

(19)日本国特許庁(JP)

(12)特許公報(B2)

(11)特許番号  
特許第7556136号  
(P7556136)

(45)発行日 令和6年9月25日(2024.9.25)

(24)登録日 令和6年9月13日(2024.9.13)

(51)国際特許分類

F I

C 0 7 F	5/02 (2006.01)	C 0 7 F	5/02	F C S P
C 0 7 F	7/10 (2006.01)	C 0 7 F	7/10	V
C 0 9 K	11/06 (2006.01)	C 0 9 K	11/06	6 6 0
H 1 0 K	50/15 (2023.01)	H 1 0 K	50/15	
H 1 0 K	50/16 (2023.01)	H 1 0 K	50/16	

請求項の数 9 (全69頁) 最終頁に続く

(21)出願番号 特願2023-514798(P2023-514798)  
 (86)(22)出願日 令和3年9月2日(2021.9.2)  
 (65)公表番号 特表2023-540962(P2023-540962 A)  
 (43)公表日 令和5年9月27日(2023.9.27)  
 (86)国際出願番号 PCT/KR2021/011828  
 (87)国際公開番号 WO2022/050710  
 (87)国際公開日 令和4年3月10日(2022.3.10)  
 審査請求日 令和5年3月2日(2023.3.2)  
 (31)優先権主張番号 10-2020-0112964  
 (32)優先日 令和2年9月4日(2020.9.4)  
 (33)優先権主張国・地域又は機関 韓国(KR)  
 (31)優先権主張番号 10-2021-0116188  
 (32)優先日 令和3年9月1日(2021.9.1)

最終頁に続く

(73)特許権者 507074834  
 エスエフシー カンパニー リミテッド  
 大韓民国, チュンチョンブク - ド, チョ  
 ンジュ - シ, チョンウォン - ク, オチャ  
 ン - ウブ, グワハクサンオブ 5 口 8 9  
 (74)代理人 100137095  
 弁理士 江部 武史  
 (72)発明者 シン, ボン - キ  
 大韓民国, 2 8 1 2 2 チュンチョンブ  
 ク - ド, チョンジュ - シ, チョンウォ  
 ン - ク, オチャン - ウブ, グワハクサ  
 ンオブ 5 口 8 9  
 (72)発明者 ジュ, ソン - フン  
 大韓民国, 2 8 1 2 2 チュンチョンブ  
 ク - ド, チョンジュ - シ, チョンウォ  
 ン

