

(19)日本国特許庁(JP)

(12)特許公報(B2)

(11)特許番号
特許第7556934号
(P7556934)

(45)発行日 令和6年9月26日(2024.9.26)

(24)登録日 令和6年9月17日(2024.9.17)

(51)国際特許分類		F I		
C 0 7 F	5/02 (2006.01)	C 0 7 F	5/02	A C S P
H 1 0 K	50/10 (2023.01)	H 0 5 B	33/14	B
H 1 0 K	50/16 (2023.01)	H 0 5 B	33/22	B
H 1 0 K	50/15 (2023.01)	H 0 5 B	33/22	D
H 0 5 B	33/10 (2006.01)	H 0 5 B	33/10	
請求項の数 21 (全81頁) 最終頁に続く				
(21)出願番号	特願2022-500085(P2022-500085)	(73)特許権者	507074834	
(86)(22)出願日	令和2年7月16日(2020.7.16)		エスエフシー カンパニー リミテッド	
(65)公表番号	特表2022-540575(P2022-540575 A)		大韓民国, チュンチョンブクード, チョ ンジューシ, チョンウォンーク, オチャ ンーウブ, グワハクサンオブ5口89	
(43)公表日	令和4年9月16日(2022.9.16)	(74)代理人	100121382	
(86)国際出願番号	PCT/KR2020/009383		弁理士 山下 託嗣	
(87)国際公開番号	WO2021/010770	(72)発明者	シム, ソ ヨン	
(87)国際公開日	令和3年1月21日(2021.1.21)		大韓民国, 28122 チュンチョンブ クード, チョンジューシ, チョンウォン ーグ, オチャンーウブ, グワハクサノブ 5ー口, 89	
審査請求日	令和5年4月5日(2023.4.5)	(72)発明者	ユ, セ ジン	
(31)優先権主張番号	10-2019-0086567		大韓民国, 28122 チュンチョンブ クード, チョンジューシ, チョンウォン	
(32)優先日	令和1年7月17日(2019.7.17)		最終頁に続く	
(33)優先権主張国・地域又は機関	韓国(KR)			

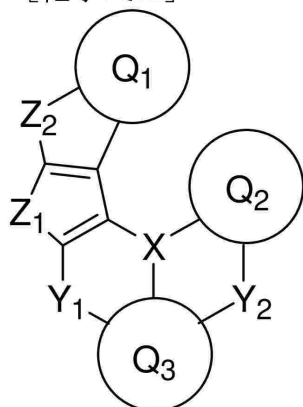
(54)【発明の名称】 新規なホウ素化合物及びこれを含む有機発光素子

(57)【特許請求の範囲】

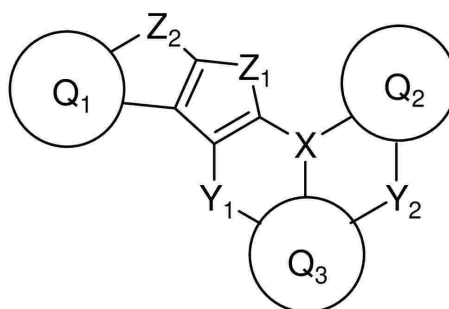
【請求項1】

下記【化学式A】から下記【化学式D】のうちのいずれか一つで表されるホウ素化合物。

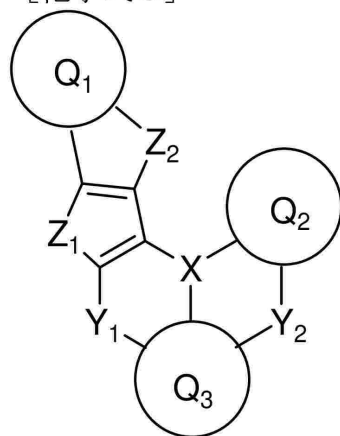
[化学式A]



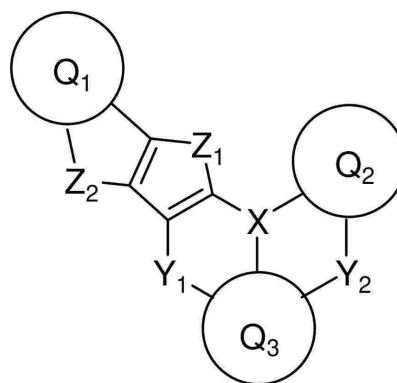
[化学式B]



[化学式C]



[化学式D]



(前記 [化学式A] から前記 [化学式D] 中、

前記 Q_1 から Q_3 は、それぞれ互いに同一でも異なってもよく、互いに独立して、置換もしくは無置換の炭素数 6 ～ 50 の芳香族炭化水素環、又は置換もしくは無置換の炭素数 2 ～ 50 の芳香族複素環であり、

前記 X は、 B であり、

前記 Y_1 及び Y_2 は、それぞれ互いに同一でも異なってもよく、互いに独立して、 $N-R_1$ 、 CR_2R_3 、 O 、 S 及び SiR_4R_5 の中から選択されるいずれか一つであり、

前記 Z_1 及び Z_2 は、それぞれ互いに同一でも異なってもよく、互いに独立して、 $N-R_6$ 、 CR_7R_8 、 O 、 S 及び SiR_9R_{10} の中から選択されるいずれか一つであり、

前記置換基 R_1 から R_{10} は、それぞれ互いに同一でも異なってもよく、互いに独立して、水素、重水素、置換もしくは無置換の炭素数 1 ～ 30 のアルキル基、置換もしくは無置換の炭素数 6 ～ 50 のアリール基、置換もしくは無置換の炭素数 3 ～ 30 のシクロアルキル基、置換もしくは無置換の炭素数 2 ～ 50 のヘテロアリール基、置換もしくは無置換の炭素数 1 ～ 30 のアルコキシ基、置換もしくは無置換の炭素数 6 ～ 30 のアリールオキシ基、置換もしくは無置換の炭素数 1 ～ 30 のアルキルチオキシ基、置換もしくは無置換の炭素数 6 ～ 30 のアリールチオキシ基、置換もしくは無置換の炭素数 1 ～ 30 のアルキルアミン基、置換もしくは無置換の炭素数 6 ～ 30 のアリールアミン基、置換もしくは無置換の炭素数 1 ～ 30 のアルキルシリル基、置換もしくは無置換の炭素数 6 ～ 30 のアリールシリル基、ニトロ基、シアノ基及びハロゲン基の中から選択されるいずれか一つであり、

前記 R_2 及び R_3 、 R_4 及び R_5 、 R_7 及び R_8 、 R_9 及び R_{10} は、それぞれ互いに連結されて脂環族又は芳香族の単環又は多環をさらに形成することができ、

前記 Y_1 内の置換基 $R_1 \sim R_5$ は、前記 Q_3 環と結合して脂環族又は芳香族の単環又は多環をさらに形成することができ、

前記 Y_2 内の置換基 $R_1 \sim R_5$ は、前記 Q_2 環又は Q_3 環と結合して脂環族又は芳香族の単環又は多環をさらに形成することができ、

前記連結基 Z_2 内の置換基 $R_6 \sim R_{10}$ は、前記 Q_1 環と結合して脂環族又は芳香族の単環又は多環をさらに形成することができ、

前記〔化学式 A〕において、

前記 Z_1 内の置換基 $R_6 \sim R_{10}$ は、それぞれ Z_2 又は Y_1 と互いに連結されて脂環族又は芳香族の単環又は多環をさらに形成することができ、

前記〔化学式 B〕において、

前記 Z_1 内の置換基 $R_6 \sim R_{10}$ は、それぞれ Z_2 と互いに連結されて脂環族又は芳香族の単環又は多環をさらに形成することができ、

前記〔化学式 C〕において、

前記 Z_1 内の置換基 $R_6 \sim R_{10}$ は、それぞれ Y_1 と互いに連結されて脂環族又は芳香族の単環又は多環をさらに形成することができ、

前記〔化学式 D〕において、

前記 Z_1 内の置換基 $R_6 \sim R_{10}$ は、それぞれ Q_1 と互いに連結されて脂環族又は芳香族の単環又は多環をさらに形成することができる。

前記〔化学式 A〕から前記〔化学式 D〕中の前記「置換もしくは無置換の」における「置換」は、重水素、シアノ基、ハロゲン基、ヒドロキシ基、ニトロ基、炭素数 1～24 のアルキル基、炭素数 1～24 のハロゲン化アルキル基、炭素数 2～24 のアルケニル基、炭素数 2～24 のアルキニル基、炭素数 3～24 のシクロアルキル基、炭素数 1～24 のヘテロアルキル基、炭素数 6～24 のアリール基、炭素数 7～24 のアリールアルキル基、炭素数 7～24 のアルキルアリール基、炭素数 2～50 のヘテロアリール基、炭素数 2～24 のヘテロアリールアルキル基、炭素数 1～24 のアルコキシ基、炭素数 1～24 のアルキルアミノ基、炭素数 12～24 のジアリールアミノ基、炭素数 2～24 のジヘテロアリールアミノ基、炭素数 7～24 のアリール（ヘテロアリール）アミノ基、炭素数 1～24 のアルキルシリル基、炭素数 6～24 のアリールシリル基、炭素数 6～24 のアリールオキシ基、及び炭素数 6～24 のアリールチオニル基よりなる群から選択された一つ以上の置換基で置換されることを意味する。）

【請求項 2】

前記〔化学式 A〕から前記〔化学式 D〕における連結基 Y_1 及び Y_2 のうちの少なくとも 1 つが NR_1 であり、前記 R_1 は、請求項 1 で定義されたのと同じである請求項 1 に記載のホウ素化合物。

【請求項 3】

前記置換基 R_1 が、置換もしくは無置換の炭素数 6～50 のアリール基、又は置換もしくは無置換の炭素数 2～50 のヘテロアリール基である請求項 2 に記載のホウ素化合物。

【請求項 4】

前記〔化学式 A〕から前記〔化学式 D〕における連結基 Y_1 及び Y_2 のうちの少なくとも一つは、互いに同一でも異なってもよく、それぞれ下記〔構造式 A〕で表される連結基である請求項 2 に記載のホウ素化合物。

〔構造式 A〕

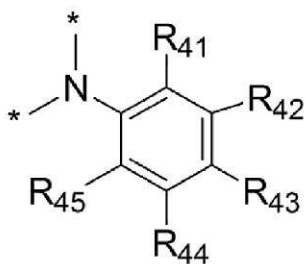
10

20

30

40

50



10

(前記〔構造式 A〕中の「-＊」は、前記置換基 Z₁に連結された炭素原子、又は Z₁を含む五角環内の Y₁に連結された炭素原子、Q₂環における芳香族炭素原子、又は Q₃環における芳香族炭素原子とそれぞれ結合するための結合サイトを意味し、

前記〔構造式 A〕中の前記 R₄₁から R₄₅は、それぞれ互いに同一でも異なってもよく、互いに独立して、水素、重水素、置換もしくは無置換の炭素数 1～30 のアルキル基、置換もしくは無置換の炭素数 6～50 のアリール基、置換もしくは無置換の炭素数 3～30 のシクロアルキル基、置換もしくは無置換の炭素数 2～50 のヘテロアリール基、置換もしくは無置換の炭素数 1～30 のアルコキシ基、置換もしくは無置換の炭素数 6～30 のアリールオキシ基、置換もしくは無置換の炭素数 1～30 のアルキルチオキシ基、置換もしくは無置換の炭素数 5～30 のアリールチオキシ基、置換もしくは無置換の炭素数 1～30 のアルキルアミン基、置換もしくは無置換の炭素数 5～30 のアリールアミン基、置換もしくは無置換の炭素数 1～30 のアルキルシリル基、置換もしくは無置換の炭素数 5～30 のアリールシリル基、ニトロ基、シアノ基、ハロゲン基の中から選択されるいずれか一つであり、前記 R₄₁及び R₄₅は、それぞれ前記 Q₂環又は Q₃環と結合して脂環族又は芳香族の単環又は多環をさらに形成することができる。)

20

【請求項 5】

前記〔化学式 A〕から前記〔化学式 D〕における連結基 Y₁及び Y₂は、それぞれ同一でも異なってもよく、N-R₁であり、R₁は、請求項 1 で定義されたのと同じである請求項 2 に記載のホウ素化合物。

【請求項 6】

前記〔化学式 A〕から前記〔化学式 D〕における連結基 Y₁及び Y₂のうちの少なくとも一つが酸素 (O) 原子である請求項 1 に記載のホウ素化合物。

30

【請求項 7】

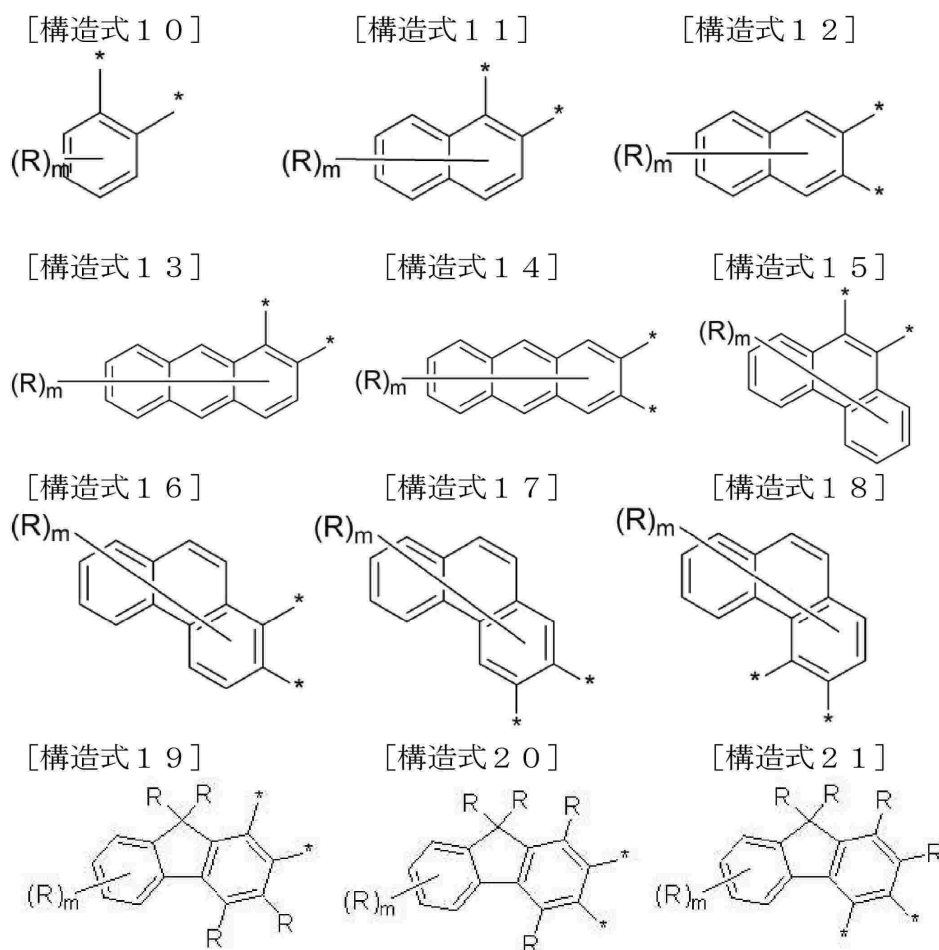
前記 Q₁から Q₃の芳香族炭化水素環は、それぞれ互いに同一でも異なってもよく、互いに独立して、置換もしくは無置換の炭素数 6～50 の芳香族炭化水素環である請求項 1 に記載のホウ素化合物。

【請求項 8】

前記〔化学式 A〕から前記〔化学式 D〕中の Q₁及び Q₂の芳香族炭化水素環は、同一でも異なってもよく、互いに独立して、下記〔構造式 10〕から前記〔構造式 21〕の中から選択されるいずれか一つである請求項 7 に記載のホウ素化合物。

40

50



(前記 [構造式 1 0] から前記 [構造式 2 1] 中の「-*」は、前記 Q₁環における芳香族環内の炭素が置換基 Z₂、又は置換基 Z₂を含む五角環内の炭素原子と結合するための結合サイトを意味するか、或いは前記 Q₂環における芳香族環内の炭素数が X 又は連結基 Y₂と結合するための結合サイトを意味し、

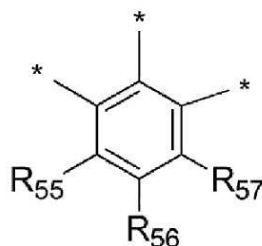
前記 [構造式 1 0] から前記 [構造式 2 1] 中の前記 R は、それぞれ互いに同一でも異なってもよく、互いに独立して、水素、重水素、置換もしくは無置換の炭素数 1～30 のアルキル基、置換もしくは無置換の炭素数 6～50 のアリール基、置換もしくは無置換の炭素数 3～30 のシクロアルキル基、置換もしくは無置換の炭素数 2～50 のヘテロアリール基、置換もしくは無置換の炭素数 1～30 のアルコキシ基、置換もしくは無置換の炭素数 6～30 のアリールオキシ基、置換もしくは無置換の炭素数 1～30 のアルキルチオキシ基、置換もしくは無置換の炭素数 5～30 のアリールチオキシ基、置換もしくは無置換の炭素数 1～30 のアルキルアミン基、置換もしくは無置換の炭素数 12～24 のジアリールアミノ基、置換もしくは無置換の炭素数 2～24 のジヘテロアリールアミノ基、置換もしくは無置換の炭素数 7～24 のアリール (ヘテロアリール) アミノ基、置換もしくは無置換の炭素数 1～30 のアルキルシリル基、置換もしくは無置換の炭素数 5～30 のアリールシリル基、シアノ基、ハロゲン基の中から選択されるいずれか一つであり、

前記 m は 1～8 の整数であり、m が 2 以上である場合又は R が 2 以上である場合には、それぞれの R は互いに同一でも異なってもよい。)

【請求項 9】

前記 [化学式 A] から前記 [化学式 D] 中の Q₃の芳香族炭化水素環は、下記 [構造式 B] で表される環である請求項 7 に記載のホウ素化合物。

〔構造式 B〕



10

（前記〔構造式 B〕中の「-*」は、Q₃における芳香族環内の炭素が連結基 Y₁、X 及び連結基 Y₂とそれぞれ結合するための結合サイトを意味し、

前記〔構造式 B〕中の前記 R₅₅から R₅₇は、それぞれ互いに同一でも異なってもよく、互いに独立して、水素、重水素、置換もしくは無置換の炭素数 1～30 のアルキル基、置換もしくは無置換の炭素数 6～50 のアリール基、置換もしくは無置換の炭素数 3～30 のシクロアルキル基、置換もしくは無置換の炭素数 2～50 のヘテロアリール基、置換もしくは無置換の炭素数 1～30 のアルコキシ基、置換もしくは無置換の炭素数 6～30 のアリールオキシ基、置換もしくは無置換の炭素数 1～30 のアルキルチオキシ基、置換もしくは無置換の炭素数 5～30 のアリールチオキシ基、置換もしくは無置換の炭素数 1～30 のアルキルアミン基、置換もしくは無置換の炭素数 12～24 のジアリールアミノ基、置換もしくは無置換の炭素数 2～24 のジヘテロアリールアミノ基、置換もしくは無置換の炭素数 7～24 のアリール（ヘテロアリール）アミノ基、置換もしくは無置換の炭素数 1～30 のアルキルシリル基、置換もしくは無置換の炭素数 5～30 のアリールシリル基、シアノ基、ハロゲン基の中から選択されるいずれか一つであり、

20

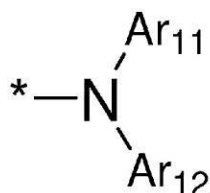
前記 R₅₅から R₅₇は、それぞれ隣り合う置換基と互いに連結されて脂環族又は芳香族の単環又は多環をさらに形成することができる。）

〔請求項 10〕

前記〔化学式 A〕から前記〔化学式 D〕における前記 Q₁～Q₃のうちの少なくとも一つは、炭素数 6～50 の芳香族炭化水素環、又は炭素数 2～50 の芳香族複素環内に下記〔構造式 F〕で表されるアリールアミノ基が結合したものである請求項 1 に記載のホウ素化合物。

30

〔構造式 F〕



40

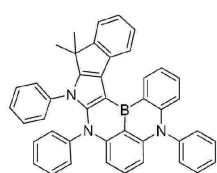
（前記〔構造式 F〕中、「-*」は、Q₁から Q₃のうちの少なくとも一つの環の芳香族炭素と結合するための結合サイトを意味し、

Ar₁₁及び Ar₁₂は、同一でも異なってもよく、互いに独立して置換もしくは無置換の炭素数 6～18 のアリール基であり、これらは互いに連結されて環を形成することができる。）

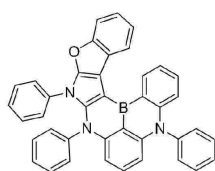
〔請求項 11〕

前記ホウ素化合物は、下記＜化学式 1＞から＜化学式 112＞の中から選択されるいずれか一つである請求項 1 に記載のホウ素化合物。

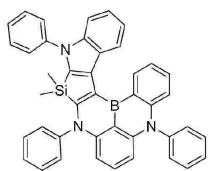
50



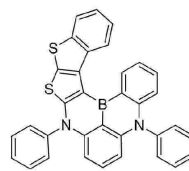
[化学式 1]



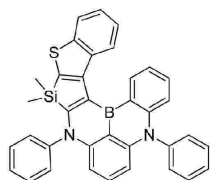
[化学式 2]



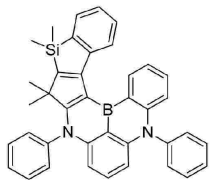
[化学式 3]



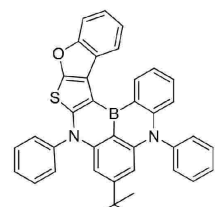
[化学式 4]



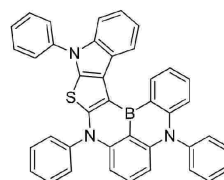
[化学式 5]



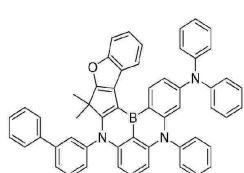
[化学式 6]



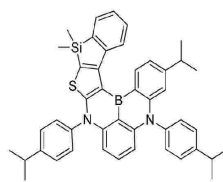
[化学式 7]



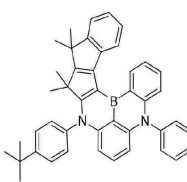
[化学式 8]



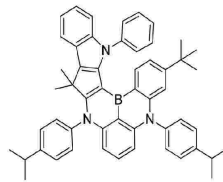
[化学式 9]



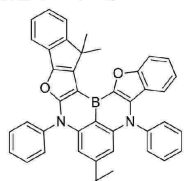
[化学式 10]



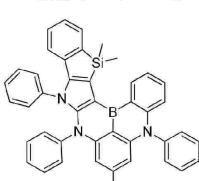
[化学式 11]



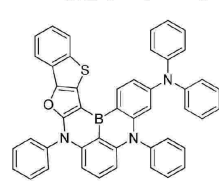
[化学式 12]



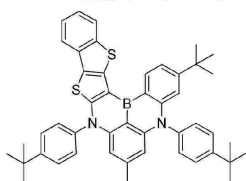
[化学式 13]



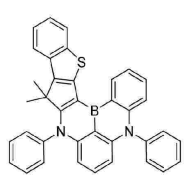
[化学式 14]



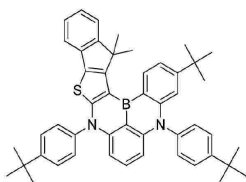
[化学式 15]



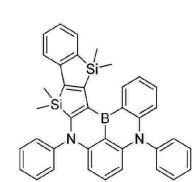
[化学式 16]



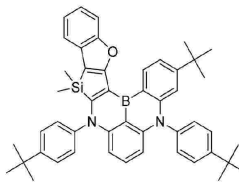
[化学式 17]



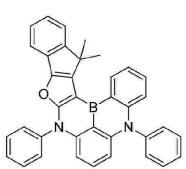
[化学式 18]



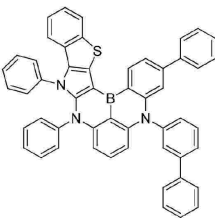
[化学式 19]



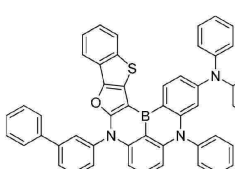
[化学式 20]



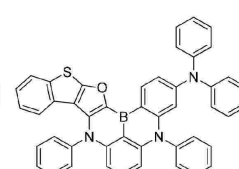
[化学式 21]



[化学式 22]



[化学式 23]



[化学式 24]

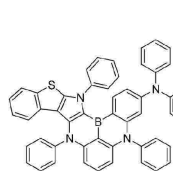
10

20

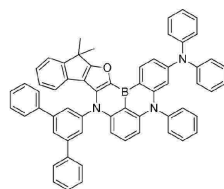
30

40

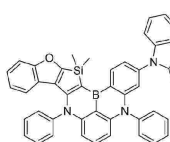
50



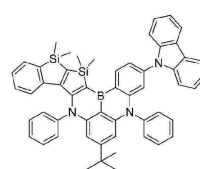
[化学式 2 5]



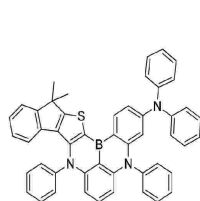
[化学式 2 6]



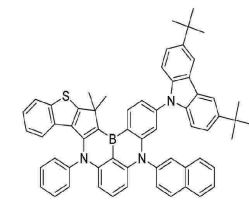
[化学式 2 7]



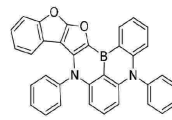
[化学式 2 8]



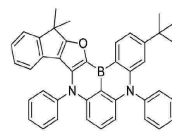
[化学式 2 9]



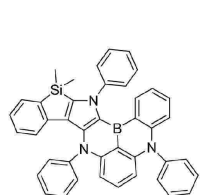
[化学式 3 0]



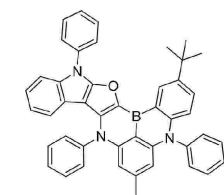
[化学式 3 1]



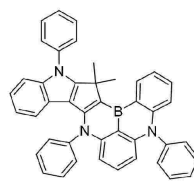
[化学式 3 2]



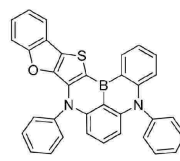
[化学式 3 3]



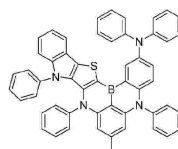
[化学式 3 4]



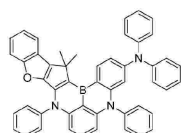
[化学式 3 5]



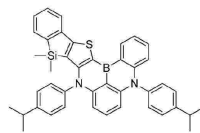
[化学式 3 6]



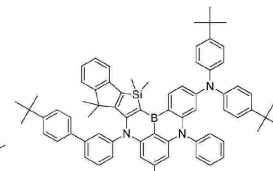
[化学式 3 7]



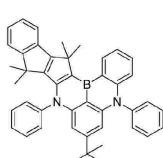
[化学式 3 8]



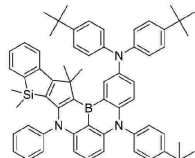
[化学式 3 9]



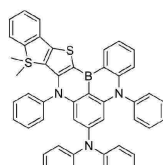
[化学式 4 0]



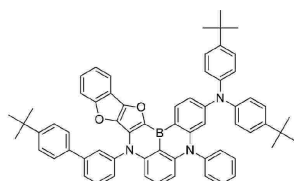
[化学式 4 1]



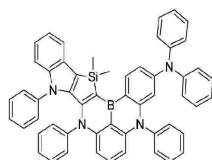
[化学式 4 2]



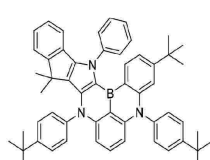
[化学式 4 3]



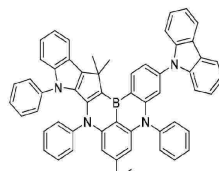
[化学式 4 4]



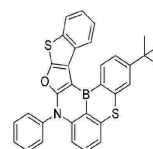
[化学式 4 5]



[化学式 4 6]



[化学式 4 7]



[化学式 4 8]

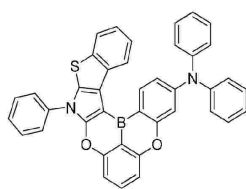
10

20

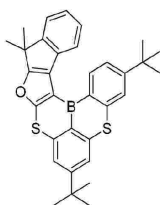
30

40

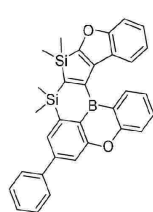
50



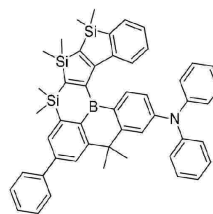
[化学式 4 9]



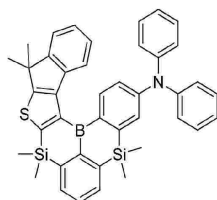
[化学式 5 0]



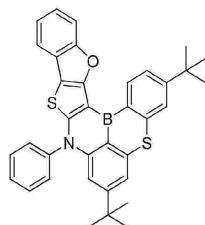
[化学式 5 1]



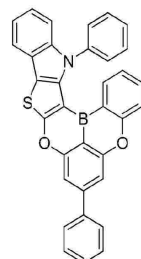
[化学式 5 2]



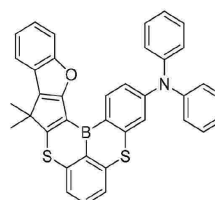
[化学式 5 3]



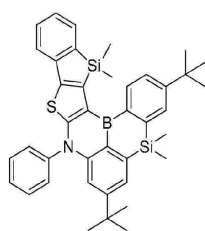
[化学式 5 4]



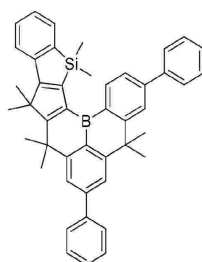
[化学式 5 5]



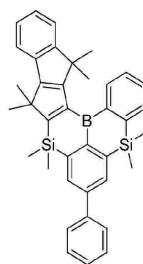
[化学式 5 6]



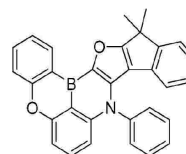
[化学式 5 7]



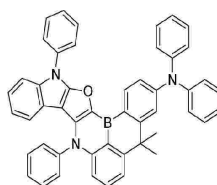
[化学式 5 8]



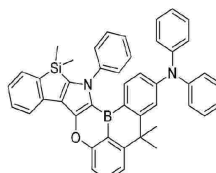
[化学式 5 9]



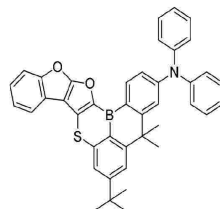
[化学式 6 0]



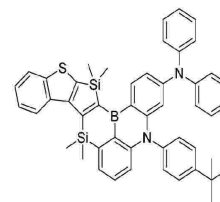
[化学式 6 1]



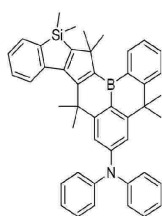
[化学式 6 2]



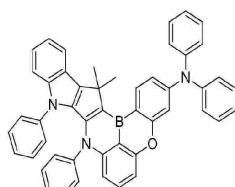
[化学式 6 3]



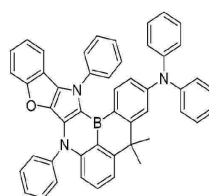
[化学式 6 4]



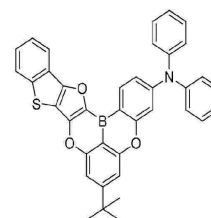
[化学式 6 5]



[化学式 6 6]



[化学式 6 7]



[化学式 6 8]

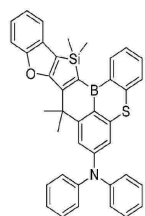
10

20

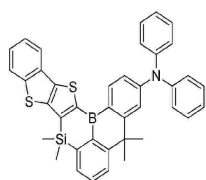
30

40

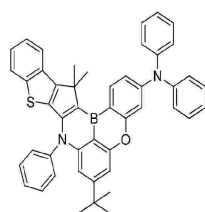
50



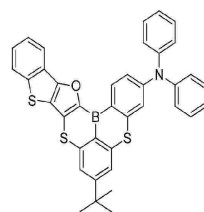
[化学式 6 9]



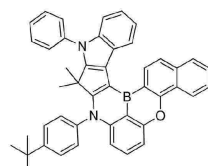
[化学式 7 0]



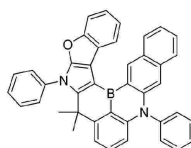
[化学式 7 1]



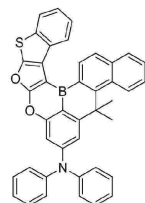
[化学式 7 2]



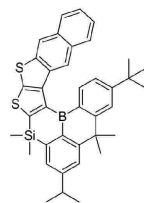
[化学式 7 3]



