

【公報種別】特許法第17条の2の規定による補正の掲載

【部門区分】第3部門第2区分

【発行日】令和4年2月1日(2022.2.1)

【公開番号】特開2019-135228(P2019-135228A)

【公開日】令和1年8月15日(2019.8.15)

【年通号数】公開・登録公報2019-033

【出願番号】特願2019-10943(P2019-10943)

【国際特許分類】

C 07 C 211/54(2006.01)

10

H 01 L 51/50(2006.01)

C 07 F 7/10(2006.01)

C 07 D 209/88(2006.01)

C 07 D 333/76(2006.01)

C 07 D 307/91(2006.01)

C 07 C 209/10(2006.01)

C 07 C 209/68(2006.01)

【F I】

C 07 C 211/54 C S P

20

H 05 B 33/22 D

H 05 B 33/14 A

C 07 F 7/10 F

C 07 D 209/88

C 07 D 333/76

C 07 D 307/91

C 07 C 209/10

C 07 C 209/68

【手続補正書】

【提出日】令和4年1月24日(2022.1.24)

30

【手続補正1】

【補正対象書類名】特許請求の範囲

【補正対象項目名】全文

【補正方法】変更

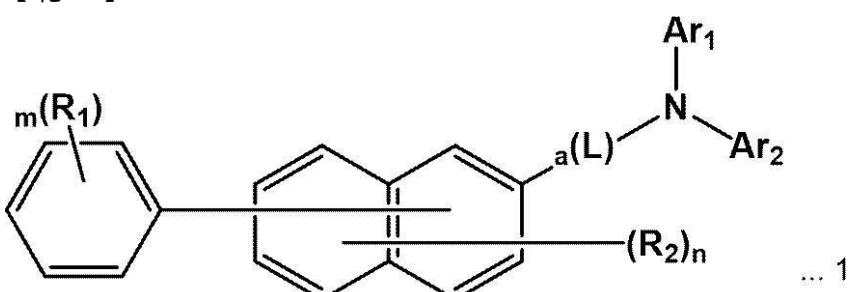
【補正の内容】

【特許請求の範囲】

【請求項1】

下記化学式1で表されるモノアミン化合物。

【化1】



40

前記化学式1において、

Ar<sub>1</sub>及びAr<sub>2</sub>は、それぞれ独立して置換若しくは無置換の炭素数1以上10以下のアルキル基、置換若しくは無置換の環形成炭素数3以上20以下のシクロアルキル基、置換

50

若しくは無置換の環形成炭素数 6 以上 30 以下のアリール基、または置換若しくは無置換の環形成炭素数 2 以上 30 以下のヘテロアリール基であり、

L は、置換若しくは無置換の環形成炭素数 6 以上 30 以下のアリーレン基、または置換若しくは無置換の環形成炭素数 2 以上 30 以下のヘテロアリーレン基であり、

R<sub>1</sub> は、水素原子、重水素原子、ハロゲン原子、置換若しくは無置換の炭素数 1 以上 20 以下のアルキル基、置換若しくは無置換の環形成炭素数 3 以上 20 以下のシクロアルキル基、または置換若しくは無置換の環形成炭素数 6 以上 30 以下のアリール基であり、

R<sub>2</sub> は、水素原子、重水素原子、ハロゲン原子、置換若しくは無置換の炭素数 1 以上 20 以下のアルキル基、または置換若しくは無置換の環形成炭素数 3 以上 20 以下のシクロアルキル基であり、

10

a は 0 以上 3 以下の整数であり、

m は 0 以上 1 以下の整数であり、

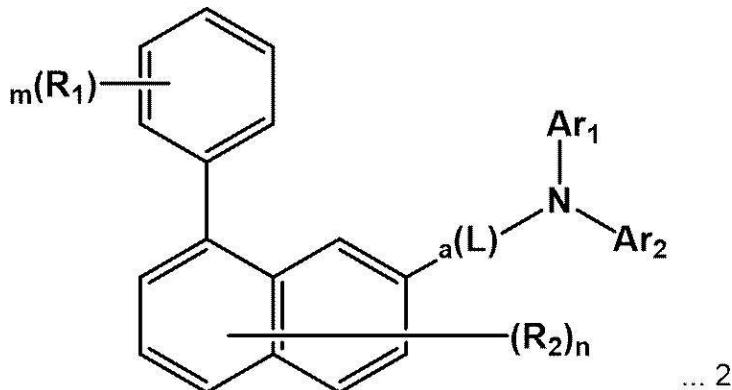
n は 0 以上 6 以下の整数であり、

Ar<sub>1</sub> 及び Ar<sub>2</sub> では、何れか 1 つが 3 - ジベンゾフラニル基である場合、残りの 1 つが 9 - フェナントリル基である場合を除く。

### 【請求項 2】

前記化学式 1 は、下記化学式 2 ~ 化学式 8 の何れか 1 つで表されるものであることを特徴とする請求項 1 に記載のモノアミン化合物。

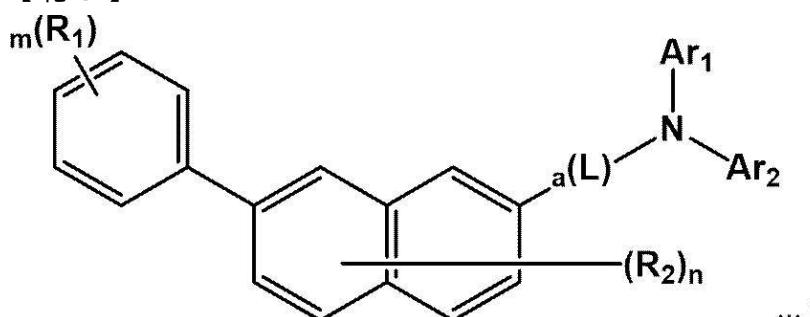
### 【化 2】



... 2

30

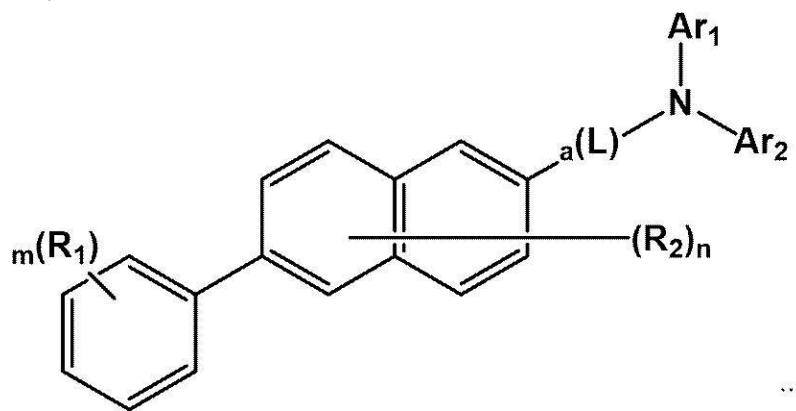
### 【化 3】



... 3

50

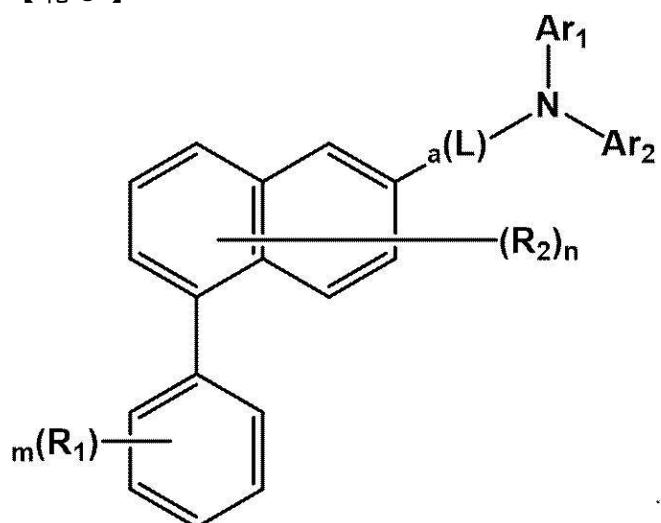
【化 4】



10

... 4

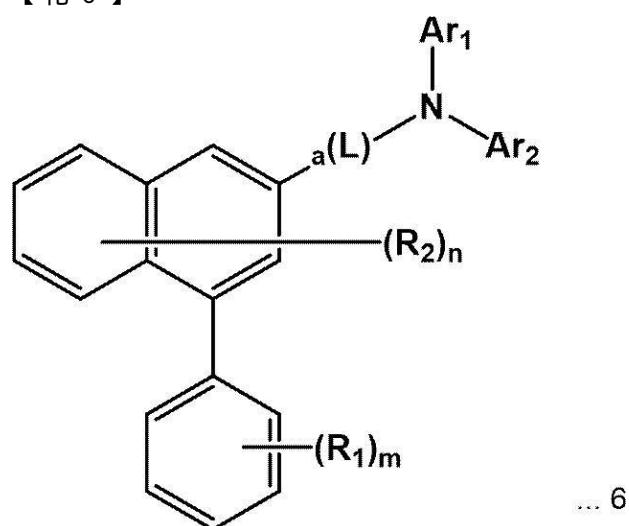
【化 5】



20

... 5

【化 6】



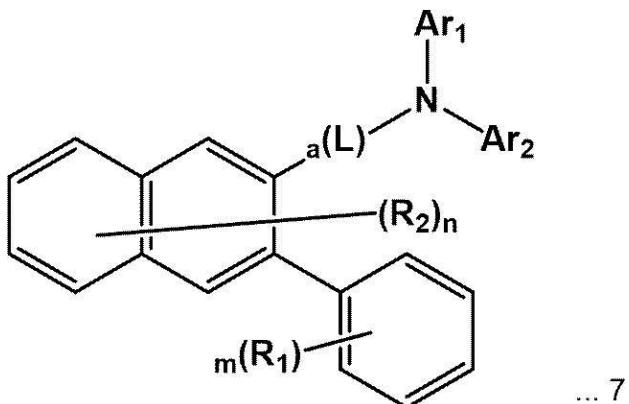
30

40

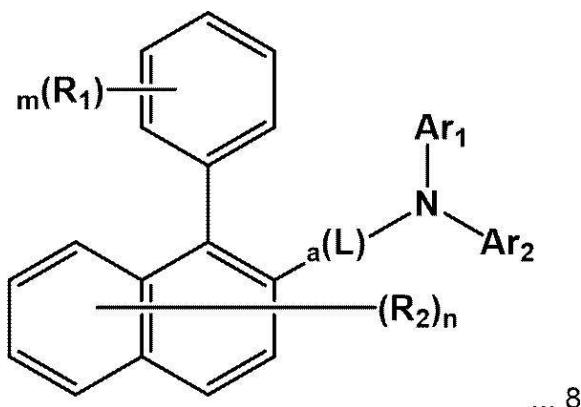
... 6

50

## 【化7】



## 【化8】



前記化学式2～8において、

Ar<sub>1</sub>、Ar<sub>2</sub>、L、R<sub>1</sub>、R<sub>2</sub>、a、m、及びnは、化学式1での定義と同一である。

## 【請求項3】

Lは、置換若しくは無置換の環形成炭素数6以上12以下のアリーレン基であることを特徴とする請求項1に記載のモノアミン化合物。

30

## 【請求項4】

Lは、置換若しくは無置換のフェニレン基であることを特徴とする請求項3に記載のモノアミン化合物。

30

## 【請求項5】

Ar<sub>1</sub>及びAr<sub>2</sub>は、それぞれ独立して置換若しくは無置換の環形成炭素数6以上12以下のアリール基であることを特徴とする請求項1に記載のモノアミン化合物。

40

## 【請求項6】

Ar<sub>1</sub>及びAr<sub>2</sub>は、それぞれ独立して置換若しくは無置換のフェニル基、置換若しくは無置換のビフェニリル基、置換若しくは無置換のナフチル基、または置換若しくは無置換のフルオレニル基であることを特徴とする請求項5に記載のモノアミン化合物。

## 【請求項7】

Ar<sub>1</sub>及びAr<sub>2</sub>は、それぞれ独立して置換若しくは無置換の環形成炭素数5以上12以下のヘテロアリール基であることを特徴とする請求項1に記載のモノアミン化合物。

40

## 【請求項8】

Ar<sub>1</sub>及びAr<sub>2</sub>は、それぞれ独立して置換若しくは無置換のジベンゾフラニル基、置換若しくは無置換のジベンゾチオフェニル基、または置換若しくは無置換のカルバゾリル基であることを特徴とする請求項7に記載のモノアミン化合物。

## 【請求項9】

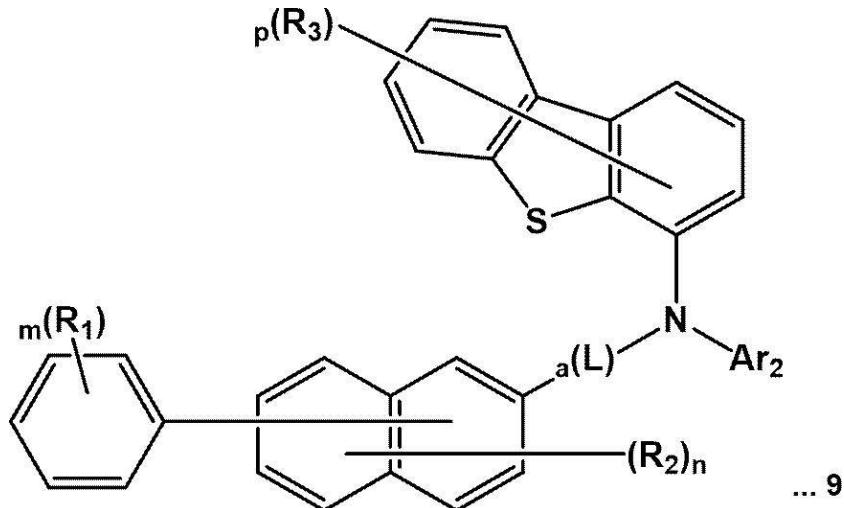
Ar<sub>1</sub>及びAr<sub>2</sub>の少なくとも1つは、置換若しくは無置換の4-ジベンゾフラニル基であることを特徴とする請求項1に記載のモノアミン化合物。

50

## 【請求項 10】

前記化学式 1 で表されるモノアミン化合物は、下記化学式 9 で表されることを特徴とする請求項 1 に記載のモノアミン化合物。

## 【化 9】



前記化学式 9 において、

R<sub>3</sub> は、水素原子、重水素原子、ハロゲン原子、置換若しくは無置換の炭素数 1 以上 20 以下 20 のアルキル基、置換若しくは無置換の環形成炭素数 3 以上 20 以下のシクロアルキル基、または置換若しくは無置換の環形成炭素数 6 以上 30 以下のアリール基であり、p は 0 以上 7 以下の整数であり、

A r<sub>2</sub>、L、R<sub>1</sub>、R<sub>2</sub>、a、m、及び n は、前記化学式 1 で定義したものと同じである

## 【請求項 11】

R<sub>2</sub> は、水素原子または重水素原子であることを特徴とする請求項 1 に記載のモノアミン化合物。

## 【請求項 12】

前記化学式 1 で表されるモノアミン化合物は、下記化合物群 1 ~ 化合物群 7 に表された化合物から選択される少なくとも 1 つであることであることを特徴とする請求項 1 に記載のモノアミン化合物。

## [化合物群 1]

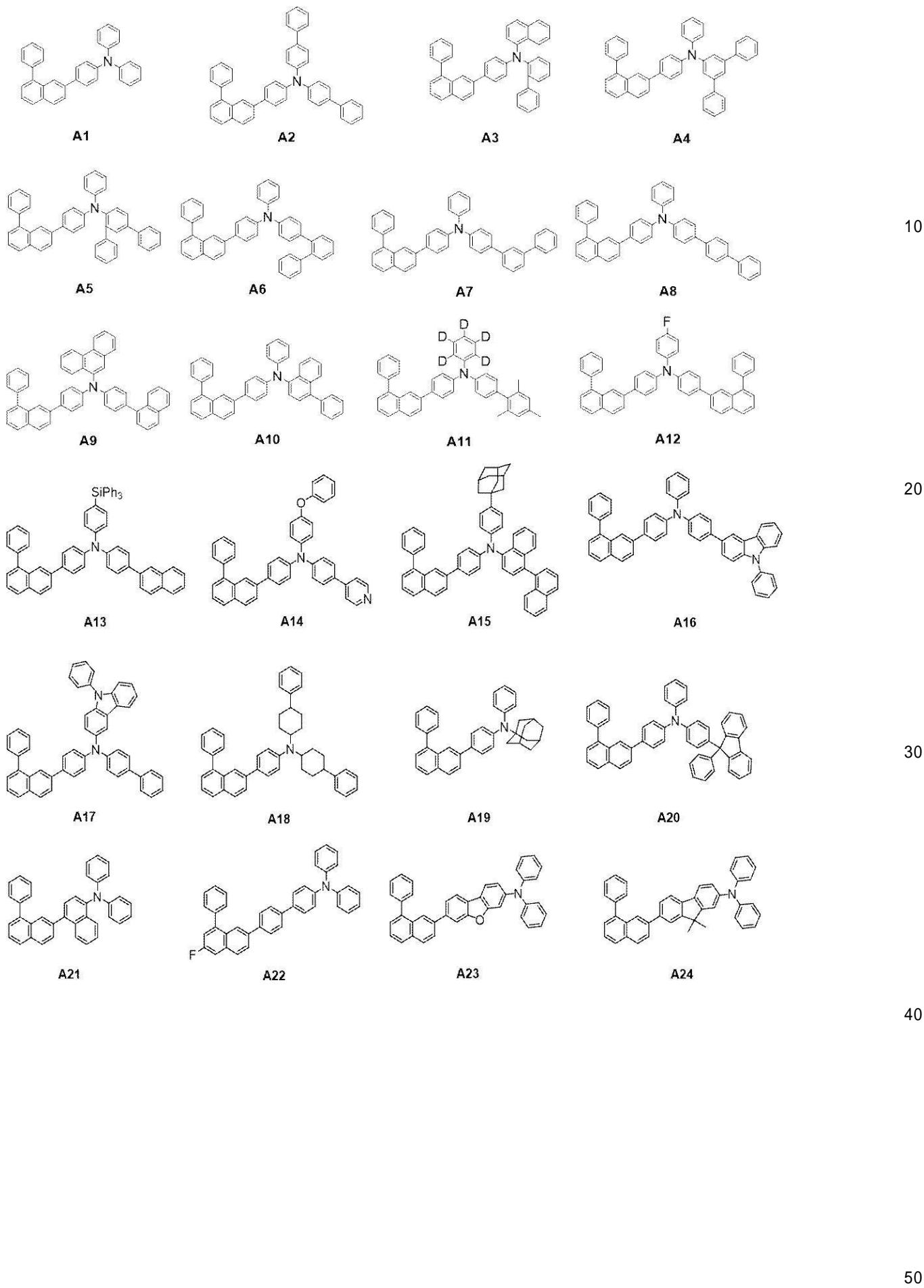
20

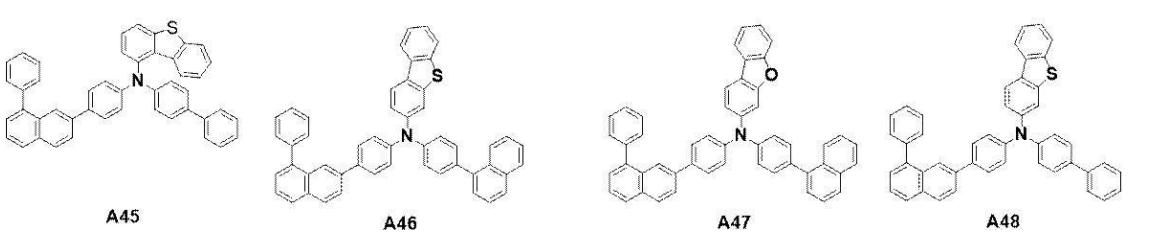
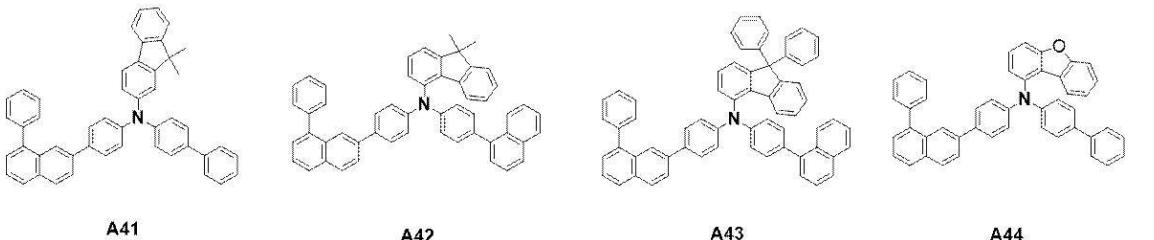
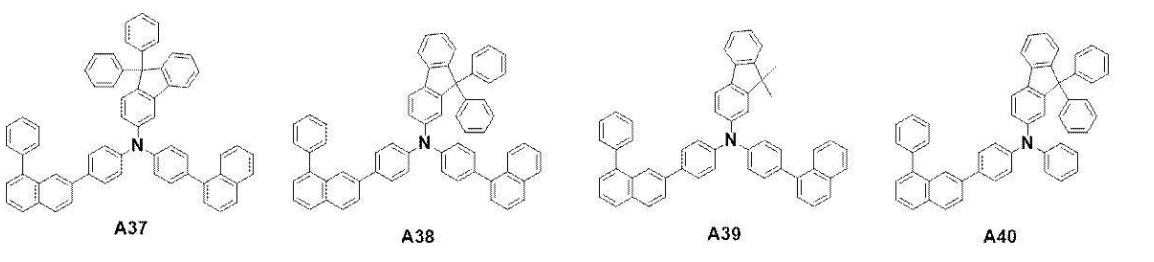
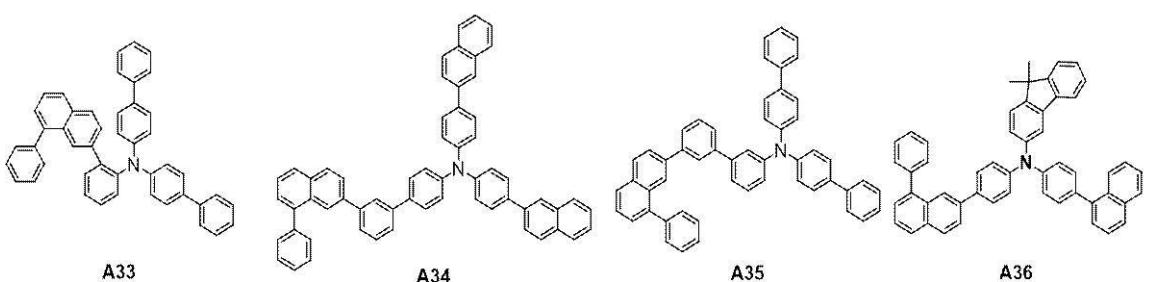
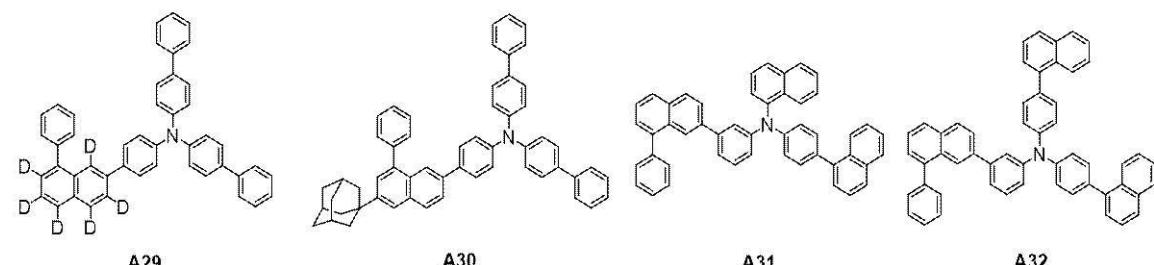
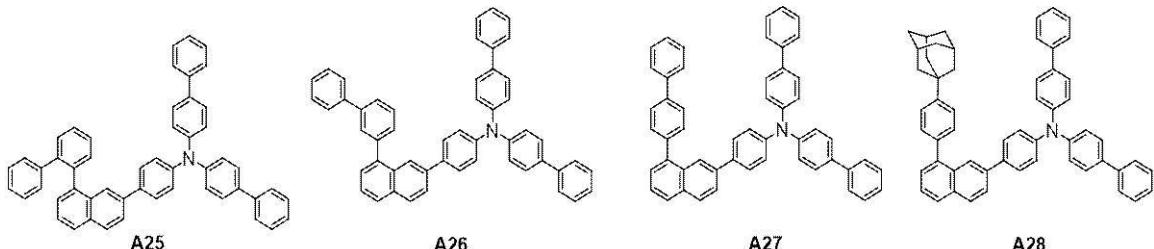
30

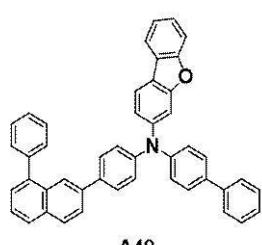
40

50

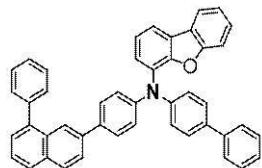
## 【化 10】



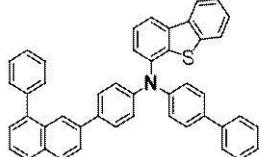




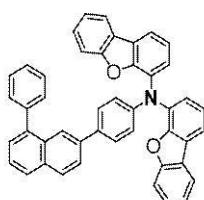
A49



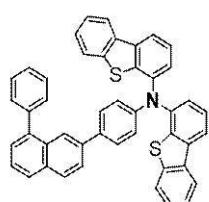
A50



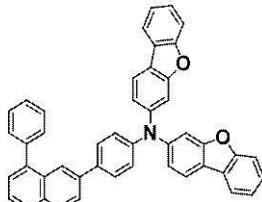
A51



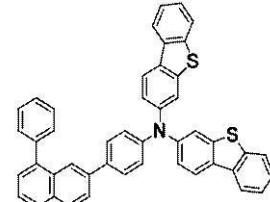
A52



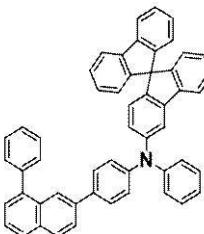
A53



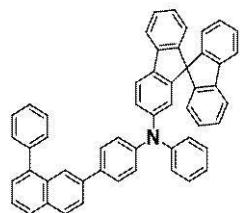
A54



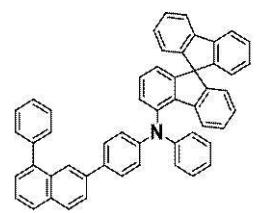
A55



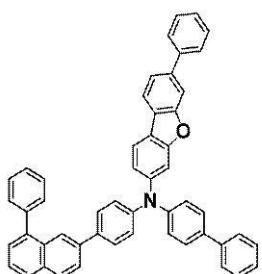
A56



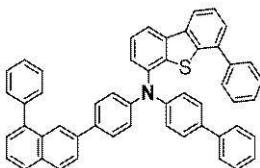
A57



A58



A59



A60

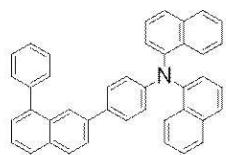
10

20

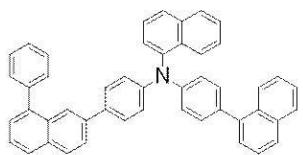
30

40

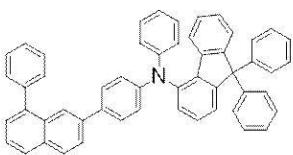
50



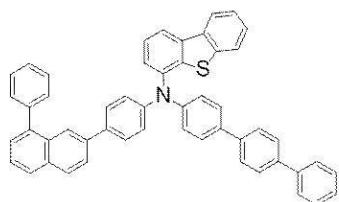
A61



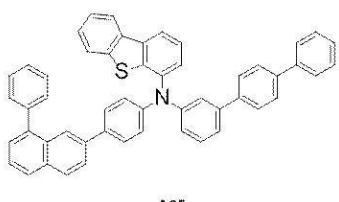
A62



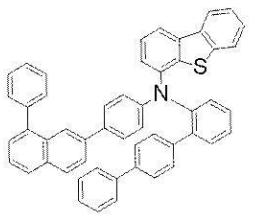
A63



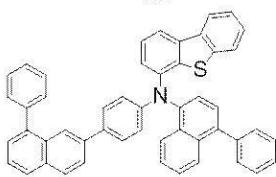
A64



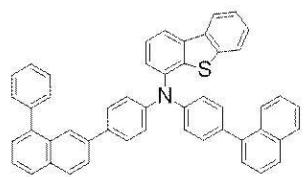
A65



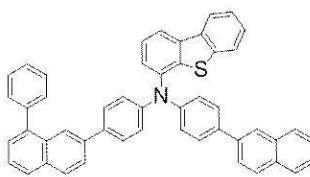
A66



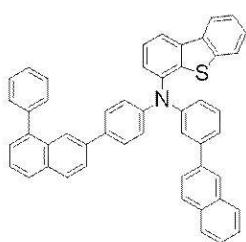
A67



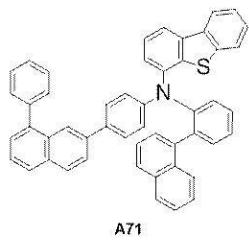
A68



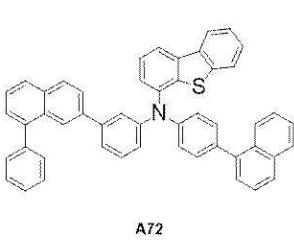
A69



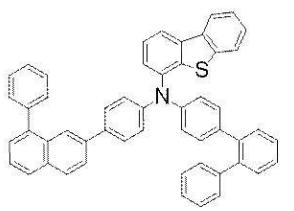
A70



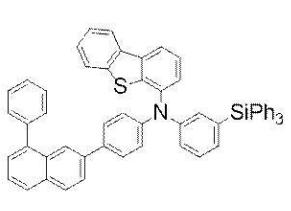
A71



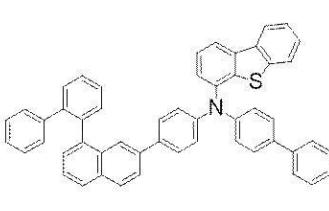
A72



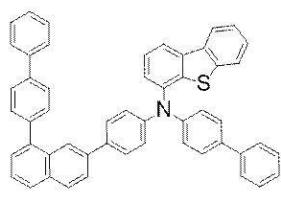
A73



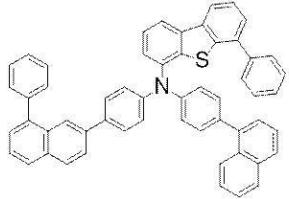
A74



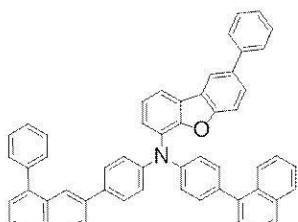
A75



A76



A77



A78

10

20

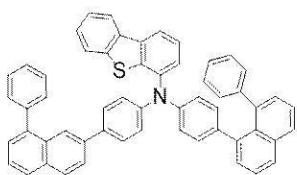
30

40

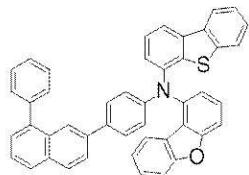
50



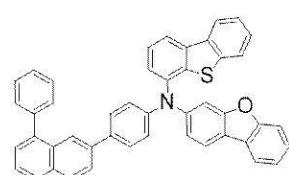
A79



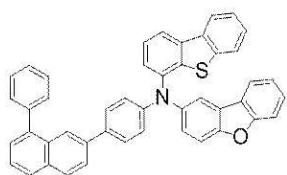
A80



A81



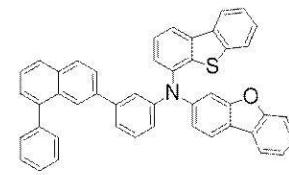
A82



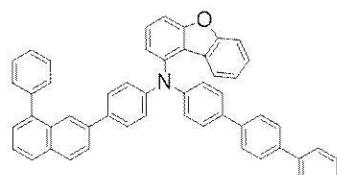
A83



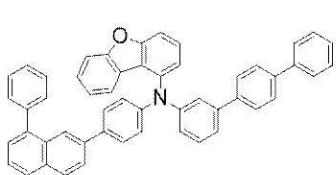
A84



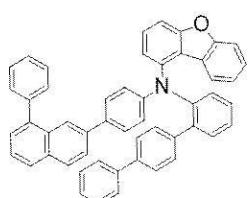
A85



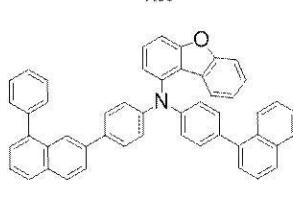
A86



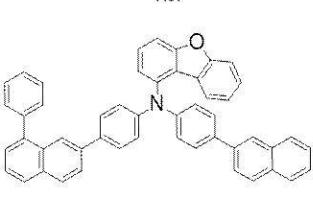
A87



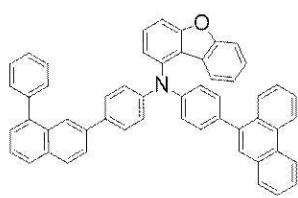
A88



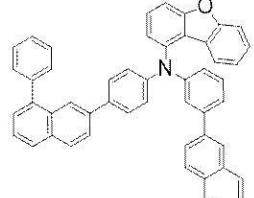
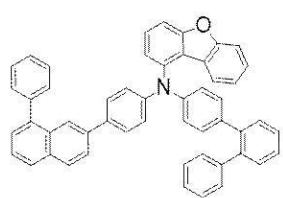
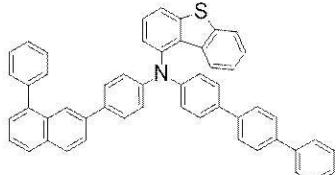
A89



A90



A91

A92  
A94A93  
A95

A96

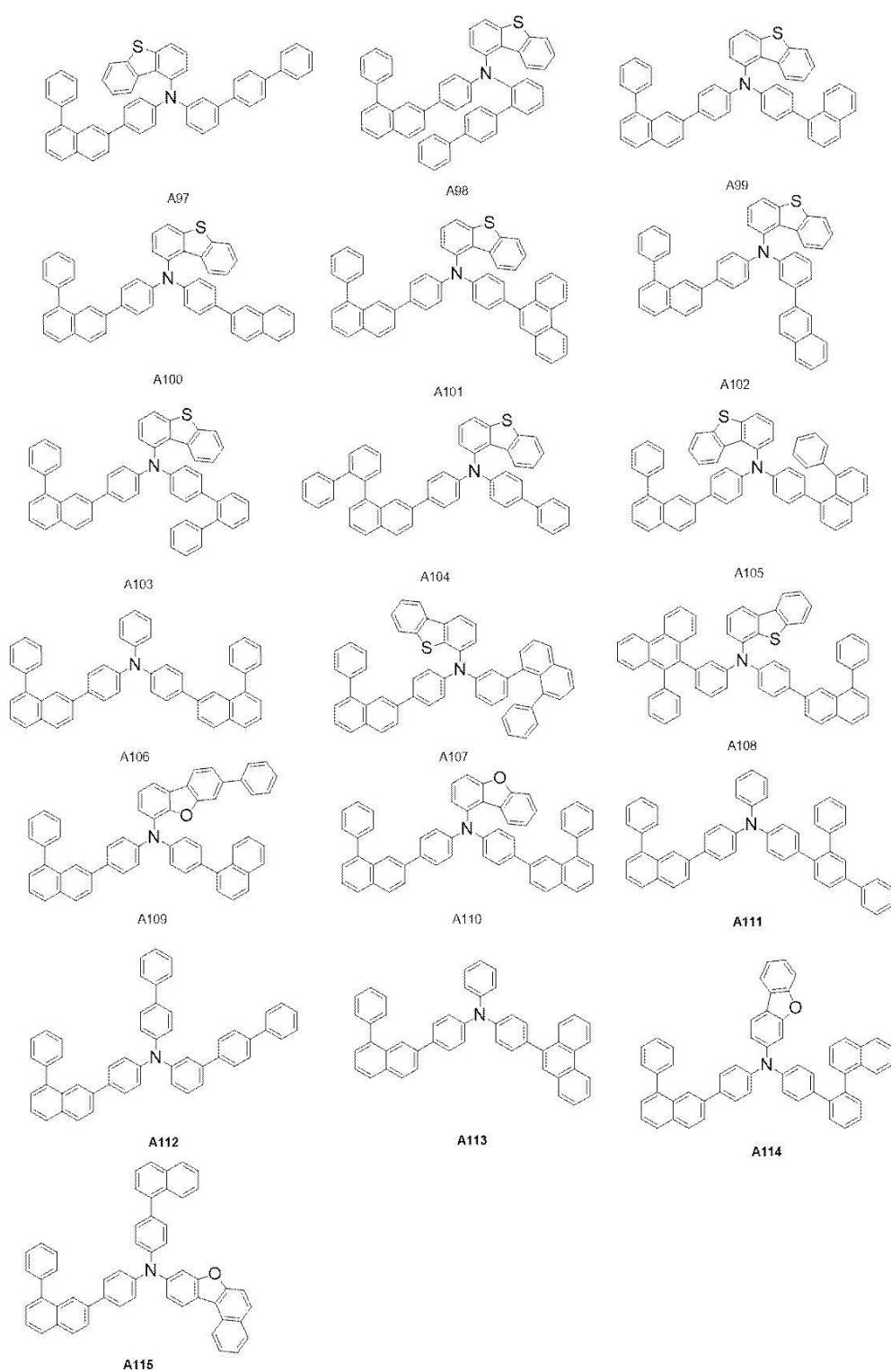
10

20

30

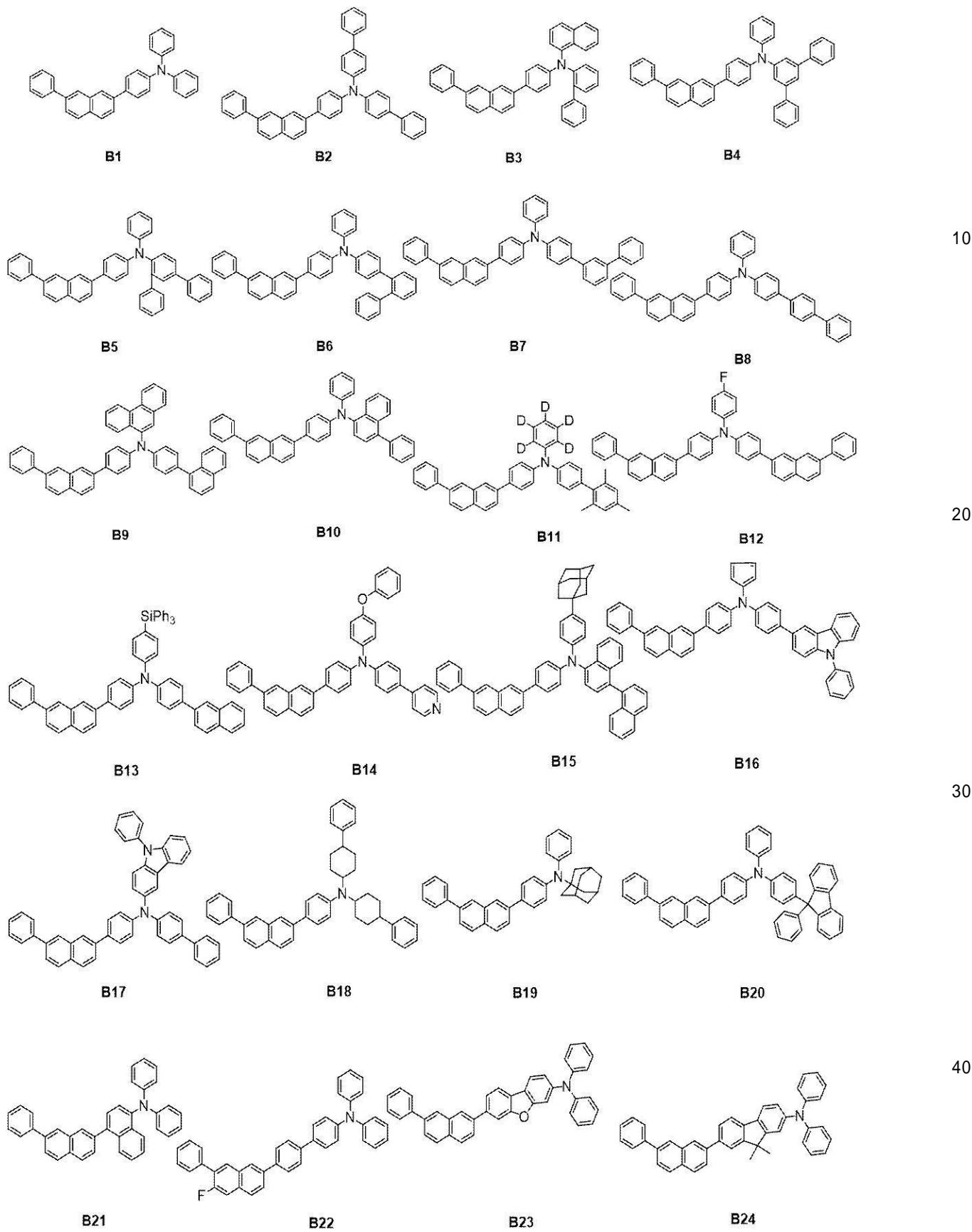
40

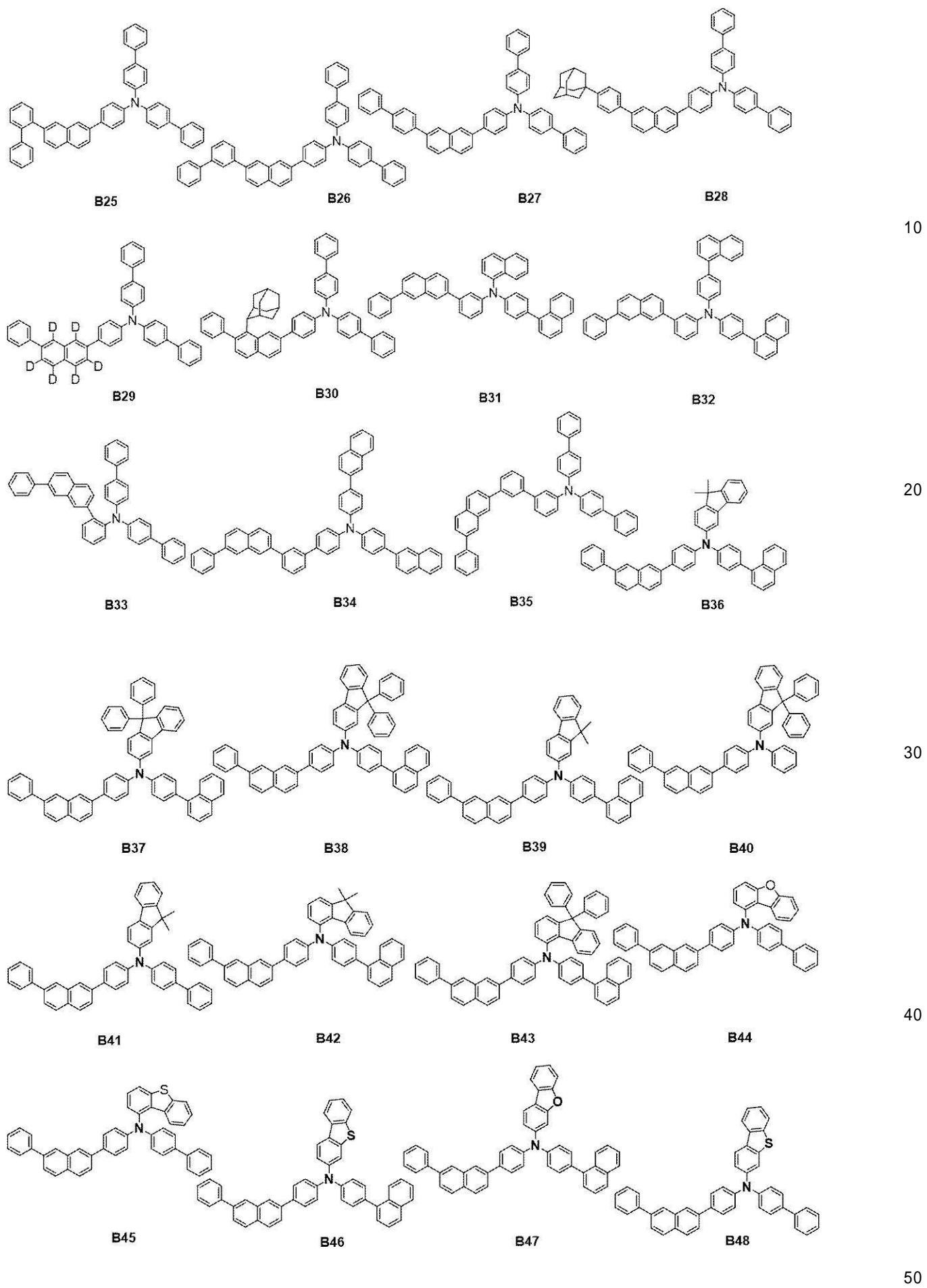
50

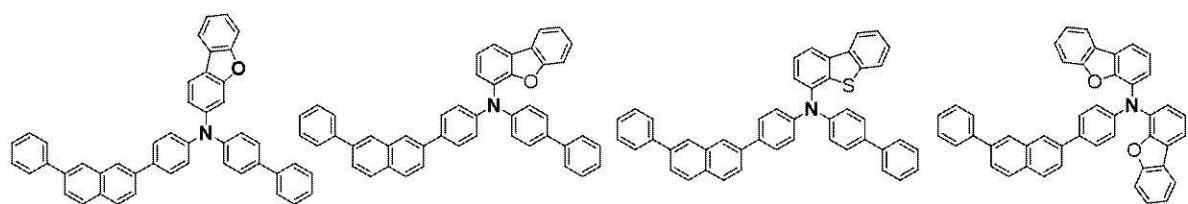


[ 化合物群 2 ]

【化 11】







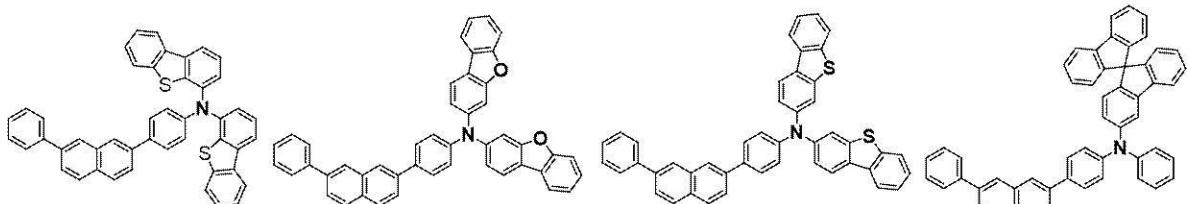
B49

B50

B51

B52

10



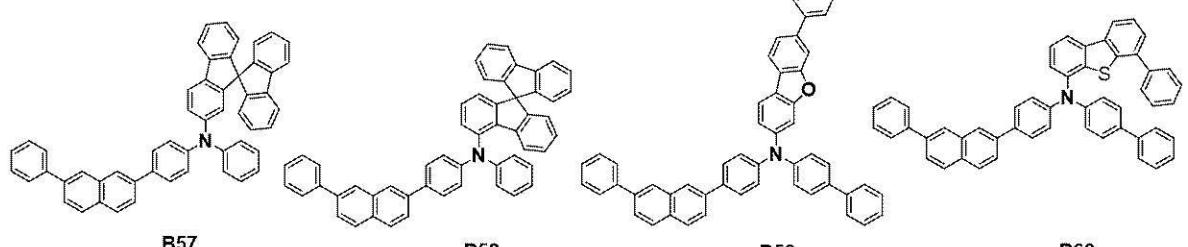
B53

B54

B55

B56

20



B57

B58

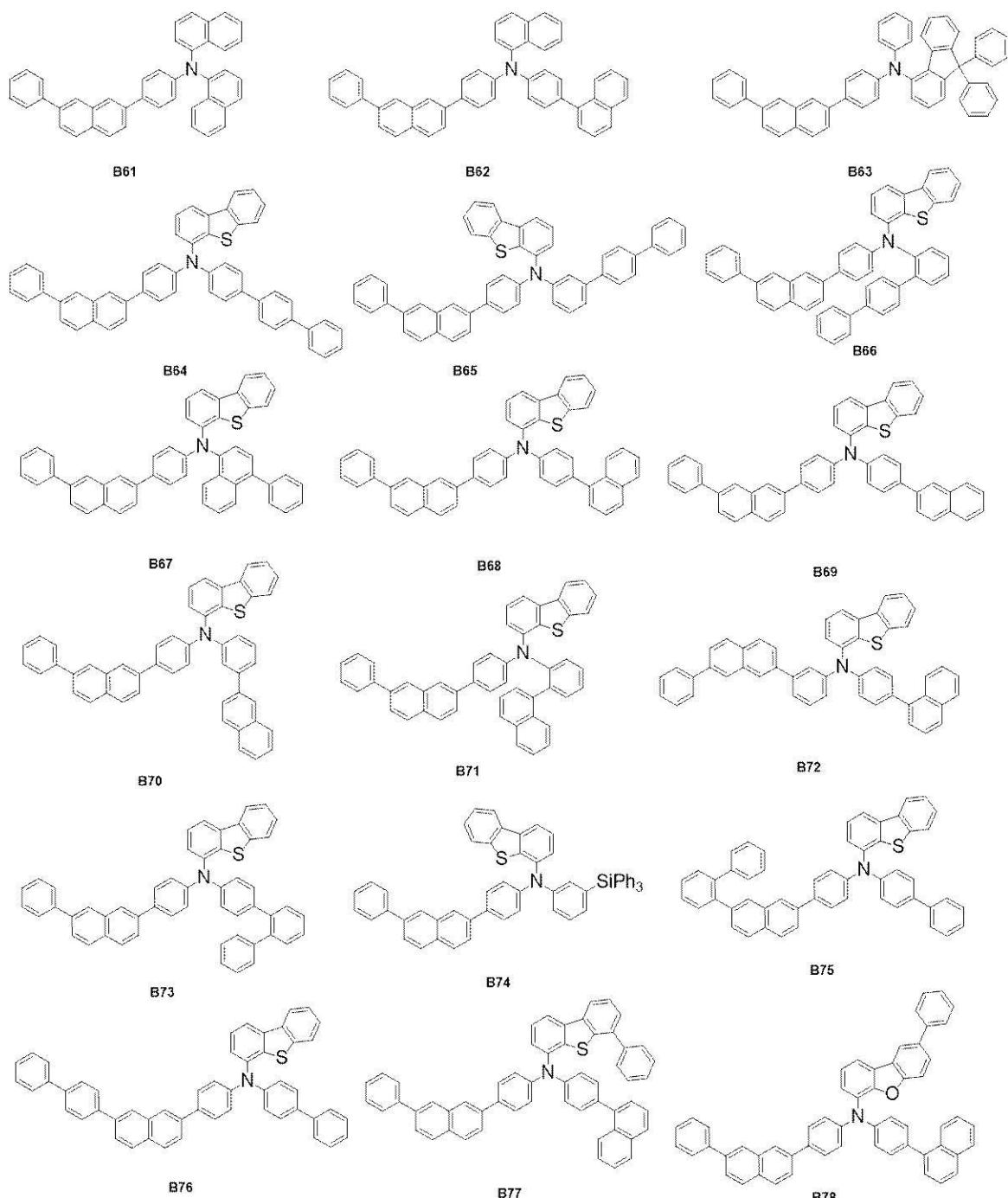
B59

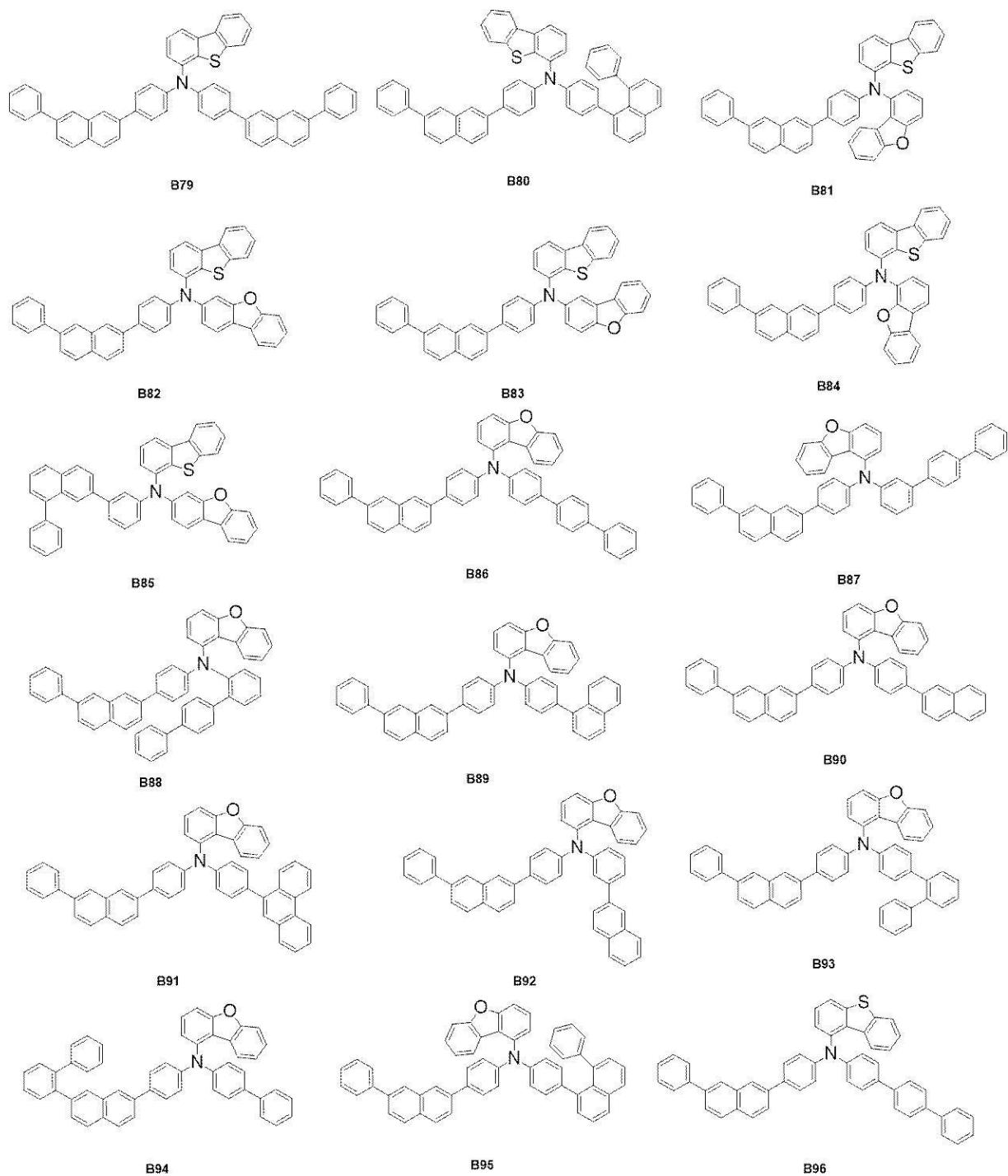
B60

30

40

50





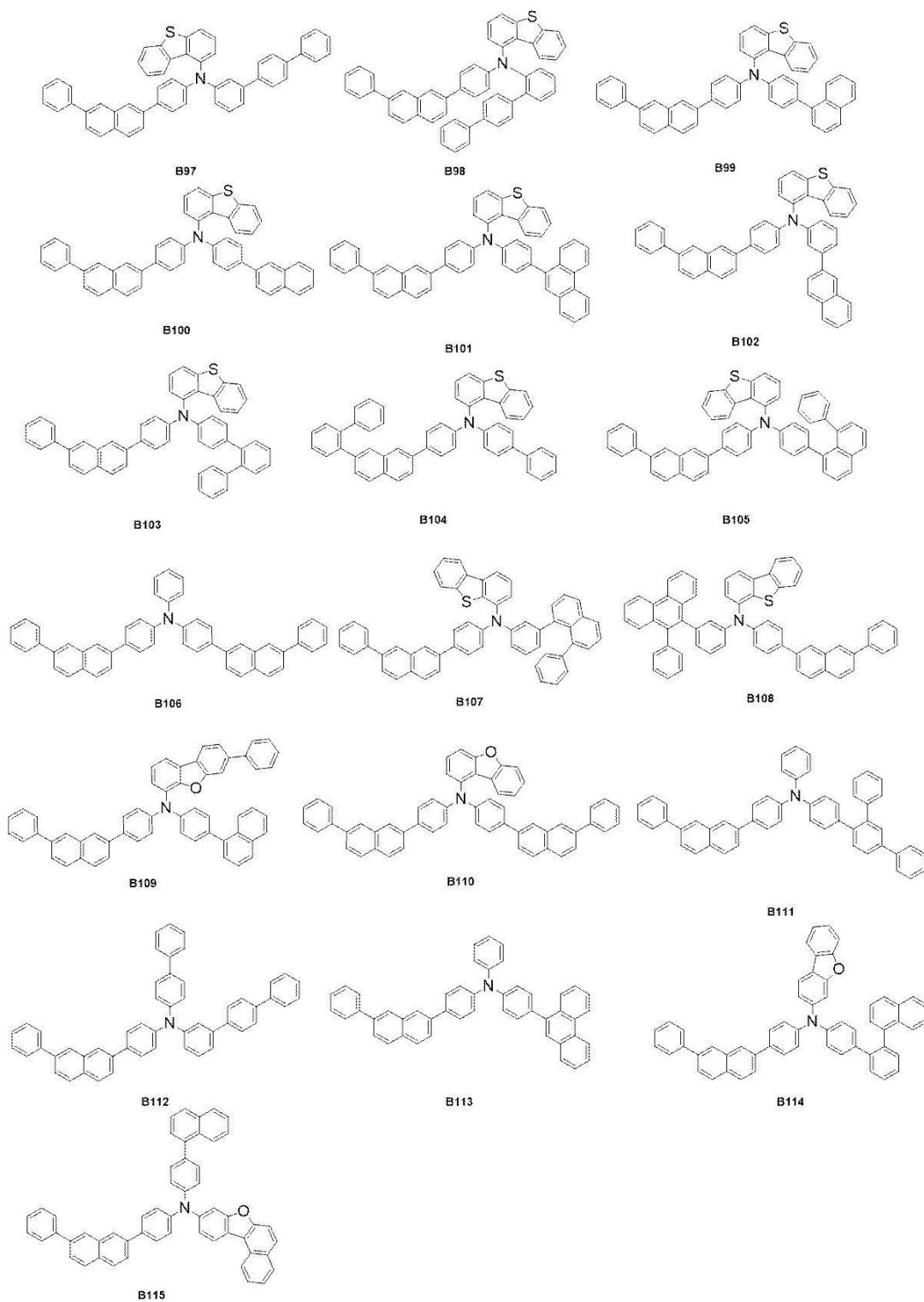
10

20

30

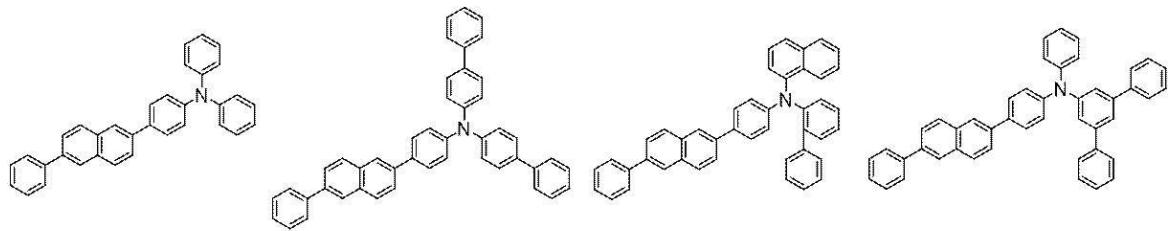
40

50



[ 化合物群 3 ]

