

(19)日本国特許庁(JP)

(12)特許公報(B2)

(11)特許番号
特許第7353034号
(P7353034)

(45)発行日 令和5年9月29日(2023.9.29)

(24)登録日 令和5年9月21日(2023.9.21)

(51)国際特許分類

F I

H 1 0 K 85/60 (2023.01)

H 1 0 K 85/60

H 1 0 K 50/15 (2023.01)

H 1 0 K 50/15

H 1 0 K 50/11 (2023.01)

H 1 0 K 50/11

C 0 9 K 11/06 (2006.01)

C 0 9 K 11/06 6 9 0

C 0 7 D 405/12 (2006.01)

C 0 9 K 11/06 6 2 5

請求項の数 18 (全157頁) 最終頁に続く

(21)出願番号 特願2018-237684(P2018-237684)

(22)出願日 平成30年12月19日(2018.12.19)

(65)公開番号 特開2019-114788(P2019-114788
A)

(43)公開日 令和1年7月11日(2019.7.11)

審査請求日 令和3年10月26日(2021.10.26)

(31)優先権主張番号 10-2017-0176483

(32)優先日 平成29年12月20日(2017.12.20)

(33)優先権主張国・地域又は機関

韓国(KR)

(31)優先権主張番号 10-2018-0137609

(32)優先日 平成30年11月9日(2018.11.9)

(33)優先権主張国・地域又は機関

韓国(KR)

前置審査

(73)特許権者 512187343

三星ディスプレイ株式会社

Samsung Display Co.
, Ltd.大韓民国京畿道龍仁市器興区三星路 1
1, Samsung-ro, Gihe
ung-gu, Yongin-si,
Gyeonggi-do, Repub
lic of Korea

(74)代理人 110002619

弁理士法人PORT

(72)発明者 ジョンウー キム

大韓民国 京畿道 龍仁市 器興区 三星路
1 三星ディスプレイ株式会社内

(72)発明者 チャンヨル ペク

最終頁に続く

(54)【発明の名称】 アミン化合物、及びそれを含んだ有機発光素子

(57)【特許請求の範囲】

【請求項 1】

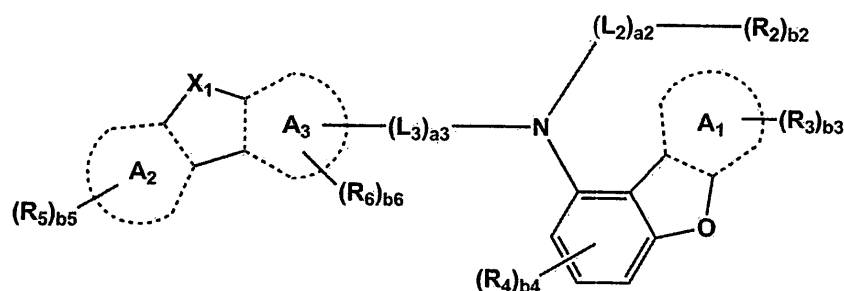
第 1 電極と、

前記第 1 電極に対向する第 2 電極と、

前記第 1 電極と前記第 2 電極との間に配置され、発光層を含んだ有機層と、を含み、

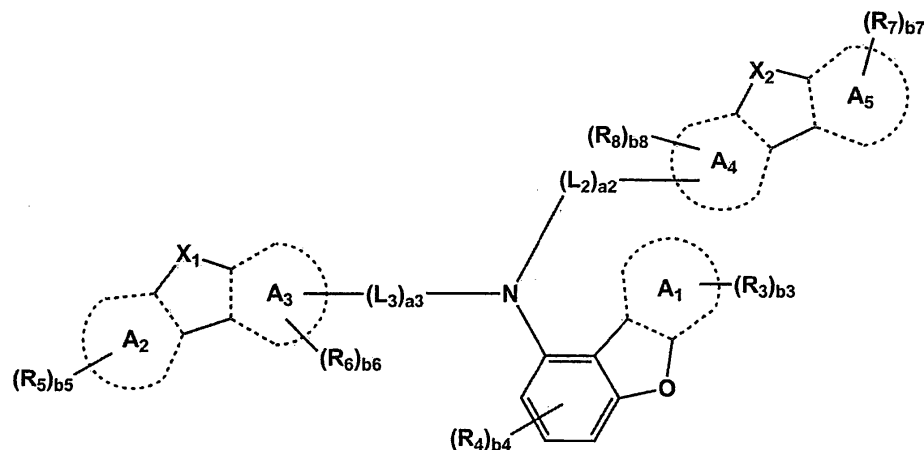
前記有機層が下記化学式 1 A または化学式 1 B で表わされるアミン化合物を 1 種以上含む有機発光素子。

【化 1】



・・・ (化学式 1 A)

【化 2】



・・・ (化学式 1 B)

(前記化学式 1 A 及び化学式 1 B において、

$A_1 \sim A_5$ は、互いに独立して、 $C_5 - C_{30}$ 炭素環式基及び $C_1 - C_{30}$ ヘテロ環式基のうちから選択され、

A_2 はフルオレン基ではなく、

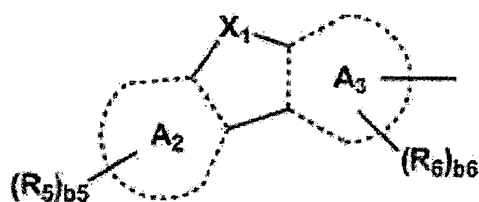
X_1 は、 $N - (L_1)_{a1} - (R_1)_{b1}$ であり、

X_2 は、 O 、 S または $C(R_{11})(R_{12})$ であり、

$L_1 \sim L_2$ は、互いに独立して、単結合、置換もしくは無置換の $C_5 - C_{60}$ 炭素環式基、及び置換もしくは無置換の $C_1 - C_{60}$ ヘテロ環式基のうちから選択され、

L_3 は、互いに独立して、単結合、置換もしくは無置換の $C_5 - C_{60}$ 炭素環式基のうちから選択され、

L_3 がフェニレン基の場合、



と N 原子とは、 L_3 のパラ位に互いに結合し、

$a_1 \sim a_3$ は、互いに独立して、 $1 \sim 5$ の整数のうちから選択され、

R_1 ないし R_8 、 R_{11} 、 R_{12} は、互いに独立して、水素原子、重水素原子、フッ素原子、塩素原子、臭素原子、ヨウ素原子、ヒドロキシル基、シアノ基、ニトロ基、アミノ基、アミジノ基、ヒドラジノ基、ヒドラゾノ基、置換もしくは無置換の $C_1 - C_{60}$ アルキル基、置換もしくは無置換の $C_2 - C_{60}$ アルケニル基、置換もしくは無置換の $C_2 - C_{60}$ アルキニル基、置換もしくは無置換の $C_1 - C_{60}$ アルコキシ基、置換もしくは無置換の $C_3 - C_{10}$ シクロアルキル基、置換もしくは無置換の $C_1 - C_{10}$ ヘテロシクロアルキル基、置換もしくは無置換の $C_3 - C_{10}$ シクロアルケニル基、置換もしくは無置換の $C_1 - C_{10}$ ヘテロシクロアルケニル基、置換もしくは無置換の $C_6 - C_{60}$ アリール基、置換もしくは無置換の $C_6 - C_{60}$ アリールオキシ基、置換もしくは無置換の $C_6 - C_{60}$ アリールチオ基、置換もしくは無置換の $C_1 - C_{60}$ ヘテロアリール基、置換もしくは無置換の一価の非芳香族縮合多環基、置換もしくは無置換の一価の非芳香族ヘテロ縮合多環基、 $-Si(Q_1)(Q_2)(Q_3)$ 、 $-B(Q_1)(Q_2)$ 、及び $-C(=O)(Q_1)$ のうちから選択され、

R_1 は、トリフェニレニル基ではなく、

R_3 は、カルバゾール基ではなく、

R_{11} 及び R_{12} は、選択的に、互いに結合されて置換もしくは無置換の C_5-C_{30} 炭素環式基、及び置換もしくは無置換の C_1-C_{30} ヘテロ環式基を形成する、或は形成せず、

$b_1 \sim b_3$ 、及び $b_5 \sim b_8$ は、互いに独立して、1～10の整数のうちから選択され、

b_4 は、1～3の整数のうちから選択され、前記置換された C_5-C_{60} 炭素環式基、置換された C_1-C_{60} ヘテロ環式基、置換された C_1-C_{60} アルキル基、置換された C_2-C_{60} アルケニル基、置換された C_2-C_{60} アルキニル基、置換された C_1-C_{60} アルコキシ基、置換された C_3-C_{10} シクロアルキル基、置換された C_1-C_{10} ヘテロシクロアルキル基、置換された C_3-C_{10} シクロアルケニル基、置換された C_1-C_{10} ヘテロシクロアルケニル基、置換された C_6-C_{60} アリール基、置換された C_6-C_{60} アリールオキシ基、置換された C_6-C_{60} アリールチオ基、置換された C_1-C_{60} ヘテロアリール基、置換された一価の非芳香族縮合多環基、及び置換された一価の非芳香族ヘテロ縮合多環基の置換基のうち少なくとも一つは、

重水素原子、フッ素原子、塩素原子、臭素原子、ヨウ素原子、ヒドロキシル基、シアノ基、ニトロ基、アミノ基、アミジノ基、ヒドラジノ基、ヒドラゾノ基、 C_1-C_{60} アルキル基、 C_2-C_{60} アルケニル基、 C_2-C_{60} アルキニル基及び C_1-C_{60} アルコキシ基；

重水素原子、フッ素原子、塩素原子、臭素原子、ヨウ素原子、ヒドロキシル基、シアノ基、ニトロ基、アミノ基、アミジノ基、ヒドラジノ基、ヒドラゾノ基、 C_3-C_{10} シクロアルキル基、 C_1-C_{10} ヘテロシクロアルキル基、 C_3-C_{10} シクロアルケニル基、 C_1-C_{10} ヘテロシクロアルケニル基、 C_6-C_{60} アリール基、 C_6-C_{60} アリールオキシ基、 C_6-C_{60} アリールチオ基、 C_1-C_{60} ヘテロアリール基、一価の非芳香族縮合多環基、一価の非芳香族ヘテロ縮合多環基、 $-Si(Q_{11})(Q_{12})(Q_{13})$ 、 $-N(Q_{11})(Q_{12})$ 、 $-B(Q_{11})(Q_{12})$ 、 $-C(=O)(Q_{11})$ 、 $-S(=O)_2(Q_{11})$ 及び $-P(=O)(Q_{11})(Q_{12})$ のうちから選択された少なくとも一つで置換された、 C_1-C_{60} アルキル基、 C_2-C_{60} アルケニル基、 C_2-C_{60} アルキニル基及び C_1-C_{60} アルコキシ基；

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

重水素原子、フッ素原子、塩素原子、臭素原子、ヨウ素原子、ヒドロキシル基、シアノ基、ニトロ基、アミノ基、アミジノ基、ヒドラジノ基、ヒドラゾノ基、 C_1-C_{60} アルキル基、 C_2-C_{60} アルケニル基、 C_2-C_{60} アルキニル基、 C_1-C_{60} アルコキシ基、 C_3-C_{10} シクロアルキル基、 C_1-C_{10} ヘテロシクロアルキル基、 C_3-C_{10} シクロアルケニル基、 C_1-C_{10} ヘテロシクロアルケニル基、 C_6-C_{60} アリール基、 C_6-C_{60} アリールオキシ基、 C_6-C_{60} アリールチオ基、 C_1-C_{60} ヘテロアリール基、一価の非芳香族縮合多環基、一価の非芳香族ヘテロ縮合多環基、ビフェニル基、ターフェニル基、 $-Si(Q_{21})(Q_{22})(Q_{23})$ 、 $-N(Q_{21})(Q_{22})$ 、 $-B(Q_{21})(Q_{22})$ 、 $-C(=O)(Q_{21})$ 、 $-S(=O)_2(Q_{21})$ 及び $-P(=O)(Q_{21})(Q_{22})$ のうちから選択された少なくとも一つで置換された、 C_3-C_{10} シクロアルキル基、 C_1-C_{10} ヘテロシクロアルキル基、 C_3-C_{10} シクロアルケニル基、 C_1-C_{10} ヘテロシクロアルケニル基、 C_6-C_{60} アリール基、 C_6-C_{60} アリールオキシ基、 C_6-C_{60} アリールチオ基、 C_1-C_{60} ヘテロアリール基、一価の非芳香族縮合多環基、一価の非芳香族ヘテロ縮合多環基、ビフェニル基及びターフェニル基；並びに

$-Si(Q_{31})(Q_{32})(Q_{33})$ 、 $-N(Q_{31})(Q_{32})$ 、 $-B(Q_{31})(Q_{32})$ 、 $-C(=O)(Q_{31})$ 、 $-S(=O)_2(Q_{31})$ 及び $-P(=O)(Q_{31})$

10

20

30

40

50

(Q_{32}) ; のうちから選択され、

前記 $Q_1 \sim Q_3$ 、 $Q_{11} \sim Q_{13}$ 、 $Q_{21} \sim Q_{23}$ 、及び $Q_{31} \sim Q_{33}$ は、互いに独立して、水素原子、重水素原子、フッ素原子、塩素原子、臭素原子、ヨウ素原子、ヒドロキシル基、シアノ基、ニトロ基、アミノ基、アミジノ基、ヒドラジノ基、ヒドラゾノ基、 $C_1 - C_{60}$ アルキル基、 $C_2 - C_{60}$ アルケニル基、 $C_2 - C_{60}$ アルキニル基、 $C_1 - C_{60}$ アルコキシ基、 $C_3 - C_{10}$ シクロアルキル基、 $C_1 - C_{10}$ ヘテロシクロアルキル基、 $C_3 - C_{10}$ シクロアルケニル基、 $C_1 - C_{10}$ ヘテロシクロアルケニル基、 $C_6 - C_{60}$ アリール基、 $C_1 - C_{60}$ アルキル基で置換された $C_6 - C_{60}$ アリール基、 $C_1 - C_{60}$ ヘテロアリール基、一価の非芳香族縮合多環基、一価の非芳香族ヘテロ縮合多環基、ビフェニル基、及びターフェニル基のうちから選択される。) 10

【請求項 2】

前記第 1 電極がアノードであり、

前記第 2 電極がカソードであり、

前記有機層は、前記第 1 電極と前記発光層との間に配置された正孔輸送領域、及び前記発光層と前記第 2 電極との間に配置された電子輸送領域をさらに含み、

前記正孔輸送領域は、正孔注入層、正孔輸送層、発光補助層、電子阻止層、またはそれらの任意の組み合わせを含み、

前記電子輸送領域は、正孔阻止層、電子輸送層、電子注入層、またはそれらの任意の組み合わせを含むことを特徴とする請求項 1 に記載の有機発光素子。 20

【請求項 3】

前記正孔輸送領域が、前記アミン化合物を含むことを特徴とする請求項 2 に記載の有機発光素子。

【請求項 4】

前記正孔輸送領域が正孔輸送層を含み、前記正孔輸送層が、前記アミン化合物を含むことを特徴とする請求項 2 に記載の有機発光素子。

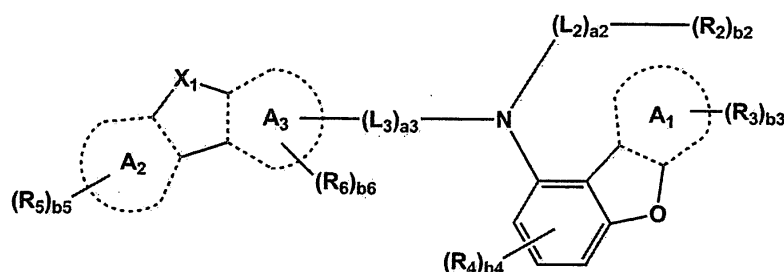
【請求項 5】

前記発光層が、スチリル系化合物、アントラセン系化合物、ピレン系化合物及びスピロ-ビフルオレン系化合物のうち少なくとも一つを含むことを特徴とする請求項 1 に記載の有機発光素子。

【請求項 6】 30

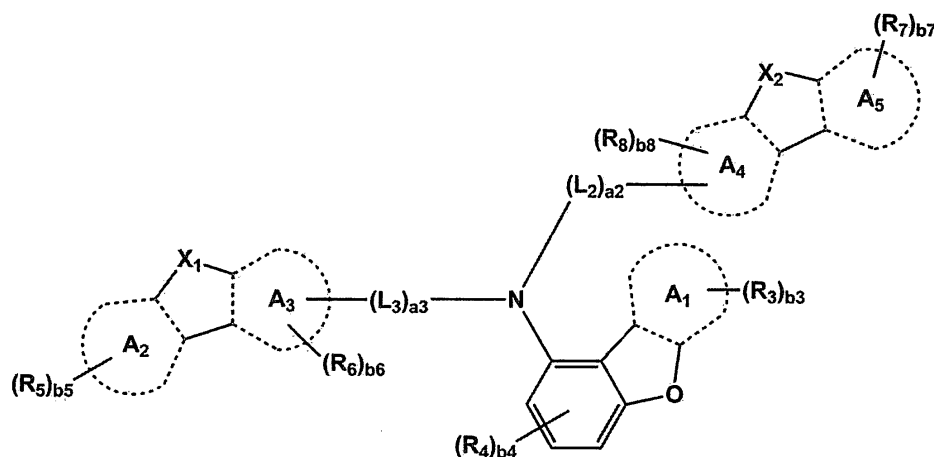
下記化学式 1 A または 1 B で表わされるアミン化合物。

【化 4】



... (化学式 1 A)

【化 5】



・・・ (化学式 1 B)

(前記化学式 1 A 及び化学式 1 B において、

$A_1 \sim A_5$ は、互いに独立して、 $C_5 - C_{30}$ 炭素環式基及び $C_1 - C_{30}$ ヘテロ環式基のうちから選択され、

A_2 はフルオレン基ではなく、

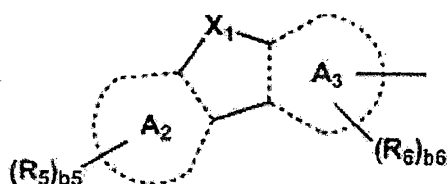
X_1 は、 $N - (L_1) A_1 - (R_1) b_1$ であり、

X_2 は、 O 、 S または $C(R_{11})(R_{12})$ であり、

$L_1 \sim L_2$ は、互いに独立して、単結合、置換もしくは無置換の $C_5 - C_{60}$ 炭素環式基、及び置換もしくは無置換の $C_1 - C_{60}$ ヘテロ環式基のうちから選択され、

L_3 は、互いに独立して、単結合、及び置換もしくは無置換の $C_5 - C_{60}$ 炭素環式基のうちから選択され、

L_3 がフェニレン基の場合、



と N 原子とは、 L_3 のパラ位に互いに結合し、

$a_1 \sim a_3$ は、互いに独立して、 $1 \sim 5$ の整数のうちから選択され、

$R_1 \sim R_8$ 、 R_{11} 、 R_{12} は、互いに独立して、水素原子、重水素原子、フッ素原子、塩素原子、臭素原子、ヨウ素原子、ヒドロキシル基、シアノ基、ニトロ基、アミノ基、アミジノ基、ヒドラジノ基、ヒドラゾノ基、置換もしくは無置換の $C_1 - C_{60}$ アルキル基、置換もしくは無置換の $C_2 - C_{60}$ アルケニル基、置換もしくは無置換の $C_2 - C_{60}$ アルキニル基、置換もしくは無置換の $C_1 - C_{60}$ アルコキシ基、置換もしくは無置換の $C_3 - C_{10}$ シクロアルキル基、置換もしくは無置換の $C_1 - C_{10}$ ヘテロシクロアルキル基、置換もしくは無置換の $C_3 - C_{10}$ シクロアルケニル基、置換もしくは無置換の $C_1 - C_{10}$ ヘテロシクロアルケニル基、置換もしくは無置換の $C_6 - C_{60}$ アリール基、置換もしくは無置換の $C_6 - C_{60}$ アリールオキシ基、置換もしくは無置換の $C_6 - C_{60}$ アリールチオ基、置換もしくは無置換の $C_1 - C_{60}$ ヘテロアリール基、置換もしくは無置換の一価の非芳香族縮合多環基、置換もしくは無置換の一価の非芳香族ヘテロ縮合多環基、 $-Si(Q_1)(Q_2)(Q_3)$ 、 $-B(Q_1)(Q_2)$ 、及び $-C(=O)(Q_1)$ のうちから選択され、

R_1 は、トリフェニレニル基ではなく、

R_3 は、カルバゾール基ではなく、

R_{11} 及び R_{12} は、選択的に、互いに結合されて置換もしくは無置換の C_5-C_{30} 炭素環式基、及び置換もしくは無置換の C_1-C_{30} ヘテロ環式基を形成する、或は形成せず、
 $b_1 \sim b_3$ 、及び $b_5 \sim b_8$ は、互いに独立して、1～10の整数のうちから選択され、
 b_4 は、1～3の整数のうちから選択され、

前記置換された C_5-C_{60} 炭素環式基、置換された C_1-C_{60} ヘテロ環式基、置換された C_1-C_{60} アルキル基、置換された C_2-C_{60} アルケニル基、置換された C_2-C_{60} アルキニル基、置換された C_1-C_{60} アルコキシ基、置換された C_3-C_{10} シクロアルキル基、置換された C_1-C_{10} ヘテロシクロアルキル基、置換された C_3-C_{10} シクロアルケニル基、置換された C_1-C_{10} ヘテロシクロアルケニル基、置換された C_6-C_{60} アリール基、置換された C_6-C_{60} アリールオキシ基、置換された C_6-C_{60} アリールチオ基、置換された C_1-C_{60} ヘテロアリール基、置換された一価非芳香族縮合多環基、及び置換された一価非芳香族ヘテロ縮合多環基の置換基のうち少なくとも一つは、

重水素原子、フッ素原子、塩素原子、臭素原子、ヨウ素原子、ヒドロキシル基、シアノ基、ニトロ基、アミノ基、アミジノ基、ヒドラジノ基、ヒドラゾノ基、 C_1-C_{60} アルキル基、 C_2-C_{60} アルケニル基、 C_2-C_{60} アルキニル基及び C_1-C_{60} アルコキシ基；

重水素原子、フッ素原子、塩素原子、臭素原子、ヨウ素原子、ヒドロキシル基、シアノ基、ニトロ基、アミノ基、アミジノ基、ヒドラジノ基、ヒドラゾノ基、 C_3-C_{10} シクロアルキル基、 C_1-C_{10} ヘテロシクロアルキル基、 C_3-C_{10} シクロアルケニル基、 C_1-C_{10} ヘテロシクロアルケニル基、 C_6-C_{60} アリール基、 C_6-C_{60} アリールオキシ基、 C_6-C_{60} アリールチオ基、 C_1-C_{60} ヘテロアリール基、一価の非芳香族縮合多環基、一価の非芳香族ヘテロ縮合多環基、 $-Si(Q_{11})(Q_{12})(Q_{13})$ 、 $-N(Q_{11})(Q_{12})$ 、 $-B(Q_{11})(Q_{12})$ 、 $-C(=O)(Q_{11})$ 、 $-S(=O)_2(Q_{11})$ 及び $-P(=O)(Q_{11})(Q_{12})$ のうちから選択された少なくとも一つで置換された、 C_1-C_{60} アルキル基、 C_2-C_{60} アルケニル基、 C_2-C_{60} アルキニル基及び C_1-C_{60} アルコキシ基；

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

重水素原子、フッ素原子、塩素原子、臭素原子、ヨウ素原子、ヒドロキシル基、シアノ基、ニトロ基、アミノ基、アミジノ基、ヒドラジノ基、ヒドラゾノ基、 C_1-C_{60} アルキル基、 C_2-C_{60} アルケニル基、 C_2-C_{60} アルキニル基、 C_1-C_{60} アルコキシ基、 C_3-C_{10} シクロアルキル基、 C_1-C_{10} ヘテロシクロアルキル基、 C_3-C_{10} シクロアルケニル基、 C_1-C_{10} ヘテロシクロアルケニル基、 C_6-C_{60} アリール基、 C_6-C_{60} アリールオキシ基、 C_6-C_{60} アリールチオ基、 C_1-C_{60} ヘテロアリール基、一価の非芳香族縮合多環基、一価の非芳香族ヘテロ縮合多環基、ビフェニル基、ターフェニル基、 $-Si(Q_{21})(Q_{22})(Q_{23})$ 、 $-N(Q_{21})(Q_{22})$ 、 $-B(Q_{21})(Q_{22})$ 、 $-C(=O)(Q_{21})$ 、 $-S(=O)_2(Q_{21})$ 及び $-P(=O)(Q_{21})(Q_{22})$ のうちから選択された少なくとも一つで置換された、 C_3-C_{10} シクロアルキル基、 C_1-C_{10} ヘテロシクロアルキル基、 C_3-C_{10} シクロアルケニル基、 C_1-C_{10} ヘテロシクロアルケニル基、 C_6-C_{60} アリール基、 C_6-C_{60} アリールオキシ基、 C_6-C_{60} アリールチオ基、 C_1-C_{60} ヘテロアリール基、一価の非芳香族縮合多環基、一価の非芳香族ヘテロ縮合多環基、ビフェニル基及びターフェニル基；並びに

$-Si(Q_{31})(Q_{32})(Q_{33})$ 、 $-N(Q_{31})(Q_{32})$ 、 $-B(Q_{31})(Q_{32})$ 、 $-C(=O)(Q_{31})$ 、 $-S(=O)_2(Q_{31})$ 及び $-P(=O)(Q_{31})(Q_{32})$ ；のうちから選択され、

前記 $Q_1 \sim Q_3$ 、 $Q_{11} \sim Q_{13}$ 、 $Q_{21} \sim Q_{23}$ 、及び $Q_{31} \sim Q_{33}$ は、互いに独立して、水素原子、重水素原子、フッ素原子、塩素原子、臭素原子、ヨウ素原子、ヒドロキシル基、シアノ基、ニトロ基、アミノ基、アミジノ基、ヒドラジノ基、ヒドラゾノ基、 $C_1 - C_{60}$ アルキル基、 $C_2 - C_{60}$ アルケニル基、 $C_2 - C_{60}$ アルキニル基、 $C_1 - C_{60}$ アルコキシ基、 $C_3 - C_{10}$ シクロアルキル基、 $C_1 - C_{10}$ ヘテロシクロアルキル基、 $C_3 - C_{10}$ シクロアルケニル基、 $C_1 - C_{10}$ ヘテロシクロアルケニル基、 $C_6 - C_{60}$ アリール基、 $C_1 - C_{60}$ アルキル基で置換された $C_6 - C_{60}$ アリール基、 $C_1 - C_{60}$ ヘテロアリール基、一価の非芳香族縮合多環基、一価の非芳香族ヘテロ縮合多環基、ビフェニル基、及びターフェニル基のうちから選択される。)

【請求項 7】

$A_1 \sim A_5$ は、互いに独立して、ベンゼン、インデン、ナフタレン、アントラセン、フルオレン、フェナントレン、トリフェニレン、ピレン、クリセン、ナフタセン、ピロール、イミダゾール、ピラゾール、ピリジン、ピリミジン、ピラジン、ピリダジン、インドール、イソインドール、インダゾール、キノリン、イソキノリン、ベンゾキノリン、ナフチリジン、キノキサリン、キナゾリン、シンノリン、カルバゾール、フェナントリジン、アクリジン、フェナントロリン、フェナジン、ベンゾイミダゾール、フラン、ベンゾフラン、チオフェン、ベンゾチオフェン、チアゾール、イソチアゾール、ベンゾチアゾール、イソオキサゾール、オキサゾール、トリアゾール、オキサジアゾール、トリアジン、ベンゾオキサゾール、ジベンゾフラン、ジベンゾチオフェン、ベンゾカルバゾール及びジベンゾカルバゾールのうちから選択された環構造を有することを特徴とする請求項 6 に記載のアミン化合物。

【請求項 8】

$A_1 \sim A_5$ は、互いに独立して、ベンゼン及びナフタレンのうちから選択された環構造を有することを特徴とする請求項 6 に記載のアミン化合物。

【請求項 9】

X_2 は、O、SまたはC(R_{11})(R_{12})であることを特徴とする請求項 6 に記載のアミン化合物。

【請求項 10】

$L_1 \sim L_3$ は、互いに独立して、単結合、ベンゼン、ペンタレン、インデン、ナフタレン、アズレン、ヘプタレン、インダセン、アセナフタレン、フルオレン、スピロービフルオレン、ベンゾフルオレン、フェナレン、フェナントレン、アントラセン、フルオランテン、トリフェニレン、ピレン、クリセン、ナフタセン、ピセン、ペリレン、ペンタフェニレン、ヘキサセン、ピロール、イミダゾール、ピラゾール、ピリジン、ピラジン、ピリミジン、ピリダジン、イソインドール、インドール、インダゾール、プリン、キノリン、イソキノリン、ベンゾキノリン、フタラジン、ナフチリジン、キノキサリン、キナゾリン、シンノリン、カルバゾール、フェナントリジン、アクリジン、フェナントロリン、フェナジン、ベンゾイミダゾール、フラン、ベンゾフラン、チオフェン、ベンゾチオフェン、チアゾール、イソチアゾール、ベンゾチアゾール、イソオキサゾール、オキサゾール、トリアゾール、テトラゾール、オキサジアゾール、トリアジン、ベンゾオキサゾール、ジベンゾフラン、ジベンゾチオフェン、ベンゾカルバゾール及びジベンゾカルバゾール；から選択された二価基並びに

重水素原子、フッ素原子、塩素原子、臭素原子、ヨウ素原子、ヒドロキシル基、シアノ基、ニトロ基、アミノ基、アミジノ基、ヒドラジノ基、ヒドラゾノ基、 $C_1 - C_{20}$ アルキル基、 $C_1 - C_{20}$ アルコキシ基、 $C_6 - C_{20}$ アリール基及び $C_1 - C_{20}$ ヘテロアリール基のうちから選択された少なくとも一つで置換された、ベンゼン、ペンタレン、インデン、ナフタレン、アズレン、ヘプタレン、インダセン、アセナフタレン、フルオレン、スピロービフルオレン、ベンゾフルオレン、フェナレン、フェナントレン、アントラセン、フルオラントレン、トリフェニレン、ピレン、クリセン、ナフタセン、ピセン、ペリレン、ペンタフェニレン、ヘキサセン、ピロール、イミダゾール、ピラゾール、ピリジン、ピラジン、ピリミジン、ピリダジン、イソインドール、インドール、インダゾール、プリン

、キノリン、イソキノリン、ベンゾキノリン、フタラジン、ナフチリジン、キノキサリン、キナゾリン、シンノリン、カルバゾール、フェナントリジン、アクリジン、フェナントロリン、フェナジン、ベンゾイミダゾール、フラン、ベンゾフラン、チオフエン、ベンゾチオフエン、チアゾール、イソチアゾール、ベンゾチアゾール、イソオキサゾール、オキサゾール、トリアゾール、テトラゾール、オキサジアゾール、トリアジン、ベンゾオキサゾール、ジベンゾフラン、ジベンゾチオフエン、ベンゾカルバゾール及びジベンゾカルバゾール；のうちから選択された二価基のうちから選択されたことを特徴とする請求項 6 に記載のアミン化合物。

【請求項 11】

$L_1 \sim L_3$ は、互いに独立して、

単結合及びベンゼンの二価基；並びに

重水素原子、フッ素原子、塩素原子、臭素原子、ヨウ素原子、ヒドロキシル基、シアノ基、ニトロ基、アミノ基、アミジノ基、ヒドラジノ基、ヒドラゾノ基、 $C_1 - C_{20}$ アルキル基、 $C_1 - C_{20}$ アルコキシ基、 $C_6 - C_{20}$ アリール基及び $C_1 - C_{20}$ ヘテロアリール基のうちから選択された少なくとも一つで置換された、ベンゼンの二価基；のうちから選択されたことを特徴とする請求項 6 に記載のアミン化合物。

【請求項 12】

R_1 及び R_2 は、互いに独立して、 $C_6 - C_{60}$ アリール基、 $C_1 - C_{60}$ ヘテロアリール基、一価の非芳香族縮合多環基及び一価の非芳香族ヘテロ縮合多環基；並びに

重水素原子、フッ素原子、塩素原子、臭素原子、ヨウ素原子、 $C_1 - C_{60}$ アルキル基、 $C_1 - C_{60}$ アルコキシ基、 $C_6 - C_{60}$ アリール基、 $C_1 - C_{60}$ ヘテロアリール基、一価の非芳香族縮合多環基、一価の非芳香族ヘテロ縮合多環基、 $-N(Q_{31})(Q_{32})$ 及び $-Si(Q_{31})(Q_{32})(Q_{33})$ のうち少なくとも一つで置換された、 $C_6 - C_{60}$ アリール基、 $C_1 - C_{60}$ ヘテロアリール基、一価の非芳香族縮合多環基及び一価の非芳香族ヘテロ縮合多環基；のうちから選択されたことを特徴とする請求項 6 に記載のアミン化合物。

【請求項 13】

R_1 及び R_2 は、互いに独立して、下記化学式 5-1～化学式 5-79 で表わされる基のうちから選択されたことを特徴とする請求項 6 に記載のアミン化合物。

10

20

30

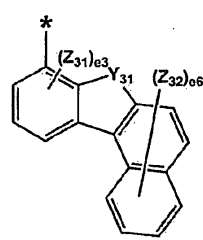
40

50

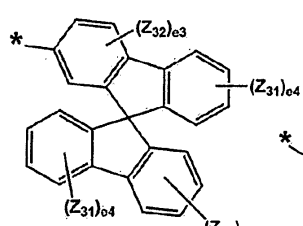
Figure 5 displays 18 chemical structures, labeled 5-1 through 5-18, representing various polycyclic aromatic hydrocarbon (PAH) derivatives. Each structure is a derivative of a specific PAH, with substituents indicated by asterisks (*) and labels (Z31), (Z32), and (Y31).

- Chemical Structure 5-1:** A benzene ring with a substituent (*) at position 1 and a label (Z31)_{e5} at position 2.
- Chemical Structure 5-2:** A naphthalene ring with a substituent (*) at position 1 and a label (Z31)_{e7} at position 7.
- Chemical Structure 5-3:** A naphthalene ring with a substituent (*) at position 1 and a label (Z31)_{e7} at position 7.
- Chemical Structure 5-4:** A triphenylene ring with a substituent (*) at position 1 and a label (Z31)_{e9} at position 9.
- Chemical Structure 5-5:** A triphenylene ring with a substituent (*) at position 1 and a label (Z31)_{e9} at position 9.
- Chemical Structure 5-6:** A triphenylene ring with a substituent (*) at position 1 and a label (Z31)_{e8} at position 8.
- Chemical Structure 5-7:** A triphenylene ring with a substituent (*) at position 1 and labels (Z31)_{e5} at position 5 and (Z32)_{e4} at position 4.
- Chemical Structure 5-8:** A triphenylene ring with a substituent (*) at position 1 and labels (Z31)_{e6} at position 6 and (Z32)_{e3} at position 3.
- Chemical Structure 5-9:** A triphenylene ring with a substituent (*) at position 1 and labels (Z31)_{e6} at position 6 and (Z32)_{e3} at position 3.
- Chemical Structure 5-10:** A triphenylene ring with a substituent (*) at position 1 and labels (Z31)_{e4} at position 4 and (Z32)_{e5} at position 5.
- Chemical Structure 5-11:** A triphenylene ring with a substituent (*) at position 1 and labels (Z31)_{e5} at position 5 and (Z32)_{e4} at position 4.
- Chemical Structure 5-12:** A triphenylene ring with a substituent (*) at position 1 and labels (Z31)_{e4} at position 4 and (Z32)_{e5} at position 5.
- Chemical Structure 5-13:** A triphenylene ring with a substituent (*) at position 1 and labels (Z31)_{e3} at position 3 and (Z32)_{e4} at position 4.
- Chemical Structure 5-14:** A triphenylene ring with a substituent (*) at position 1 and labels (Z31)_{e3} at position 3 and (Z32)_{e4} at position 4.
- Chemical Structure 5-15:** A triphenylene ring with a substituent (*) at position 1 and labels (Z31)_{e3} at position 3 and (Z32)_{e4} at position 4.
- Chemical Structure 5-16:** A triphenylene ring with a substituent (*) at position 1 and labels (Z31)_{e3} at position 3 and (Z32)_{e4} at position 4.
- Chemical Structure 5-17:** A triphenylene ring with a substituent (*) at position 1 and labels (Z31)_{e3} at position 3 and (Z32)_{e6} at position 6.
- Chemical Structure 5-18:** A triphenylene ring with a substituent (*) at position 1 and labels (Z31)_{e3} at position 3 and (Z32)_{e6} at position 6.

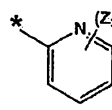
50



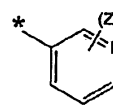
化学式 5-19



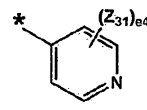
化学式 5-20



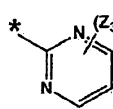
化学式 5-21



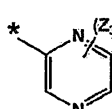
化学式 5-22



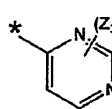
化学式 5-23



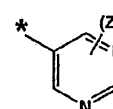
化学式 5-24



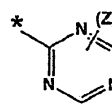
化学式 5-25



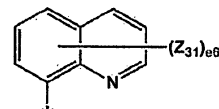
化学式 5-26



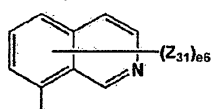
化学式 5-27



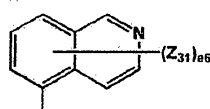
化学式 5-28



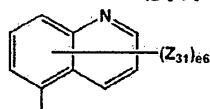
化学式 5-29



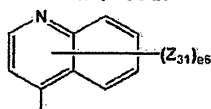
化学式 5-30



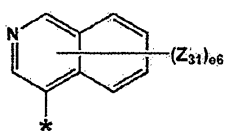
化学式 5-31



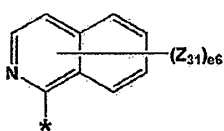
化学式 5-32



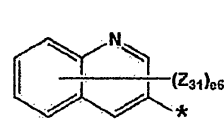
化学式 5-33



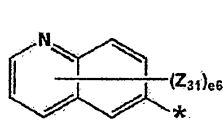
化学式 5-34



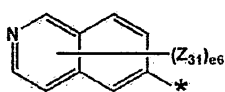
化学式 5-35



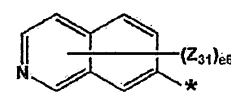
化学式 5-36



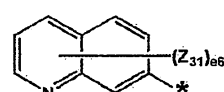
化学式 5-37



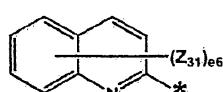
化学式 5-38



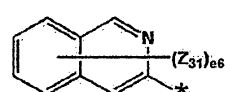
化学式 5-39



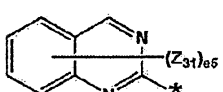
化学式 5-40



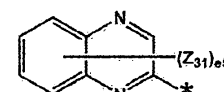
化学式 5-41



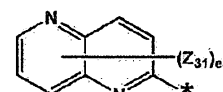
化学式 5-42



化学式 5-43



化学式 5-44



化学式 5-45

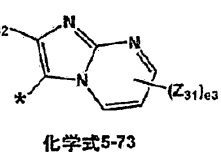
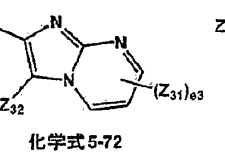
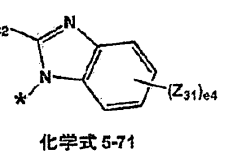
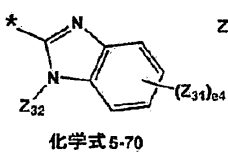
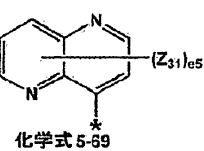
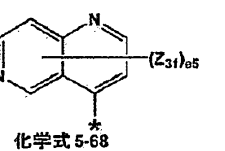
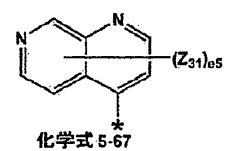
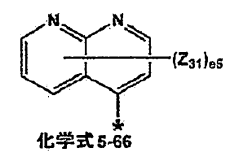
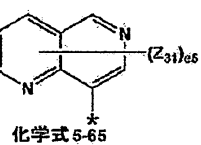
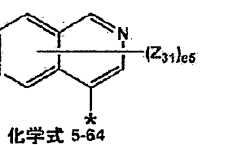
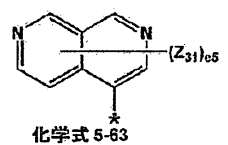
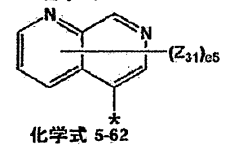
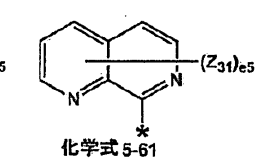
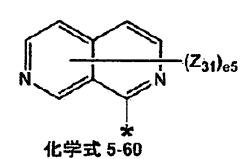
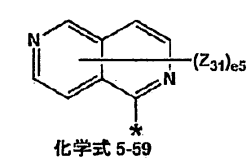
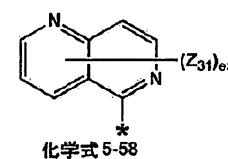
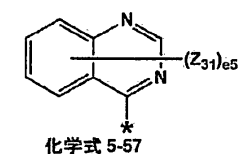
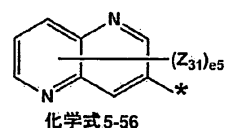
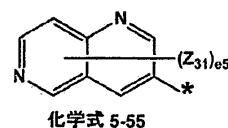
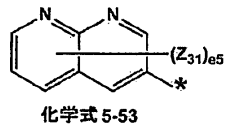
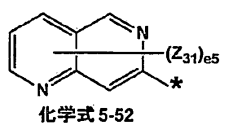
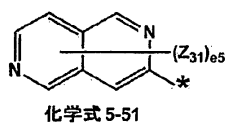
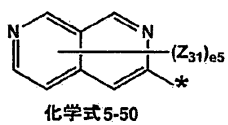
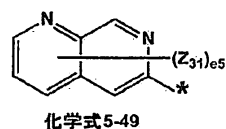
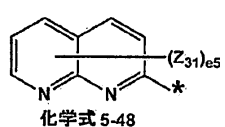
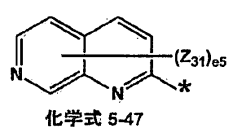
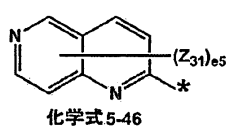
10

20

30

40

50



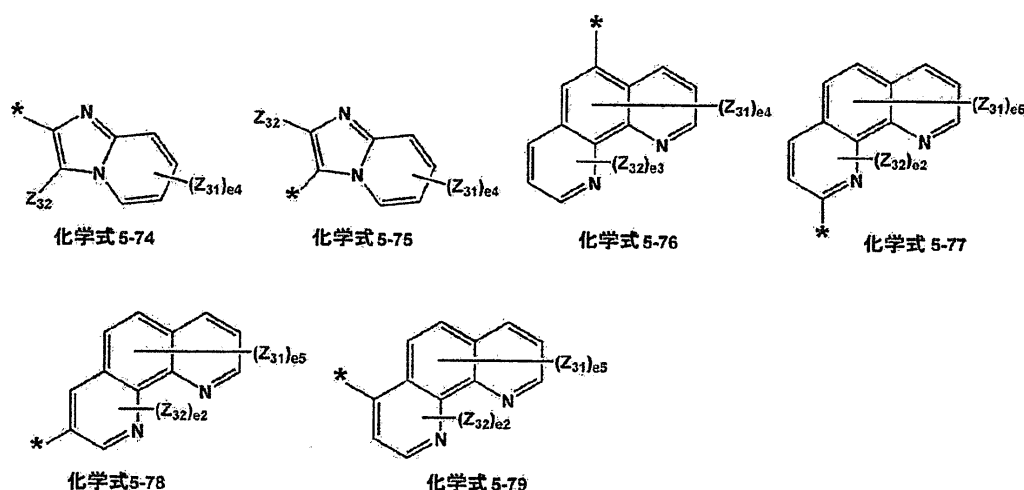
10

20

30

40

50



(前記化学式 5-1～化学式 5-79 において、

Y_{31} は、O、S、C (Z_{33}) (Z_{34})、N (Z_{35}) または Si (Z_{36}) (Z_{37}) であり、

$Z_{31} \sim Z_{37}$ は、互いに独立して、水素原子、重水素原子、フッ素原子、塩素原子、臭素原子、ヨウ素原子、ヒドロキシル基、シアノ基、ニトロ基、アミジノ基、ヒドラジノ基、ヒドラゾノ基、 $C_1 - C_{20}$ アルキル基、 $C_1 - C_{20}$ アルコキシ基、シクロペンチル基、シクロヘキシル基、シクロヘプチル基、シクロペンテニル基、シクロヘキセニル基、フェニル基、ビフェニル基、ナフチル基、フルオレニル基、スピロ-ビフルオレニル基、スピロ-フルオレン-ベンゾフルオレニル基、ベンゾフルオレニル基、ジベンゾフルオレニル基、フェナレニル基、フェナントレニル基、アントラセニル基、フルオランテニル基、トリフェニレニル基、ピリジニル基、ピラジニル基、ピリミジニル基、キノリニル基、イソキノリニル基、ベンゾキノリニル基、ナフチリジニル基、キノキサリニル基、キナゾリニル基、カルバゾリル基、フェナントリジニル基、アクリジニル基、フェナントロリニル基、フェナジニル基、トリアジニル基、ジベンゾフラニル基、ジベンゾチオフェニル基及び Si (Q_{31}) (Q_{32}) (Q_{33}) のうちから選択され、

Z_{33} 及び Z_{34} は、選択的に、互いに結合されて置換もしくは無置換の $C_5 - C_{30}$ 炭素環式基、及び置換もしくは無置換の $C_1 - C_{30}$ ヘテロ環式基を形成する、或は形成せず、

e_2 は、0～2 の整数のうちから選択され、 e_2 が 2 以上である場合、2 以上の Z_{31} 及び Z_{32} は、互いに同じであるか、或は異なり、

e_3 は、0～3 の整数のうちから選択され、 e_3 が 2 以上である場合、2 以上の Z_{31} 及び Z_{32} は、互いに同じであるか、或は異なり、

e_4 は、0～4 の整数のうちから選択され、 e_4 が 2 以上である場合、2 以上の Z_{31} 及び Z_{32} は、互いに同じであるか、或は異なり、

e_5 は、0～5 の整数のうちから選択され、 e_5 が 2 以上である場合、2 以上の Z_{31} 及び Z_{32} は、互いに同じであるか、或は異なり、

e_6 は、0～6 の整数のうちから選択され、 e_6 が 2 以上である場合、2 以上の Z_{31} 及び Z_{32} は、互いに同じであるか、或は異なり、

e_7 は、0～7 の整数のうちから選択され、 e_7 が 2 以上である場合、2 以上の Z_{31} は、互いに同じであるか、或は異なり、

e_9 は、0～9 の整数のうちから選択され、 e_9 が 2 以上である場合、2 以上の Z_{31} は、互いに同じであるか、或は異なり、

* は、隣接する原子との結合位置を示す。))

【請求項 14】

10

20

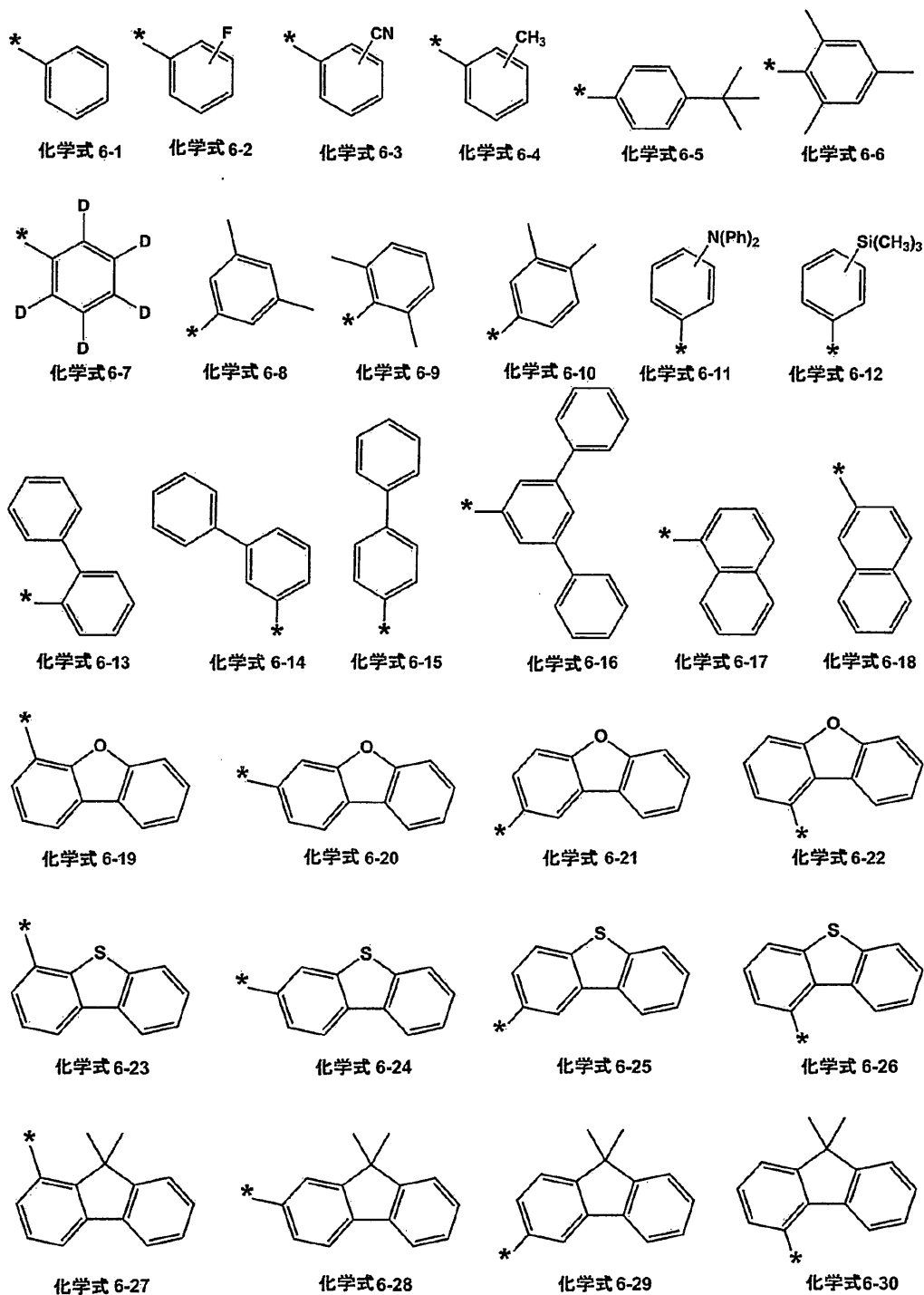
30

40

50

R₁ 及び R₂ は、互いに独立して、下記化学式 6-1～化学式 6-42 のうちから選択されたことを特徴とする請求項 6 に記載のアミン化合物。

【化 7】



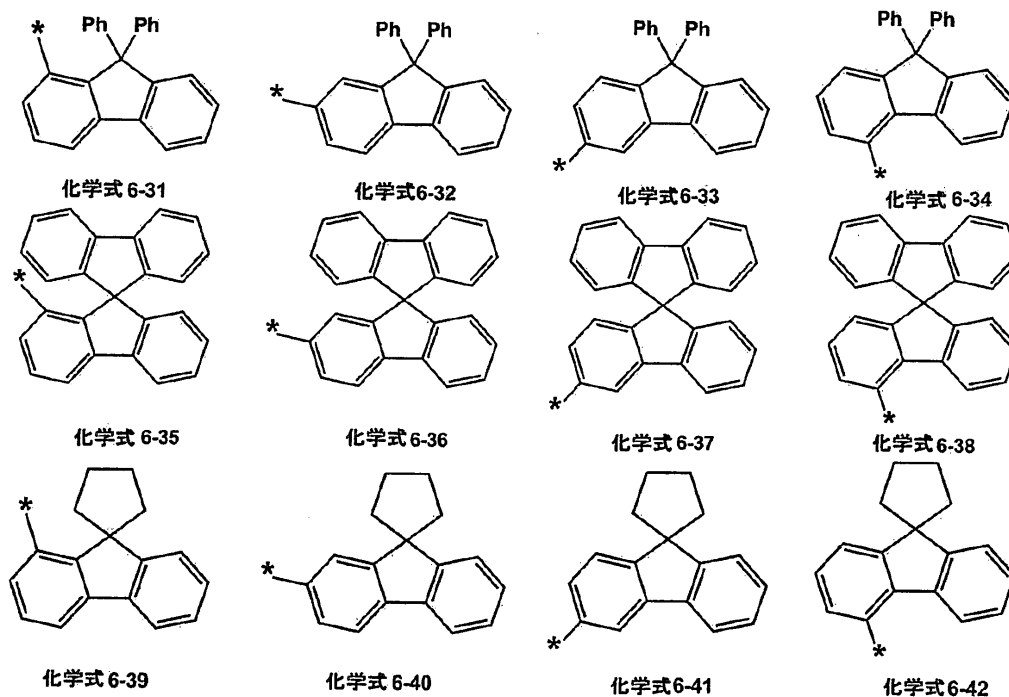
10

20

30

40

50



(前記化学式 6-1～化学式 6-42 において、

「Ph」は、フェニル基を示し、

*は、隣接する原子との結合位置を示す。)

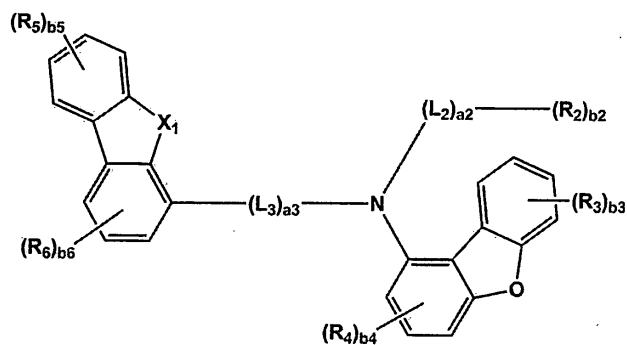
【請求項 15】

$R_3 \sim R_{12}$ は、互いに独立して、水素原子、重水素原子、フッ素原子、塩素原子、臭素原子、ヨウ素原子、メチル基、エチル基、プロピル基、イソプロピル基、*n*-ブチル基、イソブチル基、*sec*-ブチル基、*tert*-ブチル基、ペンチル基、*iso*-アミル基、ヘキシル基、フェニル基及びビフェニル基のうちから選択されたことを特徴とする請求項 6 に記載のアミン化合物。

【請求項 16】

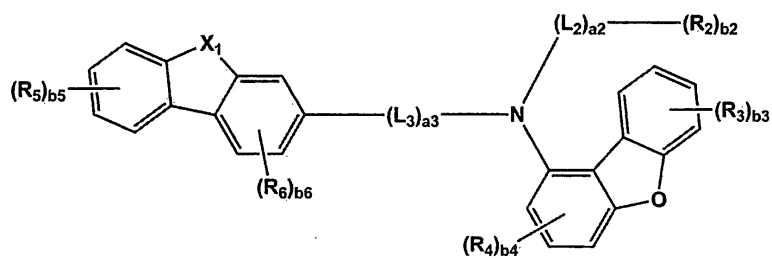
下記化学式 1A-1～化学式 1A-4、及び化学式 1B-1～化学式 1B-16 のうちから選択されたいずれか一つで表わされることを特徴とする請求項 6 に記載のアミン化合物。

【化 8】



... (化学式 1A-1)

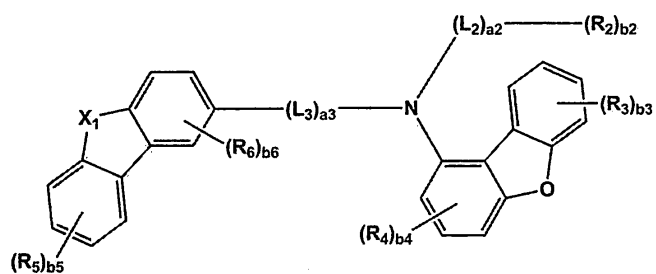
【化 9】



10

... (化学式 1 A - 2)

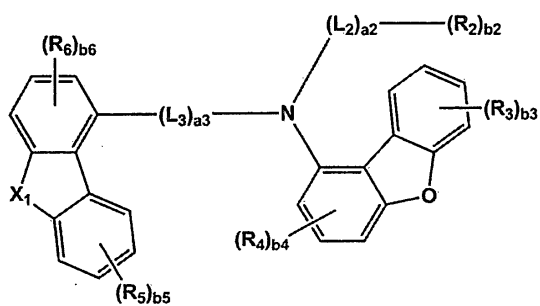
【化 1 0】



20

... (化学式 1 A - 3)

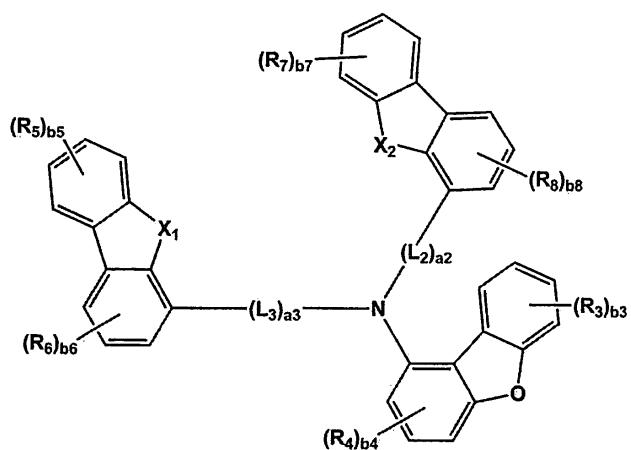
【化 1 1】



30

... (化学式 1 A - 4)

【化 1 2】

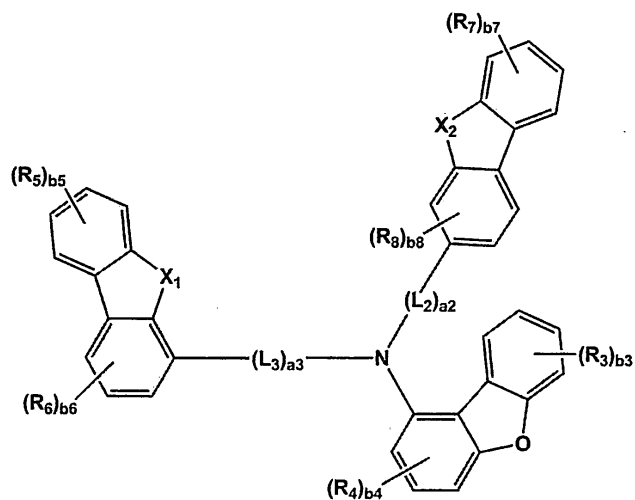


40

... (化学式 1 B - 1)

50

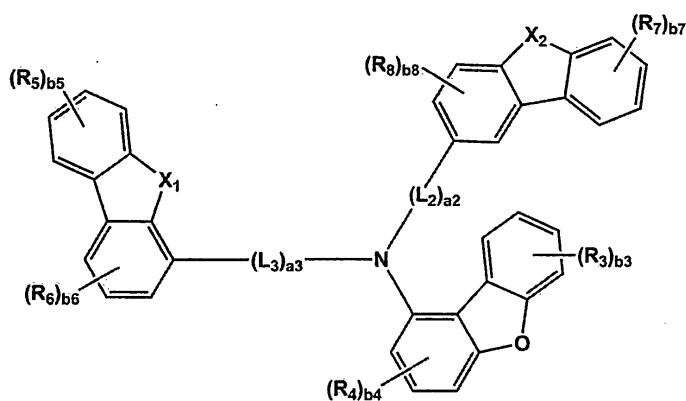
【化 1 3】



10

... (化学式 1 B - 2)

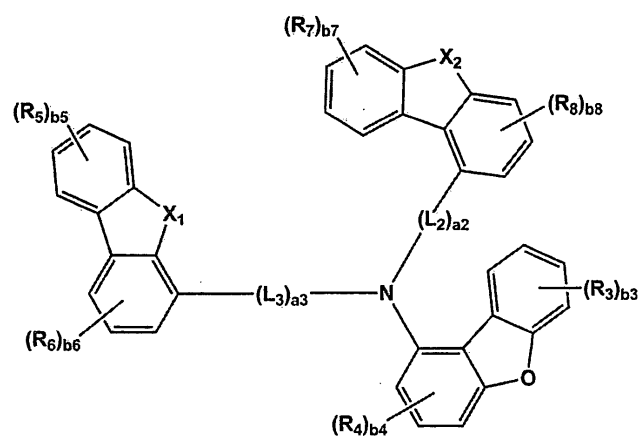
【化 1 4】



20

... (化学式 1 B - 3)

【化 1 5】

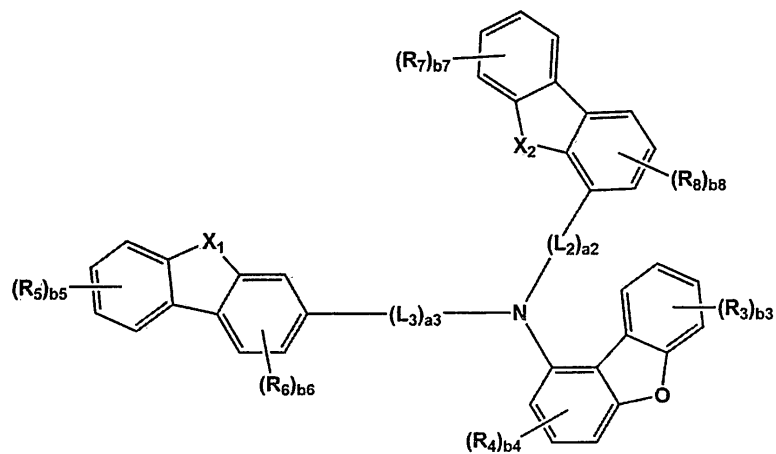


40

... (化学式 1 B - 4)

50

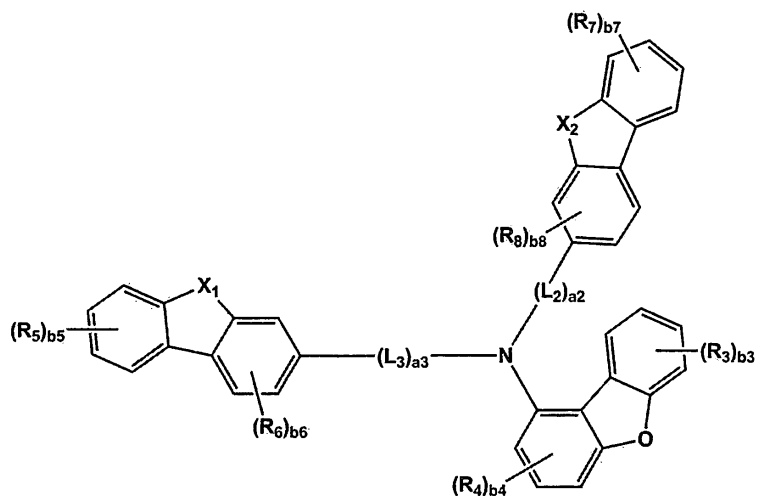
【化 1 6】



10

... (化学式 1 B - 5)

【化 1 7】

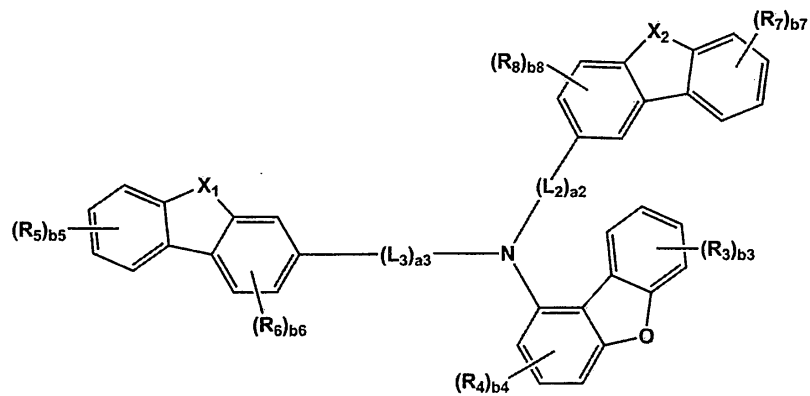


20

30

... (化学式 1 B - 6)

【化 1 8】

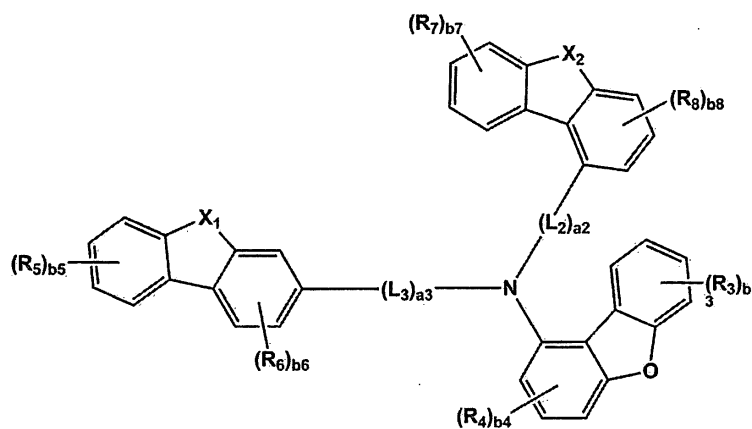


40

... (化学式 1 B - 7)

50

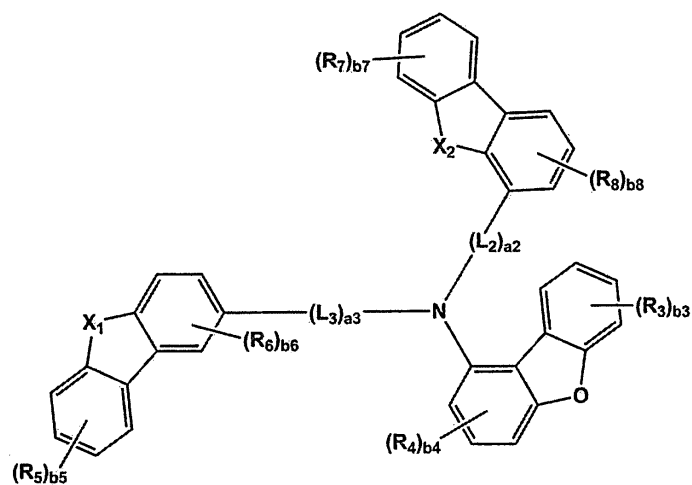
【化 1 9】



10

... (化学式 1 B - 8)

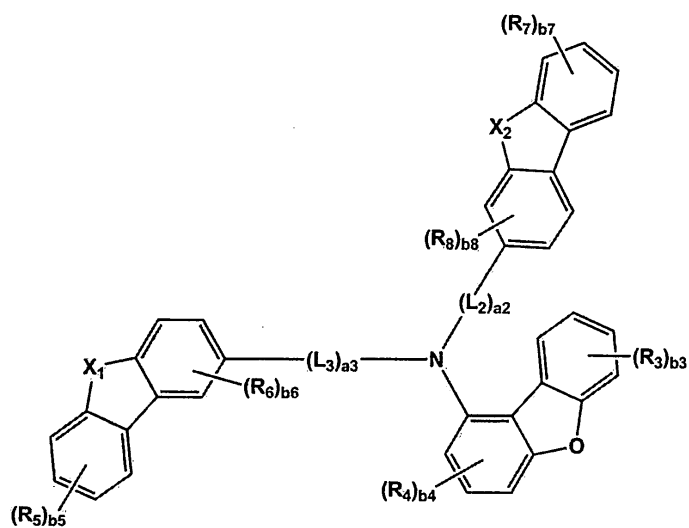
【化 2 0】



20

... (化学式 1 B - 9)

【化 2 1】

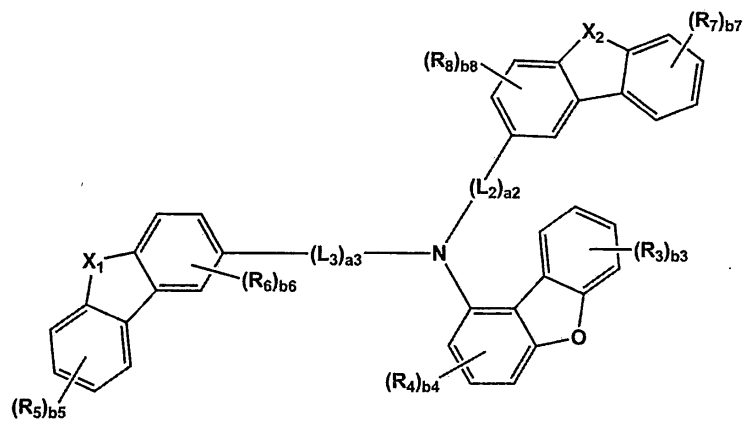


40

... (化学式 1 B - 1 0)

50

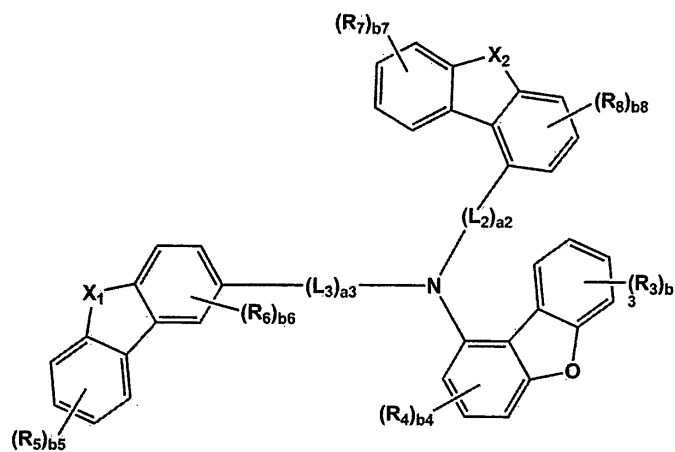
【化 2 2】



10

... (化学式 1 B - 1 1)

