

(19)日本国特許庁(JP)

(12)特許公報(B2)

(11)特許番号

特許第7608699号
(P7608699)

(45)発行日 令和7年1月7日(2025.1.7)

(24)登録日 令和6年12月23日(2024.12.23)

(51)国際特許分類

F I

C 0 7 D 403/10 (2006.01)

C 0 7 D 403/10

C S P

C 0 7 D 405/14 (2006.01)

C 0 7 D 405/14

C 0 7 D 409/14 (2006.01)

C 0 7 D 409/14

H 1 0 K 85/60 (2023.01)

H 1 0 K 85/60

H 1 0 K 50/12 (2023.01)

H 1 0 K 50/12

請求項の数 18 (全101頁)

(21)出願番号 特願2023-528169(P2023-528169)

(86)(22)出願日 令和4年2月22日(2022.2.22)

(65)公表番号 特表2024-500614(P2024-500614
A)

(43)公表日 令和6年1月10日(2024.1.10)

(86)国際出願番号 PCT/KR2022/002578

(87)国際公開番号 WO2022/177404

(87)国際公開日 令和4年8月25日(2022.8.25)

審査請求日 令和5年6月27日(2023.6.27)

(31)優先権主張番号 10-2021-0023634

(32)優先日 令和3年2月22日(2021.2.22)

(33)優先権主張国・地域又は機関
韓国(KR)

(31)優先権主張番号 10-2022-0022275

(32)優先日 令和4年2月21日(2022.2.21)

最終頁に続く

(73)特許権者 500239823

エルジー・ケム・リミテッド

大韓民国 0 7 3 3 6 ソウル, ヨンドウ
ンポグ, ヨイーデロ 1 2 8

(74)代理人 110000877

弁理士法人 R Y U K A 国際特許事務所

(72)発明者 ジュン、ミン ウー

大韓民国 0 7 3 3 6 ソウル, ヨンドウ
ンポグ, ヨイーデロ 1 2 8 エルジー
・ケム・リミテッド内

(72)発明者 リー、ドン フーン

大韓民国 0 7 3 3 6 ソウル, ヨンドウ
ンポグ, ヨイーデロ 1 2 8 エルジー
・ケム・リミテッド内

(72)発明者 スー、サン ドック

最終頁に続く

(54)【発明の名称】 新規な化合物およびこれを利用した有機発光素子

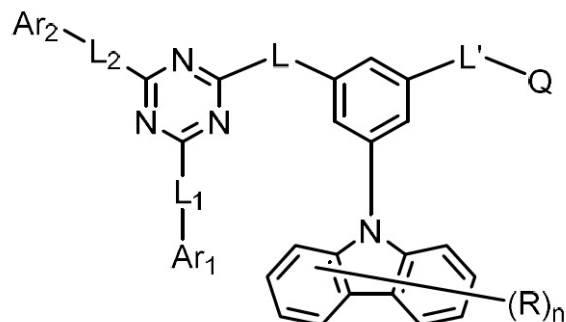
(57)【特許請求の範囲】

【請求項1】

下記化学式1で表される化合物：

【化学式1】

【化1】



前記化学式1中、

Lは単結合；非置換であるか、または重水素で置換された炭素数6～20のアリーレン；または非置換であるか、または重水素で置換されたOおよびSのうちの1個のヘテロ原子を含む炭素数2～20のヘテロアリーレンであり、

L₁およびL₂はそれぞれ独立して、単結合、または非置換であるか、または重水素で置

換された炭素数 6 ～ 20 のアリーレンであり、

$A r_1$ および $A r_2$ はそれぞれ独立して、置換または非置換の炭素数 6 ～ 60 のアリール；または置換または非置換の N、O および S のうちの 1 個以上のヘテロ原子を含む炭素数 2 ～ 60 のヘテロアリールであり、

L' は単結合；または置換または非置換の炭素数 6 ～ 60 のアリーレンであり、

Q は置換または非置換の炭素数 6 ～ 60 のアリールであり、

R は重水素；または重水素で置換されたフェニルであり、

n は 1 ～ 8 の整数である。

【請求項 2】

L は単結合、フェニレン、ビフェニルジイル、ナフチレン、またはジベンゾフラニレン、ジベンゾチオフェニレンである、請求項 1 に記載の化合物。

【請求項 3】

L_1 および L_2 はそれぞれ独立して、単結合またはフェニレンである、請求項 1 に記載の化合物。

【請求項 4】

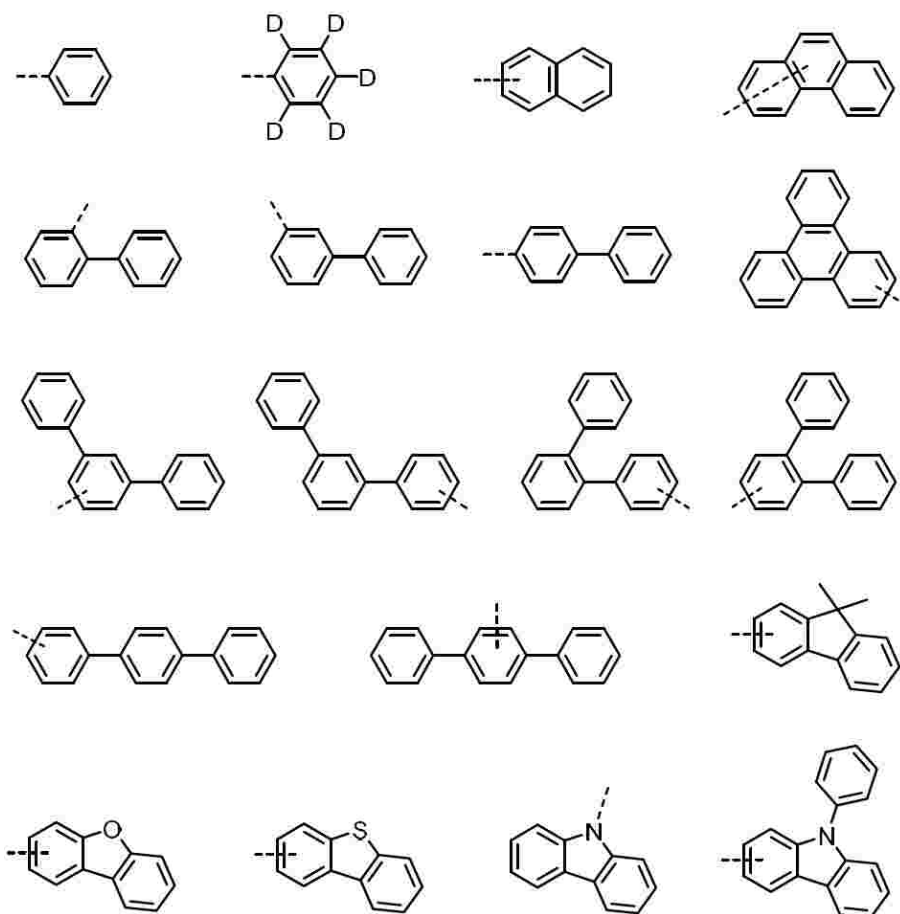
$A r_1$ および $A r_2$ はそれぞれ独立して、フェニル、ビフェニリル、ターフェニリル、ナフチル、フェナントリル、トリフェニレニル、フルオレニル、ジベンゾフラニル、ジベンゾチオフェニル、またはカルバゾリルであり、

ここで、 $A r_1$ および $A r_2$ は非置換であるか、または重水素、メチルおよびフェニルで構成される群より選択される 1 個以上の置換基で置換される、請求項 1 に記載の化合物。

【請求項 5】

$A r_1$ および $A r_2$ はそれぞれ独立して、下記で構成される群より選択されるいずれか 1 つである、請求項 4 に記載の化合物：

【化 2】



【請求項 6】

$A r_1$ および $A r_2$ のうちの少なくとも 1 つは非置換であるか、または重水素で置換された炭素数 6 ～ 12 のアリールである、請求項 1 に記載の化合物。

【請求項 7】

L が単結合であり、かつ $A r_1$ および $A r_2$ がそれぞれ独立して、フェニル、5 個の重水素で置換されたフェニル、ビフェニリル、ターフェニリル、ナフチル、フェナントリル、トリフェニレニル、9, 9-ジメチルフルオレニル、ジベンゾフラニル、ジベンゾチオフェニル、カルバゾリル、または 9-フェニルカルバゾリルであるか；または

L が炭素数 6 ～ 20 のアリーレンまたは O および S のうちの 1 個のヘテロ原子を含む炭素数 2 ～ 20 のヘテロアリーレンであり、かつ $A r_1$ および $A r_2$ が全てフェニルである、請求項 1 に記載の化合物。

10

【請求項 8】

L' は単結合またはフェニレンである、請求項 1 に記載の化合物。

【請求項 9】

Q はフェニル、ビフェニリル、ナフチル、フェナントリル、トリフェニレニル、ベンゾフェナントリル、または 9, 9-ジメチルフルオレニルであり、

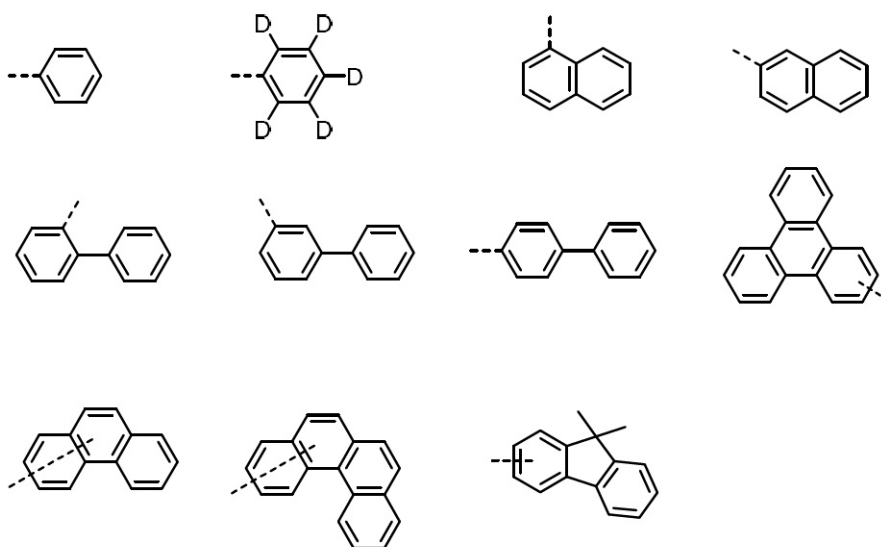
ここで、 Q は非置換であるか、または重水素で置換された、請求項 1 に記載の化合物。

【請求項 10】

Q は、下記で構成される群より選択されるいずれか 1 つである、請求項 9 に記載の化合物：

20

【化 3】



30

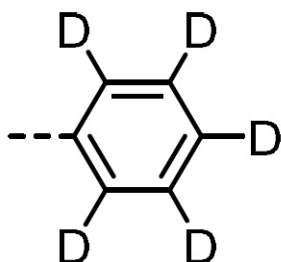
。

【請求項 11】

R は重水素、または

40

【化 4】



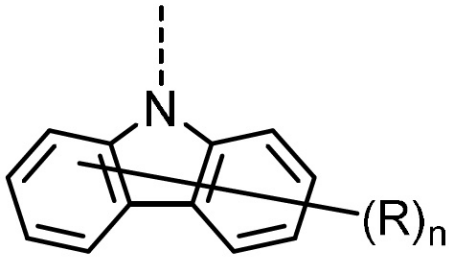
50

である、請求項 1 に記載の化合物。

【請求項 1 2】

前記

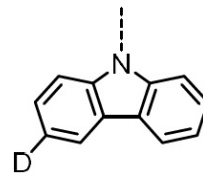
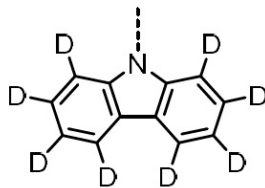
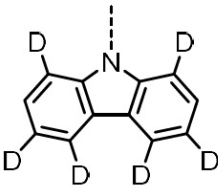
【化 5】



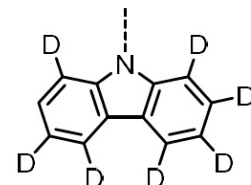
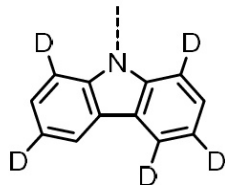
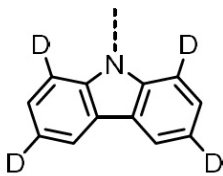
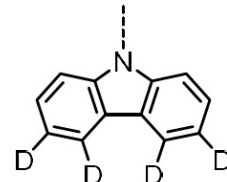
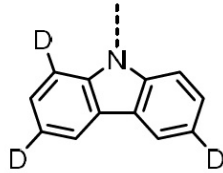
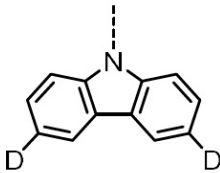
10

は、下記で構成される群より選択されるいずれか 1 つである、請求項 1 に記載の化合物：

【化 6】



20



30

。

【請求項 1 3】

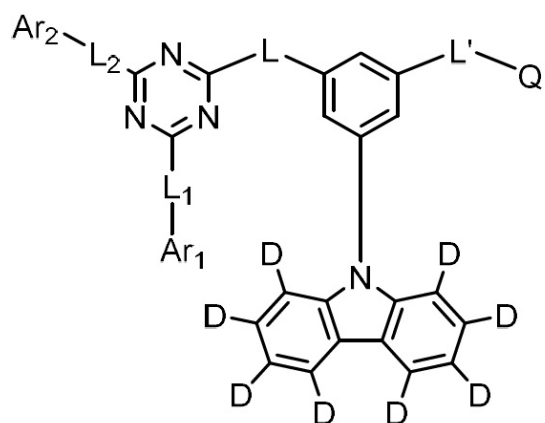
前記化合物は、下記化学式 1-1 ~ 1-3 のうちのいずれか 1 つで表される、請求項 1 に記載の化合物：

〔化学式 1-1〕

40

50

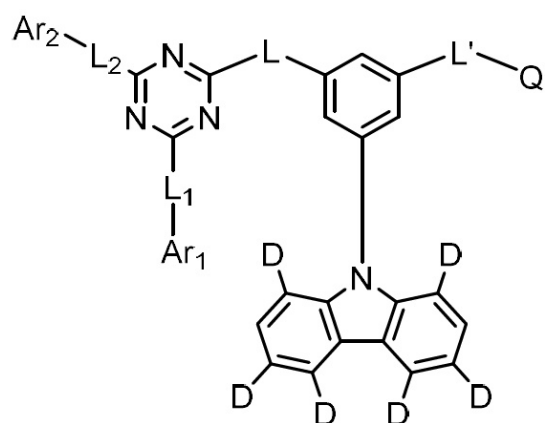
【化 7】



10

【化学式 1 - 2】

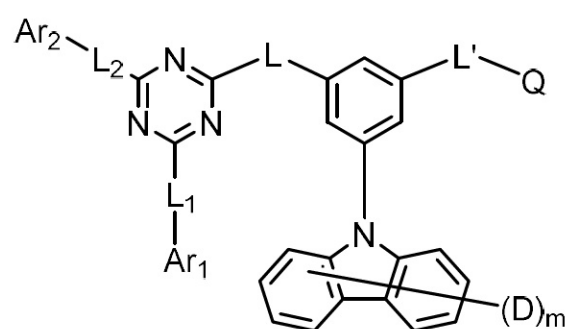
【化 8】



20

【化学式 1 - 3】

【化 9】



30

前記化学式 1 - 1 ~ 1 - 3 中、

D は重水素であり、

m は 1、2、3、4、5 または 7 であり、

L、L₁、L₂、Ar₁、Ar₂、L' および Q は、請求項 1 で定義した通りである。

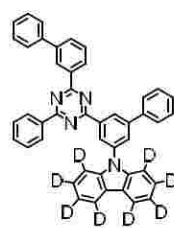
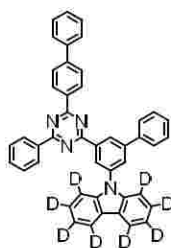
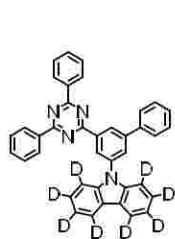
【請求項 1 4】

前記化合物は、下記化合物で構成される群より選択されるいずれか 1 つである、請求項 1 に記載の化合物：

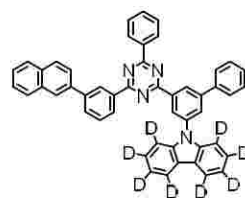
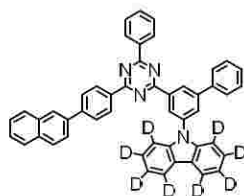
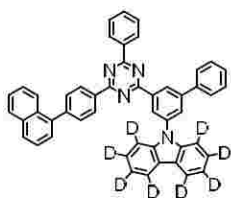
40

50

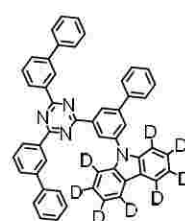
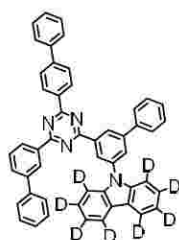
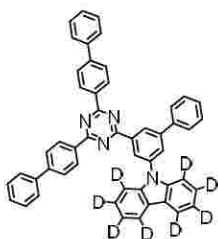
【化 10】



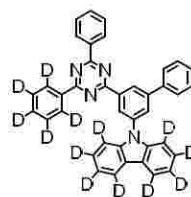
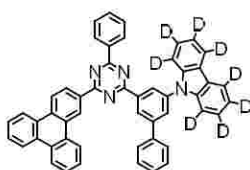
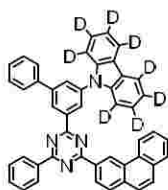
10



20



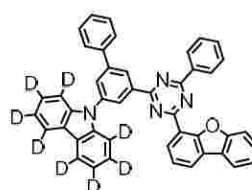
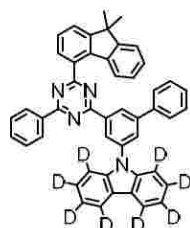
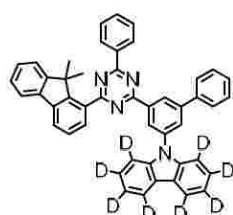
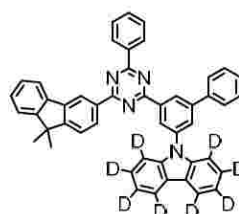
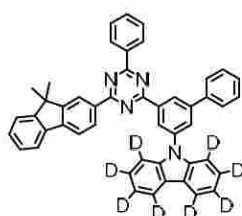
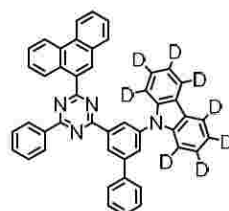
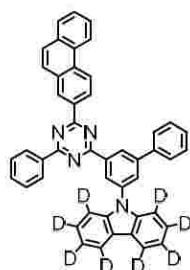
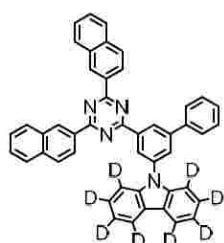
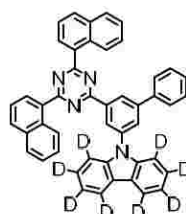
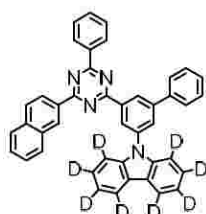
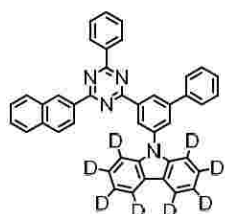
30



40

50

【化 1 1】



10

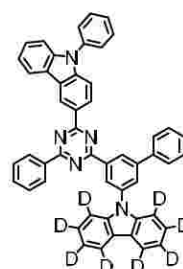
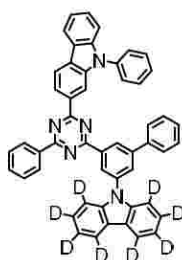
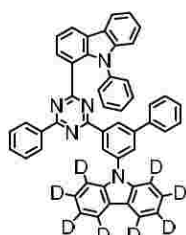
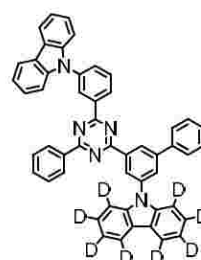
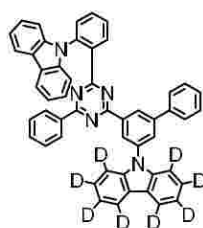
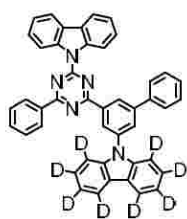
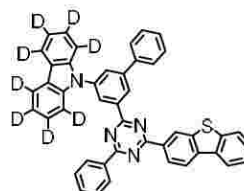
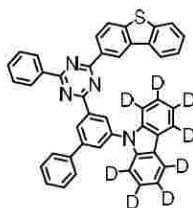
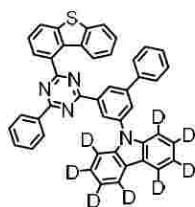
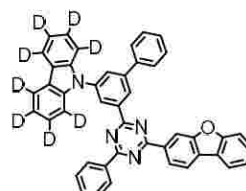
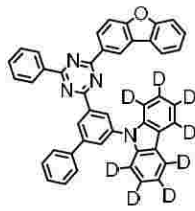
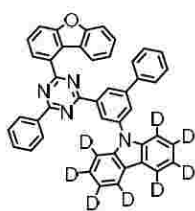
20

30

40

50

【化 1 2】



10

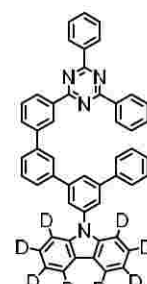
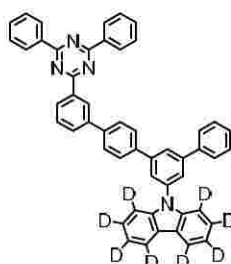
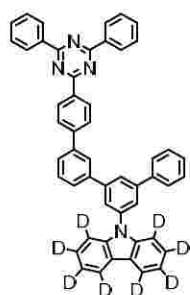
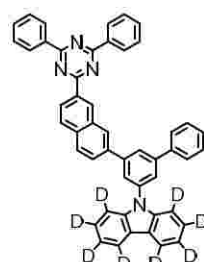
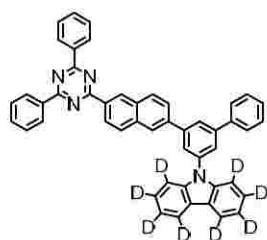
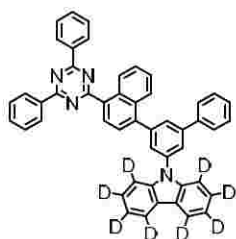
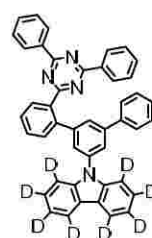
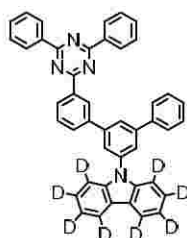
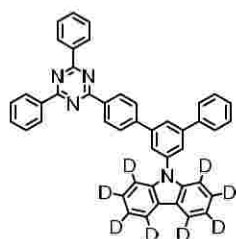
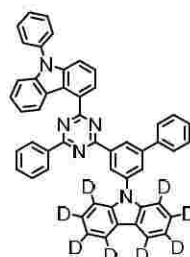
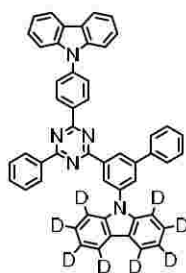
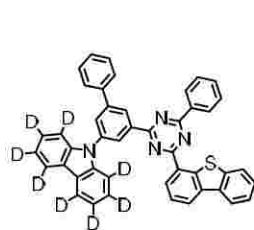
20

30

40

50

【化 1 3】



10

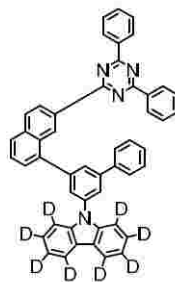
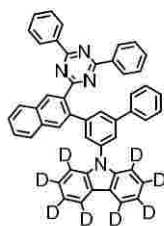
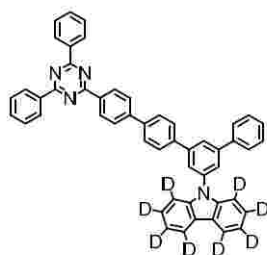
20

30

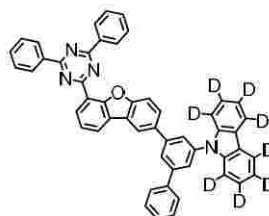
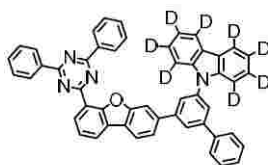
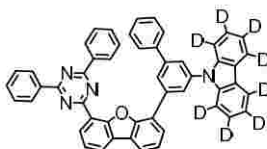
40

50

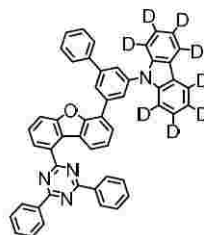
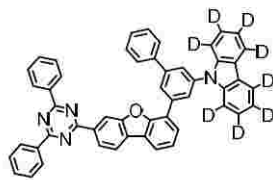
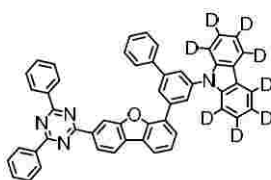
【化 1 4】



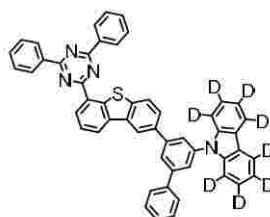
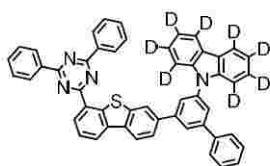
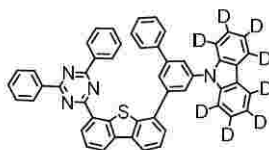
10



20



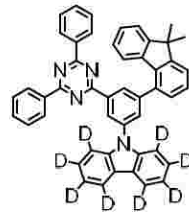
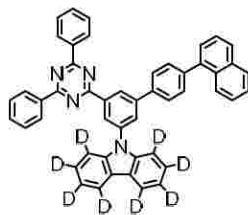
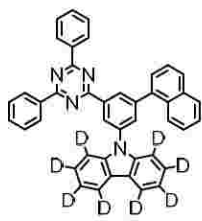
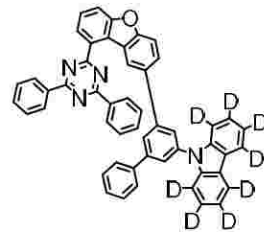
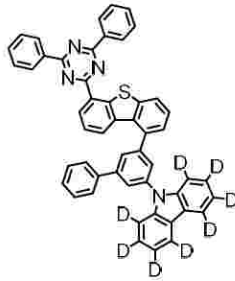
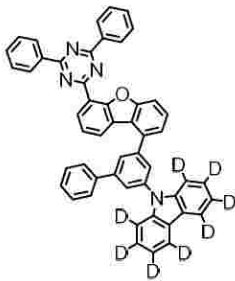
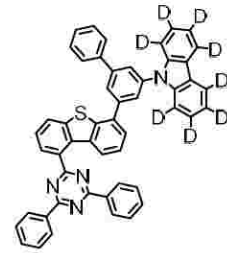
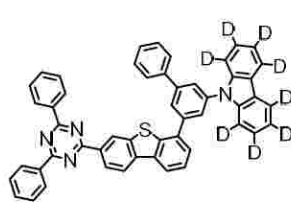
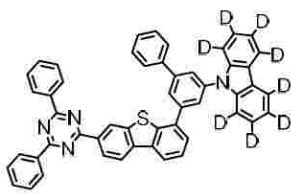
30



40

50

【化 1 5】



10

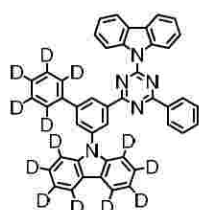
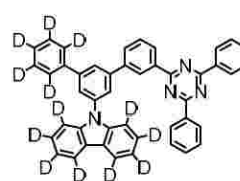
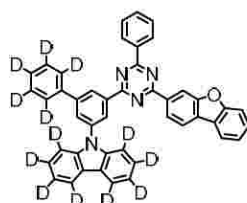
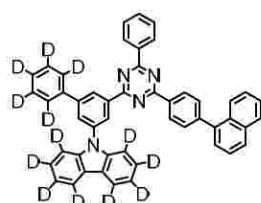
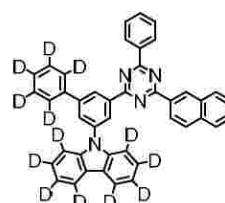
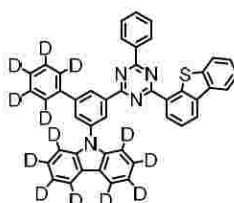
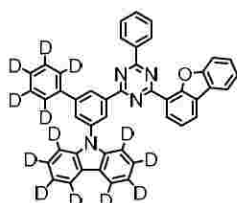
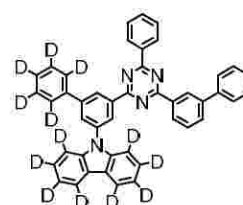
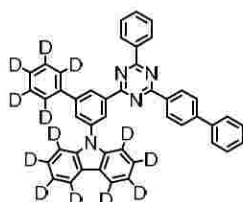
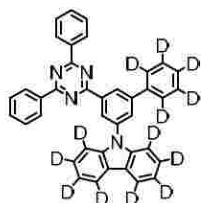
20

30

40

50

【化 1 6】



10

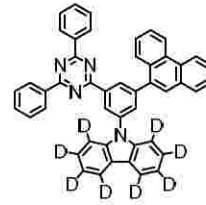
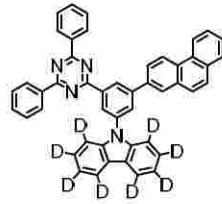
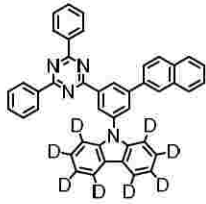
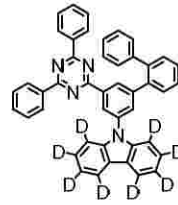
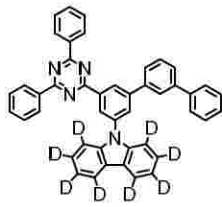
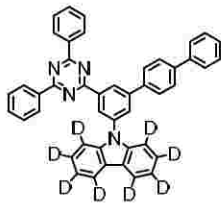
20

30

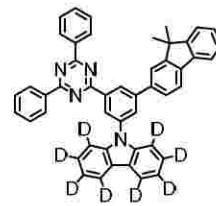
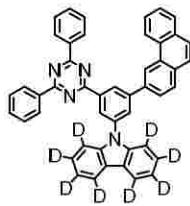
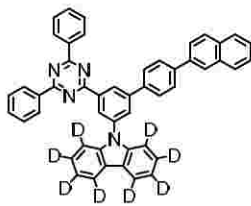
40

50

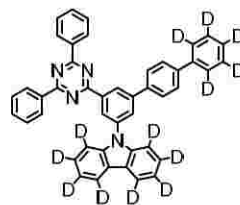
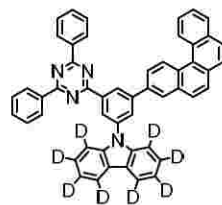
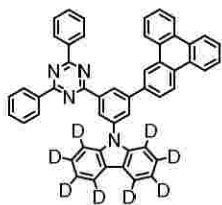
【化 1 7】



10



20

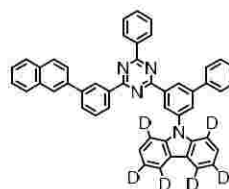
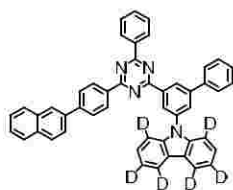
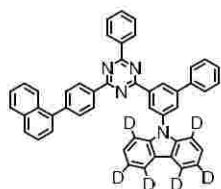
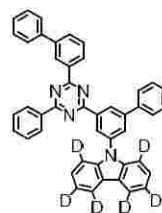
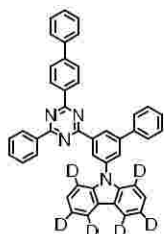
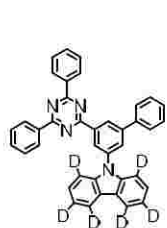


30

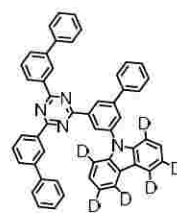
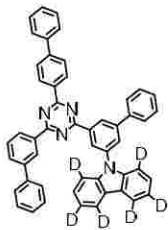
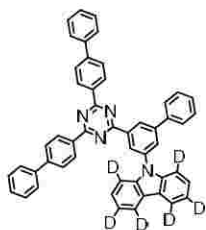
40

