が置換もしくは非置換のジベンゾチオフエン基である。

20

【0108】

本明細書の一実施態様において、 Ar_1 は、ジベンゾチオフエン基である。

【0109】

本明細書の一実施態様において、 Ar_1 は、アリール基が置換もしくは非置換のジベンゾフラン基である。

【0110】

本明細書の一実施態様において、 Ar_1 は、フェニル基、ビフェニル基、ターフェニル基、ナフチル基、トリフェニル基、フェナントリル基、またはフルオレニル基が置換もしくは非置換のジベンゾフラン基である。

【0111】

本明細書の一実施態様において、 Ar_1 は、ジベンゾフラン基である。

30

【0112】

本明細書の一実施態様において、 Ar_1 は、アリール基が置換もしくは非置換のキノリン基である。

【0113】

本明細書の一実施態様において、 Ar_1 は、フェニル基、ビフェニル基、ターフェニル基、ナフチル基、トリフェニル基、フェナントリル基、またはフルオレニル基が置換もしくは非置換のキノリン基である。

【0114】

本明細書の一実施態様において、 Ar_1 は、キノリン基である。

40

【0115】

本明細書の一実施態様において、 Ar_1 は、アリール基が置換もしくは非置換のキナゾリン基である。

【0116】

本明細書の一実施態様において、 Ar_1 は、フェニル基、ビフェニル基、ターフェニル基、ナフチル基、トリフェニル基、フェナントリル基、またはフルオレニル基が置換もしくは非置換のキナゾリン基である。

【0117】

本明細書の一実施態様において、 Ar_1 は、キナゾリン基である。

【0118】

50

本明細書の一実施態様において、 Ar_1 は、アリール基が置換もしくは非置換のキノキサリン基である。

【0119】

本明細書の一実施態様において、 Ar_1 は、フェニル基、ビフェニル基、ターフェニル基、ナフチル基、トリフェニル基、フェナントリル基、またはフルオレニル基が置換もしくは非置換のキノキサリン基である。

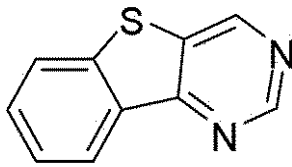
【0120】

本明細書の一実施態様において、 Ar_1 は、キノキサリン基である。

【0121】

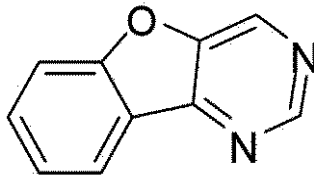
本明細書の一実施態様において、 Ar_1 は、置換もしくは非置換の
【化11】

10



または置換もしくは非置換の
【化12】

20

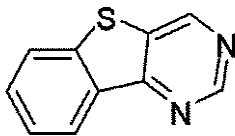


である。

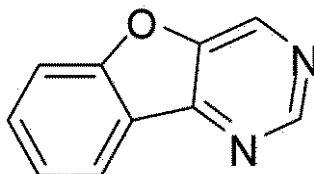
【0122】

本明細書の一実施態様において、 Ar_1 は、アリール基が置換もしくは非置換の
【化13】

30



または
【化14】



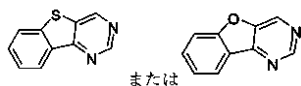
40

である。

【0123】

本明細書の一実施態様において、 Ar_1 は、フェニル基、ビフェニル基、ターフェニル基、ナフチル基、トリフェニル基、フェナントリル基、またはフルオレニル基が置換もしくは非置換の

【化 1 5】

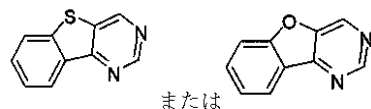


である。

【0 1 2 4】

本明細書の一実施態様において、 Ar_1 は、

【化 1 6】



である。

【0 1 2 5】

本明細書の一実施態様において、 Ar_1 は、置換もしくは非置換の炭素数 6 ～ 40 のアミン基である。

【0 1 2 6】

本明細書の一実施態様において、 Ar_1 は、アリール基またはヘテロアリール基で置換もしくは非置換のアミン基である。

【0 1 2 7】

本明細書の一実施態様において、 Ar_1 は、フェニル基、ビフェニル基、ターフェニル基、ナフチル基、カルバゾール基、ジベンゾチオフェン基、またはジベンゾフラン基で置換もしくは非置換のアミン基である。

【0 1 2 8】

本明細書の一実施態様において、 Ar_1 は、アリール基で置換もしくは非置換のホスフィンオキシド基である。

【0 1 2 9】

本明細書の一実施態様において、 Ar_1 は、フェニル基、ビフェニル基、またはナフチル基で置換もしくは非置換のホスフィンオキシド基である。

【0 1 3 0】

本明細書の一実施態様において、 Ar_1 は、ホスフィンオキシド基である。

【0 1 3 1】

本明細書の一実施態様において、 Ar_1 は、ハロゲン基である。

【0 1 3 2】

本明細書の一実施態様において、 Ar_1 は、シアノ基である。

【0 1 3 3】

本明細書の一実施態様において、 Ar_1 は、置換もしくは非置換の炭素数 1 ～ 30 のアルキル基である。

【0 1 3 4】

本明細書の一実施態様において、 Ar_1 は、置換もしくは非置換のメチル基、置換もしくは非置換のエチル基、置換もしくは非置換の *tert*-ブチル基、または置換もしくは非置換のイソプロピル基である。

【0 1 3 5】

本明細書の一実施態様において、 Ar_1 は、メチル基である。

【0 1 3 6】

本明細書の一実施態様において、 Ar_1 は、エチル基である。

【0 1 3 7】

本明細書の一実施態様において、 Ar_1 は、*tert*-ブチル基である。

【0 1 3 8】

本明細書の一実施態様において、 Ar_1 は、イソプロピル基である。

10

20

30

40

50

【0139】

本明細書の一実施態様において、 $R_4 \sim R_8$ 、 $R_{11} \sim R_{14}$ 、 $R_{21} \sim R_{24}$ 、 $R_{31} \sim R_{34}$ および $R_{101} \sim R_{106}$ は、互いに同一または異なり、それぞれ独立に、炭素数6～30のアミン基である。

【0140】

本明細書の一実施態様において、 $R_4 \sim R_8$ 、 $R_{11} \sim R_{14}$ 、 $R_{21} \sim R_{24}$ 、 $R_{31} \sim R_{34}$ および $R_{101} \sim R_{106}$ は、互いに同一または異なり、それぞれ独立に、アリール基またはヘテロアリール基で置換もしくは非置換のアミン基である。

【0141】

本明細書の一実施態様において、 $R_4 \sim R_8$ 、 $R_{11} \sim R_{14}$ 、 $R_{21} \sim R_{24}$ 、 $R_{31} \sim R_{34}$ および $R_{101} \sim R_{106}$ は、互いに同一または異なり、それぞれ独立に、フェニル基、メチル基で置換されたフェニル基、ビフェニル基、ナフチル基、カルバゾール基、ジベンゾチオフェン基、またはジベンゾフラン基で置換もしくは非置換のアミン基である。

10

【0142】

本明細書の一実施態様において、 $R_4 \sim R_8$ 、 $R_{11} \sim R_{14}$ 、 $R_{21} \sim R_{24}$ 、 $R_{31} \sim R_{34}$ および $R_{101} \sim R_{106}$ は、互いに同一または異なり、それぞれ独立に、フェニル基、メチル基で置換されたフェニル基、ビフェニル基、ナフチル基、カルバゾール基、ジベンゾチオフェン基、またはジベンゾフラン基で置換もしくは非置換のアミン基である。

20

【0143】

本明細書の一実施態様において、 R_{33} または R_{23} は、アリール基またはヘテロアリール基で置換されたアミン基である。

【0144】

本明細書の一実施態様において、 R_{33} または R_{23} は、フェニル基、メチル基で置換されたフェニル基、ビフェニル基、ナフチル基、カルバゾール基、ジベンゾチオフェン基、またはジベンゾフラン基で置換もしくは非置換のアミン基である。

【0145】

本明細書の一実施態様において、 R_{33} または R_{23} は、フェニル基、メチル基で置換されたフェニル基、ビフェニル基、ナフチル基、カルバゾール基、ジベンゾチオフェン基、またはジベンゾフラン基で置換もしくは非置換のアミン基である。

30

【0146】

本明細書の一実施態様において、 $R_4 \sim R_8$ 、 $R_{11} \sim R_{14}$ 、 $R_{21} \sim R_{24}$ 、 $R_{31} \sim R_{34}$ および $R_{101} \sim R_{106}$ は、互いに同一または異なり、それぞれ独立に、置換もしくは非置換の炭素数6～50のヘテロアリール基である。

【0147】

本明細書の一実施態様において、 $R_4 \sim R_8$ 、 $R_{11} \sim R_{14}$ 、 $R_{21} \sim R_{24}$ 、 $R_{31} \sim R_{34}$ および $R_{101} \sim R_{106}$ は、互いに同一または異なり、それぞれ独立に、置換もしくは非置換のピリジン基、置換もしくは非置換のピリミジン基、または置換もしくは非置換のトリアジン基である。

40

【0148】

本明細書の一実施態様において、 $R_4 \sim R_8$ 、 $R_{11} \sim R_{14}$ 、 $R_{21} \sim R_{24}$ 、 $R_{31} \sim R_{34}$ および $R_{101} \sim R_{106}$ は、互いに同一または異なり、それぞれ独立に、アリール基が置換もしくは非置換のピリジン基である。

【0149】

本明細書の一実施態様において、 $R_4 \sim R_8$ 、 $R_{11} \sim R_{14}$ 、 $R_{21} \sim R_{24}$ 、 $R_{31} \sim R_{34}$ および $R_{101} \sim R_{106}$ は、互いに同一または異なり、それぞれ独立に、フェニル基またはビフェニル基で置換もしくは非置換のピリジン基である。

【0150】

本明細書の一実施態様において、 $R_4 \sim R_8$ 、 $R_{11} \sim R_{14}$ 、 $R_{21} \sim R_{24}$ 、 $R_{31} \sim R_{34}$ および $R_{101} \sim R_{106}$ は、互いに同一または異なり、それぞれ独立に、フェニル基、メチル基で置換されたフェニル基、ビフェニル基、ナフチル基、カルバゾール基、ジベンゾチオフェン基、またはジベンゾフラン基で置換もしくは非置換のアミン基である。

50

$R_1 \sim R_{34}$ および $R_{101} \sim R_{106}$ は、互いに同一または異なり、それぞれ独立に、アリール基が置換もしくは非置換のピリミジン基である。

【0151】

本明細書の一実施態様において、 $R_4 \sim R_8$ 、 $R_{11} \sim R_{14}$ 、 $R_{21} \sim R_{24}$ 、 $R_{31} \sim R_{34}$ および $R_{101} \sim R_{106}$ は、互いに同一または異なり、それぞれ独立に、フェニル基またはビフェニル基で置換もしくは非置換のピリミジン基である。

【0152】

本明細書の一実施態様において、 $R_4 \sim R_8$ 、 $R_{11} \sim R_{14}$ 、 $R_{21} \sim R_{24}$ 、 $R_{31} \sim R_{34}$ および $R_{101} \sim R_{106}$ は、互いに同一または異なり、それぞれ独立に、アリール基が置換もしくは非置換のトリアジン基である。

10

【0153】

本明細書の一実施態様において、 $R_4 \sim R_8$ 、 $R_{11} \sim R_{14}$ 、 $R_{21} \sim R_{24}$ 、 $R_{31} \sim R_{34}$ および $R_{101} \sim R_{106}$ は、互いに同一または異なり、それぞれ独立に、フェニル基またはビフェニル基で置換もしくは非置換のトリアジン基である。

【0154】

本明細書の一実施態様において、 R_8 は、置換もしくは非置換のピリジン基、置換もしくは非置換のピリミジン基、または置換もしくは非置換のトリアジン基である。

【0155】

本明細書の一実施態様において、 R_8 は、アリール基で置換もしくは非置換のピリジン基である。

20

【0156】

本明細書の一実施態様において、 R_8 は、フェニル基またはビフェニル基で置換もしくは非置換のピリジン基である。

【0157】

本明細書の一実施態様において、 R_8 は、アリール基で置換もしくは非置換のピリミジン基である。

【0158】

本明細書の一実施態様において、 R_8 は、フェニル基またはビフェニル基で置換もしくは非置換のピリミジン基である。

【0159】

本明細書の一実施態様において、 R_8 は、アリール基で置換もしくは非置換のトリアジン基である。

30

【0160】

本明細書の一実施態様において、 R_8 は、フェニル基またはビフェニル基で置換もしくは非置換のトリアジン基である。

【0161】

本明細書の一実施態様において、 $R_{101} \sim R_{104}$ は、互いに同一または異なり、それぞれ独立に、置換もしくは非置換のアルキル基である。

【0162】

本明細書の一実施態様において、 $R_{101} \sim R_{104}$ は、互いに同一または異なり、それぞれ独立に、置換もしくは非置換のメチル基、置換もしくは非置換のエチル基、または置換もしくは非置換のイソプロピル基である。

40

【0163】

本明細書の一実施態様において、 $R_{101} \sim R_{104}$ は、メチル基である。

【0164】

本明細書の一実施態様において、 $R_{101} \sim R_{104}$ は、エチル基である。

【0165】

本明細書の一実施態様において、 $R_{101} \sim R_{104}$ は、イソプロピル基である。

【0166】

本明細書の一実施態様において、 R_{105} および R_{106} は、水素である。

50

【0167】

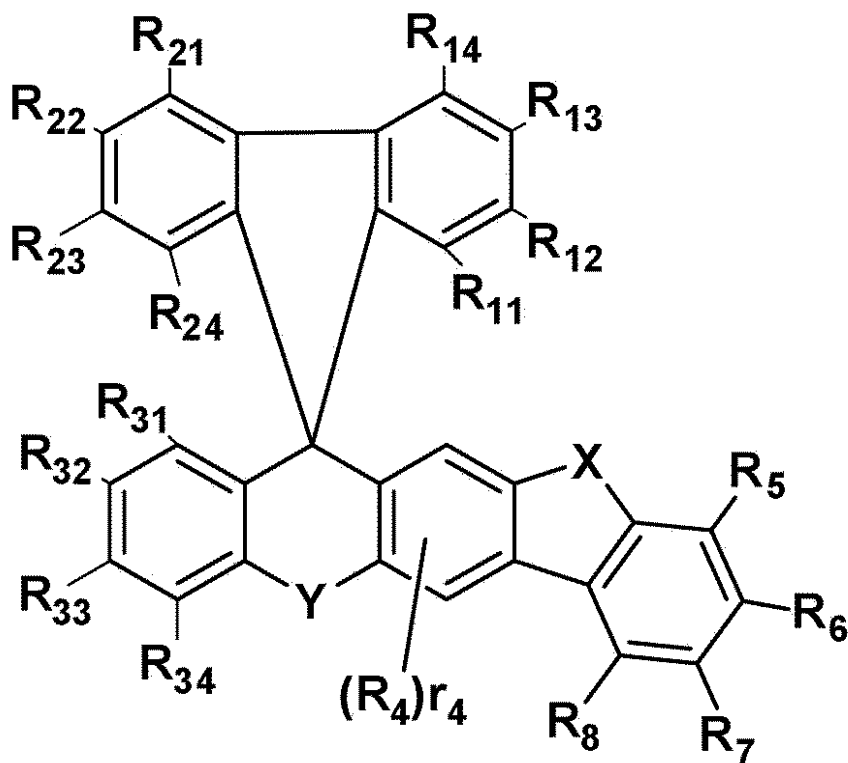
本明細書の一実施態様において、 $R_4 \sim R_8$ 、 $R_{11} \sim R_{14}$ 、 $R_{21} \sim R_{24}$ 、 $R_{31} \sim R_{34}$ 、および $R_{101} \sim R_{106}$ は、水素である。

【0168】

本明細書の一実施態様において、前記化学式1は、下記化学式2～5のうちのいずれか1つで表されてもよい。

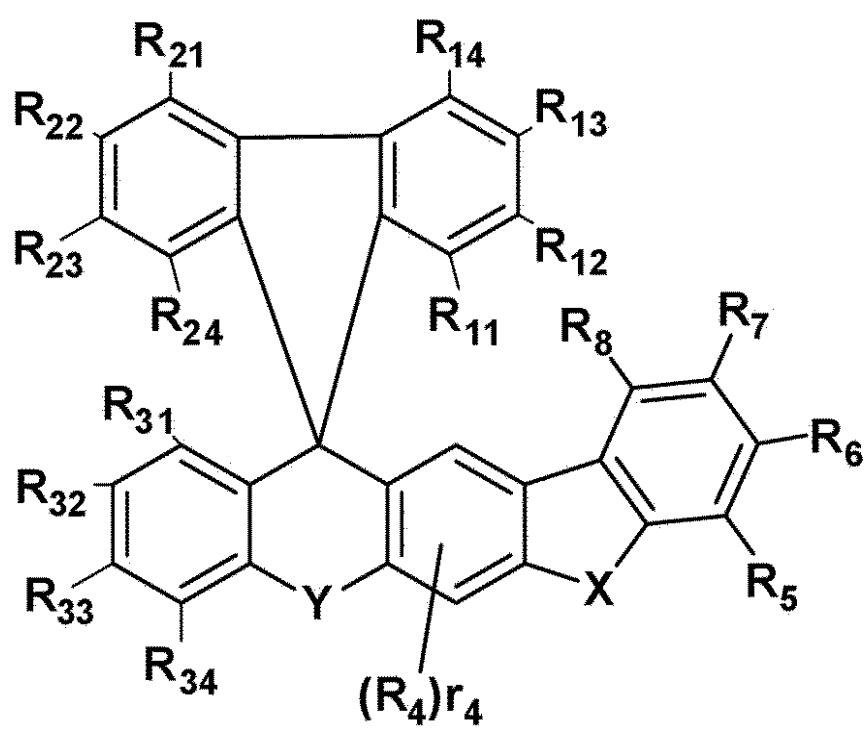
[化学式2]

【化17】



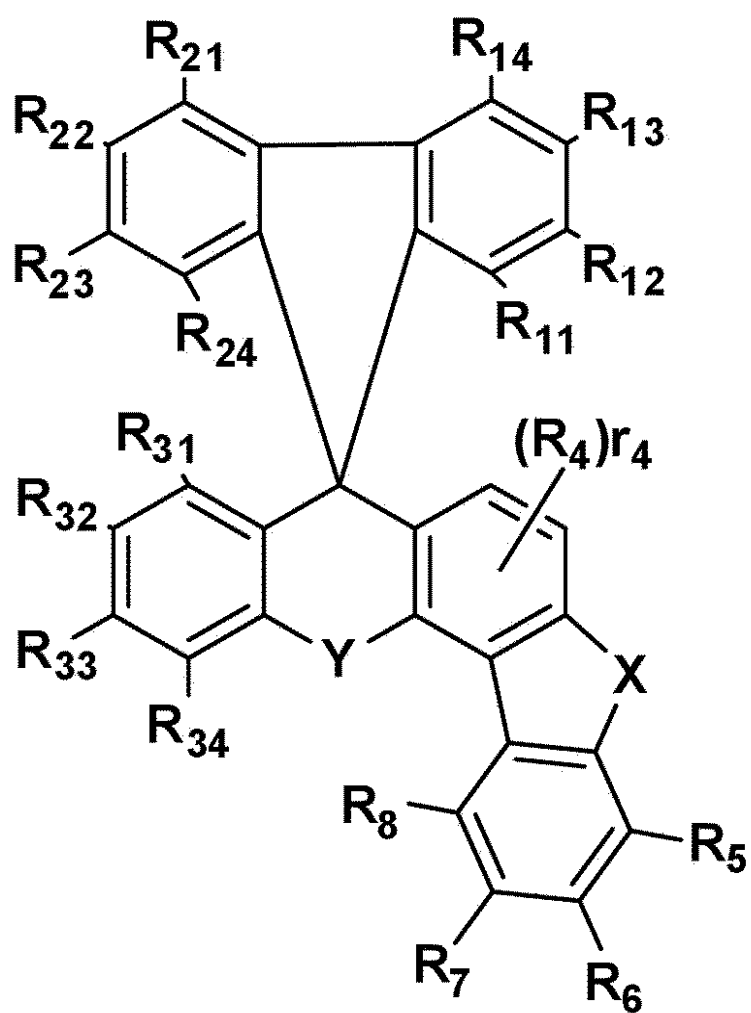
[化学式3]

【化 1 8】



[化学式 4]

【化 1 9】



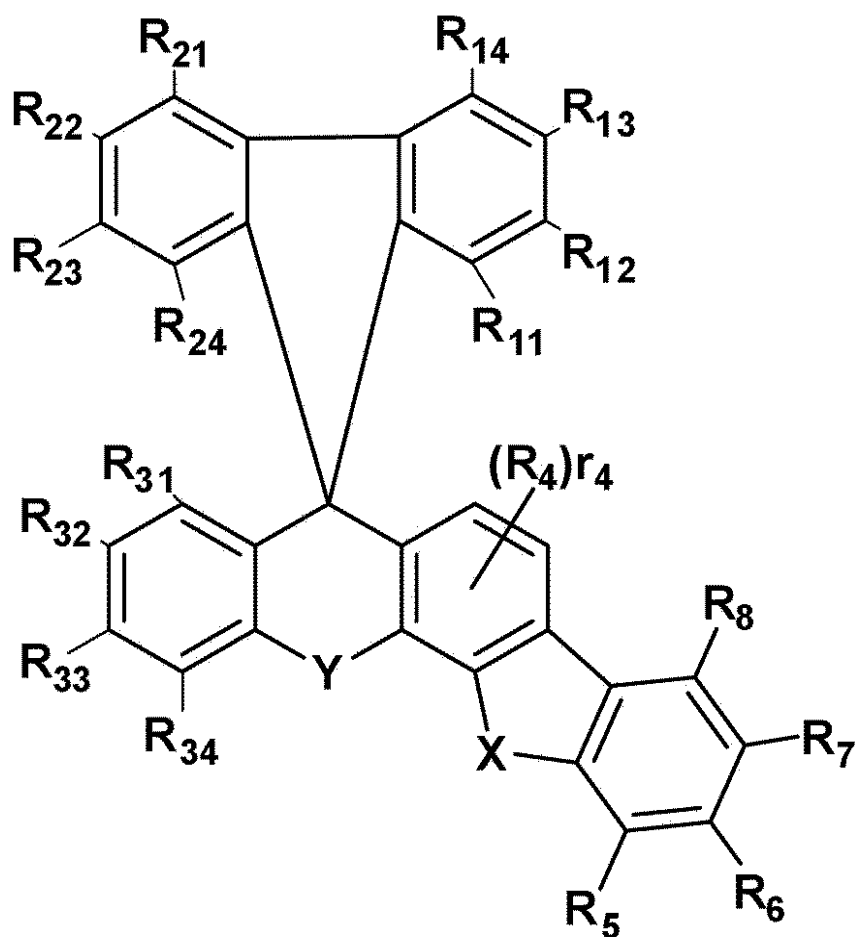
10

20

[化学式 5]

30

【化 2 0】



前記化学式 2 ～ 5 において、

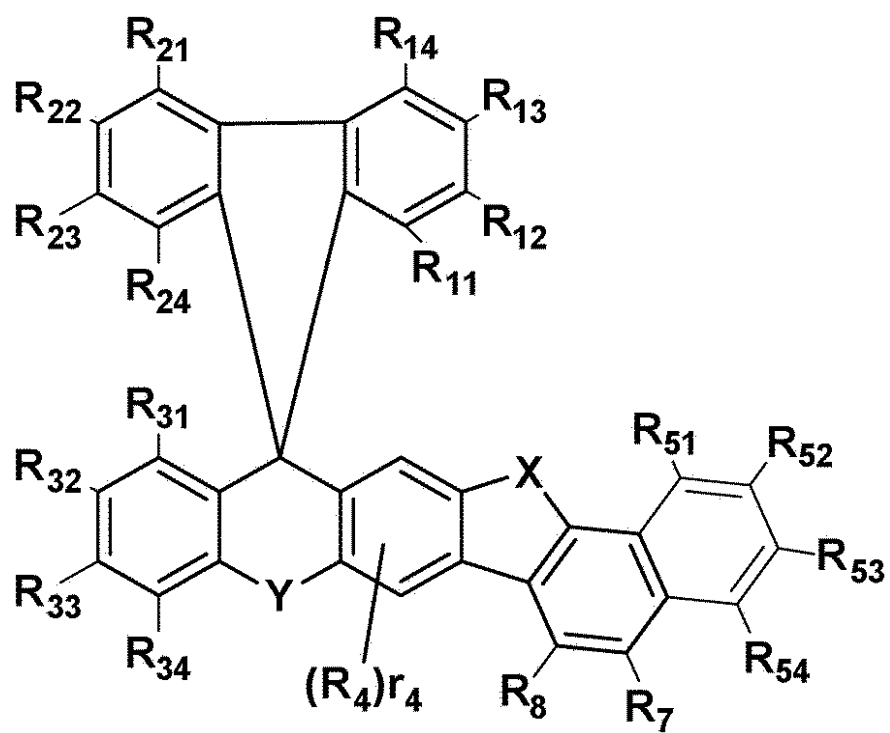
X、Y、 $R_4 \sim R_9$ 、 $R_{11} \sim R_{14}$ 、 $R_{21} \sim R_{24}$ 、 $R_{31} \sim R_{34}$ 、 $R_{101} \sim R_{106}$ および r_4 の定義は、前記化学式 1 で定義したものと同一である。

【0169】

本明細書の一実施態様において、前記化学式 1 は、下記化学式 6 ～ 17 のうちのいずれか 1 つで表されてもよい。

〔化学式 6〕

【化 2 1】

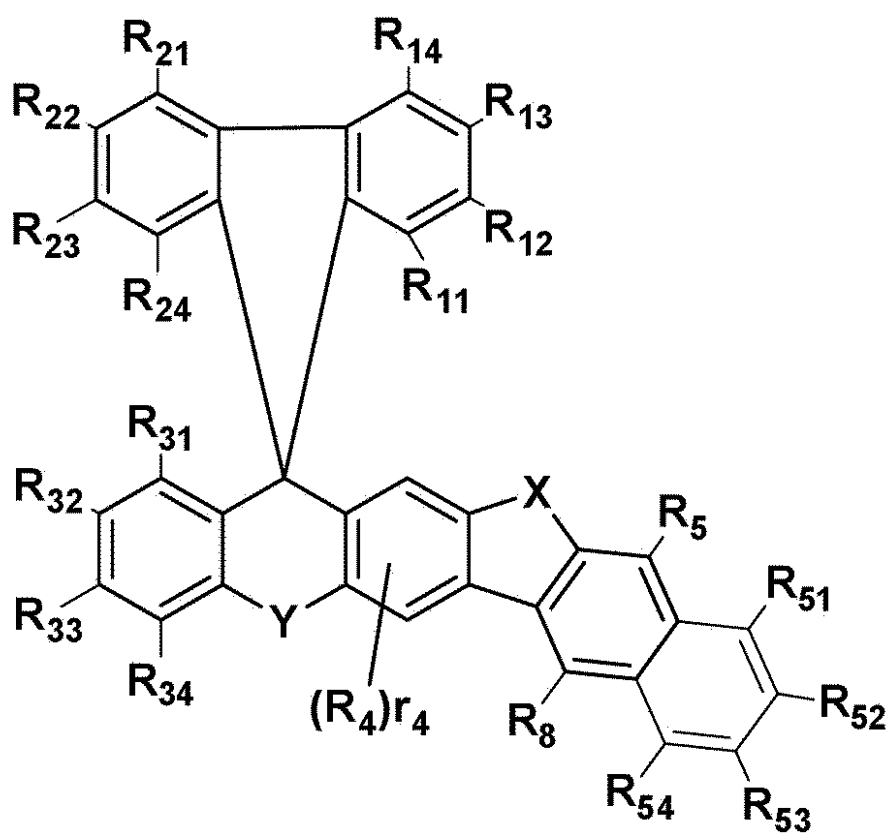


10

20

〔化学式 7〕

【化 2 2】

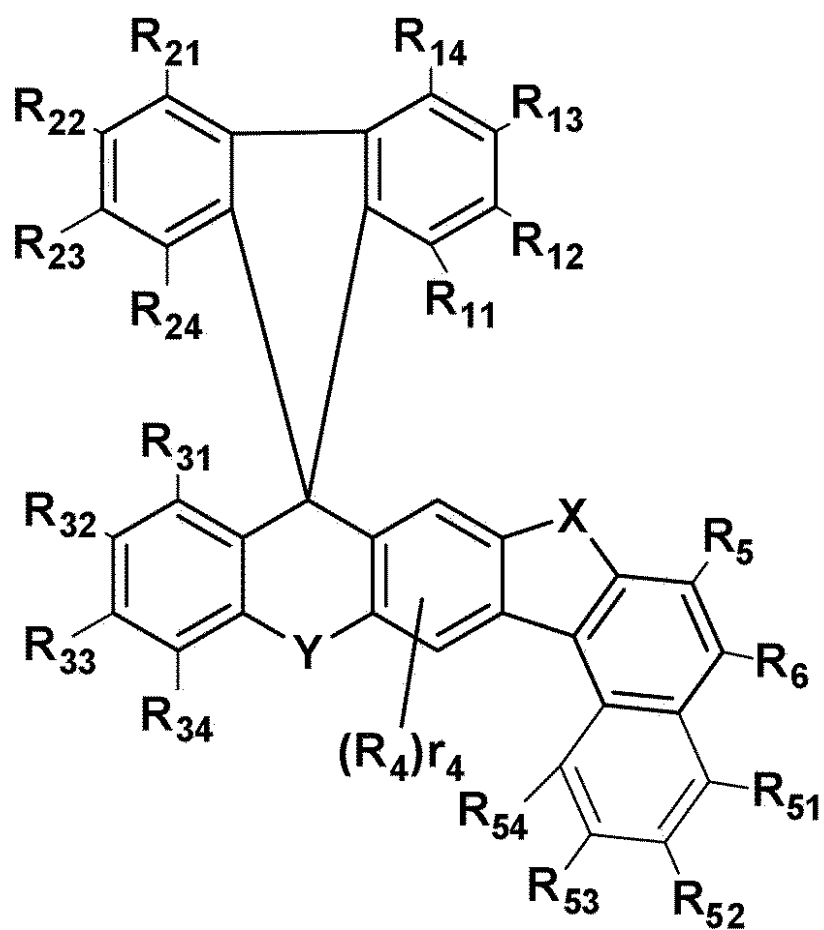


30

40

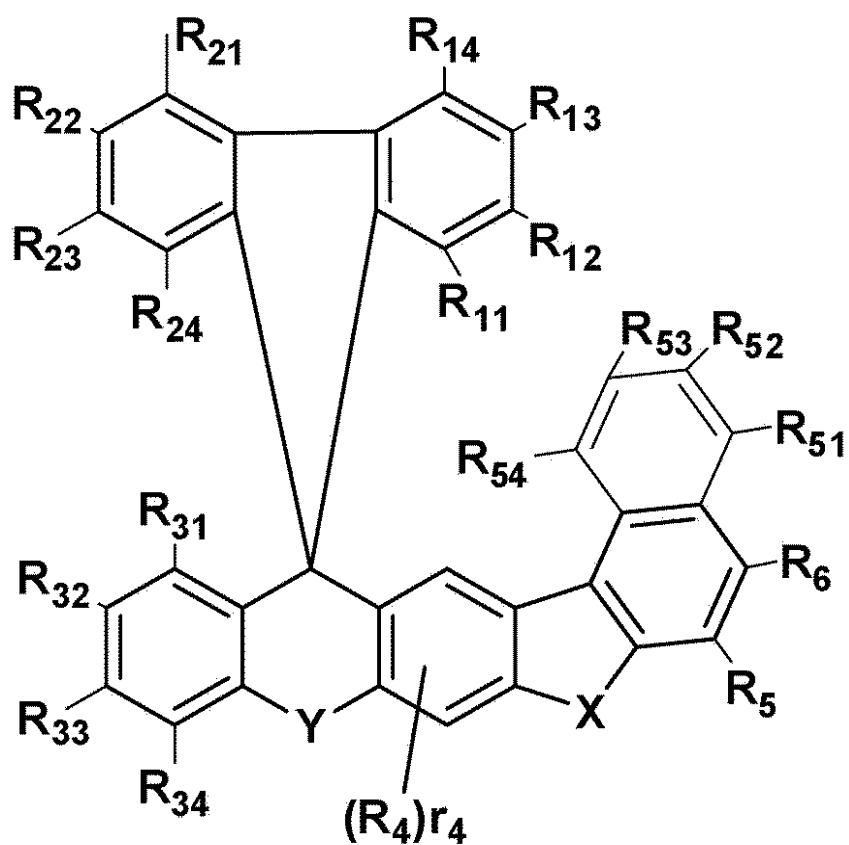
〔化学式 8〕

【化 2 3】



〔化学式 9〕

【化 2 4】

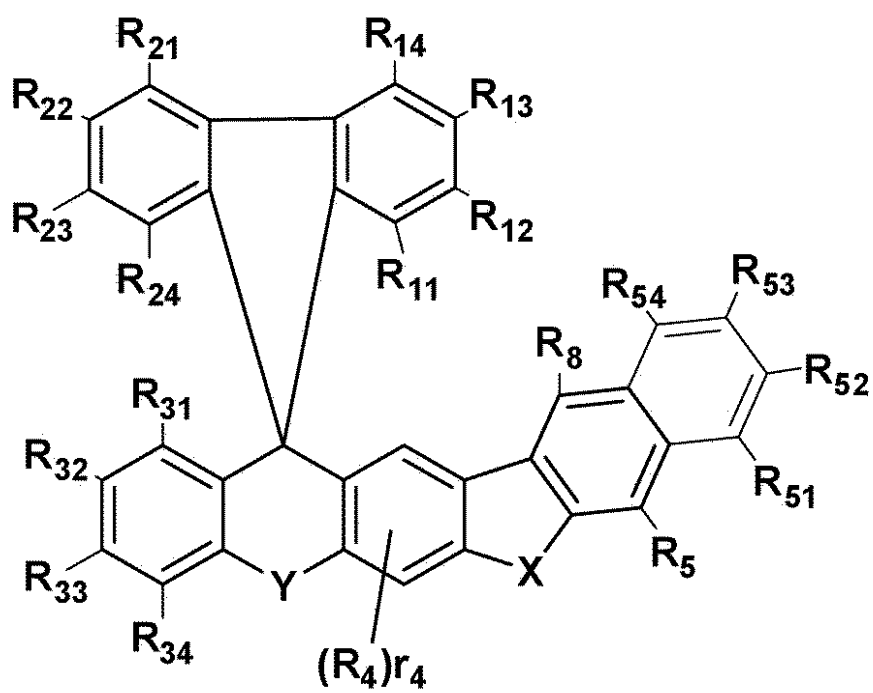


10

20

〔化学式 1 0〕

【化 2 5】

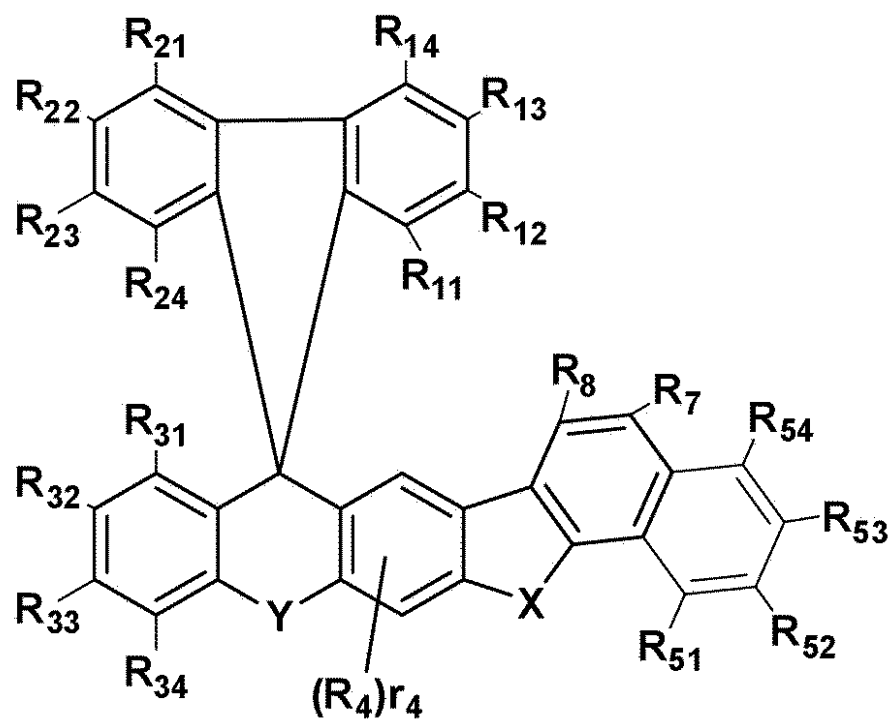


30

40

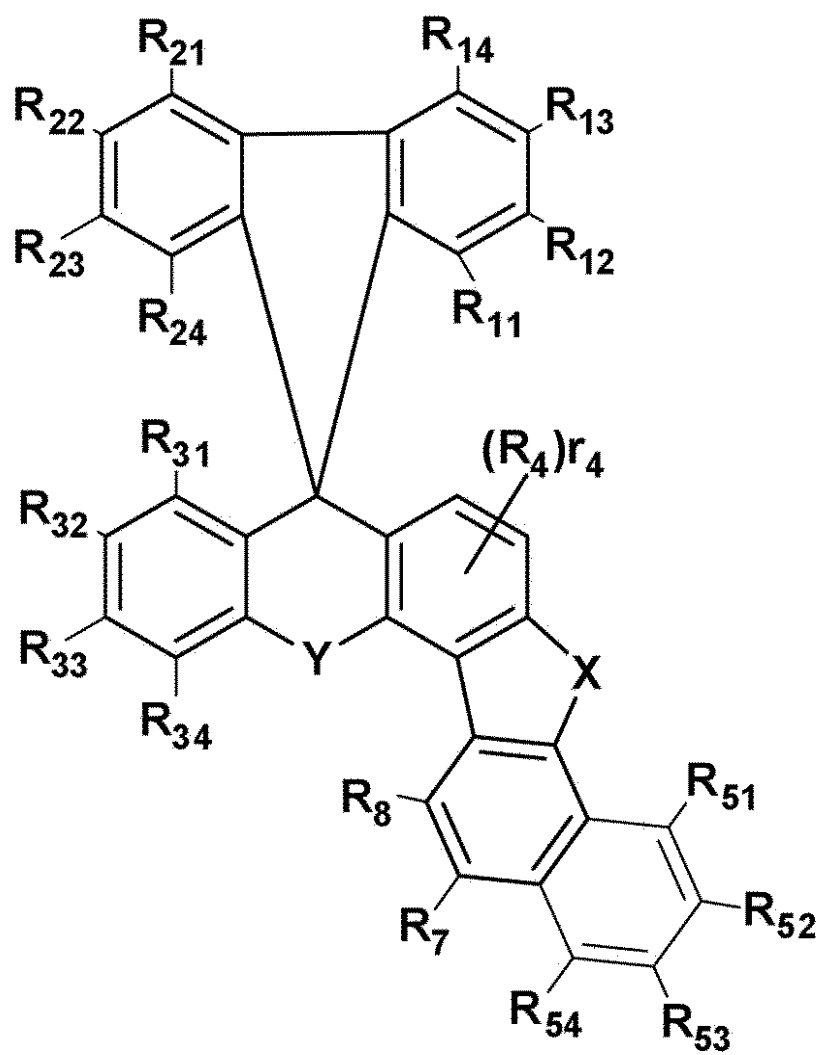
〔化学式 1 1〕

【化 2 6】



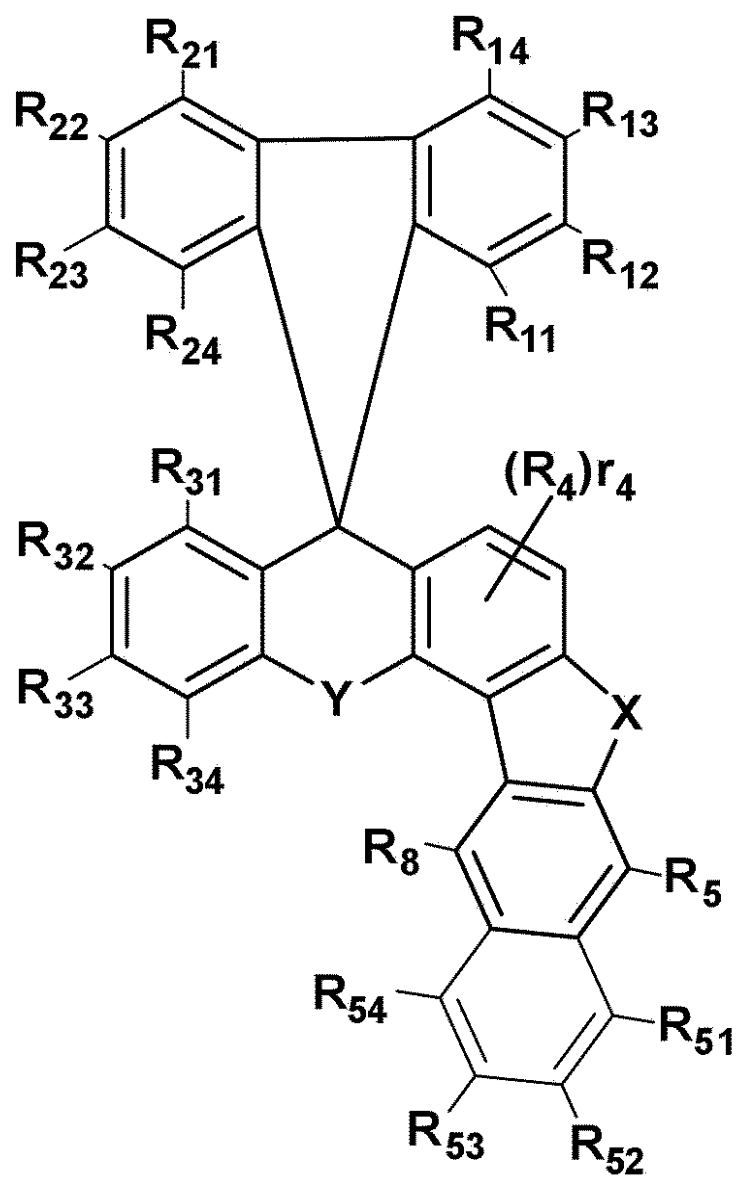
〔化学式 1 2〕

【化 2 7】



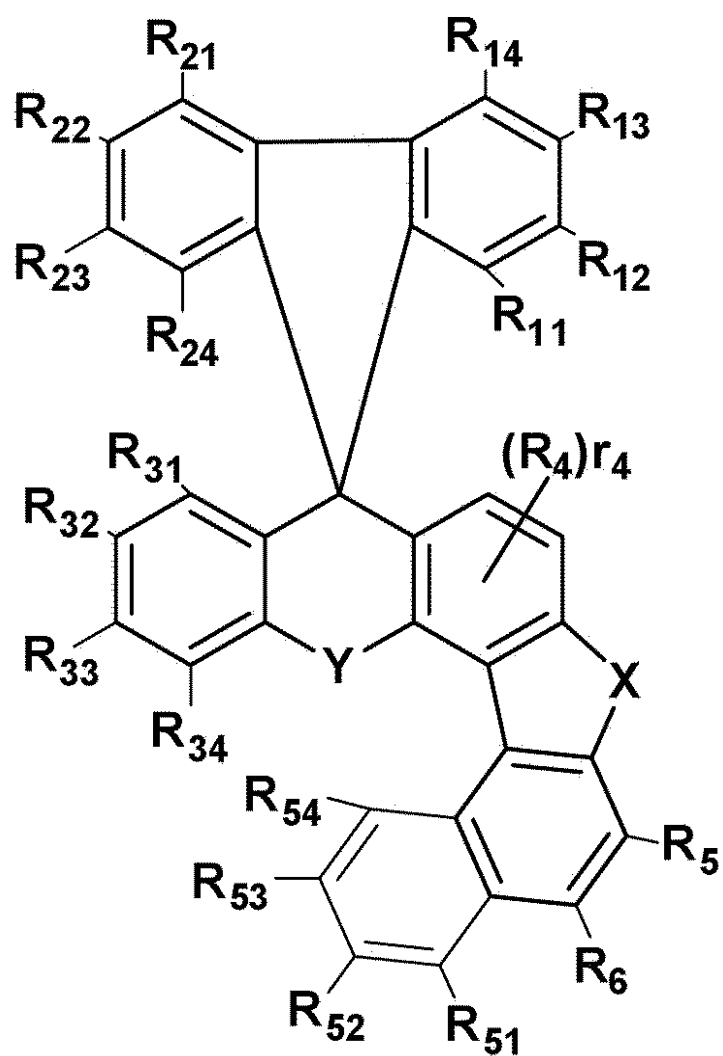
[化学式 1 3]

【化 2 8】



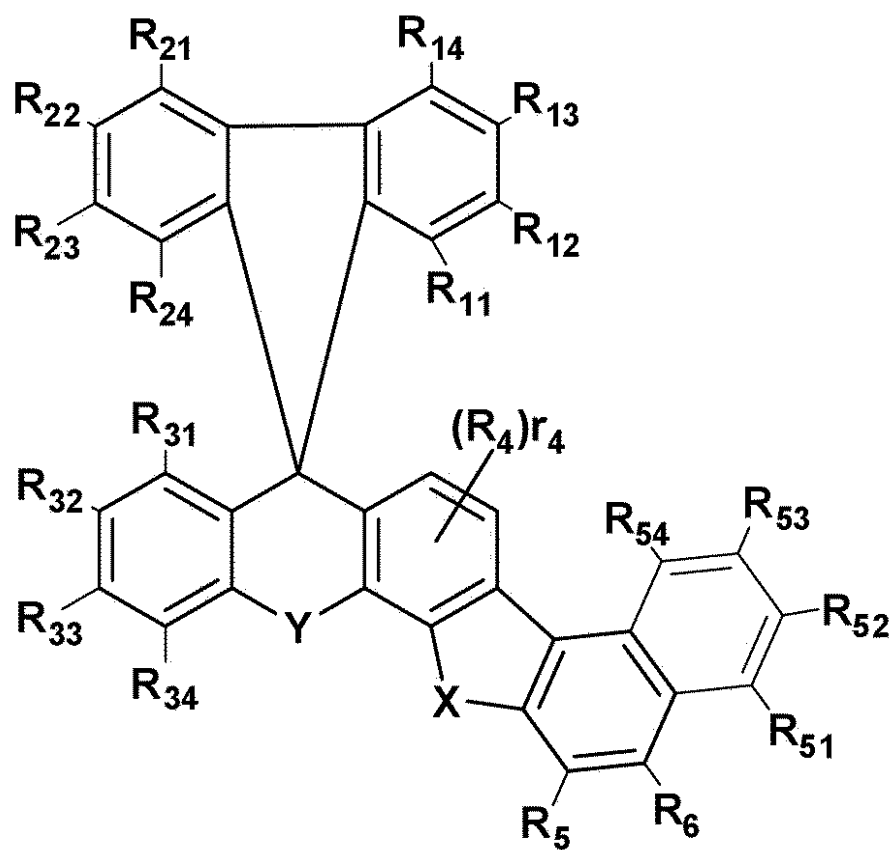
〔化学式 1 4〕

【化 2 9】



[化学式 1 5]

【化 3 0】

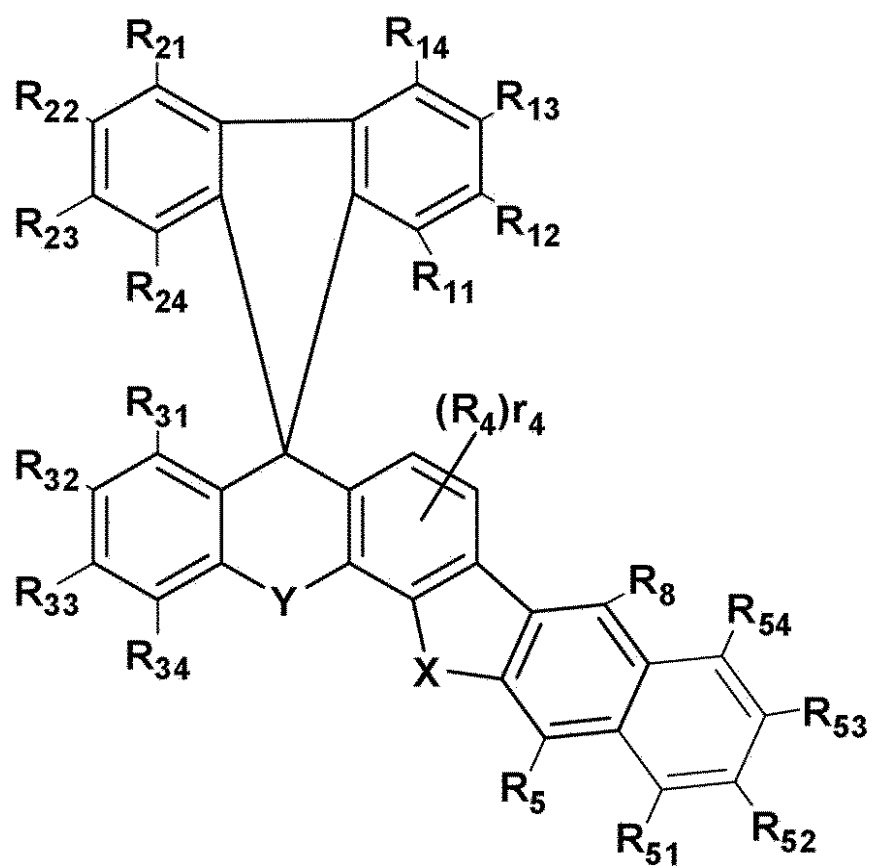


10

20

〔化学式 1 6〕

【化 3 1】

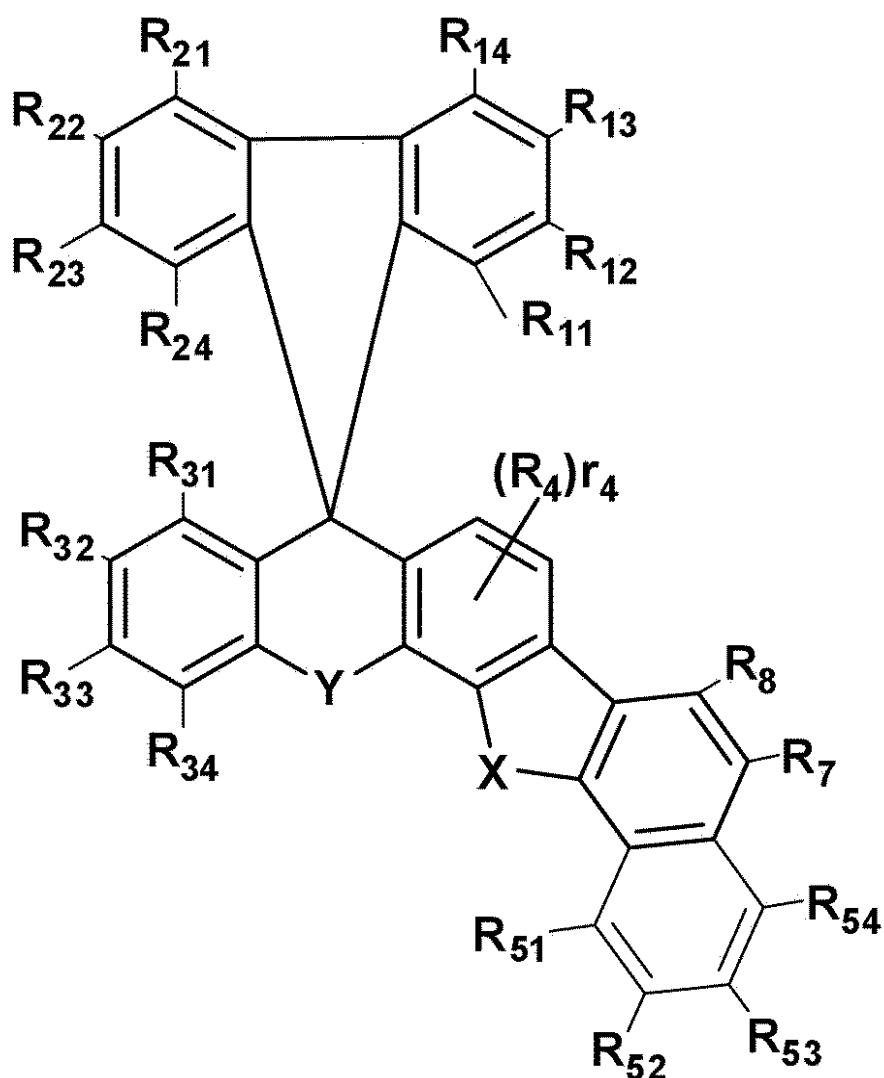


30

40

50

[化学式 17]
【化 3 2】



前記化学式 6～17 において、

X、Y、 $R_4 \sim R_9$ 、 $R_{11} \sim R_{14}$ 、 $R_{21} \sim R_{24}$ 、 $R_{31} \sim R_{34}$ 、 $R_{101} \sim R_{106}$ および r_4 の定義は、前記化学式 1 で定義したものと同一であり、

$R_{51} \sim R_{54}$ は、水素；重水素；ハロゲン基；シアノ基；ニトロ基；ヒドロキシ基；カルボニル基；エステル基；イミド基；アミノ基；置換もしくは非置換のシリル基；置換もしくは非置換のホウ素基；置換もしくは非置換のアルキル基；置換もしくは非置換のシクロアルキル基；置換もしくは非置換のアルコキシ基；置換もしくは非置換のアリールオキシ基；置換もしくは非置換のアルキルチオキシ基；置換もしくは非置換のアリールチオキシ基；置換もしくは非置換のアルキルスルホキシ基；置換もしくは非置換のアリールスルホキシ基；置換もしくは非置換のアルケニル基；置換もしくは非置換のアミン基；置換もしくは非置換のアルキルアミン基；置換もしくは非置換のアリールアミン基；置換もしくは非置換のヘテロアリールアミン基；置換もしくは非置換のホスフィンオキシド基；置換もしくは非置換のアリール基；または置換もしくは非置換のヘテロアリール基であるか、互いに隣接する基と互いに結合して環を形成してもよい。

【0170】

本明細書の一実施態様において、 $R_{51} \sim R_{54}$ は、水素である。

【0171】

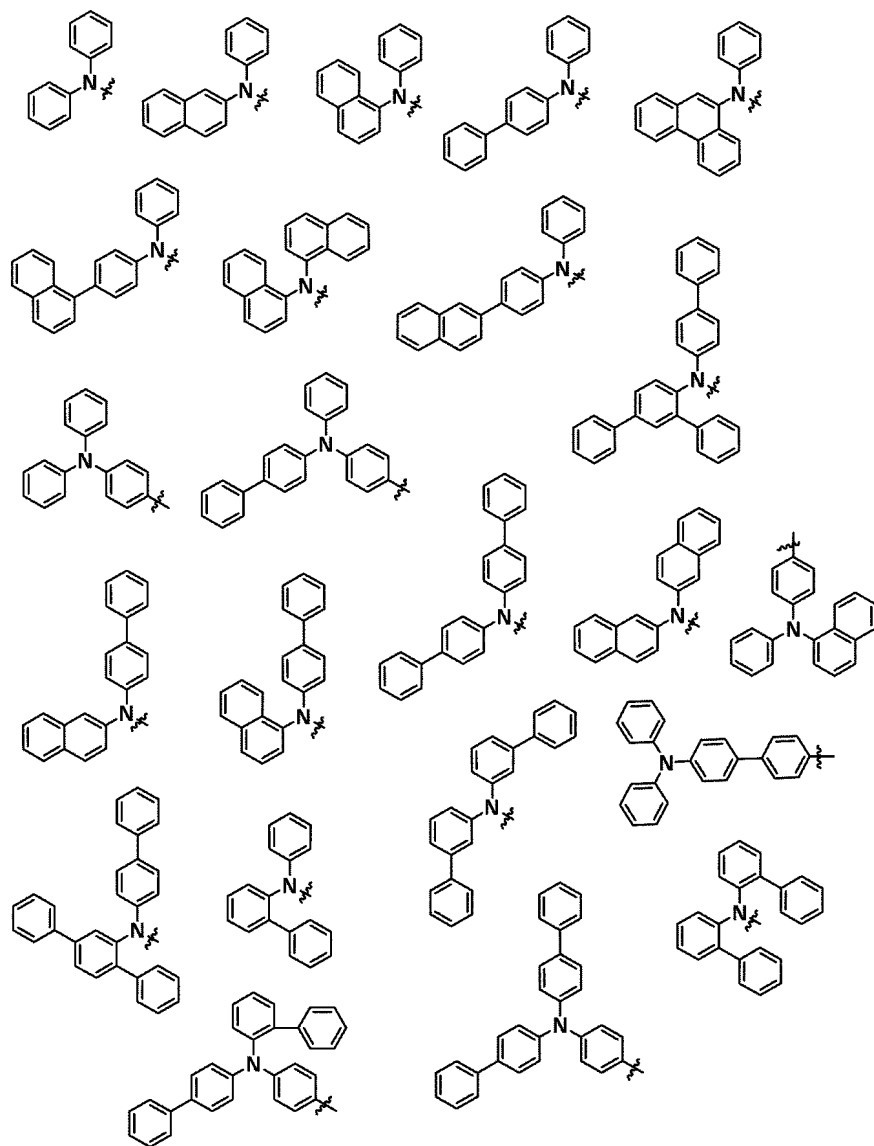
本明細書の一実施態様において、前記 $-L_1Ar_1$ は、下記 [A-1]～[A-4] の置換基のうちのいずれか 1 つであってもよいが、これに限定されるものではない。

【化 3 3】

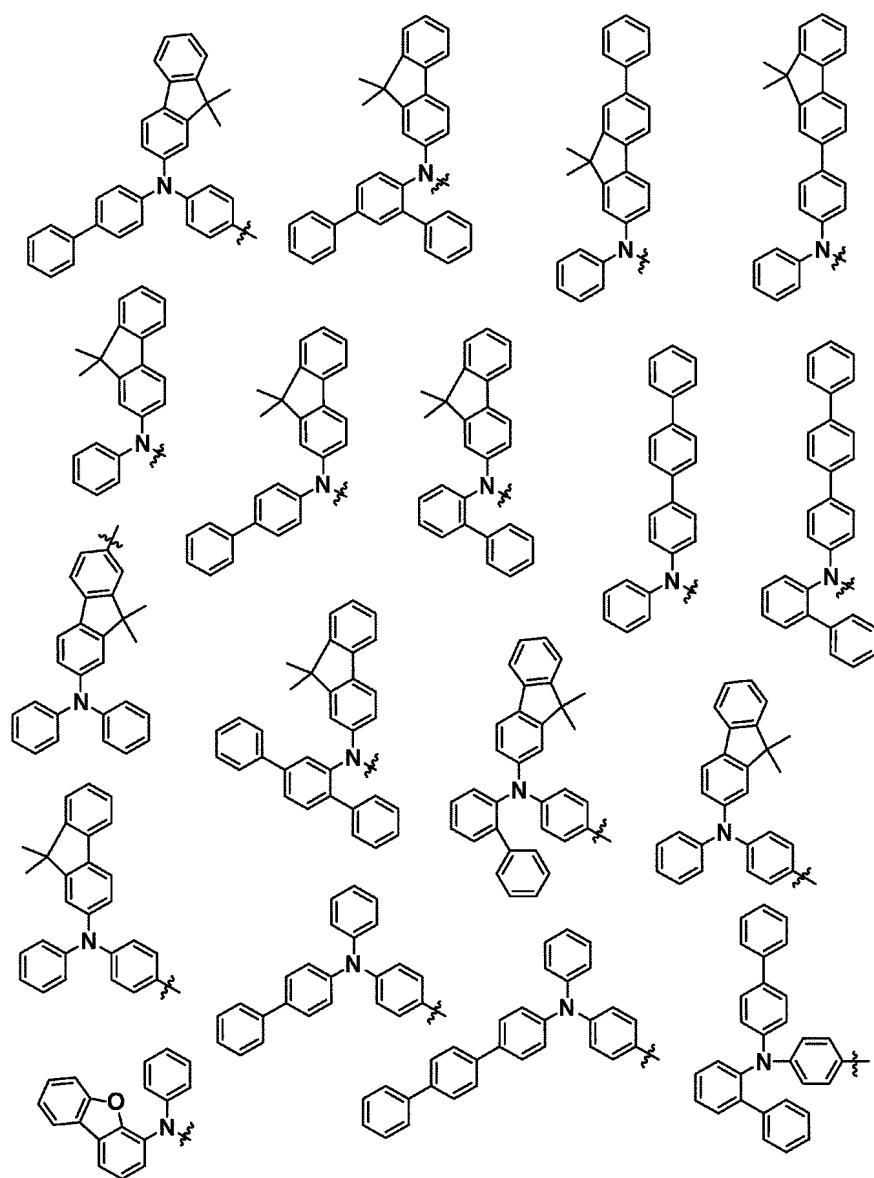


[A - 2]

【化 3 4】



【化 3 5】



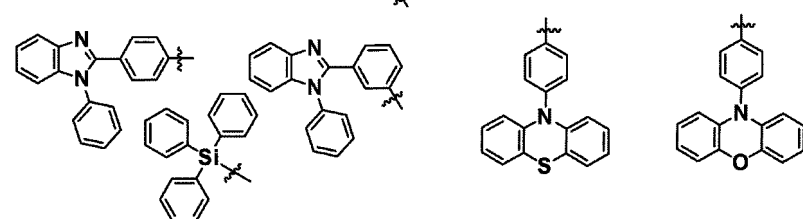
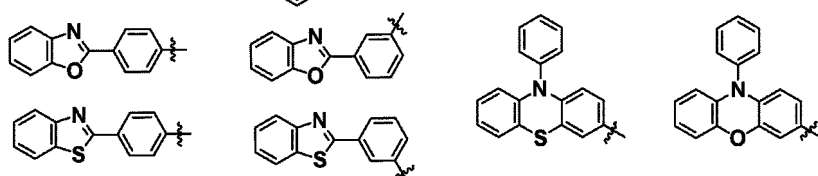
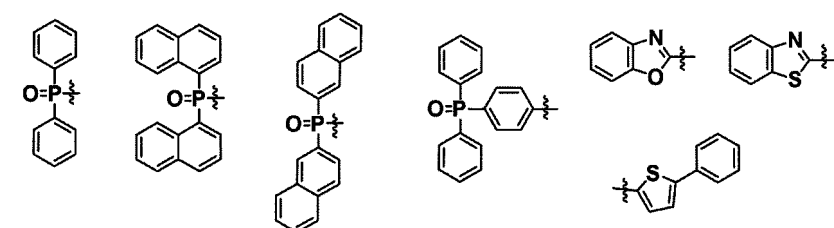
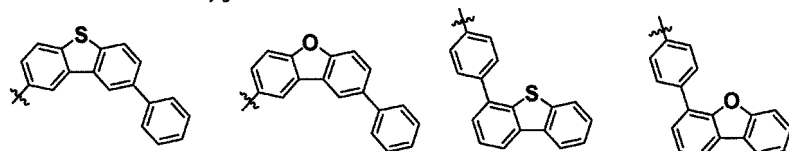
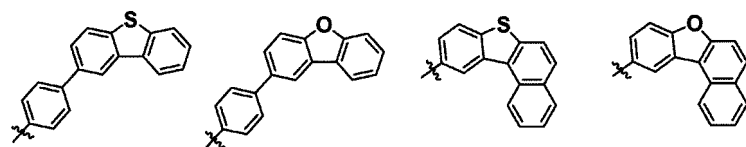
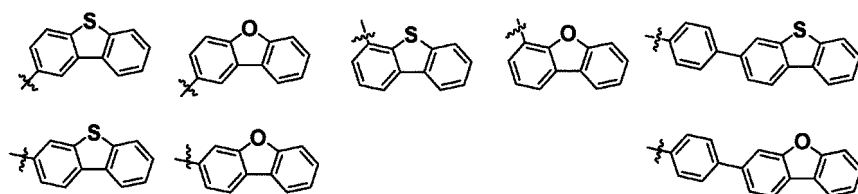
10

20

30

[A - 3]

【化 3 6】



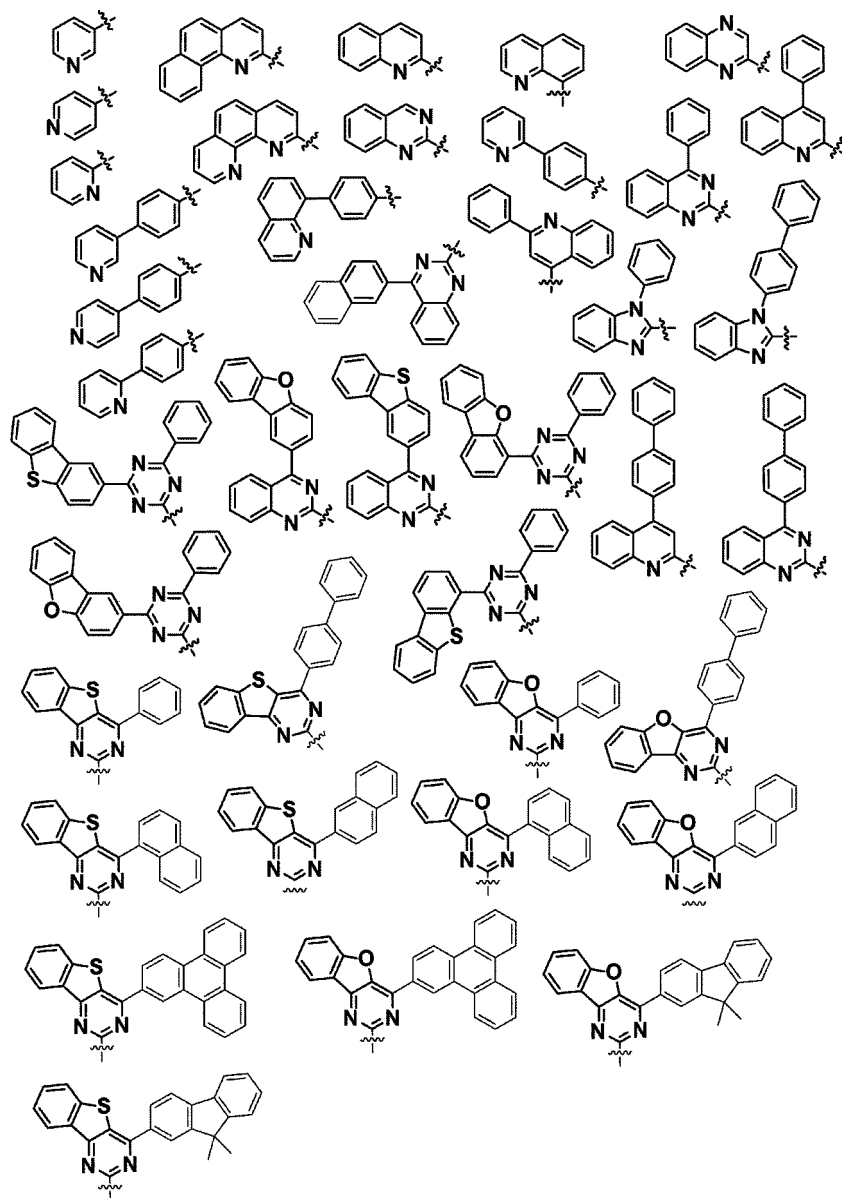
[A - 4]