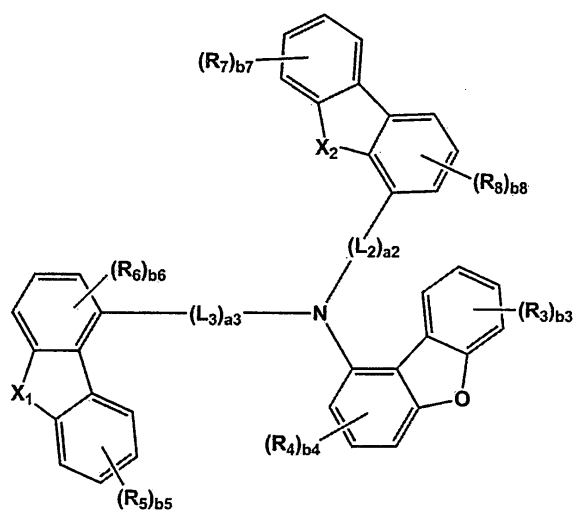
【化 2 3】



20

... (化学式 1 B - 1 2)

【化 2 4】

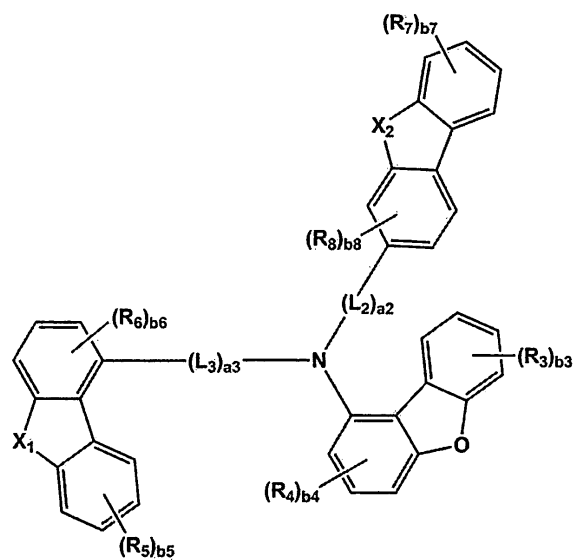


40

... (化学式 1 B - 1 3)

50

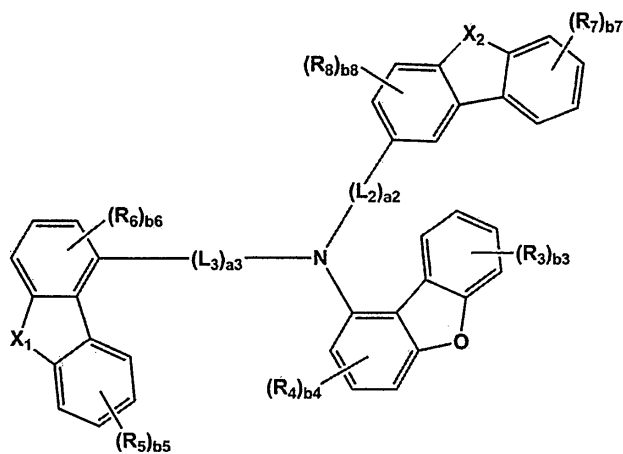
【化 2 5】



10

... (化学式 1 B - 1 4)

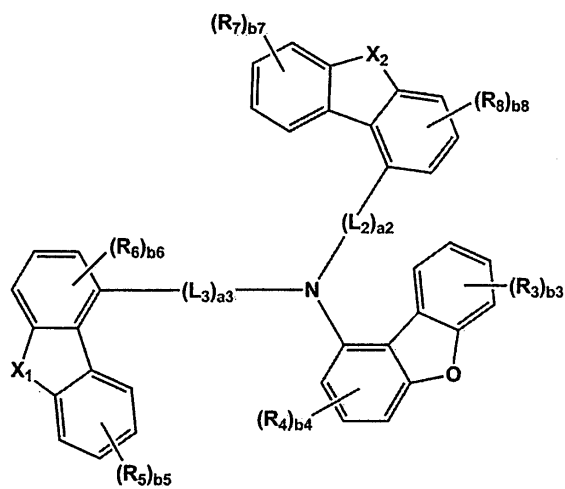
【化 2 6】



20

... (化学式 1 B - 1 5)

【化 2 7】



40

... (化学式 1 B - 1 6)

50

(前記化学式 1 A - 1 ~ 化学式 1 A - 4、及び化学式 1 B - 1 ~ 化学式 1 B - 1 6 において、

b 4、b 6 及び b 8 は、互いに独立して、1 ~ 3 の整数のうちから選択され、
b 3、b 5 及び b 7 は、互いに独立して、1 ~ 4 の整数のうちから選択される。)

【請求項 1 7】

前記 L₁ ~ L₃ は、互いに独立して、

単結合及びベンゼンの二価基；並びに

重水素原子、フッ素原子、塩素原子、臭素原子、ヨウ素原子、ヒドロキシ基、シアノ基、ニトロ基、アミノ基、アミジノ基、ヒドラジノ基、ヒドラゾノ基、C₁ - C₂₀ アルキル基、C₁ - C₂₀ アルコキシ基、C₆ - C₂₀ アリール基及び C₁ - C₂₀ ヘテロアリール基のうちから選択された少なくとも一つで置換された、ベンゼンの二価基；のうちから選択されたことを特徴とする請求項 1 6 に記載のアミン系化合物。

10

【請求項 1 8】

下記化合物のうちから選択されたことを特徴とする請求項 6 に記載のアミン化合物。

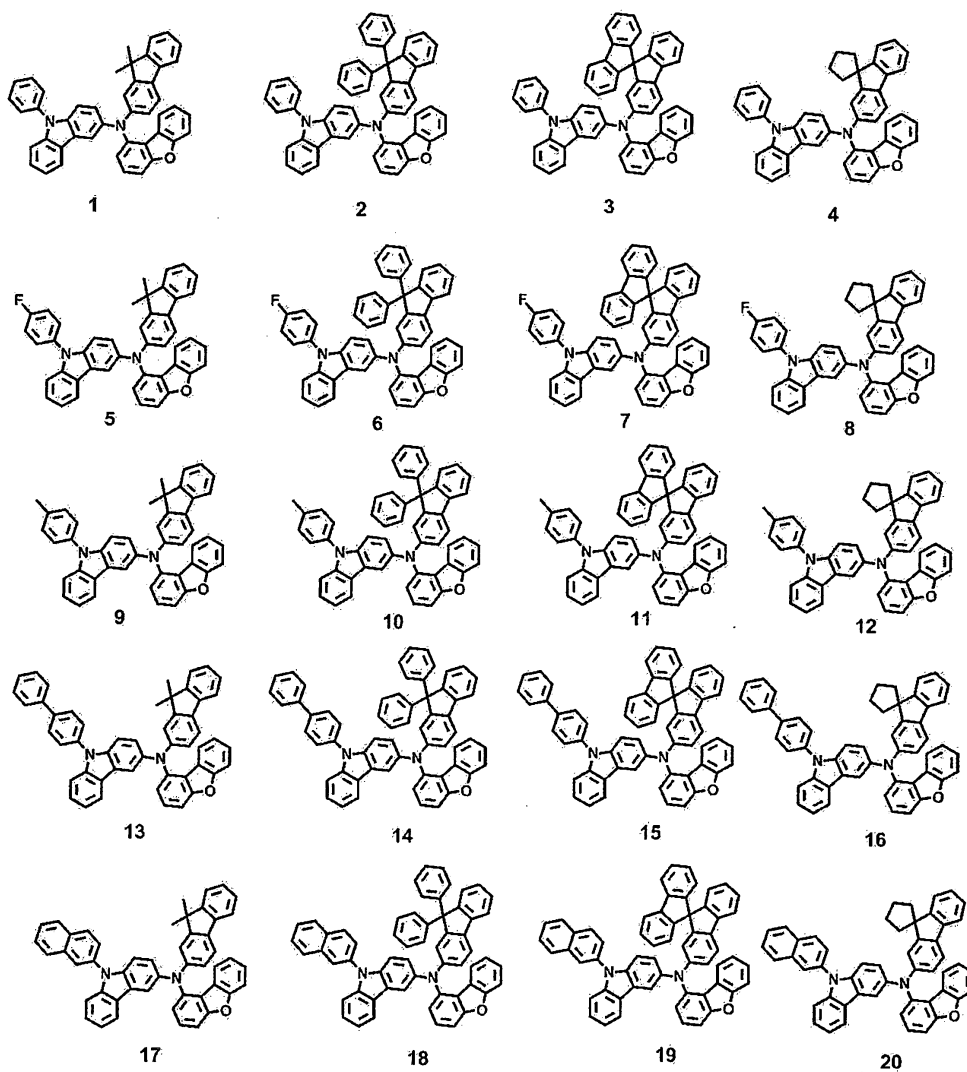
20

30

40

50

【化 2 8】



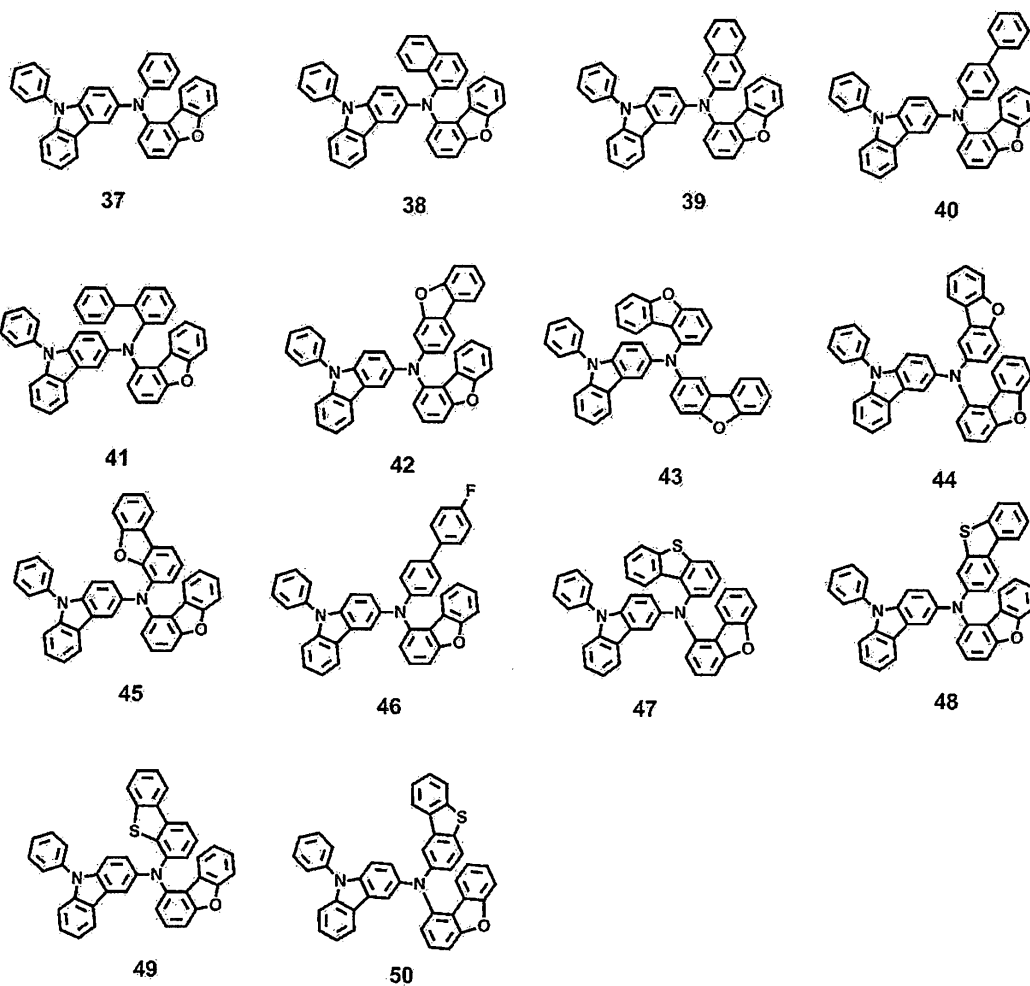
10

20

30

40

50



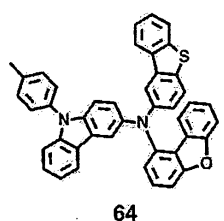
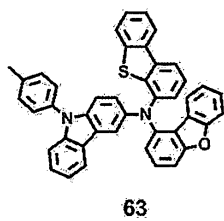
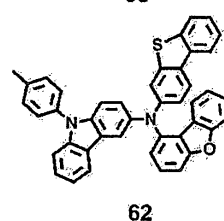
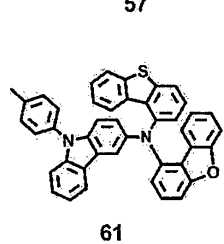
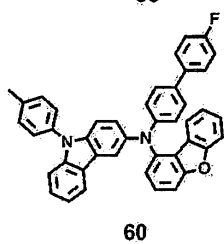
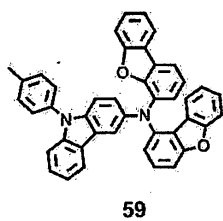
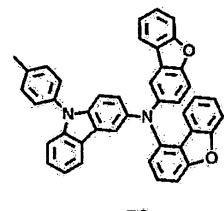
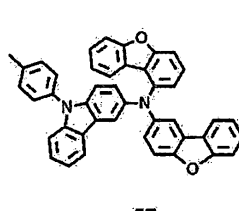
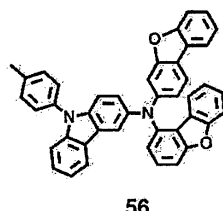
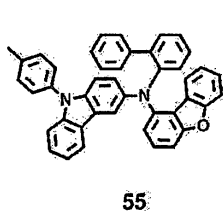
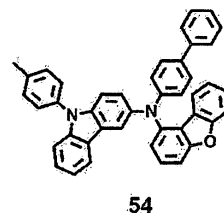
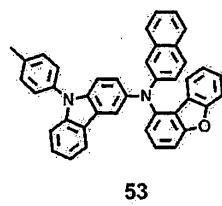
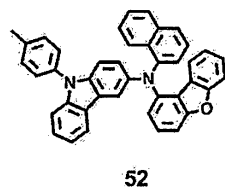
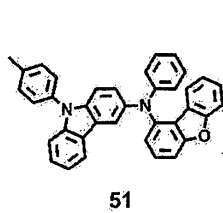
10

20

30

40

50



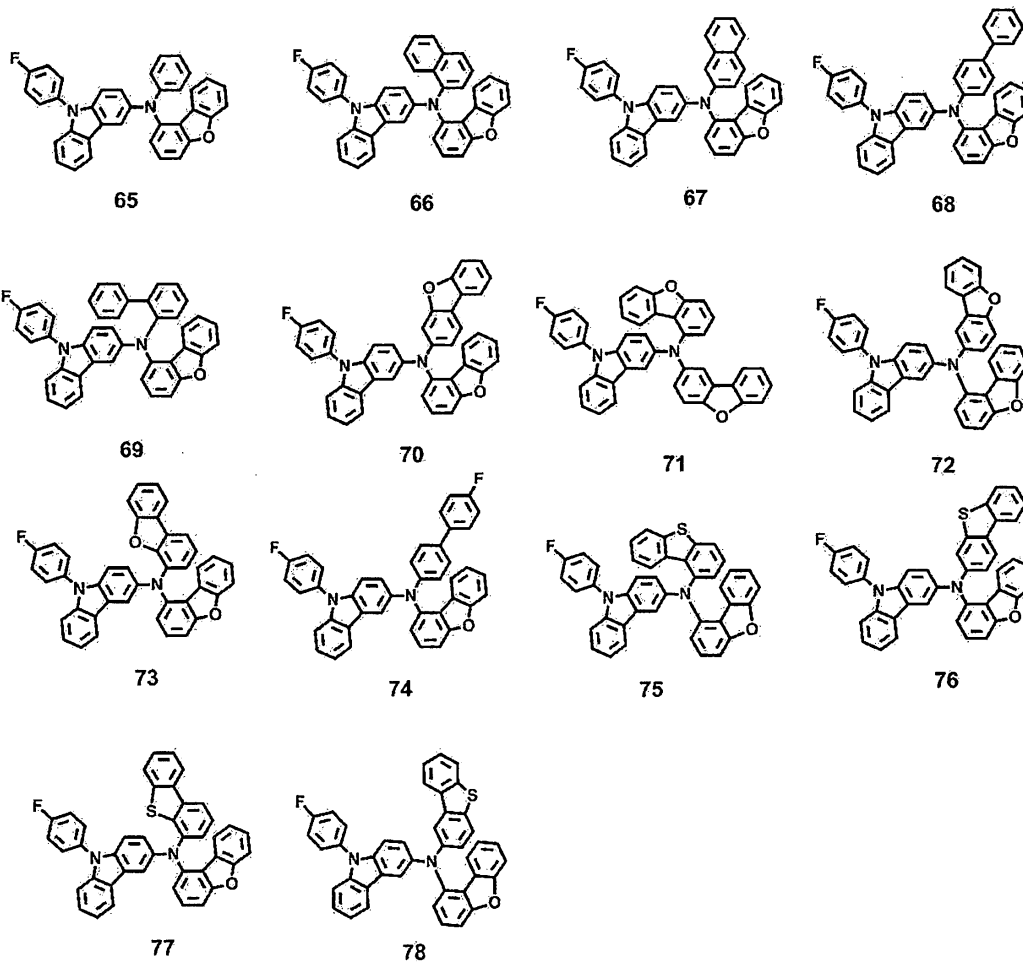
10

20

30

40

50



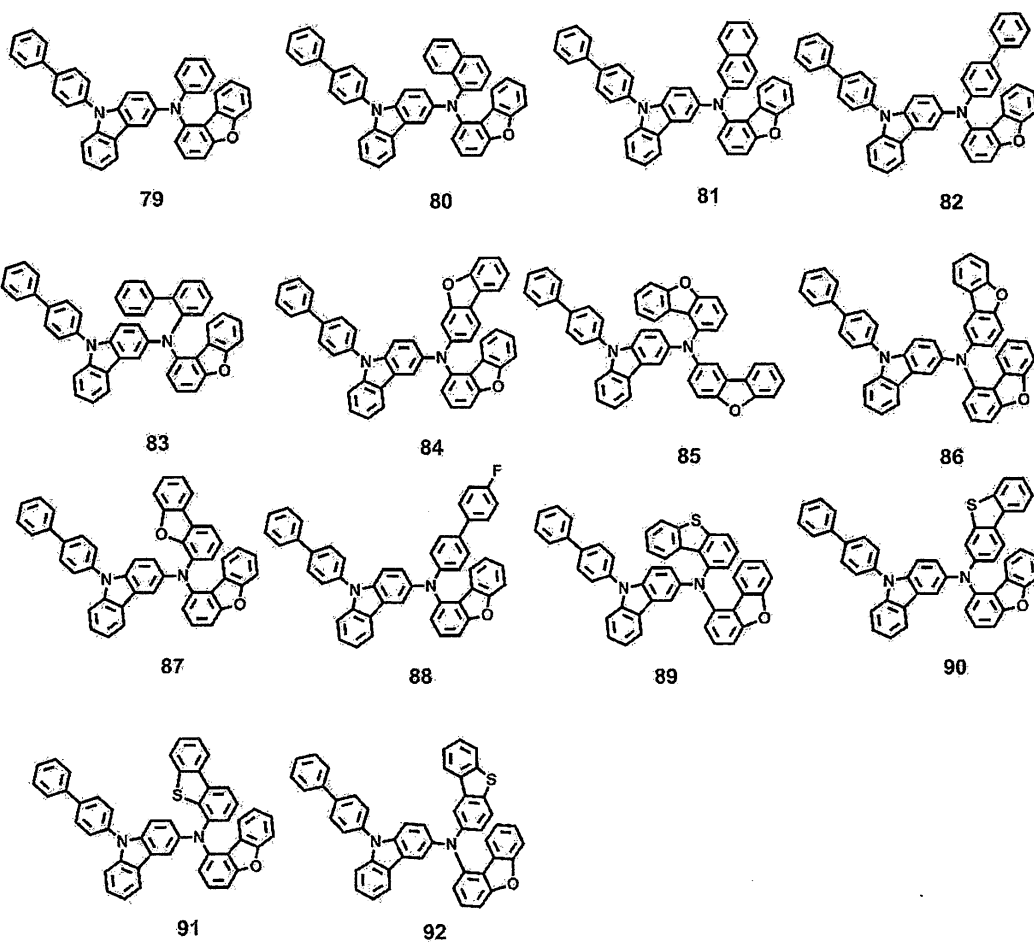
10

20

30

40

50



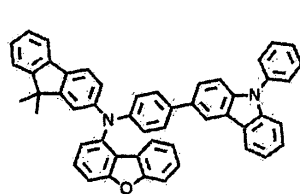
10

20

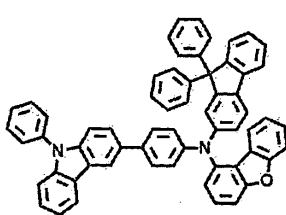
30

40

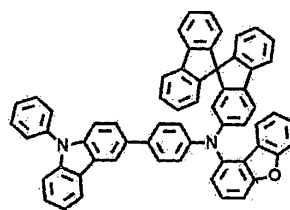
50



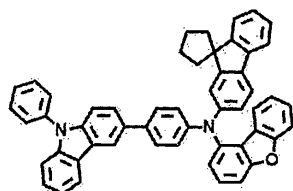
93



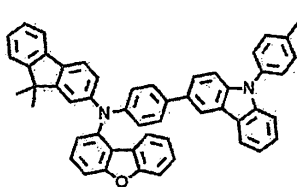
94



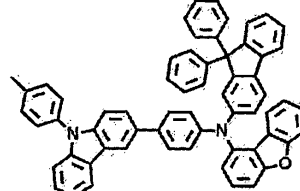
95



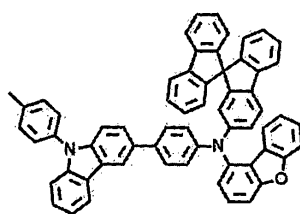
96



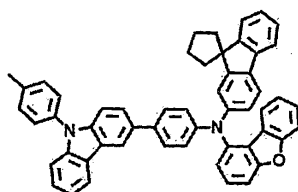
97



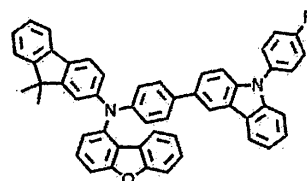
98



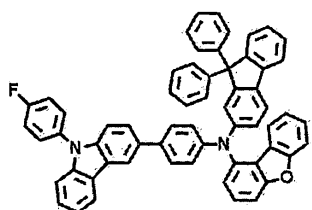
99



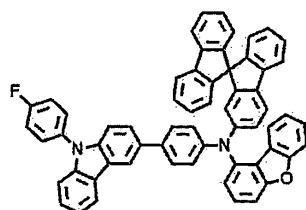
100



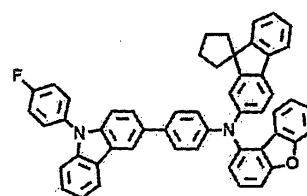
101



102



103



104

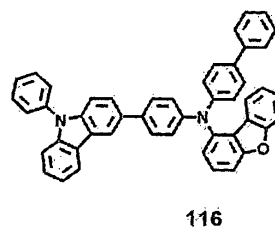
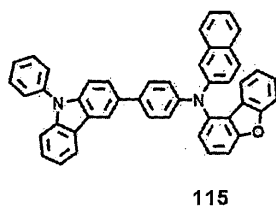
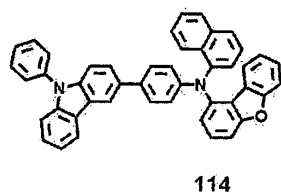
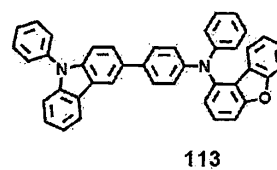
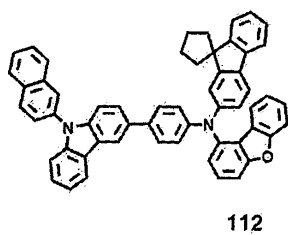
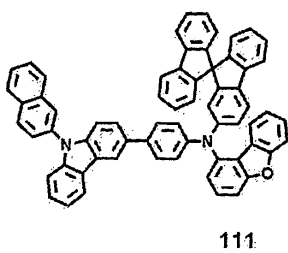
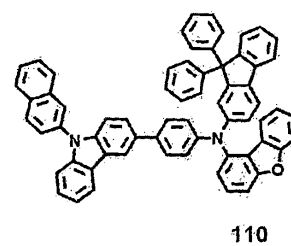
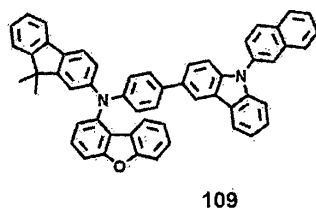
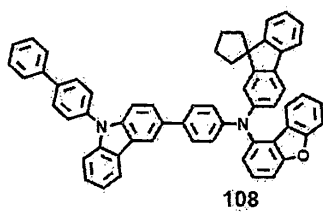
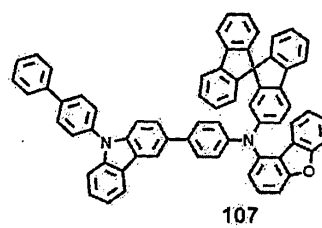
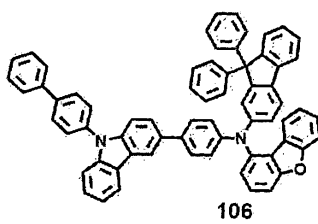
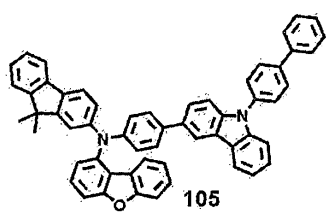
10

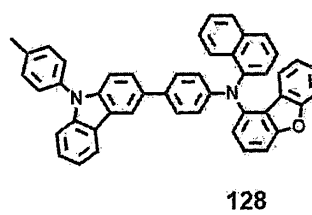
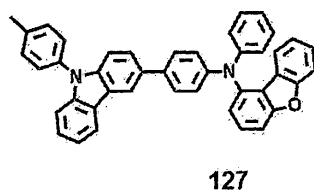
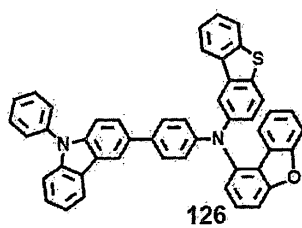
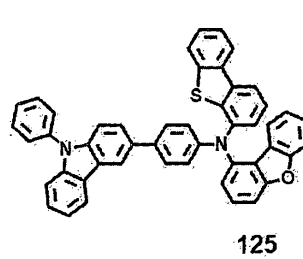
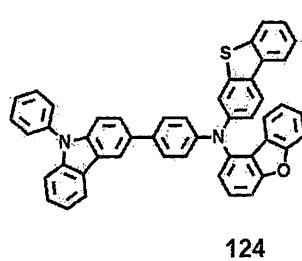
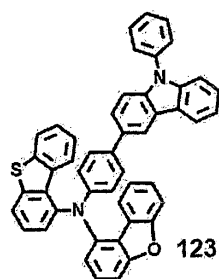
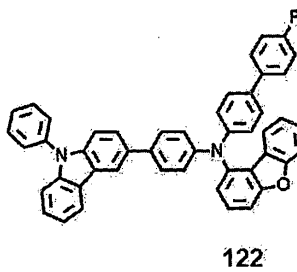
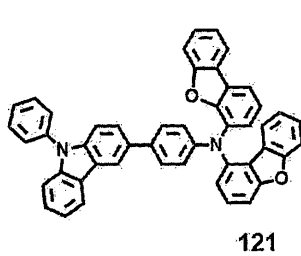
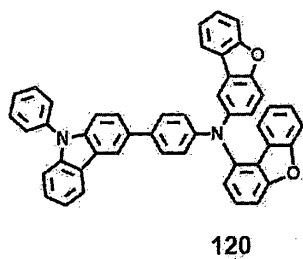
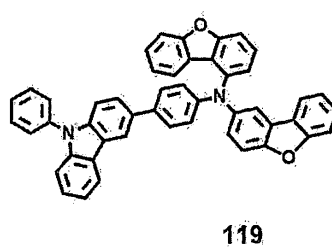
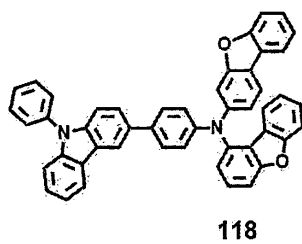
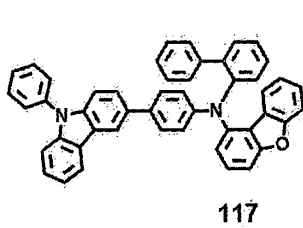
20

30

40

50





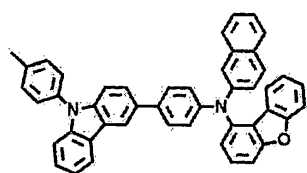
10

20

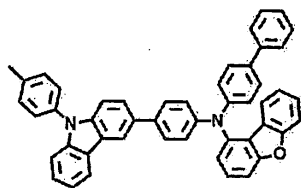
30

40

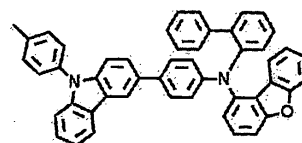
50



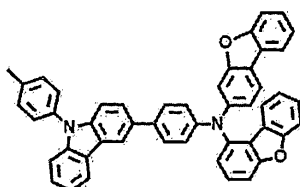
129



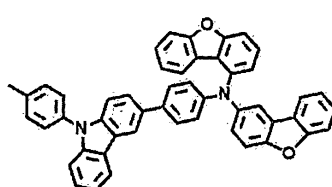
130



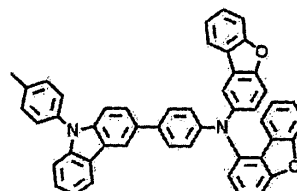
131



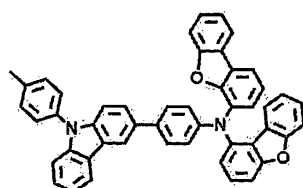
132



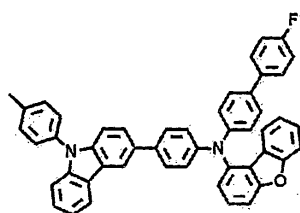
133



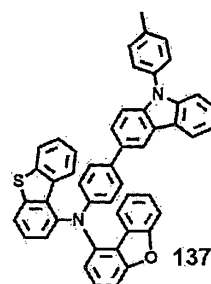
134



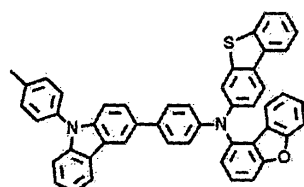
135



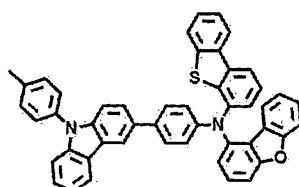
136



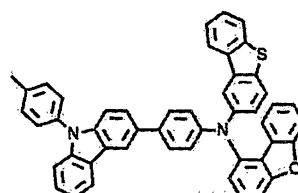
137



138



139



140

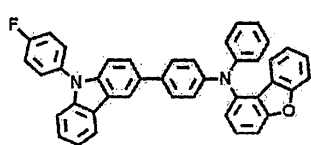
10

20

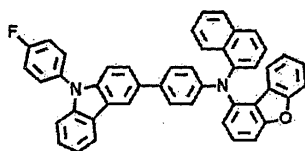
30

40

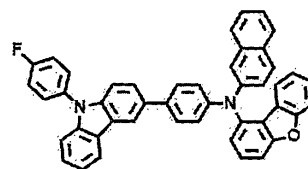
50



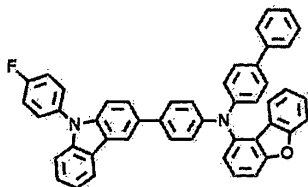
141



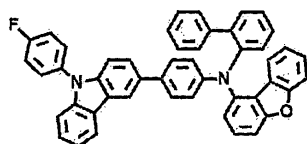
142



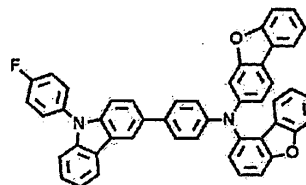
143



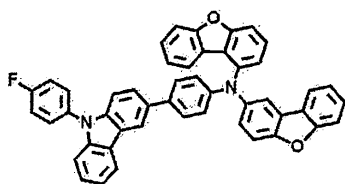
144



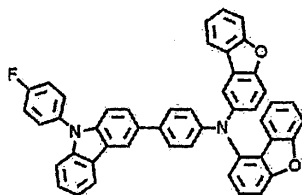
145



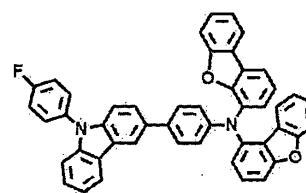
146



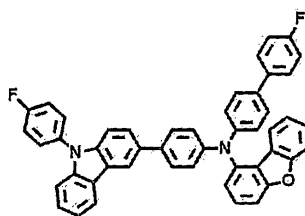
147



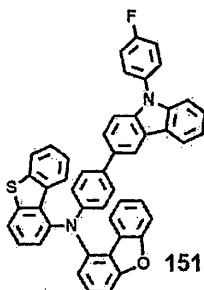
148



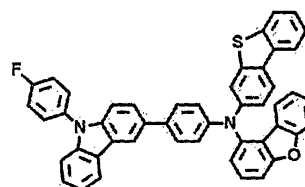
149



150



151



152

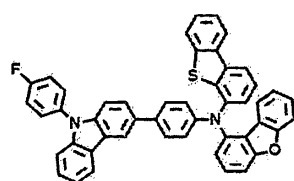
10

20

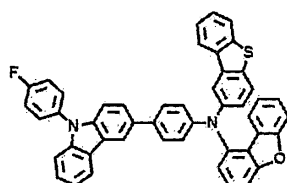
30

40

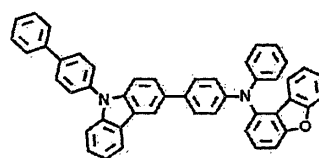
50



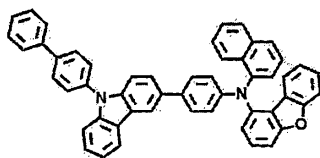
153



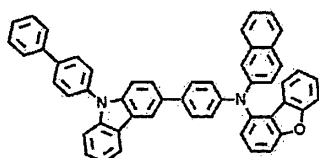
154



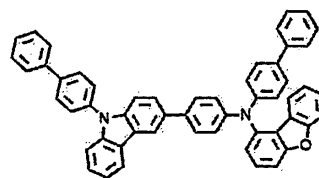
155



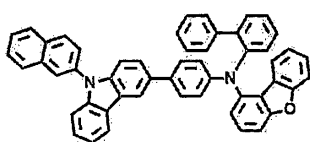
156



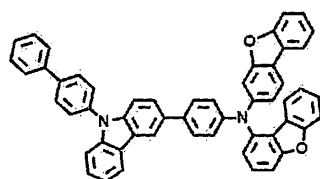
157



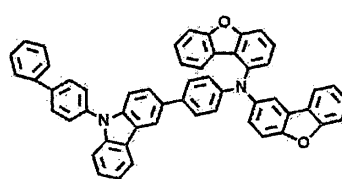
158



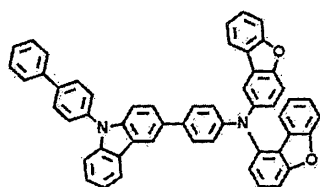
159



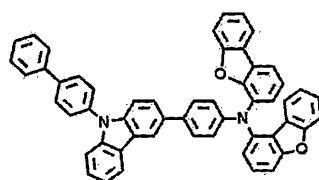
160



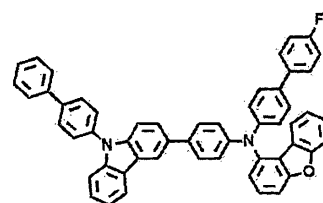
161



162



163



164

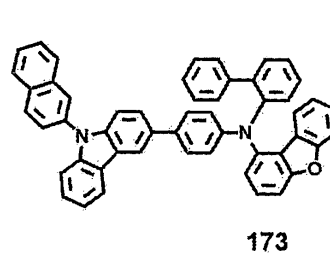
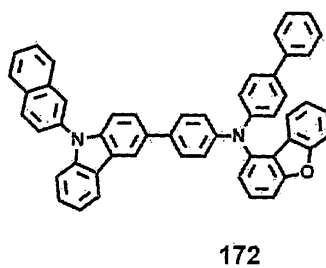
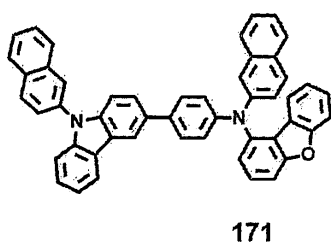
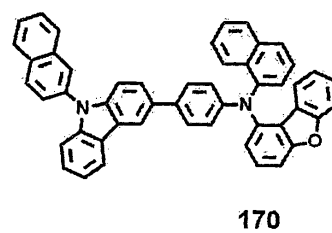
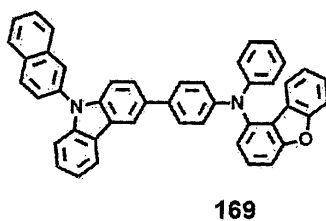
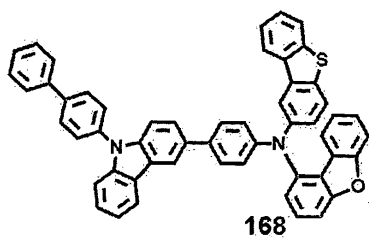
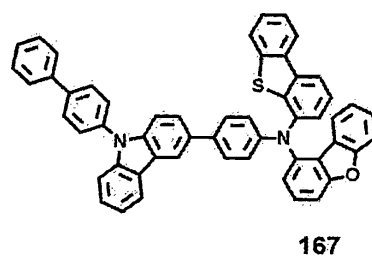
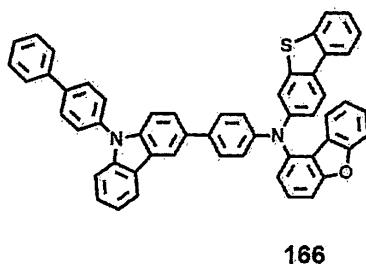
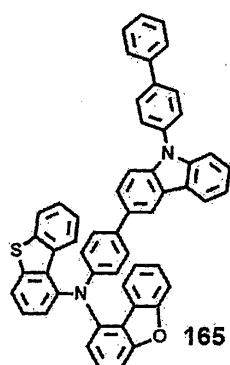
10

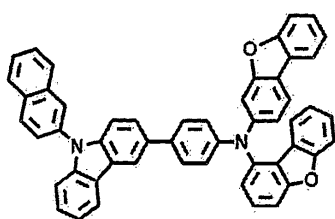
20

30

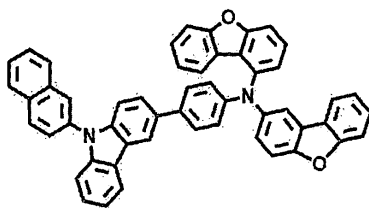
40

50

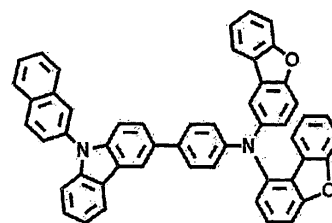




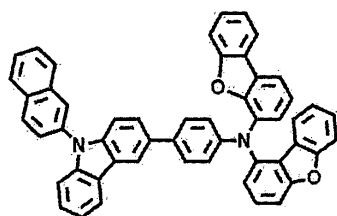
174



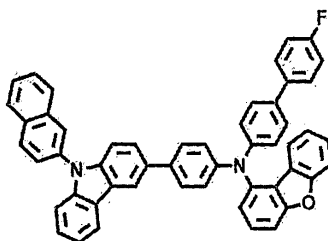
175



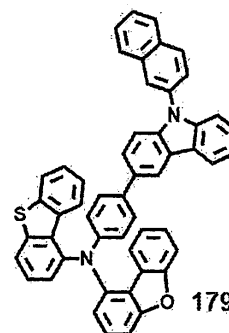
176



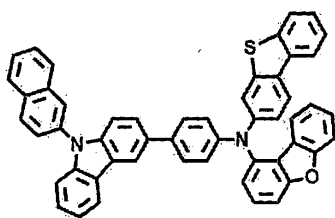
177



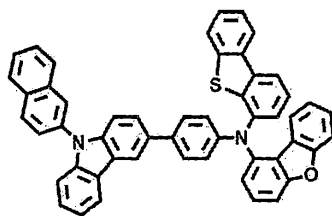
178



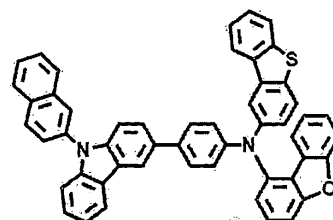
179



180



181



182

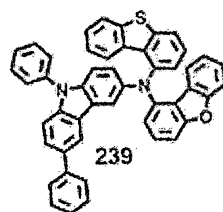
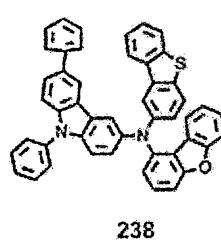
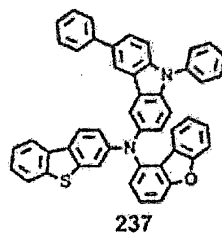
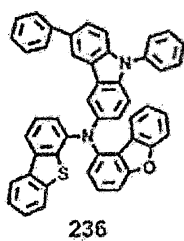
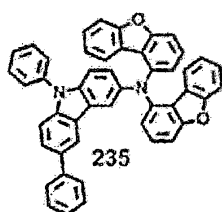
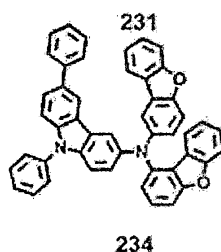
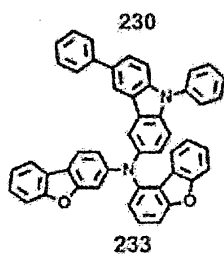
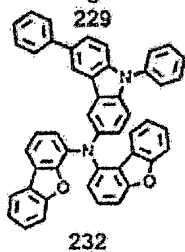
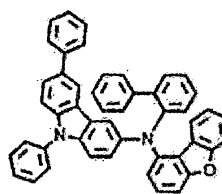
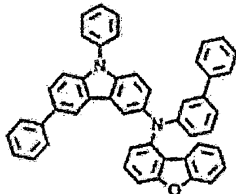
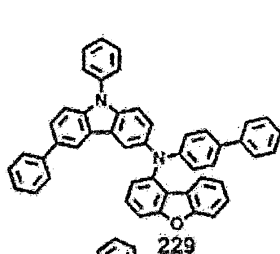
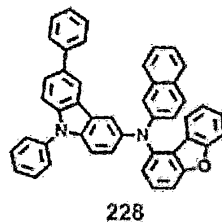
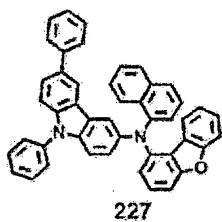
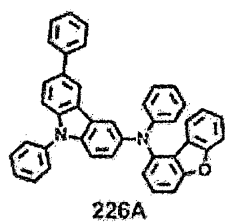
10

20

30

40

50



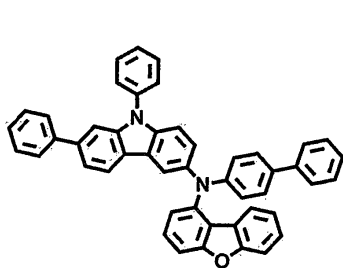
10

20

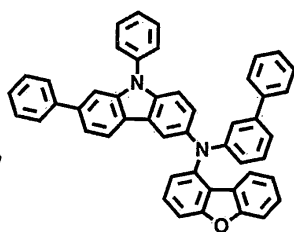
30

40

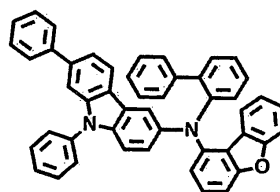
50



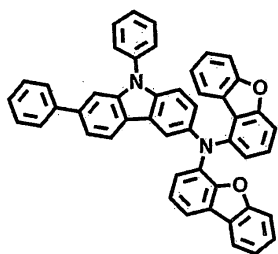
240



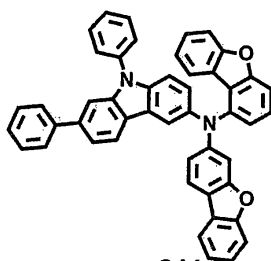
241



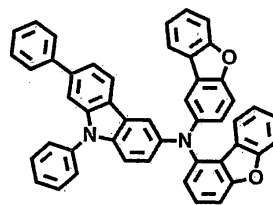
242



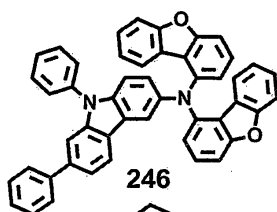
243



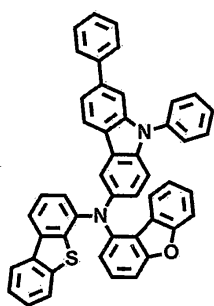
244



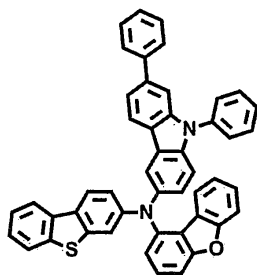
245



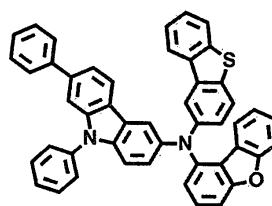
246



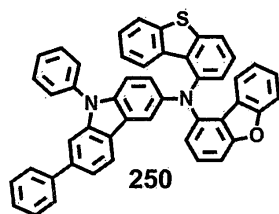
247



248



249



250

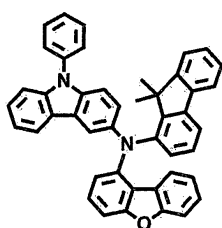
10

20

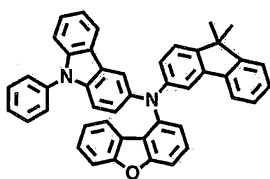
30

40

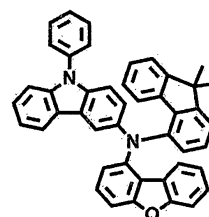
50



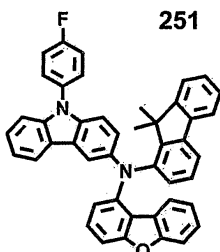
251



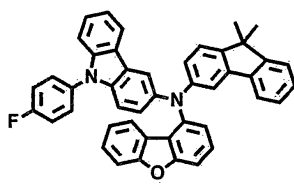
252



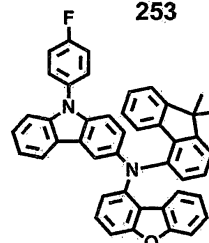
253



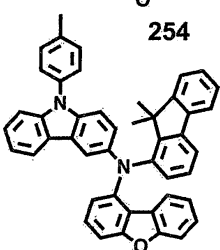
254



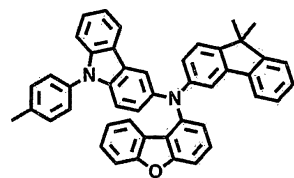
255



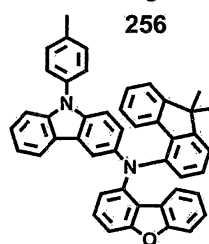
256



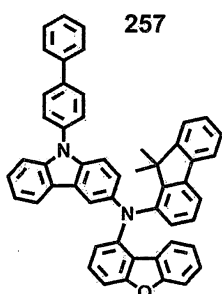
257



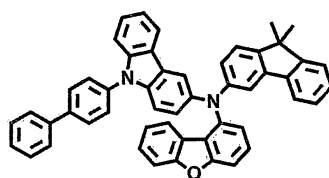
258



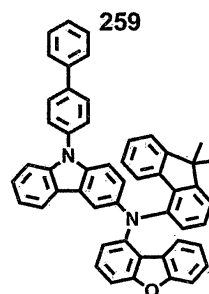
259



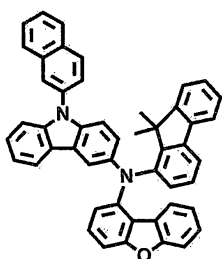
260



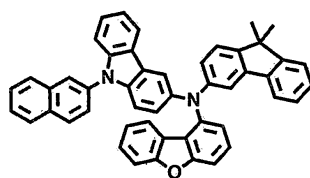
261



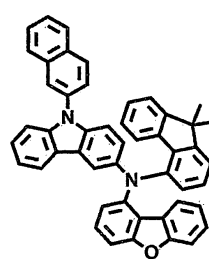
262



263



264



265

【発明の詳細な説明】

【技術分野】

【0001】

本発明は、アミン化合物、及びそれを含んだ有機発光素子に関する。

【背景技術】

【0002】

有機発光素子 (organic light emitting device) は、自発光型素子であり、従来の素子に比べ、視野角が広く、コントラストにすぐれるだけでなく、応答時間が短く、輝度、駆動電圧及び応答速度の特性にすぐれ、多色化が可能である。

【0003】

有機発光素子は、基板上部に、第1電極が配置されており、第1電極上部に、正孔輸送領域 (hole transport region)、発光層、電子輸送領域 (electron transport region) 及び第2電極が順次に積層されている構造を有する。第1電極から注入された正孔は、正孔輸送領域を経由して発光層に移動し、第2電極から注入された電子は、電子輸送領域を経由して発光層に移動する。キャリアである正孔及び電子は、発光層領域で再結合し、励起子 (exciton) を生成する。該励起子が励起状態から基底状態に戻る際に光が発生する。

【先行技術文献】

【特許文献】

10

【0004】

【文献】韓国公開特許第2012-0017382号公報

【発明の概要】

【発明が解決しようとする課題】

【0005】

本発明が解決しようとする課題は、アミン化合物、及びそれを含んだ有機発光素子を提供することである。

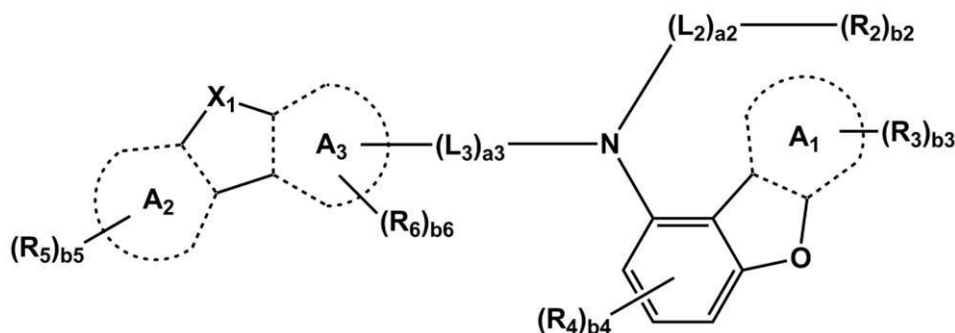
【課題を解決するための手段】

【0006】

一実施形態によれば、下記化学式1Aまたは化学式1Bで表わされるアミン化合物が提供される。

20

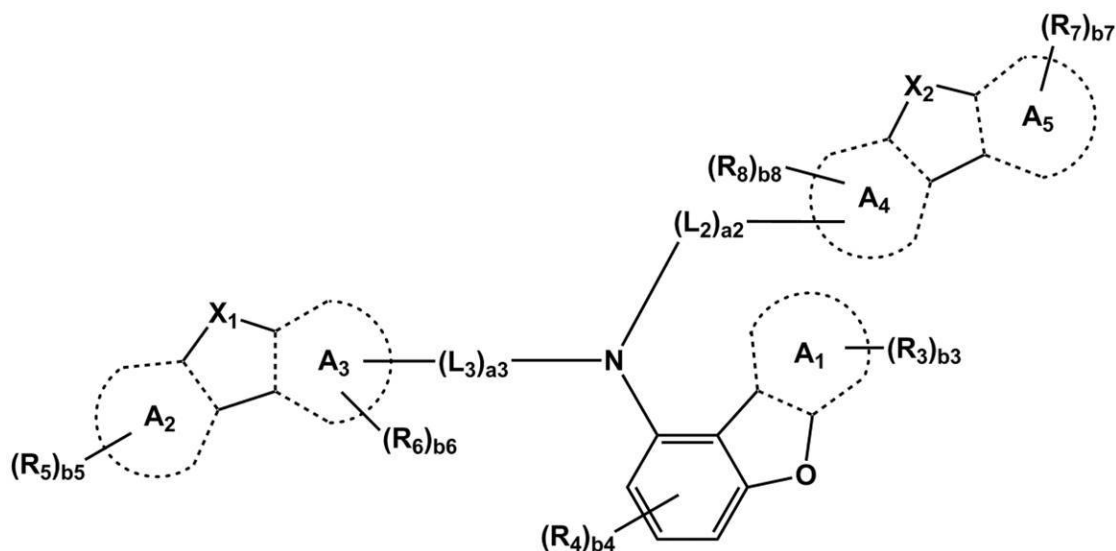
【化1】



30

・・・ (化学式1A)

【化2】



40

・・・ (化学式1B)

50

前記化学式 1 A 及び 1 B において、

$A_1 \sim A_5$ は、互いに独立して、 $C_5 - C_{30}$ 炭素環式基及び $C_1 - C_{30}$ ヘテロ環式基のうちから選択され、

X_1 は、O、S、 $N - (L_1)_{a_1} - (R_1)_{b_1}$ または $C(R_9)(R_{10})$ であり、

X_2 は、O、S または $C(R_{11})(R_{12})$ であり、

$L_1 \sim L_3$ は、互いに独立して、単結合、置換もしくは無置換の $C_5 - C_{60}$ 炭素環式基、及び置換もしくは無置換の $C_1 - C_{60}$ ヘテロ環式基のうちから選択され、

$a_1 \sim a_3$ は、互いに独立して、1～5の整数のうちから選択され、

$R_1 \sim R_{12}$ は、互いに独立して、水素原子、重水素原子、フッ素原子、塩素原子、臭素原子、ヨウ素原子、ヒドロキシル基、シアノ基、ニトロ基、アミノ基、アミジノ基、ヒドラジノ基、ヒドラゾノ基、置換もしくは無置換の $C_1 - C_{60}$ アルキル基、置換もしくは無置換の $C_2 - C_{60}$ アルケニル基、置換もしくは無置換の $C_2 - C_{60}$ アルキニル基、置換もしくは無置換の $C_1 - C_{60}$ アルコキシ基、置換もしくは無置換の $C_3 - C_{10}$ シクロアルキル基、置換もしくは無置換の $C_1 - C_{10}$ ヘテロシクロアルキル基、置換もしくは無置換の $C_3 - C_{10}$ シクロアルケニル基、置換もしくは無置換の $C_1 - C_{10}$ ヘテロシクロアルケニル基、置換もしくは無置換の $C_6 - C_{60}$ アリール基、置換もしくは無置換の $C_6 - C_{60}$ アリールオキシ基、置換もしくは無置換の $C_6 - C_{60}$ アリールチオ基、置換もしくは無置換の $C_1 - C_{60}$ ヘテロアリール基、置換もしくは無置換の一価の非芳香族縮合多環基、置換もしくは無置換の一価の非芳香族ヘテロ縮合多環基、 $-Si(Q_1)(Q_2)(Q_3)$ 、 $-B(Q_1)(Q_2)$ 、及び $-C(=O)(Q_1)$ のうちから選択され、

R_9 及び R_{10} 、並びに／または R_{11} 及び R_{12} は、選択的に、互いに結合され、置換もしくは無置換の $C_5 - C_{30}$ 炭素環式基、及び置換もしくは無置換の $C_1 - C_{30}$ ヘテロ環式基を形成することができ、

$b_1 \sim b_3$ 、及び $b_5 \sim b_8$ は、互いに独立して、1～10の整数のうちから選択され、

b_4 は、1～3の整数のうちから選択され、

前記置換された $C_5 - C_{60}$ 炭素環式基、置換された $C_1 - C_{60}$ ヘテロ環式基、置換された $C_1 - C_{60}$ アルキル基、置換された $C_2 - C_{60}$ アルケニル基、置換された $C_2 - C_{60}$ アルキニル基、置換された $C_1 - C_{60}$ アルコキシ基、置換された $C_3 - C_{10}$ シクロアルキル基、置換された $C_1 - C_{10}$ ヘテロシクロアルキル基、置換された $C_3 - C_{10}$ シクロアルケニル基、置換された $C_1 - C_{10}$ ヘテロシクロアルケニル基、置換された $C_6 - C_{60}$ アリール基、置換された $C_6 - C_{60}$ アリールオキシ基、置換された $C_6 - C_{60}$ アリールチオ基、置換された $C_1 - C_{60}$ ヘテロアリール基、置換された一価の非芳香族縮合多環基、及び置換された一価の非芳香族ヘテロ縮合多環基の置換基の中で少なくとも一つは、

重水素、 $-F$ 、 $-Cl$ 、 $-Br$ 、 $-I$ 、ヒドロキシル基、シアノ基、ニトロ基、アミノ基、アミジノ基、ヒドラジノ基、ヒドラゾノ基、 $C_1 - C_{60}$ アルキル基、 $C_2 - C_{60}$ アルケニル基、 $C_2 - C_{60}$ アルキニル基及び $C_1 - C_{60}$ アルコキシ基；

重水素、 $-F$ 、 $-Cl$ 、 $-Br$ 、 $-I$ 、ヒドロキシル基、シアノ基、ニトロ基、アミノ基、アミジノ基、ヒドラジノ基、ヒドラゾノ基、 $C_3 - C_{10}$ シクロアルキル基、 $C_1 - C_{10}$ ヘテロシクロアルキル基、 $C_3 - C_{10}$ シクロアルケニル基、 $C_1 - C_{10}$ ヘテロシクロアルケニル基、 $C_6 - C_{60}$ アリール基、 $C_6 - C_{60}$ アリールオキシ基、 $C_6 - C_{60}$ アリールチオ基、 $C_1 - C_{60}$ ヘテロアリール基、一価の非芳香族縮合多環基、一価の非芳香族ヘテロ縮合多環基、 $-Si(Q_{11})(Q_{12})(Q_{13})$ 、 $-N(Q_{11})(Q_{12})$ 、 $-B(Q_{11})(Q_{12})$ 、 $-C(=O)(Q_{11})$ 、 $-S(=O)_2(Q_{11})$ 及び $-P(=O)(Q_{11})(Q_{12})$ のうちから選択された少なくとも一つで置換された、 $C_1 - C_{60}$ アルキル基、 $C_2 - C_{60}$ アルケニル基、 $C_2 - C_{60}$ アルキニル基及び $C_1 - C_{60}$ アルコキシ基；

$C_3 - C_{10}$ シクロアルキル基、 $C_1 - C_{10}$ ヘテロシクロアルキル基、 $C_3 - C_{10}$ シクロアルケニル基、 $C_1 - C_{10}$ ヘテロシクロアルケニル基、 $C_6 - C_{60}$ アリール基、 $C_6 - C_{60}$ アリールオキシ基、 $C_6 - C_{60}$ アリールチオ基、 $C_1 - C_{60}$ ヘテロアリール

10

20

30

40

50

基、一価の非芳香族縮合多環基、一価の非芳香族ヘテロ縮合多環基、ビフェニル基及びターフェニル基；

重水素、 $-F$ 、 $-Cl$ 、 $-Br$ 、 $-I$ 、ヒドロキシル基、シアノ基、ニトロ基、アミノ基、アミジノ基、ヒドラジノ基、ヒドラゾノ基、 C_1-C_{60} アルキル基、 C_2-C_{60} アルケニル基、 C_2-C_{60} アルキニル基、 C_1-C_{60} アルコキシ基、 C_3-C_{10} シクロアルキル基、 C_1-C_{10} ヘテロシクロアルキル基、 C_3-C_{10} シクロアルケニル基、 C_1-C_{10} ヘテロシクロアルケニル基、 C_6-C_{60} アリール基、 C_6-C_{60} アリールオキシ基、 C_6-C_{60} アリールチオ基、 C_1-C_{60} ヘテロアリール基、一価の非芳香族縮合多環基、一価の非芳香族ヘテロ縮合多環基、ビフェニル基、ターフェニル基、 $-Si(Q_{21})(Q_{22})(Q_{23})$ 、 $-N(Q_{21})(Q_{22})$ 、 $-B(Q_{21})(Q_{22})$ 、 $-C(=O)(Q_{21})$ 、 $-S(=O)_2(Q_{21})$ 及び $-P(=O)(Q_{21})(Q_{22})$ のうちから選択された少なくとも一つで置換された、 C_3-C_{10} シクロアルキル基、 C_1-C_{10} ヘテロシクロアルキル基、 C_3-C_{10} シクロアルケニル基、 C_1-C_{10} ヘテロシクロアルケニル基、 C_6-C_{60} アリール基、 C_6-C_{60} アリールオキシ基、 C_6-C_{60} アリールチオ基、 C_1-C_{60} ヘテロアリール基、一価の非芳香族縮合多環基、一価の非芳香族ヘテロ縮合多環基、ビフェニル基及びターフェニル基；並びに

$-Si(Q_{31})(Q_{32})(Q_{33})$ 、 $-N(Q_{31})(Q_{32})$ 、 $-B(Q_{31})(Q_{32})$ 、 $-C(=O)(Q_{31})$ 、 $-S(=O)_2(Q_{31})$ 及び $-P(=O)(Q_{31})(Q_{32})$ ；のうちから選択され、

前記 $Q_1 \sim Q_3$ 、 $Q_{11} \sim Q_{13}$ 、 $Q_{21} \sim Q_{23}$ 、及び $Q_{31} \sim Q_{33}$ は、互いに独立して、水素、重水素、 $-F$ 、 $-Cl$ 、 $-Br$ 、 $-I$ 、ヒドロキシル基、シアノ基、ニトロ基、アミノ基、アミジノ基、ヒドラジノ基、ヒドラゾノ基、 C_1-C_{60} アルキル基、 C_2-C_{60} アルケニル基、 C_2-C_{60} アルキニル基、 C_1-C_{60} アルコキシ基、 C_3-C_{10} シクロアルキル基、 C_1-C_{10} ヘテロシクロアルキル基、 C_3-C_{10} シクロアルケニル基、 C_1-C_{10} ヘテロシクロアルケニル基、 C_6-C_{60} アリール基、 C_1-C_{60} アルキル基で置換された C_6-C_{60} アリール基、 C_1-C_{60} ヘテロアリール基、一価の非芳香族縮合多環基、一価の非芳香族ヘテロ縮合多環基、ビフェニル基、及びターフェニル基のうちから選択される。

【0007】

他の一実施形態によれば、第1電極と、前記第1電極に対向する第2電極と、前記第1電極と前記第2電極との間に配置され、発光層を含んだ有機層と、を含み、前記有機層が、前記アミン化合物を1種以上含む有機発光素子が提供される。

【発明の効果】

【0008】

本発明の、アミン化合物を含んだ有機発光素子は、低駆動電圧、高効率、長寿命、及び高い最大量子効率を有することができる。

【図面の簡単な説明】

【0009】

【図1】一実施形態による有機発光素子の構造を概略的に示した図面である。

【図2】一実施形態による有機発光素子の構造を概略的に示した図面である。

【図3】一実施形態による有機発光素子の構造を概略的に示した図面である。

【図4】一実施形態による有機発光素子の構造を概略的に示した図面である。

【発明を実施するための形態】

【0010】

本発明は、多様な変更を加えることができ、さまざまな具現が可能であるが、以下では特定の実施形態を図面に例示し、詳細な説明によって詳細に説明する。本発明の効果、特徴、及びそれらを達成する方法は、図面と共に詳細に説明する実施形態を参照すれば、明確になるであろう。しかし、本発明は、以下で開示される実施形態に限定されるものではなく、多様な形態で実現される。

【0011】

以下、添付された図面を参照し、本発明の実施形態について詳細に説明するが、図面を参照して説明するとき、同一であるか、又は類似する構成要素は、同一図面符号を付し、それについての重複説明は、省略する。

【0012】

以下の実施形態において、単数の表現は、文脈上明白に異なる意味を有さない限り、複数の表現を含む。

【0013】

以下の実施形態において、「含む」または「有する」というような用語は、明細書上に記載された特徴または構成要素が存在するということを意味するものであり、1以上の他の特徴または構成要素が付加される可能性をあらかじめ排除するものではない。

【0014】

以下の実施形態において、膜、領域、構成要素などの部分が、他の部分の上または上部にあるとすると、他の部分の真上にある場合だけではなく、その中間に、他の膜、領域、構成要素などが介在されている場合も含む。

【0015】

図面においては、説明の便宜のために、構成要素がその大きさが誇張されていたり縮小されていたりする。例えば、図面に示された各構成の大きさ及び厚みは、説明の便宜のために、任意に示されており、本発明は、必ずしも図示されたところに限定されるものではない。

【0016】

〔置換基の一般的な定義〕

本明細書において、 C_1-C_{60} アルキル基は、炭素数1～60の線状または分枝状の脂肪族炭化水素一価基を意味し、具体的な例としては、メチル基、エチル基、プロピル基、イソブチル基、sec-ブチル基、tert-ブチル基、ペンチル基、iso-アミル基、ヘキシル基などが含まれる。本明細書において、 C_1-C_{60} アルキレン基は、 C_1-C_{60} アルキル基と同一構造を有する二価基を意味する。

【0017】

本明細書において、 C_2-C_{60} アルケニル基は、 C_2-C_{60} アルキル基の中間または末端に、1以上の炭素二重結合を含んだ炭化水素基を意味し、その具体的な例としては、エテニル基、プロペニル基、ブテニル基などが含まれる。本明細書において、 C_2-C_{60} アルケニレン基は C_2-C_{60} アルケニル基と同一構造を有する二価基を意味する。

【0018】

本明細書において、 C_2-C_{60} アルキニル基は、 C_2-C_{60} アルキル基の中間または末端に、1以上の炭素三重結合を含んだ炭化水素基を意味し、その具体的な例としては、エチニル基、プロピニル基などが含まれる。本明細書において、 C_2-C_{60} アルキニレン基は、 C_2-C_{60} アルキニル基と同一構造を有する二価基を意味する。

【0019】

本明細書において、 C_1-C_{60} アルコキシ基は、 $-OA_{101}$ （ここで、 A_{101} は、 C_1-C_{60} アルキル基である）の化学式を有する一価基を意味し、その具体的な例としては、メトキシ基、エトキシ基、イソプロピルオキシ基などが含まれる。

【0020】

本明細書において、 C_3-C_{10} シクロアルキル基は、炭素数3～10の一価の飽和炭化水素単環式基を意味し、その具体例としては、シクロプロピル基、シクロブチル基、シクロペンチル基、シクロヘキシル基、シクロヘプチル基などが含まれる。本明細書において、 C_3-C_{10} シクロアルキレン基は、 C_3-C_{10} シクロアルキル基と同一構造を有する二価基を意味する。

【0021】

本明細書において、 C_1-C_{10} ヘテロシクロアルキル基は、N、O、Si、P及びSのうちから選択された少なくとも1つのヘテロ原子を環形成原子として含んだ炭素数1～10の一価の単環式基を意味し、その具体例としては、1, 2, 3, 4-オキサトリアゾリ

10

20

30

40

50

ジニル基、テトラヒドロフラニル基、テトラヒドロチオフエニル基などが含まれる。本明細書において、 C_1-C_{10} ヘテロシクロアルキレン基は、 C_1-C_{10} ヘテロシクロアルキル基と同一構造を有する二価基を意味する。

【0022】

本明細書において、 C_3-C_{10} シクロアルケニル基は、炭素数3～10の一価の単環式基として、環内に少なくとも1つの二重結合を有するが、芳香族性 (aromaticity) を有さない基を意味し、その具体例としては、シクロペンテニル基、シクロヘキセニル基、シクロヘプテニル基などが含まれる。本明細書において、 C_3-C_{10} シクロアルケニレン基は、 C_3-C_{10} シクロアルケニル基と同一構造を有する二価基を意味する。

【0023】

本明細書において、 C_1-C_{10} ヘテロシクロアルケニル基は、N、O、Si、P及びSのうちから選択された少なくとも1つのヘテロ原子を環形成原子として含んだ炭素数1～10の一価の単環式基として、環内に少なくとも1つの二重結合を有する。 C_1-C_{10} ヘテロシクロアルケニル基の具体例としては、4, 5-ジヒドロ-1, 2, 3, 4-オキサトリアゾリル基、2, 3-ジヒドロフラニル基、2, 3-ジヒドロチオフエニル基などが含まれる。本明細書において、 C_1-C_{10} ヘテロシクロアルケニレン基は、 C_1-C_{10} ヘテロシクロアルケニル基と同一構造を有する二価基を意味する。

【0024】

本明細書において、 C_6-C_{60} アリール基は、炭素数6～60の芳香族炭素環を有する一価基を意味し、 C_6-C_{60} アリーレン基は、炭素数6～60の芳香族炭素環を有する二価基を意味する。 C_6-C_{60} アリール基の具体例としては、フェニル基、ナフチル基、アントラセニル基、フェナントレニル基、ピレニル基、クリセニル基などが含まれる。 C_6-C_{60} アリール基及び C_6-C_{60} アリーレン基が2以上の環を含む場合、該2以上の環は、互いに縮合されてもよい。

【0025】

本明細書において、 C_1-C_{60} ヘテロアリール基は、N、O、Si、P及びSのうちから選択された少なくとも1つのヘテロ原子を環形成原子として含み、炭素数1～60の芳香族ヘテロ環を有する一価基を意味し、 C_1-C_{60} ヘテロアリーレン基は、N、O、Si、P及びSのうちから選択された少なくとも1つのヘテロ原子を環形成原子として含み、炭素数1～60の芳香族ヘテロ環を有する二価基を意味する。 C_1-C_{60} ヘテロアリール基の具体例としては、ピリジニル基、ピリミジニル基、ピラジニル基、ピリダジニル基、トリアジニル基、キノリニル基、イソキノリニル基などが含まれる。 C_1-C_{60} ヘテロアリール基及び C_1-C_{60} ヘテロアリーレン基が2以上の環を含む場合、該2以上の環は、互いに縮合されてもよい。

【0026】

本明細書において、 C_6-C_{60} アリールオキシ基は、 $-OA_{102}$ (ここで、 A_{102} は、 C_6-C_{60} アリール基である) を示し、 C_6-C_{60} アリールチオ基は、 $-SA_{103}$ (ここで、 A_{103} は、 C_6-C_{60} アリール基である) を示す。

【0027】

本明細書において、一価の非芳香族縮合多環基は、2以上の環が互いに縮合されており、環形成原子として炭素のみを含み、分子全体が非芳香族性 (non-aromaticity) を有する一価基 (例えば、炭素数8～60を有する) を意味する。一価の非芳香族縮合多環基の具体例としては、デカヒドロナフタレニル基などが含まれる。本明細書において、二価の非芳香族縮合多環基は、一価の非芳香族縮合多環基と同一構造を有する二価基を意味する。

