

(19) 日本国特許庁(JP)

(12) 公開特許公報(A)

(11) 特許出願公開番号

特開2010-65033
(P2010-65033A)

(43) 公開日 平成22年3月25日(2010.3.25)

(51) Int.Cl.	F I	テーマコード (参考)
C07C 211/61 (2006.01)	C07C 211/61 C S P	3 K 1 0 7
H01L 51/50 (2006.01)	H05B 33/14 B	4 C 0 3 4
H05B 33/12 (2006.01)	H05B 33/22 B	4 C 0 3 6
H01L 51/42 (2006.01)	H05B 33/22 D	4 C 0 5 5
C07F 7/10 (2006.01)	H05B 33/12 C	4 C 0 5 6

審査請求 未請求 請求項の数 8 O L 外国語出願 (全 188 頁) 最終頁に続く

(21) 出願番号 特願2009-201671 (P2009-201671)
 (22) 出願日 平成21年9月1日(2009.9.1)
 (31) 優先権主張番号 10-2008-0087069
 (32) 優先日 平成20年9月4日(2008.9.4)
 (33) 優先権主張国 韓国 (KR)

(71) 出願人 508223435
 グラセル・ディスプレイ・インコーポレー
 テッド
 大韓民国, ソウル・133-833, ソン
 ドン・グウ, ソンスー-2 ガ-3 ドン・2
 84-25, サムヤン・テクノ・タウン・
 フィフス・フロア
 (74) 代理人 110000589
 特許業務法人センダ国際特許事務所
 (72) 発明者 キム, ヤン・ジル
 大韓民国, キョンギド・431-075
 , アンヤン・シ, ドンガン・グウ, ピョン
 ガン・ドン, チョーワン・スンワン・アパ
 ートメント・104-303

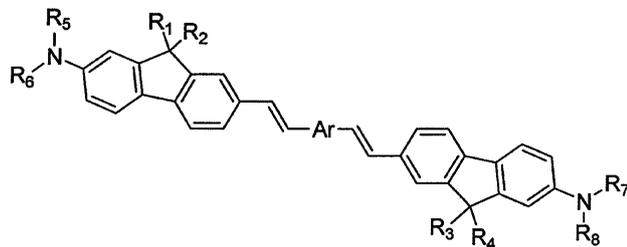
最終頁に続く

(54) 【発明の名称】 新規の有機電界発光化合物およびこれを使用する有機電界発光素子

(57) 【要約】 (修正有)

【課題】 新規の有機電界発光化合物の提供。

【解決手段】 下記化学式 1 で表される有機電界発光化合物。



(1)

10

(Ar は、C6~60のアリーレン、N、O及びSから選択される1以上のヘテロ原子を含むC3~60のヘテロアリーレン、N、O及びSから選択される1以上のヘテロ原子を含む5員もしくは6員のヘテロシクロアルキレン、C3~60シクロアルキレン等である。)

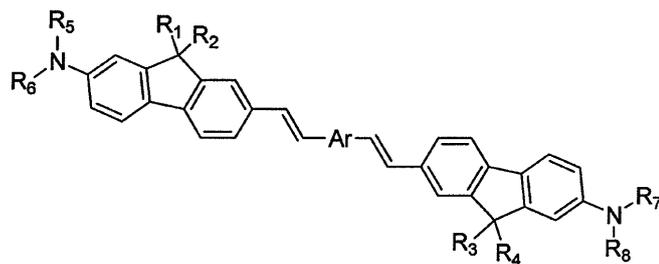
【選択図】 なし

【特許請求の範囲】

【請求項 1】

下記化学式 1 で表される有機電界発光化合物：

【化 1】



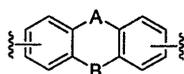
(1)

10

(化学式 1 において、

Ar は、(C6 - C60) アリーレン、(C3 - C60) ヘテロアリーレン、N、O および S から選択される 1 以上のヘテロ原子を含む 5 員もしくは 6 員のヘテロシクロアルキレン、(C3 - C60) シクロアルキレン、アダマンチレン、(C7 - C60) ビシクロアルキレン、(C2 - C60) アルケニレン、(C2 - C60) アルキニレン、(C1 - C60) アルキレンチオ、(C1 - C60) アルキレンオキシ、(C6 - C60) アリーレンオキシ、(C6 - C60) アリーレンチオ、または

【化 2】



20

であり；

A 及び B は、互いに独立して、化学結合、 $-(CR_{11})(R_{12})_m-$ 、 $-N(R_3)-$ 、 $-S-$ 、 $-O-$ 、 $-Si(R_{14})(R_{15})-$ 、 $-P(R_{16})-$ 、 $-C(=O)-$ 、 $-B(R_{17})-$ 、 $-In(R_{18})-$ 、 $-Se-$ 、 $-Ge(R_{19})(R_{20})-$ 、 $-Sn(R_{21})(R_{22})-$ 、 $-Ga(R_{23})-$ または $-(R_{24})C=C(R_{25})-$ であり、但し、A 及び B が同時に化学結合である場合を除く；

30

R₁ 乃至 R₈ は、互いに独立して、水素、重水素、ハロゲン、(C1 - C60) アルキル、(C6 - C60) アリール、N、O および S から選択される 1 以上のヘテロ原子を含む (C3 - C60) ヘテロアリール、モルホリノ、チオモルホリノ、N、O および S から選択される 1 以上のヘテロ原子を含む 5 員もしくは 6 員のヘテロシクロアルキル、(C3 - C60) シクロアルキル、トリ(C1 - C60) アルキルシリル、ジ(C1 - C60) アルキル(C6 - C60) アリールシリル、トリ(C6 - C60) アリールシリル、アダマンチル、(C7 - C60) ビシクロアルキル、(C2 - C60) アルケニル、(C2 - C60) アルキニル、シアノ、(C1 - C60) アルキルアミノ、(C6 - C60) アリールアミノ、(C6 - C60) アリール(C1 - C60) アルキル、(C1 - C60) アルキルオキシ、(C1 - C60) アルキルチオ、(C6 - C60) アリールオキシ、(C6 - C60) アリールチオ、(C1 - C60) アルコキシカルボニル、(C1 - C60) アルキルカルボニル、(C6 - C60) アリールカルボニル、カルボキシル、ニトロもしくはヒドロキシルであるか、または R₁ と R₂、R₃ と R₄、R₅ と R₆、及び R₇ と R₈ は、縮合環を含むかもしくは含まない (C3 - C60) アルキレンもしくは (C3 - C60) アルケニレンで連結されて、脂環式環、または単環式もしくは多環式芳香族環を形成することができ；

40

R₁₁ 乃至 R₂₅ は、互いに独立して、水素、重水素、ハロゲン、(C1 - C60) アルキル、(C6 - C60) アリール、N、O および S から選択される 1 以上のヘテロ原子を含む (C3 - C60) ヘテロアリール、モルホリノ、チオモルホリノ、N、O および S から選択される 1 以上のヘテロ原子を含む 5 員もしくは 6 員のヘテロシクロアルキル、(C3 - C60) シクロアルキル、トリ(C1 - C60) アルキルシリル、ジ(C1 - C60)

50

0) アルキル (C₆ - C₆₀) アリールシリル、トリ (C₆ - C₆₀) アリールシリル、アダマンチル、(C₇ - C₆₀) ビシクロアルキル、(C₂ - C₆₀) アルケニル、(C₂ - C₆₀) アルキニル、シアノ、(C₁ - C₆₀) アルキルアミノ、(C₆ - C₆₀) アリールアミノ、(C₆ - C₆₀) アリール (C₁ - C₆₀) アルキル、(C₁ - C₆₀) アルキルオキシ、(C₁ - C₆₀) アルキルチオ、(C₆ - C₆₀) アリールオキシ、(C₆ - C₆₀) アリールチオ、(C₁ - C₆₀) アルコキシカルボニル、(C₁ - C₆₀) アルキルカルボニル、(C₆ - C₆₀) アリールカルボニル、カルボキシル、ニトロもしくはヒドロキシルであるか、または R₁₁ と R₁₂、R₁₄ と R₁₅、R₁₉ と R₂₀、R₂₁ と R₂₂、及び R₂₄ と R₂₅ は、縮合環を含むかもしくは含まない (C₃ - C₆₀) アルキレンもしくは (C₃ - C₆₀) アルケニレンで連結されて、脂環式環、または単環式もしくは多環式芳香族環を形成することができ；

前記 Ar のアリーレン、ヘテロアリーレン、ヘテロシクロアルキレン、シクロアルキレン、アダマンチレン、ビシクロアルキレン、アルケニレン、アルキレンチオ、アルキレンオキシ、アリーレンオキシまたはアリーレンチオ、並びに前記 R₁ 乃至 R₈、および R₁₁ 乃至 R₂₅ のアルキル、アリール、ヘテロアリール、ヘテロシクロアルキル、シクロアルキル、トリアルキルシリル、ジアルキルアリールシリル、トリアリールシリル、アダマンチル、ビシクロアルキル、アルケニル、アルアルキル、アルキルオキシ、アルキルチオ、アリールオキシ、アリールチオ、アルキルアミノ、アリールアミノ、アルコキシカルボニル、アルキルカルボニルもしくはアリールカルボニルには、重水素、ハロゲン、ハロゲン置換基を有するもしくは有しない (C₁ - C₆₀) アルキル、(C₆ - C₆₀) アリール、(C₆ - C₆₀) アリール置換基を有するもしくは有しない N、O および S から選択される 1 以上のヘテロ原子を含む (C₃ - C₆₀) ヘテロアリール、モルホリノ、チオモルホリノ、N、O および S から選択される 1 以上のヘテロ原子を含む 5 員もしくは 6 員のヘテロシクロアルキル、(C₃ - C₆₀) シクロアルキル、トリ (C₁ - C₆₀) アルキルシリル、ジ (C₁ - C₆₀) アルキル (C₆ - C₆₀) アリールシリル、トリ (C₆ - C₆₀) アリールシリル、アダマンチル、(C₇ - C₆₀) ビシクロアルキル、(C₂ - C₆₀) アルケニル、(C₂ - C₆₀) アルキニル、シアノ、カルバゾリル、(C₁ - C₆₀) アルキルアミノ、(C₆ - C₆₀) アリールアミノ、(C₆ - C₆₀) アリール (C₁ - C₆₀) アルキル、(C₁ - C₆₀) アルキル (C₆ - C₆₀) アリール、(C₁ - C₆₀) アルキルオキシ、(C₁ - C₆₀) アルキルチオ、(C₆ - C₆₀) アリールオキシ、(C₆ - C₆₀) アリールチオ、(C₁ - C₆₀) アルコキシカルボニル、(C₁ - C₆₀) アルキルカルボニル、(C₆ - C₆₀) アリールカルボニル、カルボキシル、ニトロおよびヒドロキシルからなる群から選択される 1 以上の置換基がさらに置換可能であり；

m は、1 ~ 3 の整数である)。

【請求項 2】

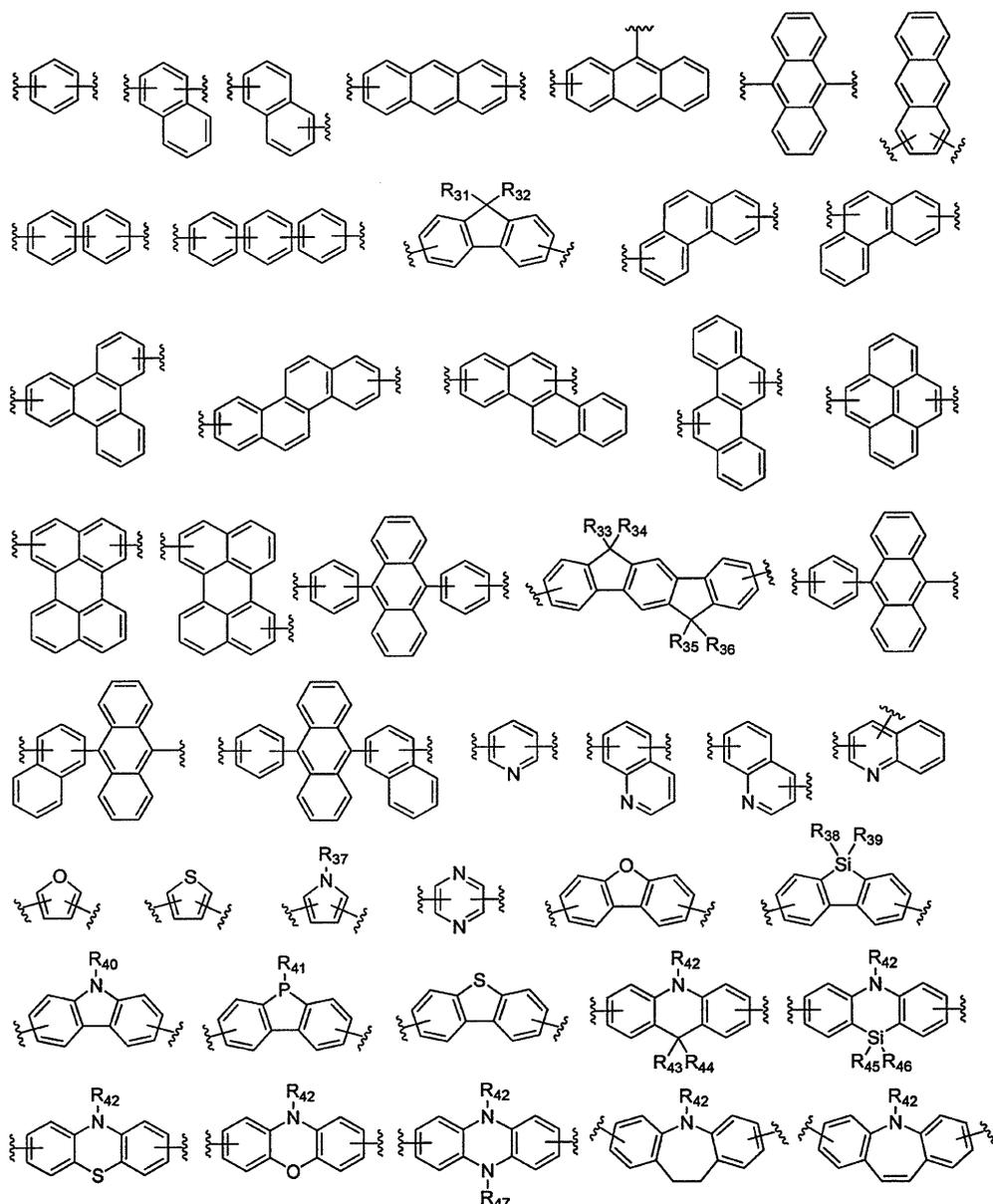
Ar が下記構造から選択される請求項 1 に記載の有機電界発光化合物：

10

20

30

【化3】



10

20

30

(式中、 R_{31} 乃至 R_{42} は、互いに独立して、水素、重水素、ハロゲン、(C1 - C60)アルキル、(C6 - C60)アリール、N、OおよびSから選択される1以上のヘテロ原子を含む(C3 - C60)ヘテロアリール、モルホリノ、チオモルホリノ、N、OおよびSから選択される1以上のヘテロ原子を含む5員もしくは6員のヘテロシクロアルキル、(C3 - C60)シクロアルキル、トリ(C1 - C60)アルキルシリル、ジ(C1 - C60)アルキル(C6 - C60)アリールシリル、トリ(C6 - C60)アリールシリル、アダマンチル、(C7 - C60)ピシクロアルキル、(C2 - C60)アルケニル、(C2 - C60)アルキニル、シアノ、(C1 - C60)アルキルアミノ、(C6 - C60)アリールアミノ、(C6 - C60)アリール(C1 - C60)アルキル、(C1 - C60)アルキルオキシ、(C1 - C60)アルキルチオ、(C6 - C60)アリールオキシ、(C6 - C60)アリールチオ、(C1 - C60)アルコキシカルボニル、(C1 - C60)アルキルカルボニル、(C6 - C60)アリールカルボニル、カルボキシル、ニトロもしくはヒドロキシルであるか、または R_{31} と R_{32} 、 R_{33} と R_{34} 、 R_{35} と R_{36} 、 R_{38} と R_{39} 、 R_{43} と R_{44} 及び R_{45} と R_{46} は、縮合環を含むかもしくは含まない(C3 - C60)アルキレンもしくは(C3 - C60)アルケニレンで連結されて、脂環式環、または単環式もしくは多環式芳香族環を形成することができ；

40

前記 R_{31} 乃至 R_{42} のアルキル、アリール、ヘテロアリール、ヘテロシクロアルキル

50

、シクロアルキル、トリアルキルシリル、ジアルキルアリールシリル、トリアリールシリル、アダマンチル、ビシクロアルキル、アルケニル、アルアルキル、アルキルオキシ、アルキルチオ、アリールオキシ、アリールチオ、アルキルアミノ、アリールアミノ、アルコキシカルボニル、アルキルカルボニルまたはアリールカルボニルには、重水素、ハロゲン、ハロゲン置換基を有するもしくは有しない(C1 - C60)アルキル、(C6 - C60)アリール、(C6 - C60)アリール置換基を有するもしくは有しないN、OおよびSから選択される1以上のヘテロ原子を含む(C3 - C60)ヘテロアリール、モルホリノ、チオモルホリノ、N、OおよびSから選択される1以上のヘテロ原子を含む5員もしくは6員のヘテロシクロアルキル、(C3 - C60)シクロアルキル、トリ(C1 - C60)アルキルシリル、ジ(C1 - C60)アルキル(C6 - C60)アリールシリル、トリ(C6 - C60)アリールシリル、アダマンチル、(C7 - C60)ビシクロアルキル、(C2 - C60)アルケニル、(C2 - C60)アルキニル、シアノ、カルバゾリル、(C1 - C60)アルキルアミノ、(C6 - C60)アリールアミノ、(C6 - C60)アリール(C1 - C60)アルキル、(C1 - C60)アルキル(C6 - C60)アリール、(C1 - C60)アルキルオキシ、(C1 - C60)アルキルチオ、(C6 - C60)アリールオキシ、(C6 - C60)アリールチオ、(C1 - C60)アルコキシカルボニル、(C1 - C60)アルキルカルボニル、(C6 - C60)アリールカルボニル、カルボキシル、ニトロおよびヒドロキシルからなる群から選択される1以上の置換基がさらに置換可能である)。

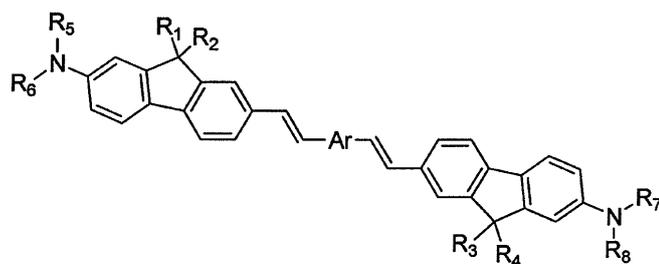
10

【請求項3】

20

第1の電極；第2の電極；および前記第1の電極と第2の電極との間に設けられる1以上の有機層を含む有機電界発光素子であって、当該有機層が下記化学式1で表される有機電界発光化合物と、化学式2または3で表される化合物から選択される1種以上のホストとを含む、有機電界発光素子：

【化4】



(1)

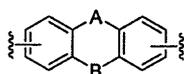
30

(化学式1において、

Arは、(C6 - C60)アリーレン、(C3 - C60)ヘテロアリーレン、N、OおよびSから選択される1以上のヘテロ原子を含む5員もしくは6員のヘテロシクロアルキレン、(C3 - C60)シクロアルキレン、アダマンチレン、(C7 - C60)ビシクロアルキレン、(C2 - C60)アルケニレン、(C2 - C60)アルキニレン、(C1 - C60)アルキレンチオ、(C1 - C60)アルキレンオキシ、(C6 - C60)アリーレンオキシ、(C6 - C60)アリーレンチオ、または

40

【化5】



であり；

A及びBは、互いに独立して、化学結合、-(CR₁₁)(R₁₂)_m-、-N(R₁₃)-、-S-、-O-、-Si(R₁₄)(R₁₅)-、-P(R₁₆)-、-C(=O)-、-B(R₁₇)-、-In(R₁₈)-、-Se-、-Ge(R₁₉)(R₂₀)-、-Sn(R₂₁)(R₂₂)-、-Ga(R₂₃)-または-(R₂₄)C=C(R₂₅)-であり、但し、A及びBが同時に化学結合である場合を除く；

50

R₁乃至R₈は、互いに独立して、水素、重水素、ハロゲン、(C₁-C₆₀)アルキル、(C₆-C₆₀)アリール、N、OおよびSから選択される1以上のヘテロ原子を含む(C₃-C₆₀)ヘテロアリール、モルホリノ、チオモルホリノ、N、OおよびSから選択される1以上のヘテロ原子を含む5員もしくは6員のヘテロシクロアルキル、(C₃-C₆₀)シクロアルキル、トリ(C₁-C₆₀)アルキルシリル、ジ(C₁-C₆₀)アルキル(C₆-C₆₀)アリールシリル、トリ(C₆-C₆₀)アリールシリル、アダマンチル、(C₇-C₆₀)ピシクロアルキル、(C₂-C₆₀)アルケニル、(C₂-C₆₀)アルキニル、シアノ、(C₁-C₆₀)アルキルアミノ、(C₆-C₆₀)アリールアミノ、(C₆-C₆₀)アリール(C₁-C₆₀)アルキル、(C₁-C₆₀)アルキルオキシ、(C₁-C₆₀)アルキルチオ、(C₆-C₆₀)アリールオキシ、(C₆-C₆₀)アリールチオ、(C₁-C₆₀)アルコキシカルボニル、(C₁-C₆₀)アルキルカルボニル、(C₆-C₆₀)アリールカルボニル、カルボキシル、ニトロもしくはヒドロキシルであるか、またはR₁とR₂、R₃とR₄、R₅とR₆、及びR₇とR₈は、縮合環を含むかもしくは含まない(C₃-C₆₀)アルキレンもしくは(C₃-C₆₀)アルケニレンで連結されて、脂環式環、または単環式もしくは多環式芳香族環を形成することができる；

10

R₁₁乃至R₂₅は、互いに独立して、水素、重水素、ハロゲン、(C₁-C₆₀)アルキル、(C₆-C₆₀)アリール、N、OおよびSから選択される1以上のヘテロ原子を含む(C₃-C₆₀)ヘテロアリール、モルホリノ、チオモルホリノ、N、OおよびSから選択される1以上のヘテロ原子を含む5員もしくは6員のヘテロシクロアルキル、(C₃-C₆₀)シクロアルキル、トリ(C₁-C₆₀)アルキルシリル、ジ(C₁-C₆₀)アルキル(C₆-C₆₀)アリールシリル、トリ(C₆-C₆₀)アリールシリル、アダマンチル、(C₇-C₆₀)ピシクロアルキル、(C₂-C₆₀)アルケニル、(C₂-C₆₀)アルキニル、シアノ、(C₁-C₆₀)アルキルアミノ、(C₆-C₆₀)アリールアミノ、(C₆-C₆₀)アリール(C₁-C₆₀)アルキル、(C₁-C₆₀)アルキルオキシ、(C₁-C₆₀)アルキルチオ、(C₆-C₆₀)アリールオキシ、(C₆-C₆₀)アリールチオ、(C₁-C₆₀)アルコキシカルボニル、(C₁-C₆₀)アルキルカルボニル、(C₆-C₆₀)アリールカルボニル、カルボキシル、ニトロもしくはヒドロキシルであるか、またはR₁₁とR₁₂、R₁₄とR₁₅、R₁₉とR₂₀、R₂₁とR₂₂、及びR₂₄とR₂₅は、縮合環を含むかもしくは含まない(C₃-C₆₀)アルキレンもしくは(C₃-C₆₀)アルケニレンで連結されて、脂環式環、または単環式もしくは多環式芳香族環を形成することができる；

20

30

前記Arのアリーレン、ヘテロアリーレン、ヘテロシクロアルキレン、シクロアルキレン、アダマンチレン、ピシクロアルキレン、アルケニレン、アルキレンチオ、アルキレンオキシ、アリーレンオキシまたはアリーレンチオ、並びに前記R₁乃至R₈、およびR₁₁乃至R₂₅のアルキル、アリール、ヘテロアリール、ヘテロシクロアルキル、シクロアルキル、トリアルキルシリル、ジアルキルアリールシリル、トリアリールシリル、アダマンチル、ピシクロアルキル、アルケニル、アルアルキル、アルキルオキシ、アルキルチオ、アリールオキシ、アリールチオ、アルキルアミノ、アリールアミノ、アルコキシカルボニル、アルキルカルボニルもしくはアリールカルボニルには、重水素、ハロゲン、ハロゲン置換基を有するもしくは有しない(C₁-C₆₀)アルキル、(C₆-C₆₀)アリール、(C₆-C₆₀)アリール置換基を有するもしくは有しないN、OおよびSから選択される1以上のヘテロ原子を含む(C₃-C₆₀)ヘテロアリール、モルホリノ、チオモルホリノ、N、OおよびSから選択される1以上のヘテロ原子を含む5員もしくは6員のヘテロシクロアルキル、(C₃-C₆₀)シクロアルキル、トリ(C₁-C₆₀)アルキルシリル、ジ(C₁-C₆₀)アルキル(C₆-C₆₀)アリールシリル、トリ(C₆-C₆₀)アリールシリル、アダマンチル、(C₇-C₆₀)ピシクロアルキル、(C₂-C₆₀)アルケニル、(C₂-C₆₀)アルキニル、シアノ、カルバゾリル、(C₁-C₆₀)アルキルアミノ、(C₆-C₆₀)アリールアミノ、(C₆-C₆₀)アリール(C₁-C₆₀)アルキル、(C₁-C₆₀)アルキル(C₆-C₆₀)アリール、(C₁

40

50

- C 6 0) アルキルオキシ、(C 1 - C 6 0) アルキルチオ、(C 6 - C 6 0) アリールオキシ、(C 6 - C 6 0) アリールチオ、(C 1 - C 6 0) アルコキシカルボニル、(C 1 - C 6 0) アルキルカルボニル、(C 6 - C 6 0) アリールカルボニル、カルボキシル、ニトロおよびヒドロキシルからなる群から選択される 1 以上の置換基がさらに置換可能であり；

m は、1 ~ 3 の整数である) ；

【化 6】



10

(化学式 2 及び化学式 3 において、

X は (C 6 - C 6 0) アリーレンまたは (C 4 - C 6 0) ヘテロアリーレンであり；

Y はアントラセニレンであり；

Ar_{11} 乃至 Ar_{14} は、互いに独立して、水素、重水素、(C 1 - C 6 0) アルキル、(C 1 - C 6 0) アルコキシ、ハロゲン、N、O および S から選択される 1 以上のヘテロ原子を含む (C 4 - C 6 0) ヘテロアリール、(C 5 - C 6 0) シクロアルキルまたは (C 6 - C 6 0) アリールであり、前記 Ar_{11} 乃至 Ar_{14} のシクロアルキル、アリールまたはヘテロアリールには、ハロゲン置換基を有するもしくは有しない (C 1 - C 6 0) アルキル、(C 1 - C 6 0) アルコキシ、(C 3 - C 6 0) シクロアルキル、重水素、ハロゲン、シアノ、トリ (C 1 - C 6 0) アルキルシリル、ジ (C 1 - C 6 0) アルキル (C 6 - C 6 0) アリールシリルおよびトリ (C 6 - C 6 0) アリールシリルからなる群から選択される 1 以上の置換基を有するもしくは有しない (C 6 - C 6 0) アリール、N、O および S から選択される 1 以上のヘテロ原子を含む (C 4 - C 6 0) ヘテロアリール、ハロゲン置換基を有するもしくは有しない (C 1 - C 6 0) アルキル、(C 1 - C 6 0) アルコキシ、(C 3 - C 6 0) シクロアルキル、重水素、ハロゲン、シアノ、トリ (C 1 - C 6 0) アルキルシリル、ジ (C 1 - C 6 0) アルキル (C 6 - C 6 0) アリールシリルおよびトリ (C 6 - C 6 0) アリールシリルからなる群から選択される 1 以上の置換基がさらに置換可能であり；

20

a、b、c 及び d は、互いに独立して、0 ~ 4 の整数である) 。

30

【請求項 4】

有機層が、アリールアミン系化合物およびスチリルアリールアミン系化合物からなる群から選択される 1 種以上の化合物を含む、請求項 3 に記載の有機電界発光素子。

【請求項 5】

有機層が、第 1 族、第 2 族、第 4 周期、第 5 周期遷移金属、ランタン系列金属、及び d - 遷移元素の有機金属からなる群から選択される 1 種以上の金属をさらに含む、請求項 3 に記載の有機電界発光素子。

【請求項 6】

有機層が電界発光層および電荷生成層を含む、請求項 3 に記載の有機電界発光素子。

【請求項 7】

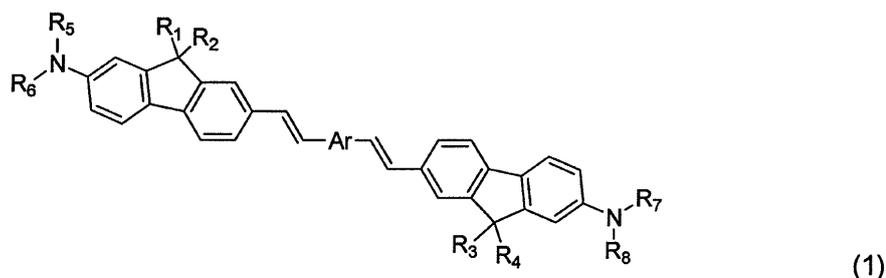
電極の対のうち的一方または両方の電極の内側表面に、還元性ドーパントと有機物質との混合領域、または酸化性ドーパントと有機物質との混合領域を配置している、請求項 3 に記載の有機電界発光素子。

40

【請求項 8】

下記化学式 1 で表される有機電界発光化合物を含む有機太陽電池；

【化7】

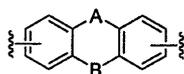


(化学式1において、

10

Arは、(C6-C60)アリーレン、(C3-C60)ヘテロアリーレン、N、OおよびSから選択される1以上のヘテロ原子を含む5員もしくは6員のヘテロシクロアルキレン、(C3-C60)シクロアルキレン、アダマンチレン、(C7-C60)ピシクロアルキレン、(C2-C60)アルケニレン、(C2-C60)アルキニレン、(C1-C60)アルキレンチオ、(C1-C60)アルキレンオキシ、(C6-C60)アリーレンオキシ、(C6-C60)アリーレンチオ、または

【化8】



20

であり；

A及びBは、互いに独立して、化学結合、-(CR₁₁)(R₁₂)_m-、-N(R₁₃)-、-S-、-O-、-Si(R₁₄)(R₁₅)-、-P(R₁₆)-、-C(=O)-、-B(R₁₇)-、-In(R₁₈)-、-Se-、-Ge(R₁₉)(R₂₀)-、-Sn(R₂₁)(R₂₂)-、-Ga(R₂₃)-または-(R₂₄)C=C(R₂₅)-であり、但し、A及びBが同時に化学結合である場合を除く；

30

R₁乃至R₈は、互いに独立して、水素、重水素、ハロゲン、(C1-C60)アルキル、(C6-C60)アリール、N、OおよびSから選択される1以上のヘテロ原子を含む(C3-C60)ヘテロアリール、モルホリノ、チオモルホリノ、N、OおよびSから選択される1以上のヘテロ原子を含む5員もしくは6員のヘテロシクロアルキル、(C3-C60)シクロアルキル、トリ(C1-C60)アルキルシリル、ジ(C1-C60)アルキル(C6-C60)アリールシリル、トリ(C6-C60)アリールシリル、アダマンチル、(C7-C60)ピシクロアルキル、(C2-C60)アルケニル、(C2-C60)アルキニル、シアノ、(C1-C60)アルキルアミノ、(C6-C60)アリールアミノ、(C6-C60)アリール(C1-C60)アルキル、(C1-C60)アルキルオキシ、(C1-C60)アルキルチオ、(C6-C60)アリールオキシ、(C6-C60)アリールチオ、(C1-C60)アルコキシカルボニル、(C1-C60)アルキルカルボニル、(C6-C60)アリールカルボニル、カルボキシル、ニトロもしくはヒドロキシルであるか、またはR₁とR₂、R₃とR₄、R₅とR₆、及びR₇とR₈は、縮合環を含むかもしくは含まない(C3-C60)アルキレンもしくは(C3-C

40

60)アルケニレンで連結されて、脂環式環、または単環式もしくは多環式芳香族環を形成することができ；

R₁₁乃至R₂₅は、互いに独立して、水素、重水素、ハロゲン、(C1-C60)アルキル、(C6-C60)アリール、N、OおよびSから選択される1以上のヘテロ原子を含む(C3-C60)ヘテロアリール、モルホリノ、チオモルホリノ、N、OおよびSから選択される1以上のヘテロ原子を含む5員もしくは6員のヘテロシクロアルキル、(C3-C60)シクロアルキル、トリ(C1-C60)アルキルシリル、ジ(C1-C60)アルキル(C6-C60)アリールシリル、トリ(C6-C60)アリールシリル、アダマンチル、(C7-C60)ピシクロアルキル、(C2-C60)アルケニル、(C2-C60)アルキニル、シアノ、(C1-C60)アルキルアミノ、(C6-C60)

50

アリールアミノ、(C6 - C60)アリール(C1 - C60)アルキル、(C1 - C60)アルキルオキシ、(C1 - C60)アルキルチオ、(C6 - C60)アリールオキシ、(C6 - C60)アリールチオ、(C1 - C60)アルコキシカルボニル、(C1 - C60)アルキルカルボニル、(C6 - C60)アリールカルボニル、カルボキシル、ニトロもしくはヒドロキシルであるか、またはR₁₁とR₁₂、R₁₄とR₁₅、R₁₉とR₂₀、R₂₁とR₂₂、及びR₂₄とR₂₅は、縮合環を含むかもしくは含まない(C3 - C60)アルキレンもしくは(C3 - C60)アルケニレンで連結されて、脂環式環、または単環式もしくは多環式芳香族環を形成することができ；

前記Arのアリーレン、ヘテロアリーレン、ヘテロシクロアルキレン、シクロアルキレン、アダマンチレン、ピシクロアルキレン、アルケニレン、アルキレンチオ、アルキレンオキシ、アリーレンオキシまたはアリーレンチオ、並びに前記R₁乃至R₈、およびR₁₁乃至R₂₅のアルキル、アリール、ヘテロアリール、ヘテロシクロアルキル、シクロアルキル、トリアルキルシリル、ジアルキルアリールシリル、トリアリールシリル、アダマンチル、ピシクロアルキル、アルケニル、アルアルキル、アルキルオキシ、アルキルチオ、アリールオキシ、アリールチオ、アルキルアミノ、アリールアミノ、アルコキシカルボニル、アルキルカルボニルもしくはアリールカルボニルには、重水素、ハロゲン、ハロゲン置換基を有するもしくは有しない(C1 - C60)アルキル、(C6 - C60)アリール、(C6 - C60)アリール置換基を有するもしくは有しないN、OおよびSから選択される1以上のヘテロ原子を含む(C3 - C60)ヘテロアリール、モルホリノ、チオモルホリノ、N、OおよびSから選択される1以上のヘテロ原子を含む5員もしくは6員のヘテロシクロアルキル、(C3 - C60)シクロアルキル、トリ(C1 - C60)アルキルシリル、ジ(C1 - C60)アルキル(C6 - C60)アリールシリル、トリ(C6 - C60)アリールシリル、アダマンチル、(C7 - C60)ピシクロアルキル、(C2 - C60)アルケニル、(C2 - C60)アルキニル、シアノ、カルバゾリル、(C1 - C60)アルキルアミノ、(C6 - C60)アリールアミノ、(C6 - C60)アリール(C1 - C60)アルキル、(C1 - C60)アルキル(C6 - C60)アリール、(C1 - C60)アルキルオキシ、(C1 - C60)アルキルチオ、(C6 - C60)アリールオキシ、(C6 - C60)アリールチオ、(C1 - C60)アルコキシカルボニル、(C1 - C60)アルキルカルボニル、(C6 - C60)アリールカルボニル、カルボキシル、ニトロおよびヒドロキシルからなる群から選択される1以上の置換基がさらに置換可能であり；

mは、1～3の整数である)。

【発明の詳細な説明】

【技術分野】

【0001】

本発明は、新規な有機電界発光(organic electroluminescence)化合物及びこれを電界発光層に使用する有機電界発光素子に関する。より具体的には、本発明は、青色発光の電界発光物質として使用される新規の有機電界発光化合物及びこれをドーパントとして使用している有機電界発光素子(organic electroluminescent device)に関する。

【背景技術】

【0002】

表示素子の中で、電界発光(EL)素子は、自己電界発光型表示素子であって、視野角が広く、コントラストに優れ、応答速度が速いという長所を有する。1987年に、Eastman Kodak社は、電界発光物質として、低分子量の芳香族ジアミンとアルミニウム錯体を使用している有機EL素子を最初に開発した[Appl. Phys. Lett. 51, 913, 1987]。

【0003】

有機EL素子において、発光効率、寿命特性などの性能に影響を及ぼす最も重要な要因は電界発光物質である。この電界発光物質に求められるいくつかの要件には、固体状態で

10

20

30

40

50

の高い蛍光量子収率、電子と正孔の高い移動度、真空蒸着時の分解に対する耐性、均一な薄膜を形成する能力、および良好な安定性が挙げられる。

【0004】

有機電界発光物質は、おおまかに、高分子量物質と低分子量物質とに分けられる。低分子量物質は分子構造に応じて、金属錯化合物と金属を含まない純粋有機電界発光物質とに分類される。トリス(8-キノラト)アルミニウムなどのキレート錯体、クマリン誘導体、テトラフェニルプタジエン誘導体、ビススチリルアアリーレン誘導体、オキサジアゾール誘導体などが知られている。これらの物質を用いて、青色から赤色までの領域の電界発光が得られることができ、フルカラー表示素子の実現が期待されていると報告されている。

10

【0005】

青色蛍光物質の場合、出光興産のDPVBi(化合物a)以後、多くの物質が商業化されてきた。出光興産の青色物質系、およびKodak社のジナフチルアントラセン(化合物b)、およびテトラ(t-ブチル)ペリレン(化合物c)が知られているが、さらなる研究開発が必要である。今までで、出光興産のジスチリル(distyryl)化合物系が最良の効率を有することが知られている。それは、6 lm/Wの電力効率および30,000時間以上の駆動寿命を示す。しかし、色純度は時間と共に悪化し、フルカラーディスプレイに適用した場合、駆動寿命はわずか数千時間に過ぎない。

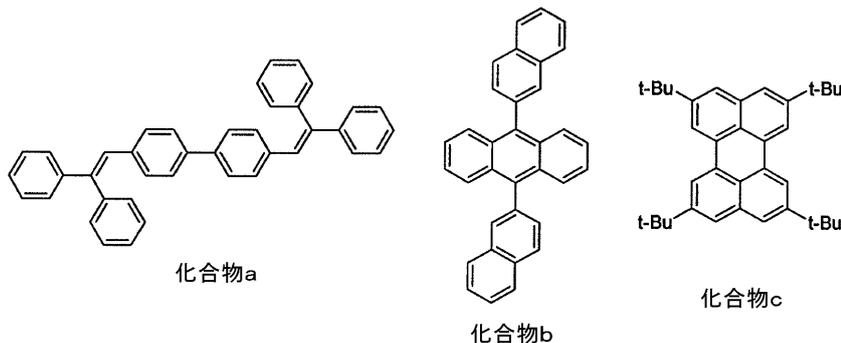
20

【0006】

一般に、青色電界発光は、電界発光波長が長波長側に少しだけ移動すると、発光効率の側面では有利である。しかし、純粋な青色が達成されないので、高品位のディスプレイには適用可能ではない。よって、色純度、効率及び熱安定性を向上させるための研究開発が切実に必要とされている。

【0007】

【化1】



30

【先行技術文献】

【非特許文献】

【0008】

【非特許文献1】Appl. Phys. Lett. 51, 913, 1987

【発明の概要】

40

【発明が解決しようとする課題】

【0009】

本発明者らは、優れた発光効率および画期的に改善された駆動寿命を有する電界発光素子を実現するための新規の電界発光化合物を発明した。

【0010】

一態様においては、上記の課題を解決するために、本発明は、既存のドーパント物質より優れた発光効率及び駆動寿命、並びに適切な色度座標を有する優れた骨格構造の有機電界発光化合物を提供する。他の態様においては、本発明は、前記有機電界発光化合物を電界発光物質として含む、高効率及び長い駆動寿命の有機電界発光素子を提供する。

【課題を解決するための手段】

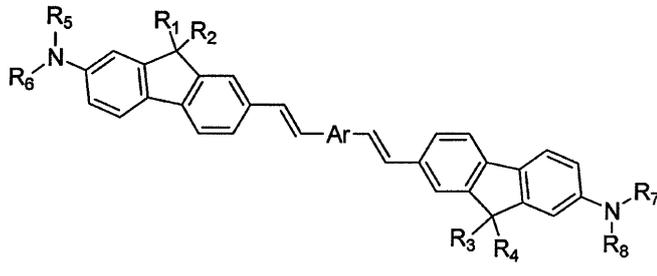
50

【0011】

本発明は、下記化学式1で表される有機電界発光化合物及びこれを含む有機電界発光素子に関する。本発明による有機電界発光化合物は、良好な発光効率、並びに優れた色純度及び寿命特性を有する。よって、それは非常に優れた駆動寿命を有するOLED素子を製造するために使用されうる。

【0012】

【化2】



(1)

10

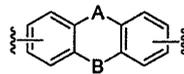
【0013】

(化学式1において、

Arは、(C6-C60)アリーレン、(C3-C60)ヘテロアリーレン、N、OおよびSから選択される1以上のヘテロ原子を含む5員もしくは6員のヘテロシクロアルキレン、(C3-C60)シクロアルキレン、アダマンチレン、(C7-C60)ビスシクロアルキレン、(C2-C60)アルケニレン、(C2-C60)アルキニレン、(C1-C60)アルキレンチオ、(C1-C60)アルキレンオキシ、(C6-C60)アリーレンオキシ、(C6-C60)アリーレンチオ、または

20

【化3】



であり；

A及びBは、互いに独立して、化学結合、 $-(CR_{11})(R_{12})_m-$ 、 $-N(R_3)-$ 、 $-S-$ 、 $-O-$ 、 $-Si(R_{14})(R_{15})-$ 、 $-P(R_{16})-$ 、 $-C(=O)-$ 、 $-B(R_{17})-$ 、 $-In(R_{18})-$ 、 $-Se-$ 、 $-Ge(R_{19})(R_{20})-$ 、 $-Sn(R_{21})(R_{22})-$ 、 $-Ga(R_{23})-$ または $-(R_{24})C=C(R_{25})-$ であり、但し、A及びBが同時に化学結合である場合を除く；

30

R_1 乃至 R_8 は、互いに独立して、水素、重水素、ハロゲン、(C1-C60)アルキル、(C6-C60)アリール、N、OおよびSから選択される1以上のヘテロ原子を含む(C3-C60)ヘテロアリール、モルホリノ、チオモルホリノ、N、OおよびSから選択される1以上のヘテロ原子を含む5員もしくは6員のヘテロシクロアルキル、(C3-C60)シクロアルキル、トリ(C1-C60)アルキルシリル、ジ(C1-C60)アルキル(C6-C60)アリールシリル、トリ(C6-C60)アリールシリル、アダマンチル、(C7-C60)ビスシクロアルキル、(C2-C60)アルケニル、(C2-C60)アルキニル、シアノ、(C1-C60)アルキルアミノ、(C6-C60)アリールアミノ、(C6-C60)アリール(C1-C60)アルキル、(C1-C60)アルキルオキシ、(C1-C60)アルキルチオ、(C6-C60)アリールオキシ、(C6-C60)アリールチオ、(C1-C60)アルコキシカルボニル、(C1-C60)アルキルカルボニル、(C6-C60)アリールカルボニル、カルボキシル、ニトロもしくはヒドロキシルであるか、または R_1 と R_2 、 R_3 と R_4 、 R_5 と R_6 、及び R_7 と R_8 は、縮合環を含むかもしくは含まない(C3-C60)アルキレンもしくは(C3-C60)アルケニレンで連結されて、脂環式環、または単環式もしくは多環式芳香族環を形成することができ；

40

R_{11} 乃至 R_{25} は、互いに独立して、水素、重水素、ハロゲン、(C1-C60)ア

50

ルキル、(C₆ - C₆₀)アリアル、N、OおよびSから選択される1以上のヘテロ原子を含む(C₃ - C₆₀)ヘテロアリアル、モルホリノ、チオモルホリノ、N、OおよびSから選択される1以上のヘテロ原子を含む5員もしくは6員のヘテロシクロアルキル、(C₃ - C₆₀)シクロアルキル、トリ(C₁ - C₆₀)アルキルシリル、ジ(C₁ - C₆₀)アルキル(C₆ - C₆₀)アリアルシリル、トリ(C₆ - C₆₀)アリアルシリル、アダマンチル、(C₇ - C₆₀)ピシクロアルキル、(C₂ - C₆₀)アルケニル、(C₂ - C₆₀)アルキニル、シアノ、(C₁ - C₆₀)アルキルアミノ、(C₆ - C₆₀)アリアルアミノ、(C₆ - C₆₀)アリアル(C₁ - C₆₀)アルキル、(C₁ - C₆₀)アルキルオキシ、(C₁ - C₆₀)アルキルチオ、(C₆ - C₆₀)アリアルオキシ、(C₆ - C₆₀)アリアルチオ、(C₁ - C₆₀)アルコキシカルボニル、(C₁ - C₆₀)アルキルカルボニル、(C₆ - C₆₀)アリアルカルボニル、カルボキシル、ニトロもしくはヒドロキシルであるか、またはR₁₁とR₁₂、R₁₄とR₁₅、R₁₉とR₂₀、R₂₁とR₂₂、及びR₂₄とR₂₅は、縮合環を含むかもしくは含まない(C₃ - C₆₀)アルキレンもしくは(C₃ - C₆₀)アルケニレンで連結されて、脂環式環、または単環式もしくは多環式芳香族環を形成することができ；

前記Arのアリレン、ヘテロアリレン、ヘテロシクロアルキレン、シクロアルキレン、アダマンチレン、ピシクロアルキレン、アルケニレン、アルキレンチオ、アルキレンオキシ、アリレンオキシまたはアリレンチオ、並びに前記R₁乃至R₈、およびR₁₁乃至R₂₅のアルキル、アリアル、ヘテロアリアル、ヘテロシクロアルキル、シクロアルキル、トリアルキルシリル、ジアルキルアリアルシリル、トリアリアルシリル、アダマンチル、ピシクロアルキル、アルケニル、アルアルキル、アルキルオキシ、アルキルチオ、アリアルオキシ、アリアルチオ、アルキルアミノ、アリアルアミノ、アルコキシカルボニル、アルキルカルボニルもしくはアリアルカルボニルには、重水素、ハロゲン、ハロゲン置換基を有するもしくは有しない(C₁ - C₆₀)アルキル、(C₆ - C₆₀)アリアル、(C₆ - C₆₀)アリアル置換基を有するもしくは有しないN、OおよびSから選択される1以上のヘテロ原子を含む(C₃ - C₆₀)ヘテロアリアル、モルホリノ、チオモルホリノ、N、OおよびSから選択される1以上のヘテロ原子を含む5員もしくは6員のヘテロシクロアルキル、(C₃ - C₆₀)シクロアルキル、トリ(C₁ - C₆₀)アルキルシリル、ジ(C₁ - C₆₀)アルキル(C₆ - C₆₀)アリアルシリル、トリ(C₆ - C₆₀)アリアルシリル、アダマンチル、(C₇ - C₆₀)ピシクロアルキル、(C₂ - C₆₀)アルケニル、(C₂ - C₆₀)アルキニル、シアノ、カルバゾリル、(C₁ - C₆₀)アルキルアミノ、(C₆ - C₆₀)アリアルアミノ、(C₆ - C₆₀)アリアル(C₁ - C₆₀)アルキル、(C₁ - C₆₀)アルキル(C₆ - C₆₀)アリアル、(C₁ - C₆₀)アルキルオキシ、(C₁ - C₆₀)アルキルチオ、(C₆ - C₆₀)アリアルオキシ、(C₆ - C₆₀)アリアルチオ、(C₁ - C₆₀)アルコキシカルボニル、(C₁ - C₆₀)アルキルカルボニル、(C₆ - C₆₀)アリアルカルボニル、カルボキシル、ニトロおよびヒドロキシルからなる群から選択される1以上の置換基がさらに置換可能であり；

mは、1～3の整数である)。

【図面の簡単な説明】

【0014】

【図1】図1はOLED素子の断面図である。

【発明を実施するための形態】

【0015】

開示された例示的な実施形態の上記および他の態様、特徴および利点は伴われる図面と共に、次の詳細な記載からより明らかになるであろう。

ここで、代表的な実施形態が、以降、代表的な実施形態が示されている添付の図面を参照して、より十分に説明されるであろう。しかし、この開示は、多くの異なる形態に具体化されることができるが、そこで説明される代表的な実施形態に限定されるように解釈されるべきではない。むしろ、この開示が詳細かつ完全であり、かつ当業者にこの開示の範

10

20

30

40

50

囲を十分に伝達するであろうように、これらの代表的な実施形態が提供される。本記載においては、提示される実施形態を不必要に曖昧にするのを回避するために、周知の特徴および技術の詳細は省略されうる。

ここで使用される用語は特定の実施形態を記載する目的のためであり、この開示が限定されるのを意図しない。用語「第1」、「第2」などの使用は特定の順序を意味せず、それらは個々の要素を特定するために含まれる。さらに、第1、第2などの用語の使用は、順序または重要性を示さず、むしろその第1、第2などの用語はある要素を他の要素から区別するために使用される。用語「含む」は、この明細書において使用される場合に、示される特徴、領域、整数、工程、操作、元素および/または成分の存在を特定するが、1以上の他の特徴、領域、整数、工程、操作、元素、成分および/またはそれらのグループの存在または追加を除外しない。

他に特定されない限りは、ここで使用される全ての用語（技術的および科学的用語を含む）は当業者に一般に理解されるのと同じ意味を有する。一般に使用される辞書で定義される用語のような用語は、関連する技術および本開示の文脈におけるその意味と一致する意味を有するとして解釈されるべきであり、ここで明確にそのように定義されない限りは理想的なまたは非常にフォーマルな感覚で解釈されないであろうことがさらに理解される。

【0016】

本発明において、「アルキル」、「アルコキシ」及びその他の「アルキル」部分を含む置換基は、直鎖または分岐鎖であり得る。

本発明において、「アリール」は、一つの水素除去により芳香族炭化水素から誘導された有機基を意味し、4～7員、特に5～6員の単一環または縮合環が挙げられうる。具体的な例には、フェニル、ナフチル、ピフェニル、アントリル、インデニル、フルオレニル、フェナントリル、トリフェニレニル、ピレニル、ペリレニル、クリセニル、ナフタセニル、フルオランテニルなどが挙げられるが、これらに限定されない。

【0017】

本発明において、「ヘテロアリール」は、芳香族環骨格原子としてN、O及びSから選択される1～4個のヘテロ原子を含み、他の残りの芳香族環骨格原子が炭素であるアリール基を意味する。ヘテロアリールは5員もしくは6員単環式ヘテロアリール、またはベンゼン環との縮合から得られる多環式ヘテロアリールであることができ、部分的に飽和されてもよい。ヘテロアリールには、環内のヘテロ原子が酸化されるか第4級化されて、例えば、N-オキシドまたは第4級塩を形成できる2価アリール基が挙げられる。具体的な例としては、フリル、チオフエニル、ピロリル、イミダゾリル、ピラゾリル、チアゾリル、チアジアゾリル、イソチアゾリル、イソオキサゾリル、オキサゾリル、オキサジアゾリル、トリアジニル、テトラジニル、トリアゾリル、テトラゾリル、フラザニル、ピリジル、ピラジニル、ピリミジニル、ピリダジニルなどの単環式ヘテロアリール、ベンゾフラニル、ベンゾチオフエニル、イソベンゾフラニル、ベンゾイミダゾリル、ベンゾチアゾリル、ベンゾイソチアゾリル、ベンゾイソオキサゾリル、ベンゾオキサゾリル、イソインドリル、インドリル、インダゾリル、ベンゾチアジアゾリル、キノリル、イソキノリル、シンノリニル、キナゾリニル、キノキサリニル、カルバゾリル、フェナントリジニル、ベンゾジオキサリルなどの多環式ヘテロアリール、これらのN-オキシド（例えば、ピリジルN-オキシド、キノリルN-オキシドなど）、これらの第4級塩などが挙げられるが、これらに限定されるものではない。

【0018】

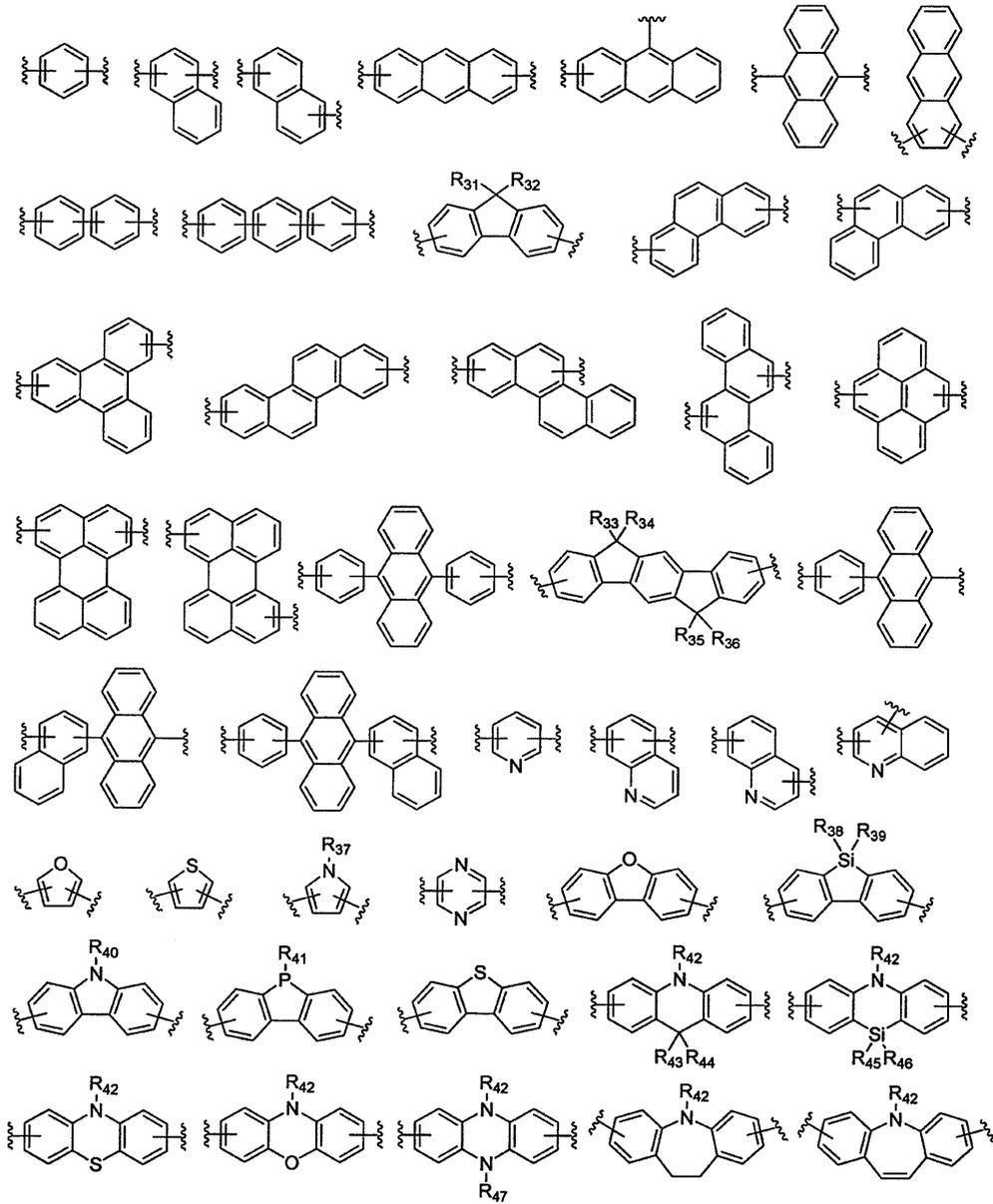
また、本発明において、「(C1-C60)アルキル」部分を含む置換基は、1～60個の炭素原子を有してもよく、1～20個の炭素原子を有してもよく、または1～10個の炭素原子を有してもよい。「(C6-C60)アリール」部分を含む置換基は、6～60個の炭素原子を有してもよく、6～20個の炭素原子を有してもよく、または6～12個の炭素原子を有してもよい。「(C3-C60)ヘテロアリール」部分を含む置換基は、3～60個の炭素原子を有してもよく、4～20個の炭素原子を有してもよく、または

4 ~ 12 個の炭素原子を有してもよい。「(C3 - C60)シクロアルキル」部分を含む置換基は、3 ~ 60 個の炭素原子を有してもよく、3 ~ 20 個の炭素原子を有してもよく、または3 ~ 7 個の炭素原子を有してもよい。「(C2 - C60)アルケニルもしくはアルキニル」部分を含む置換基は、2 ~ 60 個の炭素原子を有してもよく、2 ~ 20 個の炭素原子を有してもよく、または2 ~ 10 個の炭素原子を有してもよい。

【0019】

Ar は、下記構造から選択されるが、これらに限定されるものではない：

【化4】



10

20

30

40

【0020】

(式中、R₃₁乃至R₄₂は、互いに独立して、水素、重水素、ハロゲン、(C1 - C60)アルキル、(C6 - C60)アリール、N、OおよびSから選択される1以上のヘテロ原子を含む(C3 - C60)ヘテロアリール、モルホリノ、チオモルホリノ、N、OおよびSから選択される1以上のヘテロ原子を含む5員もしくは6員のヘテロシクロアルキル、(C3 - C60)シクロアルキル、トリ(C1 - C60)アルキルシリル、ジ(C1 - C60)アルキル(C6 - C60)アリールシリル、トリ(C6 - C60)アリールシリル、アダマンチル、(C7 - C60)ビスシクロアルキル、(C2 - C60)アルケニル、(C2 - C60)アルキニル、シアノ、(C1 - C60)アルキルアミノ、(C6 - C60)アリールアミノ、(C6 - C60)アリール(C1 - C60)アルキル、(C1

50

- C 6 0) アルキルオキシ、(C 1 - C 6 0) アルキルチオ、(C 6 - C 6 0) アリールオキシ、(C 6 - C 6 0) アリールチオ、(C 1 - C 6 0) アルコキシカルボニル、(C 1 - C 6 0) アルキルカルボニル、(C 6 - C 6 0) アリールカルボニル、カルボキシル、ニトロもしくはヒドロキシルであるか、または R_{3 1} と R_{3 2}、R_{3 3} と R_{3 4}、R_{3 5} と R_{3 6}、R_{3 8} と R_{3 9}、R_{4 3} と R_{4 4} 及び R_{4 5} と R_{4 6} は、縮合環を含むかもしくは含まない (C 3 - C 6 0) アルキレンもしくは (C 3 - C 6 0) アルケニレンで連結されて、脂環式環、または単環式もしくは多環式芳香族環を形成することができ；

前記 R_{3 1} 乃至 R_{4 2} のアルキル、アリール、ヘテロアリール、ヘテロシクロアルキル、シクロアルキル、トリアルキルシリル、ジアルキルアリールシリル、トリアリールシリル、アダマンチル、ビスシクロアルキル、アルケニル、アルアルキル、アルキルオキシ、アルキルチオ、アリールオキシ、アリールチオ、アルキルアミノ、アリールアミノ、アルコキシカルボニル、アルキルカルボニルまたはアリールカルボニルには、重水素、ハロゲン、ハロゲン置換基を有するもしくは有しない (C 1 - C 6 0) アルキル、(C 6 - C 6 0) アリール、(C 6 - C 6 0) アリール置換基を有するもしくは有しない N、O および S から選択される 1 以上のヘテロ原子を含む (C 3 - C 6 0) ヘテロアリール、モルホリノ、チオモルホリノ、N、O および S から選択される 1 以上のヘテロ原子を含む 5 員もしくは 6 員のヘテロシクロアルキル、(C 3 - C 6 0) シクロアルキル、トリ (C 1 - C 6 0) アルキルシリル、ジ (C 1 - C 6 0) アルキル (C 6 - C 6 0) アリールシリル、トリ (C 6 - C 6 0) アリールシリル、アダマンチル、(C 7 - C 6 0) ビシクロアルキル、(C 2 - C 6 0) アルケニル、(C 2 - C 6 0) アルキニル、シアノ、カルバゾリル、(C 1 - C 6 0) アルキルアミノ、(C 6 - C 6 0) アリールアミノ、(C 6 - C 6 0) アリール (C 1 - C 6 0) アルキル、(C 1 - C 6 0) アルキル (C 6 - C 6 0) アリール、(C 1 - C 6 0) アルキルオキシ、(C 1 - C 6 0) アルキルチオ、(C 6 - C 6 0) アリールオキシ、(C 6 - C 6 0) アリールチオ、(C 1 - C 6 0) アルコキシカルボニル、(C 1 - C 6 0) アルキルカルボニル、(C 6 - C 6 0) アリールカルボニル、カルボキシル、ニトロおよびヒドロキシルからなる群から選択される 1 以上の置換基がさらに置換可能である)。

【 0 0 2 1 】

より具体的に、A r は下記構造で例示されうるが、これらに限定されるものではない：

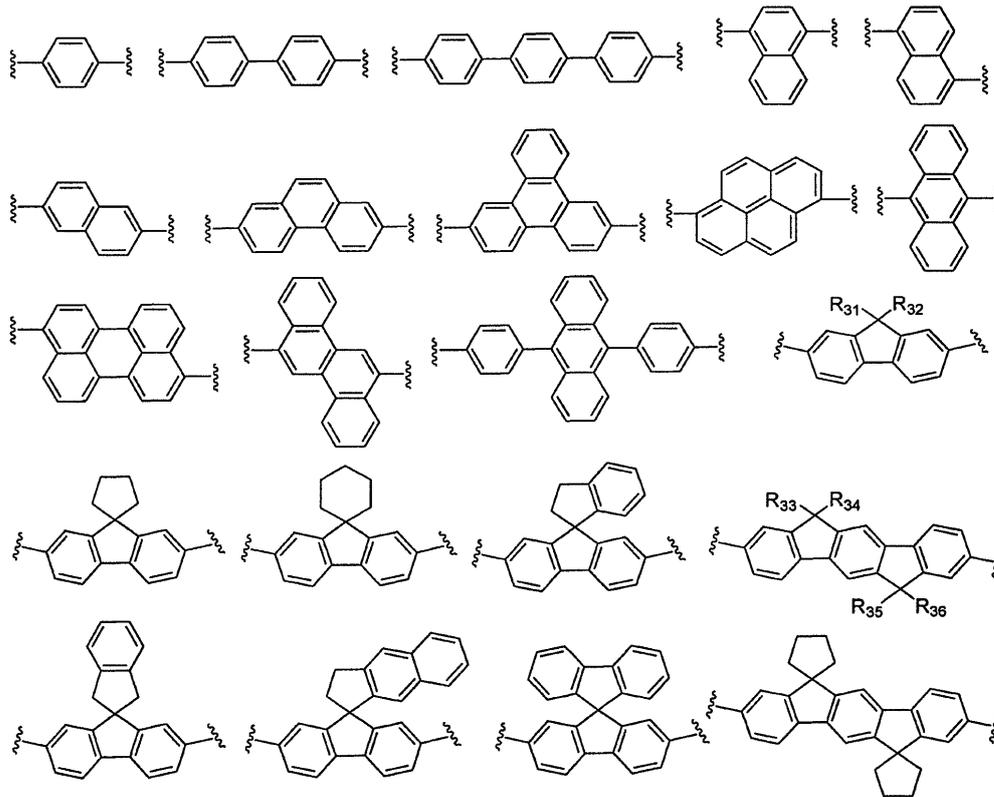
【 0 0 2 2 】

10

20

30

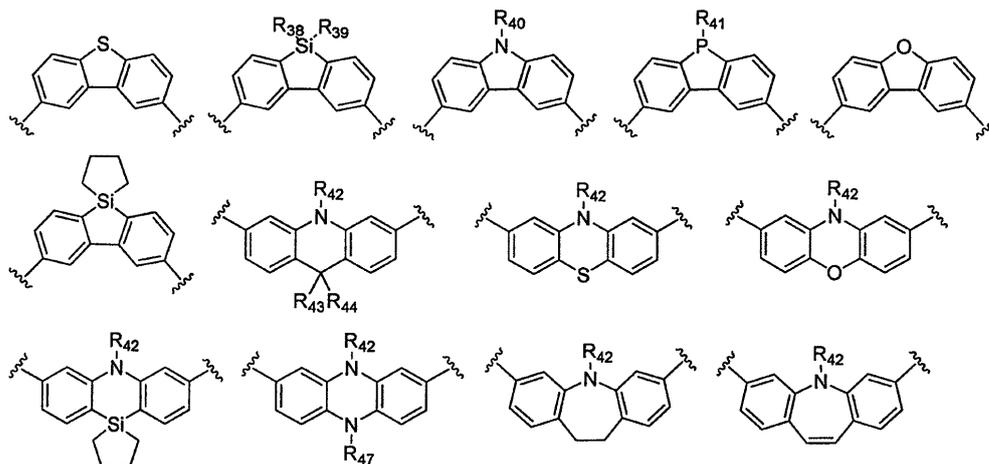
【化5】



10

20

【化6】



30

【0023】

(式中、 R_{31} 、 R_{32} 、 R_{33} 、 R_{34} 、 R_{35} 、 R_{36} 、 R_{38} 、 R_{39} 、 R_{40} 、 R_{41} 、 R_{42} 、 R_{43} 、 R_{44} 及び R_{47} は、互いに独立して、水素、重水素、メチル、エチル、*n*-プロピル、*i*-プロピル、*n*-ブチル、*i*-ブチル、*t*-ブチル、*n*-ペンチル、*i*-ペンチル、*n*-ヘキシル、*n*-ヘプチル、*n*-オクチル、2-エチルヘキシル、*n*-ノニル、デシル、ドデシル、ヘキサデシル、ベンジル、トリフルオロメチル、ペルフルオロエチル、トリフルオロエチル、ペルフルオロプロピル、ペルフルオロブチル、メトキシ、エトキシ、*n*-プロポキシ、*i*-プロポキシ、*n*-ブトキシ、*i*-ブトキシ、*t*-ブトキシ、*n*-ペントキシ、*i*-ペントキシ、*n*-ヘキシルオキシ、*n*-ペプトキシ、トリメチルシリル、トリエチルシリル、トリプロピルシリル、トリ(*t*-ブチル)シリル、*t*-ブチルジメチルシリル、ジメチルフェニルシリル、トリフェニルシリル、シクロプロピル、シクロブチル、シクロペンチル、シクロヘキシル、シクロヘプチル、シクロオクチル、シクロノニル、シクロデシル、フェニル、ナフチル、ビフェニル、9,9-ジ

40

50

メチルフルオレニル、9,9-ジフェニルフルオレニル、フェナントリル、アントリル、フルオランテニル、トリフェニレニル、ピレニル、クリセニル、ナフタセニル、ペリレニル、モルホリノ、チオモルホリノ、アダマンチル、ビシクロ[2.2.1]ヘプチル、ビシクロ[2.2.2]オクチル、ビシクロ[3.2.1]オクチル、ビシクロ[5.2.0]ノニル、ビシクロ[4.2.2]デシル、ビシクロ[2.2.2]オクチル、4-ペンチルビシクロ[2.2.2]オクチル、エテニル、フェニルエテニル、エチニル、フェニルエチニル、シアノ、ジメチルアミノ、ジフェニルアミノ、モノメチルアミノ、モノフェニルアミノ、フェニルオキシ、フェニルチオ、メトキシカルボニル、エトキシカルボニル、*t*-ブトキシカルボニル、カルボキシル、ニトロ、クロロ、フルオロまたはヒドロキシルである)。

10

【0024】

より具体的には、 R_1 乃至 R_4 は、互いに独立して、水素、重水素、メチル、エチル、*n*-プロピル、*i*-プロピル、*n*-ブチル、*i*-ブチル、*t*-ブチル、*n*-ペンチル、*i*-ペンチル、*n*-ヘキシル、*n*-ヘプチル、*n*-オクチル、2-エチルヘキシル、*n*-ノニル、デシル、ドデシル、ヘキサデシル、ベンジル、トリフルオロメチル、ペルフルオロエチル、トリフルオロエチル、ペルフルオロプロピル、ペルフルオロブチル、メトキシ、エトキシ、*n*-プロポキシ、*i*-プロポキシ、*n*-ブトキシ、*i*-ブトキシ、*t*-ブトキシ、*n*-ペントキシ、*i*-ペントキシ、*n*-ヘキシルオキシ、*n*-ペプトキシ、トリメチルシリル、トリエチルシリル、トリプロピルシリル、トリ(*t*-ブチル)シリル、*t*-ブチルジメチルシリル、ジメチルフェニルシリル、トリフェニルシリル、シクロプロピル、シクロブチル、シクロペンチル、シクロヘキシル、シクロヘプチル、シクロオクチル、シクロノニル、シクロデシル、フェニル、ナフチル、ビフェニル、9,9-ジメチルフルオレニル、9,9-ジフェニルフルオレニル、フェナントリル、アントリル、フルオランテニル、トリフェニレニル、ピレニル、クリセニル、ナフタセニル、ペリレニル、モルホリノ、チオモルホリノ、アダマンチル、ビシクロ[2.2.1]ヘプチル、ビシクロ[2.2.2]オクチル、ビシクロ[3.2.1]オクチル、ビシクロ[5.2.0]ノニル、ビシクロ[4.2.2]デシル、ビシクロ[2.2.2]オクチル、4-ペンチルビシクロ[2.2.2]オクチル、エテニル、フェニルエテニル、エチニル、フェニルエチニル、シアノ、ジメチルアミノ、ジフェニルアミノ、モノメチルアミノ、モノフェニルアミノ、フェニルオキシ、フェニルチオ、メトキシカルボニル、エトキシカルボニル、*t*-ブトキシカルボニル、カルボキシル、ニトロ、クロロ、フルオロおよびヒドロキシルから選択されて；

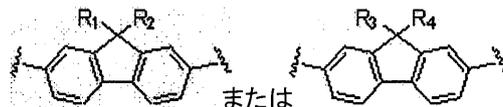
20

30

R_1 と R_2 または R_3 と R_4 は、縮合環を含むかもしくは含まない(C3-C60)アルキレンもしくは(C3-C60)アルケニレンで連結されて、脂環式環、または単環式もしくは多環式芳香族環を形成することができる。

【0025】

【化7】

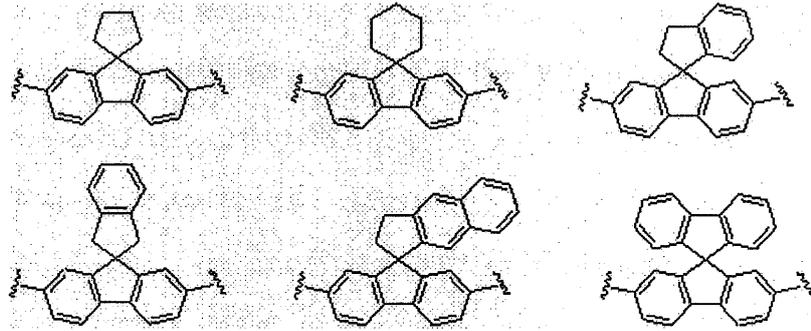


40

の R_1 と R_2 または R_3 と R_4 が縮合環を含むかもしくは含まないアルキレンもしくはアルケニレンで連結されて形成された脂環式環、または単環式もしくは多環式芳香族環は下記構造

【0026】

【化 8】



10

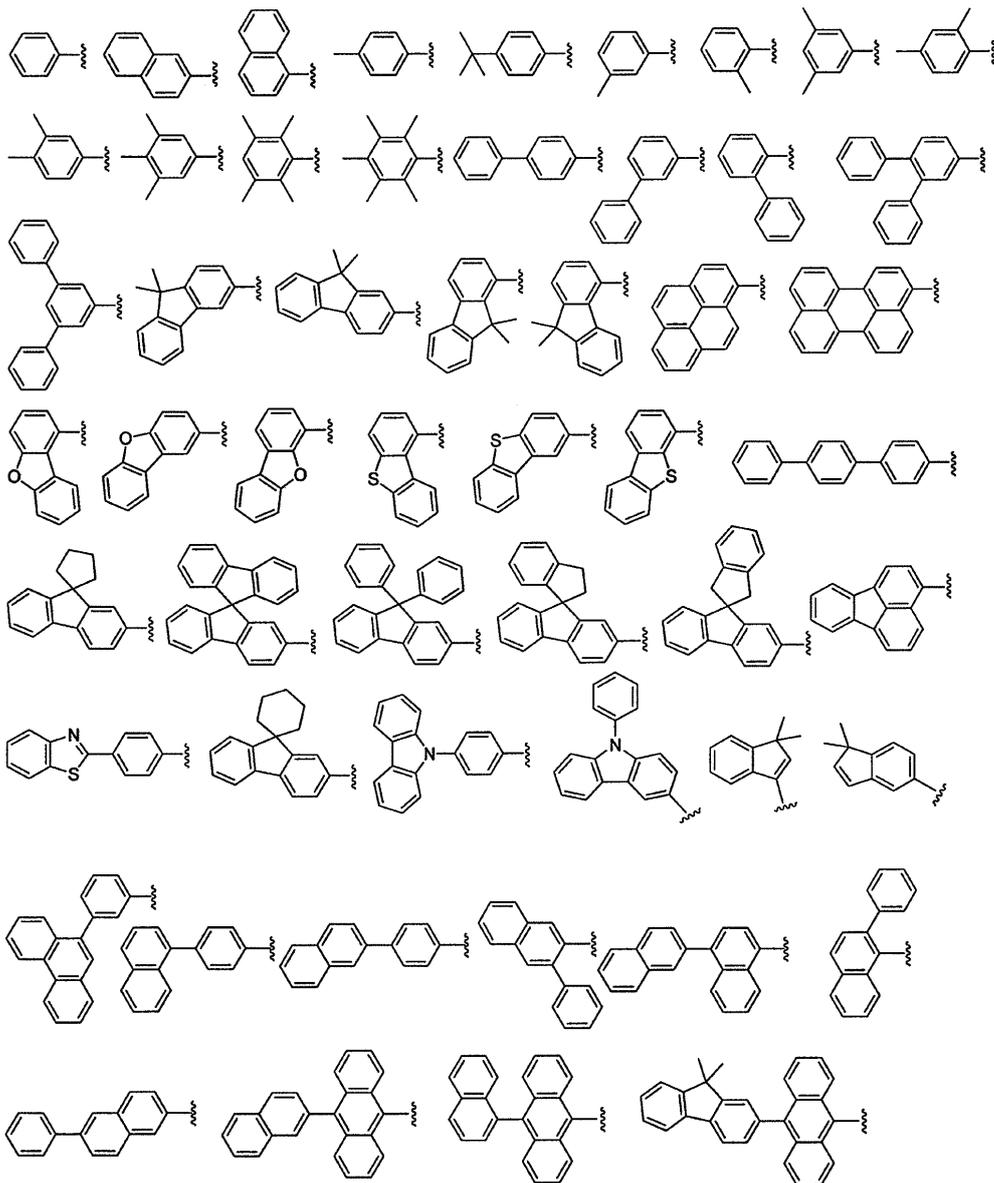
から選択される。

【0027】

具体的に、R₅乃至R₈は、互いに独立して下記構造で例示されうが、これらに限定されるものではない：

【0028】

【化 9】

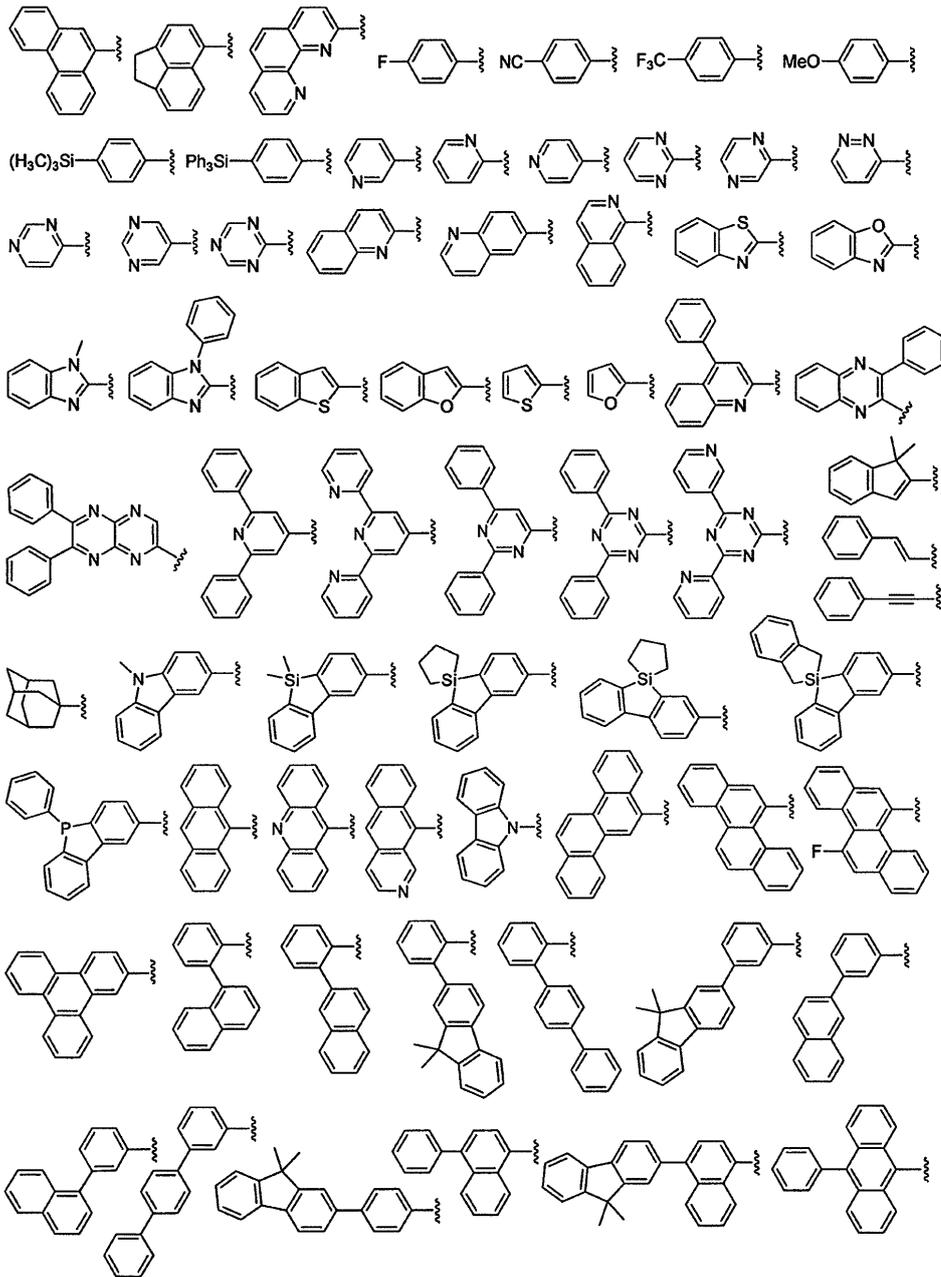


20

30

40

【化 1 0】

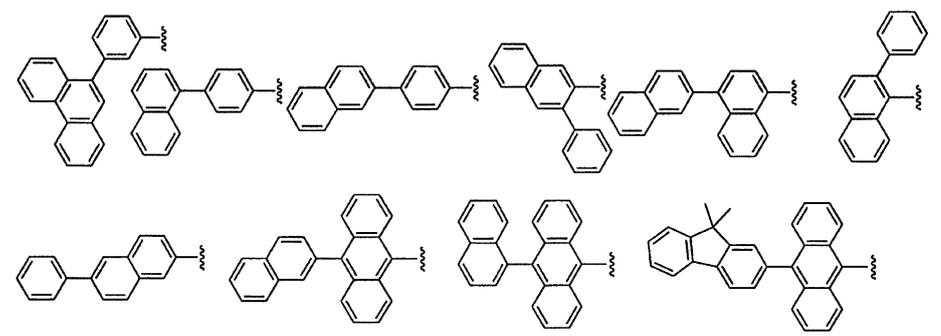


10

20

30

【化 1 1】



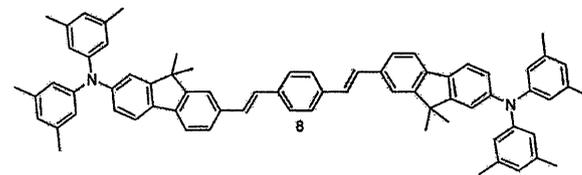
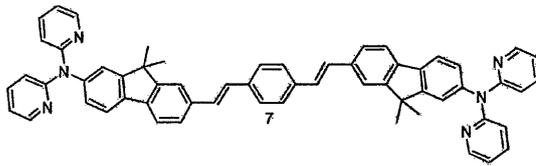
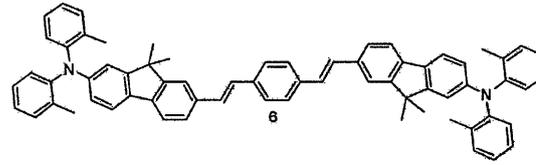
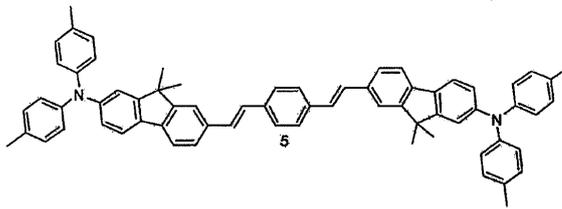
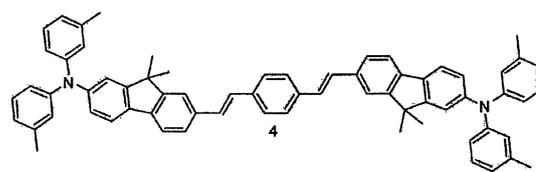
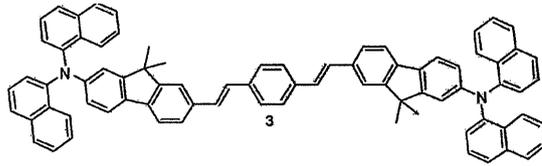
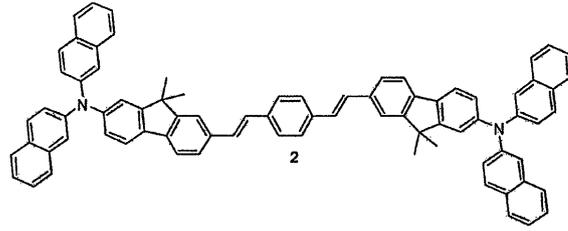
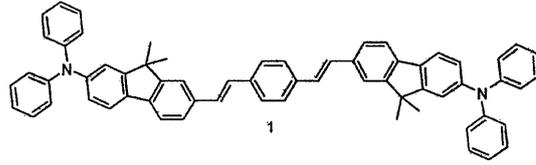
40