10

20

30

【化 3 7】

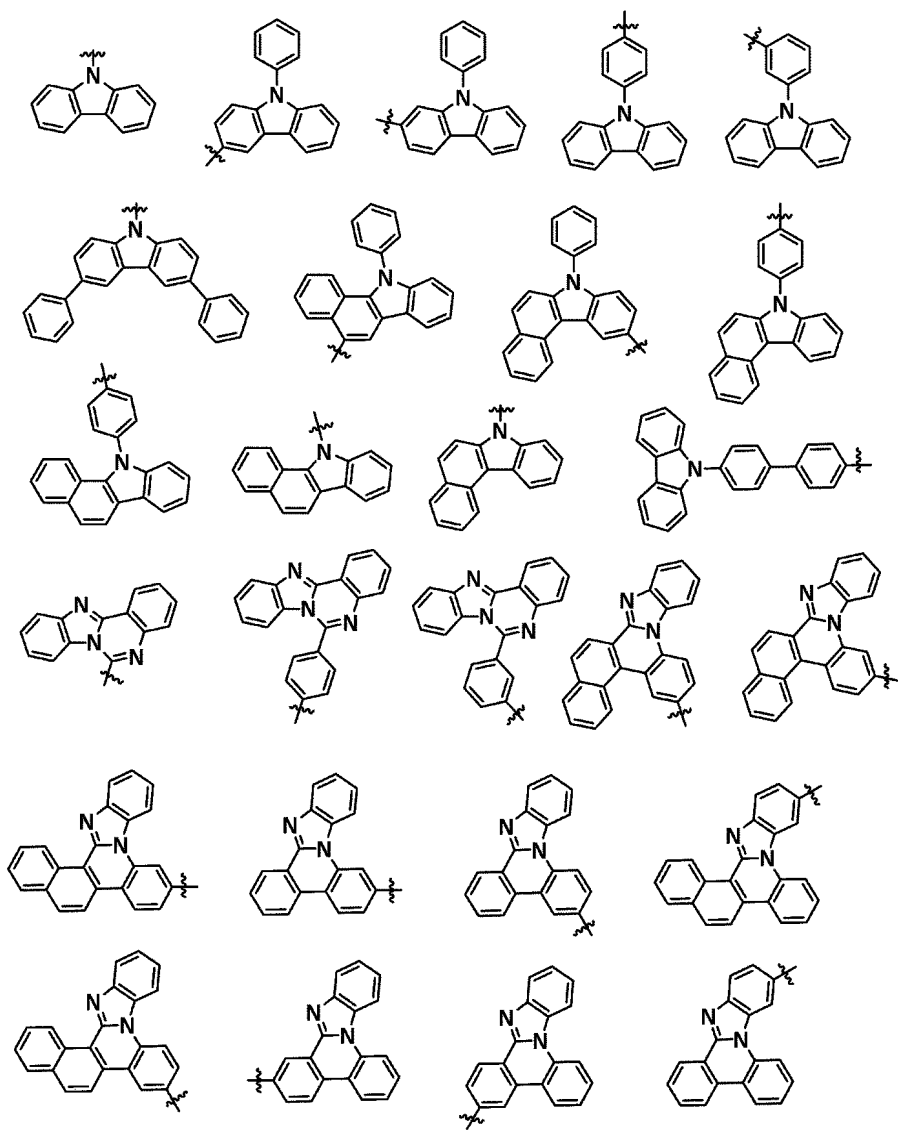


10

20

30

【化 3 8】

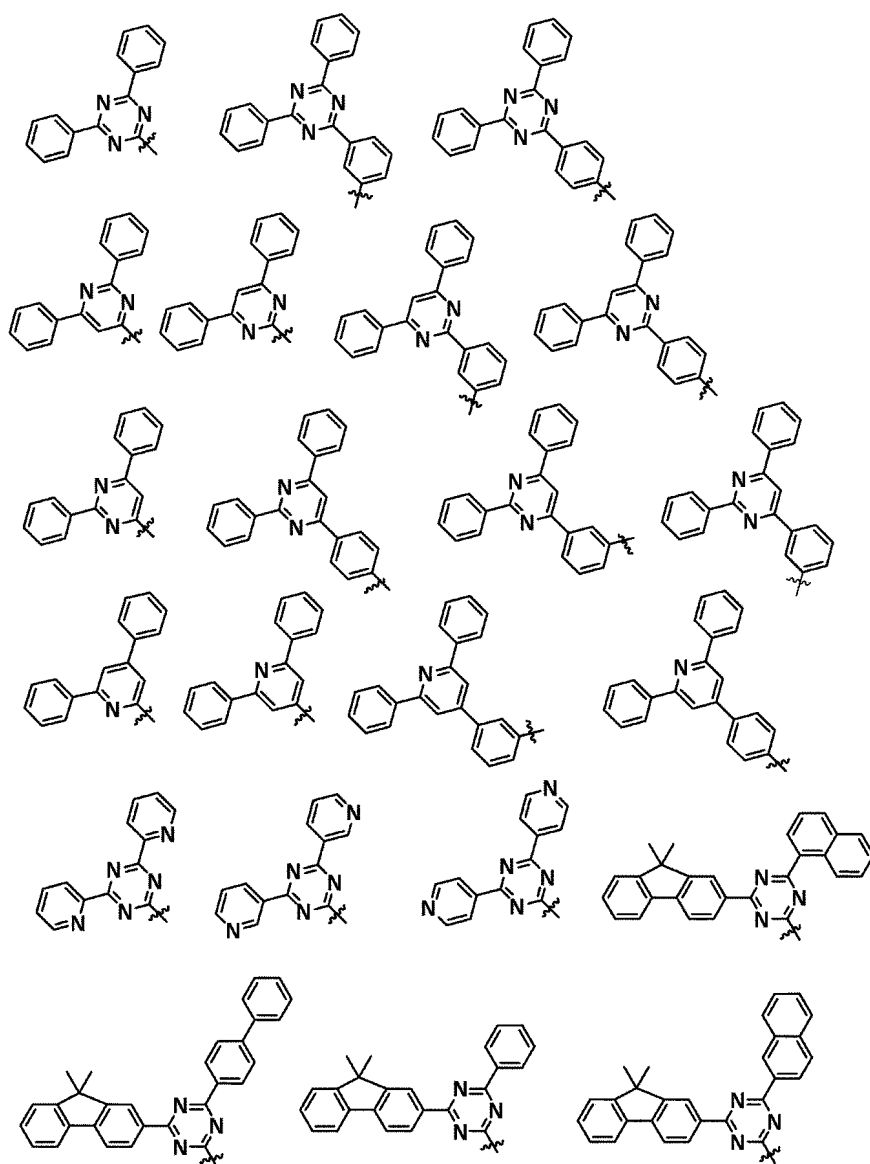


10

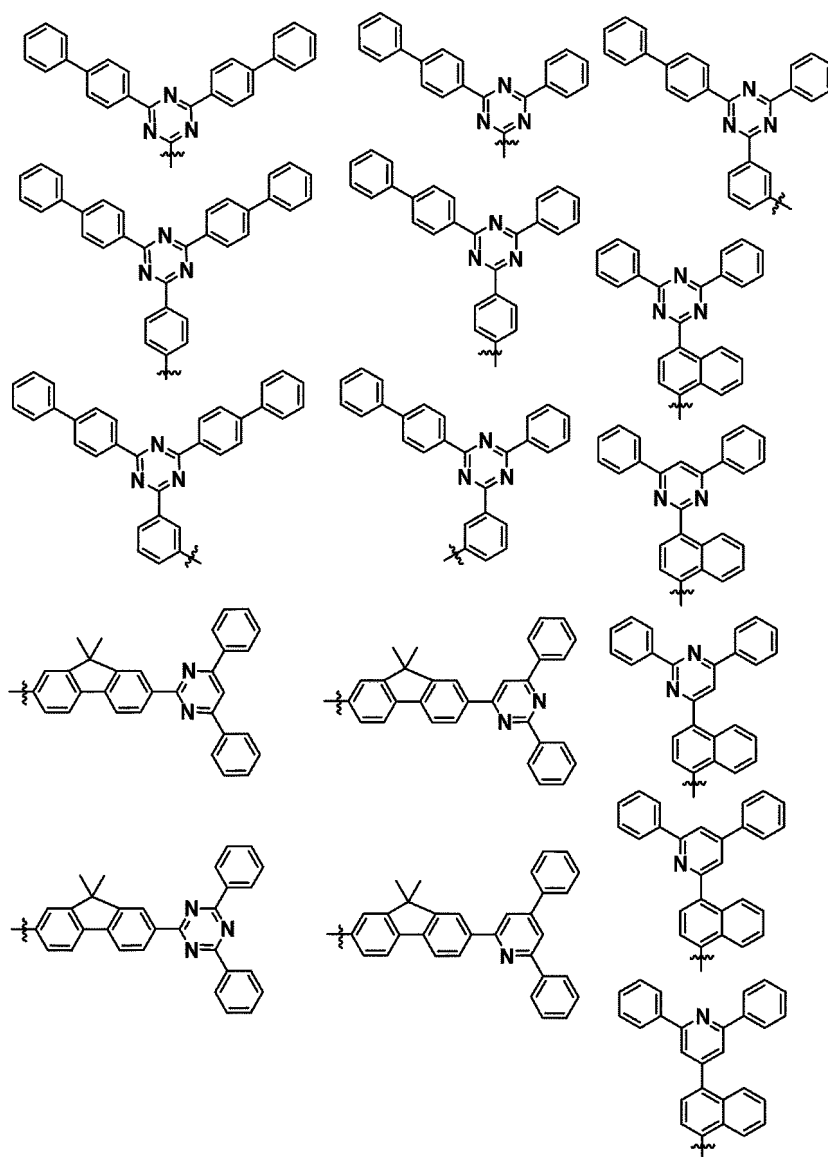
20

30

【化 3 9】



【化 4 0】



10

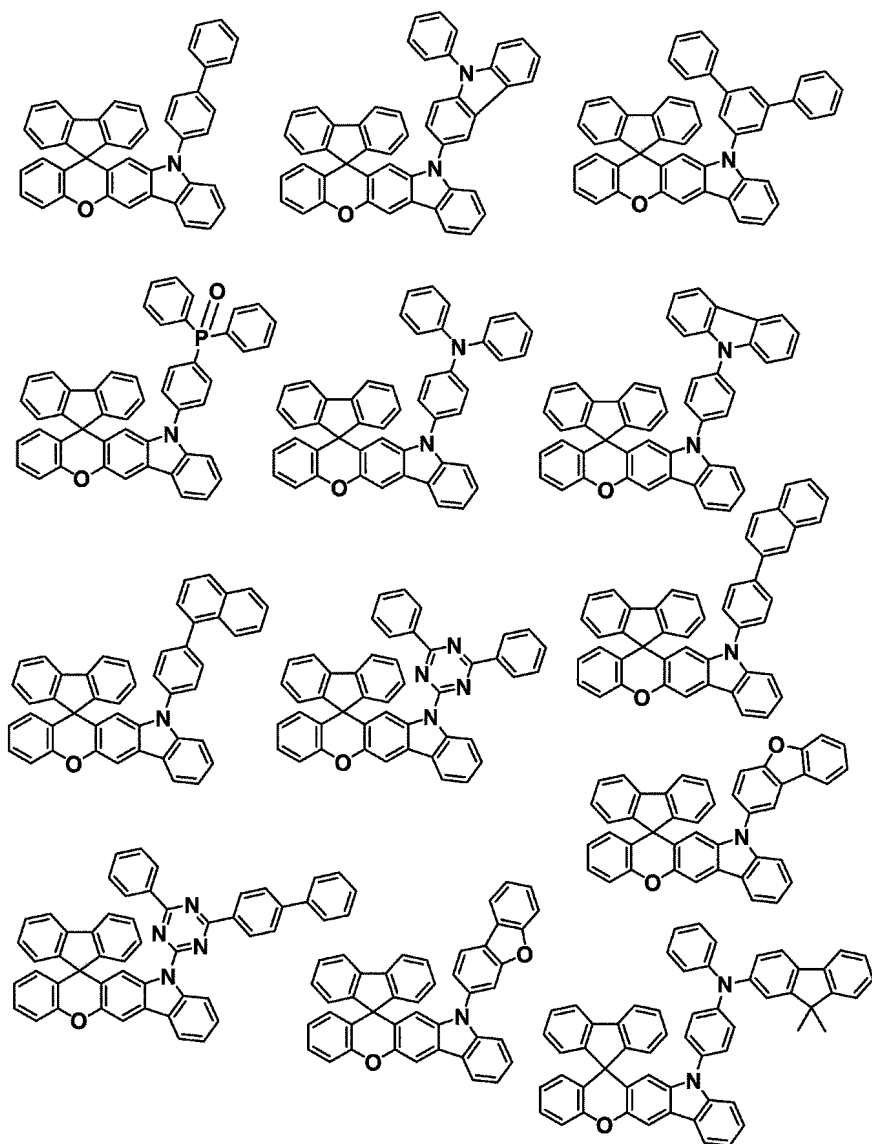
20

30

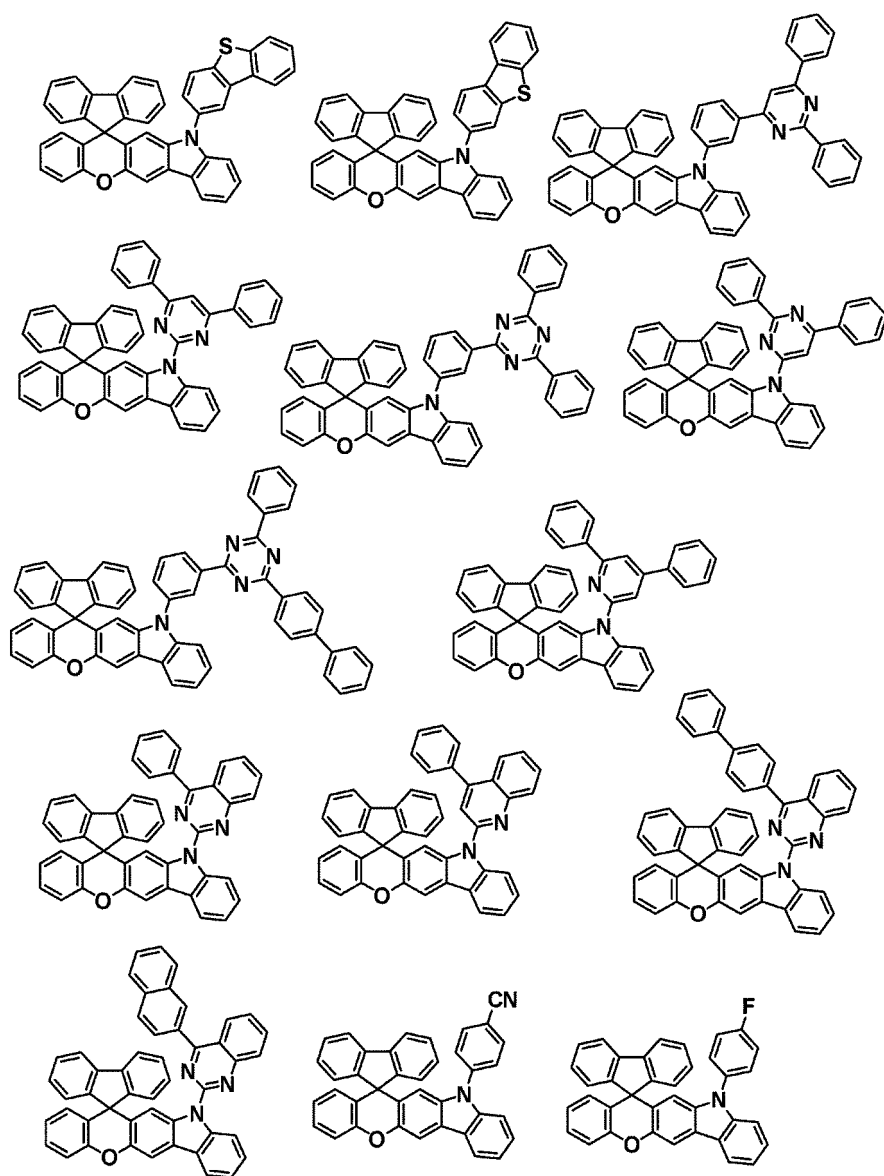
【0172】

本明細書の一実施態様によれば、前記化学式1のスピロ型化合物は、下記構造式の中から選択されるいずれか1つであってもよい。

【化 4 1】



【化 4 2】

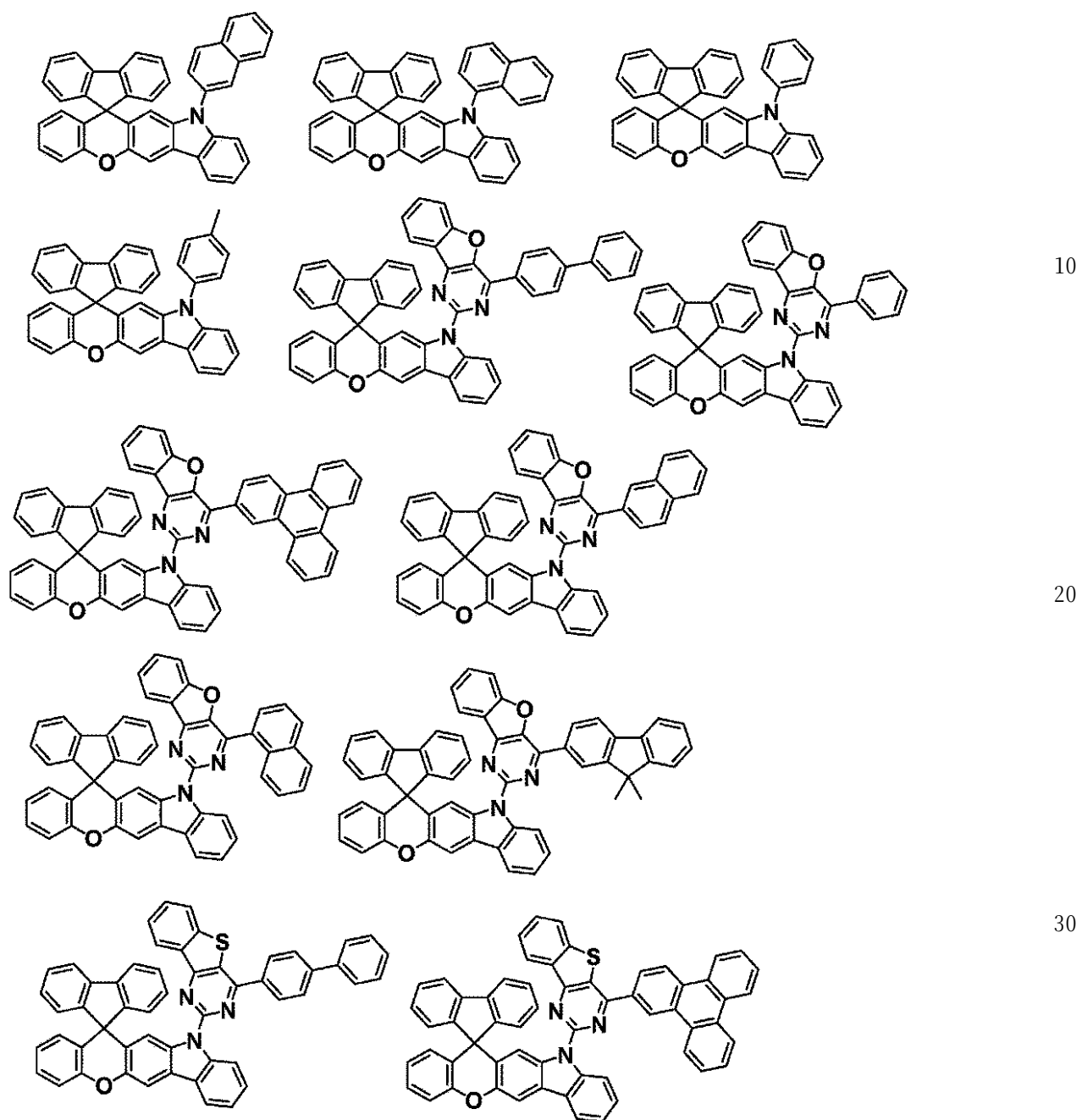


10

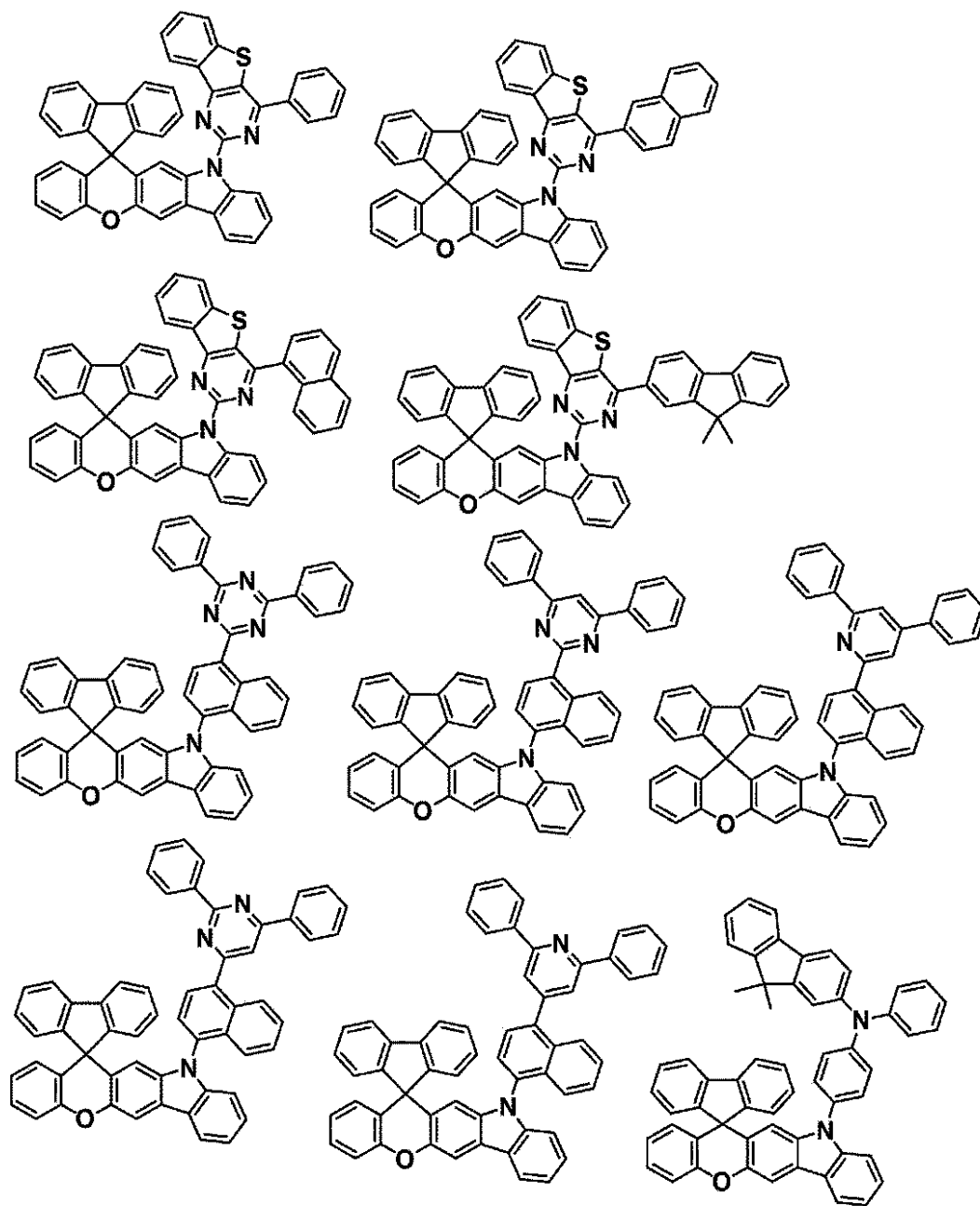
20

30

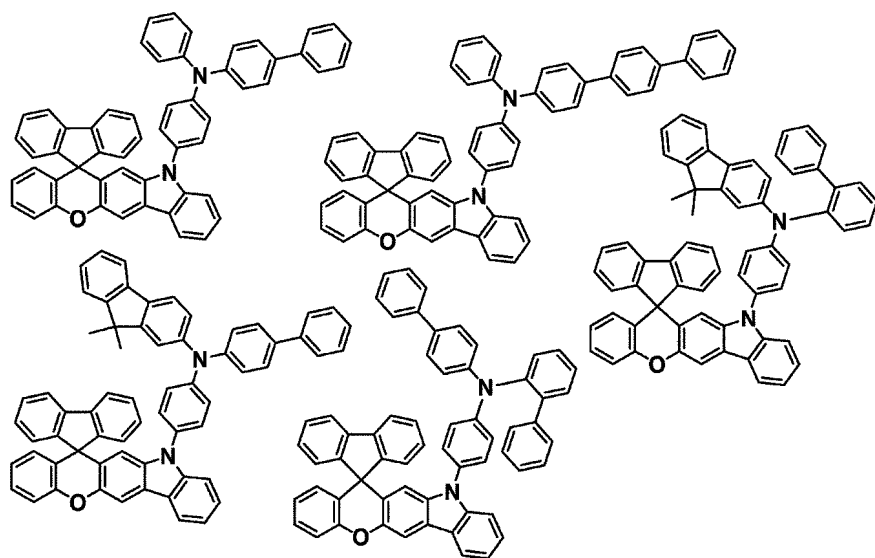
【化 4 3】



【化 4 4】

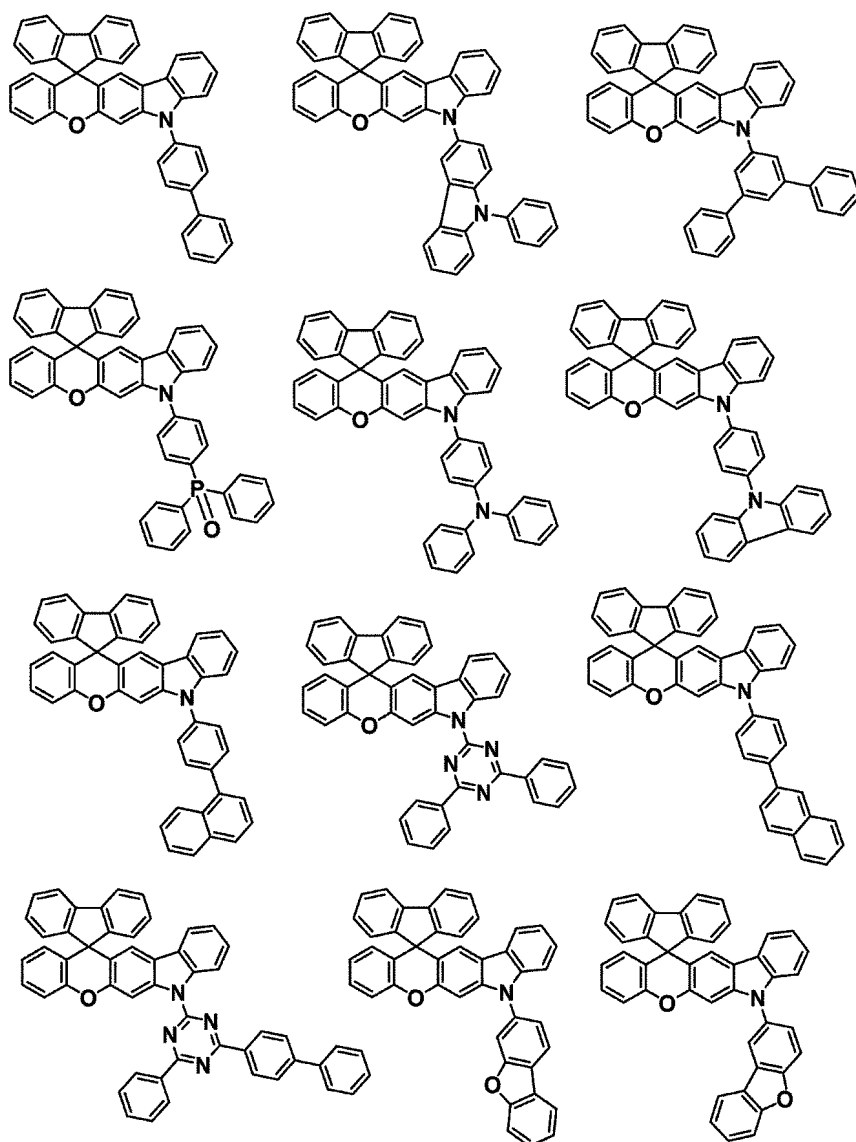


【化 4 5】



10

【化 4 6】



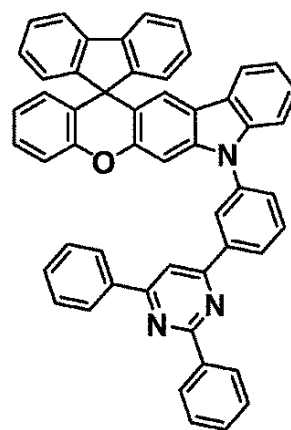
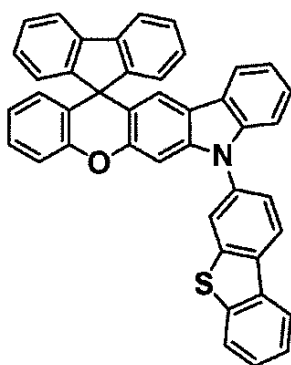
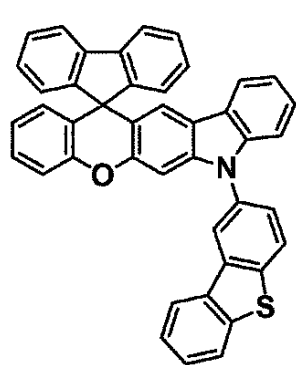
20

30

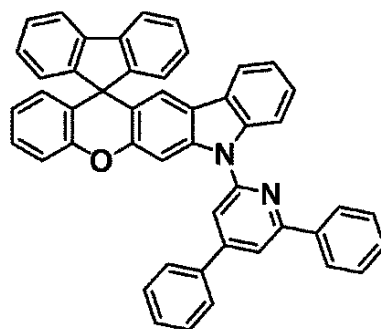
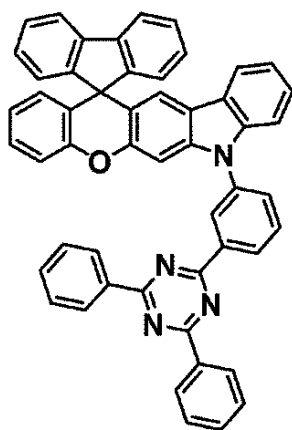
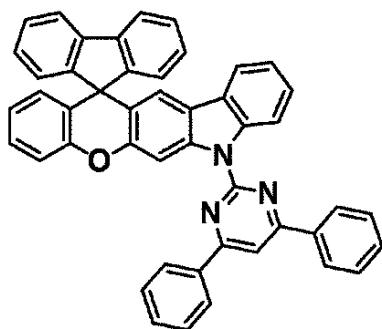
40

50

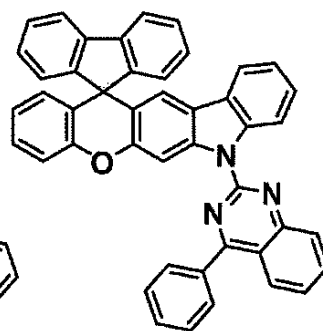
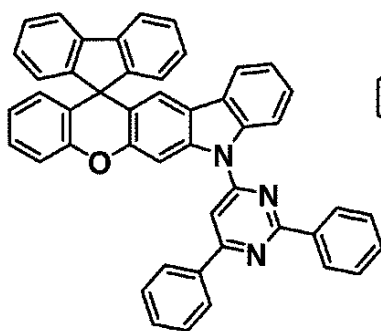
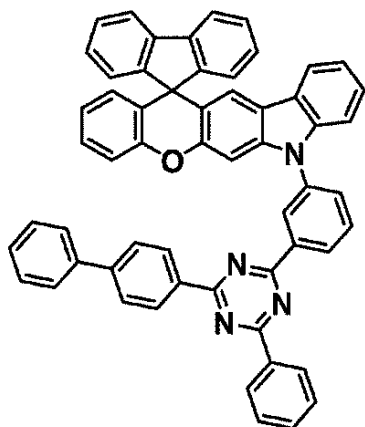
【化 4 7】



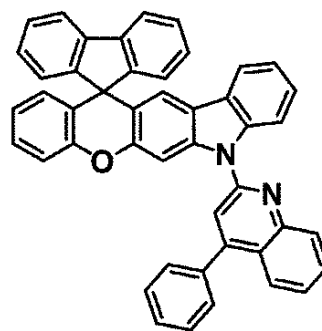
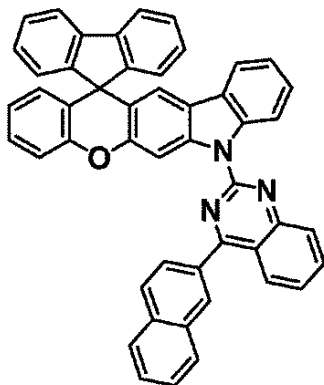
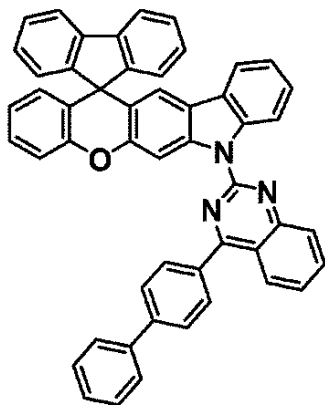
10



20

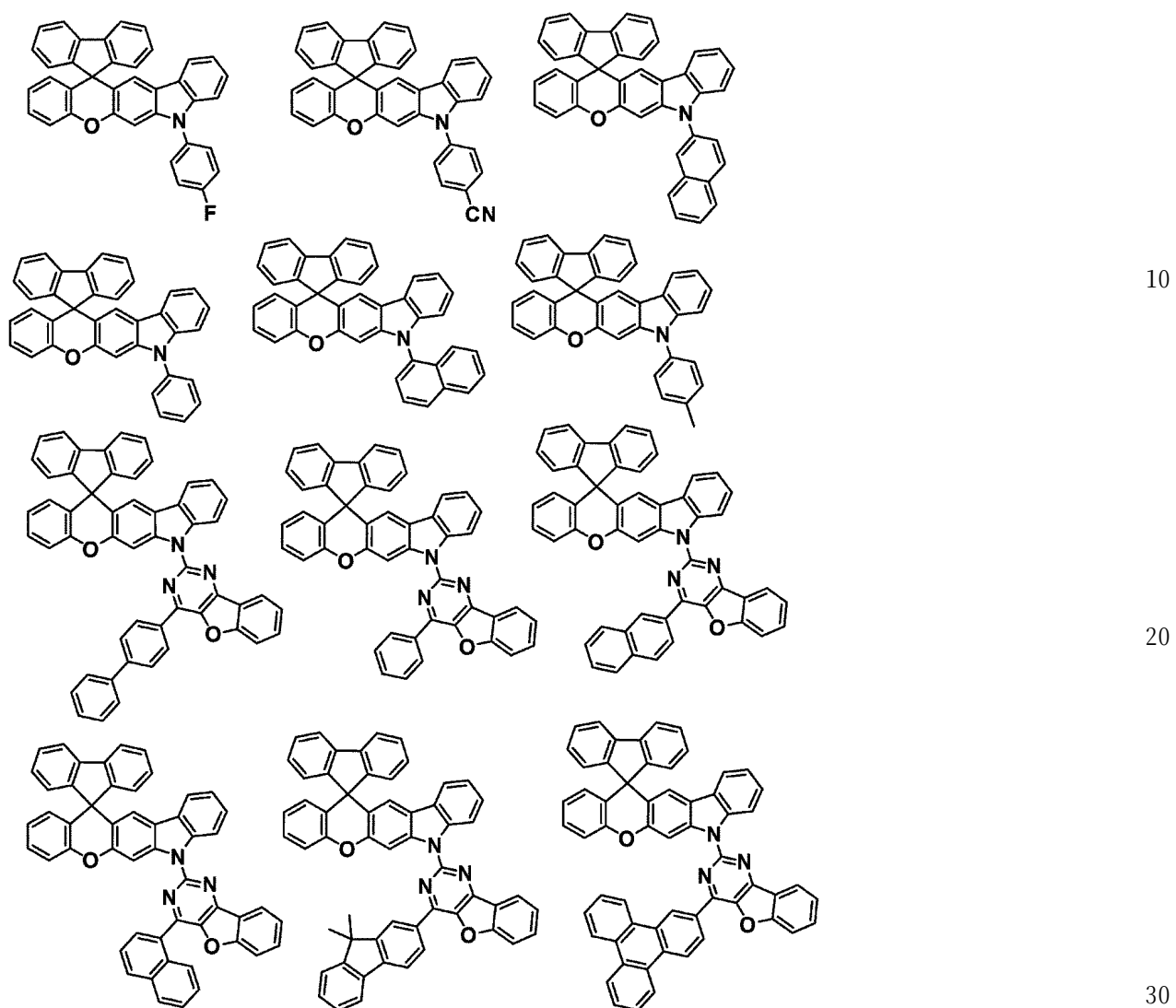


30

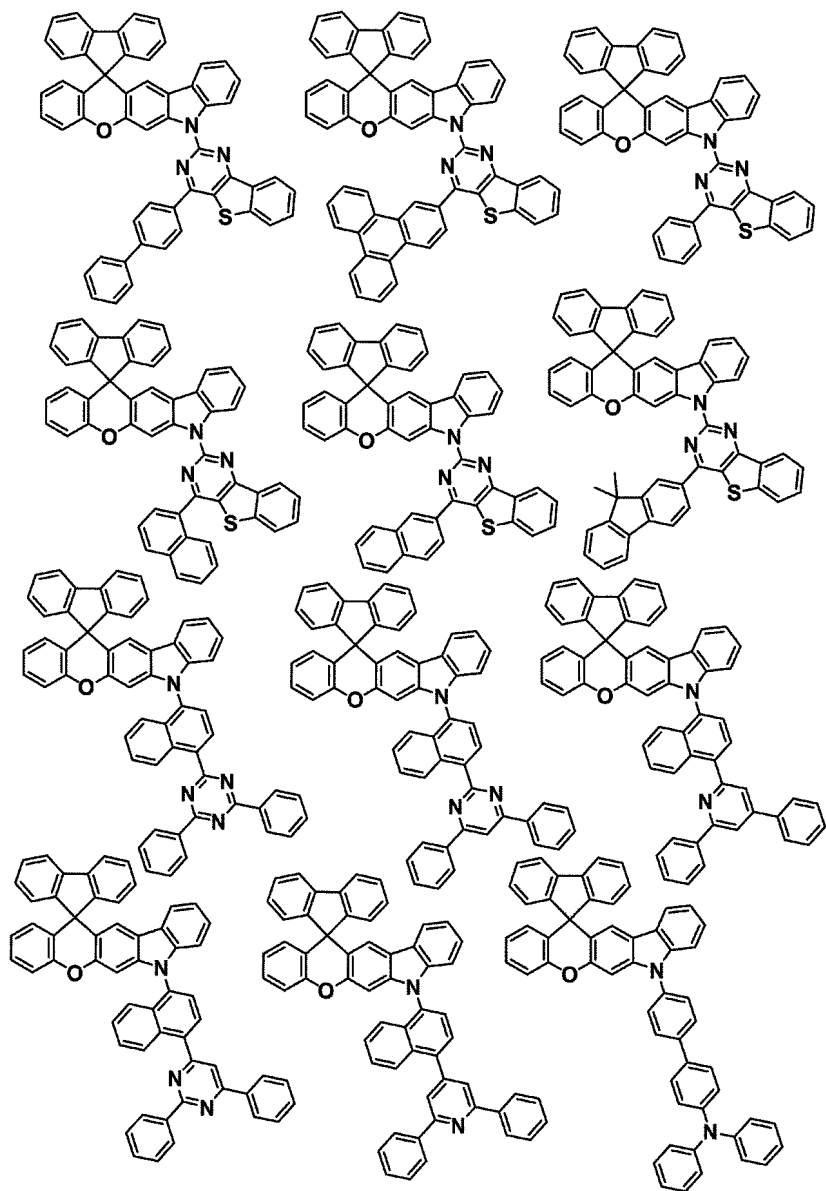


40

【化 4 8】



【化 4 9】

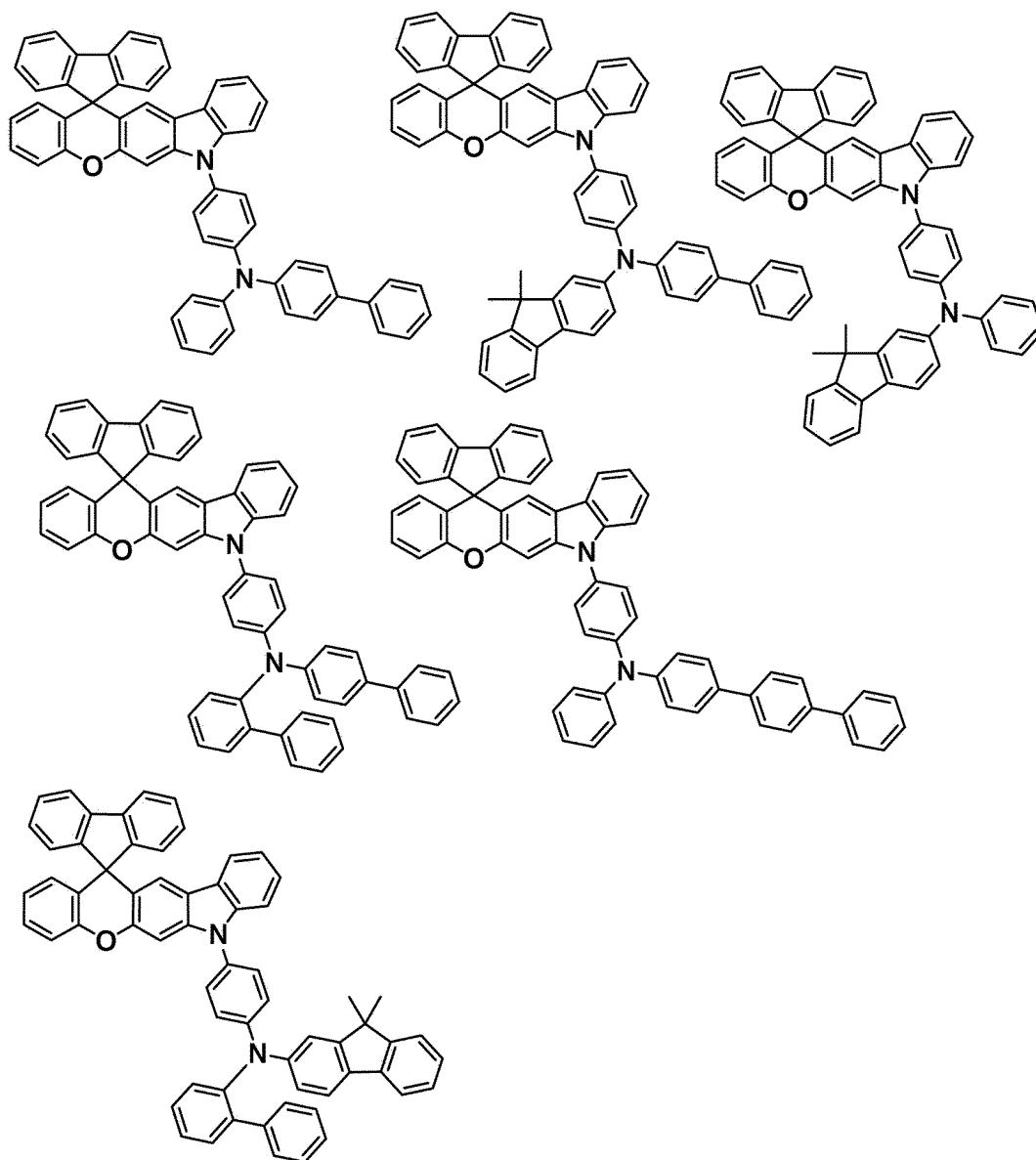


10

20

30

【化 5 0】

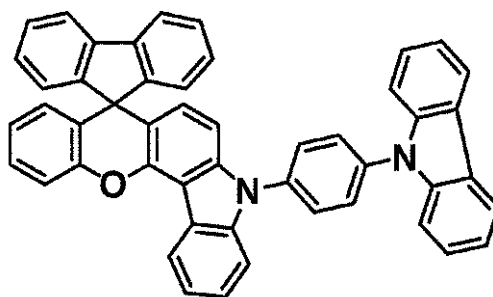
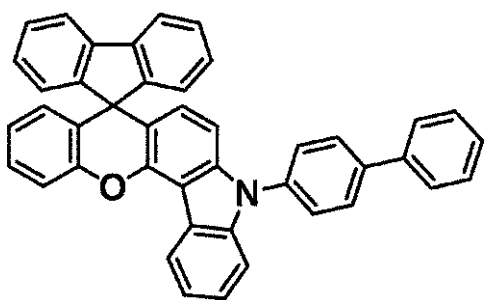


10

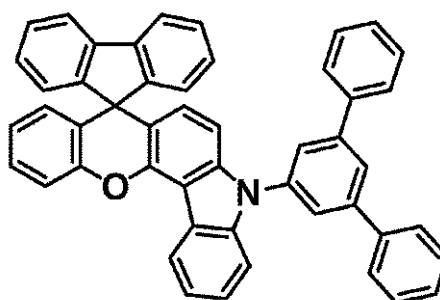
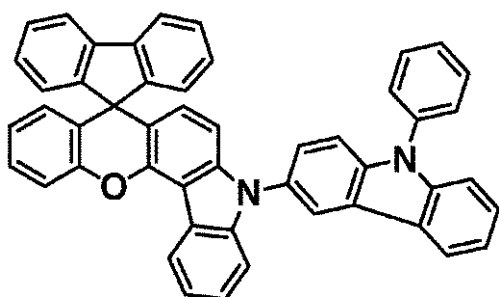
20

30

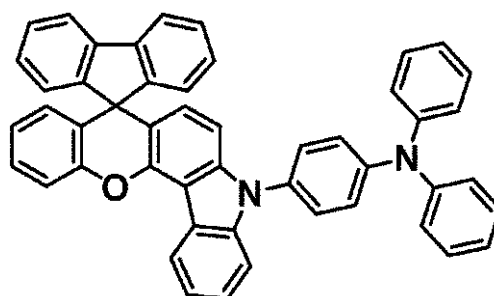
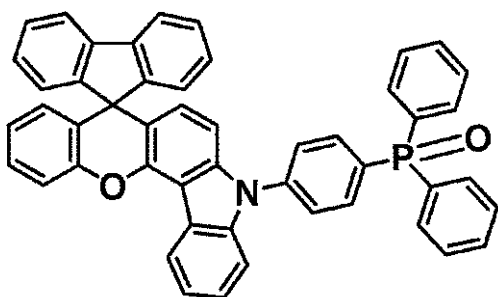
【化 5 1】



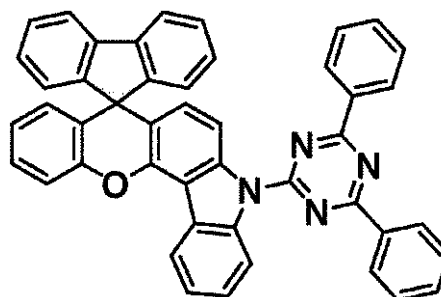
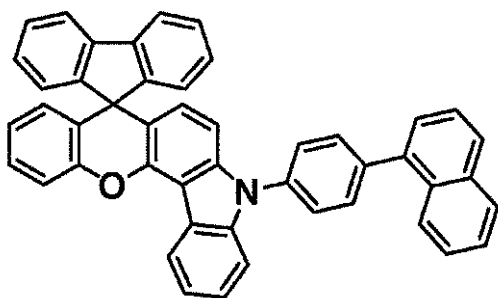
10



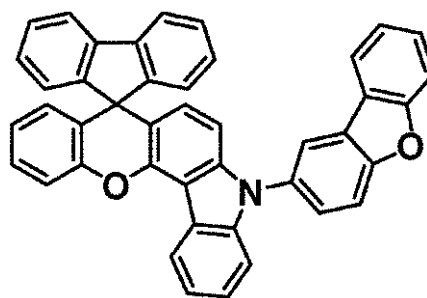
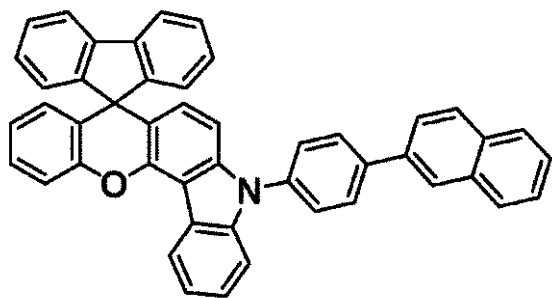
20



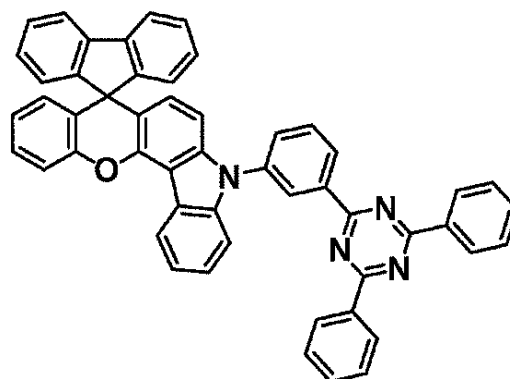
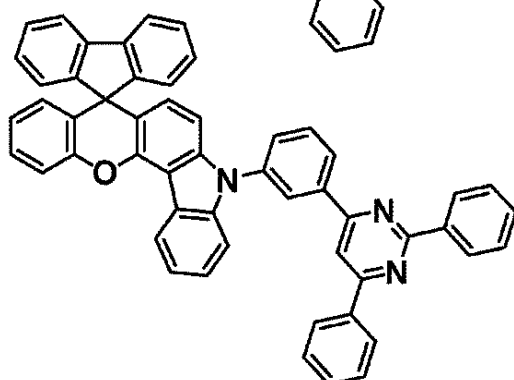
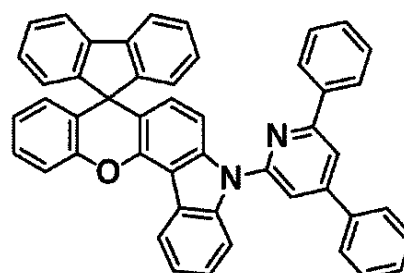
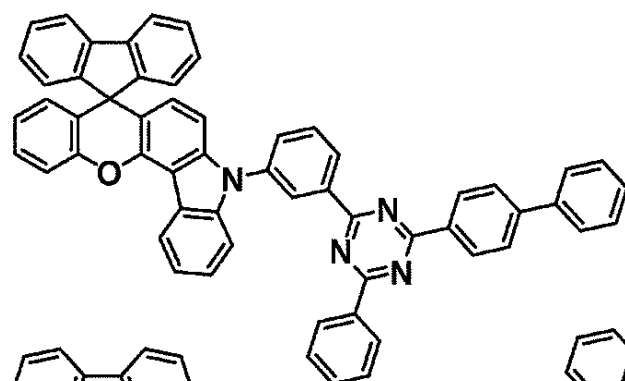
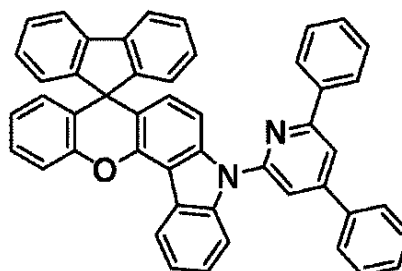
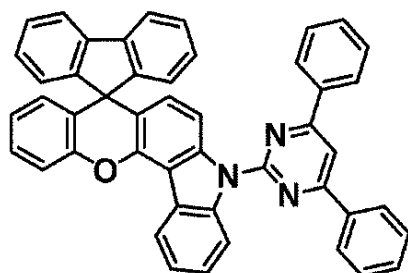
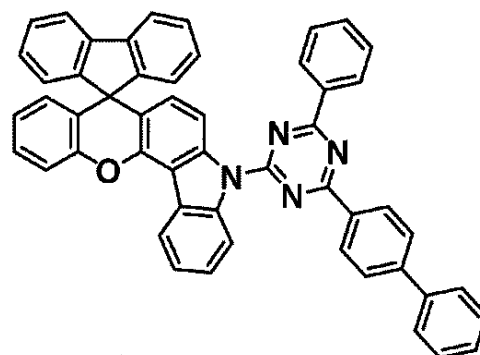
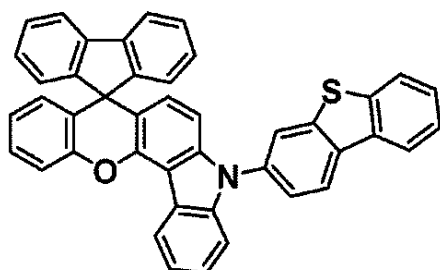
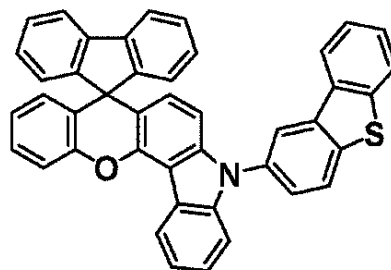
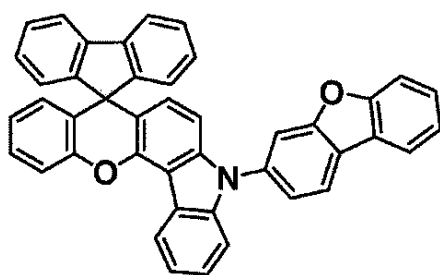
30



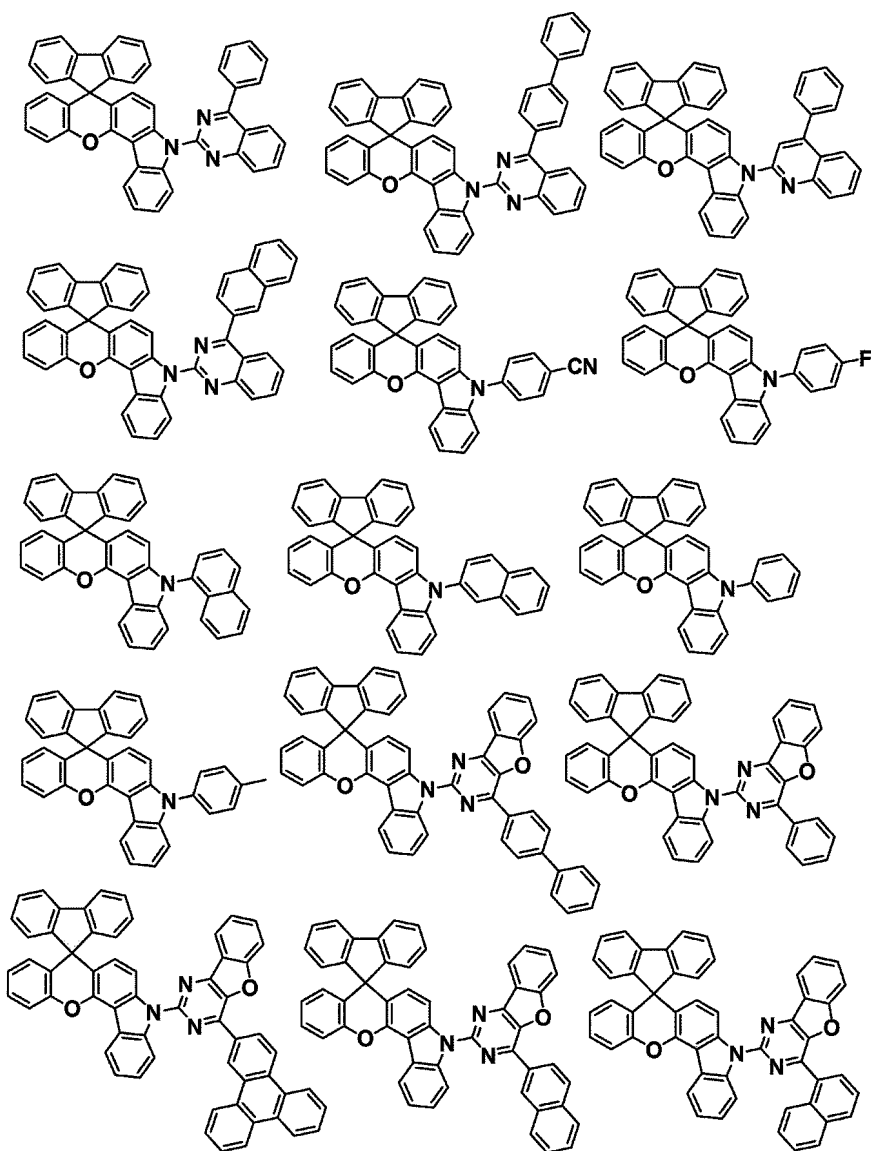
40



【化 5 2】



【化 5 3】

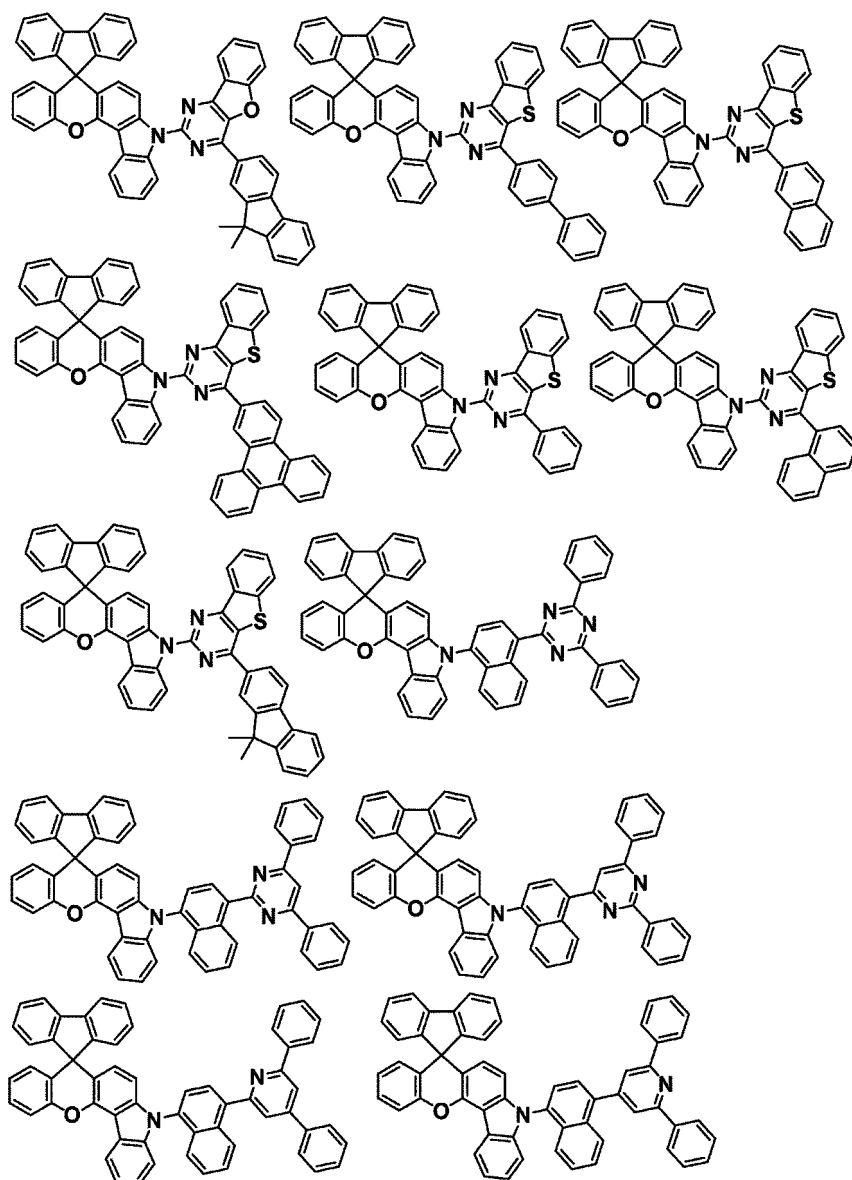


10

20

30

【化 5 4】

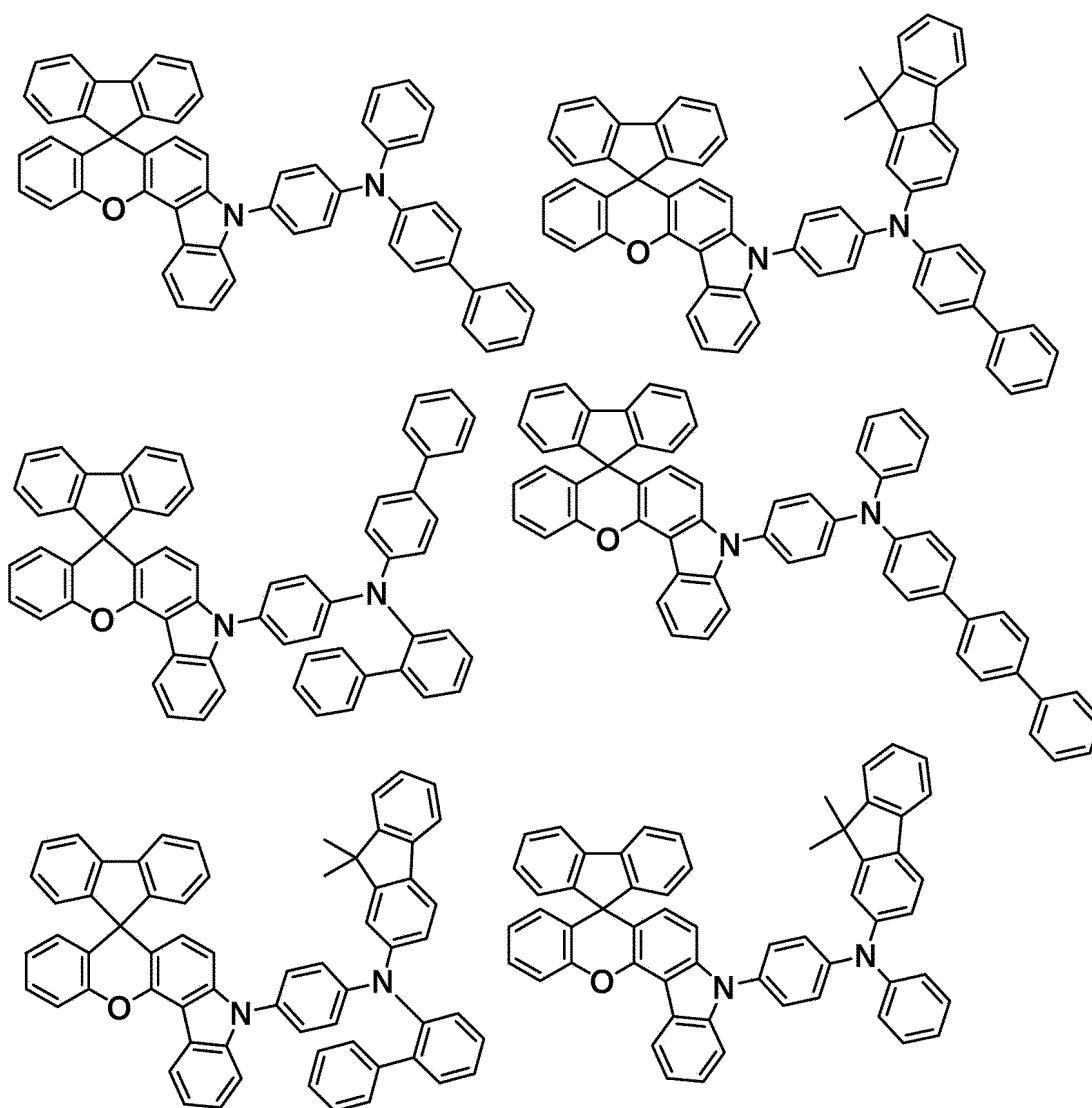


10

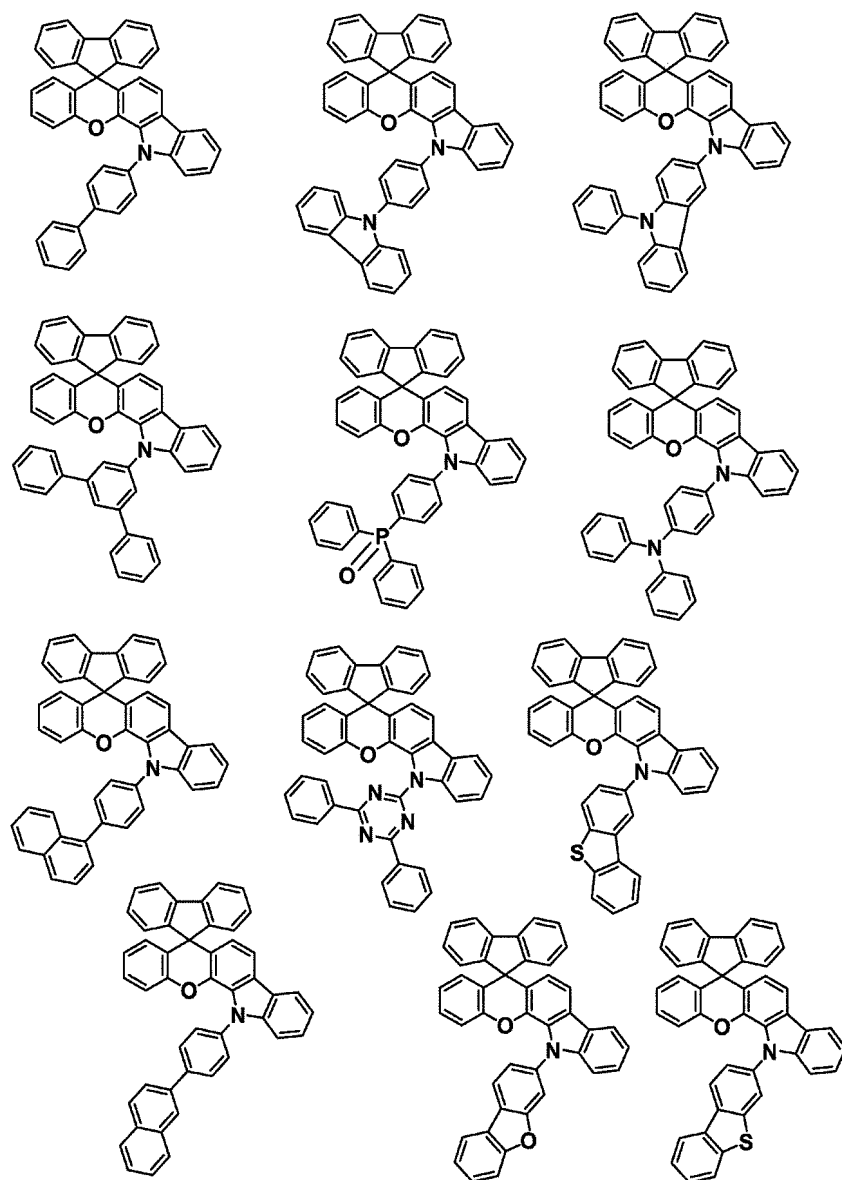
20

30

【化 5 5】



【化 5 6】

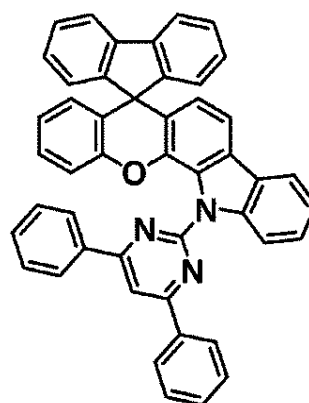
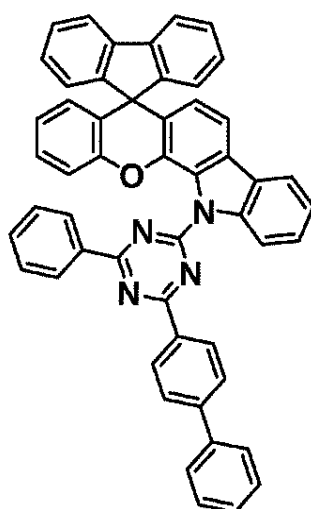
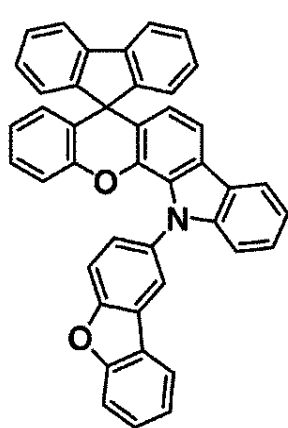


10

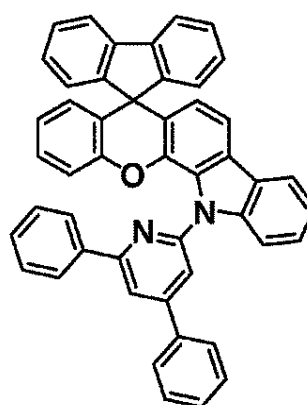
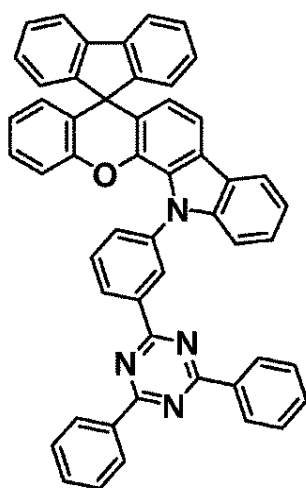
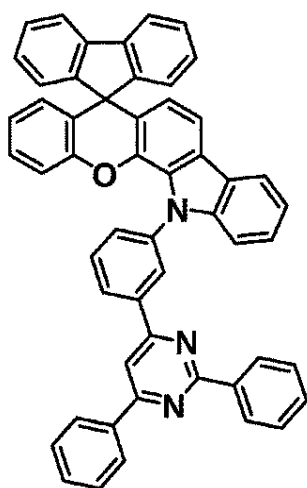
20

30

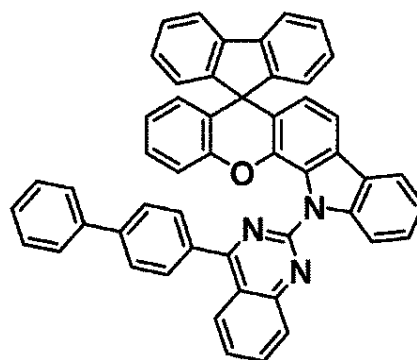
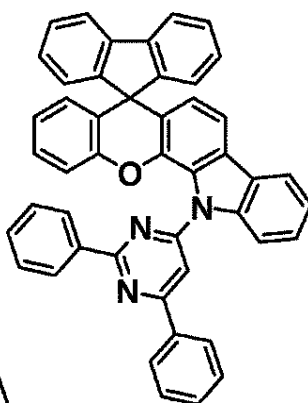
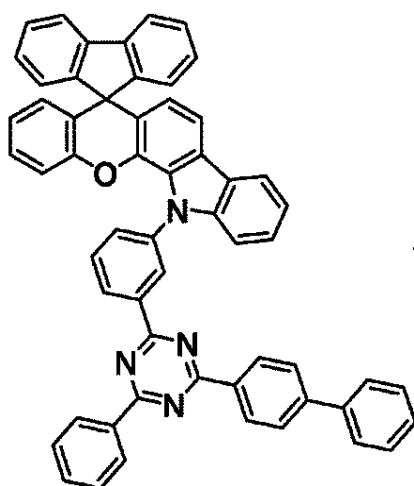
【化 5 7】



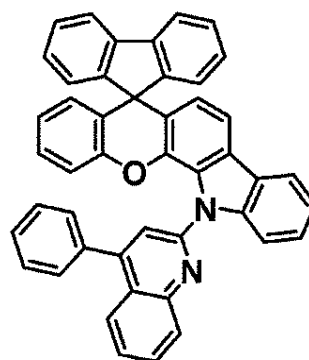
10



20

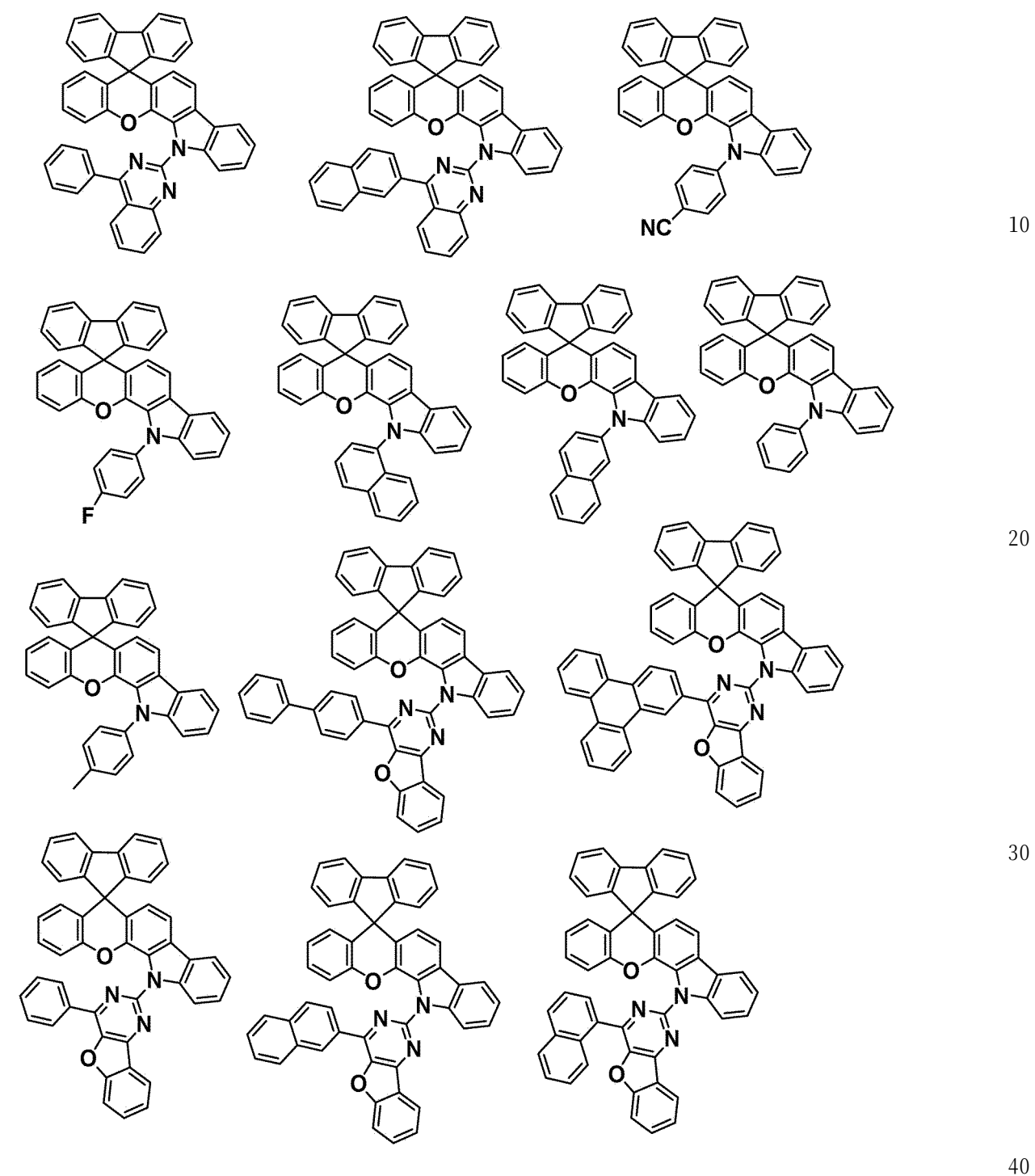


30



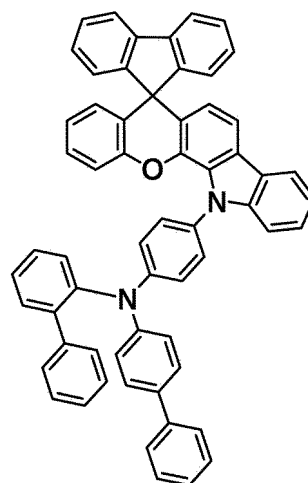
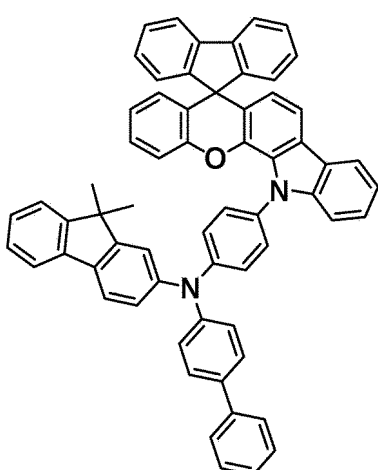
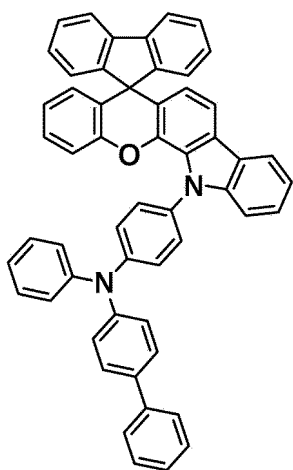
40

【化 5 8】

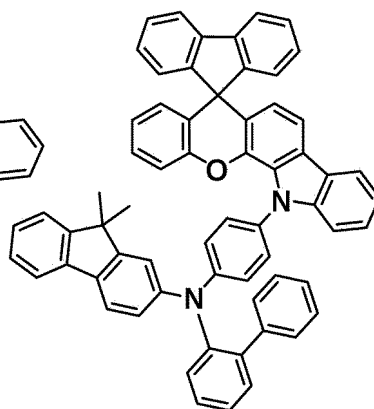
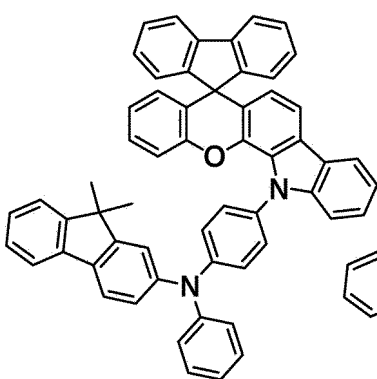
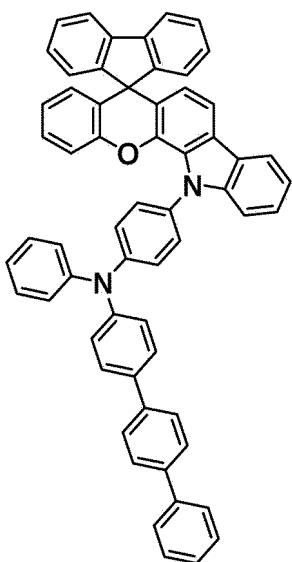


30

【化 6 0】



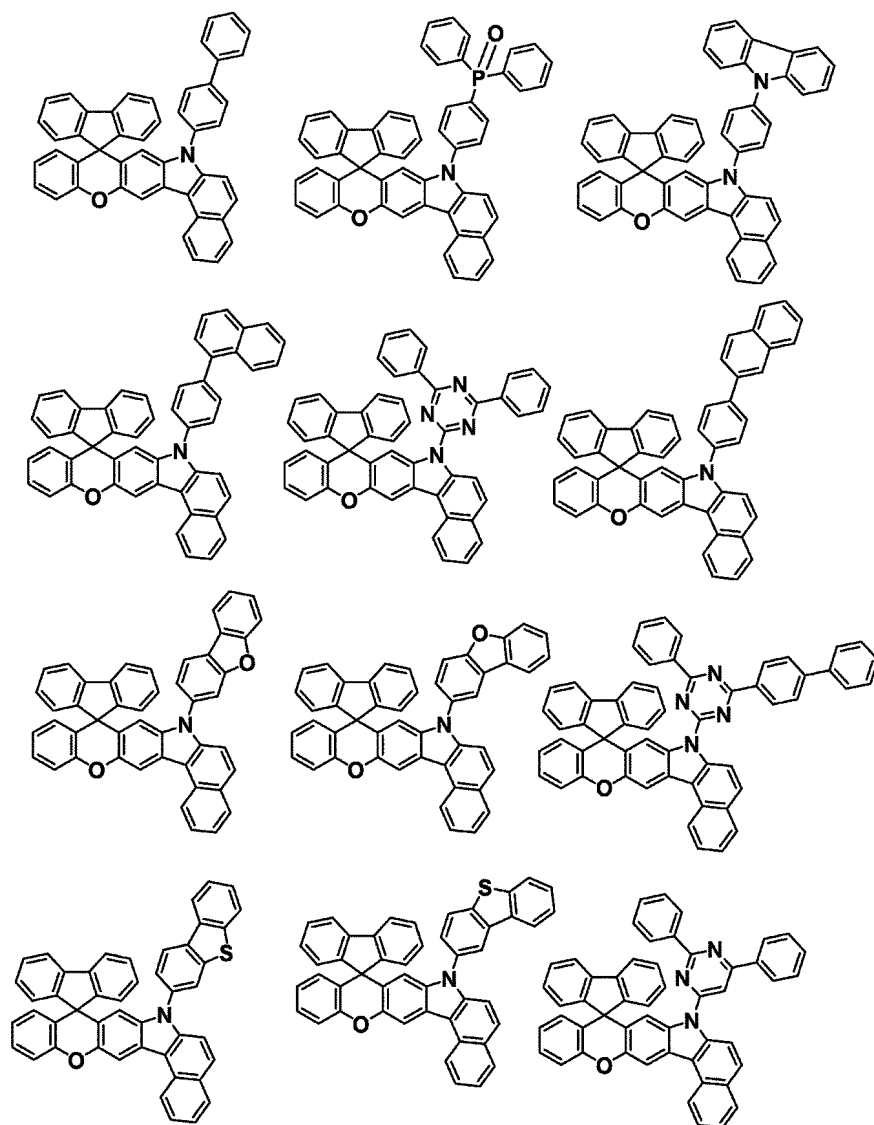
10



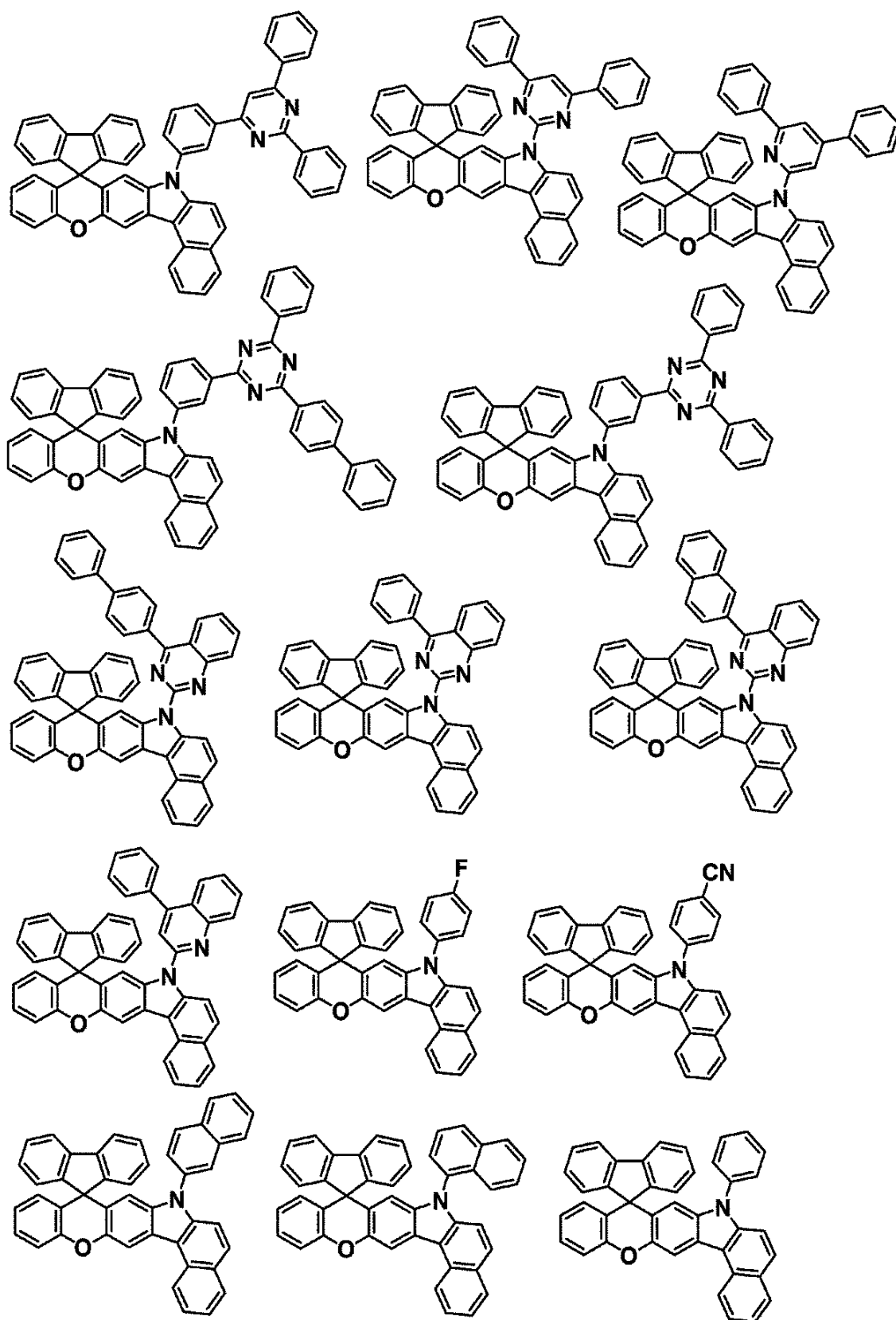
20

30

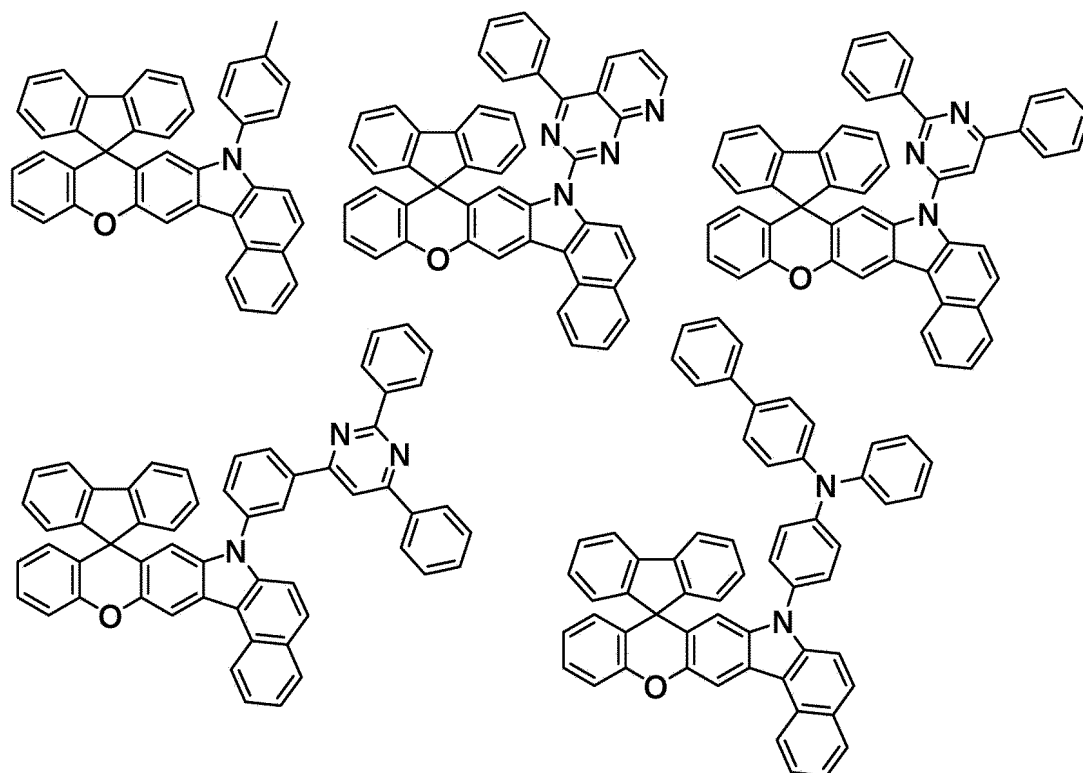
【化 6 1】



【化 6 2】



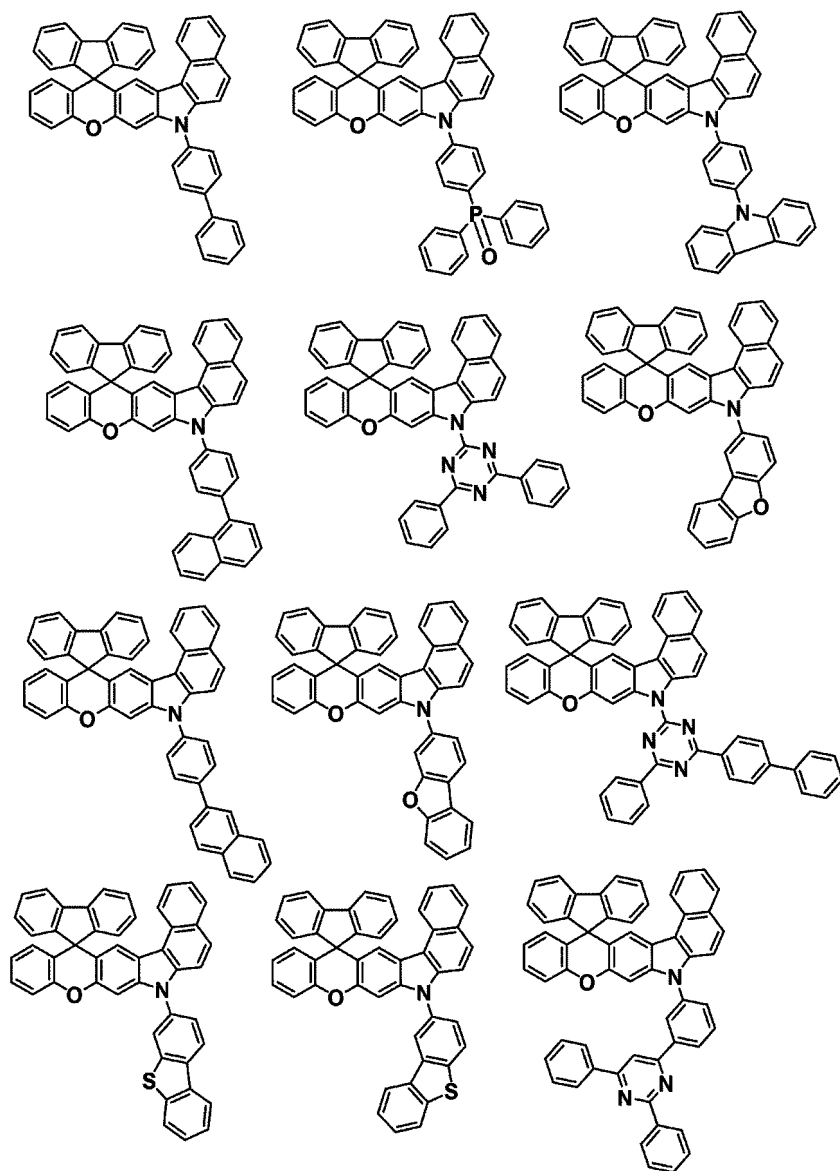
【化 6 3】



10

20

【化 6 4】



10

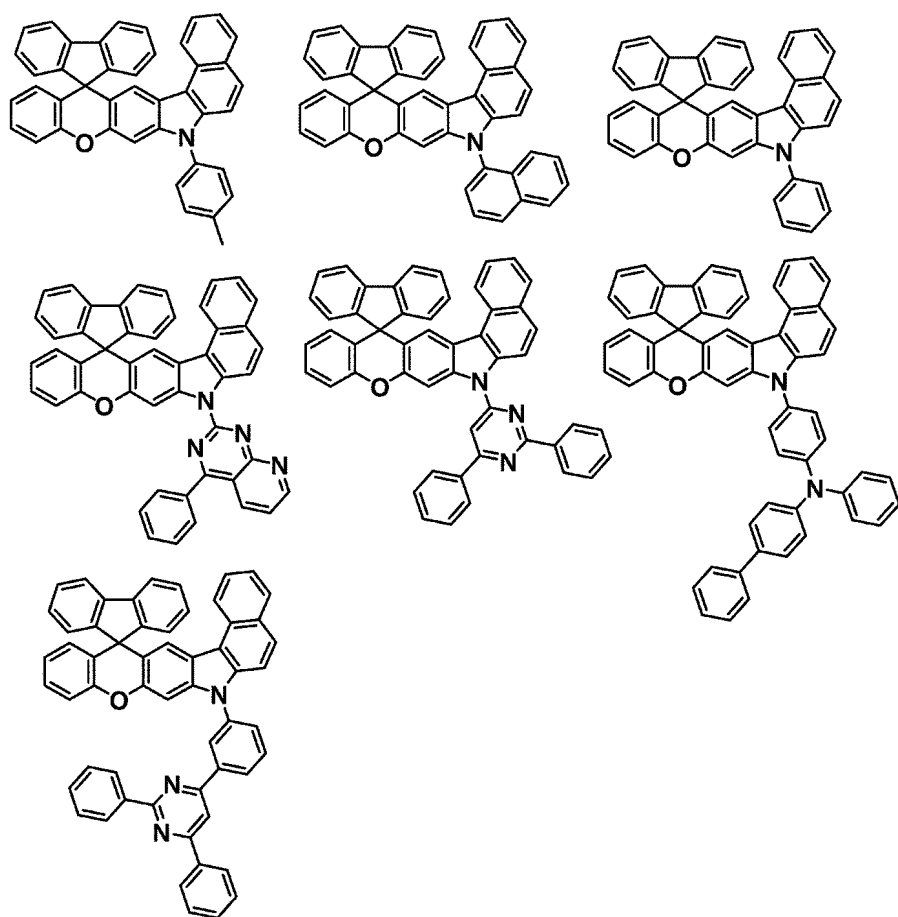
20

30

The image displays 12 chemical structures of organic molecules, likely dyes or pigments, arranged in a 4x3 grid. Each molecule features a common phthalocyanine-like core (a macrocycle with four nitrogen atoms) substituted with various groups. The substituents include phenyl rings, triphenylmethyl groups, and other aromatic systems. The structures are drawn in a skeletal format, showing the connectivity of atoms and the presence of functional groups like nitriles and fluorides.

