

(19) 日本国特許庁(JP)

(12) **特 許 公 報 (B2)**

(11) 特許番号

特許第6414793号
(P6414793)

(45) 発行日 平成30年10月31日(2018.10.31)

(24) 登録日 平成30年10月12日 (2018.10.12)

(51) Int.Cl.

F l

C07D 239/26 (2006.01)
C07D 251/24 (2006.01)
C07D 401/14 (2006.01)
C07D 409/14 (2006.01)
C07D 239/28 (2006.01)

C O 7 D 239/26 C S P
C O 7 D 251/24
C O 7 D 401/14
C O 7 D 409/14
C O 7 D 239/28

請求項の数 11 (全 80 頁) 最終頁に続く

(21) 出願番号	特願2017-517103 (P2017-517103)
(86) (22) 出願日	平成27年9月11日 (2015. 9. 11)
(65) 公表番号	特表2017-533893 (P2017-533893A)
(43) 公表日	平成29年11月16日 (2017. 11. 16)
(86) 国際出願番号	PCT/KR2015/009593
(87) 国際公開番号	W02016/068478
(87) 国際公開日	平成28年5月6日 (2016. 5. 6)
審査請求日	平成29年4月18日 (2017. 4. 18)
(31) 優先権主張番号	10-2014-0149355
(32) 優先日	平成26年10月30日 (2014. 10. 30)
(33) 優先権主張国	韓国 (KR)

(73) 特許権者 500239823
エルジー・ケム・リミテッド
大韓民国 07336 ソウル, ヨンドウ
ンポ－グ, ヨイーデロ 128

(74) 代理人 110000877
龍華国際特許業務法人

(72) 発明者 ホ、ドン ウク
大韓民国・ソウル・ヨンドウンポ－グ・ヨ
イーデロ・128 エルジー・ケム・リミ
テッド内

(72) 発明者 リー、ドン ファン
大韓民国・ソウル・ヨンドウンポ－グ・ヨ
イーデロ・128 エルジー・ケム・リミ
テッド内

[最終頁に続く](#)

(54) 【発明の名称】 環化合物およびこれを含む有機発光素子

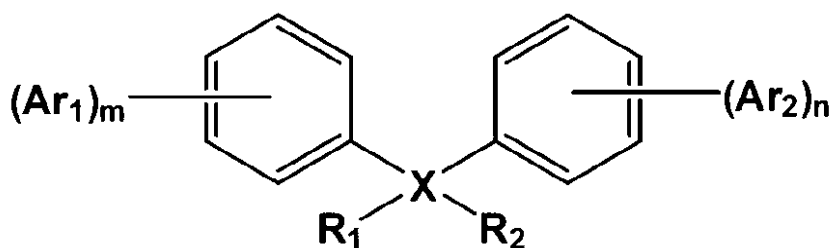
(57) 【特許請求の範囲】

【請求項1】

下記化学式 1 で表される環化合物：

[化学式 1]

【化 1】



前記化学式 1 において、

A r₁ および A r₂ の少なくとも一方は、ニトリル基、炭素数 6 ～ 3 0 の単環又は多環アリール基、及び、炭素数 2 ～ 3 0 の単環又は多環ヘテロアリール基を含む群から選択される 1 以上の置換基で置換もしくは非置換のピリミジル基；及び、ニトリル基、炭素数 6 ～ 3 0 の単環又は多環アリール基、及び、炭素数 2 ～ 3 0 の単環又は多環ヘテロアリール基を含む群から選択される 1 以上の置換基で置換もしくは非置換のトリアジニル基であり、他方は、置換もしくは非置換の炭素数 6 ～ 3 0 の単環もしくは多環のアリール基；およ

び置換もしくは非置換の炭素数 2 ～ 3 0 の単環もしくは多環のヘテロアリール基からなる群より選択され、

m および n は、1 であり、

X は、C であり、

R₁ および R₂ は、互いに同一または異なり、それぞれ独立に、置換もしくは非置換の炭素数 1 ～ 3 0 の直鎖もしくは分枝鎖のアルキル基；炭素数 6 ～ 3 0 の単環もしくは多環のアリール基；からなる群より選択されるか、R₁ および R₂ は、互いに連結されて置換もしくは非置換の単環のシクロアルキル環を形成してもよい。

【請求項 2】

前記 R₁ および R₂ は、互いに同一または異なり、それぞれ独立に、置換もしくは非置換のフェニル基；および置換もしくは非置換のナフチル基からなる群より選択されるものである請求項 1 に記載の環化合物。

10

【請求項 3】

前記 R₁ および R₂ は、互いに同一または異なり、それぞれ独立に、置換もしくは非置換のメチル基；および置換もしくは非置換のエチル基からなる群より選択されるものである請求項 1 に記載の環化合物。

【請求項 4】

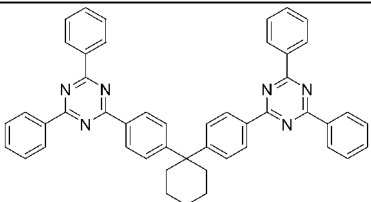
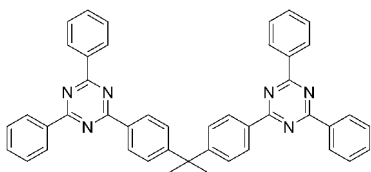
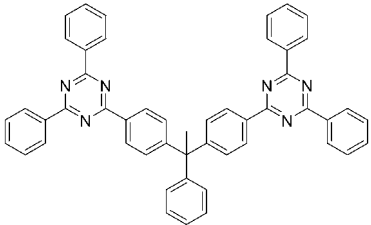
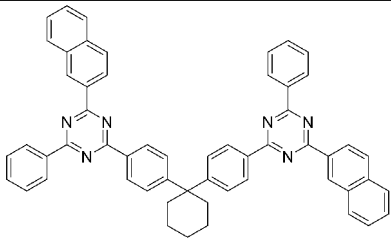
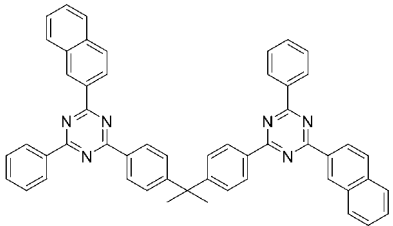
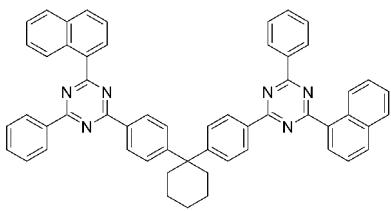
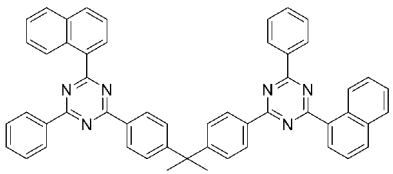
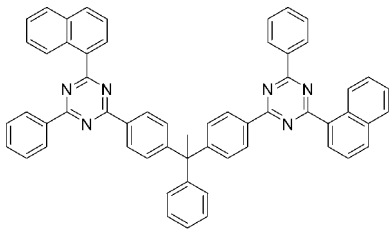
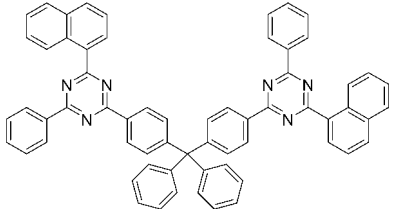
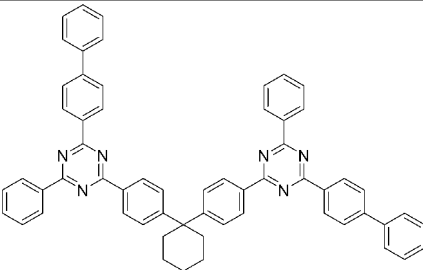
前記 R₁ および R₂ は、互いに連結されて置換もしくは非置換のシクロヘキシル環を形成するものである請求項 1 に記載の環化合物。

【請求項 5】

20

前記化学式 1 で表される環化合物は、下記の化合物 1 ～ 7 9 及び 9 7 ～ 2 0 9 のうちのいずれか 1 つで表されるものである請求項 1 に記載の環化合物。

【表 1】

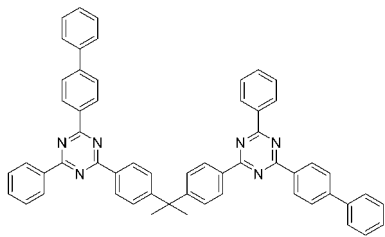
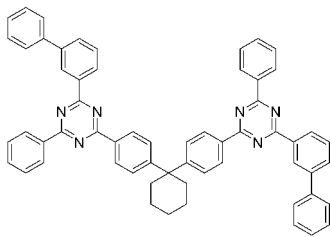
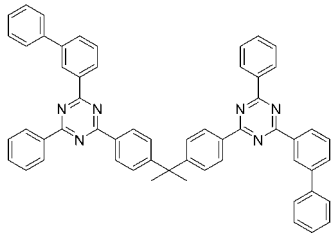
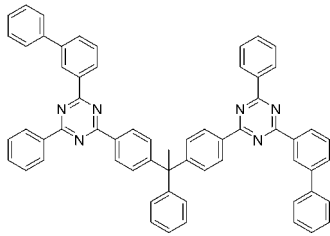
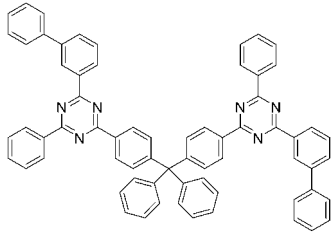
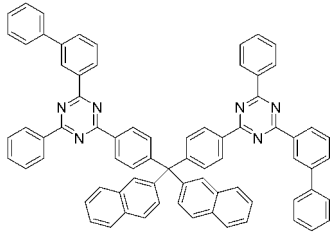
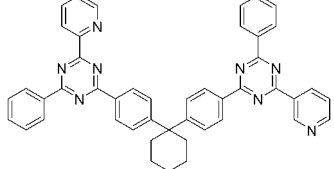
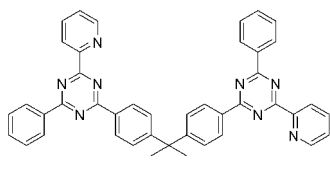
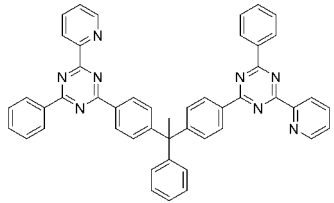
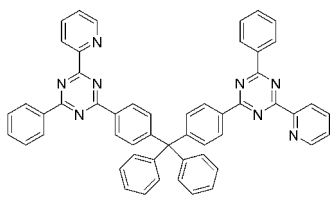
化合物 1	化合物 2
	
化合物 3	化合物 4
	
化合物 5	化合物 6
	
化合物 7	化合物 8
	
化合物 9	化合物 10
	

10

20

30

【表 2】

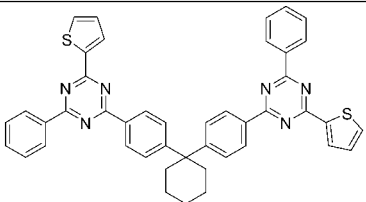
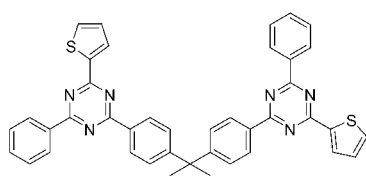
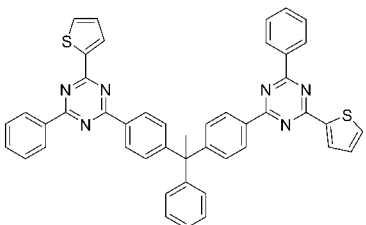
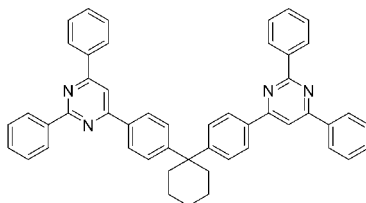
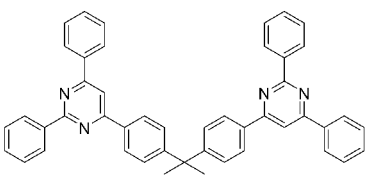
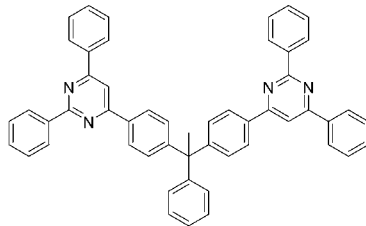
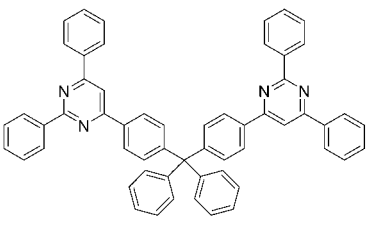
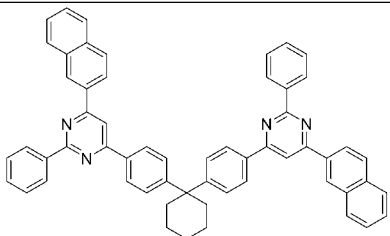
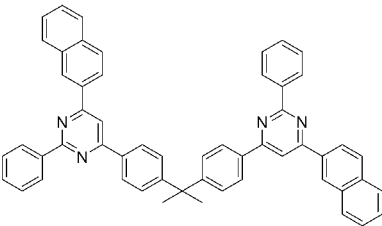
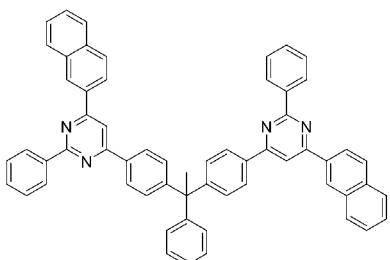
化合物 11	化合物 12
	