【0028】

本明細書において、一価の非芳香族ヘテロ縮合多環基は、2以上の環が互いに縮合されており、環形成原子として炭素以外に、N、O、Si、P及びSのうちから選択された少なくとも1つのヘテロ原子を含み、分子全体が非芳香族性を有する一価基 (例えば、炭素数1～60を有する) を意味する。一価の非芳香族ヘテロ縮合多環基の具体例としては、カルバゾリル基などが含まれる。本明細書において、二価の非芳香族ヘテロ縮合多環基は

10

20

30

40

50

、一価の非芳香族ヘテロ縮合多環基と同一構造を有する二価基を意味する。

【0029】

本明細書において、 C_5-C_{60} 炭素環式基とは、環形成原子として炭素のみを含んだ炭素数5～60の単環式基または多環式基を意味する。 C_5-C_{60} 炭素環式基は、芳香族炭素環式基または非芳香族炭素環式基である。 C_5-C_{60} 炭素環式基は、ベンゼンのような環、フェニル基のような一価基、またはフェニレン基のような二価基であってもよい。また、 C_5-C_{60} 炭素環式基に結合された置換基の個数により、 C_5-C_{60} 炭素環式基は、三価基または四価基であるというように、多様な変形が可能である。

【0030】

本明細書において、 C_1-C_{60} ヘテロ環式基とは、 C_5-C_{60} 炭素環式基と同一構造を有するが、環形成原子として、炭素（炭素数は、1～60でもある）以外に、N、O、Si、P及びSのうちから選択された少なくとも1つのヘテロ原子を含んだ基を意味する。

【0031】

本明細書において、前述の置換された C_5-C_{60} 炭素環式基、置換された C_1-C_{60} ヘテロ環式基、置換された C_3-C_{10} シクロアルキレン基、置換された C_1-C_{10} ヘテロシクロアルキレン基、置換された C_3-C_{10} シクロアルケニレン基、置換された C_1-C_{10} ヘテロシクロアルケニレン基、置換された C_6-C_{60} アリーレン基、置換された C_1-C_{60} ヘテロアリーレン基、置換された二価の非芳香族縮合多環基、置換された二価の非芳香族ヘテロ縮合多環基、置換された C_1-C_{60} アルキル基、置換された C_2-C_{60} アルケニル基、置換された C_2-C_{60} アルキニル基、置換された C_1-C_{60} アルコキシ基、置換された C_3-C_{10} シクロアルキル基、置換された C_1-C_{10} ヘテロシクロアルキル基、置換された C_3-C_{10} シクロアルケニル基、置換された C_1-C_{10} ヘテロシクロアルケニル基、置換された C_6-C_{60} アリール基、置換された C_6-C_{60} アリールオキシ基、置換された C_6-C_{60} アリールチオ基、置換された C_1-C_{60} ヘテロアリール基、置換された一価の非芳香族縮合多環基、及び置換された一価の非芳香族ヘテロ縮合多環基の置換基のうち少なくとも一つは、

重水素原子（-D）、フッ素原子（-F）、塩素原子（-Cl）、臭素原子（-Br）、ヨウ素原子（-I）、ヒドロキシル基、シアノ基、ニトロ基、アミジノ基、ヒドラジノ基、ヒドラゾノ基、 C_1-C_{60} アルキル基、 C_2-C_{60} アルケニル基、 C_2-C_{60} アルキニル基及び C_1-C_{60} アルコキシ基；

重水素原子、フッ素原子、塩素原子、臭素原子、ヨウ素原子、ヒドロキシル基、シアノ基、ニトロ基、アミジノ基、ヒドラジノ基、ヒドラゾノ基、 C_3-C_{10} シクロアルキル基、 C_1-C_{10} ヘテロシクロアルキル基、 C_3-C_{10} シクロアルケニル基、 C_1-C_{10} ヘテロシクロアルケニル基、 C_6-C_{60} アリール基、 C_6-C_{60} アリールオキシ基、 C_6-C_{60} アリールチオ基、 C_1-C_{60} ヘテロアリール基、一価の非芳香族縮合多環基、一価の非芳香族ヘテロ縮合多環基、-Si(Q₁₁)(Q₁₂)(Q₁₃)、-N(Q₁₁)(Q₁₂)、-B(Q₁₁)(Q₁₂)、-C(=O)(Q₁₁)、-S(=O)₂(Q₁₁)及び-P(=O)(Q₁₁)(Q₁₂)のうちから選択された少なくとも一つで置換された、 C_1-C_{60} アルキル基、 C_2-C_{60} アルケニル基、 C_2-C_{60} アルキニル基及び C_1-C_{60} アルコキシ基；

C_3-C_{10} シクロアルキル基、 C_1-C_{10} ヘテロシクロアルキル基、 C_3-C_{10} シクロアルケニル基、 C_1-C_{10} ヘテロシクロアルケニル基、 C_6-C_{60} アリール基、 C_6-C_{60} アリールオキシ基、 C_6-C_{60} アリールチオ基、 C_1-C_{60} ヘテロアリール基、一価の非芳香族縮合多環基及び一価の非芳香族ヘテロ縮合多環基；

重水素原子、フッ素原子、塩素原子、臭素原子、ヨウ素原子、ヒドロキシル基、シアノ基、ニトロ基、アミジノ基、ヒドラジノ基、ヒドラゾノ基、 C_1-C_{60} アルキル基、 C_2-C_{60} アルケニル基、 C_2-C_{60} アルキニル基、 C_1-C_{60} アルコキシ基、 C_3-C_{10} シクロアルキル基、 C_1-C_{10} ヘテロシクロアルキル基、 C_3-C_{10} シクロアルケニル基、 C_1-C_{10} ヘテロシクロアルケニル基、 C_6-C_{60} アリール基、 C_6-C_{60} アリールオキシ基、 C_6-C_{60} アリールチオ基、 C_1-C_{60} ヘテロアリール基、一価の非

10

20

30

40

50

芳香族縮合多環基、一価の非芳香族ヘテロ縮合多環基、 $-Si(Q_{21})(Q_{22})(Q_{23})$ 、 $-N(Q_{21})(Q_{22})$ 、 $-B(Q_{21})(Q_{22})$ 、 $-C(=O)(Q_{21})$ 、 $-S(=O)_2(Q_{21})$ 及び $-P(=O)(Q_{21})(Q_{22})$ のうちから選択された少なくとも一つで置換された、 C_3-C_{10} シクロアルキル基、 C_1-C_{10} ヘテロシクロアルキル基、 C_3-C_{10} シクロアルケニル基、 C_1-C_{10} ヘテロシクロアルケニル基、 C_6-C_{60} アリール基、 C_6-C_{60} アリールオキシ基、 C_6-C_{60} アリールチオ基、 C_1-C_{60} ヘテロアリール基、一価の非芳香族縮合多環基及び一価の非芳香族ヘテロ縮合多環基；並びに

$-Si(Q_{31})(Q_{32})(Q_{33})$ 、 $-N(Q_{31})(Q_{32})$ 、 $-B(Q_{31})(Q_{32})$ 、 $-C(=O)(Q_{31})$ 、 $-S(=O)_2(Q_{31})$ 及び $-P(=O)(Q_{31})(Q_{32})$ ；

のうちから選択され、

$Q_{11} \sim Q_{13}$ 、 $Q_{21} \sim Q_{23}$ 、及び $Q_{31} \sim Q_{33}$ は、互いに独立して、水素原子、重水素原子、フッ素原子、塩素原子、臭素原子、ヨウ素原子、ヒドロキシ基、シアノ基、ニトロ基、アミノ基、ヒドラジノ基、ヒドラゾノ基、 C_1-C_{60} アルキル基、 C_2-C_{60} アルケニル基、 C_2-C_{60} アルキニル基、 C_1-C_{60} アルコキシ基、 C_3-C_{10} シクロアルキル基、 C_1-C_{10} ヘテロシクロアルキル基、 C_3-C_{10} シクロアルケニル基、 C_1-C_{10} ヘテロシクロアルケニル基、 C_6-C_{60} アリール基、 C_1-C_{60} ヘテロアリール基、一価の非芳香族縮合多環基、一価の非芳香族ヘテロ縮合多環基、ビフェニル基及びターフェニル基のうちから選択される。

【0032】

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

【0033】

本明細書において、「ビフェニル基」は、「フェニル基で置換されたフェニル基」を意味する。「ビフェニル基」は、置換基が、「 C_6-C_{60} アリール基」である「置換されたフェニル基」に属する。

【0034】

本明細書において、「ターフェニル基」は、「ビフェニル基で置換されたフェニル基」を意味する。「ターフェニル基」は、置換基が、「 C_6-C_{60} アリール基」である「置換されたフェニル基」に属する。

【0035】

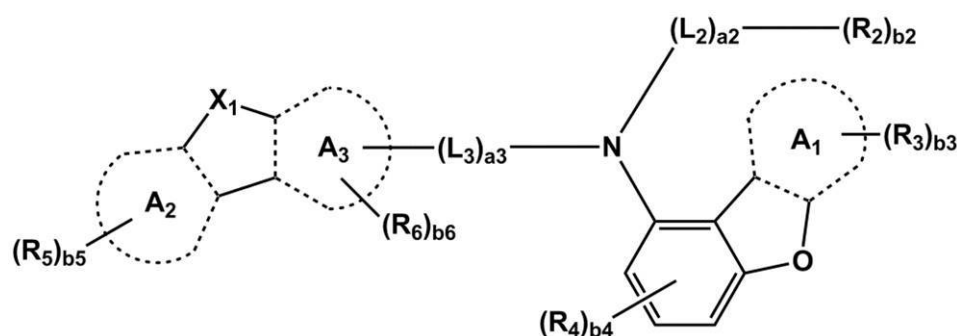
本明細書において、*及び*’は、他の定義がない限り、化学式において、隣接する原子との結合位置を意味する。

【0036】

[アミン化合物]

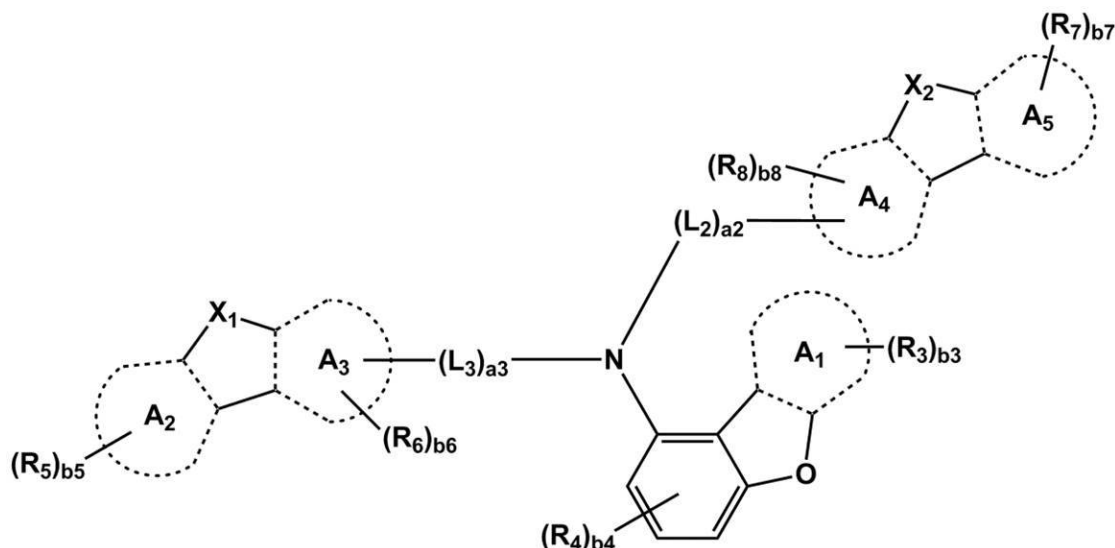
本発明のアミン化合物は、下記化学式1 Aまたは化学式1 Bで表わされる。

【化3】



・・・ (化学式1 A)

【化 4】



・・・（化学式 1 B）

【0037】

化学式 1 A 及び化学式 1 B において、 $A_1 \sim A_5$ は、互いに独立して、 $C_5 - C_{30}$ 炭素環式基及び $C_1 - C_{30}$ ヘテロ環式基のうちから選択される。

【0038】

一実施形態において、化学式 1 A 及び化学式 1 B において、 $A_1 \sim A_5$ は、互いに独立して、ベンゼン、インデン、ナフタレン、アントラセン、フルオレン、フェナントレン、トリフェニレン、ピレン、クリセン、ナフタセン、ピロール、イミダゾール、ピラゾール、ピリジン、ピリミジン、ピラジン、ピリダジン、インドール、イソインドール、インダゾール、キノリン、イソキノリン、ベンゾキノリン、ナフチリジン、キノキサリン、キナゾリン、シンノリン、カルバゾール、フェナントリジン、アクリジン、フェナントロリン、フェナジン、ベンゾイミダゾール基、フラン、ベンゾフラン、チオフエン、ベンゾチオフエン、チアゾール、イソチアゾール、ベンゾチアゾール、イソオキサゾール、オキサゾール、トリアゾール、オキサジアゾール、トリアジン、ベンゾオキサゾール、ジベンゾフラン、ジベンゾチオフエン、ベンゾカルバゾール及びジベンゾカルバゾールのうちから選択される環構造を有する。

【0039】

例えば、化学式 1 A 及び化学式 1 B において、 $A_1 \sim A_5$ は、互いに独立して、ベンゼン、インデン、ナフタレン、アントラセン、フルオレン、フェナントレン、ピリジン、ピリミジン、ピラジン、ピリダジン及びカルバゾールのうちから選択される環構造を有してもよいが、これらに限定されるものではない。

【0040】

他の例として、化学式 1 A 及び化学式 1 B において、 $A_1 \sim A_5$ は、互いに独立して、ベンゼン及びナフタレンのうちから選択される環構造を有してもよい、これらに限定されるものではない。

【0041】

さらに他の例として、化学式 1 A 及び化学式 1 B において、 $A_1 \sim A_5$ は、互いに独立して、ベンゼン環を有してもよいが、これに限定されるものではない。

【0042】

化学式 1 A 及び化学式 1 B において、 X_1 は、 O 、 S 、 $N - (L_1)_{a1} - (R_1)_{b1}$ または $C(R_9)(R_{10})$ であり、 X_2 は、 O 、 S または $C(R_{11})(R_{12})$ である。

【0043】

一実施形態において、化学式 1 A 及び化学式 1 B において、 X_1 は、 $N - (L_1)_{a1} - (R_1)_{b1}$ であり、 X_2 は、 O 、 S または $C(R_{11})(R_{12})$ であるか、あるいは X_1

は、Oであり、 X_2 は、 $C(R_{11})(R_{12})$ であってもよいが、これらに限定されるものではない。

【0044】

化学式1A及び化学式1Bにおいて、 $L_1 \sim L_3$ は、互いに独立して、単結合、置換もしくは無置換の $C_5 - C_{60}$ 炭素環式基、及び置換もしくは無置換の $C_1 - C_{60}$ ヘテロ環式基のうちから選択される。

【0045】

一実施形態において、化学式1A及び化学式1Bにおいて、 $L_1 \sim L_3$ は、互いに独立して、単結合、又はベンゼン、ペンタレン、インデン、ナフタレン、アズレン、ヘプタレン、インダセン、アセナフタレン、フルオレン、スピロビフルオレン、ベンゾフルオレン、フェナレン、フェナントレン、アントラセン、フルオランテン、トリフェニレン、ピレン、クリセン、ナフタセン、ピセン、ペリレン、ペンタフェニレン、ヘキサセン、ピロール、イミダゾール、ピラゾール、ピリジン、ピラジン、ピリミジン、ピリダジン、イソインドール、インドール、インダゾール、プリン、キノリン、イソキノリン、ベンゾキノリン、フタラジン、ナフチリジン、キノキサリン、キナゾリン、シンノリン、カルバゾール、フェナントリジン、アクリジン、フェナントロリン、フェナジン、ベンズイミダゾール、フラン、ベンゾフラン、チオフェン、ベンゾチオフェン、チアゾール、イソチアゾール、ベンゾチアゾール、イソオキサゾール、オキサゾール、トリアゾール、テトラゾール、オキサジアゾール、トリアジン、ベンゾオキサゾール、ジベンゾフラン、ジベンゾチオフェン、ベンゾカルバゾール及びジベンゾカルバゾールから選択された二価基；並びに

重水素原子、フッ素原子、塩素原子、臭素原子、ヨウ素原子、ヒドロキシ基、シアノ基、ニトロ基、アミノ基、アミジノ基、ヒドラジノ基、ヒドラゾノ基、 $C_1 - C_{20}$ アルキル基、 $C_1 - C_{20}$ アルコキシ基、 $C_6 - C_{20}$ アリール基及び $C_1 - C_{20}$ ヘテロアリール基のうちから選択された少なくとも一つで置換された、ベンゼン、ペンタレン、インデン、ナフタレン、アズレン、ヘプタレン、インダセン、アセナフタレン、フルオレン、スピロビフルオレン、ベンゾフルオレン、フェナレン、フェナントレン、アントラセン、フルオラントレン、トリフェニレン、ピレン、クリセン、ナフタセン、ピセン、ペリレン、ペンタフェニレン、ヘキサセン、ピロール、イミダゾール、ピラゾール、ピリジン、ピラジン、ピリミジン、ピリダジン、イソインドール、インドール、インダゾール、プリン、キノリン、イソキノリン、ベンゾキノリン、フタラジン、ナフチリジン、キノキサリン、キナゾリン、シンノリン、カルバゾール、フェナントリジン、アクリジン、フェナントロリン、フェナジン、ベンズイミダゾール、フラン、ベンゾフラン、チオフェン、ベンゾチオフェン、チアゾール、イソチアゾール、ベンゾチアゾール、イソオキサゾール、オキサゾール、トリアゾール、テトラゾール、オキサジアゾール、トリアジン、ベンゾオキサゾール、ジベンゾフラン、ジベンゾチオフェン、ベンゾカルバゾール及びジベンゾカルバゾールから選択された二価基；のうちから選択されるが、これらに限定されるものではない。

【0046】

他の実施形態において、化学式1A及び化学式1Bにおいて、 $L_1 \sim L_3$ は、互いに独立して、単結合、及び下記化学式3-1～化学式3-46で表わされる二価基のうちから選択される。

10

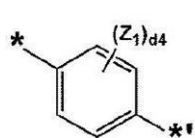
20

30

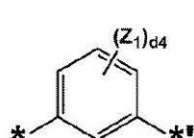
40

50

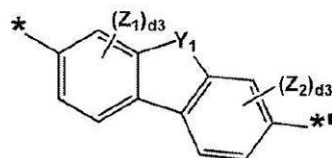
【化 5】



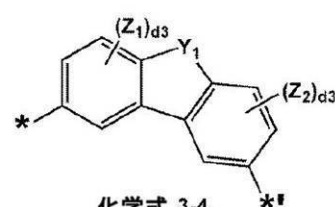
化学式 3-1



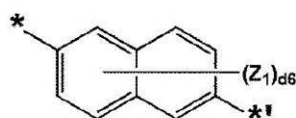
化学式 3-2



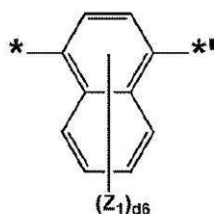
化学式 3-3



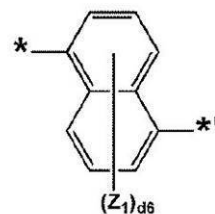
化学式 3-4



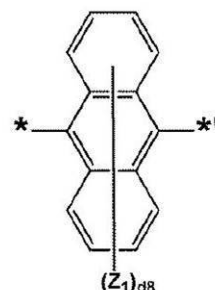
化学式 3-5



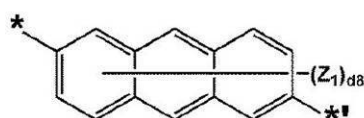
化学式 3-6



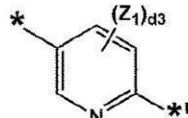
化学式 3-7



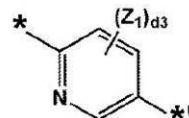
化学式 3-8



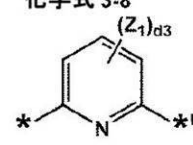
化学式 3-9



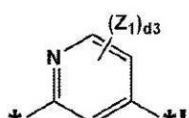
化学式 3-10



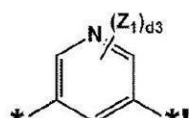
化学式 3-11



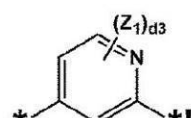
化学式 3-12



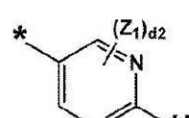
化学式 3-13



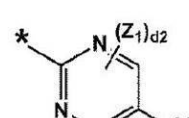
化学式 3-14



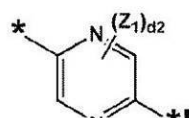
化学式 3-15



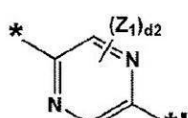
化学式 3-16



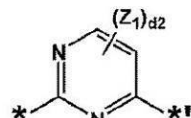
化学式 3-17



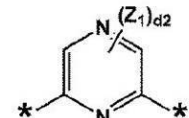
化学式 3-18



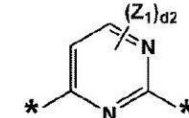
化学式 3-19



化学式 3-20



化学式 3-21



化学式 3-22

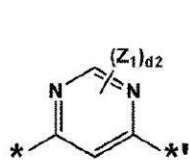
10

20

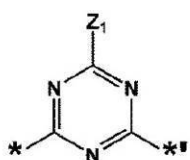
30

40

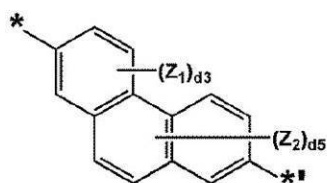
50



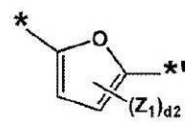
化学式 3-23



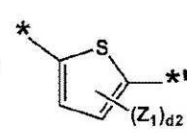
化学式 3-24



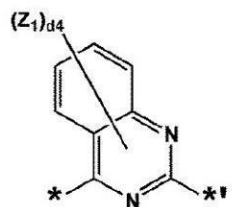
化学式 3-25



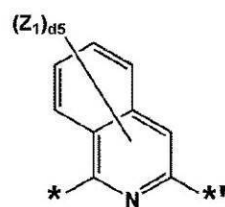
化学式 3-26



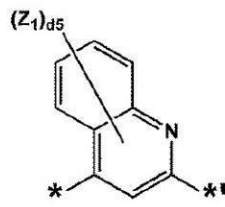
化学式 3-27



化学式 3-28



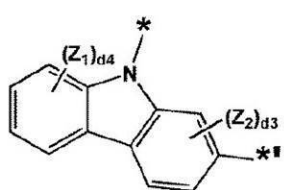
化学式 3-29



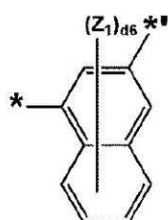
化学式 3-30



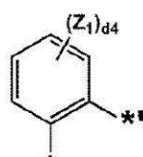
化学式 3-31



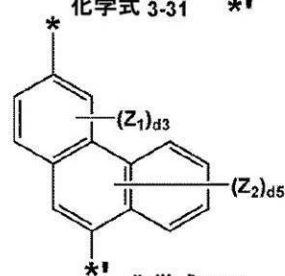
化学式 3-32



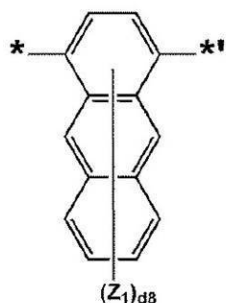
化学式 3-33



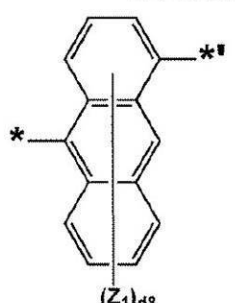
化学式 3-34



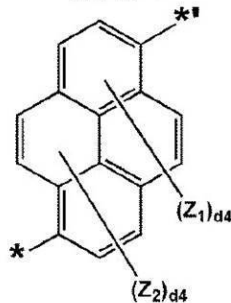
化学式 3-35



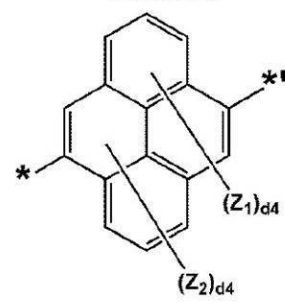
化学式 3-36



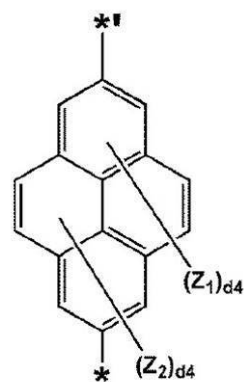
化学式 3-37



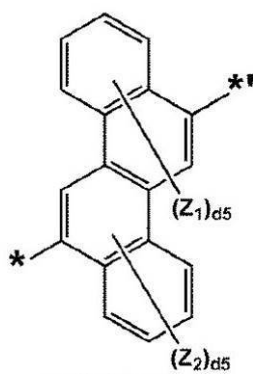
化学式 3-38



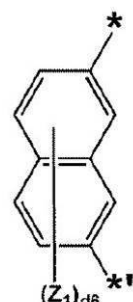
化学式 3-39



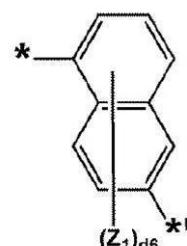
化学式 3-40



化学式 3-41



化学式 3-42



化学式 3-43

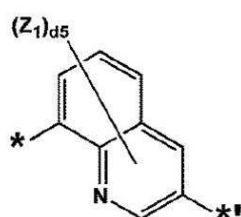
10

20

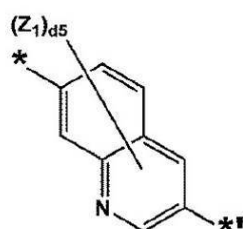
30

40

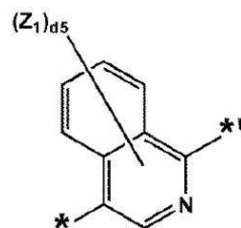
50



化学式 3-44



化学式 3-45



化学式 3-46

【0047】

化学式 3-1 ~ 化学式 3-46 において、

Y_1 は、O、S、C (Z_3) (Z_4)、N (Z_5) または Si (Z_6) (Z_7) であり、 $Z_1 \sim Z_7$ は、互いに独立して、水素原子、重水素原子、フッ素原子、塩素原子、臭素原子、ヨウ素原子、ヒドロキシル基、シアノ基、ニトロ基、アミノ基、ヒドラジノ基、ヒドラゾノ基、 C_1-C_{20} アルキル基、 C_1-C_{20} アルコキシ基、シクロペンチル基、シクロヘキシル基、シクロヘプチル基、シクロペンテニル基、シクロヘキセニル基、フェニル基、ビフェニル基、ナフチル基、フルオレニル基、スピロ-ビフルオレニル基、ペナレニル基、フェナントレニル基、アントラセニル基、フルオランテニル基、トリフェニレニル基、ピリジニル基、ピラジニル基、ピリミジニル基、キノリニル基、イソキノリニル基、ベンゾキノリニル基、ナフチリジニル基、キノキサリニル基、キナゾリニル基、カルバゾリル基、フェナントリジニル基、アクリジニル基、フェナントロリニル基、フェナジニル基、トリアジニル基、ジベンゾフラニル基、ジベンゾチオフェニル基及び -Si (Q_{31}) (Q_{32}) (Q_{33}) のうちから選択される。

【0048】

d_2 は、0 ~ 2 の整数のうちから選択され、 d_2 が 2 以上である場合、2 以上の Z_1 は、互いに同じであっても異なってもよく、

d_3 は、0 ~ 3 の整数のうちから選択され、 d_3 が 2 以上である場合、2 以上の Z_1 及び Z_2 は、互いに同じであっても異なってもよく、

d_4 は、0 ~ 4 の整数のうちから選択され、 d_4 が 2 以上である場合、2 以上の Z_1 及び Z_2 は、互いに同じであっても異なってもよく、

d_5 は、0 ~ 5 の整数のうちから選択され、 d_5 が 2 以上である場合、2 以上の Z_1 及び Z_2 は、互いに同じであっても異なってもよく、

d_6 は、0 ~ 6 の整数のうちから選択され、 d_6 が 2 以上である場合、2 以上の Z_1 及び Z_2 は、互いに同じであっても異なってもよく、

d_8 は、0 ~ 8 の整数のうちから選択され、 d_8 が 2 以上である場合、2 以上の Z_1 は、互いに同じであっても異なってもよい。

【0049】

化学式 3-1 ~ 化学式 3-46 において、* 及び *' は、隣接する原子との位置を示す。

【0050】

例えば、 $L_1 \sim L_3$ は、互いに独立して、単結合、又は化学式 3-1 ~ 化学式 3-7、化学式 3-31 ~ 化学式 3-34、化学式 3-42 及び化学式 3-43 で表わされる基のうちから選択される。

【0051】

他の例として、 $L_1 \sim L_3$ は、互いに独立して、単結合、又は化学式 3-1、化学式 3-2 及び化学式 3-34 で表わされる基のうちから選択される。

【0052】

一実施形態において、化学式 3-1 ~ 化学式 3-46 において、 $Z_1 \sim Z_7$ は、互いに独立して、水素原子、重水素原子、フッ素原子、シアノ基、メチル基、エチル基、 n -ブ

10

20

30

40

50

ロピル基、tert-ブチル基、フェニル基及びナフチル基のうちから選択されるが、これらに限定されるものではない。

【0053】

他の実施形態において、化学式1A及び化学式1Bにおいて、 $L_1 \sim L_3$ は、互いに独立して、単結合及びベンゼン環構造；並びに

重水素原子、フッ素原子、塩素原子、臭素原子、ヨウ素原子、ヒドロキシ基、シアノ基、ニトロ基、アミノ基、アミジノ基、ヒドラジノ基、ヒドラゾノ基、 C_1-C_{20} アルキル基、 C_1-C_{20} アルコキシ基、 C_6-C_{20} アリール基及び C_1-C_{20} ヘテロアリール基のうちから選択された少なくとも一つで置換された、ベンゼン環構造；のうちから選択されるが、これらに限定されるものではない。

10

【0054】

化学式1A及び化学式1Bにおいて、 $a_1 \sim a_3$ は、互いに独立して、1～5の整数のうちから選択される。 a_1 は、 L_1 の個数を示したものであり、 a_1 が2以上である場合、2以上の L_1 は、互いに同一であっても異なってもよい。 a_2 及び a_3 に係わる説明は、前述の a_1 に係わる説明と同様である。

【0055】

一実施形態において、化学式1A及び化学式1Bにおいて、 $a_1 \sim a_3$ は、互いに独立して、1～3の整数のうちから選択される。

例えば、 $a_1 \sim a_3$ は、1であってもよいが、これに限定されるものではない。

【0056】

化学式1A及び化学式1Bにおいて、 $R_1 \sim R_{12}$ は、互いに独立して、水素原子、重水素原子、フッ素原子、塩素原子、臭素原子、ヨウ素原子、ヒドロキシ基、シアノ基、ニトロ基、アミノ基、アミジノ基、ヒドラジノ基、ヒドラゾノ基、置換もしくは無置換の C_1-C_{60} アルキル基、置換もしくは無置換の C_2-C_{60} アルケニル基、置換もしくは無置換の C_2-C_{60} アルキニル基、置換もしくは無置換の C_1-C_{60} アルコキシ基、置換もしくは無置換の C_3-C_{10} シクロアルキル基、置換もしくは無置換の C_1-C_{10} ヘテロシクロアルキル基、置換もしくは無置換の C_3-C_{10} シクロアルケニル基、置換もしくは無置換の C_1-C_{10} ヘテロシクロアルケニル基、置換もしくは無置換の C_6-C_{60} アリール基、置換もしくは無置換の C_6-C_{60} アリールオキシ基、置換もしくは無置換の C_6-C_{60} アリールチオ基、置換もしくは無置換の C_1-C_{60} ヘテロアリール基、置換もしくは無置換の一価の非芳香族縮合多環基 (non-aromatic condensed polycyclic group)、置換もしくは無置換の一価の非芳香族ヘテロ縮合多環基 (non-aromatic condensed heteropolycyclic group)、 $-Si(Q_1)(Q_2)(Q_3)$ 、 $-B(Q_1)(Q_2)$ 、及び $-C(=O)(Q_1)$ のうちから選択され、

20

R_9 及び R_{10} 、並びに／または R_{11} 及び R_{12} は、任意で互いに結合され、置換もしくは無置換の C_5-C_{30} 炭素環式基、及び置換もしくは無置換の C_1-C_{30} ヘテロ環式基を形成することができる。

30

【0057】

一実施形態において、化学式1A及び化学式1Bにおいて、 R_1 及び R_2 は、互いに独立して、 C_6-C_{60} アリール基、 C_1-C_{60} ヘテロアリール基、一価の非芳香族縮合多環基及び一価の非芳香族ヘテロ縮合多環基；並びに

40

重水素原子、フッ素原子、塩素原子、臭素原子、ヨウ素原子、 C_1-C_{60} アルキル基、 C_1-C_{60} アルコキシ基、 C_6-C_{60} アリール基、 C_1-C_{60} ヘテロアリール基、一価の非芳香族縮合多環基、一価の非芳香族ヘテロ縮合多環基、 $-N(Q_{31})(Q_{32})$ 及び $-Si(Q_{31})(Q_{32})(Q_{33})$ のうち少なくとも一つで置換された、 C_6-C_{60} アリール基、 C_1-C_{60} ヘテロアリール基、一価の非芳香族縮合多環基及び一価の非芳香族ヘテロ縮合多環基；のうちから選択される。

【0058】

他の実施形態において、化学式1A及び化学式1Bにおいて、 R_1 及び R_2 は、互いに独立して、フェニル基、ペンタレニル基、インデニル基、ナフチル基、アズレニル基、ヘ

50

プタレニル基、インダセニル基、アセナフチル基、フルオレニル基、スピローフルオレニル基、スピロービフルオレニル基、ベンゾフルオレニル基、フェナレニル基、フェナントレニル基、アントラセニル基、フルオランテニル基、トリフェニレニル基、ピレニル基、クリセニル基、ナフタセニル基、ピセニル基、ペリレニル基、ペンタフェニル基、ヘキサセニル基、ピロリル基、イミダゾリル基、ピラゾリル基、ピリジニル基、ピラジニル基、ピリミジニル基、ピリダジニル基、イソインドリル基、インドリル基、インダゾリル基、プリニル基、キノリニル基、イソキノリニル基、ベンゾキノリニル基、フタラジニル基、ナフチリジニル基、キノキサリニル基、キナゾリニル基、シンノリニル基、カルバゾリル基、フェナントリジニル基、アクリジニル基、フェナントロリニル基、フェナジニル基、ベンゾオキサゾリル基、ベンゾイミダゾリル基、フラニル基、ベンゾフラニル基、チオフエニル基、ベンゾチオフエニル基、チアゾリル基、イソチアゾリル基、ベンゾチアゾリル基、イソオキサゾリル基、オキサゾリル基、トリアゾリル基、テトラゾリル基、オキサジアゾリル基、トリアジニル基、ベンゾオキサゾリル基、ジベンゾフラニル基、ジベンゾチオフエニル基、ベンゾカルバゾリル基及びジベンゾカルバゾリル基；並びに

10

重水素原子、フッ素原子、塩素原子、臭素原子、ヨウ素原子、ヒドロキシル基、シアノ基、ニトロ基、アミノ基、アミジノ基、ヒドラジノ基、ヒドラゾノ基、 C_1-C_{20} アルキル基、 C_1-C_{20} アルコキシ基、 C_6-C_{20} アリール基及び C_1-C_{20} ヘテロアリール基のうちから選択された少なくとも一つで置換された、フェニル基、ペンタレニル基、インデニル基、ナフチル基、アズレニル基、ヘプタレニル基、インダセニル基、アセナフチル基、フルオレニル基、スピローフルオレニル基、スピロービフルオレニル基、ベンゾフルオレニル基、フェナレニル基、フェナントレニル基、アントラセニル基、フルオランテニル基、トリフェニレニル基、ピレニル基、クリセニル基、ナフタセニル基、ピセニル基、ペリレニル基、ペンタフェニル基、ヘキサセニル基、ピロリル基、イミダゾリル基、ピラゾリル基、ピリジニル基、ピラジニル基、ピリミジニル基、ピリダジニル基、イソインドリル基、インドリル基、インダゾリル基、プリニル基、キノリニル基、イソキノリニル基、ベンゾキノリニル基、フタラジニル基、ナフチリジニル基、キノキサリニル基、キナゾリニル基、シンノリニル基、カルバゾリル基、フェナントリジニル基、アクリジニル基、フェナントロリニル基、フェナジニル基、ベンゾオキサゾリル基、ベンズイミダゾリル基、フラニル基、ベンゾフラニル基、チオフエニル基、ベンゾチオフエニル基、チアゾリル基、イソチアゾリル基、ベンゾチアゾリル基、イソオキサゾリル基、オキサゾリル基、トリアゾリル基、テトラゾリル基、オキサジアゾリル基、トリアジニル基、ベンゾオキサゾリル基、ジベンゾフラニル基、ジベンゾチオフエニル基、ベンゾカルバゾリル基及びジベンゾカルバゾリル基；のうちから選択されるが、これらに限定されるものではない。

20

30

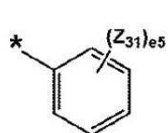
【0059】

例えば、化学式1A及び化学式1Bにおいて、 R_1 及び R_2 は、互いに独立して、下記化学式5-1～化学式5-79で表わされる基のうちから選択されるが、これらに限定されるものではない。

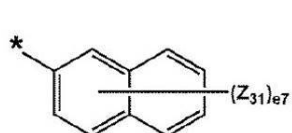
40

50

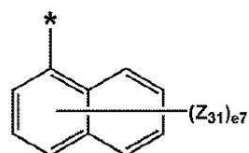
【化 6】



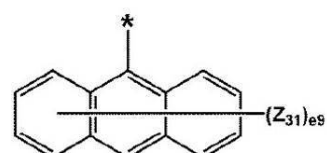
化学式 5-1



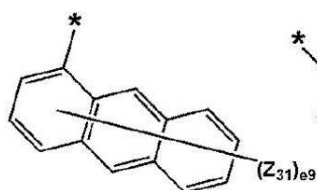
化学式 5-2



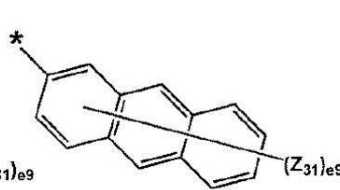
化学式 5-3



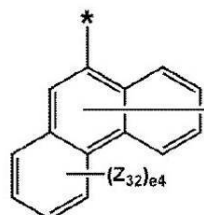
化学式 5-4



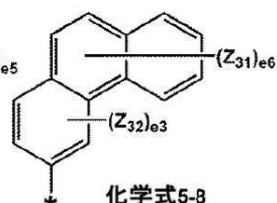
化学式 5-5



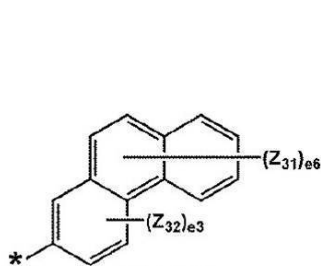
化学式 5-6



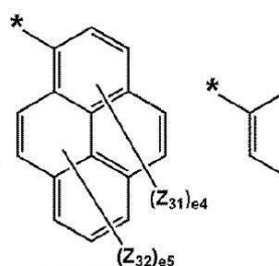
化学式 5-7



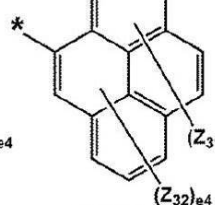
化学式 5-8



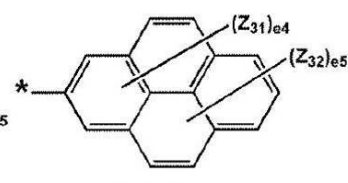
化学式 5-9



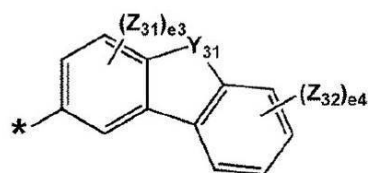
化学式 5-10



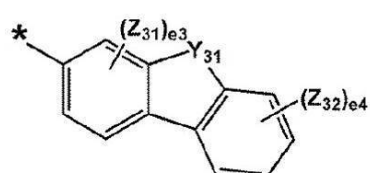
化学式 5-11



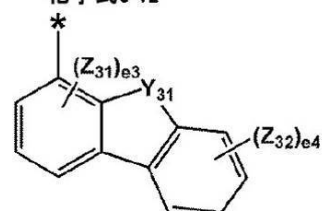
化学式 5-12



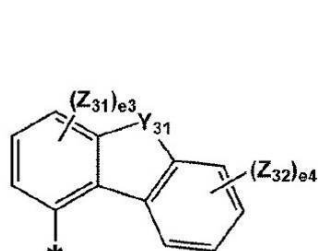
化学式 5-13



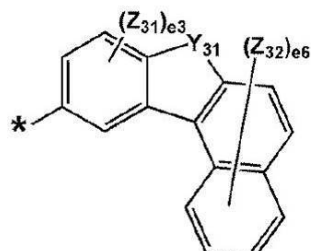
化学式 5-14



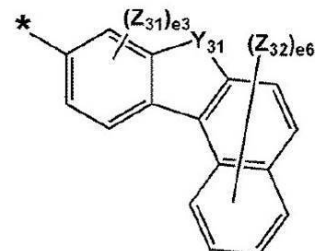
化学式 5-15



化学式 5-16



化学式 5-17



化学式 5-18

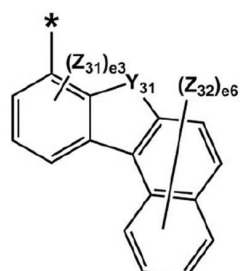
10

20

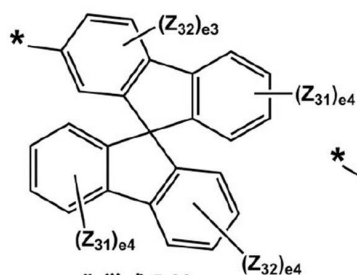
30

40

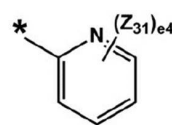
50



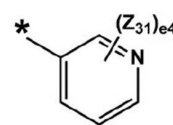
化学式 5-19



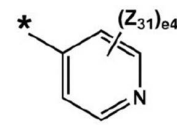
化学式 5-20



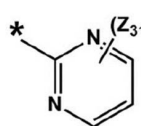
化学式 5-21



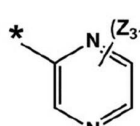
化学式 5-22



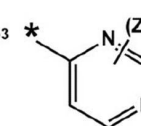
化学式 5-23



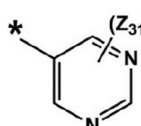
化学式 5-24



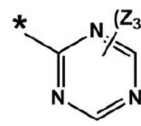
化学式 5-25



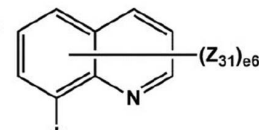
化学式 5-26



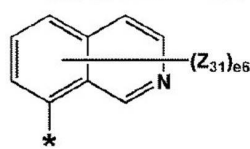
化学式 5-27



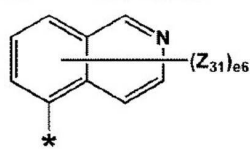
化学式 5-28



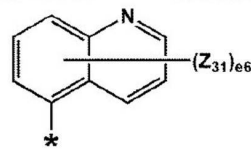
化学式 5-29



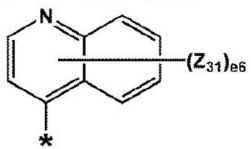
化学式 5-30



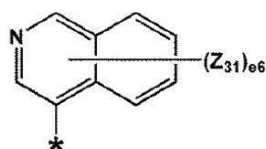
化学式 5-31



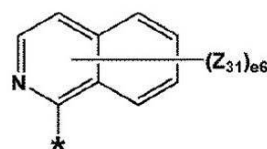
化学式 5-32



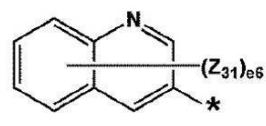
化学式 5-33



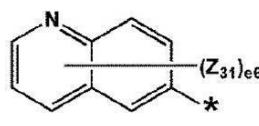
化学式 5-34



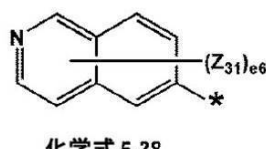
化学式 5-35



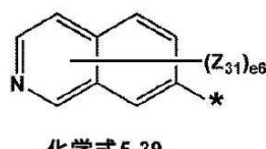
化学式 5-36



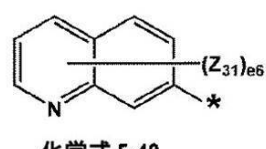
化学式 5-37



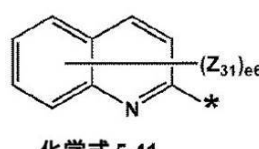
化学式 5-38



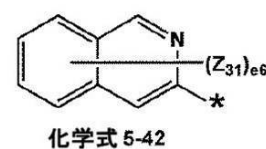
化学式 5-39



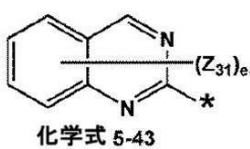
化学式 5-40



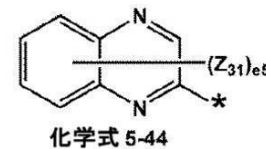
化学式 5-41



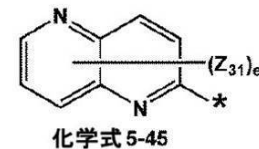
化学式 5-42



化学式 5-43



化学式 5-44



化学式 5-45

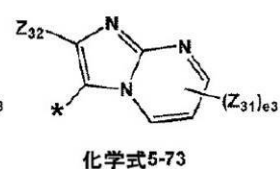
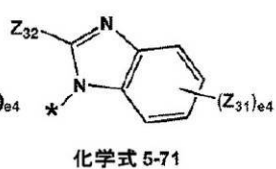
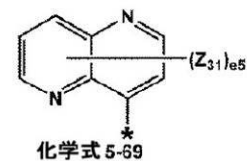
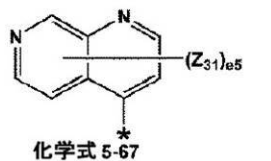
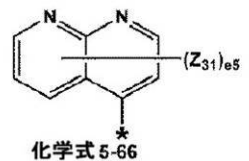
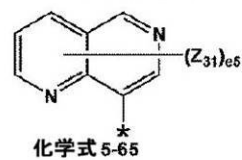
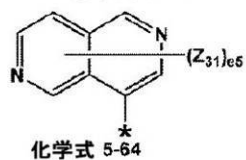
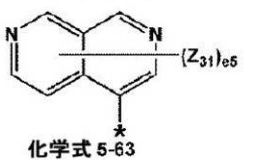
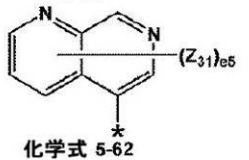
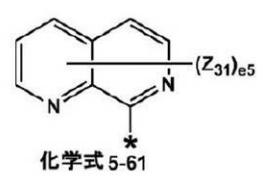
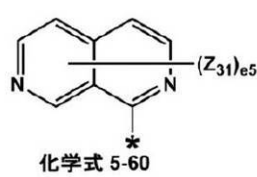
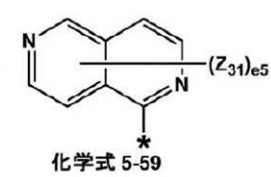
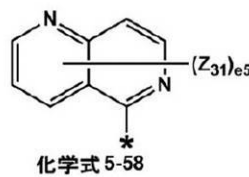
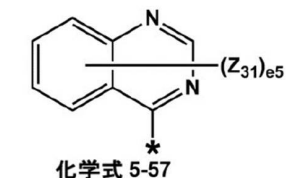
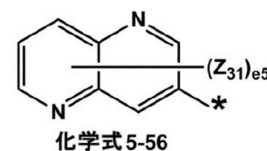
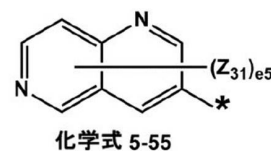
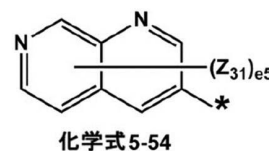
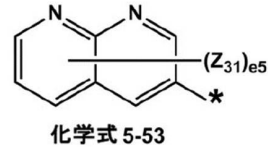
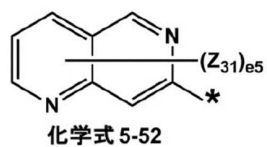
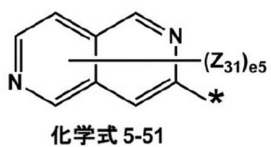
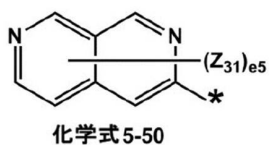
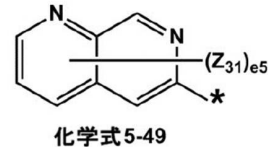
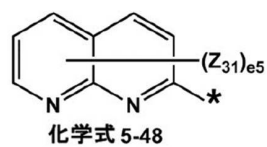
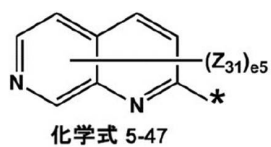
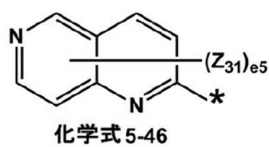
10

20

30

40

50



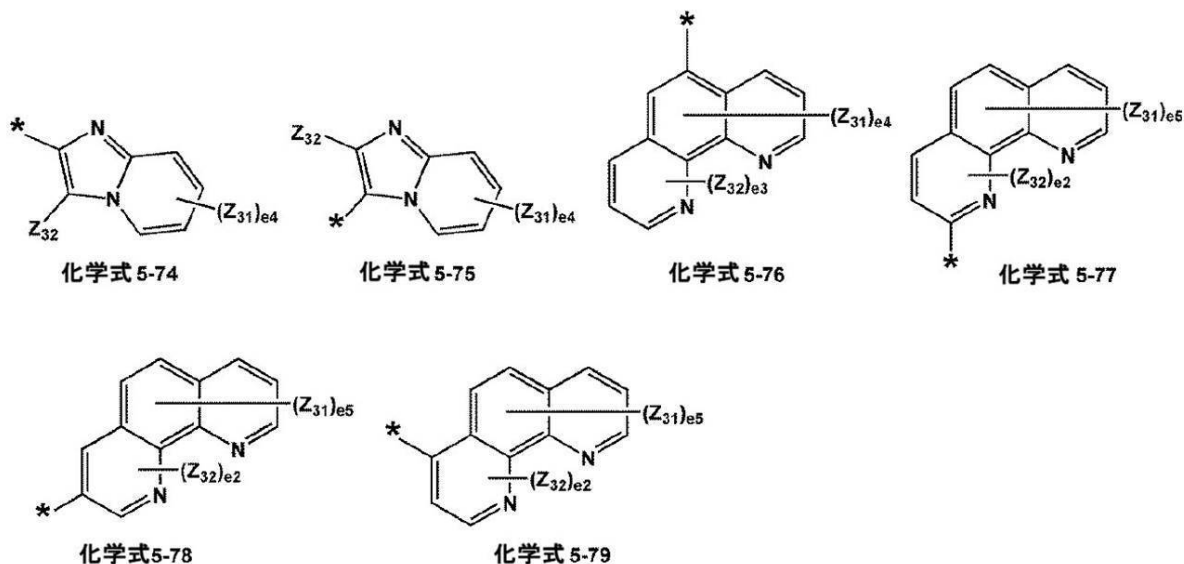
10

20

30

40

50



【 0 0 6 0 】

化学式 5-1 ~ 化学式 5-79 において、

Y_{31} は、O、S、C (Z_{33}) (Z_{34})、N (Z_{35}) または Si (Z_{36}) (Z_{37}) であり、

$Z_{31} \sim Z_{37}$ は、互いに独立して、水素原子、重水素原子、フッ素原子、塩素原子、臭素原子、ヨウ素原子、ヒドロキシル基、シアノ基、ニトロ基、アミジノ基、ヒドラジノ基、ヒドラゾノ基、 C_1-C_{20} アルキル基、 C_1-C_{20} アルコキシ基、シクロペンチル基、シクロヘキシル基、シクロヘプチル基、シクロペンテニル基、シクロヘキセニル基、フェニル基、ビフェニル基、ナフチル基、フルオレニル基、スピロ-ビフルオレニル基、スピロ-フルオレン-ベンゾフルオレニル基、ベンゾフルオレニル基、ジベンゾフルオレニル基、フェナレニル基、フェナントレニル基、アントラセニル基、フルオランテニル基、トリフェニレニル基、ピリジニル基、ピラジニル基、ピリミジニル基、キノリニル基、イソキノリニル基、ベンゾキノリニル基、ナフチリジニル基、キノキサリニル基、キナゾリニル基、カルバゾリル基、フェナントリジニル基、アクリジニル基、フェナントロリニル基、フェナジニル基、トリアジニル基、ジベンゾフラニル基、ジベンゾチオフェニル基及び Si (Q_{31}) (Q_{32}) (Q_{33}) のうちから選択され、

Z_{33} 及び Z_{34} は、任意で、互いに結合され、置換もしくは無置換の C_5-C_{30} 炭素環式基、及び置換もしくは無置換の C_1-C_{30} ヘテロ環式基を形成することができる。

【 0 0 6 1 】

e_2 は、0 ~ 2 の整数のうちから選択され、 e_2 が 2 以上である場合、2 以上の Z_{31} 及び Z_{32} は、互いに同じであっても異なってもよく、

e_3 は、0 ~ 3 の整数のうちから選択され、 e_3 が 2 以上である場合、2 以上の Z_{31} 及び Z_{32} は、互いに同じであっても異なってもよく、

e_4 は、0 ~ 4 の整数のうちから選択され、 e_4 が 2 以上である場合、2 以上の Z_{31} 及び Z_{32} は、互いに同じであっても異なってもよく、

e_5 は、0 ~ 5 の整数のうちから選択され、 e_5 が 2 以上である場合、2 以上の Z_{31} 及び Z_{32} は、互いに同じであっても異なってもよく、

e_6 は、0 ~ 6 の整数のうちから選択され、 e_6 が 2 以上である場合、2 以上の Z_{31} 及び Z_{32} は、互いに同じであっても異なってもよく、

e_7 は、0 ~ 7 の整数のうちから選択され、 e_7 が 2 以上である場合、2 以上の Z_{31} は、互いに同じであっても異なってもよく、

e_9 は、0 ~ 9 の整数のうちから選択され、 e_9 が 2 以上である場合、2 以上の Z_{31} は、互いに同じであっても異なってもよい。

【0062】

化学式5-1～化学式5-79において、*は、隣接する原子との結合位置を示す。

【0063】

例えば、化学式1A化学式1Bにおいて、 R_1 及び R_2 は、互いに独立して、化学式5-1～化学式5-20で表わされる基のうちから選択されるが、これらに限定されるものではない。

【0064】

他の例として、化学式1A及び化学式1Bにおいて、 R_1 及び R_2 は、互いに独立して、化学式5-1～化学式5-3、化学式5-13～化学式5-16、及び化学式5-20で表わされる基のうちから選択されるが、これらに限定されるものではない。

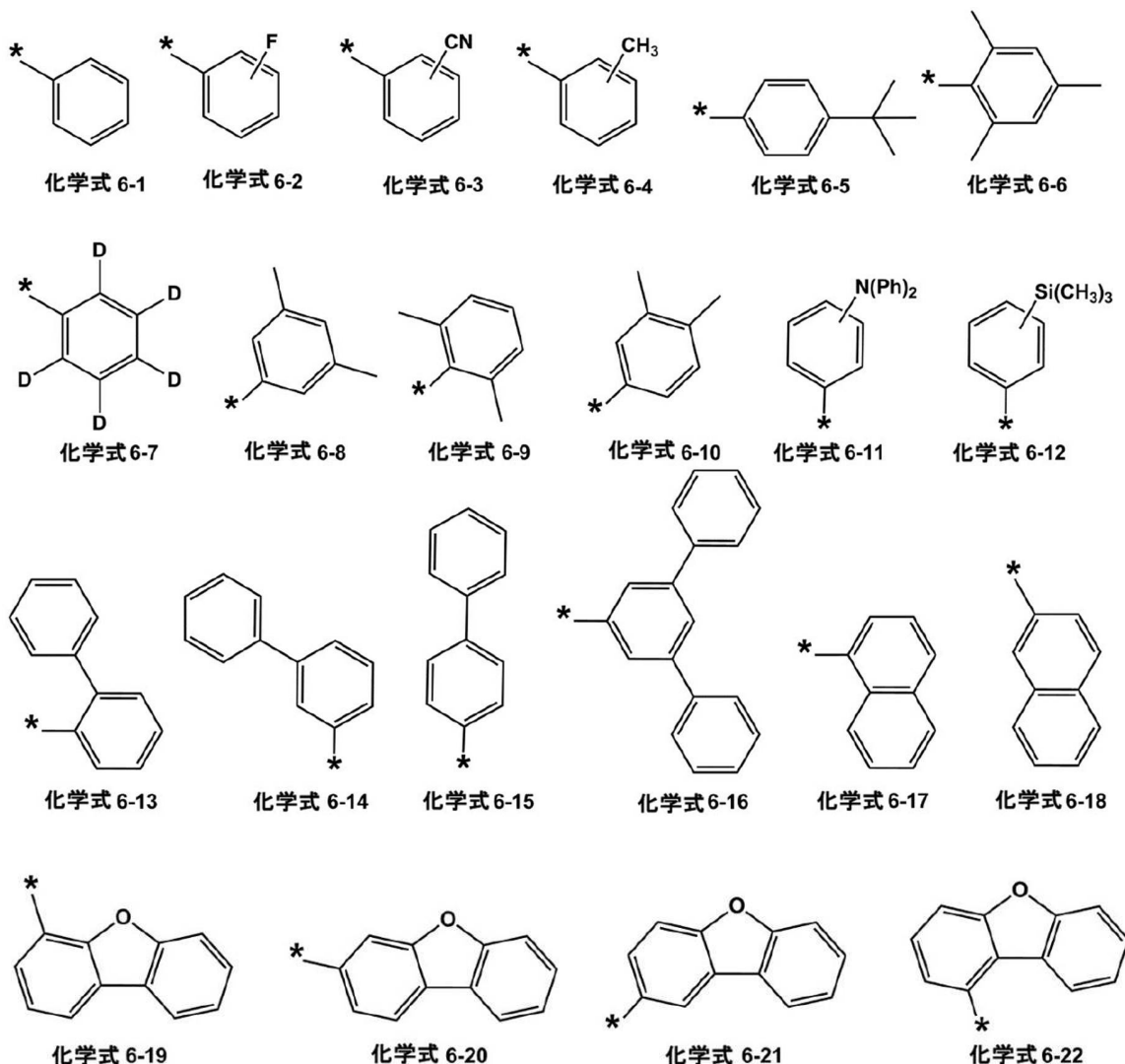
【0065】

一実施形態において、化学式5-1～化学式5-79において、 $Z_{31} \sim Z_{37}$ は、互いに独立して、水素原子、重水素原子、フッ素原子、シアノ基、メチル基、エチル基、*n*-プロピル基、*tert*-ブチル基、フェニル基及びナフチル基のうちから選択されるが、これらに限定されるものではない。

【0066】

他の実施形態において、化学式1A及び化学式1Bにおいて、 R_1 及び R_2 は、互いに独立して、下記化学式6-1～化学式6-42のうちから選択されるが、これらに限定されるものではない。

【化7】



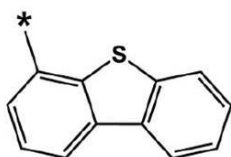
10

20

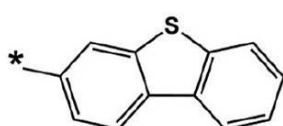
30

40

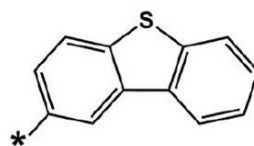
50



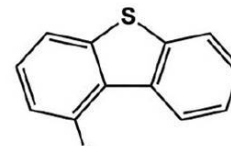
化学式 6-23



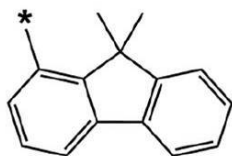
化学式 6-24



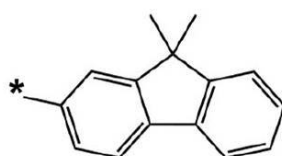
化学式 6-25



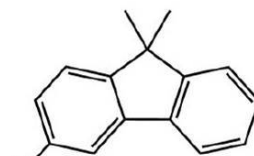
化学式 6-26



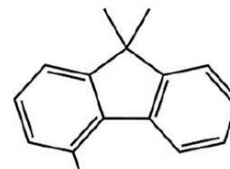
化学式 6-27



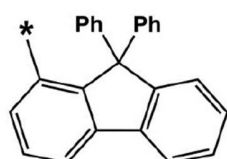
化学式 6-28



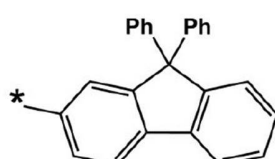
化学式 6-29



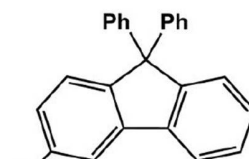
化学式 6-30



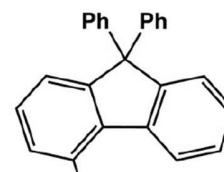
化学式 6-31



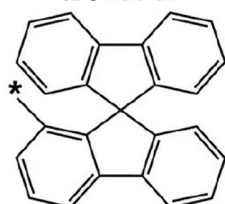
化学式 6-32



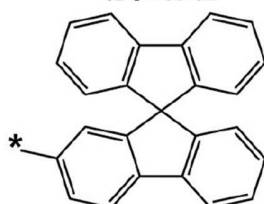
化学式 6-33



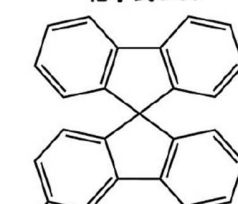
化学式 6-34



化学式 6-35



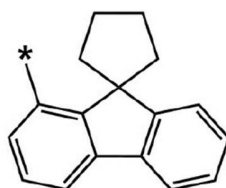
化学式 6-36



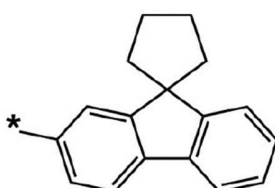
化学式 6-37



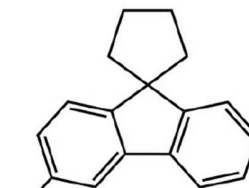
化学式 6-38



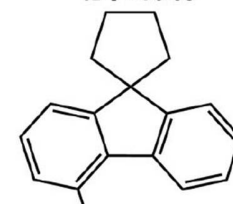
化学式 6-39



化学式 6-40



化学式 6-41



化学式 6-42

【0067】

化学式 6-1～化学式 6-42 において、「Ph」はフェニル基を示し、*は、隣接する原子との結合位置を示す。

【0068】

化学式 1A 及び化学式 1B において、 $R_3 \sim R_{12}$ は、互いに独立して、水素原子、重水素原子、フッ素原子、塩素原子、臭素原子、ヨウ素原子、 $C_1 \sim C_{60}$ アルキル基、 $C_1 \sim C_{60}$ アルコキシ基、 $C_6 \sim C_{60}$ アリール基、 $C_6 \sim C_{60}$ アリールオキシ基、 $C_6 \sim C_{60}$ アリールチオ基、 $C_1 \sim C_{60}$ ヘテロアリール基、一価の非芳香族縮合多環基、一価の非芳香族ヘテロ縮合多環基、 $-Si(Q_1)(Q_2)(Q_3)$ 及び $-N(Q_1)(Q_2)$ ；

重水素原子、フッ素原子、塩素原子、臭素原子、ヨウ素原子、シアノ基及びニトロ基のうち少なくとも一つで置換された、 $C_1 \sim C_{60}$ アルキル基及び $C_1 \sim C_{60}$ アルコキシ基；並びに

10

20

30

40

50

重水素原子、フッ素原子、塩素原子、臭素原子、ヨウ素原子 I、シアノ基、ニトロ基、メチル基、メトキシ基、フェニル基、ナフチル基及びビフェニル基のうち少なくとも一つで置換された、 C_6-C_{60} アリール基、 C_1-C_{60} ヘテロアリール基、一価の非芳香族縮合多環基及び一価の非芳香族ヘテロ縮合多環基；のうちから選択されるが、これらに限定されるものではない。

【0069】

他の実施形態において、 $R_3 \sim R_{12}$ は、互いに独立して、水素原子、重水素原子、フッ素原子、塩素原子、臭素原子、ヨウ素原子、メチル基、エチル基、プロピル基、イソプロピル基、*n*-ブチル基、イソブチル基、*sec*-ブチル基、*ter*-ブチル基、ペンチル基、*iso*-アミル基、ヘキシル基、フェニル基及びビフェニル基のうちから選択されるが、これらに限定されるものではない。

10

【0070】

化学式 1 A 及び化学式 1 B において、 $b_1 \sim b_3$ 、及び $b_5 \sim b_8$ は、互いに独立して、 $1 \sim 10$ の整数のうちから選択され、 b_4 は、 $1 \sim 3$ の整数のうちから選択される。

【0071】

b_1 は、 R_1 の個数を示したものであり、 b_1 が 2 以上である場合、2 以上の R_1 は、互いに同一であっても異なってもよい。 $b_2 \sim b_8$ に係わる説明は、 b_1 に係わる説明と同様である。

【0072】

置換された C_5-C_{60} 炭素環式基、置換された C_1-C_{60} ヘテロ環式基、置換された C_1-C_{60} アルキル基、置換された C_2-C_{60} アルケニル基、置換された C_2-C_{60} アルキニル基、置換された C_1-C_{60} アルコキシ基、置換された C_3-C_{10} シクロアルキル基、置換された C_1-C_{10} ヘテロシクロアルキル基、置換された C_3-C_{10} シクロアルケニル基、置換された C_1-C_{10} ヘテロシクロアルケニル基、置換された C_6-C_{60} アリール基、置換された C_6-C_{60} アリールオキシ基、置換された C_6-C_{60} アリールチオ基、置換された C_1-C_{60} ヘテロアリール基、置換された一価の非芳香族縮合多環基、及び置換された一価の非芳香族ヘテロ縮合多環基の置換基は、

20

重水素原子、フッ素原子、塩素原子、臭素原子、ヨウ素原子、ヒドロキシ基、シアノ基、ニトロ基、アミノ基、アミジノ基、ヒドラジノ基、ヒドラゾノ基、 C_1-C_{60} アルキル基、 C_2-C_{60} アルケニル基、 C_2-C_{60} アルキニル基及び C_1-C_{60} アルコキシ基；

30

重水素原子、フッ素原子、塩素原子、臭素原子、ヨウ素原子、ヒドロキシ基、シアノ基、ニトロ基、アミノ基、アミジノ基、ヒドラジノ基、ヒドラゾノ基、 C_3-C_{10} シクロアルキル基、 C_1-C_{10} ヘテロシクロアルキル基、 C_3-C_{10} シクロアルケニル基、 C_1-C_{10} ヘテロシクロアルケニル基、 C_6-C_{60} アリール基、 C_6-C_{60} アリールオキシ基、 C_6-C_{60} アリールチオ基、 C_1-C_{60} ヘテロアリール基、一価の非芳香族縮合多環基、一価の非芳香族ヘテロ縮合多環基、 $-Si(Q_{11})(Q_{12})(Q_{13})$ 、 $-N(Q_{11})(Q_{12})$ 、 $-B(Q_{11})(Q_{12})$ 、 $-C(=O)(Q_{11})$ 、 $-S(=O)_2(Q_{11})$ 及び $-P(=O)(Q_{11})(Q_{12})$ のうちから選択された少なくとも一つで置換された、 C_1-C_{60} アルキル基、 C_2-C_{60} アルケニル基、 C_2-C_{60} アルキニル基及び C_1-C_{60} アルコキシ基；

40

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

重水素原子、フッ素原子、塩素原子、臭素原子、ヨウ素原子、ヒドロキシ基、シアノ基、ニトロ基、アミノ基、アミジノ基、ヒドラジノ基、ヒドラゾノ基、 C_1-C_{60} アルキル基、 C_2-C_{60} アルケニル基、 C_2-C_{60} アルキニル基、 C_1-C_{60} アルコキシ基、 C_3-C_{10} シクロアルキル基、 C_1-C_{10} ヘテロシクロアルキル基、 C_3-C_{10} シ

50

クロアルケニル基、 C_1-C_{10} ヘテロシクロアルケニル基、 C_6-C_{60} アリール基、 C_6-C_{60} アリールオキシ基、 C_6-C_{60} アリールチオ基、 C_1-C_{60} ヘテロアリール基、一価の非芳香族縮合多環基、一価の非芳香族ヘテロ縮合多環基、ビフェニル基、ターフェニル基、 $-Si(Q_{21})(Q_{22})(Q_{23})$ 、 $-N(Q_{21})(Q_{22})$ 、 $-B(Q_{21})(Q_{22})$ 、 $-C(=O)(Q_{21})$ 、 $-S(=O)_2(Q_{21})$ 及び $-P(=O)(Q_{21})(Q_{22})$ のうちから選択された少なくとも一つで置換された、 C_3-C_{10} シクロアルキル基、 C_1-C_{10} ヘテロシクロアルキル基、 C_3-C_{10} シクロアルケニル基、 C_1-C_{10} ヘテロシクロアルケニル基、 C_6-C_{60} アリール基、 C_6-C_{60} アリールオキシ基、 C_6-C_{60} アリールチオ基、 C_1-C_{60} ヘテロアリール基、一価の非芳香族縮合多環基、一価の非芳香族ヘテロ縮合多環基、ビフェニル基及びターフェニル基；並びに

