

(19) 日本国特許庁(JP)

(12) 特許公報(B2)

(11) 特許番号

特許第6881915号
(P6881915)

(45) 発行日 令和3年6月2日(2021.6.2)

(24) 登録日 令和3年5月10日(2021.5.10)

(51) Int.Cl.	F 1		
H01L 51/50 (2006.01)	H05B 33/22	D	
C09K 11/06 (2006.01)	H05B 33/14	B	
C07D 307/90 (2006.01)	H05B 33/22	B	
C07D 491/048 (2006.01)	C09K 11/06	6 3 5	
C07D 405/14 (2006.01)	C09K 11/06	6 2 0	

請求項の数 21 (全 85 頁) 最終頁に続く

(21) 出願番号	特願2016-161323 (P2016-161323)	(73) 特許権者	512187343 三星ディスプレイ株式會社 Samsung Display Co., Ltd. 大韓民国京畿道龍仁市器興区三星路1 1, Samsung-ro, Giheung-gu, Yongin-si, Gyeonggi-do, Republic of Korea
(22) 出願日	平成28年8月19日(2016.8.19)		
(65) 公開番号	特開2017-41636 (P2017-41636A)		
(43) 公開日	平成29年2月23日(2017.2.23)		
審査請求日	令和1年6月20日(2019.6.20)		
(31) 優先権主張番号	10-2015-0118277	(74) 代理人	110002619 特許業務法人PORT
(32) 優先日	平成27年8月21日(2015.8.21)	(72) 発明者	金 瑞 雅 大韓民国京畿道龍仁市器興区三星路1 三星ディスプレイ株式會社内
(33) 優先権主張国・地域又は機関	韓国(KR)		
(31) 優先権主張番号	10-2016-0104281		
(32) 優先日	平成28年8月17日(2016.8.17)		
(33) 優先権主張国・地域又は機関	韓国(KR)		

最終頁に続く

(54) 【発明の名称】有機発光素子

(57) 【特許請求の範囲】

【請求項 1】

第1電極と、

前記第1電極に対向した第2電極と、

前記第1電極と前記第2電極との間に介在され、第1化合物を含む第1層と、

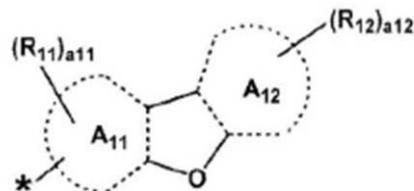
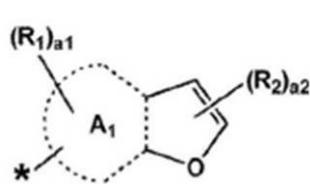
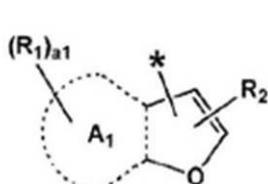
前記第1層と前記第2電極との間に介在され、第2化合物を含む第2層と、

前記第2層と前記第2電極との間に介在され、第3化合物を含む第3層と、を含み、

前記第1化合物、および前記第2化合物は、互いに独立して、下記化学式A～Cのいずれかで表される基を少なくとも1つ含み、

前記第1化合物は、* = N - *'を有する窒素含有ヘテロ環基を含まない、有機発光素子：

【化1】



化学式 A

化学式 B

化学式 C

前記化学式 A ~ C 中、

環 A₁、環 A₁₁ および環 A₁₂ は、互いに独立して、C₅ - C₃₀ 炭素環およびまたは C₂ - C₃₀ ヘテロ環であり、

R₁、R₂、R₁₁ および R₁₂ は、互いに独立して、

水素原子、重水素原子、-F、-Cl、-Br、-I、ヒドロキシル基、シアノ基、ニトロ基、アミノ基、アミジノ基、ヒドラジン基、ヒドラゾン基、カルボン酸基またはその塩、スルホン酸基またはその塩、リン酸基またはその塩、置換もしくは非置換の C₁ - C₆₀ アルキル基、置換もしくは非置換の C₂ - C₆₀ アルケニル基、置換もしくは非置換の C₂ - C₆₀ アルキニル基、および置換もしくは非置換の C₁ - C₆₀ アルコキシ基；

置換もしくは非置換の C₃ - C₁₀ シクロアルキル基、置換もしくは非置換の C₁ - C₁₀ ヘテロシクロアルキル基、置換もしくは非置換の C₃ - C₁₀ シクロアルケニル基、置換もしくは非置換の C₁ - C₁₀ ヘテロシクロアルケニル基、置換もしくは非置換の C₆ - C₆₀ アリール基、置換もしくは非置換の C₆ - C₆₀ アリールオキシ基、置換もしくは非置換の C₆ - C₆₀ アリールチオ基、置換もしくは非置換の C₁ - C₆₀ ヘテロアリール基、置換もしくは非置換の一価の非芳香族縮合多環基および置換もしくは非置換の一価の非芳香族ヘテロ縮合多環基；ならびに

-N(Q₁)(Q₂)、-Si(Q₃)(Q₄)(Q₅) および -B(Q₆)(Q₇)；からなる群より選択され、

前記 Q₁ ~ Q₇ は、互いに独立して、水素原子、重水素原子、-F、-Cl、-Br、-I、ヒドロキシル基、シアノ基、ニトロ基、アミノ基、アミジノ基、ヒドラジン基、ヒドラゾン基、カルボン酸基またはその塩、スルホン酸基またはその塩、リン酸基またはその塩、C₁ - C₆₀ アルキル基、C₂ - C₆₀ アルケニル基、C₂ - C₆₀ アルキニル基、C₁ - C₆₀ アルコキシ基、C₃ - C₁₀ シクロアルキル基、C₁ - C₁₀ ヘテロシクロアルキル基、C₃ - C₁₀ シクロアルケニル基、C₁ - C₁₀ ヘテロシクロアルケニル基、C₆ - C₆₀ アリール基、C₁ - C₆₀ ヘテロアリール基、一価の非芳香族縮合多環基、および一価の非芳香族ヘテロ縮合多環基からなる群より選択され、

a₁、a₁₁ および a₁₂ は、互いに独立して、0 ~ 10 の整数であり、

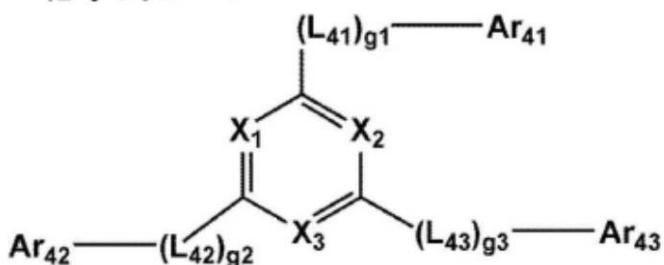
a₂ は、0 ~ 2 の整数であり、

* および *' は、隣接する原子との結合サイトであり、

前記第3化合物は、環形成部分構造として * = N - *' を含む窒素含有ヘテロ環基を含み、下記化学式 3 - 1 または化学式 3 - 2 で表される化合物から選択され、

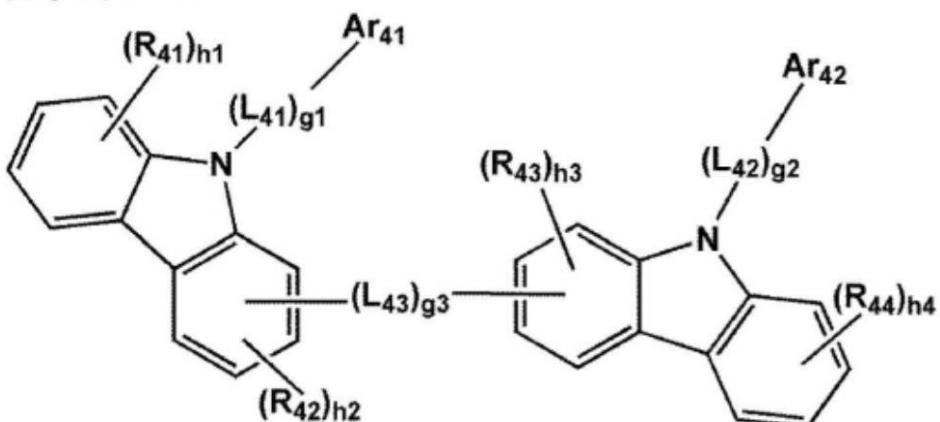
【化2】

化学式3-1



10

化学式3-2



20

前記化学式3-1および3-2中、

X₁は、C R₄₋₁またはNであり、

X₂は、C R₄₋₂またはNであり、

X₃は、C R₄₋₃またはNであり、

L₄₋₁～L₄₋₃は、互いに独立して、置換もしくは非置換のC₃-C₁₀シクロアルキレン基、置換もしくは非置換のC₁-C₁₀ヘテロシクロアルキレン基、置換もしくは非置換のC₃-C₁₀シクロアルケニレン基、置換もしくは非置換のC₁-C₁₀ヘテロシクロアルケニレン基、置換もしくは非置換のC₆-C₆アリーレン基、置換もしくは非置換のC₁-C₆ヘテロアリーレン基、置換もしくは非置換の二価非芳香族縮合多環基および置換もしくは非置換の二価非芳香族へテロ縮合多環基からなる群より選択される基であり、

g₁～g₃は、互いに独立して、0～3の整数であり、

A r₄₋₁～A r₄₋₃は、互いに独立して、前記化学式A～Cで表される基、置換もしくは非置換のC₃-C₁₀シクロアルキル基、置換もしくは非置換のC₁-C₁₀ヘテロシクロアルキル基、置換もしくは非置換のC₃-C₁₀シクロアルケニル基、置換もしくは非置換のC₁-C₁₀ヘテロシクロアルケニル基、置換もしくは非置換のC₆-C₆アリール基、ビフェニル基、ターフェニル基、置換もしくは非置換のC₁-C₆ヘテロアリール基、置換もしくは非置換の一価非芳香族縮合多環基および置換もしくは非置換の一価非芳香族へテロ縮合多環基からなる群より選択される基であり、

R₄₋₁～R₄₋₄は、互いに独立して、重水素原子、-F、-Cl、-Br、-I、ヒドロキシル基、シアノ基、ニトロ基、アミノ基、アミジノ基、ヒドラジン基、ヒドラゾン基、カルボン酸基またはその塩、スルホン酸基またはその塩、リン酸基またはその塩、置換もしくは非置換のC₁-C₆アルキル基、置換もしくは非置換のC₂-C₆アルケニル基、置換もしくは非置換のC₂-C₆アルキニル基、置換もしくは非置換のC₁-C₆アルコキシ基、置換もしくは非置換のC₃-C₁₀シクロアルキル基、置換もしくは非置換のC₃-C₁₀シク

30

40

50

ロアルケニル基、置換もしくは非置換の $C_1 - C_{10}$ ヘテロシクロアルケニル基、置換もしくは非置換の $C_6 - C_{60}$ アリール基、置換もしくは非置換の $C_6 - C_{60}$ アリールオキシ基、置換もしくは非置換の $C_6 - C_{60}$ アリールチオ基、置換もしくは非置換の $C_1 - C_{60}$ ヘテロアリール基、置換もしくは非置換の一価非芳香族縮合多環基、置換もしくは非置換の一価非芳香族ヘテロ縮合多環基、および $Si(Q_{43})(Q_{44})(Q_{45})$ からなる群より選択される基であり、

h_1 および h_4 は、互いに独立して、0 ~ 4 の整数であり、 h_2 および h_3 は、互いに独立して、0 ~ 3 の整数であり、

前記化学式 3 - 1 中、 $Ar_{41} \sim Ar_{43}$ のうち少なくとも一つは、前記化学式 A ~ C のいずれかの基であり、

前記化学式 3 - 2 中、 Ar_{41} および Ar_{42} のうち、一方は前記化学式 A ~ C のいずれかの基であり、他方は環形成部分構造として $* = N - *$ を含む窒素含有ヘテロ環基であり、

前記置換の $C_3 - C_{10}$ シクロアルキレン基、置換の $C_1 - C_{10}$ ヘテロシクロアルキレン基、置換の $C_3 - C_{10}$ シクロアルケニレン基、置換の $C_1 - C_{10}$ ヘテロシクロアルケニレン基、置換の $C_6 - C_{60}$ アリーレン基、置換の $C_6 - C_{60}$ 非縮合アリーレン基、置換の $C_6 - C_{60}$ 縮合多環式アリーレン基、置換の $C_1 - C_{60}$ ヘテロアリーレン基、置換の $C_1 - C_{60}$ 非縮合アリーレン基、置換の $C_1 - C_{60}$ 縮合多環式ヘテロアリーレン基、置換の二価非芳香族縮合多環基、置換の二価非芳香族ヘテロ縮合多環基、置換の $C_1 - C_{60}$ アルキル基、置換の $C_2 - C_{60}$ アルケニル基、置換の $C_2 - C_{60}$ アルキニル基、置換の $C_1 - C_{60}$ アルコキシ基、置換の $C_3 - C_{10}$ シクロアルキル基、置換の $C_1 - C_{10}$ ヘテロシクロアルキル基、置換の $C_3 - C_{10}$ シクロアルケニル基、置換の $C_1 - C_{10}$ ヘテロシクロアルケニル基、置換の $C_6 - C_{60}$ アリール基、置換の $C_6 - C_{60}$ アリールオキシ基、置換の $C_6 - C_{60}$ アリールチオ基、置換の $C_1 - C_{60}$ ヘテロアリール基、置換の一価非芳香族縮合多環基、置換の一価非芳香族ヘテロ縮合多環基の置換基は、

重水素原子、-F、-Cl、-Br、-I、ヒドロキシリル基、シアノ基、ニトロ基、アミノ基、アミジノ基、ヒドラジン基、ヒドラゾン基、カルボン酸基またはその塩、スルホン酸基またはその塩、リン酸基またはその塩、 $C_1 - C_{60}$ アルキル基、 $C_2 - C_{60}$ アルケニル基、 $C_2 - C_{60}$ アルキニル基、 $C_1 - C_{60}$ アルコキシ基、

重水素原子、-F、-Cl、-Br、-I、ヒドロキシリル基、シアノ基、ニトロ基、アミノ基、アミジノ基、ヒドラジン基、ヒドラゾン基、カルボン酸基またはその塩、スルホン酸基またはその塩、リン酸基またはその塩、 $C_3 - C_{10}$ シクロアルキル基、 $C_1 - C_{10}$ ヘテロシクロアルキル基、 $C_6 - C_{60}$ アリール基、 $C_6 - C_{60}$ アリールオキシ基、 $C_6 - C_{60}$ アリールチオ基、 $C_1 - C_{60}$ ヘテロアリール基、一価の非芳香族縮合多環基、一価の非芳香族ヘテロ縮合多環基、及び $-Si(Q_3)(Q_4)(Q_5)$ から選択された少なくとも一つで置換された $C_1 - C_{60}$ アルキル基、 $C_2 - C_{60}$ アルケニル基、 $C_2 - C_{60}$ アルキニル基、 $C_1 - C_{60}$ アルコキシ基、

$C_3 - C_{10}$ シクロアルキル基、 $C_1 - C_{10}$ ヘテロシクロアルキル基、 $C_3 - C_{10}$ シクロアルケニル基、 $C_1 - C_{10}$ ヘテロシクロアルケニル基、 $C_6 - C_{60}$ アリール基、 $C_6 - C_{60}$ アリールオキシ基、 $C_6 - C_{60}$ アリールチオ基、 $C_1 - C_{60}$ ヘテロアリール基、一価の非芳香族縮合多環基、一価の非芳香族ヘテロ縮合多環基、ビフェニル基、ターフェニル基、

重水素原子、-F、-Cl、-Br、-I、ヒドロキシリル基、シアノ基、ニトロ基、アミノ基、アミジノ基、ヒドラジン基、ヒドラゾン基、カルボン酸基またはその塩、スルホン酸基またはその塩、リン酸基またはその塩、 $C_1 - C_{60}$ アルキル基、 $C_2 - C_{60}$ アルケニル基、 $C_2 - C_{60}$ アルキニル基、 $C_1 - C_{60}$ アルコキシ基、 $C_3 - C_{10}$ シクロアルキル基、 $C_1 - C_{10}$ ヘテロシクロアルキル基、 $C_3 - C_{10}$ シクロアルケニル基、 $C_1 - C_{10}$ ヘテロシクロアルケニル基、 $C_6 - C_{60}$ アリール基、 $C_6 - C_{60}$ アリールオキシ基、 $C_6 - C_{60}$ アリールチオ基、 $C_1 - C_{60}$ ヘテロアリール基、一価の非芳香族ヘテロ縮合多環基、

10

20

30

40

50

芳香族縮合多環基、一価の非芳香族ヘテロ縮合多環基、ビフェニル基、ターフェニル基及び - S i (Q₃) (Q₄) (Q₅)から選択された少なくとも一つで置換された C₃ - C₁₀ シクロアルキル基、C₁ - C₁₀ ヘテロシクロアルキル基、C₃ - C₁₀ シクロアルケニル基、C₁ - C₁₀ ヘテロシクロアルケニル基、C₆ - C₆₀ アリール基、C₆ - C₆₀ アリールオキシ基、C₆ - C₆₀ アリールチオ基、C₁ - C₆₀ ヘテロアリール基、一価の非芳香族縮合多環基、一価の非芳香族ヘテロ縮合多環基、- S i (Q₃) (Q₄) (Q₅)、

から選択され、

前記 Q₁、Q₂、Q₁₃ ~ Q₁₅、Q₂₃ ~ Q₁₅、Q₃₃ ~ Q₃₅、Q₄₃ ~ Q₄₅ は、互いに独立して、水素原子、重水素原子、- F、- Cl、- Br、- I、ヒドロキシル基、シアノ基、ニトロ基、アミノ基、アミジノ基、ヒドラジン基、ヒドラゾン基、カルボン酸基またはその塩、スルホン酸基またはその塩、リン酸基またはその塩、C₁ - C₆₀ アルキル基、C₂ - C₆₀ アルケニル基、C₂ - C₆₀ アルキニル基、C₁ - C₆₀ アルコキシ基、C₃ - C₁₀ シクロアルキル基、C₁ - C₁₀ ヘテロシクロアルキル基、C₃ - C₁₀ シクロアルケニル基、C₁ - C₁₀ ヘテロシクロアルケニル基、C₆ - C₆₀ アリール基、C₁ - C₆₀ ヘテロアリール基、一価非芳香族縮合多環基、一価非芳香族ヘテロ縮合多環基、ビフェニル基及びターフェニル基からなる群より選択される基である。

【請求項 2】

前記第1化合物～第3化合物のうち少なくとも2つの最低三重項エネルギーは、2.4 eV 以上である、請求項1に記載の有機発光素子。

【請求項 3】

前記第1化合物～第3化合物は、非対称構造を有する、請求項1または2に記載の有機発光素子。

【請求項 4】

環 A₁、環 A₁₁ および環 A₁₂ は、互いに独立して、ベンゼン、ナフタレン、フルオレン、ベンゾフルオレン、ピリジン、ピリミジン、カルバゾール、ベンゾカルバゾールおよびジベンゾチオフェンからなる群より選択される、請求項1～3のいずれか1項に記載の有機発光素子。

【請求項 5】

前記化学式 A ~ C 中、R₁、R₂、R₁₁ および R₁₂ は、互いに独立して、水素原子、重水素原子、- F、- Cl、- Br、- I、ヒドロキシル基、シアノ基、ニトロ基、アミノ基、アミジノ基、ヒドラジン基、ヒドラゾン基、カルボン酸基またはその塩、スルホン酸基またはその塩、リン酸基またはその塩、置換もしくは非置換の C₁ - C₂₀ アルキル基、および置換もしくは非置換の C₁ - C₂₀ アルコキシ基；

置換もしくは非置換のフェニル基、置換も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フルオレニル基、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ピリジニル基、置換もしくは非置換のピリミジニル基、置換もしくは非置換のトリアジニル基、置換もしくは非置換のキノリニル基、置換もしくは非置換のイソキノリニル基、置換もしくは非置換のキナゾリニル基および置換もしくは非置換のキノキサリニル基；ならびに

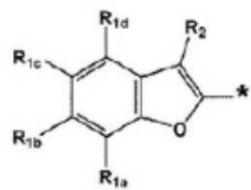
- N (Q₁) (Q₂)、- S i (Q₃) (Q₄) (Q₅) および B (Q₆) (Q₇)；からなる群より選択され、

前記 Q₁ ~ Q₇ は、互いに独立して、C₁ - C₁₀ アルキル基、C₁ - C₁₀ アルコキシ基、フェニル基、ビフェニル基、ターフェニル基、フルオレニル基およびナフチル基からなる群より選択される、請求項1～4のいずれか1項に記載の有機発光素子。

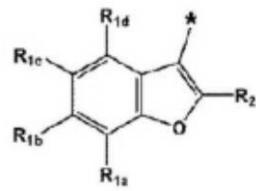
【請求項 6】

前記第1化合物～第3化合物は、互いに独立して、下記化学式 A (1)、A (2)、B (1) ~ B (4)、および化学式 C (1) ~ C (16) のいずれかで表される基を少なくとも1つ含む、請求項1～5のいずれか1項に記載の有機発光素子：

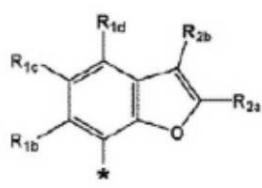
【化 2 - 1】



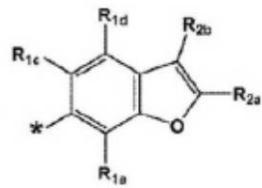
化学式 A(1)



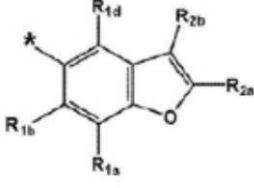
化学式 A(2)



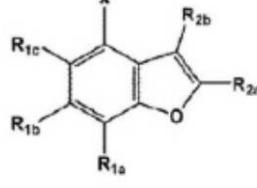
化学式 B(1)



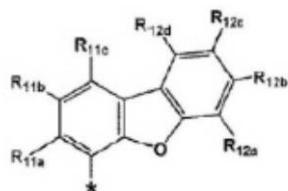
化学式 B(2)



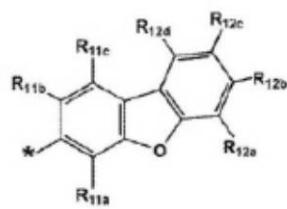
化学式 B(3)



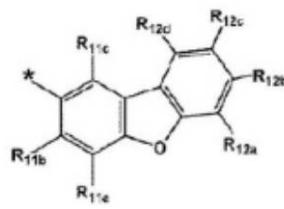
化学式 B(4)



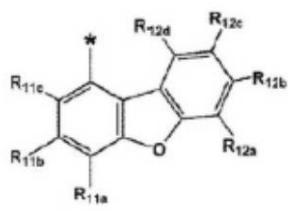
化学式 C(1)



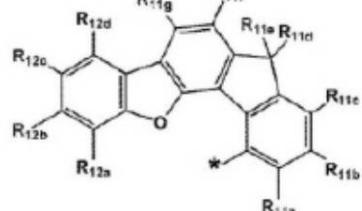
化学式 C(2)



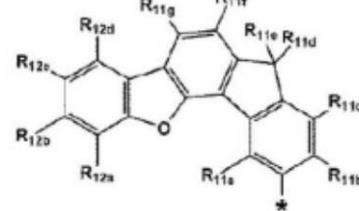
化学式 C(3)



化学式 C(4)



化学式 C(5)



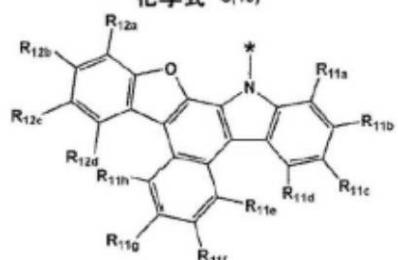
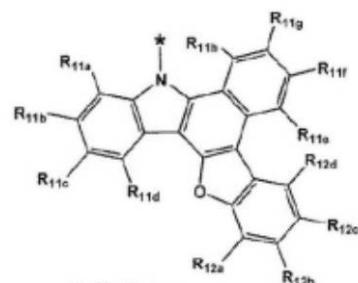
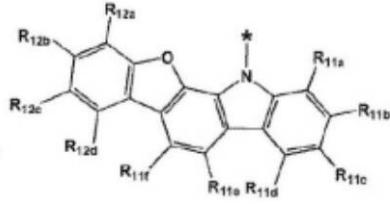
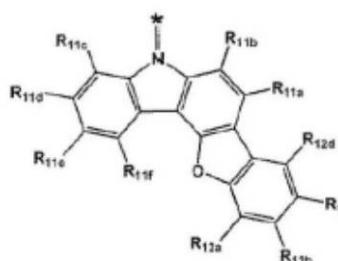
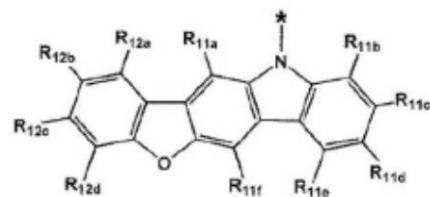
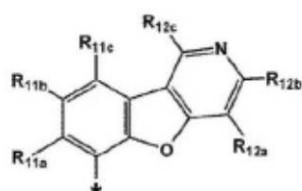
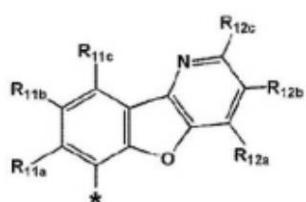
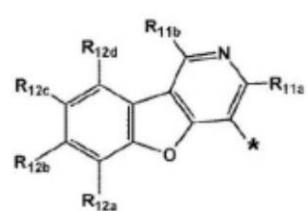
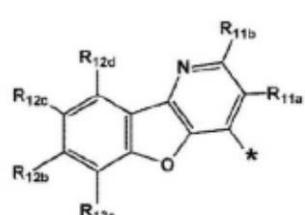
化学式 C(6)

10

20

30

【化2-2】



前記化学式 A (1)、A (2)、B (1) ~ B (4) および化学式 C (1) ~ C (16) 中、

R_{1-a} ~ R_{1-d} は、前記 R₁ と同様であり、

R_{2-a} および R_{2-b} は、前記 R₂ と同様であり、

R_{11-a} ~ R_{11-h} は、前記 R₁₁ と同様であり、

R_{12-a} ~ R_{12-d} は、前記 R₁₂ と同様であり、

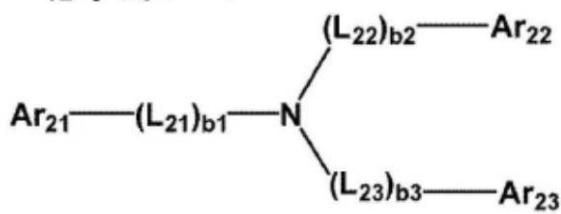
* は、隣接する原子との結合サイトである。

【請求項7】

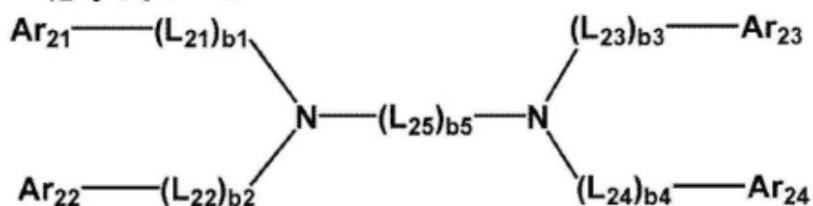
前記第1化合物 ~ 第2化合物は、互いに独立して、下記化学式 1 - 1 ~ 1 - 3、2H - 1、2D - 1、2D - 2、3 - 1 および 3 - 2 のいずれかで表される化合物である、請求項 1 ~ 6 のいずれか 1 項に記載の有機発光素子：

【化 3 - 1】

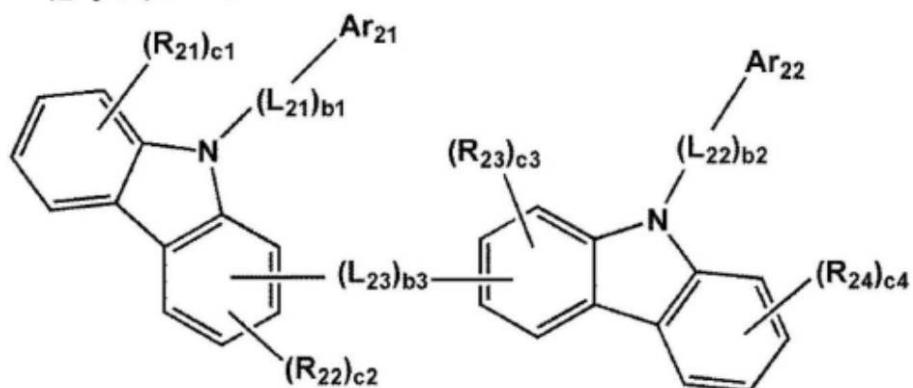
化学式 1-1



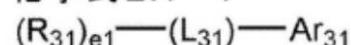
化学式 1-2



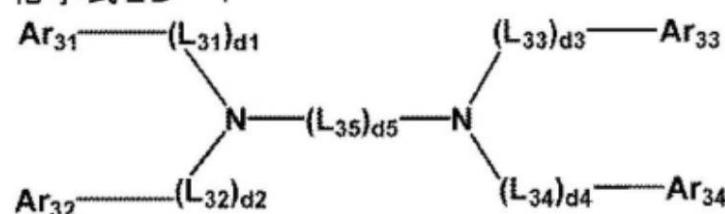
化学式 1-3



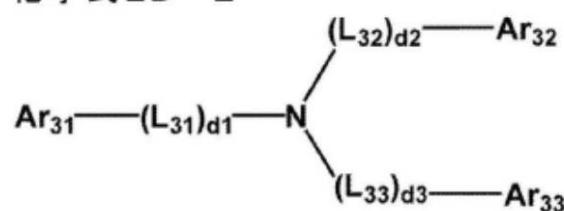
化学式 2H-1



化学式 2D-1

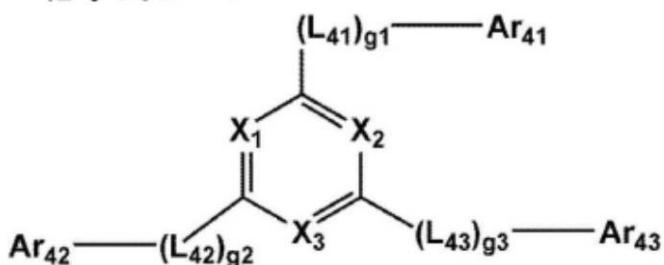


化学式 2D-2



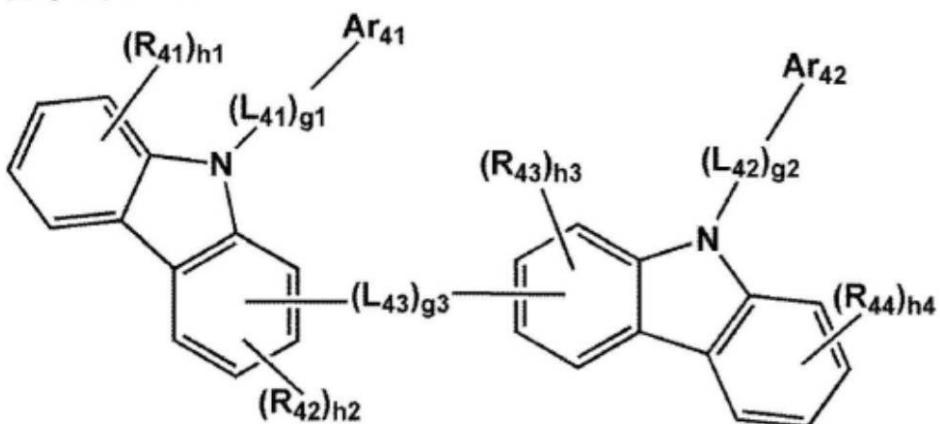
【化3-2】

化学式3-1



10

化学式3-2



20

前記化学式1-1、1-2、1-3、2H-1、2D-1、2D-2、3-1および3-2中、

X₁～X₃は、互いに独立して、CR₄₁またはNであり、

L₂₁～L₂₄、L₃₁～L₃₄およびL₄₁～L₄₃は、互いに独立して、置換もしくは非置換のC₃-C₁₀シクロアルキレン基、置換もしくは非置換のC₁-C₁₀ヘテロシクロアルキレン基、置換もしくは非置換のC₃-C₁₀シクロアルケニレン基、置換もしくは非置換のC₁-C₁₀ヘテロシクロアルケニレン基、置換もしくは非置換のC₆-C₆₀アリーレン基、置換もしくは非置換のC₁-C₆₀ヘテロアリーレン基、置換もしくは非置換の二価非芳香族縮合多環基および置換もしくは非置換の二価非芳香族ヘテロ縮合多環基からなる群より選択される基であり、

L₂₅は、置換もしくは非置換のC₃-C₁₀シクロアルキレン基、置換もしくは非置換のC₁-C₁₀ヘテロシクロアルキレン基、置換もしくは非置換のC₃-C₁₀シクロアルケニレン基、置換もしくは非置換のC₁-C₁₀ヘテロシクロアルケニレン基、置換もしくは非置換のC₆-C₆₀アリーレン基、および置換もしくは非置換のC₁-C₆₀ヘテロアリーレン基からなる群より選択される基であり、

L₃₅は、置換もしくは非置換のC₆-C₆₀縮合多環アリーレン基、置換もしくは非置換のC₁-C₆₀縮合多環ヘテロアリーレン基、置換もしくは非置換の二価非芳香族縮合多環基、および置換もしくは非置換の二価非芳香族ヘテロ縮合多環基からなる群より選択される基であり、

b₁～b₅、d₁～d₅、およびg₁～g₃は、互いに独立して、0～3の整数であり、

Ar₂₁～Ar₂₄、Ar₃₁～Ar₃₄、およびAr₄₁～Ar₄₃は、互いに独立して、前記化学式A～Cで表される基、置換もしくは非置換のC₃-C₁₀シクロアルキル基、置換もしくは非置換のC₁-C₁₀ヘテロシクロアルキル基、置換もしくは非置換のC₃-C₁₀シクロアルケニル基、置換もしくは非置換のC₁-C₁₀ヘテロシクロアルケニル基、置換もしくは非置換のC₆-C₆₀アリール基、置換もしくは非置換のC₁

40

50

- C₆～C₀ヘテロアリール基、置換もしくは非置換の一価非芳香族縮合多環基および置換もしくは非置換の一価非芳香族ヘテロ縮合多環基からなる群より選択される基であり、