30

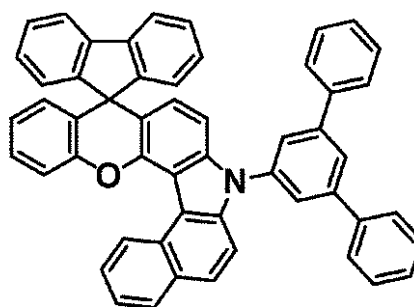
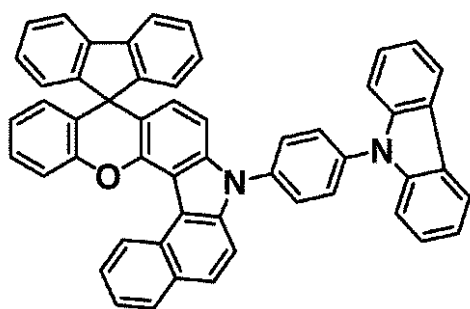
【化 6 6】



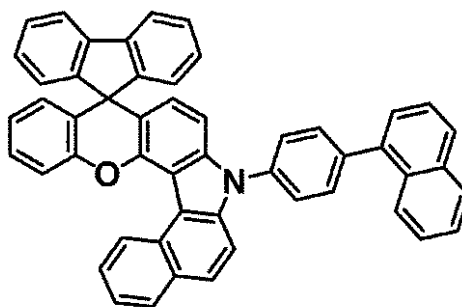
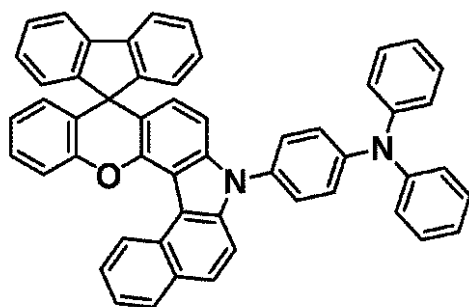
10

20

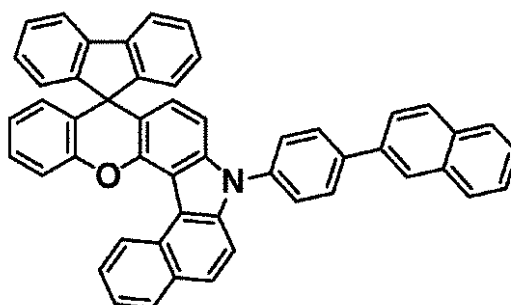
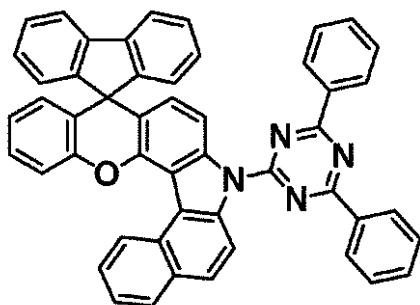
【化 6 7】



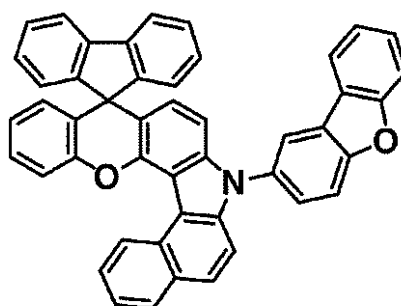
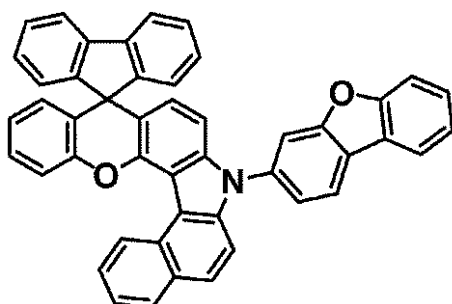
10



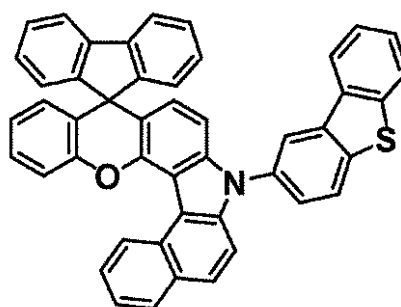
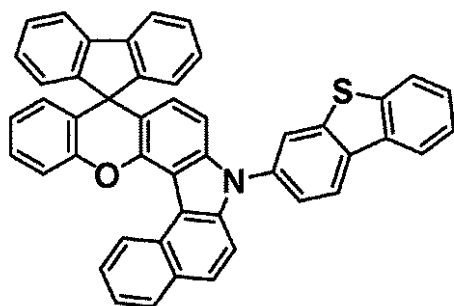
20



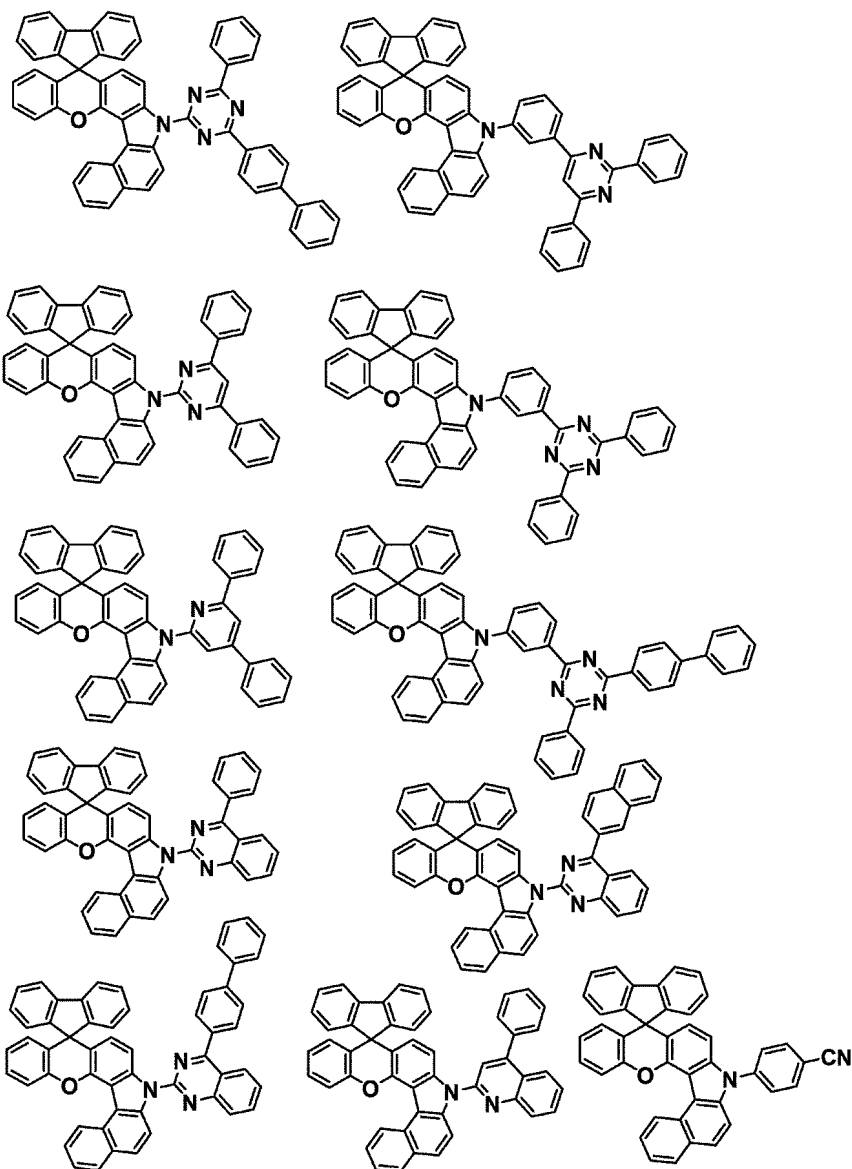
30



40



【化 6 8】

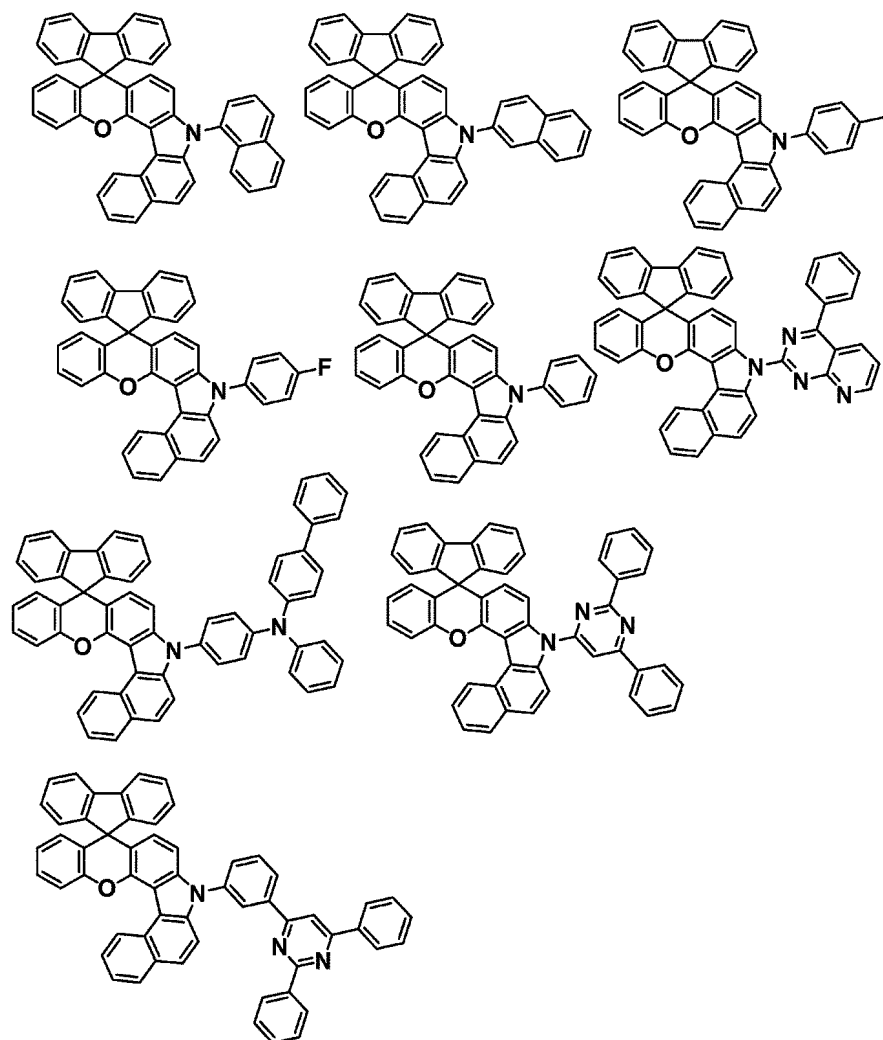


10

20

30

【化 6 9】

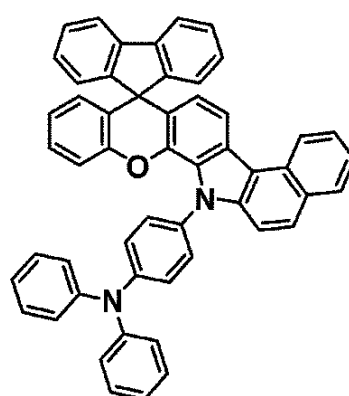
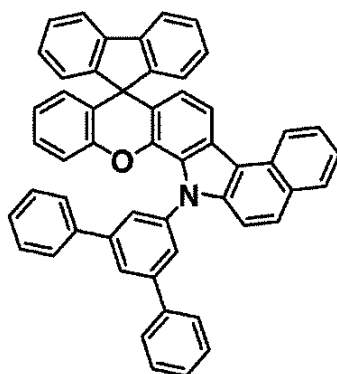
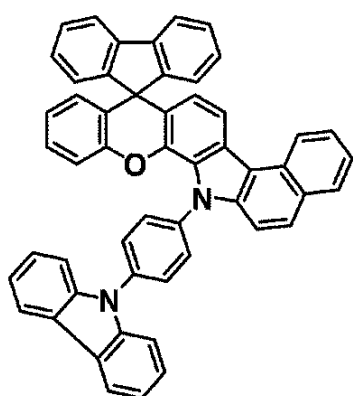


10

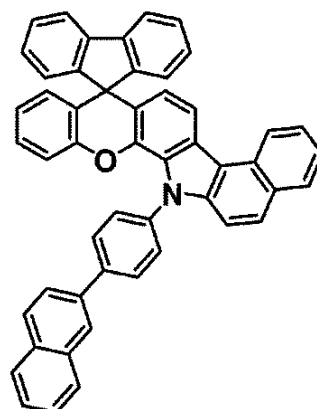
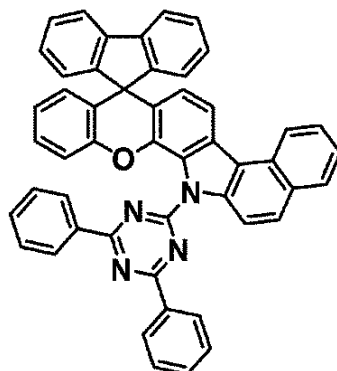
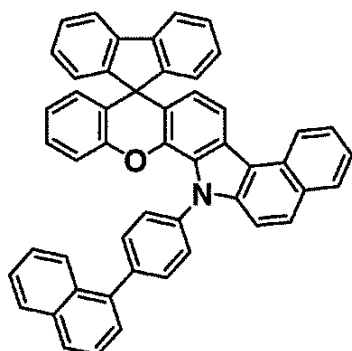
20

30

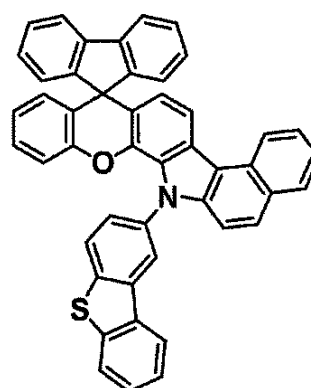
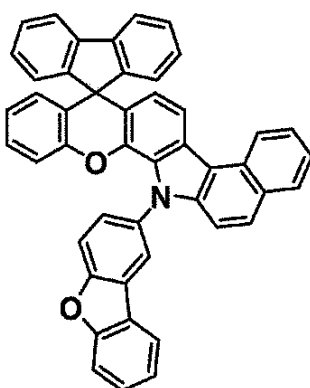
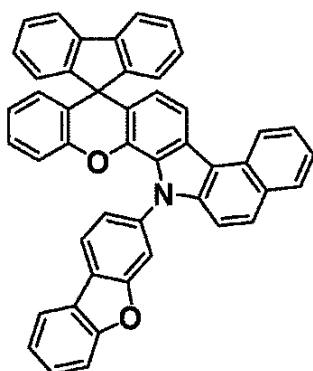
【化 7 0】



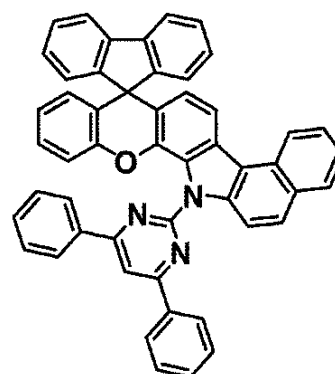
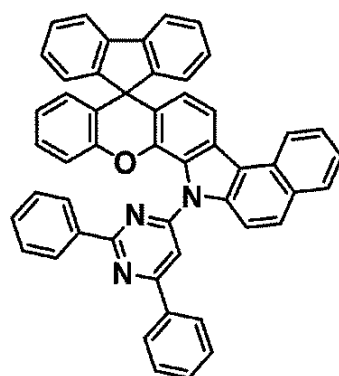
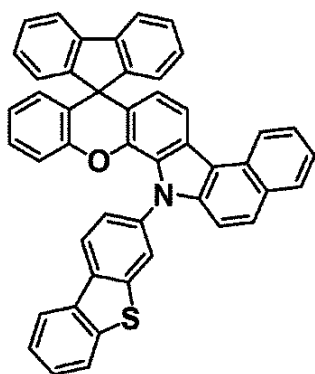
10



20

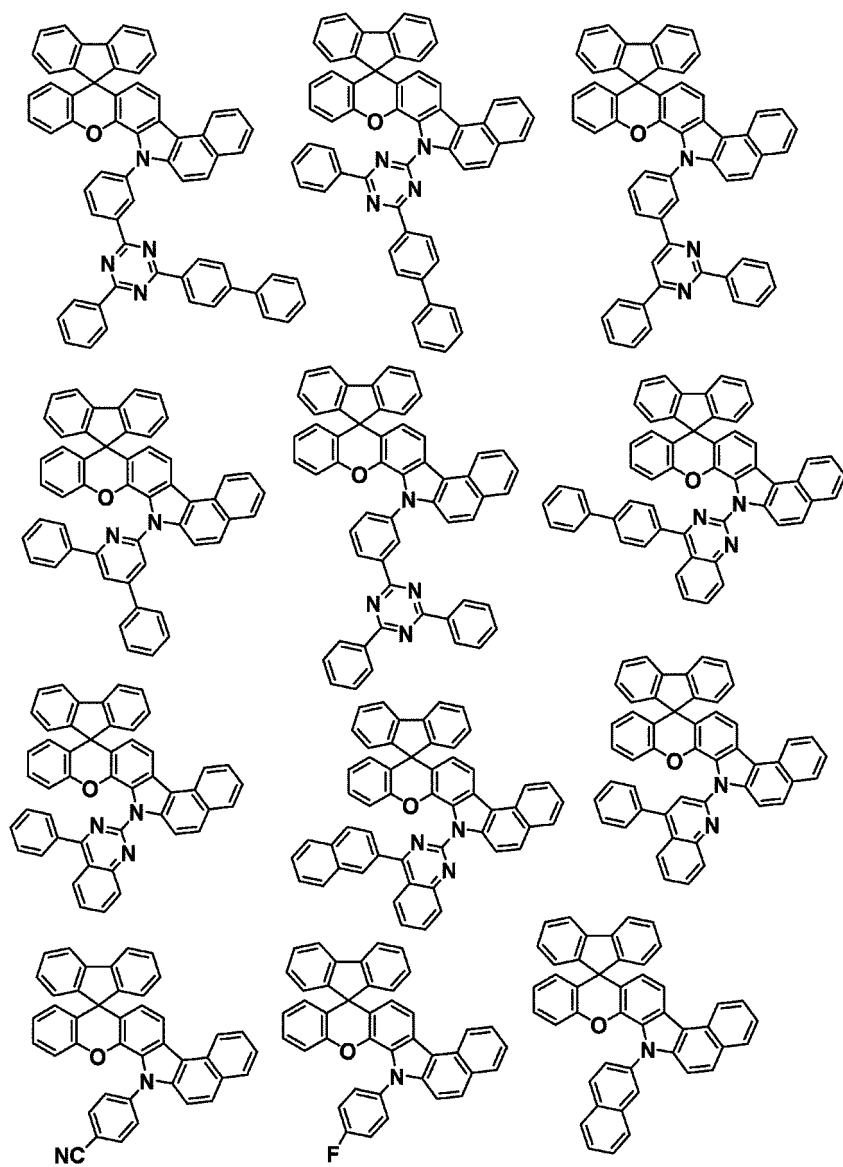


30



40

【化 7 1】

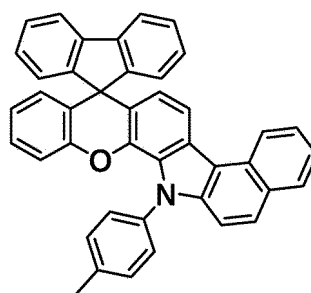
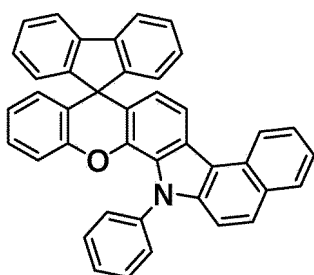
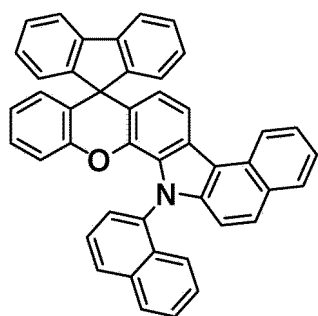


10

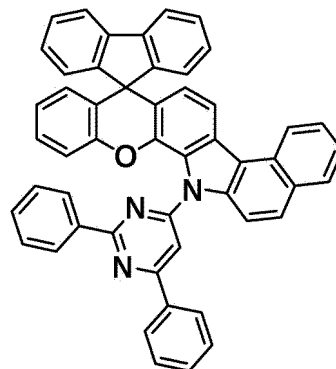
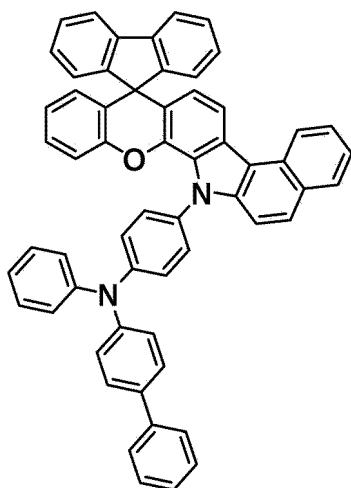
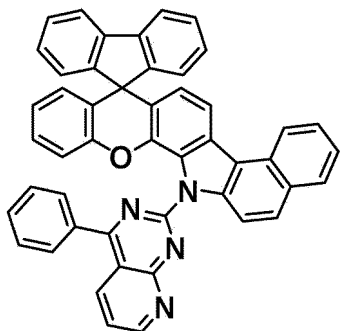
20

30

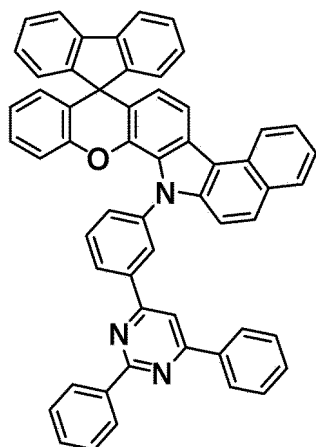
【化 7 2】



10

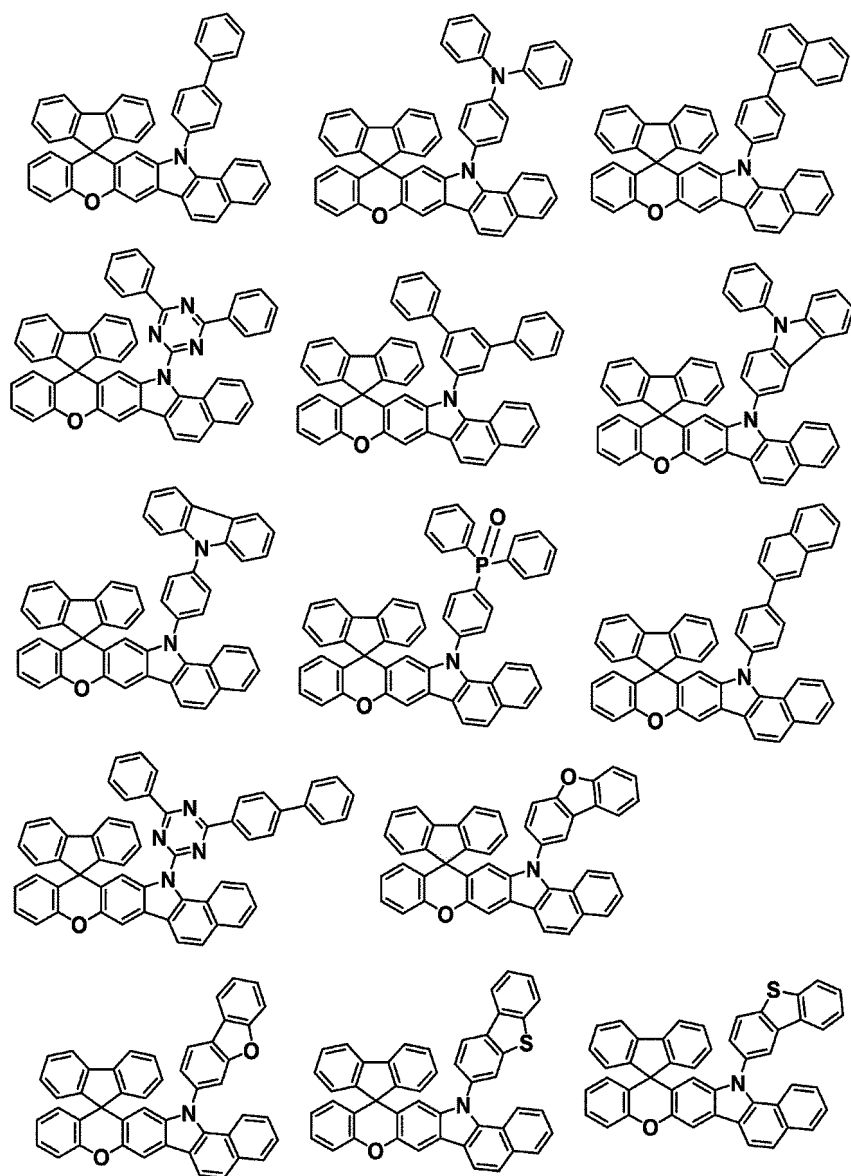


20



30

【化 7 3】

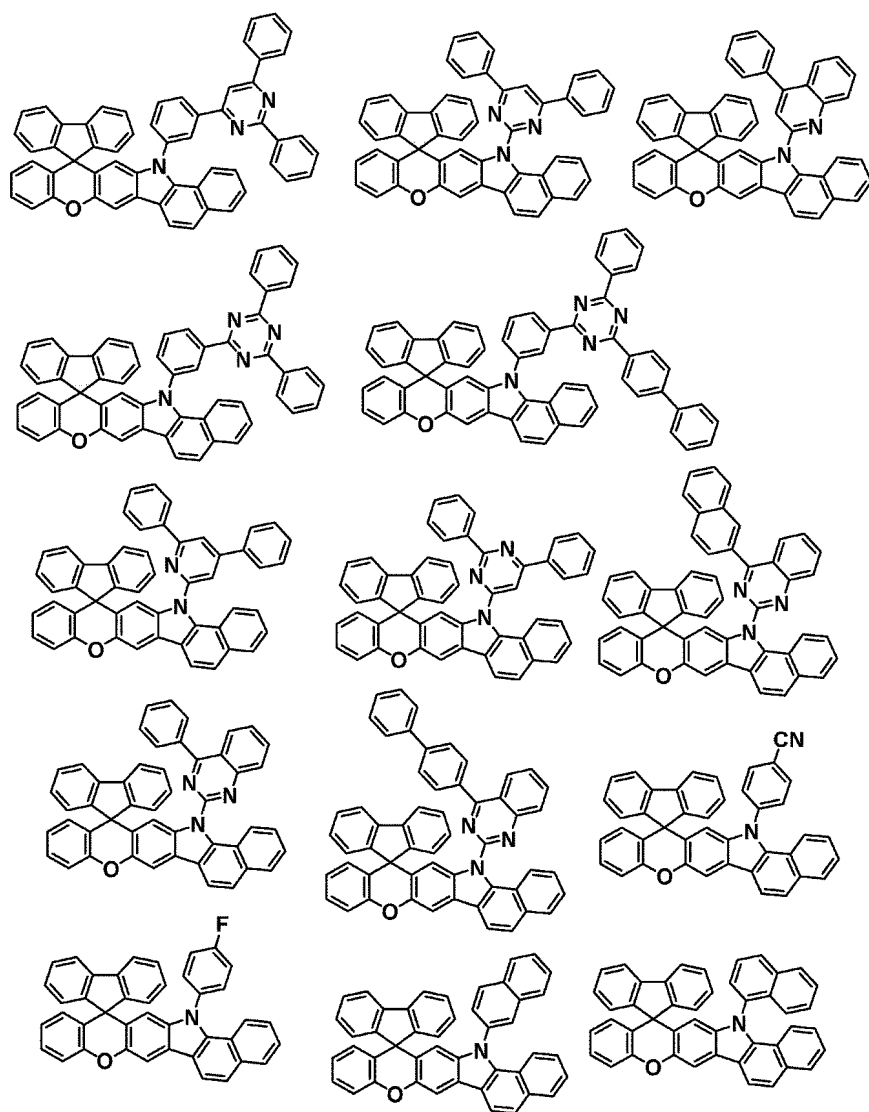


10

20

30

【化 7 4】

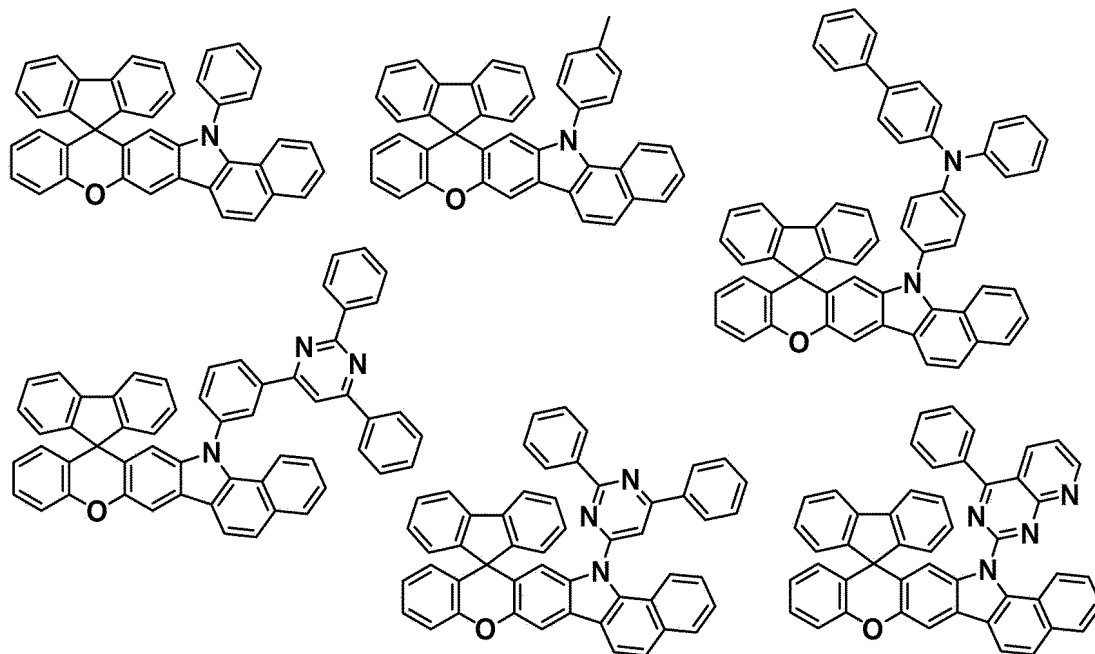


10

20

30

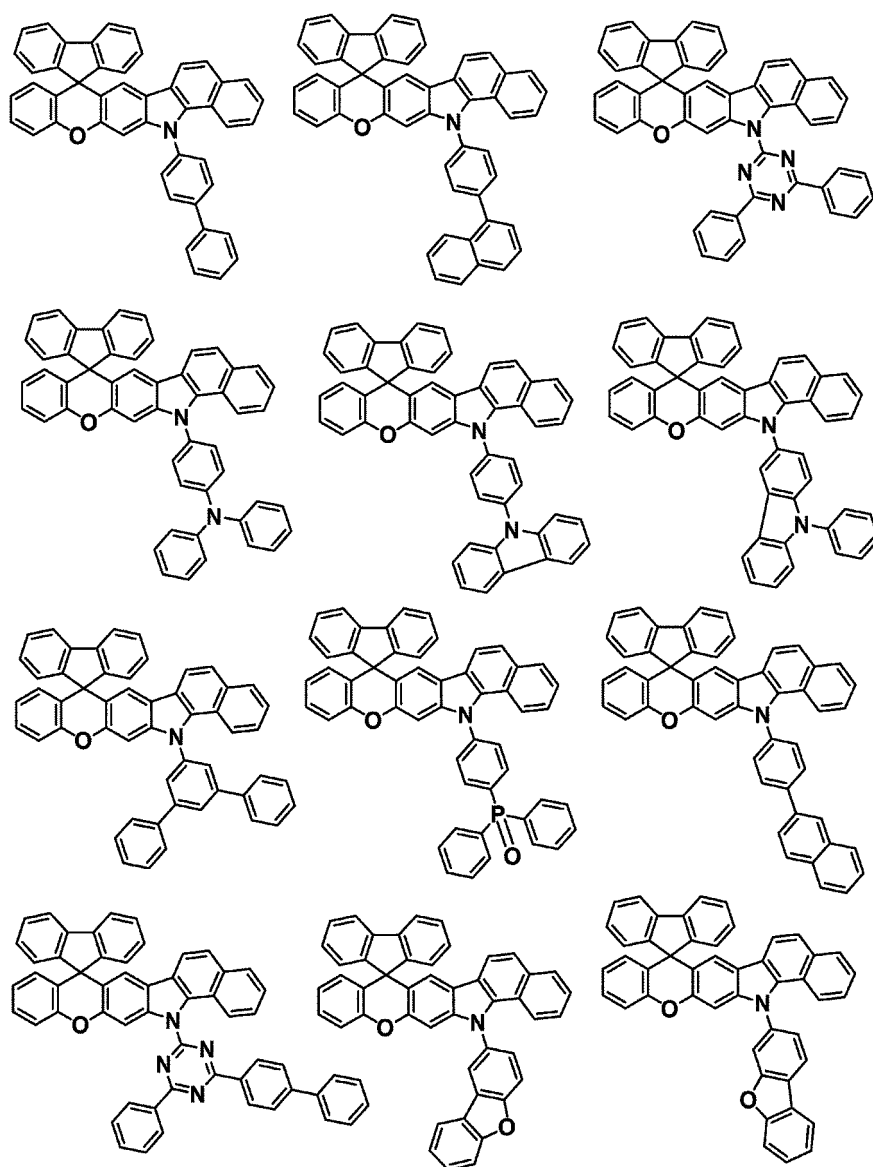
【化 7 5】



10

20

【化 7 6】

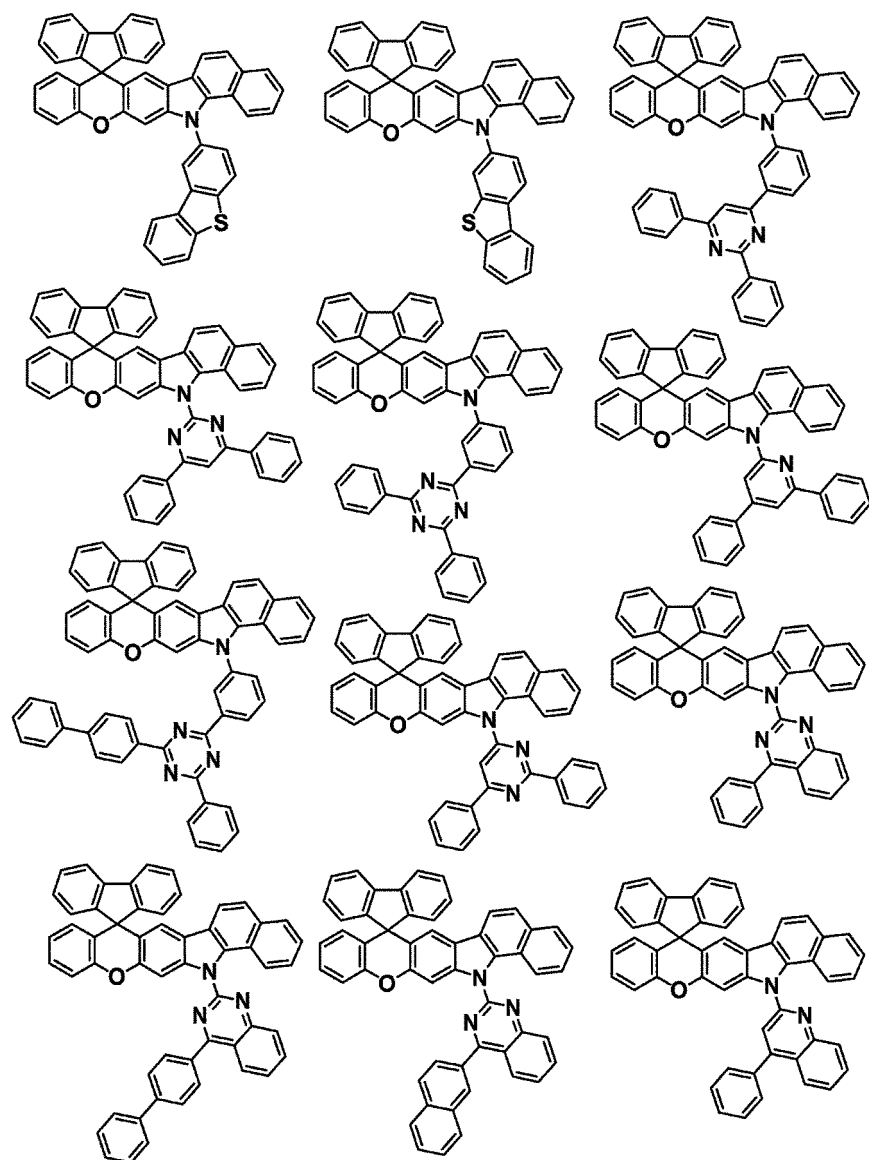


10

20

30

【化 7 7】

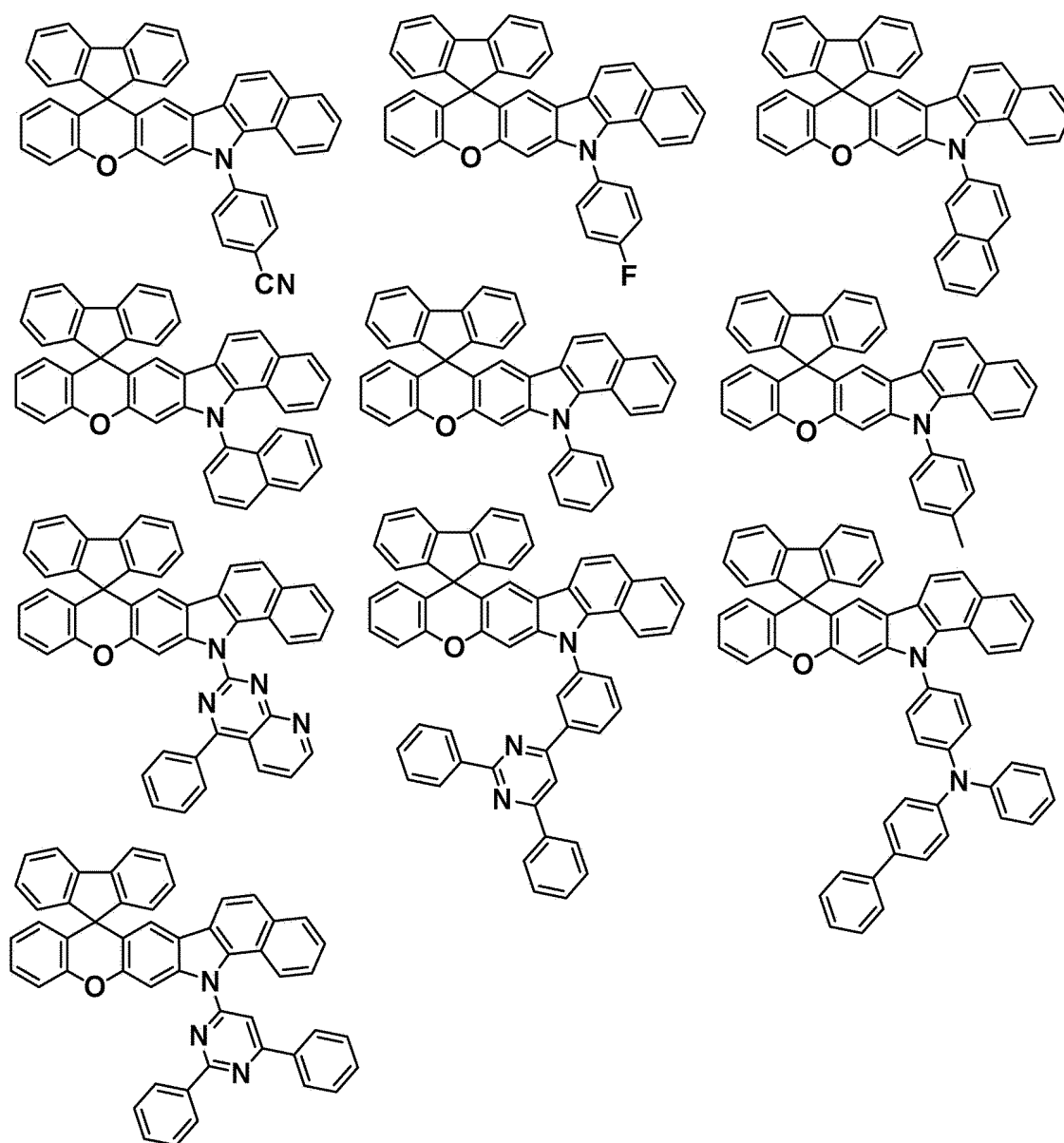


10

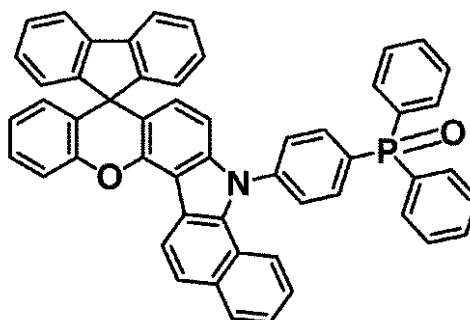
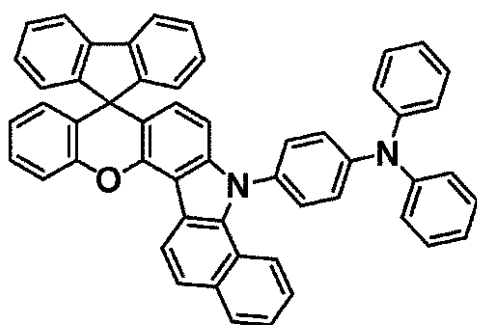
20

30

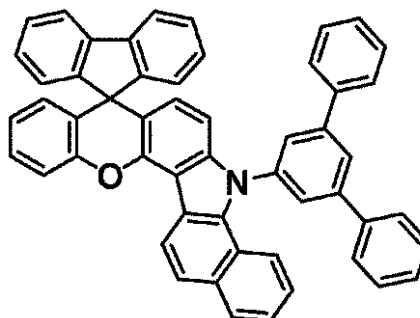
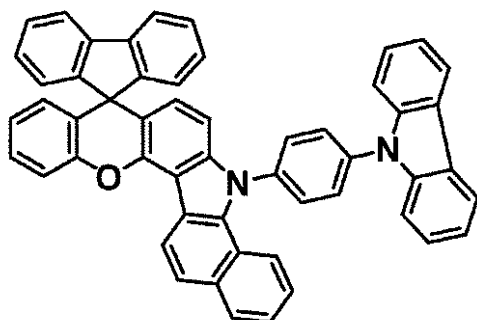
【化 7 8】



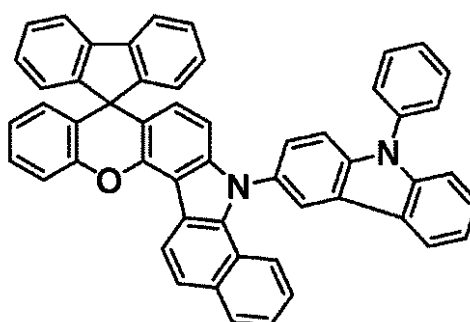
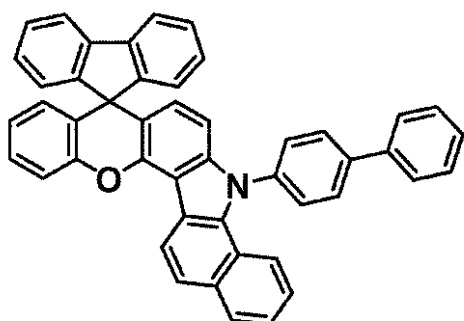
【化 7 9】



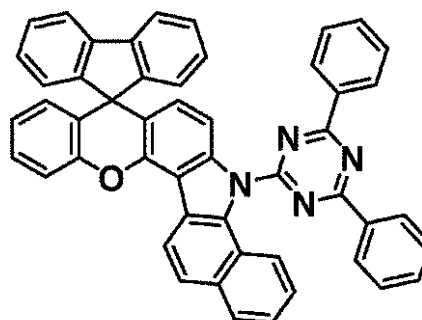
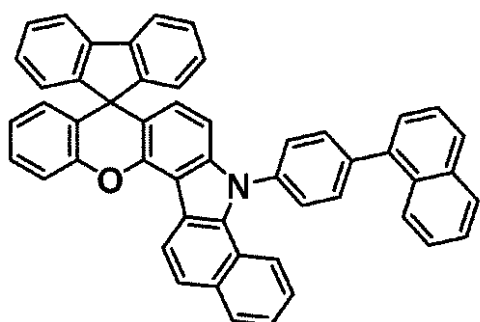
10



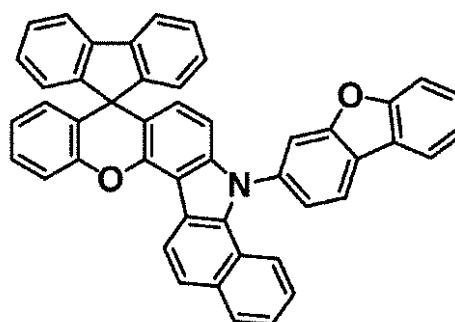
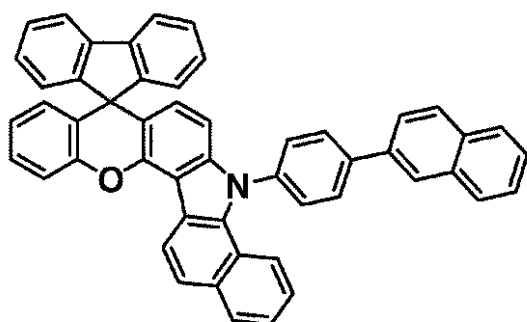
20



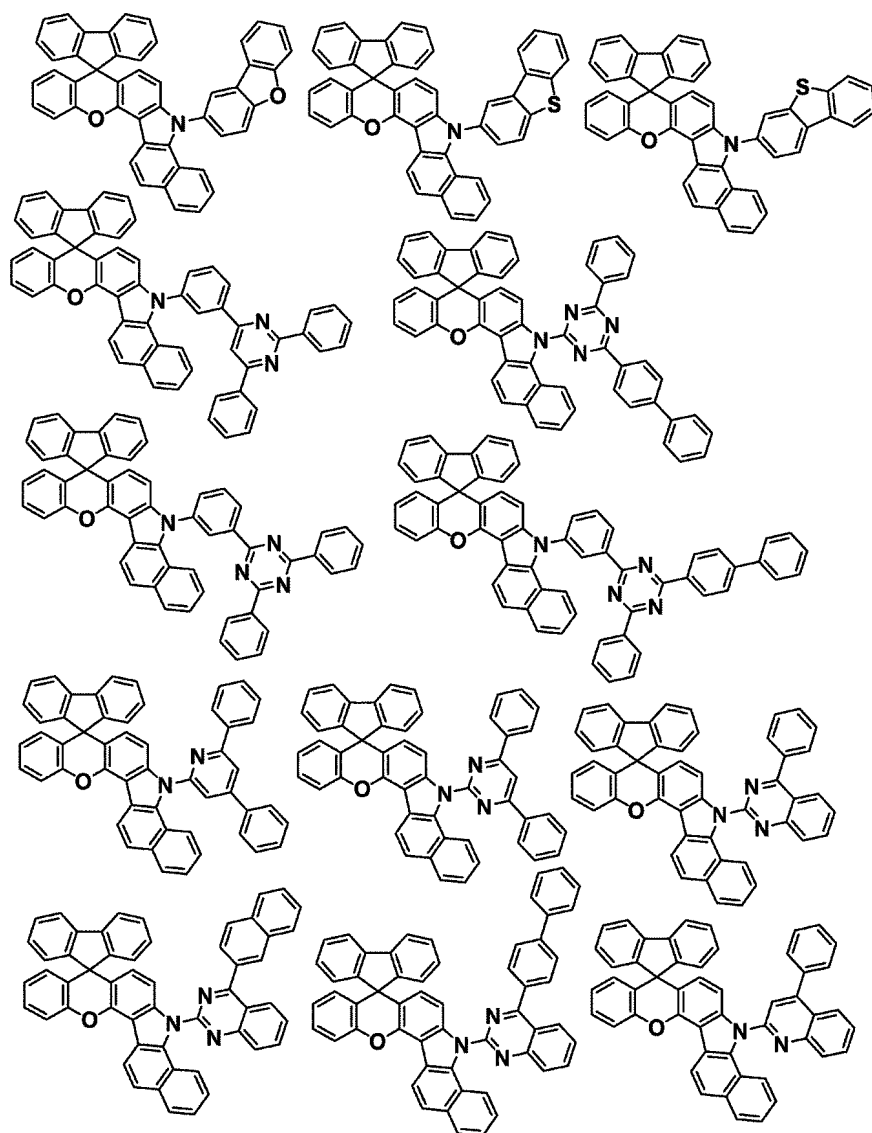
30



40



【化 8 0】

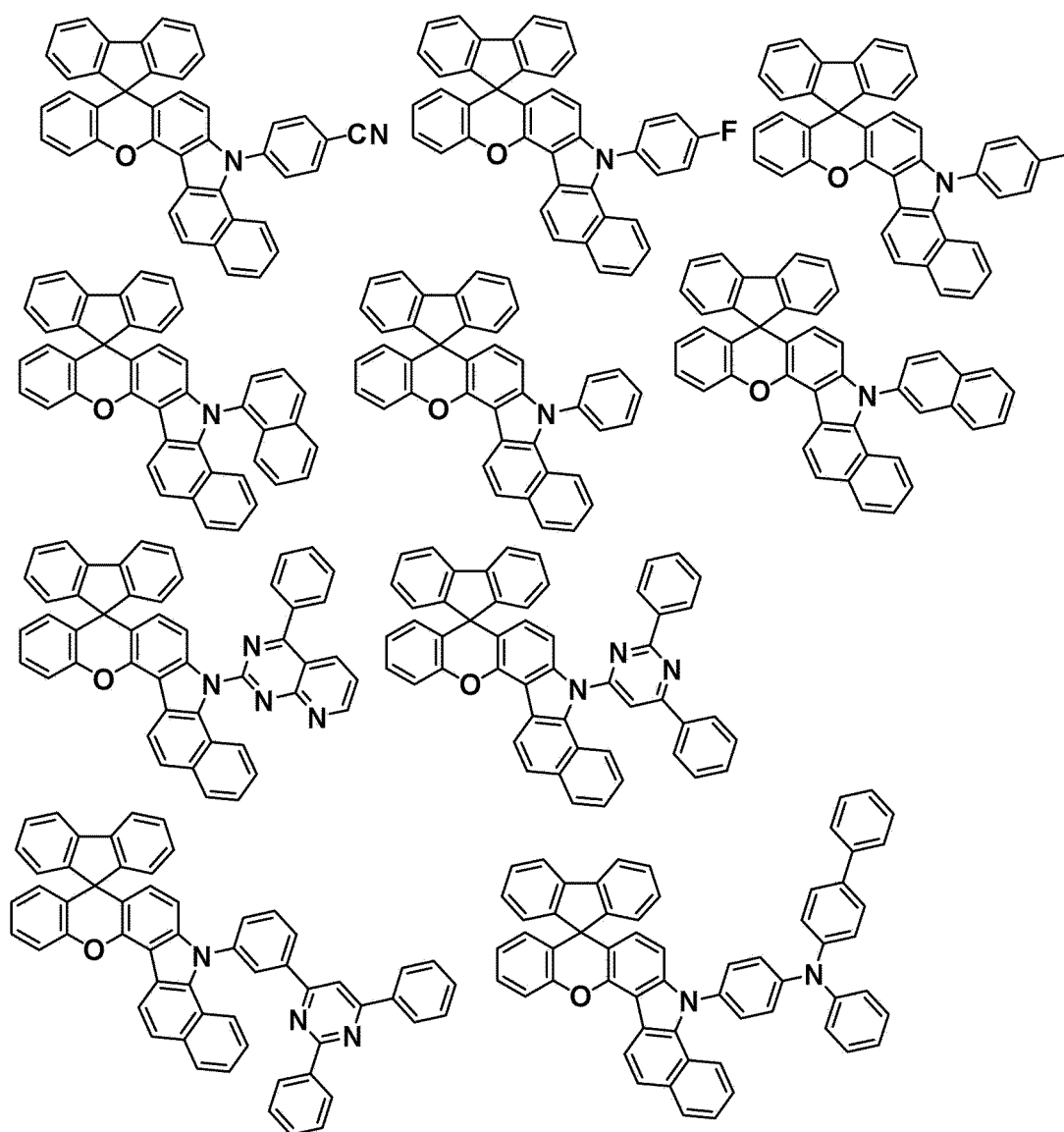


10

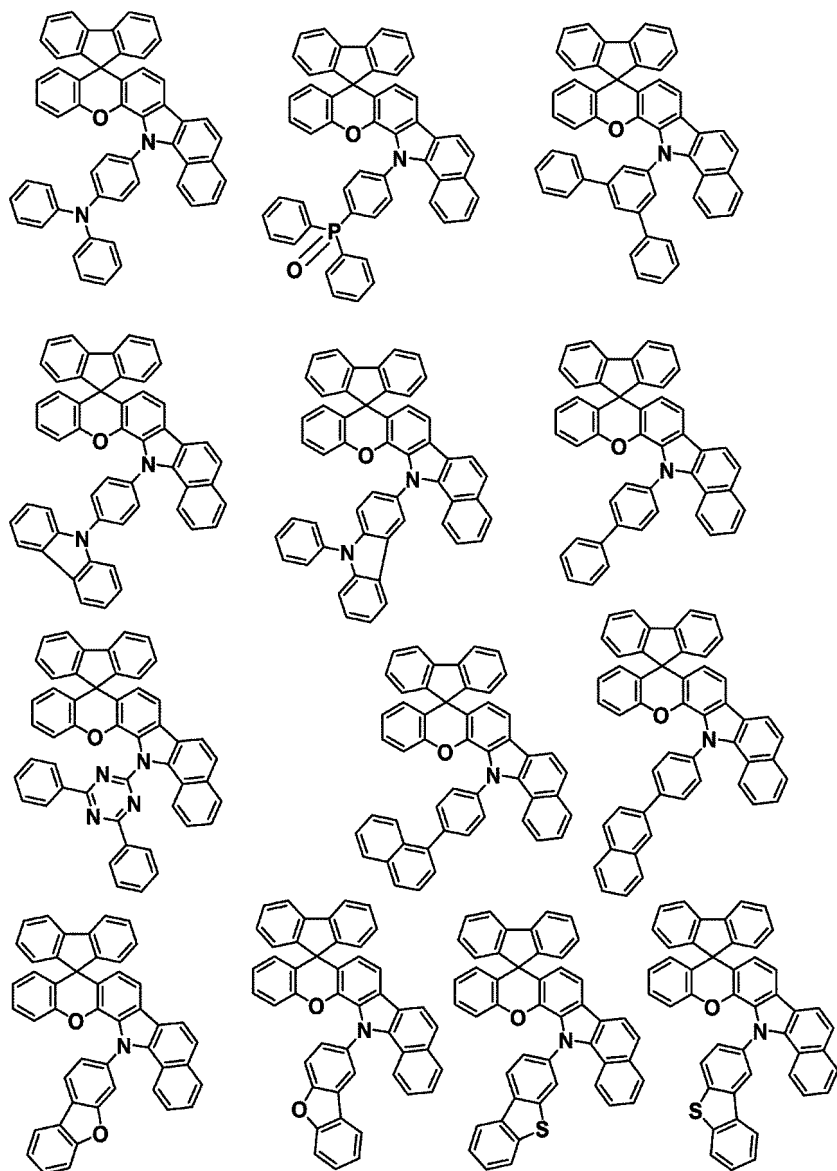
20

30

【化 8 1】



【化 8 2】

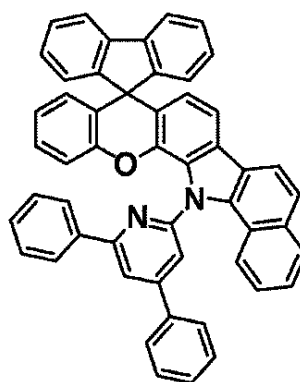
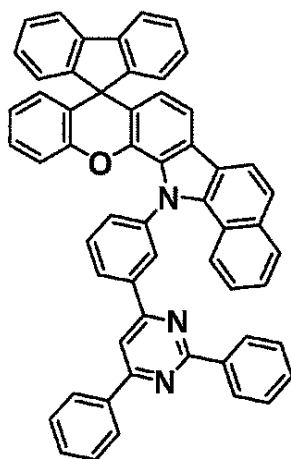
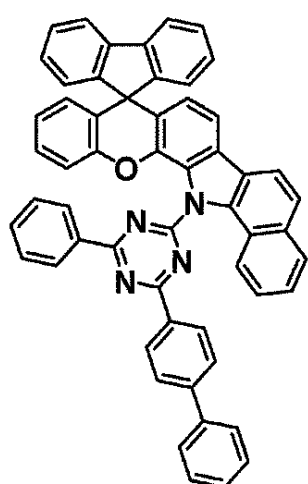


10

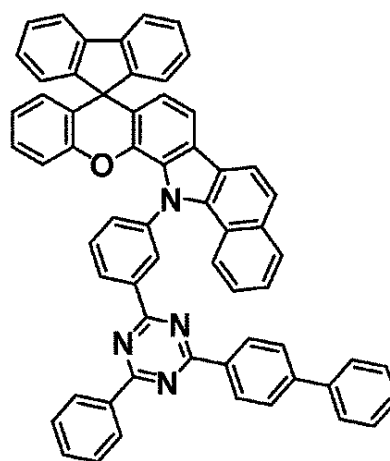
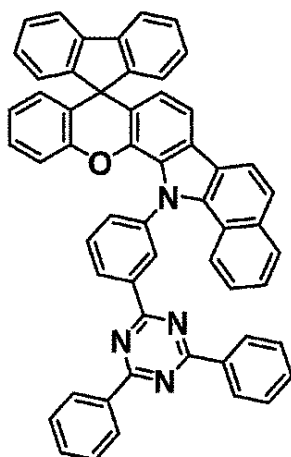
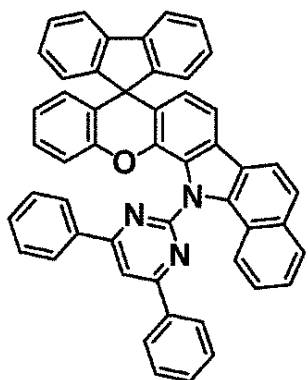
20

30

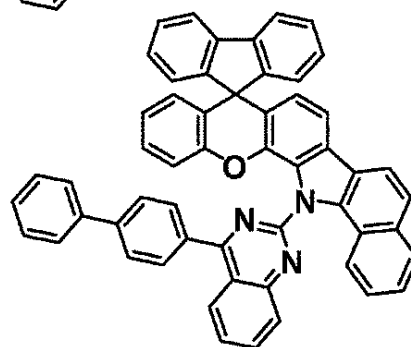
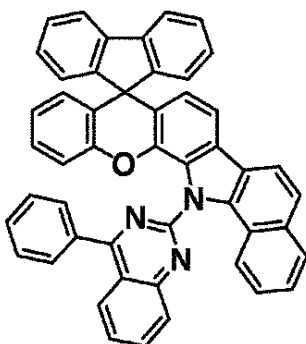
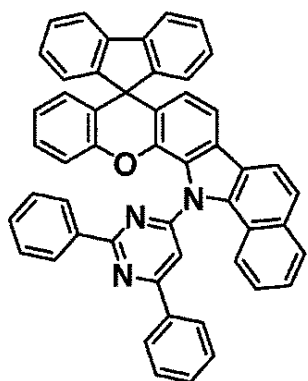
【化 8 3】



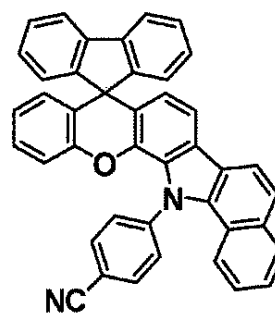
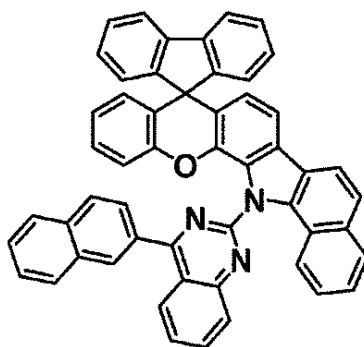
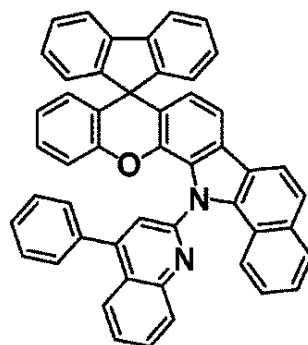
10



20

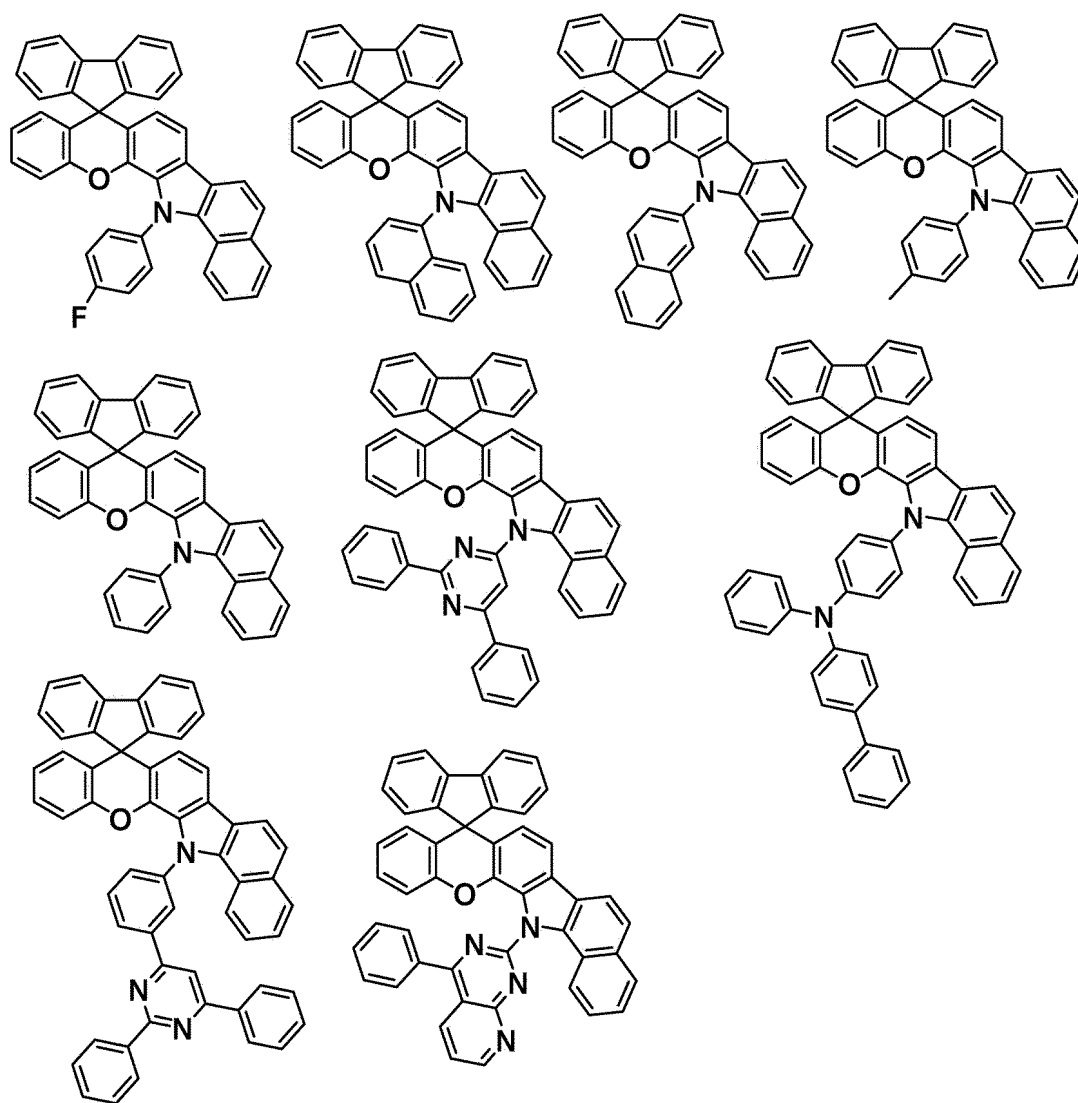


30



40

【化 8 4】

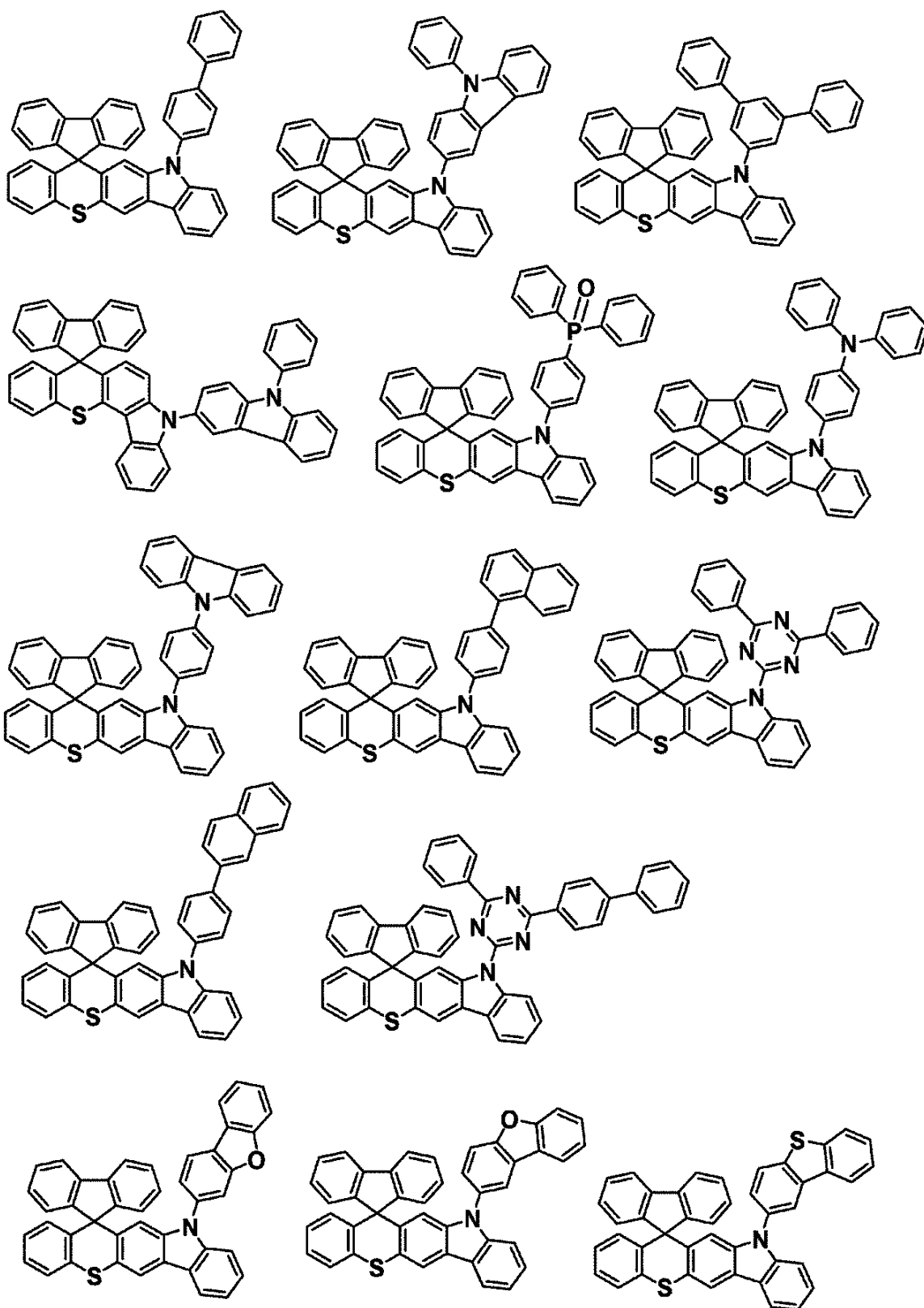


10

20

30

【化 8 5】



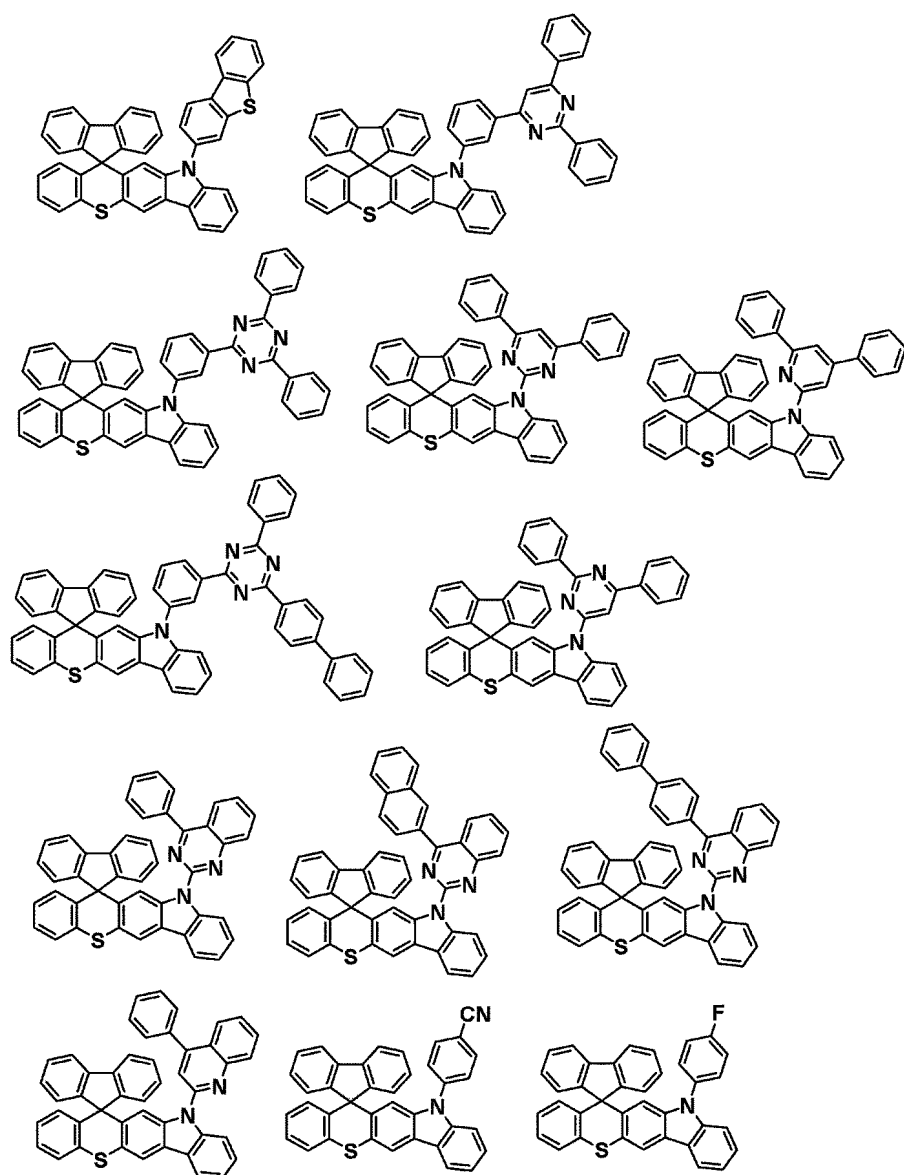
10

20

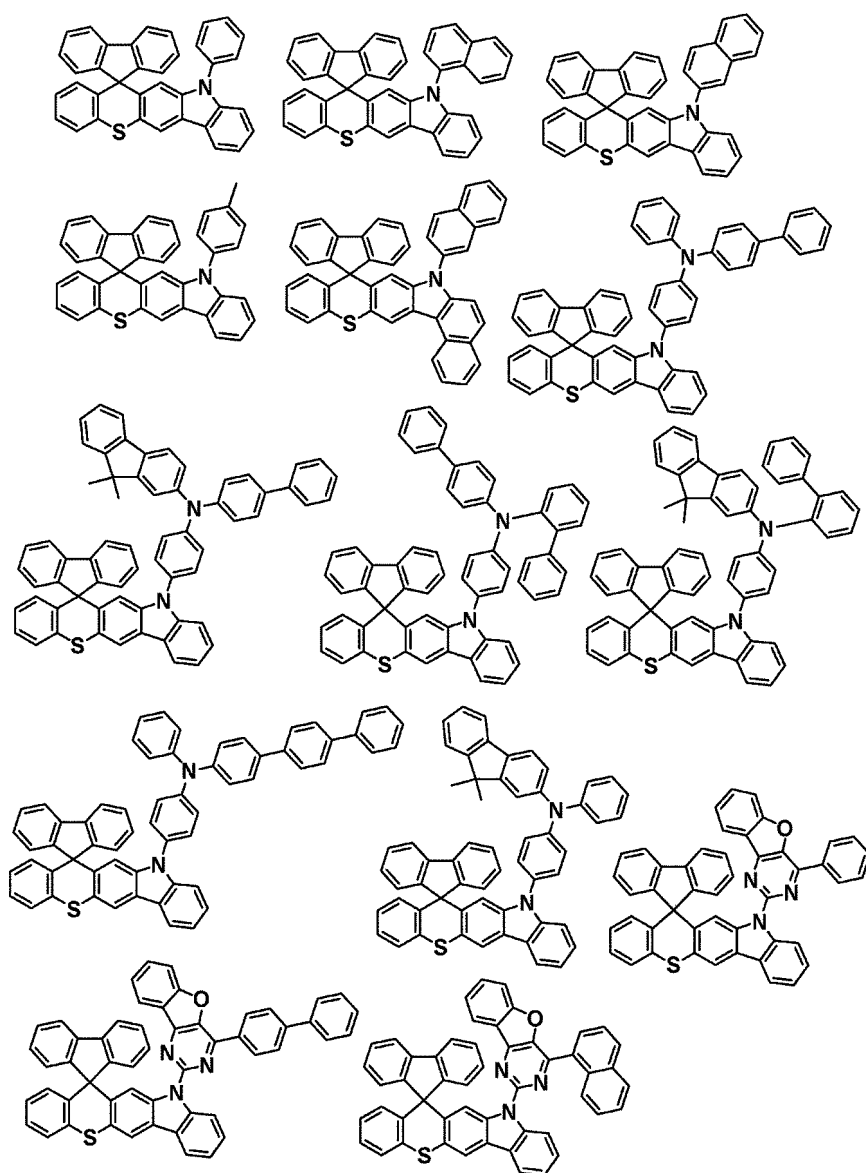
30

40

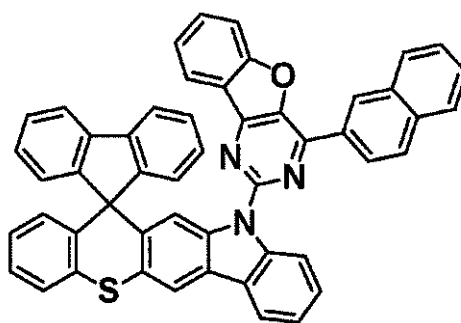
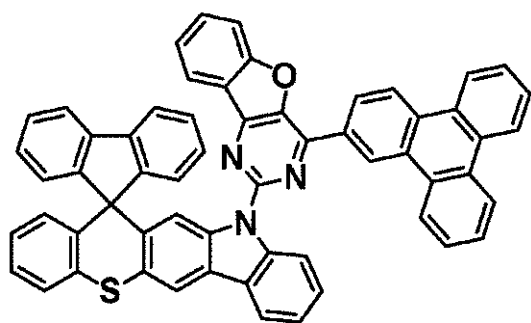
【化 8 6】



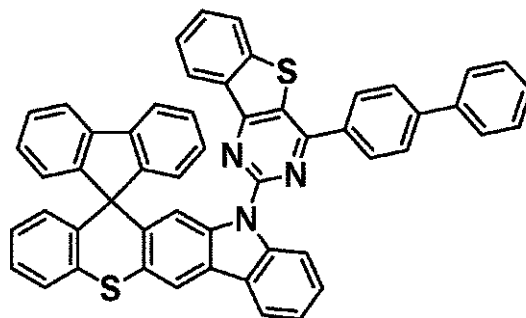
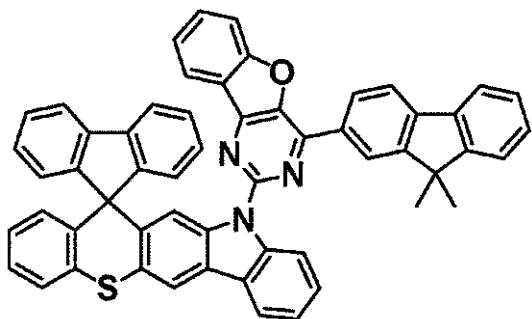
【化 8 7】



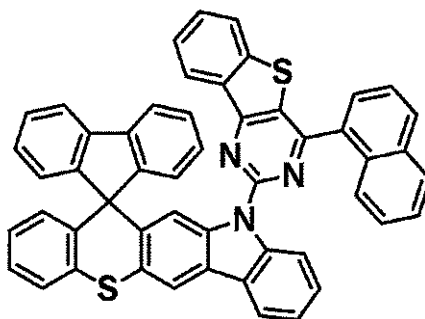
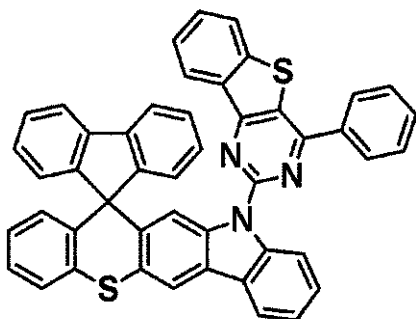
【化 8 8】



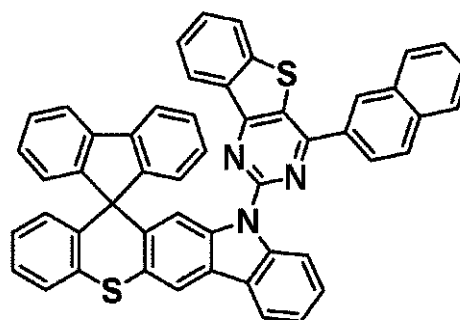
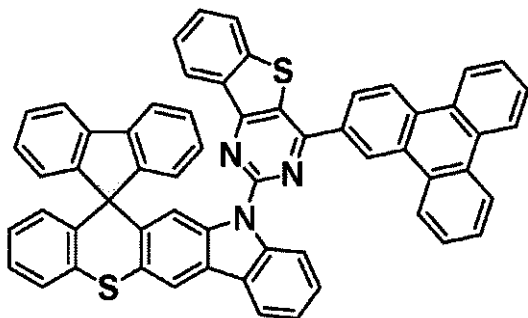
10