化合物 13	化合物 14
	
化合物 15	化合物 16
	
化合物 17	化合物 18
	
化合物 19	化合物 20
	

10

20

30

【表 3】

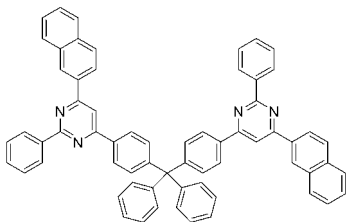
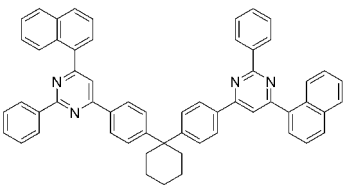
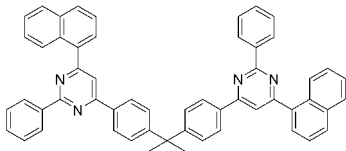
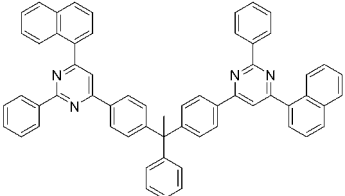
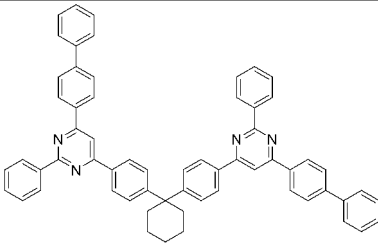
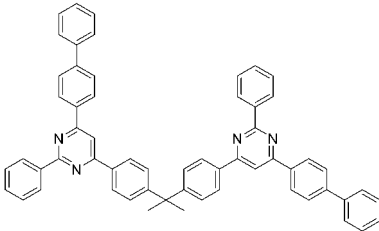
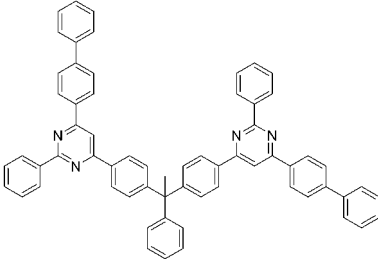
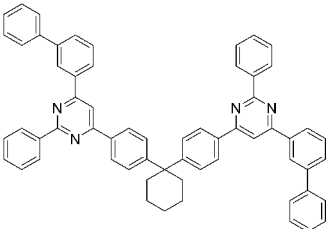
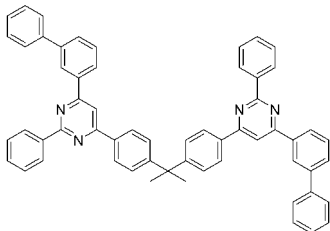
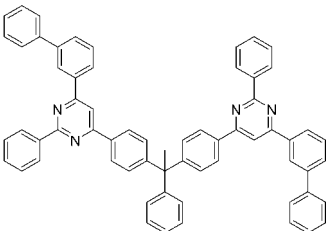
化合物 21	化合物 22
	
化合物 23	化合物 24
	
化合物 25	化合物 26
	
化合物 27	化合物 28
	
化合物 29	化合物 30
	

10

20

30

【表 4】

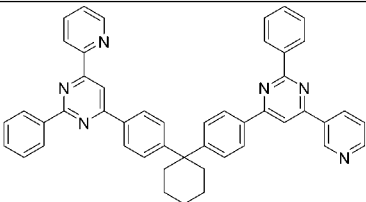
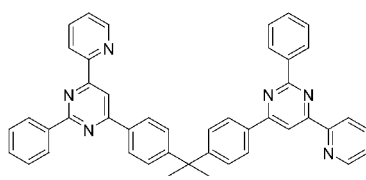
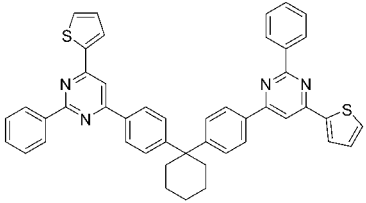
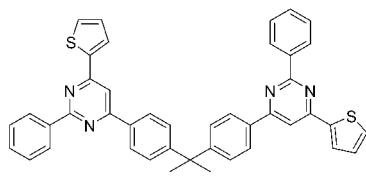
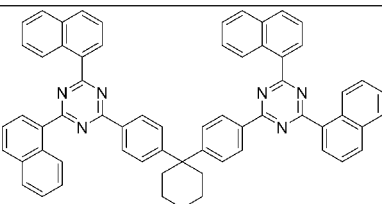
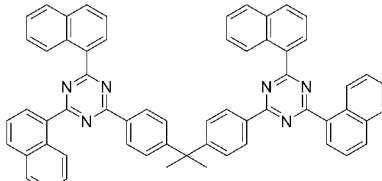
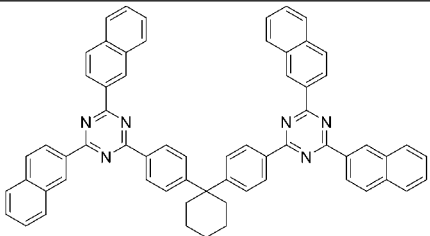
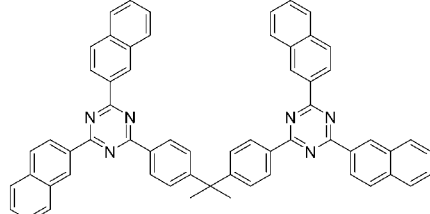
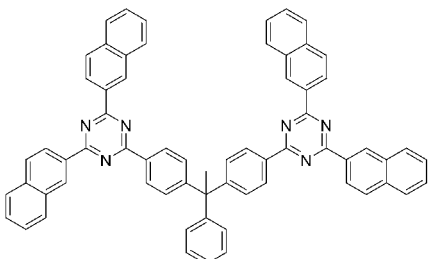
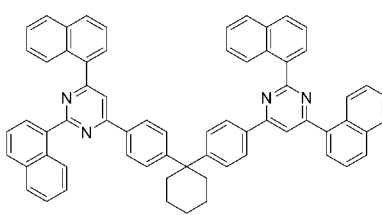
化合物 31	化合物 32
	
化合物 33	化合物 34
	
化合物 35	化合物 36
	
化合物 37	化合物 38
	
化合物 39	化合物 40
	

10

20

30

【表 5】

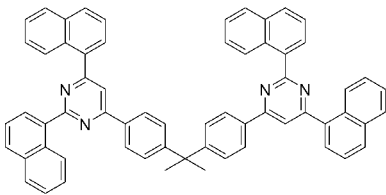
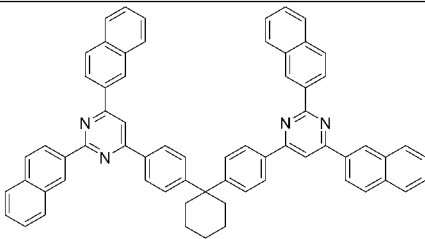
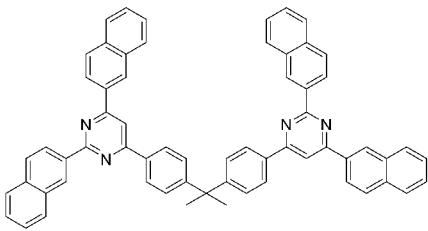
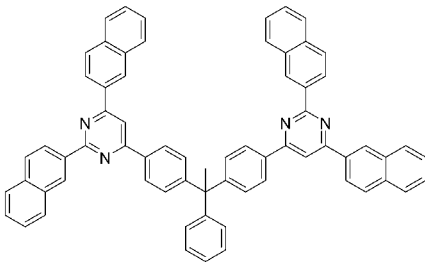
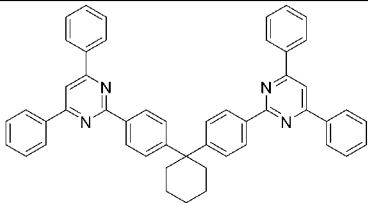
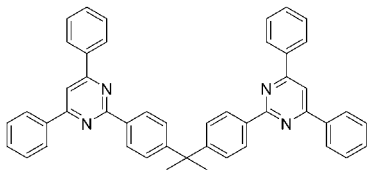
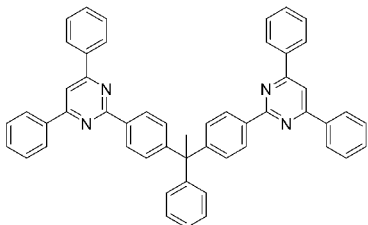
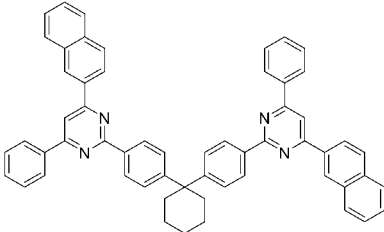
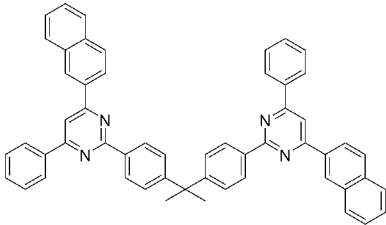
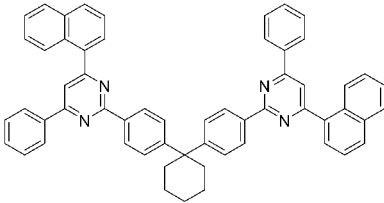
化合物 41	化合物 42
	
化合物 43	化合物 44
	
化合物 45	化合物 46
	
化合物 47	化合物 48
	
化合物 49	化合物 50
	

10

20

30

【表 6】

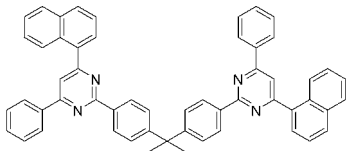
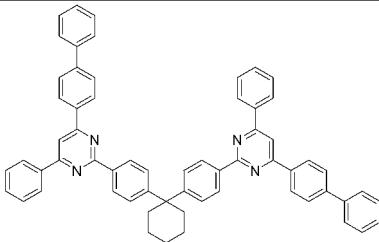
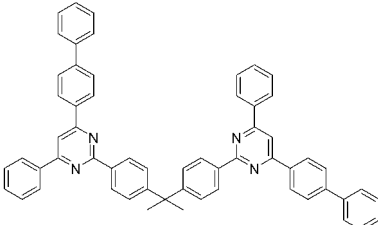
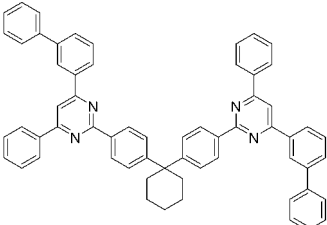
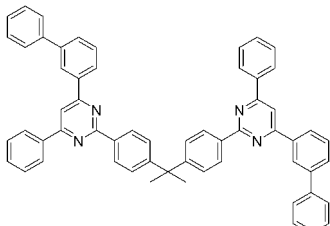
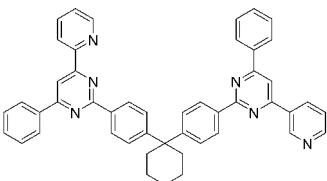
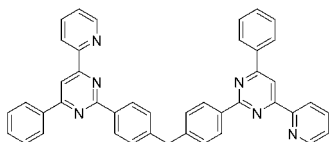
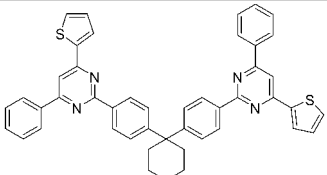
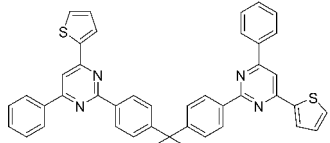
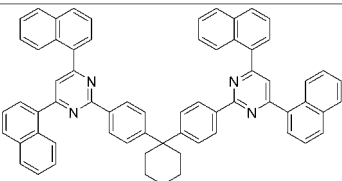
化合物 51	化合物 52
	
化合物 53	化合物 54
	
化合物 55	化合物 56
	
化合物 57	化合物 58
	
化合物 59	化合物 60
	

10

20

30

【表 7】

化合物 61	化合物 62
	
化合物 63	化合物 64
	
化合物 65	化合物 66
	
化合物 67	化合物 68
	
化合物 69	化合物 70
	

10

20

30

【表 8】

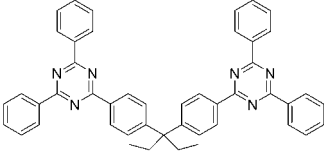
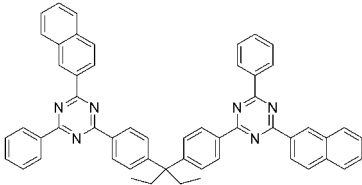
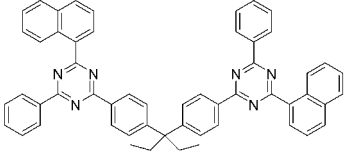
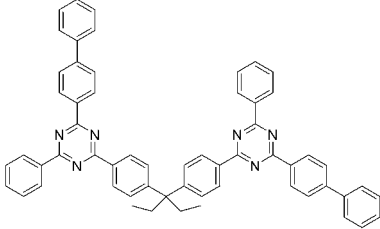
化合物 71	化合物 72
化合物 73	化合物 74
化合物 75	化合物 76
化合物 77	化合物 78
化合物 79	

10

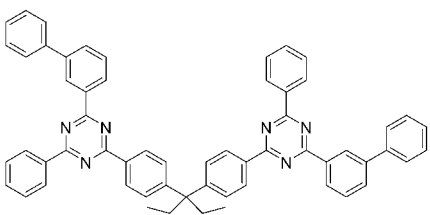
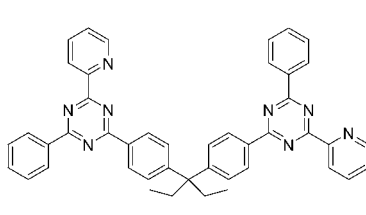
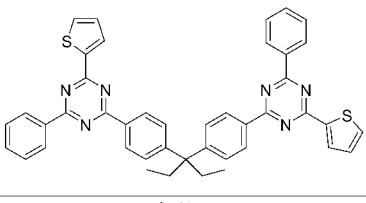
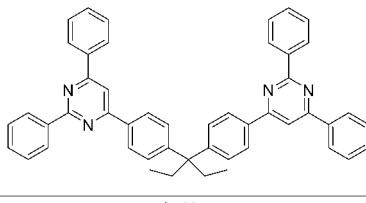
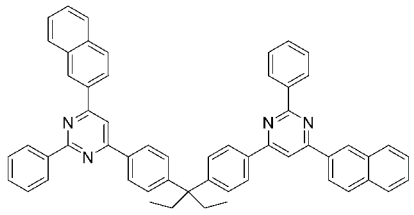
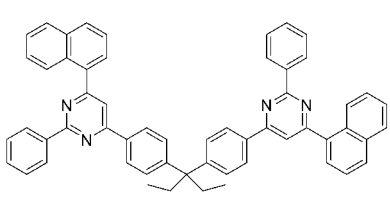
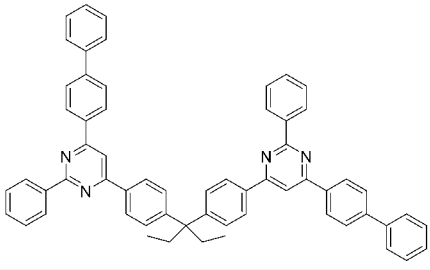
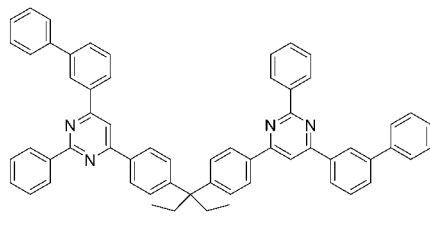
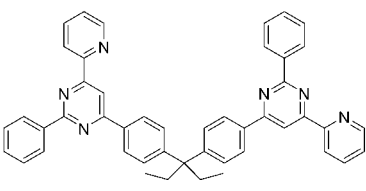
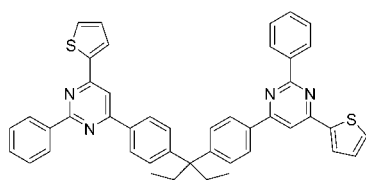
20