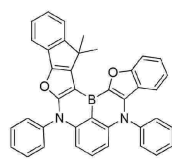
[化学式 7 4]



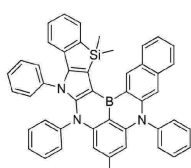
[化学式 7 5]



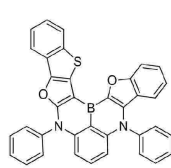
[化学式 7 6]



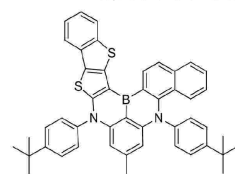
[化学式 7 7]



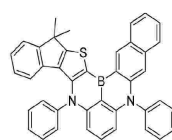
[化学式 7 8]



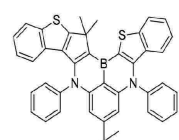
[化学式 7 9]



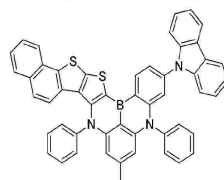
[化学式 8 0]



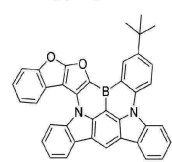
[化学式 8 1]



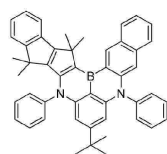
[化学式 8 2]



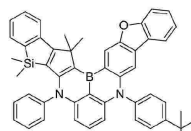
[化学式 8 3]



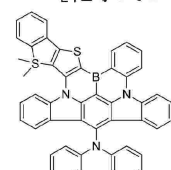
[化学式 8 4]



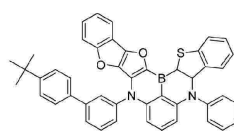
[化学式 8 5]



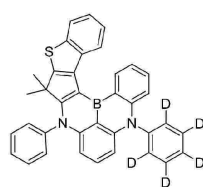
[化学式 8 6]



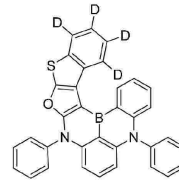
[化学式 8 7]



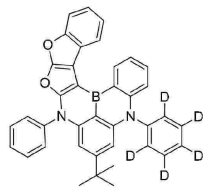
[化学式 8 8]



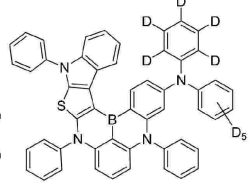
[化学式 8 9]



[化学式 9 0]



[化学式 9 1]



[化学式 9 2]

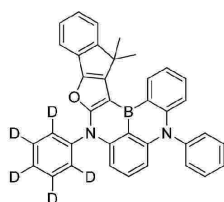
10

20

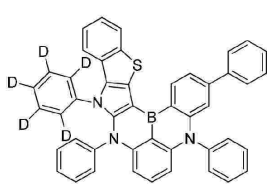
30

40

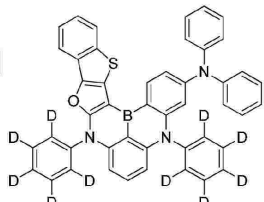
50



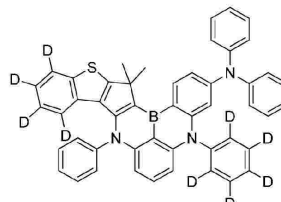
[化学式 9 3]



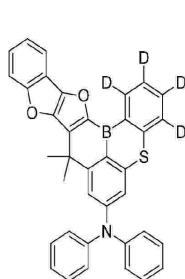
[化学式 9 4]



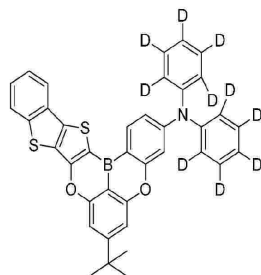
[化学式 9 5]



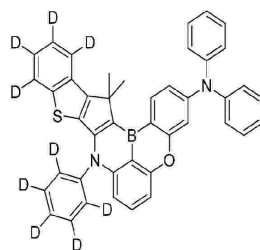
[化学式 9 6]



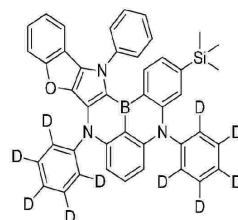
[化学式 9 7]



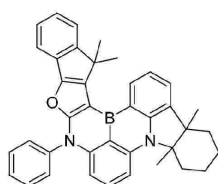
[化学式 9 8]



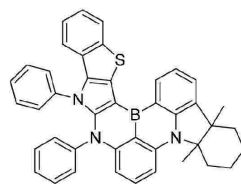
[化学式 9 9]



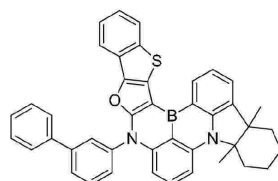
[化学式 1 0 0]



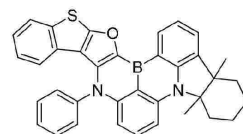
[化学式 1 0 1]



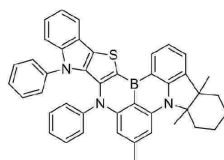
[化学式 1 0 2]



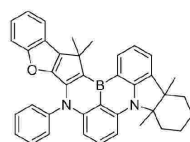
[化学式 1 0 3]



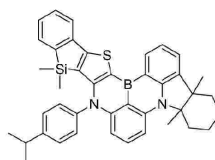
[化学式 1 0 4]



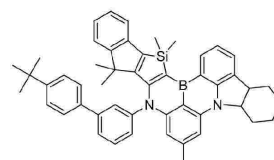
[化学式 1 0 5]



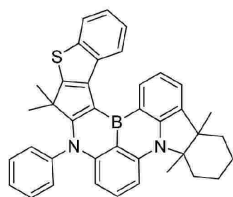
[化学式 1 0 6]



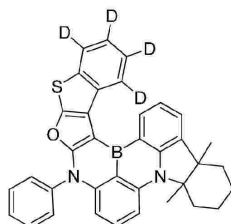
[化学式 1 0 7]



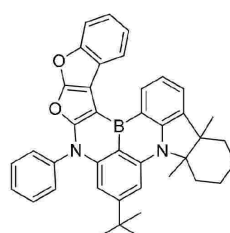
[化学式 1 0 8]



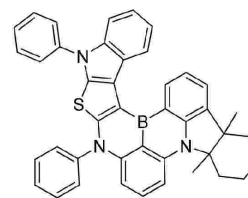
[化学式 1 0 9]



[化学式 1 1 0]



[化学式 1 1 1]



[化学式 1 1 2]

【請求項 1 2】

第一電極と、

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 電極との間に介在する有機層と、を含み、前記有機層が請求項 1 から 1 1 のいずれか一項に記載のホウ素化合物を 1 種以上含む有機発光素子。

【請求項 1 3】

前記有機層は、正孔注入層、正孔輸送層、正孔注入機能及び正孔輸送機能を同時に有する機能層、発光層、電子輸送層、及び電子注入層のうちの少なくとも一つを含む請求項 1 2 に記載の有機発光素子。

10

20

30

40

50

【請求項 14】

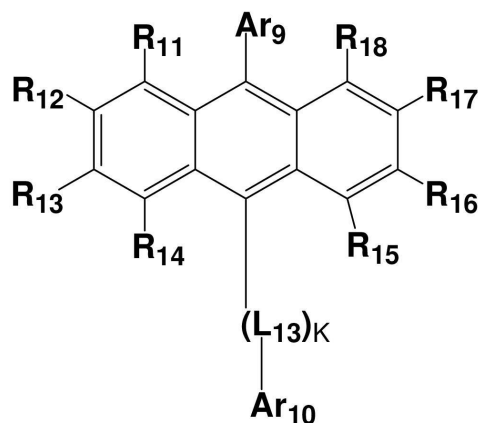
前記第 1 電極と前記第 2 電極との間に介在する有機層が発光層を含み、

前記発光層は、ホストとドーパントとからなり、前記〔化学式 A〕から前記〔化学式 D〕のうちのいずれか一つで表されるホウ素化合物がドーパントとして使用される請求項 12 に記載の有機発光素子。

【請求項 15】

前記発光層は、下記〔化学式 H〕で表されるアントラセン誘導体をホストとして使用する請求項 14 に記載の有機発光素子。

〔化学式 H〕



（前記〔化学式 H〕中、

前記置換基 R_{11} から R_{18} は、同一でも異なってもよく、それぞれ請求項 1 における R_1 から R_{10} で定義されたのと同じであり、

前記置換基 Ar_9 及び Ar_{10} は、それぞれ互いに同一でも異なってもよく、互いに独立して、水素、重水素、置換もしくは無置換の炭素数 1～30 のアルキル基、置換もしくは無置換の炭素数 6～50 のアリール基、置換もしくは無置換の炭素数 2～30 のアルケニル基、置換もしくは無置換の炭素数 2～20 のアルキニル基、置換もしくは無置換の炭素数 3～30 のシクロアルキル基、置換もしくは無置換の炭素数 5～30 のシクロアルケニル基、置換もしくは無置換の炭素数 2～50 のヘテロアリール基、置換もしくは無置換の炭素数 2～30 のヘテロシクロアルキル基、置換もしくは無置換の炭素数 1～30 のアルコキシ基、置換もしくは無置換の炭素数 6～30 のアリールオキシ基、置換もしくは無置換の炭素数 1～30 のアルキルチオキシ基、置換もしくは無置換の炭素数 6～30 のアリールチオキシ基、置換もしくは無置換の炭素数 1～30 のアルキルアミン基、置換もしくは無置換の炭素数 6～30 のアリールアミン基、置換もしくは無置換の炭素数 1～30 のアルキルシリル基、置換もしくは無置換の炭素数 6～30 のアリールシリル基の中から選択されるいずれか一つであり、

前記連結基 L_{13} は、単結合であるか、或いは置換もしくは無置換の炭素数 6～20 のアリーレン基、又は置換もしくは無置換の炭素数 2～20 のヘテロアリーレン基の中から選択されるいずれか一つであり、

前記 k は 1～3 の整数であるが、前記 k が 2 以上である場合に、それぞれの L_{13} は互いに同一でも異なってもよい。）

【請求項 16】

前記〔化学式 H〕で表されるアントラセン誘導体は、下記〔化学式 H1〕又は下記〔化学式 H2〕で表されるアントラセン誘導体である請求項 15 に記載の有機発光素子。

10

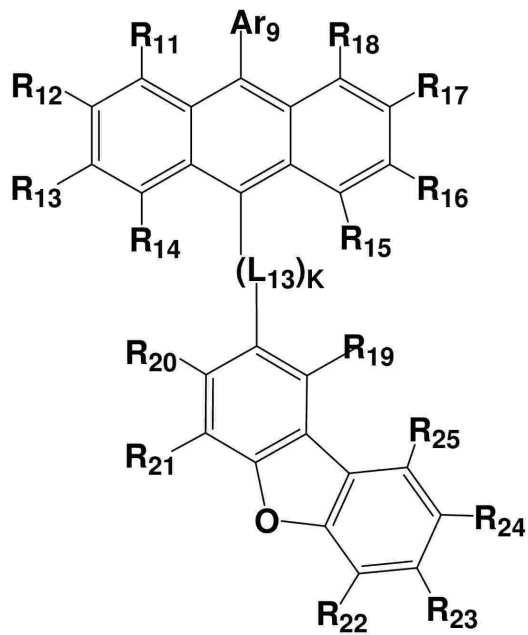
20

30

40

50

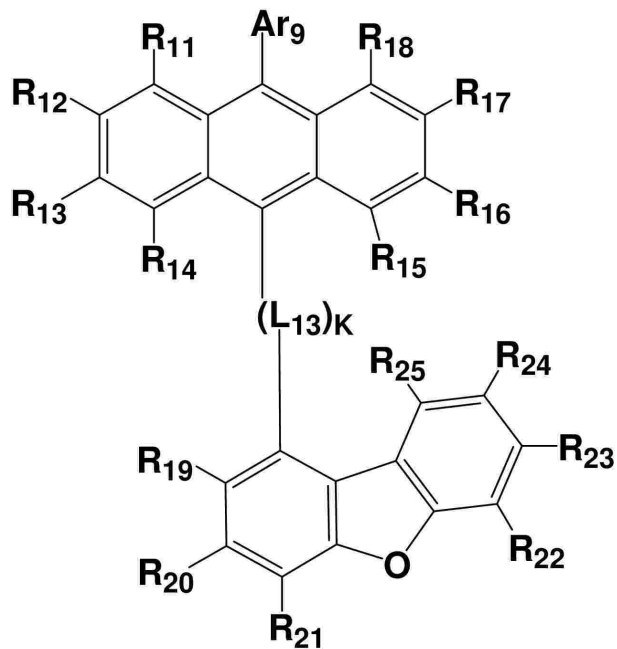
〔化学式H 1〕



10

20

〔化学式H 2〕



30

40

（前記〔化学式H 1〕及び前記〔化学式H 2〕中、
前記置換基 R₁₉～R₂₅は、同一でも異なってもよく、それぞれ請求項 1 における R₁～R₁₀で定義されたのと同じである。）

【請求項 1 7】

前記連結基 L₁₃が単結合であるか、或いは置換もしくは無置換の炭素数 6～20 のアリーレン基であり、

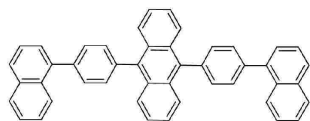
前記 k は 1～2 の整数であるが、前記 k が 2 以上である場合に、それぞれの L₁₃は互いに同一でも異なってもよい、請求項 1 5 に記載の有機発光素子