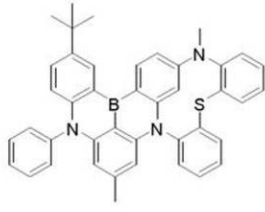
最終頁に続く

(54)【発明の名称】 多環芳香族誘導体化合物及びこれを用いた有機発光素子

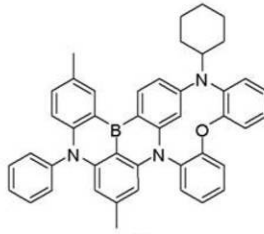
(57)【特許請求の範囲】

【請求項 1】

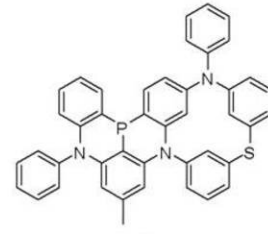
下記化合物から選択されるいずれか 1 つである、有機化合物。



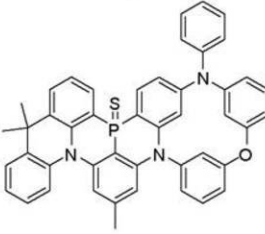
1



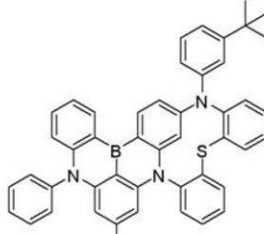
2



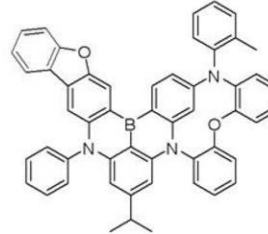
3



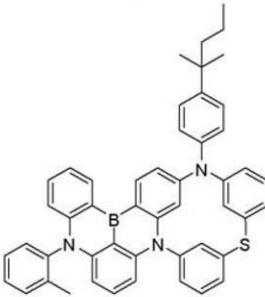
4



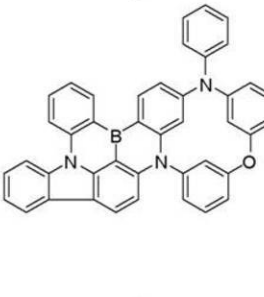
5



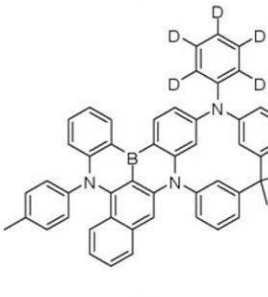
6



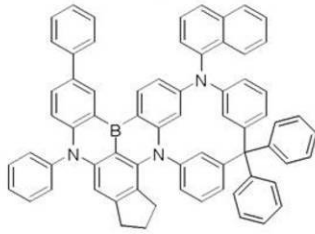
7



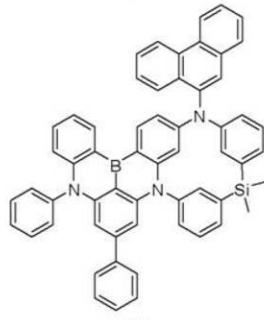
8



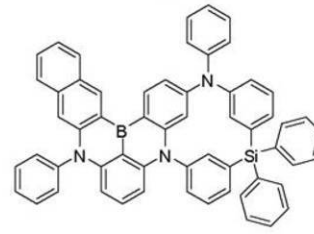
9



10



11



12

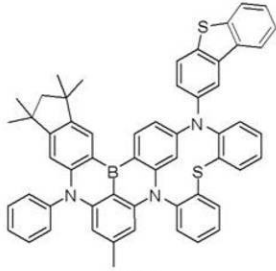
10

20

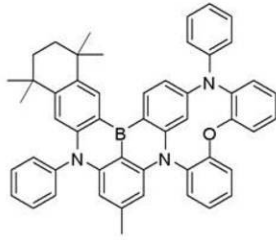
30

40

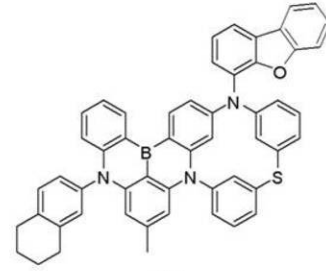
50



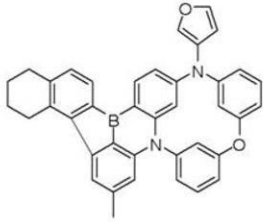
13



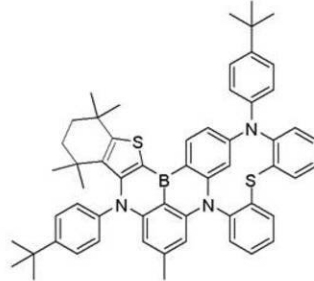
14



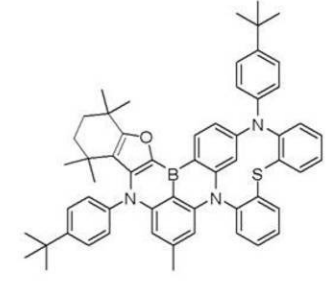
15



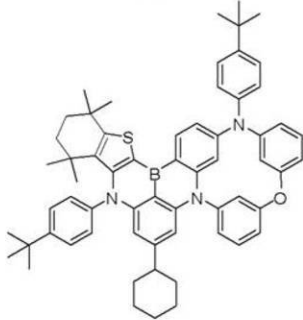
16



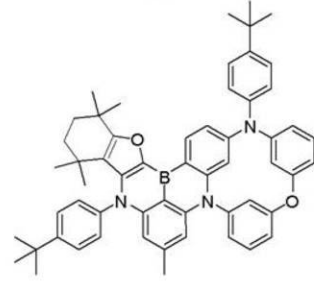
17



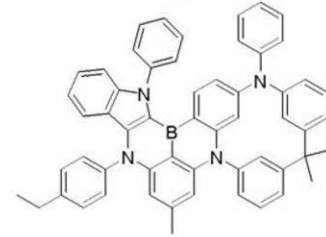
18



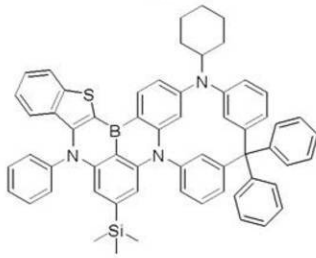
19



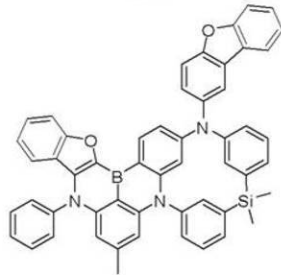
20



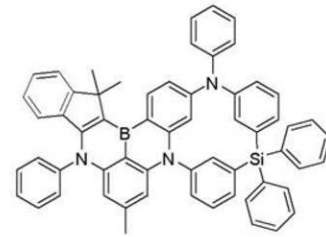
21



22



23



24

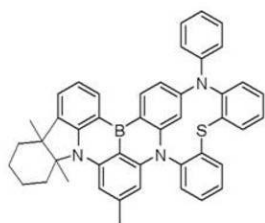
10

20

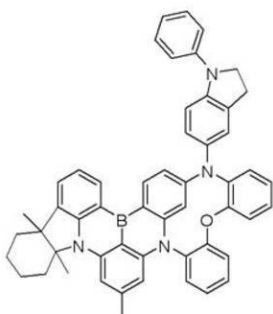
30

40

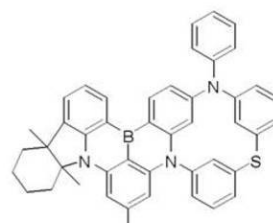
50



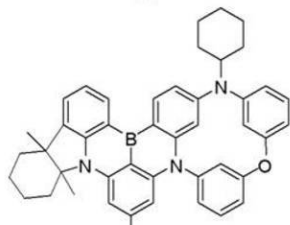
25



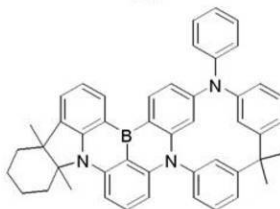
26



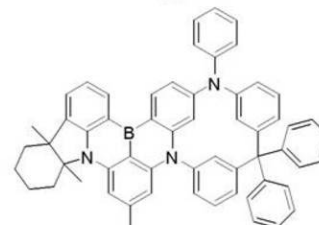
27



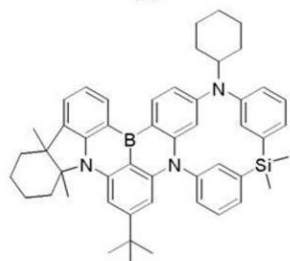
28



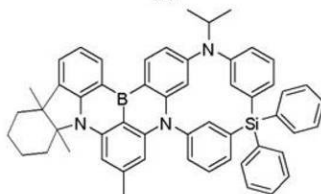
29



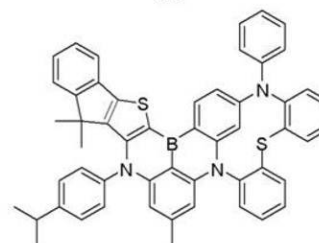
30



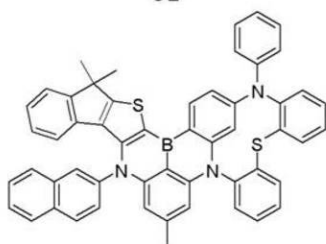
31



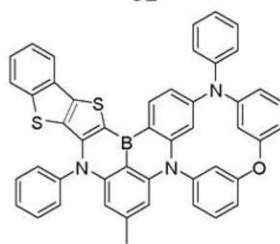
32



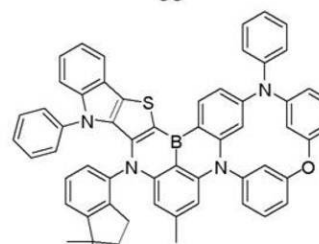
33



34



35



36

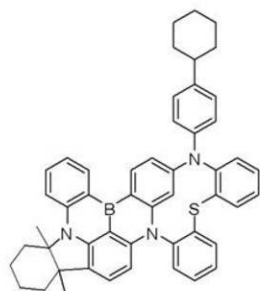
10

20

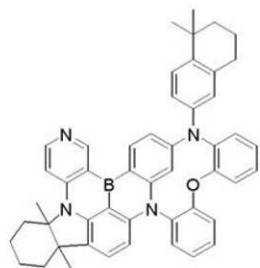
30

40

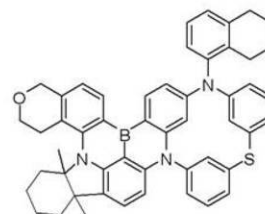
50



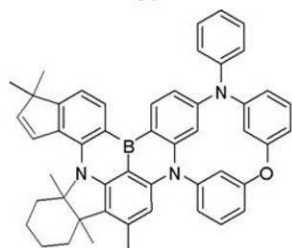
37



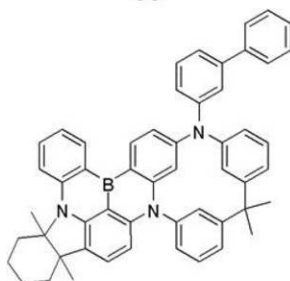
38



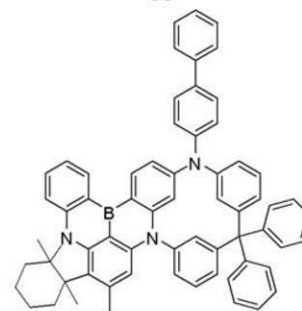
39



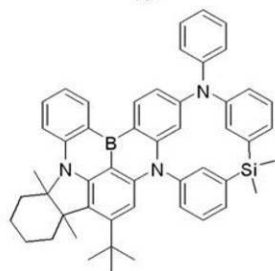
40



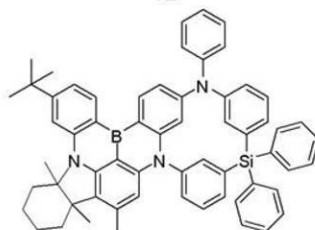
41



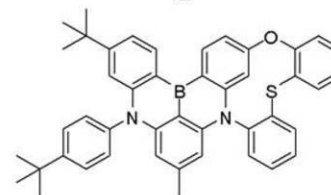
42



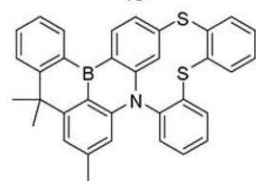
43



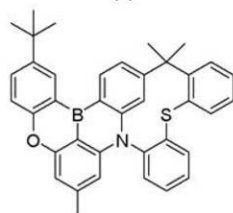
44



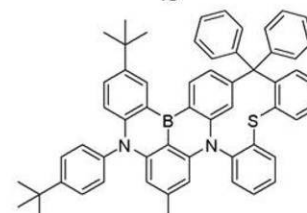
45



46



47



48

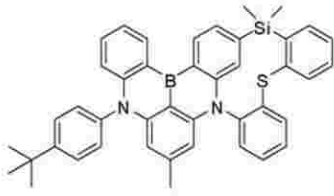
10

20

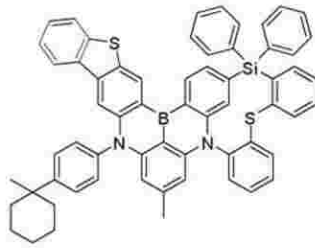
30

40

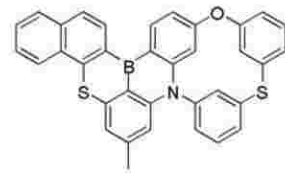
50



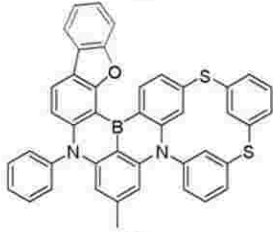
49



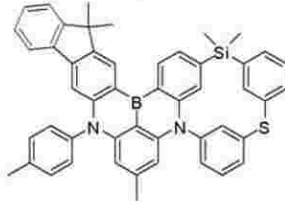
50



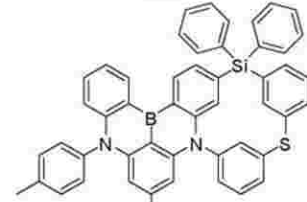
51



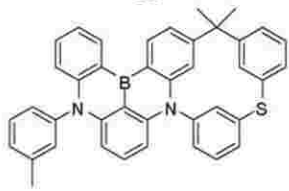
52



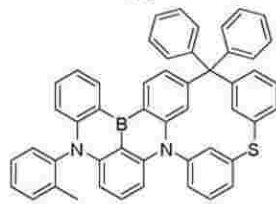
53



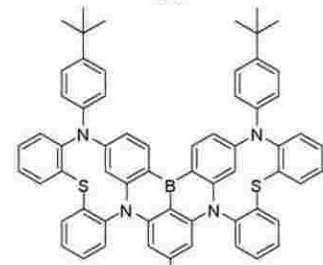
54



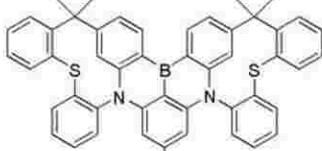
55



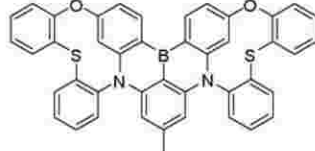
56



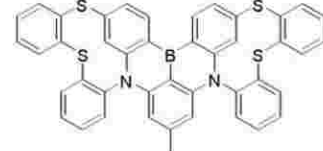
57



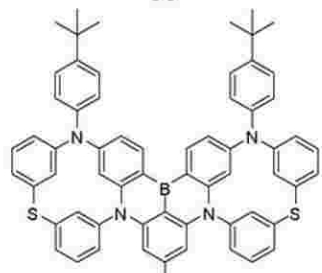
58



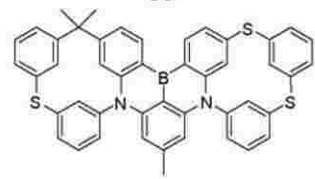
59



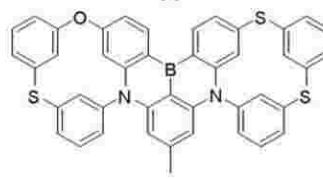
60



61



62



63

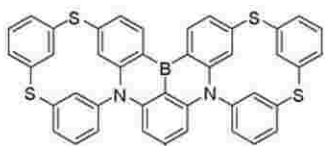
10

20

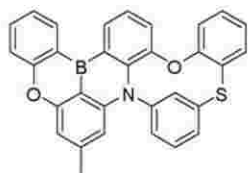
30

40

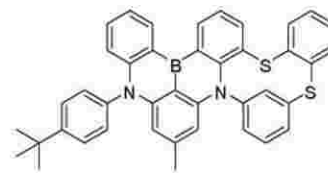
50



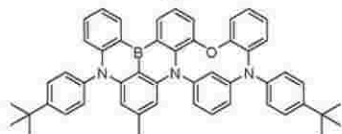
64



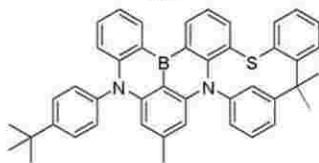
65



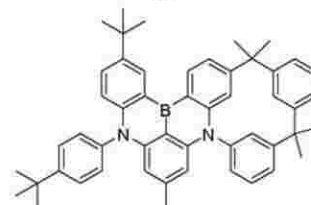
66



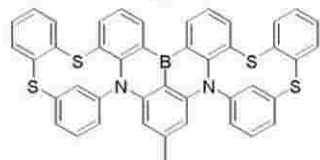
67



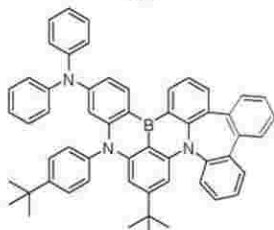
68



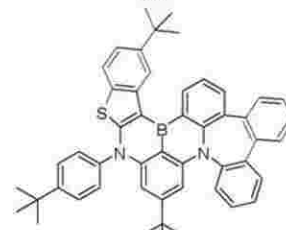
69



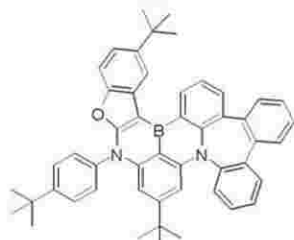
70



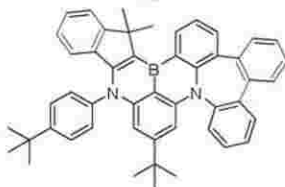
71



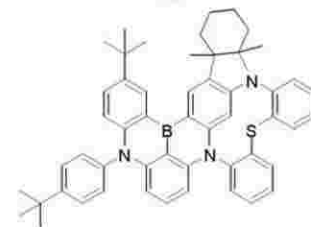
72



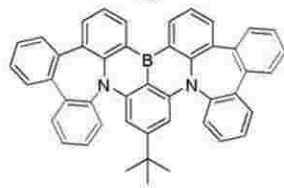
73



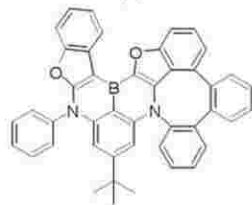
74



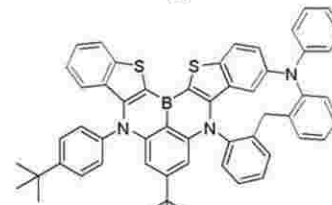
75



76



77



78

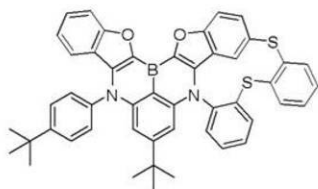
10

20

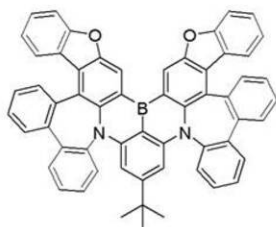
30

40

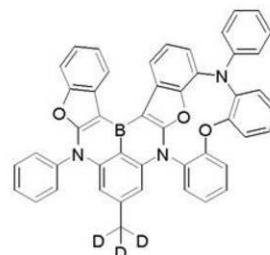
50



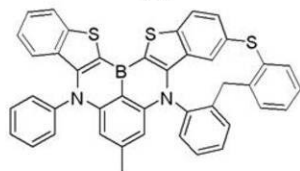
79



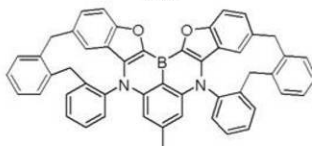
80



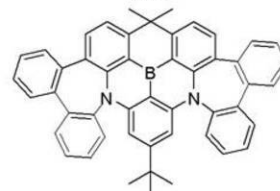
81



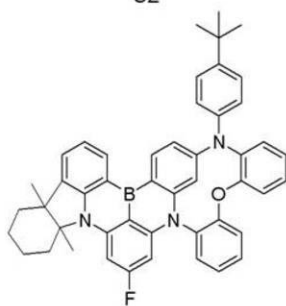
82



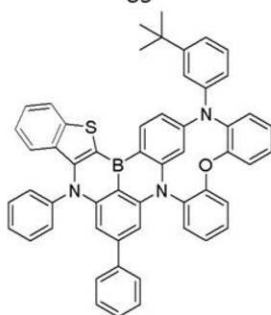
83



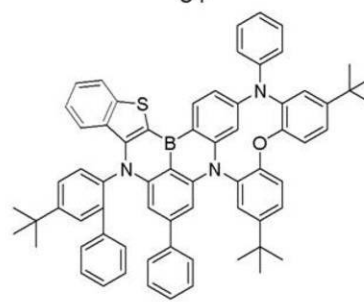
84



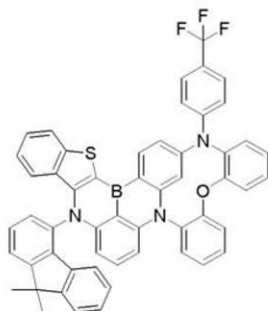
85



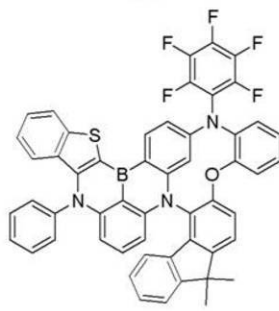
86



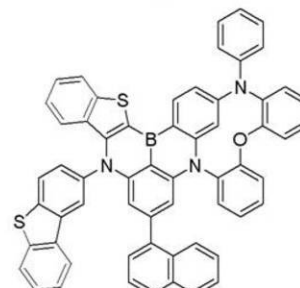
87



88



89



90

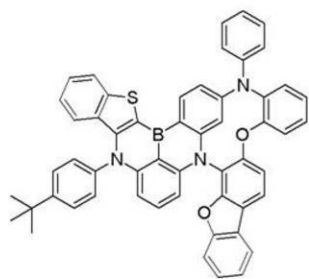
10

20

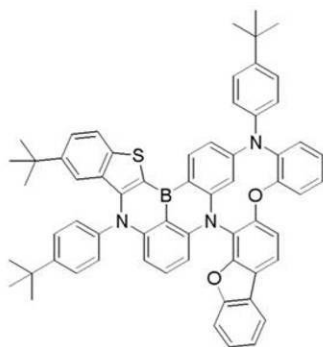
30

40

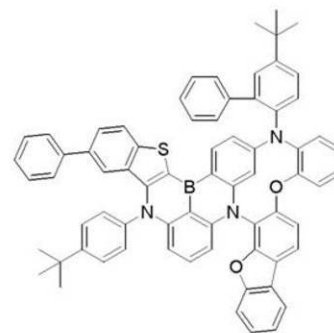
50



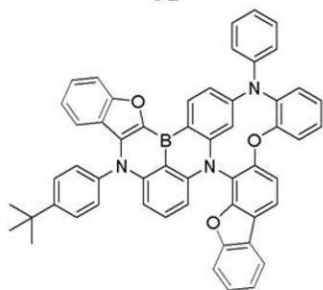
91



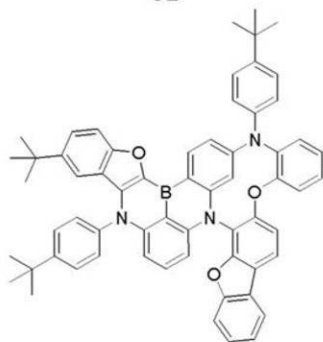
92



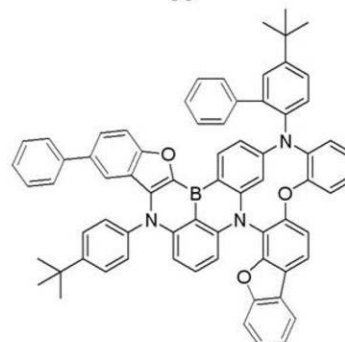
93



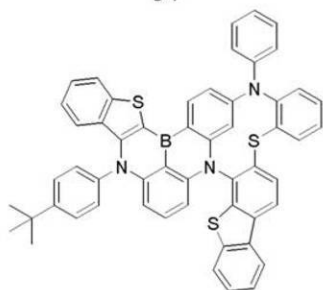
94



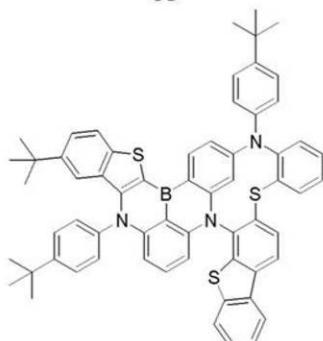
95



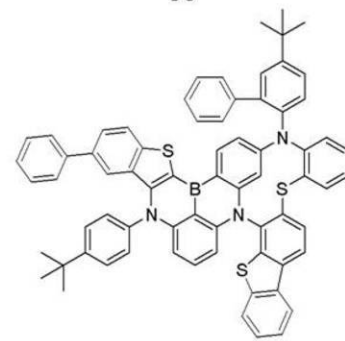
96



97



98



99

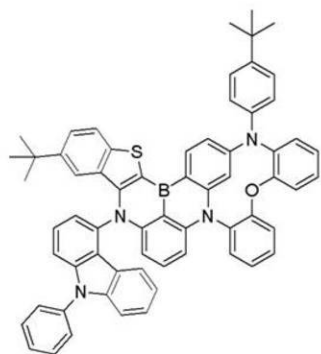
10

20

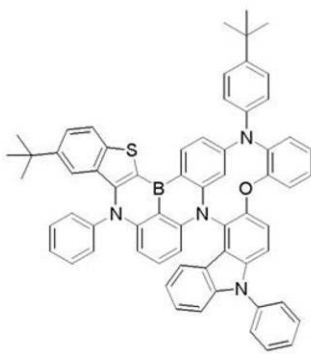
30

40

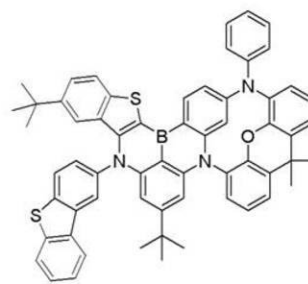
50



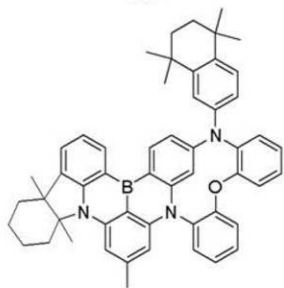
100



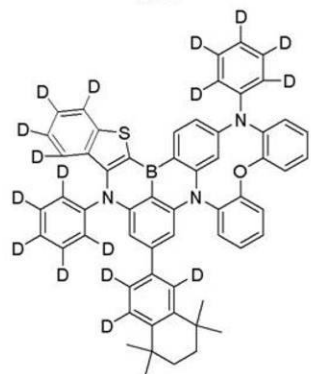
101



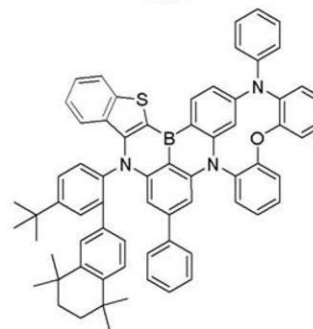
102



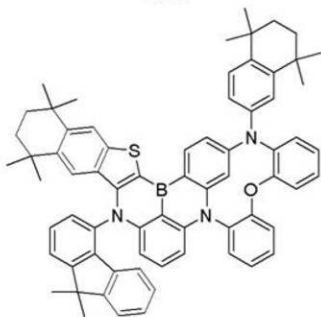
103



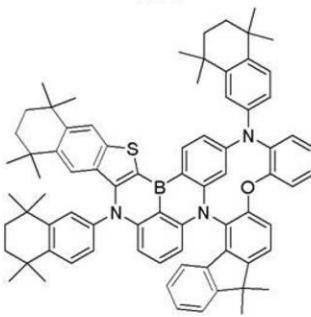
104



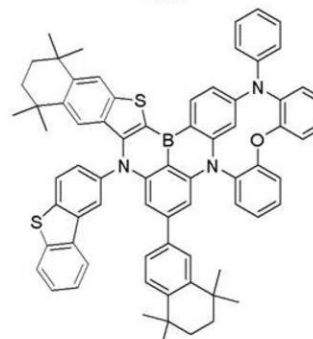
105



106



107



108

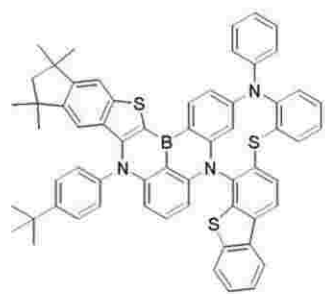
10

20

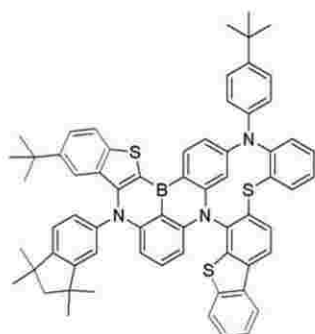
30

40

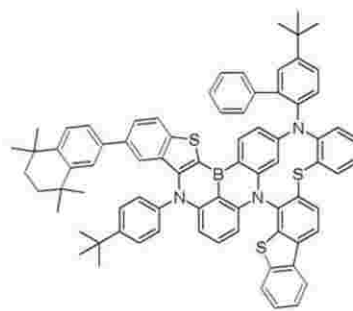
50



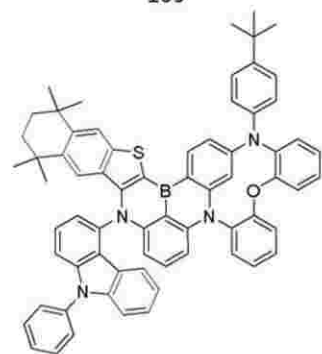
109



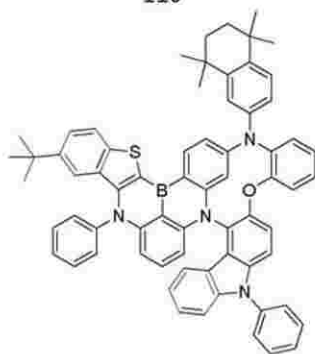
110



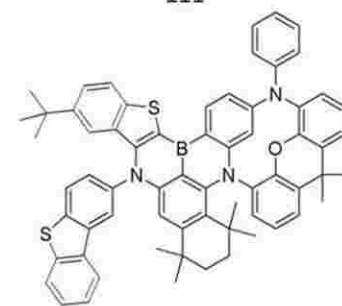
111



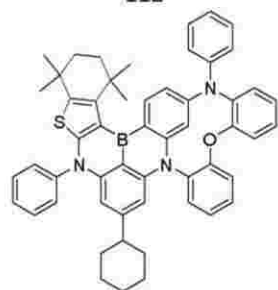
112



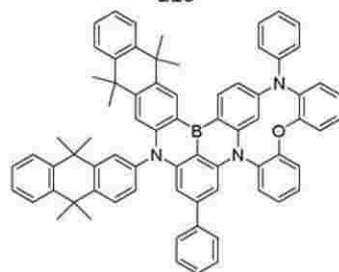
113



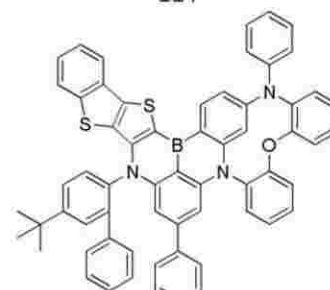
114



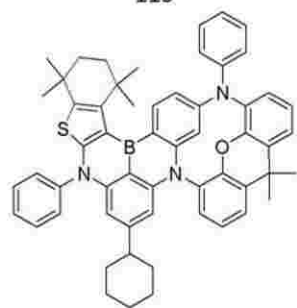
115



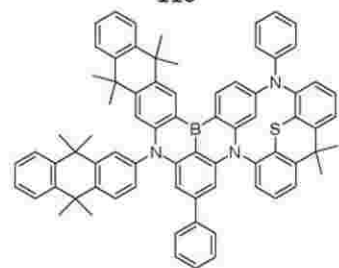
116



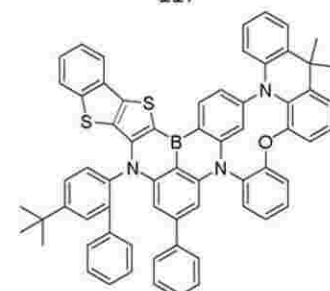
117



118



119



120

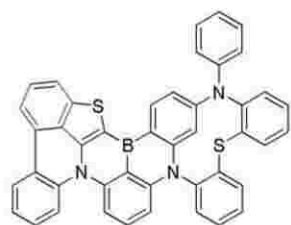
10

20

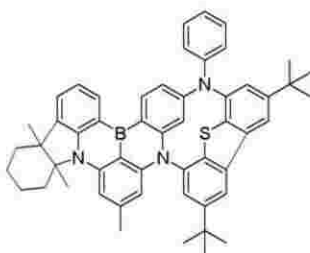
30

40

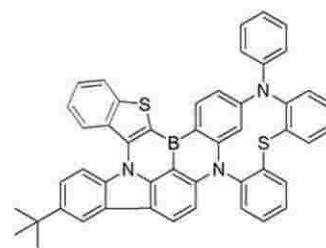
50



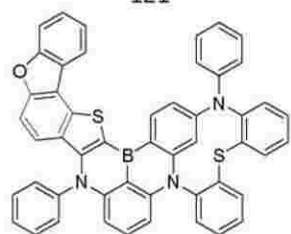
121



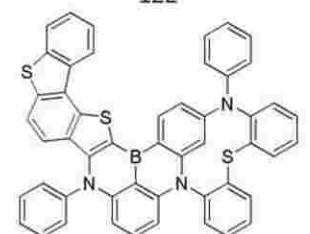
122



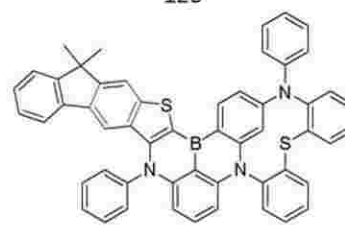
123



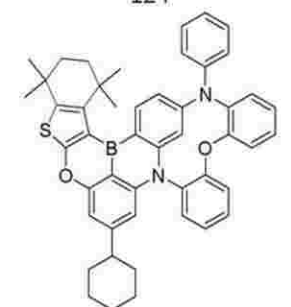
124



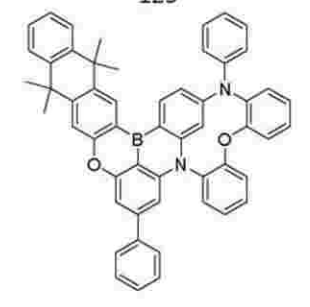
125



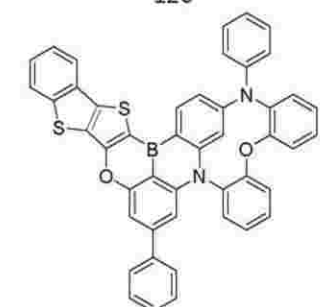
126



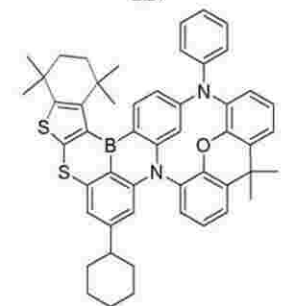
127



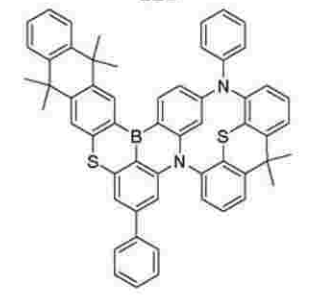
128



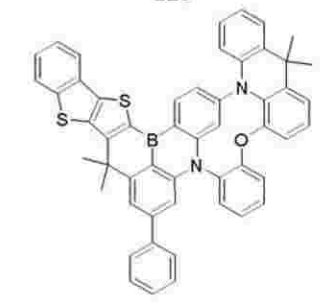
129



130



131



132

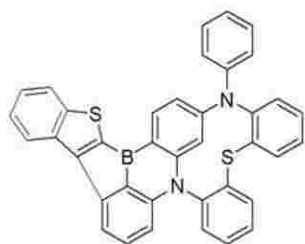
10

20

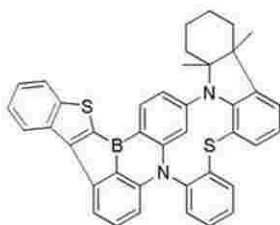
30

40

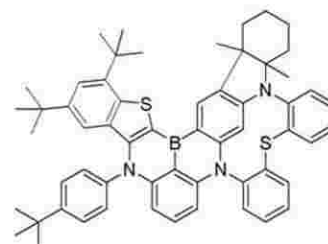
50



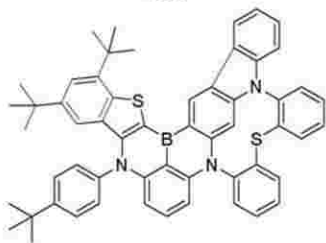
133



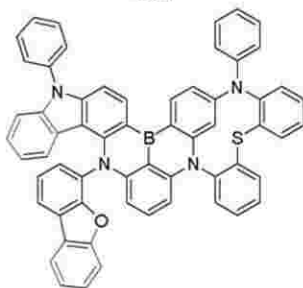
134



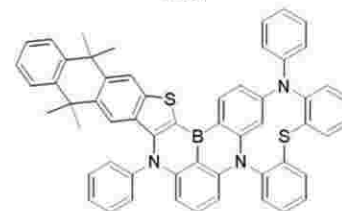
135



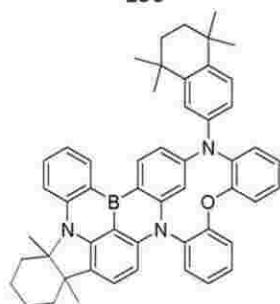
136



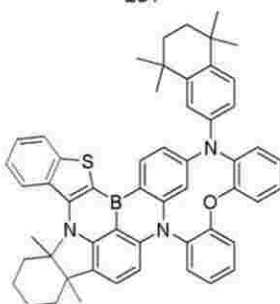
137



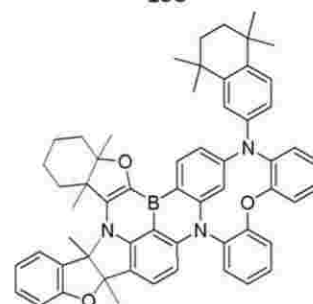
138



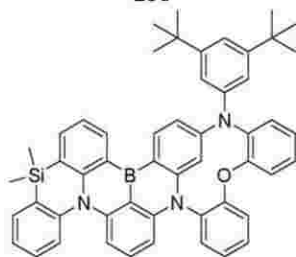
139



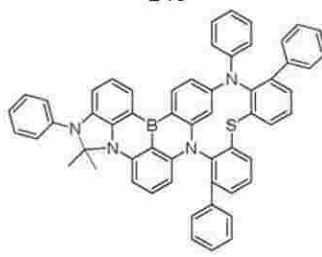
140



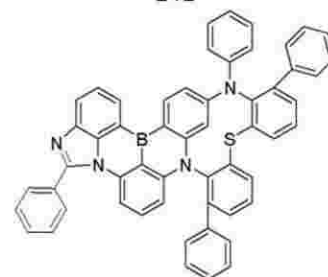
141



142



143



144

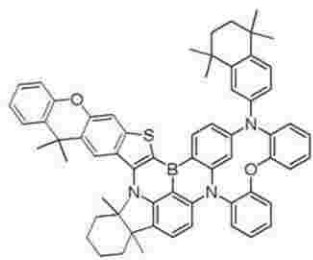
10

20

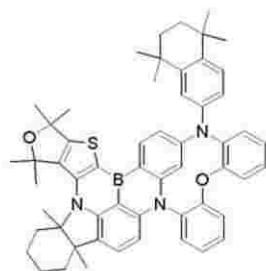
30

40

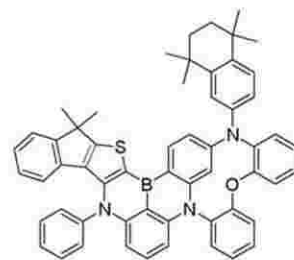
50



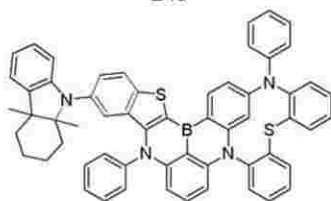
145



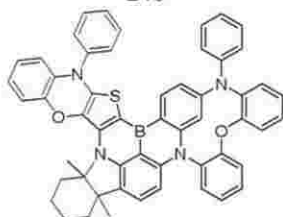
146



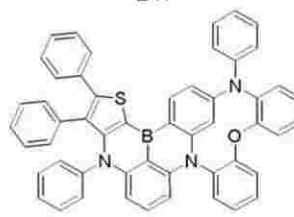
147



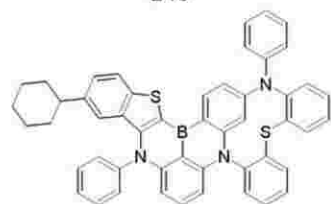
148



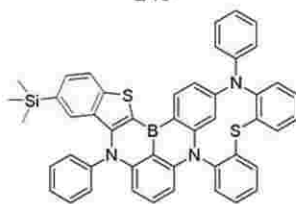
149



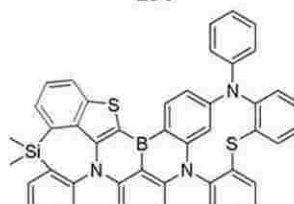
150



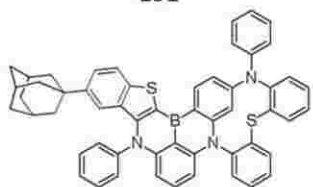
151



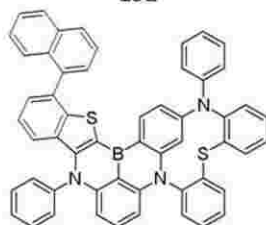
152



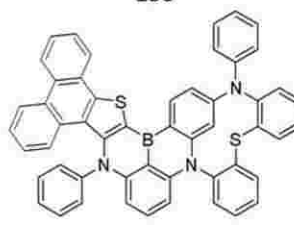
153



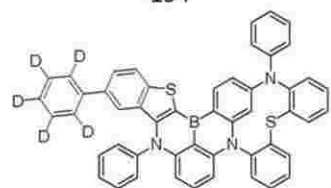
154



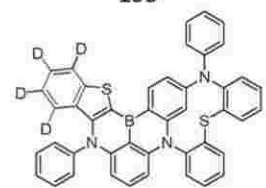
155



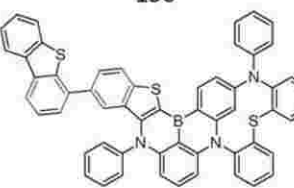
156



157



158



159

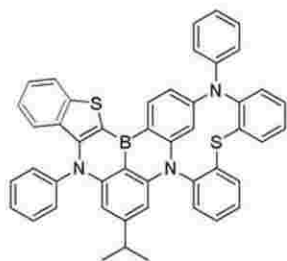
10

20

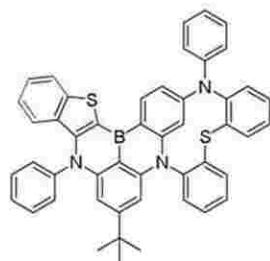
30

40

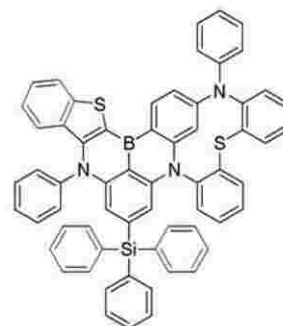
50



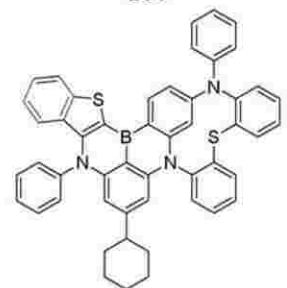
160



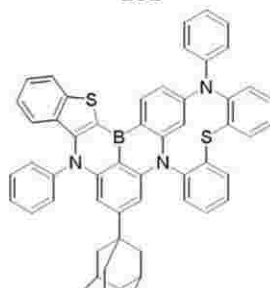
161



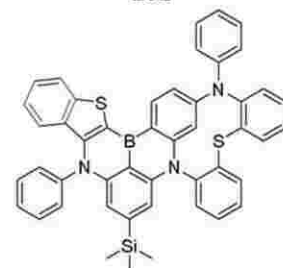
162



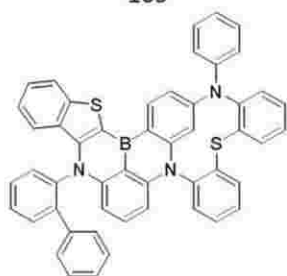
163



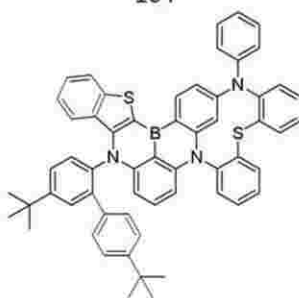
164



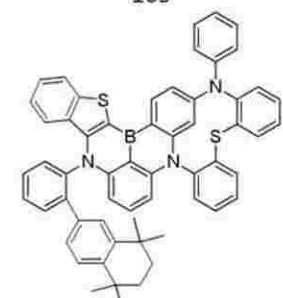
165



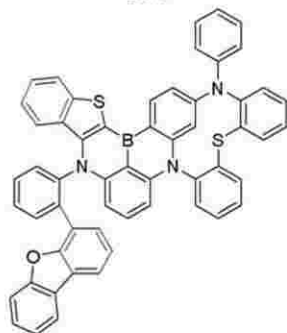
166



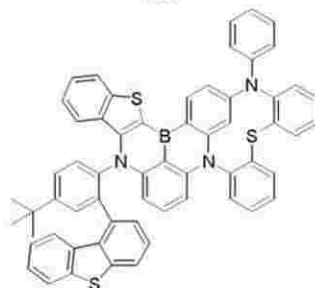
167



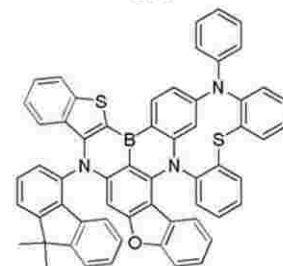
168



169



170



171

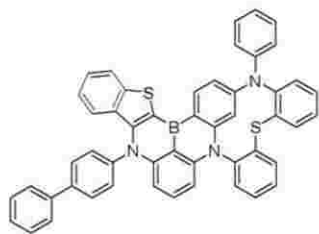
10

20

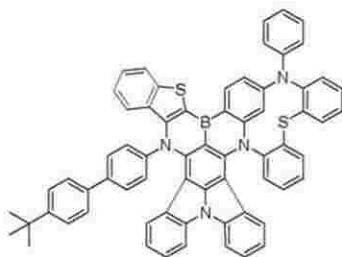
30

40

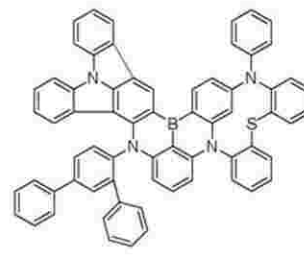
50



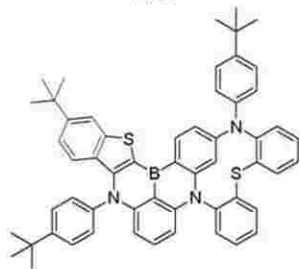
172



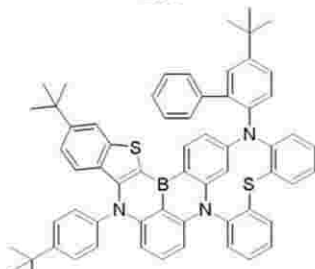
173



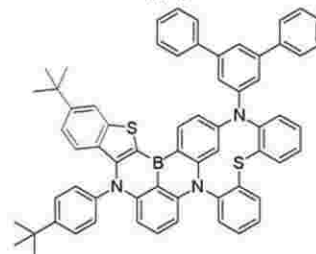
174



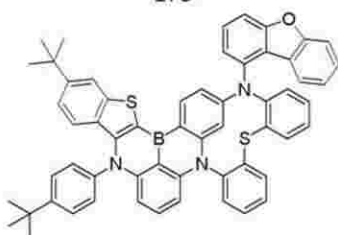
175



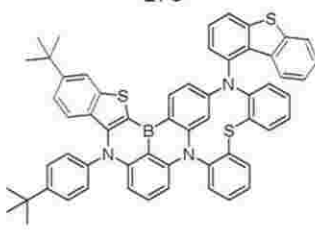
176



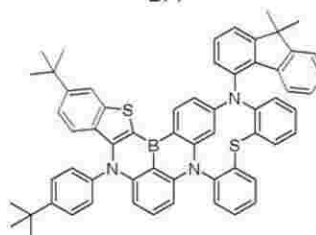