【 0 0 2 9】

本発明による有機電界発光化合物は、より具体的に下記の化合物で例示できるが、これらに限定されるものではない：

【 0 0 3 0】

【化 1 2】



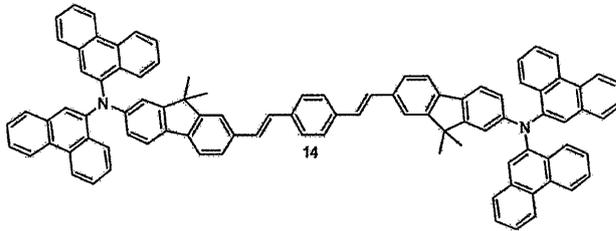
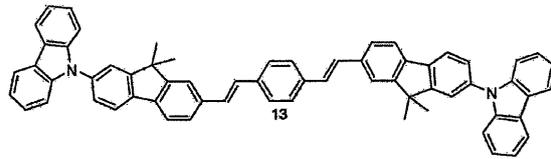
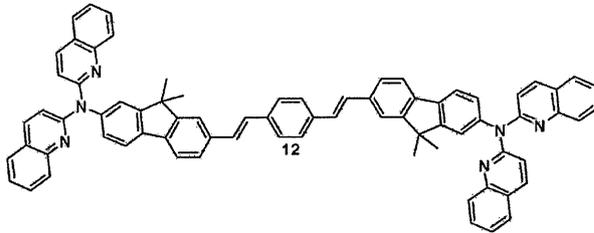
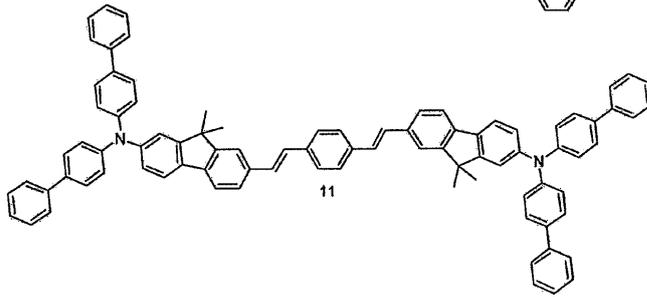
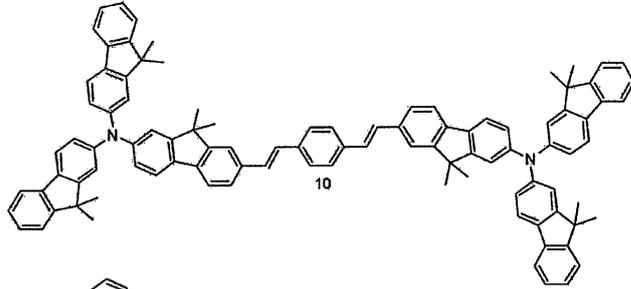
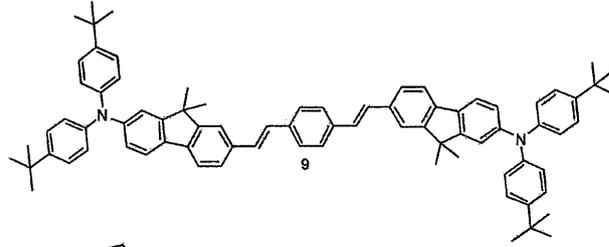
10

20

30

40

【化 1 3】

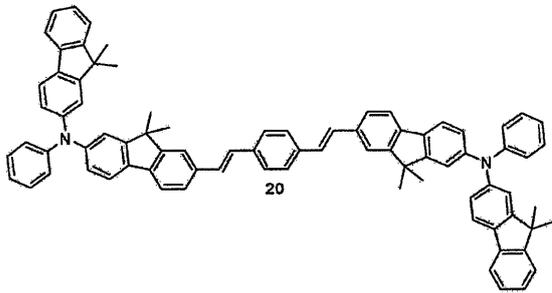
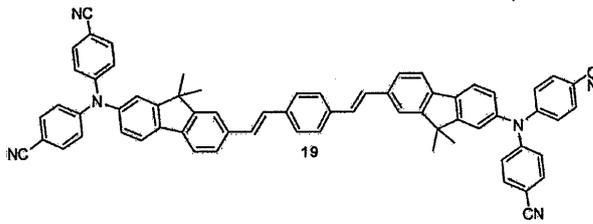
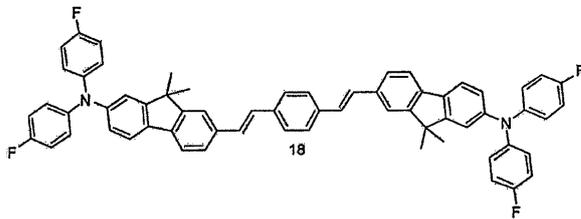
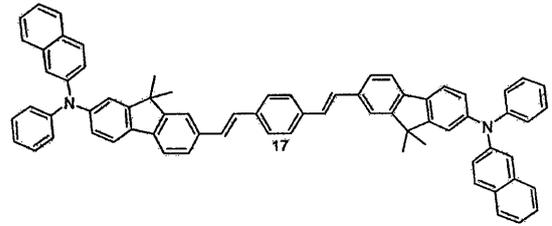
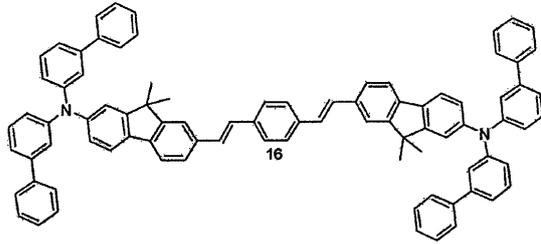
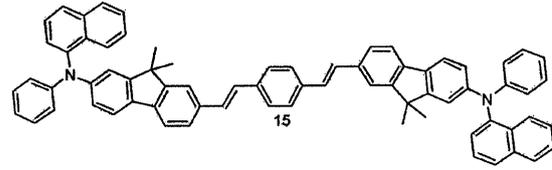


10

20

30

【化 1 4】

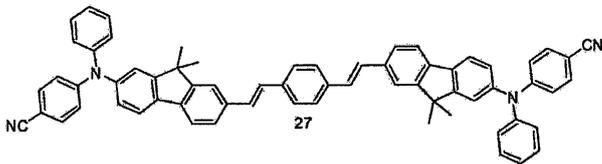
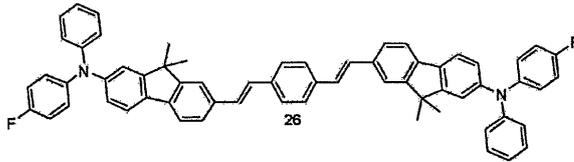
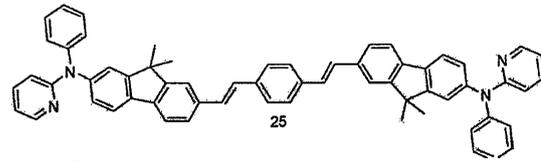
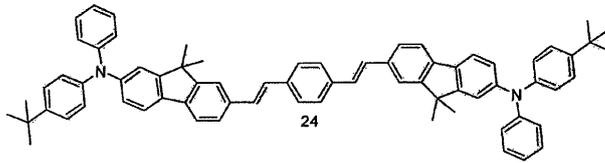
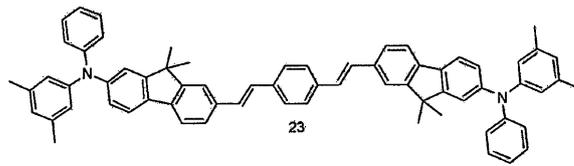
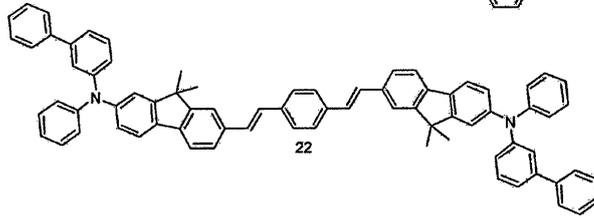
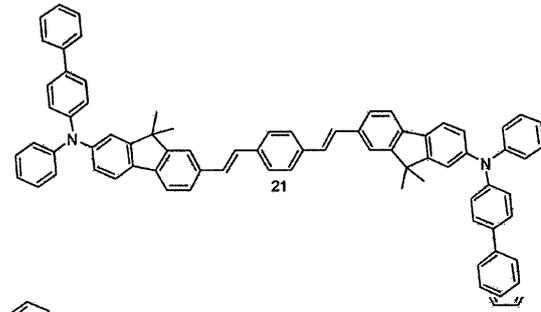


10

20

30

【化 1 5】

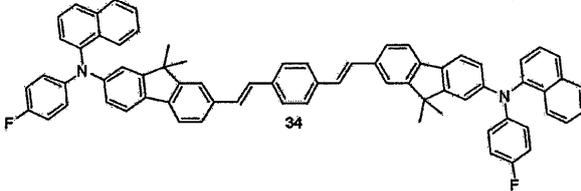
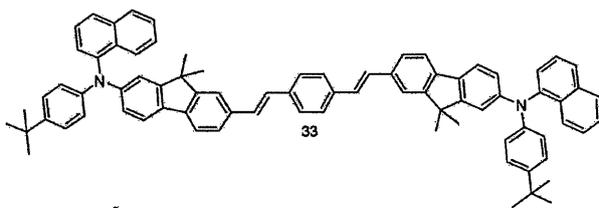
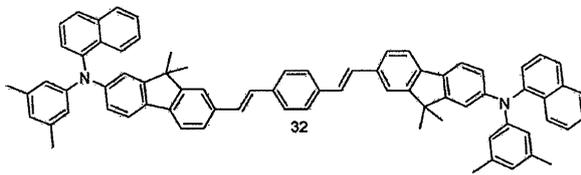
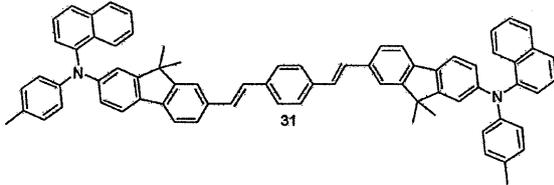
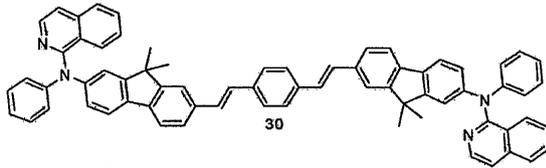
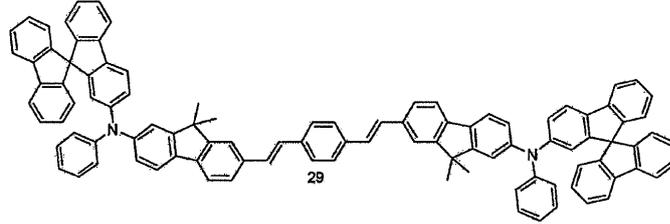
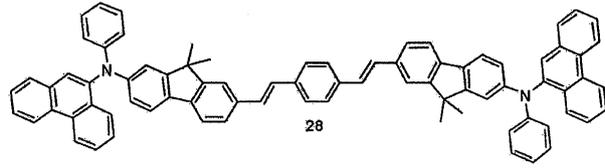


10

20

30

【化 1 6】



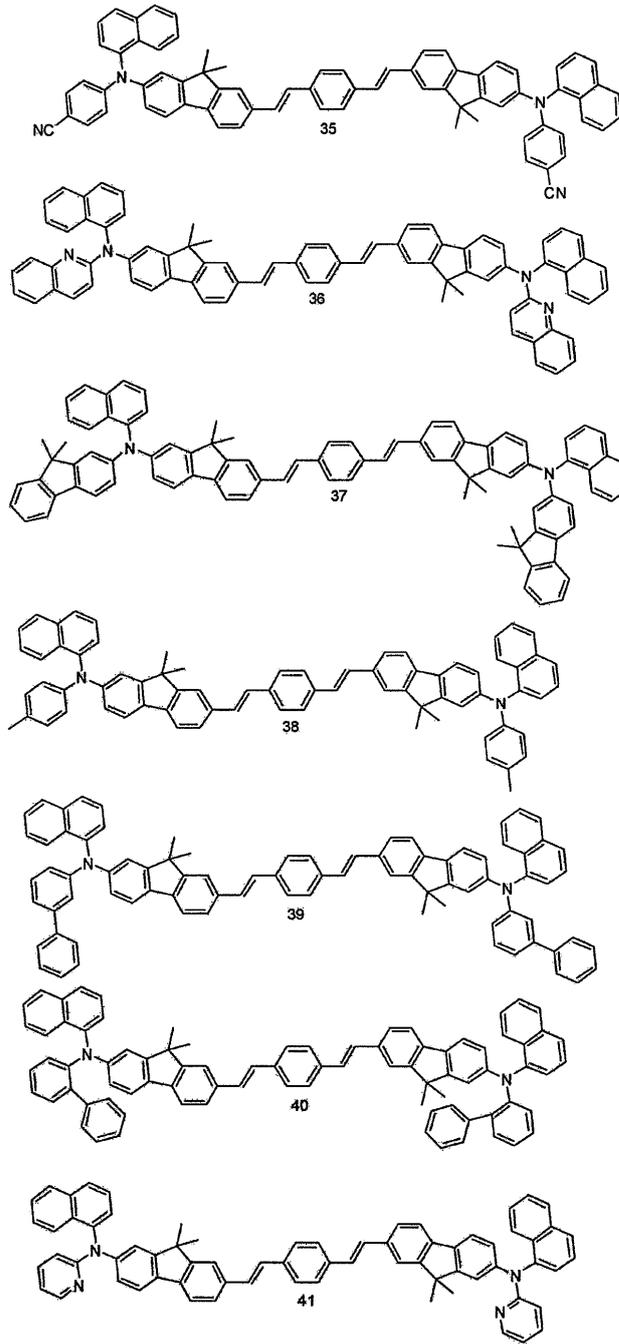
10

20

30

【 0 0 3 1 】

【化 17】

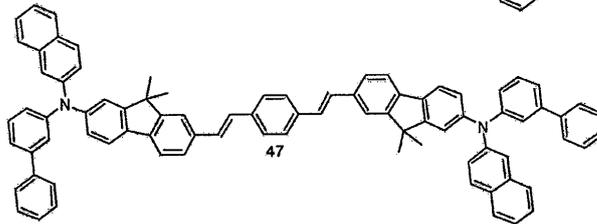
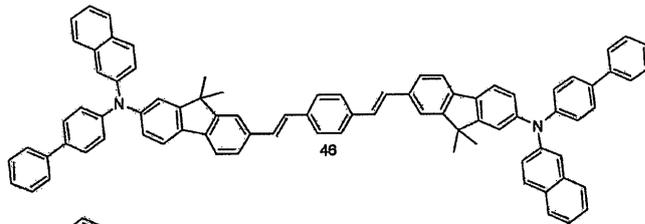
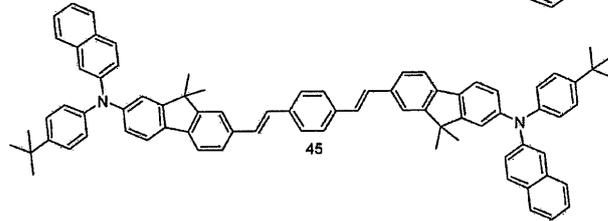
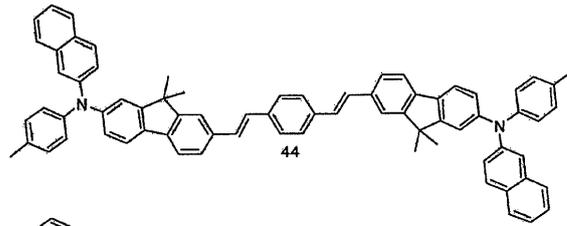
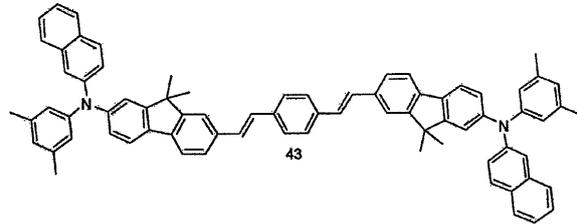
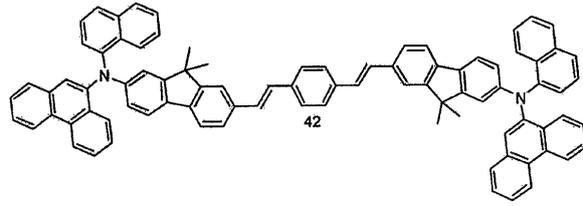


10

20

30

【化 1 8】

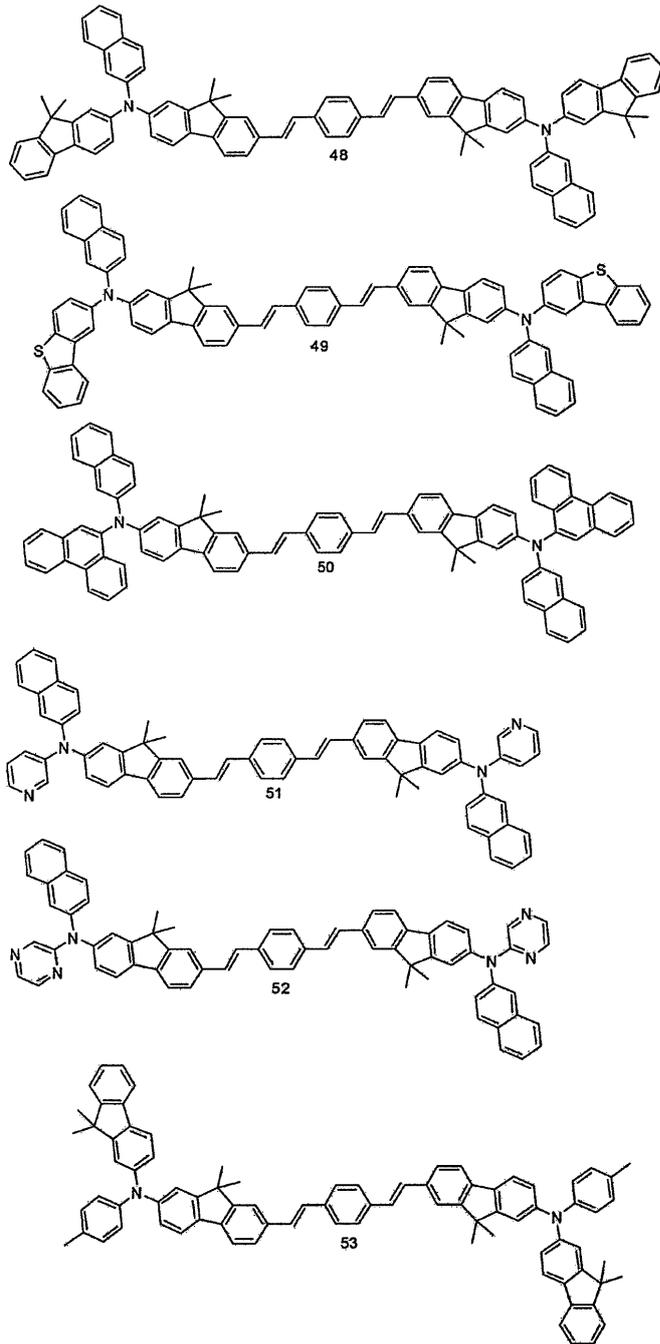


10

20

30

【化 19】

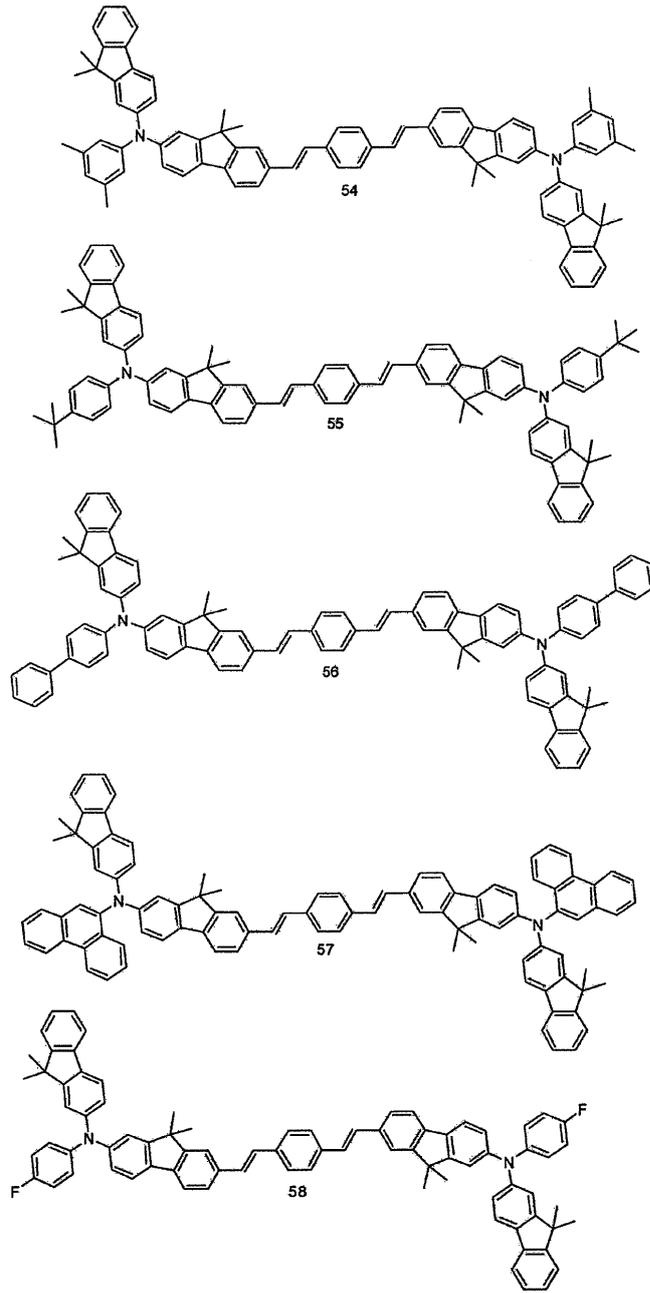


10

20

30

【化 20】

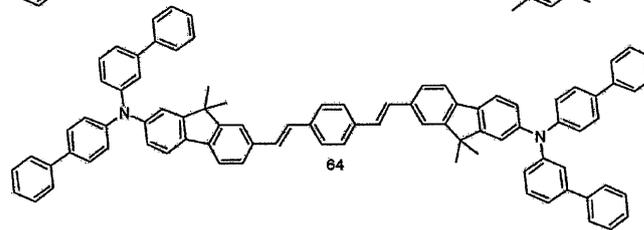
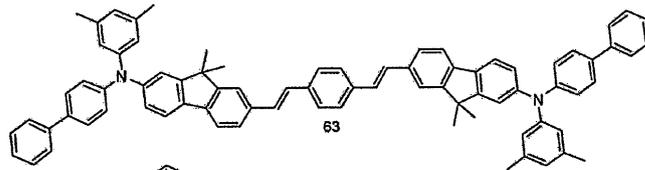
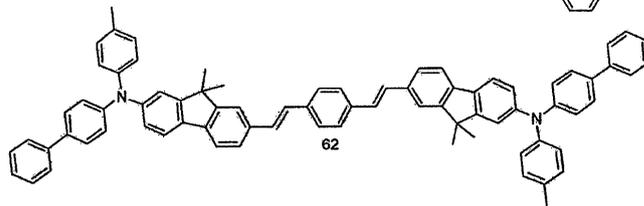
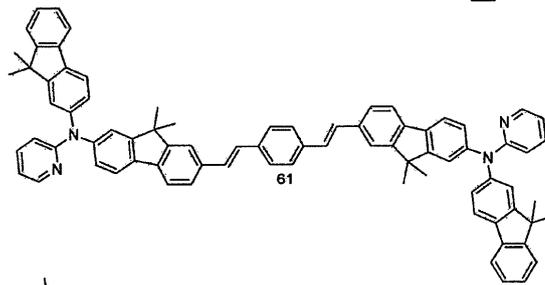
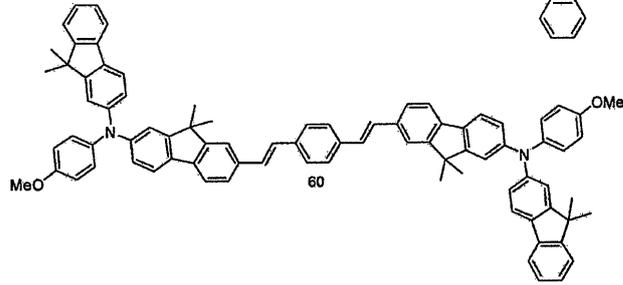
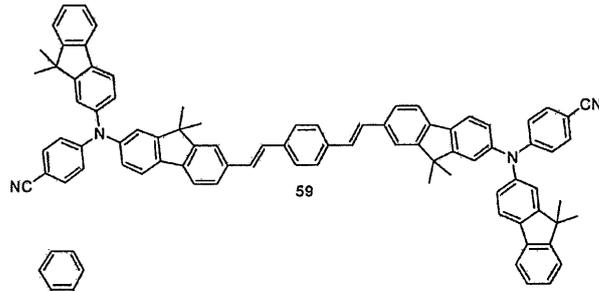


10

20

30

【化 2 1】



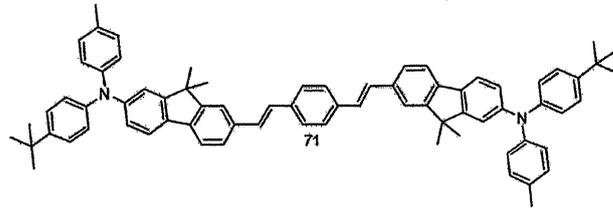
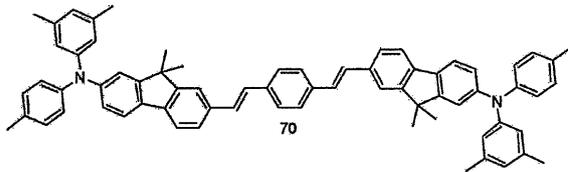
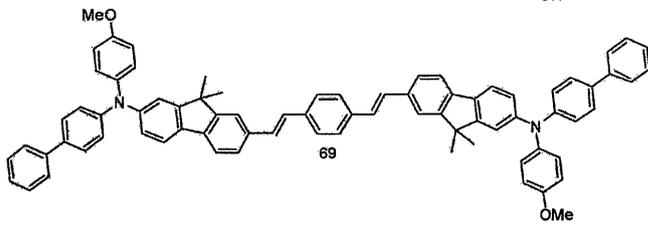
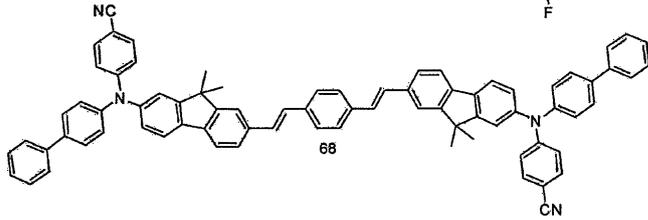
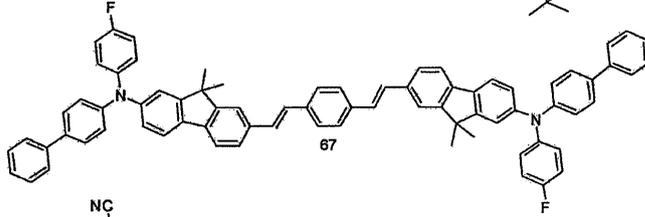
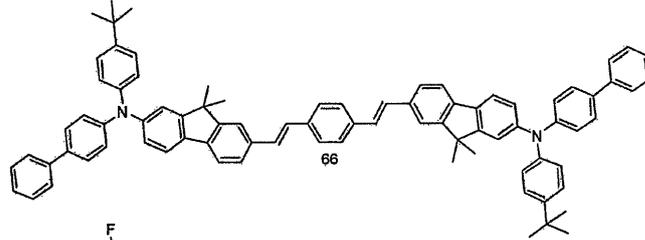
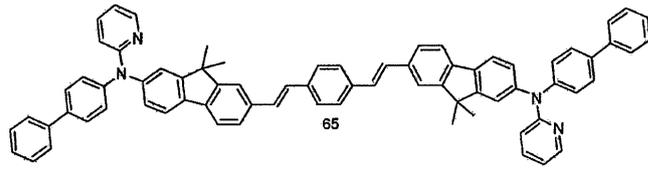
10

20

30

【 0 0 3 2 】

【化 2 2】

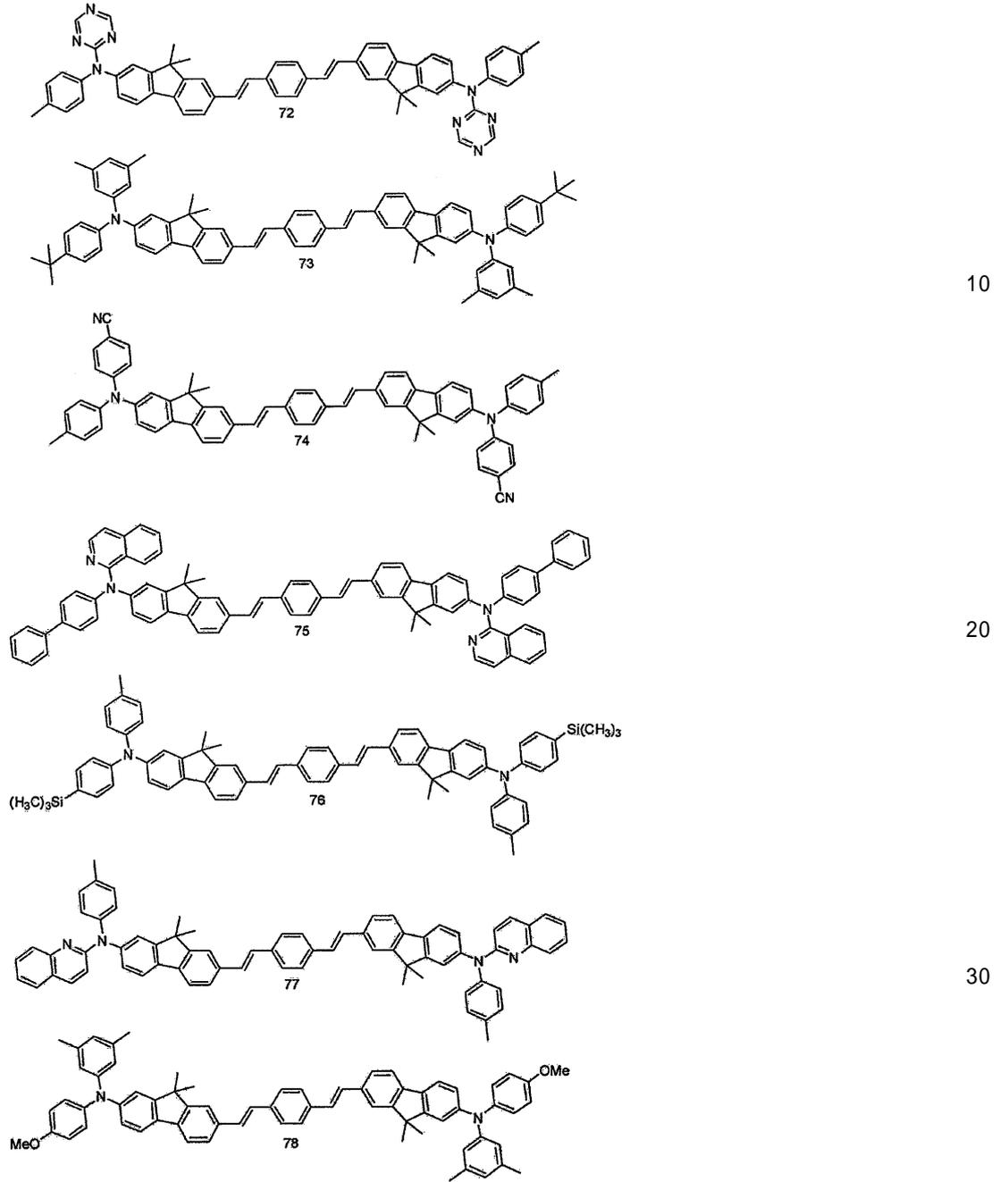


10

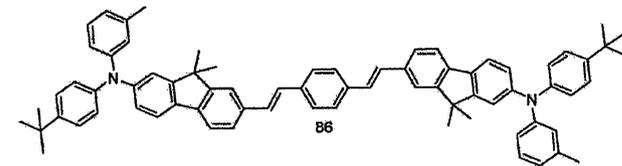
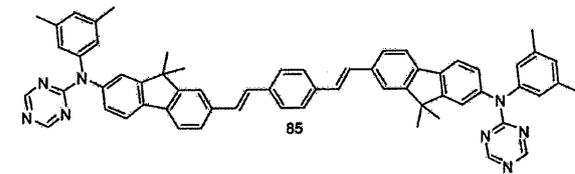
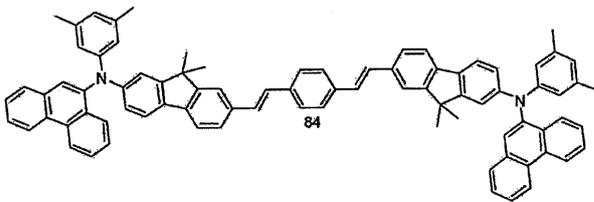
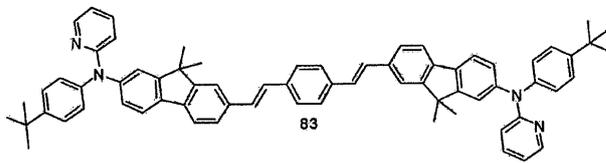
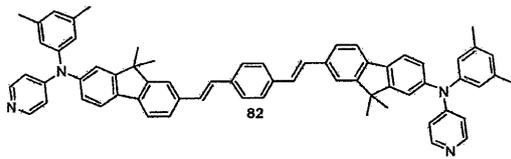
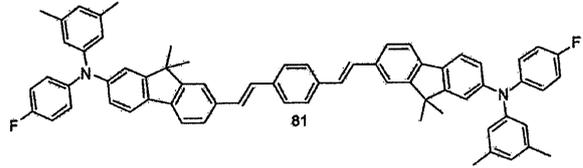
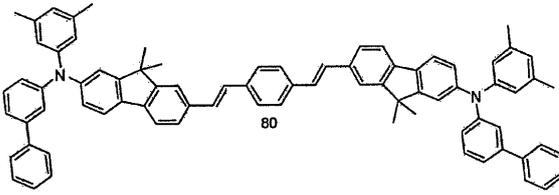
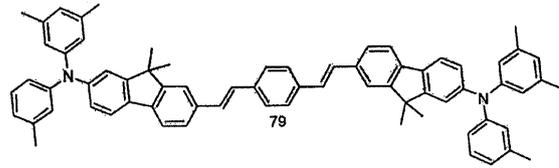
20

30

【化 2 3】



【化 2 4】

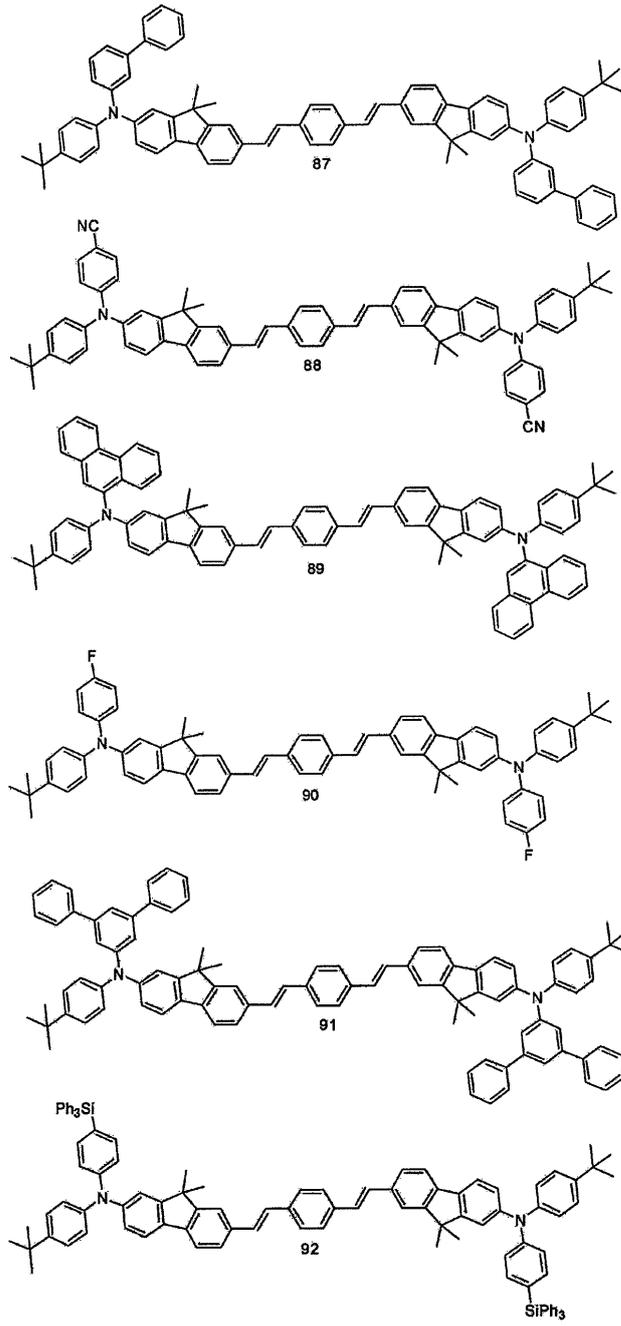


10

20

30

【化 2 5】

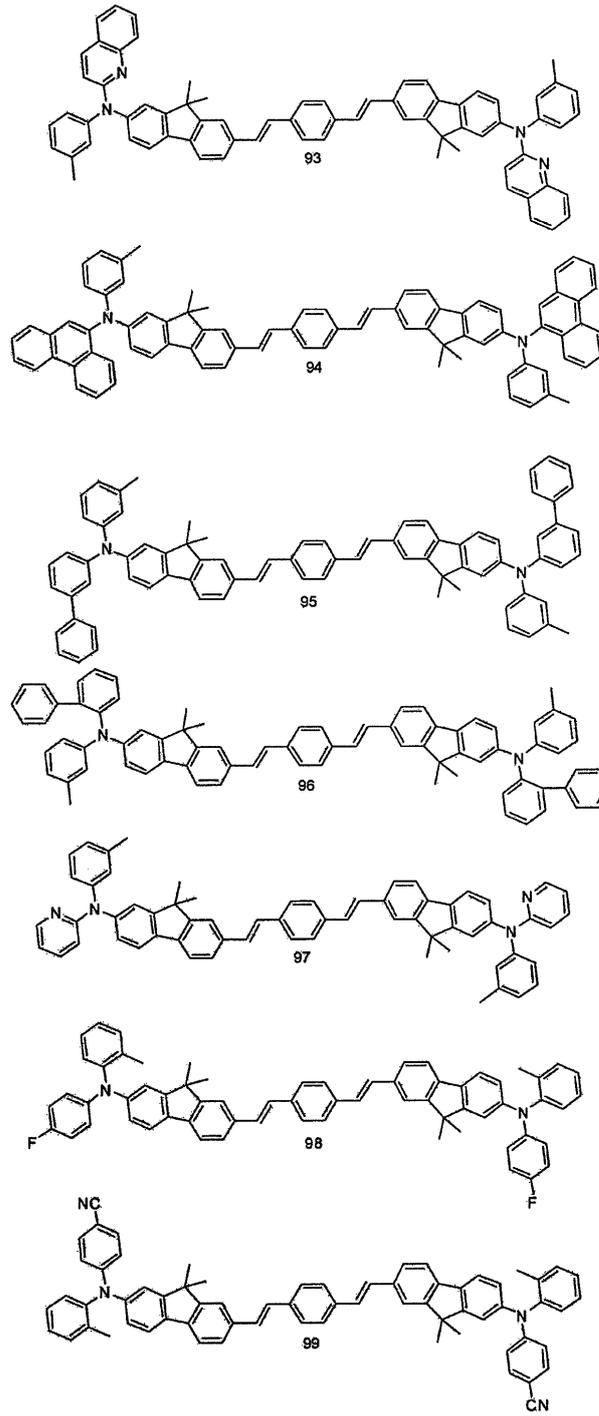


10

20

30

【化 2 6】



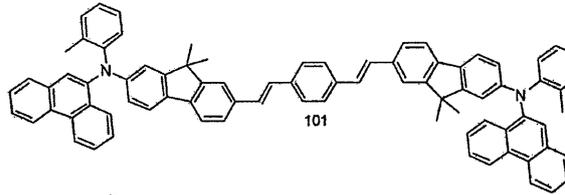
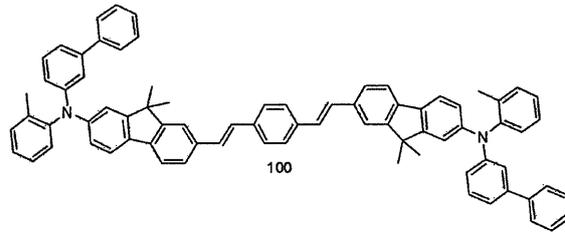
10

20

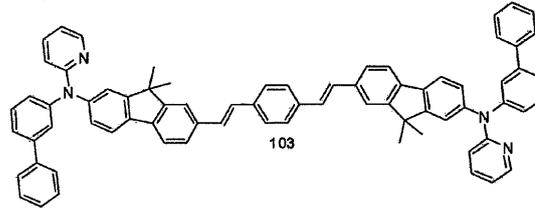
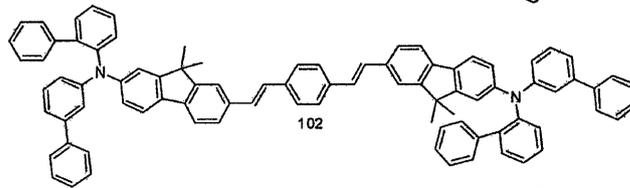
30

【 0 0 3 3 】

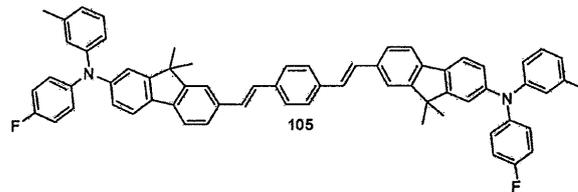
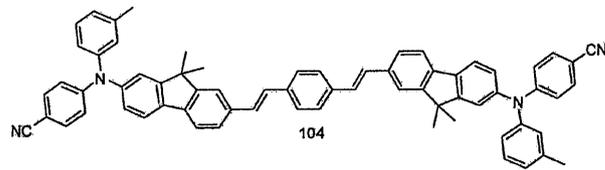
【化 27】



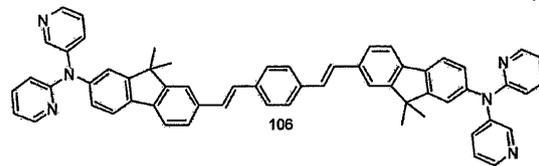
10



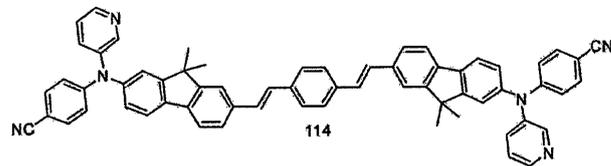
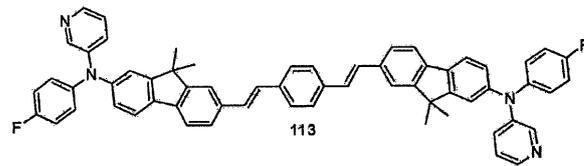
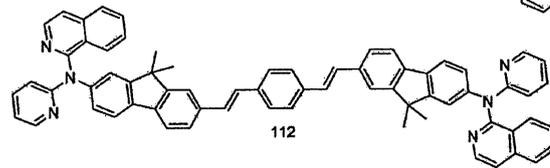
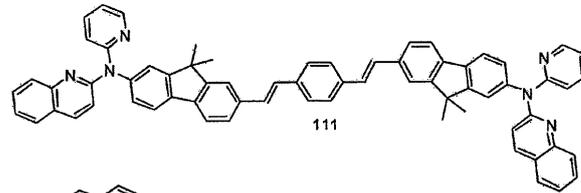
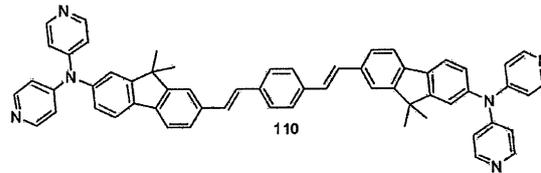
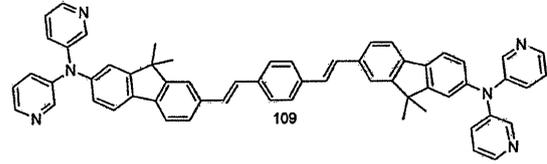
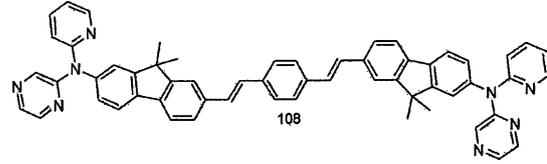
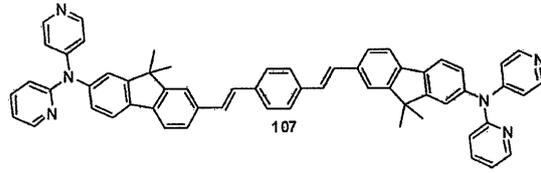
20



30



【化 2 8】

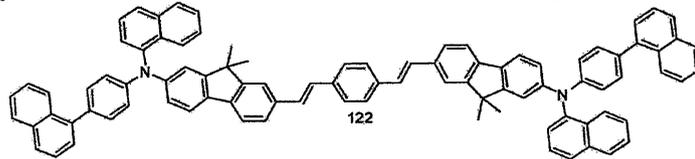
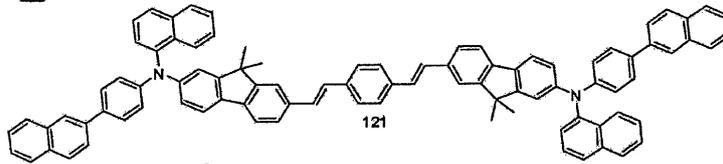
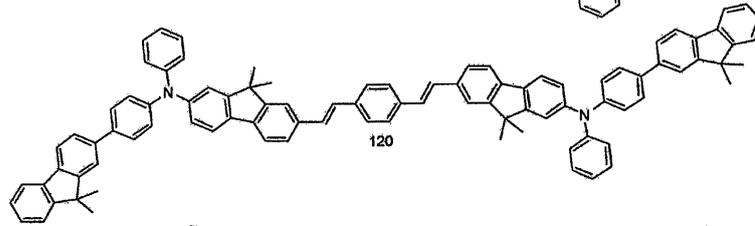
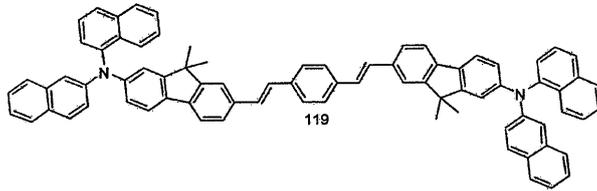
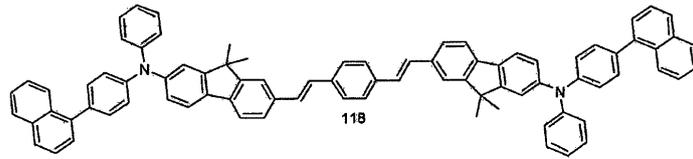
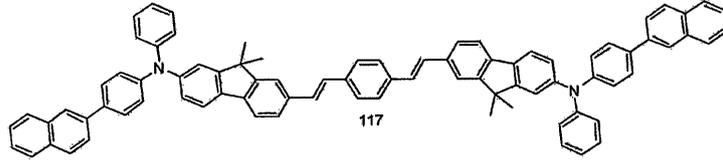
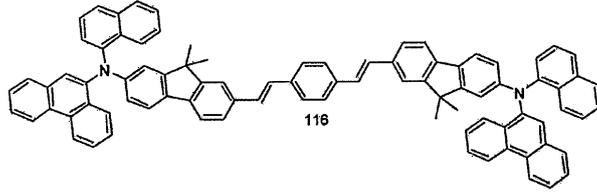
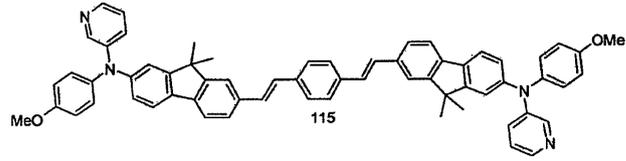


10

20

30

【化 2 9】

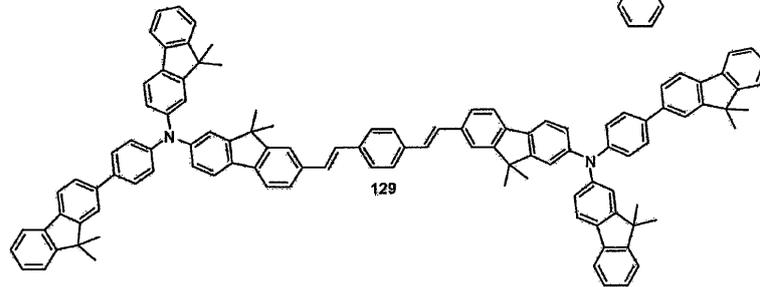
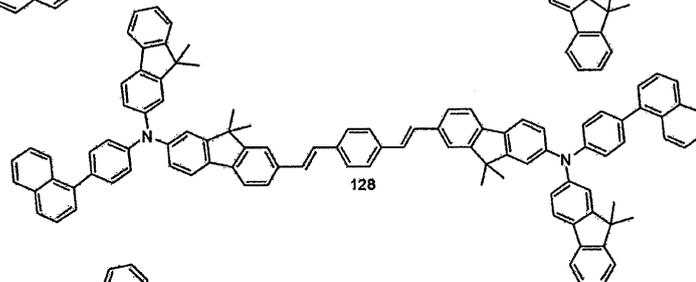
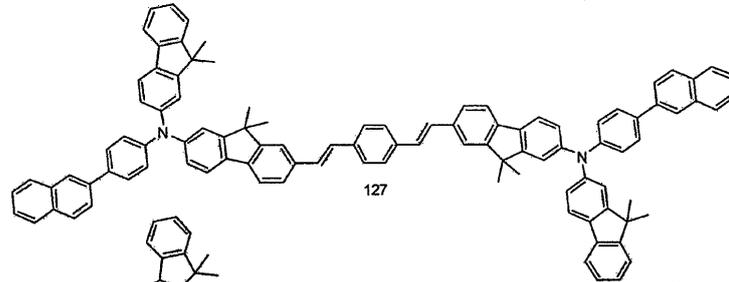
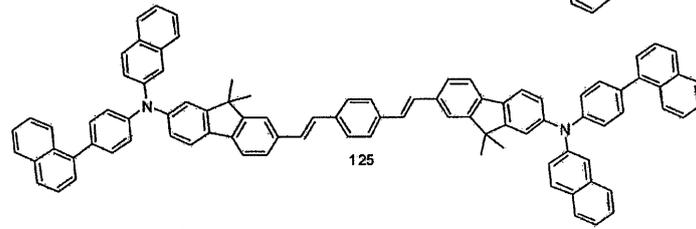
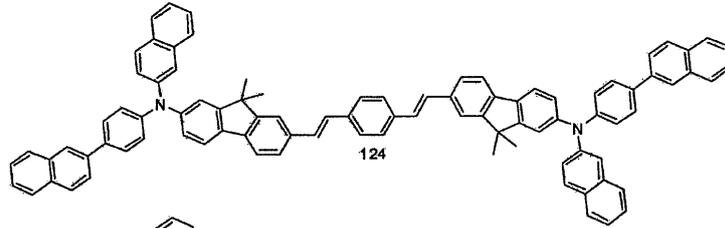
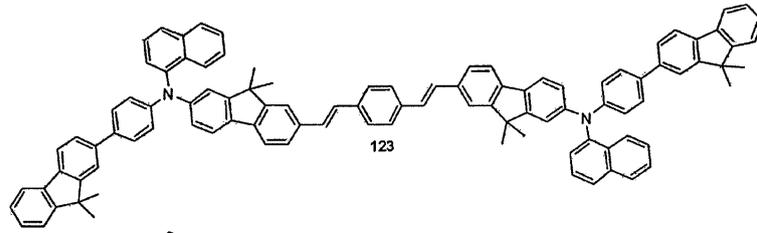


10

20

30

【化 3 0】

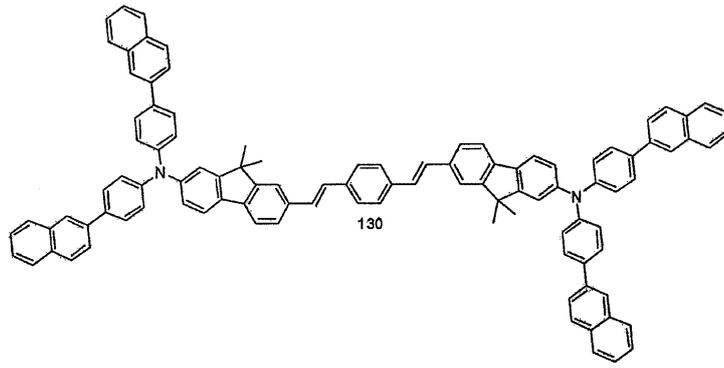


10

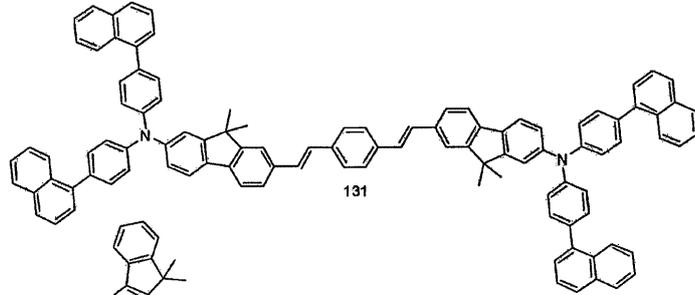
20

30

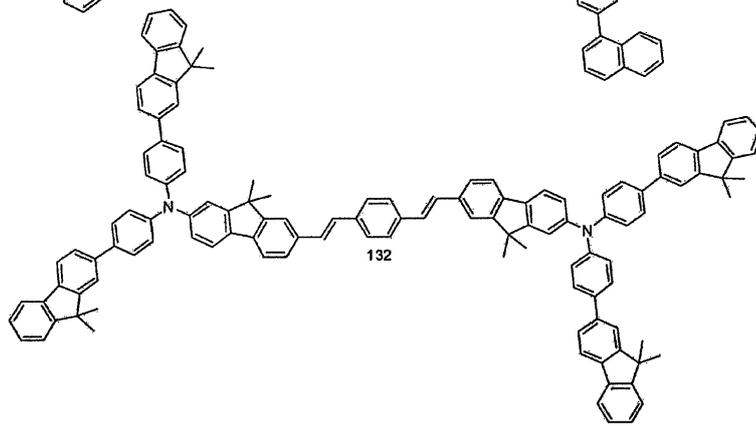
【化 3 1】



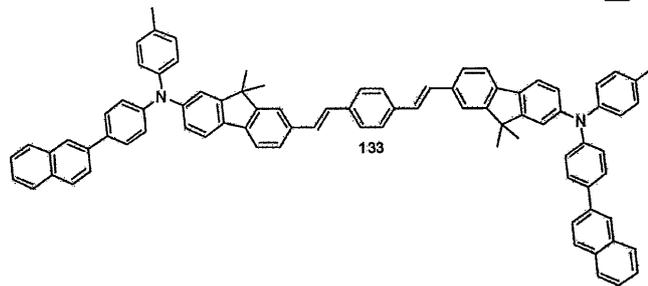
10



20

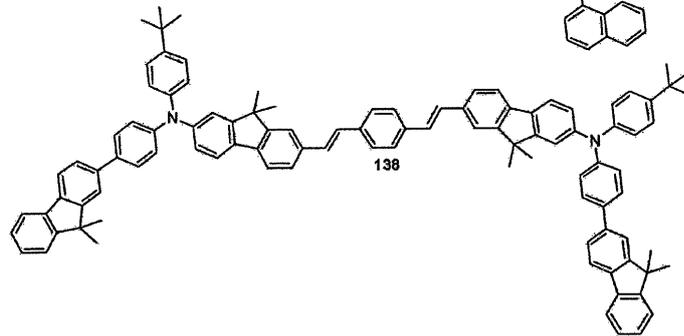
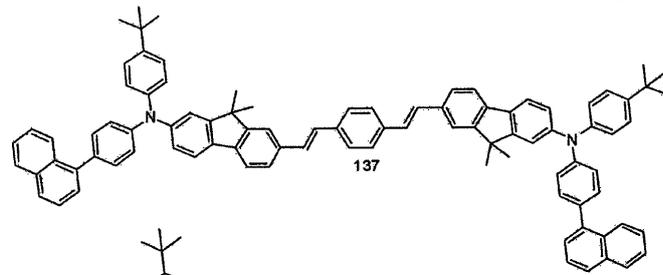
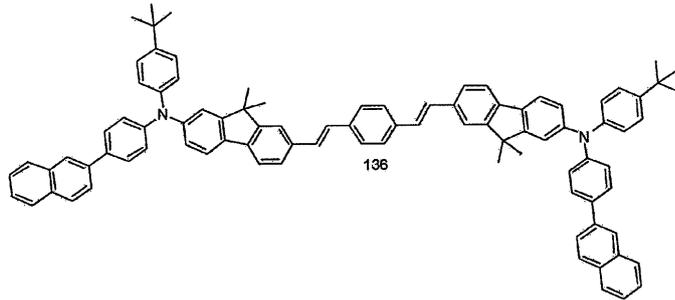
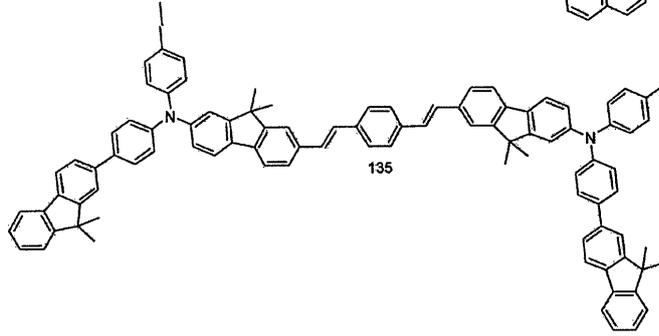
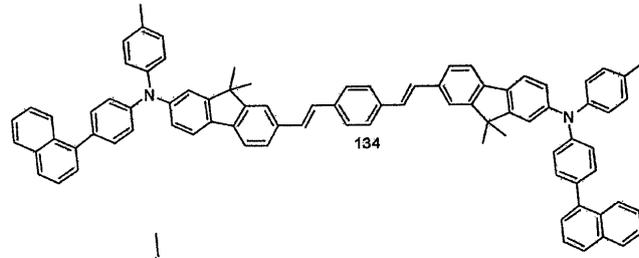


30



【 0 0 3 4 】

【化 3 2】

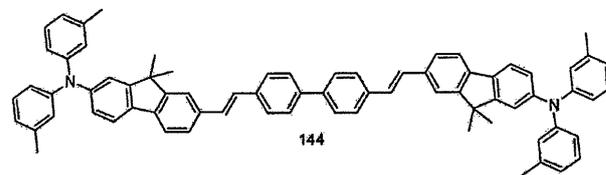
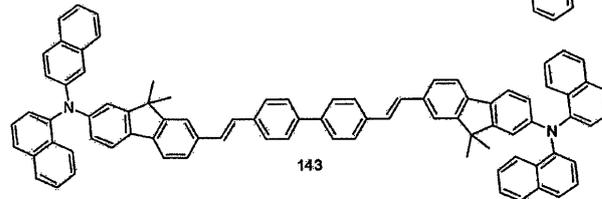
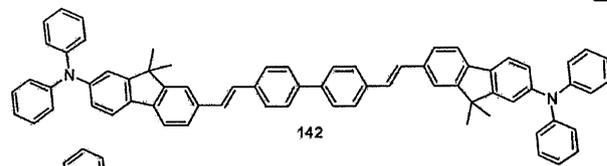
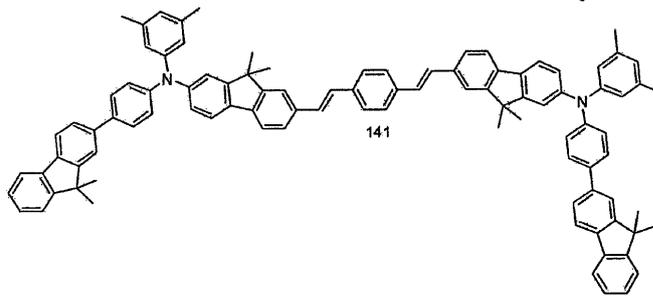
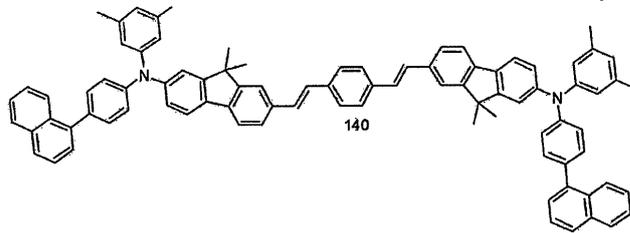
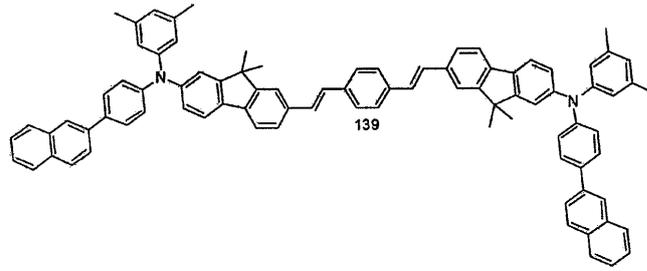


10

20

30

【化 3 3】

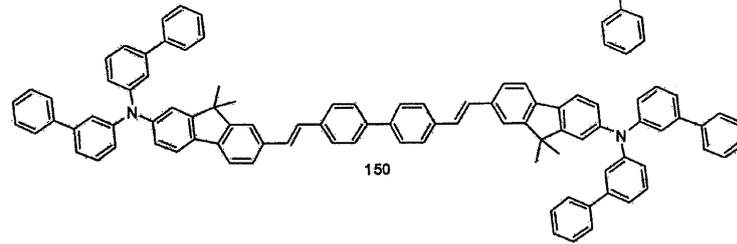
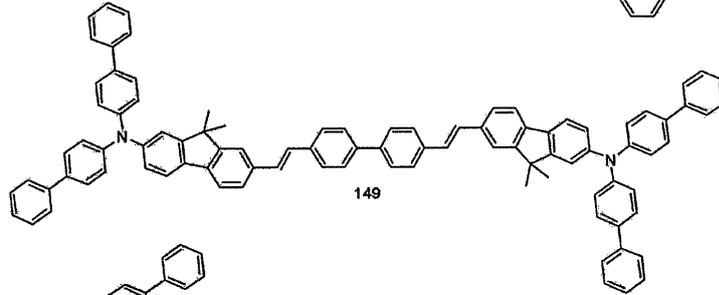
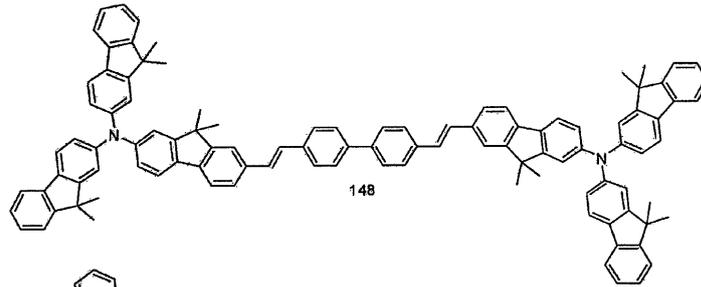
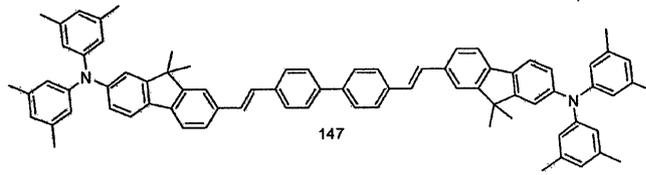
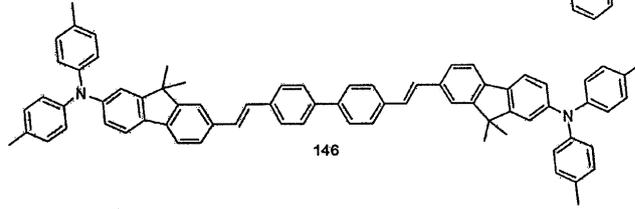
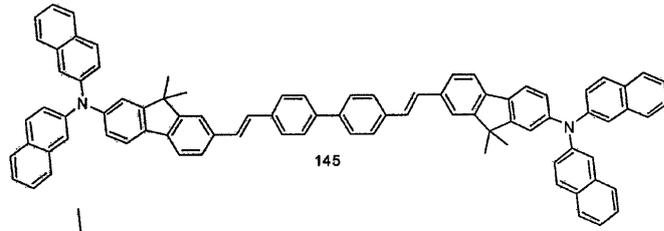


10

20

30

【化 3 4】

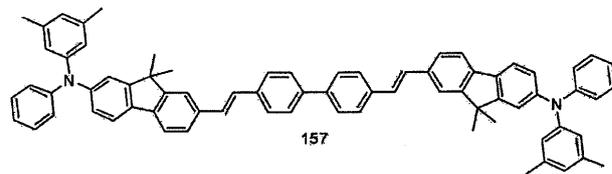
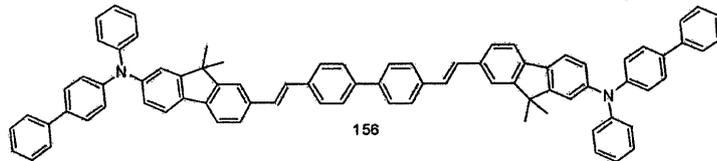
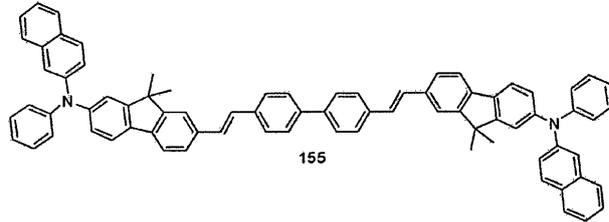
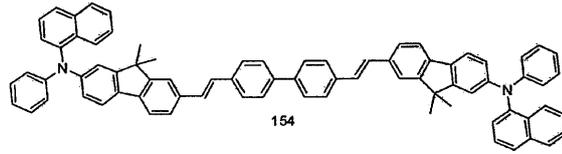
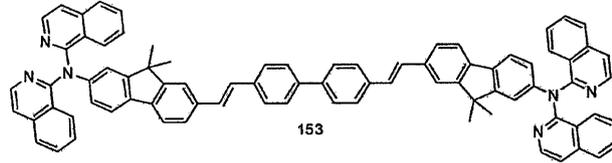
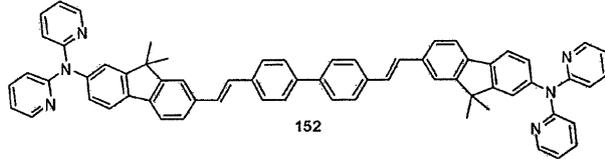
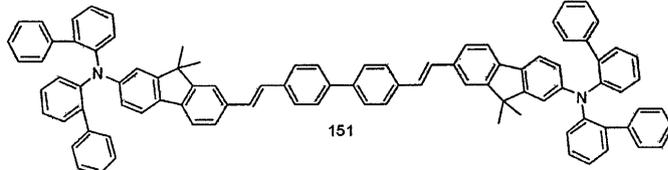


10

20

30

【化 3 5】

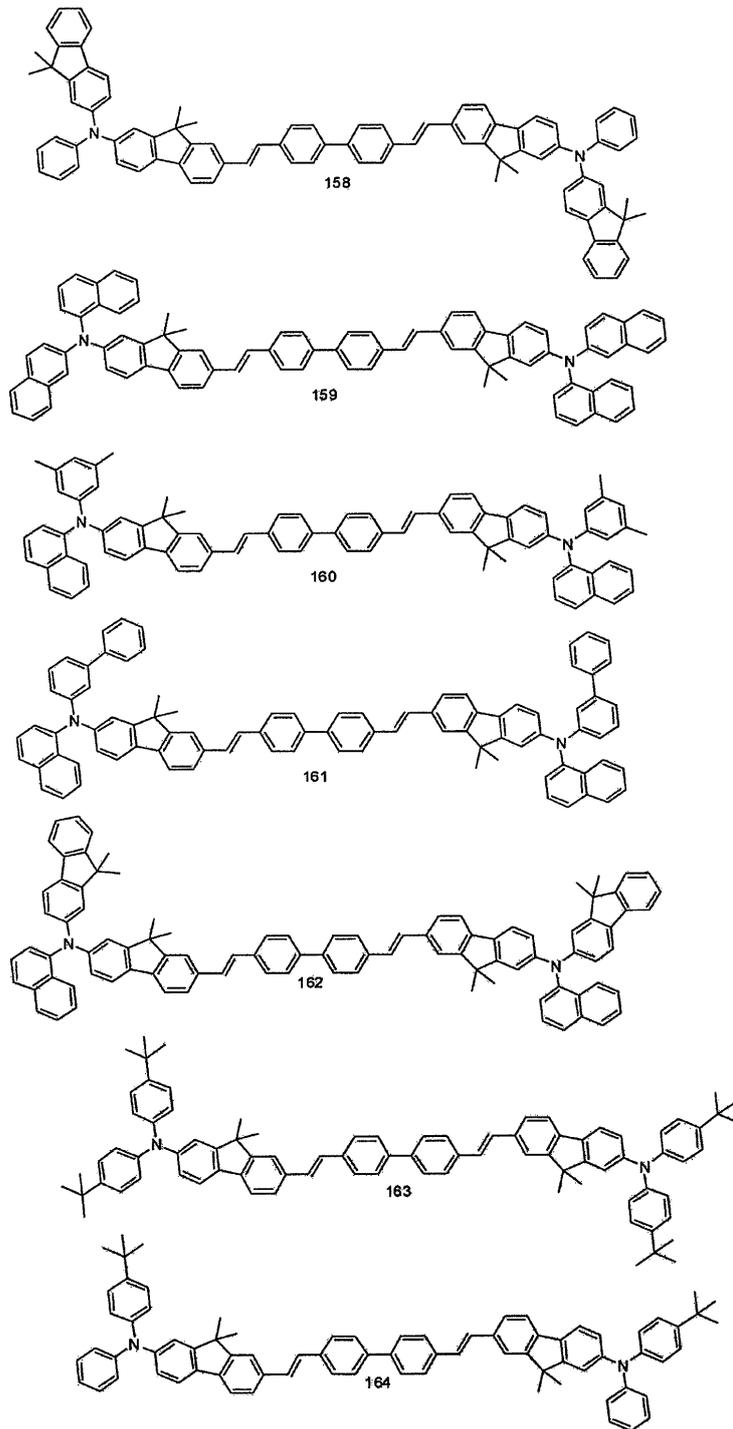


10

20

30

【化 3 6】



10

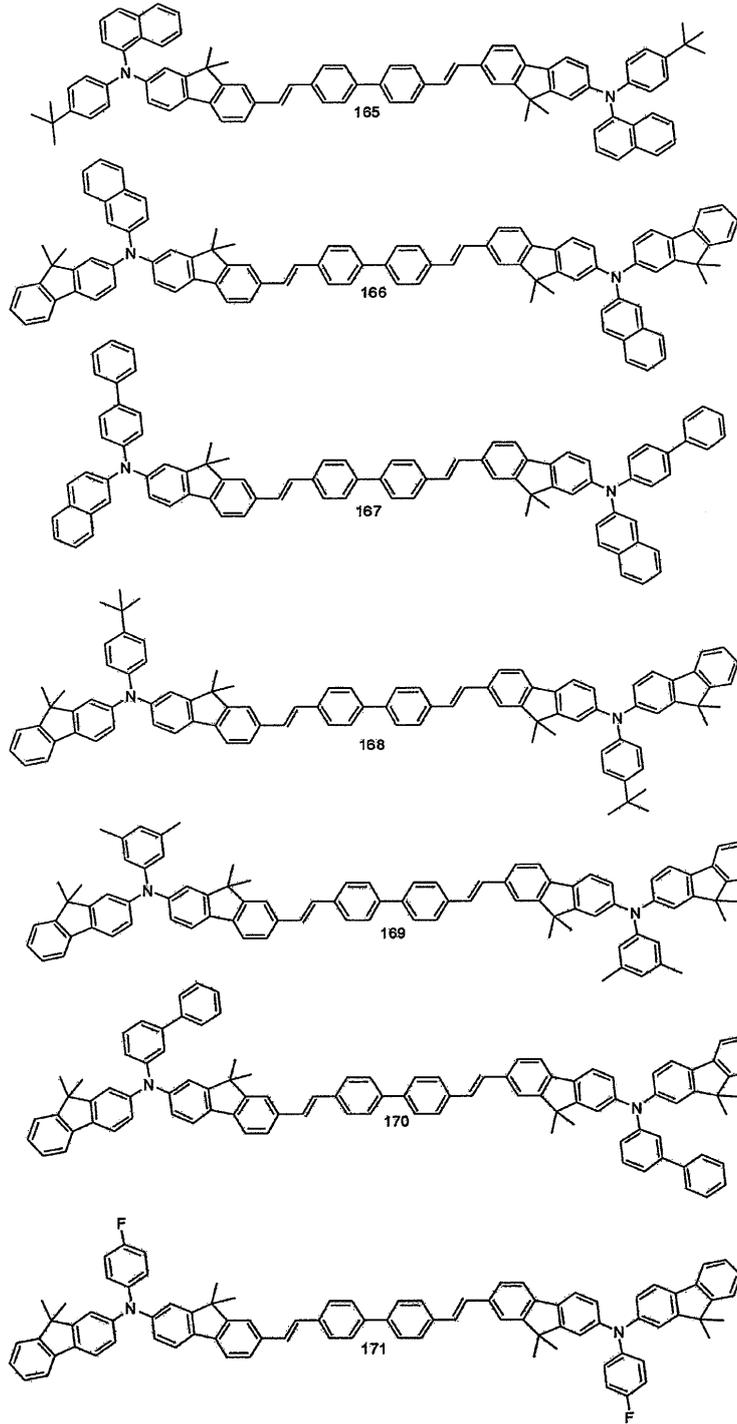
20

30

40

【 0 0 3 5 】

【化 3 7】

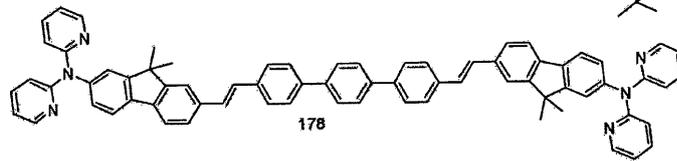
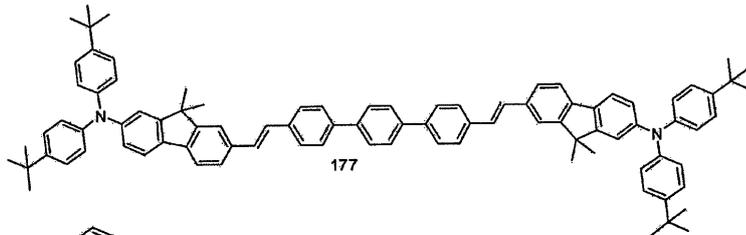
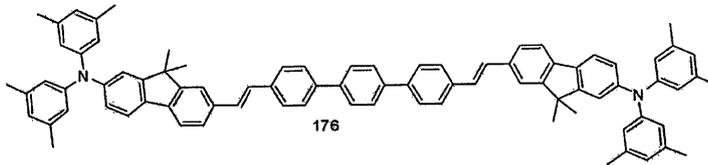
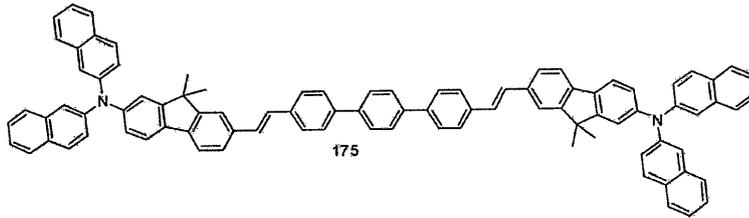
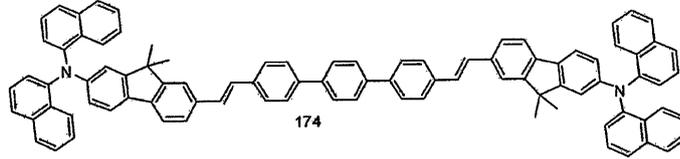
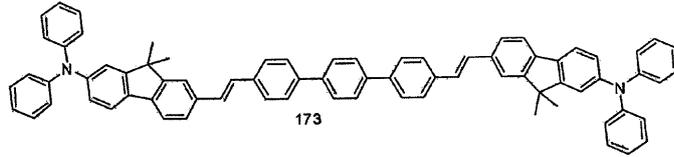
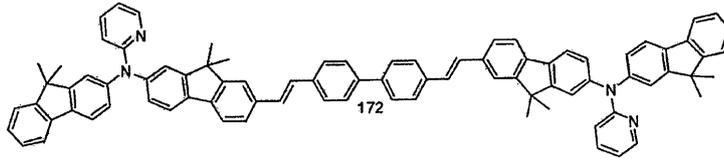