【請求項 1 8】

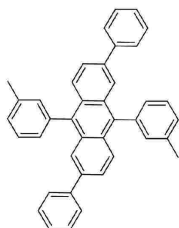
50

前記アントラセン誘導体は、下記＜化合物 1 0 1＞から下記＜化合物 1 6 6＞の中から選択されるいずれか一つである請求項 1 5 に記載の有機発光素子。

<化合物 1 0 1>



<化合物 1 0 2>

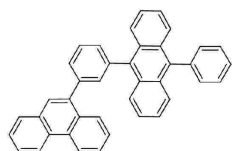


<化合物 1 0 3>

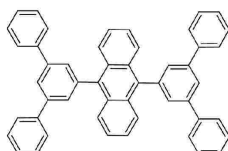


10

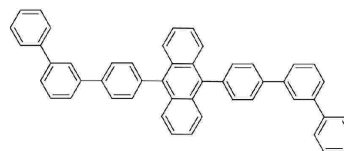
<化合物 1 0 4>



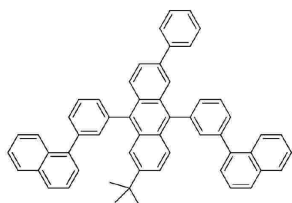
<化合物 1 0 5>



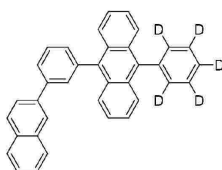
<化合物 1 0 6>



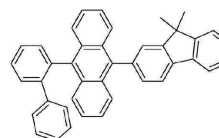
<化合物 1 0 7>



<化合物 1 0 8>

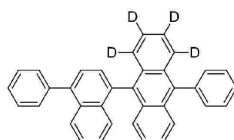


<化合物 1 0 9>

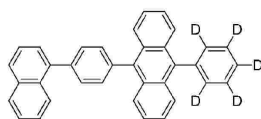


20

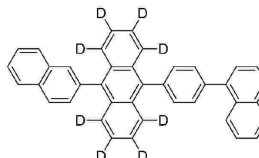
<化合物 1 1 0>



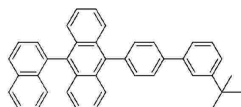
<化合物 1 1 1>



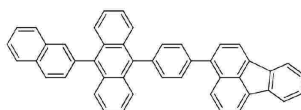
<化合物 1 1 2>



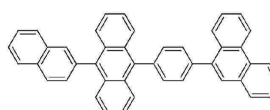
<化合物 1 1 3>



<化合物 1 1 4>

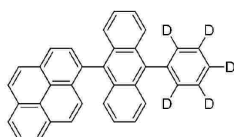


<化合物 1 1 5>

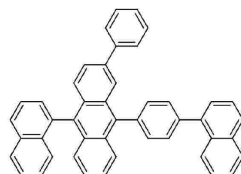


30

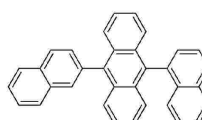
<化合物 1 1 6>



<化合物 1 1 7>



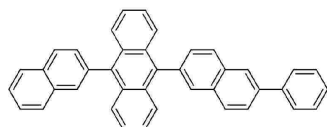
<化合物 1 1 8>



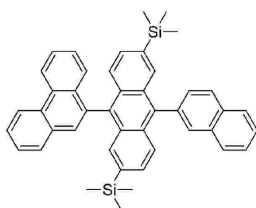
40

50

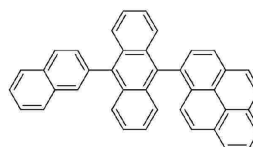
<化合物 1 1 9>



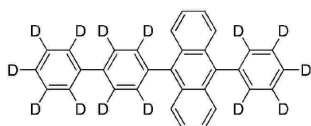
<化合物 1 2 0>



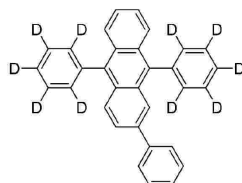
<化合物 1 2 1>



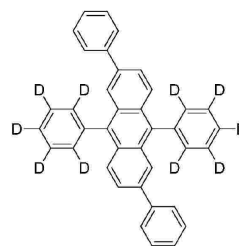
<化合物 1 2 2>



<化合物 1 2 3>

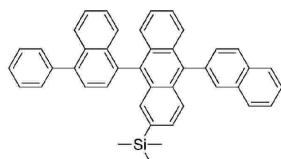


<化合物 1 2 4>

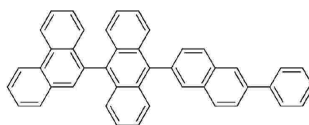


10

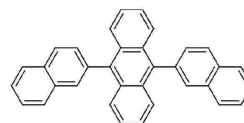
<化合物 1 2 5>



<化合物 1 2 6>

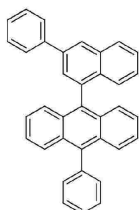


<化合物 1 2 7>

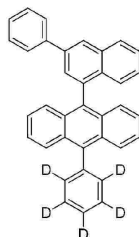


20

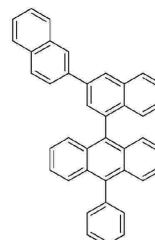
<化合物 1 2 8>



<化合物 1 2 9>

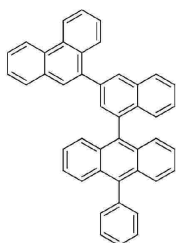


<化合物 1 3 0>

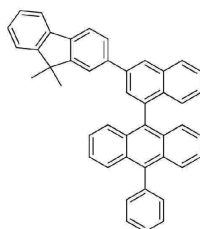


30

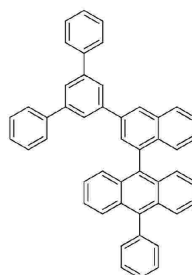
<化合物 1 3 1>



<化合物 1 3 2>



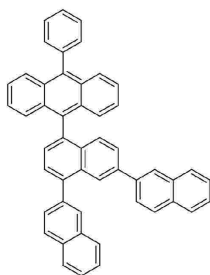
<化合物 1 3 3>



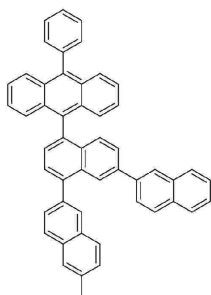
40

50

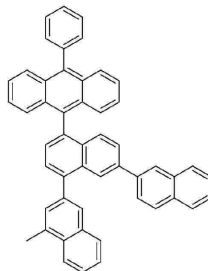
<化合物 1 3 4>



<化合物 1 3 5>

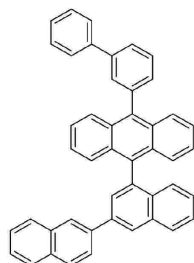


<化合物 1 3 6>

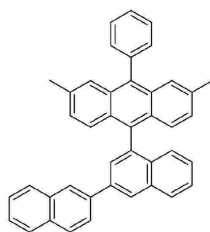


10

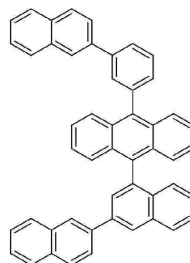
<化合物 1 3 7>



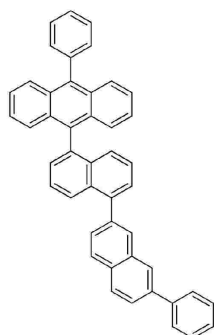
<化合物 1 3 8>



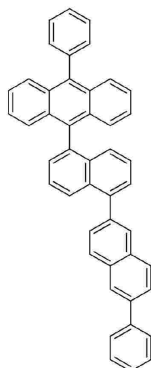
<化合物 1 3 9>



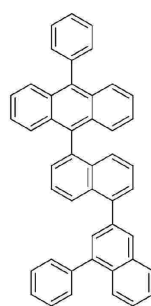
<化合物 1 4 0>



<化合物 1 4 1>

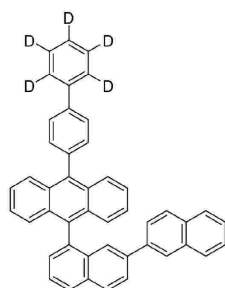


<化合物 1 4 2>

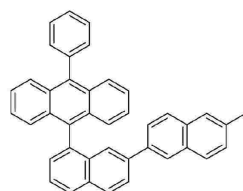


20

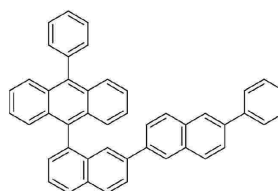
<化合物 1 4 3>



<化合物 1 4 4>



<化合物 1 4 5>

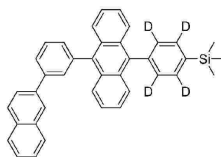


30

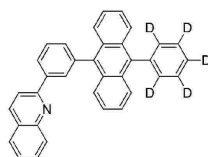
40

50

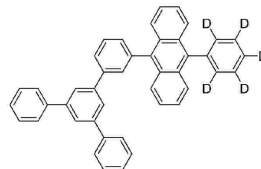
<化合物 1 4 6>



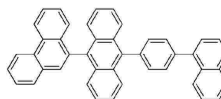
<化合物 1 4 7>



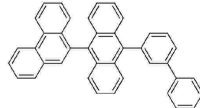
<化合物 1 4 8>



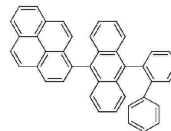
<化合物 1 4 9>



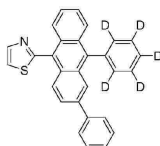
<化合物 1 5 0>



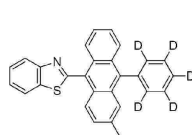
<化合物 1 5 1>



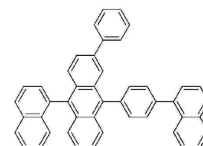
<化合物 1 5 2>



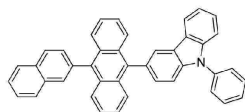
<化合物 1 5 3>



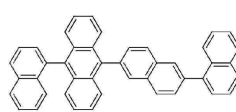
<化合物 1 5 4>



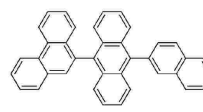
<化合物 1 5 5>



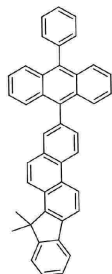
<化合物 1 5 6>



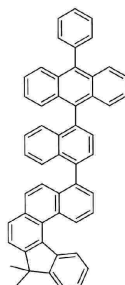
<化合物 1 5 7>



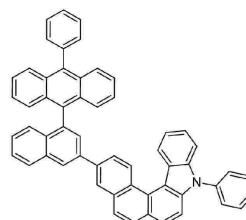
<化合物 1 5 8>



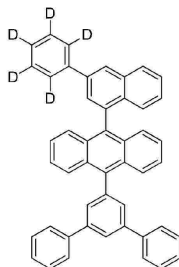
<化合物 1 5 9>



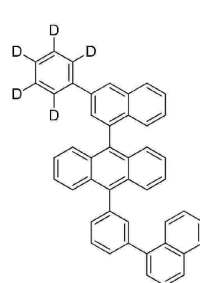
<化合物 1 6 0>



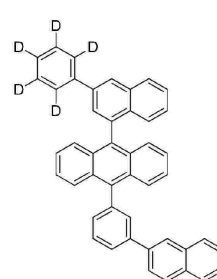
<化合物 1 6 1>



<化合物 1 6 2>



<化合物 1 6 3>



10

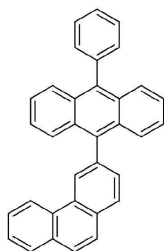
20

30

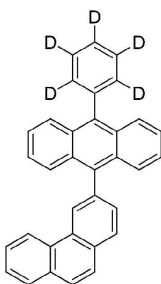
40

50

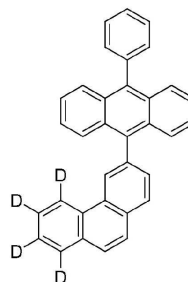
<化合物 1 6 4>



<化合物 1 6 5>



<化合物 1 6 6>



10

【請求項 1 9】

前記アントラセン誘導体は、下記<化合物 2 0 1>から下記<化合物 2 8 1>の中から選択されるいずれか一つである請求項 1 6 に記載の有機発光素子。

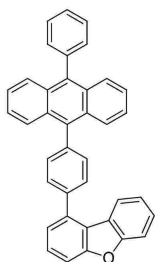
20

30

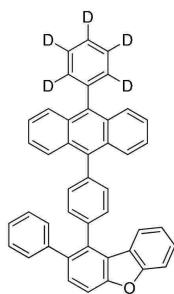
40

50

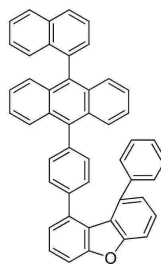
<化合物 2 0 1 >



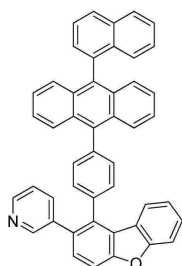
<化合物 2 0 2 >



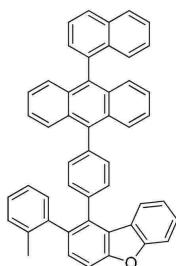
<化合物 2 0 3 >



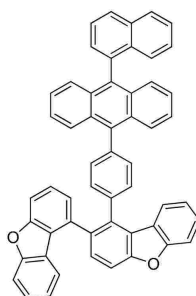
<化合物 2 0 4 >



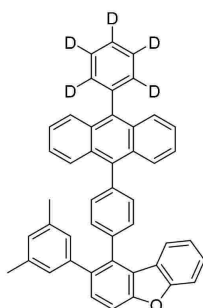
<化合物 2 0 5 >



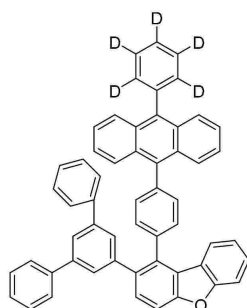
<化合物 2 0 6 >



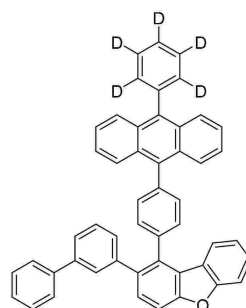
<化合物 2 0 7 >



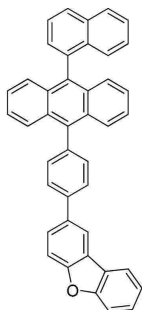
<化合物 2 0 8 >



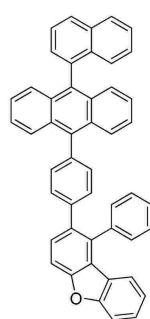
<化合物 2 0 9 >



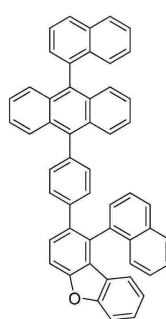
<化合物 2 1 0 >



<化合物 2 1 1 >



<化合物 2 1 2 >



10

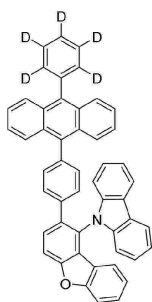
20

30

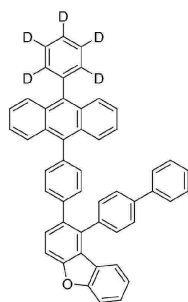
40

50

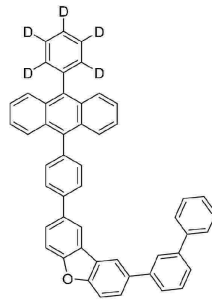
<化合物 2 1 3>



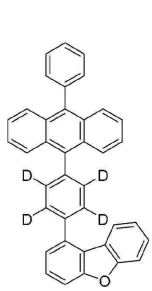
<化合物 2 1 4>



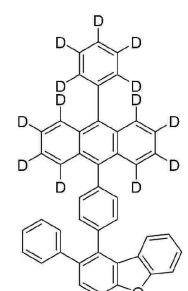
<化合物 2 1 5>



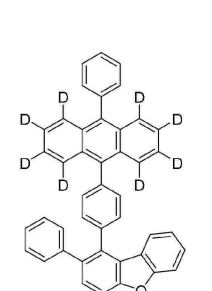
<化合物 2 1 6>



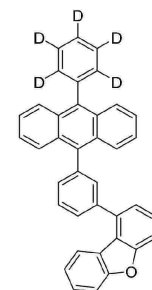
<化合物 2 1 7>



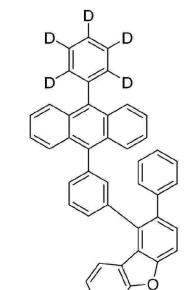
<化合物 2 1 8>



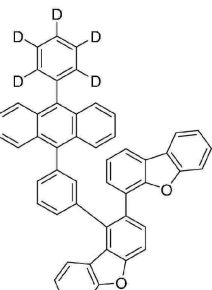
<化合物 2 1 9>



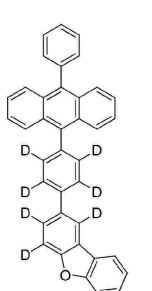
<化合物 2 2 0>



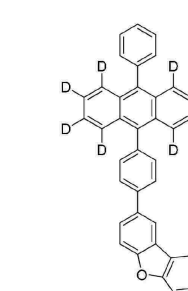
<化合物 2 2 1>



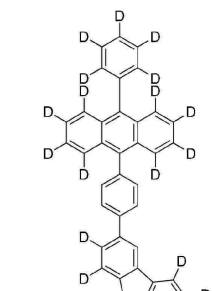
<化合物 2 2 2>



<化合物 2 2 3>



<化合物 2 2 4>



10

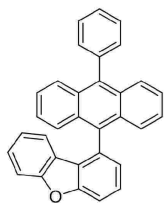
20

30

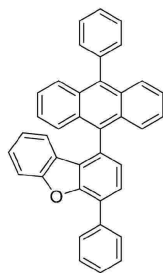
40

50

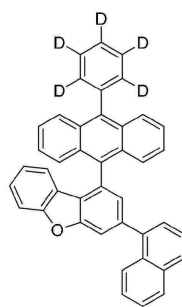
<化合物 2 2 5>



<化合物 2 2 6>

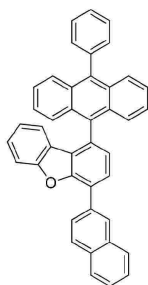


<化合物 2 2 7>

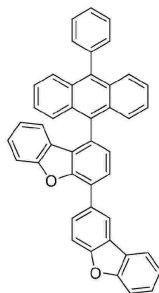


10

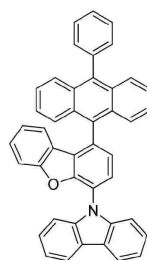
<化合物 2 2 8>



<化合物 2 2 9>

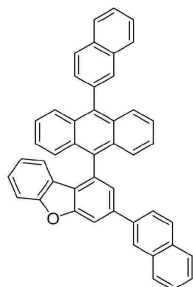


<化合物 2 3 0>

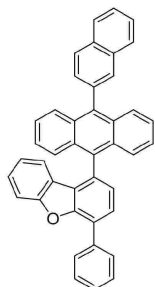


20

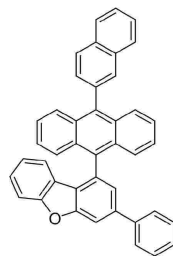
<化合物 2 3 1>



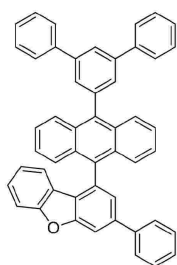
<化合物 2 3 2>



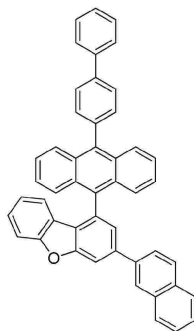
<化合物 2 3 3>



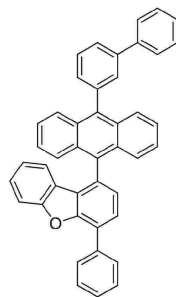
<化合物 2 3 4>



<化合物 2 3 5>



<化合物 2 3 6>

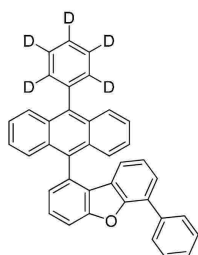


30

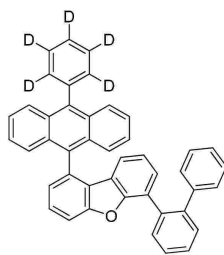
40

50

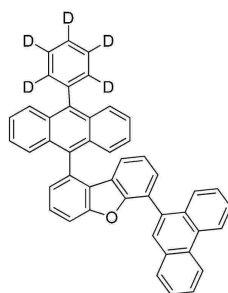
<化合物 2 3 7>



<化合物 2 3 8>

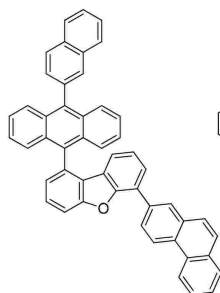


<化合物 2 3 9>

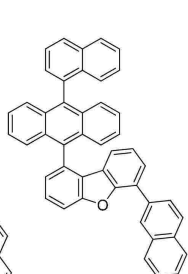


10

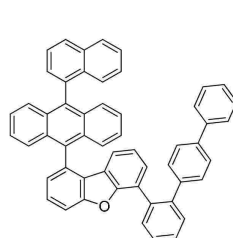
<化合物 2 4 0>



<化合物 2 4 1>

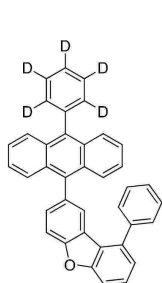


<化合物 2 4 2>

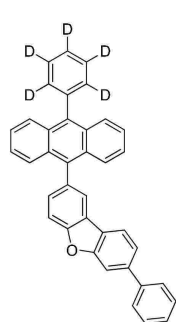


20

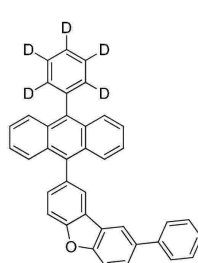
<化合物 2 4 3>



<化合物 2 4 4>

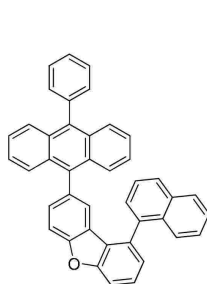


<化合物 2 4 5>

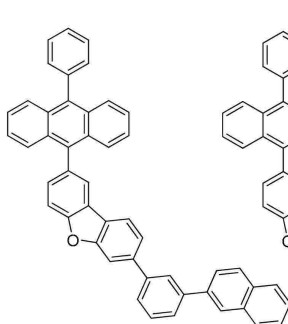


30

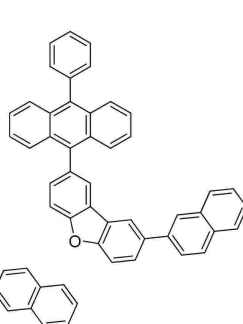
<化合物 2 4 6>



<化合物 2 4 7>



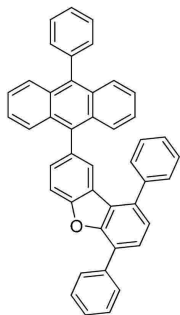
<化合物 2 4 8>



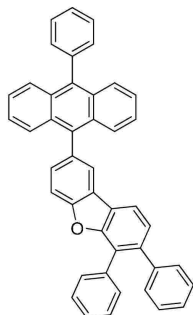
40

50

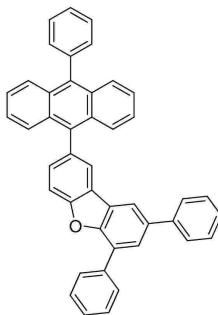
<化合物 2 4 9>



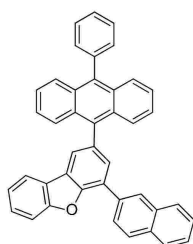
<化合物 2 5 0>



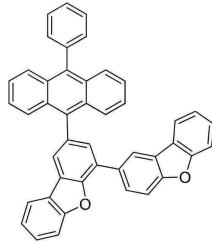
<化合物 2 5 1>



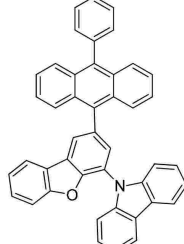
<化合物 2 5 2>



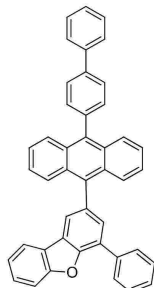
<化合物 2 5 3>



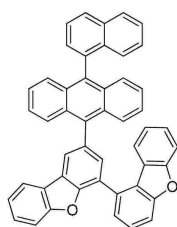
<化合物 2 5 4>



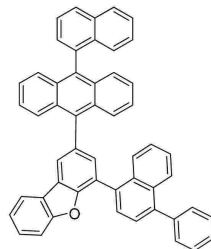
<化合物 2 5 5>



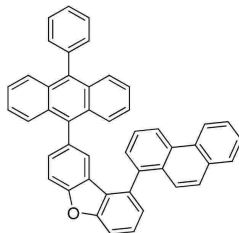
<化合物 2 5 6>



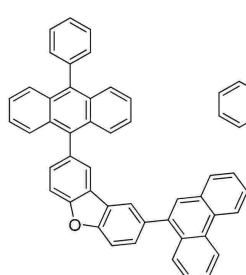
<化合物 2 5 7>



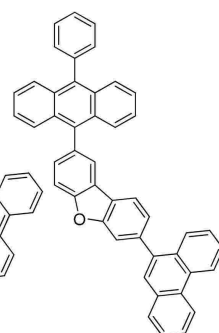
<化合物 2 5 8>



<化合物 2 5 9>



<化合物 2 6 0>



10

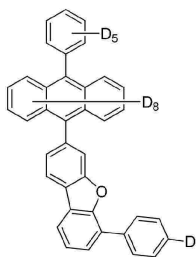
20

30

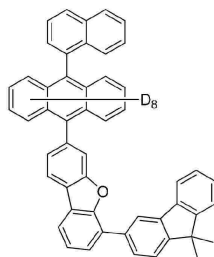
40

50

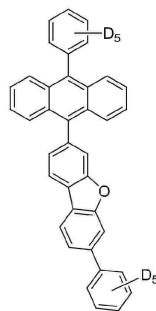
<化合物 2 6 1>



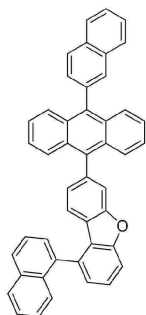
<化合物 2 6 2>



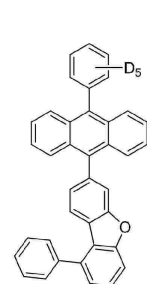
<化合物 2 6 3>



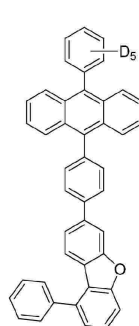
<化合物 2 6 4>



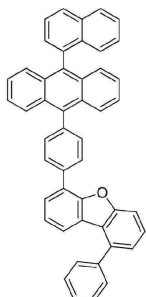
<化合物 2 6 5>



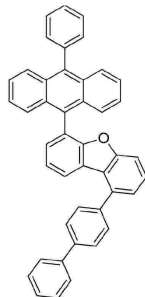
<化合物 2 6 6>



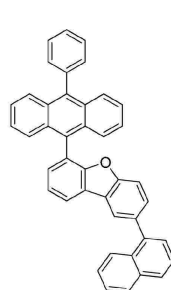
<化合物 2 6 7>



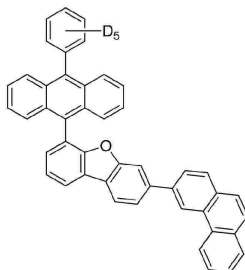
<化合物 2 6 8>



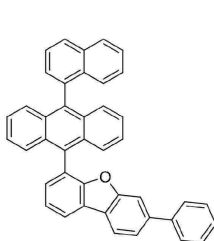
<化合物 2 6 9>



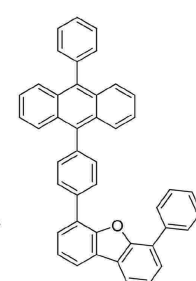
<化合物 2 7 0>



<化合物 2 7 1>



<化合物 2 7 2>



10

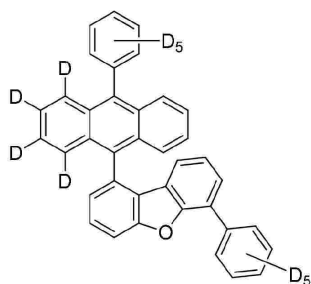
20

30

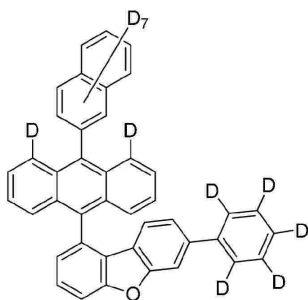
40

50

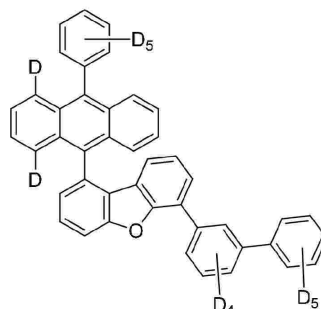
<化合物 273>



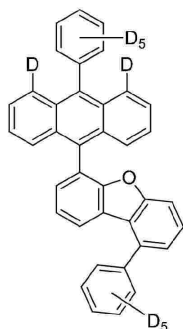
<化合物 274>



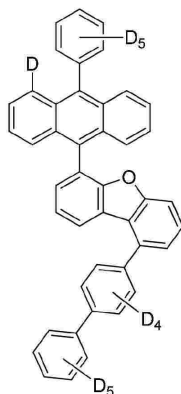
<化合物 275>



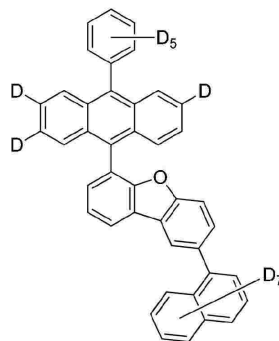
<化合物 276>



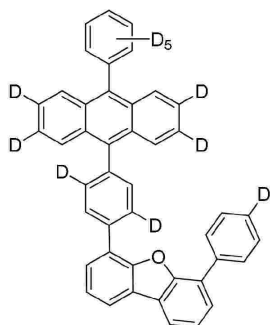
<化合物 277>



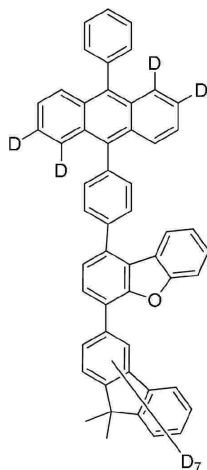
<化合物 278>



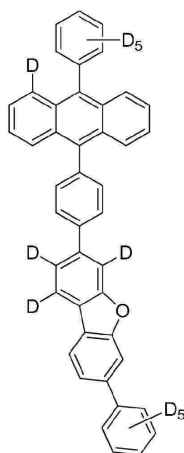
<化合物 279>



<化合物 280>



<化合物 281>



【請求項 20】

前記それぞれの層の中から選択された一つ以上の層は、蒸着工程又は溶液工程によって形成される請求項 13 に記載の有機発光素子。

【請求項 21】

前記有機発光素子は、フラットパネルディスプレイ装置、フレキシブルディスプレイ装置、単色又は白色のフラットパネル照明用装置、及び単色又は白色のフレキシブル照明用装置の中から選択されるいずれか一つに使用される請求項 12 に記載の有機発光素子。

【発明の詳細な説明】

【技術分野】

10

20

30

40

50

【0001】

本発明は、有機発光素子に使用できる新規なホウ素化合物に係り、より詳細には、有機発光素子内の発光層のドーパント材料として使用でき、これにより高い発光効率及び長寿命などの素子特性を実現することができる新規なホウ素化合物、及び前記ホウ素化合物を含む有機発光素子に関する。

【背景技術】

【0002】

有機発光素子（OLED）は、自己発光現象を利用したディスプレイであって、視野角が大きく、液晶ディスプレイに比べて軽薄化、短小化でき、速い応答速度などの利点を持っており、フルカラー（full-color）ディスプレイ又は照明への応用が期待されている。

10

一般に、有機発光現象とは、有機物質を用いて電気エネルギーを光エネルギーに転換させる現象をいう。有機発光現象を利用する有機発光素子は、通常、陽極、陰極、及びこれらの間の有機物層を含む構造を持つ。ここで、有機物層は、有機発光素子の効率と安定性を高めるために、それぞれ異なる物質からなる多層の構造を持つ場合が多く、例えば、正孔注入層、正孔輸送層、発光層、電子輸送層、電子注入層などからなってもよい。このような有機発光素子の構造で二つの電極の間に電圧をかけると、陽極では正孔、陰極では電子が有機物層に注入され、注入された正孔と電子とが結合するときに励起子（exciton）が生成され、この励起子が再び基底状態に落ちるときに発光する。このような有機発光素子は、自発光、高輝度、高効率、低い駆動電圧、広い視野角、高いコントラスト、高速応答性などの特性を有することが知られている。

20

有機発光素子において有機物層として使用される材料は、機能によって、発光材料と電荷輸送材料、例えば、正孔注入材料、正孔輸送材料、電子輸送材料、電子注入材料などに分類され得る。前記発光材料は、分子量によって高分子型と低分子型に分類され、発光メカニズムによって、電子の一重項励起状態に由来する蛍光材料と電子の三重項励起状態に由来する燐光材料に分類される。

一方、発光材料として一つの物質のみを使用する場合、分子間の相互作用によって最大発光波長が長波長に移動し、色純度が低下し、発光減衰効果により素子の効率が減少するなどの問題が発生するので、色純度の増加とエネルギー転移による発光効率を増加させるために、発光材料としてホストドーパントシステムを使用することができる。

30

その原理は、発光層を形成するホストよりもエネルギー帯域間隙が小さいドーパントを発光層に少量混合すると、発光層から発生した励起子がドーパントに輸送されて効率の高い光を出すことである。このとき、ホストの波長がドーパントの波長帯に移動するので、用いるドーパントの種類に応じて所望の波長の光を得ることができる。

最近、このような発光層中のドーパント化合物としてホウ素化合物について研究されており、これに関連する従来技術として、韓国公開特許第10-2016-0119683号公報（2016年10月14日）には、ホウ素原子と酸素原子などで複数の芳香族環を連結した多環芳香族化合物、及びこれを含む有機発光素子が開示されており、国際公開第2017/188111号パンフレット（2017年11月2日）には、複数の縮合芳香族環がホウ素原子と窒素によって連結された構造の化合物を発光層内のドーパントとして使用し、且つホストとしてアントラセン誘導体を使用した有機発光素子が開示されている。

40

しかし、これらの従来技術を含めて、有機発光素子の発光層に使用するための様々な形態の化合物が製造されたにも拘らず、未だ有機発光素子用として応用可能であるうえ、低電圧駆動が可能で、かつ安定性及び高効率特性を有する新規な化合物、及びこれを含む有機発光素子の開発が継続的に求められている。

【発明の概要】

【発明が解決しようとする課題】

【0003】

そこで、本発明の目的は、有機発光素子内の発光層のドーパント物質として使用可能である新規な構造のホウ素化合物を提供することにある。

50

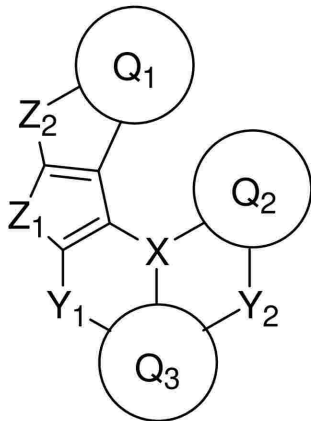
本発明の他の目的は、前記ホウ素化合物を有機発光素子内のドーパント物質に適用することにより、高い発光効率及び長寿命などの素子特性に優れた有機発光素子（OLED）を提供することにある。

【課題を解決するための手段】

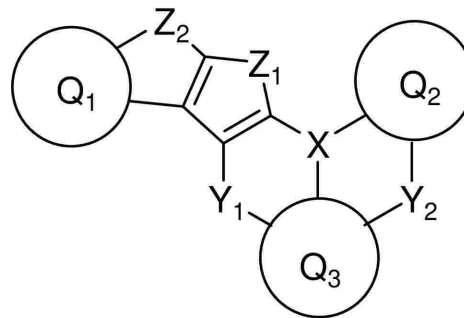
【0004】

上記の目的を達成するために、本発明は、下記【化学式A】から下記【化学式D】のうちのいずれか一つで表されるホウ素化合物を提供する。

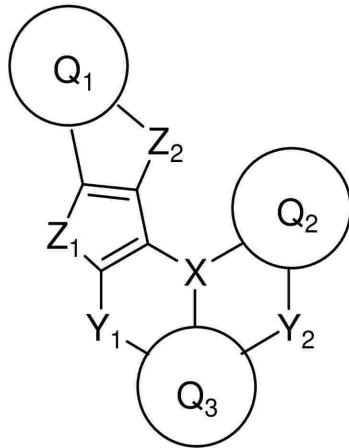
【化学式A】



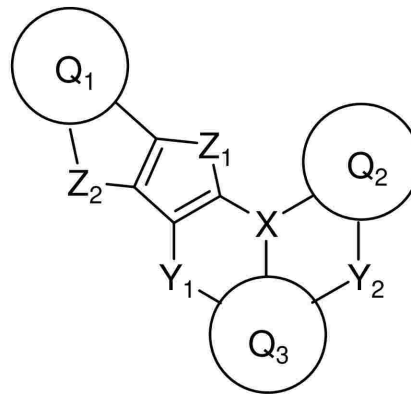
【化学式B】



【化学式C】



【化学式D】



前記【化学式A】から前記【化学式D】中、

前記Q₁からQ₃は、それぞれ互いに同一でも異なってもよく、互いに独立して、置換もしくは無置換の炭素数6～50の芳香族炭化水素環、又は置換もしくは無置換の炭素数2～50の芳香族複素環であり、

前記Xは、B、P、P=Oの中から選択されるいずれか一つであり、

前記Y₁及びY₂は、それぞれ互いに同一でも異なってもよく、互いに独立して、N-R₁、C-R₂R₃、O、S及びS i R₄R₅の中から選択されるいずれか一つであり、

前記Z₁及びZ₂は、それぞれ互いに同一でも異なってもよく、互いに独立して、N-R₆、C-R₇R₈、O、S及びS i R₉R₁₀の中から選択されるいずれか一つであり、

前記置換基R₁からR₁₀は、それぞれ互いに同一でも異なってもよく、互いに独立して、水素、重水素、置換もしくは無置換の炭素数1～30のアルキル基、置換もしくは無置

換の炭素数 6～50 のアリアル基、置換もしくは無置換の炭素数 3～30 のシクロアルキル基、置換もしくは無置換の炭素数 2～50 のヘテロアリアル基、置換もしくは無置換の炭素数 1～30 のアルコキシ基、置換もしくは無置換の炭素数 6～30 のアリアルオキシ基、置換もしくは無置換の炭素数 1～30 のアルキルチオキシ基、置換もしくは無置換の炭素数 6～30 のアリアルチオキシ基、置換もしくは無置換の炭素数 1～30 のアルキルアミン基、置換もしくは無置換の炭素数 6～30 のアリアルアミン基、置換もしくは無置換の炭素数 1～30 のアルキルシリル基、置換もしくは無置換の炭素数 6～30 のアリアルシリル基、ニトロ基、シアノ基及びハロゲン基の中から選択されるいずれか一つであり、前記 R₂ 及び R₃、R₄ 及び R₅、R₇ 及び R₈、R₉ 及び R₁₀ は、それぞれ互いに連結されて脂環族又は芳香族の単環又は多環をさらに形成することができ、

10

前記 Y₁ 内の置換基 R₁～R₅ は、前記 Q₃ 環と結合して脂環族又は芳香族の単環又は多環をさらに形成することができ、

前記 Y₂ 内の置換基 R₁～R₅ は、前記 Q₂ 環又は Q₃ 環と結合して脂環族又は芳香族の単環又は多環をさらに形成することができ、

前記連結基 Z₂ 内の置換基 R₆～R₁₀ は、前記 Q₁ 環と結合して脂環族又は芳香族の単環又は多環をさらに形成することができ、

前記〔化学式 A〕において、

前記 Z₁ 内の置換基 R₆～R₁₀ は、それぞれ Z₂ 又は Y₁ と互いに連結されて脂環族又は芳香族の単環又は多環をさらに形成することができ、

前記〔化学式 B〕において、

20

前記 Z₁ 内の置換基 R₆～R₁₀ は、それぞれ Z₂ と互いに連結されて脂環族又は芳香族の単環又は多環をさらに形成することができ、

前記〔化学式 C〕において、

前記 Z₁ 内の置換基 R₆～R₁₀ は、それぞれ Y₁ と互いに連結されて脂環族又は芳香族の単環又は多環をさらに形成することができ、

前記〔化学式 D〕において、

前記 Z₁ 内の置換基 R₆～R₁₀ は、それぞれ Q₁ と互いに連結されて脂環族又は芳香族の単環又は多環をさらに形成することができる。

【発明の効果】

【0005】

30

本発明に係る新規なホウ素化合物を有機発光素子内のドーパント物質として用いる場合に、従来技術による有機発光素子に比べて長寿命特性を示し、且つより改善された効率を示す有機発光素子を提供することができる。

【図面の簡単な説明】

【0006】

【図 1】本発明の一実施形態による有機発光素子の概略図である。

【発明を実施するための形態】

【0007】

以下、本発明をさらに詳細に説明する。本発明の各図面において、構造物のサイズ又は寸法は、本発明の明確性を期するために実際よりも拡大又は縮小して示したものであり、特徴的構成が現れるように公知の構成は省略して図示したので、図面に限定されない。

40

また、図示された各構成の大きさ及び厚さは、説明の便宜のために任意に示したので、本発明は、必ずしも図示に限定されず、また、図面において複数の層及び領域を明確に表現するために厚さを拡大して示した。そして、図面において、説明の便宜のために、一部の層及び領域の厚さを誇張して示した。層、膜、領域、板などの部分が他の部分「上に」とあるとするとき、これは他の部分の「すぐ上に」とある場合だけでなく、それらの間に別の部分がある場合も含む。

明細書全体において、ある部分がある構成要素を「含む」とするとき、これは、特に反対される記載がない限り、他の構成要素を除外するのではなく、他の構成要素をさらに含むことができることを意味する。明細書全体において、「～の上に」とは、対象部分の上

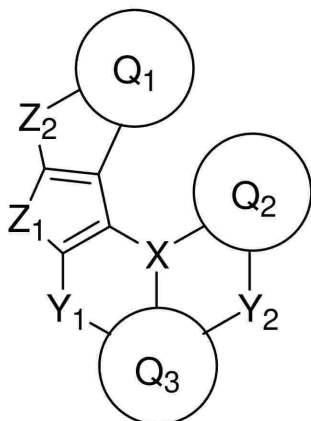
50

又は下に位置することを意味するものであり、必ずしも、重力方向を基準として上側に位置することを意味するものではない。

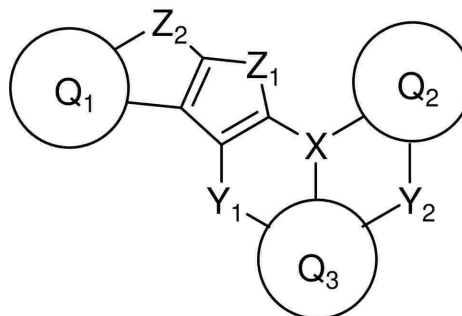
【 0 0 0 8 】

本発明は、下記【化学式 A】から下記【化学式 D】のうちのいずれか一つで表されるホウ素化合物を提供する。

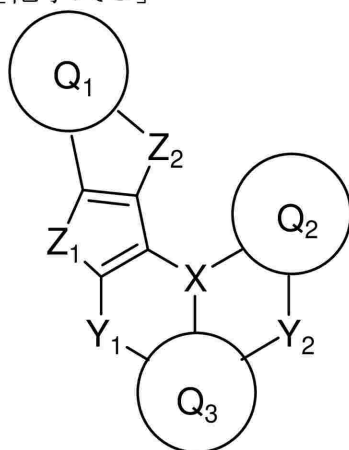
【化学式 A】



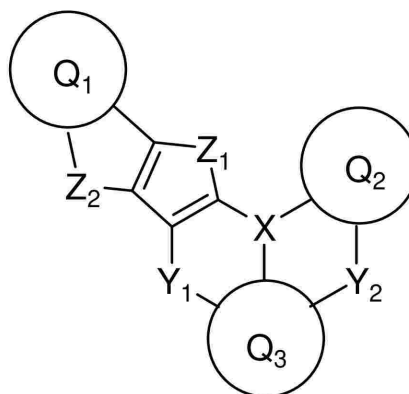
【化学式 B】



【化学式 C】



【化学式 D】



前記【化学式 A】から前記【化学式 D】中、

前記 Q₁ から Q₃ は、それぞれ互いに同一でも異なってもよく、互いに独立して、置換もしくは無置換の炭素数 6 ～ 50 の芳香族炭化水素環、又は置換もしくは無置換の炭素数 2 ～ 50 の芳香族複素環であり、

前記 X は、B、P、P=O の中から選択されるいずれか一つであり、

前記 Y₁ 及び Y₂ は、それぞれ互いに同一でも異なってもよく、互いに独立して、N-R₁、C-R₂R₃、O、S 及び S i R₄R₅ の中から選択されるいずれか一つであり、

前記 Z₁ 及び Z₂ は、それぞれ互いに同一でも異なってもよく、互いに独立して、N-R₆、C-R₇R₈、O、S 及び S i R₉R₁₀ の中から選択されるいずれか一つであり、

前記置換基 R₁ から R₁₀ は、それぞれ互いに同一でも異なってもよく、互いに独立して、水素、重水素、置換もしくは無置換の炭素数 1 ～ 30 のアルキル基、置換もしくは無置換の炭素数 6 ～ 50 のアリール基、置換もしくは無置換の炭素数 3 ～ 30 のシクロアルキル基、置換もしくは無置換の炭素数 2 ～ 50 のヘテロアリール基、置換もしくは無置換の

炭素数 1～30 のアルコキシ基、置換もしくは無置換の炭素数 6～30 のアリアルオキシ基、置換もしくは無置換の炭素数 1～30 のアルキルチオキシ基、置換もしくは無置換の炭素数 6～30 のアリアルチオキシ基、置換もしくは無置換の炭素数 1～30 のアルキルアミン基、置換もしくは無置換の炭素数 6～30 のアリアルアミン基、置換もしくは無置換の炭素数 1～30 のアルキルシリル基、置換もしくは無置換の炭素数 6～30 のアリアルシリル基、ニトロ基、シアノ基及びハロゲン基の中から選択されるいずれか一つであり、

前記 R₂ 及び R₃、R₄ 及び R₅、R₇ 及び R₈、R₉ 及び R₁₀ は、それぞれ互いに連結されて脂環族又は芳香族の単環又は多環をさらに形成することができ、

前記 Y₁ 内の置換基 R₁～R₅ は、前記 Q₃ 環と結合して脂環族又は芳香族の単環又は多環をさらに形成することができ、

前記 Y₂ 内の置換基 R₁～R₅ は、前記 Q₂ 環又は Q₃ 環と結合して脂環族又は芳香族の単環又は多環をさらに形成することができ、

前記連結基 Z₂ 内の置換基 R₆～R₁₀ は、前記 Q₁ 環と結合して脂環族又は芳香族の単環又は多環をさらに形成することができ、

前記〔化学式 A〕において、

前記 Z₁ 内の置換基 R₆～R₁₀ は、それぞれ Z₂ 又は Y₁ と互いに連結されて脂環族又は芳香族の単環又は多環をさらに形成することができ、

前記〔化学式 B〕において、

前記 Z₁ 内の置換基 R₆～R₁₀ は、それぞれ Z₂ と互いに連結されて脂環族又は芳香族の単環又は多環をさらに形成することができ、

前記〔化学式 C〕において、

前記 Z₁ 内の置換基 R₆～R₁₀ は、それぞれ Y₁ と互いに連結されて脂環族又は芳香族の単環又は多環をさらに形成することができ、

前記〔化学式 D〕において、

前記 Z₁ 内の置換基 R₆～R₁₀ は、それぞれ Q₁ と互いに連結されて脂環族又は芳香族の単環又は多環をさらに形成することができる。

【0009】

前記〔化学式 A〕から前記〔化学式 D〕中の前記「置換もしくは無置換の」における「置換」は、重水素、シアノ基、ハロゲン基、ヒドロキシ基、ニトロ基、炭素数 1～24 のアルキル基、炭素数 1～24 のハロゲン化アルキル基、炭素数 2～24 のアルケニル基、炭素数 2～24 のアルキニル基、炭素数 3～24 のシクロアルキル基、炭素数 1～24 のヘテロアルキル基、炭素数 6～24 のアリアル基、炭素数 7～24 のアリアルアルキル基、炭素数 7～24 のアルキルアリアル基、炭素数 2～24 のヘテロアリアル基、炭素数 2～24 のヘテロアリアルアルキル基、炭素数 1～24 のアルコキシ基、炭素数 1～24 のアルキルアミノ基、炭素数 12～24 のジアリアルアミノ基、炭素数 2～24 のジヘテロアリアルアミノ基、炭素数 7～24 のアリアル（ヘテロアリアル）アミノ基、炭素数 1～24 のアルキルシリル基、炭素数 6～24 のアリアルシリル基、炭素数 6～24 のアリアルオキシ基、及び炭素数 6～24 のアリアルチオニル基よりなる群から選択された一つ以上の置換基で置換されることを意味する。

本発明における前記「置換もしくは無置換の炭素数 1～30 のアルキル基」、「置換もしくは無置換の炭素数 5～50 のアリアル基」などにおける前記アルキル基又はアリアル基の範囲を考慮すると、前記炭素数 1～30 のアルキル基及び炭素数 5～50 のアリアル基の炭素数の範囲は、それぞれ、前記置換基が置換された部分を考慮せずに、無置換のものに見做したときのアルキル部分又はアリアル部分を構成する全炭素数を意味する。例えば、パラ位にブチル基が置換されたフェニル基は、炭素数 4 のブチル基で置換された炭素数 6 のアリアル基に該当するものと見做すべきである。

【0010】

本発明の化合物で使用される置換基であるアリアル基は、一つの水素除去によって芳香族炭化水素から誘導された有機ラジカルであって、前記アリアル基が置換基を持つ場合、隣り合う置換基と互いに融合（fused）して環をさらに形成することができる。

前記アリール基の具体例としては、フェニル基、*o*-ビフェニル基、*m*-ビフェニル基、*p*-ビフェニル基、*o*-テルフェニル基、*m*-テルフェニル基、*p*-テルフェニル基、ナフチル基、アントリル基、フェナントリル基、ピレニル基、インデニル基、フルオレニル基、テトラヒドロナフチル基、ペリレニル基、クリセニル基、ナフサセニル、フルオランテニル基などの芳香族基を挙げることができ、前記アリール基中の一つ以上の水素原子は、重水素原子、ハロゲン原子、ヒドロキシ基、ニトロ基、シアノ基、シリル基、アミノ基（ $-\text{NH}_2$ 、 $-\text{NH}(\text{R})$ 、 $-\text{N}(\text{R}')(\text{R}'')$ ）、 R' 及び R'' は、互いに独立して炭素数1～10のアルキル基であり、この場合、「アルキルアミノ基」という。）、アミジノ基、ヒドラジン基、ヒドラゾン基、カルボキシ基、スルホン酸基、リン酸基、炭素数1～24のアルキル基、炭素数1～24のハロゲン化アルキル基、炭素数2～24のアルケニル基、炭素数2～24のアルキニル基、炭素数1～24のヘテロアルキル基、炭素数6～24のアリール基、炭素数6～24のアリールアルキル基、炭素数2～24のヘテロアリール基、又は炭素数2～24のヘテロアリールアルキル基で置換できる。

【0011】

本発明の化合物で使用される置換基であるヘテロアリール基は、N、O、P、Si、S、Ge、Se、Teの中から選ばれた1つ、2つ又は3つのヘテロ原子を含み、残りの環原子が炭素である炭素数2～24の環状芳香族系を意味し、これらの環は、融合（fused）して環を形成することができる。そして、前記ヘテロアリール基中の一つ以上の水素原子は、前記アリール基の場合と同様の置換基で置換可能である。