177



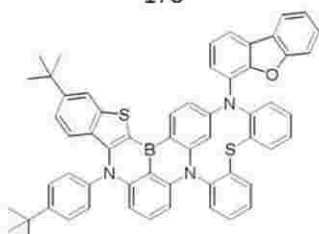
178



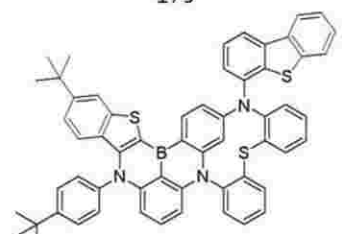
179



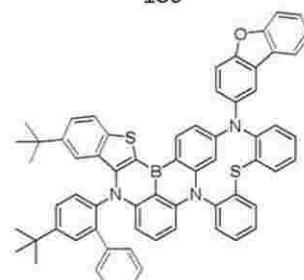
180



181



182



183

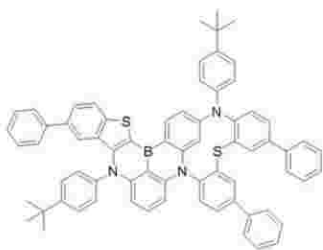
10

20

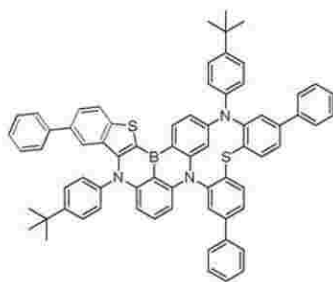
30

40

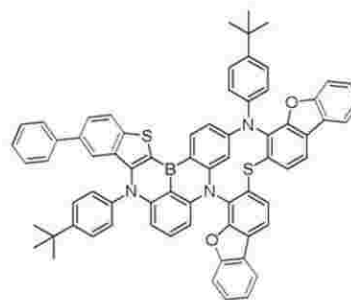
50



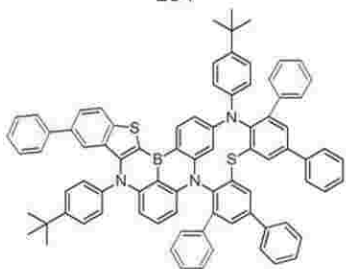
184



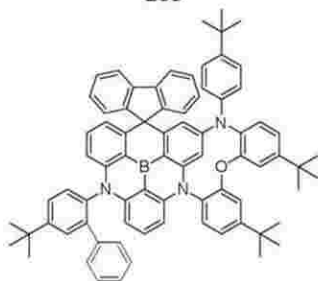
185



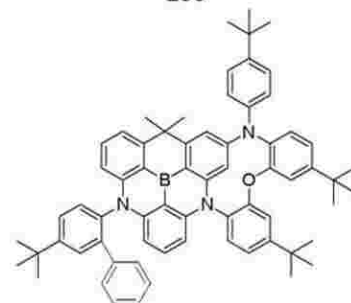
186



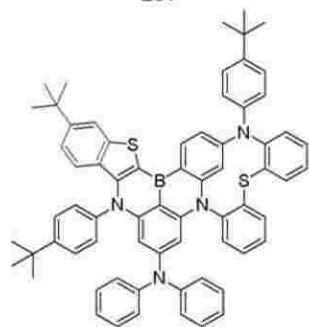
187



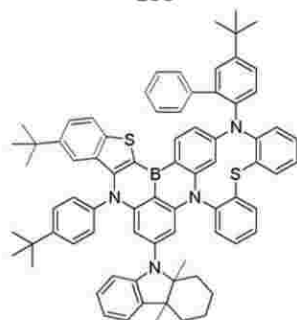
188



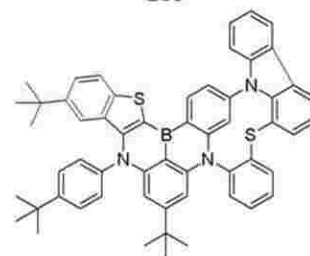
189



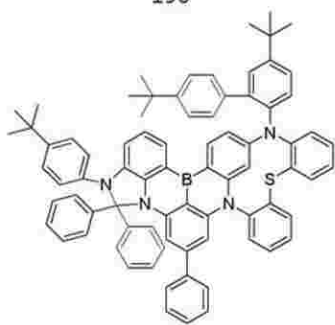
190



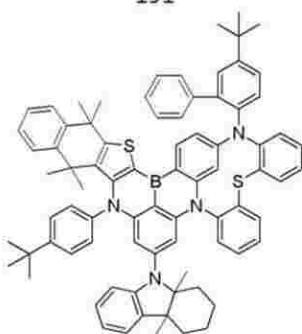
191



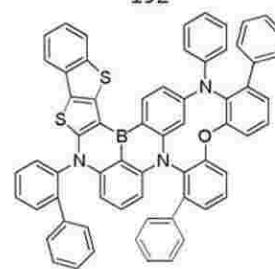
192



193



194



195

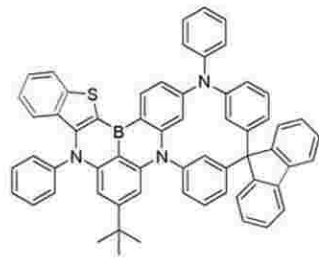
10

20

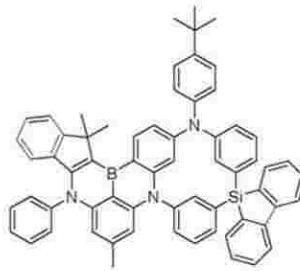
30

40

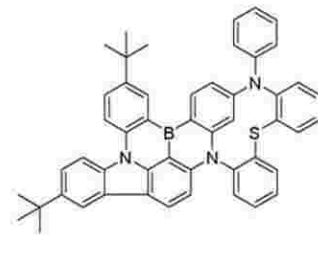
50



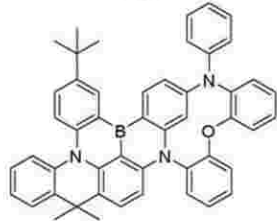
196



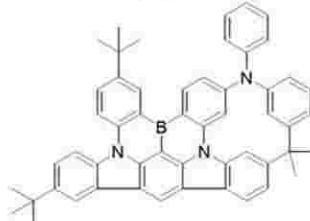
197



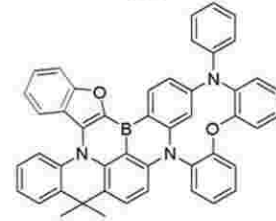
198



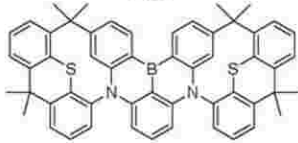
199



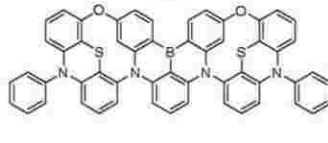
200



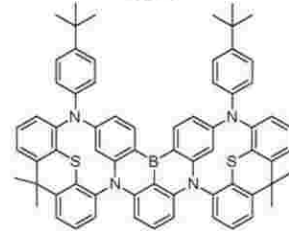
201



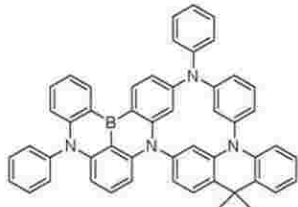
202



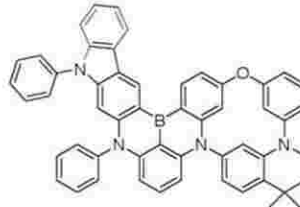
203



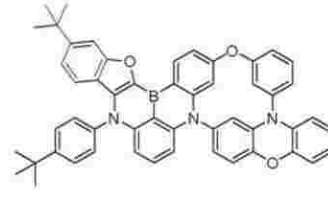
204



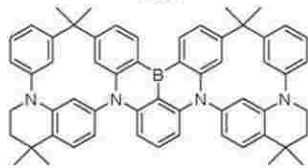
205



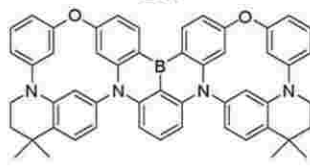
206



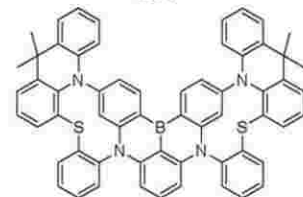
207



208



209



210

## 【請求項 2】

第 1 電極、前記第 1 電極に対向する第 2 電極、及び前記第 1 電極と前記第 2 電極との間に介在する有機層を含み、

前記有機層が、請求項 1 に記載の前記有機化合物を 1 種以上含む、有機発光素子。

## 【請求項 3】

前記有機層は、電子注入層、電子輸送層、正孔注入層、正孔輸送層、電子阻止層、正孔阻止層及び発光層のうちの 1 層以上を含み、

前記層のうちの 1 層以上が、前記有機化合物を含む、請求項 2 に記載の有機発光素子。

## 【請求項 4】

前記発光層は、ホストとドーパントからなり、前記有機化合物が前記発光層内のドーパントである、請求項 3 に記載の有機発光素子。

## 【請求項 5】

前記ホストは、下記化学式 C で表されるアントラセン誘導体である、請求項 4 に記載の有機発光素子。

10

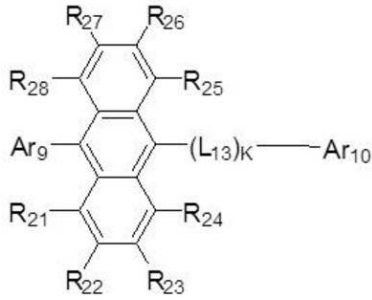
20

30

40

50

## 【化 C】



(前記化学式 C において、

$R_{21} \sim R_{28}$ は、それぞれ、同一又は異なっており、それぞれ独立して、水素、重水素、置換もしくは非置換の炭素数 1 ~ 30 のアルキル基、置換もしくは非置換の炭素数 1 ~ 30 のアルケニル基、置換もしくは非置換の炭素数 6 ~ 50 のアリール基、置換もしくは非置換の炭素数 3 ~ 30 のシクロアルキル基、置換もしくは非置換の炭素数 2 ~ 30 のヘテロシクロアルキル基、置換もしくは非置換の炭素数 2 ~ 50 のヘテロアリール基、置換もしくは非置換の炭素数 1 ~ 30 のアルコキシ基、置換もしくは非置換の炭素数 6 ~ 30 のアリールオキシ基、置換もしくは非置換の炭素数 1 ~ 30 のアルキルチオキシ基、置換もしくは非置換の炭素数 5 ~ 30 のアリールチオキシ基、置換もしくは非置換のアミン基、置換もしくは非置換のシリル基、ニトロ基、シアノ基及びハロゲン基から選択されるいずれか 1 つであり、

$Ar_9$ 及び $Ar_{10}$ は、それぞれ、互いに同一又は異なっており、互いに独立して、水素、重水素、置換もしくは非置換の炭素数 1 ~ 30 のアルキル基、置換もしくは非置換の炭素数 6 ~ 50 のアリール基、置換もしくは非置換の炭素数 2 ~ 30 のアルケニル基、置換もしくは非置換の炭素数 2 ~ 20 のアルキニル基、置換もしくは非置換の炭素数 3 ~ 30 のシクロアルキル基、置換もしくは非置換の炭素数 5 ~ 30 のシクロアルケニル基、置換もしくは非置換の炭素数 2 ~ 50 のヘテロアリール基、置換もしくは非置換の炭素数 2 ~ 30 のヘテロシクロアルキル基、置換もしくは非置換の炭素数 1 ~ 30 のアルコキシ基、置換もしくは非置換の炭素数 6 ~ 30 のアリールオキシ基、置換もしくは非置換の炭素数 1 ~ 30 のアルキルチオキシ基、置換もしくは非置換の炭素数 6 ~ 30 のアリールチオキシ基、ハロゲン基、置換もしくは非置換のアミン基、及び置換もしくは非置換のシリル基から選択されるいずれか 1 つであり、

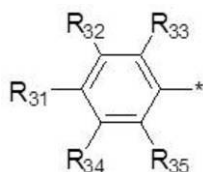
$L_{13}$ は、単結合であるか、または置換もしくは非置換の炭素数 6 ~ 20 のアリーレン基、及び置換もしくは非置換の炭素数 2 ~ 20 のヘテロアリーレン基から選択されるいずれか 1 つであり、

$k$ は、1 ~ 3 の整数であり、前記  $k$  が 2 以上である場合に、それぞれの  $L_{13}$  は互いに同一又は異なっている。)

## 【請求項 6】

前記化学式 C の  $Ar_9$ は、下記化学式 C - 1 で表される置換基である、請求項 5 に記載の有機発光素子。

## 【化 C - 1】



(前記化学式 C - 1 において、

$R_{31} \sim R_{35}$ は、それぞれ、同一又は異なっており、それぞれ独立して、水素、重水素、置換もしくは非置換の炭素数 1 ~ 30 のアルキル基、置換もしくは非置換の炭素数 1 ~ 3

10

20

30

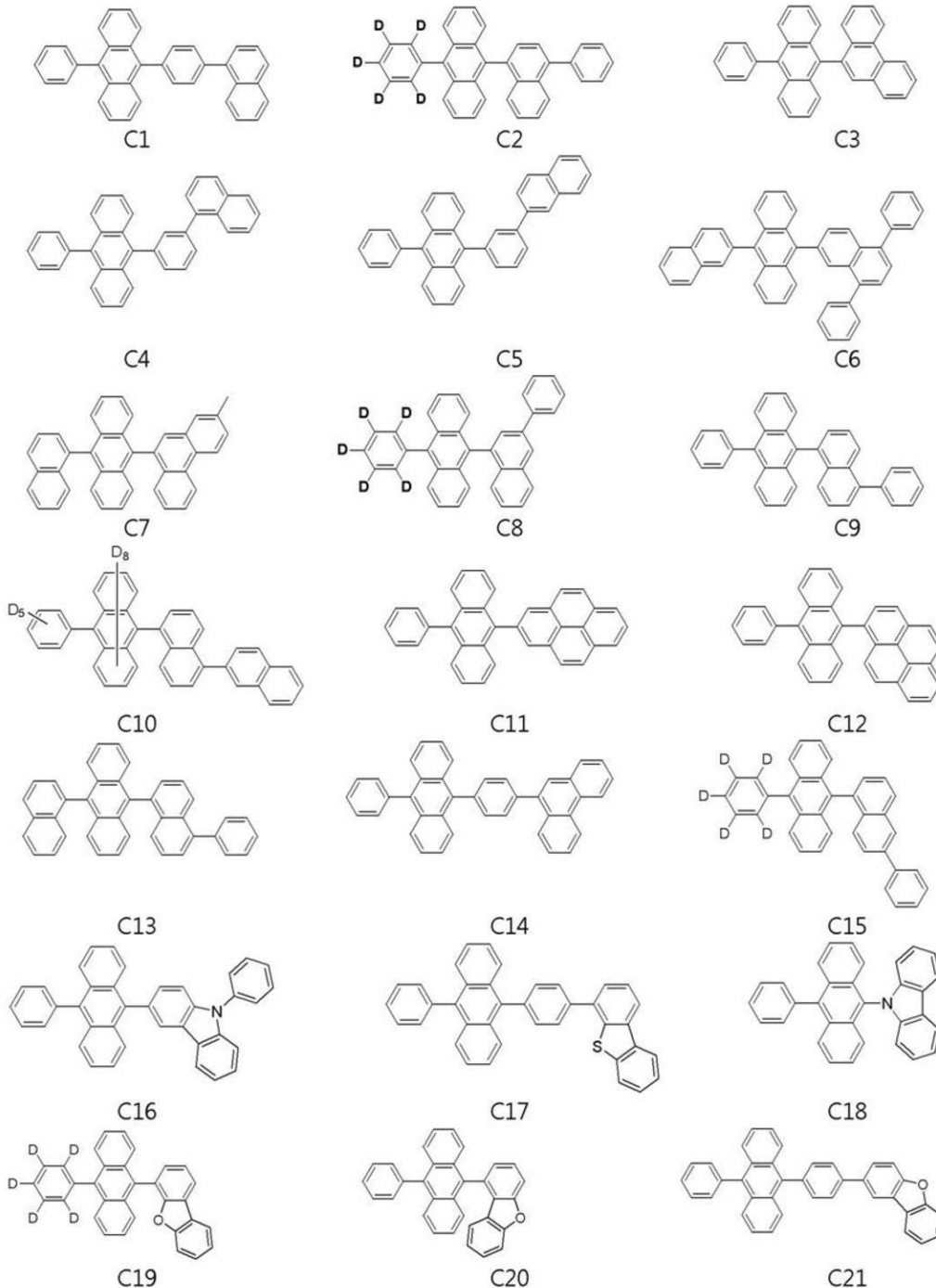
40

50

0 のアルケニル基、置換もしくは非置換の炭素数 6 ~ 5 0 のアリール基、置換もしくは非置換の炭素数 3 ~ 3 0 のシクロアルキル基、置換もしくは非置換の炭素数 2 ~ 3 0 のヘテロシクロアルキル基、置換もしくは非置換の炭素数 2 ~ 5 0 のヘテロアリール基、置換もしくは非置換の炭素数 1 ~ 3 0 のアルコキシ基、置換もしくは非置換の炭素数 6 ~ 3 0 のアリールオキシ基、置換もしくは非置換の炭素数 1 ~ 3 0 のアルキルチオキシ基、置換もしくは非置換の炭素数 5 ~ 3 0 のアリールチオキシ基、置換もしくは非置換のアミン基、置換もしくは非置換のシリル基、ニトロ基、シアノ基及びハロゲン基から選択されるいずれか 1 つであり、互いに隣接する置換基と結合して飽和あるいは不飽和環を形成することができる。)

【請求項 7】

前記化学式 C は、下記化学式 C 1 ~ 化学式 C 6 6 から選択されるいずれか 1 つである、請求項 5 に記載の有機発光素子。



10

20

30

40

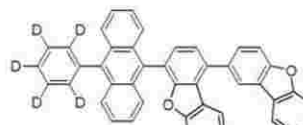
50



C22



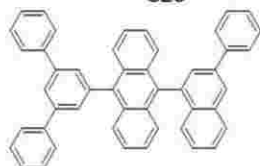
C23



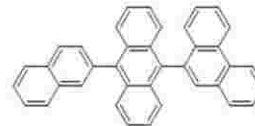
C24



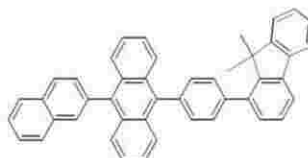
C25



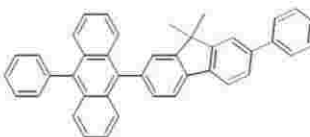
C26



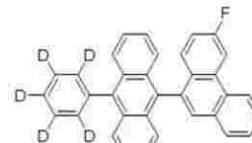
C27



C28



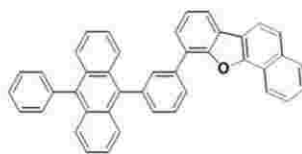
C29



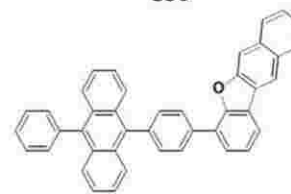
C30



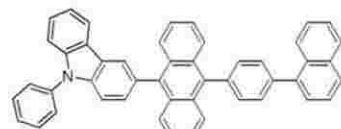
C31



C32



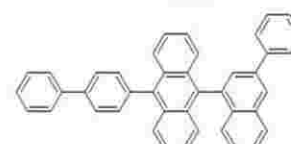
C33



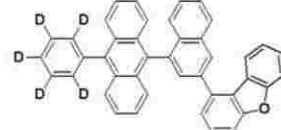
C34



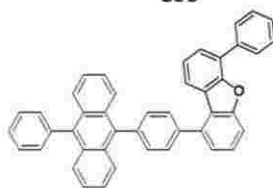
C35



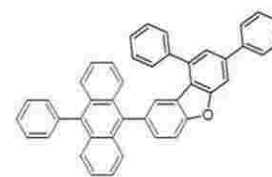
C36



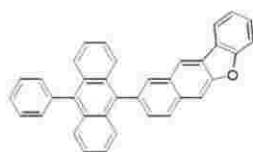
C37



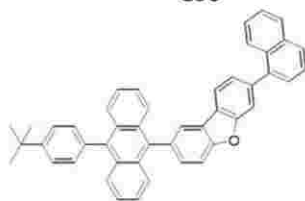
C38



C39



C40



C41



C42

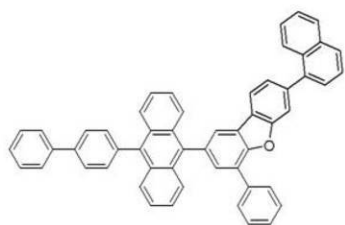
10

20

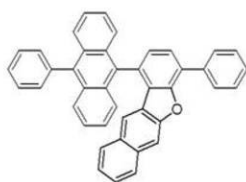
30

40

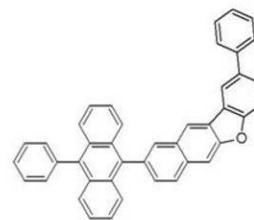
50



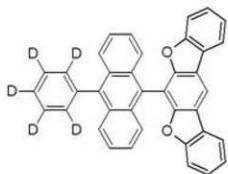
C43



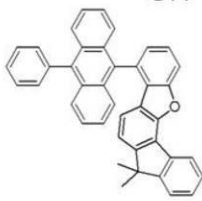
C44



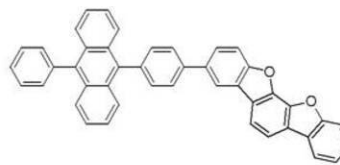
C45



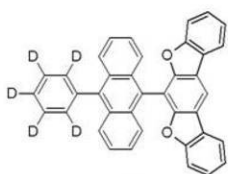
C46



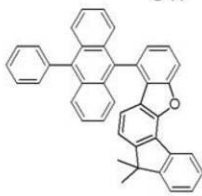
C47



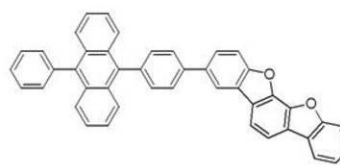
C48



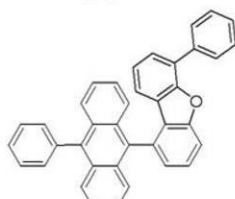
C49



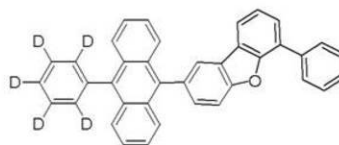
C50



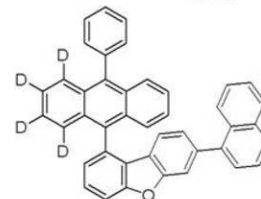
C51



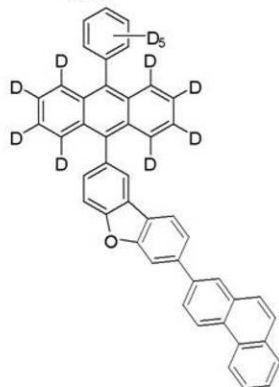
C52



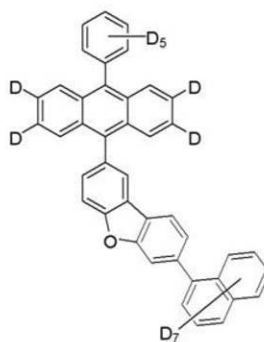
C53



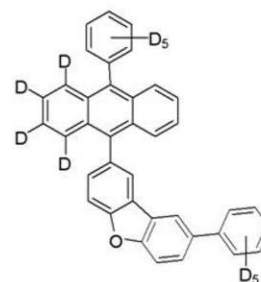
C54



C55



C56



C57

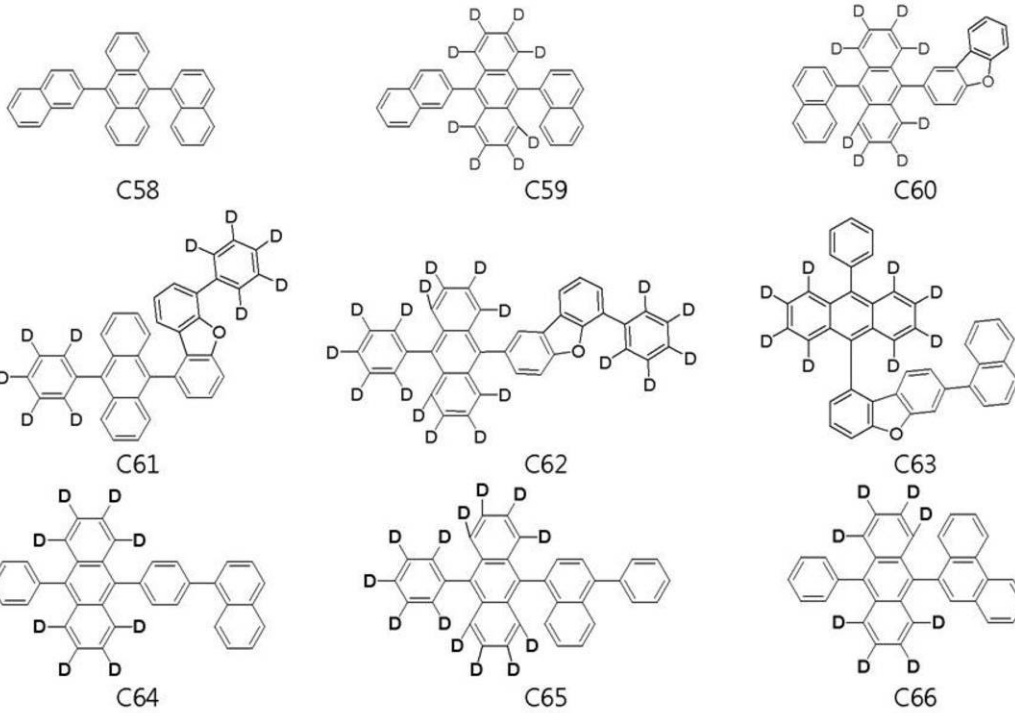
10

20

30

40

50



10

20

## 【請求項 8】

前記層から選択された前記 1 層以上の層は、蒸着工程または溶液工程によって形成される、請求項 3 に記載の有機発光素子。

## 【請求項 9】

前記有機発光素子は、平板ディスプレイ装置、フレキシブルディスプレイ装置、単色又は白色の平板照明用装置、及び単色又は白色のフレキシブル照明用装置から選択されるいずれか 1 つに使用される、請求項 2 に記載の有機発光素子。

## 【発明の詳細な説明】

## 【技術分野】

30

## 【0001】

本発明は、多環芳香族誘導体化合物、及びこれを用いて発光効率が著しく向上した高効率、長寿命の有機発光素子に関する。

## 【背景技術】

## 【0002】

有機発光素子は、電子注入電極（カソード電極）から注入された電子（electron）と、正孔注入電極（アノード電極）から注入された正孔（hole）とが発光層で結合してエキシトン（exciton）を形成し、そのエキシトンがエネルギーを放出しながら発光する自発光型素子であり、このような有機発光素子は、低い駆動電圧、高い輝度、広い視野角及び速い応答速度を有し、フルカラー平板発光ディスプレイに適用可能であるという利点から、次世代光源として脚光を浴びている。

40

## 【0003】

このような有機発光素子が前記のような特徴を発揮するためには、素子内の有機層の構造を最適化し、各有機層をなす物質である正孔注入物質、正孔輸送物質、発光物質、電子輸送物質、電子注入物質、電子阻止物質などが安定かつ効率的な材料によって支えられることが先行しなければならないが、依然として、安定かつ効率的な有機発光素子用有機層の構造及び各材料の開発が継続して必要であるのが現状である。

## 【0004】

このように、有機発光素子の発光特性を改善できる素子の構造、及びこれを支える新たな材料に関する開発が継続して要求されているのが現状である。

50

## 【発明の概要】

## 【発明が解決しようとする課題】

## 【0005】

したがって、本発明は、素子の有機層に採用されて高効率及び長寿命の有機発光素子を実現できる有機化合物、及びこれを含む有機発光素子を提供しようとする。

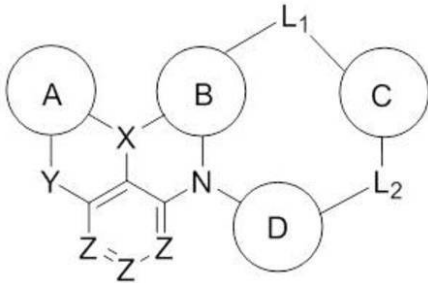
## 【課題を解決するための手段】

## 【0006】

本発明は、上記課題を解決するために、下記化学式 I または化学式 I I で表される有機化合物を提供する。

## 【0007】

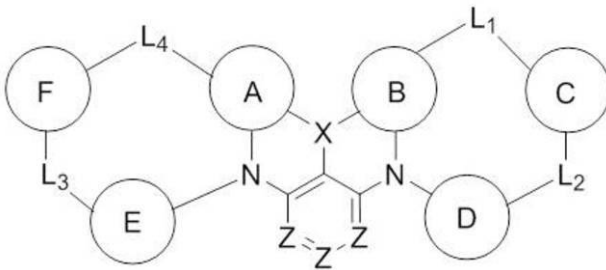
## 【化 I】



10

20

## 【化 I I】



## 【0008】

前記化学式 I と化学式 I I の構造及び実現される具体的な化合物と、A 環～F 環、X、Y、L<sub>1</sub>～L<sub>4</sub>、Z の定義については後述する。

30

## 【0009】

また、本発明は、第 1 電極、前記第 1 電極に対向する第 2 電極、及び前記第 1 電極と第 2 電極との間に介在する有機層を含み、前記有機層が前記化学式 I または化学式 I I で実現される具体的な多環芳香族化合物を 1 種以上含む、有機発光素子を提供する。

## 【発明の効果】

## 【0010】

本発明に係る多環芳香族誘導体化合物は、素子内の有機層に採用されて高効率及び長寿命の有機発光素子を実現することができる。

40

## 【発明を実施するための形態】

## 【0011】

以下、本発明をさらに詳細に説明する。

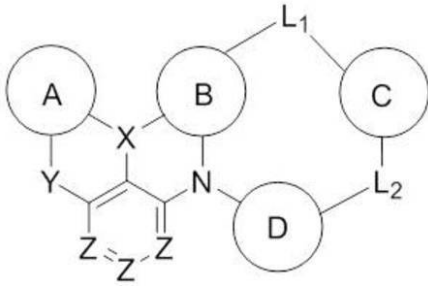
## 【0012】

本発明は、有機発光素子に含まれ、下記化学式 I または化学式 I I で表される多環芳香族誘導体化合物に関し、高効率及び長寿命の有機発光素子を実現できることを特徴とする。

## 【0013】

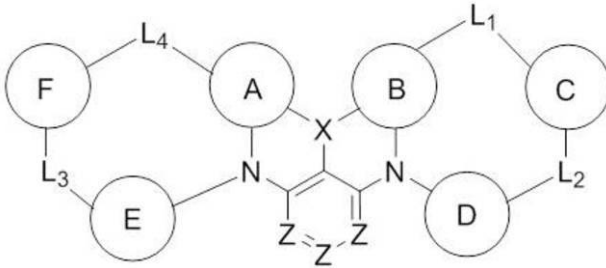
50

## 【化 I】



10

## 【化 I I】



## 【0014】

20

前記化学式 I 及び化学式 I I において、

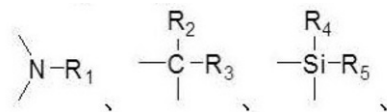
A 環 ~ F 環は、互いに同一又は異なっており、それぞれ独立して、置換もしくは非置換の炭素数 6 ~ 50 の単環もしくは多環の芳香族炭化水素環であるか；または置換もしくは非置換の炭素数 2 ~ 50 の単環もしくは多環の芳香族ヘテロ環である。

## 【0015】

X は、B、P、P = O、P = S 及び Al から選択されるいずれか 1 つである。

## 【0016】

L<sub>1</sub> ~ L<sub>4</sub> は、互いに同一又は異なっており、それぞれ独立して、単結合であるか、または

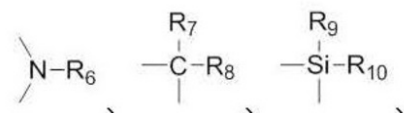


30

- O -、- S - 及び - Se - から選択されてもよい。

## 【0017】

Y は、互いに同一又は異なっており、それぞれ独立して、単結合であるか、または



40

- O -、- S - 及び - Se - から選択されてもよい。

## 【0018】

Z は、それぞれ独立して、CR または N である。

## 【0019】

前記 R、R<sub>1</sub> ~ R<sub>10</sub> は、互いに同一又は異なっており、それぞれ独立して、水素、重水素、置換もしくは非置換の炭素数 1 ~ 30 のアルキル基、置換もしくは非置換の炭素数 1 ~ 30 のアルケニル基、置換もしくは非置換の炭素数 6 ~ 50 のアリール基、置換もしくは非置換の炭素数 3 ~ 30 のシクロアルキル基、置換もしくは非置換の炭素数 2 ~ 30 のヘテロシクロアルキル基、置換もしくは非置換の炭素数 2 ~ 50 のヘテロアリール基、置

50

換もしくは非置換の炭素数 1 ~ 30 のアルコキシ基、置換もしくは非置換の炭素数 6 ~ 30 のアリールオキシ基、置換もしくは非置換の炭素数 1 ~ 30 のアルキルチオキシ基、置換もしくは非置換の炭素数 5 ~ 30 のアリールチオキシ基、置換もしくは非置換のアミン基、置換もしくは非置換のシリル基、ニトロ基、シアノ基及びハロゲン基から選択されるいずれか 1 つである。

【0020】

また、前記 R<sub>1</sub> は、すなわち、L<sub>1</sub> ~ L<sub>4</sub> がそれぞれ



10

である場合に、R<sub>1</sub> は、隣接する前記 C 環、D 環、E 環又は F 環と結合して脂環族または芳香族の単環もしくは多環をさらに形成することができる。

【0021】

また、前記 R<sub>6</sub> ~ R<sub>10</sub> は、それぞれ、前記 A 環又は R と結合して脂環族または芳香族の単環もしくは多環をさらに形成することができる。

【0022】

また、前記 R は、それぞれ、前記 D 環又は E 環と結合して脂環族または芳香族の単環もしくは多環をさらに形成することができる。

【0023】

また、前記 R<sub>2</sub> と R<sub>3</sub>、R<sub>4</sub> と R<sub>5</sub>、R<sub>7</sub> と R<sub>8</sub>、及び R<sub>9</sub> と R<sub>10</sub> は、それぞれ、互いに連結されて脂環族または芳香族の単環もしくは多環をさらに形成することができる。

20

【0024】

また、前記 A 環 ~ F 環には、置換もしくは非置換の単環もしくは多環の非芳香族環が接合されて縮合環をさらに形成することができ、前記 A 環と B 環は互いに連結され得る。