30

【表 9】

化合物 97	化合物 98
	
化合物 99	化合物 100
	

【表 10】

化合物 101	化合物 102
	
化合物 103	化合物 104
	
化合物 105	化合物 106
	
化合物 107	化合物 108
	
化合物 109	化合物 110
	

10

20

30

【表 1 1】

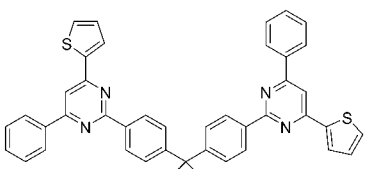
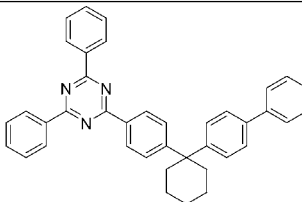
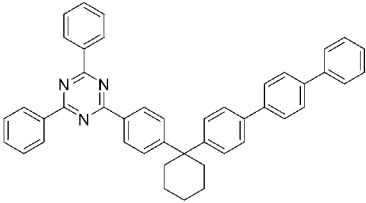
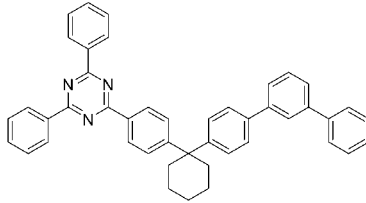
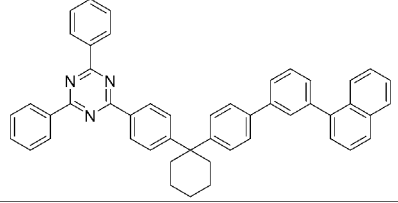
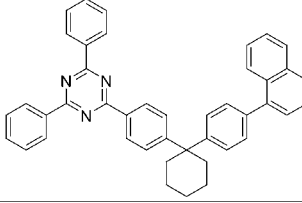
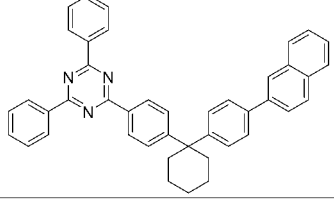
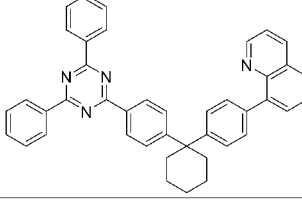
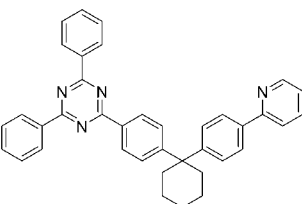
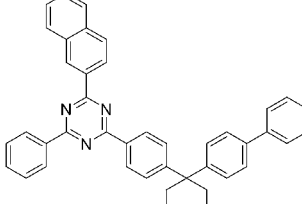
化合物 111	化合物 112
化合物 113	化合物 114
化合物 115	化合物 116
化合物 117	化合物 118
化合物 119	化合物 120

10

20

30

【表 1 2】

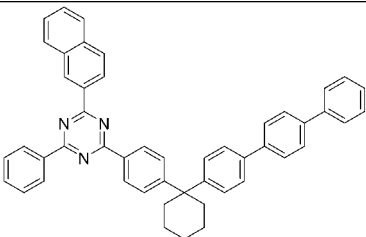
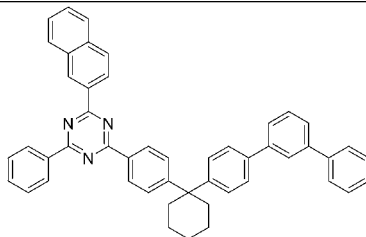
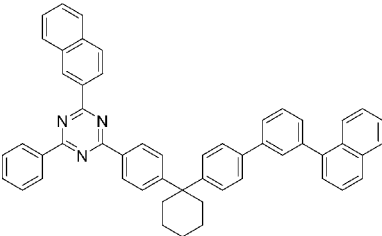
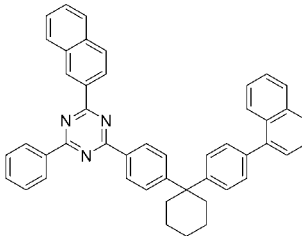
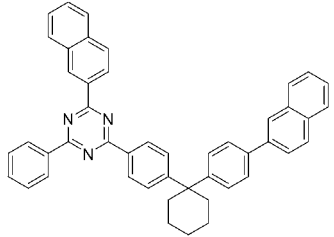
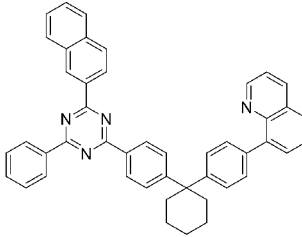
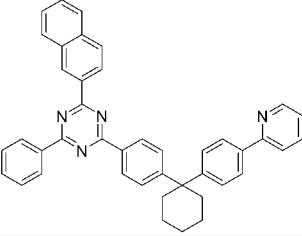
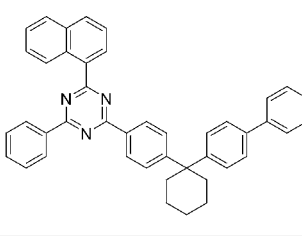
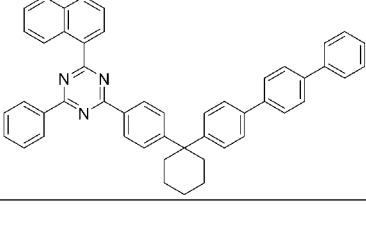
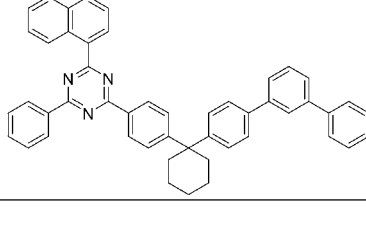
化合物 121	化合物 122
	
化合物 123	化合物 124
	
化合物 125	化合物 126
	
化合物 127	化合物 128
	
化合物 129	化合物 130
	

10

20

30

【表 1 3】

化合物 131	化合物 132
	
化合物 133	化合物 134
	
化合物 135	化合物 136
	
化合物 137	化合物 138
	
化合物 139	化合物 140
	

10

20

30

【表 1 4】

化合物 141	化合物 142
化合物 143	化合物 144
化合物 145	化合物 146
化合物 147	化合物 148
化合物 149	化合物 150

10

20

30

【表 1 5】

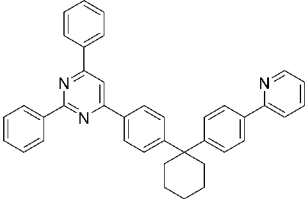
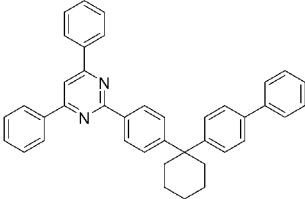
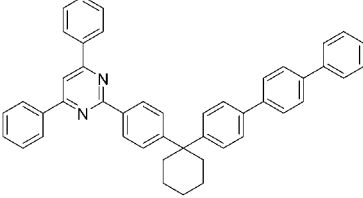
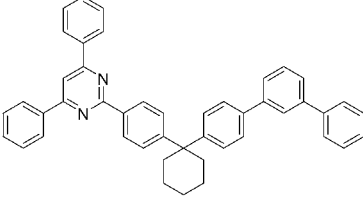
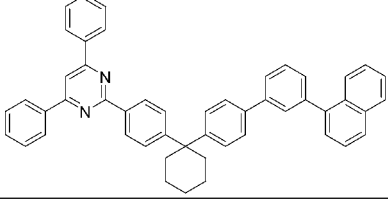
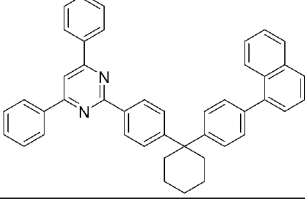
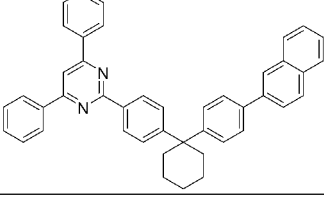
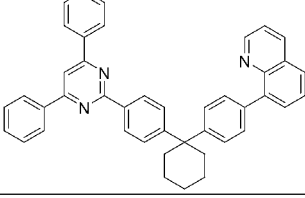
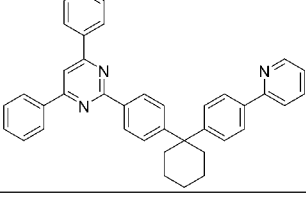
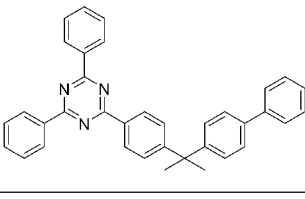
化合物 151	化合物 152
化合物 153	化合物 154
化合物 155	化合物 156
化合物 157	化合物 158
化合物 159	化合物 160

10

20

30

【表 1 6】

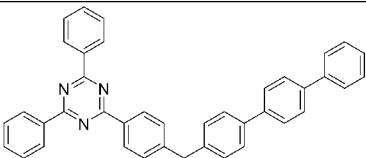
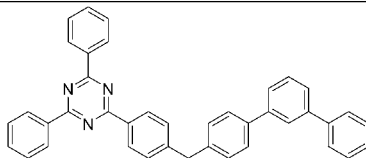
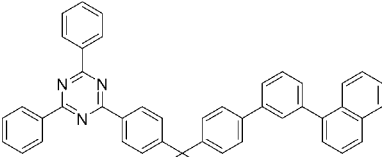
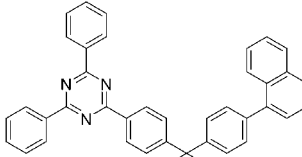
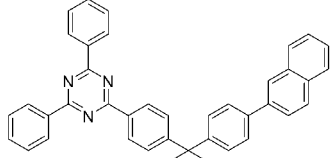
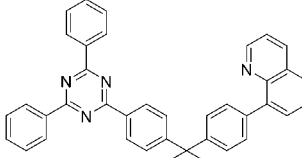
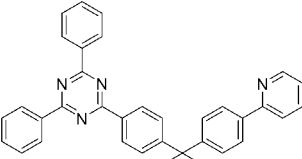
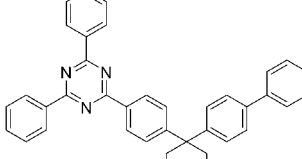
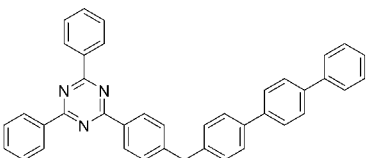
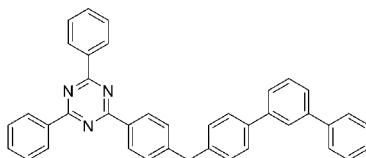
化合物 161	化合物 162
	
化合物 163	化合物 164
	
化合物 165	化合物 166
	
化合物 167	化合物 168
	
化合物 169	化合物 170
	

10

20

30

【表 1 7】

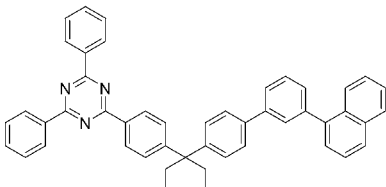
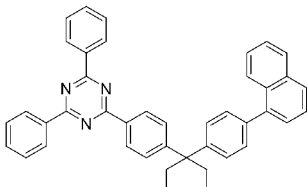
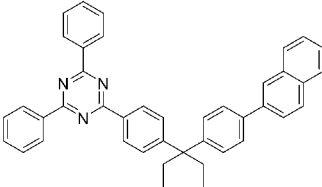
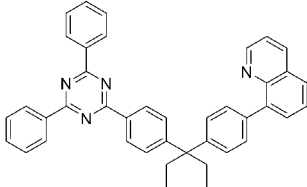
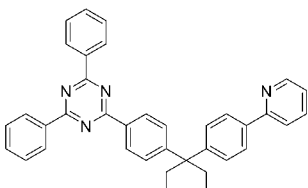
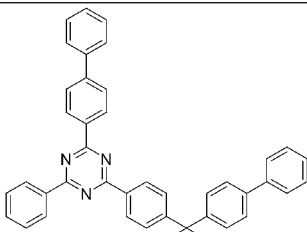
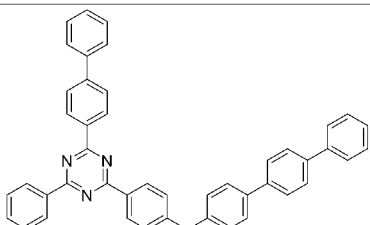
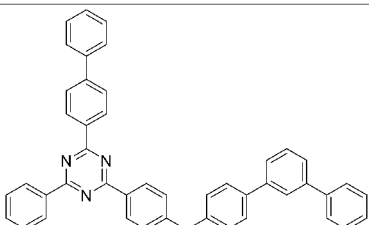
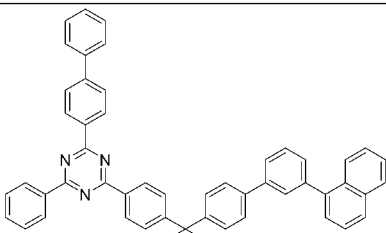
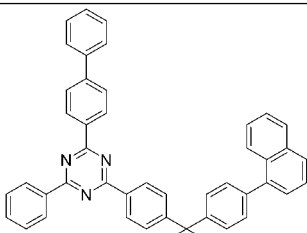
化合物 171	化合物 172
	