50

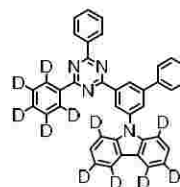
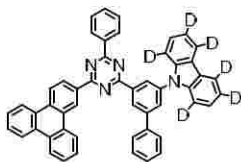
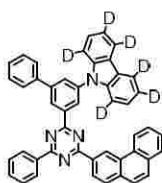
【化 1 8】



10



20

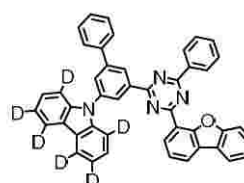
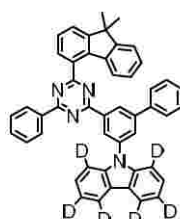
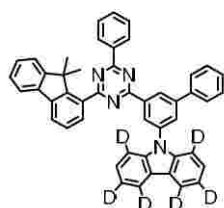
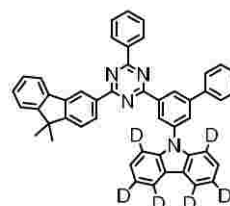
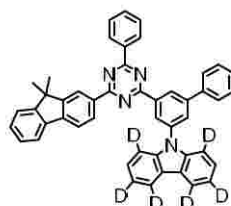
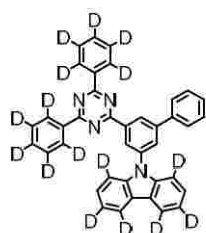
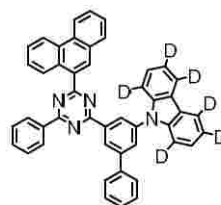
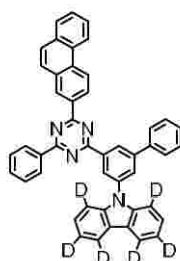
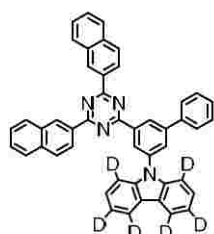
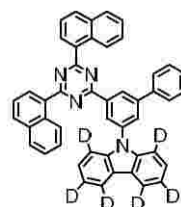
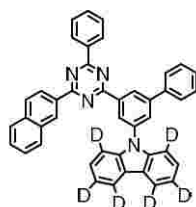
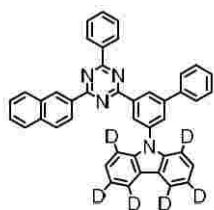


30

40

50

【化 19】



10

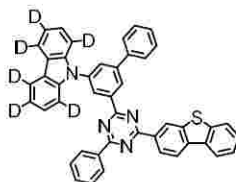
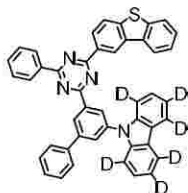
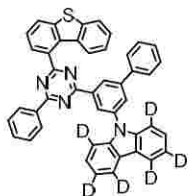
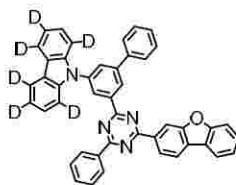
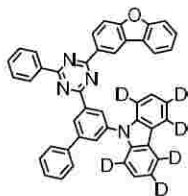
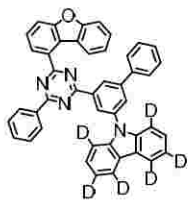
20

30

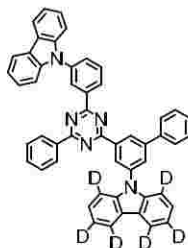
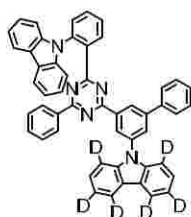
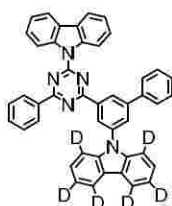
40

50

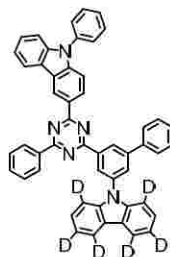
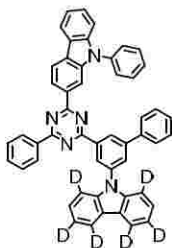
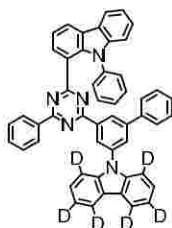
【化 20】



10



20

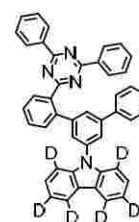
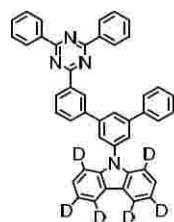
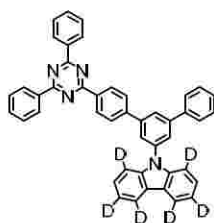
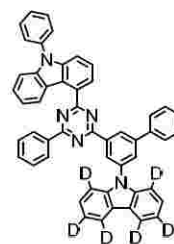
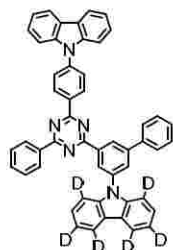
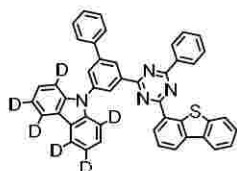


30

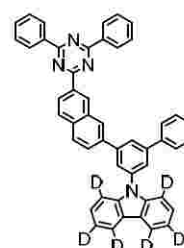
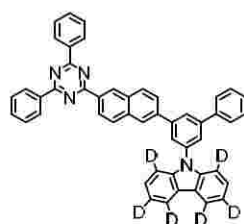
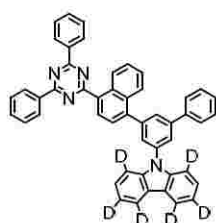
40

50

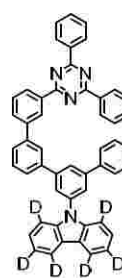
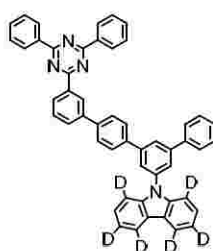
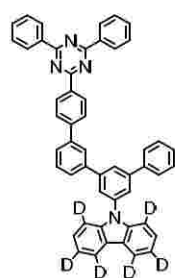
【化 2 1】



10



20

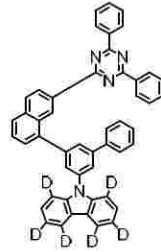
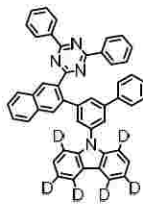
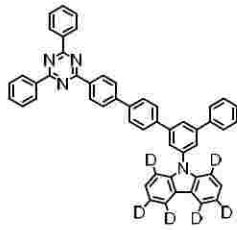


30

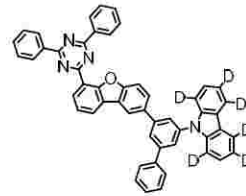
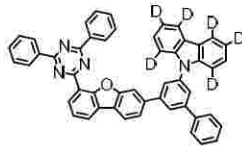
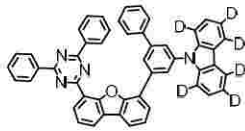
40

50

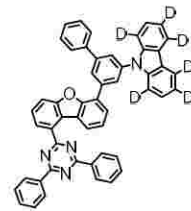
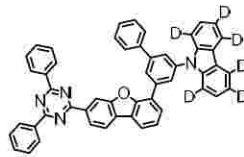
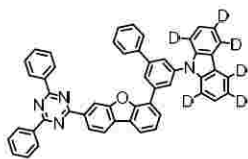
【化 2 2】



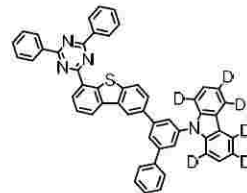
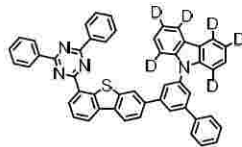
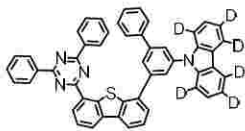
10



20

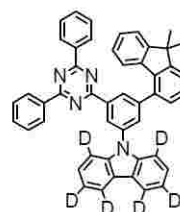
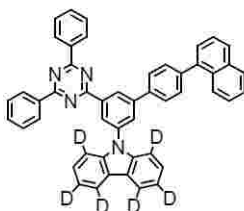
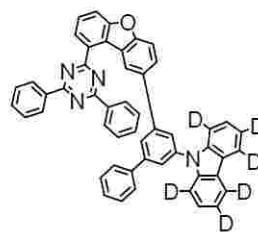
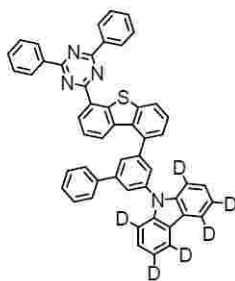
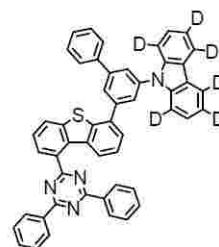
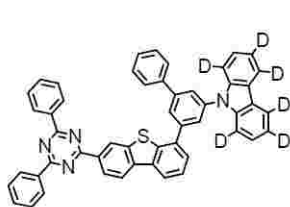


30



40

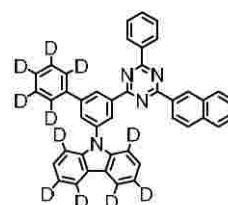
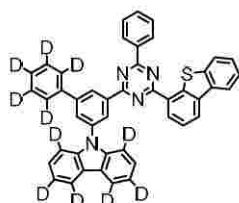
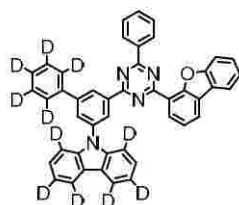
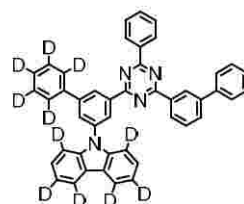
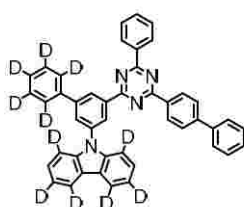
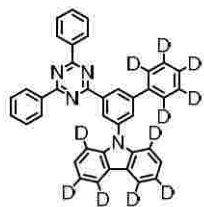
50



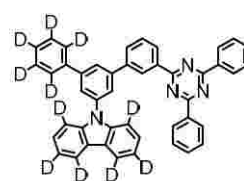
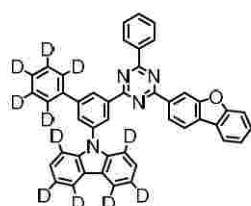
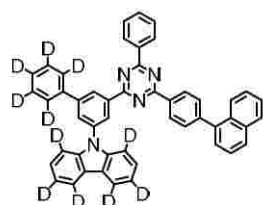
40

50

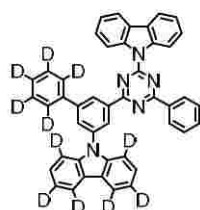
【化 2 4】



10



20

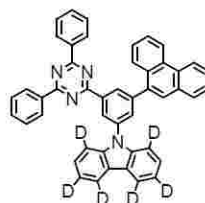
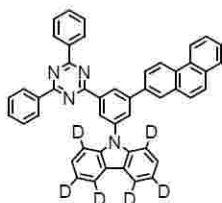
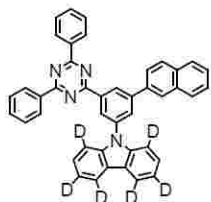
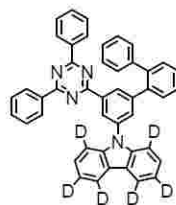
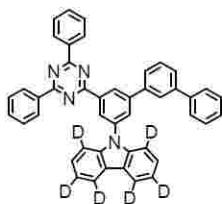
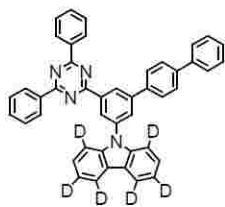


30

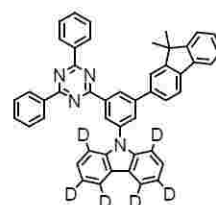
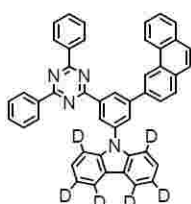
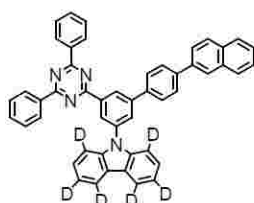
40

50

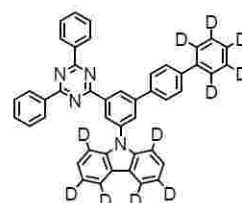
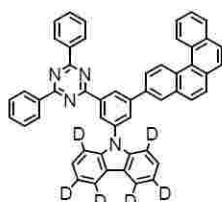
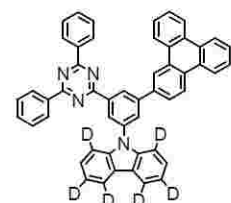
【化 2 5】



10

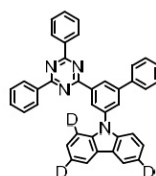
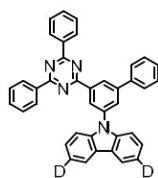
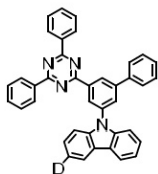


20

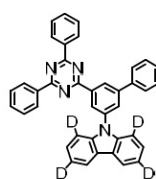
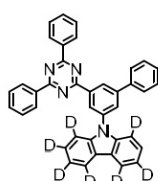
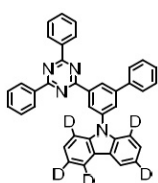


30

【化 2 6】



40



【請求項 1 5】

第 1 電極と、前記第 1 電極に対向して備えられた第 2 電極と、前記第 1 電極と前記第 2

50

電極との間に備えられた１層以上の有機物層と、を含む有機発光素子であって、前記有機物層のうちの１層以上は、請求項１～１４のいずれか一項に記載の化合物を含む、有機発光素子。

【請求項１６】

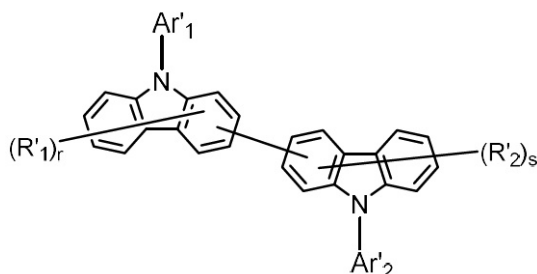
前記化合物を含む有機物層は発光層である、請求項１５に記載の有機発光素子。

【請求項１７】

前記発光層は、下記化学式２で表される化合物をさらに含む、請求項１６に記載の有機発光素子：

〔化学式２〕

【化２７】



10

前記化学式２中、

20

$Ar'1$ および $Ar'2$ はそれぞれ独立して、置換または非置換の炭素数 6 ～ 60 のアリール；または置換または非置換の N、O および S のうちの 1 個以上のヘテロ原子を含む炭素数 2 ～ 60 のヘテロアリールであり、

$R'1$ および $R'2$ はそれぞれ独立して、水素；重水素；炭素数 1 ～ 60 のアルキル；炭素数 6 ～ 60 のアリール；または N、O および S のうちの 1 個以上のヘテロ原子を含む炭素数 2 ～ 60 のヘテロアリールであり、

r および s はそれぞれ独立して、0 ～ 7 の整数である。

【請求項１８】

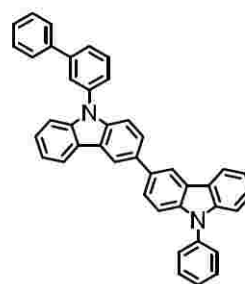
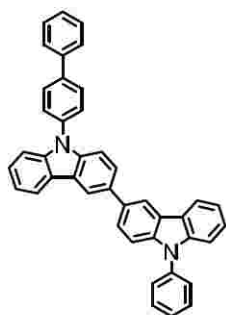
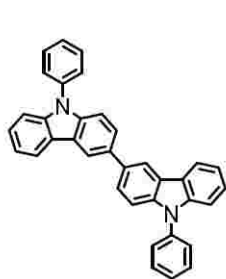
前記化学式２で表される化合物は、下記化合物で構成される群より選択されるいずれか１つである、請求項１７に記載の有機発光素子：

30

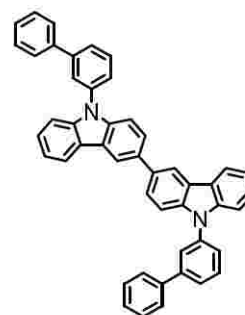
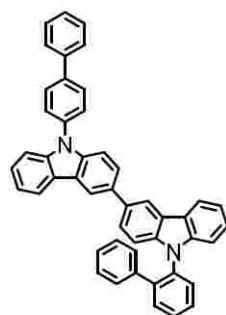
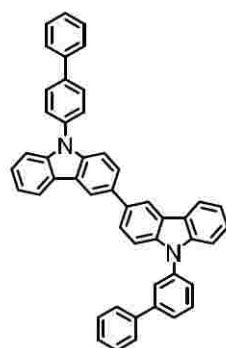
40

50

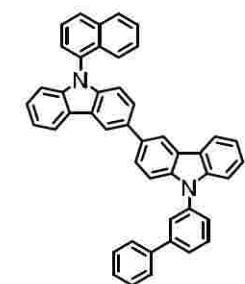
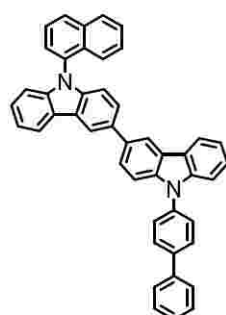
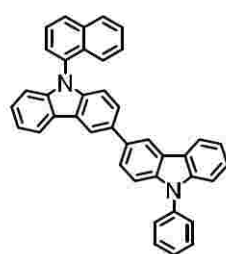
【化 2 8】



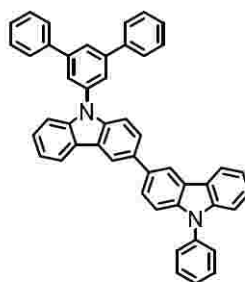
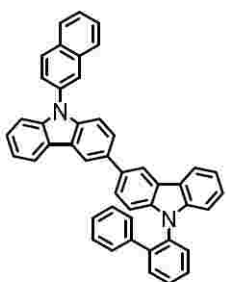
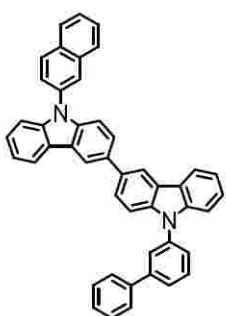
10



20



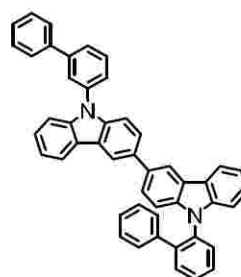
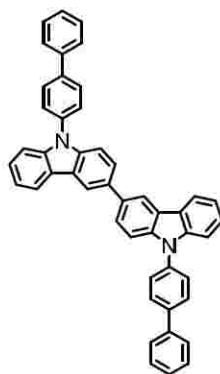
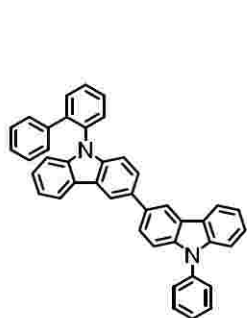
30



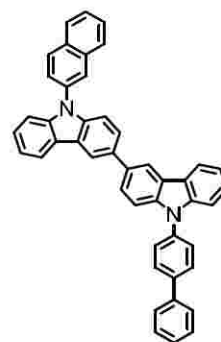
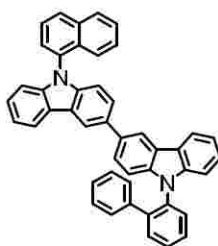
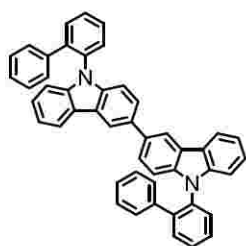
40

50

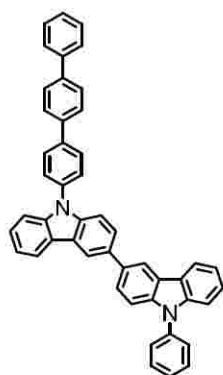
【化 2 9】



10



20

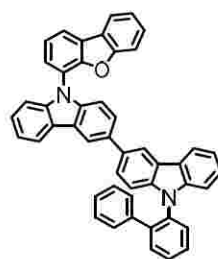
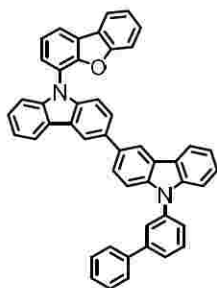
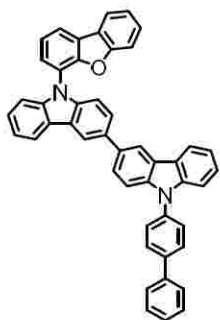


30

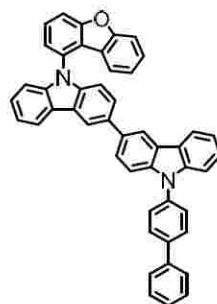
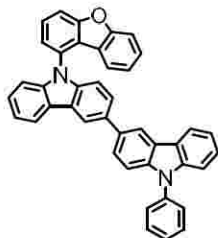
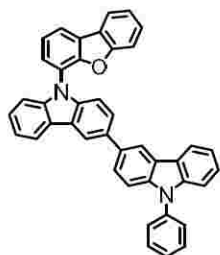
40

50

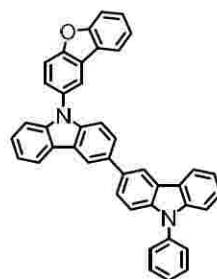
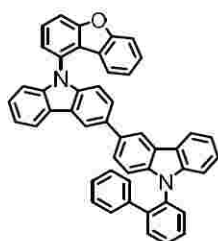
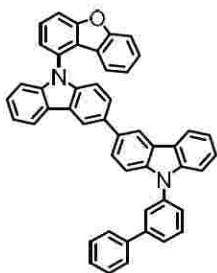
【化 3 0】



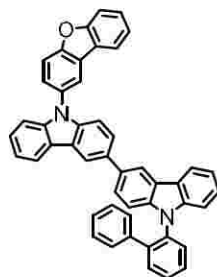
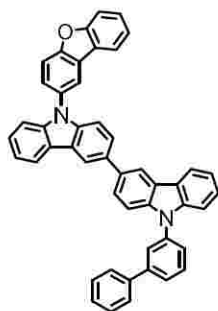
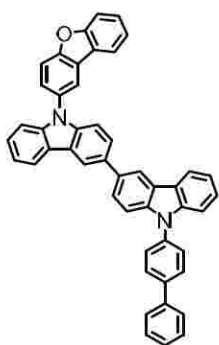
10



20



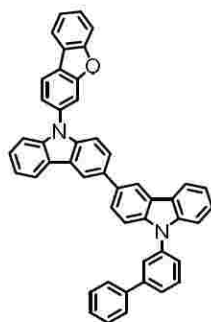
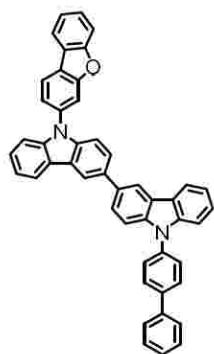
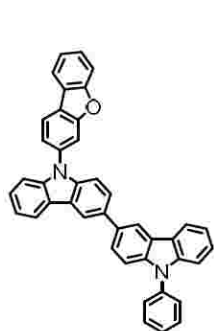
30



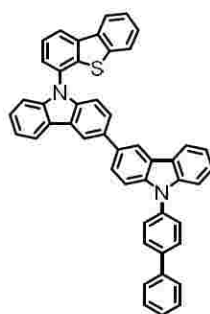
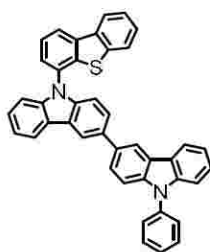
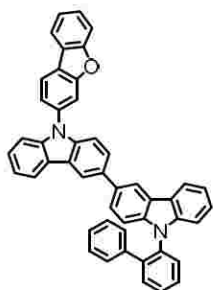
40

50

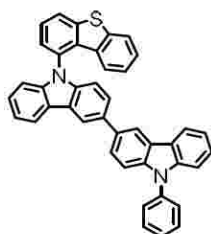
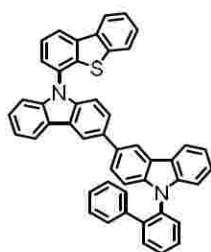
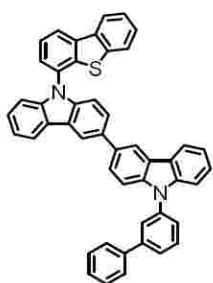
【化 3 1】



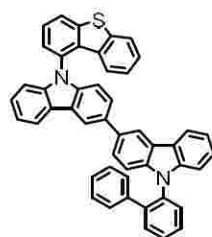
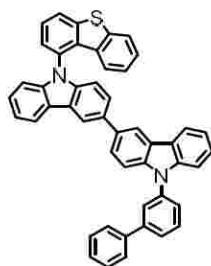
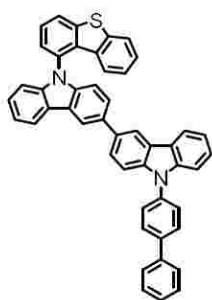
10



20



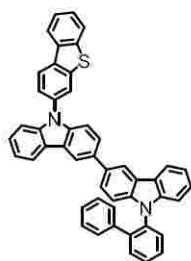
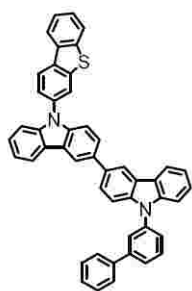
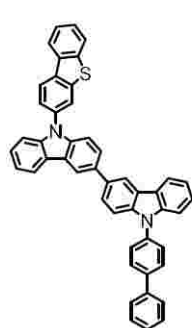
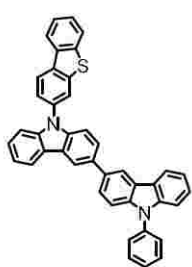
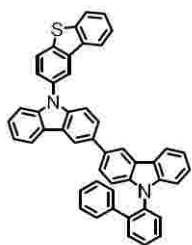
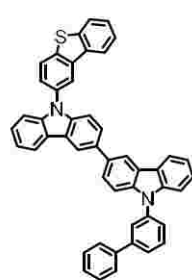
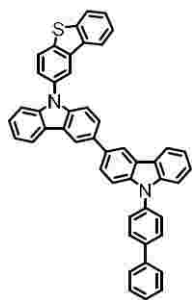
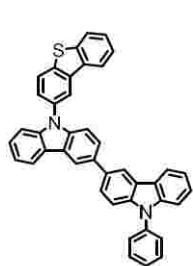
30



40

50

【化 3 2】



10

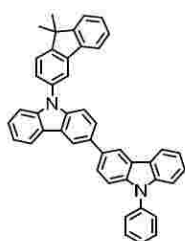
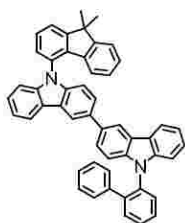
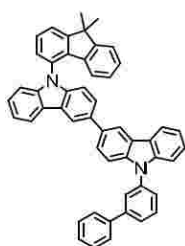
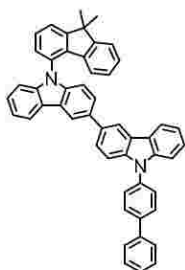
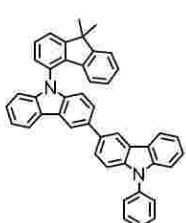
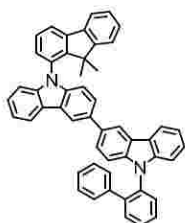
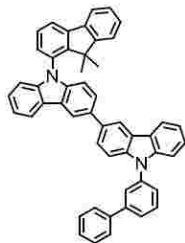
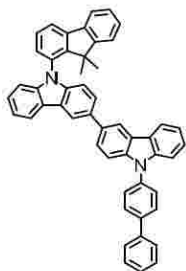
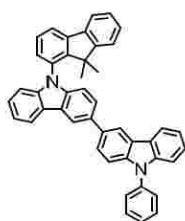
20

30

40

50

【化 3 3】



10

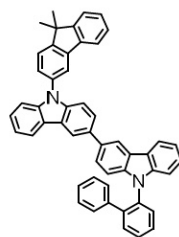
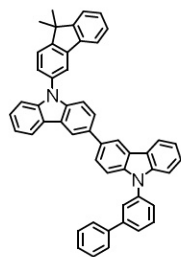
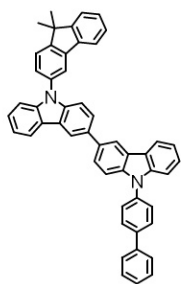
20

30

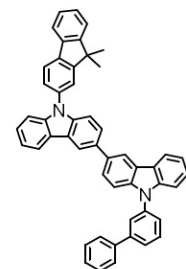
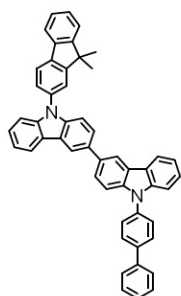
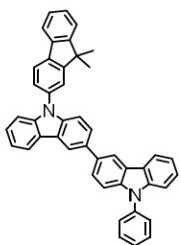
40

50

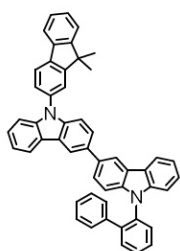
【化 3 4】



10



20

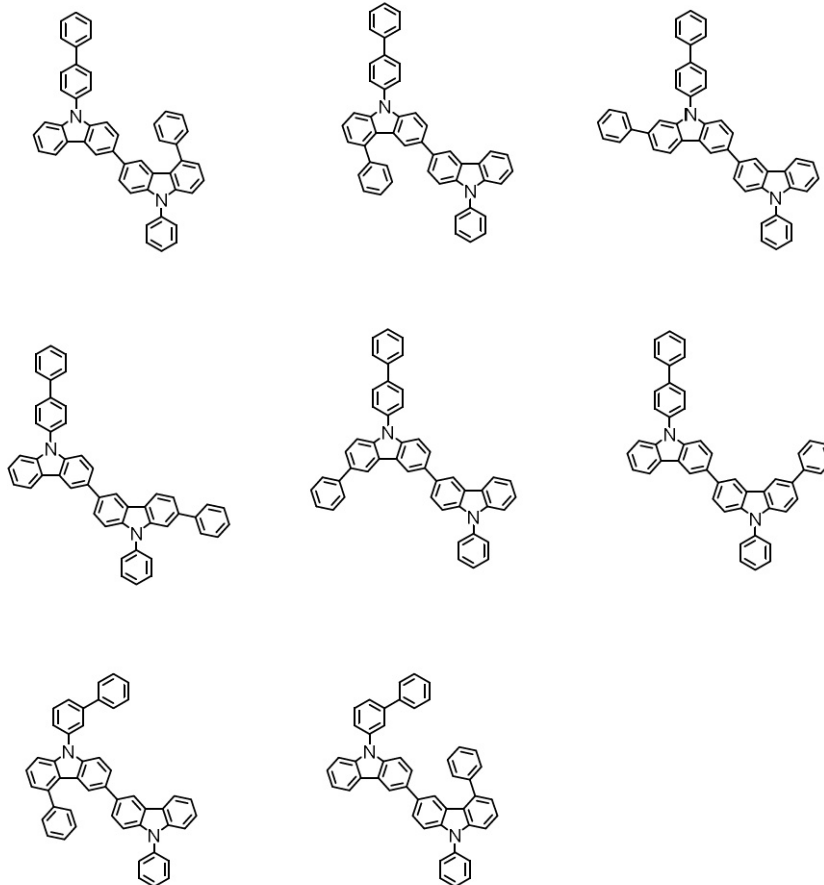


30

40

50

【化 3 5】



10

20

。

【発明の詳細な説明】

【技術分野】

【0001】

30

【関連出願の相互参照】

本出願は、2021年2月22日付の韓国特許出願第10-2021-0023634号および2022年2月21日付の韓国特許出願第10-2022-0022275号に基づく優先権の利益を主張し、当該韓国特許出願の文献に開示された全ての内容は本明細書の一部として含まれる。

【0002】

本発明は、新規な化合物およびこれを含む有機発光素子に関する。

【背景技術】

【0003】

一般的に、有機発光現象とは、有機物質を利用し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、広い視野角、優れたコントラスト、速い応答時間を有し、輝度、駆動電圧および応答速度特性に優れて多くの研究が進められている。