10

20

30

【化 3 8】

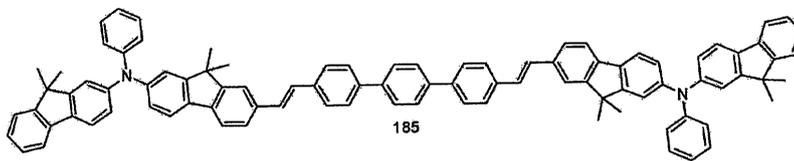
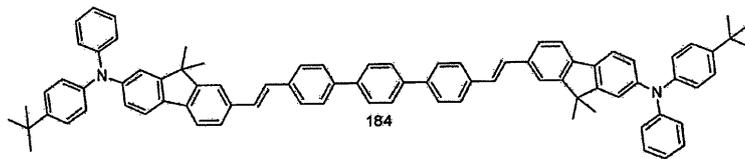
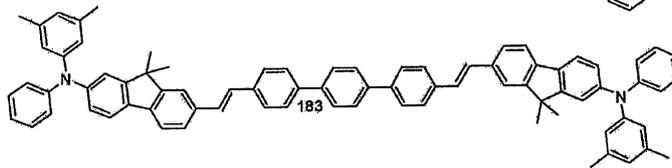
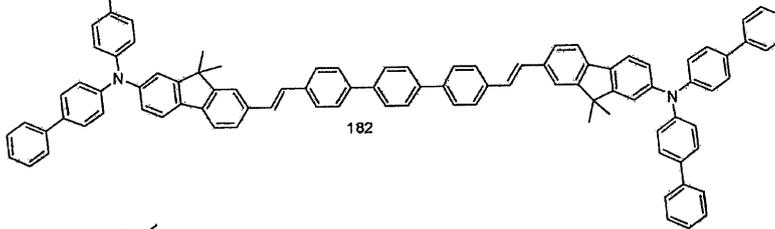
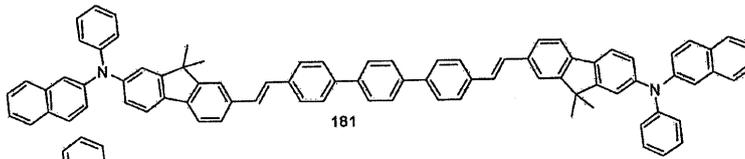
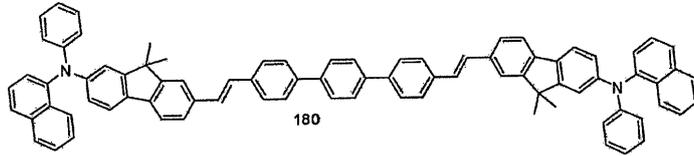
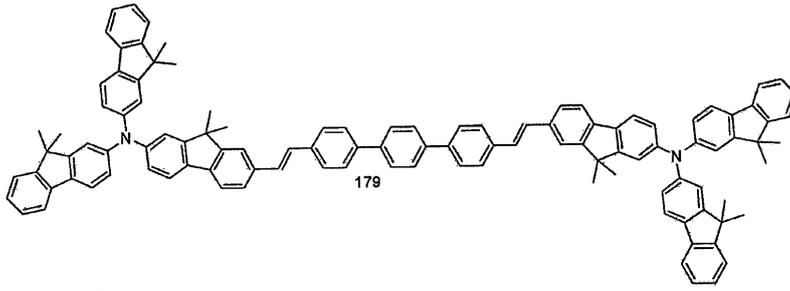


10

20

30

【化 3 9】

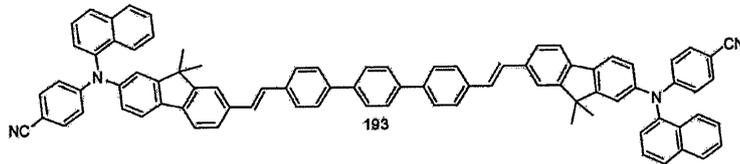
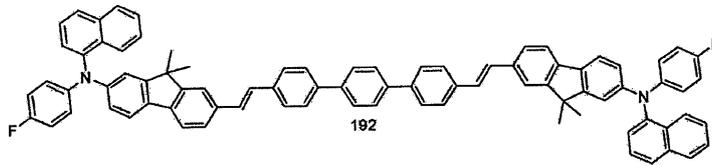
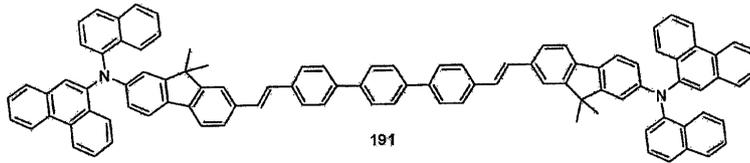
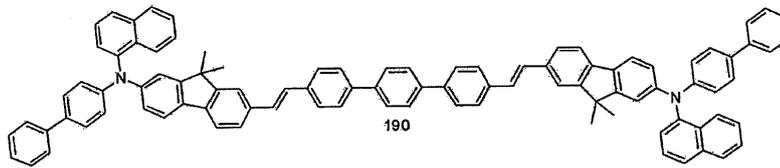
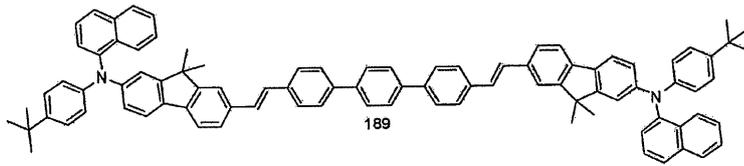
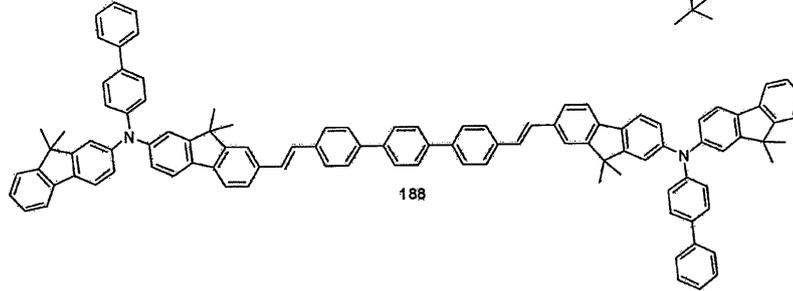
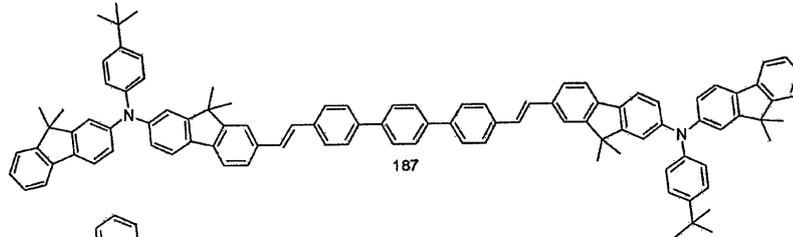


10

20

30

【化 4 0】

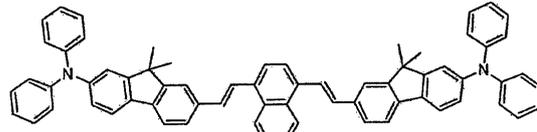


10

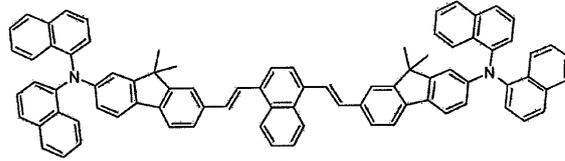
20

30

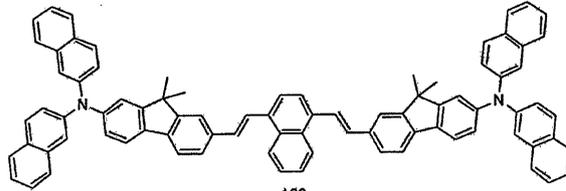
【化 4 1】



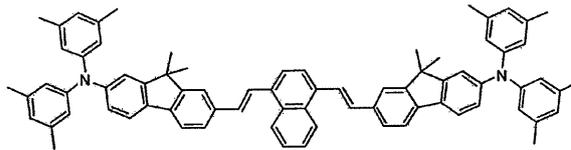
194



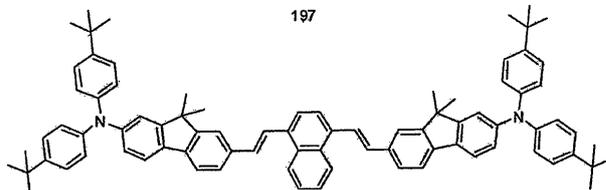
195



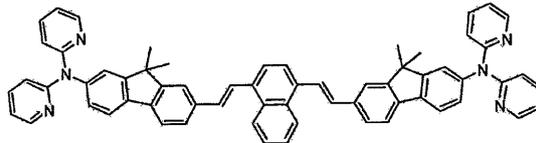
196



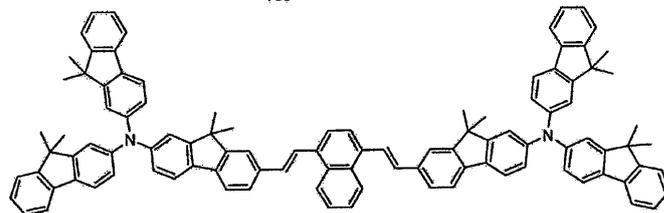
197



198



199



200

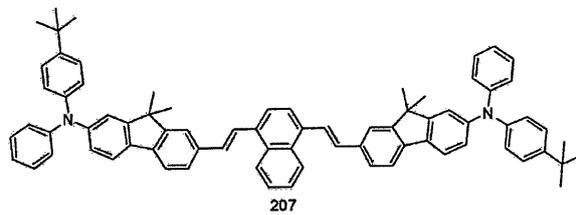
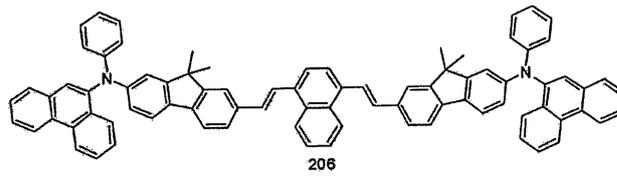
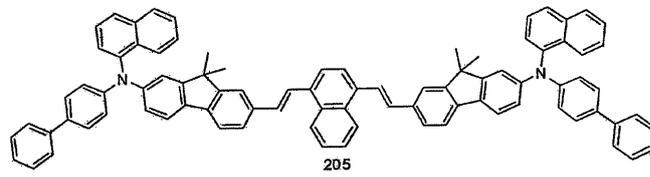
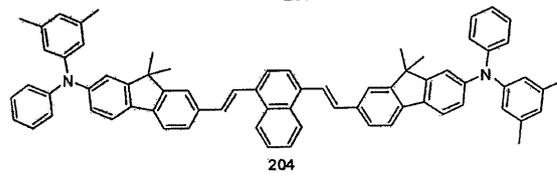
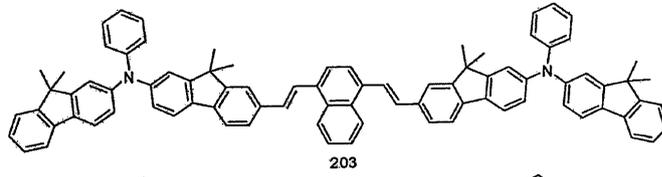
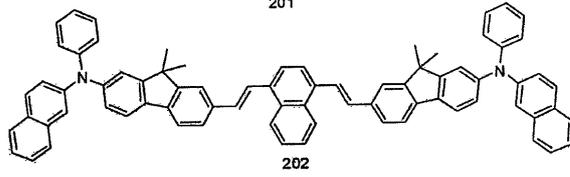
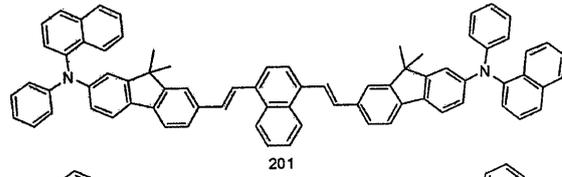
10

20

30

【 0 0 3 6 】

【化 4 2】

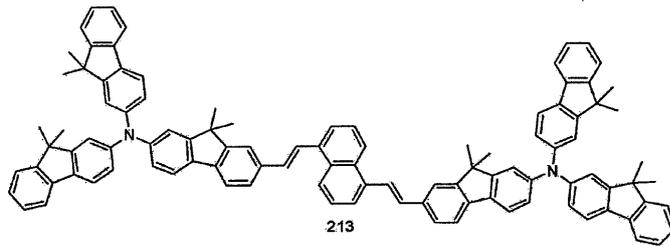
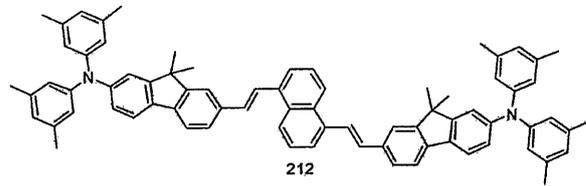
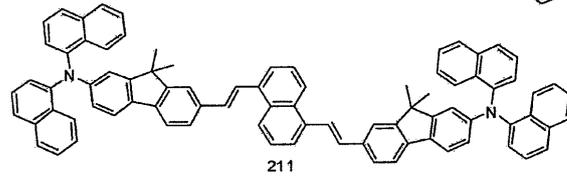
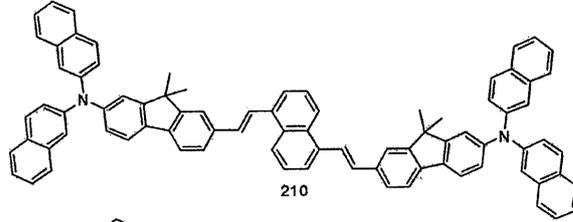
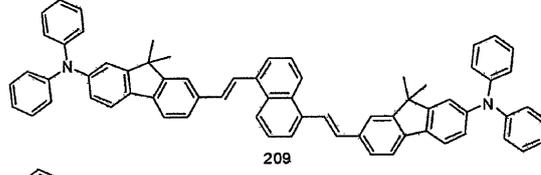
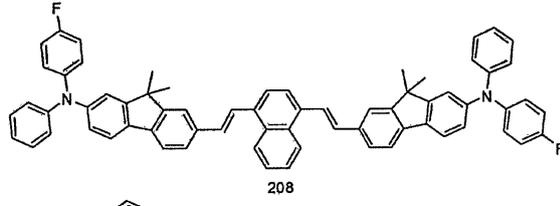


10

20

30

【化 4 3】

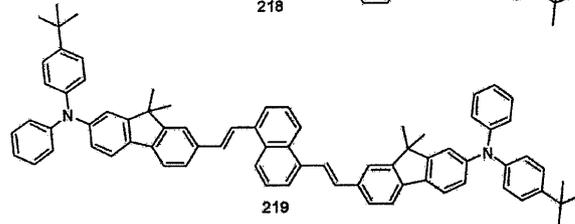
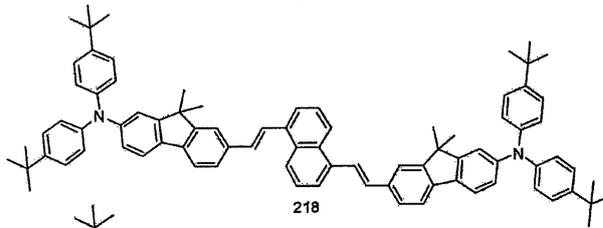
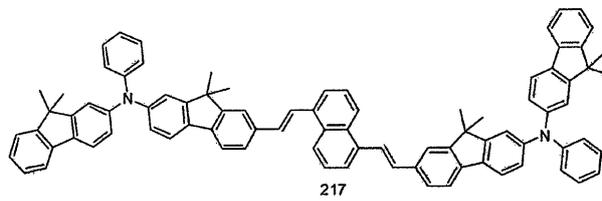
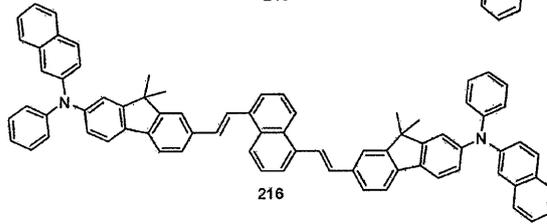
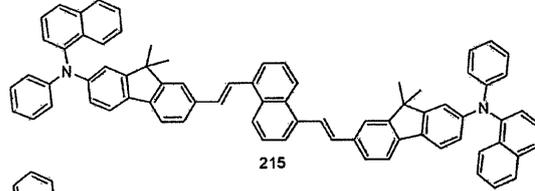
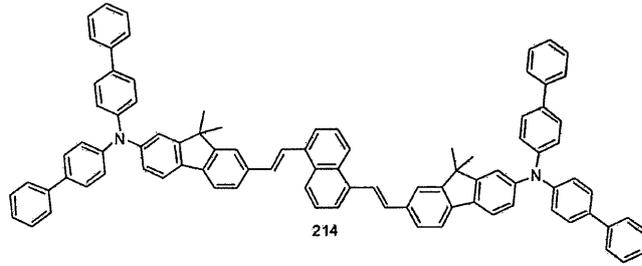


10

20

30

【化 4 4】

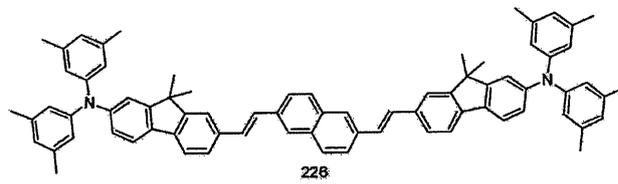
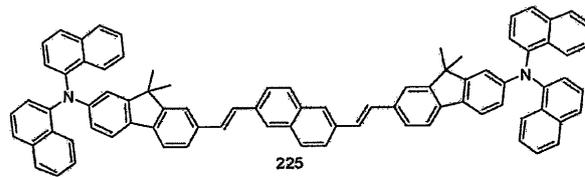
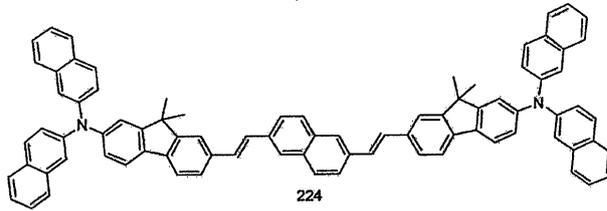
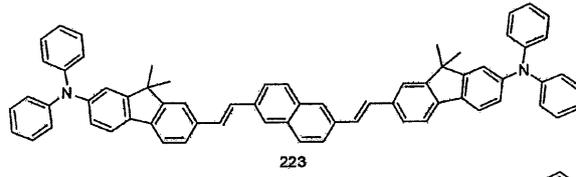
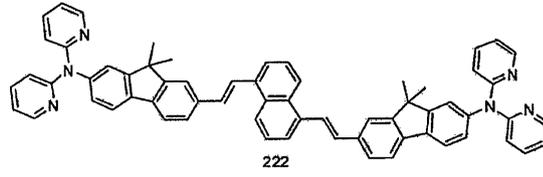
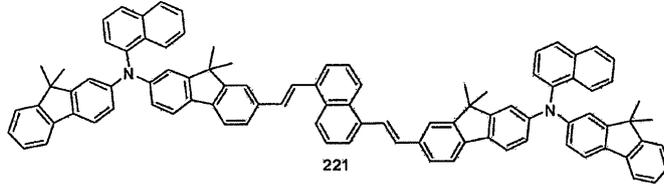
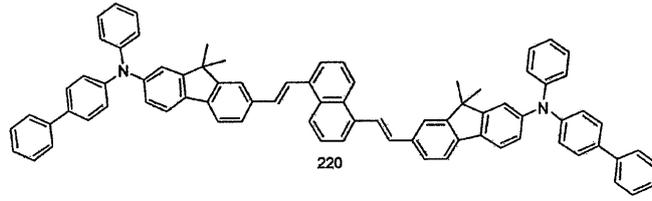


10

20

30

【化 4 5】

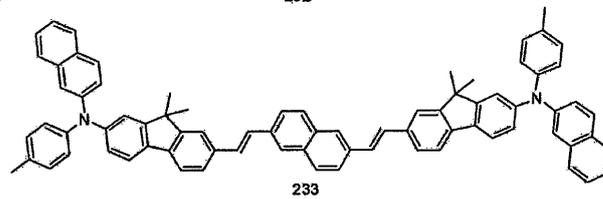
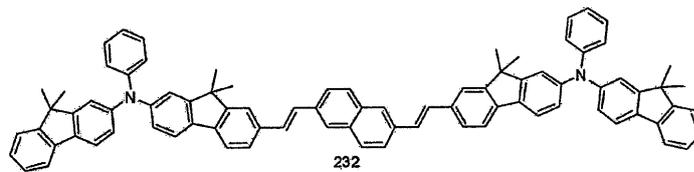
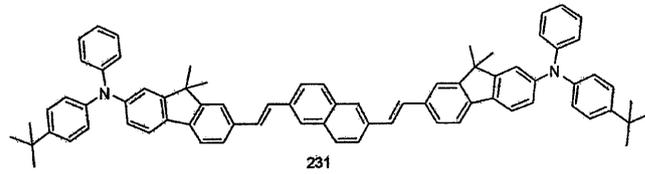
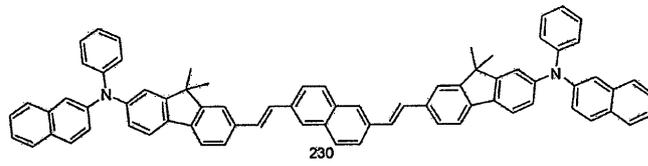
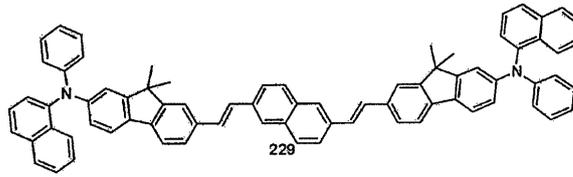
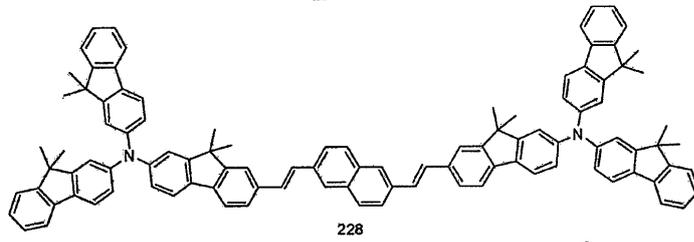
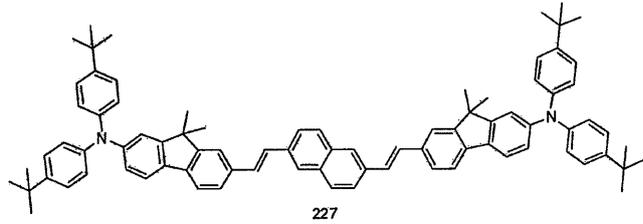


10

20

30

【化 4 6】



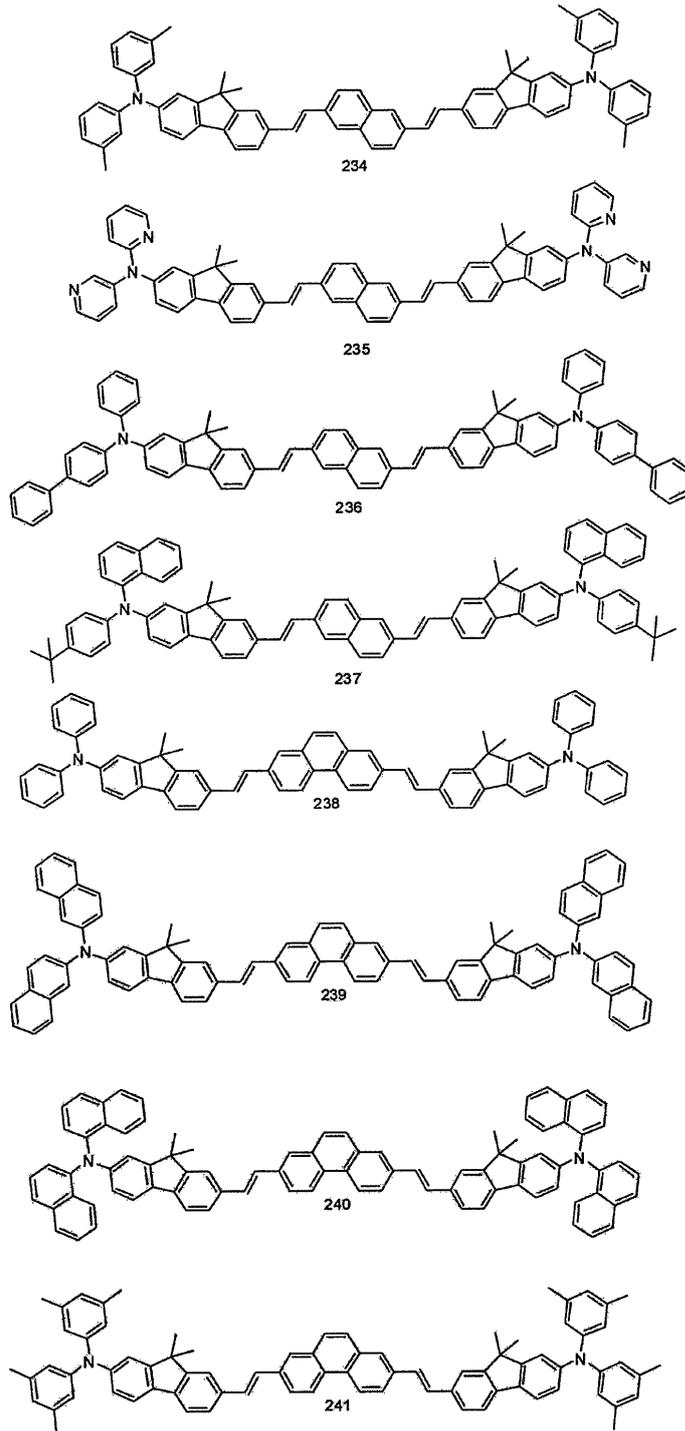
10

20

30

【 0 0 3 7 】

【化 4 7】

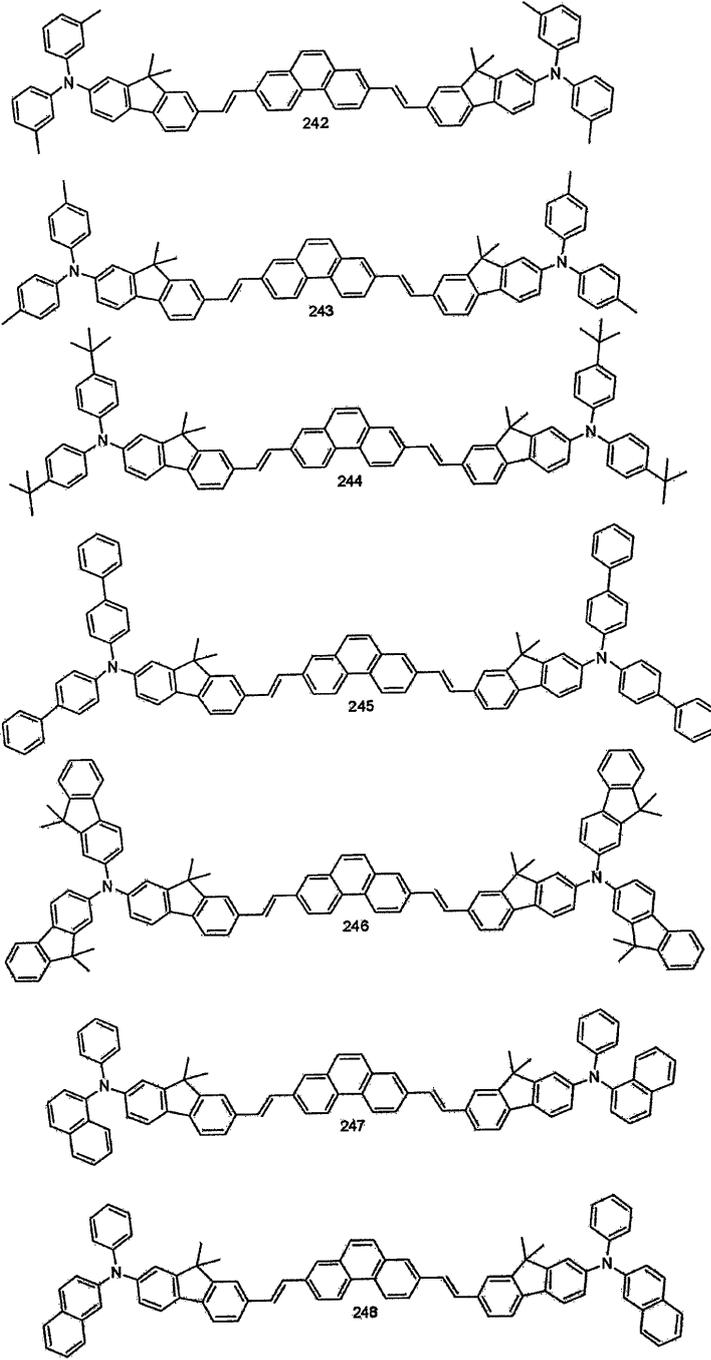


10

20

30

【化 4 8】

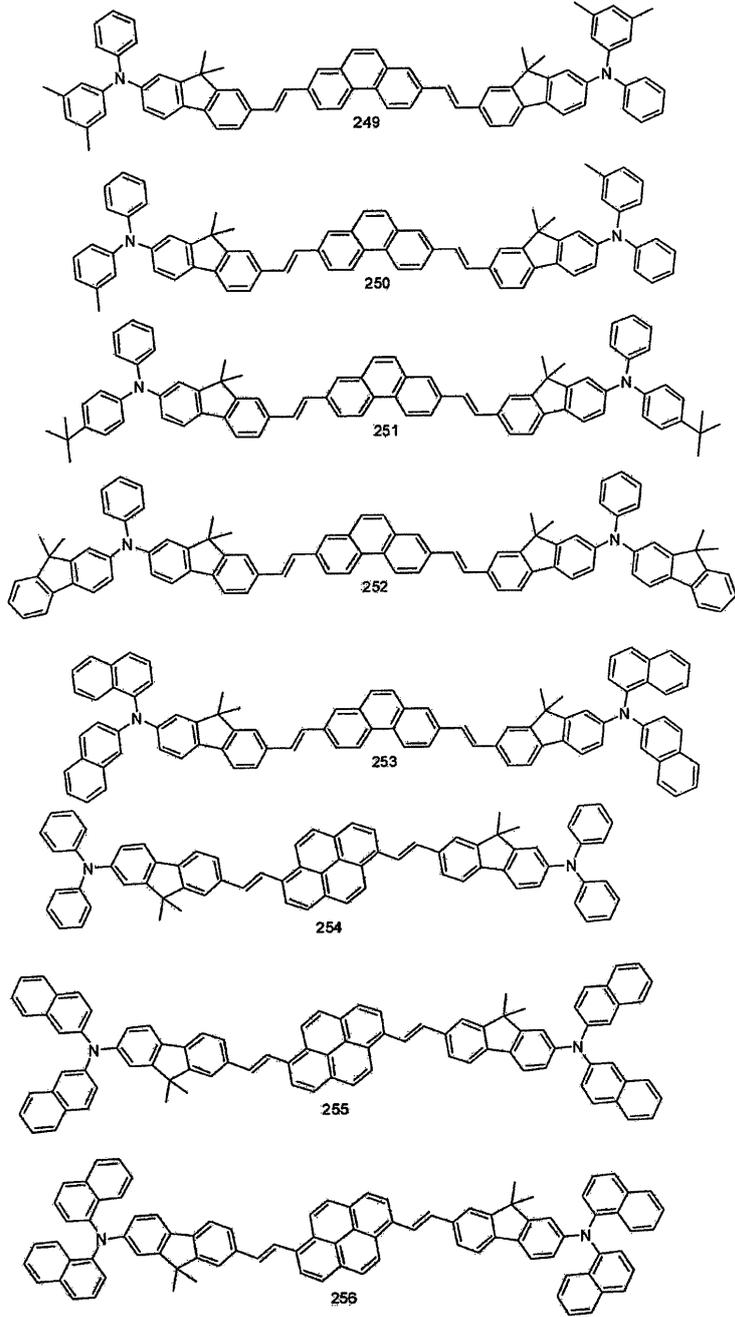


10

20

30

【化 4 9】

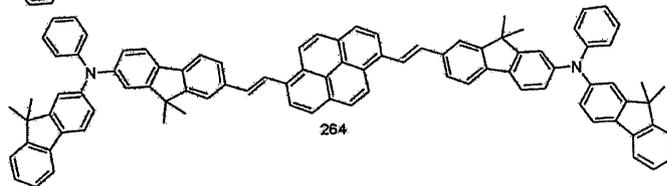
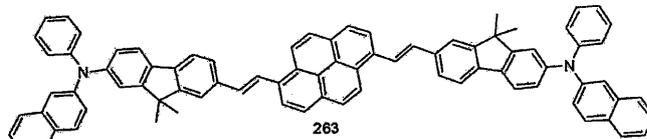
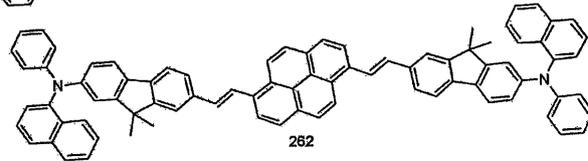
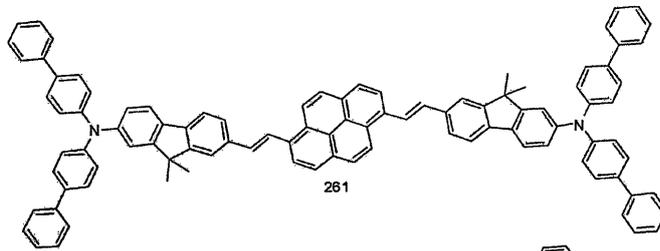
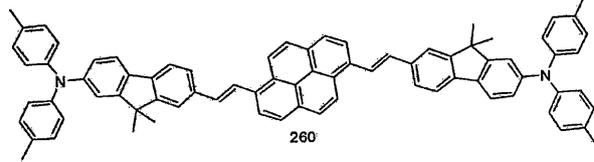
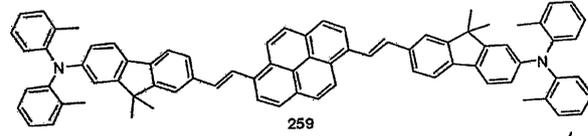
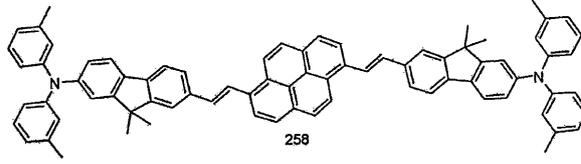
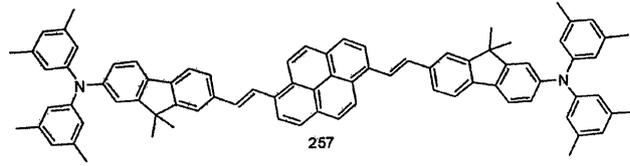


10

20

30

【化 5 0】

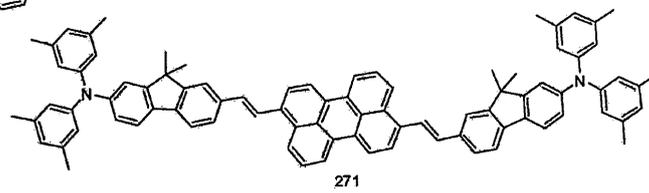
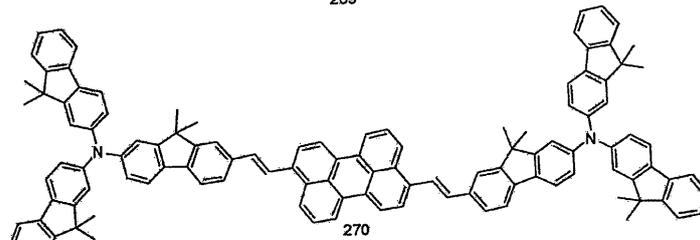
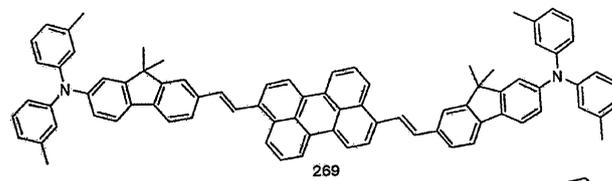
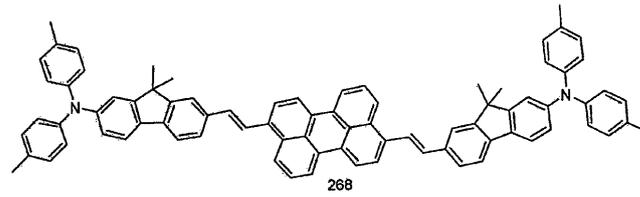
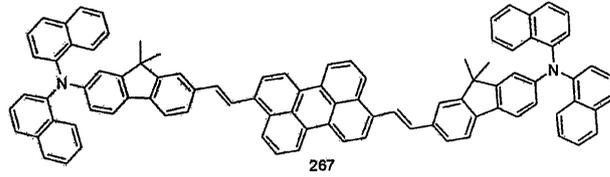
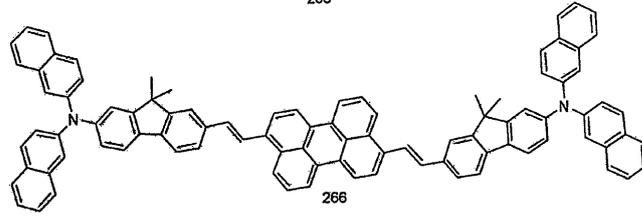
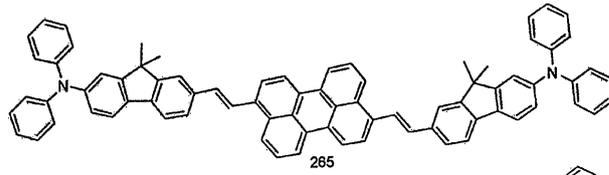


10

20

30

【化 5 1】



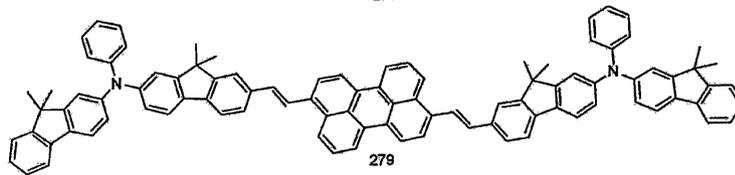
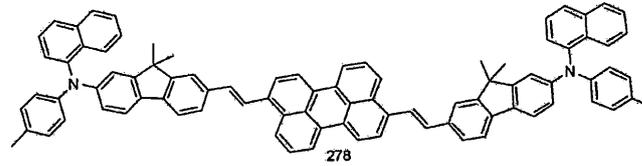
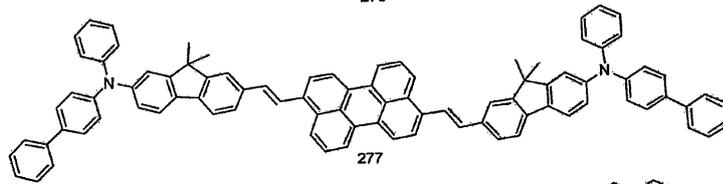
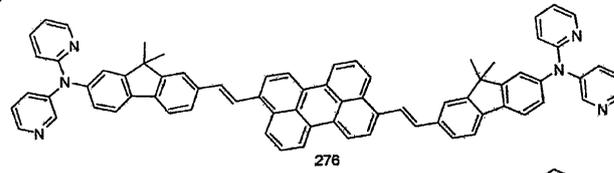
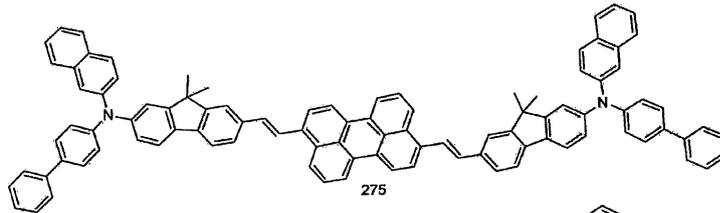
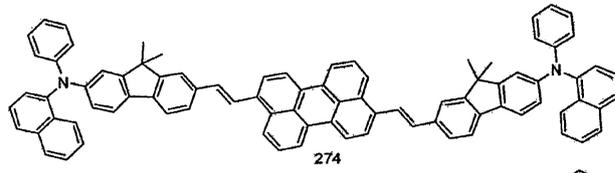
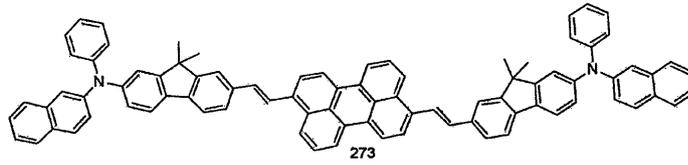
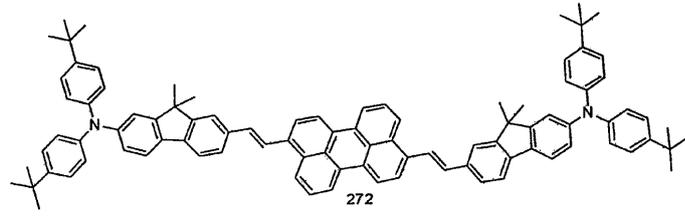
10

20

30

【 0 0 3 8 】

【化 5 2】

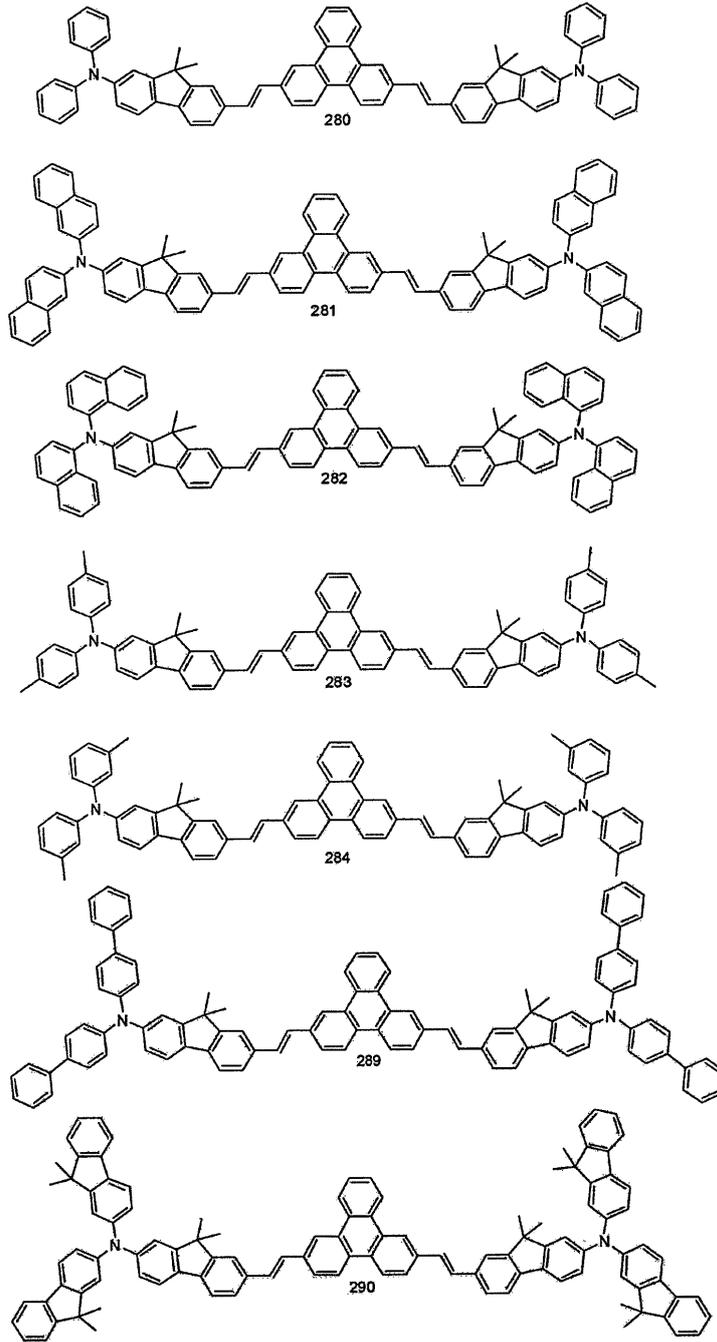


10

20

30

【化 5 3】

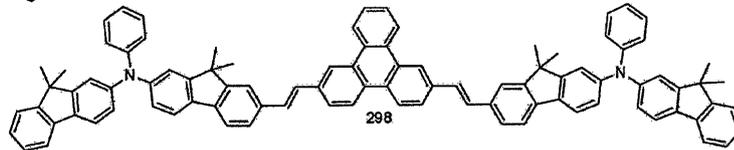
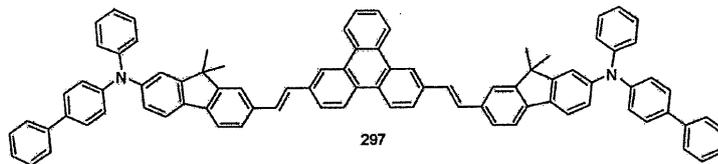
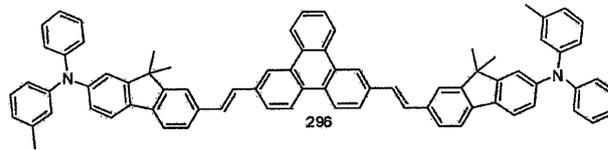
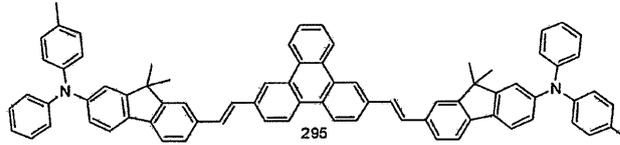
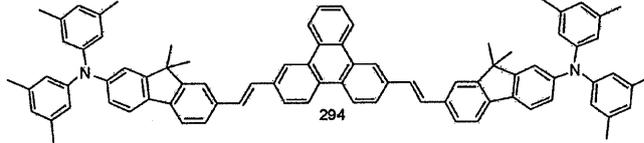
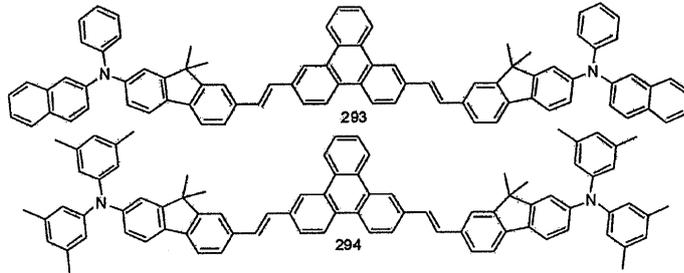
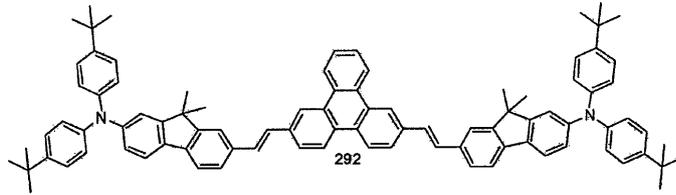
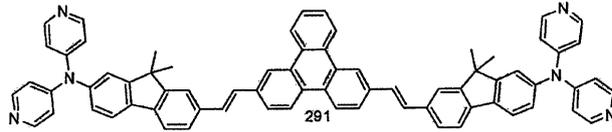


10

20

30

【化 5 4】

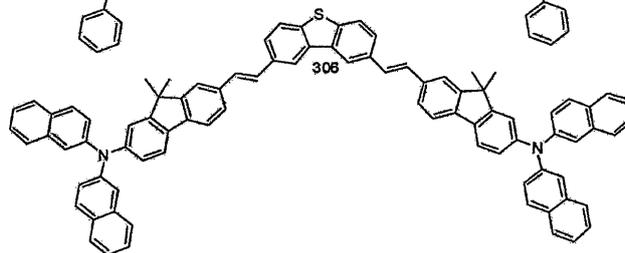
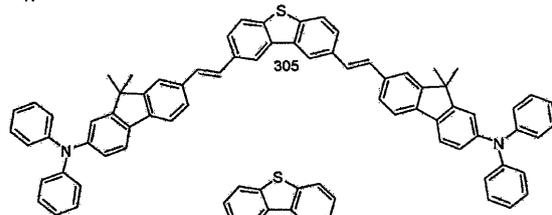
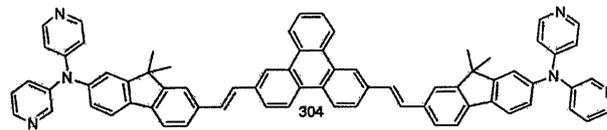
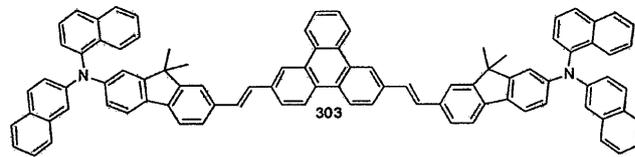
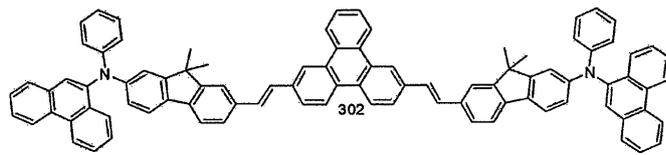
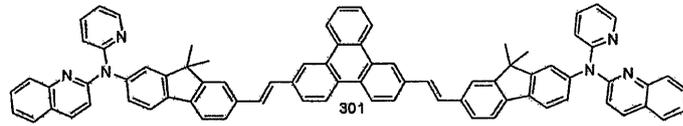
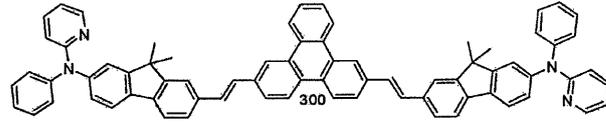
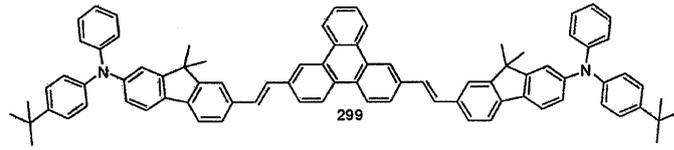


10

20

30

【化 5 5】

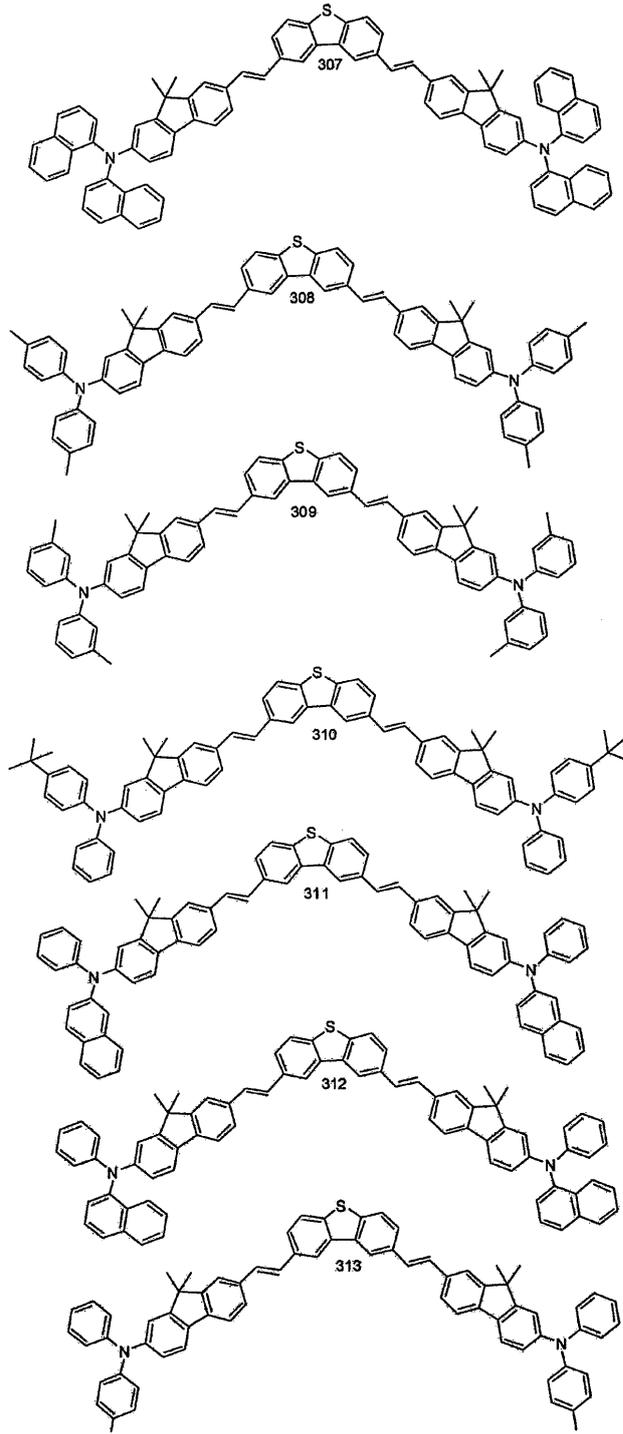


10

20

30

【化 5 6】



10

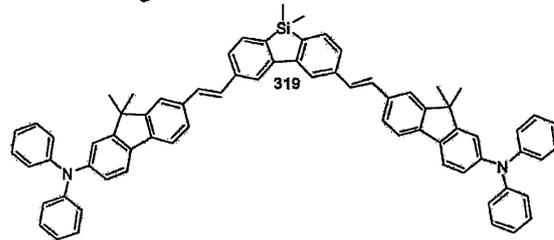
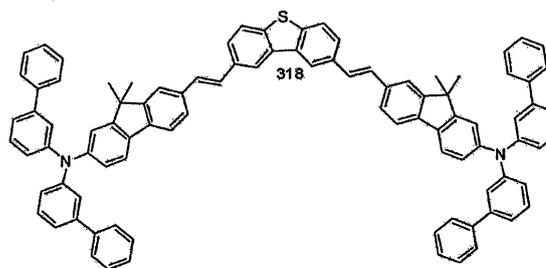
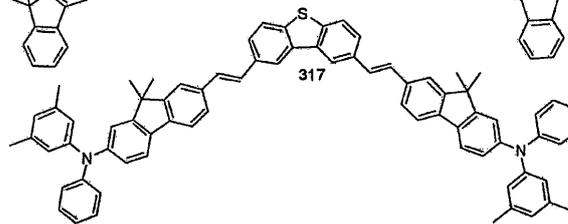
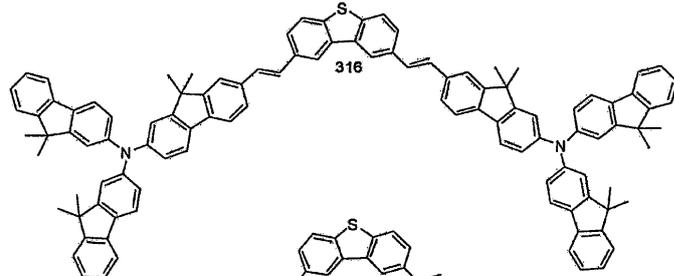
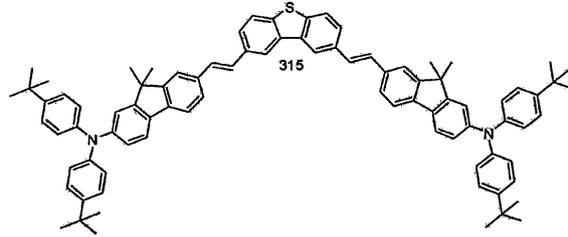
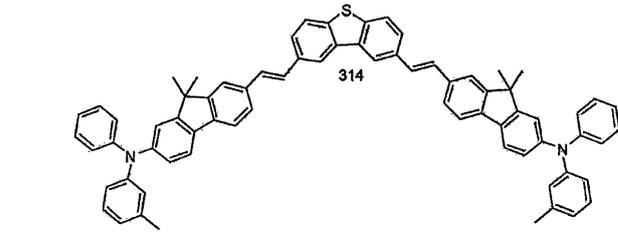
20

30

40

【 0 0 3 9 】

【化 5 7】

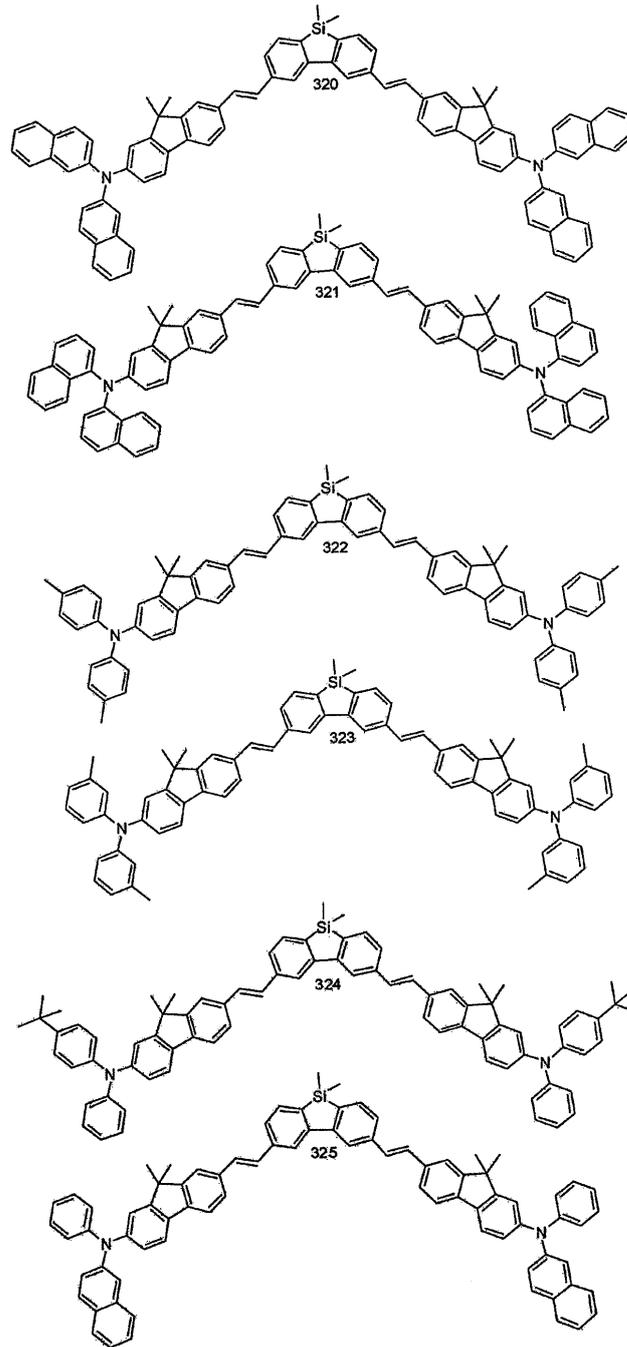


10

20

30

【化 5 8】

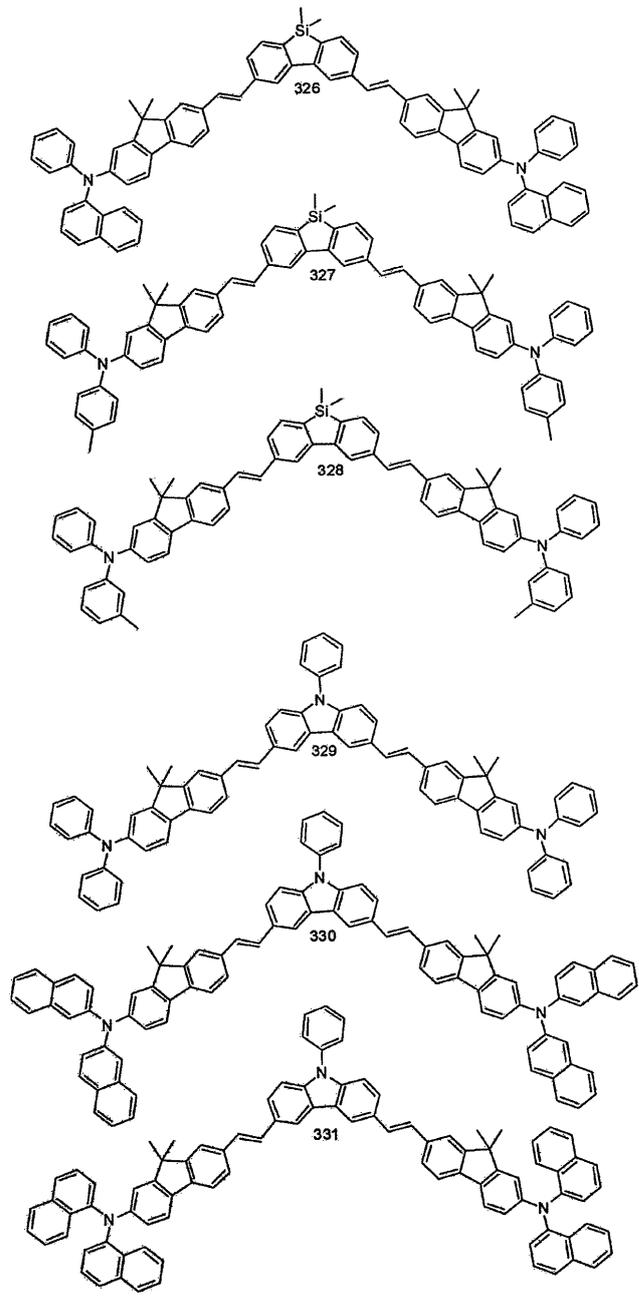


10

20

30

【化 5 9】

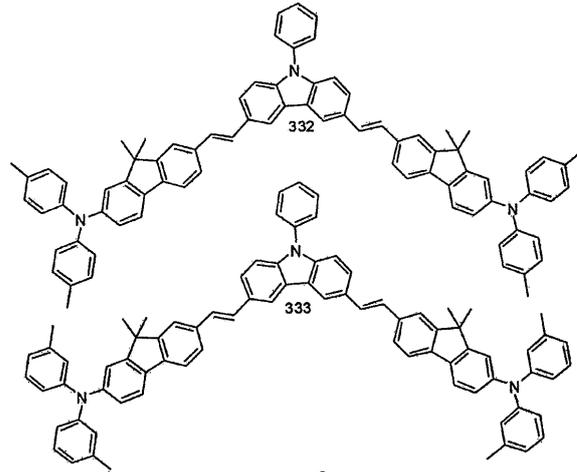


10

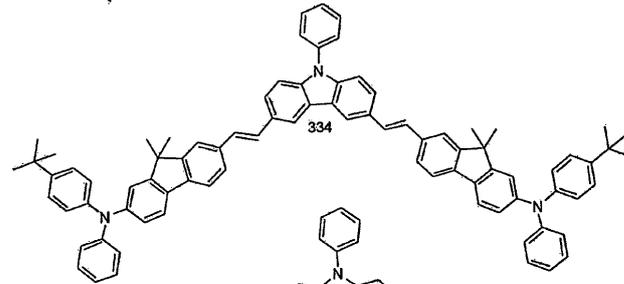
20

30

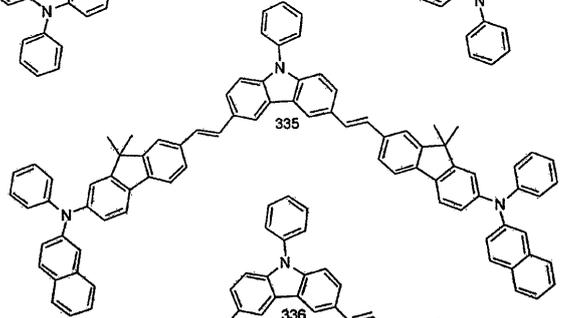
【化 60】



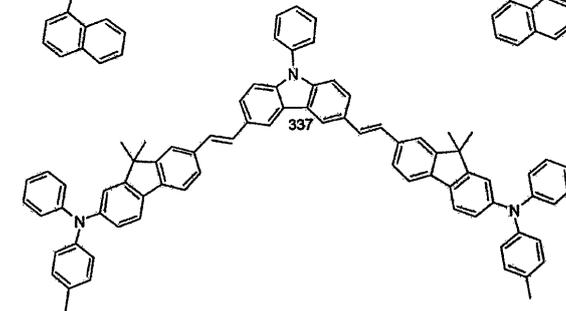
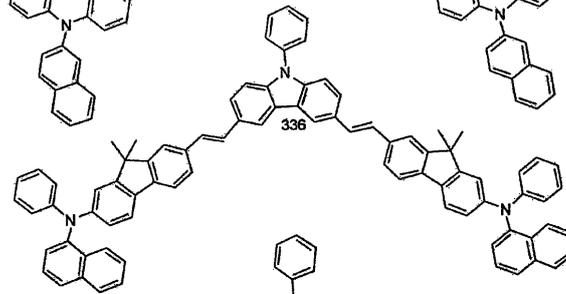
10



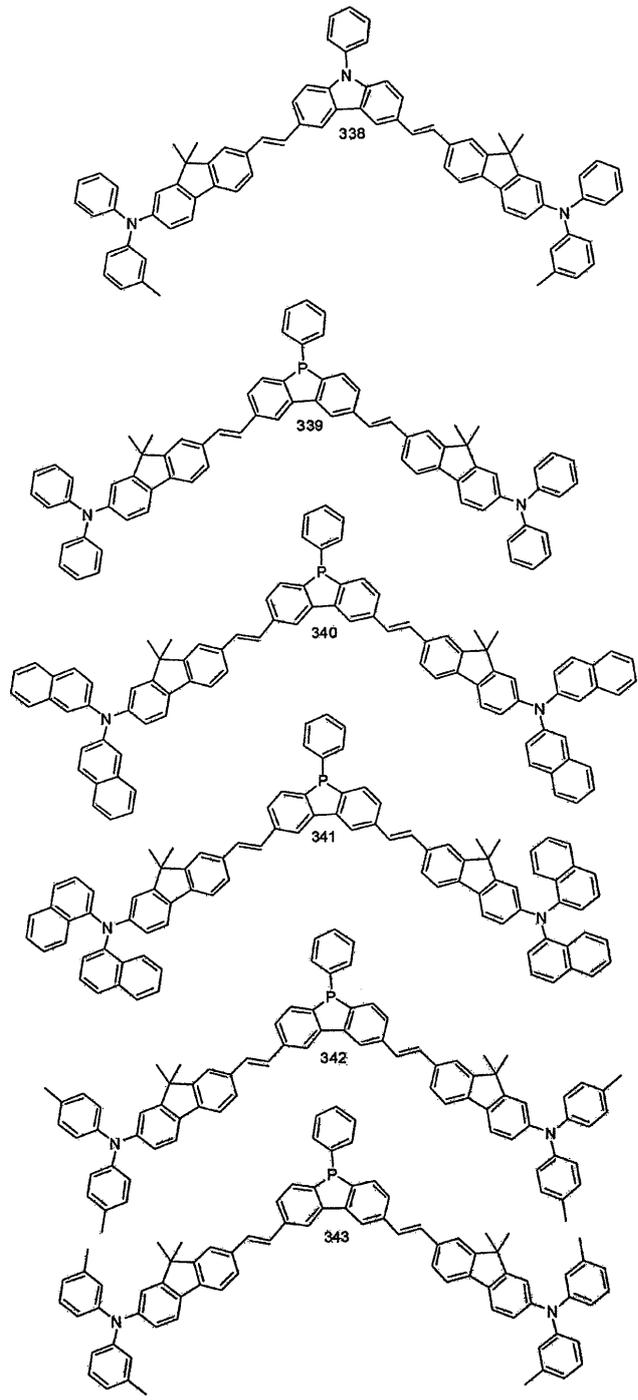
20



30



【化 6 1】



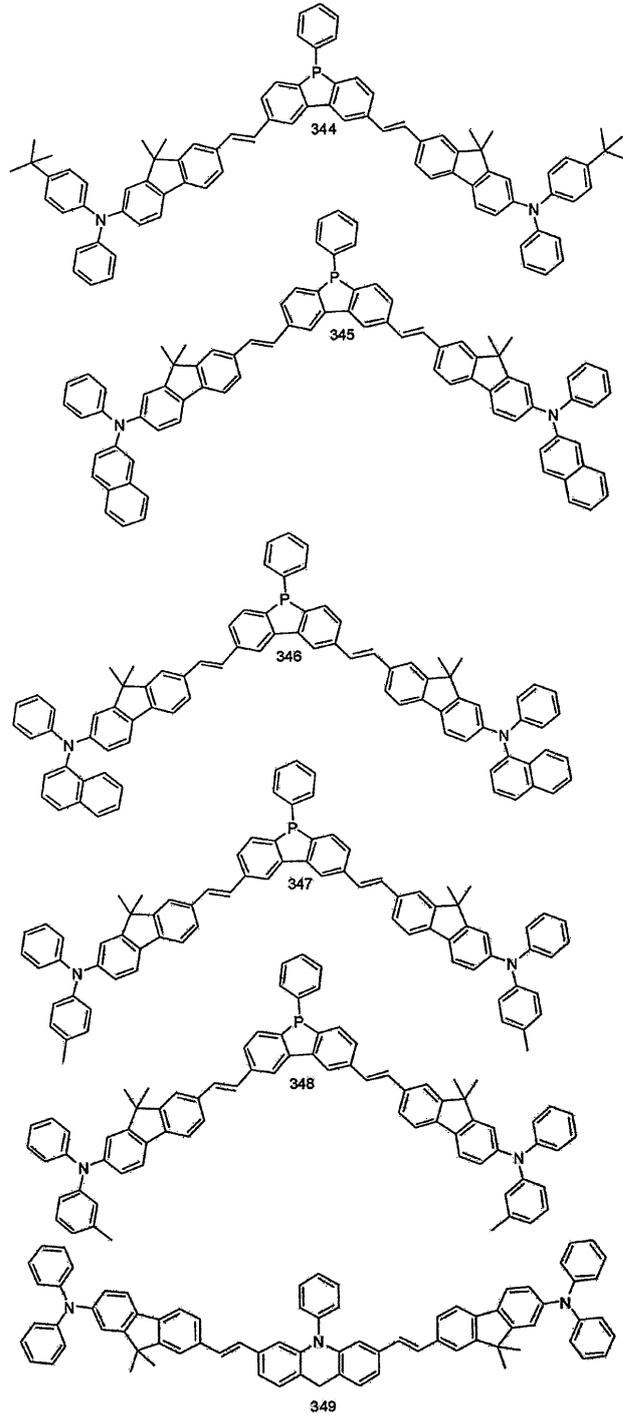
10

20

30

【 0 0 4 0 】

【化 6 2】

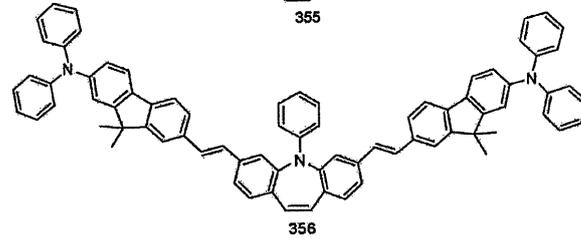
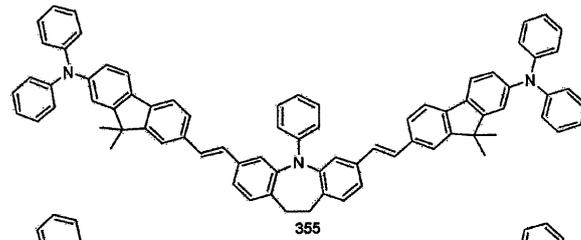
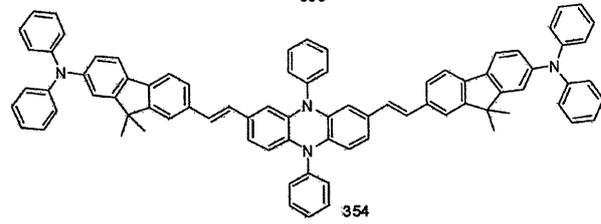
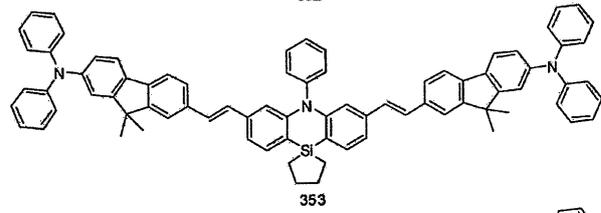
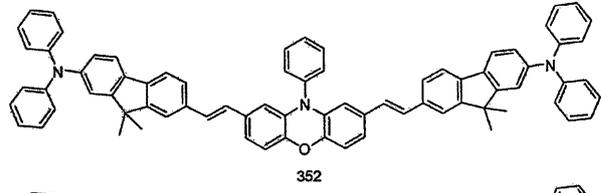
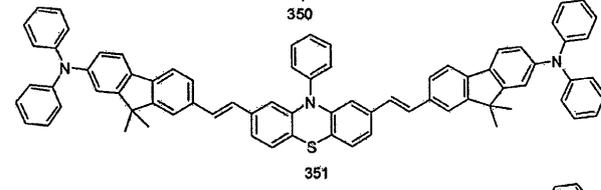
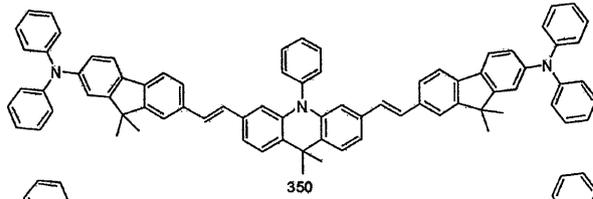