【化 1 2】

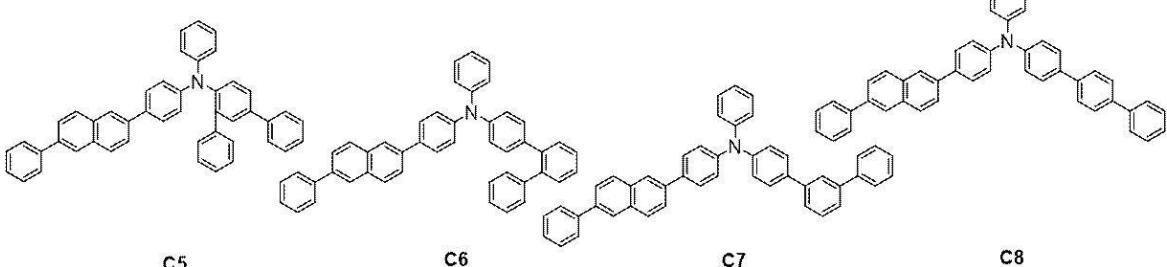


C1

C2

C3

C4

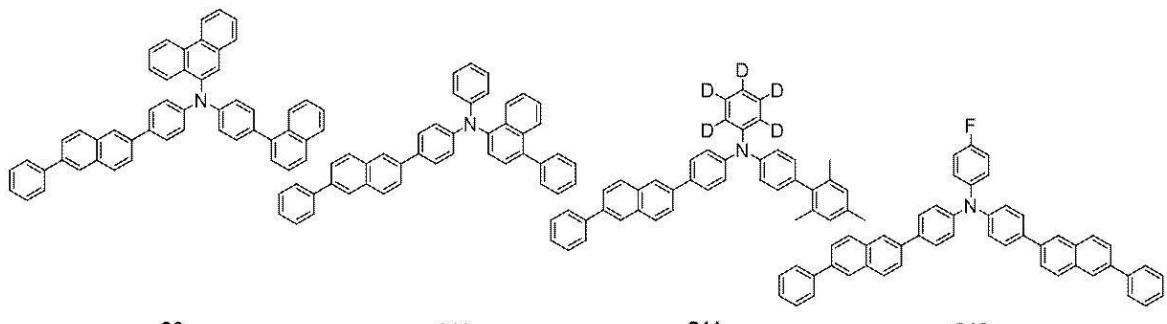


C5

C6

C7

C8



C9

C10

C11

C12

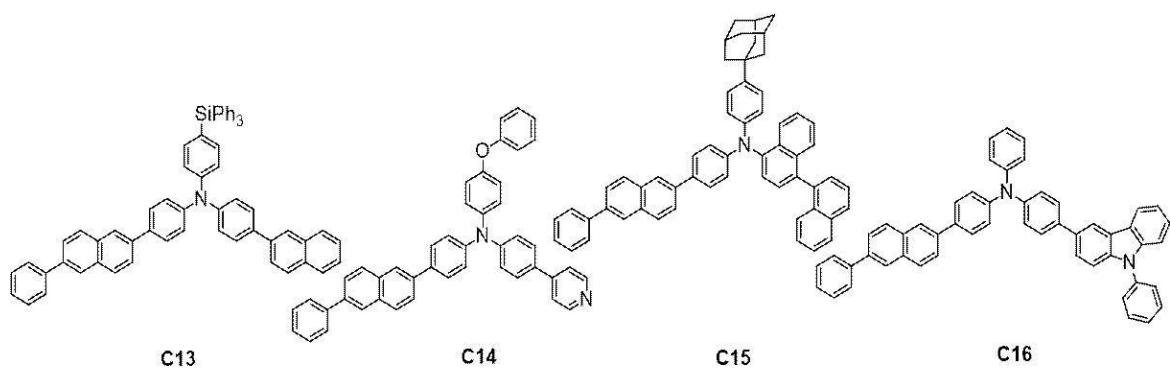
10

20

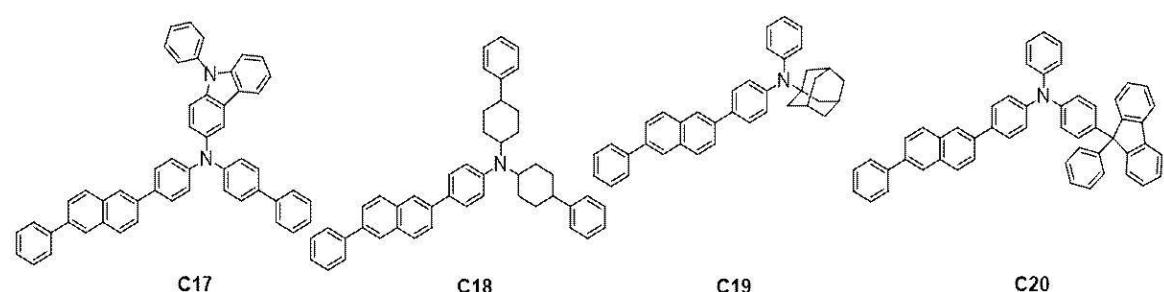
30

40

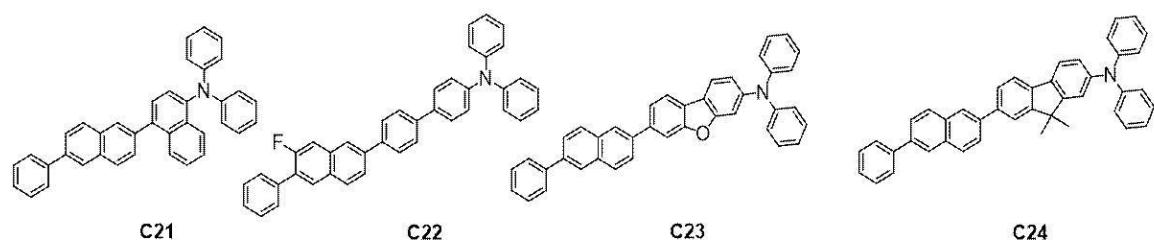
50



10



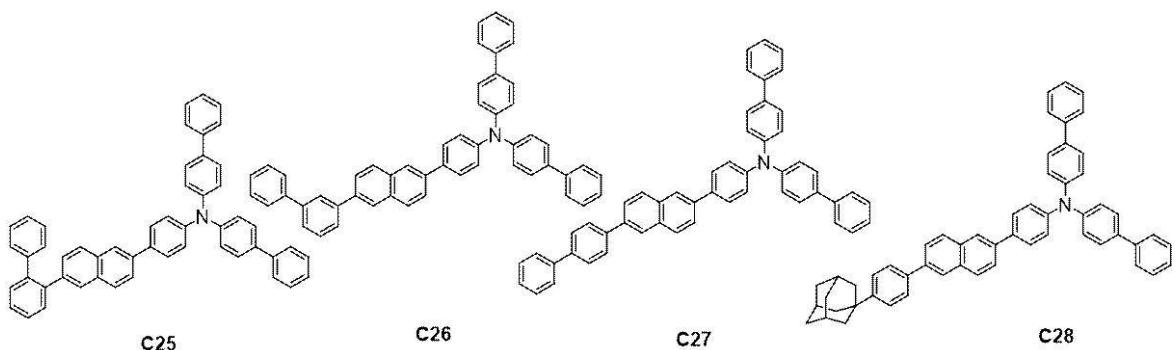
20



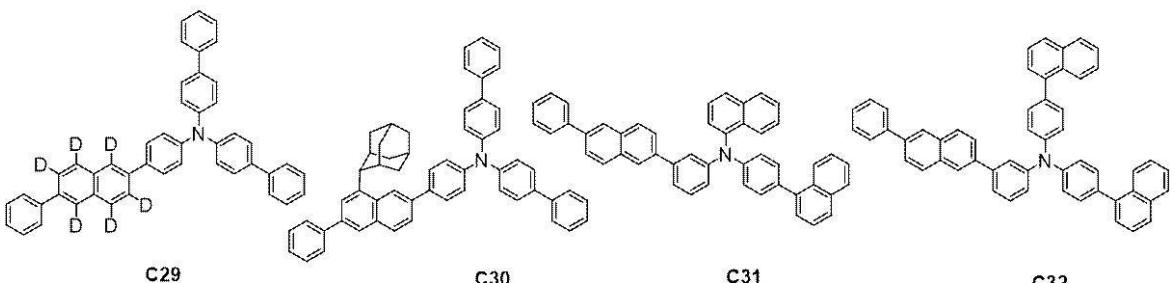
30

40

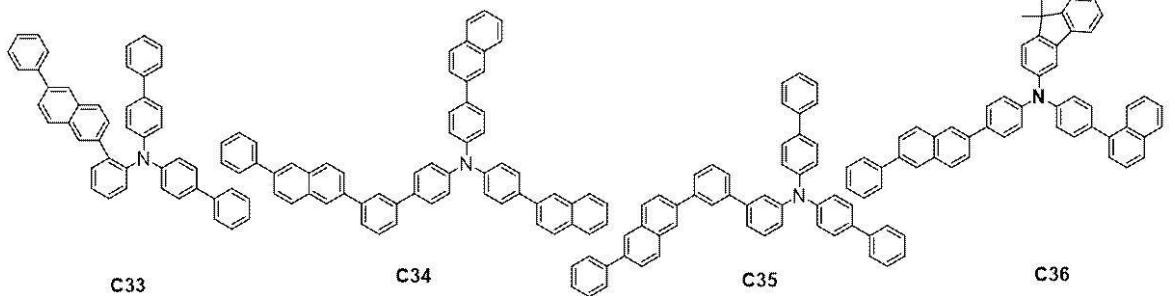
50



10



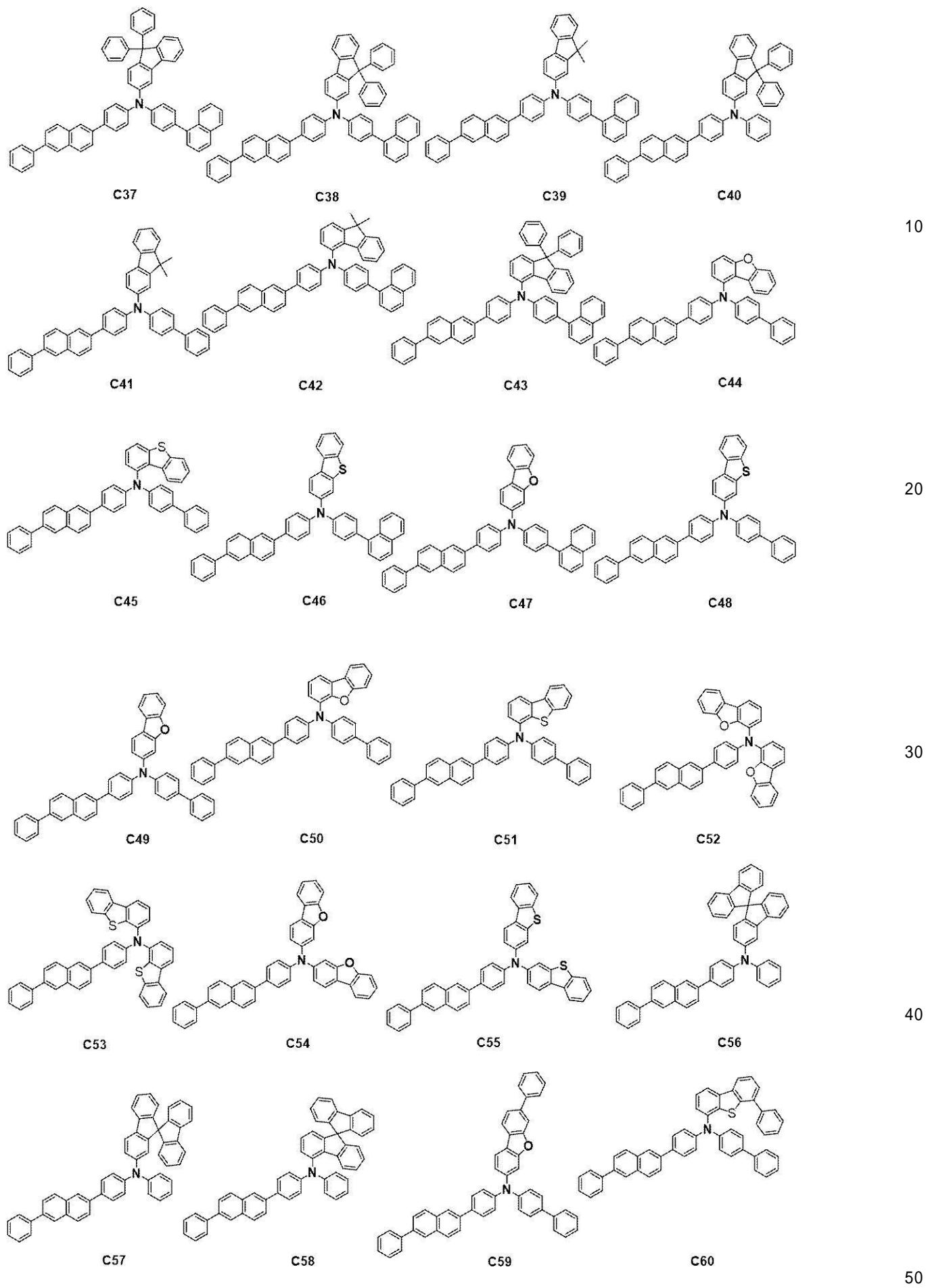
20

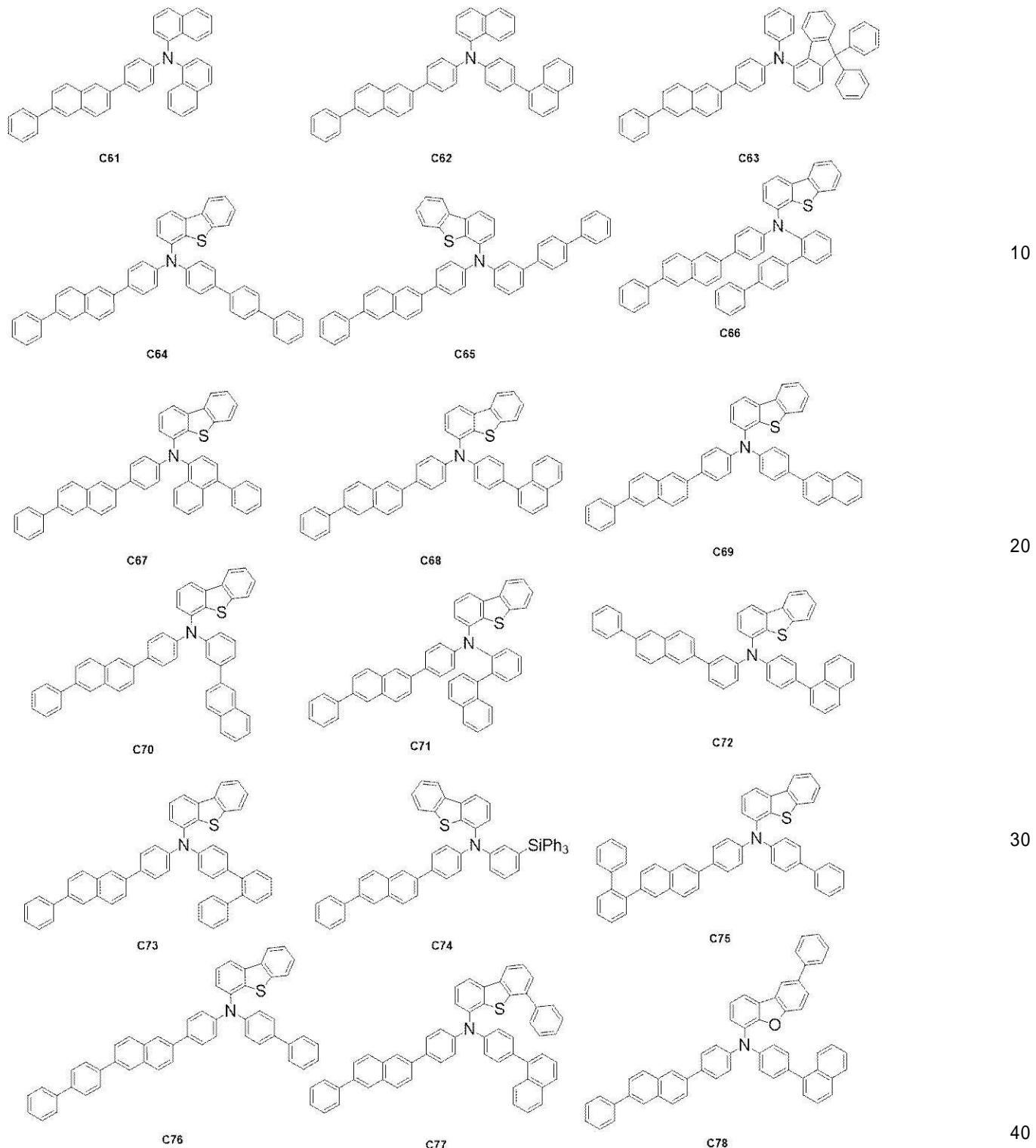


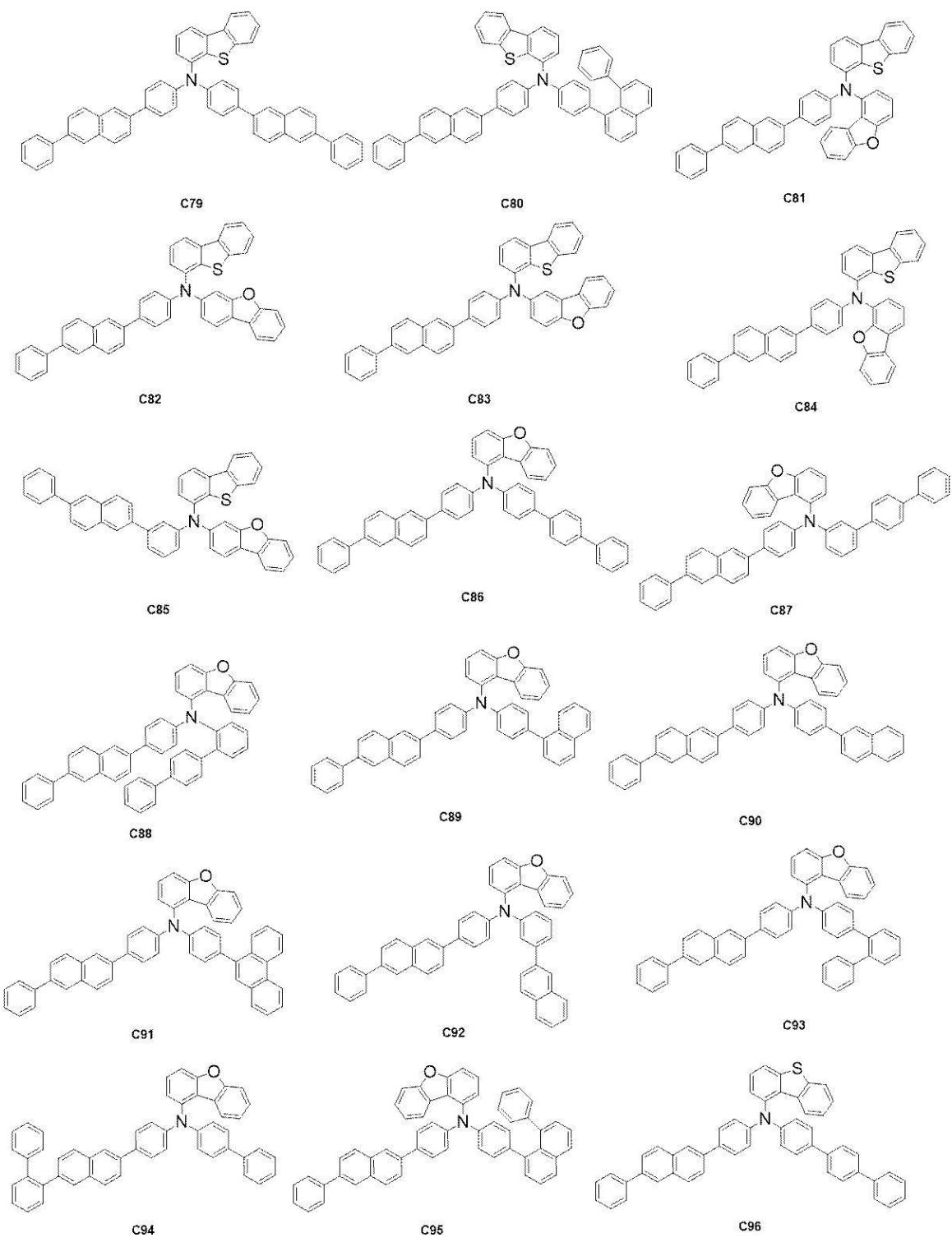
30

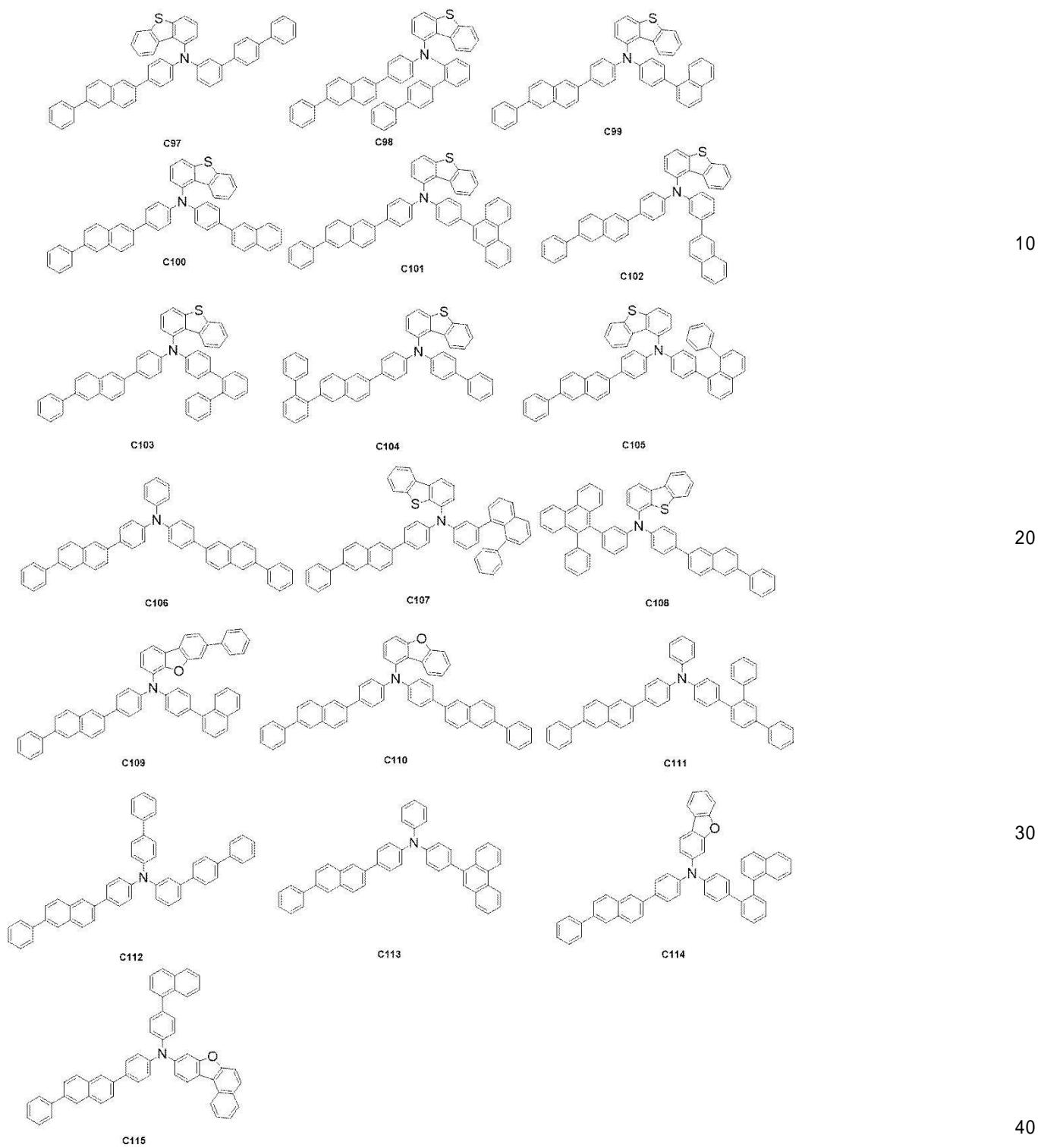
40

50



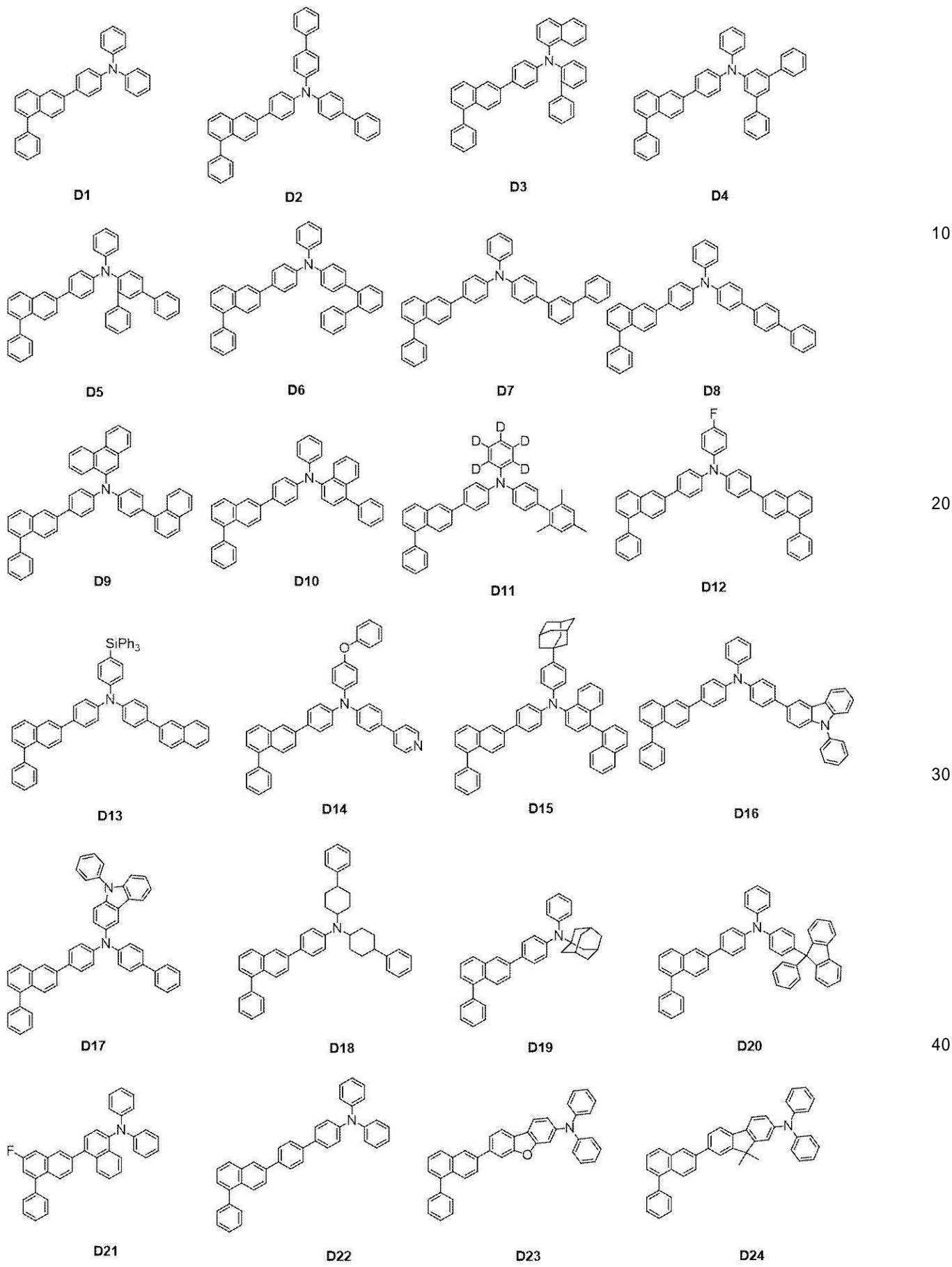


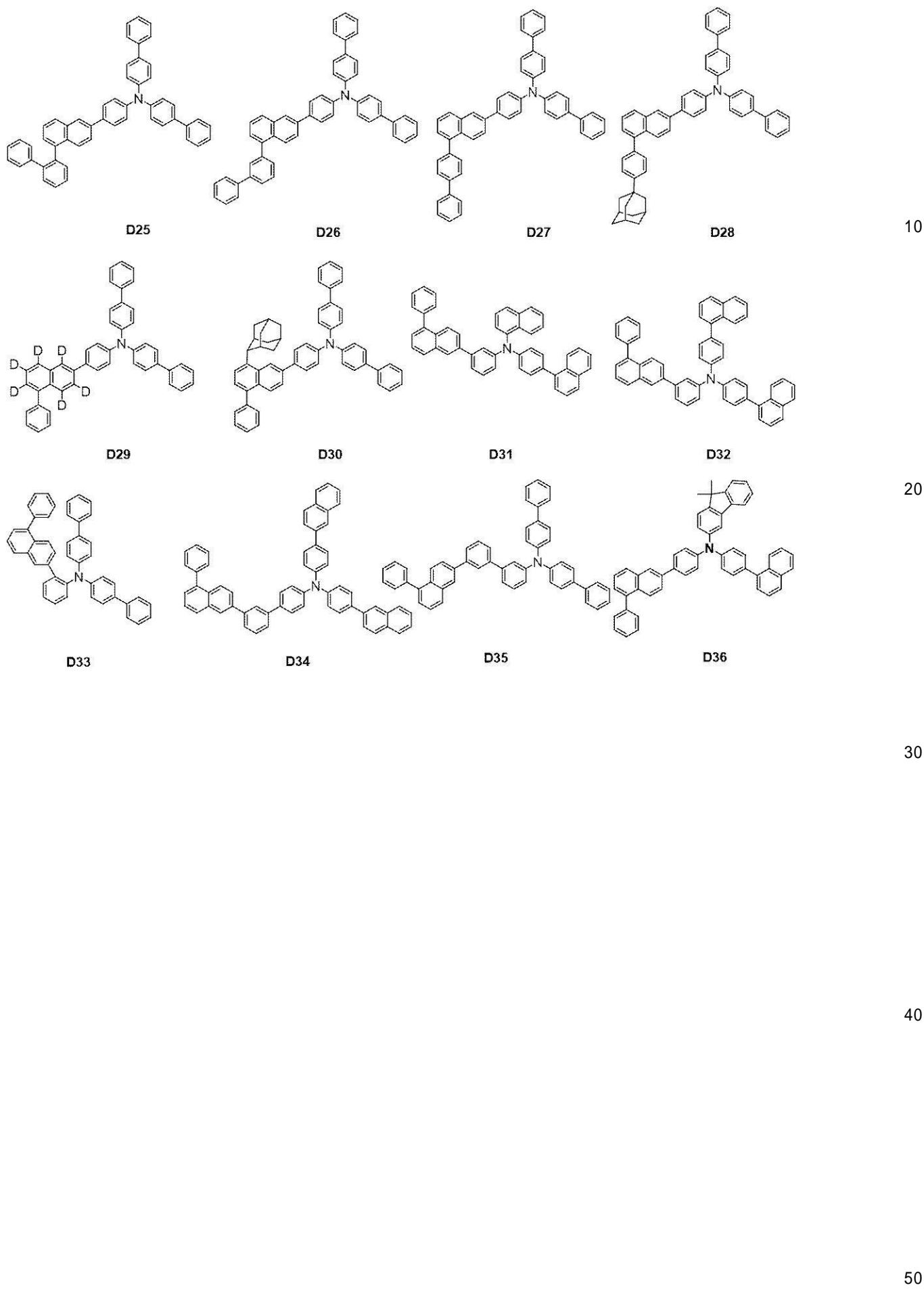


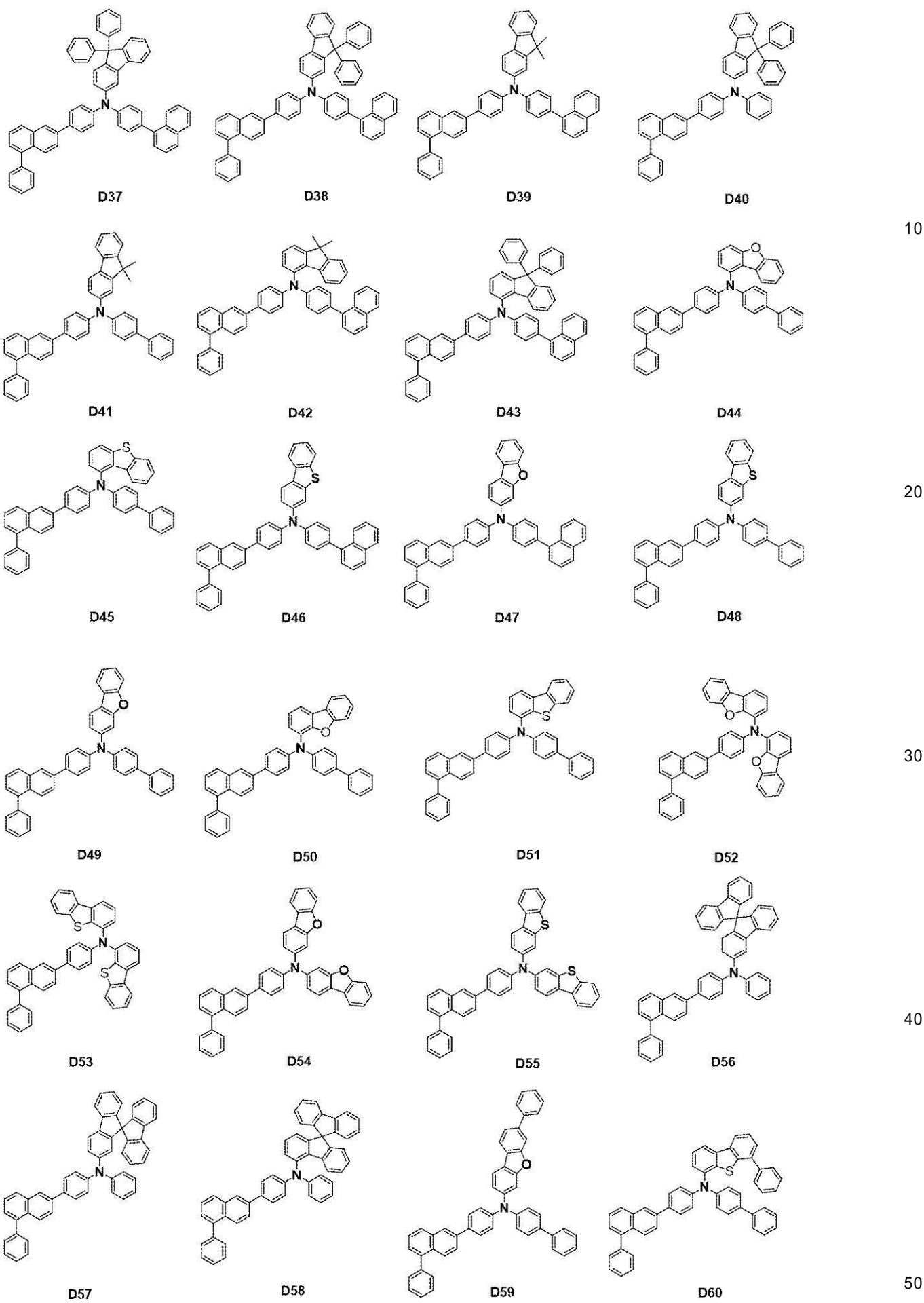


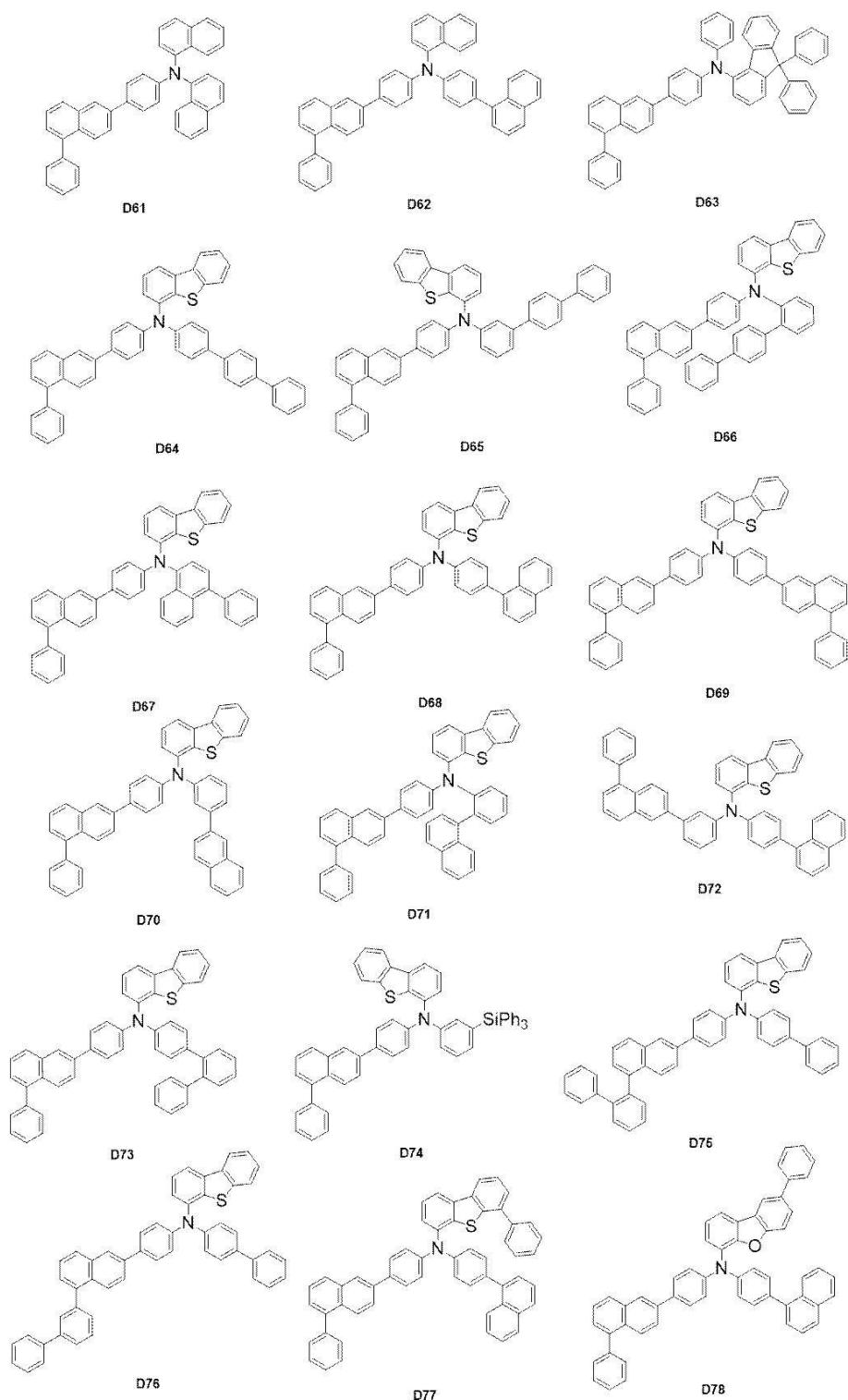
[ 化合物群 4 ]

【化 1 3】









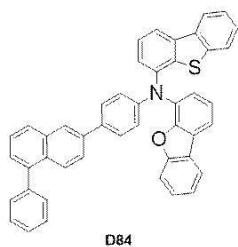
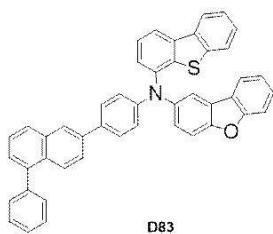
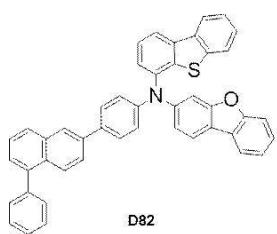
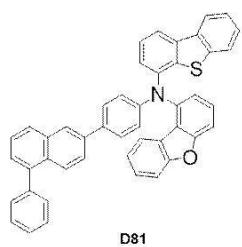
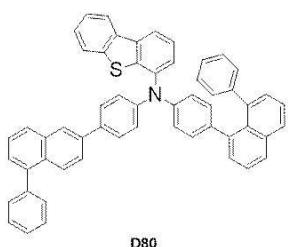
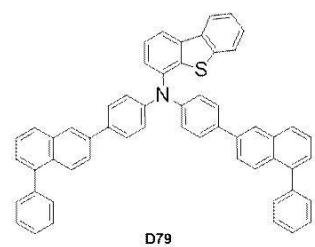
10

20

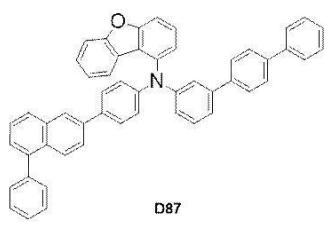
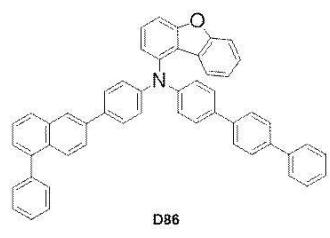
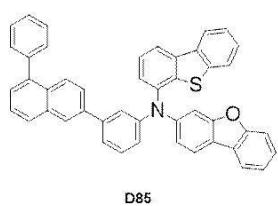
30

40

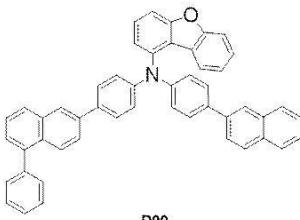
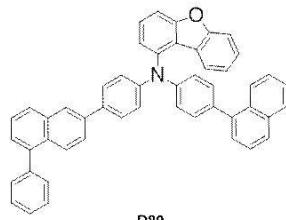
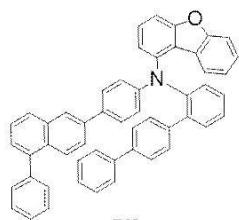
50



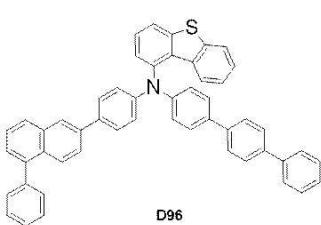
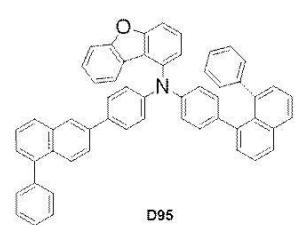
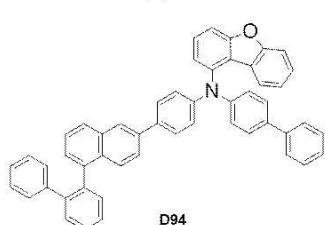
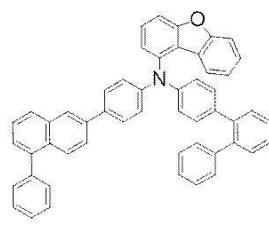
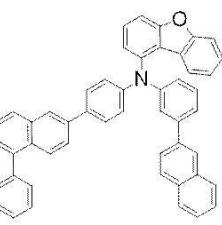
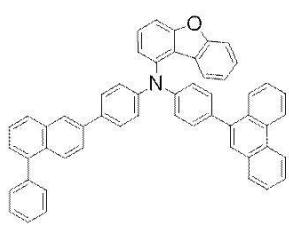
10



20

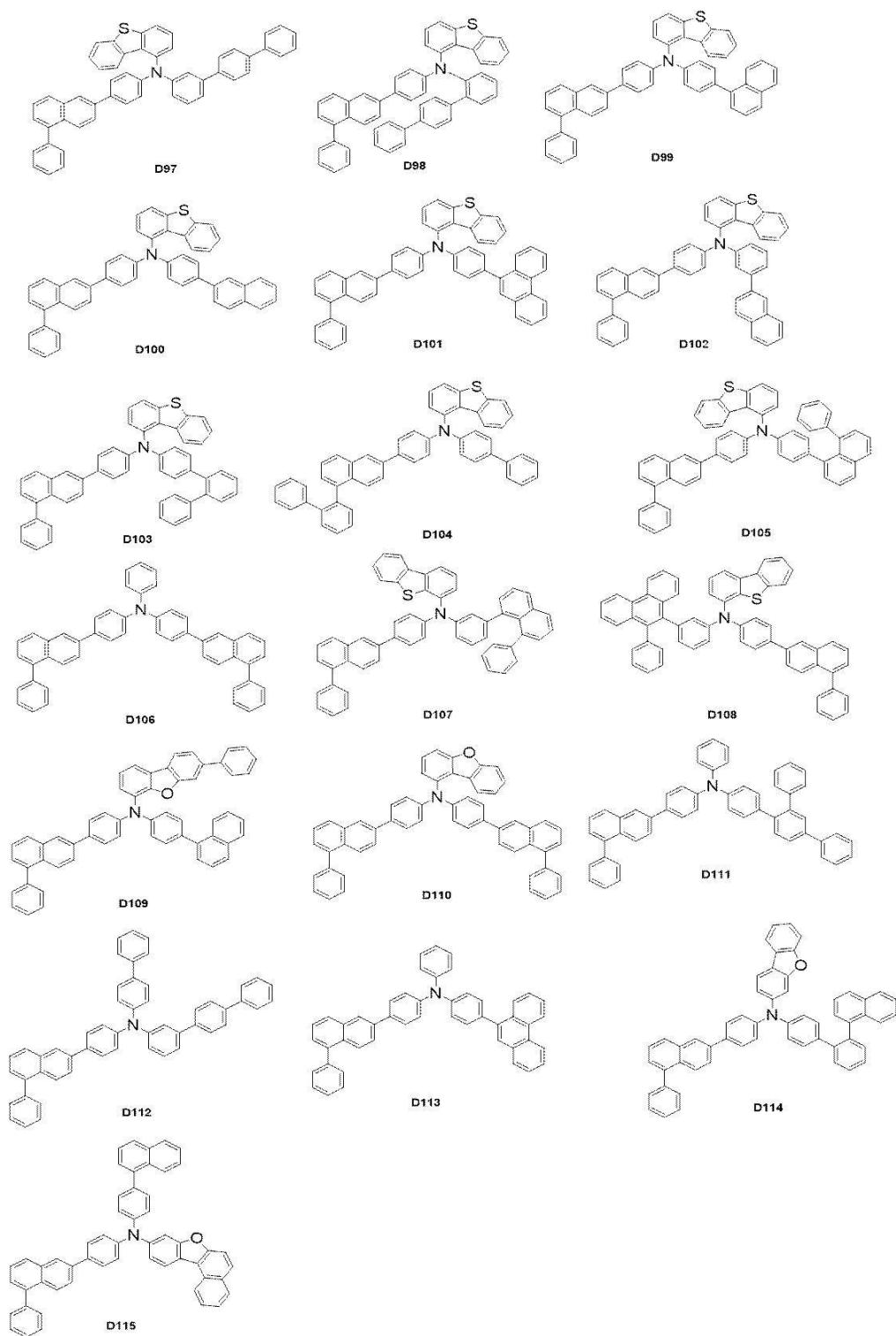


30



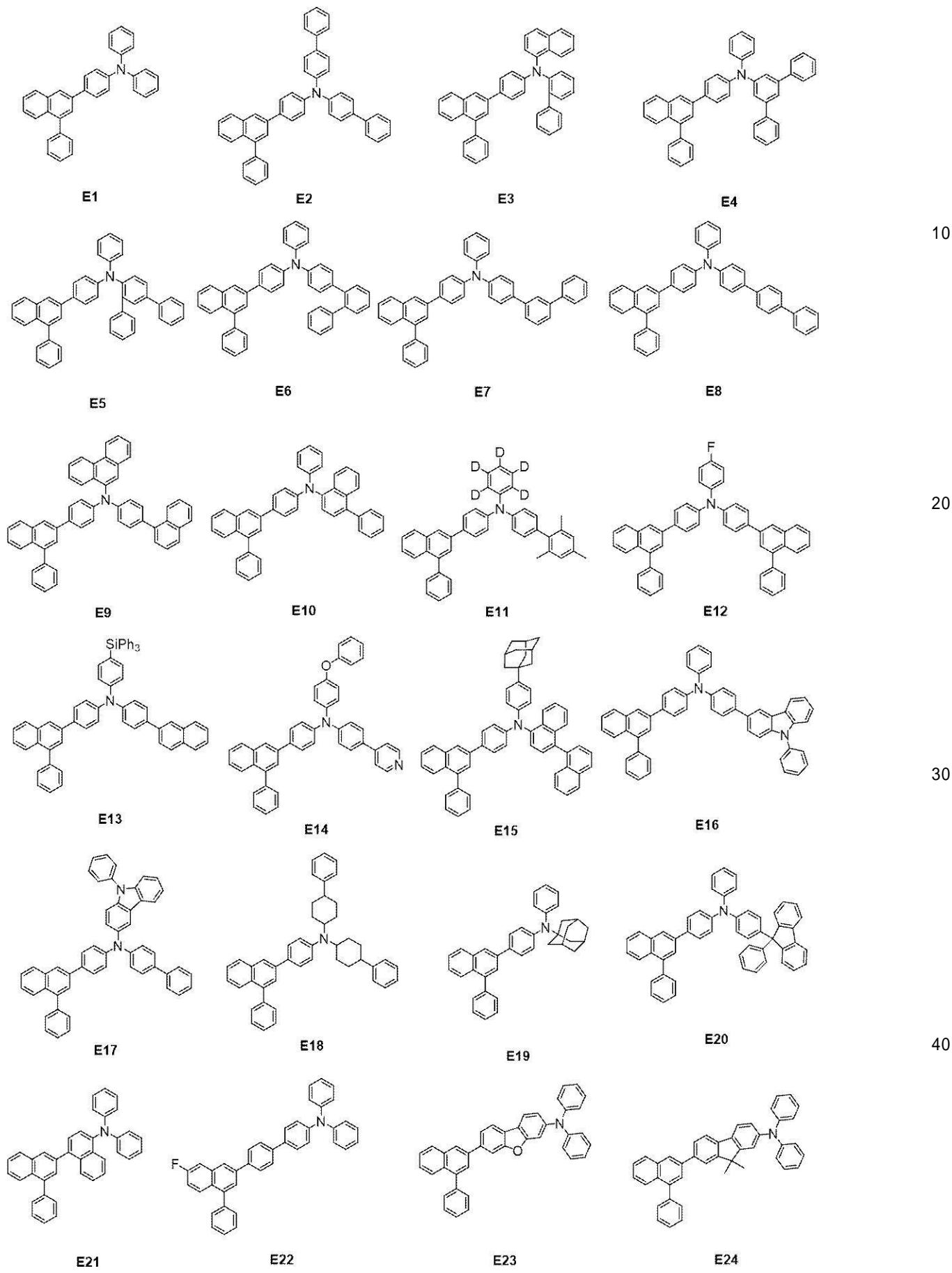
40

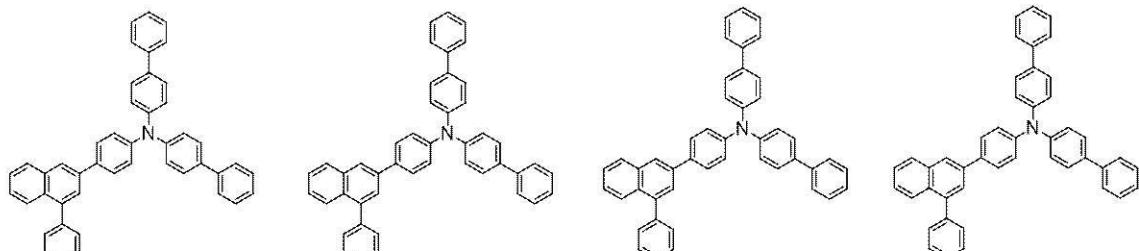
50



[ 化合物群 5 ]

【化 14】





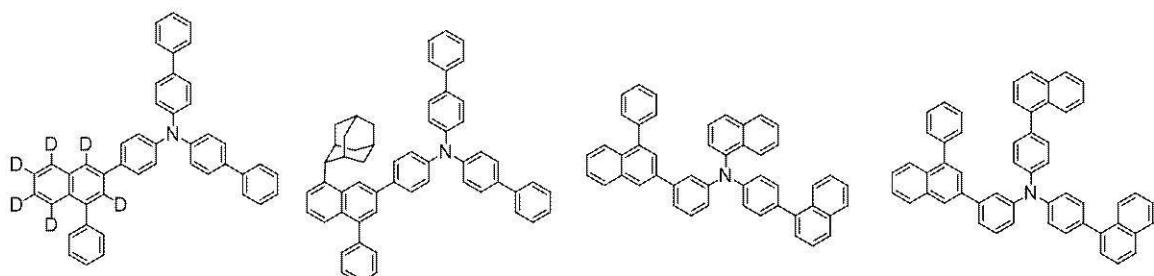
E25

E26

E27

E28

10



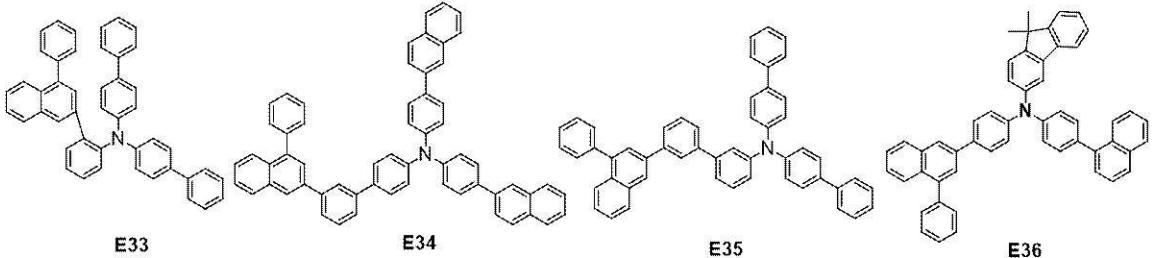
E29

E30

E31

E32

20



E33

E34

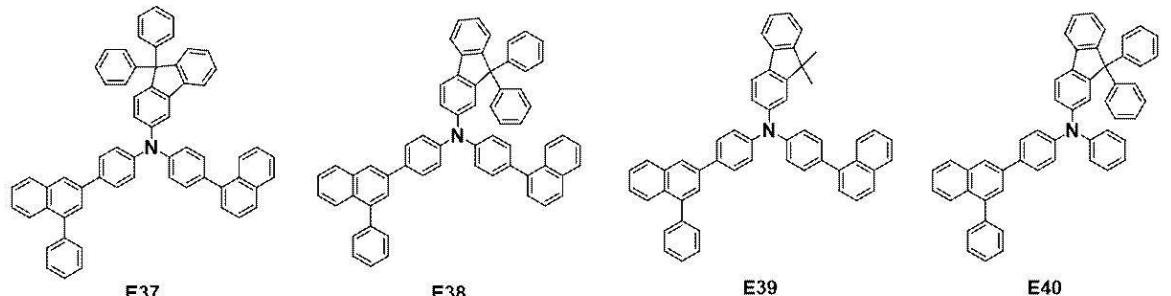
E35

E36

30

40

50



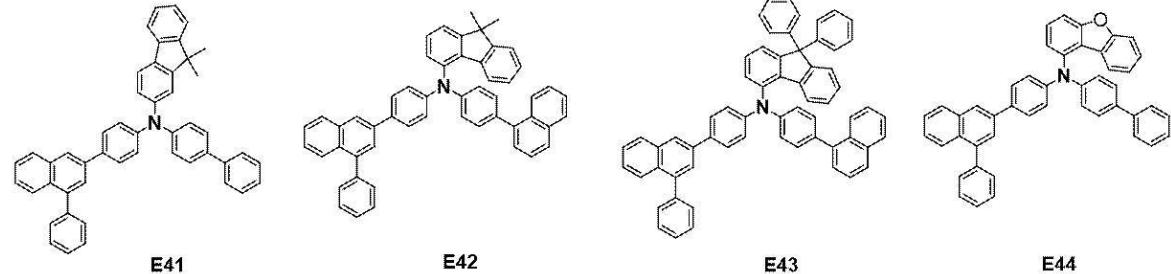
E37

E38

E39

E40

10



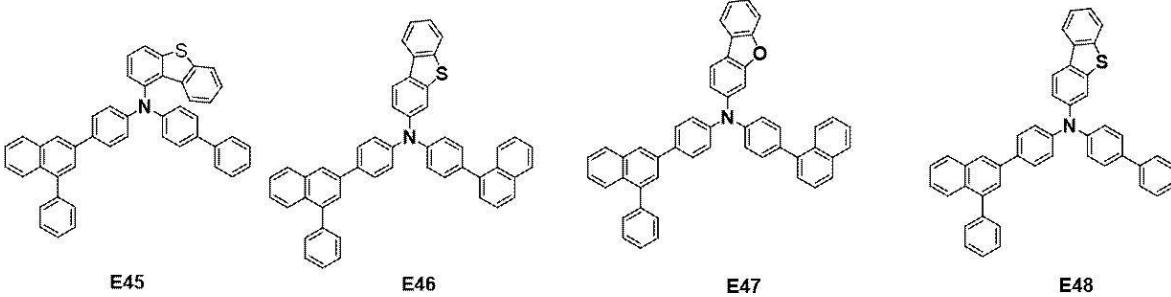
E41

E42

E43

E44

20



E45

E46

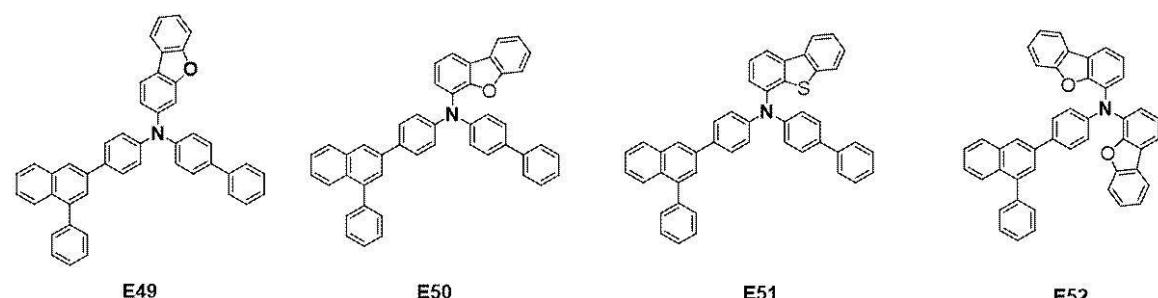
E47

E48

30

40

50

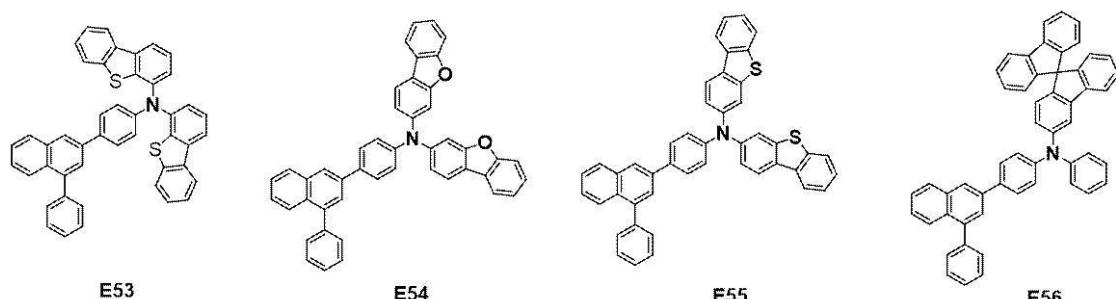


E49

E50

E51

E52

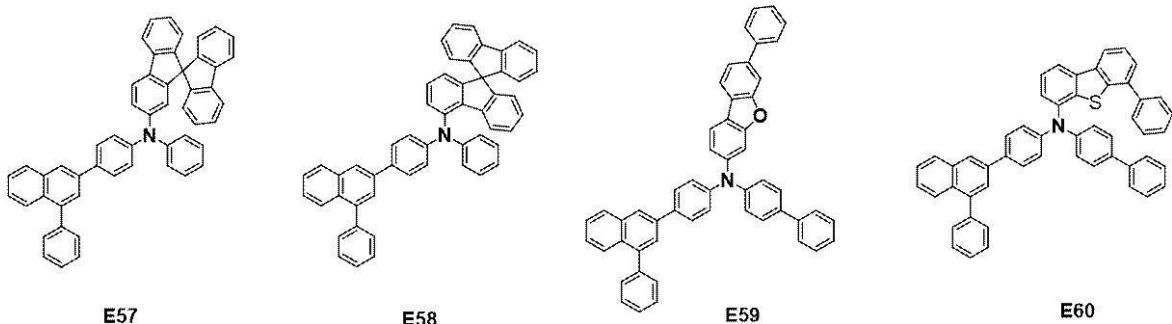


E53

E54

E55

E56



E57

E58

E59

E60

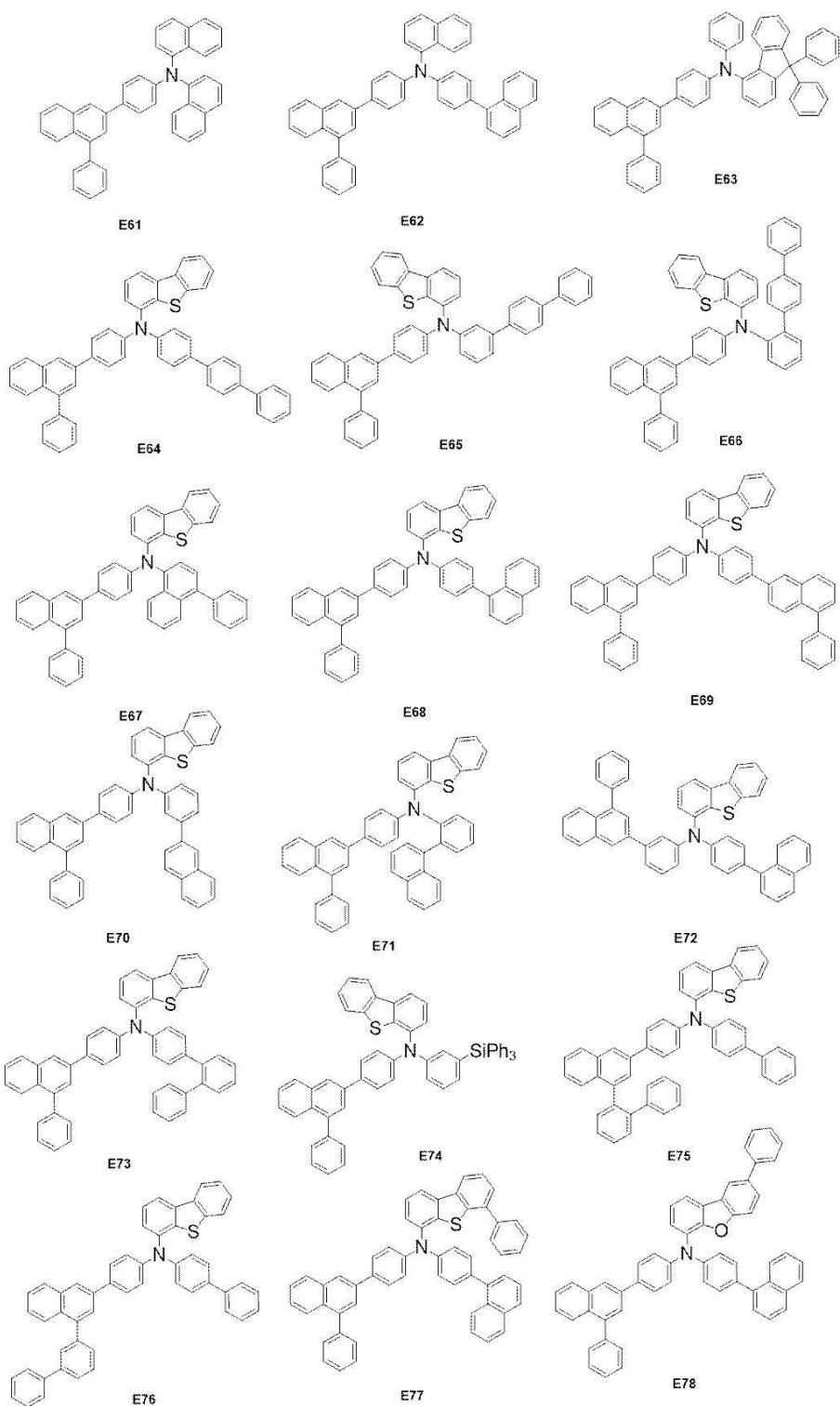
10

20

30

40

50



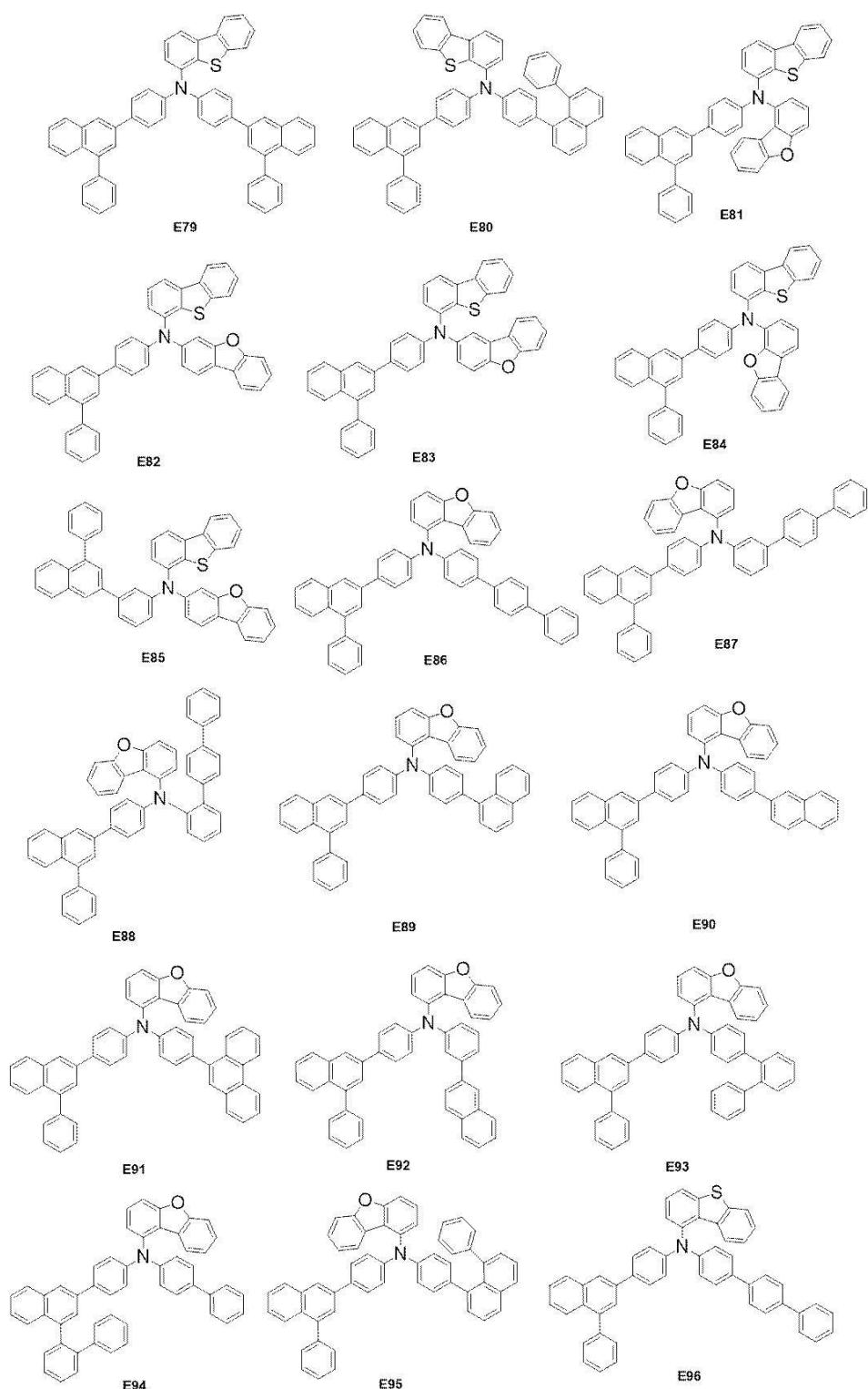
10

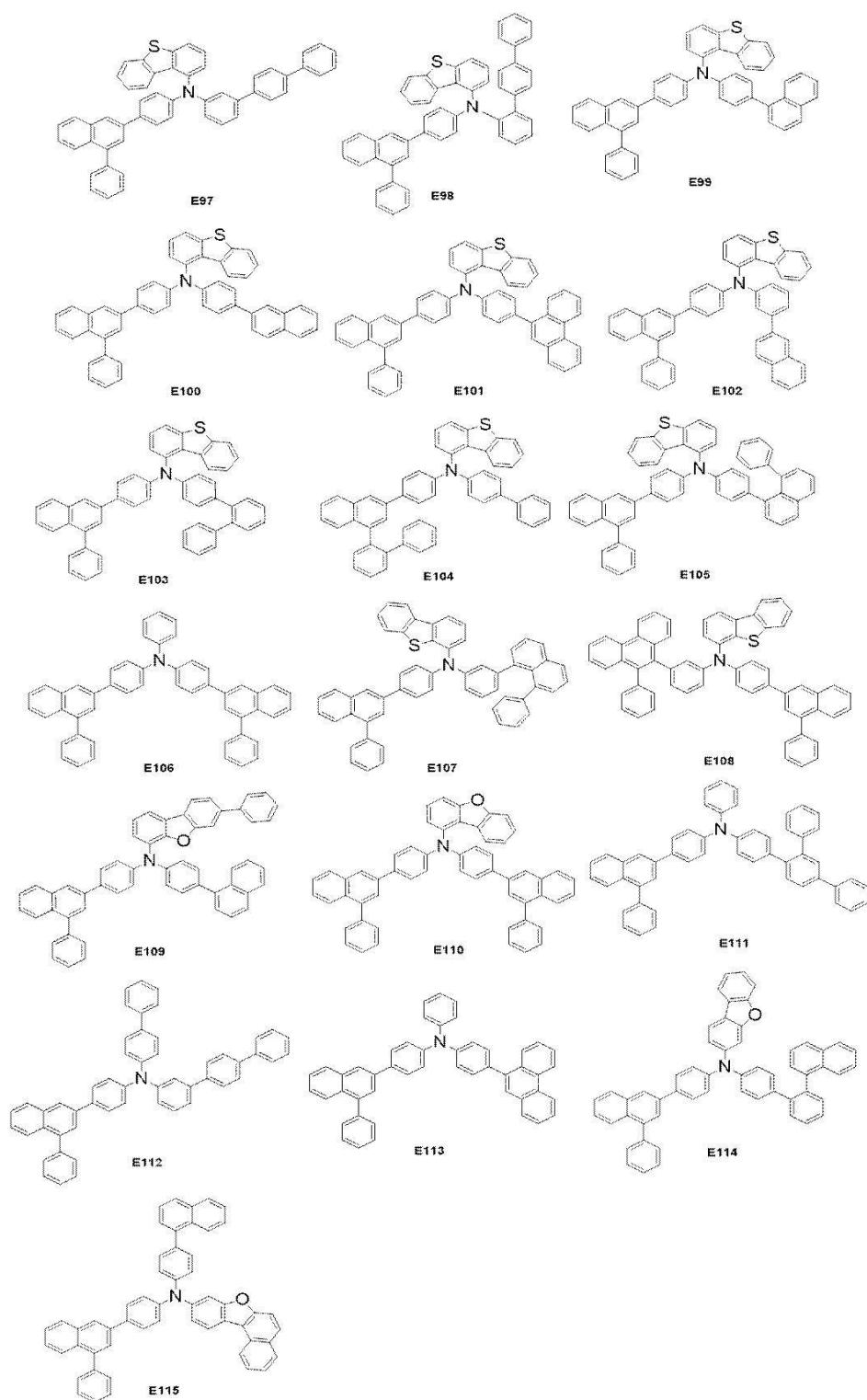
20

30

40

50





[ 化合物群 6 ]