10

$-Si(Q_{31})(Q_{32})(Q_{33})$ 、 $-N(Q_{31})(Q_{32})$ 、 $-B(Q_{31})(Q_{32})$ 、 $-C(=O)(Q_{31})$ 、 $-S(=O)_2(Q_{31})$ 及び $-P(=O)(Q_{31})(Q_{32})$ ；のうちから選択され、

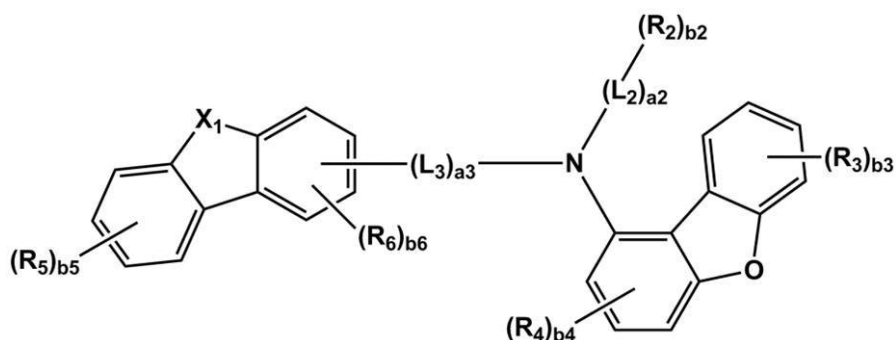
前記 $Q_1 \sim Q_3$ 、 $Q_{11} \sim Q_{13}$ 、 $Q_{21} \sim Q_{23}$ 、及び $Q_{31} \sim Q_{33}$ は、互いに独立して、水素原子、重水素原子、フッ素原子、塩素原子、臭素原子、ヨウ素原子、ヒドロキシル基、シアノ基、ニトロ基、アミノ基、アミジノ基、ヒドラジノ基、ヒドラゾノ基、 C_1-C_{60} アルキル基、 C_2-C_{60} アルケニル基、 C_2-C_{60} アルキニル基、 C_1-C_{60} アルコキシ基、 C_3-C_{10} シクロアルキル基、 C_1-C_{10} ヘテロシクロアルキル基、 C_3-C_{10} シクロアルケニル基、 C_1-C_{10} ヘテロシクロアルケニル基、 C_6-C_{60} アリール基、 C_1-C_{60} アルキル基で置換された C_6-C_{60} アリール基、 C_1-C_{60} ヘテロアリール基、一価の非芳香族縮合多環基、一価の非芳香族ヘテロ縮合多環基、ビフェニル基、及びターフェニル基のうちから選択される。

20

【0073】

一実施形態において、化学式 1 A または化学式 1 B で表わされるアミン化合物は、下記化学式 1 C または化学式 1 D で表わされてもよいが、これらに限定されるものではない。

【化 8】



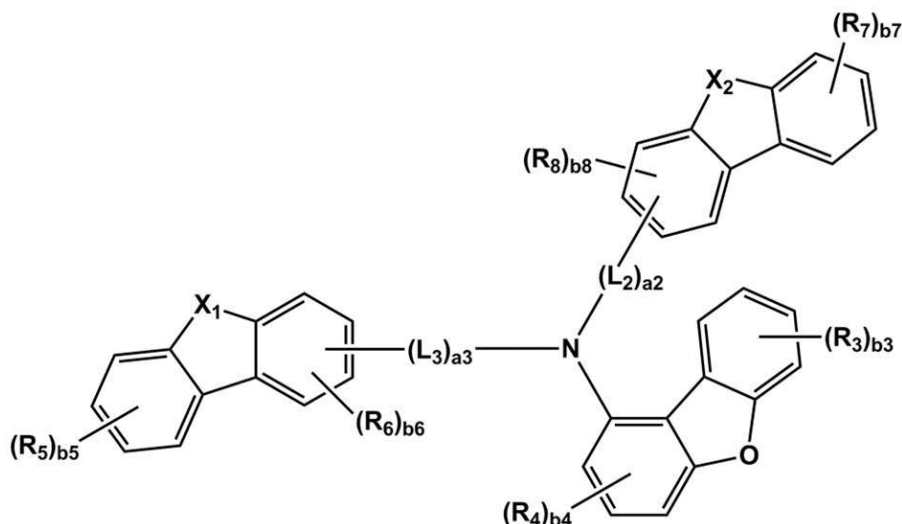
30

・・・ (化学式 1 C)

40

50

【化 9】



10

・・・ (化学式 1 D)

【 0 0 7 4】

前記化学式 1 C 及び化学式 1 D において、

X_1 、 X_2 、 $L_1 \sim L_3$ 、 $a_1 \sim a_3$ 、 $R_1 \sim R_{12}$ 、並びに b_1 及び b_2 に係わる定義は、化学式 1 A 及び化学式 1 B に係わる説明に記載されたところと同一であり、

20

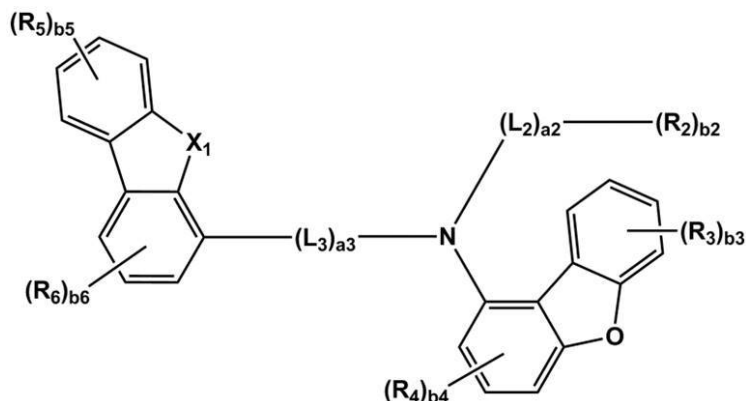
b_4 、 b_6 及び b_8 は、互いに独立して、1～3 の整数のうちから選択され、

b_3 、 b_5 及び b_7 は、互いに独立して、1～4 の整数のうちから選択される。

【 0 0 7 5】

他の実施形態において、化学式 1 A または化学式 1 B で表わされるアミン化合物は、下記化学式 1 A - 1 ～化学式 1 A - 4、及び化学式 1 B - 1 ～化学式 1 B - 16 のうちから選択されたいずれか一つでも表わされるが、これらに限定されるものではない。

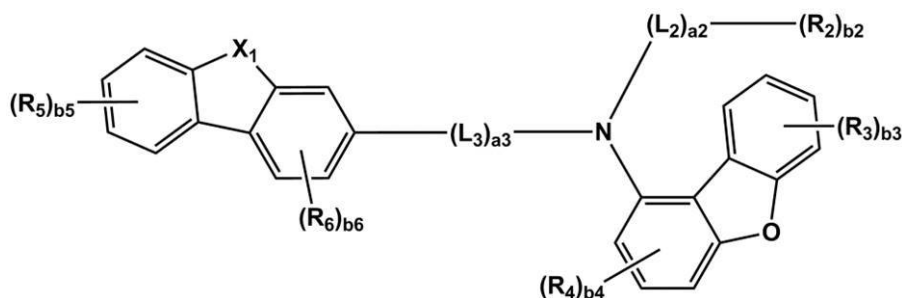
【化 1 0】



30

・・・ (化学式 1 A - 1)

【化 1 1】

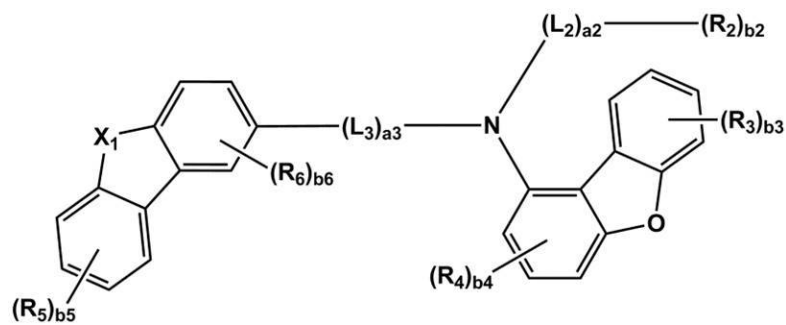


40

50

... (化学式 1 A - 2)

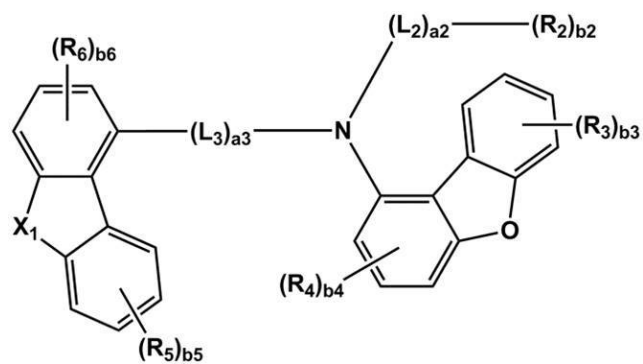
【化 1 2】



10

... (化学式 1 A - 3)

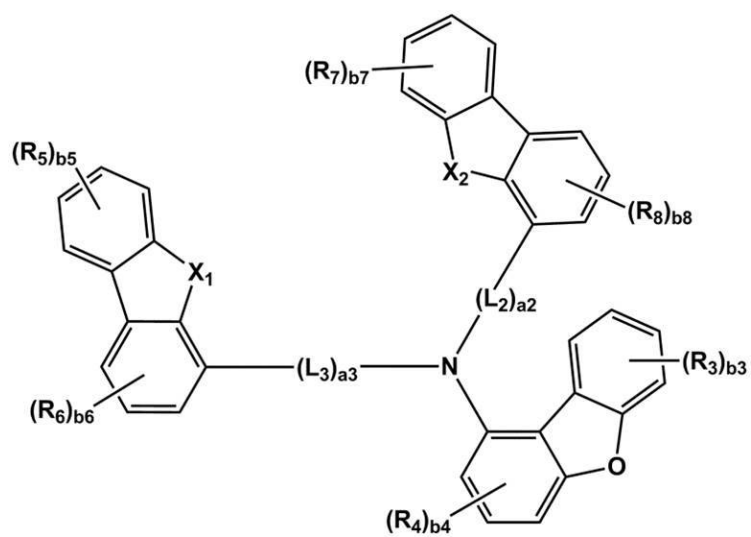
【化 1 3】



20

... (化学式 1 A - 4)

【化 1 4】



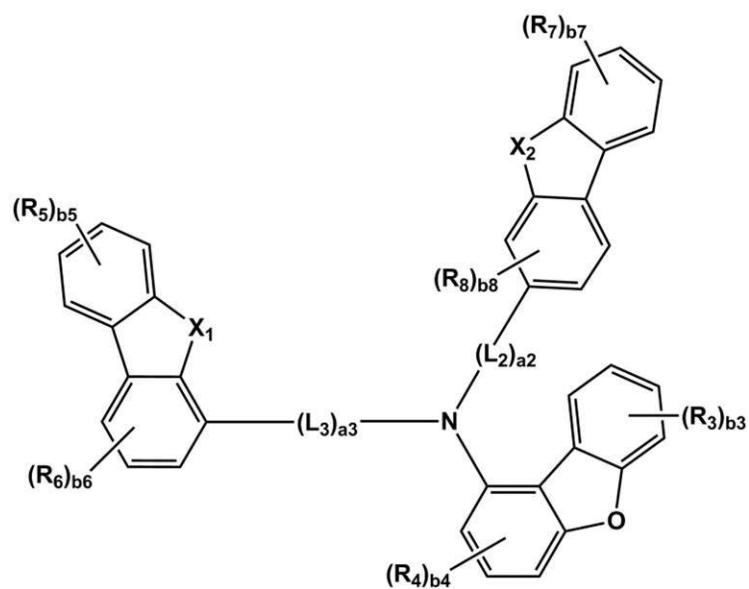
30

... (化学式 1 B - 1)

40

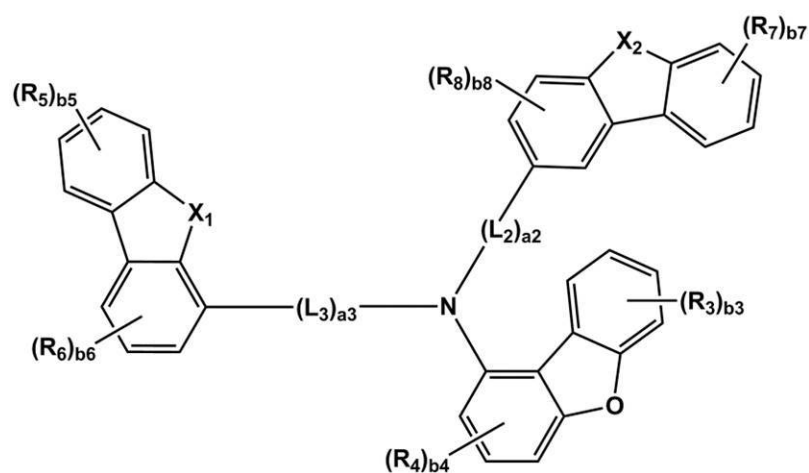
50

【化 1 5】



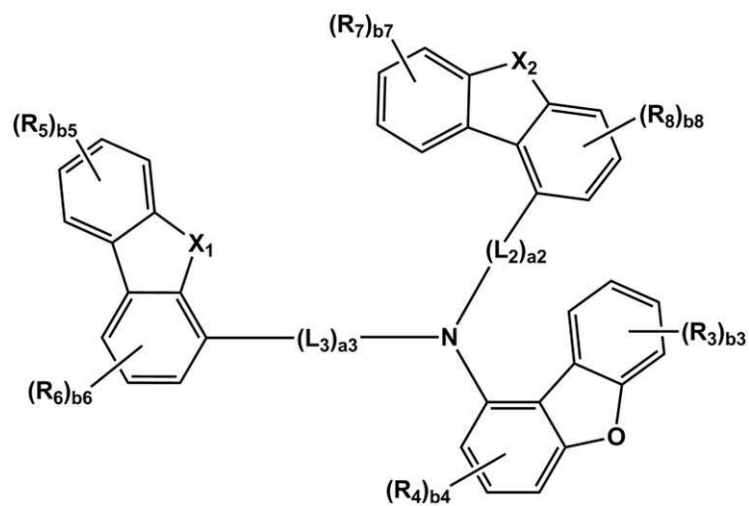
... (化学式 1 B - 2)

【化 1 6】



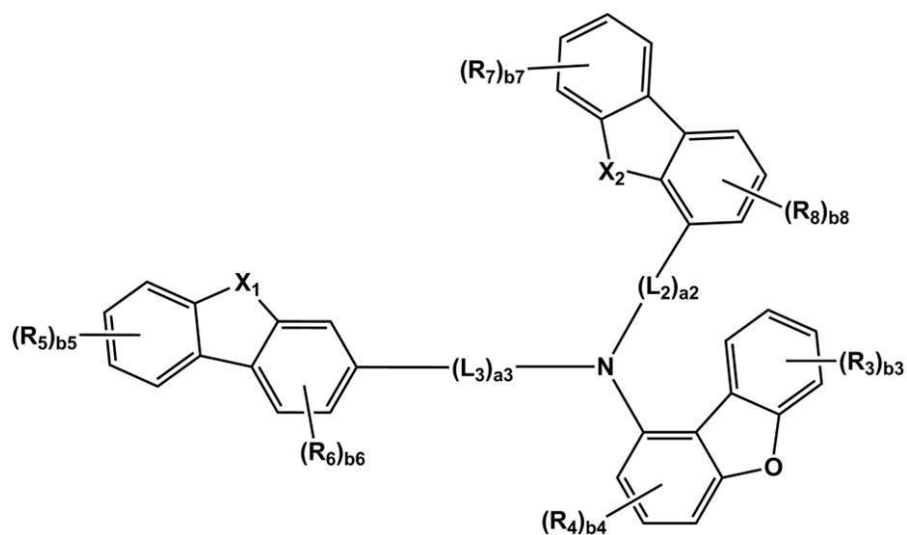
... (化学式 1 B - 3)

【化 1 7】



... (化学式 1 B - 4)

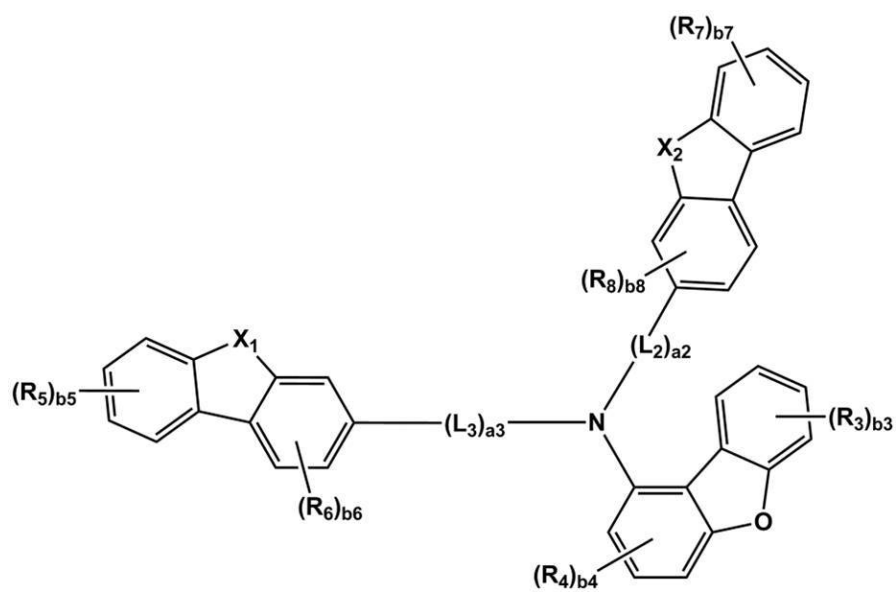
【化 1 8】



10

... (化学式 1 B - 5)

【化 1 9】

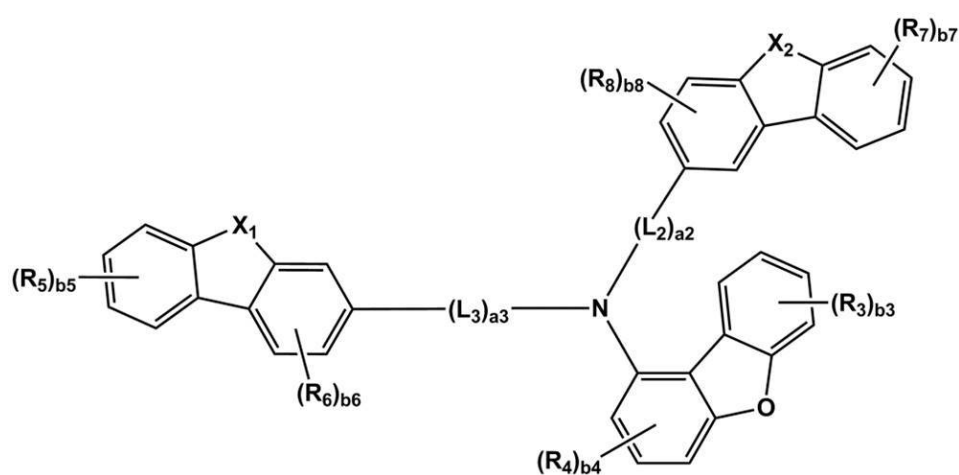


20

30

... (化学式 1 B - 6)

【化 2 0】

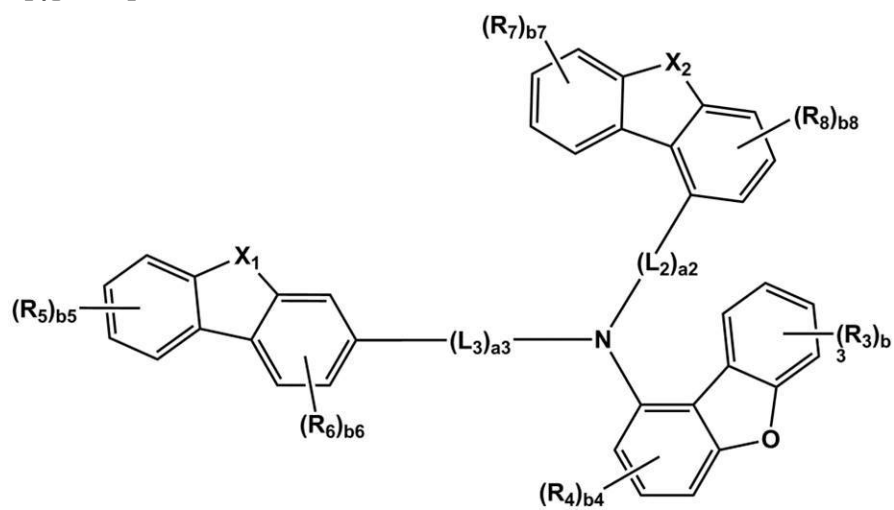


40

... (化学式 1 B - 7)

50

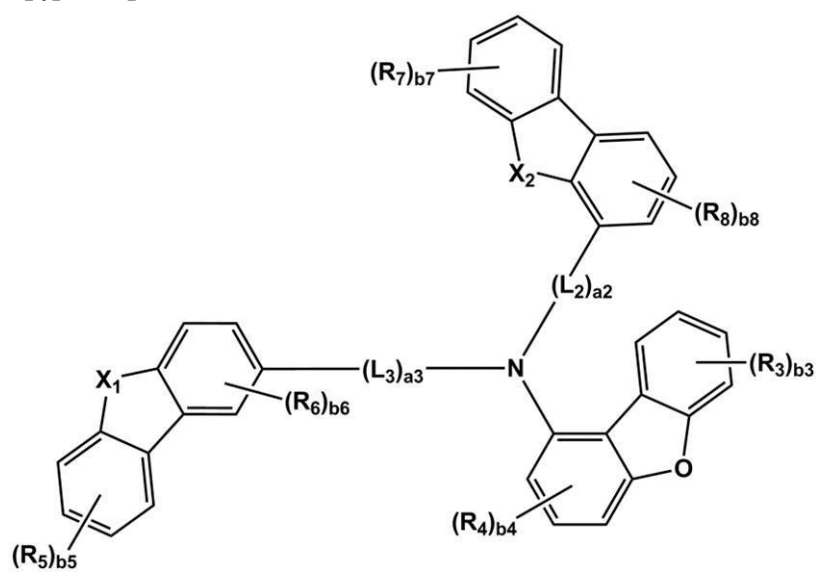
【化 2 1】



10

... (化学式 1 B - 8)

【化 2 2】



20

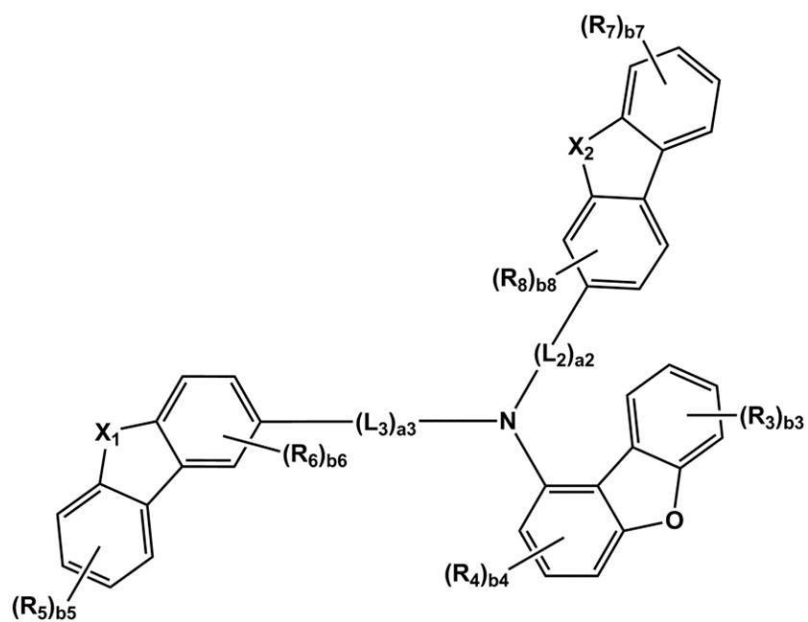
30

... (化学式 1 B - 9)

40

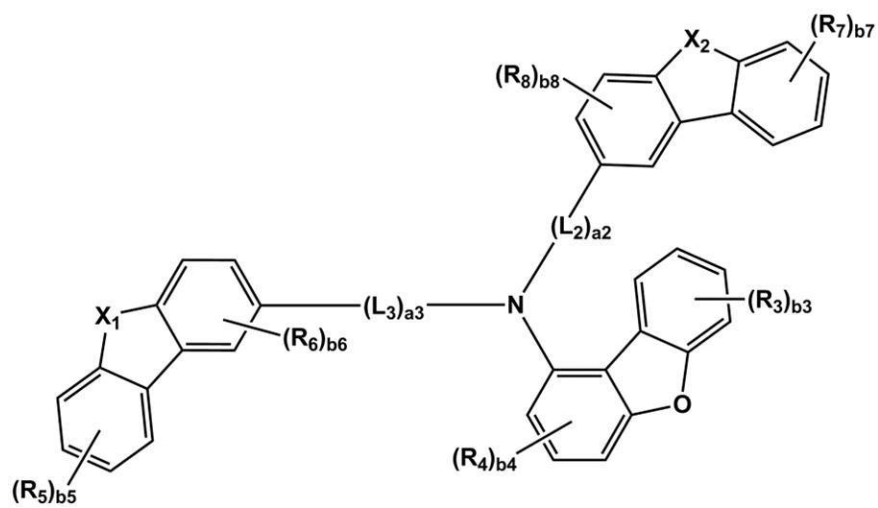
50

【化 2 3】



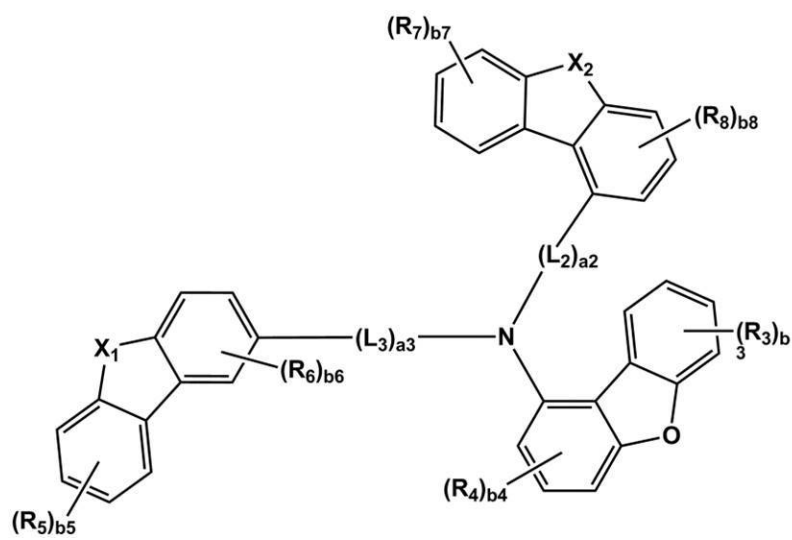
... (化学式 1 B - 1 0)

【化 2 4】



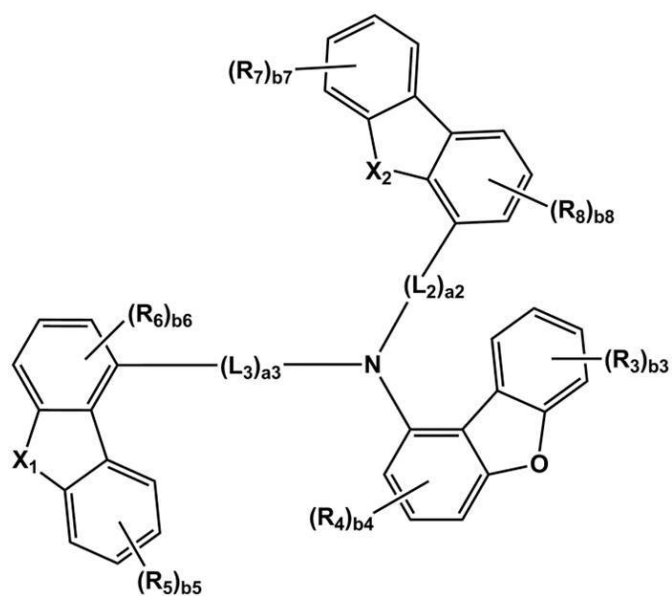
... (化学式 1 B - 1 1)

【化 2 5】



．．．（化学式 1 B - 1 2）

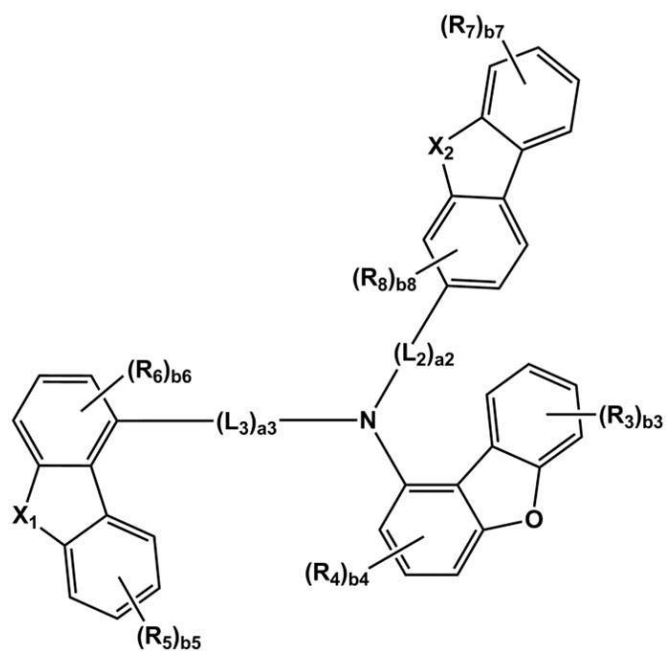
【化 2 6】



10

．．．（化学式 1 B - 1 3）

【化 2 7】



20

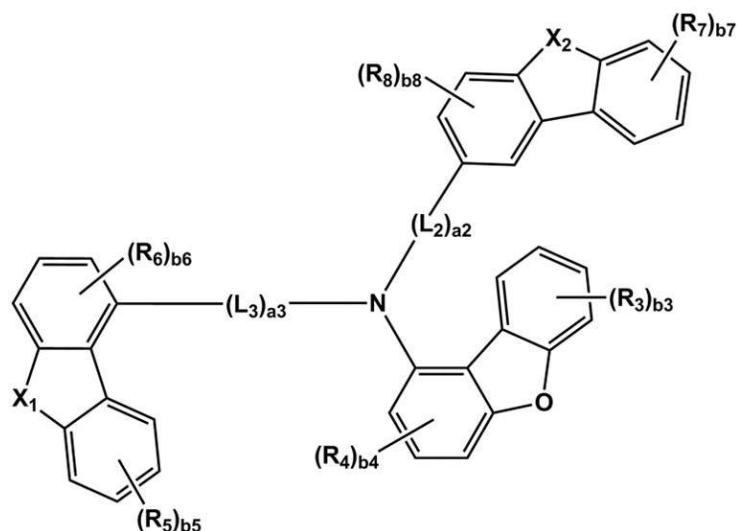
30

．．．（化学式 1 B - 1 4）

40

50

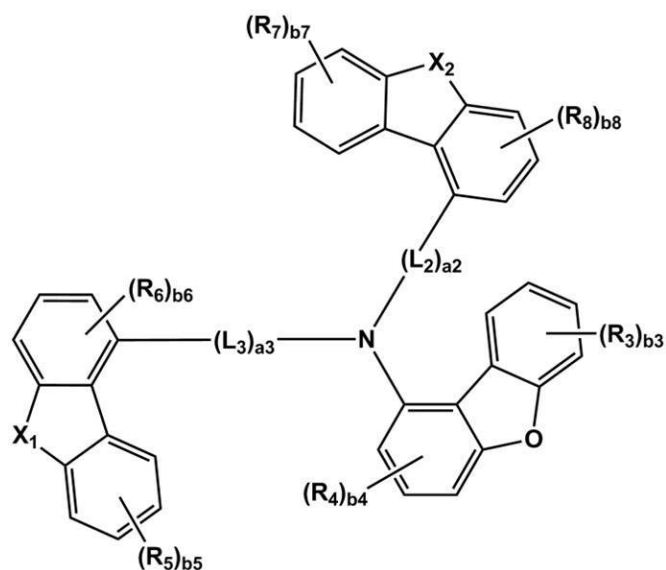
【化 2 8】



10

・・・ (化学式 1 B - 1 5)

【化 2 9】



20

30

・・・ (化学式 1 B - 1 6)

【0 0 7 6】

化学式 1 A - 1 ~ 化学式 1 A - 4、及び化学式 1 B - 1 ~ 化学式 1 B - 1 6 において、
 X_1 、 X_2 、 $L_1 \sim L_3$ 、 $a_1 \sim a_3$ 、 $R_1 \sim R_{12}$ 、並びに b_1 及び b_2 に係わる定義
 は、化学式 1 A 及び化学式 1 B に係わる説明に記載されたところと同一であり、
 b_4 、 b_6 及び b_8 は、互いに独立して、1 ~ 3 の整数のうちから選択され、
 b_3 、 b_5 及び b_7 は、互いに独立して、1 ~ 4 の整数のうちから選択される。

40

【0 0 7 7】

一実施形態において、化学式 1 A - 1 ~ 化学式 1 A - 4、及び化学式 1 B - 1 ~ 化学式
 1 B - 1 6 において、 X_1 は、 $N - (L_1)_{a_1} - (R_1)_{b_1}$ であり、 X_2 は、O、S または $C(R_{11})(R_{12})$ であるか、

X_1 は、O であり、 X_2 は、 $C(R_{11})(R_{12})$ であるか、あるいは

X_1 は、 $C(R_9)(R_{10})$ であり、 X_2 は、 $C(R_{11})(R_{12})$ であるが、これらに限定されるものではない。

【0 0 7 8】

他の実施形態において、化学式 1 A - 1 ~ 化学式 1 A - 4、及び化学式 1 B - 1 ~ 化学

50

式 1 B - 1 6 において、 $L_1 \sim L_3$ は、互いに独立して、単結合及びベンゼンの 2 価基；並びに

重水素原子、フッ素原子、塩素原子、臭素原子、ヨウ素原子、ヒドロキシ基、シアノ基、ニトロ基、アミノ基、アミジノ基、ヒドラジノ基、ヒドラゾノ基、 $C_1 - C_{20}$ アルキル基、 $C_1 - C_{20}$ アルコキシ基、 $C_6 - C_{20}$ アリール基及び $C_1 - C_{20}$ ヘテロアリール基のうちから選択された少なくとも一つで置換された、ベンゼンの 2 価基；のうちから選択されるが、これらに限定されるものではない。

【0079】

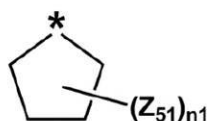
さらに他の実施形態において、化学式 1 A - 1 ~ 化学式 1 A - 4、及び化学式 1 B - 1 ~ 化学式 1 B - 1 6 において、 R_1 及び R_2 は、互いに独立して、化学式 6 - 1 ~ 化学式 6 - 4 2 のうちから選択されてもよいが、これらに限定されるものではない。

10

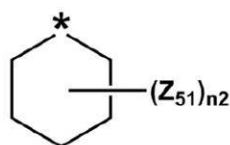
【0080】

一実施形態において、化学式 1 A 及び化学式 1 B において、 R_9 及び R_{10} 、並びに／または R_{11} 及び R_{12} が互いに結合し、化学式 7 - 1 ~ 化学式 7 - 3 のうちいずれか一つの構造を有してもよい。

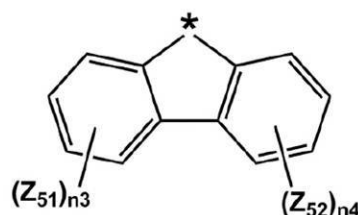
【化 3 0】



化学式 7-1



化学式 7-2



化学式 7-3

20

【0081】

化学式 7 - 1 ~ 化学式 7 - 3 において、

Z_{51} 及び Z_{52} は、互いに独立して、水素原子、重水素原子、フッ素原子、塩素原子、臭素原子、ヨウ素原子、ヒドロキシ基、シアノ基、ニトロ基、アミジノ基、ヒドラジノ基、ヒドラゾノ基、 $C_1 - C_{20}$ アルキル基、 $C_1 - C_{20}$ アルコキシ基、シクロペンチル基、シクロヘキシル基、シクロヘプチル基、シクロペンテニル基、シクロヘキセニル基、フェニル基、ビフェニル基、ナフチル基、フルオレニル基、スピロ-ビフルオレニル基、スピロ-フルオレン-ベンゾフルオレニル基、ベンゾフルオレニル基、ジベンゾフルオレニル基、フェナレニル基、フェナントレニル基、アントラセニル基、フルオランテニル基、トリフェニレニル基、ピリジニル基、ピラジニル基、ピリミジニル基、キノリニル基、イソキノリニル基、ベンゾキノリニル基、ナフチリジニル基、キノキサリニル基、キナゾリニル基、カルバゾリル基、フェナントリジニル基、アクリジニル基、フェナントロリニル基、フェナジニル基、トリアジニル基、ジベンゾフラニル基、ジベンゾチオフェニル基及び - Si (Q_{31}) (Q_{32}) (Q_{33}) のうちから選択され、

30

n_1 は、1 ~ 8 の整数のうちから選択され、

n_2 は、1 ~ 10 の整数のうちから選択され、

40

n_3 及び n_4 は、互いに独立して、1 ~ 4 の整数のうちから選択され、

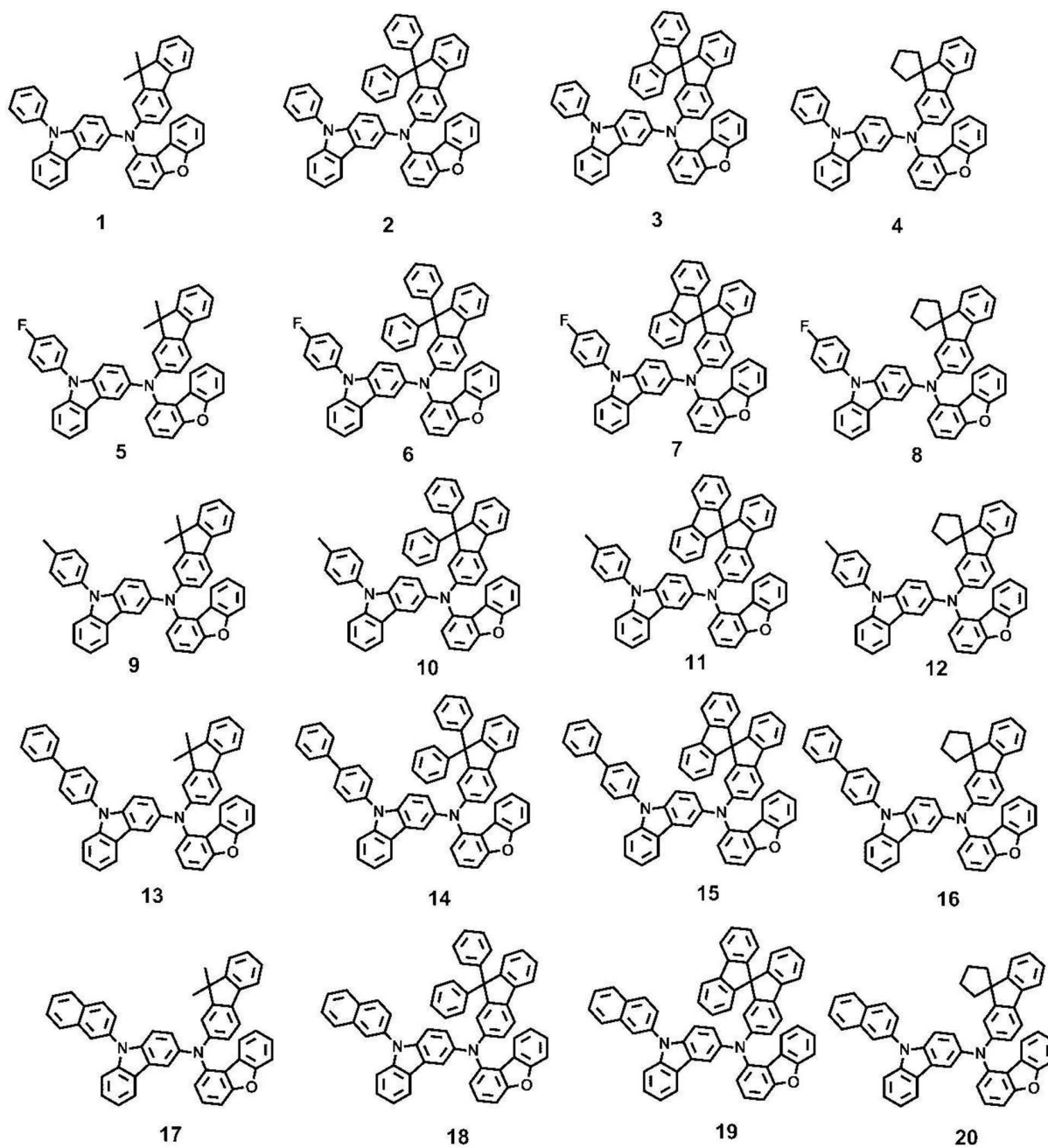
* は、 R_9 及び R_{10} 、または R_{11} 及び R_{12} が結合された炭素原子を示す。

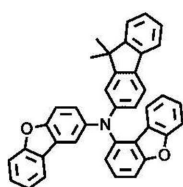
【0082】

一実施形態において、化学式 1 A または化学式 1 B で表わされるアミン化合物は、下記化合物 1 ~ 化合物 2 8 3、化合物 2 0 7 A、化合物 2 0 8 A、及び化合物 2 2 6 A のうちから選択されるが、これらに限定されるものではない。

50

【化 3 1】





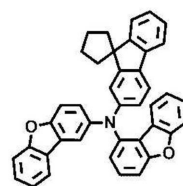
21



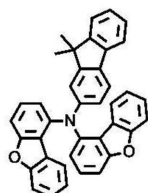
22



23



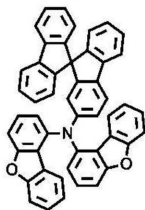
24



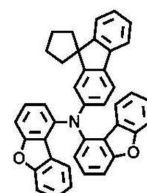
25



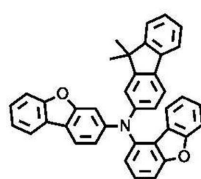
26



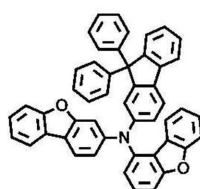
27



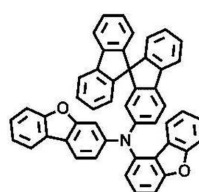
28



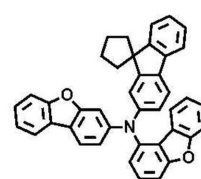
29



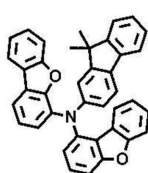
30



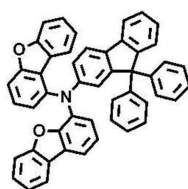
31



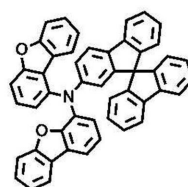
32



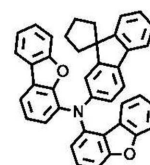
33



34



35



36

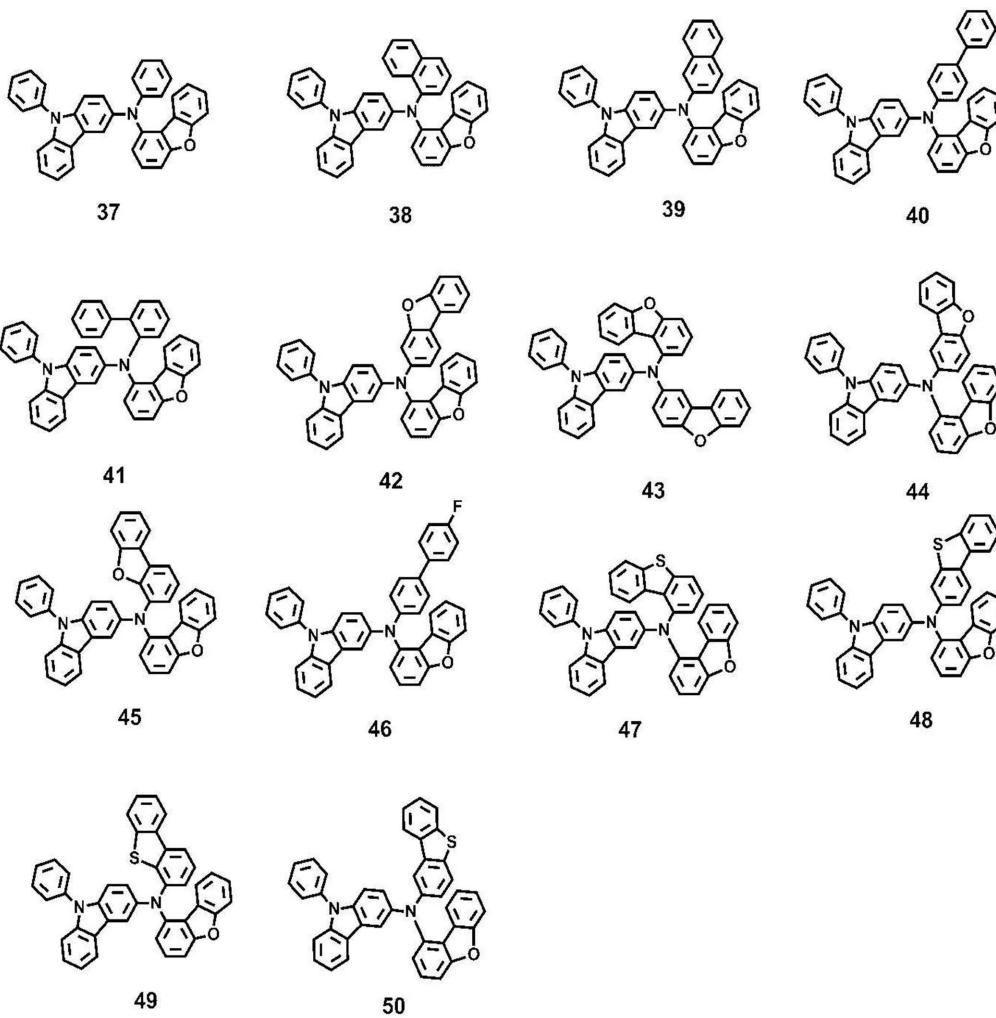
10

20

30

40

50



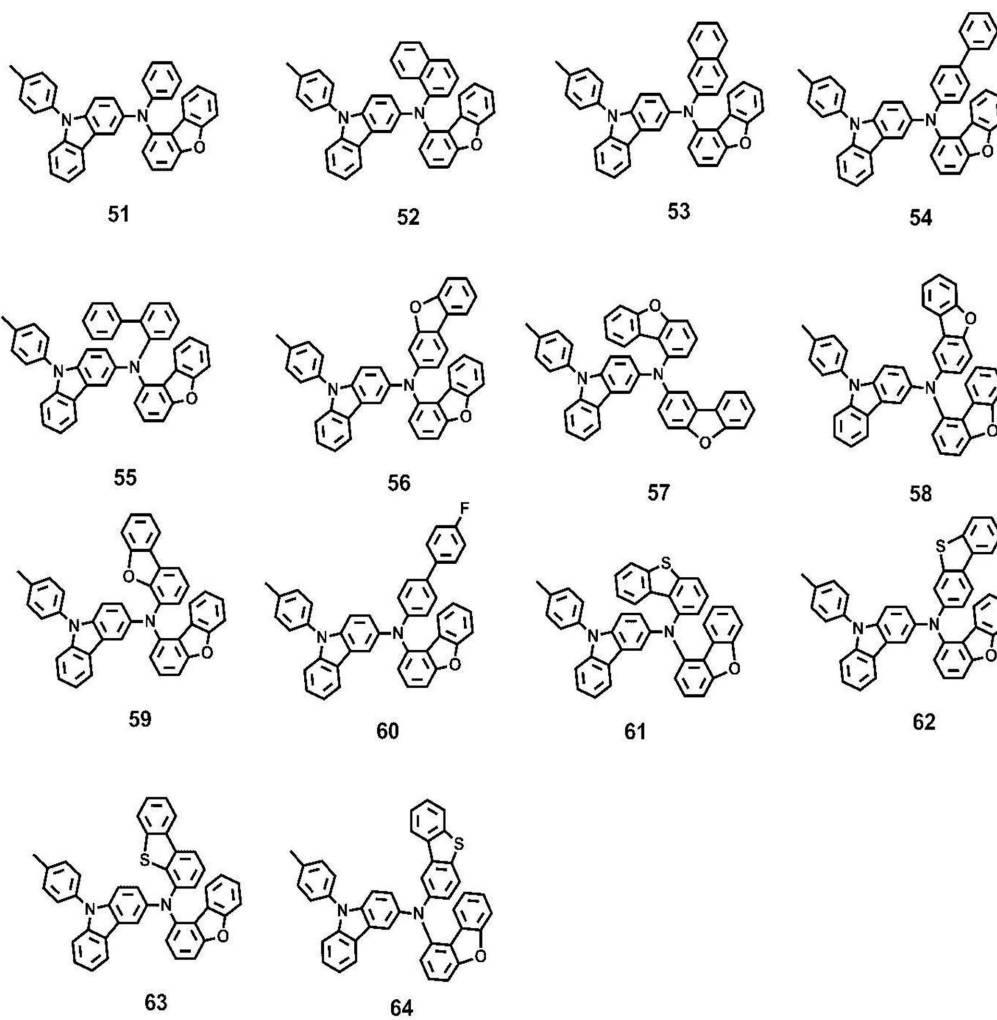
10

20

30

40

50



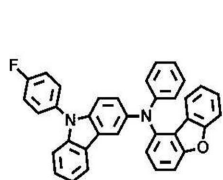
10

20

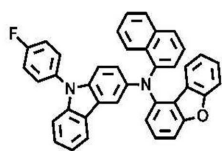
30

40

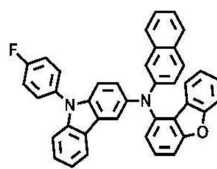
50



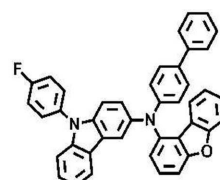
65



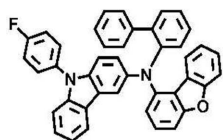
66



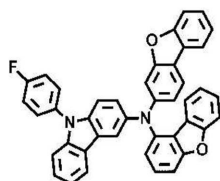
67



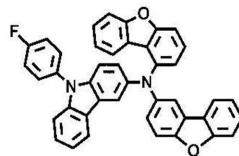
68



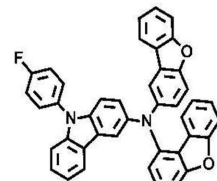
69



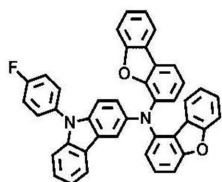
70



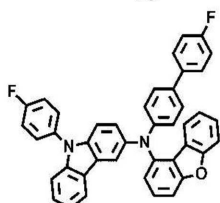
71



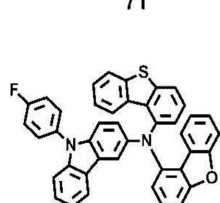
72



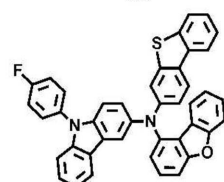
73



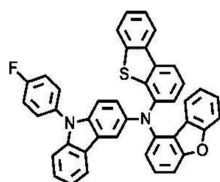
74



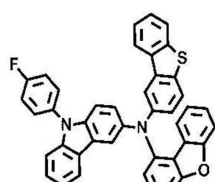
75



76



77



78

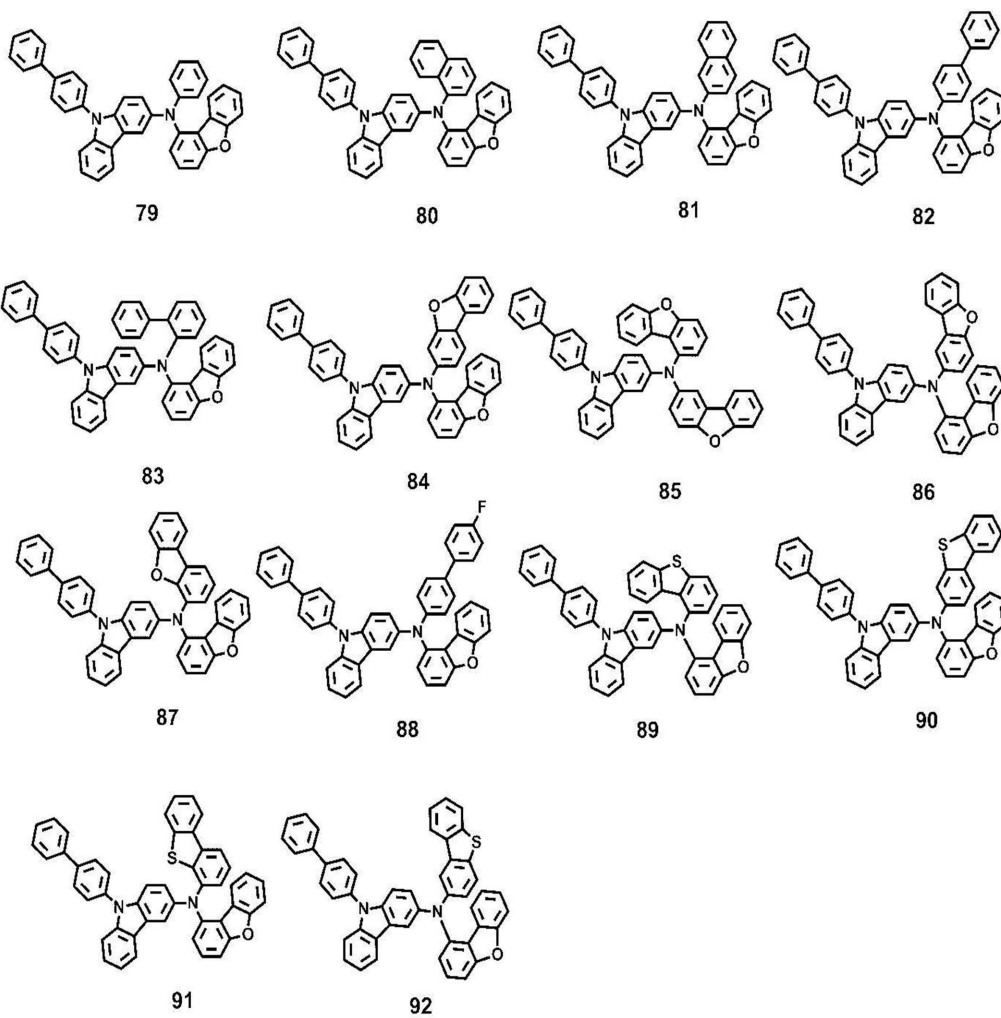
10

20

30

40

50



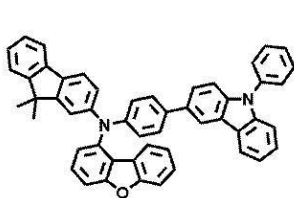
10

20

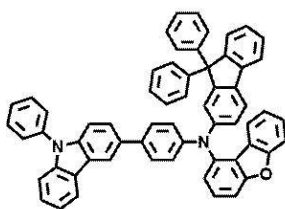
30

40

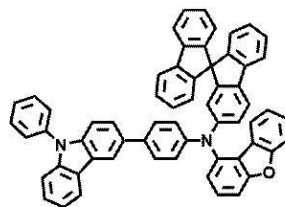
50



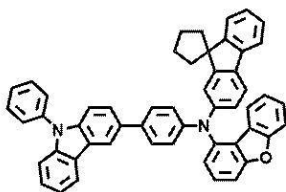
93



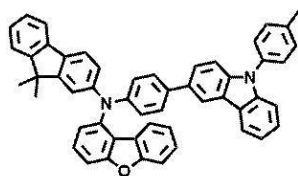
94



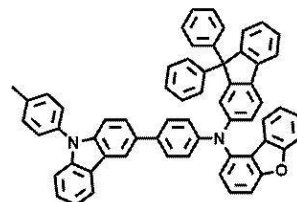
95



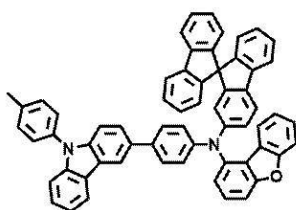
96



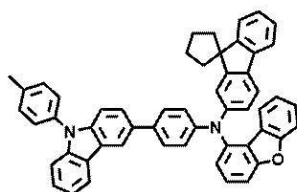
97



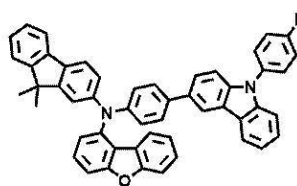
98



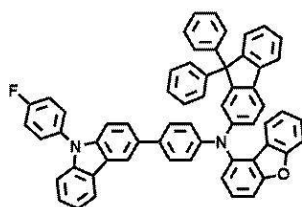
99



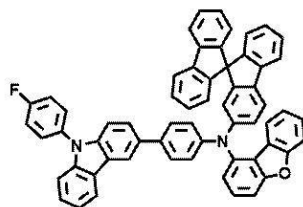
100



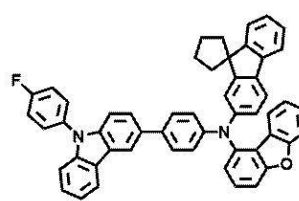
101



102



103



104

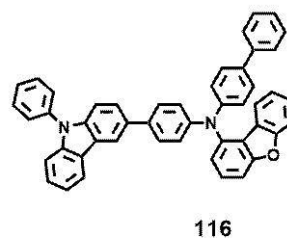
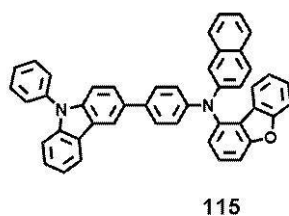
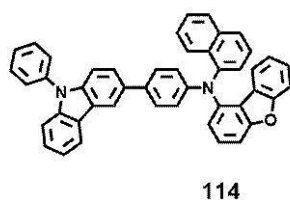
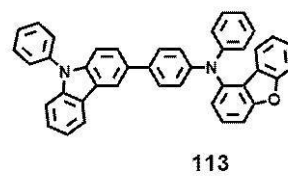
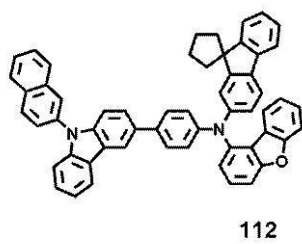
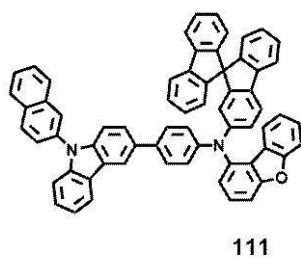
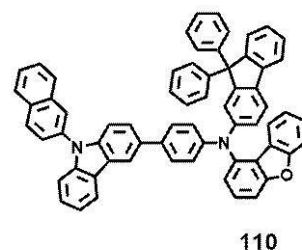
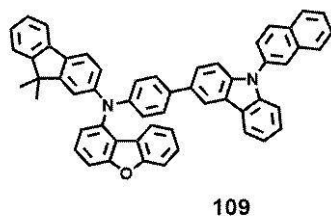
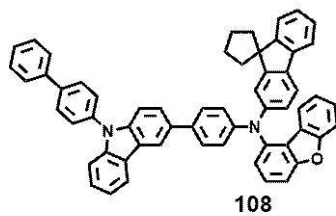
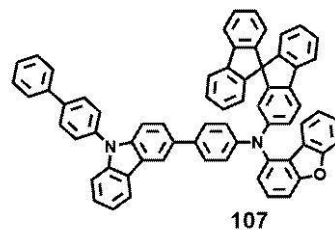
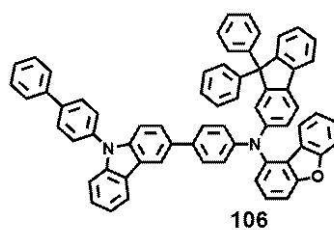
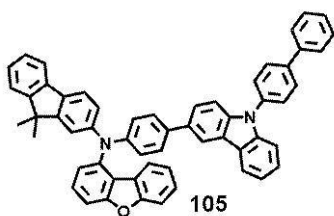
10

20

30

40

50



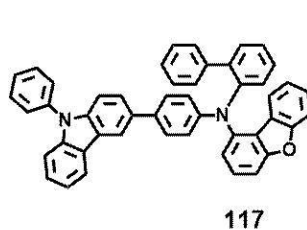
10

20

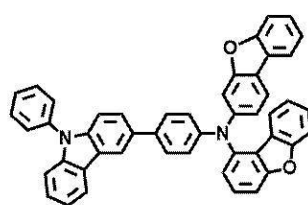
30

40

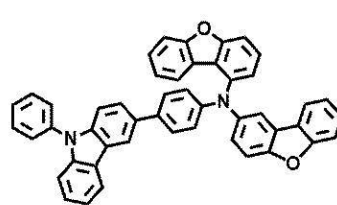
50



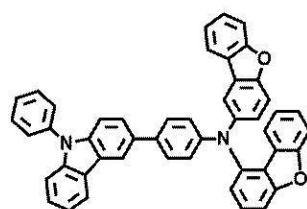
117



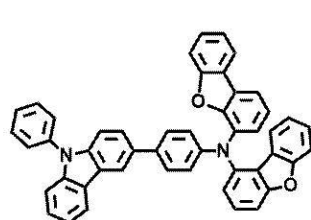
118



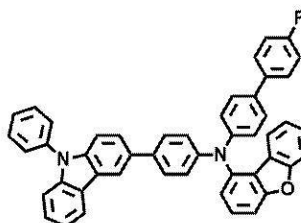
119



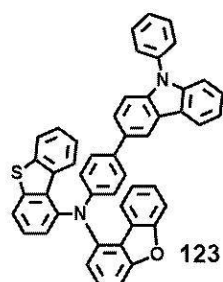
120



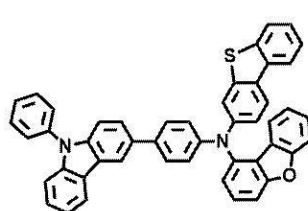
121



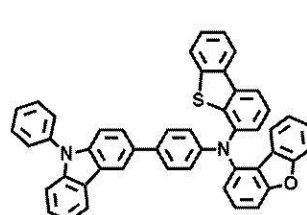
122



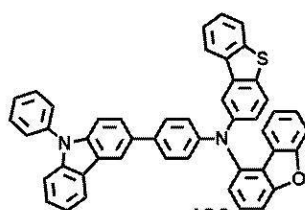
123



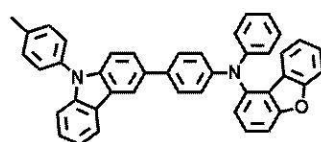
124



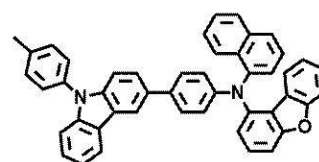
125



126



127



128

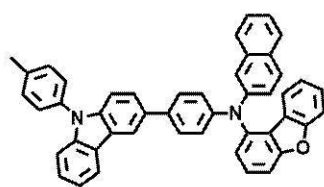
10

20

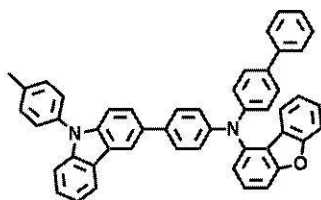
30

40

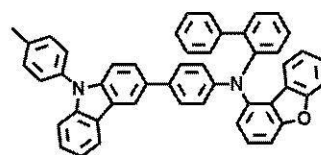
50



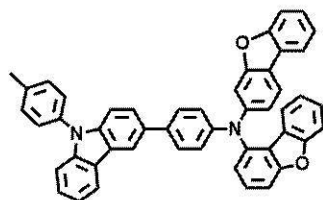
129



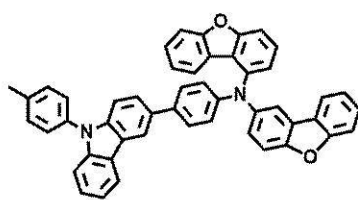
130



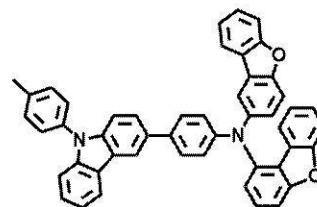
131



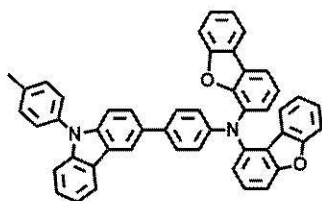
132



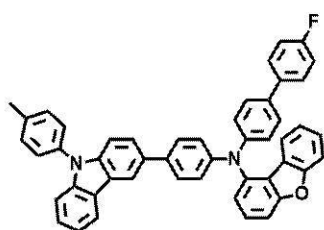
133



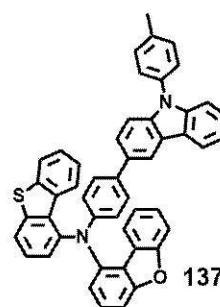
134



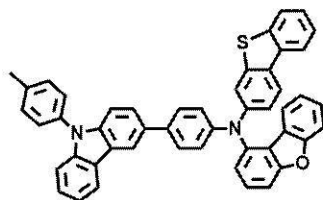
135



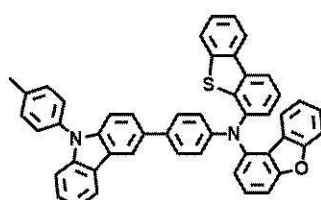
136



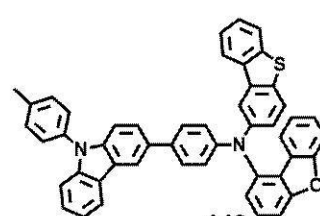
137



138



139



140

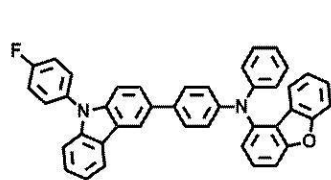
10

20

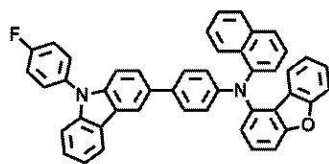
30

40

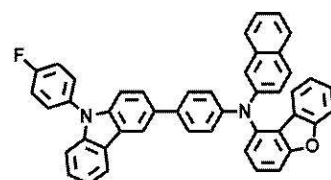
50



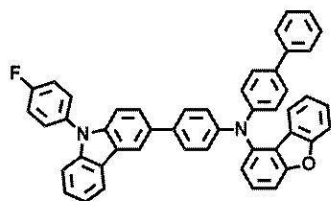
141



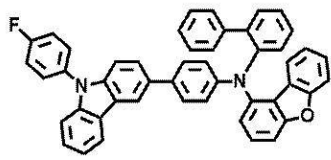
142



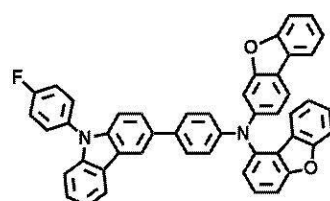
143



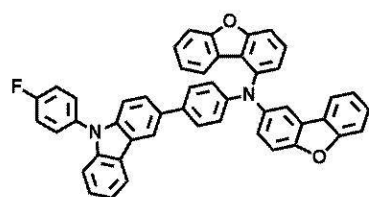
144



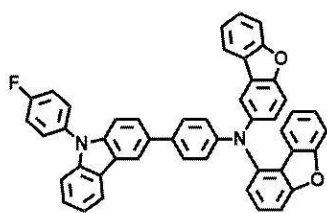
145



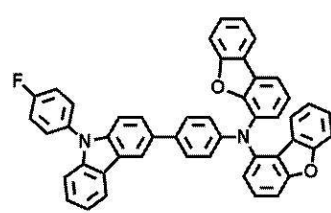
146



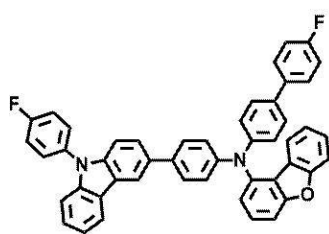
147



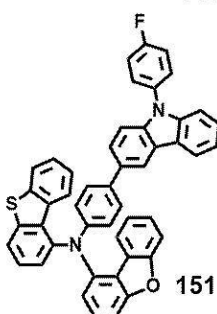
148



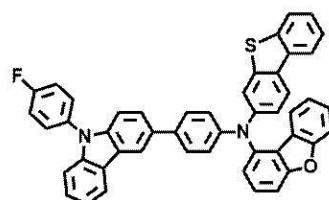
149



150



151



152

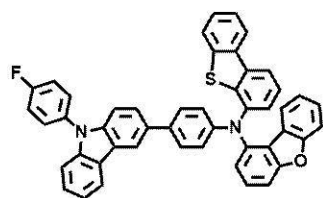
10

20

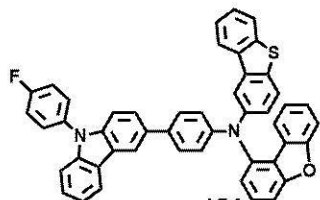
30

40

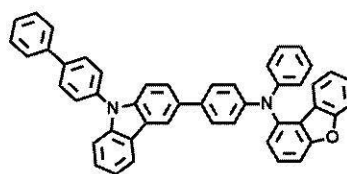
50



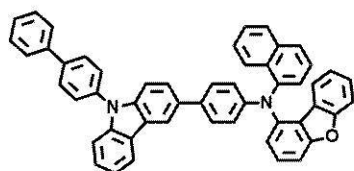
153



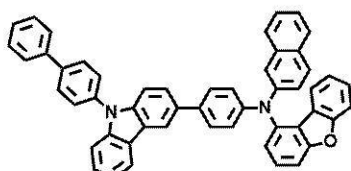
154



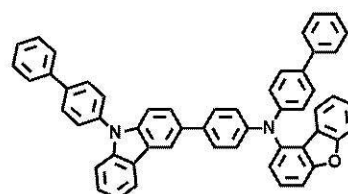
155



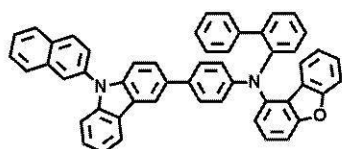
156



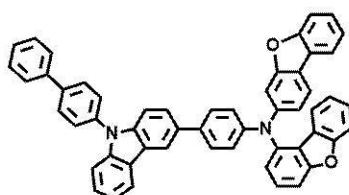
157



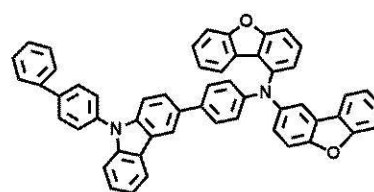
158



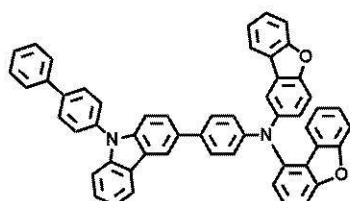
159



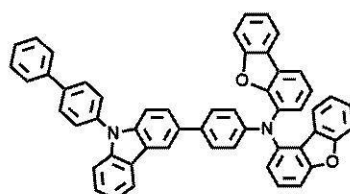
160



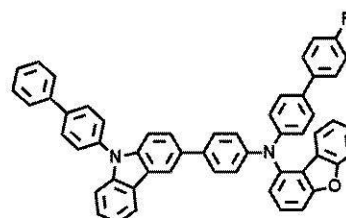
161



162



163



164

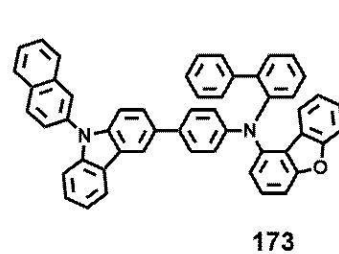
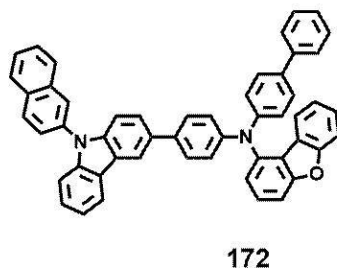
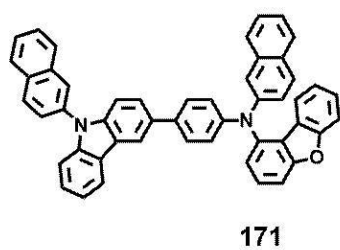
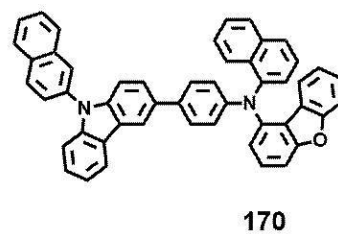
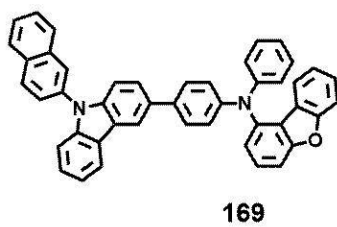
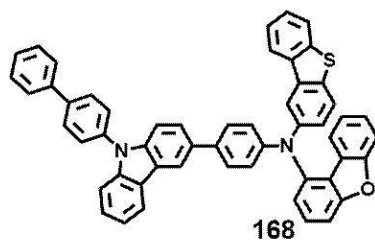
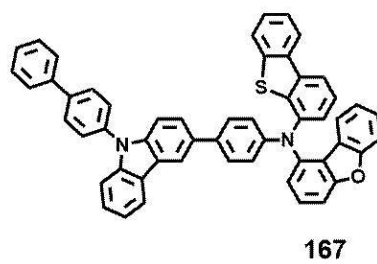
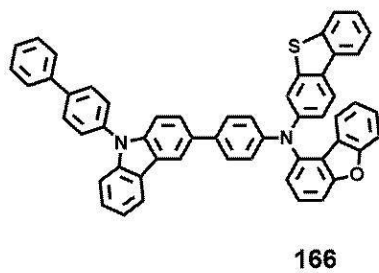
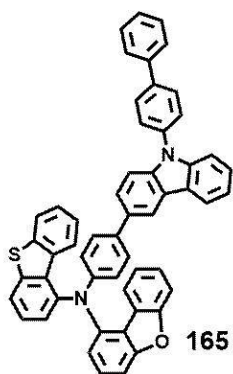
10