また、本発明において、前記芳香族複素環は、芳香族炭化水素環において芳香族炭素のうちの一つ以上がヘテロ原子で置換されたものを意味し、前記芳香族複素環は、好ましくは芳香族炭化水素内の芳香族炭素1つ～3つが、N、O、P、Si、S、Ge、Se、Teの中から選択された一つ以上のヘテロ原子で置換できる。

本発明で使用される置換基であるアルキル基は、アルカン（alkane）から水素が一つ除去された置換基であって、直鎖状、分岐状を含む構造であり、その具体例としては、メチル、エチル、プロピル、イソプロピル、イソブチル、sec-ブチル、tert-ブチル、ペンチル、iso-アミル、ヘキシルなどを挙げることができ、前記アルキル基中の一つ以上の水素原子は、前記アリール基の場合と同様の置換基で置換可能である。

本発明の化合物で使用される置換基であるシクロアルキル基、シクロアルコキシ基などにおける「シクロ」は、アルキル基又はアルコキシ基内の飽和炭化水素の単環又は多環を形成することができる構造の置換基を意味し、例えば、シクロアルキル基の具体例としては、シクロプロピル、シクロブチル、シクロペンチル、シクロヘキシル、メチルシクロペンチル、メチルシクロヘキシル、エチルシクロペンチル、エチルシクロヘキシル、アダマンチル、ジシクロペンタジエニル、デカヒドロナフチル、ノルボルニル、ボルニル、イソボルニルなどを挙げることができ、前記シクロアルキル基中の一つ以上の水素原子は、前記アリール基の場合と同様の置換基で置換可能であり、これは、シクロアルコキシにおいても同様に適用できる。

【0012】

本発明の化合物で使用される置換基であるアルコキシ基は、アルキル基又はシクロアルキル基の末端に酸素原子が結合した置換基であって、その具体例としては、メトキシ、エトキシ、プロポキシ、イソブチルオキシ、sec-ブチルオキシ、ペンチルオキシ、iso-アミルオキシ、ヘキシルオキシ、シクロブチルオキシ、シクロペンチルオキシ、アダマンタンオキシ、ジシクロペンタンオキシ、ボニルオキシ、イソボルニルオキシなどを挙げることができ、前記アルコキシ基中の一つ以上の水素原子は、前記アリール基の場合と同様の置換基で置換可能である。

本発明の化合物で使用される置換基であるアリールアルキル基の具体例としては、フェニルメチル（ベンジル）、フェニルエチル、フェニルプロピル、ナフチルメチル、ナフチルエチルなどを挙げることができ、前記アリールアルキル基中の一つ以上の水素原子は、前記アリール基の場合と同様の置換基で置換可能である。

本発明の化合物で使用される置換基であるシリル基の具体例としては、トリメチルシリ

ル、トリエチルシリル、トリフェニルシリル、トリメトキシシリル、ジメトキシフェニルシリル、ジフェニルメチルシリル、ジフェニルビニルシリル、メチルシクロブチルシリル、ジメチルフリルシリルなどを挙げることができ、前記シリル基中の一つ以上の水素原子は、前記アリール基の場合と同様の置換基で置換可能である。

本発明において、アルケニル基(alkenyl)は、2つの炭素原子によって構成される1つの炭素-炭素二重結合を含むアルキル置換基を意味し、アルキニル(alkynyl)基は、2つの炭素原子によって構成される一つの炭素-炭素三重結合を含むアルキル置換基を意味する。

本発明で使用されるアルキレン(alkylene)基は、直鎖状又は分岐状の飽和炭化水素であるアルカン(alkane)分子内の2つの水素除去によって誘導された有機ラジカルであり、前記アルキレン基の具体例としては、メチレン基、エチレン基、プロピレン基、イソプロピレン基、イソブチレン基、sec-ブチレン基、tert-ブチレン基、ペンチレン基、iso-アミレン基、ヘキシレン基などを挙げることができ、前記アルキレン基中の一つ以上の水素原子は、前記アリール基の場合と同様の置換基で置換可能である。

【0013】

本発明におけるジアリールアミノ基は、上述した同一又は異なる2つのアリール基が窒素原子に結合したアミン基を意味し、また、本発明においてジヘテロアリールアミノ基は、同一又は異なる2つのヘテロアリール基が窒素原子に結合したアミン基を意味する。さらに、前記アリール(ヘテロアリール)アミノ基は、前記アリール基とヘテロアリール基がそれぞれ窒素原子に結合したアミン基を意味する。

【0014】

前記「化学式A」から前記「化学式D」、「化学式H」内の前記「置換もしくは無置換の」における「置換」に対するより好ましい例として、これは、重水素、シアノ基、ハロゲン基、ヒドロキシ基、ニトロ基、炭素数1～12のアルキル基、炭素数1～12のハロゲン化アルキル基、炭素数2～12のアルケニル基、炭素数2～12のアルキニル基、炭素数3～12のシクロアルキル基、炭素数1～12のヘテロアルキル基、炭素数6～18のアリール基、炭素数7～20のアリールアルキル基、炭素数7～20のアルキルアリール基、炭素数2～18のヘテロアリール基、炭素数2～18のヘテロアリールアルキル基、炭素数1～12のアルコキシ基、炭素数1～12のアルキルアミノ基、炭素数6～18のアリールアミノ基、炭素数1～18のヘテロアリールアミノ基、炭素数1～12のアルキルシリル基、炭素数6～18のアリールシリル基、炭素数6～18のアリールオキシ基、炭素数6～18のアリールチオニル基よりなる群から選択された一つ以上の置換基で置換されるものとして行うことができる。

本発明において、前記「化学式A」から前記「化学式D」のうちのいずれか一つで表されるホウ素化合物は、置換もしくは無置換の炭素数6～50の芳香族炭化水素環、又は置換もしくは無置換の炭素数2～50の芳香族複素環であるQ₂及びQ₃環が中心原子Xにそれぞれ連結される構造的特徴を有し、Q₂及びQ₃環は連結基Y₂によって互いに連結され、Q₃環は、連結基Y₁によって連結されるが、前記Z₁及び2つの二重結合(ジエン)を含む五角環の一侧に位置する隣接した2つの炭素原子がそれぞれ前記Y₁及びXにそれぞれ連結され、かつ、前記Z₁及び2つの二重結合(ジエン)を含む五角環の他側に位置する隣接した2つの炭素原子がそれぞれZ₂及び置換もしくは無置換の炭素数6～50の芳香族炭素水素環、又は置換もしくは無置換の炭素数2～50の芳香族複素環であるQ₁にそれぞれ連結されることにより、前記Z₁を含む五角環と、Z₂を含む五角環と、X及びY₁を含む六角環とが縮合環を形成する構造的特徴を持つ。

【0015】

本発明において、前記「R₂及びR₃、R₄及びR₅、R₇及びR₈、R₉及びR₁₀は、それぞれ互いに連結されて脂環族又は芳香族の単環又は多環をさらに形成することができる」の場合に、これは、前記R₂及びR₃のそれぞれから一つの水素ラジカルを除去し、これらを連結することにより、さらに環を形成することができることを意味し、また、R

4 及び R₅ のそれぞれから一つの水素ラジカルを除去し、それらを連結することによりさらに環を形成することができることを意味し、残りの置換基においても同様に適用できる。

前記「Y₁内の置換基 R₁～R₅は、前記 Q₃環と結合して脂環族又は芳香族の単環又は多環をさらに形成することができる」の場合も、これは、Q₃環内の一つの水素ラジカルを除去し、前記 R₁から一つの水素ラジカルを除去してそれらを互いに連結することによりさらに環を形成することができることを意味するか、或いは、Q₃環内の一つの水素ラジカルを除去し、前記 R₂又は R₃から一つの水素ラジカルを除去してそれらを互いに連結することによりさらに環を形成することができることを意味するか、或いは、Q₃環内の一つの水素ラジカルを除去し、前記 R₄又は R₅から一つの水素ラジカルを除去してそれらを連結することによりさらに環を形成することができることを意味し、これは、後述する本発明の明細書及び請求の範囲内の「～と結合してさらに環を形成」する場合に、環を形成するための二つの置換基からそれぞれ一つの水素ラジカルを除去し、それらを互いに連結して環を形成することができることを意味する。

【0016】

本発明による前記〔化学式 A〕から前記〔化学式 D〕における前記 Q₁～Q₃は、それぞれ互いに同一でも異なってもよく、互いに独立して、置換もしくは無置換の炭素数 6～50 の芳香族炭化水素環、又は置換もしくは無置換の炭素数 2～50 の芳香族複素環であってもよく、好ましくは、置換もしくは無置換の炭素数 6～20 の芳香族炭化水素環、又は置換もしくは無置換の炭素数 2～20 の芳香族複素環であってもよく、さらに好ましくは、置換もしくは無置換の炭素数 6～14 の芳香族炭化水素環、又は置換もしくは無置換の炭素数 2～14 の芳香族複素環とすることができる。

一実施形態として、前記〔化学式 A〕から前記〔化学式 D〕における Q₃環に連結された連結基 Y₁及び Y₂のうちの少なくとも一つは、N-R₁であることができ、この場合に、前記 R₁は、上記で定義されたのと同様である。

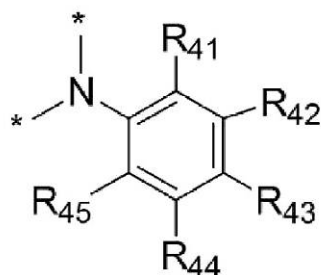
前記〔化学式 A〕から前記〔化学式 D〕における連結基 Y₁及び Y₂のうちの少なくとも一つは N-R₁である場合に、好ましくは、前記置換基 R₁は、置換もしくは無置換の炭素数 6～50 のアリール基、又は置換もしくは無置換の炭素数 2～50 のヘテロアリール基であり、好ましくは、置換もしくは無置換の炭素数 6～20 のアリール基、又は置換もしくは無置換の炭素数 2～20 のヘテロアリール基とすることができる。

前記〔化学式 A〕から前記〔化学式 D〕における連結基 Y₁及び Y₂がそれぞれ N-R₁である場合に、好ましくは、前記置換基 R₁は、置換もしくは無置換の炭素数 6～50 のアリール基又は置換もしくは無置換の炭素数 2～50 のヘテロアリール基とすることができる。

〔化学式 A〕から前記〔化学式 D〕における前記連結基 Y₁及び Y₂のうちの少なくとも一つは、互いに同一でも異なってもよく、下記〔構造式 A〕で表される連結基とすることができる。

【0017】

〔構造式 A〕



前記〔構造式 A〕中の「-*」は、前記置換基 Z₁に連結された炭素原子、又は Z₁を

含む五角環内の Y_1 に連結された炭素原子、 Q_2 環における芳香族炭素原子、又は Q_3 環における芳香族炭素原子とそれぞれ結合するための結合サイトを意味し、

前記〔構造式A〕中の前記 R_{41} から R_{45} は、それぞれ互いに同一でも異なってもよく、互いに独立して、水素、重水素、置換もしくは無置換の炭素数1～30のアルキル基、置換もしくは無置換の炭素数6～50のアリール基、置換もしくは無置換の炭素数3～30のシクロアルキル基、置換もしくは無置換の炭素数2～50のヘテロアリール基、置換もしくは無置換の炭素数1～30のアルコキシ基、置換もしくは無置換の炭素数6～30のアリールオキシ基、置換もしくは無置換の炭素数1～30のアルキルチオキシ基、置換もしくは無置換の炭素数5～30のアリールチオキシ基、置換もしくは無置換の炭素数1～30のアルキルアミン基、置換もしくは無置換の炭素数5～30のアリールアミン基、置換もしくは無置換の炭素数1～30のアルキルシリル基、置換もしくは無置換の炭素数5～30のアリールシリル基、ニトロ基、シアノ基、ハロゲン基の中から選択されるいずれか一つであり、前記 R_{41} 及び R_{45} は、それぞれ前記 Q_2 環又は Q_3 環と結合して脂環族又は芳香族の単環又は多環をさらに形成することができる。

〔0018〕

本発明において、前記「 R_{41} 及び R_{45} は、前記 Q_2 環又は Q_3 環と結合して脂環族又は芳香族の単環又は多環をさらに形成」する場合に、これは、上記の R_2 及び R_3 、 R_4 及び R_5 などは、それぞれ互いに連結される場合などにおいて考察したのと同様に、前記置換基 R_{41} 又は R_{45} 内の一つの水素ラジカルを除去し、且つ、 Q_2 環又は Q_3 環内の一つの水素ラジカルを除去し、それらを連結することによりさらに環を形成することを意味し、これは、明細書内の後述する「さらに環を形成」する場合に同様に適用できる。

一実施形態として、前記〔化学式A〕から前記〔化学式D〕における Q_3 環に連結された連結基 Y_1 及び Y_2 は、それぞれ同一でも異なってもよく、 $N-R_1$ とすることができる。この場合、前記 R_1 は、上記で定義したのと同じである。

本発明の前記〔化学式A〕から前記〔化学式D〕における連結基 Y_1 及 Y_2 のうちの少なくとも一つは酸素(O)原子であり、また、本発明の前記〔化学式A〕から前記〔化学式D〕における中心原子(X)はホウ素(B)原子とすることができる。

本発明に係る前記〔化学式A〕から前記〔化学式D〕で表される化合物内の Q_1 から Q_3 の芳香族炭素水素環は、それぞれ互いに同一でも異なってもよく、互いに独立して、置換もしくは無置換の炭素数6～50の芳香族炭化水素環とすることができる。この場合に、好ましくは、前記〔化学式A〕から前記〔化学式D〕中の Q_1 及び Q_2 の芳香族炭素水素環は、同一でも異なってもよく、互いに独立して、下記〔構造式10〕から下記〔構造式21〕の中から選択されるいずれか一つとすることができる。

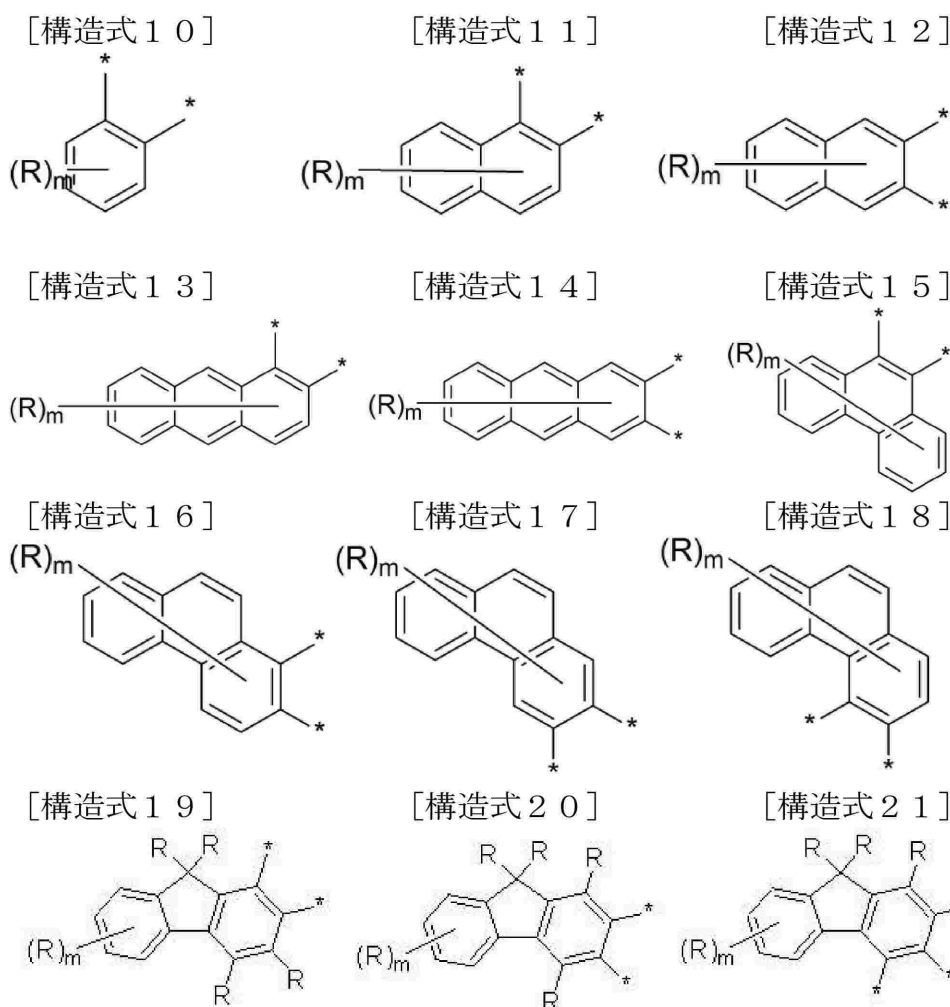
10

20

30

40

50



前記〔構造式 1 0〕から前記〔構造式 2 1〕中の「 $\ast$ 」は、前記 Q_1 環における芳香族環内の炭素が置換基 Z_2 、又は置換基 Z_2 を含む五角環内の炭素原子と結合するための結合サイトを意味するか、或いは前記 Q_2 環における芳香族環内の炭素数が X 又は連結基 Y_2 と結合するための結合サイトを意味し、

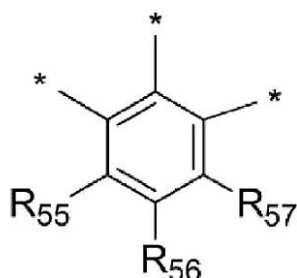
前記〔構造式 1 0〕から前記〔構造式 2 1〕中の前記 R は、それぞれ互いに同一でも異なってもよく、互いに独立して、水素、重水素、置換もしくは無置換の炭素数 1～30 のアルキル基、置換もしくは無置換の炭素数 6～50 のアリール基、置換もしくは無置換の炭素数 3～30 のシクロアルキル基、置換もしくは無置換の炭素数 2～50 のヘテロアリール基、置換もしくは無置換の炭素数 1～30 のアルコキシ基、置換もしくは無置換の炭素数 6～30 のアリールオキシ基、置換もしくは無置換の炭素数 1～30 のアルキルチオキシ基、置換もしくは無置換の炭素数 5～30 のアリールチオキシ基、置換もしくは無置換の炭素数 1～30 のアルキルアミン基、置換もしくは無置換の炭素数 12～24 のジアリールアミノ基、置換もしくは無置換の炭素数 2～24 のジヘテロアリールアミノ基、置換もしくは無置換の炭素数 7～24 のアリール（ヘテロアリール）アミノ基、置換もしくは無置換の炭素数 1～30 のアルキルシリル基、置換もしくは無置換の炭素数 5～30 のアリールシリル基、シアノ基、ハロゲン基の中から選択されるいずれか一つであり、

前記 m は 1～8 の整数であり、 m が 2 以上である場合又は R が 2 以上である場合には、それぞれの R は互いに同一でも異なってもよい。

〔0 0 1 9〕

前記 Q_1 から Q_3 環がそれぞれ互いに同一でも異なってもよく、互いに独立して置換もしくは無置換の炭素数 6 ～ 50 の芳香族炭化水素環である場合に、前記 [化学式 A] から前記 [化学式 D] 中の Q_3 の芳香族炭化水素環は、下記 [構造式 B] で表される環とすることができる。

[構造式 B]



10

前記 [構造式 B] 中の「-*」は、 Q_3 における芳香族環内の炭素が連結基 Y_1 、 X 及び連結基 Y_2 とそれぞれ結合するための結合サイトを意味する。

前記 [構造式 B] 中の前記 R_{55} から R_{57} は、それぞれ互いに同一でも異なってもよく、互いに独立して、水素、重水素、置換もしくは無置換の炭素数 1 ～ 30 のアルキル基、置換もしくは無置換の炭素数 6 ～ 50 のアリール基、置換もしくは無置換の炭素数 3 ～ 30 のシクロアルキル基、置換もしくは無置換の炭素数 2 ～ 50 のヘテロアリール基、置換もしくは無置換の炭素数 1 ～ 30 のアルコキシ基、置換もしくは無置換の炭素数 6 ～ 30 のアリールオキシ基、置換もしくは無置換の炭素数 1 ～ 30 のアルキルチオキシ基、置換もしくは無置換の炭素数 5 ～ 30 のアリールチオキシ基、置換もしくは無置換の炭素数 1 ～ 30 のアルキルアミン基、置換もしくは無置換の炭素数 12 ～ 24 のジアリールアミノ基、置換もしくは無置換の炭素数 2 ～ 24 のジヘテロアリールアミノ基、置換もしくは無置換の炭素数 7 ～ 24 のアリール（ヘテロアリール）アミノ基、置換もしくは無置換の炭素数 1 ～ 30 のアルキルシリル基、置換もしくは無置換の炭素数 5 ～ 30 のアリールシリル基、シアノ基、ハロゲン基の中から選択されるいずれか一つであり、

20

前記 R_{55} から R_{57} は、それぞれ隣り合う置換基と互いに連結されて脂環族又は芳香族の単環又は多環をさらに形成することができる。

30

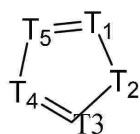
[0020]

本発明による前記 [化学式 A] から前記 [化学式 D] で表される化合物内の Q_1 から Q_3 環が置換もしくは無置換の炭素数 2 ～ 50 の芳香族複素環である場合に、これらは、互いに同一でも異なってもよく、互いに独立して、下記 [構造式 31] から下記 [構造式 40] の中から選択されるいずれか一つとすることができる。

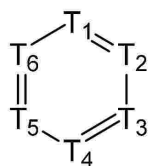
40

50

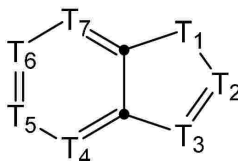
[構造式 3 1]



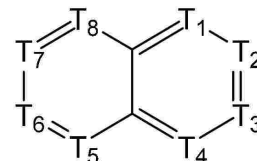
[構造式 3 2]



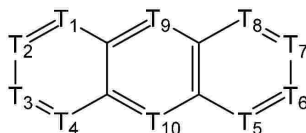
[構造式 3 3]



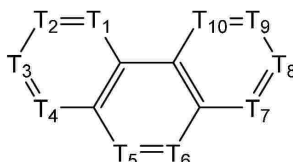
[構造式 3 4]



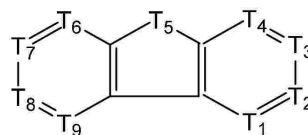
[構造式 3 5]



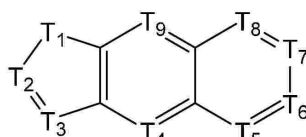
[構造式 3 6]



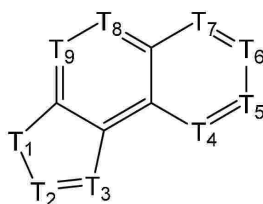
[構造式 3 7]



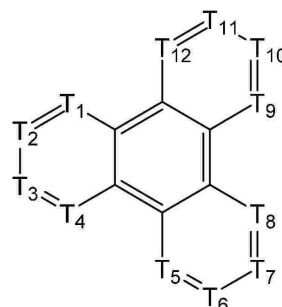
[構造式 3 8]



[構造式 3 9]



[構造式 4 0]



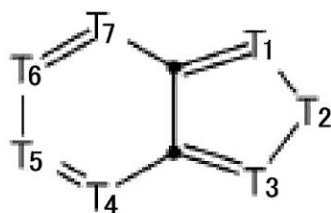
前記 [構造式 3 1] から前記 [構造式 4 0] 中、

前記連結基 T_1 から T_{12} は、互いに同一でも異なってもよく、それぞれ独立して、 $C(R_{61})$ 、 $C(R_{62})$ (R_{63})、 N 、 $N(R_{64})$ 、 O 、 S 、 Se 、 Te 、 $Si(R_{65})$ (R_{66}) 及び $Ge(R_{67})$ (R_{68}) の中から選択されるいずれか一つであることができ、前記連結基 T_1 から T_{12} が同時にいずれも炭素原子である場合は除き、前記 R_{61} から R_{68} は、上記で定義した R_1 と同一である。

【0021】

前記 [構造式 3 3] は、電子の移動に伴う共鳴構造による下記 [構造式 3 3-1] で表される化合物を含むことができる。

[構造式 3 3-1]

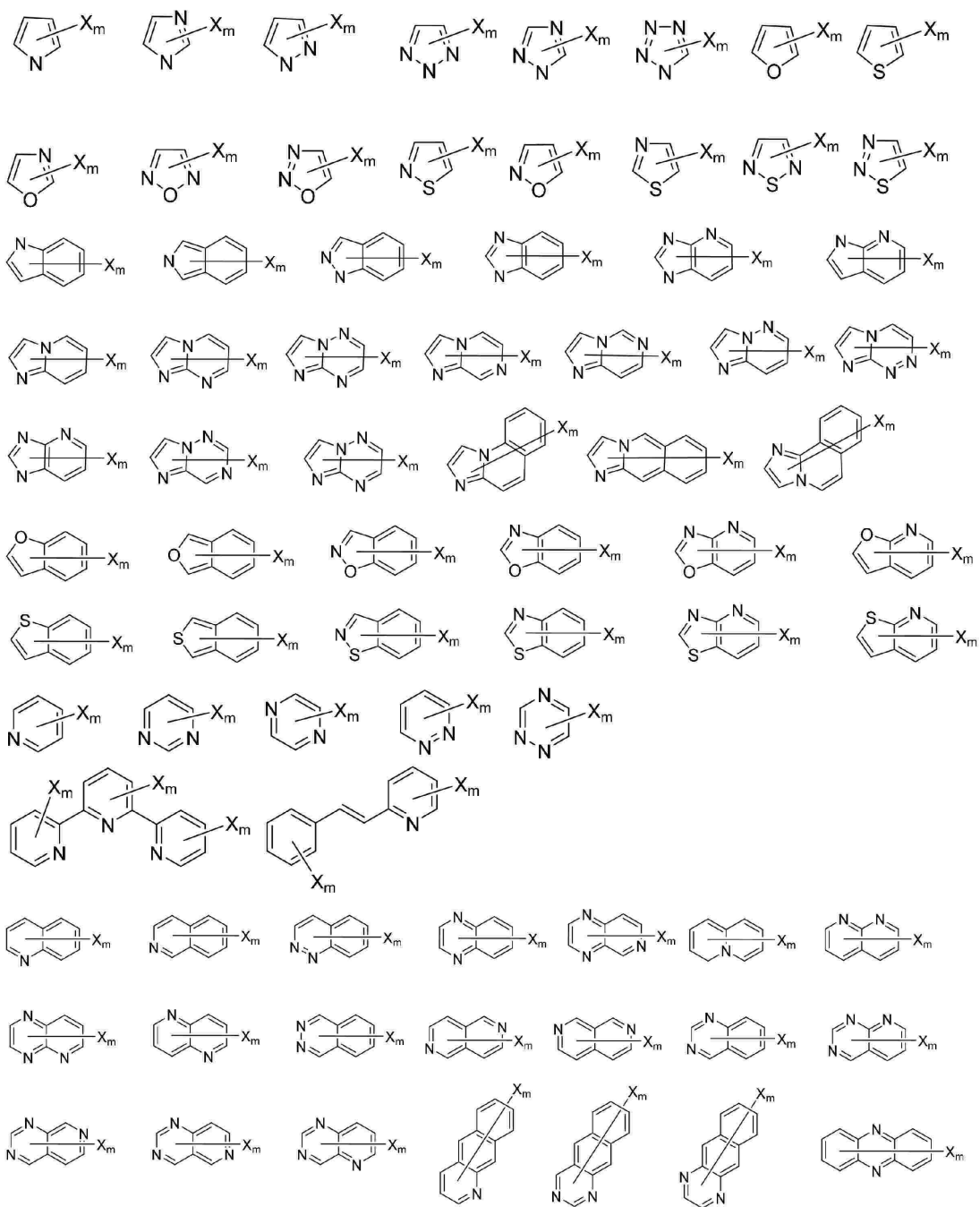


前記 [構造式 3 3-1] 中、

前記連結基 T_1 から T_7 は、前記 [構造式 3 1] から前記 [構造式 4 0] で定義したのと同じである。

前記 [構造式 3 1] から前記 [構造式 4 0] は、より好ましくは、下記 [構造式 5 0] 内の複素環の中から選択されるいずれか一つの複素環構造とすることができる。

[構造式 50]



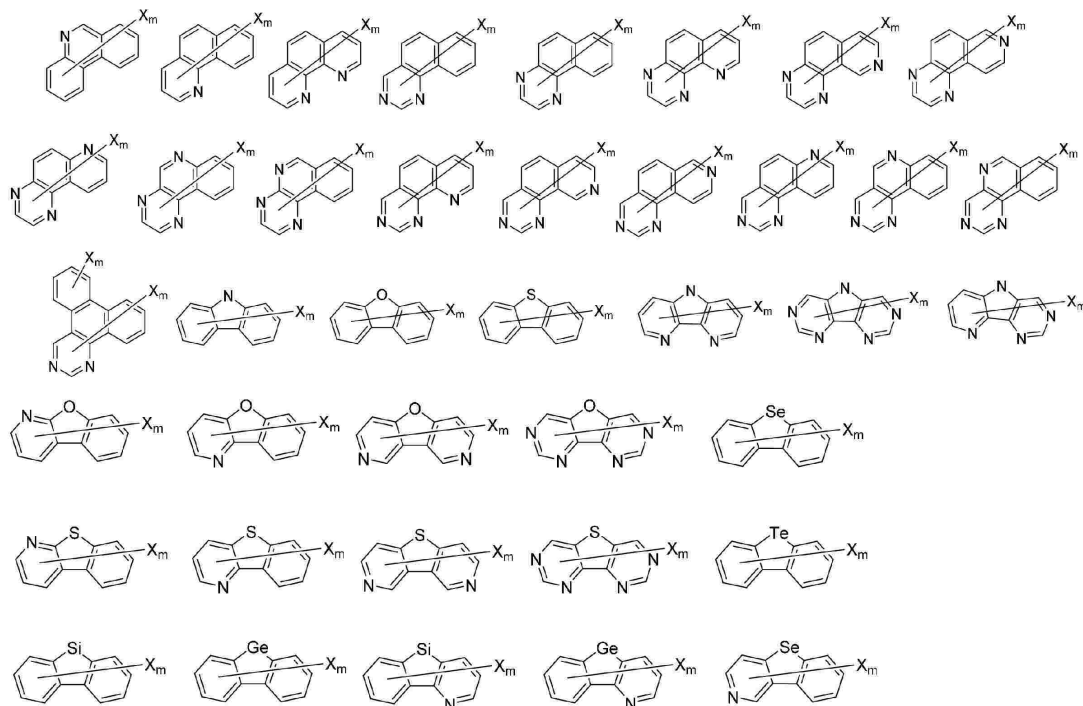
10

20

30

40

50



10

20

前記〔構造式 50〕中、

前記置換基 X は、上記で定義した R₁と同様であり、

m は 1 ～ 11 の中から選択されるいずれか一つの整数であり、m が 2 以上である場合、複数の X はそれぞれ互いに同一でも異なってもよい。

〔0022〕

本発明に係る前記〔化学式 A〕から前記〔化学式 D〕のいずれか一つで表される化合物は、前記 Q₁ から Q₃ 環の少なくとも一つは、置換もしくは無置換の炭素数 12 ～ 24 のジアリールアミノ基、置換もしくは無置換の炭素数 2 ～ 24 のジヘテロアリールアミノ基、置換もしくは無置換の炭素数 7 ～ 24 のアリール（ヘテロアリール）アミノ基の中から選択されるアミノ基が置換でき、

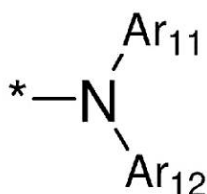
30

好ましくは、前記 Q₁ から Q₃ のうちの一つ又は二つは、置換もしくは無置換の炭素数 12 ～ 24 のジアリールアミノ基、置換もしくは無置換の炭素数 2 ～ 24 のジヘテロアリールアミノ基、置換もしくは無置換の炭素数 7 ～ 24 のアリール（ヘテロアリール）アミノ基の中から選択されるアミノ基が置換でき、ここで、前記「置換もしくは無置換」における「置換」は、上記で定義したのと同ーである。

前記〔化学式 A〕から前記〔化学式 D〕における前記 Q₁ から Q₃ のうちの少なくとも一つは、炭素数 6 ～ 50 の芳香族炭化水素環、又は炭素数 2 ～ 50 の芳香族複素環内に、下記〔構造式 F〕で表されるアリールアミノ基が結合することができ、好ましくは、0 ～ 4 個の〔構造式 F〕で表されるアリールアミノ基が結合することができ、さらに好ましくは、前記 Q₁ から Q₃ 内に 0 個又は 1 個又は 2 個の〔構造式 F〕で表されるアリールアミノ基が結合することができる。