10

20

30

【化 6 3】

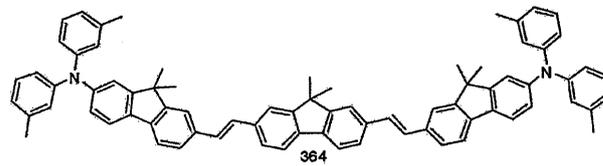
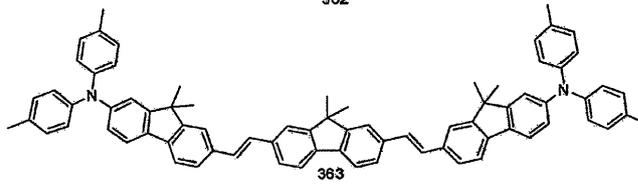
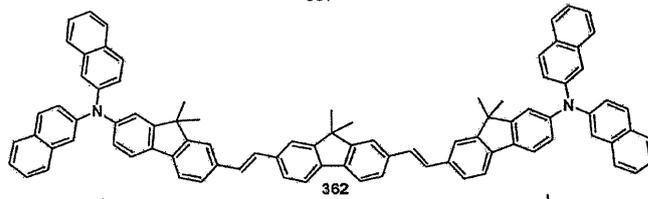
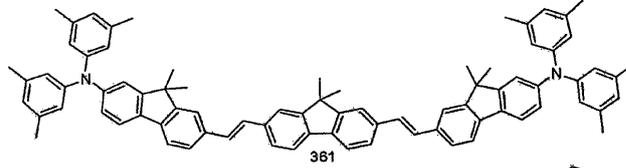
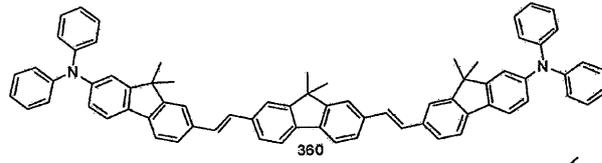
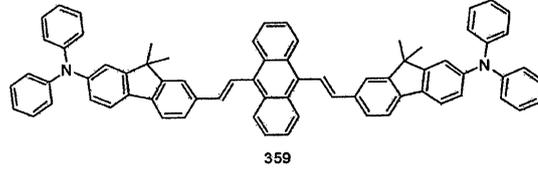
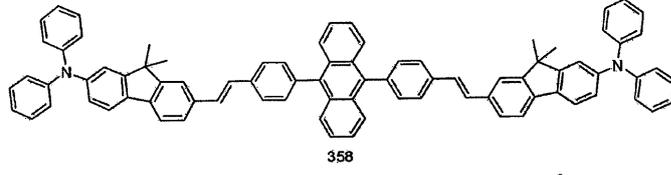
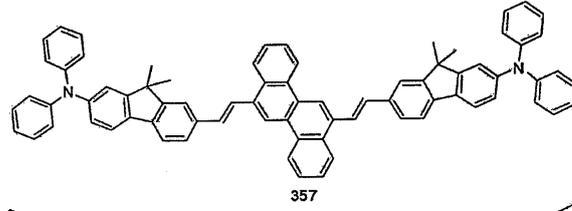


10

20

30

【化 6 4】

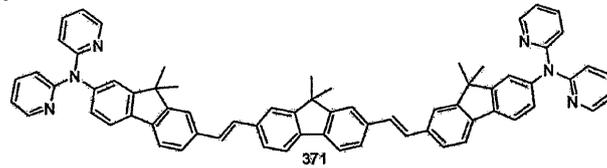
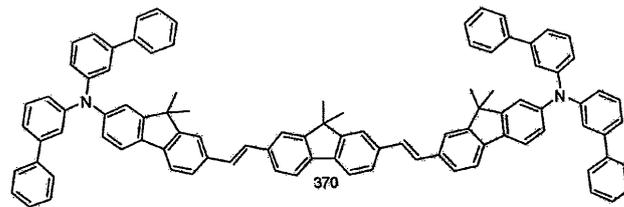
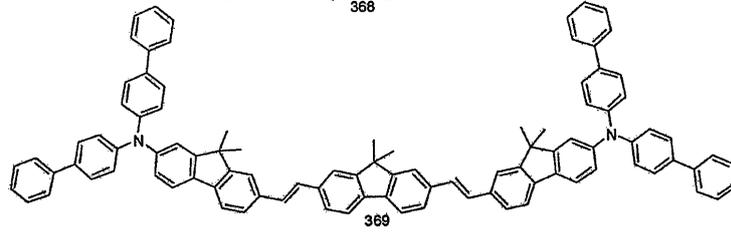
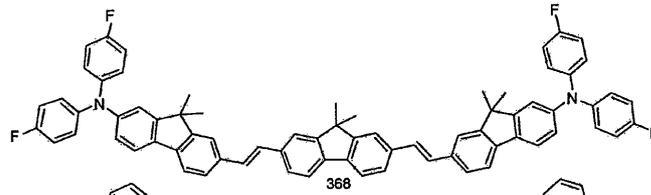
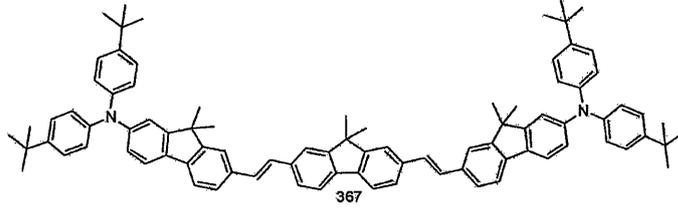
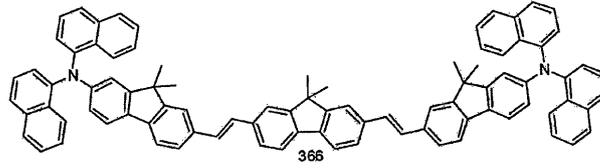
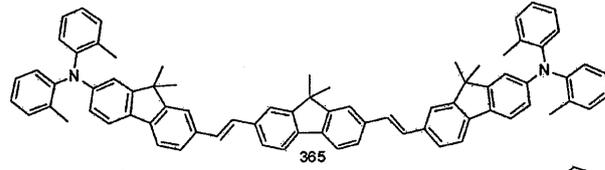


10

20

30

【化 6 5】

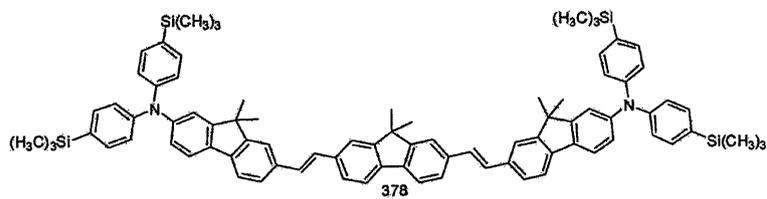
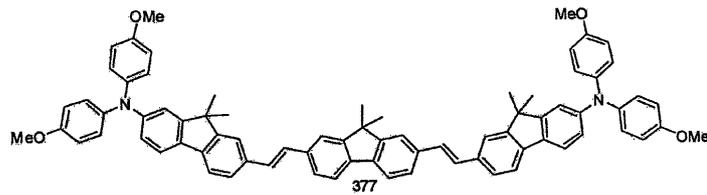
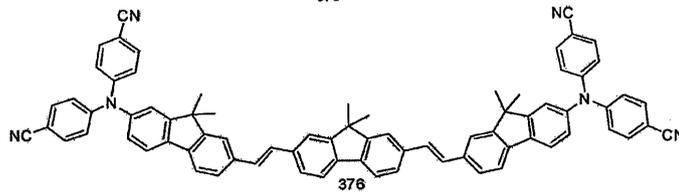
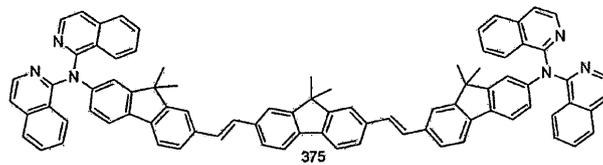
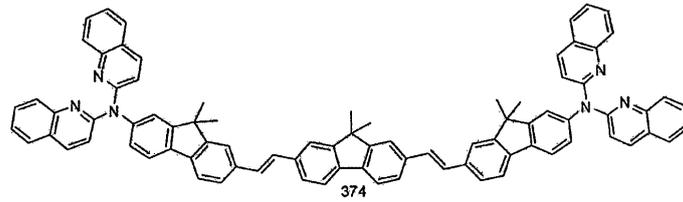
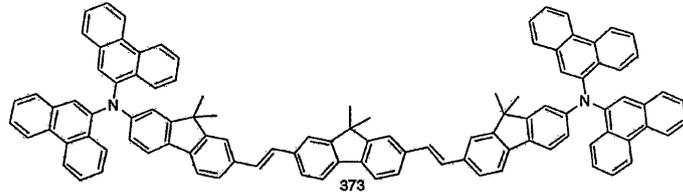
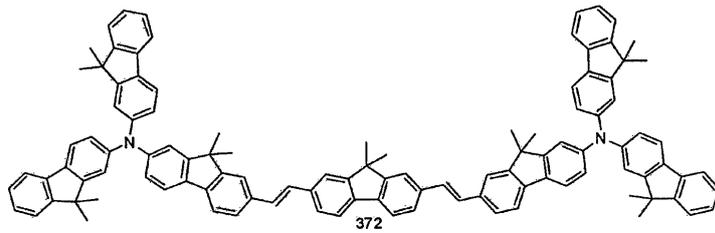


10

20

30

【化 6 6】



10

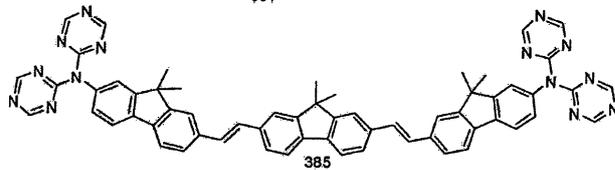
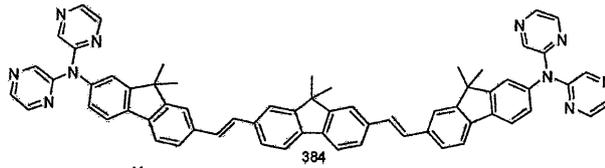
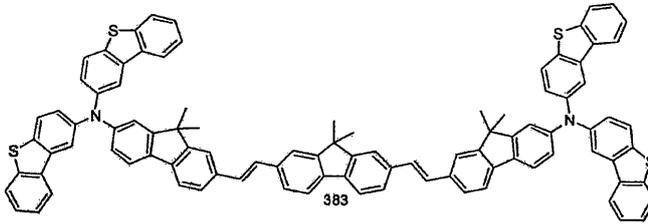
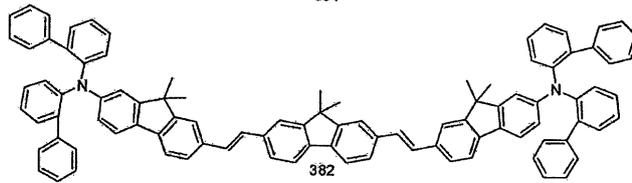
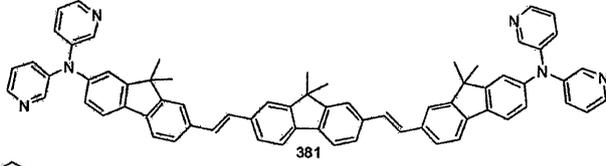
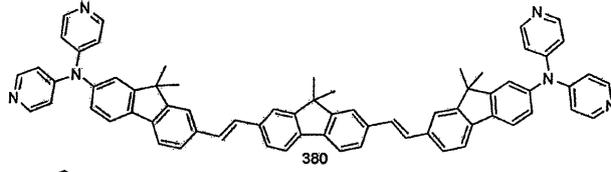
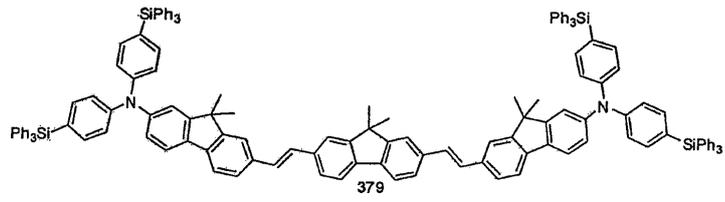
20

30

40

【 0 0 4 1 】

【化 6 7】

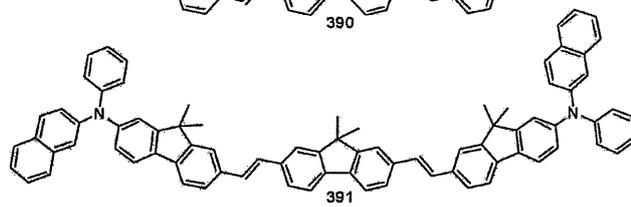
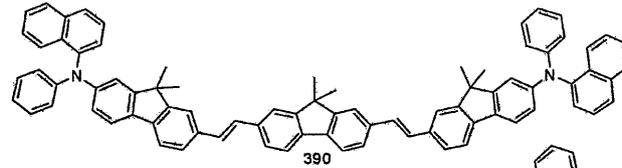
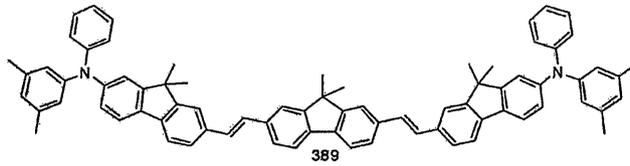
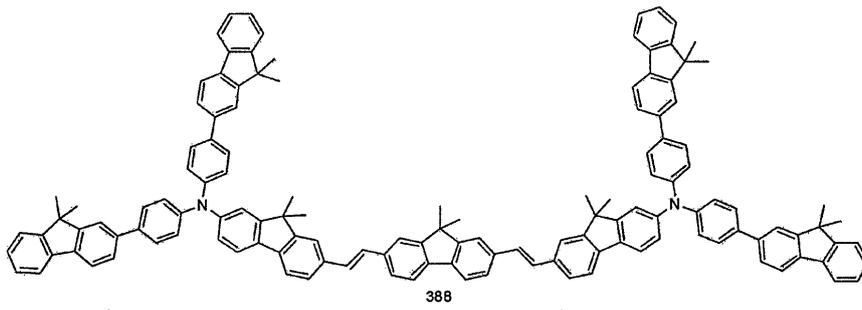
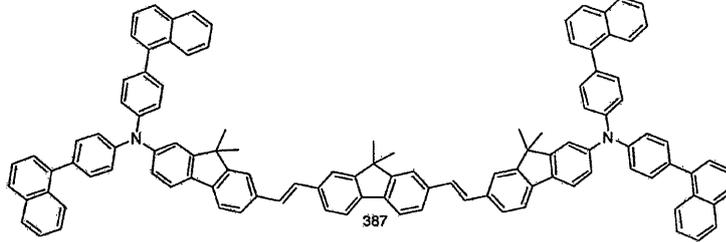
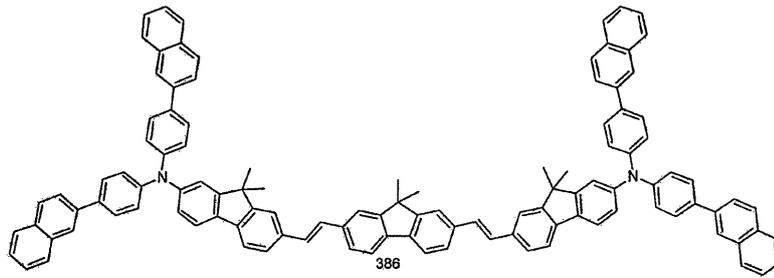


10

20

30

【化 6 8】

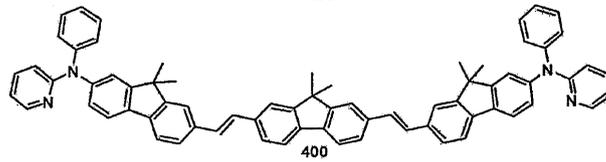
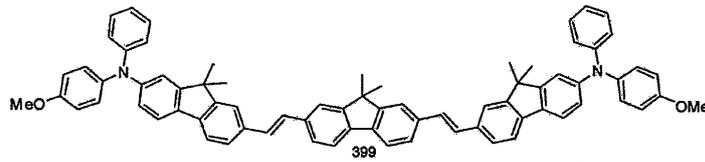
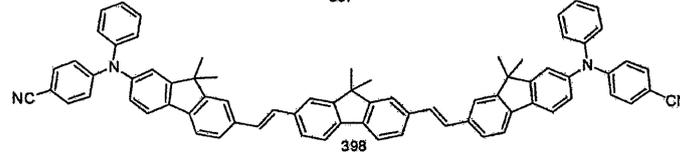
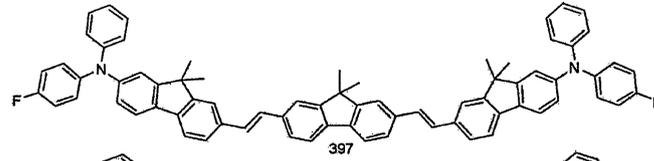
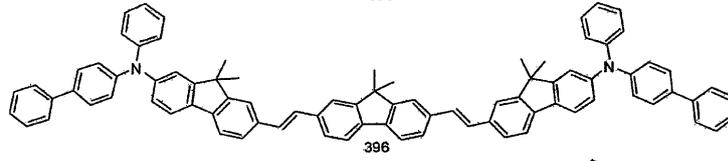
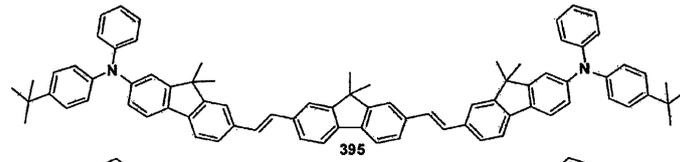
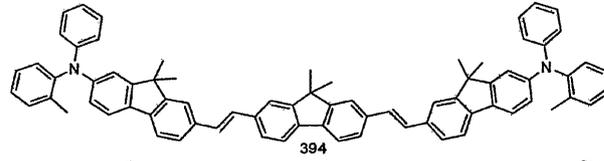
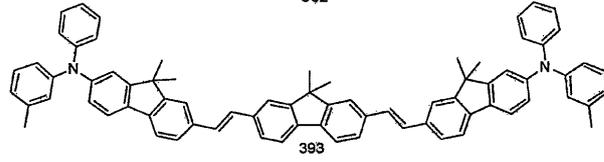
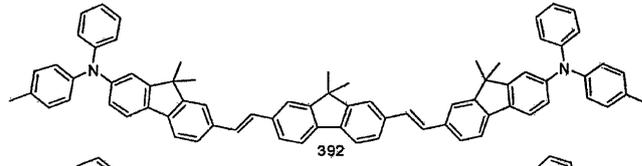


10

20

30

【化 6 9】

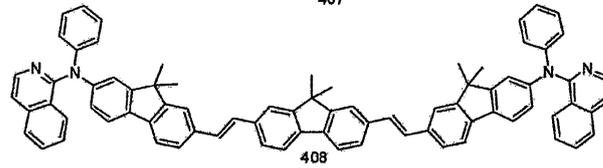
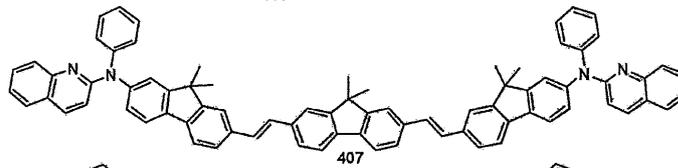
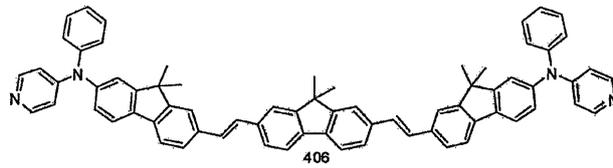
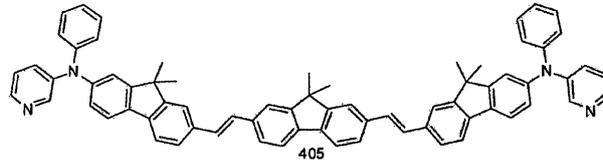
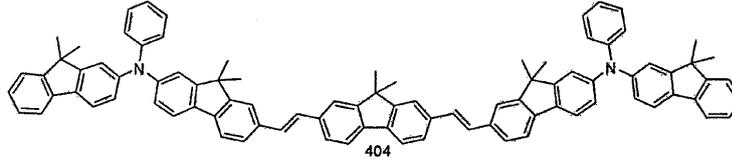
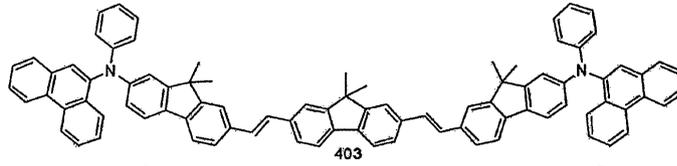
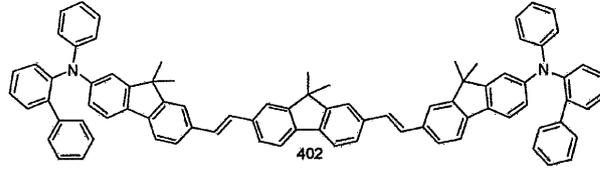
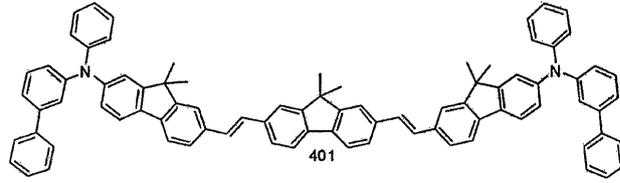


10

20

30

【化 7 0】

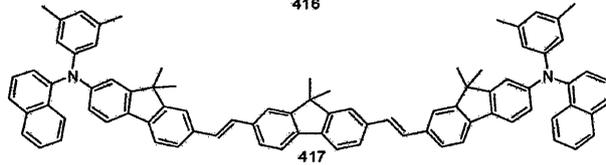
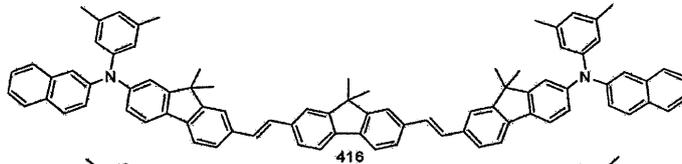
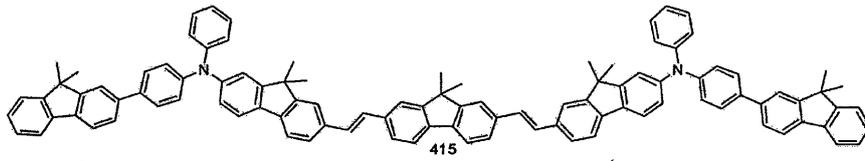
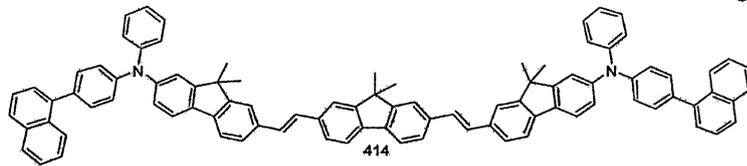
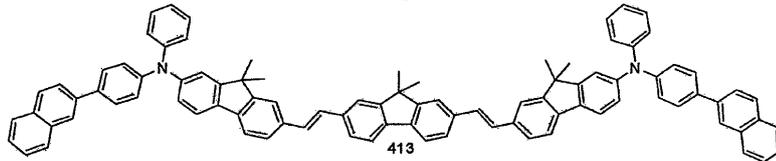
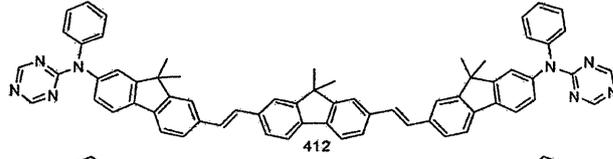
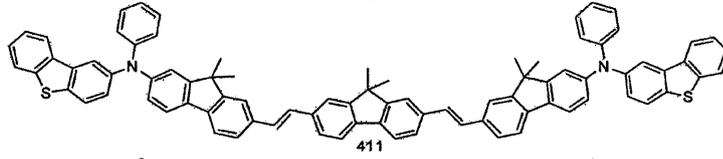
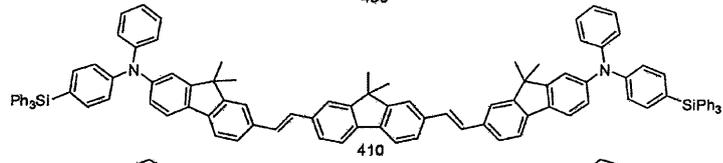
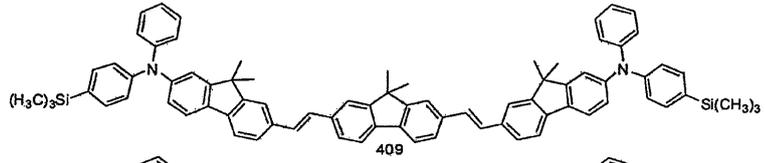


10

20

30

【化 7 1】



10

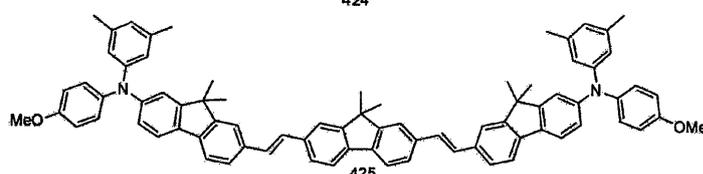
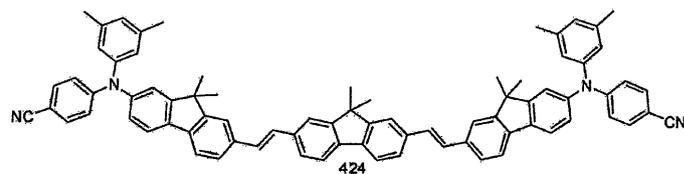
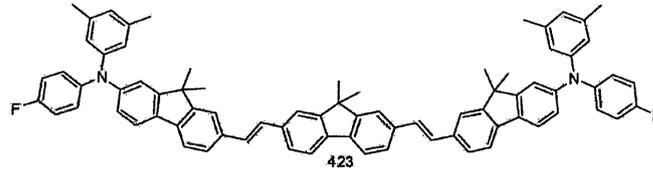
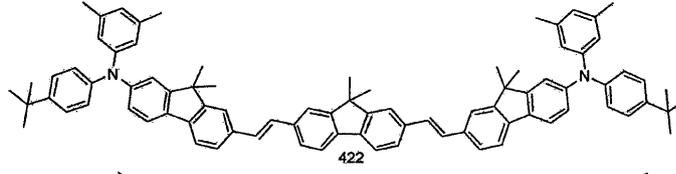
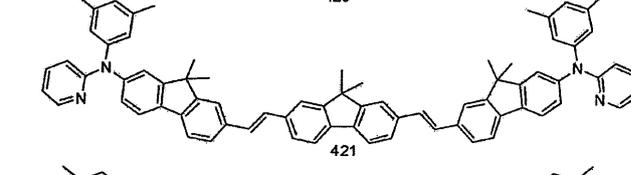
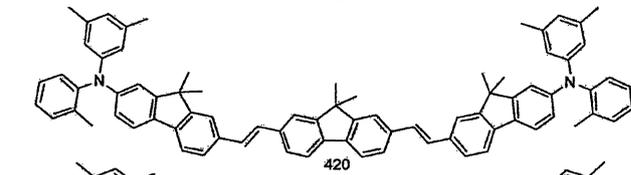
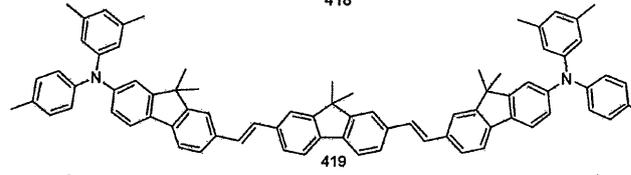
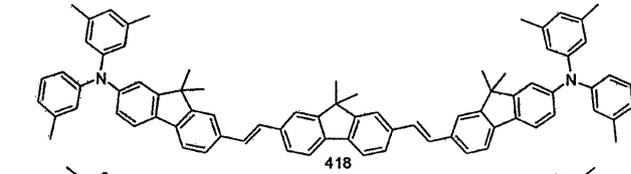
20

30

40

【 0 0 4 2】

【化 7 2】

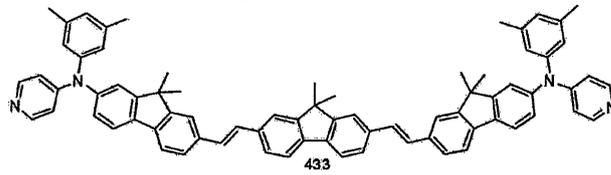
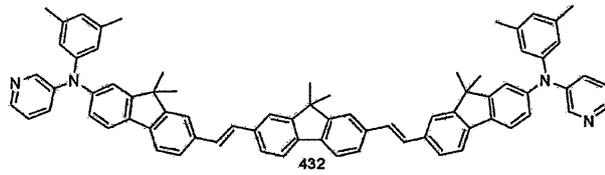
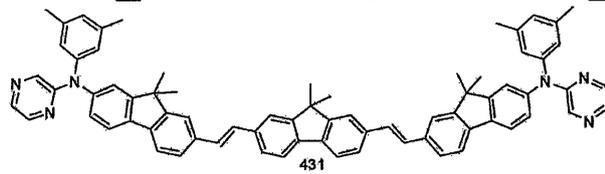
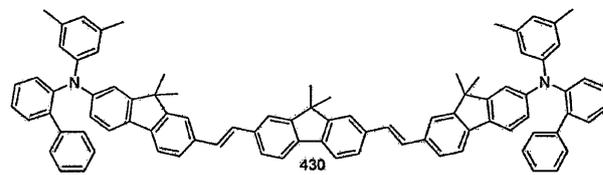
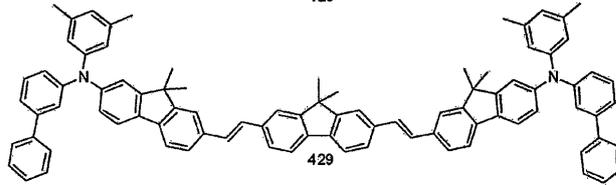
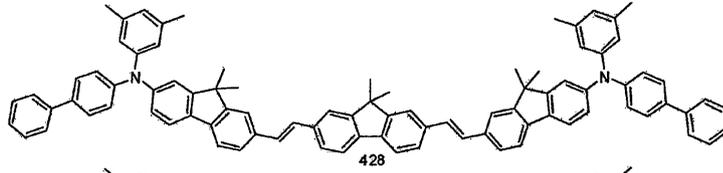
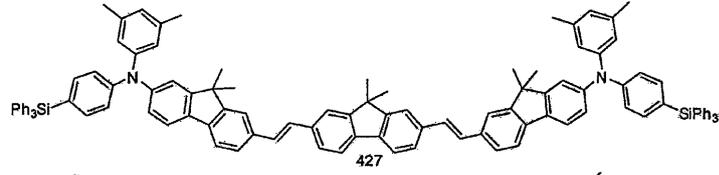
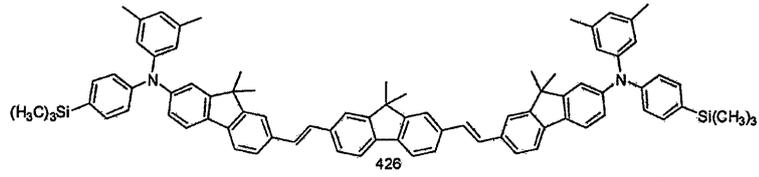


10

20

30

【化 7 3】

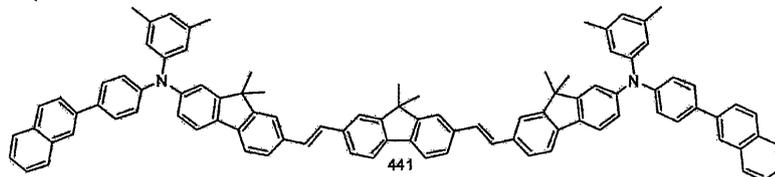
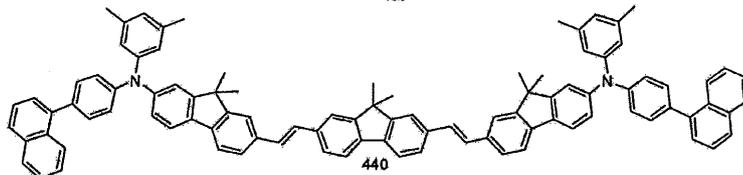
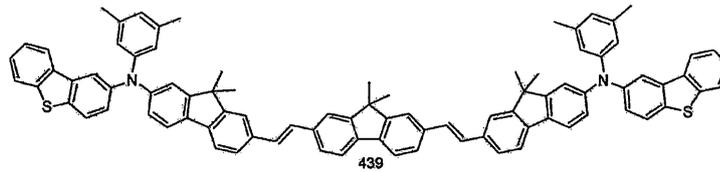
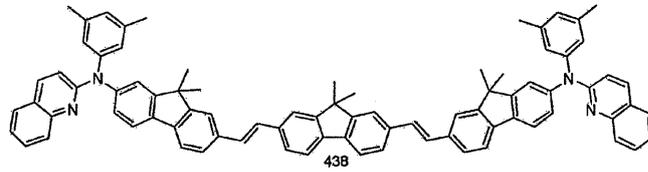
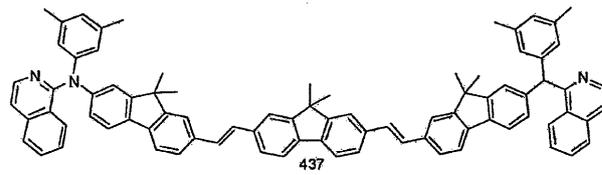
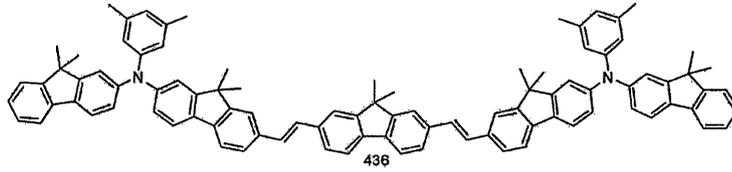
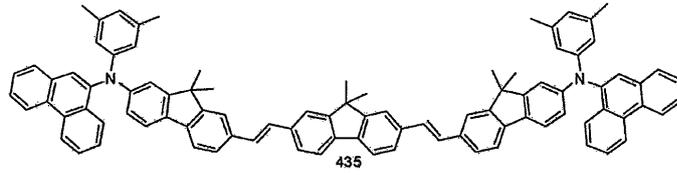
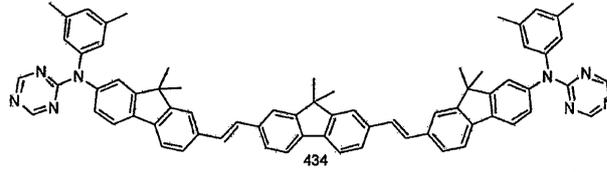


10

20

30

【化 7 4】

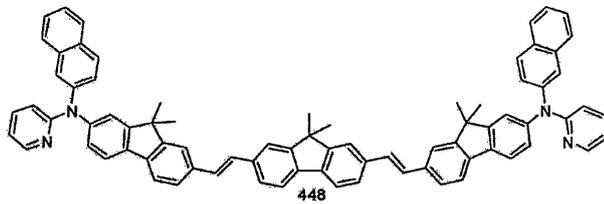
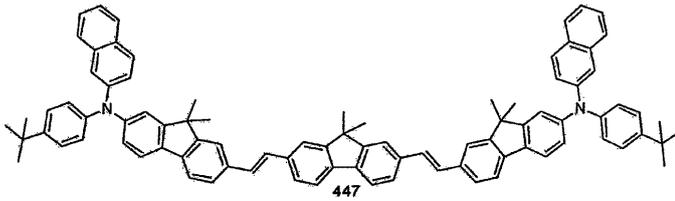
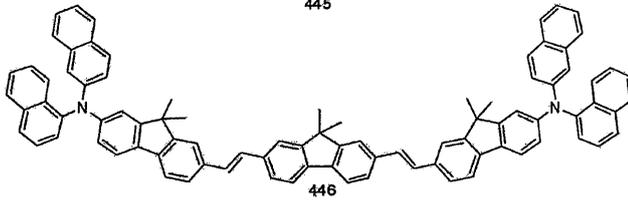
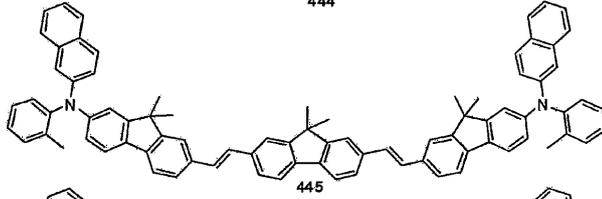
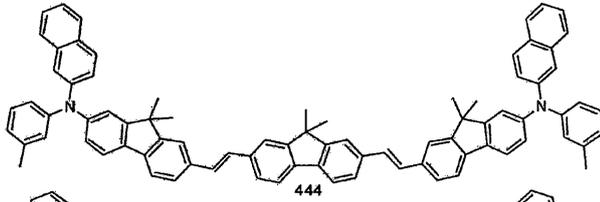
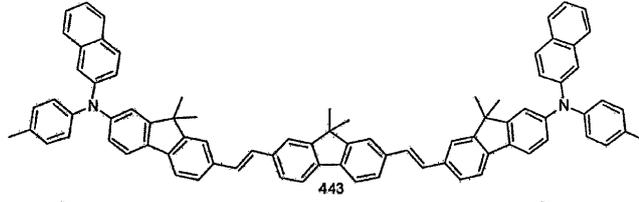
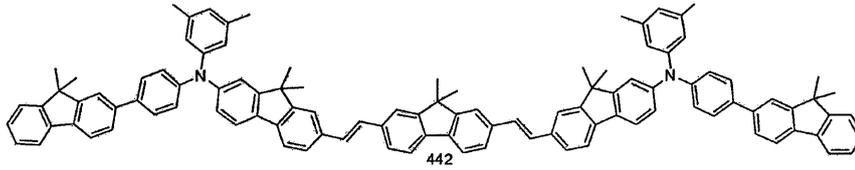


10

20

30

【化 7 5】

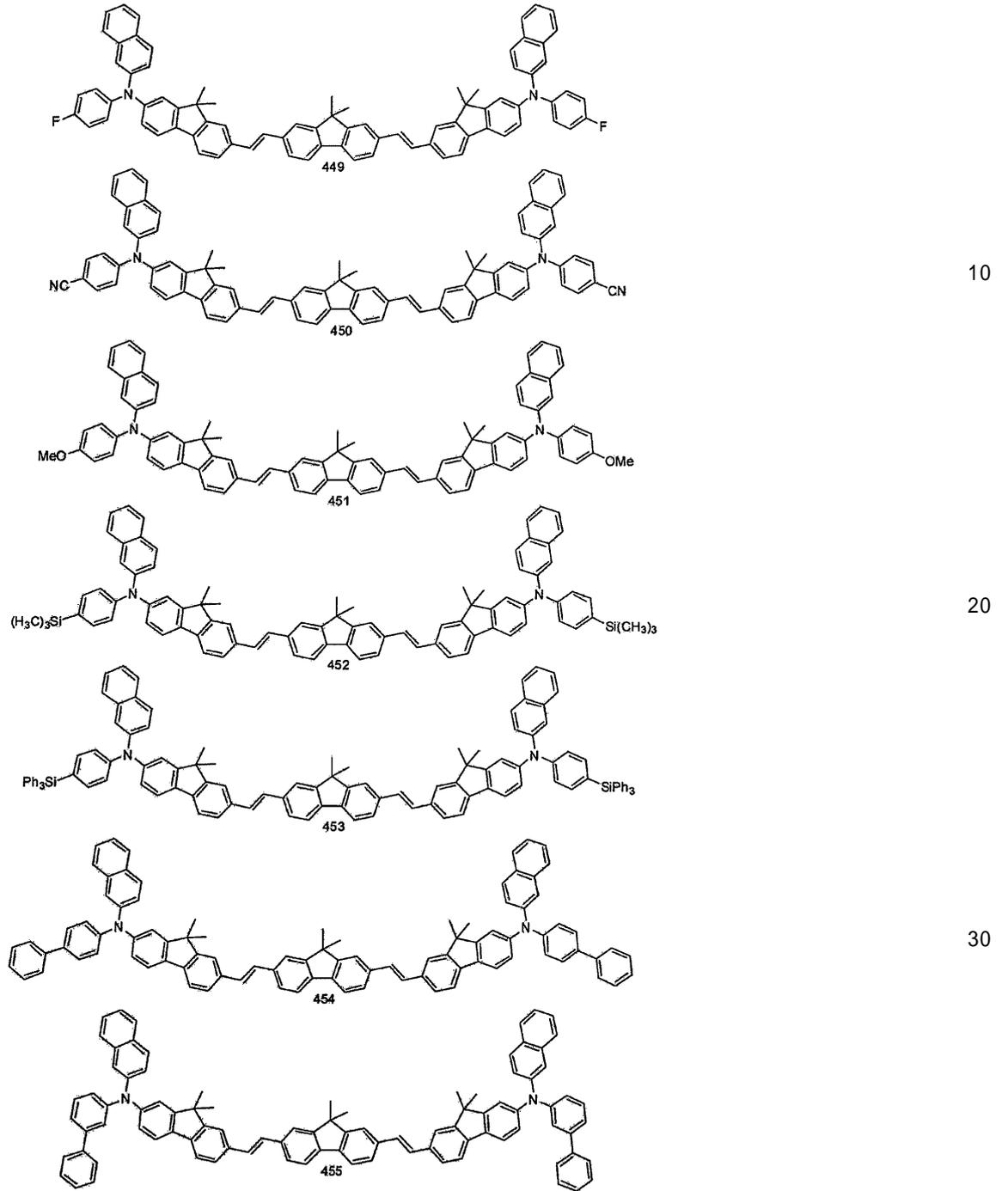


10

20

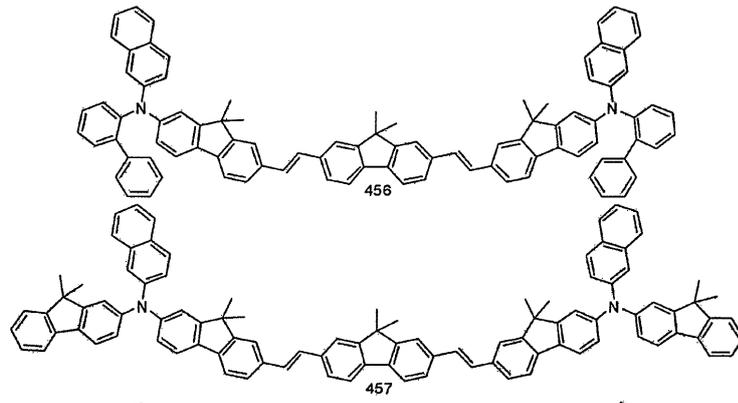
30

【化 7 6】

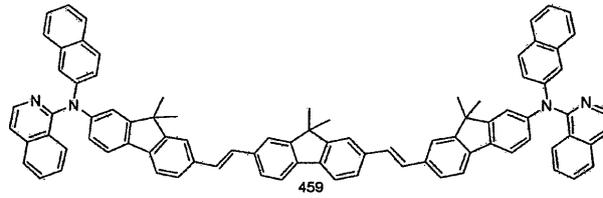
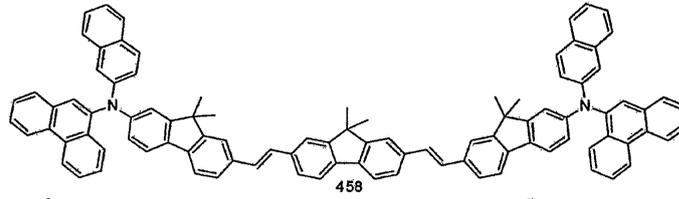


【 0 0 4 3 】

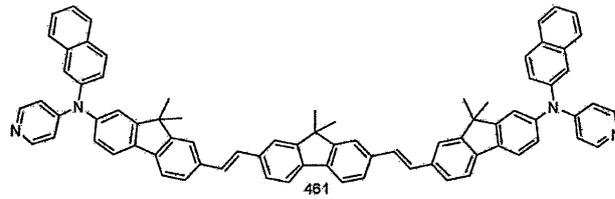
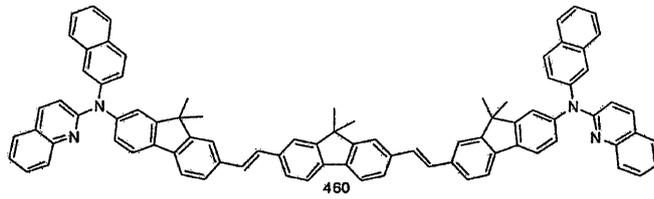
【化 7 7】



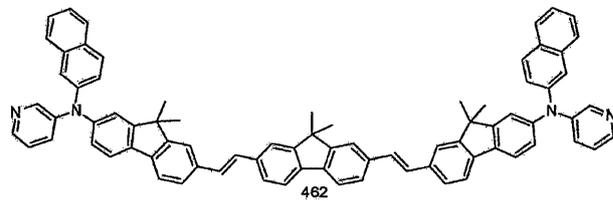
10



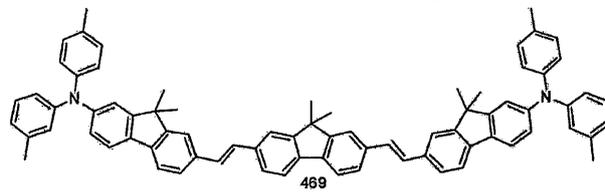
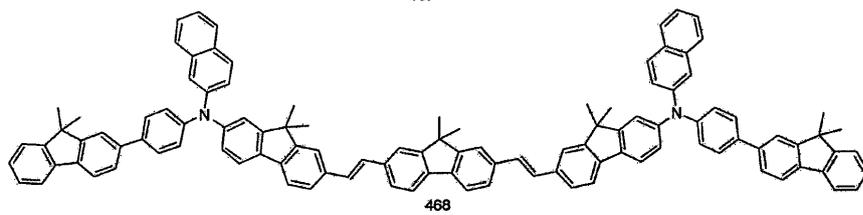
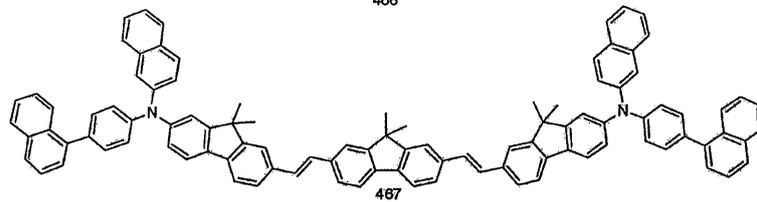
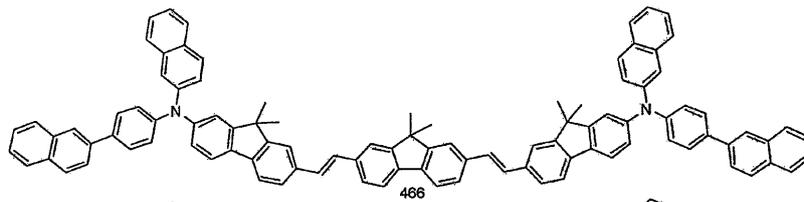
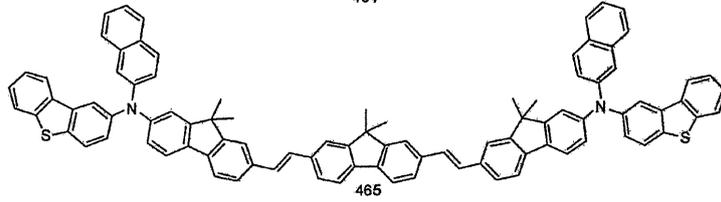
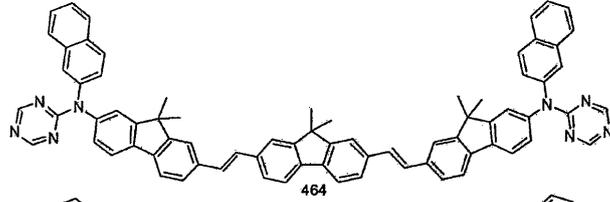
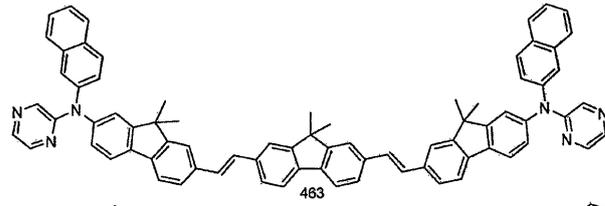
20



30



【化 7 8】

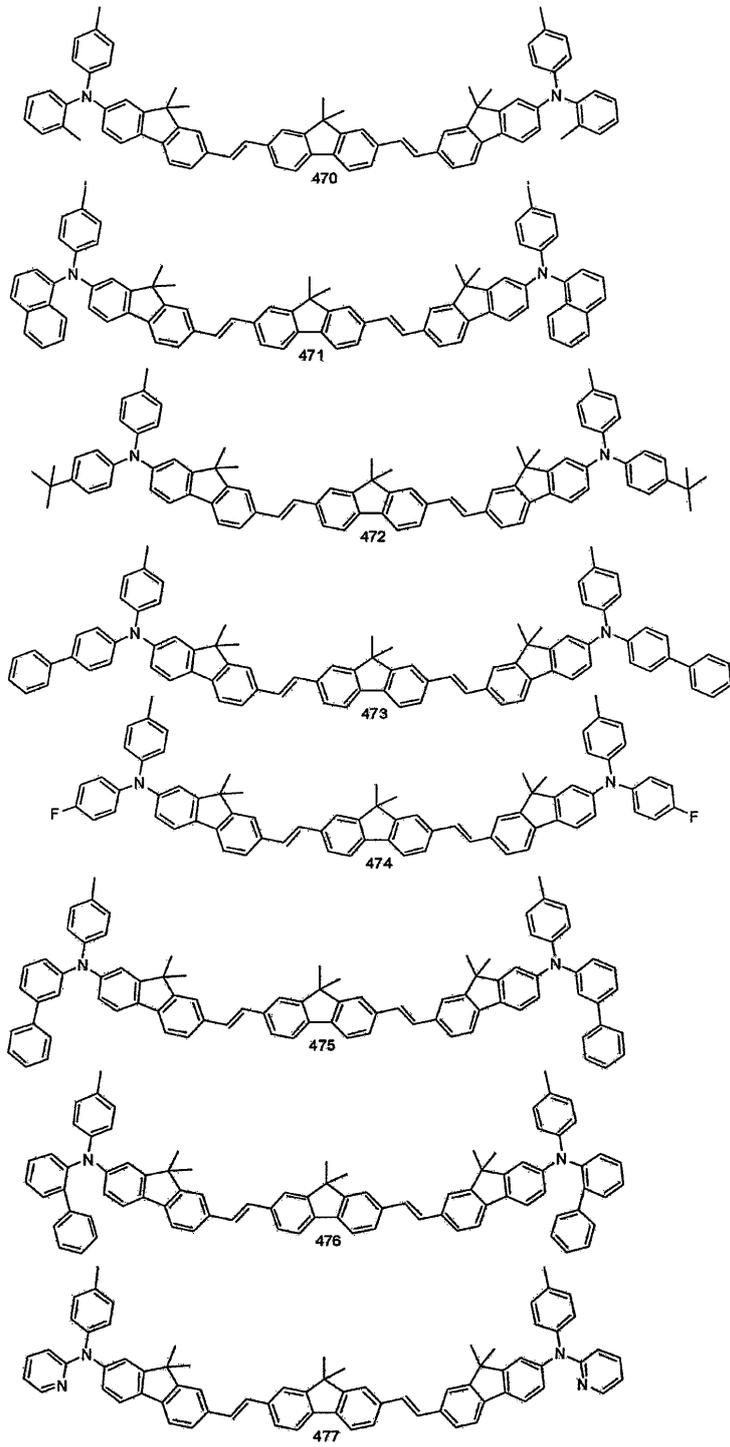


10

20

30

【化 7 9】

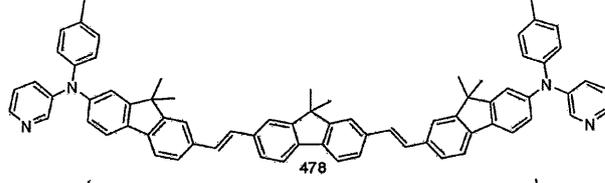
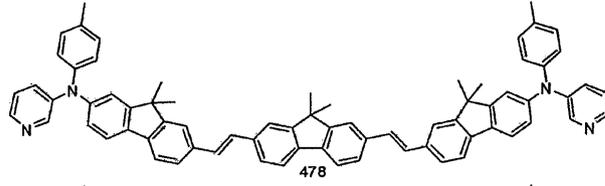


10

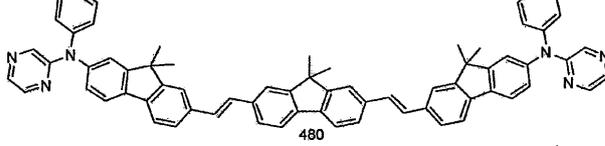
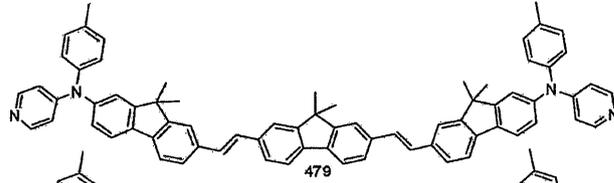
20

30

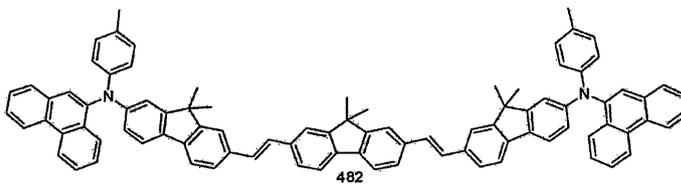
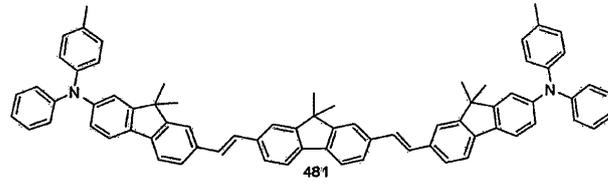
【化 8 0】



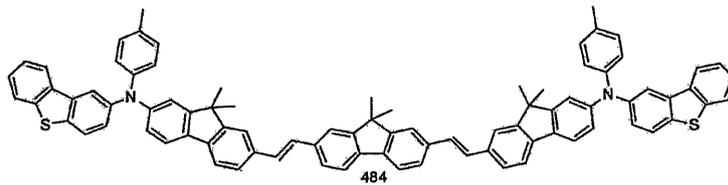
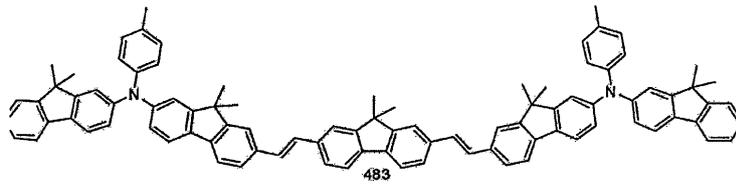
10



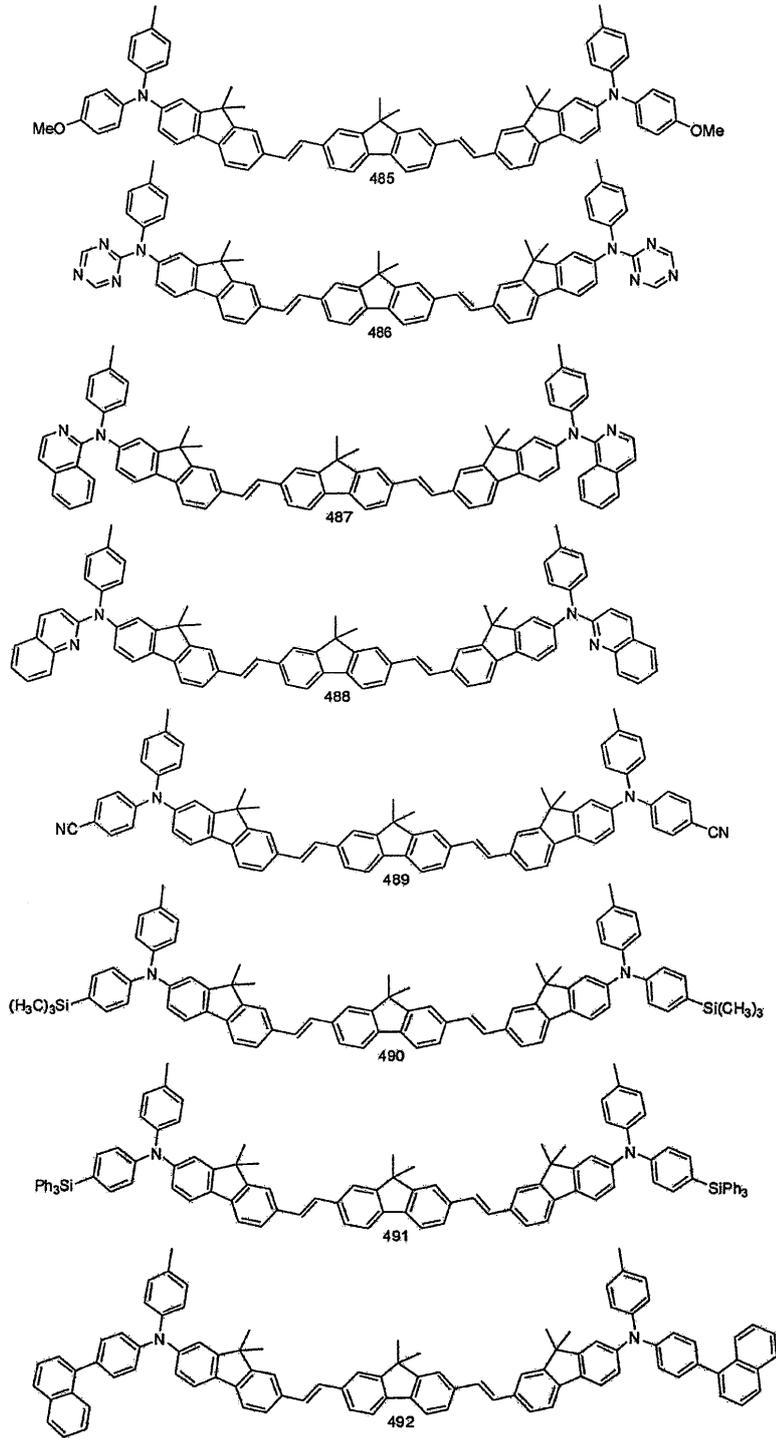
20



30



【化 8 1】



10

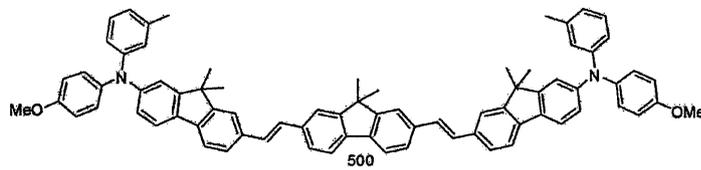
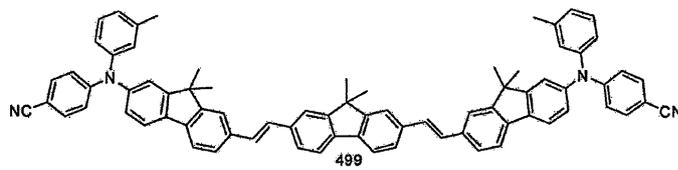
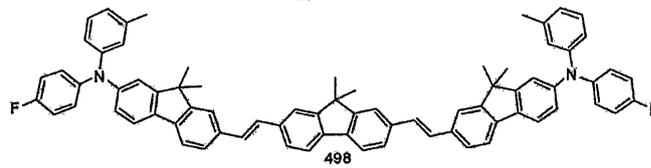
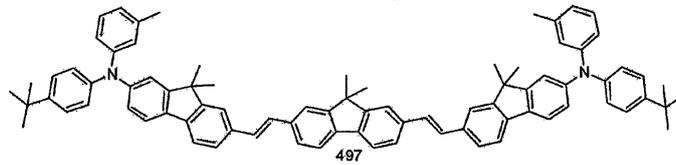
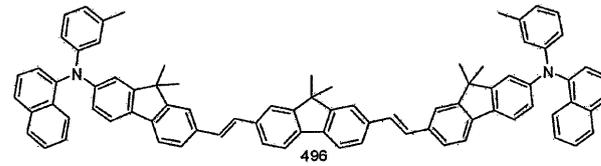
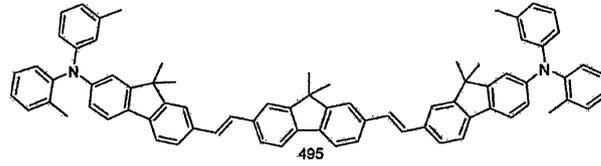
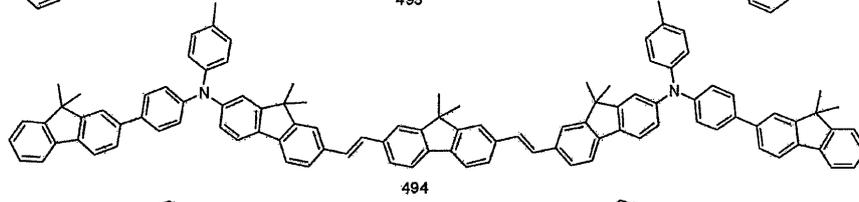
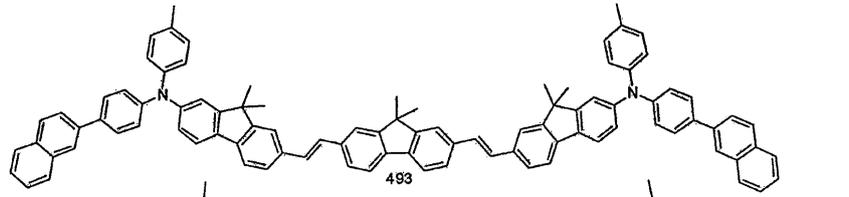
20

30

40

【 0 0 4 4 】

【化 8 2】

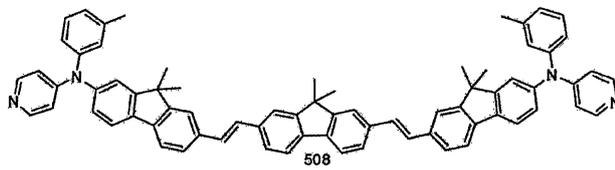
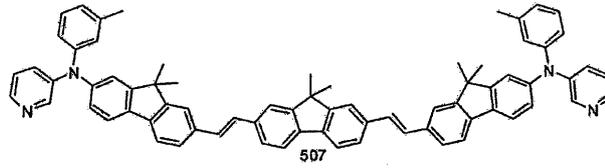
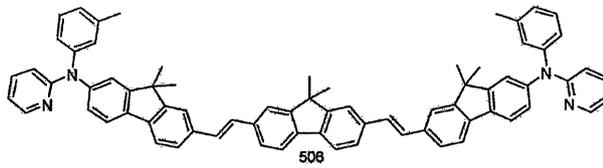
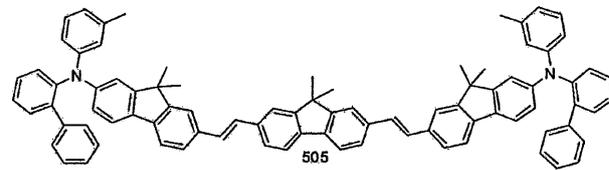
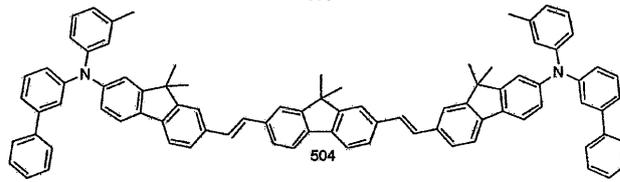
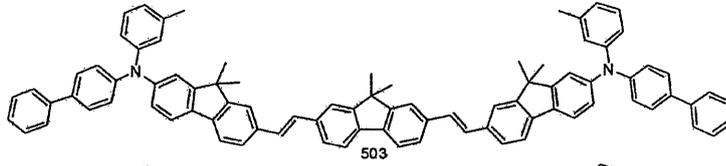
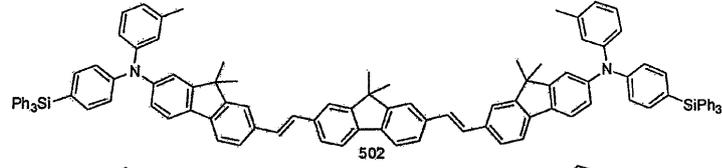
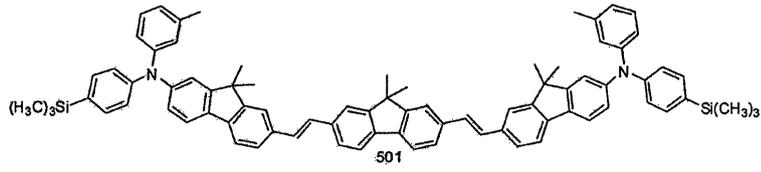


10

20

30

【化 8 3】

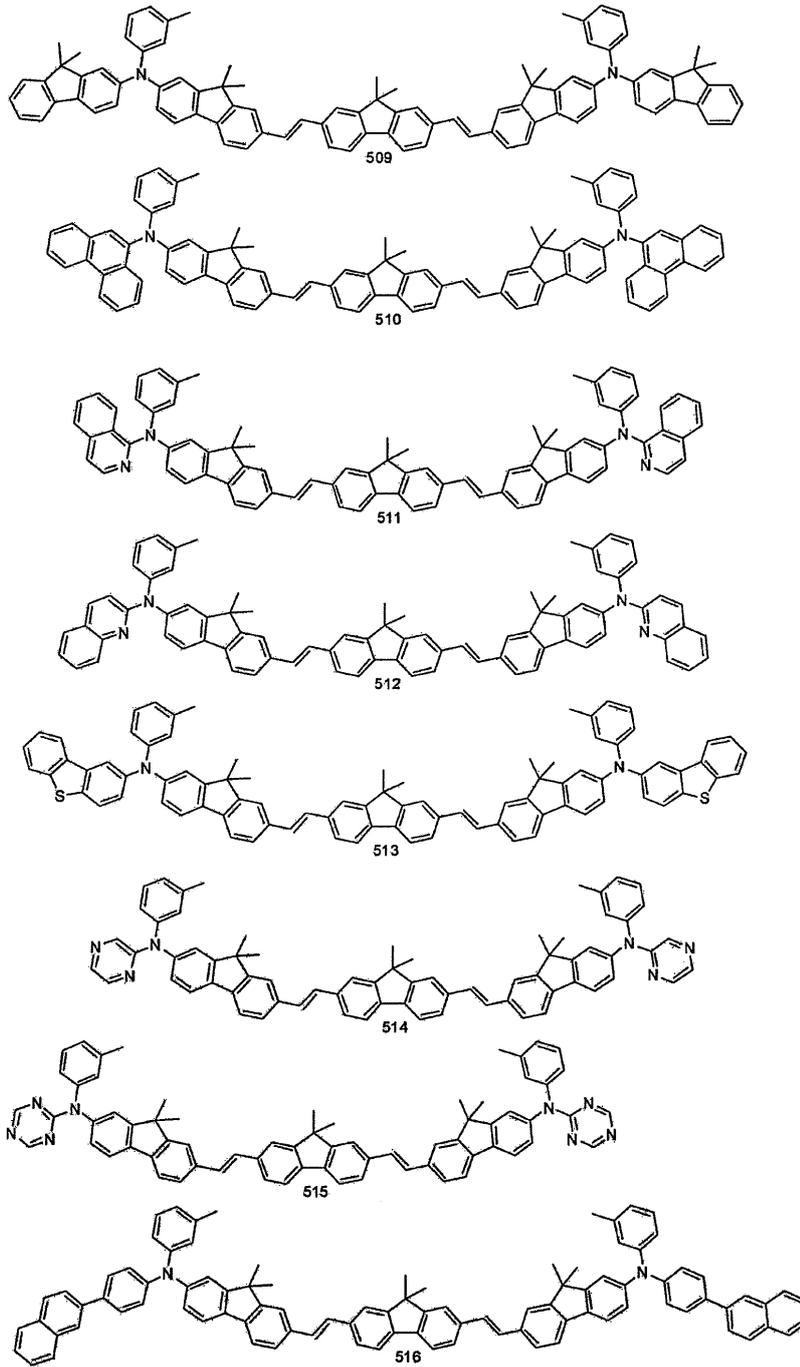


10

20

30

【化 8 4】

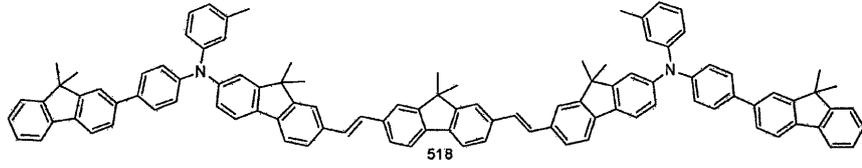
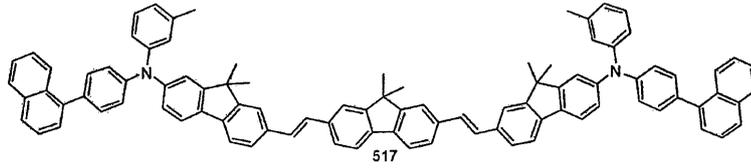


10

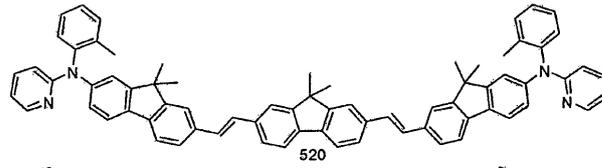
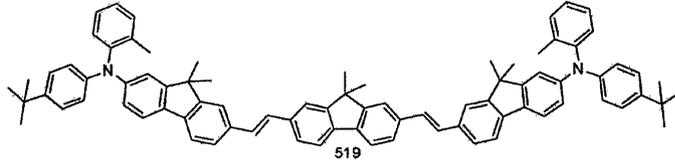
20

30

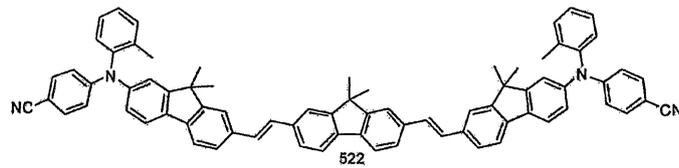
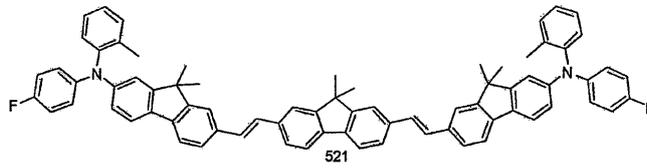
【化 8 5】



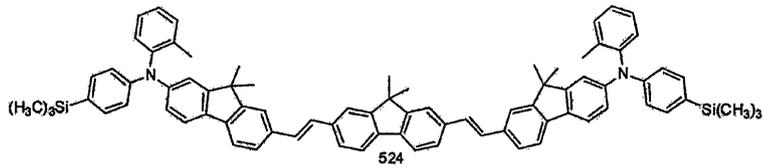
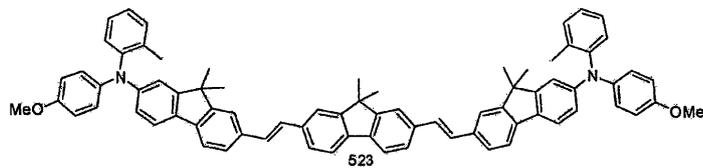
10



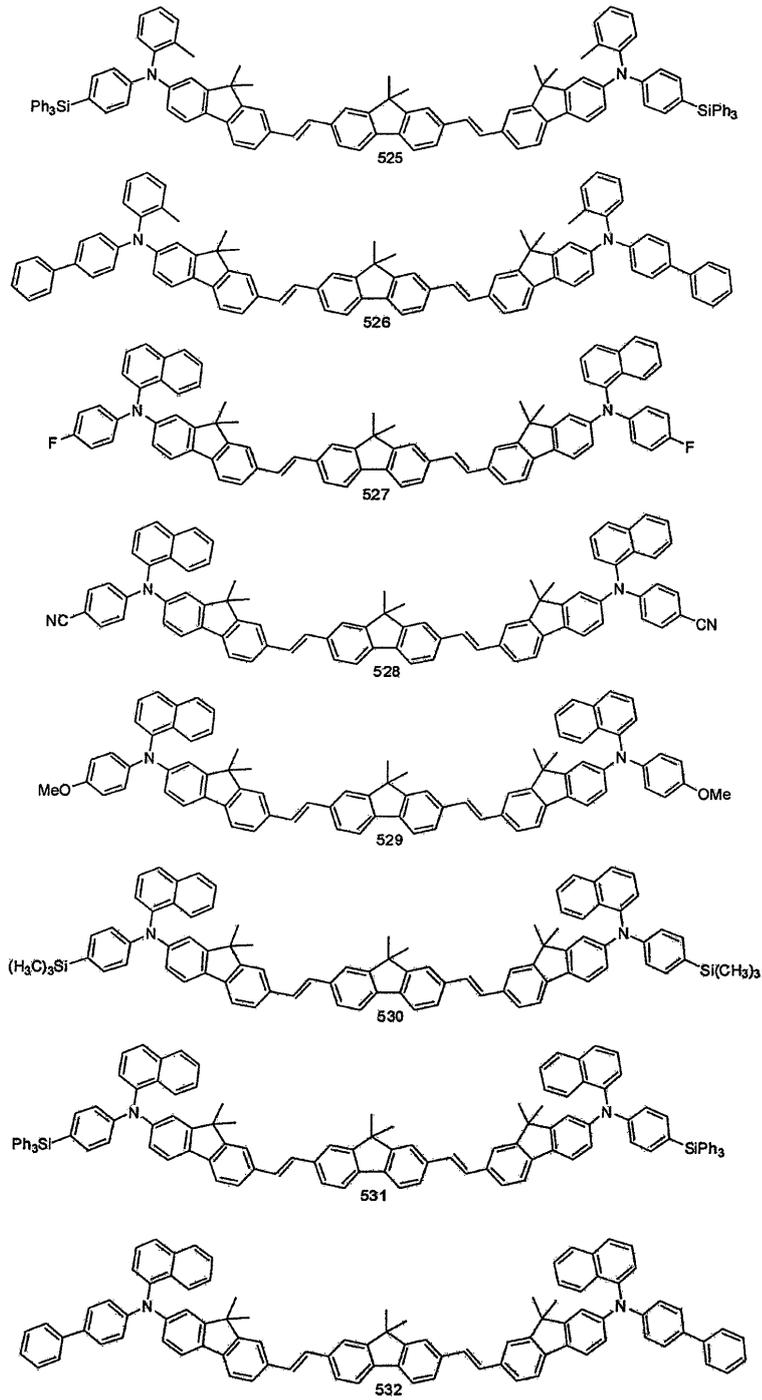
20



30



【化 8 6】



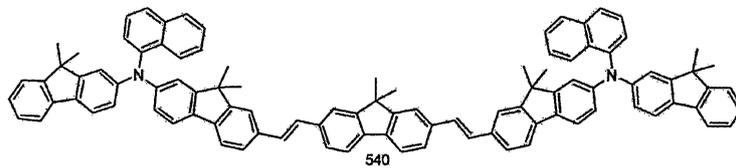
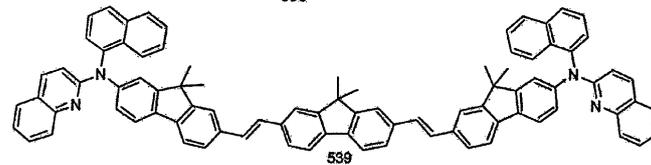
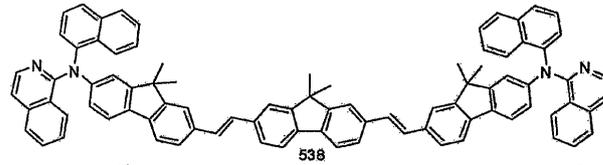
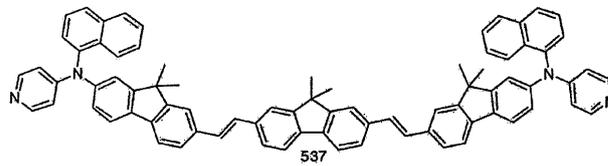
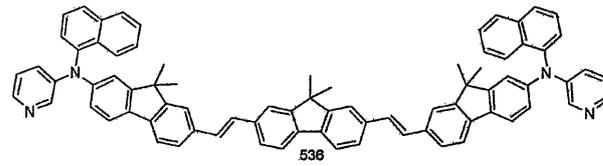
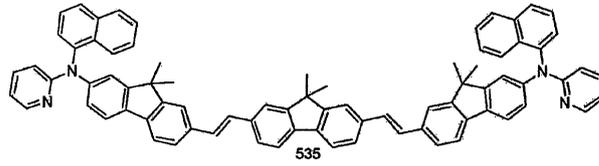
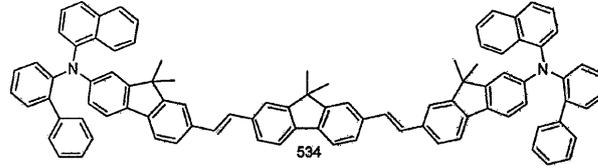
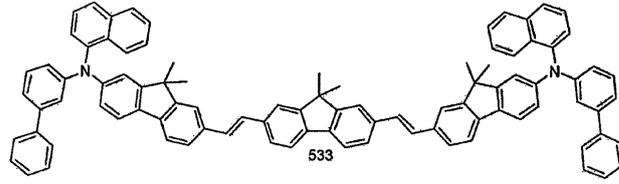
10