40

【0004】

有機発光素子は、一般的に正極と負極および前記正極と負極との間に有機物層を含む構造を有する。前記有機物層は、有機発光素子の効率と安全性を高めるために、それぞれ異なる物質から構成された多層の構造からなる場合が多く、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る。このような有機発光素子の構造において、2つの電極の間に電圧をかけると、正極からは正孔が、負極からは電子が有機物層に注入され、注入された正孔と電子が接した時、エキシトン (exciton) が形成さ

50

れ、このエキシトンが再び基底状態に落ちる時、光が出るようになる。

【０００５】

このような有機発光素子に使用される有機物に対して新たな材料の開発が要求され続けている。

【先行技術文献】

【特許文献】

【０００６】

【文献】韓国特許公開第１０－２０００－００５１８２６号

【発明の概要】

【発明が解決しようとする課題】

10

【０００７】

本発明は、新規な化合物およびこれを含む有機発光素子を提供する。

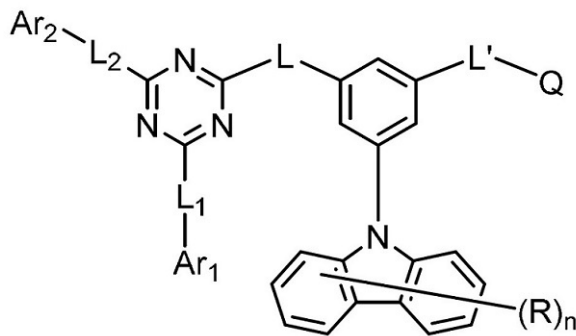
【課題を解決するための手段】

【０００８】

本発明は、下記化学式１で表される化合物を提供する：

〔化学式１〕

【化１】



20

前記化学式１中、

Lは単結合；置換または非置換の炭素数６～６０のアリーレン；または置換または非置換のN、OおよびSのうちの１個以上のヘテロ原子を含む炭素数２～６０のヘテロアリーレンであり、

30

L₁およびL₂はそれぞれ独立して、単結合；または置換または非置換の炭素数６～６０のアリーレンであり、

Ar₁およびAr₂はそれぞれ独立して、置換または非置換の炭素数６～６０のアリール；または置換または非置換のN、OおよびSのうちの１個以上のヘテロ原子を含む炭素数２～６０のヘテロアリールであり、

L'は単結合；または置換または非置換の炭素数６～６０のアリーレンであり、

Qは置換または非置換の炭素数６～６０のアリールであり、

Rは重水素；または重水素で置換されたフェニルであり、

nは１～８の整数である。

40

【０００９】

また、本発明は、第１電極と、前記第１電極に対向して備えられた第２電極と、前記第１電極と前記第２電極との間に備えられた１層以上の有機物層と、を含む有機発光素子であって、前記有機物層のうちの１層以上は、前記化学式１で表される化合物を含む、有機発光素子を提供する。

【発明の効果】

【００１０】

上述した化学式１で表される化合物は、有機発光素子の有機物層の材料として用いられ、有機発光素子で効率の向上、低い駆動電圧および／または寿命特性を向上させることができる。

50

【図面の簡単な説明】

【0011】

【図1】基板1、正極2、発光層3、および負極4からなる有機発光素子の例を示す図である。

【図2】基板1、正極2、正孔注入層5、正孔輸送層6、電子阻止層7、発光層3、電子輸送層8、電子注入層9および負極4からなる有機発光素子の例を示す図である。

【発明を実施するための形態】

【0012】

以下、本発明の理解を助けるためにより詳しく説明する。

【0013】

(用語の定義)

本明細書において、

【化2】



および

【化3】



は、他の置換基に連結される結合を意味する。

【0014】

本明細書において、「置換または非置換の」という用語は、重水素；ハロゲン基；シアノ基；ニトロ基；ヒドロキシ基；カルボニル基；エステル基；イミド基；アミノ基；ホスフィンオキシド基；アルコキシ基；アリールオキシ基；アルキルチオキシ基；アリールチオキシ基；アルキルスルホキシ基；アリールスルホキシ基；シリル基；ハウ素基；アルキル基；シクロアルキル基；アルケニル基；アリール基；アラルキル基；アラルケニル基；アルキルアリール基；アルキルアミン基；アラルキルアミン基；ヘテロアリールアミン基；アリールアミン基；アリールホスフィン基；またはN、OおよびS原子のうちの1個以上を含むヘテロアリールからなる群より選択される1個以上の置換基で置換または非置換されるか、前記例示された置換基のうちの2以上の置換基が連結された置換または非置換されることを意味する。例えば、「2以上の置換基が連結された置換基」は、ビフェニル基であってもよい。すなわち、ビフェニル基は、アリール基であってもよく、2個のフェニル基が連結された置換基と解釈されてもよい。一例として、「置換または非置換の」という用語は「非置換であるか、または重水素、ハロゲン、炭素数1～10のアルキル、炭素数1～10のアルコキシおよび炭素数6～20のアリールで構成される群より選択される1個以上、例えば、1～5個の置換基で置換される」という意味で解釈されてもよい。また、本明細書において「1個以上の置換基で置換された」という用語は、例えば「1～5個の置換基で置換された」、または「1個または2個の置換基で置換された」という意味で解釈されてもよい。

【0015】

本明細書において、カルボニル基の炭素数は特に限定されないが、炭素数1～40であることが好ましい。具体的には、下記のような構造の化合物であってもよいが、これらに限定されるものではない。

10

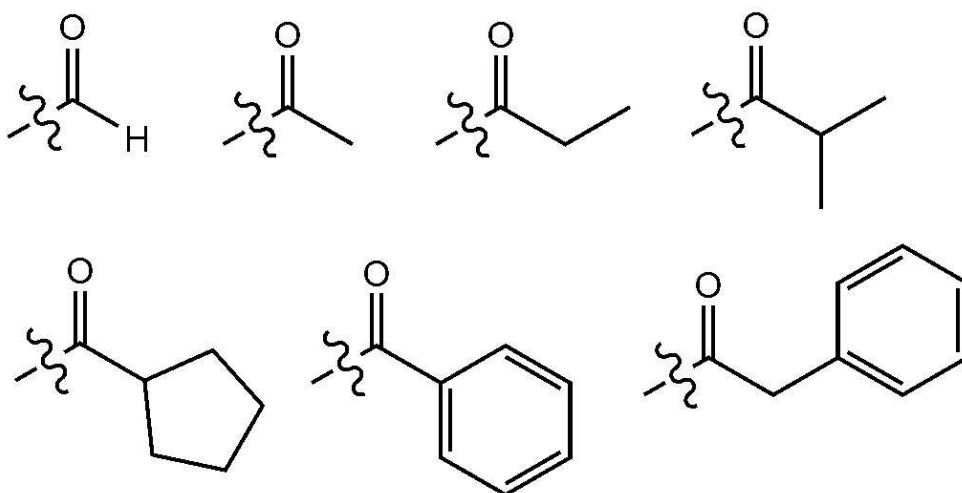
20

30

40

50

【化 4】

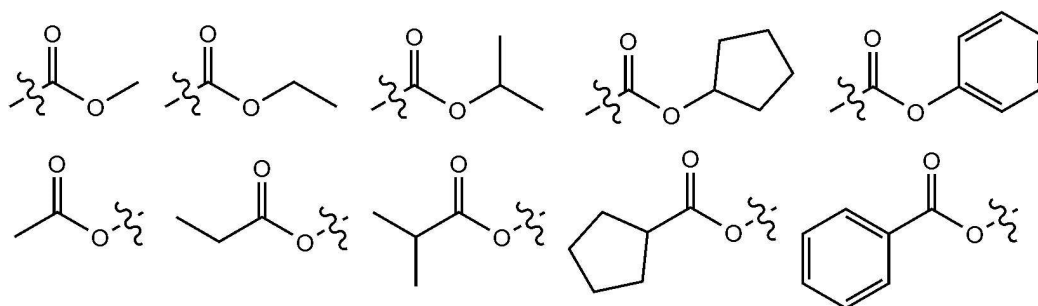


10

【0016】

本明細書において、エステル基は、エステル基の酸素が炭素数1～25の直鎖、分枝鎖もしくは環鎖アルキル基、または炭素数6～25のアリール基で置換されていてもよい。具体的には、下記構造式の化合物であってもよいが、これらに限定されるものではない。

【化 5】

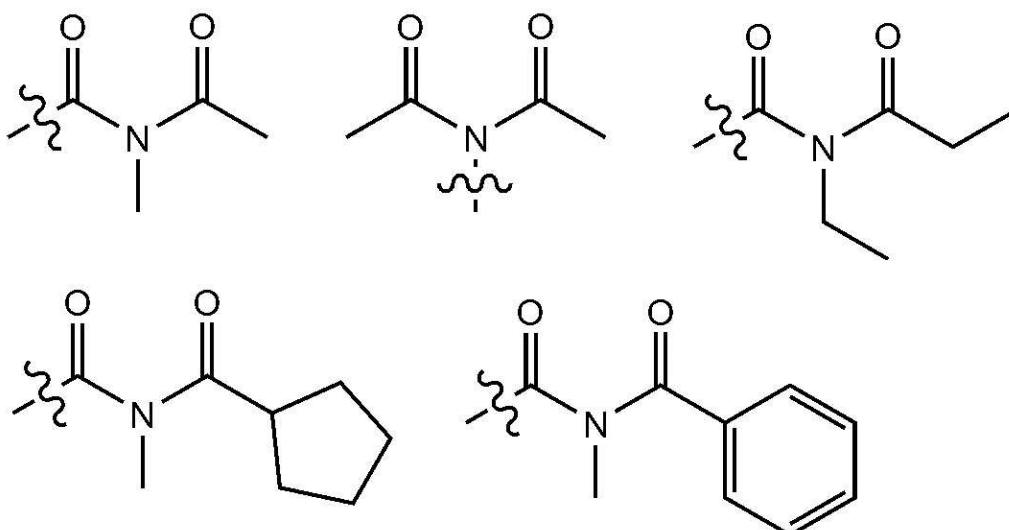


20

【0017】

本明細書において、イミド基の炭素数は特に限定されないが、炭素数1～25であることが好ましい。具体的には、下記のような構造の置換基であってもよいが、これらに限定されるものではない。

【化 6】



40

【0018】

50

本明細書において、シリル基は、具体的には、トリメチルシリル基、トリエチルシリル基、*t*-ブチルジメチルシリル基、ビニルジメチルシリル基、プロピルジメチルシリル基、トリフェニルシリル基、ジフェニルシリル基、フェニルシリル基などがあるが、これらに限定されるものではない。

【0019】

本明細書において、ホウ素基は、具体的には、トリメチルホウ素基、トリエチルホウ素基、*t*-ブチルジメチルホウ素基、トリフェニルホウ素基、フェニルホウ素基などがあるが、これらに限定されるものではない。

【0020】

本明細書において、ハロゲン基の例としては、フッ素、塩素、臭素、またはヨウ素がある。

【0021】

本明細書において、前記アルキル基は、直鎖もしくは分枝鎖であってもよく、炭素数は特に限定されないが、1～40であることが好ましい。一実施形態によれば、前記アルキル基の炭素数は1～20である。さらに一つの実施形態によれば、前記アルキル基の炭素数は1～10である。さらに一つの実施形態によれば、前記アルキル基の具体的な例としては、メチル、エチル、プロピル、*n*-プロピル、イソプロピル、ブチル、*n*-ブチル、イソブチル、*tert*-ブチル、*sec*-ブチル、1-メチルブチル、1-エチルブチル、ペンチル、*n*-ペンチル、イソペンチル、ネオペンチル、*tert*-ペンチル、1-エチルプロピル、1, 1-ジメチルプロピル、ヘキシル、*n*-ヘキシル、1-メチルペンチル、2-メチルペンチル、4-メチル-2-ペンチル、3, 3-ジメチルブチル、2-エチルブチル、ヘプチル、*n*-ヘプチル、イソヘキシル、1-メチルヘキシル、2-メチルヘキシル、3-メチルヘキシル、4-メチルヘキシル、5-メチルヘキシル、シクロペンチルメチル、シクロヘキシルメチル、オクチル、*n*-オクチル、*tert*-オクチル、1-メチルヘプチル、2-エチルヘキシル、2, 4, 4-トリメチル-1-ペンチル、2, 4, 4-トリメチル-2-ペンチル、2-プロピルペンチル、*n*-ノニル、2, 2-ジメチルヘプチルなどがあるが、これらに限定されるものではない。

【0022】

本明細書において、前記アルケニル基は、直鎖もしくは分枝鎖であってもよく、炭素数は特に限定されないが、2～40であることが好ましい。一実施形態によれば、前記アルケニル基の炭素数は2～20である。さらに一つの実施形態によれば、前記アルケニル基の炭素数は2～6である。具体的な例としては、ビニル、1-プロペニル、イソプロペニル、1-ブテニル、2-ブテニル、3-ブテニル、1-ペンテニル、2-ペンテニル、3-ペンテニル、3-メチル-1-ブテニル、1, 3-ブタジエニル、アリル、1-フェニルビニル-1-イル、2-フェニルビニル-1-イル、2, 2-ジフェニルビニル-1-イル、2-フェニル-2-(ナフチル-1-イル)ビニル-1-イル、2, 2-ビス(ジフェニル-1-イル)ビニル-1-イル、スチルベニル基、スチレニル基などがあるが、これらに限定されるものではない。

【0023】

本明細書において、シクロアルキル基は特に限定されないが、炭素数3～60であることが好ましく、一実施形態によれば、前記シクロアルキル基の炭素数は3～30である。さらに一つの実施形態によれば、前記シクロアルキル基の炭素数は3～20である。さらに一つの実施形態によれば、前記シクロアルキル基の炭素数は3～6である。具体的には、シクロプロピル、シクロブチル、シクロペンチル、3-メチルシクロペンチル、2, 3-ジメチルシクロペンチル、シクロヘキシル、3-メチルシクロヘキシル、4-メチルシクロヘキシル、2, 3-ジメチルシクロヘキシル、3, 4, 5-トリメチルシクロヘキシル、4-*tert*-ブチルシクロヘキシル、シクロヘプチル、シクロオクチルなどがあるが、これらに限定されるものではない。

【0024】

本明細書において、アリール基は特に限定されないが、炭素数 6 ～ 60 であることが好ましく、芳香族性 (aromaticity) を有する単環式アリール基または多環式アリール基であってもよい。一実施形態によれば、前記アリール基の炭素数は 6 ～ 30 である。一実施形態によれば、前記アリール基の炭素数は 6 ～ 20 である。前記単環式アリール基としては、フェニル基、ピフェニル基、ターフェニル基などであってもよいが、これらに限定されるものではない。前記多環式アリール基としては、ナフチル基、アントラセニル基、フェナントレニル基、トリフェニレニル基、ピレニル基、ペリレニル基、クリセニル基などであってもよいが、これらに限定されるものではない。

【0025】

本明細書において、ヘテロアリールは、異種元素として O、N、Si および S のうちの 1 個以上を含むヘテロアリールであって、炭素数は特に限定されないが、炭素数 2 ～ 60 であることが好ましい。ヘテロアリールの例としては、チオフェン基、フラニル基、ピロール基、イミダゾール基、チアゾール基、オキサゾール基、オキサジアゾール基、トリアゾール基、ピリジル基、ビピリジル基、ピリミジル基、トリアジニル基、アクリジニル基、ピリダジニル基、ピラジニル基、キノリニル基、キナゾリニル基、キノキサリニル基、フタラジニル基、ピリドピリミジニル基、ピリドピラジニル基、ピラジノピラジニル基、イソキノリル基、インドール基、カルバゾール基、ベンゾオキサゾール基、ベンゾイミダゾール基、ベンゾチアゾール基、ベンゾカルバゾール基、ベンゾチオフェン基、ジベンゾチオフェン基、ベンゾフラニル基、フェナントロリン基 (phenanthroline)、イソオキサゾリル基、チアジアゾリル基、フェノチアジニル基、およびジベンゾフラニル基などがあるが、これらに限定されるものではない。

【0026】

本明細書において、アラルキル基、アラルケニル基、アルキルアリール基、アリールアミン基、アリールシリル基中のアリール基は、上述したアリール基に関する説明が適用可能である。本明細書において、アラルキル基、アルキルアリール基、アルキルアミン基中のアルキル基は、上述したアルキル基に関する説明が適用可能である。本明細書において、ヘテロアリールアミン中のヘテロアリールは、上述したヘテロアリールに関する説明が適用可能である。本明細書において、アラルケニル基中のアルケニル基は、上述したアルケニル基に関する説明が適用可能である。本明細書において、アリーレンは、2 価の基であることを除けば、上述したアリール基に関する説明が適用可能である。本明細書において、ヘテロアリーレンは、2 価の基であることを除けば、上述したヘテロアリールに関する説明が適用可能である。本明細書において、炭化水素環は 1 価の基ではなく、2 個の置換基が結合して形成したことを除けば、上述したアリール基またはシクロアルキル基に関する説明が適用可能である。本明細書において、ヘテロ環は 1 価の基ではなく、2 個の置換基が結合して形成したことを除けば、上述したヘテロアリールに関する説明が適用可能である。

【0027】

(化合物)

一方、本発明は、前記化学式 1 で表される化合物を提供する。

【0028】

具体的には、前記化学式 1 で表される化合物は、ベンゼン環の 1 番位置にカルバゾール-9-イル、3 番位置にトリアジニル、および 5 番位置にアリールでそれぞれ置換された構造を有する。また、前記化合物は、前記ジベンゾフラン／ジベンゾチオフェンの 8 番位置の炭素が非置換であるか、または重水素で置換されたアリールで置換された構造を有し得る。

【0029】

特に、前記化合物は、前記カルバゾール-9-イル置換基が 1 個以上の重水素または重水素で置換されたフェニルで置換され、かつベンゼン環の 2 番、4 番および 6 番炭素は重水素で置換されていない構造を有するが、このような化合物は分子内の重水素を有していない化合物およびベンゼン環の 2 番、4 番および 6 番炭素のうちの少なくとも 1 つが重水

素で置換された化合物に比べて分子内の電子安定性が増加し得る。また、前記化合物が重水素または重水素で置換されたフェニルで置換されたカルバゾール-9-イル構造を有することによって、C-D結合の結合エネルギー（bond energy）がC-H結合の結合エネルギーより大きいという特性のため、前記化合物は重水素を持たない化合物に比べて、分子内のより強い結合エネルギーを有することになり、これによって物質安定性が向上する。

【0030】

したがって、前記化合物を採用した有機発光素子は、低い駆動電圧を示すだけでなく、寿命特性が向上する。

【0031】

一実施形態において、Lは単結合；非置換であるか、または重水素で置換された炭素数6～20のアリーレン；または非置換であるか、または重水素で置換されたOおよびSのうちの1個のヘテロ原子を含む炭素数2～20のヘテロアリーレンであり得る。

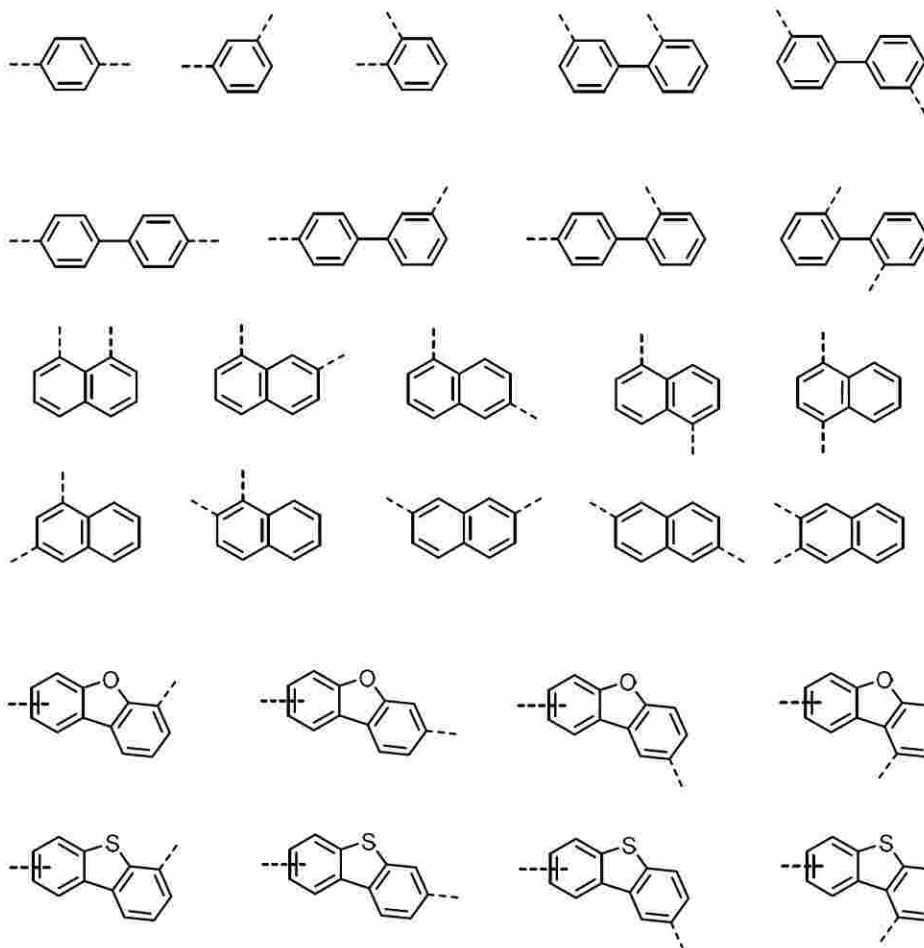
【0032】

具体的には、Lは単結合、フェニレン、ビフェニルジイル、ナフチレン、またはジベンゾフラニレン、ジベンゾチオフェニレンであり得る。

【0033】

例えば、Lは単結合、または下記で構成される群より選択されるいずれか1つである：

【化7】



【0034】

また、一実施形態において、L₁およびL₂はそれぞれ独立して、単結合、または非置換であるか、または重水素で置換された炭素数6～20のアリーレンであり得る。

【0035】

具体的には、L₁およびL₂はそれぞれ独立して、単結合、またはフェニレンであり得

る。言い換えると、 L_1 および L_2 はそれぞれ独立して、単結合、1, 2-フェニレン、1, 3-フェニレン、または1, 4-フェニレンであり得る。

【0036】

例えば、 L_1 および L_2 は全て単結合であるか；または

L_1 および L_2 のうちの1つは単結合であり、残りの1つは、1, 2-フェニレン、1, 3-フェニレン、または1, 4-フェニレンであり得る。

【0037】

この時、 L_1 および L_2 は互いに同一であってもよい。または、 L_1 および L_2 は異なっているてもよい。

【0038】

また、一実施形態において、 Ar_1 および Ar_2 はそれぞれ独立して、非置換であるか、または重水素、炭素数1～10のアルキルおよび炭素数6～20のアリールで構成される群より選択される1個以上の置換基で置換される炭素数6～20のアリール；または非置換であるか、または重水素、炭素数1～10のアルキルおよび炭素数6～20のアリールで構成される群より選択される1個以上の置換基で置換されるN、OおよびSのうちの1個以上のヘテロ原子を含む炭素数2～60のヘテロアリールであり得る。

【0039】

具体的には、 Ar_1 および Ar_2 はそれぞれ独立して、フェニル、ビフェニリル、ターフェニリル、ナフチル、フェナントリル、トリフェニレニル、フルオレニル、ジベンゾフラニル、ジベンゾチオフェニル、またはカルバゾリルであり、

【0040】

ここで、 Ar_1 および Ar_2 は非置換であるか、または重水素、メチルおよびフェニルで構成される群より選択される1個以上の置換基で置換され得る。

【0041】

具体的には、 Ar_1 および Ar_2 はそれぞれ独立して、フェニル、ビフェニリル、ターフェニリル、ナフチル、フェナントリル、トリフェニレニル、フルオレニル、ジベンゾフラニル、ジベンゾチオフェニル、またはカルバゾリルであり、

【0042】

ここで、 Ar_1 および Ar_2 は非置換であるか、または重水素、メチルおよびフェニルで構成される群より選択される1～5個の置換基で置換され得る。

【0043】

より具体的には、 Ar_1 および Ar_2 はそれぞれ独立して、フェニル、ビフェニリル、ターフェニリル、ナフチル、フェナントリル、トリフェニレニル、9, 9-ジメチルフルオレニル、ジベンゾフラニル、ジベンゾチオフェニル、カルバゾリル、または9-フェニルカルバゾリルであり得る。

【0044】

例えば、 Ar_1 および Ar_2 はそれぞれ独立して、下記で構成される群より選択されるいずれか1つであり得るが、これらに限定されるものではない：

10

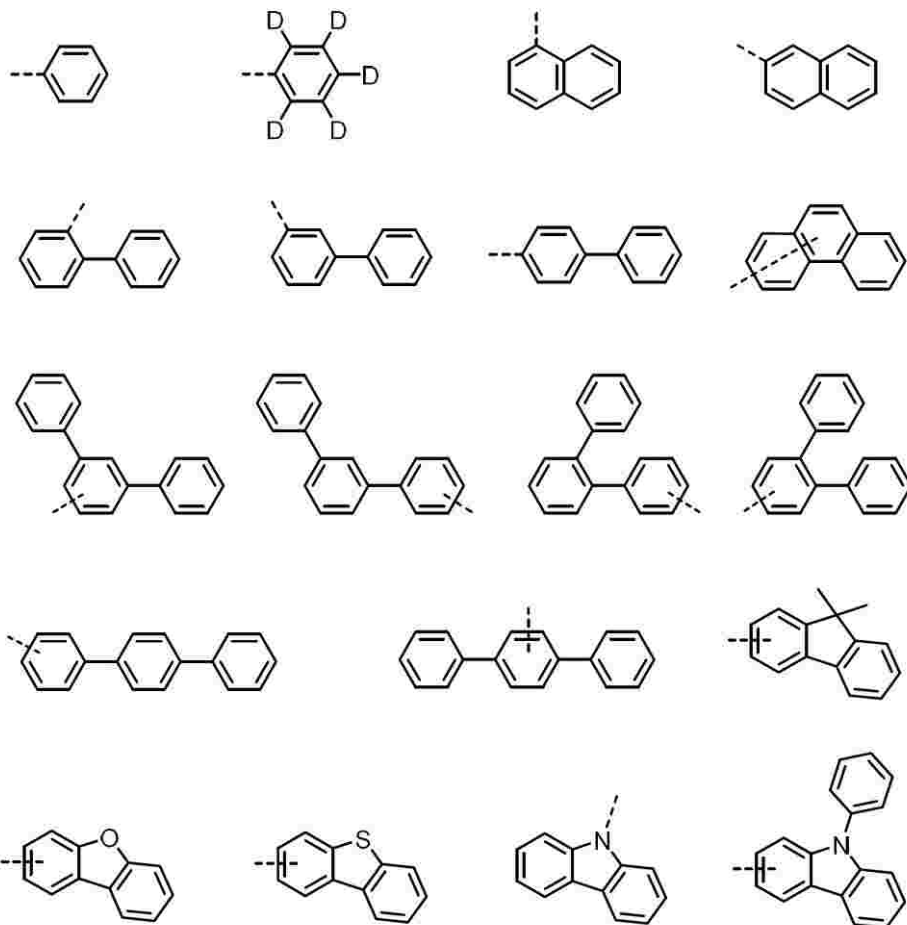
20

30

40

50

【化 8】



10

20

【0045】

この時、 Ar_1 および Ar_2 は互いに同一であってもよい。または、 Ar_1 および Ar_2 は異なってもよい。

30

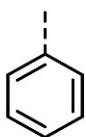
【0046】

また、一実施形態において、 Ar_1 および Ar_2 のうちの少なくとも1つは非置換であるか、または重水素で置換された炭素数6～12のアリールであり得る。

【0047】

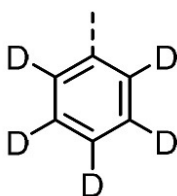
例えば、 Ar_1 および Ar_2 のうちの少なくとも1つは、

【化 9】



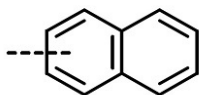
40

【化 10】



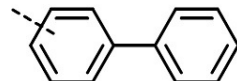
50

【化 1 1】



または

【化 1 2】



10

であり得る。

【0 0 4 8】

一実施形態において、Lが単結合ではない場合、 $A r_1$ および $A r_2$ は全てフェニルであり得る。

【0 0 4 9】

より具体的には、Lが単結合であり、かつ $A r_1$ および $A r_2$ がそれぞれ独立して、フェニル、5個の重水素で置換されたフェニル、ビフェニリル、ターフェニリル、ナフチル、フェナントリル、トリフェニレニル、9, 9-ジメチルフルオレニル、ジベンゾフラニル、ジベンゾチオフェニル、カルバゾリル、または9-フェニルカルバゾリルであるか；

20

または

【0 0 5 0】

Lが炭素数6～20のアリーレンまたはOおよびSのうちの1個のヘテロ原子を含む炭素数2～20のヘテロアリーレンであり、かつ $A r_1$ および $A r_2$ が全てフェニルであり得る。

【0 0 5 1】

また、一実施形態において、L'は単結合または非置換であるか、または重水素で置換された炭素数6～20のアリーレンであり得る。

【0 0 5 2】

具体的には、L'は単結合またはフェニレンであり得る。言い換えると、L'は単結合、1, 2-フェニレン、1, 3-フェニレン、または1, 4-フェニレンであり得る。

30

【0 0 5 3】

また、一実施形態において、Qは非置換であるか、または重水素、炭素数1～10のアルキルおよび炭素数6～20のアリールで構成される群より選択される1個以上の置換基で置換される炭素数6～24のアリールであり得る。

【0 0 5 4】

具体的には、Qはフェニル、ビフェニリル、ナフチル、フェナントリル、トリフェニレニル、ベンゾフェナントリル、または9, 9-ジメチルフルオレニルであり、

【0 0 5 5】

ここで、Qは非置換であるか、または重水素で置換され得る。

40

【0 0 5 6】

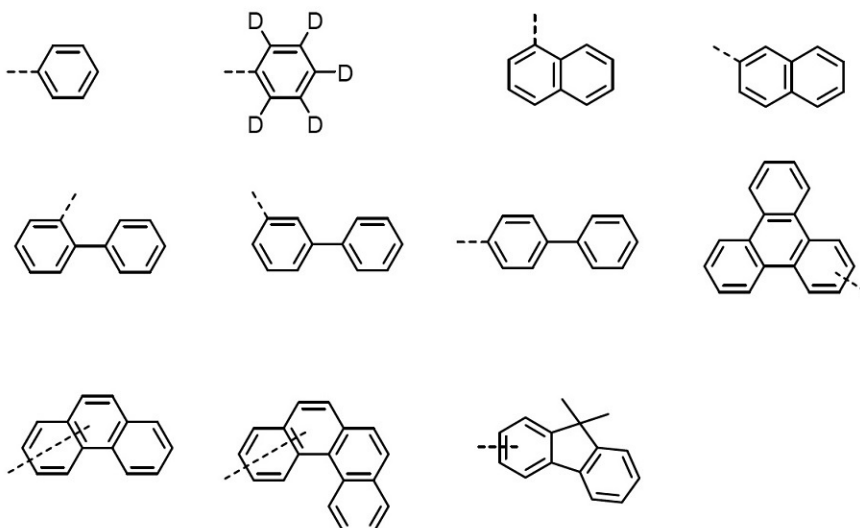
または、ここでQは非置換であるか、または1個以上の重水素で置換され得る。より具体的には、Qは非置換であるか、または分子内の全ての炭素が重水素で置換され得る。

【0 0 5 7】

例えば、Qは、下記で構成される群より選択されるいずれか1つであり得るが、これらに限定されるものではない：

50

【化 1 3】



10

【0 0 5 8】

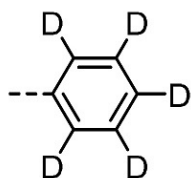
また、一実施形態において、Rは重水素、または1～5個の重水素で置換されたフェニルであり得る。