40

〔構造式 F〕



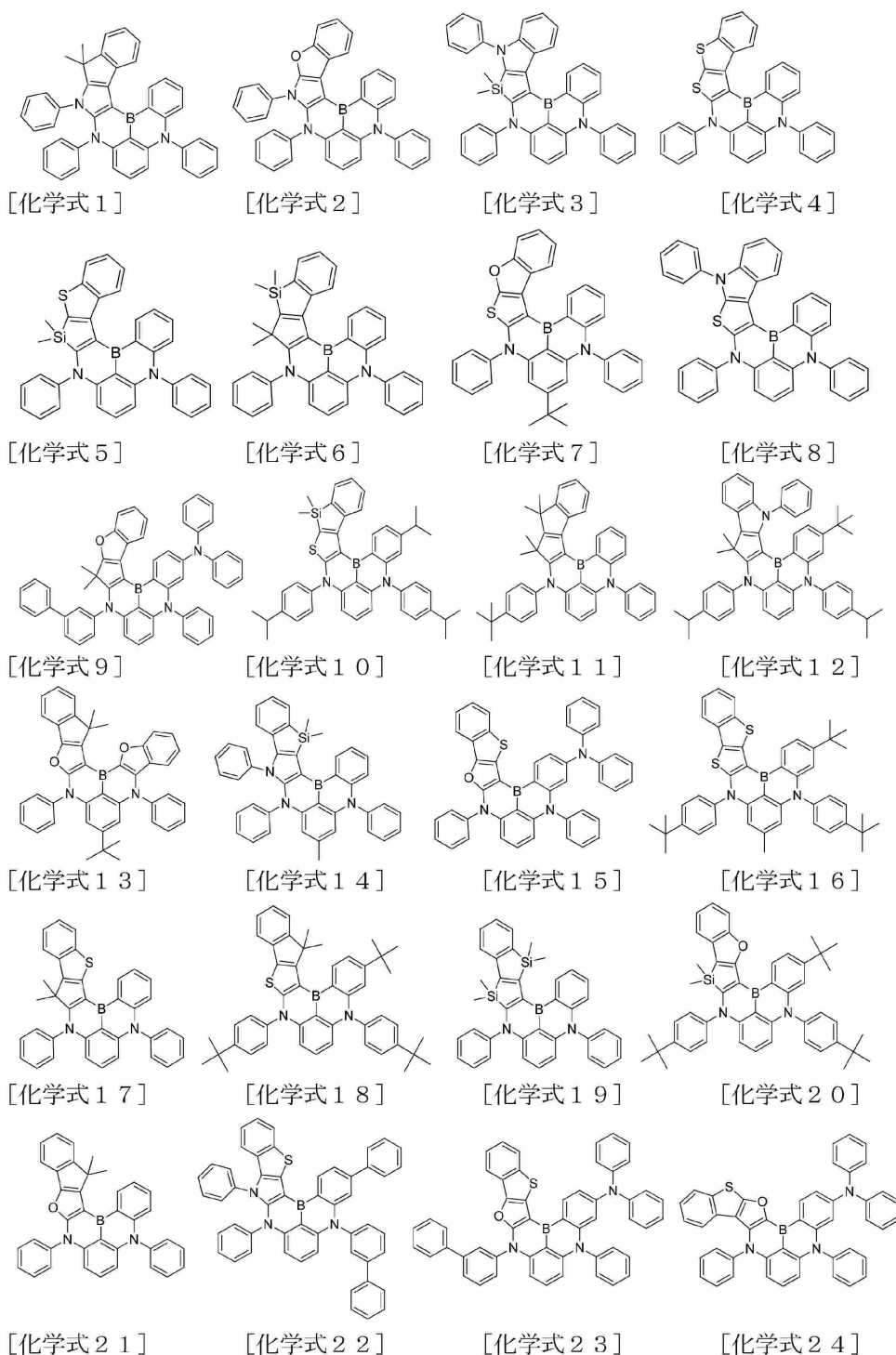
50

前記〔構造式 F〕中、「 —^* 」は、 Q_1 から Q_3 のうちの少なくとも一つの環の芳香族炭素と結合するための結合サイトを意味し、

前記 Ar_{11} 及び Ar_{12} は、同一でも異なってもよく、互いに独立して置換もしくは無置換の炭素数 6 ～ 18 のアリール基であり、好ましくは、置換もしくは無置換の炭素数 6 ～ 12 のアリール基であり、これらは互いに連結されて環を形成することができる。

〔0023〕

本発明に係る前記〔化学式 A〕から前記〔化学式 D〕のうちのいずれか一つで表されるホウ素化合物は、下記〈化学式 1〉から下記〈化学式 112〉の中から選択されるいずれか一つとすることができる。



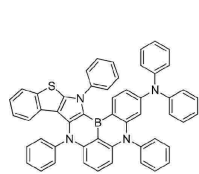
10

20

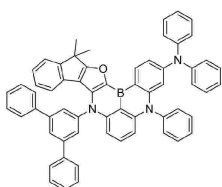
30

40

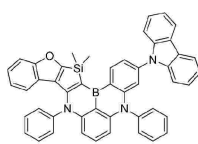
50



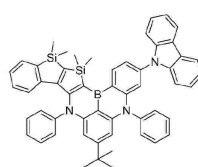
[化学式 2 5]



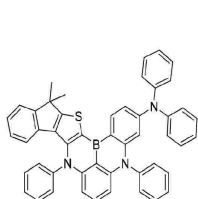
[化学式 2 6]



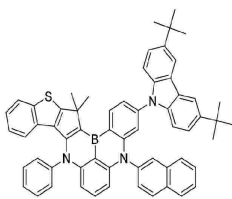
[化学式 2 7]



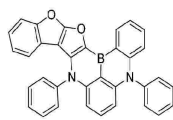
[化学式 2 8]



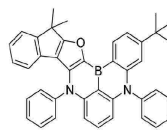
[化学式 2 9]



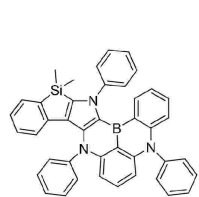
[化学式 3 0]



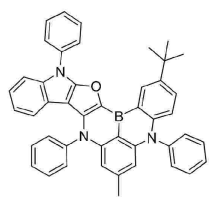
[化学式 3 1]



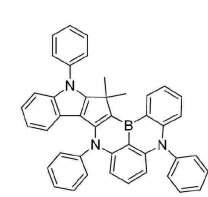
[化学式 3 2]



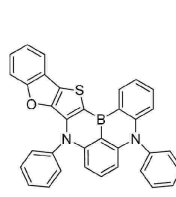
[化学式 3 3]



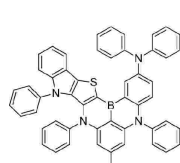
[化学式 3 4]



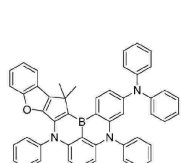
[化学式 3 5]



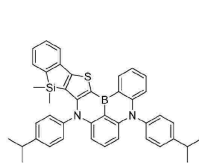
[化学式 3 6]



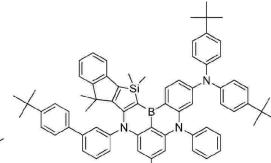
[化学式 3 7]



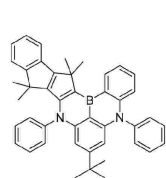
[化学式 3 8]



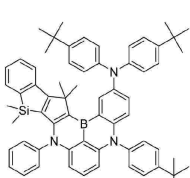
[化学式 3 9]



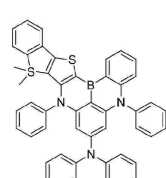
[化学式 4 0]



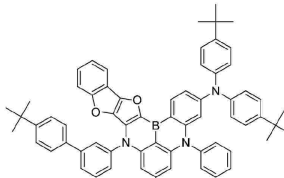
[化学式 4 1]



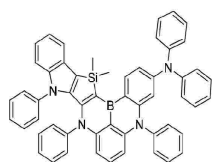
[化学式 4 2]



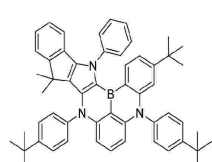
[化学式 4 3]



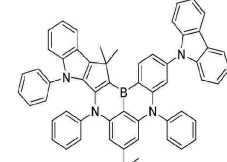
[化学式 4 4]



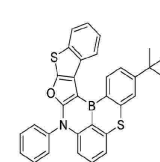
[化学式 4 5]



[化学式 4 6]



[化学式 4 7]



[化学式 4 8]

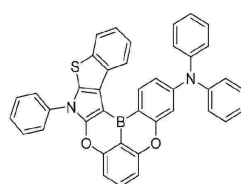
10

20

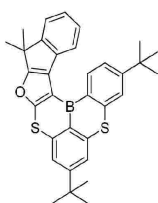
30

40

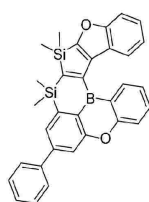
50



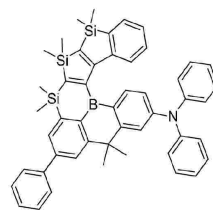
[化学式 4 9]



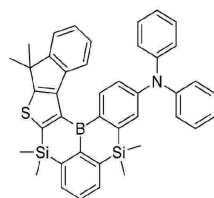
[化学式 5 0]



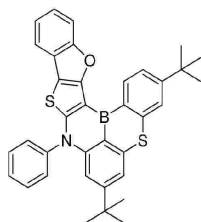
[化学式 5 1]



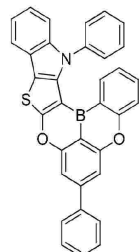
[化学式 5 2]



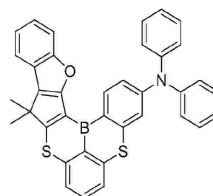
[化学式 5 3]



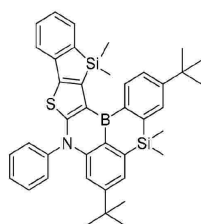
[化学式 5 4]



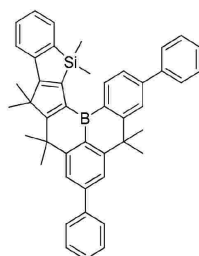
[化学式 5 5]



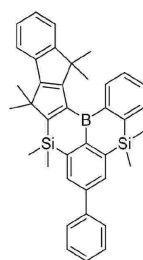
[化学式 5 6]



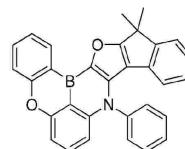
[化学式 5 7]



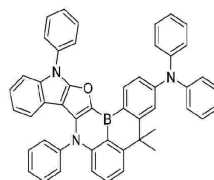
[化学式 5 8]



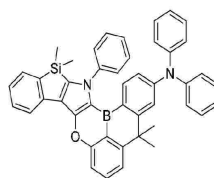
[化学式 5 9]



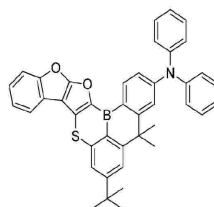
[化学式 6 0]



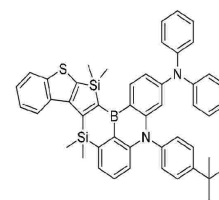
[化学式 6 1]



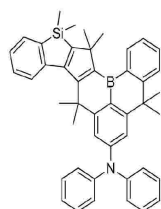
[化学式 6 2]



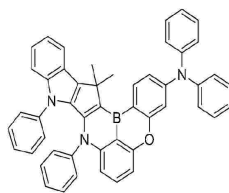
[化学式 6 3]



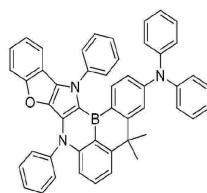
[化学式 6 4]



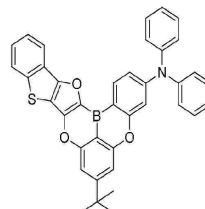
[化学式 6 5]



[化学式 6 6]



[化学式 6 7]



[化学式 6 8]

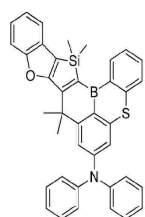
10

20

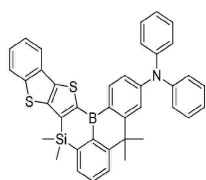
30

40

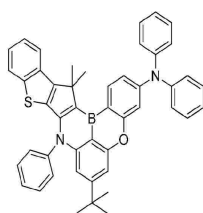
50



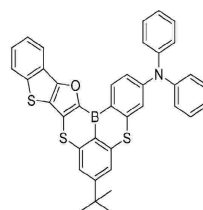
[化学式 6 9]



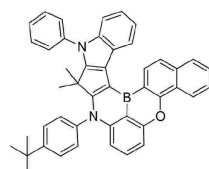
[化学式 7 0]



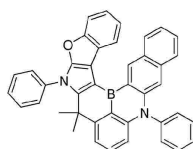
[化学式 7 1]



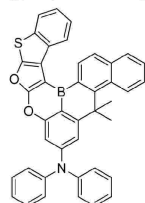
[化学式 7 2]



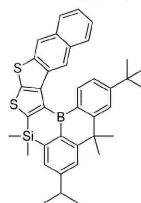
[化学式 7 3]



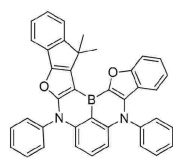
[化学式 7 4]



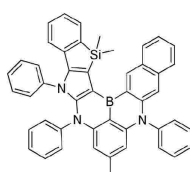
[化学式 7 5]



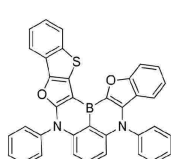
[化学式 7 6]



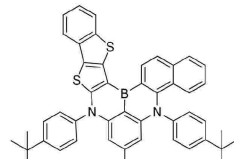
[化学式 7 7]



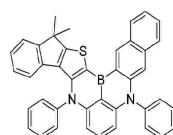
[化学式 7 8]



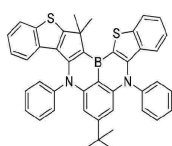
[化学式 7 9]



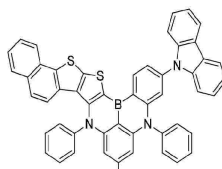
[化学式 8 0]



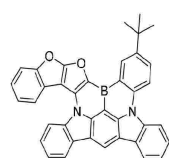
[化学式 8 1]



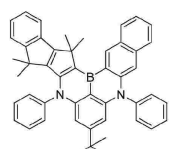
[化学式 8 2]



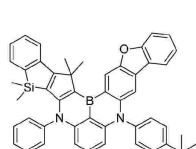
[化学式 8 3]



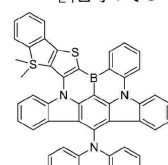
[化学式 8 4]



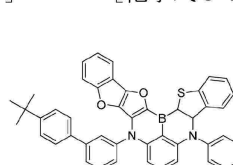
[化学式 8 5]



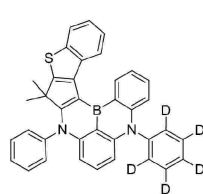
[化学式 8 6]



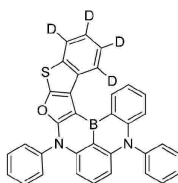
[化学式 8 7]



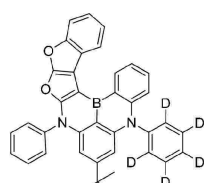
[化学式 8 8]



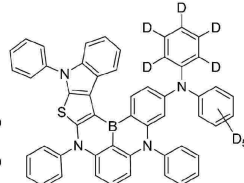
[化学式 8 9]



[化学式 9 0]



[化学式 9 1]



[化学式 9 2]

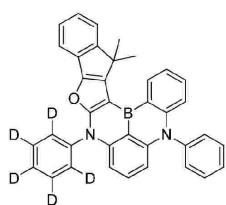
10

20

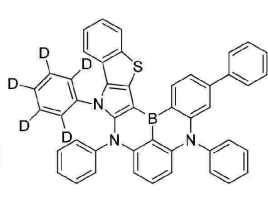
30

40

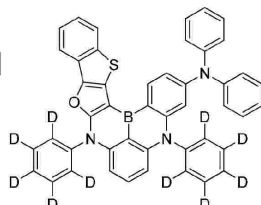
50



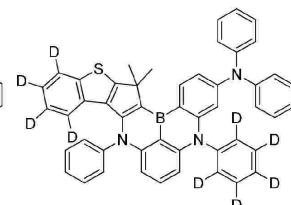
[化学式 9 3]



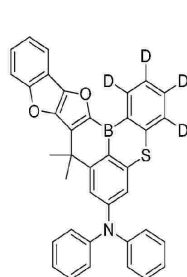
[化学式 9 4]



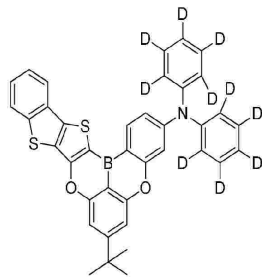
[化学式 9 5]



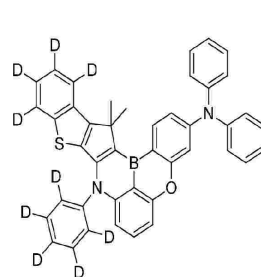
[化学式 9 6]



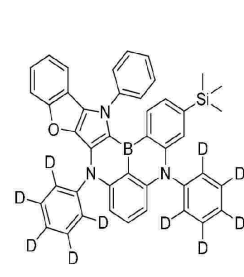
[化学式 9 7]



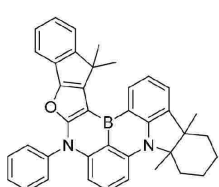
[化学式 9 8]



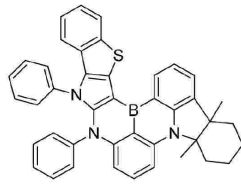
[化学式 9 9]



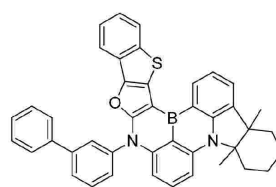
[化学式 1 0 0]



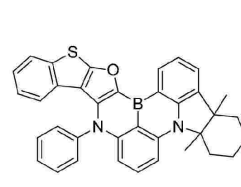
[化学式 1 0 1]



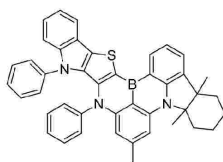
[化学式 1 0 2]



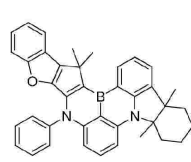
[化学式 1 0 3]



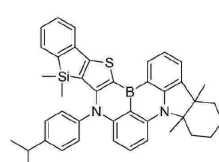
[化学式 1 0 4]



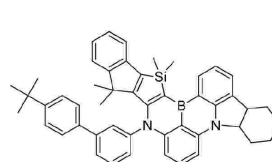
[化学式 1 0 5]



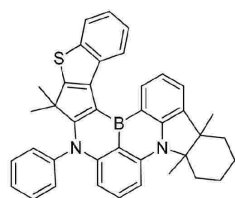
[化学式 1 0 6]



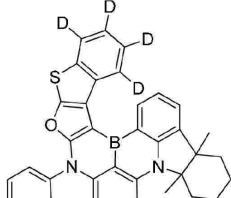
[化学式 1 0 7]



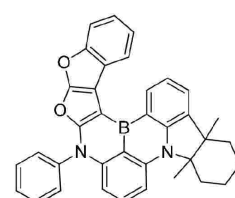
[化学式 1 0 8]



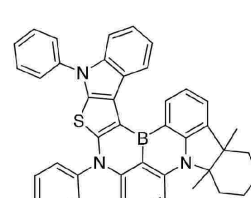
[化学式 1 0 9]



[化学式 1 1 0]



[化学式 1 1 1]



[化学式 1 1 2]

【0024】

本発明に係る前記ホウ素化合物を含む有機発光素子の一実施形態として、本発明は、第1電極；前記第1電極に対向する第2電極；及び前記第1電極と前記第2電極との間に介在する有機層；を含み、前記【化学式A】から前記【化学式D】の中から選択されるいずれか一つのホウ素化合物を1種以上含む有機発光素子を提供する。

本発明における「（有機層が）有機化合物を1種以上含む」とは、「（有機層が）本発明の範疇に属する1種の有機化合物、又は前記有機化合物の範疇に属する互いに異なる2種以上の化合物を含むことができる」と解釈できる。

本発明の前記有機発光素子は、発光層に加えて、正孔注入層、正孔輸送層、正孔注入機

10

20

30

40

50

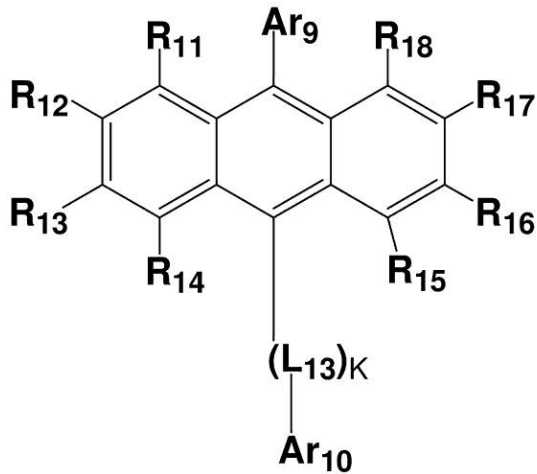
能及び正孔輸送機能を同時に有する機能層、発光層、電子輸送層、及び電子注入層のうちの少なくとも一つを含むことができる。

より好適な本発明の一実施形態として、本発明は、前記第 1 電極と前記第 2 電極との間に介在する有機層が発光層を含み、前記発光層は、ホストとドーパントからなり、本発明における前記〔化学式 A〕から前記〔化学式 D〕で表されるホウ素化合物のうちの少なくとも一つを発光層内のドーパントとして含むことができる。

【0025】

一実施形態として、本発明に係る有機発光素子において、前記ホストとしては、下記〔化学式 H〕で表されるアントラセン誘導体を使用することができる。

〔化学式 H〕



前記〔化学式 H〕中、

前記置換基 R_{11} から R_{18} は、同一でも異なってもよく、それぞれ先立って記載された〔化学式 A〕から〔化学式 D〕のうちのいずれか一つで表されるホウ素化合物内で定義された前記 R_1 から R_{10} と同一であり、

前記置換基 Ar_9 及び Ar_{10} は、それぞれ互いに同一でも異なってもよく、互いに独立して、水素、重水素、置換もしくは無置換の炭素数 1～30 のアルキル基、置換もしくは無置換の炭素数 6～50 のアリール基、置換もしくは無置換の炭素数 2～30 のアルケニル基、置換もしくは無置換の炭素数 2～20 のアルキニル基、置換もしくは無置換の炭素数 3～30 のシクロアルキル基、置換もしくは無置換の炭素数 5～30 のシクロアルケニル基、置換もしくは無置換の炭素数 2～50 のヘテロアリール基、置換もしくは無置換の炭素数 2～30 のヘテロシクロアルキル基、置換もしくは無置換の炭素数 1～30 のアルコキシ基、置換もしくは無置換の炭素数 6～30 のアリールオキシ基、置換もしくは無置換の炭素数 1～30 のアルキルチオキシ基、置換もしくは無置換の炭素数 6～30 のアリールチオキシ基、置換もしくは無置換の炭素数 1～30 のアルキルアミン基、置換もしくは無置換の炭素数 6～30 のアリールアミン基、置換もしくは無置換の炭素数 1～30 のアルキルシリル基、置換もしくは無置換の炭素数 6～30 のアリールシリル基の中から選択されるいずれか一つであり、

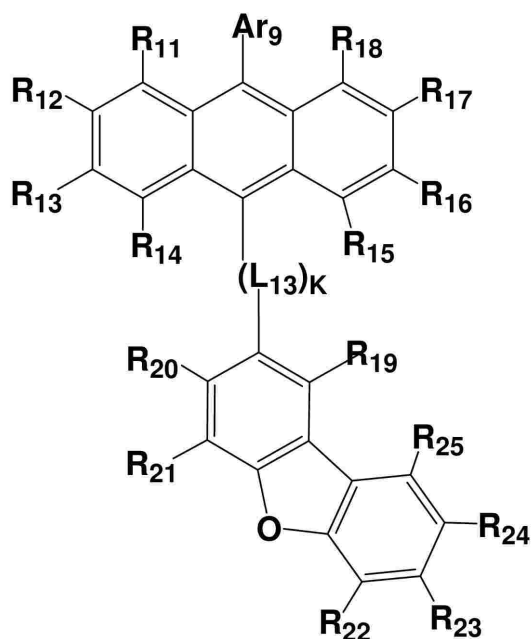
前記連結基 L_{13} は、単結合であるか、或いは置換もしくは無置換の炭素数 6～20 のアリーレン基、又は置換もしくは無置換の炭素数 2～20 のヘテロアリーレン基の中から選択されるいずれか一つであり、

前記 k は 1～3 の整数であるが、前記 k が 2 以上である場合に、それぞれの L_{13} は互いに同一でも異なってもよい。

【0026】

一実施形態として、本発明に係る有機発光素子において、前記ホストとして使用される、〔化学式 H〕で表されるアントラセン誘導体は、下記〔化学式 H 1〕又は下記〔化学式 H 2〕で表されるアントラセン誘導体とすることができる。

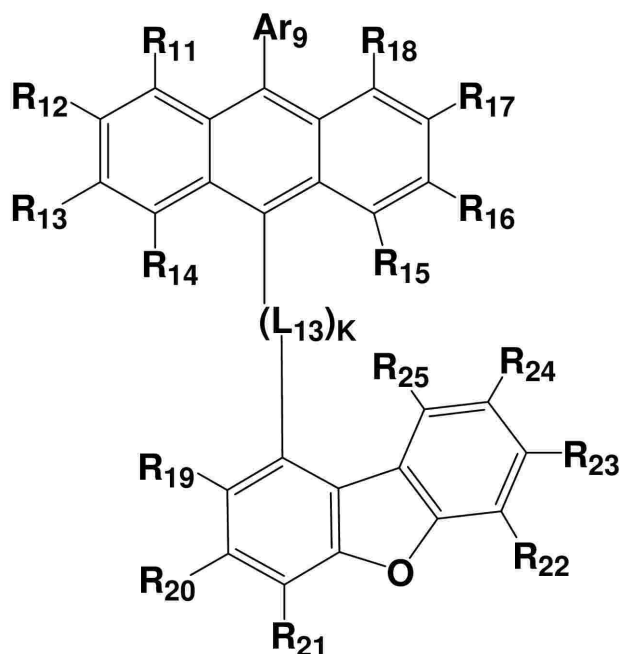
〔化学式 H 1〕



10

20

〔化学式 H 2〕



30

40

前記〔化学式 H 1〕及び前記〔化学式 H 2〕中、

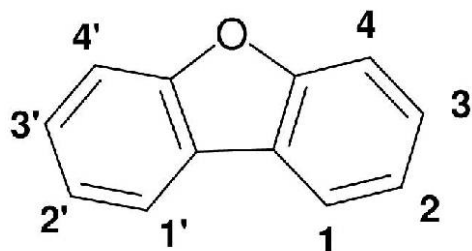
前記置換基 R₁₉～R₂₅は、同一でも異なってもよく、それぞれ前記〔化学式 A〕から前記〔化学式 D〕のうちのいずれか一つで表されるホウ素化合物内で定義された前記 R₁～R₁₀と同一である。

〔0027〕

前記〔化学式 H 1〕又は前記〔化学式 H 2〕で表される化合物は、以下の構造に示すよ

50

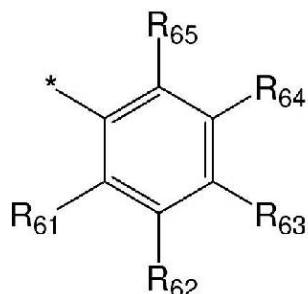
うに、ジベンゾフランのいずれか一方のフェニル環の 1 位又は 2 位又はジベンゾフランの他方のフェニル環の 1' 位又は 2' 位がアントラセニル基の 9 位に結合することを特徴とし、前記〔化学式 H 1〕又は前記〔化学式 H 2〕で表される化合物は、発光層内のホスト材料として使用できる。



10

本発明において、前記〔化学式 H〕、前記〔化学式 H 1〕又は前記〔化学式 H 2〕で表されるアントラセン誘導体内の置換基 Ar_g は、下記〔構造式 C-1〕で表される置換基とすることができる。

〔構造式 C-1〕



20

前記〔構造式 C-1〕中の $R_{61} \sim R_{65}$ は、それぞれ同一でも異なってもよく、互いに独立して、水素、重水素、置換もしくは無置換の炭素数 1~20 のアルキル基、置換もしくは無置換の炭素数 6~50 のアリール基、置換もしくは無置換の炭素数 7~50 のアリールアルキル基、置換もしくは無置換の炭素数 3~30 のシクロアルキル基、置換もしくは無置換の炭素数 1~30 のアルキルシリル基、置換もしくは無置換の炭素数 6~30 のアリールシリル基、及びハロゲン基の中から選択されるいずれか一つであり、

30

前記〔構造式 C-1〕における「*」は、前記〔化学式 H〕、前記〔化学式 H 1〕又は前記〔化学式 H 2〕内のアントラセニル基の 10 位に結合する結合サイトである。

〔0028〕

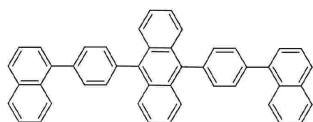
一実施形態として、本発明による有機発光素子において、前記〔化学式 H〕、前記〔化学式 H 1〕又は前記〔化学式 H 2〕内の連結基 L_{13} は、単結合であるか、或いは置換もしくは無置換の炭素数 6~20 のアリーレン基とすることができる。このとき、前記 k は 1~2 の整数であるが、前記 k が 2 以上の場合に、それぞれの L_{13} は互いに同一でも異なってもよい。

40

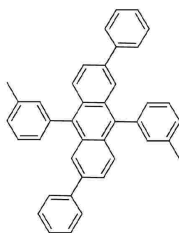
本発明に係る有機発光素子内の前記〔化学式 H〕で表されるアントラセン誘導体は、下記<化合物 101>から下記<化合物 166>の中から選択されるいずれか一つとすることができる。