20

30

【 0 0 4 5 】

【化 8 7】

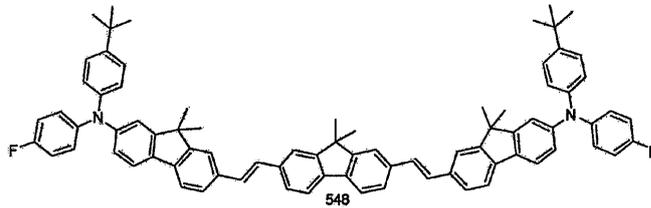
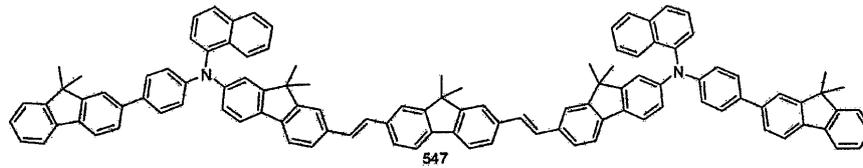
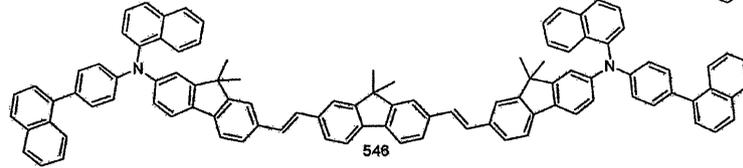
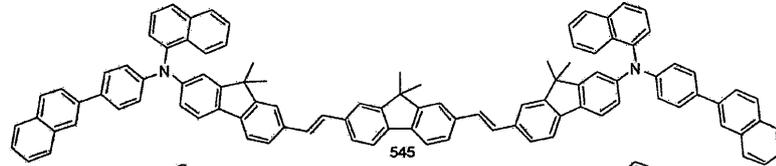
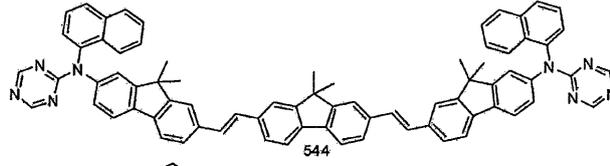
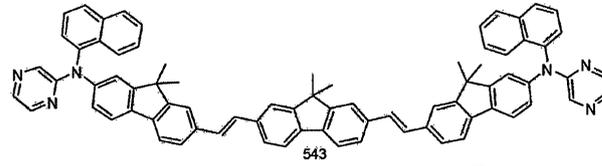
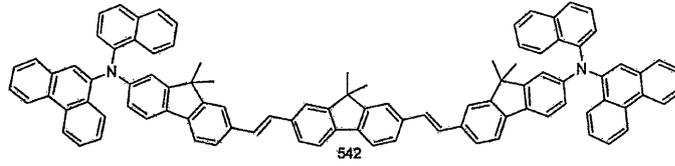
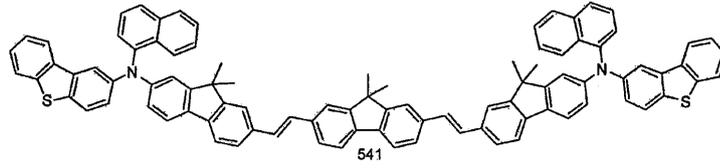


10

20

30

【化 8 8】

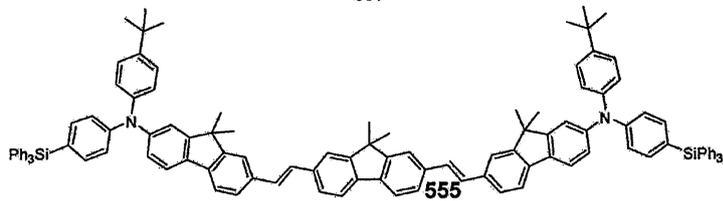
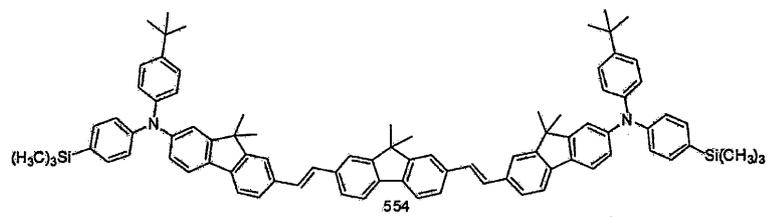
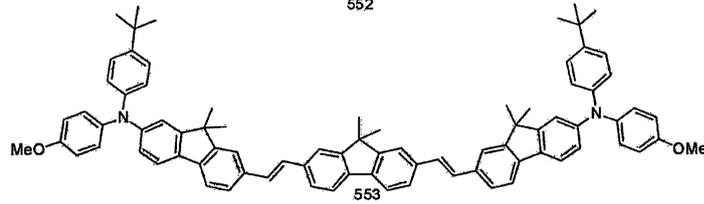
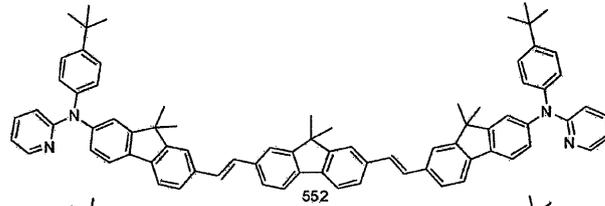
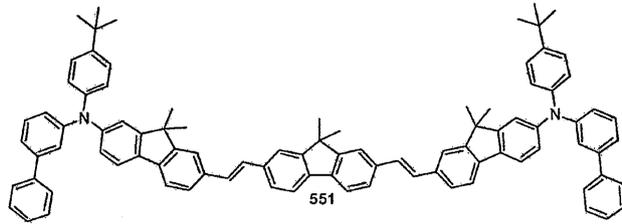
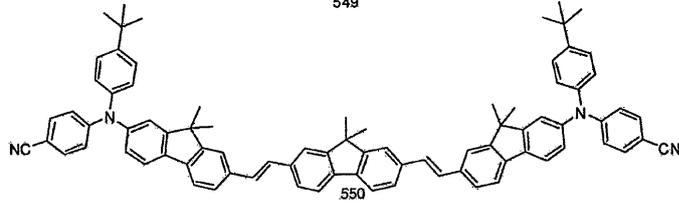
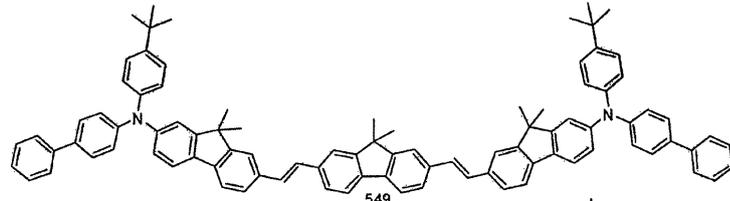


10

20

30

【化 8 9】

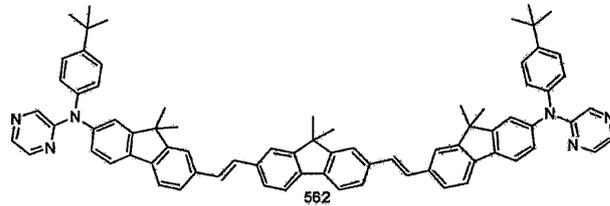
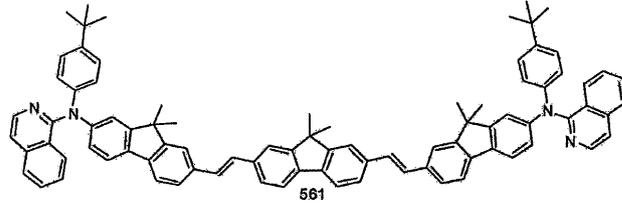
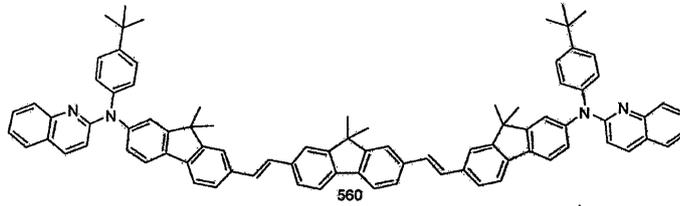
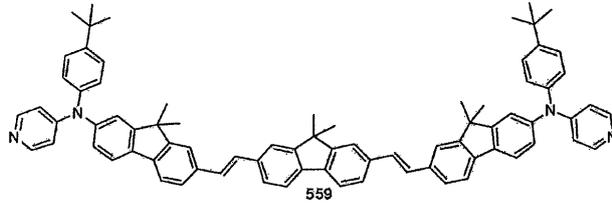
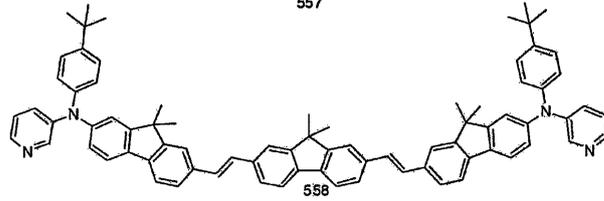
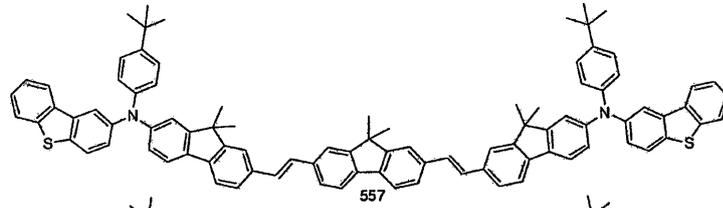
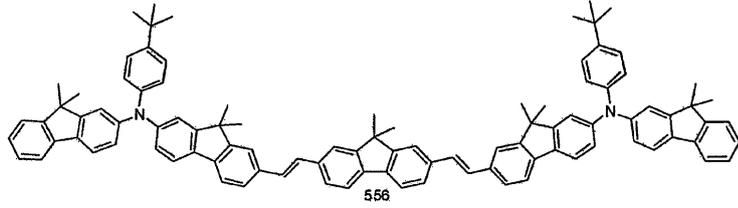


10

20

30

【化 90】

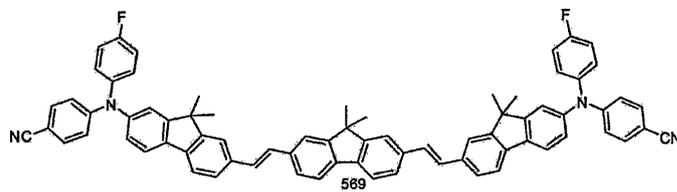
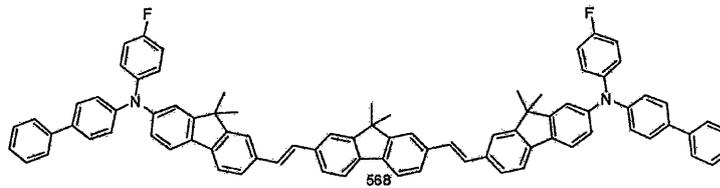
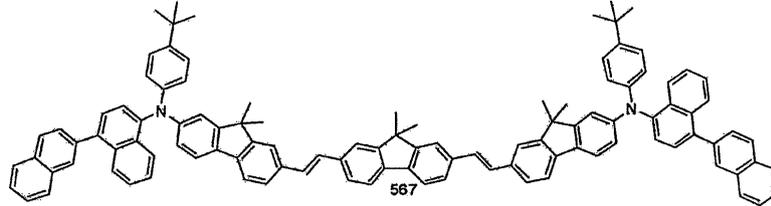
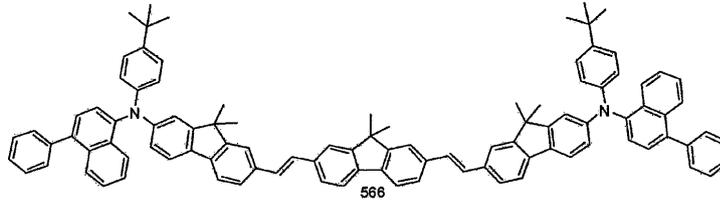
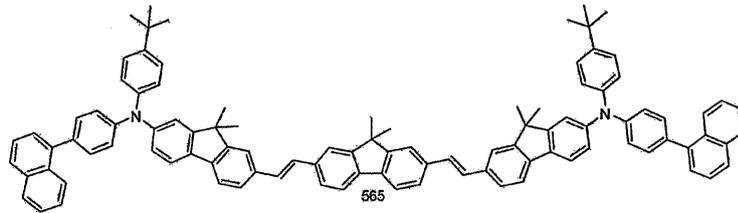
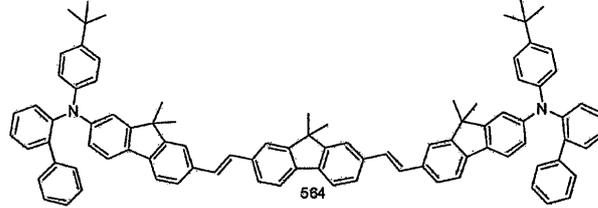
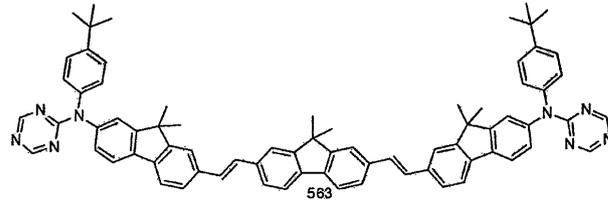


10

20

30

【化 9 1】



10

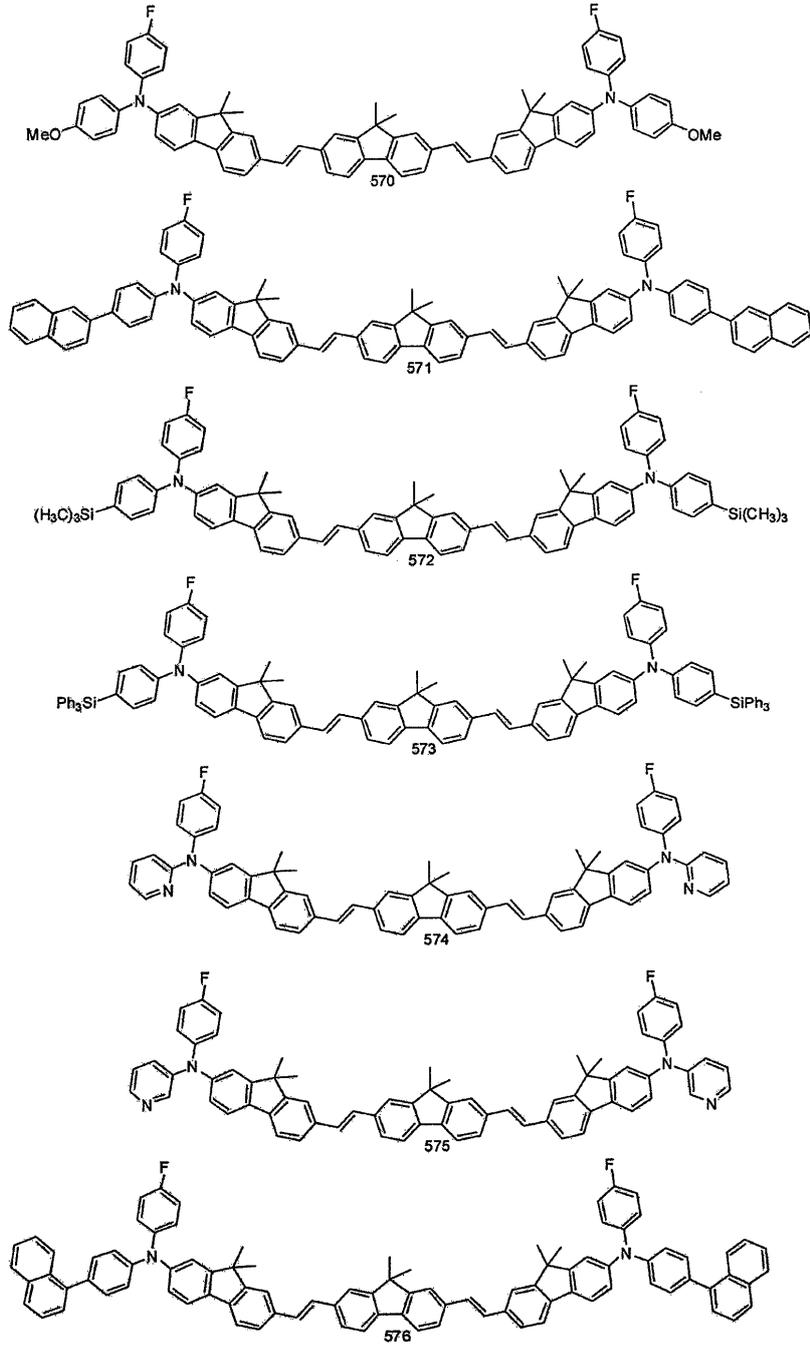
20

30

40

【 0 0 4 6 】

【化 9 2】

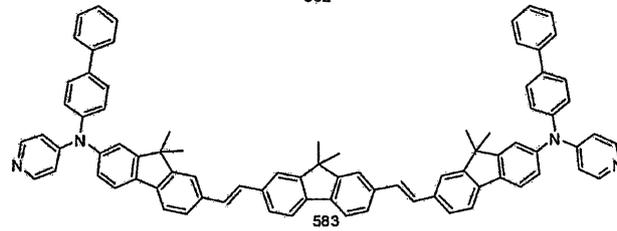
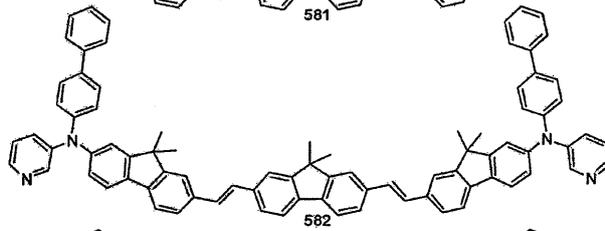
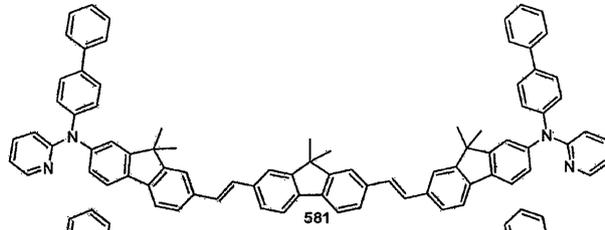
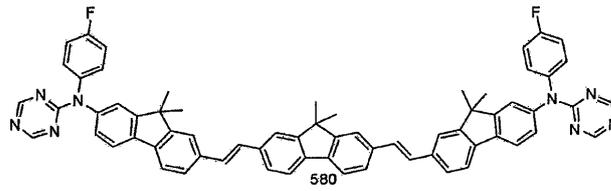
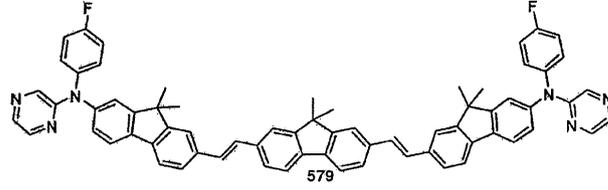
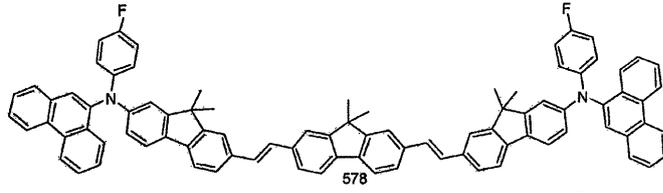
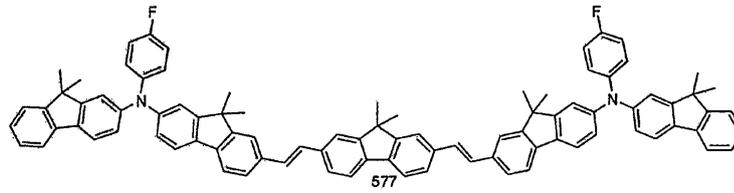


10

20

30

【化 9 3】

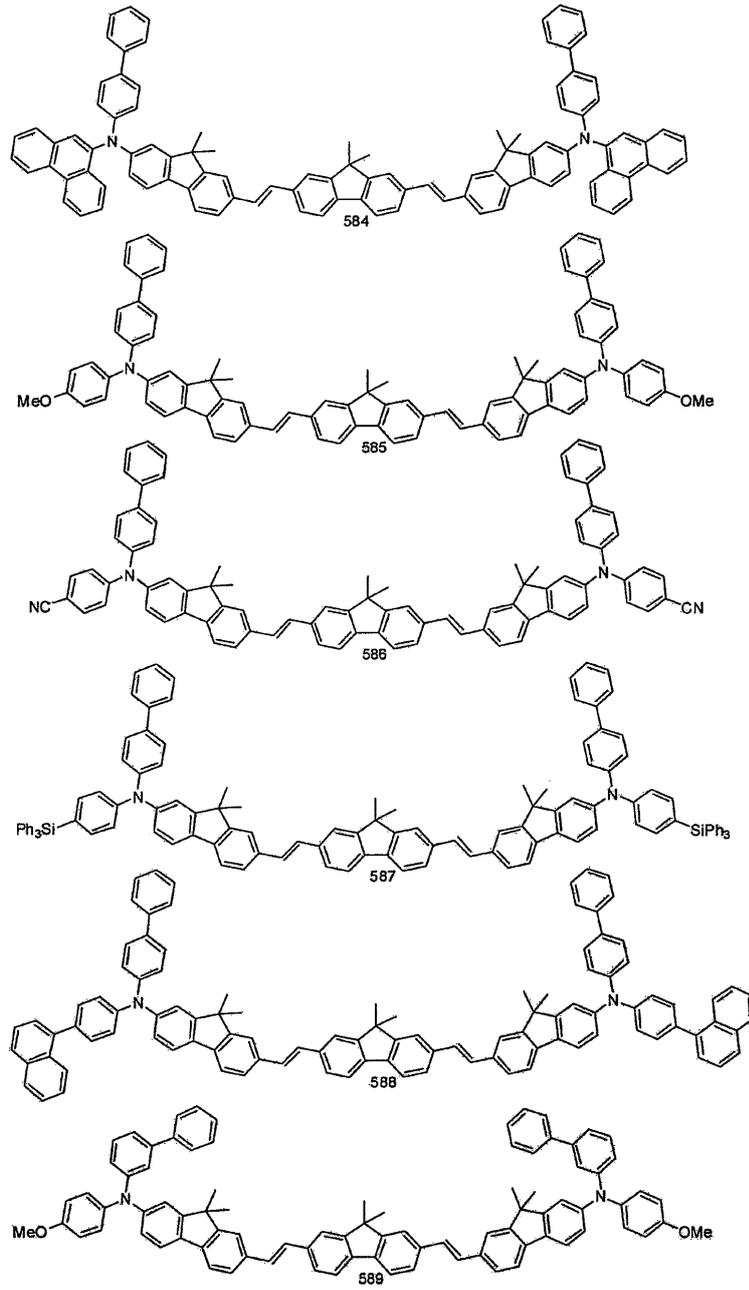


10

20

30

【化 9 4】

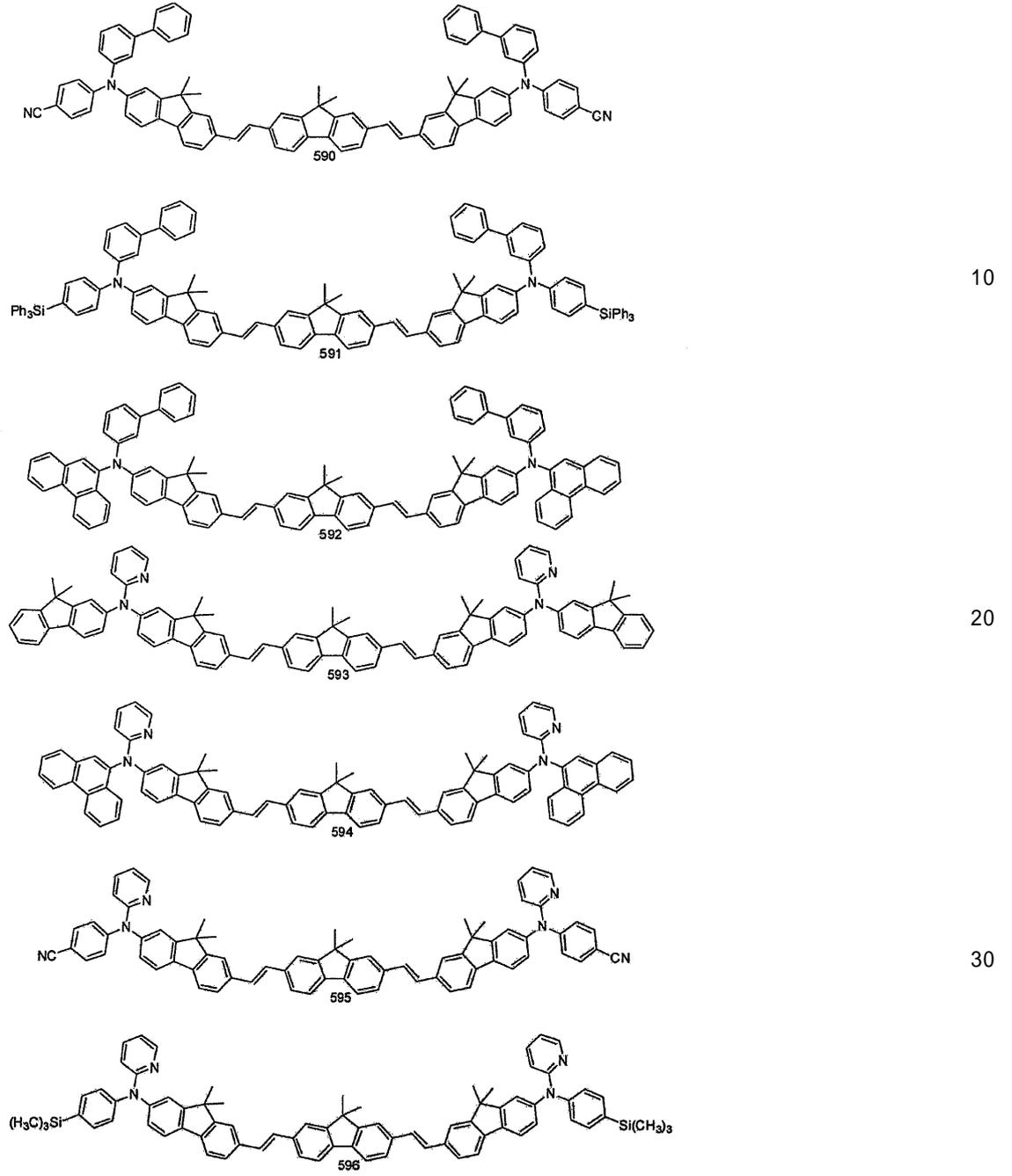


10

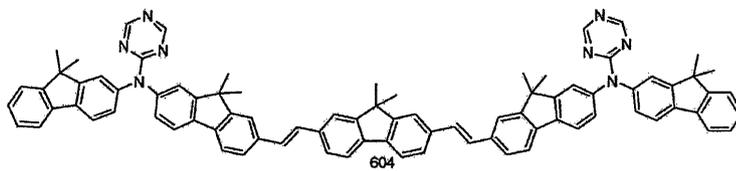
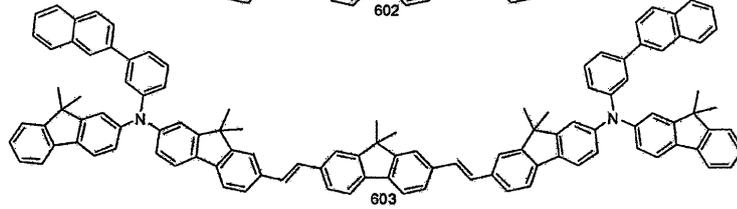
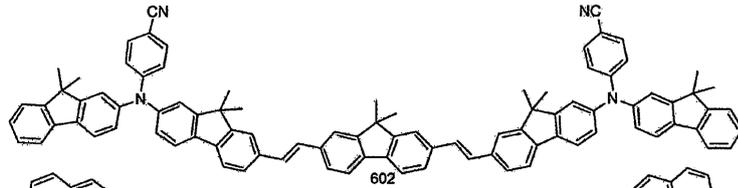
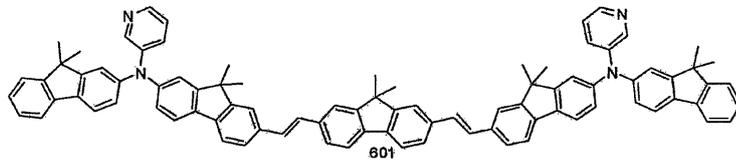
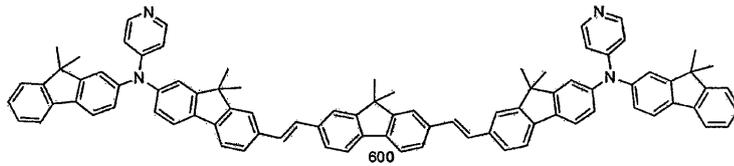
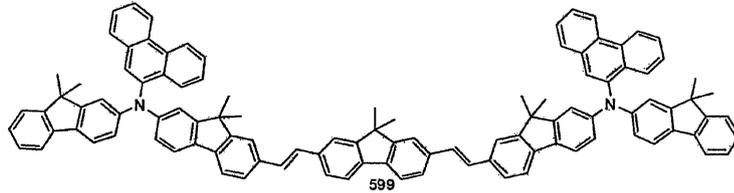
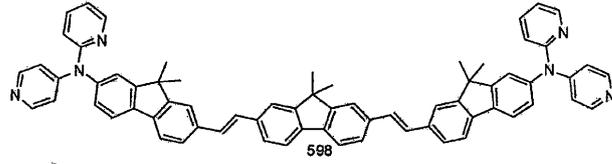
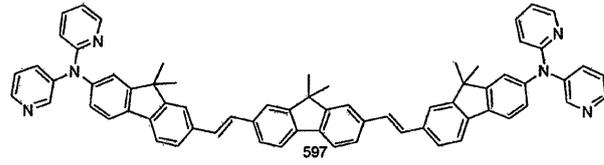
20

30

【化 9 5】



【化 9 6】



10

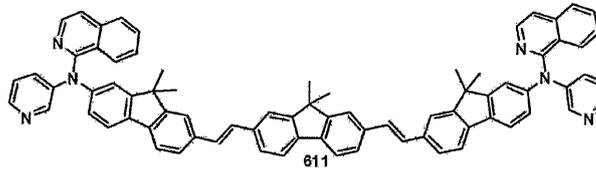
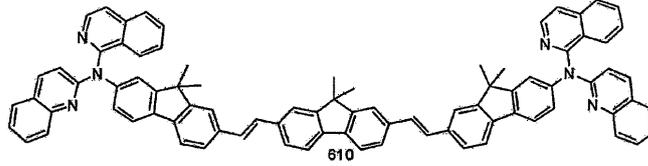
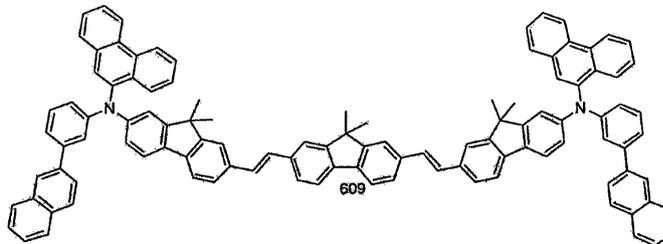
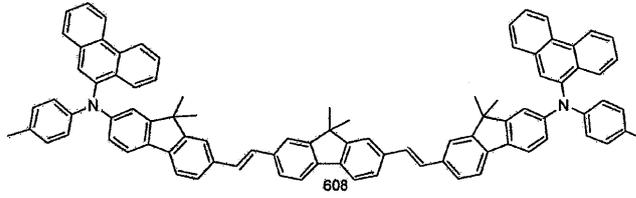
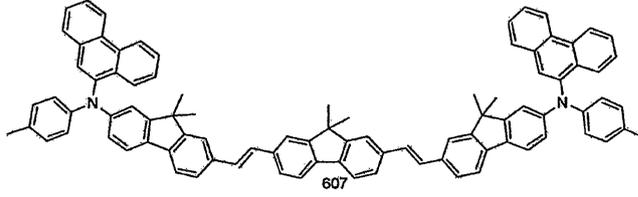
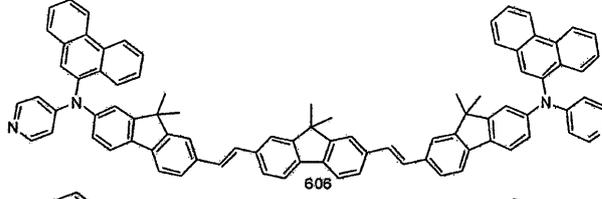
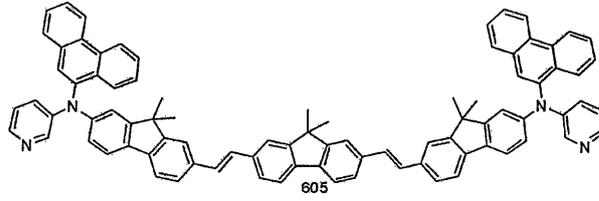
20

30

40

【 0 0 4 7 】

【化 9 7】

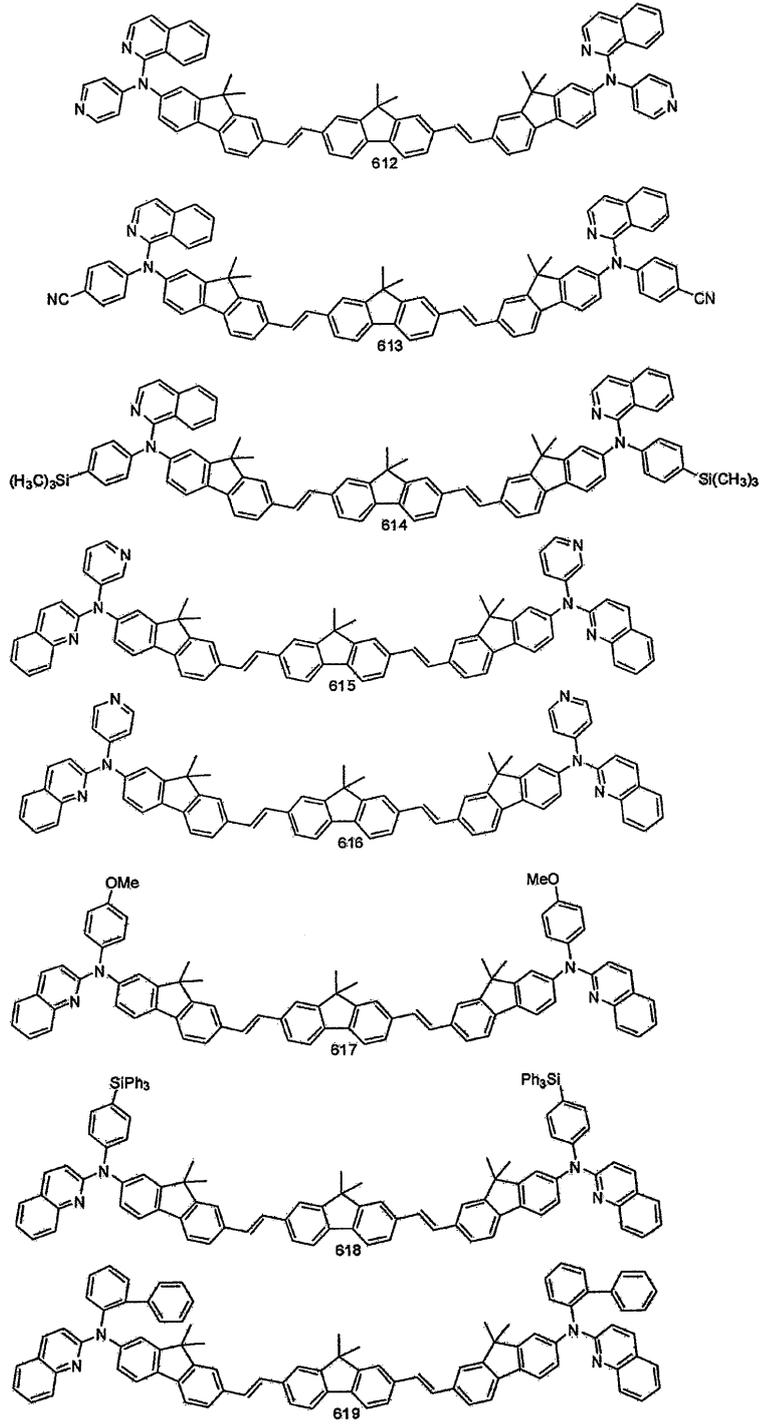


10

20

30

【化 9 8】

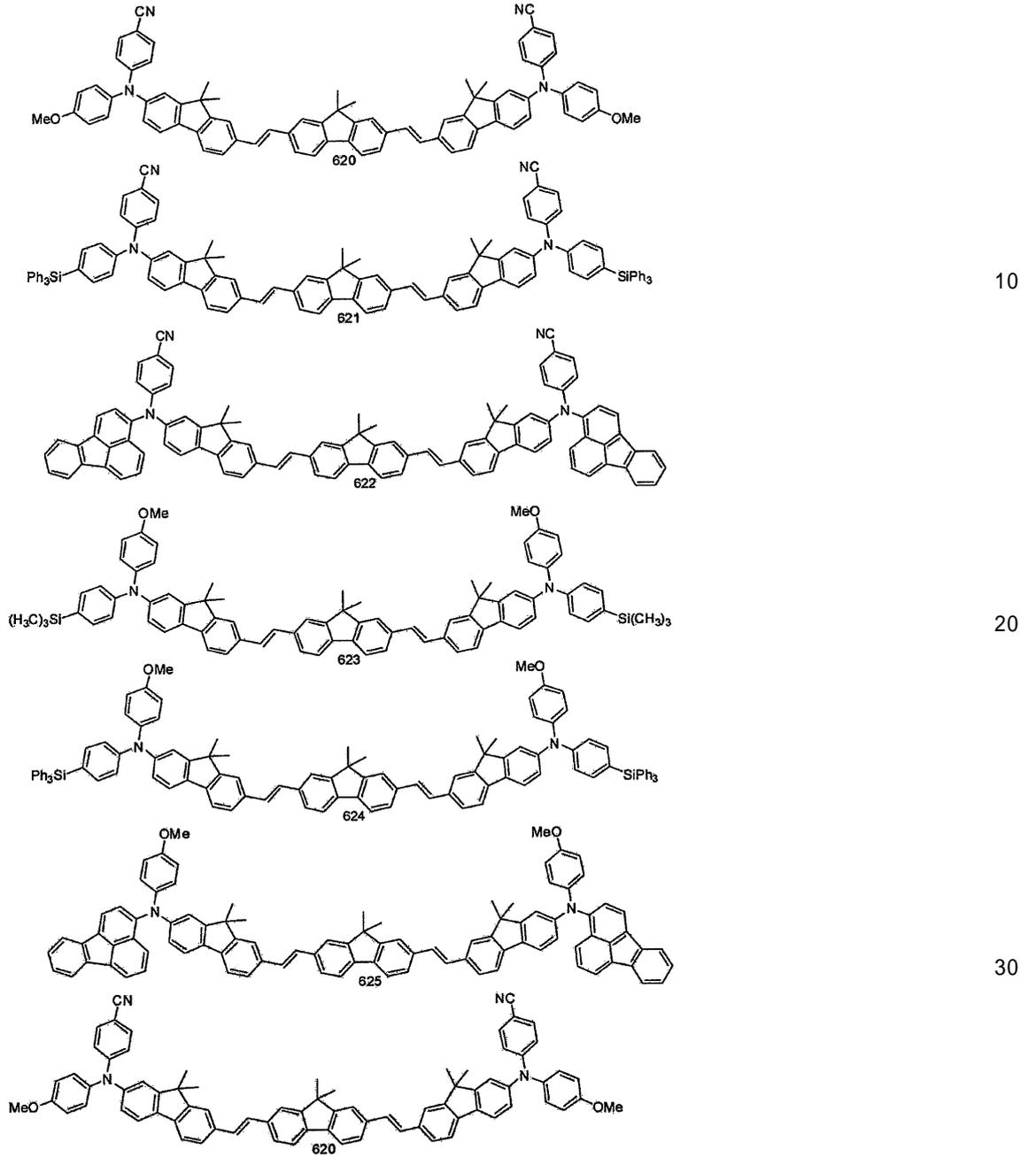


10

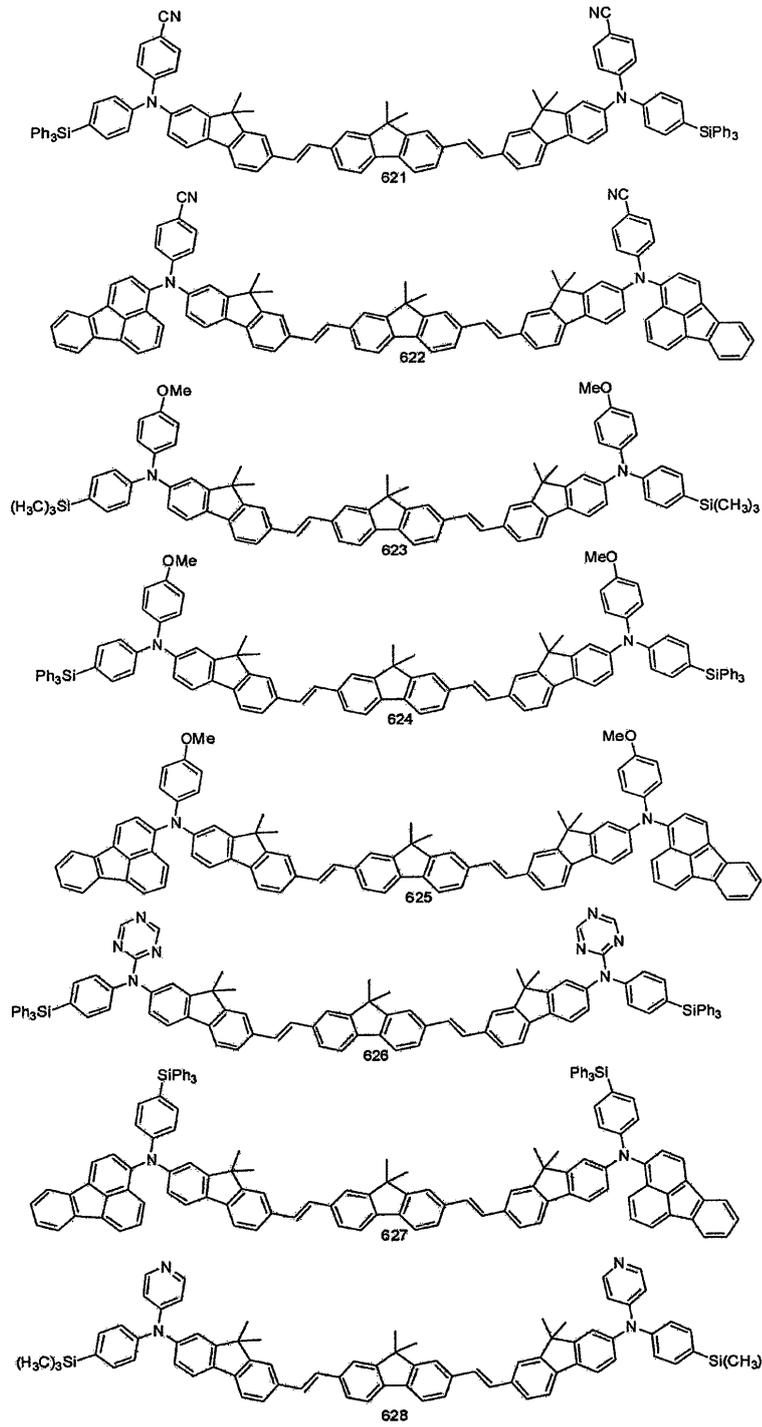
20

30

【化 9 9】



【化 1 0 0】

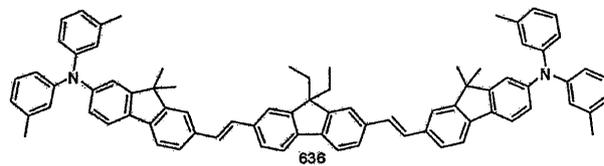
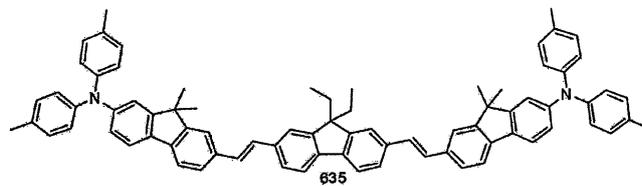
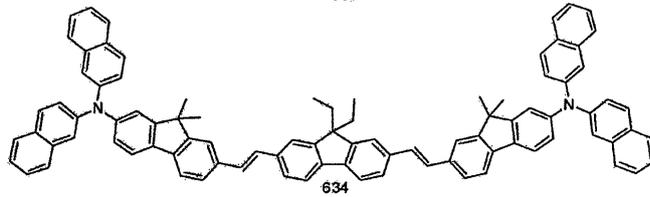
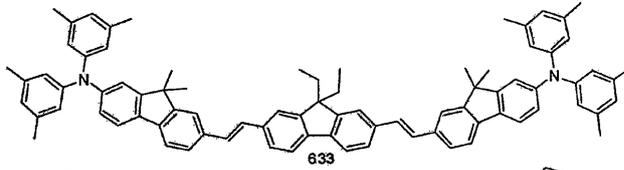
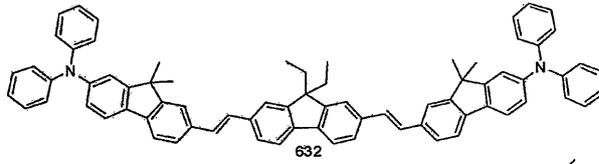
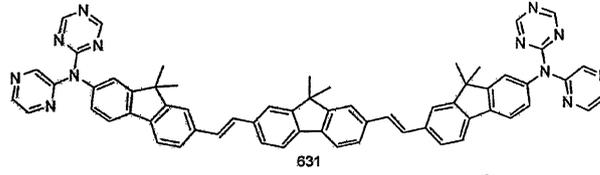
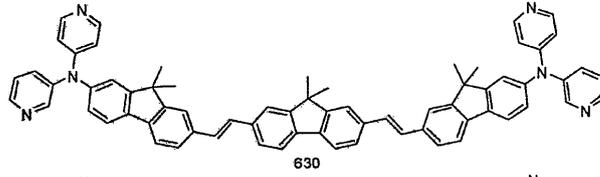
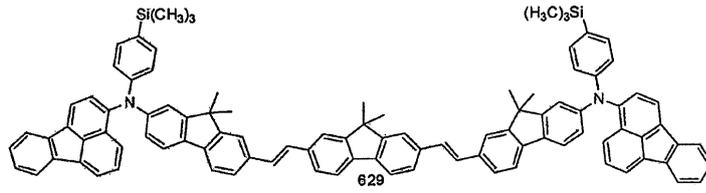


10

20

30

【化 1 0 1】



10

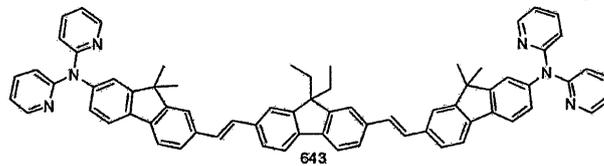
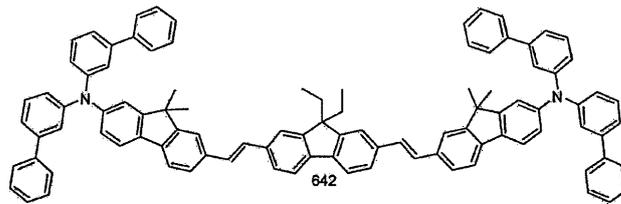
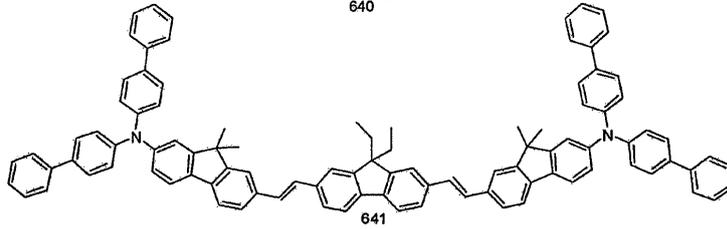
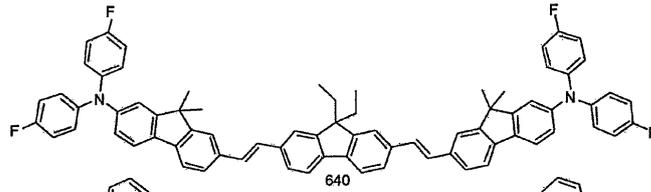
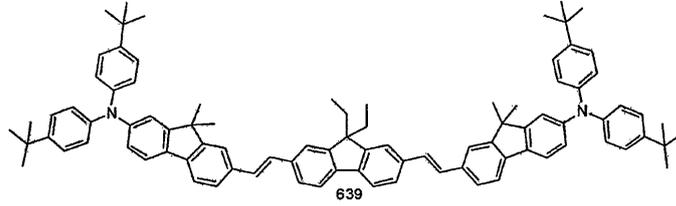
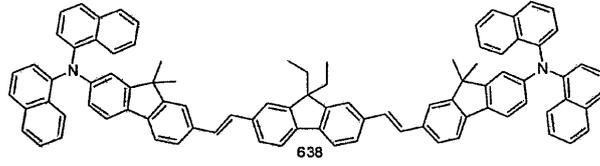
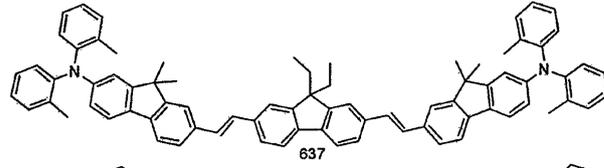
20

30

40

【 0 0 4 8 】

【化 1 0 2】

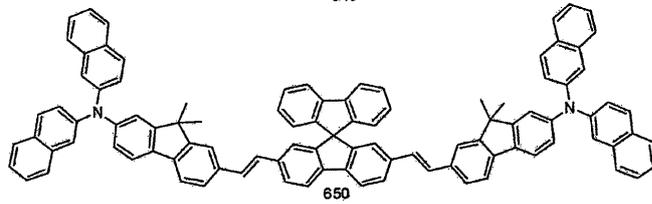
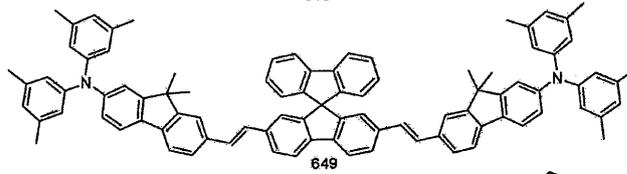
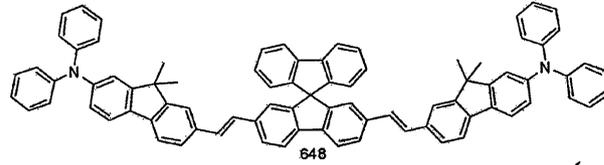
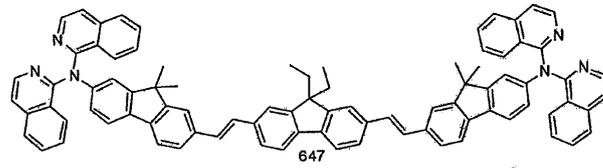
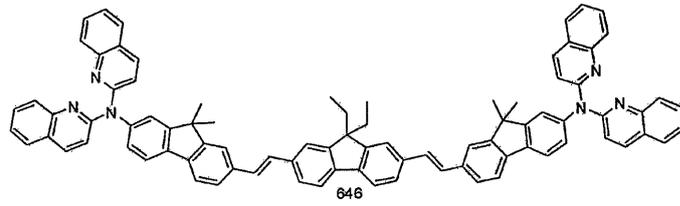
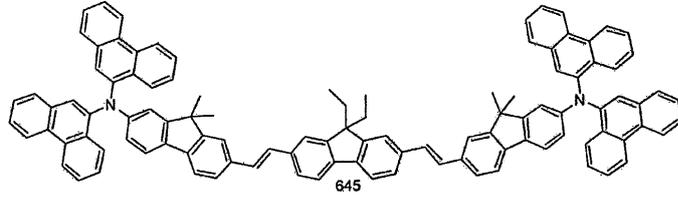
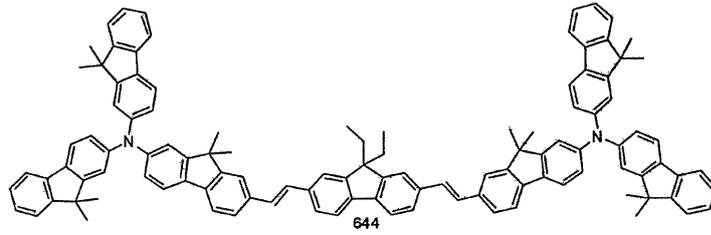


10

20

30

【化 1 0 3】

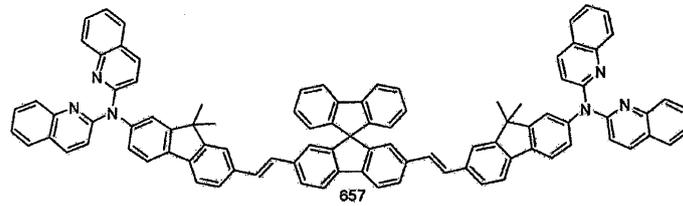
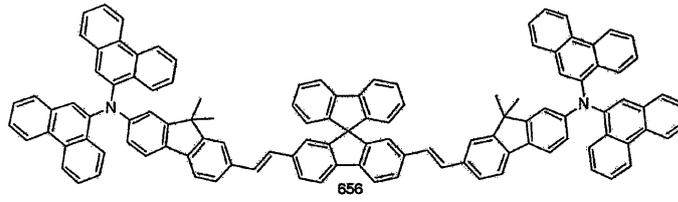
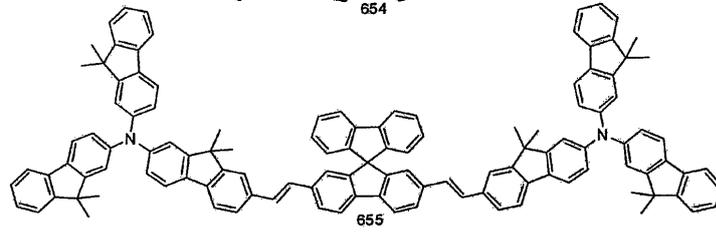
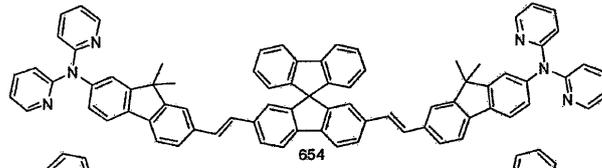
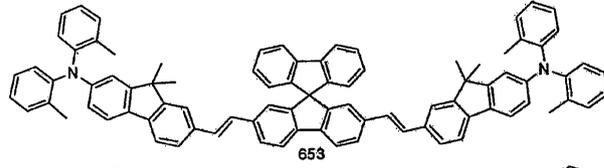
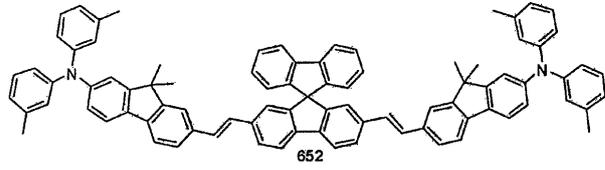
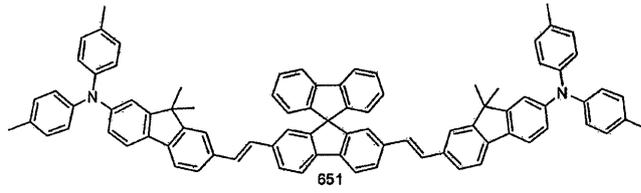


10

20

30

【化 1 0 4】

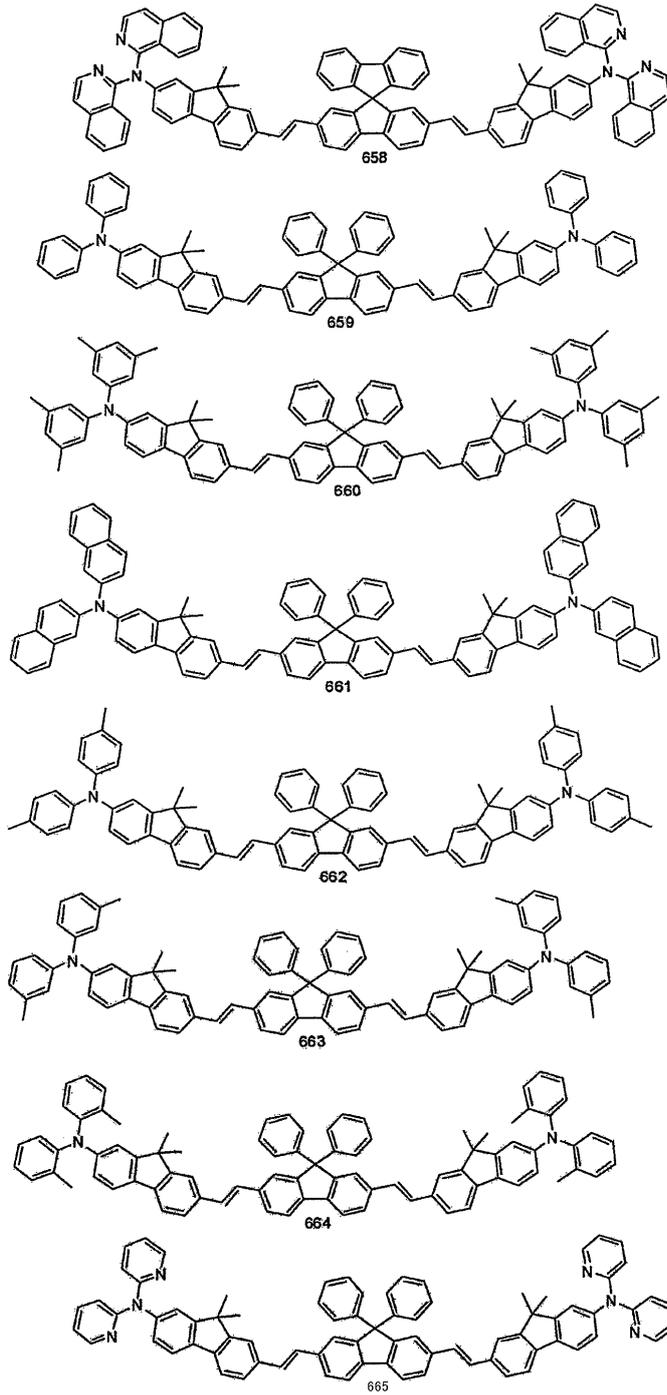


10

20

30

【化 1 0 5】

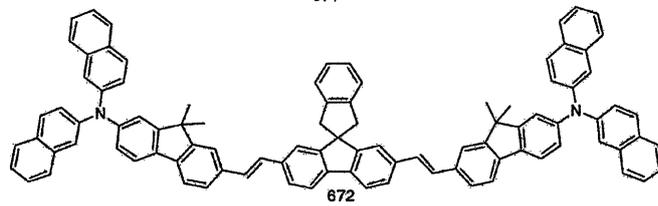
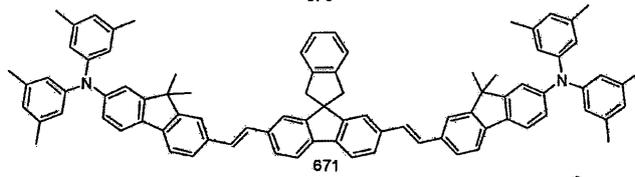
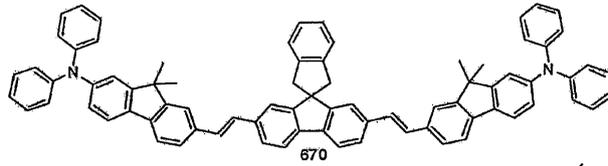
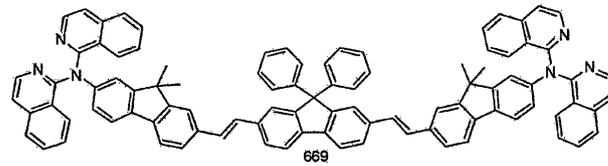
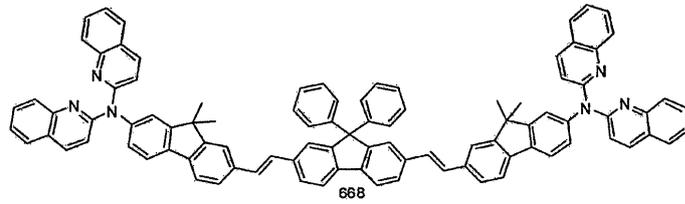
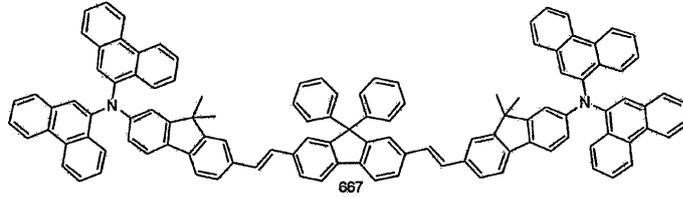
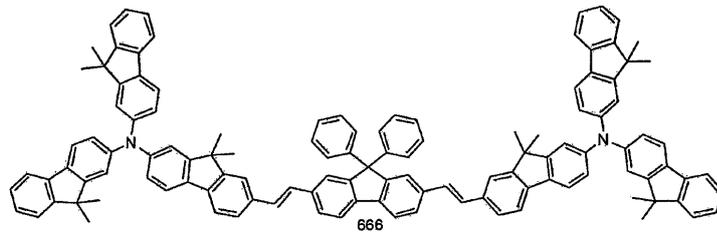


10

20

30

【化 1 0 6】



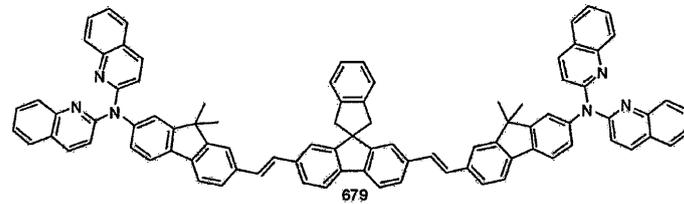
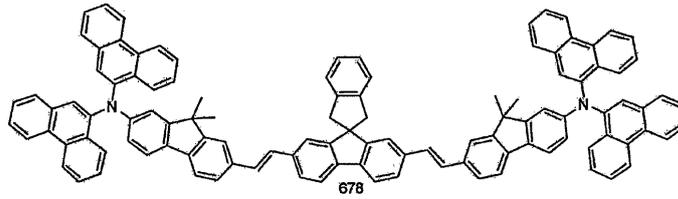
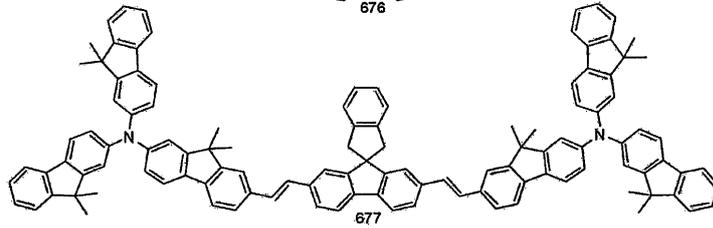
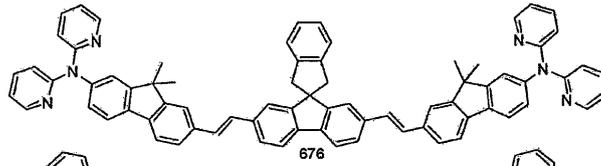
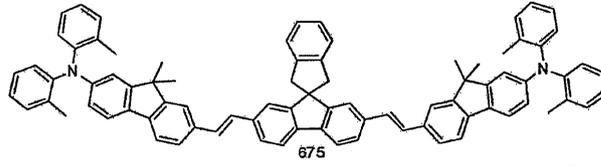
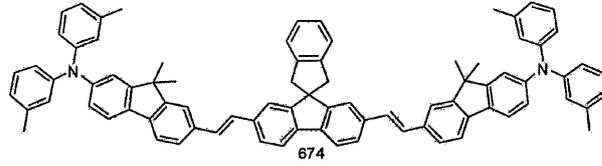
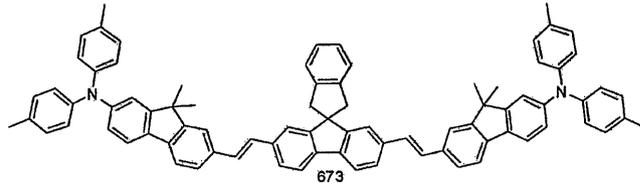
10

20

30

【 0 0 4 9 】

【化 1 0 7】

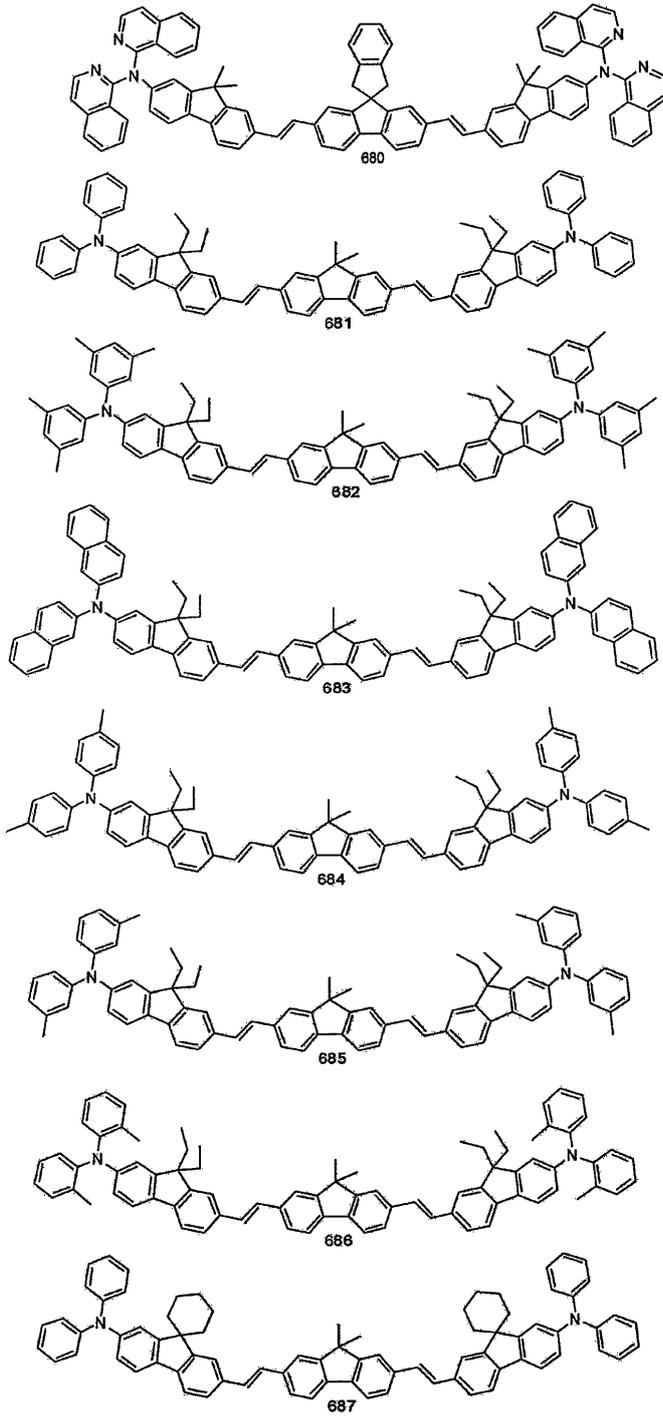


10

20

30

【化 1 0 8】

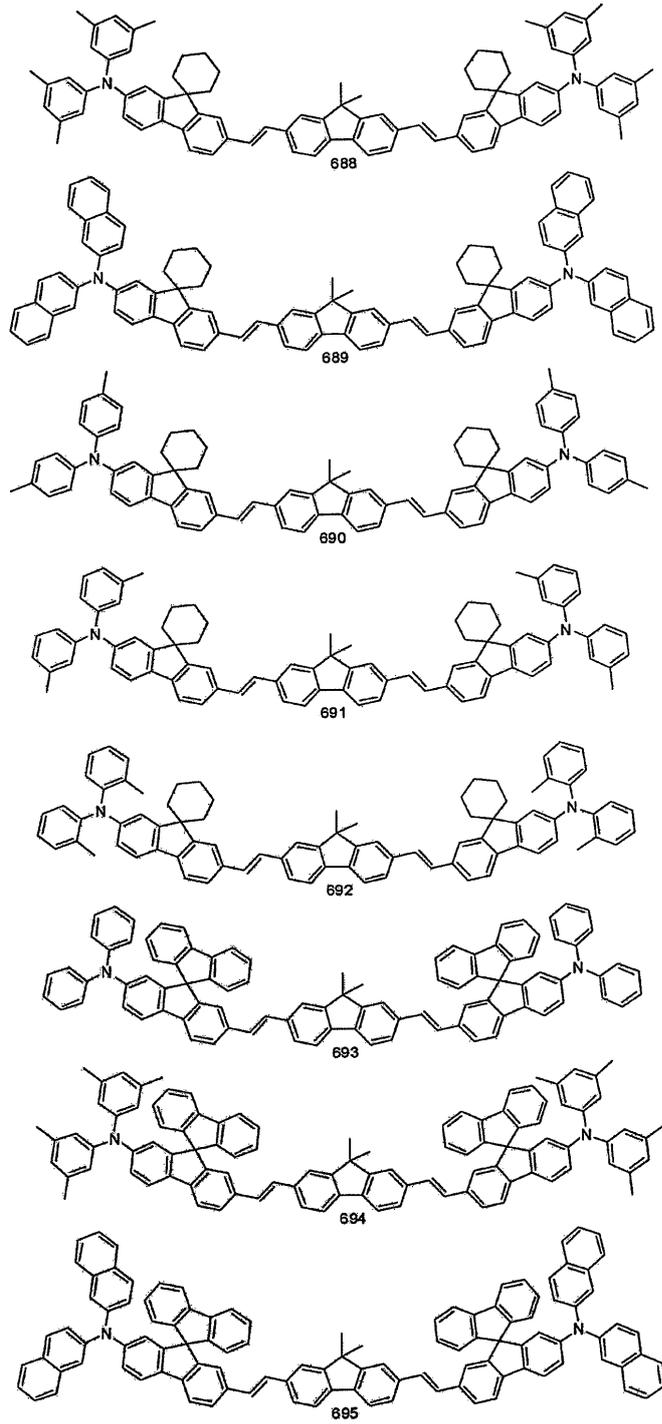


10

20

30

【化 1 0 9】

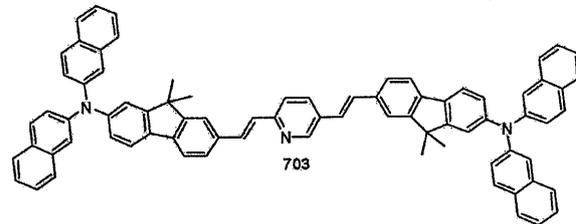
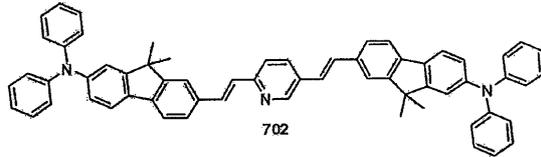
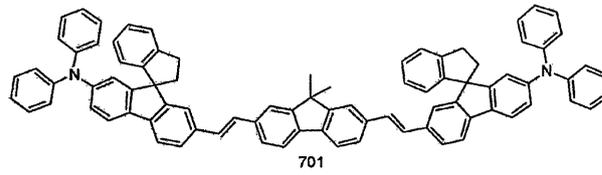
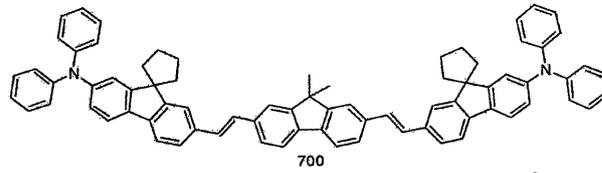
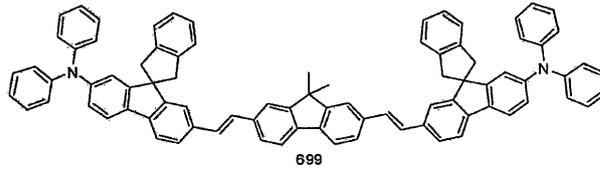
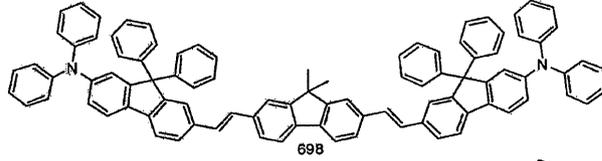
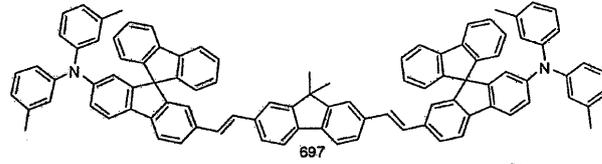
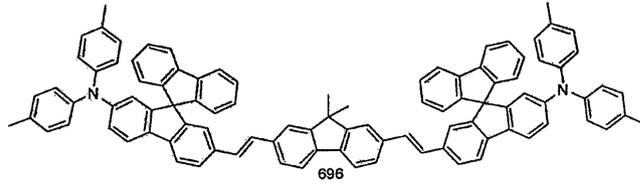


10

20

30

【化 1 1 0】

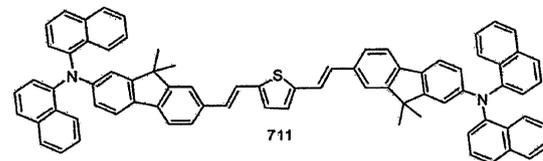
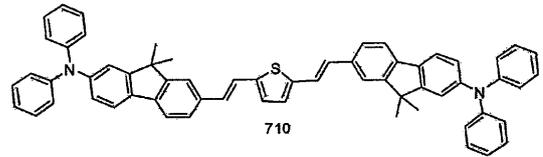
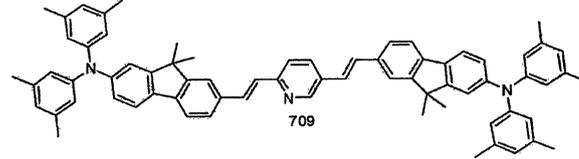
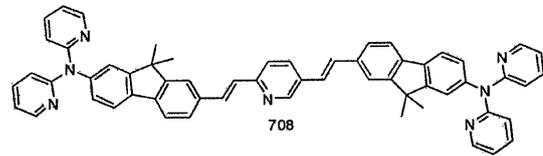
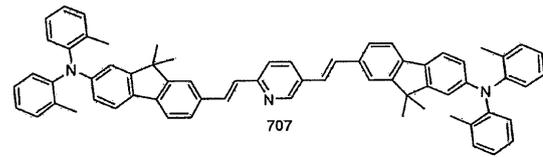
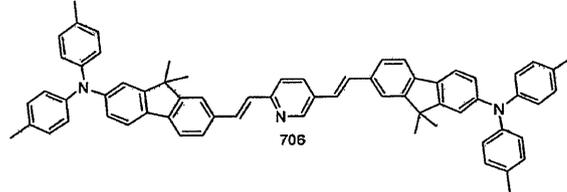
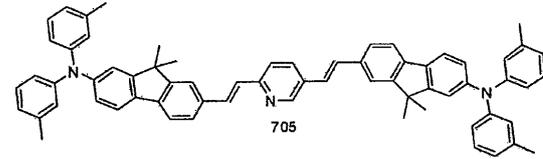
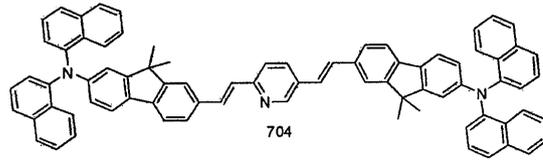


10

20

30

【化 1 1 1】

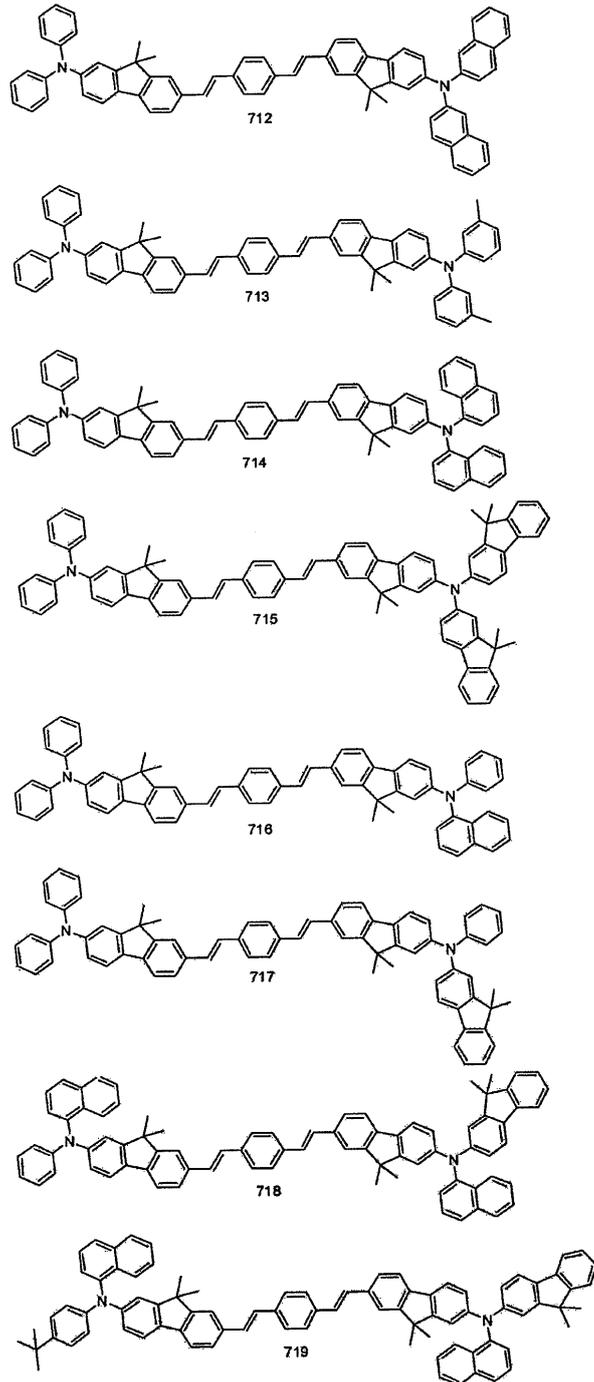


10

20

30

【化 1 1 2】



10

20

30

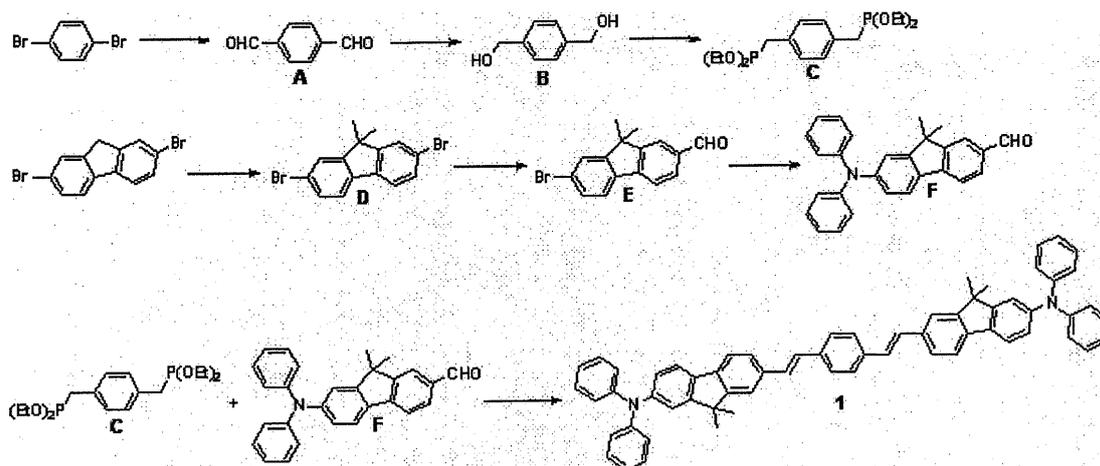
【 0 0 5 0】

本発明による有機電界発光化合物は、例えば、下記スキーム 1 に示されるように製造できるが、これに限定されるものではない：

40

【化 1 1 3】

[スキーム1]