20

【0 0 5 9】

例えば、Rは重水素、または

【化 1 4】



であり得る。

30

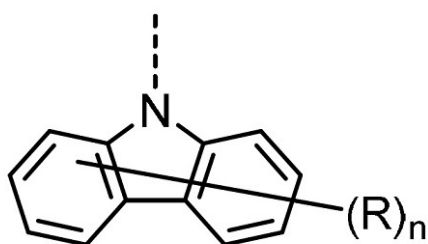
【0 0 6 0】

この時、nはRの個数を意味し、nが2以上の場合、2個以上のRは互いに同一または異なる。例えば、nは1、2、3、4、5、6、7または8であり得る。

【0 0 6 1】

また、前記

【化 1 5】

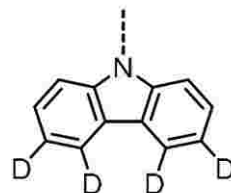
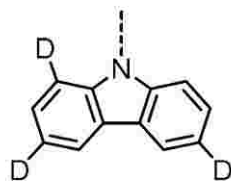
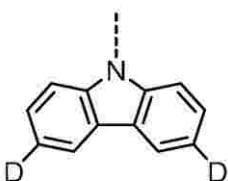
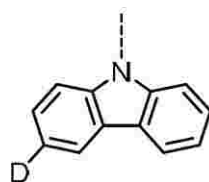
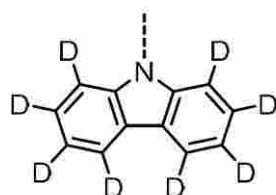
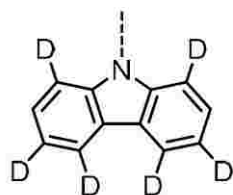


40

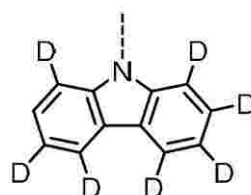
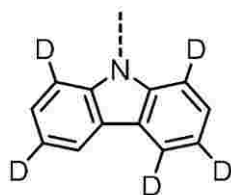
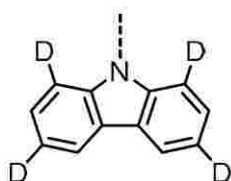
は、下記で構成される群より選択されるいずれか1つであり得る：

50

【化 1 6】



10



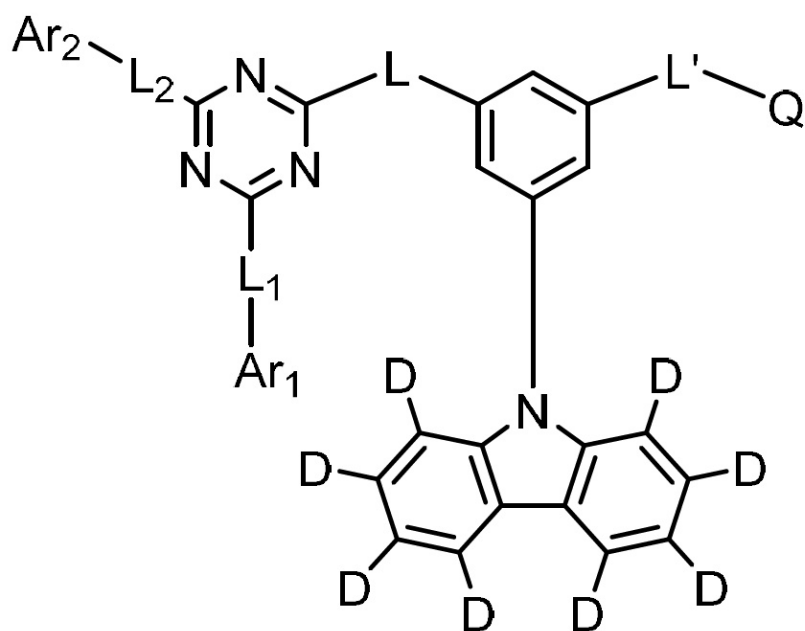
20

【 0 0 6 2】

また、前記化合物は、下記化学式 1-1 ~ 1-3 のうちのいずれか 1 つで表される：

〔化学式 1-1〕

【化 1 7】



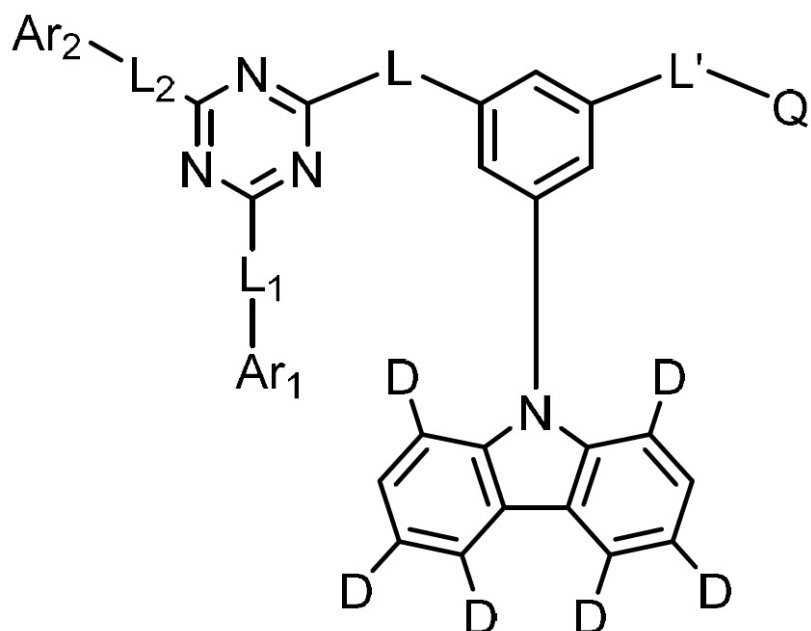
30

40

〔化学式 1-2〕

50

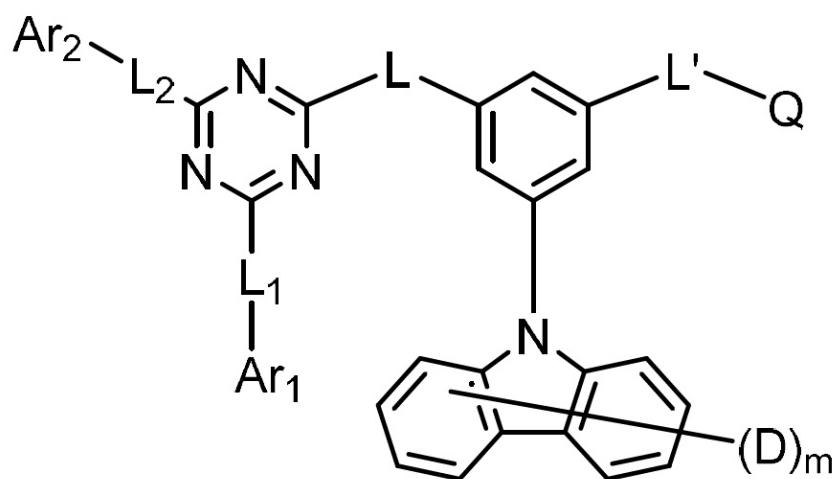
【化 1 8】



10

【化学式 1 - 3】

【化 1 9】



20

30

前記化学式 1 - 1 ~ 1 - 3 中、

D は重水素であり、

m は 1、2、3、4、5 または 7 であり、

L、 L_1 、 L_2 、 Ar_1 、 Ar_2 、 L' および Q は、前記化学式 1 で定義した通りである。

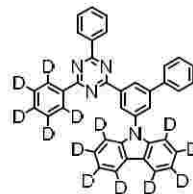
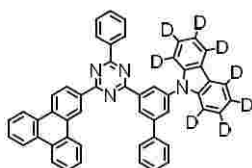
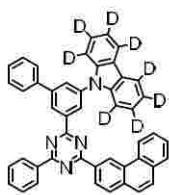
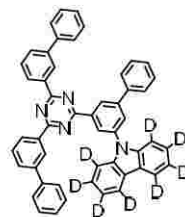
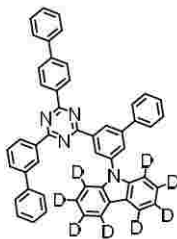
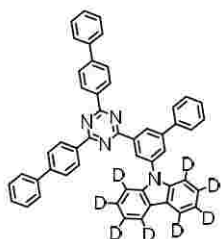
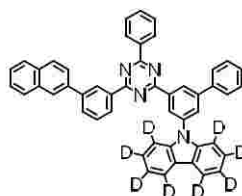
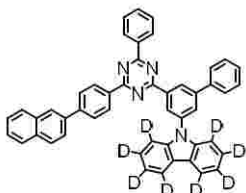
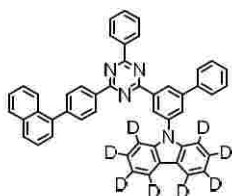
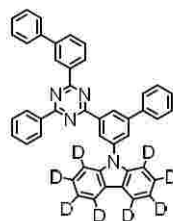
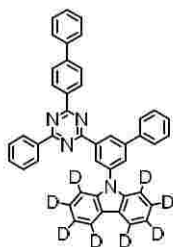
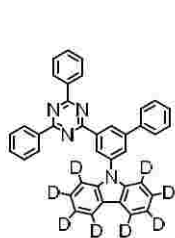
40

【0063】

一方、前記化学式 1 で表される化合物の代表的な例は以下の通りである：

50

【化 20】



10

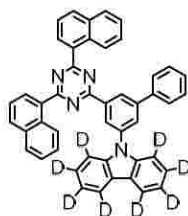
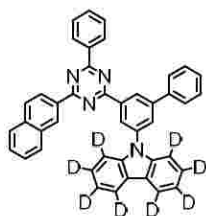
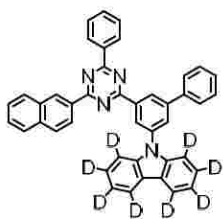
20

30

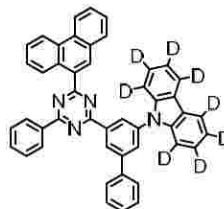
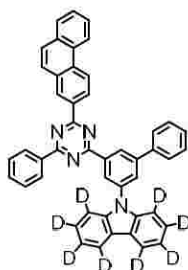
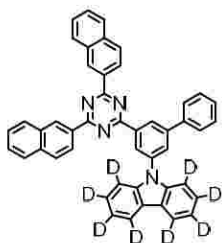
40

50

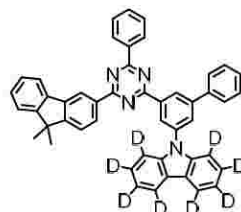
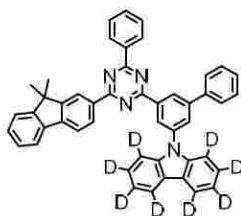
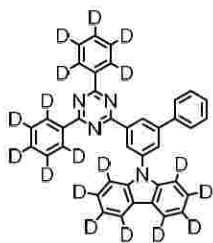
【化 2 1】



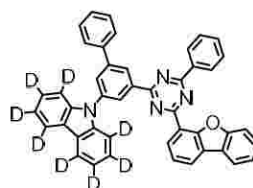
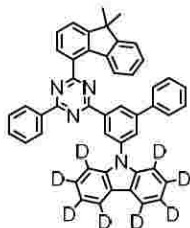
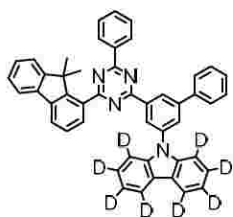
10



20



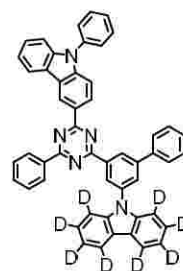
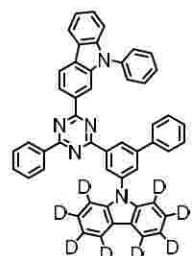
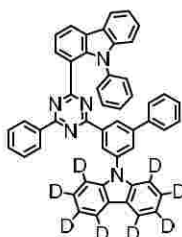
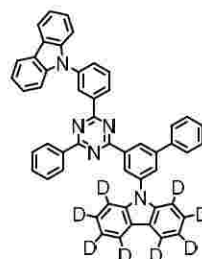
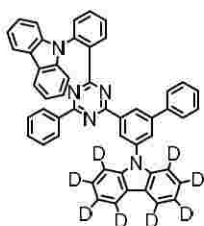
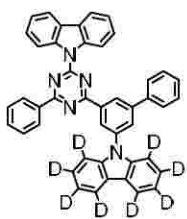
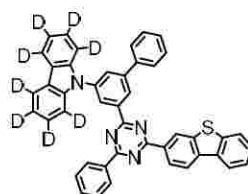
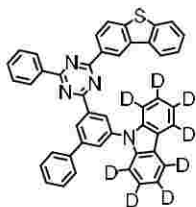
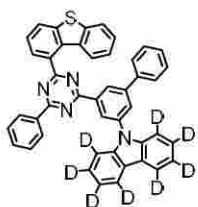
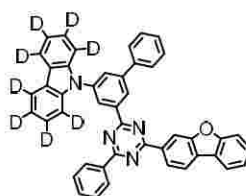
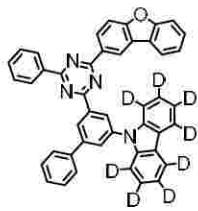
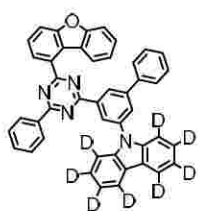
30



40

50

【化 2 2】



10

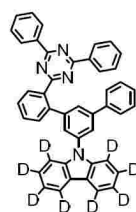
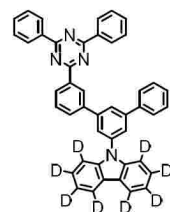
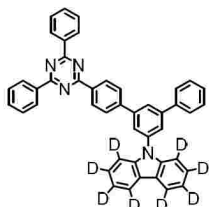
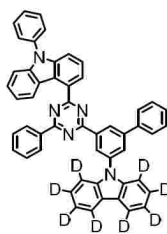
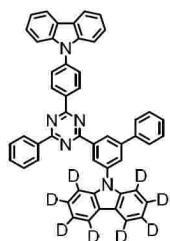
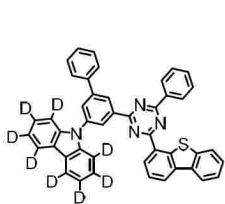
20

30

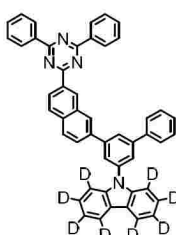
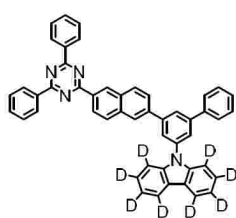
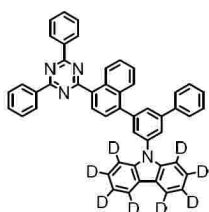
40

50

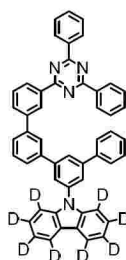
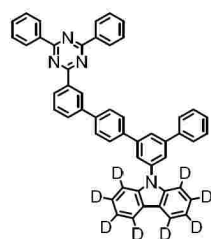
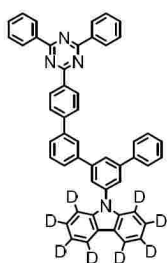
【化 2 3】



10



20

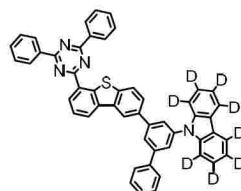
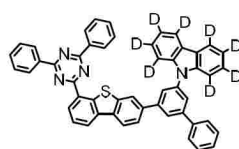
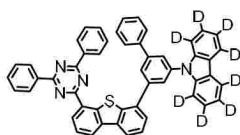
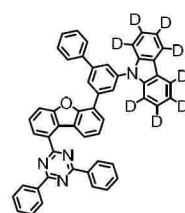
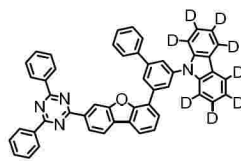
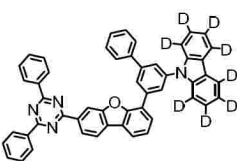
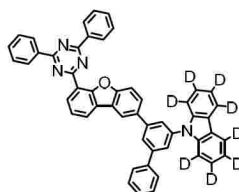
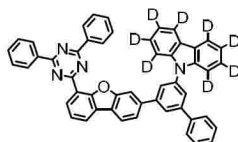
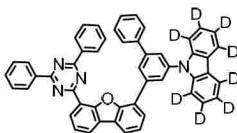
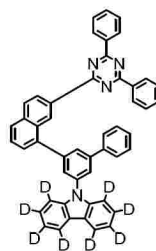
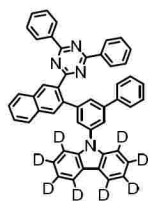
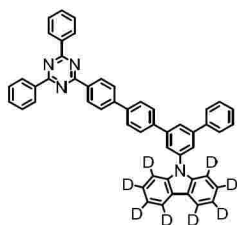


30

40

50

【化 2 4】



10

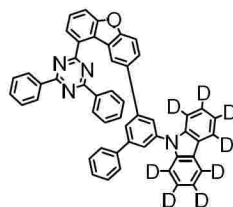
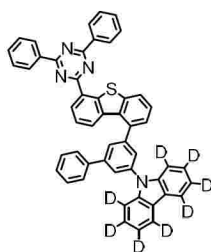
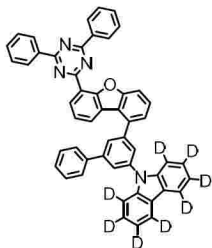
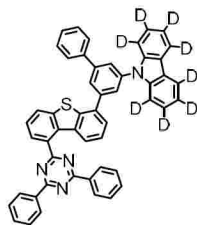
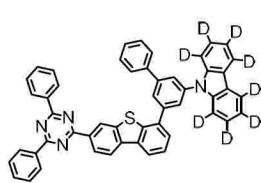
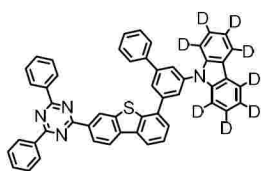
20

30

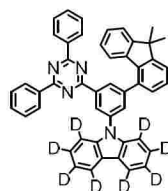
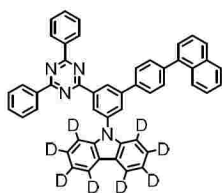
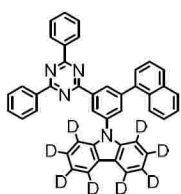
40

50

【化 2 5】



10



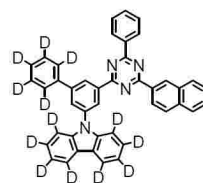
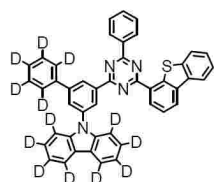
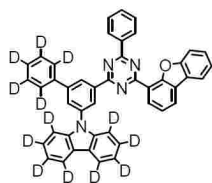
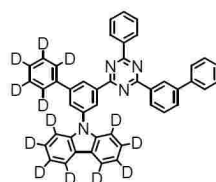
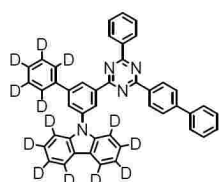
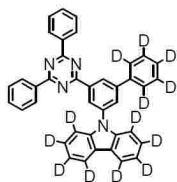
20

30

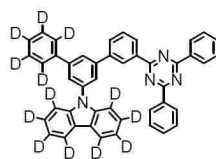
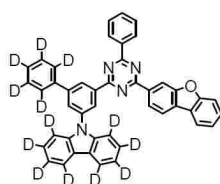
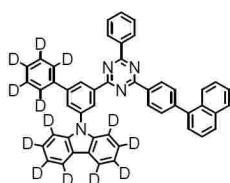
40

50

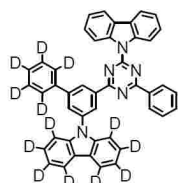
【化 2 6】



10



20

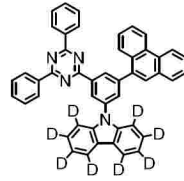
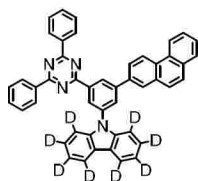
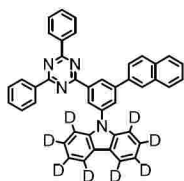
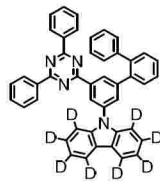
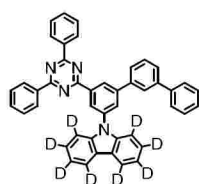
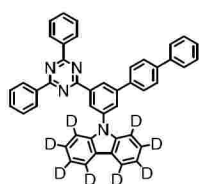


30

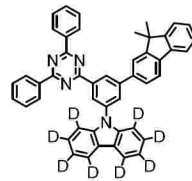
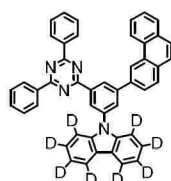
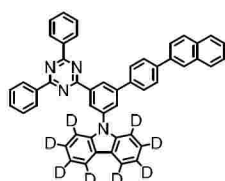
40

50

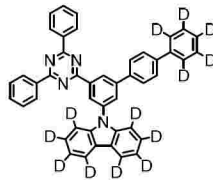
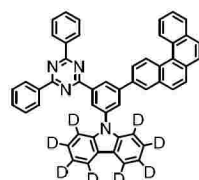
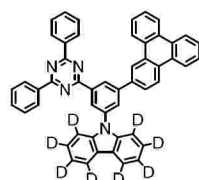
【化 2 7】



10



20

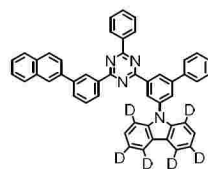
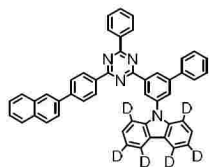
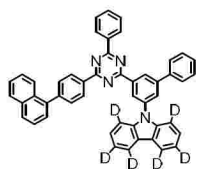
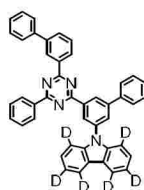
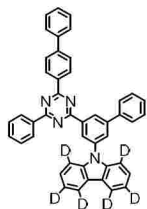
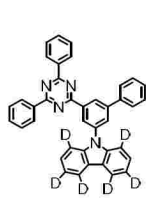


30

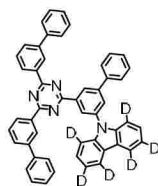
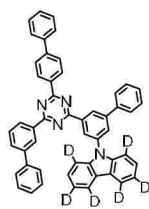
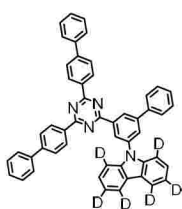
40

50

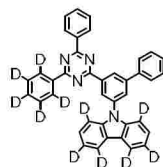
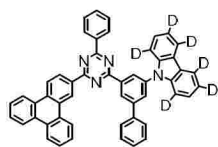
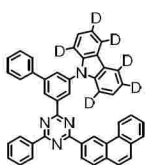
【化 2 8】



10



20

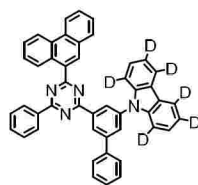
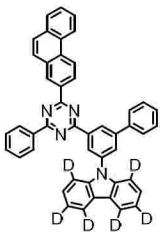
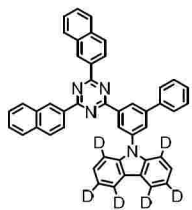
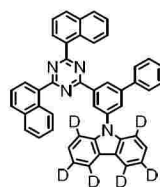
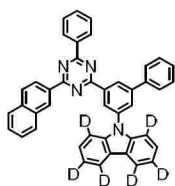
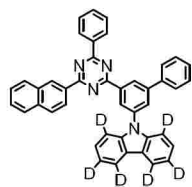


30

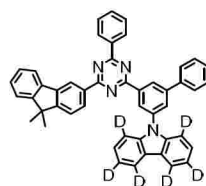
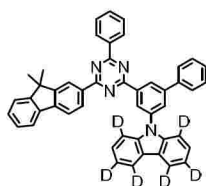
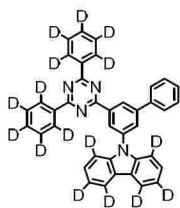
40

50

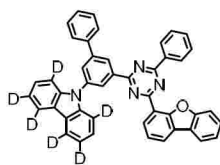
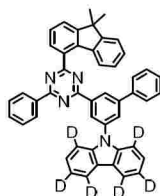
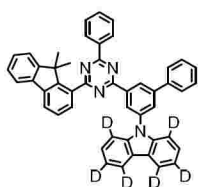
【化 2 9】



10



20

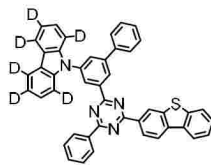
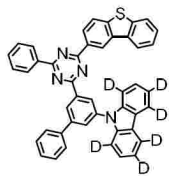
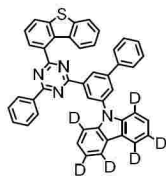
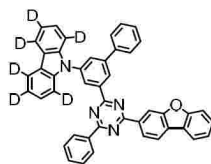
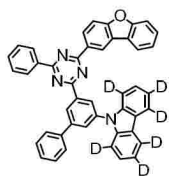
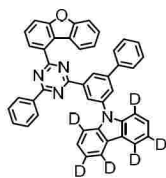


30

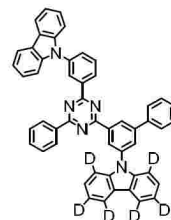
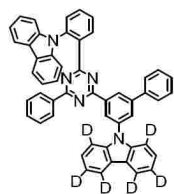
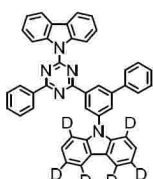
40

50

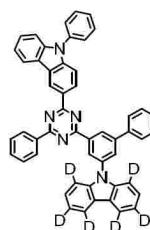
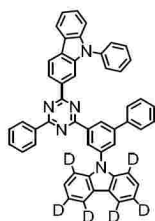
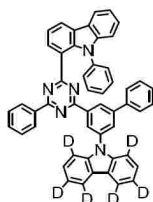
【化 3 0】



10



20

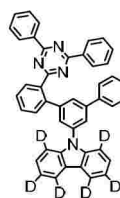
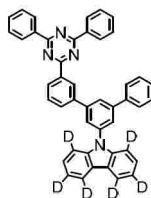
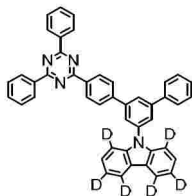
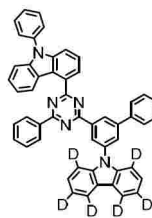
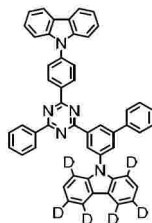
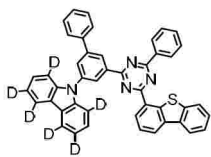


30

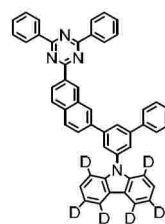
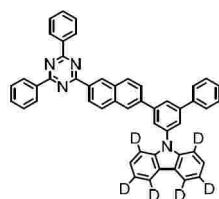
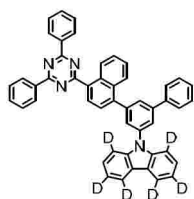
40

50

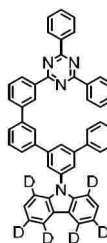
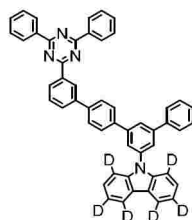
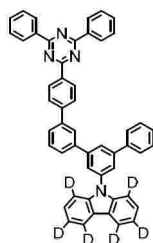
【化 3 1】



10



20

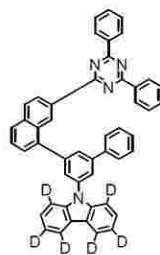
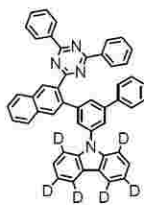
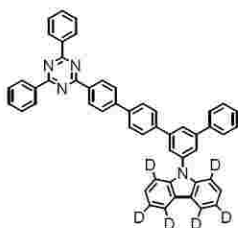


30

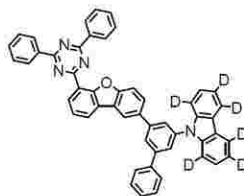
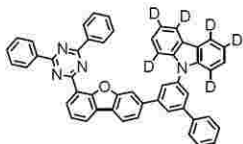
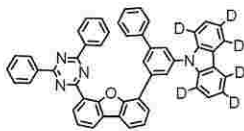
40

50

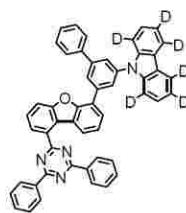
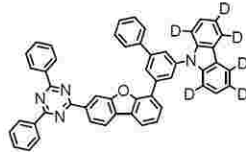
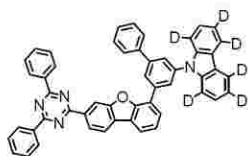
【化 3 2】



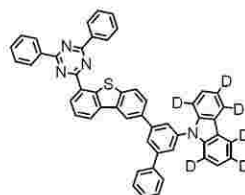
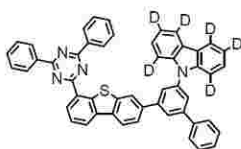
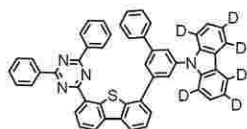
10



20



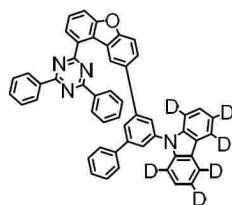
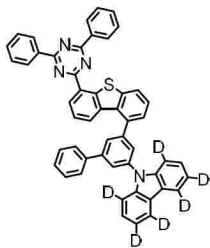
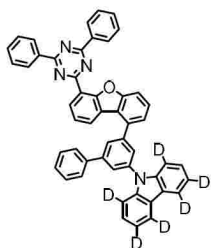
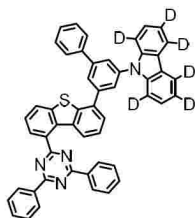
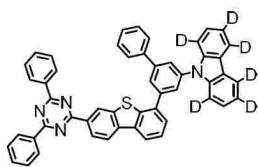
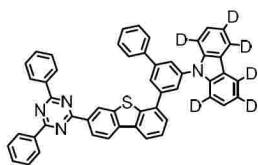
30



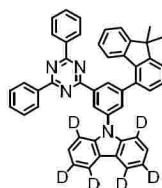
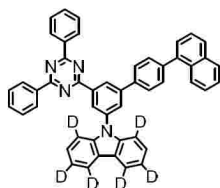
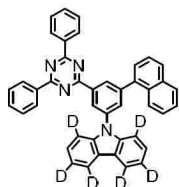
40

50

【化 3 3】



10



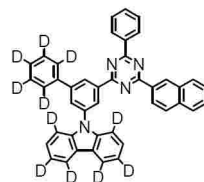
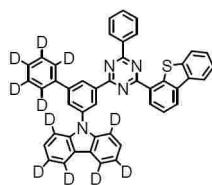
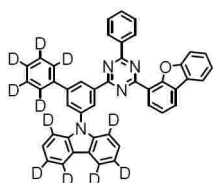
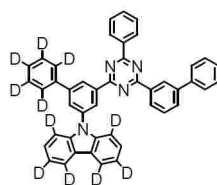
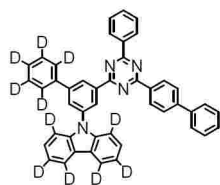
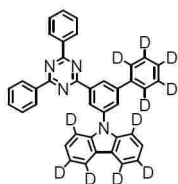
20

30

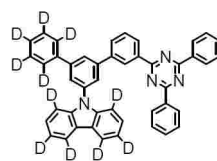
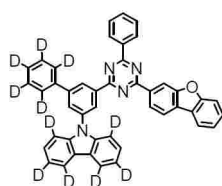
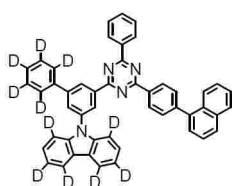
40

50

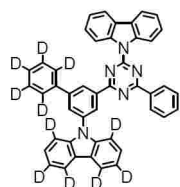
【化 3 4】



10



20

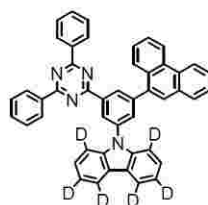
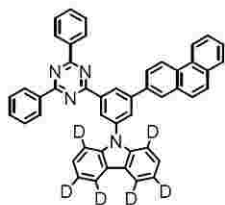
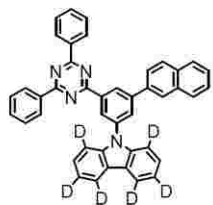
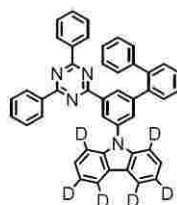
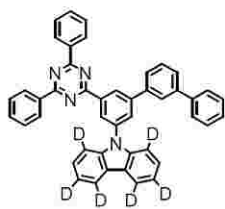
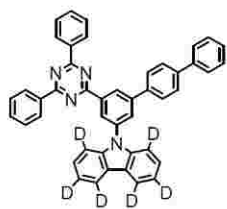


30

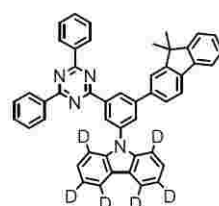
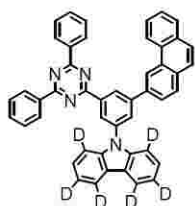
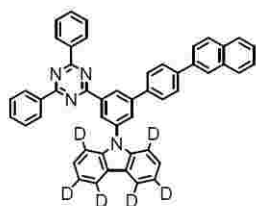
40