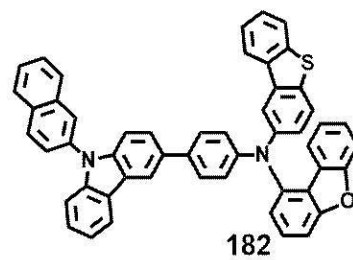
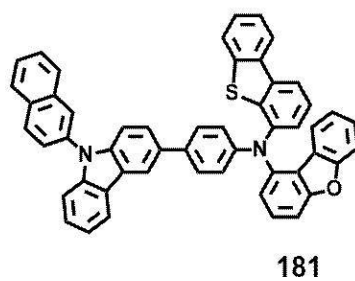
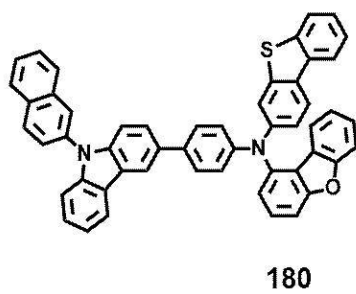
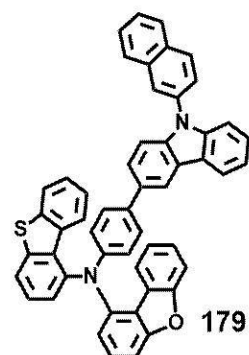
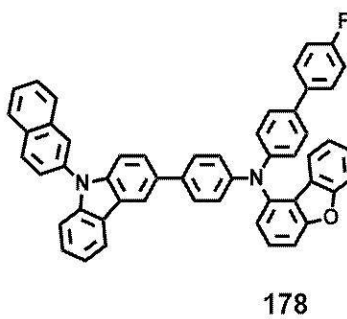
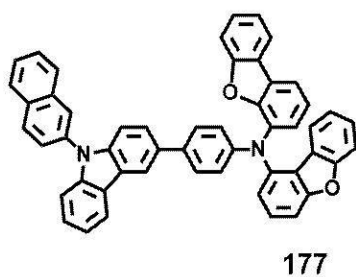
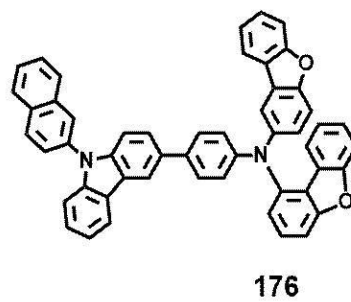
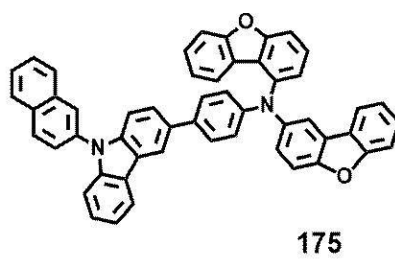
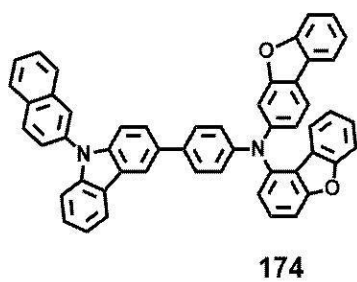
20

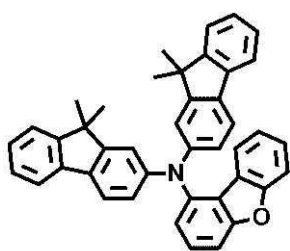
30

40

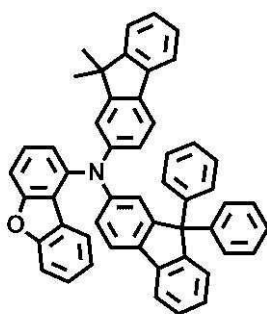
50



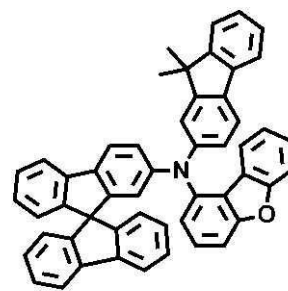




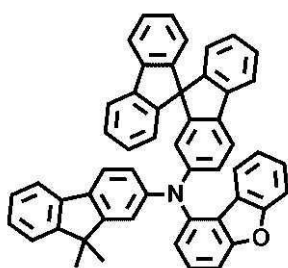
183



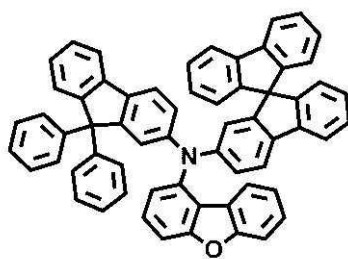
184



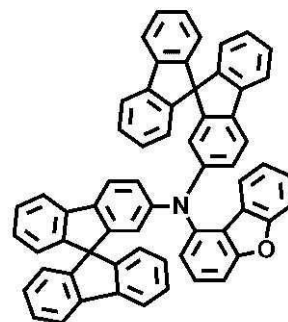
185



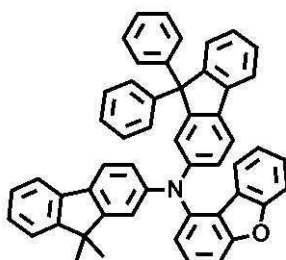
186



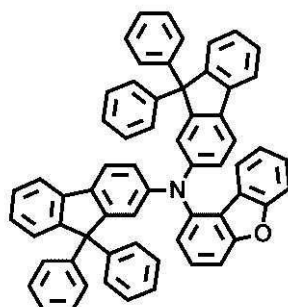
187



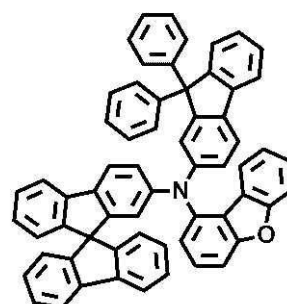
188



189



190



191

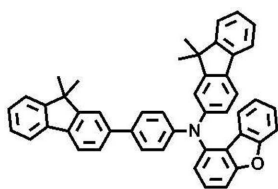
10

20

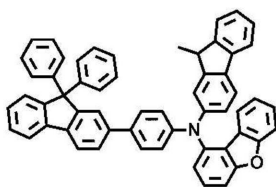
30

40

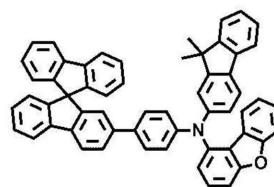
50



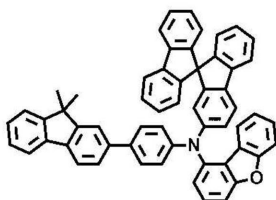
192



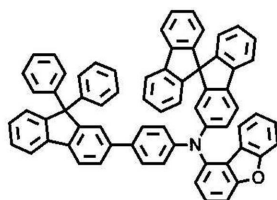
193



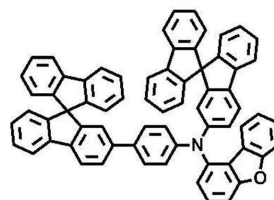
194



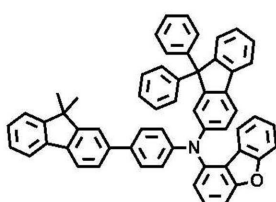
195



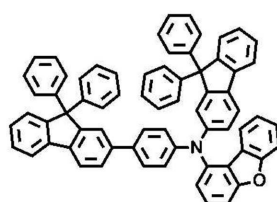
196



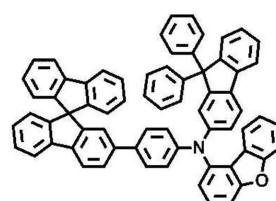
197



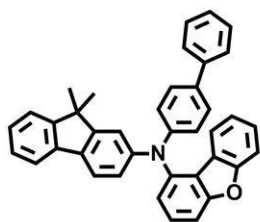
198



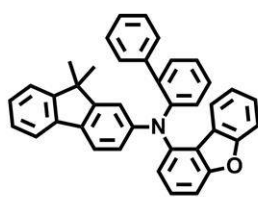
199



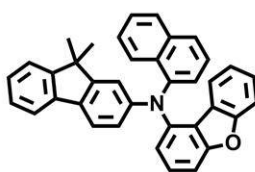
200



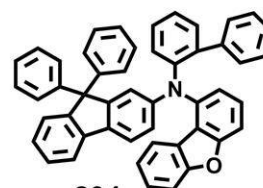
201



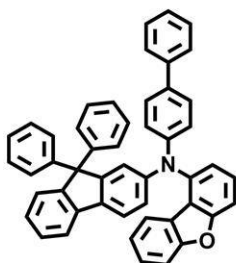
202



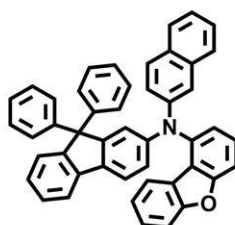
203



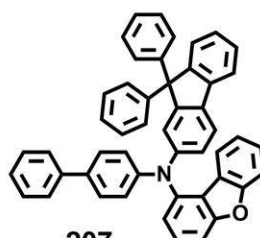
204



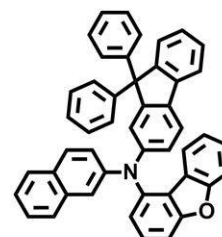
205



206



207



208

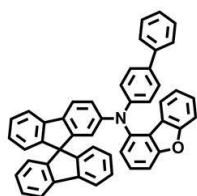
10

20

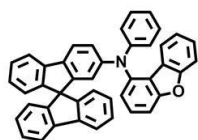
30

40

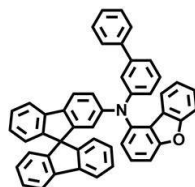
50



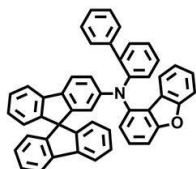
207A



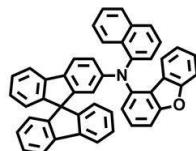
208A



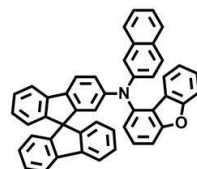
209



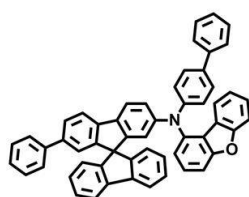
210



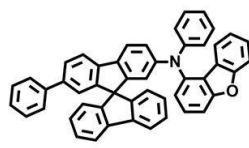
211



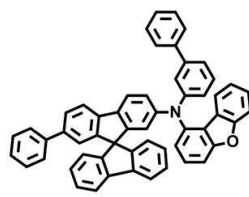
212



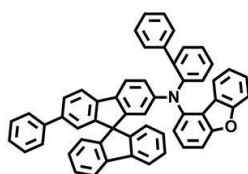
213



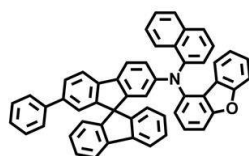
214



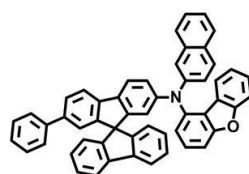
215



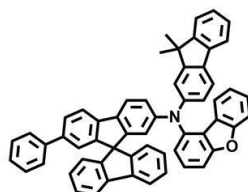
216



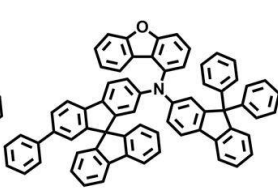
217



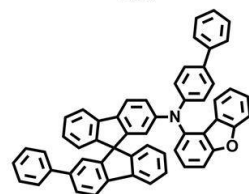
218



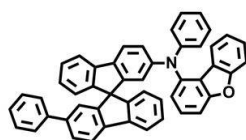
219



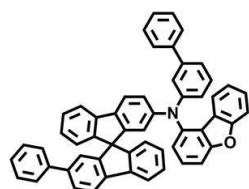
220



221



222



223

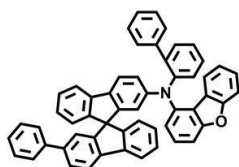
10

20

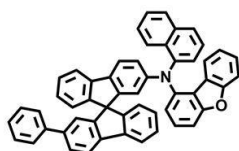
30

40

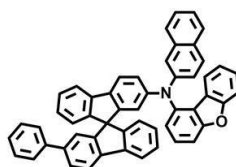
50



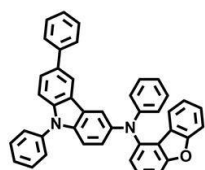
224



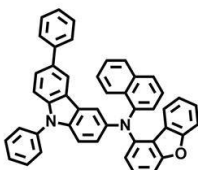
225



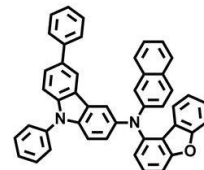
226



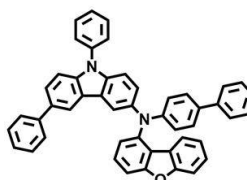
226A



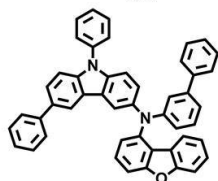
227



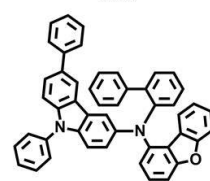
228



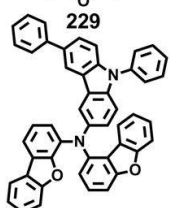
229



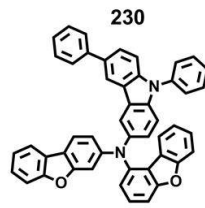
230



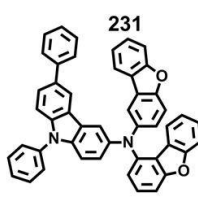
231



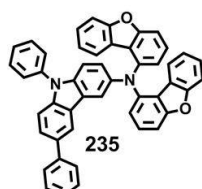
232



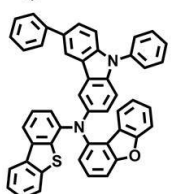
233



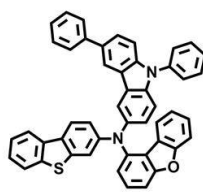
234



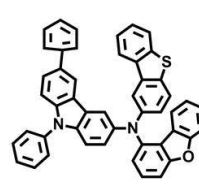
235



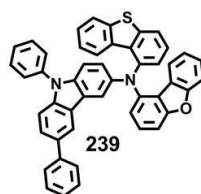
236



237



238



239

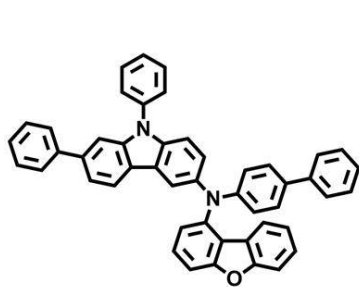
10

20

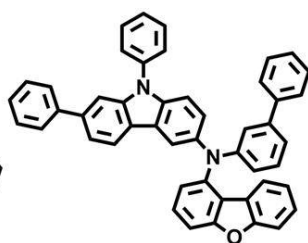
30

40

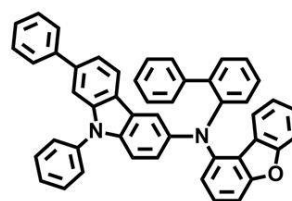
50



240

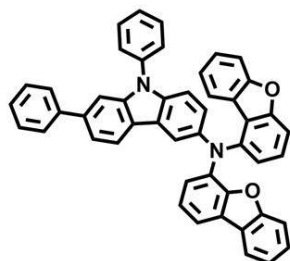


241

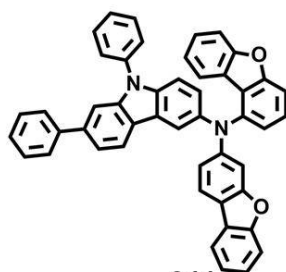


242

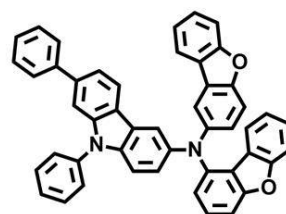
10



243

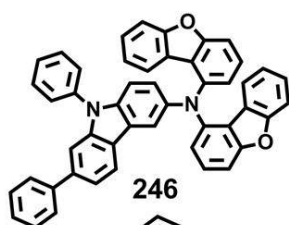


244

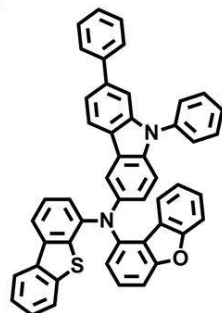


245

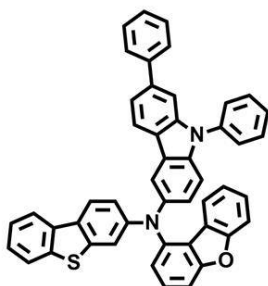
20



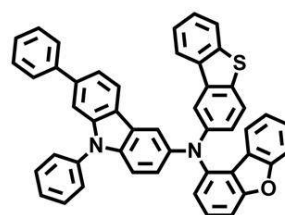
246



247

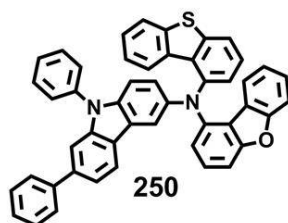


248



249

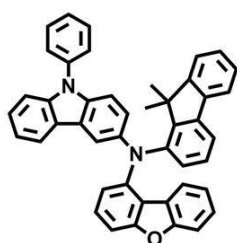
30



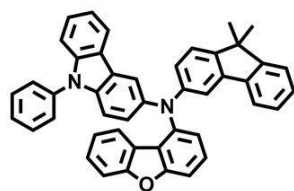
250

40

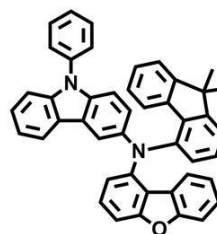
50



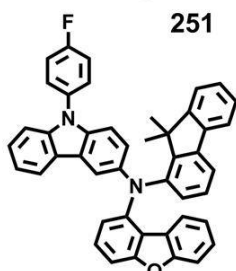
251



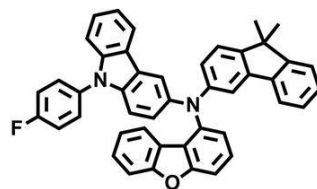
252



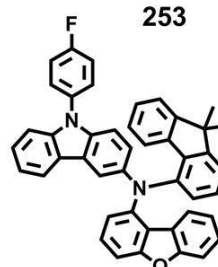
253



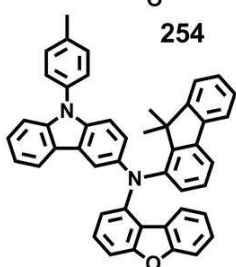
254



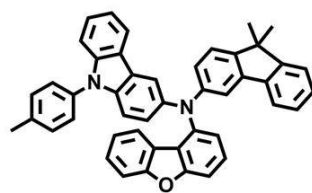
255



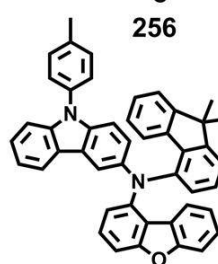
256



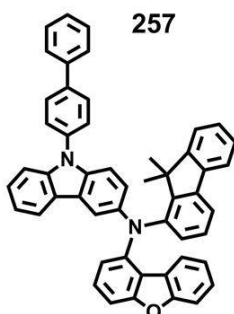
257



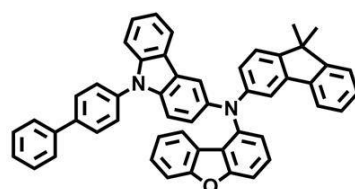
258



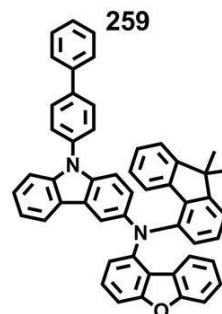
259



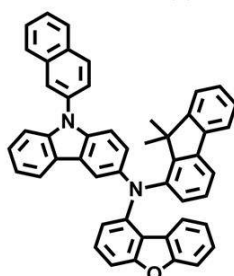
260



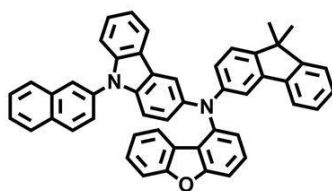
261



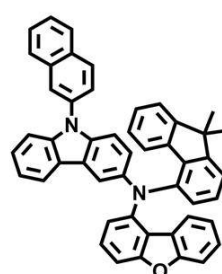
262



263



264



265

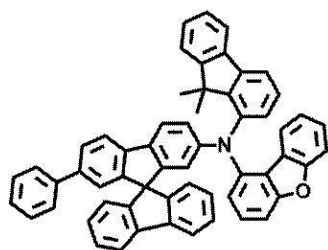
10

20

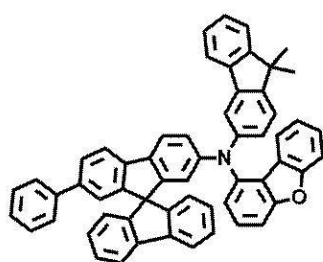
30

40

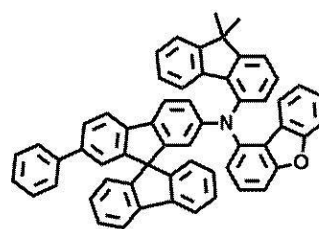
50



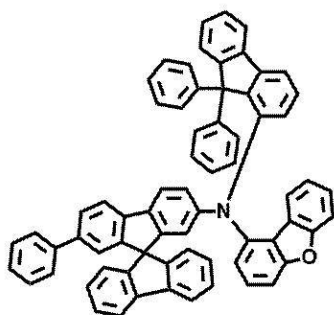
266



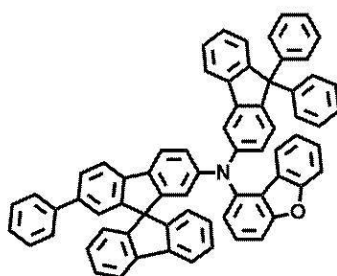
267



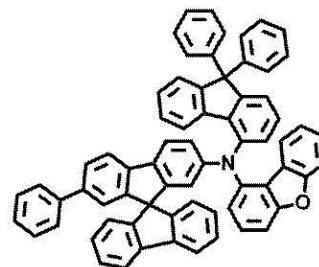
268



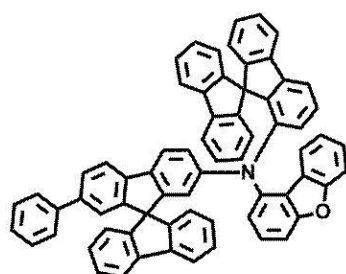
269



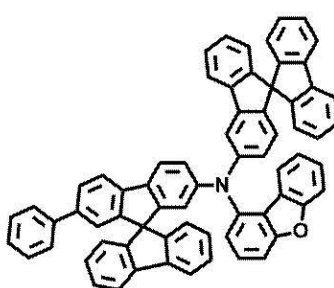
270



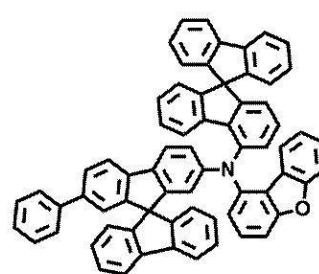
271



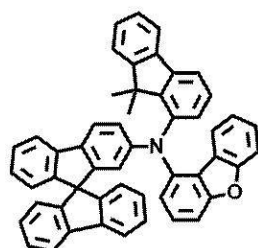
272



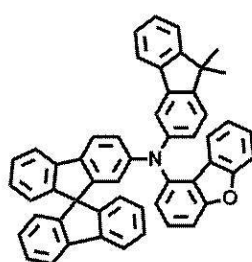
273



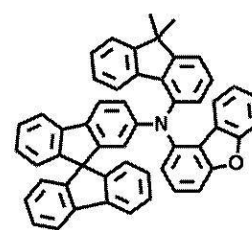
274



275



276



277

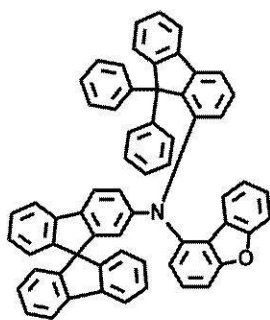
10

20

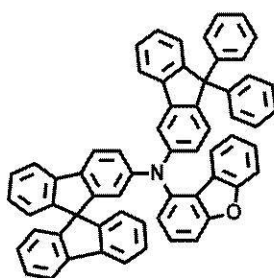
30

40

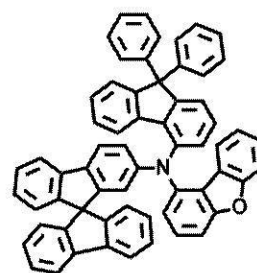
50



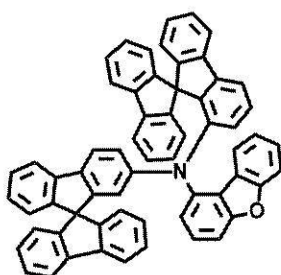
278



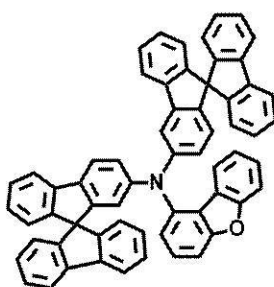
279



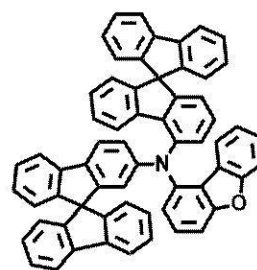
280



281



282

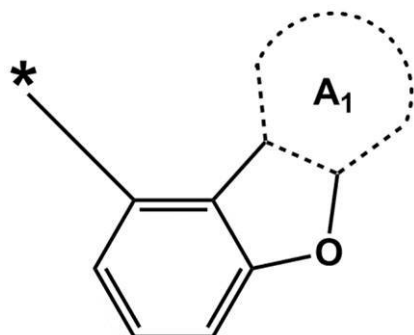


283

【0083】

化学式1Aまたは化学式1Bで表わされるアミン化合物は、下記化学式1A'で表わされる置換基が、特定位置で窒素と結合された構造を有することにより、立体障害が大きい分子構造を有する。それにより、アミン化合物は、最適の分子間密度を維持することができる。また、立体的により少なく隠れた（立体的に露出された）酸素原子の非共有電子対による相互作用増大によって、優れた正孔移動度を有することができる。

【化32】



・・・（化学式1A'）

【0084】

また、本発明のアミン化合物は、分子内に1つのアミン構造を含むことにより、2以上のアミン構造を含む化合物に比べ、適切なエネルギー準位を有する。それにより、正孔注入及び正孔注入障壁を低減させ、正孔移動度を改善することができる。

【0085】

従って、本発明のアミン化合物を含む電子素子、例えば、有機発光素子は、低駆動電圧、高効率及び長寿命を有することができる。

【0086】

化学式1Aまたは化学式1Bで表わされるアミン化合物の合成方法は、後述する実施例を参照することにより、当業者であるならば、認識することができるであろう。

【0087】

化学式 1 A または化学式 1 B で表わされるアミン化合物のうち少なくとも一つは、有機発光素子の 1 対の電極間に使用される。例えば、本発明のアミン化合物は、正孔輸送領域、電子輸送領域及び発光層のうち少なくとも一つに含まれる。また、化学式 1 A または化学式 1 B で表わされるアミン化合物は、有機発光素子の 1 対の電極の外側に位置したキャッピング層材料としても使用される。

【0088】

従って、第 1 電極と、第 1 電極に対向する第 2 電極と、第 1 電極と第 2 電極との間に配置された発光層を含む有機層と、を含み、有機層は、化学式 1 A または化学式 1 B で表わされるアミン化合物を 1 種以上含んだ有機発光素子が提供される。

【0089】

本明細書において、「(有機層) がアミン化合物を 1 種以上含む」とは、「(有機層) が、化学式 1 A または化学式 1 B の範疇に属する 1 種のアミン化合物、または化学式 1 A または化学式 1 B の範疇に属する互いに異なる 2 種以上のアミン化合物を含んでもよい」と解釈される。

【0090】

例えば、有機層は、アミン化合物として、化合物 1 のみを含んでもよい。このとき、化合物 1 は、有機発光素子の発光層に存在してもよい。または、有機層は、アミン化合物として、化合物 1 及び化合物 2 を含んでもよい。このとき、化合物 1 及び化合物 2 は、同一層に存在（例えば、化合物 1 及び化合物 2 は、いずれも発光層に存在する）するか、あるいは互いに異なる層に存在（例えば、化合物 1 は、発光層に存在し、化合物 2 は、電子輸送層に存在する）する。

【0091】

一実施形態によれば、第 1 電極がアノードであり、第 2 電極がカソードであり、有機層が、第 1 電極と発光層との間に配置された正孔輸送領域、及び発光層と第 2 電極との間に配置された電子輸送領域をさらに含み、正孔輸送領域は、正孔注入層、正孔輸送層、発光補助層、電子阻止層、またはそれらの任意の組み合わせを含み、電子輸送領域は、正孔阻止層、電子輸送層、電子注入層、またはそれらの任意の組み合わせを含んでもよい。

【0092】

一実施形態において、正孔輸送領域が本発明のアミン化合物を含んでもよい。

【0093】

他の実施形態において、正孔輸送領域が、正孔注入層及び正孔輸送層を含み、正孔注入層及び正孔輸送層のうち少なくとも 1 層が、本発明のアミン化合物を含んでもよい。

【0094】

さらに他の実施形態において、正孔輸送領域が正孔輸送層を含み、正孔輸送層が、本発明のアミン化合物を含んでもよい。

【0095】

一実施形態において、正孔輸送領域が p-ドープメントを含み、p-ドープメントの LUMO (lowest unoccupied molecular orbital) エネルギーレベルは、 -3.5 eV 以下であってもよい。

【0096】

例えば、p-ドープメントは、キノン誘導体、金属酸化物及びシアノ基含有化合物のうちから選択された少なくとも一つを含んでもよい。

【0097】

例えば、正孔輸送領域が正孔注入層を含み、正孔注入層が、p-ドープメントを含んでもよい。

【0098】

一実施形態において、発光層がスチリル系化合物、アントラセン系化合物、ピレン系化合物及びスピロ-ビフルオレン系化合物のうち少なくとも一つを含んでもよい。

【0099】

本明細書において、「有機層」は、有機発光素子において、第 1 電極と第 2 電極との間

10

20

30

40

50

に介在された単一及び／または複数の全ての層を示す用語である。「有機層」の層に含まれる物質は、有機物に限定されるものではない。

【0100】

[有機発光素子]

図1は、本発明の一実施形態による有機発光素子10の断面を概略的に示したものである。有機発光素子10は、第1電極110、有機層150及び第2電極190を含む。以下、図1を参照し、本発明の一実施形態による有機発光素子10の構造及び製造方法について説明する。

【0101】

[第1電極110]

図1の第1電極110の下部、または第2電極190の上部には、基板が追加して配置される。基板としては、機械的強度、熱安定性、透明性、表面平滑性、取り扱い容易性及び防水性にすぐれるガラス基板またはプラスチック基板を使用することができる。

【0102】

第1電極110は、例えば、基板上部に、第1電極用物質を、蒸着法またはスパッタリング法などを利用して形成される。第1電極110がアノードである場合、正孔注入が容易であるように、第1電極用材料は、高い仕事関数を有する物質のうちから選択される。

【0103】

第1電極110は、反射型電極、半透過型電極または透過型電極である。第1電極110が透過型電極である場合、第1電極用材料は、酸化インジウムスズ（ITO）、酸化インジウム亜鉛（IZO）、酸化スズ（SnO₂）、酸化亜鉛（ZnO）、及びそれらの任意の組み合わせのうちから選択されるが、これらに限定されるものではない。または、第1電極110が半透過型電極または反射型電極である場合、第1電極用材料は、マグネシウム（Mg）、銀（Ag）、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）、及びそれらの任意の組み合わせのうちから選択されるが、これらに限定されるものではない。

【0104】

第1電極110は、単一層である単層構造、または複層を有する多層構造を有することができる。例えば、第1電極110は、ITO／Ag／ITOの3層構造を有することができるが、これに限定されるものではない。

【0105】

[有機層150]

第1電極110上部には、有機層150が配置されている。記有機層150は、発光層を含む。有機層150は、第1電極110と発光層との間に介在された正孔輸送領域（hole transport region）、及び発光層と第2電極190との間に介在された電子輸送領域（electron transport region）をさらに含んでもよい。

【0106】

[正孔輸送領域]

正孔輸送領域は、i) 単一物質からなる単一層からなる単層構造、ii) 複数の互いに異なる物質からなる単一層からなる単層構造、またはiii) 複数の互いに異なる物質からなる複層を有する多層構造を有することができる。

【0107】

正孔輸送領域は、正孔注入層（HIL）、正孔輸送層（HTL）、発光補助層及び電子阻止層（EBL）のうちから選択された少なくとも1つの層を含んでもよい。例えば、正孔輸送領域は、複数の互いに異なる物質からなる単一層からなる単層構造を有するか、あるいは第1電極110から順に積層された正孔注入層／正孔輸送層、正孔注入層／正孔輸送層／発光補助層、正孔注入層／発光補助層、正孔輸送層／発光補助層または正孔注入層／正孔輸送層／電子阻止層の多層構造を有することができるが、これらに限定されるものではない。

10

20

30

40

50

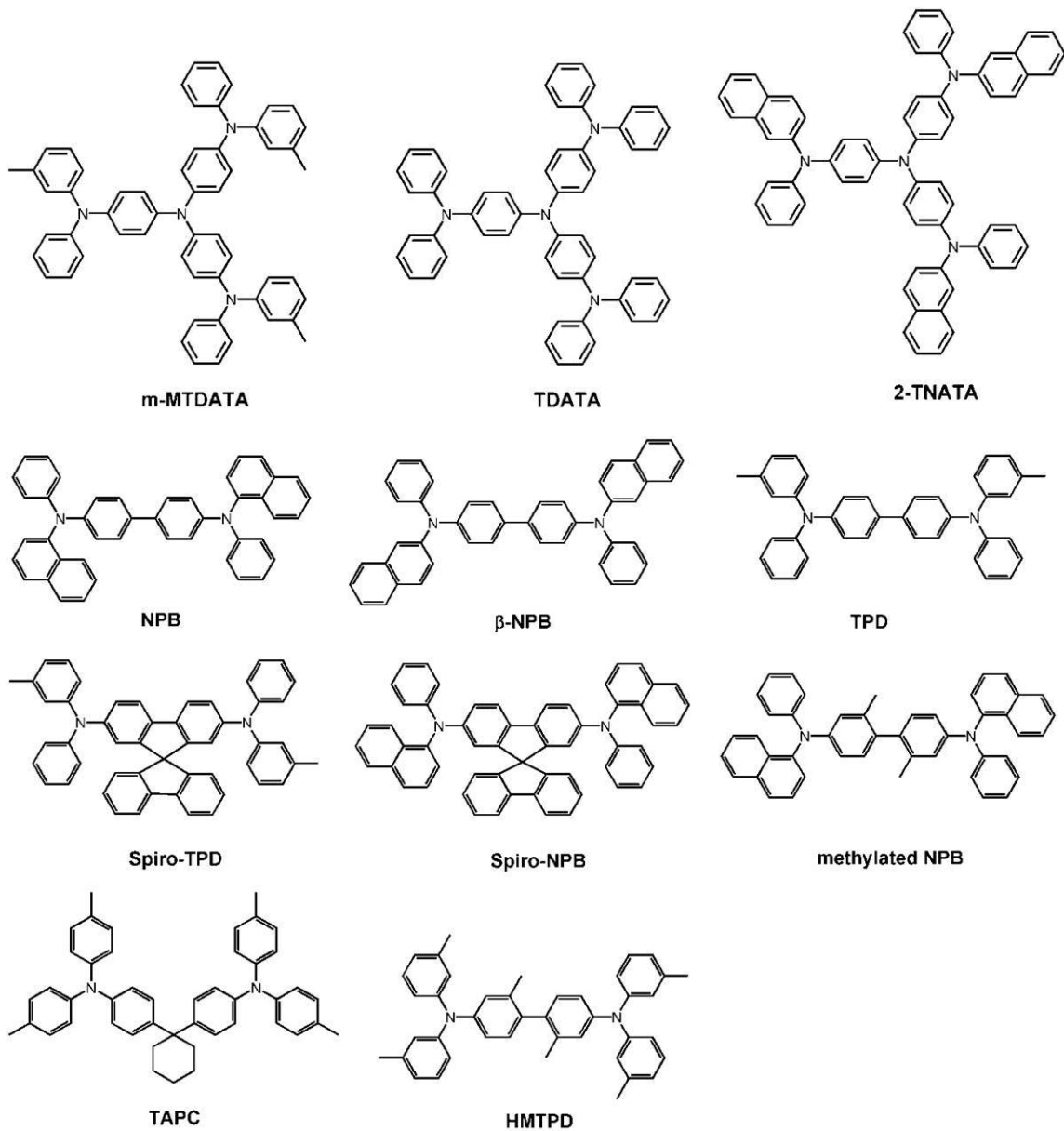
【0108】

正孔輸送領域は、化学式1 Aまたは化学式1 Bで表わされるアミン化合物を含んでもよい。

【0109】

また、正孔輸送領域は、化学式1 Aまたは化学式1 Bで表わされるアミン化合物外に、*m*-MTDATA、TDATA、2-TNATA、NPB (NPD)、 β -NPB、TPD、spiro-TPD、spiro-NPB、メチル化された-NPB、TAPC、HMTPD、4, 4', 4''-トリス (N-カルバゾリル) トリフェニルアミン (TCTA)、ポリアニリン/ドデシルベンゼンスルホン酸 (Pani/DBSA)、ポリ (3, 4-エチレンジオキシチオフェン)/ポリ (4-スチレンスルホネート) (PEDOT/PSS)、ポリアニリン/カンファースルホン酸 (Pani/CSA)、ポリアニリン/ポリ (4-スチレンスルホネート) (PANI/PSS)、下記化学式2 01で表わされる化合物、及び下記化学式2 02で表わされる化合物のうちから選択された少なくとも一つを含んでもよい。

【化33】



10

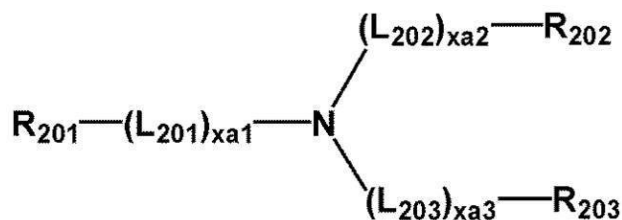
20

30

40

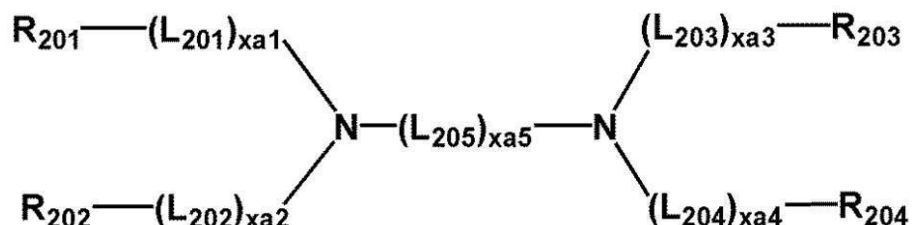
50

【化 3 4】



・・・ (化学式 2 0 1)

【化 3 5】



・・・ (化学式 2 0 2)

【0 1 1 0】

化学式 2 0 1 及び化学式 2 0 2 において、

$L_{201} \sim L_{204}$ は、互いに独立して、置換もしくは無置換の $C_3 - C_{10}$ シクロアルキレン基、置換もしくは無置換の $C_1 - C_{10}$ ヘテロシクロアルキレン基、置換もしくは無置換の $C_3 - C_{10}$ シクロアルケニレン基、置換もしくは無置換の $C_1 - C_{10}$ ヘテロシクロアルケニレン基、置換もしくは無置換の $C_6 - C_{60}$ アリーレン基、置換もしくは無置換の $C_1 - C_{60}$ ヘテロアリーレン基、置換もしくは無置換の二価の非芳香族縮合多環基、及び置換もしくは無置換の二価の非芳香族ヘテロ縮合多環基のうちから選択され、

L_{205} は、 $* - O - *$ 、 $* - S - *$ 、 $* - N(Q_{201}) - *$ 、置換もしくは無置換の $C_1 - C_{20}$ アルキレン基、置換もしくは無置換の $C_2 - C_{20}$ アルケニレン基、置換もしくは無置換の $C_3 - C_{10}$ シクロアルキレン基、置換もしくは無置換の $C_1 - C_{10}$ ヘテロシクロアルキレン基、置換もしくは無置換の $C_3 - C_{10}$ シクロアルケニレン基、置換もしくは無置換の $C_1 - C_{10}$ ヘテロシクロアルケニレン基、置換もしくは無置換の $C_6 - C_{60}$ アリーレン基、置換もしくは無置換の $C_1 - C_{60}$ ヘテロアリーレン基、置換もしくは無置換の二価の非芳香族縮合多環基、及び置換もしくは無置換の二価の非芳香族ヘテロ縮合多環基のうちから選択され、

$x_{a1} \sim x_{a4}$ は、互いに独立して、0 ～ 3 の整数のうちから選択され、

x_{a5} は、1 ～ 10 の整数のうちから選択され、

$R_{201} \sim R_{204}$ 、及び Q_{201} は、互いに独立して、置換もしくは無置換の $C_3 - C_{10}$ シクロアルキル基、置換もしくは無置換の $C_1 - C_{10}$ ヘテロシクロアルキル基、置換もしくは無置換の $C_3 - C_{10}$ シクロアルケニル基、置換もしくは無置換の $C_1 - C_{10}$ ヘテロシクロアルケニル基、置換もしくは無置換の $C_6 - C_{60}$ アリール基、置換もしくは無置換の $C_6 - C_{60}$ アリールオキシ基、置換もしくは無置換の $C_6 - C_{60}$ アリールチオ基、置換もしくは無置換の $C_1 - C_{60}$ ヘテロアリール基、置換もしくは無置換の一価の非芳香族縮合多環基、及び置換もしくは無置換の一価の非芳香族ヘテロ縮合多環基のうちから選択される。

【0 1 1 1】

例えば、化学式 2 0 2 において、 R_{201} と R_{202} は、任意で、単結合、ジメチルメチレン基またはジフェニルメチレン基を介して互いに結合されてもよく、 R_{203} と R_{204} は、任意で、単結合、ジメチルメチレン基またはジフェニルメチレン基を介して互いに結合されてもよい。

【0 1 1 2】

一実施形態によれば、化学式 201 及び化学式 202 において、

L₂₀₁～L₂₀₅は、互いに独立して、

フェニレン基、ペンタレニレン基、インデニレン基、ナフチレン基、アズレニレン基、ヘプタレニレン基、インダセニレン基、アセナフチレン基、フルオレニレン基、スピロビフルオレニレン基、ベンゾフルオレニレン基、ジベンゾフルオレニレン基、フェナレニレン基、フェナントレニレン基、アントラセニレン基、フルオランテニレン基、トリフェニレニレン基、ピレニレン基、クリセニレン基、ナфтаセニレン基、ピセニレン基、ペリレニレン基、ペンタフェニレン基、ヘキサセニレン基、ペンタセニレン基、ルビセニレン基、コロネニレン基、オバレニレン基、チオフェニレン基、フラニレン基、カルバゾリレン基、インドリレン基、イソインドリレン基、ベンゾフラニレン基、ベンゾチオフェニレン基、ジベンゾフラニレン基、ジベンゾチオフェニレン基、ベンゾカルバゾリレン基、ジベンゾカルバゾリレン基、ジベンゾシロリレン基及びピリジニレン基；並びに

重水素原子、フッ素原子、塩素原子、臭素原子、ヨウ素原子、ヒドロキシル基、シアノ基、ニトロ基、アミジノ基、ヒドラジノ基、ヒドラゾノ基、C₁～C₂₀アルキル基、C₁～C₂₀アルコキシ基、シクロペンチル基、シクロヘキシル基、シクロヘプチル基、シクロペンテニル基、シクロヘキセニル基、フェニル基、ビフェニル基、ターフェニル基、C₁～C₁₀アルキル基で置換されたフェニル基、フッ素原子で置換されたフェニル基、ペンタレニル基、インデニル基、ナフチル基、アズレニル基、ヘプタレニル基、インダセニル基、アセナフチル基、フルオレニル基、スピロビフルオレニル基、ベンゾフルオレニル基、ジベンゾフルオレニル基、フェナレニル基、フェナントレニル基、アントラセニル基、フルオランテニル基、トリフェニレニル基、ピレニル基、クリセニル基、ナфтаセニル基、ピセニル基、ペリレニル基、ペンタフェニル基、ヘキサセニル基、ペンタセニル基、ルビセニル基、コロネニル基、オバレニル基、チオフェニル基、フラニル基、カルバゾリル基、インドリル基、イソインドリル基、ベンゾフラニル基、ベンゾチオフェニル基、ジベンゾフラニル基、ジベンゾチオフェニル基、ベンゾカルバゾリル基、ジベンゾカルバゾリル基、ジベンゾシロリル基、ピリジニル基、-Si(Q₃₁)(Q₃₂)(Q₃₃)、及び-N(Q₃₁)(Q₃₂)のうちから選択された少なくとも一つで置換された、フェニレン基、ペンタレニレン基、インデニレン基、ナフチレン基、アズレニレン基、ヘプタレニレン基、インダセニレン基、アセナフチレン基、フルオレニレン基、スピロビフルオレニレン基、ベンゾフルオレニレン基、ジベンゾフルオレニレン基、フェナレニレン基、フェナントレニレン基、アントラセニレン基、フルオランテニレン基、トリフェニレニレン基、ピレニレン基、クリセニレン基、ナфтаセニレン基、ピセニレン基、ペリレニレン基、ペンタフェニレン基、ヘキサセニレン基、ペンタセニレン基、ルビセニレン基、コロネニレン基、オバレニレン基、チオフェニレン基、フラニレン基、カルバゾリレン基、インドリレン基、イソインドリレン基、ベンゾフラニレン基、ベンゾチオフェニレン基、ジベンゾフラニレン基、ジベンゾチオフェニレン基、ベンゾカルバゾリレン基、ジベンゾカルバゾリレン基、ジベンゾシロリレン基及びピリジニレン基；のうちから選択され、

Q₃₁～Q₃₃は、互いに独立して、C₁～C₁₀アルキル基、C₁～C₁₀アルコキシ基、フェニル基、ビフェニル基、ターフェニル基及びナフチル基のうちから選択される。

【0113】

他の実施形態によれば、x_{a1}～x_{a4}は、互いに独立して、0、1または2である。

【0114】

さらに他の実施形態によれば、x_{a5}は、1、2、3または4である。

【0115】

さらに他の実施形態によれば、R₂₀₁～R₂₀₄、及びQ₂₀₁は、互いに独立して、フェニル基、ビフェニル基、ターフェニル基、ペンタレニル基、インデニル基、ナフチル基、アズレニル基、ヘプタレニル基、インダセニル基、アセナフチル基、フルオレニル基、スピロビフルオレニル基、ベンゾフルオレニル基、ジベンゾフルオレニル基、フェナレニル基、フェナントレニル基、アントラセニル基、フルオランテニル基、トリフェニレニル基、ピレニル基、クリセニル基、ナфтаセニル基、ピセニル基、ペリレニル基、ペン

タフェニル基、ヘキサセニル基、ペンタセニル基、ルビセニル基、コロネニル基、オバレニル基、チオフェニル基、フラニル基、カルバゾリル基、インドリル基、イソインドリル基、ベンゾフラニル基、ベンゾチオフェニル基、ジベンゾフラニル基、ジベンゾチオフェニル基、ベンゾカルバゾリル基、ジベンゾカルバゾリル基、ジベンゾシロリル基及びピリジニル基；並びに

重水素原子、フッ素原子、塩素原子、臭素原子、ヨウ素原子、ヒドロキシ基、シアノ基、ニトロ基、アミジノ基、ヒドラジノ基、ヒドラゾノ基、 C_1-C_{20} アルキル基、 C_1-C_{20} アルコキシ基、シクロペンチル基、シクロヘキシル基、シクロヘプチル基、シクロペンテニル基、シクロヘキセニル基、フェニル基、ビフェニル基、ターフェニル基、 C_1-C_{10} アルキル基で置換されたフェニル基、フッ素原子で置換されたフェニル基、ペントレニル基、インデニル基、ナフチル基、アズレニル基、ヘプタレニル基、インダセニル基、アセナフチル基、フルオレニル基、スピロ-ビフルオレニル基、ベンゾフルオレニル基、ジベンゾフルオレニル基、フェナレニル基、フェナントレニル基、アントラセニル基、フルオランテニル基、トリフェニレニル基、ピレニル基、クリセニル基、ナフタセニル基、ピセニル基、ペリレニル基、ペンタフェニル基、ヘキサセニル基、ペンタセニル基、ルビセニル基、コロネニル基、オバレニル基、チオフェニル基、フラニル基、カルバゾリル基、インドリル基、イソインドリル基、ベンゾフラニル基、ベンゾチオフェニル基、ジベンゾフラニル基、ジベンゾチオフェニル基、ベンゾカルバゾリル基、ジベンゾカルバゾリル基、ジベンゾシロリル基、ピリジニル基、 $-Si(Q_{31})(Q_{32})(Q_{33})$ 、及び $-N(Q_{31})(Q_{32})$ のうちから選択された少なくとも一つで置換された、フェニル基、ビフェニル基、ターフェニル基、ペントレニル基、インデニル基、ナフチル基、アズレニル基、ヘプタレニル基、インダセニル基、アセナフチル基、フルオレニル基、スピロ-ビフルオレニル基、ベンゾフルオレニル基、ジベンゾフルオレニル基、フェナレニル基、フェナントレニル基、アントラセニル基、フルオランテニル基、トリフェニレニル基、ピレニル基、クリセニル基、ナフタセニル基、ピセニル基、ペリレニル基、ペンタフェニル基、ヘキサセニル基、ペンタセニル基、ルビセニル基、コロネニル基、オバレニル基、チオフェニル基、フラニル基、カルバゾリル基、インドリル基、イソインドリル基、ベンゾフラニル基、ベンゾチオフェニル基、ジベンゾフラニル基、ジベンゾチオフェニル基、ベンゾカルバゾリル基、ジベンゾカルバゾリル基、ジベンゾシロリル基及びピリジニル基；のうちから選択される。

【0116】

$Q_{31} \sim Q_{33}$ に係わる説明は、本明細書に記載されたところを参照する。

【0117】

さらに他の実施形態によれば、化学式201において、 $R_{201} \sim R_{203}$ のうち少なくとも一つは、互いに独立して、

フルオレニル基、スピロ-ビフルオレニル基、カルバゾリル基、ジベンゾフラニル基及びジベンゾチオフェニル基；並びに

重水素原子、フッ素原子、塩素原子、臭素原子、ヨウ素原子、ヒドロキシ基、シアノ基、ニトロ基、アミジノ基、ヒドラジノ基、ヒドラゾノ基、 C_1-C_{20} アルキル基、 C_1-C_{20} アルコキシ基、シクロペンチル基、シクロヘキシル基、シクロヘプチル基、シクロペンテニル基、シクロヘキセニル基、フェニル基、ビフェニル基、ターフェニル基、 C_1-C_{10} アルキル基で置換されたフェニル基、フッ素原子で置換されたフェニル基、ナフチル基、フルオレニル基、スピロ-ビフルオレニル基、カルバゾリル基、ジベンゾフラニル基及びジベンゾチオフェニル基のうちから選択された少なくとも一つで置換された、フルオレニル基、スピロ-ビフルオレニル基、カルバゾリル基、ジベンゾフラニル基及びジベンゾチオフェニル基；のうちから選択されるが、これらに限定されるものではない。

【0118】

さらに他の実施形態によれば、化学式202において、i) R_{201} と R_{202} は、単結合を介しても互いに結合され、及び／またはii) R_{203} と R_{204} は、単結合を介しても互いに結合される。

【0119】

さらに他の実施形態によれば、化学式202において、 $R_{201} \sim R_{204}$ のうち少なくとも一つは、

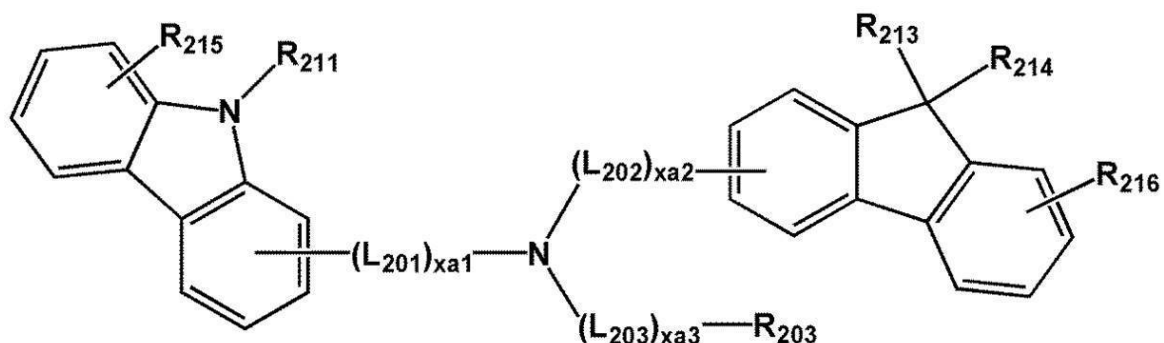
カルバゾリル基；並びに

重水素原子、フッ素原子、塩素原子、臭素原子、ヨウ素原子、ヒドロキシ基、シアノ基、ニトロ基、アミノ基、ヒドラジノ基、ヒドラゾノ基、 $C_1 \sim C_{20}$ アルキル基、 $C_1 \sim C_{20}$ アルコキシ基、シクロペンチル基、シクロヘキシル基、シクロヘプチル基、シクロペンテニル基、シクロヘキセニル基、フェニル基、ビフェニル基、ターフェニル基、 $C_1 \sim C_{10}$ アルキル基で置換されたフェニル基、フッ素原子で置換されたフェニル基、ナフチル基、フルオレニル基、スピロ-ビフルオレニル基、カルバゾリル基、ジベンゾフラニル基及びジベンゾチオフェニル基のうちから選択された少なくとも一つで置換されたカルバゾリル基；のうちから選択されるが、これらに限定されるものではない。

【0120】

化学式201で表わされる化合物は、化学式201Aで表わされてもよい。

【化36】

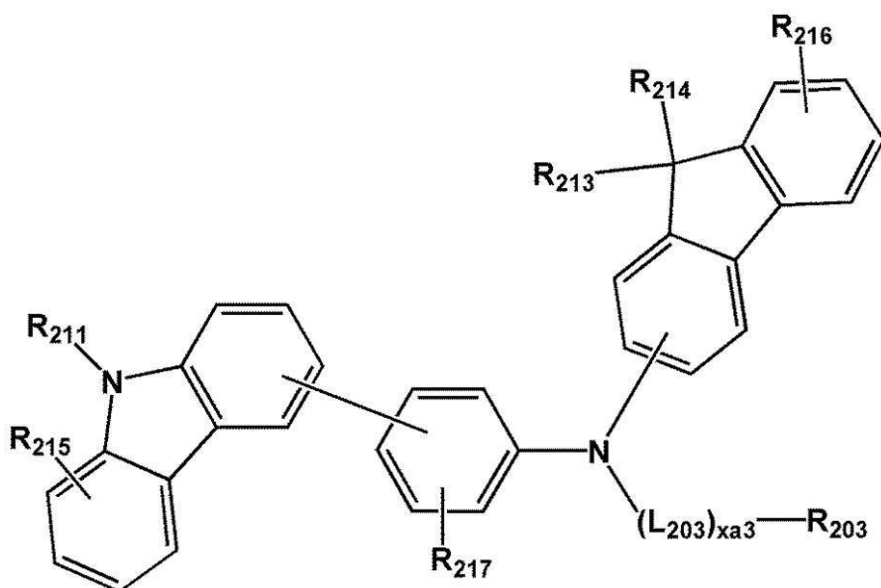


・・・（化学式201）

【0121】

例えば、化学式201で表わされる化合物は、下記化学式201A（1）で表わされてもよいが、これに限定されるものではない。

【化37】

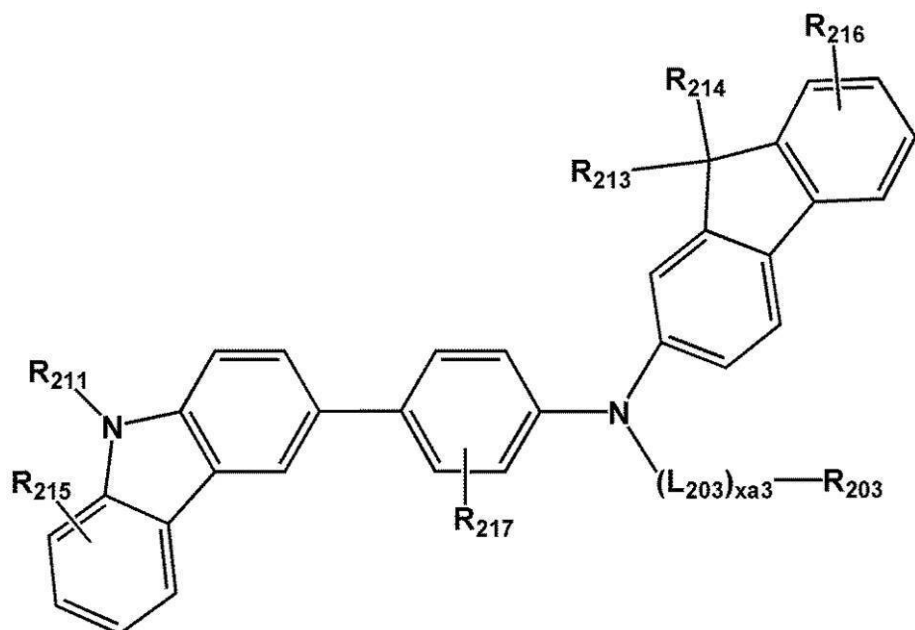


・・・（化学式201A（1））

【0122】

さらに他の例として、化学式201で表わされる化合物は、下記化学式201A-1で表わされてもよいが、これに限定されるものではない。

【化 3 8】

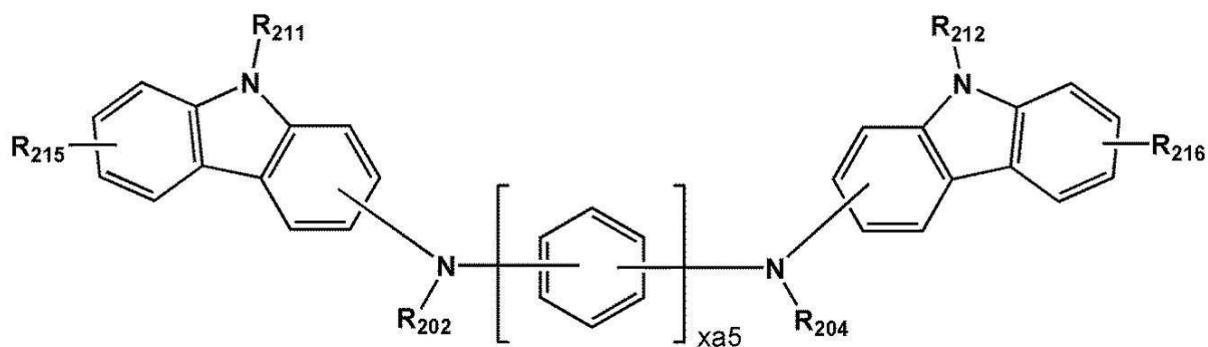


・・・ (化学式 2 0 1 A - 1)

【 0 1 2 3】

一方、化学式 2 0 2 で表わされる化合物は、下記化学式 2 0 2 A で表わされてもよい。

【化 3 9】

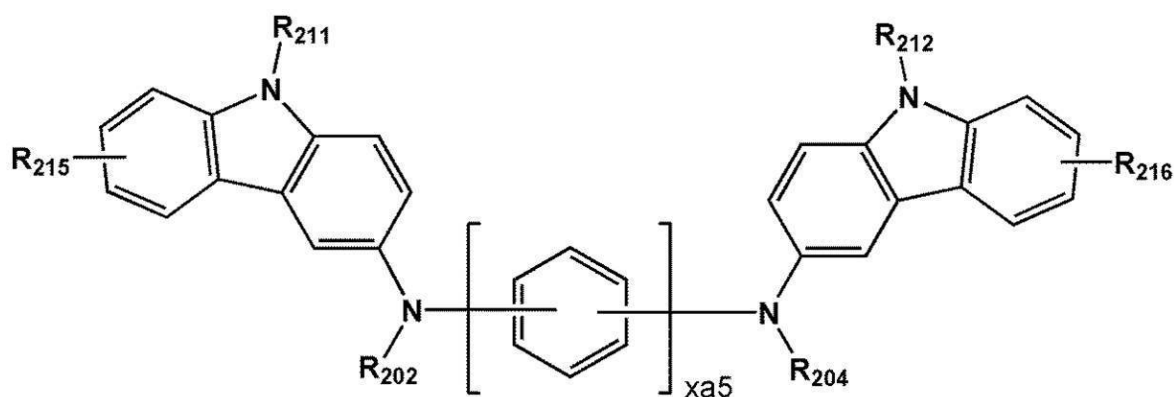


・・・ (化学式 2 0 2 A)

【 0 1 2 4】

さらに他の実施形態によれば、化学式 2 0 2 で表わされる化合物は、下記化学式 2 0 2 A - 1 で表わされてもよい。

【化 4 0】



・・・ (化学式 2 0 2 A - 1)

【 0 1 2 5】

化学式 201A、化学式 201A (1) 化学式 201A-1、化学式 202A 及び化学式 202A-1 において、

L₂₀₁~L₂₀₃、x_{a1}~x_{a3}、x_{a5}、及び R₂₀₂~R₂₀₄に係わる説明は、本明細書に記載されたところを参照し、

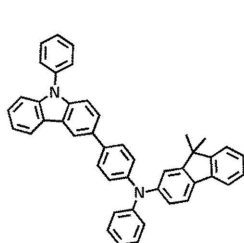
R₂₁₁及びR₂₁₂は、前述のR₂₀₃と同様であり、

R₂₁₃~R₂₁₇は、互いに独立して、水素原子、重水素原子、フッ素原子、塩素原子、臭素原子、ヨウ素原子、ヒドロキシル基、シアノ基、ニトロ基、アミジノ基、ヒドラジノ基、ヒドラゾノ基、C₁~C₂₀アルキル基、C₁~C₂₀アルコキシ基、シクロペンチル基、シクロヘキシル基、シクロヘプチル基、シクロペンテニル基、シクロヘキセニル基、フェニル基、ビフェニル基、ターフェニル基、C₁~C₁₀アルキル基で置換されたフェニル基、フッ素原子で置換されたフェニル基、ペンタレニル基、インデニル基、ナフチル基、アズレニル基、ヘプタレニル基、インダセニル基、アセナフチル基、フルオレニル基、スピロ-ビフルオレニル基、ベンゾフルオレニル基、ジベンゾフルオレニル基、フェナレニル基、フェナントレニル基、アントラセニル基、フルオランテニル基、トリフェニレニル基、ピレニル基、クリセニル基、ナфтаセニル基、ピセニル基、ペリレニル基、ペンタフェニル基、ヘキサセニル基、ペンタセニル基、ルビセニル基、コロネニル基、オバレニル基、チオフェニル基、フラニル基、カルバゾリル基、インドリル基、イソインドリル基、ベンゾフラニル基、ベンゾチオフェニル基、ジベンゾフラニル基、ジベンゾチオフェニル基、ベンゾカルバゾリル基、ジベンゾカルバゾリル基、ジベンゾシロリル基及びピリジニル基のうちから選択される。