R₂～R₂、R₃～R₃、およびR₄～R₄は、互いに独立して、重水素原子、-F、-Cl、-Br、-I、ヒドロキシリル基、シアノ基、ニトロ基、アミノ基、アミジノ基、ヒドラジン基、ヒドラゾン基、カルボン酸基またはその塩、スルホン酸基またはその塩、リン酸基またはその塩、置換もしくは非置換のC₁～C₆アルキル基、置換もしくは非置換のC₂～C₆アルケニル基、置換もしくは非置換のC₂～C₆アルキニル基、置換もしくは非置換のC₁～C₆アルコキシ基、置換もしくは非置換のC₃～C₁₀シクロアルキル基、置換もしくは非置換のC₁～C₁₀ヘテロシクロアルキル基、置換もしくは非置換のC₃～C₁₀シクロアルケニル基、置換もしくは非置換のC₁～C₁₀ヘテロシクロアルケニル基、置換もしくは非置換のC₆～C₆アリール基、置換もしくは非置換のC₆～C₆アリールオキシ基、置換もしくは非置換のC₆～C₆アリールチオ基、置換もしくは非置換のC₁～C₆ヘテロアリール基、置換もしくは非置換のビフェニル基、置換もしくは非置換の一価非芳香族縮合多環基、置換もしくは非置換の一価非芳香族ヘテロ縮合多環基、およびSi(Q₄)₃(Q₄)(Q₄)からなる群より選択される基であり、

c₁、c₄、e₁、h₁およびh₄は、互いに独立して、0～4の整数であり、c₂、c₃、h₂およびh₃は、互いに独立して、0～3の整数であり、

前記化学式1～1中、Ar₂～Ar₂のうち少なくとも一つは、前記化学式A～Cのいずれかの基であり、

前記化学式1～2中、Ar₂～Ar₂のうち少なくとも一つは、前記化学式A～Cのいずれかの基であり、

前記化学式1～3中、Ar₂およびAr₂のうち少なくとも一つは、前記化学式A～Cのいずれかの基であり、

前記化学式2H～1中、Ar₃は、前記化学式A～Cのいずれかの基であり、

前記化学式2D～1中、Ar₃～Ar₃のうち少なくとも一つは、前記化学式A～Cのいずれかの基であり、

前記化学式2D～2中、Ar₃～Ar₃のうち少なくとも一つは、前記化学式A～Cのいずれかの基であり、

前記化学式3～1中、Ar₄～Ar₄のうち少なくとも一つは、前記化学式A～Cのいずれかの基であり、

前記化学式3～2中、Ar₄およびAr₄のうち、一方は前記化学式A～Cのいずれかの基であり、他方は*=N-*'を含む窒素含有ヘテロ環基である。

【請求項8】

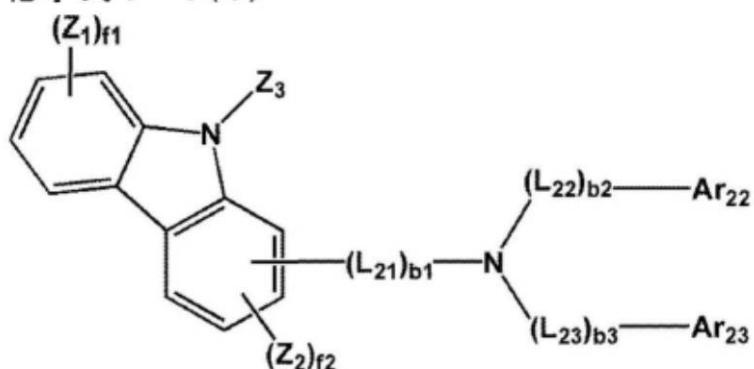
前記第1化合物は、前記化学式1～1～1～3のいずれかで表される化合物であり、前記第2化合物は、前記化学式2H～1、2D～1および2D～2のいずれかで表される化合物である、請求項7に記載の有機発光素子。

【請求項9】

前記第1化合物～第2化合物は、互いに独立して、下記化学式1～1(1)～1～1(4)、1～2(1)、1～3(1)、2H～1(1)～2H～1(4)、2D～1(1)～2D～1(4)、2D～2(1)、2D～2(2)、3～1(1)～3～1(2)および3～2(1)のいずれかで表される化合物である、請求項1～7のいずれか1項に記載の有機発光素子：

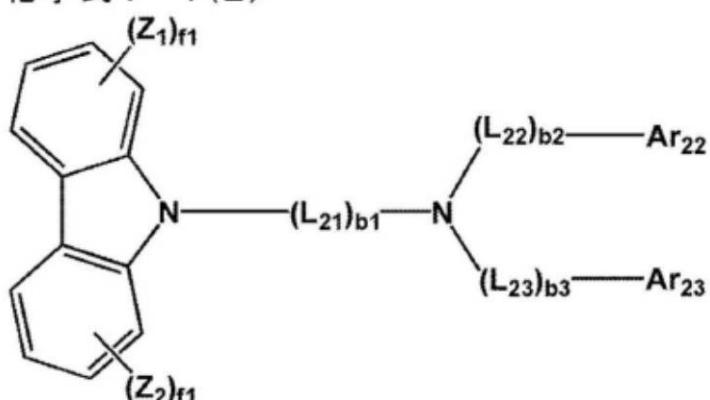
【化4-1】

化学式1-1(1)



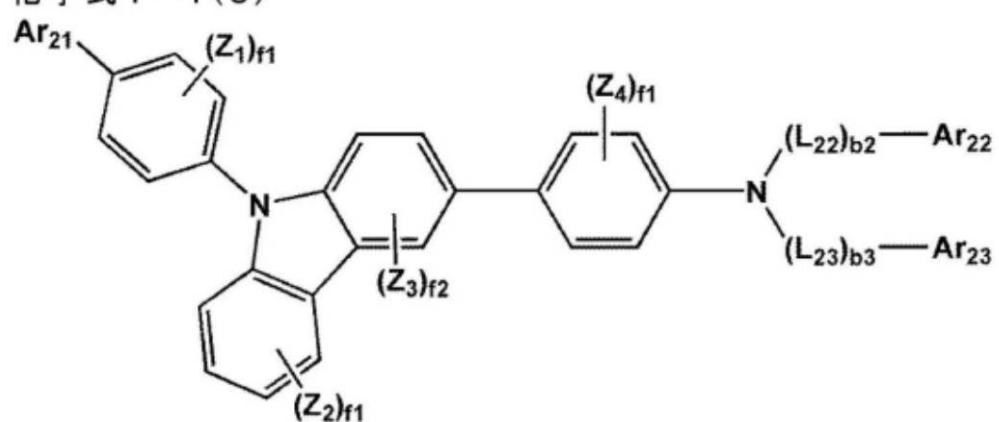
10

化学式1-1(2)



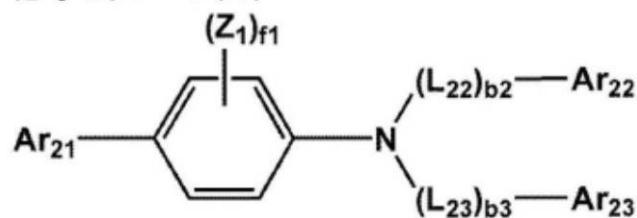
20

化学式1-1(3)



30

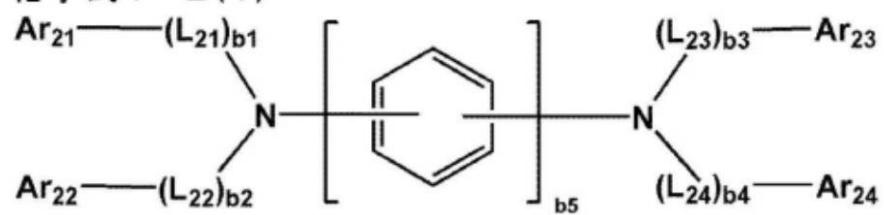
化学式1-1(4)



40

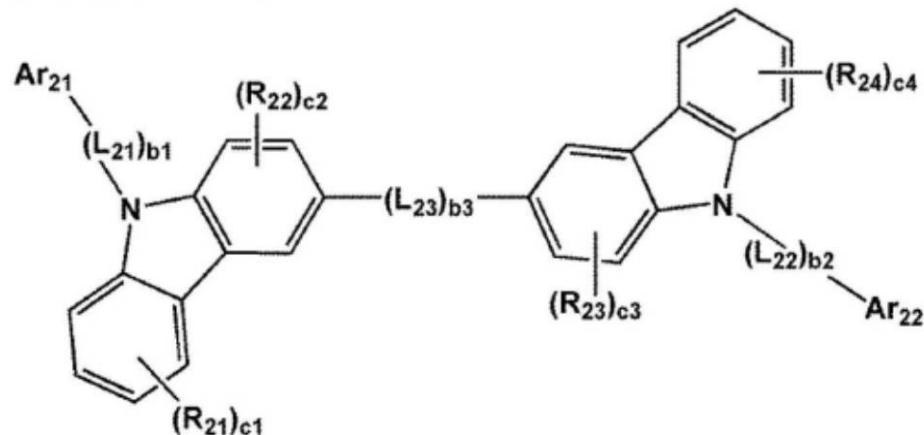
【化 4 - 2】

化学式 1-2(1)



10

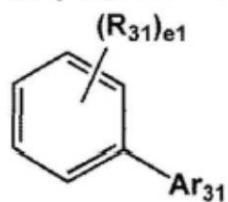
化学式 1-3(1)



20

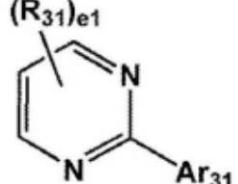
【化4-3】

化学式2H-1(1)



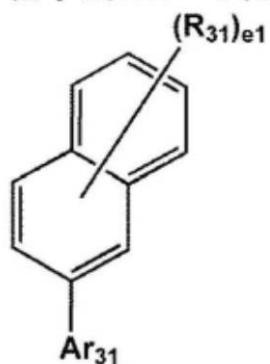
10

化学式2H-1(2)



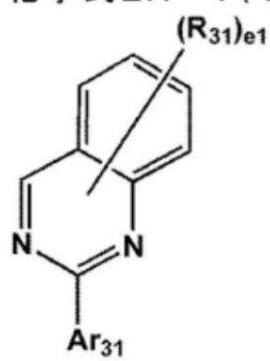
20

化学式2H-1(3)



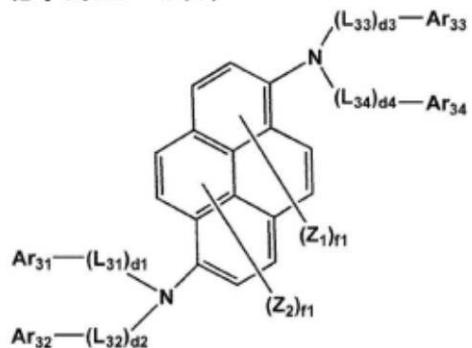
30

化学式2H-1(4)



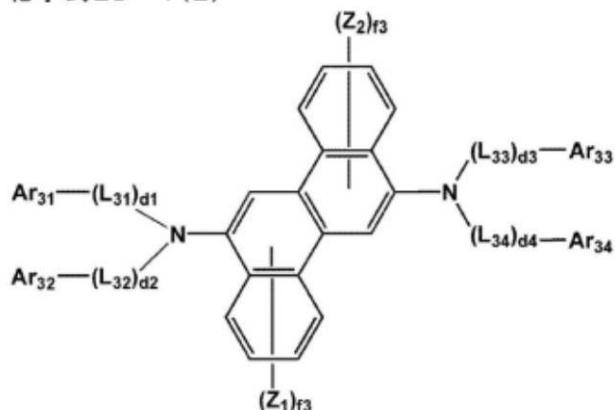
【化 4 - 4】

化学式 2D-1(1)



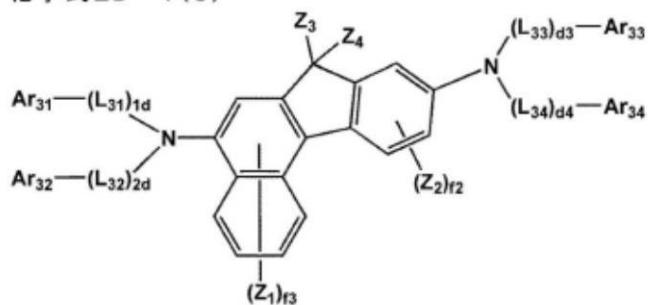
10

化学式 2D-1(2)



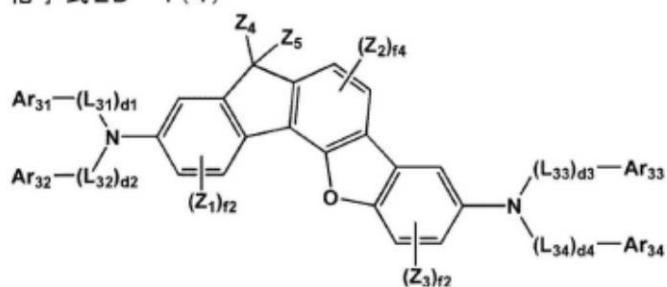
20

化学式 2D-1(3)



30

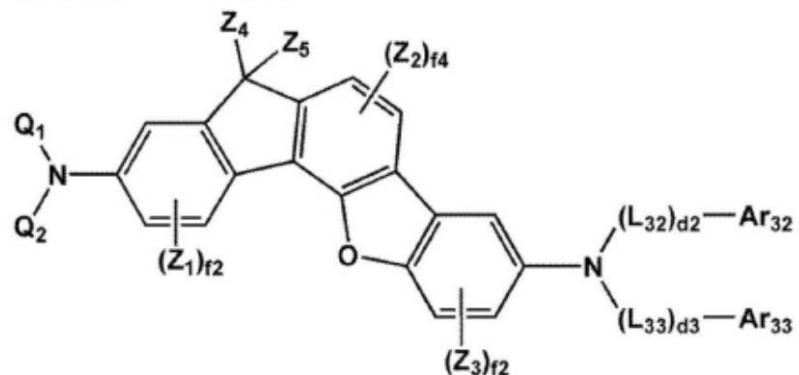
化学式 2D-1(4)



40

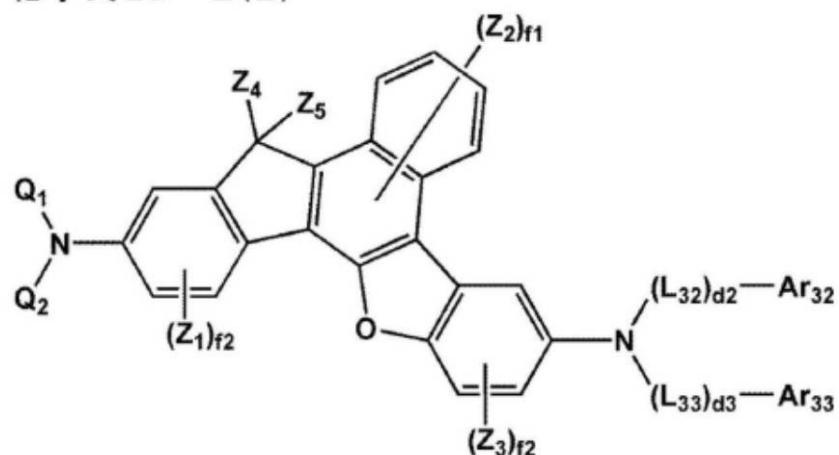
【化 4 - 5】

化学式 2D-2(1)



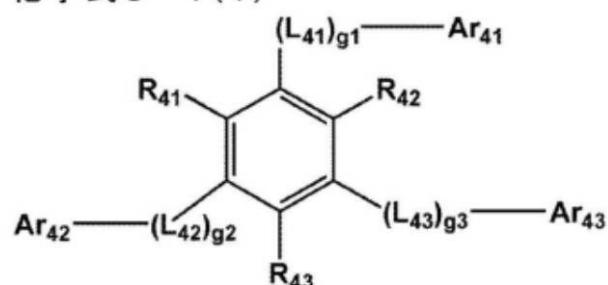
10

化学式 2D-2(2)



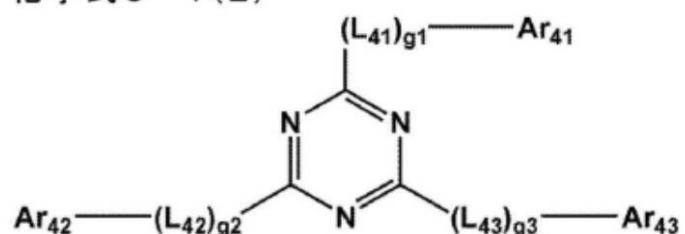
20

化学式 3-1(1)



30

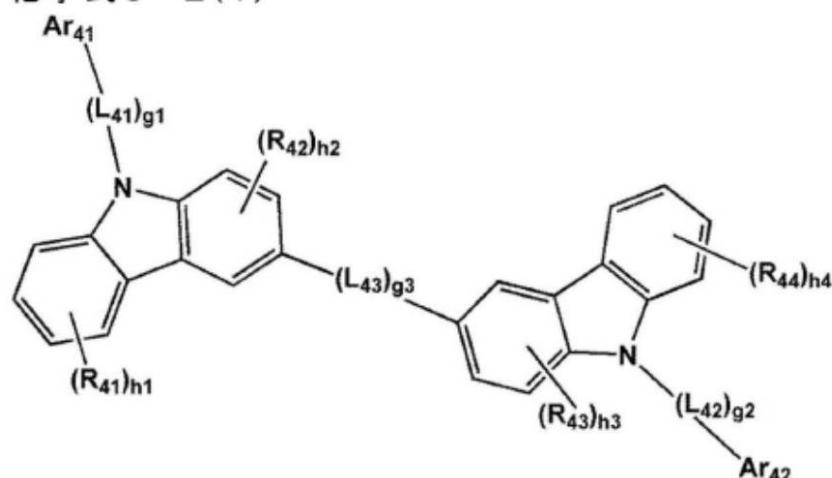
化学式 3-1(2)



40

【化4-6】

化学式3-2(1)



10

前記化学式1-1(1)~1-1(4)、1-2(1)、1-3(1)、2H-1(1)
~2H-1(4)、2D-1(1)~2D-1(4)、2D-2(1)、2D-2(2)
)、3-1(1)、3-1(2)および3-2(1)中、

L₂₁~L₂₄、L₃₁~L₃₄、L₄₁~L₄₃、b₁~b₅、d₁~d₄、g₁~
g₃、Ar₂₁~Ar₂₄、Ar₃₁~Ar₃₄、Ar₄₁~Ar₄₃、R₂₁~R₂₄
、R₃₁、R₄₁~R₄₄、c₁~c₄、e₁、h₁~h₄、Q₁およびQ₂は、上記と
同様であり、

20

Z₁~Z₅は、互いに独立して、

重水素原子、-F、-Cl、-Br、-I、ヒドロキシル基、シアノ基、ニトロ基、ア
ミノ基、アミジノ基、ヒドラジン基、ヒドラゾン基、カルボン酸基またはその塩、スルホ
ン酸基またはその塩、リン酸基またはその塩、置換もしくは非置換のC₁-C₆アルキ
ル基、置換もしくは非置換のC₂-C₆アルケニル基、置換もしくは非置換のC₂-C
6アルキニル基、およびC₁-C₆アルコキシ基、置換もしくは非置換のC₃-C₁
シクロアルキル基、置換もしくは非置換のC₁-C₁ヘテロシクロアルキル基、置換
もしくは非置換のC₃-C₁シクロアルケニル基、置換もしくは非置換のC₁-C₁0
ヘテロシクロアルケニル基、置換もしくは非置換のC₆-C₆アリール基、置換もしく
は非置換のC₆-C₆アリールオキシ基、置換もしくは非置換のC₆-C₆アリール
チオ基、置換もしくは非置換のC₁-C₆ヘテロアリール基、置換もしくは非置換の一
価非芳香族縮合多環基および置換もしくは非置換の一価非芳香族ヘテロ縮合多環基 お
よび-Si(Q₃₃)(Q₃₄)(Q₃₅)；からなる群より選択される基であり、

30

前記Q₃₃~Q₃₅は、互いに独立して、水素原子、重水素原子、-F、-Cl、-Br
、-I、ヒドロキシル基、シアノ基、ニトロ基、アミノ基、アミジノ基、ヒドラジン基
、ヒドラゾン基、カルボン酸基またはその塩、スルホン酸基またはその塩、リン酸基または
その塩、C₁-C₆アルキル基、C₂-C₆アルケニル基、C₂-C₆アルキニ
ル基、C₁-C₆アルコキシ基、C₃-C₁シクロアルキル基、C₁-C₁0ヘテロ
シクロアルキル基、C₃-C₁シクロアルケニル基、C₁-C₁0ヘテロシクロアルケ
ニル基、C₆-C₆アリール基、C₁-C₆ヘテロアリール基、一価非芳香族縮合多
環基および一価非芳香族ヘテロ縮合多環基からなる群より選択される基であり、

40

f₁は、0~4の整数であり、f₂は、0~3の整数であり、f₃は、0~5の整数で
あり、f₄は、0~2の整数であり、

前記化学式1-1(1)中、Ar₂₂およびAr₂₃のうち少なくとも一つは、前記化
学式A~Cのいずれかの基であり、

前記化学式1-1(2)中、Ar₂₂およびAr₂₃のうち少なくとも一つは、前記化
学式A~Cのいずれかの基であり、

50

前記化学式 1 - 1 (3) 中、 $A_{r_{21}} \sim A_{r_{23}}$ のうち少なくとも一つは、前記化学式 A ~ C のいずれかの基であり、

前記化学式 1 - 1 (4) 中、 $A_{r_{21}} \sim A_{r_{23}}$ のうち少なくとも一つは、前記化学式 A ~ C のいずれかの基であり、

前記化学式 1 - 2 (1) 中、 $A_{r_{21}} \sim A_{r_{24}}$ のうち少なくとも一つは、前記化学式 A ~ C のいずれかの基であり、

前記化学式 1 - 3 (1) 中、 $A_{r_{21}}$ および $A_{r_{22}}$ のうち少なくとも一つは、前記化学式 A ~ C のいずれかの基であり、

前記化学式 2 H - 1 (1) ~ 2 H - 1 (4) 中、 $A_{r_{31}}$ は、前記化学式 A ~ C のいずれかの基であり、

前記化学式 2 D - 1 (1) 中、 $A_{r_{31}} \sim A_{r_{34}}$ のうち少なくとも一つは、前記化学式 A ~ C のいずれかの基であり、

前記化学式 2 D - 1 (2) 中、 $A_{r_{31}} \sim A_{r_{34}}$ のうち少なくとも一つは、前記化学式 A ~ C のいずれかの基であり、

前記化学式 2 D - 1 (3) 中、 $A_{r_{31}} \sim A_{r_{34}}$ のうち少なくとも一つは、前記化学式 A ~ C のいずれかの基であり、

前記化学式 2 D - 1 (4) 中、 $A_{r_{31}} \sim A_{r_{34}}$ のうち少なくとも一つは、前記化学式 A ~ C のいずれかの基であり、

前記化学式 2 D - 2 (1) 中、 $A_{r_{32}}$ および $A_{r_{33}}$ のうち少なくとも一つは、前記化学式 A ~ C のいずれかの基であり、

前記化学式 2 D - 2 (2) 中、 $A_{r_{32}}$ および $A_{r_{33}}$ のうち少なくとも一つは、前記化学式 A ~ C のいずれかの基であり、

前記化学式 3 - 1 (1) 中、 $A_{r_{41}} \sim A_{r_{43}}$ のうち少なくとも一つは、前記化学式 A ~ C のいずれかの基であり、

前記化学式 3 - 1 (2) 中、 $A_{r_{41}} \sim A_{r_{43}}$ のうち少なくとも一つは、前記化学式 A ~ C のいずれかの基であり、

前記化学式 3 - 2 (1) 中、 $A_{r_{41}}$ および $A_{r_{42}}$ のうち、一方は前記化学式 A ~ C のいずれかの基であり、他方は $* = N - *$ を含む窒素含有ヘテロ環基である。

【請求項 10】

前記第1化合物は、前記化学式 1 - 1 (1) ~ 1 - 1 (4)、1 - 2 (1) および 1 - 3 (1) のいずれかで表される化合物であり、

前記第2化合物は、前記化学式 2 H - 1 (1) ~ 2 H - 1 (4)、2 D - 1 (1) ~ 2 D - 1 (4)、2 D - 2 (1) および 2 D - 2 (2) のいずれかで表される化合物であり、

前記第3化合物は、前記化学式 3 - 1 (1)、3 - 1 (2) および 3 - 2 (1) のいずれかで表される化合物である、請求項 9 に記載の有機発光素子。

【請求項 11】

前記第1化合物は、前記化学式 1 - 1 ~ 1 - 3 のいずれかで表される化合物であり、

前記第2化合物は、前記化学式 2 H - 1 で表される化合物である、請求項 7 に記載の有機発光素子。

【請求項 12】

前記第2層が発光層であり、前記第2層は、ドーパントをさらに含み、

前記第1層および第3層は、それぞれ前記第2層に隣接する、請求項 11 に記載の有機発光素子。

【請求項 13】

前記第1化合物は、前記化学式 1 - 1 ~ 1 - 3 のいずれかで表される化合物であり、

前記第2化合物は、前記化学式 2 D - 1 または 2 D - 2 で表される化合物である、請求項 7 に記載の有機発光素子。

【請求項 14】

前記第2層が発光層であり、前記第2層は、ホストをさらに含み、

10

20

40

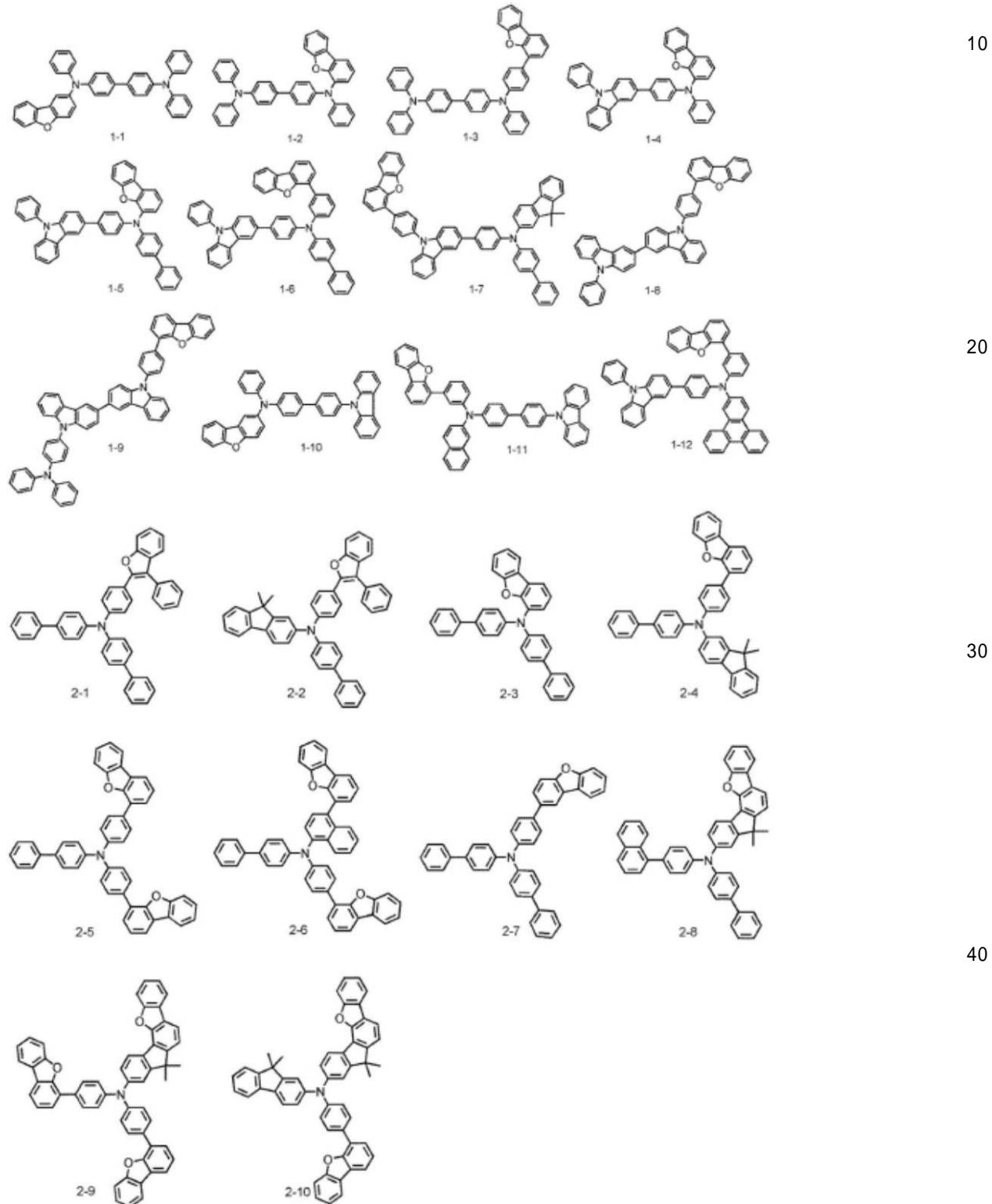
50

前記第1層および第3層は、それぞれ前記第2層に隣接する、請求項1～3に記載の有機発光素子。

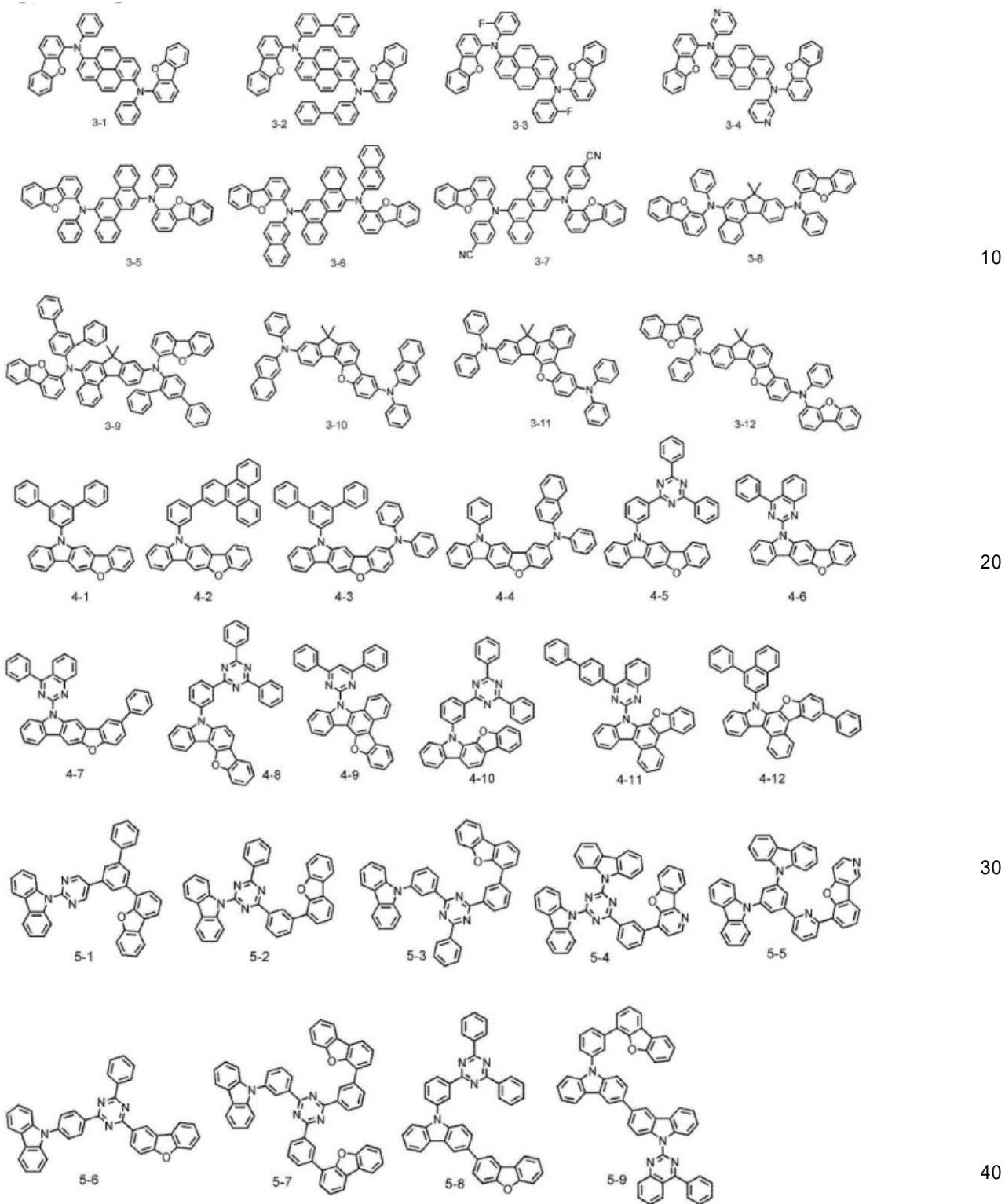
【請求項15】

前記第1化合物～第2化合物は、互いに独立して、下記化合物1-1～1-12、2-1～2-10、3-1～3-12、4-1～4-12からなる群より選択される化合物であり、第3化合物は、下記化合物5-1～5-9からなる群より選択される化合物である、請求項1～7および9のいずれか1項に記載の有機発光素子：

【化5-1】



【化 5 - 2】



【請求項 1 6】

前記第1化合物は、前記化合物1-1～1-12および2-1～2-10からなる群より選択される化合物であり、

前記第2化合物は、前記化合物3-1～3-12および4-1～4-12からなる群より選択される化合物である、請求項15に記載の有機発光素子。

【請求項 1 7】

前記第1化合物および前記第2化合物は、互いに独立して、前記化学式1-1～1-3のいずれかで表される化合物であり、

前記第1化合物と前記第2化合物とは、互いに異なる、請求項7に記載の有機発光素子

。

【請求項 18】

前記第1化合物および前記第2化合物は、互いに独立して、前記化学式1-1(1)～1-1(4)、1-2(1)および1-3(1)のいずれかで表される化合物であり、

前記第3化合物は、前記化学式3-1(1)、3-1(2)および3-2(1)のいずれかで表される化合物である、請求項9に記載の有機発光素子。

【請求項 19】

前記第3層が発光層であり、前記第3層は、ドーパントをさらに含み、

前記第2層は、前記第3層に隣接する、請求項16に記載の有機発光素子。

【請求項 20】

前記第3層が発光層であり、前記第3層は、ホストをさらに含み、

前記第2層は、前記第3層に隣接する、請求項16に記載の有機発光素子。

【請求項 21】

前記第1化合物および前記第2化合物は、互いに独立して、前記化合物1-1～1-12、および2-1～2-10からなる群より選択される化合物であり、

前記第1化合物と前記第2化合物とは、互いに異なる、請求項15に記載の有機発光素子。

【発明の詳細な説明】

【技術分野】

【0001】

本発明は、有機発光素子に関する。

【背景技術】

【0002】

有機発光素子(organic light emitting device)は、自発光型素子であり、従来の素子に比べ、視野角が広く、コントラストに優れるだけではなく、応答時間が短く、輝度、駆動電圧および応答速度の特性に優れる。

【0003】

特許文献1で開示されている有機発光素子は、基板上部に第1電極が配置されており、前記第1電極上部に、正孔輸送領域(hole transport region)、発光層、電子輸送領域(electron transport region)および第2電極が順次に形成されている構造を有することができる。前記第1電極から注入された正孔は、正孔輸送領域を経由して発光層に移動し、第2電極から注入された電子は、電子輸送領域を経由して発光層に移動する。前記正孔および電子のようなキャリアは、発光層領域で再結合し、励起子(excitation)を生成する。この励起子が励起状態から基底状態に変わりながら光が生成される。

【先行技術文献】

【特許文献】

【0004】

【特許文献1】大韓民国特許出願公開第2014-0095491号明細書

【発明の概要】

【発明が解決しようとする課題】

【0005】

しかしながら、特許文献1で開示されている有機発光素子は、効率および寿命の面で不十分であった。

【0006】

したがって、本発明の目的は、高効率および長寿命を有する有機発光素子を提供することにある。また、本発明の他の目的は、低駆動電圧である有機発光素子を提供することにある。

【課題を解決するための手段】

【0007】

10

20

30

40

50

本発明者らは、前記課題を達成するために鋭意検討した結果、以下の構成を有する有機発光素子により達成できることを見出し、本発明を完成させた。

【0008】

第1電極と、

前記第1電極に対向した第2電極と、

前記第1電極と前記第2電極との間に介在され、第1化合物を含む第1層と、

前記第1層と前記第2電極との間に介在され、第2化合物を含む第2層と、

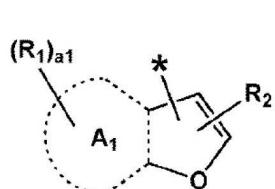
前記第2層と前記第2電極との間に介在され、第3化合物を含む第3層と、を含み、

前記第1化合物、前記第2化合物および前記第3化合物は、互いに独立して、下記化学式A～Cのいずれかで表される基を少なくとも一つ含み、

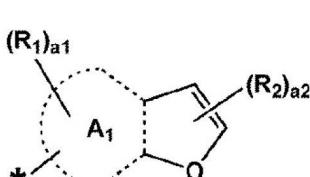
前記第1化合物は、* = N - *' を有する窒素含有ヘテロ環基を含まない、有機発光素子：