10

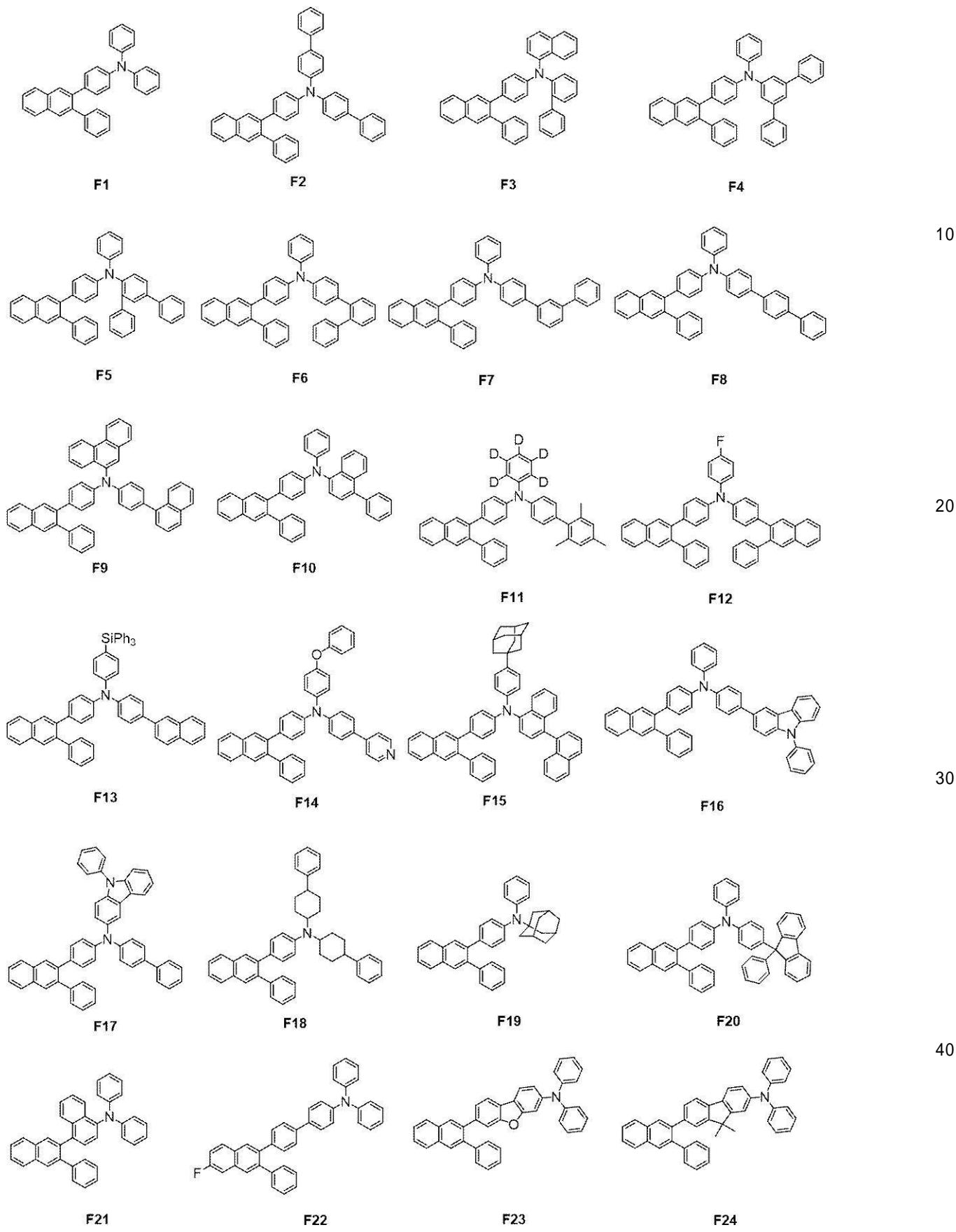
20

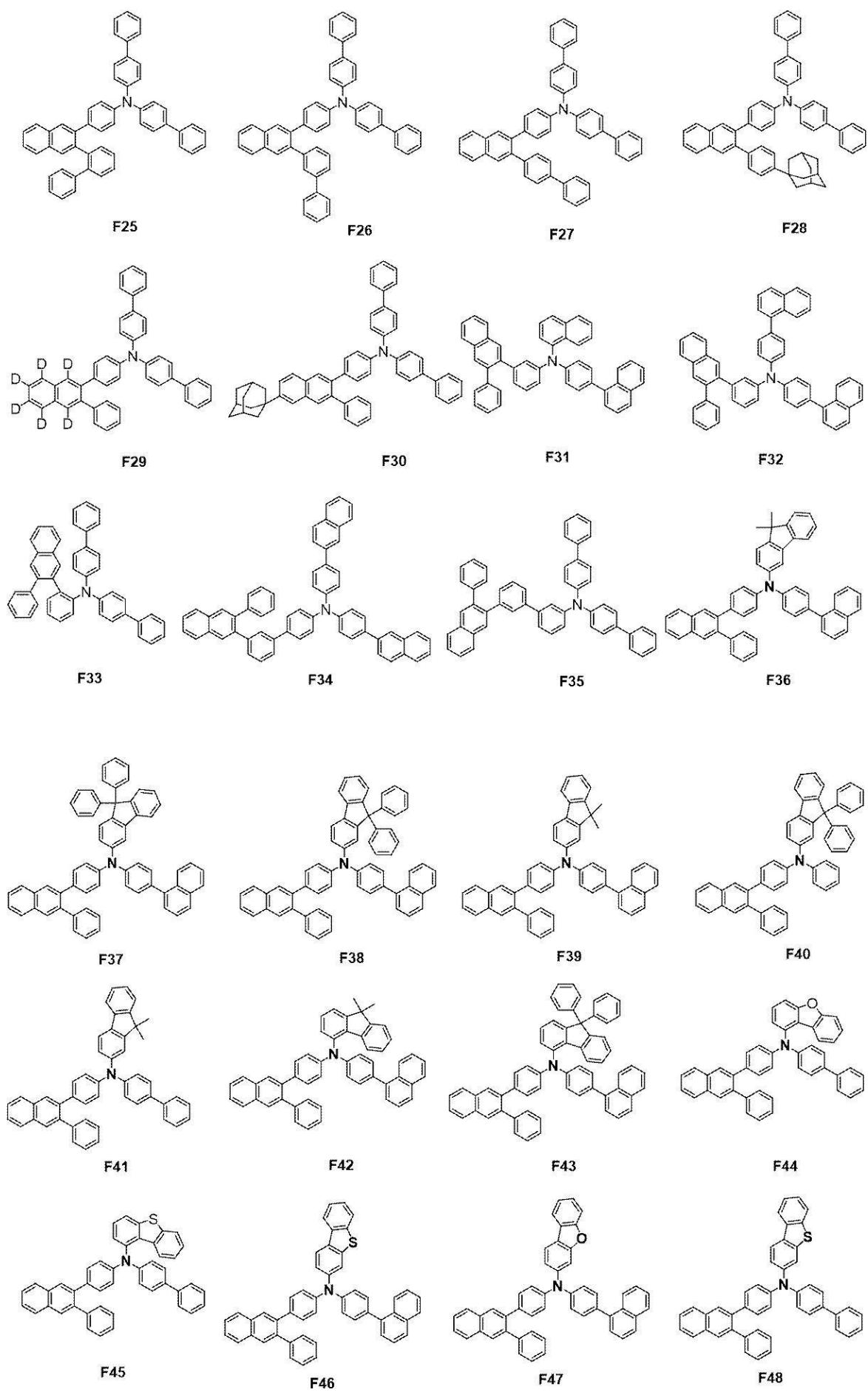
30

40

50

【化 15】





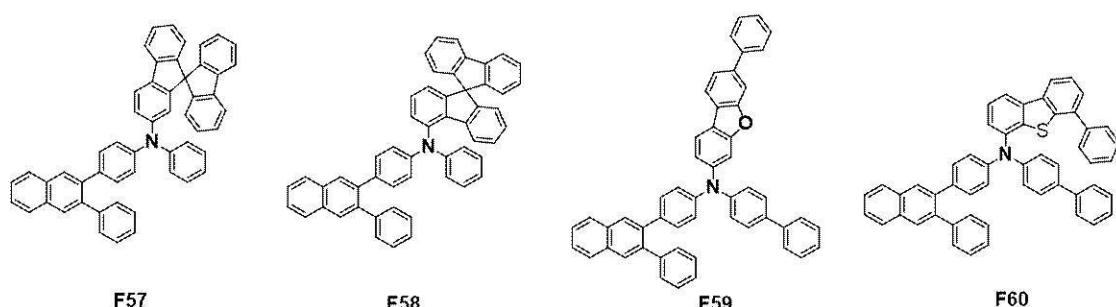
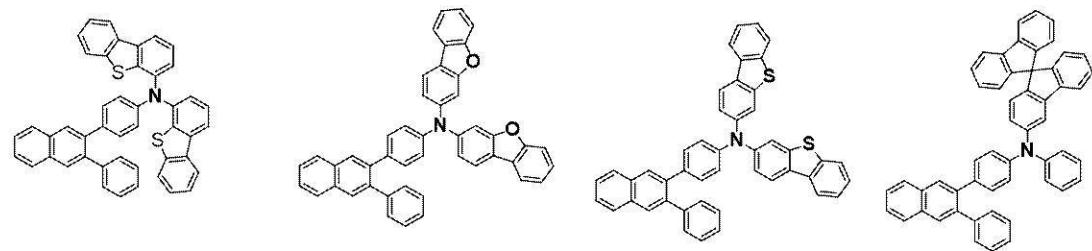
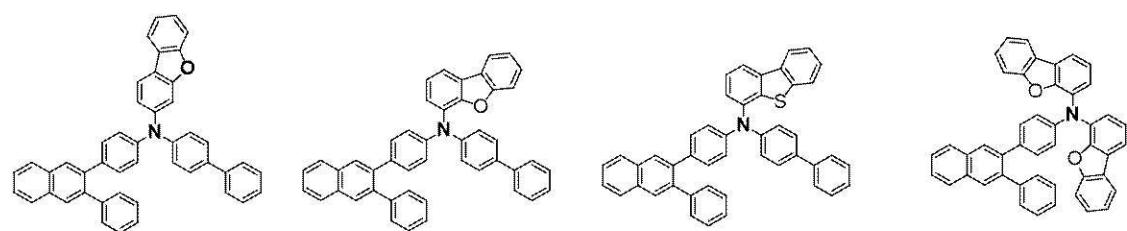
10

20

30

40

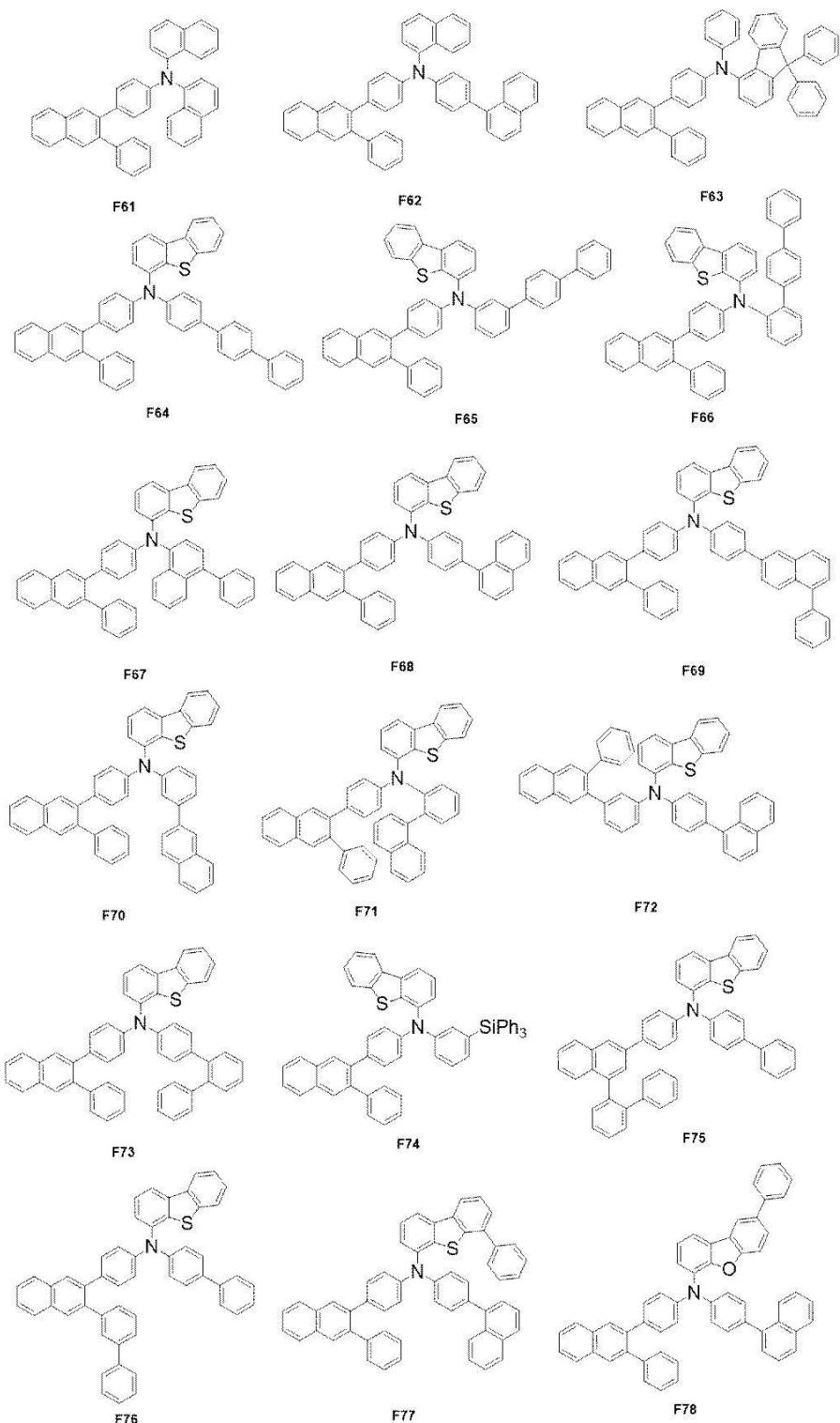
50



30

40

50



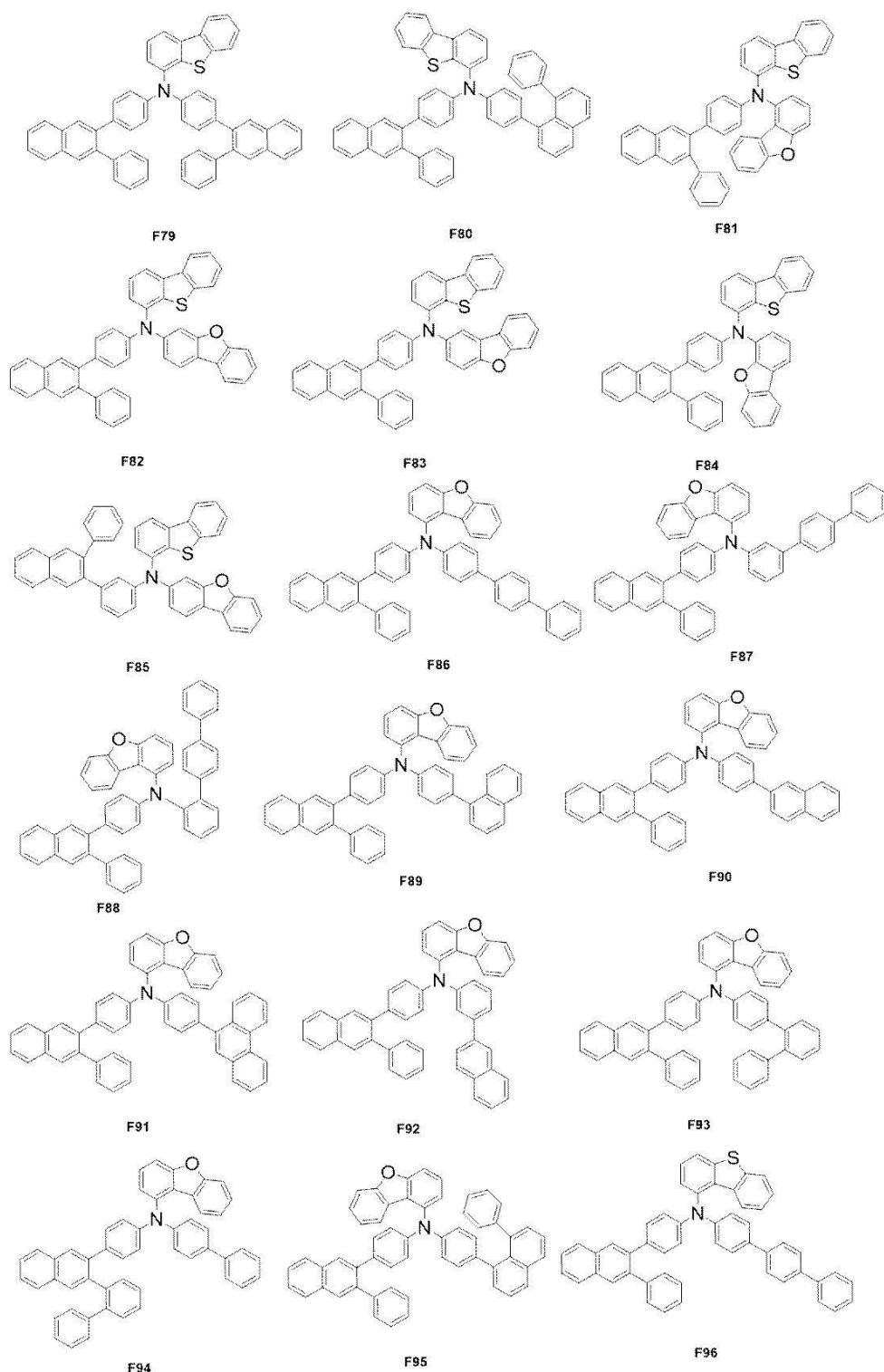
10

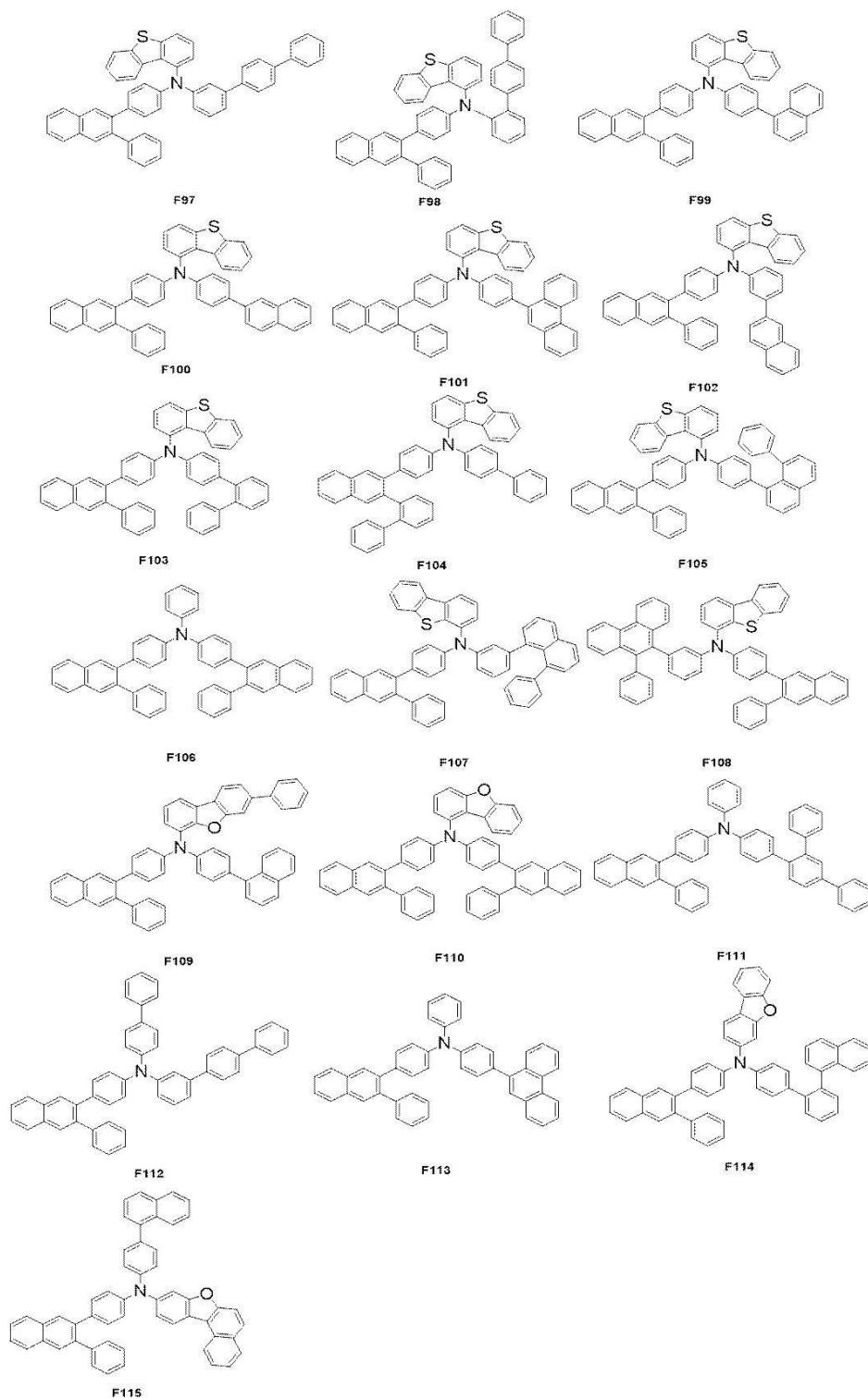
20

30

40

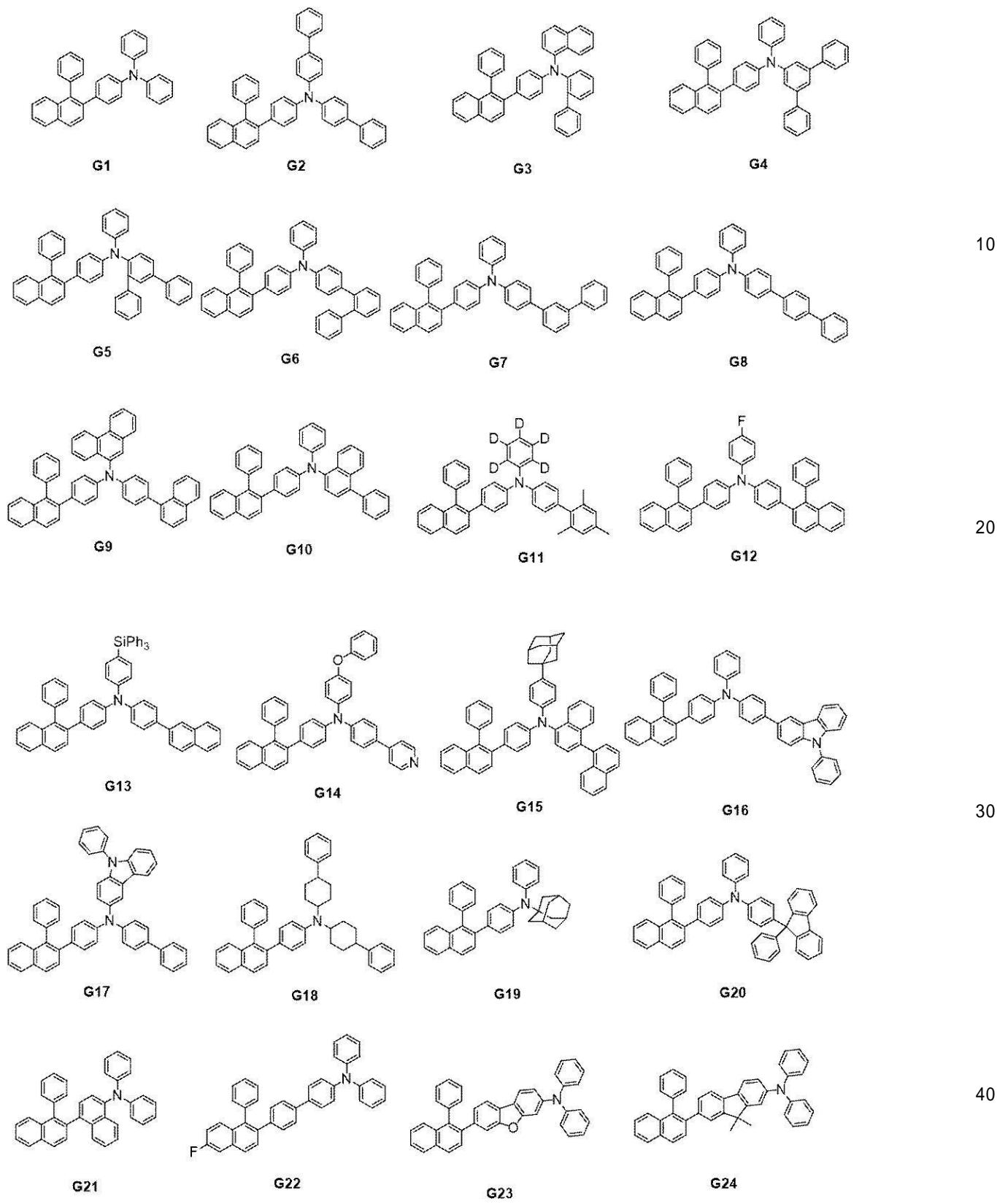
50

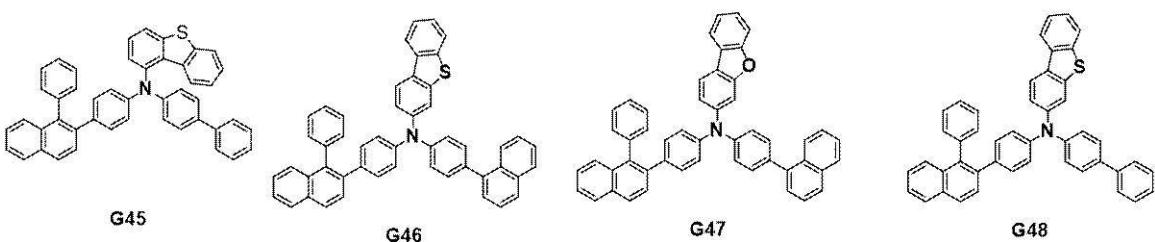
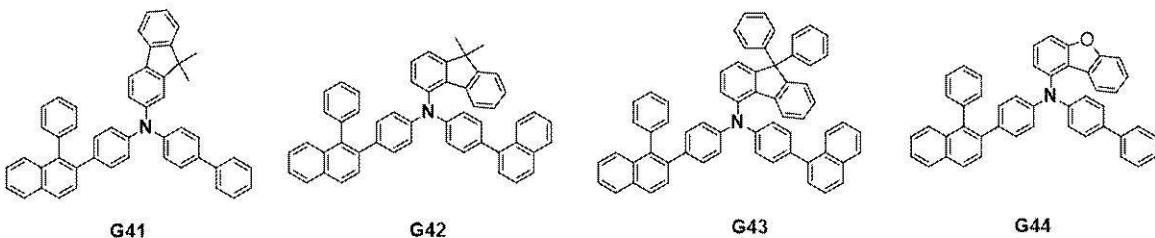
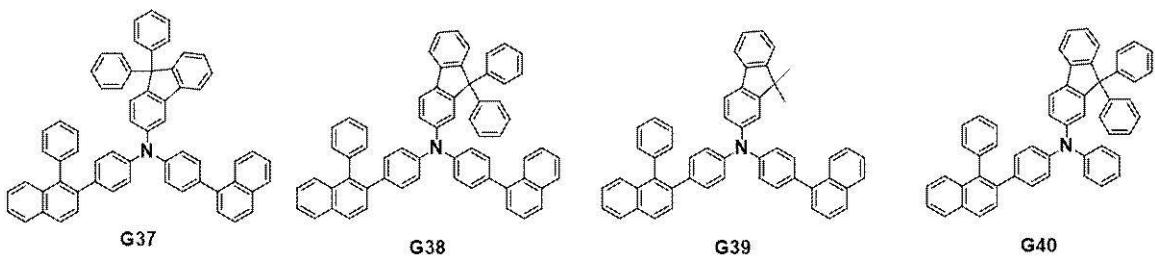
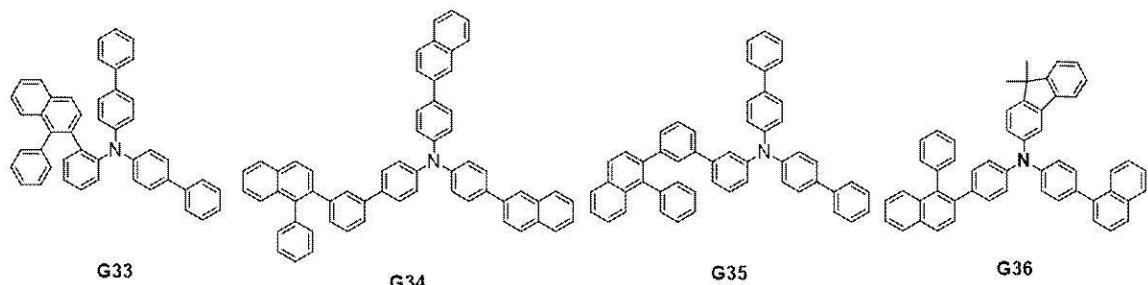
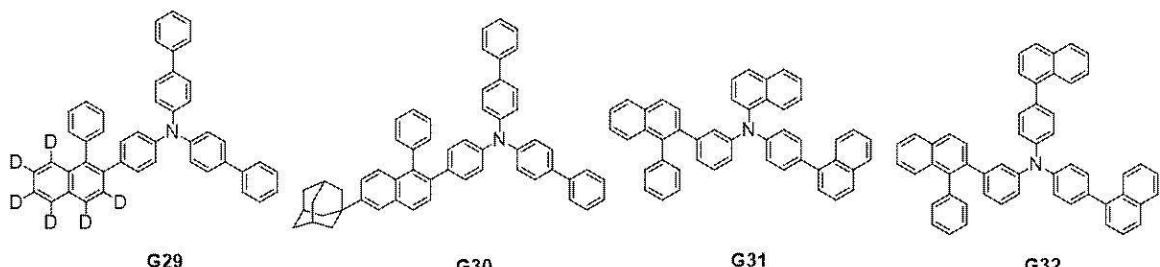
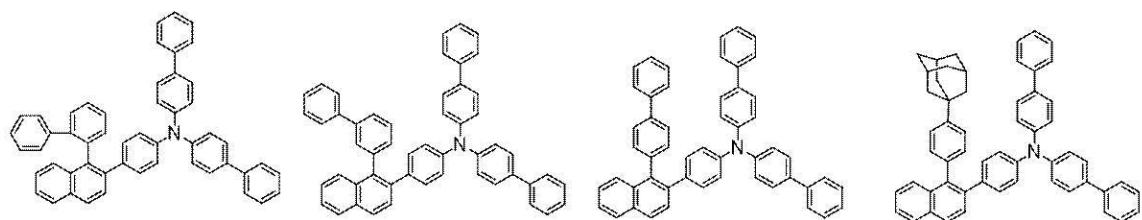


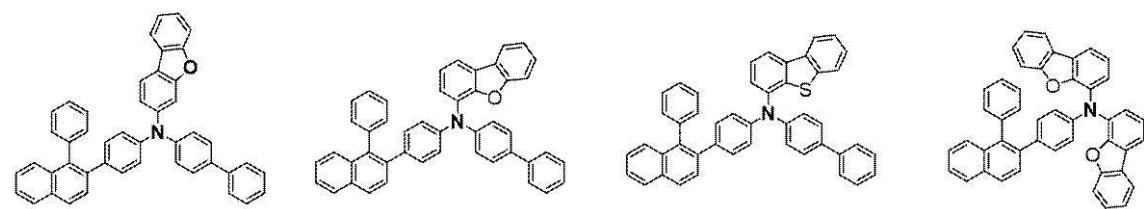


[ 化合物群 7 ]

【化 1 6】





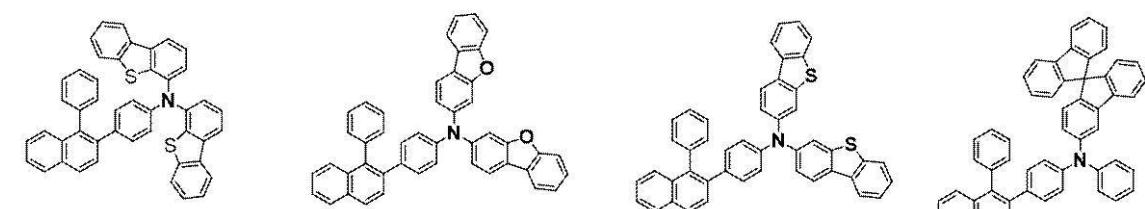


G49

G50

G51

G52

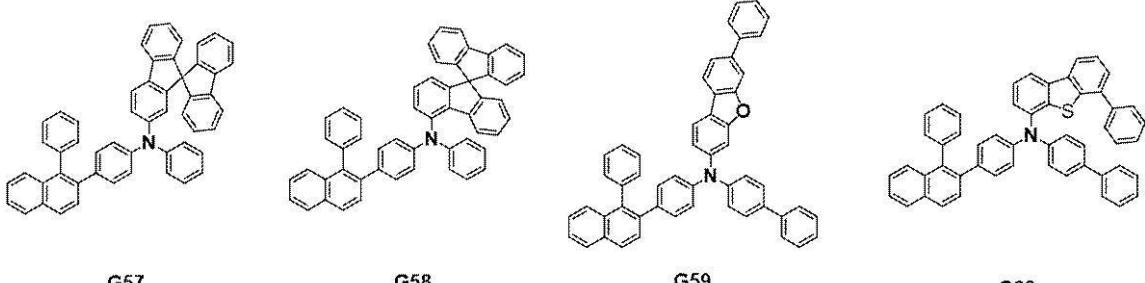


G53

G54

G55

G56



G57

G58

G59

G60

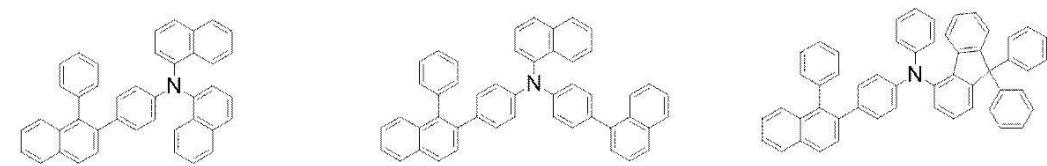
10

20

30

40

50

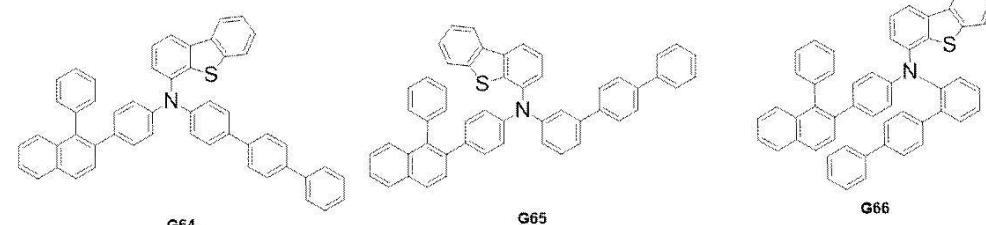


G61

G62

G63

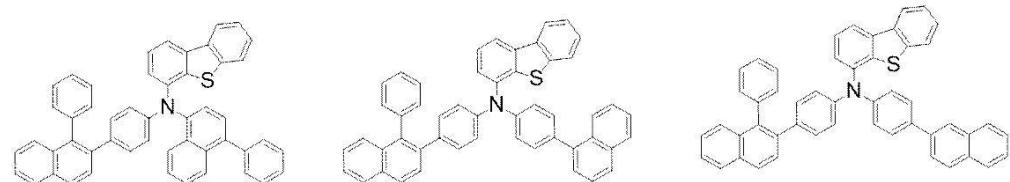
10



G64

G65

G66

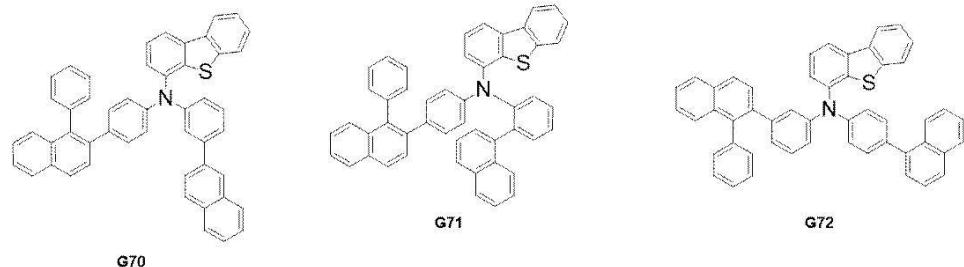


G67

G68

G69

20

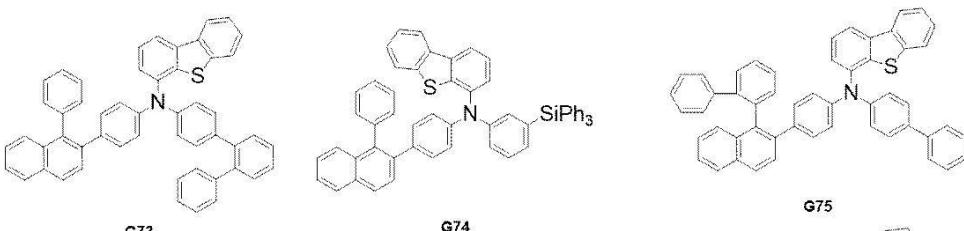


G70

G71

G72

30

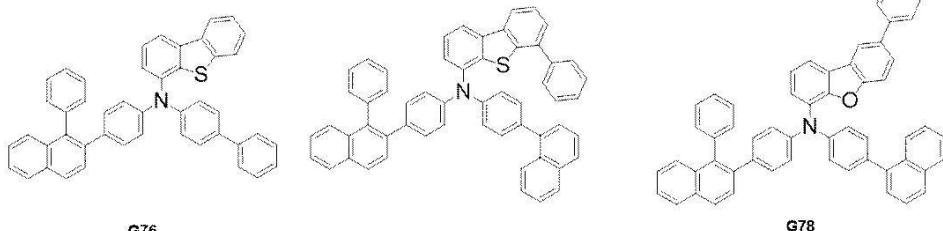


G73

G74

G75

40

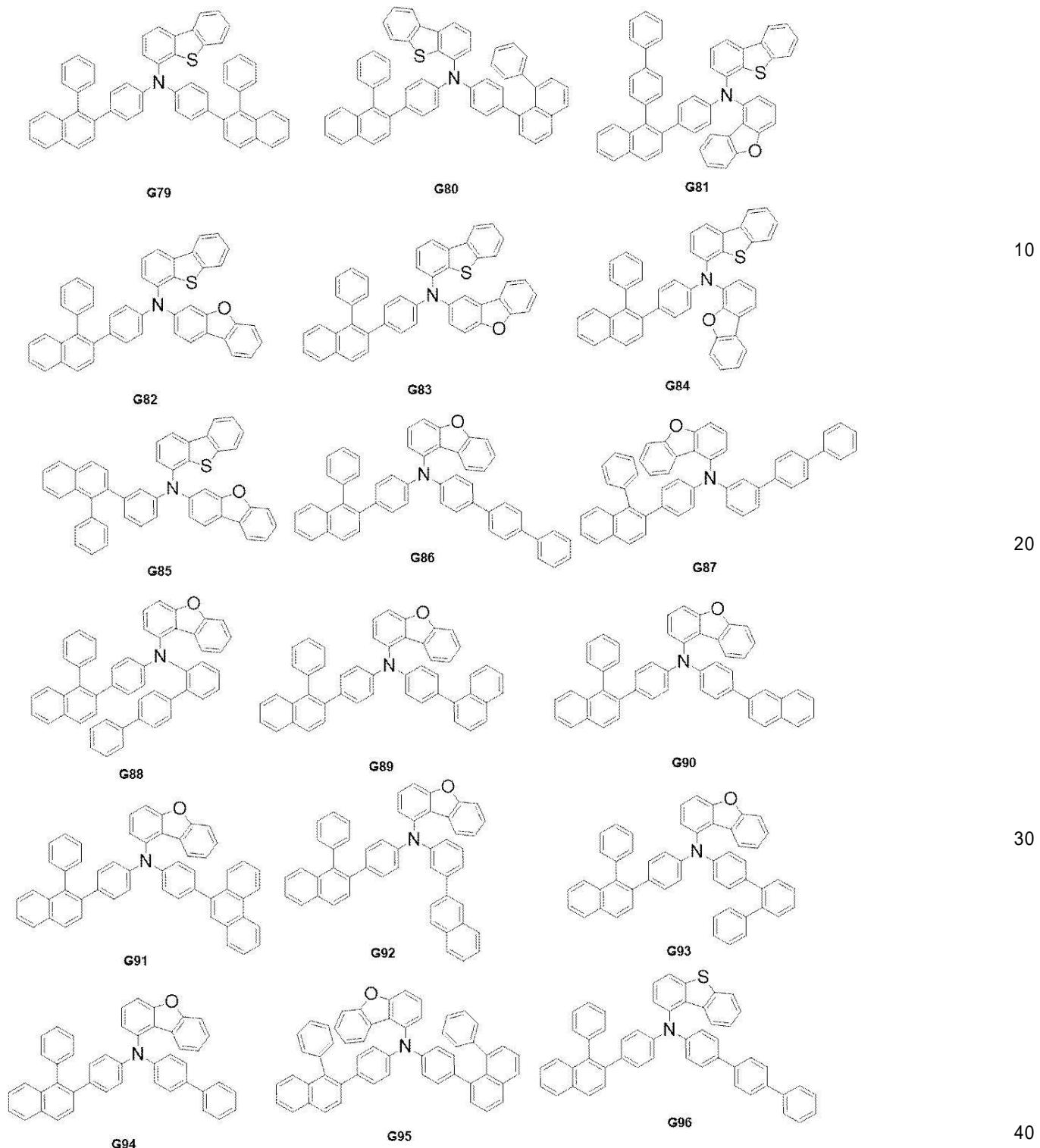


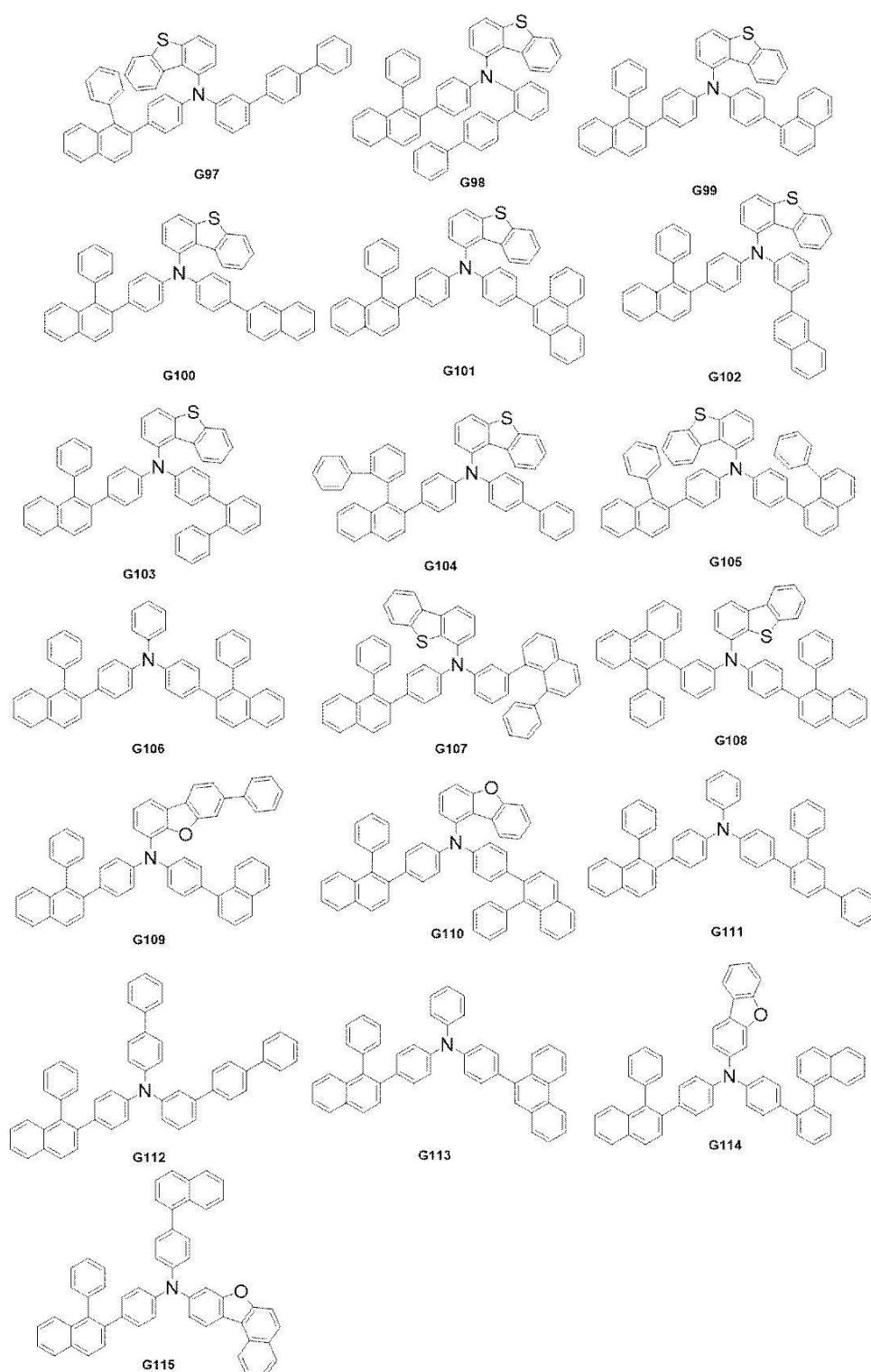
G76

G77

G78

50





## 【請求項 1 3】

第1電極と、

前記第1電極上に提供された正孔輸送領域と、

前記正孔輸送領域上に提供された発光層と、

前記発光層上に提供された電子輸送領域と、

前記電子輸送領域上に提供された第2電極と、を含み、

前記正孔輸送領域は、請求項1～12に記載の何れか1つのモノアミン化合物を含むことを特徴とする有機電界発光素子。

**【請求項 1 4】**

前記正孔輸送領域は、複数の層を有する多層構造を備え、  
前記複数の層のうち前記発光層と接する層が前記モノアミン化合物を含むことを特徴とする請求項1\_3に記載の有機電界発光素子。

**【請求項 1 5】**

前記正孔輸送領域は、

前記第1電極上に配置された正孔注入層と、

前記正孔注入層上に配置された正孔輸送層と、

前記正孔輸送層上に配置された電子阻止層と、を含み、

前記電子阻止層が前記モノアミン化合物を含むことを特徴とする請求項1\_3に記載の有機電界発光素子。 10

**【手続補正 2】**

【補正対象書類名】明細書

【補正対象項目名】全文

【補正方法】変更

【補正の内容】

【発明の詳細な説明】

【技術分野】

【0 0 0 1】

本発明は、有機電界発光素子及び有機電界発光素子用モノアミン化合物に関する。 20

【背景技術】

【0 0 0 2】

最近、映像表示装置として、有機電界発光表示装置(Organic Electroluminescence Display)の開発が盛んに行われてきた。有機電界発光表示装置は、液晶表示装置などとは違って、第1電極及び第2電極から注入された正孔及び電子を発光層において再結合させることにより、発光層で有機化合物を含む発光材料を発光させて表示を実現する、いわゆる自発光型の表示装置である。

【0 0 0 3】

有機電界発光素子を表示装置に応用するに当たり、有機電界発光素子の低駆動電圧化、高発光効率化、及び長寿命化が求められており、これを安定的に実現することができる有機電界発光素子用材料の開発が継続的に求められている。 30

【発明の概要】

【発明が解決しようとする課題】

【0 0 0 4】

本発明は、有機電界発光素子及び有機電界発光素子用アミン化合物を提供することを一目的とし、より具体的には、高効率の有機電界発光素子及び有機電界発光素子の正孔輸送領域に含まれるアミン化合物を提供することを一目的とする。

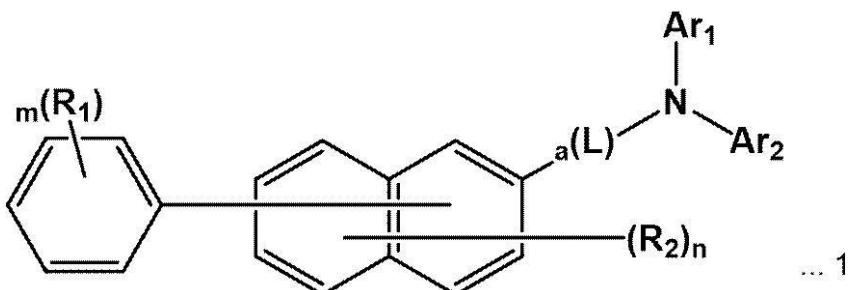
【課題を解決するための手段】

【0 0 0 5】

本発明の一実施形態は、第1電極、第1電極上に提供された正孔輸送領域、正孔輸送領域上に提供された発光層、発光層上に提供された電子輸送領域、及び電子輸送領域上に提供された第2電極を含み、正孔輸送領域が下記化学式1で表されるモノアミン化合物を含む有機電界発光素子を提供する。 40

【0 0 0 6】

## 【化1】



10

## 【0007】

化学式1において、Ar<sub>1</sub>及びAr<sub>2</sub>は、それぞれ独立して置換若しくは無置換の炭素数1以上10以下のアルキル基、置換若しくは無置換の環形成炭素数3以上20以下のシクロアルキル基、置換若しくは無置換の環形成炭素数6以上30以下のアリール基、または置換若しくは無置換の環形成炭素数2以上30以下のヘテロアリール基であり、Lは、置換若しくは無置換の環形成炭素数6以上30以下のアリーレン基、または置換若しくは無置換の環形成炭素数2以上30以下のヘテロアリーレン基であり、R<sub>1</sub>は水素原子、重水素原子、ハロゲン原子、置換若しくは無置換の炭素数1以上20以下のアルキル基、置換若しくは無置換の環形成炭素数3以上20以下のシクロアルキル基、または置換若しくは無置換の環形成炭素数6以上30以下のアリール基であり、R<sub>2</sub>は水素原子、重水素原子、ハロゲン原子、置換若しくは無置換の炭素数1以上20以下のアルキル基、または置換若しくは無置換の環形成炭素数3以上20以下のシクロアルキル基であり、aは0以上3以下の整数であり、mは0以上1以下の整数であり、nは0以上6以下の整数であり、Ar<sub>1</sub>及びAr<sub>2</sub>において、何れか1つが3-ジベンゾフラニル基である場合、残りの1つが9-フェナントリル基である場合を除く。

20

## 【0008】

正孔輸送領域は複数の層を有する多層構造であり、上記複数の層のうち上記発光層と接する層が上述した本発明の一実施形態によるモノアミン化合物を含むものであってもよい。

## 【0009】

正孔輸送領域は、第1電極上に配置された正孔注入層、正孔注入層上に配置された正孔輸送層、及び正孔輸送層上に配置された電子阻止層を含み、電子阻止層が上述した本発明の一実施形態に係るモノアミン化合物を含むものであってもよい。

30

## 【0010】

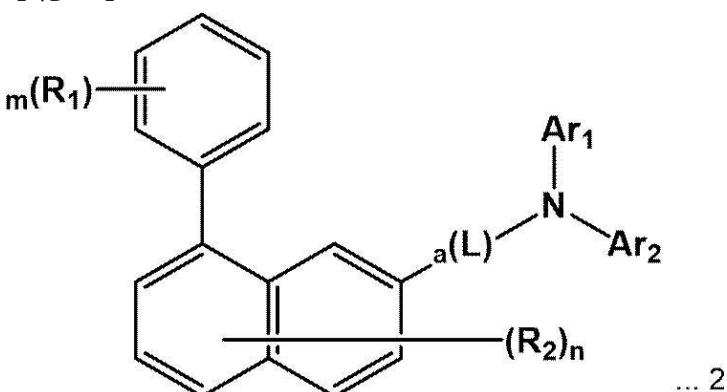
電子輸送領域は、発光層上に提供された正孔阻止層、正孔阻止層上に提供された電子輸送層、及び電子輸送層上に提供された電子注入層を含んでもよい。

## 【0011】

化学式1は、下記化学式2～化学式8の何れか1つで表されてもよい。

## 【0012】

## 【化2】

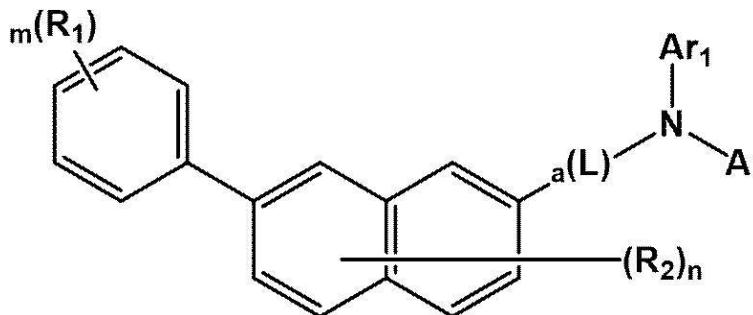


40

50

【 0 0 1 3 】

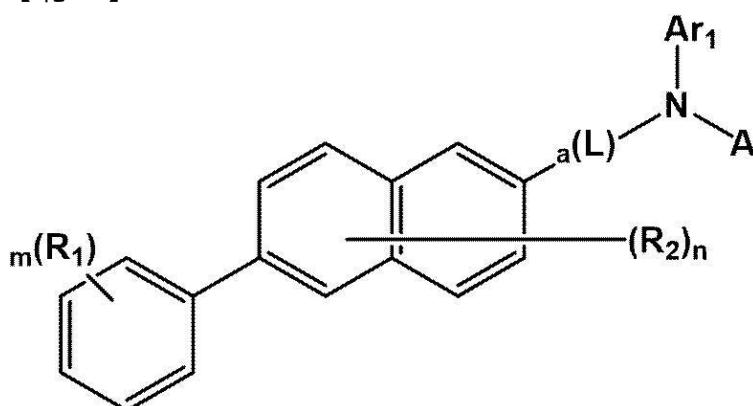
【 化 3 】



10

【 0 0 1 4 】

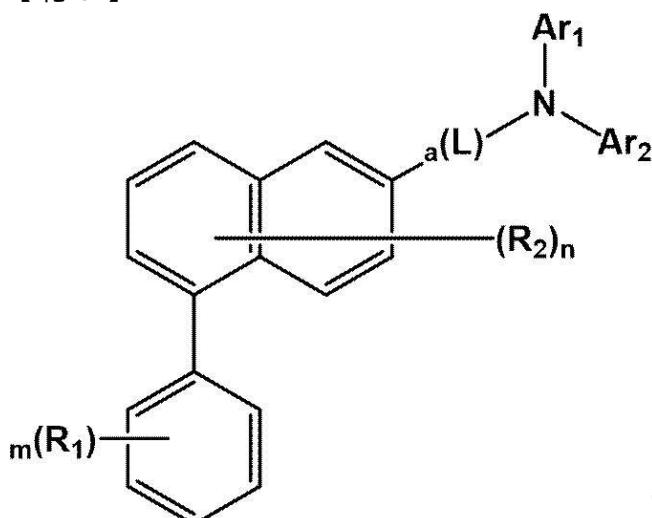
【 化 4 】



20

【 0 0 1 5 】

【 化 5 】



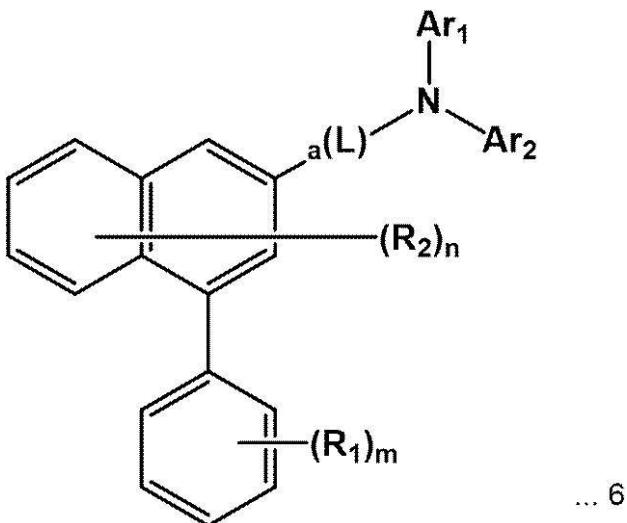
30

【 0 0 1 6 】

40

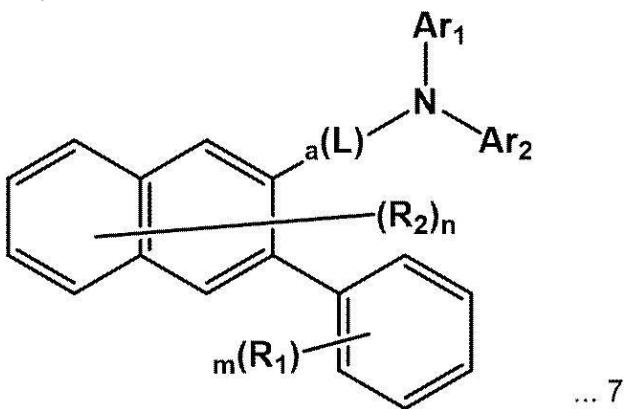
50

【化6】



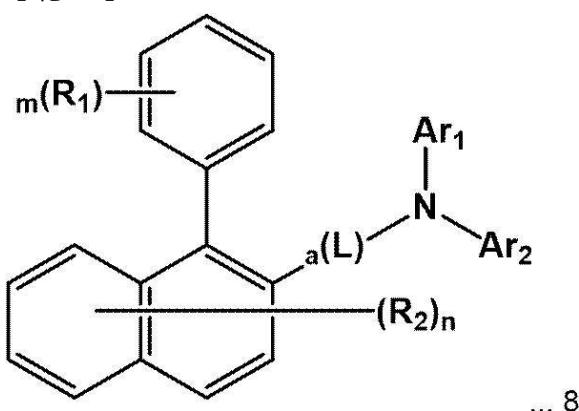
【0 0 1 7】

【化7】



【0 0 1 8】

【化8】



【0 0 1 9】

化学式2～8において、Ar<sub>1</sub>、Ar<sub>2</sub>、L、R<sub>1</sub>、R<sub>2</sub>、a、m、及びnは、化学式1での定義と同一である。

【0 0 2 0】

Lは、置換若しくは無置換の環形成炭素数6以上12以下のアリーレン基であってもよい。

【0 0 2 1】

Lは、置換若しくは無置換のフェニレン基であってもよい。

50

## 【0022】

$A_{r_1}$  及び  $A_{r_2}$  は、それぞれ独立して置換若しくは無置換の環形成炭素数 6 以上 12 以下のアリール基であってもよい。

## 【0023】

$A_{r_1}$  及び  $A_{r_2}$  は、それぞれ独立して置換若しくは無置換のフェニル基、置換若しくは無置換のビフェニリル基、置換若しくは無置換のナフチル基、または置換若しくは無置換のフルオレニル基であってもよい。

## 【0024】

$A_{r_1}$  及び  $A_{r_2}$  は、それぞれ独立して置換若しくは無置換の環形成炭素数 5 以上 12 以下のヘテロアリール基であってもよい。

10

## 【0025】

$A_{r_1}$  及び  $A_{r_2}$  は、それぞれ独立して置換若しくは無置換のジベンゾフラニル基、置換若しくは無置換のジベンゾチオフェニル基、または置換若しくは無置換のカルバゾリル基であってもよい。

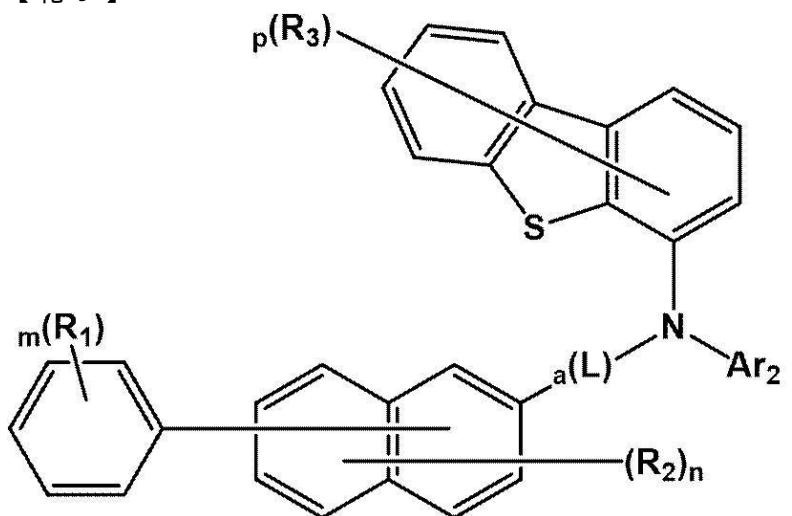
## 【0026】

$A_{r_1}$  及び  $A_{r_2}$  の少なくとも 1 つは、置換若しくは無置換の 4 - ジベンゾフラニル基であってもよい。

## 【0027】

化学式 1 で表されるモノアミン化合物は、下記化学式 9 で表されてもよい。

## 【化9】



20

30

化学式 9 において、 $R_3$  は、水素原子、重水素原子、ハロゲン原子、置換若しくは無置換の炭素数 1 以上 20 以下のアルキル基、置換若しくは無置換の環形成炭素数 3 以上 20 以下のシクロアルキル基、または置換若しくは無置換の環形成炭素数 6 以上 30 以下のアリール基であってもよく、 $p$  は 0 以上 7 以下の整数であってもよく、 $A_{r_2}$ 、 $L$ 、 $R_1$ 、 $R_2$ 、 $a$ 、 $m$ 、及び  $n$  は、化学式 1 で定義したものと同じである。