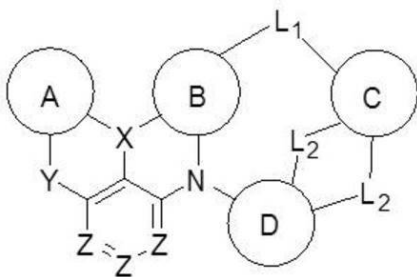
【0025】

一方、本発明の一実施例によれば、前記化学式 I において、前記 C 環と D 環は、2 つの L<sub>2</sub> で連結されて C 環及び D 環と共に環を形成して、下記化学式 I - 1 のように表され得、下記 2 つの L<sub>2</sub> は、互いに同一又は異なっている。

【0026】

【化 I - 1】

30



【0027】

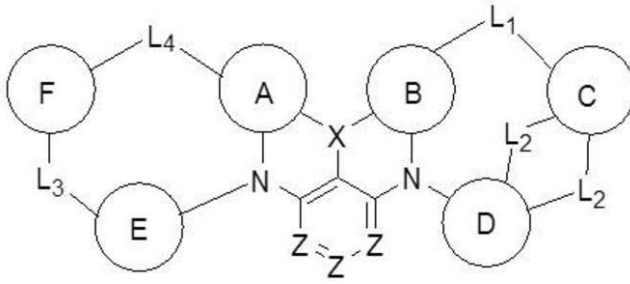
一方、本発明の一実施例によれば、前記化学式 I I において、前記 C 環と D 環は、2 つの L<sub>2</sub> で連結されて C 環及び D 環と共に環を形成して、下記化学式 I I - 1 のように表され得、下記 2 つの L<sub>2</sub> は、互いに同一又は異なっている。

40

【0028】

50

## 【化 I I - 1】



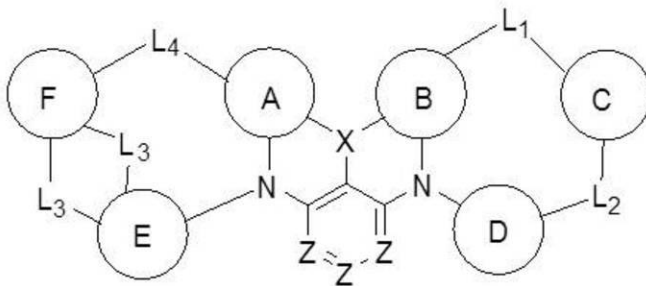
10

## 【0029】

また、前記化学式 I I において、前記 E 環と F 環は、2つの L<sub>3</sub>で連結されて E 環及び F 環と共に環を形成して、下記化学式 I I - 2 のように表され得、下記 2つの L<sub>3</sub>は、互いに同一又は異なっている。

## 【0030】

## 【化 I I - 2】



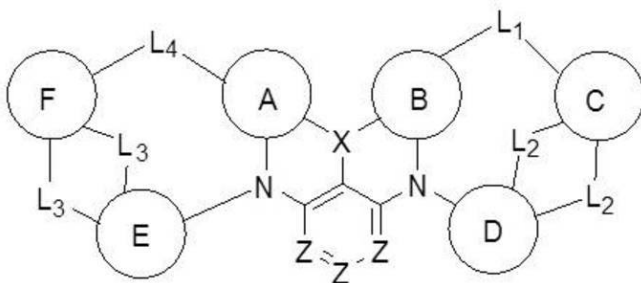
20

## 【0031】

また、前記化学式 I I において、前記 C 環と D 環は、2つの L<sub>2</sub>で連結されて C 環及び D 環と共に環を形成し、前記 E 環と F 環は、2つの L<sub>3</sub>で連結されて E 環及び F 環と共に環を形成する場合に、下記化学式 I I - 3 のように表され得る。

## 【0032】

## 【化 I I - 3】



40

## 【0033】

本発明に係る化学式 I と化学式 I I の具体的な構造及び追加の環を形成する構造は、後述する具体的な化合物からこれを確認することができる。

## 【0034】

一方、本発明において「置換もしくは非置換の」という用語は、A 環～F 環、R、R<sub>1</sub>～R<sub>10</sub>などが、それぞれ、重水素、シアノ基、ハロゲン基、ヒドロキシ基、ニトロ基、アルキル基、ハロゲン化されたアルキル基、シクロアルキル基、アルケニル基、アルキニル基、ヘテロアルキル基、アリール基、アリールアルキル基、アルキルアリール基、ヘテロアリール基、ヘテロアリールアルキル基、アルコキシ基、アミン基、シリル基、アリールオキシ基及び脂肪族芳香族混合環基から選択された 1 又は 2 以上の置換基で置換されるか、

50

前記置換基のうちの2以上の置換基が連結された置換基で置換されるか、またはいかなる置換基も有しないことを意味する。

【0035】

また、前記「置換もしくは非置換の炭素数1~30のアルキル基」、「置換もしくは非置換の炭素数6~50のアリール基」などでの前記アルキル基またはアリール基の炭素数の範囲は、前記置換基が置換された部分を考慮せずに非置換のものと見なしたときのアルキル部分またはアリール部分を構成する全炭素数を意味する。例えば、パラ位にブチル基が置換されたフェニル基は、炭素数4のブチル基で置換された炭素数6のアリール基に該当することを意味する。

【0036】

また、本発明において、隣接する基と互いに結合して環を形成するという意味は、隣接する基と互いに結合して置換もしくは非置換の脂環族または芳香族環を形成できることを意味し、「隣接する置換基」は、当該置換基が置換された原子と直接連結された原子に置換された置換基、当該置換基と立体構造的に最も近く位置した置換基、または当該置換基が置換された原子に置換された他の置換基を意味することができる。例えば、ベンゼン環においてオルト(ortho)位に置換された2個の置換基、及び脂肪族環において同一炭素に置換された2個の置換基は、互いに「隣接する置換基」として解釈され得る。

【0037】

本発明において、アルキル基は、直鎖または分岐鎖であってもよく、具体例としては、メチル基、エチル基、プロピル基、*n*-プロピル基、イソプロピル基、ブチル基、*n*-ブチル基、イソブチル基、*tert*-ブチル基、*sec*-ブチル基、1-メチル-ブチル基、1-エチル-ブチル基、ペンチル基、*n*-ペンチル基、イソペンチル基、ネオペンチル基、*tert*-ペンチル基、ヘキシル基、*n*-ヘキシル基、1-メチルペンチル基、2-メチルペンチル基、4-メチル-2-ペンチル基、3,3-ジメチルブチル基、2-エチルブチル基、ヘプチル基、*n*-ヘプチル基、1-メチルヘキシル基、シクロペンチルメチル基、シクロヘキシルメチル基、オクチル基、*n*-オクチル基、*tert*-オクチル基、1-メチルヘプチル基、2-エチルヘキシル基、2-プロピルペンチル基、*n*-ノニル基、2,2-ジメチルヘプチル基、1-エチル-プロピル基、1,1-ジメチル-プロピル基、イソヘキシル基、2-メチルペンチル基、4-メチルヘキシル基、5-メチルヘキシル基などがあるが、これらに限定されない。

【0038】

本発明において、アルケニル基は、直鎖または分岐鎖を含み、他の置換基によってさらに置換されてもよく、具体的には、ビニル基、1-プロペニル基、イソプロペニル基、1-ブテニル基、2-ブテニル基、3-ブテニル基、1-ペンテニル基、2-ペンテニル基、3-ペンテニル基、3-メチル-1-ブテニル基、1,3-ブタジエニル基、アリル基、1-フェニルビニル-1-イル基、2-フェニルビニル-1-イル基、2,2-ジフェニルビニル-1-イル基、2-フェニル-2-(ナフチル-1-イル)ビニル-1-イル基、2,2-ビス(ジフェニル-1-イル)ビニル-1-イル基、スチルベニル基、スチレニル基などがあるが、これらに限定されない。

【0039】

本発明において、アルキニル基もまた、直鎖または分岐鎖を含み、他の置換基によってさらに置換されてもよく、エチニル(ethynyl)、2-プロピニル(2-propynyl)などが挙げられるが、これに限定されるものではない。

【0040】

本発明において、シクロアルキル基は、単環または多環を含み、他の置換基によってさらに置換されてもよく、多環とは、シクロアルキル基が他の環基と直接連結または縮合された基を意味するものであって、他の環基とは、シクロアルキル基であってもよいが、他の種類の環基、例えば、ヘテロシクロアルキル基、アリール基、ヘテロアリール基などであってもよい。具体的には、シクロプロピル基、シクロブチル基、シクロペンチル基、アダマンチル基、3-メチルシクロペンチル基、2,3-ジメチルシクロペンチル基、シク

10

20

30

40

50

ロヘキシル基、3 - メチルシクロヘキシル基、4 - メチルシクロヘキシル基、2 , 3 - ジメチルシクロヘキシル基、3 , 4 , 5 - トリメチルシクロヘキシル基、4 - t e r t - ブチルシクロヘキシル基、シクロヘプチル基、シクロオクチル基などがあるが、これに限定されない。

【 0 0 4 1 】

本発明において、ヘテロシクロアルキル基は、O、S、S e、NまたはS iなどの異種原子を含むものであって、これもまた単環または多環を含み、他の置換基によってさらに置換されてもよく、多環とは、ヘテロシクロアルキル基が他の環基と直接連結または縮合された基を意味するものであって、他の環基とは、ヘテロシクロアルキル基であってもよいが、他の種類の環基、例えば、シクロアルキル基、アリール基、ヘテロアリール基など

10

【 0 0 4 2 】

本発明において、芳香族炭化水素環またはアリール基は、単環式または多環式であってもよく、単環式アリール基の例としては、フェニル基、ピフェニル基、テルフェニル基、スチルベン基などがあり、多環式アリール基の例としては、ナフチル基、アントラセニル基、フェナントレニル基、ピレニル基、ペリレニル基、テトラセニル基、クリセニル基、フルオレニル基、アセナフタセニル基、トリフェニレン基、フルオランテン基などがあるが、本発明の範囲がこれらの例のみに限定されるものではない。

【 0 0 4 3 】

本発明において、芳香族ヘテロ環またはヘテロアリール基は、ヘテロ原子のうち1つ以上を含む芳香族環であって、その例としては、チオフェン基、フラン基、ピロール基、イミダゾール基、チアゾール基、オキサゾール基、オキサジアゾール基、トリアゾール基、ピリジル基、ピピリジル基、ピリミジル基、トリアジン基、トリアゾール基、アクリジル基、ピリダジン基、ピラジニル基、キノリニル基、キナゾリン基、キノキサリニル基、フタラジニル基、ピリドピリミジニル基、ピリドピラジニル基、ピラジノピラジニル基、イソキノリン基、インドール基、カルバゾール基、ベンゾオキサゾール基、ベンゾイミダゾール基、ベンゾチアゾール基、ベンゾカルバゾール基、ベンゾチオフェン基、ジベンゾチオフェン基、ベンゾフラニル基、ジベンゾフラニル基、フェナントロリン基、チアゾリル基、イソオキサゾリル基、オキサジアゾリル基、チアジアゾリル基、ベンゾチアゾリル基、フェノチアジニル基などがあるが、これらのみに限定されるものではない。

20

30

【 0 0 4 4 】

本発明において、脂肪族炭化水素環とは、芳香族ではない環であって、炭素と水素原子のみからなる環を意味し、その例として単環または多環を含み、他の置換基によってさらに置換されてもよく、多環とは、他の環基と直接連結または縮合された基を意味するものであって、他の環基とは、脂肪族炭化水素環であってもよいが、他の種類の環基、例えば、脂肪族ヘテロ環、アリール基、ヘテロアリール基などであってもよい。具体的には、シクロプロピル基、シクロブチル基、シクロペンチル基、アダマンチル基、3 - メチルシクロペンチル基、2 , 3 - ジメチルシクロペンチル基、シクロヘキシル基、3 - メチルシクロヘキシル基、4 - メチルシクロヘキシル基、2 , 3 - ジメチルシクロヘキシル基、3 , 4 , 5 - トリメチルシクロヘキシル基、4 - t e r t - ブチルシクロヘキシル基、シクロヘプチル基、シクロオクチル基などのシクロアルキル、そして、シクロヘキサン、シクロペンタンなどのシクロアルカン、そして、シクロヘキセン、シクロブテンなどのシクロアルケンを含み、これに限定されるものではない。

40

【 0 0 4 5 】

本発明において、脂肪族ヘテロ環とは、ヘテロ原子のうち1つ以上を含む脂肪族環を意味し、O、S、S e、NまたはS iなどの異種原子を含むものであって、これもまた単環または多環を含み、他の置換基によってさらに置換されてもよく、多環とは、ヘテロシクロアルキル、ヘテロシクロアルカン、ヘテロシクロアルケン基などが他の環基と直接連結または縮合された基を意味するものであって、他の環基とは、脂肪族ヘテロ環であってもよいが、他の種類の環基、例えば、脂肪族炭化水素環、アリール基、ヘテロアリール基な

50

どであってもよい。

【0046】

本発明において、脂肪族芳香族混合環は、2以上の環が互いに連結、縮合されており、脂肪族環と芳香族環が縮合されて全体的に非芳香族性(non-aromaticity)を有する環を意味し、また、多環の脂肪族芳香族混合環において、C以外に、N、O、P及びSから選択されたヘテロ原子を含むことができる。

【0047】

本発明において、アルコキシ基は、具体的には、メトキシ、エトキシ、プロポキシ、イソブチルオキシ、sec-ブチルオキシ、ペンチルオキシ、iso-アミルオキシ、ヘキシルオキシなどであってもよいが、これらのみに限定されるものではない。

10

【0048】

本発明において、シリル基は、-SiH<sub>3</sub>、アルキルシリル基、アリールシリル基、アルキルアリールシリル基、アリールヘテロアリールシリル基などであってもよく、シリル基の具体的な例としては、トリメチルシリル、トリエチルシリル、トリフェニルシリル、トリメトキシシリル、ジメトキシフェニルシリル、ジフェニルメチルシリル、ジフェニルビニルシリル、メチルシクロブチルシリル、ジメチルフリルシリルなどが挙げられる。

【0049】

本発明において、アミン基は、-NH<sub>2</sub>、アルキルアミン基、アリールアミン基、アリールヘテロアリールアミン基などであってもよく、アリールアミン基は、アリールで置換されたアミンを意味し、アルキルアミン基は、アルキルで置換されたアミンを意味し、アリールヘテロアリールアミン基は、アリール及びヘテロアリール基で置換されたアミンを意味するものであって、アリールアミン基の例としては、置換もしくは非置換のモノアリールアミン基、置換もしくは非置換のジアアリールアミン基、または置換もしくは非置換のトリアアリールアミン基があり、前記アリールアミン基及びアリールヘテロアリールアミン基中のアリール基及びヘテロアリール基は、単環式アリール基、単環式ヘテロアリール基であってもよく、または多環式アリール基、多環式ヘテロアリール基であってもよく、前記アリール基、ヘテロアリール基を2以上含むアリールアミン基、アリールヘテロアリールアミン基は、単環式アリール基(ヘテロアリール基)、多環式アリール基(ヘテロアリール基)、または単環式アリール基(ヘテロアリール基)と多環式アリール基(ヘテロアリール基)を同時に含むことができる。また、前記アリールアミン基及びアリールヘテロアリールアミン基中のアリール基、ヘテロアリール基は、前述したアリール基、ヘテロアリール基の例示から選択されてもよい。

20

30

【0050】

本発明において、アリールオキシ基及びアリールチオキシ基中のアリール基は、前述したアリール基の例示と同一であり、具体的には、アリールオキシ基としては、フェノキシ基、p-トリルオキシ基、m-トリルオキシ基、3,5-ジメチル-フェノキシ基、2,4,6-トリメチルフェノキシ基、p-tert-ブチルフェノキシ基、3-ピフェニルオキシ基、4-ピフェニルオキシ基、1-ナフチルオキシ基、2-ナフチルオキシ基、4-メチル-1-ナフチルオキシ基、5-メチル-2-ナフチルオキシ基、1-アントリルオキシ基、2-アントリルオキシ基、9-アントリルオキシ基、1-フェナントリルオキシ基、3-フェナントリルオキシ基、9-フェナントリルオキシ基などがあり、アリールチオキシ基としては、フェニルチオキシ基、2-メチルフェニルチオキシ基、4-tert-ブチルフェニルチオキシ基などがあるが、これに限定されるものではない。

40

【0051】

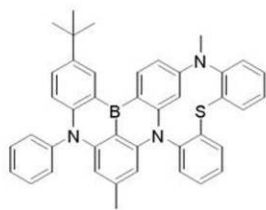
本発明において、ハロゲン基の例としては、フッ素、塩素、臭素またはヨウ素がある。

【0052】

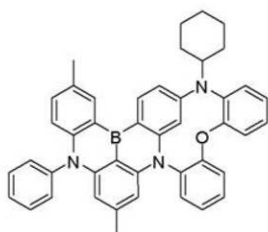
より具体的には、本発明に係る化学式Iまたは化学式IIで表される多環芳香族誘導体化合物は、下記化合物から選択されるいずれか1つであってもよく、これを通じて具体的な置換基を明確に確認することができ、但し、これによって本発明に係る化学式Iまたは化学式IIの範囲が限定されるものではない。