【0009】

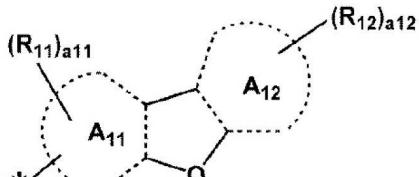
【化1】



化学式 A



化学式 B



化学式 C

【0010】

前記化学式A～C中、

環A₁、環A₁₁および環A₁₂は、互いに独立して、C₅～C₃₀炭素環又はC₂～C₃₀ヘテロ環であり、

R₁、R₂、R₁₁およびR₁₂は、互いに独立して、

水素原子、重水素原子、-F、-Cl、-Br、-I、ヒドロキシル基、シアノ基、二トロ基、アミノ基、アミジノ基、ヒドラジン基、ヒドラゾン基、カルボン酸基またはその塩、スルホン酸基またはその塩、リン酸基またはその塩、置換もしくは非置換のC₁～C₆₀アルキル基、置換もしくは非置換のC₂～C₆₀アルケニル基、置換もしくは非置換のC₂～C₆₀アルキニル基、および置換もしくは非置換のC₁～C₆₀アルコキシ基；

置換もしくは非置換のC₃～C₁₀シクロアルキル基、置換もしくは非置換のC₁～C₁₀ヘテロシクロアルキル基、置換もしくは非置換のC₃～C₁₀シクロアルケニル基、置換もしくは非置換のC₁～C₁₀ヘテロシクロアルケニル基、置換もしくは非置換のC₆～C₆₀アリール基、置換もしくは非置換のC₆～C₆₀アリールオキシ基、置換もしくは非置換のC₆～C₆₀アリールチオ基、置換もしくは非置換のC₁～C₆₀ヘテロアリール基、置換もしくは非置換の一価の非芳香族縮合多環基および置換もしくは非置換の一価の非芳香族ヘテロ縮合多環基；ならびに

-N(Q₁)(Q₂)、-Si(Q₃)(Q₄)(Q₅)および-B(Q₆)(Q₇)；からなる群より選択され、

前記Q₁～Q₇は、互いに独立して、水素原子、重水素原子、-F、-Cl、-Br、-I、ヒドロキシル基、シアノ基、二トロ基、アミノ基、アミジノ基、ヒドラジン基、ヒドラゾン基、カルボン酸基またはその塩、スルホン酸基またはその塩、リン酸基またはその塩、C₁～C₆₀アルキル基、C₂～C₆₀アルケニル基、C₂～C₆₀アルキニル基、C₁～C₆₀アルコキシ基、C₃～C₁₀シクロアルキル基、C₁～C₁₀ヘテロシクロアルキル基、C₃～C₁₀シクロアルケニル基、C₆～C₆₀アリール基、C₁～C₆₀ヘテロアリール基、一価の非芳香族縮合多環基および一価の非芳香族ヘテロ縮合多環基からなる群より選択され、

a₁、a₁₁およびa₁₂は、互いに独立して、0～10の整数であり、

10

20

30

40

50

a_2 は、0 ~ 2 の整数であり、

* および *' は、隣接する原子との結合サイトである。

【発明の効果】

【0011】

本発明による有機発光素子は、高効率および長寿命を有する。

【図面の簡単な説明】

【0012】

【図1】一実施形態に係る有機発光素子の構造を概略的に示した図面である。

【発明を実施するための形態】

【0013】

以下、本発明の実施形態について本発明が属する技術分野における通常の知識を有する者が容易に実施することができるように詳細に説明する。しかし、本発明は、多様な異なる形態に実現することができ、ここで説明する実施形態に限定されない。

【0014】

本明細書で別途の定義がない限り、「置換」とは、化合物のうちの水素原子が、重水素原子、-F、-Cl、-Br、-I、ヒドロキシリル基、シアノ基、ニトロ基、アミノ基、アミジノ基、ヒドラジン基、ヒドラゾン基、カルボキシリル基やその塩、スルホン酸基やその塩、リン酸基やその塩、 $C_1 - C_{6,0}$ アルキル基(好ましくは $C_1 - C_{2,0}$ アルキル基、より好ましくは $C_1 - C_{1,0}$ アルキル基)、 $C_2 - C_{6,0}$ アルケニル基、 $C_2 - C_{6,0}$ アルキニル基、 $C_1 - C_{6,0}$ アルコキシ基(好ましくは $C_1 - C_{2,0}$ アルコキシ基、より好ましくは $C_1 - C_{1,0}$ アルコキシ基)、 $C_3 - C_{1,0}$ シクロアルキル基、 $C_1 - C_{1,0}$ ヘテロシクロアルキル基、 $C_3 - C_{1,0}$ シクロアルケニル基、 $C_1 - C_{1,0}$ ヘテロシクロアルケニル基、 $C_6 - C_{6,0}$ アリール基(好ましくは $C_6 - C_{1,6}$ アリール基)、 $C_6 - C_{6,0}$ アリールオキシ基、 $C_6 - C_{6,0}$ アリールチオ基、 $C_1 - C_{6,0}$ ヘテロアリール基、一価の非芳香族縮合多環基および一価の非芳香族ヘテロ縮合多環基、-N(Q₁)(Q₂)、-Si(Q₃)(Q₄)(Q₅)、-B(Q₆)(Q₇)、カルボニル基、カルバミル基、チオール基、エステル基、 $C_7 - C_{3,0}$ アリールアルキル基、 $C_3 - C_{3,0}$ ヘテロアリールアルキル基、 $C_6 - C_{1,5}$ シクロアルキニル基、 $C_2 - C_{3,0}$ ヘテロシクロアルキル基からなる群より選択される基で置換されることを意味する。これらの置換基は、他の置換基でさらに置換されてもよいが、同一の置換基でさらに置換されることはない。すなわち、置換のアルキル基は、アルキル基で置換されることはない。なお、上記Q₁ ~ Q₇は、互いに独立して、水素原子、重水素原子、-F、-Cl、-Br、-I、ヒドロキシリル基、シアノ基、ニトロ基、アミノ基、アミジノ基、ヒドラジン基、ヒドラゾン基、カルボン酸基またはその塩、スルホン酸基またはその塩、リン酸基またはその塩、 $C_1 - C_{6,0}$ アルキル基、 $C_2 - C_{6,0}$ アルケニル基、 $C_2 - C_{6,0}$ アルキニル基、 $C_1 - C_{6,0}$ アルコキシ基、 $C_3 - C_{1,0}$ シクロアルキル基、 $C_1 - C_{1,0}$ ヘテロシクロアルキル基、 $C_3 - C_{1,0}$ シクロアルケニル基、 $C_1 - C_{1,0}$ ヘテロシクロアルケニル基、 $C_6 - C_{6,0}$ アリール基、 $C_1 - C_{6,0}$ ヘテロアリール基、一価の非芳香族縮合多環基、および一価の非芳香族ヘテロ縮合多環基からなる群より選択される。

【0015】

また、本明細書で別途の定義がない限り、「ヘテロ」とは、N、O、S、およびPからなる群より選択されるヘテロ原子を1 ~ 3個含有したものを意味する。

【0016】

また、本明細書において、範囲を示す「X ~ Y」は、XおよびYを含み、「X以上Y以下」を意味する。また、特記しない限り、操作および物性等の測定は室温(20 ~ 25°C) / 相対湿度40 ~ 50%の条件で行う。

【0017】

本発明の実施形態に係る有機発光素子は、

第1電極と、

前記第1電極に対向した第2電極と、

10

20

30

40

50

前記第1電極と前記第2電極との間に介在され、第1化合物を含む第1層と、
前記第1層と前記第2電極との間に介在され、第2化合物を含む第2層と、
前記第2層と前記第2電極との間に介在され、第3化合物を含む第3層と、を含む。

【0018】

前記第1電極は、アノードであり、前記第2電極は、カソードであってもよく、第1電極および第2電極についての説明は、後述のところを参照する。

【0019】

第1電極と第1層との間には、他の層が介在してもよいが、両者は隣接していることが好ましい。

【0020】

第3層と第2電極との間には、他の層（例えば、電子注入層、電子輸送層）が介在してもよい。

10

【0021】

第1層と第2層との間には、他の層が介在してもよいが、両層は隣接していることが好ましい。同様に、第2層と第3層との間には、他の層が介在してもよいが、両層は隣接していることが好ましい。

【0022】

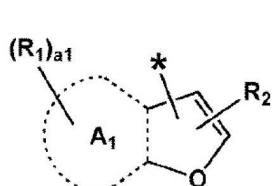
前記第1化合物～第3化合物は、互いに独立して、下記化学式A～Cのいずれかで表される基を、少なくとも1つ、好ましくは1～4つ、さらに好ましくは1～3つ、特に好ましくは1～2つ含む。また、前記第1化合物～第3化合物は、互いに独立して、下記化学式Cで表される基を少なくとも一つ含むことが好ましい。

20

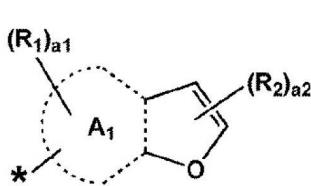
ただし、前記第1化合物は、* = N - *' を有する窒素含有ヘテロ環基を含まない。

【0023】

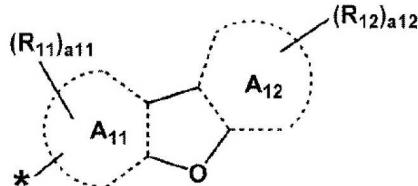
【化2】



化学式 A



化学式 B



化学式 C

30

【0024】

前記化学式A～C中、環A₁、環A₁₁および環A₁₂は、互いに独立して、C₅～C₃₀炭素環又はC₂～C₃₀ヘテロ環、好ましくはC₆～C₁₆炭素環またはC₁～C₆ヘテロ環である。一実施形態によれば、前記化学式A～C中、環A₁、環A₁₁および環A₁₂は、互いに独立して、ベンゼン、ナフタレン、フルオレン、ベンゾフルオレン、ピリジン、ピリミジン、カルバゾール、ベンゾカルバゾールおよびジベンゾチオフェンからなる群より選択される。化学式C中、環A₁₁および環A₁₂のうち少なくとも一方は、ベンゼンであることが好ましい。

40

【0025】

前記化学式A～C中、R₁、R₂、R₁₁およびR₁₂は、互いに独立して、水素原子、重水素原子、-F、-Cl、-Br、-I、ヒドロキシル基、シアノ基、二トロ基、アミノ基、アミジノ基、ヒドラジン基、ヒドラゾン基、カルボン酸基またはその塩、スルホン酸基またはその塩、リン酸基またはその塩、置換もしくは非置換のC₁～C₆アルキル基、置換もしくは非置換のC₂～C₆アルケニル基、置換もしくは非置換のC₂～C₆アルキニル基、および置換もしくは非置換のC₁～C₆アルコキシ基；置換もしくは非置換のC₃～C₁₀シクロアルキル基、置換もしくは非置換のC₁～C₁₀ヘテロシクロアルキル基、置換もしくは非置換のC₃～C₁₀シクロアルケニル基、置換もしくは非置換のC₁～C₁₀ヘテロシクロアルケニル基、置換もしくは非置換のC

50

$C_6 - C_{6,0}$ アリール基、置換もしくは非置換の $C_6 - C_{6,0}$ アリールオキシ基、置換もしくは非置換の $C_6 - C_{6,0}$ アリールチオ基、置換もしくは非置換の $C_1 - C_{6,0}$ ヘテロアリール基、置換もしくは非置換の一価の非芳香族縮合多環基および一価の非芳香族ヘテロ縮合多環基；

; ならびに

- N (Q₁) (Q₂)、- Si (Q₃) (Q₄) (Q₅) および - B (Q₆) (Q₇) ; からなる群より選択され、

前記 Q₁ ~ Q₇ は、互いに独立して、水素原子、重水素原子、- F、- Cl、- Br、- I、ヒドロキシリル基、シアノ基、ニトロ基、アミノ基、アミジノ基、ヒドラジン基、ヒドラゾン基、カルボン酸基またはその塩、スルホン酸基またはその塩、リン酸基またはその塩、置換もしくは非置換の $C_1 - C_{6,0}$ アルキル基、置換もしくは非置換の $C_2 - C_{6,0}$ アルケニル基、置換もしくは非置換の $C_2 - C_{6,0}$ アルキニル基、置換もしくは非置換の $C_1 - C_{6,0}$ アルコキシ基、置換もしくは非置換の $C_3 - C_{1,0}$ シクロアルキル基、置換もしくは非置換の $C_1 - C_{1,0}$ ヘテロシクロアルキル基、置換もしくは非置換の $C_3 - C_{1,0}$ シクロアルケニル基、置換もしくは非置換の $C_1 - C_{1,0}$ ヘテロシクロアルケニル基、置換もしくは非置換の $C_6 - C_{6,0}$ アリール基、置換もしくは非置換の $C_1 - C_{6,0}$ ヘテロアリール基、一価の非芳香族縮合多環基および一価の非芳香族ヘテロ縮合多環基からなる群より選択される。

【0026】

他の実施形態によれば、前記化学式 A ~ C 中、R₁、R₂、R_{1,1} および R_{1,2} は、互いに独立して、水素原子、重水素原子、- F、- Cl、- Br、- I、ヒドロキシリル基、シアノ基、ニトロ基、アミノ基、アミジノ基、ヒドラジン基、ヒドラゾン基、カルボン酸基またはその塩、スルホン酸基またはその塩、リン酸基またはその塩、置換もしくは非置換の $C_1 - C_{2,0}$ アルキル基および置換もしくは非置換の $C_1 - C_{2,0}$ アルコキシ基；

置換もしくは非置換のフェニル基、置換も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フルオレニル基、置換もしくは非置換のスピロ-フルオレニル基、置換もしくは非置換のベンゾフルオレニル基、置換もしくは非置換のジベンゾフルオレニル基、置換もしくは非置換のフェナントレニル基、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トリフェニレニル基、置換もしくは非置換のピレニル基、置換もしくは非置換のクリセニル基、置換もしくは非置換のピロリル基、置換もしくは非置換のチオフェニル基、置換もしくは非置換のフラニル基、置換もしくは非置換のイミダゾリル基、置換もしくは非置換のピラゾリル基、置換もしくは非置換のチアゾリル基、置換もしくは非置換のイソチアゾリル基、置換もしくは非置換のオキサゾリル基、置換もしくは非置換のイソキサゾリル基、置換もしくは非置換のピリジニル基、置換もしくは非置換のピラジニル基、置換もしくは非置換のピリミジニル基、置換もしくは非置換のピリダジニル基、置換もしくは非置換のキノリニル基、置換もしくは非置換のイソキノリニル基、置換もしくは非置換のベンゾキノリニル基、置換もしくは非置換のキノキサリニル基、置換もしくは非置換のキナゾリニル基、置換もしくは非置換のカルバゾリル基、置換もしくは非置換のベンゾイミダゾリル基、置換もしくは非置換のベンゾフラニル基、置換もしくは非置換のベンゾチオフェニル基、置換もしくは非置換のイソベンゾチアゾリル基、置換もしくは非置換のベンゾオキサゾリル基、置換もしくは非置換のイソベンゾオキサゾリル基、置換もしくは非置換のオキサジアゾリル基、置換もしくは非置換のトリアジニル基、置換もしくは非置換のジベンゾフラニル基、置換もしくは非置換のジベンゾチオフェニル基、置換もしくは非置換のイミダゾピリジニル基および置換もしくは非置換のイミダゾピリミジニル基；ならびに

- N (Q₁) (Q₂)、- Si (Q₃) (Q₄) (Q₅) および - B (Q₆) (Q₇) ; からなる群より選択され、

前記 Q₁ ないし Q₇ は、互いに独立して、 $C_1 - C_{1,0}$ アルキル基、 $C_1 - C_{1,0}$ アルコキシ基、フェニル基、ビフェニル基、ターフェニル基およびナフチル基のうちから選択される。

10

20

30

40

50

【0027】

本発明の一実施形態によれば、前記化学式A～C中、R₁、R₂、R₁₁およびR₁₂は、互いに独立して、水素原子、重水素原子、-F、-Cl、-Br、-I、ヒドロキシル基、シアノ基、ニトロ基、アミノ基、アミジノ基、ヒドラジン基、ヒドラゾン基、カルボン酸基またはその塩、スルホン酸基またはその塩、リン酸基またはその塩、置換もしくは非置換のC₁～C₂₀アルキル基、および置換もしくは非置換のC₁～C₂₀アルコキシ基；

置換もしくは非置換のフェニル基、置換も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フルオレニル基、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ピリジニル基、置換もしくは非置換のピリミジニル基、置換もしくは非置換のトリアジニル基、置換もしくは非置換のキノリニル基、置換もしくは非置換のイソキノリニル基、置換もしくは非置換のキナゾリニル基および置換もしくは非置換のキノキサリニル基；ならびに

-N(Q₁)(Q₂)、-Si(Q₃)(Q₄)(Q₅)および-B(Q₆)(Q₇)；からなる群より選択され、

前記Q₁～Q₇は、互いに独立して、C₁～C₁₀アルキル基、C₁～C₁₀アルコキシ基、フェニル基、ビフェニル基、ターフェニル基、フルオレニル基およびナフチル基からなる群より選択されてもよい。

【0028】

前記化学式A～C中、R₁、R₂、R₁₁およびR₁₂は、互いに独立して、水素原子または置換もしくは非置換のC₁～C₆アルキル基であることが好ましく、水素原子または置換もしくは非置換のC₁～C₂₀アルキル基であることがより好ましく、水素原子または置換もしくは非置換のC₁～C₈アルキル基であることが好ましい。

【0029】

前記化学式A～C中、a₁、a₁₁およびa₁₂は、互いに独立して、0～10の整数であり、a₂は、0～2の整数であってもよい。

【0030】

a₁は、化学式AにおけるR₁の個数を示したものであり、a₁が2以上である場合、2以上のR₁は、互いに同一であっても、あるいは異なるっていてもよい。a₂、a₁₁およびa₁₂についての説明は、化学式BおよびCの構造、並びにa₁についての説明を参考して理解されるであろう。

【0031】

例えば、前記化学式A～C中、a₁、a₁₁およびa₁₂は、互いに独立して、0～8の整数であり、a₂は、0～2の整数であってもよい。a₁₁およびa₁₂は、好ましくは0～4の整数であり、より好ましくは0～2の整数であり、さらにより好ましくは0または1であり、特に好ましくは0である。

【0032】

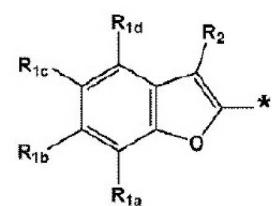
前記化学式A～C中、*および*'は、隣接する原子との結合サイトである。

【0033】

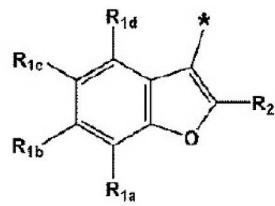
本発明の他の実施形態によれば、前記第1化合物～前記第3化合物は、互いに独立して、下記化学式A(1)、A(2)、B(1)～B(4)およびC(1)～C(16)のいずれかで表される基を少なくとも一つ含んでもよい。

【0034】

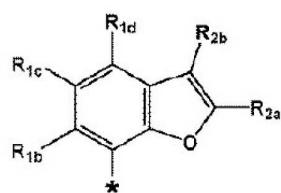
【化 3 - 1】



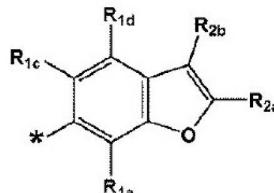
化学式 A(1)



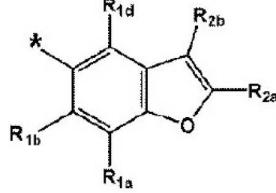
化学式 A(2)



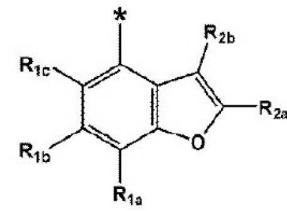
化学式 B(1)



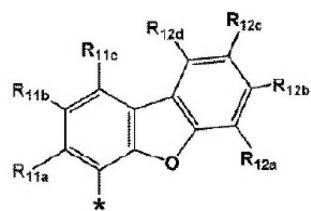
化学式 B(2)



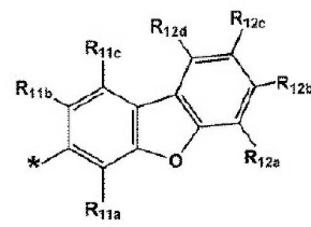
化学式 B(3)



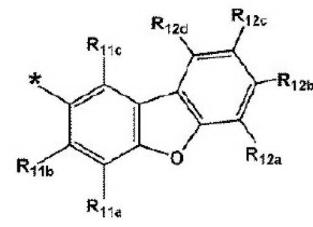
化学式 B(4)



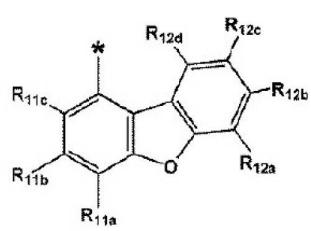
化学式 C(1)



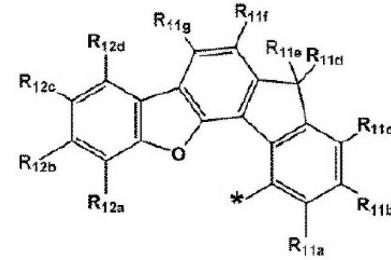
化学式 C(2)



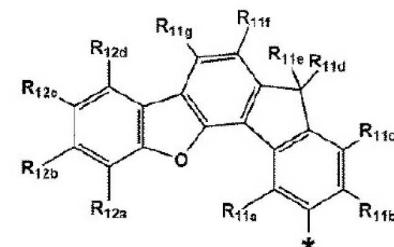
化学式 C(3)



化学式 C(4)



化学式 C(5)



化学式 C(6)

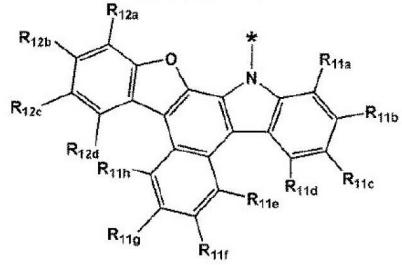
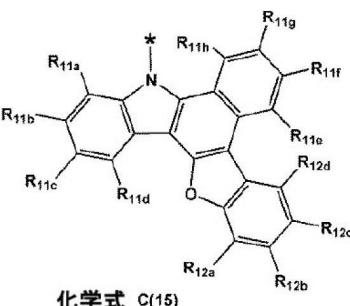
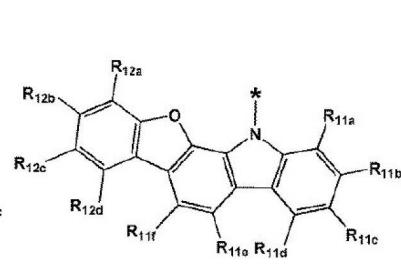
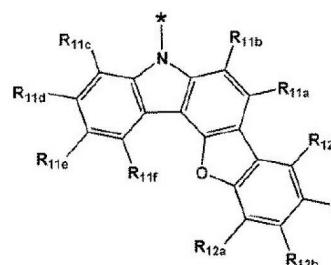
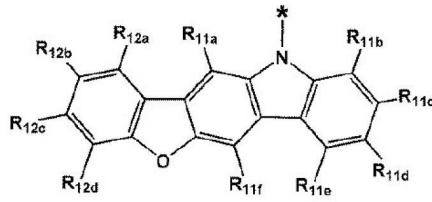
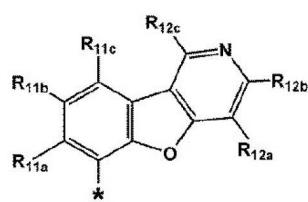
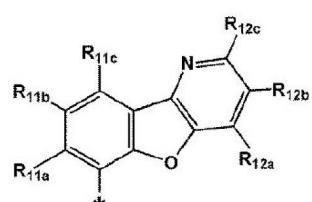
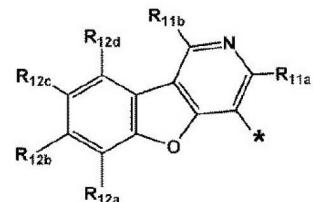
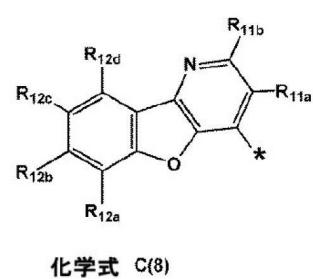
【 0 0 3 5 】

10

20

30

【化3-2】



【0036】

前記化学式 A (1)、A (2)、B (1) ~ B (4) および化学式 C (1) ~ C (16) 中、

R₁a ~ R₁d は、前記 R₁ と同様であり、

R₂a および R₂b は、前記 R₂ と同様であり、

R₁₁a ~ R₁₁h は、前記 R₁₁ と同様であり、

R₁₂a ~ R₁₂d は、前記 R₁₂ と同様であり、

* は、隣接する原子との結合サイトである。

【0037】

例えば、前記化学式 A (1)、A (2)、B (1) ~ B (4) および化学式 C (1) ~ C (16) 中、

R₁a ~ R₁d、R₂a、R₂b、R₁₁a ~ R₁₁h および R₁₂a ~ R₁₂d は、互いに独立して、

水素原子、重水素原子、-F、-Cl、-Br、-I、ヒドロキシル基、シアノ基、ニトロ基、アミノ基、アミジノ基、ヒドラジン基、ヒドラゾン基、カルボン酸基またはその塩、スルホン酸基またはその塩、リン酸基またはその塩、置換もしくは非置換の C₁ ~ C₁₆

10

20

30

40

50

C_2 $_0$ アルキル基、および置換もしくは非置換の C_1 - C_{20} アルコキシ基；置換もしくは非置換のフェニル基、置換も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およびナフチル基；ならびに

- N (Q₁) (Q₂)、- Si (Q₃) (Q₄) (Q₅) および - B (Q₆) (Q₇)；からなる群より選択され、

前記 Q₁ ~ Q₇ は、互いに独立して、 C_1 - C_{10} アルキル基、 C_1 - C_{10} アルコキシ基、フェニル基、ビフェニル基、ターフェニル基およびナフチル基からなる群より選択される。

【0038】

前記 R_{1a} ~ R_{1d}、R_{2a}、R_{2b}、R_{11a} ~ R_{11h} および R_{12a} ~ R_{12d}¹⁰ は、互いに独立して、水素原子または置換もしくは非置換の C_1 - C_{20} アルキル基であることが好ましく、水素原子または置換もしくは非置換の C_1 - C_8 アルキル基であることがより好ましく、水素原子または置換もしくは非置換の C_1 - C_4 アルキル基であることがさらにより好ましい。

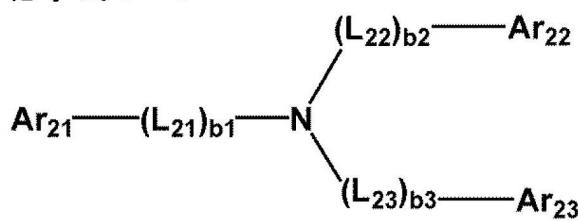
【0039】

本発明の一実施形態によれば、前記第1化合物～第3化合物は、互いに独立して、下記化学式 1 - 1 ~ 1 - 3、2H - 1、2D - 1、2D - 2、3 - 1 および 3 - 2 のいずれかで表される化合物であってもよい。

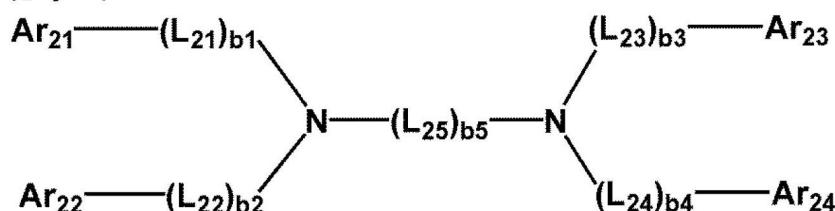
【0040】

【化4-1】

化学式1-1

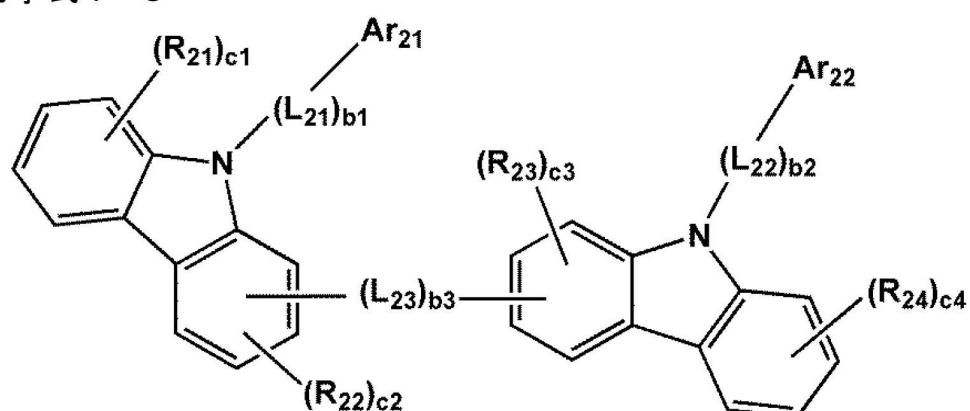


化学式1-2



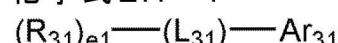
10

化学式1-3



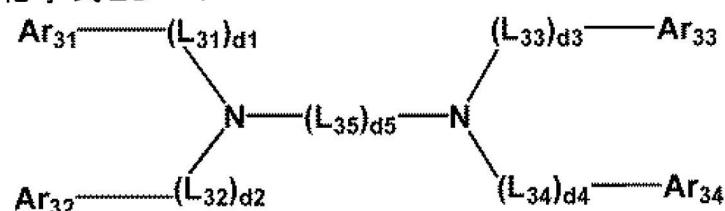
20

化学式2H-1



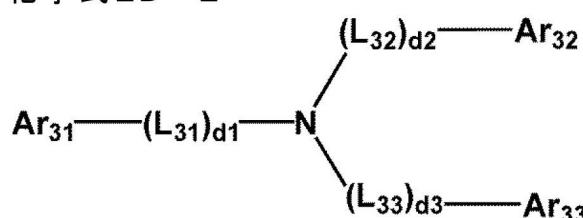
30

化学式2D-1



40

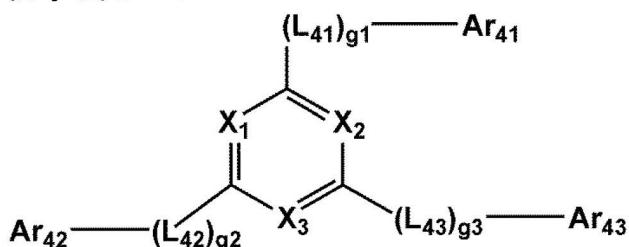
化学式2D-2



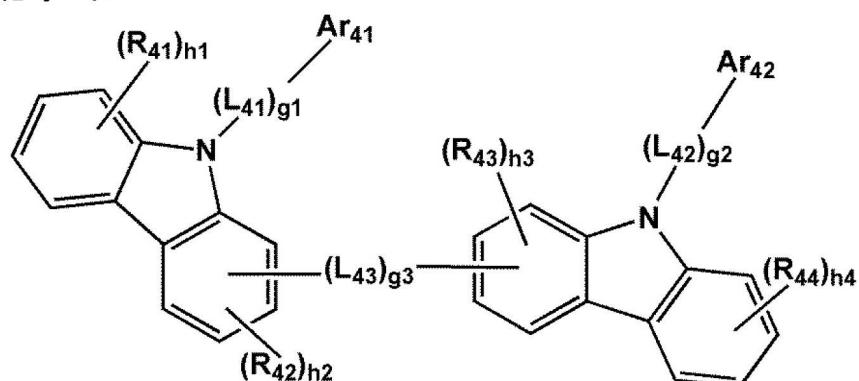
【0041】

【化4-2】

化学式3-1



化学式3-2



10

20

【0042】

前記化学式3-1中、

 $X_1 \sim X_3$ は、互いに独立して、CR₄₋₁ またはNである。

【0043】

例えば、前記化学式3-1中、 X_1 は、CR₄₋₁ であり、 X_2 は、CR₄₋₂ であり、 X_3 は、CR₄₋₃ であってもよい。その場合、Ar₄₋₁ ~ Ar₄₋₃ のうち少なくとも一つは、 $* = N - *$ を有する窒素含有ヘテロ環基を含んでもよい。

【0044】

一実施形態において、前記化学式3-1中、 $X_1 \sim X_3$ のうち少なくとも一つはNであることが好ましく、 $X_1 \sim X_3$ のうち少なくとも二つがNであることがより好ましい。

30

【0045】

前記化学式3-2中、R₄₋₁ ~ R₄₋₃ は、後述のところを参照する。

【0046】

前記化学式1-1、1-2、1-3、2H-1、2D-1、2D-2、3-1および3-2中、

$L_{2-1} \sim L_{2-4}$ 、 $L_{3-1} \sim L_{3-4}$ 、および $L_{4-1} \sim L_{4-3}$ は、互いに独立して、置換もしくは非置換のC₃-C₁₀シクロアルキレン基、置換もしくは非置換のC₁-C₁₀ヘテロシクロアルキレン基、置換もしくは非置換のC₃-C₁₀シクロアルケニレン基、置換もしくは非置換のC₁-C₁₀ヘテロシクロアルケニレン基、置換もしくは非置換のC₆-C₆アリーレン基、置換もしくは非置換のC₁-C₆ヘテロアリーレン基、置換もしくは非置換の二価の非芳香族縮合多環基および置換もしくは非置換の二価の非芳香族ヘテロ縮合多環基からなる群より選択される。

40

【0047】

例えば、前記化学式1-1、1-2、1-3、2H-1、2D-1、2D-2、3-1および3-2中、

L_{2-1} ないし L_{2-4} 、 L_{3-1} ないし L_{3-4} 、および L_{4-1} ないし L_{4-3} は、互いに独立して、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ペンタレニレン基、置換もしくは非置換のインデニレン基、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アズレニレン基、置換もしくは非置換のヘプタレニレン基、置換もしくは非置換