## 【0028】

本発明の一実施形態は、上記化学式 1 で表されるモノアミン化合物を提供する。

40

## 【発明の効果】

## 【0029】

本発明の一実施形態による有機電界発光素子は、効率に優れている。

## 【0030】

本発明の一実施形態によるモノアミン化合物は、有機電界発光素子の正孔輸送領域の材料として用いられてもよく、これを用いることにより、有機電界発光素子の効率及び寿命の向上が可能である。

## 【0031】

本発明の一実施形態によるモノアミン化合物は、有機電界発光素子の正孔輸送領域の材料

50

として用いられてもよく、これを用いることにより、有機電界発光素子の低駆動電圧化効果がある。

【図面の簡単な説明】

【0032】

【図1】本発明の一実施形態による有機電界発光素子を概略的に示す断面図である。

【図2】本発明の一実施形態による有機電界発光素子を概略的に示す断面図である。

【図3】本発明の一実施形態による有機電界発光素子を概略的に示す断面図である。

【発明を実施するための形態】

【0033】

以上の本発明の目的、他の目的、特徴、及び利点は、添付の図面及び以下の好ましい実施形態により容易に理解できるだろう。しかし、本発明は、ここに説明する実施形態に限定されず、他の形態で具体化されることができる。むしろ、ここで紹介する実施形態は、開示された内容が徹底且つ完全になるように、そして、通常の技術者に本発明の思想が十分に伝達されるように提供するものである。

【0034】

各図面を説明するにあたり、類似する構成要素には類似する参照符号を使用した。添付の図面において、構造物の寸法は、本発明を明確にするために実際より拡大して示したものである。第1、第2などの用語は、様々な構成要素を説明するために用いられるが、上記構成要素は上記用語により限定されてはならない。上記用語は1つの構成要素を他の構成要素から区別する目的でのみ用いられる。例えば、本発明の権利範囲から外れない範囲内で、第1構成要素は第2構成要素と命名されてもよく、同様に、第2構成要素も第1構成要素と命名されてもよい。単数の表現は文脈上明らかに違う意味を持たない限り、複数の表現を含む。

【0035】

本明細書において、「含む」または「有する」などの用語は、明細書上に記載された特徴、数字、段階、動作、構成要素、部品、またはこれらの組み合わせが存在することを規定するためであり、1つまたはそれ以上の他の特徴や数字、段階、動作、構成要素、部品またはこれらの組み合わせの存在または付加可能性を事前に排除するものではないと理解すべきである。また、層、膜、領域、板などの部分が他の部分の「上に」あるというときは、他の部分の「真上に」ある場合のみならず、その中間に他の部分がある場合も含む。逆に、層、膜、領域、板などの部分が他の部分の「下部に」あるというときは、他の部分の「真下に」ある場合のみならず、その中間に他の部分がある場合も含む。

【0036】

まず、図1～図3を参照して本発明の一実施形態による有機電界発光素子について説明する。

【0037】

図1は本発明の一実施形態による有機電界発光素子を概略的に示す断面図である。図2は本発明の一実施形態による有機電界発光素子を概略的に示す断面図である。図3は本発明の一実施形態による有機電界発光素子を概略的に示す断面図である。

【0038】

図1～図3を参照すると、本発明の一実施形態による有機電界発光素子10は、第1電極EL1、正孔輸送領域HTR、発光層EML、電子輸送領域ETR、及び第2電極EL2を含む。

【0039】

正孔輸送領域HTRは、本発明の一実施形態によるモノアミン化合物を含む。以下、本発明の一実施形態によるモノアミン化合物を詳しく説明してから、有機電界発光素子10の各層について説明する。

【0040】

本明細書において、「置換若しくは無置換の」は、重水素原子、ハロゲン原子、シアノ基、ニトロ基、シリル基、ホウ素基、ホスフィン基、アルキル基、アルケニル基、アリール

10

20

30

40

50

基、及びヘテロ環基からなる群より選択される 1 つ以上の置換基で置換されている、または置換されていないことを意味する。また、例示された置換基のそれぞれは、置換されたものであってもよく、または置換されていないものであってもよい。例えば、ビフェニリル基はアリール基と解釈されてもよく、フェニル基で置換されたフェニル基と解釈されてもよい。

#### 【 0 0 4 1 】

本明細書において、ハロゲン原子の例としては、フッ素原子、塩素原子、臭素原子、またはヨウ素原子がある。

#### 【 0 0 4 2 】

本明細書において、アルキル基は、直鎖、分岐鎖または環状であってもよい。アルキル基の炭素数は、1 以上 30 以下、1 以上 20 以下、1 以上 10 以下、または 1 以上 4 以下である。アルキル基の例としては、メチル基、エチル基、n - プロピル基、イソプロピル基、n - ブチル基、s - ブチル基、t - ブチル基、i - ブチル基、2 - エチルブチル基、3 , 3 - ジメチルブチル基、n - ペンチル基、i - ペンチル基、ネオペンチル基、t - ペンチル基、シクロペンチル基、1 - メチルペンチル基、3 - メチルペンチル基、2 - エチルペンチル基、4 - メチル - 2 - ペンチル基、n - ヘキシル基、1 - メチルヘキシル基、2 - エチルヘキシル基、2 - ブチルヘキシル基、シクロヘキシル基、4 - メチルシクロヘキシル基、4 - t - ブチルシクロヘキシル基、n - ヘプチル基、1 - メチルヘプチル基、2 , 2 - ジメチルヘプチル基、2 - エチルヘプチル基、2 - ブチルヘプチル基、n - オクチル基、t - オクチル基、2 - エチルオクチル基、2 - ブチルオクチル基、2 - ヘキシルオクチル基、3 , 7 - ジメチルオクチル基、シクロオクチル基、n - ノニル基、n - デシル基、アダマンチル基、2 - エチルデシル基、2 - ブチルデシル基、2 - ヘキシルデシル基、2 - オクチルデシル基、n - ウンデシル基、n - ドデシル基、2 - エチルドデシル基、2 - ブチルドデシル基、2 - ヘキシルドデシル基、2 - オクチルドデシル基、n - トリデシル基、n - テトラデシル基、n - ペンタデシル基、n - ヘキサデシル基、2 - エチルヘキサデシル基、2 - ブチルヘキサデシル基、2 - ヘキシルヘキサデシル基、2 - オクチルヘキサデシル基、n - ヘプタデシル基、n - オクタデシル基、n - ノナデシル基、n - イコシル基、2 - エチルイコシル基、2 - ブチルイコシル基、2 - ヘキシルイコシル基、2 - オクチルイコシル基、n - ヘンイコシル基、n - ドコシル基、n - トリコシル基、n - テトラコシル基、n - ペンタコシル基、n - ヘキサコシル基、n - ヘプタコシル基、n - オクタコシル基、n - ノナコシル、及び n - トリエアコンチル基などが挙げられるが、これらに限定されない。

#### 【 0 0 4 3 】

本明細書において、アリール基は、芳香族炭化水素環から誘導された任意の作用基または置換基を意味する。アリール基は、単環式アリール基または多環式アリール基であってもよい。アリール基の環形成炭素数 6 以上 30 以下、6 以上 20 以下、または 6 以上 12 以下であってもよい。アリール基の例としては、フェニル基、ナフチル基、フルオレニル基、アントラセニル基、フェナントリル基、ビフェニリル基、ターフェニリル基、クオーターフェニリル基、キンクフェニリル基、セクシフェニリル基、ビフェニレニル基、トリフェニレニル基、ピレニル基、ベンゾフルオランテニル基、クリセニル基などが挙げられるが、これらに限定されない。

#### 【 0 0 4 4 】

本明細書において、フルオレニル基は置換されてもよく、置換基 2 つが互いに結合してスピロ構造を形成してもよい。フルオレニル基が置換される場合の例示は下記の通りである。但し、これに限定されるものではない。

#### 【 0 0 4 5 】

10

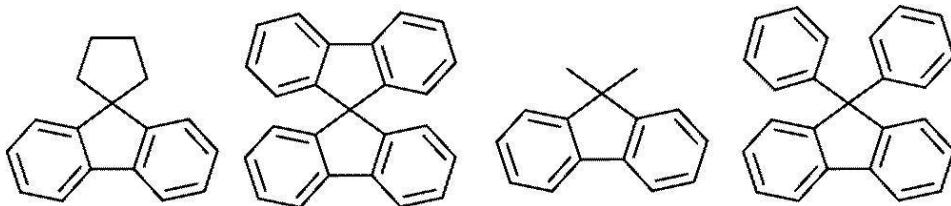
20

30

40

50

## 【化10】



## 【0046】

本明細書において、ヘテロアリール基はヘテロ原子としてO、N、P、S i 及びSのうち1つ以上を含むヘテロアリール基であってもよい。ヘテロアリール基がヘテロ原子を2つ含む場合、2つのヘテロ原子は互いに同一または異なってもよい。ヘテロアリール基の環形成炭素数は2以上30以下または5以上12以下である。ヘテロアリール基は単環式ヘテロアリール基または多環式ヘテロアリール基であってもよい。多環式ヘテロアリール基は、例えば、2環または3環構造であってもよい。ヘテロアリール基の例としては、チオフェニル基、フラニル基、ピロリル基、イミダゾリル基、チアゾリル基、オキサゾリル基、オキサジアゾリル基、トリアゾリル基、ピリジニル基、ビピリジニル基、ピリミジニル基、トリアジニル基、アクリジニル基、ピリダジニル基、ピラジニル基、キノリニル基、キナゾリニル基、キノキサリニル基、フェノキサジニル基、プララジニル基、ピリドピリミジニル基、ピリドピラジニル基、ピラジノピラジニル基、イソキノリニル基、インドリル基、カルバゾリル基、N-アリールカルバゾリル基、N-ヘテロアリールカルバゾリル基、N-アルキルカルバゾリル基、ベンゾオキサゾリル基、ベンゾイミダゾリル基、ベンゾチアゾリル基、ベンゾカルバゾリル基、ベンゾチオフェニル基、ジベンゾチオフェニル基、チエノチオフェニル基、ベンゾフラニル基、フェナントロリニル基、イソオキサゾリル基、チアジアゾリル基、フェノチアジニル基、ジベンゾシロリル基、及びジベンゾフラニル基などがあるが、これらに限定されない。

10

20

30

40

## 【0047】

本明細書において、シリル基は、アルキルシリル基及びアリールシリル基を含む。シリル基の例としては、トリメチルシリル基、トリエチルシリル基、t-ブチルジメチルシリル基、ビニルジメチルシリル基、プロピルジメチルシリル基、トリフェニルシリル基、ジフェニルシリル基、フェニルシリル基などがあるが、これらに限定されない。

## 【0048】

本明細書において、ホウ素基は、アルキルホウ素基及びアリールホウ素基を含む。ホウ素基の例としては、トリメチルホウ素基、トリエチルホウ素基、t-ブチルジメチルホウ素基、トリフェニルホウ素基、ジフェニルホウ素基、フェニルホウ素基などがあるが、これらに限定されない。

## 【0049】

本明細書において、アルケニル基は直鎖または分枝鎖であってもよい。炭素数は特に限定されないが、2以上30以下、2以上20以下、または2以上10以下である。アルケニル基の例としては、ビニル基、1-ブテニル基、1-フェンテニル基、1,3-ブタジエニルアリール基、スチレニル基、スチリルビニル基などがあるが、これらに限定されない。

## 【0050】

本明細書において、アリーレン基は2価基であることを除き、上述したアリール基に関する説明が適用される。

## 【0051】

本明細書において、ヘテロアリーレン基は2価基であることを除き、上述したヘテロアリール基に関する説明が適用される。

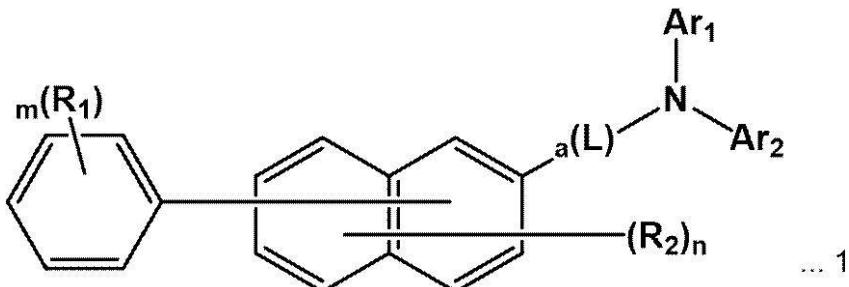
## 【0052】

本発明の一実施形態によるモノアミン化合物は、下記化学式1で表される。

## 【0053】

50

## 【化11】



10

## 【0054】

化学式1において、Ar<sub>1</sub>及びAr<sub>2</sub>は、それぞれ独立して置換若しくは無置換の炭素数1以上10以下のアルキル基、置換若しくは無置換の環形成炭素数3以上20以下のシクロアルキル基、置換若しくは無置換の環形成炭素数6以上30以下のアリール基、または置換若しくは無置換の環形成炭素数2以上30以下のヘテロアリール基である。

## 【0055】

化学式1において、Lは、置換若しくは無置換の環形成炭素数6以上30以下のアリーレン基、または置換若しくは無置換の環形成炭素数2以上30以下のヘテロアリーレン基である。

## 【0056】

化学式1において、R<sub>1</sub>は、水素原子、重水素原子、ハロゲン原子、置換若しくは無置換の炭素数1以上20以下のアルキル基、置換若しくは無置換の環形成炭素数3以上20以下のシクロアルキル基、または置換若しくは無置換の環形成炭素数6以上30以下のアリール基である。

20

## 【0057】

化学式1において、R<sub>2</sub>は、水素原子、重水素原子、ハロゲン原子、置換若しくは無置換の炭素数1以上20以下のアルキル基、または置換若しくは無置換の環形成炭素数3以上20以下のシクロアルキル基である。一方、R<sub>2</sub>はアリール基及びヘテロアリール基ではない。R<sub>2</sub>がアリール基及びヘテロアリール基である場合、ナフタレン骨格側にHOMO(Highest Occupied Molecular Orbital)が大きく分布するようになり、これにより、アミノ基側の電子密度が相対的に減少して長寿命を誘導するアミノ基の特性を保持することが困難となり、有機電界発光素子の寿命が低下することがある。R<sub>2</sub>がアリール基及びヘテロアリール基ではないことは、R<sub>2</sub>がアリール基及びヘテロアリール基で置換されていない場合を全て含む。

30

## 【0058】

化学式1において、aは0以上3以下の整数である。一方、aが2以上の場合、複数のLは互いに同一であってもよく、異なっていてもよい。

## 【0059】

化学式1において、mは0以上1以下の整数である。

40

## 【0060】

化学式1において、nは0以上6以下の整数である。一方、nが2以上の場合、複数のR<sub>2</sub>は互いに同一であってもよく、異なっていてもよい。

## 【0061】

化学式1において、Ar<sub>1</sub>及びAr<sub>2</sub>では、何れか1つが3-ジベンゾフラニル基である場合、残りの1つが9-フェナントリル基である場合を除く。即ち、Ar<sub>1</sub>は3-ジベンゾフラニル基である場合、Ar<sub>2</sub>は9-フェナントリル基ではなく、Ar<sub>2</sub>が3-ジベンゾフラニル基である場合、Ar<sub>1</sub>は9-フェナントリル基ではなく、窒素原子に3-ジベンゾフラニル基及び9-フェナントリル基が同時に置換される場合を除く。窒素原子に3-ジベンゾフラニル基及び9-フェナントリル基が同時に置換される場合、分子スタッキ

50

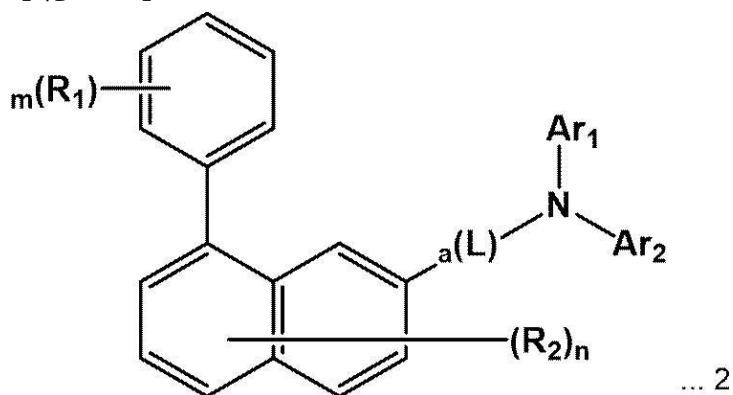
ング（stacking）が強く、蒸着温度が高いため、熱分解が起こる可能性があり、これにより、有機電界発光素子の特性が低下することがある。

## 【0062】

一実施形態において、化学式1は、下記化学式2～化学式8の何れか1つで表されてもよい。

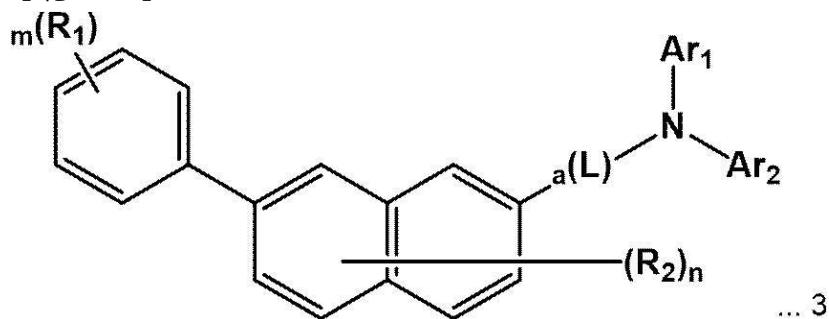
## 【0063】

## 【化12】



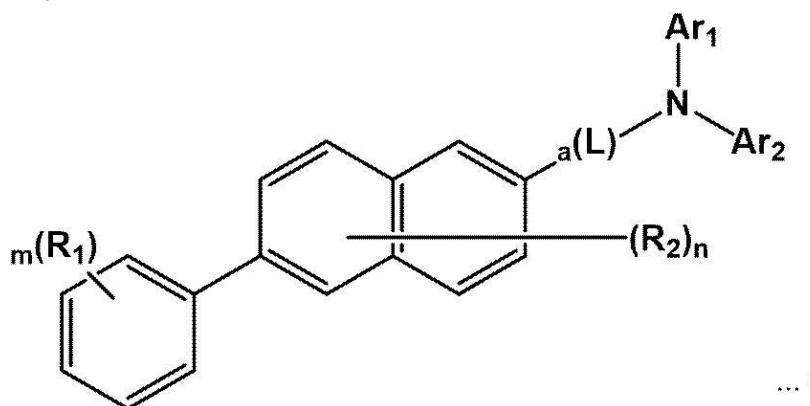
## 【0064】

## 【化13】



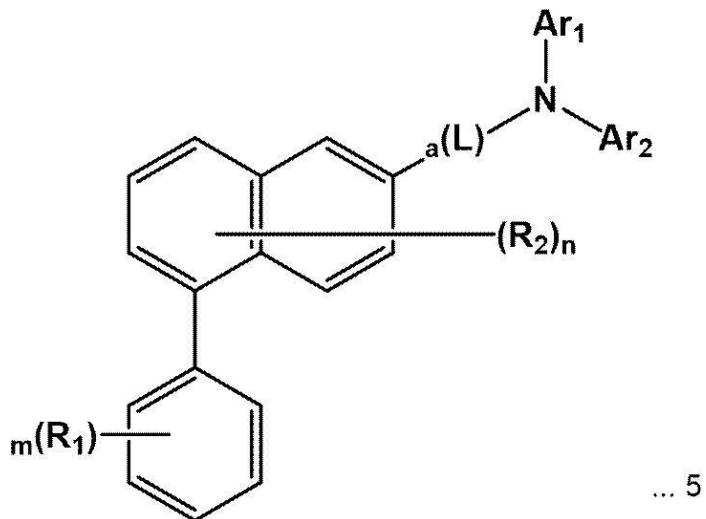
## 【0065】

## 【化14】



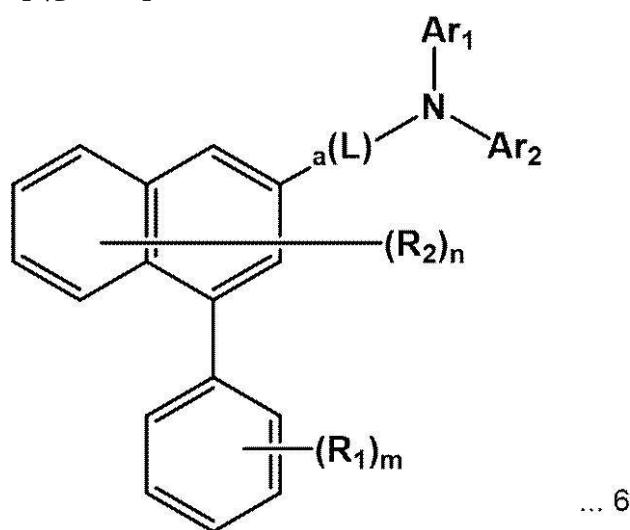
## 【0066】

【化 1 5】



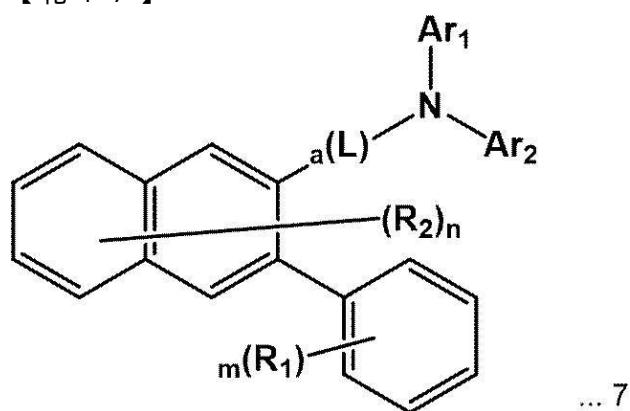
【 0 0 6 7 】

【化 1 6】



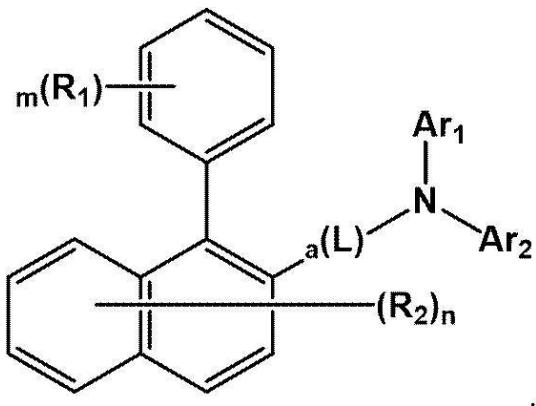
【 0 0 6 8 】

【化 1 7】



【 0 0 6 9 】

## 【化18】



10

## 【0070】

化学式2～8において、Ar<sub>1</sub>、Ar<sub>2</sub>、L、R<sub>1</sub>、R<sub>2</sub>、a、m、及びnは、化学式1での定義と同一である。

## 【0071】

化学式1において、mは1であり、Lは置換若しくは無置換の環形成炭素数6以上12以下のアリーレン基であってもよい。Lは、例えば、置換若しくは無置換のフェニレン基であってもよい。但し、これに限定されるものではない。

20

## 【0072】

化学式1において、Ar<sub>1</sub>及びAr<sub>2</sub>は、それぞれ独立して置換若しくは無置換の環形成炭素数6以上12以下のアリール基であってもよい。Ar<sub>1</sub>及びAr<sub>2</sub>は、例えば、それぞれ独立して置換若しくは無置換のフェニル基、置換若しくは無置換のビフェニル基、置換若しくは無置換のナフチル基、または置換若しくは無置換のフルオレニレン基であってもよい。但し、これに限定されるものではない。

30

## 【0073】

化学式1において、Ar<sub>1</sub>及びAr<sub>2</sub>は、それぞれ独立して置換若しくは無置換の環形成炭素数5以上12以下のヘテロアリール基であってもよい。Ar<sub>1</sub>及びAr<sub>2</sub>は、例えば、それぞれ独立して置換若しくは無置換のジベンゾフラニル基、置換若しくは無置換のジベンゾチオフェニル基、または置換若しくは無置換のカルバゾリル基であってもよい。但し、これに限定されるものではない。Ar<sub>1</sub>及びAr<sub>2</sub>の少なくとも1つは、置換若しくは無置換の4-ジベンゾフラニル基であってもよい。例えば、Ar<sub>1</sub>及びAr<sub>2</sub>の全てが無置換の4-ジベンゾフラニル基であってもよい。Ar<sub>1</sub>が無置換の4-ジベンゾフラニル基であってもよく、Ar<sub>2</sub>が、無置換のm-ターフェニル基であってもよい。Ar<sub>1</sub>が無置換の4-ジベンゾフラニル基であってもよく、Ar<sub>2</sub>が、無置換の4-ナフチルフェニル基であってもよい。

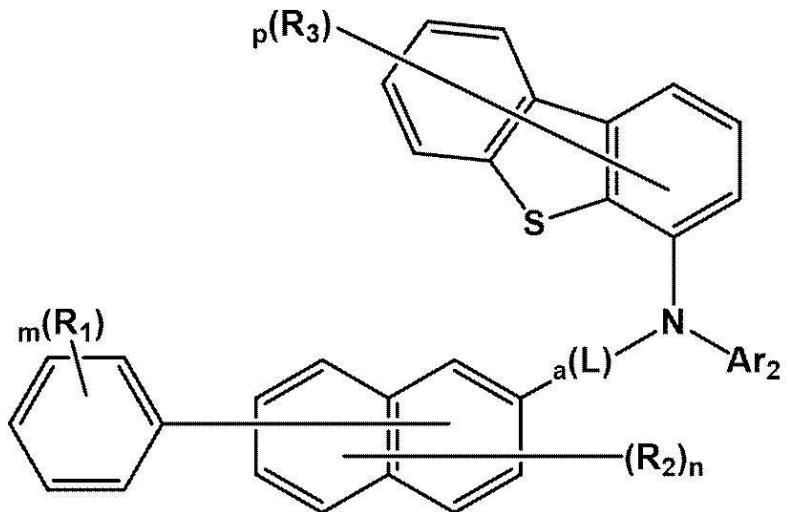
## 【0074】

化学式1で表されるモノアミン化合物は、下記化学式9で表されてもよい。

40

50

【化19】



化学式9において、R<sub>3</sub>は、水素原子、重水素原子、ハロゲン原子、置換若しくは無置換の炭素数1以上20以下のアルキル基、置換若しくは無置換の環形成炭素数3以上20以下のシクロアルキル基、または置換若しくは無置換の環形成炭素数6以上30以下のアリール基であってもよい。例えば、R<sub>3</sub>は、水素原子又は重水素原子であってもよい。pは0以上7以下の整数であってもよい。pが2以上の整数である場合には、複数のR<sub>3</sub>は、同じであってもよく、互いに異なっていてもよい。

20

20

【0075】

化学式1において、R<sub>2</sub>は、水素原子または重水素原子であってもよい。

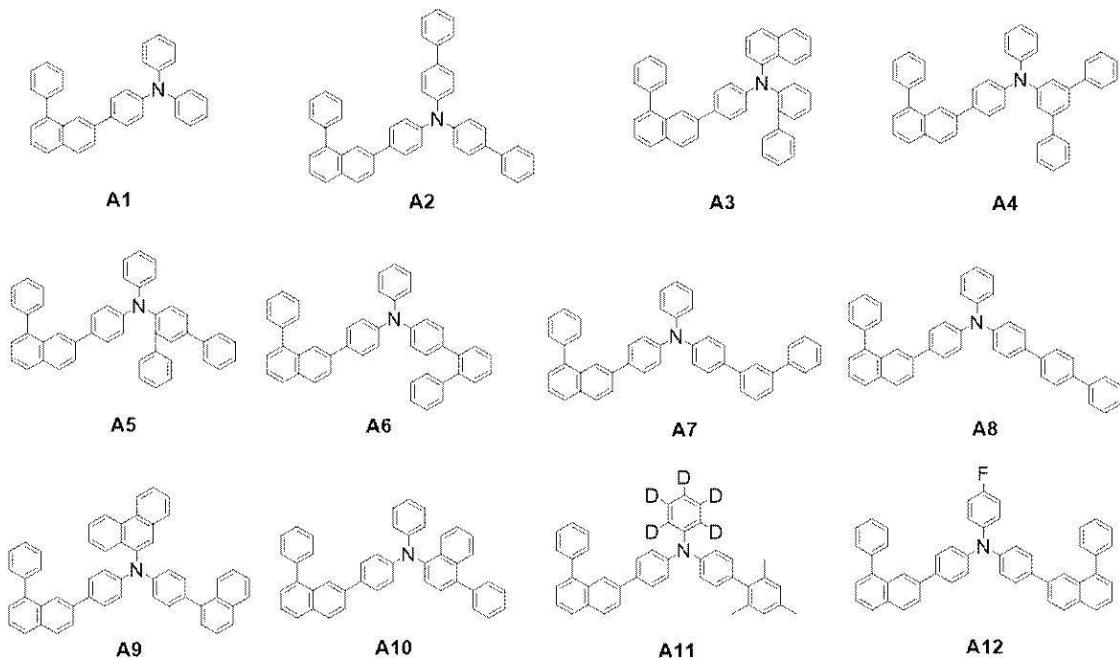
【0076】

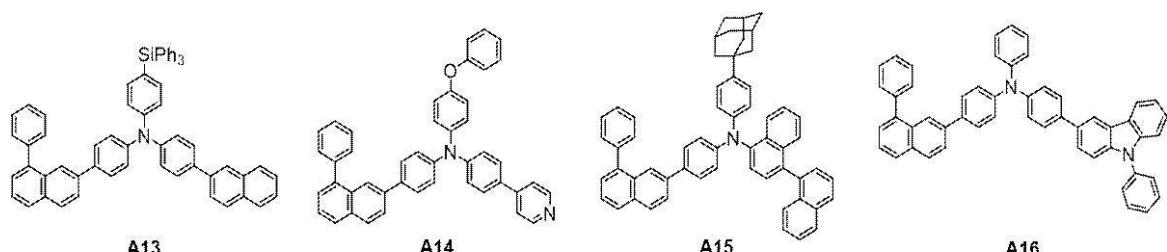
発明の一実施形態による化学式1で表されるモノアミン化合物は、下記化合物群1～化合物群7に表された化合物から選択される何れか1つであってもよい。但し、これに限定されるものではない。

【0077】

[化合物群1]

【化20】





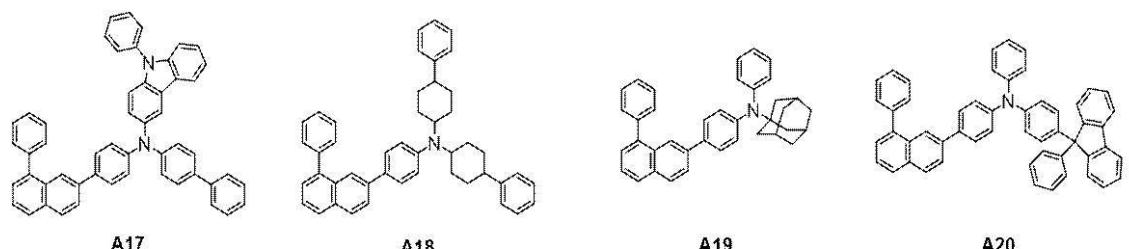
A13

A14

A15

A16

10



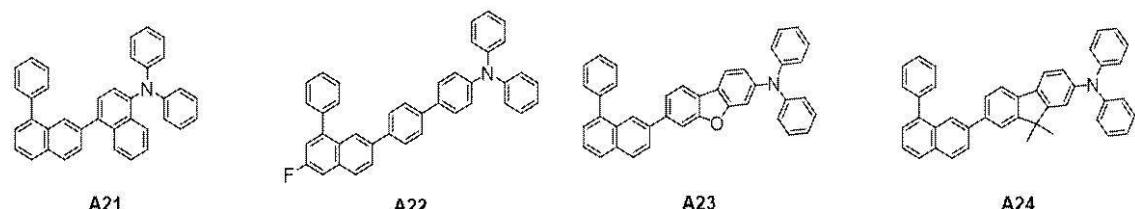
A17

A18

A19

A20

20



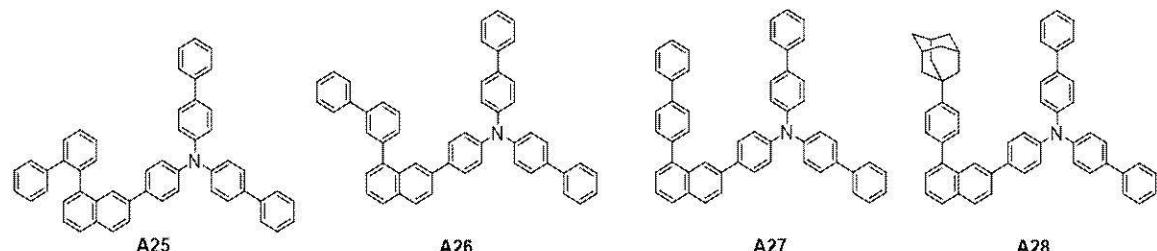
A21

A22

A23

A24

20



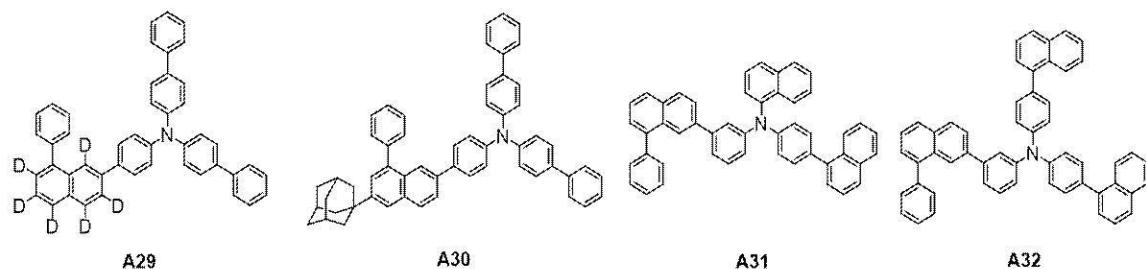
A25

A26

A27

A28

30



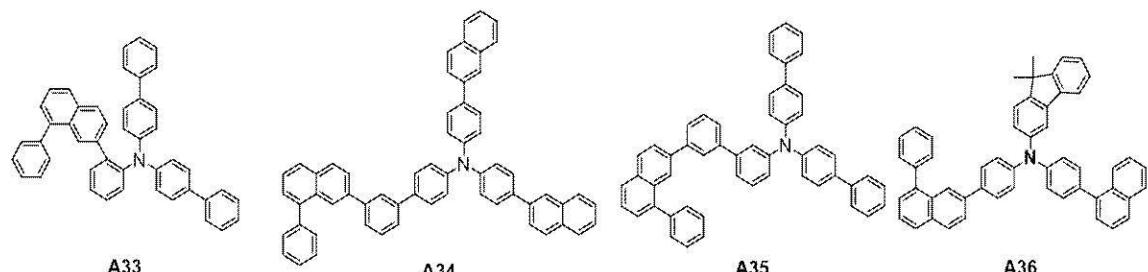
A29

A30

A31

A32

40



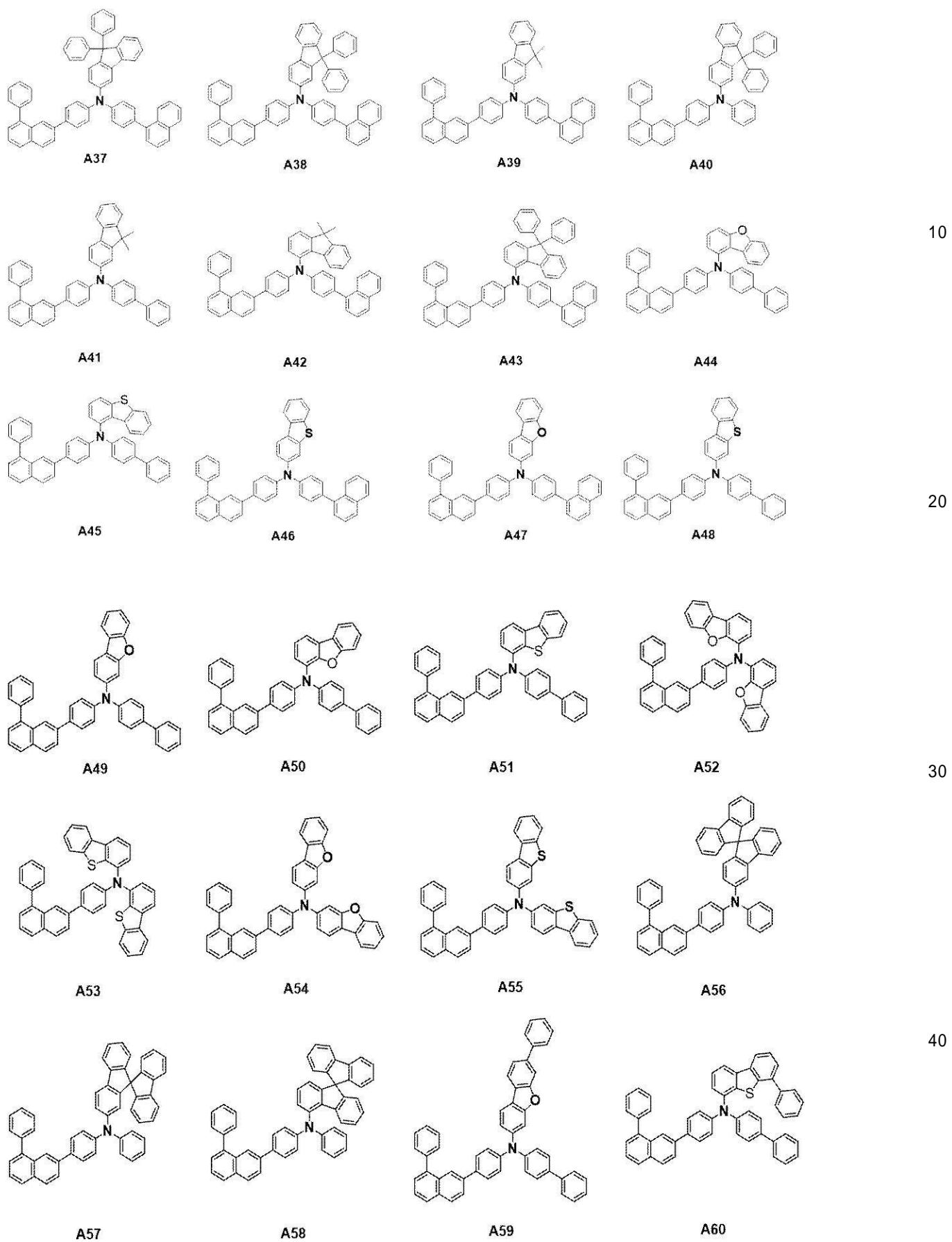
A33

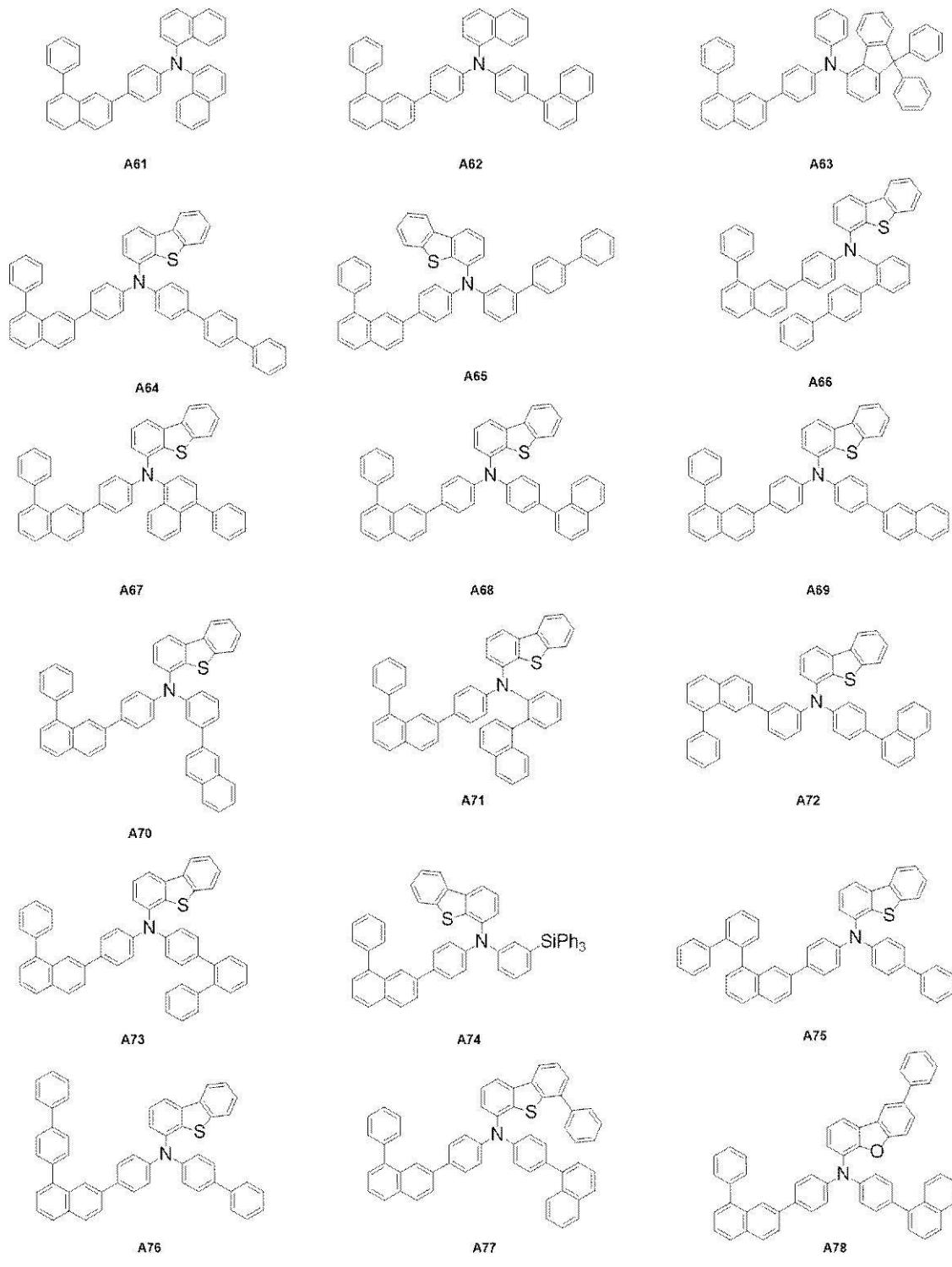
A34

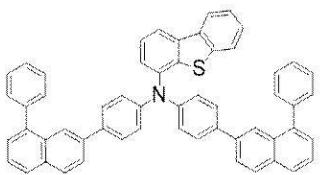
A35

A36

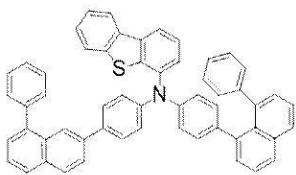
50



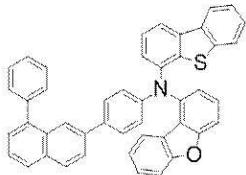




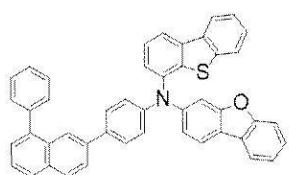
A79



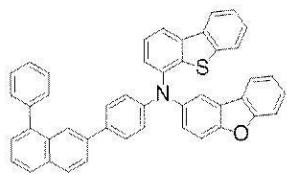
A80



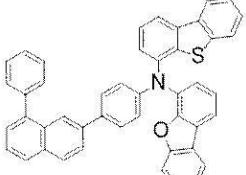
A81



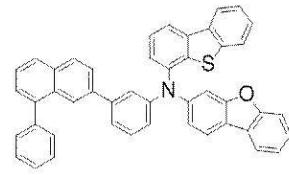
A82



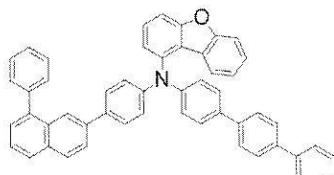
A83



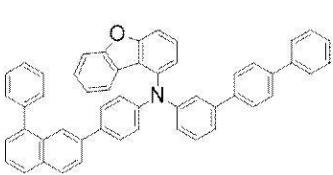
A84



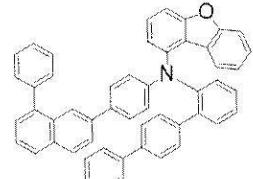
A85



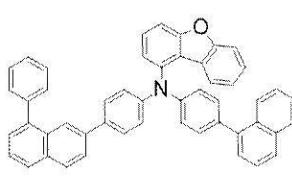
A86



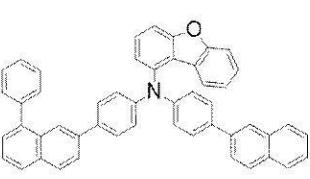
A87



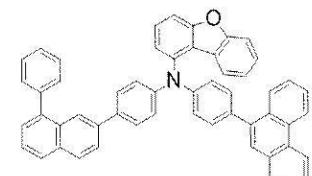
A88



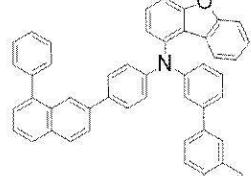
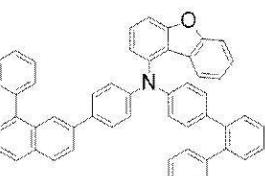
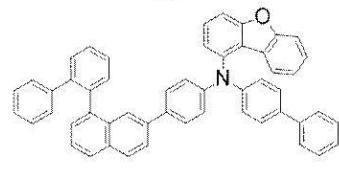
A89



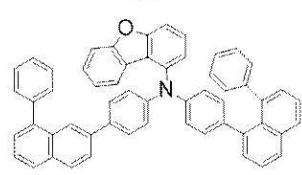
A90



A91

A92  
A95A93  
A96

A94



A96

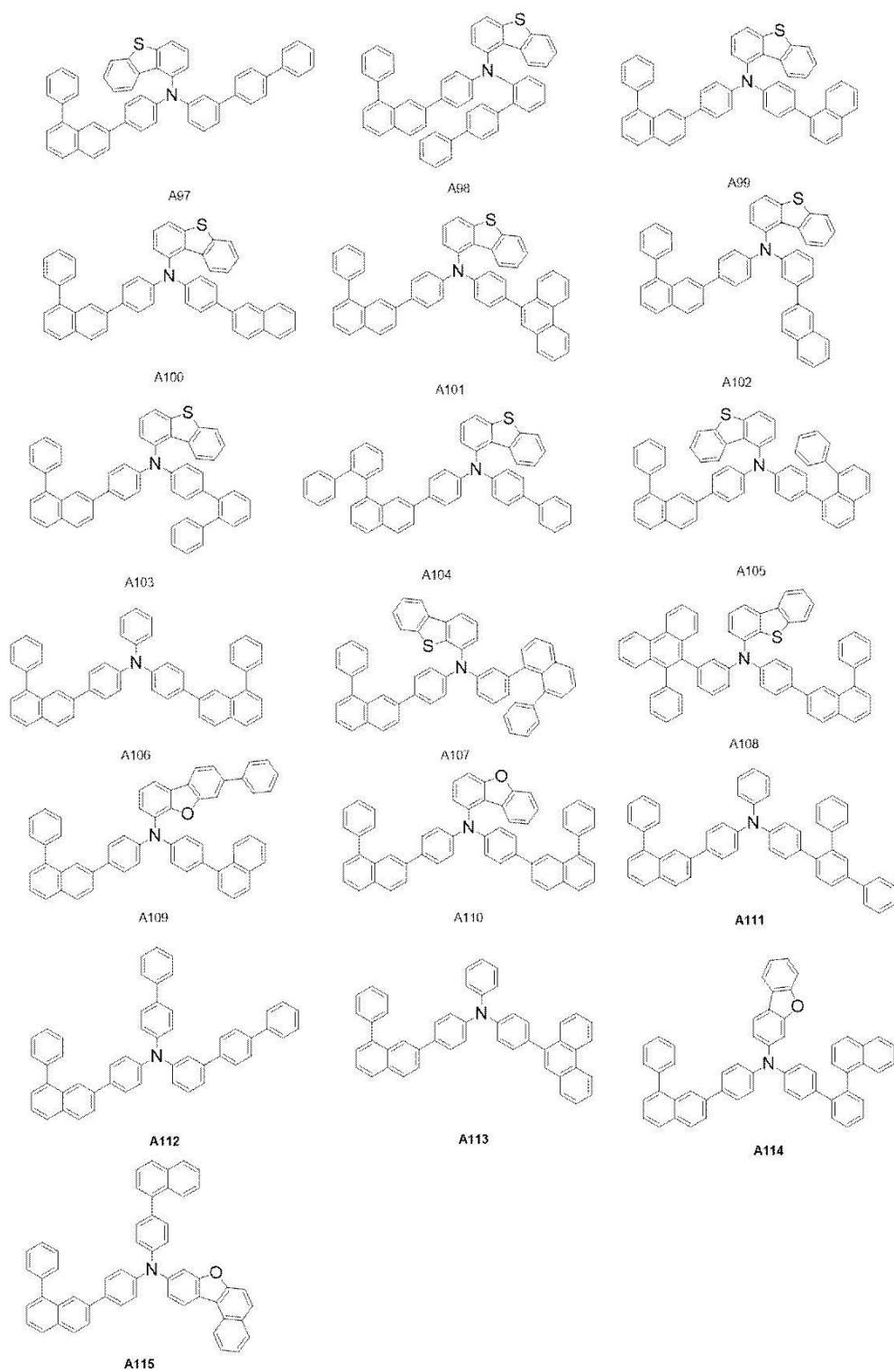
10

20

30

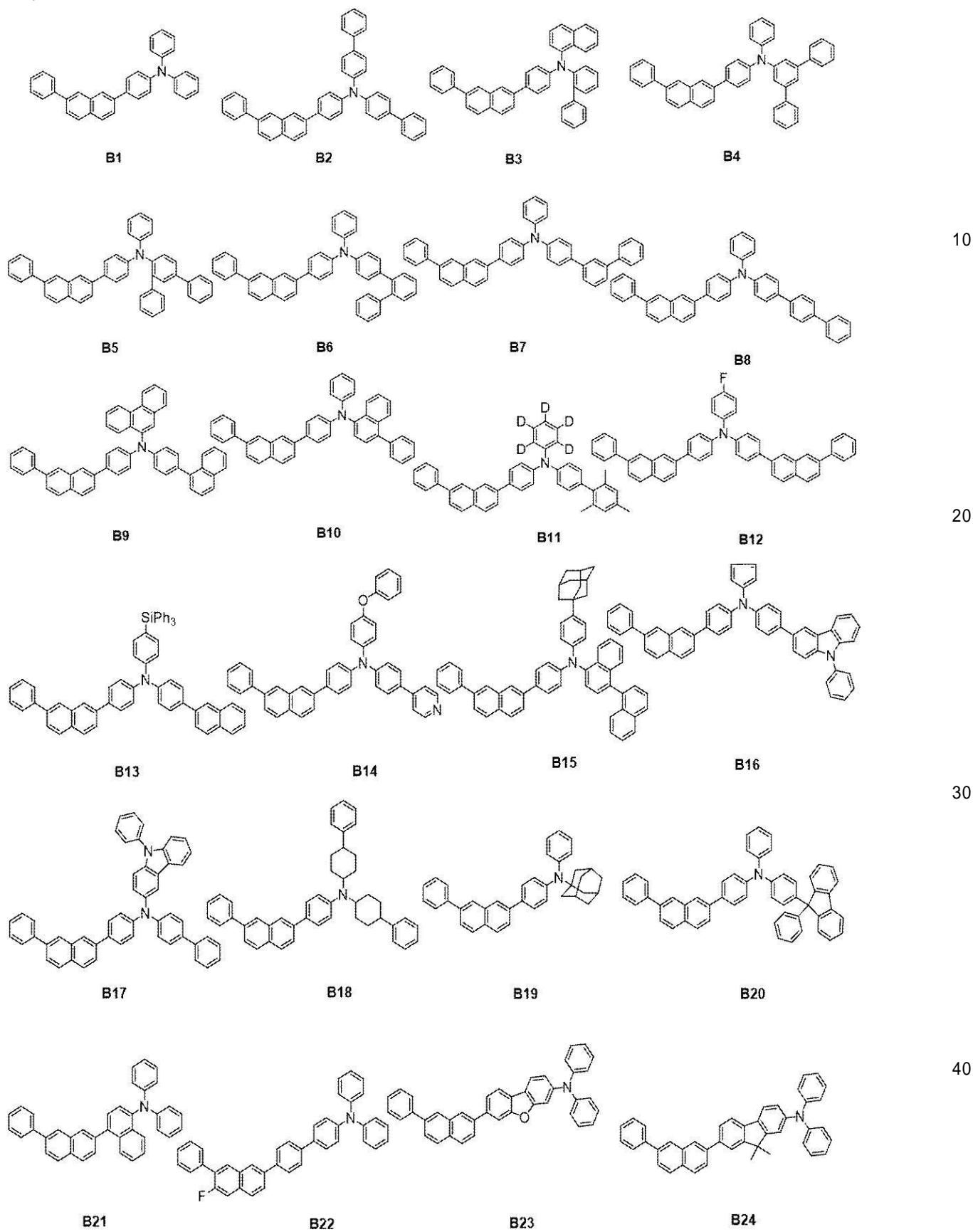
40

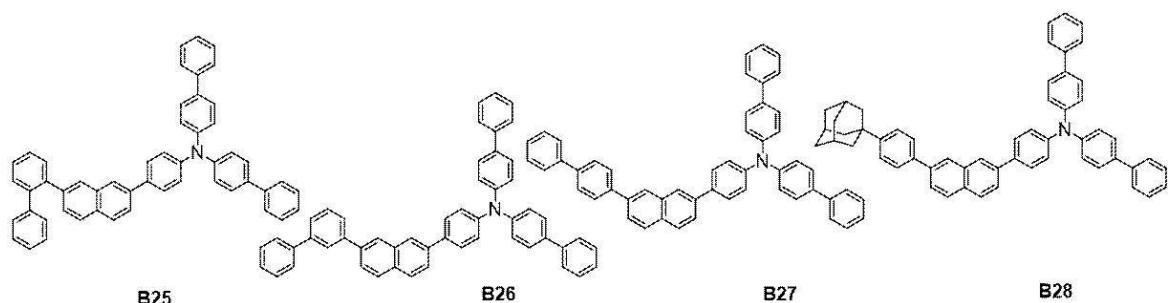
50



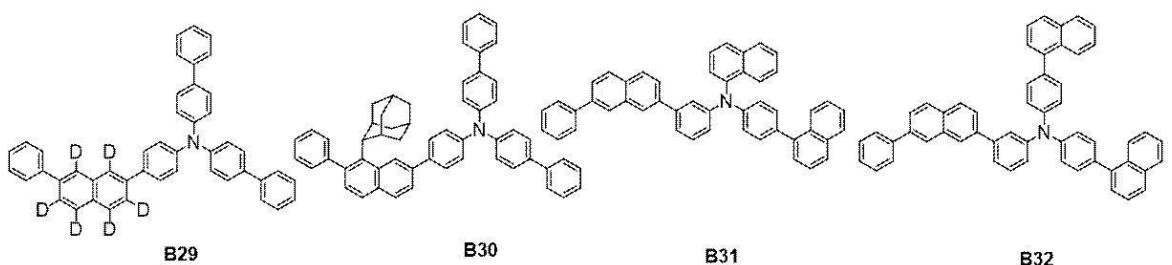
【 0 0 7 8 】  
[ 化合物群 2 ]