50

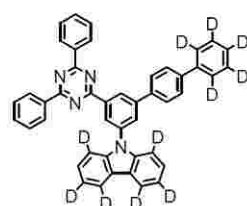
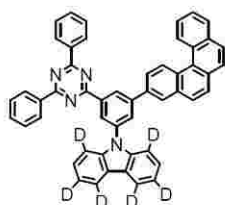
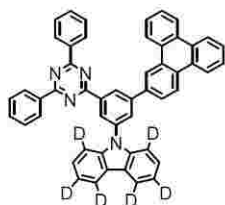
【化 3 5】



10

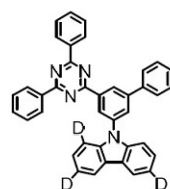
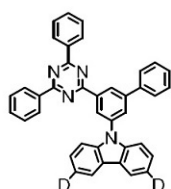
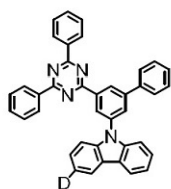


20

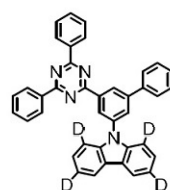
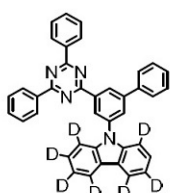
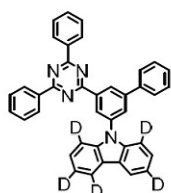


30

【化 3 6】



40



【0064】

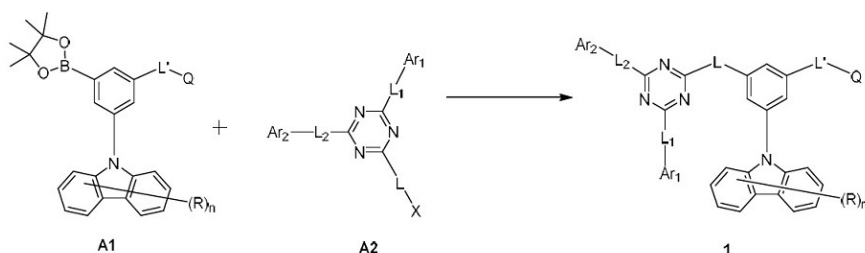
一方、前記化学式 1 で表される化合物は、一例として、下記反応式 1 のような製造方法

50

で製造することができる：

【反応式 1】

【化 3 7】



10

【0065】

前記反応式 1 中、X はハロゲンであり、好ましくは、臭素、または塩素であり、残りの置換基に対する説明は上記で定義した通りである。

【0066】

具体的には、前記化学式 1 で表される化合物は、反応物質である A 1 および A 2 の Suzuki-coupling 反応によって製造することができる。この時、Suzuki-coupling 反応は、パラジウム触媒および塩基下で行うことが好ましく、反応のための反応基は当業界で公知のものによって変更可能である。前記製造方法は、後述する製造例でさらに具体化される。

20

【0067】

(有機発光素子)

一方、本発明は、前記化学式 1 で表される化合物を含む有機発光素子を提供する。一例として、本発明は、第 1 電極と、前記第 1 電極に対向して備えられた第 2 電極と、前記第 1 電極と前記第 2 電極との間に備えられた 1 層以上の有機物層と、を含む有機発光素子であって、前記有機物層のうちの 1 層以上は、前記化学式 1 で表される化合物を含む、有機発光素子を提供する。

【0068】

本発明の有機発光素子の有機物層は、単層構造からなってもよいが、2 層以上の有機物層が積層される多層構造からなってもよい。例えば、本発明の有機発光素子は、有機物層として正孔注入層、正孔輸送層、発光層、電子輸送層、電子注入層などを含む構造を有し得る。しかし、有機発光素子の構造はこれに限定されず、より少数の有機物層を含んでもよい。

30

【0069】

一実施形態において、前記有機物層は発光層を含んでもよく、この時、前記化合物を含む有機物層は発光層であってもよい。

【0070】

他の実施形態において、前記有機物層は正孔注入層、正孔輸送層、発光層、電子輸送層および電子注入層を含んでもよく、この時、前記化合物を含む有機物層は、発光層または電子輸送層であってもよい。

40

【0071】

さらに他の実施形態において、前記有機物層は正孔注入層、正孔輸送層、電子阻止層、発光層、電子輸送層および電子注入層を含んでもよく、この時、前記化合物を含む有機物層は、発光層または電子輸送層であってもよい。

【0072】

さらに他の実施形態において、前記有機物層は正孔注入層、正孔輸送層、電子阻止層、発光層、正孔阻止層、電子輸送層および電子注入層を含んでもよく、この時、前記化合物を含む有機物層は、発光層または電子輸送層であってもよい。

【0073】

本発明の有機発光素子の有機物層は、単層構造からなってもよいが、2 層以上の有機物

50

層が積層される多層構造からなってもよい。例えば、本発明の有機発光素子は、有機物層として発光層以外に、前記第1電極と前記発光層との間の正孔注入層および正孔輸送層、および前記発光層と前記第2電極との間の電子輸送層および電子注入層をさらに含む構造を有し得る。しかし、有機発光素子の構造はこれに限定されず、より少数またはより多数の有機物層を含んでもよい。

【0074】

また、本発明に係る有機発光素子は、第1電極が正極であり、第2電極が負極である、基板上に正極、1層以上の有機物層および負極が順次積層された構造（normal type）の有機発光素子であり得る。また、本発明に係る有機発光素子は、第1電極が負極であり、第2電極が正極である、基板上に負極、1層以上の有機物層および正極が順次積層された逆方向構造（inverted type）の有機発光素子であり得る。例えば、本発明の一実施例による有機発光素子の構造は図1および図2に示されている。

10

【0075】

図1は、基板1、正極2、発光層3、および負極4からなる有機発光素子の例を示す図である。この構造において、前記化学式1で表される化合物は、発光層に含まれ得る。

【0076】

図2は、基板1、正極2、正孔注入層5、正孔輸送層6、電子阻止層7、発光層3、電子輸送層8、電子注入層9および負極4からなる有機発光素子の例を示す図である。この構造において、前記化学式1で表される化合物は発光層に含まれ得る。

20

【0077】

本発明に係る有機発光素子は、前記有機物層のうちの1層以上が前記化学式1で表される化合物を含むことを除けば、当該技術分野で知られている材料および方法で製造され得る。また、前記有機発光素子が複数の有機物層を含む場合、前記有機物層は、同一の物質または異なる物質で形成され得る。

【0078】

例えば、本発明に係る有機発光素子は、基板上に、第1電極、有機物層、および第2電極を順次積層させて製造することができる。この時、スパッタリング法（sputtering）や電子ビーム蒸発法（e-beam evaporation）などのPVD（physical Vapor Deposition）方法を用いて、基板上に金属または導電性を有する金属酸化物またはこれらの合金を蒸着させて正極を形成し、その上に正孔注入層、正孔輸送層、発光層、および電子輸送層を含む有機物層を形成した後、その上に負極として用いられる物質を蒸着させて製造することができる。この方法以外にも、基板上に、負極物質から有機物層、正極物質を順に蒸着させて有機発光素子を作ることができる。

30

【0079】

また、前記化学式1で表される化合物は、有機発光素子の製造時に真空蒸着法のみならず、溶液塗布法によって有機物層に形成され得る。ここで、溶液塗布法とは、スピンコーティング、ディップコーティング、ドクターブレードリング、インクジェットプリンティング、スクリーンプリンティング、スプレー法、ロールコーティングなどを意味するが、これらにのみ限定されるものではない。

40

【0080】

この方法以外にも、基板上に、負極物質から有機物層、正極物質を順に蒸着させて有機発光素子を製造することができる（WO2003/012890）。但し、製造方法はこれに限定されるものではない。

【0081】

一例として、前記第1電極は正極であり、前記第2電極は負極であるか、または、前記第1電極は負極であり、前記第2電極は正極である。

【0082】

前記正極物質としては、通常有機物層への正孔注入が円滑となるように仕事関数の大きい物質が好ましい。前記正極物質の具体的な例としては、バナジウム、クロム、銅、亜鉛

50

、金などの金属、またはこれらの合金；亜鉛酸化物、インジウム酸化物、インジウムスズ酸化物（ITO）、インジウム亜鉛酸化物（IZO）などの金属酸化物；ZnO：AlまたはSnO₂：Sbなどの金属と酸化物との組み合わせ；ポリ（3-メチルチオフェン）、ポリ[3, 4-（エチレン-1, 2-ジオキシ）チオフェン]（PEDOT）、ポリピロールおよびポリアニリンなどの導電性高分子などがあるが、これらにのみ限定されるものではない。

【0083】

前記負極物質としては、通常有機物層への電子注入が容易となるように仕事関数の小さい物質であることが好ましい。前記負極物質の具体的な例としては、マグネシウム、カルシウム、ナトリウム、カリウム、チタニウム、インジウム、イットリウム、リチウム、ガドリニウム、アルミニウム、銀、スズおよび鉛などの金属、またはこれらの合金；LiF／AlまたはLiO₂／Alなどの多層構造物質などがあるが、これらにのみ限定されるものではない。

【0084】

また、前記正孔注入層は電極から正孔を注入する層で、正孔注入物質としては、正孔を輸送する能力を有し、正極からの正孔注入効果、発光層または発光材料に対して優れた正孔注入効果を有し、発光層で生成された励起子の電子注入層または電子注入材料への移動を防止し、また、薄膜形成能力の優れた化合物が好ましい。正孔注入物質のHOMO（highest occupied molecular orbital）が正極物質の仕事関数と周辺有機物層のHOMOとの間であることが好ましい。正孔注入物質の具体的な例としては、金属ポルフィリン（porphyrin）、オリゴチオフェン、アリアルアミン系の有機物、ヘキサニトリルヘキサアザトリフェニレン系の有機物、キナクリドン（quinacridone）系の有機物、ペリレン（perylene）系の有機物、アントラキノンおよびポリアニリンとポリチオフェン系の導電性高分子などがあるが、これらにのみ限定されるものではない。

【0085】

また、前記正孔輸送層は、正孔注入層から正孔を受け取って発光層まで正孔を輸送する層で、正孔輸送物質としては、正極や正孔注入層から正孔輸送を受けて発光層に移し得る物質で、正孔に対する移動性の大きい物質が好適である。前記正孔輸送物質としては、アリアルアミン系の有機物、導電性高分子、および共役部分と非共役部分が共に存在するブロック共重合体などを使用することができるが、これらに限定されるものではない。

【0086】

また、前記電子阻止層は、前記正孔輸送層上に形成され、好ましくは、発光層に接して備えられ、正孔移動度を調節し、電子の過剰な移動を防止して正孔-電子間の結合確率を高めることによって有機発光素子の効率を改善する役割を果たす層を意味する。前記電子阻止層は電子阻止物質を含み、このような電子阻止物質の例としてはアリアルアミン系の有機物などを使用することができるが、これに限定されるものではない。

【0087】

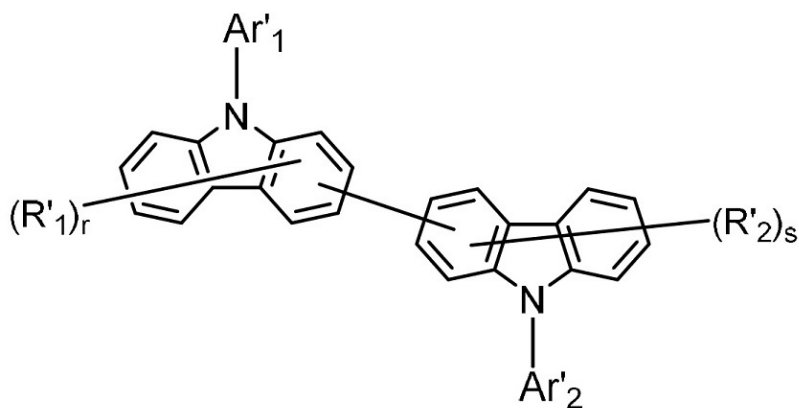
また、前記発光層は、ホスト材料およびドーパント材料を含むことができる。このようなドーパント材料としては、前記化学式1で表される化合物を使用することができる。また、ホスト材料としては、前記化学式1で表される化合物以外に、縮合芳香族環誘導体またはヘテロ環含有化合物などをさらに含むことができる。具体的には、縮合芳香族環誘導体としては、アントラセン誘導体、ピレン誘導体、ナフタレン誘導体、ペンタセン誘導体、フェナントレン化合物、フルオランテン化合物などがあり、ヘテロ環含有化合物としては、カルバゾール誘導体、ジベンゾフラン誘導体、ラダー型フラン化合物、ピリミジン誘導体などがあるが、これらに限定されない。

【0088】

一実施形態において、前記発光層は、前記化学式1で表される化合物以外に、下記化学式2で表される化合物をさらに含むことができる：

〔化学式2〕

【化 3 8】



10

前記化学式 2 中、

Ar'_1 および Ar'_2 はそれぞれ独立して、置換または非置換の炭素数 6 ～ 60 のアリール；または置換または非置換の N、O および S のうちの 1 個以上のヘテロ原子を含む炭素数 2 ～ 60 のヘテロアリールであり、

R'_1 および R'_2 はそれぞれ独立して、水素；重水素；炭素数 1 ～ 60 のアルキル；炭素数 6 ～ 60 のアリール；または N、O および S のうちの 1 個以上のヘテロ原子を含む炭素数 2 ～ 60 のヘテロアリールであり、

20

r および s はそれぞれ独立して、0 ～ 7 の整数である。

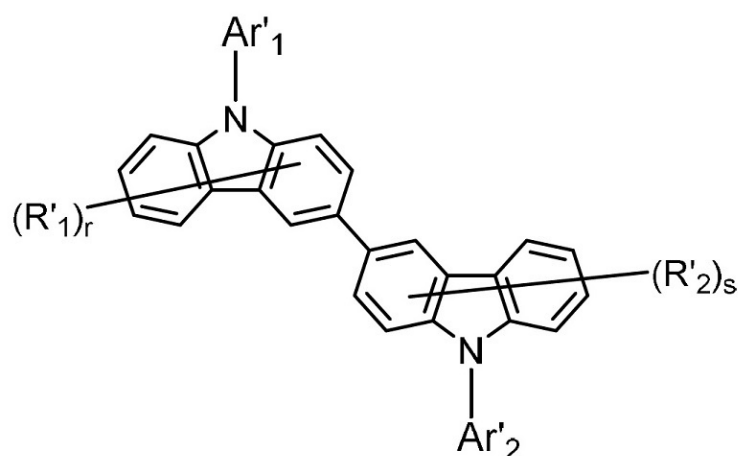
前記有機発光素子が発光層のホスト物質として正孔をドーパント物質に効率的に伝達できる前記化学式 2 で表される化合物をさらに含む場合、電子輸送能力に優れた前記化学式 1 で表される化合物と共に発光層内での正孔と電子の再結合確率が高くなり、有機発光素子の効率および寿命を向上させることができる。

【0089】

一実施形態によれば、前記化学式 2 で表される化合物は、下記化学式 2' で表される：

〔化学式 2'〕

【化 3 9】



30

前記化学式 2' 中、

Ar'_1 、 Ar'_2 、 R'_1 、 R'_2 、 r および s は、前記化学式 2 で定義した通りである。

【0090】

また、前記化学式 2 中、 Ar'_1 および Ar'_2 はそれぞれ独立して、炭素数 6 ～ 20 のアリール、または N、O および S のうちの 1 個のヘテロ原子を含む炭素数 2 ～ 20 のヘテロアリールであり、

ここで、 Ar'_1 は非置換であるか、または重水素および炭素数 6 ～ 20 のアリールで構成される群より選択される 1 個以上の置換基で置換され得る。

50

【0091】

例えば、 $A r'_{11}$ および $A r'_{12}$ はそれぞれ独立して、フェニル、ビフェニリル、ターフェニリル、ナフチル、ジベンゾフラニル、またはジベンゾチオフェニルであり、

ここで、 $A r'_{11}$ は非置換であるか、または重水素および炭素数6～20のアリールで構成される群より選択される1個以上の置換基で置換され得る。

【0092】

この時、 $A r'_{11}$ および $A r'_{12}$ のうちの少なくとも1つはフェニルまたはビフェニリルであり得る。

【0093】

また、前記化学式2中、 R'_{11} および R'_{12} はそれぞれ独立して、水素、重水素、または炭素数6～20のアリールであり得る。

10

【0094】

例えば、 R'_{11} および R'_{12} はそれぞれ独立して、水素、重水素、またはフェニルであり得るが、これらに限定されるものではない。

【0095】

また、 R'_{11} および R'_{12} の個数をそれぞれ示す、 r および s はそれぞれ独立して、0、1、2、3、4、5、6または7である。

【0096】

より具体的には、 r および s はそれぞれ独立して、0、1または7である。

【0097】

例えば、 $r + s$ は0または1である。

20

【0098】

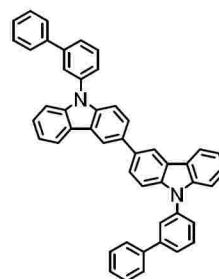
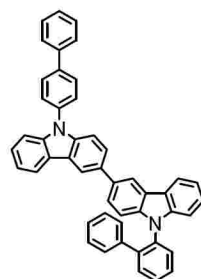
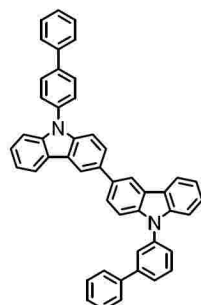
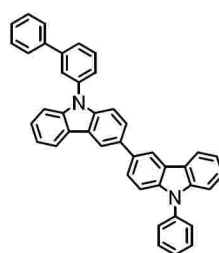
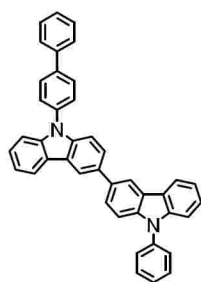
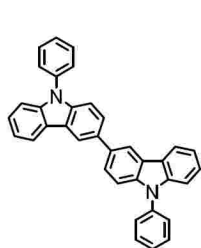
前記化学式2で表される化合物の代表的な例は以下の通りである：

30

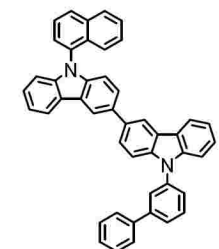
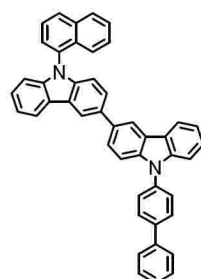
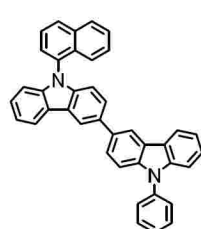
40

50

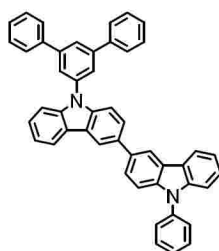
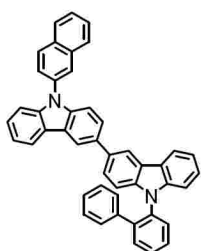
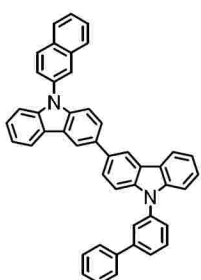
【化 4 0】



10



20

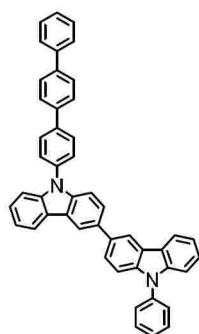
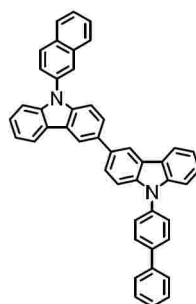
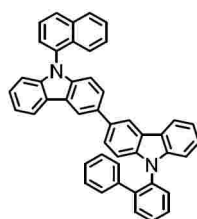
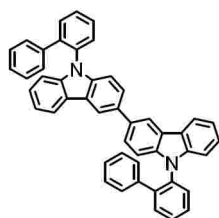
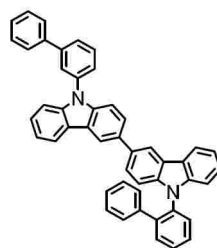
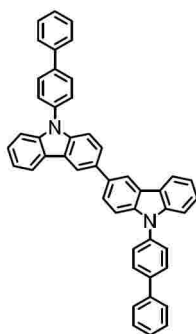
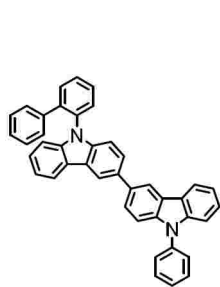


30

40

50

【化 4 1】



10

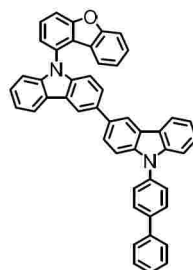
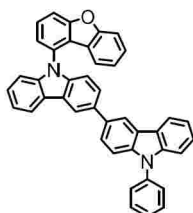
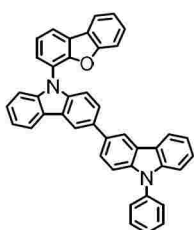
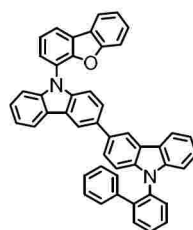
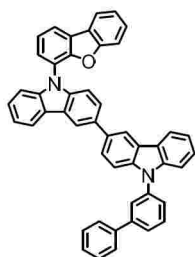
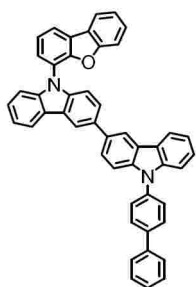
20

30

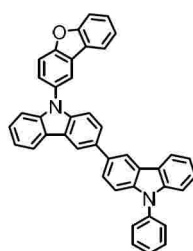
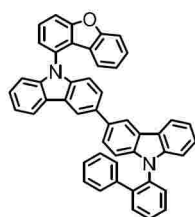
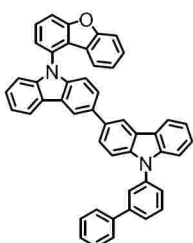
40

50

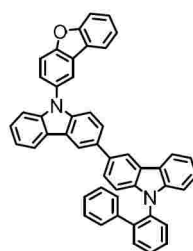
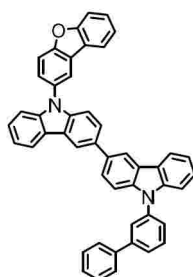
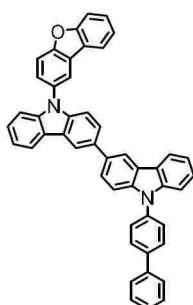
【化 4 2】



10



20

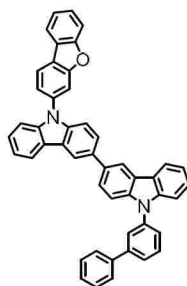
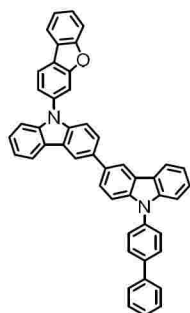
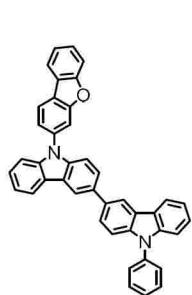


30

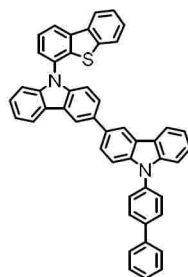
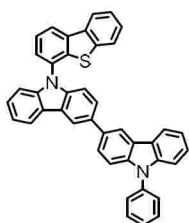
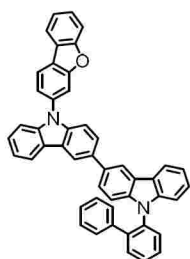
40

50

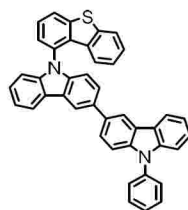
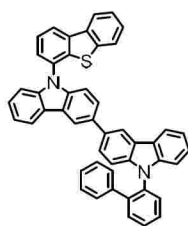
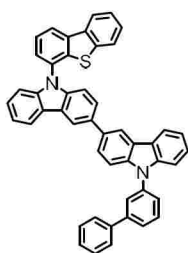
【化 4 3】



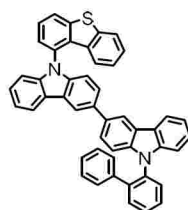
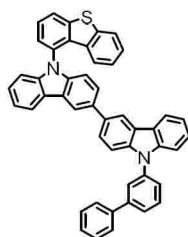
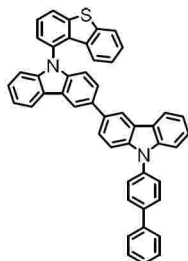
10



20



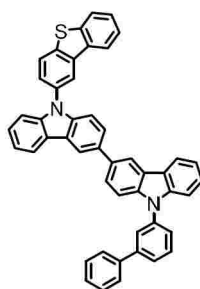
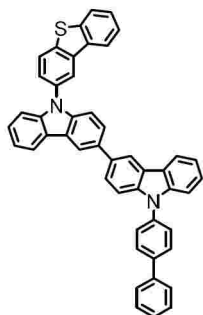
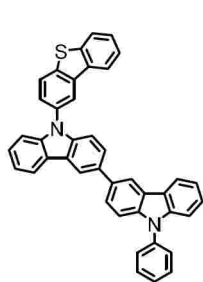
30



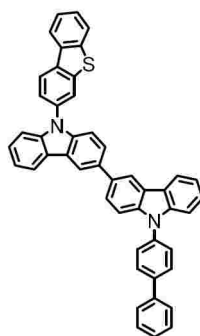
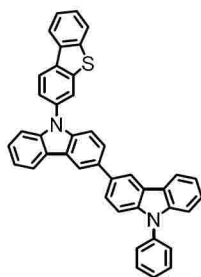
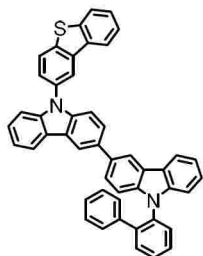
40

50

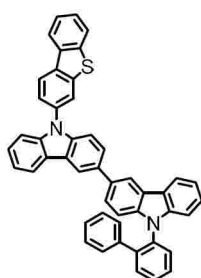
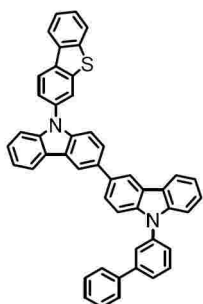
【化 4 4】



10



20

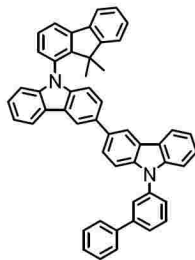
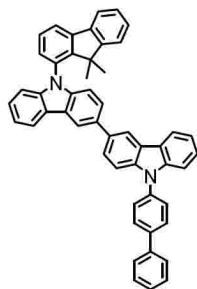
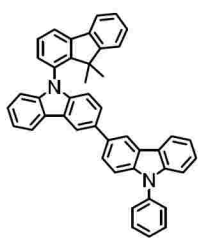


30

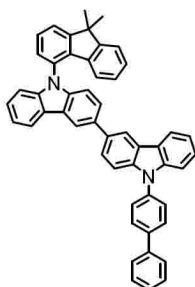
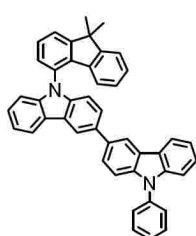
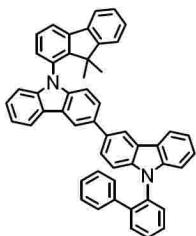
40

50

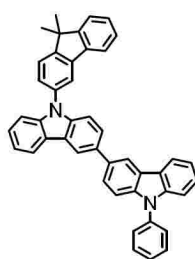
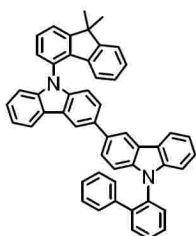
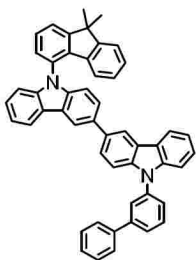
【化 4 5】



10



20

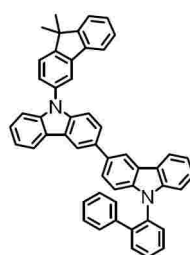
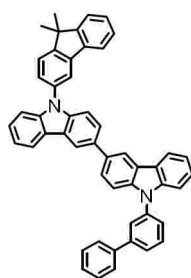
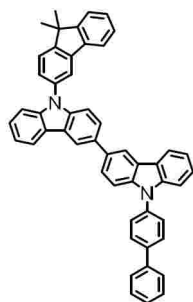


30

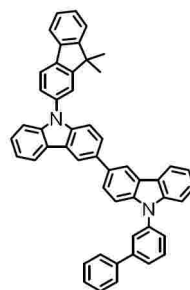
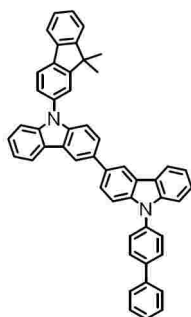
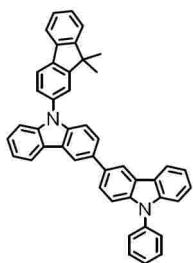
40

50

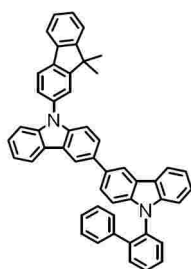
【化 4 6】



10



20

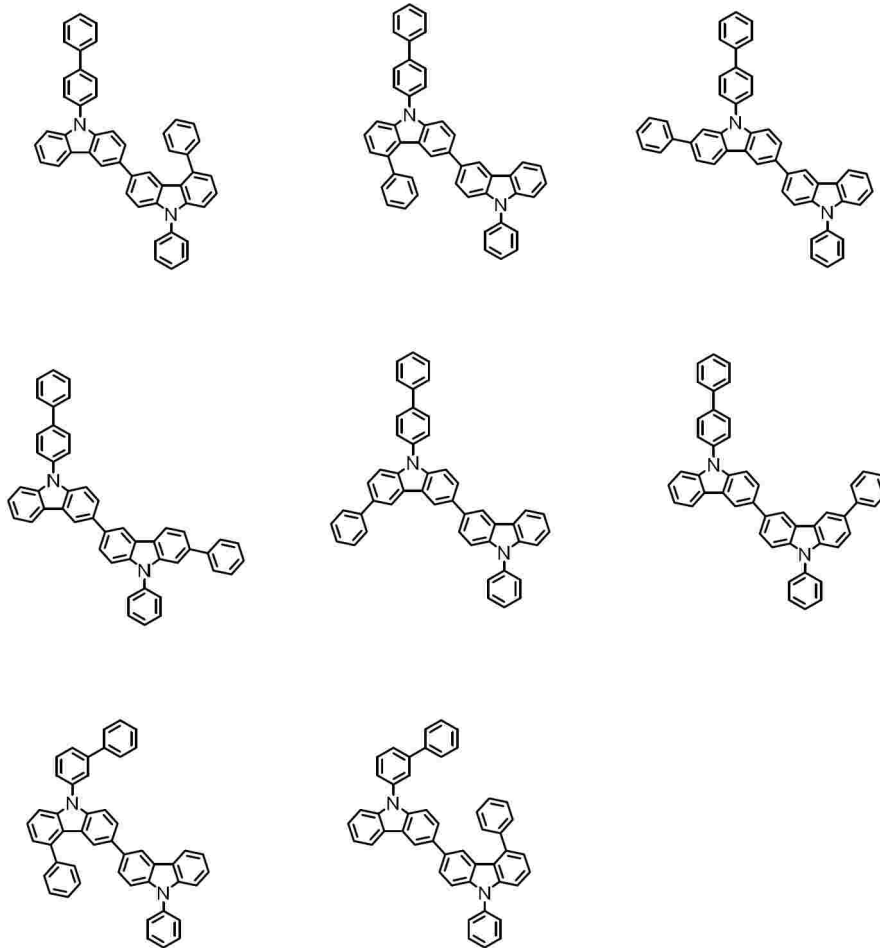


30

40

50

【化 4 7】



【0099】

このような2種のホスト物質である前記化学式1で表される化合物と前記化学式2で表される化合物は、発光層内に10:90~90:10の重量比、一例として50:50の重量比で含まれる。