化合物 173	化合物 174
	
化合物 175	化合物 176
	
化合物 177	化合物 178
	
化合物 179	化合物 180
	

10

20

30

【表 1 8】

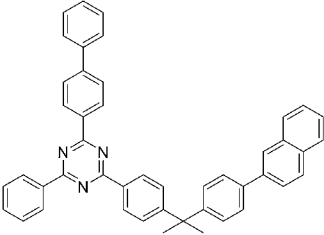
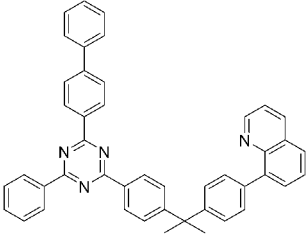
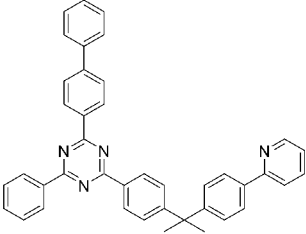
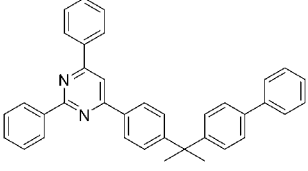
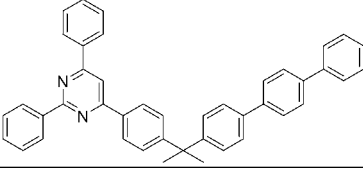
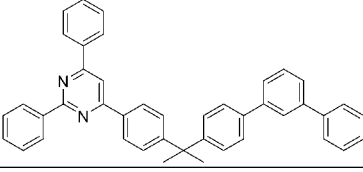
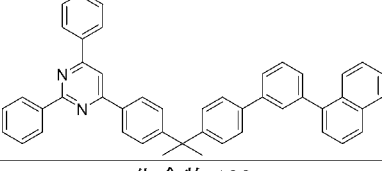
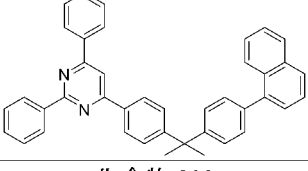
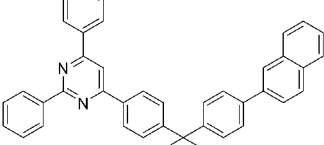
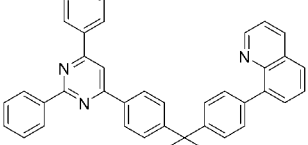
化合物 181	化合物 182
	
化合物 183	化合物 184
	
化合物 185	化合物 186
	
化合物 187	化合物 188
	
化合物 189	化合物 190
	

10

20

30

【表 1 9】

化合物 191	化合物 192
	
化合物 193	化合物 194
	
化合物 195	化合物 196
	
化合物 197	化合物 198
	
化合物 199	化合物 200
	

10

20

30

【表 20】

化合物 201	化合物 202
化合物 203	化合物 204
化合物 205	化合物 206
化合物 207	化合物 208
化合物 209	

【請求項 6】

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 電極と第 2 電極との間に備えられた 1 層または 2 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 1～5 のいずれか 1 項に記載の環化合物を含むものである有機発光素子。

【請求項 7】

前記有機物層は、正孔注入層または正孔輸送層を含み、前記正孔注入層または正孔輸送層は、前記環化合物を含むものである請求項 6 に記載の有機発光素子。

【請求項 8】

前記有機物層は、発光層を含み、前記発光層は、前記環化合物を含むものである請求項 6 に記載の有機発光素子。

【請求項 9】

前記有機物層は、電子輸送層、電子注入層、または電子輸送および電子注入を同時に行う層を含み、前記電子輸送層、電子注入層、または電子輸送および電子注入を同時に行う層は、前記環化合物を含むものである請求項 6 に記載の有機発光素子。

【請求項 10】

前記有機物層は、正孔阻止層を含み、前記正孔阻止層は、前記環化合物を含むものである請求項 6 に記載の有機発光素子。

【請求項 11】

前記有機物層は、正孔注入層、正孔輸送層、発光層、正孔阻止層、電子輸送層、および電子注入層からなる群より選択される 1 層または 2 層以上をさらに含むものである請求項

10

20

30

40

50

6に記載の有機発光素子。

【発明の詳細な説明】

【技術分野】

【0001】

本出願は、2014年10月30日付で韓国特許庁に提出された韓国特許出願第10-2014-0149355号の出願日の利益を主張し、その内容のすべては本明細書に組み込まれる。

【0002】

本明細書は、環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】

10

【0003】

一般的に、有機発光現象とは、有機物質を用いて電気エネルギーを光エネルギーに転換させる現象をいう。有機発光現象を利用する有機発光素子は、通常、陽極および陰極と、これらの間に有機物層とを含む構造を有する。ここで、有機物層は、有機発光素子の効率と安定性を高めるために、それぞれ異なる物質で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、陽極からは正孔が、陰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会った時、エキシトン (exciton) が形成され、このエキシトンが再び基底状態に落ちる時に光を発する。

20

【0004】

前記のような有機発光素子のための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】

【0005】

【特許文献1】国際公開第2003-012890号

【発明の概要】

【発明が解決しようとする課題】

【0006】

本明細書は、環化合物およびこれを含む有機発光素子を提供する。

30

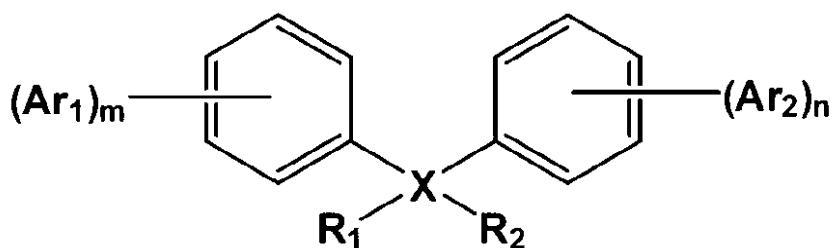
【課題を解決するための手段】

【0007】

本明細書は、下記化学式1で表される環化合物を提供する。

[化学式1]

【化1】



40

前記化学式1において、

【0008】

Ar₁およびAr₂は、互いに同一または異なり、それぞれ独立に、水素；重水素；ニトリル基；置換もしくは非置換の炭素数6～30の単環もしくは多環のアリール基；および置換もしくは非置換の炭素数2～30の単環もしくは多環のヘテロアリール基からなる群より選択され、

mおよびnは、互いに同一または異なり、それぞれ独立に、1～5の整数であり、

50

前記 m が2以上の場合、前記 $A r_1$ は、互いに同一または異なり、
前記 n が2以上の場合、前記 $A r_2$ は、互いに同一または異なり、
 X は、非コンジュゲーション基であり、

R_1 および R_2 は、互いに同一または異なり、それぞれ独立に、水素；重水素；ニトリル基；置換もしくは非置換の炭素数1～30の直鎖もしくは分枝鎖のアルキル基；置換もしくは非置換の炭素数3～30の単環もしくは多環のシクロアルキル基；置換もしくは非置換の炭素数6～30の単環もしくは多環のアリール基；および置換もしくは非置換の炭素数2～30の単環もしくは多環のヘテロアリール基からなる群より選択されるか、 R_1 および R_2 は、互いに連結されて置換もしくは非置換の単環もしくは多環の炭化水素環；または置換もしくは非置換の単環もしくは多環のヘテロ環を形成してもよい。

10

【0009】

また、本明細書の一実施態様によれば、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電極と第2電極との間に備えられた1層または2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で表される環化合物を含む。

【発明の効果】

【0010】

本明細書の一実施態様に係る環化合物は、有機発光素子の有機物層の材料として使用可能であり、これを用いることにより、有機発光素子における効率の向上、低い駆動電圧および／または寿命特性の向上が可能である。

20

【0011】

また、本明細書の一実施態様に係る有機発光素子は、広いバンドギャップを有し、深い最高準位占有分子軌道（HOMO）レベルを有する。

【図面の簡単な説明】

【0012】

【図1】本明細書の一実施態様に係る有機発光素子10を示すものである。

【図2】本明細書のもう一つの実施態様に係る有機発光素子11を示すものである。

【発明を実施するための形態】

【0013】

以下、本明細書についてより詳細に説明する。

30

【0014】

本明細書は、前記化学式1で表される環化合物を提供する。

【0015】

本明細書において、ある部分がある構成要素を「含む」とする時、これは、特に反対となる記載がない限り、他の構成要素を除くのではなく、他の構成要素をさらに包含できることを意味する。

【0016】

本明細書において、ある部材が他の部材「上に」位置しているとする時、これは、ある部材が他の部材に接している場合のみならず、2つの部材の間にさらに他の部材が存在する場合も含む。

40

【0017】

本明細書において、置換基の例示は以下に説明するが、これに限定されるものではない。

【0018】

前記「置換」という用語は、化合物の炭素原子に結合された水素原子が他の置換基に変わることを意味し、置換される位置は、水素原子の置換される位置すなわち、置換基が置換可能な位置であれば限定はなく、2以上置換される場合、2以上の置換基は、互いに同一または異なってもよい。

【0019】

本明細書において、「置換もしくは非置換の」という用語は、重水素；ハロゲン基；ニ

50

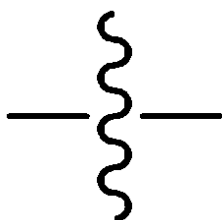
トリル基；ニトロ基；イミド基；アミド基；ヒドロキシ基；置換もしくは非置換のアルキル基；置換もしくは非置換のシクロアルキル基；置換もしくは非置換のアルコキシ基；置換もしくは非置換のアルケニル基；置換もしくは非置換のアミン基；置換もしくは非置換のアリール基；および置換もしくは非置換のヘテロ環基からなる群より選択された1または2以上の置換基で置換されているか、前記例示された置換基のうちの2以上の置換基が連結された置換基で置換されるか、またはいずれの置換基も有しないことを意味する。例えば、「2以上の置換基が連結された置換基」は、ビフェニル基であってもよい。すなわち、ビフェニル基は、アリール基であってもよく、2個のフェニル基が連結された置換基として解釈できる。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基で置換もしくは非置換であることを意味する。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して解釈できる。

10

【0020】

本明細書において、

【化2】



20

は、他の置換基または結合部に結合される部位を意味する。

【0021】

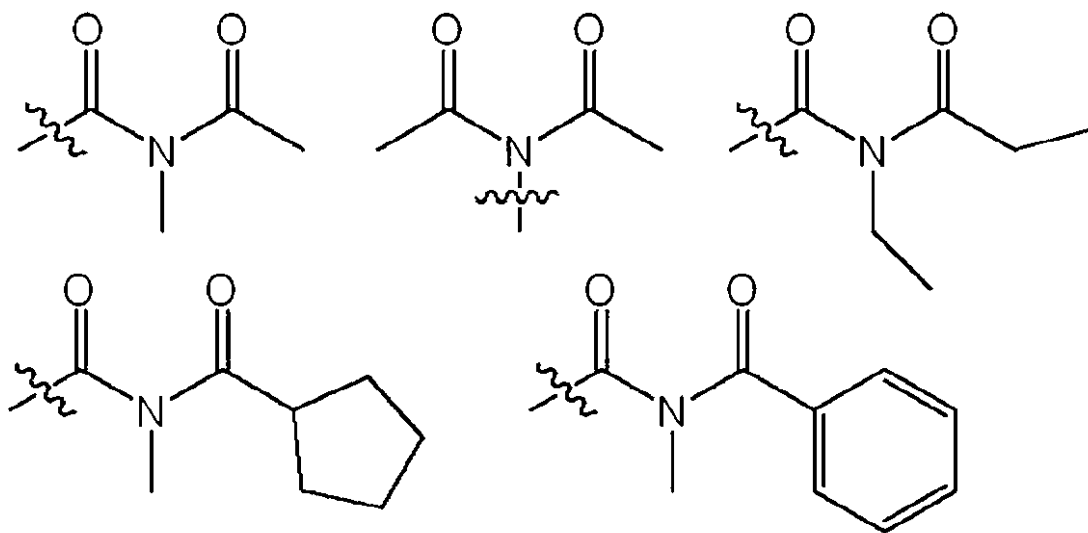
本明細書において、ハロゲン基は、フッ素、塩素、臭素、またはヨウ素になっていてもよい。

【0022】

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1～30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になっていてもよいが、これに限定されるものではない。

30

【化3】



40

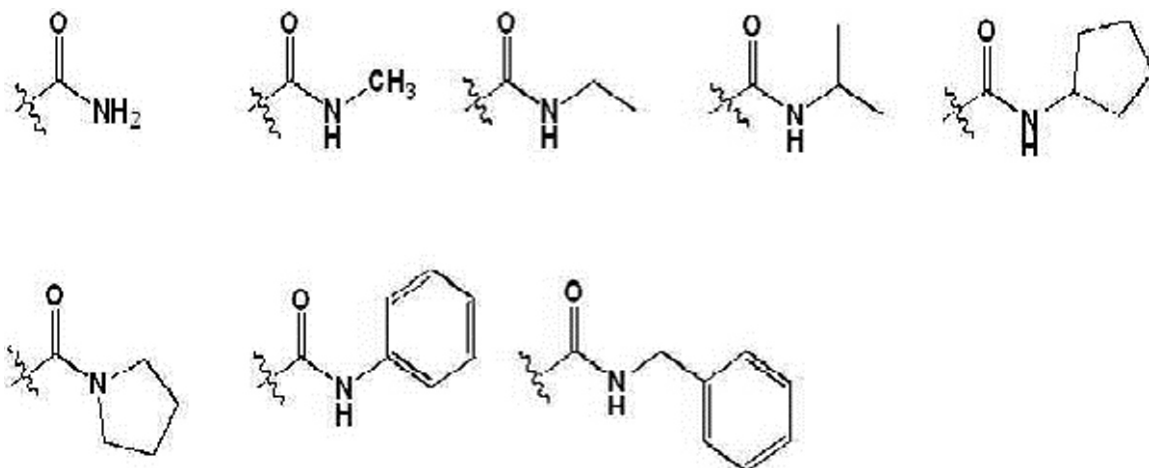
【0023】

本明細書において、アミド基は、アミド基の窒素が水素、炭素数1～30の直鎖、分枝鎖もしくは環鎖アルキル基、または炭素数6～30のアリール基で1または2置換されていてもよい。具体的には、下記構造式の化合物になっていてもよいが、これに限定される

50

ものではない。

【化 4】



10

【0024】

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、1～30であることが好ましい。具体例としては、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、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、1-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-プロピルペンチル、*n*-ノニル、2,2-ジメチルヘプチル、1-エチルプロピル、1,1-ジメチルプロピル、イソヘキシル、2-メチルペンチル、4-メチルヘキシル、5-メチルヘキシルなどがあるが、これらに限定されない。

20

【0025】

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3～30であることが好ましく、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、これらに限定されない。

30

【0026】

本明細書において、前記アルコキシ基は、直鎖、分枝鎖もしくは環鎖であってもよい。アルコキシ基の炭素数は特に限定されないが、炭素数1～30であることが好ましい。具体的には、メトキシ、エトキシ、*n*-プロポキシ、イソプロポキシ、*i*-プロピルオキシ、*n*-ブトキシ、イソブトキシ、*tert*-ブトキシ、*sec*-ブトキシ、*n*-ペンチルオキシ、ネオペンチルオキシ、イソペンチルオキシ、*n*-ヘキシルオキシ、3,3-ジメチルブチルオキシ、2-エチルブチルオキシ、*n*-オクチルオキシ、*n*-ノニルオキシ、*n*-デシルオキシ、ベンジルオキシ、*p*-メチルベンジルオキシなどになっていてもよいが、これらに限定されるものではない。