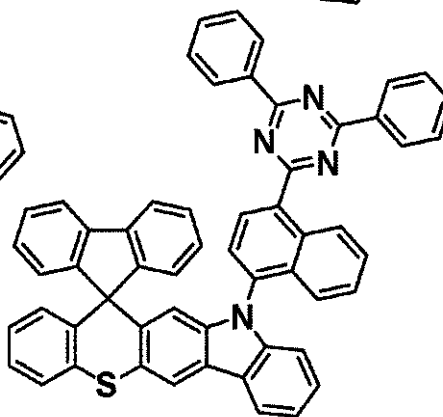
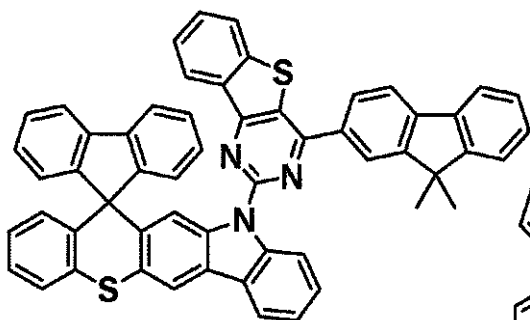
20



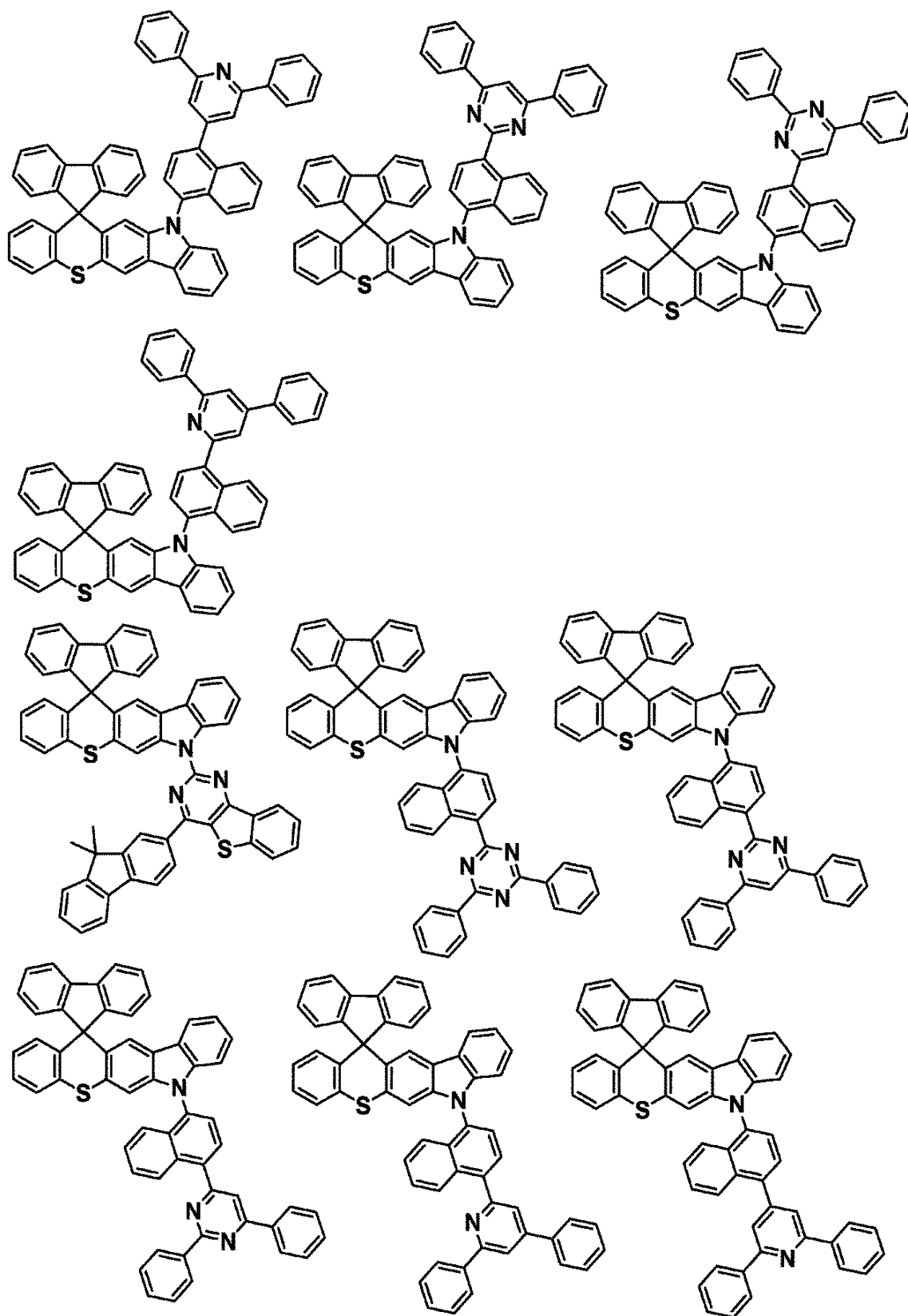
30



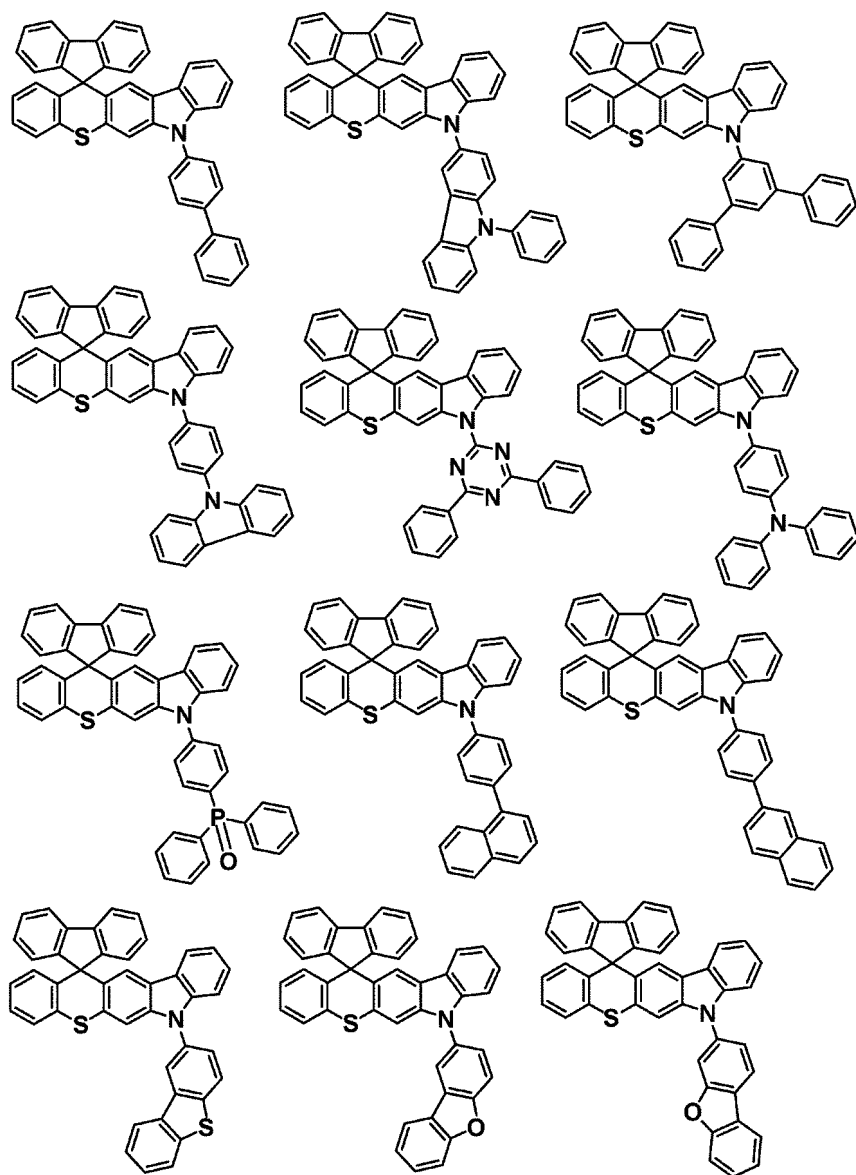
40



【化 8 9】



【化 9 0】

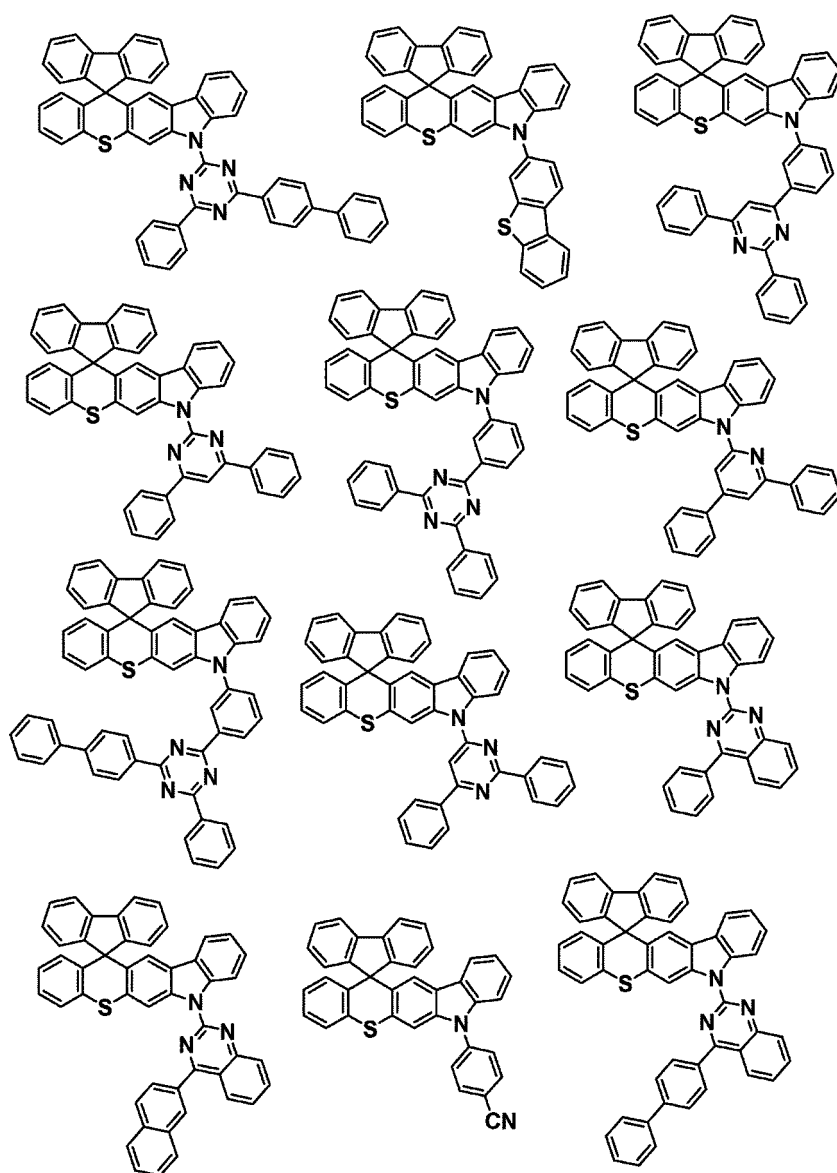


10

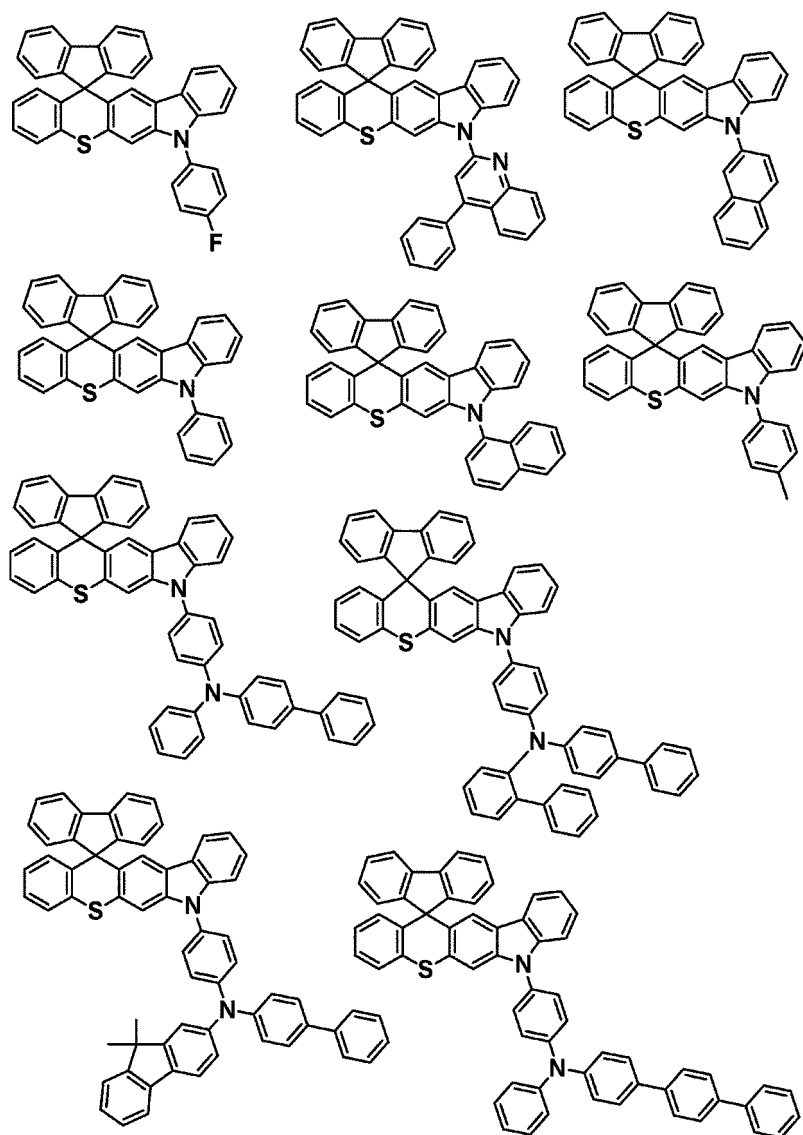
20

30

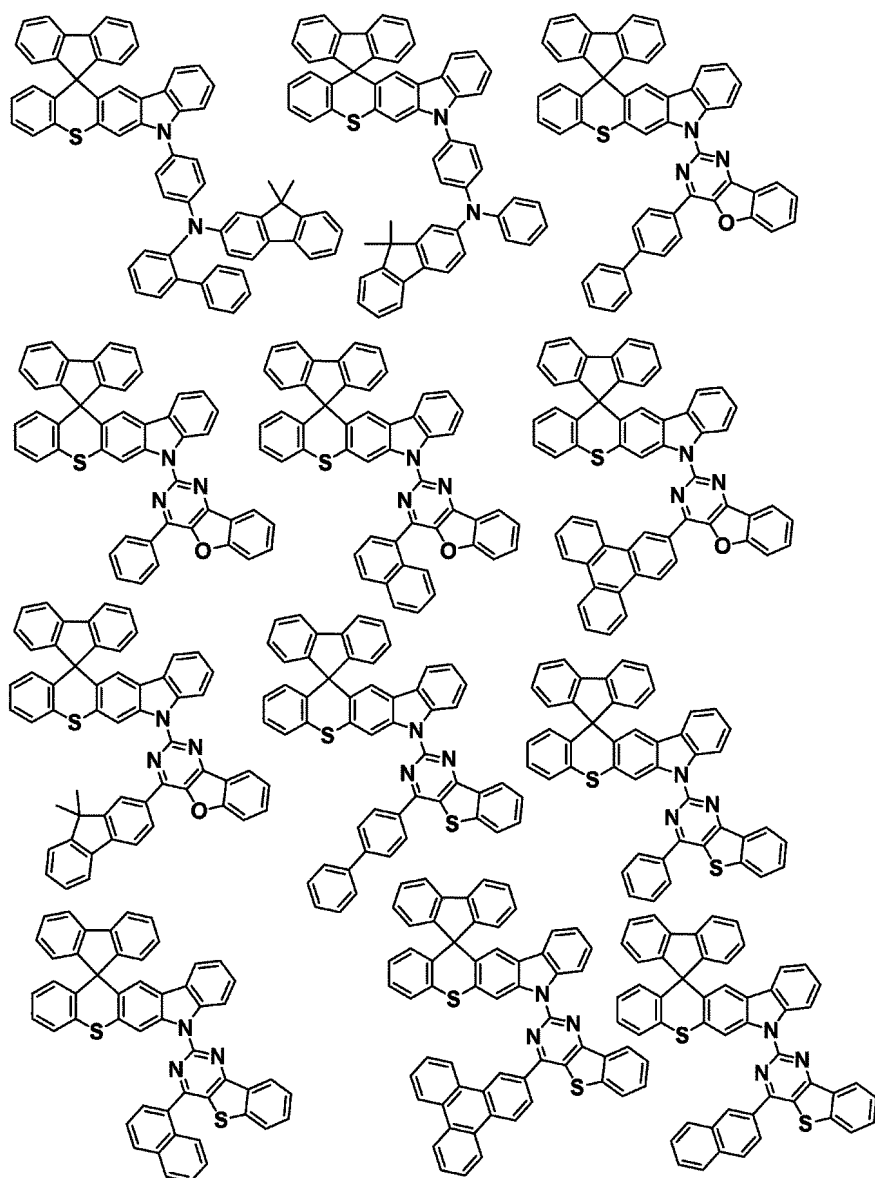
【化 9 1】



【化 9 2】



【化 9 3】

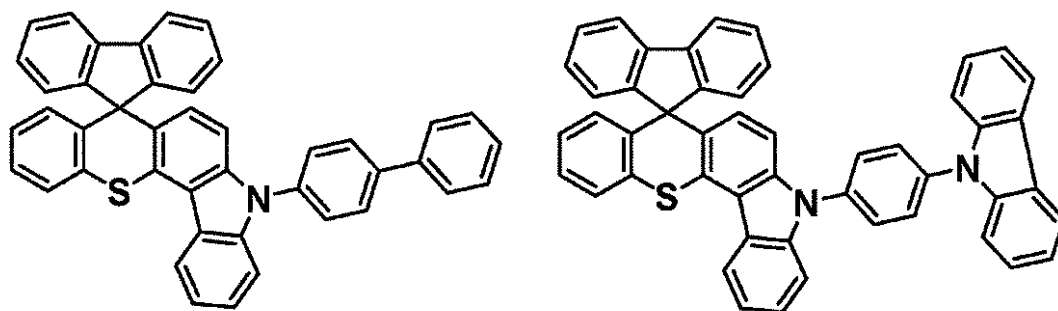


10

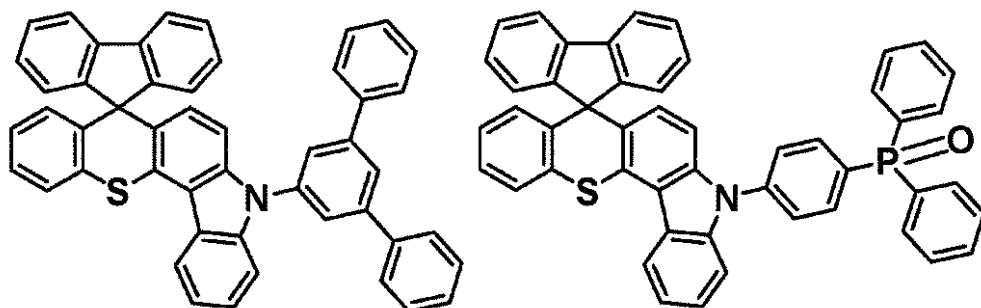
20

30

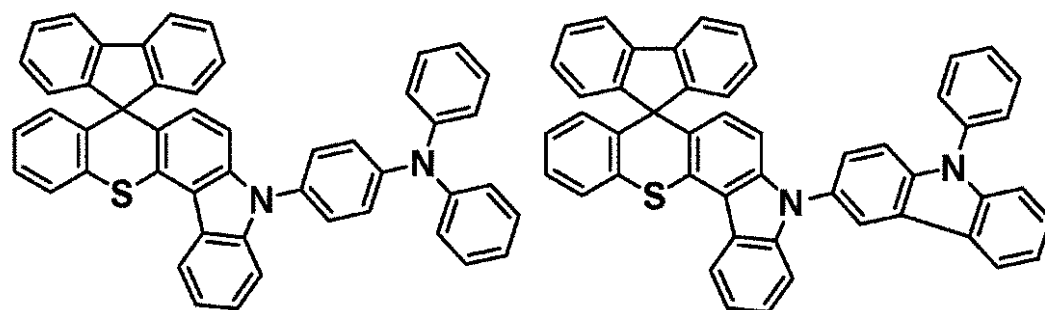
【化 9 4】



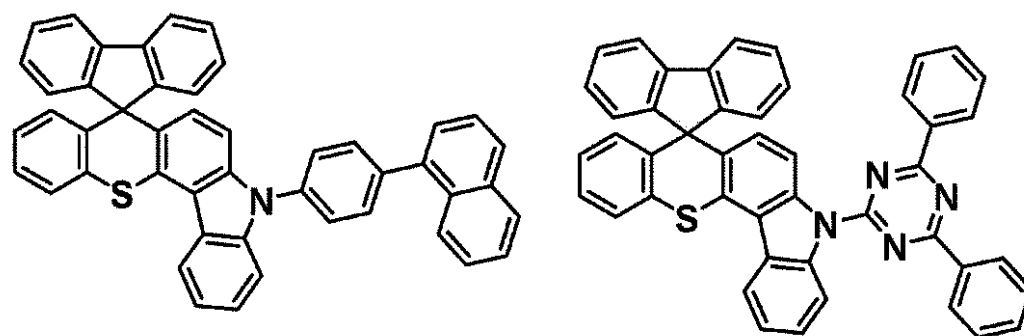
10



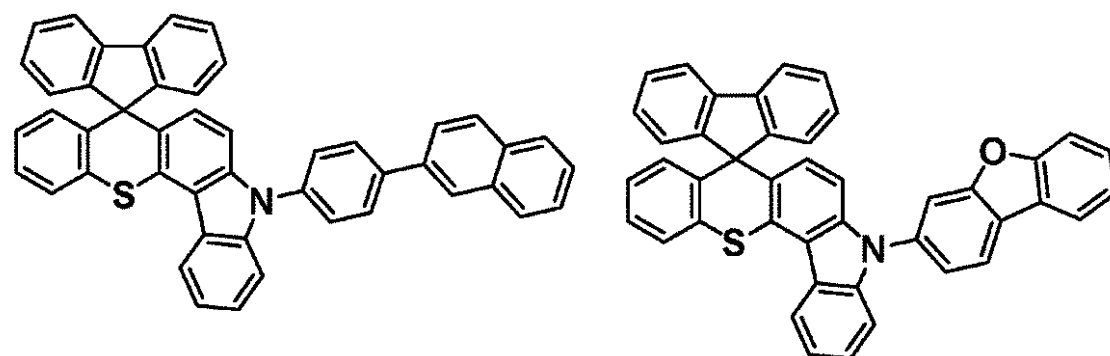
20



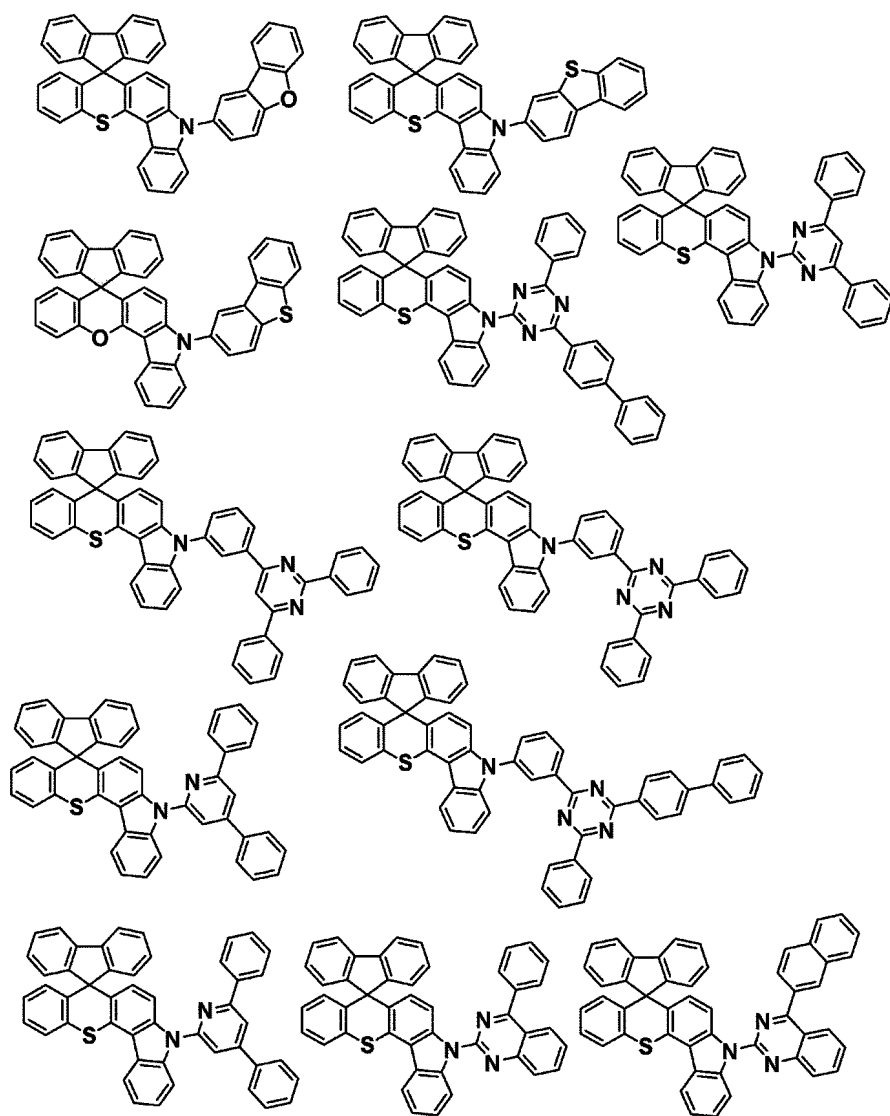
30



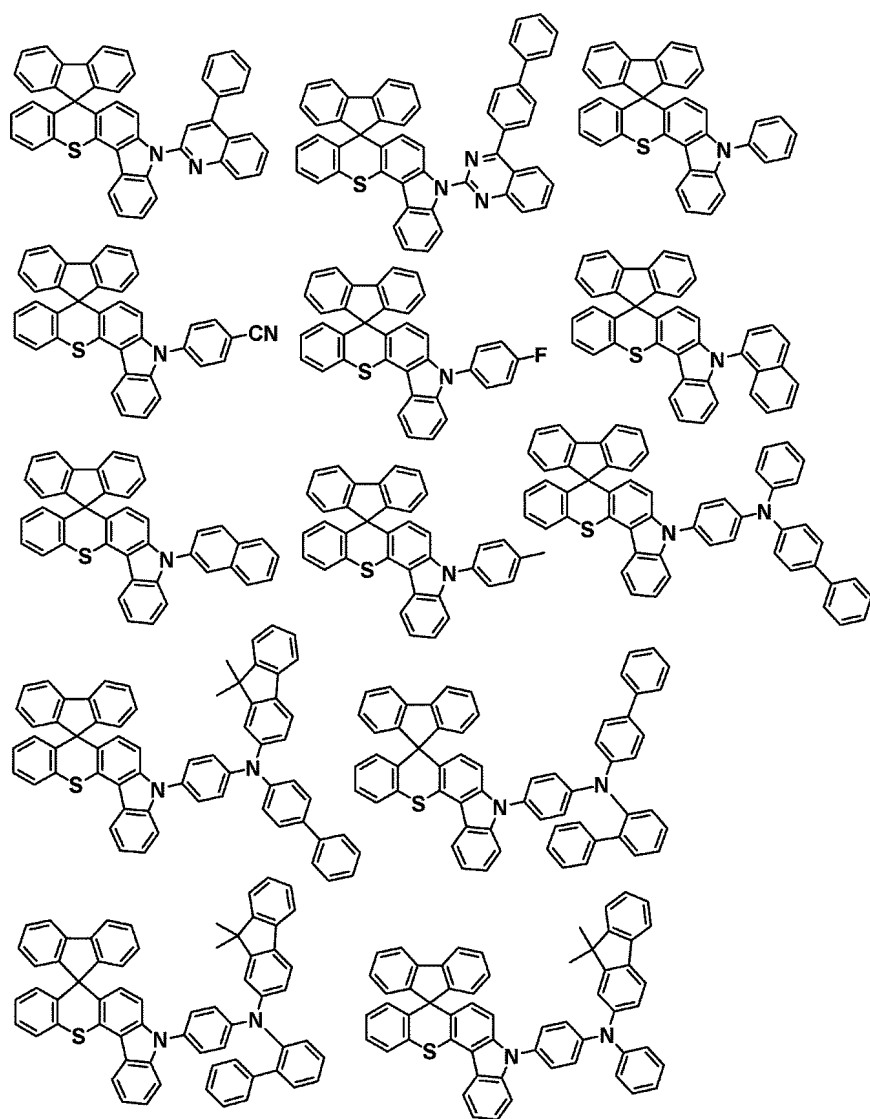
40



【化 9 5】



【化 9 6】

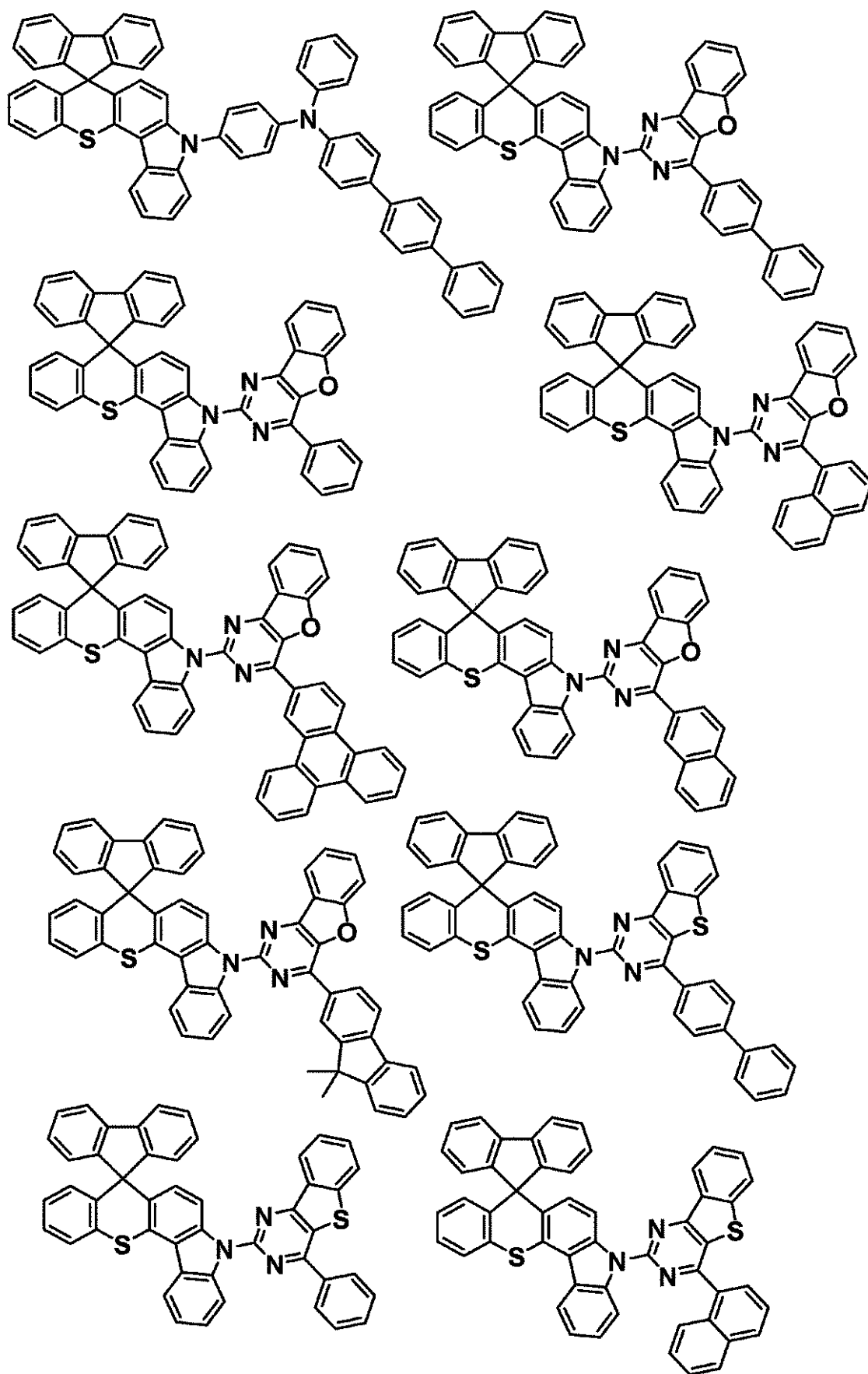


10

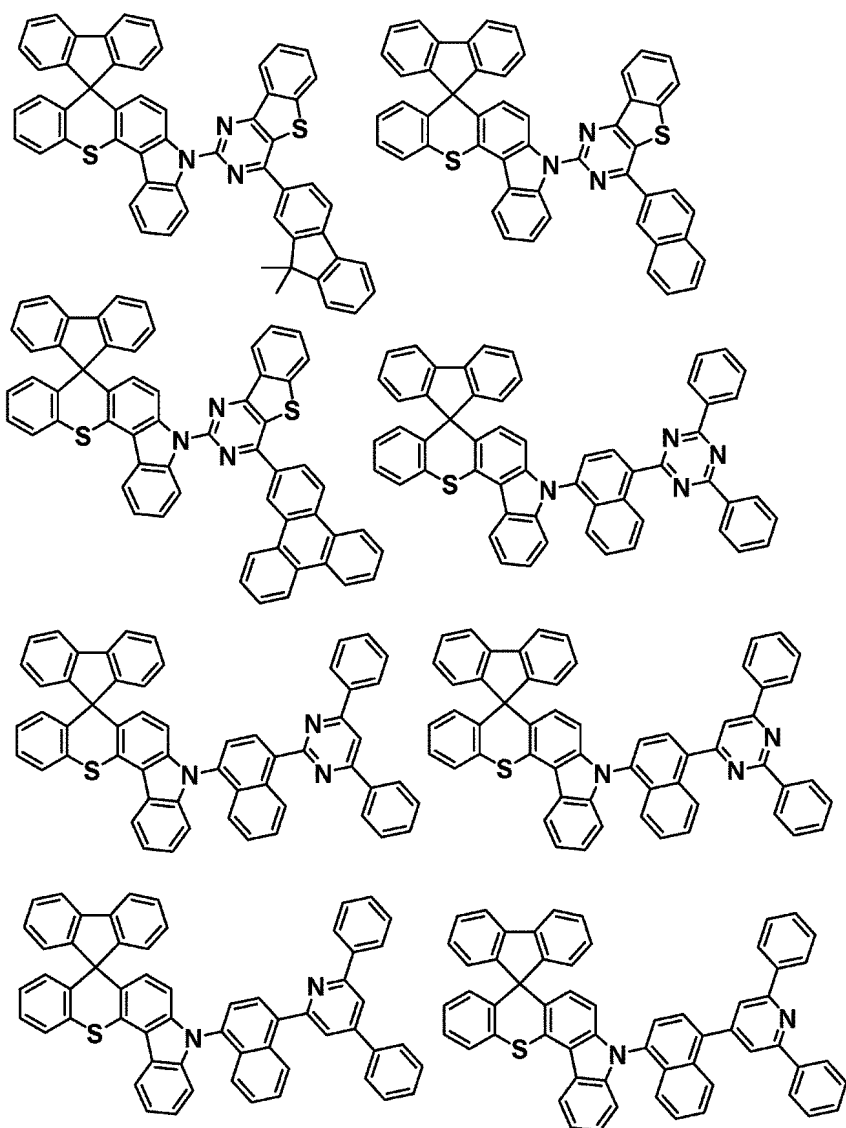
20

30

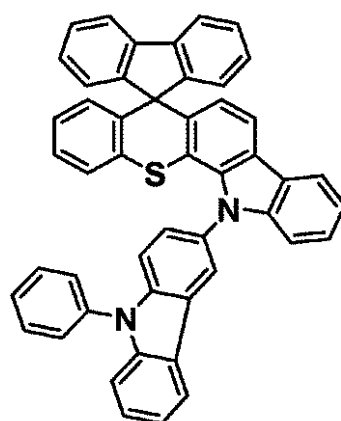
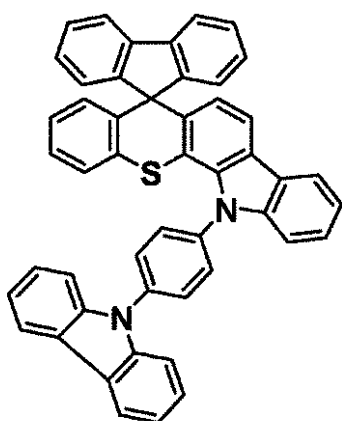
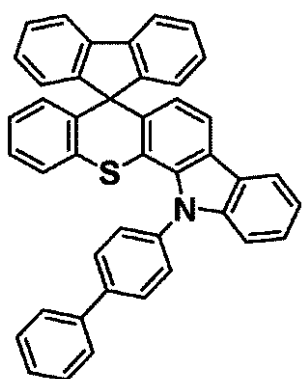
【化 9 7】



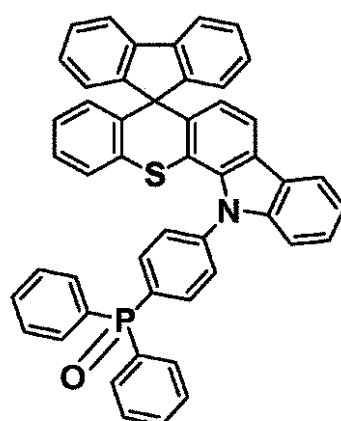
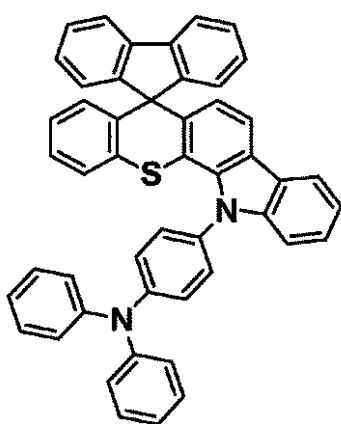
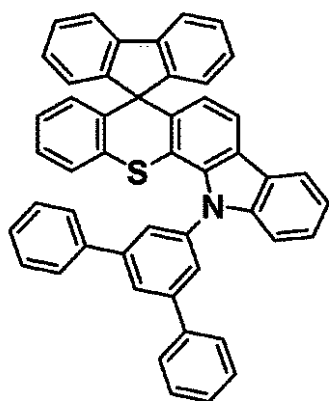
【化 9 8】



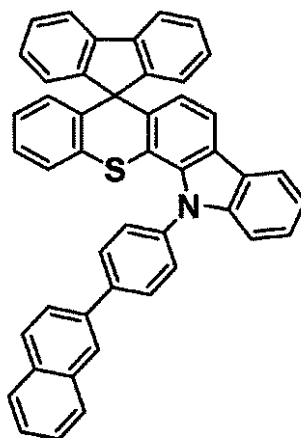
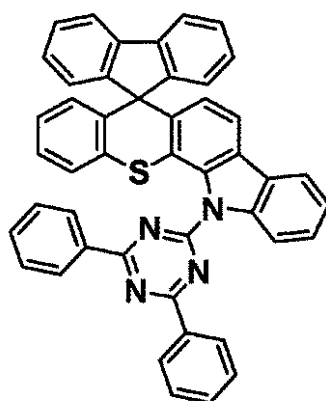
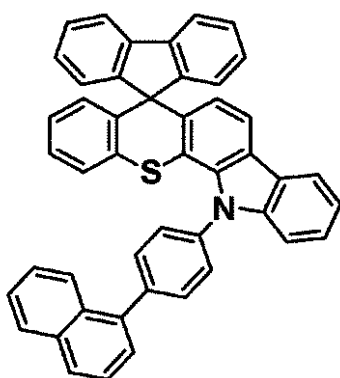
【化 9 9】



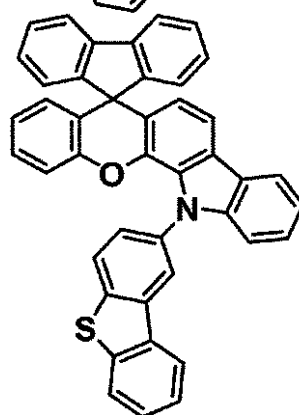
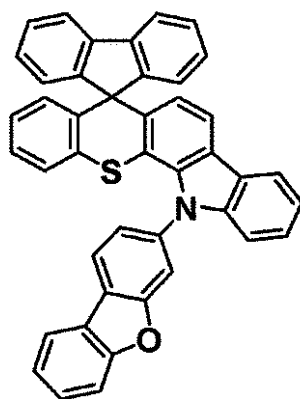
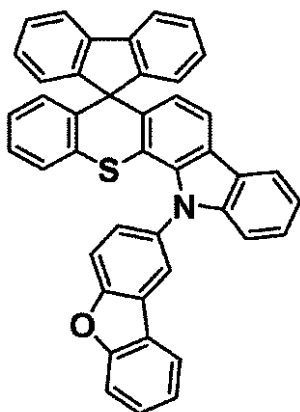
10



20

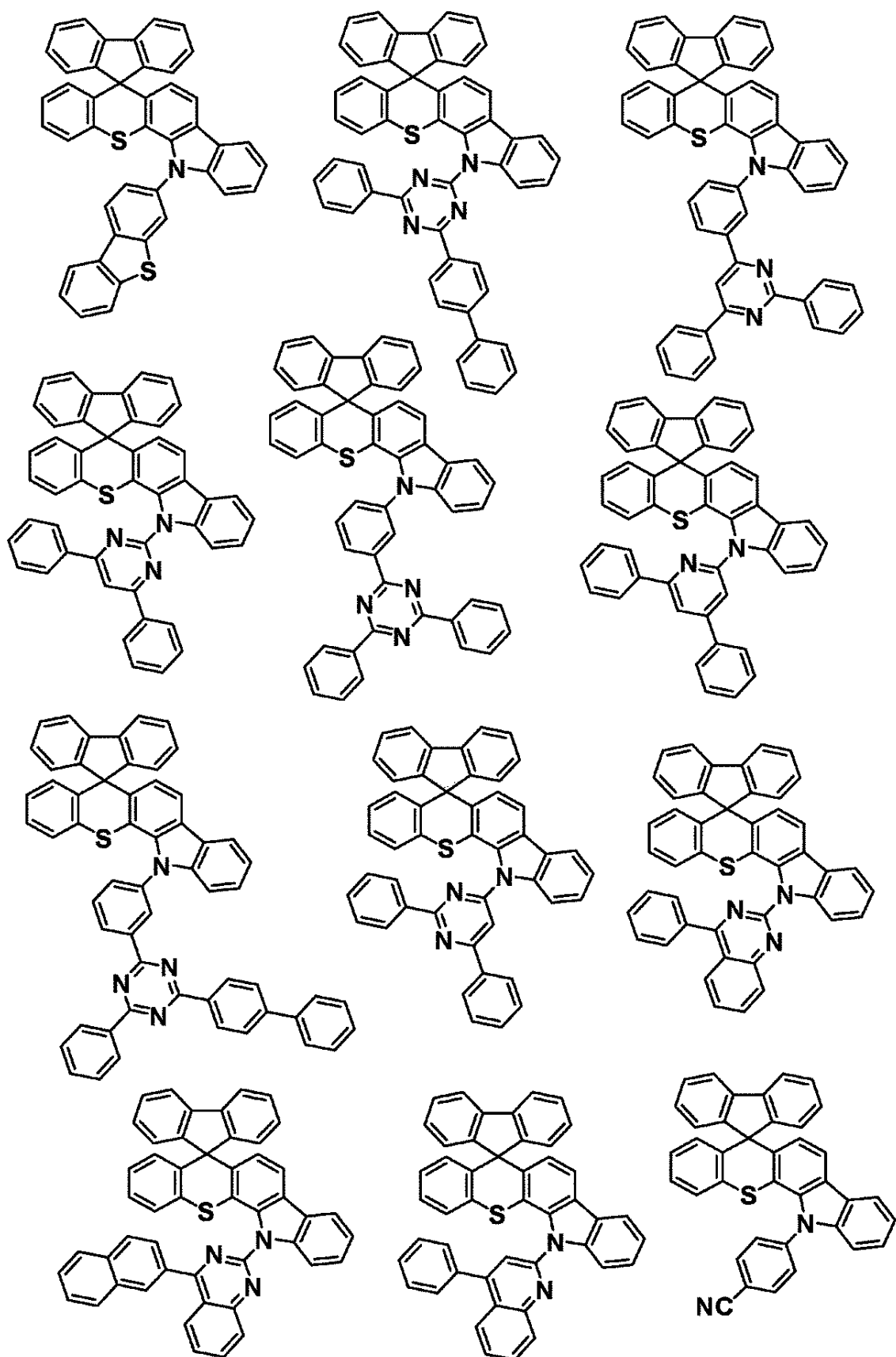


30

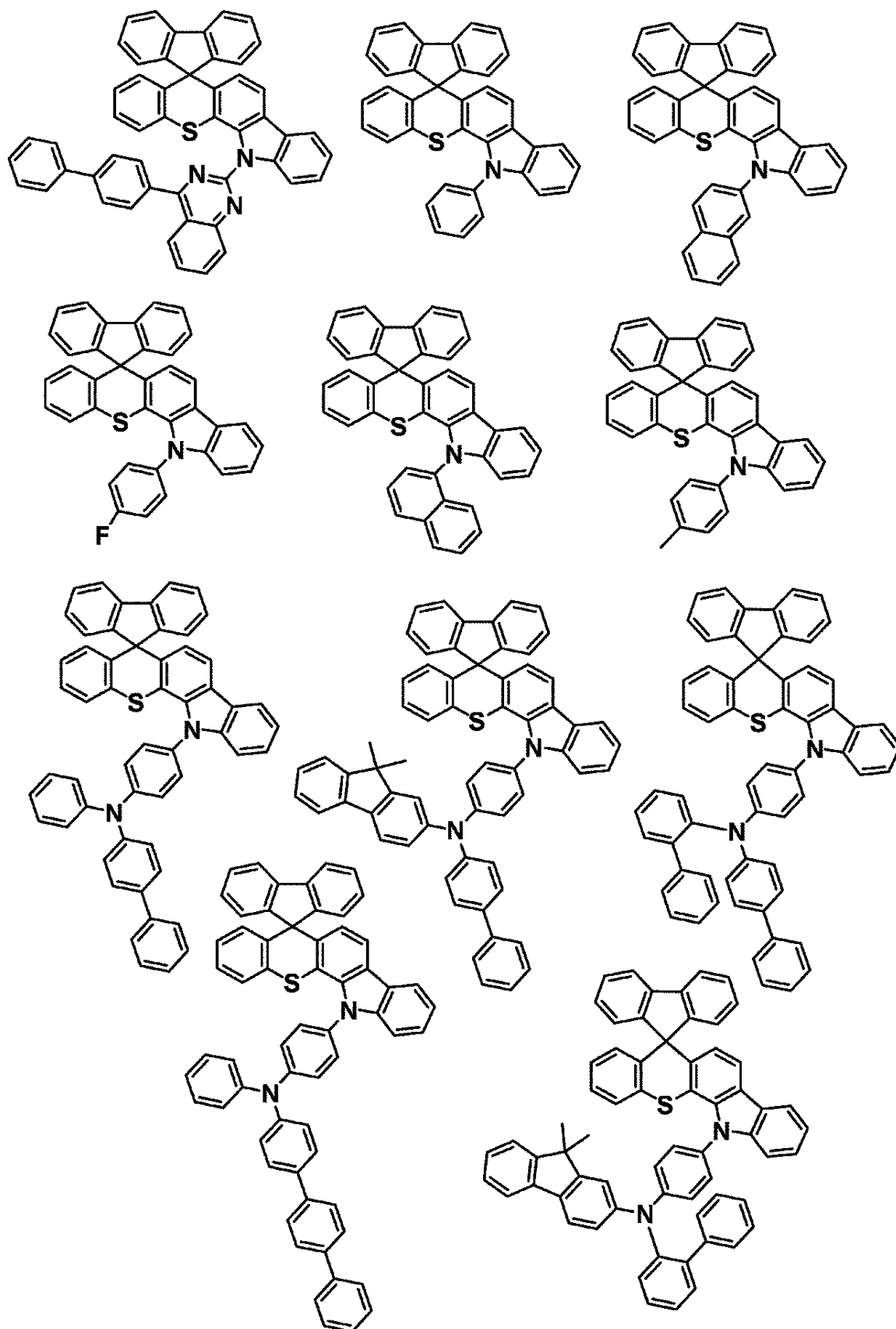


40

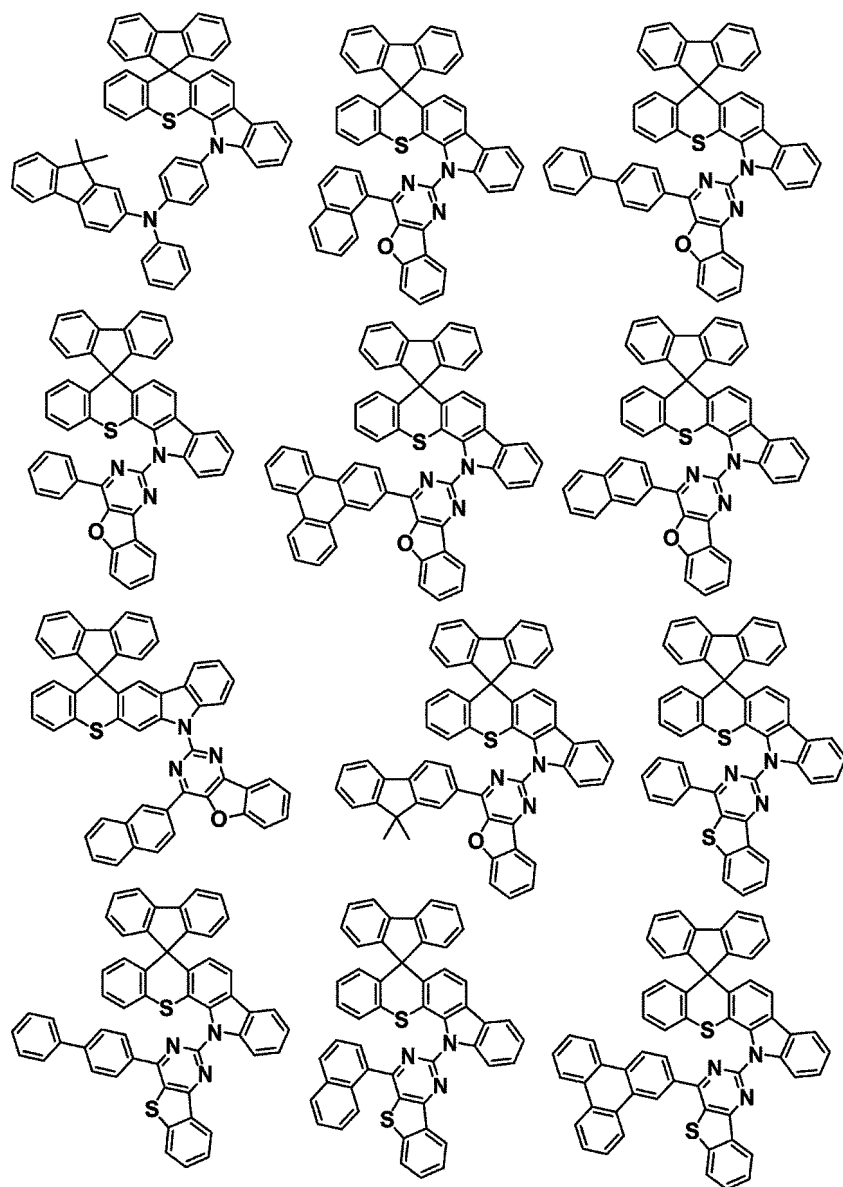
【化 1 0 0】



【化 1 0 1】



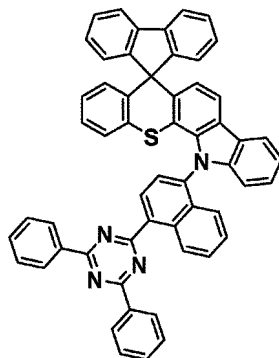
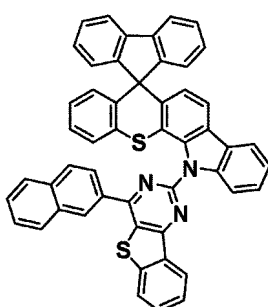
【化 1 0 2】



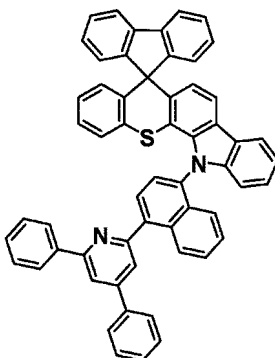
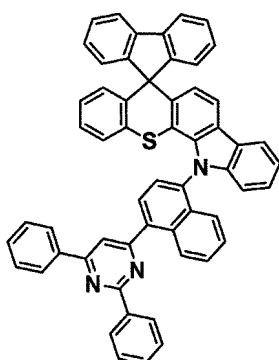
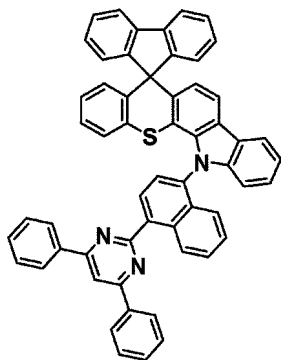
10

20

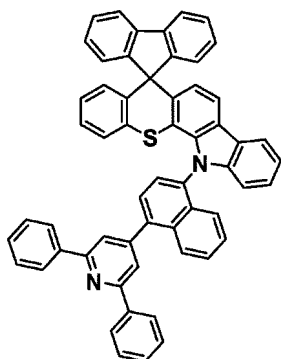
30



10

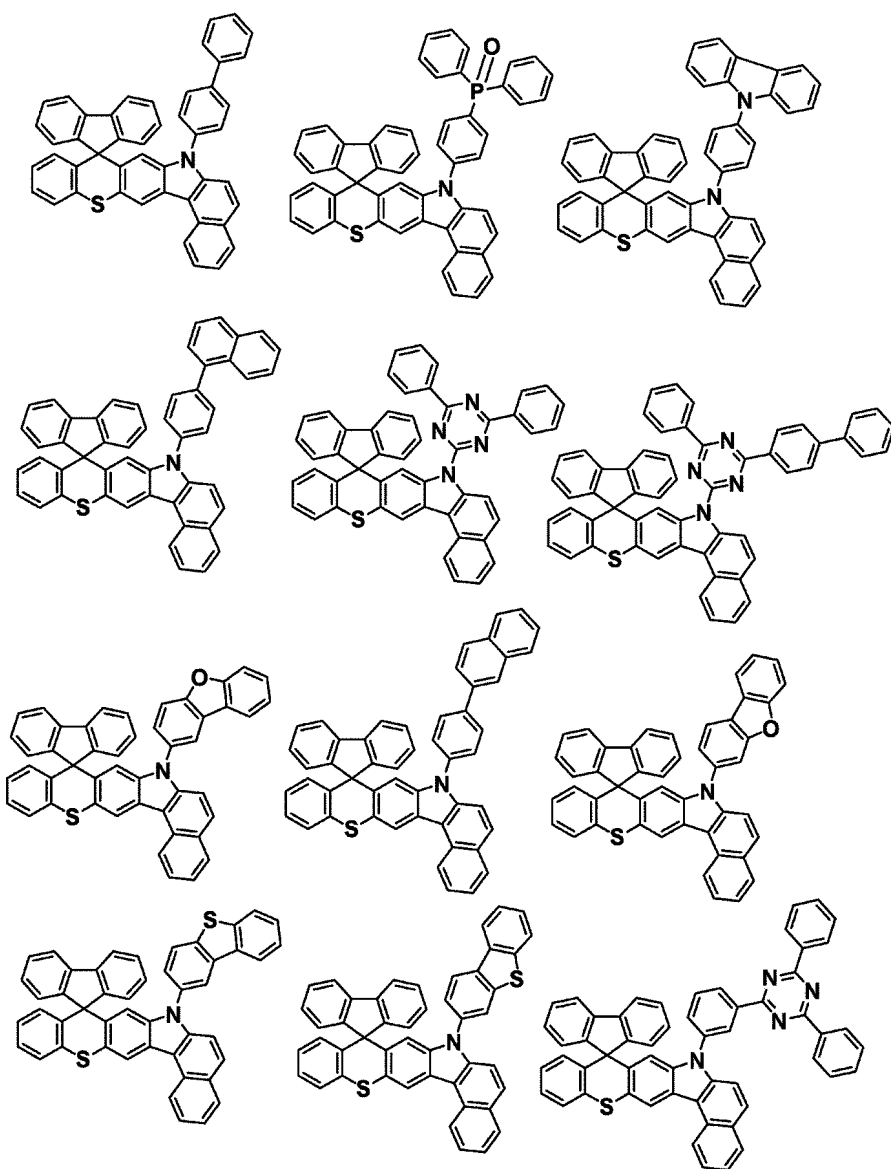


20



30

【化 1 0 4】

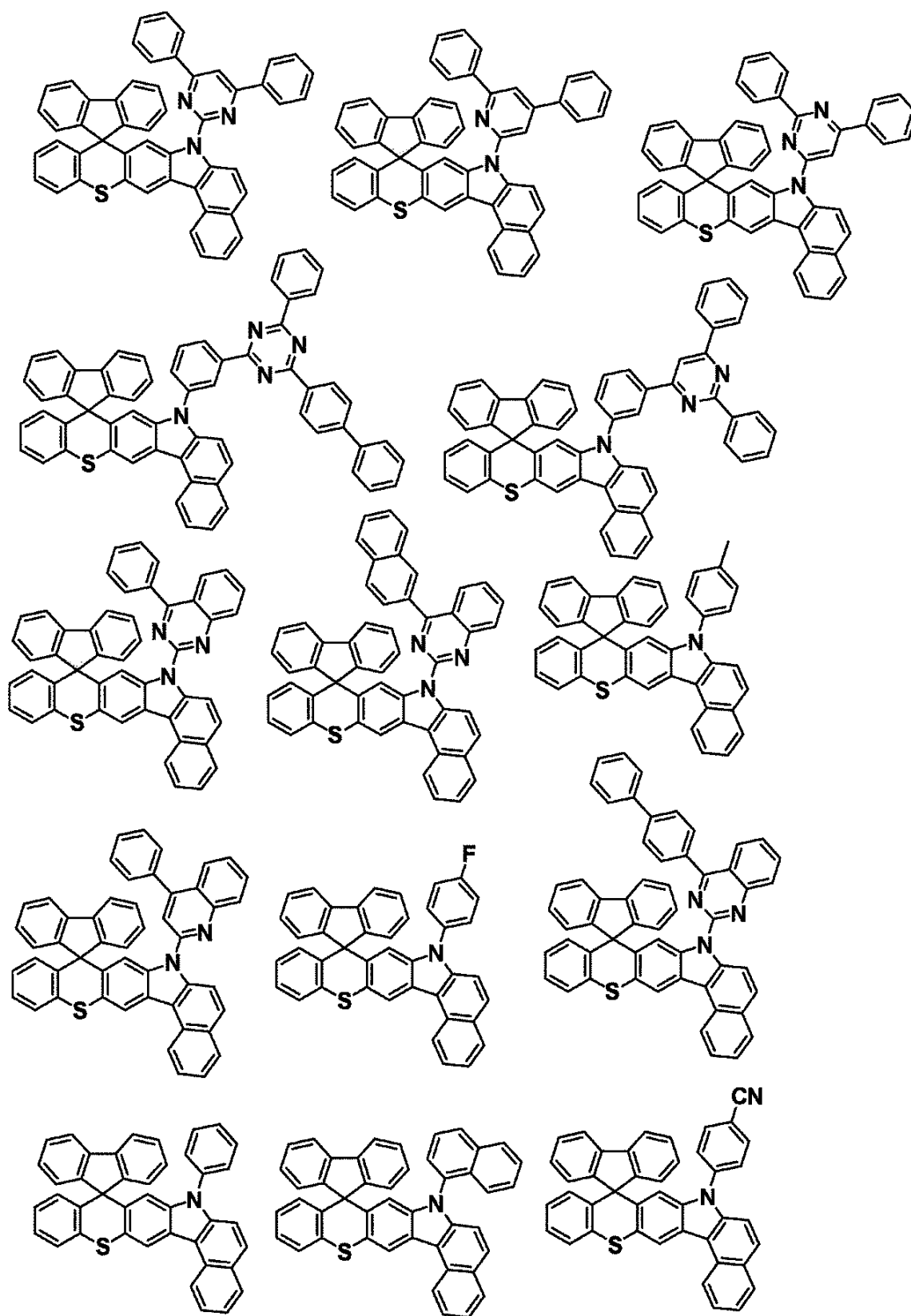


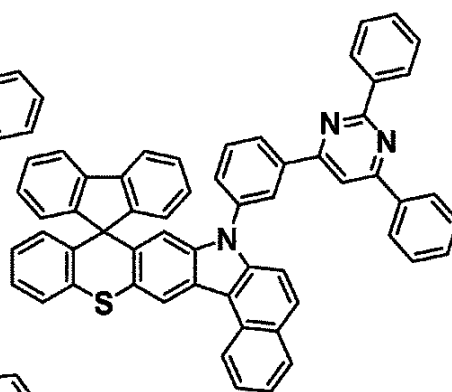
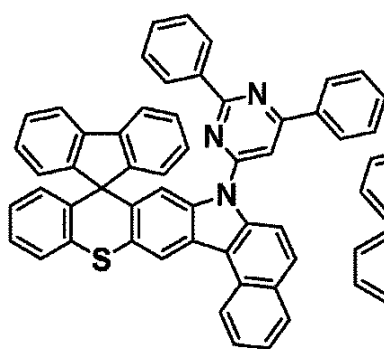
10

20

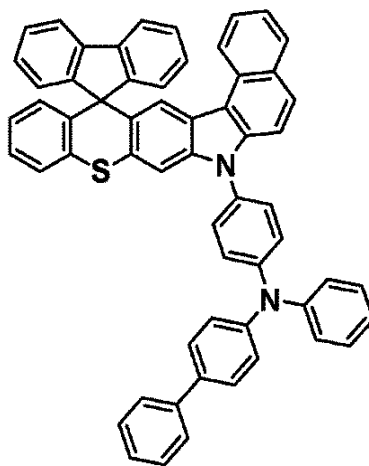
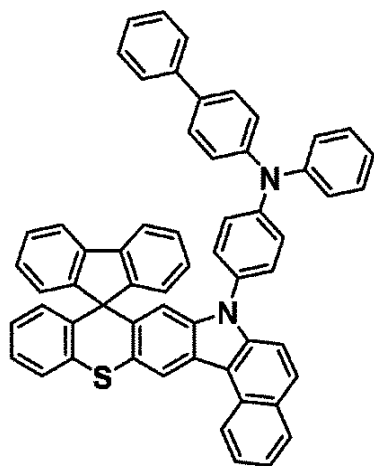
30

【化 1 0 5】

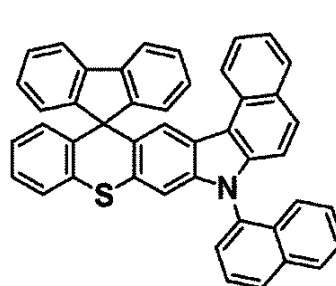
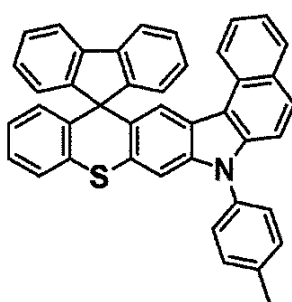
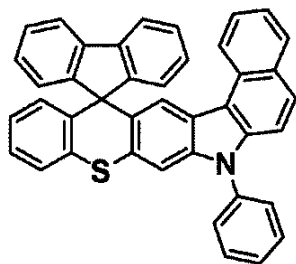




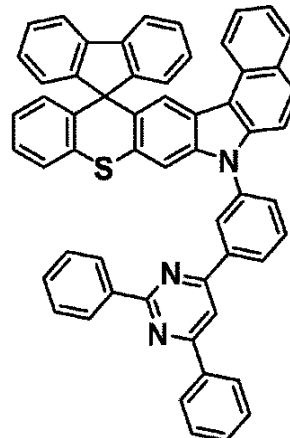
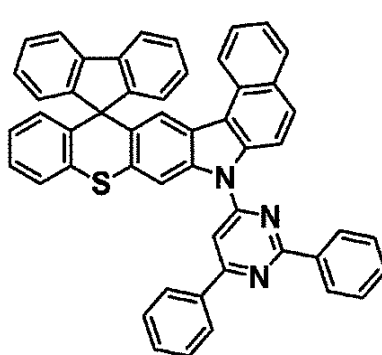
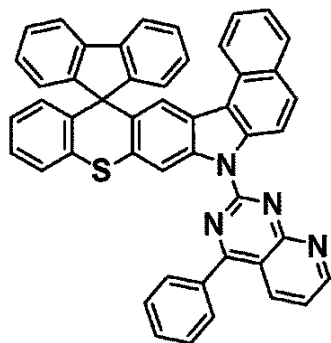
10



20

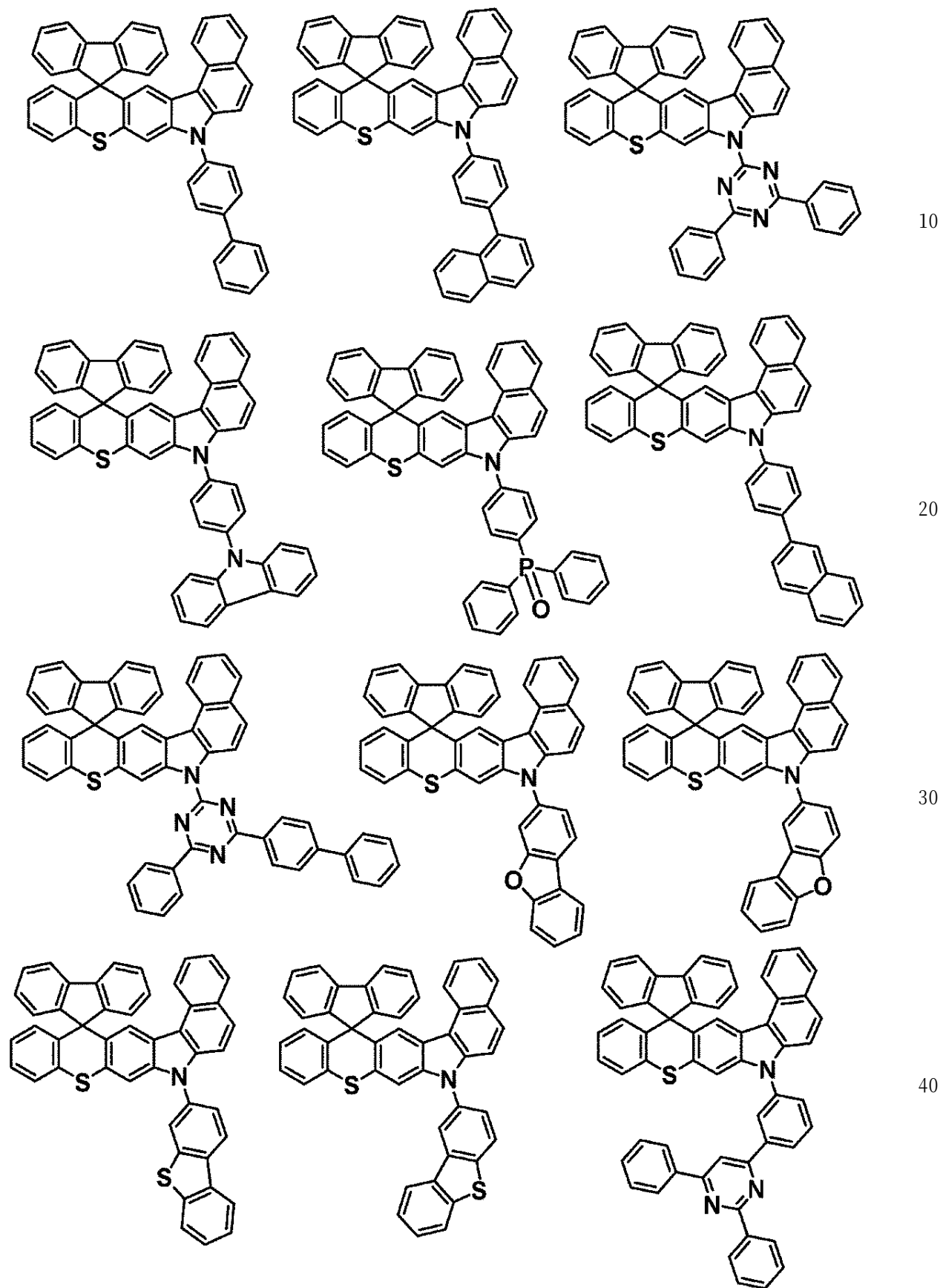


30

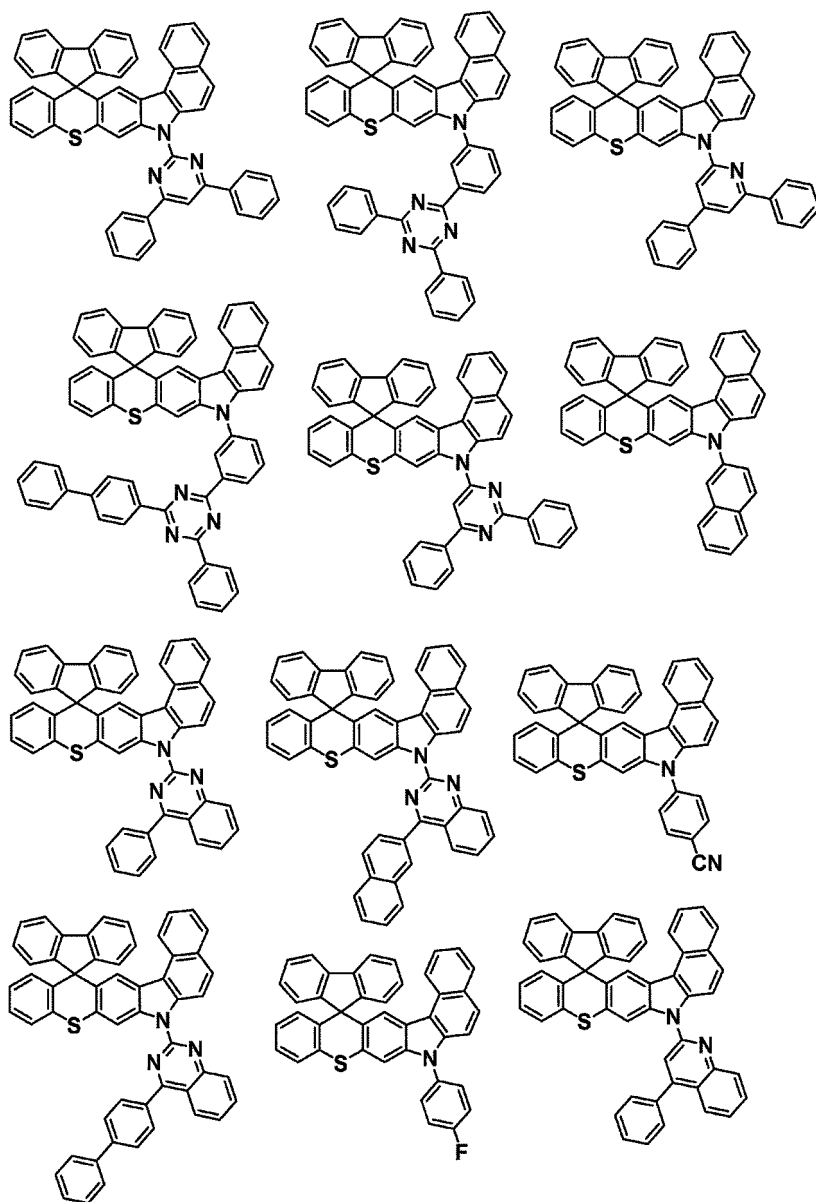


40

【化 1 0 7】



【化 1 0 8】

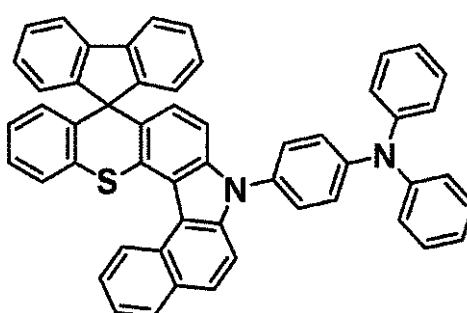
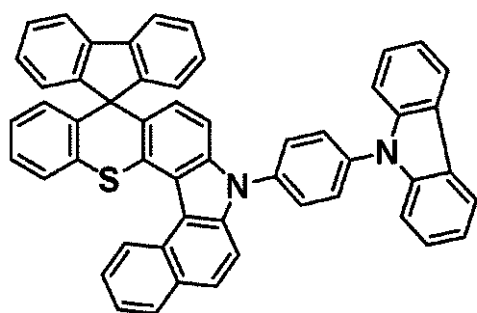


10

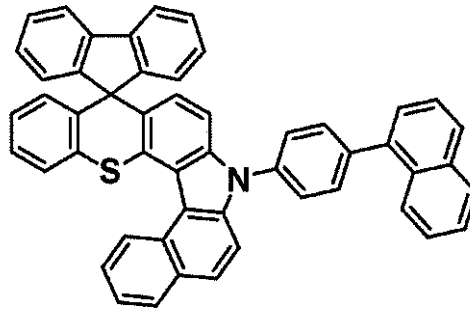
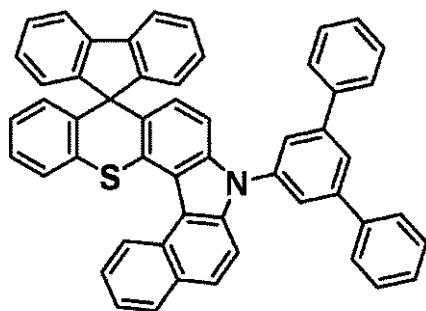
20

30

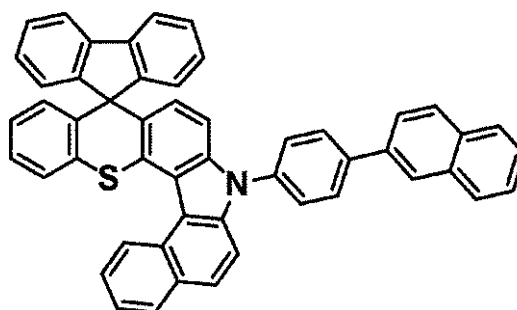
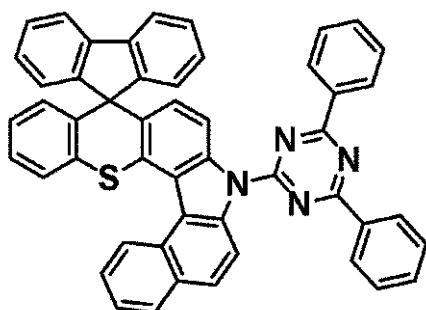
【化 1 0 9】



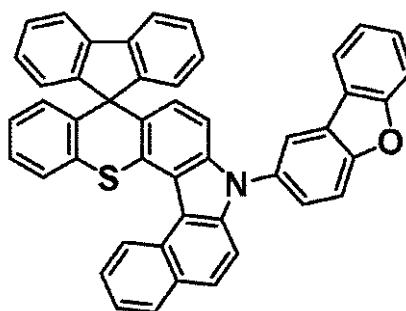
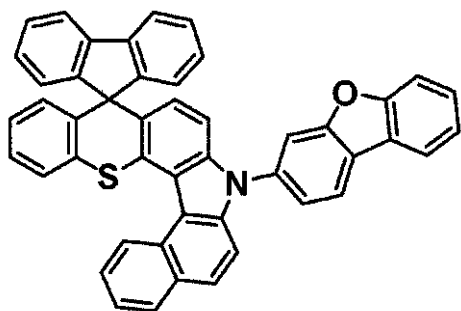
10



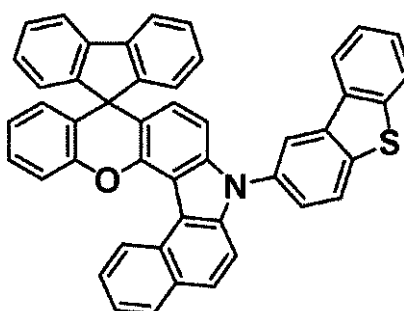
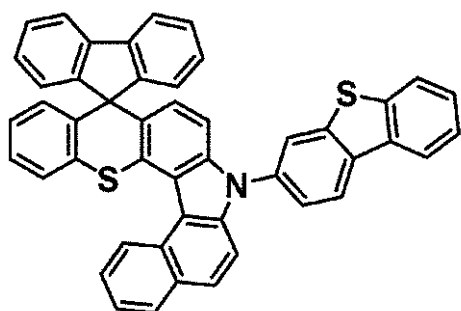
20