【0100】

また、ドーパント材料としては、芳香族アミン誘導体、スチリルアミン化合物、ホウ素錯体、フルオランテン化合物、金属錯体などがある。具体的には、芳香族アミン誘導体としては、置換または非置換のアリールアミノ基を有する縮合芳香族環誘導体であって、アリールアミノ基を有するピレン、アントラセン、クリセン、ペリフランテンなどがあり、スチリルアミン化合物としては、置換または非置換のアリールアミンに少なくとも1個のアリールビニル基が置換されている化合物で、アリール基、シリル基、アルキル基、シクロアルキル基、およびアリールアミノ基からなる群より1または2以上選択される置換基が置換または非置換される。具体的には、スチリルアミン、スチリルジアミン、スチリルトリアミン、スチリルテトラアミンなどがあるが、これらに限定されない。また、金属錯体としては、イリジウム錯体、白金錯体などがあるが、これらに限定されない。

【0101】

また、前記正孔阻止層は発光層上に形成され、好ましくは発光層に接して備えられ、電子移動度を調節し、正孔の過剰な移動を防止して正孔-電子間の結合確率を高めることによって有機発光素子の効率を改善する役割を果たす層を意味する。前記正孔阻止層は正孔阻止物質を含み、このような正孔阻止物質の例としては、トリアジンを含むアジン類誘導体；トリアゾール誘導体；オキサジアゾール誘導体；フェナントロリン誘導体；ホスフィンオキシド誘導体などの電子吸引基が導入された化合物を使用することができるが、これらに限定されるものではない。

【0102】

また、前記電子輸送層は電子注入層から受け取った電子を発光層まで輸送する役割を果たす層で、発光層または正孔阻止層上に形成される。前記電子輸送層は電子輸送物質を含み、このような電子輸送物質としては、電子に対する移動性の大きい物質が好適である。具体的な電子輸送物質の例としては、8-ヒドロキシキノリンのAl錯体；Alq₃を含む錯体；有機ラジカル化合物；ヒドロキシフラボン-金属錯体；トリアジン誘導体などがあるが、これらにのみ限定されるものではない。または、それらとフルオレノン、アントラキノジメタン、ジフェノキノン、チオピランジオキシド、オキサゾール、オキサジアゾール、トリアゾール、イミダゾール、ペリレンテトラカルボン酸、フルオレニリデンメタン、アントロンなどとそれらの誘導体、金属錯体化合物、または含窒素5員環誘導体などを電子輸送物質と一緒に使用することもできる。

10

【0103】

また、電子注入層は、電極から電子を注入する役割を果たす層で、前記電子輸送層上に形成される。前記電子注入層に含まれる電子注入物質としては、LiF、NaCl、CsF、Li₂O、BaO、フルオレノン、アントラキノジメタン、ジフェノキノン、チオピランジオキシド、オキサゾール、オキサジアゾール、トリアゾール、イミダゾール、ペリレンテトラカルボン酸、フルオレニリデンメタン、アントロンなどとそれらの誘導体、金属錯体化合物、および含窒素5員環誘導体などを使用することができるが、これらに限定されない。

【0104】

ここで、前記金属錯体化合物としては、8-ヒドロキシキノリナトリウム、ビス(8-ヒドロキシキノリナト)亜鉛、ビス(8-ヒドロキシキノリナト)銅、ビス(8-ヒドロキシキノリナト)マンガン、トリス(8-ヒドロキシキノリナト)アルミニウム、トリス(2-メチル-8-ヒドロキシキノリナト)アルミニウム、トリス(8-ヒドロキシキノリナト)ガリウム、ビス(10-ヒドロキシベンゾ[h]キノリナト)ベリリウム、ビス(10-ヒドロキシベンゾ[h]キノリナト)亜鉛、ビス(2-メチル-8-ヒドロキシキノリナト)クロロガリウム、ビス(2-メチル-8-ヒドロキシキノリナト)(o-クレゾラト)ガリウム、ビス(2-メチル-8-ヒドロキシキノリナト)(1-ナフトラト)アルミニウム、ビス(2-メチル-8-ヒドロキシキノリナト)(2-ナフトラト)ガリウムなどがあるが、これらに限定されない。

20

【0105】

本発明に係る有機発光素子は、背面発光(bottom emission)素子、前面発光(top emission)素子、または両面発光素子であり得、特に、相対的に高い発光効率が求められる背面発光素子であり得る。

【0106】

また、前記化学式1で表される化合物は、有機発光素子以外にも、有機太陽電池または有機トランジスターに含まれ得る。

【0107】

以下、前記化学式1で表される化合物およびこれを含む有機発光素子の製造を実施例により具体的に説明する。しかし、下記の実施例は本発明を例示したものに過ぎず、本発明の範囲がこれらによって限定されるものではない。

30

40

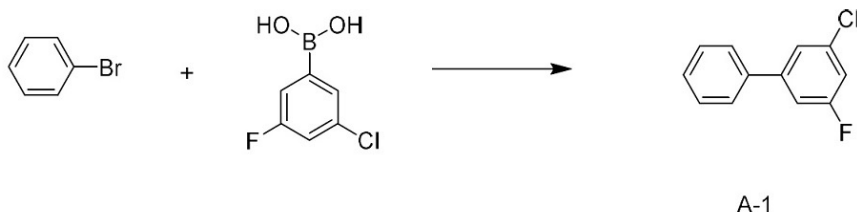
【0108】

製造例1：化合物A-3の製造

1) 化合物A-1の製造

50

【化 4 8】



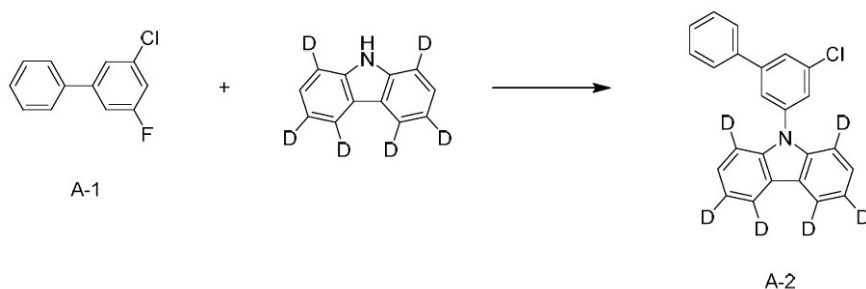
【0109】

窒素雰囲気下でBromobenzene (100 g、641.2 mmol) と (3-chloro-5-fluorophenyl) boronic acid (111.6 g、641.2 mmol) をテトラヒドロフラン2000 mLに入れて攪拌および還流した。その後、炭酸カリウム (265.9 g、1923.6 mmol) を水266 mLに溶かして投入して十分に攪拌した後、テトラキストリフェニルーホスフィノパラジウム (22.2 g、19.2 mmol) を投入した。1時間反応後、常温に冷却した後、有機層と水層を分離した後、有機層を蒸留した。これを再びクロロホルム2642 mLに投入して溶かし、水で2回洗浄した後、有機層を分離して、無水硫酸マグネシウムを入れて攪拌した後、ろ過して濾液を減圧蒸留した。濃縮した化合物をクロロホルムと酢酸エチルで再結晶して灰色の固体化合物A-1 (80.6 g、61%、MS: $[M+H]^+ = 207$) を製造した。

【0110】

2) 化合物A-2の製造

【化 4 9】



【0111】

窒素雰囲気下でA-1 (100 g、485.4 mmol) と9H-carbazole-1,3,4,5,6,8-d6 (84 g、485.4 mmol) をキシレン2000 mLに入れて攪拌および還流した。その後、ナトリウムtert-ブトキシド (140 g、1456.1 mmol) を投入して十分に攪拌した後、ビス(トリ-tert-ブチルホスフィン)パラジウム (7.4 g、14.6 mmol) を投入した。4時間反応後、常温に冷却した後、生成された固体をろ過した。固体をクロロホルム5229 mLに投入して溶かし、水で2回洗浄した後、有機層を分離して、無水硫酸マグネシウムを入れて攪拌した後、ろ過して濾液を減圧蒸留した。濃縮した化合物をクロロホルムと酢酸エチルを用いてシリカカラムで精製して白色の固体化合物A-2 (111.6 g、64%、MS: $[M+H]^+ = 360.1$) を製造した。

【0112】

3) 化合物A-3の製造

10

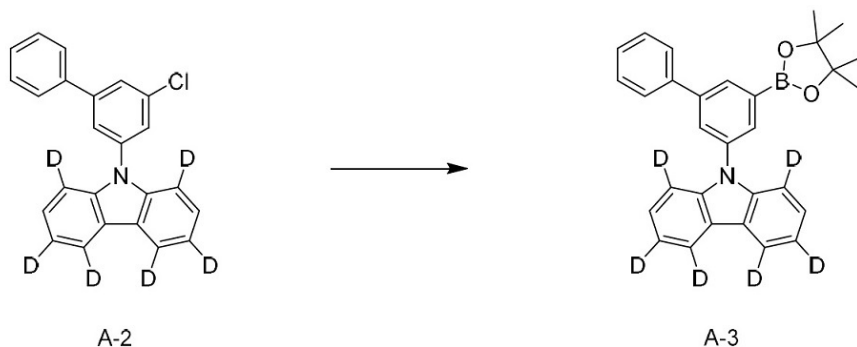
20

30

40

50

【化50】



10

【0113】

窒素雰囲気下でA-2 (50 g、139.2 mmol) とビス(ピナコラート)ジボロン (38.9 g、153.1 mmol) を1,4-ジオキサン1000 mLに入れて攪拌および還流した。その後、酢酸カリウム (40.1 g、417.7 mmol) を投入して十分に攪拌した後、ジベンジリデンアセトンパラジウム (2.4 g、4.2 mmol) およびトリシクロヘキシルホスフィン (2.3 g、8.4 mmol) を投入した。5時間反応後、常温に冷却した後、有機層をろ過処理して塩を除去した後、ろ過された有機層を蒸留した。これを再びクロロホルム628 mLに投入して溶かし、水で2回洗浄した後、有機層を分離して、無水硫酸マグネシウムを入れて攪拌した後、ろ過して濾液を減圧蒸留した。濃縮した化合物をクロロホルムとエタノールで再結晶して灰色の固体化合物A-3 (51.5 g、82%、MS: $[M+H]^+ = 452.3$) を製造した。

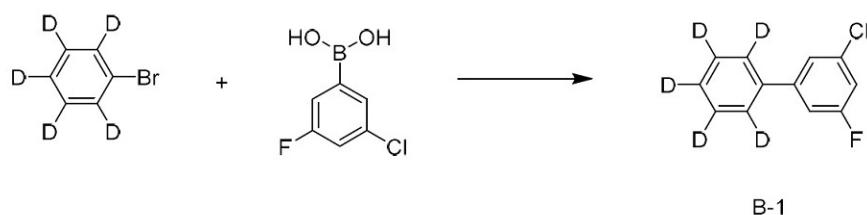
20

【0114】

製造例2：化合物B-3の製造

1) 化合物B-1の製造

【化51】



30

【0115】

窒素雰囲気下で1-bromobenzene-2,3,4,5,6-d5 (100 g、621.2 mmol) と(3-chloro-5-fluorophenyl)boronic acid (108.1 g、621.2 mmol) をテトラヒドロフラン2000 mLに入れて攪拌および還流した。その後、炭酸カリウム (257.6 g、1863.5 mmol) を水258 mLに溶かして投入して十分に攪拌した後、テトラキストリフェニルホスフィノパラジウム (21.5 g、18.6 mmol) を投入した。1時間反応後、常温に冷却した後、有機層と水層を分離した後、有機層を蒸留した。これを再びクロロホルム2622 mLに投入して溶かし、水で2回洗浄した後、有機層を分離して、無水硫酸マグネシウムを入れて攪拌した後、ろ過して濾液を減圧蒸留した。濃縮した化合物をクロロホルムと酢酸エチルで再結晶して灰色の固体化合物B-1 (80 g、61%、MS: $[M+H]^+ = 212.1$) を製造した。

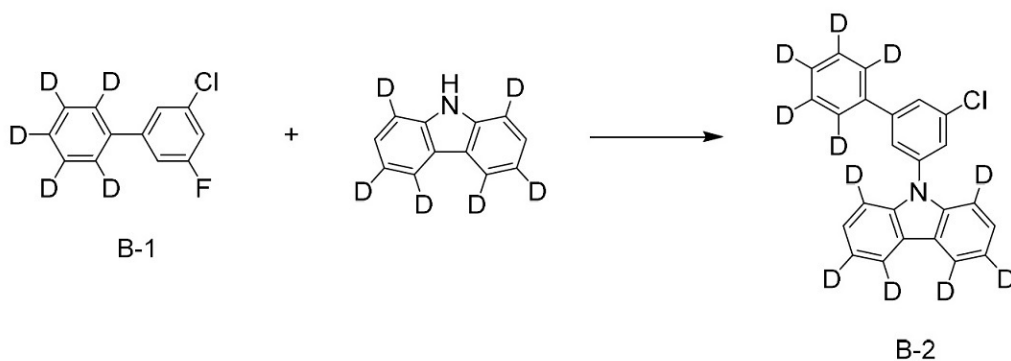
40

【0116】

2) 化合物B-2の製造

50

【化52】



10

【0117】

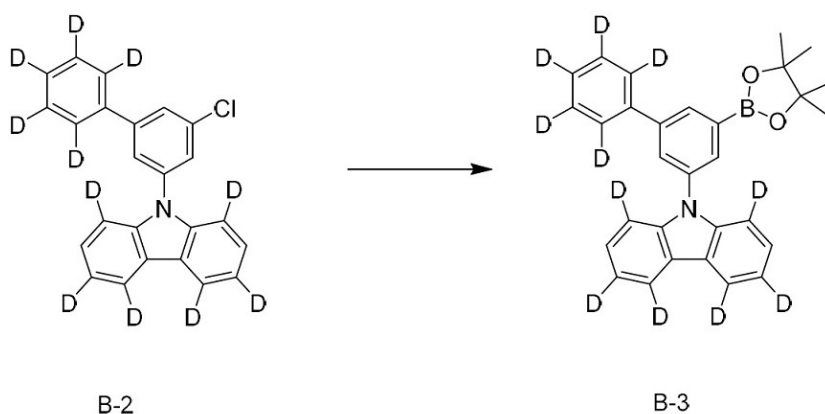
窒素雰囲気下でB-1 (100 g、473.8 mmol)と9H-carbazole-1,3,4,5,6,8-d6 (82 g、473.8 mmol)をキシレン2000 mLに入れて攪拌および還流した。その後、ナトリウムtert-ブトキシド (136.6 g、1421.4 mmol)を投入して十分に攪拌した後、ビス(トリ-tert-ブチルホスフィン)パラジウム (7.3 g、14.2 mmol)を投入した。1時間反応後、常温に冷却した後、生成された固体をろ過した。固体をクロロホルム5176 mLに投入して溶かし、水で2回洗浄した後、有機層を分離して、無水硫酸マグネシウムを入れて攪拌した後、ろ過して濾液を減圧蒸留した。濃縮した化合物をクロロホルムと酢酸エチルを用いてシリカカラムで精製して白色の固体化合物B-2 (103.5 g、60%、MS: $[M+H]^+ = 365.2$)を製造した。

20

【0118】

3) 化合物B-3の製造

【化53】



30

【0119】

窒素雰囲気下でB-2 (50 g、137.3 mmol)とビス(ピナコラート)ジボロン (38.4 g、151 mmol)を1,4-ジオキサン1000 mLに入れて攪拌および還流した。その後、酢酸カリウム (39.6 g、411.9 mmol)を投入して十分に攪拌した後、ジベンジリデンアセトンパラジウム (2.4 g、4.1 mmol)およびトリシクロヘキシルホスフィン (2.3 g、8.2 mmol)を投入した。4時間反応後、常温に冷却した後、有機層をろ過処理して塩を除去した後、ろ過された有機層を蒸留した。これを再びクロロホルム626 mLに投入して溶かし、水で2回洗浄した後、有機層を分離して、無水硫酸マグネシウムを入れて攪拌した後、ろ過して濾液を減圧蒸留した。濃縮した化合物をクロロホルムとエタノールで再結晶して灰色の固体化合物B-3 (32 g、51%、MS: $[M+H]^+ = 457.3$)を製造した。

40

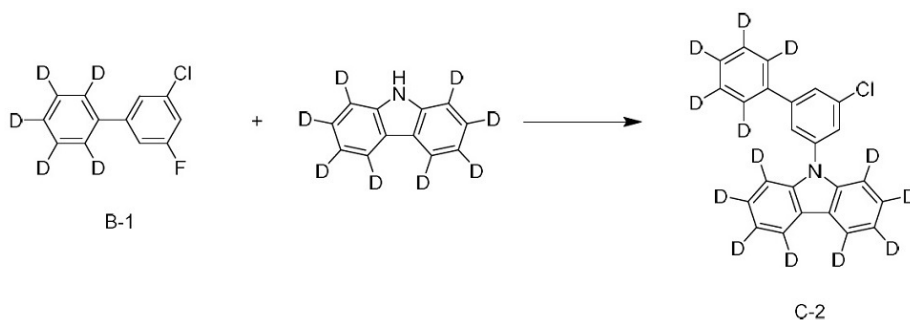
【0120】

50

製造例 3：化合物 C-3 の製造

1) 化合物 C-2 の製造

【化 5 4】



10

【0121】

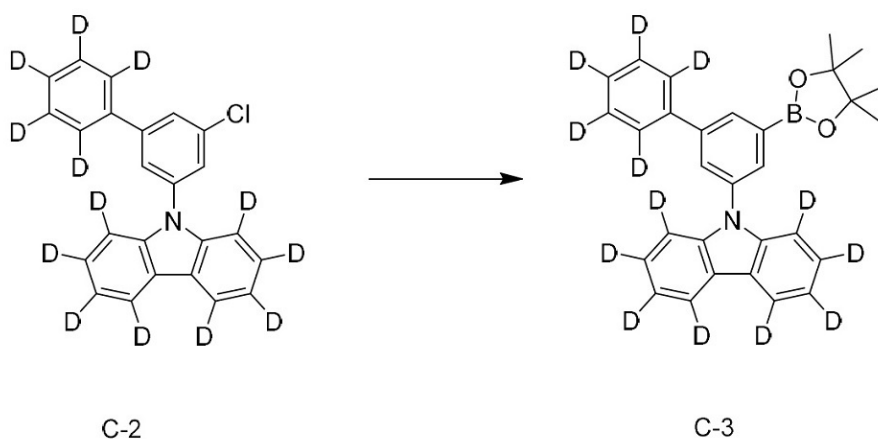
窒素雰囲気下で B-1 (100 g、473.8 mmol) と 9H-carbazole-1,2,3,4,5,6,7,8-d₈ (83 g、473.8 mmol) をキシレン 2000 mL に入れて攪拌および還流した。その後、ナトリウム *tert*-ブトキシド (136.6 g、1421.4 mmol) を投入して十分に攪拌した後、ビス(トリ-*tert*-ブチルホスフィン)パラジウム (7.3 g、14.2 mmol) を投入した。5 時間反応後、常温に冷却した後、生成された固体をろ過した。固体をクロロホルム 520 mL に投入して溶かし、水で 2 回洗浄した後、有機層を分離して、無水硫酸マグネシウムを入れて攪拌した後、ろ過して濾液を減圧蒸留した。濃縮した化合物をクロロホルムと酢酸エチルを用いてシリカカラムで精製して白色の固体化合物 C-2 (131.9 g、76%、MS: [M+H]⁺ = 367.2) を製造した。

20

【0122】

2) 化合物 C-3 の製造

【化 5 5】



30

【0123】

窒素雰囲気下で C-2 (50 g、137.3 mmol) とビス(ピナコラート)ジボロン (38.4 g、151 mmol) を 1,4-ジオキサン 1000 mL に入れて攪拌および還流した。その後、酢酸カリウム (39.6 g、411.9 mmol) を投入して十分に攪拌した後、ジベンジリデンアセトンパラジウム (2.4 g、4.1 mmol) およびトリシクロヘキシルホスフィン (2.3 g、8.2 mmol) を投入した。5 時間反応後、常温に冷却した後、有機層をろ過処理して塩を除去した後、ろ過された有機層を蒸留した。これを再びクロロホルム 626 mL に投入して溶かし、水で 2 回洗浄した後、有機層を分離して、無水硫酸マグネシウムを入れて攪拌した後、ろ過して濾液を減圧蒸留した。濃縮した化合物をクロロホルムとエタノールで再結晶して灰色の固体化合物 C-3 (48.9 g、78%、MS: [M+H]⁺ = 457.3) を製造した。

40

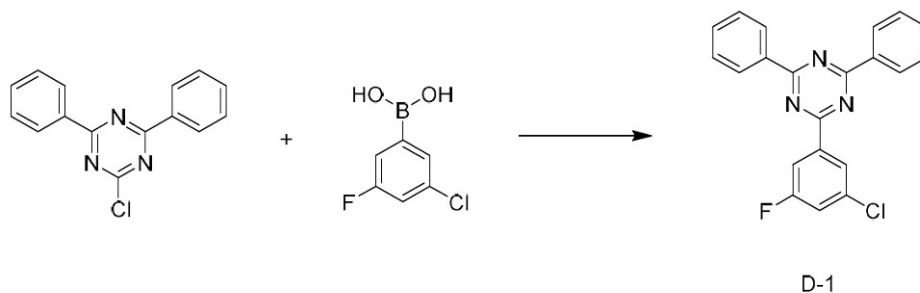
50

【0124】

製造例4：化合物D-3の製造

1) 化合物D-1の製造

【化56】



10

【0125】

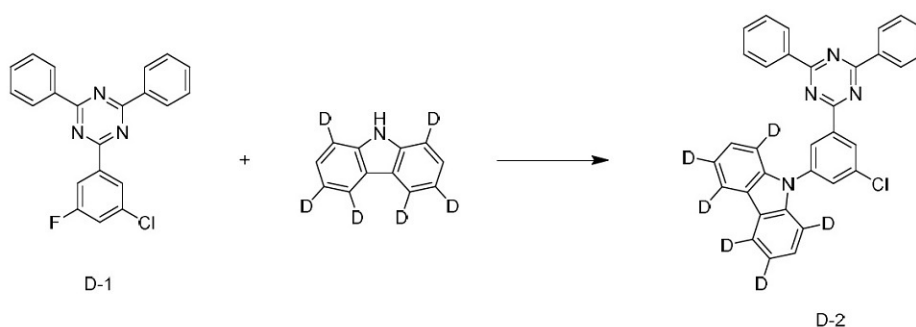
窒素雰囲気下で2-chloro-4,6-diphenyl-1,3,5-triazine (100 g、200.3 mmol) と (3-chloro-5-fluorophenyl)boronic acid (68.7 g、200.3 mmol) をテトラヒドロフラン2000 mLに入れて攪拌および還流した。その後、炭酸カリウム (83.1 g、601 mmol) を水83 mLに溶かして投入して十分に攪拌した後、テトラキストリフェニルホスフィノパラジウム (6.9 g、6 mmol) を投入した。2時間反応後、常温に冷却した後、有機層と水層を分離した後、有機層を蒸留した。これを再びクロロホルム1447 mLに投入して溶かし、水で2回洗浄した後、有機層を分離して、無水硫酸マグネシウムを入れて攪拌した後、ろ過して濾液を減圧蒸留した。濃縮した化合物をクロロホルムと酢酸エチルで再結晶して灰色の固体化合物D-1 (41.2 g、57%、MS: $[M+H]^+ = 362.1$) を製造した。

20

【0126】

2) 化合物D-2の製造

【化57】



30

【0127】

窒素雰囲気下でD-1 (30 g、83.1 mmol) と9H-carbazole-1,3,4,5,6,8-d6 (14.4 g、83.1 mmol) をジメチルホルムアミド600 mLに入れて攪拌および還流した。その後、リン酸三カリウム (52.9 g、249.3 mmol) を投入して十分に攪拌した後、5時間反応後、常温に冷却した後、有機層をろ過処理して塩を除去した後、ろ過された有機層を蒸留した。これを再びクロロホルム427 mLに投入して溶かし、水で2回洗浄した後、有機層を分離して、無水硫酸マグネシウムを入れて攪拌した後、ろ過して濾液を減圧蒸留した。濃縮した化合物をクロロホルムと酢酸エチルを用いてシリカカラムで精製して黄色の固体化合物D-2 (25.6 g、60%、MS: $[M+H]^+ = 515.2$) を製造した。

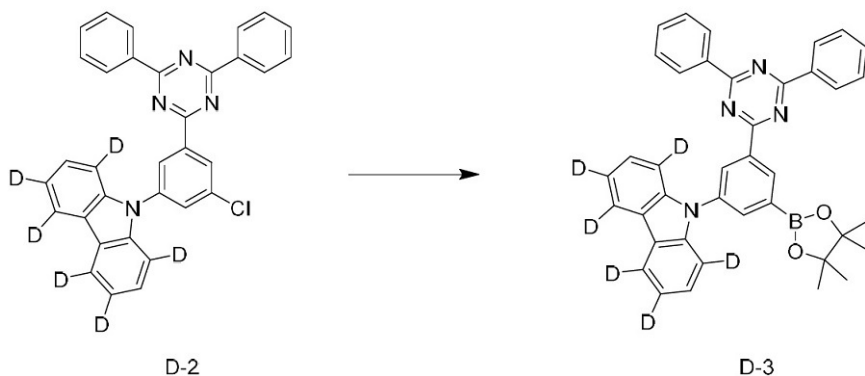
40

【0128】

3) 化合物D-3の製造

50

【化 5 8】



10

【0129】

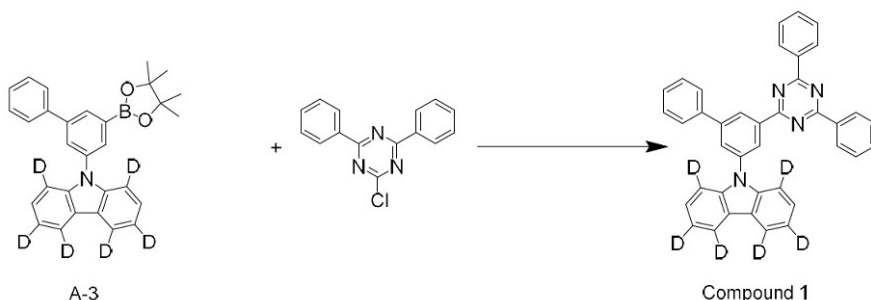
窒素雰囲気下でD-2 (50 g、97.2 mmol) とビス(ピナコラート)ジボロン (27.2 g、107 mmol) を1,4-ジオキサン1000 mLに入れて攪拌および還流した。その後、酢酸カリウム (28 g、291.7 mmol) を投入して十分に攪拌した後、ジベンジリデンアセトンパラジウム (1.7 g、2.9 mmol) およびトリシクロヘキシルホスフィン (1.6 g、5.8 mmol) を投入した。7時間反応後、常温に冷却した後、有機層をろ過処理して塩を除去した後、ろ過された有機層を蒸留した。これを再びクロロホルム590 mLに投入して溶かし、水で2回洗浄した後、有機層を分離して、無水硫酸マグネシウムを入れて攪拌した後、ろ過して濾液を減圧蒸留した。濃縮した化合物をクロロホルムとエタノールで再結晶して灰色の固体化合物D-3 (35.4 g、60%、MS: $[M+H]^+ = 607.3$) を製造した。

20

【0130】

合成例1：化合物1の製造

【化 5 9】



30

【0131】

窒素雰囲気下でA-3 (20 g、44.3 mmol) と2-chloro-4,6-diphenyl-1,3,5-triazine (11.8 g、44.3 mmol) をテトラヒドロフラン400 mLに入れて攪拌および還流した。その後、炭酸カリウム (18.4 g、133 mmol) を水18 mLに溶かして投入して十分に攪拌した後、テトラキストリフェニルホスフィンパラジウム (1.5 g、1.3 mmol) を投入した。3時間反応後、常温に冷却した後、生成された固体をろ過した。固体をクロロホルム1233 mLに投入して溶かし、水で2回洗浄した後、有機層を分離して、無水硫酸マグネシウムを入れて攪拌した後、ろ過して濾液を減圧蒸留した。濃縮した化合物をクロロホルムと酢酸エチルで再結晶して白色の固体化合物Compound 1 (19.2 g、78%、MS: $[M+H]^+ = 557.3$) を製造した。

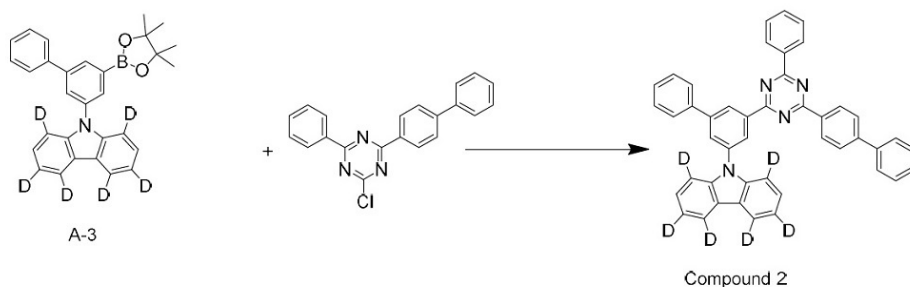
40

【0132】

合成例2：化合物2の製造

50

【化60】



10

【0133】

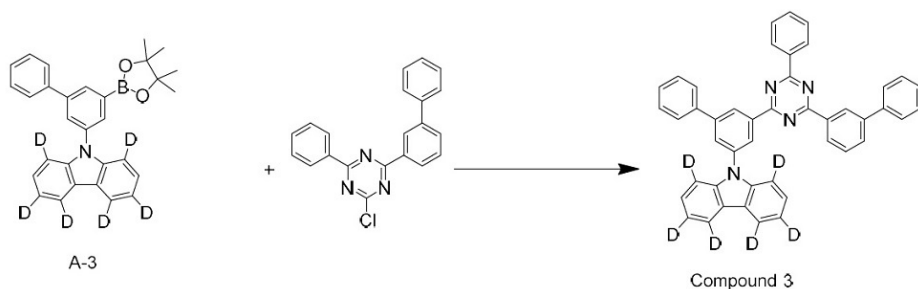
窒素雰囲気下でA-3 (20 g、44.3 mmol) と2-([1,1'-biphenyl]-4-yl)-4-chloro-6-phenyl-1,3,5-triazine (15.2 g、44.3 mmol) をテトラヒドロフラン400 mLに入れて攪拌および還流した。その後、炭酸カリウム (18.4 g、133 mmol) を水18 mLに溶かして投入して十分に攪拌した後、テトラキストリフェニルホスフィノパラジウム (1.5 g、1.3 mmol) を投入した。2時間反応後、常温に冷却した後、生成された固体をろ過した。固体をクロロホルム140 mLに投入して溶かし、水で2回洗浄した後、有機層を分離して、無水硫酸マグネシウムを入れて攪拌した後、ろ過して濾液を減圧蒸留した。濃縮した化合物をクロロホルムと酢酸エチルで再結晶して白色の固体化合物Compound 2 (17.1 g、61%、MS: $[M+H]^+ = 633.3$) を製造した。

20

【0134】

合成例3：化合物3の製造

【化61】



30

【0135】

窒素雰囲気下でA-3 (20 g、44.3 mmol) と2-([1,1'-biphenyl]-4-yl)-3-chloro-6-phenyl-1,3,5-triazine (15.2 g、44.3 mmol) をテトラヒドロフラン400 mLに入れて攪拌および還流した。その後、炭酸カリウム (18.4 g、133 mmol) を水18 mLに溶かして投入して十分に攪拌した後、テトラキストリフェニルホスフィノパラジウム (1.5 g、1.3 mmol) を投入した。3時間反応後、常温に冷却した後、生成された固体をろ過した。固体をクロロホルム140 mLに投入して溶かし、水で2回洗浄した後、有機層を分離して、無水硫酸マグネシウムを入れて攪拌した後、ろ過して濾液を減圧蒸留した。濃縮した化合物をクロロホルムと酢酸エチルで再結晶して白色の固体化合物Compound 3 (15.7 g、56%、MS: $[M+H]^+ = 633.3$) を製造した。