50

のインダセニレン基、置換もしくは非置換のアセナフチレン基、置換もしくは非置換のフルオレニレン基、置換もしくは非置換のスピロ - フルオレニレン基、置換もしくは非置換のベンゾフルオレニレン基、置換もしくは非置換のジベンゾフルオレニレン基、置換もしくは非置換のフェナレニレン基、置換もしくは非置換のフェナントレニレン基、置換もしくは非置換のアントラセニレン基、置換もしくは非置換のフルオランテニレン基、置換もしくは非置換のトリフェニレン基、置換もしくは非置換のピレニレン基、置換もしくは非置換のクリセニレン基、置換もしくは非置換のナフタセニレン基、置換もしくは非置換のピセニレン基、置換もしくは非置換のペリレニレン基、置換もしくは非置換のペンタフェニレン基、置換もしくは非置換のヘキサセニレン基、置換もしくは非置換のペンタセニレン基、置換もしくは非置換のルビセニレン基、置換もしくは非置換のコロネニレン基、置換もしくは非置換のオバレニレン基、置換もしくは非置換のピロリレン基、置換もしくは非置換のチオフェニレン基、置換もしくは非置換のフラニレン基、置換もしくは非置換のイミダゾリレン基、置換もしくは非置換のピラゾリレン基、置換もしくは非置換のチアゾリレン基、置換もしくは非置換のイソチアゾリレン基、置換もしくは非置換のオキサゾリレン基、置換もしくは非置換のイソキサゾリレン基、置換もしくは非置換のピリジニレン基、置換もしくは非置換のピラジニレン基、置換もしくは非置換のピリミジニレン基、置換もしくは非置換のピリダジニレン基、置換もしくは非置換のイソインドリレン基、置換もしくは非置換のインドリレン基、置換もしくは非置換のインダゾリレン基、置換もしくは非置換のプリニレン基、置換もしくは非置換のキノリニレン基、置換もしくは非置換のイソキノリニレン基、置換もしくは非置換のベンゾキノリニレン基、置換もしくは非置換のフタラジニレン基、置換もしくは非置換のナフチリジニレン基、置換もしくは非置換のキノキサリニレン基、置換もしくは非置換のキナゾリニレン基、置換もしくは非置換のシンノリニレン基、置換もしくは非置換のカルバゾリレン基、置換もしくは非置換のフェナントリジニレン基、置換もしくは非置換のアクリジニレン基、置換もしくは非置換のフェナントロリニレン基、置換もしくは非置換のフェナジニレン基、置換もしくは非置換のベンゾイミダゾリレン基、置換もしくは非置換のベンゾフラニレン基、置換もしくは非置換のベンゾチオフェニレン基、置換もしくは非置換のイソベンゾチアゾリレン基、置換もしくは非置換のベンゾオキサゾリレン基、置換もしくは非置換のイソベンゾオキサゾリレン基、置換もしくは非置換のトリアゾリレン基、置換もしくは非置換のテトラゾリレン基、置換もしくは非置換のオキサジアゾリレン基、置換もしくは非置換のトリアジニレン基、置換もしくは非置換のジベンゾフラニレン基、置換もしくは非置換のジベンゾチオフェニレン基、置換もしくは非置換のベンゾカルバゾリレン基、置換もしくは非置換のジベンゾカルバゾリレン基、置換もしくは非置換のチアシアゾリレン基、置換もしくは非置換のイミダゾピリミジニレン基であってもよく、好ましくは、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ピリミジニレン基または置換もしくは非置換のカルバゾリレン基である。

【0048】

前記化学式 1 - 2 中、 L_{2-5} は、置換もしくは非置換の C_3-C_{10} シクロアルキレン基、置換もしくは非置換の C_1-C_{10} ヘテロシクロアルキレン基、置換もしくは非置換の C_3-C_{10} シクロアルケニレン基、置換もしくは非置換の C_1-C_{10} ヘテロシクロアルケニレン基、置換もしくは非置換の C_6-C_{60} アリーレン基、および置換もしくは非置換の C_1-C_{60} ヘテロアリーレン基からなる群より選択される基であり、好ましくは置換もしくは非置換の C_6-C_{60} アリーレン基であり、より好ましくは置換もしくは非置換の C_6-C_{20} アリーレン基、特に好ましくは置換もしくは非置換のフェニレン基である。

【0049】

前記化学式 2D - 1 中、 L_{3-5} は、置換もしくは非置換の C_6-C_{60} 縮合多環アリーレン基、置換もしくは非置換の C_1-C_{60} 縮合多環ヘテロアリーレン基、置換もしくは非置換の二価非芳香族縮合多環基、および置換もしくは非置換の二価非芳香族ヘテロ縮合多環基からなる群より選択される。

10

20

30

40

50

【0050】

例えば、前記化学式2D-1で、 $L_{3\text{--}5}$ は、

置換もしくは非置換のペントアリレン基、置換もしくは非置換のインデニレン基、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アズレニレン基、置換もしくは非置換のヘプタリレン基、置換もしくは非置換のインダセニレン基、置換もしくは非置換のアセナフチレン基、置換もしくは非置換のフルオレニレン基、置換もしくは非置換のスピロ-フルオレニレン基、置換もしくは非置換のベンゾフルオレニレン基、置換もしくは非置換のジベンゾフルオレニレン基、置換もしくは非置換のフェナレニレン基、置換もしくは非置換のフェナントレニレン基、置換もしくは非置換のアントラセニレン基、置換もしくは非置換のフルオランテニレン基、置換もしくは非置換のトリフェニリレン基、置換もしくは非置換のピレニレン基、置換もしくは非置換のクリセニレン基、置換もしくは非置換のナフタセニレン基、置換もしくは非置換のピセニレン基、置換もしくは非置換のペリリレン基、置換もしくは非置換のペントフェニレン基、置換もしくは非置換のヘキサセニレン基、置換もしくは非置換のペントセニレン基、置換もしくは非置換のルビセニレン基、置換もしくは非置換のコロネニレン基、置換もしくは非置換のオバレニレン基、置換もしくは非置換のイソインドリレン基、置換もしくは非置換のインドリレン基、置換もしくは非置換のインダゾリレン基、置換もしくは非置換のブリニレン基、置換もしくは非置換のキノリニレン基、置換もしくは非置換のイソキノリニレン基、置換もしくは非置換のベンゾキノリニレン基、置換もしくは非置換のフタラジニレン基、置換もしくは非置換のナフチリジニレン基、置換もしくは非置換のキノキサリニレン基、置換もしくは非置換のキナゾリニレン基、置換もしくは非置換のシンノリニレン基、置換もしくは非置換のカルバゾリレン基、置換もしくは非置換のフェナントリジニレン基、置換もしくは非置換のアクリジニレン基、置換もしくは非置換のフェナントロリニレン基、置換もしくは非置換のフェナジニレン基、置換もしくは非置換のベンゾイミダゾリレン基、置換もしくは非置換のベンゾフラニレン基、置換もしくは非置換のベンゾチオフェニレン基、置換もしくは非置換のイソベンゾチアゾリレン基、置換もしくは非置換のベンゾオキサゾリレン基、置換もしくは非置換のイソベンゾオキサゾリレン基、置換もしくは非置換のオキサジアゾリレン基、置換もしくは非置換のジベンゾフラニレン基、置換もしくは非置換のジベンゾチオフェニレン基、置換もしくは非置換のベンゾカルバゾリレン基、置換もしくは非置換のイミダゾピリジニレン基および置換もしくは非置換のイミダゾピリミジニレン基からなる群より選択される基であり、好ましくは置換もしくは非置換のピレニレン基である。

【0051】

前記化学式1-1、1-2、1-3、2D-1、2D-2、3-1および3-2中、 $b_1 \sim b_5$ 、 $d_1 \sim d_5$ 、および $g_1 \sim g_3$ は、互いに独立して、0~3の整数であってよい。

【0052】

b_1 は、前記化学式1-1~1-3における $L_{2\text{--}1}$ の個数を示したものであり、 b_1 が0である場合、 $* - (L_{2\text{--}1})_{b_1} - *$ は、単結合になり、 b_1 が2以上である場合、2以上の $L_{2\text{--}1}$ は、互いに同一であっても、あるいは異なっていてもよい。 $b_2 \sim b_5$ についての説明は、化学式1-1~1-3の構造、および b_1 についての説明を参照して理解されるであろう。

【0053】

化学式1-1中、 $b_1 \sim b_3$ は、互いに独立して、好ましくは1~3の整数である。

【0054】

化学式1-2中、 $b_1 \sim b_4$ は、互いに独立して、好ましくは0~2の整数であり、より好ましくは1または2である。また、化学式1-2において、 b_5 は、好ましくは1~3の整数であり、より好ましくは1または2であり、さらにより好ましくは2である。

【0055】

化学式1-3中、 $b_1 \sim b_3$ は、互いに独立して、好ましくは0~2の整数であり、よ

10

20

30

40

50

り好ましくは0または1である。

【0056】

d1は、前記化学式2D-1および2D-2におけるL₃₁の個数を示したものであり、d1が0である場合、*- (L₃₁)_{d1}-*’は、単結合になり、d1が2以上である場合、2以上のL₃₁は、互いに同一であっても、あるいは異なっていてもよい。d2～d5についての説明は、化学式2D-1および2D-2の構造、およびd1についての説明を参照して理解されるであろう。

【0057】

化学式2D-1中、d1～d4は、互いに独立して、好ましくは0～2の整数であり、より好ましくは0または1であり、さらにより好ましくは0である。また、化学式2D-1において、d5は、好ましくは0～2の整数であり、より好ましくは1または2であり、さらにより好ましくは1である。
10

【0058】

化学式2D-2中、d1～d3は、互いに独立して、好ましくは1～3の整数であり、より好ましくは1または2であり、さらにより好ましくは1である。

【0059】

g1は、前記化学式3-1および3-2におけるL₄₁の個数を示したものであり、g1が0である場合、*- (L₄₁)_{g1}-*’は、単結合になり、g1が2以上である場合、2以上のL₄₁は、互いに同一であっても、あるいは異なっていてもよい。g2およびg3についての説明は、化学式3-1および3-2の構造、およびg1についての説明を参照して理解されるであろう。
20

【0060】

化学式3-1中、g1～g3は、互いに独立して、好ましくは0～2の整数であり、より好ましくは0または1である。

【0061】

化学式3-2中、g1およびg2は、互いに独立して、好ましくは0～2の整数であり、より好ましくは0または1である。また、化学式3-2において、g3は、0～2の整数であり、より好ましくは0または1であり、さらにより好ましくは0である。

【0062】

前記化学式1-1、1-2、1-3、2H-1、2D-1、2D-2、3-1および3-2中、
30

Ar₂₁～Ar₂₄、Ar₃₁～Ar₃₄、およびAr₄₁～Ar₄₃は、互いに独立して、前記化学式A～Cで表される基、置換もしくは非置換のC₃-C₁₀シクロアルキル基、置換もしくは非置換のC₁-C₁₀ヘテロシクロアルキル基、置換もしくは非置換のC₃-C₁₀シクロアルケニル基、置換もしくは非置換のC₁-C₁₀ヘテロシクロアルケニル基、置換もしくは非置換のC₆-C₆₀アリール基、置換もしくは非置換のC₁-C₆₀ヘテロアリール基、置換もしくは非置換の一価非芳香族縮合多環基および置換もしくは非置換の一価非芳香族ヘテロ縮合多環基からなる群より選択される。

【0063】

例えば、前記化学式1-1、1-2、1-3、2H-1、2D-1、2D-2、3-1および3-2で、Ar₂₁～Ar₂₄、Ar₃₁～Ar₃₄およびAr₄₁～Ar₄₃は、互いに独立して、
40

前記化学式A～Cで表される基；および

置換もしくは非置換のフェニル基、置換も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ペンタレニル基、置換もしくは非置換のインデニル基、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ズレニル基、置換もしくは非置換のヘプタレニル基、置換もしくは非置換のインダセニル基、置換もしくは非置換のアセナフチル基、置換もしくは非置換のフルオレニル基、置換もしくは非置換のスピロ-フルオレニル基、置換もしくは非置換のベンゾフルオレニル基、置換もしくは非置換のジベンゾフルオレニル基、置換もしくは非置換のフェナレニル基、置換もしく
50

は非置換のフェナントレニル基、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ルオランテニル基、置換もしくは非置換のトリフェニレニル基、置換もしくは非置換のピレニル基、置換もしくは非置換のクリセニル基、置換もしくは非置換のナフタセニル基、置換もしくは非置換のピセニル基、置換もしくは非置換のペリレニル基、置換もしくは非置換のペンタフェニル基、置換もしくは非置換のヘキサセニル基、置換もしくは非置換のペンタセニル基、置換もしくは非置換のルビセニル基、置換もしくは非置換のコロネニル基、置換もしくは非置換のオバレニル基、置換もしくは非置換のピロリル基、置換もしくは非置換のチオフェニル基、置換もしくは非置換のフラニル基、置換もしくは非置換のイミダゾリル基、置換もしくは非置換のピラゾリル基、置換もしくは非置換のチアゾリル基、置換もしくは非置換のイソチアゾリル基、置換もしくは非置換のオキサゾリル基、置換もしくは非置換のイソキサゾリル基、置換もしくは非置換のピリジニル基、置換もしくは非置換のピラジニル基、置換もしくは非置換のピリミジニル基、置換もしくは非置換のピリダジニル基、置換もしくは非置換のイソインドリル基、置換もしくは非置換のインドリル基、置換もしくは非置換のインダゾリル基、置換もしくは非置換のブリニル基、置換もしくは非置換のキノリニル基、置換もしくは非置換のイソキノリニル基、置換もしくは非置換のベンゾキノリニル基、置換もしくは非置換のフタラジニル基、置換もしくは非置換のナフチリジニル基、置換もしくは非置換のキノキサリニル基、置換もしくは非置換のキナゾリニル基、置換もしくは非置換のシンノリニル基、置換もしくは非置換のカルバゾリル基、置換もしくは非置換のフェナントリジニル基、置換もしくは非置換のアクリジニル基、置換もしくは非置換のフェナントロリニル基、置換もしくは非置換のフェナジニル基、置換もしくは非置換のベンゾイミダゾリル基、置換もしくは非置換のベンゾフラニル基、置換もしくは非置換のベンゾチオフェニル基、置換もしくは非置換のイソベンゾチアゾリル基、置換もしくは非置換のベンゾオキサゾリル基、置換もしくは非置換のイソベンゾオキサゾリル基、置換もしくは非置換のトリアゾリル基、置換もしくは非置換のテトラゾリル基、置換もしくは非置換のオキサジアゾリル基、置換もしくは非置換のトリアジニル基、置換もしくは非置換のジベンゾフラニル基、置換もしくは非置換のジベンゾチオフェニル基、置換もしくは非置換のベンゾカルバゾリル基、置換もしくは非置換のジベンゾカルバゾリル基、置換もしくは非置換のジベンゾシロリル基、置換もしくは非置換のチアジアゾリル基、置換もしくは非置換のイミダゾピリジニル基および置換もしくは非置換のイミダゾピリミジニル基からなる群より選択される基である。

【0064】

前記 $\text{Ar}_{2\,1} \sim \text{Ar}_{2\,4}$ 、 $\text{Ar}_{3\,1} \sim \text{Ar}_{3\,4}$ および $\text{Ar}_{4\,1} \sim \text{Ar}_{4\,3}$ は、互いに独立して、前記化学式 A ~ C で表される基、置換もしくは非置換のフェニル基、置換もしくは非置換のビフェニル基、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フルオレニル基、置換もしくは非置換のキナゾリニル基または置換もしくは非置換のカルバゾリル基であることが好ましい。この際、存在してもよい置換基としては、 $\text{C}_6 - \text{C}_{2\,0}$ アリールアミノ基、 $\text{C}_1 - \text{C}_{2\,0}$ アルキル基、 $\text{C}_6 - \text{C}_{2\,0}$ アリール基が好ましく、ジフェニルアミノ基、 $\text{C}_1 - \text{C}_4$ アルキル基、フェニル基、ナフチル基がより好ましい。

【0065】

前記化学式 1 - 3、2H - 1 および 3 - 2 中、

$\text{R}_{2\,1} \sim \text{R}_{2\,4}$ 、 $\text{R}_{3\,1}$ 、および $\text{R}_{4\,1} \sim \text{R}_{4\,4}$ は、互いに独立して、重水素原子、-F、-Cl、-Br、-I、ヒドロキシリル基、シアノ基、ニトロ基、アミノ基、アミジノ基、ヒドラジン基、ヒドラゾン基、カルボン酸基またはその塩、スルホン酸基またはその塩、リン酸基またはその塩、置換もしくは非置換の $\text{C}_1 - \text{C}_{6\,0}$ アルキル基、置換もしくは非置換の $\text{C}_2 - \text{C}_{6\,0}$ アルケニル基、置換もしくは非置換の $\text{C}_2 - \text{C}_{6\,0}$ アルキニル基、置換もしくは非置換の $\text{C}_1 - \text{C}_{6\,0}$ アルコキシ基、置換もしくは非置換の $\text{C}_3 - \text{C}_{1\,0}$ シクロアルキル基、置換もしくは非置換の $\text{C}_1 - \text{C}_{1\,0}$ ヘテロシクロアルキル基、置換もしくは非置換の $\text{C}_3 - \text{C}_{1\,0}$ シクロアルケニル基、置換もしくは非置換の $\text{C}_1 - \text{C}_{1\,0}$ ヘテロシクロアルケニル基、置換もしくは非置換の $\text{C}_6 - \text{C}_{6\,0}$ アリール基、置換もしくは非置換の $\text{C}_6 - \text{C}_{6\,0}$ アリールオキシ基、置換もしくは非置換の $\text{C}_6 - \text{C}_{6\,0}$ アリールチ

オ基、置換もしくは非置換の $C_1 - C_{60}$ ヘテロアリール基、置換もしくは非置換の一価非芳香族縮合多環基、置換もしくは非置換の一価非芳香族ヘテロ縮合多環基および - Si (Q_{43}) (Q_{44}) (Q_{45}) からなる群より選択される。 $Q_{43} \sim Q_{45}$ は、本明細書に記載された Q_1 についての説明を参照する。

【0066】

例えば、前記化学式 1-3、2H-1 および 3-2 中、

$R_{21} \sim R_{24}$ 、 R_{31} 、および $R_{41} \sim R_{44}$ は、互いに独立して、

重水素原子、-F、-Cl、-Br、-I、ヒドロキシル基、シアノ基、ニトロ基、アミノ基、アミジノ基、ヒドラジン基、ヒドラゾン基、カルボン酸基またはその塩、スルホン酸基またはその塩、リン酸基またはその塩、置換もしくは非置換の $C_1 - C_{20}$ アルキル基および置換もしくは非置換の $C_1 - C_{20}$ アルコキシ基；

置換もしくは非置換のフェニル基、置換も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フルオレニル基、置換もしくは非置換のスピロ-フルオレニル基、置換もしくは非置換のベンゾフルオレニル基、置換もしくは非置換のジベンゾフルオレニル基、置換もしくは非置換のフェナントレニル基、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トリフェニレニル基、置換もしくは非置換のピレニル基、置換もしくは非置換のクリセニル基、置換もしくは非置換のピロリル基、置換もしくは非置換のチオフェニル基、置換もしくは非置換のフラニル基、置換もしくは非置換のイミダゾリル基、置換もしくは非置換のピラゾリル基、置換もしくは非置換のチアゾリル基、置換もしくは非置換のイソチアゾリル基、置換もしくは非置換のオキサゾリル基、置換もしくは非置換のイソキサゾリル基、置換もしくは非置換のピリジニル基、置換もしくは非置換のピリダジニル基、置換もしくは非置換のキノリニル基、置換もしくは非置換のイソキノリニル基、置換もしくは非置換のベンゾキノリニル基、置換もしくは非置換のキノキサリニル基、置換もしくは非置換のキナゾリニル基、置換もしくは非置換のカルバゾリル基、置換もしくは非置換のベンゾイミダゾリル基、置換もしくは非置換のベンゾフラニル基、置換もしくは非置換のベンゾチオフェニル基、置換もしくは非置換のイソベンゾチアゾリル基、置換もしくは非置換のベンゾオキサゾリル基、置換もしくは非置換のイソベンゾオキサゾリル基、置換もしくは非置換のオキサジアゾリル基、置換もしくは非置換のトリアジニル基、置換もしくは非置換のジベンゾフラニル基、置換もしくは非置換のジベンゾチオフェニル基、置換もしくは非置換のイミダゾピリミジニル基および置換もしくは非置換のイミダゾピリミジニル基；ならびに

- Si (Q_{43}) (Q_{44}) (Q_{45})；からなる群より選択される。

【0067】

化学式 2H-1 中、 R_{31} は、置換もしくは非置換のビフェニル基であることが好ましい。

【0068】

前記化学式 1-3、2H-1 および 3-2 中、

c1、c4、e1、h1 および h4 は、互いに独立して、0 ~ 4 の整数であり、c2、c3、h2 および h3 は、互いに独立して、0 ~ 3 の整数であってもよい。

【0069】

c1 は、前記化学式 1-3 における R_{21} の個数を示したものであり、c1 が 2 以上である場合、2 以上の R_{21} は、互いに同一であっても、あるいは異なるっていてもよい。c2 ~ c4 は、前記化学式 1-3 の構造、および c1 についての説明を参照して理解されるであろう。c1 ~ c4 は、互いに独立して、好ましくは 0 ~ 2 の整数であり、より好ましくは 0 または 1 であり、さらにより好ましくは 0 である。

【0070】

e1 は、前記化学式 2H-1 における R_{31} の個数を示したものであり、e1 が 2 以上である場合、2 以上の R_{31} は、互いに同一であっても、あるいは異なるっていてもよい。e1 は、好ましくは 1 ~ 3 の整数であり、より好ましくは 1 または 2 であり、さらにより

10

20

30

30

40

50

好ましくは1である。

【0071】

h_1 は、前記化学式3-2における $R_{4\ 1}$ の個数を示したものであり、 h_1 が2以上である場合、2以上の $R_{4\ 1}$ は、互いに同一であっても、あるいは異なっていてもよい。 $h_2 \sim h_4$ は、前記化学式3-2の構造、および h_1 についての説明を参照して理解されるであろう。 $h_1 \sim h_4$ は、互いに独立して、好ましくは0~2の整数であり、より好ましくは0または1であり、さらにより好ましくは0である。

【0072】

前記化学式1-1中、 $A_{r\ 2\ 1} \sim A_{r\ 2\ 3}$ において、少なくとも一つは、前記化学式A~Cのいずれかで表される基であり、

前記化学式1-2中、 $A_{r\ 2\ 1} \sim A_{r\ 2\ 4}$ のうち少なくとも一つは、前記化学式A~Cのいずれかで表される基であり、

前記化学式1-3中、 $A_{r\ 2\ 1}$ および $A_{r\ 2\ 2}$ のうち少なくとも一つは、前記化学式A~Cのいずれかで表される基であり、

前記化学式2H-1中、 $A_{r\ 3\ 1}$ は、前記化学式A~Cのいずれかで表される基であり、

前記化学式2D-1中、 $A_{r\ 3\ 1} \sim A_{r\ 3\ 4}$ のうち少なくとも一つは、前記化学式A~Cのいずれかで表される基であり、

前記化学式2D-2中、 $A_{r\ 3\ 1} \sim A_{r\ 3\ 3}$ のうち少なくとも一つは、前記化学式A~Cのいずれかで表される基であり、

前記化学式3-1中、 $A_{r\ 4\ 1} \sim A_{r\ 4\ 3}$ のうち少なくとも一つは、前記化学式A~Cのいずれかで表される基であり、 $A_{r\ 4\ 1} \sim A_{r\ 4\ 3}$ のうち残りの基はフェニル基またはカルバゾリル基であることが好ましく、

前記化学式3-2中、 $A_{r\ 4\ 1}$ および $A_{r\ 4\ 2}$ において、一方は前記化学式A~Cからなる群より選択される基であり、他方は $* = N - *$ を含む置換もしくは非置換の窒素含有ヘテロ環基である。 $* = N - *$ を含む窒素含有ヘテロ環基の例としてはキナゾリニル基が挙げられ、フェニル基やナフチル基などのC₆-C₂₀アリール基で置換されていてよい。

【0073】

すなわち、前記化学式1-1、1-2、1-3、2H-1、2D-1、2D-2、3-1および3-2で表される化合物は、前記化学式A~Cのいずれかで表される基を必ず含む。

【0074】

本発明の一実施形態によれば、前記第1化合物は、前記化学式1-1~1-3のいずれかで表される化合物であり、

前記第2化合物は、前記化学式2H-1、2D-1および2D-2のいずれかで表される化合物であり、

前記第3化合物は、 $* = N - *$ を有する窒素含有ヘテロ環基を含み、前記化学式3-1または3-2で表される化合物である。

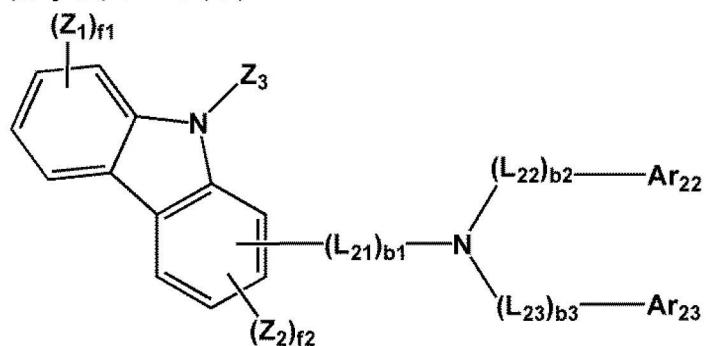
【0075】

本発明の実施形態によれば、前記第1化合物~第3化合物は、互いに独立して、下記化学式1-1(1)~1-1(4)、1-2(1)、1-3(1)、2H-1(1)~2H-1(4)、2D-1(1)~2D-1(4)、2D-2(1)、2D-2(2)、3-1(1)~3-1(2)および3-2(1)のいずれかで表される化合物であってよい。

【0076】

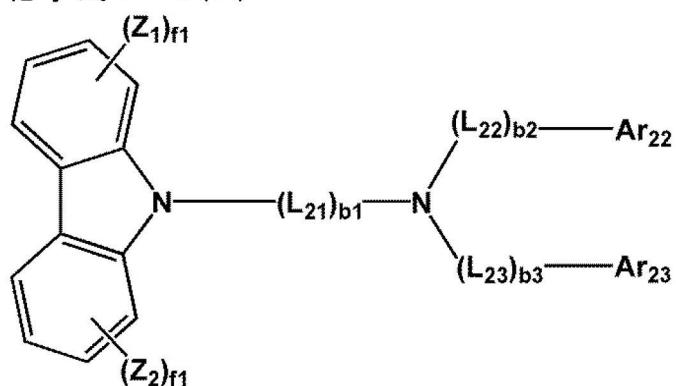
【化 5 - 1】

化学式 1-1(1)



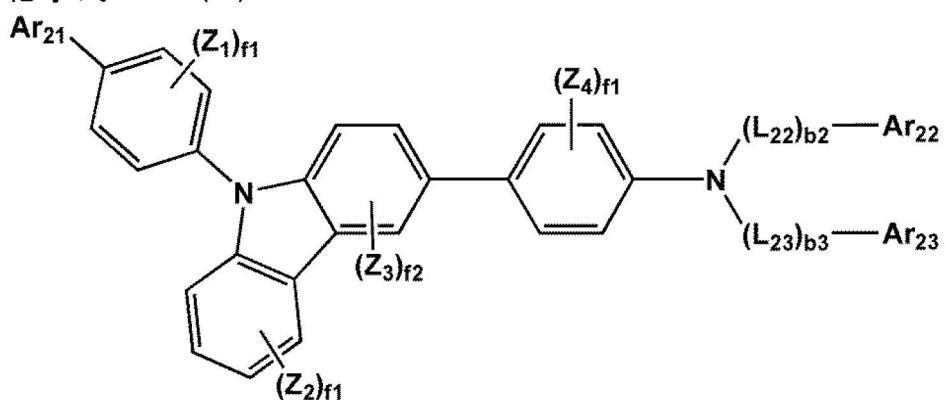
10

化学式 1-1(2)



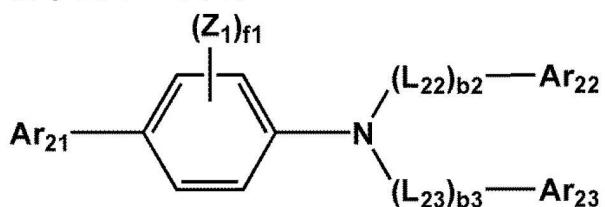
20

化学式 1-1(3)



30

化学式 1-1(4)

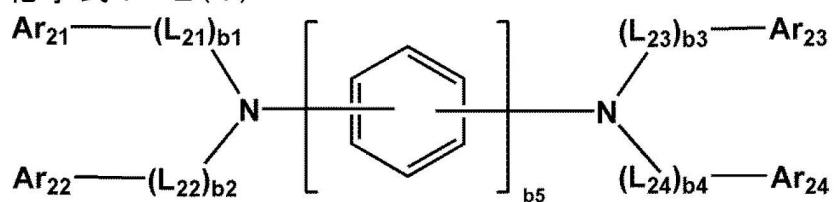


40

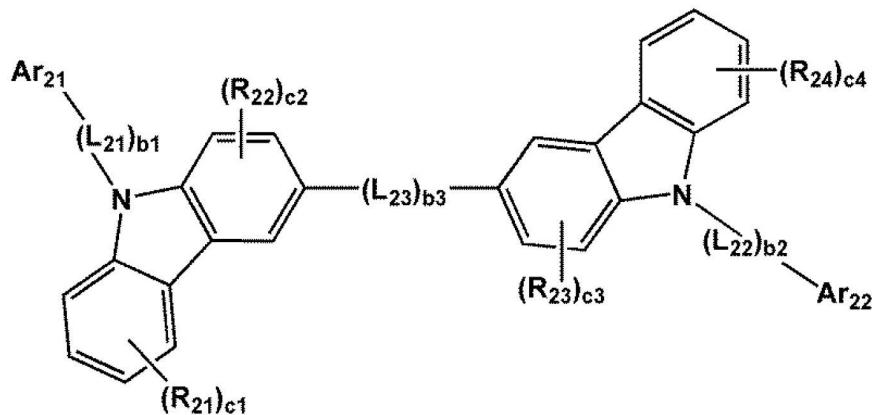
【0077】

【化5-2】

化学式1-2(1)



化学式1-3(1)



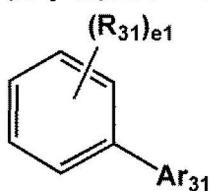
【0078】

10

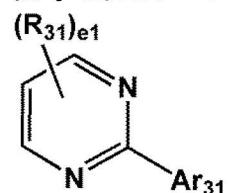
20

【化 5 - 3】

化学式 2H-1(1)

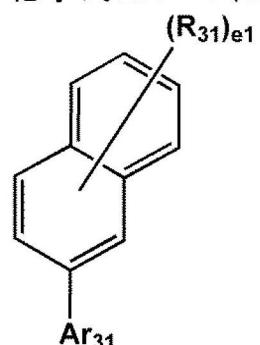


化学式 2H-1(2)



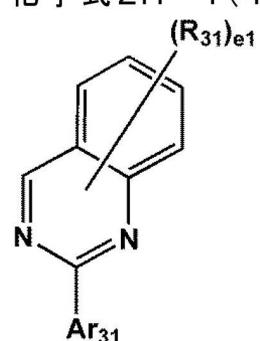
10

化学式 2H-1(3)



20

化学式 2H-1(4)

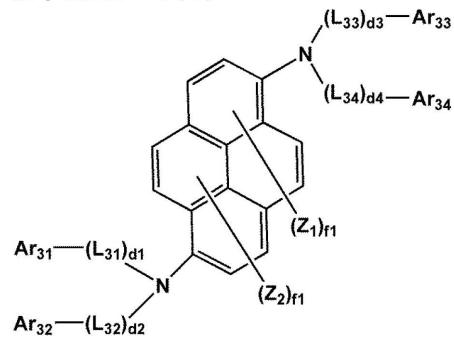


30

【0079】

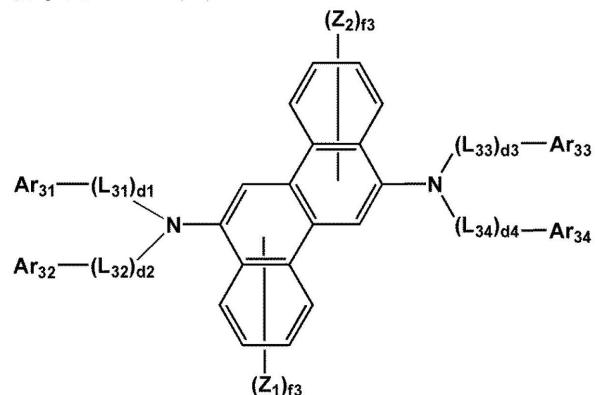
【化5-4】

化学式2D-1(1)



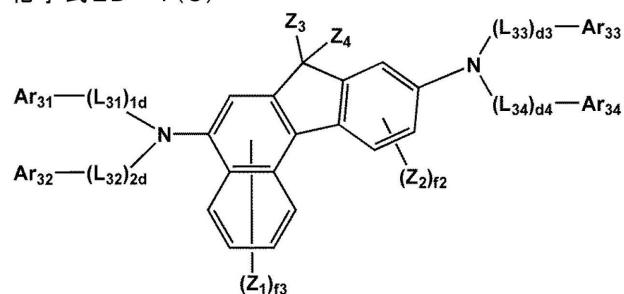
10

化学式2D-1(2)



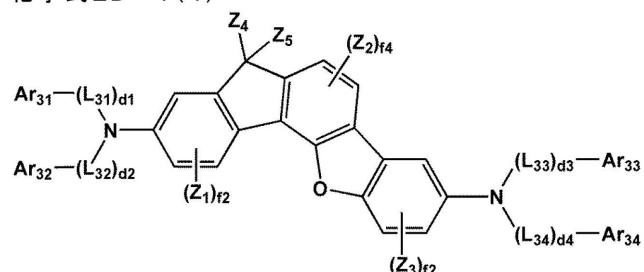
20

化学式2D-1(3)



30

化学式2D-1(4)

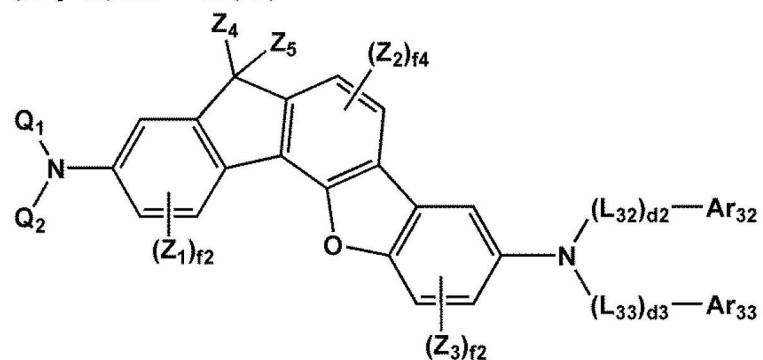


40

【0080】

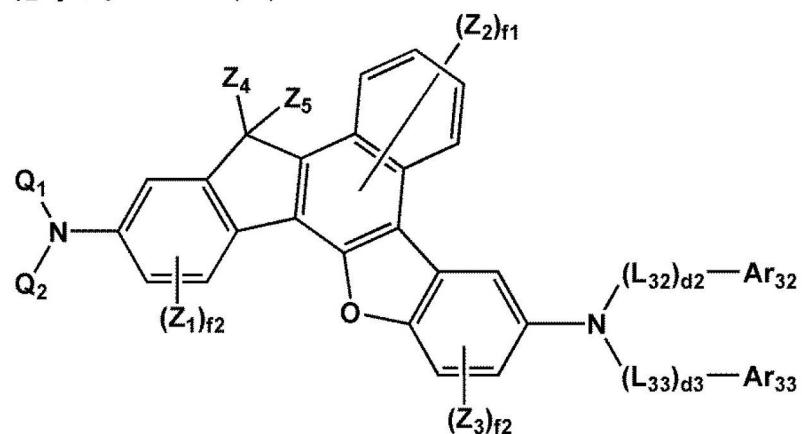
【化 5 - 5】

化学式 2D-2(1)



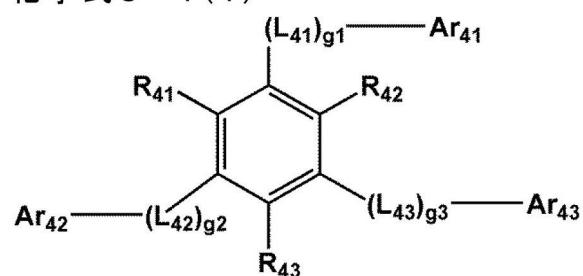
10

化学式 2D-2(2)