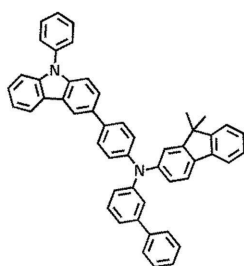
【0126】

正孔輸送領域は、下記化合物HT1~化合物HT39のうちから選択された少なくとも1つの化合物を含んでもよいが、これらに限定されるものではない。

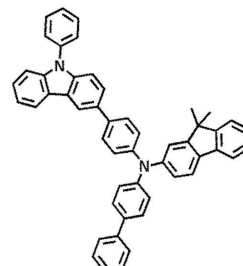
【化41】



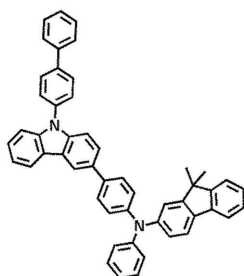
HT1



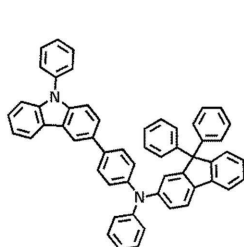
HT2



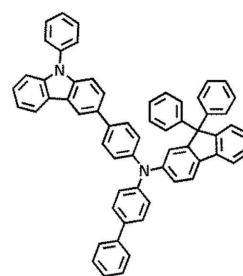
HT3



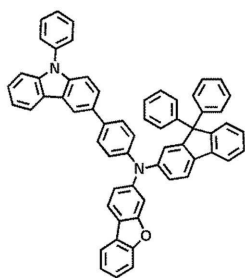
HT4



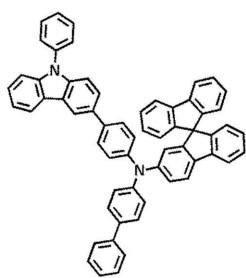
HT5



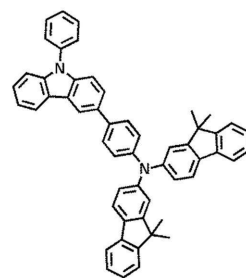
HT6



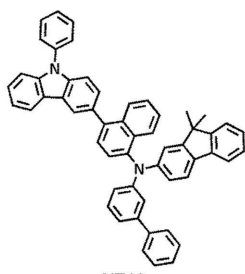
HT7



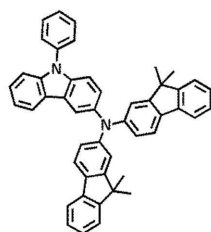
HT8



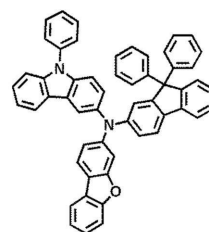
HT9



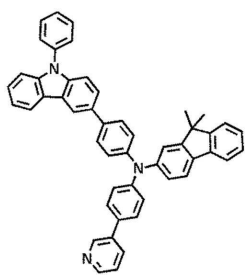
HT10



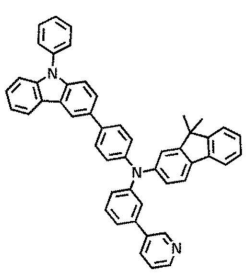
HT11



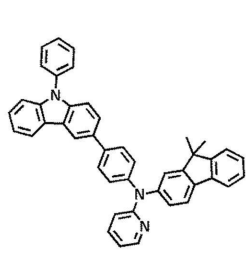
HT12



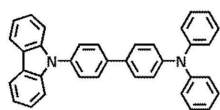
HT13



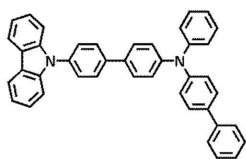
HT14



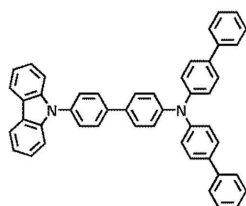
HT15



HT16



HT17



HT18

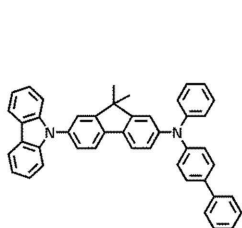
10

20

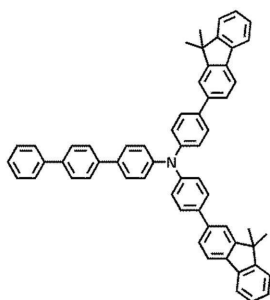
30

40

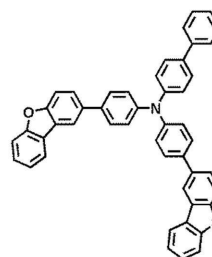
50



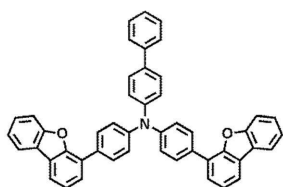
HT19



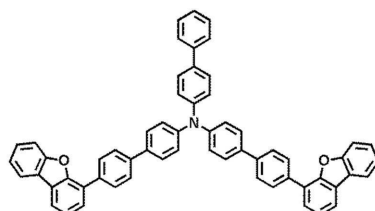
HT20



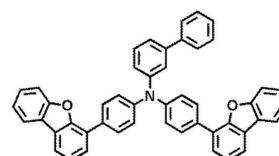
HT21



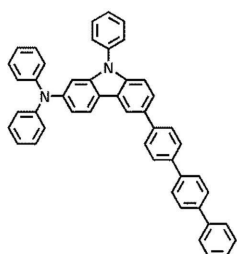
HT22



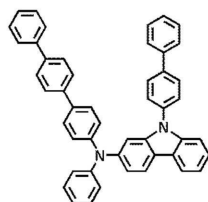
HT23



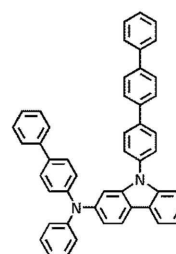
HT24



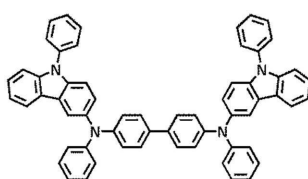
HT25



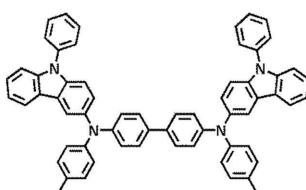
HT26



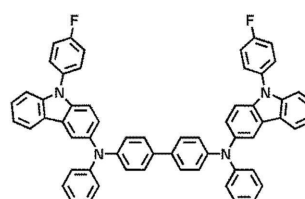
HT27



HT28



HT29



HT30

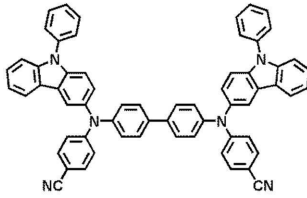
10

20

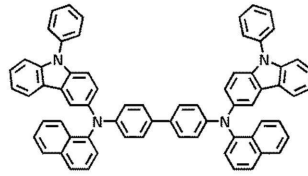
30

40

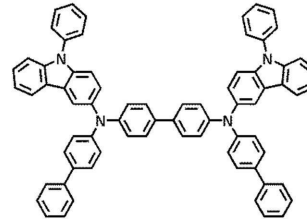
50



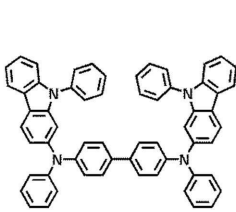
HT31



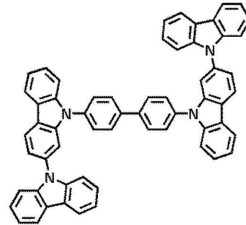
HT32



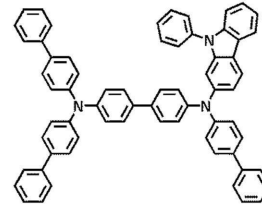
HT33



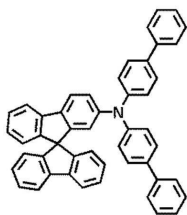
HT34



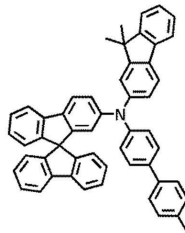
HT35



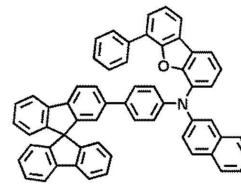
HT36



HT37



HT38



HT39

【 0 1 2 7 】

正孔輸送領域の厚みは、約 10 nm～約 1,000 nm、例えば、約 10 nm～約 100 nm である。正孔輸送領域が、正孔注入層及び正孔輸送層のうち少なくとも 1 層を含むのであるならば、正孔注入層の厚みは、約 10 nm～約 900 nm、例えば、約 10 nm～約 100 nm であり、正孔輸送層の厚みは、約 5 nm～約 200 nm、例えば、約 10 nm～約 150 nm である。正孔輸送領域、正孔注入層及び正孔輸送層の厚みが前述のような範囲を満たす場合、実質的な駆動電圧の上昇なしに、優れた正孔輸送特性を得ることができる。

【 0 1 2 8 】

発光補助層は、発光層で放出される光の波長による光学的共振距離を補償し、光放出効率を上昇させる役割を行う層であり、電子阻止層は、電子輸送領域からの電子注入を防止する役割を行う層である。発光補助層及び電子阻止層には、前述のような物質が含まれてもよい。

【 0 1 2 9 】

〔 p -ドープアント〕

正孔輸送領域は、前述のような物質以外に、導電性向上のために、電荷生成物質をさらに含んでもよい。電荷生成物質は、正孔輸送領域内に、均一又は不均一に分散されている。

【 0 1 3 0 】

電荷生成物質は、例えば、p -ドープアントでもある。一実施形態によれば、p -ドープアントの LUMO エネルギーレベルは、 -3.5 eV 以下である。p -ドープアントは、キノン誘導体、金属酸化物及びシアノ基含有化合物のうちから選択された少なくとも一つを含んでもよいが、これらに限定されるものではない。

【 0 1 3 1 】

例えば、p -ドープアントは、テトラシアノキノジメタン (TCNQ) 及び 2, 3, 5,

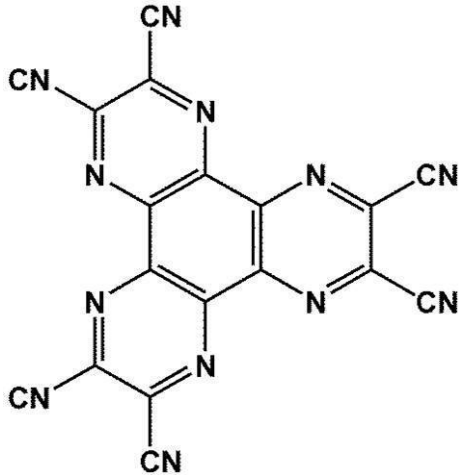
6-テトラフルオロ-7,7,8,8-テトラシアノキノジメタン (F4-TCNQ) のようなキノン誘導体；

タングステン酸化物及びモリブデン酸化物のような金属酸化物；

1,4,5,8,9,12-ヘキサアザトリフェニレン-ヘキサカルボニトリル (HAT-CN)；及び

下記化学式 221 で表わされる化合物；のうちから選択された少なくとも一つを含んでもよいが、これらに限定されるものではない。

【化 4 2】

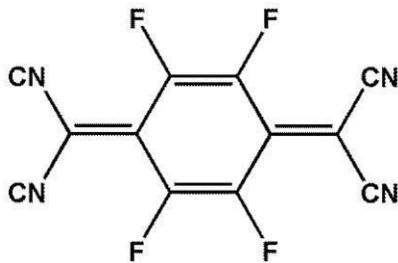


10

20

・・・<HAT-CN>

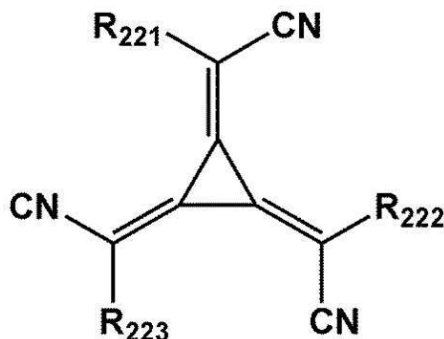
【化 4 3】



30

・・・<F4-TCNQ>

【化 4 4】



40

・・・(化学式 221)

【0132】

化学式 221 において、

R₂₂₁～R₂₂₃は、互いに独立して、置換もしくは無置換のC₃～C₁₀シクロアルキル基、置換もしくは無置換のC₁～C₁₀ヘテロシクロアルキル基、置換もしくは無置換のC₃～C₁₀シクロアルケニル基、置換もしくは無置換のC₁～C₁₀ヘテロシクロアルケニル基、置換もしくは無置換のC₆～C₆₀アリール基、置換もしくは無置換のC₁～C

50

60ヘテロアリール基、置換もしくは無置換の一価非芳香族縮合多環基、及び置換もしくは無置換の一価の非芳香族ヘテロ縮合多環基のうちから選択されるが、 $R_{221} \sim R_{223}$ のうち少なくとも一つは、シアノ基、フッ素原子、塩素原子、臭素原子、ヨウ素原子、フッ素原子で置換された C_1-C_{20} アルキル基、塩素原子で置換された C_1-C_{20} アルキル基、臭素原子で置換された C_1-C_{20} アルキル基、及びヨウ素原子で置換された C_1-C_{20} アルキル基のうちから選択された少なくとも1つの置換基を有する。

【0133】

〔発光層〕

有機発光素子10がフルカラー有機発光素子である場合、発光層は、副画素別に、赤色発光層、緑色発光層及び青色発光層にパターンニングされる。または、発光層は、赤色発光層、緑色発光層及び青色発光層のうちから選択された2以上の層が、接触または離隔されて積層された構造を有するか、あるいは赤色光放出物質、緑色光放出物質及び青色光放出物質のうちから選択された2以上の物質が、層区分なしに混合された構造を有し、白色光を出射することができる。

【0134】

発光層は、ホスト及びドーパントを含んでもよい。ドーパントは、リン光ドーパント及び蛍光ドーパントのうち少なくとも一つを含んでもよい。

【0135】

発光層において、ドーパントの含量は、一般的に、ホスト約100重量部に対して、約0.01～約15重量部の範囲で選択されるが、これに限定されるものではない。

【0136】

発光層の厚みは、約10nm～約100nm、例えば、約20nm～約60nmである。発光層の厚みが前述のような範囲を満たす場合、実質的な駆動電圧の上昇なしに、優れた発光特性を示すことができる。

【0137】

〔ホスト〕

ホストは、下記化学式301で表わされる化合物を含んでもよい。

$[Ar_{301}]_{xb11} - [(L_{301})_{xb1} - R_{301}]_{xb21} \cdots$ (化学式301)

【0138】

化学式301において、

Ar_{301} は、置換もしくは無置換の C_5-C_{60} 炭素環式基、または置換もしくは無置換の C_1-C_{60} ヘテロ環式基であり、

$xb11$ は、1、2または3であり、

L_{301} は、置換もしくは無置換の C_3-C_{10} シクロアルキレン基、置換もしくは無置換の C_1-C_{10} ヘテロシクロアルキレン基、置換もしくは無置換の C_3-C_{10} シクロアルケニレン基、置換もしくは無置換の C_1-C_{10} ヘテロシクロアルケニレン基、置換もしくは無置換の C_6-C_{60} アリーレン基、置換もしくは無置換の C_1-C_{60} ヘテロアリーレン基、置換もしくは無置換の二価の非芳香族縮合多環基、及び置換もしくは無置換の二価の非芳香族ヘテロ縮合多環基のうちから選択され、

$xb1$ は、0～5の整数のうちから選択され、

R_{301} は、重水素原子、フッ素原子、塩素原子、臭素原子、ヨウ素原子、ヒドロキシル基、シアノ基、ニトロ基、アミジノ基、ヒドラジノ基、ヒドラゾノ基、置換もしくは無置換の C_1-C_{60} アルキル基、置換もしくは無置換の C_2-C_{60} アルケニル基、置換もしくは無置換の C_2-C_{60} アルキニル基、置換もしくは無置換の C_1-C_{60} アルコキシ基、置換もしくは無置換の C_3-C_{10} シクロアルキル基、置換もしくは無置換の C_1-C_{10} ヘテロシクロアルキル基、置換もしくは無置換の C_3-C_{10} シクロアルケニル基、置換もしくは無置換の C_1-C_{10} ヘテロシクロアルケニル基、置換もしくは無置換の C_6-C_{60} アリール基、置換もしくは無置換の C_6-C_{60} アリールオキシ基、置換もしくは無置換の C_6-C_{60} アリールチオ基、置換もしくは無置換の C_1-C_{60} ヘテロアリール基、置換もしくは無置換の一価非芳香族縮合多環基、置換もしくは無置換の一価非芳香族ヘテ

10

20

30

40

50

口縮合多環基、 $-Si(Q_{301})(Q_{302})(Q_{303})$ 、 $-N(Q_{301})(Q_{302})$ 、 $-B(Q_{301})(Q_{302})$ 、 $-C(=O)(Q_{301})$ 、 $-S(=O)_2(Q_{301})$ 、及び $-P(=O)(Q_{301})(Q_{302})$ のうちから選択され、

x_{b21} は、1～5の整数のうちから選択され、

$Q_{301} \sim Q_{303}$ は、互いに独立して、 C_1-C_{10} アルキル基、 C_1-C_{10} アルコキシ基、フェニル基、ビフェニル基、ターフェニル基及びナフチル基のうちから選択されるが、これらに限定されるものではない。

【0139】

一実施形態によれば、化学式301において Ar_{301} は、

ナフタレン、フルオレン、スピロビフルオレン、ベンゾフルオレン、ジベンゾフルオレン、フェナレン、フェナントレン、アントラセン、フルオランテン、トリフェニレン、ピレン、クリセン、ナфтаセン、ピセン、ペリレン、ペンタフェン、インデノアントラセン、ジベンゾフラン及びジベンゾチオフェンの1価基；並びに

重水素原子、フッ素原子、塩素原子、臭素原子、ヨウ素原子、ヒドロキシル基、シアノ基、ニトロ基、アミジノ基、ヒドラジノ基、ヒドラゾノ基、 C_1-C_{20} アルキル基、 C_1-C_{20} アルコキシ基、フェニル基、ビフェニル基、ターフェニル基、ナフチル基、 $-Si(Q_{31})(Q_{32})(Q_{33})$ 、 $-N(Q_{31})(Q_{32})$ 、 $-B(Q_{31})(Q_{32})$ 、 $-C(=O)(Q_{31})$ 、 $-S(=O)_2(Q_{31})$ 及び $-P(=O)(Q_{31})(Q_{32})$ のうちから選択された少なくとも一つで置換された、ナフタレン、フルオレン、スピロビフルオレン、ベンゾフルオレン、ジベンゾフルオレン、フェナレン、フェナントレン、アントラセン、フルオランテン、トリフェニレン、ピレン、クリセン、ナфтаセン、ピセン、ペリレン、ペンタフェン、インデノアントラセン、ジベンゾフラン及びジベンゾチオフェンの1価基；のうちから選択され、

$Q_{31} \sim Q_{33}$ は、互いに独立して、 C_1-C_{10} アルキル基、 C_1-C_{10} アルコキシ基、フェニル基、ビフェニル基、ターフェニル基及びナフチル基のうちから選択されるが、これらに限定されるものではない。

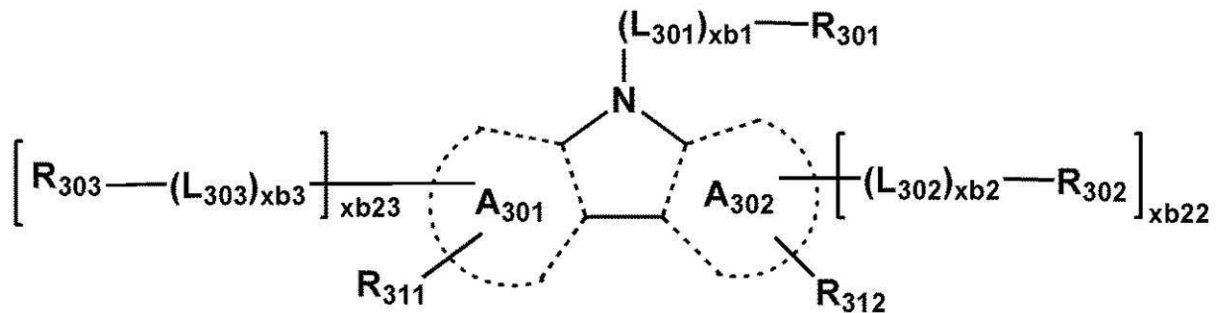
【0140】

化学式301において、 x_{b11} が2以上である場合、2以上の Ar_{301} は、単結合を介しても互いに結合されてもよい。

【0141】

他の実施形態によれば、化学式301で表わされる化合物は、下記化学式301-1または化学式301-2で表わされる。

【化45】



・・・(化学式301-1)

10

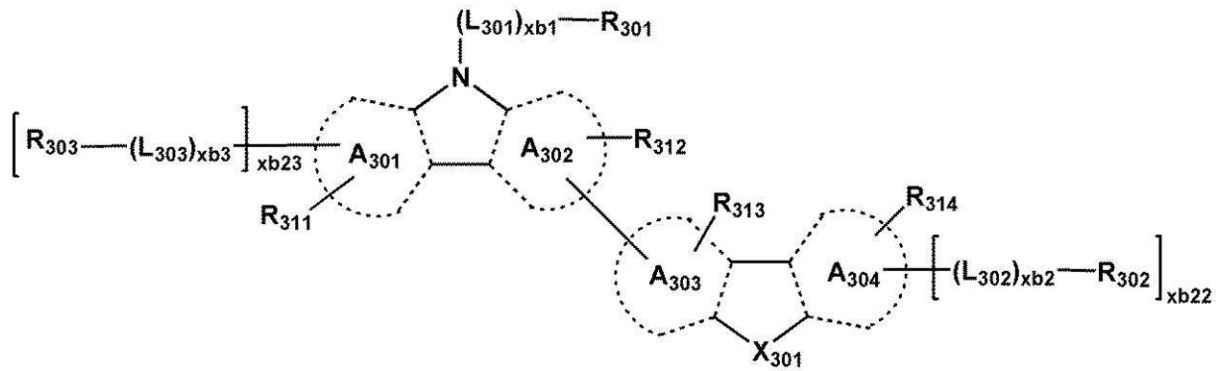
20

30

40

50

【化 4 6】



10

・・・（化学式 301-2）

【0142】

化学式 301-1～化学式 301-2 において、

A301～A304 は、互いに独立して、ベンゼン、ナフタレン、フェナントレン、フルオランテン、トリフェニレン、ピレン、クリセン、ピリジン、ピリミジン、インデン、フルオレン、スピロ-ビフルオレン、ベンゾフルオレン、ジベンゾフルオレン、インドール、カルバゾール、ベンゾカルバゾール、ジベンゾカルバゾール、フラン、ベンゾフラン、ジベンゾフラン、ナフトフラン、ベンゾナフトフラン、ジナフトフラン、チオフェン、ベンゾチオフェン、ジベンゾチオフェン、ナフトチオフェン、ベンゾナフトチオフェン及びジナフトチオフェンのうちから選択された環構造を有し、

20

X301 は、O、S または N-[(L304)xb4-R304] であり、

R311～R314 は、互いに独立して、水素原子、重水素元素、フッ素原子、塩素原子、臭素原子、ヨウ素原子、ヒドロキシル基、シアノ基、ニトロ基、アミジノ基、ヒドラジノ基、ヒドラゾノ基、C1-C20 アルキル基、C1-C20 アルコキシ基、フェニル基、ビフェニル基、ターフェニル基、ナフチル基、-Si(Q31)(Q32)(Q33)、-N(Q31)(Q32)、-B(Q31)(Q32)、-C(=O)(Q31)、-S(=O)2(Q31) 及び -P(=O)(Q31)(Q32) のうちから選択され、

xb22 及び xb23 は、互いに独立して、0、1 または 2 であり、

30

L301、xb1、R301、及び Q31～Q33 に係わる説明は、本明細書に記載されたところを参照し、

L302～L304 に係わる説明は、互いに独立して、前述の L301 と同様であり、

xb2～xb4 に係わる説明は、互いに独立して、前述の xb1 と同様であり、

R302～R304 に係わる説明は、互いに独立して、前述の R301 と同様である。

【0143】

例えば、化学式 301、化学式 301-1 及び化学式 301-2 において、L301～L304 は、互いに独立して、

フェニレン基、ナフチレン基、フルオレニレン基、スピロ-ビフルオレニレン基、ベンゾフルオレニレン基、ジベンゾフルオレニレン基、フェナントレニレン基、アントラセニレン基、フルオランテニレン基、トリフェニレニレン基、ピレニレン基、クリセニレン基、ペリレニレン基、ペンタフェニレン基、ヘキサセニレン基、ペンタセニレン基、チオフェニレン基、フラニレン基、カルバゾリレン基、インドリレン基、イソインドリレン基、ベンゾフラニレン基、ベンゾチオフェニレン基、ジベンゾフラニレン基、ジベンゾチオフェニレン基、ベンゾカルバゾリレン基、ジベンゾカルバゾリレン基、ジベンゾシロリレン基、ピリジニレン基、イミダゾリレン基、ピラゾリレン基、チアゾリレン基、イソチアゾリレン基、オキサゾリレン基、イソキサゾリレン基、チアジアゾリレン基、オキサジアゾリレン基、ピラジニレン基、ピリミジニレン基、ピリダジニレン基、トリアジニレン基、キノリニレン基、イソキノリニレン基、ベンゾキノリニレン基、フタラジニレン基、ナフチリジニレン基、キノキサリニレン基、キナゾリニレン基、シンノリニレン基、フェナン

40

50

トリジニレン基、アクリジニレン基、フェナントロリニレン基、フェナジニレン基、ベンゾイミダゾリレン基、イソベンゾチアゾリレン基、ベンゾオキサゾリレン基、イソベンゾオキサゾリレン基、トリアゾリレン基、テトラゾリレン基、イミダゾピリジニレン基、イミダゾピリミジニレン基及びアザカルバゾリレン基；並びに

重水素原子、フッ素原子、塩素原子、臭素原子、ヨウ素原子、ヒドロキシル基、シアノ基、ニトロ基、アミジノ基、ヒドラジノ基、ヒドラゾノ基、 $C_{1}-C_{20}$ アルキル基、 $C_{1}-C_{20}$ アルコキシ基、フェニル基、ビフェニル基、ターフェニル基、ナフチル基、フルオレニル基、スピロ-ビフルオレニル基、ベンゾフルオレニル基、ジベンゾフルオレニル基、フェナントレニル基、アントラセニル基、フルオランテニル基、トリフェニレニル基、ピレニル基、クリセニル基、ペリレニル基、ペンタフェニル基、ヘキサセニル基、ペンタセニル基、チオフェニル基、フラニル基、カルバゾリル基、インドリル基、イソインドリル基、ベンゾフラニル基、ベンゾチオフェニル基、ジベンゾフラニル基、ジベンゾチオフェニル基、ベンゾカルバゾリル基、ジベンゾカルバゾリル基、ジベンゾシロリル基、ピリジニル基、イミダゾリル基、ピラゾリル基、チアゾリル基、イソチアゾリル基、オキサゾリル基、イソオキサゾリル基、チアジアゾリル基、オキサジアゾリル基、ピラジニル基、ピリミジニル基、ピリダジニル基、トリアジニル基、キノリニル基、イソキノリニル基、ベンゾキノリニル基、フタラジニル基、ナフチリジニル基、キノキサリニル基、キナゾリニル基、シンノリニル基、フェナントリジニル基、アクリジニル基、フェナントロリニル基、フェナジニル基、ベンゾイミダゾリル基、イソベンゾチアゾリル基、ベンゾオキサゾリル基、イソベンゾオキサゾリル基、トリアゾリル基、テトラゾリル基、イミダゾピリジニル基、イミダゾピリミジニル基、アザカルバゾリル基、 $-Si(Q_{31})(Q_{32})(Q_{33})$ 、 $-N(Q_{31})(Q_{32})$ 、 $-B(Q_{31})(Q_{32})$ 、 $-C(=O)(Q_{31})$ 、 $-S(=O)_2(Q_{31})$ 及び $-P(=O)(Q_{31})(Q_{32})$ のうちから選択された少なくとも一つで置換された、フェニレン基、ナフチレン基、フルオレニレン基、スピロ-ビフルオレニレン基、ベンゾフルオレニレン基、ジベンゾフルオレニレン基、フェナントレニレン基、アントラセニレン基、フルオランテニレン基、トリフェニレニレン基、ピレニレン基、クリセニレン基、ペリレニレン基、ペンタフェニレン基、ヘキサセニレン基、ペンタセニレン基、チオフェニレン基、フラニレン基、カルバゾリレン基、インドリレン基、イソインドリレン基、ベンゾフラニレン基、ベンゾチオフェニレン基、ジベンゾフラニレン基、ジベンゾチオフェニレン基、ベンゾカルバゾリレン基、ジベンゾカルバゾリレン基、ジベンゾシロリレン基、ピリジニレン基、イミダゾリレン基、ピラゾリレン基、チアゾリレン基、イソチアゾリレン基、オキサゾリレン基、イソキサゾリレン基、チアジアゾリレン基、オキサジアゾリレン基、ピラジニレン基、ピリミジニレン基、ピリダジニレン基、トリアジニレン基、キノリニレン基、イソキノリニレン基、ベンゾキノリニレン基、フタラジニレン基、ナフチリジニレン基、キノキサリニレン基、キナゾリニレン基、シンノリニレン基、フェナントリジニレン基、アクリジニレン基、フェナントロリニレン基、フェナジニレン基、ベンゾイミダゾリレン基、イソベンゾチアゾリレン基、ベンゾオキサゾリレン基、イソベンゾオキサゾリレン基、トリアゾリレン基、テトラゾリレン基、イミダゾピリジニレン基、イミダゾピリミジニレン基及びアザカルバゾリレン基；のうちから選択され、

前記 $Q_{31} \sim Q_{33}$ に係わる説明は、本明細書に記載されたところを参照することができる。

【0144】

他の例として、化学式301、化学式301-1及び化学式301-2において、 $R_{301} \sim R_{304}$ は、互いに独立して、

フェニル基、ビフェニル基、ターフェニル基、ナフチル基、フルオレニル基、スピロ-ビフルオレニル基、ベンゾフルオレニル基、ジベンゾフルオレニル基、フェナントレニル基、アントラセニル基、フルオランテニル基、トリフェニレニル基、ピレニル基、クリセニル基、ペリレニル基、ペンタフェニル基、ヘキサセニル基、ペンタセニル基、チオフェニル基、フラニル基、カルバゾリル基、インドリル基、イソインドリル基、ベンゾフラニ

10

20

30

40

50

ル基、ベンゾチオフェニル基、ジベンゾフラニル基、ジベンゾチオフェニル基、ベンゾカルバゾリル基、ジベンゾカルバゾリル基、ジベンゾシロリル基、ピリジニル基、イミダゾリル基、ピラゾリル基、チアゾリル基、イソチアゾリル基、オキサゾリル基、イソオキサゾリル基、チアジアゾリル基、オキサジアゾリル基、ピラジニル基、ピリミジニル基、ピリダジニル基、トリアジニル基、キノリニル基、イソキノリニル基、ベンゾキノリニル基、フタラジニル基、ナフチリジニル基、キノキサリニル基、キナゾリニル基、シンノリニル基、フェナントリジニル基、アクリジニル基、フェナントロリニル基、フェナジニル基、ベンゾイミダゾリル基、イソベンゾチアゾリル基、ベンゾオキサゾリル基、イソベンゾオキサゾリル基、トリアゾリル基、テトラゾリル基、イミダゾピリジニル基、イミダゾピリミジニル基及びアザカルバゾリル基；並びに

10

重水素原子、フッ素原子、塩素原子、臭素原子、ヨウ素原子、ヒドロキシル基、シアノ基、ニトロ基、アミノ基、ヒドラジノ基、ヒドラゾノ基、 $C_{1}-C_{20}$ アルキル基、 $C_{1}-C_{20}$ アルコキシ基、フェニル基、ビフェニル基、ターフェニル基、ナフチル基、フルオレニル基、スピロ-ビフルオレニル基、ベンゾフルオレニル基、ジベンゾフルオレニル基、フェナントレニル基、アントラセニル基、フルオランテニル基、トリフェニレニル基、ピレニル基、クリセニル基、ペリレニル基、ペンタフェニル基、ヘキサセニル基、ペンタセニル基、チオフェニル基、フラニル基、カルバゾリル基、インドリル基、イソインドリル基、ベンゾフラニル基、ベンゾチオフェニル基、ジベンゾフラニル基、ジベンゾチオフェニル基、ベンゾカルバゾリル基、ジベンゾカルバゾリル基、ジベンゾシロリル基、ピリジニル基、イミダゾリル基、ピラゾリル基、チアゾリル基、イソチアゾリル基、オキサゾリル基、イソオキサゾリル基、チアジアゾリル基、オキサジアゾリル基、ピラジニル基、ピリミジニル基、ピリダジニル基、トリアジニル基、キノリニル基、イソキノリニル基、ベンゾキノリニル基、フタラジニル基、ナフチリジニル基、キノキサリニル基、キナゾリニル基、シンノリニル基、フェナントリジニル基、アクリジニル基、フェナントロリニル基、フェナジニル基、ベンゾイミダゾリル基、イソベンゾチアゾリル基、ベンゾオキサゾリル基、イソベンゾオキサゾリル基、トリアゾリル基、テトラゾリル基、イミダゾピリジニル基、イミダゾピリミジニル基、アザカルバゾリル基、 $-Si(Q_{31})(Q_{32})(Q_{33})$ 、 $-N(Q_{31})(Q_{32})$ 、 $-B(Q_{31})(Q_{32})$ 、 $-C(=O)(Q_{31})$ 、 $-S(=O)_2(Q_{31})$ 及び $-P(=O)(Q_{31})(Q_{32})$ のうちから選択された少なくとも一つで置換された、フェニル基、ビフェニル基、ターフェニル基、ナフチル基、フルオレニル基、スピロ-ビフルオレニル基、ベンゾフルオレニル基、ジベンゾフルオレニル基、フェナントレニル基、アントラセニル基、フルオランテニル基、トリフェニレニル基、ピレニル基、クリセニル基、ペリレニル基、ペンタフェニル基、ヘキサセニル基、ペンタセニル基、チオフェニル基、フラニル基、カルバゾリル基、インドリル基、イソインドリル基、ベンゾフラニル基、ベンゾチオフェニル基、ジベンゾフラニル基、ジベンゾチオフェニル基、ベンゾカルバゾリル基、ジベンゾカルバゾリル基、ジベンゾシロリル基、ピリジニル基、イミダゾリル基、ピラゾリル基、チアゾリル基、イソチアゾリル基、オキサゾリル基、イソオキサゾリル基、チアジアゾリル基、オキサジアゾリル基、ピラジニル基、ピリミジニル基、ピリダジニル基、トリアジニル基、キノリニル基、イソキノリニル基、ベンゾキノリニル基、フタラジニル基、ナフチリジニル基、キノキサリニル基、キナゾリニル基、シンノリニル基、フェナントリジニル基、アクリジニル基、フェナントロリニル基、フェナジニル基、ベンゾイミダゾリル基、イソベンゾチアゾリル基、ベンゾオキサゾリル基、イソベンゾオキサゾリル基、トリアゾリル基、テトラゾリル基、イミダゾピリジニル基、イミダゾピリミジニル基及びアザカルバゾリル基；のうちから選択され、

20

30

40

$Q_{31} \sim Q_{33}$ に係わる説明は、本明細書に記載されたところを参照することができる。

【0145】

さらに他の例として、ホストは、アルカリ土類金属錯体を含んでもよい。例えば、ホストは、Be錯体（例えば、下記化合物H55）、Mg錯体及びZn錯体のうちから選択される。

【0146】

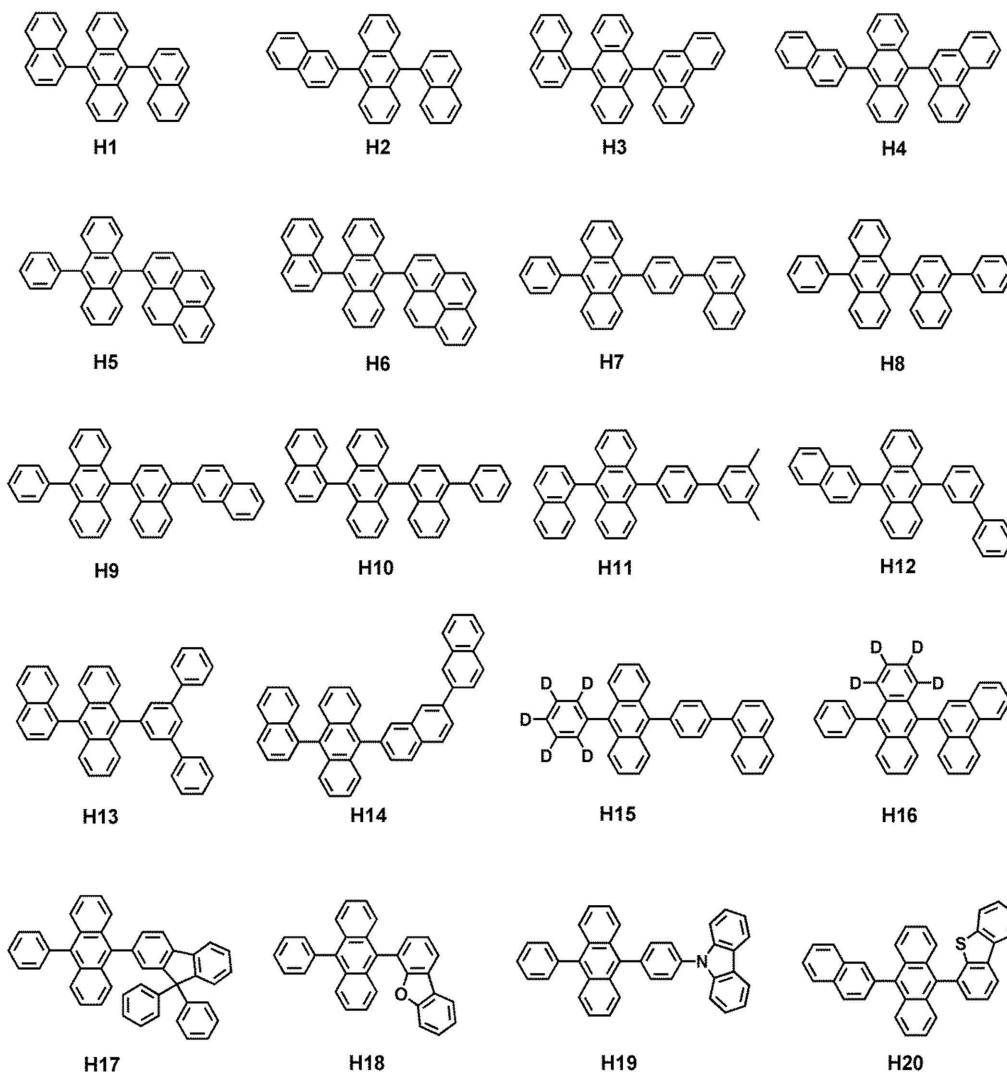
50

ホストは、9

1545200714720_88.aspx?CBNumber=CB6282088&postData3=JP&SYMBOL_Type=JP');

(ADN)、2-メチル-9,10-ビス(ナフタレン-2-イル)アントラセン(MADN)、9,10-ジ-(2-ナフチル)-2-テブチル-アントラセン(TBADN)、4,4'-ビス(N-カルbazol-1-イル)-1,1'-ビフェニル(CBP)、1,3-ジ-9-カルbazol-1-イルベンゼン(mCP)、1,3,5-トリ(カルbazol-9-イル)ベンゼン(TCP)、及び下記化合物H1~化合物H55のうちから選択された少なくとも一つを含んでもよいが、これらに限定されるものではない。

【化47】



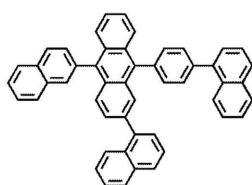
10

20

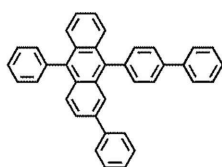
30

40

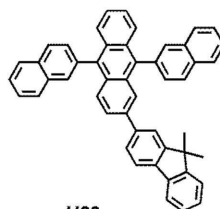
50



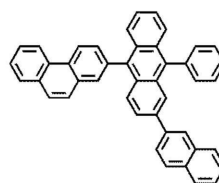
H21



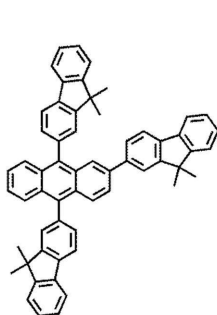
H22



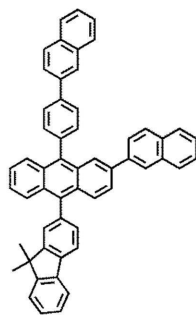
H23



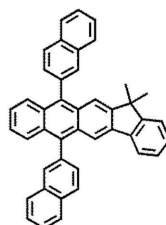
H24



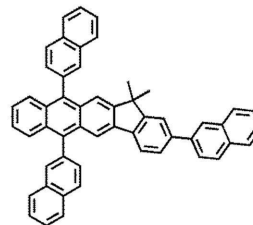
H25



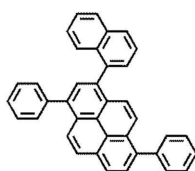
H26



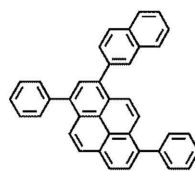
H27



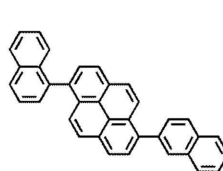
H28



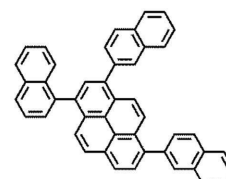
H29



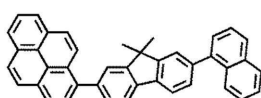
H30



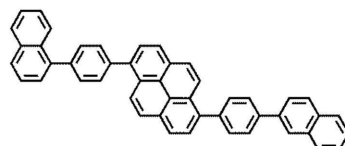
H31



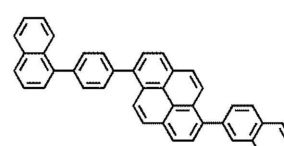
H32



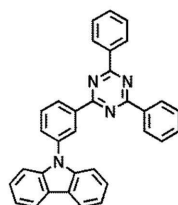
H33



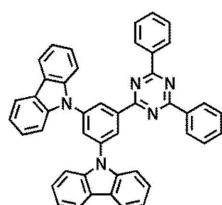
H34



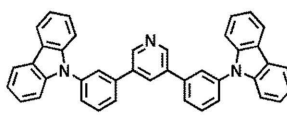
H35



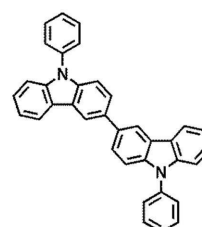
H36



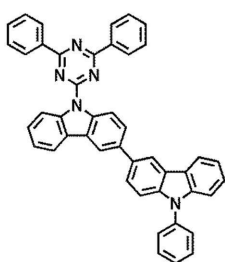
H37



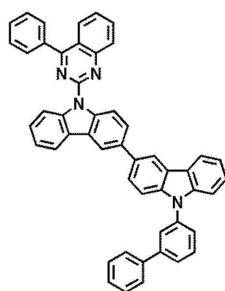
H38



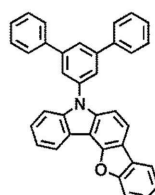
H39



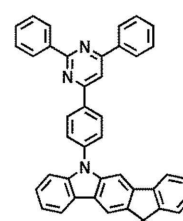
H40



H41



H42



H43

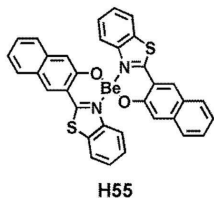
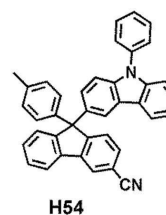
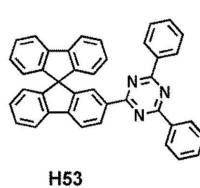
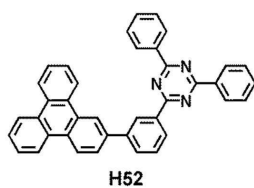
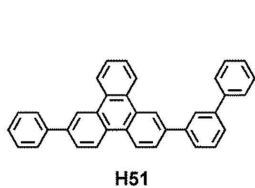
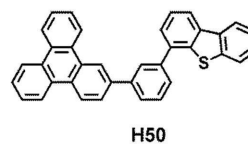
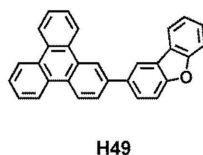
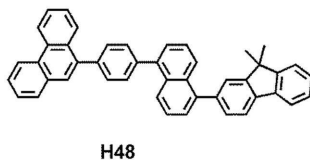
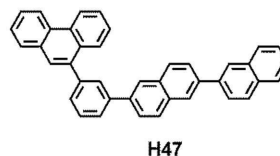
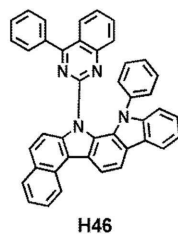
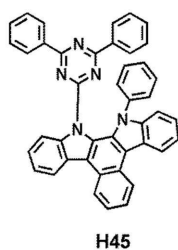
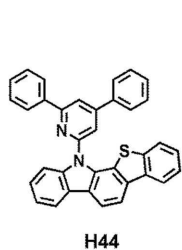
10

20

30

40

50



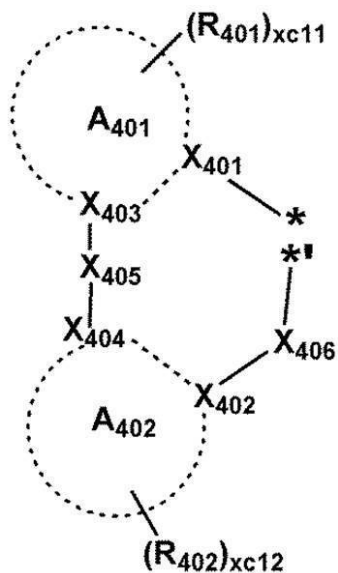
【 0 1 4 7 】

【リン光ドーパント】

リン光ドーパントは、下記化学式 4 0 1 及び化学式 2 で表わされる有機金属錯体を含んでもよい。

$M (L_{401})_{x c 1} (L_{402})_{x c 2} \cdots$ (化学式 4 0 1)

【化 4 8】



... (化学式 4 0 2)

【0148】

化学式402において、*及び*'は、化学式401におけるMとの結合位置を示す。

【0149】

化学式401及び化学式402において、

Mは、イリジウム(Ir)、白金(Pt)、パラジウム(Pd)、オスミウム(Os)、チタン(Ti)、ジルコニウム(Zr)、ハフニウム(Hf)、ユウロピウム(Eu)、テルビウム(Tb)、ロジウム(Rh)及びツリウム(Tm)のうちから選択され、

L₄₀₁は、化学式402で表わされるリガンド(配位子)のうちから選択され、x_{c1}は、1、2または3であり、x_{c1}が2以上である場合、2以上のL₄₀₁は、互いに同じであっても異なってもよく、

L₄₀₂は、有機リガンドであり、x_{c2}は、0～4の整数のうちから選択され、x_{c2}が2以上である場合、2以上のL₄₀₂は、互いに同じであっても異なってもよく、

X₄₀₁～X₄₀₄は、互いに独立して、窒素または炭素であり、

X₄₀₁とX₄₀₃は、単結合または二重結合を介して結合され、X₄₀₂とX₄₀₄は、単結合または二重結合を介して結合され、

A₄₀₁及びA₄₀₂は、互いに独立して、C₅～C₆₀炭素環式基またはC₁～C₆₀ヘテロ環式基であり、

X₄₀₅は、単結合、*～O～*'、*～S～*'、*～C(=O)～*'、*～N(Q₄₁₁)～*'、*～C(Q₄₁₁)(Q₄₁₂)～*'、*～C(Q₄₁₁)=C(Q₄₁₂)～*'、*～C(Q₄₁₁)=*'または*=C=*'であり、前記Q₄₁₁及びQ₄₁₂は、水素原子、重水素原子、C₁～C₂₀アルキル基、C₁～C₂₀アルコキシ基、フェニル基、ビフェニル基、ターフェニル基またはナフチル基であり、

X₄₀₆は、単結合、OまたはSであり、

R₄₀₁及びR₄₀₂は、互いに独立して、水素原子、重水素原子、フッ素原子、塩素原子、臭素原子、ヨウ素原子、ヒドロキシル基、シアノ基、ニトロ基、アミジノ基、ヒドラジノ基、ヒドラゾノ基、置換もしくは無置換のC₁～C₂₀アルキル基、置換もしくは無置換のC₁～C₂₀アルコキシ基、置換もしくは無置換のC₃～C₁₀シクロアルキル基、置換もしくは無置換のC₁～C₁₀ヘテロシクロアルキル基、置換もしくは無置換のC₃～C₁₀シクロアルケニル基、置換もしくは無置換のC₁～C₁₀ヘテロシクロアルケニル基、置換もしくは無置換のC₆～C₆₀アリール基、置換もしくは無置換のC₆～C₆₀アリールオキシ基、置換もしくは無置換のC₆～C₆₀アリールチオ基、置換もしくは無置換のC₁～C₆₀ヘテロアリール基、置換もしくは無置換の一価の非芳香族縮合多環基、置換もしくは無置換の一価の非芳香族ヘテロ縮合多環基、～Si(Q₄₀₁)(Q₄₀₂)(Q₄₀₃)、～N(Q₄₀₁)(Q₄₀₂)、～B(Q₄₀₁)(Q₄₀₂)、～C(=O)(Q₄₀₁)、～S(=O)₂(Q₄₀₁)、及び～P(=O)(Q₄₀₁)(Q₄₀₂)のうちから選択され、Q₄₀₁～Q₄₀₃は、互いに独立して、C₁～C₁₀アルキル基、C₁～C₁₀アルコキシ基、C₆～C₂₀アリール基及びC₁～C₂₀ヘテロアリール基のうちから選択され、

x_{c11}及びx_{c12}は、互いに独立して、0～10の整数のうちから選択される。

【0150】

一実施形態によれば、化学式402において、A₄₀₁及びA₄₀₂は、互いに独立して、ベンゼン、ナフタレン、フルオレン、スピロービフルオレン、インデン、ピロール、チオフェン、フラン、イミダゾール、ピラゾール、チアゾール、イソチアゾール、オキサゾール、イソオキサゾール、ピリジン、ピラジン、ピリミジン、ピリダジン、キノリン、イソキノリン、ベンゾキノリン、キノキサリン、キナゾリン、カルバゾール、ベンゾイミダゾール、ベンゾフラン、ベンゾチオフェン、イソベンゾチオフェン、ベンゾオキサゾール、イソベンゾオキサゾール、トリアゾール、テトラゾール、オキサジアゾール、トリアジン、ジベンゾフラン及びジベンゾチオフェンのうちから選択される環構造を有する。

【0151】

他の実施形態によれば、化学式402において、i) X₄₀₁は、窒素であり、X₄₀₂

10

20

30

40

50

は、炭素であるか、あるいは i) X_{401} と X_{402} とがいずれも窒素でもある。

【0152】

さらに他の実施形態によれば、化学式 402 において、 R_{401} 及び R_{402} は、互いに独立して、

水素原子、重水素原子、フッ素原子、塩素原子、臭素原子、ヨウ素原子、ヒドロキシル基、シアノ基、ニトロ基、アミジノ基、ヒドラジノ基、ヒドラゾノ基、 C_1-C_{20} アルキル基及び C_1-C_{20} アルコキシ基；

重水素原子、フッ素原子、塩素原子、臭素原子、ヨウ素原子、ヒドロキシル基、シアノ基、ニトロ基、アミジノ基、ヒドラジノ基、ヒドラゾノ基、フェニル基、ナフチル基、シクロペンチル基、シクロヘキシル基、アダマンタニル基、ノルボルナニル基及びノルボルネニル基のうちから選択された少なくとも一つで置換された、 C_1-C_{20} アルキル基及び C_1-C_{20} アルコキシ基；

シクロペンチル基、シクロヘキシル基、アダマンタニル基、ノルボルナニル基、ノルボルネニル基、フェニル基、ビフェニル基、ターフェニル基、ナフチル基、フルオレニル基、ピリジニル基、ピラジニル基、ピリミジニル基、ピリダジニル基、トリアジニル基、キノリニル基、イソキノリニル基、キノキサリニル基、キナゾリニル基、カルバゾリル基、ジベンゾフラニル基及びジベンゾチオフェニル基；

重水素原子、フッ素原子、塩素原子、臭素原子、ヨウ素原子、ヒドロキシル基、シアノ基、ニトロ基、アミジノ基、ヒドラジノ基、ヒドラゾノ基、 C_1-C_{20} アルキル基、 C_1-C_{20} アルコキシ基、シクロペンチル基、シクロヘキシル基、アダマンタニル基、ノルボルナニル基、ノルボルネニル基、フェニル基、ビフェニル基、ターフェニル基、ナフチル基、フルオレニル基、ピリジニル基、ピラジニル基、ピリミジニル基、ピリダジニル基、トリアジニル基、キノリニル基、イソキノリニル基、キノキサリニル基、キナゾリニル基、カルバゾリル基、ジベンゾフラニル基及びジベンゾチオフェニル基のうちから選択された少なくとも一つで置換された、シクロペンチル基、シクロヘキシル基、アダマンタニル基、ノルボルナニル基、ノルボルネニル基、フェニル基、ビフェニル基、ターフェニル基、ナフチル基、フルオレニル基、ピリジニル基、ピラジニル基、ピリミジニル基、ピリダジニル基、トリアジニル基、キノリニル基、イソキノリニル基、キノキサリニル基、キナゾリニル基、カルバゾリル基、ジベンゾフラニル基及びジベンゾチオフェニル基；並びに

$-Si(Q_{401})(Q_{402})(Q_{403})$ 、 $-N(Q_{401})(Q_{402})$ 、 $-B(Q_{401})(Q_{402})$ 、 $-C(=O)(Q_{401})$ 、 $-S(=O)_2(Q_{401})$ 及び $-P(=O)(Q_{401})(Q_{402})$ ；のうちから選択され、

$Q_{401} \sim Q_{403}$ は、互いに独立して、 C_1-C_{10} アルキル基、 C_1-C_{10} アルコキシ基、フェニル基、ビフェニル基及びナフチル基のうちから選択されるが、これらに限定されるものではない。

【0153】

さらに他の実施形態によれば、化学式 401 において、 x_{c1} が 2 以上である場合、2 以上の L_{401} で、2 個の A_{401} は、任意で、連結基である X_{407} を介して互いに結合されるか、あるいは 2 個の A_{402} は、任意で、連結基である X_{408} を介して互いに結合される（下記化合物 PD1～化合物 PD4、及び化合物 PD7 参照）。 X_{407} 及び X_{408} は、互いに独立して、単結合、 $*-O-*'$ 、 $*-S-*'$ 、 $*-C(=O)-*'$ 、 $*-N(Q_{413})-*'$ 、 $*-C(Q_{413})(Q_{414})-*'$ または $*-C(Q_{413})=C(Q_{414})-*'$ （ここで、 Q_{413} 及び Q_{414} は、互いに独立して、水素原子、重水素原子、 C_1-C_{20} アルキル基、 C_1-C_{20} アルコキシ基、フェニル基、ビフェニル基、ターフェニル基またはナフチル基である）であるが、これらに限定されるものではない。

【0154】

化学式 401 において、 L_{402} は、任意の一価、二価または三価の有機リガンドである。例えば、 L_{402} は、ハロゲン、ジケトン（例えば、アセチルアセトネート）、カルボン酸（例えば、ピコリネート）、 $-C(=O)$ 、イソニトリル、 $-CN$ 及びホスフォロス（例えば、ホスフィン（phosphine）、ホスファイト（phosphite））のうちから選択され

10

20

30

40

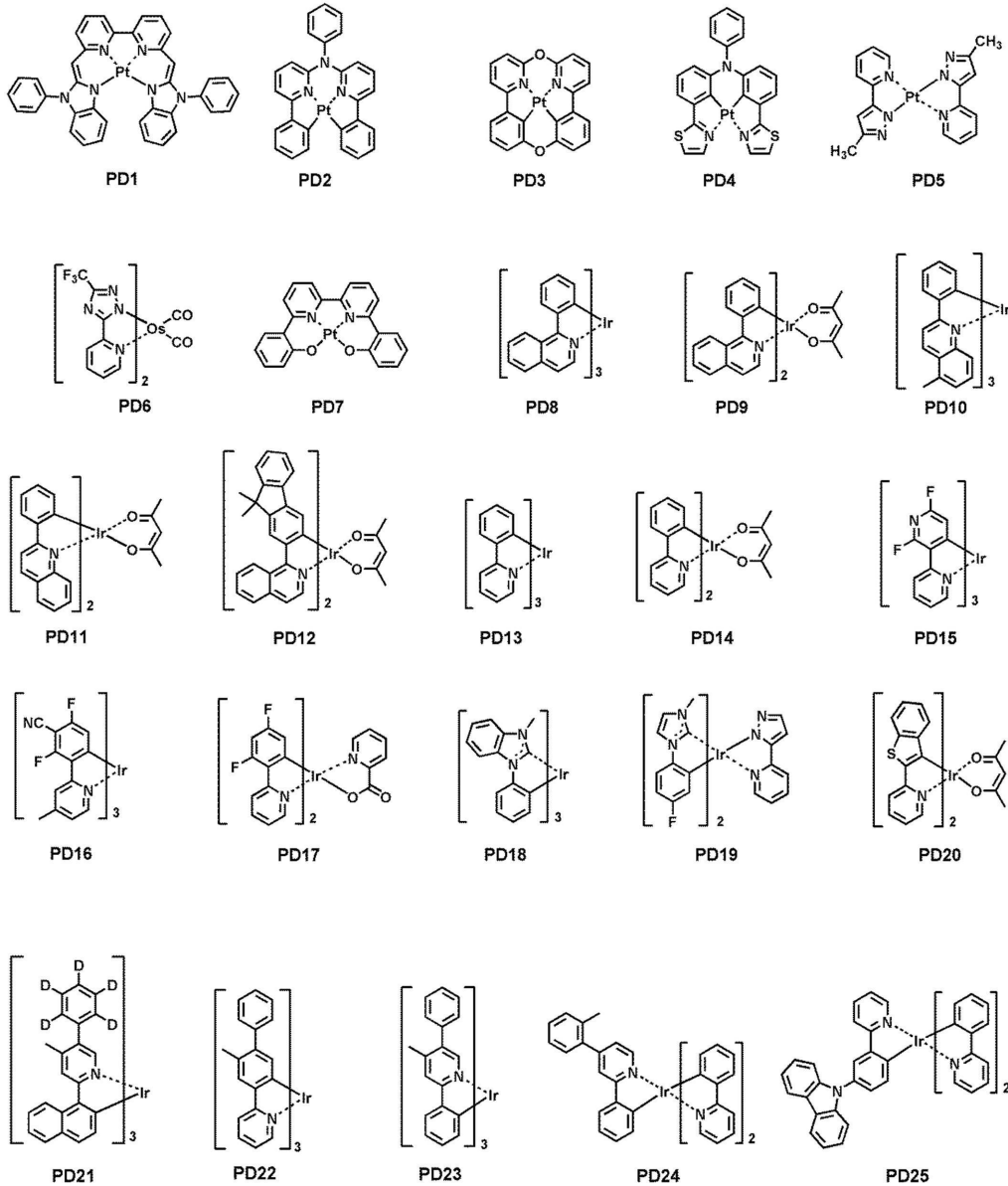
50

るが、これらに限定されるものではない。

【 0 1 5 5 】

または、リン光ドーパントは、例えば、下記化合物 P D 1 ~ 化合物 P D 2 5 のうちから選択されるが、これらに限定されるものではない。

【化 4 9】



10

20

30

【 0 1 5 6 】

【蛍光ドーパント】

蛍光ドーパントは、アリールアミン化合物またはスチリルアミン化合物を含んでもよい。

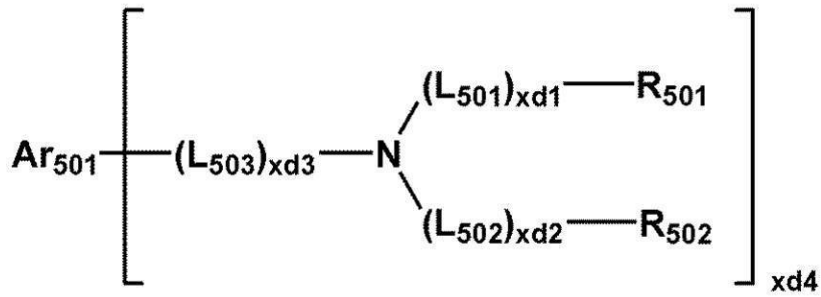
【 0 1 5 7 】

蛍光ドーパントは、下記化学式 5 0 1 で表わされる化合物を含んでもよい。

40

50

【化 5 0】



・・・ (化学式 5 0 1)

【0 1 5 8】

化学式 5 0 1 において、

Ar_{501} は、置換もしくは無置換の $\text{C}_5 - \text{C}_{60}$ 炭素環式基、または置換もしくは無置換の $\text{C}_1 - \text{C}_{60}$ ヘテロ環式基であり、

$\text{L}_{501} \sim \text{L}_{503}$ は、互いに独立して、置換もしくは無置換の $\text{C}_3 - \text{C}_{10}$ シクロアルキレン基、置換もしくは無置換の $\text{C}_1 - \text{C}_{10}$ ヘテロシクロアルキレン基、置換もしくは無置換の $\text{C}_3 - \text{C}_{10}$ シクロアルケニレン基、置換もしくは無置換の $\text{C}_1 - \text{C}_{10}$ ヘテロシクロアルケニレン基、置換もしくは無置換の $\text{C}_6 - \text{C}_{60}$ アリーレン基、置換もしくは無置換の $\text{C}_1 - \text{C}_{60}$ ヘテロアリーレン基、置換もしくは無置換の二価の非芳香族縮合多環基、及び置換もしくは無置換の二価の非芳香族ヘテロ縮合多環基のうちから選択され、

$\text{xd}1 \sim \text{xd}3$ は、互いに独立して、0～3の整数のうちから選択され、

R_{501} 及び R_{502} は、互いに独立して、置換もしくは無置換の $\text{C}_3 - \text{C}_{10}$ シクロアルキル基、置換もしくは無置換の $\text{C}_1 - \text{C}_{10}$ ヘテロシクロアルキル基、置換もしくは無置換の $\text{C}_3 - \text{C}_{10}$ シクロアルケニル基、置換もしくは無置換の $\text{C}_1 - \text{C}_{10}$ ヘテロシクロアルケニル基、置換もしくは無置換の $\text{C}_6 - \text{C}_{60}$ アリール基、置換もしくは無置換の $\text{C}_6 - \text{C}_{60}$ アリールオキシ基、置換もしくは無置換の $\text{C}_6 - \text{C}_{60}$ アリールチオ基、置換もしくは無置換の $\text{C}_1 - \text{C}_{60}$ ヘテロアリール基、置換もしくは無置換の一価の非芳香族縮合多環基、及び置換もしくは無置換の一価の非芳香族ヘテロ縮合多環基のうちから選択され、

$\text{xd}4$ は、1～6の整数のうちから選択される。

【0 1 5 9】

一実施形態によれば、化学式 5 0 1 において Ar_{501} は、

ナフタレン、ヘプタレン、フルオレン、スピロ-ビフルオレン、ベンゾフルオレン、ジベンゾフルオレン、フェナレン、フェナントレン、アントラセン、フルオランテン、トリフェニレン、ピレン、クリセン、ナフタセン、ピセン、ペリレン、ペンタフェン、インデノアントラセン及びインデノフェナントレン；並びに

重水素原子、フッ素原子、塩素原子、臭素原子、ヨウ素原子、ヒドロキシル基、シアノ基、ニトロ基、アミジノ基、ヒドラジノ基、ヒドラゾノ基、 $\text{C}_1 - \text{C}_{20}$ アルキル基、 $\text{C}_1 - \text{C}_{20}$ アルコキシ基、フェニル基、ビフェニル基、ターフェニル基及びナフチル基のうちから選択された少なくとも一つで置換された、ナフタレン、ヘプタレン、フルオレン、スピロ-ビフルオレン、ベンゾフルオレン、ジベンゾフルオレン、フェナレン、フェナントレン、アントラセン、フルオランテン、トリフェニレン、ピレン、クリセン、ナフタセン、ピセン、ペリレン、ペンタフェン、インデノアントラセン及びインデノフェナントレン；のうちから選択される環構造を有する。

【0 1 6 0】

他の実施形態によれば、化学式 5 0 1 において、 $\text{L}_{501} \sim \text{L}_{503}$ は、互いに独立して、

フェニレン基、ナフチレン基、フルオレニレン基、スピロ-ビフルオレニレン基、ベンゾフルオレニレン基、ジベンゾフルオレニレン基、フェナントレニレン基、アントラセニレン基、フルオランテニレン基、トリフェニレニレン基、ピレニレン基、クリセニレン基

10

20

30

40

50

、ペリレニレン基、ペンタフェニレン基、ヘキサセニレン基、ペンタセニレン基、チオフェニレン基、フラニレン基、カルバゾリレン基、インドリレン基、イソインドリレン基、ベンゾフラニレン基、ベンゾチオフェニレン基、ジベンゾフラニレン基、ジベンゾチオフェニレン基、ベンゾカルバゾリレン基、ジベンゾカルバゾリレン基、ジベンゾシロリレン基、ピリジニレン基；及び

重水素原子、フッ素原子、塩素原子、臭素原子、ヨウ素原子、ヒドロキシ基、シアノ基、ニトロ基、アミジノ基、ヒドラジノ基、ヒドラゾノ基、 C_1-C_{20} アルキル基、 C_1-C_{20} アルコキシ基、フェニル基、ビフェニル基、ターフェニル基、ナフチル基、フルオレニル基、スピロ-ビフルオレニル基、ベンゾフルオレニル基、ジベンゾフルオレニル基、フェナントレニル基、アントラセニル基、フルオランテニル基、トリフェニレニル基、ピレニル基、クリセニル基、ペリレニル基、ペンタフェニル基、ヘキサセニル基、ペンタセニル基、チオフェニル基、フラニル基、カルバゾリル基、インドリル基、イソインドリル基、ベンゾフラニル基、ベンゾチオフェニル基、ジベンゾフラニル基、ジベンゾチオフェニル基、ベンゾカルバゾリル基、ジベンゾカルバゾリル基、ジベンゾシロリル基及びピリジニル基のうちから選択された少なくとも一つで置換された、フェニレン基、ナフチレン基、フルオレニレン基、スピロ-ビフルオレニレン基、ベンゾフルオレニレン基、ジベンゾフルオレニレン基、フェナントレニレン基、アントラセニレン基、フルオランテニレン基、トリフェニレニレン基、ピレニレン基、クリセニレン基、ペリレニレン基、ペンタフェニレン基、ヘキサセニレン基、ペンタセニレン基、チオフェニレン基、フラニレン基、カルバゾリレン基、インドリレン基、イソインドリレン基、ベンゾフラニレン基、ベンゾチオフェニレン基、ジベンゾフラニレン基、ジベンゾチオフェニレン基、ベンゾカルバゾリレン基、ジベンゾカルバゾリレン基、ジベンゾシロリレン基、ピリジニレン基；のうちから選択される。

【0161】

さらに他の実施形態によれば、化学式501において、 R_{501} 及び R_{502} は、互いに独立して、

フェニル基、ビフェニル基、ターフェニル基、ナフチル基、フルオレニル基、スピロ-ビフルオレニル基、ベンゾフルオレニル基、ジベンゾフルオレニル基、フェナントレニル基、アントラセニル基、フルオランテニル基、トリフェニレニル基、ピレニル基、クリセニル基、ペリレニル基、ペンタフェニル基、ヘキサセニル基、ペンタセニル基、チオフェニル基、フラニル基、カルバゾリル基、インドリル基、イソインドリル基、ベンゾフラニル基、ベンゾチオフェニル基、ジベンゾフラニル基、ジベンゾチオフェニル基、ベンゾカルバゾリル基、ジベンゾカルバゾリル基、ジベンゾシロリル基及びピリジニル基；並びに

重水素原子、フッ素原子、塩素原子、臭素原子、ヨウ素原子、ヒドロキシ基、シアノ基、ニトロ基、アミジノ基、ヒドラジノ基、ヒドラゾノ基、 C_1-C_{20} アルキル基、 C_1-C_{20} アルコキシ基、フェニル基、ビフェニル基、ターフェニル基、ナフチル基、フルオレニル基、スピロ-ビフルオレニル基、ベンゾフルオレニル基、ジベンゾフルオレニル基、フェナントレニル基、アントラセニル基、フルオランテニル基、トリフェニレニル基、ピレニル基、クリセニル基、ペリレニル基、ペンタフェニル基、ヘキサセニル基、ペンタセニル基、チオフェニル基、フラニル基、カルバゾリル基、インドリル基、イソインドリル基、ベンゾフラニル基、ベンゾチオフェニル基、ジベンゾフラニル基、ジベンゾチオフェニル基、ベンゾカルバゾリル基、ジベンゾカルバゾリル基、ジベンゾシロリル基、ピリジニル基及び-Si(Q_{31})(Q_{32})(Q_{33})のうちから選択された少なくとも一つで置換された、フェニル基、ビフェニル基、ターフェニル基、ナフチル基、フルオレニル基、スピロ-ビフルオレニル基、ベンゾフルオレニル基、ジベンゾフルオレニル基、フェナントレニル基、アントラセニル基、フルオランテニル基、トリフェニレニル基、ピレニル基、クリセニル基、ペリレニル基、ペンタフェニル基、ヘキサセニル基、ペンタセニル基、チオフェニル基、フラニル基、カルバゾリル基、インドリル基、イソインドリル基、ベンゾフラニル基、ベンゾチオフェニル基、ジベンゾフラニル基、ジベンゾチオフェニル基、ベンゾカルバゾリル基、ジベンゾカルバゾリル基、ジベンゾシロリル基及びピリジ