【化 2 1】

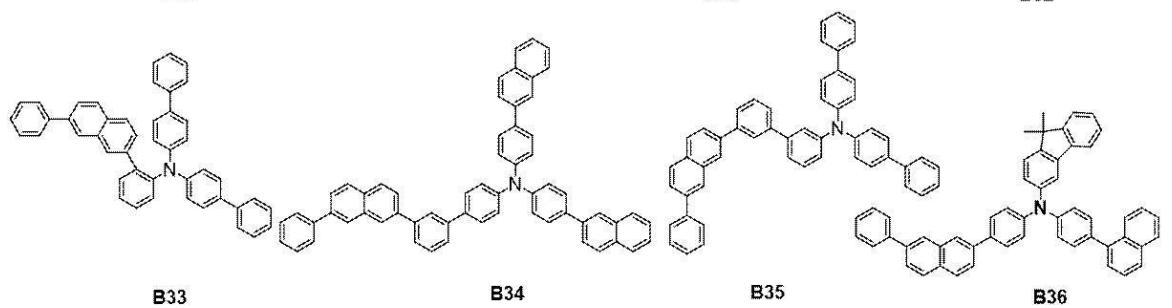




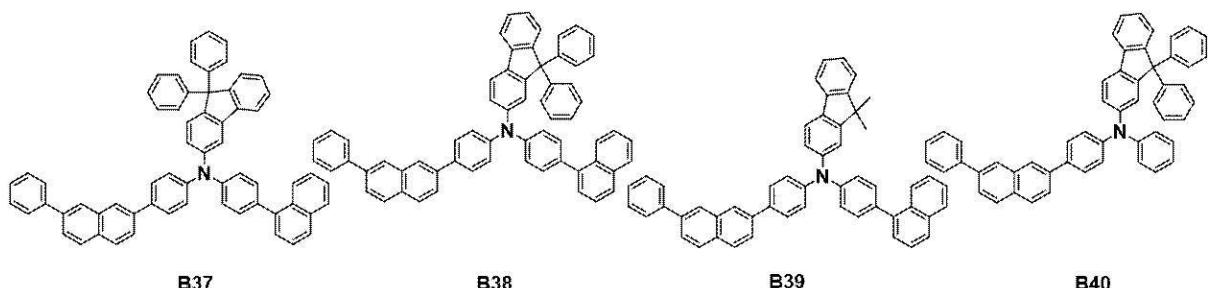
10



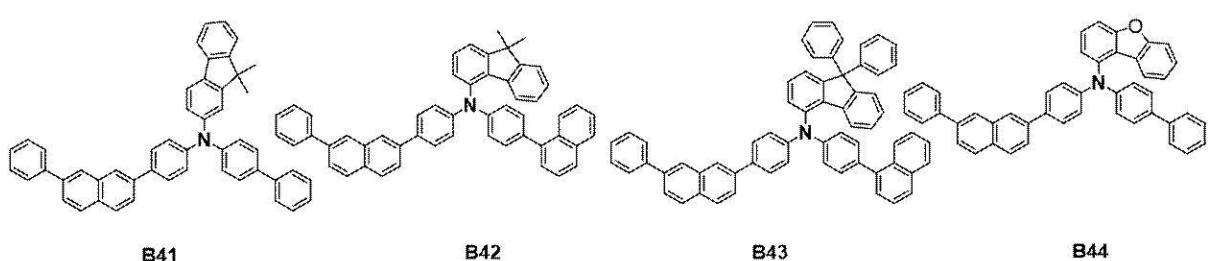
20



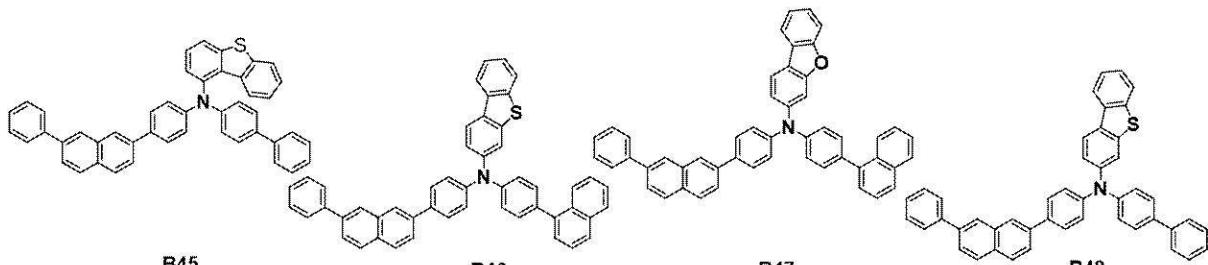
30

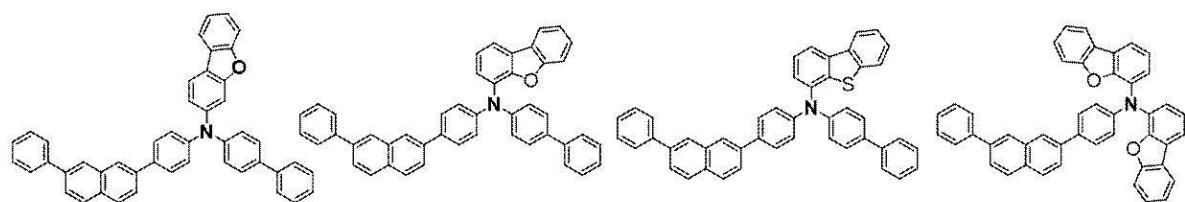


40



50





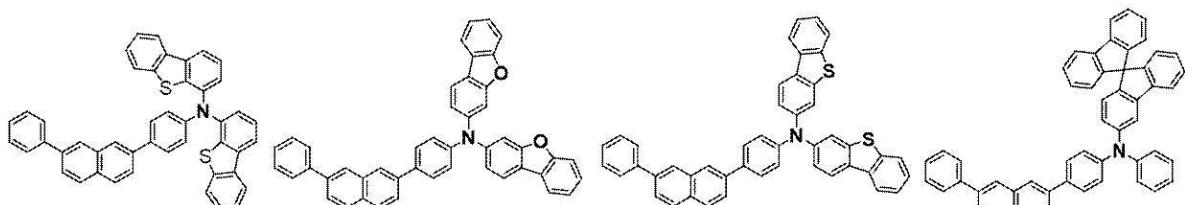
B49

B50

B51

B52

10



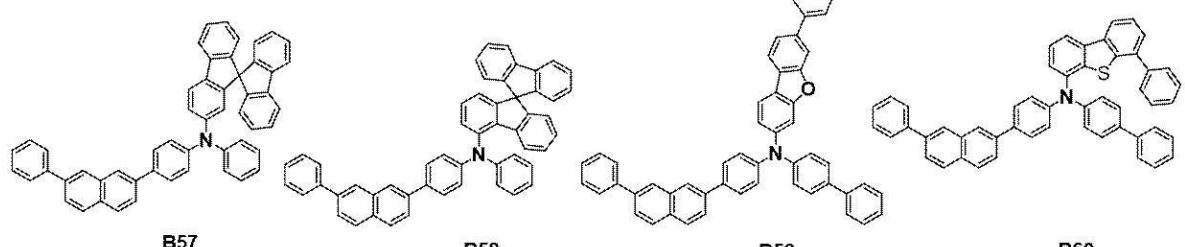
B53

B54

B55

B56

20



B57

B58

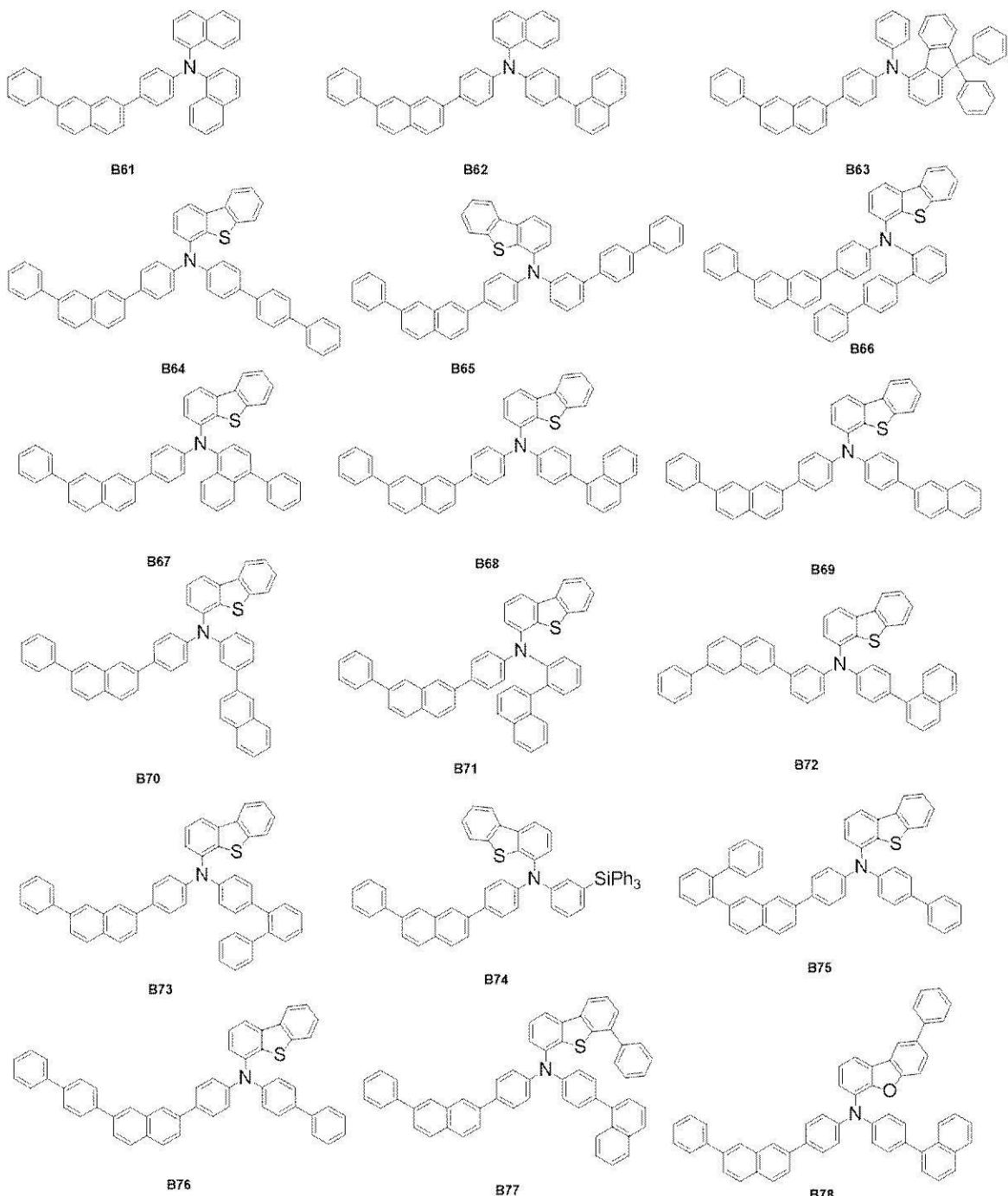
B59

B60

30

40

50



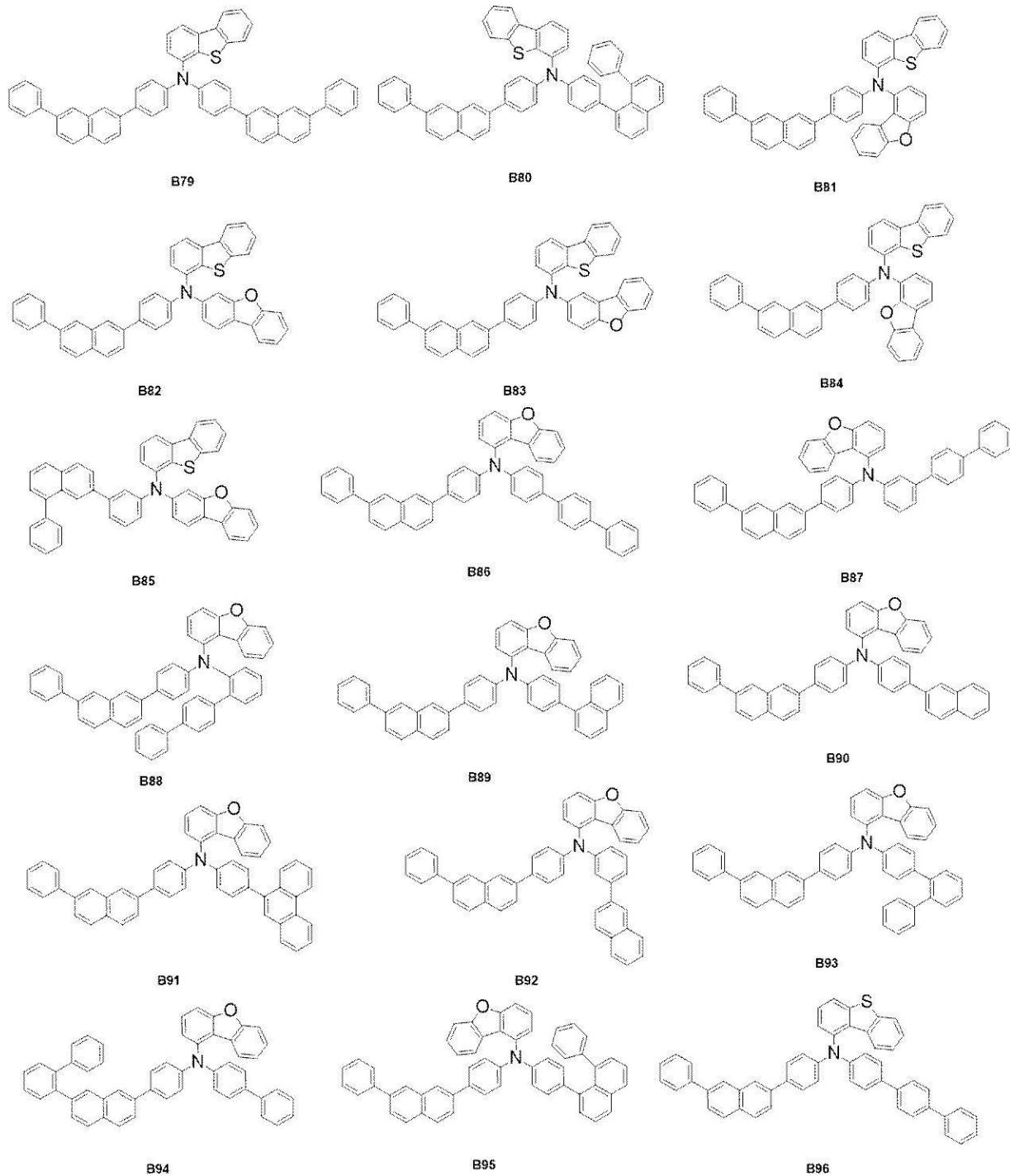
10

20

30

40

50



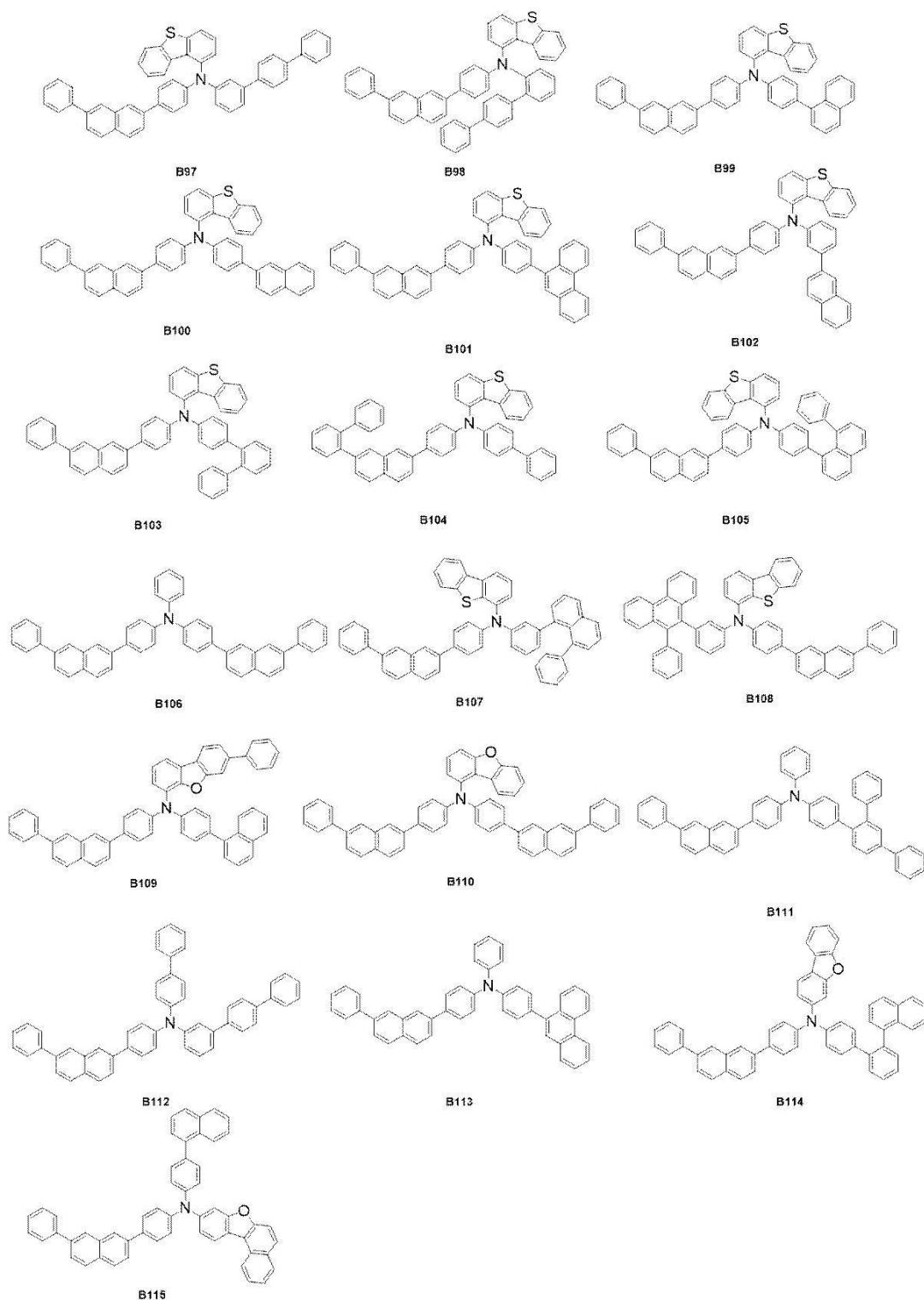
10

20

30

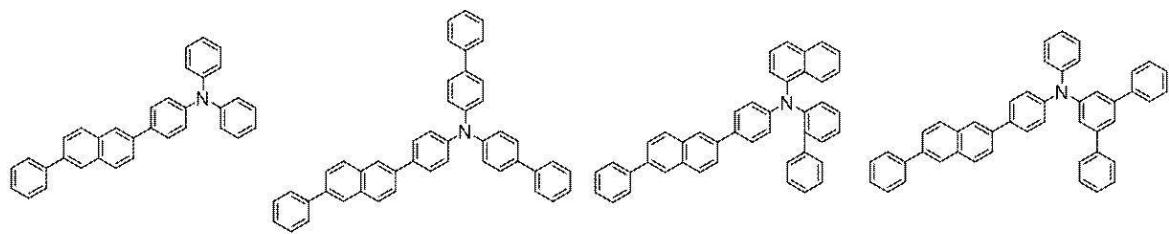
40

50



【 0 0 7 9 】  
[ 化合物群 3 ]

【化 2 2】



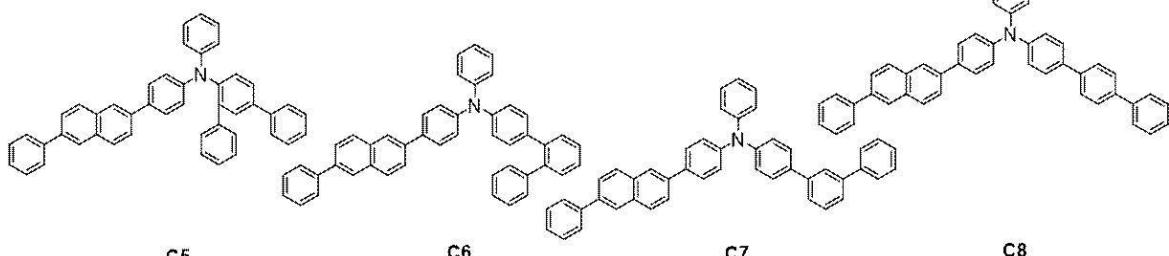
C1

C2

C3

C4

10



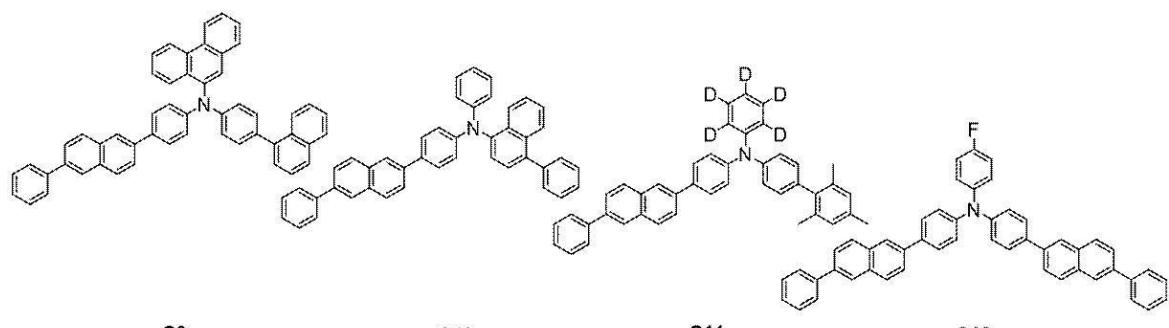
C5

C6

C7

C8

20



C9

C10

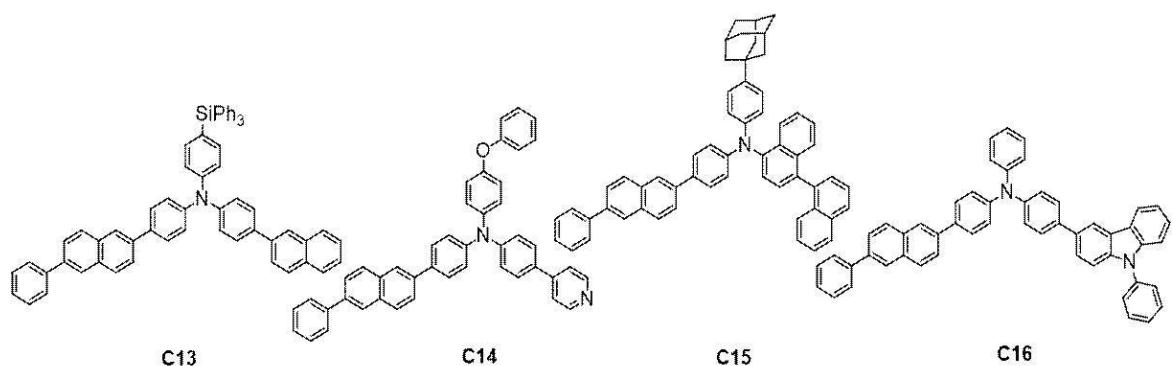
C11

C12

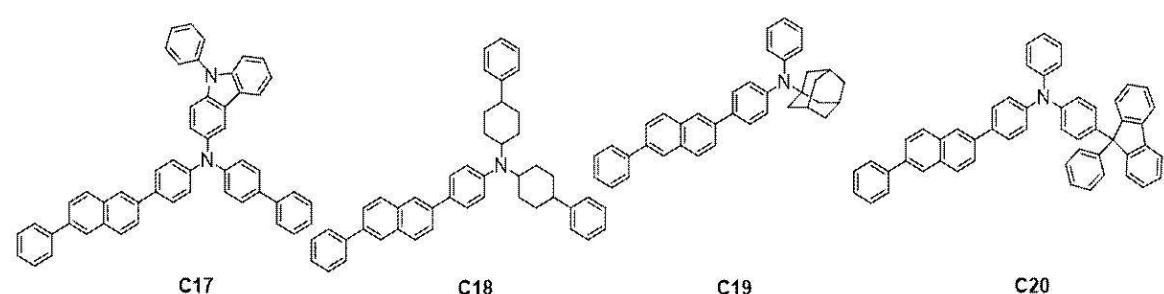
30

40

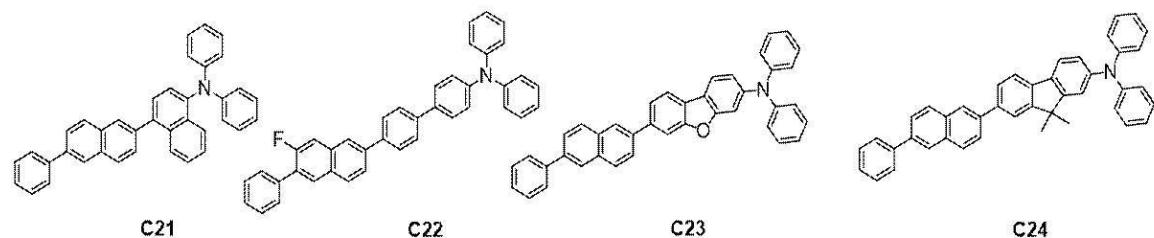
50



10



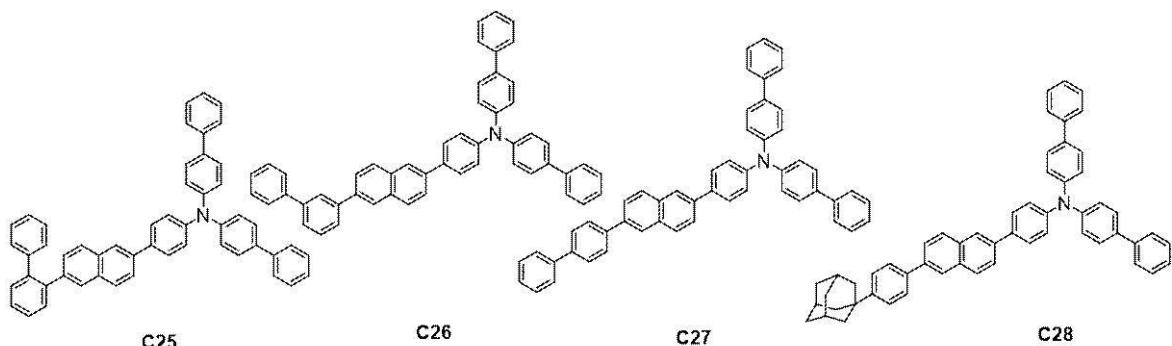
20



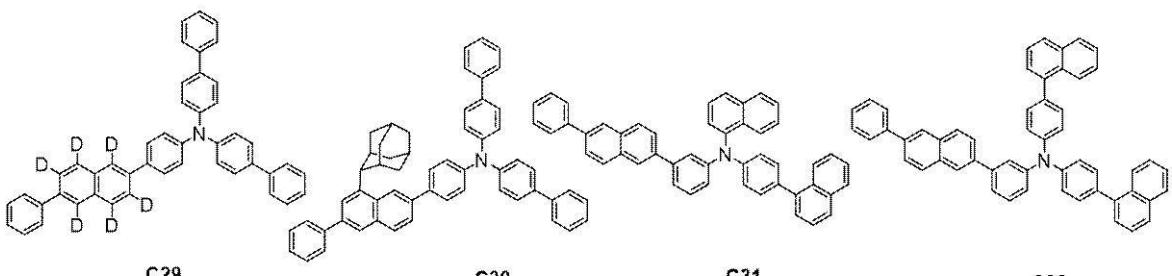
30

40

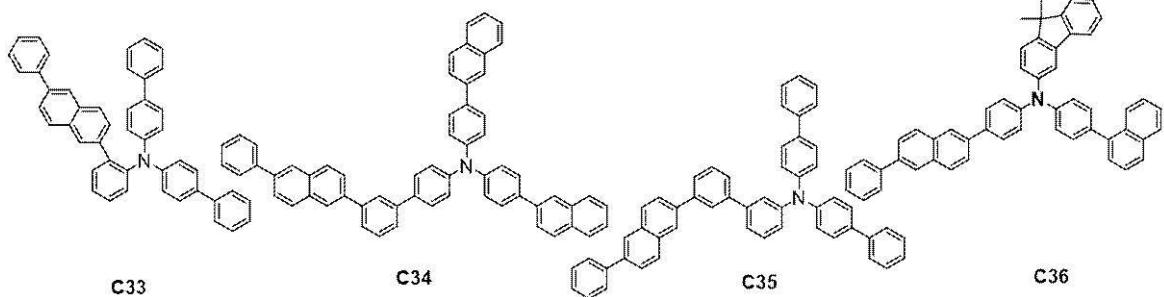
50



10



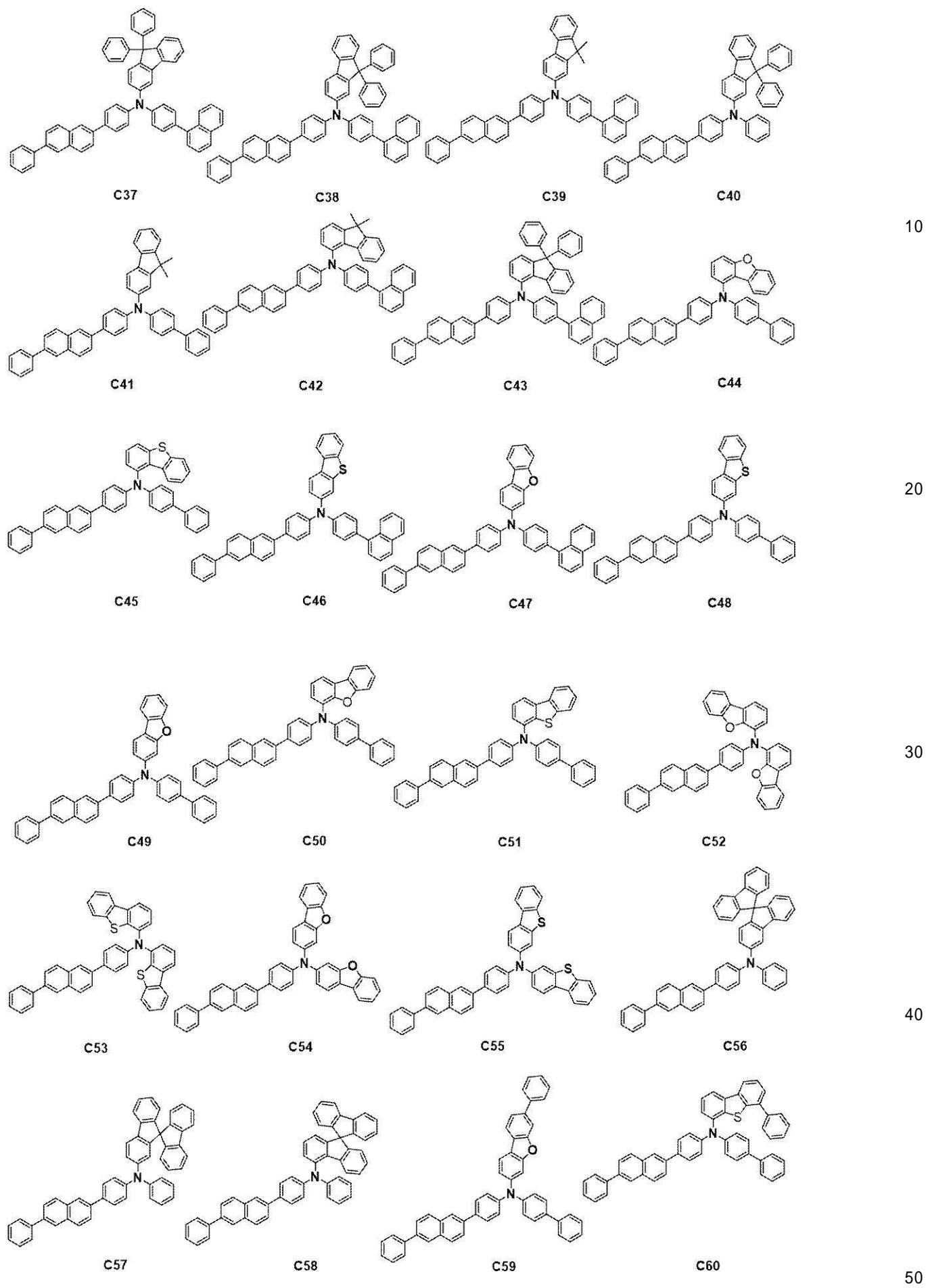
20

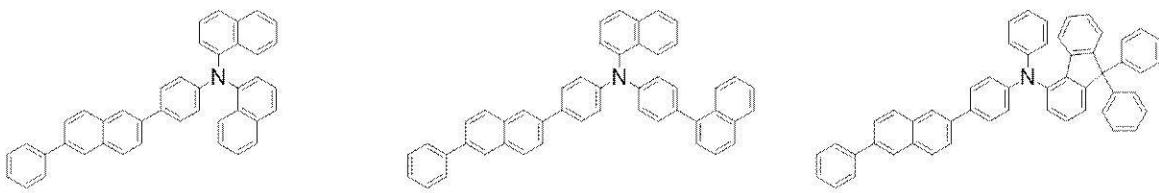


30

40

50

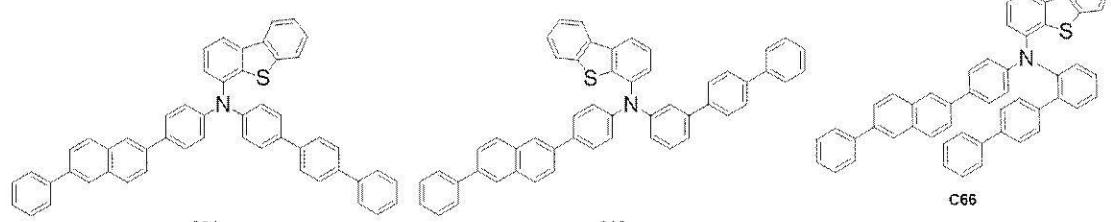




C61

C62

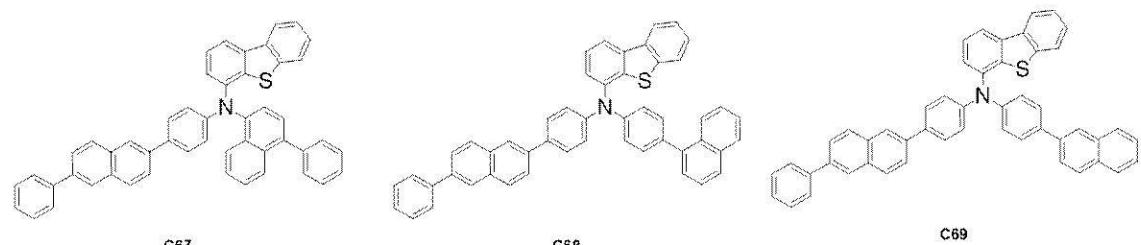
C63



C64

C65

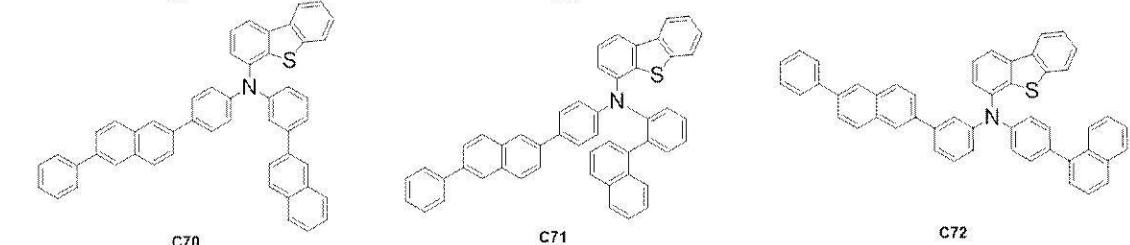
C66



C67

C68

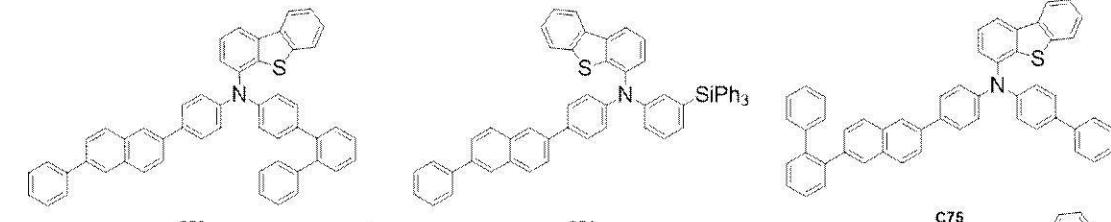
C69



C70

C71

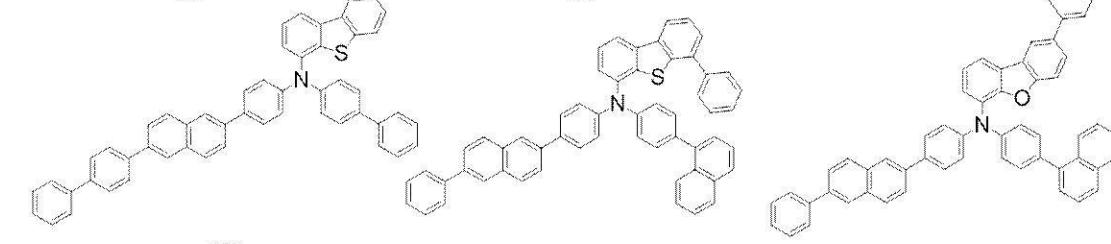
C72



C73

C74

C75



C76

C77

C78

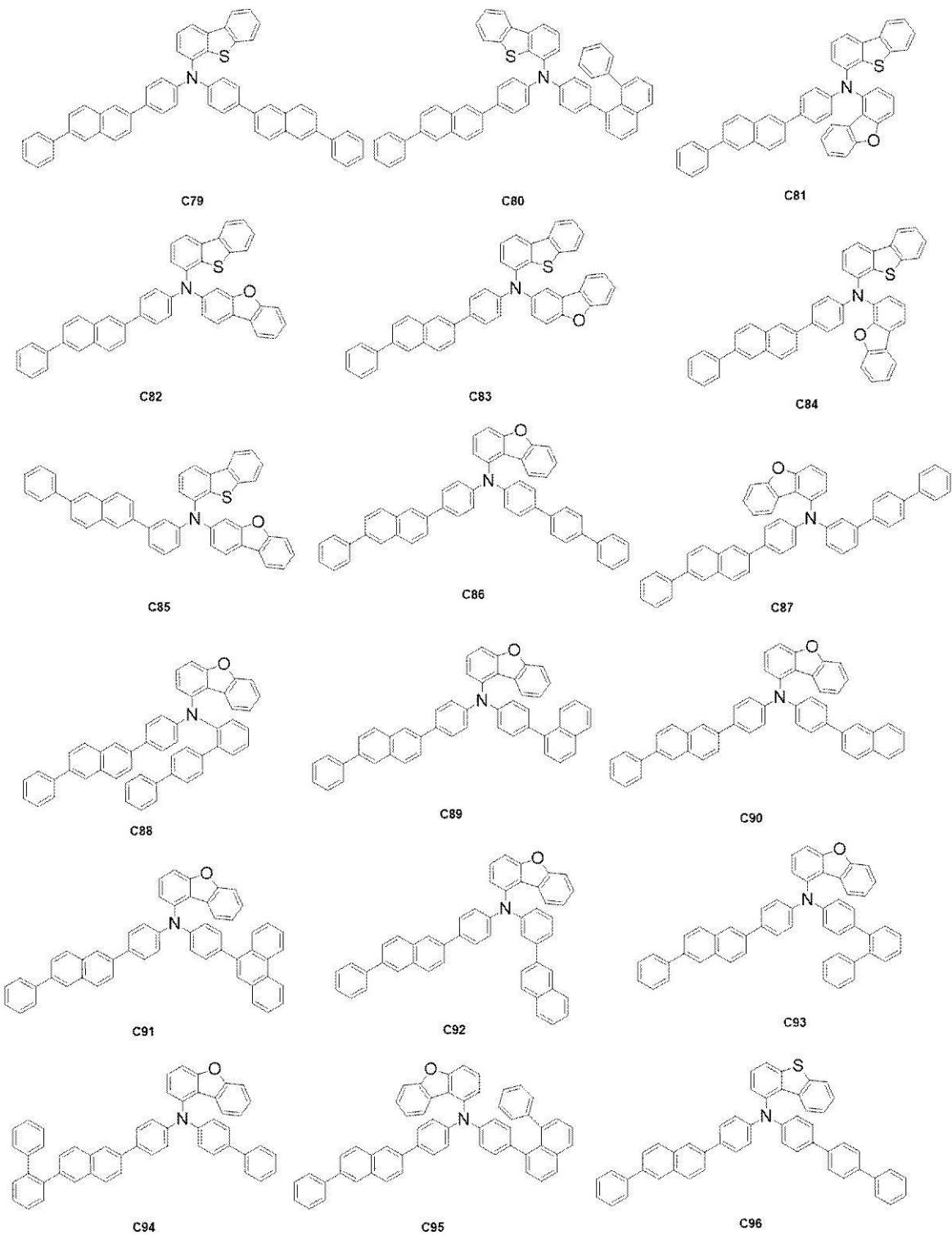
10

20

30

40

50



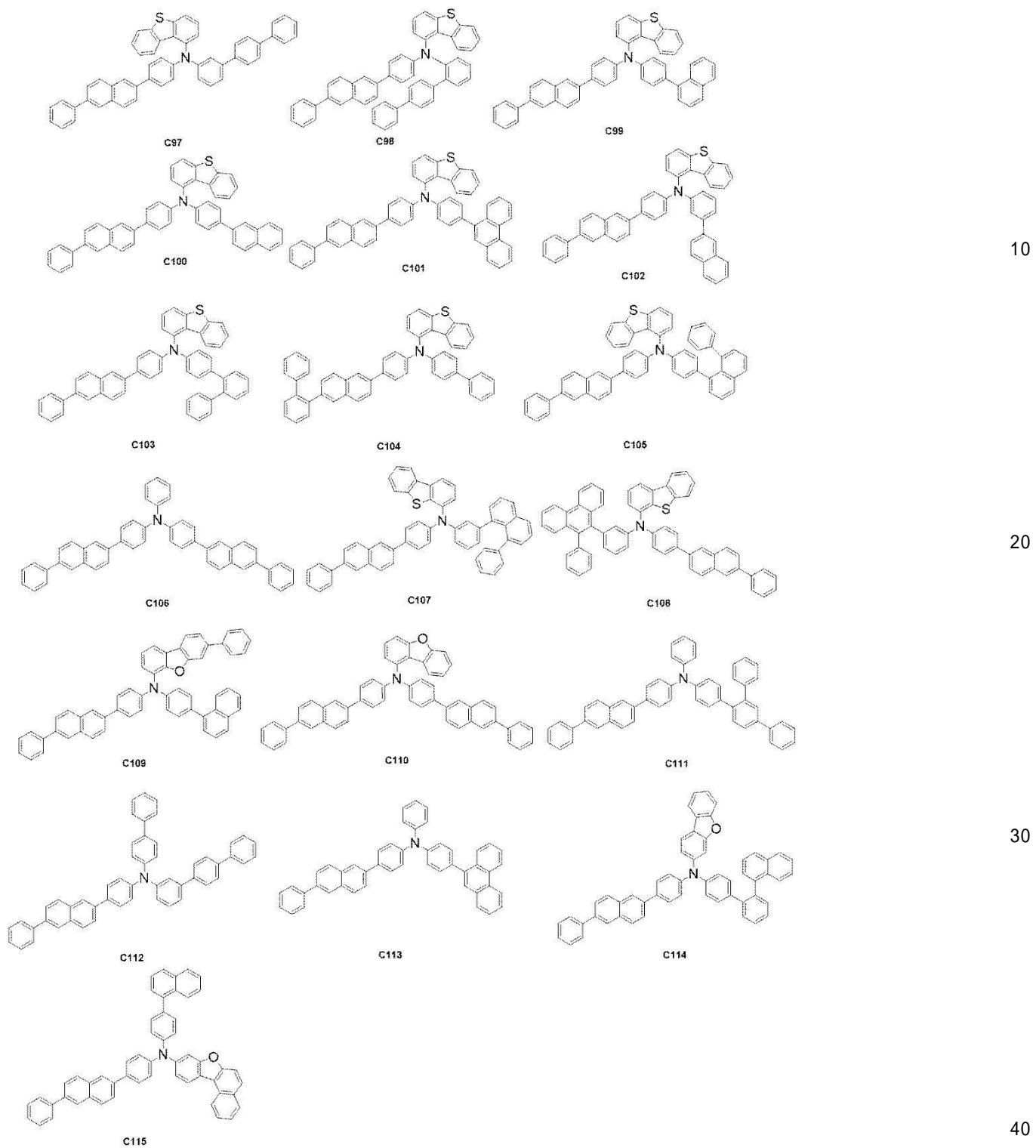
10

20

30

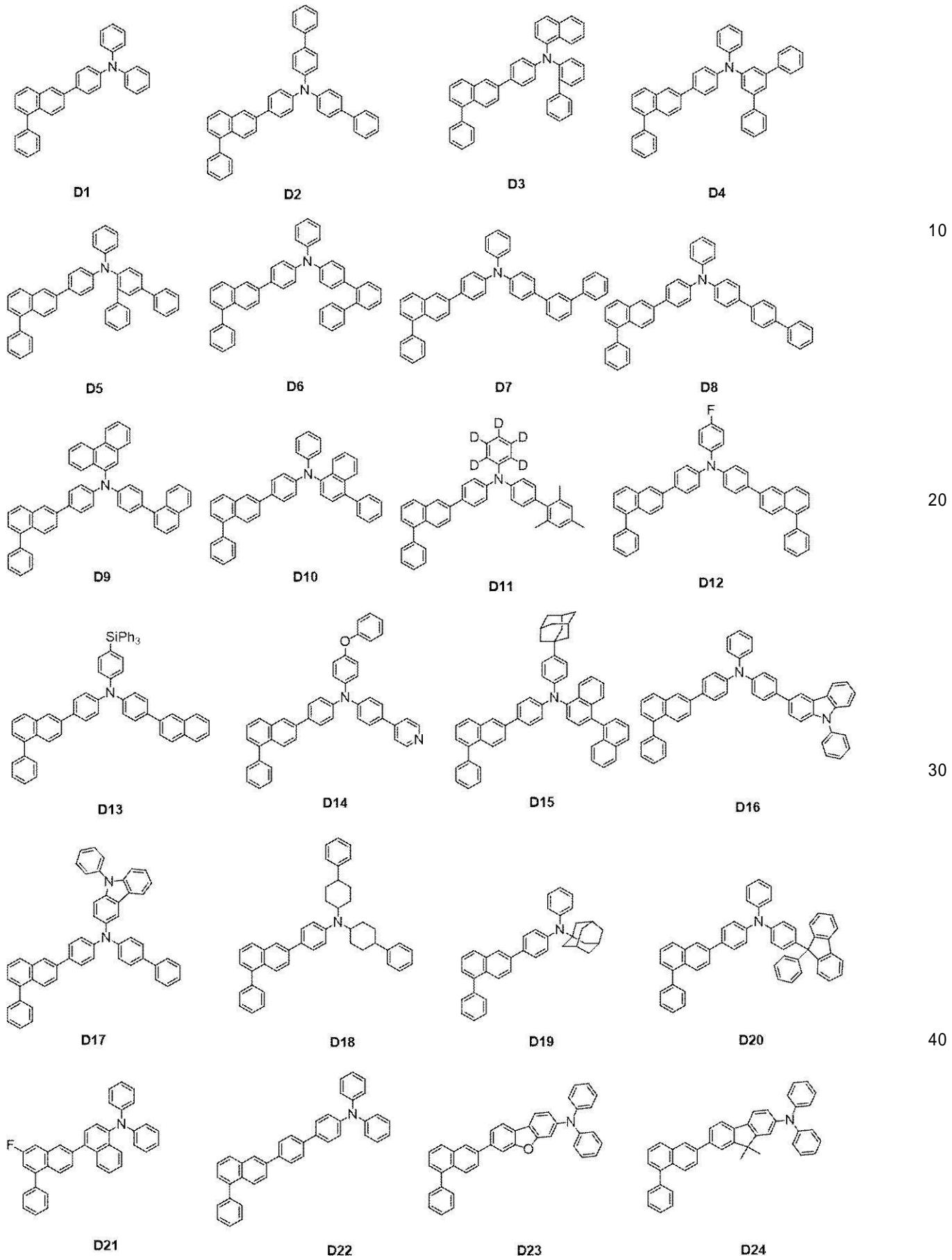
40

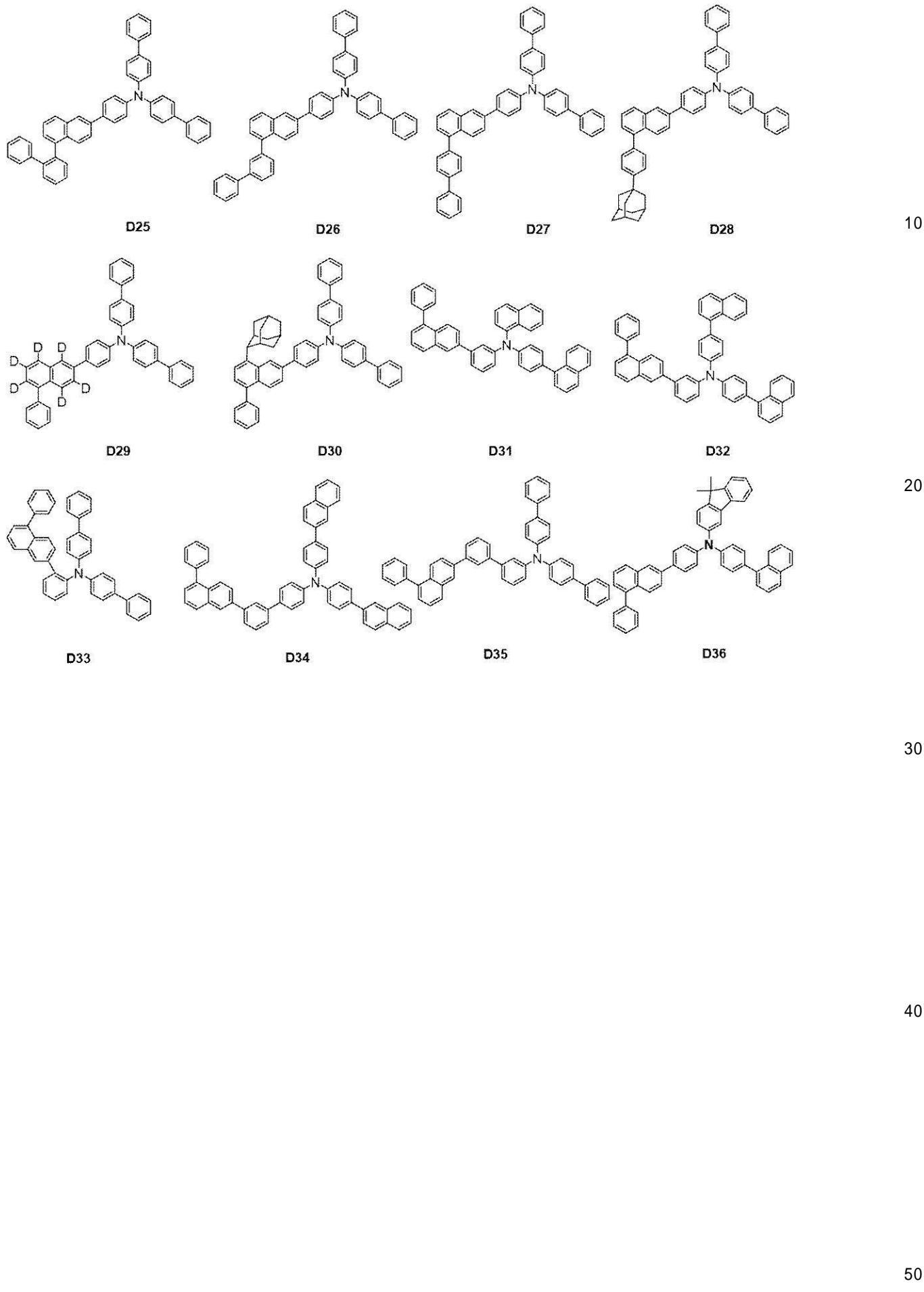
50

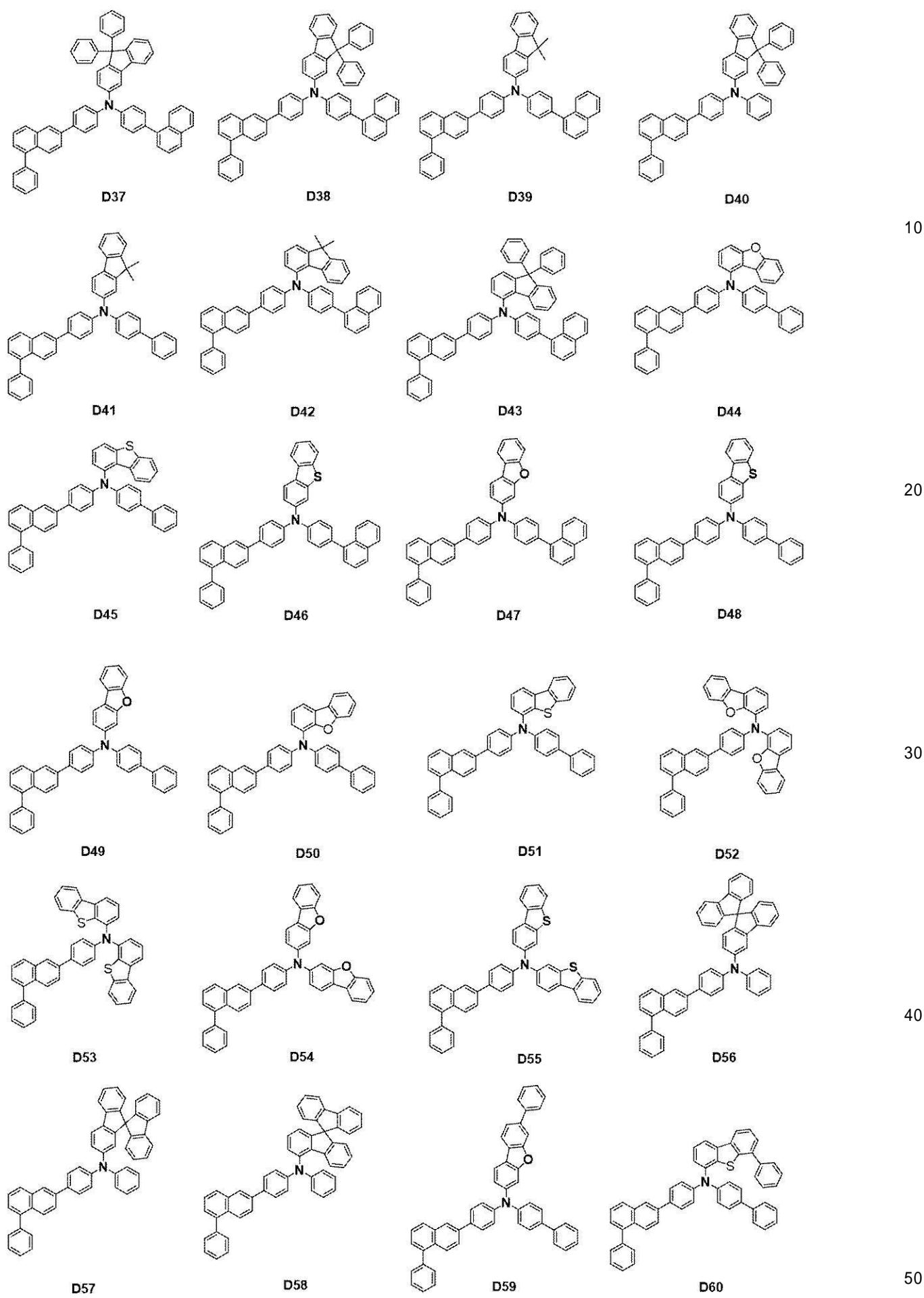


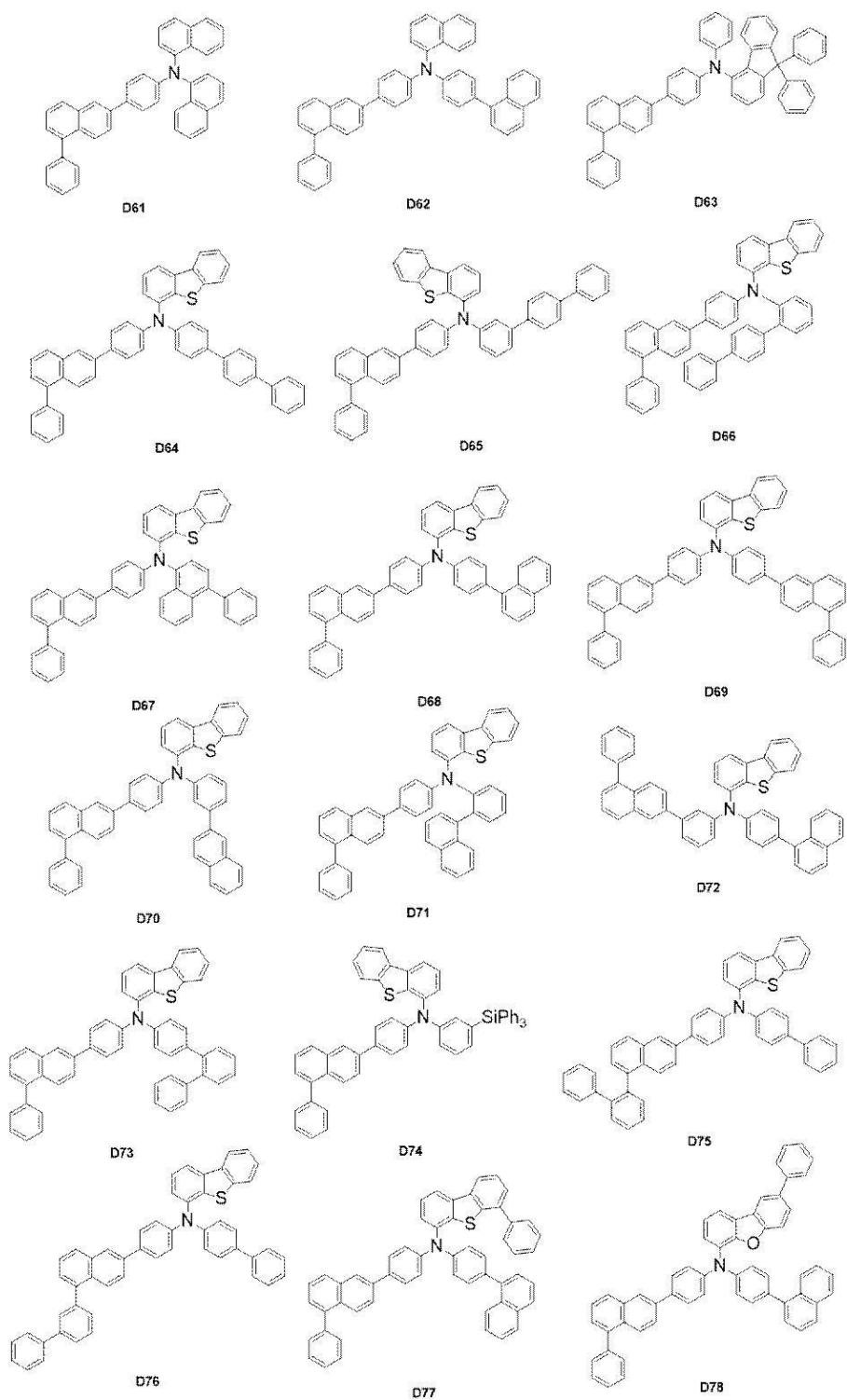
【 0 0 8 0 】  
[ 化合物群 4 ]

【化 2 3】









10

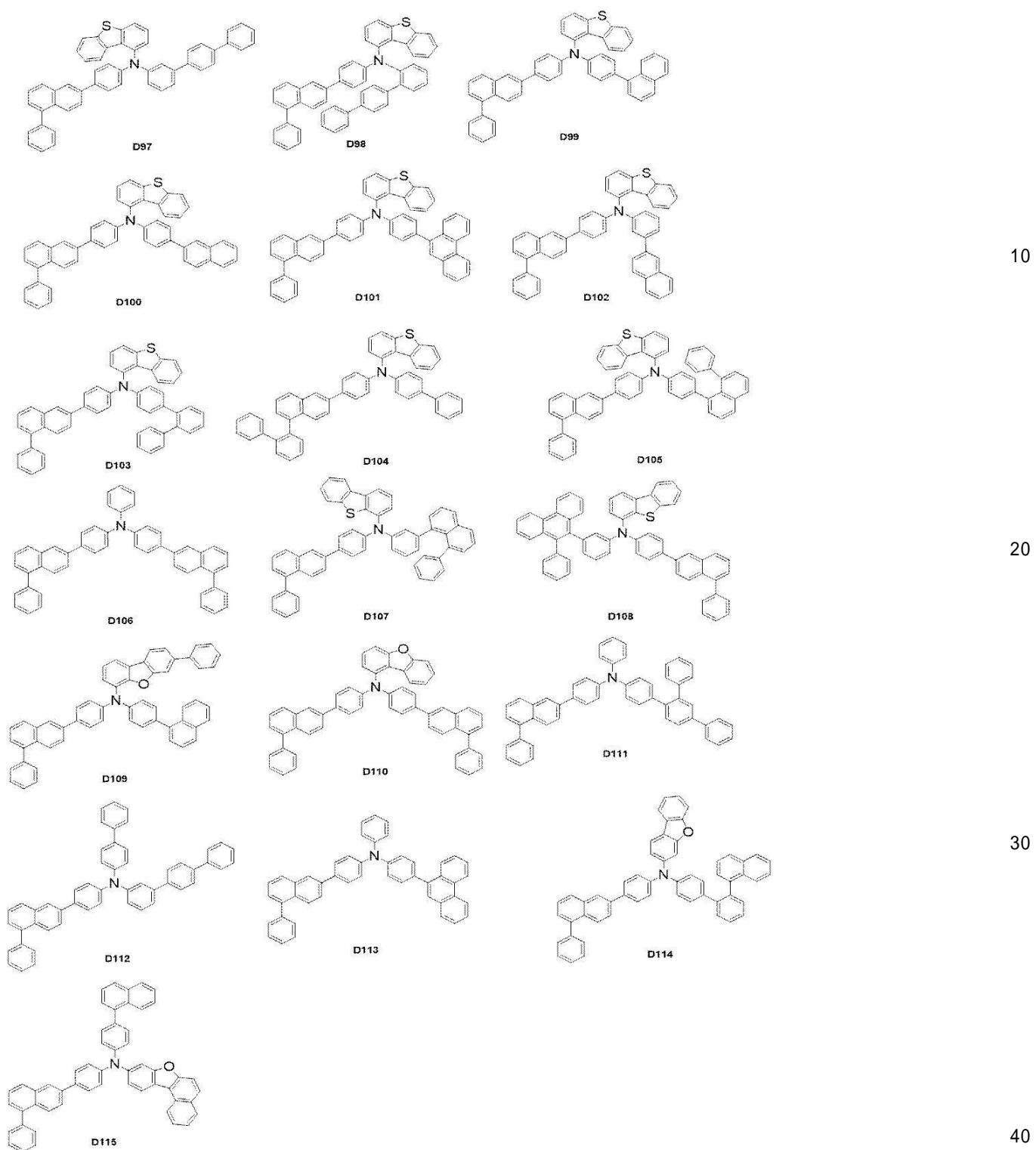
20

30

40

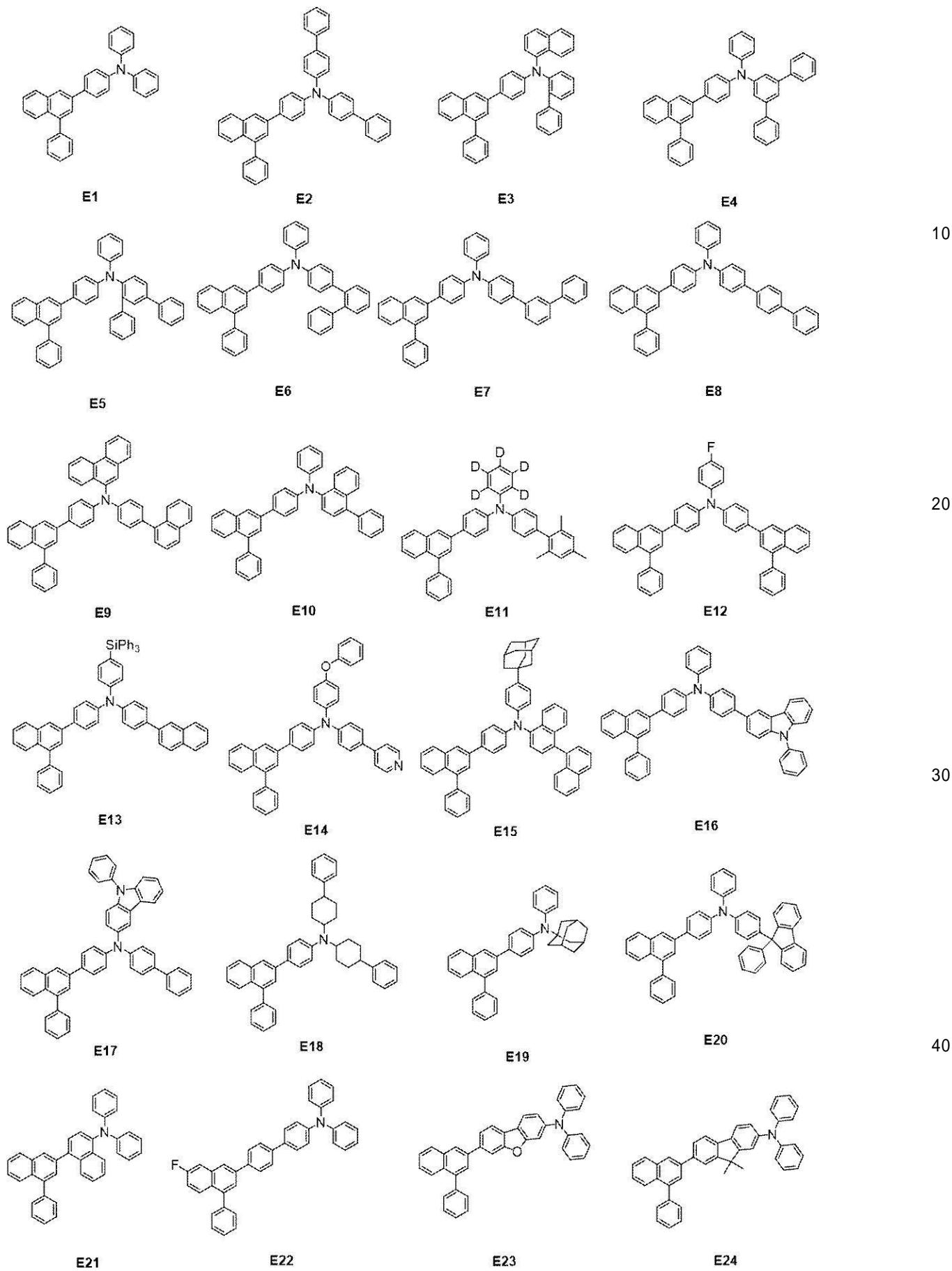
50

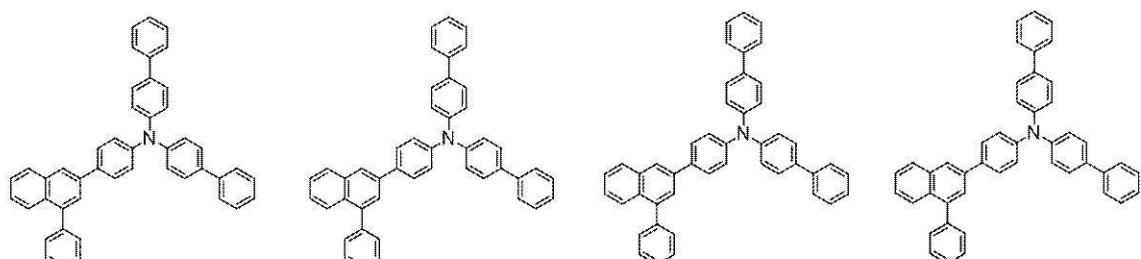




【 0 0 8 1 】  
[ 化合物群 5 ]