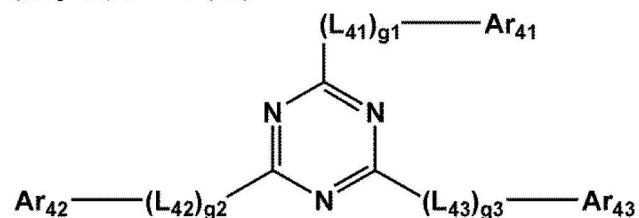
20

化学式 3-1(1)



30

化学式 3-1(2)

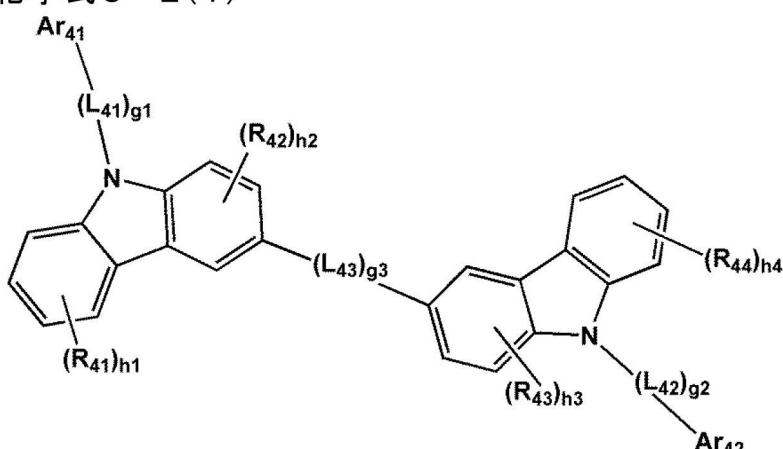


40

【 0 0 8 1 】

【化5-6】

化学式3-2(1)



10

【0082】

前記化学式1-1(1)~1-1(4)、1-2(1)、1-3(1)、2H-1(1)~2H-1(4)、2D-1(1)~2D-1(4)、2D-2(1)、2D-2(2)、3-1(1)、3-1(2)および3-2(1)で、

$L_{2,1} \sim L_{2,4}$ 、 $L_{3,1} \sim L_{3,4}$ 、 $L_{4,1} \sim L_{4,3}$ 、 $b_1 \sim b_5$ 、 $d_1 \sim d_4$ 、 $g_1 \sim g_3$ 、 $Ar_{2,1} \sim Ar_{2,4}$ 、 $Ar_{3,1} \sim Ar_{3,4}$ 、 $Ar_{4,1} \sim Ar_{4,3}$ 、 $R_{2,1} \sim R_{2,4}$ 、 $R_{3,1}$ 、 $R_{4,1} \sim R_{4,4}$ 、 $c_1 \sim c_4$ 、 e_1 、 $h_1 \sim h_4$ 、 Q_1 および Q_2 は、本明細書に記載されたところを参照する。

20

【0083】

前記化学式1-1(1)~1-1(4)、2D-1(1)~2D-1(4)、2D-2(1)および2D-2(2)で、 $Z_1 \sim Z_5$ は、互いに独立して、

重水素原子、-F、-Cl、-Br、-I、ヒドロキシル基、シアノ基、ニトロ基、アミノ基、アミジノ基、ヒドラジン基、ヒドラゾン基、カルボン酸基またはその塩、スルホン酸基またはその塩、リン酸基またはその塩、置換もしくは非置換の $C_1 \sim C_6$ アルキル基、置換もしくは非置換の $C_2 \sim C_6$ アルケニル基、置換もしくは非置換の $C_2 \sim C_6$ アルキニル基、および置換もしくは非置換の $C_1 \sim C_6$ アルコキシ基；

30

置換もしくは非置換の $C_3 \sim C_1$ シクロアルキル基、置換もしくは非置換の $C_1 \sim C_1$ ヘテロシクロアルキル基、置換もしくは非置換の $C_3 \sim C_1$ シクロアルケニル基、置換もしくは非置換の $C_1 \sim C_1$ ヘテロシクロアルケニル基、置換もしくは非置換の $C_6 \sim C_6$ アリール基、置換もしくは非置換の $C_6 \sim C_6$ アリールオキシ基、置換もしくは非置換の $C_6 \sim C_6$ アリールチオ基、置換もしくは非置換の $C_1 \sim C_6$ ヘテロアリール基、置換もしくは非置換の一価の非芳香族縮合多環基および置換もしくは非置換の一価の非芳香族ヘテロ縮合多環基；ならびに

-Si(Q_{3,3})(Q_{3,4})(Q_{3,5})；からなる群より選択される。

【0084】

前記Q_{3,3}~Q_{3,5}は、本明細書に記載されたQ₁についての説明を参照する。

40

【0085】

前記化学式1-1(1)~1-1(4)、2D-1(1)~2D-1(4)、2D-2(1)および2D-2(2)で、f₁は、0~4の整数であり、f₂は、0~3の整数であり、f₃は、0~5の整数であり、f₄は、0~2の整数である。f₁~f₄は、0または1であることが好ましく、0であることがより好ましい。

【0086】

前記化学式1-1(1)中、Ar_{2,2}およびAr_{2,3}のうち少なくとも一つは、前記化学式A~Cのいずれかで表される基であり、

前記化学式1-1(2)中、Ar_{2,2}およびAr_{2,3}のうち少なくとも一つは、前記化学式A~Cのいずれかで表される基であり、

50

前記化学式 1 - 1 (3) 中、 $A r_{2\cdot1} \sim A r_{2\cdot3}$ のうち少なくとも一つは、前記化学式 A ~ C のいずれかで表される基であり、

前記化学式 1 - 1 (4) 中、 $A r_{2\cdot1} \sim A r_{2\cdot3}$ のうち少なくとも一つは、前記化学式 A ~ C のいずれかで表される基であり、

前記化学式 1 - 2 (1) 中、 $A r_{2\cdot1} \sim A r_{2\cdot4}$ のうち少なくとも一つは、前記化学式 A ~ C のいずれかで表される基であり、

前記化学式 1 - 3 (1) 中、 $A r_{2\cdot1}$ および $A r_{2\cdot2}$ のうち少なくとも一つは、前記化学式 A ~ C のいずれかで表される基であり、

前記化学式 2 H - 1 (1) ~ 2 H - 1 (4) 中、 $A r_{3\cdot1}$ は、前記化学式 A ~ C のいずれかで表される基であり、

前記化学式 2 D - 1 (1) 中、 $A r_{3\cdot1} \sim A r_{3\cdot4}$ のうち少なくとも一つは、前記化学式 A ~ C のいずれかで表される基であり、

前記化学式 2 D - 1 (2) 中、 $A r_{3\cdot1} \sim A r_{3\cdot4}$ のうち少なくとも一つは、前記化学式 A ~ C のいずれかで表される基であり、

前記化学式 2 D - 1 (3) 中、 $A r_{3\cdot1} \sim A r_{3\cdot4}$ のうち少なくとも一つは、前記化学式 A ~ C のいずれかで表される基であり、

前記化学式 2 D - 1 (4) 中、 $A r_{3\cdot1} \sim A r_{3\cdot4}$ のうち少なくとも一つは、前記化学式 A ~ C のいずれかで表される基であり、

前記化学式 2 D - 2 (1) 中、 $A r_{3\cdot2}$ および $A r_{3\cdot3}$ のうち少なくとも一つは、前記化学式 A ~ C のいずれかで表される基であり、

前記化学式 2 D - 2 (2) 中、 $A r_{3\cdot2}$ および $A r_{3\cdot3}$ のうち少なくとも一つは、前記化学式 A ~ C のいずれかで表される基であり、

前記化学式 3 - 1 (1) 中、 $A r_{4\cdot1} \sim A r_{4\cdot3}$ のうち少なくとも一つは、前記化学式 A ~ C のいずれかで表される基であり、

前記化学式 3 - 1 (2) 中、 $A r_{4\cdot1} \sim A r_{4\cdot3}$ のうち少なくとも一つは、前記化学式 A ~ C のいずれかで表される基であり、 $A r_{4\cdot1} \sim A r_{4\cdot3}$ のうち残りの基はフェニル基またはカルバゾリル基であることが好ましく、

前記化学式 3 - 2 (1) 中、 $A r_{4\cdot1}$ および $A r_{4\cdot2}$ において、一方は前記化学式 A ~ C のいずれかで表される基であり、他方は * = N - *' を含む窒素含有ヘテロ環基である。

【 0 0 8 7 】

すなわち、前記化学式 1 - 1 (1) ~ 1 - 1 (4)、1 - 2 (1)、1 - 3 (1)、2 H - 1 (1) ~ 2 H - 1 (4)、2 D - 1 (1) ~ 2 D - 1 (4)、2 D - 2 (1)、2 D - 2 (2)、3 - 1 (1)、3 - 1 (2) および 3 - 2 (1) で表される化合物は、前記化学式 A ~ C のいずれかで表される基を必ず含む。

【 0 0 8 8 】

一実施形態によれば、前記第 1 化合物は、下記化学式 1 - 1 (1) ~ 1 - 1 (4)、1 - 2 (1) および 1 - 3 (1) のいずれか、好ましくは 1 - 1 (3)、1 - 2 (1)、1 - 3 (1) または 1 - 2 (1) のいずれかで表される化合物であり、

前記第 2 化合物は、下記化学式 2 H - 1 (1) ~ 2 H - 1 (4)、2 D - 1 (1) ~ 2 D - 1 (4)、2 D - 2 (1) および 2 D - 2 (2) のいずれか、好ましくは 2 D - 1 (1) または 2 H - 1 (4) で表される化合物であり、

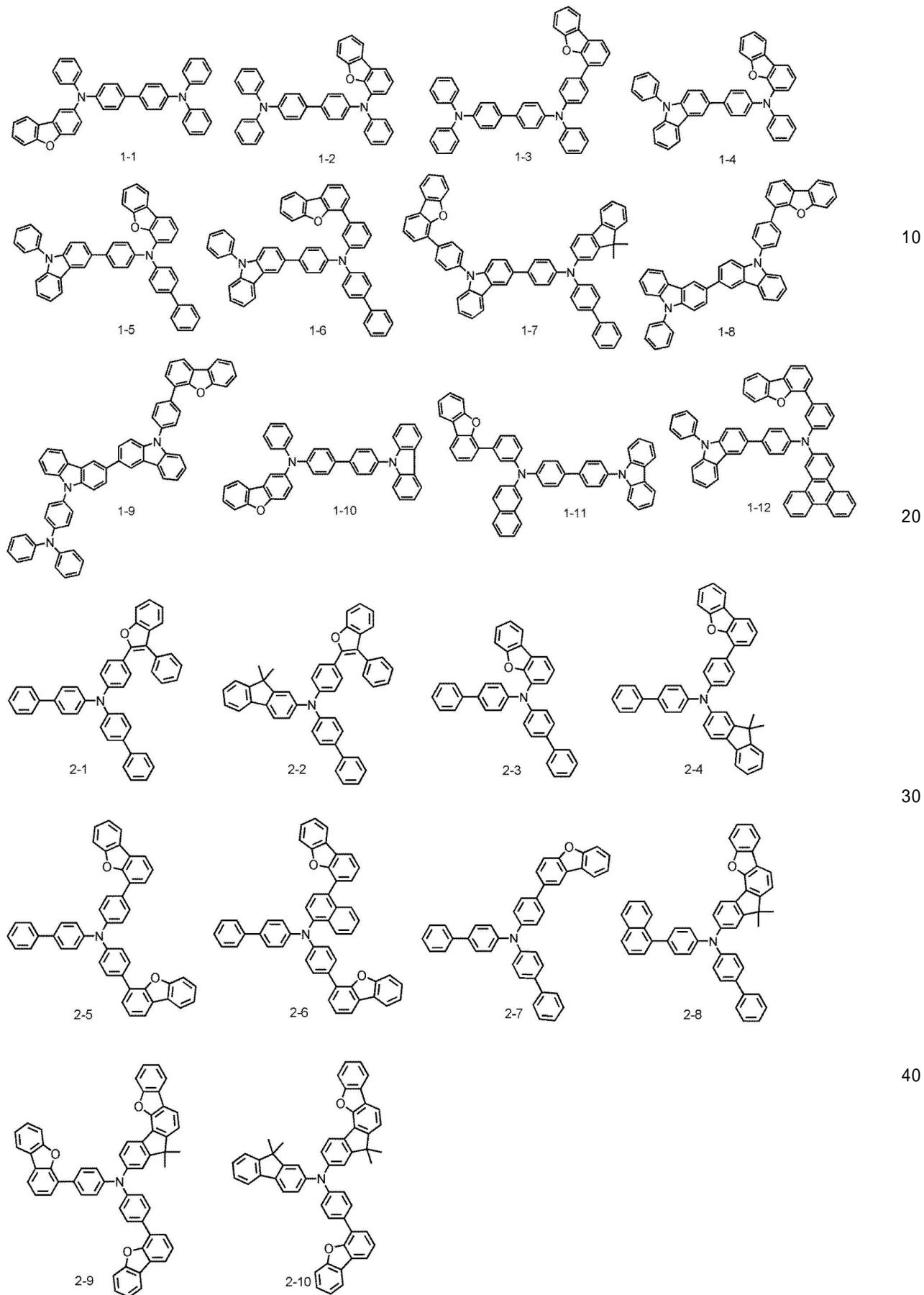
前記第 3 化合物は、下記化学式 3 - 1 (1)、3 - 1 (2) および 3 - 2 (1) のいずれか、好ましくは 3 - 1 (2) で表される化合物である。

【 0 0 8 9 】

本発明の一実施形態によれば、前記第 1 化合物 ~ 第 3 化合物は、互いに独立して、下記化合物 1 - 1 ~ 1 - 1 2、2 - 1 ~ 2 - 1 0、3 - 1 ~ 3 - 1 2、4 - 1 ~ 4 - 1 2 および 5 - 1 ~ 5 - 9 からなる群より選択される化合物であってもよい。

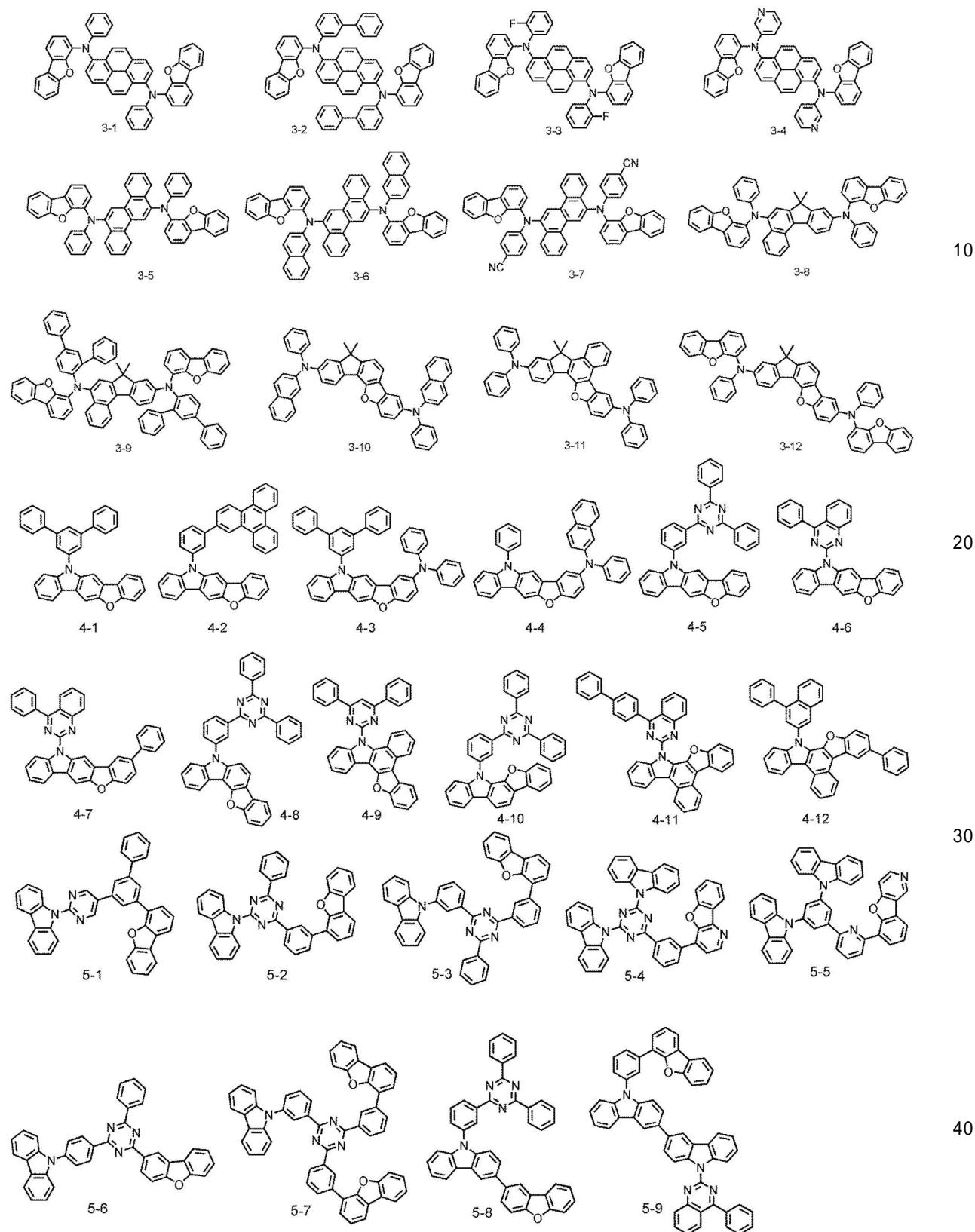
【 0 0 9 0 】

【化 6 - 1】



【 0 0 9 1 】

【化 6 - 2】



【 0 0 9 2 】

本発明の一実施形態によれば、

前記第1化合物は、前記化合物1-1～1-12および2-1～2-10からなる群より選択される化合物であり、

前記第2化合物は、前記化合物3-1～3-12および4-1～4-12からなる群より選択される化合物であり、

前記第3化合物は、前記化合物5-1～5-9からなる群より選択される化合物であつてもよい。

【0093】

前記第1化合物～前記第3化合物からなる群より選択された少なくとも2個の化合物の最低三重項エネルギーは、2.4eV以上、例えば、2.5eV以上であつてもよい。最低三重項エネルギーが前記範囲を満足する場合、例えば、蛍光有機発光素子においては、TTT (triplet-triplet fusion) による発光効率向上を期待することができ、リン光有機発光素子においては、発光層で形成された三重項励起子の転移を防ぎ、素子効率低下を防止することができる。

【0094】

一方、前記第1化合物～前記第3化合物は、非対称構造を有することができる。

【0095】

例えば、前記化学式1-1で、 $- (L_{21})_{b_1} - Ar_{21}$ 、 $- (L_{22})_{b_2} - Ar_{22}$ および $(L_{23})_{b_3} - Ar_{23}$ が互いに同一である場合は除き、前記化学式1-2で、 $- (L_{21})_{b_1} - Ar_{21}$ 、 $- (L_{22})_{b_2} - Ar_{22}$ 、 $- (L_{23})_{b_3} - Ar_{23}$ および $(L_{24})_{b_4} - Ar_{24}$ が互いに同一である場合は除き、前記化学式2D-1で、 $- (L_{31})_{d_1} - Ar_{31}$ 、 $- (L_{32})_{d_2} - Ar_{32}$ 、 $- (L_{33})_{d_3} - Ar_{33}$ および $(L_{34})_{d_4} - Ar_{34}$ が互いに同一である場合は除き、前記化学式2D-1で、 $- (L_{31})_{d_1} - Ar_{31}$ 、 $- (L_{32})_{d_2} - Ar_{32}$ および $(L_{33})_{d_3} - Ar_{33}$ が互いに同一である場合は除き、前記化学式3-1で、 $- (L_{41})_{g_1} - Ar_{41}$ 、 $- (L_{42})_{g_2} - Ar_{42}$ および $(L_{43})_{g_3} - Ar_{43}$ が互いに同一である場合は除く。

【0096】

他の例として、前記化学式1-3で、 $- (L_{23})_{b_3} -$ を挟んだ2個のカルバゾール部位は、互いに異なっており、前記化学式2H-1で、 $- (L_{31}) -$ を挟んだ $(R_{31})_{e_1}$ および Ar_{31} は、互いに異なっており、前記化学式3-2で、 $- (L_{43})_{g_3} -$ を挟んだ2個のカルバゾール部分は、互いに異なっていてもよい。

【0097】

前記第1化合物～第3化合物は、そのような非対称構造を有することにより、有機層内分子の会合および凝集の程度を低下させることができる。従って、例えば、前記第1化合物～第3化合物が、それぞれそれらが含まれる層にマトリックス材料として使用される場合、素子劣化を防止して素子寿命向上を期待することができる。

【0098】

一実施形態によれば、前記第1化合物は、前記化学式1-1～1-3のいずれかで表される化合物であり、

前記第2化合物は、前記化学式2H-1で表される化合物であり、

前記第3化合物は、前記化学式3-1または3-2で表される化合物である。

【0099】

他の実施形態によれば、前記第1化合物は、前記化学式1-1(1)～1-1(4)、1-2(1)および1-3(1)のいずれかで表される化合物であり、

前記第2化合物は、前記化学式2H-1(1)～2H-1(4)のいずれかで表される化合物であり、

前記第3化合物は、前記化学式3-1(1)、3-1(2)および3-2(1)のいずれかで表される化合物である。

【0100】

本発明の一実施形態に係る有機発光素子は、効率および寿命の向上の観点から、前記第2層が発光層であり、前記第2層がドーパントをさらに含み、前記第1層および第3層は、それぞれ前記第2層に隣接することが好ましい。例えば、前記ドーパントは、リン光ドーパントであつてもよい。前記ドーパントの例は、後述のところを参照する。

【0101】

10

20

30

40

50

一実施形態によれば、前記第1化合物は、前記化学式1-1~1-3のいずれかで表される化合物であり、

前記第2化合物は、前記化学式2D-1または2D-2で表される化合物であり、

前記第3化合物は、前記化学式3-1または3-2で表される化合物である。

【0102】

他の実施形態によれば、前記第1化合物は、前記化学式1-1(1)~1-1(4)、
1-2(1)および1-3(1)のいずれかで表される化合物であり、

前記第2化合物は、前記化学式2D-1(1)~2D-1(4)、2D-2(1)および
2D-2(2)のいずれかで表される化合物であり、

前記第3化合物は、前記化学式3-1(1)、3-1(2)および3-2(1)のいずれかで表される化合物である。 10

【0103】

本発明の他の実施形態に係る有機発光素子は、効率および寿命の向上の観点から、前記第2層が発光層であり、前記第2層は、ホストをさらに含み、前記第1層および第3層は、それぞれ前記第2層に隣接することが好ましい。例えば、前記ホストは、蛍光ホストであってもよい。前記ホストの例は、後述のところを参照する。

【0104】

一実施形態によれば、

前記第1化合物および前記第2化合物は、互いに独立して、前記化学式1-1~1-3のいずれかで表される化合物であり、

前記第1化合物と前記第2化合物とは、互いに異なっており、

前記第3化合物は、前記化学式2H-1、2D-1、2D-2、3-1および3-2のいずれかで表される化合物である。 20

【0105】

例えば、前記第1化合物および前記第2化合物は、互いに独立して、前記化学式1-1(1)~1-1(4)、1-2(1)および1-3(1)のいずれかで表される化合物であり、

前記第1化合物と前記第2化合物とは、互いに異なっており、

前記第3化合物は、前記化学式2H-1(1)~2H-1(4)、2D-1(1)~2D-1(4)、
2D-2(1)、2D-2(2)、3-1(1)、3-1(2)および3-2(1)のいずれかで表される化合物である。 30

【0106】

他の実施形態によれば、

前記第1化合物および前記第2化合物は、互いに独立して、前記化学式1-1~1-3のいずれかで表される化合物であり、

前記第1化合物と前記第2化合物とは、互いに異なっており、

前記第3化合物は、前記化学式2H-1、3-1および3-2のいずれかで表される化合物である。 40

【0107】

さらに他の実施形態によれば、前記第1化合物および前記第2化合物は、互いに独立して、前記化学式1-1(1)~1-1(4)、1-2(1)および1-3(1)のいずれかで表される化合物であり、

前記第1化合物と前記第2化合物は、互いに異なっており、

前記第3化合物は、前記化学式2H-1(1)~2H-1(4)、3-1(1)、3-1(2)および3-2(1)のいずれかで表される化合物である。

【0108】

本発明のさらに他の実施形態に係る有機発光素子は、効率および寿命の向上の観点から、前記第3層が発光層であり、前記第3層がドーパントをさらに含み、前記第2層が前記第3層に隣接してもよい。 例えば、前記ドーパントは、リン光ドーパントであってもよい。 50

【0109】

他の実施形態によれば、前記第1化合物および前記第2化合物は、互いに独立して、前記化学式1-1～1-3のいずれかで表される化合物であり、

前記第1化合物と前記第2化合物とは、互いに異なっており、

前記第3化合物は、前記化学式2D-1または2D-2で表される化合物である。

【0110】

さらに他の実施形態によれば、前記第1化合物および前記第2化合物は、前記化学式1-1(1)～1-1(4)、1-2(1)および1-3(1)のいずれかで表される化合物であり、

前記第1化合物と第2化合物とは、互いに異なっており、

10

前記第3化合物は、前記化学式2D-1(1)～2D-1(4)、2D-2(1)、2D-2(2)、3-1(1)、3-1(2)および3-2(1)のいずれかで表される化合物である。

【0111】

本発明のさらに他の一実施形態に係る有機発光素子は、効率および寿命の向上の観点から、前記第3層が発光層であり、前記第3層がホストをさらに含み、前記第2層が前記第3層に隣接することが好ましい。

【0112】

例えば、前記ホストは、蛍光ホストであってもよい。

【0113】

20

本発明の一実施形態によれば、

前記第1化合物および前記第2化合物は、互いに独立して、前記化合物1-1～1-12、2-1～2-10のいずれかで表される化合物であり、

前記第1化合物と前記第2化合物とは、互いに異なっており、

前記第3化合物は、前記化合物3-1～3-12、4-1～4-12、および5-1～5-9からなる群より選択される化合物である。

【0114】

本発明に係る有機発光素子の正孔輸送層は、前記化学式1-1～1-3のいずれかで表される1以上の化合物を含むことが好ましい。詳細には、本発明に係る有機発光素子の正孔輸送層は、前記化学式1-1(1)～1-1(4)、1-2(1)、1-3(1)のいずれかで表される1以上の化合物を含むことが好ましい。より詳細には、本発明に係る有機発光素子の正孔輸送層は、好ましくは前記化合物1-1～1-12および2-1～2-10のいずれかで表される1以上の化合物を含むことが好ましい。

30

【0115】

本発明に係る有機発光素子の電子輸送層は、前記化学式3-1または3-2のいずれかで表される1以上の化合物を含むことが好ましく、前記化学式3-2で表される1以上の化合物を含むことがさらに好ましい。詳細には、本発明の実施形態に係る有機発光素子の電子輸送層は、前記化学式3-1(1)～3-1(2)および3-2(1)のいずれかで表される1以上の化合物を含むことが好ましく、前記化学式3-1(2)で表される1以上の化合物を含むことがより好ましい。より詳細には、本発明に係る有機発光素子の電子輸送層は、前記化合物5-1～5-8からなる群より選択される1以上の化合物を含むことが好ましい。

40

【0116】

本発明に係る有機発光素子の発光層は、前記化学式2H-1、3-1および3-2のいずれかで表される1以上の化合物をホストとして含むことが好ましい。詳細には、本発明に係る有機発光素子の発光層には、前記化学式2H-1(1)～2H-1(4)、3-1(1)～3-1(2)および3-2(1)のいずれかで表される1以上の化合物をホストとして含むことが好ましい。より詳細には、本発明に係る有機発光素子は、前記化合物4-1～4-12および5-1～5-9からなる群より選択される1以上の化合物をホストとして含むことが好ましい。

50

【0117】

本発明に係る有機発光素子の発光層は、前記化学式2D-1または2D-2のいずれかで表される1以上の化合物をドーパントとして含むことが好ましく、前記化学式2D-1で表される1以上の化合物をドーパントとして含むことがより好ましい。詳細には、本発明に係る有機発光素子の発光層は、前記化学式2D-1(1)～2D-1(4)および2D-2(1)～2D-2(2)のいずれかで表される1以上の化合物をドーパントとして含むことが好ましく、前記化学式2D-1(1)で表される1以上の化合物をドーパントとして含むことがより好ましい。より詳細には、本発明に係る有機発光素子は、好ましくは前記化合物3-1～3-10からなる群より選択される少なくとも1以上の化合物をドーパントとして含むことが好ましい。

10

【0118】

前記有機発光素子は、前記化学式A～Cのいずれかで表される基を含む化合物を、第1層～第3層のいずれについても導入することにより、分子構造類似性によって電荷の移動を円滑にし、3層間の界面特性が向上し、有機発光素子の安定性および寿命を向上させるという効果を達成することができる。

【0119】

以下、図1を参照し、本発明の一実施形態に係る有機発光素子の構造および製造方法について説明すれば、次の通りである。

【0120】

図1は、前記有機発光素子の一実施形態の構造を概略的に示した図面である。

20

【0121】

図1の有機発光素子10は、第1電極110、第1層130、第2層150、第3層170および第2電極190が順に積層された構造を有する。なお、第3層170と第2電極190との間には、電子注入層、電子輸送層等の他の層が1つ以上存在してもよい。

【0122】

図1の第1電極110の下部、または第2電極190の上部には、基板が追加して配置される。前記基板は、機械的強度、熱安定性、透明性、表面平滑性、取り扱い容易性および防水性に優れるガラス基板または透明プラスチック基板を使用することができる。

【0123】

本発明の一実施形態によれば、第1層130は正孔輸送層であり、第2層150は発光層であり、第3層170は電子輸送層である。

30

【0124】

本発明の他の実施形態によれば、第1層130および第2層150はいずれも正孔輸送層であり、第3層170は発光層である。

【0125】

前記第1電極110は、例えば、基板上部に、第1電極用物質を、蒸着法またはスパッタリング法などをを利用して提供することによって形成される。前記第1電極110がアノードである場合、正孔注入が容易になるように、第1電極用物質は、高い仕事関数を有する物質のうちから選択される。前記第1電極110は、反射型電極、半透過型電極または透過型電極であってもよい。第1電極用物質としては、透明であって伝導性に優れる酸化インジウムスズ(ITO)、酸化インジウム亜鉛(IZO)、酸化スズ(SnO₂)、酸化亜鉛(ZnO)などを利用することができる。または、半透過型電極または反射型電極である第1電極110を形成するために、第1電極用物質として、マグネシウム(Mg)、アルミニウム(Al)、アルミニウム-リチウム(Al-Li)、カルシウム(Ca)、マグネシウム-インジウム(Mg-In)、マグネシウム-銀(Mg-Ag)のうち少なくとも一つを選択することができる。

40

【0126】

前記第1電極110は、単層、または複数層を有する多層の構造を有することができる。例えば、前記第1電極110は、ITO/Ag/ITOの3層構造を有することができるが、それに限定されるものではない。

50

【0127】

前記第1電極110の上部には、第1層130、第2層150および第3層170が順に積層されている。

【0128】

前記第1層は第1化合物を含み、前記第2層は第2化合物を含み、前記第3層は第3化合物を含む。前記第1化合物、第2化合物および第3化合物についての説明は、本明細書に記載されたところを参照する。

【0129】

第1層の成膜方法は、特に制限されず、真空蒸着法、スピニコーティング法、キャスト法、LB (Langmuir - Blodgett) 法、インクジェットプリンティング法、レーザプリンティング法、レーザ熱転写法 (LITI : laser induced thermal imaging) のような多様な方法を利用することができます。第2層および第3層の成膜方法についても同様である。10

【0130】

図1には図示されていないが、前記第1電極と前記第1層との間には、正孔注入層が追加して具備されてもよい。

【0131】

前記有機発光素子が正孔注入層を含む場合、真空蒸着法、スピニコーティング法、キャスト法、LB (Langmuir - Blodgett) 法、インクジェットプリンティング法、レーザプリンティング法、レーザ熱転写法 (LITI : laser induced thermal imaging) のような多様な方法を利用し、前記第1電極110上部に、前記正孔注入層を形成することができる。20

【0132】

真空蒸着法によって正孔注入層を形成する場合、蒸着条件は、例えば、100～500の蒸着温度、 $10^{-8} \sim 10^{-3}$ torr の真空度、および0.01～100 / sec の蒸着速度の範囲内で、蒸着する正孔注入層用化合物、および形成する正孔注入層構造を考慮して選択される。

【0133】

スピニコーティング法によって正孔注入層を形成する場合、コーティング条件は、2,000～5,000 rpm のコーティング速度、および80～200 の熱処理温度の範囲内で、蒸着する正孔注入層用化合物、および形成する正孔注入層構造を考慮して選択される。30

【0134】

前記正孔注入層の厚みは、100～10,000、例えば、100～1,000 であってもよい。

【0135】

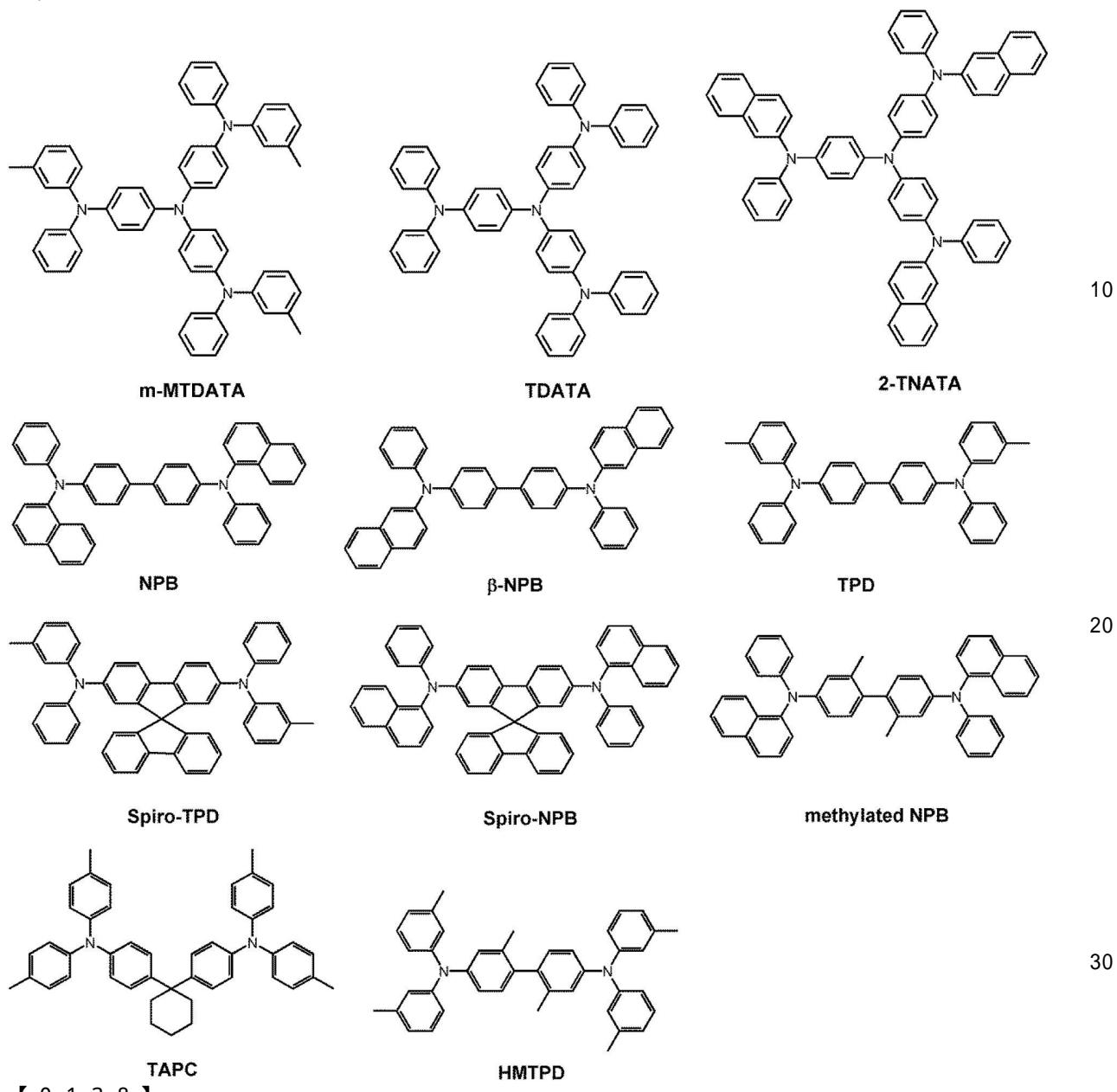
前記第1層、第2層および第3層の形成方法は、正孔注入層の形成方法と同様である。

【0136】

前記第1層は、前記第1化合物以外に、m-MT DATA、T DATA、2-TNATA、NPB、-NPB、TPD、spiro-TPD、spiro-NPB、メチル化NPB、TAPC、HMTPD、4,4',4"-トリス(N-カルバゾリル)トリフェニルアミン (TCTA)、ポリアニリン / ドデシルベンゼンスルホン酸 (Pani / DBSA)、ポリ (3,4-エチレンジオキシチオフェン) / ポリ (4-スチレンスルホネート) (PEDOT / PSS)、ポリアニリン / カンファースルホン酸 (Pani / CSA) およびポリアニリン / ポリ (4-スチレンスルホネート) (PANI / PSS) からなる群より選択された少なくとも一つをさらに含んでもよい。40