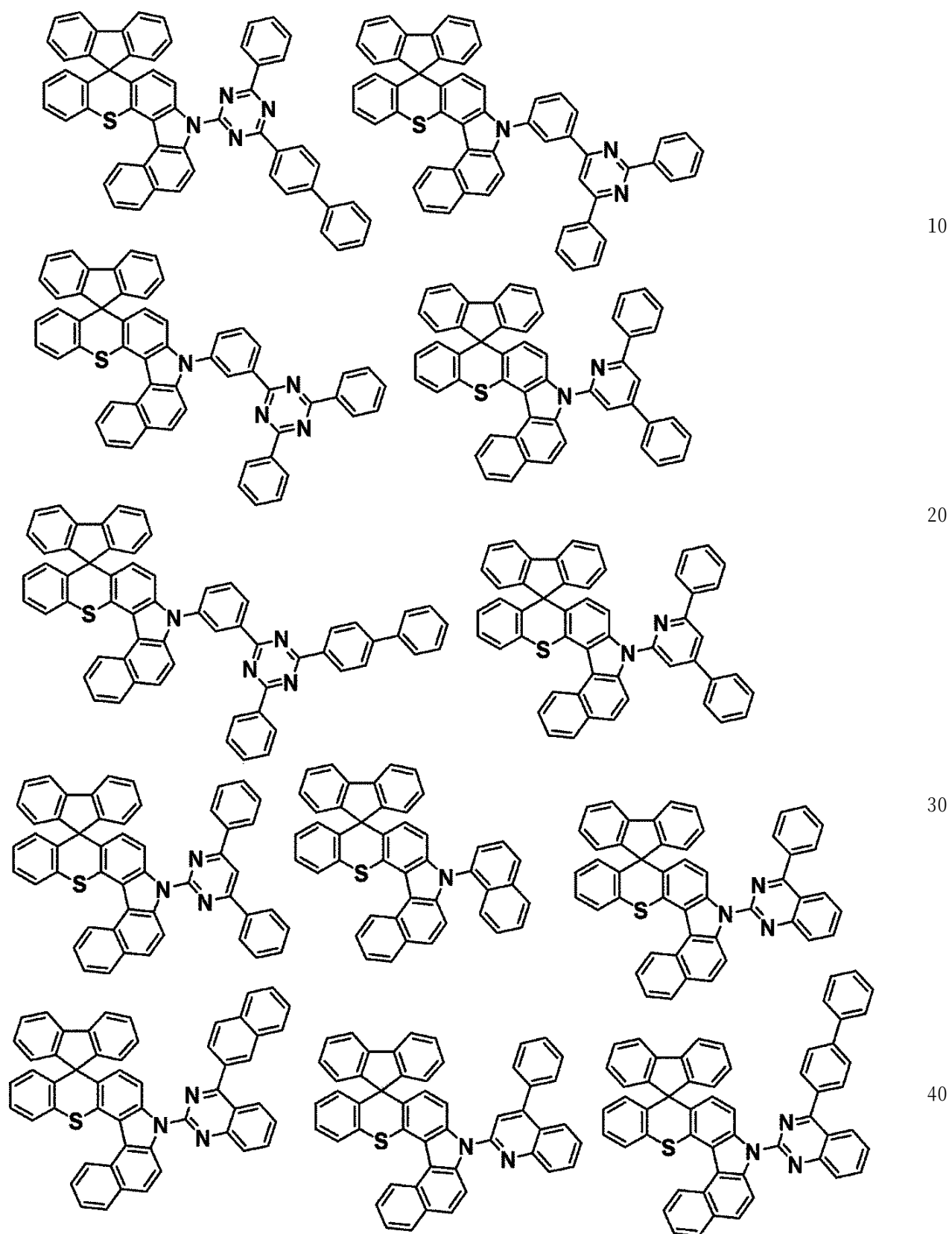
30



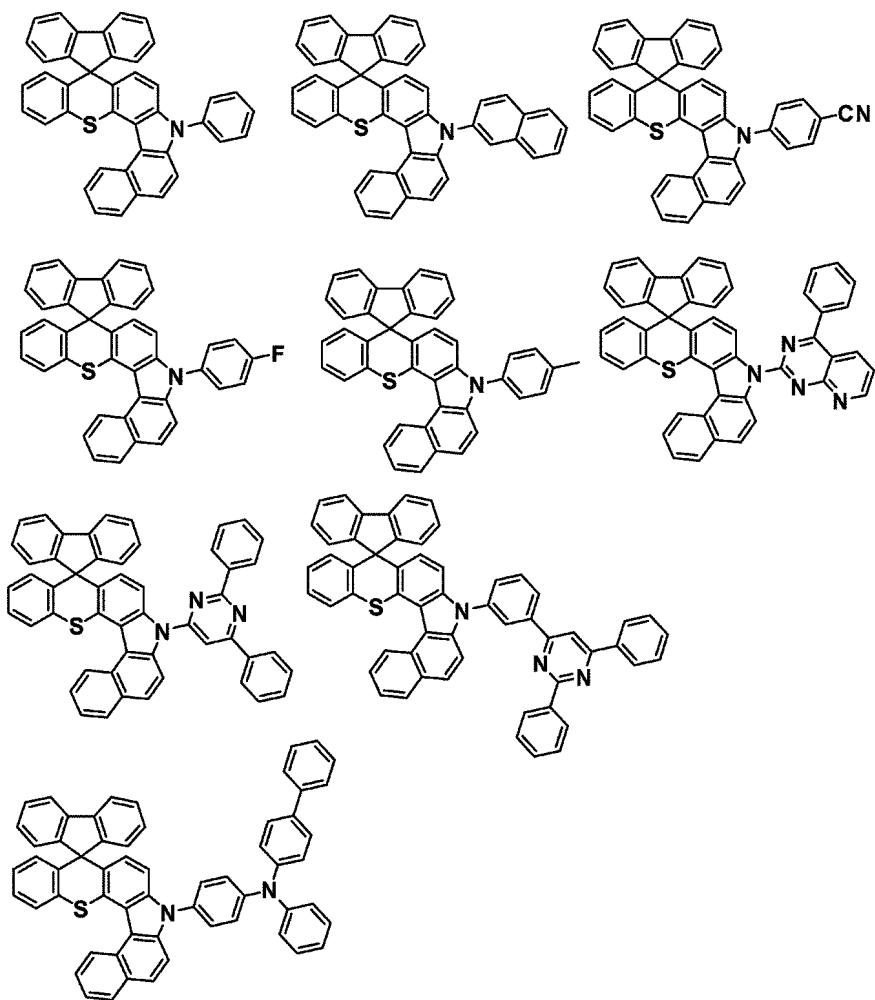
40



【化 1 1 0】



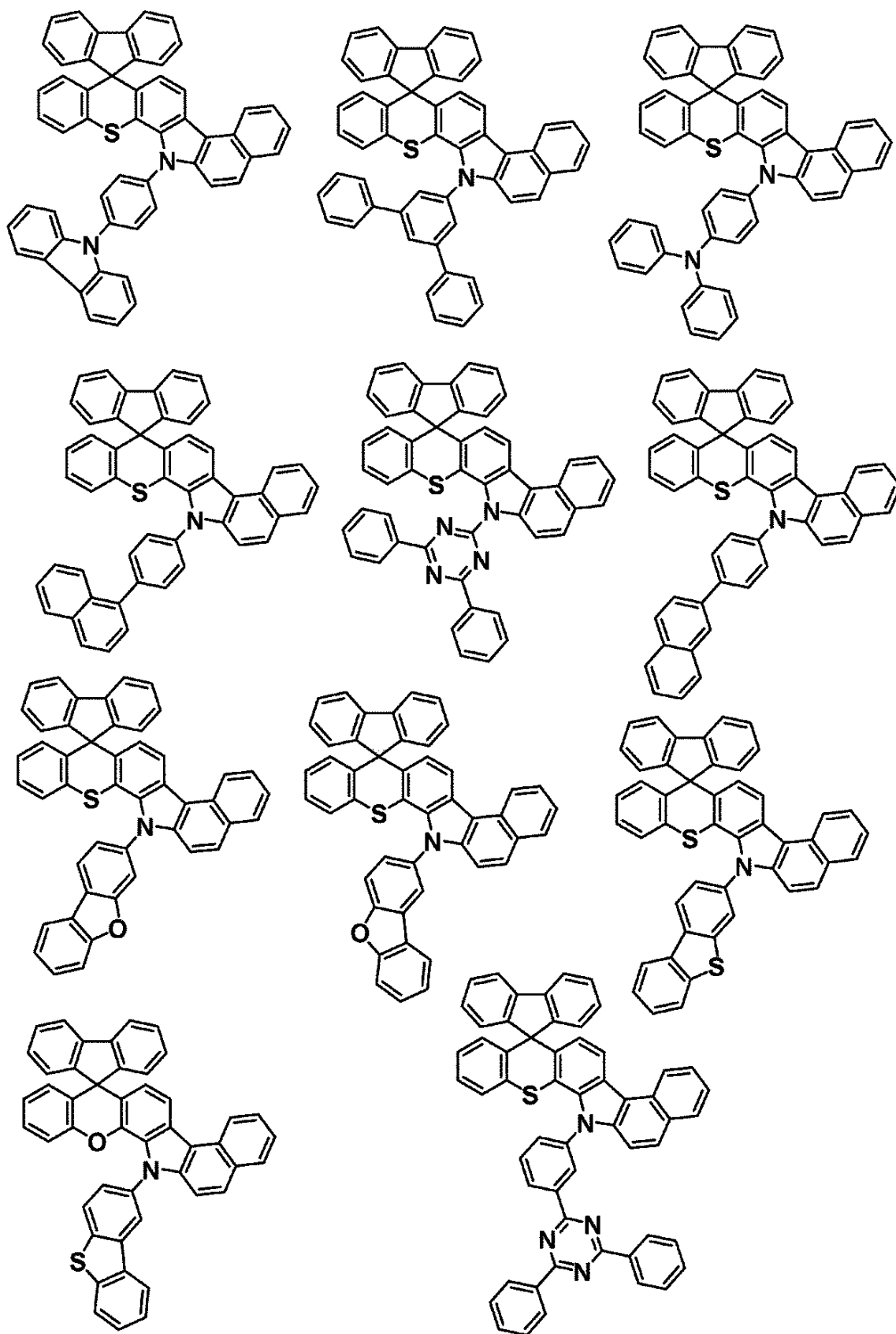
【化 1 1 1】



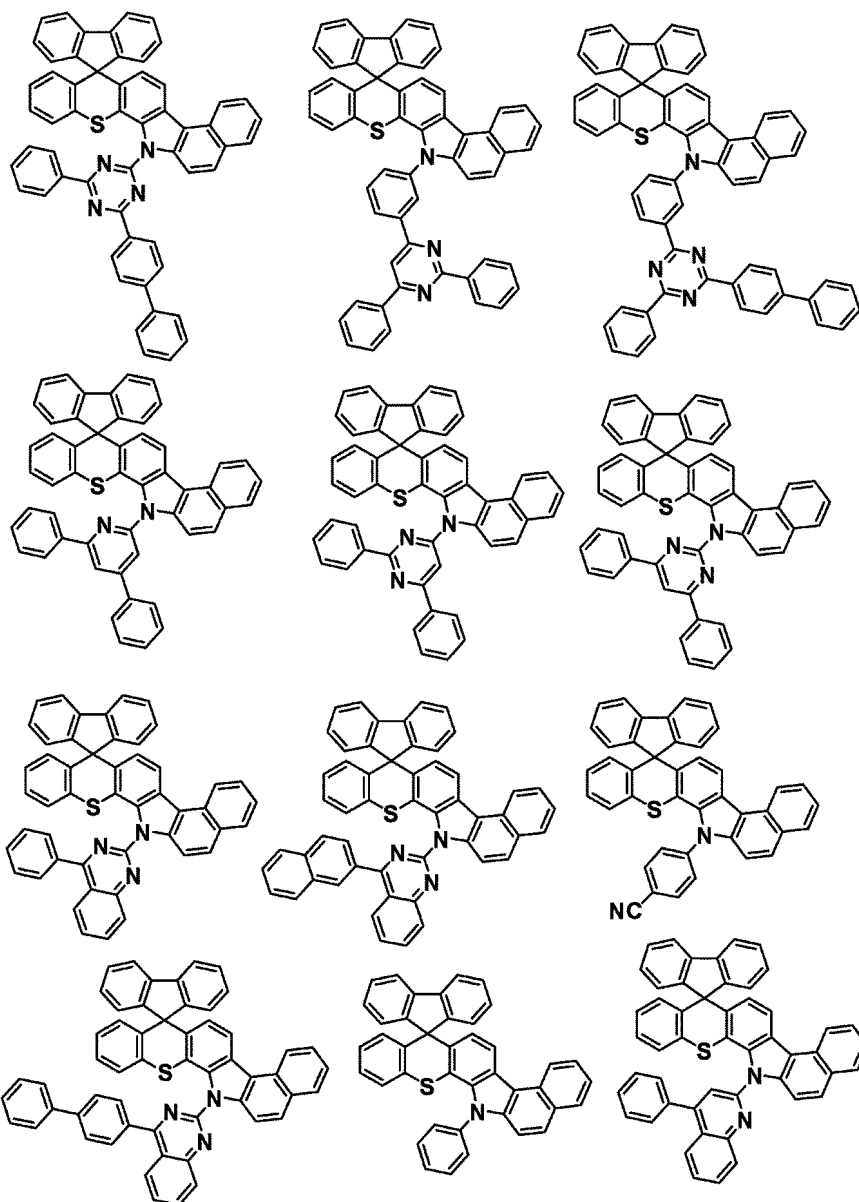
10

20

【化 1 1 2】



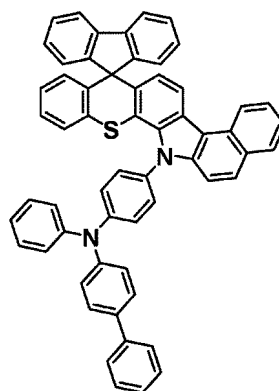
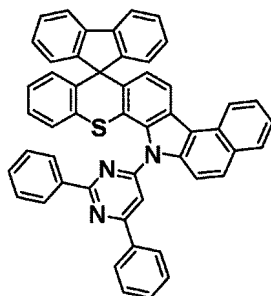
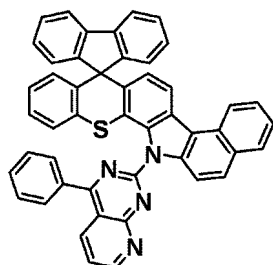
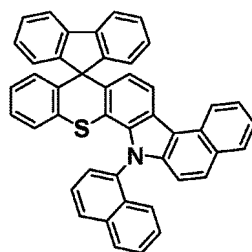
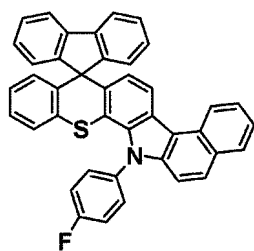
【化 1 1 3】



10

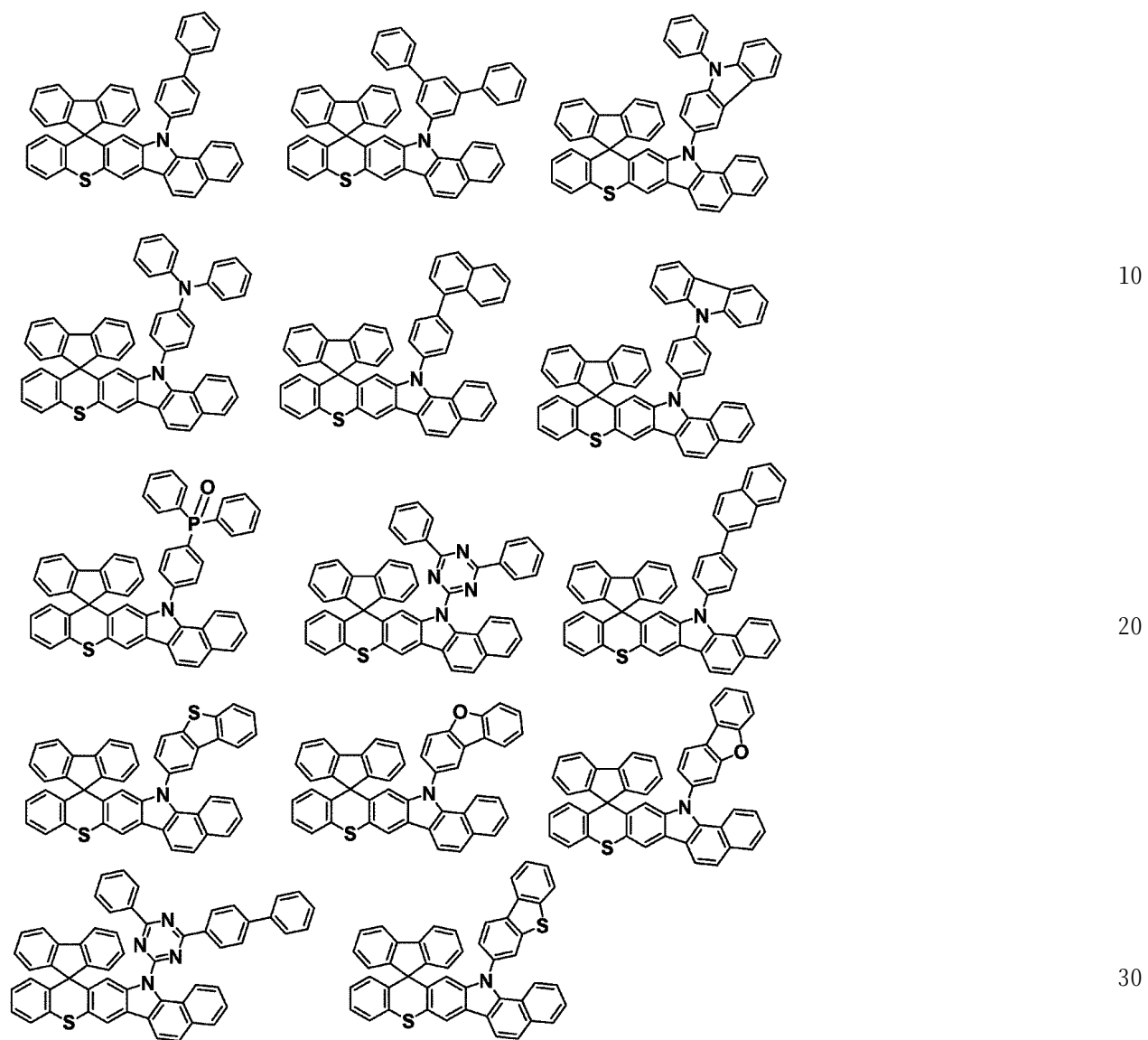
20

30

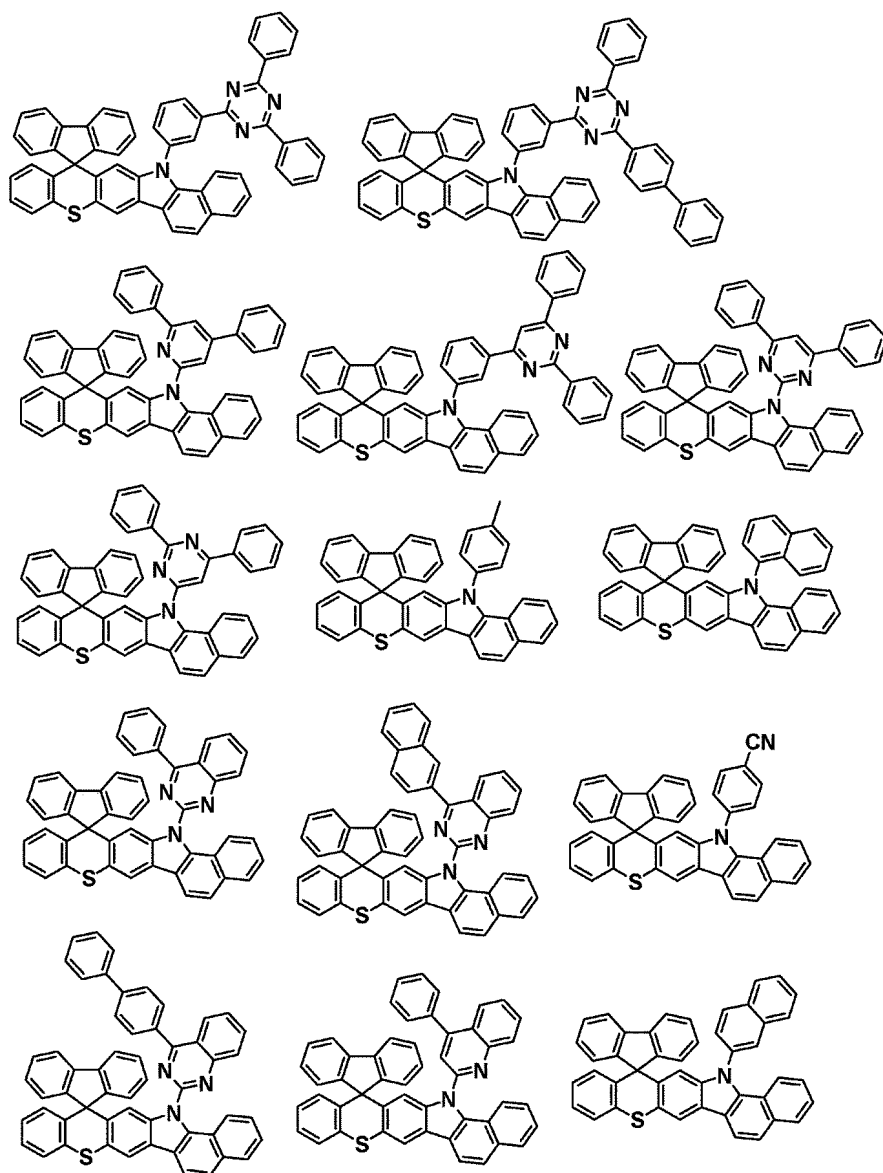


20

【化 1 1 5】



【化 1 1 6】

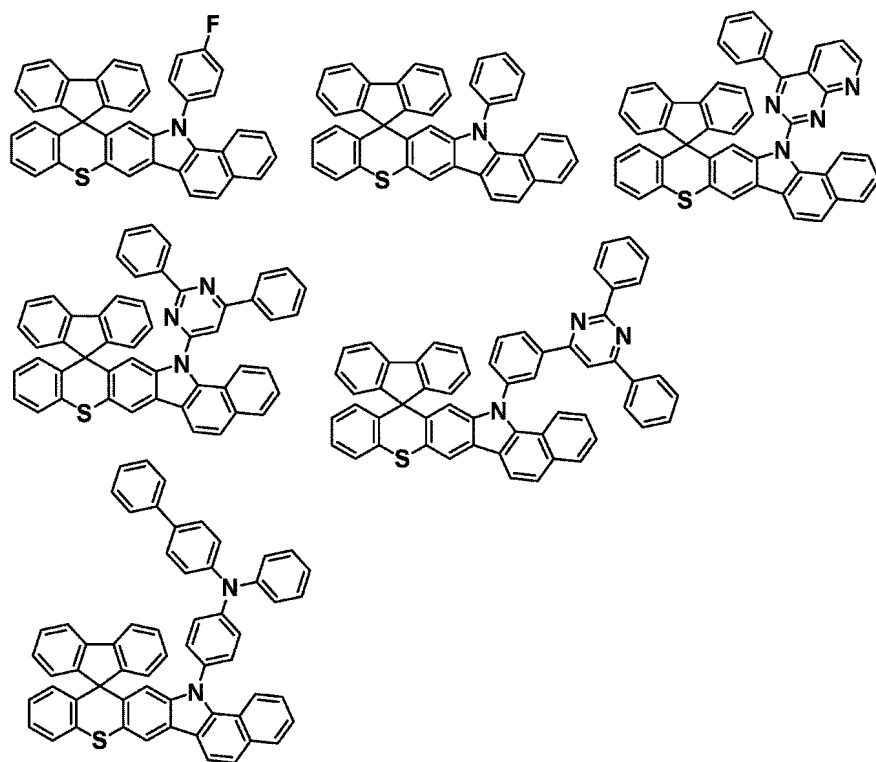


10

20

30

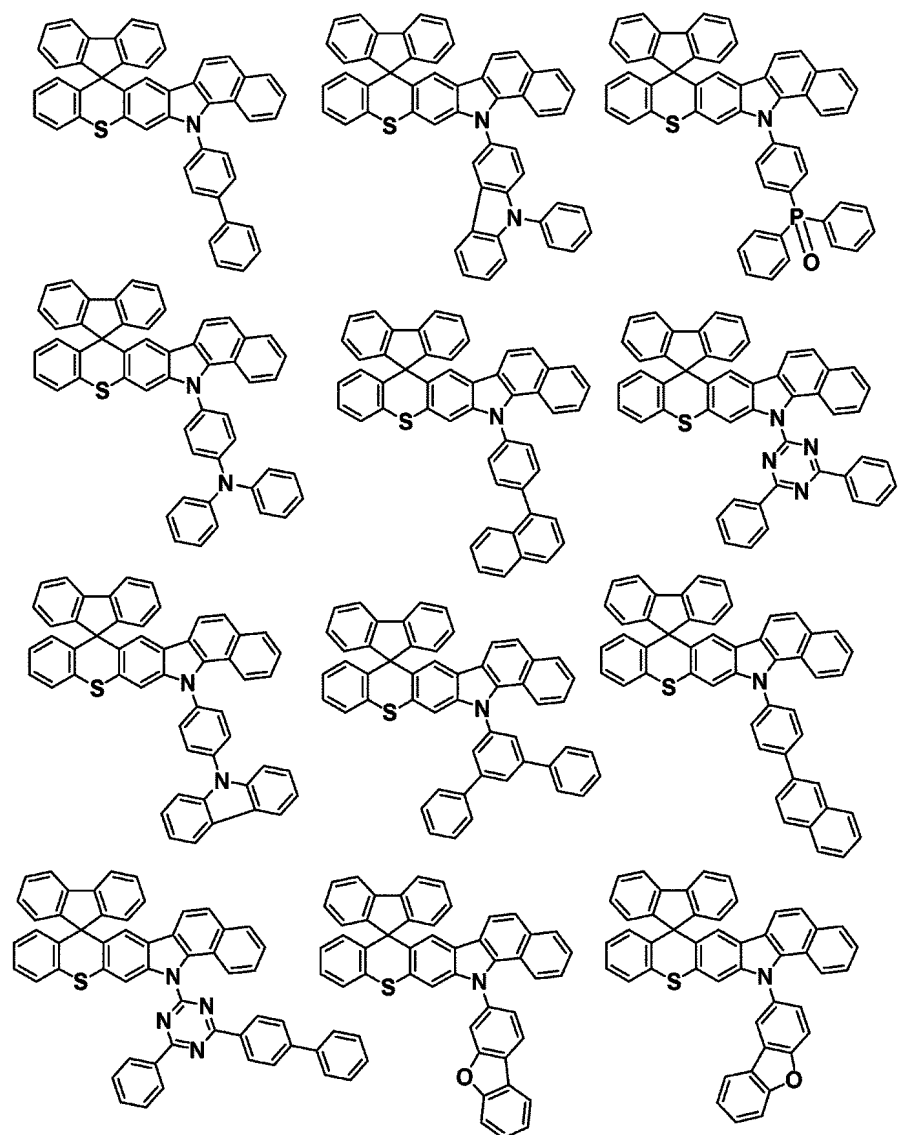
【化 1 1 7】



10

20

【化 1 1 8】

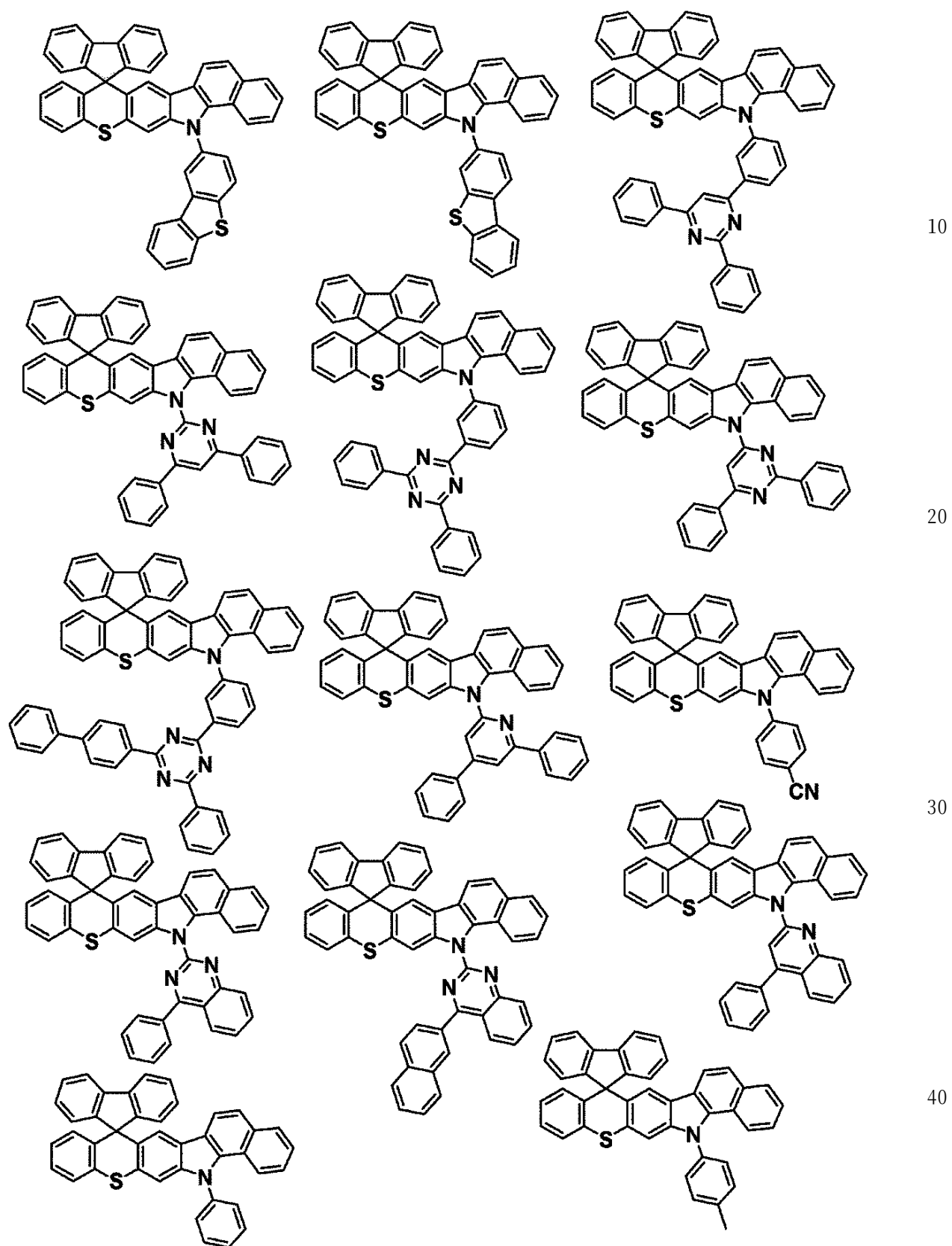


10

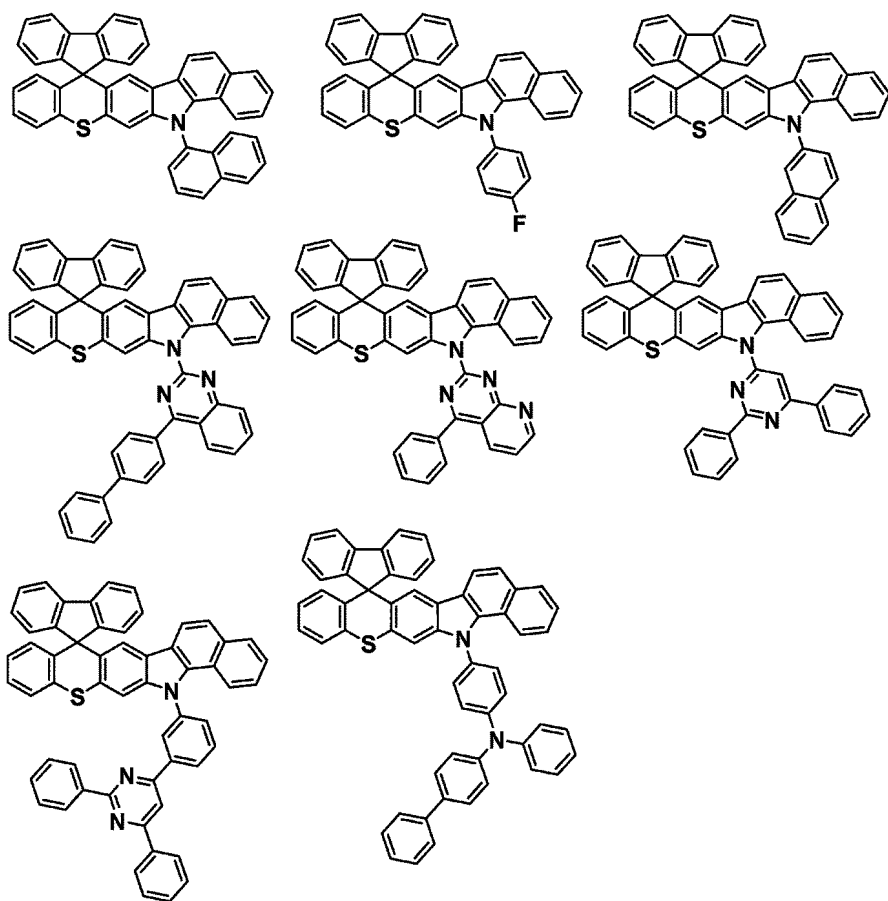
20

30

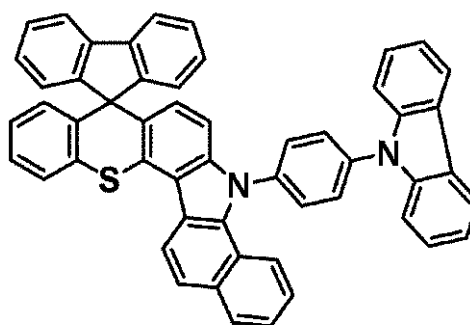
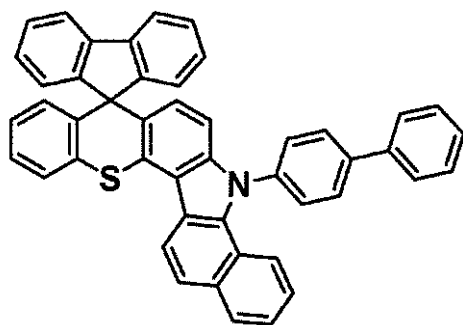
【化 1 1 9】



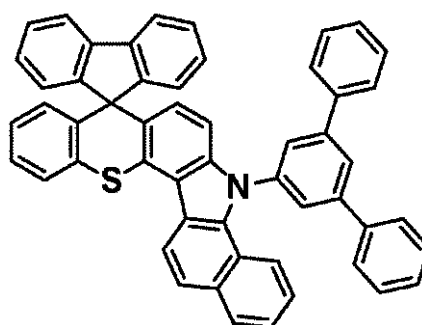
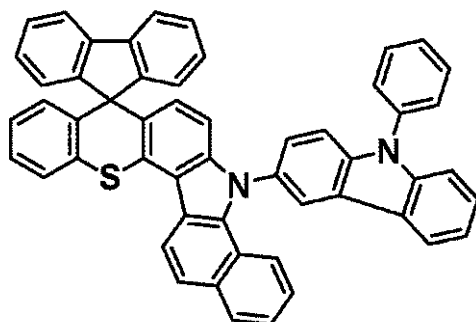
【化 1 2 0】



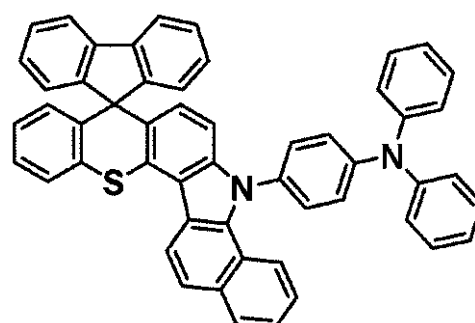
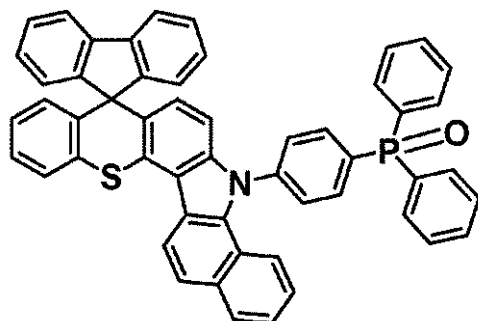
【化 1 2 1】



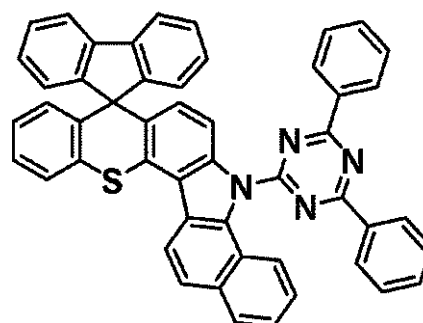
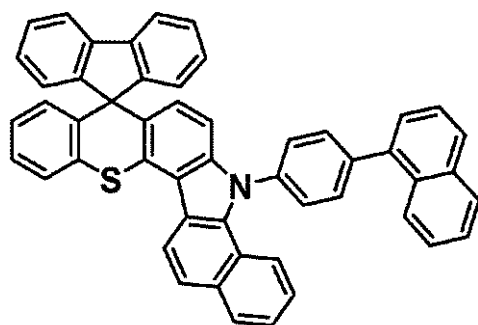
10



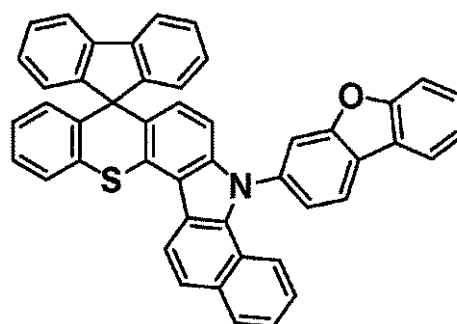
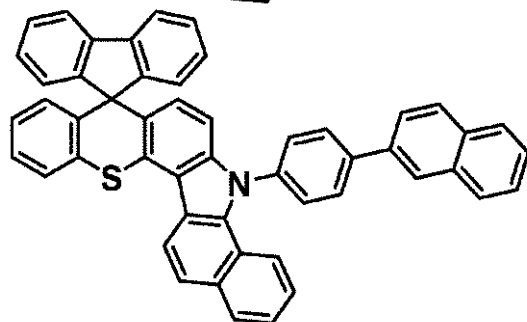
20



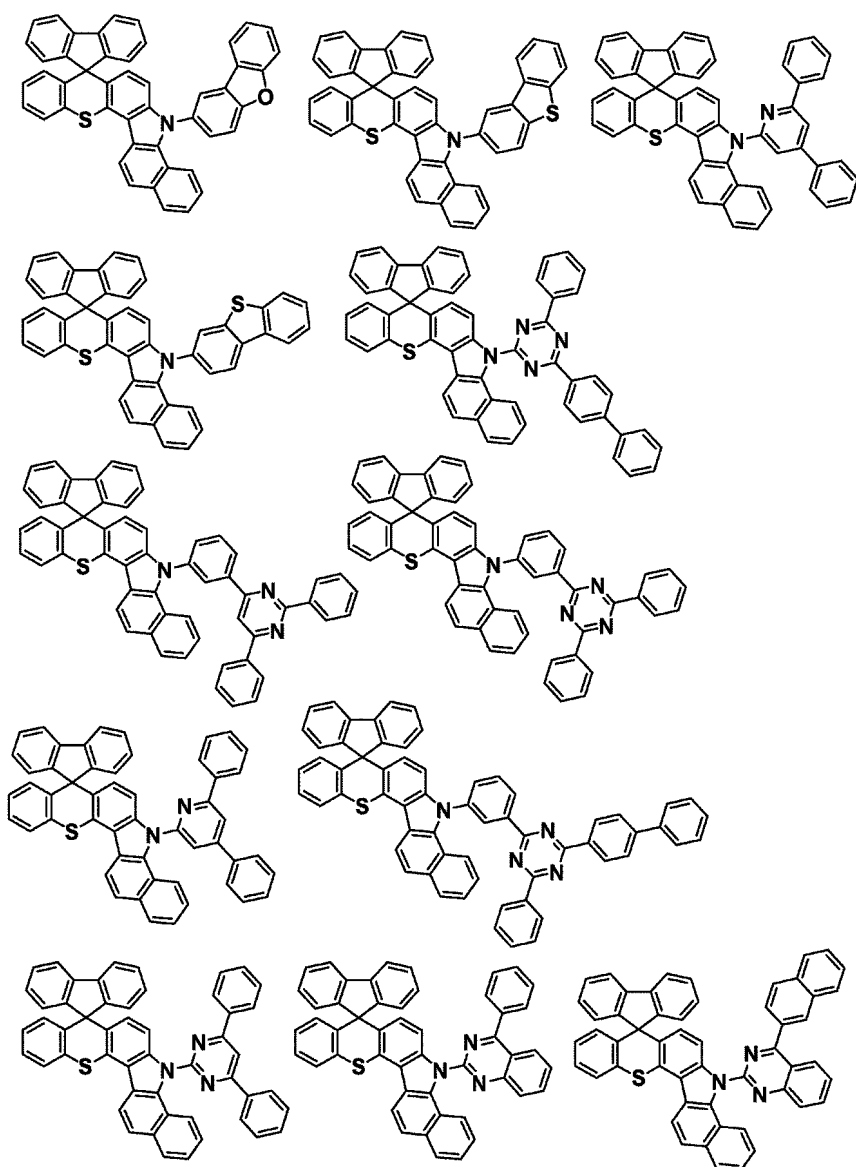
30



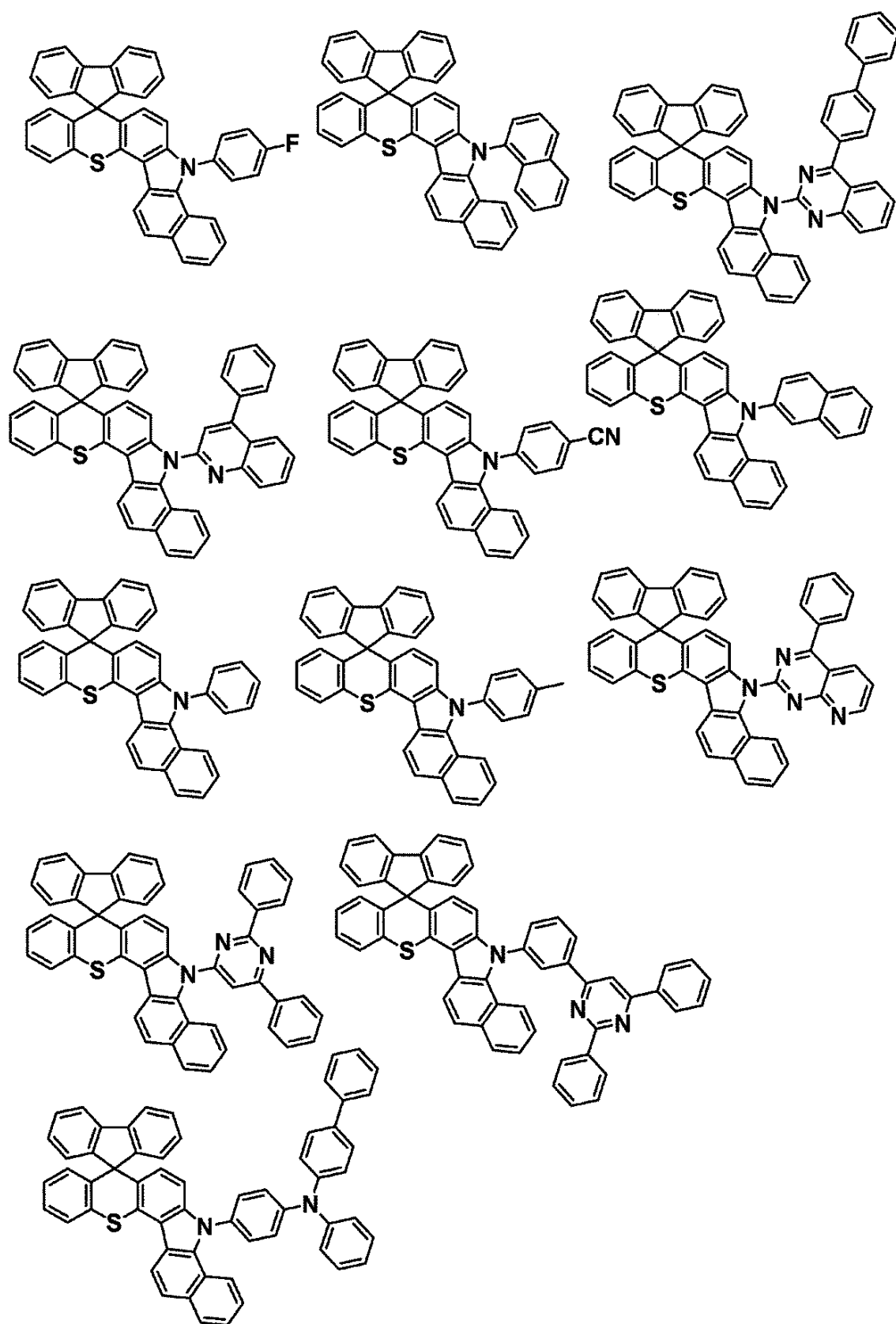
40



【化 1 2 2】



【化 1 2 3】



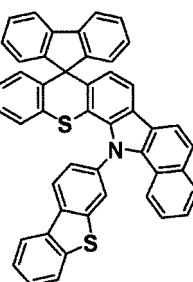
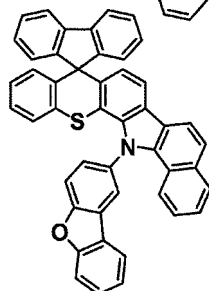
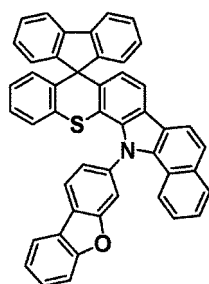
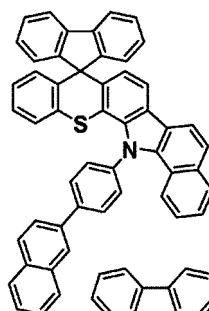
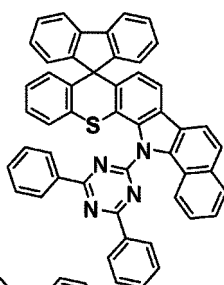
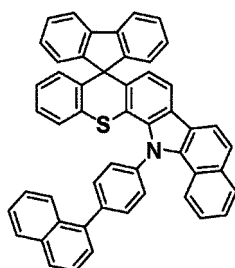
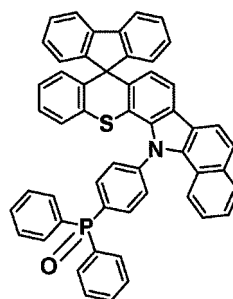
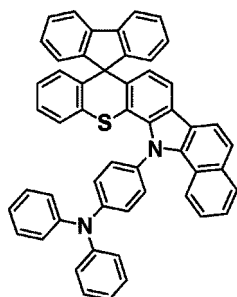
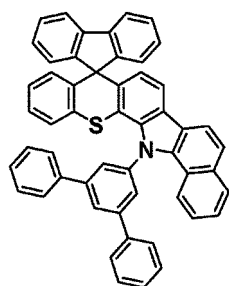
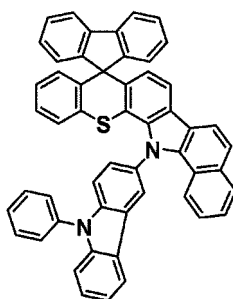
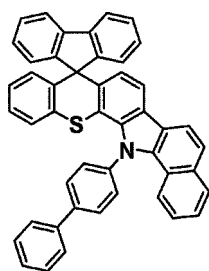
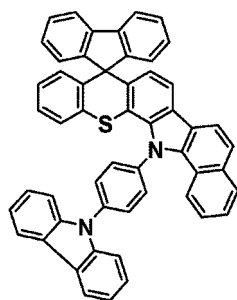
10

20

30

40

【化 1 2 4】

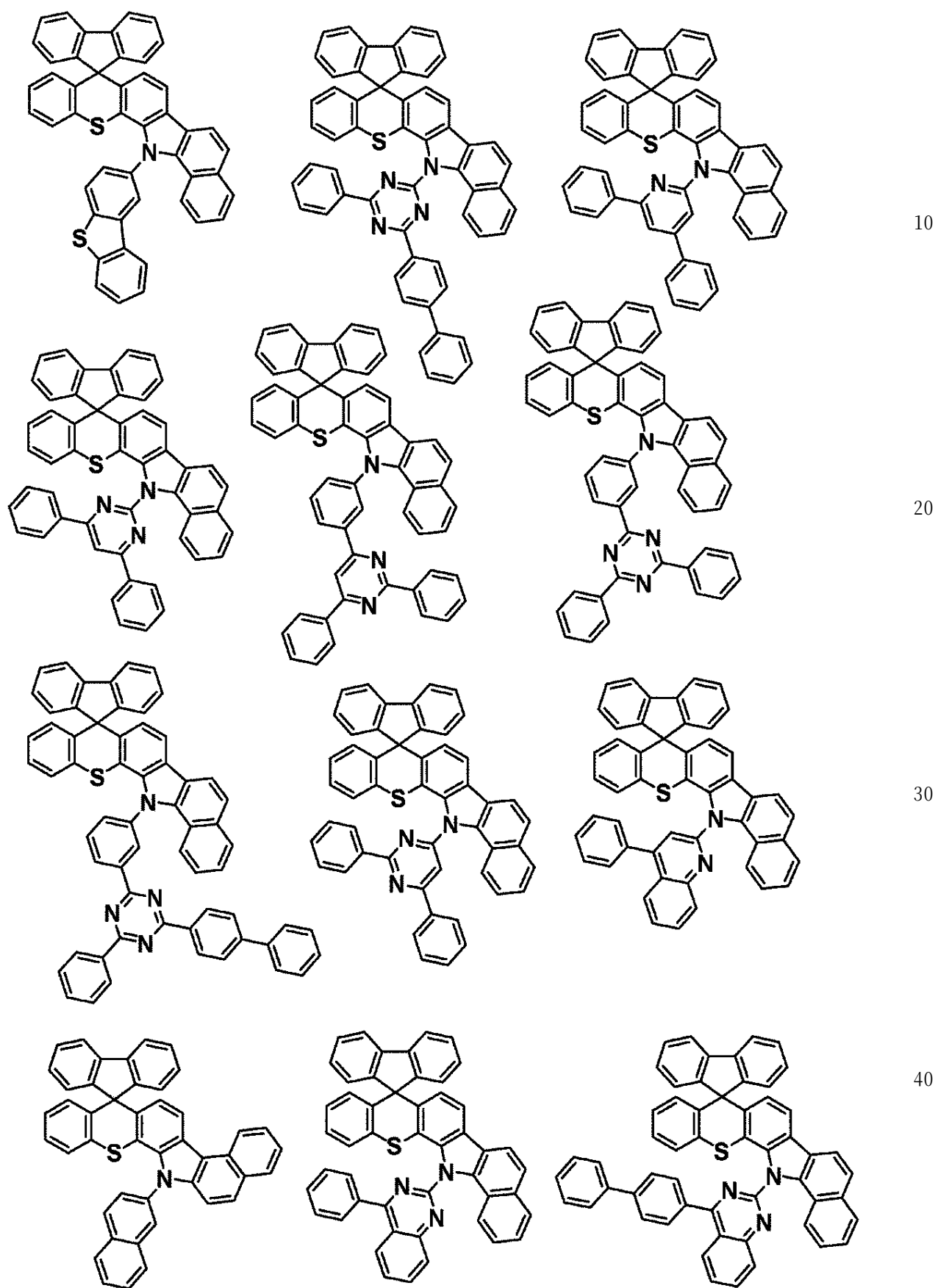


10

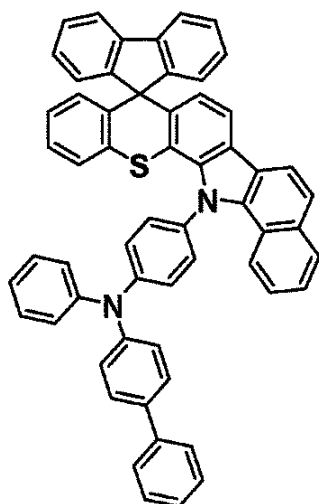
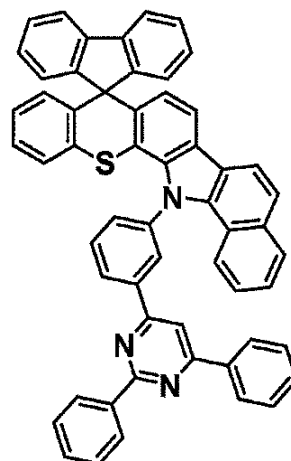
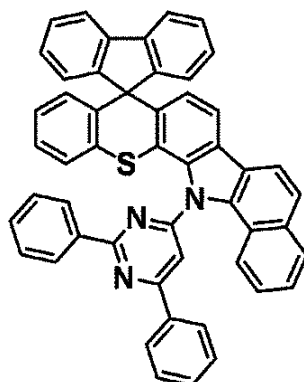
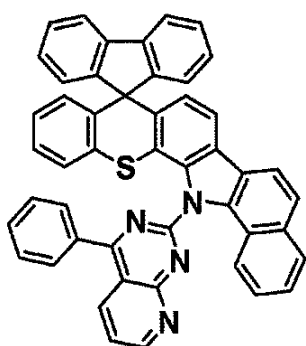
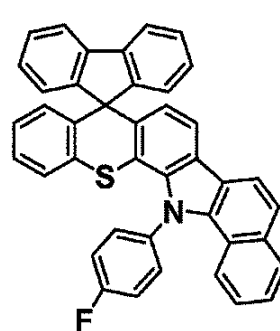
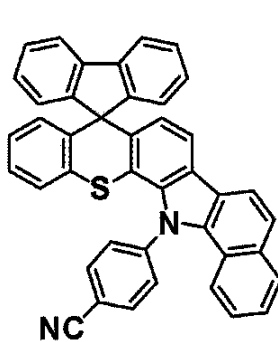
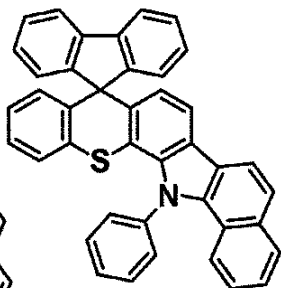
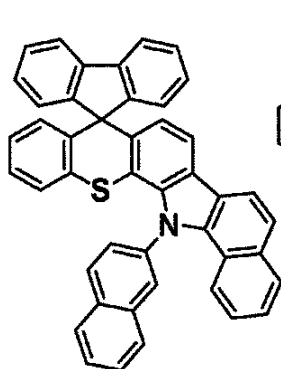
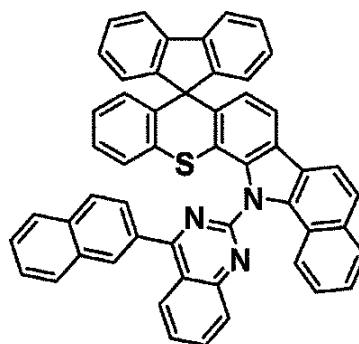
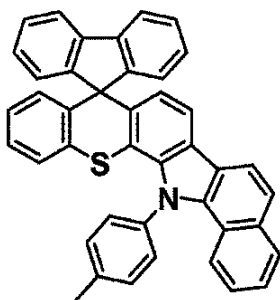
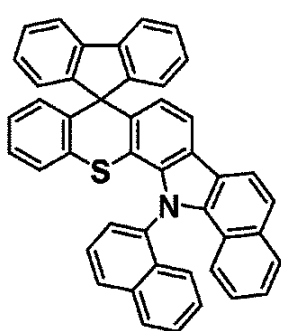
20

30

【化 1 2 5】



【化 1 2 6】



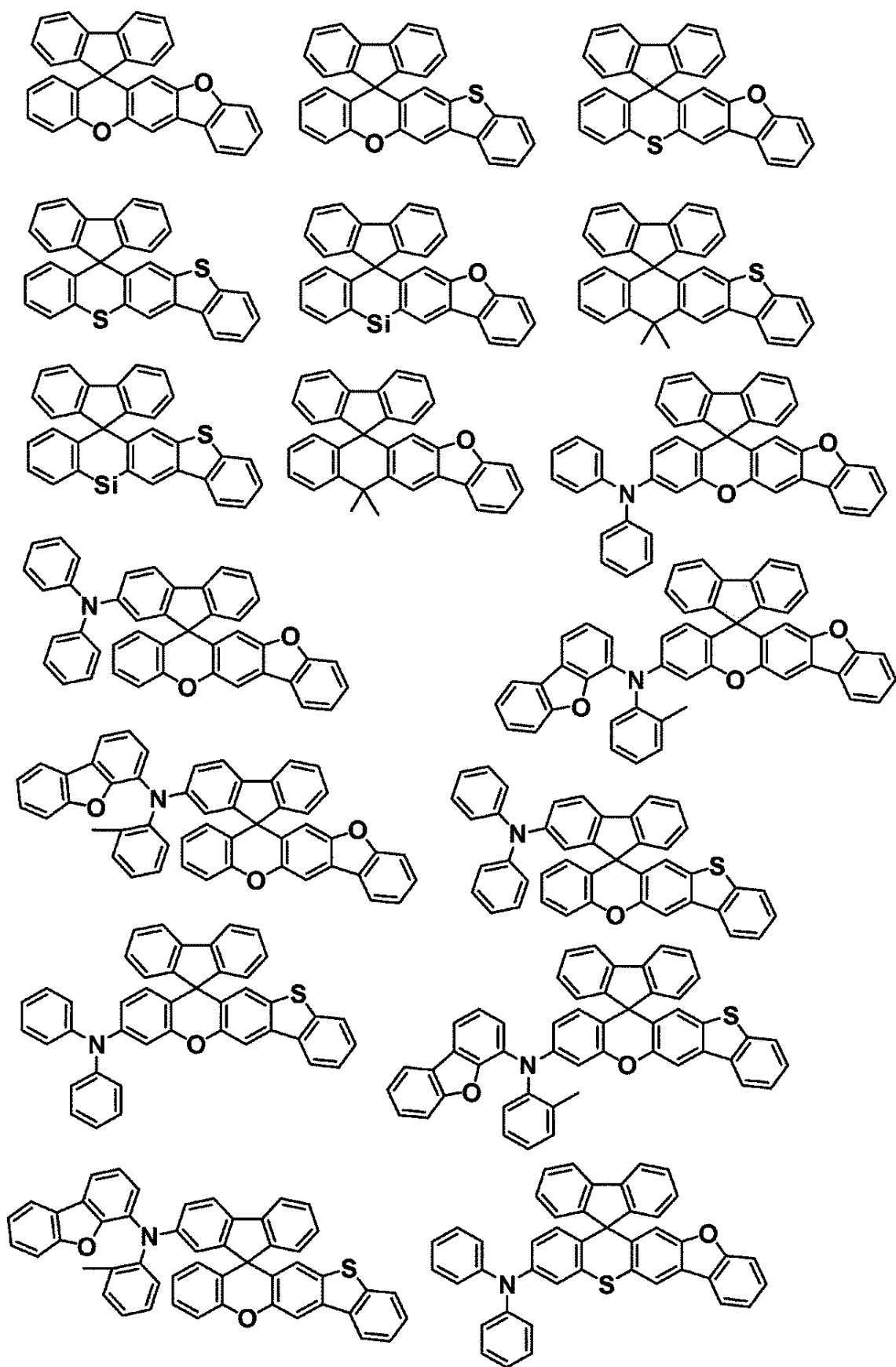
10

20

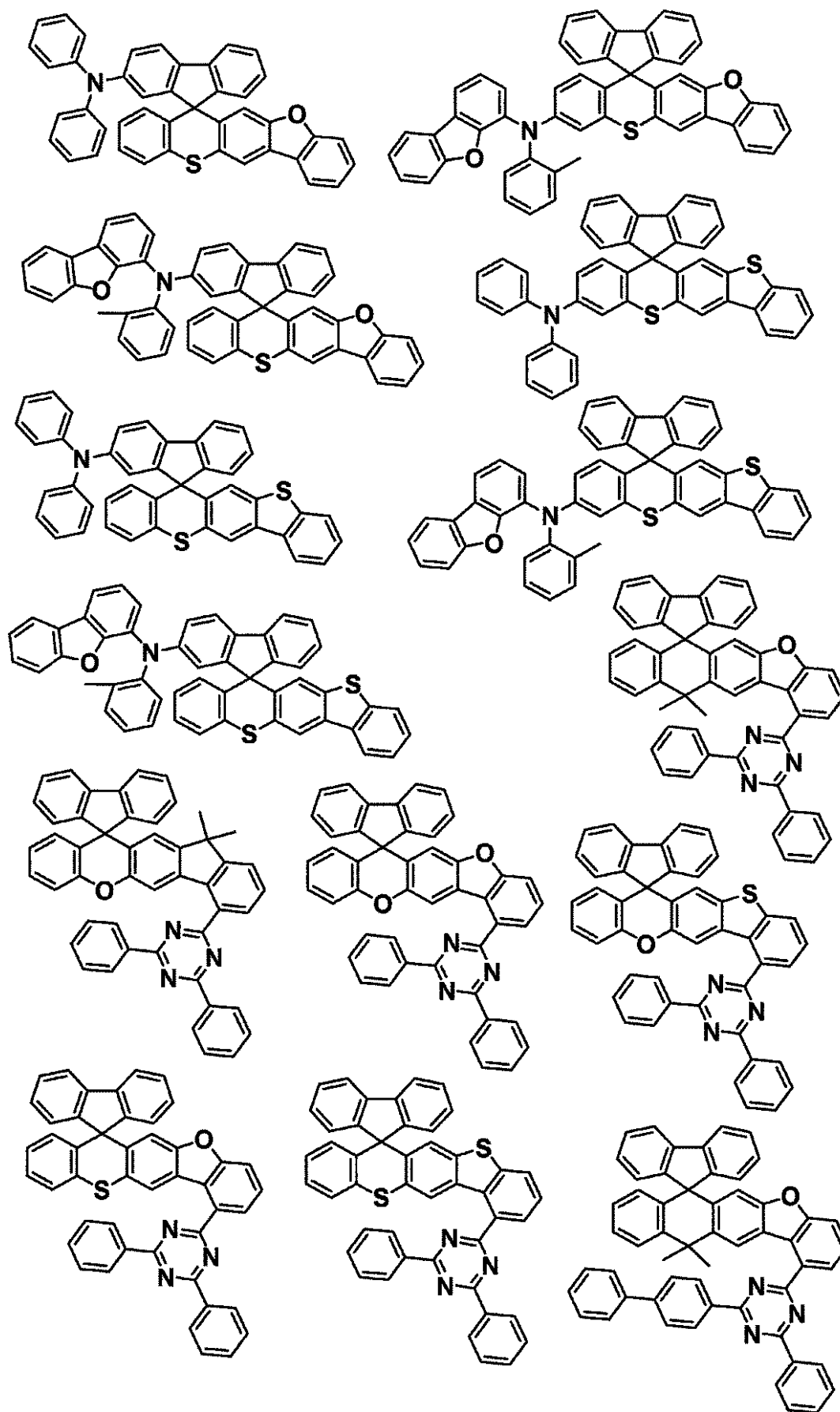
30

40

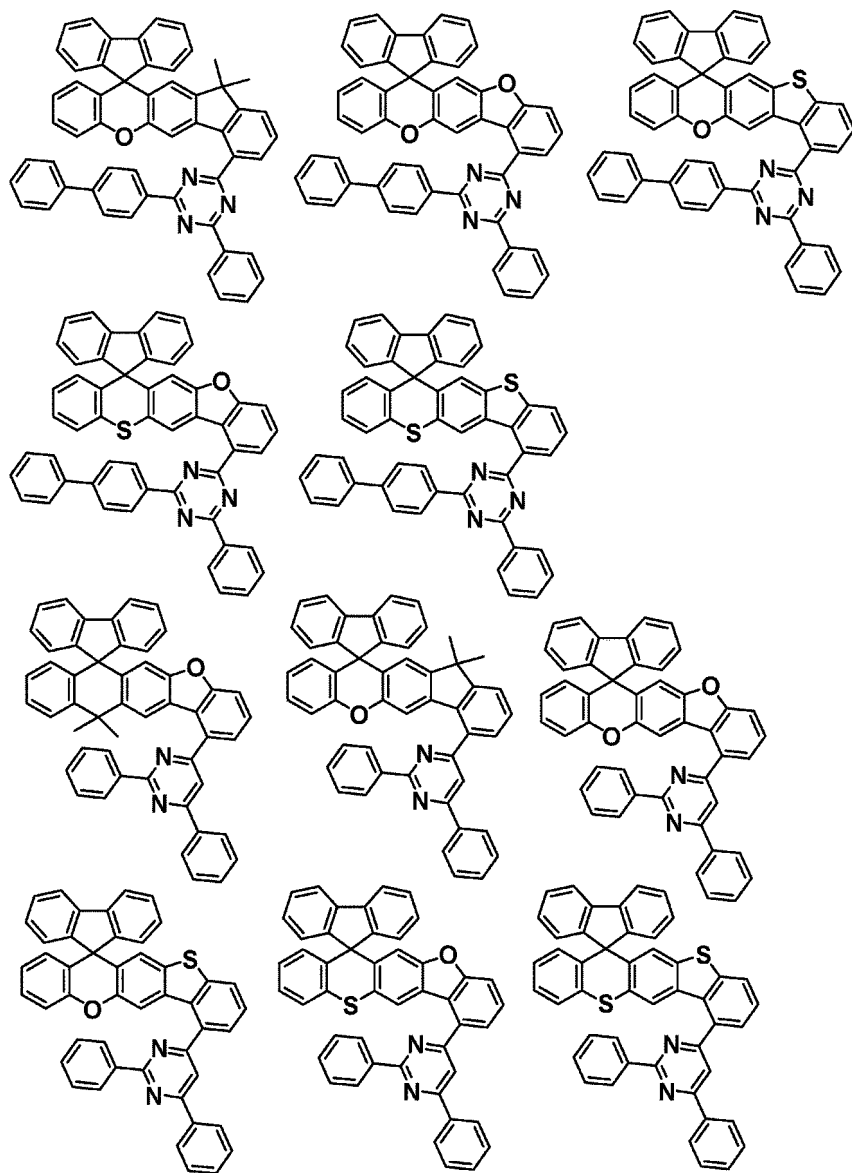
【化 1 2 7】



【化 1 2 8】



【化 1 2 9】

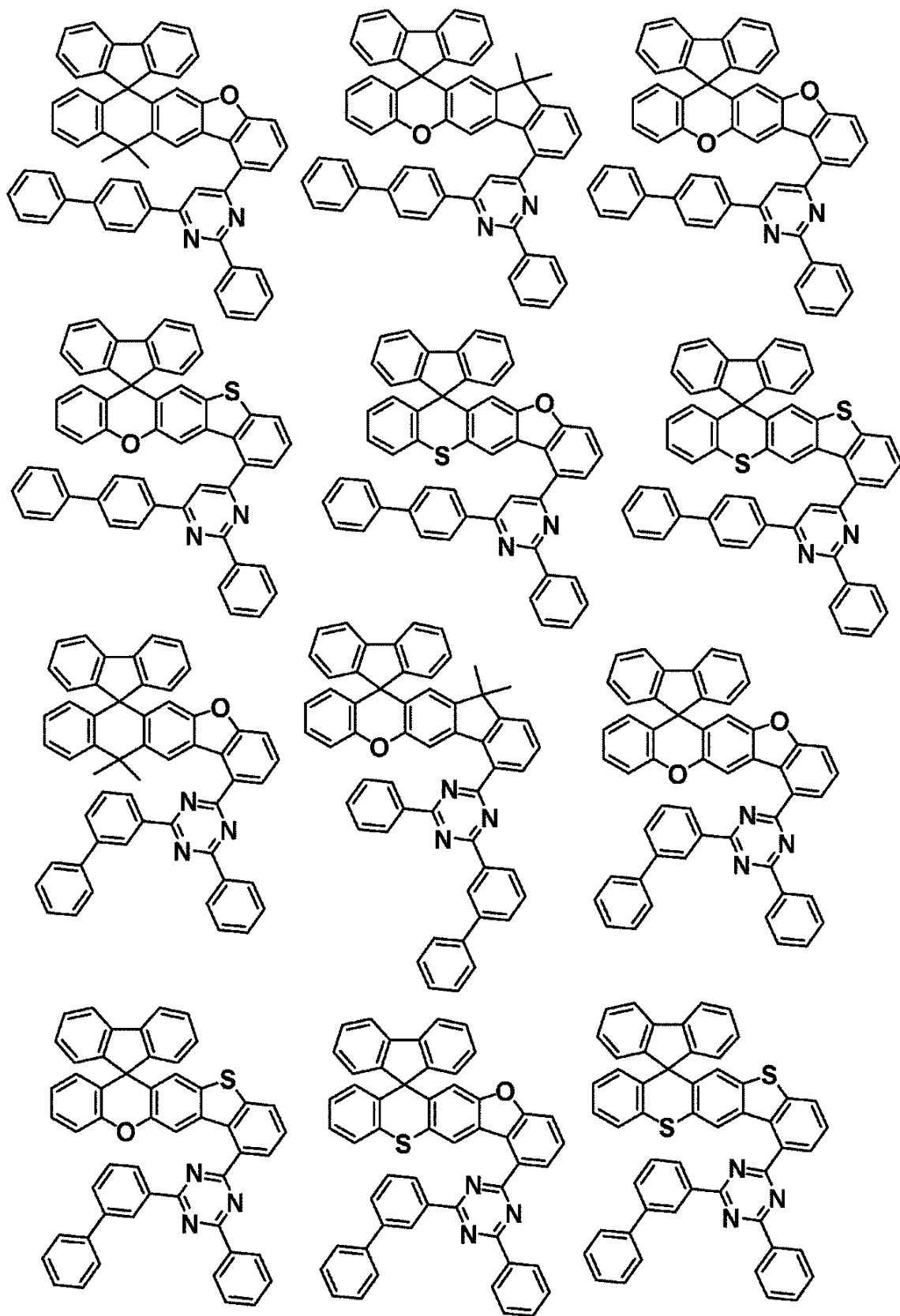


10

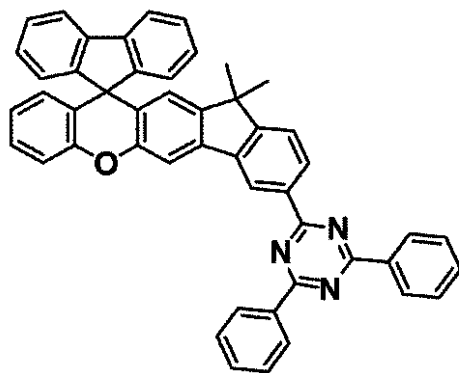
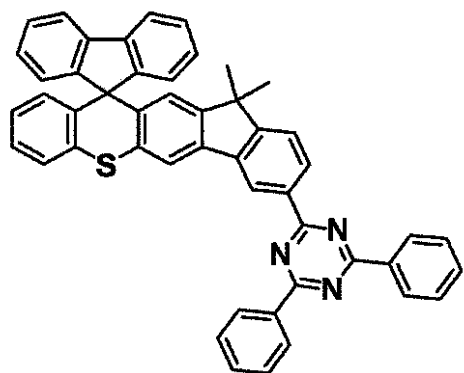
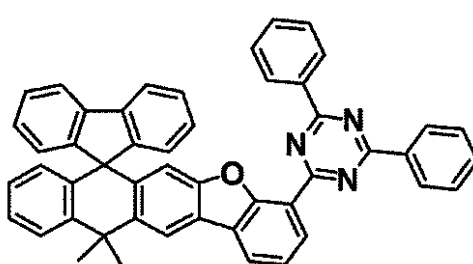
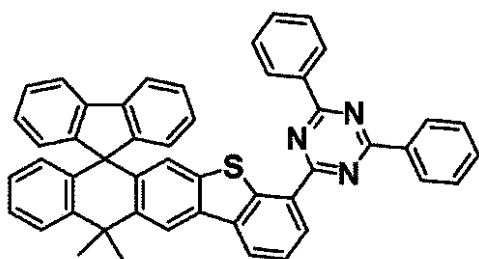
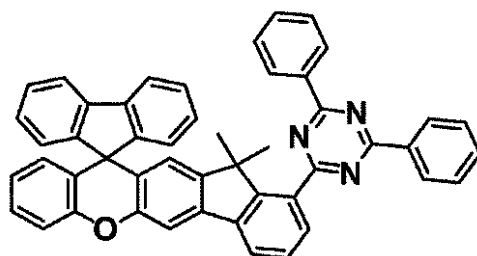
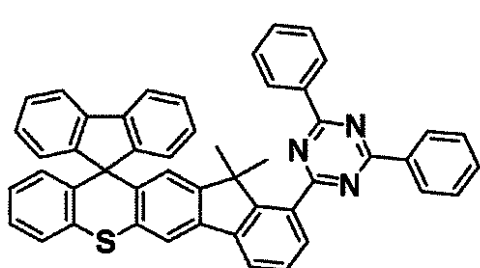
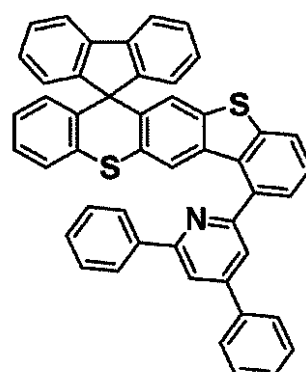
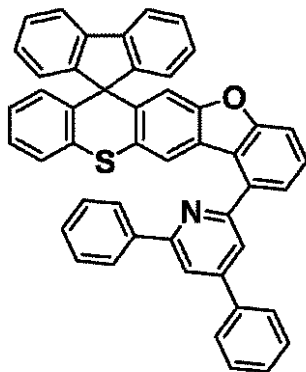
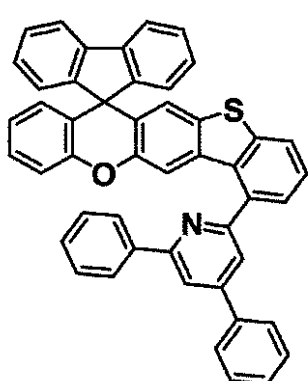
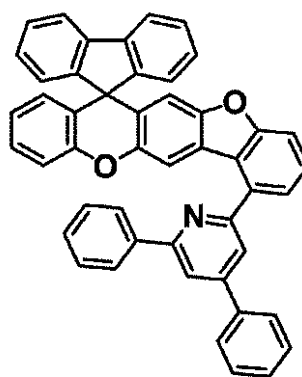
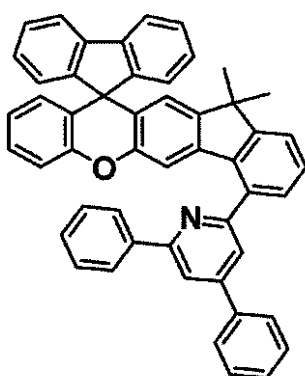
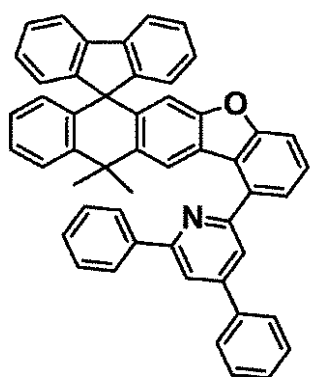
20

30

【化 1 3 0】



【化 1 3 1】



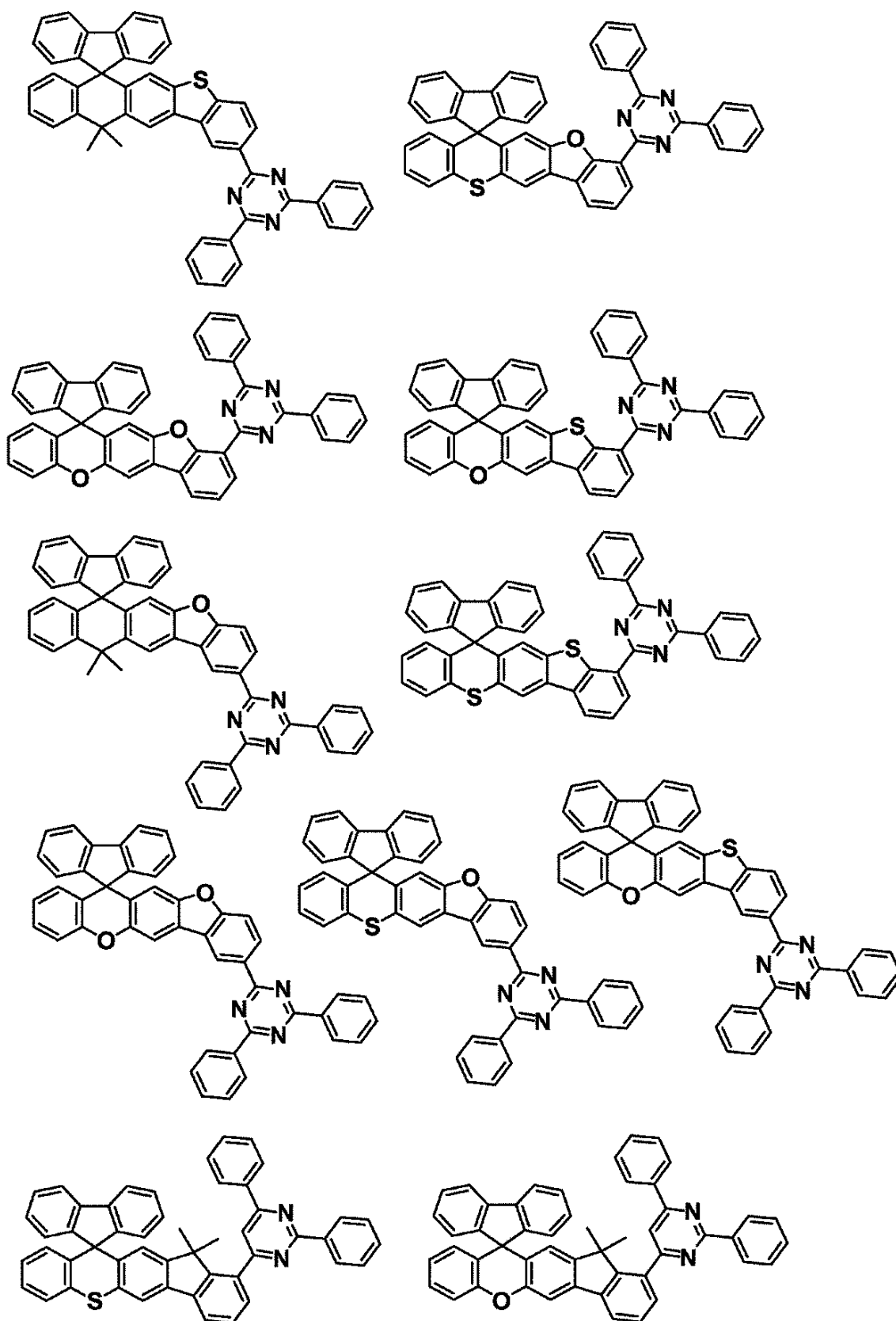
10

20

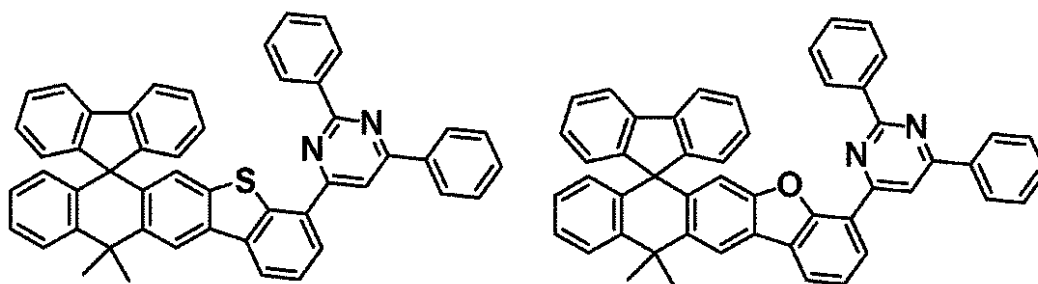
30

40

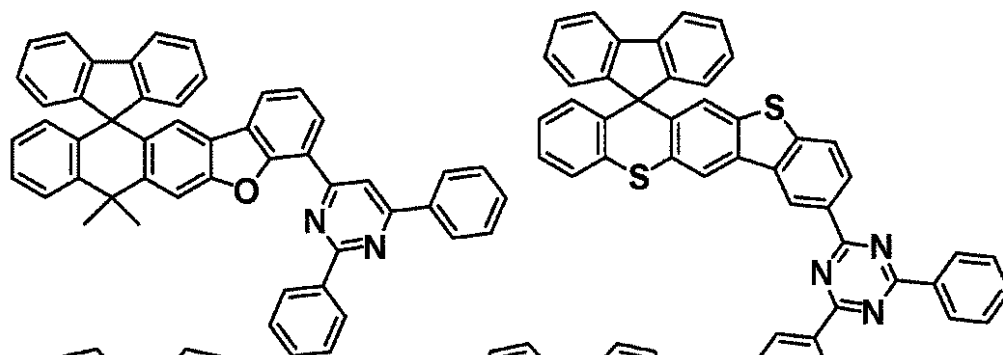
【化 1 3 2】



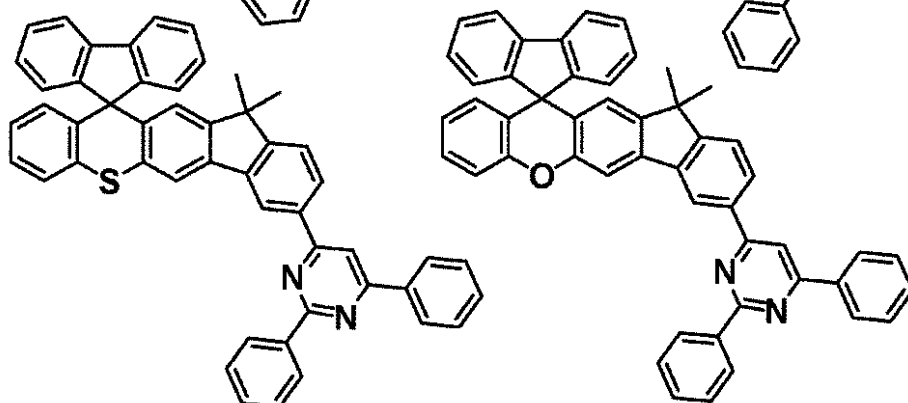
【化 1 3 3】



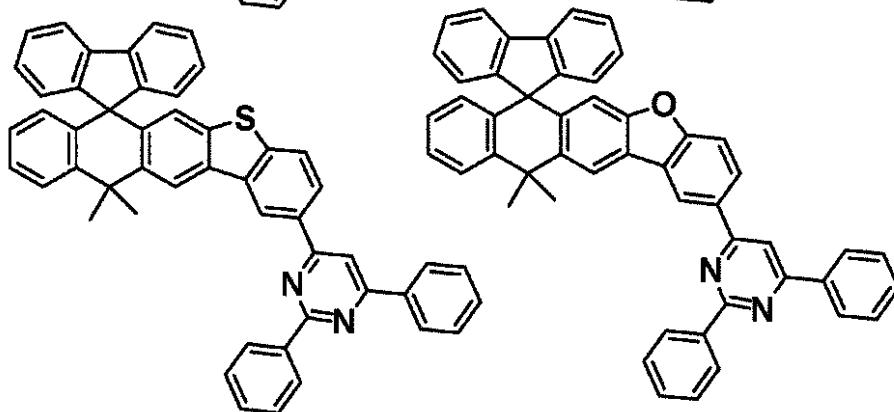
10



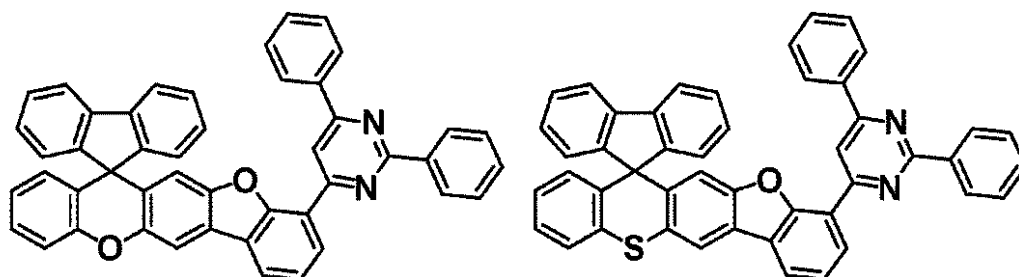
20



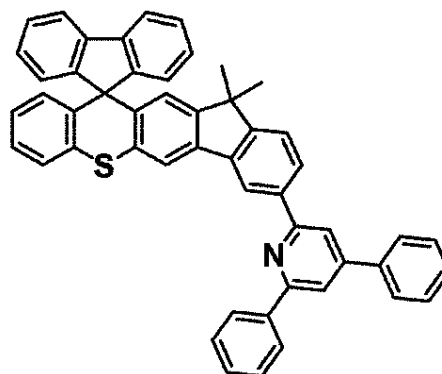
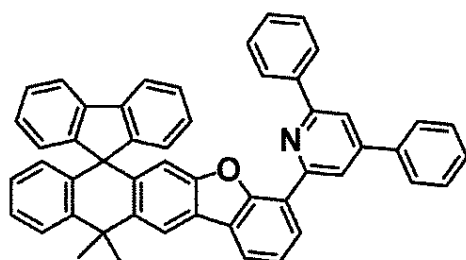
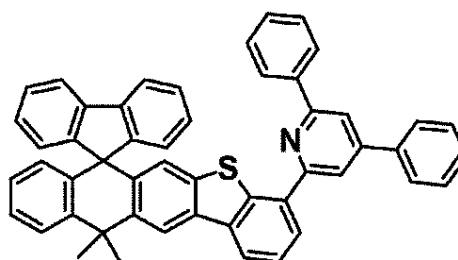
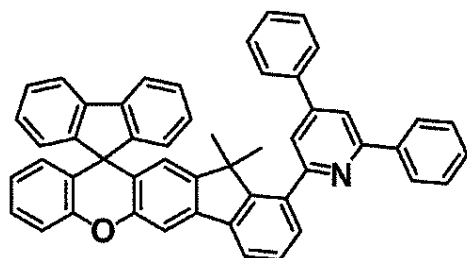
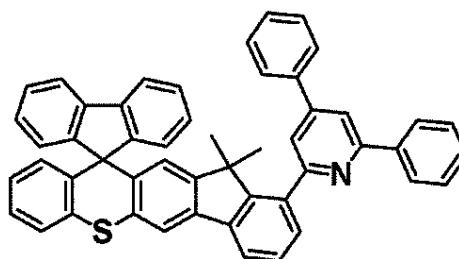
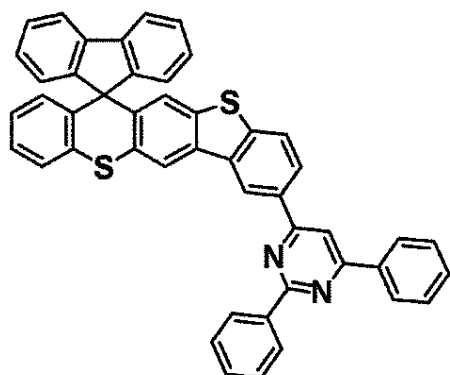
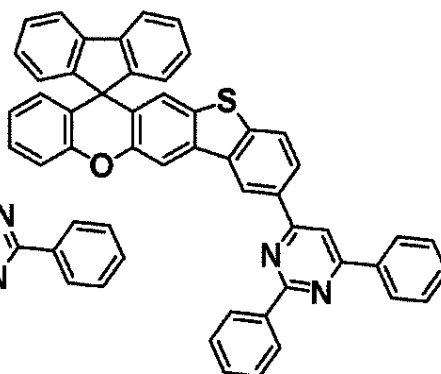
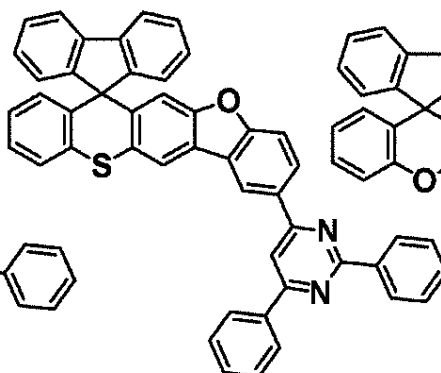
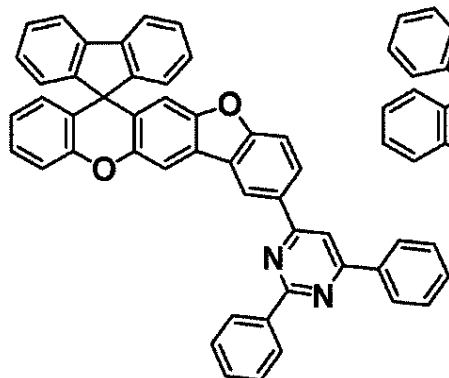
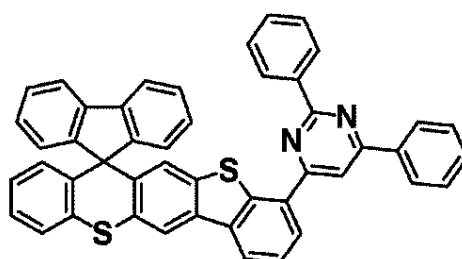
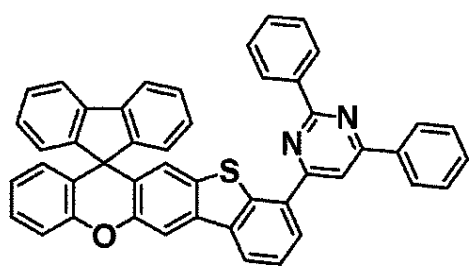
30