## 【化 2 4】





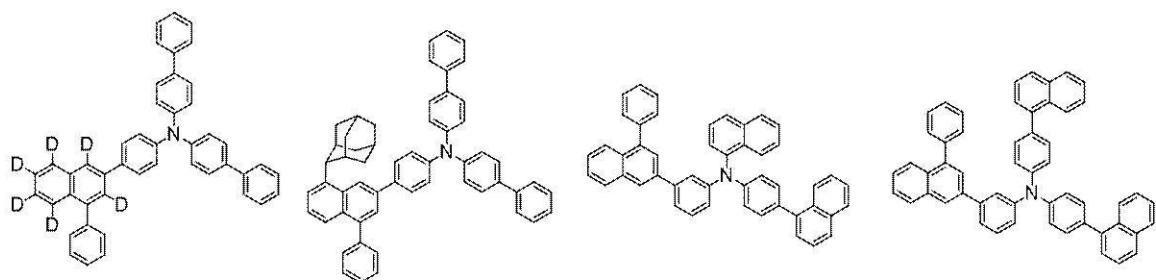
E25

E26

E27

E28

10



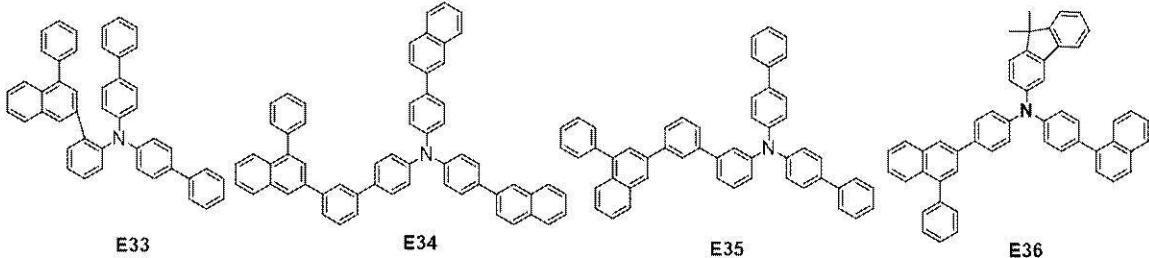
E29

E30

E31

E32

20



E33

E34

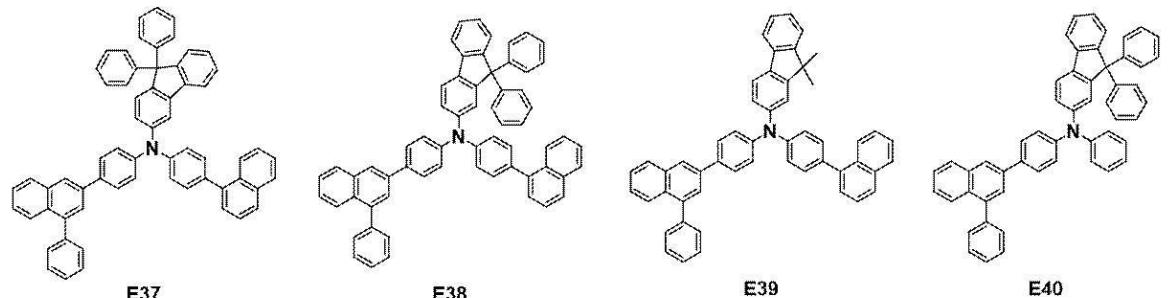
E35

E36

30

40

50



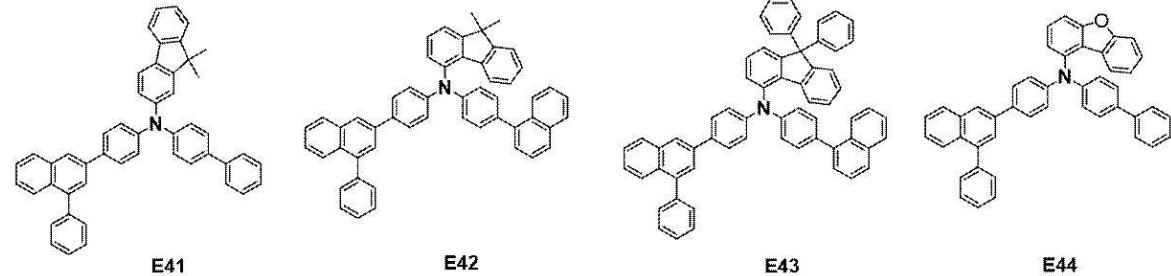
E37

E38

E39

E40

10



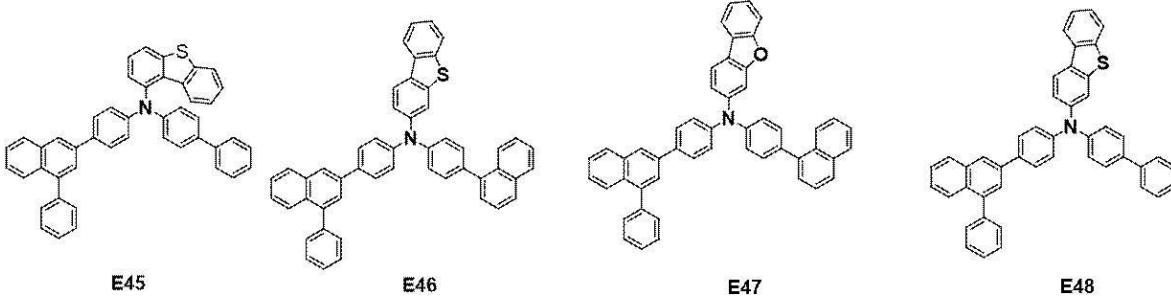
E41

E42

E43

E44

20



E45

E46

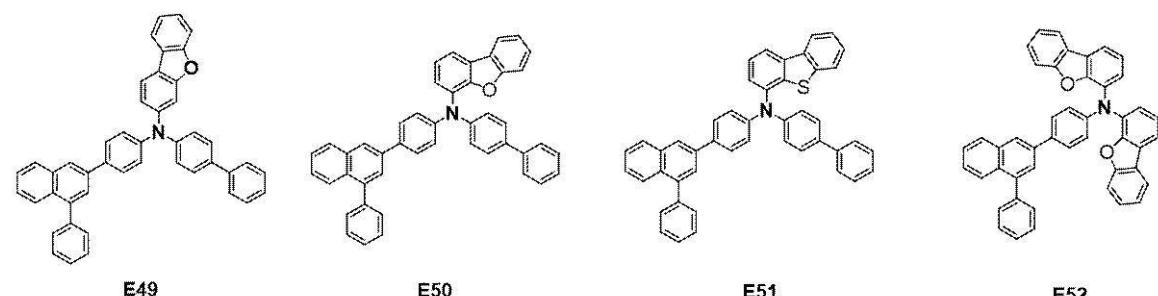
E47

E48

30

40

50

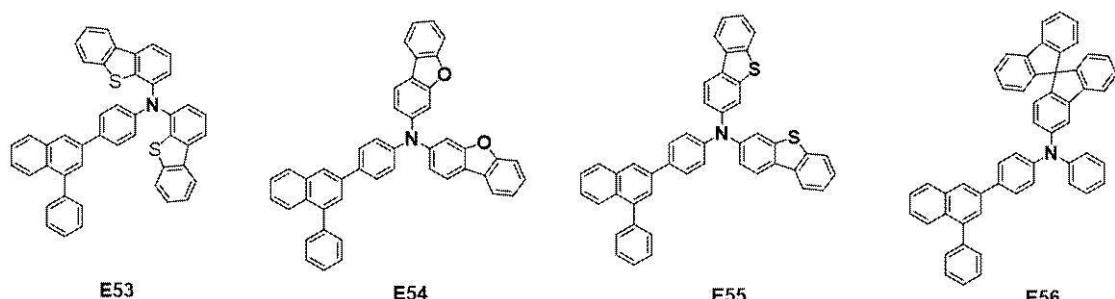


E49

E50

E51

E52

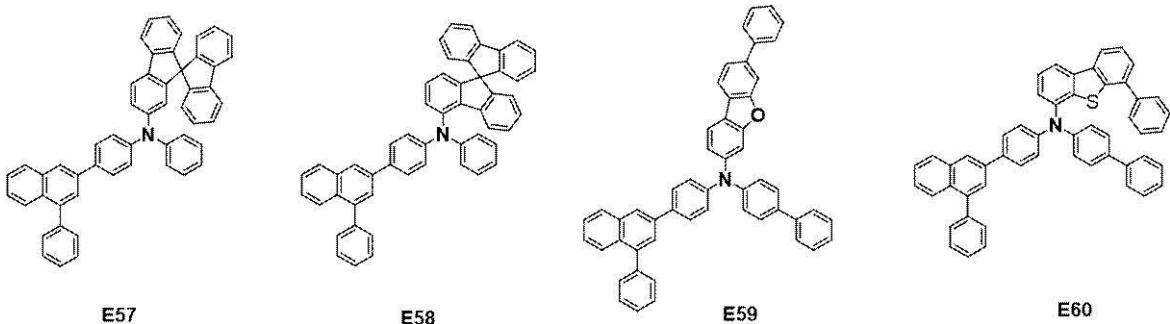


E53

E54

E55

E56



E57

E58

E59

E60

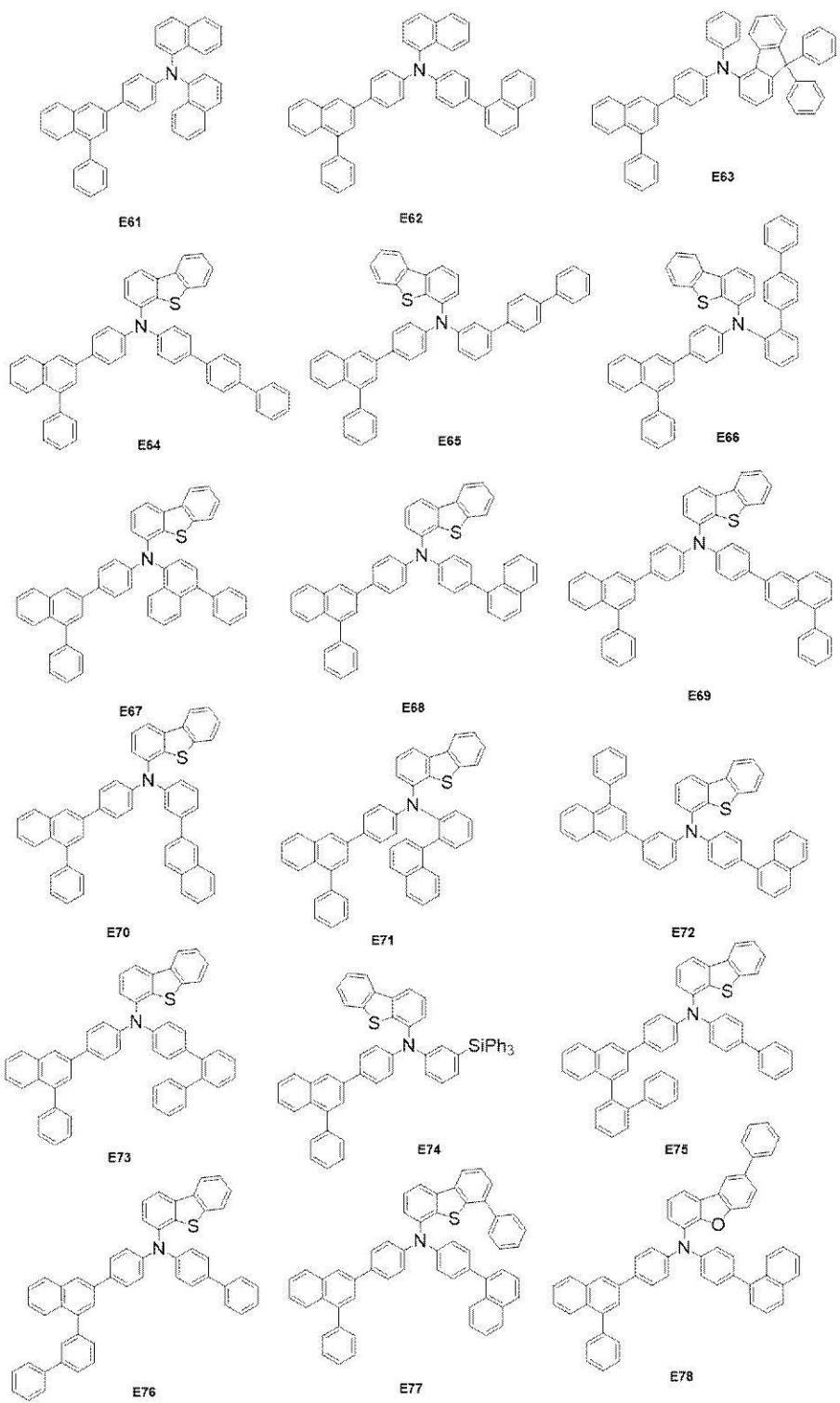
10

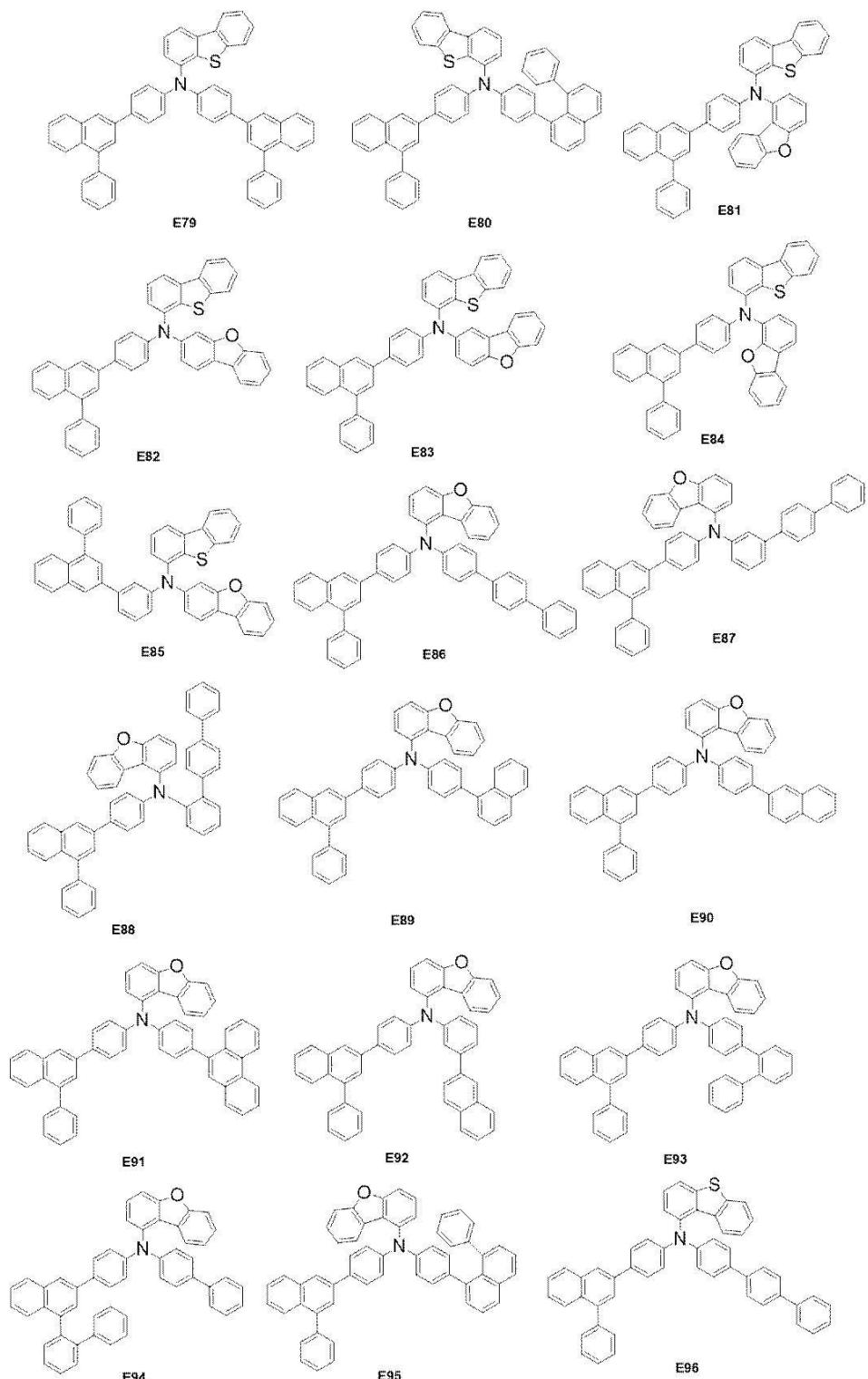
20

30

40

50





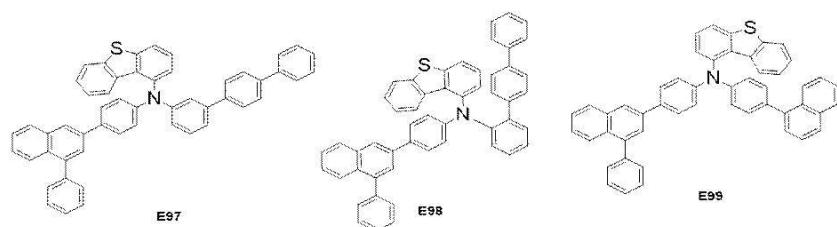
10

20

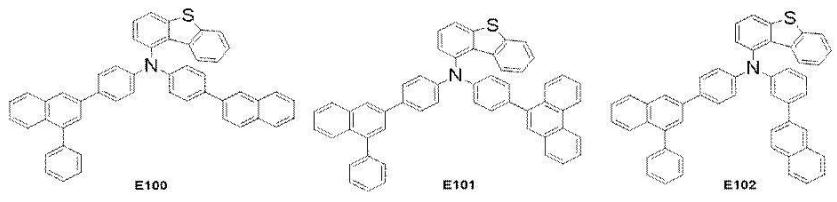
30

40

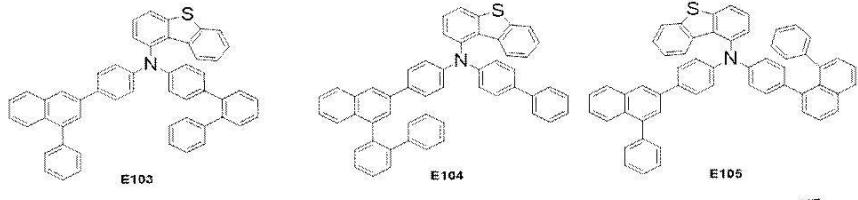
50



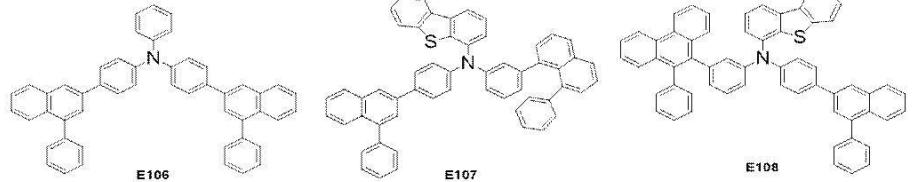
E97 E98 E99



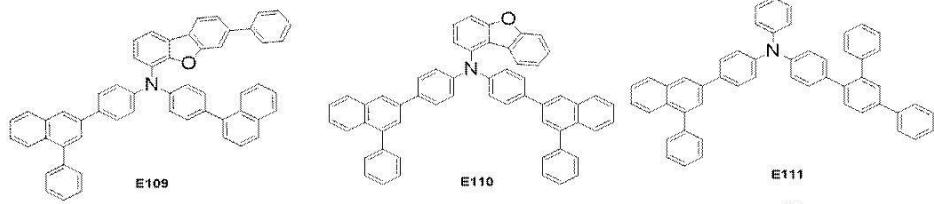
E100 E101 E102



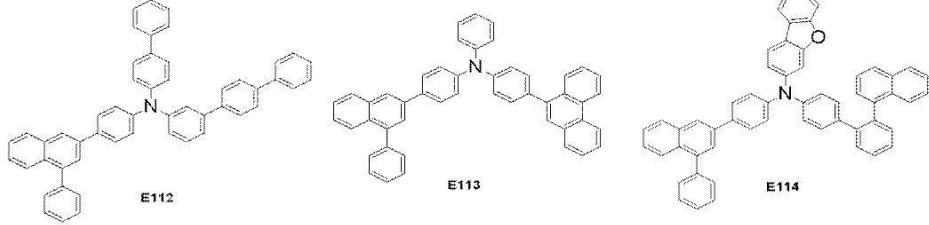
E103 E104 E105



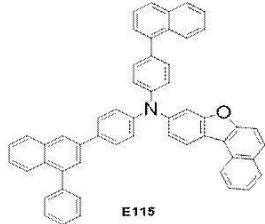
E106 E107 E108



E109 E110 E111



E112 E113 E114



E115

10

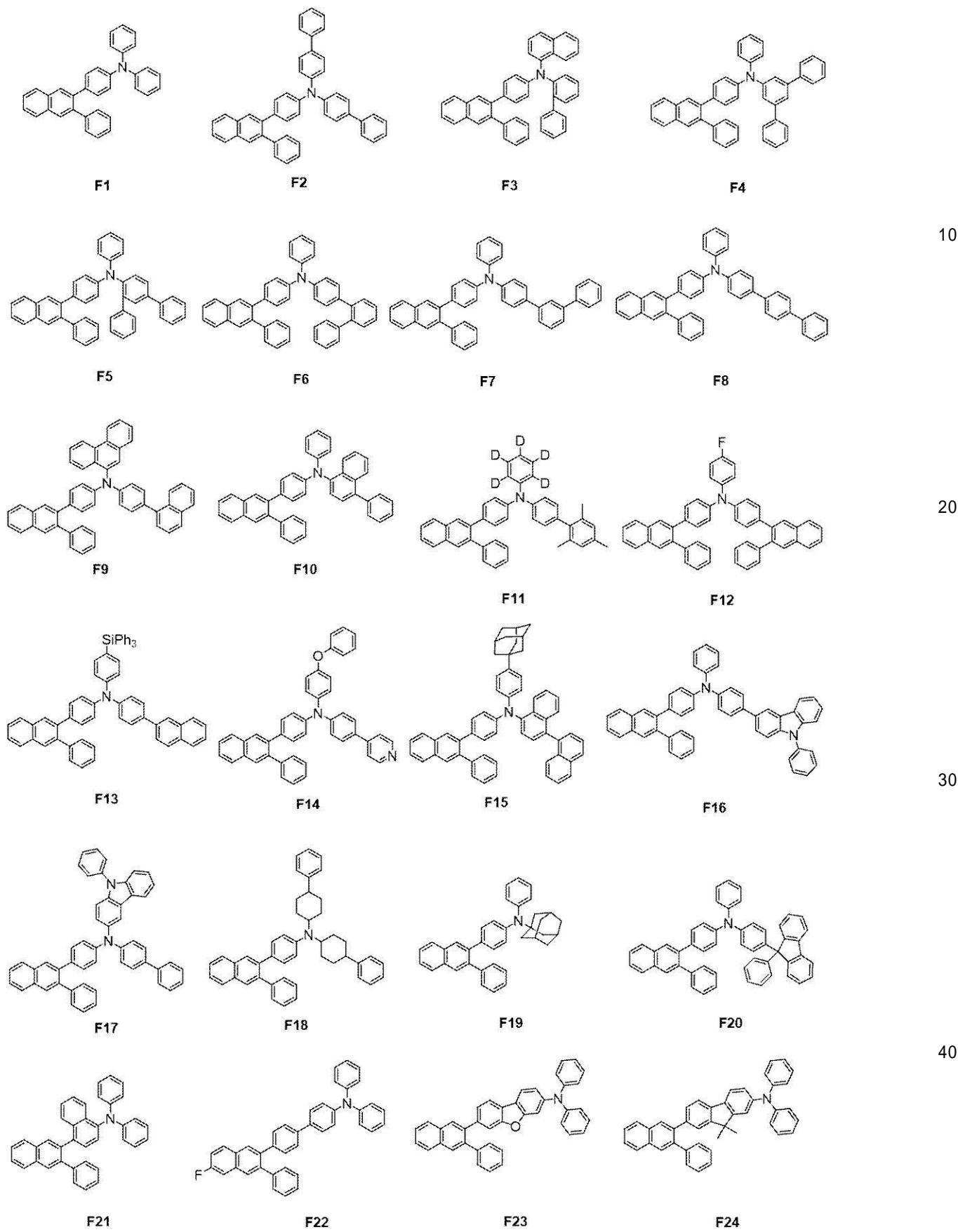
20

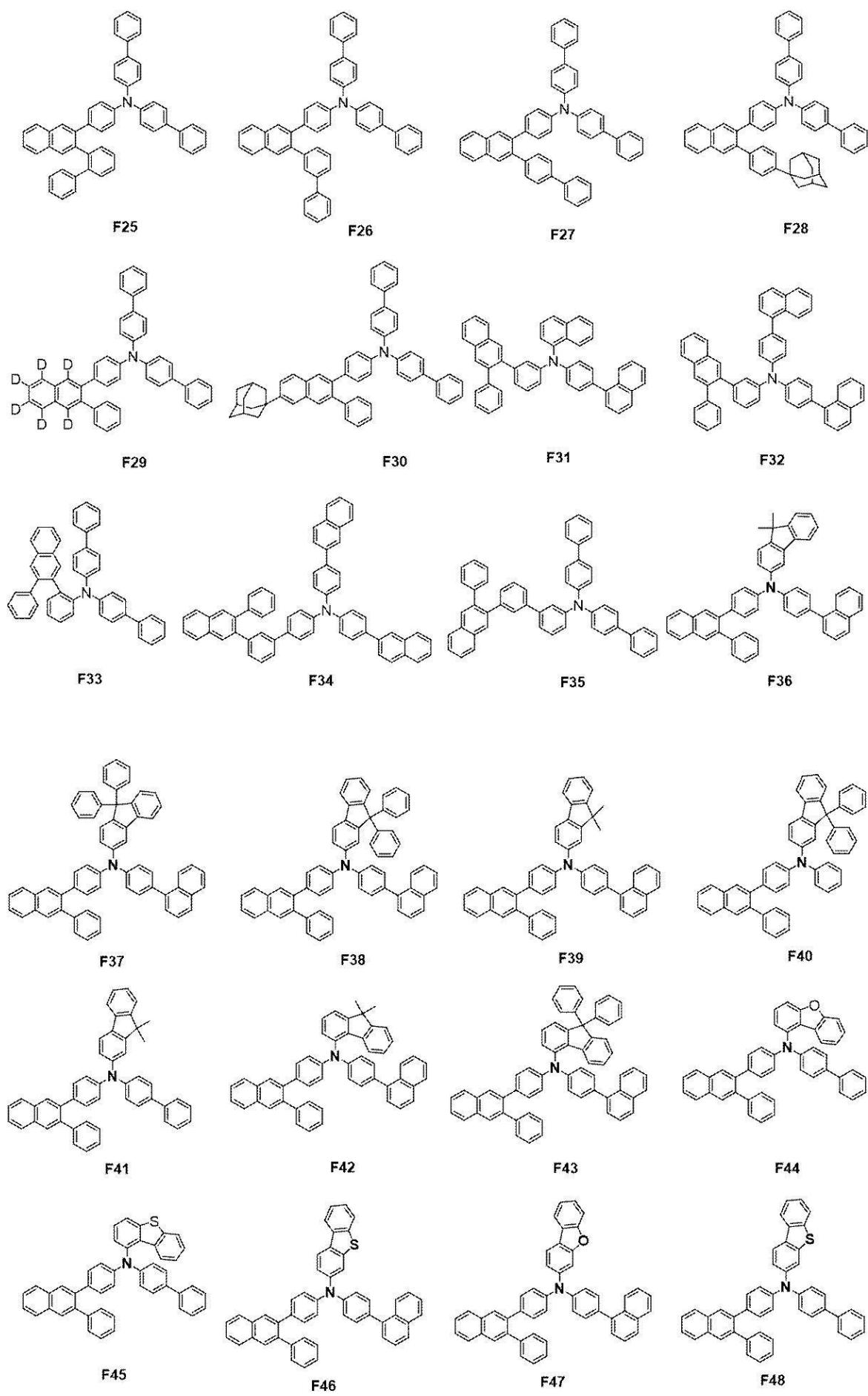
30

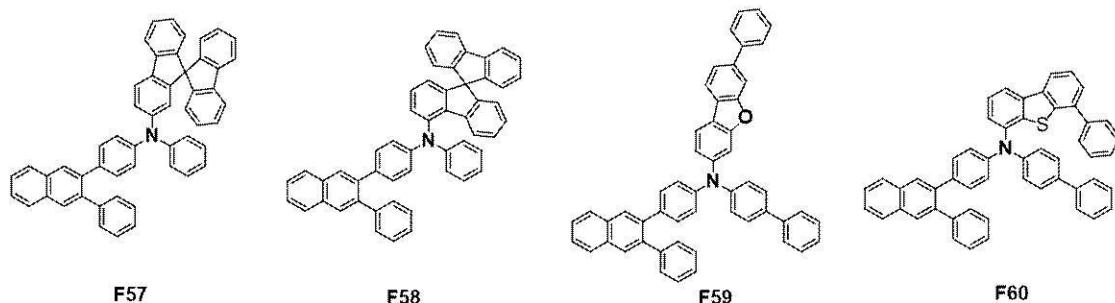
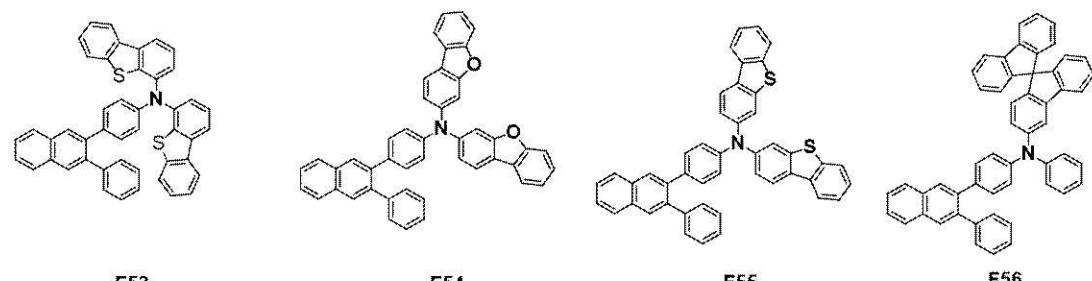
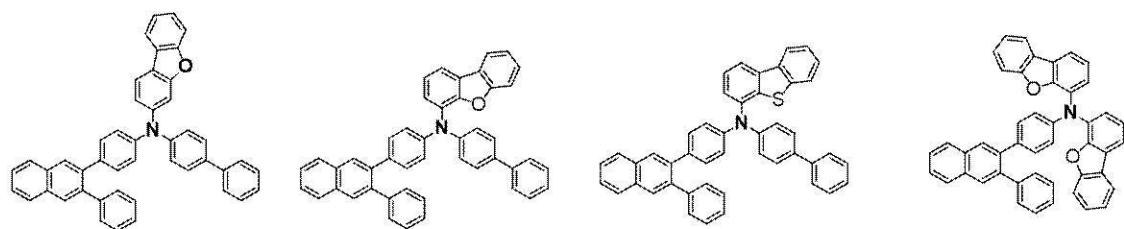
40

【 0 0 8 2 】  
[ 化合物群 6 ]

## 【化 2 5】







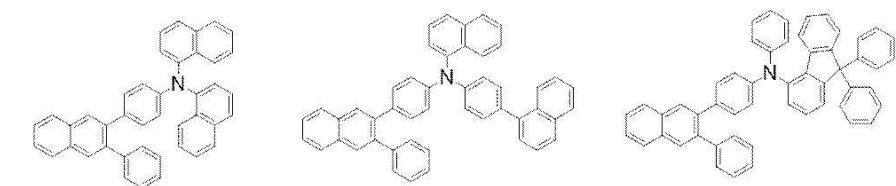
10

20

30

40

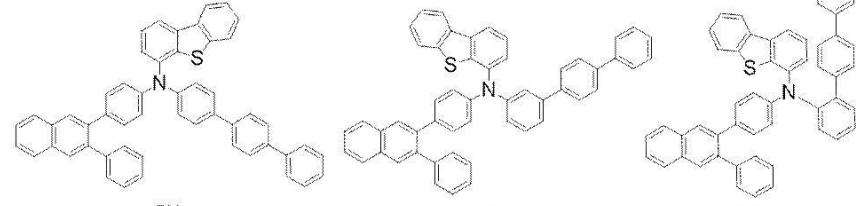
50



F61

F62

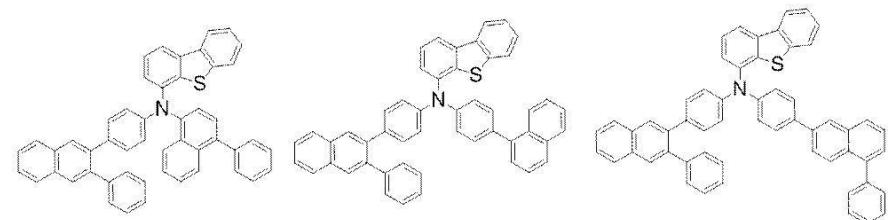
F63



F64

F65

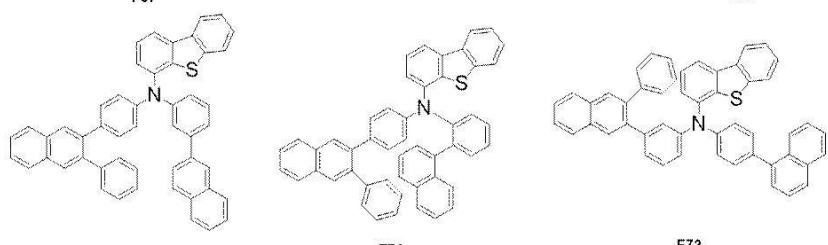
F66



F67

F68

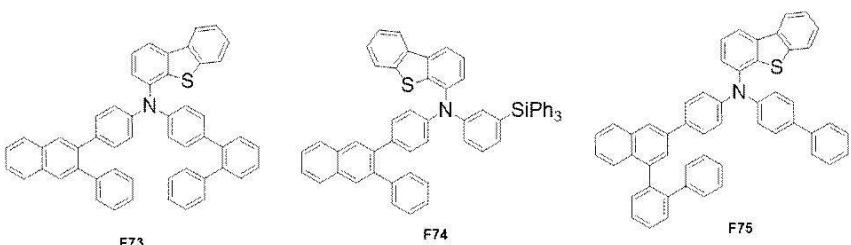
F69



F70

F71

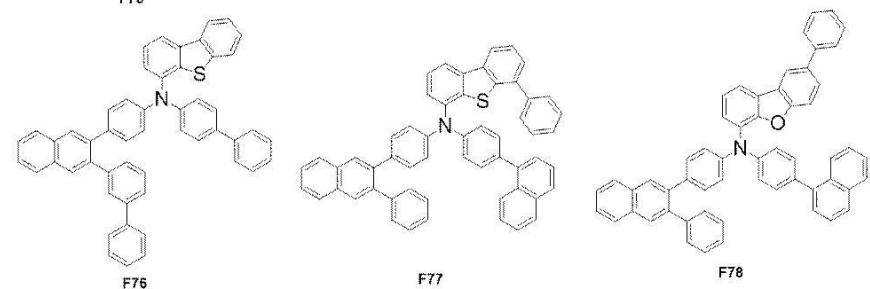
F72



F73

F74

F75



F76

F77

F78

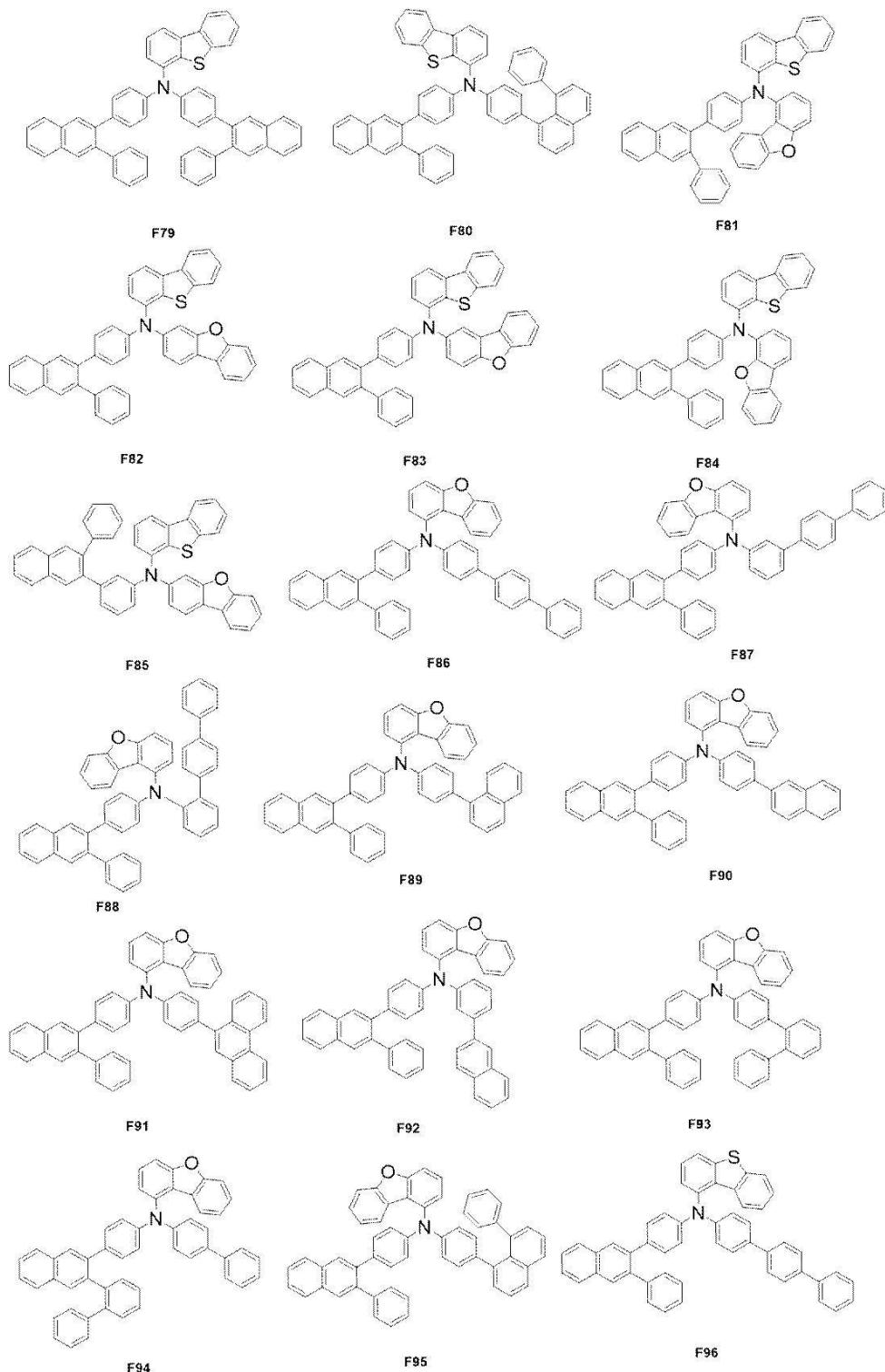
10

20

30

40

50



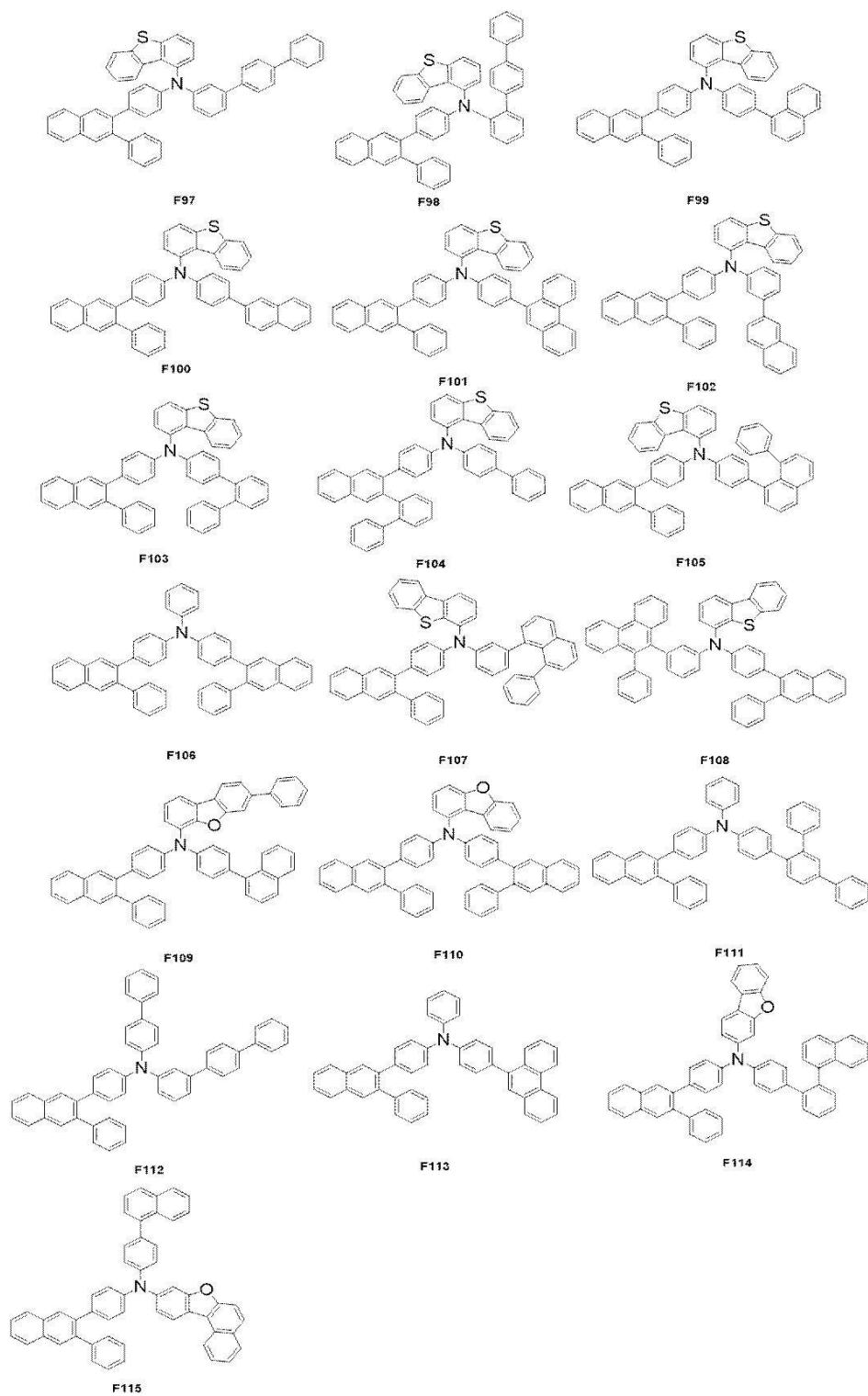
10

20

30

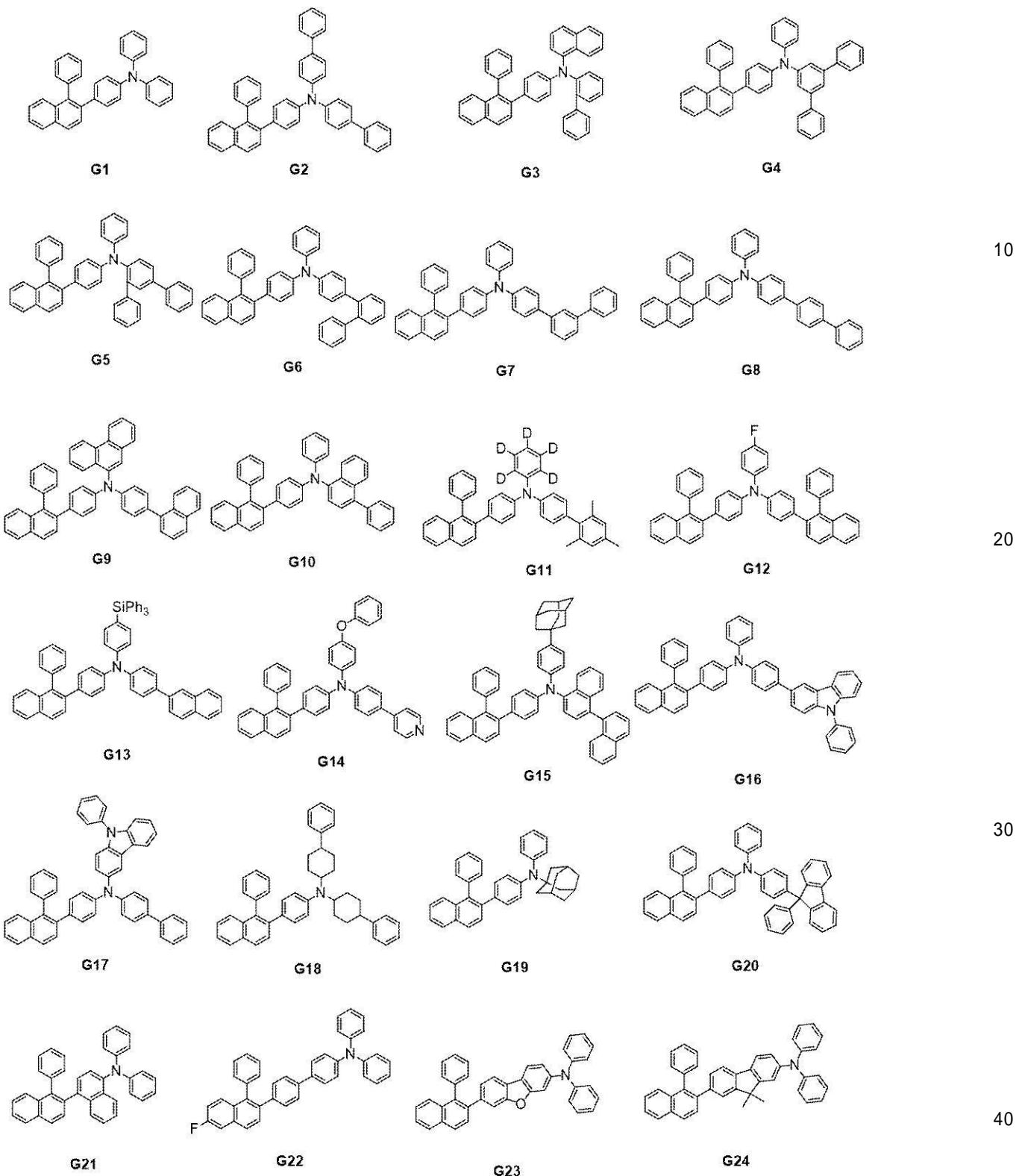
40

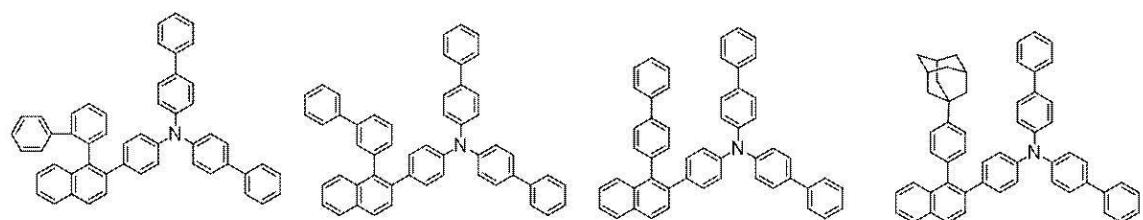
50



【 0 0 8 3 】  
[ 化合物群 7 ]

【化 2 6】



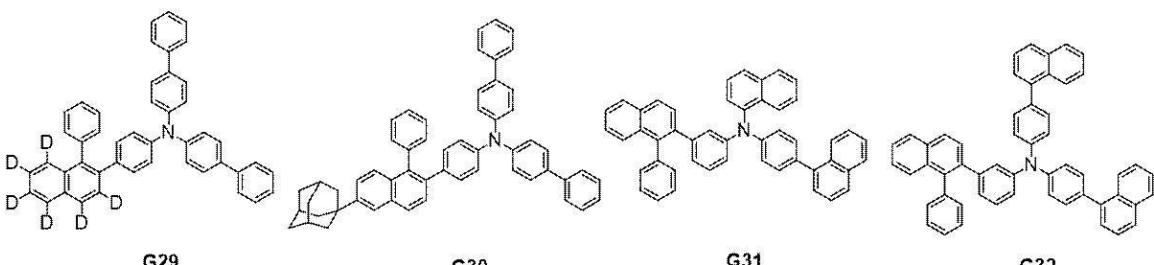


G25

G26

G27

G28

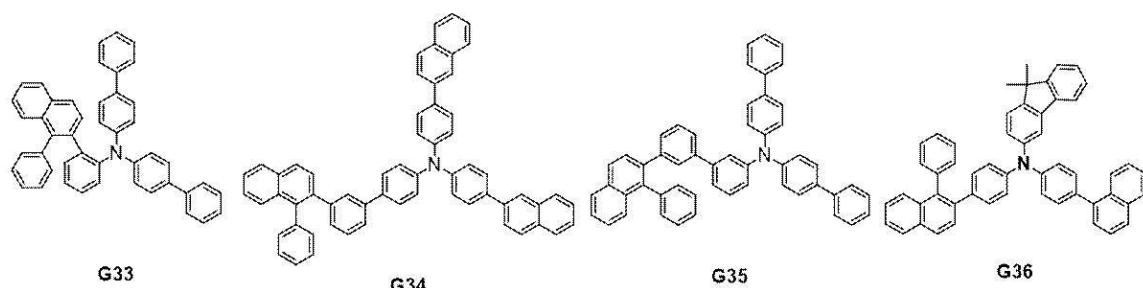


G29

G30

G31

G32

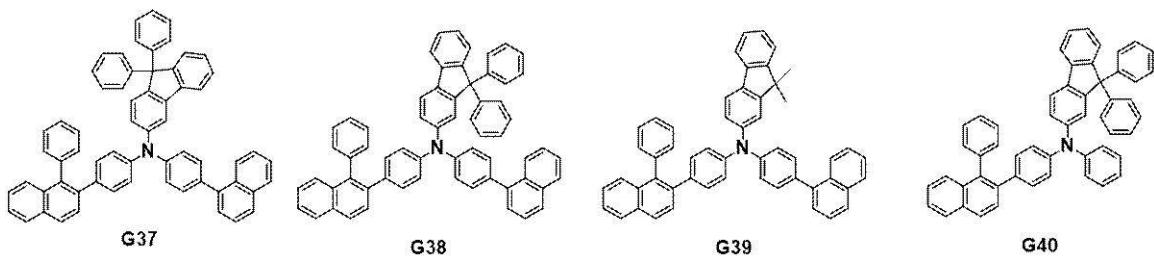


G33

G34

G35

G36

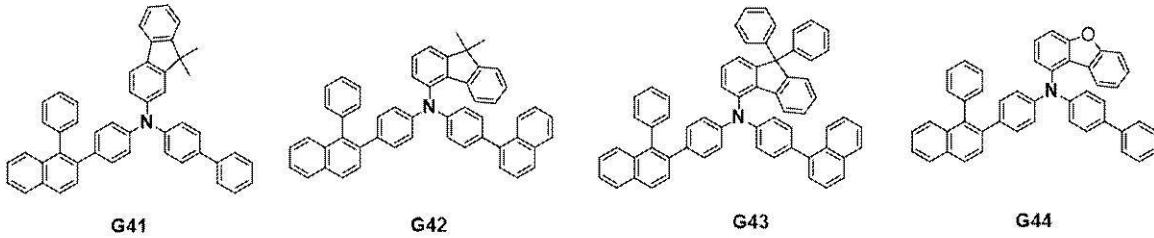


G37

G38

G39

G40

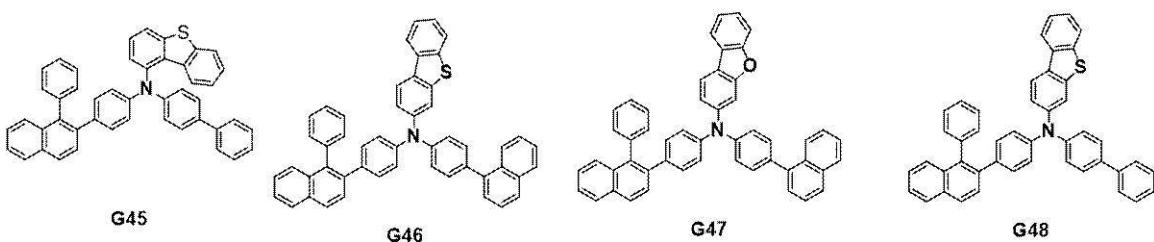


G41

G42

G43

G44



G45

G46

G47

G48

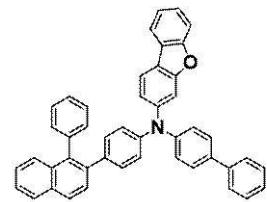
10

20

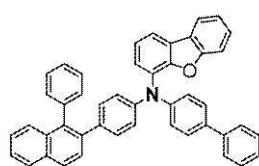
30

40

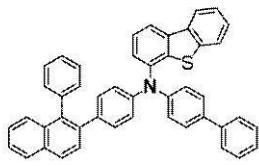
50



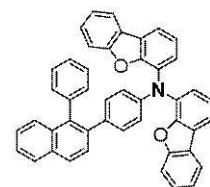
G49



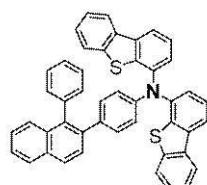
G50



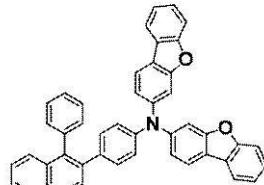
G51



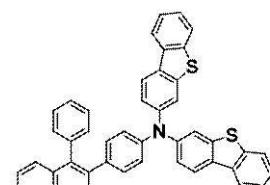
G52



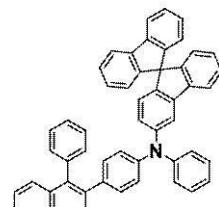
G53



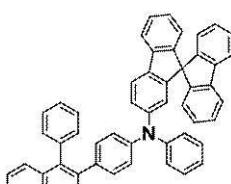
G54



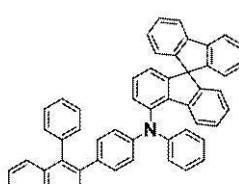
G55



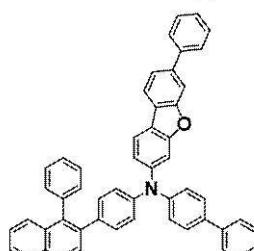
G56



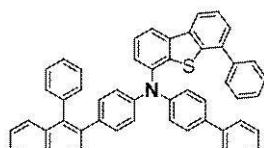
G57



G58



G59



G60

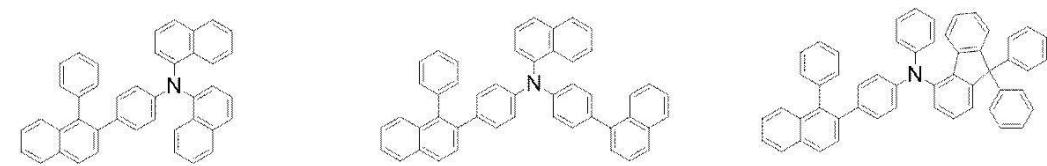
10

20

30

40

50

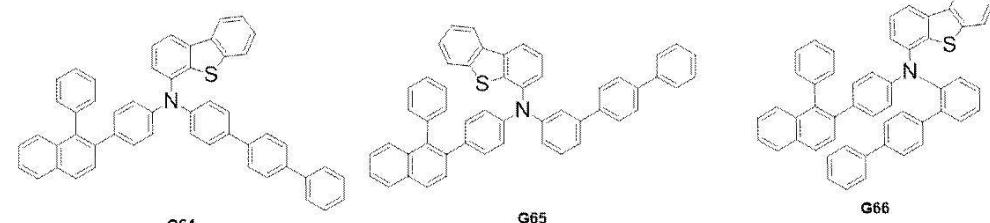


G61

G62

G63

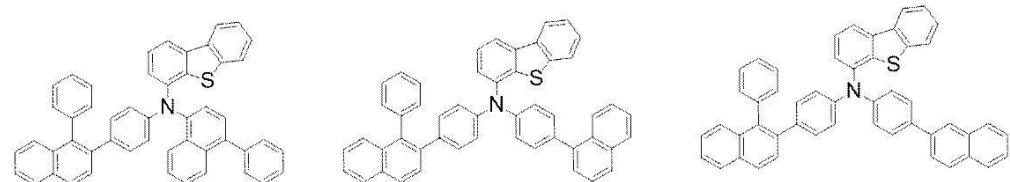
10



G64

G65

G66

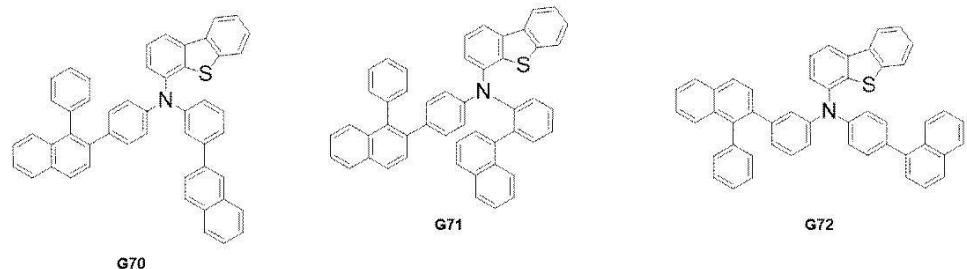


G67

G68

G69

20

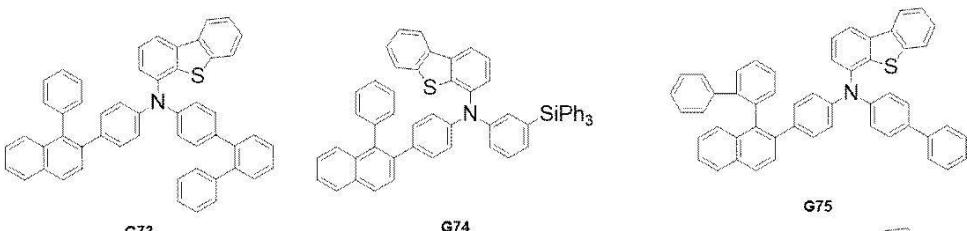


G70

G71

G72

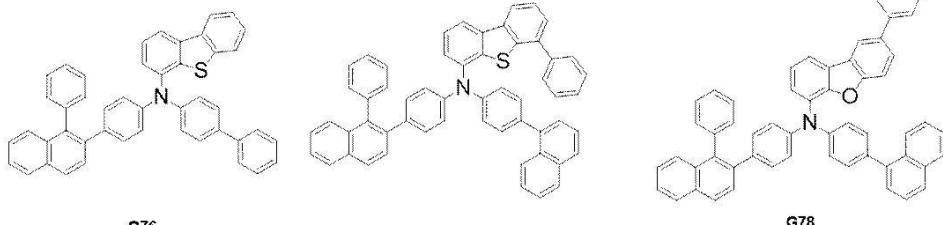
30



G73

G74

G75



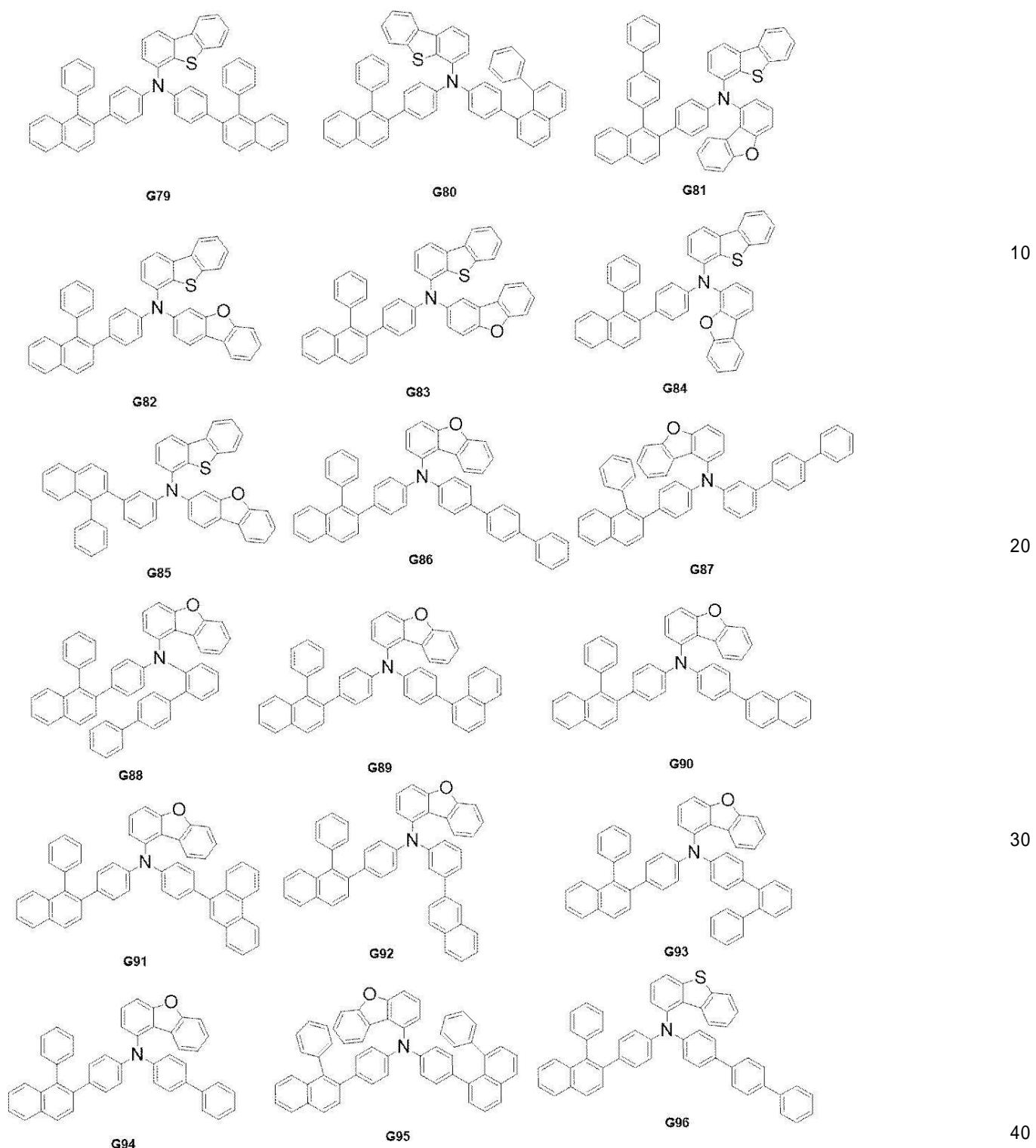
G76

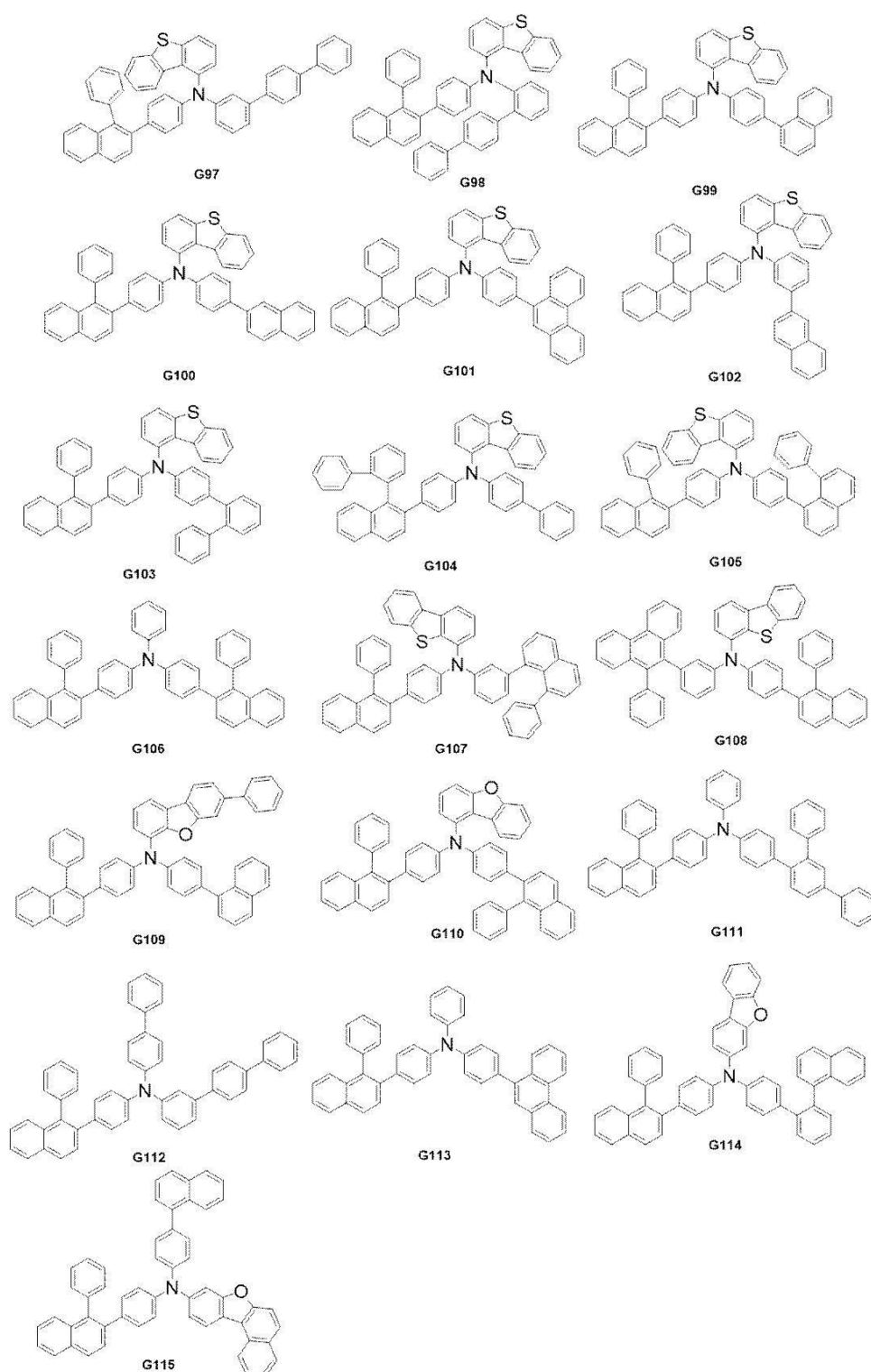
G77

G78

40

50





## 【0084】

本発明の一実施形態によるモノアミン化合物は、縮合環及び熱耐性、電荷耐性の高いフェニルナフチル基を含み、これにより、有機電界発光素子に適用する場合、長寿命化に寄与することができる。フェニルナフチル基の体積によって分子の対称性が低下して結晶化が抑制されることにより、膜質を向上させることができるために、高効率化にも寄与することができる。

## 【0085】

また、図1～図3を参照して本発明の一実施形態による有機電界発光素子について説明する。本発明の一実施形態による有機電界発光素子は、上述した本発明の一実施形態による

モノアミン化合物を含む。例えば、正孔輸送領域HTRは化学式1で表されるモノアミン化合物を含む。

【0086】

以下では、上述した本発明の一実施形態によるモノアミン化合物との相違点を中心に具体的に説明し、説明しない部分は上述した本発明の一実施形態によるモノアミン化合物に従う。

【0087】

第1電極EL1は導電性を有する。第1電極EL1は画素電極または正極であってもよい。第1電極EL1は透過型電極、半透過型電極または反射型電極であってもよい。第1電極EL1が透過型電極である場合、第1電極EL1は、透明金属酸化物、例えば、ITO(indium tin oxide)、IZO(indium zinc oxide)、ZnO(zinc oxide)、ITZO(indium tin zinc oxide)などを含んでもよい。第1電極EL1が半透過型電極または反射型電極である場合、第1電極EL1は、Ag、Mg、Cu、Al、Pt、Pd、Au、Ni、Nd、Ir、Cr、Li、Ca、LiF/Ca、LiF/Al、Mo、Ti、またはこれらの化合物や混合物(例えば、AgとMgの混合物)を含んでもよい。または上記物質で形成された反射膜や半透過膜及びITO、IZO、ZnO、ITZOなどで形成された透明導電膜を含む複数層の構造であってもよい。例えば、第1電極EL1はITO/Ag/ITOの3層構造であってもよいが、これに限定されるものではない。

【0088】

第1電極EL1の厚さは、約100nm～約1000nm、例えば、約100nm～約300nmであってもよい。

【0089】

正孔輸送領域HTRは、第1電極EL1上に提供される。正孔輸送領域HTRは、正孔注入層HIL、正孔輸送層HTL、正孔バッファ層、及び電子阻止層EBLのうち少なくとも1つを含んでもよい。

【0090】

正孔輸送領域HTRは、上述したように、本発明の一実施形態によるモノアミン化合物を含む。

【0091】

正孔輸送領域HTRは、单一物質からなる単一層、複数の異なる物質からなる単一層、または複数の異なる物質からなる複数の層を有する多層構造であってもよい。

【0092】

例えば、正孔輸送領域HTRは、正孔注入層HILまたは正孔輸送層HTLの単一層の構造であってもよく、正孔注入物質と正孔輸送物質からなる単一層構造であってもよい。また、正孔輸送領域HTRは、複数の異なる物質からなる単一層の構造であるか、第1電極EL1から順に積層された正孔注入層HIL/正孔輸送層HTL、正孔注入層HIL/正孔輸送層HTL/正孔バッファ層、正孔注入層HIL/正孔バッファ層、正孔輸送層HTL/正孔バッファ層、または正孔注入層HIL/正孔輸送層HTL/電子阻止層EBLの構造であってもよいが、これに限定されるものではない。

【0093】

上述したように、正孔輸送領域HTRは、複数の層を有する多層構造であってもよく、複数の層のうち発光層EMLと接する層が化学式1で表されるモノアミン化合物を含むものであってもよい。例えば、正孔輸送領域HTRは、第1電極EL1上に配置された正孔注入層HIL、正孔注入層HIL上に配置された正孔輸送層HTL、及び正孔輸送層HTL上に配置された電子阻止層EBLを含み、電子阻止層EBLが化学式1で表されるモノアミン化合物を含むものであってもよい。但し、これに限定されるものではなく、例えば、正孔輸送領域HTRは、正孔注入層HILと正孔輸送層HTLを含み、正孔輸送層HTLが化学式1で表されるモノアミン化合物を含むものであってもよい。