ニル基；のうちから選択され、

Q₃₁～Q₃₃は、互いに独立して、C₁～C₁₀アルキル基、C₁～C₁₀アルコキシ基、フェニル基、ビフェニル基、ターフェニル基及びナフチル基のうちから選択される。

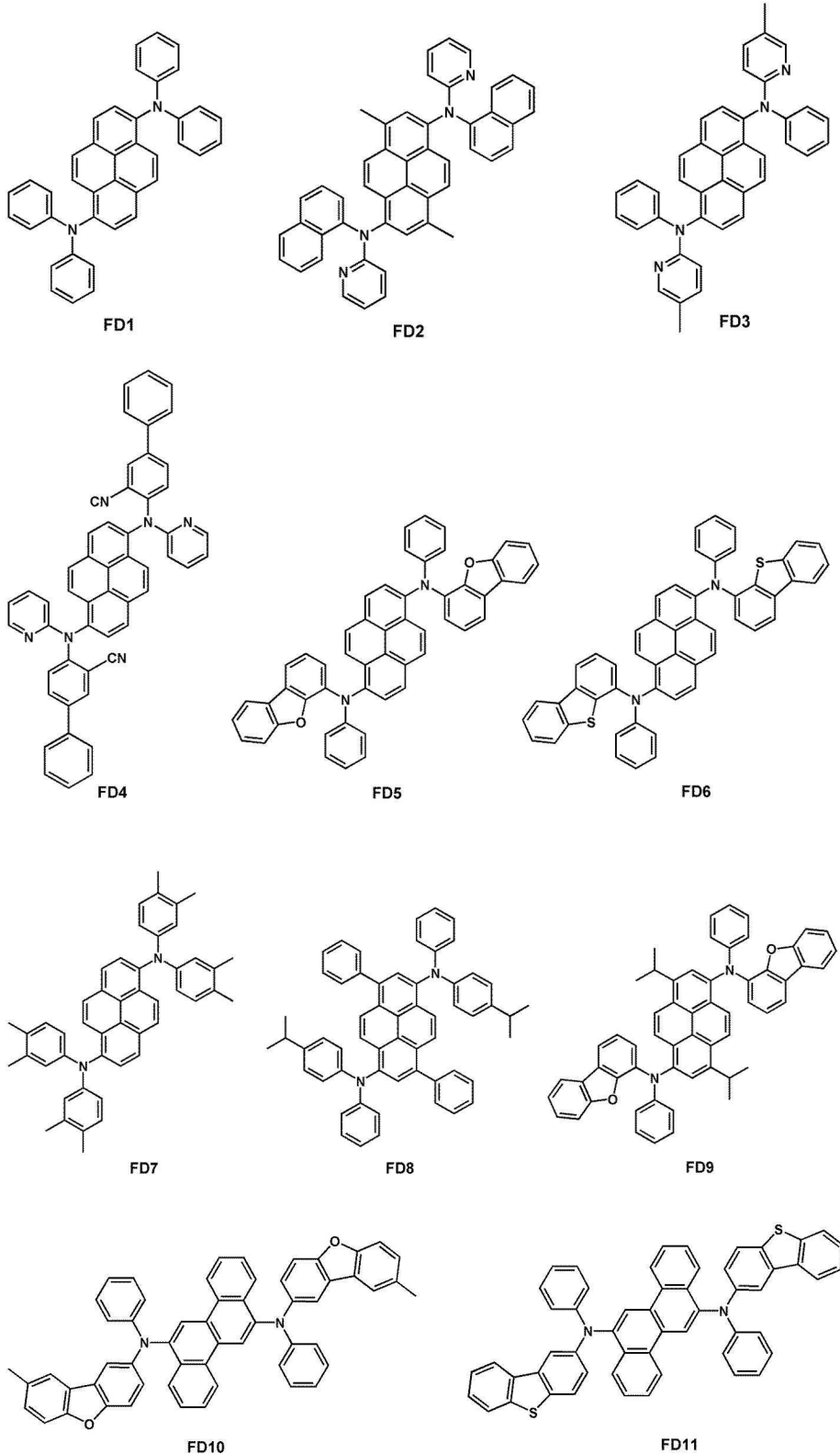
【0162】

さらに他の実施形態によれば、化学式501において、x_{d4}は、2であってもよいが、これに限定されるものではない。

【0163】

例えば、蛍光ドーパントは、下記化合物FD1～化合物FD22のうちから選択される。

【化51】



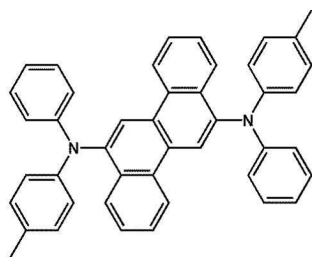
10

20

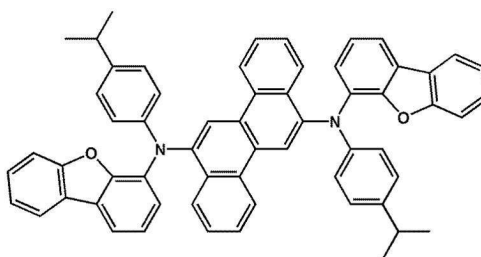
30

40

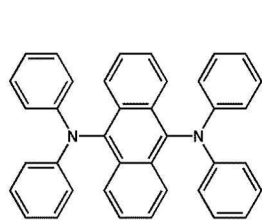
50



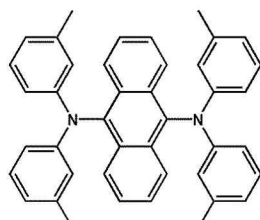
FD12



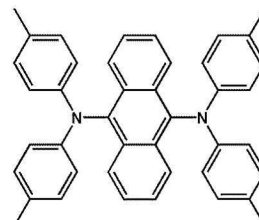
FD13



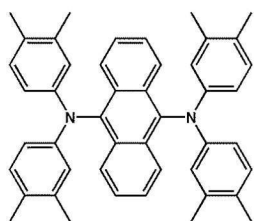
FD14



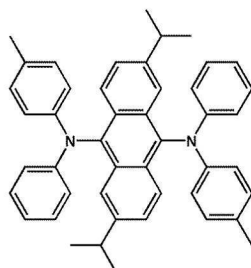
FD15



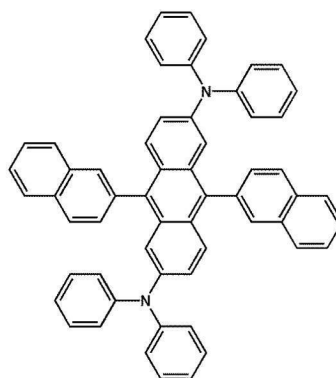
FD16



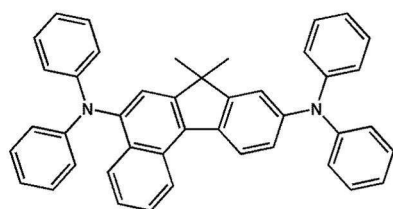
FD17



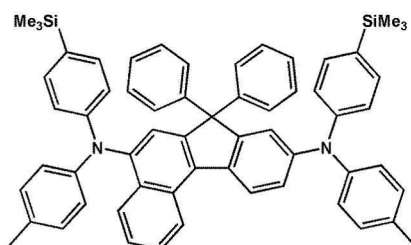
FD18



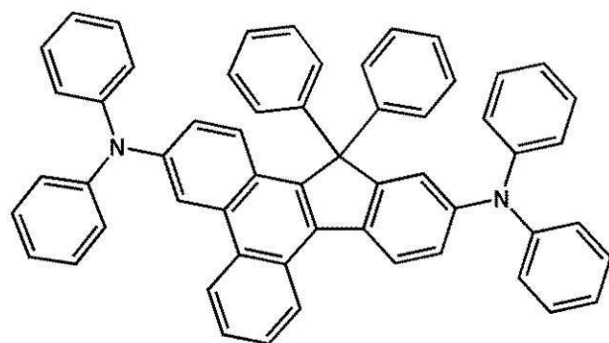
FD19



FD20



FD21



FD22

10

20

30

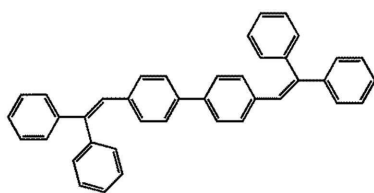
40

50

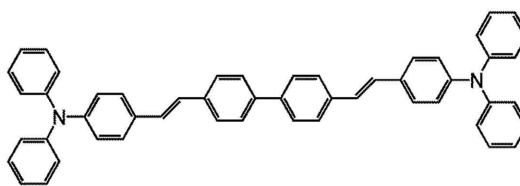
【0164】

また、蛍光ドーパントは、下記化合物のうちから選択されてもよいが、これらに限定されるものではない。

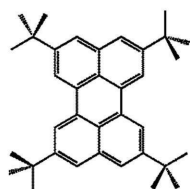
【化52】



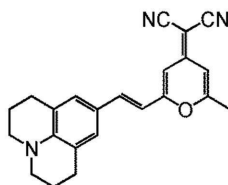
DPVBi



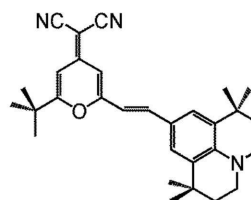
DPAVB



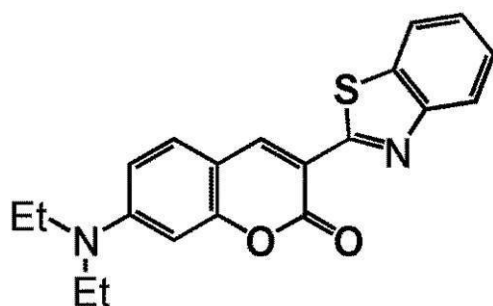
TBP



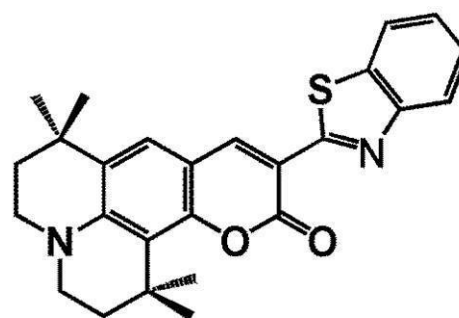
DCM



DCJT



Coumarin 6



C545T

【0165】

[電子輸送領域]

電子輸送領域は、i) 単一物質からなる単一層からなる単層構造、ii) 複数の互いに異なる物質からなる単一層からなる単層構造、またはiii) 複数の互いに異なる物質からなる複層を有する多層構造を有することができる。電子輸送領域は、バッファ層、正孔阻止層、電子調節層、電子輸送層 (ETL) 及び電子注入層のうちから選択された少なくとも1層を含んでもよいが、これらに限定されるものではない。

【0166】

例えば、電子輸送領域は、発光層から順に積層された電子輸送層／電子注入層、正孔阻止層／電子輸送層／電子注入層、電子調節層／電子輸送層／電子注入層またはバッファ層／電子輸送層／電子注入層などの構造を有することができるが、これらに限定されるものではない。

【0167】

電子輸送領域 (例えば、電子輸送領域において、バッファ層、正孔阻止層、電子調節層または電子輸送層) は、 π 電子欠乏性含窒素環を少なくとも一つ含んだ金属非含有化合物を含んでもよい。

【0168】

「 π 電子欠乏性含窒素環」は、環形成部分構造であり、少なくとも1つの $*-N=*$ 構造を有する $C_{1}-C_{60}$ ヘテロ環式基を意味する。例えば、「 π 電子欠乏性含窒素環」は、i) 少なくとも1つの $*-N=*$ 構造を有する5員～7員のヘテロ単環式基であるが、i

10

20

30

40

50

i) 少なくとも1つの $*-N=*'$ 構造を有する5員～7員のヘテロ単環式基のうち2以上が互いに縮合されているヘテロ多環式基であるか、あるいはiii) 少なくとも1つの $*-N=*'$ 構造を有する5員～7員のヘテロ単環式基のうち少なくとも一つと、少なくとも1つの C_5-C_{60} 炭素環式基とが互いに縮合されているヘテロ多環式基でもあってもよい。

【0169】

π 電子欠乏性含窒素環の具体例としては、イミダゾール、ピラゾール、チアゾール、イソチアゾール、オキサゾール、イソオキサゾール、ピリジン、ピラジン、ピリミジン、ピリダジン、インダゾール、プリン、キノリン、イソキノリン、ベンゾキノリン、フタラジン、ナフチリジン、キノキサリン、キナゾリン、シンノリン、フェナントリジン、アクリジン、フェナントロリン、フェナジン、ベンゾイミダゾール、イソベンゾチアゾール、ベンゾオキサゾール、イソベンゾオキサゾール、トリアゾール、テトラゾール、オキサジアゾール、トリアジン、チアジアゾール、イミダゾピリジン、イミダゾピリミジン、アザカルバゾールなどを挙げることができるが、これらに限定されるものではない。

【0170】

例えば、電子輸送領域は、下記化学式601で表わされる化合物を含んでもよい。

$[Ar_{601}]_{xe11} - [(L_{601})_{xe1} - R_{601}]_{xe21} \cdots$ (化学式601)

【0171】

化学式601において、

Ar_{601} は、置換もしくは無置換の C_5-C_{60} 炭素環式基、または置換もしくは無置換の C_1-C_{60} ヘテロ環式基であり、

$xe11$ は、1、2または3であり、

L_{601} は、置換もしくは無置換の C_3-C_{10} シクロアルキレン基、置換もしくは無置換の C_1-C_{10} ヘテロシクロアルキレン基、置換もしくは無置換の C_3-C_{10} シクロアルケニレン基、置換もしくは無置換の C_1-C_{10} ヘテロシクロアルケニレン基、置換もしくは無置換の C_6-C_{60} アリーレン基、置換もしくは無置換の C_1-C_{60} ヘテロアリーレン基、置換もしくは無置換の二価の非芳香族縮合多環基、及び置換もしくは無置換の二価の非芳香族ヘテロ縮合多環基のうちから選択され、

$xe1$ は、0～5の整数のうちから選択され、

R_{601} は、置換もしくは無置換の C_3-C_{10} シクロアルキル基、置換もしくは無置換の C_1-C_{10} ヘテロシクロアルキル基、置換もしくは無置換の C_3-C_{10} シクロアルケニル基、置換もしくは無置換の C_1-C_{10} ヘテロシクロアルケニル基、置換もしくは無置換の C_6-C_{60} アリール基、置換もしくは無置換の C_6-C_{60} アリールオキシ基、置換もしくは無置換の C_6-C_{60} アリールチオ基、置換もしくは無置換の C_1-C_{60} ヘテロアリール基、置換もしくは無置換の一価非芳香族縮合多環基、置換もしくは無置換の一価非芳香族ヘテロ縮合多環基、 $-Si(Q_{601})(Q_{602})(Q_{603})$ 、 $-C(=O)(Q_{601})$ 、 $-S(=O)_2(Q_{601})$ 、及び $-P(=O)(Q_{601})(Q_{602})$ のうちから選択され、

前記 $Q_{601} \sim Q_{603}$ は、互いに独立して、 C_1-C_{10} アルキル基、 C_1-C_{10} アルコキシ基、フェニル基、ビフェニル基、ターフェニル基またはナフチル基であり、

$xe21$ は、1～5の整数のうちから選択される。

【0172】

一実施形態によれば、 $xe11$ 個の Ar_{601} 、及び $xe21$ 個の R_{601} のうち少なくとも一つは、前述のような π 電子欠乏性含窒素環を含んでもよい。

【0173】

一実施形態によれば、化学式601において環 Ar_{601} は、

ベンゼン、ナフタレン、フルオレン、スピロ-ビフルオレン、ベンゾフルオレン、ジベンゾフルオレン、フェナレン、フェナントレン、アントラセン、フルオランテン、トリフェニレン、ピレン、クリセン、ナフタセン、ピセン、ペリレン、ペンタフェン、インデノアントラセン、ジベンゾフラン、ジベンゾチオフエン、カルバゾール、イミダゾール、ピ

10

20

30

40

50

ラゾール、チアゾール、イソチアゾール、オキサゾール、イソオキサゾール、ピリジン、ピラジン、ピリミジン、ピリダジン、インダゾール、プリン、キノリン、イソキノリン、ベンゾキノリン、フタラジン、ナフチリジン、キノキサリン、キナゾリン、シンノリン、フェナントリジン、アクリジン、フェナントロリン、フェナジン、ベンゾイミダゾール、イソベンゾチアゾール、ベンゾオキサゾール、イソベンゾオキサゾール、トリアゾール、テトラゾール、オキサジアゾール、トリアジン、チアジアゾール、イミダゾピリジン、イミダゾピリミジン及びアザカルバゾール；並びに

重水素原子、フッ素原子、塩素原子、臭素原子、ヨウ素原子、ヒドロキシル基、シアノ基、ニトロ基、アミジノ基、ヒドラジノ基、ヒドラゾノ基、 C_1-C_{20} アルキル基、 C_1-C_{20} アルコキシ基、フェニル基、ビフェニル基、ターフェニル基、ナフチル基、 $-Si(Q_{31})(Q_{32})(Q_{33})$ 、 $-S(=O)_2(Q_{31})$ 及び $-P(=O)(Q_{31})(Q_{32})$ のうちから選択された少なくとも一つで置換された、ベンゼン、ナフタレン、フルオレン、スピロービフルオレン、ベンゾフルオレン、ジベンゾフルオレン、フェナレン、フェナントレン、アントラセン、フルオランテン、トリフェニレン、ピレン、クリセン、ナフタセン、ピセン、ペリレン、ペンタフェン、インデノアントラセン、ジベンゾフラン、ジベンゾチオフェン、カルバゾール、イミダゾール、ピラゾール、チアゾール、イソチアゾール、オキサゾール、イソオキサゾール、ピリジン、ピラジン、ピリミジン、ピリダジン、インダゾール、プリン、キノリン、イソキノリン、ベンゾキノリン、フタラジン、ナフチリジン、キノキサリン、キナゾリン、シンノリン、フェナントリジン、アクリジン、フェナントロリン、フェナジン、ベンゾイミダゾール、イソベンゾチアゾール、ベンゾオキサゾール、イソベンゾオキサゾール、トリアゾール、テトラゾール、オキサジアゾール、トリアジン、チアジアゾール、イミダゾピリジン、イミダゾピリミジン及びアザカルバゾール基；のうちから選択され、

$Q_{31} \sim Q_{33}$ は、互いに独立して、 C_1-C_{10} アルキル基、 C_1-C_{10} アルコキシ基、フェニル基、ビフェニル基、ターフェニル基及びナフチル基のうちから選択される。

【0174】

化学式601において、 x_{e11} が2以上である場合、2以上の Ar_{601} は、単結合を介しても互いに結合されてもよい。

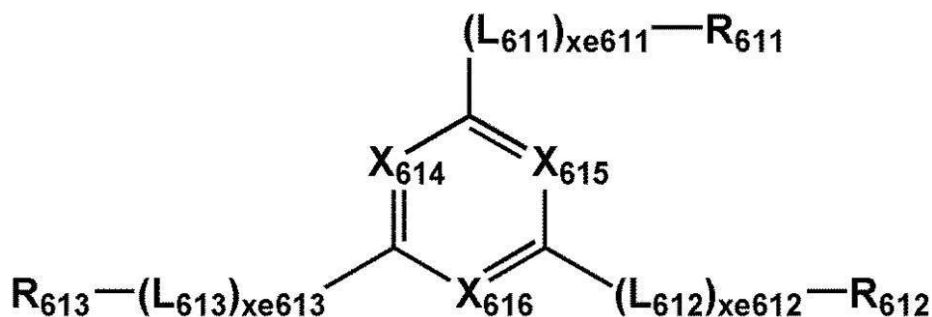
【0175】

他の実施形態によれば、化学式601において Ar_{601} は、アントラセン基である。

【0176】

さらに他の実施形態によれば、化学式601で表わされる化合物は、下記化学式601-1で表わされてもよい。

【化53】



・・・（化学式601-1）

【0177】

化学式601-1において、

X_{614} は、NまたはC(R_{614})であり、 X_{615} は、NまたはC(R_{615})であり、 X_{616} は、NまたはC(R_{616})であり、 $X_{614} \sim X_{616}$ のうち少なくとも一つは、Nであり、

$L_{611} \sim L_{613}$ は、互いに独立して、前述の L_{601} と同様であり、

$x_{611} \sim x_{613}$ は、互いに独立して、前述の x_{e1} と同様であり、

$R_{611} \sim R_{613}$ は、互いに独立して、前述の R_{601} と同様であり、

$R_{614} \sim R_{616}$ は、互いに独立して、水素原子、重水素原子、フッ素原子、塩素原子、臭素原子、ヨウ素原子、ヒドロキシル基、シアノ基、ニトロ基、アミジノ基、ヒドラジノ基、ヒドラゾノ基、 C_1-C_{20} アルキル基、 C_1-C_{20} アルコキシ基、フェニル基、ビフェニル基、ターフェニル基及びナフチル基のうちから選択される。

【0178】

一実施形態によれば、化学式601及び化学式601-1において、 L_{601} 、及び $L_{611} \sim L_{613}$ は、互いに独立して、

フェニレン基、ナフチレン基、フルオレニレン基、スピロービフルオレニレン基、ベンゾフルオレニレン基、ジベンゾフルオレニレン基、フェナントレニレン基、アントラセニレン基、フルオランテニレン基、トリフェニレニレン基、ピレニレン基、クリセニレン基、ペリレニレン基、ペンタフェニレン基、ヘキサセニレン基、ペンタセニレン基、チオフェニレン基、フラニレン基、カルバゾリレン基、インドリレン基、イソインドリレン基、ベンゾフラニレン基、ベンゾチオフェニレン基、ジベンゾフラニレン基、ジベンゾチオフェニレン基、ベンゾカルバゾリレン基、ジベンゾカルバゾリレン基、ジベンゾシロリレン基、ピリジニレン基、イミダゾリレン基、ピラゾリレン基、チアゾリレン基、イソチアゾリレン基、オキサゾリレン基、イソキサゾリレン基、チアジアゾリレン基、オキサジアゾリレン基、ピラジニレン基、ピリミジニレン基、ピリダジニレン基、トリアジニレン基、キノリニレン基、イソキノリニレン基、ベンゾキノリニレン基、フタラジニレン基、ナフチリジニレン基、キノキサリニレン基、キナゾリニレン基、シンノリニレン基、フェナントリジニレン基、アクリジニレン基、フェナントロリニレン基、フェナジニレン基、ベンゾイミダゾリレン基、イソベンゾチアゾリレン基、ベンゾオキサゾリレン基、イソベンゾオキサゾリレン基、トリアゾリレン基、テトラゾリレン基、イミダゾピリジニレン基、イミダゾピリミジニレン基及びアザカルバゾリレン基；並びに

重水素原子、フッ素原子、塩素原子、臭素原子、ヨウ素原子、ヒドロキシル基、シアノ基、ニトロ基、アミジノ基、ヒドラジノ基、ヒドラゾノ基、 C_1-C_{20} アルキル基、 C_1-C_{20} アルコキシ基、フェニル基、ビフェニル基、ターフェニル基、ナフチル基、フルオレニル基、スピロービフルオレニル基、ベンゾフルオレニル基、ジベンゾフルオレニル基、フェナントレニル基、アントラセニル基、フルオランテニル基、トリフェニレニル基、ピレニル基、クリセニル基、ペリレニル基、ペンタフェニル基、ヘキサセニル基、ペンタセニル基、チオフェニル基、フラニル基、カルバゾリル基、インドリル基、イソインドリル基、ベンゾフラニル基、ベンゾチオフェニル基、ジベンゾフラニル基、ジベンゾチオフェニル基、ベンゾカルバゾリル基、ジベンゾカルバゾリル基、ジベンゾシロリル基、ピリジニル基、イミダゾリル基、ピラゾリル基、チアゾリル基、イソチアゾリル基、オキサゾリル基、イソオキサゾリル基、チアジアゾリル基、オキサジアゾリル基、ピラジニル基、ピリミジニル基、ピリダジニル基、トリアジニル基、キノリニル基、イソキノリニル基、ベンゾキノリニル基、フタラジニル基、ナフチリジニル基、キノキサリニル基、キナゾリニル基、シンノリニル基、フェナントリジニル基、アクリジニル基、フェナントロリニル基、フェナジニル基、ベンゾイミダゾリル基、イソベンゾチアゾリル基、ベンゾオキサゾリル基、イソベンゾオキサゾリル基、トリアゾリル基、テトラゾリル基、イミダゾピリジニル基、イミダゾピリミジニル基及びアザカルバゾリル基のうちから選択された少なくとも一つで置換された、フェニレン基、ナフチレン基、フルオレニレン基、スピロービフルオレニレン基、ベンゾフルオレニレン基、ジベンゾフルオレニレン基、フェナントレニレン基、アントラセニレン基、フルオランテニレン基、トリフェニレニレン基、ピレニレン基、クリセニレン基、ペリレニレン基、ペンタフェニレン基、ヘキサセニレン基、ペンタセニレン基、チオフェニレン基、フラニレン基、カルバゾリレン基、インドリレン基、イソインドリレン基、ベンゾフラニレン基、ベンゾチオフェニレン基、ジベンゾフラニレン基、ジベンゾチオフェニレン基、ベンゾカルバゾリレン基、ジベンゾカルバゾリレン基、ジベンゾシロリレン基、ピリジニレン基、イミダゾリレン基、ピラゾリレン基、チアゾ

10

20

30

40

50

リレン基、イソチアゾリレン基、オキサゾリレン基、イソキサゾリレン基、チアジアゾリレン基、オキサジアゾリレン基、ピラジニレン基、ピリミジニレン基、ピリダジニレン基、トリアジニレン基、キノリニレン基、イソキノリニレン基、ベンゾキノリニレン基、フタラジニレン基、ナフチリジニレン基、キノキサリニレン基、キナゾリニレン基、シンノリニレン基、フェナントリジニレン基、アクリジニレン基、フェナントロリニレン基、フェナジニレン基、ベンゾイミダゾリレン基、イソベンゾチアゾリレン基、ベンゾオキサゾリレン基、イソベンゾオキサゾリレン基、トリアゾリレン基、テトラゾリレン基、イミダゾピリジニレン基、イミダゾピリミジニレン基及びアザカルバゾリレン基；のうちから選択されるが、これらに限定されるものではない。

【0179】

他の実施形態によれば、化学式601及び化学式601-1において、 $x \leq 1$ 及び $x \leq 611 \sim x \leq 613$ は、互いに独立して、0、1または2である。

【0180】

さらに他の実施形態によれば、化学式601及び化学式601-1において、 R_{601} 、及び $R_{611} \sim R_{613}$ は、互いに独立して、

フェニル基、ビフェニル基、ターフェニル基、ナフチル基、フルオレニル基、スピロービフルオレニル基、ベンゾフルオレニル基、ジベンゾフルオレニル基、フェナントレニル基、アントラセニル基、フルオランテニル基、トリフェニレニル基、ピレニル基、クリセニル基、ペリレニル基、ペンタフェニル基、ヘキサセニル基、ペンタセニル基、チオフェニル基、フラニル基、カルバゾリル基、インドリル基、イソインドリル基、ベンゾフラニル基、ベンゾチオフェニル基、ジベンゾフラニル基、ジベンゾチオフェニル基、ベンゾカルバゾリル基、ジベンゾカルバゾリル基、ジベンゾシロリル基、ピリジニル基、イミダゾリル基、ピラゾリル基、チアゾリル基、イソチアゾリル基、オキサゾリル基、イソオキサゾリル基、チアジアゾリル基、オキサジアゾリル基、ピラジニル基、ピリミジニル基、ピリダジニル基、トリアジニル基、キノリニル基、イソキノリニル基、ベンゾキノリニル基、フタラジニル基、ナフチリジニル基、キノキサリニル基、キナゾリニル基、シンノリニル基、フェナントリジニル基、アクリジニル基、フェナントロリニル基、フェナジニル基、ベンゾイミダゾリル基、イソベンゾチアゾリル基、ベンゾオキサゾリル基、イソベンゾオキサゾリル基、トリアゾリル基、テトラゾリル基、イミダゾピリジニル基、イミダゾピリミジニル基及びアザカルバゾリル基；

重水素原子、フッ素原子、塩素原子、臭素原子、ヨウ素原子、ヒドロキシ基、シアノ基、ニトロ基、アミジノ基、ヒドラジノ基、ヒドラゾノ基、 $C_1 \sim C_{20}$ アルキル基、 $C_1 \sim C_{20}$ アルコキシ基、フェニル基、ビフェニル基、ターフェニル基、ナフチル基、フルオレニル基、スピロービフルオレニル基、ベンゾフルオレニル基、ジベンゾフルオレニル基、フェナントレニル基、アントラセニル基、フルオランテニル基、トリフェニレニル基、ピレニル基、クリセニル基、ペリレニル基、ペンタフェニル基、ヘキサセニル基、ペンタセニル基、チオフェニル基、フラニル基、カルバゾリル基、インドリル基、イソインドリル基、ベンゾフラニル基、ベンゾチオフェニル基、ジベンゾフラニル基、ジベンゾチオフェニル基、ベンゾカルバゾリル基、ジベンゾカルバゾリル基、ジベンゾシロリル基、ピリジニル基、イミダゾリル基、ピラゾリル基、チアゾリル基、イソチアゾリル基、オキサゾリル基、イソオキサゾリル基、チアジアゾリル基、オキサジアゾリル基、ピラジニル基、ピリミジニル基、ピリダジニル基、トリアジニル基、キノリニル基、イソキノリニル基、ベンゾキノリニル基、フタラジニル基、ナフチリジニル基、キノキサリニル基、キナゾリニル基、シンノリニル基、フェナントリジニル基、アクリジニル基、フェナントロリニル基、フェナジニル基、ベンゾイミダゾリル基、イソベンゾチアゾリル基、ベンゾオキサゾリル基、イソベンゾオキサゾリル基、トリアゾリル基、テトラゾリル基、イミダゾピリジニル基、イミダゾピリミジニル基及びアザカルバゾリル基のうちから選択された少なくとも一つで置換された、フェニル基、ビフェニル基、ターフェニル基、ナフチル基、フルオレニル基、スピロービフルオレニル基、ベンゾフルオレニル基、ジベンゾフルオレニル基、フェナントレニル基、アントラセニル基、フルオランテニル基、トリフェニレニル基

10

20

30

40

50

、ピレニル基、クリセニル基、ペリレニル基、ペンタフェニル基、ヘキサセニル基、ペンタセニル基、チオフェニル基、フラニル基、カルバゾリル基、インドリル基、イソインドリル基、ベンゾフラニル基、ベンゾチオフェニル基、ジベンゾフラニル基、ジベンゾチオフェニル基、ベンゾカルバゾリル基、ジベンゾカルバゾリル基、ジベンゾシロリル基、ピリジニル基、イミダゾリル基、ピラゾリル基、チアゾリル基、イソチアゾリル基、オキサゾリル基、イソオキサゾリル基、チアジアゾリル基、オキサジアゾリル基、ピラジニル基、ピリミジニル基、ピリダジニル基、トリアジニル基、キノリニル基、イソキノリニル基、ベンゾキノリニル基、フタラジニル基、ナフチリジニル基、キノキサリニル基、キナゾリニル基、シンノリニル基、フェナントリジニル基、アクリジニル基、フェナントロリニル基、フェナジニル基、ベンゾイミダゾリル基、イソベンゾチアゾリル基、ベンゾオキサゾリル基、イソベンゾオキサゾリル基、トリアゾリル基、テトラゾリル基、イミダゾピリジニル基、イミダゾピリミジニル基及びアザカルバゾリル基；並びに

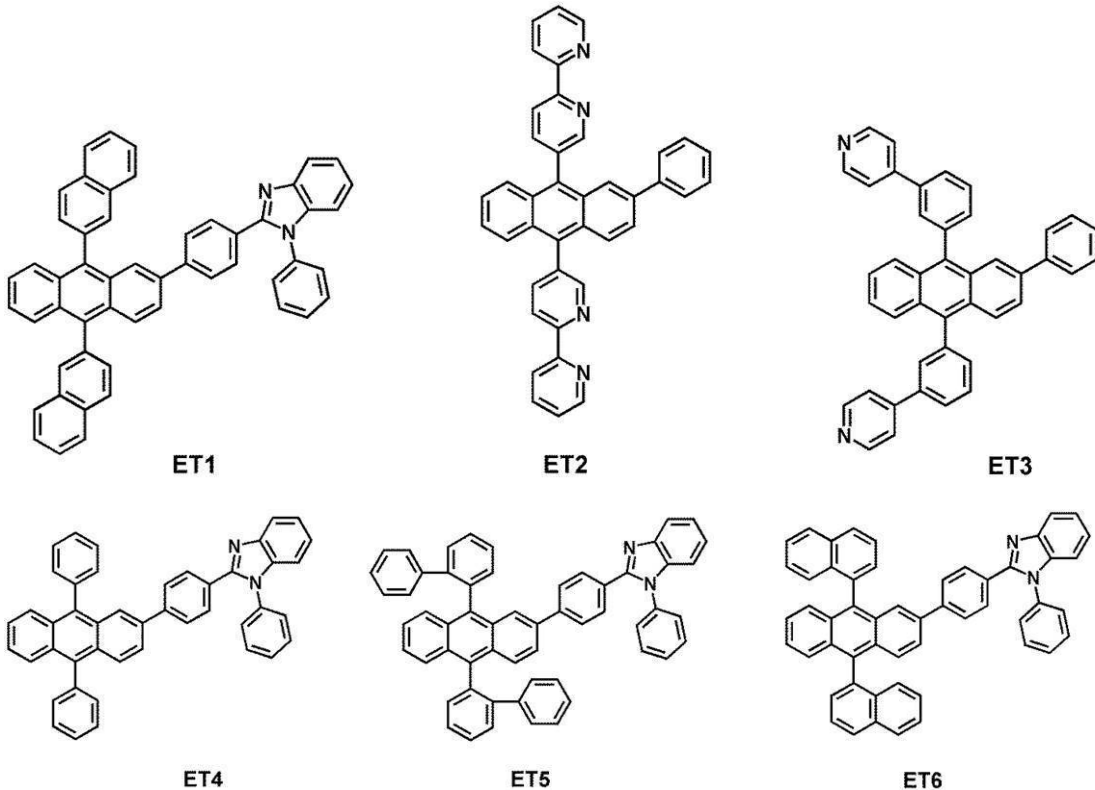
－S(=O)₂(Q601)及び－P(=O)(Q601)(Q602)；のうちから選択され、

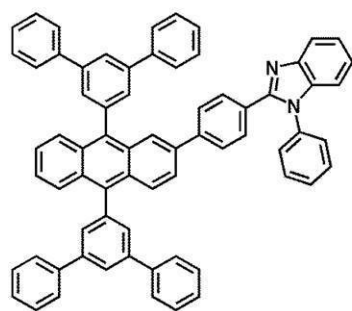
Q601及びQ602に係わる説明は、本明細書に記載されたところを参照する。

【0181】

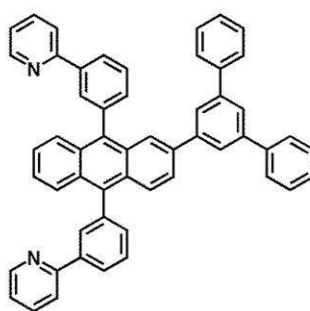
電子輸送領域は、下記化合物ET1～化合物ET36のうちから選択された少なくとも1つの化合物を含んでもよいが、これらに限定されるものではない。

【化54】

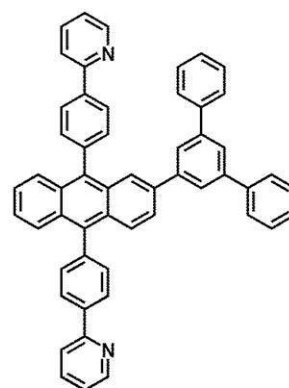




ET7

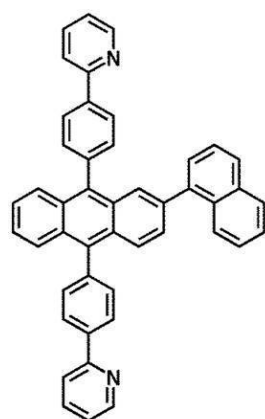


ET8

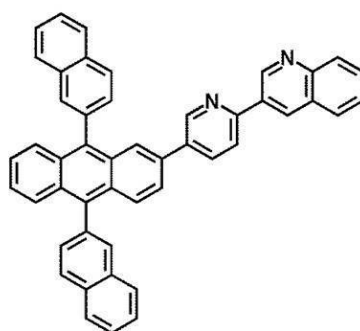


ET9

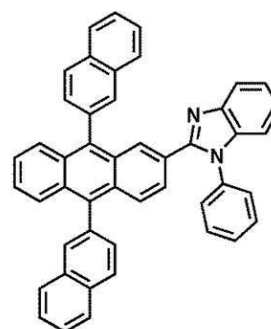
10



ET10

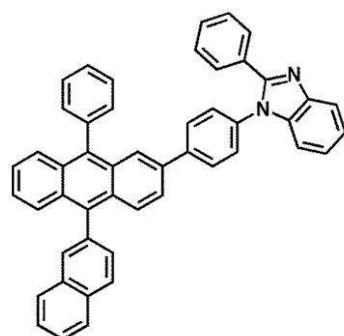


ET11

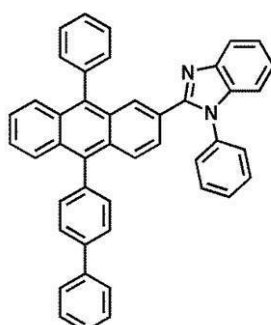


ET12

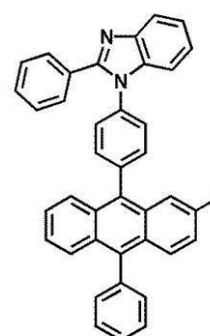
20



ET13



ET14

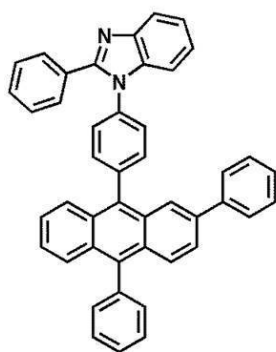


ET15

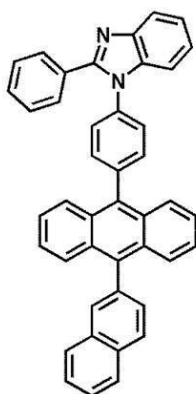
30

40

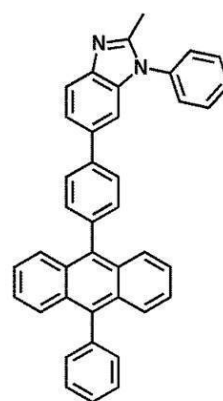
50



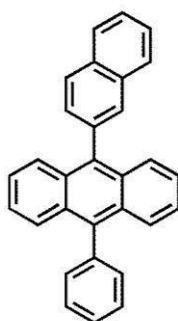
ET16



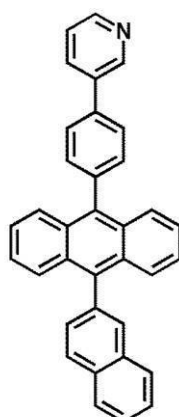
ET17



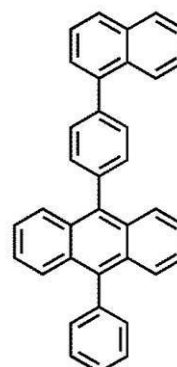
ET18



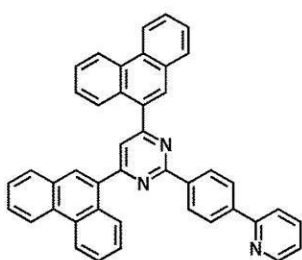
ET19



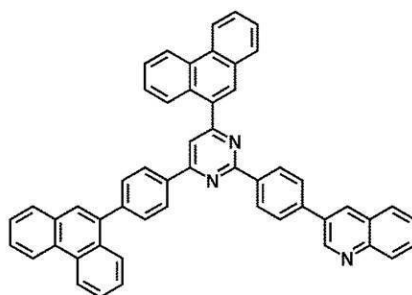
ET20



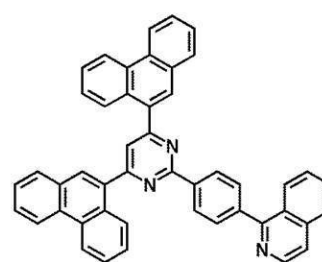
ET21



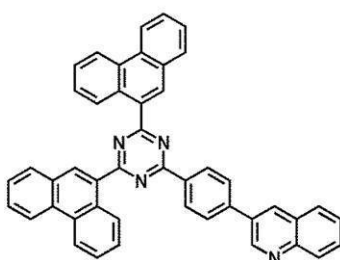
ET22



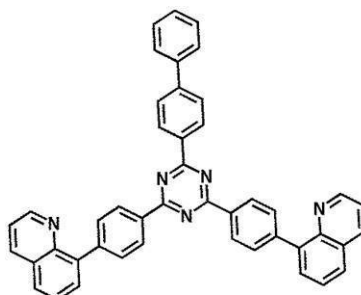
ET23



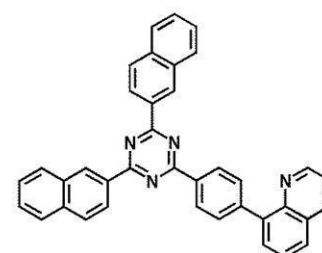
ET24



ET25



ET26



ET27

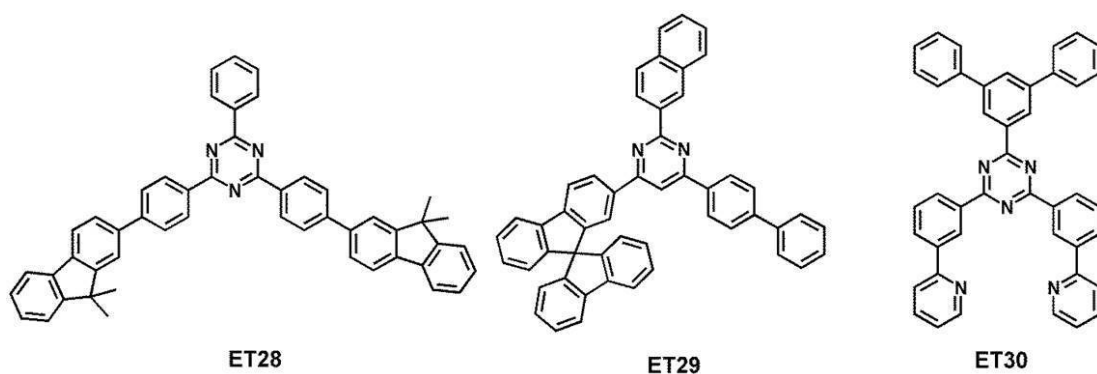
10

20

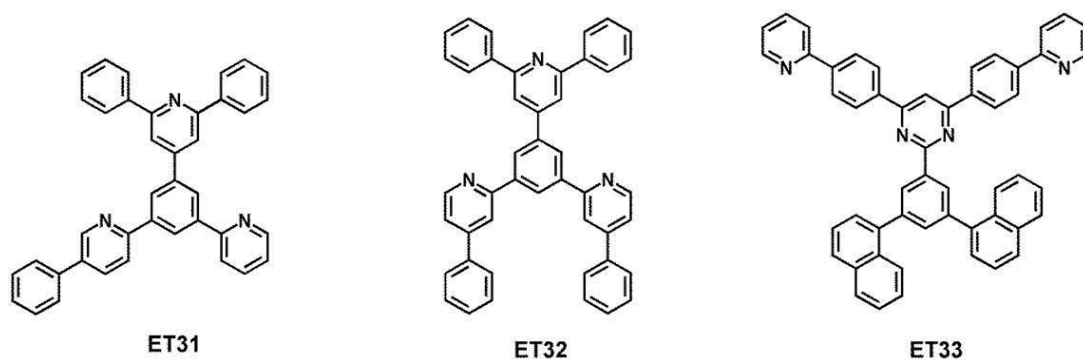
30

40

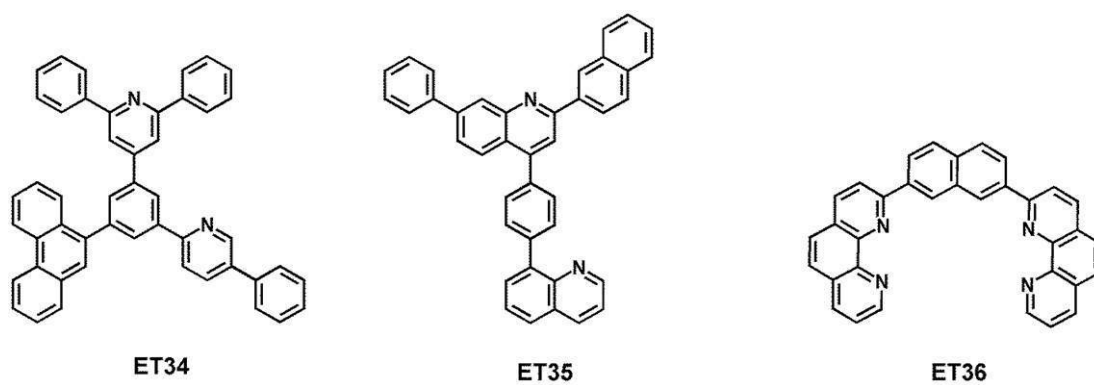
50



10



20



30

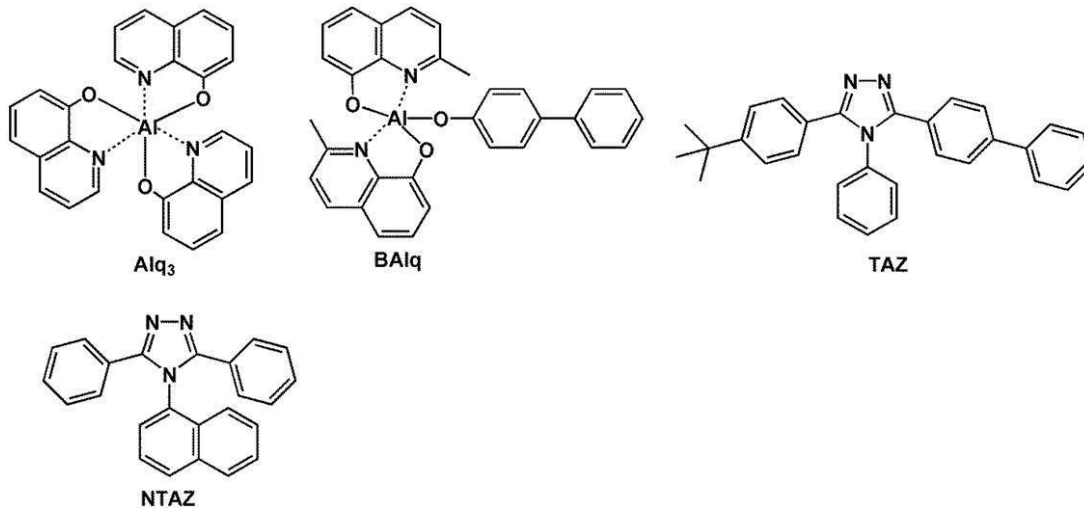
【0182】

また、電子輸送領域は、2,9-ジメチル-4,7-ジフェニル-1,10-フェナントロリン (BCP)、4,7-ジフェニル-1,10-フェナントロリン (Bphen)、Alq3、BALq、3-(ビフェニル-4-イル)-5-(4-tert-ブチルフェニル)-4-フェニル-4H-1,2,4-トリアゾール (TAZ) 及びNTAZのうちから選択された少なくとも1つの化合物を含んでもよい。

40

50

【化 5 5】



10

【0183】

バッファ層、正孔阻止層または電子調節層の厚みは、互いに独立して、約2 nm～約100 nm、例えば、約3 nm～約30 nmである。バッファ層、正孔阻止層または電子調節層の厚みが前述のような範囲を満たす場合、実質的な駆動電圧の上昇なしに、優れた正孔阻止特性または電子調節特性を得ることができる。

20

【0184】

記電子輸送層の厚みは、約10 nm～約100 nm、例えば、約15 nm～約50 nmである。電子輸送層の厚みが前述のような範囲を満たす場合、実質的な駆動電圧の上昇なしに、優れた電子輸送特性を得ることができる。

【0185】

電子輸送領域（例えば、電子輸送領域における電子輸送層）は、前述のような物質以外に、金属含有物質をさらに含んでもよい。

【0186】

金属含有物質は、アルカリ金属錯体及びアルカリ土類金属錯体のうちから選択された少なくとも一つを含んでもよい。アルカリ金属錯体の金属イオンは、Liイオン、Naイオン、Kイオン、Rbイオン及びCsイオンのうちから選択され、アルカリ土類金属錯体の金属イオンは、Beイオン、Mgイオン、Caイオン、Srイオン及びBaイオンのうちから選択される。アルカリ金属錯体及びアルカリ土類金属錯体の金属イオンに配位されたリガンドは、互いに独立して、ヒドロキシキノリン、ヒドロキシイソキノリン、ヒドロキシベンゾキノリン、ヒドロシアクリジン、ヒドロキシフェナントリジン、ヒドロキシフェニルオキサゾール、ヒドロキシフェニルチアゾール、ヒドロキシフェニルオキサジアゾール、ヒドロキシフェニルチアジアゾール、ヒドロキシフェニルピリジン、ヒドロキシフェニルベンゾイミダゾール、ヒドロキシフェニルベンゾチアゾール、ビピリジン、フェナントロリン及びシクロペンタジエンのうちから選択されるが、これらに限定されるものではない。

30

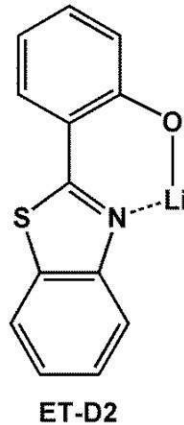
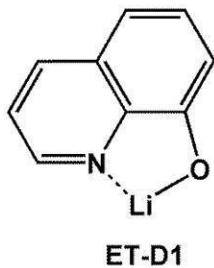
【0187】

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

40

50

【化 5 6】



【 0 1 8 8 】

電子輸送領域は、第 2 電極 190 からの電子注入を容易にする電子注入層を含んでもよい。電子注入層は、第 2 電極 190 と直接接触してもよい。

【 0 1 8 9 】

電子注入層は、i) 単一物質からなる単一層からなる単層構造、ii) 複数の互いに異なる物質からなる単一層からなる単層構造、あるいは iii) 複数の互いに異なる物質からなる複層を有する多層構造を有することができる。

【 0 1 9 0 】

電子注入層は、アルカリ金属、アルカリ土類金属、希土類金属、アルカリ金属化合物、アルカリ土類金属化合物、希土類金属化合物、アルカリ金属錯体、アルカリ土類金属錯体、希土類金属錯体、またはそれらのうち任意の組み合わせを含んでもよい。

【 0 1 9 1 】

アルカリ金属は、Li、Na、K、Rb 及び Cs のうちから選択される。一実施形態によれば、アルカリ金属は Li、Na または Cs である。他の実施形態によれば、アルカリ金属は Li または Cs であるが、これらに限定されるものではない。

【 0 1 9 2 】

アルカリ土類金属は、Mg、Ca、Sr、及び Ba のうちから選択される。

【 0 1 9 3 】

希土類金属は、Sc、Y、Ce、Tb、Yb 及び Gd のうちから選択される。

【 0 1 9 4 】

アルカリ金属化合物、アルカリ土類金属化合物及び希土類金属化合物は、アルカリ金属、アルカリ土類金属及び希土類金属の酸化物及びハロゲン化物（例えば、フッ化物、塩化物、臭化物、ヨウ化物など）のうちから選択される。

【 0 1 9 5 】

アルカリ金属化合物は、 Li_2O 、 Cs_2O 、 K_2O のようなアルカリ金属酸化物、及び LiF 、 NaF 、 CsF 、 KF 、 LiI 、 NaI 、 CsI 、 KI のようなアルカリ金属ハロゲン化物のうちから選択される。一実施形態によれば、アルカリ金属化合物は、 LiF 、 Li_2O 、 NaF 、 LiI 、 NaI 、 CsI 、 KI のうちから選択されるが、これらに限定されるものではない。

【 0 1 9 6 】

アルカリ土類金属化合物は、 BaO 、 SrO 、 CaO 、 $\text{Ba}_x\text{Sr}_{1-x}\text{O}$ ($0 < x < 1$)、 $\text{Ba}_x\text{Ca}_{1-x}\text{O}$ ($0 < x < 1$) のようなアルカリ土類金属化合物のうちから選択される。一実施形態によれば、アルカリ土類金属化合物は、 BaO 、 SrO 及び CaO のうちから選択されるが、これらに限定されるものではない。

【 0 1 9 7 】

希土類金属化合物は、 YbF_3 、 ScF_3 、 ScO_3 、 Y_2O_3 、 Ce_2O_3 、 GdF_3 及び TbF_3 のうちから選択される。一実施形態によれば、希土類金属化合物は、 YbF_3

、 ScF_3 、 TbF_3 、 YbI_3 、 ScI_3 、 TbI_3 のうちから選択されるが、これらに限定されるものではない。

【0198】

アルカリ金属錯体、アルカリ土類金属錯体及び希土類金属錯体は、前述のようなアルカリ金属、アルカリ土類金属及び希土類金属のイオンを含み、アルカリ金属錯体、アルカリ土類金属錯体及び希土類金属錯体の金属イオンに配位されたりガンドは、互いに独立して、ヒドロキシキノリン、ヒドロキシイソキノリン、ヒドロキシベンゾキノリン、ヒドロキシシアクリジン、ヒドロキシフェナントリジン、ヒドロキシフェニルオキサゾール、ヒドロキシフェニルチアゾール、ヒドロキシフェニルオキサジアゾール、ヒドロキシフェニルチアジアゾール、ヒドロキシフェニルピリジン、ヒドロキシフェニルベンゾイミダゾール、ヒドロキシフェニルベンゾチアゾール、ビピリジン、フェナントロリン及びシクロペンタジエンのうちから選択されるが、これらに限定されるものではない。

【0199】

電子注入層は、前述のようなアルカリ金属、アルカリ土類金属、希土類金属、アルカリ金属化合物、アルカリ土類金属化合物、希土類金属化合物、アルカリ金属錯体、アルカリ土類金属錯体、希土類金属錯体、またはそれらのうち任意の組み合わせだけからなってもよく、あるいは前記有機物をさらに含んでもよい。電子注入層が有機物をさらに含む場合、アルカリ金属、アルカリ土類金属、希土類金属、アルカリ金属化合物、アルカリ土類金属化合物、希土類金属化合物、アルカリ金属錯体、アルカリ土類金属錯体、希土類金属錯体、またはそれらのうち任意の組み合わせは、前記有機物からなるマトリックスに均一又は不均一に分散されている。

【0200】

電子注入層の厚みは、約0.1nm～約10nm、約0.3nm～約9nmである。電子注入層の厚みが前述のような範囲を満たす場合、実質的な駆動電圧の上昇なしに、優れた電子注入特性を得ることができる。

【0201】

[第2電極190]

前述のような有機層150上部には、第2電極190が配置されている。第2電極190は、電子注入電極であるカソード(cathode)であるが、このとき、第2電極190用の材料としては、低い仕事関数を有する金属、合金、電気伝導性化合物及びそれらの組み合わせを使用することができる。

【0202】

第2電極190は、リチウム(Li)、銀(Ag)、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)、ITO及びIZOのうちから選択された少なくとも一つを含んでもよいが、これらに限定されるものではない。第2電極190は、透過型電極、半透過型電極または反射型電極である。

【0203】

第2電極190は、単一層である単層構造、または複層を有する多層構造を有することができる。

【0204】

[他の有機発光素子]

図2の有機発光素子20は、第1キャッピング層210、第1電極110、有機層150及び第2電極190が順に積層された構造を有し、図3の有機発光素子30は、第1電極110、有機層150、第2電極190及び第2キャッピング層220が順に積層された構造を有し、図4の有機発光素子40は、第1キャッピング層210、第1電極110、有機層150、第2電極190及び第2キャッピング層220が順に積層された構造を有する。

【0205】

図2～図4に示した有機発光素子20, 30, 40において、第1電極110、有機層

10

20

30

40

50

150及び第2電極190に係わる説明は、図1に示した有機発光素子10に係わる説明を参照する。

【0206】

有機発光素子20, 40の有機層150における発光層で生成された光は、半透過型電極または透過型電極である第1電極110及び第1キャッピング層210を経て、外部に取り出され、有機発光素子30, 40の有機層150における発光層で生成された光は、半透過型電極または透過型電極である第2電極190及び第2キャッピング層220を経て、外部に取り出される。

【0207】

第1キャッピング層210及び第2キャッピング層220は、補強干渉の原理により、外部発光効率を向上させる役割を果たす。

10

【0208】

第1キャッピング層210及び第2キャッピング層220は、互いに独立して、有機物からなる有機キャッピング層、無機物からなる無機キャッピング層、または有機物及び無機物を含んだ複合キャッピング層である。

【0209】

第1キャッピング層210及び第2キャッピング層220のうち少なくとも1層は、互いに独立して、炭素環式化合物、ヘテロ環式化合物、アミン化合物、ポルフィン誘導体 (porphine derivatives)、フタロシアニン誘導体 (phthalocyanine derivatives)、ナフタロシアニン誘導体 (naphthalocyanine derivatives)、アルカリ金属錯体及びアルカリ土類金属錯体のうちから選択された少なくとも1つの物質を含んでもよい。炭素環式化合物、ヘテロ環式化合物及びアミン化合物は、選択的に、O、N、S、Se、Si、F、Cl、Br及びIのうちから選択された少なくとも1つの元素を含んだ置換基で置換される。一実施形態によれば、第1キャッピング層210及び第2キャッピング層220のうち少なくとも1層は、互いに独立して、アミン化合物を含んでもよい。

20

【0210】

他の実施形態によれば、第1キャッピング層210及び第2キャッピング層220のうち少なくとも1層は、互いに独立して、化学式201で表わされる化合物、または化学式202で表わされる化合物を含んでもよい。

【0211】

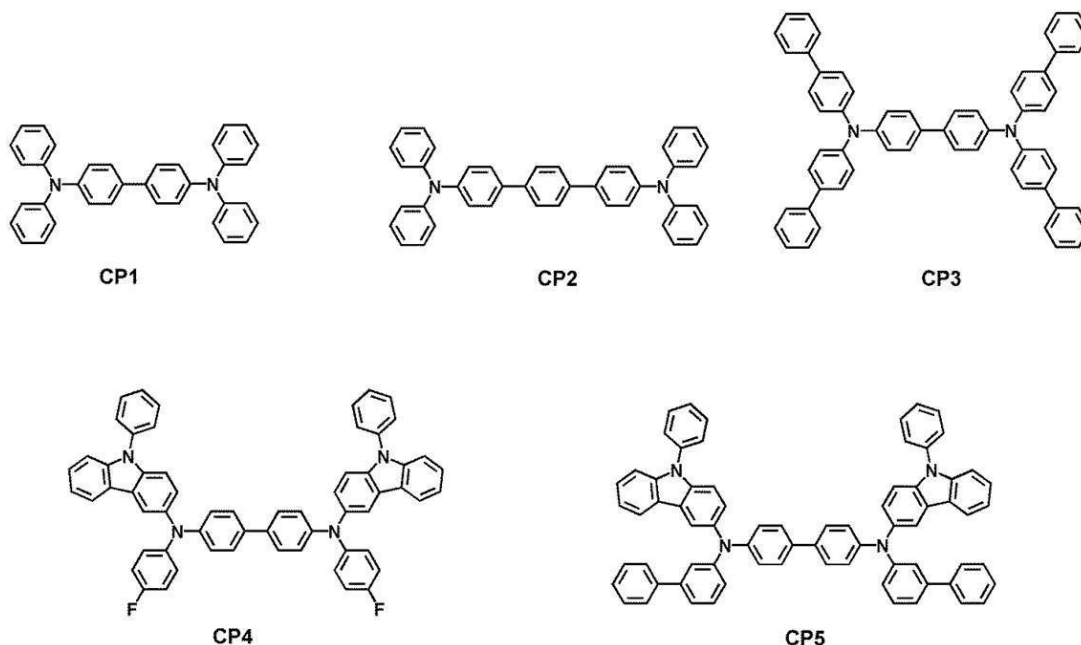
さらに他の実施形態によれば、第1キャッピング層210及び第2キャッピング層220のうち少なくとも1層は、互いに独立して、前述の化合物HT28～化合物HT33、及び下記化合物CP1～化合物CP5のうちから選択された化合物を含んでもよいが、これらに限定されるものではない。

30

40

50

【化 5 7】



10

【0 2 1 2】

以上、有機発光素子について、図 1～4 を参照して説明したが、有機発光素子の構成は、これらに限定されるものではない。

20

【0 2 1 3】

正孔輸送領域に含まれた各層、発光層、及び電子輸送領域に含まれた各層は、それぞれ、真空蒸着法、スピンコーティング法、キャスト法、LB (Langmuir-Blodgett) 法、インクジェットプリンティング法、レーザープリンティング法、レーザー熱転写 (L I T I : l a s e r i n d u c e d t h e r m a l i m a g i n g) 法のような多様な方法を利用し、所定領域に形成される。

【0 2 1 4】

該真空蒸着法により、正孔輸送領域に含まれた各層、発光層、及び電子輸送領域に含まれた各層をそれぞれ形成する場合、蒸着条件は、例えば、約 100°C ～約 500°C の蒸着温度、約 10^{-8} torr ～約 10^{-3} torr の真空度、及び約 0.001 nm/sec ～約 10 nm/sec の蒸着速度範囲内で、形成しようとする層に含まれる材料、及び形成しようとする層の構造を考慮して選択される。

30

【0 2 1 5】

該スピンコーティング法により、正孔輸送領域に含まれた各層、発光層、及び電子輸送領域に含まれた各層をそれぞれ形成する場合、コーティング条件は、例えば、約 $2,000\text{ rpm}$ ～約 $5,000\text{ rpm}$ のコーティング速度、及び約 80°C ～ 200°C の熱処理温度範囲内で、形成しようとする層に含まれる材料、及び形成しようとする層の構造を考慮して選択される。

40

【実施例】

【0 2 1 6】

以下、合成例及び実施例を挙げ、本発明の一実施形態による化合物及び有機発光素子について、さらに具体的に説明する。下記合成例において、「A の代わりに B を使用した」という表現において、A のモル当量と B のモル当量は、互いに同一である。

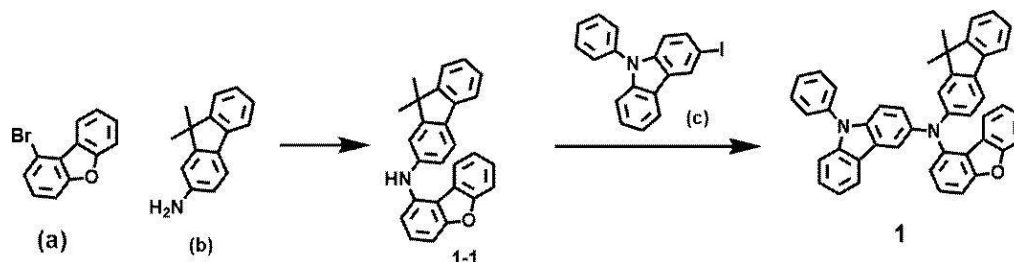
【0 2 1 7】

〔合成例〕

合成例 1：化合物 1 の合成

50

【化 5 8】



【0218】

(1) 中間体 1-1 の合成

1-ブロモベンゾ [b, d] フラン (a) (5 g)、9,9-ジメチル-9H-フルオレン-2-アミン (b) (6.4 g)、 K_tOBu (6.4 g)、 $P(tBu)_3$ (0.3 g)、 $Pd_2(dba)_3$ (0.4 g) をトルエンに薄めた後、 $100^\circ C$ で還流撹拌した。20 時間後、温度を常温にした後、水で反応を終結させた。酢酸エチルを利用して 3 回抽出した後、無水硫酸マグネシウムを利用して乾燥させた後、減圧濾過した。そのように得た残渣を、カラムクロマトグラフィ法を利用して分離精製した後、中間体 1-1 を 6.5 g (収率: 86%) 得た。生成された化合物は、LC-MS (liquid chromatography-mass spectrometry) を介して確認した。

$C_{27}H_{21}NO$: calc'd: $M+ 375.16$ found: 375.26

【0219】

(2) 化合物 1 の合成

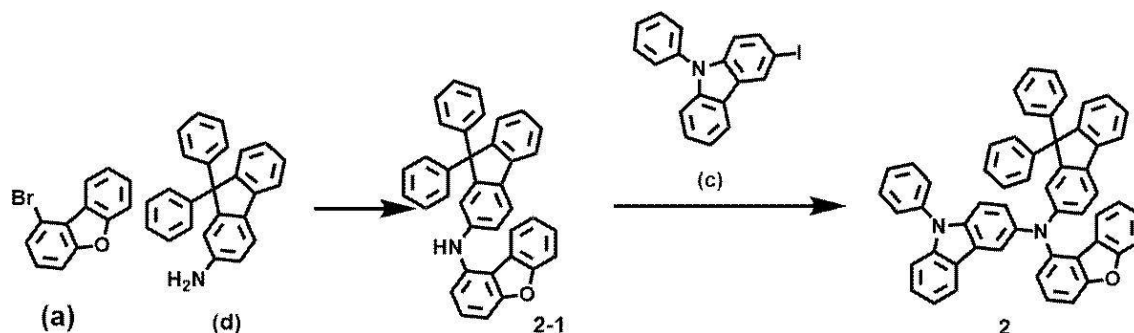
中間体 (b) の代わりに、中間体 1-1 (3.8 g) を使用し、1-ブロモベンゾ [b, d] フラン (a) の代わりに、3-ヨード-9-フェニル-9H-カルバゾール (c) (3.7 g) を使用することを除いては、中間体 1-1 の同じ方法で化合物 1 を得た。

$C_{45}H_{32}N_2O$: calc'd: $M+ 616.25$ found: 616.35

【0220】

合成例 2: 化合物 2 の合成

【化 5 9】



【0221】

(1) 中間体 2-1 の合成

中間体 (b) の代わりに、中間体 (d) (8 g) を使用することを除いては、中間体 1-1 と同じ方法により、中間体 2-1 (8.2 g、82%) を得た。

$C_{37}H_{25}NO$: calc'd: $M+ 499.19$ found: 499.29

【0222】

(2) 化合物 2 の合成

中間体 1-1 の代わりに、中間体 2-1 (5 g) を使用することを除いては、化合物 1 と同じ方法により、化合物 2 を得た。

$C_{55}H_{36}N_2O$: calc'd: $M+ 740.28$ found: 740.38

【0223】

合成例 3: 化合物 3 の合成

10

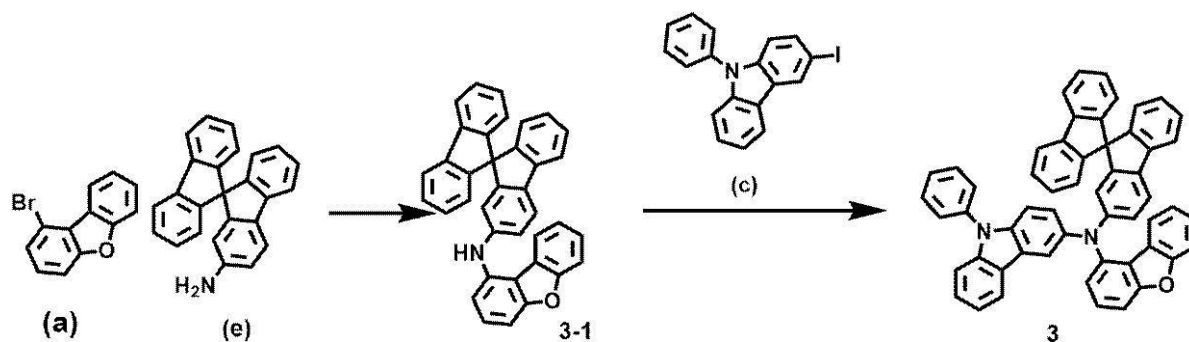
20

30

40

50

【化 6 0】



10

【0 2 2 4】

(1) 中間体 3-1 の合成

中間体 (b) の代わりに、中間体 (e) (8 g) を使用することを除いては、中間体 1-1 と同じ方法により、中間体 3-1 (5.2 g、52%) を得た。

$C_{37}H_{25}NO$: calc'd: $M+ 497.18$ found: 497.28

【0 2 2 5】

(2) 化合物 3 の合成

中間体 1-1 の代わりに、中間体 3-1 (5 g) を使用することを除いては、化合物 1 と同じ方法により、化合物 3 (7.4 g、75%) を得た。

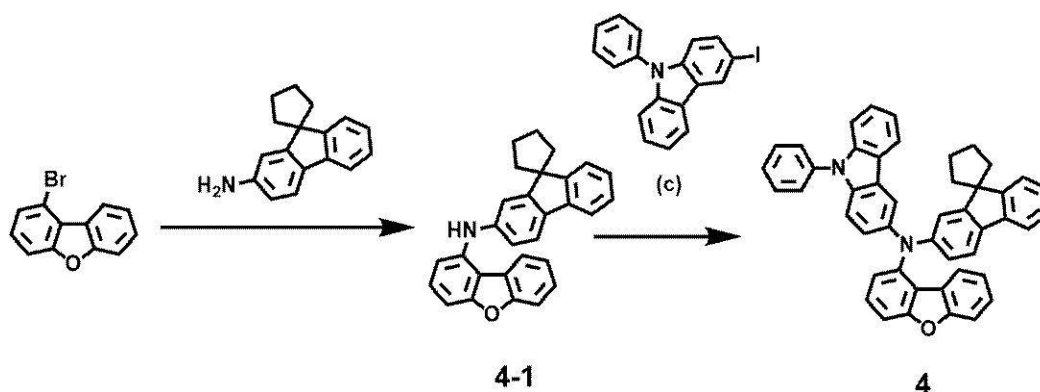
$C_{55}H_{36}N_2O$: calc'd: $M+ 740.28$ found: 740.38

20

【0 2 2 6】

合成例 4: 化合物 4 の合成

【化 6 1】



30

【0 2 2 7】

(1) 中間体 4-1 の合成

中間体 (a) (5 g) と中間体 (b) との代わりに、1-ブロモジベンゾ [b, d] フラン (4.9 g) とスピロ [シクロペンタン-1, 9'-フルオレン] -2'-アミン (7.1 g) とをそれぞれ使用することを除いては、中間体 1-1 と同じ方法で、中間体 4-1 (5.1 g、64%) を得た。

$C_{29}H_{23}NO$: calc'd: $M+ 401.18$ found: 401.20

【0 2 2 8】

(2) 化合物 4 の合成

中間体 (b) と中間体 (a) との代わりに、中間体 4-1 (4 g) と 3-ヨード-9-フェニル-9H-カルバゾール (c) (3.7 g) とをそれぞれ使用することを除いては、中間体 1-1 と同じ方法で、化合物 4 (4.6 g、72%) を得た。

$C_{47}H_{34}N_2O$: calc'd: $M+ 647.27$ found: 647.28

1H NMR (500 MHz, $CDCl_3$) δ = 8.22 (m, 1H)、7.79 (dd, 2H)、7.72 (dd, 1H)、7.67 (d, 1H)、7.54-7.14 (m, 1

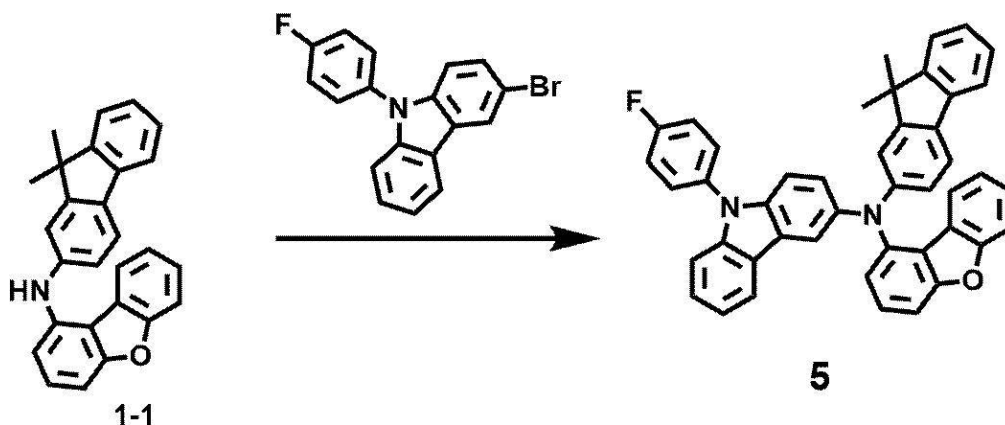
50

7 H)、6.95 (d, 1H)、6.90 (dd, 1H)、6.66 (dd, 1H)、6.54 (dd, 1H)、2.19–2.08 (m, 2H)、1.95–1.72 (m, 6H)

【0229】

合成例5：化合物5の合成

【化62】



【0230】

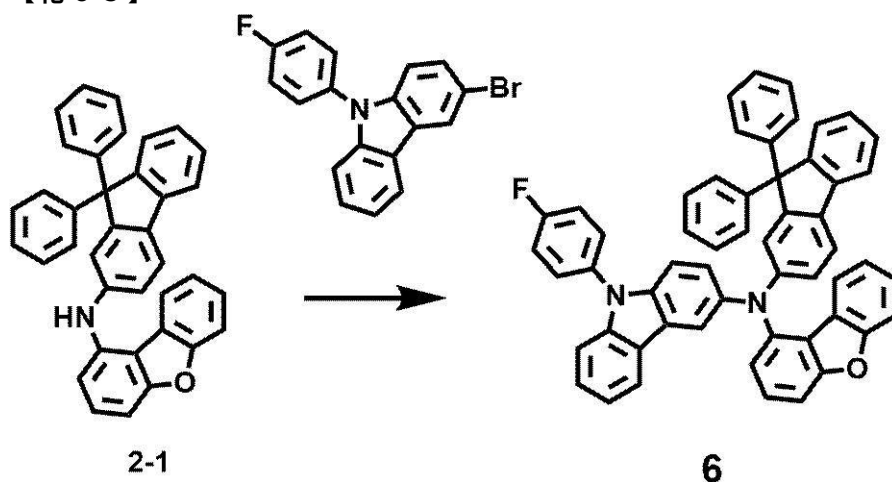
中間体(b)の代わりに、中間体1-1(3.8g)を使用し、中間体(a)の代わりに、3-ブromo-9-(4-フルオロフェニル)-9H-カルバゾール(3.4g)を使用することを除いては、中間体1-1と同じ方法により、化合物5(4.7g、74%)を得た。