40



【化 1 3 4】



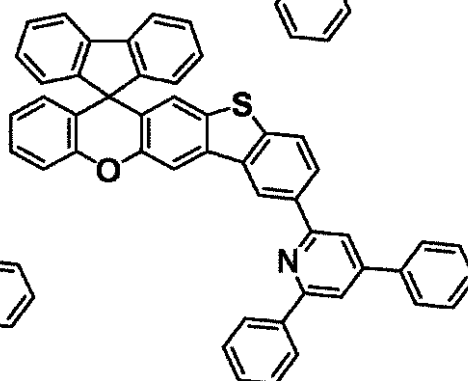
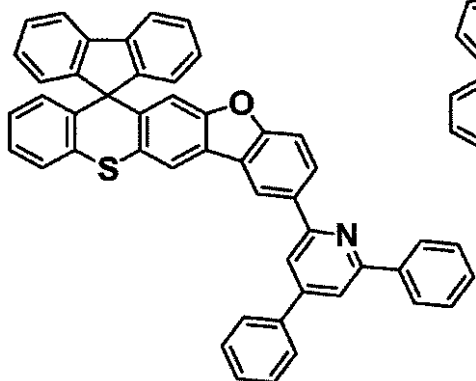
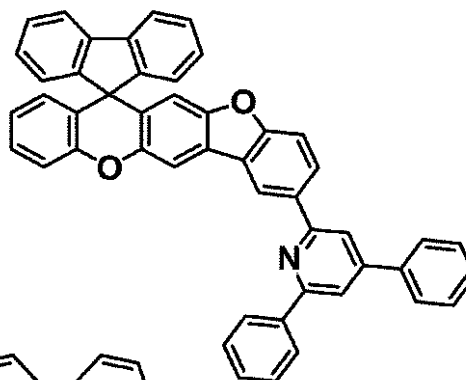
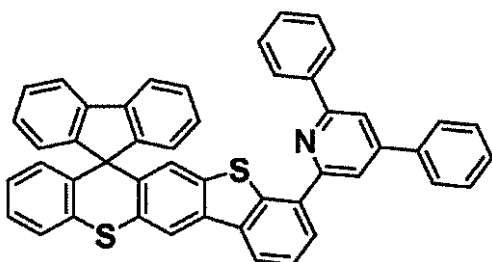
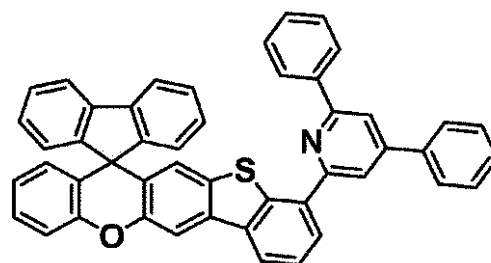
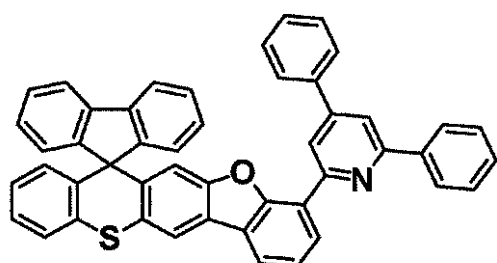
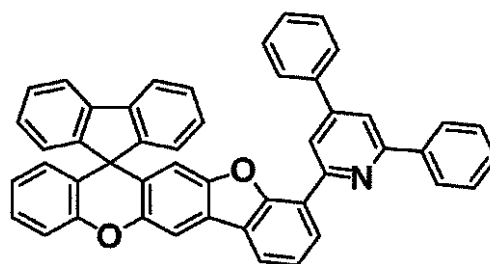
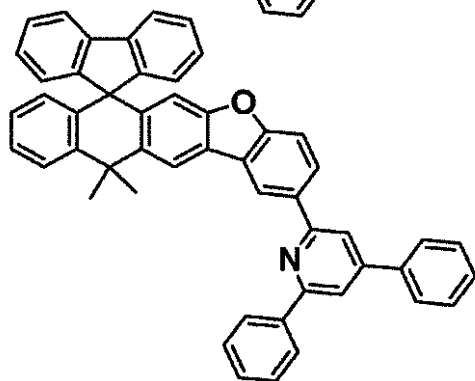
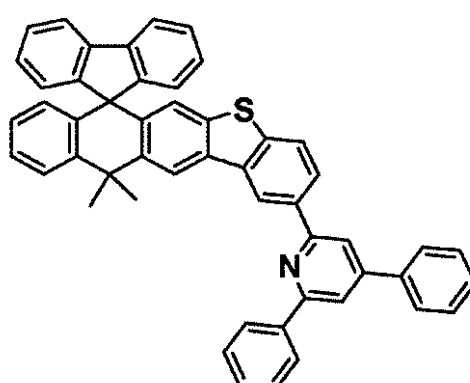
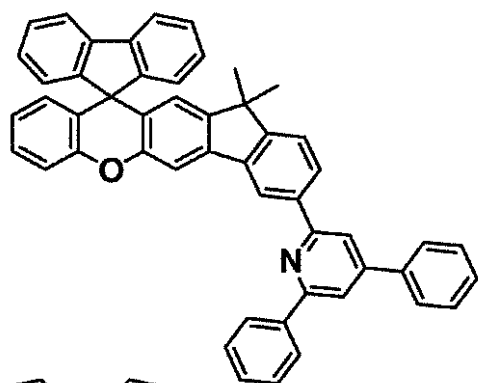
10

20

30

40

【化 1 3 5】



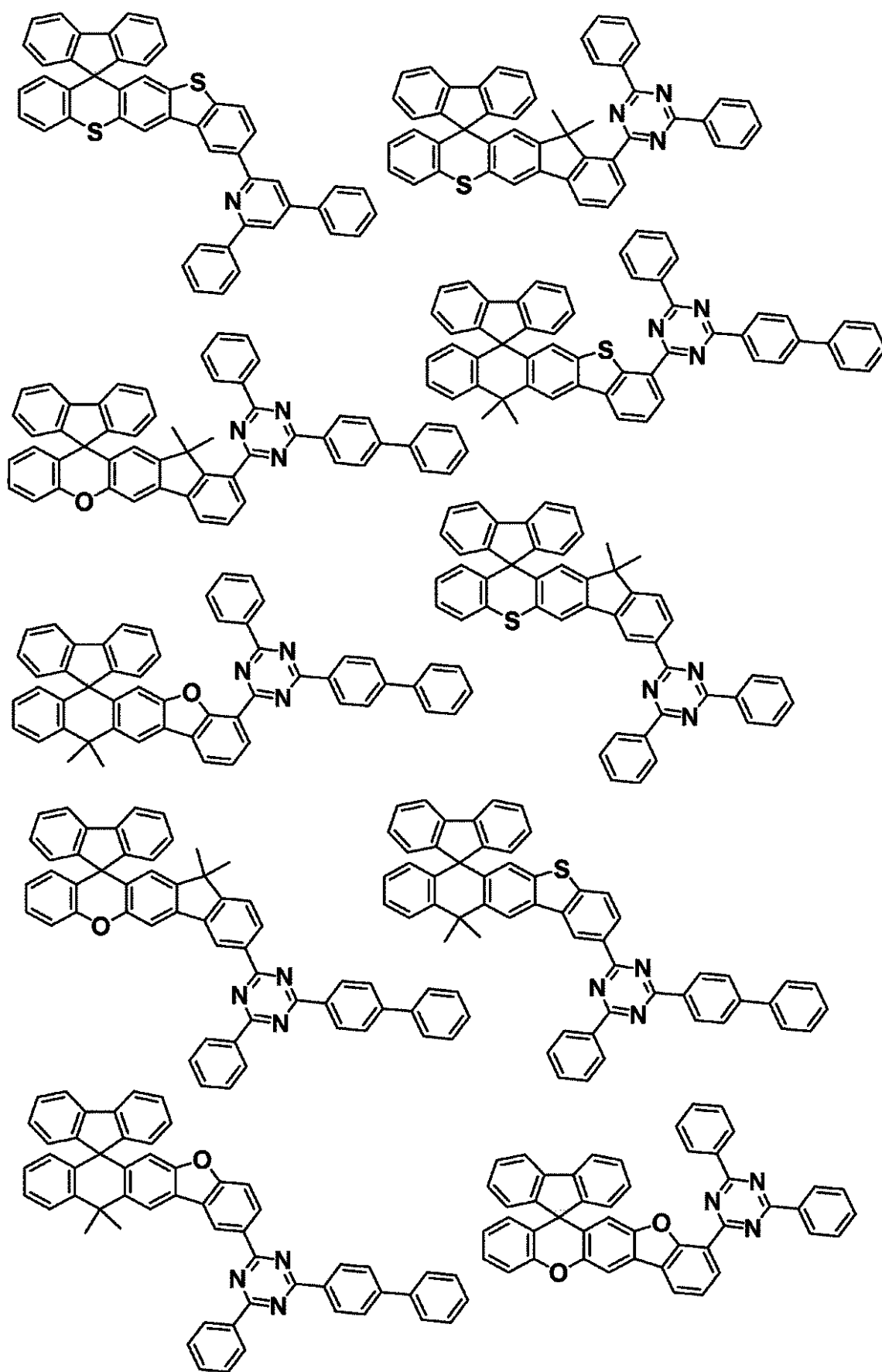
10

20

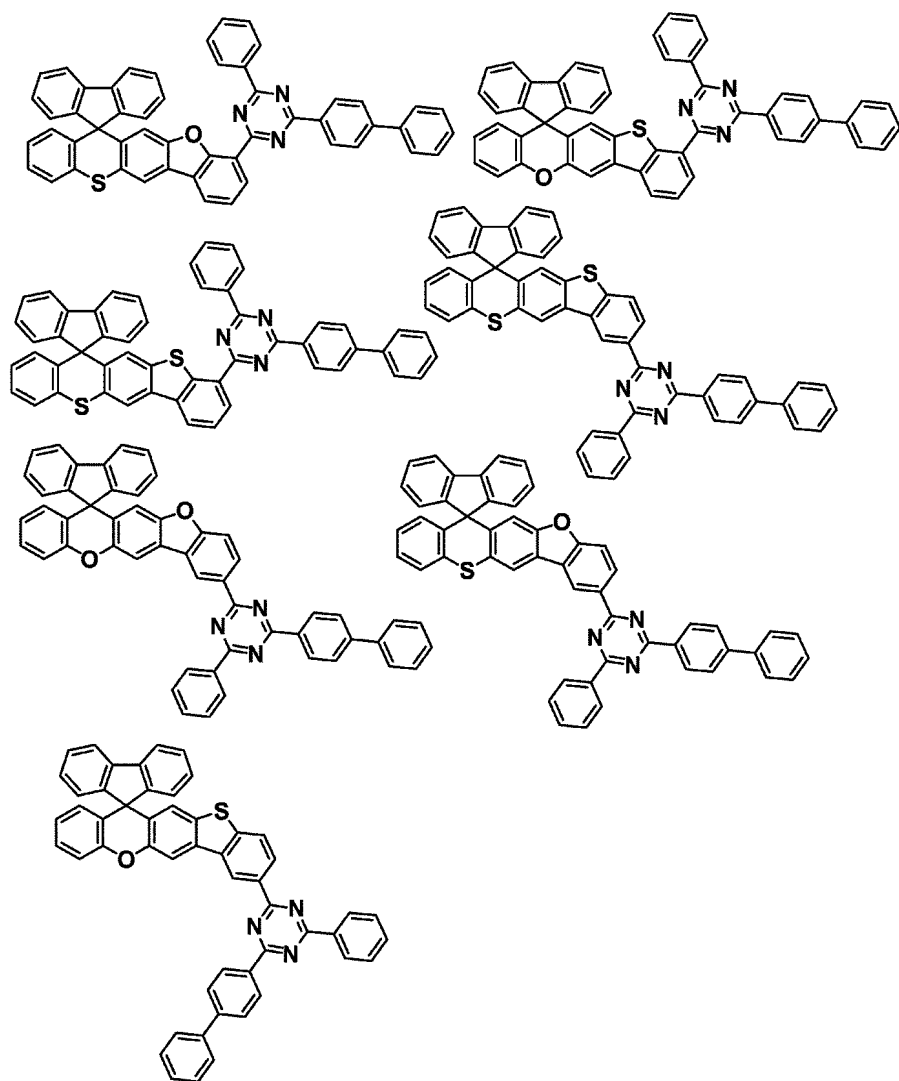
30

40

【化 1 3 6】



【化 1 3 7】

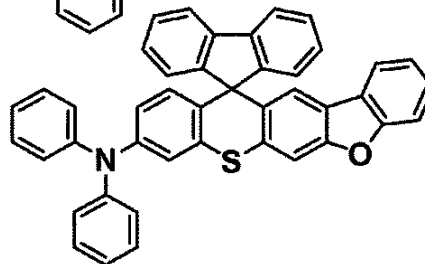


10

20

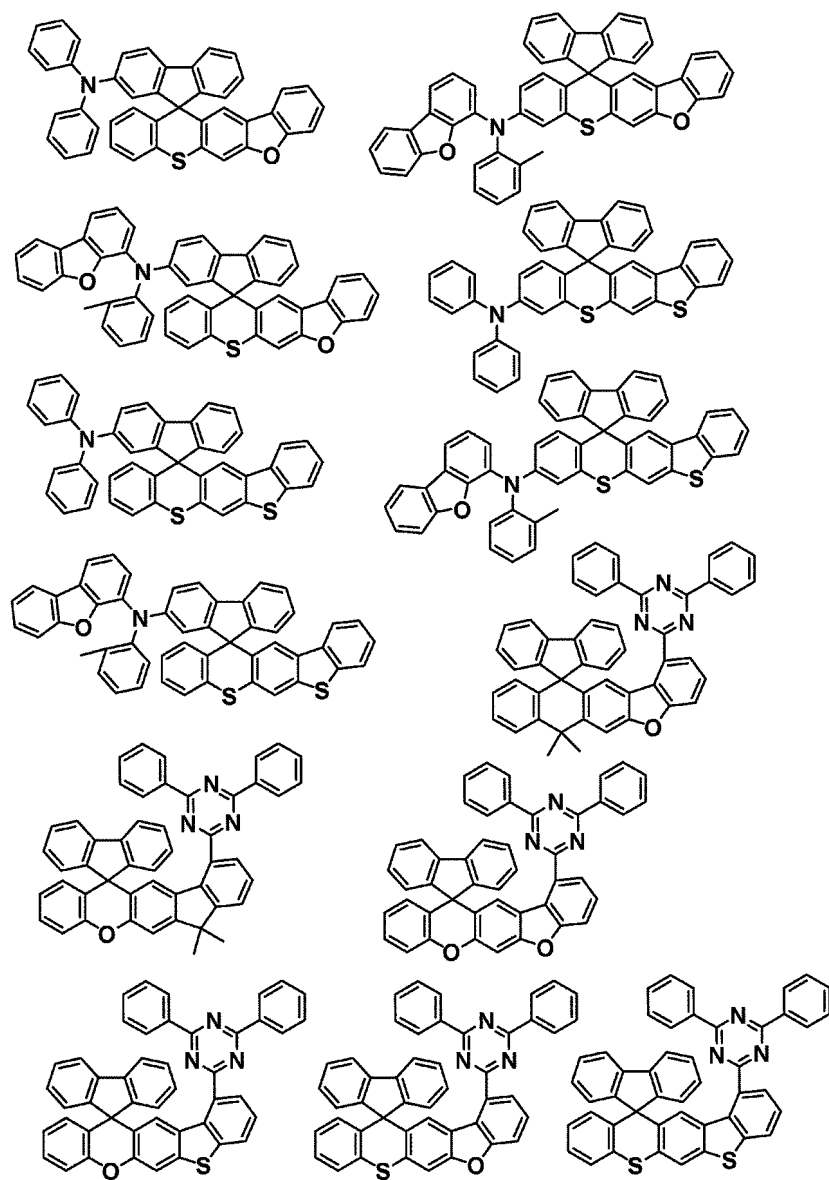
30

【化 1 3 8】

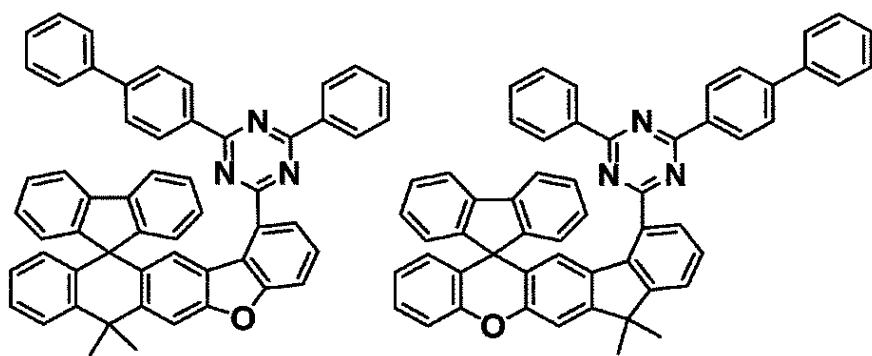


40

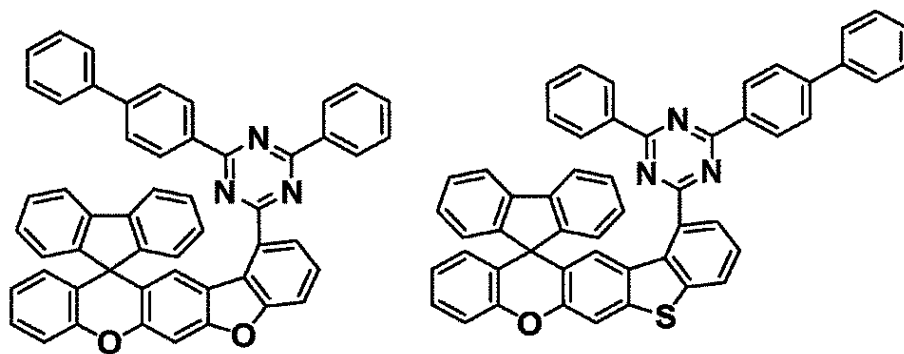
【化 1 3 9】



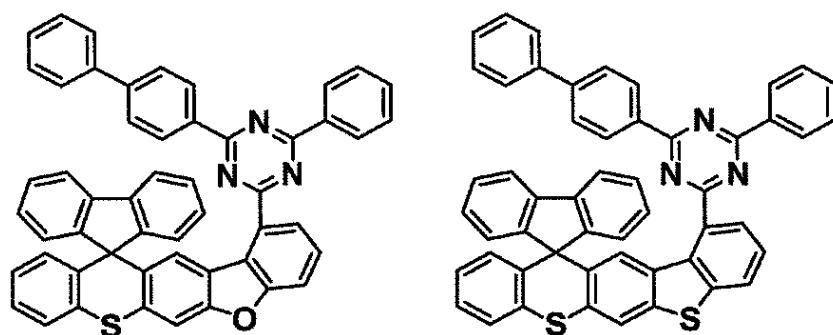
【化 1 4 0】



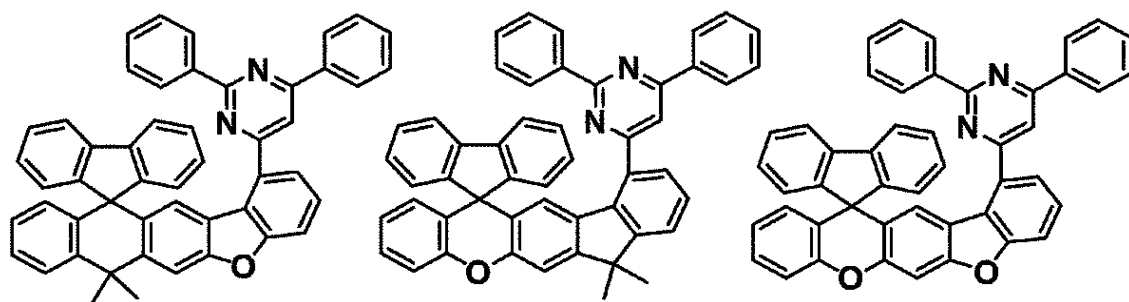
10



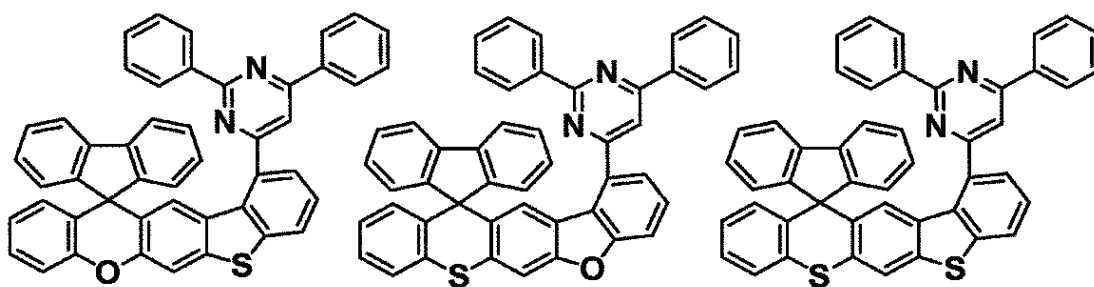
20



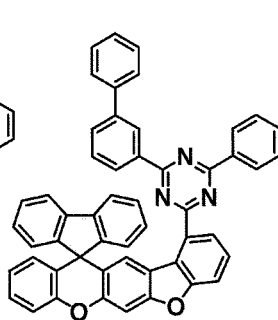
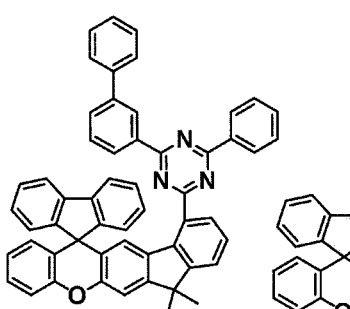
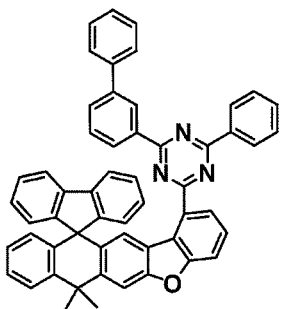
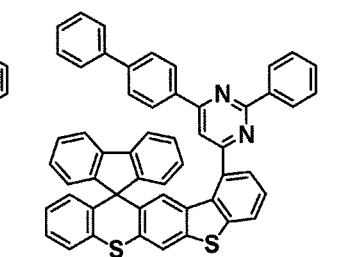
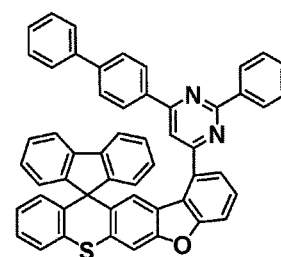
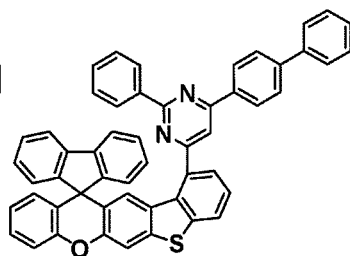
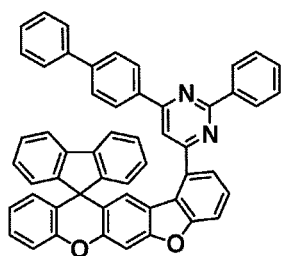
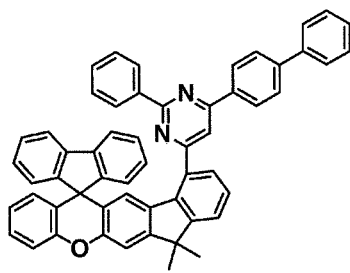
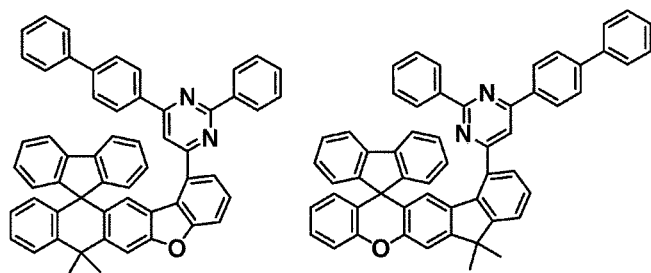
30



40



【化 1 4 1】

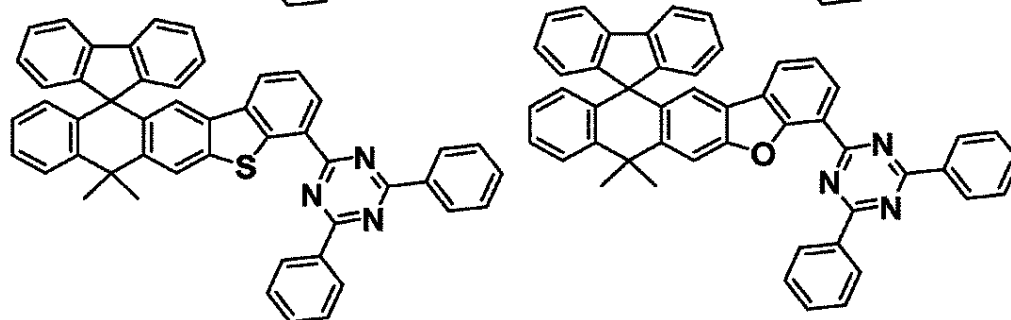
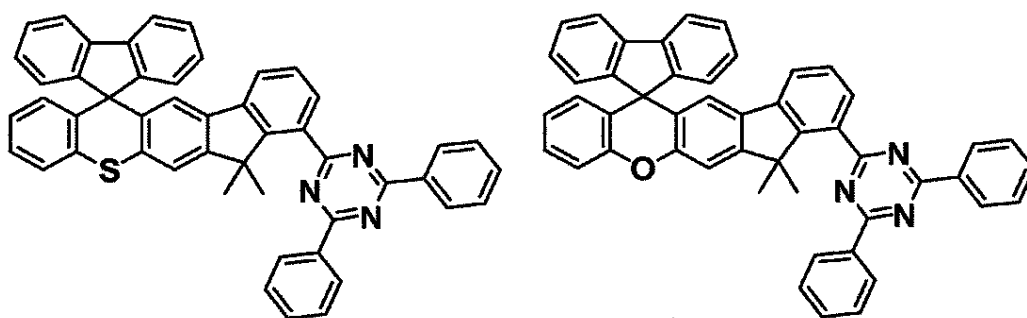
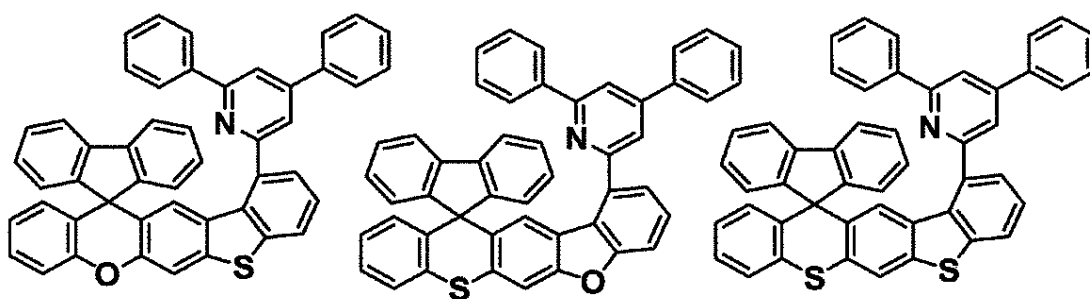
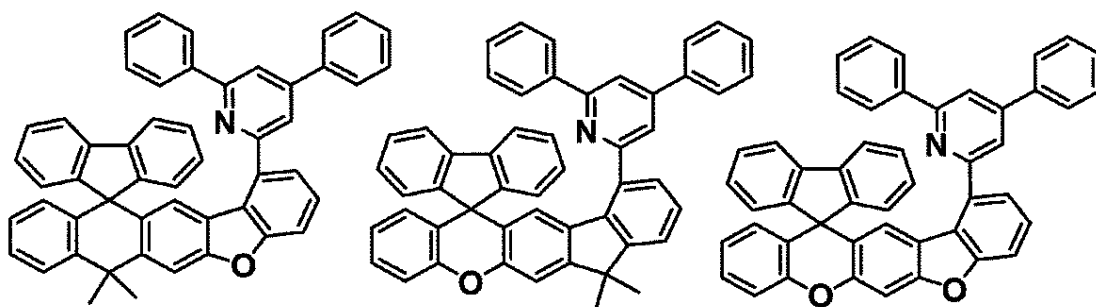
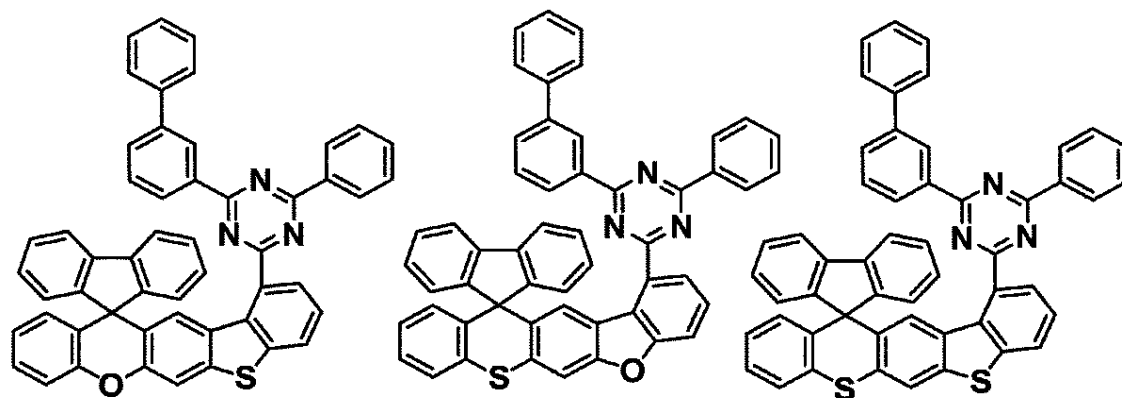


10

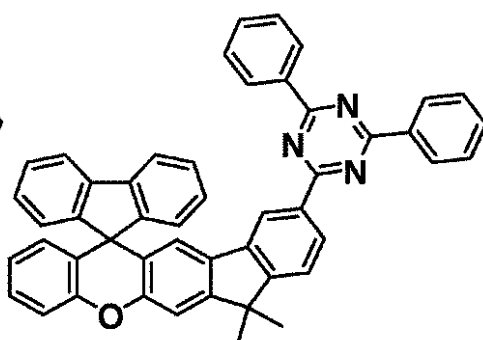
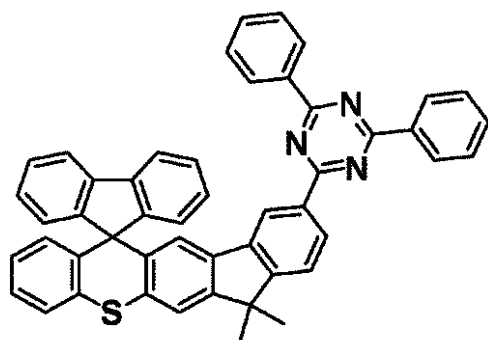
20

30

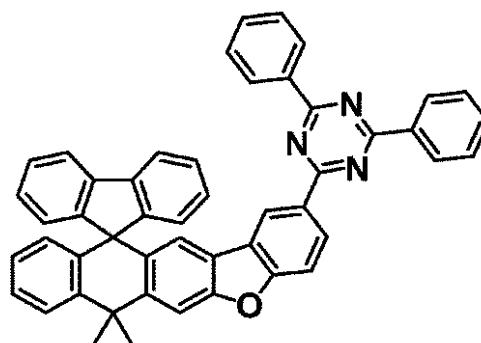
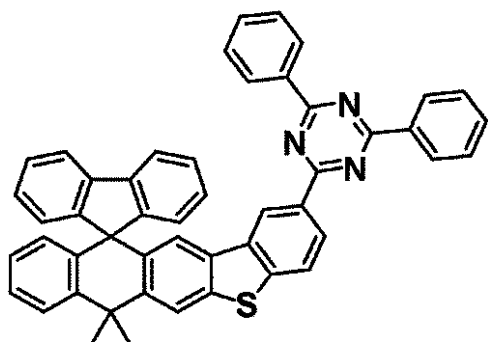
【化 1 4 2】



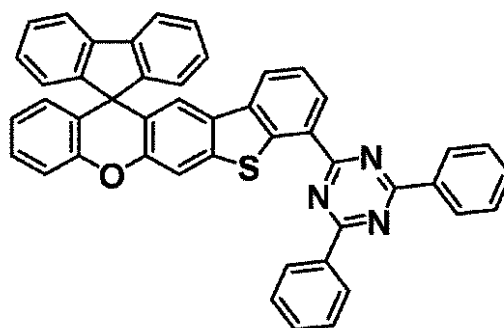
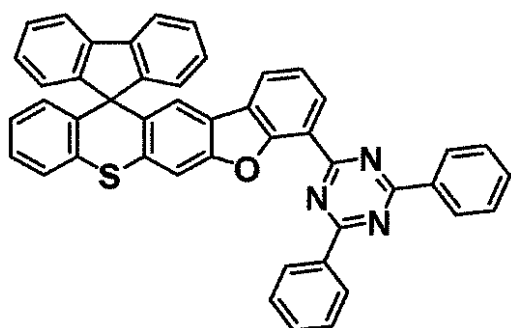
【化 1 4 3】



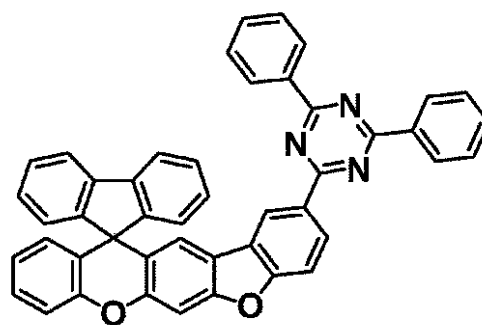
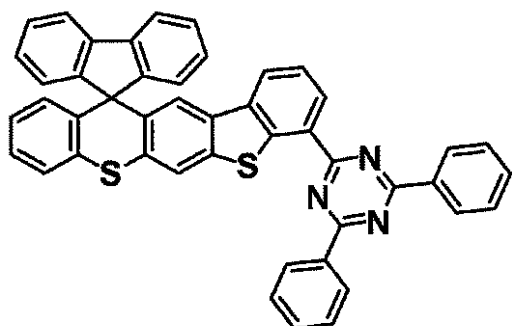
10



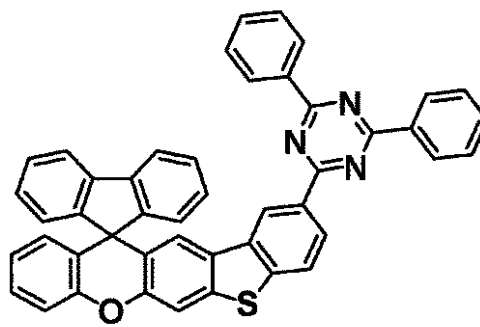
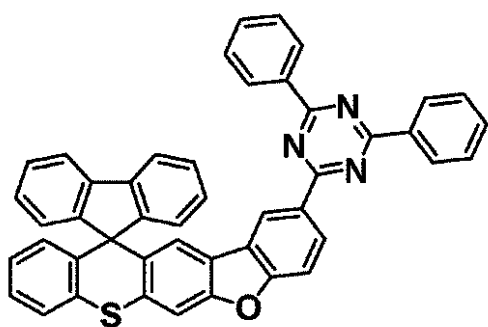
20



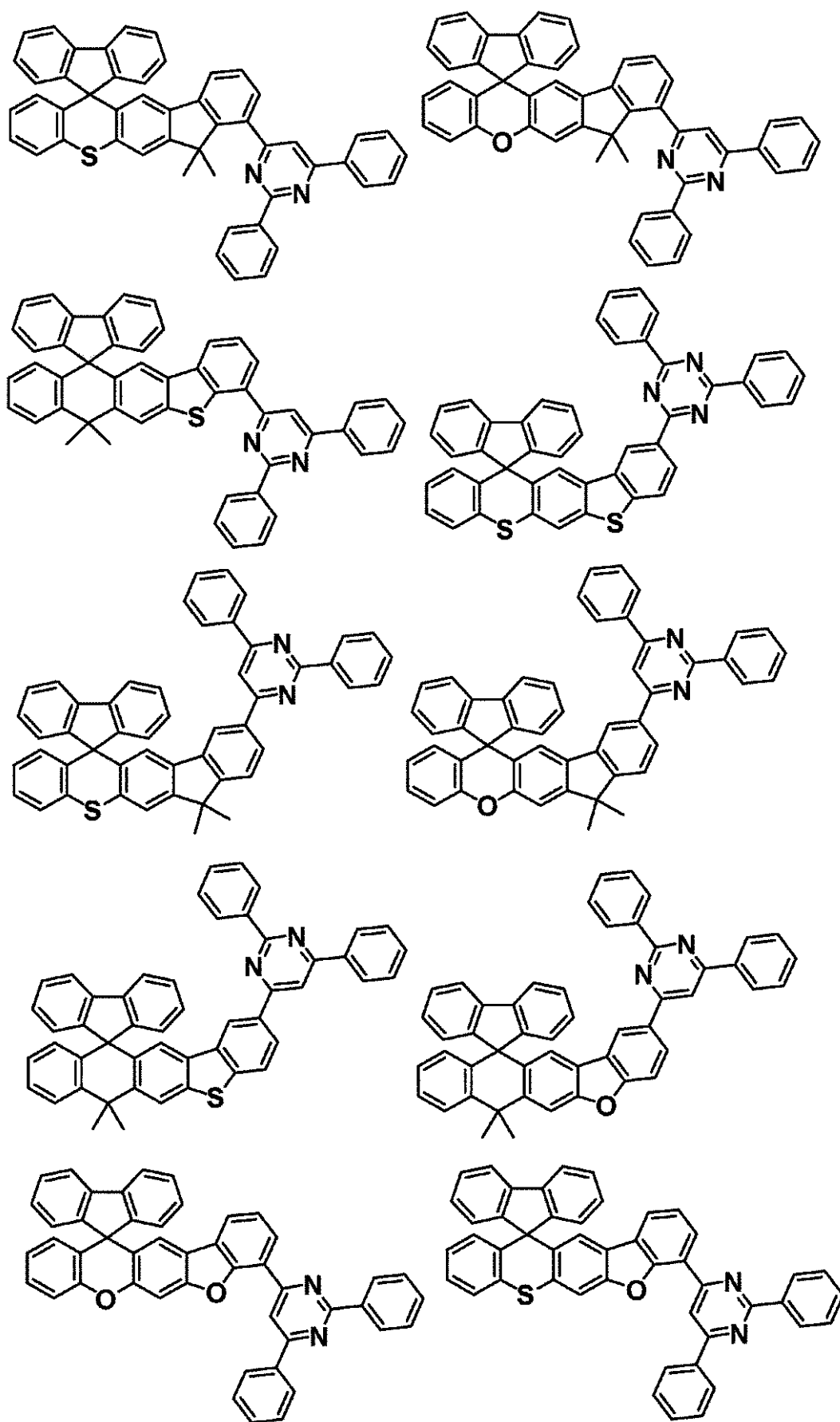
30



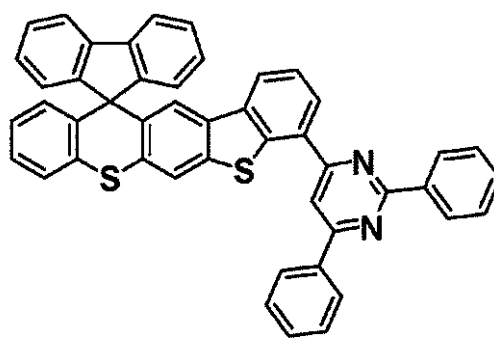
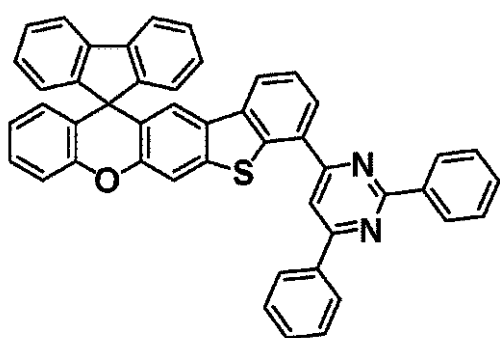
40



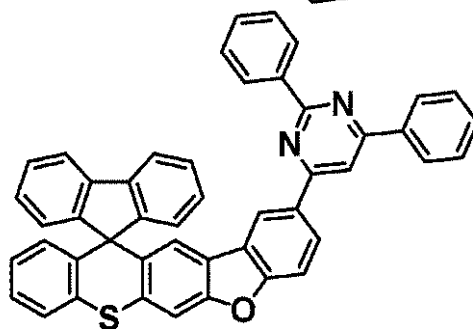
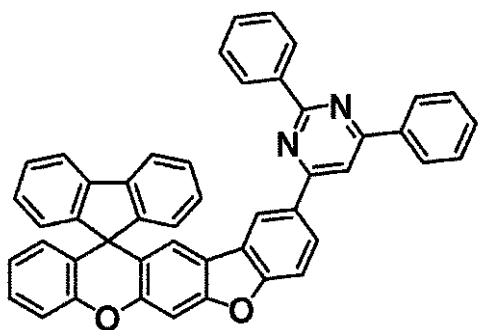
【化 1 4 4】



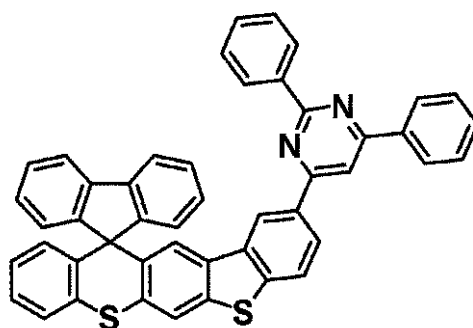
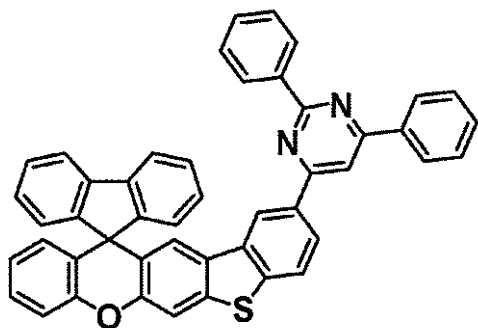
【化 1 4 5】



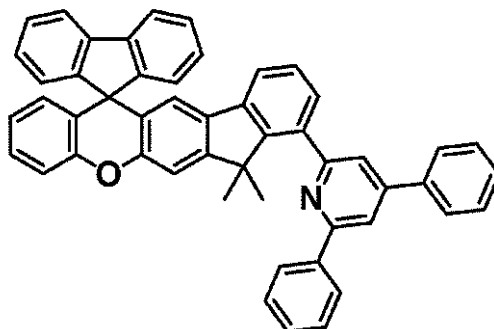
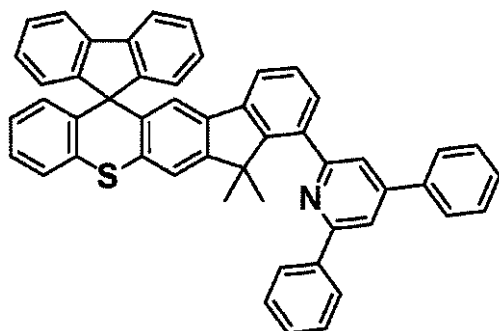
10



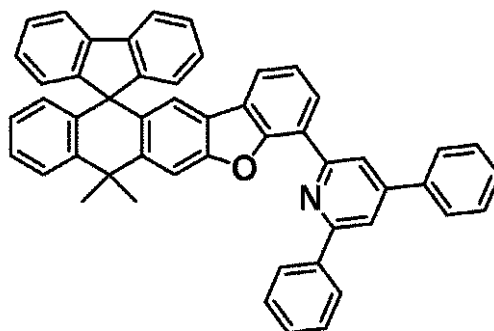
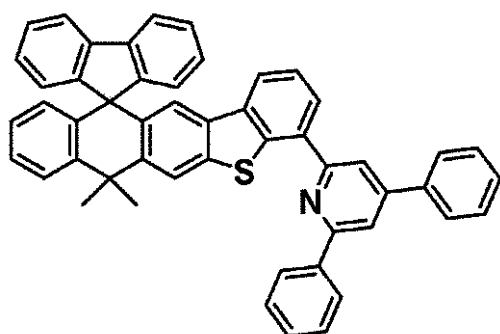
20



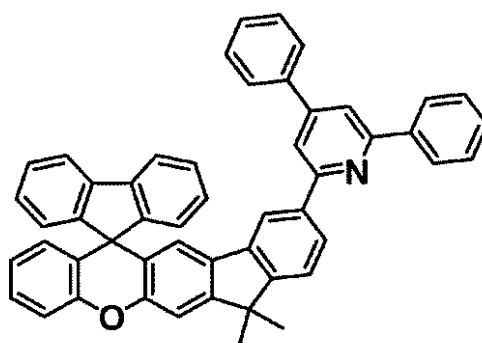
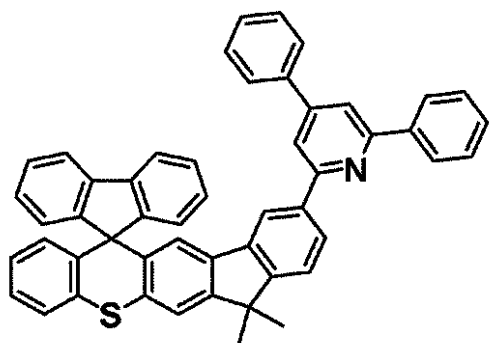
30



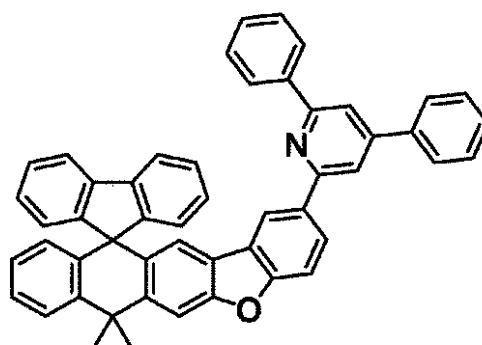
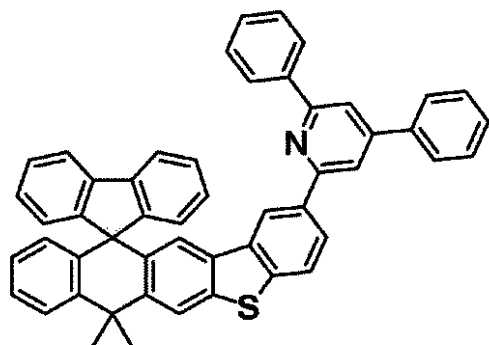
40



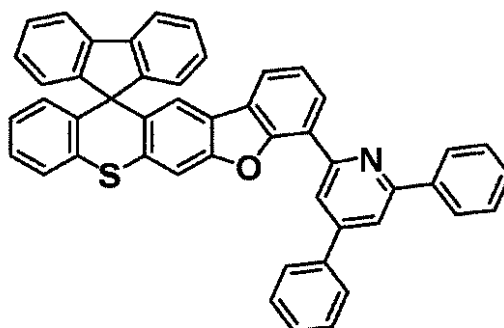
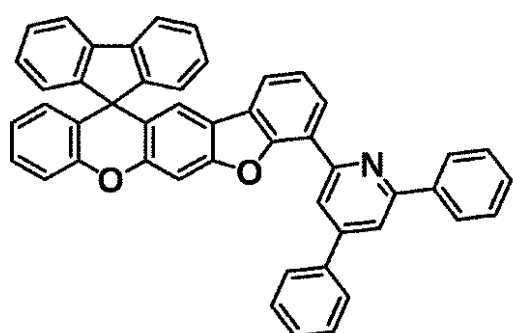
【化 1 4 6】



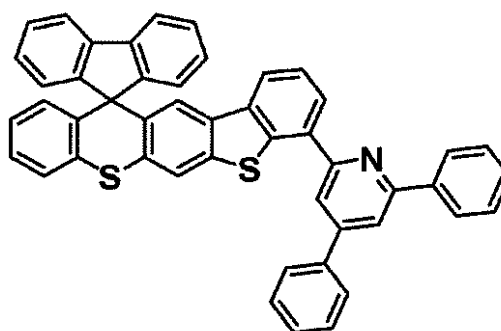
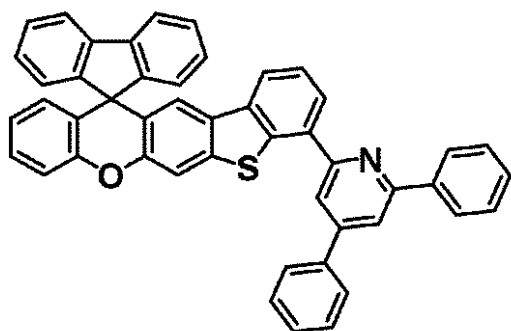
10



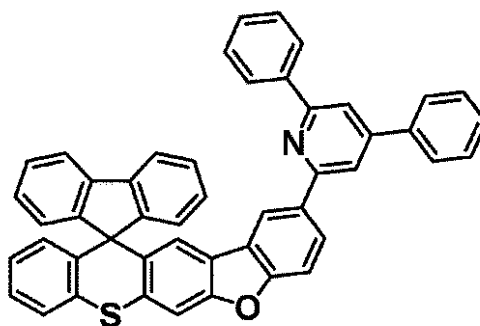
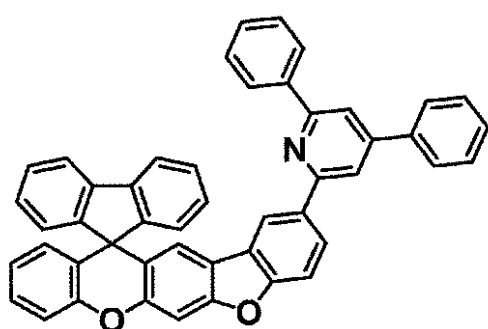
20



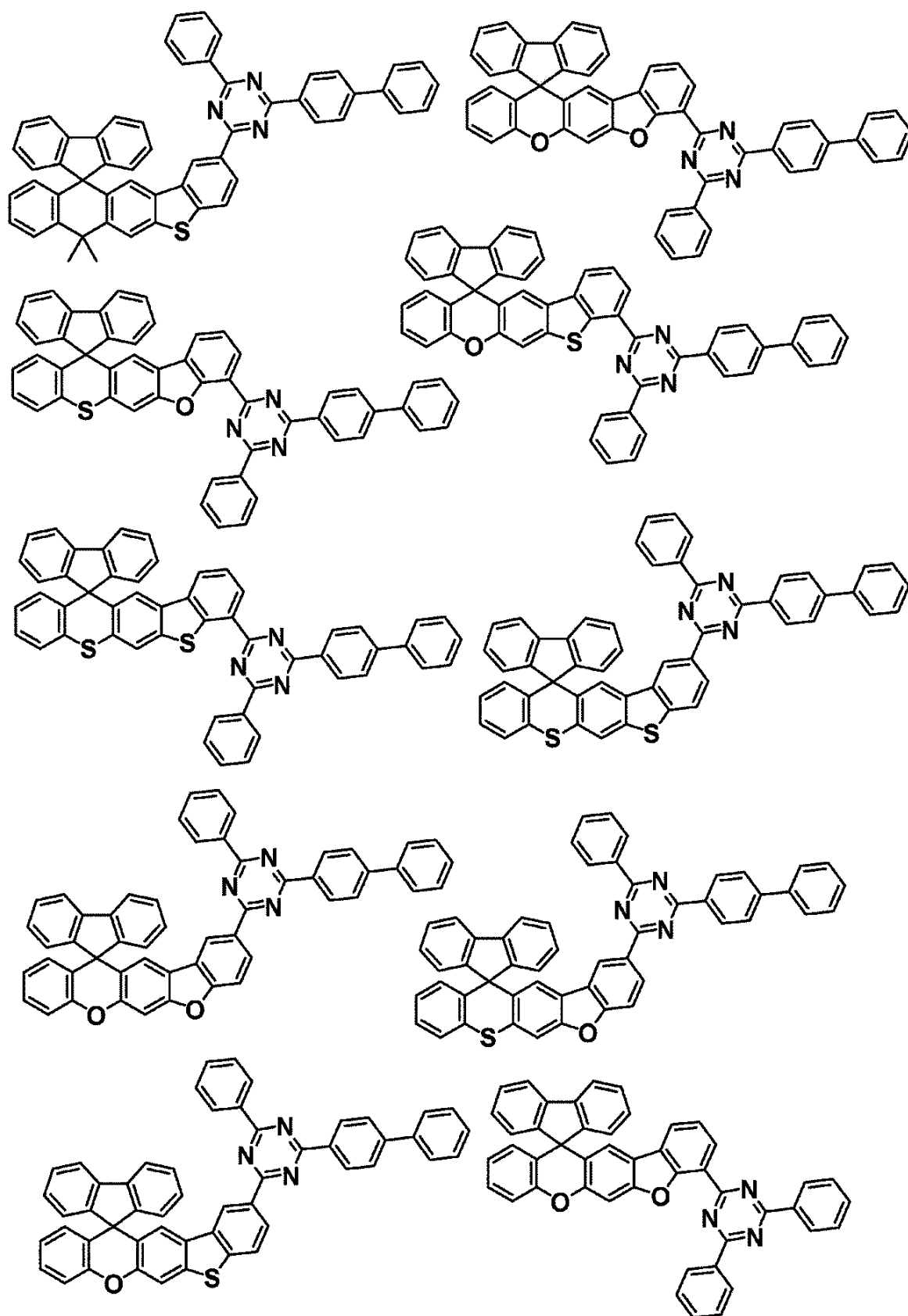
30



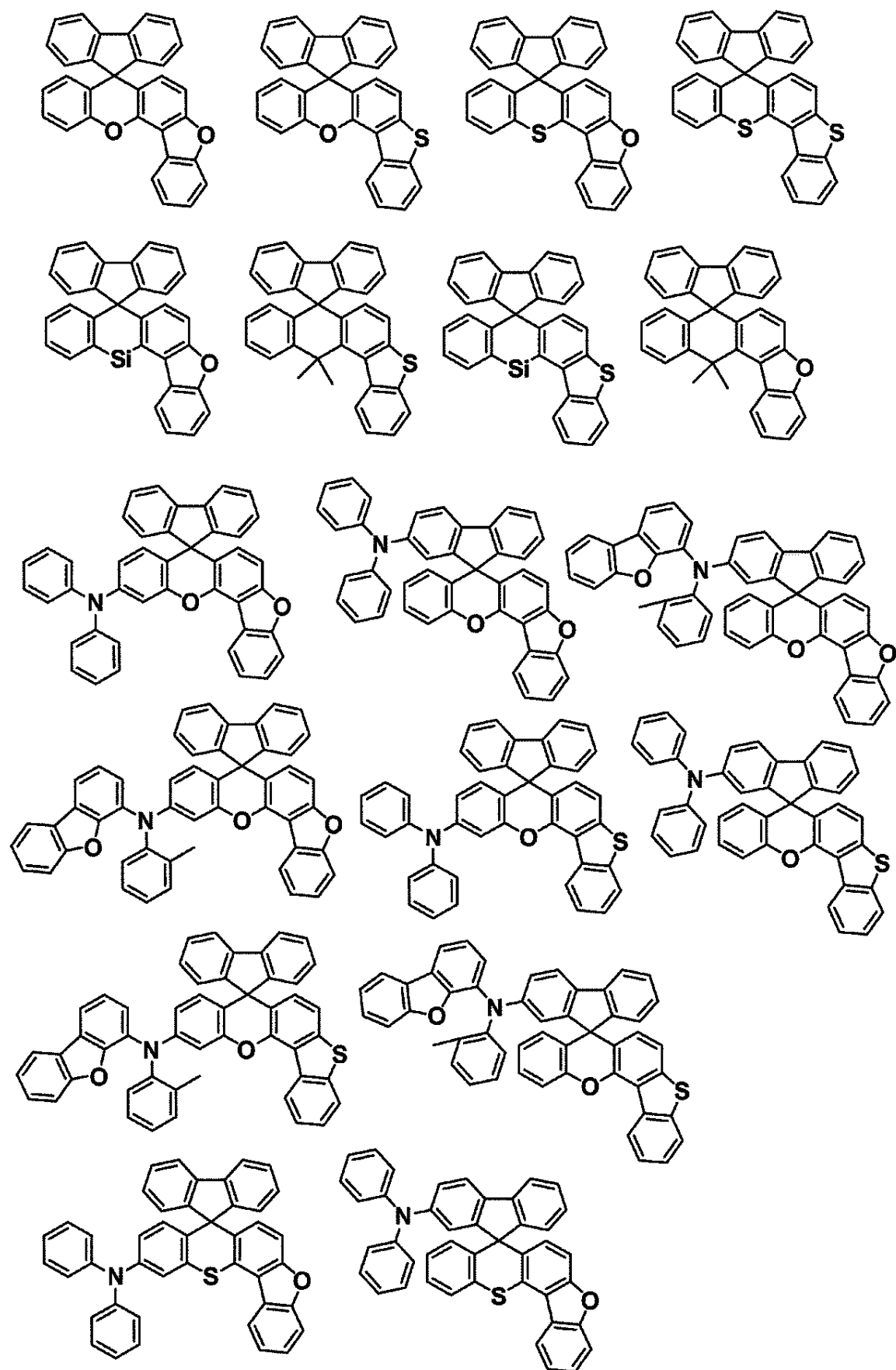
40



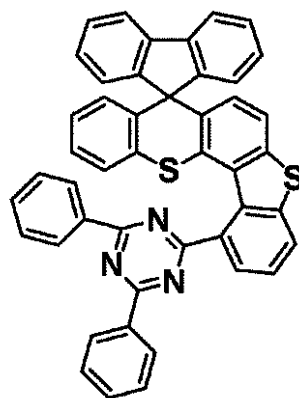
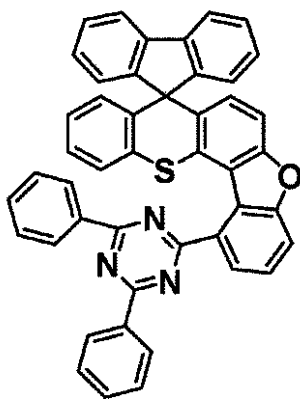
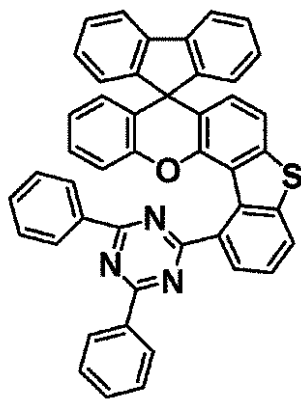
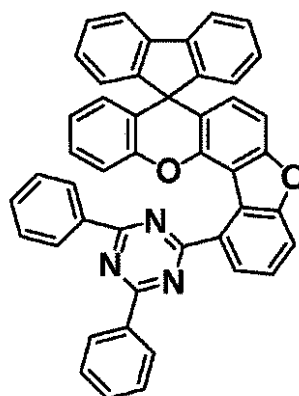
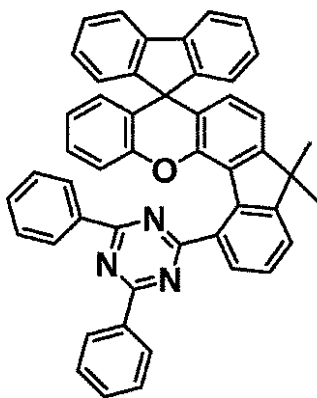
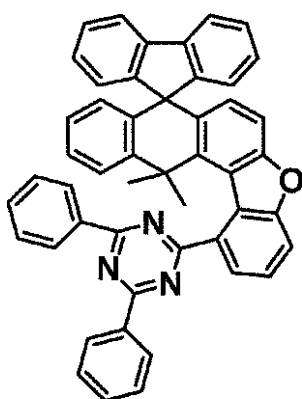
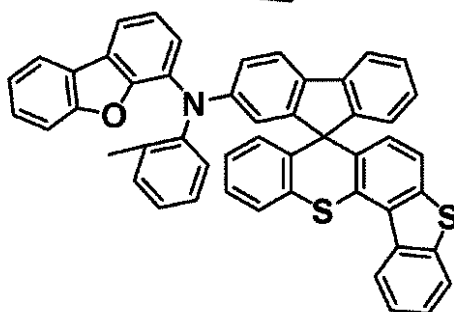
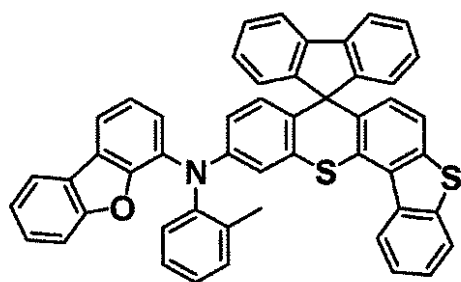
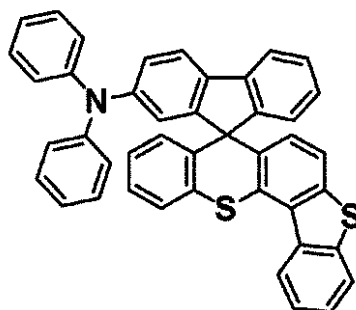
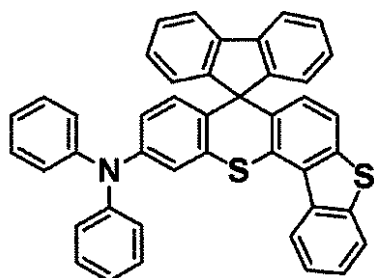
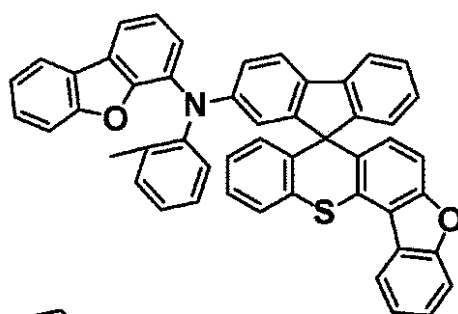
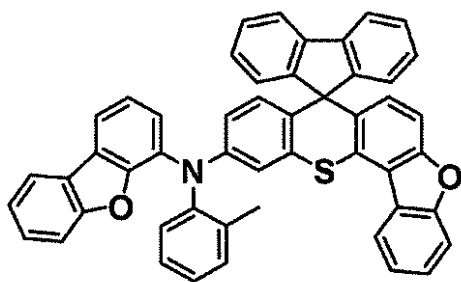
【化 1 4 8】



【化 1 4 9】



【化 1 5 0】



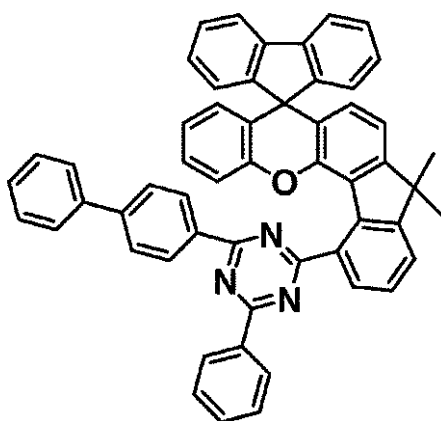
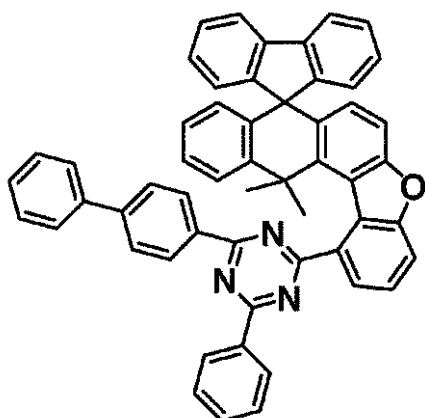
10

20

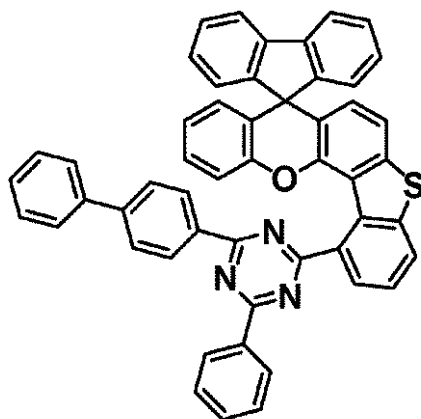
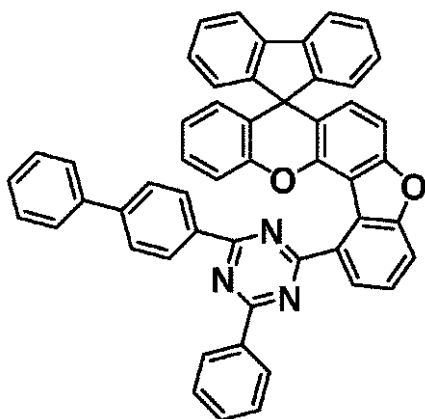
30

40

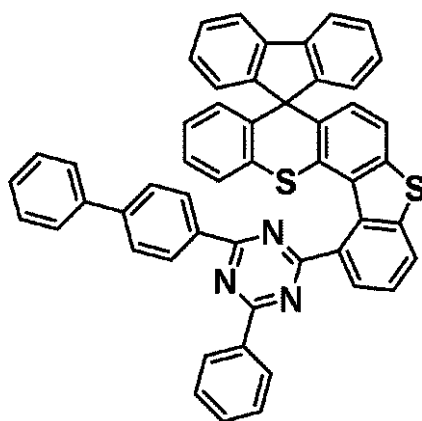
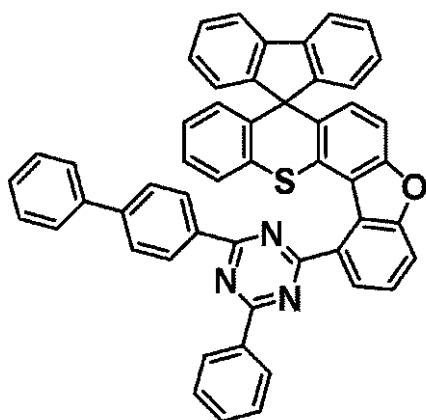
【化 1 5 1】



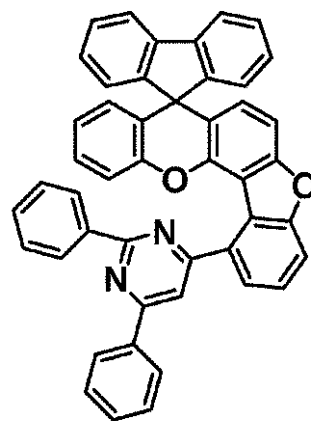
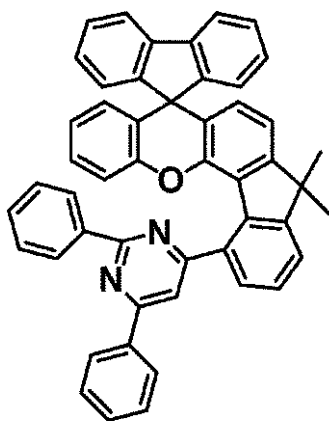
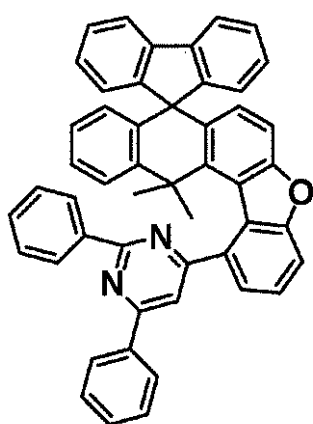
10