40

【0027】

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、2～30であることが好ましい。具体例としては、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

50

ージフェニルビニル-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、これらに限定されない。

【0028】

本明細書において、アミン基は、 $-NH_2$ ；アルキルアミン基；アラルキルアミン基；アリールアミン基；およびヘテロアリールアミン基からなる群より選択されてもよいし、置換基に含まれる炭素の数は特に限定されないが、1～30であることが好ましい。アミン基の具体例としては、メチルアミン基、ジメチルアミン基、エチルアミン基、ジエチルアミン基、フェニルアミン基、ナフチルアミン基、ピフェニルアミン基、アントラセニルアミン基、9-メチル-アントラセニルアミン基、ジフェニルアミン基、フェニルナフチルアミン基、ジトリルアミン基、フェニルトリルアミン基、トリフェニルアミン基などがあるが、これらにのみ限定されるものではない。

10

【0029】

前記アリール基が単環式アリール基の場合、炭素数は特に限定されないが、炭素数6～25であることが好ましい。具体的には、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になっていてもよいが、これらに限定されるものではない。

【0030】

前記アリール基が多環式アリール基の場合、炭素数は特に限定されないが、炭素数10～24であることが好ましい。具体的には、多環式アリール基としては、ナフチル基、トリフェニレニル基、アントラセニル基、フェナントリル基、ピレニル基、ペリレニル基、クリセニル基、フルオレニル基などになっていてもよいが、これらに限定されるものではない。

20

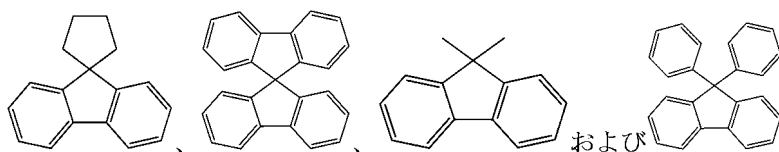
【0031】

本明細書において、前記フルオレニル基は、置換されていてもよいし、隣接した置換基が互いに結合して環を形成してもよい。

【0032】

前記フルオレニル基が置換される場合、

【化5】



30

などになっていてもよい。ただし、これらに限定されるものではない。

【0033】

本明細書において、ヘテロアリール基は、炭素でない原子、異種原子を1以上含むものであって、具体的には、前記異種原子は、O、N、Se、およびSなどからなる群より選択される原子を1以上含むことができる。炭素数は特に限定されないが、炭素数2～60のものが好ましい。ヘテロ環基の例としては、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、ピリジル基、ビピリジル基、ピリミジル基、トリアジン基、トリアゾール基、アクリジル基、ピリダジニル基、ピラジニル基、キノリニル基、キナゾリル基、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、イソキノリン基、インドール基、カルバゾール基、ベンズオキサゾール基、ベンズイミダゾール基、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、チアゾリル基、イソオキサゾリル基、オキサジアゾリル基、チアジアゾリル基、ベンゾチアゾリル基、チエノチオフェン基、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、これらにのみ限定されるものではない。

40

50

【0034】

前記ヘテロアリール基は、単環もしくは多環であってもよく、芳香族、脂肪族、または芳香族と脂肪族との縮合環であってもよい。

【0035】

本明細書において、アリーレン基は、アリール基に結合位置が2つあるものすなわち、2価の置換基を意味する。これらは、それぞれ2価の置換基であることを除けば、上述したアリール基の説明が適用可能である。

【0036】

本明細書において、ヘテロアリーレン基は、ヘテロアリール基に結合位置が2つあるものすなわち、2価の置換基を意味する。これらは、それぞれ2価の置換基であることを除けば、上述したヘテロアリール基の説明が適用可能である。

10

【0037】

本明細書において、炭化水素環は、シクロアルキル基；シクロアルケニル基；芳香族環基；または脂肪族環基をすべて含み、単環もしくは多環であってもよく、これらが1または2以上結合して縮合された環をすべて含む。

【0038】

本明細書において、芳香族環は、単環もしくは多環であってもよく、1価でないことを除き、前記アリール基の例示の中から選択されてもよい。

【0039】

本明細書において、ヘテロ環は、脂肪族環または芳香族環であってもよく、前記脂肪族または芳香族環のうちの少なくとも1つの炭素原子がN、O、S e、またはS原子で置換されたものを意味し、単環もしくは多環であってもよい。

20

【0040】

本明細書の一実施態様によれば、前記化学式1において、前記Ar₁のうちの少なくとも1つは、-L₁-(Z₁)_pであり、

L₁は、直接結合；置換もしくは非置換の炭素数6～30の単環もしくは多環のアリーレン基；および置換もしくは非置換の炭素数2～30の単環もしくは多環のヘテロアリーレン基からなる群より選択され、

Z₁は、水素；重水素；ニトリル基；置換もしくは非置換の炭素数6～30の単環もしくは多環のアリール基；および置換もしくは非置換の炭素数2～30の単環もしくは多環のヘテロアリール基からなる群より選択され、

30

ただし、L₁が直接結合の場合、Z₁は、水素でなく、

pは、1～3の整数であり、前記pが2以上の場合、前記Z₁は、互いに同一または異なる。

【0041】

本明細書のもう一つの実施態様によれば、前記L₁は、直接結合；置換もしくは非置換の炭素数6～20の単環もしくは多環のアリーレン基；および置換もしくは非置換の炭素数2～20の単環もしくは多環のヘテロアリーレン基からなる群より選択される。

【0042】

本明細書のもう一つの実施態様によれば、前記L₁は、直接結合；置換もしくは非置換の炭素数6～10の単環もしくは多環のアリーレン基；および置換もしくは非置換の炭素数2～10の単環もしくは多環のヘテロアリーレン基からなる群より選択される。

40

【0043】

本明細書のもう一つの実施態様によれば、前記L₁は、直接結合；置換もしくは非置換のフェニレン基；置換もしくは非置換のビフェニリレン基；置換もしくは非置換のナフチレン基；置換もしくは非置換のピリミジレン基；置換もしくは非置換のキノリレン基；置換もしくは非置換のキナゾリレン基；置換もしくは非置換のピリジレン基；および置換もしくは非置換のトリアジニレン基からなる群より選択される。

【0044】

本明細書のもう一つの実施態様によれば、前記L₁は、直接結合；フェニレン基；ビフ

50

ェニリレン基；ナフチレン基；ピリミジレン基；キノリレン基；キナゾリレン基；ピリジレン基；およびトリアジニレン基からなる群より選択される。

【0045】

本明細書のもう一つの実施態様によれば、前記 Z_1 は、水素；重水素；ニトリル基；置換もしくは非置換の炭素数6～20の単環もしくは多環のアリール基；および置換もしくは非置換の炭素数2～20の単環もしくは多環のヘテロアリール基からなる群より選択される。

【0046】

本明細書のもう一つの実施態様によれば、前記 Z_1 は、水素；重水素；ニトリル基；置換もしくは非置換の炭素数6～10の単環もしくは多環のアリール基；および置換もしくは非置換の炭素数2～10の単環もしくは多環のヘテロアリール基からなる群より選択される。

10

【0047】

本明細書のもう一つの実施態様によれば、前記 Z_1 は、水素；重水素；ニトリル基；置換もしくは非置換のフェニル基；置換もしくは非置換のビフェニル基；置換もしくは非置換のナフチル基；置換もしくは非置換のチオフエン基；置換もしくは非置換のキノリル基；および置換もしくは非置換のピリジル基からなる群より選択される。

【0048】

本明細書のもう一つの実施態様によれば、前記 Z_1 は、水素；重水素；ニトリル基；フェニル基；ビフェニル基；ナフチル基；チオフエン基；キノリル基；ピリジル基；フェニル基で置換されたキノリル基；ピリジル基で置換されたキノリル基；およびピリジル基およびフェニル基で置換されたキノリル基；からなる群より選択される。

20

【0049】

本明細書の一実施態様によれば、前記化学式1において、前記 Ar_2 のうちの少なくとも1つは、 $-L_2-(Z_2)_q$ であり、

L_2 は、直接結合；置換もしくは非置換の炭素数6～30の単環もしくは多環のアリーレン基；および置換もしくは非置換の炭素数2～30の単環もしくは多環のヘテロアリーレン基からなる群より選択され、

Z_2 は、水素；重水素；ニトリル基；置換もしくは非置換の炭素数6～30の単環もしくは多環のアリール基；および置換もしくは非置換の炭素数2～30の単環もしくは多環のヘテロアリール基からなる群より選択され、

30

ただし、 L_2 が直接結合の場合、 Z_2 は、水素でなく、

q は、1～3の整数であり、前記 q が2以上の場合、前記 Z_2 は、互いに同一または異なる。

【0050】

本明細書のもう一つの実施態様によれば、前記 L_2 は、直接結合；置換もしくは非置換の炭素数6～20の単環もしくは多環のアリーレン基；および置換もしくは非置換の炭素数2～20の単環もしくは多環のヘテロアリーレン基からなる群より選択される。

【0051】

本明細書のもう一つの実施態様によれば、前記 L_2 は、直接結合；置換もしくは非置換の炭素数6～10の単環もしくは多環のアリーレン基；および置換もしくは非置換の炭素数2～10の単環もしくは多環のヘテロアリーレン基からなる群より選択される。

40

【0052】

本明細書のもう一つの実施態様によれば、前記 L_2 は、直接結合；置換もしくは非置換のフェニレン基；置換もしくは非置換のビフェニリレン基；置換もしくは非置換のナフチレン基；置換もしくは非置換のピリミジレン基；置換もしくは非置換のキノリレン基；置換もしくは非置換のキナゾリレン基；置換もしくは非置換のピリジレン基；および置換もしくは非置換のトリアジニレン基からなる群より選択される。

【0053】

本明細書のもう一つの実施態様によれば、前記 L_2 は、直接結合；フェニレン基；ビフ

50

ェニリレン基；ナフチレン基；ピリミジレン基；キノリレン基；キナゾリレン基；ピリジレン基；およびトリアジニレン基からなる群より選択される。

【0054】

本明細書のもう一つの実施態様によれば、前記 Z_2 は、水素；重水素；ニトリル基；置換もしくは非置換の炭素数6～20の単環もしくは多環のアリール基；および置換もしくは非置換の炭素数2～20の単環もしくは多環のヘテロアリール基からなる群より選択される。

【0055】

本明細書のもう一つの実施態様によれば、前記 Z_2 は、水素；重水素；ニトリル基；置換もしくは非置換の炭素数6～10の単環もしくは多環のアリール基；および置換もしくは非置換の炭素数2～10の単環もしくは多環のヘテロアリール基からなる群より選択される。

10

【0056】

本明細書のもう一つの実施態様によれば、前記 Z_2 は、水素；重水素；ニトリル基；置換もしくは非置換のフェニル基；置換もしくは非置換のビフェニル基；置換もしくは非置換のナフチル基；置換もしくは非置換のチオフエン基；置換もしくは非置換のキノリル基；および置換もしくは非置換のピリジル基からなる群より選択される。

【0057】

本明細書のもう一つの実施態様によれば、前記 Z_2 は、水素；重水素；ニトリル基；フェニル基；ビフェニル基；ナフチル基；チオフエン基；キノリル基；ピリジル基；フェニル基で置換されたキノリル基；ピリジル基で置換されたキノリル基；およびピリジル基およびフェニル基で置換されたキノリル基からなる群より選択される。

20

【0058】

本明細書の一実施態様によれば、前記化学式1において、前記Xは、非コンジュゲーション基である。

【0059】

本明細書の一実施態様によれば、前記Xは、炭素であってもよい。

【0060】

本明細書の一実施態様に係る化学式1で表される環化合物は、 Ar_1 および Ar_2 の間にコンジュゲーションを抑制する構造を導入することにより、従来の有機発光素子で 사용되는有機物質より広いバンドギャップを有することが特徴であり、これによって、深いHOMOレベルを有することができる。

30

【0061】

本明細書の一実施態様によれば、前記化学式1において、前記 R_1 および R_2 は、互いに同一または異なり、それぞれ独立に、水素；重水素；ニトリル基；置換もしくは非置換の炭素数1～20の直鎖もしくは分枝鎖のアルキル基；置換もしくは非置換の炭素数3～20の単環もしくは多環のシクロアルキル基；置換もしくは非置換の炭素数6～20の単環もしくは多環のアリール基；および置換もしくは非置換の炭素数2～20のヘテロアリール基からなる群より選択される。

【0062】

本明細書のもう一つの実施態様によれば、前記 R_1 および R_2 は、互いに同一または異なり、それぞれ独立に、水素；重水素；ニトリル基；置換もしくは非置換の炭素数1～10の直鎖もしくは分枝鎖のアルキル基；置換もしくは非置換の炭素数3～10の単環もしくは多環のシクロアルキル基；置換もしくは非置換の炭素数6～10の単環もしくは多環のアリール基；および置換もしくは非置換の炭素数2～10のヘテロアリール基からなる群より選択される。

40

【0063】

本明細書のもう一つの実施態様によれば、前記 R_1 および R_2 は、互いに同一または異なり、それぞれ独立に、水素；置換もしくは非置換のフェニル基；および置換もしくは非置換のナフチル基からなる群より選択される。

50

【0064】

本明細書のもう一つの実施態様によれば、前記 R_1 および R_2 は、互いに同一または異なり、それぞれ独立に、水素；フェニル基；およびナフチル基からなる群より選択される。

【0065】

本明細書のもう一つの実施態様によれば、前記 R_1 および R_2 は、互いに同一または異なり、それぞれ独立に、置換もしくは非置換のメチル基；および置換もしくは非置換のエチル基からなる群より選択される。

【0066】

本明細書のもう一つの実施態様によれば、前記 R_1 および R_2 は、互いに連結されて置換もしくは非置換の炭化水素環を形成してもよい。

10

【0067】

本明細書のもう一つの実施態様によれば、前記 R_1 および R_2 は、互いに連結されて置換もしくは非置換のシクロヘキシル環を形成してもよい。

【0068】

本明細書のもう一つの実施態様によれば、前記 R_1 および R_2 は、互いに連結されてシクロヘキシル環を形成してもよい。

【0069】

本明細書のもう一つの実施態様によれば、前記 Ar_1 および Ar_2 は、互いに同一または異なり、それぞれ独立に、置換もしくは非置換の6員のヘテロ環を含む単環もしくは多環のヘテロアリール基である。

20

【0070】

本明細書のもう一つの実施態様によれば、前記 Ar_1 および Ar_2 は、互いに同一または異なり、それぞれ独立に、置換もしくは非置換の6員のヘテロアリール基である。