【0137】

【化7】



【0138】

前記第1層は、前述のような物質以外に、導電性向上のために、電荷生成物質をさらに含んでもよい。前記電荷生成物質は、前記第1層内に、均一にまたは不均一に分散している。

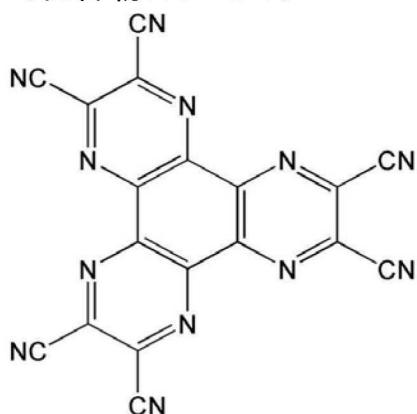
【0139】

前記電荷生成物質は、例えば、p - ドーパントであってもよい。前記p - ドーパントは、キノン誘導体、金属酸化物およびシアノ基含有化合物のうち一つであってもよいが、それらに限定されるものではない。例えば、前記p - ドーパントの非制限的な例としては、テトラシアノキノンジメタン (TCNQ) および化合物HT-D2のようなキノン誘導体；タングステン酸化物およびモリブデン酸化物のような金属酸化物；および下記化合物HT-D1などを有することができるが、それらに限定されるものではない。

【0140】

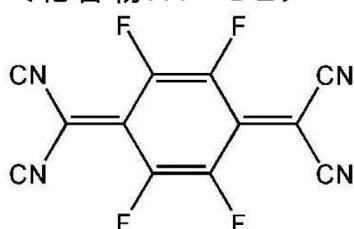
【化8】

<化合物HT-D1>



10

<化合物HT-D2>



20

【0141】

前記第1層が正孔輸送層である場合、その厚みは、好ましくは50~2,000、より好ましくは100~1,500、さらにより好ましくは500~1,500、特に好ましくは1,000~1,500である。

【0142】

一実施形態によれば、前記第2層が発光層であり、前記第1層および前記第3層は、それぞれ前記第2層に隣接することが好ましい。

【0143】

他の実施形態によれば、前記第3層が発光層であり、前記第2層が前記第3層に隣接することが好ましい。

30

【0144】

前記有機発光素子10がフルカラー有機発光素子である場合、発光層は、個別副画素別に、赤色発光層、緑色発光層および青色発光層としてパターニングされる。または、前記発光層は、赤色発光層、緑色発光層および青色発光層が積層された構造を有するか、あるいは赤色光発出物質、緑色光発出物質および青色光放出物質が層区分なしに混合された構造を有し、白色光を放出することができる。

【0145】

例えば、前記第2層が発光層である場合、前記発光層は、前記第2化合物以外に、ホストまたはドーパントをさらに含んでもよい。言い換えれば、第2化合物をホストとして用いる場合は、ドーパントをさらに含んでもよいし、第2化合物をドーパントとして用いる場合は、ホストをさらに含んでもよい。

40

【0146】

他の例として、前記第3層が発光層である場合、前記発光層は、前記第3化合物以外に、ホストまたはドーパントをさらに含んでもよい。言い換えれば、第3化合物をホストとして用いる場合は、ドーパントをさらに含んでもよいし、第3化合物をドーパントとして用いる場合は、ホストをさらに含んでもよい。

【0147】

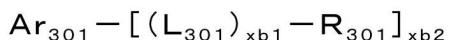
前記ホストは、下記化学式301で表される化合物を含んでもよい。

【0148】

50

【化9】

化学式301



【0149】

前記化学式301で、

Ar_{301} は、

置換もしくは非置換のナフタレン、置換もしくは非置換のヘプタレン、置換もしくは非置換のフルオレン、置換もしくは非置換のスピロ-フルオレン、置換もしくは非置換のベンゾフルオレン、置換もしくは非置換のジベンゾフルオレン、置換もしくは非置換のフェナレン、置換もしくは非置換のフェナントレン、置換もしくは非置換のアントラセン、置換もしくは非置換のフルオランテン、置換もしくは非置換のトリフェニレン、置換もしくは非置換のピレン、置換もしくは非置換のクリセン、置換もしくは非置換のナフタセン、置換もしくは非置換のピセン、置換もしくは非置換のペリレン、置換もしくは非置換のペンタフェンおよび置換もしくは非置換のインデノアントラセンからなる群より選択される化合物から誘導される基であり、

L_{301} は、前記 L_{21} と同様であり、

R_{301} は、

置換もしくは非置換の $C_1 - C_{20}$ アルキル基および置換もしくは非置換の $C_1 - C_{20}$ アルコキシ基；

置換もしくは非置換のフェニル基、置換も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フルオレニル基、置換もしくは非置換のスピロ-フルオレニル基、置換もしくは非置換のベンゾフルオレニル基、置換もしくは非置換のジベンゾフルオレニル基、置換もしくは非置換のフェナントレニル基、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ピレニル基、置換もしくは非置換のクリセニル基、置換もしくは非置換のピリジニル基、置換もしくは非置換のピラジニル基、置換もしくは非置換のピリミジニル基、置換もしくは非置換のピリダジニル基、置換もしくは非置換のキノリニル基、置換もしくは非置換のイソキノリニル基、置換もしくは非置換のキノキサリニル基、置換もしくは非置換のキナゾリニル基、置換もしくは非置換のカルバゾリル基および置換もしくは非置換のトリアジニル基からなる群より選択され、

$xb1$ は、0～3の整数であり、

$xb2$ は、1～4の整数である。 $xb2$ が2以上の場合、 $[(L_{301})_{xb1} - R_{301}]_{xb2}$ は、同一であっても異なるものであってもよい。

【0150】

例えば、前記化学式301で、

L_{301} 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ナフチレン基、置換もしくは非置換のフルオレニレン基、置換もしくは非置換のスピロ-フルオレニレン基、置換もしくは非置換のベンゾフルオレニレン基、置換もしくは非置換のジベンゾフルオレニレン基、置換もしくは非置換のフェナントレニレン基、置換もしくは非置換のアントラセニレン基、置換もしくは非置換のピレニレン基および置換もしくは非置換のクリセニレン基からなる群より選択され、

R_{301} は、

置換もしくは非置換の $C_1 - C_{20}$ アルキル基および置換もしくは非置換の $C_1 - C_{20}$ アルコキシ基；ならびに

置換もしくは非置換のフェニル基、置換も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フルオレニル基、置換もしくは非置換のスピロ-フルオレニル基、置換もしくは非置換のベンゾフルオレニル基、置換もしくは非置換のジベンゾフルオレニル基、置換もしくは非置換

10

20

30

40

50

のフェナントレニル基、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ピレニル基およびクリセニル基；からなる群より選択されるが、それらに限定されるものではない。

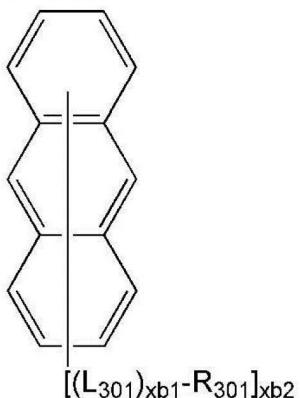
【0151】

例えば、前記ホストは、下記化学式301Aで表される化合物を含んでもよい：

【0152】

【化10】

化学式301A



10

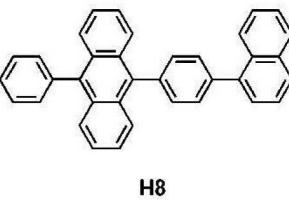
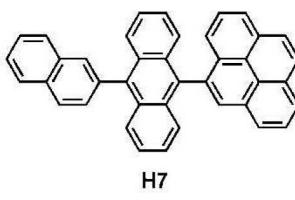
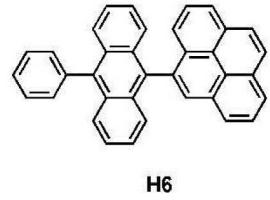
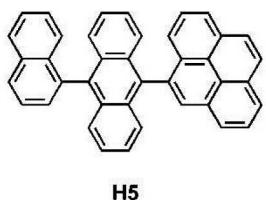
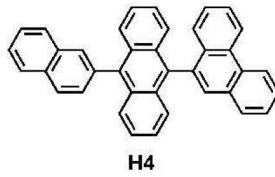
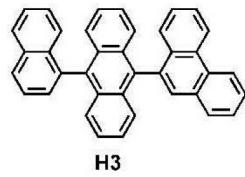
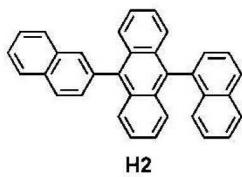
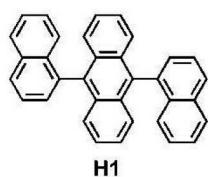
【0153】

20

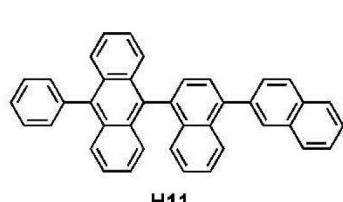
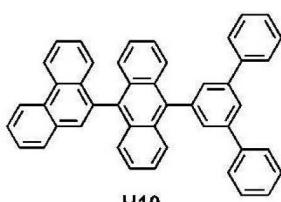
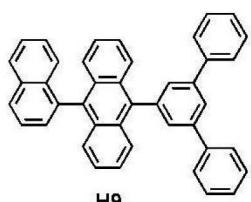
前記化学式301で表される化合物は、下記化合物H1～H49のうち少なくとも一つを含んでもよいが、それらに限定されるものではない：

【0154】

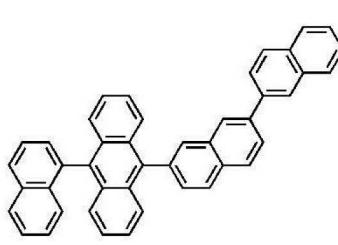
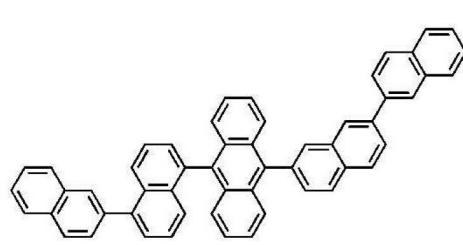
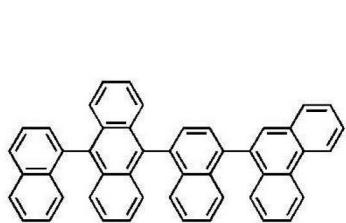
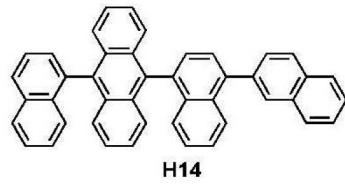
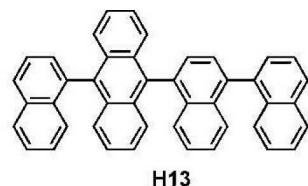
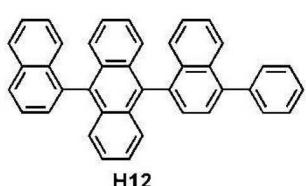
【化 1 1 - 1】



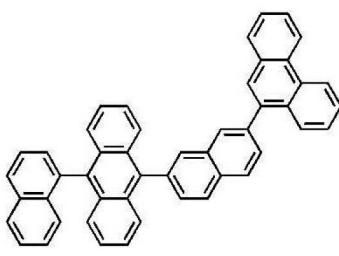
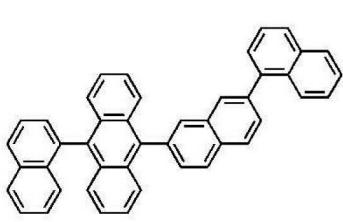
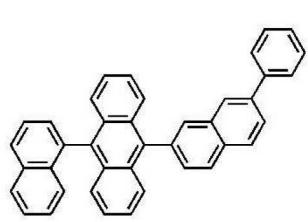
10



20



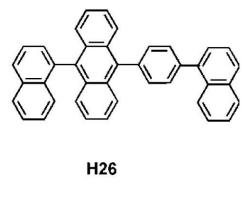
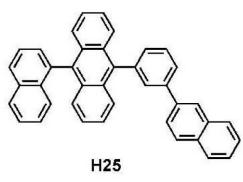
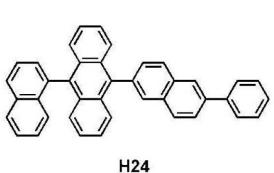
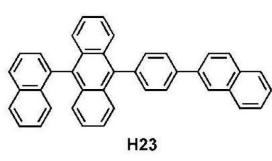
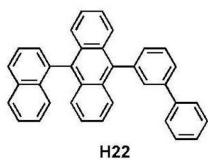
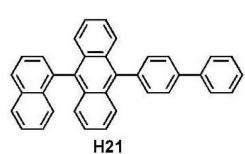
30



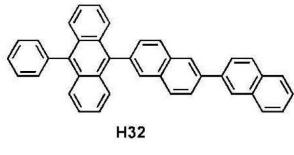
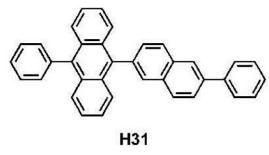
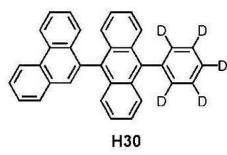
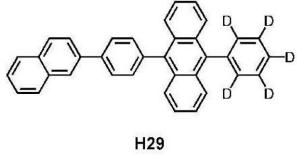
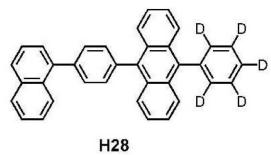
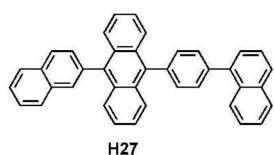
40

【 0 1 5 5 】

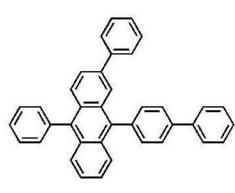
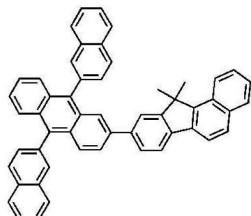
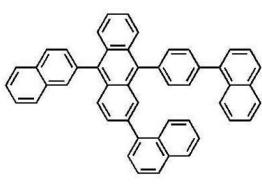
【化 1 1 - 2】



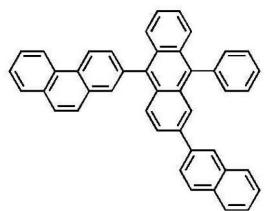
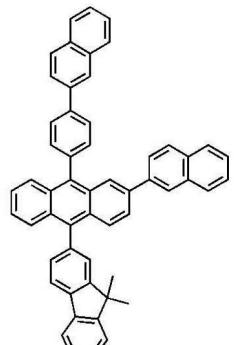
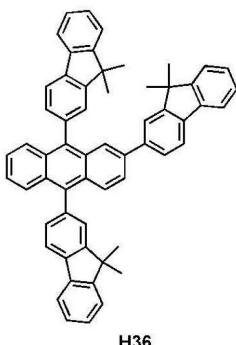
10



20



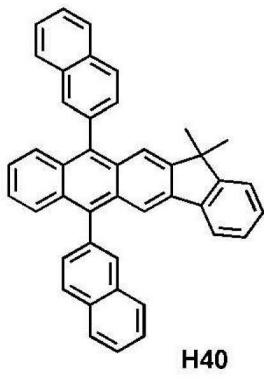
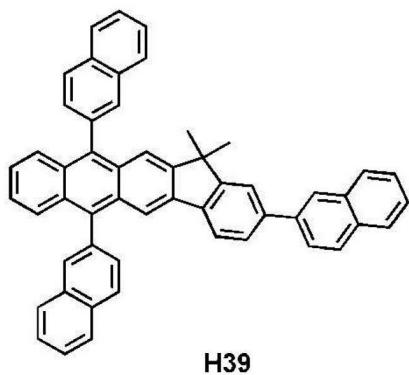
30



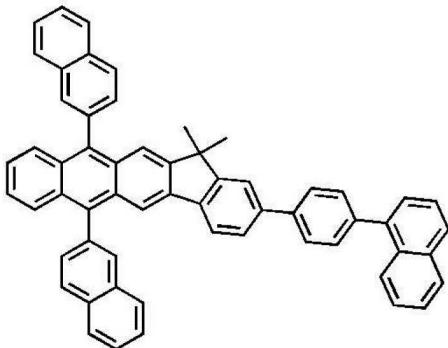
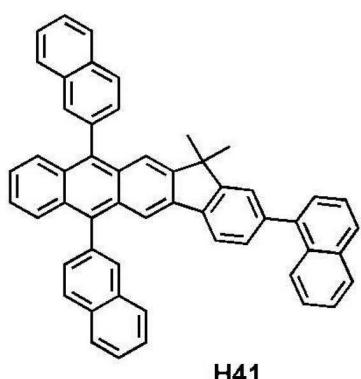
40

【 0 1 5 6 】

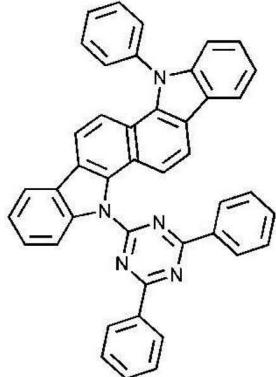
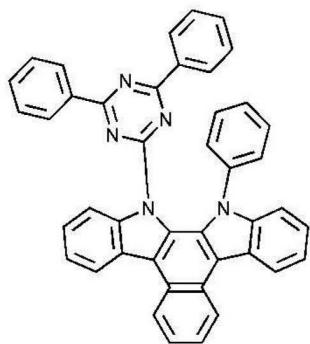
【化 1 1 - 3】



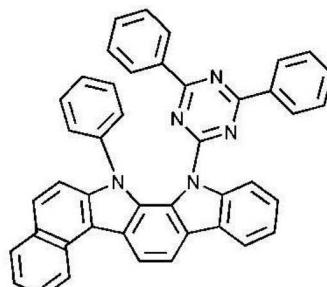
10



20

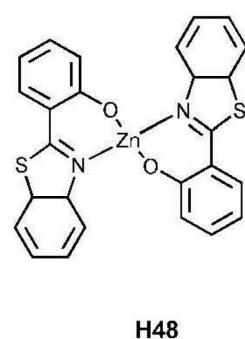
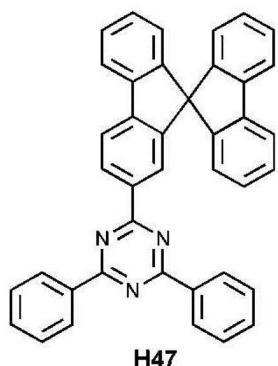
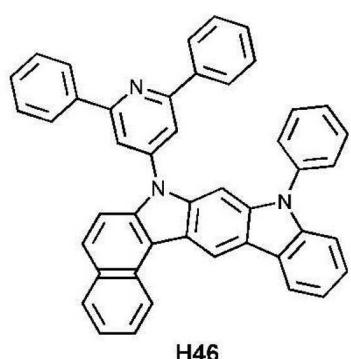


30

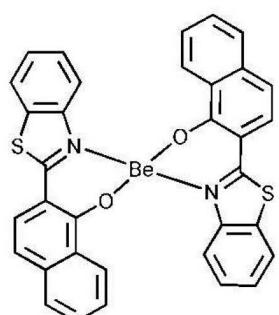


【0 1 5 7】

【化 1 1 - 4】



10



20

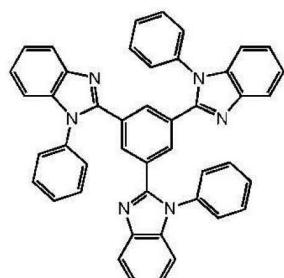
H49

【0 1 5 8】

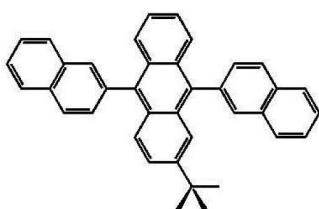
または前記ホストは、下記化合物のうち一つを含んでもよいが、それらに限定されるものではない：

【0 1 5 9】

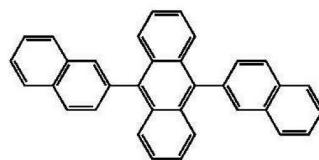
【化12】



TPBi

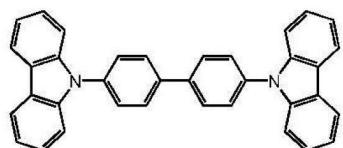


TBADN

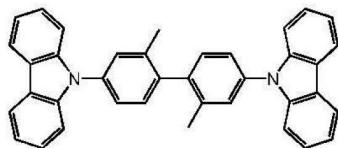


ADN

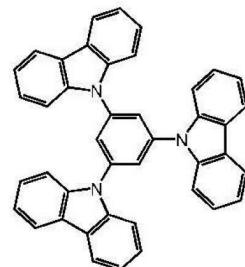
10



CBP

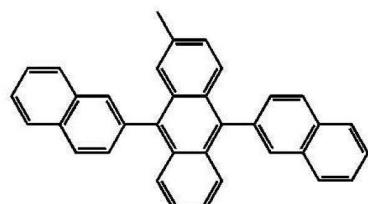


CDBP



TCP

20



MADN

【0160】

前記ドーパントは、リン光ドーパントであってもよい。

30

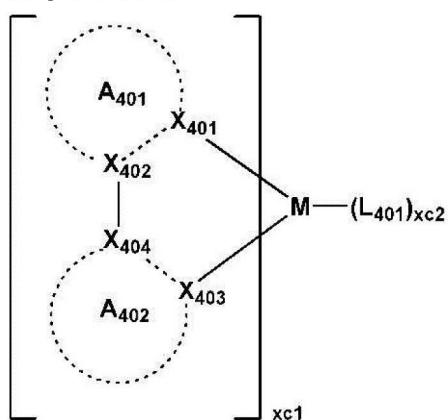
【0161】

前記リン光ドーパントは、下記化学式401で表される有機金属錯体を含んでもよい：

【0162】

【化13】

化学式401



40

【0163】

前記化学式401で、

Mは、イリジウム(Ir)、白金(Pt)、オスミウム(Os)、チタン(Ti)、ジルコニウム(Zr)、ハフニウム(Hf)、ユウロピウム(Eu)、テルビウム(Tb)

50

およびツリウム (Tm) からなる群より選択され、

$X_{4\ 0\ 1} \sim X_{4\ 0\ 4}$ は、互いに独立して、窒素原子または炭素原子であり、

$A_{4\ 0\ 1}$ 環および $A_{4\ 0\ 2}$ 環は、互いに独立して、置換もしくは非置換のベンゼン、置換もしくは非置換のナフタレン、置換もしくは非置換のフルオレン、置換もしくは非置換のスピロ - フルオレン、置換もしくは非置換のインデン、置換もしくは非置換のピロール、置換もしくは非置換のチオフェン、置換もしくは非置換のフラン (furan)、置換もしくは非置換のイミダゾール、置換もしくは非置換のピラゾール、置換もしくは非置換のチアゾール、置換もしくは非置換のイソチアゾール、置換もしくは非置換のオキサゾール、置換もしくは非置換のピリジン、置換もしくは非置換のピラジン、置換もしくは非置換のピリミジン、置換もしくは非置換のピリダジン、置換もしくは非置換のキノリン、置換もしくは非置換のイソキノリン、置換もしくは非置換のベンゾキノリン、置換もしくは非置換のカルバゾール、置換もしくは非置換のベンゾイミダゾール、置換もしくは非置換のベンゾフラン (benzofuran)、置換もしくは非置換のベンゾチオフェン、置換もしくは非置換のイソベンゾチオフェン、置換もしくは非置換のベンゾオキサゾール、置換もしくは非置換のイソベンゾオキサゾール、置換もしくは非置換のトリアゾール、置換もしくは非置換のオキサジアゾール、置換もしくは非置換のトリアジン、置換もしくは非置換のジベンゾフラン (dibenzofuran)、および置換もしくは非置換のジベンゾチオフェンからなる群より選択され。10

$L_{4\ 0\ 1}$ は、有機リガンドであり、

$x_{c\ 1}$ は、1 ~ 3 の整数であり、

$x_{c\ 2}$ は、0 ~ 3 の整数である。

【0164】

前記 $L_{4\ 0\ 1}$ は、任意の一価、二価または三価の有機リガンドであってもよい。例えば、 $L_{4\ 0\ 1}$ は、ハロゲンリガンド (例えば、Cl、F)、ジケトンリガンド (例えば、アセチルアセトネート、1,3-ジフェニル-1,3-プロパンジオネート、2,2,6,6-テトラメチル-3,5-ヘプタンジオネート、ヘキサフルオロアセトネート)、カルボン酸リガンド (例えば、ピコリネート、ジメチル-3-ピラゾールカルボキシレート、ベンゾエート)、カーボンモノオキサイドリガンド、イソニトリルリガンド、シアノリガンドおよび亜リン酸リガンド (例えば、ホスфин、ホスファイト) からなる群より選択されるが、それらに限定されるものではない。30

【0165】

前記化学式401中、 $A_{4\ 0\ 1}$ が2以上の置換基を有する場合、 $A_{4\ 0\ 1}$ の2以上の置換基を互いに結合し、飽和環または不飽和環を形成することができる。

【0166】

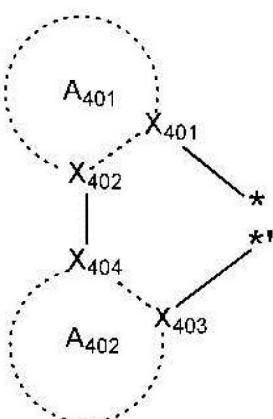
前記化学式401中、 $A_{4\ 0\ 2}$ が2以上の置換基を有する場合、 $A_{4\ 0\ 2}$ の2以上の置換基を互いに結合し、飽和環または不飽和環を形成することができる。

【0167】

前記化学式401中、 $x_{c\ 1}$ が2以上である場合、化学式401で、下記化学式で表されるリガンドは、互いに同一であっても、あるいは異なっていてもよい。40

【0168】

【化14】



10

【0169】

前記化学式401で、 x_{c1} が2以上である場合、 A_{401} および A_{402} は、それぞれ隣接する他のリガンドの A_{401} および A_{402} とそれぞれ直接、または連結基（例えば、 $C_1 - C_5$ アルキレン基、 $-N(R')$ -（ここで、 R' は、 $C_1 - C_{10}$ アルキル基または $C_6 - C_{20}$ アリール基である）、または $-C(=O)-$ ）を挟んで連結される。

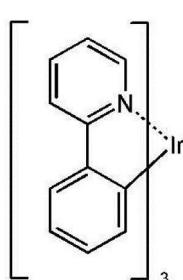
【0170】

前記リン光ドーパントは、例えば、下記化合物PD1～PD21、およびPD76からなる群より選択されるが、それらに限定されるものではない：

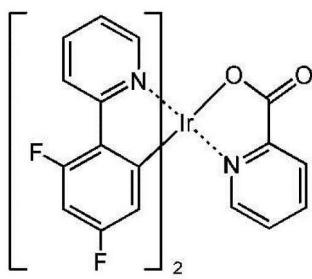
20

【0171】

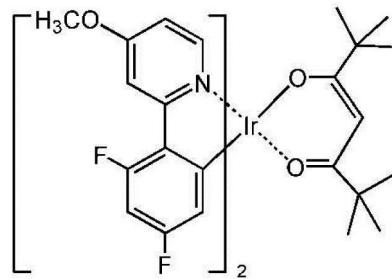
【化15-1】



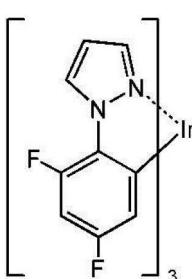
PD1



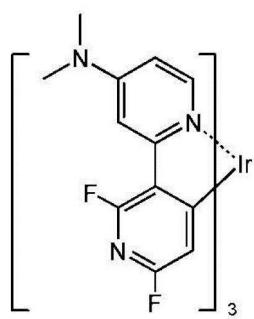
PD2



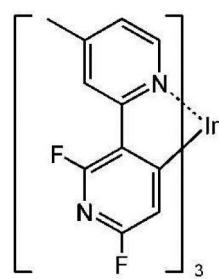
PD3



PD4



PD5



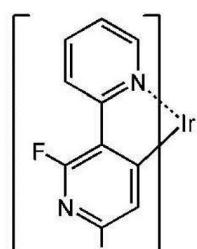
PD6

【0172】

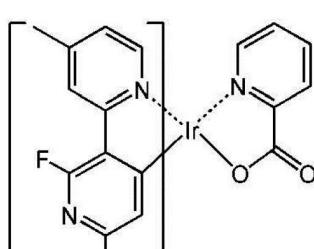
30

40

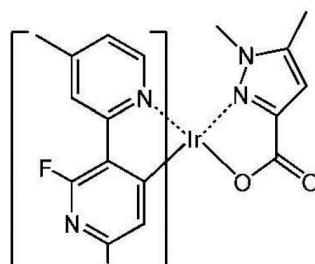
【化 1 5 - 2】



PD7

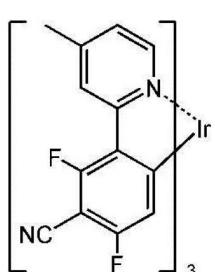


PD8

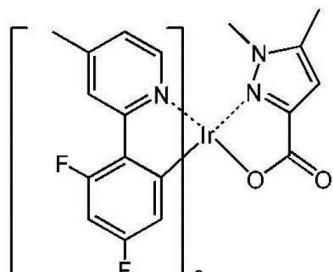


PD9

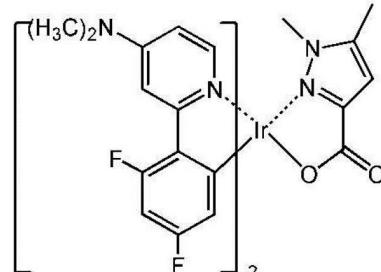
10



PD10

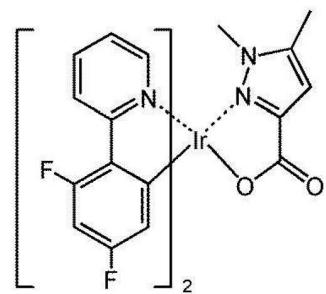


PD11

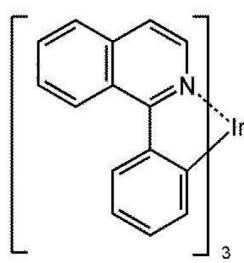


PD12

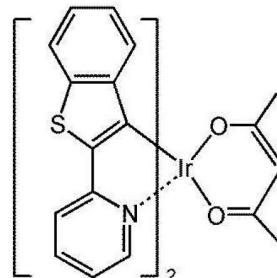
20

【0 1 7 3】
【化 1 5 - 3】

PD13

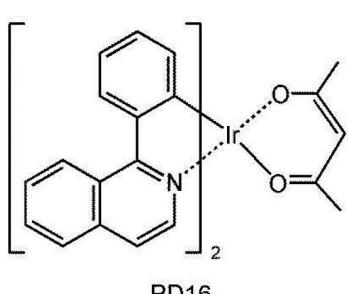


PD14

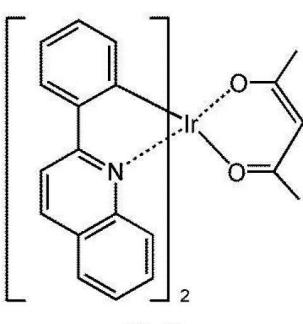


PD15

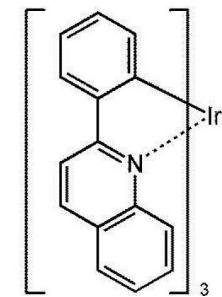
30



PD16



PD17

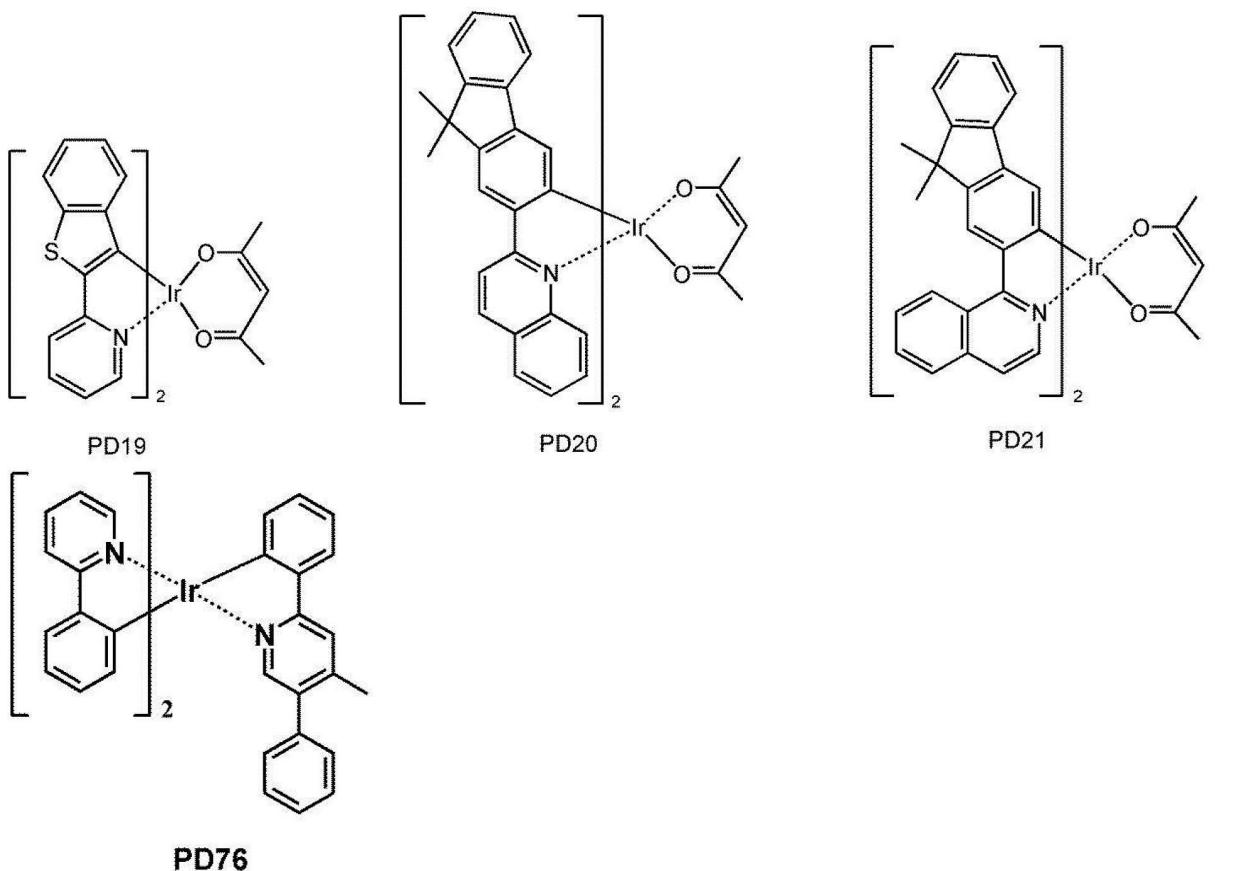


PD18

40

【0 1 7 4】

【化15-4】



【0175】

例えば、前記第2層が発光層であり、前記発光層が、前記第2化合物および前記ドーパントを含む場合、ドーパントの含量は、第2化合物100重量部に対して、0.01~15重量部、1~10重量部、または5~10重量部の範囲で選択されるが、それに限定されるものではない。