50

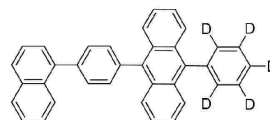
<化合物 1 0 1>



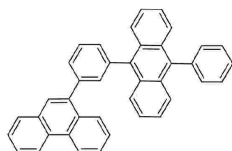
<化合物 1 0 2>



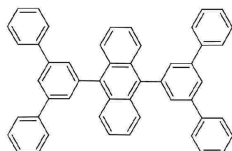
<化合物 1 0 3>



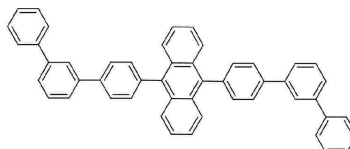
<化合物 1 0 4>



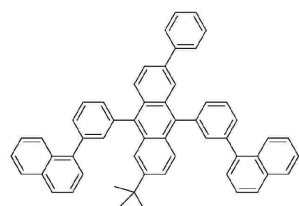
<化合物 1 0 5>



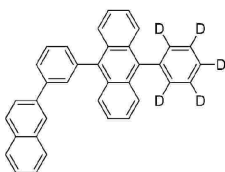
<化合物 1 0 6>



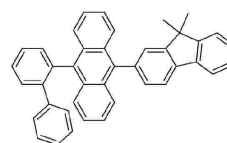
<化合物 1 0 7>



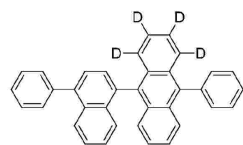
<化合物 1 0 8>



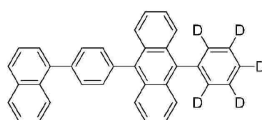
<化合物 1 0 9>



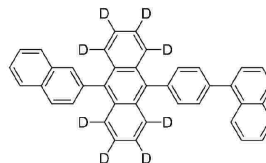
<化合物 1 1 0>



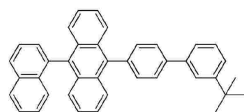
<化合物 1 1 1>



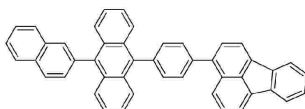
<化合物 1 1 2>



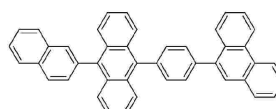
<化合物 1 1 3>



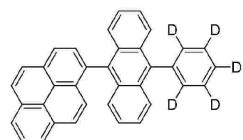
<化合物 1 1 4>



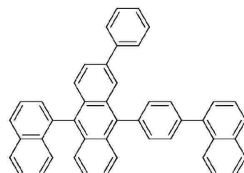
<化合物 1 1 5>



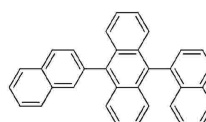
<化合物 1 1 6>



<化合物 1 1 7>



<化合物 1 1 8>



10

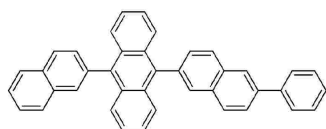
20

30

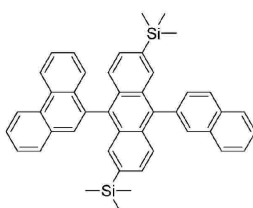
40

50

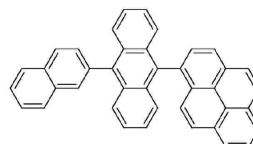
<化合物 1 1 9>



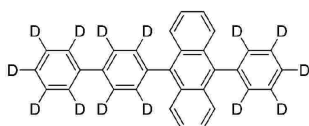
<化合物 1 2 0>



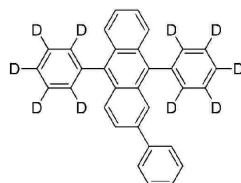
<化合物 1 2 1>



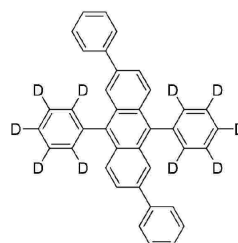
<化合物 1 2 2>



<化合物 1 2 3>

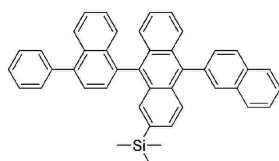


<化合物 1 2 4>

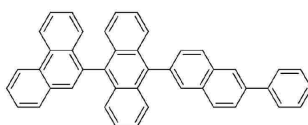


10

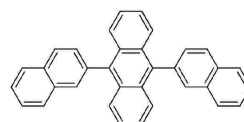
<化合物 1 2 5>



<化合物 1 2 6>

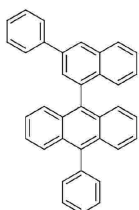


<化合物 1 2 7>

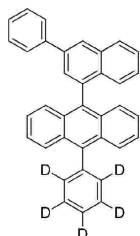


20

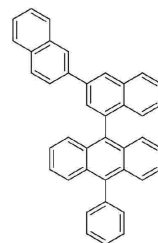
<化合物 1 2 8>



<化合物 1 2 9>

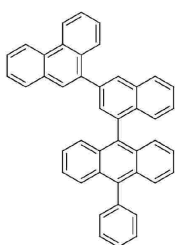


<化合物 1 3 0>

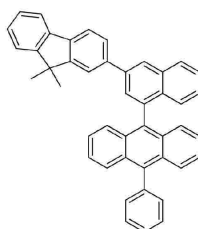


30

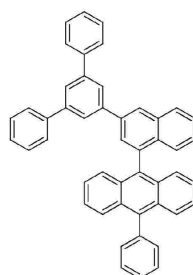
<化合物 1 3 1>



<化合物 1 3 2>



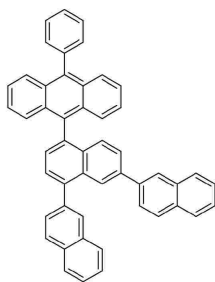
<化合物 1 3 3>



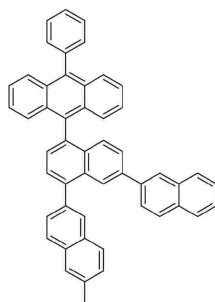
40

50

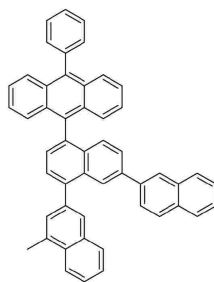
<化合物 1 3 4>



<化合物 1 3 5>

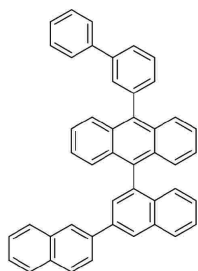


<化合物 1 3 6>

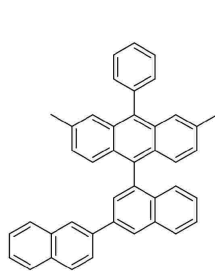


10

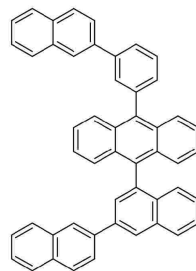
<化合物 1 3 7>



<化合物 1 3 8>

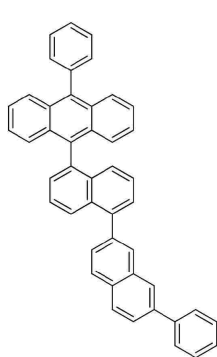


<化合物 1 3 9>

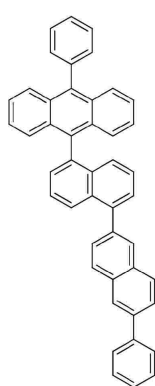


20

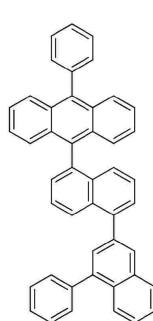
<化合物 1 4 0>



<化合物 1 4 1>

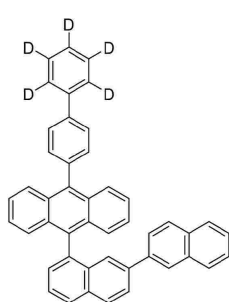


<化合物 1 4 2>

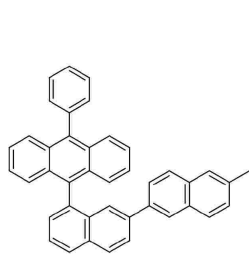


30

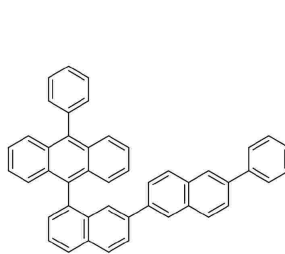
<化合物 1 4 3>



<化合物 1 4 4>



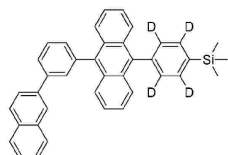
<化合物 1 4 5>



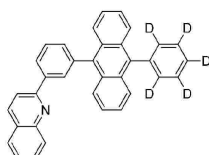
40

50

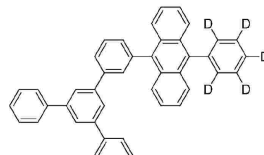
<化合物 1 4 6 >



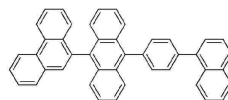
<化合物 1 4 7 >



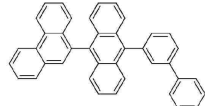
<化合物 1 4 8 >



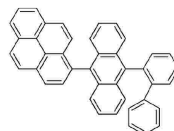
<化合物 1 4 9 >



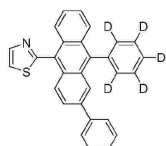
<化合物 1 5 0 >



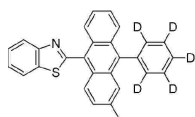
<化合物 1 5 1 >



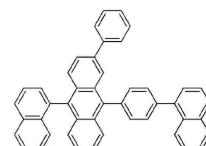
<化合物 1 5 2 >



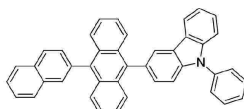
<化合物 1 5 3 >



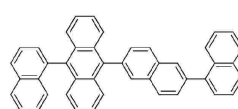
<化合物 1 5 4 >



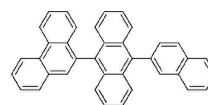
<化合物 1 5 5 >



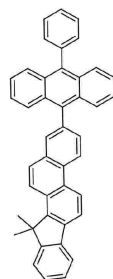
<化合物 1 5 6 >



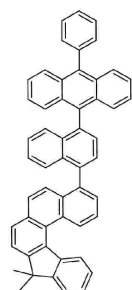
<化合物 1 5 7 >



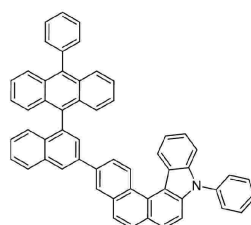
<化合物 1 5 8 >



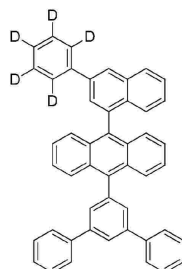
<化合物 1 5 9 >



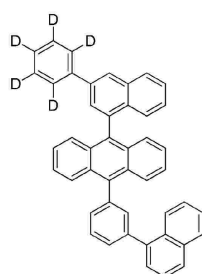
<化合物 1 6 0 >



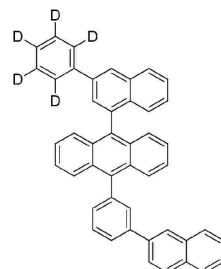
<化合物 1 6 1 >



<化合物 1 6 2 >



<化合物 1 6 3 >



10

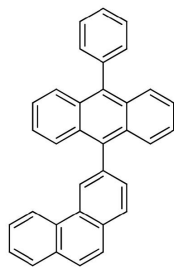
20

30

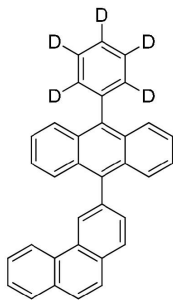
40

50

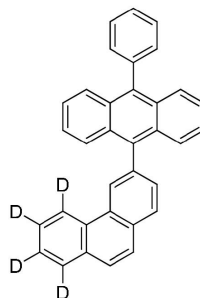
<化合物 1 6 4>



<化合物 1 6 5>



<化合物 1 6 6>



10

【 0 0 2 9 】

別の一実施形態として、本発明に係る有機発光素子内の前記〔化学式 H 1〕及び前記〔化学式 H 2〕のうちのいずれか一つで表されるアントラセン誘導体は、下記<化合物 2 0 1>から下記<化合物 2 8 1>の中から選択されるいずれか一つとすることができる。

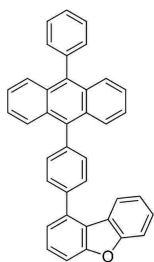
20

30

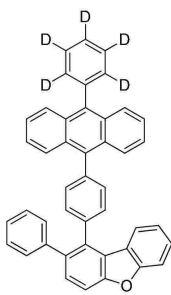
40

50

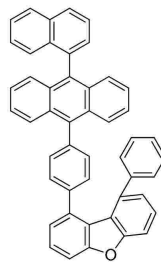
<化合物 2 0 1>



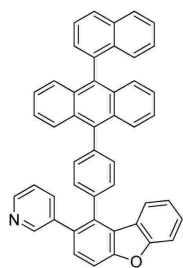
<化合物 2 0 2>



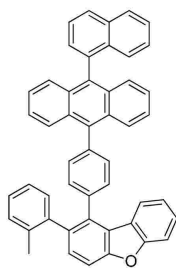
<化合物 2 0 3>



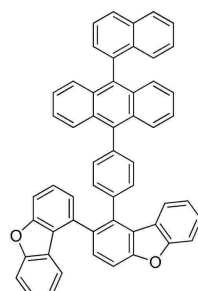
<化合物 2 0 4>



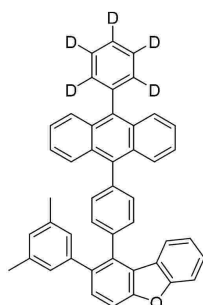
<化合物 2 0 5>



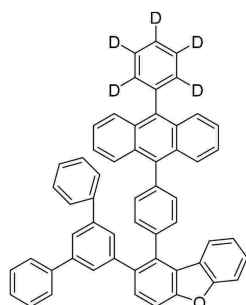
<化合物 2 0 6>



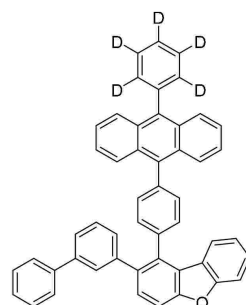
<化合物 2 0 7>



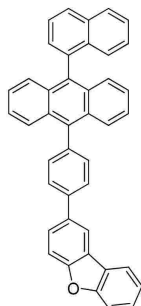
<化合物 2 0 8>



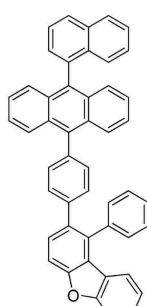
<化合物 2 0 9>



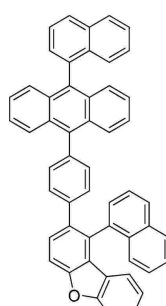
<化合物 2 1 0>



<化合物 2 1 1>



<化合物 2 1 2>



10

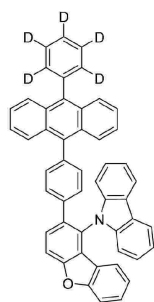
20

30

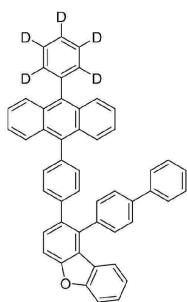
40

50

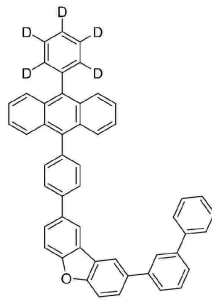
<化合物 2 1 3 >



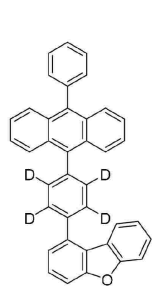
<化合物 2 1 4 >



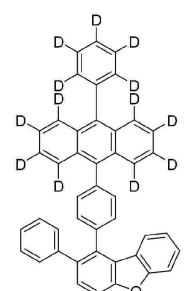
<化合物 2 1 5 >



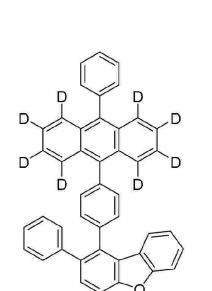
<化合物 2 1 6 >



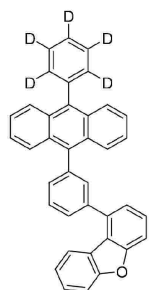
<化合物 2 1 7 >



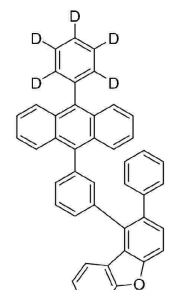
<化合物 2 1 8 >



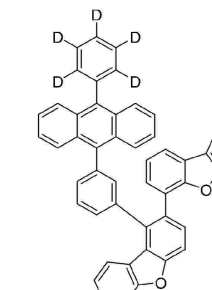
<化合物 2 1 9 >



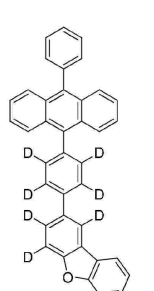
<化合物 2 2 0 >



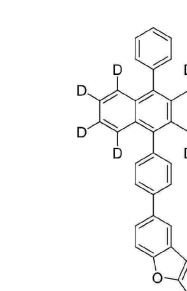
<化合物 2 2 1 >



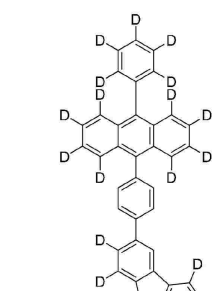
<化合物 2 2 2 >



<化合物 2 2 3 >



<化合物 2 2 4 >



10

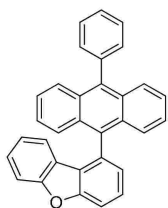
20

30

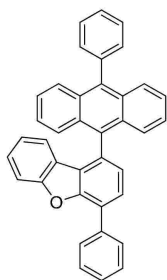
40

50

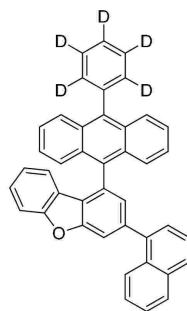
<化合物 2 2 5>



<化合物 2 2 6>

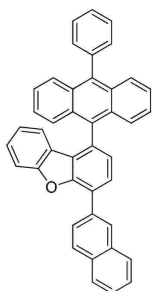


<化合物 2 2 7>

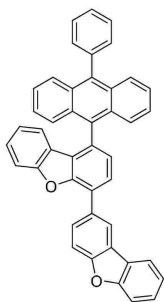


10

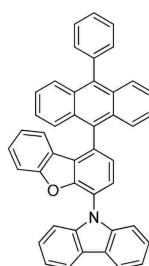
<化合物 2 2 8>



<化合物 2 2 9>

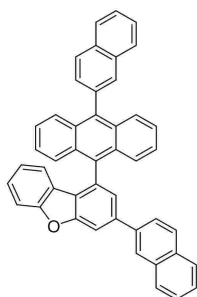


<化合物 2 3 0>

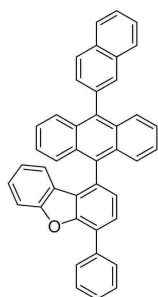


20

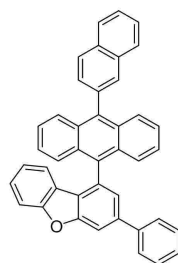
<化合物 2 3 1>



<化合物 2 3 2>

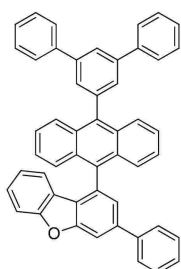


<化合物 2 3 3>

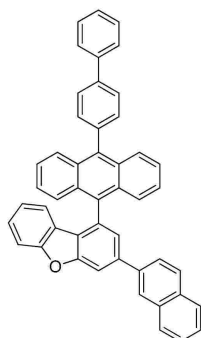


30

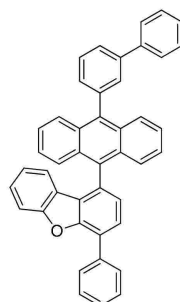
<化合物 2 3 4>



<化合物 2 3 5>



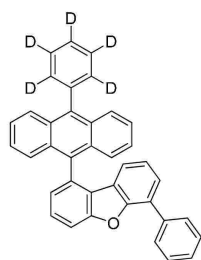
<化合物 2 3 6>



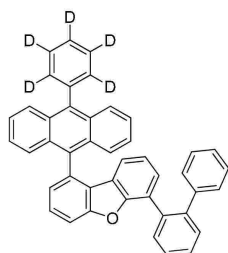
40

50

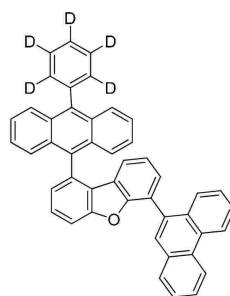
<化合物 2 3 7>



<化合物 2 3 8>

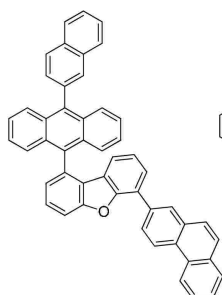


<化合物 2 3 9>

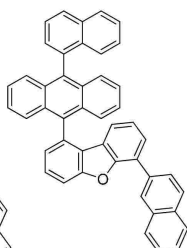


10

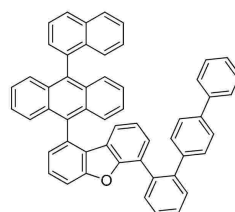
<化合物 2 4 0>



<化合物 2 4 1>

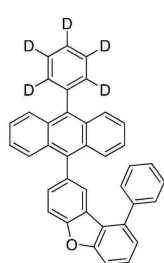


<化合物 2 4 2>

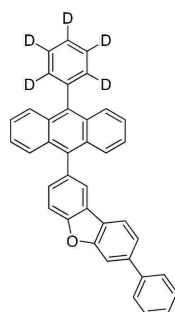


20

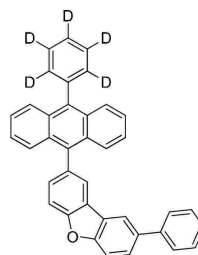
<化合物 2 4 3>



<化合物 2 4 4>

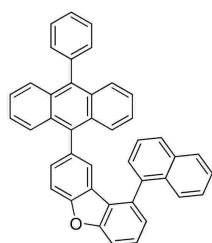


<化合物 2 4 5>

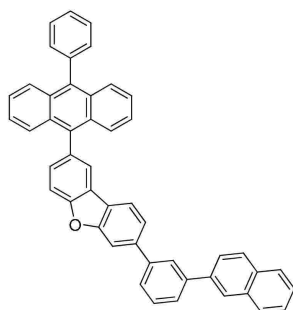


30

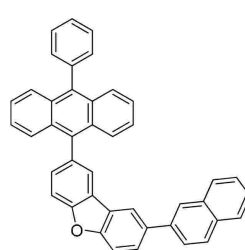
<化合物 2 4 6>



<化合物 2 4 7>



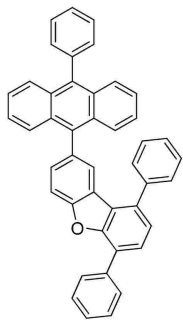
<化合物 2 4 8>



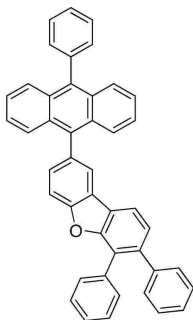
40

50

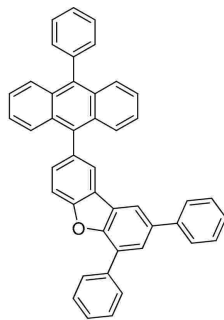
<化合物 2 4 9>



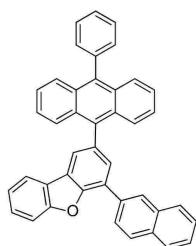
<化合物 2 5 0>



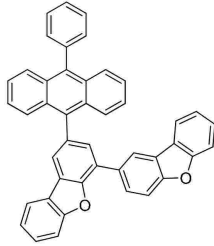
<化合物 2 5 1>



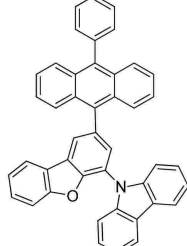
<化合物 2 5 2>



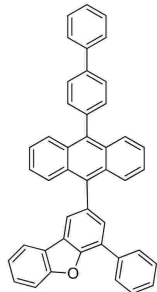
<化合物 2 5 3>



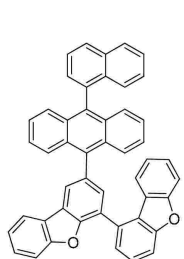
<化合物 2 5 4>



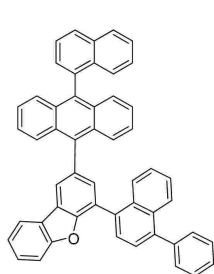
<化合物 2 5 5>



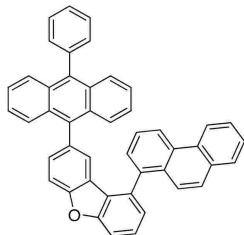
<化合物 2 5 6>



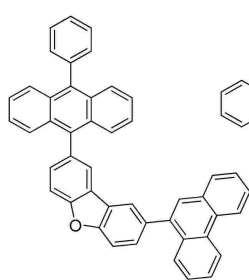
<化合物 2 5 7>



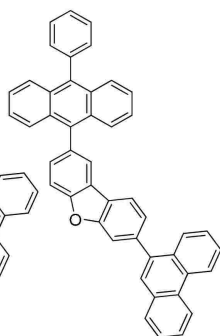
<化合物 2 5 8>



<化合物 2 5 9>



<化合物 2 6 0>



10

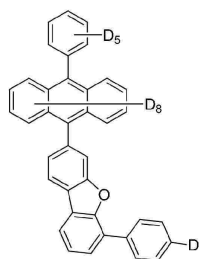
20

30

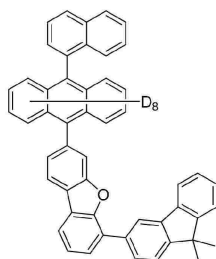
40

50

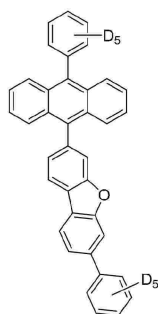
<化合物 2 6 1>



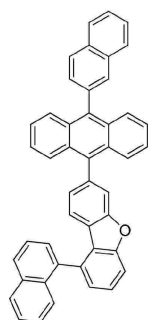
<化合物 2 6 2>



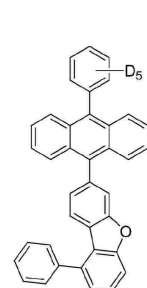
<化合物 2 6 3>



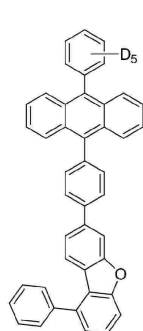
<化合物 2 6 4>



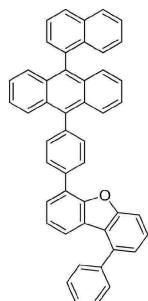
<化合物 2 6 5>



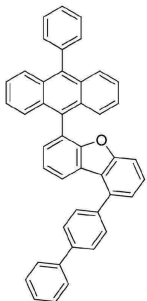
<化合物 2 6 6>



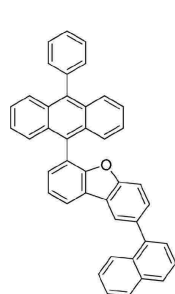
<化合物 2 6 7>



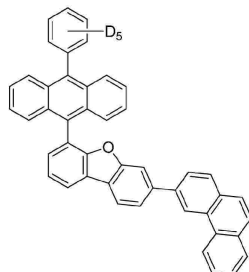
<化合物 2 6 8>



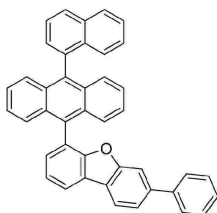
<化合物 2 6 9>



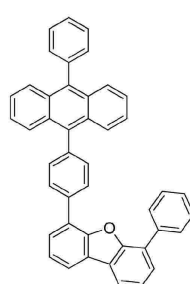
<化合物 2 7 0>



<化合物 2 7 1>



<化合物 2 7 2>



10

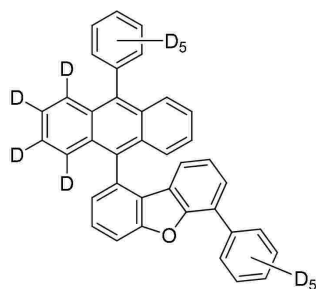
20

30

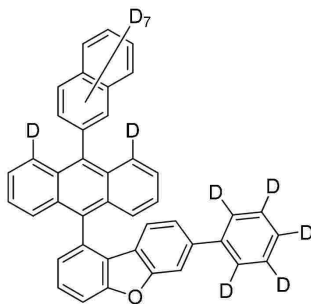
40

50

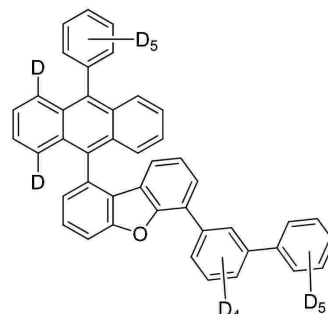
<化合物 273>



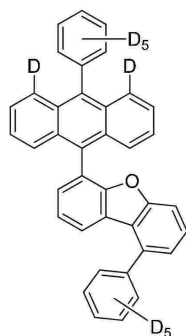
<化合物 274>



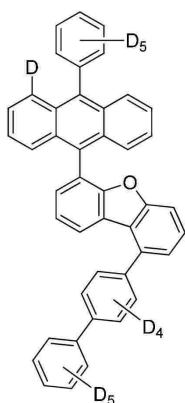
<化合物 275>



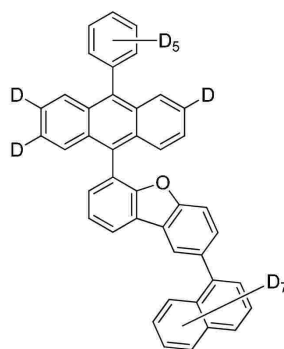
<化合物 276>



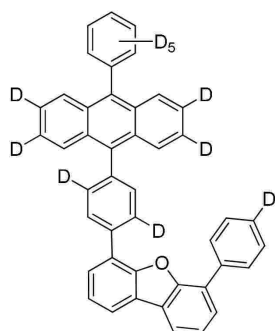
<化合物 277>



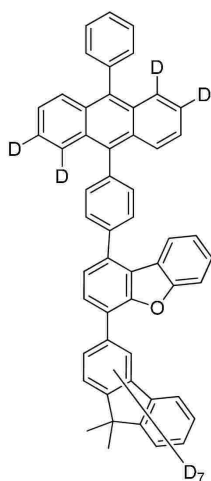
<化合物 278>



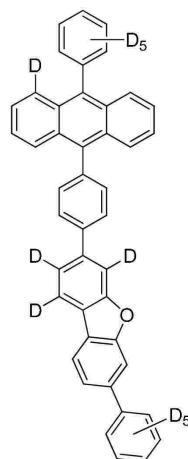
<化合物 279>



<化合物 280>



<化合物 281>



【0030】

より好適な本発明の一実施形態として、本発明は、第1電極としての陽極；第1電極に対向する第2電極としての陰極及び前記陽極と前記陰極との間に介在する発光層；を含み、本発明における前記【化学式A】から前記【化学式D】のうちのいずれか一つで表されるホウ素化合物を発光層内のドーパントとして含み、且つ前記【化学式H】で表される化合物のうちの少なくとも一つを発光層内のホストとして含む有機発光素子であることができ、このような構造的特徴によって、本発明による有機発光素子は、低電圧駆動及び高効率特性を有することができる。

前記発光層内のドーパントの含有量は、通常、ホスト約100重量部を基準にして約0

10

20

30

40

50

・ 01～約20重量部の範囲で選択でき、これに限定されるものではない。

前記発光層は、前記ドーパントと前記ホストの他にも、様々なホストと様々なドーパント物質をさらに含むことができる。

【0031】

以下、図面を参照して、本発明の一実施形態による有機発光素子を説明する。

図1は本発明の一実施形態による有機発光素子の構造を示す図である。

図1に示すように、本発明の実施形態による有機発光素子は、陽極20、正孔輸送層40、ホスト及びドーパントを含む発光層50、電子輸送層60、及び陰極80を順次含む有機発光素子であって、前記陽極を第1電極、陰極を第2電極にして、前記陽極と発光層との間に正孔輸送層を含み、発光層と陰極との間に電子輸送層を含む有機発光素子に該当する。

10

本発明の実施形態による有機発光素子は、前記陽極20と正孔輸送層40との間に正孔注入層30を含み、前記電子輸送層60と陰極80との間に電子注入層70を含むことができる。

【0032】

以下、図1を参照して、本発明の有機発光素子及びその製造方法について説明する。

まず、基板10の上部に陽極（アノード）電極用物質をコーティングして陽極20を形成する。ここで、基板10としては、通常の有機EL素子で使用する基板を使用するが、透明性、表面平滑性、扱いやすさ及び防水性に優れた有機基板又は透明プラスチック基板であることが好ましい。そして、陽極電極用物質としては、透明で伝導性に優れた酸化インジウムスズ（ITO）、酸化インジウム亜鉛（IZO）、酸化スズ（SnO₂）、酸化亜鉛（ZnO）などを使用する。

20

前記陽極20電極の上部に正孔注入層物質を真空熱蒸着又はスピンコーティングして正孔注入層30を形成する。その次に、前記正孔注入層30の上部に正孔輸送層物質を真空熱蒸着又はスピンコーティングして正孔輸送層40を形成する。

【0033】

前記正孔注入層の材料は、当該分野における通常使用されるものである限りは、特に制限されずに使用することができ、例えば、2-TNATA [4, 4', 4' '-tris (2-naphthylphenyl-phenylamino)-triphenylamine]、NPD [N, N'-di (1-naphthyl)-N, N'-diphenylbenzidine]、TPD [N, N'-diphenyl-N, N'-bis (3-methylphenyl)-1, 1'-biphenyl-4, 4'-diamine]、DNTPD [N, N'-diphenyl-N, N'-bis- [4- (phenyl-m-tolyl-amino)-phenyl]-biphenyl-4, 4'-diamine] などを使用することができる。しかし、本発明は、必ずしもこれらに限定されるものではない。

30

前記正孔輸送層の材料は、当該分野における通常使用されるものである限りは、特に制限されず、例えば、N, N'-ビス (3-メチルフェニル) -N, N'-ジフェニル [1, 1'-ビフェニル] -4, 4'-ジアミン (TPD)、又はN, N'-ジ (ナフタレン-1-イル) -N, N'-ジフェニルベンジジン (a-NPD) などを使用することができる。しかし、本発明は、必ずしもこれに限定されるものではない。

40

本発明は、前記正孔輸送層の上部に電子遮断層をさらに形成することができる。前記電子遮断層は、電子注入層から注入された電子が発光層を通して正孔輸送層に進入することを防止することにより、素子の寿命と効率を向上させるための層であって、発光層と正孔注入層との間における適切な部分に形成でき、好ましくは、発光層と正孔輸送層との間に形成できる。