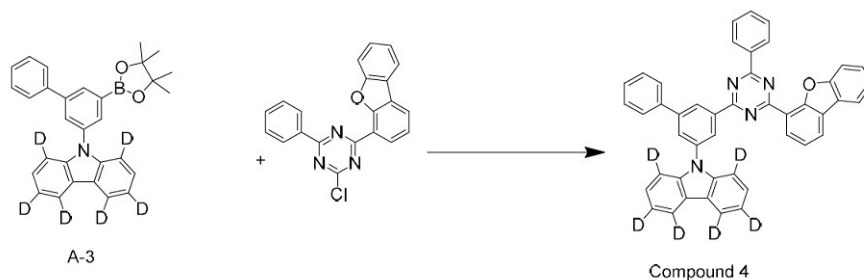
40

【0136】

合成例4：化合物4の製造

50

【化 6 2】



10

【0137】

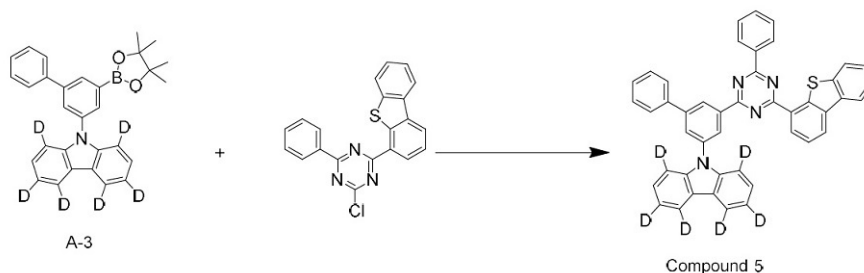
窒素雰囲気下でA-3 (20 g、44.3 mmol) と2-chloro-4-(dibenzofuran-4-yl)-1,3,5-triazine (15.8 g、44.3 mmol) をテトラヒドロフラン400 mLに入れて攪拌および還流した。その後、炭酸カリウム (18.4 g、133 mmol) を水18 mLに溶かして投入して十分に攪拌した後、テトラキストリフェニルホスフィノパラジウム (1.5 g、1.3 mmol) を投入した。3時間反応後、常温に冷却した後、生成された固体をろ過した。固体をクロロホルム1432 mLに投入して溶かし、水で2回洗浄した後、有機層を分離して、無水硫酸マグネシウムを入れて攪拌した後、ろ過して濾液を減圧蒸留した。濃縮した化合物をクロロホルムと酢酸エチルで再結晶して白色の固体化合物Compound 4 (14.9 g、52%、MS: $[M+H]^+ = 647.3$) を製造した。

20

【0138】

合成例5：化合物5の製造

【化 6 3】



30

【0139】

窒素雰囲気下でA-3 (20 g、44.3 mmol) と2-chloro-4-(dibenzothiophen-4-yl)-1,3,5-triazine (16.5 g、44.3 mmol) をテトラヒドロフラン400 mLに入れて攪拌および還流した。その後、炭酸カリウム (18.4 g、133 mmol) を水18 mLに溶かして投入して十分に攪拌した後、テトラキストリフェニルホスフィノパラジウム (1.5 g、1.3 mmol) を投入した。3時間反応後、常温に冷却した後、生成された固体をろ過した。固体をクロロホルム1468 mLに投入して溶かし、水で2回洗浄した後、有機層を分離して、無水硫酸マグネシウムを入れて攪拌した後、ろ過して濾液を減圧蒸留した。濃縮した化合物をクロロホルムと酢酸エチルで再結晶して白色の固体化合物Compound 5 (21.1 g、72%、MS: $[M+H]^+ = 663.2$) を製造した。

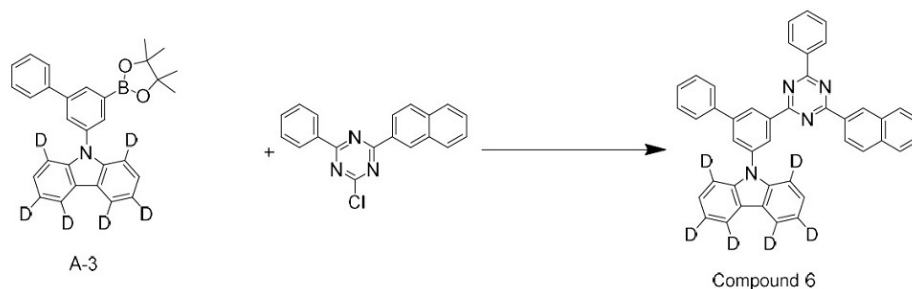
40

【0140】

合成例6：化合物6の製造

50

【化 6 4】



10

【0141】

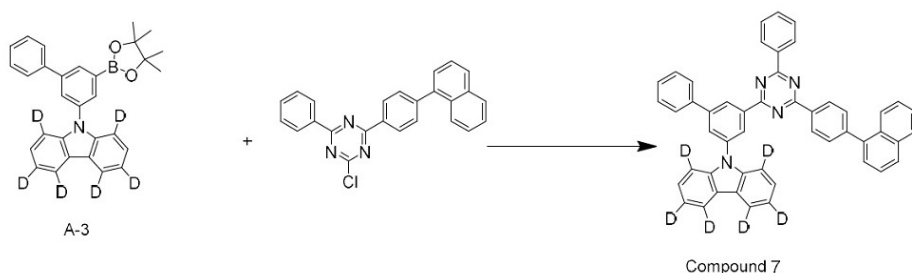
窒素雰囲気下でA-3 (20 g、44.3 mmol) と2-chloro-4-(naphthalen-2-yl)-6-phenyl-1,3,5-triazine (14.1 g、44.3 mmol) をテトラヒドロフラン400 mLに入れて攪拌および還流した。その後、炭酸カリウム (18.4 g、133 mmol) を水18 mLに溶かして投入して十分に攪拌した後、テトラキストリフェニルホスフィノパラジウム (1.5 g、1.3 mmol) を投入した。3時間反応後、常温に冷却した後、生成された固体をろ過した。固体をクロロホルム1344 mLに投入して溶かし、水で2回洗浄した後、有機層を分離して、無水硫酸マグネシウムを入れて攪拌した後、ろ過して濾液を減圧蒸留した。濃縮した化合物をクロロホルムと酢酸エチルで再結晶して白色の固体化合物Compound 6 (19.1 g、71%、MS: $[M+H]^+ = 607.3$) を製造した。

20

【0142】

合成例7：化合物7の製造

【化 6 5】



30

【0143】

窒素雰囲気下でA-3 (20 g、44.3 mmol) と2-chloro-4-(4-(naphthalen-1-yl)phenyl)-6-phenyl-1,3,5-triazine (17.4 g、44.3 mmol) をテトラヒドロフラン400 mLに入れて攪拌および還流した。その後、炭酸カリウム (18.4 g、133 mmol) を水18 mLに溶かして投入して十分に攪拌した後、テトラキストリフェニルホスフィノパラジウム (1.5 g、1.3 mmol) を投入した。2時間反応後、常温に冷却した後、生成された固体をろ過した。固体をクロロホルム1512 mLに投入して溶かし、水で2回洗浄した後、有機層を分離して、無水硫酸マグネシウムを入れて攪拌した後、ろ過して濾液を減圧蒸留した。濃縮した化合物をクロロホルムと酢酸エチルで再結晶して白色の固体化合物Compound 7 (23.6 g、78%、MS: $[M+H]^+ = 683.3$) を製造した。

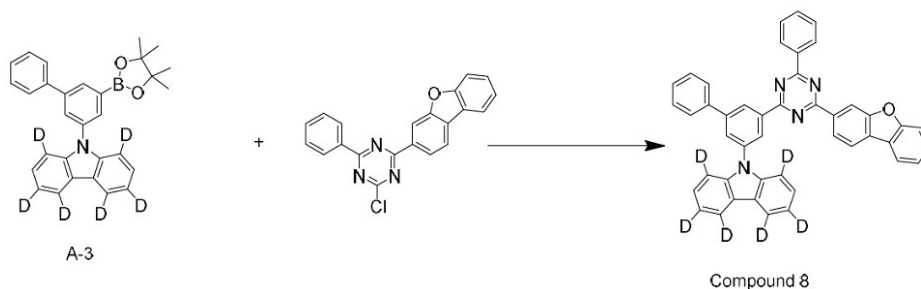
40

【0144】

合成例8：化合物8の製造

50

【化 6 6】



10

【0145】

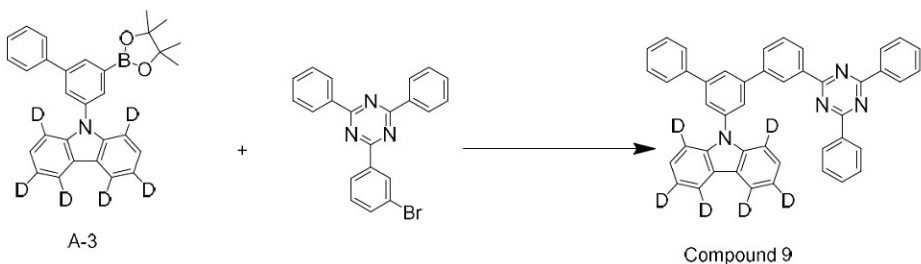
窒素雰囲気下でA-3 (20 g、44.3 mmol) と2-chloro-4-(dibenzob[5,4-d]furan-3-yl)-1,3,5-triazine (15.8 g、44.3 mmol) をテトラヒドロフラン400 mLに入れて攪拌および還流した。その後、炭酸カリウム (18.4 g、133 mmol) を水18 mLに溶かして投入して十分に攪拌した後、テラキストリフェニルホスフィノパラジウム (1.5 g、1.3 mmol) を投入した。3時間反応後、常温に冷却した後、生成された固体をろ過した。固体をクロロホルム1432 mLに投入して溶かし、水で2回洗浄した後、有機層を分離して、無水硫酸マグネシウムを入れて攪拌した後、ろ過して濾液を減圧蒸留した。濃縮した化合物をクロロホルムと酢酸エチルで再結晶して白色の固体化合物Compound 8 (18.9 g、66%、MS: $[M+H]^+ = 647.3$) を製造した。

20

【0146】

合成例9：化合物9の製造

【化 6 7】



30

【0147】

窒素雰囲気下でA-3 (20 g、44.3 mmol) と2-(3-bromophenyl)-4,6-diphenyl-1,3,5-triazine (17.2 g、44.3 mmol) をテトラヒドロフラン400 mLに入れて攪拌および還流した。その後、炭酸カリウム (18.4 g、133 mmol) を水18 mLに溶かして投入して十分に攪拌した後、テラキストリフェニルホスフィノパラジウム (1.5 g、1.3 mmol) を投入した。3時間反応後、常温に冷却した後、生成された固体をろ過した。固体をクロロホルム1401 mLに投入して溶かし、水で2回洗浄した後、有機層を分離して、無水硫酸マグネシウムを入れて攪拌した後、ろ過して濾液を減圧蒸留した。濃縮した化合物をクロロホルムと酢酸エチルで再結晶して白色の固体化合物Compound 9 (15.4 g、55%、MS: $[M+H]^+ = 633.3$) を製造した。

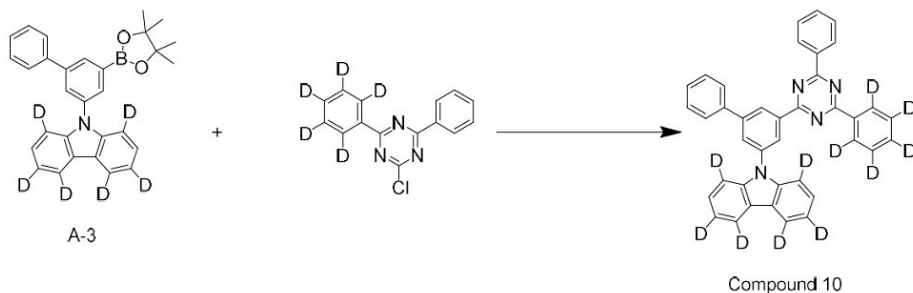
40

【0148】

合成例10：化合物10の製造

50

【化 6 8】



10

【0149】

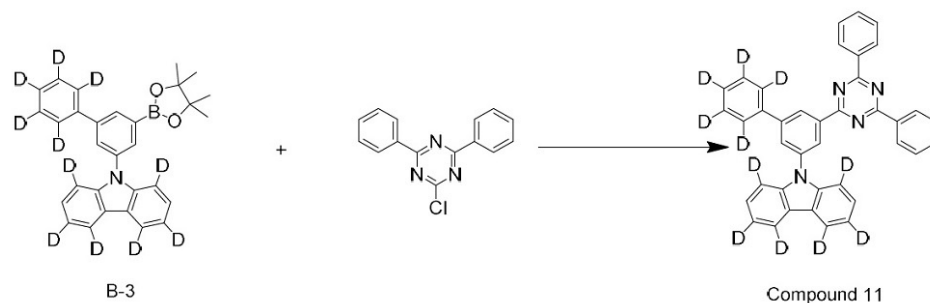
窒素雰囲気下でA-3 (20 g、44.3 mmol) と 2-chloro-4-phenyl-6-(5-deutero-1-phenyl-1,3,5-triazin-2-yl) (12.3 g、44.3 mmol) をテトラヒドロフラン400 mLに入れて攪拌および還流した。その後、炭酸カリウム (18.4 g、133 mmol) を水18 mLに溶かして投入して十分に攪拌した後、テトラキストリフェニルホスフィノパラジウム (1.5 g、1.3 mmol) を投入した。1時間反応後、常温に冷却した後、生成された固体をろ過した。固体をクロロホルム1244 mLに投入して溶かし、水で2回洗浄した後、有機層を分離して、無水硫酸マグネシウムを入れて攪拌した後、ろ過して濾液を減圧蒸留した。濃縮した化合物をクロロホルムと酢酸エチルで再結晶して白色の固体化合物Compound 10 (15.7 g、63%、MS: $[M+H]^+ = 562.3$) を製造した。

20

【0150】

合成例11：化合物11の製造

【化 6 9】



30

【0151】

窒素雰囲気下でB-3 (20 g、43.8 mmol) と 2-chloro-4,6-diphenyl-1,3,5-triazine (11.7 g、43.8 mmol) をテトラヒドロフラン400 mLに入れて攪拌および還流した。その後、炭酸カリウム (18.2 g、131.5 mmol) を水18 mLに溶かして投入して十分に攪拌した後、テトラキストリフェニルホスフィノパラジウム (1.5 g、1.3 mmol) を投入した。3時間反応後、常温に冷却した後、生成された固体をろ過した。固体をクロロホルム1230 mLに投入して溶かし、水で2回洗浄した後、有機層を分離して、無水硫酸マグネシウムを入れて攪拌した後、ろ過して濾液を減圧蒸留した。濃縮した化合物をクロロホルムと酢酸エチルで再結晶して白色の固体化合物Compound 11 (18.2 g、74%、MS: $[M+H]^+ = 562.3$) を製造した。

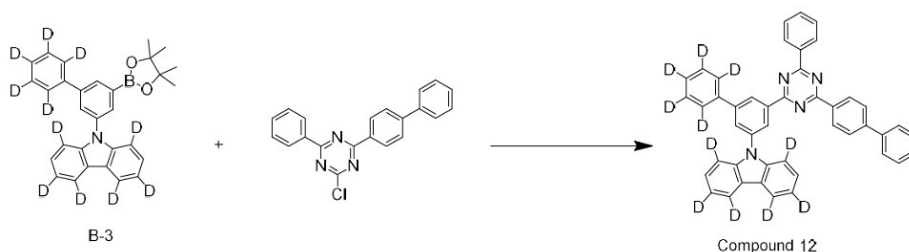
40

【0152】

合成例12：化合物12の製造

50

【化 70】



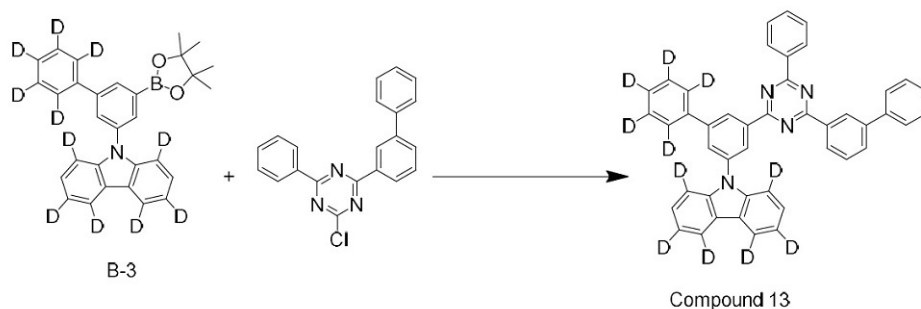
【0153】

窒素雰囲気下でB-3 (20 g、43.8 mmol) と2-([1,1'-biphenyl]-4-yl)-4-chloro-6-phenyl-1,3,5-triazine (15 g、43.8 mmol) をテトラヒドロフラン400 mLに入れて攪拌および還流した。その後、炭酸カリウム (18.2 g、131.5 mmol) を水18 mLに溶かして投入して十分に攪拌した後、テトラキストリフェニルーホスフィノパラジウム (1.5 g、1.3 mmol) を投入した。2時間反応後、常温に冷却した後、生成された固体をろ過した。固体をクロロホルム1397 mLに投入して溶かし、水で2回洗浄した後、有機層を分離して、無水硫酸マグネシウムを入れて攪拌した後、ろ過して濾液を減圧蒸留した。濃縮した化合物をクロロホルムと酢酸エチルで再結晶して白色の固体化合物Compound 12 (15.4 g、55%、MS: $[M+H]^+ = 638.3$) を製造した。

【0154】

合成例13：化合物13の製造

【化 71】



【0155】

窒素雰囲気下でB-3 (20 g、43.8 mmol) と2-([1,1'-biphenyl]-4-yl)-3-chloro-6-phenyl-1,3,5-triazine (15 g、43.8 mmol) をテトラヒドロフラン400 mLに入れて攪拌および還流した。その後、炭酸カリウム (18.2 g、131.5 mmol) を水18 mLに溶かして投入して十分に攪拌した後、テトラキストリフェニルーホスフィノパラジウム (1.5 g、1.3 mmol) を投入した。2時間反応後、常温に冷却した後、生成された固体をろ過した。固体をクロロホルム1397 mLに投入して溶かし、水で2回洗浄した後、有機層を分離して、無水硫酸マグネシウムを入れて攪拌した後、ろ過して濾液を減圧蒸留した。濃縮した化合物をクロロホルムと酢酸エチルで再結晶して白色の固体化合物Compound 13 (14.8 g、53%、MS: $[M+H]^+ = 638.3$) を製造した。

【0156】

合成例14：化合物14の製造

10

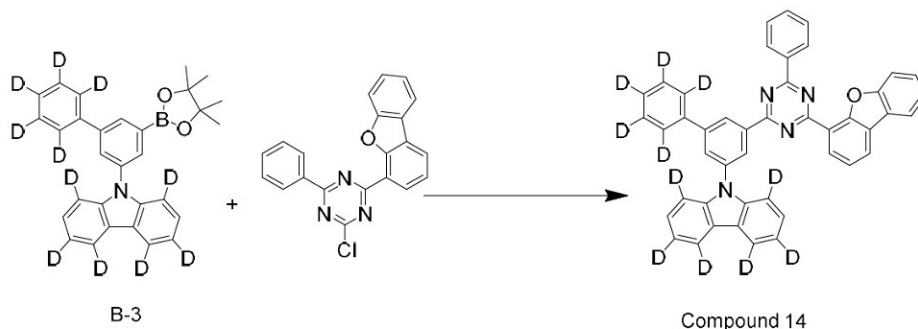
20

30

40

50

【化 7 2】



10

【0157】

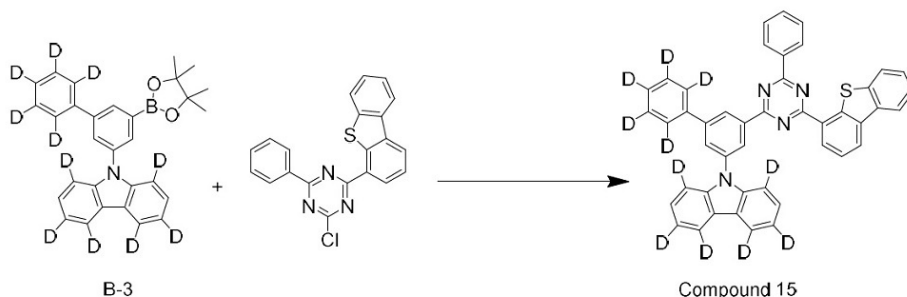
窒素雰囲気下でB-3 (20 g、43.8 mmol) と2-chloro-4-(dibenzofuran-4-yl)-6-phenyl-1,3,5-triazine (15.7 g、43.8 mmol) をテトラヒドロフラン400 mLに入れて攪拌および還流した。その後、炭酸カリウム (18.2 g、131.5 mmol) を水18 mLに溶かして投入して十分に攪拌した後、テトラキストリフェニルホスフィノパラジウム (1.5 g、1.3 mmol) を投入した。1時間反応後、常温に冷却した後、生成された固体をろ過した。固体をクロロホルム1427 mLに投入して溶かし、水で2回洗浄した後、有機層を分離して、無水硫酸マグネシウムを入れて攪拌した後、ろ過して濾液を減圧蒸留した。濃縮した化合物をクロロホルムと酢酸エチルで再結晶して白色の固体化合物Compound 14 (22.3 g、78%、MS: $[M+H]^+ = 652.3$) を製造した。

20

【0158】

合成例15：化合物15の製造

【化 7 3】



30

【0159】

窒素雰囲気下でB-3 (20 g、43.8 mmol) と2-chloro-4-(dibenzothiophen-4-yl)-6-phenyl-1,3,5-triazine (16.4 g、43.8 mmol) をテトラヒドロフラン400 mLに入れて攪拌および還流した。その後、炭酸カリウム (18.2 g、131.5 mmol) を水18 mLに溶かして投入して十分に攪拌した後、テトラキストリフェニルホスフィノパラジウム (1.5 g、1.3 mmol) を投入した。1時間反応後、常温に冷却した後、生成された固体をろ過した。固体をクロロホルム1462 mLに投入して溶かし、水で2回洗浄した後、有機層を分離して、無水硫酸マグネシウムを入れて攪拌した後、ろ過して濾液を減圧蒸留した。濃縮した化合物をクロロホルムと酢酸エチルで再結晶して白色の固体化合物Compound 15 (17.8 g、61%、MS: $[M+H]^+ = 668.2$) を製造した。

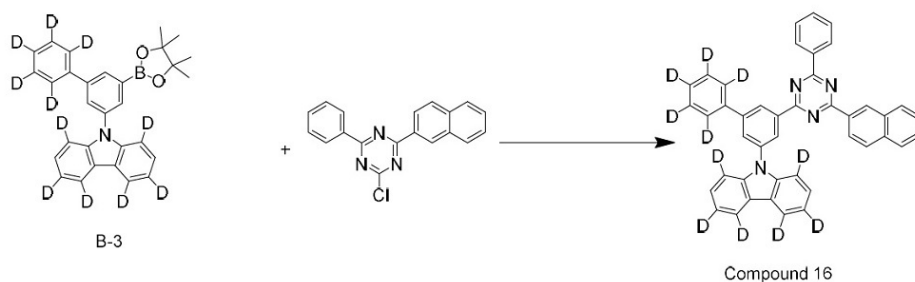
40

【0160】

合成例16：化合物16の製造

50

【化 7 4】



10

【0161】

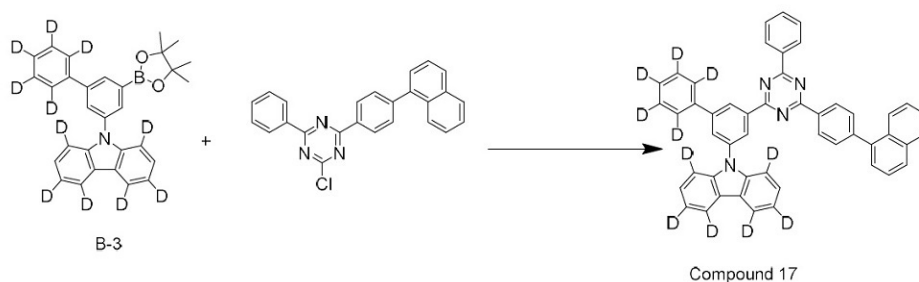
窒素雰囲気下でB-3 (20 g、43.8 mmol) と2-chloro-4-(naphthalen-2-yl)-6-phenyl-1,3,5-triazine (13.9 g、43.8 mmol) をテトラヒドロフラン400 mLに入れて攪拌および還流した。その後、炭酸カリウム (18.2 g、131.5 mmol) を水18 mLに溶かし投入して十分に攪拌した後、テトラキストリフェニルホスフィノパラジウム (1.5 g、1.3 mmol) を投入した。2時間反応後、常温に冷却した後、生成された固体をろ過した。固体をクロロホルム1340 mLに投入して溶かし、水で2回洗浄した後、有機層を分離して、無水硫酸マグネシウムを入れて攪拌した後、ろ過して濾液を減圧蒸留した。濃縮した化合物をクロロホルムと酢酸エチルで再結晶して白色の固体化合物Compound 16 (13.9 g、52%、MS: $[M+H]^+ = 612.3$) を製造した。

20

【0162】

合成例17：化合物17の製造

【化 7 5】



30

【0163】

窒素雰囲気下でB-3 (20 g、43.8 mmol) と2-chloro-4-(4-(naphthalen-1-yl)phenyl)-6-phenyl-1,3,5-triazine (17.2 g、43.8 mmol) をテトラヒドロフラン400 mLに入れて攪拌および還流した。その後、炭酸カリウム (18.2 g、131.5 mmol) を水18 mLに溶かし投入して十分に攪拌した後、テトラキストリフェニルホスフィノパラジウム (1.5 g、1.3 mmol) を投入した。3時間反応後、常温に冷却した後、生成された固体をろ過した。固体をクロロホルム1506 mLに投入して溶かし、水で2回洗浄した後、有機層を分離して、無水硫酸マグネシウムを入れて攪拌した後、ろ過して濾液を減圧蒸留した。濃縮した化合物をクロロホルムと酢酸エチルで再結晶して白色の固体化合物Compound 17 (16.3 g、54%、MS: $[M+H]^+ = 688.3$) を製造した。

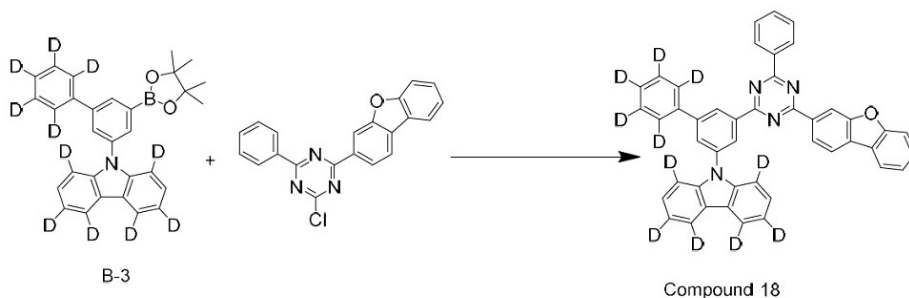
40

【0164】

合成例18：化合物18の製造

50

【化 7 6】



10

【0165】

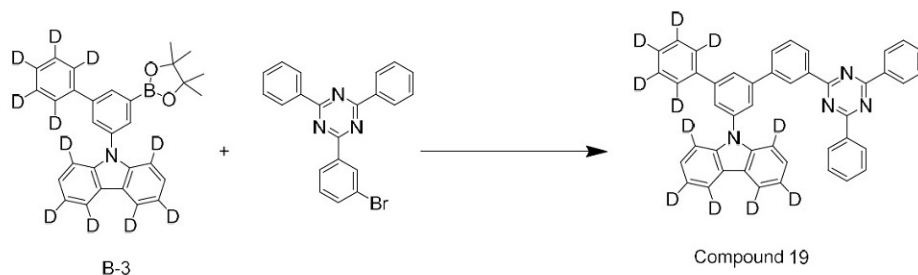
窒素雰囲気下でB-3 (20 g、43.8 mmol) と2-chloro-4-(dibenzofuran-3-yl)-1,3,5-triazine (15.7 g、43.8 mmol) をテトラヒドロフラン400 mLに入れて攪拌および還流した。その後、炭酸カリウム (18.2 g、131.5 mmol) を水18 mLに溶かして投入して十分に攪拌した後、テトラキストリフェニルホスフィノパラジウム (1.5 g、1.3 mmol) を投入した。2時間反応後、常温に冷却した後、生成された固体をろ過した。固体をクロロホルム1427 mLに投入して溶かし、水で2回洗浄した後、有機層を分離して、無水硫酸マグネシウムを入れて攪拌した後、ろ過して濾液を減圧蒸留した。濃縮した化合物をクロロホルムと酢酸エチルで再結晶して白色の固体化合物Compound 18 (15.1 g、53%、MS: $[M+H]^+ = 652.3$) を製造した。

20

【0166】

合成例19：化合物19の製造

【化 7 7】



30

【0167】

窒素雰囲気下でB-3 (20 g、43.8 mmol) と2-(3-bromophenyl)-4,6-diphenyl-1,3,5-triazine (17 g、43.8 mmol) をテトラヒドロフラン400 mLに入れて攪拌および還流した。その後、炭酸カリウム (18.2 g、131.5 mmol) を水18 mLに溶かして投入して十分に攪拌した後、テトラキストリフェニルホスフィノパラジウム (1.5 g、1.3 mmol) を投入した。3時間反応後、常温に冷却した後、生成された固体をろ過した。固体をクロロホルム1408 mLに投入して溶かし、水で2回洗浄した後、有機層を分離して、無水硫酸マグネシウムを入れて攪拌した後、ろ過して濾液を減圧蒸留した。濃縮した化合物をクロロホルムと酢酸エチルで再結晶して白色の固体化合物Compound 19 (22.5 g、80%、MS: $[M+H]^+ = 643.3$) を製造した。

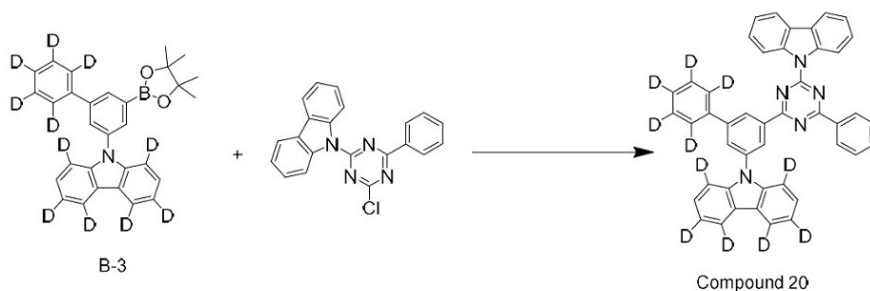
40

【0168】

合成例20：化合物20の製造

50

【化 7 8】



10

【0169】

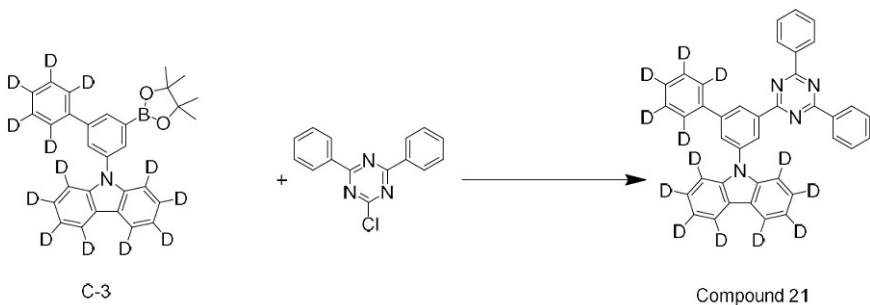
窒素雰囲気下でB-3 (100 g、219.2 mmol) と9-(4-chloro-6-phenyl-1,3,5-triazin-2-yl)-9H-carbazole (78 g、219.2 mmol) をテトラヒドロフラン2000 mLに入れて攪拌および還流した。その後、炭酸カリウム (90.9 g、657.5 mmol) を水91 mLに溶かして投入して十分に攪拌した後、テトラキストリフェニルホスフィノパラジウム (7.6 g、6.6 mmol) を投入した。2時間反応後、常温に冷却した後、有機層と水層を分離した後、有機層を蒸留した。これを再びクロロホルム2850 mLに投入して溶かし、水で2回洗浄した後、有機層を分離して、無水硫酸マグネシウムを入れて攪拌した後、ろ過して濾液を減圧蒸留した。濃縮した化合物をクロロホルムと酢酸エチルで再結晶して灰色の固体化合物Compound 20 (102.6 g、72%、MS: $[M+H]^+ = 651.3$) を製造した。

20

【0170】

合成例21：化合物21の製造

【化 7 9】



30

【0171】

窒素雰囲気下でC-3 (20 g、43.6 mmol) と2-chloro-4,6-diphenyl-1,3,5-triazine (11.7 g、43.6 mmol) をテトラヒドロフラン400 mLに入れて攪拌および還流した。その後、炭酸カリウム (18.1 g、130.9 mmol) を水18 mLに溶かして投入して十分に攪拌した後、テトラキストリフェニルホスフィノパラジウム (1.5 g、1.3 mmol) を投入した。2時間反応後、常温に冷却した後、生成された固体をろ過した。固体をクロロホルム1229 mLに投入して溶かし、水で2回洗浄した後、有機層を分離して、無水硫酸マグネシウムを入れて攪拌した後、ろ過して濾液を減圧蒸留した。濃縮した化合物をクロロホルムと酢酸エチルで再結晶して白色の固体化合物Compound 21 (13 g、53%、MS: $[M+H]^+ = 564.3$) を製造した。