10

【 0 0 5 1】

本発明は有機太陽電池も提供する。本発明による有機太陽電池は、化学式 1 で表される有機電界発光化合物を 1 種以上含む。

20

【 0 0 5 2】

さらに、本発明は有機電界発光素子を提供する。本発明による有機電界発光素子は、第 1 の電極；第 2 の電極；および前記第 1 の電極と第 2 の電極との間に設けられる 1 以上の有機層を含み、当該有機層は化学式 1 で表される有機電界発光化合物を 1 種以上含む。

【 0 0 5 3】

本発明による有機電界発光素子においては、有機層が電界発光層を含む。電界発光層は、電界発光ドーパントとして、化学式 1 で表される 1 種以上の有機電界発光化合物と、1 種以上のホストとを含む。本発明の有機電界発光素子に使用されるホストは、特に限定されないが、下記化学式 2 および 3 の化合物から選択されうる：

30

【 0 0 5 4】

【化 1 1 4】



【 0 0 5 5】

(化学式 2 及び化学式 3 において、

X は (C 6 - C 6 0) アリーレンまたは (C 4 - C 6 0) ヘテロアリーレンであり；

Y はアントラセニレンであり；

40

Ar₁₁ 乃至 Ar₁₄ は、互いに独立して、水素、重水素、(C 1 - C 6 0) アルキル、(C 1 - C 6 0) アルコキシ、ハロゲン、(C 4 - C 6 0) ヘテロアリール、(C 5 - C 6 0) シクロアルキルまたは (C 6 - C 6 0) アリールであり、前記 Ar₁₁ 乃至 Ar₁₄ のシクロアルキル、アリールまたはヘテロアリールには、重水素、ハロゲン置換基を有するもしくは有しない (C 1 - C 6 0) アルキル、(C 1 - C 6 0) アルコキシ、(C 3 - C 6 0) シクロアルキル、ハロゲン、シアノ、トリ (C 1 - C 6 0) アルキルシリル、ジ (C 1 - C 6 0) アルキル (C 6 - C 6 0) アリールシリルおよびトリ (C 6 - C 6 0) アリールシリルからなる群から選択される 1 以上の置換基を有するもしくは有しない (C 6 - C 6 0) アリールもしくは (C 4 - C 6 0) ヘテロアリール、ハロゲン置換基を有するもしくは有しない (C 1 - C 6 0) アルキル、(C 1 - C 6 0) アルコキシ、(C

50

3 - C 6 0) シクロアルキル、重水素、ハロゲン、シアノ、トリ (C 1 - C 6 0) アルキルシリル、ジ (C 1 - C 6 0) アルキル (C 6 - C 6 0) アリールシリルおよびトリ (C 6 - C 6 0) アリールシリルからなる群から選択される 1 以上の置換基がさらに置換可能であり；

a、b、c 及び d は、互いに独立して、0 ~ 4 の整数である。

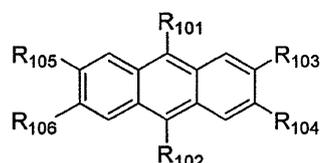
【 0 0 5 6 】

化学式 2 または 3 で表されるホストは、化学式 4 乃至 7 で表されるアントラセン誘導体またはベンズ [a] アントラセン誘導体で例示できる：

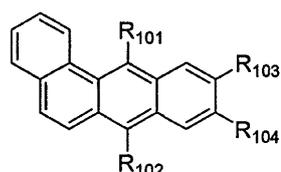
【 0 0 5 7 】

【 化 1 1 5 】

10

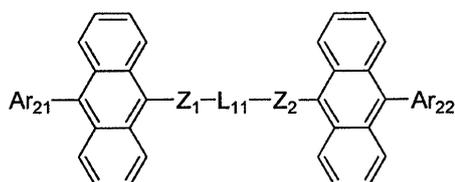


(4)



(5)

20



(6)

【 0 0 5 8 】

(化学式 4 乃至 6 において、

R₁₀₁ 及び R₁₀₂ は、互いに独立して、水素、重水素、(C 1 - C 6 0) アルキル、ハロゲン、(C 6 - C 6 0) アリール、(C 4 - C 6 0) ヘテロアリール、N、O および S から選択される 1 以上のヘテロ原子を含む 5 員もしくは 6 員のヘテロシクロアルキルまたは (C 3 - C 6 0) シクロアルキルであり、前記 R₁₀₁ 及び R₁₀₂ のアリールまたはヘテロアリールには、重水素、(C 1 - C 6 0) アルキル、ハロ (C 1 - C 6 0) アルキル、(C 1 - C 6 0) アルコキシ、(C 3 - C 6 0) シクロアルキル、(C 6 - C 6 0) アリール、(C 4 - C 6 0) ヘテロアリール、ハロゲン、シアノ、トリ (C 1 - C 6 0) アルキルシリル、ジ (C 1 - C 6 0) アルキル (C 6 - C 6 0) アリールシリルおよびトリ (C 6 - C 6 0) アリールシリルからなる群から選択される 1 以上の置換基がさらに置換可能であり；

30

R₁₀₃ 乃至 R₁₀₆ は、互いに独立して、水素、重水素、(C 1 - C 6 0) アルキル、(C 1 - C 6 0) アルコキシ、ハロゲン、(C 4 - C 6 0) ヘテロアリール、(C 5 - C 6 0) シクロアルキルまたは (C 6 - C 6 0) アリールであり、前記 R₁₀₃ 乃至 R₁₀₆ のヘテロアリール、シクロアルキルまたはアリールには、重水素、ハロゲン置換基を有するもしくは有しない (C 1 - C 6 0) アルキル、(C 1 - C 6 0) アルコキシ、(C 3 - C 6 0) シクロアルキル、ハロゲン、シアノ、トリ (C 1 - C 6 0) アルキルシリル、ジ (C 1 - C 6 0) アルキル (C 6 - C 6 0) アリールシリルおよびトリ (C 6 - C 6 0) アリールシリルからなる群から選択される 1 以上の置換基がさらに置換可能であり；

40

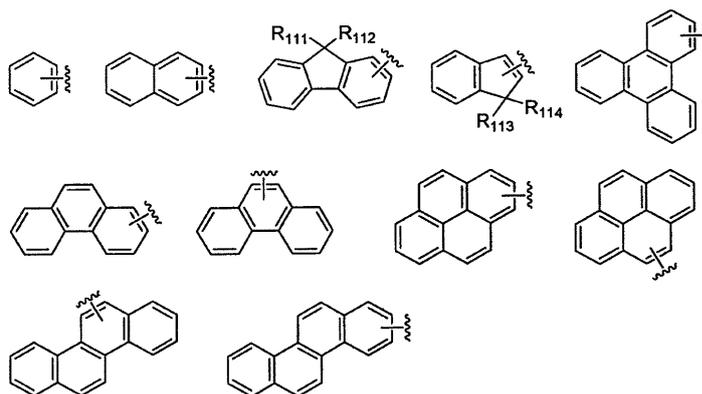
Z₁ 及び Z₂ は、互いに独立して、化学結合であるか、または (C 1 - C 6 0) アルキル、(C 1 - C 6 0) アルコキシ、(C 6 - C 6 0) アリール、(C 4 - C 6 0) ヘテロアリールおよびハロゲンから選択される 1 以上の置換基を有するもしくは有しない (C 6

50

- C 6 0) アリーレンであり ;

Ar₂₁ 及び Ar₂₂ は、下記構造

【化 1 1 6】



10

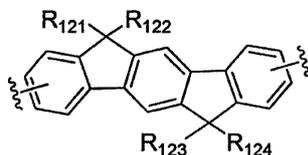
から選択されるアリールまたは (C 4 - C 6 0) ヘテロアリールであり ;

前記 Ar₂₁ 及び Ar₂₂ のアリールまたはヘテロアリールには、(C 1 - C 6 0) アルキル、(C 1 - C 6 0) アルコキシ、(C 6 - C 6 0) アリールおよび (C 4 - C 6 0) ヘテロアリールから選択される 1 以上の置換基が置換可能であり ;

L₁₁ は、(C 6 - C 6 0) アリーレン、(C 4 - C 6 0) ヘテロアリーレン、または下記式

20

【化 1 1 7】



の化合物であり ;

前記 L₁₁ のアリーレンまたはヘテロアリーレンには、(C 1 - C 6 0) アルキル、(C 1 - C 6 0) アルコキシ、(C 6 - C 6 0) アリール、(C 4 - C 6 0) ヘテロアリールおよびハロゲンから選択される 1 以上の置換基が置換可能であり ;

30

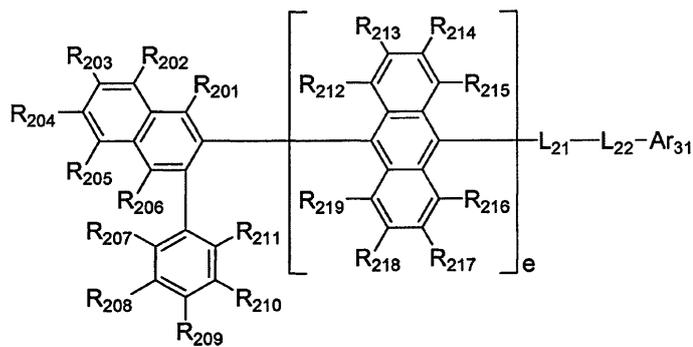
R₁₁₁、R₁₁₂、R₁₁₃ 及び R₁₁₄ は、互いに独立して、水素、重水素、(C 1 - C 6 0) アルキルもしくは (C 6 - C 6 0) アリールであるか、またはそのそれぞれは隣接した置換基と縮合環を含むかもしくは含まない (C 3 - C 6 0) アルキレンもしくは (C 3 - C 6 0) アルケニレンで連結されて、脂環式環、または単環式もしくは多環式芳香族環を形成することができ ;

R₁₂₁、R₁₂₂、R₁₂₃ 及び R₁₂₄ は、互いに独立して、水素、重水素、(C 1 - C 6 0) アルキル、(C 1 - C 6 0) アルコキシ、(C 6 - C 6 0) アリール、(C 4 - C 6 0) ヘテロアリールもしくはハロゲンであるか、またはそのそれぞれは隣接した置換基と縮合環を含むかもしくは含まない (C 3 - C 6 0) アルキレンもしくは (C 3 - C 6 0) アルケニレンで連結されて、脂環式環、または単環式もしくは多環式芳香族環を形成することができる) ;

40

【 0 0 5 9】

【化 1 1 8】



10

【 0 0 6 0】

(化学式 7 において、

L_{21} 及び L_{22} は、互いに独立して、化学結合、(C6 - C60)アリーレンまたは(C3 - C60)ヘテロアリーレンであり、前記 L_{21} 及び L_{22} のアリーレンまたはヘテロアリーレンには、(C1 - C60)アルキル、重水素、ハロゲン、シアノ、(C1 - C60)アルコキシ、(C3 - C60)シクロアルキル、(C6 - C60)アリール、(C3 - C60)ヘテロアリール、トリ(C1 - C30)アルキルシリル、ジ(C1 - C30)アルキル(C6 - C30)アリールシリルおよびトリ(C6 - C30)アリールシリルから選択される 1 以上の置換基がさらに置換可能であり；

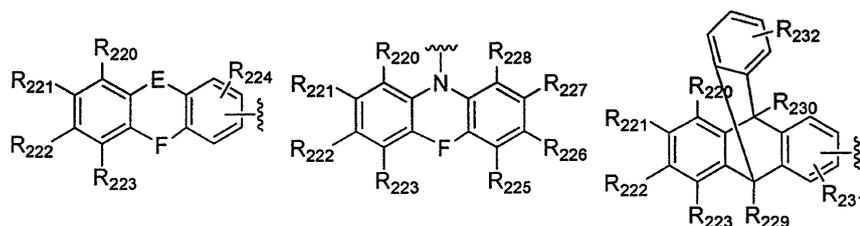
20

R_{201} 乃至 R_{219} は、互いに独立して、水素、重水素、ハロゲン、(C1 - C60)アルキル、(C6 - C60)アリール、(C4 - C60)ヘテロアリール、N、O および S から選択される 1 以上のヘテロ原子を含む 5 員もしくは 6 員のヘテロシクロアルキル、(C3 - C60)シクロアルキル、トリ(C1 - C60)アルキルシリル、ジ(C1 - C60)アルキル(C6 - C60)アリールシリル、トリ(C6 - C60)アリールシリル、アダマンチル、(C7 - C60)ビスシクロアルキル、(C2 - C60)アルケニル、(C2 - C60)アルキニル、(C1 - C60)アルコキシ、シアノ、(C1 - C60)アルキルアミノ、(C6 - C60)アリールアミノ、(C6 - C60)アリール(C1 - C60)アルキル、(C6 - C60)アリールオキシ、(C6 - C60)アリールチオ、(C1 - C60)アルコキシカルボニル、カルボキシル、ニトロもしくはヒドロキシルであるか、または R_{201} 乃至 R_{219} のそれぞれは、隣接した置換基と縮合環を含むもしくは含まない(C3 - C60)アルケレンもしくは(C3 - C60)アルケニレンで連結されて、脂環式環、または単環式もしくは多環式芳香族環を形成することができ；

30

Ar_{31} は、(C6 - C60)アリール、(C4 - C60)ヘテロアリール、N、O および S から選択される 1 以上のヘテロ原子を含む 5 員もしくは 6 員のヘテロシクロアルキル、(C3 - C60)シクロアルキル、アダマンチル、(C7 - C60)ビスシクロアルキルであるか、または下記構造

【化 1 1 9】



40

から選択される置換基であり；

式中、 R_{220} 乃至 R_{232} は、互いに独立して、水素、重水素、ハロゲン、(C1 - C60)アルキル、(C6 - C60)アリール、(C4 - C60)ヘテロアリール、N、O および S から選択される 1 以上のヘテロ原子を含む 5 員もしくは 6 員のヘテロシクロアルキル、(C3 - C60)シクロアルキル、トリ(C1 - C60)アルキルシリル、ジ(

50

C 1 - C 6 0) アルキル (C 6 - C 6 0) アリールシリル、トリ (C 6 - C 6 0) アリールシリル、アダマンチル、(C 7 - C 6 0) ビシクロアルキル、(C 2 - C 6 0) アルケニル、(C 2 - C 6 0) アルキニル、(C 1 - C 6 0) アルコキシ、シアノ、(C 1 - C 6 0) アルキルアミノ、(C 6 - C 6 0) アリールアミノ、(C 6 - C 6 0) アリール (C 1 - C 6 0) アルキル、(C 6 - C 6 0) アリールオキシ、(C 6 - C 6 0) アリールチオ、(C 1 - C 6 0) アルコキシカルボニル、カルボキシル、ニトロまたはヒドロキシルであり；

E 及び F は、互いに独立して、化学結合、 $-(CR_{233}R_{234})_n-$ 、 $-N(R_{235})-$ 、 $-S-$ 、 $-O-$ 、 $-Si(R_{236})(R_{237})-$ 、 $-P(R_{238})-$ 、 $-C(=O)-$ 、 $-B(R_{239})-$ 、 $-In(R_{240})-$ 、 $-Se-$ 、 $-Ge(R_{241})(R_{242})-$ 、 $-Sn(R_{243})(R_{244})-$ 、 $-Ga(R_{245})-$ 、または $-(R_{246})C=C(R_{247})-$ であり；

R_{233} 乃至 R_{247} は、互いに独立して、水素、重水素、ハロゲン、(C 1 - C 6 0) アルキル、(C 6 - C 6 0) アリール、(C 4 - C 6 0) ヘテロアリール、N、O および S から選択される 1 以上のヘテロ原子を含む 5 員もしくは 6 員のヘテロシクロアルキル、(C 3 - C 6 0) シクロアルキル、トリ (C 1 - C 6 0) アルキルシリル、ジ (C 1 - C 6 0) アルキル (C 6 - C 6 0) アリールシリル、トリ (C 6 - C 6 0) アリールシリル、アダマンチル、(C 7 - C 6 0) ビシクロアルキル、(C 2 - C 6 0) アルケニル、(C 2 - C 6 0) アルキニル、(C 1 - C 6 0) アルコキシ、シアノ、(C 1 - C 6 0) アルキルアミノ、(C 6 - C 6 0) アリールアミノ、(C 6 - C 6 0) アリール (C 1 - C 6 0) アルキル、(C 6 - C 6 0) アリールオキシ、(C 6 - C 6 0) アリールチオ、(C 1 - C 6 0) アルコキシカルボニル、カルボキシル、ニトロもしくはヒドロキシルであるか、または R_{233} 乃至 R_{247} のそれぞれは、隣接した置換基と縮合環を含むかもしくは含まない (C 3 - C 6 0) アルケレンもしくは (C 3 - C 6 0) アルケニレンで連結されて、脂環式環、または単環式もしくは多環式芳香族環を形成することができ；

前記 Ar_{31} のアリール、ヘテロアリール、ヘテロシクロアルキル、アダマンチルもしくはビシクロアルキル、または前記 R_{201} 乃至 R_{232} のアルキル、アルケニル、アルキニル、シクロアルキル、ヘテロシクロアルキル、アリール、ヘテロアリール、アリールシリル、アルキルシリル、アルキルアミノもしくはアリールアミノには、重水素、ハロゲン、(C 1 - C 6 0) アルキル、(C 6 - C 6 0) アリール、(C 4 - C 6 0) ヘテロアリール、N、O および S から選択される 1 以上のヘテロ原子を含む 5 員もしくは 6 員のヘテロシクロアルキル、(C 3 - C 6 0) シクロアルキル、トリ (C 1 - C 6 0) アルキルシリル、ジ (C 1 - C 6 0) アルキル (C 6 - C 6 0) アリールシリル、トリ (C 6 - C 6 0) アリールシリル、アダマンチル、(C 7 - C 6 0) ビシクロアルキル、(C 2 - C 6 0) アルケニル、(C 2 - C 6 0) アルキニル、(C 1 - C 6 0) アルコキシ、シアノ、(C 1 - C 6 0) アルキルアミノ、(C 6 - C 6 0) アリールアミノ、(C 6 - C 6 0) アリール (C 1 - C 6 0) アルキル、(C 6 - C 6 0) アリールオキシ、(C 6 - C 6 0) アリールチオ、(C 1 - C 6 0) アルコキシカルボニル、カルボキシル、ニトロおよびヒドロキシルから選択される 1 以上の置換基がさらに置換可能であり；

e は 1 ~ 4 の整数であり；

n は 1 ~ 4 の整数である。

【0061】

電界発光層は電界発光が起こる層を意味する。電界発光層は単層でもよく、二つ以上の層を含んでいてもよい。本発明に従って、ドーパントおよびホストが一緒に使用される場合には、発光効率の著しい改善が達成されうる。ドーピング濃度は 0.5 ~ 10 重量% でありうる。既存の他のホスト物質と比べると、当該ホストは、優れた電子および正孔伝導性、優れた安定性、良好な発光効率、および顕著に向上された寿命特性を提供する。

【0062】

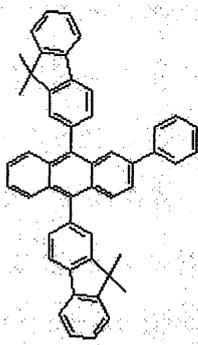
よって、化学式 4 乃至 7 で表される化合物を電界発光ホストとして使用する場合には、それらは化学式 1 で表される有機電界発光化合物の電氣的欠点を補完しうる。

【 0 0 6 3 】

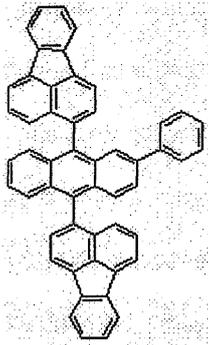
化学式 4 乃至 7 で表されるホスト化合物は、下記化合物で例示できるが、これに限定されるものではない：

【 0 0 6 4 】

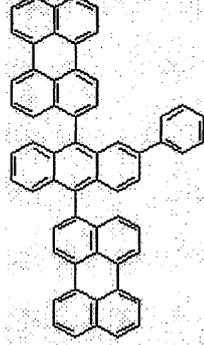
【 化 1 2 0 】



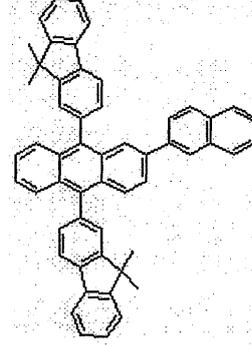
H-1



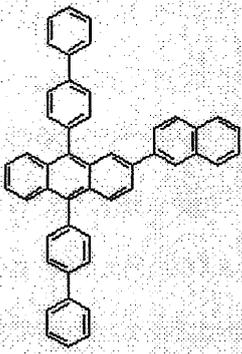
H-2



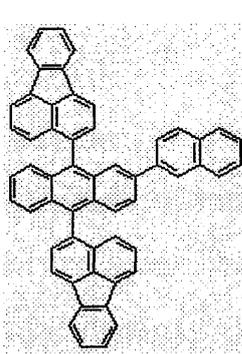
H-3



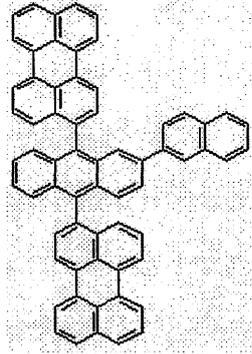
H-4



H-5



H-6

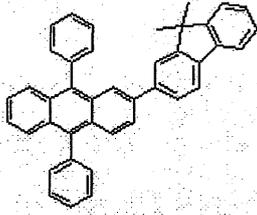


H-7

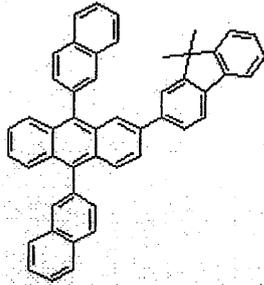
10

20

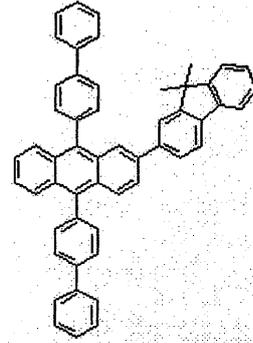
【化 1 2 1】



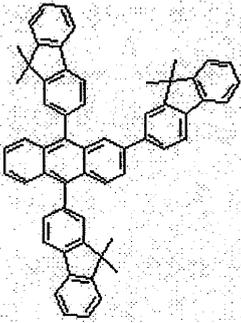
H-8



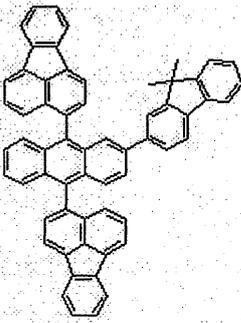
H-9



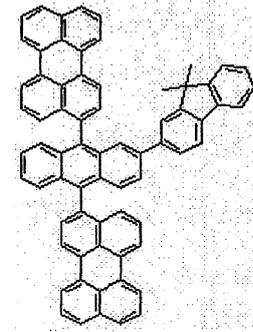
H-10



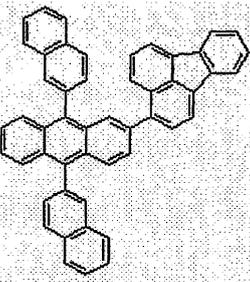
H-11



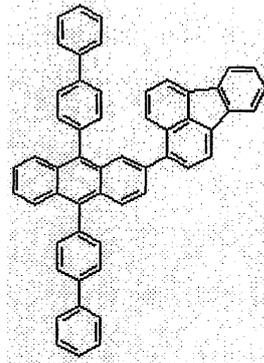
H-12



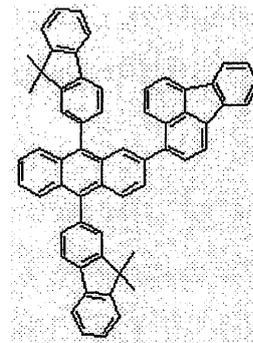
H-13



H-14



H-15



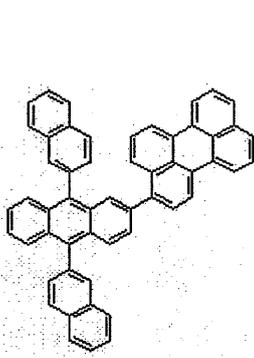
H-16

10

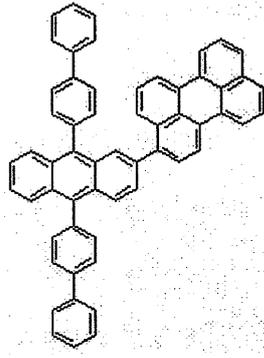
20

30

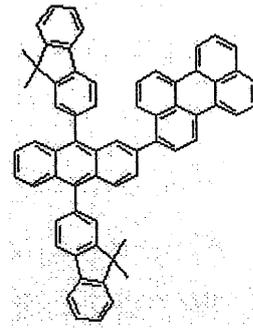
【化 1 2 2】



H-17

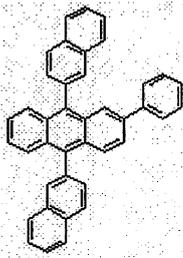


H-18

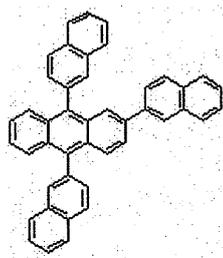


H-19

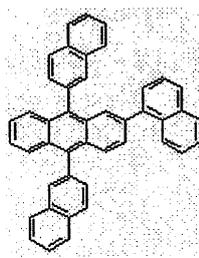
10



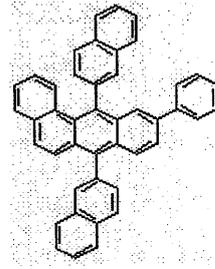
H-20



H-21

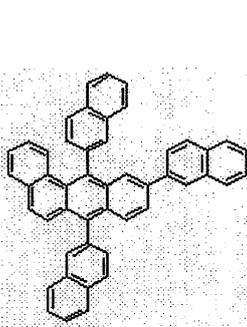


H-22

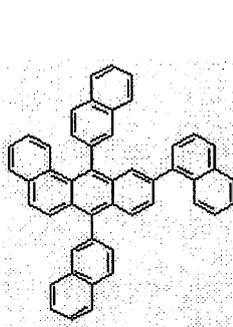


H-23

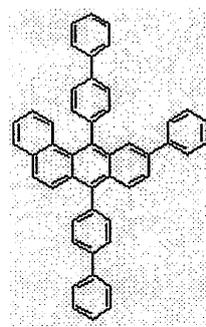
20



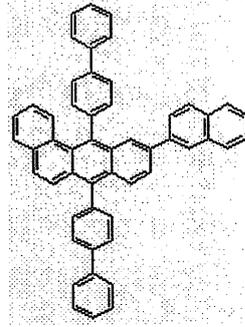
H-24



H-25



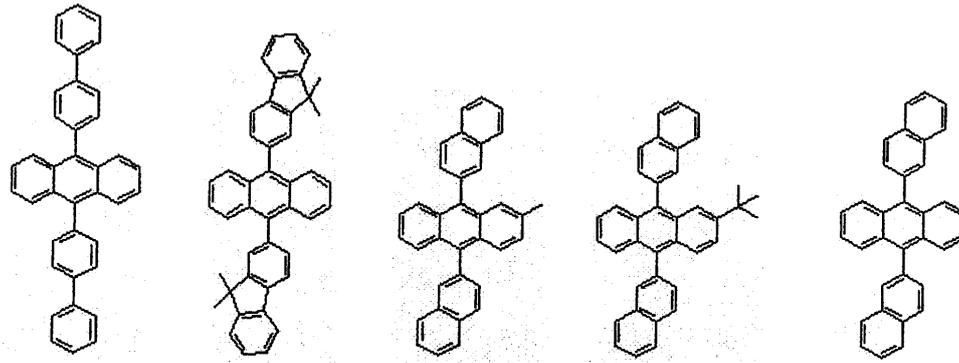
H-26



H-27

30

【化 1 2 3】



H-28

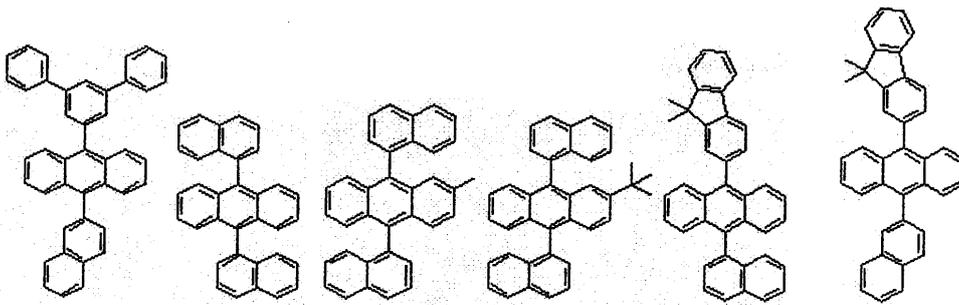
H-29

H-30

H-31

H-32

10



H-33

H-34

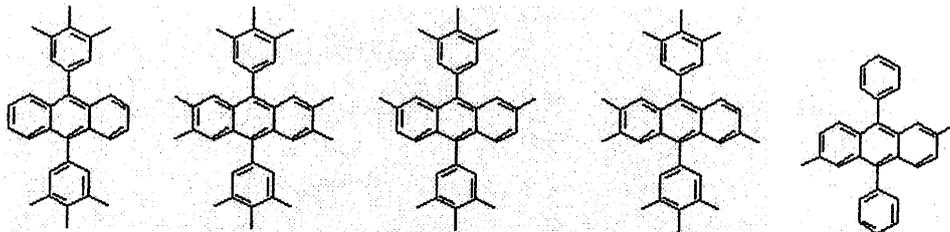
H-35

H-36

H-37

H-38

20



H-39

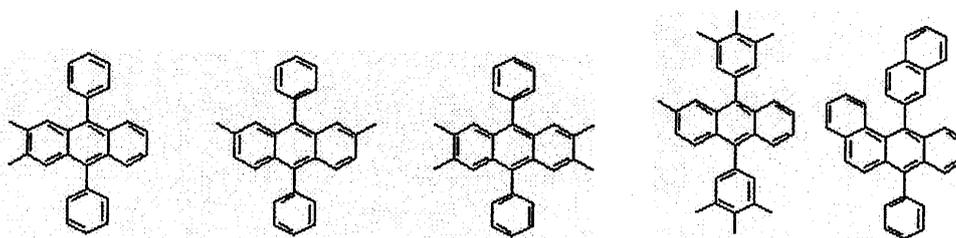
H-40

H-41

H-42

H-43

30



H-44

H-45

H-46

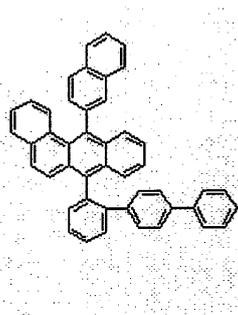
H-47

H-48

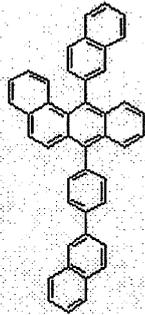
40

【 0 0 6 5 】

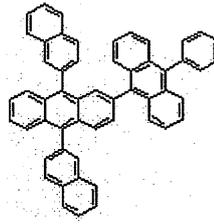
【化 1 2 4】



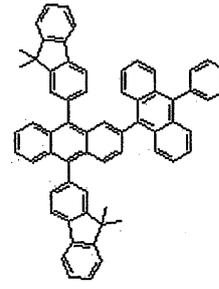
H-49



H-50

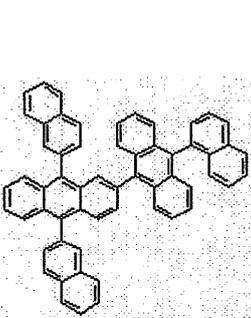


H-51

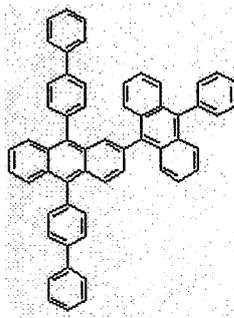


H-52

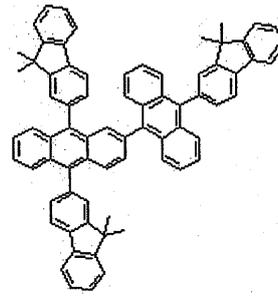
10



H-53

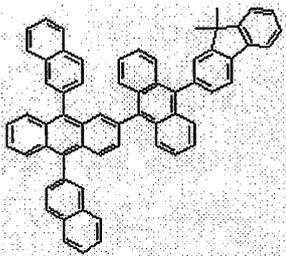


H-54

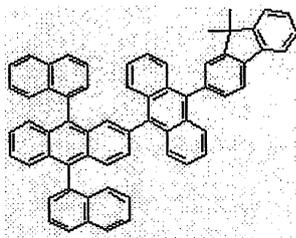


H-55

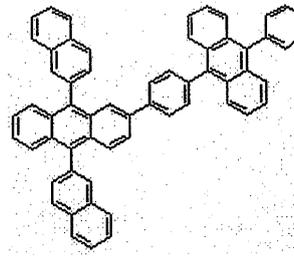
20



H-56



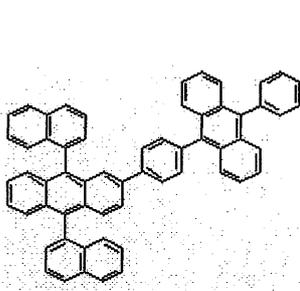
H-57



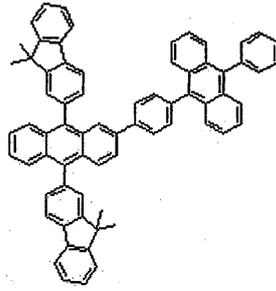
H-58

30

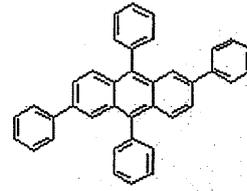
【化 1 2 5】



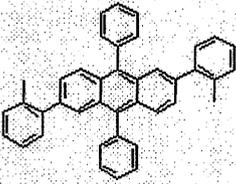
H-59



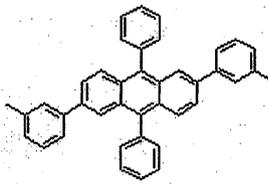
H-60



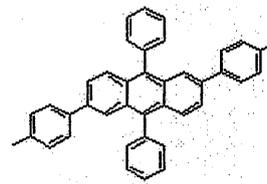
H-61



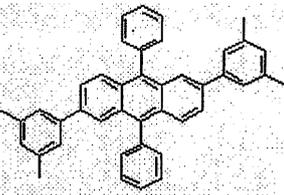
H-62



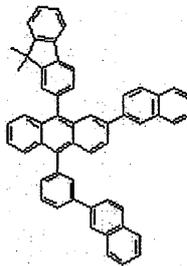
H-63



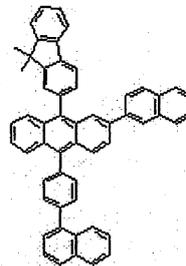
H-64



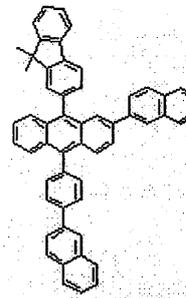
H-65



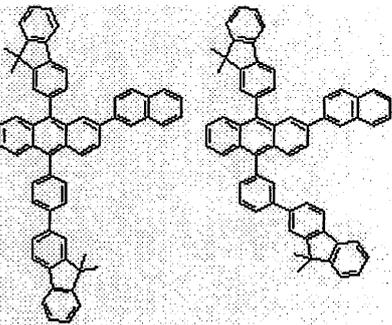
H-66



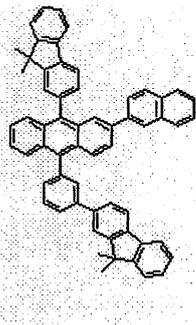
H-67



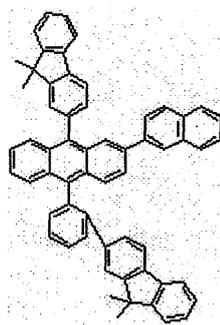
H-68



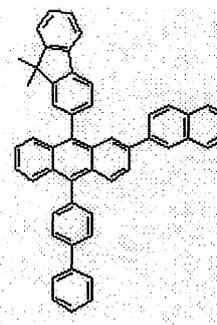
H-69



H-70



H-71



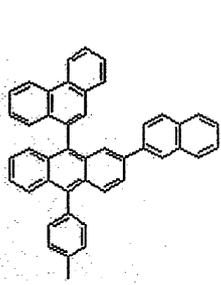
H-72

10

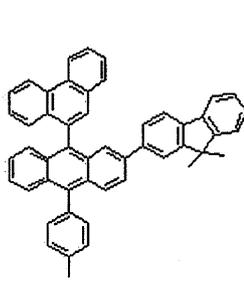
20

30

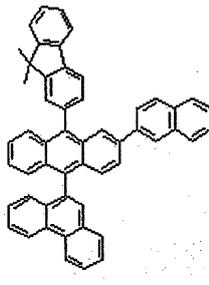
【化 1 2 6】



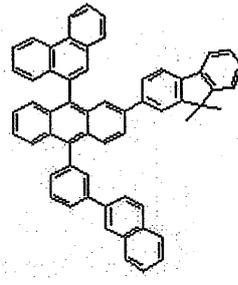
H-73



H-74

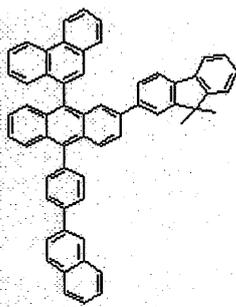


H-75

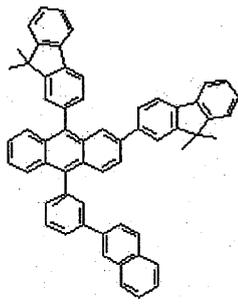


H-76

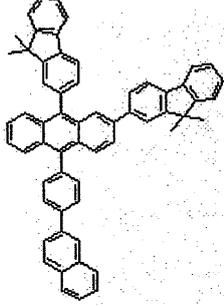
10



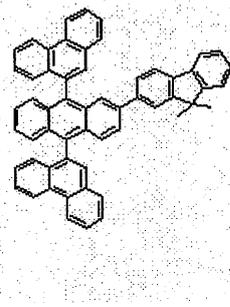
H-77



H-78

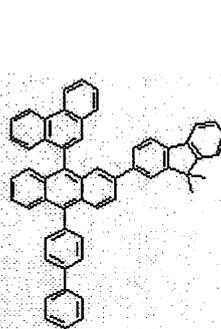


H-79

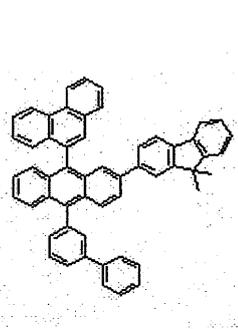


H-80

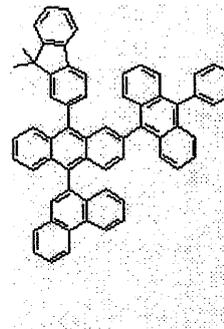
20



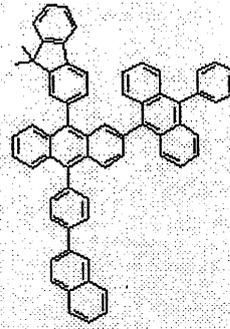
H-81



H-82



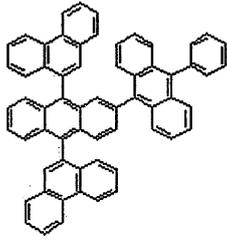
H-83



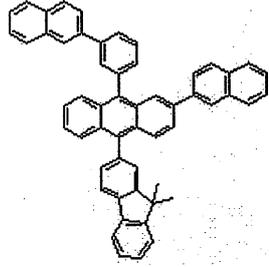
H-84

30

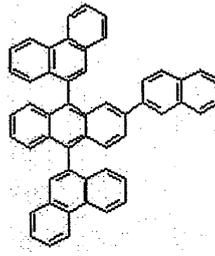
【化 1 2 7】



H-85

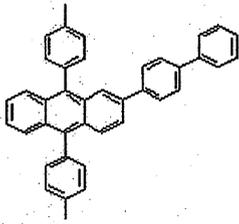


H-86

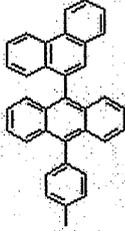


H-87

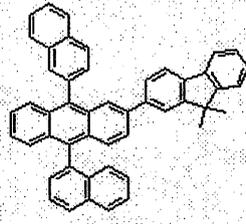
10



H-88

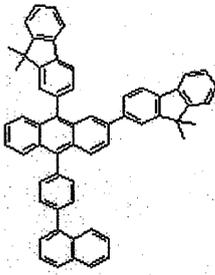


H-89

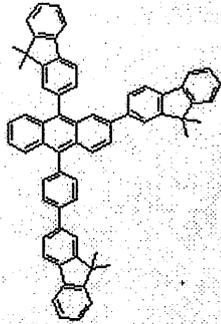


H-90

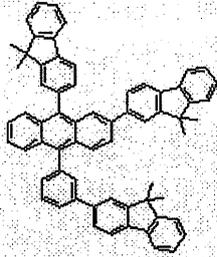
20



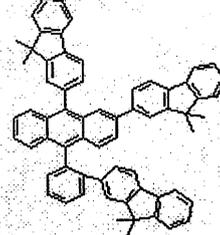
H-91



H-92



H-93

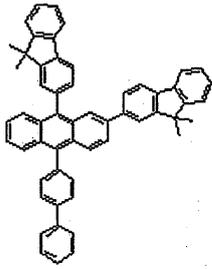


H-94

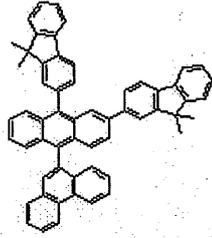
30

【 0 0 6 6 】

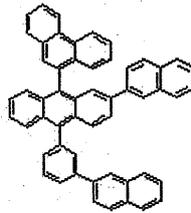
【化 1 2 8】



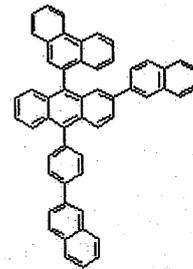
H-95



H-96

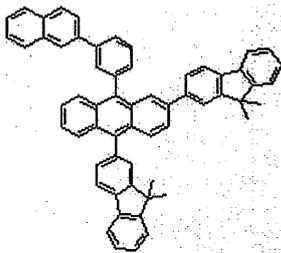


H-97

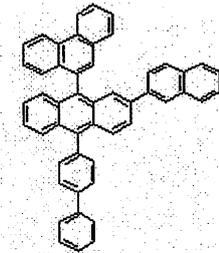


H-98

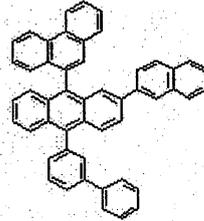
10



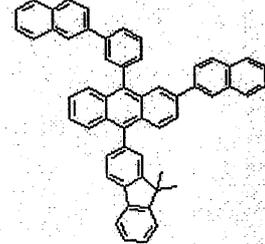
H-99



H-100

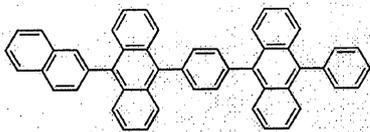


H-101

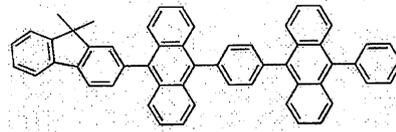


H-102

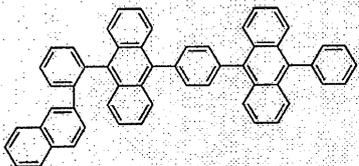
20



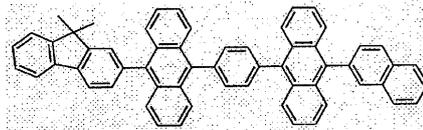
H-103



H-104

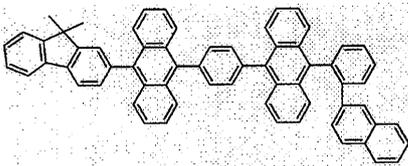


H-105

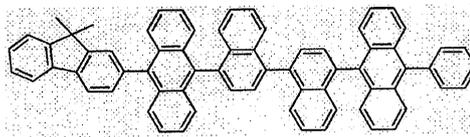


H-106

30



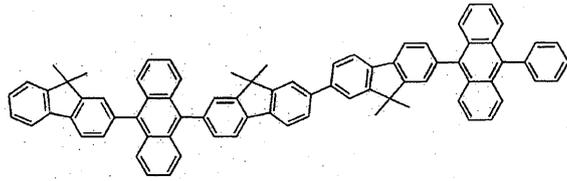
H-107



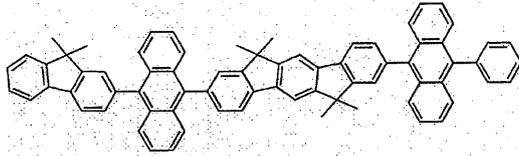
H-108

40

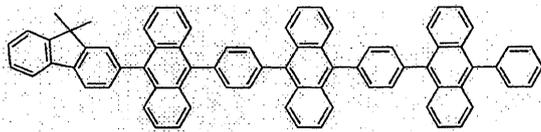
【化 1 2 9】



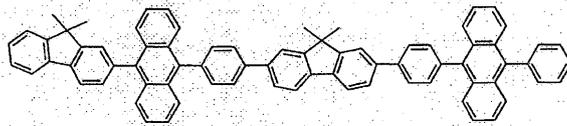
H-109



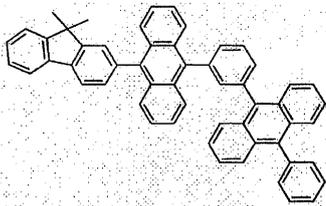
H-110



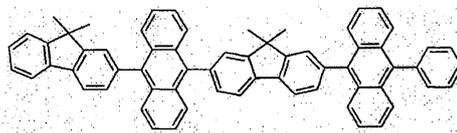
H-111



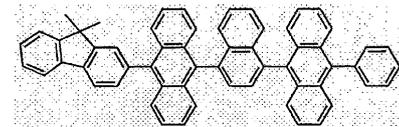
H-112



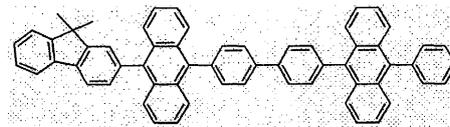
H-113



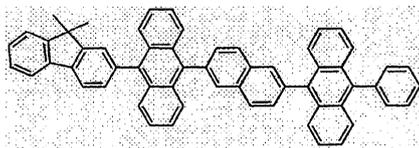
H-114



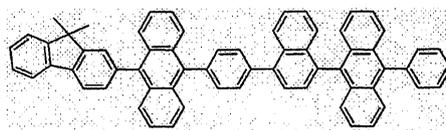
H-115



H-116



H-117



H-118

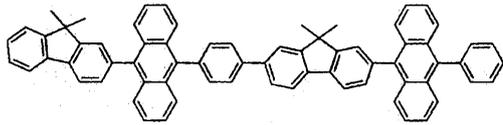
10

20

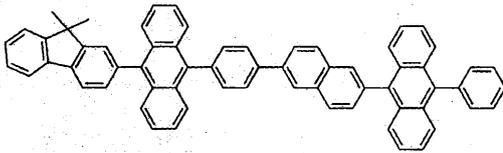
30

40

【化 1 3 0】

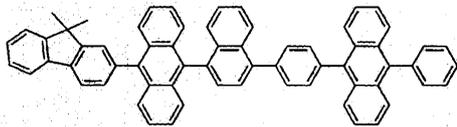


H-119

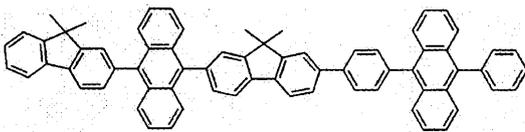


H-120

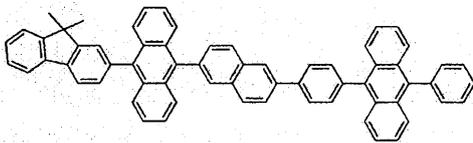
10



H-121

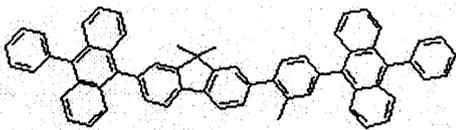


H-122

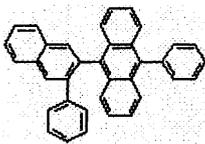


H-123

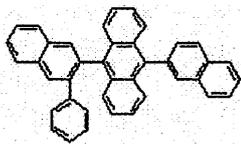
20



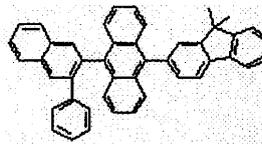
H-124



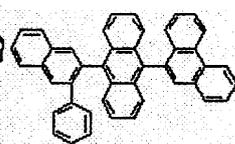
H-125



H-126



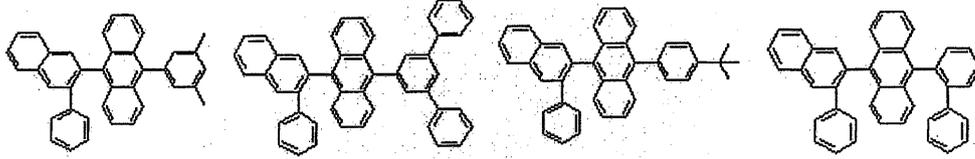
H-127



H-128

30

【化 1 3 1】

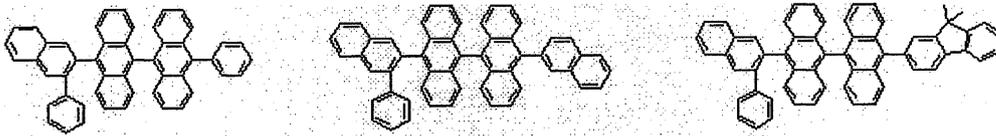


H-129

H-130

H-131

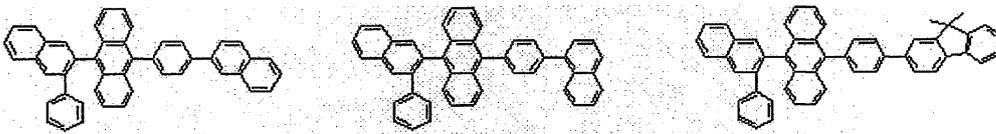
H-132



H-133

H-134

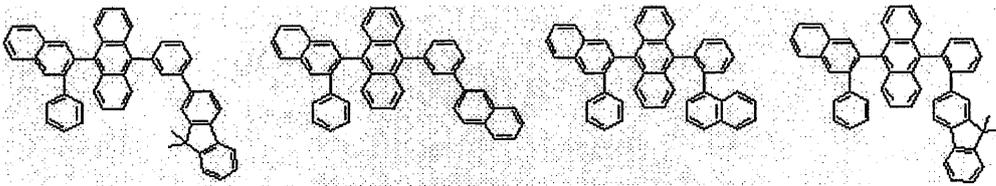
H-135



H-136

H-137

H-138

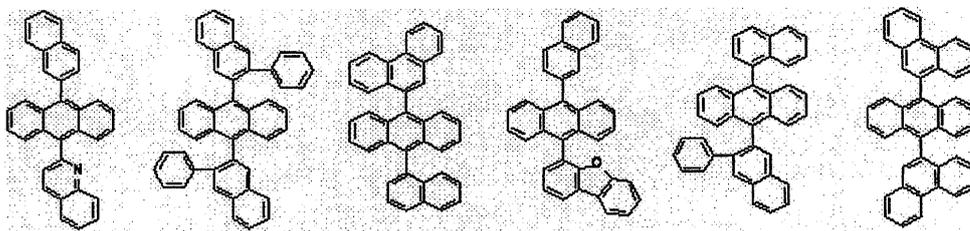


H-139

H-140

H-141

H-142



H-143

H-144

H-145

H-146

H-147

H-148

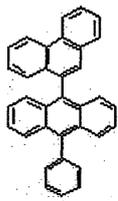
10

20

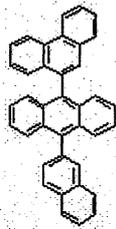
30

40

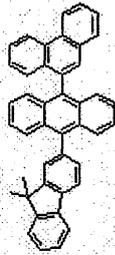
【化 1 3 2】



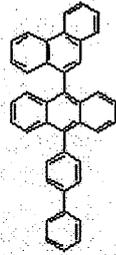
H-149



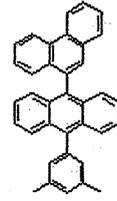
H-150



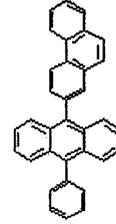
H-151



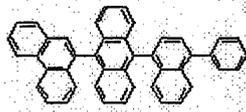
H-152



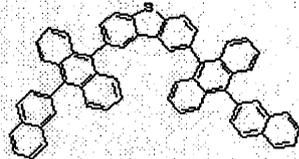
H-153



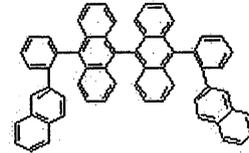
H-154



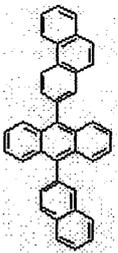
H-155



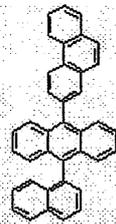
H-156



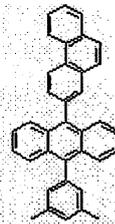
H-157



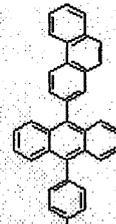
H-158



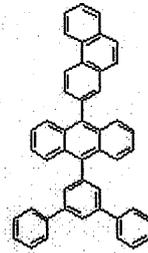
H-159



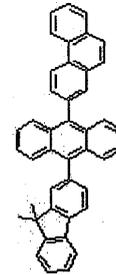
H-160



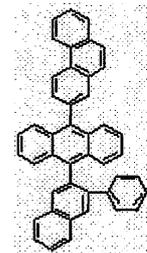
H-161



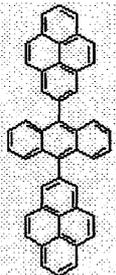
H-162



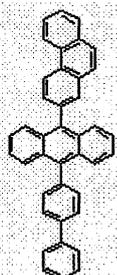
H-163



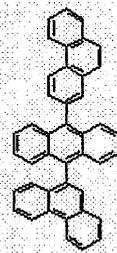
H-164



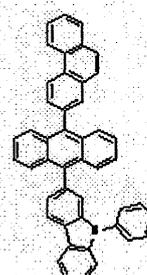
H-165



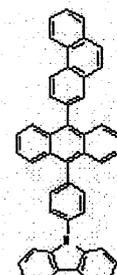
H-166



H-167



H-168



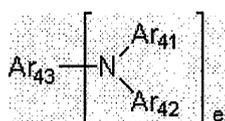
H-169

【0067】

本発明の電界発光素子は、化学式 1 で表される有機電界発光化合物を含み、同時に、アリールアミン系化合物およびスチリルアリールアミン系化合物からなる群から選択される 1 種以上の化合物をさらに含むことができる。例えば、アリールアミン系化合物またはスチリルアリールアミン系化合物は、下記化学式 8 で表される化合物でありうるが、これに限定されるものではない：

【0068】

【化 1 3 3】



(8)

10

20

30

40

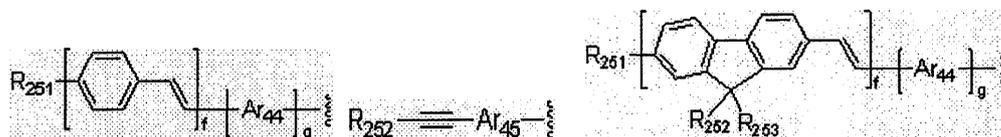
50

【0069】

(化学式8において、 Ar_{41} 及び Ar_{42} は、互いに独立して、(C1-C60)アルキル、(C6-C60)アリール、(C4-C60)ヘテロアリール、(C6-C60)アリールアミノ、(C1-C60)アルキルアミノ、N、OおよびSから選択される1以上のヘテロ原子を含む5員もしくは6員のヘテロシクロアルキル、または(C3-C60)シクロアルキルであり、 Ar_{41} と Ar_{42} は、縮合環を含むかもしくは含まない(C3-C60)アルキレンもしくは(C3-C60)アルケニレンで連結されて、脂環式環、または単環式もしくは多環式芳香族環を形成することができ；

eが1である場合には、 Ar_{43} は(C6-C60)アリール、(C4-C60)ヘテロアリールまたは下記構造

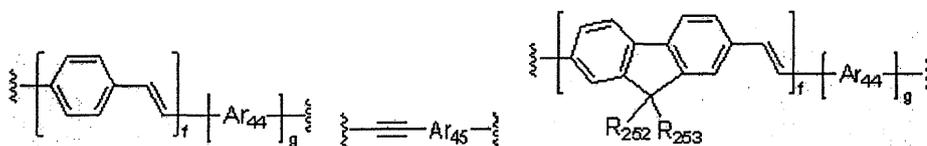
【化134】



を有するアリールであり；

eが2である場合には、 Ar_{43} は(C6-C60)アリーレン、(C4-C60)ヘテロアリーレンまたは下記構造

【化135】



を有するアリーレンであり；

Ar_{44} 及び Ar_{45} は、互いに独立して、(C6-C60)アリーレンまたは(C4-C60)ヘテロアリーレンであり；

R_{251} 、 R_{252} 及び R_{253} は、互いに独立して、水素、重水素、(C1-C60)アルキルまたは(C6-C60)アリールであり；

fは1~4の整数であり；

gは0または1の整数であり；

前記 Ar_{41} 及び Ar_{42} のアルキル、アリール、ヘテロアリール、アリールアミノ、アルキルアミノ、シクロアルキルもしくはヘテロシクロアルキル、前記 Ar_{43} のアリール、ヘテロアリール、アリーレンもしくはヘテロアリーレン、前記 Ar_{44} 及び Ar_{45} のアリーレンもしくはヘテロアリーレン、または前記 R_{251} 乃至 R_{253} のアルキルもしくはアリールには、重水素、ハロゲン、(C1-C60)アルキル、(C6-C60)アリール、(C4-C60)ヘテロアリール、N、OおよびSから選択される1以上のヘテロ原子を含む5員もしくは6員のヘテロシクロアルキル、(C3-C60)シクロアルキル、トリ(C1-C60)アルキルシリル、ジ(C1-C60)アルキル(C6-C60)アリールシリル、トリ(C6-C60)アリールシリル、アダマンチル、(C7-C60)ピシクロアルキル、(C2-C60)アルケニル、(C2-C60)アルキニル、シアノ、(C1-C60)アルキルアミノ、(C6-C60)アリールアミノ、(C6-C60)アリール(C1-C60)アルキル、(C6-C60)アリールオキシ、(C1-C60)アルキルオキシ、(C6-C60)アリールチオ、(C1-C60)アルキルチオ、(C1-C60)アルコキシカルボニル、(C1-C60)アルキルカルボニル、(C6-C60)アリールカルボニル、カルボキシル、ニトロおよびヒドロキシルからなる群から選択される1以上の置換基がさらに置換可能である)。

【0070】

アリールアミン系化合物またはスチリルアリールアミン系化合物は、より具体的に下記

10

20

30

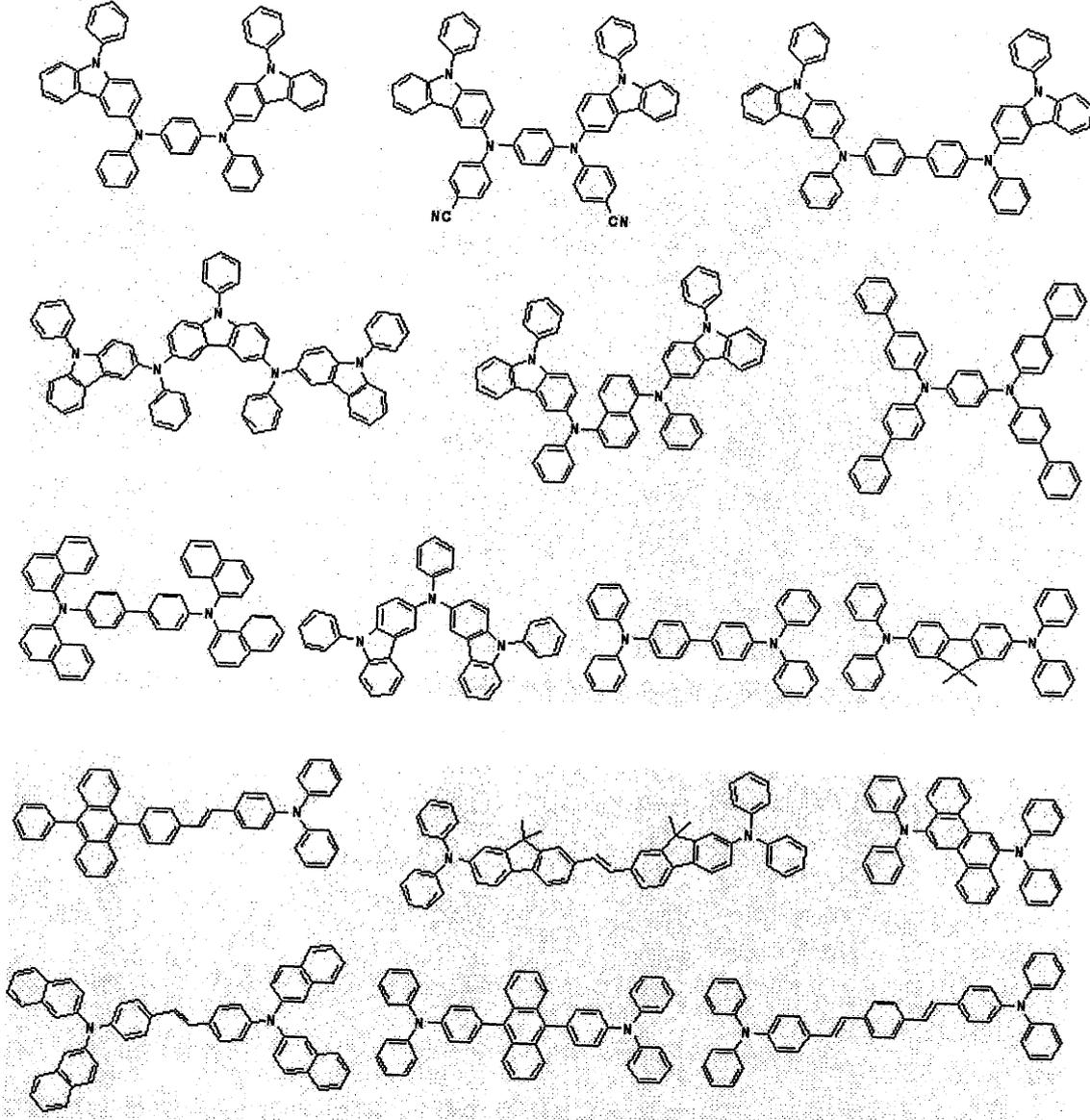
40

50

の化合物で例示できるが、これらに限定されるものではない：

【0071】

【化136】

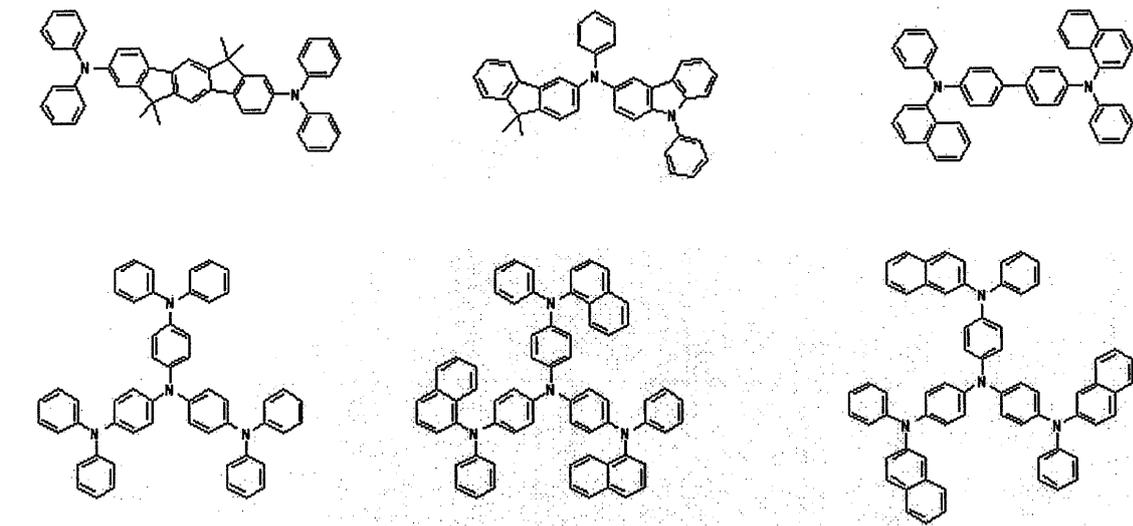


10

20

30

【化137】



40

50

【 0 0 7 2 】

本発明の電界発光素子において、有機層は、化学式 1 で表される電界発光化合物の他に、第 1 族、第 2 族、第 4 周期、第 5 周期遷移金属、ランタン系列金属、及び d - 遷移元素の有機金属からなる群から選択される 1 種以上の金属をさらに含むことができる。また、有機層は、電界発光層および電荷生成層を同時に含むことができる。

【 0 0 7 3 】

化学式 1 で表される電界発光化合物を含む本発明の電界発光素子がサブピクセルとして使用され、かつ Ir、Pt、Pd、Rh、Re、Os、Tl、Pb、Bi、In、Sn、Sb、Te、Au 及び Ag からなる群から選択される 1 種以上の金属化合物を含むサブピクセルの一つ以上が並列にパターンニングされているピクセル構造を有する独立電界発光型の電界発光素子が製造されうる。

10

【 0 0 7 4 】

有機層は 500 ~ 560 nm の波長の電界発光ピークを有する化合物と、560 nm 以上の波長の電界発光ピークを有する化合物とを同時に含むことができる。500 ~ 560 nm の波長の電界発光ピークを有する化合物または 560 nm 以上の波長の電界発光ピークを有する化合物は、下記化学式 9 乃至 15 で表される化合物で例示できるが、これらに限定されるものではない：

【 0 0 7 5 】

【 化 1 3 8 】



(9)

20

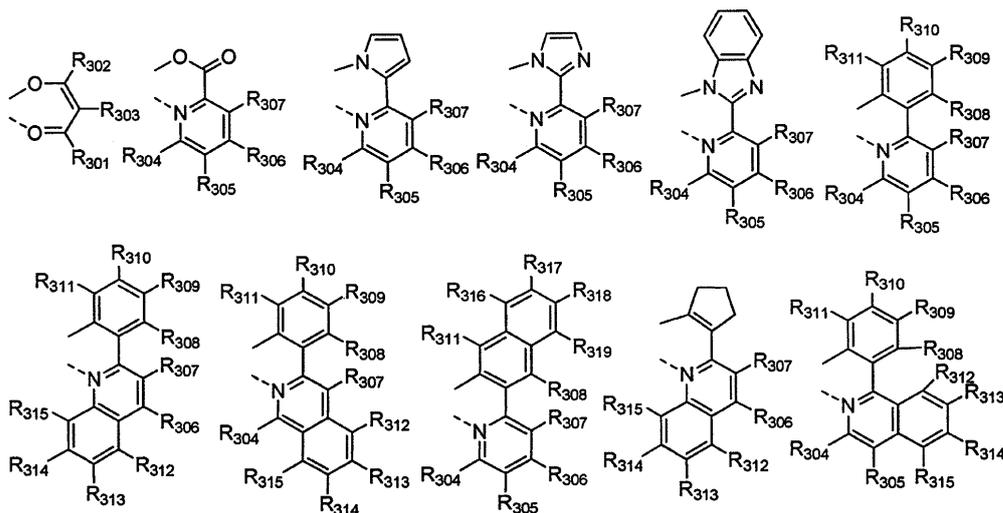
【 0 0 7 6 】

(化学式 9 において、 M^1 は、第 7 族、第 8 族、第 9 族、第 10 族、第 11 族、第 13 族、第 14 族、第 15 族及び第 16 族の金属からなる群から選択される金属であり；

リガンド L^{101} 、 L^{102} 及び L^{103} は、互いに独立して、下記構造

【 0 0 7 7 】

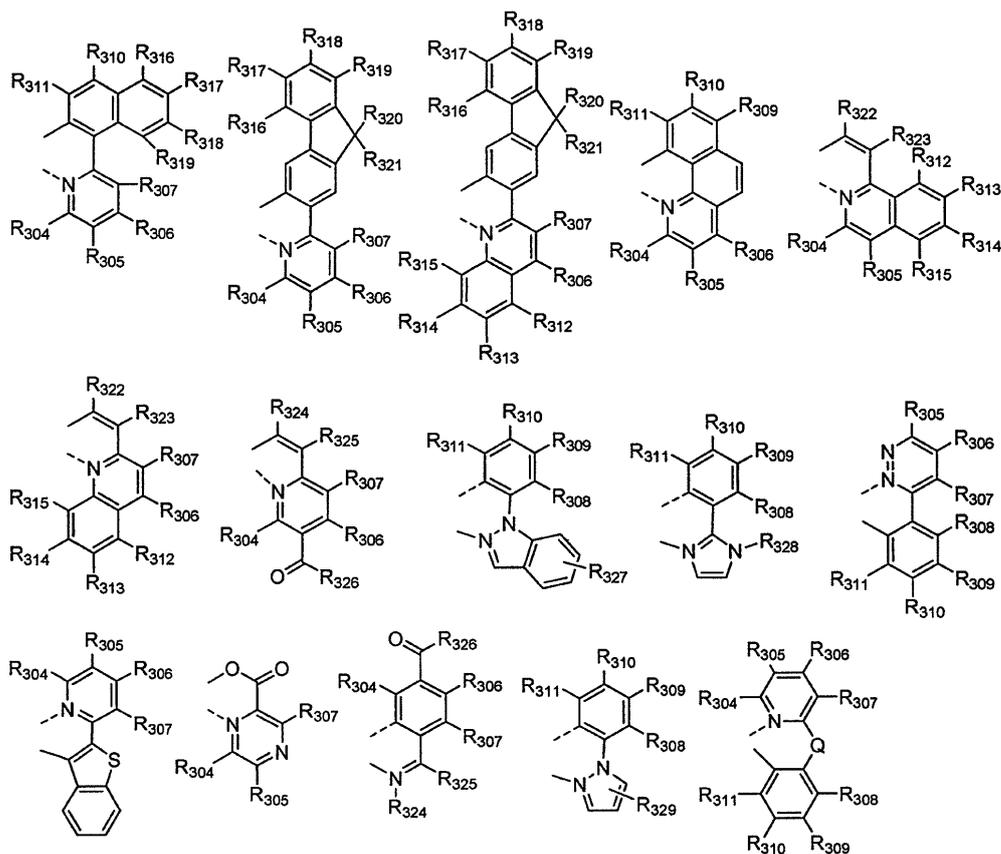
【 化 1 3 9 】



30

40

【化140】



10

20

【0078】

から選択され；

式中、 R_{301} 乃至 R_{303} は、互いに独立して、水素、重水素、ハロゲン置換基を有するもしくは有しない (C1 - C60) アルキル、(C1 - C60) アルキル置換基を有するもしくは有しない (C6 - C60) アリールまたはハロゲンであり；

R_{304} 乃至 R_{319} は、互いに独立して、水素、重水素、(C1 - C60) アルキル、(C1 - C30) アルコキシ、(C3 - C60) シクロアルキル、(C2 - C30) アルケニル、(C6 - C60) アリール、モノもしくはジ(C1 - C30) アルキルアミノ、モノもしくはジ(C6 - C30) アリールアミノ、 SF_5 、トリ(C1 - C30) アルキルシリル、ジ(C1 - C30) アルキル(C6 - C30) アリールシリル、トリ(C6 - C30) アリールシリル、シアノまたはハロゲンであり、前記 R_{304} 乃至 R_{319} のアルキル、シクロアルキル、アルケニルまたはアリールには、重水素、(C1 - C60) アルキル、(C6 - C60) アリールおよびハロゲンから選択される1以上の置換基がさらに置換可能であり；

R_{320} 乃至 R_{323} は、互いに独立して、水素、重水素、ハロゲン置換基を有するもしくは有しない (C1 - C60) アルキル、または (C1 - C60) アルキル置換基を有するもしくは有しない (C6 - C60) アリールであり；

R_{324} 及び R_{325} は、互いに独立して、水素、重水素、(C1 - C60) アルキル、(C6 - C60) アリールもしくはハロゲンであるか、または R_{324} と R_{325} は、縮合環を含むかもしくは含まない (C3 - C12) アルキレンもしくは (C3 - C12) アルケニレンで連結されて、脂環式環、または単環式もしくは多環式芳香族環を形成することができ、前記 R_{324} 及び R_{325} のアルキルもしくはアリール、またはそれらが縮合環を含むかもしくは含まない (C3 - C12) アルキレンもしくは (C3 - C12) アルケニレンで連結されて形成された脂環式環、または単環式もしくは多環式芳香族環には、重水素、ハロゲン置換基を有するもしくは有しない (C1 - C60) アルキル、(C1 - C30) アルコキシ、ハロゲン、トリ(C1 - C30) アルキルシリル、トリ(C6 -

30

40

50

C 3 0) アリールシリル及び (C 6 - C 6 0) アリールから選択される 1 以上の置換基がさらに置換可能であり;

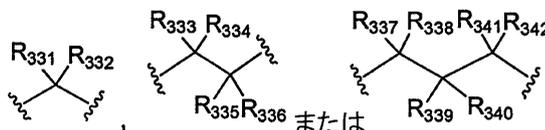
R_{3 2 6} は、(C 1 - C 6 0) アルキル、(C 6 - C 6 0) アリール、(C 5 - C 6 0) ヘテロアリールまたはハロゲンであり;

R_{3 2 7} 乃至 R_{3 2 9} は、互いに独立して、水素、重水素、(C 1 - C 6 0) アルキル、(C 6 - C 6 0) アリールまたはハロゲンであり、前記 R_{3 2 6} 乃至 R_{3 2 9} のアルキルもしくはアリールには、ハロゲンまたは (C 1 - C 6 0) アルキルがさらに置換可能であり;

【0079】

Q は

【化141】



10

であり、

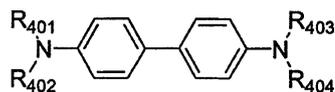
【0080】

式中、R_{3 3 1} 乃至 R_{3 4 2} は、互いに独立して、水素、重水素、ハロゲン置換基を有するもしくは有しない (C 1 - C 6 0) アルキル、(C 1 - C 3 0) アルコキシ、ハロゲン、(C 6 - C 6 0) アリール、シアノ、もしくは (C 5 - C 6 0) シクロアルキルであるか、または R_{3 3 1} 乃至 R_{3 4 2} のそれぞれは、隣接した置換基とアルキレンもしくはアルケニレンで連結されて、(C 5 - C 7) スピロ環もしくは (C 5 - C 9) 縮合環を形成できるか、または R_{3 0 7} もしくは R_{3 0 8} とアルキレンもしくはアルケニレンで連結されて、(C 5 - C 7) 縮合環を形成することができる) :

20

【0081】

【化142】



(10)

【0082】

30

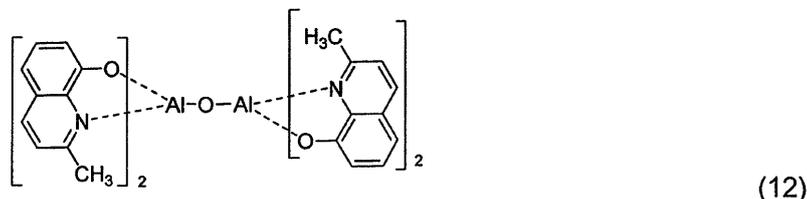
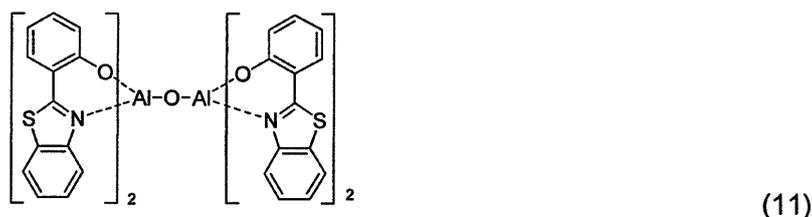
(化学式 10 において、R_{4 0 1} 乃至 R_{4 0 4} は、互いに独立して、(C 1 - C 6 0) アルキルもしくは (C 6 - C 6 0) アリールであるか、またはそのそれぞれは隣接した置換基と縮合環を含むかもしくは含まない (C 3 - C 6 0) アルキレンもしくは (C 3 - C 6 0) アルケニレンで連結されて、脂環式環、または単環式もしくは多環式芳香族環を形成することができる) ;