【0071】

本明細書のもう一つの実施態様によれば、前記 Ar_1 および Ar_2 は、互いに同一または異なり、それぞれ独立に、置換もしくは非置換の6員のヘテロ環を含む多環のヘテロアリール基である。

【0072】

本明細書のもう一つの実施態様によれば、前記 Ar_1 および Ar_2 は、互いに同一または異なり、それぞれ独立に、置換もしくは非置換のピリジル基；置換もしくは非置換のピリミジル基；または置換もしくは非置換のトリアジニル基を含む単環もしくは多環のヘテロアリール基である。

30

【0073】

本明細書のもう一つの実施態様によれば、前記 Ar_1 および Ar_2 は、互いに同一または異なり、それぞれ独立に、置換もしくは非置換のピリジル基；置換もしくは非置換のピリミジル基；置換もしくは非置換のトリアジニル基；置換もしくは非置換のキノリル基；置換もしくは非置換のキナゾリニル基；または置換もしくは非置換のキノキサリニル基である。

【0074】

本明細書のもう一つの実施態様によれば、前記 Ar_1 および Ar_2 は、互いに同一または異なり、それぞれ独立に、ピリジル基；ピリミジル基；トリアジニル基；キノリル基；またはキナゾリニル基である。

40

【0075】

前記 Ar_1 および Ar_2 は、ニトリル基；フェニル基；ビフェニル基；ナフチル基；チオフエン基；フェニル基で置換されたキノリル基、ピリジル基で置換されたキノリル基、およびピリジル基からなる群より選択される1以上で置換もしくは非置換であってもよい。

【0076】

本明細書のもう一つの実施態様によれば、前記 R_1 および R_2 は、互いに同一または異

50

なり、それぞれ独立に、置換もしくは非置換のメチル基；および置換もしくは非置換のエチル基からなる群より選択され、前記 Ar_1 および Ar_2 は、互いに同一または異なり、それぞれ独立に、置換もしくは非置換の6員のヘテロ環を含む単環のヘテロアリール基である。前記例示した R_1 、 R_2 、 Ar_1 および Ar_2 を置換基として含む前記化学式1で表される環化合物は、 sp^3 結合と前記 Ar_1 および Ar_2 の立体効果 (steric effect) によって分子内の広いバンドギャップを誘導し、高いトリプレット (triplet) を形成し、 sp^3 結合する4方向の置換基のうち、前記 R_1 および R_2 を除いた2方向だけがコンジュゲーショングループであるので、分子間の影響で π - π オーバーラップが少ないことから、有機発光素子内で優れた正孔移動度および／または電子移動度を示すため、有機発光素子の効率の向上が可能である。

10

【0077】

本明細書のもう一つの実施態様によれば、前記 R_1 および R_2 は、互いに同一または異なり、それぞれ独立に、置換もしくは非置換のメチル基；および置換もしくは非置換のエチル基からなる群より選択され、前記 Ar_1 および Ar_2 は、互いに同一または異なり、それぞれ独立に、置換もしくは非置換のピリジル基、置換もしくは非置換のピリミジル基、または置換もしくは非置換のトリアジニル基である。

【0078】

本明細書のもう一つの実施態様によれば、前記 R_1 および R_2 は、互いに同一または異なり、それぞれ独立に、メチル基；およびエチル基からなる群より選択され、前記 Ar_1 および Ar_2 は、互いに同一または異なり、それぞれ独立に、ピリジル基、ピリミジル基、またはトリアジニル基である。

20

【0079】

前記 Ar_1 および Ar_2 は、ニトリル基；フェニル基；ビフェニル基；ナフチル基；チオフェン基；フェニル基で置換されたキノリル基、ピリジル基で置換されたキノリル基、およびピリジル基からなる群より選択される1以上で置換もしくは非置換であってもよい。

【0080】

本明細書のもう一つの実施態様によれば、前記 R_1 および R_2 は、互いに連結されて置換もしくは非置換の炭化水素環を形成し、前記 Ar_1 および Ar_2 は、互いに同一または異なり、それぞれ独立に、置換もしくは非置換の6員のヘテロ環を含む単環のヘテロアリール基である。

30

【0081】

本明細書のもう一つの実施態様によれば、前記 R_1 および R_2 は、互いに連結されて置換もしくは非置換のシクロヘキシル環を形成し、前記 Ar_1 および Ar_2 は、互いに同一または異なり、それぞれ独立に、置換もしくは非置換の6員のヘテロ環を含む単環のヘテロアリール基である。前記例示した R_1 、 R_2 、 Ar_1 および Ar_2 を置換基として含む前記化学式1で表される環化合物は、 sp^3 結合と前記 Ar_1 および Ar_2 の立体効果 (steric effect) によって分子内の広いバンドギャップを誘導し、高いトリプレット (triplet) を形成し、 sp^3 結合する4方向の置換基のうち、前記 R_1 および R_2 を除いた2方向だけがコンジュゲーショングループであるので、分子間の影響で π - π オーバーラップが少ないことから、有機発光素子内で優れた正孔移動度および／または電子移動度を示すため、有機発光素子の効率の向上が可能である。

40

【0082】

本明細書のもう一つの実施態様によれば、前記 R_1 および R_2 は、互いに連結されて置換もしくは非置換のシクロヘキシル環を形成し、前記 Ar_1 および Ar_2 は、互いに同一または異なり、それぞれ独立に、置換もしくは非置換のピリジル基、置換もしくは非置換のピリミジル基、または置換もしくは非置換のトリアジニル基である。

【0083】

本明細書のもう一つの実施態様によれば、前記 R_1 および R_2 は、互いに連結されてシクロヘキシル環を形成し、前記 Ar_1 および Ar_2 は、互いに同一または異なり、それぞ

50

れ独立に、ピリジル基、ピリミジル基、またはトリアジニル基である。

【0084】

前記 $A r_1$ および $A r_2$ は、ニトリル基；フェニル基；ビフェニル基；ナフチル基；チオフェン基；フェニル基で置換されたキノリル基、ピリジル基で置換されたキノリル基、およびピリジル基からなる群より選択される1以上で置換もしくは非置換であってもよい。

【0085】

本明細書のもう一つの実施態様によれば、前記 R_1 および R_2 は、互いに連結されて置換もしくは非置換の炭化水素環を形成し、前記 $A r_1$ および $A r_2$ は、互いに同一または異なり、それぞれ独立に、置換もしくは非置換の6員のヘテロ環を含む多環のヘテロアリール基である。

10

【0086】

本明細書のもう一つの実施態様によれば、前記 R_1 および R_2 は、互いに連結されて置換もしくは非置換のシクロヘキシル環を形成し、前記 $A r_1$ および $A r_2$ は、互いに同一または異なり、それぞれ独立に、置換もしくは非置換の6員のヘテロ環を含む多環のヘテロアリール基である。前記例示した R_1 、 R_2 、 $A r_1$ および $A r_2$ を置換基として含む前記化学式1で表される環化合物は、 sp^3 結合と前記 $A r_1$ および $A r_2$ の立体効果 (steric effect) によって分子内の広いバンドギャップを誘導し、高いトリプレット (triplet) を形成し、 sp^3 結合する4方向の置換基のうち、前記 R_1 および R_2 を除いた2方向だけがコンジュゲーショングループであるので、分子間の影響で π - π オーバーラップが少ないことから、有機発光素子内で優れた正孔移動度および／または電子移動度を示すため、有機発光素子の効率の向上が可能である。

20

【0087】

本明細書のもう一つの実施態様によれば、前記 R_1 および R_2 は、互いに連結されて置換もしくは非置換のシクロヘキシル環を形成し、前記 $A r_1$ および $A r_2$ は、互いに同一または異なり、それぞれ独立に、置換もしくは非置換のピリジル基、置換もしくは非置換のピリミジル基、または置換もしくは非置換のトリアジニル基を含む多環のヘテロアリール基である。

【0088】

本明細書のもう一つの実施態様によれば、前記 R_1 および R_2 は、互いに連結されて置換もしくは非置換のシクロヘキシル環を形成し、前記 $A r_1$ および $A r_2$ は、互いに同一または異なり、それぞれ独立に、置換もしくは非置換のキノリル基；または置換もしくは非置換のキナゾリニル基である。

30

【0089】

本明細書のもう一つの実施態様によれば、前記 R_1 および R_2 は、互いに連結されてシクロヘキシル環を形成し、前記 $A r_1$ および $A r_2$ は、互いに同一または異なり、それぞれ独立に、キノリル基；またはキナゾリニル基である。

【0090】

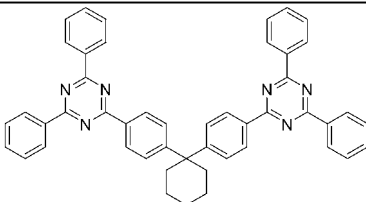
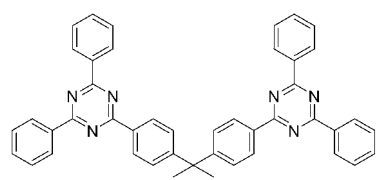
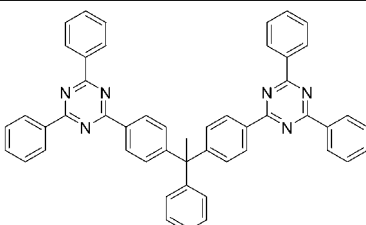
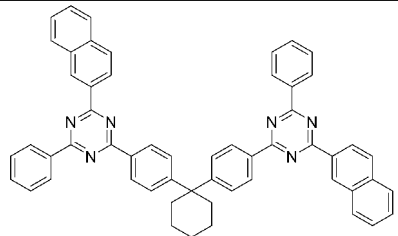
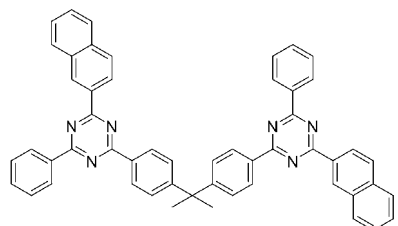
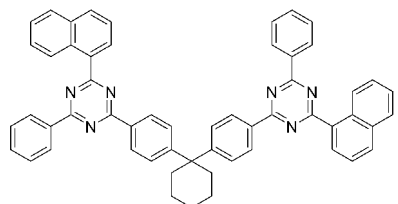
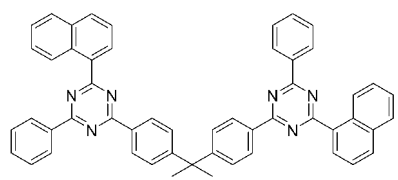
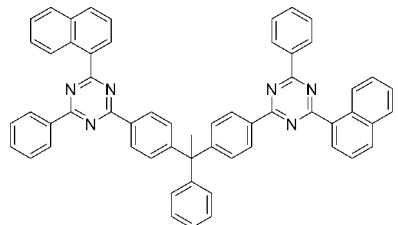
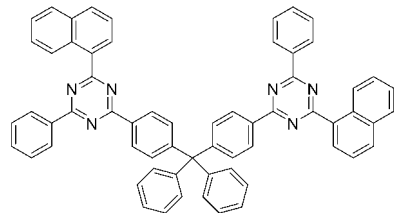
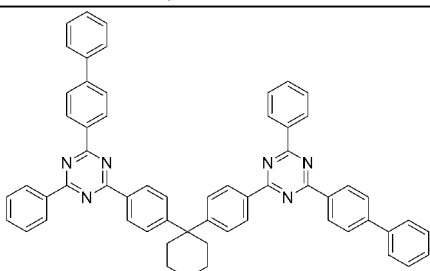
前記 $A r_1$ および $A r_2$ は、ニトリル基；フェニル基；ビフェニル基；ナフチル基；チオフェン基；フェニル基で置換されたキノリル基、ピリジル基で置換されたキノリル基、およびピリジル基からなる群より選択される1以上で置換もしくは非置換であってもよい。

40

【0091】

本明細書の一実施態様によれば、前記化学式1で表される環化合物は、下記の化合物の中から選択されてもよい。

【表 1】

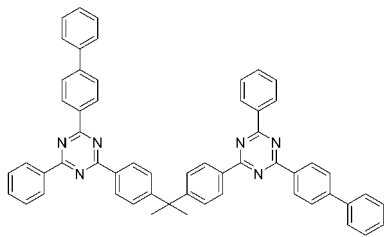
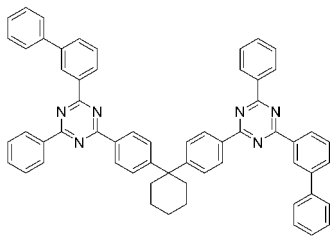
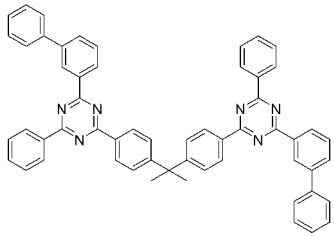
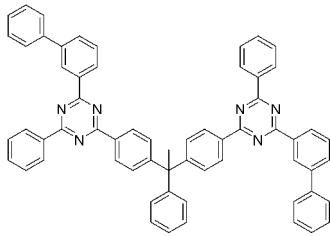
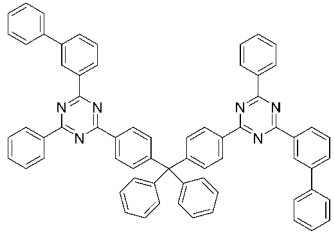
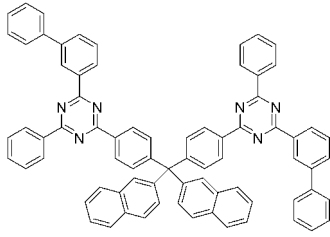
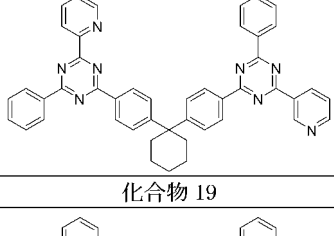
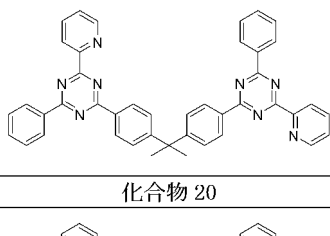
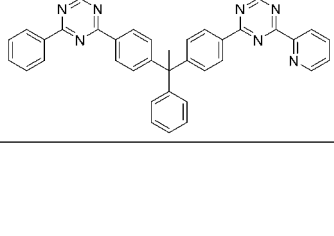
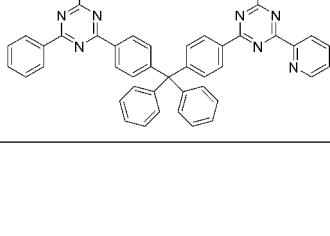
化合物 1	化合物 2
	