50

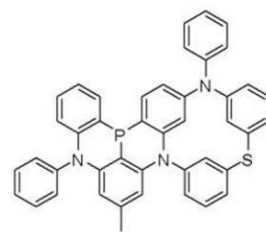
【 0 0 5 3 】



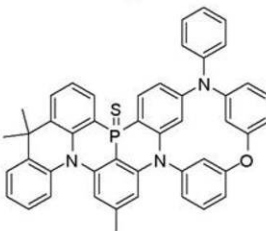
1



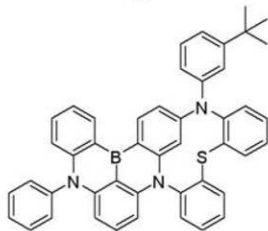
2



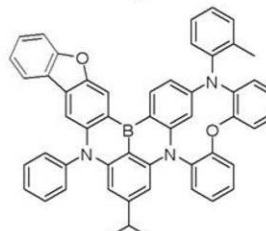
3



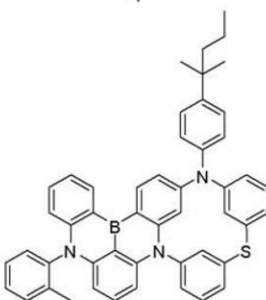
4



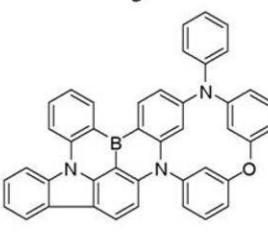
5



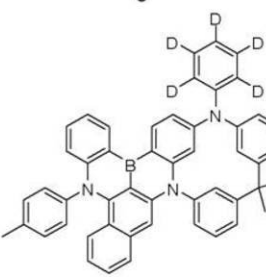
6



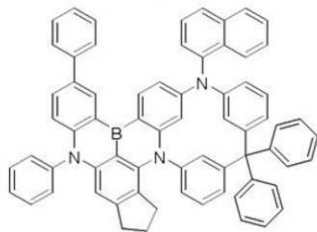
7



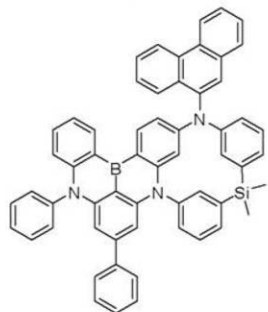
8



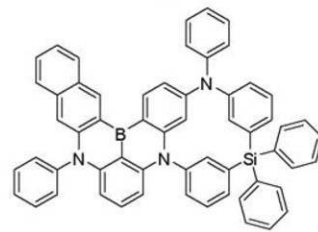
9



10



11



12

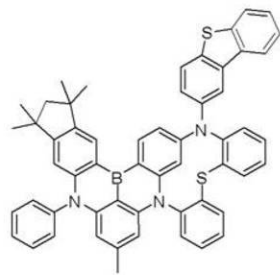
10

20

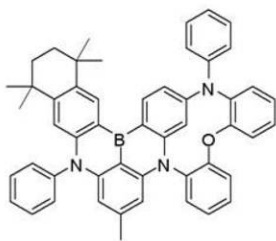
30

40

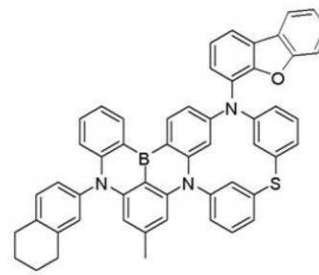
50



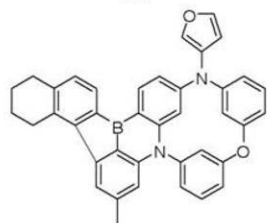
13



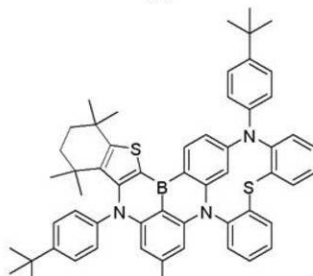
14



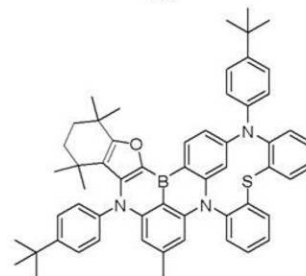
15



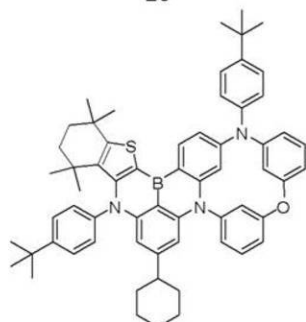
16



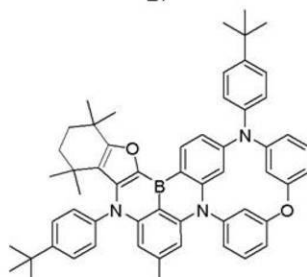
17



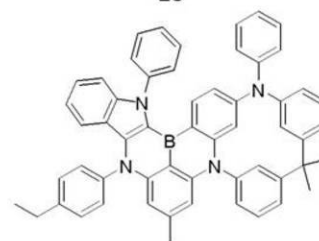
18



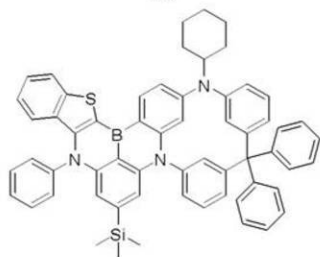
19



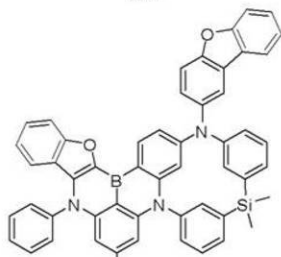
20



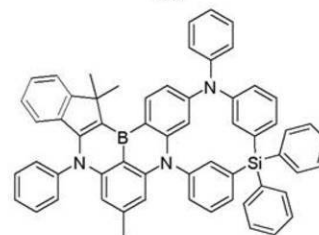
21



22



23



24

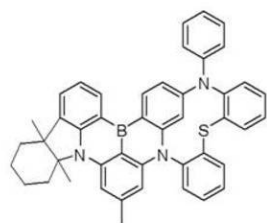
10

20

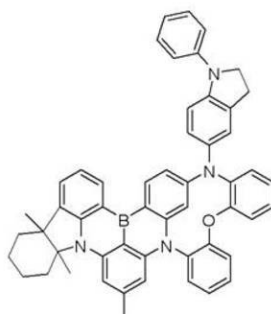
30

40

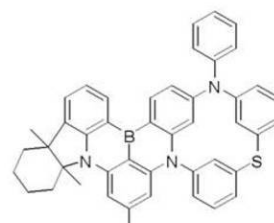
50



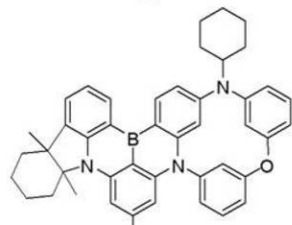
25



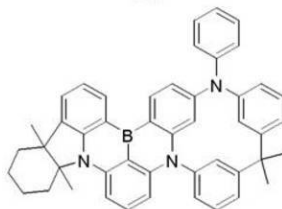
26



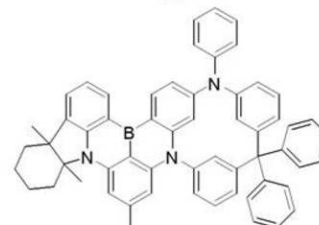
27



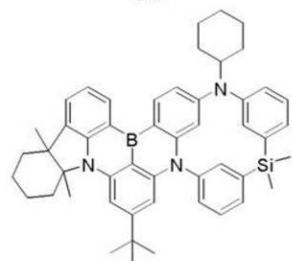
28



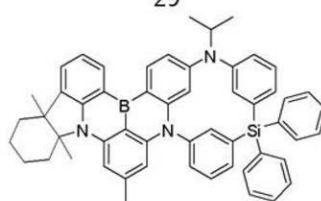
29



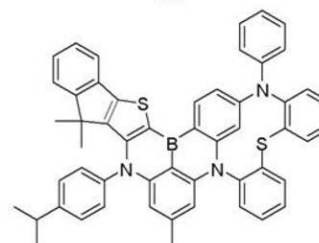
30



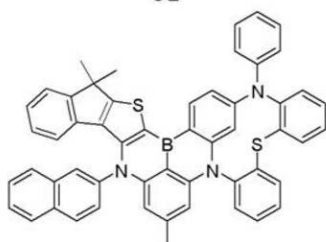
31



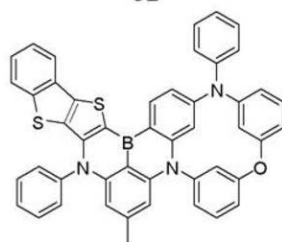
32



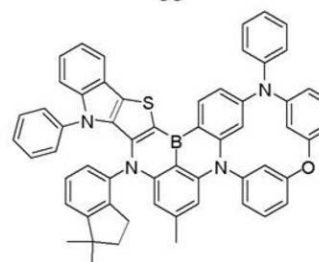
33



34



35



36

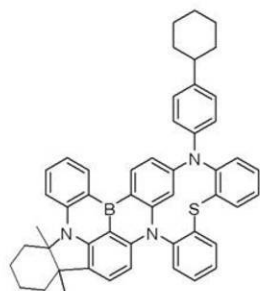
10

20

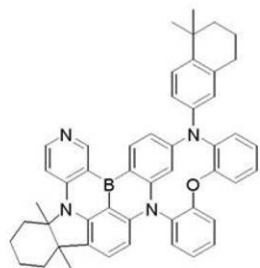
30

40

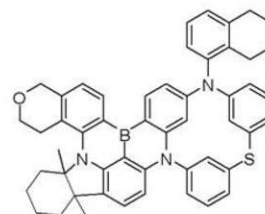
50



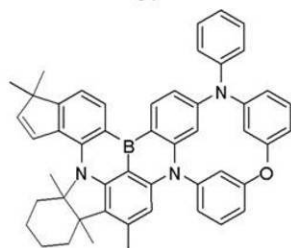
37



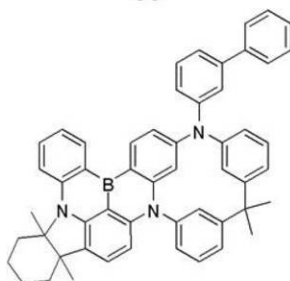
38



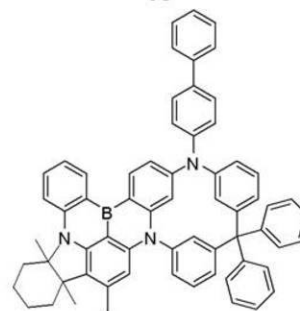
39



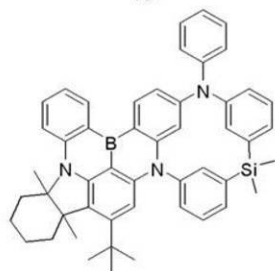
40



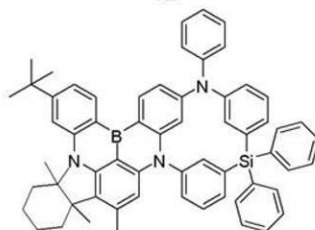
41



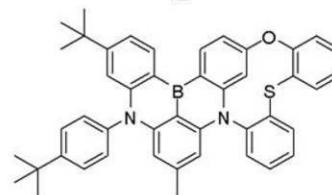
42



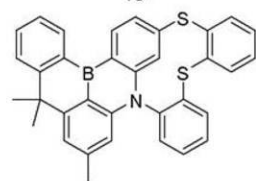
43



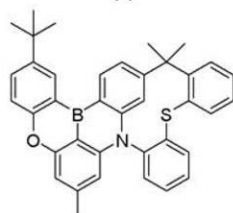
44



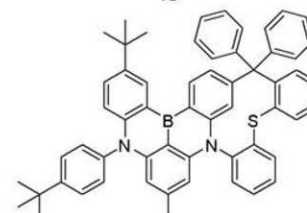
45



46



47



48

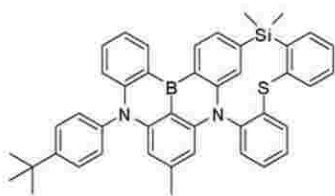
10

20

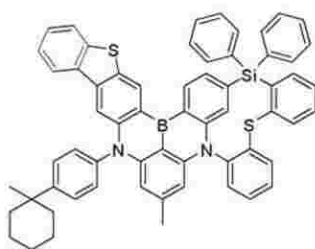
30

40

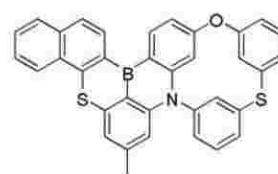
50



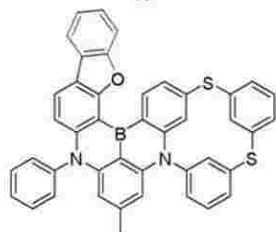
49



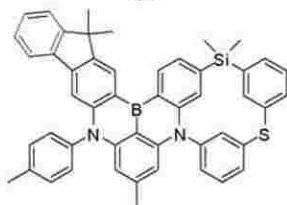
50



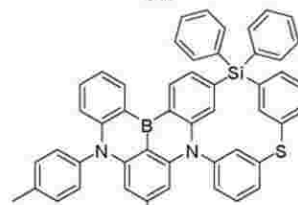
51



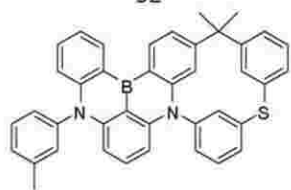
52



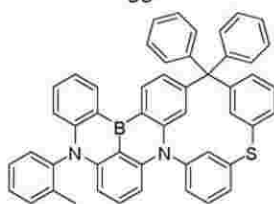
53



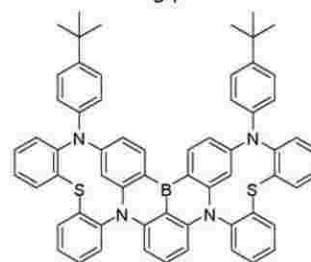
54



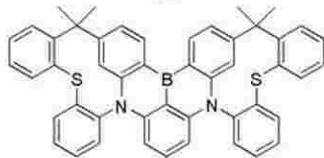
55



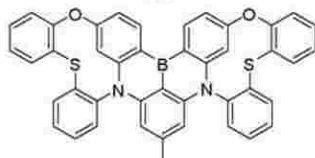
56



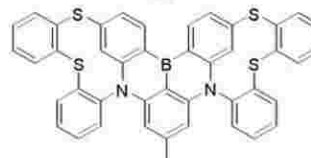
57



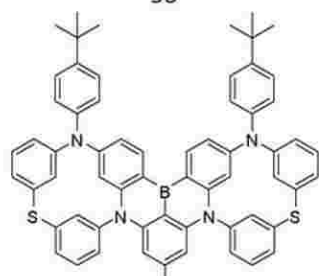
58



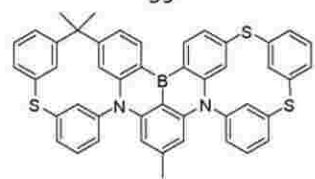
59



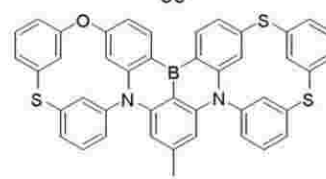
60



61



62



63

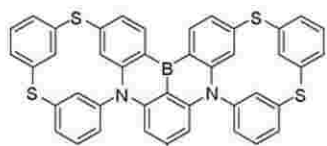
10

20

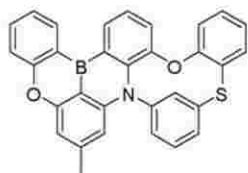
30

40

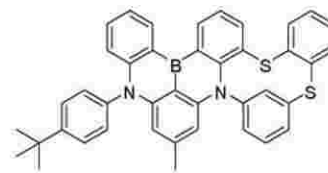
50



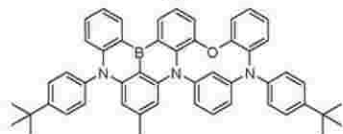
64



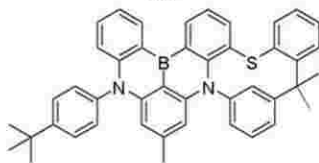
65



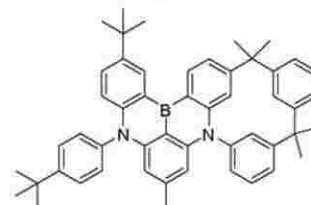
66



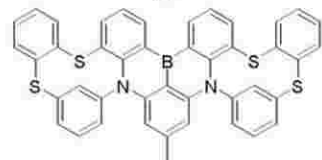
67



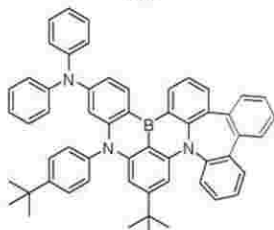
68



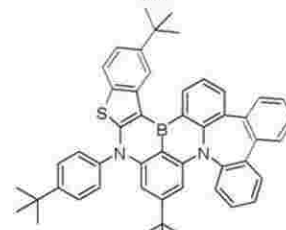
69



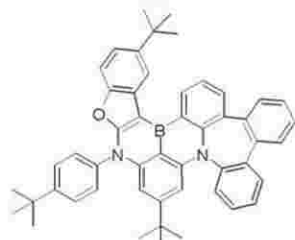
70



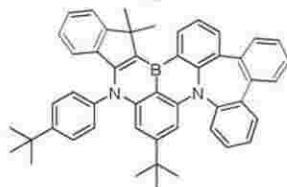
71



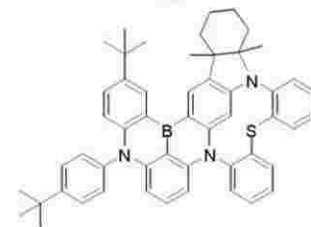
72



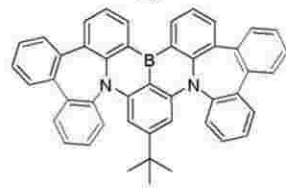
73



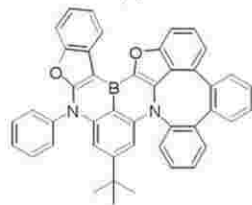
74



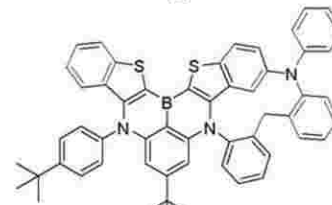
75



76



77



78

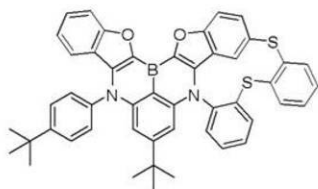
10

20

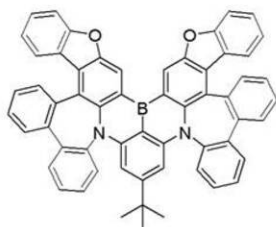
30

40

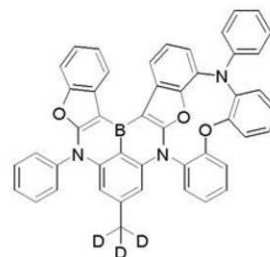
50



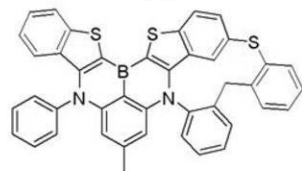
79



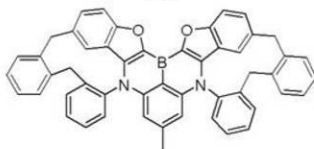
80



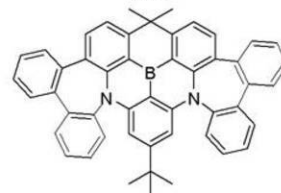
81



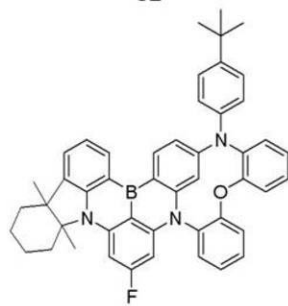
82



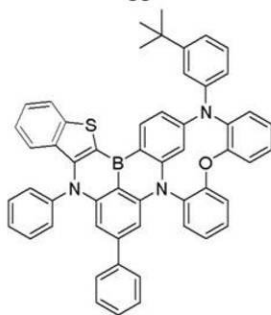
83



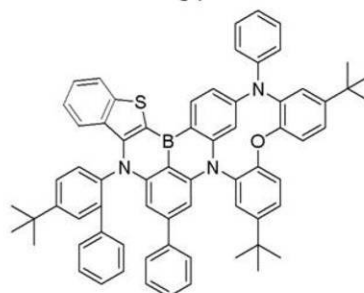
84



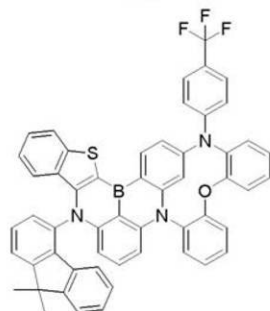
85



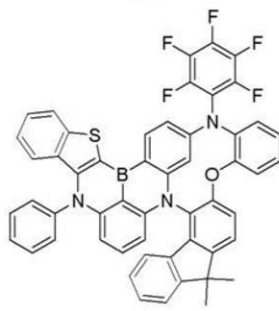
86



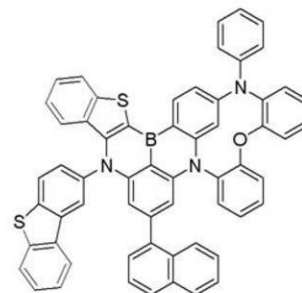
87



88



89



90

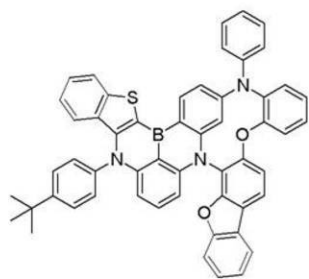
10

20

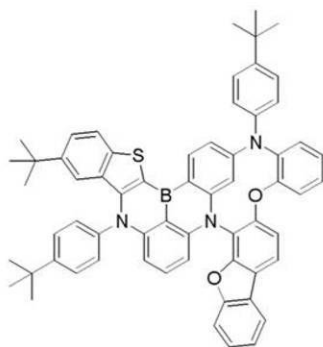
30

40

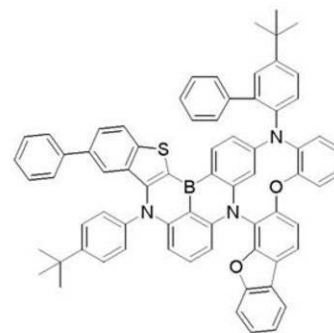
50



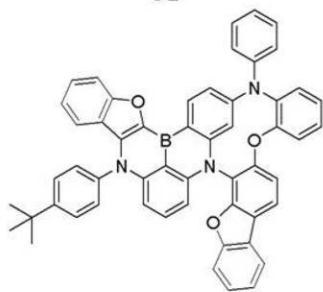
91



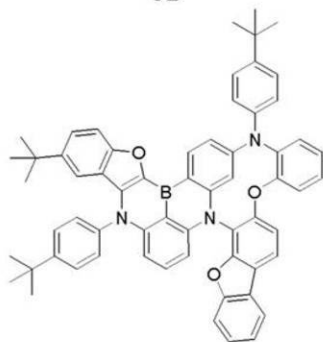
92



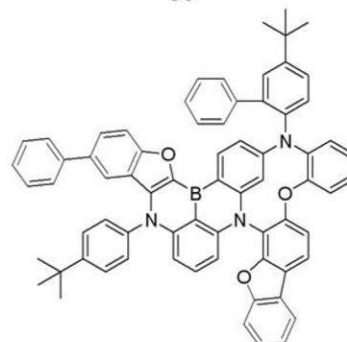
93



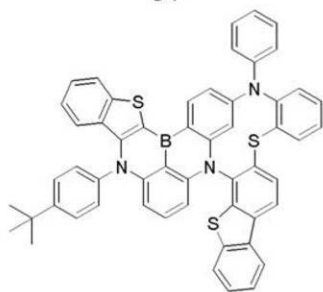
94



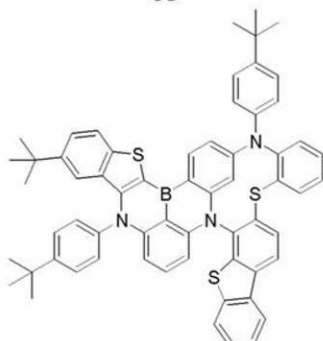
95



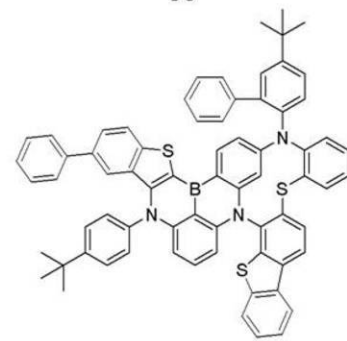
96



97



98



99

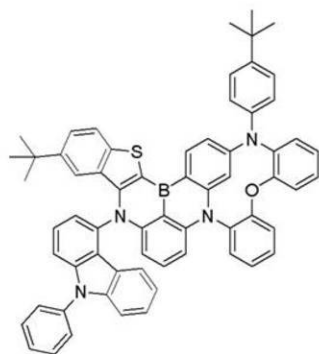
10

20

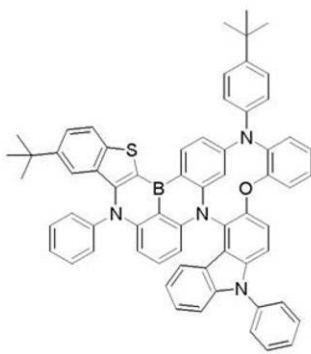
30

40

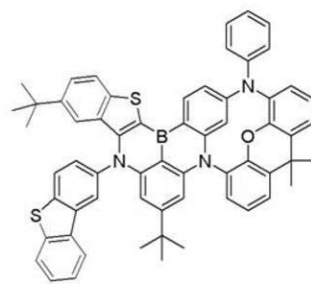
50



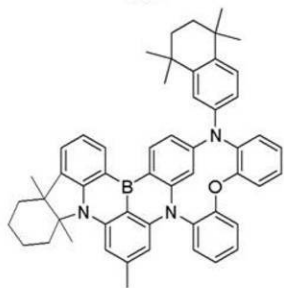
100



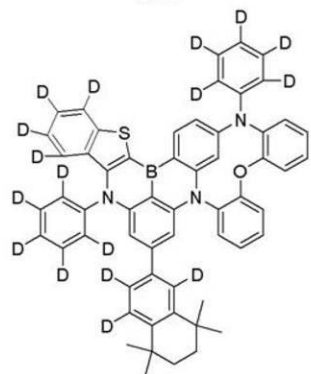
101



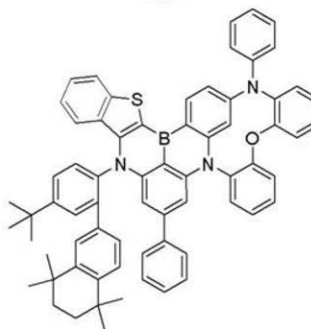
102



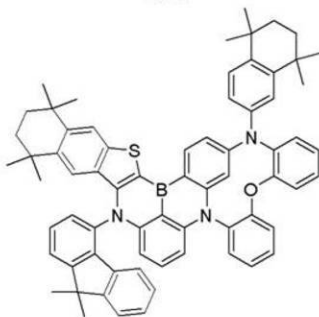
103



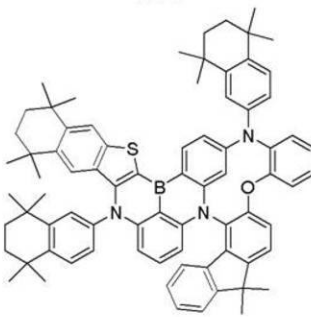
104



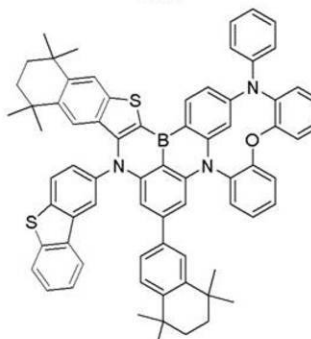
105



106



107



108

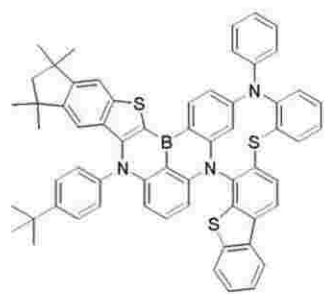
10

20

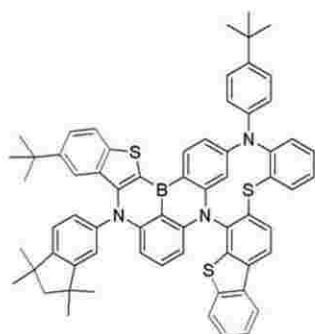
30

40

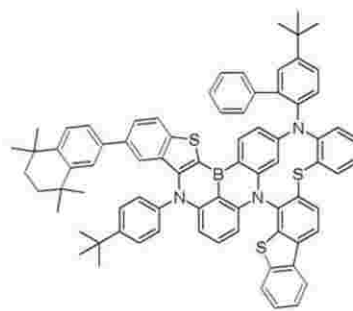
50



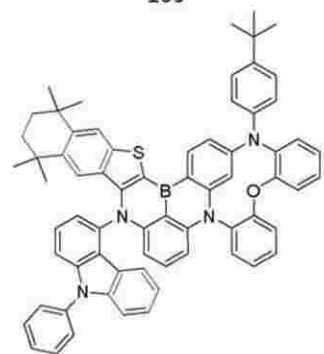
109



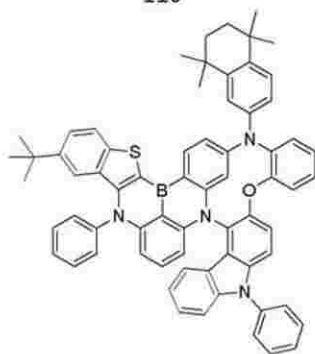
110



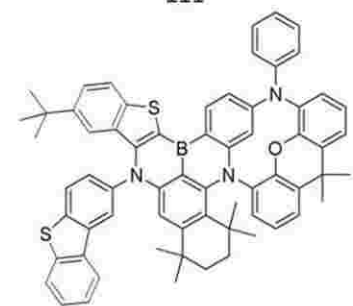
111



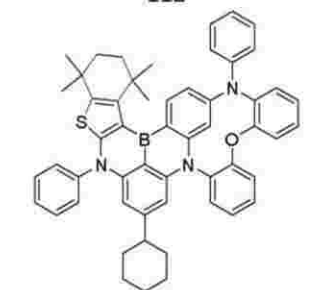
112



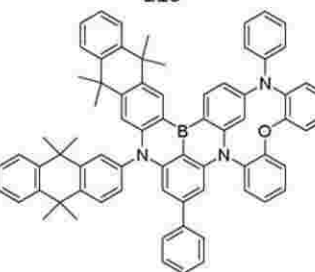
113



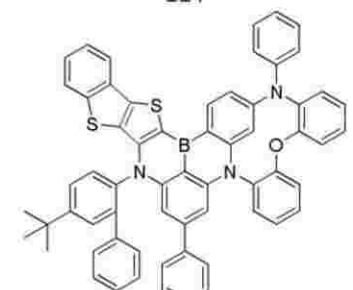
114



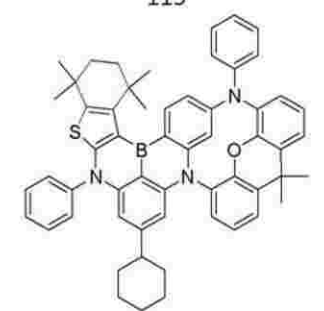
115



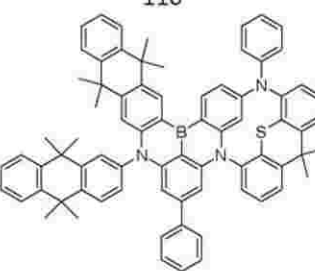
116



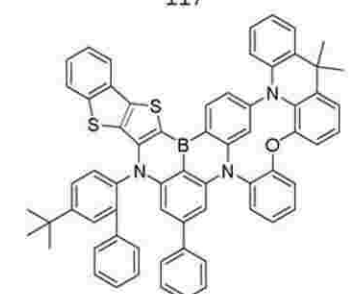
117



118



119



120

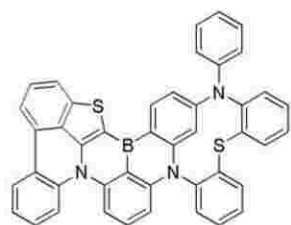
10

20

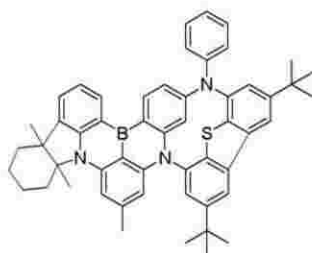
30

40

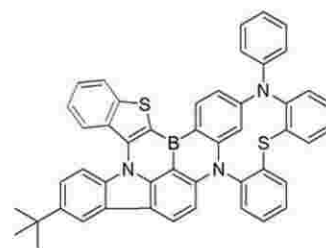
50



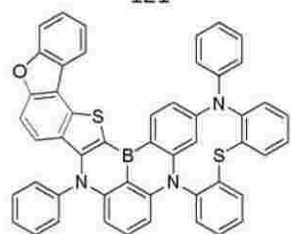
121



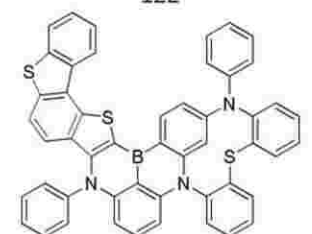
122



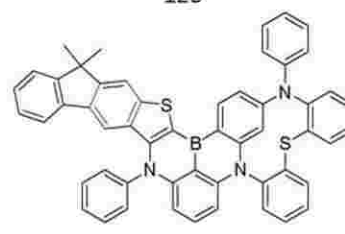
123



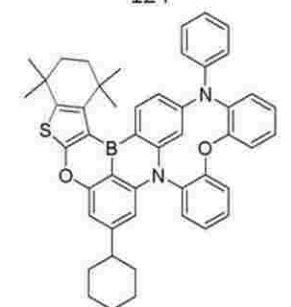
124



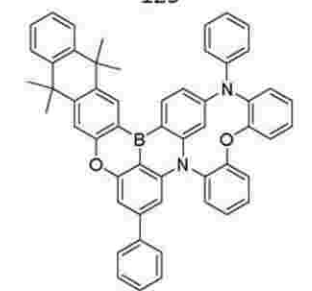
125



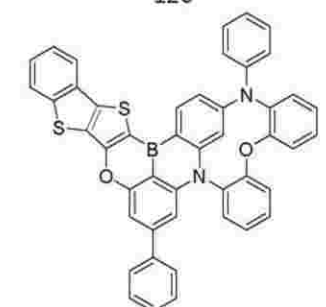
126



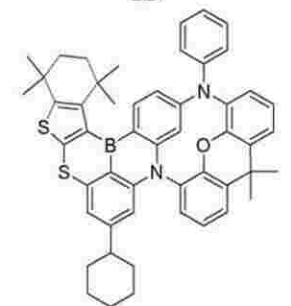
127



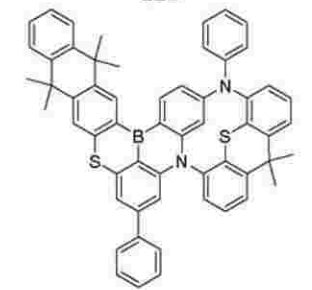
128



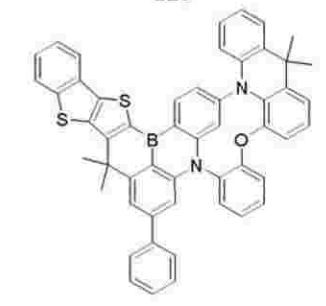
129



130



131



132