20

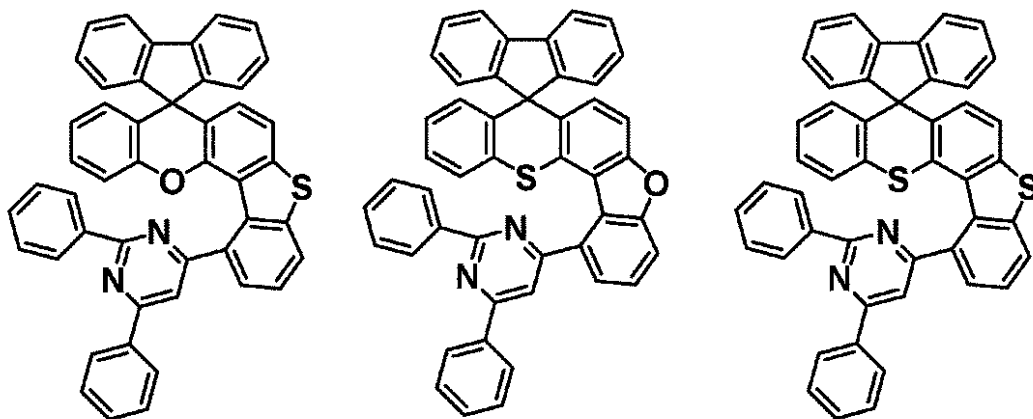


30

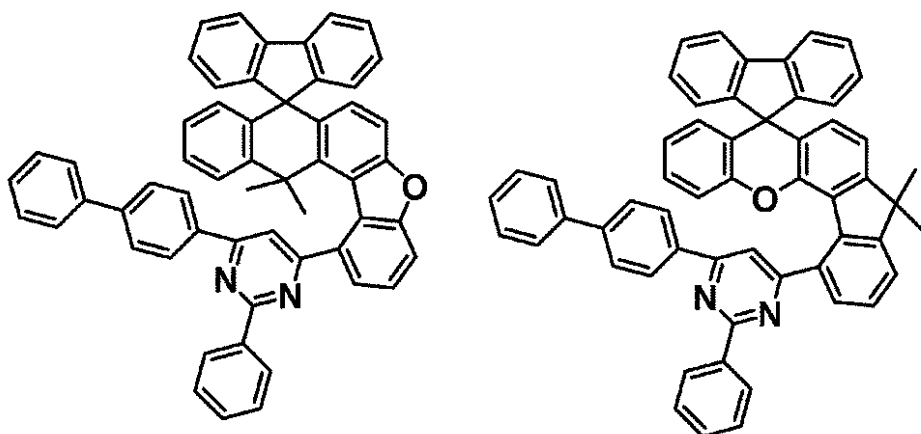


40

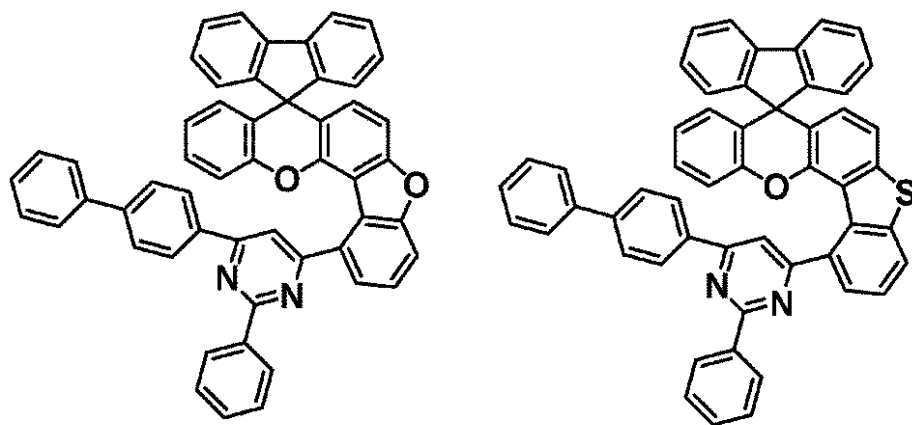
【化 1 5 2】



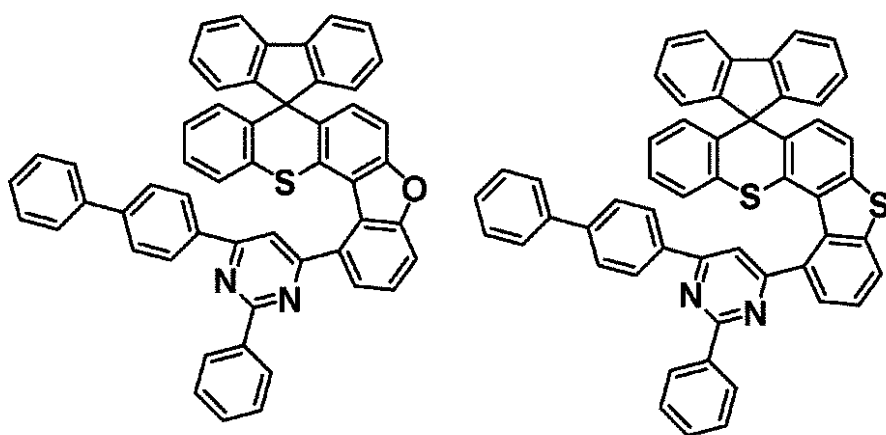
10



20

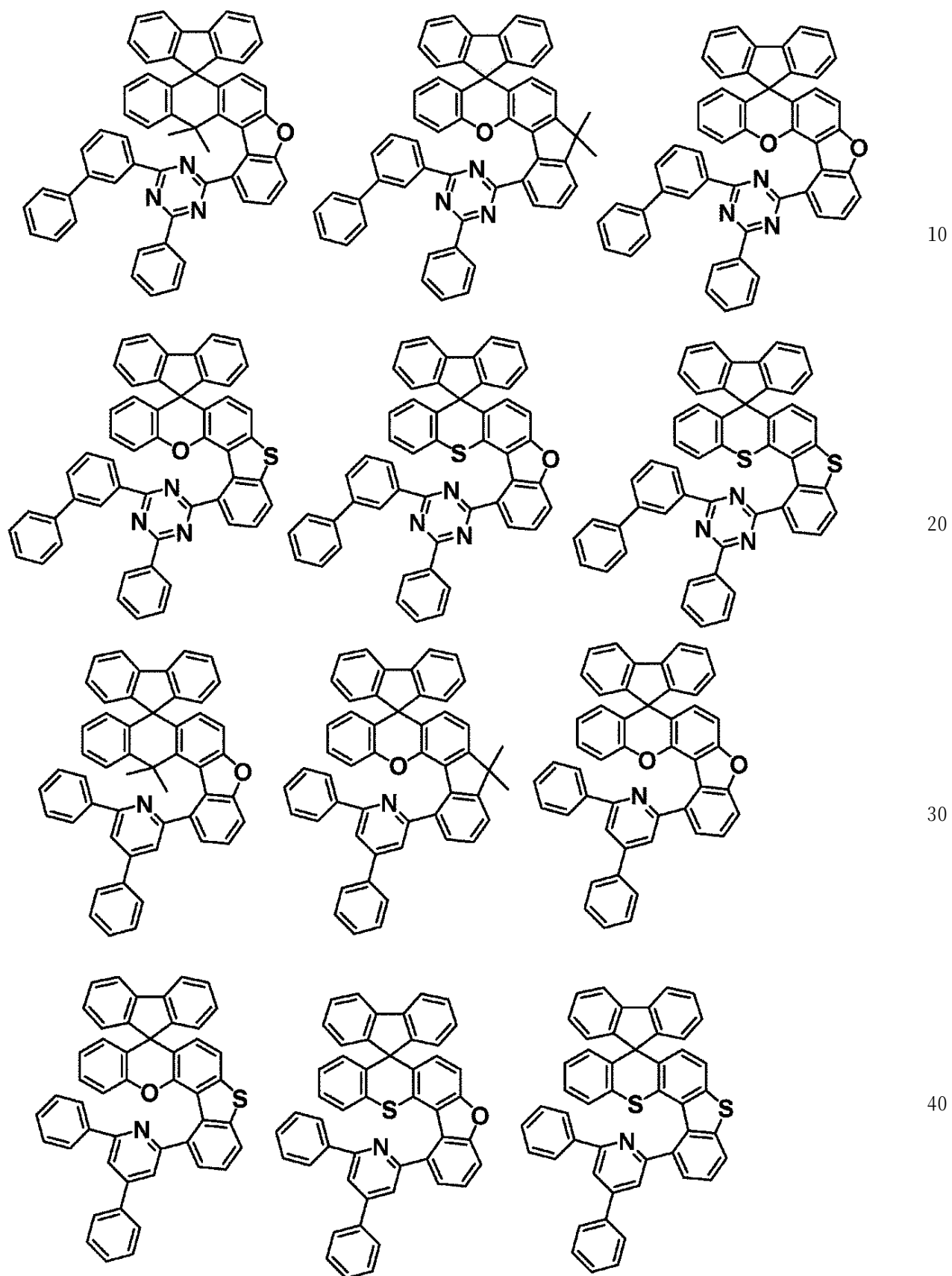


30

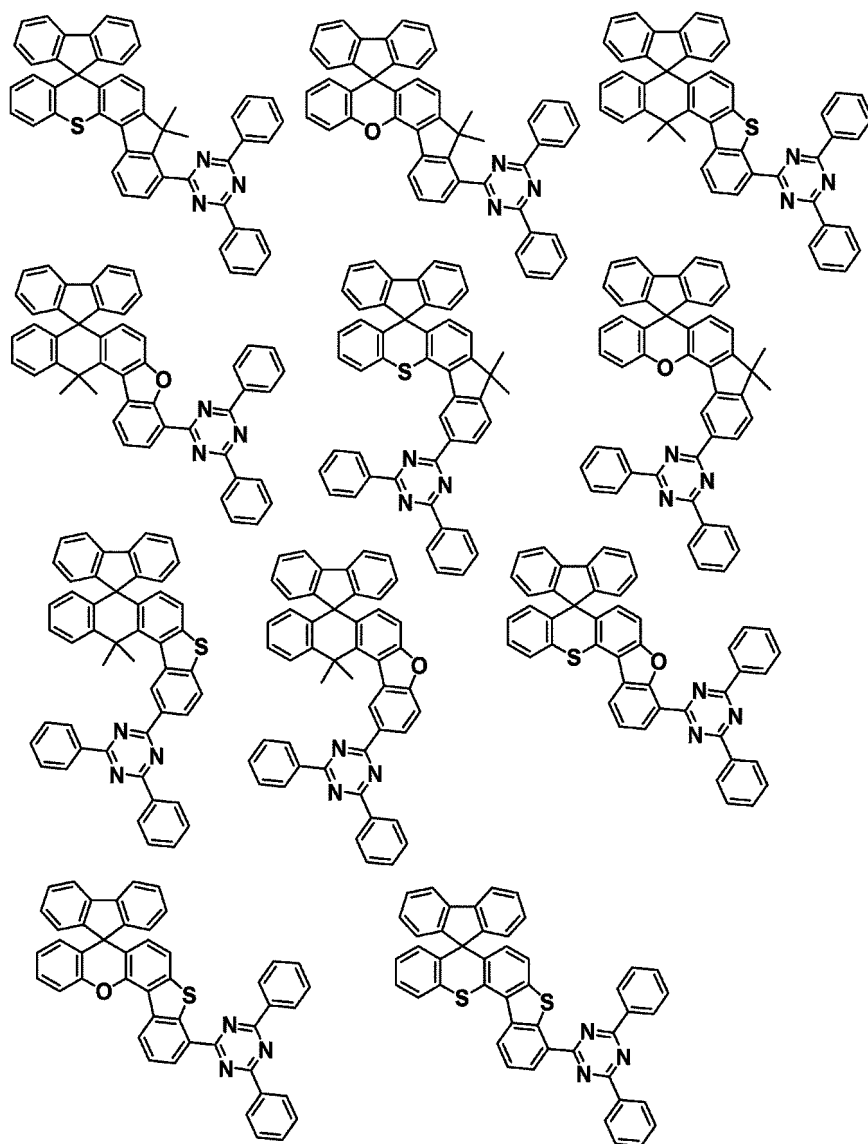


40

【化 1 5 3】



【化 1 5 4】

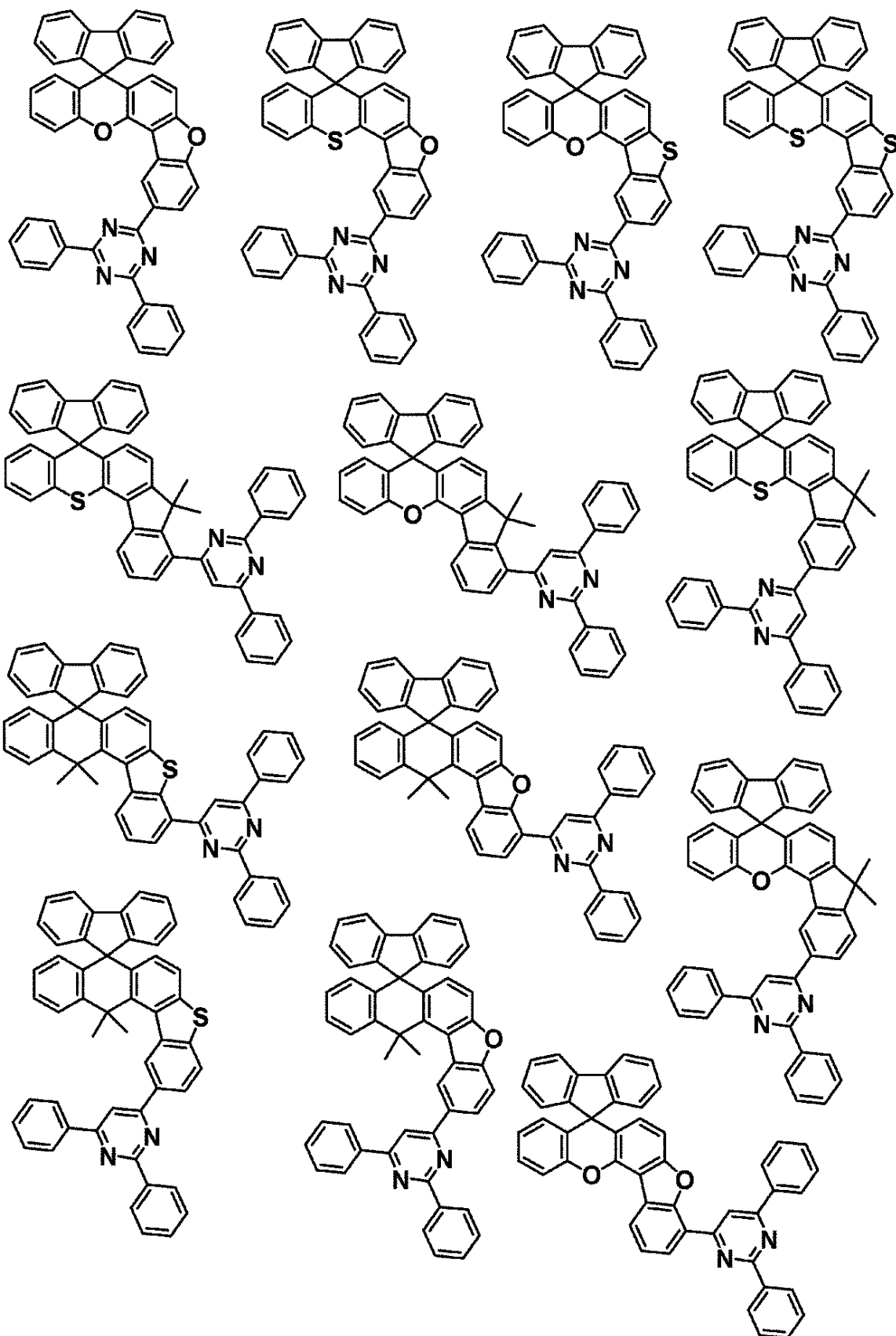


10

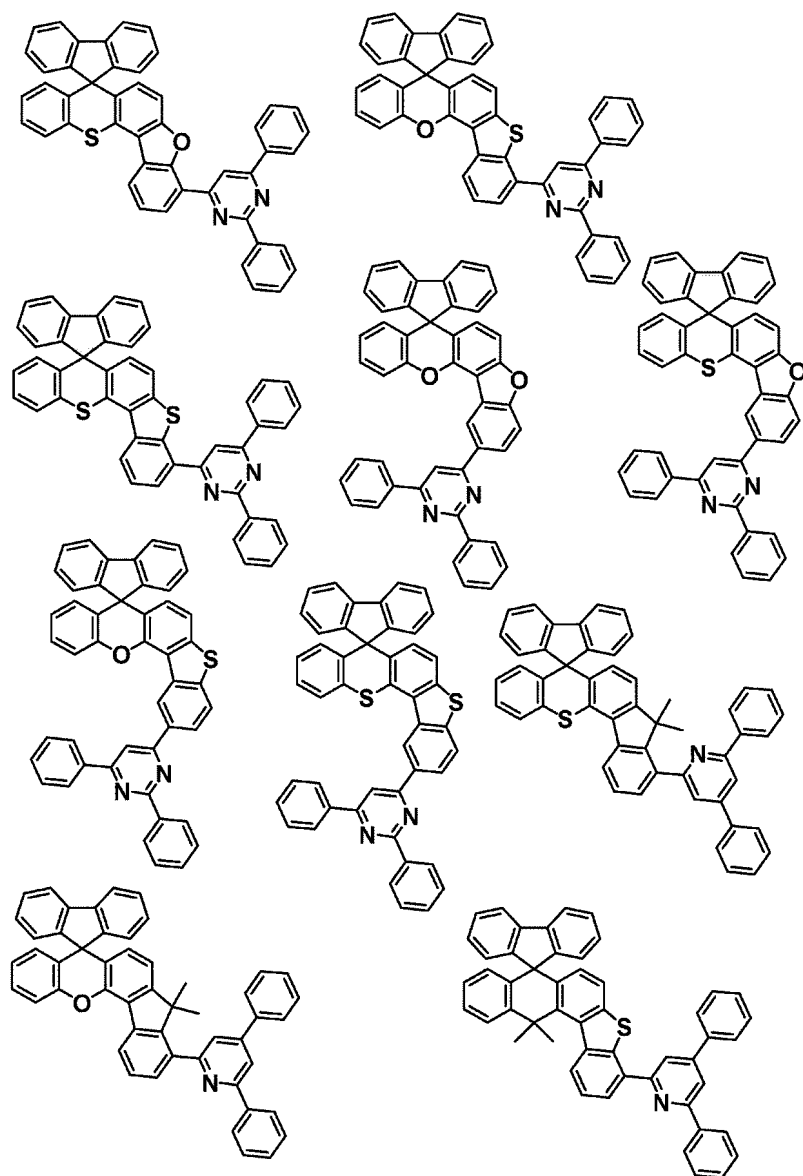
20

30

【化 1 5 5】



【化 1 5 6】

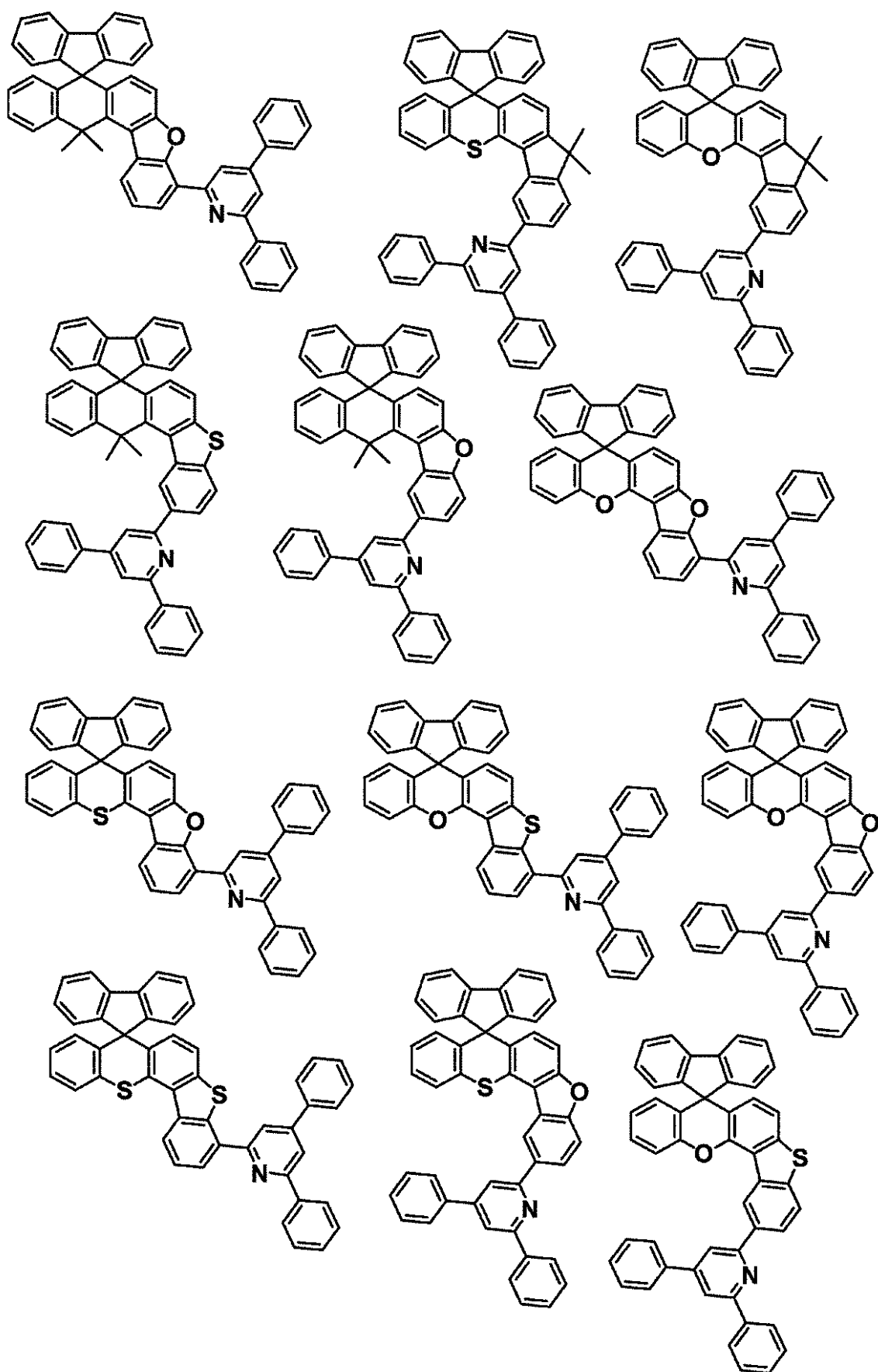


10

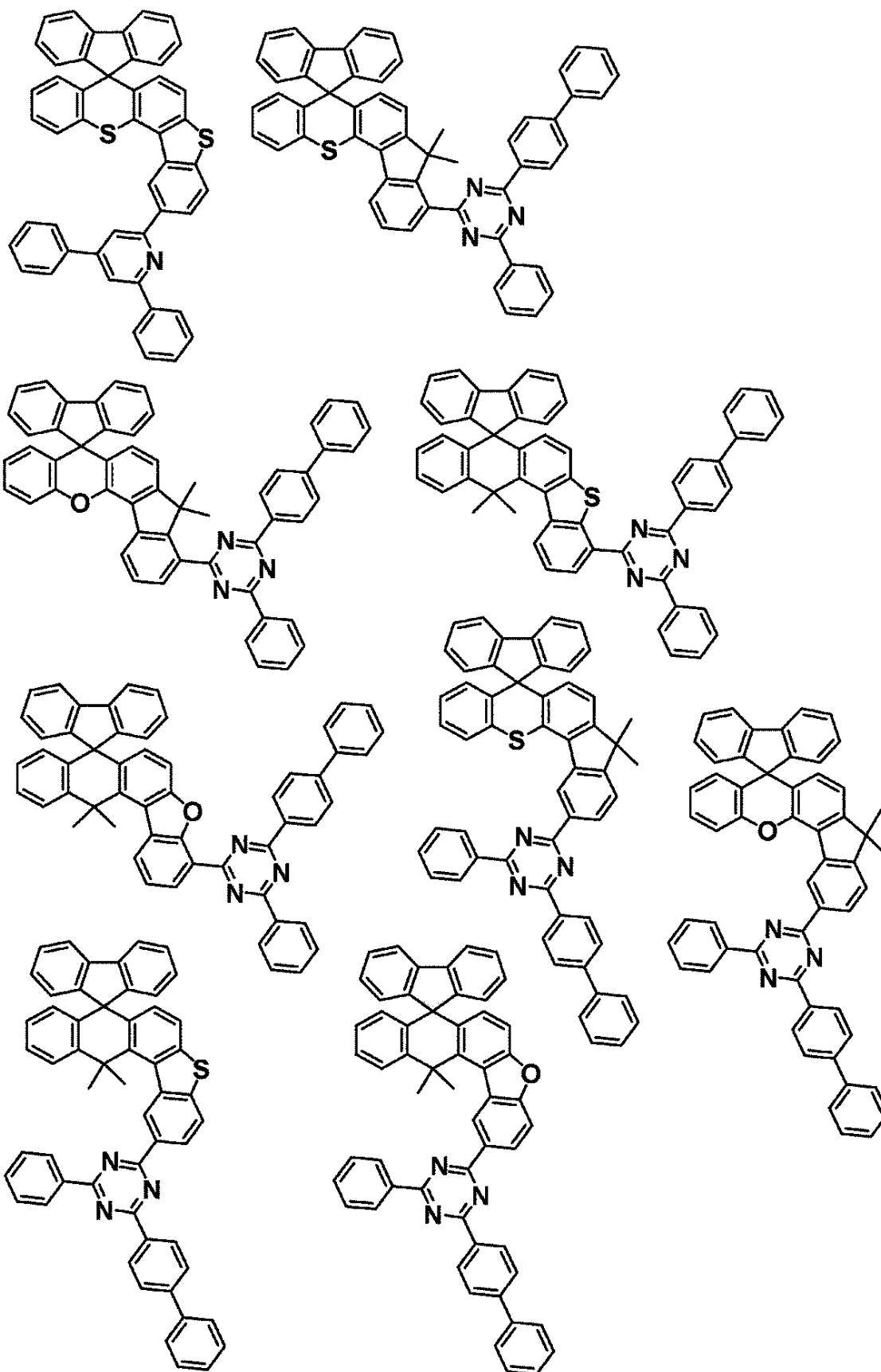
20

30

【化 1 5 7】



【化 1 5 8】



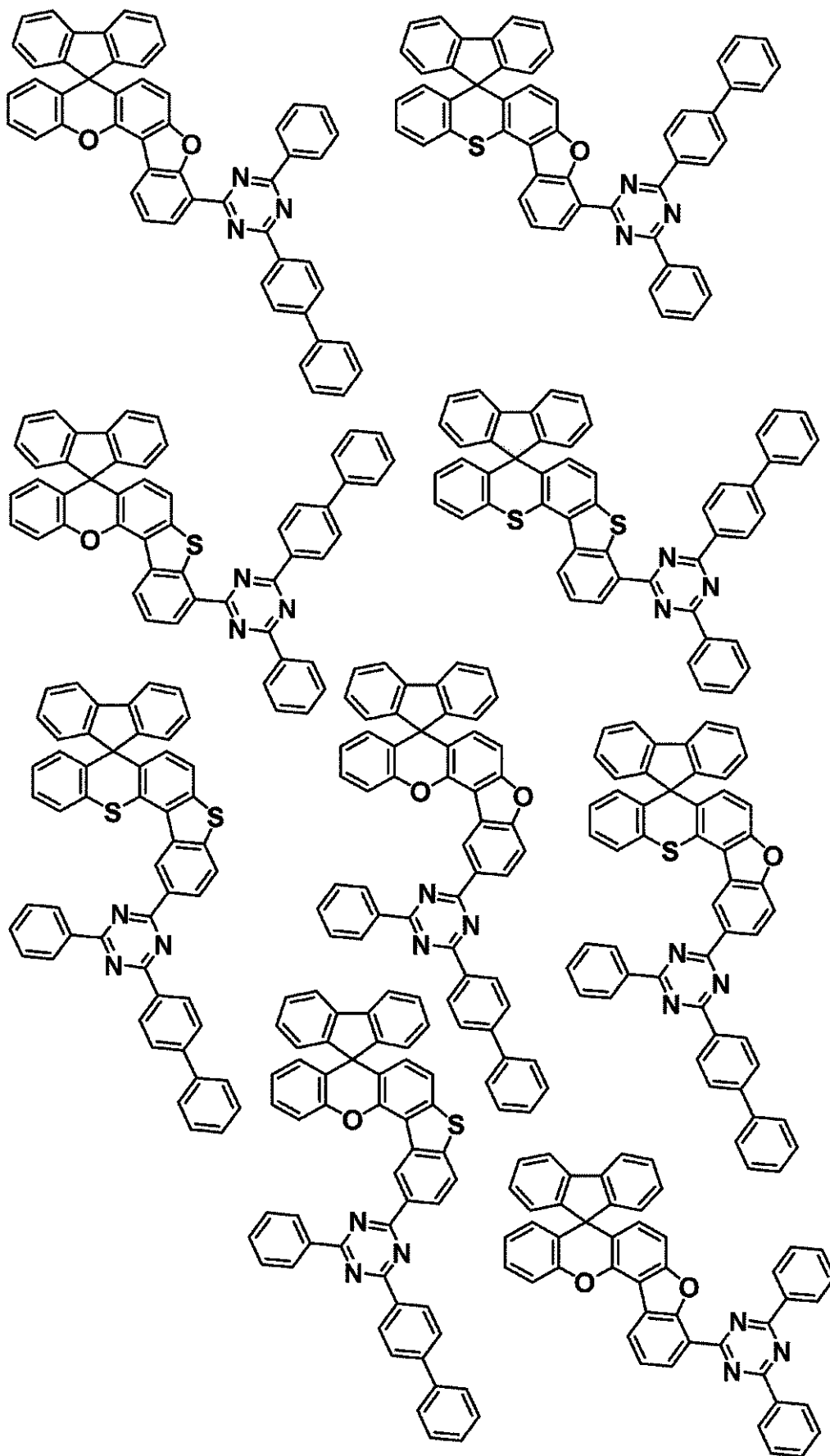
10

20

30

40

【化 1 5 9】



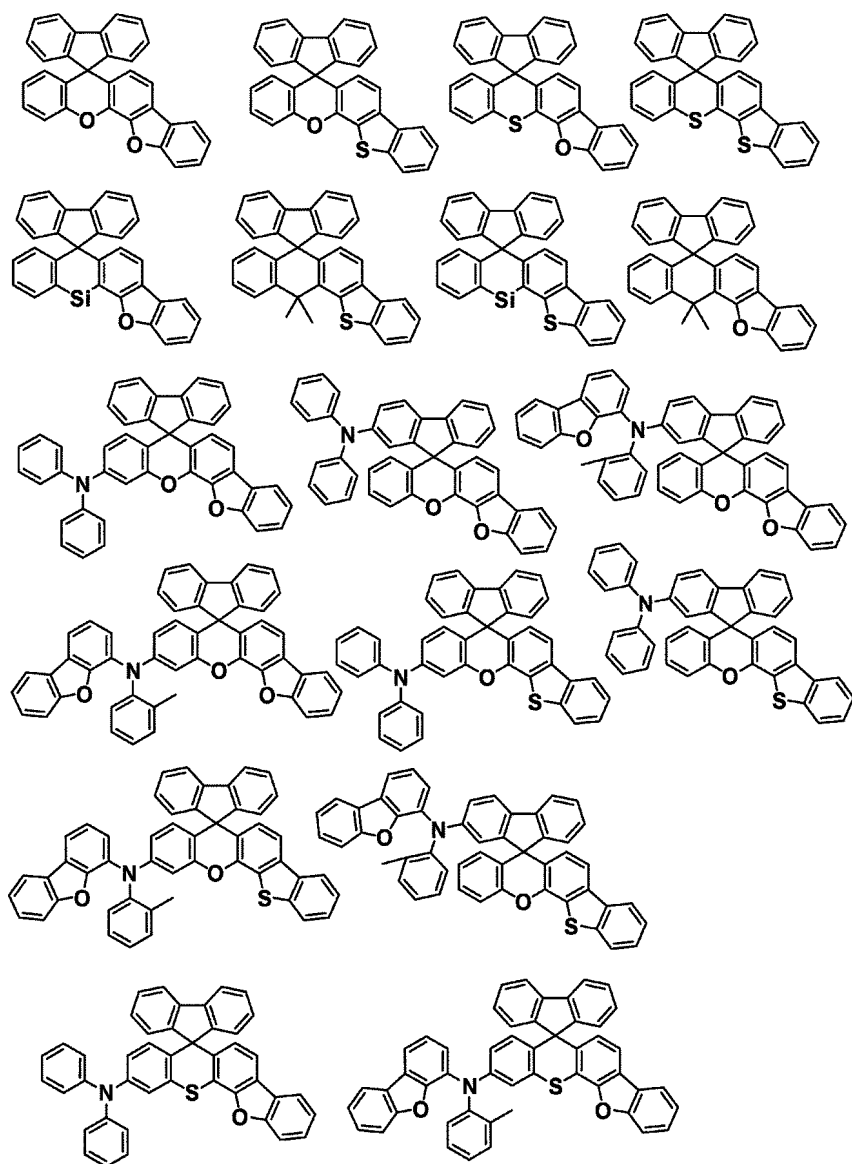
10

20

30

40

【化 1 6 0】

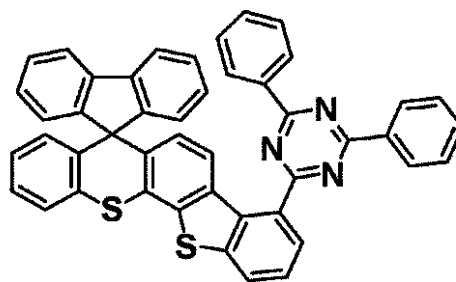
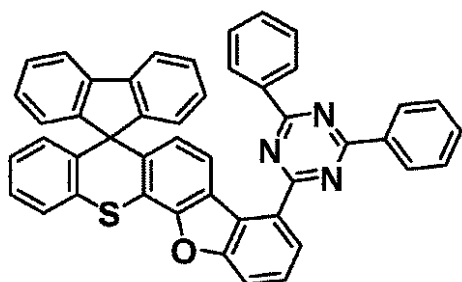
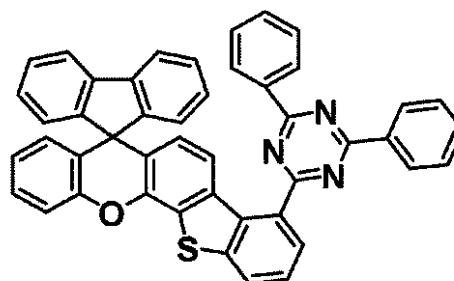
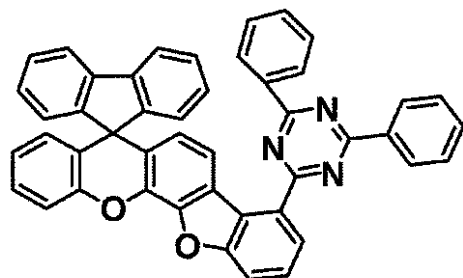
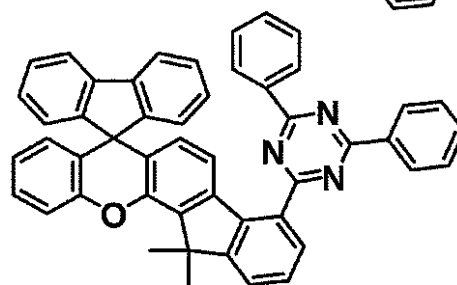
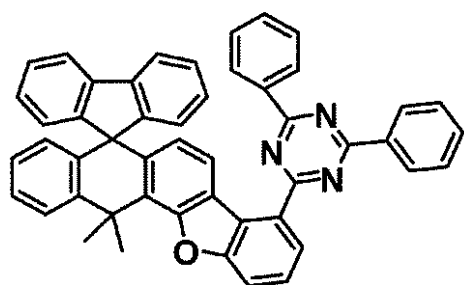
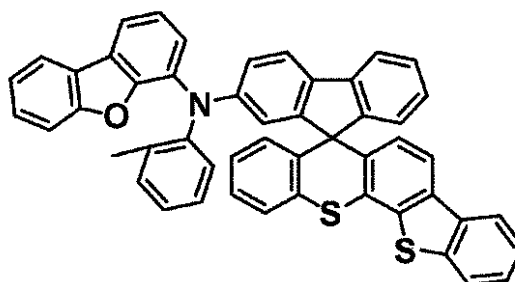
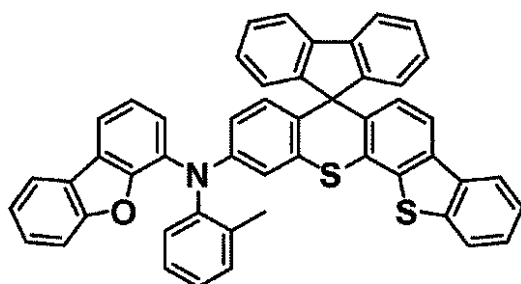
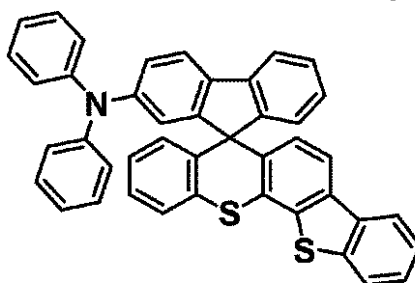
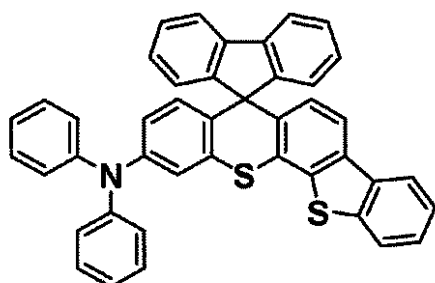
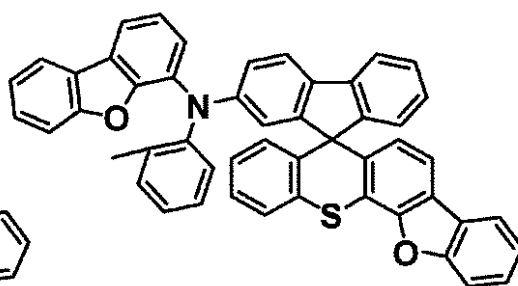
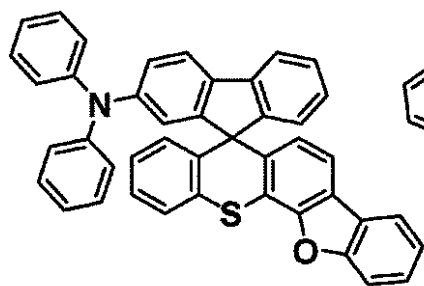


10

20

30

【化 1 6 1】



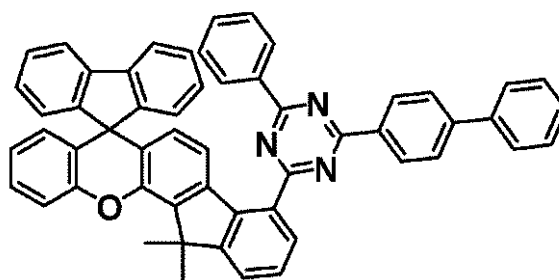
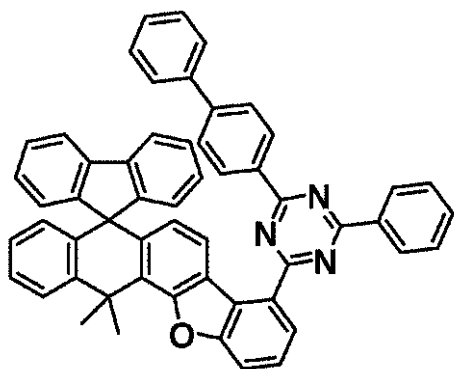
10

20

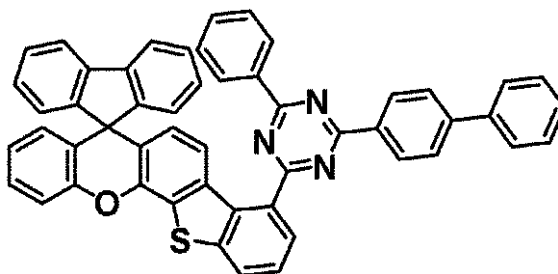
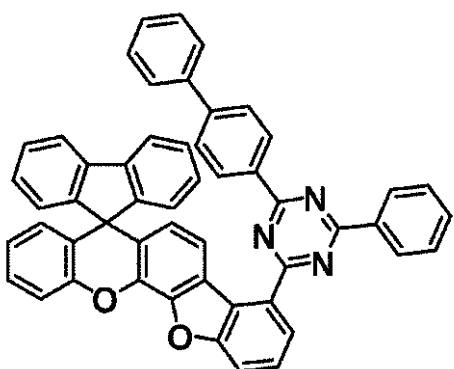
30

40

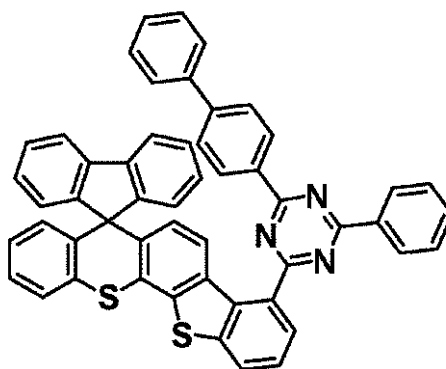
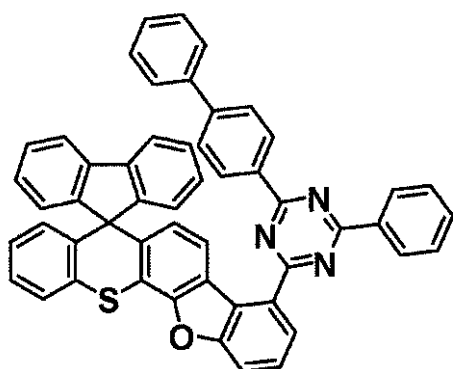
【化 1 6 2】



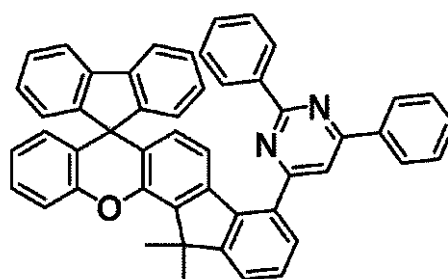
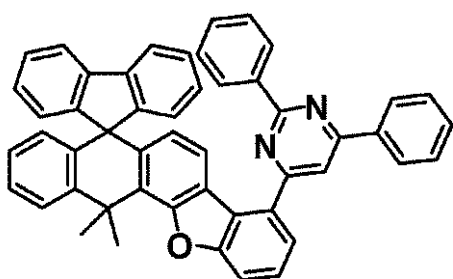
10



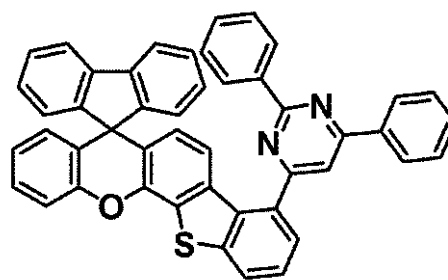
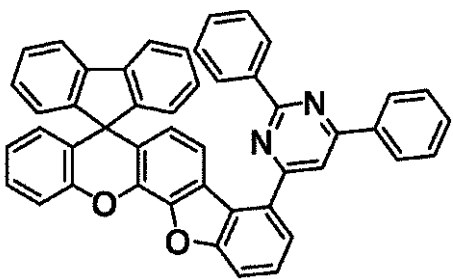
20



30

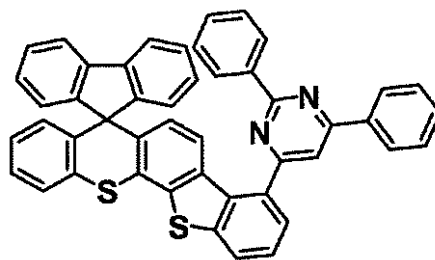
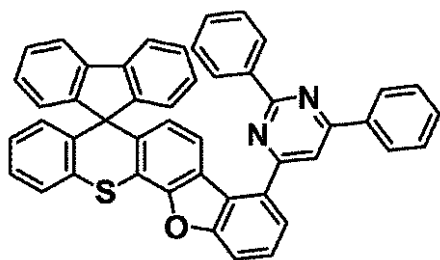


40

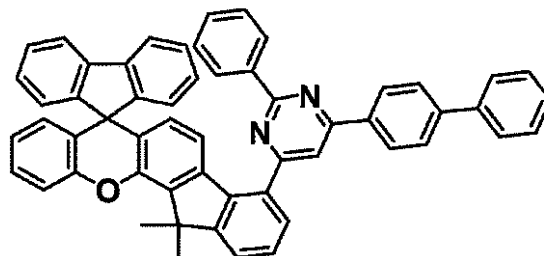
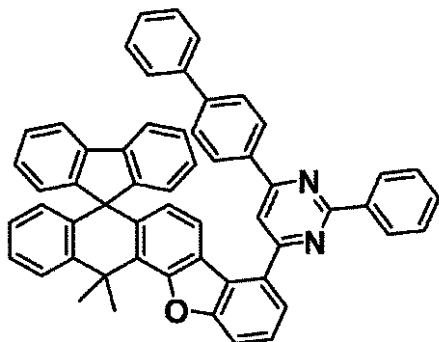


...

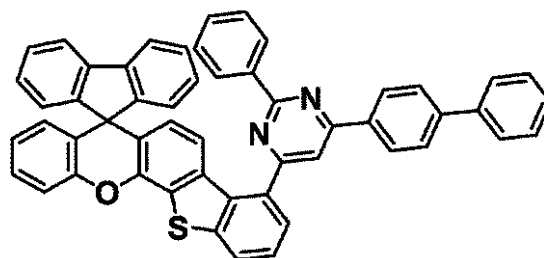
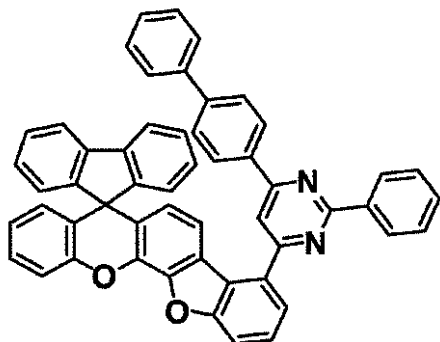
【化 1 6 3】



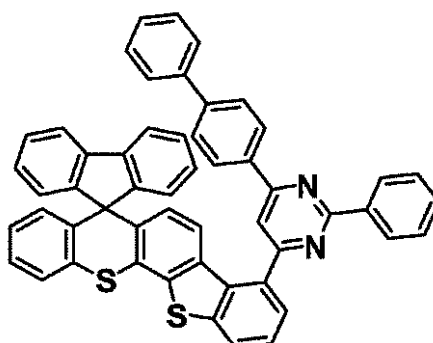
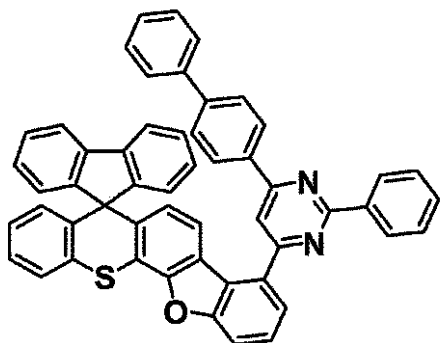
10



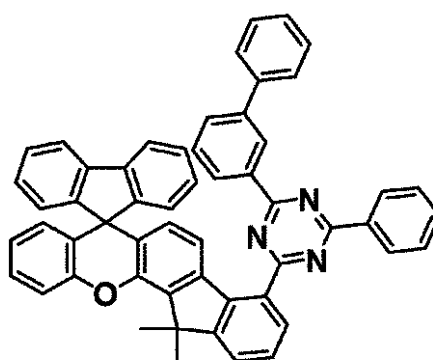
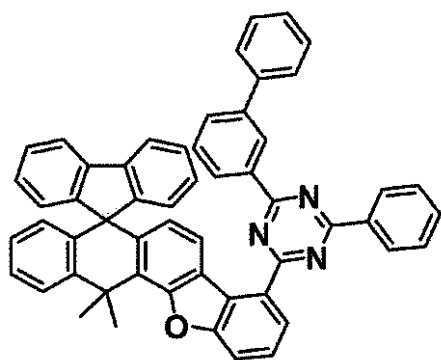
20



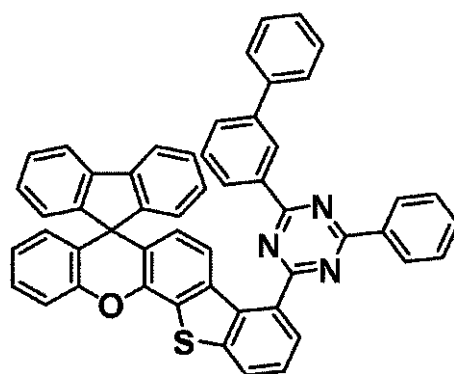
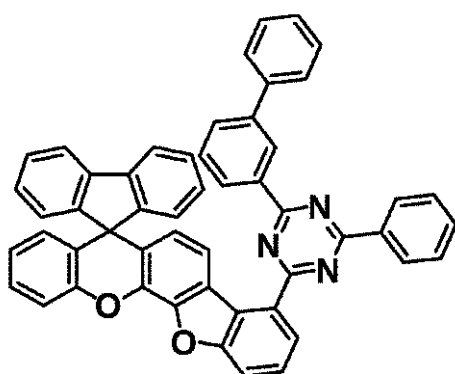
30



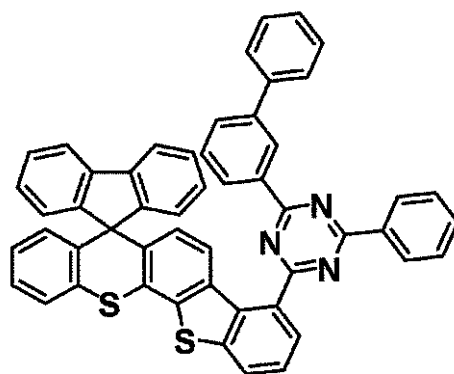
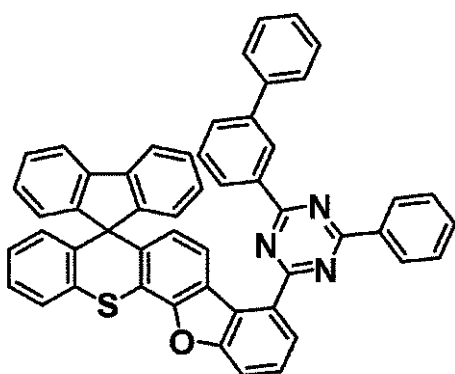
40



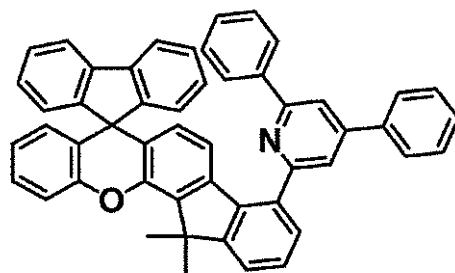
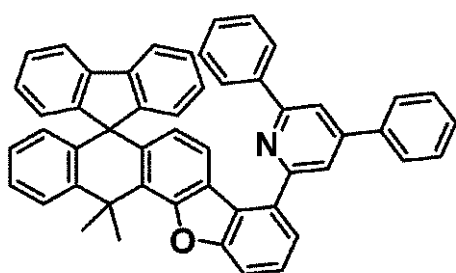
【化 1 6 4】



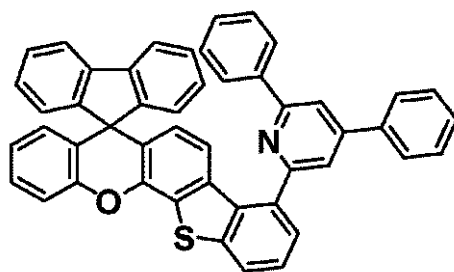
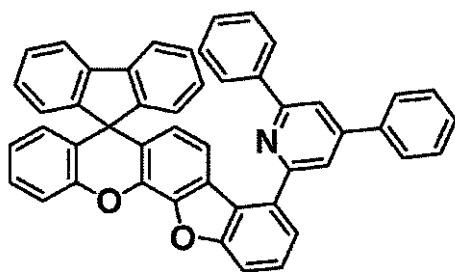
10



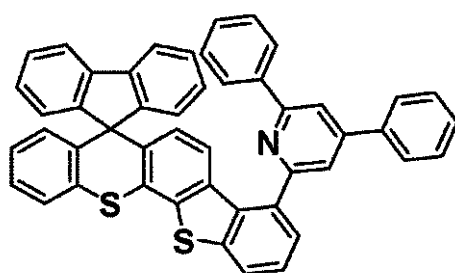
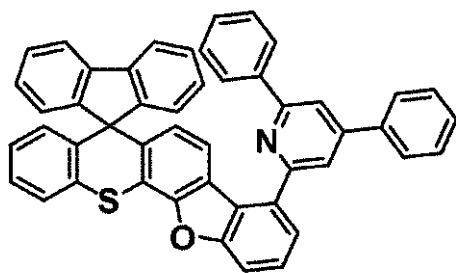
20



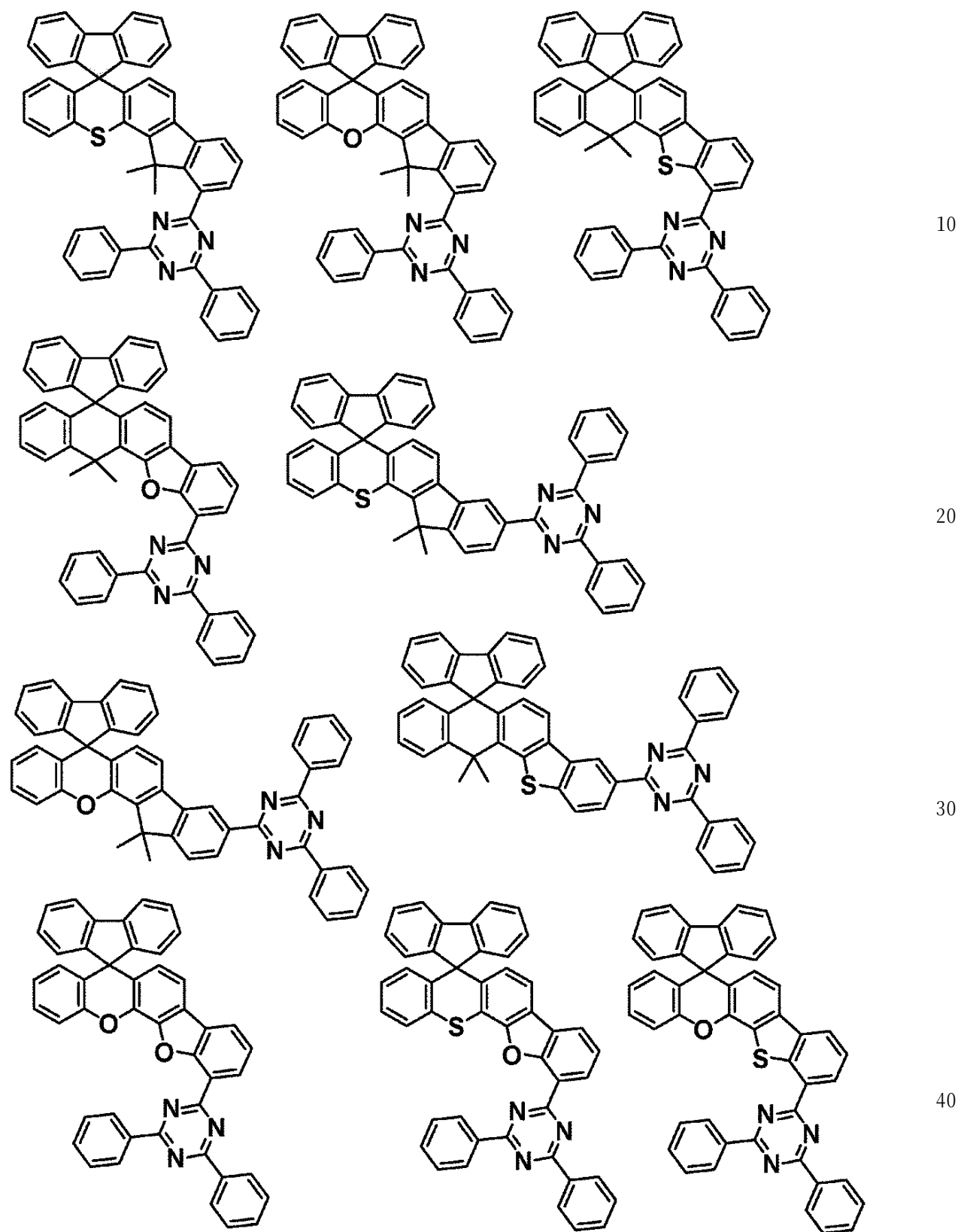
30



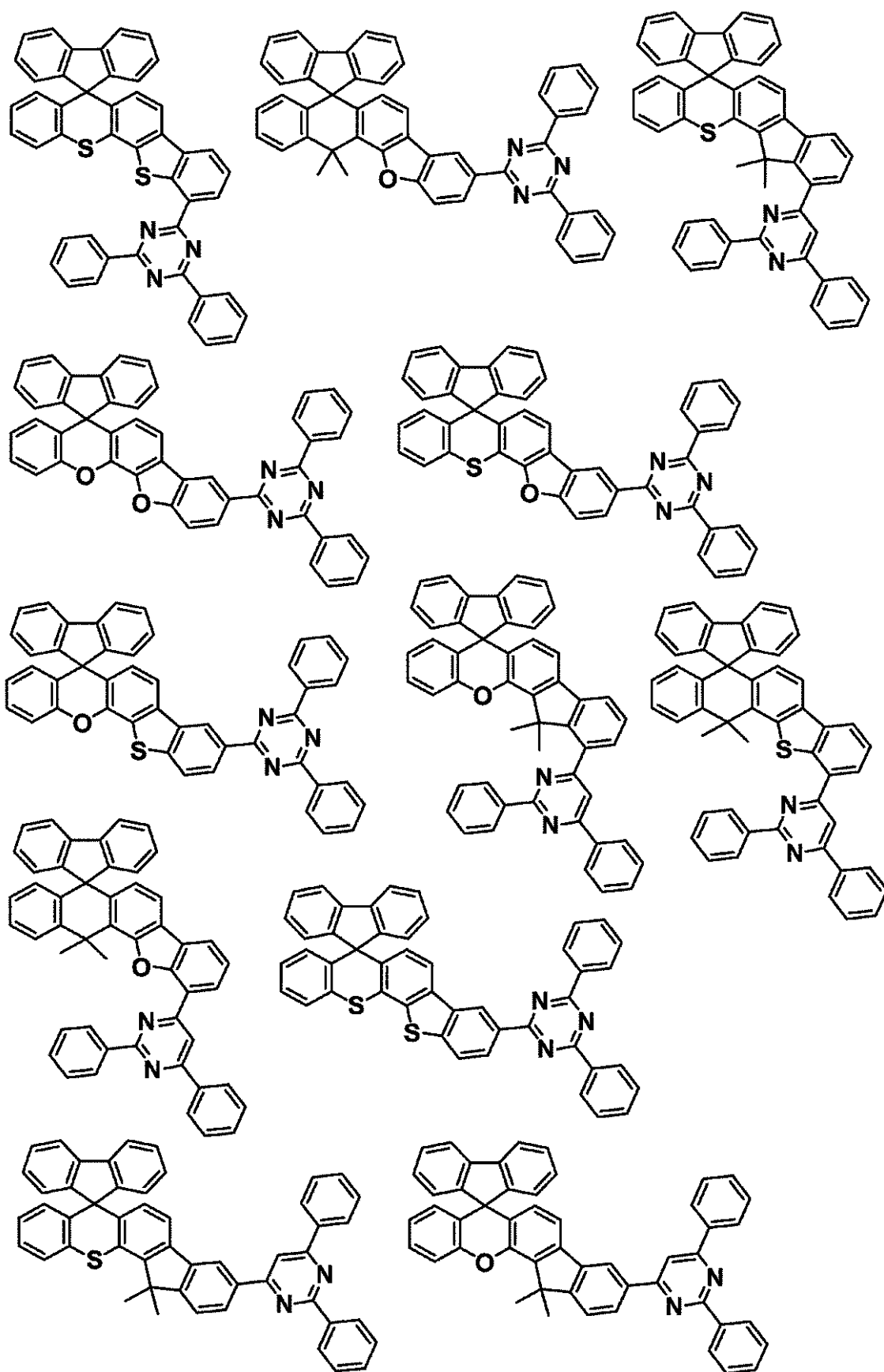
40



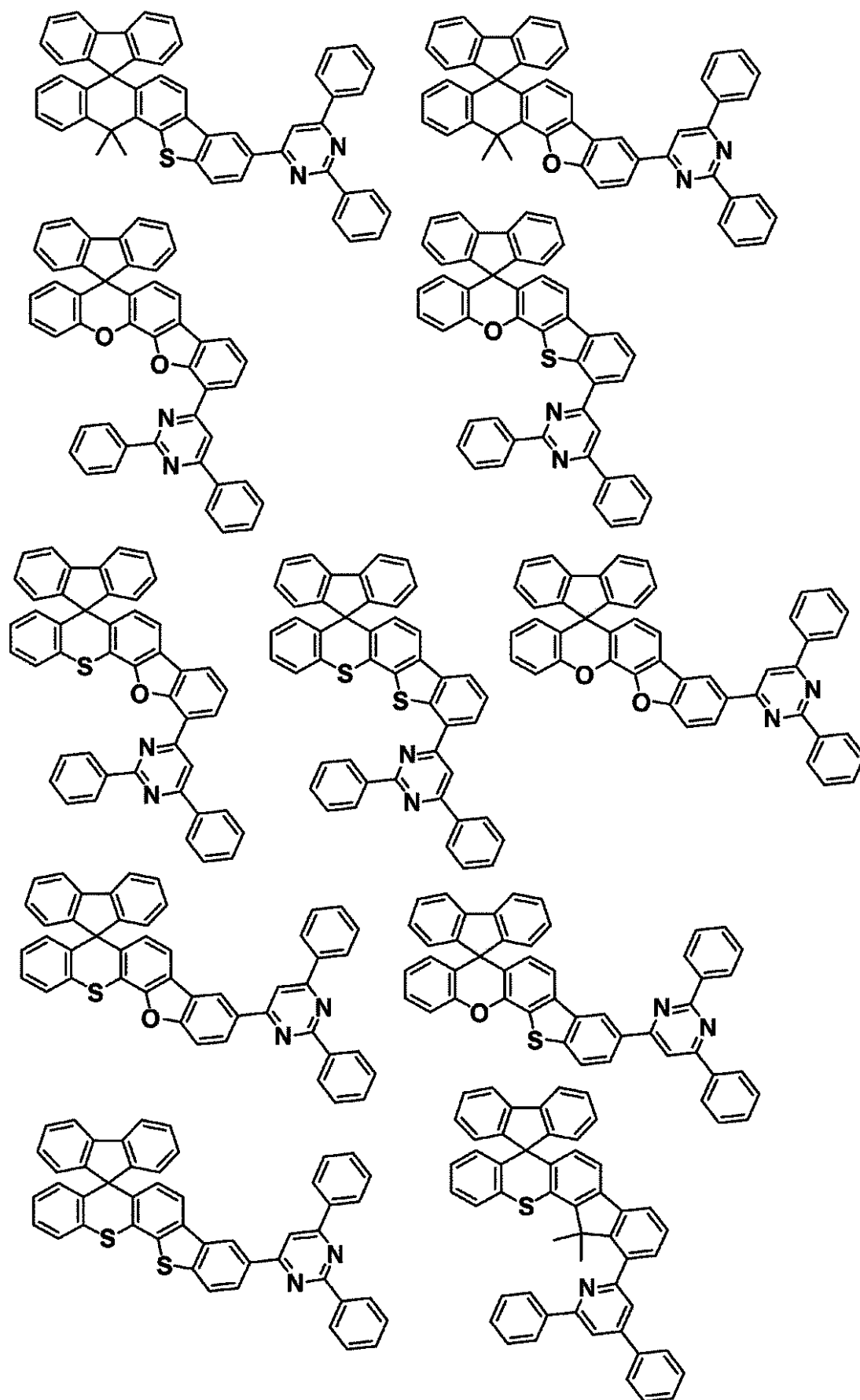
【化 1 6 5】



【化 1 6 6】



【化 1 6 7】



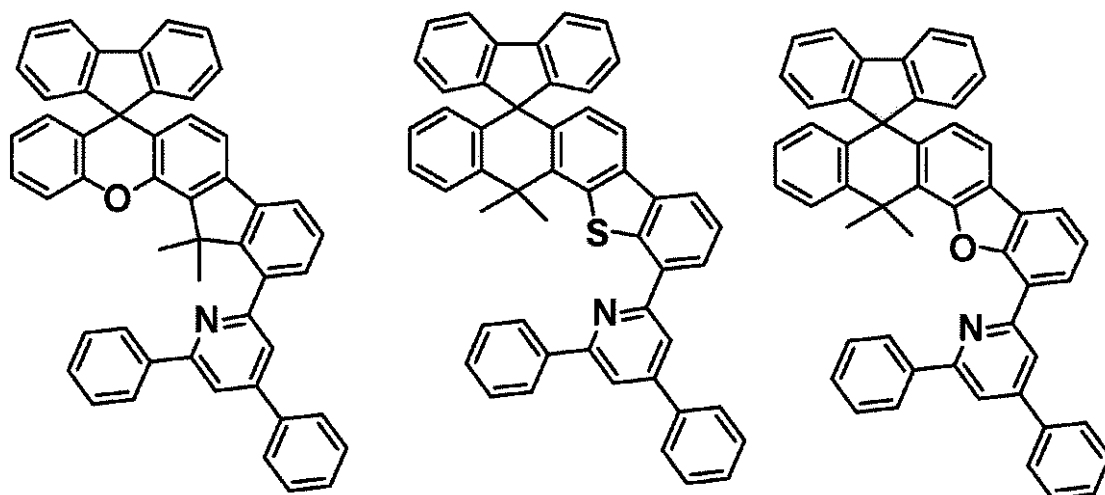
10

20

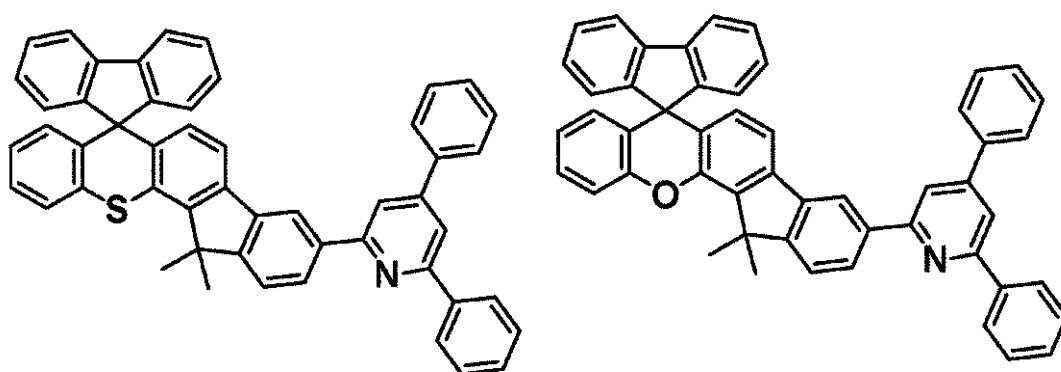
30

40

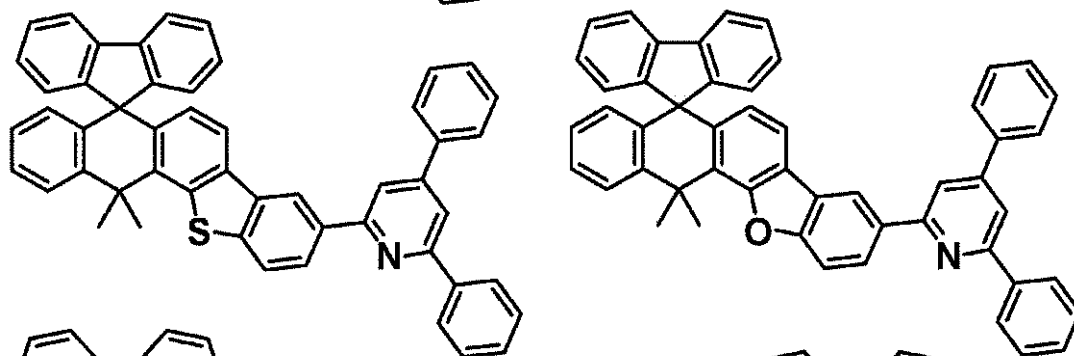
【化 1 6 8】



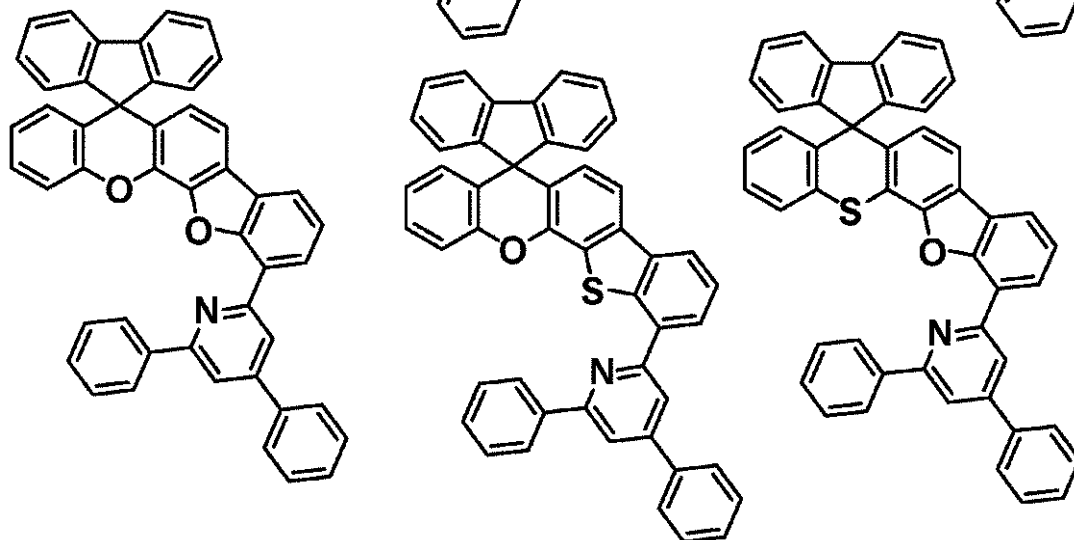
10



20

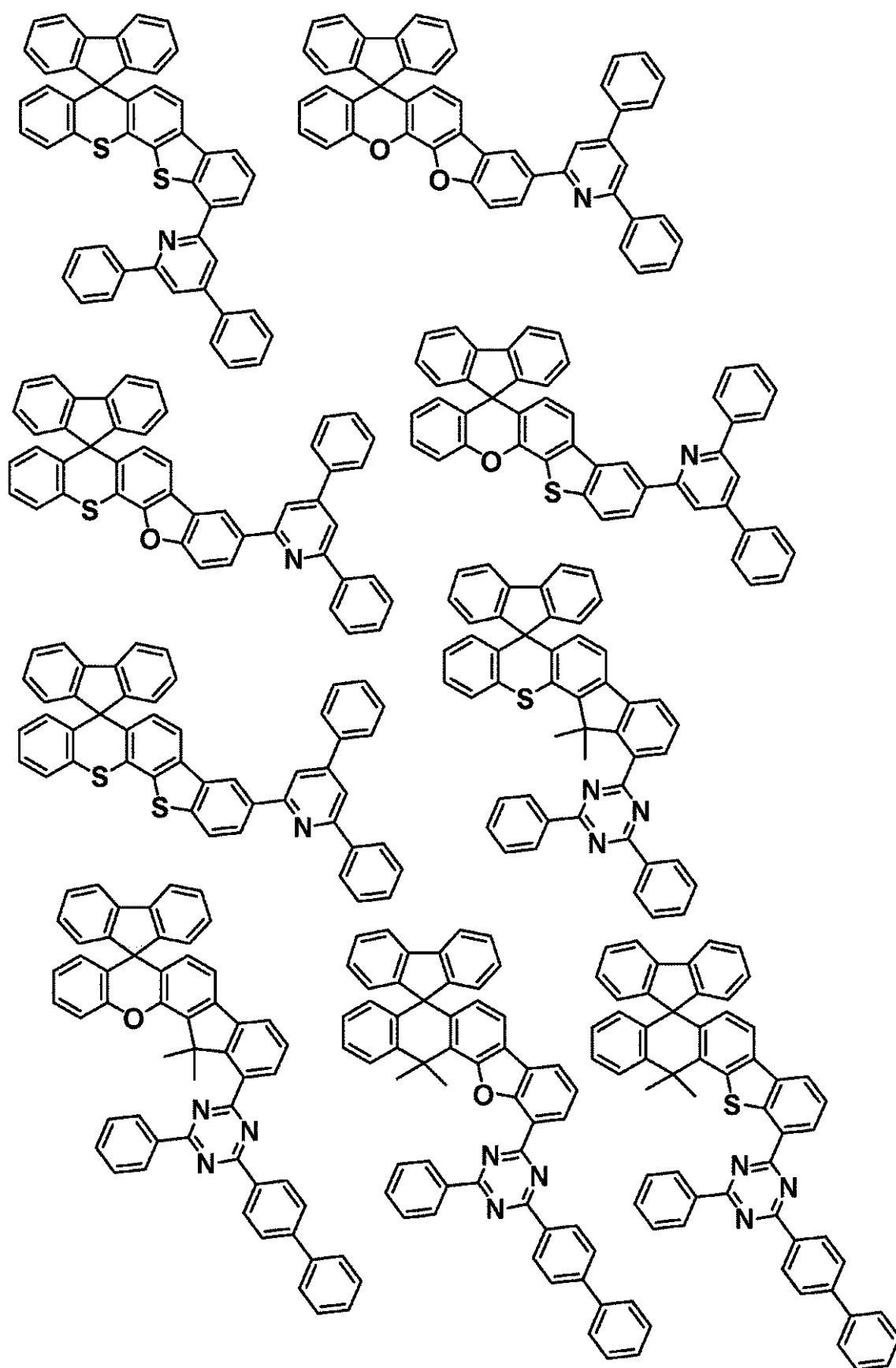


30

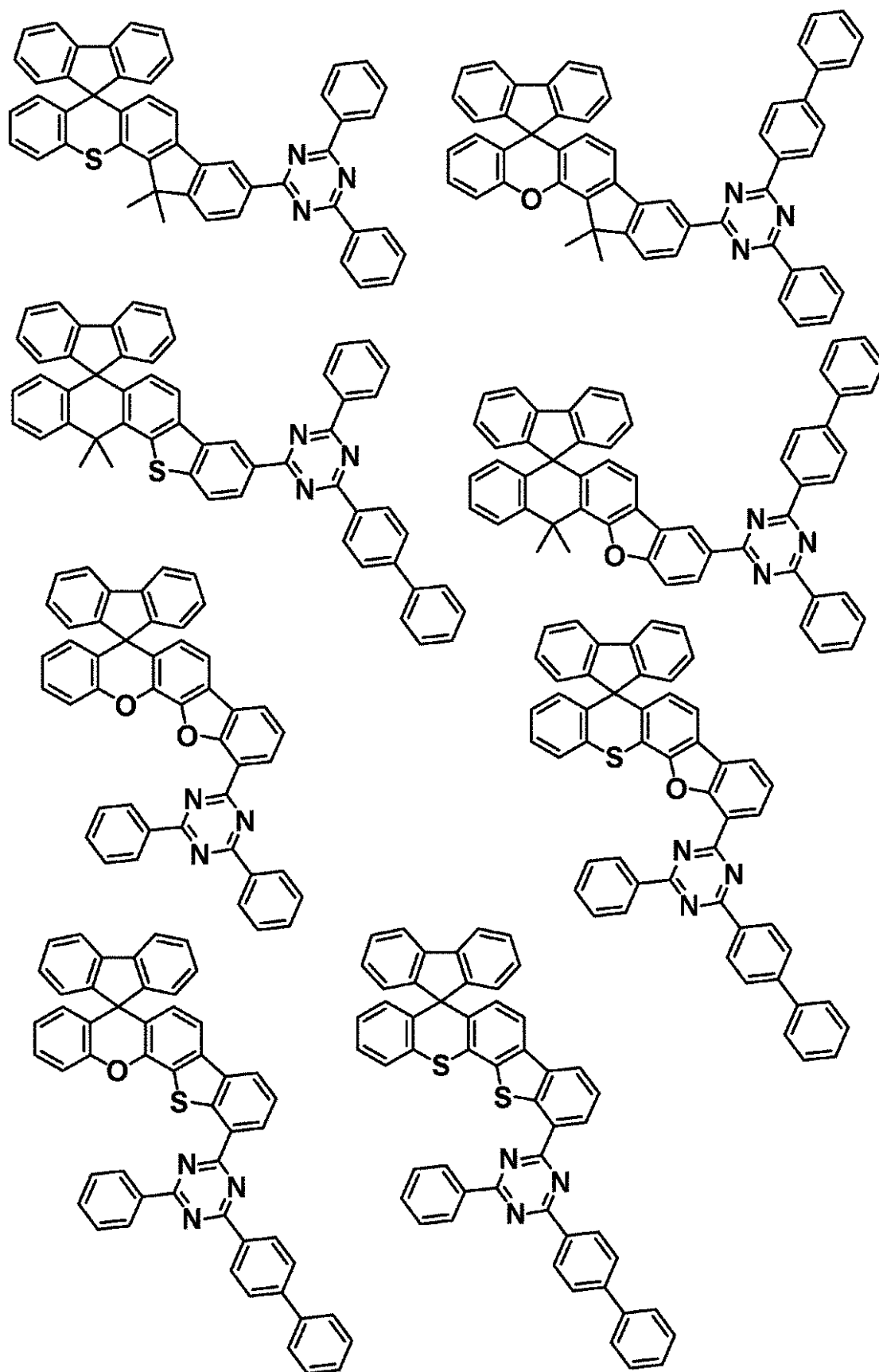


40

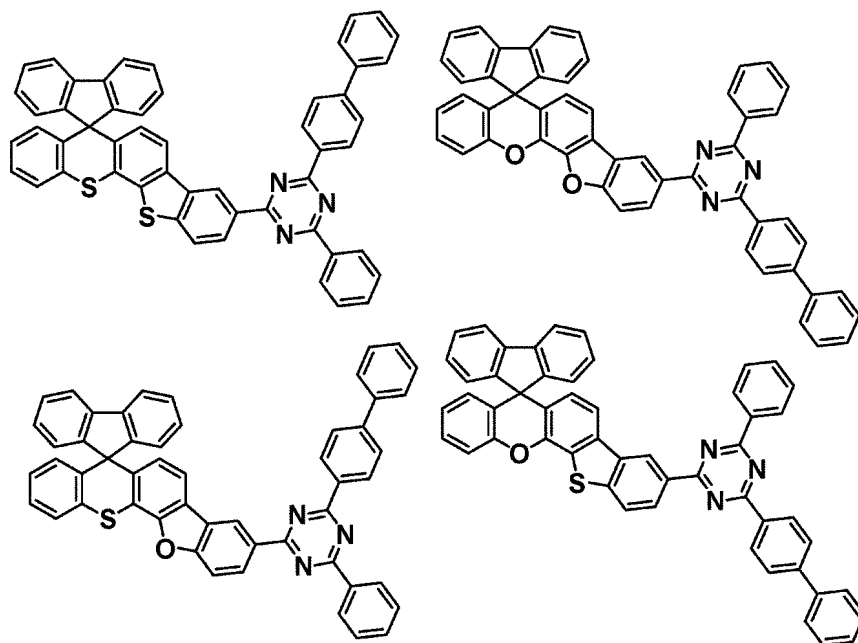
【化 1 6 9】



【化 170】



【化 1 7 1】



10

20

【0 1 7 3】

本明細書の一実施態様に係るスピロ型化合物は、後述する製造方法で製造できる。後述する製造例では代表的な例示を記載するが、必要に応じて、置換基を追加したり除外したりしてもよいし、置換基の位置を変更してもよい。また、当技術分野で知られている技術に基づいて、出発物質、反応物質、反応条件などを変更してもよい。

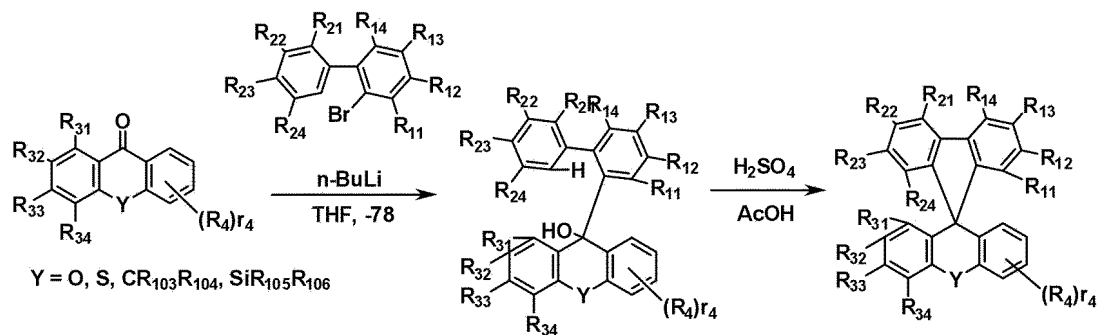
【0 1 7 4】

例えば、前記化学式 1 のスピロ型化合物は、下記反応式 1 または 2 のようなコア構造が製造され、具体的には、反応式 4～6 のような反応により前記化学式 1 のスピロ型化合物を製造することができる。置換基は、当技術分野で知られている方法によって結合され、置換基の種類、位置、または個数は、当技術分野で知られている技術により変更可能である。具体的な製造方法は後述する。

30

〔反応式 1〕

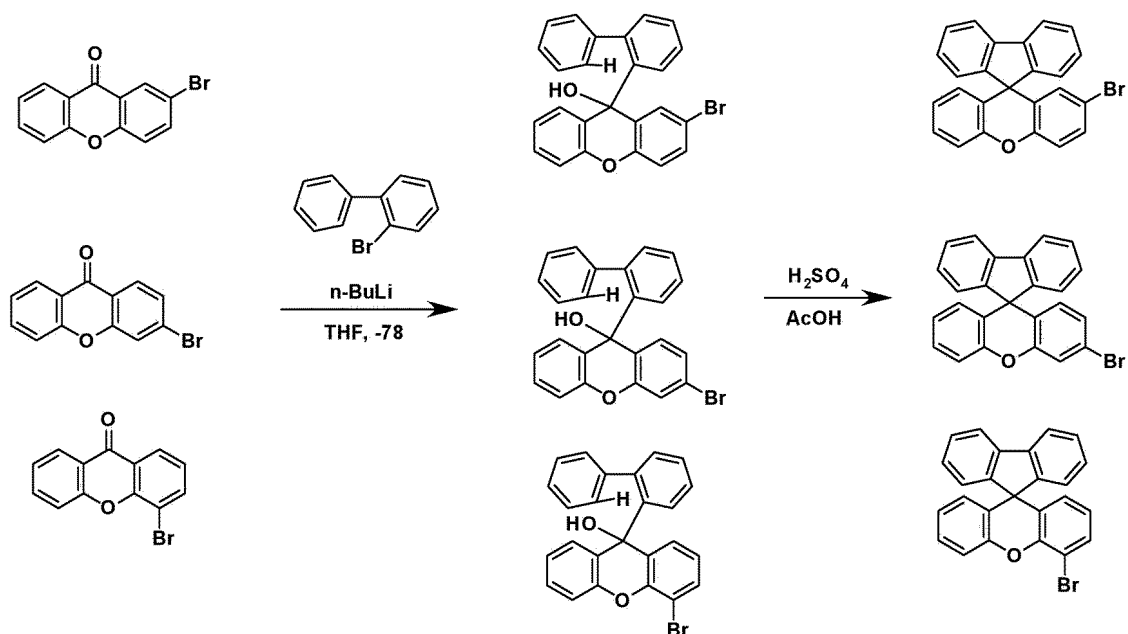
【化 1 7 2】



40

〔反応式 2〕

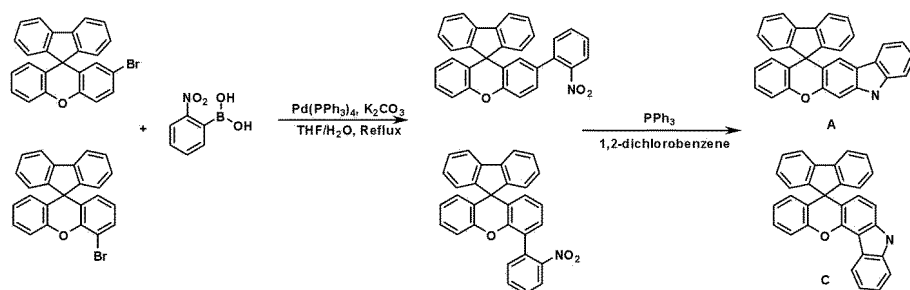
【化 1 7 3】



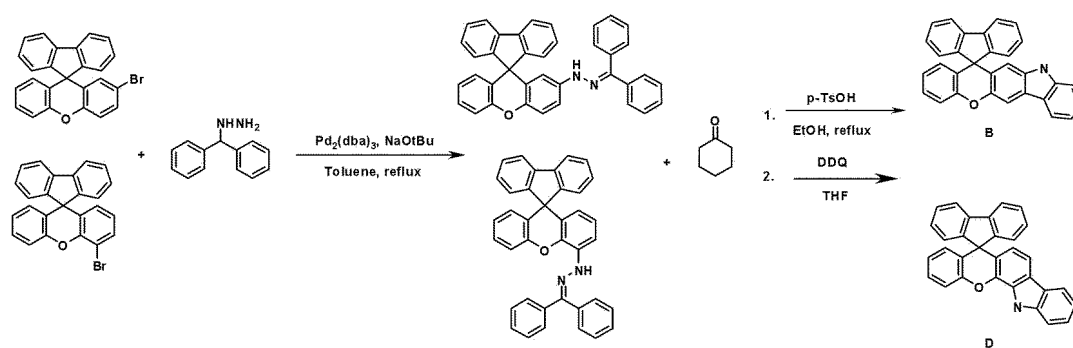
10

[反応式 3]