化合物 3	化合物 4
	
化合物 5	化合物 6
	
化合物 7	化合物 8
	
化合物 9	化合物 10
	

10

20

30

【表 2】

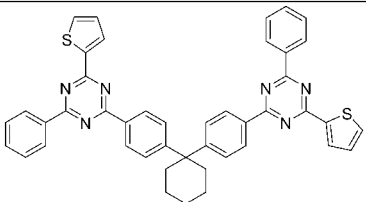
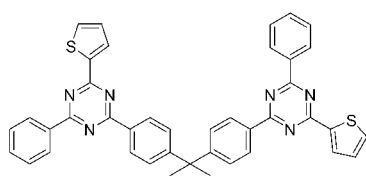
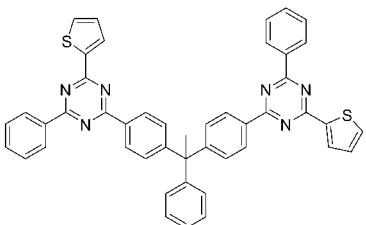
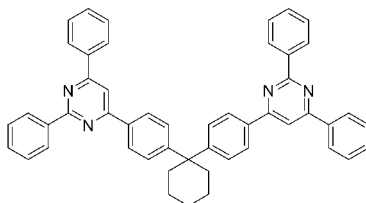
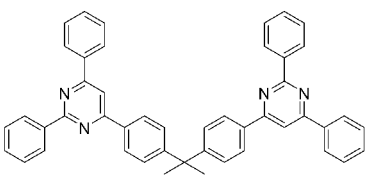
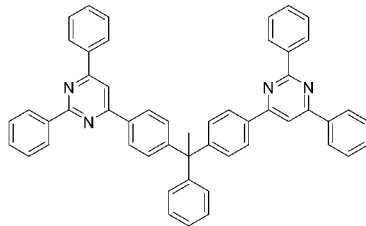
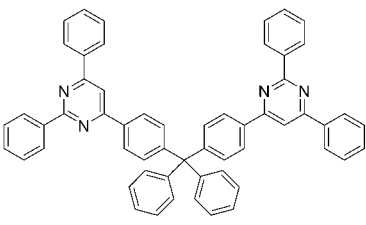
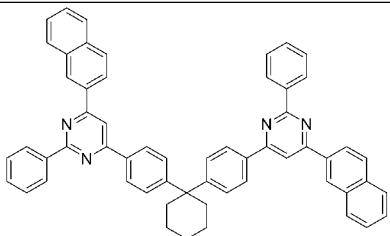
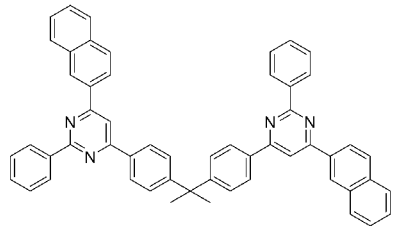
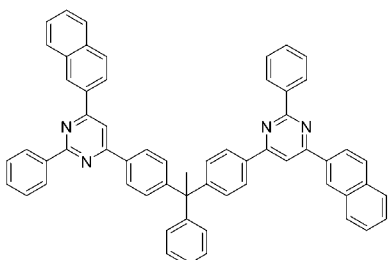
化合物 11	化合物 12
	
化合物 13	化合物 14
	
化合物 15	化合物 16
	
化合物 17	化合物 18
	
化合物 19	化合物 20
	

10

20

30

【表 3】

化合物 21	化合物 22
	
化合物 23	化合物 24
	
化合物 25	化合物 26
	
化合物 27	化合物 28
	
化合物 29	化合物 30
	

10

20

30

【表 4】

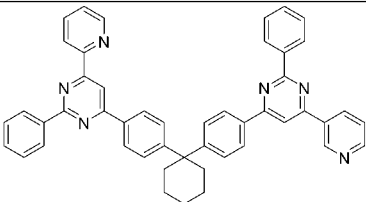
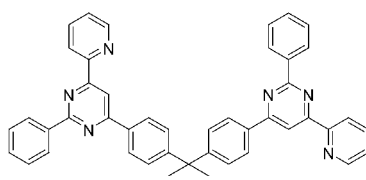
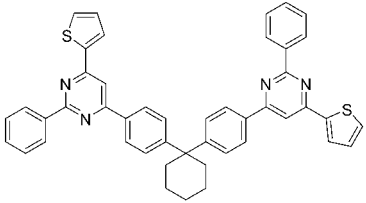
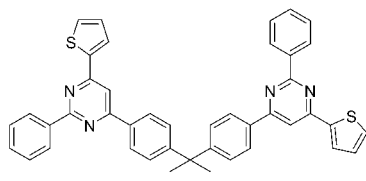
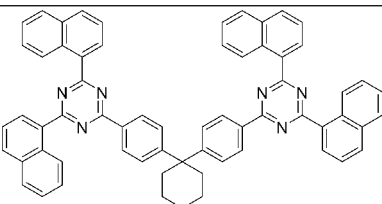
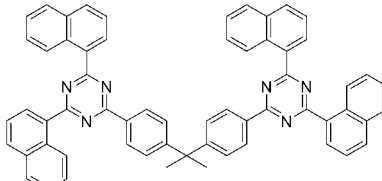
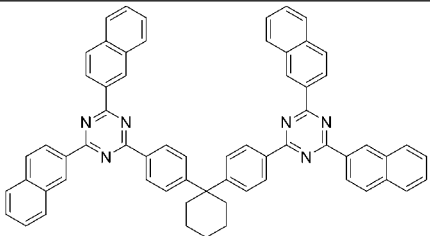
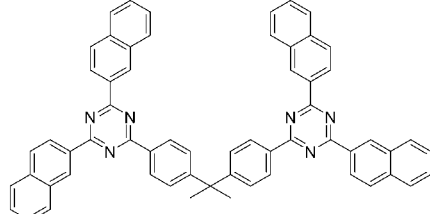
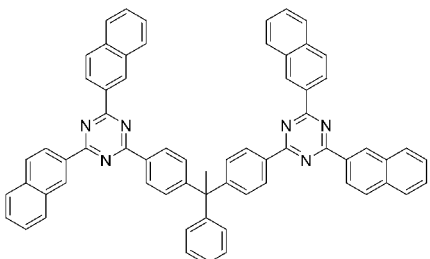
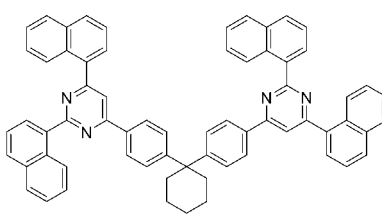
化合物 31	化合物 32
化合物 33	化合物 34
化合物 35	化合物 36
化合物 37	化合物 38
化合物 39	化合物 40

10

20

30

【表 5】

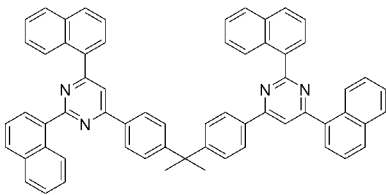
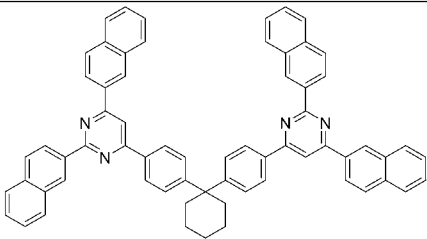
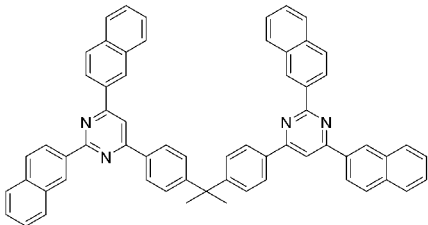
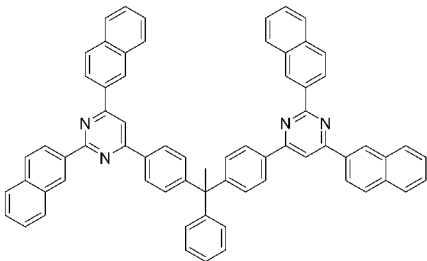
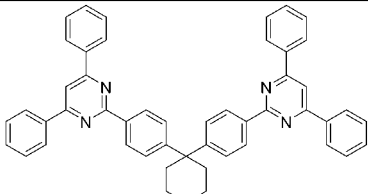
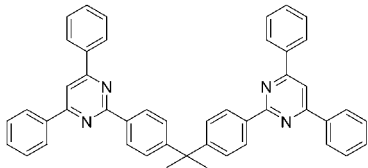
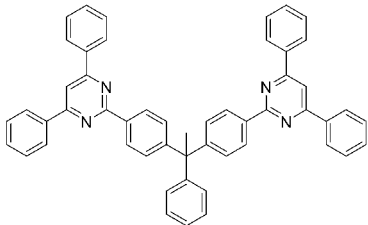
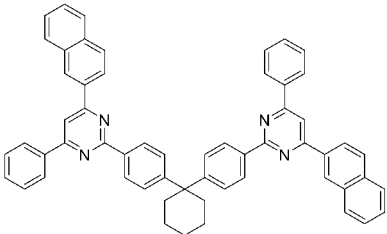
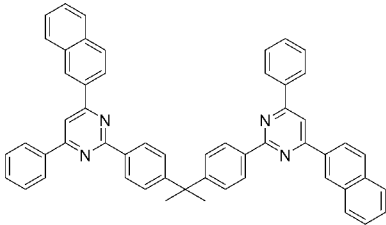
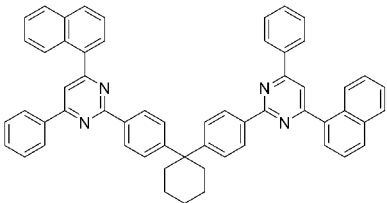
化合物 41	化合物 42
	
化合物 43	化合物 44
	
化合物 45	化合物 46
	
化合物 47	化合物 48
	
化合物 49	化合物 50
	

10

20

30

【表 6】

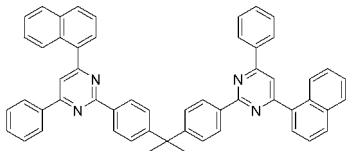
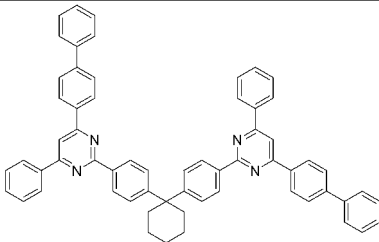
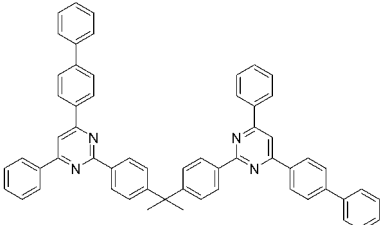
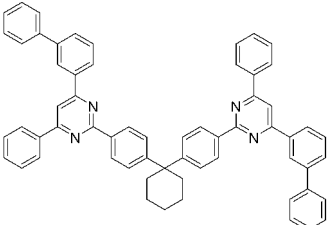
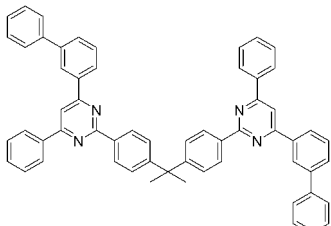
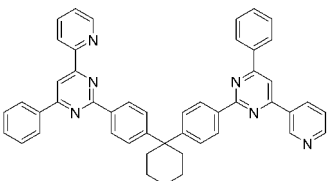
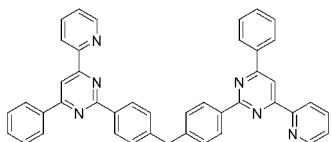
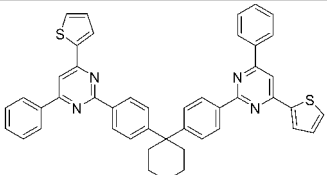
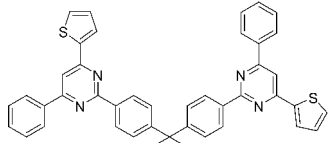
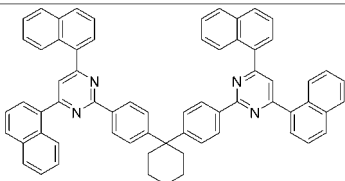
化合物 51	化合物 52
	
化合物 53	化合物 54
	
化合物 55	化合物 56
	
化合物 57	化合物 58
	
化合物 59	化合物 60
	

10

20

30

【表 7】

化合物 61	化合物 62
	
化合物 63	化合物 64
	
化合物 65	化合物 66
	
化合物 67	化合物 68
	
化合物 69	化合物 70
	

10

20

30

【表 8】

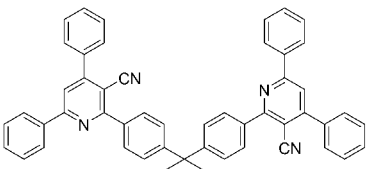
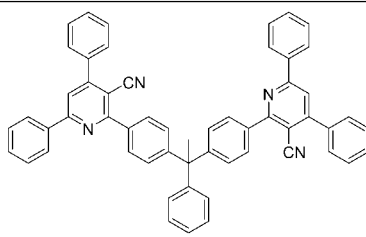
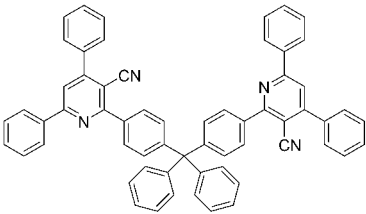
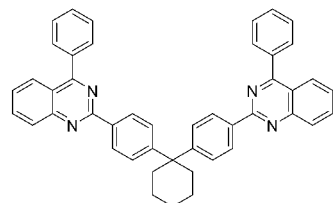
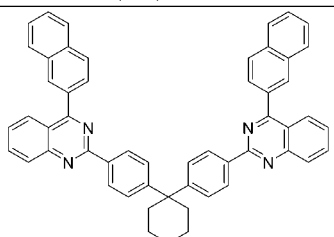
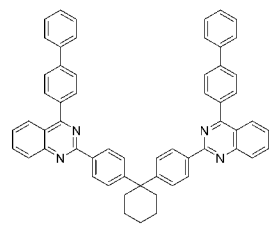
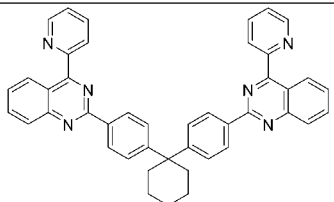
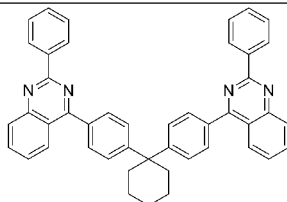
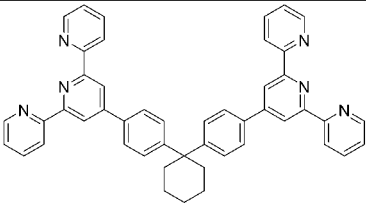
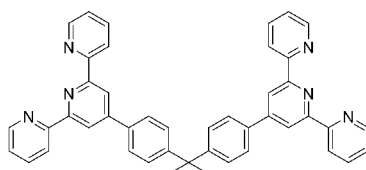
化合物 71	化合物 72
化合物 73	化合物 74
化合物 75	化合物 76
化合物 77	化合物 78
化合物 79	化合物 80