次いで、前記正孔輸送層40又は電子遮断層の上部に発光層50を真空蒸着法又はスピンコーティング法で積層することができる。

前記発光層は、ホストとドーパントからなる。これらを構成する材料については、上記で記載したのと同様である。

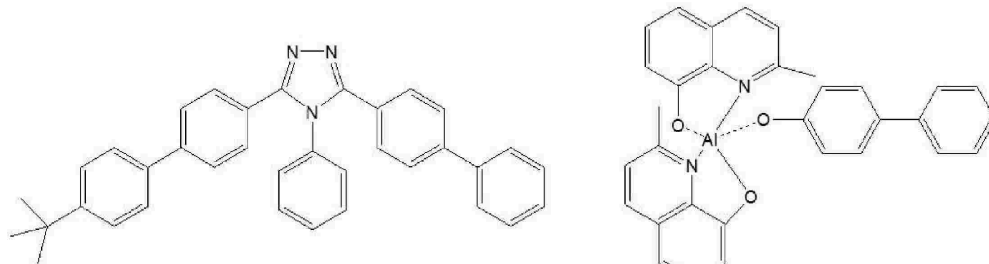
50

本発明の具体例によれば、前記発光層の厚さは50～2,000 Åであることが好ましい。

前記発光層上に電子輸送層60を真空蒸着法又はスピンコーティング法によって蒸着する。

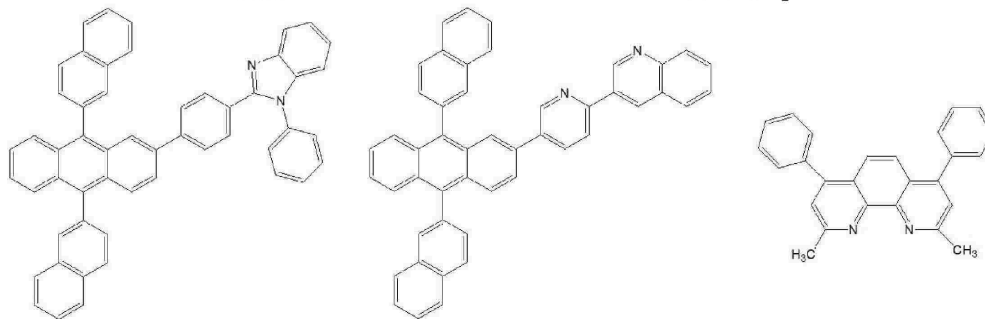
【0034】

本発明において、前記電子輸送層の材料としては、電子注入電極（カソード（Cathode））から注入された電子を安定的に輸送する機能を果たすものであって、公知の電子輸送物質を用いることができる。公知の電子輸送物質の例としては、キノリン誘導体、特に、トリス（8-キノリノレート）アルミニウム（Alq₃）、Li_q、TAZ、BALq、ベリリウムビス（ベンゾキノリン-10-オレート）（beryllium bis（benzoquinolin-10-olate：Bebq₂）、化合物ET201、化合物ET202、BCP、オキサジアゾール誘導体であるPBD、BMD、BNDなどの材料を使用することもできるが、これに限定されるものではない。



TAZ

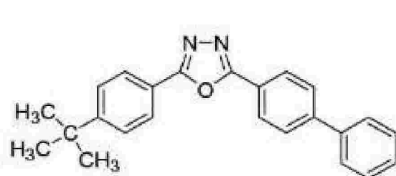
BALq



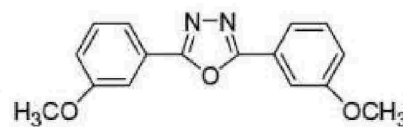
<化合物 ET201>

<化合物 ET202>

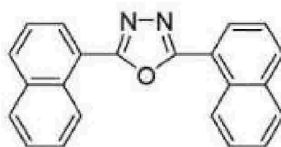
BCP



PBD



BMD



BND

【0035】

本発明における有機発光素子は、前記電子輸送層を形成した後に、電子輸送層の上部に

、陰極からの電子の注入を容易にする機能を有する物質である電子注入層（EIL）が積層できる。これは、特に材料を制限しない。

前記電子注入層形成材料としては、CsF、NaF、LiF、Li₂O、BaOなどの電子注入層形成材料として公知になっている任意の物質を用いることができる。前記電子注入層の蒸着条件は、使用する化合物によって異なるが、一般に、正孔注入層の形成とほぼ同じ条件範囲の中から選択できる。

前記電子注入層の厚さは、約1 Å～約100 Å、約3 Å～約90 Åとすることができる。前記電子注入層の厚さが前述の範囲を満足する場合、実質的な駆動電圧の上昇なしに満足すべき程度の電子注入特性を得ることができる。

本発明において、前記陰極は、容易な電子注入のために仕事関数の小さい物質を用いることができる。リチウム（Li）、マグネシウム（Mg）、カルシウム（Ca）、又はこれらの合金アルミニウム（Al）、アルミニウム－リチウム（Al－Li）、マグネシウム－インジウム（Mg－In）、マグネシウム－銀（Mg－Ag）などを使用するか、或いはITO、IZOを用いた透過型陰極を使用することができる。

本発明における有機発光素子は、380 nm～800 nmの波長範囲で発光する青色発光材料、緑色発光材料又は赤色発光材料の発光層をさらに含むことができる。すなわち、本発明における発光層は複数の発光層であって、前記さらに形成される発光層内の青色発光材料、緑色発光材料又は赤色発光材料は、蛍光材料又は燐光材料とすることができる。

本発明において、前記それぞれの層の中から選択された一つ以上の層は、単分子蒸着工程又は溶液工程によって形成できる。

前記蒸着工程は、前記それぞれの層を形成するための材料として使用される物質を真空又は低圧状態で加熱などによって蒸発させて薄膜を形成する方法を意味し、前記溶液工程は、前記それぞれの層を形成するための材料として使用される物質を溶媒と混合し、これをインクジェット印刷、ロール・ツー・ロールコーティング、スクリーン印刷、スプレーコーティング、ディップコーティング、スピンドコーティングなどの方法によって薄膜を形成する方法を意味する。

本発明における前記有機発光素子は、フラットパネルディスプレイ装置、フレキシブルディスプレイ装置、単色又は白色のフラットパネル照明用装置、及び単色又は白色のフレキシブル照明装置の中から選択されるいずれか一つの装置に使用できる。

【0036】

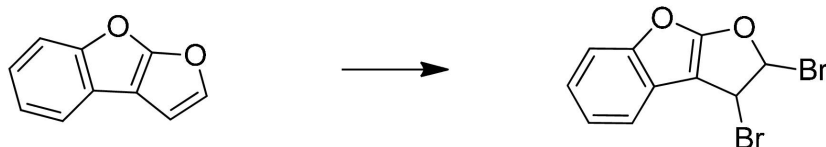
以下、好適な実施例を挙げて本発明をさらに詳細に説明する。しかし、これらの実施例は、本発明をより具体的に説明するためのものである。本発明の範囲がこれらの実施例によって限定されないのは、当業分野における通常の知識を有する者にとって自明である。

【実施例】

【0037】

合成例1：化学式31の合成

合成例1-1．＜中間体1-a＞の合成

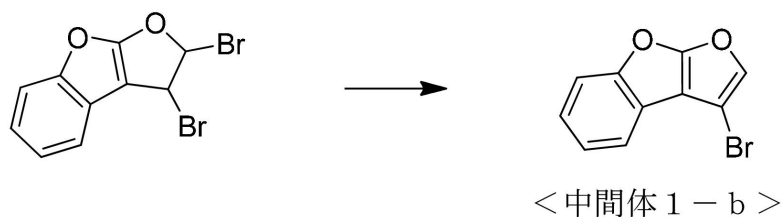


[中間体1-a]

反応器にフロ[2, 3-b]ベンゾフラン33.2 g (210 mmol)、ジクロロメタン250 mLを入れて攪拌する。－10℃に冷却し、臭素33.6 g (210 mmol)をジクロロメタン50 mLに希釈して滴加した後、0℃で2時間攪拌する。反応終了後、チオ硫酸ナトリウム水溶液を入れて攪拌した後、抽出する。有機層を減圧濃縮した後、

エタノールで再結晶して＜中間体 1-a＞58.7 g を得た。（収率 88%）

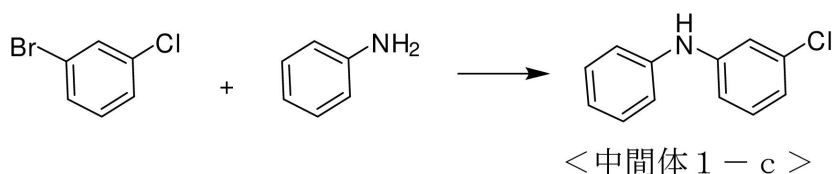
合成例 1-2. ＜中間体 1-b＞の合成



10

反応器に水酸化カリウム 12.1 g (216 mmol) とエタノール 200 mL を入れて溶かす。0℃で＜中間体 1-a＞34.3 g (108 mmol) をエタノールに溶かして滴加した後、2時間還流撹拌する。反応終了後、減圧濃縮し、カラムクロマトグラフィーで分離して＜中間体 1-b＞12.8 g を得た。（収率 50%）

合成例 1-3. ＜中間体 1-c＞の合成



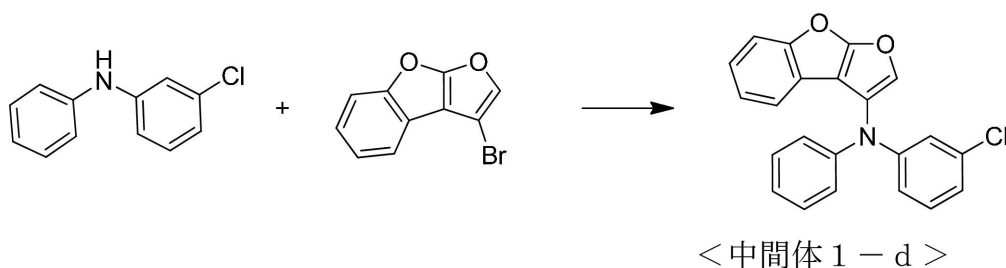
20

反応器に 1-ブromo-3-クロロベンゼン 3.1 g (16 mmol)、アニリン 5.8 g (16 mmol)、酢酸パラジウム 0.1 g (1 mmol)、ナトリウムtert-ブトキシド 3 g (32 mmol)、ビス(ジフェニルホスフィノ)-1,1'-ビナフチル 0.2 g (1 mmol) 及びトルエン 45 mL を入れ、24時間還流撹拌する。反応終了後、濾過して濃縮し、カラムクロマトグラフィーで分離して＜中間体 1-c＞5.2 g を得た。（収率 82%）

30

【0038】

合成例 1-4. ＜中間体 1-d＞の合成

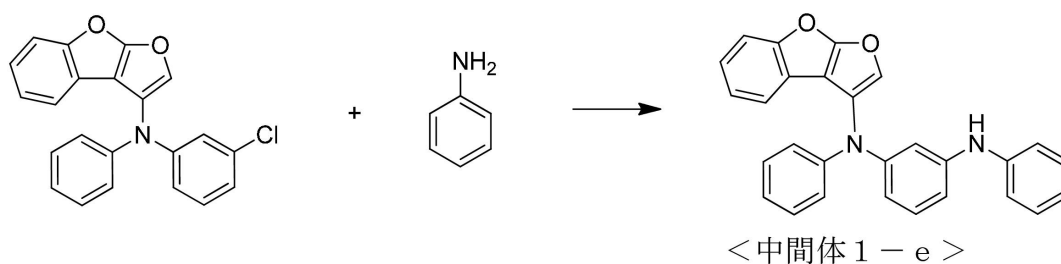


40

反応器に＜中間体 1-c＞20 g (98 mmol)、＜中間体 1-b＞23.2 g (98 mmol)、酢酸パラジウム 0.5 g (2 mmol)、ナトリウムtert-ブトキシド 18.9 g (196 mmol)、トリ-tert-ブチルホスフィン 0.8 g (4 mmol) 及びトルエン 200 mL を入れ、5時間還流撹拌する。反応終了後、濾過して濃縮し、カラムクロマトグラフィーで分離して＜中間体 1-d＞27.5 g を得た。（収率 78%）

50

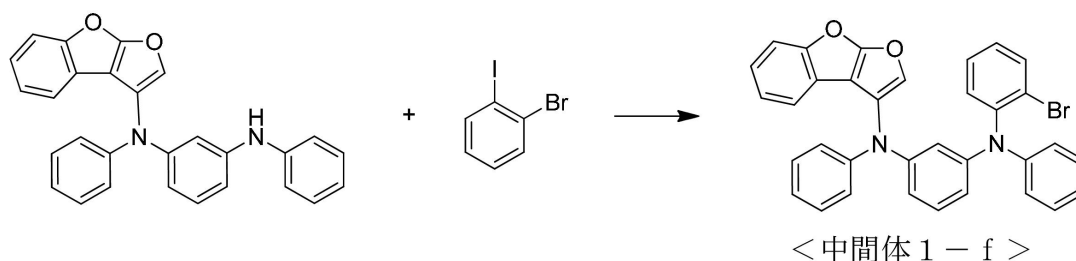
合成例 1-5. <中間体 1-e>の合成



10

1-ブロモ-3-クロロベンゼンの代わりに<中間体 1-d>を用いた以外は、合成例 1-3と同様の方法で合成して、<中間体 1-e>を得た。(収率 71%)

合成例 1-6. <中間体 1-f>の合成



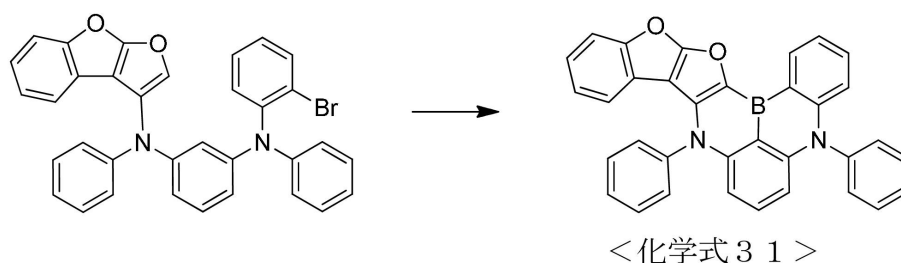
20

<中間体 1-c>の代わりに<中間体 1-e>を用い、<中間体 1-b>の代わりに1-ブロモ-2-ヨードベンゼンを用いた以外は、合成例 1-4と同様の方法で合成して、<中間体 1-f>を得た。(収率 80%)

【0039】

30

合成例 1-7. <化学式 31>の合成



40

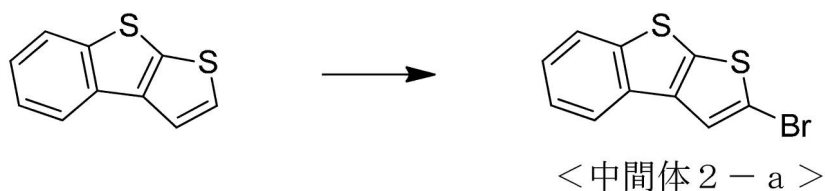
反応器に<中間体 1-f> 1.3 g (2.3 mmol)、tert-ブチルベンゼン 120 mLを入れる。-78℃でn-ブチルリチウム 4.2 mL (6.8 mmol)を滴加した後、60℃で3時間攪拌する。同じ温度で窒素を吹き込んでヘプタンを除去する。温度を-78℃に下げた後、三臭化ホウ素 1.3 g (4.5 mmol)を滴加する。常温で1時間攪拌する。0℃でN,N-ジイソプロピルエチルアミン 5.9 g (4.5 mmol)を滴加した後、120℃で2時間攪拌する。常温で酢酸ナトリウム水溶液を入れて攪拌する。反応終了後、濾過して濃縮し、カラムクロマトグラフィーで分離して<化学式 31> 1.4 gを得た。(収率 12%)

50

MS (MALDI-TOF) : m/z 500.17 [M^+]
[0040]

合成例 2 : 化学式 4 の合成

合成例 2-1. <中間体 2-a> の合成



10

反応器にチエノ [2, 3-b] ベンゾチオフエン 19 g (100 mmol)、クロロホルム 300 mL を入れて攪拌する。0℃に冷却し、N-ブロモスクシンイミド 17.8 mg (100 mmol) を 30 分間ゆっくり滴加した後、4 時間攪拌する。反応終了後、抽出して濃縮した後、カラムクロマトグラフィーで分離して<中間体 2-a> 22.6 g を得た。(収率 84%)

合成例 2-2. <化学式 4> の合成

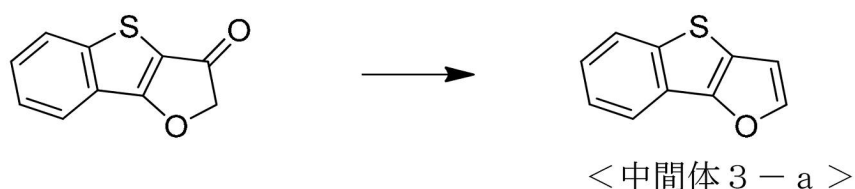
合成例 1-4 において<中間体 1-b>の代わりに<中間体 2-a>を用いた以外は、合成例 1-4~1-7 と同様の方法で合成して、<化学式 4>を得た。(収率 12%)

20

[0041]

合成例 3 : 化学式 23 の合成

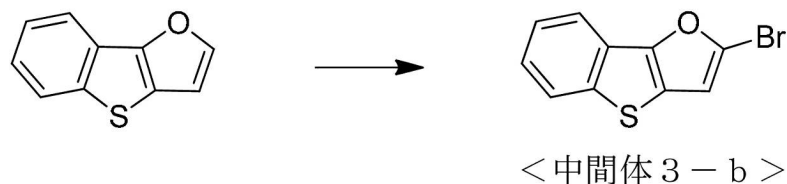
合成例 3-1. <中間体 3-a> の合成



30

反応器にベンゾチエノフラン-3(2h)-オン 5 g (26.2 mmol) を入れ、メタノール 50 mL に溶かす。0℃に冷却し、水素化ホウ素ナトリウム 1.5 g (40 mmol) をゆっくり 15 分間滴加した後、1 時間攪拌する。氷水 100 mL を加えて希釈した後、5%塩酸で酸性化させて pH 4 に合わせる。抽出して濃縮した後、カラムクロマトグラフィーで分離して<中間体 3-a> 3.5 g を得た。(収率 76%)

合成例 3-2. <中間体 3-b> の合成



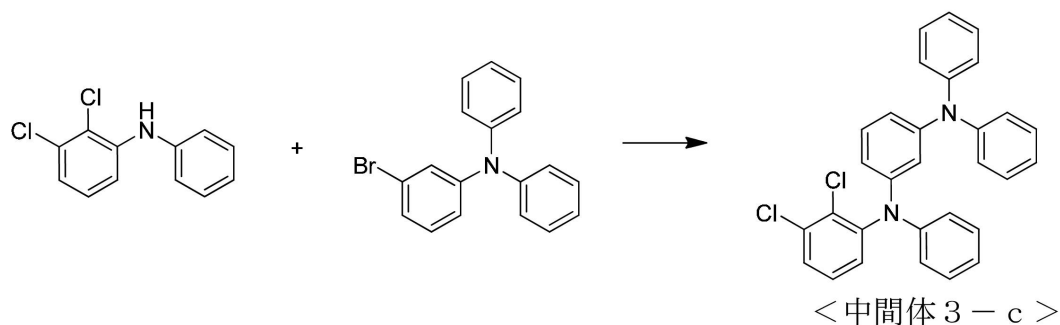
40

ジオキサニージクロロメタン 1:1 の混合溶液 10 mL にジブロミド 1.57 g (6.33 mmol) を溶かした後、同じ溶媒 (ジオキサニージクロロメタン 1:1 の混合溶液) 6 mL に<中間体 3-a> 1 g (5.74 mmol) を溶かした溶液を 0℃でゆっくり滴加した。同じ温度で 2 時間攪拌した。炭酸水素ナトリウムを加えて中性化させ、20 分後に濾過する。抽出して濃縮した後、カラムクロマトグラフィーで分離して<中間体 3-

50

b > 0.84 g を得た。(収率 58%)

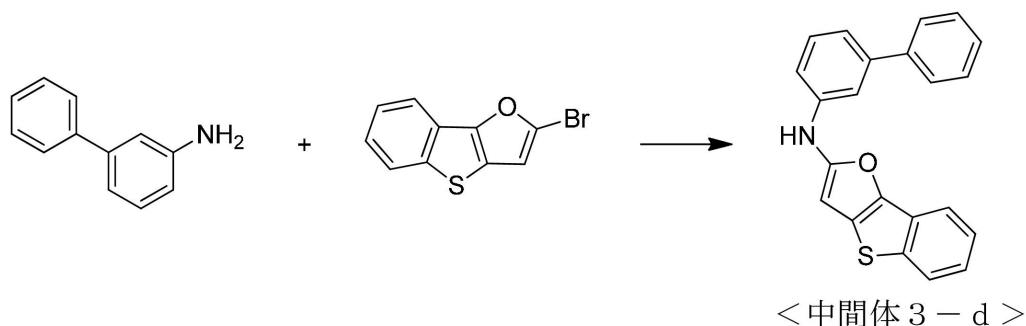
合成例 3-3. <中間体 3-c> の合成



10

<中間体 1-c>の代わりに2,3-ジクロロ-N-フェニルアニリンを用い、<中間体 1-b>の代わりに3-ブロモトリフェニルアミンを用いた以外は、合成例 1-4 と同様の方法で合成して、<中間体 3-c>を得た。(収率 77%)

合成例 3-4. <中間体 3-d> の合成

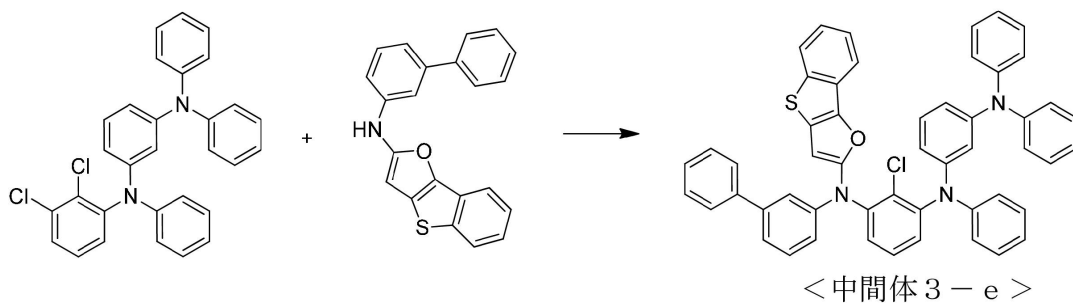


20

1-ブロモ-3-クロロベンゼンの代わりに<中間体 3-b>を用い、アニリンの代わりに3-アミノビフェニルを用いた以外は、合成例 1-3 と同様の方法で合成して、<中間体 3-d>を得た。(収率 67%)

【0042】

合成例 3-5. <中間体 3-e> の合成

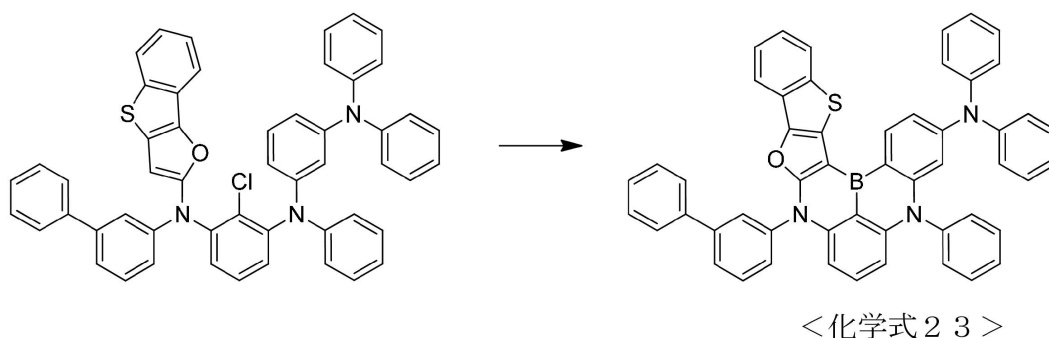


40

<中間体 1-c>の代わりに<中間体 3-d>を用い、<中間体 1-b>の代わりに<中間体 3-c>を用いた以外は、合成例 1-4 と同様の方法で合成して、<中間体 3-e>を得た。(収率 60%)

50

合成例 3-6. <化学式 23>の合成



10

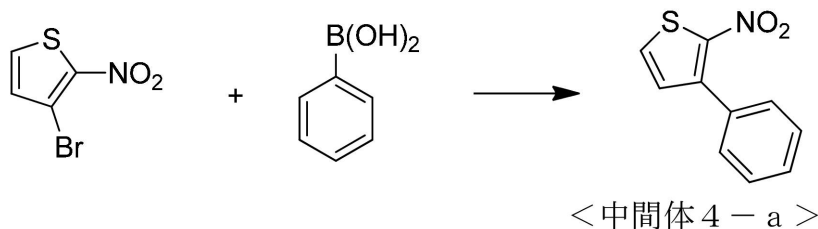
<中間体 1-f>の代わりに<中間体 3-e>を用いた以外は、合成例 1-7と同様の方法で合成して、<化学式 23>を得た。(収率 17%)

MS (MALDI-TOF) : m/z 759.25 [M^+]

[0043]

合成例 4: 化学式 8 の合成

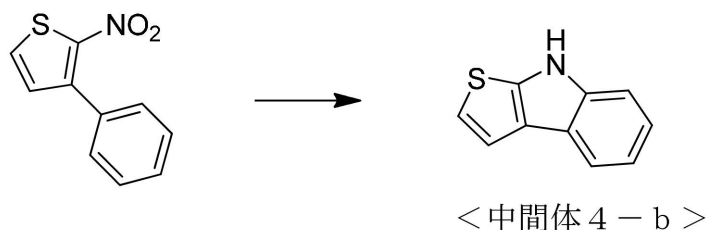
合成例 4-1. <中間体 4-a>の合成



20

反応器に 3-ブロモ-2-ニトロチオフエン 20.8 g (100 mmol)、フェニルボロン酸 12.2 g (100 mmol)、テトラキス(トリフェニルホスフィン)パラジウム 4 g (3 mmol)、炭酸カリウム 41.5 g (300 mmol)、テトラヒドロフラン 250 mL 及び蒸留水 90 mL を入れ、24 時間還流撹拌する。反応終了後、有機層を減圧濃縮した後、カラムクロマトグラフィーで分離して<中間体 4-a> 16 g を得た。(収率 78%)

合成例 4-2. <中間体 4-b>の合成



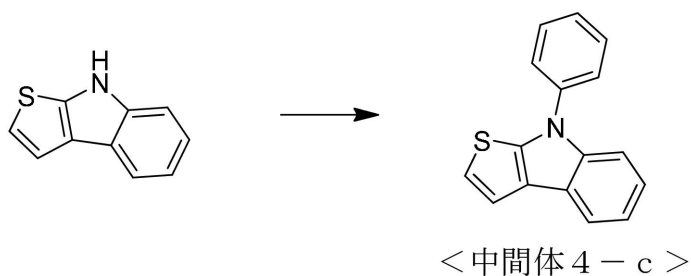
30

反応器に<中間体 4-a> 16 g (78 mmol)、トリフェニルホスフィン 51.1 g (195 mmol) を入れた後、1,2-ジクロロベンゼン 300 mL を入れ、溶かした後、24 時間還流撹拌する。反応終了後、有機層を減圧濃縮した後、カラムクロマトグラフィーで分離して<中間体 4-b> 9.7 g を得た。(収率 72%)

40

50

合成例 4-3. <中間体 4-c>の合成

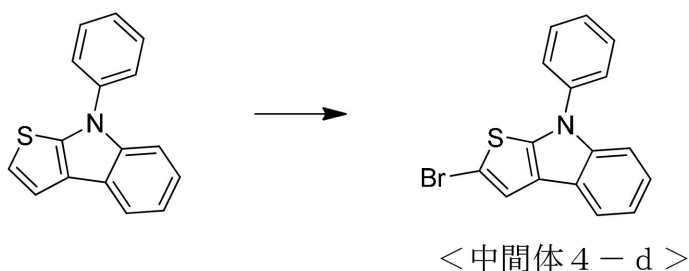


10

<中間体 1-c>の代わりに<中間体 4-b>を用い、<中間体 1-b>の代わりにヨードベンゼンを用いた以外は、合成例 1-4と同様の方法で合成して、<中間体 4-c>を得た。（収率 74%）

【0044】

合成例 4-4. <中間体 4-d>の合成



20

チエノ [2,3-b] ベンゾチオフエンの代わりに<中間体 4-c>を用いた以外は、合成例 2-1と同様の方法で合成して、<中間体 4-d>を得た。（収率 78%）

30

合成例 4-5. <化学式 8>の合成

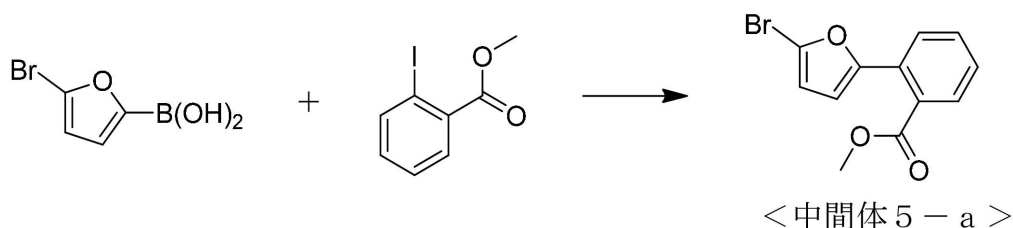
合成例 1-4において<中間体 1-b>の代わりに<中間体 4-d>を用いた以外は、合成例 1-4~1-7と同様の方法で合成して、<化学式 8>を得た。（収率 13%）

MS (MALDI-TOF) : m/z 591.19 [M^+]

【0045】

合成例 5: 化学式 13 の合成

合成例 5-1. <中間体 5-a>の合成



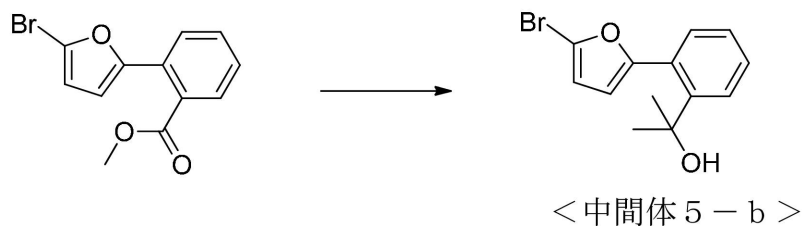
40

反応器に 5-ブロモフラン-2-ボロン酸 22.5 g (118 mmol)、メチル 2-ヨードベンゾエート 30.9 g (118 mmol)、テトラキストリフェニルホスフィンパラジウム 2.7 g (2.3 mmol)、炭酸カリウム 33 g (237 mmol)、トル

50

エン 200 ml、1,4-ジオキサン 200 ml 及び水 100 ml を窒素状態下で投入し、12 時間還流した。反応終了後、有機層を減圧濃縮した後、カラムクロマトグラフィーで分離して＜中間体 5-a＞24.5 g を得た。（収率 74%）

合成例 5-2. ＜中間体 5-b＞の合成

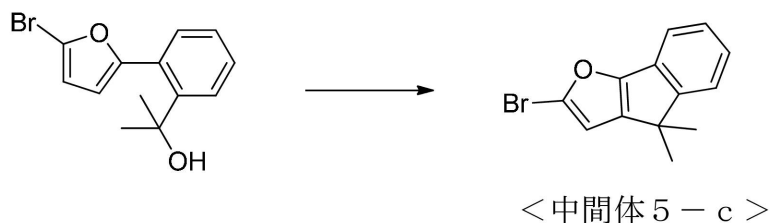


10

テトラヒドロフラン 150 ml 入りの反応器に＜中間体 5-a＞30.9 g (110 mmol) を入れて温度を -10°C に下げた後、3 M 臭化メチルマグネシウム 85 ml (254 mmol) をゆっくり滴加する。40 $^{\circ}\text{C}$ に温度を上げた後、4 時間攪拌する。温度を -10°C に下げた後、2 N 塩酸 70 ml をゆっくり滴加し、塩化アンモニウム水溶液 70 ml を入れた後、温度を常温に上げる。反応終了後、反応物を水で洗浄し、減圧濃縮した後、カラムクロマトグラフィーで分離して＜中間体 5-b＞24.7 g を得た。（収率 80%）

20

合成例 5-3. ＜中間体 5-c＞の合成

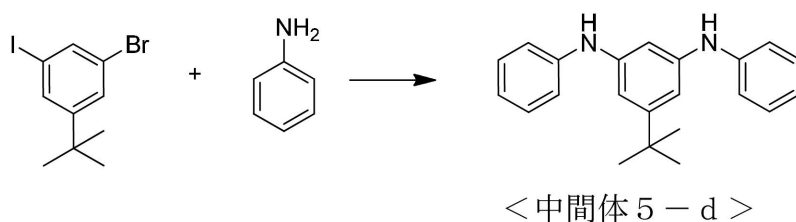


30

反応器に窒素雰囲気下で＜中間体 5-b＞25 g (89.2 mmol)、リン酸 70 ml を入れ、常温で 12 時間攪拌した。反応終了後、抽出して濃縮した後、カラムクロマトグラフィーで分離して＜中間体 5-c＞16.4 g を得た。（収率 70%）