【0094】

10

20

30

40

50

正孔輸送領域HTRは、化学式1で表されるモノアミン化合物を1種または2種以上を含んでもよい。例えば、正孔輸送領域HTRは、上述した化合物群1～化合物群7に表された化合物から選択される少なくとも1つを含んでもよい。

#### 【0095】

正孔輸送領域HTRは、真空蒸着法、スピニコート法、キャスト法、LB法(Langmuir-Blodgett)、インクジェットプリント法、レーザープリント法、レーザー熱転写法(Laser Induced Thermal Imaging、LITI)などの様々な方法を利用して形成してもよい。

#### 【0096】

但し、正孔輸送領域は、各層毎に下記の材料をさらに含んでもよい。

10

#### 【0097】

正孔注入層HILは、例えば、銅フタロシアニン(copper phthalocyanine)などのフタロシアニン(phthalocyanine)化合物；DNTPD( $N,N'$ -diphenyl-N,N'-bis-[4-(phenyl-m-tolyl-amino)-phenyl]-biphenyl-4,4'-diamine)、m-MTDATA(4,4',4''-tris(3-methylphenylphenylphenylamino)triphenylamine)、TDTA(4,4'4''-Triis( $N,N$ -diphenylamino)triphenylamine)、2-TNATA(4,4',4''-tris{N,-(2-naphthyl)-N-phenylamino}-triphenylamine)、PEDOT/PSS(Poly(3,4-ethylenedioxythiophene)/Poly(4-styrenesulfonate))、PANI/DBSA(Polyaniline/Dodecylbenzenesulfonic acid)、PANI/CSA(Polyaniline/Camphor sulfonic acid)、PANI/PSS((Polyaniline)/Poly(4-styrenesulfonate))、NPD( $N,N'$ -di(naphthalene-1-yl)-N,N'-diphenylbenzidine)、トリフェニルアミンを含むポリエーテルケトン(TPAPEK)、4-Isopropyl-4'-methoxydiphenyliodonium Tetrakis(pentafluorophenyl)borate]、HAT-CN(dipyrazino[2,3-f:2',3'-h]quinoxaline-2,3,6,7,10,11-hexacarbonitrile)などを含んでもよい。

#### 【0098】

正孔輸送層HTLは、例えば、N-フェニルカルバゾール、ポリビニルカルバゾールなどのカルバゾール系誘導体、フルオレン(fluorine)系誘導体、TPD( $N,N'$ -bis(3-methylphenyl)-N,N'-diphenyl-[1,1-biphenyl]-4,4'-diamine)、TCTA(4,4',4''-tris( $N$ -carbazolyl)triphenylamine)などのようなトリフェニルアミン系誘導体、NPD( $N,N'$ -di(naphthalene-1-yl)-N,N'-diphenylbenzidine)、TAPC(4,4'-Cyclohexylidene bis[N,N-bis(4-methylphenyl)benzenamine])、HMTPD(4,4'-Bis[N,N'-(3-tolyl)amino]-3,3'-dimethylbiphenyl)などを含んでもよい。

#### 【0099】

電子阻止層EBLは、上述したように、化学式1で表されるモノアミン化合物を含んでもよい。但し、これに限定されるものではなく、電子阻止層EBLは、当技術分野に知られている一般的な材料を含んでもよい。電子阻止層EBLは、例えば、N-フェニルカルバゾール、ポリビニルカルバゾールなどのカルバゾール系誘導体、フルオレン(fluorine)系誘導体、TPD( $N,N'$ -bis(3-methylphenyl)-N,N'-diphenyl-[1,1-biphenyl]-4,4'-diamine)、TCTA(4,4',4''-tris( $N$ -carbazolyl)triphenyl 50

amine)などのようなトリフェニルアミン系誘導体、NPD(*N,N'*-di(naphthalene-1-yl)-*N,N'*-diphenyl-benzidine)、TAPC(4,4'-Cyclohexylidene bis[N,N-bis(4-methylphenyl)benzenamine])、HMTPD(4,4'-Bis[N,N-(3-toly)amino]-3,3'-dimethylbiphenyl)またはmCPなどを含んでもよい。

#### 【0100】

正孔輸送領域HTRの厚さは、約10nm～約1000nm、例えば、約10nm～約500nmであってもよい。正孔注入層HILの厚さは、例えば、約3nm～約100nmであり、正孔輸送層HTLの厚さは、約3nm～約100nmであってもよい。電子阻止層EBLの厚さは、約1nm～約100nmであってもよい。正孔輸送領域HTR、正孔注入層HIL、正孔輸送層HTL、及び電子阻止層EBLの厚さが上述した範囲を満たす場合、実質的な駆動電圧の上昇なしに満足できる程度の正孔輸送特性を得ることができる。  
10

#### 【0101】

正孔輸送領域HTRは、上述した物質のほかに、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。電荷生成物質は、正孔輸送領域HTR内に均一または不均一に分散されていてもよい。電荷生成物質は、例えば、p-ドーパント(dopant)であってもよい。p-ドーパントは、キノン(quinone)誘導体、金属酸化物及びシアノ(cyano)基含有化合物のうち1つであってもよいが、これに限定されるものではない。例えば、p-ドーパントの非制限的な例としては、TCNQ(Tetracyanoquinodimethane)及びF4-TCNQ(2,3,5,6-tetrafluoro-tetracyanoquinodimethane)などのようなキノン誘導体、タンゲステン酸化物、及びモリブデン酸化物などのような金属酸化物などが挙げられるが、これらに限定されるものではない。  
20

#### 【0102】

上述したように、正孔輸送領域HTRは、正孔バッファ層及び電子阻止層EBLのうち少なくとも1つをさらに含んでもよい。正孔バッファ層は、発光層EMLから放出される光の波長に応じた共振距離を補償して光放出効率を増加させることができる。正孔バッファ層に含まれる物質としては、正孔輸送領域HTRに含まれる物質を用いてもよい。電子阻止層EBLは、電子輸送領域ETRから正孔輸送領域HTRへの電子注入を防止する役割をする層である。  
30

#### 【0103】

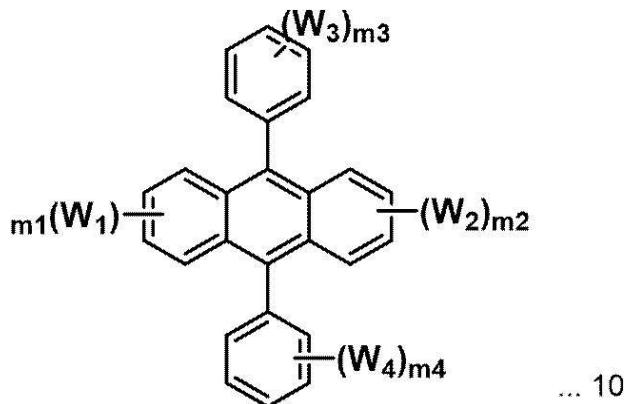
発光層EMLは正孔輸送領域HTR上に提供される。発光層EMLは、例えば、約10nm～約100nm、または約10nm～約60nmの厚さを有するものであってもよい。発光層EMLは、単一物質からなる単一層、複数の異なる物質からなる単一層、または複数の異なる物質からなる複数の層を有する多層構造であってもよい。

#### 【0104】

発光層EMLの材料としては、公知の発光材料を使用してもよく、特に限定されるものではないが、フルオランテン(fluoranthene)誘導体、ピレン(pyrene)誘導体、アリールアセチレン(arylacetylene)誘導体、アントラセン(anthracene)誘導体、フルオレン(fluorene)誘導体、ペリレン(perylene)誘導体、クリセン(chrysene)誘導体などから選択される。好みしくは、ピレン誘導体、ペリレン誘導体、アントラセン誘導体を挙げができる。例えば、発光層EMLのホスト材料として、下記化学式10で表されるアントラセン誘導体を使用することもできる。  
40

#### 【0105】

## 【化27】



10

20

30

40

50

## 【0106】

化学式10において、W<sub>1</sub>～W<sub>4</sub>は、それぞれ独立して水素原子、重水素原子、ハロゲン原子、置換若しくは無置換のシリル基、置換若しくは無置換の炭素数1以上20以下のアルキル基、置換若しくは無置換の環形成炭素数6以上30以下のアリール基、または置換若しくは無置換の環形成炭素数2以上30以下のヘテロアリール基であるか、隣接する基と互いに結合して環を形成することができ、m<sub>1</sub>及びm<sub>2</sub>は、それぞれ独立して0以上4以下の整数であり、m<sub>3</sub>及びm<sub>4</sub>は、それぞれ独立して0以上5以下の整数である。

## 【0107】

m<sub>1</sub>が1である場合、W<sub>1</sub>は水素原子ではなくてもよく、m<sub>2</sub>が1である場合、W<sub>2</sub>は水素原子ではなくてもよく、m<sub>3</sub>が1である場合、W<sub>3</sub>は水素原子ではなくてもよく、m<sub>4</sub>が1である場合、W<sub>4</sub>は水素原子ではなくてもよい。

## 【0108】

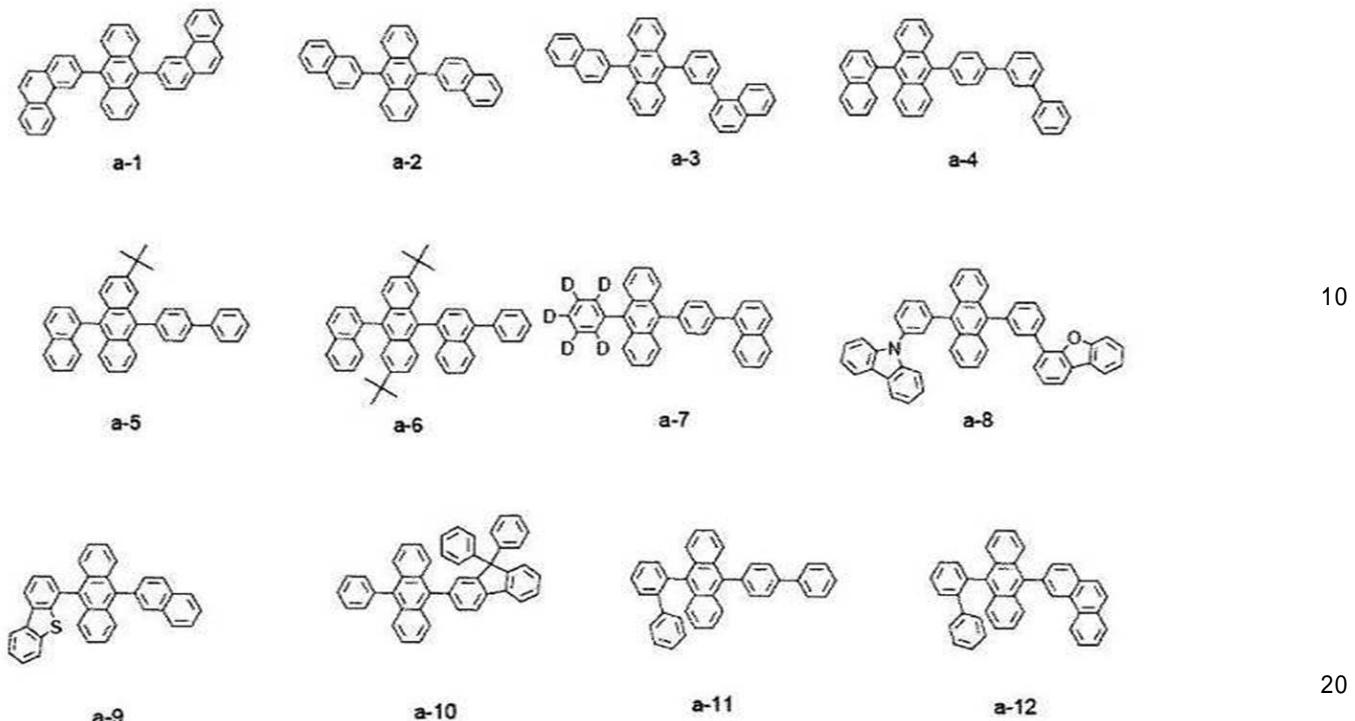
m<sub>1</sub>が2以上である場合、複数のW<sub>1</sub>は互いに同一であってもよく、異なっていてもよい。m<sub>2</sub>が2以上である場合、複数のW<sub>2</sub>は互いに同一であってもよく、異なっていてもよい。m<sub>3</sub>が2以上である場合、複数のW<sub>3</sub>は互いに同一であってもよく、異なっていてもよい。m<sub>4</sub>が2以上である場合、複数のW<sub>4</sub>は互いに同一であってもよく、異なっていてもよい。

## 【0109】

化学式10で表される化合物は、一例として、下記構造式で表される化合物が挙げられる。但し、上記化学式10で表される化合物は以下に限定されるものではない。

## 【0110】

## 【化28】



## 【0111】

発光層EMLは、例えば、スピロ-DPVBi (spiro-DPVBi)、スピロ-6P (spiro-6P、2,2',7,7'-tetraakis(biphenyl-4-yl)-9,9'-spirobifluorene (spiro-sexiphenyl))、DSB (distyryl-benzene)、DSA (distyryl-arylene)、PFO (Polyfluorene) 系高分子及びPPV (poly(p-phenylene vinylene) 系高分子からなる群より選択された何れか1つを含む蛍光物質を含んでもよい。

30

## 【0112】

発光層EMLはドーパントをさらに含んでもよく、ドーパントは公知の材料を使用してもよい。例えば、スチリル誘導体（例えば、1,4-bis[2-(3-N-ethylcarbazolyl)vinyl]benzene (BCzVB)、4-(di-p-tolylamino)-4'-(di-p-tolylamino)styrylstilbene (DPAVB)、N-(4-((E)-2-(6-((E)-4-(diphenylamino)styryl)naphthalen-2-yl)vinyl)phenyl)-N-phenylbenzenamine (N-BDAVBi)）、ペリレン及びその誘導体（例えば、2,5,8,11-tetra-t-butylperylene (TBPe)）、ピレン及びその誘導体（例えば、1,1-dipyrrene、1,4-dipyranylbenzene、1,4-Bis(N,N-Diphenylamino)pyrene、1,6-Bis(N,N-Diphenylamino)pyrene）、2,5,8,11-Tetra-t-butylperylene (TBP)、TPBi (2,4,6-tris(N-phenylbenzimidazolo-2-yl)benzene)などをドーパントとして使用することができる。

40

## 【0113】

発光層EMLは、例えば、Alq<sub>3</sub> (tris(8-hydroxyquinolinato)aluminum)、CBP (4,4'-bis(N-carbazolyl)-1,1'-biphenyl)、PVK (poly(N-vinyl carbazole)、ADN (9,10-di(naphthalene-2-yl)anthracene) 50

、TCTA(4,4',4''-Triis(carbazol-9-yl)-triphenylamine)、TPBi(1,3,5-tris(N-phenylbenzimidazole-2-yl)benzene)、TBADN(3-tert-butyl-9,10-di(naphth-2-yl)anthracene)、DSA(disstyrylarylene)、CDBP(4,4'-bis(9-carbazolyl)-2,2'-dimethyl-biphenyl)、MADN(2-Methyl-9,10-bis(naphthalen-2-yl)anthracene)、DPEPO(bis[2-(diphenylphosphino)phenyl]ether oxide)、CP1(Hexaphenylcyclotriphosphazene)、UGH2(1,4-Bis(triphenylsilyl)benzene)、DPSiO<sub>3</sub>(Hexaphenylcyclotrisiloxane)、DPSiO<sub>4</sub>(Octaphenylcyclotetrasiloxane)またはPPF(2,8-Bis(diphenylphosphoryl)dibenzofuran)などを含んでもよい。

#### 【0114】

電子輸送領域ETRは発光層EML上に提供される。電子輸送領域ETRは、正孔阻止層HBL、電子輸送層ETL及び電子注入層EILのうち少なくとも1つを含んでもよいが、これに限定されるものではない。

#### 【0115】

電子輸送領域ETRは、单一物質からなる単一層、複数の異なる物質からなる単一層、または複数の異なる物質からなる複数の層を有する多層構造であってもよい。

#### 【0116】

例えば、電子輸送領域ETRは、電子注入層EILまたは電子輸送層ETLの単一層の構造であってもよく、電子注入物質及び電子輸送物質からなる単一層の構造であってもよい。また、電子輸送領域ETRは、複数の異なる物質からなる単一層の構造であるか、発光層EMLから順に積層された電子輸送層ETL／電子注入層EIL、正孔阻止層HBL／電子輸送層ETL／電子注入層EILの構造であってもよいが、これに限定されるものではない。電子輸送領域ETRの厚さは、例えば、約10nm～約150nmであってもよい。

#### 【0117】

電子輸送領域ETRは、真空蒸着法、スピンドルコート法、キャスト法、LB法、インクジェットプリント法、レーザープリント法、レーザー熱転写法などの様々な方法を利用して形成してもよい。

#### 【0118】

電子輸送領域ETRが電子輸送層ETLを含む場合、電子輸送領域ETRはAlq<sub>3</sub>(Triis(8-hydroxyquinolinato)aluminum)、1,3,5-tri[(3-pyridyl)-phen-3-yl]benzene、2,4,6-tris(3-(pyridin-3-yl)biphenyl-3-yl)-1,3,5-triazine、DPEPO(bis[2-(diphenylphosphino)phenyl]ether oxide)、2-(4-(N-phenylbenzimidazolyl-1-yl)phenyl)-9,10-dinaphthylanthracene、TPBi(2,4,6-Tri(1-phenyl-1H-benzodimidazol-2-yl)phenyl)、BCP(2,9-Dimethyl-4,7-diphenyl-1,10-phenanthroline)、Bphen(4,7-Diphenyl-1,10-phenanthroline)、TAZ(3-(4-Biphenyl-yl)-4-phenyl-5-tert-butylphenyl-1,2,4-triazole)、NTAZ(4-(Naphthalen-1-yl)-3,5-diphenyl-4H-1,2,4-triazole)、tBu-PBD(2-(4-Biphenyl-yl)-5-(4-tert-butylphenyl)-1,3,4-oxadiazole)、BALq(Bis(2-m

10

20

30

40

50

ethyl-8-quinolinolato-N1,O8)-(1,1'-Biphenyl-4-olate)aluminum)、Be bq 2(beryllium bis(benzoquinolin-10-olate))、ADN(9,10-di(naphthalene-2-yl)anthracene)、及びこれらの混合物を含んでもよいが、これに限定されるものではない。電子輸送層ETLの厚さは、約10nm～約100nm、例えば、約15nm～約50nmであってもよい。電子輸送層ETLの厚さが上述のような範囲を満たす場合、実質的な駆動電圧の上昇なしに満足できる程度の電子輸送特性を得ることができる。

## 【0119】

電子輸送領域ETRが電子注入層EILを含む場合、電子輸送領域ETRはLiF、LiQ(Lithium quinolate)、Li<sub>2</sub>O、BaO、NaCl、CsF、Ybのようなランタノイド金属、またはRbCl、RbIのようなハロゲン化金属などを用いてもよいが、これに限定されるものではない。また、電子注入層EILは電子輸送物質と絶縁性の有機金属塩(organo metal salt)が混合された物質からなってもよい。有機金属塩は、エネルギー・バンドギャップ(energy band gap)が約4eV以上の物質になることができる。具体的には、例えば、有機金属塩は、金属アセテート(metal acetate)、金属ベンゾエート(metal benzoate)、金属アセトアセテート(metal acetoacetate)、金属アセチルアセトネート(metal acetylacetone)、または金属ステアレート(stearate)を含んでもよい。電子注入層EILの厚さは、約0.1～約10nm、約0.3nm～約9nmであってもよい。電子注入層EILの厚さが上述のような範囲を満たす場合、実質的な駆動電圧の上昇なしに満足できる程度の電子注入特性を得ることができる。

## 【0120】

電子輸送領域ETRは、上述したように正孔阻止層HBLを含んでもよい。正孔阻止層HBLは、例えば、BCP(2,9-dimethyl-4,7-diphenyl-1,10-phenanthroline)、Bphen(4,7-diphenyl-1,10-phenanthroline)、またはDPEPO(bis[2-(diphenylphosphino)phenyl]ether oxide)などを含んでもよいが、これに限定されるものではない。

## 【0121】

第2電極EL2は、電子輸送領域ETR上に提供される。第2電極EL2は、共通電極または負極であってもよい。第2電極EL2は透過型電極、半透過型電極または反射型電極であってもよい。第2電極EL2が透過型電極である場合、第2電極EL2は、透明金属酸化物、例えば、ITO、IZO、ZnO、ITZOなどからなってもよい。

## 【0122】

第2電極EL2が半透過型電極または反射型電極である場合、第2電極EL2はAg、Mg、Cu、Al、Pt、Pd、Au、Ni、Nd、Ir、Cr、Li、Ca、LiF/Ca、LiF/Al、Mo、Tiまたはこれらを含む化合物や混合物(例えば、AgとMgの混合物)を含んでもよい。または上記物質からなる反射膜や半透過膜、及びITO、IZO、ZnO、ITZOなどからなる透明導電膜を含む複数の層の構造であってもよい。

## 【0123】

図示していないが、第2電極EL2は補助電極と連結されてもよい。第2電極EL2が補助電極と連結されると、第2電極EL2の抵抗を減少させることができる。

## 【0124】

有機電界発光素子10において、第1電極EL1と第2電極EL2にそれぞれ電圧が印加されることによって、第1電極EL1から注入された正孔(hole)は正孔輸送領域HTRを経て発光層EMLに移動し、第2電極EL2から注入された電子は電子輸送領域ETRを経て発光層EMLに移動する。電子と正孔は発光層EMLで再結合して励起子(excitation)を生成し、励起子が励起状態から基底状態に落ちながら発光するようにな

10

20

30

40

50

る。

【0125】

有機電界発光素子10が前面発光型である場合、第1電極EL1は反射型電極であり、第2電極EL2は透過型電極または半透過型電極であってもよい。有機電界発光素子10が背面発光型である場合、第1電極EL1は透過型電極または半透過型電極であり、第2電極EL2は反射型電極であってもよい。

【0126】

本発明の一実施形態による有機電界発光素子10は、化学式1で表されるモノアミン化合物を含むことを特徴とし、これにより、高効率化及び長寿命化を実現することができる。また、低駆動電圧化の効果もある。

10

【実施例】

【0127】

以下、具体的な実施例及び比較例を通じて本発明をより具体的に説明する。下記実施例は、本発明の理解を助けるための例示に過ぎず、本発明の範囲はこれに限定されない。

【0128】

(合成例)

本発明の一実施例によるモノアミン化合物は、例えば、下記のように合成することができる。但し、本発明の一実施例によるモノアミン化合物の合成方法はこれに限定されるものではない。

【0129】

20

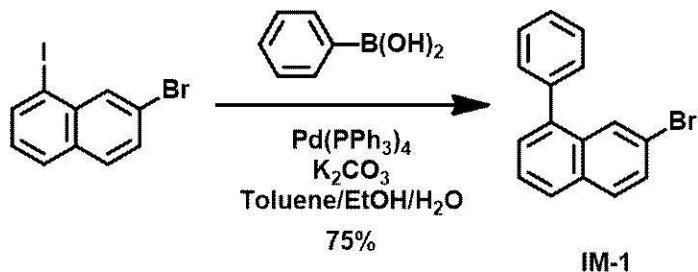
1. 化合物A4の合成

本発明の一実施例によるモノアミン化合物である化合物A4は、例えば、下記反応によって合成することができる。

【0130】

(中間体IM-1の合成)

【化29】



30

【0131】

Ar雰囲気下、1Lの3口フラスコに、7-bromo-1-iodonaphthalene 25.00g(75.1mmol)、phenylboronic acid 10.07g(1.1equiv、82.6mmol)、K<sub>2</sub>CO<sub>3</sub> 31.13g(3.0equiv、225.2mmol)、Pd(PPh<sub>3</sub>)<sub>4</sub> 4.34g(0.05eq、3.8mmol)、及びToluene/EtOH/H<sub>2</sub>O(4/2/1)の混合溶液525mLを順に加え、80℃で加熱攪拌した。室温まで空冷した後、反応溶液をTolueneで抽出した。水層を除去し、有機層を飽和食塩水で洗浄した後、MgSO<sub>4</sub>で乾燥した。MgSO<sub>4</sub>の濾別と有機層の濃縮を行い、得られた粗生成物をsilicage column chromatography(展開層にはHexaneとTolueneの混合溶媒を使用)で精製し、中間体IM-1(15.95g、収率75%)を得た。FAB-MSを測定し、質量数m/z=283が分子ion peakとして観測されたことにより、中間体IM-1を確認した。

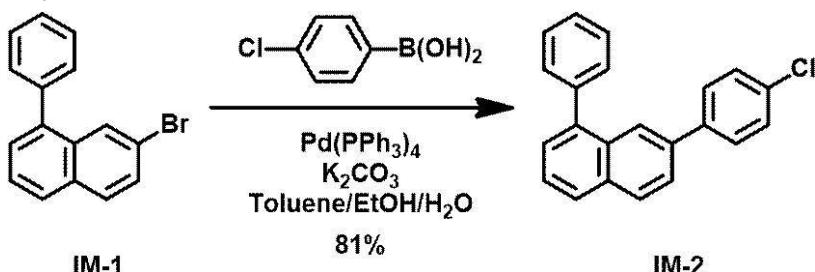
40

【0132】

(中間体IM-2の合成)

50

【化 3 0】



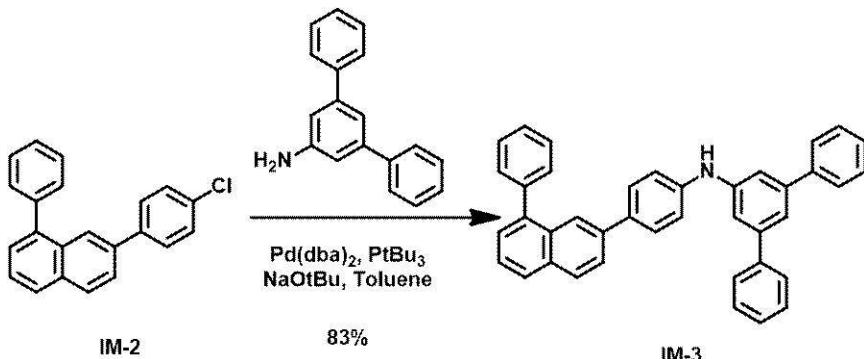
[ 0 1 3 3 ]

Ar 霧囲気下、1 L の 3 口フラスコに、IM-1 (13.00 g (45.9 mmol))、4-chlorophenylboronic acid (7.90 g (1.1 equiv, 50.5 mmol))、K<sub>2</sub>CO<sub>3</sub> (19.04 g (3.0 equiv, 60.7 mmol))、Pd(PPh<sub>3</sub>)<sub>4</sub> (2.65 g (0.05 eq, 2.3 mmol))、及びToluene/EtOH/H<sub>2</sub>O (4/2/1) の混合溶液 321 mL を順に加え、80で加熱攪拌した。室温まで空冷した後、反応溶液を Toluene で抽出した。水層を除去し、有機層を飽和食塩水で洗浄した後、MgSO<sub>4</sub> で乾燥した。MgSO<sub>4</sub> の濾別と有機層の濃縮を行い、得られた粗生成物を silica gel column chromatography (展開層には Hexane と Toluene の混合溶媒を使用) で精製し、中間体 IM-2 (11.71 g、収率 81%)を得た。FAB-MS を測定し、質量数 m/z = 314 が分子 ion peak として観測されたことにより、中間体 IM-2 を確認した。

[ 0 1 3 4 ]

### ( 中間体 I M - 3 の合成 )

【化 3 1】



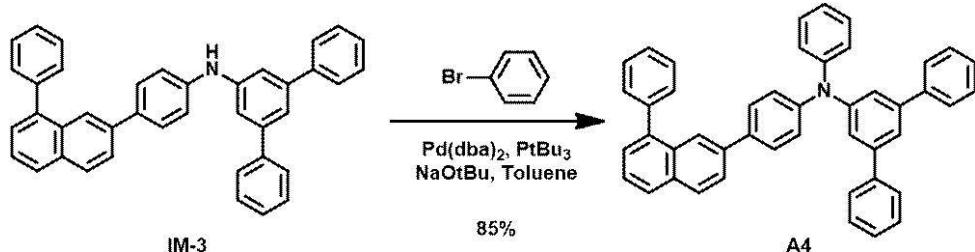
[ 0 1 3 5 ]

Ar 雰囲気下、300mLの3口フラスコに、IM-2 10.00g (31.8mmol)、Pd(dba)<sub>2</sub> 0.55g (0.03equiv、1.0mmol)、NaOtBu 3.05g (1.0equiv、31.8mmol)、Toluene 159mL、3,5-diphenylaniline 8.57g (1.1equiv、34.9mmol) 及びtBu<sub>3</sub>P 0.64g (0.1equiv、3.2mmol) を順に加え、加熱還流攪拌した。室温まで空冷した後、反応溶媒に水を加えて有機層を分取した。水層にTolueneを加えて有機層をさらに抽出し、有機層を合わせて食塩水で洗浄した後、MgSO<sub>4</sub>で乾燥した。MgSO<sub>4</sub>の濾別と有機層の濃縮を行い、得られた粗生成物をsilica gel column chromatography (展開層にはHexaneとTolueneの混合溶媒を使用)で精製し、化合物IM-3 (13.81g、収率83%)を得た。FAB-MSを測定し、質量数m/z = 523が分子ion peakとして観測されたことにより、化合物IM-3を確認した。

[ 0 1 3 6 ]

### ( 化合物 A 4 の合成 )

## 【化32】



## 【0137】

10

Ar 霧囲気下、300mLの3口フラスコに、IM-3 8.00g (15.3mmol)、Pd(dba)<sub>2</sub> 0.26g (0.03equiv、0.5mmol)、NaOtBu 2.94g (2.0equiv、30.6mmol)、Toluene 76mL、bromobenzene 2.64g (1.1equiv、16.8mmol) 及び tBu<sub>3</sub>P 0.31g (0.1equiv、1.5mmol) を順に加え、加熱還流攪拌した。室温まで空冷した後、反応溶媒に水を加えて有機層を分取した。水層に Toluene を加えて有機層をさらに抽出し、有機層を合わせて食塩水で洗浄した後、MgSO<sub>4</sub> で乾燥した。MgSO<sub>4</sub> の濾別と有機層の濃縮を行い、得られた粗生成物を silicagel column chromatography (展開層には Hexane と Toluene の混合溶媒を使用) で精製し、化合物 A4 (7.79g、収率 85%)を得た。

20

## 【0138】

FAB-MS を測定し、質量数 m/z = 599 が分子 ion peak として観測されたことにより、化合物 A4 を確認した。

## 【0139】

30

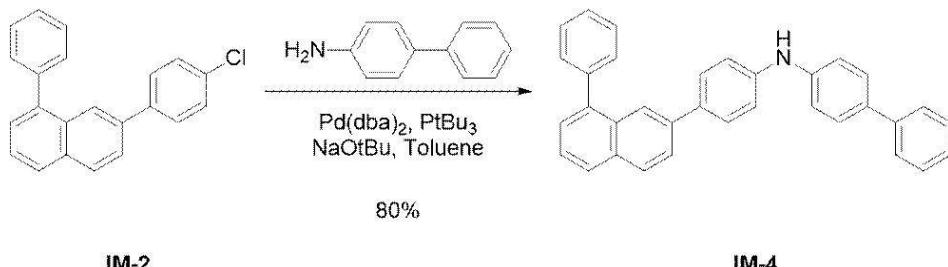
## 2. 化合物 A17 の合成

本発明の一実施例によるモノアミン化合物である化合物 A17 は、例えば、下記反応によって合成することができる。

## 【0140】

## (中間体 IM-4 の合成)

## 【化33】



## 【0141】

40

Ar 霧囲気下、300mLの3口フラスコに、IM-2 10.00g (31.8mmol)、Pd(dba)<sub>2</sub> 0.55g (0.03equiv、1.0mmol)、NaOtBu 3.05g (1.0equiv、31.8mmol)、Toluene 159mL、p-biphenylamine 5.91g (1.1equiv、34.9mmol) 及び tBu<sub>3</sub>P 0.64g (0.1equiv、3.2mmol) を順に加え、加熱還流攪拌した。室温まで空冷した後、反応溶媒に水を加えて有機層を分取した。水層に Toluene を加えて有機層をさらに抽出し、有機層を合わせて食塩水で洗浄した後、MgSO<sub>4</sub> で乾燥した。MgSO<sub>4</sub> の濾別と有機層の濃縮を行い、得られた粗生成物を silicagel column chromatography (展開層には Hexane と Toluene の混合溶媒を使用) で精製し、化合物 IM-4 (11.37g、収率 80%)を得た。

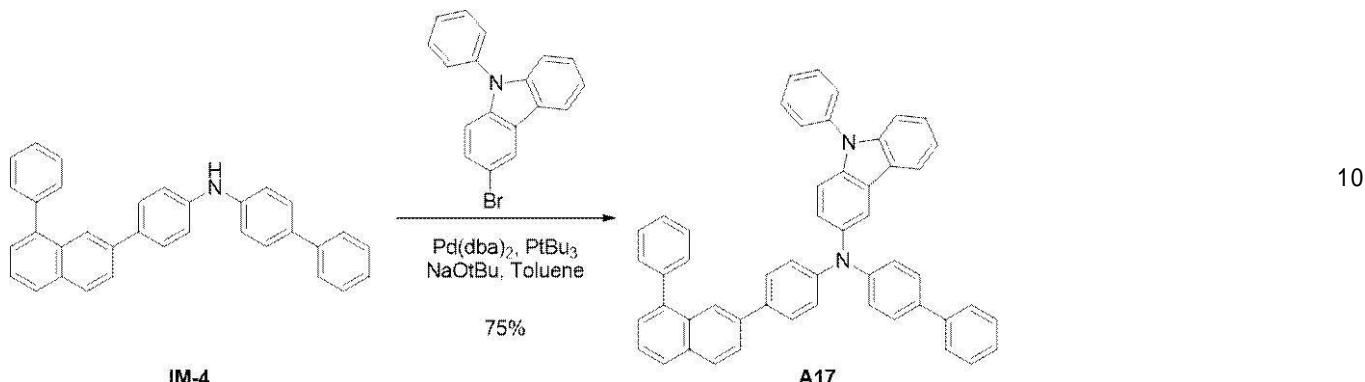
50

、収率80%を得た。FAB-MSを測定し、質量数m/z=447が分子ion peakとして観測されたことにより、化合物IM-4を確認した。

#### 【0142】

(化合物A17の合成)

#### 【化34】



#### 【0143】

Ar雰囲気下、300mLの3口フラスコに、IM-4 8.00g (17.9mmol)、Pd(dba)<sub>2</sub> 0.31g (0.03equiv、0.5mmol)、NaOtBu 3.44g (2.0equiv、35.7mmol)、Toluene 89mL、3-bromo-9-phenyl-9H-carbazole 6.33g (1.1equiv、19.7mmol)及びtBu<sub>3</sub>P 0.36g (0.1equiv、1.8mmol)を順に加え、加熱還流攪拌した。室温まで空冷した後、反応溶媒に水を加えて有機層を分取した。水層にTolueneを加えて有機層をさらに抽出し、有機層を合わせて食塩水で洗浄した後、MgSO<sub>4</sub>で乾燥した。MgSO<sub>4</sub>の濾別と有機層の濃縮を行い、得られた粗生成物をsilica gel column chromatography (展開層にはHexaneとTolueneの混合溶媒を使用)で精製し、化合物A17 (9.23g、収率75%)を得た。FAB-MSを測定し、質量数m/z=688が分子ion peakとして観測されたことにより、化合物A17を確認した。

#### 【0144】

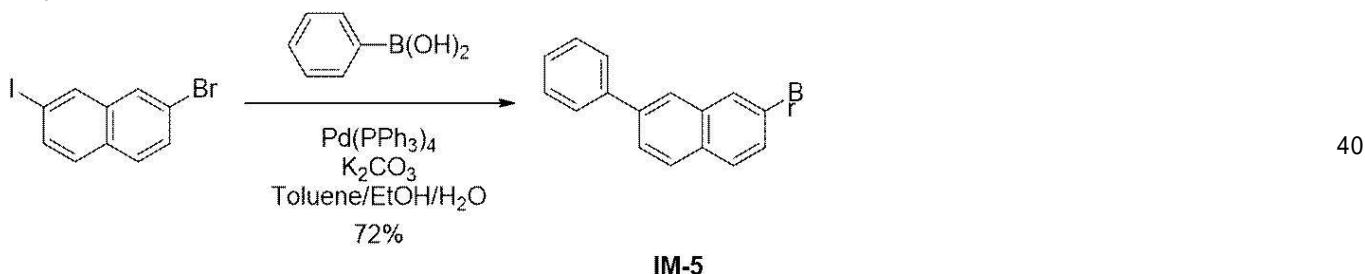
3. 化合物B13の合成

本発明の一実施例によるモノアミン化合物である化合物B13は、例えば、下記反応によって合成することができる。

#### 【0145】

(中間体IM-5の合成)

#### 【化35】



#### 【0146】

Ar雰囲気下、1Lの3口フラスコに、7-bromo-2-iodonaphthalene 25.00g (75.1mmol)、phenylboronic acid 10.07g (1.1equiv、82.6mmol)、K<sub>2</sub>CO<sub>3</sub> 31.13g (3.0equiv、225.2mmol)、Pd(PPh<sub>3</sub>)<sub>4</sub> 4.34g (0.05eq、3.8mmol)、及びToluene/EtOH/H<sub>2</sub>O (4/2/1)の混合溶媒

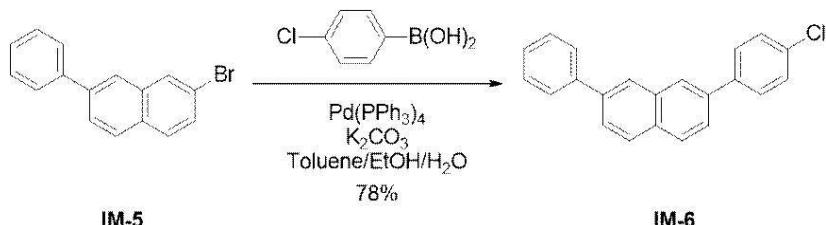
50

液 5 2 5 mL を順に加え、80°で加熱攪拌した。室温まで空冷した後、反応溶液を Toluene で抽出した。水層を除去し、有機層を飽和食塩水で洗浄した後、MgSO<sub>4</sub> で乾燥した。MgSO<sub>4</sub> の濾別と有機層の濃縮を行い、得られた粗生成物を silica gel column chromatography (展開層には Hexane と Toluene の混合溶媒を使用) で精製し、中間体 IM-5 (15.31 g、収率 72%)を得た。FAB-MS を測定し、質量数 m/z = 283 が分子 ion peak として観測されたことにより、中間体 IM-5 を確認した。

[ 0 1 4 7 ]

( 中間体 I M - 6 の合成 )

【化 3 6】



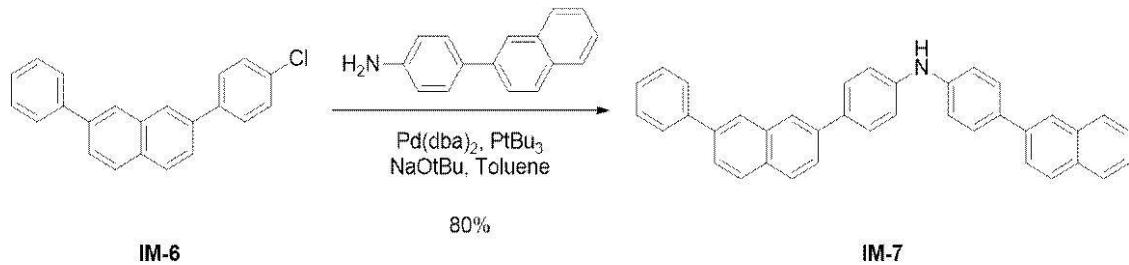
【 0 1 4 8 】

Ar雰囲気下、1Lの3口フラスコに、IM-5 13.00g (45.9mmol)、4-chlorophenylboronic acid 7.90g (1.1equiv、50.5mmol)、K<sub>2</sub>CO<sub>3</sub> 19.04g (3.0equiv、60.7mmol)、Pd(PPh<sub>3</sub>)<sub>4</sub> 2.65g (0.05eq、2.3mmol)、及びToluene/EtOH/H<sub>2</sub>O (4/2/1)の混合溶液321mLを順に加え、80で加熱攪拌した。室温まで空冷した後、反応溶液をTolueneで抽出した。水層を除去し、有機層を飽和食塩水で洗浄した後、MgSO<sub>4</sub>で乾燥した。MgSO<sub>4</sub>の濾別と有機層の濃縮を行い、得られた粗生成物をsilica gel column chromatography (展開層にはHexaneとTolueneの混合溶媒を使用)で精製し、中間体IM-6 (11.27g、収率78%)を得た。FAB-MSを測定し、質量数m/z = 314が分子ion peakとして観測されたことにより、中間体IM-6を確認した。

【 0 1 4 9 】

( 中間体 I M - 7 の合成 )

【化 3 7】



【 0 1 5 0 】

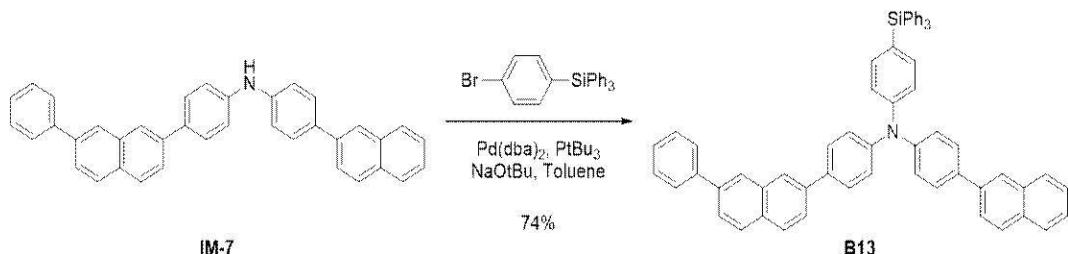
Ar雰囲気下、300mLの3口フラスコに、IM-6 10.00g(31.8mmol)、Pd(dba)<sub>2</sub> 0.55g(0.03equiv、1.0mmol)、NaOtBu 3.05g(1.0equiv、31.8mmol)、Toluene 159mL、4-(naphthalen-2-yl)aniline 7.66g(1.1equiv、34.9mmol)及びtBu<sub>3</sub>P 0.64g(0.1equiv、3.2mmol)を順に加え、加熱還流攪拌した。室温まで空冷した後、反応溶媒に水を加えて有機層を分取した。水層にTolueneを加えて有機層をさらに抽出し、有機層を合わせて食塩水で洗浄した後、MgSO<sub>4</sub>で乾燥した。MgSO<sub>4</sub>の濾別と有機層の濃縮を行

い、得られた粗生成物を silica gel column chromatography ( 展開層には Hexane と Toluene の混合溶媒を使用 ) で精製し、化合物 I M - 7 ( 12.65 g 、収率 80% ) を得た。FAB-MS を測定し、質量数  $m/z = 497$  が分子 ion peak として観測されたことにより、化合物 I M - 7 を確認した。

【 0 1 5 1 】

### ( 化合物 B 1 3 の合成 )

【化 3 8】



[ 0 1 5 2 ]

Ar 霧囲気下、300mLの3口フラスコに、IM-7 8.00g(16.1mmol)、Pd(dba)<sub>2</sub> 0.27g(0.03equiv、0.5mmol)、NaOtBu 3.09g(2.0equiv、32.2mmol)、Toluene 80mL、1-bromo-4-triphenylsilylbenzene 7.35g(1.1equiv、17.7mmol)及びtBu<sub>3</sub>P 0.33g(0.1equiv、1.6mmol)を順に加え、加熱還流攪拌した。室温まで空冷した後、反応溶媒に水を加えて有機層を分取した。水層にTolueneを加えて有機層をさらに抽出し、有機層を合わせて食塩水で洗浄した後、MgSO<sub>4</sub>で乾燥した。MgSO<sub>4</sub>の濾別と有機層の濃縮を行い、得られた粗生成物をsilicagel column chromatography(展開層にはHexaneとTolueneの混合溶媒を使用)で精製し、化合物B13(9.90g、収率74%)を得た。FAB-MSを測定し、質量数m/z = 832が分子ion peakとして観測されたことにより、化合物B13を確認した。

( 0 1 5 3 )

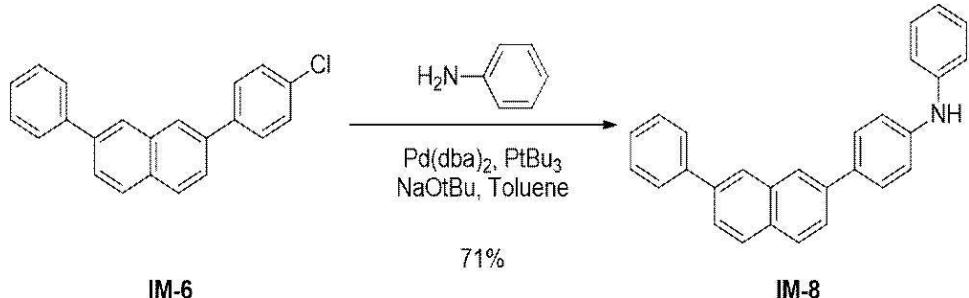
#### 4. 化合物 B<sub>2</sub>O の合成

本発明の一実施例によるモノアミン化合物である化合物B20は、例えば、下記反応によって合成することができる。

【 0 1 5 4 】

( 中間体 I M - 8 の合成 )

【化 3 9】



【 0 1 5 5 】

Ar 霧囲気下、300mLの3口フラスコに、IM-6 10.00g(31.8mmol)、Pd(dba)<sub>2</sub> 0.55g(0.03equiv、1.0mmol)、NaOtBu 3.05g(1.0equiv、31.8mmol)、Toluene 159mL、aniline 3.25g(1.1equiv、34.9mmol)及びtBu<sub>3</sub>P 0.64g(0.1equiv、3.2mmol)を順に加え、加熱還流攪拌した。

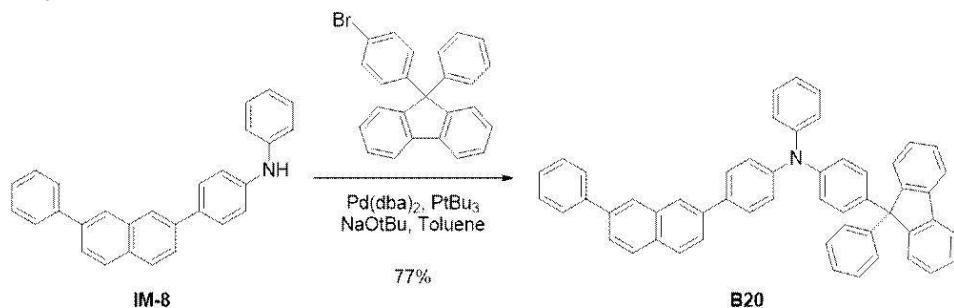
。室温まで空冷した後、反応溶媒に水を加えて有機層を分取した。水層に Toluene を加えて有機層をさらに抽出し、有機層を合わせて食塩水で洗浄した後、 $MgSO_4$  で乾燥した。 $MgSO_4$  の濾別と有機層の濃縮を行い、得られた粗生成物を silica gel column chromatography ( 展開層には Hexane と Toluene の混合溶媒を使用 ) で精製し、化合物 IM-8 ( 8.38 g 、収率 71 % ) を得た。FAB-MS を測定し、質量数  $m/z = 371$  が分子 ion peak として観測されたことにより、化合物 IM-8 を確認した。

[ 0 1 5 6 ]

( 化合物 B 2 0 の合成 )

【化 4 0】

10



【 0 1 5 7 】

20

Ar 霧囲気下、300mLの3口フラスコに、IM-8 8.00g(21.5mmol)、Pd(dba)<sub>2</sub> 0.37g(0.03equiv、0.6mmol)、NaOtBu 4.14g(2.0equiv、43.1mmol)、Toluene 108mL、9(4-bromophenyl)-9-phenyl-9H-fluorene 9.41g(1.1equiv、23.7mmol)及びtBu<sub>3</sub>P 0.44g(0.1equiv、2.1mmol)を順に加え、加熱還流攪拌した。室温まで空冷した後、反応溶媒に水を加えて有機層を分取した。水層にTolueneを加えて有機層をさらに抽出し、有機層を合わせて食塩水で洗浄した後、MgSO<sub>4</sub>で乾燥した。MgSO<sub>4</sub>の濾別と有機層の濃縮を行い、得られた粗生成物をsilica gel column chromatography(展開層にはHexaneとTolueneの混合溶媒を使用)で精製し、化合物B20(11.41g、収率77%)を得た。FAB-MSを測定し、質量数m/z = 687が分子ion peakとして観測されたことにより、化合物B20を確認した。

【 0 1 5 8 】

## 5 . 化合物 B 4 0 の合成

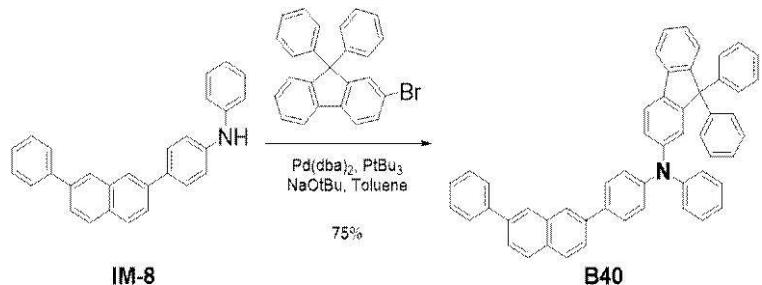
本発明の一実施例によるモノアミン化合物である化合物B40は、例えば、下記反応によって合成することができる。

【 0 1 5 9 】

### ( 化合物 B 4 0 の合成 )

【化 4 1】

40



【 0 1 6 0 】

Ar 雰囲気下、300mL の 3 口 フラスコに、IM-88.00g (21.5mmol) 50

)、Pd(dba)<sub>2</sub> 0.37 g (0.03 equiv、0.6 mmol)、NaOt-Bu 4.14 g (2.0 equiv、43.1 mmol)、Toluene 108 mL、2-bromo-9,9-diphenyl-9H-fluorene 9.41 g (1.1 equiv、23.7 mmol) 及びtBu<sub>3</sub>P 0.44 g (0.1 equiv、2.1 mmol) を順に加え、加熱還流攪拌した。室温まで空冷した後、反応溶媒に水を加えて有機層を分取した。水層にTolueneを加えて有機層をさらに抽出し、有機層を合わせて食塩水で洗浄した後、MgSO<sub>4</sub>で乾燥した。MgSO<sub>4</sub>の濾別と有機層の濃縮を行い、得られた粗生成物をsilica gel column chromatography (展開層にはHexaneとTolueneの混合溶媒を使用) で精製し、化合物B40 (11.42 g、収率75%)を得た。FAB-MSを測定し、質量数m/z = 687が分子ion peakとして観測されたことにより、化合物B40を確認した。  
10

## 【0161】

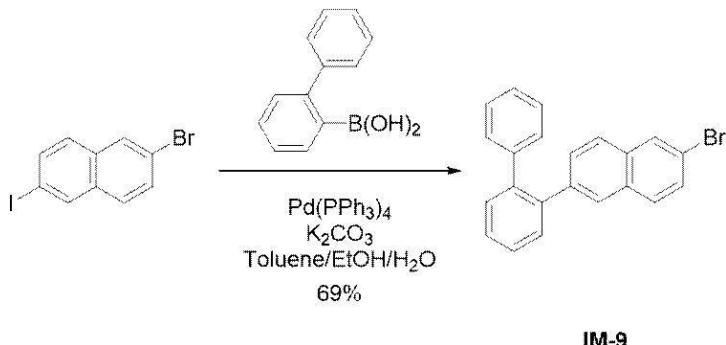
## 6. 化合物C25の合成

本発明の一実施例によるモノアミン化合物である化合物C25は、例えば、下記反応によって合成することができる。

## 【0162】

## (中間体IM-9の合成)

## 【化42】



20

## 【0163】

Ar雰囲気下、1Lの3口フラスコに、2-bromo-6-iodonaphthalene 25.00 g (75.1 mmol)、2-biphenylboronic acid 16.35 g (1.1 equiv、82.6 mmol)、K<sub>2</sub>CO<sub>3</sub> 31.13 g (3.0 equiv、225.2 mmol)、Pd(PPh<sub>3</sub>)<sub>4</sub> 4.4.34 g (0.05 eq、3.8 mmol)、及びToluene/EtOH/H<sub>2</sub>O (4/2/1) の混合溶液525 mLを順に加え、80°で加熱攪拌した。室温まで空冷した後、反応溶液をTolueneで抽出した。水層を除去し、有機層を飽和食塩水で洗浄した後、MgSO<sub>4</sub>で乾燥した。MgSO<sub>4</sub>の濾別と有機層の濃縮を行い、得られた粗生成物をsilica gel column chromatography (展開層にはHexaneとTolueneの混合溶媒を使用) で精製し、中間体IM-9 (18.61 g、収率69%)を得た。FAB-MSを測定し、質量数m/z = 359が分子ion peakとして観測されたことにより、中間体IM-9を確認した。  
30

30

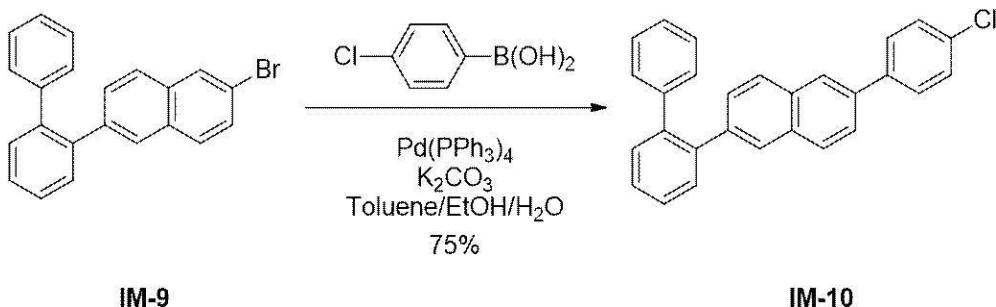
## 【0164】

## (中間体IM-10の合成)

40

50

## 【化43】



10

## 【0165】

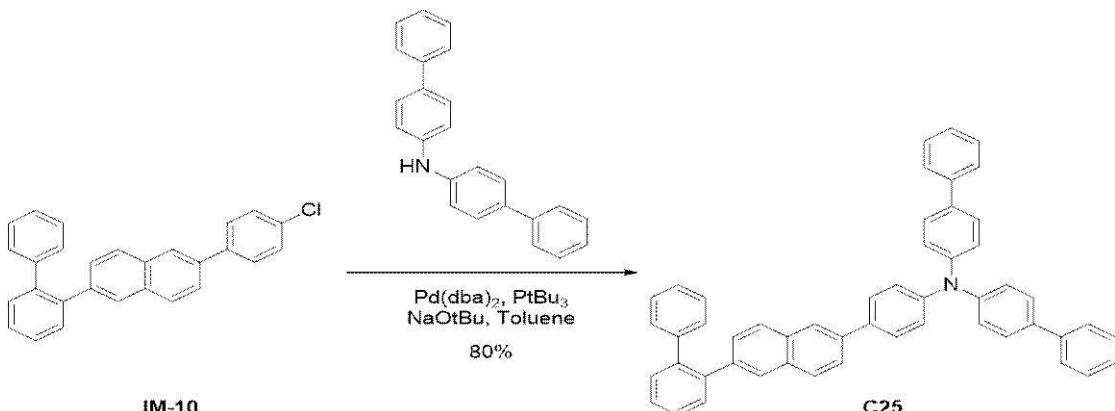
Ar 霧囲気下、1 L の 3 口フラスコに、IM-9 15.00 g (41.8 mmol)、4-chlorophenyl boronic acid 7.18 g (1.1 equiv、45.9 mmol)、K<sub>2</sub>CO<sub>3</sub> 17.31 g (3.0 equiv、125.3 mmol)、Pd(PPh<sub>3</sub>)<sub>4</sub> 2.41 g (0.05 eq、3.8 mmol)、及び Toluene / EtOH / H<sub>2</sub>O (4 / 2 / 1) の混合溶液 525 mL を順に加え、80 で加熱攪拌した。室温まで空冷した後、反応溶液を Toluene で抽出した。水層を除去し、有機層を飽和食塩水で洗浄した後、MgSO<sub>4</sub> で乾燥した。MgSO<sub>4</sub> の濾別と有機層の濃縮を行い、得られた粗生成物を silica gel column chromatography (展開層には Hexane と Toluene の混合溶媒を使用) で精製し、中間体 IM-10 (12.24 g、収率 75%)を得た。FAB-MS を測定し、質量数 m/z = 390 が分子 ion peak として観測されたことにより、中間体 IM-10 を確認した。

20

## 【0166】

(化合物 C25 の合成)

## 【化44】



30

## 【0167】

Ar 霧囲気下、300 mL の 3 口フラスコに、IM-10 10.00 g (25.6 mmol)、Pd(dba)<sub>2</sub> 0.44 g (0.03 equiv、0.6 mmol)、NaOtBu 4.92 g (2.0 equiv、51.2 mmol)、Toluene 128 mL、bis(4-biphenyl)amine 9.04 g (1.1 equiv、28.1 mmol) 及び tBu<sub>3</sub>P 0.52 g (0.1 equiv、2.6 mmol) を順に加え、加熱還流攪拌した。室温まで空冷した後、反応溶媒に水を加えて有機層を分取した。水層に Toluene を加えて有機層をさらに抽出し、有機層を合わせて食塩水で洗浄した後、MgSO<sub>4</sub> で乾燥した。MgSO<sub>4</sub> の濾別と有機層の濃縮を行い、得られた粗生成物を silica gel column chromatography (展開層には Hexane と Toluene の混合溶媒を使用) で精製し、化合物 C25 (13.83 g、収率 80%)を得た。FAB-MS を測定し、質量数 m/z = 675 が分子 ion peak として観測されたことにより、化合物 C25 を確認した。

40

50

ion peakとして観測されたことにより、化合物C25を確認した。

【0168】

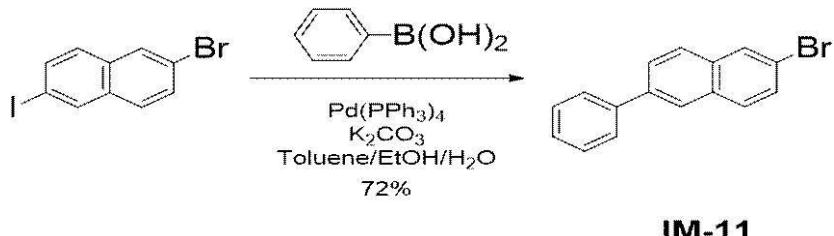
7. 化合物C51の合成

本発明の一実施例によるモノアミン化合物である化合物C51は、例えば、下記反応によって合成することができる。

【0169】

(中間体IM-11の合成)

【化45】



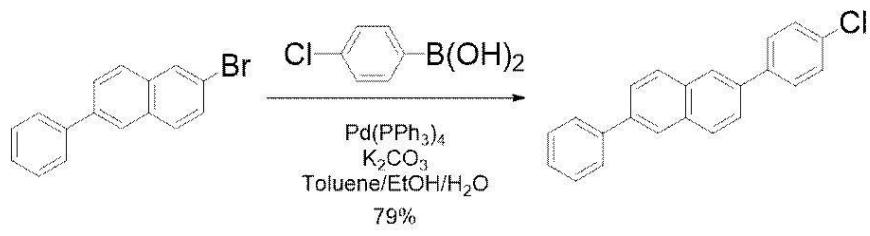
【0170】

Ar雰囲気下、1Lの3口フラスコに、2-bromo-6-iodonaphthalene 25.00g (75.1mmol)、phenylboronic acid 10.07g (1.1equiv, 82.6mmol)、K<sub>2</sub>CO<sub>3</sub> 31.13g (3.0equiv, 225.2mmol)、Pd(PPh<sub>3</sub>)<sub>4</sub> 4.34g (0.05eq, 3.8mmol)、及びToluene/EtOH/H<sub>2</sub>O (4/2/1)の混合溶液525mLを順に加え、80で加熱攪拌した。室温まで空冷した後、反応溶液をTolueneで抽出した。水層を除去し、有機層を飽和食塩水で洗浄した後、MgSO<sub>4</sub>で乾燥した。MgSO<sub>4</sub>の濾別と有機層の濃縮を行い、得られた粗生成物をsilica gel column chromatography(展開層にはHexaneとTolueneの混合溶媒を使用)で精製し、中間体IM-11 (15.31g、収率72%)を得た。FAB-MSを測定し、質量数m/z = 283が分子ion peakとして観測されたことにより、中間体IM-11を確認した。

【0171】

(中間体IM-12の合成)

【化46】



【0172】

Ar雰囲気下、1Lの3口フラスコに、IM-11 13.00g (45.9mmol)、4-chlorophenylboronic acid 7.90g (1.1equiv, 50.5mmol)、K<sub>2</sub>CO<sub>3</sub> 19.04g (3.0equiv, 60.7mmol)、Pd(PPh<sub>3</sub>)<sub>4</sub> 2.65g (0.05eq, 2.3mmol)、及びToluene/EtOH/H<sub>2</sub>O (4/2/1)の混合溶液321mLを順に加え、80で加熱攪拌した。室温まで空冷した後、反応溶液をTolueneで抽出した。水層を除去し、有機層を飽和食塩水で洗浄した後、MgSO<sub>4</sub>で乾燥した。MgSO<sub>4</sub>の濾別と有機層の濃縮を行い、得られた粗生成物をsilica gel column chromatography(展開層にはHexaneとTolueneの混合溶媒を使用)で精製し、中間体IM-12 (11.42g、収率79%)を得た。

10

20

30

40

50

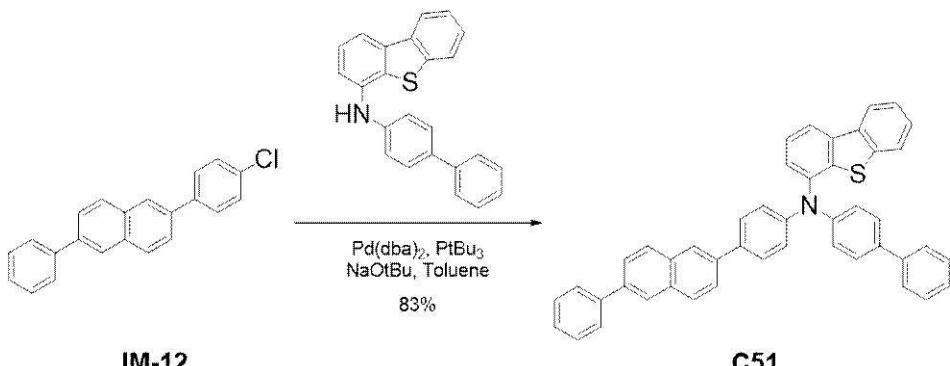
[ 0 1 7 3 ]

FAB-MSを測定し、質量数 $m/z = 314$ が分子ion peakとして観測されたことにより、中間体IM-12を確認した。

[ 0 1 7 4 ]

( 化合物 C 5 1 の合成 )

【化 4 7】



[ 0 1 7 5 ]

Ar 霧囲気下、300mLの3口フラスコに、IM-12 8.00g(25.4mmol)、Pd(dba)<sub>2</sub> 0.44g(0.03equiv、0.8mmol)、NaOtBu 4.88g(2.0equiv、50.8mmol)、Toluene 128mL、N-[1,1'-biphenyl]-4-yl)dibenzothiophen-4-amine 9.82g(1.1equiv、28.0mmol)及びtBu<sub>3</sub>P 0.51g(0.1equiv、2.5mmol)を順に加え、加熱還流攪拌した。室温まで空冷した後、反応溶媒に水を加えて有機層を分取した。水層にTolueneを加えて有機層をさらに抽出し、有機層を合わせて食塩水で洗浄した後、MgSO<sub>4</sub>で乾燥した。MgSO<sub>4</sub>の濾別と有機層の濃縮を行い、得られた粗生成物をsilicagel column chromatography(展開層にはHexaneとTolueneの混合溶媒を使用)で精製し、化合物C51(13.28g、収率83%)を得た。FAB-MSを測定し、質量数m/z = 629が分子ion peakとして観測されたことにより、化合物C51を確認した。

[ 0 1 7 6 ]