【0176】

他の例として、前記第2層が発光層であり、前記発光層が、前記ホストおよび前記第2化合物を含む場合、第2化合物の含量は、前記ホスト100重量部に対して、0.01~15重量部、1~10重量部、または5~10重量部の範囲で選択されるが、それに限定されるものではない。

【0177】

さらに他の例として、前記第3層が発光層であり、前記発光層が、前記ホストおよび前記第3化合物を含む場合、第3化合物の含量は、前記ホスト100重量部に対して、0.01~15重量部、1~10重量部、または5~10重量部の範囲で選択されるが、それに限定されるものではない。

【0178】

さらに他の例として、前記第3層が発光層であり、前記発光層が、前記ドーパントおよび前記第3化合物を含む場合、第3化合物の含量は、前記ホスト100重量部に対して、0.01~15重量部、1~10重量部、または5~10重量部の範囲で選択されるが、それに限定されるものではない。

【0179】

前記発光層の厚みは、好ましくは100~1,000、より好ましくは200~600、さらにより好ましくは300~500である。前記発光層の厚みが前述のような範囲を満足する場合、実質的に駆動電圧が上昇することなく、優秀な発光特性を示すことができる。

【0180】

10

20

30

40

50

図1には図示されていないが、前記第2層が発光層である場合、前記第2電極と前記第3層との間に、電子注入を容易にする電子注入層がさらに具備され、前記電子注入層は、真空蒸着法、スピンドローティング法、キャスト法、LB法、インクジェットプリンティング法、レーザープリンティング法、レーザ熱転写法(LITI)のような多様な方法を利用し、前記第3層上部に形成される。真空蒸着法およびスピンドローティング法によって電子注入層を形成する場合、電子注入層の蒸着条件およびコーティング条件は、前記正孔注入層の蒸着条件およびコーティング条件を参照する。

【0181】

前記電子注入層は、LiF、NaCl、CsF、Li₂O、BaOおよびLiQからなる群より選択された少なくとも一つを含んでもよい。

10

【0182】

前記電子注入層の厚みは、好ましくは1~100、より好ましくは3~90、さらにより好ましくは10~50である。前記電子注入層の厚みが前述のような範囲を満足する場合、実質的に駆動電圧が上昇することなく、満足すべき電子注入特性を得ることができる。

【0183】

他の実施形態によれば、前記第3層が発光層である場合、前記第3層と前記第2電極との間には、電子輸送層および電子注入層からなる群より選択された少なくとも1層がさらに具備される。電子注入層についての説明は、前述のところを参照する。

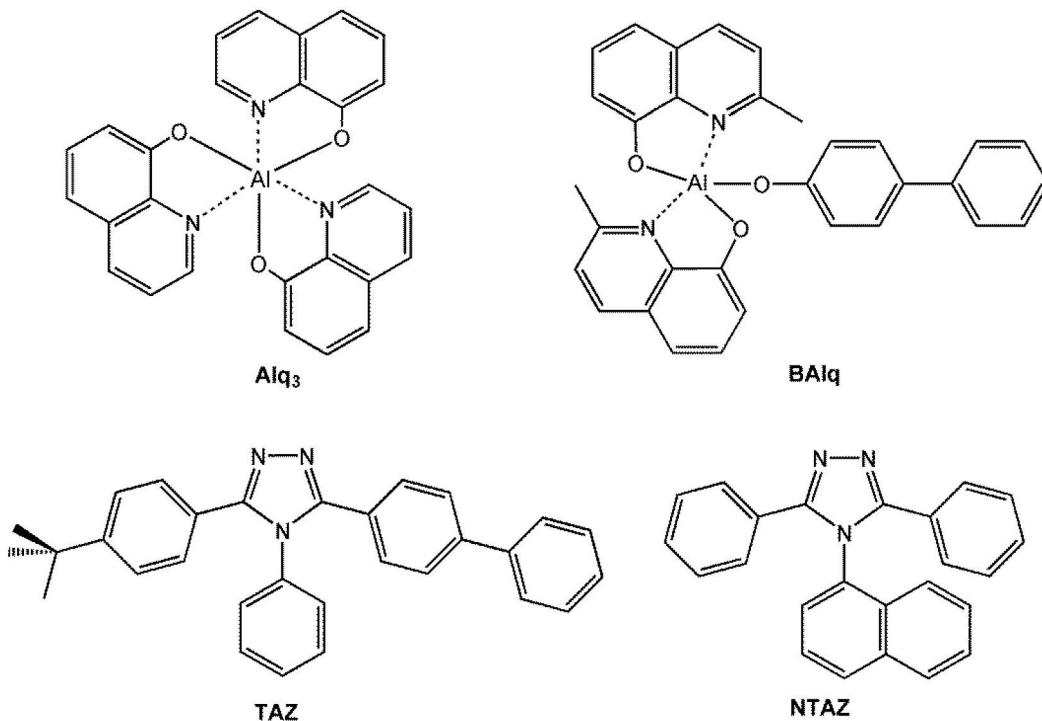
【0184】

20

前記電子輸送層は、前記BCP、Bphen、および下記Alq₃、BA1q、TAZおよびNTAZのうち少なくとも一つを含んでもよい。

【0185】

【化16】



【0186】

前記電子輸送層の厚みは、好ましくは100~1,000、より好ましくは150~500、さらにより好ましくは200~400である。前記電子輸送層の厚みが前述のような範囲を満足する場合、実質的に駆動電圧が上昇することなく、満足すべき電子輸送特性を得ることができる。また、前記第2層が発光層であり、前記第3層が電子輸送層であってもよい。

【0187】

40

50

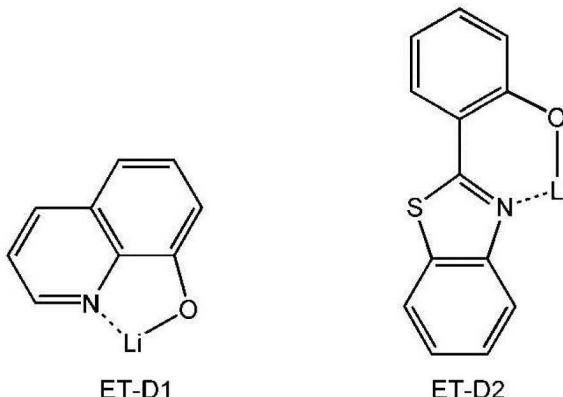
前記電子輸送層は、前述のような物質以外に、金属含有物質をさらに含んでもよい。

【0188】

前記金属含有物質は、Li錯体を含んでもよい。前記Li錯体は、例えば、下記化合物ET-D1(リチウムキノレート(LiQ))またはET-D2を含んでもよい。

【0189】

【化17】



10

【0190】

前記第2電極190は、電子注入電極であるカソードであってもよいが、このとき、前記第2電極190用物質としては、低い仕事関数を有する、金属、合金、電気伝導性化合物、およびそれらの混合物を使用することができる。第2電極190用物質の具体的な例としては、リチウム(Li)、マグネシウム(Mg)、アルミニウム(Al)、アルミニウム-リチウム(Al-Li)、カルシウム(Ca)、マグネシウム-インジウム(Mg-In)、マグネシウム-銀(Mg-Ag)などが含まれる。または、前記第2電極190用物質としては、ITOまたはIZOなどを使用することができる。前記第2電極190は、半透過型電極または透過型電極であってもよい。

20

【0191】

本明細書において、C₁-C₆アルキル基は、C₁-C₆線状または分枝状の脂肪族炭化水素一価基を意味し、具体的な例としては、メチル基、エチル基、プロピル基、イソブチル基、sec-ブチル基、tert-ブチル基、ペンチル基、iso-アミル基、ヘキシリル基などが含まれる。本明細書において、C₁-C₆アルキレン基は、前記C₁-C₆アルキル基と同一構造を有する二価基を意味する。

30

【0192】

本明細書において、C₁-C₆アルコキシ基は、-O_nA₁₀₁(ここで、A₁₀₁は、前記C₁-C₆アルキル基であり、具体的な例は上記のとおりである)の化学式を有する一価基を意味し、その具体的な例としては、メトキシ基、エトキシ基、イソプロピルオキシ基などが含まれる。

【0193】

本明細書において、C₂-C₆アルケニル基は、前記C₂-C₆アルキル基の中間に末端に、1以上の炭素二重結合を含んだ炭化水素基を意味し、その具体的な例としては、エテニル基、プロペニル基、ブテニル基などが含まれる。本明細書において、C₂-C₆アルケニレン基は、前記C₂-C₆アルケニル基と同一構造を有する二価基を意味する。

40

【0194】

本明細書において、C₂-C₆アルキニル基は、前記C₂-C₆アルキル基の中間に末端に、1以上の炭素三重結合を含んだ炭化水素基を意味し、その具体的な例としては、エチニル基(ethynyl)、プロピニル基(propynyl)などが含まれる。本明細書において、C₂-C₆アルキニレン基は、前記C₂-C₆アルキニル基と同一構造を有する二価基を意味する。

【0195】

50

本明細書において、 $C_3 - C_{10}$ シクロアルキル基は、 $C_3 - C_{10}$ 一価飽和炭化水素单環式基を意味し、その具体例としては、シクロプロピル基、シクロブチル基、シクロペニチル基、シクロヘキシリ基、シクロヘプチル基などを含む。本明細書において、 $C_3 - C_{10}$ シクロアルキレン基は、前記 $C_3 - C_{10}$ シクロアルキル基と同一構造を有する二価基を意味する。

【0196】

本明細書において、 $C_1 - C_{10}$ ヘテロシクロアルキル基は、N、O、PおよびSからなる群より選択された少なくとも1つのヘテロ原子を環形成原子として含んだ $C_1 - C_{10}$ 一価单環式基を意味し、その具体例としては、テトラヒドロフラニル基(tetrahydrofuranyl)、テトラヒドロチオフェニル基などを含む。本明細書において、 $C_1 - C_{10}$ ヘテロシクロアルキレン基は、前記 $C_1 - C_{10}$ ヘテロシクロアルキル基と同一構造を有する二価基を意味する。10

【0197】

本明細書において、 $C_3 - C_{10}$ シクロアルケニル基は、 $C_3 - C_{10}$ 一価单環式基であり、環内に少なくとも1つの二重結合を有するが、芳香族性(aromaticity)を有さない基を意味し、その具体例としては、シクロペンテニル基、シクロヘキセニル基、シクロヘプテニル基などを含む。本明細書において、 $C_3 - C_{10}$ シクロアルケニレン基は、前記 $C_3 - C_{10}$ シクロアルケニル基と同一構造を有する二価基を意味する。

【0198】

本明細書において、 $C_1 - C_{10}$ ヘテロシクロアルケニル基は、N、O、PおよびSからなる群より選択された少なくとも1つのヘテロ原子を環形成原子として含んだ $C_1 - C_{10}$ 一価单環式基であり、環内に少なくとも1つの二重結合を有する。前記 $C_1 - C_{10}$ ヘテロシクロアルケニル基の具体例としては、2、3-ヒドロフラニル基、2、3-ヒドロチオフェニル基などを含む。本明細書において、 $C_1 - C_{10}$ ヘテロシクロアルケニレン基は、前記 $C_1 - C_{10}$ ヘテロシクロアルケニル基と同一構造を有する二価基を意味する。20

【0199】

本明細書において、 $C_6 - C_{60}$ アリール基は、 $C_6 - C_{60}$ 炭素環芳香族系を有する一価基を意味し、 $C_6 - C_{60}$ アリーレン基は、 $C_6 - C_{60}$ 炭素環芳香族系を有する二価基を意味する。30

【0200】

前記 $C_6 - C_{60}$ 非縮合(non-condensed)アリーレン基は、2以上の環を有さない $C_6 - C_{60}$ 炭素環芳香族系を有する二価基を意味する。前記 $C_6 - C_{60}$ 縮合多環(condensed polycyclic)アリーレン基は、2以上の環を有する $C_6 - C_{60}$ 炭素環芳香族系を有する二価基を意味する。

【0201】

前記 $C_6 - C_{60}$ アリール基の具体例としては、フェニル基、ナフチル基、アントラセニル基、フェナントレニル基、ピレニル基、クリセニル基などを含む。

【0202】

前記 $C_6 - C_{60}$ 非縮合アリーレン基の具体例としては、フェニレン基などを含む。前記 $C_6 - C_{60}$ 縮合多環アリーレン基は、ナフチレン基、アントラセニレン基、フェナントレニレン基、ピレニレン基、クリセニレン基などを含む。40

【0203】

前記 $C_6 - C_{60}$ アリール基および $C_6 - C_{60}$ アリーレン基が2以上の環を含む場合、前記2以上の環は、互いに融合される。

【0204】

本明細書において、 $C_1 - C_{60}$ ヘテロアリール基は、N、O、PおよびSからなる群より選択された少なくとも1つのヘテロ原子を環形成原子として含み、 $C_1 - C_{60}$ 炭素環芳香族系を有する一価基を意味し、 $C_1 - C_{60}$ ヘテロアリーレン基は、N、O、PおよびSからなる群より選択された少なくとも1つのヘテロ原子を環形成原子として含み、50

$C_1 - C_{6,0}$ 炭素環芳香族系を有する二価基を意味する。

【0205】

前記 $C_1 - C_{6,0}$ 非縮合ヘテロアリーレン基は、N、O、PおよびSからなる群より選択された少なくとも1つのヘテロ原子を環形成原子として含み、2以上の環を有さない $C_1 - C_{6,0}$ 炭素環芳香族系を有する二価基を意味する。前記 $C_1 - C_{6,0}$ 縮合多環ヘテロアリーレン基は、N、O、PおよびSからなる群より選択された少なくとも1つのヘテロ原子を環形成原子として含み、2以上の環を有する $C_1 - C_{6,0}$ 炭素環芳香族系を有する二価基を意味する。

【0206】

前記 $C_1 - C_{6,0}$ ヘテロアリール基の具体例としては、ピリジニル基、ピリミジニル基、ピラジニル基、ピリダジニル基、トリアジニル基、キノリニル基、イソキノリニル基などを含む。

【0207】

前記 $C_1 - C_{6,0}$ 非縮合ヘテロアリーレン基の具体例としては、ピリジニレン基、ピリミジニレン基、ピラジニレン基、ピリダジニレン基、トリアジニレン基などを含む。前記 $C_1 - C_{6,0}$ 縮合多環ヘテロアリーレン基の具体例としては、キノリニレン基、イソキノリニレン基、キノキサリニレン基、フタラジニレン基などを含む。前記 $C_1 - C_{6,0}$ ヘテロアリール基および $C_1 - C_{6,0}$ ヘテロアリーレン基が2以上の環を含む場合、2以上の環は、互いに融合される。

【0208】

本明細書において、 $C_6 - C_{6,0}$ アリールオキシ基は、-O $A_{1,0,2}$ （ここで、 $A_{1,0,2}$ は、前記 $C_6 - C_{6,0}$ アリール基である）を示し、前記 $C_6 - C_{6,0}$ アリールチオ基（arylthio）は、-S $A_{1,0,3}$ （ここで、 $A_{1,0,3}$ は、前記 $C_6 - C_{6,0}$ アリール基である）を示す。

【0209】

本明細書において、一価の非芳香族縮合多環基は、2以上の環が互いに縮合されており、環形成原子として炭素のみを含み、分子全体が非芳香族性（non-aromaticity）を有する一価基（例えば、 $C_8 - C_{6,0}$ ）を意味する。前記一価の非芳香族縮合多環基の具体例としては、フルオレニル基などを含む。本明細書において、二価の非芳香族縮合多環基は、前記一価の非芳香族縮合多環基と同一構造を有する二価基を意味する。

【0210】

本明細書において、一価の非芳香族ヘテロ縮合多環基（non-aromatic condensed heteropoly cyclic group）は、2以上の環が互いに縮合されており、環形成原子として炭素以外に、N、O、PおよびSからなる群より選択されたヘテロ原子を含み、分子全体が非芳香族性を有する一価基（例えば、 $C_2 - C_{6,0}$ ）を意味する。前記一価の非芳香族ヘテロ縮合多環基は、カルバゾリル基などを含む。本明細書において、二価の非芳香族ヘテロ縮合多環基は、前記一価の非芳香族ヘテロ縮合多環基と同一構造を有する二価基を意味する。

【0211】

本明細書において、置換された $C_3 - C_{1,0}$ シクロアルキレン基、置換された $C_1 - C_{1,0}$ ヘテロシクロアルキレン基、置換された $C_3 - C_{1,0}$ シクロアルケニレン基、置換された $C_1 - C_{1,0}$ ヘテロシクロアルケニレン基、置換された $C_6 - C_{6,0}$ アリーレン基、置換された $C_6 - C_{6,0}$ 非縮合アリーレン基、置換された $C_6 - C_{6,0}$ 縮合多環アリーレン基、置換された $C_1 - C_{6,0}$ ヘテロアリーレン基、置換された $C_1 - C_{6,0}$ 非縮合ヘテロアリーレン基、置換された $C_1 - C_{6,0}$ 縮合多環ヘテロアリーレン基、置換された二価非芳香族縮合多環基、置換された $C_1 - C_{6,0}$ アルキル基、置換された $C_2 - C_{6,0}$ アルケニル基、置換された $C_2 - C_{6,0}$ アルキニル基、置換された $C_1 - C_{6,0}$ アルコキシ基、置換された $C_3 - C_{1,0}$ シクロアルキル基、置換された $C_1 - C_{1,0}$ ヘテロシクロアルキル基、置換された $C_3 - C_{1,0}$ シクロアルケニル基、置換された $C_1 - C_{1,0}$ ヘテロシクロアルケニル基、置換された $C_6 - C_{6,0}$

10

20

30

40

50

アリール基、置換された $C_6 - C_{60}$ アリールオキシ基、置換された $C_6 - C_{60}$ アリールチオ基、置換された $C_1 - C_{60}$ ヘテロアリール基、置換された一価非芳香族縮合多環基、および置換された一価非芳香族へテロ縮合多環基のうち少なくとも一つは、

重水素、-F、-Cl、-Br、-I、ヒドロキシリル基、シアノ基、ニトロ基、アミノ基、アミジノ基、ヒドラジン基、ヒドラゾン基、カルボン酸基またはその塩、スルホン酸基またはその塩、リン酸基またはその塩、 $C_1 - C_{60}$ アルキル基、 $C_2 - C_{60}$ アルケニル基、 $C_2 - C_{60}$ アルキニル基、および $C_1 - C_{60}$ アルコキシ基；

重水素、-F、-Cl、-Br、-I、ヒドロキシリル基、シアノ基、ニトロ基、アミノ基、アミジノ基、ヒドラジン基、ヒドラゾン基、カルボン酸基またはその塩、スルホン酸基またはその塩、リン酸基またはその塩、 $C_3 - C_{10}$ シクロアルキル基、 $C_1 - C_{10}$ ヘテロシクロアルキル基、 $C_3 - C_{10}$ シクロアルケニル基、 $C_1 - C_{10}$ ヘテロシクロアルケニル基、 $C_6 - C_{60}$ アリール基、 $C_6 - C_{60}$ アリールオキシ基、 $C_6 - C_{60}$ アリールチオ基、 $C_1 - C_{60}$ ヘテロアリール基、一価非芳香族縮合多環基、一価非芳香族へテロ縮合多環基、および Si (Q₁₃) (Q₁₄) (Q₁₅) からなる群より選択された少なくとも一つで置換された、 $C_1 - C_{60}$ アルキル基、 $C_2 - C_{60}$ アルケニル基、 $C_2 - C_{60}$ アルキニル基および $C_1 - C_{60}$ アルコキシ基；

$C_3 - C_{10}$ シクロアルキル基、 $C_1 - C_{10}$ ヘテロシクロアルキル基、 $C_3 - C_{10}$ シクロアルケニル基、 $C_1 - C_{10}$ ヘテロシクロアルケニル基、 $C_6 - C_{60}$ アリール基、 $C_6 - C_{60}$ アリールオキシ基、 $C_6 - C_{60}$ アリールチオ基、 $C_1 - C_{60}$ ヘテロアリール基、一価非芳香族縮合多環基、一価非芳香族へテロ縮合多環基、ビフェニル基およびターフェニル基；

重水素、-F、-Cl、-Br、-I、ヒドロキシリル基、シアノ基、ニトロ基、アミノ基、アミジノ基、ヒドラジン基、ヒドラゾン基、カルボン酸基またはその塩、スルホン酸基またはその塩、リン酸基またはその塩、 $C_1 - C_{60}$ アルキル基、 $C_2 - C_{60}$ アルケニル基、 $C_2 - C_{60}$ アルキニル基、 $C_1 - C_{60}$ アルコキシ基、 $C_3 - C_{10}$ シクロアルキル基、 $C_1 - C_{10}$ ヘテロシクロアルキル基、 $C_3 - C_{10}$ シクロアルケニル基、 $C_1 - C_{10}$ ヘテロシクロアルケニル基、 $C_6 - C_{60}$ アリール基、 $C_6 - C_{60}$ アリールオキシ基、 $C_6 - C_{60}$ アリールチオ基、 $C_1 - C_{60}$ ヘテロアリール基、一価非芳香族縮合多環基、一価非芳香族へテロ縮合多環基、ビフェニル基、ターフェニル基、および Si (Q₂₃) (Q₂₄) (Q₂₅) からなる群より選択された少なくとも一つで置換された、 $C_3 - C_{10}$ シクロアルキル基、 $C_1 - C_{10}$ ヘテロシクロアルキル基、 $C_3 - C_{10}$ シクロアルケニル基、 $C_1 - C_{10}$ ヘテロシクロアルケニル基、 $C_6 - C_{60}$ アリール基、 $C_6 - C_{60}$ アリールオキシ基、 $C_6 - C_{60}$ アリールチオ基、 $C_1 - C_{60}$ ヘテロアリール基、一価非芳香族縮合多環基および一価非芳香族へテロ縮合多環基；並びに

-Si (Q₃₃) (Q₃₄) (Q₃₅)；からなる群より選択され、

前記 Q₁₃ ~ Q₁₅、Q₂₃ ~ Q₂₅、および Q₃₃ ~ Q₃₅ は、互いに独立して、水素、重水素、-F、-Cl、-Br、-I、ヒドロキシリル基、シアノ基、ニトロ基、アミノ基、アミジノ基、ヒドラジン基、ヒドラゾン基、カルボン酸基またはその塩、スルホン酸基またはその塩、リン酸基またはその塩、 $C_1 - C_{60}$ アルキル基、 $C_2 - C_{60}$ アルケニル基、 $C_2 - C_{60}$ アルキニル基、 $C_1 - C_{60}$ アルコキシ基、 $C_3 - C_{10}$ シクロアルキル基、 $C_1 - C_{10}$ ヘテロシクロアルキル基、 $C_3 - C_{10}$ シクロアルケニル基、 $C_1 - C_{10}$ ヘテロシクロアルケニル基、 $C_6 - C_{60}$ アリール基、 $C_1 - C_{60}$ ヘテロアリール基、一価非芳香族縮合多環基、一価非芳香族へテロ縮合多環基、ビフェニル基、およびターフェニル基からなる群より選択される。

【0212】

例えば、前記置換された $C_3 - C_{10}$ シクロアルキレン基、置換された $C_1 - C_{10}$ ヘテロシクロアルキレン基、置換された $C_3 - C_{10}$ シクロアルケニレン基、置換された $C_1 - C_{10}$ ヘテロシクロアルケニレン基、置換された $C_6 - C_{60}$ アリーレン基、置換された $C_6 - C_{60}$ 非縮合アリーレン基、置換された $C_6 - C_{60}$ 縮合多環アリーレン基、置換された $C_1 - C_{60}$ ヘテロアリーレン基、置換された $C_1 - C_{60}$ 非縮合ヘテロアリ

10

20

30

40

50

ーレン基、置換されたC₁ - C₆基縮合多環ヘテロアリーレン基、置換された二価非芳香族縮合多環基、置換された二価非芳香族ヘテロ縮合多環基、置換されたC₁ - C₆アルキル基、置換されたC₂ - C₆アルケニル基、置換されたC₂ - C₆アルキニル基、置換されたC₁ - C₆アルコキシ基、置換されたC₃ - C₁シクロアルキル基、置換されたC₁ - C₁ヘテロシクロアルキル基、置換されたC₃ - C₁シクロアルケニル基、置換されたC₁ - C₁ヘテロシクロアルケニル基、置換されたC₆ - C₆アリール基、置換されたC₆ - C₆アリールオキシ基、置換されたC₆ - C₆アリールチオ基、置換されたC₁ - C₆ヘテロアリール基、置換された一価非芳香族縮合多環基、および置換された一価非芳香族ヘテロ縮合多環基のうち少なくとも一つは、

重水素、-F、-Cl、-Br、-I、ヒドロキシル基、シアノ基、ニトロ基、アミノ基、アミジノ基、ヒドラジン基、ヒドラゾン基、カルボン酸基またはその塩、スルホン酸基またはその塩、リン酸基またはその塩、C₁ - C₆アルキル基、C₂ - C₆アルケニル基、C₂ - C₆アルキニル基、およびC₁ - C₆アルコキシ基；

重水素、-F、-Cl、-Br、-I、ヒドロキシル基、シアノ基、ニトロ基、アミノ基、アミジノ基、ヒドラジン基、ヒドラゾン基、カルボン酸基またはその塩、スルホン酸基またはその塩、リン酸基またはその塩、シクロペンチル基、シクロヘキシル基、シクロヘプチル基、シクロペンテニル基、シクロヘキセニル基、フェニル基、ビフェニル基、ターフェニル基、ペントラニル基、インデニル基、ナフチル基、アズレニル基、ヘプタニル基、インダセニル基、アセナフチル基、フルオレニル基、スピロ-フルオレニル基、ベンゾフルオレニル基、ジベンゾフルオレニル基、フェナレニル基、フェナントレニル基、アントラセニル基、フルオランテニル基、トリフェニレニル基、ピレニル基、クリセニル基、ナフタセニル基、ピセニル基、ペリレニル基、ペントラフェニル基、ヘキサセニル基、ペントセニル基、ルビセニル基、コロネニル基、オバレニル基、ピロリル基、チオフェニル基、フラニル基、イミダゾリル基、ピラゾリル基、チアゾリル基、イソチアゾリル基、オキサゾリル基、イソキサゾリル基、ピリジニル基、ピラジニル基、ピリミジニル基、ピリダジニル基、イソインドリル基、インドリル基、インダゾリル基、ブリニル基、キノリニル基、イソキノリニル基、ベンゾキノリニル基、フタラジニル基、ナフチリジニル基、キノキサリニル基、キナゾリニル基、シンノリニル基、カルバゾリル基、フェナントリジニル基、アクリジニル基、フェナントロリニル基、フェナジニル基、ベンゾイミダゾリル基、ベンゾフラニル基、ベンゾチオフェニル基、イソベンゾチアゾリル基、ベンゾオキサゾリル基、イソベンゾオキサゾリル基、トリアゾリル基、テトラゾリル基、オキサジアゾリル基、トリアジニル基、ジベンゾフラニル基、ジベンゾチオフェニル基、ベンゾカルバゾリル基、ジベンゾカルバゾリル基、チアジアゾリル基、イミダゾピリジニル基、イミダゾピリミジニル基、およびSi(Q₁₃)(Q₁₄)(Q₁₅)からなる群より選択された少なくとも一つで置換された、C₁ - C₆アルキル基、C₂ - C₆アルケニル基、C₂ - C₆アルキニル基およびC₁ - C₆アルコキシ基；

シクロペンチル基、シクロヘキシル基、シクロヘプチル基、シクロペンテニル基、シクロヘキセニル基、フェニル基、ビフェニル基、ターフェニル基、ペントラニル基、インデニル基、ナフチル基、アズレニル基、ヘプタニル基、インダセニル基、アセナフチル基、フルオレニル基、スピロ-フルオレニル基、ベンゾフルオレニル基、ジベンゾフルオレニル基、フェナレニル基、フェナントレニル基、アントラセニル基、フルオランテニル基、トリフェニレニル基、ピレニル基、クリセニル基、ナフタセニル基、ピセニル基、ペリレニル基、ペントラフェニル基、ヘキサセニル基、ルビセニル基、コロネニル基、オバレニル基、ピロリル基、チオフェニル基、フラニル基、イミダゾリル基、ピラゾリル基、チアゾリル基、イソチアゾリル基、オキサゾリル基、イソキサゾリル基、ピリジニル基、ピラジニル基、ピリミジニル基、ピリダジニル基、イソインドリル基、インドリル基、インダゾリル基、ブリニル基、キノリニル基、イソキノリニル基、ベンゾキノリニル基、フタラジニル基、ナフチリジニル基、キノキサリニル基、キナゾリニル基、シンノリニル基、カルバゾリル基、フェナントリジニル基、アクリジニル基、フェナントロリニル基、フェナジニル基、ベンゾフラニル基、ベンゾチオフェニル基、ベンゾイミダゾリル基、ベンゾフラニル基、ベンゾチオフェニル基、

10

20

30

40

50

ニル基、イソベンゾチアゾリル基、ベンゾオキサゾリル基、イソベンゾオキサゾリル基、トリアゾリル基、テトラゾリル基、オキサジアゾリル基、トリアジニル基、ジベンゾフラニル基、ジベンゾチオフェニル基、ベンゾカルバゾリル基、ジベンゾカルバゾリル基、チアジアゾリル基、イミダゾピリジニル基およびイミダゾピリミジニル基；

重水素、-F、-C₁、-Br、-I、ヒドロキシル基、シアノ基、ニトロ基、アミノ基、アミジノ基、ヒドラジン基、ヒドラゾン基、カルボン酸基またはその塩、スルホン酸基またはその塩、リン酸基またはその塩、C₁ - C₆アルキル基、C₂ - C₆アルケニル基、C₂ - C₆アルキニル基、C₁ - C₆アルコキシ基、シクロペンチル基、シクロヘキシル基、シクロヘプチル基、シクロペンテニル基、シクロヘキセニル基、フェニル基、ビフェニル基、ターフェニル基、ペントラニル基、インデニル基、ナフチル基、アズレニル基、ヘプタニル基、インダセニル基、アセナフチル基、フルオレニル基、スピロ-フルオレニル基、ベンゾフルオレニル基、ジベンゾフルオレニル基、フェナレニル基、フェナントレニル基、アントラセニル基、フルオランテニル基、トリフェニレニル基、ピレニル基、クリセニル基、ナフタセニル基、ピセニル基、ペリレニル基、ペントラフェニル基、ヘキサセニル基、ペントラセニル基、ルビセニル基、コロネニル基、オバレニル基、ピロリル基、チオフェニル基、フラニル基、イミダゾリル基、ピラゾリル基、チアゾリル基、イソチアゾリル基、オキサゾリル基、イソキサゾリル基、ピリジニル基、ピラジニル基、ピリミジニル基、ピリダジニル基、イソインドリル基、インドリル基、インダゾリル基、ブリニル基、キノリニル基、イソキノリニル基、ベンゾキノリニル基、フタラジニル基、ナフチリジニル基、キノキサリニル基、キナゾリニル基、シンノリニル基、カルバゾリル基、フェナントリジニル基、アクリジニル基、フェナントロリニル基、フェナジニル基、ベンゾイミダゾリル基、ベンゾフラニル基、ベンゾチオフェニル基、イソベンゾチアゾリル基、ベンゾオキサゾリル基、イソベンゾオキサゾリル基、トリアゾリル基、テトラゾリル基、オキサジアゾリル基、トリアジニル基、ジベンゾフラニル基、ジベンゾチオフェニル基、ベンゾカルバゾリル基、ジベンゾカルバゾリル基、チアジアゾリル基、イミダゾピリジニル基、イミダゾピリミジニル基、およびSi(Q₂₃)(Q₂₄)(Q₂₅)からなる群より選択された少なくとも一つで置換された、シクロペンチル基、シクロヘキシル基、シクロヘプチル基、シクロペンテニル基、シクロヘキセニル基、フェニル基、ビフェニル基、ターフェニル基、ペントラニル基、インデニル基、ナフチル基、アズレニル基、ヘプタニル基、インダセニル基、アセナフチル基、フルオレニル基、スピロ-フルオレニル基、ベンゾフルオレニル基、ジベンゾフルオレニル基、フェナレニル基、フェナントレニル基、アントラセニル基、フルオランテニル基、トリフェニレニル基、ピレニル基、クリセニル基、ナフタセニル基、ピセニル基、ペリレニル基、ペントラフェニル基、ヘキサセニル基、ペントラセニル基、ルビセニル基、コロネニル基、オバレニル基、ピロリル基、チオフェニル基、フラニル基、イミダゾリル基、ピラゾリル基、チアゾリル基、イソチアゾリル基、オキサゾリル基、イソキサゾリル基、ピリジニル基、ピラジニル基、ピリミジニル基、ピリダジニル基、イソインドリル基、インドリル基、インダゾリル基、ブリニル基、キノリニル基、イソキノリニル基、ベンゾキノリニル基、フタラジニル基、ナフチリジニル基、キノキサリニル基、キナゾリニル基、シンノリニル基、カルバゾリル基、フェナントリジニル基、アクリジニル基、フェナントロリニル基、フェナジニル基、ベンゾイミダゾリル基、ベンゾフラニル基、ベンゾチオフェニル基、イソベンゾチアゾリル基、ベンゾオキサゾリル基、イソベンゾオキサゾリル基、トリアゾリル基、テトラゾリル基、オキサジアゾリル基、トリアジニル基、ジベンゾフラニル基、ジベンゾチオフェニル基、ベンゾカルバゾリル基、ジベンゾカルバゾリル基、チアジアゾリル基、イミダゾピリジニル基およびイミダゾピリミジニル基；並びに

-Si(Q₃₃)(Q₃₄)(Q₃₅)；からなる群より選択され、

前記Q₁₃ ~ Q₁₅、Q₂₃ ~ Q₂₅、およびQ₃₃ ~ Q₃₅は、互いに独立して、水素、重水素、-F、-C₁、-Br、-I、ヒドロキシル基、シアノ基、ニトロ基、アミノ基、アミジノ基、ヒドラジン基、ヒドラゾン基、カルボン酸基またはその塩、スルホン酸基またはその塩、リン酸基またはその塩、C₁ - C₆アルキル基、C₂ - C₆アル