$C_{45}H_{31}FN_2O$: calc'd: M+ 634.24 found: 634.34

【0231】

合成例6：化合物6の合成

【化63】



【0232】

中間体(b)の代わりに、中間体2-1(5g)を使用し、中間体(a)の代わりに、3-ブromo-9-(4-フルオロフェニル)-9H-カルバゾール(3.4g)を使用することを除いては、中間体1-1と同じ方法により、化合物6(5.2g、68%)を得た。

$C_{55}H_{35}FN_2O$: calc'd: M+ 758.27 found: 758.37

【0233】

合成例7：化合物8の合成

10

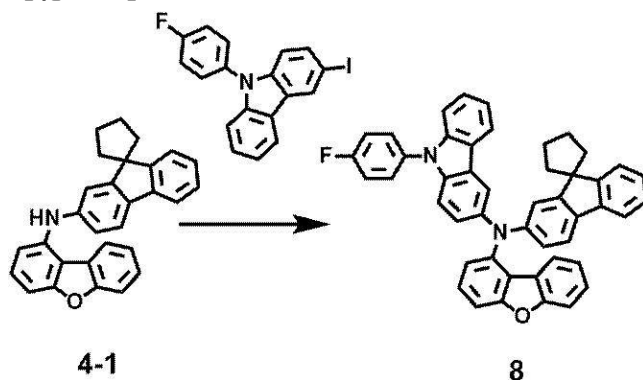
20

30

40

50

【化 6 4】



10

【0 2 3 4】

中間体 4-1 (4 g) と 9-(4-フルオロフェニル)-3-ヨード-9H-カルバゾール (3.9 g) とを使用することを除いては、化合物 4 と同じ方法で、化合物 8 (5 g、76%) を得た。

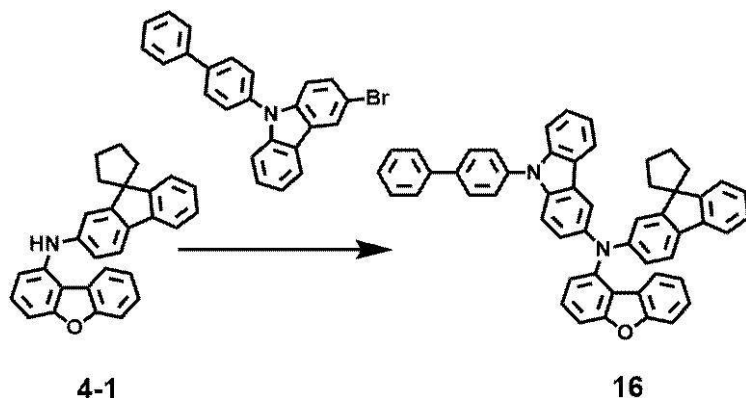
$C_{47}H_{33}FN_2O$: calc'd: $M+ 660.26$ found: 660.27
 1H NMR (500 MHz, $CDCl_3$) δ = 8.22 (m, 1H)、7.79 (dd, 2H)、7.72 (dd, 1H)、7.67 (d, 1H)、7.48–7.23 (m, 13H)、7.18–7.14 (m, 1H)、7.09–7.04 (m, 2H)、6.95 (d, 1H)、6.90 (dd, 1H)、6.66 (dd, 1H)、6.54 (dd, 1H)、2.19–2.08 (m, 2H)、1.95–1.72 (m, 6H)

20

【0 2 3 5】

合成例 8: 化合物 16 の合成

【化 6 5】



30

【0 2 3 6】

中間体 4-1 (4 g) と 9-([1,1'-ビフェニル]-4-イル)-3-ブromo-9H-カルバゾール (4 g) とを使用することを除いては、化合物 4 と同じ方法で、化合物 16 (4.7 g、66%) を得た。

40

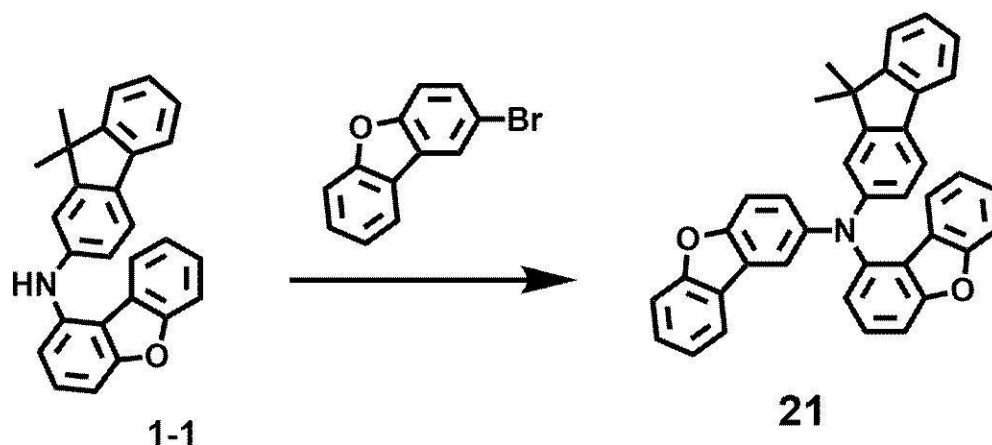
$C_{53}H_{38}N_2O$: calc'd: $M+ 718.30$ found: 718.33
 1H NMR (500 MHz, $CDCl_3$) δ = 8.22 (m, 1H)、7.79 (dd, 2H)、7.72 (dd, 1H)、7.67 (d, 1H)、7.63–7.59 (m, 2H)、7.57–7.23 (m, 18H)、7.18 (dt, 1H)、6.95 (d, 1H)、6.90 (dd, 1H)、6.66 (dd, 1H)、6.59 (dd, 1H)、2.19–2.08 (m, 2H)、1.95–1.72 (m, 6H)

【0 2 3 7】

合成例 9: 化合物 21 の合成

50

【化 6 6】



10

【0 2 3 8】

中間体 (b) の代わりに、中間体-1 (3.8 g) を使用し、中間体 (a) の代わりに、2-ブロモジベンゾ [b, d] フラン (2.5 g) を使用することを除いては、中間体 1-1 と同じ方法により、化合物 21 (4.3 g、80%) を得た。

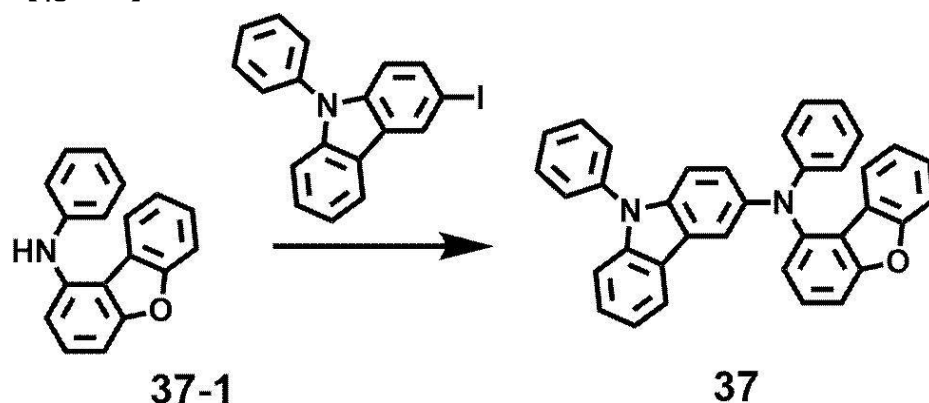
$C_{45}H_{31}FN_2O$: calc'd: $M+ 541.20$ found: 541.30

【0 2 3 9】

合成例 10: 化合物 37 の合成

20

【化 6 7】



30

【0 2 4 0】

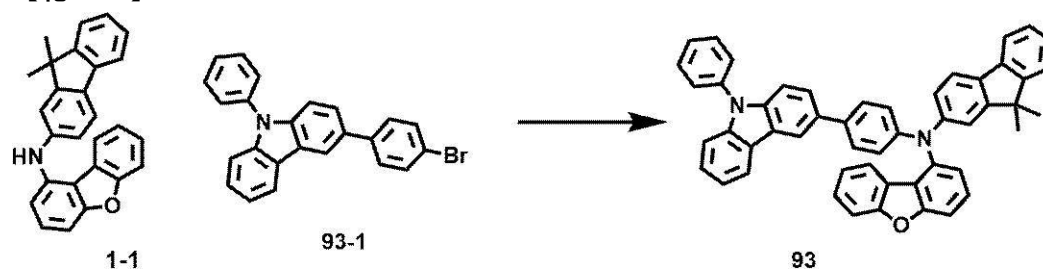
中間体 (b) の代わりに、中間体 37-1 (2.6 g) を使用し、中間体 (a) の代わりに、化合物 (c) (3.7 g) を使用することを除いては、中間体 1-1 と同じ方法により、化合物 37 (3.8 g、76%) を得た。

$C_{36}H_{24}N_2O$: $M+ calc'd: 500.19$ found: 500.29

【0 2 4 1】

合成例 11: 化合物 93 の合成

【化 6 8】



40

【0 2 4 2】

中間体 (b) の代わりに、中間体 1-1 (3.8 g) を使用し、中間体 (a) の代わり

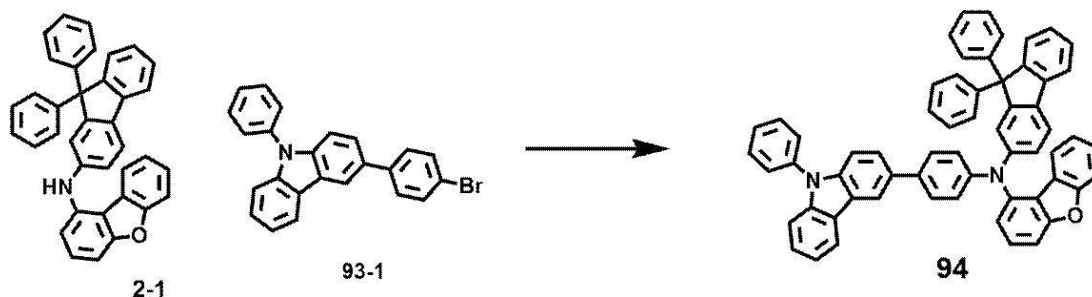
50

に、中間体 93-1 (4 g) を使用することを除いては、中間体 1-1 と同じ方法により、化合物 93 (5.1 g、74%) を得た。

$C_{51}H_{36}N_2O$: M+ calc'd: 692.28 found: 692.38
【0243】

合成例 12: 化合物 94 の合成

【化 69】



10

【0244】

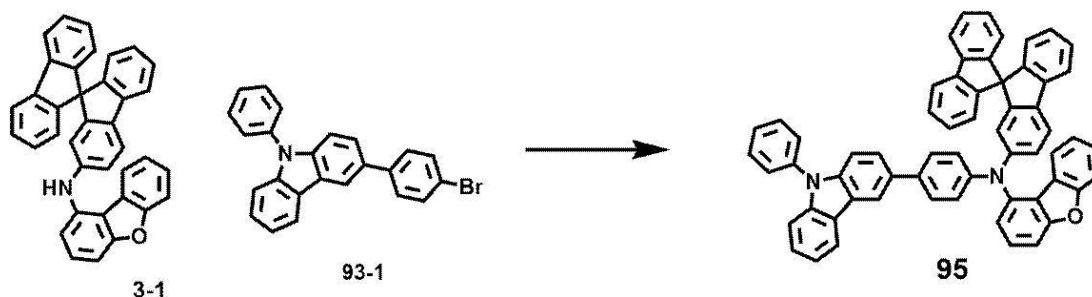
中間体 (b) の代わりに、中間体 2-1 (5 g) を使用し、中間体 (a) の代わりに、中間体 93-1 (4 g) を使用することを除いては、中間体 1-1 と同じ方法により、化合物 94 (6.3 g、77%) を得た。

$C_{61}H_{40}N_2O$: M+ calc'd: 816.31 found: 816.41
【0245】

20

合成例 13: 化合物 95 の合成

【化 70】



30

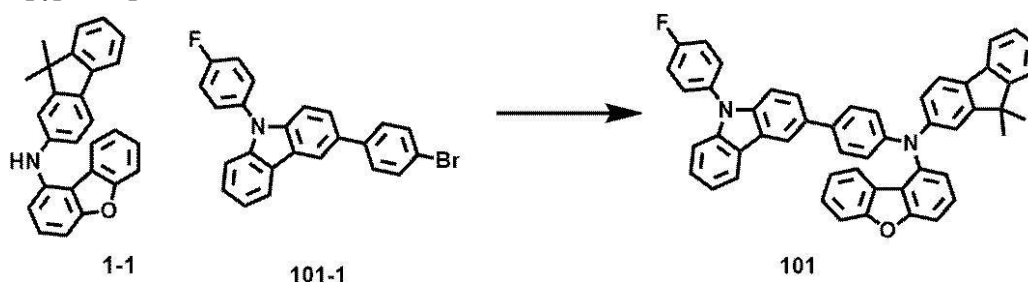
【0246】

中間体 (b) の代わりに、中間体 3-1 (5 g) を使用し、中間体 (a) の代わりに、中間体 93-1 (4 g) を使用することを除いては、中間体 1-1 と同じ方法により、化合物 95 (6.1 g、75%) を得た。

$C_{61}H_{38}N_2O$: M+ calc'd: 814.30 found: 814.40
【0247】

合成例 14: 化合物 101 の合成

【化 71】



40

【0248】

中間体 (b) の代わりに、中間体 1-1 (3.8 g) を使用し、中間体 (a) の代わり

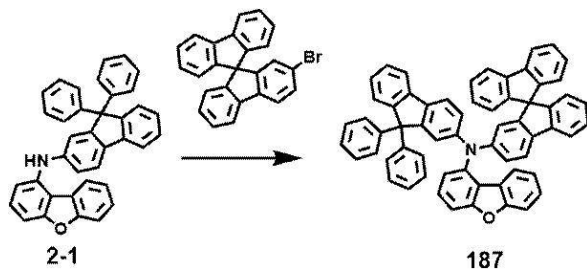
50

に、中間体 101-1 (4.2 g) を使用することを除いては、中間体 1-1 と同じ方法により、化合物 101 (7.1 g、75%) を得た。

$C_{51}H_{35}FN_2O$: $M + calcd: 710.27$ $found: 710.37$
【0249】

合成例 15: 化合物 187 の合成

【化 72】



10

【0250】

中間体 (b) と中間体 (a) との代わりに、中間体 2-1 (2.5 g) と 2-ブロモ-9,9'-スピロビ[フルオレン] (2 g) とをそれぞれ使用することを除いては、中間体 1-1 と同じ方法で、化合物 187 (3.1 g、77%) を得た。

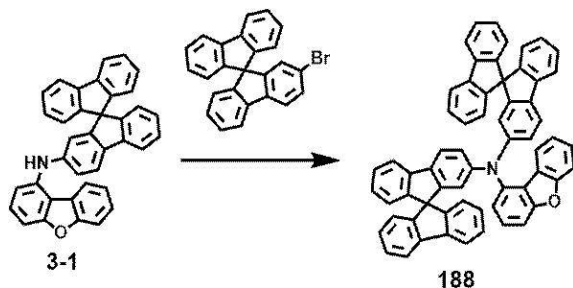
$C_{62}H_{39}NO$: $calcd: M + 813.30$ $found: 813.34$
 1H NMR (500 MHz, $CDCl_3$) δ = 7.92–7.84 (m, 4H)、7.79 (m, 1H)、7.72 (dd, 1H)、7.61 (d, 1H)、7.58 (d, 1H)、7.48–7.41 (m, 5H)、7.36–7.28 (m, 3H)、7.21–7.06 (m, 14H)、6.92 (dd, 1H)、6.81–6.72 (m, 5H)、6.66 (dd, 1H)、6.57 (d, 1H)、6.43 (d, 1H)

20

【0251】

合成例 16: 化合物 188 の合成

【化 73】



30

【0252】

中間体 (b) と中間体 (a) との代わりに、中間体 3-1 (2.5 g) と 2-ブロモ-9,9'-スピロビ[フルオレン] (2 g) とをそれぞれ使用することを除いては、中間体 1-1 と同じ方法で、化合物 188 (3.3 g、81%) を得た。

$C_{62}H_{37}NO$: $calcd: M + 811.29$ $found: 811.31$
 1H NMR (500 MHz, $CDCl_3$) δ = 7.92 (dd, 4H)、7.89 (dd, 2H)、7.79 (td, 1H)、7.72 (dd, 1H)、7.61 (d, 2H)、7.48–7.41 (m, 7H)、7.36–7.26 (m, 3H)、7.21–7.15 (m, 6H)、6.92 (dd, 2H)、6.77–6.73 (m, 6H)、6.68 (dd, 1H)、6.43 (d, 2H)

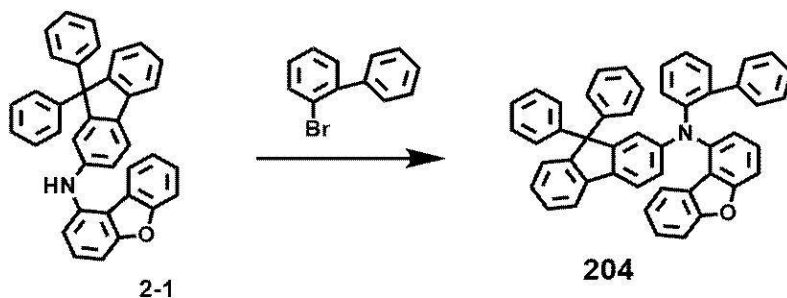
40

【0253】

合成例 17: 化合物 204 の合成

50

【化 7 4】



【0 2 5 4】

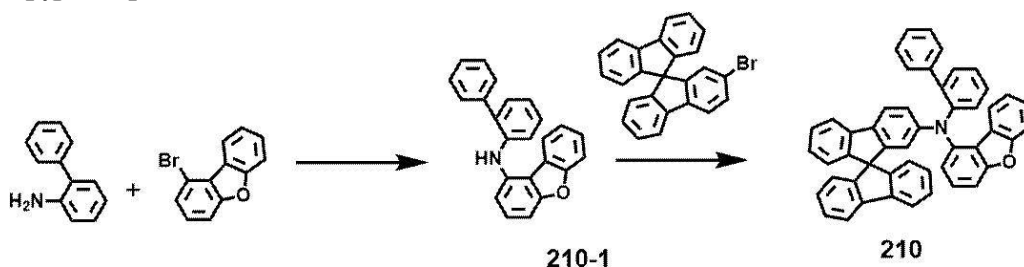
中間体 (b) の代わりに、中間体 2-1 (5 g) を使用し、中間体 (a) の代わりに、2-ブロモ-1, 1'-ビフェニル (2.3 g) を使用することを除いては、中間体 1-1 と同じ方法により、化合物 204 (3.8 g、58%) を得た。

$C_{49}H_{33}NO$: $M^+ calcd: 651.26$ $found: 651.36$

【0 2 5 5】

合成例 18: 化合物 210 の合成

【化 7 5】



【0 2 5 6】

(1) 中間体 210-1 の合成

中間体 (b) と中間体 (a) (5 g) との代わりに、[1, 1'-ビフェニル]-2-アミン (2.5 g) と 1-ブロモジベンゾ [b, d] フラン (2.5 g) とをそれぞれ使用することを除いては、中間体 1-1 と同じ方法で、中間体 210-1 (3 g、91%) を得た。

$C_{24}H_{17}NO$: $calcd: M^+ 335.13$ $found: 335.14$

【0 2 5 7】

(2) 化合物 210 の合成

中間体 (b) と中間体 (a) との代わりに、中間体 210-1 (3 g) と 2-ブロモ-9, 9'-スピロビ [フルオレン] (3.7 g) とをそれぞれ使用することを除いては、中間体 1-1 と同じ方法で、化合物 210 (5.1 g、86%) を得た。

$C_{49}H_{31}NO$: $calcd: M^+ 649.24$ $found: 649.25$

1H NMR (500 MHz, $CDCl_3$) δ = 7.92 (dd, 2H)、7.89 (dd, 1H)、7.80 (d, 1H)、7.72 (d, 1H)、7.59–7.51 (m, 5H)、7.49–7.41 (m, 5H)、7.32–7.27 (m, 3H)、7.21–7.14 (m, 5H)、7.01 (t, 1H)、6.77–6.73 (m, 4H)、6.66 (dd, 1H)、6.61 (dd, 1H)、5.47 (d, 1H)

【0 2 5 8】

合成例 19: 化合物 213 の合成

10

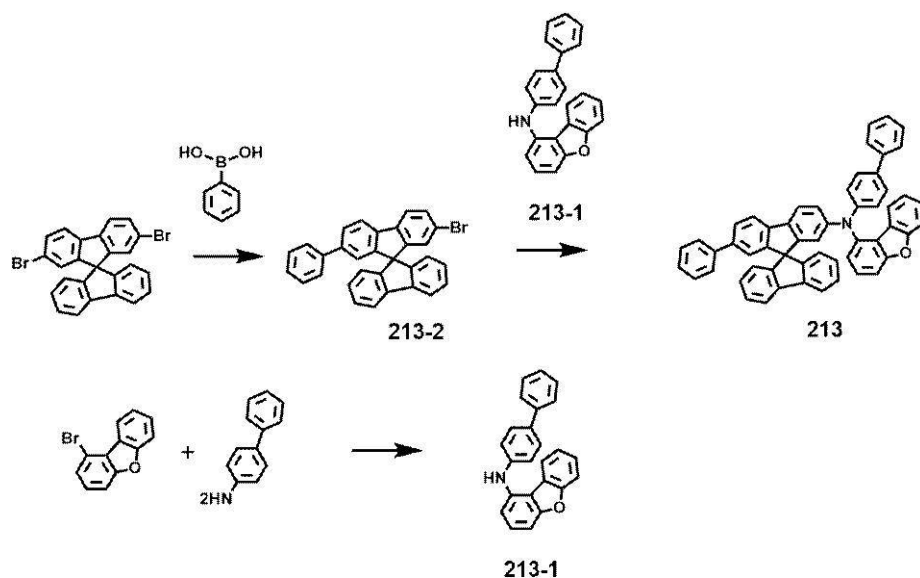
20

30

40

50

【化 76】



10

【0259】

(1) 中間体 213-2 の合成

2,7-ジブロモ-9,9'-スピロビ[フルオレン] (4.7 g) とフェニルボロン酸 (3.4 g) とを、テトラヒドロフラン (60 mL) と水 (20 mL) とに薄めた。K₂CO₃ (4.1 g) と Pd(PPh₃)₄ (580 mg) とを滴加した後、65℃で還流撹拌した。反応が完結した後、徐々に温度を常温に下げた後、酢酸エチルで3回抽出及び減圧濾過した。その後、減圧蒸留して得た残渣を、カラムクロマトグラフィ法で分離及び精製し、中間体 213-2 (4.4 g、93%) を得た。

20

C₃₁H₁₉Br: calc'd: M+ 470.07 found: 470.08

【0260】

(2) 中間体 213-1 の合成

中間体 (b) と中間体 (a) (5 g) との代わりに、[1,1'-ビフェニル]-4-アミン (2.5 g) と 1-ブロモジベンゾ[*b*,*d*]フラン (2.5 g) とをそれぞれ使用することを除いては、中間体 1-1 と同じ方法で、中間体 213-1 (3 g、91%) を得た。

30

C₂₄H₁₇NO: calc'd: M+ 335.13 found: 335.14

【0261】

(3) 化合物 213 の合成

中間体 (a) と中間体 (b) との代わりに、中間体 213-2 (4.4 g) 及び中間体 213-1 (3 g) をそれぞれ使用することを除いては、中間体 1-1 と同じ方法で、化合物 213 (5.1 g、79%) を得た。

C₅₅H₃₅NO: calc'd: M+ 725.27 found: 725.30

¹H NMR (500 MHz, CDCl₃) δ = 7.93 (dd, 2H)、7.79–7.78 (m, 2H)、7.72–7.59 (m, 6H)、7.54–7.28 (m, 15H)、7.20 (t, 2H)、6.89 (m, 2H)、6.75 (dd, 2H)、6.68 (dd, 1H)、6.56–6.54 (m, 2H)、5.68 (d, 1H)

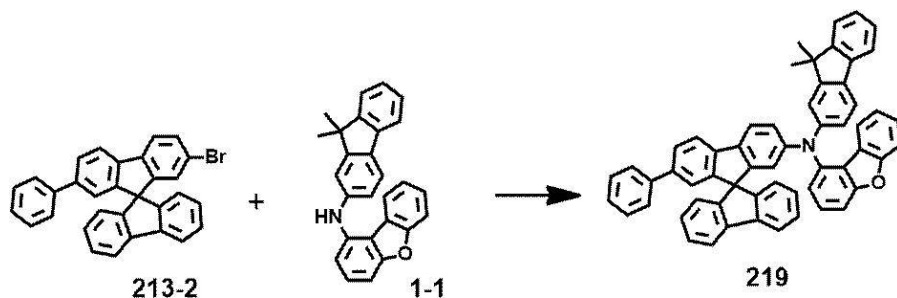
40

【0262】

合成例 20: 化合物 219 の合成

50

【化 7 7】



10

【0 2 6 3】

中間体 (a) と中間体 (b) との代わりに、中間体 213-2 (2.4 g) と中間体 1-1 (1.9 g) とをそれぞれ使用することを除いては、中間体 1-1 と同じ方法で、化合物 219 (3.1 g、81%) を得た。

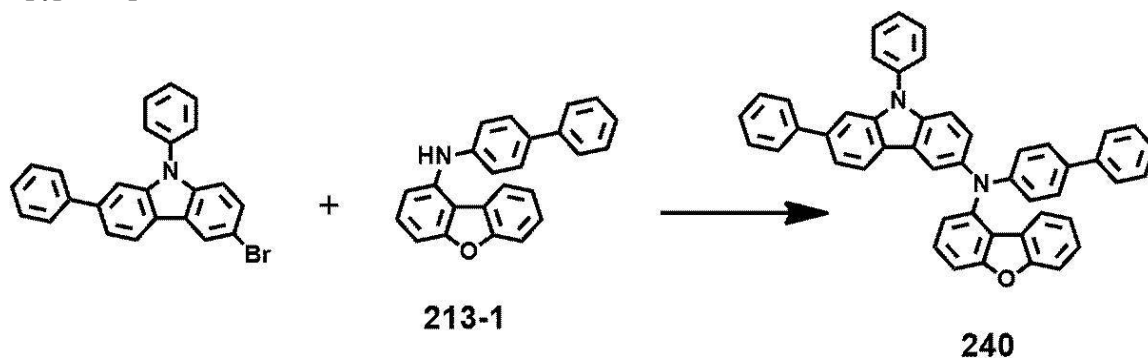
$C_{58}H_{39}NO$: calc'd: $M+ 765.30$ found: 765.34
 1H NMR (500 MHz, $CDCl_3$) δ = 7.93 (dd, 2H)、7.79–7.67 (m, 6H)、7.62 (d, 1H)、7.53–7.28 (m, 11H)、7.18 (dt, 2H)、7.11 (dd, 2H)、6.89–6.82 (m, 3H)、6.75 (dd, 2H)、6.68 (dd, 1H)、6.50 (d, 1H)、6.10 (d, 1H)、1.61 (s, 6H)

20

【0 2 6 4】

合成例 21: 化合物 240 の合成

【化 7 8】



30

【0 2 6 5】

中間体 (a) と中間体 (b) との代わりに、6-ブロモ-2,9-ジフェニル-9H-カルバゾール (2 g) と中間体 213-1 (1.7 g) とをそれぞれ使用することを除いては、中間体 1-1 と同じ方法で、化合物 240 (2.5 g、78%) を得た。

$C_{48}H_{32}N_2O$: calc'd: $M+ 625.25$ found: 625.29
 1H NMR (500 MHz, $CDCl_3$) δ = 7.86 (dd, 1H)、7.79–7.76 (m, 2H)、7.73–7.70 (m, 3H)、7.65–7.61 (m, 2H)、7.55–7.28 (m, 18H)、7.24–7.21 (m, 2H)、6.70–6.65 (m, 3H)、6.59 (dd, 1H)

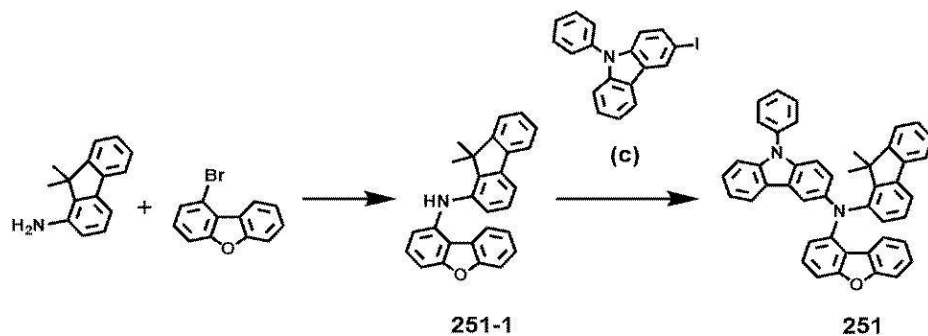
40

【0 2 6 6】

合成例 22: 化合物 251 の合成

50

【化 79】



10

【0267】

(1) 中間体 251-1 の合成

中間体 (b) と中間体 (a) (5 g) との代わりに、9,9-ジメチル-9H-フルオレン-1-アミン (2.1 g) と 1-ブロモジベンゾ [b, d] フラン (2.5 g) とをそれぞれ使用することを除いては、中間体 1-1 と同じ方法で、中間体 251-1 (3.1 g、83%) を得た。

$C_{27}H_{21}NO$: calc'd: M+ 375.16 found: 375.19

【0268】

(2) 化合物 251 の合成

中間体 (b) と中間体 (a) との代わりに、中間体 251-1 (3.1 g) 及び 3-ヨード-9-フェニル-9H-カルバゾール (3.1 g) をそれぞれ使用することを除いては、中間体 1-1 と同じ方法で、化合物 251 (4 g、78%) を得た。

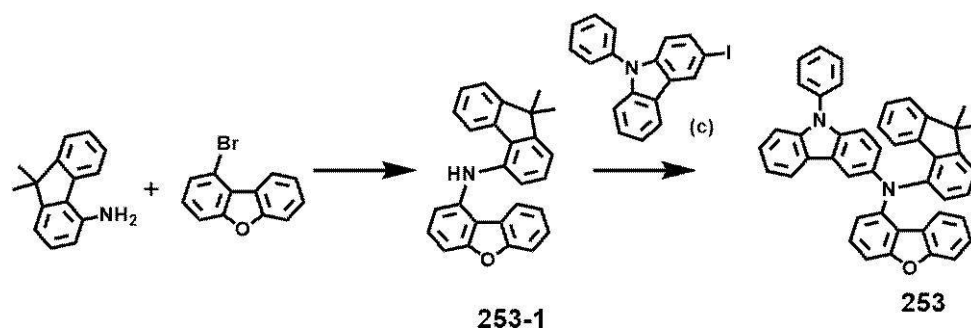
$C_{45}H_{32}N_2O$: calc'd: M+ 616.25 found: 616.29

1H NMR (500 MHz, $CDCl_3$) δ = 8.22 (d, 1H)、7.82 (d, 1H)、7.77 (td, 1H)、7.70 (dd, 1H)、7.54–7.44 (m, 7H)、7.39–7.22 (m, 10H)、7.11 (dd, 1H)、6.96 (dd, 1H)、6.57–6.47 (m, 3H)、1.68 (s, 6H)

【0269】

合成例 23: 化合物 253 の合成

【化 80】



40

【0270】

(1) 中間体 253-1 の合成

中間体 (b) と中間体 (a) (5 g) との代わりに、9,9-ジメチル-9H-フルオレン-4-アミン (2.1 g) と 1-ブロモジベンゾ [b, d] フラン (2.5 g) とをそれぞれ使用することを除いては、中間体 1-1 と同じ方法で、中間体 253-1 (3.5 g、92%) を得た。

$C_{27}H_{21}NO$: calc'd: M+ 375.16 found: 375.19

【0271】

(2) 化合物 253 の合成

中間体 (b) と中間体 (a) との代わりに、中間体 253-1 (3.5 g) 及び 3-ヨ

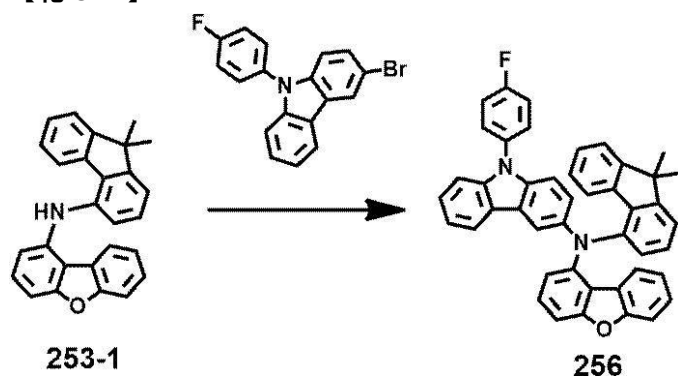
50

ードー9-フェニル-9H-カルバゾール (3.6 g) をそれぞれ使用することを除いては、中間体1-1と同じ方法で、化合物253 (4.6 g、81%) を得た。

$C_{45}H_{32}N_2O$: calc'd: $M+ 616.25$ found: 616.29
 1H NMR (500 MHz, $CDCl_3$) δ = 8.22 (d, 1H)、7.82 (d, 1H)、7.72 (d, 1H)、7.63 (dd, 1H)、7.51–7.21 (m, 16H)、7.14–7.07 (m, 2H)、6.86 (dd, 1H)、6.61–6.59 (m, 1H)、6.53 (dd, 1H)、6.24 (td, 1H)、1.61 (s, 6H)
 【0272】

合成例24: 化合物256の合成

【化81】



【0273】

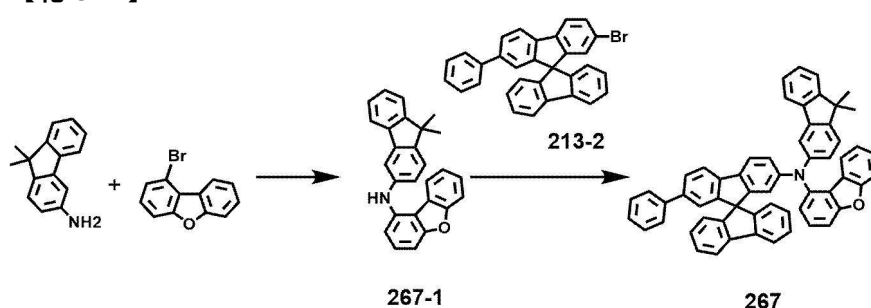
中間体 (b) と中間体 (a) との代わりに、中間体253-1 (3.5 g) 及び3-ブロモ-9-(4-フルオロフェニル)-9H-カルバゾール (3.2 g) をそれぞれ使用することを除いては、中間体1-1と同じ方法で、化合物256 (5.0 g、84%) を得た。

$C_{45}H_{31}FN_2O$: calc'd: $M+ 634.24$ found: 634.25
 1H NMR (500 MHz, $CDCl_3$) δ = 8.23 (d, 1H)、7.82 (d, 1H)、7.72 (td, 1H)、7.62 (dd, 1H)、7.58–7.35 (m, 3H)、7.34–7.21 (m, 10H)、7.14–7.03 (m, 4H)、6.86 (dd, 1H)、6.61 (m, 1H)、6.53 (dd, 1H)、6.24 (dd, 1H)、1.61 (s, 6H)

【0274】

合成例25: 化合物267の合成

【化82】



【0275】

(1) 中間体267-1の合成

中間体 (b) と中間体 (a) (5 g) との代わりに、9,9-ジメチル-9H-フルオレン-2-アミン (2.1 g) と1-ブロモジベンゾ [b, d] フラン (2.5 g) とをそれぞれ使用することを除いては、中間体1-1と同じ方法で、中間体267-1 (3.2 g、85%) を得た。

$C_{27}H_{21}NO$: calc'd: $M+ 375.16$ found: 375.18

【0276】

(2) 化合物267の合成

中間体(b)と中間体(a)との代わりに、中間体267-1(3.2g)及び中間体213-2(4.0g)をそれぞれ使用することを除いては、中間体1-1と同じ方法で、化合物267(5.7g、88%)を得た。

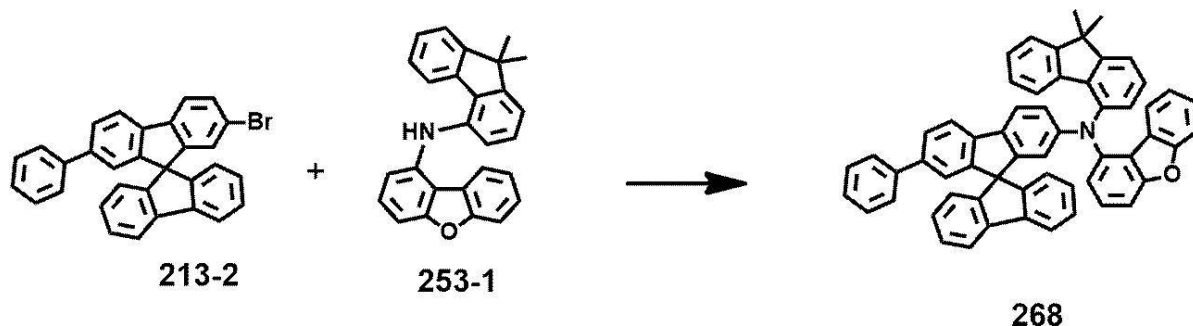
$C_{58}H_{39}NO$: calc'd: $M+ 765.30$ found: 765.32
 1H NMR (500MHz, $CDCl_3$) δ = 7.93 (dd, 2H)、7.79–7.66 (m, 6H)、7.62 (d, 1H)、7.53–7.29 (m, 11H)、7.20 (dt, 2H)、7.11–7.04 (m, 4H)、6.89 (d, 1H)、6.87 (t, 1H)、6.75 (t, 1H)、6.74 (d, 1H)、6.66 (dd, 1H)、6.42 (dd, 1H)、5.68 (d, 1H)、1.52 (s, 6H)

10

【0277】

合成例26: 化合物268の合成

【化83】



20

【0278】

中間体(b)と中間体(a)との代わりに、中間体253-1(3.2g)及び213-2(4.0g)をそれぞれ使用することを除いては、中間体1-1と同じ方法で、化合物268(4.8g、74%)を得た。

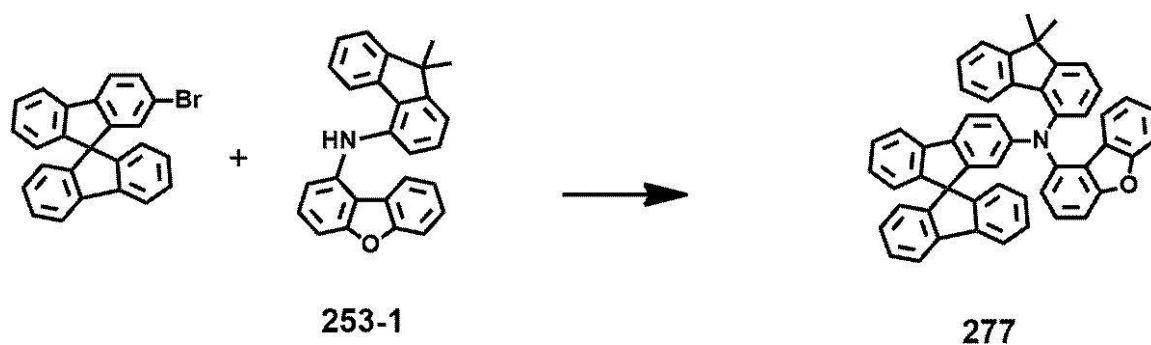
$C_{58}H_{39}NO$: calc'd: $M+ 765.30$ found: 765.32
 1H NMR (500MHz, $CDCl_3$) δ = 7.93 (d, 2H)、7.82 (d, 1H)、7.80 (d, 1H)、7.72–7.58 (m, 5H)、7.53–7.36 (m, 7H)、7.33–7.05 (m, 9H)、6.87–6.84 (m, 2H)、6.79 (dd, 1H)、6.75 (dd, 2H)、6.61 (m, 1H)、6.23 (d, 1H)、5.49 (d, 1H)、1.61 (s, 6H)

30

【0279】

合成例27: 化合物277の合成

【化84】



40

【0280】

中間体(b)と中間体(a)との代わりに、中間体253-1(3.2g)及び2-ブロモ-9,9'-ス피ロビ[フルオレン](3.8g)をそれぞれ使用することを除いては、中間体1-1と同じ方法で、化合物277(4.3g、86%)を得た。

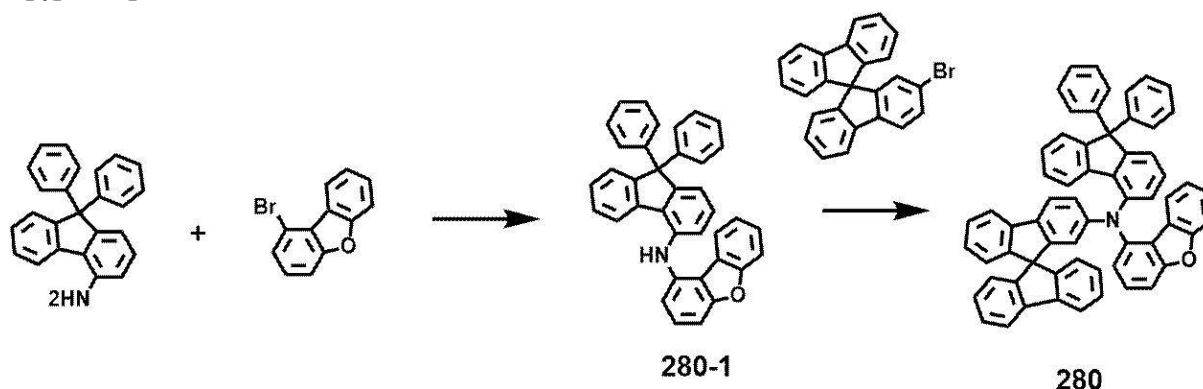
50

$C_{52}H_{35}NO$: calc'd: $M+ 689.27$ found: 689.28
 1H NMR (500 MHz, $CDCl_3$) δ = 7.92 (d, 2H)、7.89 (d, 1H)、7.82 (d, 1H)、7.72 (d, 1H)、7.62 (dd, 1H)、7.59 (d, 1H)、7.48–7.41 (m, 4H)、7.32–7.06 (m, 10H)、6.87 (d, 1H)、6.81 (dd, 1H)、6.77–6.73 (m, 3H)、6.61 (m, 1H)、6.23 (d, 1H)、5.72 (dd, 1H)、1.61 (s, 6H)

【0281】

合成例 28: 化合物 280 の合成

【化 85】



【0282】

(1) 中間体 280-1 の合成

中間体 (b) と中間体 (a) (5 g) との代わりに、9,9-ジフェニル-9H-フルオレン-4-アミン (3.3 g) と 1-ブロモジベンゾ [b, d] フラン (2.5 g) とをそれぞれ使用することを除いては、中間体 1-1 と同じ方法で、中間体 280-1 (3.8 g、77%) を得た。

$C_{37}H_{25}NO$: calc'd: $M+ 499.19$ found: 499.23

【0283】

(2) 化合物 280 の合成

中間体 (b) と中間体 (a) との代わりに、中間体 280-1 (3.8 g) 及び 2-ブロモ-9,9'-スピロビ [フルオレン] (3.2 g) をそれぞれ使用することを除いては、中間体 1-1 と同じ方法で、化合物 280 (4.9 g、79%) を得た。

$C_{62}H_{39}NO$: calc'd: $M+ 813.30$ found: 813.33

1H NMR (500 MHz, $CDCl_3$) δ = 7.92 (d, 2H)、7.89 (d, 1H)、7.82 (d, 1H)、7.72 (d, 1H)、7.59 (dd, 2H)、7.49–7.40 (m, 4H)、7.33–7.26 (m, 4H)、7.21–7.05 (m, 14H)、6.81–6.71 (m, 6H)、6.62 (m, 1H)、6.56 (dd, 1H)、5.72 (d, 1H)、5.68 (t, 1H)

【0284】

前述した合成例 1～合成例 28 で合成された化合物の 1H NMR (nuclear magnetic resonance) を下記表 1 及び表 2 に示した。表 1 及び表 2 に示した化合物以外の他の化合物も、前述の合成方法及び原料物質を参照すれば、当該技術分野の当業者であるならば、その合成方法を容易に認識するであろう。

10

20

30

40

50

【表 1】

化合物	¹ H NMR(400Mhz)
1	8.25(d,1H), 7.85(d,2H), 7.80-7.75(m,2H), 7.73-7.70(m,1H), 7.56(d,1H), 7.53-7.21(m,14H), 7.15-7.09(m,2H), 7.00(dd,3H), 6.85(dd,1H), 6.65(dd,1H), 6.55(dd,1H), 1.61(s,6H)
2	8.22-8.20(m,1H), 7.86(td,1H), 7.79-7.77(m,1H), 7.72(m,1H), 7.58(d,1H), 7.51-7.23(m,15H), 7.21-7.05(m,11H), 6.81(td,1H), 6.73(dd,1H), 6.65(dd,1H), 6.53-6.48(m,2H)
3	8.22-8.20(m,1H), 7.90(dd,2H), 7.87(dd,1H), 7.79(m,1H), 7.72(m,1H), 7.61(d,1H), 7.54-7.12(m,20H), 6.92(dd,1H), 6.77-6.73(m,3H), 6.66(dd,1H), 6.51(dd,1H), 5.97(q, 1H)
5	8.22-8.20(m,1H), 7.85(m,1H), 7.79-7.76(m,2H), 7.71(m,1H), 7.57(m,1H), 7.46(dd,1H), 7.40-7.21(m,10H), 7.14-7.03(m,4H), 7.01(dd,1H), 6.85(dd,1H), 6.66(dd,1H), 6.54(dd,1H), 1.61(s,6H)
6	8.22-8.20(m,1H), 7.86(td,1H), 7.79-7.77(m,1H), 7.72-7.70(m,1H), 7.58(d,1H), 7.48-7.23(m,12H), 7.20-7.03(m,13H), 6.81(dd,1H), 6.73(dd,1H), 6.66(dd,1H), 6.53(q, 1H), 6.51(dd,1H)
21	7.84-7.82(m,1H), 7.79-7.75(m,2H), 7.73-7.70(m,2H), 7.68-7.65(m,1H), 7.57-7.40(m,5H), 7.34-7.25(m,4H), 7.14-7.09(m,2H), 7.03(dd,1H), 6.85(m,1H), 6.66(dd,1H), 6.54(dd,1H), 1.61(s,6H)
37	8.22-8.20(m,1H), 7.79(m,1H), 7.72(m,1H), 7.54-7.21(m,14H), 7.08-7.02(m,2H), 6.67-6.53(m,3H), 6.34-6.31(m,2H)
93	8.24-8.22(m,1H), 8.15(m,1H), 7.79-7.70(m,4H), 7.67(d,1H), 7.58-7.42(m,8H), 7.39-7.25(m,7H), 7.21-7.19(m,1H), 7.14-7.09(m,2H), 6.84(dd,1H), 6.68(dd,1H), 6.63-6.59(m,2H), 6.49(m,1H), 1.61(s,6H)
94	8.24-8.22(m,1H), 8.15(m,1H), 7.86(td,1H), 7.79-7.70(m,3H), 7.67(d,1H), 7.60-7.53(m,3H), 7.50-7.25(m,12H), 7.21-7.03(m,12H), 6.81(td,1H), 6.75(dd,1H), 6.68(dd,1H), 6.63-6.57(m,3H), 6.44(d,1H)
95	8.24-8.22(m,1H), 8.15(m,1H), 8.02-7.87(m,3H), 7.79-7.70(m,3H), 7.67(d,1H), 7.60-7.53(m,3H), 7.50-7.25(m,14H), 7.23-7.15(m,4H), 6.92(dd,1H), 6.77-6.71(m,3H), 6.68(dd,1H), 6.63-6.57(m,3H), 5.95(d,1H)
101	8.24-8.22(m,1H), 8.15(m,1H), 7.79-7.70(m,4H), 7.67(d,1H), 7.58-7.52(m,3H), 7.48-7.44(m,1H), 7.39-7.25(m,8H), 7.21-7.19(m,1H), 7.14-7.03(m,4H), 6.84(dd,1H), 6.68(dd,1H), 6.63-6.59(m,2H), 6.49(m,1H), 1.61(s,6H)
204	7.92-7.87(m,3H), 7.79(m,1H), 7.72(m,1H), 7.63-7.58(m,3H), 7.52-7.24(m,12H), 7.21-7.15(m,3H), 6.92(dd,1H), 6.77-6.71(m,3H), 6.68-6.66(dd,1H), 6.58-6.54(m,2H), 5.95(dd,1H)

10

20

30

40

50

【表 2】

化合物	¹ H NMR(500Mhz)
4	8.22(m,1H), 7.79(dd,2H), 7.72(dd,1H), 7.67(d,1H), 7.54-7.14(m,17H), 6.95(d,1H), 6.90(dd,1H), 6.66(dd,1H), 6.54(dd,1H), 2.19-2.08(m,2H), 1.95-1.72(m,6H)
8	8.22(m,1H), 7.79(dd,2H), 7.72(dd,1H), 7.67(d,1H), 7.48-7.23(m,13H), 7.18-7.14(m,1H), 7.09-7.04(m,2H), 6.95(d,1H), 6.90(dd,1H), 6.66(dd,1H), 6.54(dd,1H), 2.19-2.08(m,2H), 1.95-1.72(m,6H)
16	8.22(m,1H), 7.79(dd,2H), 7.72(dd,1H), 7.67(d,1H), 7.63-7.59(m,2H), 7.57-7.23(m,18H), 7.18(dt,1H), 6.95(d,1H), 6.90(dd,1H), 6.66(dd,1H), 6.59(dd,1H), 2.19-2.08(m,2H), 1.95-1.72(m,6H)
187	7.92-7.84(m,4H), 7.79(m,1H), 7.72(dd,1H), 7.61(d,1H), 7.58(d,1H), 7.48-7.41(m,5H), 7.36-7.28(m,3H), 7.21-7.06(m,14H), 6.92(dd,1H), 6.81-6.72(m,5H), 6.66(dd,1H), 6.57(d,1H), 6.43(d,1H)
188	7.92(dd,4H), 7.89(dd,2H), 7.79(td,1H), 7.72(dd,1H), 7.61(d,2H), 7.48-7.41(m,7H), 7.36-7.26(m,3H), 7.21-7.15(m,6H), 6.92(dd,2H), 6.77-6.73(m,6H), 6.68(dd,1H), 6.43(d,2H)
210	7.92(dd,2H), 7.89(dd,1H), 7.80(d,1H), 7.72(d,1H), 7.59-7.51(m,5H), 7.49-7.41(m,5H), 7.32-7.27(m,3H), 7.21-7.14(m,5H), 7.01(t,1H), 6.77-6.73(m,4H), 6.66(dd,1H), 6.61(dd,1H), 5.47(d,1H)
213	7.93(dd,2H), 7.79-7.78(m,2H), 7.72-7.59(m,6H), 7.54-7.28(m,15H), 7.20(t,2H), 6.89(m,2H), 6.75(dd,2H), 6.68(dd,1H), 6.56-6.54(m,2H), 5.68(d,1H)
219	7.93(dd,2H), 7.79-7.67(m,6H), 7.62(d,1H), 7.53-7.28(m,11H), 7.18(dt,2H), 7.11(dd,2H), 6.89-6.82(m,3H), 6.75(dd,2H), 6.68(dd,1H), 6.50(d,1H), 6.10(d,1H), 1.61(s,6H)
240	7.86(dd,1H), 7.79-7.76(m,2H), 7.73-7.70(m,3H), 7.65-7.61(m,2H), 7.55-7.28(m,18H), 7.24-7.21(m,2H), 6.70-6.65(m,3H), 6.59(dd,1H)
251	8.22(d,1H), 7.82(d,1H), 7.77(td,1H), 7.70(dd,1H), 7.54-7.44(m,7H), 7.39-7.22(m,10H), 7.11(dd,1H), 6.96(dd,1H), 6.57-6.47(m,3H), 1.68(s,6H)
253	8.22(d,1H), 7.82(d,1H), 7.72(d,1H), 7.63(dd,1H), 7.51-7.21(m,16H), 7.14-7.07(m,2H), 6.86(dd,1H), 6.61-6.59(m,1H), 6.53(dd,1H), 6.24(td,1H), 1.61(s,6H)
256	8.23(d,1H), 7.82(d,1H), 7.72(td,1H), 7.62(dd,1H), 7.58-7.35(m,3H), 7.34-7.21(m,10H), 7.14-7.03(m,4H), 6.86(dd,1H), 6.61(m,1H), 6.53(dd,1H), 6.24(dd,1H), 1.61(s,6H)
267	7.93(dd,2H), 7.79-7.66(m,6H), 7.62(d,1H), 7.53-7.29(m,11H), 7.20(dt,2H), 7.11-7.04(m,4H), 6.89(d,1H), 6.87(t,1H), 6.75(t,1H), 6.74(d,1H), 6.66(dd,1H), 6.42(dd,1H), 5.68(d,1H), 1.52(s,6H)
268	7.93(d,2H), 7.82(d,1H), 7.80(d,1H), 7.72-7.58(m,5H), 7.53-7.36(m,7H), 7.33-7.05(m,9H), 6.87-6.84(m,2H), 6.79(dd,1H), 6.75(dd,2H), 6.61(m,1H), 6.23(d,1H), 5.49(d,1H), 1.61(s,6H)
277	7.92(d,2H), 7.89(d,1H), 7.82(d,1H), 7.72(d,1H), 7.62(dd,1H), 7.59(d,1H), 7.48-7.41(m,4H), 7.32-7.06(m,10H), 6.87(d,1H), 6.81(dd,1H), 6.77-6.73(m,3H), 6.61(m,1H), 6.23(d,1H), 5.72(dd,1H), 1.61(s,6H)
280	7.92(d,2H), 7.89(d,1H), 7.82(d,1H), 7.72(d,1H), 7.59(dd,2H), 7.49-7.40(m,4H), 7.33-7.26(m,4H), 7.21-7.05(m,14H), 6.81-6.71(m,6H), 6.62(m,1H), 6.56(dd,1H), 5.72(d,1H), 5.68(t,1H)

【0285】

比較例 1

アノードとして、コーニング (Corning) 社の $15 \Omega / \text{cm}^2$ ($1, 200 \text{ \AA}$) ITO ガラス基板を利用した。該 ITO ガラス基板を、 $50 \text{ mm} \times 50 \text{ mm} \times 0.7 \text{ mm}$ サイズに切り、イソプロピルアルコールと純水とを利用し、各 5 分間超音波洗浄した後、30 分間紫外線を照射してオゾンに露出させて洗浄し、真空蒸着装置に該 ITO ガラス基板を設けた。

【0286】

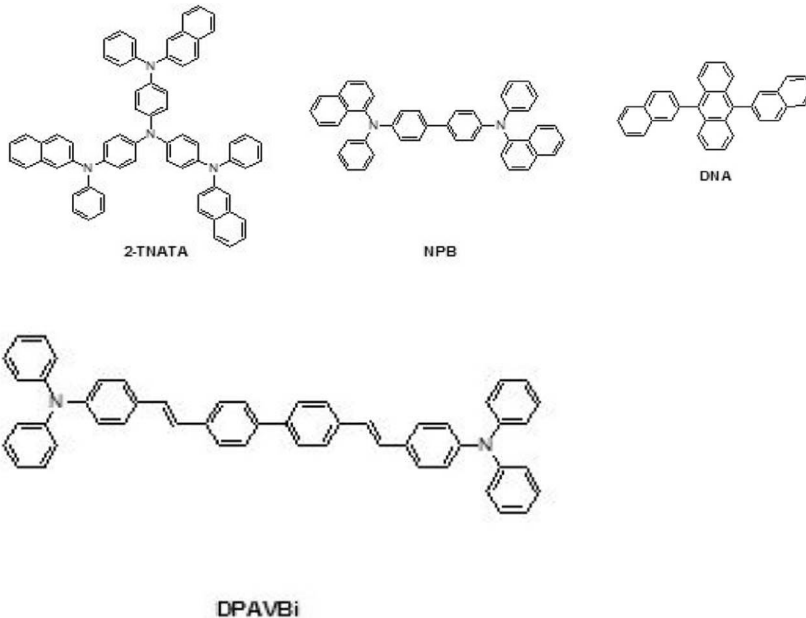
該 ITO ガラス基板上部に、まず、正孔注入層として公知の物質である 2-TNATA

を真空蒸着し、60 nm厚に形成した後、次に、正孔輸送性化合物として、正孔輸送物質である4,4'-ビス[N-(1-ナフチル)-N-フェニルアミノ]ビフェニル(NPB)を30 nm厚に真空蒸着して正孔輸送層を形成した。

【0287】

正孔輸送層上部に、公知の青色蛍光ホストとして、9,10-ジ(ナフタレン-2-イル)アントラセン(DNA)と、青色蛍光ドーパントとして、公知の化合物である4,4'-ビス[2-(4-(N,N-ジフェニルアミノ)フェニル)ビニル]ビフェニル(DPAVB i)とを重量比98:2で同時蒸着し、30 nm厚に発光層を形成した。

【化86】



【0288】

次に、発光層上部に、電子輸送層として、Alq3を30 nm厚に蒸着した後、電子輸送層上部に、ハロゲン化アルカリ金属であるLiFを、電子注入層として、1 nm厚に蒸着し、Alを300 nm厚に真空蒸着し、LiF/Al電極(カソード)を形成することにより、有機発光素子を製造した。

【0289】

実施例1～実施例28

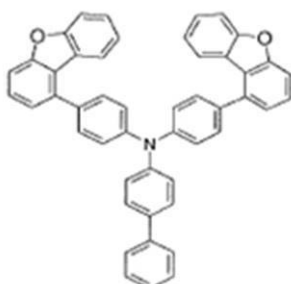
正孔輸送層の形成時、NPBの代わりに、下記表3に記載された化合物を利用したことを除いては、比較例1と同様に有機発光素子を作製した。

【0290】

比較例2

正孔輸送層の形成時、NPBの代わりに、下記化合物Aを利用したことを除いては、比較例1と同様に有機発光素子を作製した。

【化87】



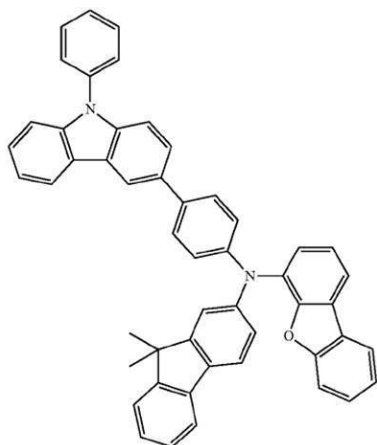
・・・＜化合物 A＞

【0291】

比較例 3

正孔輸送層の形成時、NPBの代わりに、下記化合物 B を利用したことを除いては、比較例 1 と同様に有機発光素子を作製した。

【化 88】



10

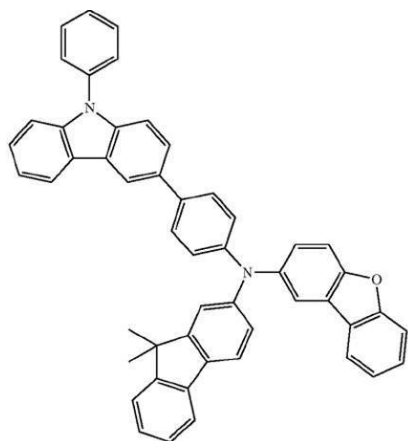
・・・＜化合物 B＞

【0292】

比較例 4

正孔輸送層の形成時、NPBの代わりに、下記化合物 C を利用したことを除いては、比較例 1 と同様に有機発光素子を作製した。

【化 89】



30

＜化合物 C＞

【0293】

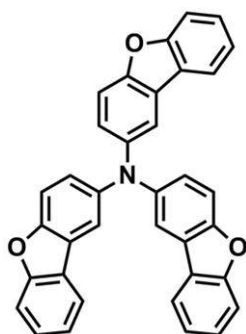
比較例 5

正孔輸送層の形成時、NPBの代わりに、下記化合物 D を利用したことを除いては、比較例 1 と同様に有機発光素子を作製した。

40

50

【化 9 0】



10

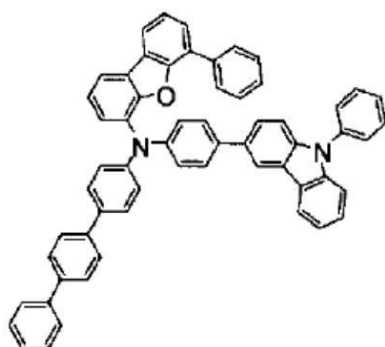
・・・＜化合物 D＞

【 0 2 9 4】

比較例 6

正孔輸送層の形成時、NPBの代わりに、下記化合物 E を利用したことを除いては、比較例 1 と同様に有機発光素子を作製した。

【化 9 1】



20

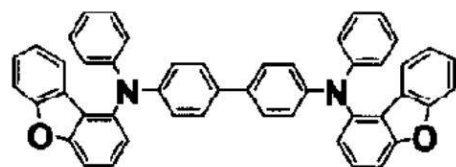
・・・＜化合物 E＞

【 0 2 9 5】

比較例 7

正孔輸送層の形成時、NPBの代わりに、下記化合物 F を利用したことを除いては、比較例 1 と同様に有機発光素子を作製した。

【化 9 2】



40

・・・＜化合物 F＞

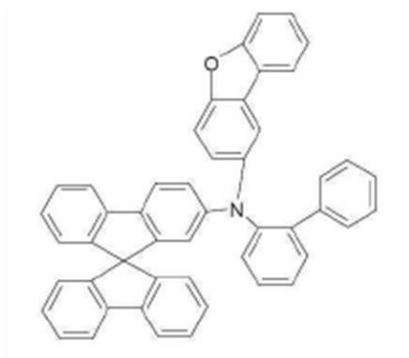
【 0 2 9 6】

比較例 8

正孔輸送層の形成時、NPBの代わりに、下記化合物 G を利用したことを除いては、比較例 1 と同様に有機発光素子を作製した。

50

【化 9 3】



10

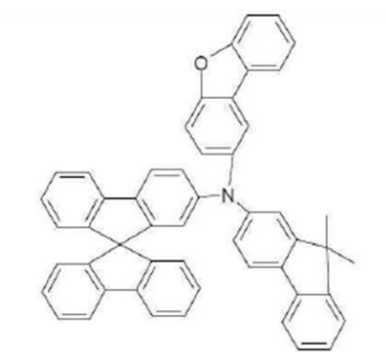
・・・＜化合物 G＞

【 0 2 9 7】

比較例 9

正孔輸送層の形成時、NPBの代わりに、下記化合物Hを利用したことを除いては、比較例1と同様に有機発光素子を作製した。

【化 9 4】



20

・・・＜化合物 H＞

【 0 2 9 8】

実施例1～実施例28、及び比較例1～比較例9で作製した有機発光素子に対して、電流密度 50 mA/cm^2 における駆動時の素子性能（駆動電圧、輝度、効率及び色座標）と、電流密度 100 mA/cm^2 における初期輝度が50%低下するまでの時間（半減寿命）とを測定して下記表2に示した。

30

－輝度：電流－電圧計（Kethley S M U 2 3 6）で電源を供給し、輝度計 P R 6 5 0 を利用して測定した。

－効率：電流・電圧計（Kethley S M U 2 3 6）で電源を供給し、輝度計 P R 6 5 0 を利用して測定した。

40

50

【表 3】

	正孔輸送材料	駆動電圧 (V)	電流密度 (mA/cm ²)	輝度 (cd/m ²)	効率 (cd/A)	発光色	半減寿命 (hr @100mA/cm ²)
実施例1	化合物1	4.32	50	3670	7.34	青色	362
実施例2	化合物2	4.21	50	3715	7.43	青色	353
実施例3	化合物3	4.22	50	3665	7.33	青色	372
実施例4	化合物4	4.85	50	3876	7.75	青色	374
実施例5	化合物5	4.26	50	3730	7.46	青色	374
実施例6	化合物6	4.26	50	3730	7.46	青色	374
実施例7	化合物8	4.67	50	3985	7.97	青色	356
実施例8	化合物16	4.72	50	3451	6.90	青色	382
実施例9	化合物21	4.25	50	3630	7.26	青色	384
実施例10	化合物37	4.41	50	3725	7.45	青色	343
実施例11	化合物93	4.26	50	3630	7.26	青色	366
実施例12	化合物94	4.32	50	3670	7.34	青色	378
実施例13	化合物95	4.45	50	3440	6.88	青色	325
実施例14	化合物101	4.60	50	3490	6.98	青色	330
実施例15	化合物187	4.55	50	3655	7.31	青色	375
実施例16	化合物188	4.69	50	3492	6.98	青色	356
実施例17	化合物204	4.82	50	3540	7.08	青色	381
実施例18	化合物210	4.96	50	3987	7.97	青色	351
実施例19	化合物213	4.74	50	3859	7.72	青色	348
実施例20	化合物219	4.73	50	3565	7.13	青色	316
実施例21	化合物240	4.89	50	3529	7.06	青色	355
実施例22	化合物251	4.82	50	3983	7.97	青色	327
実施例23	化合物253	4.76	50	3852	7.70	青色	331
実施例24	化合物256	4.96	50	3874	7.75	青色	326
実施例25	化合物267	4.81	50	3721	7.44	青色	312
実施例27	化合物268	4.53	50	3652	7.30	青色	332
実施例27	化合物2778	4.56	50	3552	7.10	青色	351
実施例28	化合物280	4.66	50	3512	7.02	青色	366
比較例1	NPB	7.01	50	2645	5.29	青色	258
比較例2	化合物A	6.50	50	2805	5.61	青色	220
比較例3	化合物B	5.81	50	3105	6.21	青色	180
比較例4	化合物C	6.02	50	3205	6.41	青色	210
比較例5	化合物D	8.21	50	1851	3.70	青色	127
比較例6	化合物E	6.01	50	2353	5.98	青色	231
比較例7	化合物F	7.32	50	2553	5.90	青色	221
比較例8	化合物G	5.88	50	2678	5.34	青色	231
比較例9	化合物H	5.68	50	2635	5.27	青色	235

【0299】

表3から分かるように、本発明の一実施形態による化合物を、正孔輸送材料として有機電界発光素子に使用した場合、本発明の化合物を利用した実施例がいずれも公知物質であるNPBを使用した比較例1の有機発光素子に比べ、駆動電圧が改善され、効率が向上した優秀なI-V-L特性を示し、特に、寿命改善効果が卓越しており、寿命が大幅に向上するという結果を示すことを確認することができる。また、化合物A～化合物Hを使用した比較例2～比較例9と比較しても、駆動電圧が改善され、輝度、発光効率及び半減寿命に優れているということを確認することができる。

【0300】

10

20

30

40

50

本発明について、前記合成例及び前記実施例を参照して説明したが、それらは、例示的なものに過ぎず、本発明に属する技術分野の当業者であるならば、それらから多様な変形、及び均等な他の実施例が可能であるという点を理解するであろう。従って、本発明の真の技術的保護範囲は、特許請求の範囲の技術的思想によって決められるものである。

【産業上の利用可能性】

【0301】

本発明の、アミン化合物、及びそれを含んだ有機発光素子は、例えば、発光関連の技術分野に効果的に適用可能である。

【符号の説明】

【0302】

10, 20, 30, 40 有機発光素子

110 第1電極

150 有機層

190 第2電極

210 第1キャッピング層

220 第2キャッピング層

10

20

30

40

50

【図面】

【図 1】

10

190
150
110

【図 2】

20

190
150
110
210

10

20

30

40

50

【図 3】

30

220
190
150
110

【図 4】

40

220
190
150
110
210

10

20

30

40

50

フロントページの続き

(51)国際特許分類

C 0 7 D 307/91 (2006.01)

F I

C 0 7 D 405/12

C S P

C 0 7 D 307/91

- (72)発明者 大韓民国 京畿道 龍仁市 器興區 三星路 1 三星ディスプレイ株式會社内
ウンジェ チョン
- (72)発明者 大韓民国 京畿道 龍仁市 器興區 三星路 1 三星ディスプレイ株式會社内
サンヒョン ハン
- (72)発明者 大韓民国 京畿道 龍仁市 器興區 三星路 1 三星ディスプレイ株式會社内
ヨングク キム
- (72)発明者 大韓民国 京畿道 龍仁市 器興區 三星路 1 三星ディスプレイ株式會社内
ソクファン ファン
- (72)発明者 大韓民国 京畿道 龍仁市 器興區 三星路 1 三星ディスプレイ株式會社内
ソクファン ファン

審査官 酒井 康博

(56)参考文献

国際公開第2017/148564 (WO, A1)
米国特許出願公開第2016/0365517 (US, A1)
米国特許出願公開第2017/0213970 (US, A1)
国際公開第2017/012687 (WO, A1)
国際公開第2017/207596 (WO, A1)
中国特許出願公開第105349134 (CN, A)
特開2014-208614 (JP, A)
韓国公開特許第10-2017-0095755 (KR, A)
米国特許出願公開第2016/0093810 (US, A1)
米国特許出願公開第2016/0126469 (US, A1)
米国特許出願公開第2013/0087776 (US, A1)
国際公開第2017/041874 (WO, A1)
国際公開第2017/148565 (WO, A1)

(58)調査した分野 (Int.Cl., DB名)

H10K 85/60
H10K 50/00 - 50/88
C09K 11/06
C07D 405/12
C07D 307/91
Caplus/REGISTRY (STN)