【化 1 7 4】



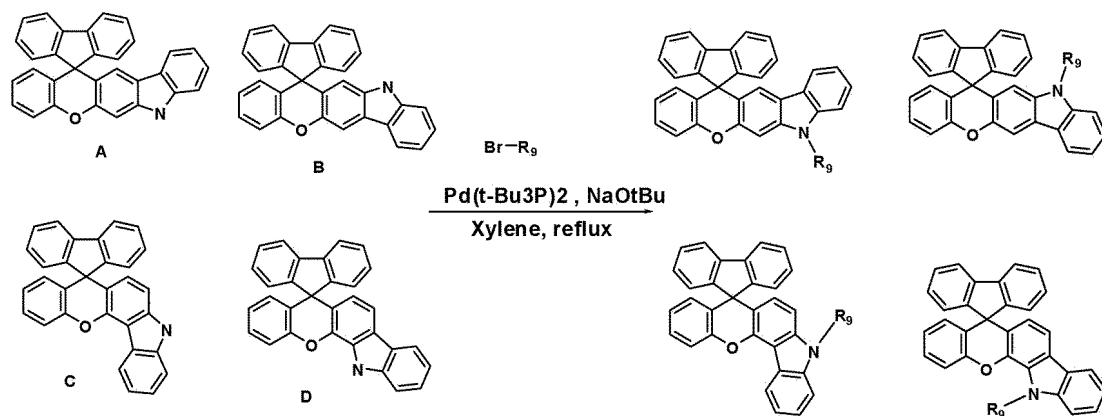
30



40

[反応式 4]

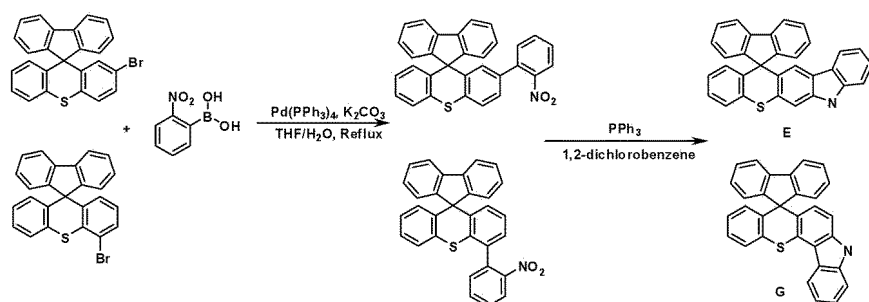
【化 1 7 5】



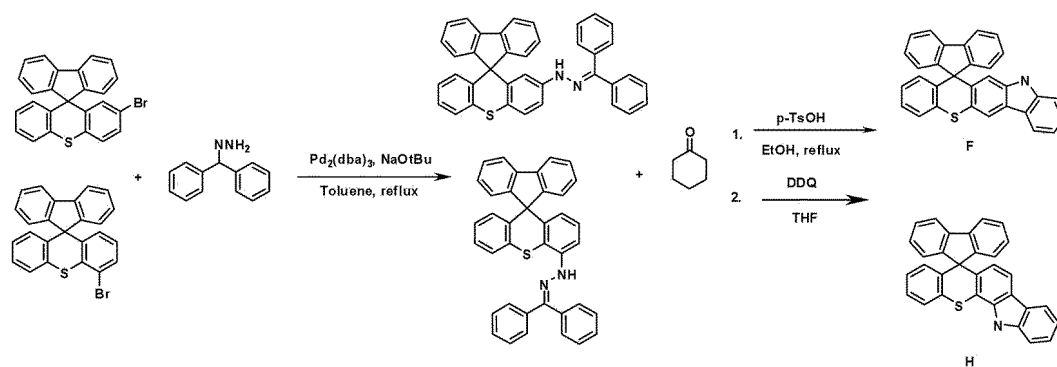
10

[反応式 5]

【化 1 7 6】



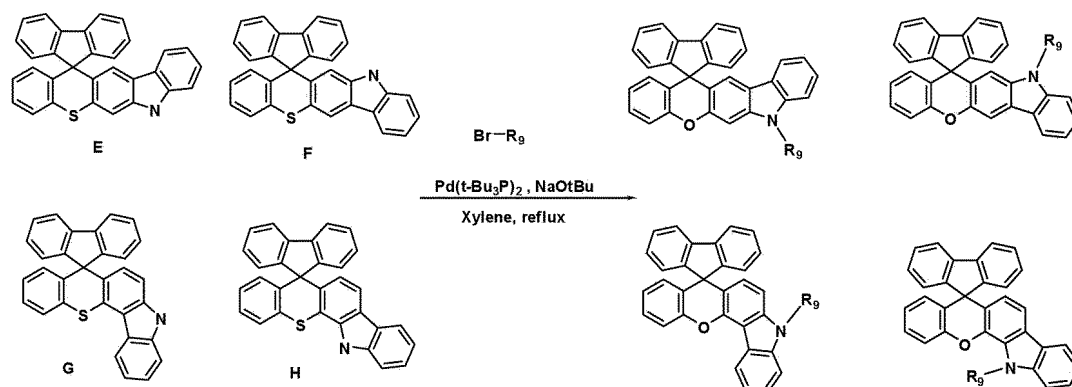
20



30

[反応式 6]

【化 1 7 7】



10

【0 1 7 5】

前記反応式 1～6 は、前記化学式 1 のコアを合成する方法の一例を記載したものに過ぎず、これに限定されない。

【0 1 7 6】

前記反応式 1～6 において、 Y 、 $\text{R}_{11} \sim \text{R}_{14}$ 、 $\text{R}_{21} \sim \text{R}_{24}$ 、 $\text{R}_{31} \sim \text{R}_{34}$ 、 R_4 、 r_4 および R_9 についての定義は、前記化学式 1 で前述したものと同一である。具体的な製造方法は後述する。

20

【0 1 7 7】

また、本明細書は、前記前述の化合物を含む有機電子素子を提供する。

【0 1 7 8】

本明細書の一実施態様において、第 1 電極と、前記第 1 電極に対向して備えられた第 2 電極と、前記第 1 電極と前記第 2 電極との間に備えられた 1 層以上の有機物層とを含む有機電子素子であって、前記有機物層のうちの 1 層以上は、前記化合物を含むものである有機電子素子を提供する。

【0 1 7 9】

本明細書において、ある部材が他の部材「上に」位置しているとする時、これは、ある部材が他の部材に接している場合のみならず、2つの部材の間にさらに他の部材が存在する場合も含む。

30

【0 1 8 0】

本明細書において、ある部分がある構成要素を「含む」とする時、これは、特に反対の記載がない限り、他の構成要素を除くのではなく、他の構成要素をさらに包含できることを意味する。

【0 1 8 1】

本明細書の有機電子素子の有機物層は、単層構造からなってもよいが、2層以上の有機物層が積層された多層構造からなってもよい。例えば、本発明の有機電子素子の代表例として、有機発光素子は、有機物層として、正孔注入層、正孔輸送層、発光層、電子輸送層、電子注入層、電子阻止層、正孔阻止層などを含む構造を有することができる。しかし、有機電子素子の構造はこれに限定されず、より少数の有機層を含んでもよい。

40

【0 1 8 2】

本明細書の一実施態様によれば、前記有機電子素子は、有機発光素子、有機燐光素子、有機太陽電池、有機感光体 (OPC)、および有機トランジスタからなる群より選択されてもよい。

【0 1 8 3】

以下、有機発光素子について例示する。

【0 1 8 4】

本明細書の一実施態様において、前記有機物層は、発光層を含み、前記発光層は、前記化学式 1 で表されるスピロ型化合物を含む。

50

【0185】

本明細書の一実施態様において、前記有機物層は、発光層を含み、前記発光層は、前記化学式1で表される化合物を発光層のホストとして含む。

【0186】

本明細書の一実施態様によれば、前記有機物層は、発光層を含み、前記発光層は、前記化学式1で表されるスピロ型化合物を発光層の燐光ホストまたは蛍光ホストとして含む。

【0187】

本明細書の一実施態様において、前記有機物層は、前記化学式1で表されるスピロ型化合物を発光層のホストとして含む、他の有機化合物、金属または金属化合物をドーパントとして含む。

10

【0188】

本明細書の一実施態様において、前記有機物層は、前記化学式1で表されるスピロ型化合物を発光層のホストとして含む、イリジウム錯体をドーパントとして含む。

【0189】

本明細書の一実施態様において、前記有機物層は、正孔注入層または正孔輸送層を含み、前記正孔注入層または正孔輸送層は、前記化学式1で表されるスピロ型化合物を含む。

【0190】

本明細書の一実施態様において、前記有機物層は、電子輸送層または電子注入層を含み、前記電子輸送層または電子注入層は、前記化学式1で表されるスピロ型化合物を含む。

【0191】

20

本明細書の一実施態様において、前記有機物層は、電子阻止層を含み、前記電子阻止層は、前記化学式1で表されるスピロ型化合物を含む。

【0192】

本明細書の一実施態様において、前記有機発光素子は、正孔注入層、正孔輸送層、発光層、電子輸送層、電子注入層、正孔阻止層、および電子阻止層からなる群より選択される1層または2層以上をさらに含む。

【0193】

本明細書の一実施態様において、前記有機発光素子は、第1電極と、前記第1電極に対向して備えられた第2電極と、前記第1電極と前記第2電極との間に備えられた発光層と、前記発光層と前記第1電極との間、または前記発光層と前記第2電極との間に備えられた2層以上の有機物層とを含み、前記2層以上の有機物層のうちの少なくとも1つは、前記スピロ型化合物を含む。本明細書の一実施態様において、前記2層以上の有機物層は、電子輸送層、電子注入層、電子輸送および電子注入を同時に行う層、並びに正孔阻止層からなる群より2以上が選択されてもよい。

30

【0194】

本明細書の一実施態様において、前記有機物層は、2層以上の電子輸送層を含み、前記2層以上の電子輸送層のうちの少なくとも1つは、前記スピロ型化合物を含む。具体的には、本明細書の一実施態様において、前記スピロ型化合物は、前記2層以上の電子輸送層のうちの1層に含まれてもよいし、それぞれの2層以上の電子輸送層に含まれてもよい。

【0195】

40

また、本明細書の一実施態様において、前記スピロ型化合物が前記それぞれの2層以上の電子輸送層に含まれる場合、前記スピロ型化合物を除いた他の材料は、互いに同一でも異なってもよい。

【0196】

本明細書の一実施態様において、前記有機物層は、前記スピロ型化合物を含む有機物層のほか、アリーールアミノ基、カルバゾリル基、またはベンゾカルバゾリル基を含む化合物を含む正孔注入層または正孔輸送層をさらに含む。

【0197】

もう一つの実施態様において、有機発光素子は、基板上に、陽極、1層以上の有機物層、および陰極が順次に積層された構造（normal type）の有機発光素子であっ

50

てもよい。

【0198】

前記化学式1のスピロ型化合物を含む有機物層が電子輸送層の場合、前記電子輸送層は、n型ドーパントをさらに含んでもよい。前記n型ドーパントは、当技術分野で知られているものを使用することができ、例えば、金属または金属錯体を使用することができる。一例によれば、前記化学式1の化合物を含む電子輸送層は、LiQをさらに含んでもよい。

【0199】

もう一つの実施態様において、有機発光素子は、基板上に、陰極、1層以上の有機物層、および陽極が順次に積層された逆方向構造（*inverted type*）の有機発光素子であってもよい。

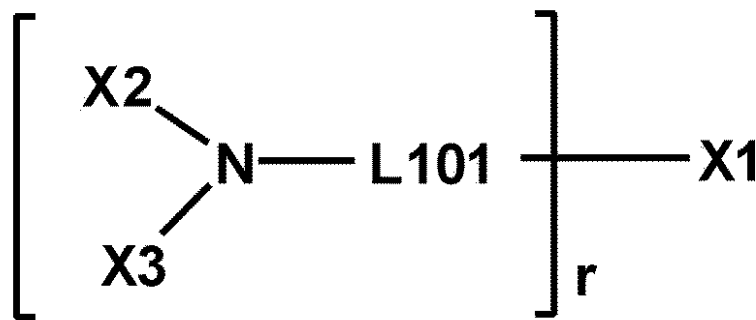
10

【0200】

本明細書の一実施態様において、前記有機物層は、発光層を含み、前記発光層は、下記化学式A-1で表される化合物を含む。

[化学式A-1]

【化178】



20

前記化学式A-1において、

X1は、置換もしくは非置換の1個以上のベンゾフルオレン基；置換もしくは非置換の1個以上のフルオランテン基；置換もしくは非置換の1個以上のピレン基；または置換もしくは非置換の1個以上のクリセン基であり、

30

L101は、直接結合；置換もしくは非置換のアリーレン基；または置換もしくは非置換のヘテロアリーレン基であり、

X2およびX3は、互いに同一または異なり、それぞれ独立に、置換もしくは非置換のアリール基；置換もしくは非置換のシリル基；置換もしくは非置換のアルキル基；置換もしくは非置換のアラルキル基；または置換もしくは非置換のヘテロアリール基であるか、互いに結合して置換もしくは非置換の環を形成してもよく、

rは、1以上の整数であり、

rが2以上の場合、括弧内の置換基は、互いに同一または異なる。

【0201】

40

本明細書の一実施態様によれば、前記有機物層は、発光層を含み、前記発光層は、前記化学式A-1で表される化合物を発光層のドーパントとして含む。

【0202】

本明細書の一実施態様において、前記L101は、直接結合である。

【0203】

本明細書の一実施態様において、前記rは、2である。

【0204】

本明細書の一実施態様によれば、前記X1は、置換もしくは非置換の2個のピレン基である。

【0205】

50

もう一つの実施態様において、前記 X 1 は、アルキル基で置換もしくは非置換の 2 価のピレン基である。

【0206】

もう一つの実施態様において、前記 X 1 は、2 価のピレン基である。

【0207】

本明細書の一実施態様において、前記 X 2 および X 3 は、互いに同一または異なり、それぞれ独立に、置換もしくは非置換の炭素数 6 ～ 30 のアリール基；置換もしくは非置換の炭素数 1 ～ 30 のアルキル基；または置換もしくは非置換の炭素数 2 ～ 30 のヘテロアリール基である。

【0208】

本明細書の一実施態様によれば、前記 X 2 および X 3 は、互いに同一または異なり、それぞれ独立に、置換もしくは非置換の炭素数 6 ～ 30 のアリール基である。

【0209】

本明細書の一実施態様において、前記 X 2 および X 3 は、互いに同一または異なり、それぞれ独立に、ゲルマニウム基で置換もしくは非置換の炭素数 6 ～ 30 のアリール基である。

【0210】

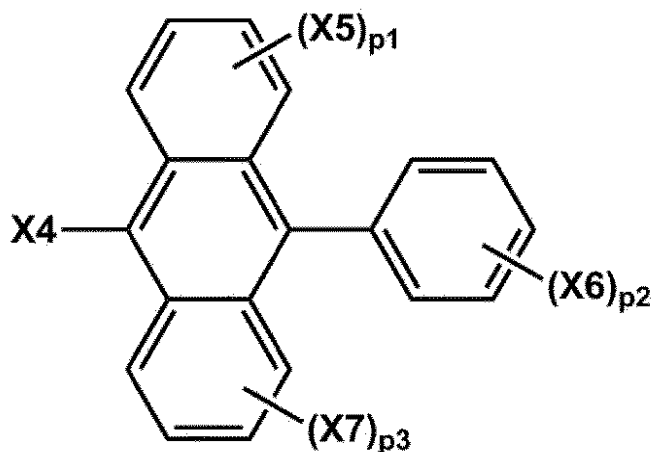
本明細書の一実施態様において、前記 X 2 および X 3 は、トリメチルゲルマニウム基で置換もしくは非置換のフェニル基である。

【0211】

本明細書の一実施態様において、前記有機物層は、発光層を含み、前記発光層は、下記化学式 A-2 で表される化合物を含む。

[化学式 A-2]

【化179】



前記化学式 A-2 において、

X 4 は、1-ナフチル基、2-ナフチル基、1-アントラセニル基、2-アントラセニル基、1-フェナントリル基、2-フェナントリル基、3-フェナントリル基、4-フェナントリル基、9-フェナントリル基、1-ナフタセニル基、2-ナフタセニル基、9-ナフタセニル基、1-ピレニル基、2-ピレニル基、4-ピレニル基、3-メチル-2-ナフチル基、4-メチル-1-ナフチル基、または下記化学式

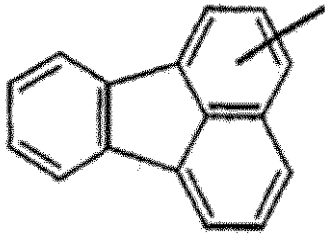
10

20

30

40

【化 1 8 0】



であり、

X 6 は、フェニル基、1-ナフチル基、2-ナフチル基、1-アントラセニル基、2-アントラセニル基、1-フェナントリル基、2-フェナントリル基、3-フェナントリル基、4-フェナントリル基、9-フェナントリル基、1-ナフタセニル基、2-ナフタセニル基、9-ナフタセニル基、1-ピレニル基、2-ピレニル基、4-ピレニル基、2-ビフェニリル基、2-ビフェニリル基、3-ビフェニリル基、4-ビフェニリル基、p-ターフェニル-4-イル基、p-ターフェニル-3-イル基、p-ターフェニル-2-イル基、m-ターフェニル-4-イル基、m-ターフェニル-3-イル基、m-ターフェニル-2-イル基、o-トリル基、m-トリル基、p-トリル基、p-tert-ブチルフェニル基、p-(2-フェニルプロピル)フェニル基、3-メチル-2-ナフチル基、4-メチル-1-ナフチル基、4-メチル-1-アントラセニル基、4'-メチルビフェニリル基、4''-tert-ブチル-p-ターフェニル-4-イル基、または3-フルオランテニル基で

10

20

X 5 および X 7 は、互いに同一または異なり、それぞれ独立に、水素；置換もしくは非置換のアルキル基；置換もしくは非置換のアルコキシ基；置換もしくは非置換のアリール基；または置換もしくは非置換のヘテロアリール基であり、

p 2 は、1～5の整数であり、

p 1 および p 3 はそれぞれ、1～4の整数であり、

前記 p 1 ～ p 3 がそれぞれ2以上の場合、括弧内の置換基は、互いに同一または異なる

。

【0 2 1 2】

本明細書の一実施態様によれば、前記有機物層は、発光層を含み、前記発光層は、前記化学式 A-2 で表される化合物を発光層のホストとして含む。

30

【0 2 1 3】

本明細書の一実施態様において、前記 X 4 は、1-ナフチル基、2-ナフチル基、1-アントラセニル基、2-アントラセニル基、1-フェナントリル基、2-フェナントリル基、4-フェナントリル基、1-ナフタセニル基、または1-ピレニル基である。

【0 2 1 4】

本明細書の一実施態様において、前記 X 4 は、1-ナフチル基、2-ナフチル基、または1-アントラセニル基である。

【0 2 1 5】

本明細書の一実施態様において、前記 X 4 は、1-ナフチル基である。

40

【0 2 1 6】

本明細書の一実施態様において、前記 X 6 は、フェニル基、1-ナフチル基、2-ナフチル基、1-アントラセニル基、2-アントラセニル基、1-フェナントリル基、2-フェナントリル基、4-フェナントリル基、1-ナフタセニル基、または1-ピレニル基である。

【0 2 1 7】

本明細書の一実施態様において、前記 X 6 は、フェニル基、1-ナフチル基、2-ナフチル基、または1-アントラセニル基である。

【0 2 1 8】

本明細書の一実施態様によれば、前記 X 6 は、2-ナフチル基であり、p 2 は、1であ

50

る。

【0219】

本明細書の一実施態様において、前記X5およびX7は、水素である。

【0220】

例えば、本明細書の有機発光素子の構造は、図1および図2に示されているような構造を有することができるが、これにのみ限定されるものではない。

【0221】

図1には、基板20上に、第1電極30、発光層40、および第2電極50が順次に積層された有機発光素子10の構造が例示されている。前記図1は、本明細書の一実施態様に係る有機発光素子の例示的な構造であり、他の有機物層をさらに含んでもよい。

10

【0222】

図2には、基板20上に、第1電極30、正孔注入層60、正孔輸送層70、電子阻止層80、発光層40、電子輸送層90、電子注入層100、および第2電極50が順次に積層された有機発光素子の構造が例示されている。前記図2は、本明細書の実施態様に係る例示的な構造であり、他の有機物層をさらに含んでもよい。

【0223】

本明細書の有機発光素子は、有機物層のうちの1層以上が本明細書の化合物、すなわち前記化合物を含むことを除けば、当技術分野で知られている材料および方法で製造できる。

【0224】

前記有機発光素子が複数の有機物層を含む場合、前記有機物層は、同一の物質または異なる物質で形成される。

20

【0225】

本明細書の有機発光素子は、有機物層のうちの1層以上が前記化合物、すなわち前記化学式1で表される化合物を含むことを除けば、当技術分野で知られている材料および方法で製造できる。

【0226】

例えば、本明細書の有機発光素子は、基板上に、第1電極、有機物層、および第2電極を順次に積層させることにより製造することができる。この時、スパッタリング法(sputtering)や電子ビーム蒸発法(e-beam evaporation)のようなPVD(Physical Vapor Deposition)方法を利用して、基板上に金属または導電性を有する金属酸化物またはこれらの合金を蒸着させて陽極を形成し、その上に正孔注入層、正孔輸送層、発光層、および電子輸送層を含む有機物層を形成した後、その上に陰極として使用可能な物質を蒸着させることにより製造できる。この方法以外にも、基板上に、陰極物質から有機物層、陽極物質を順に蒸着させて有機発光素子を作ることができる。

30

【0227】

また、前記化学式1の化合物は、有機発光素子の製造時、真空蒸着法だけでなく、溶液塗布法によって有機物層に形成される。ここで、溶液塗布法とは、スピンコーティング、ディップコーティング、ドクターブレードイング、インクジェットプリンティング、スクリーンプリンティング、スプレー法、ロールコーティングなどを意味するが、これらにのみ限定されるものではない。

40

【0228】

この方法以外にも、基板上に、陰極物質から有機物層、陽極物質を順に蒸着させて有機発光素子を作ることにもできる(国際特許出願公開第2003/012890号)。ただし、製造方法がこれに限定されるものではない。

【0229】

本明細書の一実施態様において、前記第1電極は、陽極であり、前記第2電極は、陰極である。

【0230】

50

もう一つの実施態様において、前記第1電極は、陰極であり、前記第2電極は、陽極である。

【0231】

前記陽極物質としては、通常、有機物層に正孔注入が円滑となるように仕事関数の大きい物質が好ましい。本発明で使用可能な陽極物質の具体例としては、バナジウム、クロム、銅、亜鉛、金のような金属またはこれらの合金；亜鉛酸化物、インジウム酸化物、インジウムスズ酸化物（ITO）、インジウム亜鉛酸化物（IZO）のような金属酸化物； $\text{ZnO}:\text{Al}$ または $\text{SnO}_2:\text{Sb}$ のような金属と酸化物との組み合わせ；ポリ（3-メチルチオフェン）、ポリ〔3, 4-（エチレン-1, 2-ジオキシ）チオフェン〕（PEDOT）、ポリピロールおよびポリアニリンのような導電性高分子などがあるが、これらにのみ限定されるものではない。

10

【0232】

前記陰極物質としては、通常、有機物層に電子注入が容易となるように仕事関数の小さい物質であることが好ましい。陰極物質の具体例としては、マグネシウム、カルシウム、ナトリウム、カリウム、チタン、インジウム、イットリウム、リチウム、ガドリニウム、アルミニウム、銀、スズおよび鉛のような金属またはこれらの合金； LiF/Al または LiO_2/Al のような多層構造の物質などがあるが、これらにのみ限定されるものではない。

【0233】

前記正孔注入層は、電極から正孔を注入する層で、正孔注入物質としては、正孔を輸送する能力を有し、陽極からの正孔注入効果、発光層または発光材料に対して優れた正孔注入効果を有し、発光層で生成された励起子の電子注入層または電子注入材料への移動を防止し、また、薄膜形成能力の優れた化合物が好ましい。正孔注入物質のHOMO（highest occupied molecular orbital）が陽極物質の仕事関数と周辺有機物層のHOMOとの間であることが好ましい。正孔注入物質の具体例としては、金属ポルフィリン（porphyrin）、オリゴチオフェン、アリールアミン系の有機物、ヘキサニトリルヘキサアザトリフェニレン系の有機物、キナクリドン（quinacridone）系の有機物、ペリレン（perylene）系の有機物、アントラキノンおよびポリアニリンとポリチオフェン系の導電性高分子などがあるが、これらにのみ限定されるものではない。

20

30

【0234】

前記正孔輸送層は、正孔注入層から正孔を受け取って発光層まで正孔を輸送する層で、正孔輸送物質としては、陽極や正孔注入層から正孔を受けて発光層に移し得る物質で、正孔に対する移動性の大きい物質が好適である。具体例としては、アリールアミン系の有機物、導電性高分子、および共役部分と非共役部分がともにあるブロック共重合体などがあるが、これらにのみ限定されるものではない。

【0235】

前記電子阻止層は、正孔注入層から注入された正孔が発光層を経て電子注入層に進入するのを防止して素子の寿命と効率を向上させる層であり、必要な場合に、公知の材料を用いて発光層と電子注入層との間における適切な部分に形成される。

40

【0236】

前記正孔阻止層は、正孔注入層から注入された正孔が発光層を経て電子注入層に進入するのを防止して素子の寿命と効率を向上させる層であり、必要な場合に、公知の材料を用いて発光層と電子注入層との間における適切な部分に形成される。

【0237】

本明細書において、前記化学式1で表される化合物が発光層以外の有機物層に含まれたり、追加の発光層が備えられたりする場合、前記発光層の発光物質としては、正孔輸送層と電子輸送層から正孔と電子をそれぞれ受けて結合させることにより可視光線領域の光を発し得る物質であって、蛍光や燐光に対する量子効率の良い物質が好ましい。具体例としては、8-ヒドロキシキノリンアルミニウム錯体（ Alq_3 ）；カルバゾール系化合物

50

；二量体化スチリル（dimerized styryl）化合物；BA1q；10-ヒドロキシベンゾキノリン-金属化合物；ベンゾキサゾール、ベンズチアゾール、およびベンズイミダゾール系の化合物；ポリ（p-フェニレンビニレン）（PPV）系の高分子；スピロ（spiro）化合物；ポリフルオレン、ルブレンなどがあるが、これらにのみ限定されるものではない。

【0238】

前記発光層は、ホスト材料およびドーパント材料を含むことができる。ホスト材料は、縮合芳香族環誘導体またはヘテロ環含有化合物などがある。具体的には、縮合芳香族環誘導体としては、アントラセン誘導体、ピレン誘導体、ナフタレン誘導体、ペンタセン誘導体、フェナントレン化合物、フルオランテン化合物などがあり、ヘテロ環含有化合物とし

10

【0239】

前記ドーパント材料としては、芳香族アミン誘導体、スチリルアミン化合物、ホウ素錯体、フルオランテン化合物、金属錯体などがある。具体的には、芳香族アミン誘導体としては、置換もしくは非置換のアリールアミノ基を有する縮合芳香族環誘導体であって、アリールアミノ基を有するピレン、アントラセン、クリセン、ペリフランテンなどがあり、スチリルアミン化合物としては、置換もしくは非置換のアリールアミンに少なくとも1個のアリールビニル基が置換されている化合物で、アリール基、シリル基、アルキル基、シクロアルキル基、およびアリールアミノ基からなる群より1または2以上選択される置換

20

【0240】

前記電子輸送層は、電子注入層から電子を受け取って発光層まで電子を輸送する層で、電子輸送物質としては、陰極から電子がよく注入されて発光層に移し得る物質であって、電子に対する移動性の大きい物質が好適である。具体例としては、8-ヒドロキシキノリンのA1錯体；A1q₃を含む錯体；有機ラジカル化合物；ヒドロキシフラボン-金属錯体などがあるが、これらにのみ限定されるものではない。電子輸送層は、従来技術により使用されているような、任意の所望するカソード物質とともに使用することができる。特

30

【0241】

前記電子注入層は、電極から電子を注入する層で、電子を輸送する能力を有し、陰極からの電子注入効果、発光層または発光材料に対して優れた電子注入効果を有し、発光層で生成された励起子の正孔注入層への移動を防止し、また、薄膜形成能力の優れた化合物が好ましい。具体的には、フルオレノン、アントラキノジメタン、ジフェノキノン、チオピランジオキシド、オキサゾール、オキサジアゾール、トリアゾール、イミダゾール、ペリ

40

【0242】

前記金属錯体化合物としては、8-ヒドロキシキノリナートリチウム、ビス（8-ヒドロキシキノリナート）亜鉛、ビス（8-ヒドロキシキノリナート）銅、ビス（8-ヒドロキシキノリナート）マンガン、トリス（8-ヒドロキシキノリナート）アルミニウム、トリス（2-メチル-8-ヒドロキシキノリナート）アルミニウム、トリス（8-ヒドロキシキノリナート）ガリウム、ビス（10-ヒドロキシベンゾ[h]キノリナート）ベリリウム、ビス（10-ヒドロキシベンゾ[h]キノリナート）亜鉛、ビス（2-メチル-8-キノリナート）クロロガリウム、ビス（2-メチル-8-キノリナート）（o-クレゾ

50

ラート) ガリウム、ビス(2-メチル-8-キノリナート)(1-ナフトラート) アルミニウム、ビス(2-メチル-8-キノリナート)(2-ナフトラート) ガリウムなどがあるが、これらに限定されない。

【0243】

前記正孔阻止層は、正孔の陰極到達を阻止する層で、一般的に、正孔注入層と同一の条件で形成される。具体的には、オキサジアゾール誘導体やトリアゾール誘導体、フェナントロリン誘導体、BCP、アルミニウム錯体(aluminum complex)などがあるが、これらに限定されない。

【0244】

本明細書に係る有機発光素子は、使用される材料によって、前面発光型、後面発光型、または両面発光型であってもよい。

10

【0245】

本明細書の一実施態様において、前記化学式1で表される化合物は、有機発光素子以外にも、有機太陽電池または有機トランジスタに含まれる。

【0246】

本明細書に係る化合物は、有機発光素子、有機太陽電池、有機感光体、有機トランジスタなどを含めた有機電子素子においても、有機発光素子に適用されるのと類似の原理で作用できる。

【実施例】

【0247】

20

以下、本明細書を具体的に説明するために、実施例および比較例などを挙げて詳細に説明する。しかし、本明細書に係る実施例および比較例は、種々の異なる形態に変形可能であり、本明細書の範囲が以下に詳述する実施例および比較例に限定されると解釈されない。本明細書の実施例および比較例は、当業界における平均的な知識を有する者に本明細書をより完全に説明するために提供されるものである。

【0248】

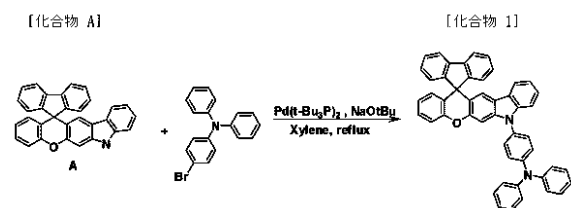
<実施例>

【0249】

<製造例1>-化合物1の合成

【化181】

30



窒素雰囲気下、500mlの丸底フラスコに、前記化合物A(10.0g、23.75mmol)、4-ブロモ-N,N-ジフェニルアニリン(8.06g、24.94mmol)をキシレン(xylene)150mlに完全に溶かした後、ソジウム-tert-ブトキシド(2.97g、30.88mmol)を添加し、ビス(トリ-tert-ブチルホスフィン)パラジウム(0.12g、0.24mmol)を入れた後、2時間加熱撹拌した。常温に温度を下げて濾過して塩を除去した後、キシレン(xylene)を減圧濃縮させ、エチルアセテート120mlで再結晶して、前記化合物1(12.16g、収率:77%)を製造した。

40

【0250】

MS [M+H]⁺ = 665

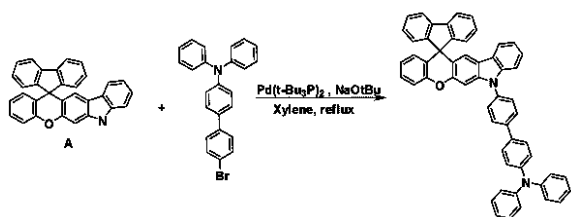
【0251】

<製造例2>-化合物2の合成

【化 1 8 2】

【化合物 A】

【化合物 2】



窒素雰囲気下、500 ml の丸底フラスコに、前記化合物 A (10.0 g、23.75 mmol)、4'-ブロモ-N,N-ジフェニルビフェニル-4-アミン (9.98 g、24.94 mmol) をキシレン (xylene) 190 ml に完全に溶かした後、ソジウム-tert-ブトキシド (2.97 g、30.88 mmol) を添加し、ビス(トリ-tert-ブチルホスフィン)パラジウム (0.12 g、0.24 mmol) を入れた後、5 時間加熱撹拌した。常温に温度を下げて濾過して塩を除去した後、キシレン (xylene) を減圧濃縮させ、エチルアセテート 160 ml で再結晶して、前記化合物 2 (15.68 g、収率：89%) を製造した。

【0 2 5 2】

MS [M+H]⁺ = 741

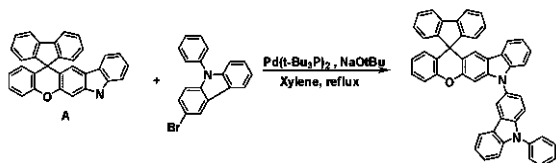
【0 2 5 3】

<製造例 3> - 化合物 3 の合成

【化 1 8 3】

【化合物 A】

【化合物 3】



窒素雰囲気下、500 ml の丸底フラスコに、前記化合物 A (10.0 g、23.75 mmol)、3-ブロモ-9-フェニル-9H-カルバゾール (8.01 g、24.94 mmol) をキシレン (xylene) 180 ml に完全に溶かした後、ソジウム-tert-ブトキシド (2.97 g、30.88 mmol) を添加し、ビス(トリ-tert-ブチルホスフィン)パラジウム (0.12 g、0.24 mmol) を入れた後、2 時間加熱撹拌した。常温に温度を下げて濾過して塩を除去した後、キシレン (xylene) を減圧濃縮させ、エチルアセテート 140 ml で再結晶して、前記化合物 3 (9.49 g、収率：60%) を製造した。

【0 2 5 4】

MS [M+H]⁺ = 663

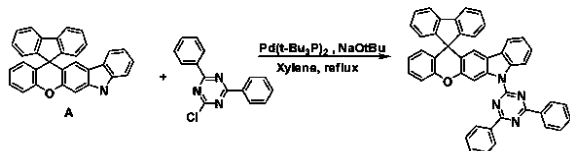
【0 2 5 5】

<製造例 4> - 化合物 4 の合成

【化 1 8 4】

【化合物 A】

【化合物 4】



窒素雰囲気下、500 ml の丸底フラスコに、前記化合物 A (10.0 g、23.75 mmol)、2-クロロ-4,6-ジフェニル-1,3,5-トリアジン (6.66 g、24.94 mmol) をキシレン (xylene) 210 ml に完全に溶かした後、ソジ

ウム-tert-ブトキシド (2.97 g、30.88 mmol) を添加し、ビス(トリ-tert-ブチルホスフィン)パラジウム (0.12 g、0.24 mmol) を入れた後、4時間加熱撹拌した。常温に温度を下げて濾過して塩を除去した後、キシレン (xylene) を減圧濃縮させ、エチルアセテート 240 ml で再結晶して、前記化合物 4 (14.47 g、収率：93%) を製造した。

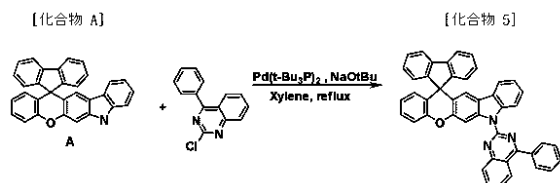
【0256】

MS $[M+H]^+ = 653$

【0257】

<製造例 5>—化合物 5 の合成

【化185】



窒素雰囲気下、500 ml の丸底フラスコに、前記化合物 A (10.0 g、23.75 mmol)、2-クロロ-4-フェニルキノゾリン (6.66 g、24.94 mmol) をキシレン (xylene) 250 ml に完全に溶かした後、ソジウム-tert-ブトキシド (2.97 g、30.88 mmol) を添加し、ビス(トリ-tert-ブチルホスフィン)パラジウム (0.12 g、0.24 mmol) を入れた後、7時間加熱撹拌した。常温に温度を下げて濾過して塩を除去した後、キシレン (xylene) を減圧濃縮させ、エチルアセテート 210 ml で再結晶して、前記化合物 5 (12.10 g、収率：81%) を製造した。

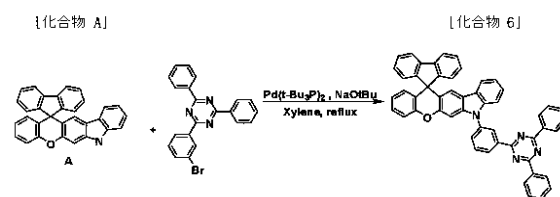
【0258】

MS $[M+H]^+ = 626$

【0259】

<製造例 6>—化合物 6 の合成

【化186】



窒素雰囲気下、500 ml の丸底フラスコに、前記化合物 A (10.0 g、23.75 mmol)、2-(3-ブロモフェニル)-4,6-ジフェニル-1,3,5-トリアジン (9.65 g、24.94 mmol) をキシレン (xylene) 330 ml に完全に溶かした後、ソジウム-tert-ブトキシド (2.97 g、30.88 mmol) を添加し、ビス(トリ-tert-ブチルホスフィン)パラジウム (0.12 g、0.24 mmol) を入れた後、4時間加熱撹拌した。常温に温度を下げて濾過して塩を除去した後、キシレン (xylene) を減圧濃縮させ、テトラヒドロフラン 340 ml で再結晶して、前記化合物 6 (15.54 g、収率：90%) を製造した。

【0260】

MS $[M+H]^+ = 729$

【0261】

<製造例 7>—化合物 7 の合成

10

20

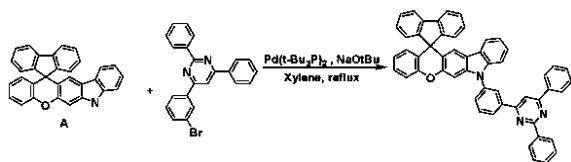
30

40

【化 1 8 7】

【化合物 A】

【化合物 7】



窒素雰囲気下、500 ml の丸底フラスコに、前記化合物 A (10.0 g、23.75 mmol)、4-(3-ブロモフェニル)-2,6-ジフェニルピリミジン (9.65 g、24.94 mmol) をキシレン (xylene) 330 ml に完全に溶かした後、ソジウム-tert-ブトキシド (2.97 g、30.88 mmol) を添加し、ビス(トリ-tert-ブチルホスフィン)パラジウム (0.12 g、0.24 mmol) を入れた後、4 時間加熱撹拌した。常温に温度を下げて濾過して塩を除去した後、キシレン (xylene) を減圧濃縮させ、テトラヒドロフラン 340 ml で再結晶して、前記化合物 7 (15.54 g、収率：90%) を製造した。

【0 2 6 2】

MS [M+H]⁺ = 729

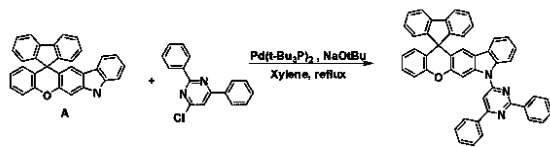
【0 2 6 3】

<製造例 8> - 化合物 8 の合成

【化 1 8 8】

【化合物 A】

【化合物 8】



窒素雰囲気下、500 ml の丸底フラスコに、前記化合物 A (10.0 g、23.75 mmol)、4-クロロ-2,6-ジフェニルピリミジン (6.66 g、24.94 mmol) をキシレン (xylene) 210 ml に完全に溶かした後、ソジウム-tert-ブトキシド (2.97 g、30.88 mmol) を添加し、ビス(トリ-tert-ブチルホスフィン)パラジウム (0.12 g、0.24 mmol) を入れた後、3 時間加熱撹拌した。常温に温度を下げて濾過して塩を除去した後、キシレン (xylene) を減圧濃縮させ、エチルアセテート 190 ml で再結晶して、前記化合物 8 (14.47 g、収率：93%) を製造した。

【0 2 6 4】

MS [M+H]⁺ = 652

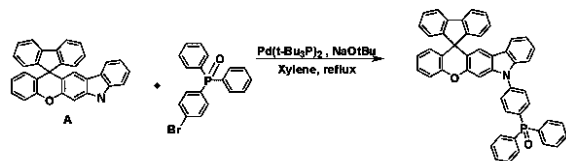
【0 2 6 5】

<製造例 9> - 化合物 9 の合成

【化 1 8 9】

【化合物 A】

【化合物 9】



窒素雰囲気下、500 ml の丸底フラスコに、前記化合物 A (10.0 g、23.75 mmol)、(4-ブロモフェニル)ジフェニルホスフィンオキシド (8.88 g、24.94 mmol) をキシレン (xylene) 230 ml に完全に溶かした後、ソジウム-tert-ブトキシド (2.97 g、30.88 mmol) を添加し、ビス(トリ-tert-ブチルホスフィン)パラジウム (0.12 g、0.24 mmol) を入れた後、6

時間加熱撹拌した。常温に温度を下げて濾過して塩を除去した後、キシレン (x y l e n e) を減圧濃縮させ、エチルアセテート 120 ml で再結晶して、前記化合物 9 (13.34 g、収率：81%) を製造した。

【0266】

MS [M+H]⁺ = 698

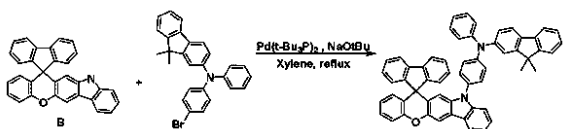
【0267】

<製造例 10>—化合物 10 の合成

【化 190】

【化合物 B】

【化合物 10】



窒素雰囲気下、500 ml の丸底フラスコに、前記化合物 B (10.0 g、23.75 mmol)、N-(4-ブロモフェニル)-9,9-ジメチル-N-フェニル-9H-フルオレン-2-アミン (10.97 g、24.94 mmol) をキシレン (x y l e n e) 170 ml に完全に溶かした後、ソジウム-tert-ブトキシド (2.97 g、30.88 mmol) を添加し、ビス(トリ-tert-ブチルホスフィン)パラジウム (0.12 g、0.24 mmol) を入れた後、5時間加熱撹拌した。常温に温度を下げて濾過して塩を除去した後、キシレン (x y l e n e) を減圧濃縮させ、エチルアセテート 160 ml で再結晶して、前記化合物 10 (14.29 g、収率：77%) を製造した。

【0268】

MS [M+H]⁺ = 781

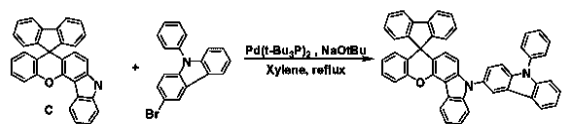
【0269】

<製造例 11>—化合物 11 の合成

【化 191】

【化合物 C】

【化合物 11】



窒素雰囲気下、500 ml の丸底フラスコに、前記化合物 C (10.0 g、23.75 mmol)、3-ブロモ-9-フェニル-9H-カルバゾール (8.01 g、24.94 mmol) をキシレン (x y l e n e) 180 ml に完全に溶かした後、ソジウム-tert-ブトキシド (2.97 g、30.88 mmol) を添加し、ビス(トリ-tert-ブチルホスフィン)パラジウム (0.12 g、0.24 mmol) を入れた後、2時間加熱撹拌した。常温に温度を下げて濾過して塩を除去した後、キシレン (x y l e n e) を減圧濃縮させ、エチルアセテート 140 ml で再結晶して、前記化合物 11 (12.11 g、収率：77%) を製造した。

【0270】

MS [M+H]⁺ = 663

【0271】

<製造例 12>—化合物 12 の合成

10

20

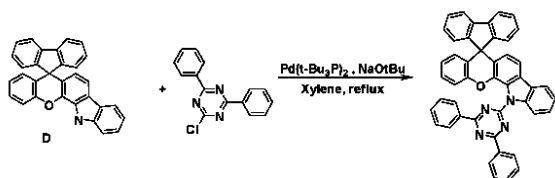
30

40

【化 1 9 2】

[化合物 D]

[化合物 12]



窒素雰囲気下、500 ml の丸底フラスコに、前記化合物 D (10.0 g、23.75 mmol)、2-クロロ-4,6-ジフェニル-1,3,5-トリアジン (6.66 g、24.94 mmol) をキシレン (xylene) 210 ml に完全に溶かした後、ソジウム-tert-ブトキシド (2.97 g、30.88 mmol) を添加し、ビス(トリ-tert-ブチルホスフィン)パラジウム (0.12 g、0.24 mmol) を入れた後、4 時間加熱撹拌した。常温に温度を下げて濾過して塩を除去した後、キシレン (xylene) を減圧濃縮させ、エチルアセテート 240 ml で再結晶して、前記化合物 12 (10.86 g、収率：70%) を製造した。

10

【0 2 7 2】

MS [M+H]⁺ = 653

【0 2 7 3】

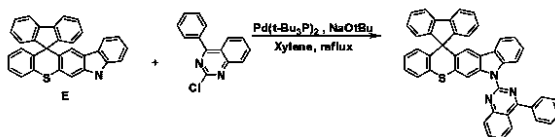
<製造例 13> - 化合物 13 の合成

20

【化 1 9 3】

[化合物 E]

[化合物 13]



窒素雰囲気下、500 ml の丸底フラスコに、前記化合物 E (10.0 g、22.88 mmol)、2-クロロ-4-フェニルキナゾリン (5.77 g、24.03 mmol) をキシレン (xylene) 210 ml に完全に溶かした後、ソジウム-tert-ブトキシド (2.86 g、29.75 mmol) を添加し、ビス(トリ-tert-ブチルホスフィン)パラジウム (0.12 g、0.23 mmol) を入れた後、5 時間加熱撹拌した。常温に温度を下げて濾過して塩を除去した後、キシレン (xylene) を減圧濃縮させ、エチルアセテート 260 ml で再結晶して、前記化合物 13 (9.92 g、収率：68%) を製造した。

30

【0 2 7 4】

MS [M+H]⁺ = 642

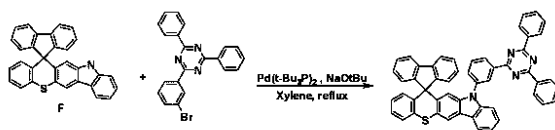
【0 2 7 5】

<製造例 14> - 化合物 14 の合成

【化 1 9 4】

[化合物 F]

[化合物 14]



窒素雰囲気下、500 ml の丸底フラスコに、前記化合物 F (10.0 g、22.88 mmol)、2-(3-ブロモフェニル)-4,6-ジフェニル-1,3,5-トリアジン (9.30 g、24.03 mmol) をキシレン (xylene) 250 ml に完全に溶かした後、ソジウム-tert-ブトキシド (2.86 g、29.75 mmol) を添加

50

し、ビス（トリ-*tert*-ブチルホスフィン）パラジウム（0.12 g、0.23 mmol）を入れた後、5時間加熱撹拌した。常温に温度を下げて濾過して塩を除去した後、キシレン（*xylene*）を減圧濃縮させ、エチルアセテート280 mlで再結晶して、前記化合物14（12.45 g、収率：72%）を製造した。

【0276】

MS [M+H]⁺ = 745

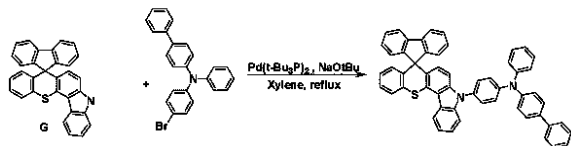
【0277】

<製造例15>—化合物15の合成

【化195】

【化合物 G】

【化合物 15】



窒素雰囲気下、500 mlの丸底フラスコに、前記化合物G（10.0 g、22.88 mmol）、N-（4-ブロモフェニル）-N-フェニルビフェニル-4-アミン（9.61 g、24.03 mmol）をキシレン（*xylene*）150 mlに完全に溶かした後、ソジウム-*tert*-ブトキシド（2.86 g、29.75 mmol）を添加し、ビス（トリ-*tert*-ブチルホスフィン）パラジウム（0.12 g、0.23 mmol）を入れた後、4時間加熱撹拌した。常温に温度を下げて濾過して塩を除去した後、キシレン（*xylene*）を減圧濃縮させ、エチルアセテート180 mlで再結晶して、前記化合物15（13.39 g、収率：77%）を製造した。

【0278】

MS [M+H]⁺ = 757

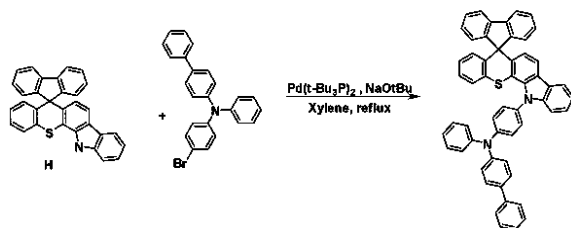
【0279】

<製造例16>—化合物16の合成

【化196】

【化合物 H】

【化合物 16】



窒素雰囲気下、500 mlの丸底フラスコに、化合物H（10.0 g、22.88 mmol）、N-（4-ブロモフェニル）-N-フェニルビフェニル-4-アミン（9.61 g、24.03 mmol）をキシレン（*xylene*）150 mlに完全に溶かした後、ソジウム-*tert*-ブトキシド（2.86 g、29.75 mmol）を添加し、ビス（トリ-*tert*-ブチルホスフィン）パラジウム（0.12 g、0.23 mmol）を入れた後、4時間加熱撹拌した。常温に温度を下げて濾過して塩を除去した後、キシレン（*xylene*）を減圧濃縮させ、エチルアセテート130 mlで再結晶して、前記化合物16（12.24 g、収率：71%）を製造した。

【0280】

MS [M+H]⁺ = 757

【0281】

<実験例1>

【0282】

<実験例1-1>

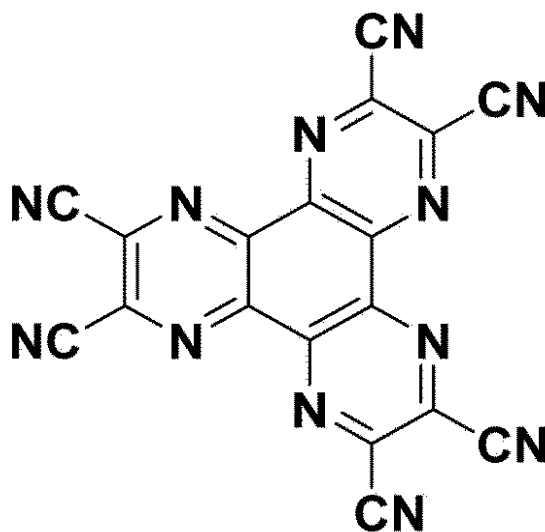
ITO (indium tin oxide) が $1,000 \text{ \AA}$ の厚さに薄膜コーティングされたガラス基板を洗剤を溶かした蒸留水に入れて超音波洗浄した。この時、洗剤としてはフィッシャー社 (Fischer Co.) 製品を使用し、蒸留水としてはミリポア社 (Millipore Co.) 製品のフィルタ (Filter) で2次濾過した蒸留水を使用した。ITOを30分間洗浄した後、蒸留水で2回繰り返し超音波洗浄を10分間進行させた。蒸留水洗浄が終わった後、イソプロピルアルコール、アセトン、メタノールの溶剤で超音波洗浄をし乾燥させた後、プラズマ洗浄機に輸送させた。また、酸素プラズマを用いて前記基板を5分間洗浄した後、真空蒸着機に基板を輸送させた。

【0283】

こうして容易されたITO透明電極上に、下記化学式のヘキサニトリルヘキサアザトリフェニレン (hexaazatriphenylene; HAT) を $150 \text{ \AA}$ の厚さに熱真空蒸着して、正孔注入層を形成した。

【化197】

[HAT]

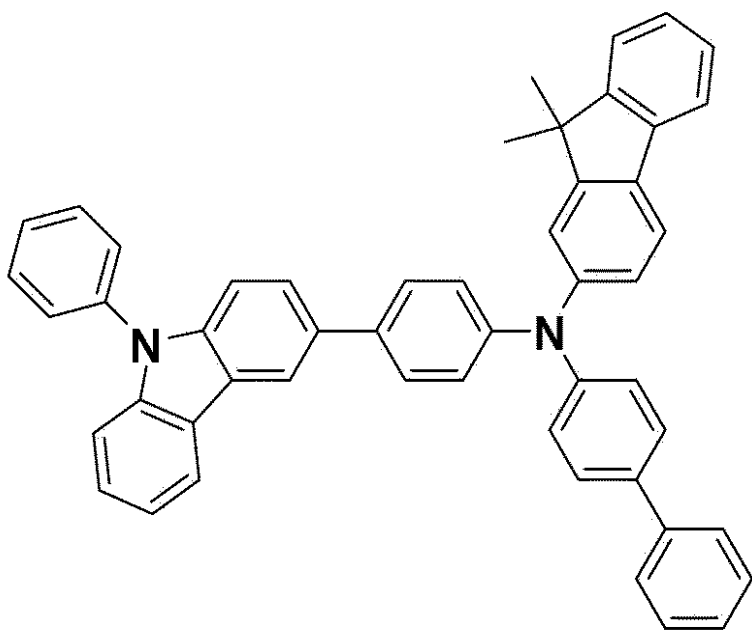


【0284】

前記正孔注入層上に、正孔を輸送する物質である下記化合物HT ($850 \text{ \AA}$) を真空蒸着して、正孔輸送層を形成した。

【化 1 9 8】

[HT]



10

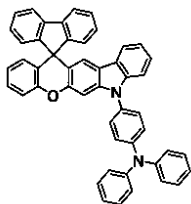
20

【0 2 8 5】

次に、前記正孔輸送層上に、膜厚さ150 Åとして化合物1を真空蒸着して、電子阻止層を形成した。

【化 1 9 9】

[化合物 1]



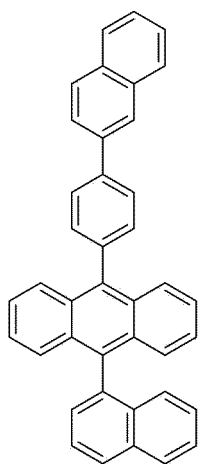
30

【0 2 8 6】

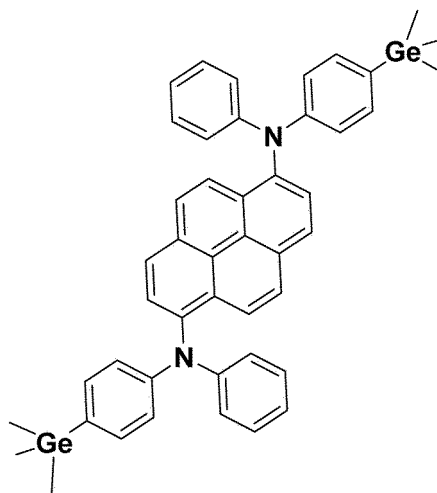
次に、前記電子阻止層上に、膜厚さ300 Åとして以下のようなBHとBDとを25：1の重量比で真空蒸着して、発光層を形成した。

【化 2 0 0】

[BH]

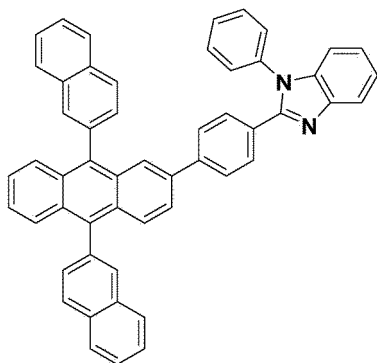


[BD]

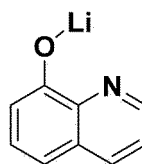


10

[ET1]



[LiQ]



20

30

【0 2 8 7】

前記発光層上に、前記化合物ET1とLiQ (Lithium Quinolate) とを1:1の重量比で真空蒸着して、360 Åの厚さに電子注入および輸送層を形成した。前記電子注入および輸送層上に、順次に、12 Åの厚さにリチウムフルオライド (LiF) と2,000 Åの厚さにアルミニウムを蒸着して、陰極を形成した。

【0 2 8 8】

前記過程で、有機物の蒸着速度は0.4~0.7 Å/secを維持し、陰極のリチウムフルオライドは0.3 Å/sec、アルミニウムは2 Å/secの蒸着速度を維持し、蒸着時の真空度は $2 \times 10^{-7} \sim 5 \times 10^{-6}$ torrを維持して、有機発光素子を作製した。

40

【0 2 8 9】

<実験例1-2>

前記実験例1-1における化合物1の代わりに前記化合物2を用いたことを除けば、実験例1-1と同様の方法で有機発光素子を作製した。

【0 2 9 0】

<実験例1-3>

前記実験例1-1における化合物1の代わりに前記化合物3を用いたことを除けば、実験例1-1と同様の方法で有機発光素子を作製した。

【0 2 9 1】

<実験例1-4>

50

前記実験例 1-1 における化合物 1 の代わりに前記化合物 10 を用いたことを除けば、実験例 1-1 と同様の方法で有機発光素子を作製した。

【0292】

＜実験例 1-5＞

前記実験例 1-1 における化合物 1 の代わりに前記化合物 11 を用いたことを除けば、実験例 1-1 と同様の方法で有機発光素子を作製した。

【0293】

＜実験例 1-6＞

前記実験例 1-1 における化合物 1 の代わりに前記化合物 15 を用いたことを除けば、実験例 1-1 と同様の方法で有機発光素子を作製した。

10

【0294】

＜実験例 1-7＞

前記実験例 1-1 における化合物 1 の代わりに前記化合物 16 を用いたことを除けば、実験例 1-1 と同様の方法で有機発光素子を作製した。

【0295】

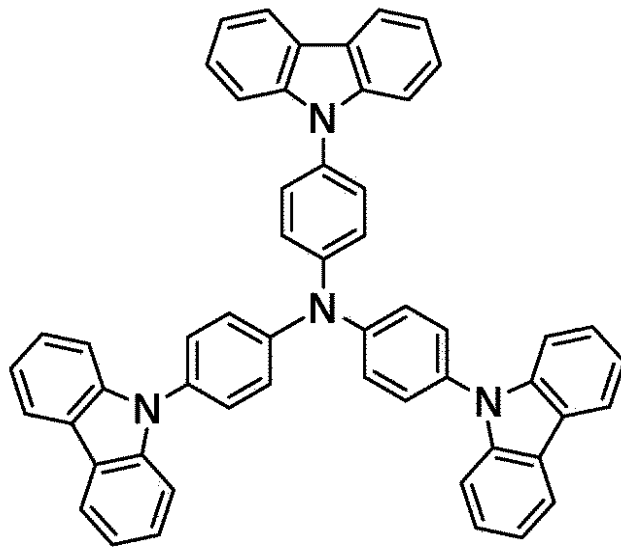
＜比較例 1-1＞

前記実験例 1-1 における化合物 1 の代わりに下記 EB1 (TC TA) を用いたことを除けば、実験例 1-1 と同様の方法で有機発光素子を作製した。

【化201】

20

[EB 1]



30

【0296】

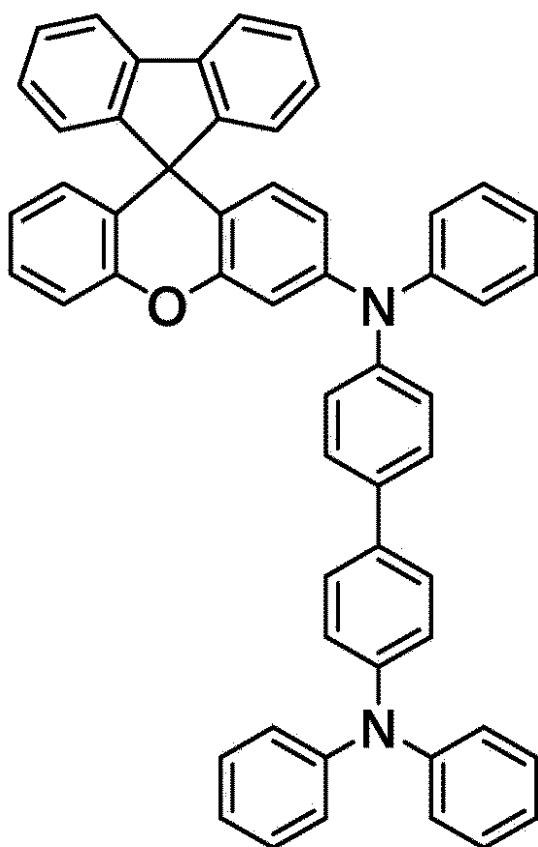
＜比較例 1-2＞

40

前記実験例 1-1 における化合物 1 の代わりに下記 EB2 を用いたことを除けば、実験例 1-1 と同様の方法で有機発光素子を作製した。

【化 2 0 2】

[EB 2]



10

20

【0 2 9 7】

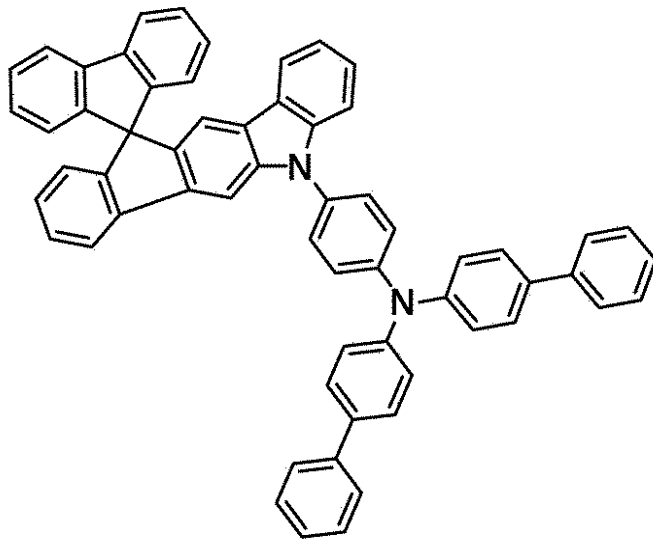
30

<比較例 1－3>

前記実験例 1－1 における化合物 1 の代わりに下記 E B 3 を用いたことを除けば、実験例 1－1 と同様の方法で有機発光素子を作製した。

【化 2 0 3】

[EB 3]



10

【0 2 9 8】

前記実験例 1-1～1-7 および比較例 1-1～1-3 により作製された有機発光素子に電流を印加した時、下記表 1 の結果を得た。

【表 1】

区分	化合物 (電子阻止層)	電圧 (V@10mA/cm ²)	効率 (cd/A@10mA/cm ²)	色座標 (x, y)
実験例 1-1	化合物 1	3.70	5.30	(0.138, 0.125)
実験例 1-2	化合物 2	3.62	5.38	(0.137, 0.126)
実験例 1-3	化合物 3	3.59	5.41	(0.137, 0.126)
実験例 1-4	化合物 10	3.52	5.46	(0.138, 0.126)
実験例 1-5	化合物 11	3.53	5.44	(0.137, 0.126)
実験例 1-6	化合物 15	3.61	5.39	(0.138, 0.126)
実験例 1-7	化合物 16	3.68	5.49	(0.138, 0.127)
比較例 1-1	EB 1(TCTA)	4.13	4.71	(0.137, 0.126)
比較例 1-2	EB 2	4.04	4.85	(0.139, 0.125)
比較例 1-3	EB 3	4.25	4.56	(0.138, 0.124)

20

30

【0 2 9 9】

前記表 1 に示されるように、本明細書に係る前記化学式 1 で表されるスピロ型化合物を電子阻止層として用いる実験例 1-1～1-7 は、従来の EB 1 (TCTA) を用いる比較例 1-1 および本明細書の化学式 1 と類似のコア構造を有する比較例 1-2 および 1-3 に比べて、低電圧および高効率の特性を示すことが分かる。

40

【0 3 0 0】

本明細書に係る化合物誘導体は、電子抑制能力に優れて低電圧および高効率の特性を示し、有機電子素子に適用可能であることを確認することができた。

【0 3 0 1】

<実験例 2>

【0 3 0 2】

<実験例 2-1>

前記製造例で合成された化合物を通常知られた方法で高純度昇華精製をした後、下記のような方法で緑色有機発光素子を製造した。

【0 3 0 3】

50

ITO (indium tin oxide) が $1,000 \text{ \AA}$ の厚さに薄膜コーティングされたガラス基板を洗剤を溶かした蒸留水に入れて超音波洗浄した。この時、洗剤としてはフィッシャー社 (Fischer Co.) 製品を使用し、蒸留水としてはミリポア社 (Millipore Co.) 製品のフィルタ (Filter) で2次濾過した蒸留水を使用した。ITOを30分間洗浄した後、蒸留水で2回繰り返し超音波洗浄を10分間進行させた。蒸留水洗浄が終わった後、イソプロピルアルコール、アセトン、メタノールの溶剤で超音波洗浄をし乾燥させた後、プラズマ洗浄機に輸送させた。また、酸素プラズマを用いて前記基板を5分間洗浄した後、真空蒸着機に基板を輸送させた。

【0304】

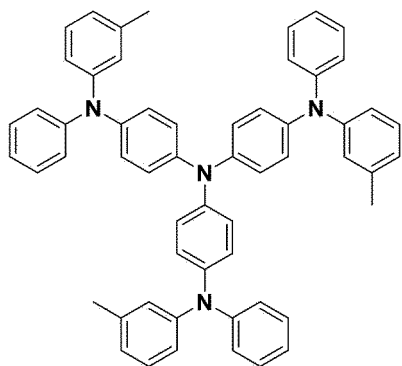
こうして容易されたITO透明電極上に、化合物4をホストとして用いて、m-MTDATA (60 nm) / TCTA (80 nm) / 化合物4 + 10% Ir(ppy)₃ (300 nm) / BCP (10 nm) / Alq₃ (30 nm) / LiF (1 nm) / Al (200 nm) の順に発光素子を構成して、有機電子素子を製造した。

【0305】

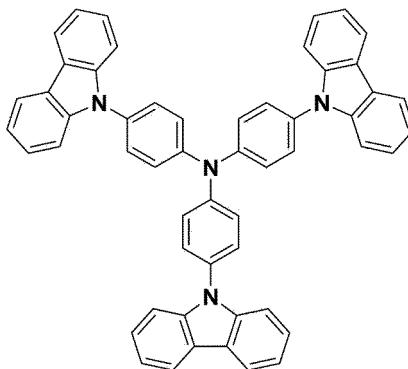
m-MTDATA、TCTA、Ir(ppy)₃、およびBCPの構造はそれぞれ、下記の通りである。

【化204】

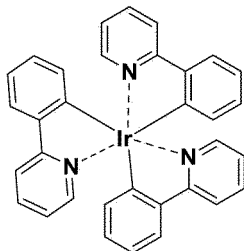
[m-MTDATA]



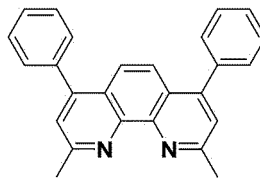
[TCTA]



[Ir(ppy)₃]

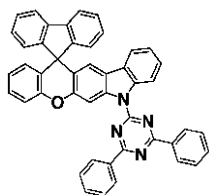


[BCP]



【化205】

[化合物4]



【0306】

<実験例2-2>

前記実験例2-1における化合物4の代わりに前記化合物6を用いたことを除けば、実

10

20

30

40

50

験例 2-1 と同様の方法で有機発光素子を作製した。

【0307】

＜実験例 2-3＞

前記実験例 2-1 における化合物 4 の代わりに前記化合物 7 を用いたことを除けば、実験例 2-1 と同様の方法で有機発光素子を作製した。

【0308】

＜実験例 2-4＞

前記実験例 2-1 における化合物 4 の代わりに前記化合物 8 を用いたことを除けば、実験例 2-1 と同様の方法で有機発光素子を作製した。

【0309】

＜実験例 2-5＞

前記実験例 2-1 における化合物 4 の代わりに前記化合物 12 を用いたことを除けば、実験例 2-1 と同様の方法で有機発光素子を作製した。

【0310】

＜実験例 2-6＞

前記実験例 2-1 における化合物 4 の代わりに前記化合物 14 を用いたことを除けば、実験例 2-1 と同様の方法で有機発光素子を作製した。

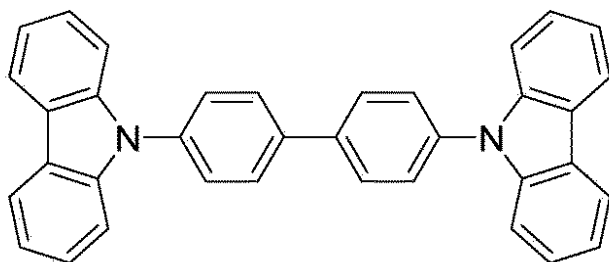
【0311】

＜比較例 2-1＞

前記実験例 2-1 における化合物 4 の代わりに下記 GH 1 (CBP) を用いたことを除けば、実験例 2-1 と同様の方法で有機発光素子を作製した。

【化 206】

[GH 1]



【0312】

＜比較例 2-2＞

前記実験例 2-1 における化合物 4 の代わりに下記 GH 2 を用いたことを除けば、実験例 2-1 と同様の方法で有機発光素子を作製した。

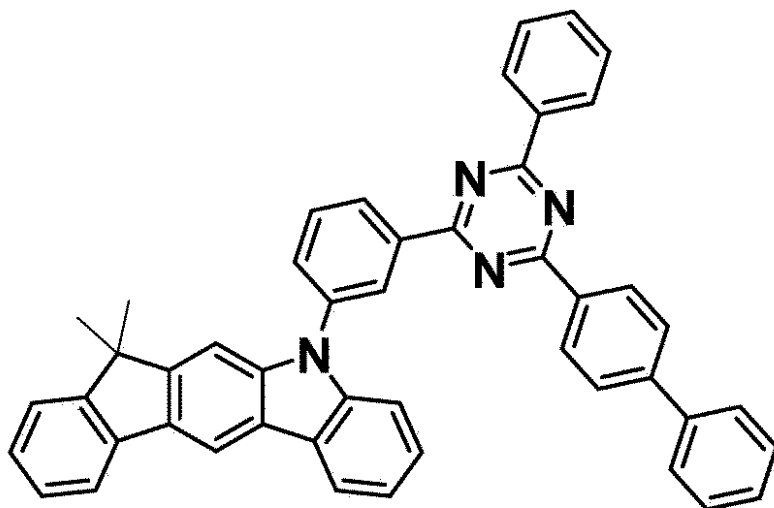
10

20

30

【化 2 0 7】

[GH 2]



10

【 0 3 1 3 】

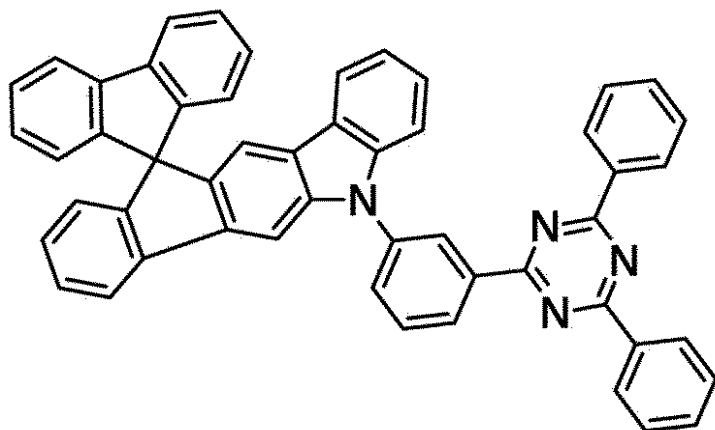
20

< 比較例 2 - 3 >

前記実験例 2 - 1 における化合物 4 の代わりに下記 GH 3 を用いたことを除けば、実験例 2 - 1 と同様の方法で有機発光素子を作製した。

【化 2 0 8】

[GH 3]



30

【 0 3 1 4 】

40

実験例 2 - 1 ~ 2 - 6 および比較例 2 - 1 ~ 2 - 3 により作製された有機発光素子に電流を印加した時、下記表 2 の結果を得た。

【表 2】

区分	化合物 (ホスト)	電圧 (V@10mA/cm ²)	効率 (cd/A@10mA/cm ²)	EL ピーク (nm)
実験例 2-1	化合物 4	5.38	45.31	517
実験例 2-2	化合物 6	5.43	44.93	516
実験例 2-3	化合物 7	5.55	44.34	518
実験例 2-4	化合物 8	5.49	44.25	517
実験例 2-5	化合物 12	5.44	44.88	518
実験例 2-6	化合物 14	5.39	45.30	517
比較例 2-1	GH 1 (CBP)	6.12	39.41	517
比較例 2-2	GH 2	5.75	41.35	518
比較例 2-3	GH 3	5.92	40.25	519

10

【0315】

前記表 2 に示されるように、本明細書に係る前記化学式 1 で表されるスピロ型化合物を緑色発光層のホスト物質として用いる実験例 2-1 ～ 2-6 の緑色有機発光素子は、従来の CBP を用いる比較例 2-1 ～ 2-3 の緑色有機 EL 素子より、電流効率および駆動電圧の面で優れた性能を示すことを確認することができた。

【0316】

< 実験例 3 >

【0317】

< 実験例 3-1 >

前記製造例で合成された化合物を通常知られた方法で高純度昇華精製をした後、下記のような方法で赤色有機発光素子を製造した。

【0318】

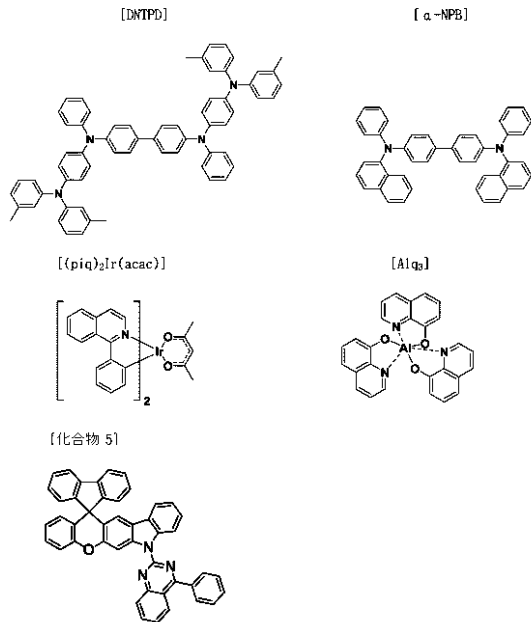
ITO ガラスの発光面積が 2 mm × 2 mm の大きさとなるようにパターニングした後、洗浄した。基板を真空チャンバに装着した後、ベース圧力が 1×10^{-6} torr となるようにした後、有機物を、前記 ITO 上に、DNTPD (700 Å)、α-NPB (300 Å)、化合物 5 をホストとして (90 wt %) 使用し、ドーパントとして下記 (piq)₂Ir(acac) (10 wt %) を真空蒸着 (300 Å) し、Alq₃ (350 Å)、LiF (5 Å)、Al (1,000 Å) の順に成膜し、0.4 mA で測定をした。

30

【0319】

前記 DNTPD、α-NPB、(piq)₂Ir(acac)、および Alq₃ の構造は、次の通りである。

【化 2 0 9】



10

【 0 3 2 0】

< 実験例 3 - 2 >

20

前記実験例 3 - 1 における化合物 5 の代わりに前記化合物 1 3 を用いたことを除けば、実験例 3 - 1 と同様の方法で有機発光素子を作製した。

【 0 3 2 1】

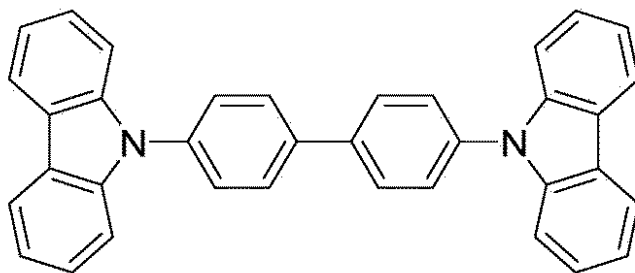
< 比較例 3 - 1 >

前記実験例 3 - 1 における化合物 5 の代わりに下記化合物 RH 1 (CBP) を用いたことを除けば、実験例 3 - 1 と同様の方法で有機発光素子を作製した。

【化 2 1 0】

[RH 1]

30



【 0 3 2 2】

40

前記実験例 3 - 1 および 3 - 2 と比較例 3 - 1 により製造された有機発光素子に対して、電圧、電流密度、輝度、色座標および寿命を測定し、その結果を下記表 3 に示した。T₉₅ は、輝度が初期輝度 (5000 nit) から 95% に減少するのにかかる時間を意味する。

【表 3】

区分	化合物 (ホスト)	電圧 (V)	輝度 (cd/m ²)	色座標 (x, y)	T95 (hr)
実験例 3-1	化合物 5	4.3	1860	(0.670, 0.329)	465
実験例 3-2	化合物 13	4.2	1920	(0.674, 0.325)	435
比較例 3-1	RH 1 (CBP)	5.4	1350	(0.671, 0.327)	355

【0323】

前記表 3 に示されるように、本明細書に係るスピロ型化合物を発光層のホスト物質として用いる実験例 3-1 および 3-2 の赤色有機発光素子は、従来の CBP を用いる比較例 3-1 の赤色有機 EL 素子より、電流効率、駆動電圧および寿命の面で優れた性能を示すことを確認することができた。

10

【0324】

以上、本明細書の好ましい実施例（電子阻止層、緑色発光層、赤色発光層）について説明したが、本明細書はこれに限定されるものではなく、特許請求の範囲と発明の詳細な説明の範囲内で多様に変形して実施することが可能であり、これも明細書の範疇に属する。

【符号の説明】

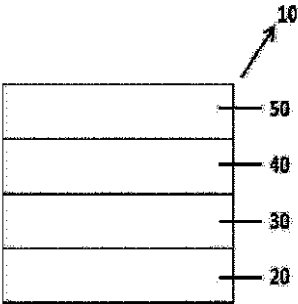
【0325】

- 10、11：有機発光素子
- 20：基板
- 30：第 1 電極
- 40：発光層
- 50：第 2 電極
- 60：正孔注入層
- 70：正孔輸送層
- 80：電子阻止層
- 90：電子輸送層
- 100：電子注入層

20

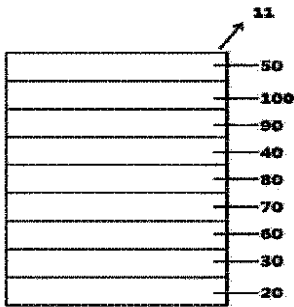
【図 1】

[図1]



【図 2】

[図2]



フロントページの続き

(51)Int.Cl.

F I

H 0 5 B 33/22

B

H 0 5 B 33/22

D

(72)発明者 キム、ジュンブム

大韓民国・ソウル・ヨンドゥンポグ・ヨイーデロ・128 エルジー・ケム・リミテッド内

(72)発明者 ホ、ドン ウク

大韓民国・ソウル・ヨンドゥンポグ・ヨイーデロ・128 エルジー・ケム・リミテッド内

(72)発明者 リー、スン ジェ

大韓民国・ソウル・ヨンドゥンポグ・ヨイーデロ・128 エルジー・ケム・リミテッド内

審査官 早乙女 智美

(56)参考文献 特開2012-229195 (JP, A)

国際公開第2010/047551 (WO, A2)

特表2014-527522 (JP, A)

国際公開第2015/009076 (WO, A1)

特表2017-523970 (JP, A)

特表2018-518471 (JP, A)

国際公開第2014/051232 (WO, A1)

韓国公開特許第10-2013-0140303 (KR, A)

Bhanuchandra, M. et al., Synthesis of Spirocyclic Diarylfluorenes by One-Pot Twofold S
NAr Reactions of Diaryl Sulfones with Diarylmethanes, Organic Letters, 2016年, 18(
3), pp. 384-387

(58)調査した分野(Int.Cl., DB名)

C 0 7 D

H 0 1 L

C 0 9 K

C A p l u s / R E G I S T R Y (S T N)