【0046】

合成例 5-4. ＜中間体 5-d＞の合成



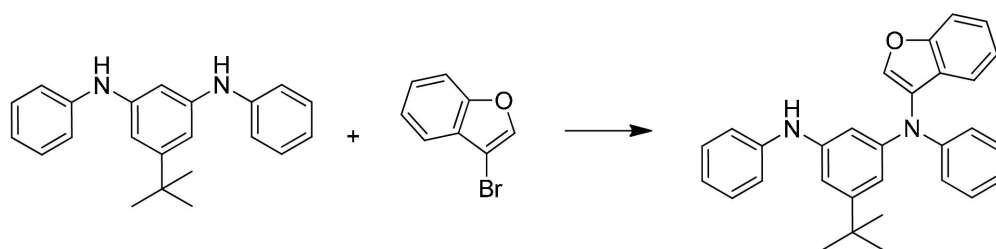
40

反応器に 1-ブromo-3-(tert-ブチル)-5-ヨードベンゼン 50 g (177 mmol)、アニリン 36.2 g (389 mmol)、酢酸パラジウム 1.6 g (7 mmol)、ナトリウム tert-ブトキシド 51 g (530 mmol)、ビス(ジフェニルホ

50

スフィノ) - 1, 1' - ビナフチル 4.4 g (7 mmol) 及びトルエン 500 mL を入れ、24 時間還流撹拌する。反応終了後、濾過して濾液を濃縮する。カラムクロマトグラフィーで分離して<中間体 5-d> 42.5 g を得た。(収率 50%)

合成例 5-5. <中間体 5-e> の合成



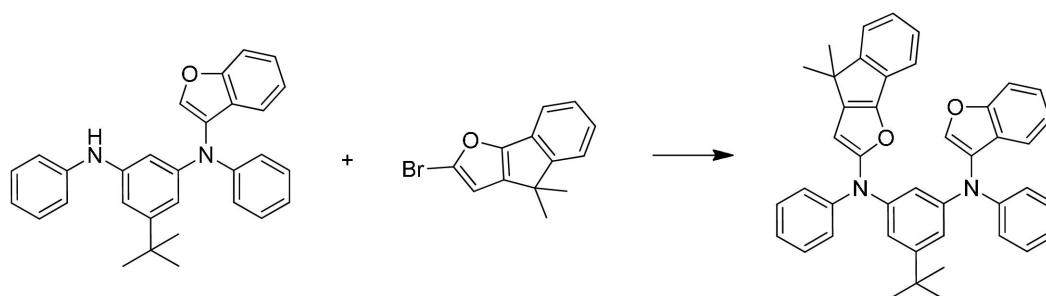
<中間体 5-e>

10

反応器に<中間体 5-d> 31.6 g (100 mmol)、3-ブロモベンゾフラン 19.7 g (100 mmol)、酢酸パラジウム 1 g (2 mmol)、ナトリウム tert-ブトキシド 12.2 g (127 mmol)、トリ-tert-ブチルホスフィン 0.7 g (3 mmol)、トルエン 150 mL を入れ、5 時間還流撹拌する。反応終了後、濃縮する。カラムクロマトグラフィーで分離し、<中間体 5-e> 19.5 g を得た。(収率 45%)

20

合成例 5-6. <中間体 5-f> の合成



<中間体 5-f>

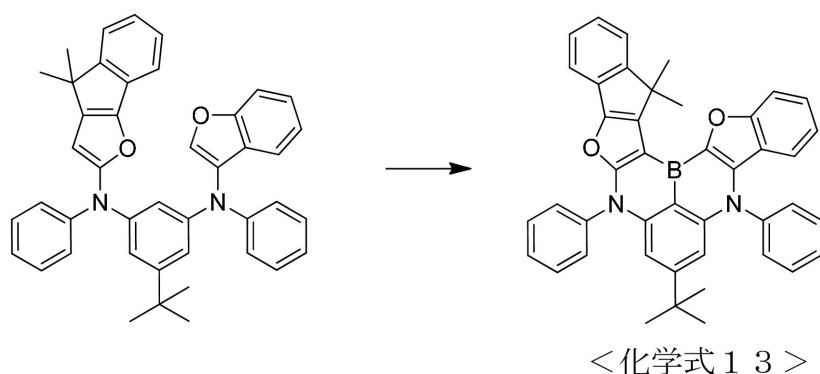
30

<中間体 1-c> の代わりに<中間体 5-e> を用い、<中間体 1-b> の代わりに<中間体 5-c> を用いた以外は、合成例 1-4 と同様の方法で合成して、<中間体 5-f> を得た。(収率 67%)

合成例 5-7. <化学式 13> の合成

40

50



10

＜中間体 1-f＞の代わりに＜中間体 5-f＞を用いた以外は、合成例 1-7 と同様の方法で合成して＜化学式 13＞を得た。（収率 15%）

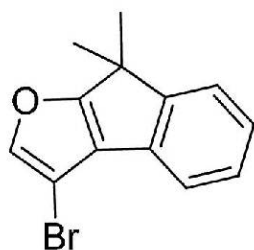
MS (MALDI-TOF) : m/z 622.28 $[M^+]$

【0047】

合成例 6 : 化学式 60 の合成

合成例 6-1. ＜中間体 6-a＞の合成

20

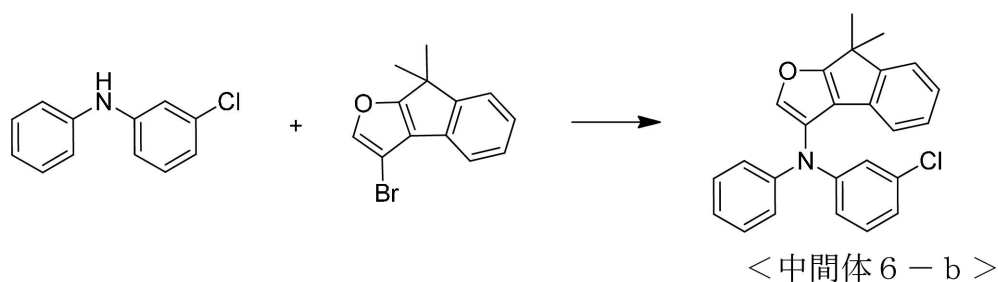


＜中間体 6-a＞

30

合成例 5-1 において 5-ブロモフラン-2-ボロン酸の代わりに（4-ブロモフラン-3-イル）ボロン酸を用いた以外は、合成例 5-1 ~ 5-3 と同様の方法で合成して、＜中間体 6-a＞を得た。（収率 65%）

合成例 6-2. ＜中間体 6-b＞の合成

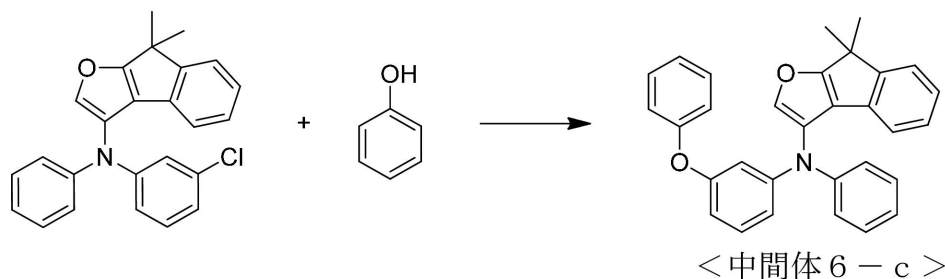


40

＜中間体 1-b＞の代わりに＜中間体 6-a＞を用いた以外は、合成例 1-4 と同様の方法で合成して、＜中間体 6-b＞を得た。（収率 72%）

合成例 6-3. ＜中間体 6-c＞の合成

50



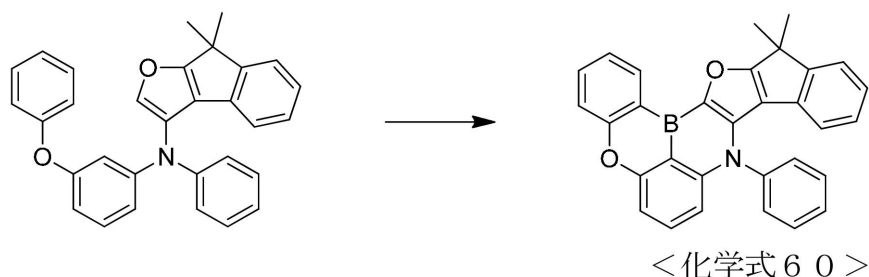
10

反応器に＜中間体 6 - b＞57.9 g (150 mmol)、フェノール 31.2 g (160 mmol)、炭酸カリウム 45.7 g (300 mmol) 及び NMP 250 mL を入れ、160℃で12時間還流撹拌する。反応終了後、温度を常温に下げ、NMP を減圧下で蒸留除去した後、抽出する。溶媒を減圧濃縮した後、カラムクロマトグラフィーで分離して＜中間体 6 - c＞43.2 g を得た。(収率 65%)

【0048】

合成例 6 - 4. ＜化学式 60＞の合成

20



＜中間体 1 - f＞の代わりに＜中間体 6 - c＞を用いた以外は、合成例 1 - 7 と同様の方法で合成して、＜化学式 60＞を得た。(収率 15%)

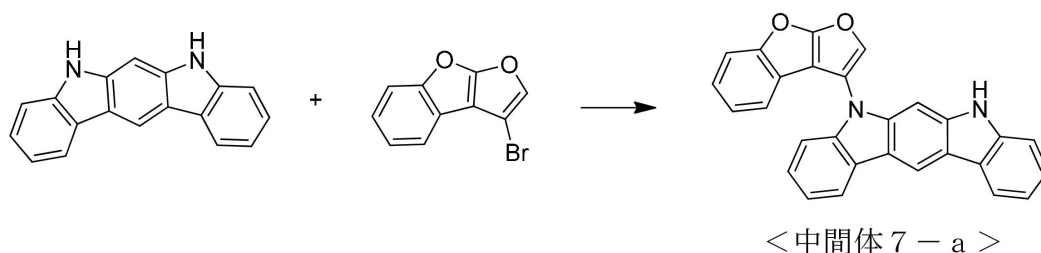
30

MS (MALDI-TOF) : m/z 451.17 [M^+]

【0049】

合成例 7 : 化学式 84 の合成

合成例 7 - 1. ＜中間体 7 - a＞の合成



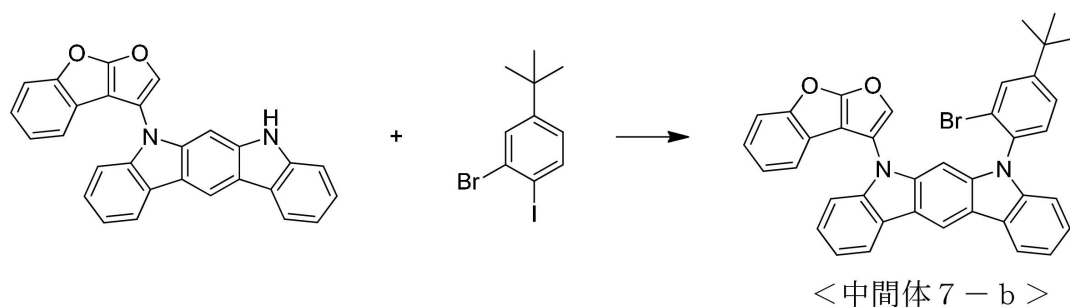
40

反応器に 5, 7 - ジヒドロインドロ [2, 3 - b] カルバゾール 10.8 g (42 mmol)、＜中間体 1 - b＞9.9 g (42 mmol)、銅粉末 10.7 g (1 mmol)、18 - クラウン - 6 - エーテル 4.5 g (17 mmol) 及び炭酸カリウム 34.9 g (253 mmol) を入れ、ジクロロベンゼン 110 mL を加えた後、180℃で約 24 時間還流撹拌する。反応終了後、ジクロロベンゼンを除去し、カラムクロマトグラフィー

50

で分離して＜中間体 7-a＞12.5 g を得た。（収率 72%）

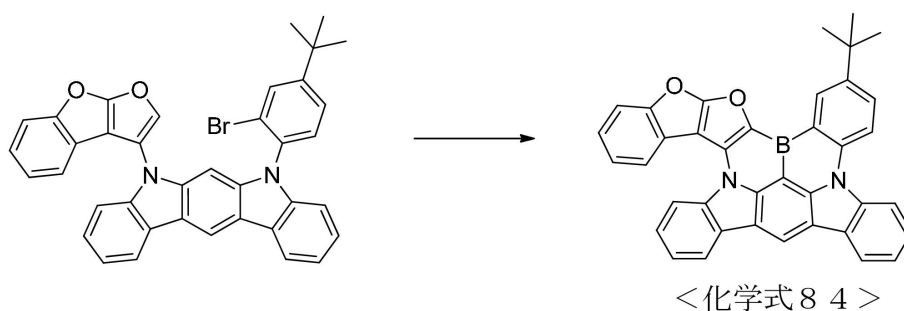
合成例 7-2. ＜中間体 7-b＞の合成



10

＜中間体 1-c＞の代わりに＜中間体 7-a＞を用い、＜中間体 1-b＞の代わりに 2-ブロモ-4-tert-ブチル-1-ヨードベンゼンを用いた以外は、合成例 1-4 と同様の方法で合成して＜中間体 7-b＞を得た。（収率 67%）

合成例 7-3. ＜化学式 84＞の合成



20

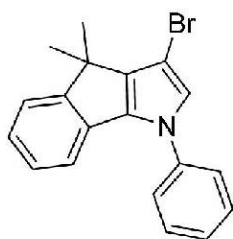
＜中間体 1-f＞の代わりに＜中間体 7-b＞を用いた以外は、合成例 1-7 と同様の方法で合成して、＜化学式 84＞を得た。（収率 15%）

MS (MALDI-TOF) : m/z 552.20 $[M^+]$

【0050】

合成例 8 : 化学式 46 の合成

合成例 8-1. ＜中間体 8-a＞の合成



＜中間体 8-a＞

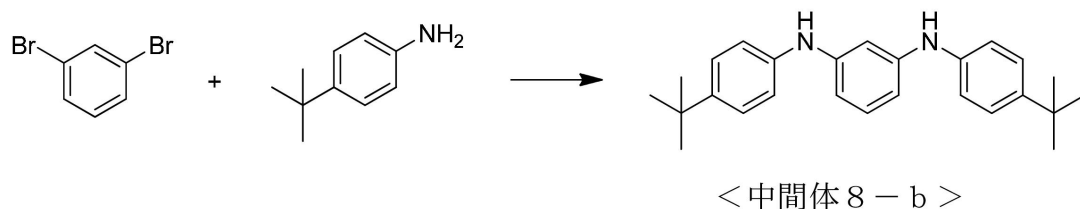
30

40

合成例 4-3 において＜中間体 4-b＞の代わりに 4,4-ジメチル-1,4-ジヒドロインドノ〔1,2-b〕ピロールを用いた以外は、合成例 4-3 ~ 4-4 と同様の方法で合成して＜中間体 8-a＞を得た。（収率 55%）

50

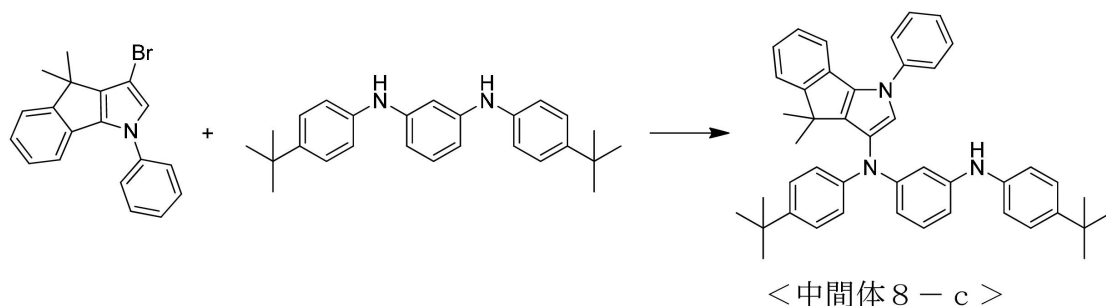
合成例 8-2. <中間体 8-b>の合成



10

1-ブロモ-3-クロロベンゼンの代わりに1,3-ジブロモベンゼンを用い、アニリンの代わりに4-tert-ブチルアニリンを用いた以外は、合成例1-3と同様の方法で合成して<中間体 8-b>を得た。(収率77%)

合成例 8-3. <中間体 8-c>の合成



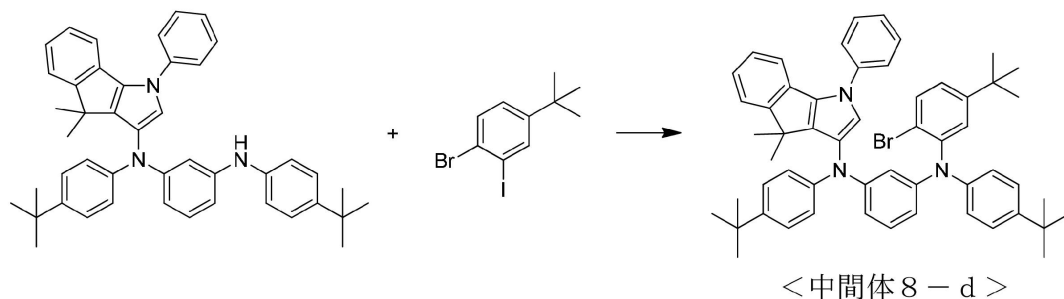
20

5,7-ジヒドロインドロ[2,3-b]カルバゾールの代わりに<中間体 8-b>を用い、<中間体 1-b>の代わりに<中間体 8-a>を用いた以外は、合成例7-1と同様の方法で合成して、<中間体 8-c>を得た。(収率69%)

30

【0051】

合成例 8-4. <中間体 8-d>の合成

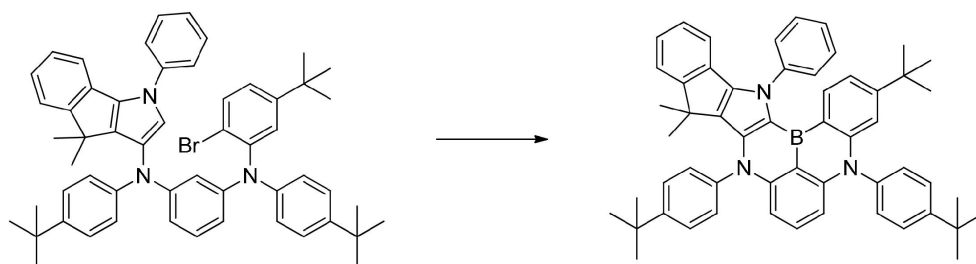


40

<中間体 1-c>の代わりに<中間体 8-c>を用い、<中間体 1-b>の代わりに1-ブロモ-4-tert-ブチル-2-ヨードベンゼンを用いた以外は、合成例1-4と同様の方法で合成して、<中間体 8-d>を得た。(収率72%)

合成例 8-5. <化学式 46>の合成

50



<化学式 4 6>

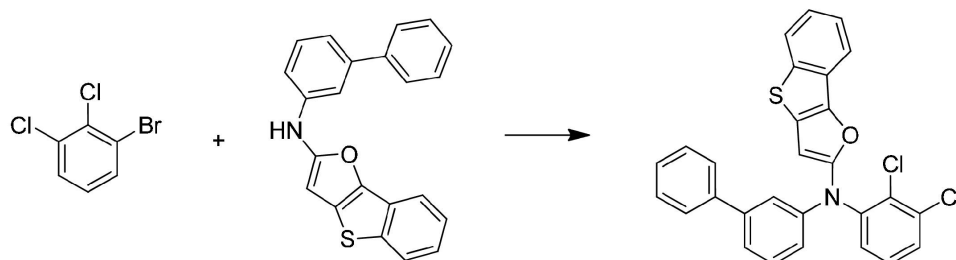
10

<中間体 1 - f>の代わりに<中間体 8 - d>を用いた以外は、合成例 1 - 7 と同様の方法で合成して、<化学式 4 6>を得た。（収率 1 3 %）

【 0 0 5 2 】

合成例 9：化学式 1 0 3 の合成

合成例 9 - 1．<中間体 9 - a>の合成

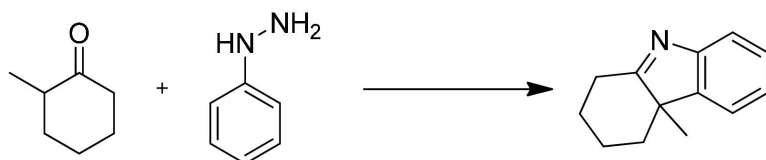


<中間体 9 - a>

20

<中間体 1 - c>の代わりに<中間体 3 - d>を用い、<中間体 1 - b>の代わりに 1 - ブロモ - 2, 3 - ジクロロベンゼンを用いた以外は、合成例 1 - 4 と同様の方法で合成して、<中間体 9 - a>を得た。（収率 7 5 %）

合成例 9 - 2．<中間体 9 - b>の合成



<中間体 9 - b>

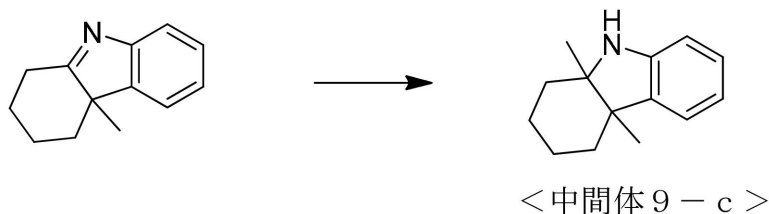
30

40

反応器にフェニルヒドラジン 1 0 0 g（0. 9 2 4 m o l）、酢酸 5 0 0 m L を入れて攪拌した後、6 0 °C に加熱した。2 - メチルシクロヘキサノン 1 0 3. 6 g（0. 9 2 4 m o l）をゆっくり滴加した後、8 時間還流した。反応終了後、水と酢酸エチルで抽出した後、濃縮し、カラムクロマトグラフィーで分離して<中間体 9 - b> 1 3 0 g を得た。（収率 7 6 %）

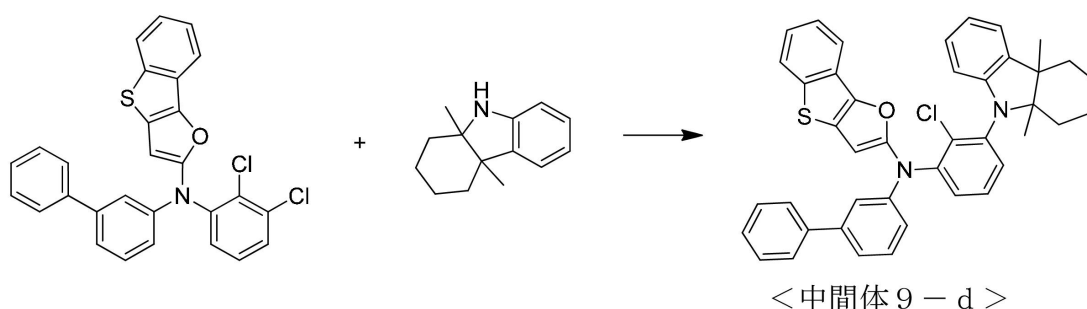
合成例 9 - 3．<中間体 9 - c>の合成

50



窒素雰囲気下でトルエン 750 mL 入りの反応器に<中間体 9 - b> 75 g (405 mmol) を入れ、マイナス 10℃ に冷却した後、1.6 M メチルリチウム 380 mL (608 mmol) をゆっくり滴加し、マイナス 10℃ で 3 時間程度撹拌した。反応完了後、水と酢酸エチルを用いて抽出した後、濃縮し、カラムクロマトグラフィーで分離して<中間体 9 - c> 50.5 g を得た。(収率 62%)

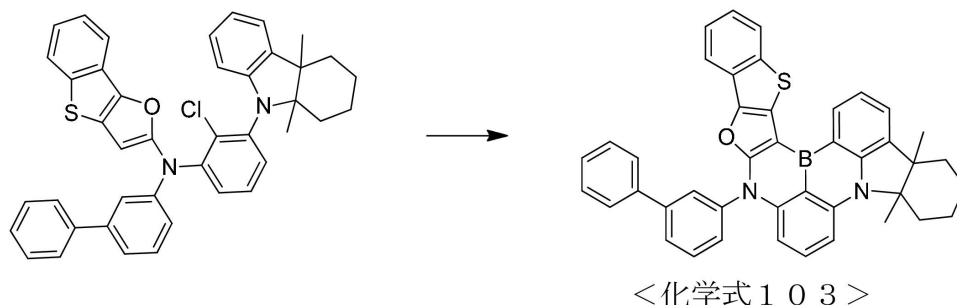
合成例 9 - 4. <中間体 9 - d> の合成



<中間体 1 - c> の代わりに<中間体 9 - c> を用い、<中間体 1 - b> の代わりに<中間体 9 - a> を用いた以外は、合成例 1 - 4 と同様の方法で合成して<中間体 9 - d> を得た。(収率 64%)

【0053】

合成例 9 - 5. <化学式 103> の合成



<中間体 1 - f> の代わりに<中間体 9 - d> を用いた以外は、合成例 1 - 7 と同様の方法で合成して<化学式 103> を得た。(収率 15%)

MS (MALDI-TOF) : m/z 624.24 [M⁺]

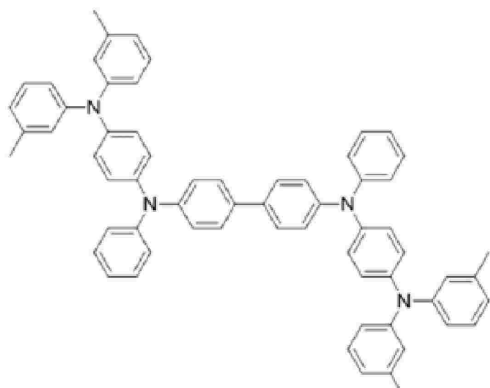
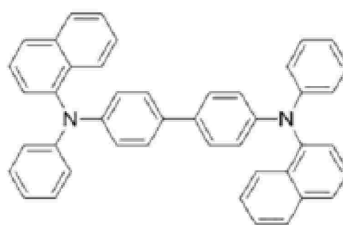
【0054】

実施例 1 ~ 18 : 有機発光素子の製造

ITO ガラスの発光面積が 2 mm × 2 mm のサイズとなるようにパターニングした後、

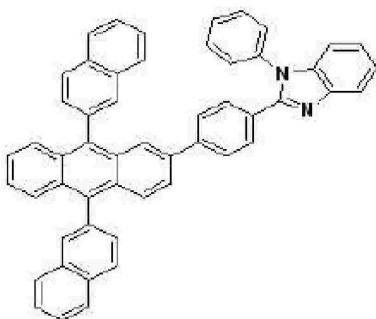
洗浄した。ITOガラスを真空チャンバーに取り付けた後、DNTPD (700 Å)、 α -NPD (300 Å) の順に成膜した。発光層のホストとドープントとして、下記表 1 に記載された化合物を重量比 (97 : 3) で混ぜて成膜 (250 Å) した後、電子輸送層として [化学式 E-1] (300 Å)、電子注入層として Liq (10 Å) を順次成膜し、陰極である Al (1000 Å) を成膜して有機発光素子を製造した。有機発光素子の特性は、 $10 \text{ mA} / \text{cm}^2$ で測定した。

[DNTPD]

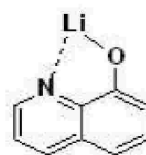
[α -NPD]

10

[化学式 E-1]



[Liq]



20

30

【0055】

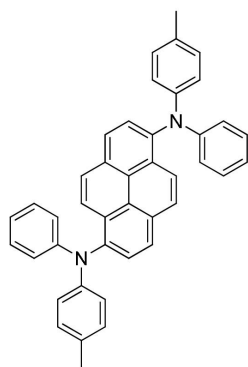
比較例 1 から 6

前記実施例 1 ~ 18 で使用されたドープント化合物の代わりに [BD1] から [BD3] を用いた以外は同様にして有機発光素子を作製した。前記有機発光素子の発光特性は $10 \text{ mA} / \text{cm}^2$ で測定した。前記 [BD1] から [BD3] の構造は、次のとおりである。

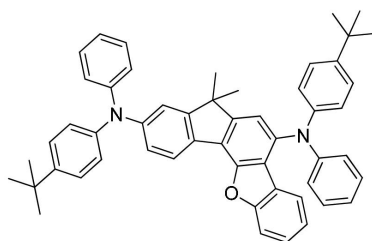
40

50

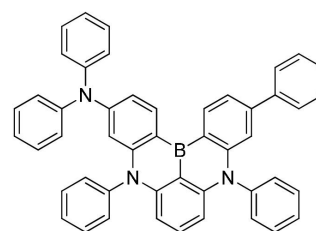
[BD 1]



[BD 2]



[BD 3]



10

20

30

40

50

【表 1】

	ホスト	ドーパント	EQE	T97(h)
実施例 1	化合物 129	化学式 4	9.05	127
実施例 2	化合物 244	化学式 4	9.22	136
実施例 3	化合物 129	化学式 8	9.18	145
実施例 4	化合物 244	化学式 8	9.27	139
実施例 5	化合物 129	化学式 13	9.34	154
実施例 6	化合物 244	化学式 13	9.65	161
実施例 7	化合物 129	化学式 23	9.22	169
実施例 8	化合物 244	化学式 23	9.46	133
実施例 9	化合物 129	化学式 31	9.38	145
実施例 10	化合物 244	化学式 31	9.65	158
実施例 11	化合物 129	化学式 60	9.42	144
実施例 12	化合物 244	化学式 60	9.59	173
実施例 13	化合物 129	化学式 84	9.37	166
実施例 14	化合物 244	化学式 84	9.53	173
実施例 15	化合物 129	化学式 46	9.68	159
実施例 16	化合物 244	化学式 46	9.87	175
実施例 17	化合物 129	化学式 103	9.15	130
実施例 18	化合物 244	化学式 103	9.32	141
比較例 1	化合物 129	BD1	5.68	81
比較例 2	化合物 244	BD1	5.97	87
比較例 3	化合物 129	BD2	7.16	88
比較例 4	化合物 244	BD2	7.25	92
比較例 5	化合物 129	BD3	7.36	90
比較例 6	化合物 244	BD3	7.51	94

【0056】

前記表 1 に示すように、本発明による有機発光素子は、従来技術による比較例 1 ～ 比較例 6 の化合物を用いた有機発光素子よりも発光効率に優れ、長寿命の素子特性を示すことにより有機発光素子として応用可能性が高いことが分かる。

【産業上の利用可能性】

【0057】

本発明に係る新規なホウ素化合物は、有機発光素子内のドーパント物質として用いる場合に、従来の物質に比べてより長寿命及び高効率の特性を持っており、有機発光素子に適用する場合に改善された特性を示すため、有機発光素子及びこれに関連する産業分野で産業上の利用可能性が高い。

10

20

30

40

50

【図面】

【図 1】

[図1]

80
70
60
50
40
30
20
10

10

20

30

40

50

フロントページの続き

(51)国際特許分類	F I			
	C 0 9 K	11/06	(2006.01)	C 0 9 K 11/06 6 6 0
				C 0 9 K 11/06 6 9 0

ーグ, オチャンーウプ, グワハクサノブ5ー口, 8 9

審査官	吉田 早希
(56)参考文献	国際公開第2 0 1 7 / 1 2 6 4 4 3 (WO, A 1)
	米国特許出願公開第2 0 1 9 / 0 1 1 5 5 3 8 (US, A 1)
	韓国登録特許第1 0 - 1 9 9 0 8 1 8 (KR, B 1)
	国際公開第2 0 1 7 / 1 8 8 1 1 1 (WO, A 1)
	中国特許出願公開第1 0 8 4 0 9 7 6 1 (CN, A)
	韓国公開特許第1 0 - 2 0 1 8 - 0 1 2 2 2 9 8 (KR, A)
	国際公開第2 0 1 8 / 1 8 6 3 7 4 (WO, A 1)
	中国特許出願公開第1 0 7 5 0 1 3 1 1 (CN, A)
	国際公開第2 0 1 5 / 1 0 2 1 1 8 (WO, A 1)
	特開2 0 2 0 - 0 8 3 8 9 6 (JP, A)
	国際公開第2 0 2 0 / 0 5 4 6 7 6 (WO, A 1)

(58)調査した分野	(Int.Cl., D B名)
	C 0 7 F
	H 1 0 K
	H 0 5 B
	C 0 9 K
	C A p l u s / R E G I S T R Y (STN)