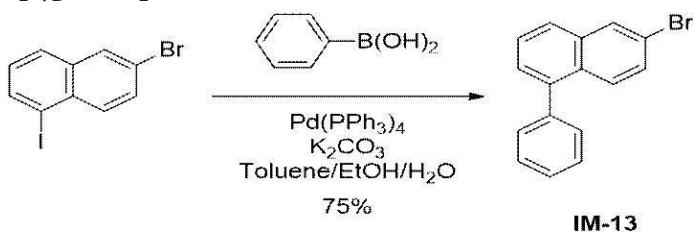
## 8. 化合物 D 1 2 の合成

本発明の一実施例によるモノアミン化合物である化合物D12は、例えば、下記反応によって合成することができる。

[ 0 1 7 7 ]

(中間体 I M - 13 の合成)

【化 4 8】



【 0 1 7 8 】

Ar雰囲気下、1 Lの3口フラスコに、2-bromo-5-iodonaphthalene 25.00 g (75.1 mmol)、phenylboronic acid 10.07 g (1.1 equiv、82.6 mmol)、K<sub>2</sub>CO<sub>3</sub> 31.13 g (3.0 equiv、225.2 mmol)、Pd(PPh<sub>3</sub>)<sub>4</sub> 4.34 g (0.05 eq、3.8 mmol)、及びToluene/EtOH/H<sub>2</sub>O (4/2/1)の混合溶

液 5 2 5 mL を順に加え、80°で加熱攪拌した。室温まで空冷した後、反応溶液を Toluene で抽出した。水層を除去し、有機層を飽和食塩水で洗浄した後、MgSO<sub>4</sub> で乾燥した。MgSO<sub>4</sub> の濾別と有機層の濃縮を行い、得られた粗生成物を silica gel column chromatography (展開層には Hexane と Toluene の混合溶媒を使用) で精製し、中間体 IM-13 (15.95 g、収率 75%)を得た。

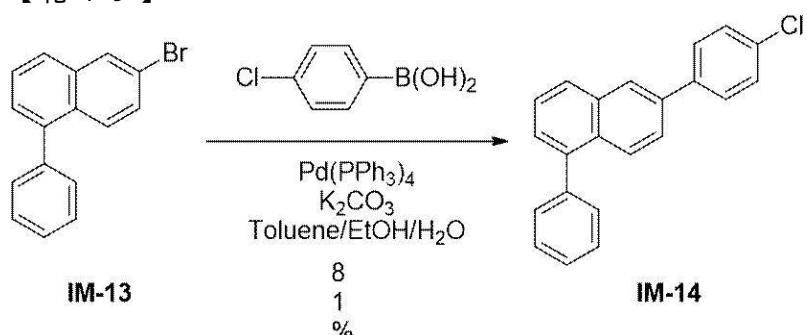
## 【0179】

FAB-MS を測定し、質量数 m/z = 283 が分子 ion peak として観測されたことにより、中間体 IM-13 を確認した。

## 【0180】

(中間体 IM-14 の合成)

## 【化49】



10

20

## 【0181】

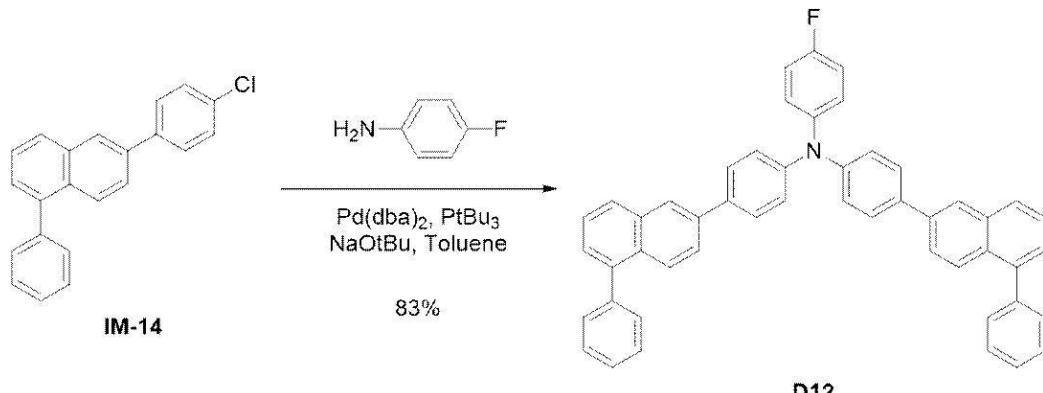
Ar 雰囲気下、1 L の 3 口フラスコに、IM-13 13.00 g (45.9 mmol)、4-chlorophenylboronic acid 7.90 g (1.1 equiv, 50.5 mmol)、K<sub>2</sub>CO<sub>3</sub> 19.04 g (3.0 equiv, 60.7 mmol)、Pd(PPh<sub>3</sub>)<sub>4</sub> 2.65 g (0.05 eq, 2.3 mmol)、及び Toluene / EtOH / H<sub>2</sub>O (4 / 2 / 1) の混合溶液 321 mL を順に加え、80°で加熱攪拌した。室温まで空冷した後、反応溶液を Toluene で抽出した。水層を除去し、有機層を飽和食塩水で洗浄した後、MgSO<sub>4</sub> で乾燥した。MgSO<sub>4</sub> の濾別と有機層の濃縮を行い、得られた粗生成物を silica gel column chromatography (展開層には Hexane と Toluene の混合溶媒を使用) で精製し、中間体 IM-14 (11.71 g、収率 81%)を得た。FAB-MS を測定し、質量数 m/z = 314 が分子 ion peak として観測されたことにより、中間体 IM-14 を確認した。

30

## 【0182】

(化合物 D12 の合成)

## 【化50】



40

## 【0183】

50

Ar 霧囲気下、300mLの3口フラスコに、IM-149.35g(2.2equiv、29.7mmol)、Pd(dba)<sub>2</sub>0.23g(0.03equiv、0.4mmol)、NaOtBu 2.59g(2.0equiv、27.0mmol)、Toluene 67mL、4-fluoroaniline 1.5g(13.5mmol)及びtBu<sub>3</sub>P 0.27g(0.1equiv、1.3mmol)を順に加え、加熱還流攪拌した。室温まで空冷した後、反応溶媒に水を加えて有機層を分取した。水層にTolueneを加えて有機層をさらに抽出し、有機層を合わせて食塩水で洗浄した後、MgSO<sub>4</sub>で乾燥した。MgSO<sub>4</sub>の濾別と有機層の濃縮を行い、得られた粗生成物をsilica gel column chromatography(展開層にはHexaneとTolueneの混合溶媒を使用)で精製し、化合物D12(7.48g、収率83%)を得た。

( 0 1 8 4 )

FAB-MSを測定し、質量数 $m/z = 667$ が分子ion peakとして観測されたことにより、化合物D12を確認した。

[ 0 1 8 5 ]

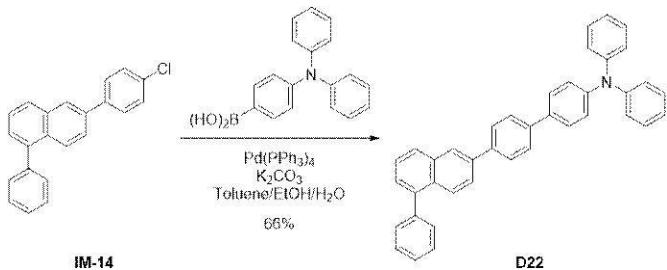
## 9. 化合物 D 2 2 の合成

本発明の一実施例によるモノアミン化合物である化合物D22は、例えば、下記反応によって合成することができる。

[ 0 1 8 6 ]

( 化合物 D 2 の合成 )

【化 5 1】



〔 0 1 8 7 〕

Ar雰囲気下、1 Lの3口フラスコに、IM-14 10.00 g (31.8 mmol)、(4-(diphenylamino)phenyl)boronic acid 10.10 g (1.1 equiv, 34.9 mmol)、K<sub>2</sub>CO<sub>3</sub> 13.17 g (3.0 equiv, 95.3 mmol)、Pd(PPh<sub>3</sub>)<sub>4</sub> 1.84 g (0.05 eq, 1.6 mmol)、及びToluene/EtOH/H<sub>2</sub>O (4/2/1)の混合溶液222 mLを順に加え、80 °Cで加熱攪拌した。室温まで空冷した後、反応溶液をTolueneで抽出した。水層を除去し、有機層を飽和食塩水で洗浄した後、MgSO<sub>4</sub>で乾燥した。MgSO<sub>4</sub>の濾別と有機層の濃縮を行い、得られた粗生成物をsilicagel column chromatography (展開層にはHexaneとTolueneの混合溶媒を使用)で精製し、化合物D22 (10.98 g、収率66%)を得た。

【 0 1 8 8 】

FAB-MS を測定し、質量数  $m/z = 523$  が分子 ion peak として観測されたことにより、化合物 D22 を確認した。

【 0 1 8 9 】

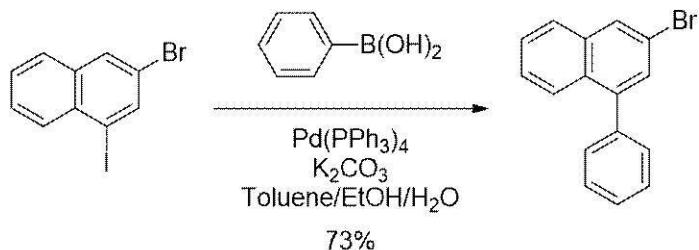
## 10. 化合物 E 3 の合成

本発明の一実施例によるモノアミン化合物である化合物E3は、例えば、下記反応によって合成することができる。

【 0 1 9 0 】

### ( 中間体 I M - 1 5 の合成 )

## 【化52】



IM-15

10

## 【0191】

Ar 霧囲気下、1 L の 3 口フラスコに、3 - b r o m o - 1 - i o d o n a p h t h a l e n e 25.00 g (75.1 mmol)、phenyl boronic acid 10.07 g (1.1 equiv, 82.6 mmol)、K<sub>2</sub>CO<sub>3</sub> 31.13 g (3.0 equiv, 225.2 mmol)、Pd (PPh<sub>3</sub>)<sub>4</sub> 4.34 g (0.05 eq, 3.8 mmol)、及び Toluene / EtOH / H<sub>2</sub>O (4 / 2 / 1) の混合溶液 525 mL を順に加え、80 °C で加熱攪拌した。室温まで空冷した後、反応溶液を Toluene で抽出した。水層を除去し、有機層を飽和食塩水で洗浄した後、MgSO<sub>4</sub> で乾燥した。MgSO<sub>4</sub> の濾別と有機層の濃縮を行い、得られた粗生成物を silica gel column chromatography (展開層には Hexane と Toluene の混合溶媒を使用) で精製し、中間体 IM-15 (15.52 g、収率 73%)を得た。

20

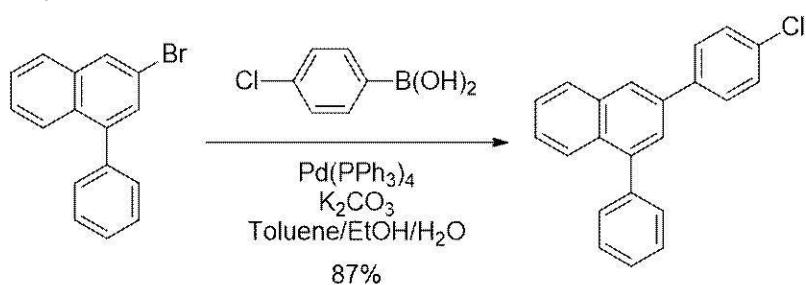
## 【0192】

FAB-MS を測定し、質量数 m/z = 283 が分子 ion peak として観測されたことにより、中間体 IM-15 を確認した。

## 【0193】

(中間体 IM-16 の合成)

## 【化53】



IM-16

30

## 【0194】

Ar 霧囲気下、1 L の 3 口フラスコに、IM-15 13.00 g (45.9 mmol)、4 - c h l o r o p h e n y l b o r o n i c a c i d 7.90 g (1.1 equiv, 50.5 mmol)、K<sub>2</sub>CO<sub>3</sub> 19.04 g (3.0 equiv, 60.7 mmol)、Pd (PPh<sub>3</sub>)<sub>4</sub> 2.65 g (0.05 eq, 2.3 mmol)、及び Toluene / EtOH / H<sub>2</sub>O (4 / 2 / 1) の混合溶液 321 mL を順に加え、80 °C で加熱攪拌した。室温まで空冷した後、反応溶液を Toluene で抽出した。水層を除去し、有機層を飽和食塩水で洗浄した後、MgSO<sub>4</sub> で乾燥した。MgSO<sub>4</sub> の濾別と有機層の濃縮を行い、得られた粗生成物を silica gel column chromatography (展開層には Hexane と Toluene の混合溶媒を使用) で精製し、中間体 IM-16 (12.57 g、収率 87%)を得た。

40

## 【0195】

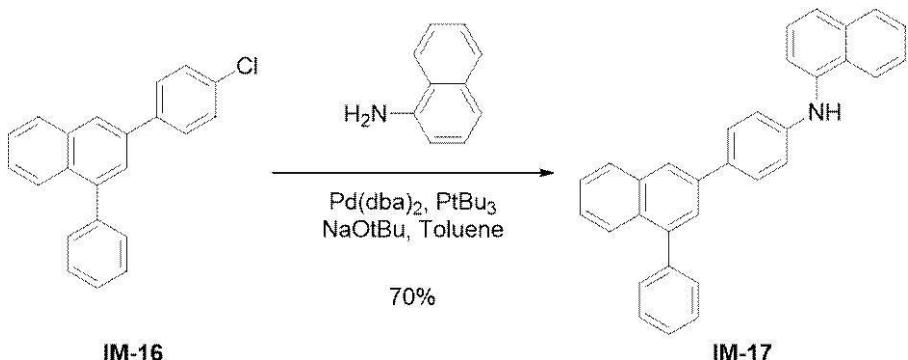
50

FAB-MSを測定し、質量数 $m/z = 314$ が分子ion peakとして観測されたことにより、中間体IM-16を確認した。

( 0 1 9 6 )

( 中間体 I M - 17 の合成 )

【化 5 4】



( 0 1 9 7 )

Ar 霧囲気下、300mLの3口フラスコに、IM-16 10.00g(31.8mmol)、Pd(dba)<sub>2</sub> 0.55g(0.03equiv、1.0mmol)、NaOtBu 3.05g(1.0equiv、31.8mmol)、Toluene 159mL、1-naphthylamine 5.00g(1.1equiv、34.9mmol)及びtBu<sub>3</sub>P 0.64g(0.1equiv、3.2mmol)を順に加え、加熱還流攪拌した。室温まで空冷した後、反応溶媒に水を加えて有機層を分取した。水層にTolueneを加えて有機層をさらに抽出し、有機層を合わせて食塩水で洗浄した後、MgSO<sub>4</sub>で乾燥した。MgSO<sub>4</sub>の濾別と有機層の濃縮を行い、得られた粗生成物をsilica gel column chromatography(展開層にはHexaneとTolueneの混合溶媒を使用)で精製し、化合物IM-17(9.37g、収率70%)を得た。

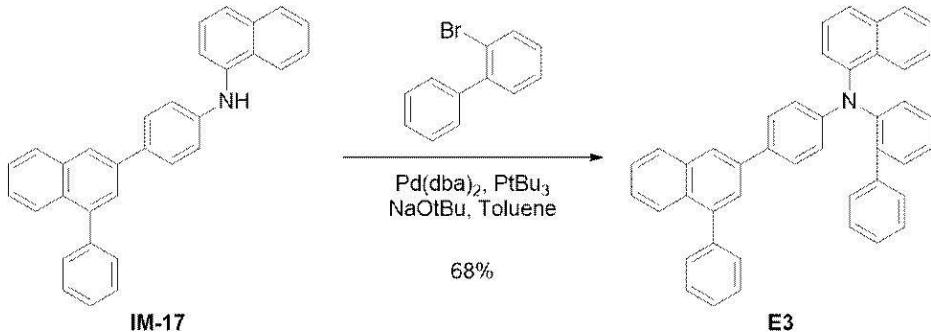
[ 0 1 9 8 ]

FAB-MSを測定し、質量数 $m/z = 421$ が分子ion peakとして観測されたことにより、化合物IM-17を確認した。

〔 0 1 9 9 〕

### ( 化合物 E 3 の合成 )

【化 5 5】



【 0 2 0 0 】

Ar雰囲気下、300mLの3口フラスコに、IM-17 8.00g(19.0mmol)、Pd(dba)<sub>2</sub> 0.33g(0.03equiv、0.6mmol)、NaOtBu 3.65g(2.0equiv、38.0mmol)、Toluene 95mL、2-bromobiphenyl 4.87g(1.1equiv、20.9mmol)及びtBu<sub>3</sub>P 0.39g(0.1equiv、1.9mmol)を順に加え、加熱還流攪拌した。室温まで空冷した後、反応溶媒に水を加えて有機層を分取した。水層にTolueneを加えて有機層をさらに抽出し、有機層を合わせて食塩水で洗浄した後、

$MgSO_4$  で乾燥した。 $MgSO_4$  の濾別と有機層の濃縮を行い、得られた粗生成物を *silica gel column chromatography* (展開層には Hexane と Toluene の混合溶媒を使用) で精製し、化合物 E 3 (7.40 g、収率 68%) を得た。

[ 0 2 0 1 ]

FAB-MS を測定し、質量数  $m/z = 573$  が分子 ion peak として観測されたことにより、化合物 E3 を確認した。

[ 0 2 0 2 ]

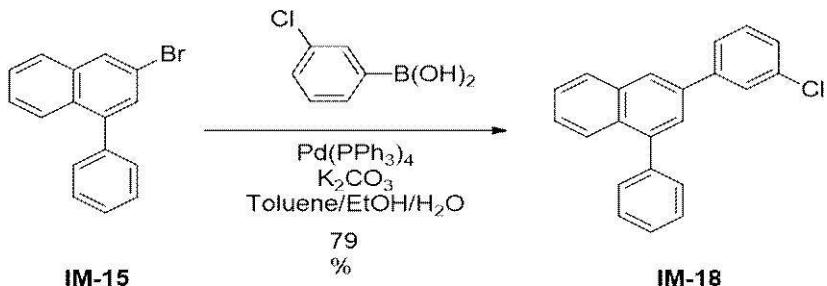
## 1.1. 化合物 E 32 の合成

本発明の一実施例によるモノアミン化合物である化合物E32は、例えば、下記反応によ  
って合成することができる。 10

[ 0 2 0 3 ]

( 中間体 I M - 1 8 の合成 )

【化 5 6】



[ 0 2 0 4 ]

Ar雰囲気下、1 Lの3口フラスコに、IM-15 (13.00 g (45.9 mmol))、3-chlorophenylboronic acid (7.90 g (1.1 equiv, 50.5 mmol))、K<sub>2</sub>CO<sub>3</sub> (19.04 g (3.0 equiv, 60.7 mmol))、Pd(PPh<sub>3</sub>)<sub>4</sub> (2.65 g (0.05 eq, 2.3 mmol))、及びToluene/EtOH/H<sub>2</sub>O (4/2/1)の混合溶液321 mLを順に加え、80度で加熱攪拌した。室温まで空冷した後、反応溶液をTolueneで抽出した。水層を除去し、有機層を飽和食塩水で洗浄した後、MgSO<sub>4</sub>で乾燥した。MgSO<sub>4</sub>の濾別と有機層の濃縮を行い、得られた粗生成物をsilica gel column chromatography (展開層にはHexaneとTolueneの混合溶媒を使用)で精製し、中間体IM-18 (11.42 g、収率79%)を得た。

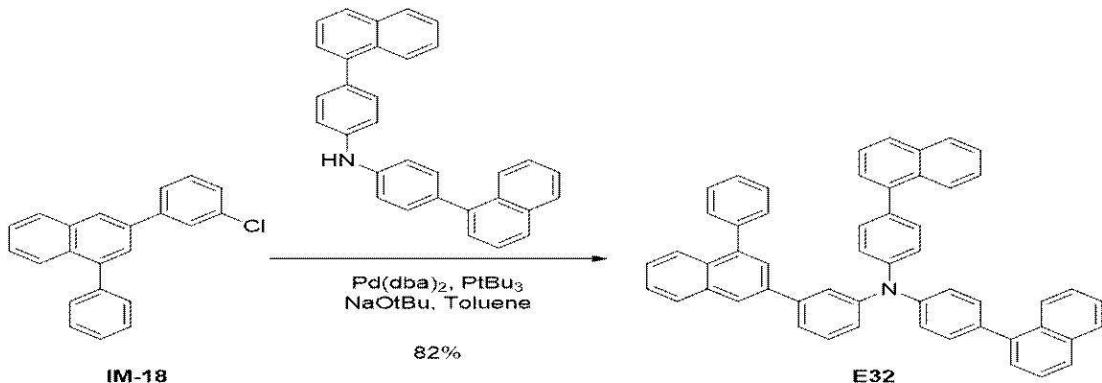
【 0 2 0 5 】

FAB-MSを測定し、質量数 $m/z = 314$ が分子ion peakとして観測されたことにより、中間体IM-18を確認した。

【 0 2 0 6 】

### ( 化合物 E 3 2 の合成 )

【化 5 7】



## 【0207】

Ar 雰囲気下、300 mL の3口フラスコに、IM-18 10.00 g (31.8 mmol)、Pd(dba)<sub>2</sub> 0.55 g (0.03 equiv, 1.0 mmol)、NaOtBu 6.11 g (2.0 equiv, 63.5 mmol)、Toluene 158 mL、bis(4-(naphthalen-1-yl)phenyl)amine 14.73 g (1.1 equiv, 34.9 mmol) 及び tBu<sub>3</sub>P 0.64 g (0.1 equiv, 3.2 mmol) を順に加え、加熱還流攪拌した。室温まで空冷した後、反応溶媒に水を加えて有機層を分取した。水層に Toluene を加えて有機層をさらに抽出し、有機層を合わせて食塩水で洗浄した後、MgSO<sub>4</sub> で乾燥した。MgSO<sub>4</sub> の濾別と有機層の濃縮を行い、得られた粗生成物を silica gel column chromatography (展開層には Hexane と Toluene の混合溶媒を使用) で精製し、化合物 E 32 (18.23 g、収率 82%)を得た。

## 【0208】

FAB-MS を測定し、質量数 m/z = 699 が分子 ion peak として観測されたことにより、化合物 E 32 を確認した。

## 【0209】

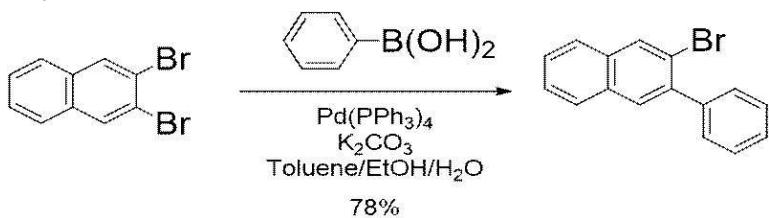
## 12. 化合物 F 46 の合成

本発明の一実施例によるモノアミン化合物である化合物 F 46 は、例えば、下記反応によって合成することができる。

## 【0210】

(中間体 IM-19 の合成)

## 【化58】



## 【0211】

Ar 雰囲気下、1 L の3口フラスコに、2,3-dibromonaphthalene 25.00 g (87.4 mmol)、phenylboronic acid 11.73 g (1.1 equiv, 96.2 mmol)、K<sub>2</sub>CO<sub>3</sub> 36.2 g (3.0 equiv, 262.3 mmol)、Pd(PPh<sub>3</sub>)<sub>4</sub> 5.05 g (0.05 eq, 3.4 mmol) 及び Toluene / EtOH / H<sub>2</sub>O (4/2/1) の混合溶液 612 mL を順に加え、80 °C で加熱攪拌した。室温まで空冷した後、反応溶液を Toluene で抽出した。水層を除去し、有機層を飽和食塩水で洗浄した後、MgSO<sub>4</sub> で乾燥した。MgSO<sub>4</sub> の濾別と有機層の濃縮を行い、得られた粗生成物を silica gel column chromatography (展開層には Hexane と Toluene の混合溶媒を使用) で精製し、中間体 IM-19 (19.31 g、収率 78%)を得た。

## 【0212】

FAB-MS を測定し、質量数 m/z = 283 が分子 ion peak として観測されたことにより、中間体 IM-19 を確認した。

## 【0213】

(中間体 IM-20 の合成)

10

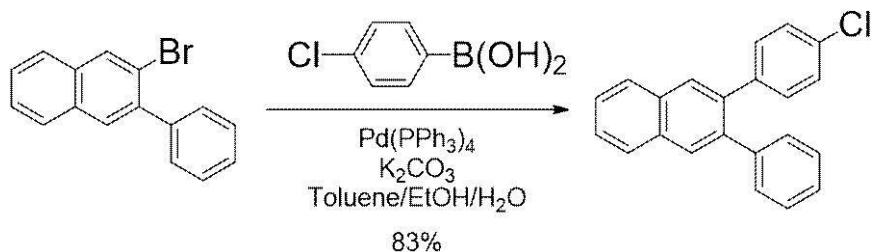
20

30

40

50

【化 5 9】



IM-19

IM-20

10

[ 0 2 1 4 ]

Ar 霧囲気下、1 L の 3 口フラスコに、IM-19 (13.00 g (45.9 mmol))、4-chlorophenylboronic acid (7.90 g (1.1 equiv, 50.5 mmol))、K<sub>2</sub>CO<sub>3</sub> (19.04 g (3.0 equiv, 60.7 mmol))、Pd(PPh<sub>3</sub>)<sub>4</sub> (2.65 g (0.05 eq, 2.3 mmol))、及びToluene/EtOH/H<sub>2</sub>O (4/2/1) の混合溶液 321 mL を順に加え、80 °C で加熱攪拌した。室温まで空冷した後、反応溶液を Toluene で抽出した。水層を除去し、有機層を飽和食塩水で洗浄した後、MgSO<sub>4</sub> で乾燥した。MgSO<sub>4</sub> の濾別と有機層の濃縮を行い、得られた粗生成物を silica gel column chromatography (展開層には Hexane と Toluene の混合溶媒を使用) で精製し、中間体 IM-20 (12.00 g、収率 83%)を得た。

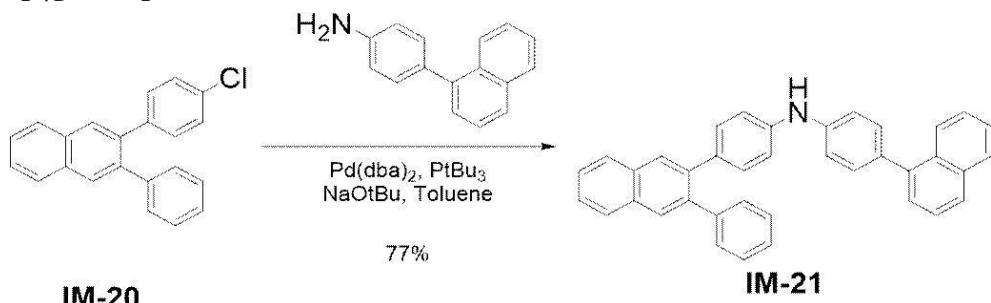
( 0 2 1 5 )

FAB-MSを測定し、質量数 $m/z = 314$ が分子ion peakとして観測されたことにより、中間体IM-20を確認した。

【 0 2 1 6 】

### ( 中間体 I M - 2 1 の合成 )

【化 6 0】



[ 0 2 1 7 ]

Ar 霧囲気下、300 mL の3口フラスコに、IM-20 10.00 g (31.8 mmol)、Pd(dba)<sub>2</sub> 0.55 g (0.03 equiv、1.0 mmol)、NaOtBu 3.05 g (1.0 equiv、31.8 mmol)、Toluene 159 mL、4-(naphthalen-1-yl)aniline 7.66 g (1.1 equiv、34.9 mmol) 及び tBu<sub>3</sub>P 0.64 g (0.1 equiv、3.2 mmol) を順に加え、加熱還流攪拌した。室温まで空冷した後、反応溶媒に水を加えて有機層を分取した。水層に Toluene を加えて有機層をさらに抽出し、有機層を合わせて食塩水で洗浄した後、MgSO<sub>4</sub> で乾燥した。MgSO<sub>4</sub> の濾別と有機層の濃縮を行い、得られた粗生成物を silica gel column chromatography (展開層には Hexane と Toluene の混合溶媒を使用) で精製し、化合物 IM-21 (10.31 g、収率 77%) を得た。

【 0 2 1 8 】

F A B - M S を測定し、質量数  $m/z = 421$  が分子 ion peak として観測された

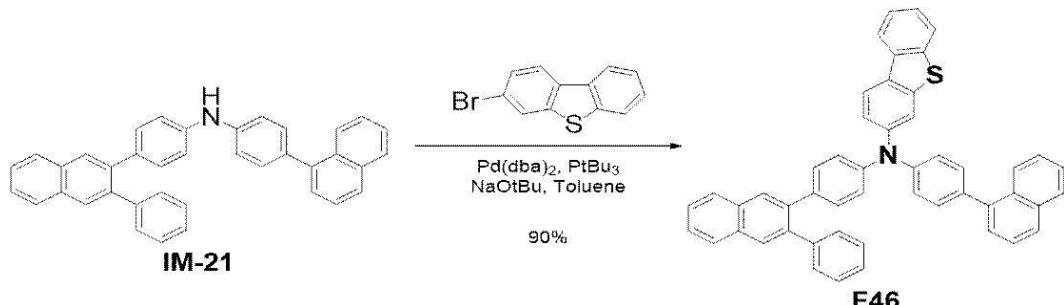
50

ことにより、化合物IM-21を確認した。

【0219】

(化合物F46の合成)

【化61】



【0220】

Ar雰囲気下、300mLの3口フラスコに、IM-21 8.00g (19.0mmol)、Pd(dba)<sub>2</sub> 0.33g (0.03equiv、0.6mmol)、NaOtBu 3.65g (2.0equiv、38.0mmol)、Toluene 95mL、3-bromo-2,2-dibenzothiophene 5.49g (1.1equiv、20.9mmol)及びtBu<sub>3</sub>P 0.39g (0.1equiv、1.9mmol)を順に加え、加熱還流攪拌した。室温まで空冷した後、反応溶媒に水を加えて有機層を分取した。水層にTolueneを加えて有機層をさらに抽出し、有機層を合わせて食塩水で洗浄した後、MgSO<sub>4</sub>で乾燥した。MgSO<sub>4</sub>の濾別と有機層の濃縮を行い、得られた粗生成物をsilica gel column chromatography(展開層にはHexaneとTolueneの混合溶媒を使用)で精製し、化合物F46 (11.61g、収率90%)を得た。

20

【0221】

FAB-MSを測定し、質量数m/z = 679が分子ion peakとして観測されたことにより、化合物F46を確認した。

【0222】

13. 化合物F53の合成

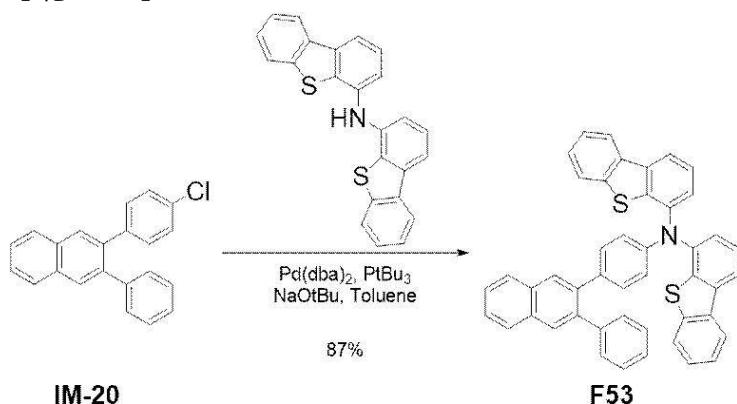
30

本発明の一実施例によるモノアミン化合物である化合物F53は、例えば、下記反応によって合成することができる。

【0223】

(化合物F53の合成)

【化62】



【0224】

Ar雰囲気下、300mLの3口フラスコに、IM-20 8.00g (23.4mmol)、Pd(dba)<sub>2</sub> 0.40g (0.03equiv、0.7mmol)、NaOtBu 4.50g (2.0equiv、46.8mmol)、Toluene 117mL、3-bromo-2,2-dibenzothiophene 5.49g (1.1equiv、20.9mmol)及びtBu<sub>3</sub>P 0.39g (0.1equiv、1.9mmol)を順に加え、加熱還流攪拌した。室温まで空冷した後、反応溶媒に水を加えて有機層を分取した。水層にTolueneを加えて有機層をさらに抽出し、有機層を合わせて食塩水で洗浄した後、MgSO<sub>4</sub>で乾燥した。MgSO<sub>4</sub>の濾別と有機層の濃縮を行い、得られた粗生成物をsilica gel column chromatography(展開層にはHexaneとTolueneの混合溶媒を使用)で精製し、化合物F53 (11.61g、収率90%)を得た。

50

m L、bis(dibenzothiophen-4-yl)amine 9.82 g (1.1 equiv, 25.7 mmol) 及び tBu<sub>3</sub>P 0.47 g (0.1 equiv, 2.3 mmol) を順に加え、加熱還流攪拌した。室温まで空冷した後、反応溶媒に水を加えて有機層を分取した。水層に Toluene を加えて有機層をさらに抽出し、有機層を合わせて食塩水で洗浄した後、MgSO<sub>4</sub> で乾燥した。MgSO<sub>4</sub> の濾別と有機層の濃縮を行い、得られた粗生成物を silica gel column chromatography (展開層には Hexane と Toluene の混合溶媒を使用) で精製し、化合物 F53 (13.44 g、収率 87%)を得た。

## 【0225】

FAB-MS を測定し、質量数 m/z = 659 が分子 ion peak として観測されたことにより、化合物 F53 を確認した。 10

## 【0226】

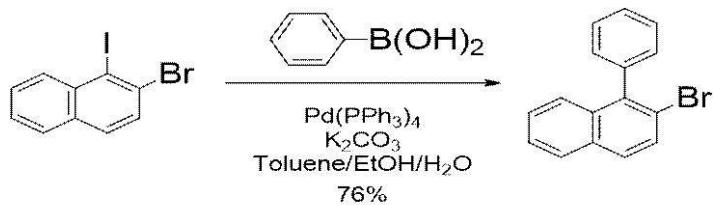
## 14. 化合物 G54 の合成

本発明の一実施例によるモノアミン化合物である化合物 G54 は、例えば、下記反応によって合成することができる。 20

## 【0227】

## (中間体 IM-22 の合成)

## 【化63】



## 【0228】

Ar 雰囲気下、1 L の 3 口フラスコに、2-bromo-1-iodonaphthalene 25.00 g (75.1 mmol)、phenylboronic acid 10.07 g (1.1 equiv, 82.6 mmol)、K<sub>2</sub>CO<sub>3</sub> 31.1 g (3.0 equiv, 225.2 mmol)、Pd(PPh<sub>3</sub>)<sub>4</sub> 4.434 g (0.05 eq, 3.8 mmol)、及び Toluene / EtOH / H<sub>2</sub>O (4 / 2 / 1) の混合溶液 525 mL を順に加え、80°で加熱攪拌した。室温まで空冷した後、反応溶液を Toluene で抽出した。水層を除去し、有機層を飽和食塩水で洗浄した後、MgSO<sub>4</sub> で乾燥した。MgSO<sub>4</sub> の濾別と有機層の濃縮を行い、得られた粗生成物を silica gel column chromatography (展開層には Hexane と Toluene の混合溶媒を使用) で精製し、中間体 IM-22 (16.16 g、収率 76%)を得た。 30

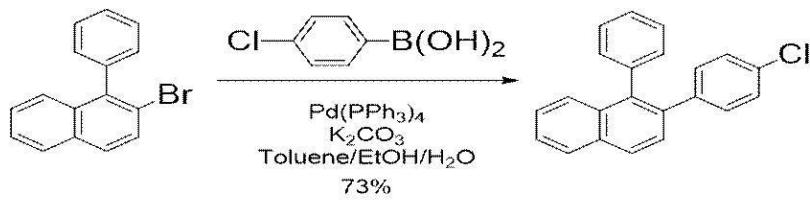
## 【0229】

FAB-MS を測定し、質量数 m/z = 283 が分子 ion peak として観測されたことにより、中間体 IM-22 を確認した。 40

## 【0230】

## (中間体 IM-23 の合成)

## 【化64】



IM-22

IM-23

## 【0231】

Ar 霧囲気下、1 L の 3 口フラスコに、IM-22 13.00 g (45.9 mmol)、4-chlorophenyl boronic acid 7.90 g (1.1 equiv, 50.5 mmol)、K<sub>2</sub>CO<sub>3</sub> 19.04 g (3.0 equiv, 60.7 mmol)、Pd(PPh<sub>3</sub>)<sub>4</sub> 2.65 g (0.05 eq, 2.3 mmol)、及び Toluene / EtOH / H<sub>2</sub>O (4/2/1) の混合溶液 321 mL を順に加え、80 °C で加熱攪拌した。室温まで空冷した後、反応溶液を Toluene で抽出した。水層を除去し、有機層を飽和食塩水で洗浄した後、MgSO<sub>4</sub> で乾燥した。MgSO<sub>4</sub> の濾別と有機層の濃縮を行い、得られた粗生成物を silica gel column chromatography (展開層には Hexane と Toluene の混合溶媒を使用) で精製し、中間体 IM-23 (10.55 g、収率 73%)を得た。  
10

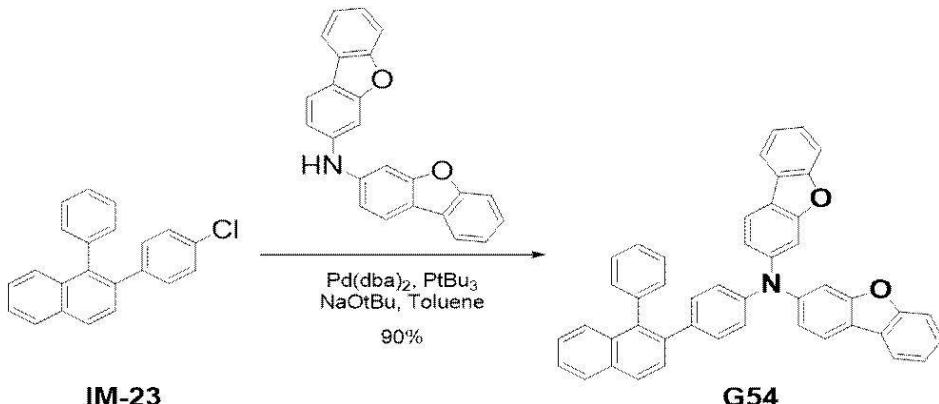
## 【0232】

FAB-MS を測定し、質量数 m/z = 314 が分子 ion peak として観測されたことにより、中間体 IM-23 を確認した。

## 【0233】

(化合物 G54 の合成)

## 【化65】



## 【0234】

Ar 霧囲気下、300 mL の 3 口フラスコに、IM-23 8.00 g (25.4 mmol)、Pd(dba)<sub>2</sub> 0.44 g (0.03 equiv, 0.8 mmol)、NaOtBu 4.88 g (2.0 equiv, 50.8 mmol)、Toluene 127 mL、bis(dibenzofuran-3-yl)amine 9.77 g (1.1 equiv, 28.0 mmol) 及び tBu<sub>3</sub>P 0.51 g (0.1 equiv, 2.5 mmol) を順に加え、加熱還流攪拌した。室温まで空冷した後、反応溶媒に水を加えて有機層を分取した。水層に Toluene を加えて有機層をさらに抽出し、有機層を合わせて食塩水で洗浄した後、MgSO<sub>4</sub> で乾燥した。MgSO<sub>4</sub> の濾別と有機層の濃縮を行い、得られた粗生成物を silica gel column chromatography (展開層には Hexane と Toluene の混合溶媒を使用) で精製し、化合物 G54 (14.4 g、収率 90%)を得た。  
30  
40

## 【0235】

FAB-MS を測定し、質量数 m/z = 627 が分子 ion peak として観測されたことにより、化合物 G54 を確認した。

## 【0236】

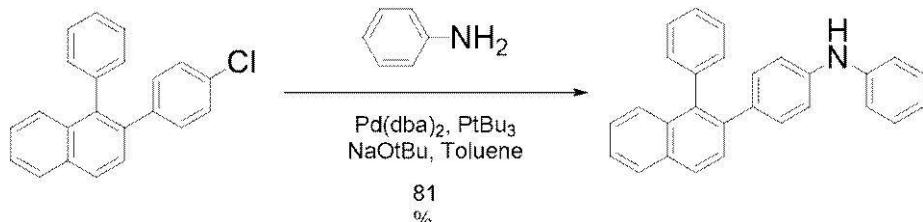
15. 化合物 G58 の合成

本発明の一実施例によるモノアミン化合物である化合物 G58 は、例えば、下記反応によって合成することができる。

## 【0237】

(中間体 IM-24 の合成)

## 【化66】



IM-23

IM-24

10

Ar 霧囲気下、300 mL の3口フラスコに、IM-23 10.00 g (31.8 mmol)、Pd(dba)<sub>2</sub> 0.55 g (0.03 equiv、1.0 mmol)、NaOtBu 3.05 g (1.0 equiv、31.8 mmol)、Toluene 159 mL、aniline 3.25 g (1.1 equiv、34.9 mmol) 及び tBu<sub>3</sub>P 0.64 g (0.1 equiv、3.2 mmol) を順に加え、加熱還流攪拌した。室温まで空冷した後、反応溶媒に水を加えて有機層を分取した。水層に Toluene を加えて有機層をさらに抽出し、有機層を合わせて食塩水で洗浄した後、MgSO<sub>4</sub> で乾燥した。MgSO<sub>4</sub> の濾別と有機層の濃縮を行い、得られた粗生成物を silica gel column chromatography (展開層には Hexane と Toluene の混合溶媒を使用) で精製し、化合物 IM-24 (9.56 g、収率 81%)を得た。

20

## 【0238】

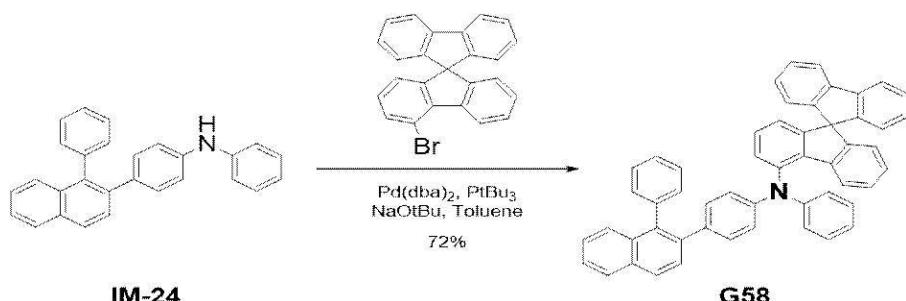
FAB-MS を測定し、質量数 m/z = 371 が分子 ion peak として観測されたことにより、化合物 IM-24 を確認した。

20

## 【0240】

(化合物 G58 の合成)

## 【化67】



IM-24

G58

30

## 【0241】

Ar 霧囲気下、300 mL の3口フラスコに、IM-24 8.00 g (21.5 mmol)、Pd(dba)<sub>2</sub> 0.37 g (0.03 equiv、0.6 mmol)、NaOtBu 4.14 g (2.0 equiv、43.1 mmol)、Toluene 108 mL、4-bromo-9,9'-spirobifluorene 9.36 g (1.1 equiv、23.7 mmol) 及び tBu<sub>3</sub>P 0.44 g (0.1 equiv、2.2 mmol) を順に加え、加熱還流攪拌した。室温まで空冷した後、反応溶媒に水を加えて有機層を分取した。水層に Toluene を加えて有機層をさらに抽出し、有機層を合わせて食塩水で洗浄した後、MgSO<sub>4</sub> で乾燥した。MgSO<sub>4</sub> の濾別と有機層の濃縮を行い、得られた粗生成物を silica gel column chromatography (展開層には Hexane と Toluene の混合溶媒を使用) で精製し、化合物 G58 (10.63 g、収率 72%)を得た。

40

## 【0242】

FAB-MS を測定し、質量数 m/z = 685 が分子 ion peak として観測された

50

ことにより、化合物 G 5 8 を確認した。

**【0243】**

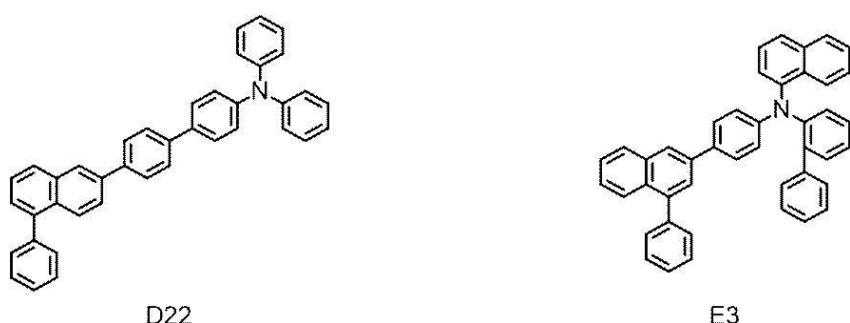
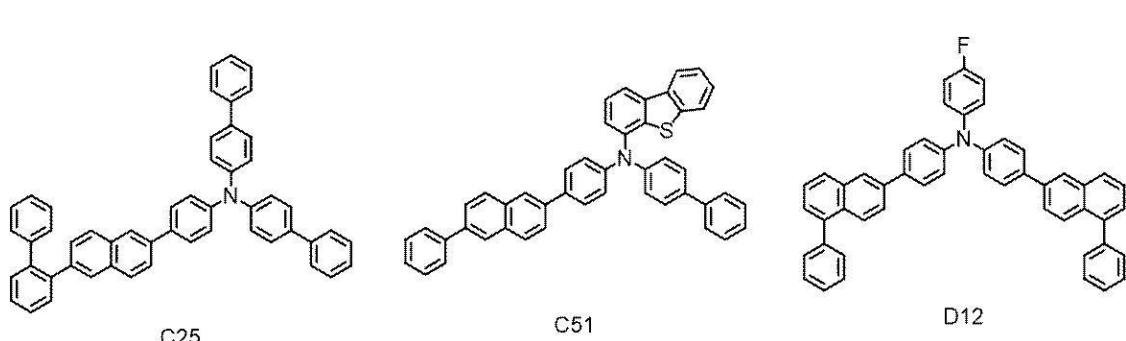
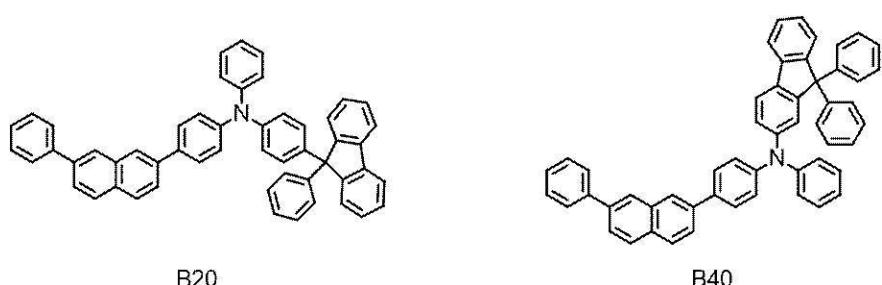
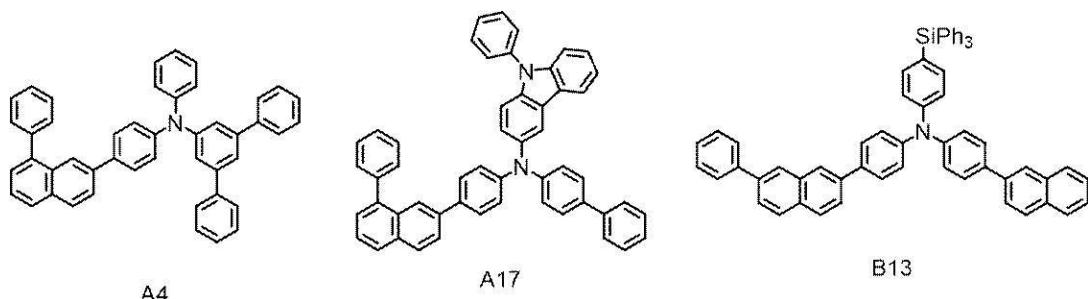
(素子作成例)

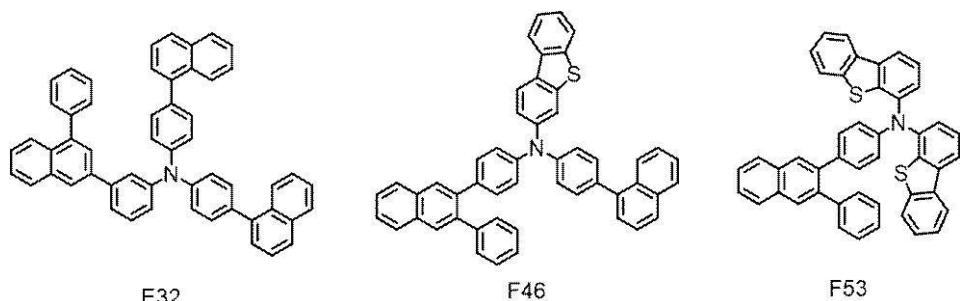
上述した化合物 A 4、A 17、B 13、B 20、B 40、C 25、C 51、D 12、D 22、E 3、E 32、F 46、F 53、G 54 及び G 58 を電子阻止層の材料として使用し、実施例 1～15 の有機電界発光素子を製作した。

**【0244】**

[実施例化合物]

**【化68】**



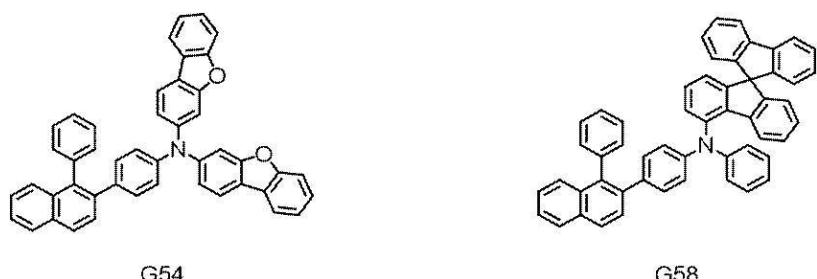


E32

F46

F53

10



G54

G58

20

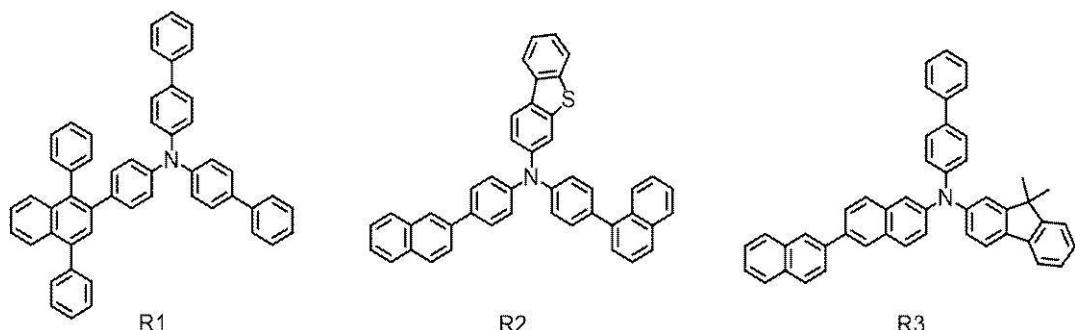
## 【 0 2 4 5 】

下記比較例化合物 R - 1 ~ R - 8 を電子阻止層の材料として使用し、比較例 1 ~ 8 の有機電界発光素子を製作した。

## 【 0 2 4 6 】

## [ 比較例化合物 ]

## 【 化 6 9 】

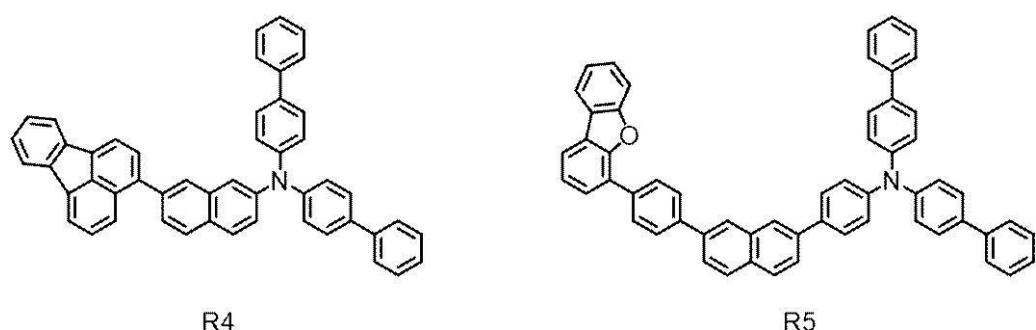


R1

R2

R3

30

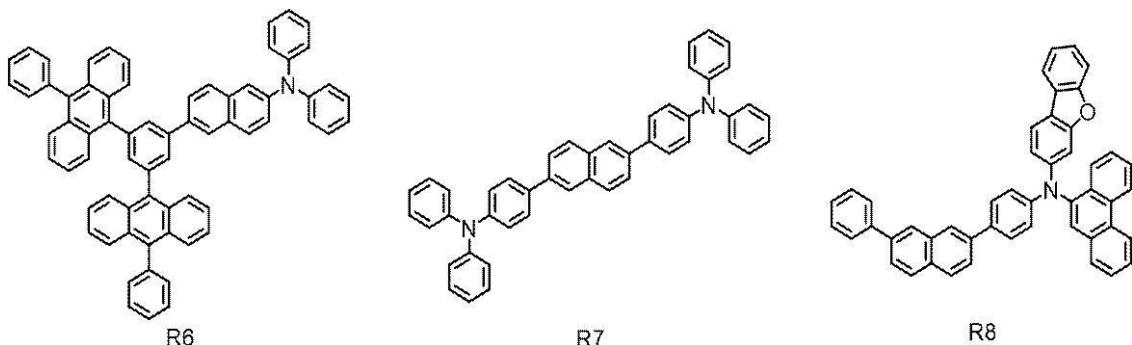


R4

R5

40

50



10

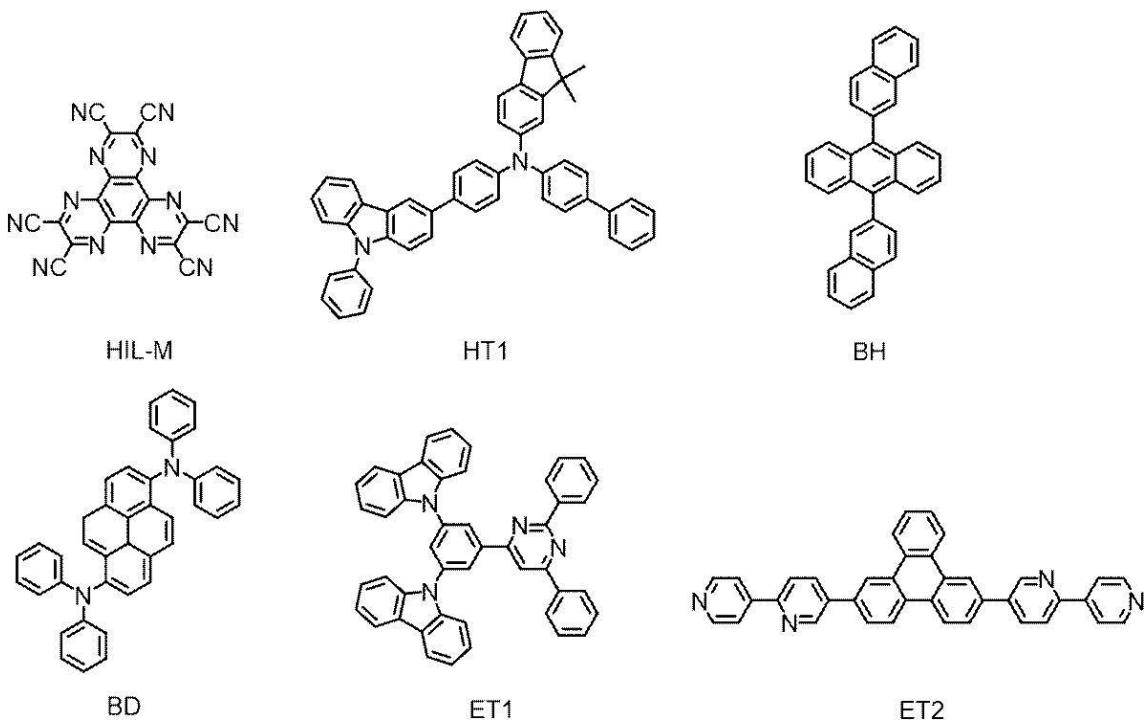
## 【0247】

実施例1～15及び比較例1～8の有機電界発光素子は、ITOで150nmの第1電極を形成し、HT1にHIL-Mを2%でドープした10nm厚さの正孔注入層を形成し、HT1で120nm厚さの正孔輸送層を形成し、実施例化合物または比較例化合物で10nm厚さの電子阻止層を形成し、BHにBDを2%ドープした30nm厚さの発光層を形成し、ET1で10nm厚さの正孔阻止層を形成し、ET2で20nm厚さの電子輸送層を形成し、LiFで1nm厚さの電子注入層を形成し、マグネシウム(Mg)と銀(Ag)を9:1(体積比)で共蒸着して120nm厚さの第2電極を形成した。各層はすべて真空蒸着法で形成した。

20

## 【0248】

## 【化70】



30

40

## 【0249】

実施例1～15及び比較例1～8による有機電界発光素子の電圧、半減寿命、発光効率及び色座標を表1に示す。

## 【0250】

50

【表1】

	電子阻止層	電圧 (V)	寿命 LT50(h)	発光効率 (cd/A)	色座標 CIE(x, y)
実施例 1	実施例化合物 A4	4.8	5.5	189	0.141, 0.051
実施例 2	実施例化合物 A17	4.6	5.5	190	0.142, 0.051
実施例 3	実施例化合物 B13	4.7	5.6	196	0.141, 0.051
実施例 4	実施例化合物 B20	4.6	5.5	195	0.141, 0.052
実施例 5	実施例化合物 B40	4.6	5.4	197	0.142, 0.052
実施例 6	実施例化合物 C25	4.6	5.4	199	0.142, 0.051
実施例 7	実施例化合物 C51	4.8	5.4	196	0.141, 0.051
実施例 8	実施例化合物 D12	4.8	5.5	188	0.142, 0.052
実施例 9	実施例化合物 D22	4.7	5.4	190	0.142, 0.051
実施例 10	実施例化合物 E3	4.8	5.6	184	0.141, 0.052
実施例 11	実施例化合物 E32	4.8	5.6	189	0.141, 0.052
実施例 12	実施例化合物 F46	4.7	5.3	193	0.141, 0.051
実施例 13	実施例化合物 F53	4.8	5.5	192	0.141, 0.051
実施例 14	実施例化合物 G54	4.8	5.6	197	0.141, 0.052
実施例 15	実施例化合物 G58	4.8	5.6	185	0.142, 0.052
比較例 1	比較例化合物 R1	5.0	4.9	167	0.140, 0.052
比較例 2	比較例化合物 R2	5.2	3.8	165	0.141, 0.053
比較例 3	比較例化合物 R3	5.1	4.0	167	0.142, 0.051
比較例 4	比較例化合物 R4	5.3	4.2	163	0.139, 0.049
比較例 5	比較例化合物 R5	5.1	5.0	168	0.140, 0.050
比較例 6	比較例化合物 R6	5.5	3.5	155	0.137, 0.047
比較例 7	比較例化合物 R7	4.9	5.0	157	0.143, 0.053
比較例 8	比較例化合物 R8	4.9	4.9	169	0.142, 0.052

10

20

30

40

50

## 【0251】

発光効率は  $10 \text{ mA/cm}^2$  で測定した値であり、半減寿命は  $1.0 \text{ mA/cm}^2$  における値である。

## 【0252】

上記表1を参照すると、実施例1～15は、比較例1～8に比べて低駆動電圧化、長寿命化及び高効率化された。本発明の一実施例によるモノアミン化合物は、置換された-フェニルナフチル基を含むことにより、低駆動電圧化、長寿命化及び高効率化が達成された。熱及び電荷に対する耐性に優れたナフチル基を導入することにより、アミンの特性を保持しながら素子の長寿命化が実現された。また、ナフチル基にフェニル基が置換されていることにより体積が大きくなり、分子の対称性が低下して結晶化が抑制され、結果的に膜質を向上させることができたため、効率も向上した。

## 【0253】

実施例1、2、8～11、14及び15は、素子の寿命と効率が向上した。化合物A4、A17、D12、D22、E3、E32、G54及びG58は、ナフチル基の'位置に置換基を含み、'位置に結合した置換基と他方の'位置に置換する水素原子の間に立体電子的反発が生じるため、ナフチル基に置換されたフェニル基とナフチル基骨格が互いにねじれることによって、分子全体の平面性が低下して結晶性が抑制されるとともに、正孔輸送性が改善され、発光層内における正孔と電子の再結合の確率が向上したためであると判断される。

**【 0 2 5 4 】**

実施例 3 ~ 7、12、及び 13 は、素子の寿命と効率が向上した。化合物 B 1 3、B 2 0、B 4 0、C 2 5、C 5 1、F 4 6、及び F 5 3 は、ナフチル基の位置に置換基を含み、位置に結合した置換基とナフチル基が平面に近い立体構造をとることにより、アミン周辺の共役が非局在化されてラジカル状態が安定するため、寿命が向上した。

**【 0 2 5 5 】**

比較例 1 は、実施例と比較して、特に素子寿命が低下する結果を示した。R 1 は、本発明の一実施例と類似して、リンカーを介してナフチル基の位置にアミノ基が結合されているが、ナフチル基に 2 つのフェニル基が置換されており、ナフチル基に HOMO 軌道が大きく分布するようになり、相対的にアミノ基側の電子密度が小さくなり、長寿命を誘導するアミンの特性を保持することが困難になったと判断される。  
10

**【 0 2 5 6 】**

比較例 2 は、ナフチル基を含むアミン化合物であるが、フェニルナフチル基を含んでいないため、電荷耐性が低く、膜質が十分ではないため、素子の寿命が短く効率が低い。

**【 0 2 5 7 】**

比較例 3 及び 4 は、本発明の一実施例と類似して、リンカーを介してナフチル基の位置にアミノ基が結合されている化合物であるが、ナフチル基にフェニル基ではない多環芳香族基が結合されており、多環芳香族基の影響で分子スタッキング (stacking) が非常に強く、蒸着温度が高いため、熱分解が容易に起きたと判断され、これにより、実施例と比べて発光効率及び寿命がともに低下する結果を示した。  
20

**【 0 2 5 8 】**

比較例 6 は、本発明の一実施例と類似して、リンカーを介してナフチル基の位置にアミノ基が結合されている化合物であるが、フェニル基に 2 つの置換基を含んで分子スタッキング (stacking) が非常に強く、蒸着温度が高いため、熱分解が容易に起こり、実施例と比べて発光効率及び寿命がともに低下する結果を示した。

**【 0 2 5 9 】**

比較例 5 及び 7 は、実施例と比べて、特に発光効率が低下する結果を示した。比較例化合物 R 5 はナフチル基の置換されたフェニル基にヘテロ環であるジベンゾフラン (dibenzo furan) 環が置換されており、比較例化合物 R 7 はジアミン化合物であるため、キャリアバランスが崩れたと判断される。  
30

**【 0 2 6 0 】**

比較例 8 は、実施例と比べて発光効率及び寿命がともに低下する結果を示した。比較例化合物 R 8 は、窒素原子に 3 - ジベンゾフラニル基 (3 - dibenzofuran-1-yl) 及び 9 - フェナントリル基 (9 - phenanthryl) を同時に結合して熱分解が容易に起きたと判断される。即ち、分子スタッキング (stacking) が非常に強くなることができる 9 - フェナントリル基 (9 - phenanthryl) が窒素に結合し、同時に分子全体に平面性が高くなる 3 - ジベンゾフラニル基 (3 - dibenzofuran-1-yl) が結合して分子スタッキングが増強され、蒸着温度が上昇することにより、分子の熱分解が容易に発生し、素子の効率及び寿命が低下したと判断される。

**【 0 2 6 1 】**

本発明の一実施例によるモノアミン化合物は、正孔輸送領域に使用されて有機電界発光素子の低駆動電圧化、高効率化及び長寿命化に寄与する。  
40

**【 0 2 6 2 】**

以上、本発明の実施例を説明したが、本発明が属する技術分野で通常の知識を有する者は、本発明がその技術的思想や必須の特徴を変更せずに、他の具体的な形態で実施できることが理解できるであろう。よって、以上で説明した実施例は、すべての面において例示的なものであり、限定的ではないと理解すべきである。

**【 符号の説明 】****【 0 2 6 3 】**

E L 1 第 1 電極  
H T R 正孔輸送領域  
H I L 正孔注入層  
H T L 正孔輸送層  
E M L 發光層  
E T R 電子輸送領域  
E T L 電子輸送層  
E I L 電子注入層  
E L 2 第 2 電極

10

20

30

40

50