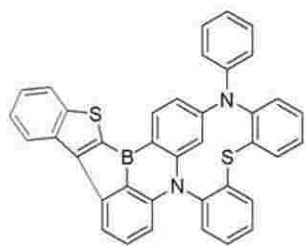
10

20

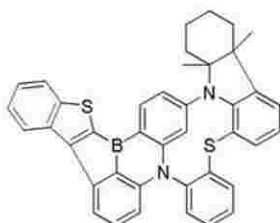
30

40

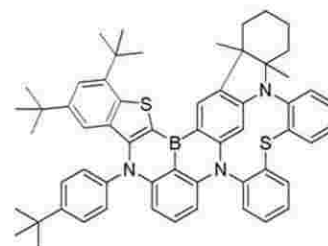
50



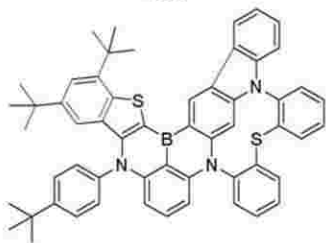
133



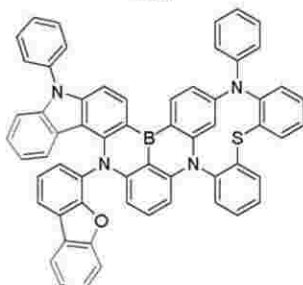
134



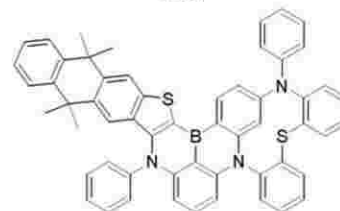
135



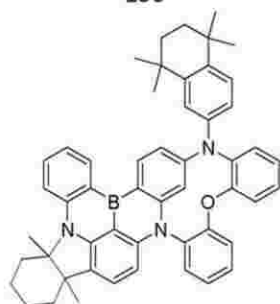
136



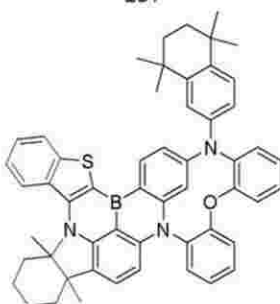
137



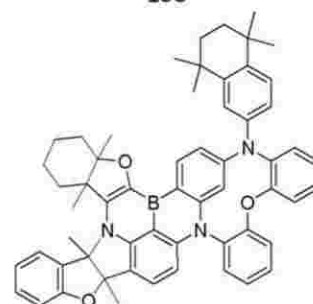
138



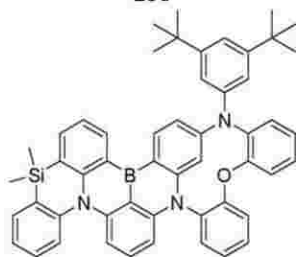
139



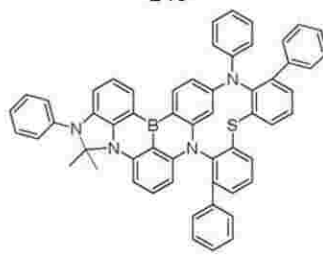
140



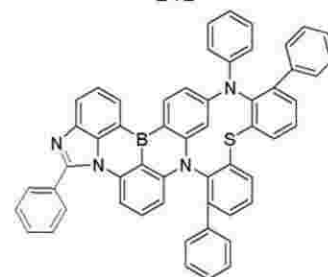
141



142



143



144

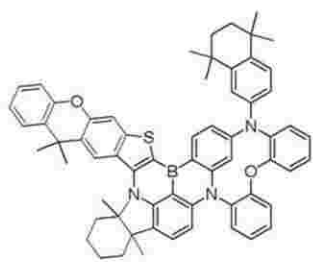
10

20

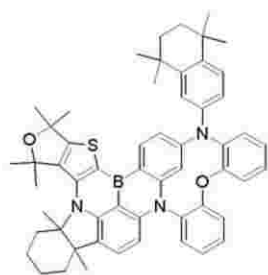
30

40

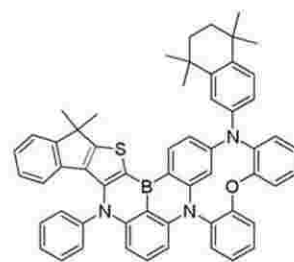
50



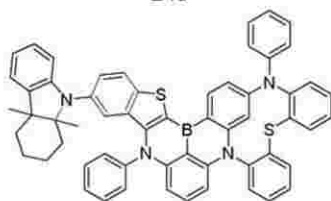
145



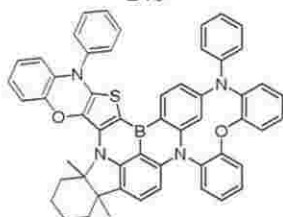
146



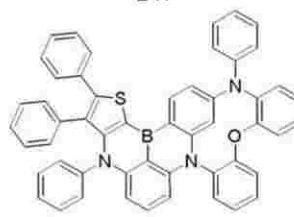
147



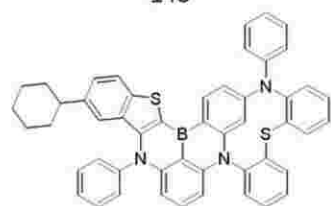
148



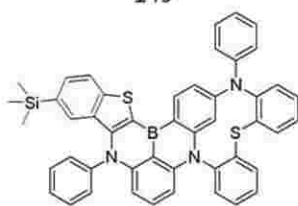
149



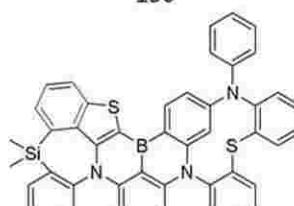
150



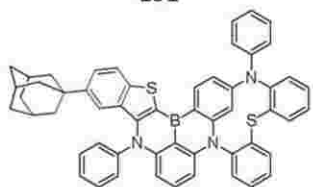
151



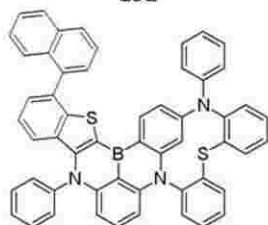
152



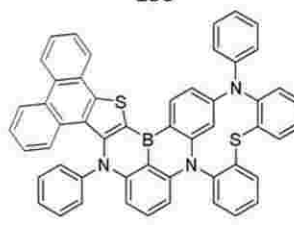
153



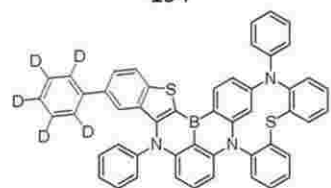
154



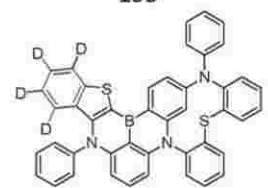
155



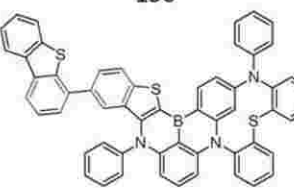
156



157



158



159

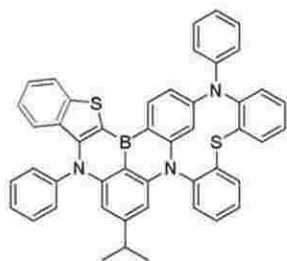
10

20

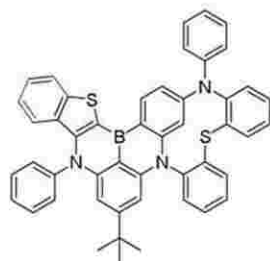
30

40

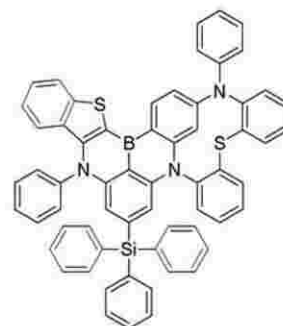
50



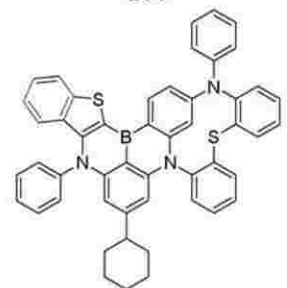
160



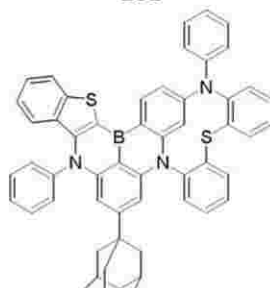
161



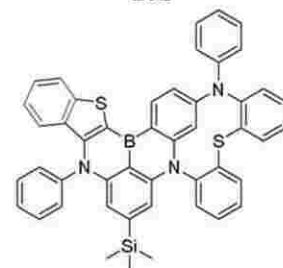
162



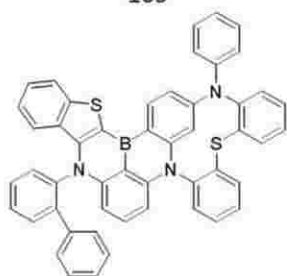
163



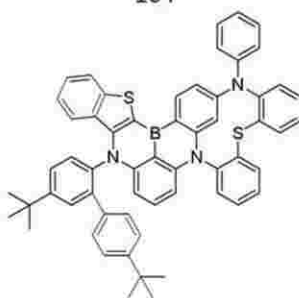
164



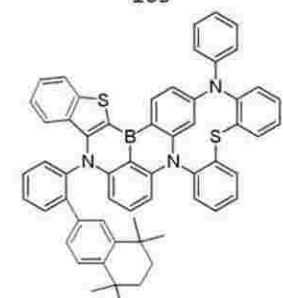
165



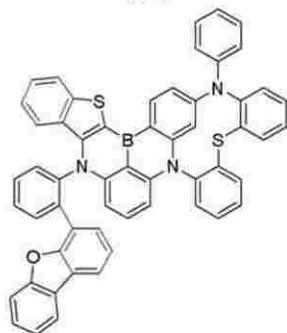
166



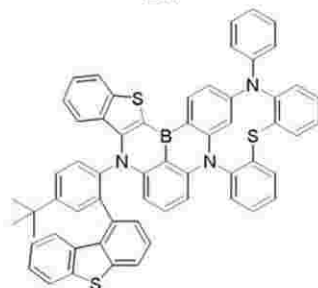
167



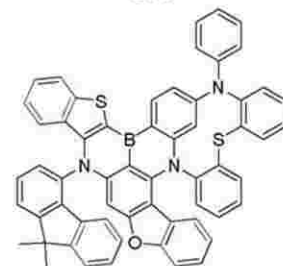
168



169



170



171

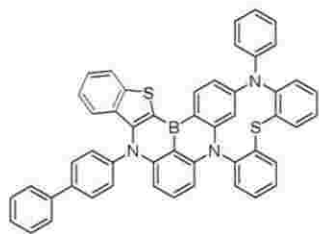
10

20

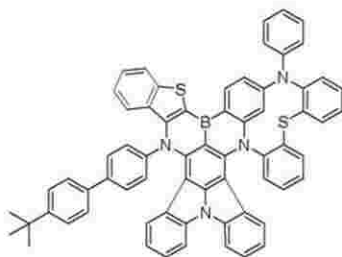
30

40

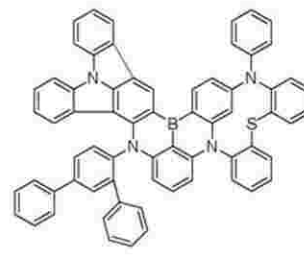
50



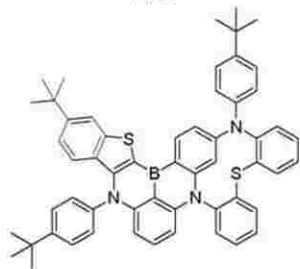
172



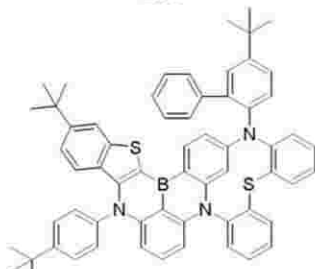
173



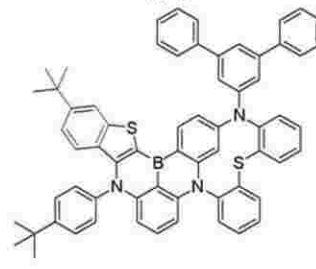
174



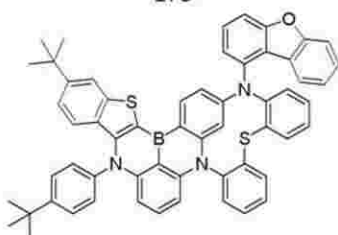
175



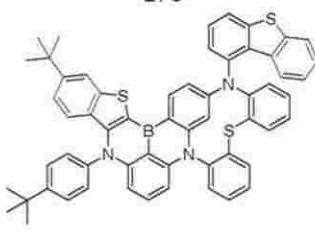
176



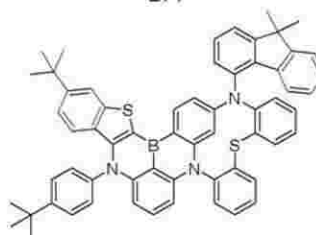
177



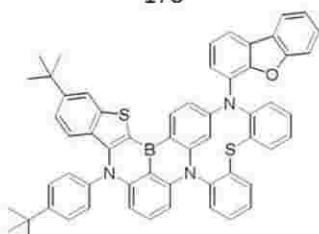
178



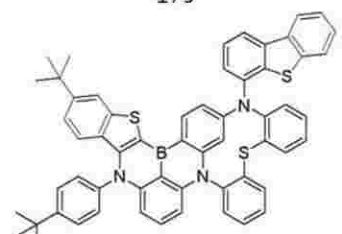
179



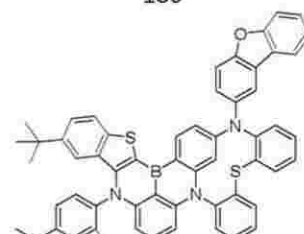
180



181



182



183

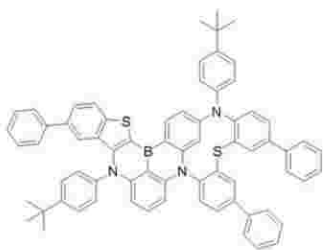
10

20

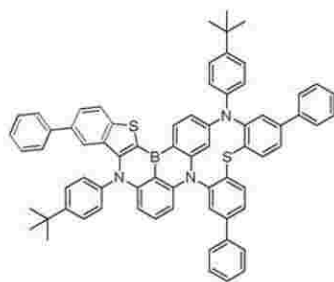
30

40

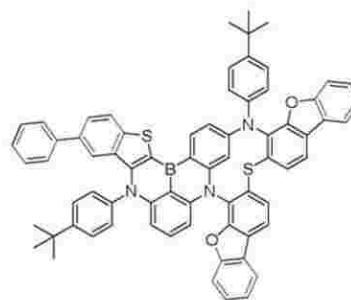
50



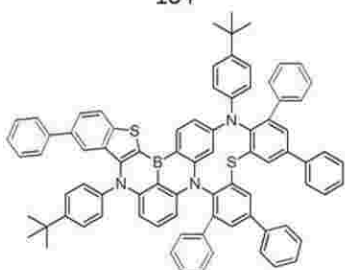
184



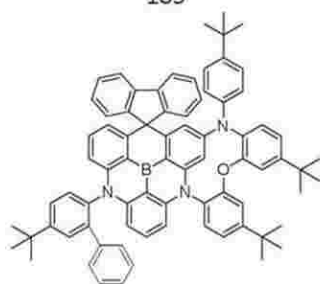
185



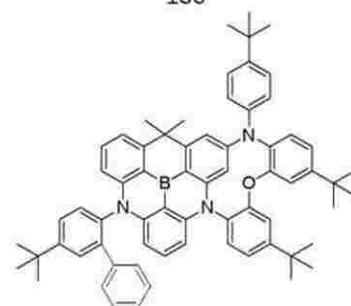
186



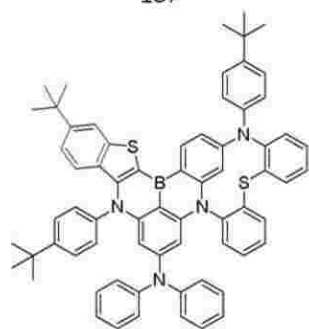
187



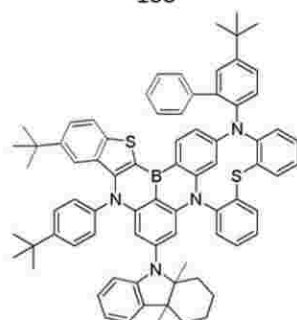
188



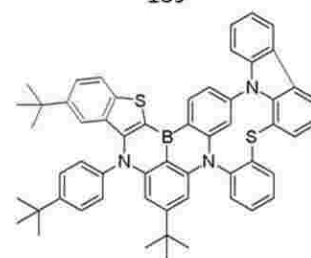
189



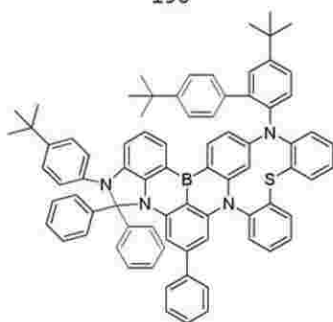
190



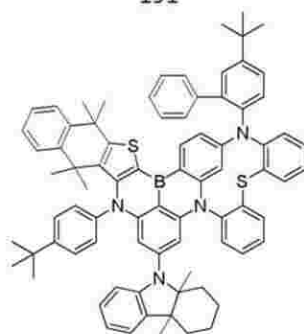
191



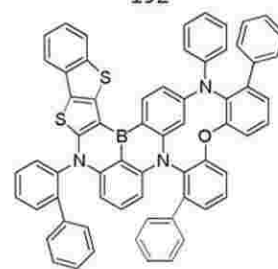
192



193



194



195

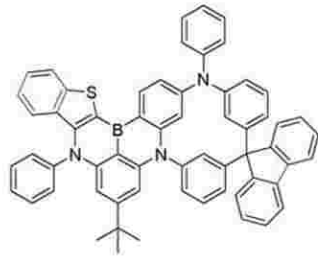
10

20

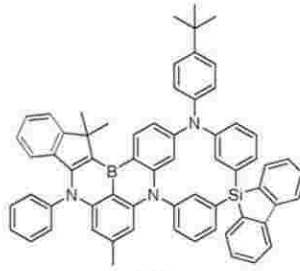
30

40

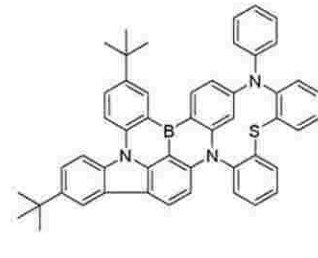
50



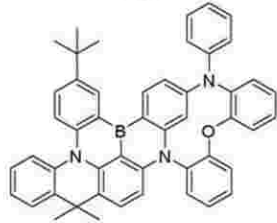
196



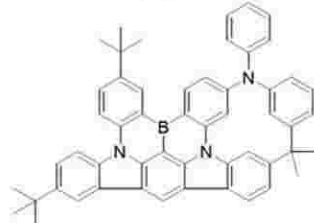
197



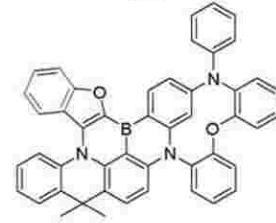
198



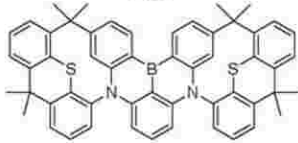
199



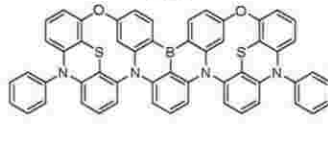
200



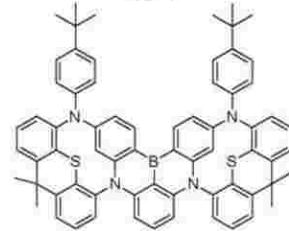
201



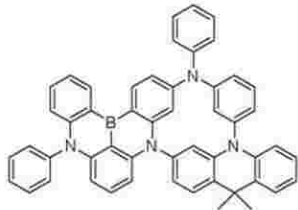
202



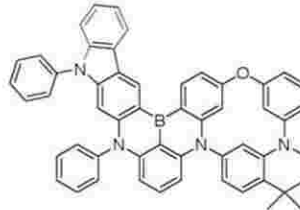
203



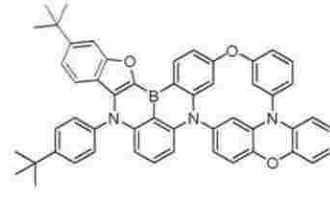
204



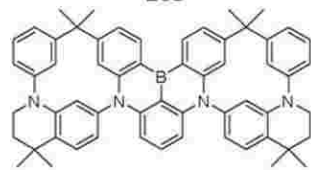
205



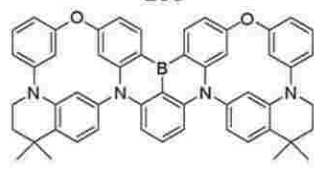
206



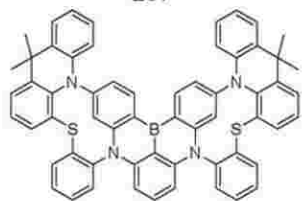
207



208



209



210

## 【 0 0 5 4 】

前記具体的な化合物から確認できるように、B、P、P=O、P=S、Alなどを含んで多環芳香族構造を形成し、これに置換基を導入して、その置換基の固有の特性を有する有機材料を合成することができ、例えば、有機発光素子の製造時に使用される正孔注入層、正孔輸送層、発光層、電子輸送層、電子注入層、電子阻止層、正孔阻止層の物質などに使用される置換基を前記構造に導入することによって、各有機層で要求する条件を満たす物質を製造することができ、これを通じて、高効率の有機発光素子を実現することができる。

## 【 0 0 5 5 】

また、本発明の他の一態様は、第1電極、第2電極、及び前記第1電極と第2電極との間に介在する1層以上の有機層からなる有機発光素子に関し、前記有機層に、前記化学式Iまたは化学式IIで表される本発明に係る有機化合物を少なくとも1個以上含むことができる。

## 【 0 0 5 6 】

10

20

30

40

50

すなわち、本発明の一実施例に係る有機発光素子は、第1電極、第2電極、及びこれら間に配置された有機層を含む構造からなることができ、本発明に係る化学式Iまたは化学式IIの有機化合物を素子の有機物層に使用する以外は、当技術分野での通常の素子の製造方法及び材料を使用して製造することができる。

【0057】

本発明に係る有機発光素子の有機層は単層構造からなってもよいが、2層以上の有機層が積層された多層構造からなることができる。例えば、正孔注入層、正孔輸送層、正孔阻止層、発光層、電子阻止層、電子輸送層、電子注入層などを含む構造を有することができる。しかし、これに限定されず、さらに少ない数またはさらに多くの数の有機層を含むこともでき、本発明に係る好ましい有機発光素子の有機物層の構造などについては、後述する実施例でより詳しく説明する。

10

【0058】

本発明に係る有機発光素子は、アノード、正孔輸送層、発光層、電子輸送層及びカソードを含み、必要に応じて、アノードと正孔輸送層との間に正孔注入層をさらに含むことができ、また、電子輸送層とカソードとの間に電子注入層をさらに含むことができ、それ以外にも、1層又は2層の中間層をさらに形成することもでき、正孔阻止層又は電子阻止層をさらに形成させることもできる。

【0059】

本発明の一実施例として、本発明は、前記第1電極と第2電極との間に介在する有機層が発光層を含み、前記発光層は、ホストとドーパントからなり、本発明に係る前記化学式Iまたは化学式IIで表される化合物を発光層内のドーパントとして含むことができる。このとき、前記発光層内のドーパントの含量は、通常、ホスト約100重量部を基準として約0.01～約20重量部の範囲で選択されてもよく、これに限定されるものではない。

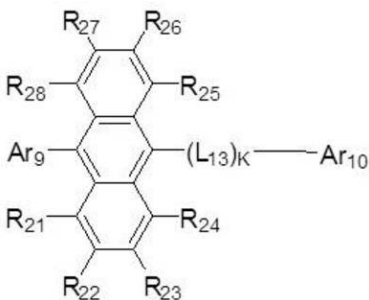
20

【0060】

また、本発明の一実施例として、発光層内のホストは、下記化学式Cで表されるアントラセン誘導体化合物であってもよい。

【0061】

【化C】



30

【0062】

前記化学式Cにおいて、

R<sub>21</sub>～R<sub>28</sub>は、それぞれ、同一又は異なっており、前記化学式Iまたは化学式IIのRで定義されたものと同ーである。

40

【0063】

Ar<sub>9</sub>及びAr<sub>10</sub>は、それぞれ、互いに同一又は異なっており、互いに独立して、水素、重水素、置換もしくは非置換の炭素数1～30のアルキル基、置換もしくは非置換の炭素数6～50のアリール基、置換もしくは非置換の炭素数2～30のアルケニル基、置換もしくは非置換の炭素数2～20のアルキニル基、置換もしくは非置換の炭素数3～30のシクロアルキル基、置換もしくは非置換の炭素数5～30のシクロアルケニル基、置換もしくは非置換の炭素数2～50のヘテロアリール基、置換もしくは非置換の炭素数2～30のヘテロシクロアルキル基、置換もしくは非置換の炭素数1～30のアルコキシ基、置換もしくは非置換の炭素数6～30のアリールオキシ基、置換もしくは非置換の炭素数

50

1 ~ 30 のアルキルチオキシ基、置換もしくは非置換の炭素数 6 ~ 30 のアリールチオキシ基、ハロゲン基、置換もしくは非置換のアミン基、及び置換もしくは非置換のシリル基から選択される。

【0064】

$L_{13}$  は、単結合であるか、または置換もしくは非置換の炭素数 6 ~ 20 のアリーレン基、及び置換もしくは非置換の炭素数 2 ~ 20 のヘテロアリーレン基から選択される。

【0065】

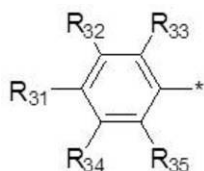
$k$  は、1 ~ 3 の整数であり、前記  $k$  が 2 以上である場合に、それぞれの  $L_{13}$  は互いに同一又は異なっている。

【0066】

本発明の一実施例によれば、前記化学式 C の  $A_{rg}$  は、下記化学式 C - 1 で表されてもよい。

【0067】

【化 C - 1】



10

20

【0068】

前記化学式 C - 1 において、

$R_{31} \sim R_{35}$  は、それぞれ、同一又は異なっており、前記化学式 I または化学式 II の R で定義されたものと同一であり、互いに隣接する置換基と結合して飽和あるいは不飽和環を形成することができる。

【0069】

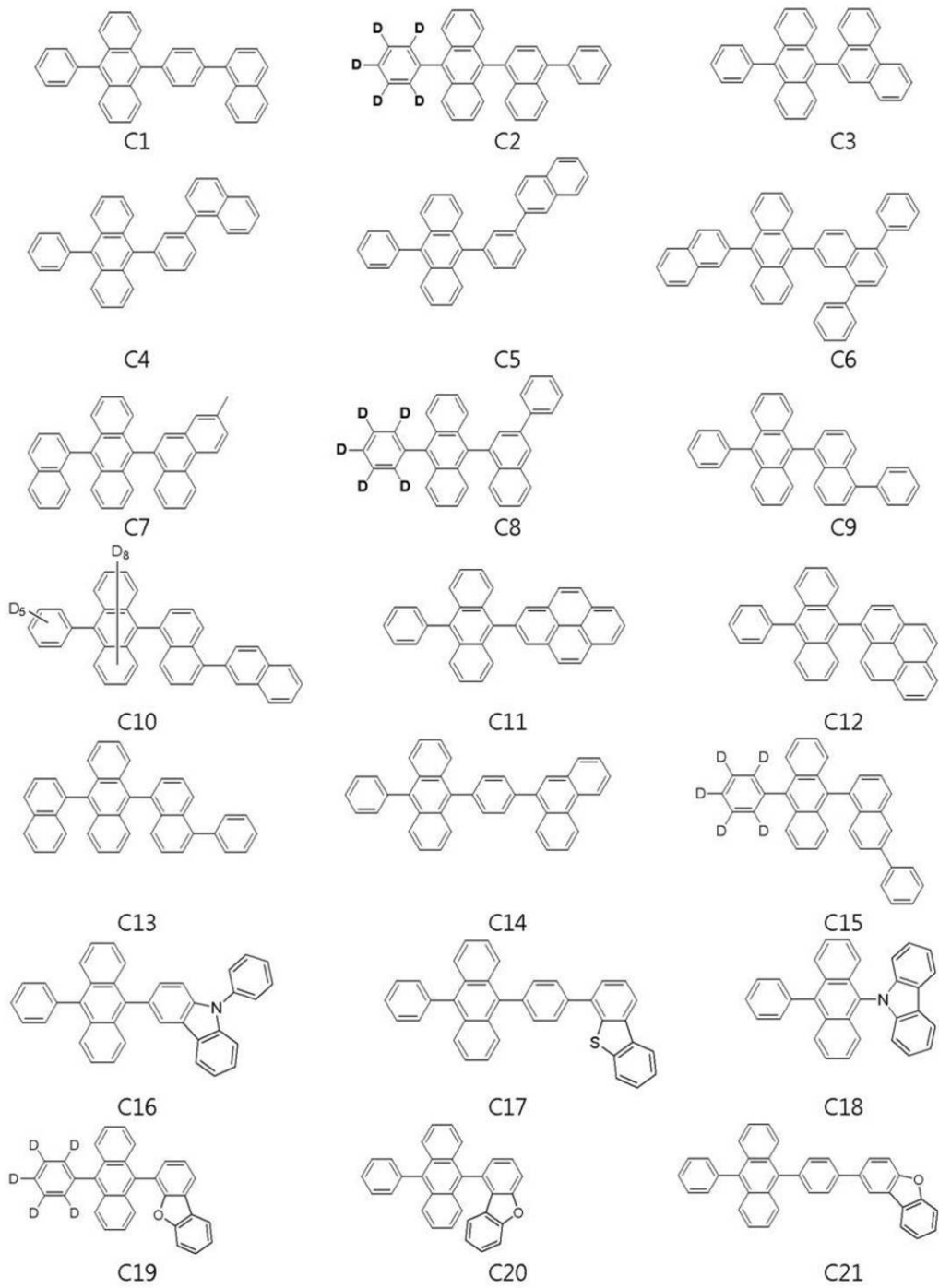
本発明の一実施例に係る化学式 C で表されるホストは、下記化学式 C 1 ~ 化学式 C 6 6 から選択されるいずれか 1 つであってもよく、これによってその範囲が限定されるものではない。