ケニル基、C₂ - C₆アルキニル基、C₁ - C₆アルコキシ基、シクロペンチル基、シクロヘキシル基、シクロヘプチル基、シクロペンテニル基、シクロヘキセニル基、フェニル基、ビフェニル基、ターフェニル基、ペントレニル基、インデニル基、ナフチル基、アズレニル基、ヘプタレニル基、インダセニル基、アセナフチル基、フルオレニル基、スピロ - フルオレニル基、ベンゾフルオレニル基、ジベンゾフルオレニル基、フェナレニル基、フェナントレニル基、アントラセニル基、フルオランテニル基、トリフェニレニル基、ピレニル基、クリセニル基、ナフタセニル基、ピセニル基、ペリレニル基、ペントフェニル基、ヘキサセニル基、ペントセニル基、ルビセニル基、コロネニル基、オバレニル基、ピロリル基、チオフェニル基、フラニル基、イミダゾリル基、ピラゾリル基、チアゾリル基、イソチアゾリル基、オキサゾリル基、イソキサゾリル基、ピリジニル基、ピラジニル基、ピリミジニル基、ピリダジニル基、イソインドリル基、インドリル基、インダゾリル基、ブリニル基、キノリニル基、イソキノリニル基、ベンゾキノリニル基、フタラジニル基、ナフチリジニル基、キノキサリニル基、キナゾリニル基、シンノリニル基、カルバゾリル基、フェナントリジニル基、アクリジニル基、フェナントロリニル基、フェナジニル基、ベンゾイミダゾリル基、ベンゾフラニル基、ベンゾチオフェニル基、イソベンゾチアゾリル基、ベンゾオキサゾリル基、イソベンゾオキサゾリル基、トリアゾリル基、テトラゾリル基、オキサジアゾリル基、トリアジニル基、ジベンゾフラニル基、ジベンゾチオフェニル基、ベンゾカルバゾリル基、ジベンゾカルバゾリル基、チアジアゾリル基、イミダゾピリジニル基、およびイミダゾピリミジニル基からなる群より選択される。 10

【0213】

20

本明細書において、「Ph」は、フェニル基を意味し、「Me」は、メチル基を意味し、「Et」は、エチル基を意味し、「ter-Bu」または「But」は、tert-ブチル基を意味する。

【0214】

本明細書において、「ビフェニル基」は、2個のベンゼンが単結合で互いに連結されている一価基を意味し、「ターフェニル基」は、3個のベンゼンが単結合で互いに連結されている一価基を意味する。

【実施例】

【0215】

30

以下、合成例および実施例を挙げ、本発明の一具現例による有機発光素子について、さらに具体的に説明する。下記合成例において、「Aの代わりにBを使用した」という表現中、Aのモル当量とBのモル当量は、互いに同一である。

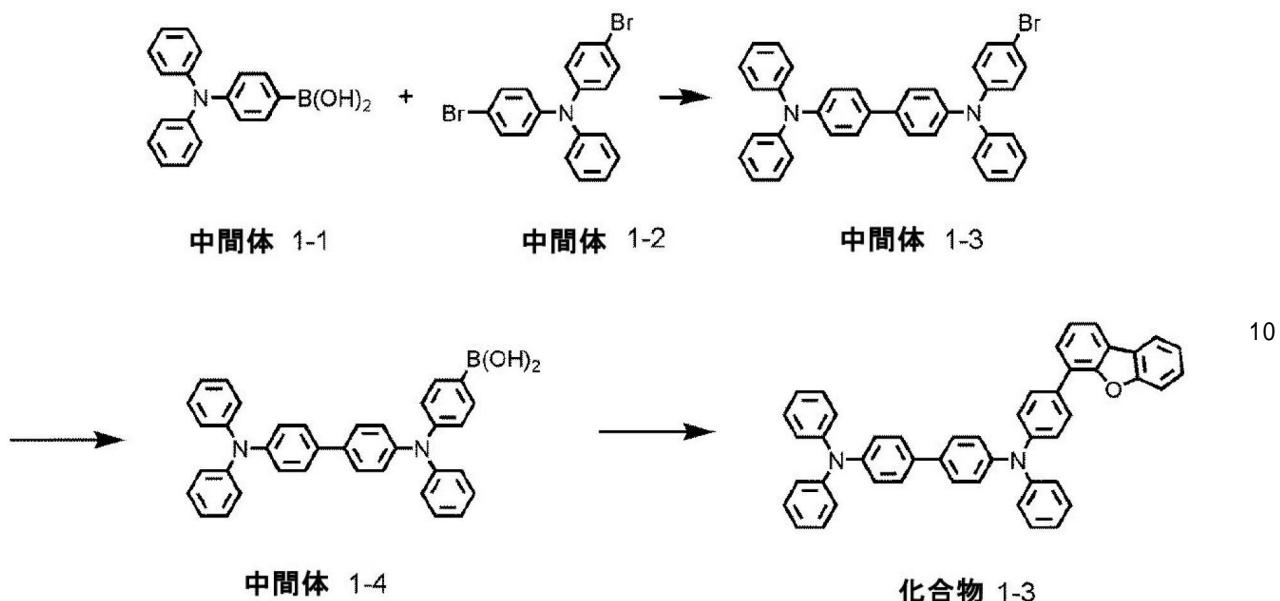
【0216】

<合成例>

[合成例1：化合物1 - 3の合成]

【0217】

【化 1 8】



【 0 2 1 8 】

(中間体 1 - 3 の合成)

中間体 1 - 1 0 . 0 4 m o l 、 中間体 1 - 2 0 . 0 4 m o l 、 テトラキス(トリフェニルホスフィン)パラジウム 2 m m o l 、 2 M K₂CO₃ 水溶液 2 0 mL 、 エタノール 2 0 mL およびトルエン 5 0 mL を混合した後、 1 2 0 ℃ に加熱させながら、 4 時間攪拌した。反応終了後、酢酸エチルと蒸留水とで抽出した後、有機層を無水硫酸マグネシウムで乾燥させて濾過して濾過液を減圧濃縮した。生成物をカラムクロマトグラフィで精製して中間体 1 - 3 を得た。

[0 2 1 9]

(中間体 1 - 4 の合成)

中間体1-3 0.03 molを入れ、テトラヒドロフラン(THF)100mLを入れて-78℃に冷却させた。2.5M n-ブチルリチウム0.07molを入れ、1時間後イソプロピルボレート0.07molを入れて17時間還流攪拌した。反応終了後、酢酸エチルと蒸留水とで抽出した後、有機層を無水硫酸マグネシウムで乾燥させて濾過し、濾過液を減圧濃縮し、中間体1-4を得た。

(0220)

(化合物 1 - 3 の合成)

中間体 1 - 4 0.02 mol、4-ブロモ-ジベンゾ[b , d]フラン 0.03 mol
 1, Pd (PPh₃)₄ 1 mmol、K₂CO₃ 0.04 mol およびトルエン 100 mL、EtOH 25 mL、H₂O₂ 5 mLを入れ、13時間還流攪拌した。反応終了後、ジクロロメタンと蒸留水とで抽出した後、有機層を無水硫酸マグネシウムで乾燥させて濾過して濾液を減圧濃縮した。生成物をカラムクロマトグラフィで精製し、化合物 1 - 3 を得た：

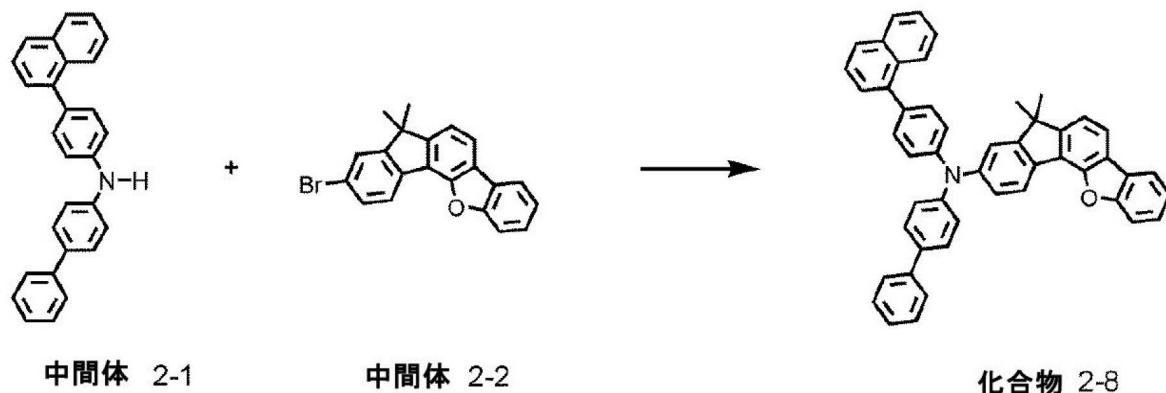
T₁ (化合物 1 - 3) = 2.2 eV。

【 0 2 2 1 】

[合成例 2 : 化合物 2 - 8 の合成]

〔 0 2 2 2 〕

【化19】



【0223】

(化合物2-8の合成)

中間体2-1 0.02 mol、中間体2-2 0.02 mol、ナトリウムt-ブトキシド0.06 mol、トリ-tert-ブチルホスフィン1 mmolをトルエン100 mlに溶解させ、Pd(dba)₂ 1 mmolを入れた後、窒素雰囲気下で12時間還流攪拌させる。反応終了後、トルエンと蒸留水とで抽出した後、有機層を無水硫酸マグネシウムで乾燥させて濾過して濾液を減圧濃縮した。生成物をカラムクロマトグラフィで精製し、化合物2-8を得た：

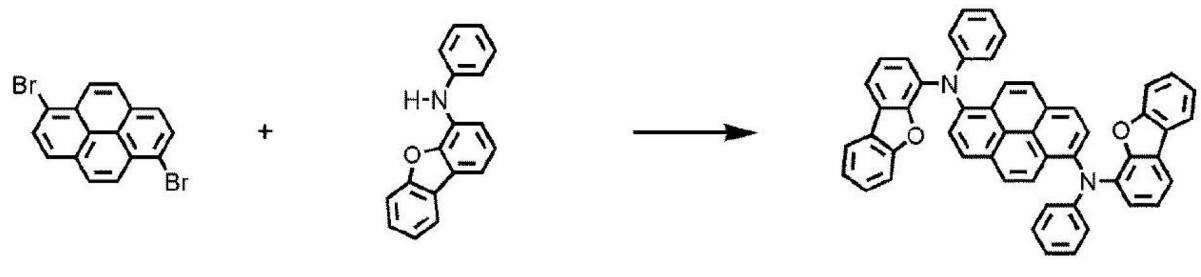
 T_1 (化合物2-8) = 2.6 eV。

【0224】

[合成例3：化合物3-1の合成]

【0225】

【化20】



【0226】

(化合物3-1の合成)

中間体3-1 0.05 mol、中間体3-2 0.02 mol、ナトリウムt-ブトキシド0.8 mol、トリ-tert-ブチルホスフィン1 mmolをトルエン100 mlに溶解させ、Pd(dba)₂ 2 mmolを入れた後、窒素雰囲気下で12時間還流攪拌させる。反応終了後、トルエンと蒸留水とで抽出した後、有機層を無水硫酸マグネシウムで乾燥させて濾過して濾液を減圧濃縮した。生成物をカラムクロマトグラフィで精製し、目的化合物3-1を得た：

 T_1 (化合物3-1) = 2.0 eV。

【0227】

[合成例4：化合物4-5の合成]

【0228】

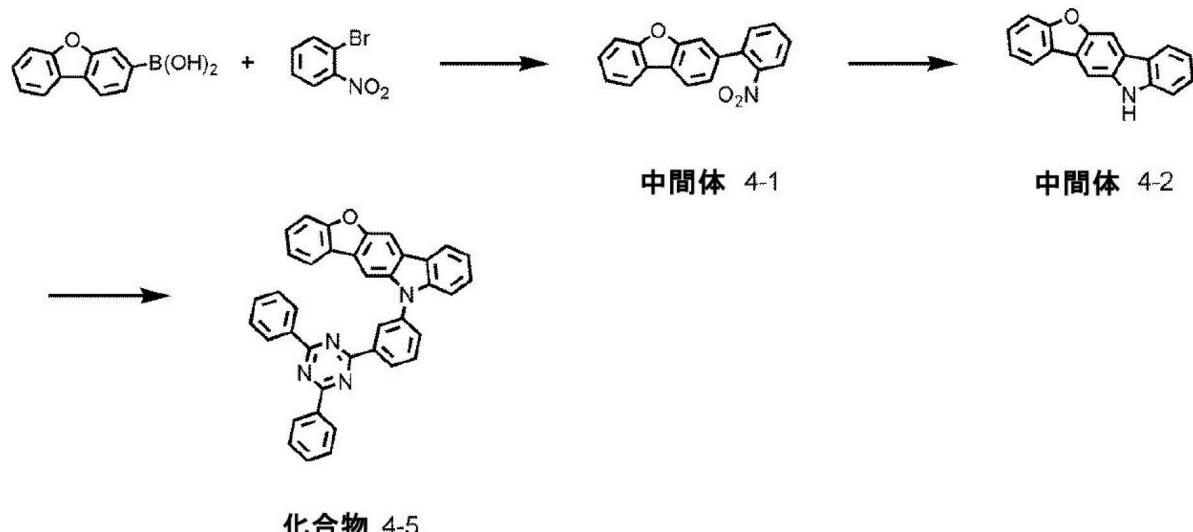
10

20

30

40

【化 2 1】



[0 2 2 9]

(中間体 4 - 1 の合成)

1 - ブロモ - 2 - ニトロベンゼン 0 . 0 2 m o l 、ジベンゾ [b , d] フラン - 3 - イルボロン酸 0 . 0 2 2 m o l 、テトラキス (トリフェニルホスフィン) パラジウム 1 m m o l 、2 M K₂CO₃ 水溶液 3 0 mL 、エタノール 3 0 mL およびトルエン 6 0 mL を混合した後 120 ℃ に加熱させながら 4 時間攪拌した。反応終了後、酢酸エチルと蒸留水とで抽出した後、有機層を無水硫酸マグネシウムで乾燥させて濾過して濾過液を減圧濃縮した。生成物をカラムクロマトグラフィで精製し、中間体 4 - 1 を得た。

【 0 2 3 0 】

(中間体 4 - 2 の合成)

中間体4-1 0.02 mol、トリエチルホスファイト60 mLおよび1,2-ジクロロベンゼン30 mLを混合した後、150℃に加熱して12時間攪拌した。反応終了後、蒸留(distillation)装置を利用して、未反応トリエチルホスファイトと1,2-ジクロロベンゼンとを除去した後、反応終了後、酢酸エチルと蒸留水とで抽出した後、有機層を無水硫酸マグネシウムで乾燥させて濾過して濾過液を減圧濃縮した。生成物をカラムクロマトグラフィで精製し、中間体4-2を得た。

【 0 2 3 1 】

(化合物 4 - 5 の合成)

N a H 4 mm o 1 をジメチルホルムアミドに溶解させて攪拌した。中間体 4 - 2 3 mm o 1 をジメチルホルムアミドに溶解させた後、攪拌させる N a H 溶液に添加し、1 時間攪拌した。2 - (3 - プロモフェニル) - 4 , 6 - ジフェニル - 1 , 3 , 5 - トリアジン 3 . 5 mm o 1 を D M F に溶解させた後で攪拌し、1 時間攪拌した反応物を添加して室温で 2 4 時間攪拌した。反応終了後、生成された固体を取り出した後、酢酸エチルで洗浄し、カラムクロマトグラフィで精製し、目的化合物 4 - 5 を得た：

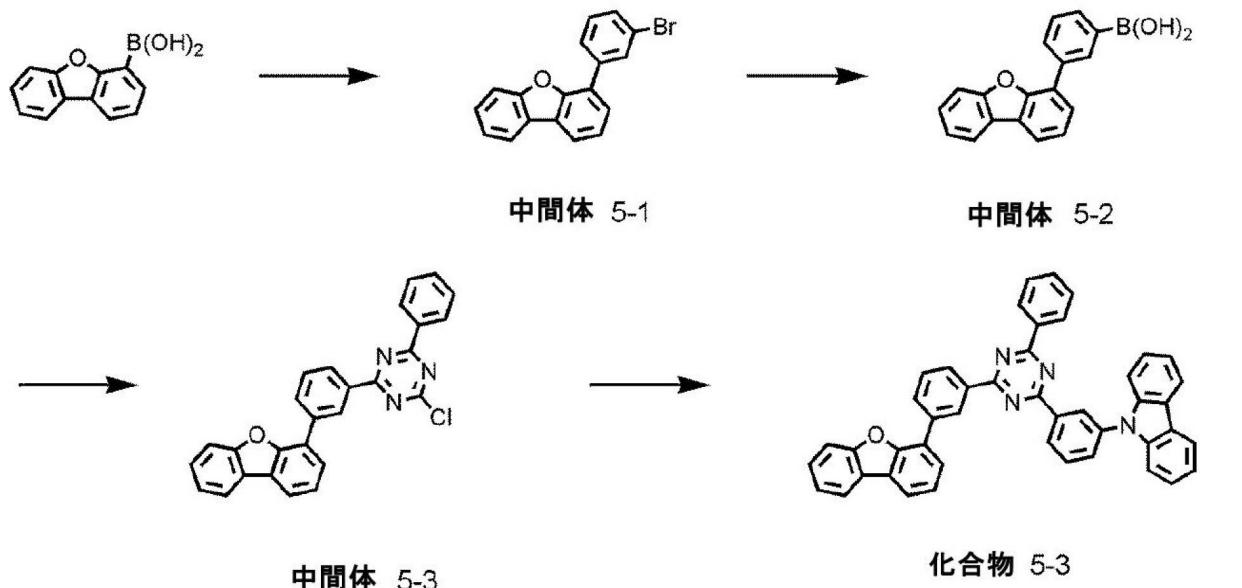
T_1 (化合物 4 - 5) = 2.5 eV。

【 0 2 3 2 】

[合成例 5 : 化合物 5 - 3 の合成]

【 0 2 3 3 】

【化 2 2】



【 0 2 3 4 】

(中間体 5 - 1 の合成)

250 mL 丸フラスコに、ジベンゾフラン-4-イルボロン酸 0.04 mol、1-ブロモ-3-ヨードベンゼン 0.05 mol、Pd(PPh₃)₄ 2 mmol、K₂CO₃ 0.08 mol、トルエン(100 mL)、EtOH(25 mL)およびH₂O(25 mL)を入れて4時間還流攪拌した。反応終了後、ジクロロメタンと蒸留水とで抽出した後、有機層を無水硫酸マグネシウムで乾燥させて濾過して濾液を減圧濃縮した。生成物をカラムクロマトグラフィで精製し、中間体 5-1を得た。

[0 2 3 5]

(中間体 5 - 2 の合成)

500 mL 丸フラスコに、中間体 5-1 0.03 mol を入れ、THF 100 mL を入れて -78℃ に冷却させた。2.5 M n-ブチルリチウム 0.05 mol を入れ、1 時間後、イソプロピルボレート 0.05 mol を入れて 17 時間還流攪拌した。反応終了後、酢酸エチルと蒸留水とで抽出した後、有機層を無水硫酸マグネシウムで乾燥させて濾過し、濾過液を減圧濃縮し、中間体 5-2 を得た。

(0236)

(中間体 5 - 3 の合成)

1 L 丸フラスコに中間体 5 - 2 0 . 0 2 mol、1 - フェニル - 3 , 5 - ジクロロピリミジン 0 . 0 3 mol、Pd(PPh₃)₄ 1 mmol、K₂CO₃ 0 . 0 4 mol 1、およびトルエン 1 0 0 mL、EtOH₂ 5 mL、H₂O₂ 5 mLを入れて 13 時間還流攪拌した。反応終了後、ジクロロメタンと蒸留水とで抽出した後、有機層を無水硫酸マグネシウムで乾燥させて濾過して濾過液を減圧濃縮した。生成物をカラムクロマトグラフィで精製し、中間体 5 - 3 を得た。

[0 2 3 7]

(化合物 5 - 3 の合成)

中間体 5 - 3 0 . 0 1 m o l 、 (3 - (9 - カルバゾール - 9 - イル) フェニル) ポロン酸 0 . 0 1 2 m o l 、 N a H 0 . 0 1 5 m o l およびジメチルホルムアミド 1 5 0 m L を添加した後、室温で 5 時間攪拌した。反応終了後、酢酸エチルと蒸留水とで抽出した後、有機層を無水硫酸マグネシウムで乾燥させて濾過して濾過液を減圧濃縮した。生成物をカラムクロマトグラフィで精製し、化合物 5 - 3 を得た：

T_1 (化合物 5 - 3) = 2.6 eV.

(0 2 3 8)

「寒施例 1 - 1 」

15 / cm² (1,200) 厚のITO層が形成されたITOガラス基板(コーニング(Corning)社製)を、50mm×50mm×0.5mmサイズに切り、イソプロピルアルコールと純水とを利用し、それぞれ15分間超音波洗浄した後、30分間紫外線を照射し、オゾンに露出させて洗浄し、真空蒸着装置に、前記ITOガラス基板(アノード)を設けた。

【0239】

前記ITOアノード基板の上部に化合物1-9を、1,200厚に真空蒸着し、正孔輸送層を形成した。次に、前記正孔輸送層上部に、化合物4-5(ホスト)およびPD17(ドーパント)を、重量比95:5で共蒸着し、300厚の発光層を形成した。

【0240】

次に、前記発光層上部に化合物5-3を蒸着し、100厚の第1電子輸送層を形成した後、前記第1電子輸送層上部に、BA1q(Bis(2-methyl-8-quinolinolato-N1,O8)-(1,1'-Biphenyl-4-olato)aluminum)を真空蒸着し、300厚の第2電子輸送層を形成した。前記第2電子輸送層上部にLiFを蒸着し、10厚の電子注入層を形成した。

【0241】

その後、前記電子注入層上部にAlを蒸着し、2,000のカソードを形成することにより、有機発光素子を作製した。

【0242】

[実施例1-2~1-5]

下記表1に記載された材料を使用したという点を除き、実施例1-1と同一の方法を使用して有機発光素子を作製した。

【0243】

[比較例1-1]

発光層の形成時、化合物4-5の代わりに、CBP(4,4'-N,N'-diphenyl-bazol-biphenyl)を使用したという点を除いては、実施例1-1と同一の方法を利用して有機発光素子を作製した。

【0244】

[比較例1-2]

第1電子輸送層を形成せず、発光層上部にBA1qを真空蒸着し、400厚の電子輸送層を形成したという点を除いては、実施例1-1と同一の方法を利用して有機発光素子を作製した。

【0245】

[実施例2-1]

15 / cm² (1,200) 厚のITO層が形成されたITOガラス基板(コーニング(Corning)社製)を、50mm×50mm×0.5mmサイズに切り、イソプロピルアルコールと純水とを利用し、それぞれ15分間超音波洗浄した後、30分間紫外線を照射し、オゾンに露出させて洗浄し、真空蒸着装置に前記ITOガラス基板(アノード)を設けた。

【0246】

前記ITOアノード基板上部に、化合物1-9を1,100厚に真空蒸着し、第1正孔輸送層を形成した。次に、前記第1正孔輸送層上部に、化合物2-8を100厚に真空蒸着し、第2正孔輸送層を形成した。前記第2正孔輸送層上部に、化合物4-5(ホスト)およびPD17(ドーパント)を、重量比95:5で共蒸着し、300厚の発光層を形成した。

【0247】

その後、前記発光層上部にBA1qを真空蒸着し、400厚の電子輸送層を形成した。前記電子輸送層上部にLiFを蒸着し、10厚の電子注入層を形成し、前記電子注入層上部にAlを蒸着し、2,000のカソードを形成することにより、有機発光素子を作製した。

10

20

30

40

50

【0248】

[実施例2-2～2-5]

下記表2に記載された材料を使用したという点を除いては、実施例2-1と同一の方法を使用して有機発光素子を作製した。

【0249】

[比較例2-1]

発光層の形成時、化合物4-5の代わりに、CBPを使用したという点を除いては、実施例2-1と同一の方法を使用して有機発光素子を作製した。

【0250】

[比較例2-2]

第2正孔輸送層の形成時、化合物2-8の代わりに、化合物HT3を使用したという点を除いては、実施例2-1と同一の方法を使用して有機発光素子を作製した。

【0251】

[比較例2-3]

第1正孔輸送層の形成時、化合物1-9の代わりに、N,N'-ジ-1-ナフチル-N,N'-ジフェニルベンジン(NPD)を使用し、第2正孔輸送層の形成時、化合物2-8の代わりに、化合物2-4を使用したという点を除いては、実施例2-1と同一の方法を使用して有機発光素子を作製した。

【0252】

[実施例3-1]

15 / cm² (1,200)厚のITO層が形成されたITOガラス基板(コーニング(Corning)社製)を、50mm×50mm×0.5mmサイズに切り、イソプロピルアルコールと純水とを利用し、それぞれ15分間超音波洗浄した後、30分間紫外線を照射し、オゾンに露出させて洗浄し、真空蒸着装置に、前記ITOガラス基板(アノード)を設けた。

【0253】

前記ITOアノード基板上部に化合物1-9を、1,200厚に真空蒸着し、正孔輸送層を形成した。次に、前記正孔輸送層上部に、化合物9,10-ジ(2-ナフチル)アントラセン(ADN)(ホスト)および化合物3-1(ドーパント)を、重量比95:5で共蒸着し、300厚の発光層を形成した。

【0254】

次に、前記発光層上部に化合物5-3を蒸着し、100厚の第1電子輸送層を形成した後、前記第1電子輸送層上部にAlq3を真空蒸着し、300厚の第2電子輸送層を形成した。前記第2電子輸送層上部にLiFを蒸着し、10厚の電子注入層を形成した。

【0255】

その後、前記電子注入層上部にAlを蒸着し、2,000のカソードを形成することにより、有機発光素子を作製した。

【0256】

[実施例3-2～3-5]

下記表3に記載された材料を使用したという点を除いては、実施例3-1と同一の方法を使用して有機発光素子を作製した。

【0257】

[比較例3-1]

発光層の形成時、化合物3-1の代わりに、FD1を使用したという点を除いては、実施例3-1と同一の方法を利用して有機発光素子を作製した。

【0258】

[比較例3-2]

第1電子輸送層を形成せず、発光層上部にAlq3を真空蒸着し、400厚の電子輸送層を形成したという点を除いては、実施例3-1と同一の方法を使用して有機発光素子

10

20

30

40

50

を作製した。

【0259】

[実施例4-1]

15 / cm² (1,200) 厚のITO層が形成されたITOガラス基板(コーニング(Corning)社製)を、50mm × 50mm × 0.5mm サイズに切り、イソプロピルアルコールと純水とを利用し、それぞれ15分間超音波洗浄した後、30分間紫外線を照射し、オゾンに露出させて洗浄し、真空蒸着装置に、前記ITOガラス基板(アノード)を設けた。

【0260】

前記ITOアノード基板上部に、化合物1-9を、1,100 厚に真空蒸着し、第1正孔輸送層を形成した。次に、前記第1正孔輸送層上部に、化合物2-8を100 厚に真空蒸着し、第2正孔輸送層を形成した。前記第2正孔輸送層上部に、ADNおよび化合物3-1(ドーパント)を、重量比95:5で共蒸着し、300 厚の発光層を形成した。

【0261】

その後、前記発光層上部にAlq3を真空蒸着し、400 厚の電子輸送層を形成した。前記電子輸送層上部にLiFを蒸着し、10 厚の電子注入層を形成し、前記電子注入層上部にAlを蒸着し、2,000 のカソードを形成することにより、有機発光素子を作製した。

【0262】

[実施例4-2~4-5]

下記表4に記載された材料を使用したという点を除いては、実施例4-1と同一の方法を使用して有機発光素子を作製した。

【0263】

[比較例4-1]

発光層の形成時、化合物3-1の代わりに、FD1を使用したという点を除いては、実施例4-1と同一の方法を利用して有機発光素子を作製した。

【0264】

[比較例4-2]

第2正孔輸送層の形成時、化合物2-8の代わりに、化合物HT3を使用したという点を除いては、実施例4-1と同一の方法を利用して有機発光素子を作製した。

【0265】

<評価例1>

前記実施例1-1~1-5、2-1~2-5、3-1~3-5、4-1~4-5、比較例1-1、1-2、2-1~2-3、3-1、3-2、4-1および4-2で作製された有機発光素子の効率およびT90寿命を、輝度計PR650を利用して測定し、その結果を表1~4に示した。T90寿命は、150nit 輝度条件下で測定した初期輝度を100%にするとき、輝度が90%まで低下するのにかかる時間を測定したものである。

【0266】

【表1】

(表1)

	第1層 (正孔輸送層) 材料	第2層 (発光層) 注入材料	第3層 (第1電子輸送層) 材料	効率 (cd/A)	寿命 (T90、hr)
実施例 1-1	1-9	4-5	5-3	22.1	126
実施例 1-2	1-9	4-10	5-4	22.8	139
実施例 1-3	1-3	4-5	5-3	21.7	151
実施例 1-4	1-3	4-11	5-8	20.9	140
実施例 1-5	1-7	4-11	5-6	22.5	163
比較例 1-1	1-9	CBP	5-3	16.2	58
比較例 1-2	1-9	4-5	-	12.7	65

【0267】

【表2】

(表2)

	第1層 (第1正孔輸送層) 材料	第2層 (第2正孔輸送層) 材料	第3層 (発光層) 木入材料	効率 (cd/A)	寿命 (T90、hr)
実施例 2-1	1-9	2-8	4-5	19.8	137
実施例 2-2	1-9	2-5	5-2	21.5	148
実施例 2-3	1-3	2-8	4-5	20.9	120
実施例 2-4	1-3	2-5	5-9	19.5	131
実施例 2-5	1-7	2-4	5-1	20.3	145
比較例 2-1	1-9	2-8	CBP	16.4	73
比較例 2-2	1-9	HT3	4-5	15.2	78
比較例 2-3	NPD	2-4	4-5	18.2	102

【0268】

【表3】

(表3)

	第1層 (正孔輸送層) 材料	第2層 (発光層) トーハント材料	第3層 (第1電子輸送層) 材料	効率 (cd/A)	寿命 (T90、hr)
実施例 3-1	1-9	3-1	5-3	5.8	55
実施例 3-2	1-9	3-2	5-4	5.4	61
実施例 3-3	1-3	3-1	5-3	5.3	51
実施例 3-4	1-3	3-2	5-8	5.7	70
実施例 3-5	1-7	3-1	5-6	5.9	82
比較例 3-1	1-9	FD1	5-3	4.9	33
比較例 3-2	1-9	3-1	-	4.4	29

【0269】

【表4】

(表4)

	(第1層 正孔輸送層) 材料	(第2層 正孔輸送層) 材料	第3層 (発光層) トーハン外材料	効率 (cd/A)	寿命 (T90、hr)
実施例 4-1	1-9	2-8	3-1	5.1	60
実施例 4-2	1-9	2-5	3-2	5.3	75
実施例 4-3	1-3	2-8	3-1	4.9	55
実施例 4-4	1-3	2-5	3-2	5.3	83
実施例 4-5	1-7	2-4	3-1	5.4	88
比較例 4-1	1-9	2-8	FD1	4.3	21
比較例 4-2	1-9	HT3	3-1	4.5	27

【0270】

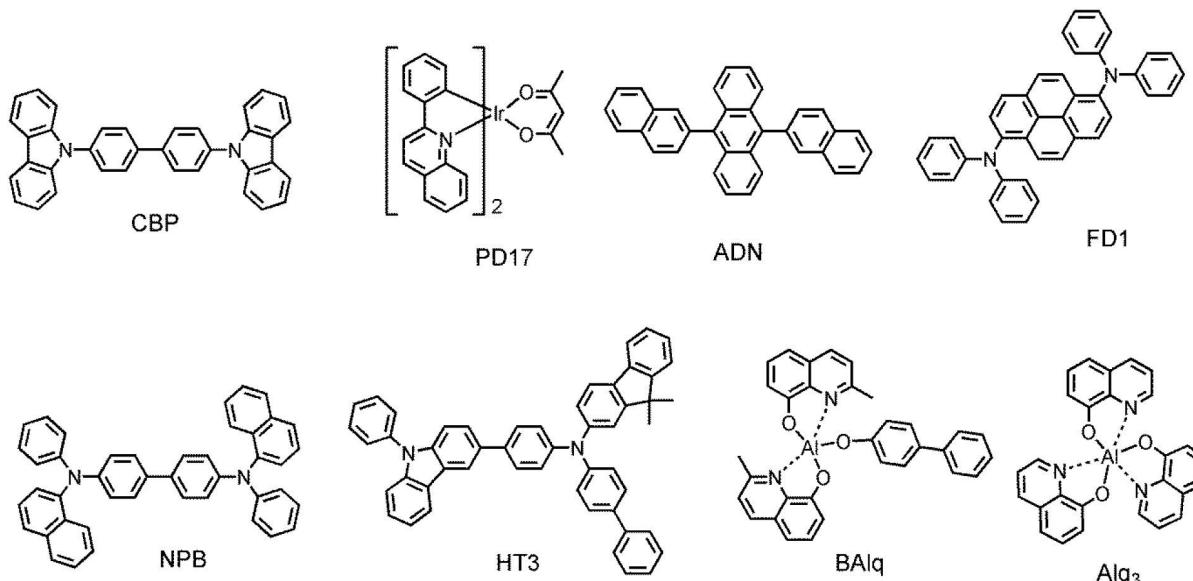
40

10

20

30

【化 2 3】



【0 2 7 1】

前記表1～4から、実施例1-1～1-5、2-1～2-5、3-1～3-5、および4-1～4-5で製造された有機発光素子の効率および寿命は、それぞれ比較例1-1、1-2、2-1～2-3、3-1、3-2、4-1および4-2で製造された有機発光素子の効率および寿命に比べ、優秀であるということを確認することができる。

10

【産業上の利用可能性】

【0 2 7 2】

本発明の有機発光素子は、例えば、発光関連の技術分野に効果的に適用可能である。

【符号の説明】

【0 2 7 3】

- | | |
|-------|--------|
| 1 0 | 有機発光素子 |
| 1 1 0 | 第1電極 |
| 1 3 0 | 第1層 |
| 1 5 0 | 第2層 |
| 1 7 0 | 第3層 |
| 1 9 0 | 第2電極 |

20

30

【図1】

10

190
170
150
130
110

フロントページの続き

(51)Int.Cl.

F I

C 0 9 K 11/06 6 9 0
 C 0 7 D 307/90
 C 0 7 D 491/048
 C 0 7 D 405/14

(72)発明者 金允善

大韓民国京畿道龍仁市器興区三星路1 三星ディスプレイ株式會社内

(72)発明者 申東雨

大韓民国京畿道龍仁市器興区三星路1 三星ディスプレイ株式會社内

(72)発明者 李廷渉

大韓民国京畿道龍仁市器興区三星路1 三星ディスプレイ株式會社内

(72)発明者 伊藤尚行

大韓民国京畿道龍仁市器興区三星路1 三星ディスプレイ株式會社内

(72)発明者 林珍娛

大韓民国京畿道龍仁市器興区三星路1 三星ディスプレイ株式會社内

審査官 倉本勝利

(56)参考文献 國際公開第2015/114102(WO,A1)

特開2011-139044(JP,A)
 特表2014-527067(JP,A)
 特開2015-063518(JP,A)
 國際公開第2014/044722(WO,A1)
 特開2014-080416(JP,A)
 特開2013-060411(JP,A)
 特開2014-208614(JP,A)
 特開2013-010730(JP,A)
 特開2012-140418(JP,A)
 國際公開第2017/022730(WO,A1)
 特表2018-524803(JP,A)
 特開2015-106661(JP,A)
 國際公開第2012/157211(WO,A1)
 特開2011-231108(JP,A)
 米国特許出願公開第2015/0207079(US,A1)
 米国特許出願公開第2015/0060796(US,A1)
 國際公開第2011/019156(WO,A1)

(58)調査した分野(Int.Cl., DB名)

H 01 L 27 / 32 ; H 05 B 33 / 00 - 33 / 28 ;
 H 01 L 51 / 50
 C A p l u s / R E G I S T R Y (S T N)