前記 R_{4 0 1} 乃至 R_{4 0 4} のアルキルもしくはアリール、またはそれらが縮合環を含むかもしくは含まない (C 3 - C 6 0) アルキレンもしくは (C 3 - C 6 0) アルケニレンで連結されて形成された脂環式環、または単環式もしくは多環式芳香族環には、重水素、ハロゲン置換基を有するもしくは有しない (C 1 - C 6 0) アルキル、(C 1 - C 6 0) アルコキシ、ハロゲン、トリ (C 1 - C 6 0) アルキルシリル、トリ (C 6 - C 6 0) アリールシリル及び (C 6 - C 6 0) アリールから選択される 1 以上の置換基がさらに置換可能である) :

40

【0083】

【化 1 4 3】

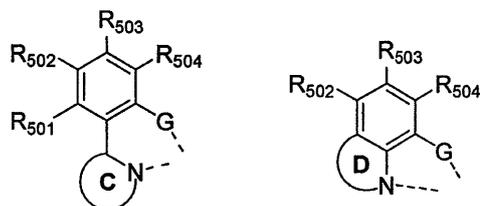


10

【 0 0 8 4】

(化学式 1 3 において、リガンド L^{201} 及び L^{202} は、互いに独立して下記構造

【化 1 4 4】



20

から選択され；

M^2 は、2 価または 3 価金属であり；

M^2 が 2 価金属である場合には h は 0 であり、 M^2 が 3 価金属である場合には h は 1 であり；

T は、(C 6 - C 6 0) アリールオキシまたはトリ (C 6 - C 6 0) アリールシリルであり、前記 T のアリールオキシまたはトリアリールシリルには、(C 1 - C 6 0) アルキルまたは (C 6 - C 6 0) アリールがさらに置換可能であり；

G は、O、S または Se であり；

環 C は、オキサゾール、チアゾール、イミダゾール、オキサジアゾール、チアジアゾール、ベンゾオキサゾール、ベンゾチアゾール、ベンゾイミダゾール、ピリジン、またはキノリンであり；

環 D は、ピリジンまたはキノリンであって、前記環 D には、(C 1 - C 6 0) アルキル、(C 1 - C 6 0) アルキル置換基を有するもしくは有しないフェニル、またはナフチルがさらに置換可能であり；

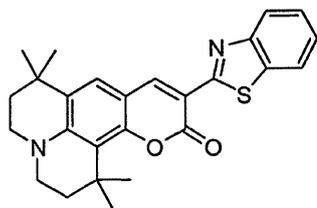
R_{501} 乃至 R_{504} は、互いに独立して、水素、重水素、(C 1 - C 6 0) アルキル、ハロゲン、トリ (C 1 - C 6 0) アルキルシリル、トリ (C 6 - C 6 0) アリールシリルもしくは (C 6 - C 6 0) アリールであるか、またはそのそれぞれは隣接した置換基と (C 3 - C 6 0) アルキレンもしくは (C 3 - C 6 0) アルケニレンで結合されて縮合環を形成することができ、前記ピリジンまたはキノリンは、 R_{501} と化学結合をなして縮合環を形成することができ；

前記環 C 並びに R_{401} 乃至 R_{404} のアリールには、重水素、(C 1 - C 6 0) アルキル、ハロゲン、ハロゲン置換基を有する (C 1 - C 6 0) アルキル、フェニル、ナフチル、トリ (C 1 - C 6 0) アルキルシリル、トリ (C 6 - C 6 0) アリールシリルまたはアミノがさらに置換可能である)；

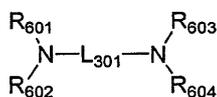
【 0 0 8 5】

40

【化 1 4 5】



(14)



(15)

10

【 0 0 8 6】

(化学式 15 において、 L_{301} は、重水素、ハロゲン、(C1 - C60) アルキル、(C6 - C60) アリール、(C4 - C60) ヘテロアリール、N、O および S から選択される 1 以上のヘテロ原子を含む 5 員もしくは 6 員のヘテロシクロアルキル、(C3 - C60) シクロアルキル、トリ(C1 - C60) アルキルシリル、ジ(C1 - C60) アルキル(C6 - C60) アリールシリル、トリ(C6 - C60) アリールシリル、アダマンチル、(C7 - C60) ビシクロアルキル、(C2 - C60) アルケニル、(C2 - C60) アルキニル、(C1 - C60) アルコキシ、シアノ、(C1 - C60) アルキルアミノ、(C6 - C60) アリールアミノ、(C6 - C60) アリール(C1 - C60) アルキル、(C6 - C60) アリールオキシ、(C6 - C60) アリールチオ、(C1 - C60) アルコキシカルボニル、カルボキシル、ニトロおよびヒドロキシルからなる群から選択される 1 以上の置換基を有するもしくは有しない(C6 - C60) アリーレンであり、前記アリーレンに置換されるアルキル、シクロアルキル、ヘテロシクロアルキル、アリール、ヘテロアリール、アリールシリル、アルキルシリル、アルキルアミノまたはアリールアミノ置換基には、重水素、ハロゲン、(C1 - C60) アルキル、(C6 - C60) アリール、(C4 - C60) ヘテロアリール、N、O および S から選択される 1 以上のヘテロ原子を含む 5 員もしくは 6 員のヘテロシクロアルキル、(C3 - C60) シクロアルキル、トリ(C1 - C60) アルキルシリル、ジ(C1 - C60) アルキル(C6 - C60) アリールシリル、トリ(C6 - C60) アリールシリル、アダマンチル、(C7 - C60) ビシクロアルキル、(C2 - C60) アルケニル、(C2 - C60) アルキニル、(C1 - C60) アルコキシ、シアノ、(C1 - C60) アルキルアミノ、(C6 - C60) アリールアミノ、(C6 - C60) アリール(C1 - C60) アルキル、(C6 - C60) アリールオキシ、(C6 - C60) アリールチオ、(C1 - C60) アルコキシカルボニル、カルボキシル、ニトロおよびヒドロキシルから選択される 1 以上の置換基がさらに置換可能であり；

20

30

R_{601} 乃至 R_{604} は、互いに独立して、(C1 - C60) アルキル、(C6 - C60) アリール、(C4 - C60) ヘテロアリール、(C6 - C60) アリールアミノ、(C1 - C60) アルキルアミノ、N、O および S から選択される 1 以上のヘテロ原子を含む 5 員もしくは 6 員のヘテロシクロアルキル、もしくは(C3 - C60) シクロアルキルであるか、または R_{601} 乃至 R_{604} のそれぞれは、隣接した置換基と縮合環を含むかもしくは含まない(C3 - C60) アルキレンもしくは(C3 - C60) アルケニレンで連結されて、脂環式環、または単環式もしくは多環式芳香族環を形成することができ；

40

前記 R_{601} 乃至 R_{604} のアルキル、アリール、ヘテロアリール、アリールアミノ、アルキルアミノ、シクロアルキルもしくはヘテロシクロアルキルには、重水素、ハロゲン、(C1 - C60) アルキル、(C6 - C60) アリール、(C4 - C60) ヘテロアリール、N、O および S から選択される 1 以上のヘテロ原子を含む 5 員もしくは 6 員のヘテロシクロアルキル、(C3 - C60) シクロアルキル、トリ(C1 - C60) アルキルシリル、ジ(C1 - C60) アルキル(C6 - C60) アリールシリル、トリ(C6 - C60) アリールシリル、アダマンチル、(C7 - C60) ビシクロアルキル、(C2 - C60) アルケニル、(C2 - C60) アルキニル、(C1 - C60) アルコキシ、シアノ、(C1 - C60) アルキルアミノ、(C6 - C60) アリールアミノ、(C6 - C60) アリール(C1 - C60) アルキル、(C6 - C60) アリールオキシ、(C6 - C60) アリールチオ、(C1 - C60) アルコキシカルボニル、カルボキシル、ニトロおよびヒドロキシルから選択される 1 以上の置換基がさらに置換可能であり；

50

0) アルケニル、(C2 - C60) アルキニル、(C1 - C60) アルコキシ、シアノ、(C1 - C60) アルキルアミノ、(C6 - C60) アリールアミノ、(C6 - C60) アリール(C1 - C60) アルキル、(C6 - C60) アリールオキシ、(C6 - C60) アリールチオ、(C1 - C60) アルコシカルボニル、カルボキシル、ニトロおよびヒドロキシルから選択される1以上の置換基がさらに置換可能である)。

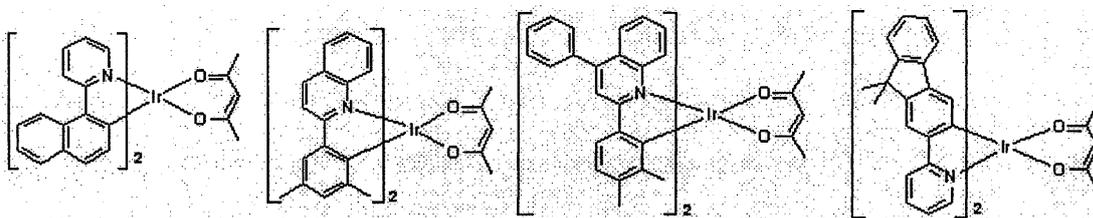
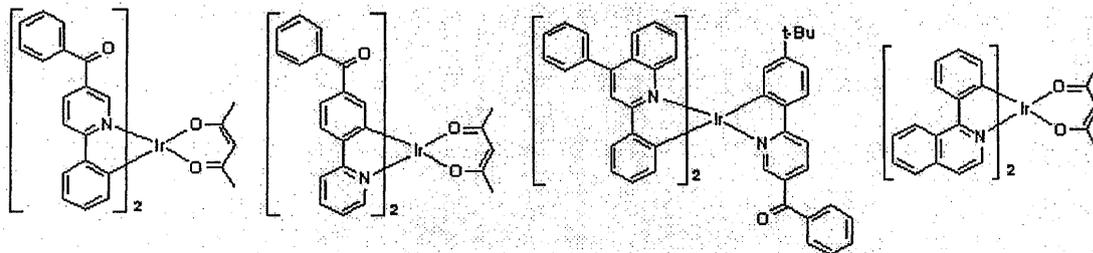
【0087】

500 ~ 560 nmの波長の電界発光ピークを有する化合物、または560 nm以上の波長の電界発光ピークを有する化合物は、下記化合物で表される化合物により例示できるが、これらに限定されるものではない：

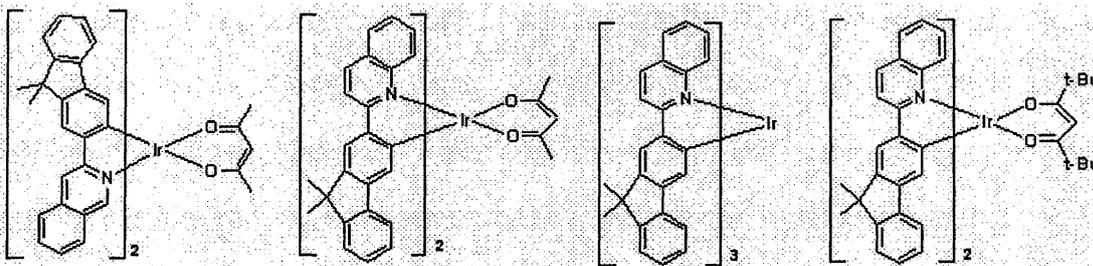
【0088】

10

【化146】

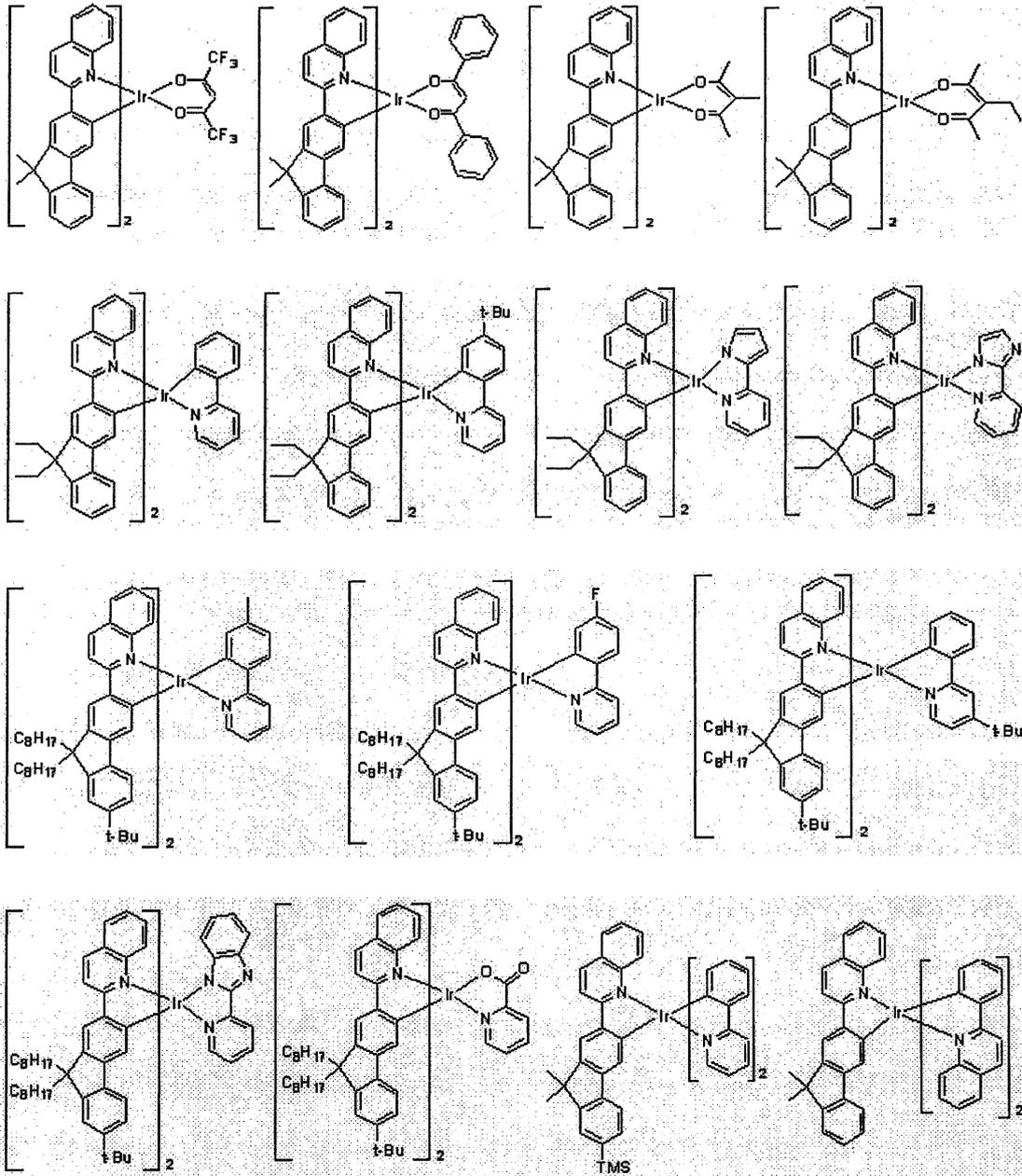


20



30

【化 1 4 7】

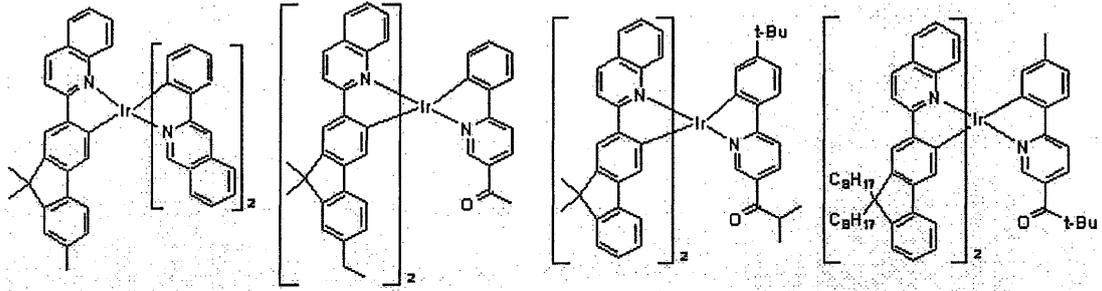


10

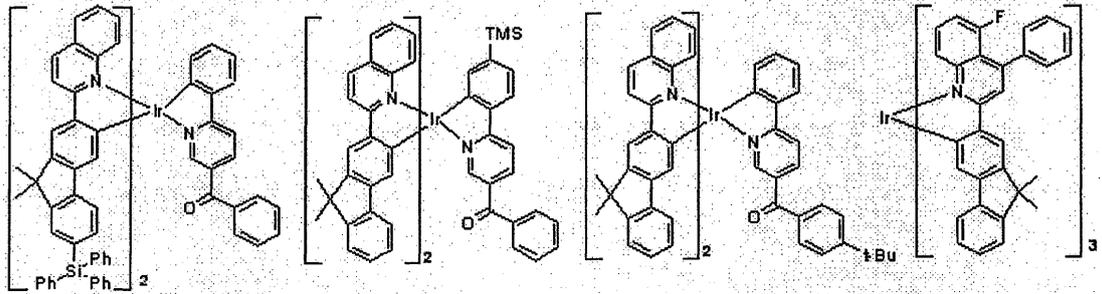
20

30

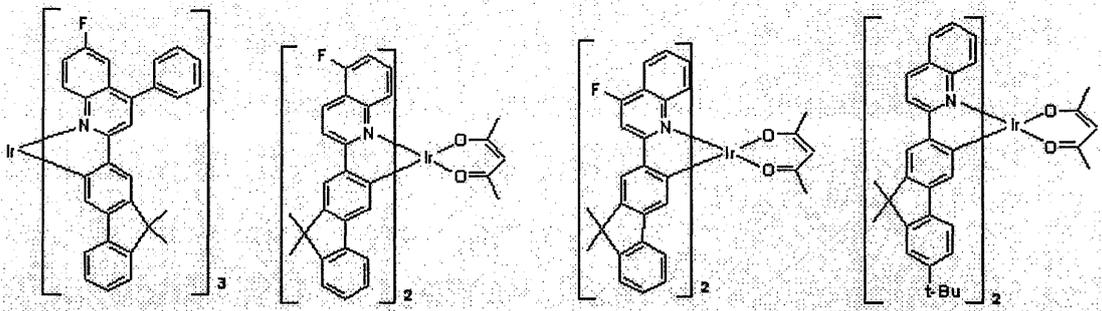
【化 1 4 8】



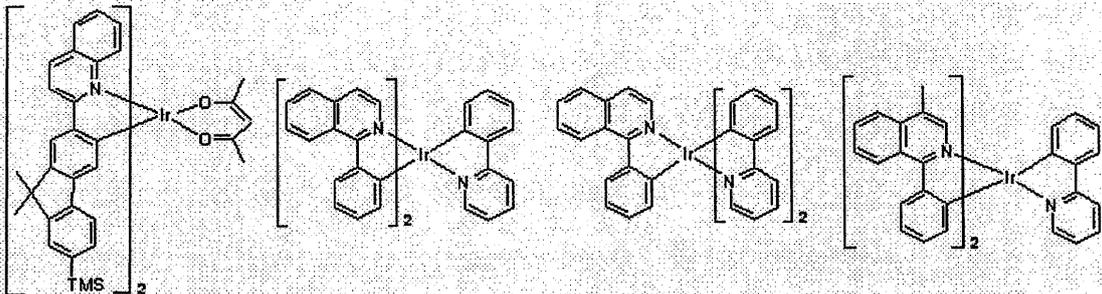
10



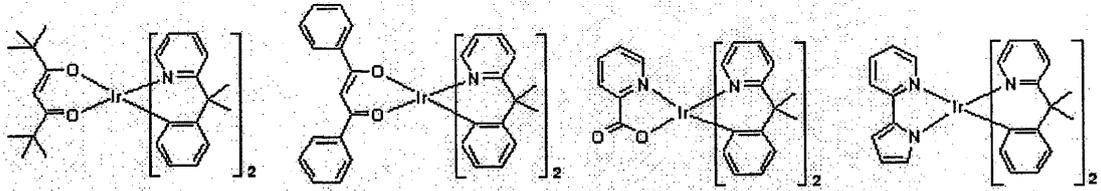
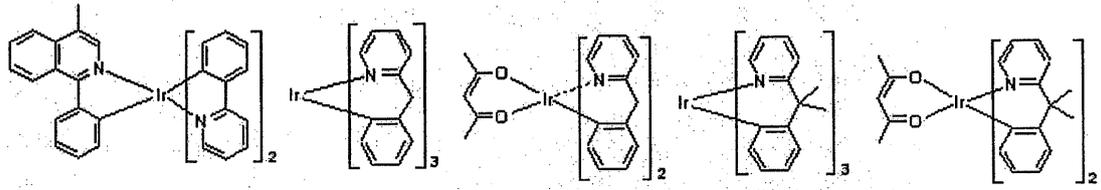
20



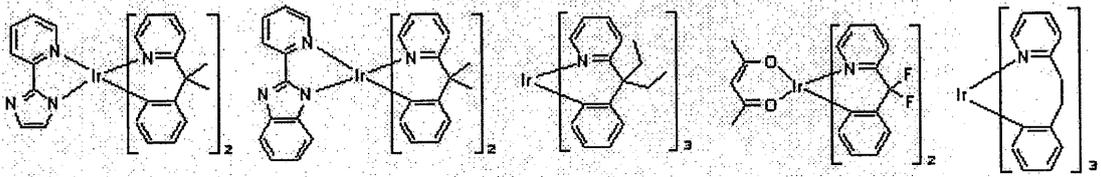
30



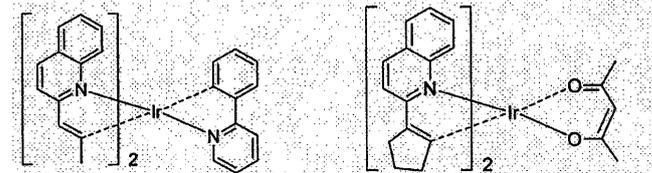
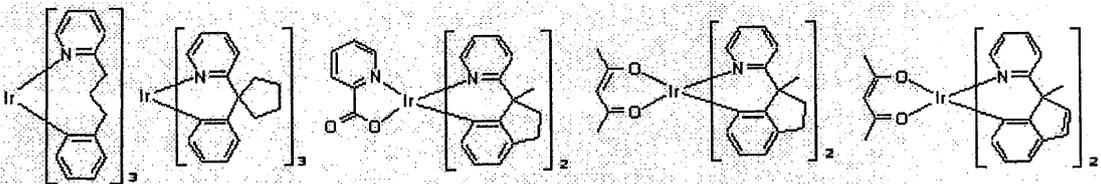
【化 1 4 9】



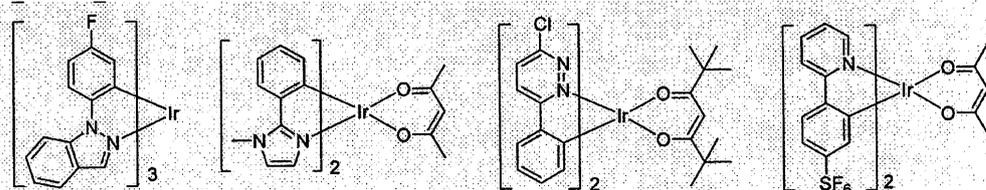
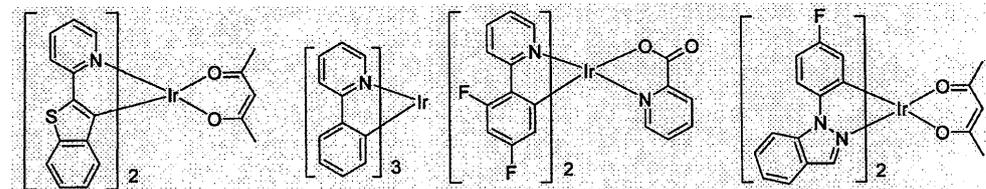
10



20

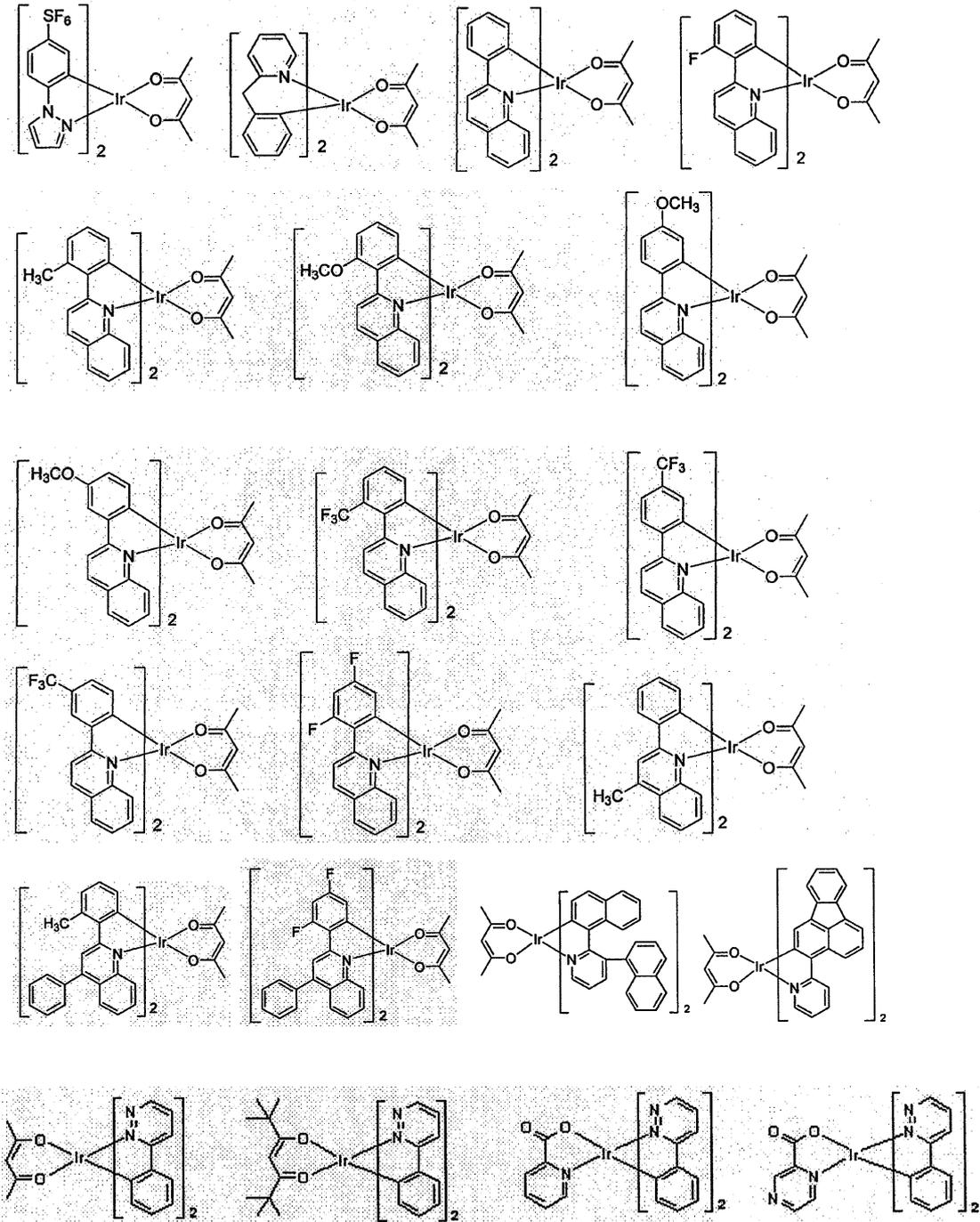


30



40

【化 1 5 0】



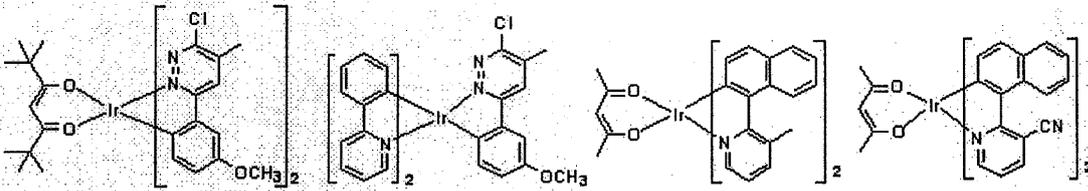
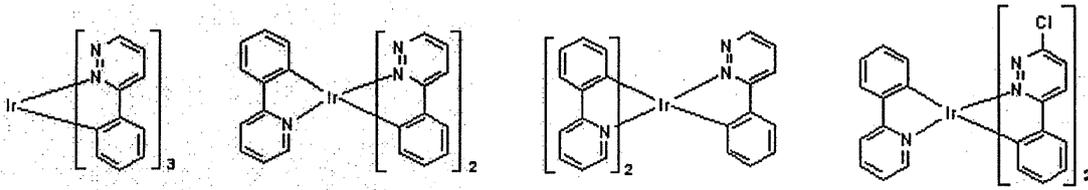
10

20

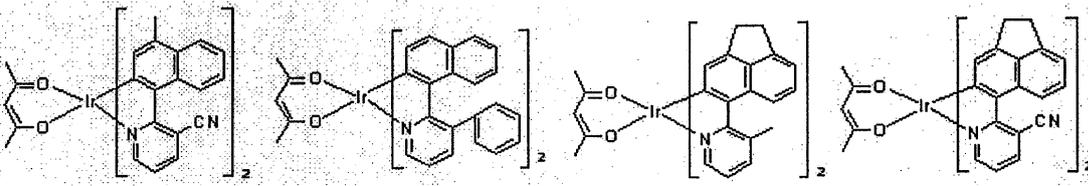
30

【 0 0 8 9 】

【化 1 5 1】

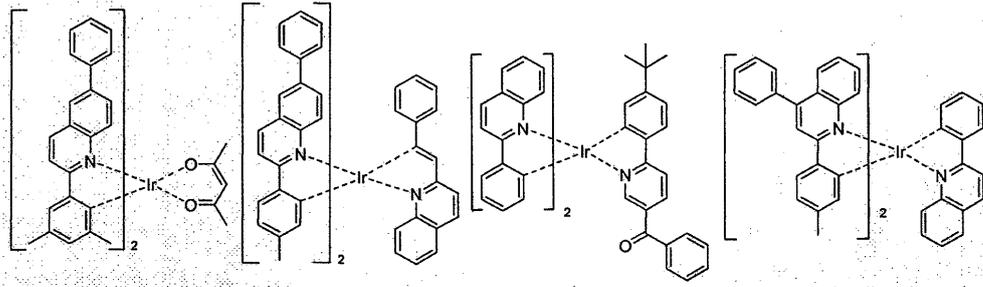


10

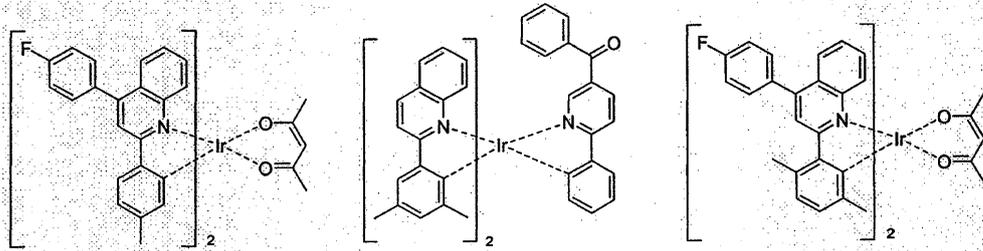


20

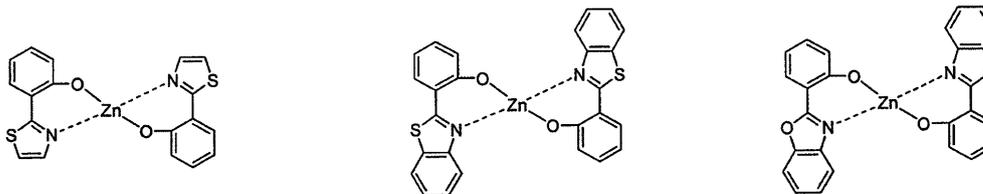
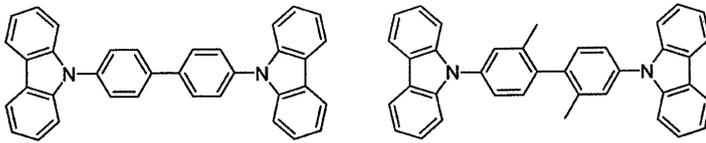
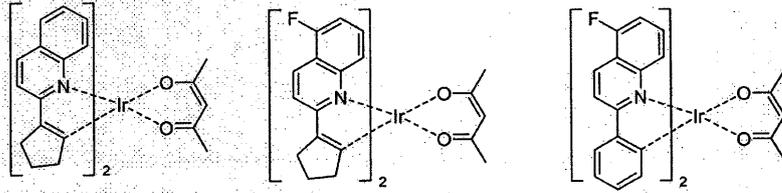
【化 1 5 2】



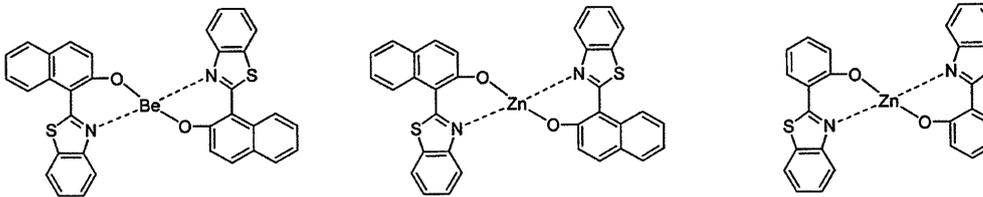
10



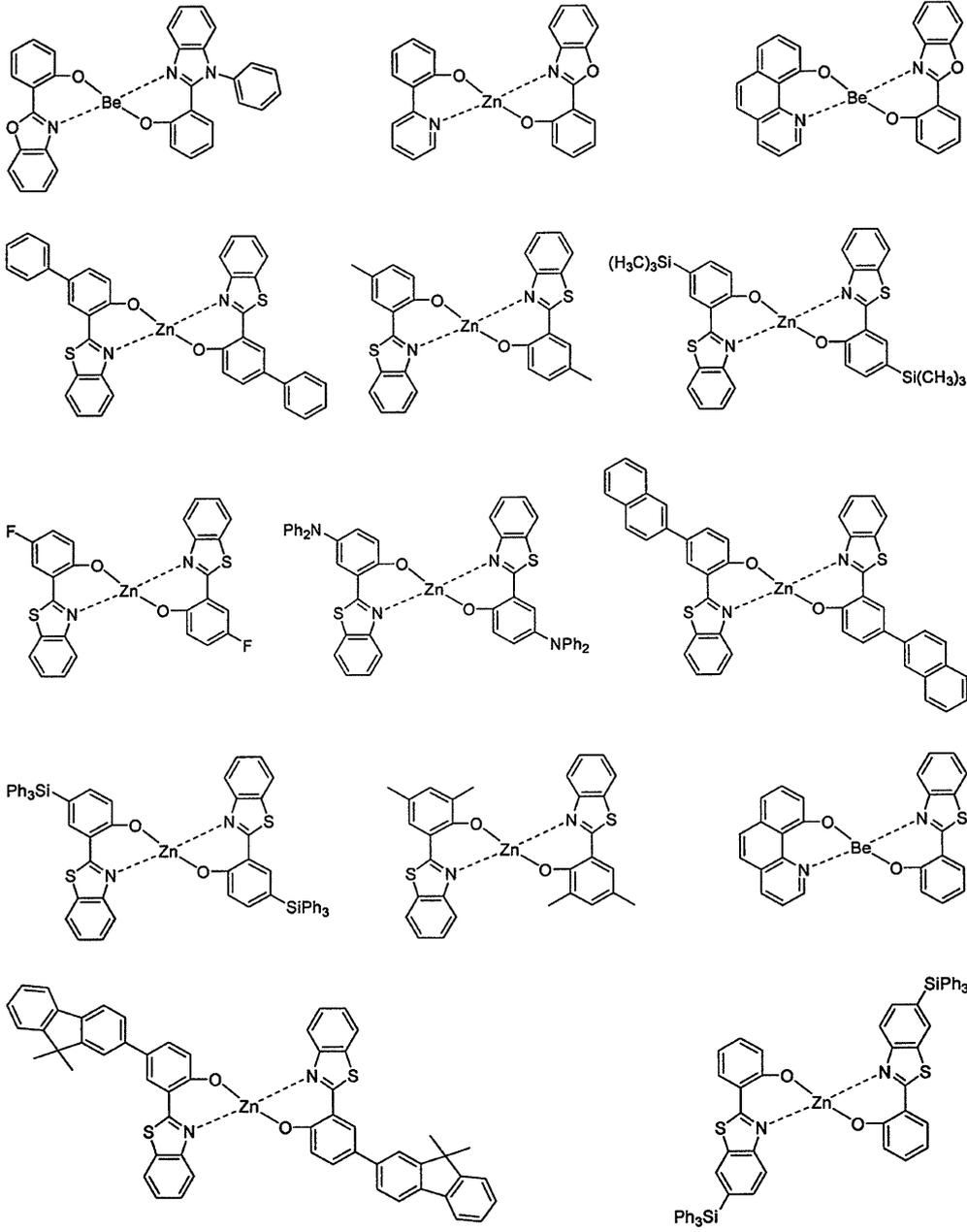
20



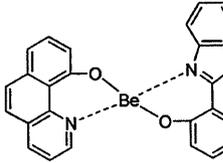
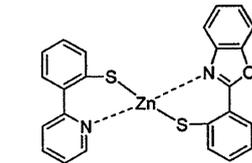
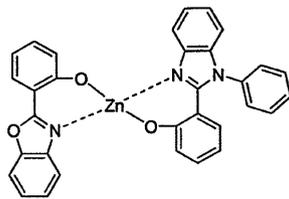
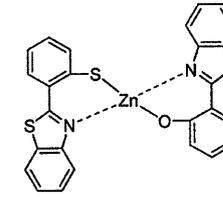
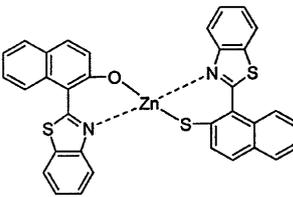
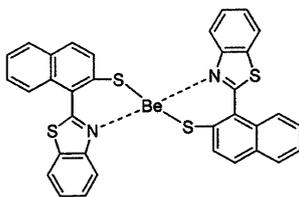
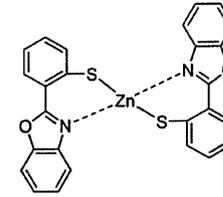
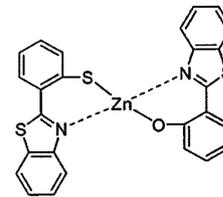
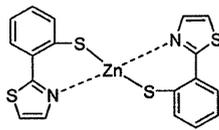
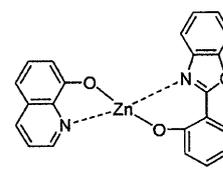
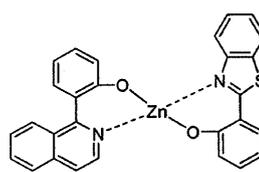
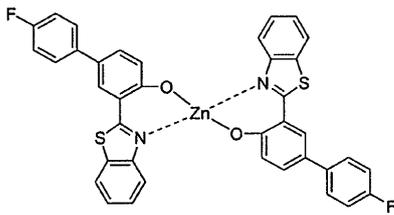
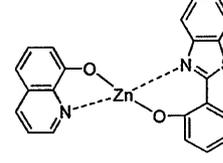
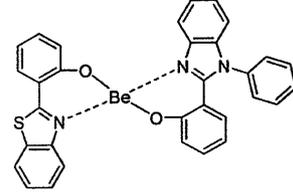
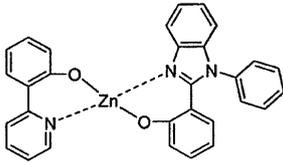
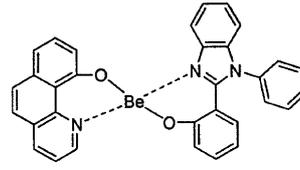
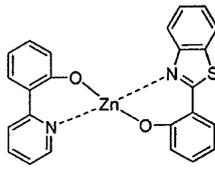
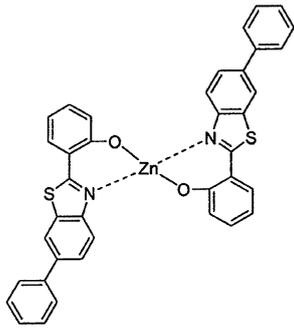
30



【化 1 5 3】



【化 1 5 4】



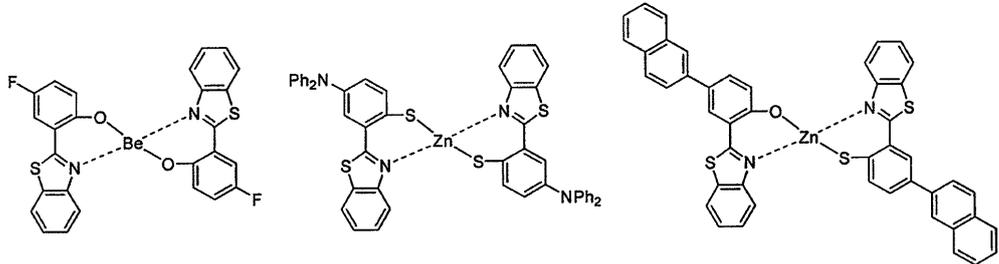
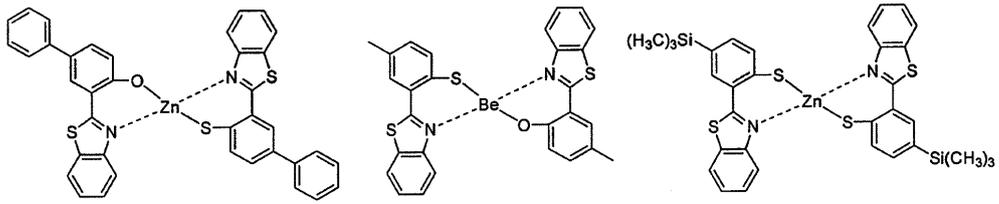
10

20

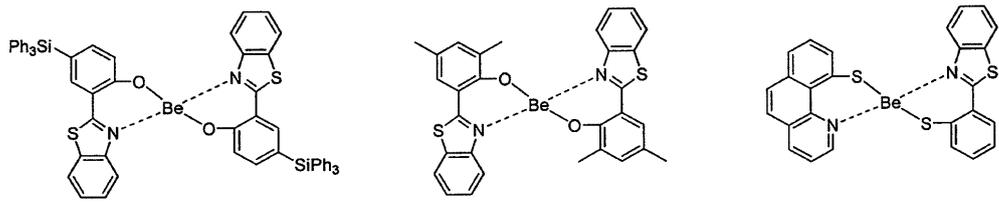
30

40

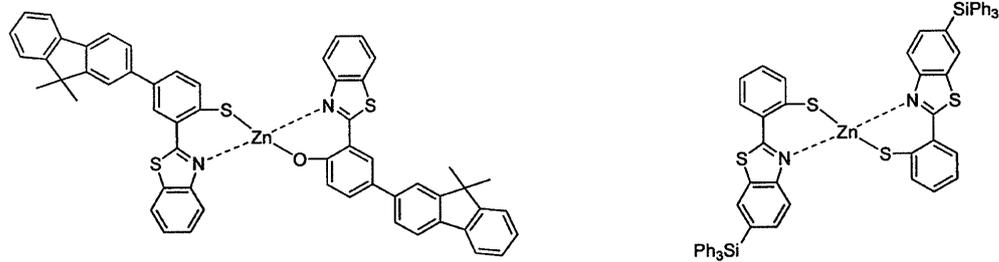
【化 1 5 5】



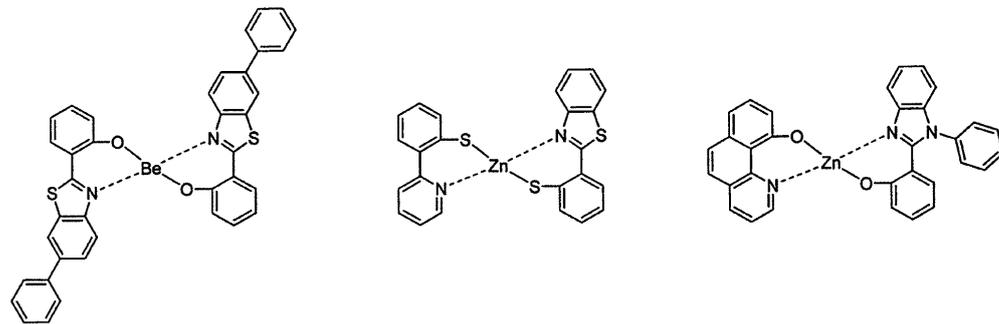
10



20

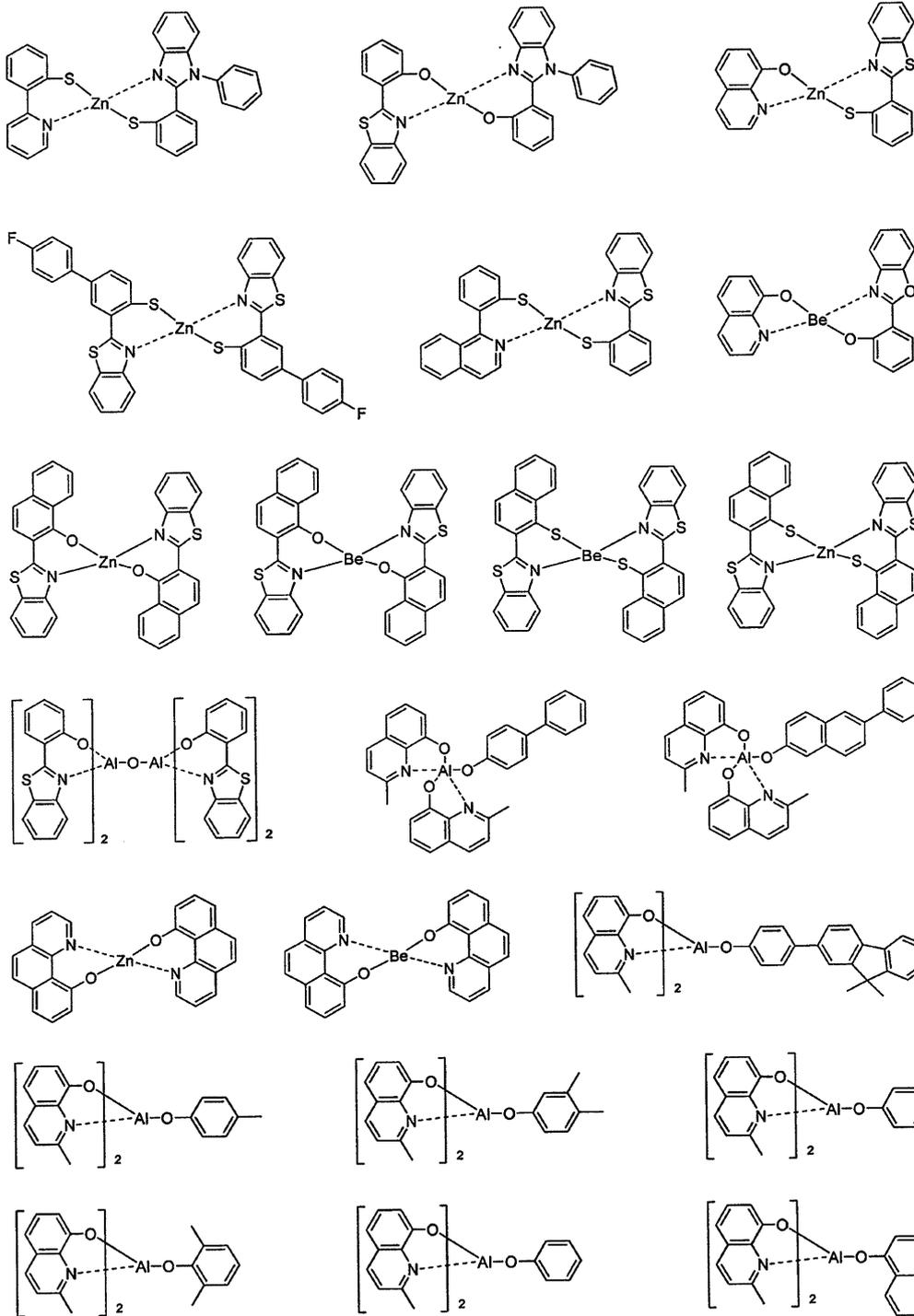


30

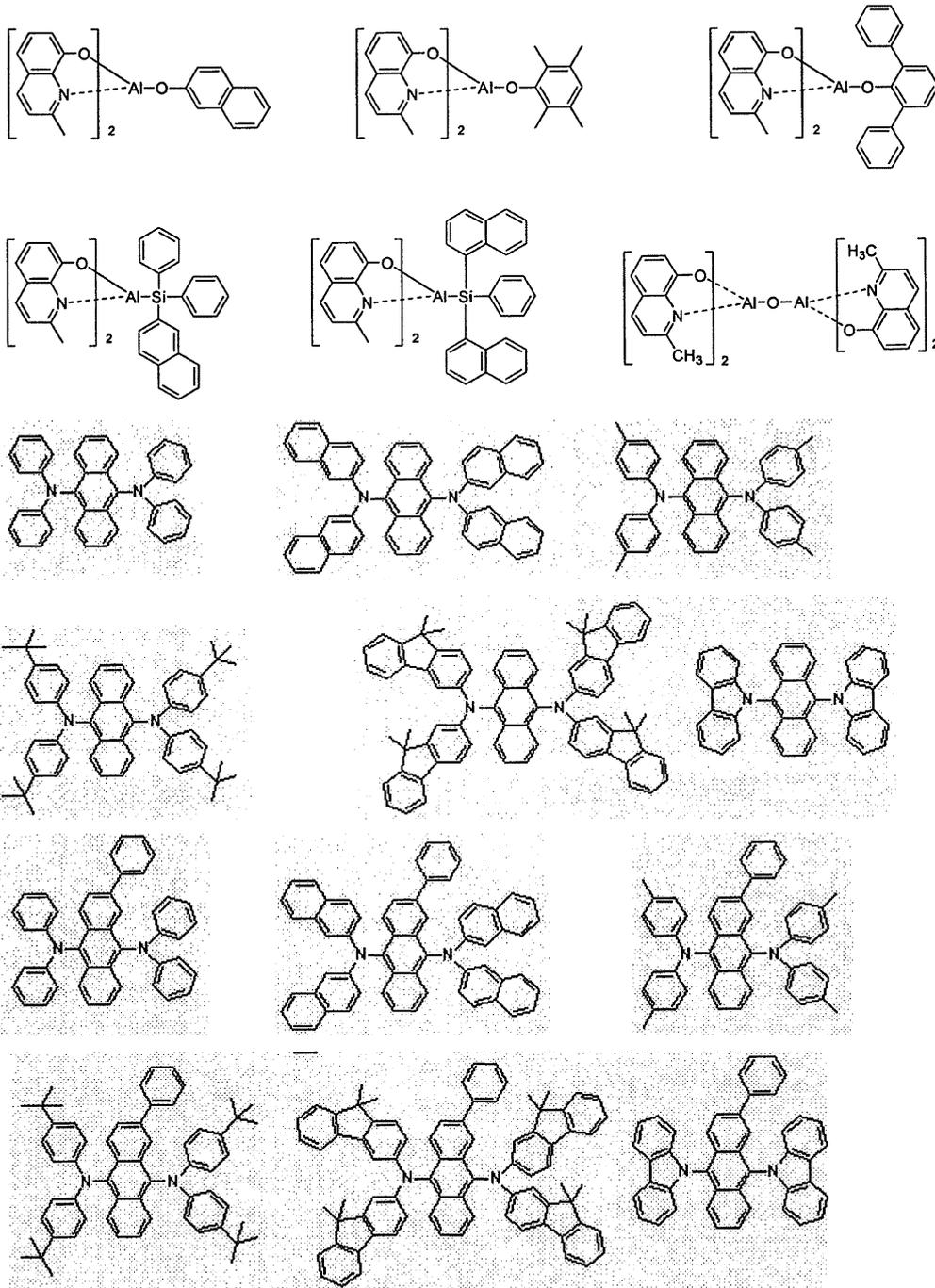


【 0 0 9 0 】

【化 1 5 6】



【化 1 5 7】

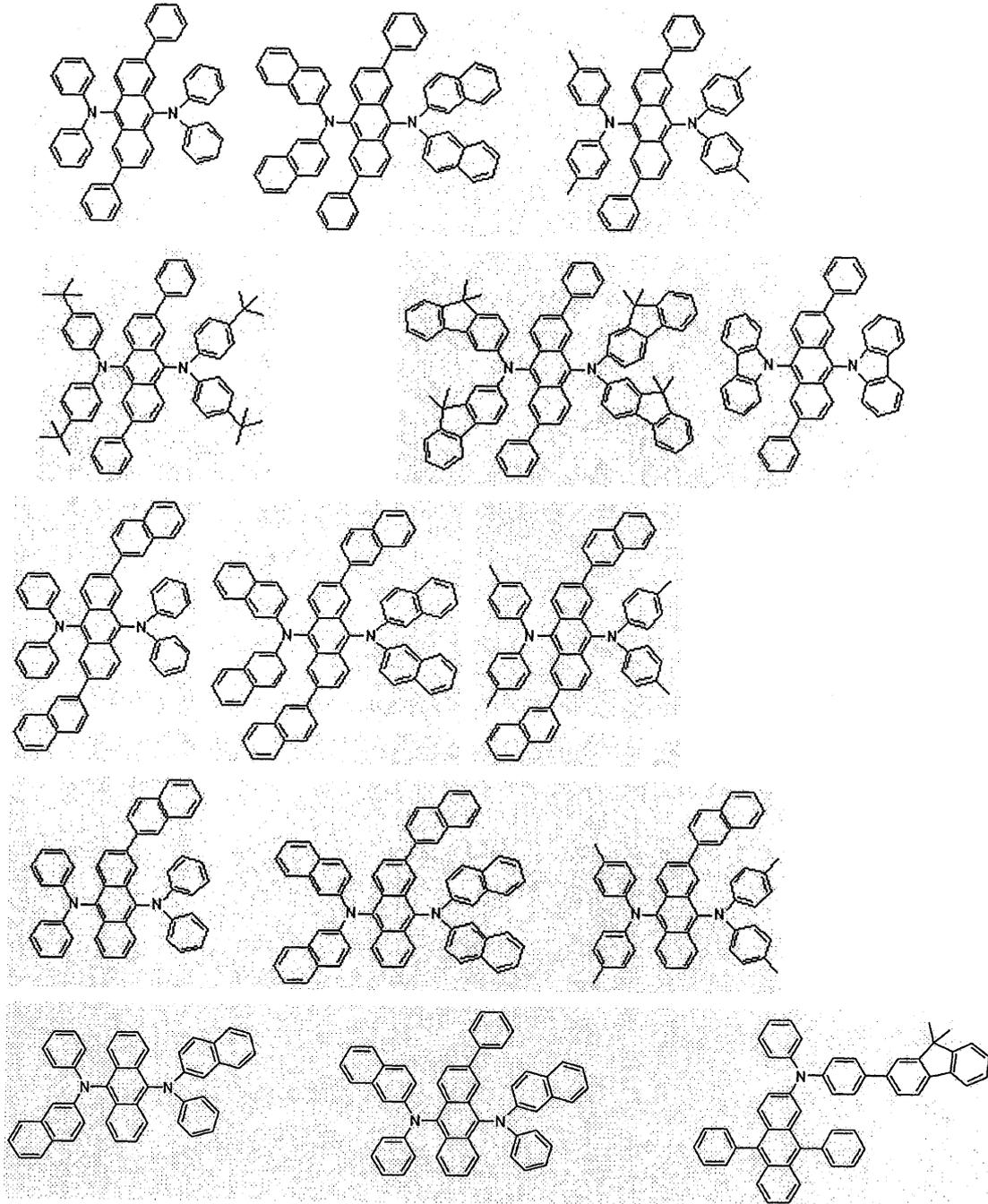


10

20

30

【化 1 5 8】

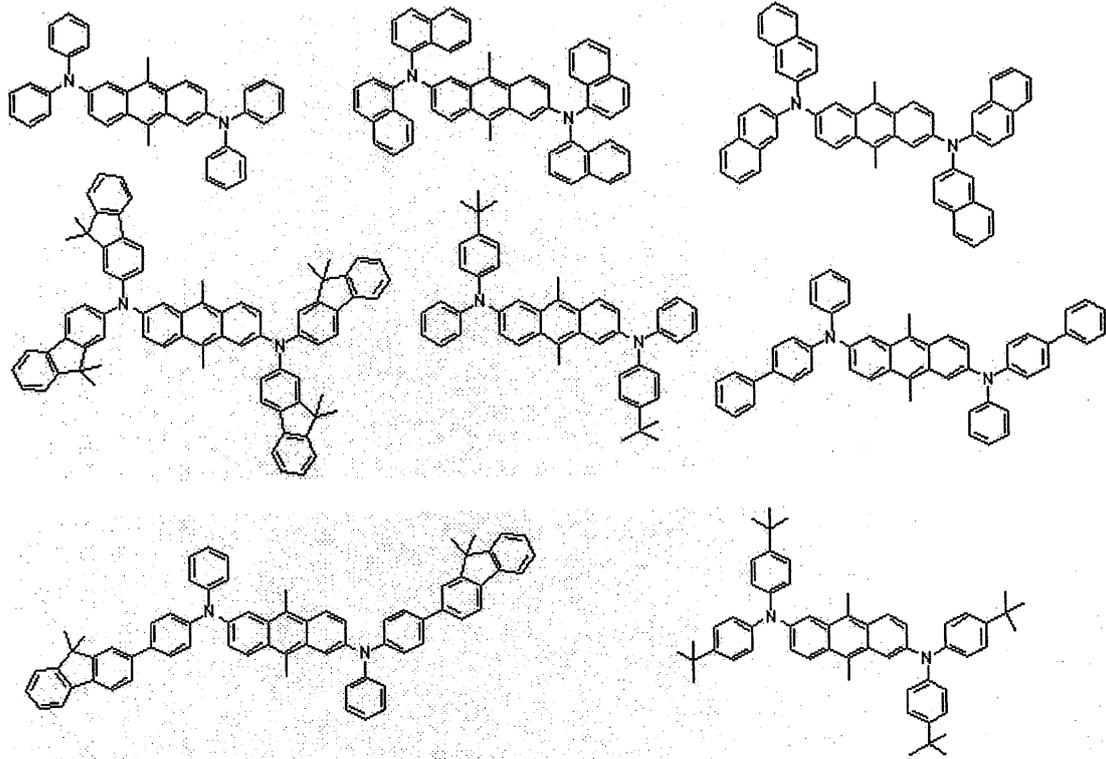


10

20

30

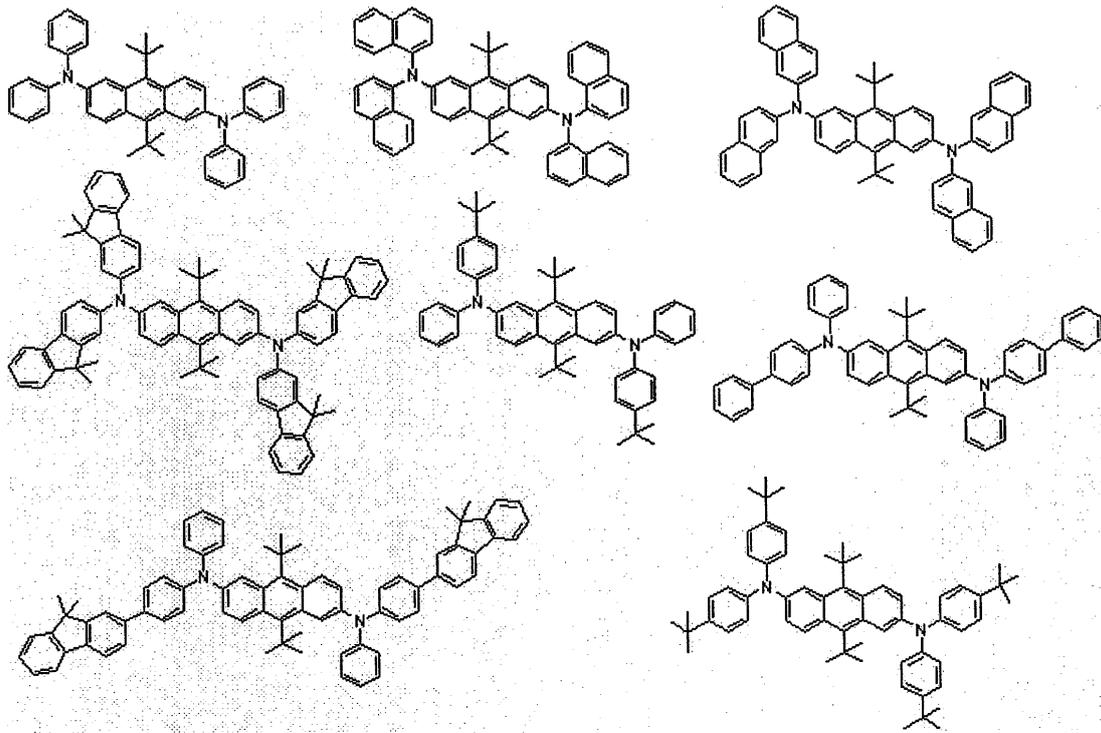
【化 1 5 9】



10

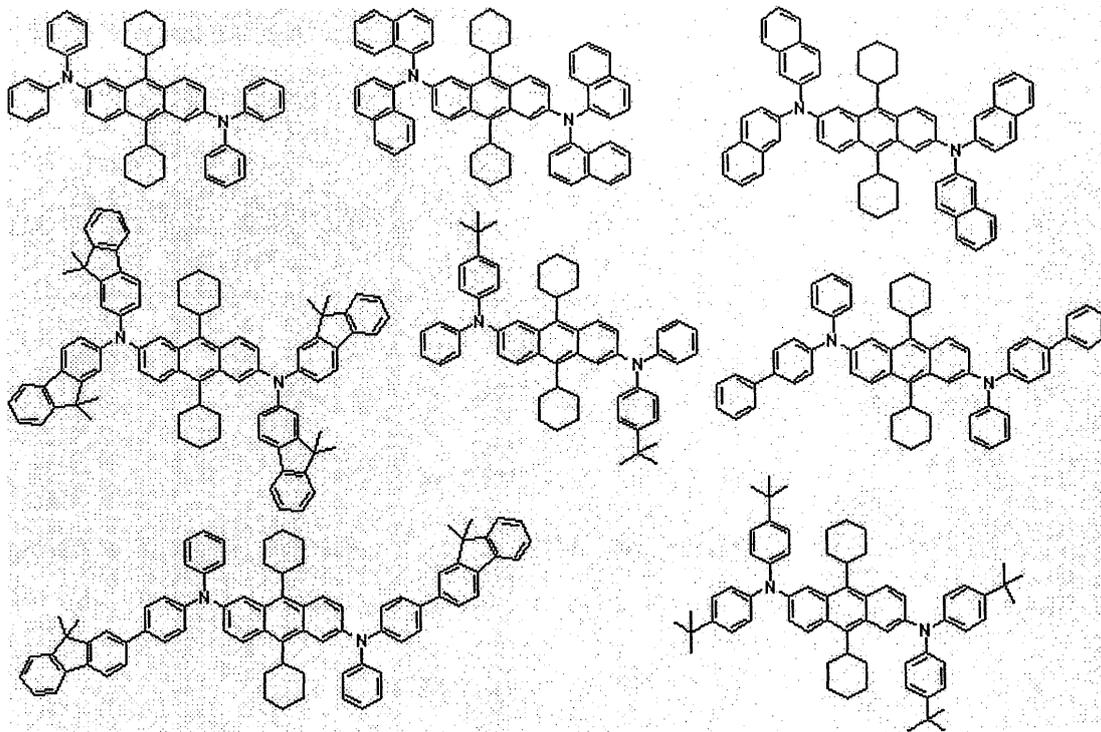
20

【化 1 6 0】



10

20

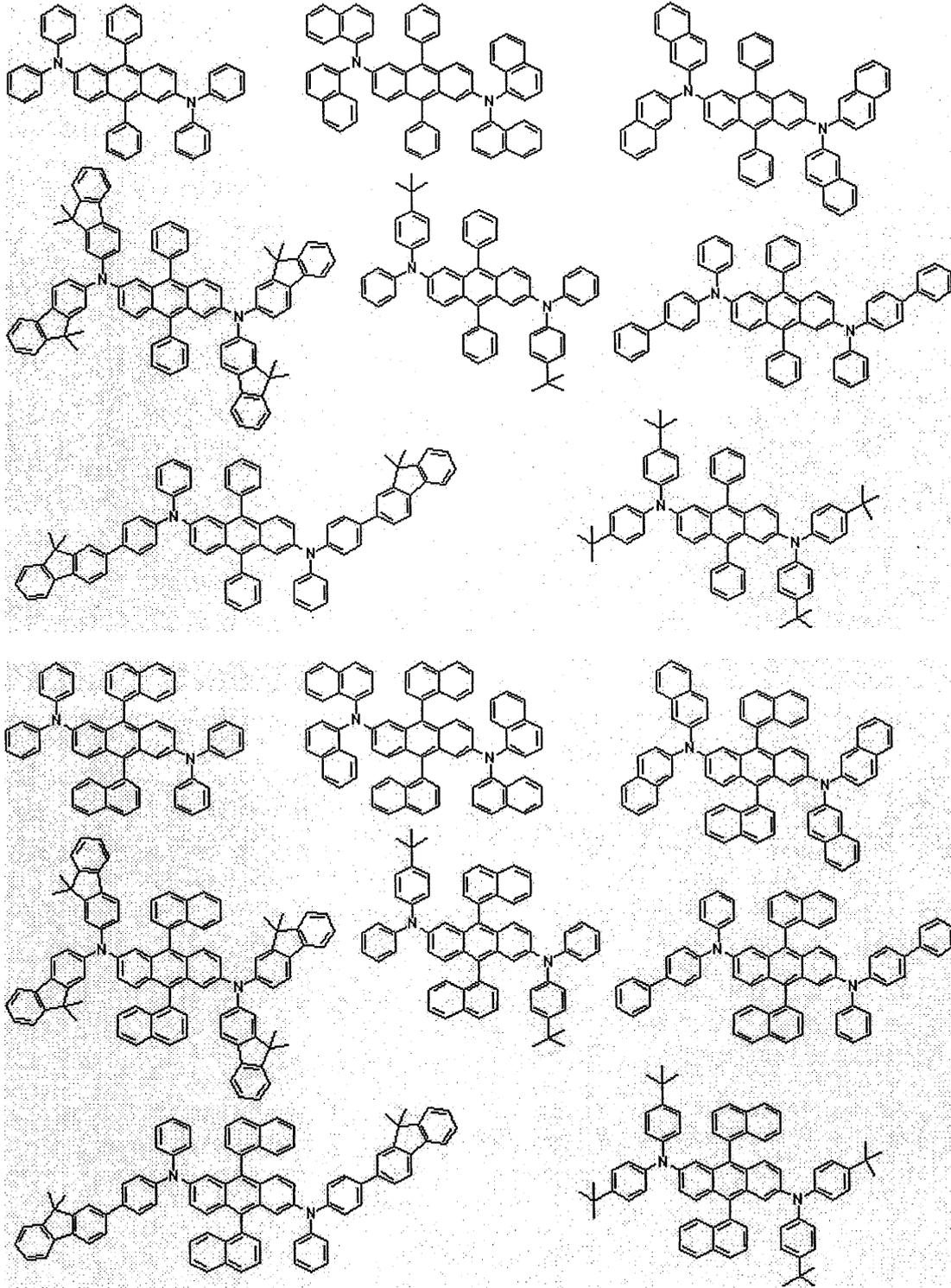


30

40

【 0 0 9 1 】

【化 1 6 1】



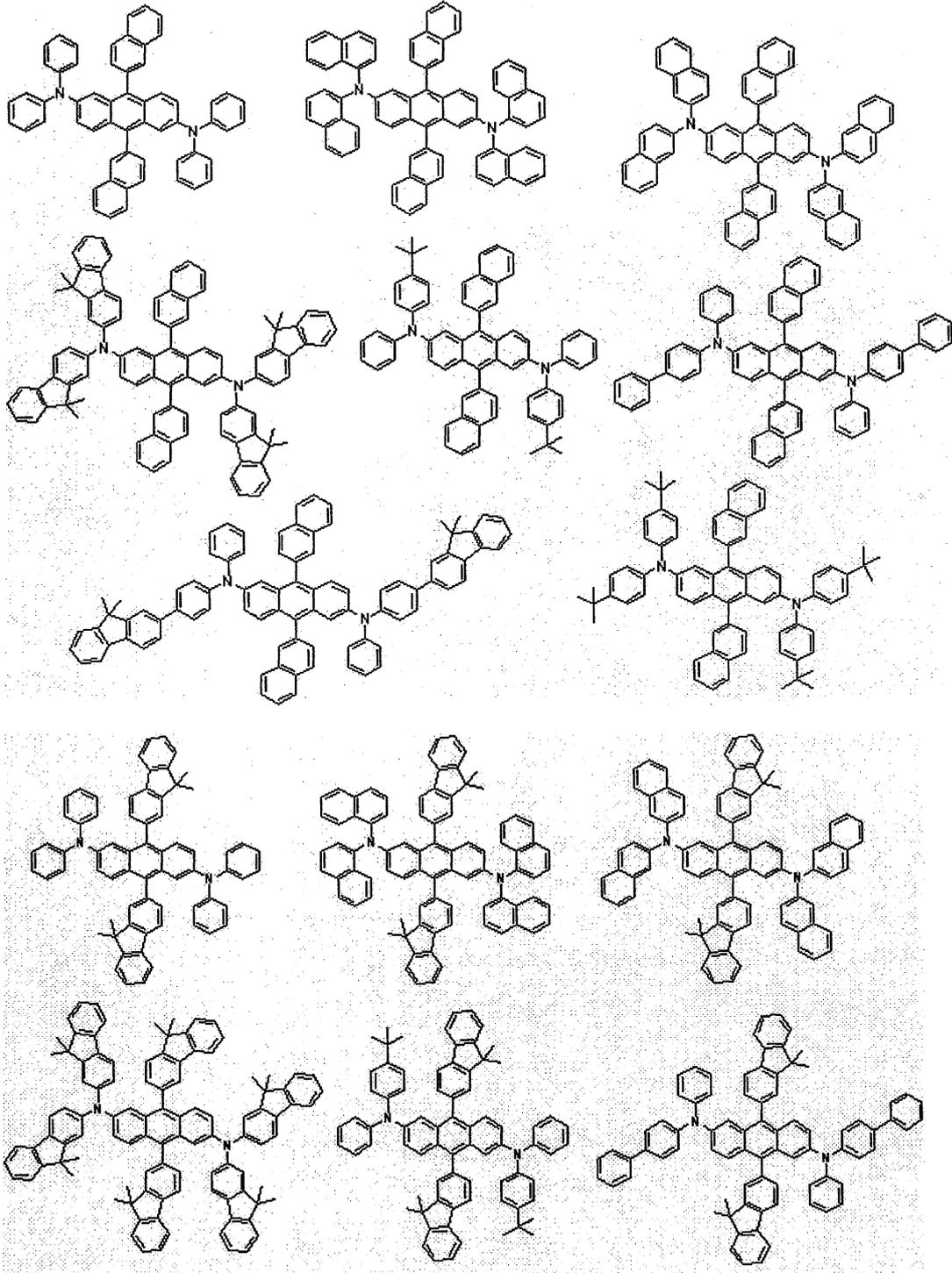
10

20

30

40

【化 1 6 2】

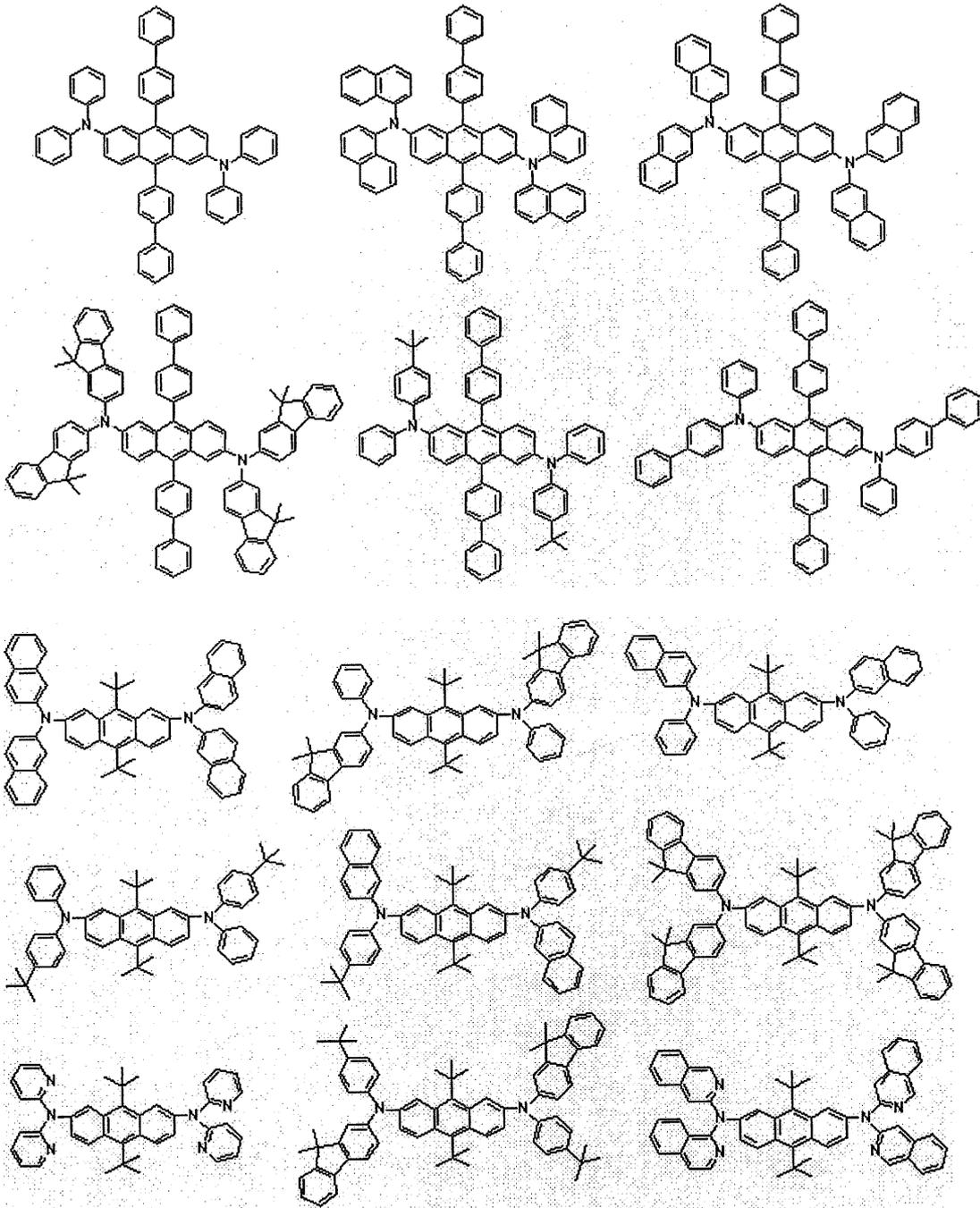


10

20

30

【化 1 6 3】

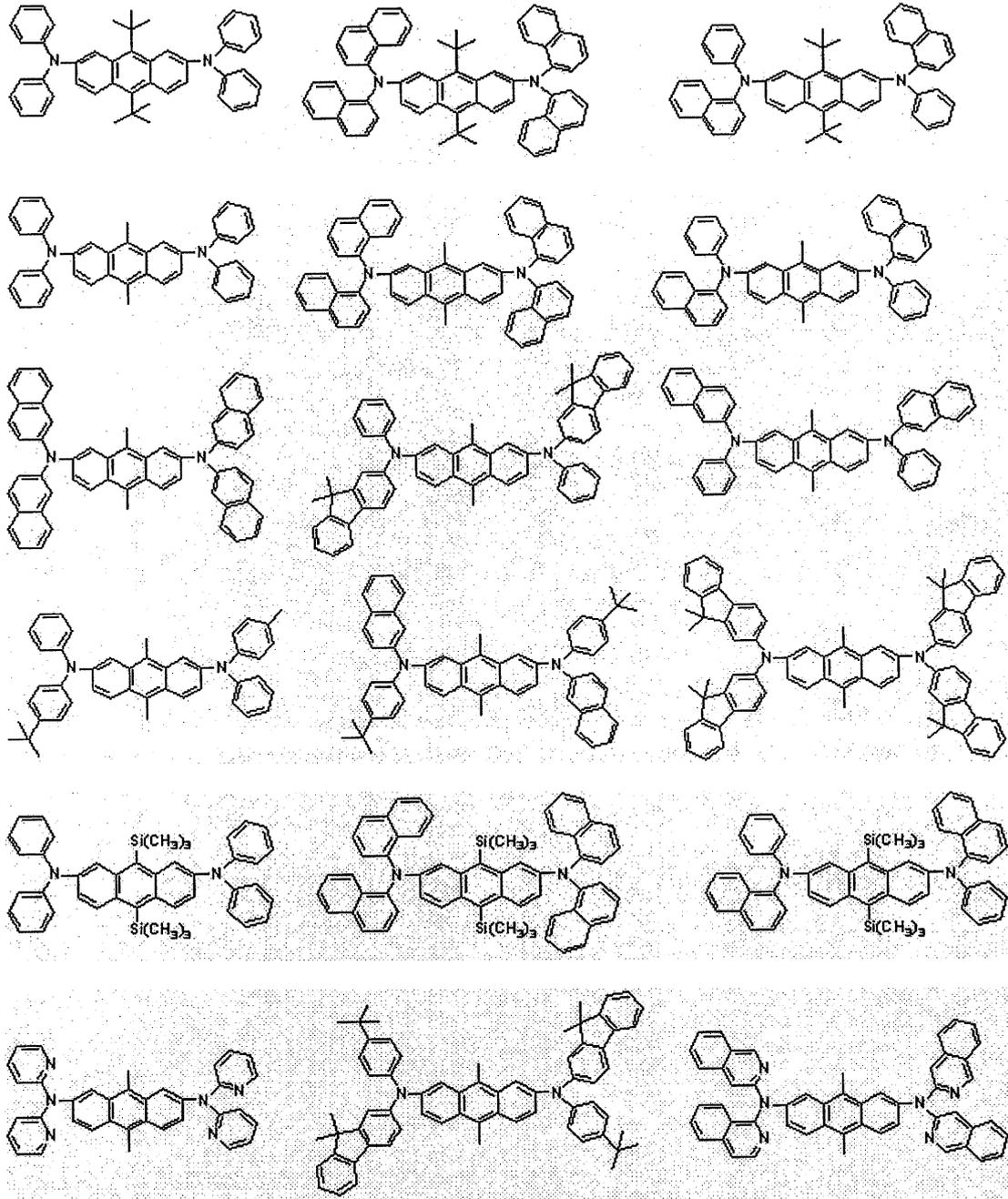


10

20

30

【化 1 6 4】

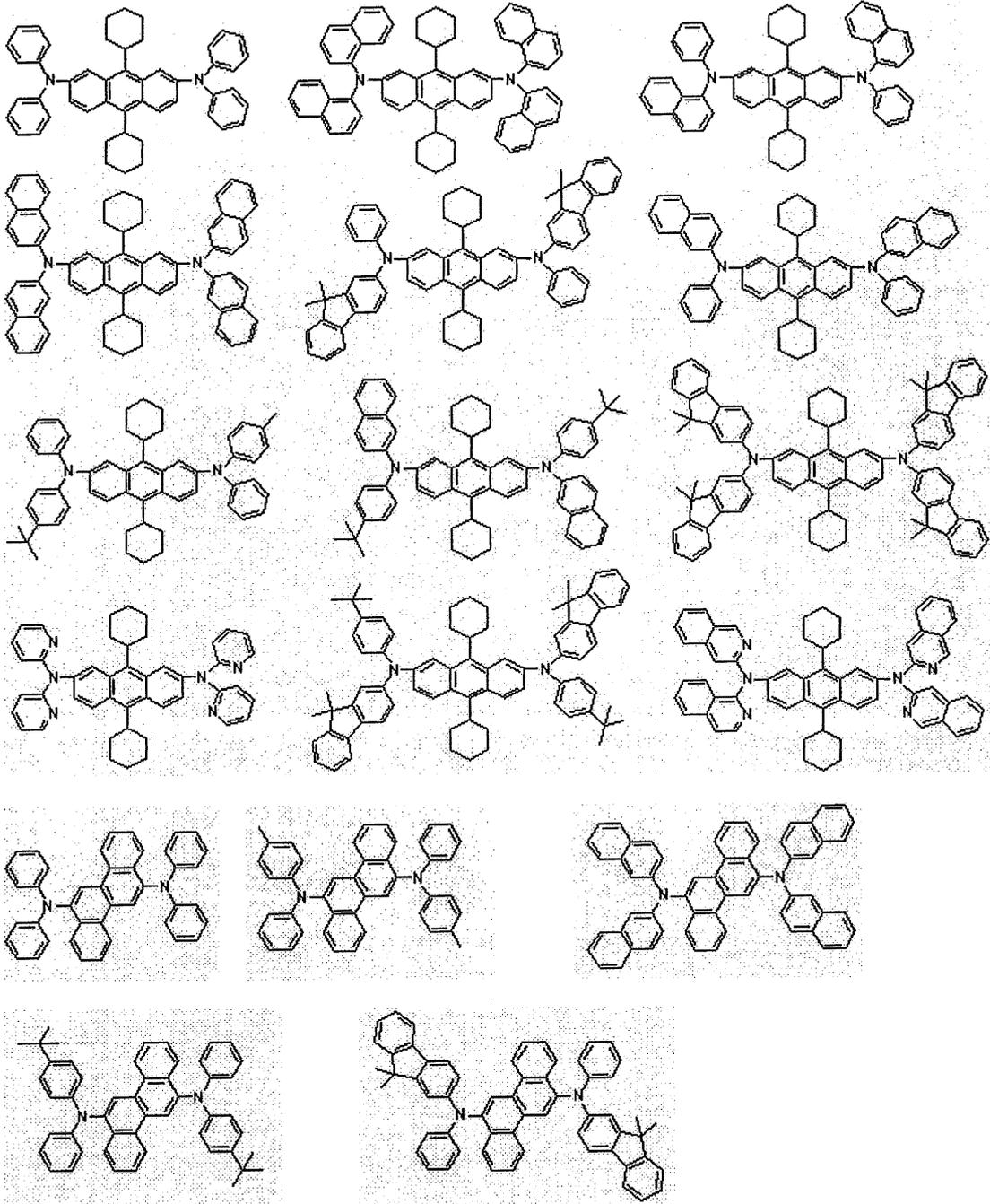


10

20

30

【化 1 6 5】

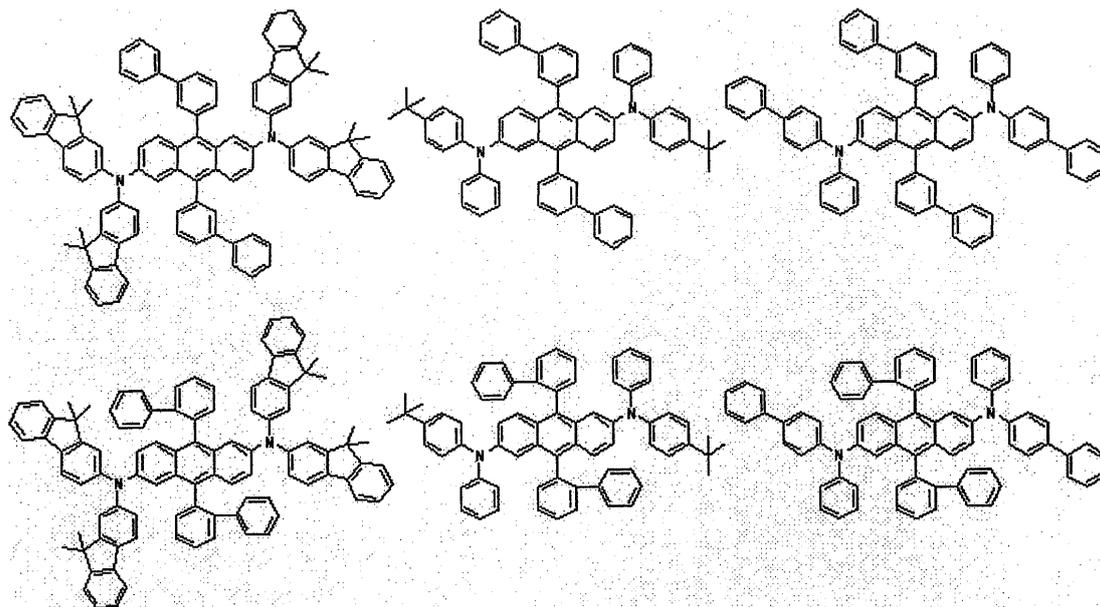


10

20

30

【化 1 6 6】



10

【0092】

本発明の電界発光素子において、電極の対のうち的一方または両方の電極の内側表面に、カルコゲナイド (chalcogenide) 層、ハロゲン化金属層、及び金属酸化層から選択される層 (以下、「表面層」という) が配置されうる。より具体的には、電界発光層の陽極表面に珪素またはアルミニウムのカルコゲナイド (酸化物を含む) 層を配置することができ、および電界発光層の陰極表面にハロゲン化金属層または金属酸化層を配置することができる。これにより、駆動の安定性が達成されうる。