【0070】

30

40

50



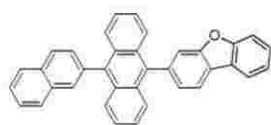
10

20

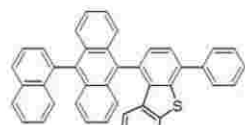
30

40

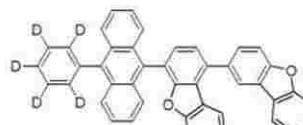
50



C22



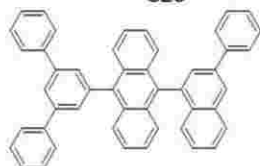
C23



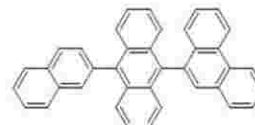
C24



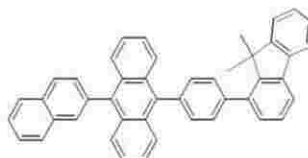
C25



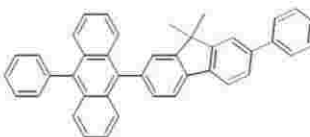
C26



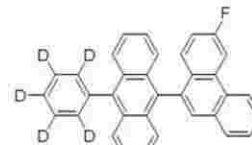
C27



C28



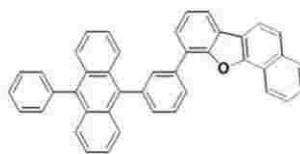
C29



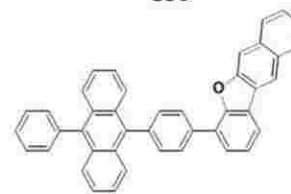
C30



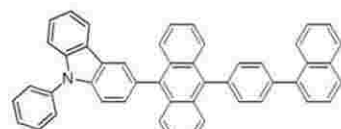
C31



C32



C33



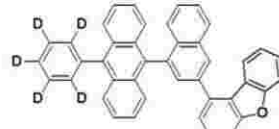
C34



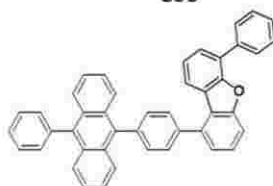
C35



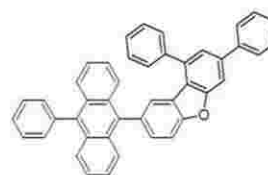
C36



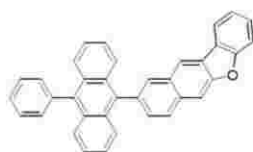
C37



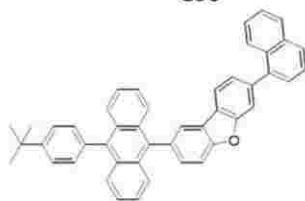
C38



C39



C40



C41



C42

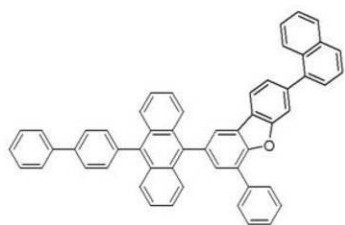
10

20

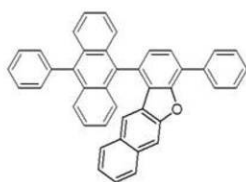
30

40

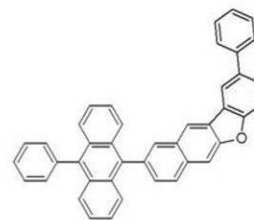
50



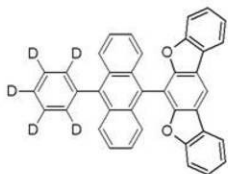
C43



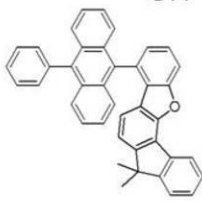
C44



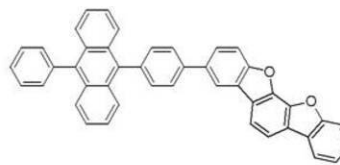
C45



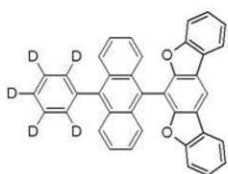
C46



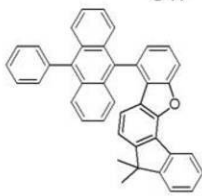
C47



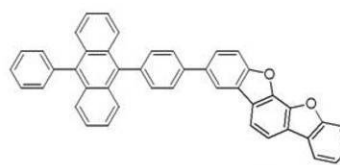
C48



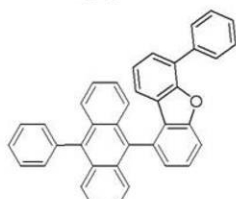
C49



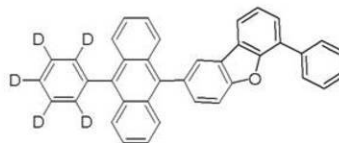
C50



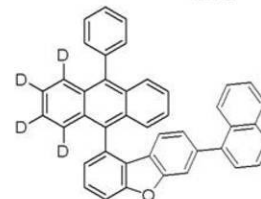
C51



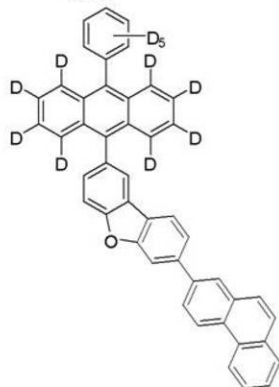
C52



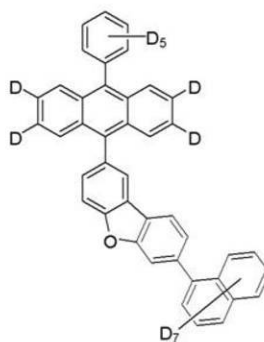
C53



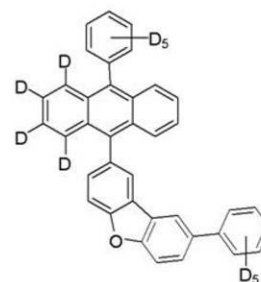
C54



C55



C56



C57

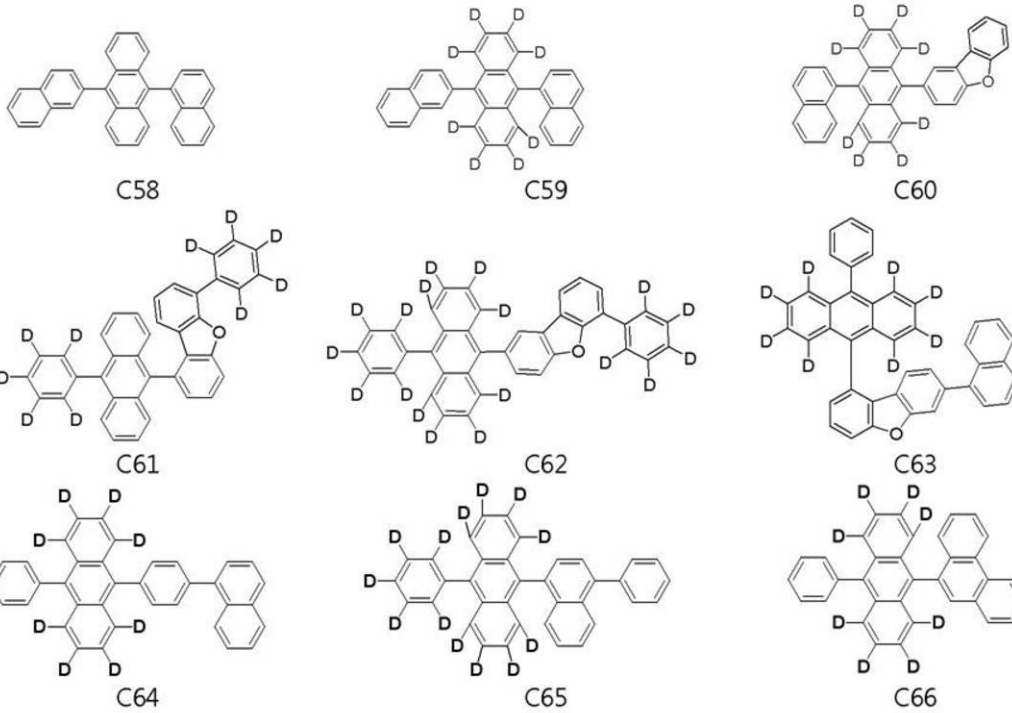
10

20

30

40

50



10

20

【 0 0 7 1 】

一方、本発明の一実施例に係る有機発光素子の具体的な構造、その製造方法及び各有機層の材料について説明すると、次の通りである。

【 0 0 7 2 】

まず、基板の上部にアノード電極用物質をコーティングしてアノードを形成する。ここで、基板としては、通常の有機発光素子で使用される基板を使用するが、透明性、表面平滑性、取り扱いの容易性及び防水性に優れた有機基板又は透明プラスチック基板が好ましい。そして、アノード電極用物質としては、透明かつ伝導性に優れた酸化インジウムスズ (ITO)、酸化インジウム亜鉛 (IZO)、酸化スズ (SnO<sub>2</sub>)、酸化亜鉛 (ZnO) などを使用する。

30

【 0 0 7 3 】

前記アノード電極の上部に正孔注入層物質を真空熱蒸着又はスピコートして正孔注入層を形成し、その次に、前記正孔注入層の上部に正孔輸送層物質を真空熱蒸着又はスピコートして正孔輸送層を形成する。

【 0 0 7 4 】

前記正孔注入層の材料は、当技術分野で通常使用されるものであれば、特に制限されずに使用することができ、具体的な例示として、2-TNATA [ 4 , 4 ' , 4 ' ' - t r i s ( 2 - n a p h t h y l p h e n y l - p h e n y l a m i n o ) - t r i p h e n y l a m i n e ] ( 4 , 4 ' , 4 ' ' - トリス ( 2 - ナフチルフェニル - フェニルアミノ ) - トリフェニルアミン)、NPD [ N , N ' - d i ( 1 - n a p h t h y l ) - N , N ' - d i p h e n y l b e n z i d i n e ] ( N , N ' - ジ ( 1 - ナフチル ) - N , N ' - ジフェニルベンジジン)、TPD [ N , N ' - d i p h e n y l - N , N ' - b i s ( 3 - m e t h y l p h e n y l ) - 1 , 1 ' - b i p h e n y l - 4 , 4 ' - d i a m i n e ] ( N , N ' - ジフェニル - N , N ' - ビス ( 3 - メチルフェニル ) - 1 , 1 ' - ビフェニル - 4 , 4 ' - ジアミン)、DNTPD [ N , N ' - d i p h e n y l - N , N ' - b i s - [ 4 - ( p h e n y l - m - t o l y l - a m i n o ) - p h e n y l ] - b i p h e n y l - 4 , 4 ' - d i a m i n e ] ( N , N ' - ジフェニル - N , N ' - ビス - [ 4 - ( フェニル - m - トリル - アミノ ) - フェニル ] - ビフェニル - 4 , 4 ' - ジアミン)、HAT-CN [ 1 , 4 , 5 , 8 , 9 , 1 1 - H e x a a z a t r i p h e n y l e n e h e x a c a r b o n i

40

50

trile] (1, 4, 5, 8, 9, 11 - ヘキサザトリフェニレンヘキサカルボニトリル) などを使用することができる。

【0075】

また、前記正孔輸送層の材料も、当技術分野で通常使用されるものであれば、特に制限されず、例えば、N, N' - ビス(3 - メチルフェニル) - N, N' - ジフェニル - [1, 1 - ビフェニル] - 4, 4' - ジアミン(TPD)、またはN, N' - ジ(ナフタレン - 1 - イル) - N, N' - ジフェニルベンジジン( - NPD) などを使用することができる。

【0076】

次いで、前記正孔輸送層の上部に正孔補助層及び発光層を続いて積層し、前記発光層の上部に選択的に、正孔阻止層を真空蒸着方法又はスピンコーティング方法で薄膜として形成することができる。前記正孔阻止層は、正孔が有機発光層を通過してカソードに流入する場合には、素子の寿命及び効率が減少するため、HOMO(Highest Occupied Molecular Orbital)レベルが非常に低い物質を使用することによって、このような問題を防止する役割を果たす。このとき、使用される正孔阻止物質は、特に制限されないが、電子輸送能力を有し、かつ発光化合物よりも高いイオン化ポテンシャルを有しなければならず、代表的にBALq、BCP、TPBIなどが使用され得る。

10

【0077】

前記正孔阻止層に使用される物質として、BALq、BCP、Bphen、TPBI、NTAZ、BeBq<sub>2</sub>、OXD-7、Liqなどが使用されてもよいが、これに限定されるものではない。

20

【0078】

このような正孔阻止層上に電子輸送層を真空蒸着方法又はスピンコーティング方法を通じて蒸着した後に電子注入層を形成し、前記電子注入層の上部にカソード形成用金属を真空熱蒸着してカソード電極を形成することによって、本発明の一実施例に係る有機発光素子が完成する。

【0079】

ここで、カソード形成用金属としては、リチウム(Li)、マグネシウム(Mg)、アルミニウム(Al)、アルミニウム - リチウム(Al-Li)、カルシウム(Ca)、マグネシウム - インジウム(Mg-In)、マグネシウム - 銀(Mg-Ag)などを使用することができるが、前面発光素子を得るためには、ITO、IZOを用いた透過型カソードを使用することができる。

30

【0080】

前記電子輸送層の材料としては、カソードから注入された電子を安定に輸送する機能を行う公知の電子輸送物質を用いることができる。公知の電子輸送物質の例としては、キノリン誘導体、特に、トリス(8 - キノリノレート)アルミニウム(Alq<sub>3</sub>)、TAZ、BALq、ベリリウムビス(ベンゾキノリン - 10 - オラート)(beryllium bis(benzoquinolin-10-olate: BeBq<sub>2</sub>))、オキサジアゾール誘導体であるPBD、BMD、BNDなどのような材料を使用してもよい。

【0081】

40

また、前記有機層のそれぞれは、単分子蒸着方式又は溶液工程によって形成されてもよい。ここで、前記蒸着方式は、前記それぞれの層を形成するための材料として使用される物質を真空又は低圧状態で加熱などを通じて蒸発させて薄膜を形成する方法を意味し、前記溶液工程は、前記それぞれの層を形成するための材料として使用される物質を溶媒と混合し、これをインクジェット印刷、ロールツーロールコーティング、スクリーン印刷、スプレーコーティング、ディップコーティング、スピンコーティングなどのような方法を通じて薄膜を形成する方法を意味する。

【0082】

また、本発明に係る有機発光素子は、平板ディスプレイ装置、フレキシブルディスプレイ装置、単色又は白色の平板照明用装置、及び単色又は白色のフレキシブル照明用装置が

50

ら選択される装置に使用することができる。

【実施例】

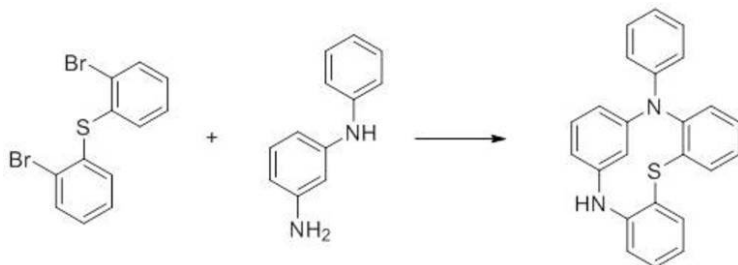
【0083】

以下、好ましい実施例を挙げて本発明をさらに詳細に説明する。しかし、これらの実施例は、本発明をより具体的に説明するためのもので、本発明の範囲がこれによって制限されないということは、当技術分野における通常の知識を有する者には自明であろう。

【0084】

合成例1．化合物Aの製造

合成例1-1．中間体A-1の合成



10

A - 1 a            A - 1 b            A - 1

【0085】

反応器に、文献 (Angewandte Chemie - International Edition, 2008, vol. 47, # 9, p. 1726 - 1728) を参考にして合成した A - 1 a (50.0 g)、文献 (European Journal of Medicinal Chemistry, 2017, vol. 134, p. 230 - 241) を参考にして合成した A - 1 b (26.8 g)、ビス(トリ-tert-ブチルホスフィン)パラジウム(0) (2.23 g)、ナトリウムtert-ブトキシド (27.9 g)、トルエン (500 mL) を投入し、24時間還流撹拌した。常温に冷却した後、水 (200 mL) を投入した。酢酸エチルで有機層を抽出し、減圧濃縮した後、シリカゲルカラムクロマトグラフィーで A - 1 を分離した。(15.1 g、収率28.4%)

20

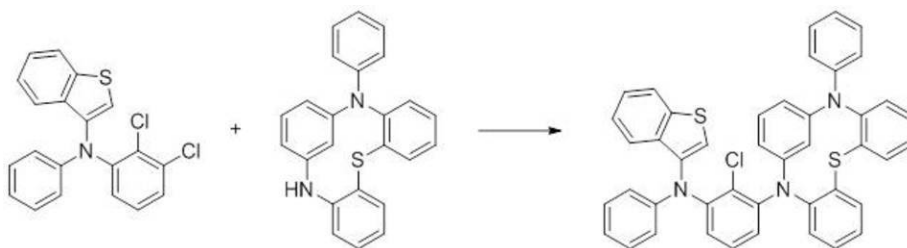
【0086】

MS (ESI) calcd for Chemical Formula (化学式の計算値):  $C_{24}H_{19}N_2S$  (Pos) 367.13, found 367.1

30

【0087】

合成例1-2．中間体A-2の合成



40

A - 2 a            A - 1            A - 2

【0088】

反応器に、文献 (米国特許公開公報 US 2020 / 395553 A 1) を参考にして合成した A - 2 a (12.0 g)、A - 1 (11.9 g)、ビス(トリ-tert-ブチルホスフィン)パラジウム(0) (0.33 g)、ナトリウムtert-ブトキシド (6.23 g)、トルエン (120 mL) を投入し、18時間還流撹拌した。常温に冷却した後、水 (50 mL) を投入した。酢酸エチルで有機層を抽出し、減圧濃縮した後、シリカゲルカラムクロマトグラフィーで A - 2 を分離した。(17.8 g、収率78.4%)

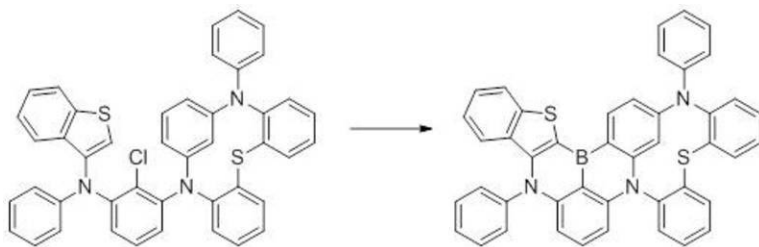
50

【0089】

MS (ESI) calcd for Chemical Formula: C<sub>44</sub>H<sub>31</sub>ClN<sub>3</sub>S<sub>2</sub> (Pos) 700.17, found 700.1

【0090】

合成例 1 - 3 . 化合物 A の合成



10

A - 2

A

【0091】

反応器に A - 2 (12.0 g)、tert - ブチルベンゼン (120 mL) を投入した後、- 60 で 1.7 M の tert - ブチルリチウム (30.2 mL) を滴加した。60 に昇温後、2 時間攪拌した。- 60 に冷却した後、三臭化ホウ素 (3.3 mL) を滴加した。常温に昇温後、1 時間攪拌した後、0 に冷却後、N, N - ジイソプロピルエチルアミン (6.0 mL) を滴加した。120 に昇温後、16 時間攪拌した。常温に冷却後、水 (50 mL)、酢酸ナトリウム (2.8 g) を投入した。酢酸エチルで有機層を抽出し、減圧濃縮した後、シリカゲルカラムクロマトグラフィーで化合物 A を分離した。(2.1 g、収率 18.2%)

20

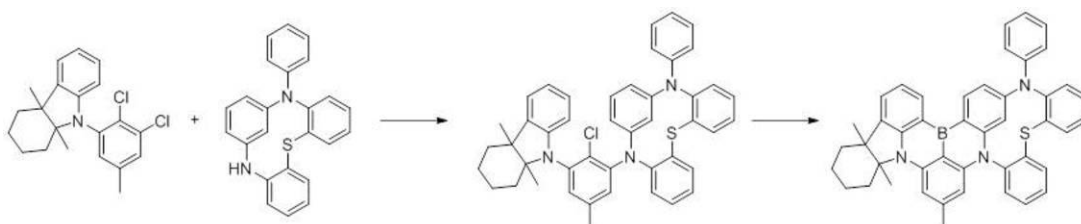
【0092】

MS (ESI) calcd for Chemical Formula: C<sub>44</sub>H<sub>29</sub>BN<sub>3</sub>S<sub>2</sub> (Pos) 674.19, found 674.1

【0093】

合成例 2 . 化合物 B の製造

合成例 2 - 1 . 化合物 B の合成



30

B - 1

A - 1

B - 2

B

【0094】

中間体 A - 2 a の代わりに、文献 (韓国登録特許公報 KR 2239994 B1) を参考にして合成した B - 1 を用いた以外は、前記合成例 1 と同様の方法で合成して、中間体 B - 2 から化合物 B を得た。(17.9%)

40

【0095】

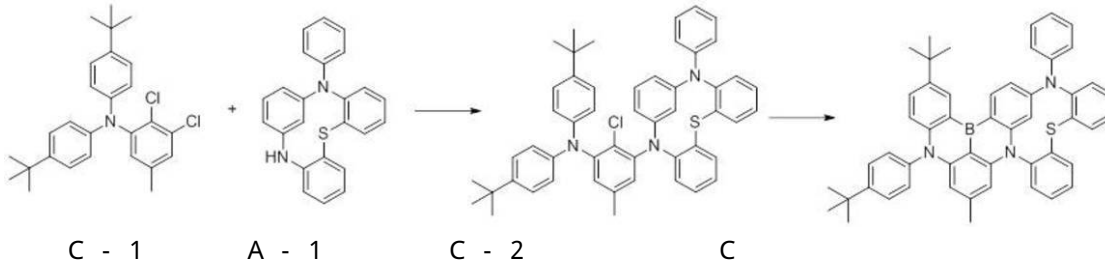
MS (ESI) calcd for Chemical Formula: C<sub>45</sub>H<sub>39</sub>BN<sub>3</sub>S (Pos) 664.30, found 664.3

【0096】

合成例 3 . 化合物 C の製造

合成例 3 - 1 . 化合物 C の合成

50



【0097】

中間体 A - 2 a の代わりに、文献（韓国特許公開公報 KR 2020 - 00909015 8 A）を参考にして合成した C - 1 を用いた以外は、前記合成例 1 と同様の方法で合成して、中間体 C - 2 から化合物 C を得た。（19.3%）

10

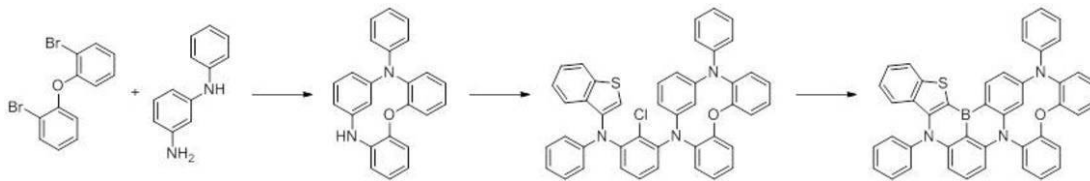
【0098】

MS (ESI) calcd for Chemical Formula:  $C_{51}H_{47}BN_3S$  (Pos) 744.36, found 744.3

【0099】

合成例 4 . 化合物 D の製造

合成例 4 - 1 . 化合物 D の合成



D - 1    A - 1 b    D - 2            D - 3            D

【0100】

中間体 A - 1 a の代わりに、文献（Angewandte Chemie - International Edition, 2018, vol. 57, # 38, p. 12380 - 12384）を参考にして合成した D - 1 を用いた以外は、前記合成例 1 と同様の方法で合成して、中間体 D - 3 から化合物 D を得た。（20.2%）

20

30

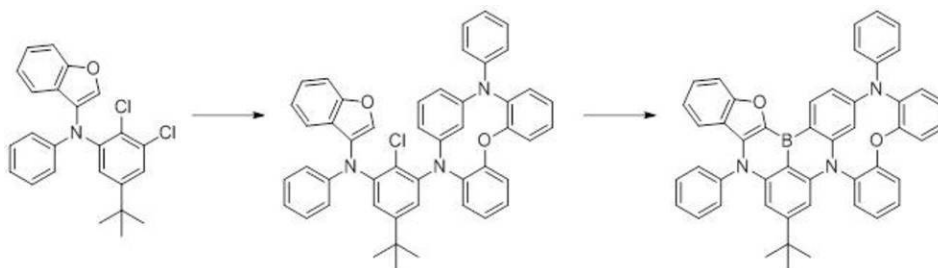
【0101】

MS (ESI) calcd for Chemical Formula:  $C_{44}H_{29}BN_3OS$  (Pos) 658.21, found 658.2

【0102】

合成例 5 . 化合物 E の製造

合成例 5 - 1 . 化合物 E の合成



E - 1            E - 2            E

【0103】

中間体 A - 2 a の代わりに文献（米国特許公開公報 US 2020 / 172558 A 1）を参考にして合成した E - 1 を使い、中間体 A - 1 の代わりに D - 2 を用いた以外は、前記合成例 1 と同様の方法で合成して、中間体 E - 2 から化合物 E を得た。（16.7%）

40

50

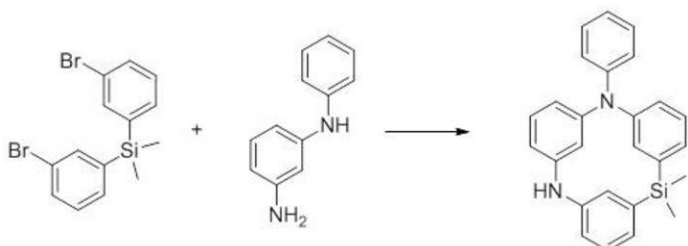
## 【0104】

MS (ESI) calcd for Chemical Formula:  $C_{44}H_{29}BN_3O_2$  (Pos) 642.24, found 642.2

## 【0105】

合成例6. 化合物Fの製造

合成例6-1. 中間体F-1の合成



10

F-1a      A-1b      F-1

## 【0106】

中間体A-1aの代わりに、文献(Journal of Organometallic Chemistry, 2013, vol. 735, p. 58-64)を参考にして合成したF-1aを用いた以外は、前記合成例1と同様の方法で合成して、中間体A-1bから中間体F-1を得た。(30.3%)

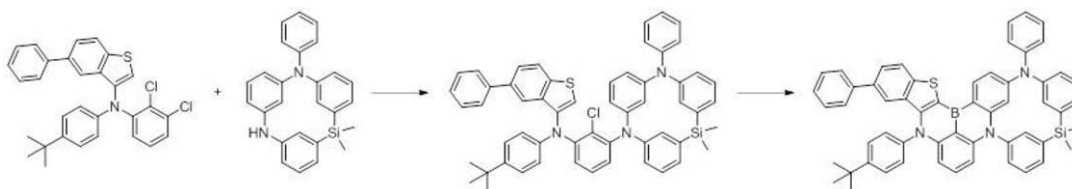
20

## 【0107】

MS (ESI) calcd for Chemical Formula:  $C_{26}H_{25}N_2Si$  (Pos) 393.18, found 393.1

## 【0108】

合成例6-2. 化合物Fの合成



30

F-2      F-1      F-3      F

## 【0109】

中間体A-2aの代わりに文献(米国特許公開公報US 2020/172558A1)を参考にして合成したF-2を用い、中間体A-1の代わりにF-1を用いた以外は、前記合成例1と同様の方法で合成して、中間体F-3から化合物Fを得た。(24.8%)

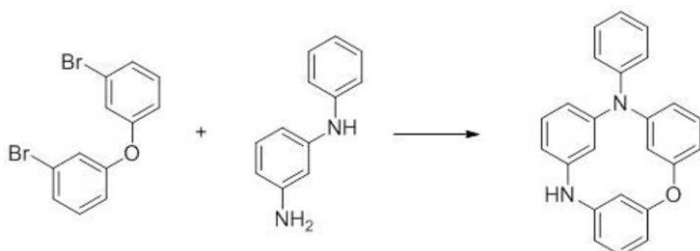
## 【0110】

MS (ESI) calcd for Chemical Formula:  $C_{56}H_{47}BN_3SSi$  (Pos) 832.34, found 832.3

## 【0111】

合成例7. 化合物Gの製造

合成例7-1. 中間体G-1の合成



50

G - 1 a      A - 1 b      G - 1  
 【 0 1 1 2 】

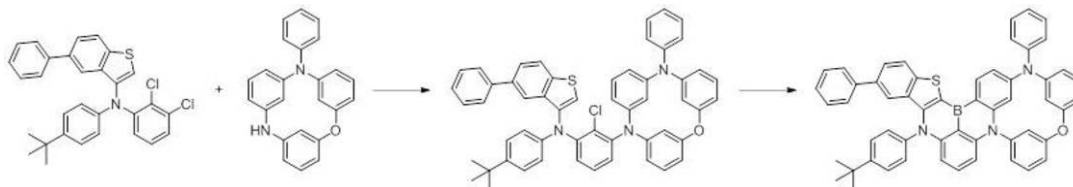
中間体 A - 1 a の代わりに、文献 ( *C h e m i s t r y - A E u r o p e a n J o u r n a l* , 2 0 1 0 , v o l . 1 6 , # 4 1 , p . 1 2 2 9 9 - 1 2 3 0 2 ) を参考にして合成した G - 1 a を用いた以外は、前記合成例 1 と同様の方法で合成して、中間体 A - 1 b から中間体 G - 1 を得た。( 3 3 . 1 % )

【 0 1 1 3 】

M S ( E S I ) c a l c d f o r C h e m i c a l F o r m u l a : C <sub>24</sub>H<sub>19</sub>N<sub>2</sub>O ( P o s ) 3 5 1 . 1 5 , f o u n d 3 5 1 . 1

【 0 1 1 4 】

合成例 7 - 2 . 化合物 G の合成



F - 2      G - 1      G - 2      G  
 【 0 1 1 5 】

中間体 A - 2 a の代わりに文献 ( 米国特許公開公報 U S 2 0 2 0 / 1 7 2 5 5 8 A 1 ) を参考にして合成した F - 2 を使い、中間体 A - 1 の代わりに G - 1 を用いた以外は、前記合成例 1 と同様の方法で合成して、中間体 G - 2 から化合物 G を得た。( 2 3 . 0 % )

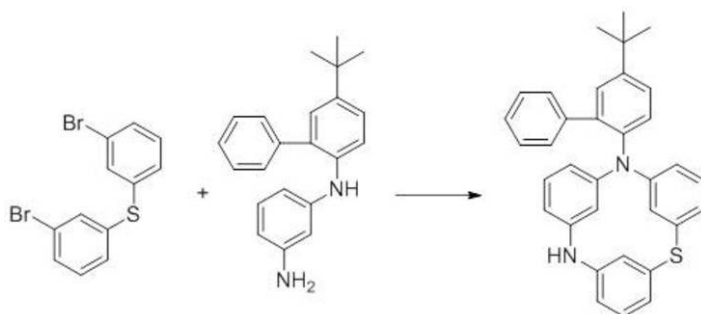
【 0 1 1 6 】

M S ( E S I ) c a l c d f o r C h e m i c a l F o r m u l a : C <sub>54</sub>H<sub>41</sub>B N<sub>3</sub>O S ( P o s ) 7 9 0 . 3 1 , f o u n d 7 9 0 . 3

【 0 1 1 7 】

合成例 8 . 化合物 H の製造

合成例 8 - 1 . 中間体 H - 1 の合成



H - 1 a      H - 1 b      H - 1  
 【 0 1 1 8 】

中間体 A - 1 a の代わりに文献 ( *C e l l C h e m i c a l B i o l o g y* , 2 0 2 0 , v o l . 2 7 , # 8 , p . 1 0 6 3 - 1 0 7 2 ) を参考にして合成した H - 1 a を使い、中間体 A - 1 b の代わりに H - 1 b を用いた以外は、前記合成例 1 と同様の方法で合成して、中間体 H - 1 b から中間体 H - 1 を得た。( 1 7 . 1 % )