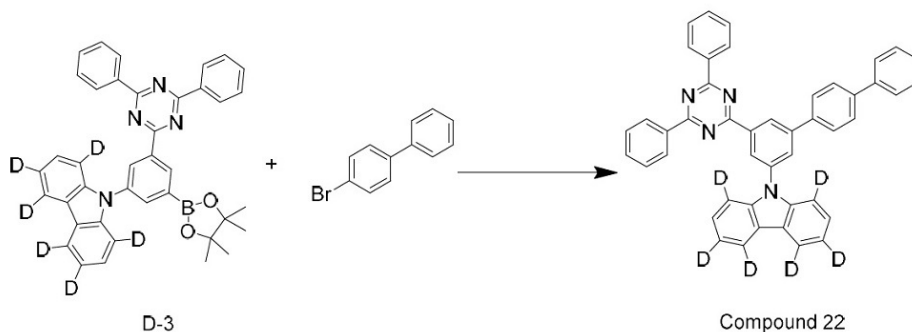
40

【0172】

合成例22：化合物22の製造

50

【化 8 0】



10

【0 1 7 3】

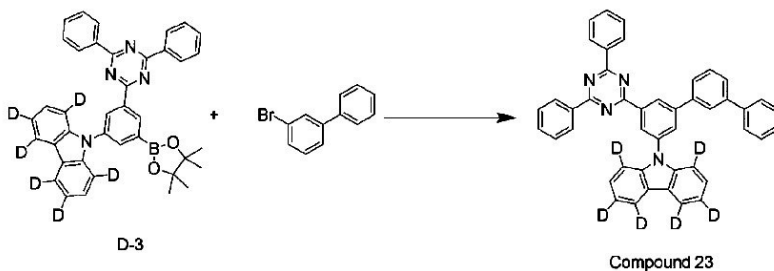
窒素雰囲気下でD-3 (20 g、32.9 mmol) と4-bromo-1,1'-biphenyl (7.6 g、32.9 mmol) をテトラヒドロフラン400 mLに入れて攪拌および還流した。その後、炭酸カリウム (13.6 g、98.6 mmol) を水14 mLに溶かして投入して十分に攪拌した後、テラキストリフェニルホスフィノパラジウム (1.1 g、1 mmol) を投入した。1時間反応後、常温に冷却した後、生成された固体をろ過した。固体をクロロホルム1040 mLに投入して溶かし、水で2回洗浄した後、有機層を分離して、無水硫酸マグネシウムを入れて攪拌した後、ろ過して濾液を減圧蒸留した。濃縮した化合物をクロロホルムと酢酸エチルで再結晶して白色の固体化合物Compound 22 (13.3 g、64%、MS: $[M+H]^+ = 633.3$) を製造した。

20

【0 1 7 4】

合成例 23: 化合物 23 の製造

【化 8 1】



30

【0 1 7 5】

窒素雰囲気下でD-3 (20 g、32.9 mmol) と3-bromo-1,1'-biphenyl (7.6 g、32.9 mmol) をテトラヒドロフラン400 mLに入れて攪拌および還流した。その後、炭酸カリウム (13.6 g、98.6 mmol) を水14 mLに溶かして投入して十分に攪拌した後、テラキストリフェニルホスフィノパラジウム (1.1 g、1 mmol) を投入した。2時間反応後、常温に冷却した後、生成された固体をろ過した。固体をクロロホルム1040 mLに投入して溶かし、水で2回洗浄した後、有機層を分離して、無水硫酸マグネシウムを入れて攪拌した後、ろ過して濾液を減圧蒸留した。濃縮した化合物をクロロホルムと酢酸エチルで再結晶して白色の固体化合物Compound 23 (16.2 g、78%、MS: $[M+H]^+ = 633.3$) を製造した。

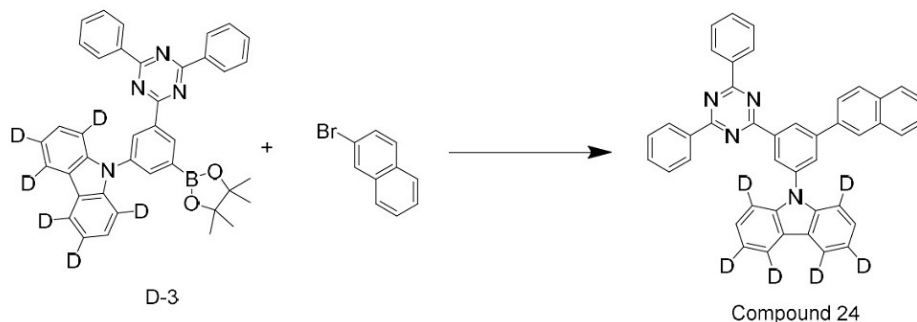
40

【0 1 7 6】

合成例 24: 化合物 24 の製造

50

【化 8 2】



10

【0177】

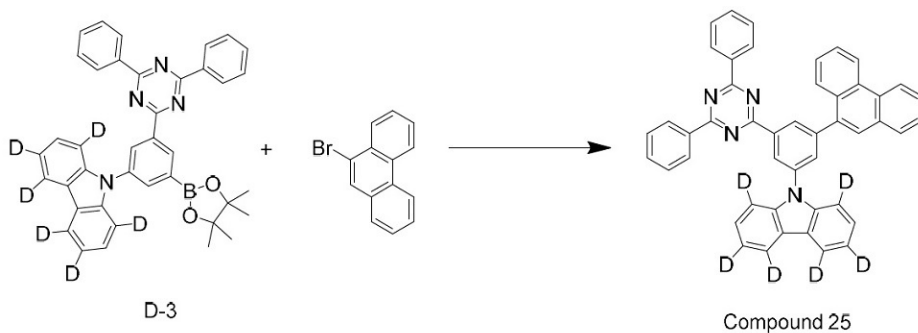
窒素雰囲気下でD-3 (20 g、32.9 mmol) と2-bromonaphthalene (6.8 g、32.9 mmol) をテトラヒドロフラン400 mLに入れて攪拌および還流した。その後、炭酸カリウム (13.6 g、98.6 mmol) を水14 mLに溶かして投入して十分に攪拌した後、テトラキストリフェニルホスフィノパラジウム (1.1 g、1 mmol) を投入した。3時間反応後、常温に冷却した後、生成された固体をろ過した。固体をクロロホルム997 mLに投入して溶かし、水で2回洗浄した後、有機層を分離して、無水硫酸マグネシウムを入れて攪拌した後、ろ過して濾液を減圧蒸留した。濃縮した化合物をクロロホルムと酢酸エチルで再結晶して白色の固体化合物Compound 24 (13 g、65%、MS: $[M+H]^+ = 607.3$) を製造した。

20

【0178】

合成例25：化合物25の製造

【化 8 3】



30

【0179】

窒素雰囲気下でD-3 (20 g、32.9 mmol) と9-bromophenanthrene (8.4 g、32.9 mmol) をテトラヒドロフラン400 mLに入れて攪拌および還流した。その後、炭酸カリウム (13.6 g、98.6 mmol) を水14 mLに溶かして投入して十分に攪拌した後、テトラキストリフェニルホスフィノパラジウム (1.1 g、1 mmol) を投入した。3時間反応後、常温に冷却した後、生成された固体をろ過した。固体をクロロホルム1079 mLに投入して溶かし、水で2回洗浄した後、有機層を分離して、無水硫酸マグネシウムを入れて攪拌した後、ろ過して濾液を減圧蒸留した。濃縮した化合物をクロロホルムと酢酸エチルで再結晶して白色の固体化合物Compound 25 (13.6 g、63%、MS: $[M+H]^+ = 657.3$) を製造した。

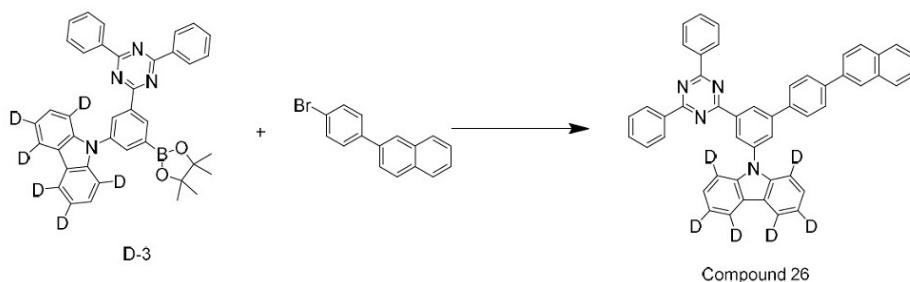
40

【0180】

合成例26：化合物26の製造

50

【化 8 4】



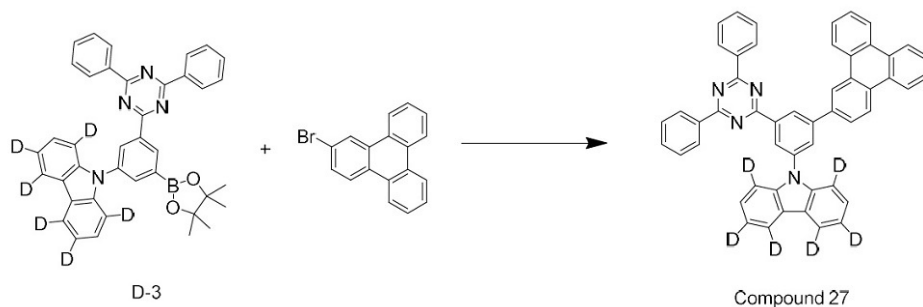
【0181】

窒素雰囲気下でD-3 (20 g、32.9 mmol) と2-(4-bromophenyl)naphthalene (9.3 g、32.9 mmol) をテトラヒドロフラン400 mLに入れて攪拌および還流した。その後、炭酸カリウム (13.6 g、98.6 mmol) を水14 mLに溶かして投入して十分に攪拌した後、テトラキストリフェニルホスフィノパラジウム (1.1 g、1 mmol) を投入した。3時間反応後、常温に冷却した後、生成された固体をろ過した。固体をクロロホルム1122 mLに投入して溶かし、水で2回洗浄した後、有機層を分離して、無水硫酸マグネシウムを入れて攪拌した後、ろ過して濾液を減圧蒸留した。濃縮した化合物をクロロホルムと酢酸エチルで再結晶して白色の固体化合物Compound 26 (15 g、67%、MS: $[M+H]^+ = 683.3$) を製造した。

【0182】

合成例27：化合物27の製造

【化 8 5】



【0183】

窒素雰囲気下でD-3 (20 g、32.9 mmol) と2-bromotriphenylene (11.7 g、32.9 mmol) をテトラヒドロフラン400 mLに入れて攪拌および還流した。その後、炭酸カリウム (13.6 g、98.6 mmol) を水14 mLに溶かして投入して十分に攪拌した後、テトラキストリフェニルホスフィノパラジウム (1.1 g、1 mmol) を投入した。1時間反応後、常温に冷却した後、生成された固体をろ過した。固体をクロロホルム1161 mLに投入して溶かし、水で2回洗浄した後、有機層を分離して、無水硫酸マグネシウムを入れて攪拌した後、ろ過して濾液を減圧蒸留した。濃縮した化合物をクロロホルムと酢酸エチルで再結晶して白色の固体化合物Compound 27 (16.7 g、72%、MS: $[M+H]^+ = 707.3$) を製造した。

【0184】

合成例28：化合物28の製造

10

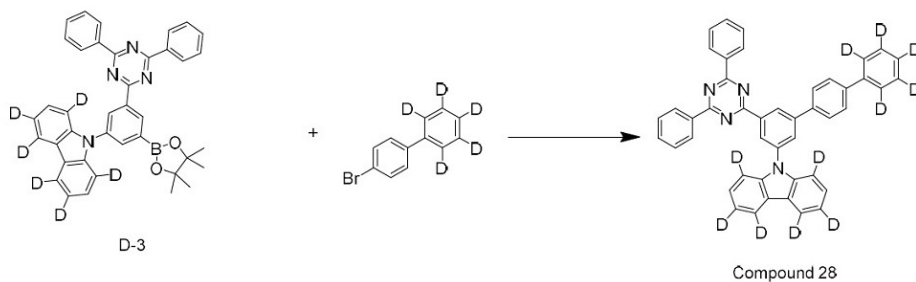
20

30

40

50

【化 8 6】



10

【0185】

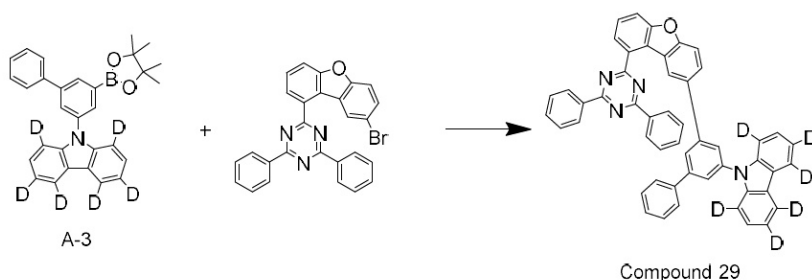
窒素雰囲気下でD-3 (20 g、32.9 mmol) と4-bromo-1,1'-biphenyl-2,3,4,5,6-pentadeuterio (7.8 g、32.9 mmol) をテトラヒドロフラン400 mLに入れて攪拌および還流した。その後、炭酸カリウム (13.6 g、98.6 mmol) を水14 mLに溶かして投入して十分に攪拌した後、テトラキストリフェニルホスフィノパラジウム (1.1 g、1 mmol) を投入した。3時間反応後、常温に冷却した後、生成された固体をろ過した。固体をクロロホルム1048 mLに投入して溶かし、水で2回洗浄した後、有機層を分離して、無水硫酸マグネシウムを入れて攪拌した後、ろ過して濾液を減圧蒸留した。濃縮した化合物をクロロホルムと酢酸エチルで再結晶して白色の固体化合物Compound 28 (11.1 g、53%、MS: [M+H]⁺ = 638.3) を製造した。

20

【0186】

合成例29：化合物29の製造

【化 8 7】



30

【0187】

窒素雰囲気下でA-3 (20 g、44.3 mmol) と2-(8-bromodibenzo[b,d]furan-1-yl)-4,6-diphenyl-1,3,5-triazine (21.1 g、44.3 mmol) をテトラヒドロフラン400 mLに入れて攪拌および還流した。その後、炭酸カリウム (18.4 g、133 mmol) を水18 mLに溶かして投入して十分に攪拌した後、テトラキストリフェニルホスフィノパラジウム (1.5 g、1.3 mmol) を投入した。3時間反応後、常温に冷却した後、生成された固体をろ過した。固体をクロロホルム1601 mLに投入して溶かし、水で2回洗浄した後、有機層を分離して、無水硫酸マグネシウムを入れて攪拌した後、ろ過して濾液を減圧蒸留した。濃縮した化合物をクロロホルムと酢酸エチルで再結晶して黄色の固体化合物Compound 29 (23.4 g、73%、MS: [M+H]⁺ = 723.3) を製造した。

40

【0188】

実施例1：有機発光素子の製造

ITO (indium tin oxide) が1,300 Åの厚さに薄膜コーティングされたガラス基板を洗剤を溶かした蒸留水に入れて超音波洗浄した。この時、洗剤としてはフィッシャー社 (Fischer Co.) 製品を使用し、蒸留水としてはミリポア社

50

(Millipore Co.) 製品のフィルタ (Filter) で2次ろ過した蒸留水を使用した。ITOを30分間洗浄した後、蒸留水で2回繰り返し超音波洗浄を10分間進行した。蒸留水洗浄が終わった後、イソプロピルアルコール、アセトン、メタノールの溶剤で超音波洗浄をし、乾燥させた後、プラズマ洗浄装置に輸送させた。また、酸素プラズマを用いて前記基板を5分間洗浄した後、真空蒸着装置に基板を輸送させた。

【0189】

こうして用意されたITO透明電極上に、下記HI-1化合物を50 Åの厚さに熱真空蒸着して正孔注入層を形成した。前記正孔注入層上に下記HT-1化合物を250 Åの厚さに熱真空蒸着して正孔輸送層を形成し、HT-1蒸着膜上に下記HT-2化合物を50 Åの厚さに真空蒸着して電子阻止層を形成した。

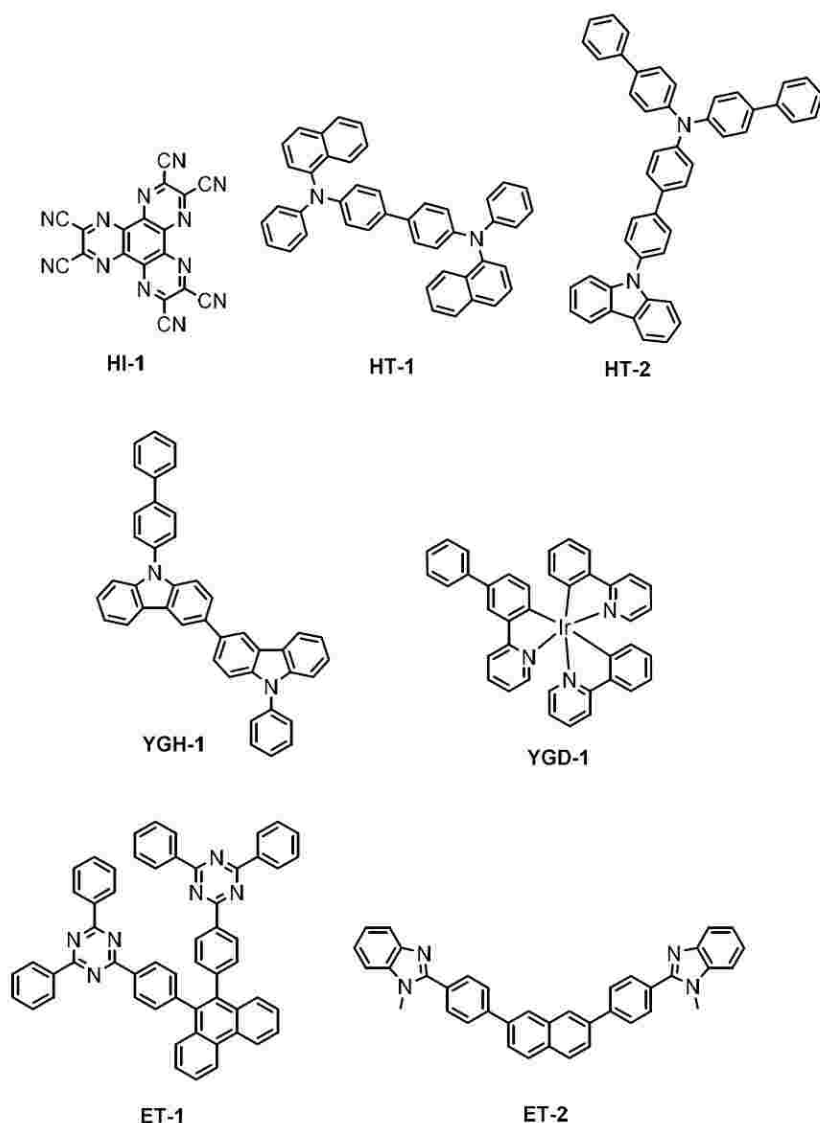
【0190】

前記HT-2蒸着膜上に、発光層として前記合成例1で製造した化合物1、下記YGH-1化合物、およびリン光ドーパントYGD-1を44:44:12の重量比で共蒸着して400 Åの厚さの発光層を形成した。

【0191】

前記発光層上に、下記ET-1化合物を250 Åの厚さに真空蒸着して電子輸送層を形成し、前記電子輸送層上に、下記ET-2化合物およびLiFを8:2の重量比で真空蒸着して100 Åの厚さの電子注入層を形成した。前記電子注入層上に、1000 Åの厚さにアルミニウムを蒸着して負極を形成した。

【化88】



【0192】

上記の過程で、有機物の蒸着速度は $0.4 \sim 0.7 \text{ \AA} / \text{sec}$ を維持し、アルミニウムは $2 \text{ \AA} / \text{sec}$ の蒸着速度を維持し、蒸着時の真空度は $1 \times 10^{-7} \sim 5 \times 10^{-8} \text{ torr}$ を維持した。

【0193】

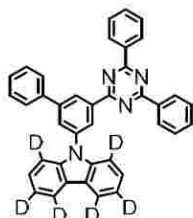
実施例2～実施例29

前記実施例1で発光層のホスト物質の一つとして合成例1の化合物1の代わりに下記表1に記載された化合物を使用したことを除いては、前記実施例1と同様の方法で有機発光素子を製造した。

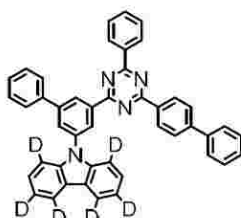
【0194】

この時、実施例1～実施例29で用いられた化合物の構造を整理すると、以下の通りである。

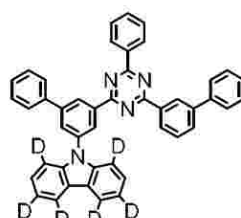
【化89】



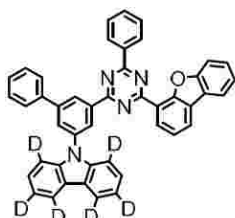
Compound 1



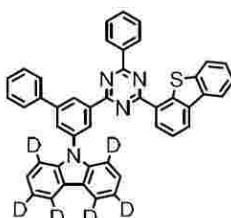
Compound 2



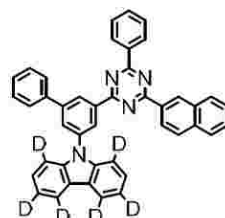
Compound 3



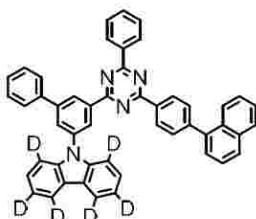
Compound 4



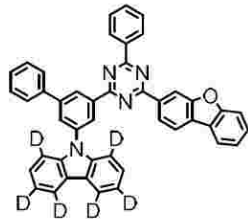
Compound 5



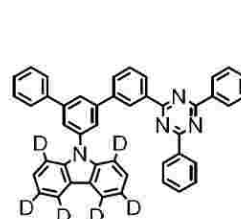
Compound 6



Compound 7



Compound 8



Compound 9

10

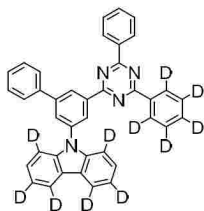
20

30

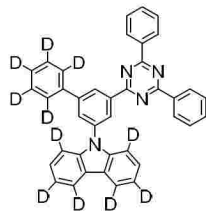
40

50

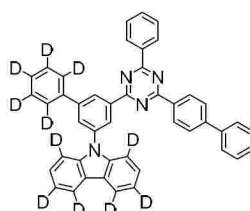
【化 9 0】



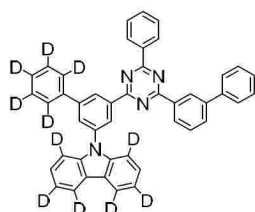
Compound 10



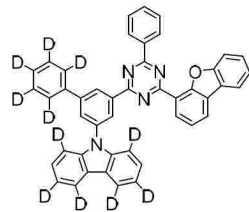
Compound 11



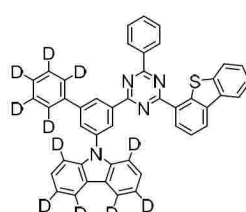
Compound 12



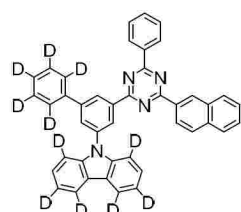
Compound 13



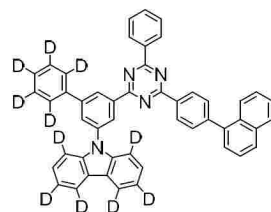
Compound 14



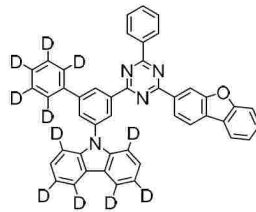
Compound 15



Compound 16



Compound 17



Compound 18

10

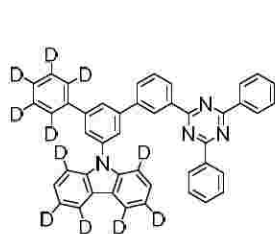
20

30

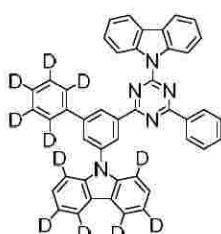
40

50

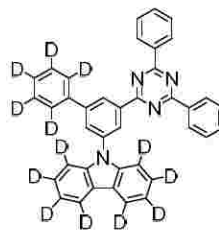
【化 9 1】



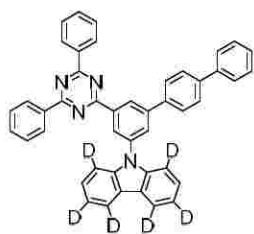
Compound 19



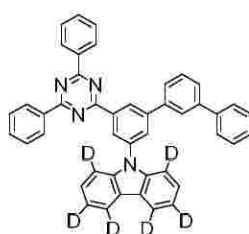
Compound 20



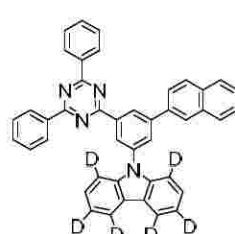
Compound 21



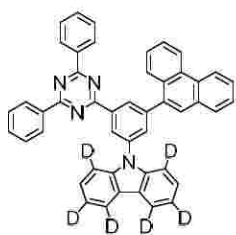
Compound 22



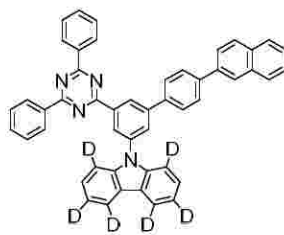
Compound 23



Compound 24



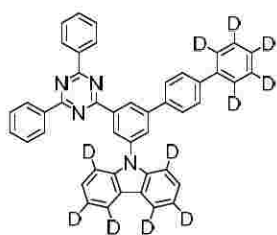
Compound 25



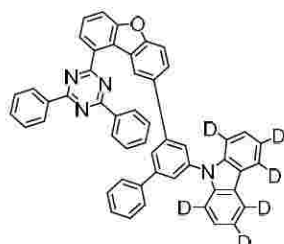
Compound 26



Compound 27



Compound 28



Compound 29

【 0 1 9 5 】

比較例 1～比較例 4 前記実施例 1 で発光層のホスト物質の一つとして合成例 1 の化合物 1 の代わりに下記表 1 に記載された化合物を使用したことを除いては、前記実施例 1 と同様の方法で有機発光素子を製造した。この時、下記表 1 中の C E 1～C E 4 の化合物は以下の通りである。

10

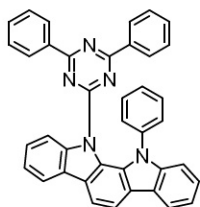
20

30

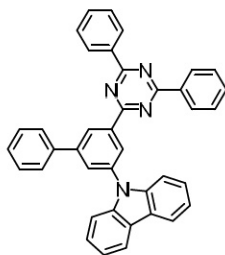
40

50

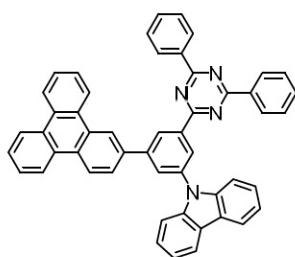
【化 9 2】



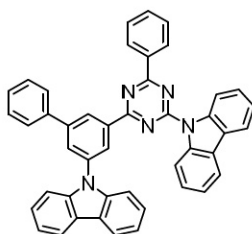
CE1



CE2



CE3



CE4

【 0 1 9 6】

実験例 1：素子の特性評価

前記実施例および比較例で製造した有機発光素子それぞれに対して $10 \text{ mA} / \text{cm}^2$ の電流密度での電圧および効率を測定し、 $50 \text{ mA} / \text{cm}^2$ の電流密度での寿命を測定してその結果を下記表 1 に示す。この時、LT95 は、初期輝度が 95 % に低下するまでの時間を意味する。

10

20

30

40

50

【表 1】

	化合物	電圧 (V) (@10mA/cm ²)	効率 (Cd/A) (@10mA/cm ²)	色座標 (x, y)	寿命 (h) (LT ₉₅ at 50mA/cm ²)
実施例1	化合物1	4	82	0.45, 0.54	160
実施例2	化合物2	4.1	83	0.45, 0.54	180
実施例3	化合物3	4.2	81	0.45, 0.54	200
実施例4	化合物4	4.2	82	0.45, 0.53	170
実施例5	化合物5	4.3	80	0.45, 0.54	220
実施例6	化合物6	4.2	81	0.45, 0.54	150
実施例7	化合物7	4.3	80	0.45, 0.53	150
実施例8	化合物8	4.2	81	0.45, 0.54	230
実施例9	化合物9	4.2	84	0.45, 0.53	140
実施例10	化合物10	4	82	0.45, 0.54	180
実施例11	化合物11	4	82	0.45, 0.54	180
実施例12	化合物12	4.1	83	0.45, 0.54	200
実施例13	化合物13	4.2	81	0.45, 0.54	220
実施例14	化合物14	4.2	82	0.45, 0.54	190
実施例15	化合物15	4.3	80	0.45, 0.53	240
実施例16	化合物16	4.2	81	0.45, 0.54	160

実施例17	化合物17	4.3	80	0.45, 0.54	160
実施例18	化合物18	4.2	81	0.45, 0.53	250
実施例19	化合物19	4.2	84	0.45, 0.54	150
実施例20	化合物20	4.3	77	0.45, 0.53	190
実施例21	化合物21	4	82	0.45, 0.53	190
実施例22	化合物22	4.1	82	0.45, 0.53	160
実施例23	化合物23	4.2	79	0.45, 0.53	170
実施例24	化合物24	4.2	79	0.45, 0.53	150
実施例25	化合物25	4.3	80	0.45, 0.53	160
実施例26	化合物26	4.2	80	0.45, 0.53	160
実施例27	化合物27	4.3	79	0.45, 0.53	200
実施例28	化合物28	4.1	82	0.45, 0.53	170
実施例29	化合物29	4.3	79	0.45, 0.53	230
比較例1	CE1	4.1	75	0.45, 0.53	100
比較例2	CE2	4	82	0.45, 0.54	100
比較例3	CE3	4.3	79	0.45, 0.53	120
比較例4	CE4	4.3	77	0.45, 0.53	110

【0197】

上記表1に示すように、発光層のホスト物質として前記化学式1で表される化合物を用いた実施例の有機発光素子は、これとは異なる構造を有する化合物を用いた比較例の有機発光素子に比べて、効率の低下なしに顕著に向上した寿命特性を示すことが分かった。したがって、一般に有機発光素子の発光効率および寿命特性は、互いにトレードオフ（Trade-off）の関係を有することを考慮すると、本発明の化合物は、比較化合物に比べて有機発光素子の特性を向上させることを確認することができた。

【符号の説明】

【0198】

10

20

30

40

50

- 1 基板
- 2 正極
- 3 発光層
- 4 負極
- 5 正孔注入層
- 6 正孔輸送層
- 7 電子阻止層
- 8 電子輸送層
- 9 電子注入層

【図面】

10

【図 1】

【図 2】

[図1]

4
3
2
1

[図2]

4
9
8
3
7
6
5
2
1

20

30

40

50

フロントページの続き

(33)優先権主張国・地域又は機関

韓国(KR)

大韓民国 07336 ソウル, ヨンドウンポ-グ, ヨイ-デロ 128 エルジー・ケム・リミテ
ッド内

(72)発明者 リー、ジュンハ

大韓民国 07336 ソウル, ヨンドウンポ-グ, ヨイ-デロ 128 エルジー・ケム・リミテ
ッド内

(72)発明者 ハン、ス ジン

大韓民国 07336 ソウル, ヨンドウンポ-グ, ヨイ-デロ 128 エルジー・ケム・リミテ
ッド内

(72)発明者 パク、セウルチャン

大韓民国 07336 ソウル, ヨンドウンポ-グ, ヨイ-デロ 128 エルジー・ケム・リミテ
ッド内

(72)発明者 ホワン、スンヒュン

大韓民国 07336 ソウル, ヨンドウンポ-グ, ヨイ-デロ 128 エルジー・ケム・リミテ
ッド内

審査官 土橋 敬介

(56)参考文献

米国特許出願公開第2017/0331048 (US, A1)

米国特許出願公開第2019/0288215 (US, A1)

米国特許出願公開第2015/0200373 (US, A1)

特表2013-503860 (JP, A)

特表2008-540517 (JP, A)

特表2004-515506 (JP, A)

特表2021-519803 (JP, A)

特表2021-535915 (JP, A)

特表2021-524155 (JP, A)

特開2020-183372 (JP, A)

(58)調査した分野 (Int.Cl., DB名)

C07D

H10K

Caplus/REGISTRY (STN)