20

【0093】

カルコゲナイドとしては、例えば、 SiO_x ($1 < x < 2$)、 AlO_x ($1 < x < 1.5$)、 $SiON$ 、 $SiAlON$ などが挙げられうる。ハロゲン化金属としては、例えば、 LiF 、 MgF_2 、 CaF_2 、フッ化希土類金属などが挙げられうる。金属酸化物としては、例えば、 Cs_2O 、 Li_2O 、 MgO 、 SrO 、 BaO 、 CaO などが挙げられうる。

30

【0094】

また、本発明の電界発光素子において、電極の対のうち的一方または両方の電極の内側表面に、電子輸送化合物と還元性ドーパント (dopant) との混合領域、または正孔輸送化合物と酸化性ドーパントとの混合領域を配置することができる。このような方式により、電子輸送化合物がアニオンまで還元されるため、混合領域から電界発光層への電子の輸送がより容易になる。また、正孔輸送化合物は酸化されてカチオンになるため、混合領域から電界発光層への正孔の輸送がより容易になる。酸化性ドーパントの好ましい例としては、各種ルイス酸及びアクセプター (acceptor) 化合物が挙げられる。還元性ドーパントの好ましい例としては、アルカリ金属、アルカリ金属化合物、アルカリ土類金属、希土類金属及びこれらの混合物が挙げられる。

40

【0095】

本発明による有機電界発光化合物は、優れた発光効率並びに優れた寿命特性を有するので、それは非常に良好な駆動寿命を有する OLED 素子を製造するために使用されうる。

【実施例】

【0096】

以下、本発明の理解のために、本発明による有機電界発光化合物、その製造方法、及び素子の電界発光特性が説明される。しかし、次の実施例は例示目的だけのためであり、本発明の範囲を限定することを意図するものではない。

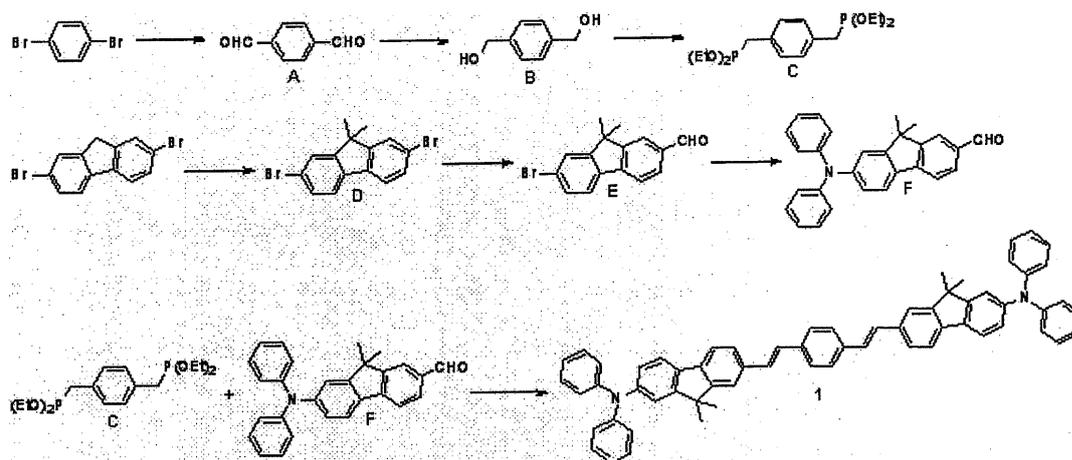
【0097】

50

[製造例]

[製造例 1] 化合物 1 の製造

【化 1 6 7】



10

【 0 0 9 8 】

化合物 A の製造

1, 4 - ジブロモベンゼン (2 0 . 0 g 、 5 6 . 8 1 m m o l) をテトラヒドロフラン (1 0 0 0 m L) に溶かした。温度を - 7 8 に下げた後、2 . 5 M ブチルリチウム (n - B u L i) (5 6 . 8 1 m L 、 1 4 2 . 0 2 m m o l) を徐々に滴下添加した。3 0 分間攪拌後、N , N - ジメチルホルムアミド (D M F) (1 3 . 1 9 m L 、 1 7 0 . 4 3 m m o l) を加えた。徐々に加熱した後、2 時間攪拌し、N H ₄ C l 水溶液 (8 0 0 m L) と蒸留水 (8 0 0 m L) を加えて反応を終了させた。有機層を分離して、減圧下で溶媒を除去した。メタノールおよびヘキサンから再結晶させて、化合物 A (1 1 . 0 9 g 、 4 4 . 3 1 m m o l) を得た。

20

【 0 0 9 9 】

化合物 B の製造

化合物 A (1 1 . 0 9 g 、 4 4 . 3 1 m m o l) と N a B H ₄ (2 . 5 g 、 6 6 . 4 7 m m o l) を反応器に入れた。減圧下で空気を除去した後、それに窒素ガスを満たした。テトラヒドロフラン (6 0 0 m L) を添加した後、混合物を攪拌しながらメタノール (3 5 0 m L) を徐々に滴下添加した。反応終了後、生成物を水 (1 0 0 0 m L) で洗浄し、酢酸エチルで抽出した。ジクロロメタンとヘキサンを使用するカラムクロマトグラフィーによって、化合物 B (8 . 4 5 g 、 3 3 . 1 2 m m o l) を得た。

30

【 0 1 0 0 】

化合物 C の製造

化合物 B (5 . 0 g 、 1 9 . 6 6 m m o l) を反応器に入れた。減圧下で空気を除去した後、その中を窒素ガスで満たし、トリエチルホスファイト (1 0 . 1 5 m L 、 5 8 . 9 8 m m o l) のうち 5 m L を添加し、化合物 B を溶解させた。他の反応器にトリエチルホスファイトの残りの 5 . 1 5 m L を入れた。蓋を開けてヨード (I ₂) (9 . 9 8 g 、 3 9 . 3 2 m m o l) を少しずつ入れながら、混合物を 0 で 3 0 分間攪拌した。ヨードとトリエチルホスファイトとの混合物を、化合物 B の入っている反応器に入れた。1 5 0 まで加熱した後、混合物を 4 時間攪拌した。反応が終了すると、生成物を水 (5 0 m L) で洗浄し、酢酸エチル (5 0 m L) で抽出した。メタノールを用いて再結晶させて、化合物 C (1 3 . 5 9 g 、 2 7 . 4 8 m m o l) を得た。

40

【 0 1 0 1 】

化合物 D の製造

窒素雰囲気下で、2 , 7 - ジブロモフルオレン (5 0 g 、 1 5 4 . 2 6 m m o l) 、および水酸化カリウム (K O H) (6 9 . 2 g 、 1 2 3 4 m m o l) を D M S O (7 0 0 m

50

L) に溶かした。0 に冷却後、蒸留水 (113 mL) を徐々に滴下添加し、混合物を 1 時間攪拌した。次いで、ヨードメタン (CH_3I) (38.49 mL、617.04 mmol) を徐々に滴下添加した後、室温までゆっくりと加熱し、混合物を室温で 15 時間攪拌した。過剰量の水を添加して反応を終了させ、ジクロロメタンを用いて抽出を行った。得られた有機層を硫酸マグネシウムで乾燥して、ろ過し、減圧下で濃縮した。カラム分離によって化合物 D (53.0 g、150.50 mmol) を得た。

【0102】

化合物 E の製造

化合物 D (53.0 g、150.50 mmol) をテトラヒドロフラン (350 mL) に溶かした。温度を -78 まで下げた後、1.6 M の *n*-BuLi (63.2 mL、158.04 mmol) を徐々に滴下添加した。30 分間攪拌後、*N,N*-ジメチルホルムアミド (16.32 mL、210.7 mmol) を添加した。徐々に加熱しながら 2 時間攪拌した後、 NH_4Cl 水溶液 (80 mL) と蒸留水 (80 mL) を加えて反応を終了させた。有機層を分離して、減圧下で溶媒を除去した。カラム分離によって化合物 E (20.9 g、69.40 mmol) を得た。

10

【0103】

化合物 F の製造

化合物 E (20.9 g、69.40 mmol)、ジフェニルアミン (12.5 g、104.10 mmol)、炭酸セシウム (24.1 g、104.10 mmol)、および Pd(OAc)₂ (332 mg、2.08 mmol) をトルエン (800 mL) に懸濁した。P(*t*-Bu)₃ (599 mg、4.16 mmol) を加えて、120 で 4 時間混合物を攪拌した。飽和 NH_4Cl 水溶液 (500 mL) を添加した後、酢酸エチル (500 mL) で抽出し、乾燥し、ろ過し、減圧下で濃縮して、メタノール/*n*-ヘキサン (300 mL (v/v = 1/1)) を用いて再結晶させて、化合物 F (15.2 g、39.00 mmol) を得た。

20

【0104】

化合物 1 の製造

化合物 C (5.1 g、9.72 mmol) および化合物 F (5.8 g、21.37 mmol) を反応器に入れ、減圧下で乾燥させた。窒素雰囲気下でテトラヒドロフラン (200 mL) をそれに添加して、混合物を攪拌した。テトラヒドロフラン (30 mL) 中に溶解されたカリウム *tert*-ブトキシド (*t*-BuOK) (4.14 g、37.17 mmol) を 0 以下で徐々に滴下添加し混合物を室温までゆっくりと加熱した。4 時間攪拌後、反応終了時に水 (500 mL) を添加した。生成された固体をろ過し、メタノール (1 L) で洗浄した。この手順を 3 回繰り返した。テトラヒドロフランおよびメタノールを用いる再結晶、続いてヘキサンでの洗浄によって、化合物 1 (5.00 g、6.6 mmol) を得た。

30

【0105】

製造例 1 の方法に従って、電界発光化合物 (化合物 1 ~ 719) が製造された。表 1 は製造された電界発光化合物の ¹H NMR 及び MS / FAB を示す。

【0106】

40

【表 1】

表1

化合物	$^1\text{H NMR}(\text{CDCl}_3, 200 \text{ MHz})$	MS/FAB	
		実測値	計算値
1	$\delta = 1.72(12\text{H, s}), 6.58\sim 6.63(10\text{H, m}), 6.75\sim 6.81(6\text{H, m}), 6.95(4\text{H, m}), 7.2(8\text{H, m}), 7.5\sim 7.54(6\text{H, m}), 7.62(2\text{H, m}), 7.71(2\text{H, m}), 7.87(2\text{H, m})$	849.11	848.41
4	$\delta = 1.72(12\text{H, s}), 2.34(12\text{H, s}), 6.44(4\text{H, m}), 6.55\sim 6.59(10\text{H, m}), 6.75(2\text{H, m}), 6.95(4\text{H, m}), 7.08(4\text{H, m}), 7.5\sim 7.54(6\text{H, m}), 7.62(2\text{H, m}), 7.71(2\text{H, m}), 7.87(2\text{H, m})$	905.22	904.48
9	$\delta = 1.35(36\text{H, s}), 1.72(12\text{H, s}), 6.55\sim 6.58(10\text{H, m}), 6.75(2\text{H, m}), 6.95\sim 7.01(12\text{H, m}), 7.5\sim 7.54(6\text{H, m}), 7.62(2\text{H, m}), 7.71(2\text{H, m}), 7.87(2\text{H, m})$	1073.54	1072.66

【表 2】

表1の続き

10	$\delta = 1.72(36H, s), 6.58(6H, m), 6.75(6H, m), 6.95(4H, m), 7.28(4H, m), 7.38(4H, m), 7.5\sim 7.55(10H, m), 7.62(6H, m), 7.71(2H, m), 7.87(6H, m)$	1313.75	1312.66
13	$\delta = 1.72(12H, s), 6.95(4H, m), 7.17(2H, m), 7.25\sim 7.34(10H, m), 7.5(8H, m), 7.63(2H, m), 7.87(4H, m), 7.94(2H, m), 8.12(2H, m), 8.55(2H, m)$	845.08	844.38
15	$\delta = 1.72(12H, s), 6.58\sim 6.63(6H, m), 6.75\sim 6.81(4H, m), 6.95\sim 6.98(6H, m), 7.2(4H, m), 7.38(2H, m), 7.5\sim 7.62(14H, m), 7.71(2H, m), 7.87(2H, m), 8.02\sim 8.07(4H, m)$	949.23	948.44
20	$\delta = 1.72(24H, s), 6.58\sim 6.63(8H, m), 6.75\sim 6.81(6H, m), 6.95(4H, m), 7.2(4H, m), 7.28(2H, m), 7.38(2H, m), 7.5\sim 7.55(8H, m), 7.62(4H, m), 7.71(2H, m), 7.87(4H, m)$	1081.43	1080.54
28	$\delta = 1.72(12H, s), 6.58\sim 6.63(6H, m), 6.75\sim 6.81(4H, m), 6.91\sim 6.95(6H, m), 7.2(4H, m), 7.5\sim 7.54(6H, m), 7.62(2H, m), 7.71(2H, m), 7.82\sim 7.88(10H, m), 8.12(4H, m), 8.93(4H, m)$	1049.35	1048.48
33	$\delta = 1.35(18H, s), 1.72(12H, s), 6.55\sim 6.58(6H, m), 6.75(2H, m), 6.95\sim 7.01(10H, m), 7.38(2H, m), 7.5\sim 7.62(14H, m), 7.71(2H, m), 7.87(2H, m), 8.02\sim 8.07(4H, m)$	1061.44	1060.57
37	$\delta = 1.72(24H, s), 6.58(4H, m), 6.75(4H, m), 6.95\sim 6.98(6H, m), 7.28(2H, m), 7.38(4H, m), 7.5\sim 7.62(18H, m), 7.71(2H, m), 7.87(4H, m), 8.02\sim 8.07(4H, m)$	1181.55	1180.57
46	$\delta = 1.72(12H, s), 6.58(2H, m), 6.69\sim 6.75(6H, m), 6.95(4H, m), 7.36\sim 7.41(4H, m), 7.49\sim 7.54(22H, m), 7.62(2H, m), 7.71\sim 7.77(6H, m), 7.84\sim 7.88(6H, m)$	1101.42	1100.51
54	$\delta = 1.72(24H, s), 2.34(12H, s), 6.36(4H, m), 6.58(4H, m), 6.71\sim 6.75(6H, m), 6.95(4H, m), 7.28(2H, m), 7.38(2H, m), 7.5\sim 7.55(8H, m), 7.62(4H, m), 7.71(2H, m), 7.87(4H, m)$	1137.54	1136.60
66	$\delta = 1.35(18H, s), 1.72(12H, s), 6.55\sim 6.58(6H, m), 6.69\sim 6.75(6H, m), 6.95\sim 7.01(8H, m), 7.41(2H, m), 7.5\sim 7.54(18H, m), 7.62(2H, m), 7.71(2H, m), 7.87(2H, m)$	1113.52	1112.60
70	$\delta = 1.72(12H, s), 2.34(18H, s), 6.36(4H, m), 6.51(4H, m), 6.58(2H, m), 6.71\sim 6.75(4H, m), 6.95\sim 6.98(8H, m), 7.5\sim 7.54(6H, m), 7.62(2H, m), 7.71(2H, m), 7.87(2H, m)$	933.27	932.51

10

20

30

【表3】

表1の続き

84	$\delta = 1.72(12H, s), 2.34(12H, s), 6.36(4H, m), 6.58(2H, m), 6.71\sim 6.75(4H, m), 6.91\sim 6.95(6H, m), 7.5\sim 7.54(6H, m), 7.62(2H, m), 7.71(2H, m), 7.82\sim 7.88(10H, m), 8.12(4H, m), 8.93(4H, m)$	1105.45	1104.54
106	$\delta = 1.72(12H, s), 6.58\sim 6.62(4H, m), 6.7\sim 6.75(4H, m), 6.95(4H, m), 7.27(2H, m), 7.36(2H, m), 7.5\sim 7.55(8H, m), 7.62(2H, m), 7.71(2H, m), 7.87(2H, m), 8.04\sim 8.09(6H, m)$	853.06	852.39
112	$\delta = 1.72(12H, s), 6.58\sim 6.62(4H, m), 6.7\sim 6.75(4H, m), 6.95\sim 6.99(6H, m), 7.41\sim 7.62(16H, m), 7.71(2H, m), 7.87(2H, m), 8.07(2H, m), 8.17(2H, m), 8.28(2H, m)$	953.18	952.43
117	$\delta = 1.72(12H, s), 6.58\sim 6.63(6H, m), 6.69\sim 6.81(8H, m), 6.95(4H, m), 7.2(4H, m), 7.5\sim 7.62(18H, m), 7.71\sim 7.73(4H, m), 7.87\sim 7.92(4H, m), 8(4H, m)$	1101.42	1100.51
120	$\delta = 1.72(24H, s), 6.58\sim 6.63(6H, m), 6.69\sim 6.81(8H, m), 6.95(4H, m), 7.2(4H, m), 7.28(2H, m), 7.38(2H, m), 7.5\sim 7.55(12H, m), 7.62\sim 7.63(4H, m), 7.71\sim 7.77(4H, m), 7.87\sim 7.93(6H, m)$	1233.62	1232.60
123	$\delta = 1.72(24H, s), 6.58(2H, m), 6.69\sim 6.75(6H, m), 6.95\sim 6.98(6H, m), 7.28(2H, m), 7.38(4H, m), 7.5\sim 7.63(22H, m), 7.71\sim 7.77(4H, m), 7.87\sim 7.93(6H, m), 8.02\sim 8.07(4H, m)$	1333.74	1332.63
130	$\delta = 1.72(12H, s), 6.58(2H, m), 6.69\sim 6.75(10H, m), 6.95(4H, m), 7.5\sim 7.62(28H, m), 7.71\sim 7.73(6H, m), 7.87\sim 7.92(6H, m), 8(8H, m)$	1353.73	1352.60
135	$\delta = 1.72(24H, s), 2.34(6H, s), 6.51(4H, m), 6.58(2H, m), 6.69\sim 6.75(6H, m), 6.95\sim 6.98(8H, m), 7.28(2H, m), 7.38(2H, m), 7.5\sim 7.55(12H, m), 7.62\sim 7.63(4H, m), 7.71\sim 7.77(4H, m), 7.87\sim 7.93(6H, m)$	1261.68	1260.63
142	$\delta = 1.72(12H, s), 6.58\sim 6.63(10H, m), 6.75\sim 6.81(6H, m), 6.95(4H, m), 7.2(8H, m), 7.54\sim 7.56(6H, m), 7.62\sim 7.64(6H, m), 7.71(2H, m), 7.87(2H, m)$	925.21	924.44
145	$\delta = 1.72(12H, s), 6.58(2H, m), 6.75(2H, m), 6.95(4H, m), 7.36(4H, m), 7.49\sim 7.56(14H, m), 7.62\sim 7.64(6H, m), 7.71\sim 7.77(10H, m), 7.84\sim 7.88(10H, m)$	1125.44	1124.51
154	$\delta = 1.72(12H, s), 6.58\sim 6.63(6H, m), 6.75\sim 6.81(4H, m), 6.95\sim 6.98(6H, m), 7.2(4H, m), 7.38(2H, m), 7.53\sim 7.64(18H, m), 7.71(2H, m), 7.87(2H, m), 8.02\sim 8.07(4H, m)$	1025.32	1024.48

10

20

30

40

【0107】

【表4】

表1の続き

162	$\delta = 1.72(24H, s), 6.58(4H, m), 6.75(4H, m), 6.95\sim 6.98(6H, m), 7.28(2H, m), 7.38(4H, m), 7.53\sim 7.64(22H, m), 7.71(2H, m), 7.87(4H, m), 8.02\sim 8.07(4H, m)$	1257.64	1256.60
166	$\delta = 1.72(24H, s), 6.58(4H, m), 6.75(4H, m), 6.95(4H, m), 7.28(2H, m), 7.36\sim 7.38(4H, m), 7.49\sim 7.56(12H, m), 7.62\sim 7.64(8H, m), 7.71\sim 7.77(6H, m), 7.84\sim 7.88(8H, m)$	1257.64	1256.60
171	$\delta = 1.72(24H, s), 6.58\sim 6.61(8H, m), 6.75(4H, m), 6.95\sim 6.99(8H, m), 7.28(2H, m), 7.38(2H, m), 7.54\sim 7.56(8H, m), 7.62\sim 7.64(8H, m), 7.71(2H, m), 7.87(4H, m)$	1193.51	1192.55
173	$\delta = 1.72(12H, s), 6.58\sim 6.63(10H, m), 6.75\sim 6.81(6H, m), 6.95(4H, m), 7.2\sim 7.25(12H, m), 7.54\sim 7.56(6H, m), 7.62\sim 7.64(6H, m), 7.71(2H, m), 7.87(2H, m)$	1001.30	1000.48
176	$\delta = 1.72(12H, s), 2.34(24H, s), 6.36(8H, m), 6.58(2H, m), 6.71\sim 6.75(6H, m), 6.95(4H, m), 7.25(4H, m), 7.54\sim 7.56(6H, m), 7.62\sim 7.64(6H, m), 7.71(2H, m), 7.87(2H, m)$	1113.52	1112.60
181	$\delta = 1.72(12H, s), 6.58\sim 6.63(6H, m), 6.75\sim 6.81(4H, m), 6.95(4H, m), 7.2\sim 7.25(8H, m), 7.36(2H, m), 7.49\sim 7.56(10H, m), 7.62\sim 7.64(6H, m), 7.71\sim 7.77(6H, m), 7.84\sim 7.88(6H, m)$	1101.42	1100.51
187	$\delta = 1.35(18H, s), 1.72(24H, s), 6.55\sim 6.58(8H, m), 6.75(4H, m), 6.95\sim 7.01(8H, m), 7.25\sim 7.28(6H, m), 7.38(2H, m), 7.54\sim 7.56(8H, m), 7.62\sim 7.64(8H, m), 7.71(2H, m), 7.87(4H, m)$	1345.84	1344.73
194	$\delta = 1.72(12H, s), 6.58\sim 6.63(10H, m), 6.75\sim 6.81(6H, m), 6.95(4H, m), 7.2(8H, m), 7.54\sim 7.55(4H, m), 7.62(2H, m), 7.71(2H, m), 7.87\sim 7.93(6H, m)$	899.17	898.43
198	$\delta = 1.35(36H, s), 1.72(12H, s), 6.55\sim 6.58(10H, m), 6.75(2H, m), 6.95\sim 7.01(12H, m), 7.54\sim 7.55(4H, m), 7.62(2H, m), 7.71(2H, m), 7.87\sim 7.93(6H, m)$	1123.60	1122.68
199	$\delta = 1.72(12H, s), 6.58\sim 6.62(6H, m), 6.7\sim 6.75(6H, m), 6.95(4H, m), 7.54\sim 7.55(8H, m), 7.62(2H, m), 7.71(2H, m), 7.87\sim 7.93(6H, m), 8.07(4H, m)$	903.12	902.41
203	$\delta = 1.72(24H, s), 6.58\sim 6.63(8H, m), 6.75\sim 6.81(6H, m), 6.95(4H, m), 7.2(4H, m), 7.28(2H, m), 7.38(2H, m), 7.54\sim 7.55(6H, m), 7.62(4H, m), 7.71(2H, m), 7.87\sim 7.93(8H, m)$	1131.49	1130.55

10

20

30

40

【表5】

表1の続き

212	$\delta = 1.72(12H, s), 2.34(24H, s), 6.36(8H, m), 6.58(2H, m), 6.71\sim 6.75(6H, m), 6.95(4H, m), 7.54\sim 7.55(4H, m), 7.62(2H, m), 7.71(2H, m), 7.78(2H, m), 7.87\sim 7.9(4H, m)$	1011.38	1010.55
220	$\delta = 1.72(12H, s), 6.58\sim 6.63(6H, m), 6.69\sim 6.81(8H, m), 6.95(4H, m), 7.2(4H, m), 7.41(2H, m), 7.51\sim 7.55(16H, m), 7.62(2H, m), 7.71(2H, m), 7.78(2H, m), 7.87\sim 7.9(4H, m)$	1051.36	1050.49
223	$\delta = 1.72(12H, s), 6.58\sim 6.63(10H, m), 6.75\sim 6.81(6H, m), 6.95(4H, m), 7.2(8H, m), 7.54\sim 7.62(6H, m), 7.71(2H, m), 7.8(2H, m), 7.87(2H, m), 7.95(2H, m)$	899.17	898.43
231	$\delta = 1.35(18H, s), 1.72(12H, s), 6.55\sim 6.63(10H, m), 6.75\sim 6.81(4H, m), 6.95\sim 7.01(8H, m), 7.2(4H, m), 7.54\sim 7.62(6H, m), 7.71(2H, m), 7.8(2H, m), 7.87(2H, m), 7.95(2H, m)$	1011.38	1010.55
237	$\delta = 1.35(18H, s), 1.72(12H, s), 6.55\sim 6.58(6H, m), 6.75(2H, m), 6.95\sim 7.01(10H, m), 7.38(2H, m), 7.53\sim 7.62(12H, m), 7.71(2H, m), 7.8(2H, m), 7.87(2H, m), 7.95(2H, m), 8.02\sim 8.07(4H, m)$	1111.50	1110.59
238	$\delta = 1.72(12H, s), 6.58\sim 6.63(10H, m), 6.75\sim 6.81(6H, m), 6.95(4H, m), 7.2(8H, m), 7.54(2H, m), 7.62(2H, m), 7.71(4H, m), 7.87(2H, m), 8.04(2H, m), 8.28(2H, m), 8.93(2H, m)$	949.23	948.44
242	$\delta = 1.72(12H, s), 2.34(12H, s), 6.44(4H, m), 6.55\sim 6.59(10H, m), 6.75(2H, m), 6.95(4H, m), 7.08(4H, m), 7.54(2H, m), 7.62(2H, m), 7.71(4H, m), 7.87(2H, m), 8.04(2H, m), 8.28(2H, m), 8.93(2H, m)$	1005.33	1004.51
251	$\delta = 1.35(18H, s), 1.72(12H, s), 6.55\sim 6.63(10H, m), 6.75\sim 6.81(4H, m), 6.95\sim 7.01(8H, m), 7.2(4H, m), 7.54(2H, m), 7.62(2H, m), 7.71(4H, m), 7.87(2H, m), 8.04(2H, m), 8.28(2H, m), 8.93(2H, m)$	1061.44	1060.57
256	$\delta = 1.72(12H, s), 6.58(2H, m), 6.75(2H, m), 6.95\sim 6.98(8H, m), 7.38(4H, m), 7.53\sim 7.62(16H, m), 7.71(6H, m), 7.87(2H, m), 7.98\sim 8.07(12H, m)$	1173.48	1172.51
265	$\delta = 1.72(12H, s), 6.58\sim 6.63(10H, m), 6.75\sim 6.81(6H, m), 6.95(4H, m), 7.2(8H, m), 7.39(4H, m), 7.54\sim 7.55(4H, m), 7.62(2H, m), 7.71(2H, m), 7.87\sim 7.91(6H, m)$	1023.31	1022.46
270	$\delta = 1.72(36H, s), 6.58(6H, m), 6.75(6H, m), 6.95(4H, m), 7.28(4H, m), 7.38\sim 7.39(8H, m), 7.54\sim 7.55(8H, m), 7.62(6H, m), 7.71(2H, m), 7.87\sim 7.91(10H, m)$	1487.95	1486.71

10

20

30

40

【表6】

表1の続き

275	$\delta = 1.72(12H, s), 6.58(2H, m), 6.69\sim 6.75(6H, m), 6.95(4H, m), 7.36\sim 7.41(8H, m), 7.49\sim 7.55(20H, m), 7.62(2H, m), 7.71\sim 7.77(6H, m), 7.84\sim 7.91(10H, m)$	1275.62	1274.55
280	$\delta = 1.72(12H, s), 6.58\sim 6.63(10H, m), 6.75\sim 6.81(6H, m), 6.95(4H, m), 7.2(8H, m), 7.54(2H, m), 7.62(2H, m), 7.71(2H, m), 7.85\sim 7.87(4H, m), 8.04(2H, m), 8.28(2H, m), 8.52(2H, m), 8.93(2H, m)$	999.29	998.46
289	$\delta = 1.72(12H, s), 6.58(2H, m), 6.69\sim 6.75(10H, m), 6.95(4H, m), 7.41(4H, m), 7.51\sim 7.54(26H, m), 7.62(2H, m), 7.71(2H, m), 7.85\sim 7.87(4H, m), 8.04(2H, m), 8.28(2H, m), 8.52(2H, m), 8.93(2H, m)$	1303.67	1302.59
296	$\delta = 1.72(12H, s), 2.34(6H, s), 6.44(2H, m), 6.55\sim 6.63(10H, m), 6.75\sim 6.81(4H, m), 6.95(4H, m), 7.08(2H, m), 7.2(4H, m), 7.54(2H, m), 7.62(2H, m), 7.71(2H, m), 7.85\sim 7.87(4H, m), 8.04(2H, m), 8.28(2H, m), 8.52(2H, m), 8.93(2H, m)$	1027.34	1026.49
299	$\delta = 1.35(18H, s), 1.72(12H, s), 6.55\sim 6.63(10H, m), 6.75\sim 6.81(4H, m), 6.95\sim 7.01(8H, m), 7.2(4H, m), 7.54(2H, m), 7.62(2H, m), 7.71(2H, m), 7.85\sim 7.87(4H, m), 8.04(2H, m), 8.28(2H, m), 8.52(2H, m), 8.93(2H, m)$	1111.50	1110.59
305	$\delta = 1.72(12H, s), 6.58\sim 6.63(10H, m), 6.75\sim 6.81(6H, m), 6.95(4H, m), 7.2(8H, m), 7.43(2H, m), 7.54(2H, m), 7.62(2H, m), 7.71(2H, m), 7.87(2H, m), 7.98\sim 7.99(4H, m)$	955.26	954.40
309	$\delta = 1.72(12H, s), 2.34(12H, s), 6.44(4H, m), 6.55\sim 6.59(10H, m), 6.75(2H, m), 6.95(4H, m), 7.08(4H, m), 7.43(2H, m), 7.54(2H, m), 7.62(2H, m), 7.71(2H, m), 7.87(2H, m), 7.98\sim 7.99(4H, m)$	1011.36	1010.46
315	$\delta = 1.35(36H, s), 1.72(12H, s), 6.55\sim 6.58(10H, m), 6.75(2H, m), 6.95\sim 7.01(12H, m), 7.43(2H, m), 7.54(2H, m), 7.62(2H, m), 7.71(2H, m), 7.87(2H, m), 7.98\sim 7.99(4H, m)$	1179.68	1178.65
320	$\delta = 0.66(6H, s), 1.72(12H, s), 6.58(2H, m), 6.75(2H, m), 6.95(4H, m), 7.36(4H, m), 7.49\sim 7.56(14H, m), 7.62(2H, m), 7.71\sim 7.77(10H, m), 7.84\sim 7.88(10H, m), 8.17(2H, m)$	1181.58	1180.52
326	$\delta = 0.66(6H, s), 1.72(12H, s), 6.58\sim 6.63(6H, m), 6.75\sim 6.81(4H, m), 6.95\sim 6.98(6H, m), 7.2(4H, m), 7.38(2H, m), 7.52\sim 7.62(14H, m), 7.71(2H, m), 7.87(2H, m), 8.02\sim 8.07(4H, m), 8.17(2H, m)$	1081.46	1080.48

10

20

30

【0108】

40

【表7】

表1の続き

330	$\delta = 1.72(12H, s), 6.58(2H, m), 6.75(2H, m), 6.95(4H, m), 7.08(1H, m), 7.36(4H, m), 7.45\sim 7.63(18H, m), 7.7\sim 7.77(11H, m), 7.84\sim 7.88(10H, m), 7.94(1H, m), 8.46(1H, m), 8.59(1H, m)$	1214.54	1213.53
337	$\delta = 1.72(12H, s), 2.34(6H, s), 6.51(4H, m), 6.58\sim 6.63(6H, m), 6.75\sim 6.81(4H, m), 6.95\sim 6.98(8H, m), 7.08(1H, m), 7.2(4H, m), 7.45\sim 7.63(10H, m), 7.7\sim 7.71(3H, m), 7.87(2H, m), 7.94(1H, m), 8.46(1H, m), 8.59(1H, m)$	1042.35	1041.50
340	$\delta = 1.72(12H, s), 6.58(2H, m), 6.75(2H, m), 6.95(4H, m), 7.36\sim 7.42(8H, m), 7.49\sim 7.54(10H, m), 7.62(2H, m), 7.71\sim 7.78(25H, m), 8.4(2H, m)$	1231.50	1230.50
345	$\delta = 1.72(12H, s), 6.58\sim 6.63(6H, m), 6.75\sim 6.81(4H, m), 6.95(4H, m), 7.2(4H, m), 7.36\sim 7.42(6H, m), 7.49\sim 7.54(6H, m), 7.62(2H, m), 7.71\sim 7.78(17H, m), 8.4(2H, m)$	1131.39	1130.47
349	$\delta = 1.72(12H, s), 3.81(2H, s), 6.44(2H, m), 6.58\sim 6.63(12H, m), 6.75\sim 6.81(7H, m), 6.95\sim 6.98(6H, m), 7.07(2H, m), 7.2(10H, m), 7.54(2H, m), 7.62(2H, m), 7.71(2H, m), 7.87(2H, m)$	1028.33	1027.49
350	$\delta = 1.72(18H, s), 6.48(2H, m), 6.58\sim 6.63(12H, m), 6.75\sim 6.81(7H, m), 6.95(4H, m), 7.05(2H, m), 7.11(2H, m), 7.2(10H, m), 7.54(2H, m), 7.62(2H, m), 7.71(2H, m), 7.87(2H, m)$	1056.38	1055.52
351	$\delta = 1.72(12H, s), 6.58\sim 6.63(12H, m), 6.75\sim 6.84(9H, m), 6.91\sim 6.95(6H, m), 7.16\sim 7.2(12H, m), 7.54(2H, m), 7.62(2H, m), 7.71(2H, m), 7.87(2H, m)$	1046.37	1045.44
352	$\delta = 1.72(12H, s), 6.52(2H, m), 6.58\sim 6.63(12H, m), 6.75\sim 6.81(7H, m), 6.89(2H, m), 6.95(4H, m), 7.17\sim 7.2(12H, m), 7.54(2H, m), 7.62(2H, m), 7.71(2H, m), 7.87(2H, m)$	1030.30	1029.47
353	$\delta = 1.3(4H, m), 1.45(4H, m), 1.72(12H, s), 6.58\sim 6.66(14H, m), 6.75\sim 6.81(7H, m), 6.95\sim 6.96(6H, m), 7.2\sim 7.21(12H, m), 7.54(2H, m), 7.62(2H, m), 7.71(2H, m), 7.87(2H, m)$	1098.49	1097.51
354	$\delta = 1.72(12H, s), 6.31(2H, m), 6.38(2H, m), 6.58\sim 6.63(14H, m), 6.75\sim 6.81(8H, m), 6.95(4H, m), 7.13(2H, m), 7.2(12H, m), 7.54(2H, m), 7.62(2H, m), 7.71(2H, m), 7.87(2H, m)$	1105.41	1104.51

10

20

30

【表 8】

表1の続き

355	$\delta = 1.72(12H, s), 2.88(4H, m), 6.51(2H, m), 6.58\sim 6.63(12H, m), 6.75\sim 6.81(7H, m), 6.95(4H, m), 7.04(2H, m), 7.14(2H, m), 7.2(10H, m), 7.54(2H, m), 7.62(2H, m), 7.71(2H, m), 7.87(2H, m)$	1042.35	1041.50
356	$\delta = 1.72(12H, s), 6.56\sim 6.63(14H, m), 6.75\sim 6.86(9H, m), 6.95\sim 6.99(6H, m), 7.2\sim 7.25(12H, m), 7.54(2H, m), 7.62(2H, m), 7.71(2H, m), 7.87(2H, m)$	1040.34	1039.49
357	$\delta = 1.72(12H, s), 6.58\sim 6.63(10H, m), 6.75\sim 6.81(6H, m), 6.95(4H, m), 7.2(8H, m), 7.54(2H, m), 7.62(2H, m), 7.71(2H, m), 7.82\sim 7.88(6H, m), 8.12(2H, m), 8.48(2H, s), 8.93(2H, m)$	999.29	998.46
358	$\delta = 1.72(12H, s), 6.58\sim 6.63(10H, m), 6.75\sim 6.81(6H, m), 6.95(4H, m), 7.2(8H, m), 7.39(4H, m), 7.54\sim 7.56(6H, m), 7.62\sim 7.64(6H, m), 7.71(2H, m), 7.87\sim 7.91(6H, m)$	1101.42	1100.51
359	$\delta = 1.72(12H, s), 6.58\sim 6.63(10H, m), 6.75\sim 6.81(6H, m), 6.95(4H, m), 7.2(8H, m), 7.39(4H, m), 7.54(2H, m), 7.62(2H, m), 7.71(2H, m), 7.87\sim 7.91(6H, m)$	649.23	648.44
360	$\delta = 1.72(18H, s), 6.58\sim 6.63(10H, m), 6.75\sim 6.81(6H, m), 6.95(4H, m), 7.2(8H, m), 7.54(4H, m), 7.62(2H, m), 7.71(4H, m), 7.87(4H, m)$	965.27	964.48
364	$\delta = 1.72(18H, s), 2.34(12H, s), 6.44(4H, m), 6.55\sim 6.59(10H, m), 6.75(2H, m), 6.95(4H, m), 7.08(4H, m), 7.54(4H, m), 7.62(2H, m), 7.71(4H, m), 7.87(4H, m)$	1021.38	1020.54
368	$\delta = 1.72(18H, s), 6.58\sim 6.61(10H, m), 6.75(2H, m), 6.95\sim 6.99(12H, m), 7.54(4H, m), 7.62(2H, m), 7.71(4H, m), 7.87(4H, m)$	1037.23	1036.44
373	$\delta = 1.72(18H, s), 6.58(2H, m), 6.75(2H, m), 6.91\sim 6.95(8H, m), 7.54(4H, m), 7.62(2H, m), 7.71(4H, m), 7.82\sim 7.88(20H, m), 8.12(8H, m), 8.93(8H, m)$	1365.74	1364.60
378	$\delta = 0.25(36H, s), 1.72(18H, s), 6.58\sim 6.61(10H, m), 6.75(2H, m), 6.95(4H, m), 7.15(8H, m), 7.54(4H, m), 7.62(2H, m), 7.71(4H, m), 7.87(4H, m)$	1254.00	1252.63
381	$\delta = 1.72(18H, s), 6.58(2H, m), 6.75(2H, m), 6.95(4H, m), 7.27(4H, m), 7.36(4H, m), 7.54(4H, m), 7.62(2H, m), 7.71(4H, m), 7.87(4H, m), 8.04\sim 8.09(8H, m)$	969.22	968.46
389	$\delta = 1.72(18H, s), 2.34(12H, s), 6.36(4H, m), 6.58\sim 6.63(6H, m), 6.71\sim 6.81(6H, m), 6.95(4H, m), 7.2(4H, m), 7.54(4H, m), 7.62(2H, m), 7.71(4H, m), 7.87(4H, m)$	1021.38	1020.54

10

20

30

40

【表9】

表1の続き

395	$\delta = 1.35(18H, s), 1.72(18H, s), 6.55\sim 6.63(10H, m), 6.75\sim 6.81(4H, m), 6.95\sim 7.01(8H, m), 7.2(4H, m), 7.54(4H, m), 7.62(2H, m), 7.71(4H, m), 7.87(4H, m)$	1077.48	1076.60
404	$\delta = 1.72(30H, s), 6.58\sim 6.63(8H, m), 6.75\sim 6.81(6H, m), 6.95(4H, m), 7.2(4H, m), 7.28(2H, m), 7.38(2H, m), 7.54\sim 7.55(6H, m), 7.62(4H, m), 7.71(4H, m), 7.87(6H, m)$	1197.59	1196.60
411	$\delta = 1.72(18H, s), 6.58\sim 6.63(6H, m), 6.75\sim 6.86(6H, m), 6.95(4H, m), 7.2(4H, m), 7.4(2H, m), 7.5\sim 7.54(8H, m), 7.62(2H, m), 7.71\sim 7.73(6H, m), 7.87(4H, m), 7.98(2H, m), 8.45(2H, m)$	1177.56	1176.45
415	$\delta = 1.72(30H, s), 6.58\sim 6.63(6H, m), 6.69\sim 6.81(8H, m), 6.95(4H, m), 7.2(4H, m), 7.28(2H, m), 7.38(2H, m), 7.54\sim 7.55(10H, m), 7.62\sim 7.63(4H, m), 7.71\sim 7.77(6H, m), 7.87\sim 7.93(8H, m)$	1349.78	1348.66
422	$\delta = 1.35(18H, s), 1.72(18H, s), 2.34(12H, s), 6.36(4H, m), 6.55\sim 6.58(6H, m), 6.71\sim 6.75(4H, m), 6.95\sim 7.01(8H, m), 7.54(4H, m), 7.62(2H, m), 7.71(4H, m), 7.87(4H, m)$	1133.59	1132.66
428	$\delta = 1.72(18H, s), 2.34(12H, s), 6.36(4H, m), 6.58(2H, m), 6.69\sim 6.75(8H, m), 6.95(4H, m), 7.41(2H, m), 7.51\sim 7.54(16H, m), 7.62(2H, m), 7.71(4H, m), 7.87(4H, m)$	1173.57	1172.60
435	$\delta = 1.72(18H, s), 2.34(12H, s), 6.36(4H, m), 6.58(2H, m), 6.71\sim 6.75(4H, m), 6.91\sim 6.95(6H, m), 7.54(4H, m), 7.62(2H, m), 7.71(4H, m), 7.82\sim 7.88(12H, m), 8.12(4H, m), 8.93(4H, m)$	1221.61	1220.60
447	$\delta = 1.35(18H, s), 1.72(18H, s), 6.55\sim 6.58(6H, m), 6.75(2H, m), 6.95\sim 7.01(8H, m), 7.36(2H, m), 7.49\sim 7.54(8H, m), 7.62(2H, m), 7.71\sim 7.77(8H, m), 7.84\sim 7.88(8H, m)$	1177.60	1176.63
454	$\delta = 1.72(18H, s), 6.58(2H, m), 6.69\sim 6.75(6H, m), 6.95(4H, m), 7.36\sim 7.41(4H, m), 7.49\sim 7.54(20H, m), 7.62(2H, m), 7.71\sim 7.77(8H, m), 7.84\sim 7.88(8H, m)$	1217.58	1216.57
457	$\delta = 1.72(30H, s), 6.58(4H, m), 6.75(4H, m), 6.95(4H, m), 7.28(2H, m), 7.36\sim 7.38(4H, m), 7.49\sim 7.55(10H, m), 7.62(4H, m), 7.71\sim 7.77(8H, m), 7.84\sim 7.88(10H, m)$	1297.71	1296.63
458	$\delta = 1.72(18H, s), 6.58(2H, m), 6.75(2H, m), 6.91\sim 6.95(6H, m), 7.36(2H, m), 7.49\sim 7.54(8H, m), 7.62(2H, m), 7.71\sim 7.88(24H, m), 8.12(4H, m), 8.93(4H, m)$	1265.62	1264.57

10

20

30

【表 10】

表1の続き

466	$\delta = 1.72(18H, s), 6.58(2H, m), 6.69\sim 6.75(6H, m), 6.95(4H, m), 7.36(2H, m), 7.49\sim 7.62(20H, m), 7.71\sim 7.77(10H, m), 7.84\sim 7.92(10H, m), 8(4H, m)$	1317.70	1316.60
472	$\delta = 1.35(18H, s), 1.72(18H, s), 2.34(6H, s), 6.51\sim 6.58(10H, m), 6.75(2H, m), 6.95\sim 7.01(12H, m), 7.54(4H, m), 7.62(2H, m), 7.71(4H, m), 7.87(4H, m)$	1105.54	1104.60
483	$\delta = 1.72(30H, s), 2.34(6H, s), 6.51(4H, m), 6.58(4H, m), 6.75(4H, m), 6.95\sim 6.98(8H, m), 7.28(2H, m), 7.38(2H, m), 7.54\sim 7.55(6H, m), 7.62(4H, m), 7.71(4H, m), 7.87(6H, m)$	1225.64	1224.63
497	$\delta = 1.35(18H, s), 1.72(18H, s), 2.34(6H, s), 6.44(2H, m), 6.55\sim 6.59(10H, m), 6.75(2H, m), 6.95\sim 7.01(8H, m), 7.08(2H, m), 7.54(4H, m), 7.62(2H, m), 7.71(4H, m), 7.87(4H, m)$	1105.54	1104.63
510	$\delta = 1.72(18H, s), 2.34(6H, s), 6.44(2H, m), 6.55\sim 6.59(6H, m), 6.75(2H, m), 6.91\sim 6.95(6H, m), 7.08(2H, m), 7.54(4H, m), 7.62(2H, m), 7.71(4H, m), 7.82\sim 7.88(12H, m), 8.12(4H, m), 8.93(4H, m)$	1193.56	1192.57
521	$\delta = 1.72(18H, s), 2.12(6H, s), 6.51(2H, m), 6.58\sim 6.61(6H, m), 6.69\sim 6.75(4H, m), 6.95\sim 7.01(10H, m), 7.15(2H, m), 7.54(4H, m), 7.62(2H, m), 7.71(4H, m), 7.87(4H, m)$	1029.30	1028.49
527	$\delta = 1.72(18H, s), 6.58\sim 6.61(6H, m), 6.75(2H, m), 6.95\sim 6.99(10H, m), 7.38(2H, m), 7.53\sim 7.62(12H, m), 7.71(4H, m), 7.87(4H, m), 8.02\sim 8.07(4H, m)$	1101.37	1100.49
537	$\delta = 1.72(18H, s), 6.58(2H, m), 6.75(2H, m), 6.95\sim 6.99(10H, m), 7.38(2H, m), 7.53\sim 7.62(12H, m), 7.71(4H, m), 7.87(4H, m), 8.02\sim 8.07(4H, m), 8.46(4H, m)$	1067.36	1066.50
540	$\delta = 1.72(30H, s), 6.58(4H, m), 6.75(4H, m), 6.95\sim 6.98(6H, m), 7.28(2H, m), 7.38(4H, m), 7.53\sim 7.62(16H, m), 7.71(4H, m), 7.87(6H, m), 8.02\sim 8.07(4H, m)$	1297.71	1296.63
542	$\delta = 1.72(18H, s), 6.58(2H, m), 6.75(2H, m), 6.91\sim 6.98(8H, m), 7.38(2H, m), 7.53\sim 7.62(12H, m), 7.71(4H, m), 7.82\sim 7.88(12H, m), 8.02\sim 8.12(8H, m), 8.93(4H, m)$	1265.62	1264.57
547	$\delta = 1.72(30H, s), 6.58(2H, m), 6.69\sim 6.75(6H, m), 6.95\sim 6.98(6H, m), 7.28(2H, m), 7.38(4H, m), 7.53\sim 7.63(20H, m), 7.71\sim 7.77(6H, m), 7.87\sim 7.93(8H, m), 8.02\sim 8.07(4H, m)$	1449.90	1448.69

10

20

30

40

【表 1 1】

表1の続き

549	$\delta = 1.35(18H, s), 1.72(18H, s), 6.55\sim 6.58(6H, m), 6.69\sim 6.75(6H, m), 6.95\sim 7.01(8H, m), 7.41(2H, m), 7.51\sim 7.54(16H, m), 7.62(2H, m), 7.71(4H, m), 7.87(4H, m)$	1229.68	1228.66
556	$\delta = 1.35(18H, s), 1.72(30H, s), 6.55\sim 6.58(8H, m), 6.75(4H, m), 6.95\sim 7.01(8H, m), 7.28(2H, m), 7.38(2H, m), 7.54\sim 7.55(6H, m), 7.62(4H, m), 7.71(4H, m), 7.87(6H, m)$	1309.80	1308.73
567	$\delta = 1.35(18H, s), 1.72(18H, s), 6.55\sim 6.58(6H, m), 6.75(2H, m), 6.95\sim 7.04(10H, m), 7.53\sim 7.62(16H, m), 7.71\sim 7.78(8H, m), 7.87\sim 7.92(6H, m), 8(4H, m), 8.07(2H, m), 8.49(2H, m)$	1429.91	1428.73
577	$\delta = 1.72(30H, s), 6.58\sim 6.61(8H, m), 6.75(4H, m), 6.95\sim 6.99(8H, m), 7.28(2H, m), 7.38(2H, m), 7.54\sim 7.55(6H, m), 7.62(4H, m), 7.71(4H, m), 7.87(6H, m)$	1233.57	1232.58
584	$\delta = 1.72(18H, s), 6.58(2H, m), 6.69\sim 6.75(6H, m), 6.91\sim 6.95(6H, m), 7.41(2H, m), 7.51\sim 7.54(16H, m), 7.62(2H, m), 7.71(4H, m), 7.82\sim 7.88(12H, m), 8.12(4H, m), 8.93(4H, m)$	1317.70	1316.60
588	$\delta = 1.72(18H, s), 6.58(2H, m), 6.69\sim 6.75(10H, m), 6.95(4H, m), 7.41(2H, m), 7.51\sim 7.55(24H, m), 7.61\sim 7.62(4H, m), 7.71(4H, m), 7.87(4H, m), 8.04\sim 8.08(4H, m), 8.42(2H, m), 8.55(2H, m)$	1369.77	1368.63
598	$\delta = 1.72(18H, s), 6.58\sim 6.62(4H, m), 6.7\sim 6.75(4H, m), 6.95\sim 6.99(8H, m), 7.54\sim 7.55(6H, m), 7.62(2H, m), 7.71(4H, m), 7.87(4H, m), 8.07(2H, m), 8.46(4H, m)$	969.22	968.46
599	$\delta = 1.72(30H, s), 6.58(4H, m), 6.75(4H, m), 6.91\sim 6.95(6H, m), 7.28(2H, m), 7.38(2H, m), 7.54\sim 7.55(6H, m), 7.62(4H, m), 7.71(4H, m), 7.82\sim 7.88(14H, m), 8.12(4H, m), 8.93(4H, m)$	1397.83	1396.66
607	$\delta = 1.72(18H, s), 2.34(6H, s), 6.51(4H, m), 6.58(2H, m), 6.75(2H, m), 6.91\sim 6.98(10H, m), 7.54(4H, m), 7.62(2H, m), 7.71(4H, m), 7.82\sim 7.88(12H, m), 8.12(4H, m), 8.93(4H, m)$	1193.56	1192.57
612	$\delta = 1.72(18H, s), 6.58(2H, m), 6.75(2H, m), 6.95\sim 6.99(10H, m), 7.41\sim 7.47(4H, m), 7.54\sim 7.62(8H, m), 7.71(4H, m), 7.87(4H, m), 8.17(2H, m), 8.28(2H, m), 8.46(4H, m)$	1069.34	1068.49
620	$\delta = 1.72(18H, s), 3.83(6H, s), 6.52(4H, m), 6.58(2H, m), 6.74\sim 6.81(10H, m), 6.95(4H, m), 7.39(4H, m), 7.54(4H, m), 7.62(2H, m), 7.71(4H, m), 7.87(4H, m)$	1075.34	1074.49

10

20

30

40

【表 1 2】

表1の続き

625	$\delta = 1.72(18H, s), 3.83(6H, s), 6.52(4H, m), 6.58(2H, m), 6.74\sim 6.81(8H, m), 6.95(4H, m), 7.54\sim 7.62(8H, m), 7.71\sim 7.78(8H, m), 7.87\sim 7.88(6H, m), 8.1(4H, m), 8.42(4H, m)$	1273.60	1272.56
632	$\delta = 0.9(6H, m), 1.72(12H, s), 1.91(4H, m), 6.58\sim 6.63(10H, m), 6.75\sim 6.81(6H, m), 6.95(4H, m), 7.2(8H, m), 7.54(4H, m), 7.62(2H, m), 7.71(4H, m), 7.87(4H, m)$	993.32	992.51
635	$\delta = 0.9(6H, m), 1.72(12H, s), 1.91(4H, m), 2.34(12H, s), 6.51(8H, m), 6.58(2H, m), 6.75(2H, m), 6.95\sim 6.98(12H, m), 7.54(4H, m), 7.62(2H, m), 7.71(4H, m), 7.87(4H, m)$	1049.43	1048.57
643	$\delta = 0.9(6H, m), 1.72(12H, s), 1.91(4H, m), 6.58\sim 6.62(6H, m), 6.7\sim 6.75(6H, m), 6.95(4H, m), 7.54\sim 7.55(8H, m), 7.62(2H, m), 7.71(4H, m), 7.87(4H, m), 8.07(4H, m)$	997.28	996.46
648	$\delta = 1.72(12H, s), 6.58\sim 6.63(10H, m), 6.75\sim 6.81(6H, m), 6.95(4H, m), 7.16\sim 7.2(12H, m), 7.35(2H, m), 7.54(4H, m), 7.62(2H, m), 7.71\sim 7.75(6H, m), 7.87(4H, m)$	1087.39	1086.49
659	$\delta = 1.72(12H, s), 6.58\sim 6.63(10H, m), 6.75\sim 6.81(6H, m), 6.95(4H, m), 7.11(4H, m), 7.2\sim 7.26(10H, m), 7.33(4H, m), 7.54(4H, m), 7.62(2H, m), 7.71(4H, m), 7.87(4H, m)$	1089.41	1088.51
663	$\delta = 1.72(12H, s), 2.34(12H, s), 6.44(4H, m), 6.55\sim 6.59(10H, m), 6.75(2H, m), 6.95(4H, m), 7.08\sim 7.11(8H, m), 7.26(2H, m), 7.33(4H, m), 7.54(4H, m), 7.62(2H, m), 7.71(4H, m), 7.87(4H, m)$	1145.52	1144.57
670	$\delta = 1.72(12H, s), 3.49(4H, s), 6.58\sim 6.63(10H, m), 6.75\sim 6.81(6H, m), 6.95(4H, m), 7.2(12H, m), 7.54(4H, m), 7.62(2H, m), 7.71(4H, m), 7.87(4H, m)$	1039.35	1038.49
680	$\delta = 1.72(12H, s), 3.49(4H, s), 6.58(2H, m), 6.75(2H, m), 6.95\sim 6.99(8H, m), 7.2(4H, m), 7.41\sim 7.47(8H, m), 7.54\sim 7.62(10H, m), 7.71(4H, m), 7.87(4H, m), 8.17(4H, m), 8.28(4H, m)$	1243.54	1242.53
681	$\delta = 0.9(12H, m), 1.72(6H, s), 1.91(8H, m), 6.58\sim 6.63(10H, m), 6.75\sim 6.81(6H, m), 6.95(4H, m), 7.2(8H, m), 7.54(4H, m), 7.62(2H, m), 7.71(4H, m), 7.87(4H, m)$	1021.38	1020.54
686	$\delta = 0.9(12H, m), 1.72(6H, s), 1.91(8H, m), 2.12(12H, s), 6.51(4H, m), 6.58(2H, m), 6.69\sim 6.75(6H, m), 6.95\sim 7.01(8H, m), 7.15(4H, m), 7.54(4H, m), 7.62(2H, m), 7.71(4H, m), 7.87(4H, m)$	1077.48	1076.60

10

20

30

40

【表 1 3】

表1の続き

698	$\delta = 1.72(6H, s), 6.58\sim 6.63(10H, m), 6.75\sim 6.81(6H, m), 6.95(4H, m), 7.11(8H, m), 7.2\sim 7.26(12H, m), 7.33(8H, m), 7.54(4H, m), 7.62(2H, m), 7.71(4H, m), 7.87(4H, m)$	1213.55	1212.54
699	$\delta = 1.72(6H, s), 3.49(8H, s), 6.58\sim 6.63(10H, m), 6.75\sim 6.81(6H, m), 6.95(4H, m), 7.2(16H, m), 7.54(4H, m), 7.62(2H, m), 7.71(4H, m), 7.87(4H, m)$	1113.43	1112.51
700	$\delta = 1.51(8H, m), 1.72(6H, s), 2.09(8H, m), 6.58\sim 6.63(10H, m), 6.75\sim 6.81(6H, m), 6.95(4H, m), 7.2(8H, m), 7.54(4H, m), 7.62(2H, m), 7.71(4H, m), 7.87(4H, m)$	1017.35	1016.51
701	$\delta = 1.72(6H, s), 2.62(4H, m), 2.91(4H, m), 6.58\sim 6.63(10H, m), 6.75\sim 6.81(6H, m), 6.95(4H, m), 7.02\sim 7.06(4H, m), 7.15\sim 7.2(12H, m), 7.54(4H, m), 7.62(2H, m), 7.71(4H, m), 7.87(4H, m)$	1113.43	1112.51
702	$\delta = 1.72(12H, s), 6.58\sim 6.63(10H, m), 6.75\sim 6.81(6H, m), 6.95(2H, m), 7.2(9H, m), 7.42\sim 7.43(3H, m), 7.56\sim 7.63(6H, m), 7.82(2H, m), 8.4(1H, m)$	850.10	849.41
710	$\delta = 1.72(12H, s), 6.58\sim 6.63(10H, m), 6.75\sim 6.81(6H, m), 6.95\sim 6.99(4H, m), 7.08(2H, m), 7.2(8H, m), 7.42(2H, m), 7.59\sim 7.62(4H, m), 7.82(2H, m)$	855.14	854.37
712	$\delta = 1.72(12H, s), 6.58\sim 6.63(6H, m), 6.75\sim 6.81(4H, m), 6.95(4H, m), 7.2(4H, m), 7.36(2H, m), 7.49\sim 7.54(10H, m), 7.62(2H, m), 7.71\sim 7.77(6H, m), 7.84\sim 7.88(6H, m)$	949.23	948.44
716	$\delta = 1.72(12H, s), 6.58\sim 6.63(8H, m), 6.75\sim 6.81(5H, m), 6.95\sim 6.98(5H, m), 7.2(6H, m), 7.38(1H, m), 7.5\sim 7.62(11H, m), 7.71(2H, m), 7.87(2H, m), 8.02\sim 8.07(2H, m)$	899.17	898.43
717	$\delta = 1.72(18H, s), 6.58\sim 6.63(9H, m), 6.75\sim 6.81(6H, m), 6.95(4H, m), 7.2(6H, m), 7.28(1H, m), 7.38(1H, m), 7.5\sim 7.55(7H, m), 7.62(3H, m), 7.71(2H, m), 7.87(3H, m)$	965.27	964.48
719	$\delta = 1.35(9H, s), 1.72(18H, s), 6.55\sim 6.58(5H, m), 6.75(3H, m), 6.95\sim 7.01(8H, m), 7.28(1H, m), 7.38(3H, m), 7.5\sim 7.62(16H, m), 7.71(2H, m), 7.87(3H, m), 8.02\sim 8.07(4H, m)$	1121.49	1120.57

10

20

30

【0110】

[実施例1] 本発明による有機電界発光化合物を使用したOLED素子の製造
本発明の有機電界発光化合物を使用してOLED素子を製造した。

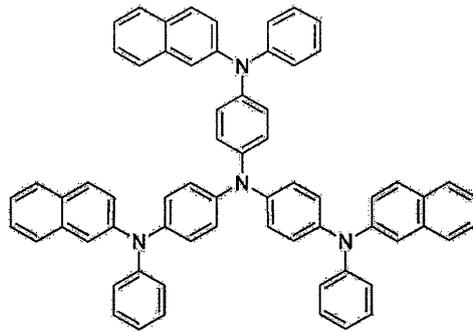
まず、OLED用ガラス基体1(三星-コーニング社製造)から得られた透明電極ITO薄膜2(15 /)を、トリクロロエチレン、アセトン、エタノールおよび蒸留水を順に使用して超音波洗浄にかけ、イソプロパノールに入れて保管した後使用した。

次に、真空蒸着装置の基体ホルダにITO基体を取り付けて、真空蒸着装置のセル内に下記構造の4, 4', 4"-トリス(N, N-(2-ナフチル)-フェニルアミノ)トリフェニルアミン(2-TNATA)を入れたあと、チャンパー内側の圧力を 10^{-6} torrに至るまで低下させた。次いで、セルに電流を適用することにより2-TNATAを蒸発させた。ITO基体上に60nm厚の正孔注入層3を形成させた。

40

【0111】

【化168】



2-TNATA

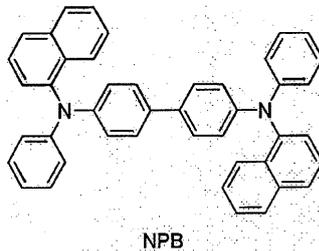
10

【0112】

次いで、真空蒸着装置の他のセル内に、下記構造のN,N'-ビス(2-ナフチル)-N,N'-ジフェニル-4,4'-ジアミン(NPB)を入れた後、電流を適用してNPBを蒸発させた。正孔注入層上に20nm厚の正孔輸送層4を形成させた。

【0113】

【化169】



NPB

20

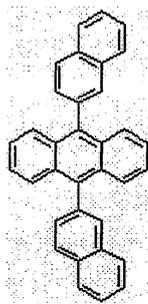
【0114】

正孔注入層および正孔輸送層を形成した後、その上に電界発光層を次のように形成した。真空蒸着装置の一方のセルに、ホストとして、下記構造の化合物H-32を入れて、他のセルにはドーパントとして化合物1を入れた。二つの物質を異なる速度で蒸発させて、ホスト基準に2~5重量%で、前記正孔輸送層上に30nm厚の電界発光層5を形成させた。

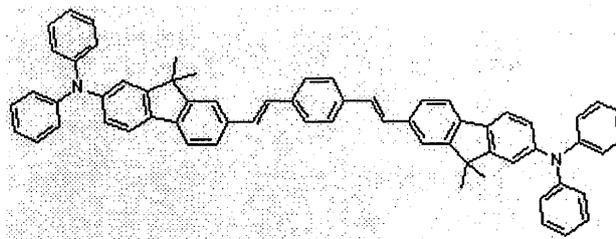
30

【0115】

【化170】



H-32



化合物1

40

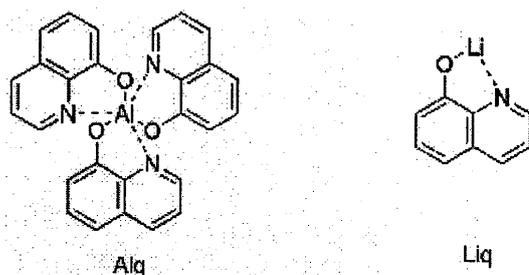
【0116】

次いで、電子輸送層6として下記構造のトリス(8-ヒドロキシキノリン)-アルミニウム(III)(Alq)を20nm厚で堆積させた。次いで、電子注入層7として、下記構造の化合物リチウムキノラート(Liq)を1~2nm厚で堆積させた。次いで、別の真空蒸着装置を使用して、Al陰極8を150nm厚で形成して、OLEDを製造した。

50

【 0 1 1 7 】

【 化 1 7 1 】



10

【 0 1 1 8 】

それぞれの OLED 電界発光物質は 10^{-6} torr での真空昇華によって精製された。

【 0 1 1 9 】

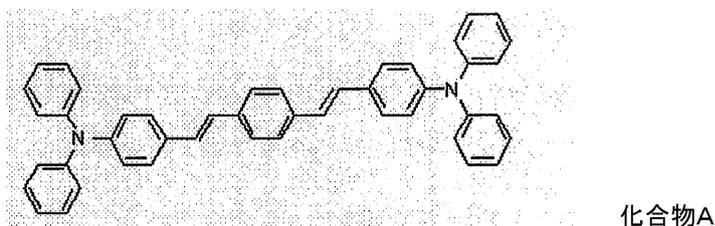
[比較例 1] 従来の電界発光物質を使用した OLED 素子の製造

実施例 1 におけるように、正孔注入層および正孔輸送層を形成した。真空蒸着装置の一方のセルに、電界発光ホスト物質としてジナフチルアントラセン (DNA) を入れて、また他のセルには、青色発光の電界発光物質として下記構造の化合物 A を入れた。蒸着速度を 100 : 1 に設定することにより、正孔輸送層上に 30 nm 厚の電界発光層を形成させた。

20

【 0 1 2 0 】

【 化 1 7 2 】



【 0 1 2 1 】

次いで、実施例 1 におけるように、電子輸送層および電子注入層を形成し、別の真空蒸着装置を使用して、150 nm 厚の Al 陰極を形成して、OLED を製造した。

30

【 0 1 2 2 】

[実施例 2] 製造された OLED 素子の電界発光特性

本発明による有機電界発光化合物を含む実施例 1 で製造された OLED 素子、および従来の電界発光化合物を含む比較例 1 で製造された OLED 素子の発光効率を、 $1,000 \text{ cd/m}^2$ で測定した。結果が表 2 に示される。

【 0 1 2 3 】

【表 1 4】

表2

番号	ホスト	ドーパント	ドーピング濃度 (重量%)	発光効率 (cd/A)	色
				@ 1000 cd/m ²	
1	H-28	5	3.0	12.8	ライトブルー
2	H-29	42	3.0	12.9	ライトブルー
3	H-30	84	3.0	12.5	ライトブルー
4	H-32	1	3.0	12.6	ライトブルー
5	H-48	148	3.0	13.0	ライトブルー
6	H-49	178	3.0	11.5	青色
7	H-89	212	3.0	11.8	青色
8	H-104	255	3.0	12.6	ライトブルー
9	H-116	274	3.0	12.8	ライトブルー
10	H-124	289	3.0	13.2	ライトブルー
11	H-127	315	3.0	13.0	ライトブルー
12	H-134	360	3.0	12.9	ライトブルー
13	H-136	404	3.0	12.7	ライトブルー
14	H-139	542	3.0	12.6	ライトブルー
比較例1	DNA	化合物 A	3.0	12.4	翡翠色

10

20

30

【0124】

表2に示されるように、本発明の化合物が使用されて青色発光の電界発光素子を製造した場合、発光効率が同等以上に維持されつつ、色純度が、翡翠色と比較して、ライトブルー乃至青色に有意に向上された。

代表的な実施形態が示され説明されたが、それに対して、特許請求の範囲で特定されるような本開示の意図および範囲から逸脱することなく、形態および詳細における様々な変更がなされることが当業者に理解される。

さらに、その本質的な範囲から逸脱することなく、本開示の教示について、特定の状況または物質に適合させるために、多くの改変がなされうる。よって、本開示は、本開示の実施のために意図されるベストモードとして開示される特定の例示的な実施形態に限定されず、本開示は特許請求の範囲内に該当する全ての実施形態を包含するであろうことが意図される。

40

【符号の説明】

【0125】

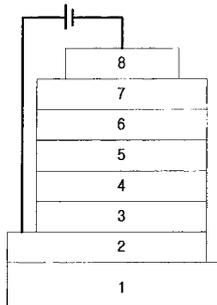
- 1 ガラス
- 2 透明電極
- 3 正孔注入層
- 4 正孔輸送層

50

- 5 電界発光層
- 6 電子輸送層
- 7 電子注入層
- 8 A 1 陰極

【 図 1 】

図 1



フロントページの続き

(51)Int.Cl.	F I	テーマコード(参考)
C 0 7 F 9/6568 (2006.01)	H 0 1 L 31/04 D	4 C 0 6 3
C 0 7 C 255/58 (2006.01)	C 0 7 F 7/10 C	4 C 2 0 4
C 0 7 C 217/92 (2006.01)	C 0 7 F 9/6568	4 H 0 0 6
C 0 9 K 11/06 (2006.01)	C 0 7 F 7/10 S	4 H 0 4 9
C 0 7 D 209/86 (2006.01)	C 0 7 C 255/58	4 H 0 5 0
C 0 7 D 213/74 (2006.01)	C 0 7 C 217/92	5 F 0 5 1
C 0 7 D 401/14 (2006.01)	C 0 9 K 11/06 6 2 5	
C 0 7 D 333/76 (2006.01)	C 0 9 K 11/06 6 4 5	
C 0 7 D 219/02 (2006.01)	C 0 9 K 11/06 6 4 0	
C 0 7 D 279/20 (2006.01)	C 0 9 K 11/06 6 6 0	
C 0 7 D 267/00 (2006.01)	C 0 9 K 11/06 6 3 5	
C 0 7 D 241/36 (2006.01)	C 0 9 K 11/06 6 5 0	
C 0 7 D 223/22 (2006.01)	C 0 9 K 11/06 6 5 5	
	C 0 9 K 11/06 6 3 0	
	C 0 7 D 209/86	
	C 0 7 D 213/74	
	C 0 7 D 401/14	
	C 0 7 D 333/76	
	C 0 7 D 219/02	
	C 0 7 D 279/20	
	C 0 7 D 267/00	
	C 0 7 D 241/36	
	C 0 7 D 223/22	

- (72)発明者 チョー, ヤン・チュン
大韓民国, ソウル・136-060, ソンブク-グウ, ドナム-ドン・15-1, サムスン・アパートメント・101-1111
- (72)発明者 キム, チ・シク
大韓民国, ソウル・133-111, ソンドン-グウ, ソンス・1-ガ・14-60, サード・フロア
- (72)発明者 ユム, サン・チン
大韓民国, ソウル・152-053, グロ-グウ, グロ・3-ドン・1274, シンサン・ミソジウム・104-805
- (72)発明者 クォン, ヒョク・チュー
大韓民国, ソウル・130-100, ドンデムン-グウ, チャンガン・ドン, サムスン・レミアン・2・チャ・アパートメント・224-2001
- (72)発明者 キム, ボン・ゴク
大韓民国, ソウル・135-090, ガンナム-グウ, サムソン-ドン・4, ハンソル・アパートメント・101-1108
- (72)発明者 キム, ソン・ミン
大韓民国, ソウル・158-761, ヤンチョン-グウ, モク・1-ドン・917, モクドン・パラゴン・アパートメント・109-902
- (72)発明者 ユーン, スン・スー
大韓民国, ソウル・135-884, ガンナム-グウ, スソ-ドン, サミク・アパートメント・405-1409

Fターム(参考) 3K107 AA01 BB01 CC04 CC07 CC21 DD52 DD53 DD59 DD68 DD69
DD71 DD73 DD74 DD76 DD78 DD80 DD84

4C034 BA07
4C036 AA03 AA08 AA17
4C055 AA01 BA02 BA52 BB17 CA01 DA01
4C056 AA02 AB01 AC03 AD05 AE02 FA13 FB01 FC02
4C063 AA05 BB09 CC15 DD12 EE10
4C204 CB25 EB01 FB16 GB01
4H006 AA01 AA03 AB91 BJ50 BP30 BU48
4H049 VN01 VP01 VP04 VQ35 VQ84 VQ89 VR24 VU25
4H050 AA01 AA03 AB91
5F051 AA11 FA04 FA06 GA03

【外国語明細書】

2010065033000001.pdf

2010065033000002.pdf

2010065033000003.pdf

2010065033000004.pdf