【 0 1 1 9 】

M S ( E S I ) c a l c d f o r C h e m i c a l F o r m u l a : C <sub>58</sub>H<sub>51</sub>B N<sub>3</sub>S ( P o s ) 8 3 2 . 4 0 , f o u n d 8 3 2 . 4

【 0 1 2 0 】

合成例 8 - 2 . 化合物 H の合成

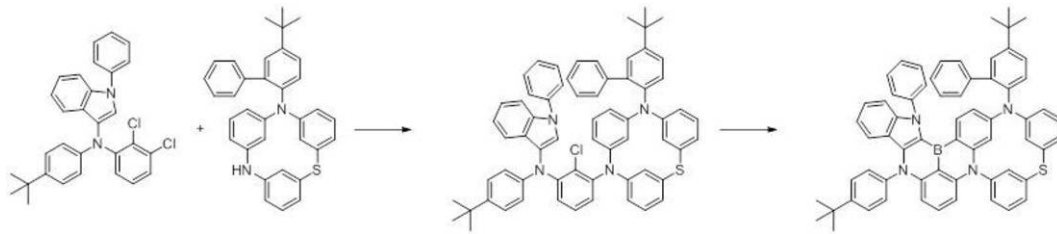
10

20

30

40

50



H - 2      H - 1      H - 3      H

【0121】

中間体 A - 2 a の代わりに文献 ( 米国特許公開公報 US 2020 / 172558A1 ) を参考にして合成した H - 2 を使い、中間体 A - 1 の代わりに H - 1 を用いた以外は、前記合成例 1 と同様の方法で合成して、中間体 H - 3 から化合物 H を得た。( 17.9% )

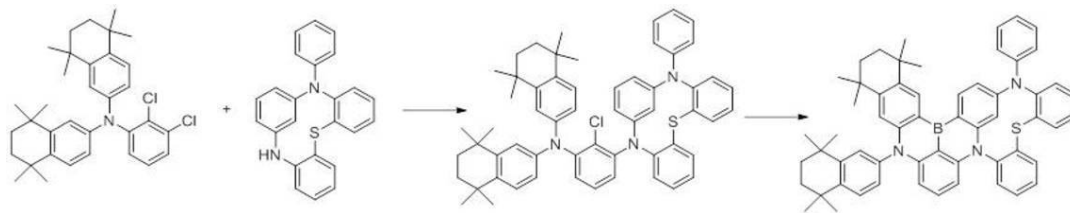
【0122】

MS ( ESI ) calcd for Chemical Formula : C<sub>64</sub>H<sub>54</sub>BN<sub>4</sub>S ( Pos ) 921.42 , found 921.4

【0123】

合成例 9 . 化合物 I の製造

合成例 9 - 1 . 化合物 I の合成



I - 1      A - 1      I - 2      I

【0124】

中間体 A - 2 a の代わりに、文献 ( 米国特許公開公報 US 2018 / 0094000A1 ) を参考にして合成した I - 1 を用いた以外は、前記合成例 1 と同様の方法で合成して、中間体 I - 2 から化合物 I を得た。( 22.6% )

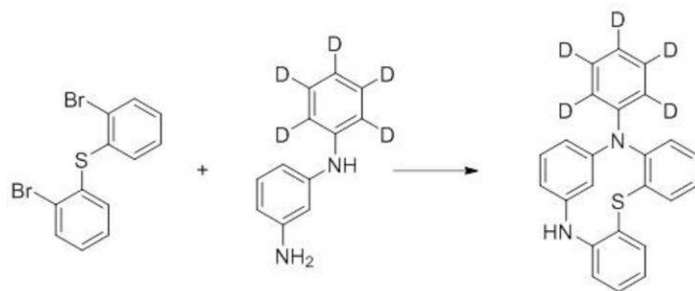
【0125】

MS ( ESI ) calcd for Chemical Formula : C<sub>58</sub>H<sub>57</sub>BN<sub>3</sub>S ( Pos ) 838.44 , found 838.4

【0126】

合成例 10 . 化合物 J の製造

合成例 10 - 1 . 中間体 J - 1 の合成



A - 1 a      J - 1 a      J - 1

【0127】

中間体 A - 1 b の代わりに J - 1 a を用いた以外は、前記合成例 1 と同様の方法で合成して、中間体 J - 1 a から中間体 J - 1 を得た。( 30.0% )

10

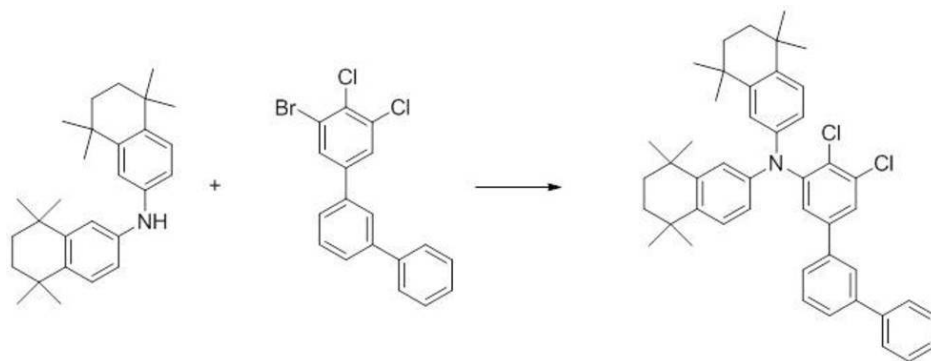
20

30

40

50





K - 1 a                      K - 1 b                      K - 1

【0136】

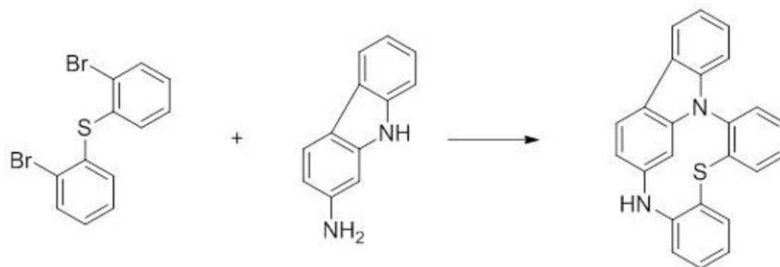
反応器に、文献(Tetrahedron, 2014, vol. 70, # 32, p. 4754 - 4759)を参考にして合成したK - 1 a (15.0 g)、文献(中国特許公開公報CN106674210)と文献(米国特許公開公報US2020/172558A1)を参考にして合成したK - 1 b (29.1 g)、ビス(トリ-tert-ブチルホスフィン)パラジウム(0) (0.39 g)、ナトリウムtert-ブトキシド(7.4 g)、トルエン(150 mL)を投入し、12時間還流撹拌した。常温に冷却した後、水(60 mL)を投入した。酢酸エチルで有機層を抽出し、減圧濃縮した後、シリカゲルカラムクロマトグラフィーでK - 1を分離した。(19.3 g、収率73.0%)

【0137】

MS (ESI) calcd for Chemical Formula: C<sub>46</sub>H<sub>50</sub>Cl<sub>2</sub>N (Pos) 686.33, found 686.3

【0138】

合成例11-2. 中間体K-2の合成



A - 1 a                      K - 2 a                      K - 2

【0139】

中間体A - 2 aの代わりに、文献(Tetrahedron Letters, 2018, vol. 59, # 22, p. 2145 - 2149)を参考にして合成したK - 2 aを用いた以外は、前記合成例1と同様の方法で合成して、中間体K - 2 aから中間体K - 2を得た。(21.4%)

【0140】

MS (ESI) calcd for Chemical Formula: C<sub>24</sub>H<sub>17</sub>N<sub>2</sub>S (Pos) 365.11, found 365.1

【0141】

合成例11-3. 中間体K-3の合成

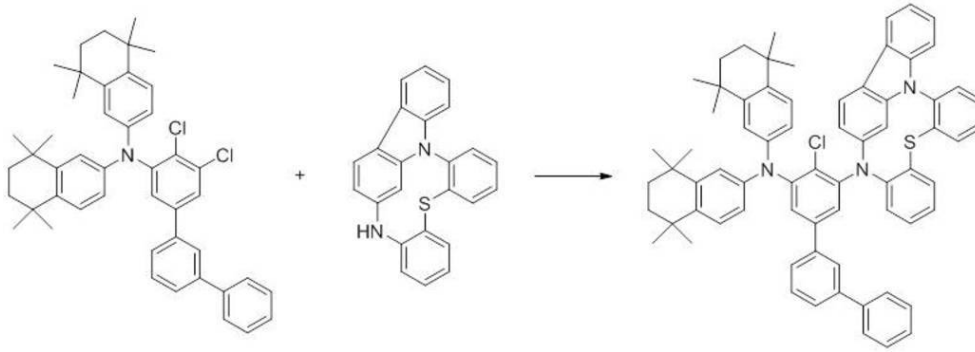
10

20

30

40

50



10

K - 1                      K - 2                      K - 3

【0142】

前記合成例1と同様の方法で合成して、中間体K-1から中間体K-3を得た。(79.5%)

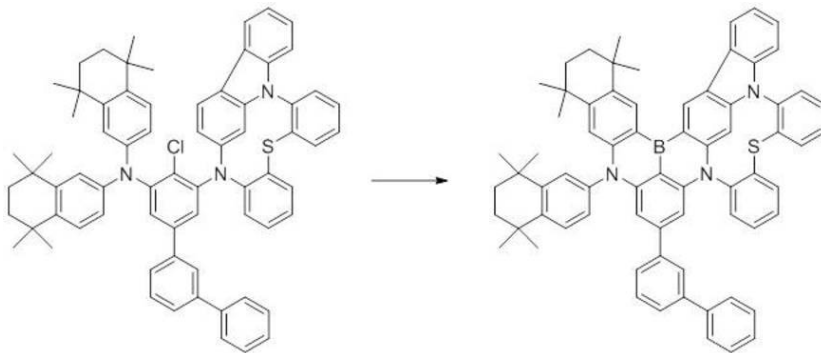
【0143】

MS (ESI) calcd for Chemical Formula:  $C_{70}H_{65}ClN_3S$  (Pos) 1014.46, found 1014.4

【0144】

合成例11-4. 化合物Kの合成

20



30

K - 3                                      K

【0145】

前記合成例1と同様の方法で合成して、中間体K-3から化合物Kを得た。(19.5%)

【0146】

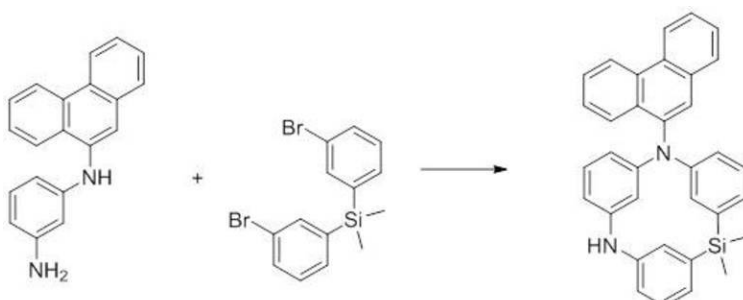
MS (ESI) calcd for Chemical Formula:  $C_{70}H_{63}BN_3S$  (Pos) 988.49, found 988.4

【0147】

合成例12. 化合物Lの製造

40

合成例12-1. 中間体L-1の合成



50

L - 1 a          F - 1 a          L - 1  
 【 0 1 4 8 】

前記合成例 1 と同様の方法で合成して、文献 ( *Tetrahedron* , 2 0 1 9 , v o l . 7 5 , # 6 , p . 7 2 1 - 7 3 1 ) を参考にして合成した中間体 L - 1 a 及び中間体 F - 1 a から中間体 L - 1 を得た。( 2 8 . 9 % )

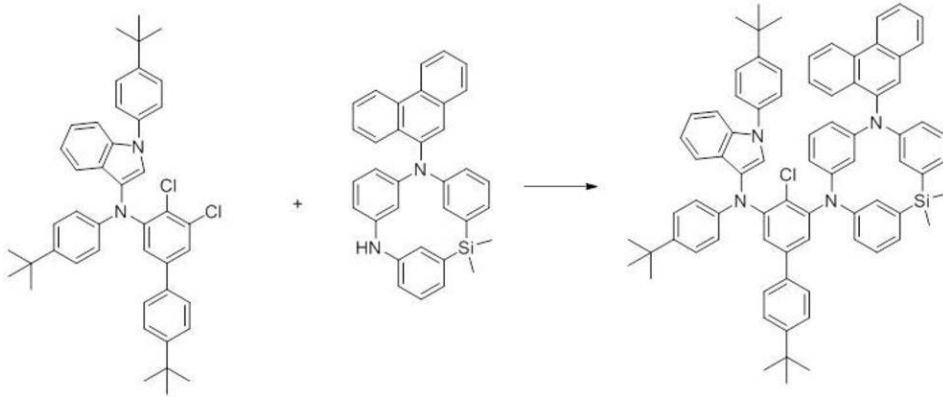
【 0 1 4 9 】

MS ( ESI ) calcd for Chemical Formula : C<sub>34</sub>H<sub>29</sub>N<sub>2</sub>Si ( Pos ) 4 9 3 . 2 1 , found 4 9 3 . 2

【 0 1 5 0 】

合成例 1 2 - 2 . 中間体 L - 2 の合成

10



20

L - 2 a          L - 1          L - 2  
 【 0 1 5 1 】

前記合成例 1 と同様の方法で合成して、文献 ( 米国特許公開公報 US 2 0 2 0 / 1 7 2 5 5 8 A 1 ) を参考にして合成した中間体 L - 2 a 及び中間体 L - 1 から中間体 L - 2 を得た。( 8 1 . 8 % )

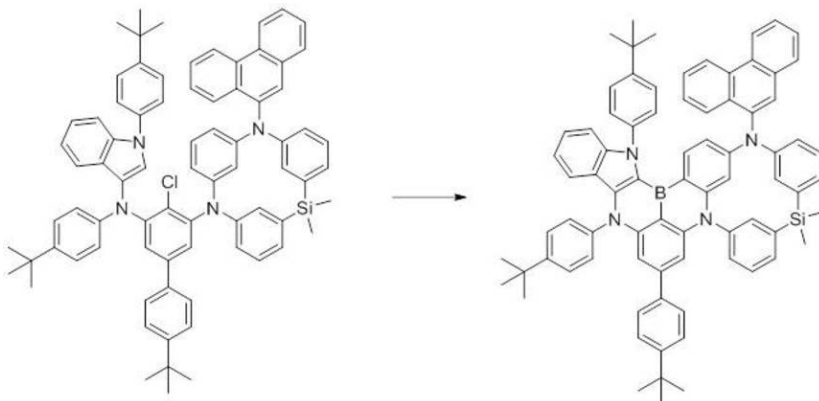
【 0 1 5 2 】

MS ( ESI ) calcd for Chemical Formula : C<sub>78</sub>H<sub>74</sub>Cl<sub>4</sub>Si ( Pos ) 1 1 2 9 . 5 4 , found 1 1 2 9 . 5

【 0 1 5 3 】

合成例 1 2 - 3 . 化合物 L の合成

30



40

L - 2          L  
 【 0 1 5 4 】

前記合成例 1 と同様の方法で合成して、中間体 L - 2 から化合物 L を得た。( 2 3 . 8 % )

【 0 1 5 5 】

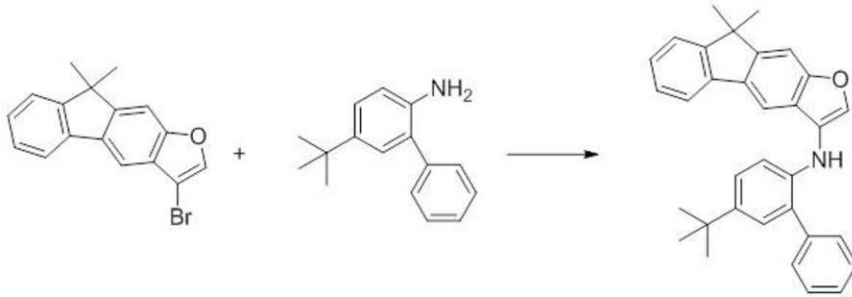
MS ( ESI ) calcd for Chemical Formula : C<sub>78</sub>H<sub>71</sub>

50

BN<sub>4</sub>Si (Pos) 1103.56, found 1103.5  
【0156】

合成例13. 化合物Mの製造

合成例13-1. 中間体M-1の合成



10

M-1a                      M-1b                      M-1

【0157】

反応器に、文献(中国特許公開公報CN111303149A)を参考にして合成した中間体M-1a(23.0g)、文献(Angewandte Chemie - International Edition, 2015, vol. 54, #51, p. 15385-15389)を参考にして合成したM-1b(16.6g)、トリス(ジベンジリデンアセトン)ジパラジウム(0)(1.34g)、ビス(ジフェニルホスフィノ)-1,1'-ピナフチル(0.91g)、ナトリウムtert-ブトキシド(14.1g)、トルエン(230mL)を投入し、18時間還流撹拌した。常温に冷却した後、水(100mL)を投入した後、有機層を分離した。シリカゲルクロマトグラフィーで分離して、中間体M-1を得た。(28.1g、83.6%)

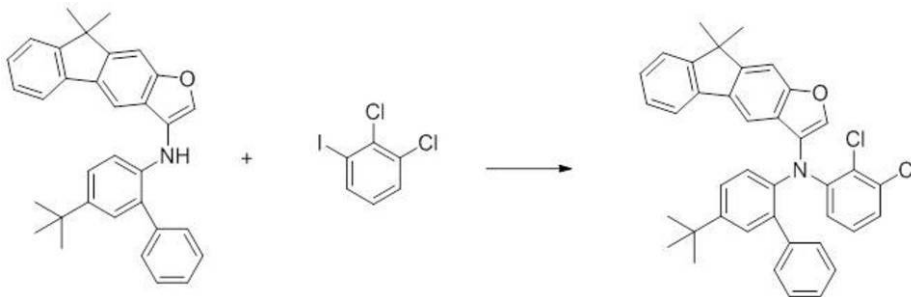
20

【0158】

MS (ESI) calcd for Chemical Formula: C<sub>33</sub>H<sub>32</sub>NO (Pos) 458.25, found 458.2

【0159】

合成例13-2. 中間体M-2の合成



30

M-1                      M-2a                      M-2

【0160】

前記合成例11と同様の方法で合成して、中間体M-1及びM-2aから化合物M-2を得た。(42.7%)

40

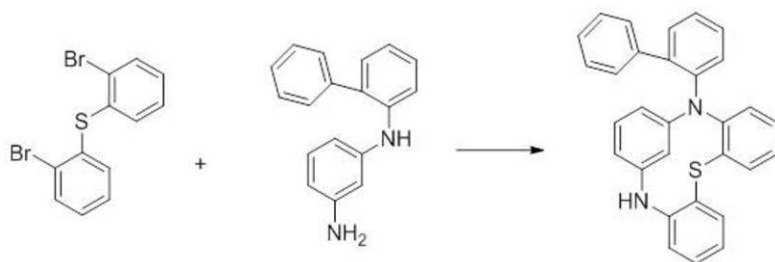
【0161】

MS (ESI) calcd for Chemical Formula: C<sub>39</sub>H<sub>34</sub>Cl<sub>2</sub>NO (Pos) 602.20, found 602.2

【0162】

合成例13-3. 中間体M-3の合成

50



A - 1 a          M - 3 a          M - 3

【0163】

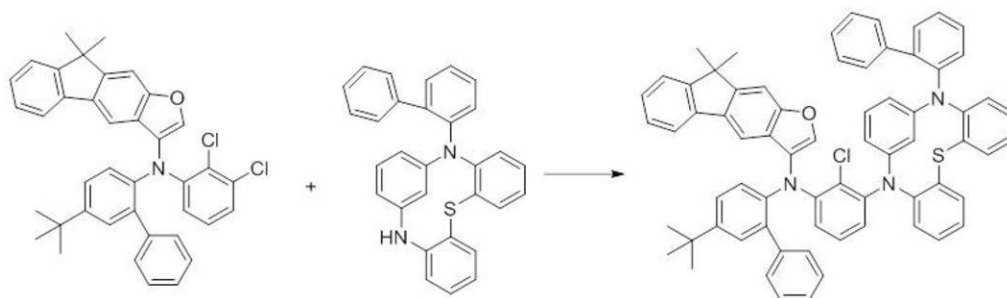
中間体 A - 1 b の代わりに、文献 ( *Tetrahedron* , 2019 , vol . 75 , # 6 , p . 721 - 731 ) を参考にして合成した M - 3 a を用いた以外は、前記合成例 1 と同様の方法で合成して、中間体 M - 3 a から中間体 M - 3 を得た。( 25 . 7 % )

【0164】

MS ( ESI ) calcd for Chemical Formula : C<sub>30</sub>H<sub>23</sub>N<sub>2</sub>S ( Pos ) 443 . 16 , found 443 . 1

【0165】

合成例 13 - 4 . 中間体 M - 4 の合成



M - 2                  M - 3                  M - 4

【0166】

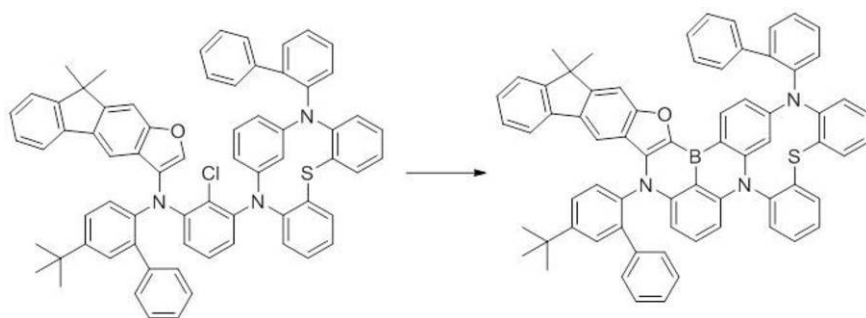
前記合成例 1 と同様の方法で合成して、中間体 M - 2 及び M - 3 から中間体 M - 4 を得た。( 80 . 0 % )

【0167】

MS ( ESI ) calcd for Chemical Formula : C<sub>69</sub>H<sub>55</sub>ClN<sub>3</sub>OS ( Pos ) 1008 . 38 , found 1008 . 3

【0168】

合成例 13 - 5 . 化合物 M の合成



M - 4                  M

【0169】

前記合成例 1 と同様の方法で合成して、中間体 M - 4 から化合物 M を得た。( 22 . 3 % )

10

20

30

40

50

## 【0170】

MS (ESI) calcd for Chemical Formula:  $C_{69}H_{53}BN_3OS$  (Pos) 982.40, found 982.4

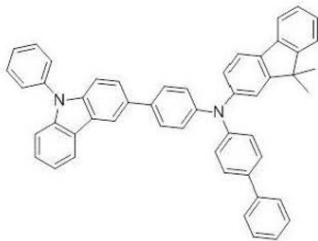
## 【0171】

実施例1～10：有機発光素子の製造

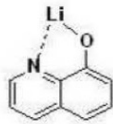
ITOガラスの発光面積が2mm×2mmのサイズとなるようにパターニングした後、洗浄した。前記ITOガラスを真空チャンバに装着した後、ベース圧力が $1 \times 10^{-7}$  torrとなるようにした後、前記ITO上に2-TNATA(4,4',4''-Tris[2-naphthyl(phenyl)amino]triphenylamine)(700)、化学式G(250)の順に成膜した。発光層のホストとドーパントとして、下記表1に記載された本発明に係る化合物を重量比(98:2)で混合して成膜(250)した後、その後、電子輸送層として化学式E-1と化学式E-2を1:1の比で300、電子注入層として化学式E-1を5、Al(1000)の順に成膜して、有機発光素子を製造した。前記有機発光素子の発光特性は0.4mAで測定した。

## 【0172】

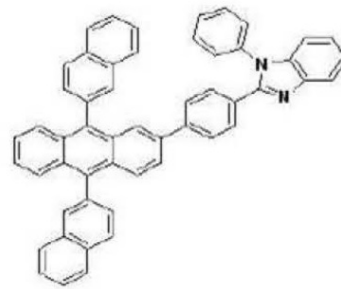
[化G]



[化E-1]



[化E-2]



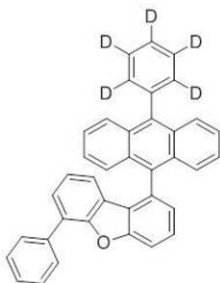
## 【0173】

比較例1～2

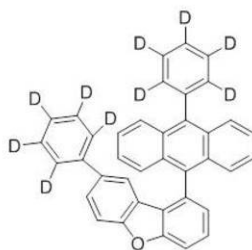
前記実施例の素子の構造において、発光層内に、本発明に係る化合物の代わりに、下記表1の比較例1～2に記載されたホスト化合物及びドーパント化合物を用いた以外は、同様にして有機発光素子を作製し、前記有機発光素子の発光特性は0.4mAで測定した。比較例1～2で用いられたBH1、BH2及びBD1の構造は、次の通りである。

## 【0174】

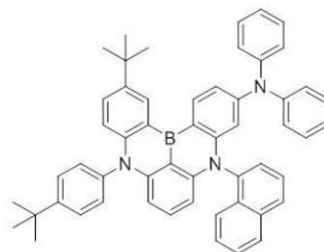
[BH1]



[BH2]



[BD1]



## 【0175】

前記実施例1～10と比較例1～2によって製造された有機発光素子に対して、電圧、外部量子効率及び寿命を測定し、その結果を下記表1に示した。

## 【0176】

10

20

30

40

50

【表 1】

区分	ホスト	ドーパント	電圧 (V)	外部量子効率 (%)	寿命 (LT97)
実施例 1	BH1	化合物 F	3.7	9.21	149
実施例 2	BH1	化合物 G	3.7	9.14	181
実施例 3	BH1	化合物 H	3.7	9.01	173
実施例 4	BH1	化合物 K	3.7	9.31	169
実施例 5	BH1	化合物 L	3.7	9.01	143
実施例 6	BH1	化合物 J	3.7	8.98	158
実施例 7	BH1	化合物 M	3.7	9.05	151
実施例 8	BH1	化合物 O	3.7	9.07	160
実施例 9	BH1	化合物 P	3.7	9.11	157
実施例 10	BH1	化合物 N	3.7	9.03	166
比較例 1	BH1	BD1	3.7	8.56	105
比較例 2	BH2	BD1	3.5	8.07	98

## 【0177】

前記表 1 に示されたように、本発明の化学式 I または化学式 II による化合物を、有機発光素子内の発光層のドーパント化合物として採用した有機発光素子は、本発明に係る化合物の特徴的な構造と対比して構造的な差を有する化合物 (BD1) を採用した素子に比べて、効率及び寿命特性が著しく向上した高効率および長寿命の有機発光素子を実現することができる。

## 【産業上の利用可能性】

## 【0178】

本発明に係る多環芳香族誘導体化合物は、素子内の有機層に採用されて高効率及び長寿命の有機発光素子を実現できるので、平板ディスプレイ装置、フレキシブルディスプレイ装置、単色又は白色の平板照明用装置、及び単色又は白色のフレキシブル照明用装置などで産業的に有用に活用することができる。

10

20

30

40

50

## フロントページの続き

## (51)国際特許分類

F I

H 1 0 K	50/18	(2023.01)	H 1 0 K	50/18
H 1 0 K	50/17	(2023.01)	H 1 0 K	50/17
H 1 0 K	50/12	(2023.01)	H 1 0 K	50/12
H 1 0 K	85/60	(2023.01)	H 1 0 K	85/60

## (33)優先権主張国・地域又は機関

韓国(KR)

ソク, オチャン - ウプ, グゥハクサンオブ5口89

## (72)発明者 ヤン, ヒョン - ソン

大韓民国, 28122 チュンチョンブク - ド, チョンジュ - シ, チョンウォン - ク, オチャン - ウプ, グゥハクサンオブ5口89

## (72)発明者 キム, ジ - ファン

大韓民国, 28122 チュンチョンブク - ド, チョンジュ - シ, チョンウォン - ク, オチャン - ウプ, グゥハクサンオブ5口89

## (72)発明者 ジョ, ヒョン - ジュン

大韓民国, 28122 チュンチョンブク - ド, チョンジュ - シ, チョンウォン - ク, オチャン - ウプ, グゥハクサンオブ5口89

## (72)発明者 チェ, ソン - ウン

大韓民国, 28122 チュンチョンブク - ド, チョンジュ - シ, チョンウォン - ク, オチャン - ウプ, グゥハクサンオブ5口89

審査官 増永 淳司

## (56)参考文献

中国特許出願公開第111574544 (CN, A)

中国特許出願公開第111574543 (CN, A)

韓国公開特許第10-2020-0090123 (KR, A)

韓国公開特許第10-2018-0112721 (KR, A)

国際公開第2016/152418 (WO, A1)

韓国公開特許第10-2020-0066208 (KR, A)

中国特許出願公開第111153919 (CN, A)

## (58)調査した分野 (Int.Cl., D B名)

C 0 7 F 5 / 0 2

C 0 7 F 7 / 1 0

C 0 9 K 1 1 / 0 6

H 1 0 K 5 0 / 1 5

H 1 0 K 5 0 / 1 6

H 1 0 K 5 0 / 1 8

H 1 0 K 5 0 / 1 7

H 1 0 K 5 0 / 1 2

H 1 0 K 8 5 / 6 0

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