10

20

30

【表 9】

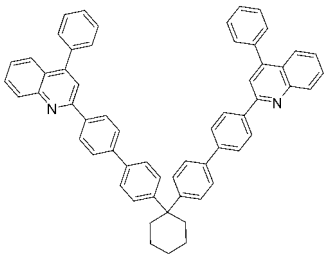
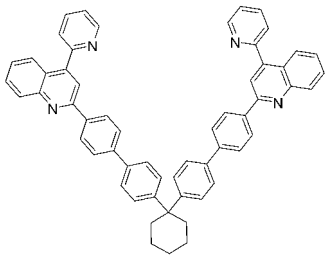
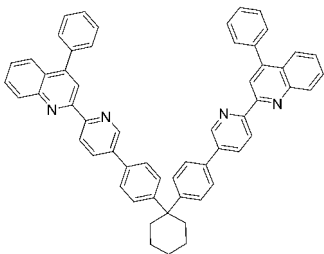
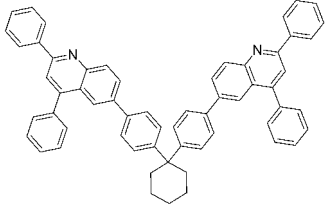
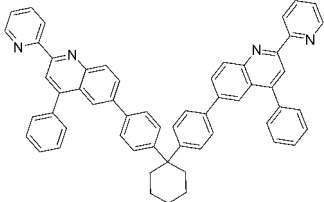
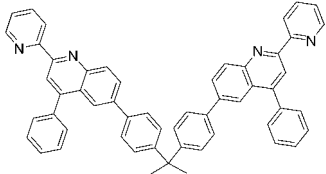
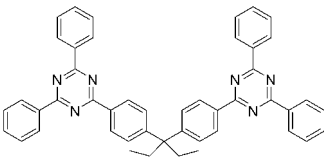
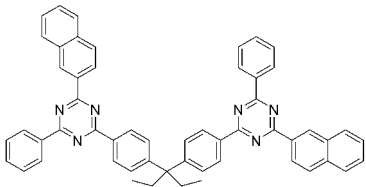
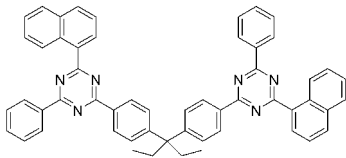
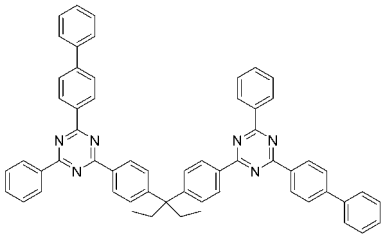
化合物 81	化合物 82
	
化合物 83	化合物 84
	
化合物 85	化合物 86
	
化合物 87	化合物 88
	
化合物 89	化合物 90
	

10

20

30

【表 10】

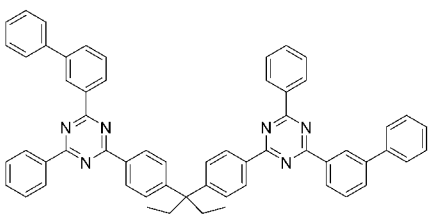
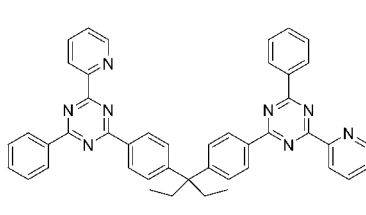
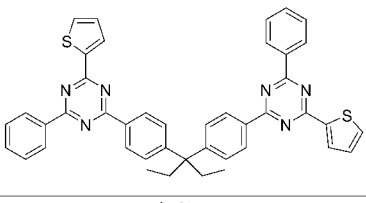
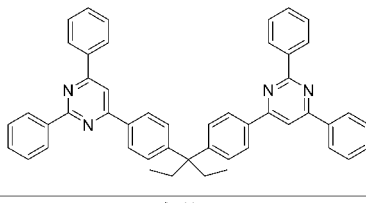
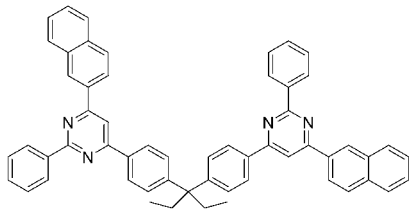
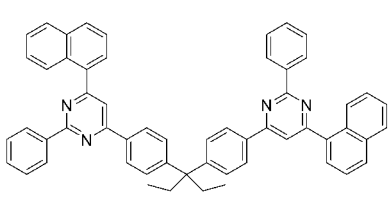
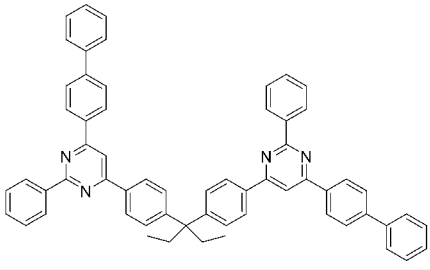
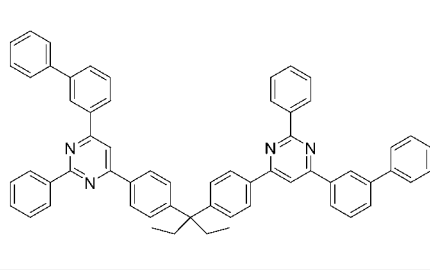
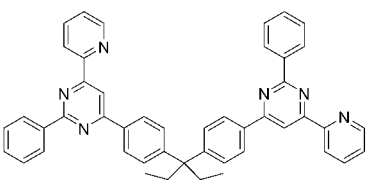
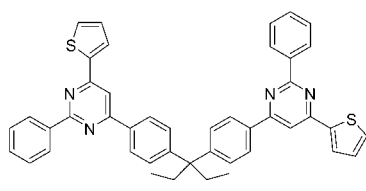
化合物 91	化合物 92
	
化合物 93	化合物 94
	
化合物 95	化合物 96
	
化合物 97	化合物 98
	
化合物 99	化合物 100
	

10

20

30

【表 1 1】

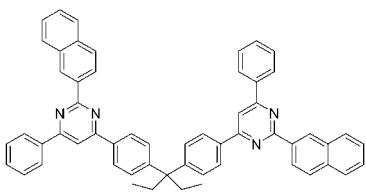
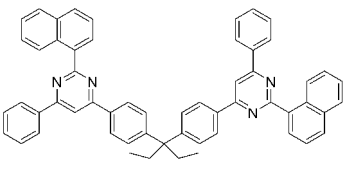
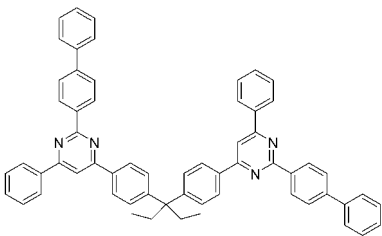
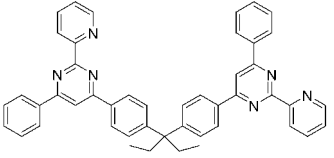
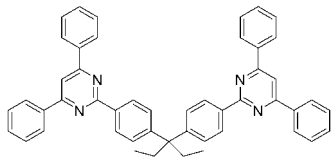
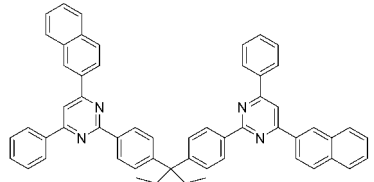
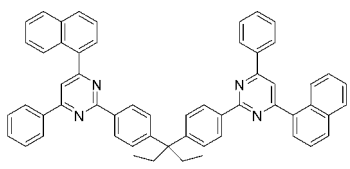
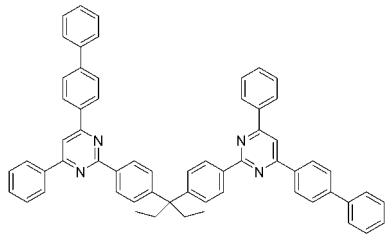
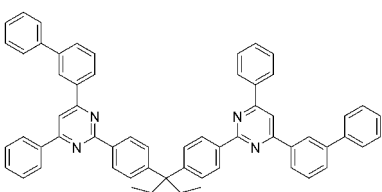
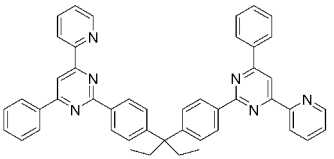
化合物 101	化合物 102
	
化合物 103	化合物 104
	
化合物 105	化合物 106
	
化合物 107	化合物 108
	
化合物 109	化合物 110
	

10

20

30

【表 1 2】

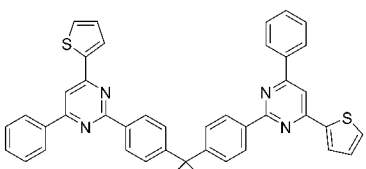
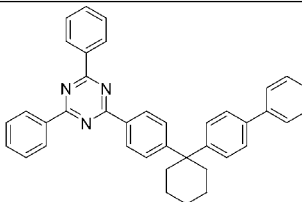
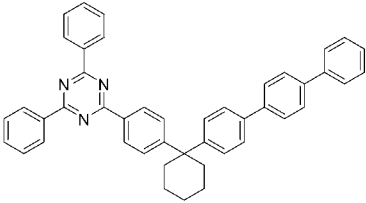
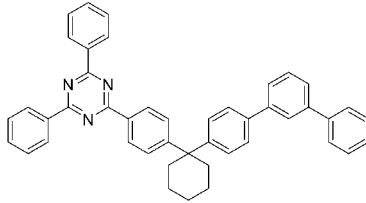
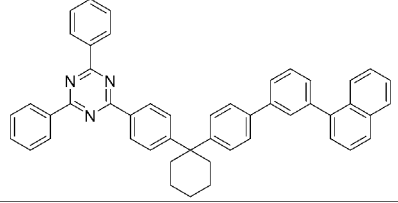
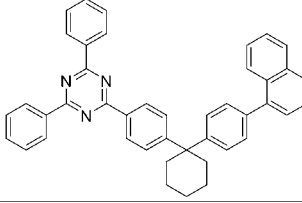
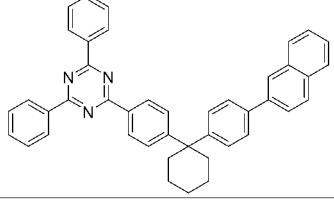
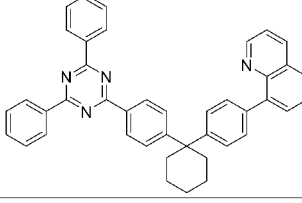
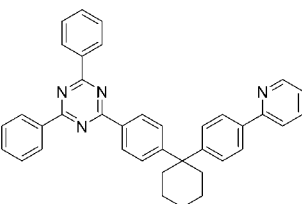
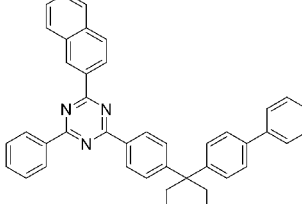
化合物 111	化合物 112
	
化合物 113	化合物 114
	
化合物 115	化合物 116
	
化合物 117	化合物 118
	
化合物 119	化合物 120
	

10

20

30

【表 1 3】

化合物 121	化合物 122
	
化合物 123	化合物 124
	
化合物 125	化合物 126
	
化合物 127	化合物 128
	
化合物 129	化合物 130
	

10

20

30

【表 1 4】

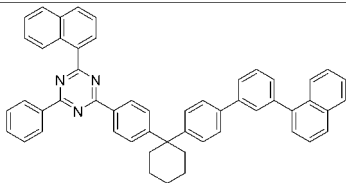
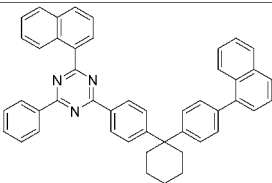
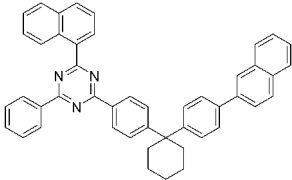
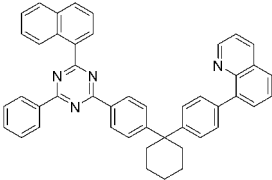
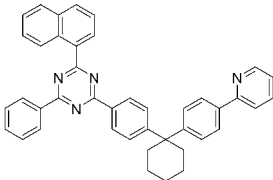
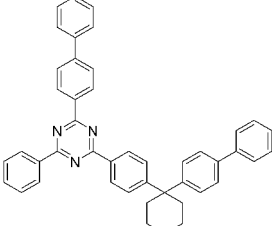
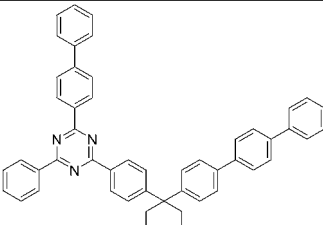
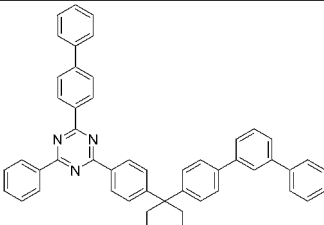
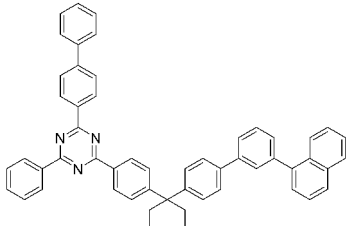
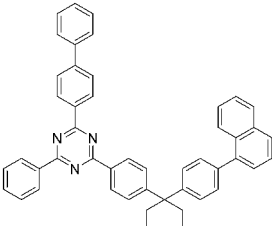
化合物 131	化合物 132
化合物 133	化合物 134
化合物 135	化合物 136
化合物 137	化合物 138
化合物 139	化合物 140

10

20

30

【表 1 5】

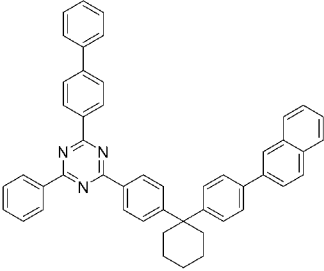
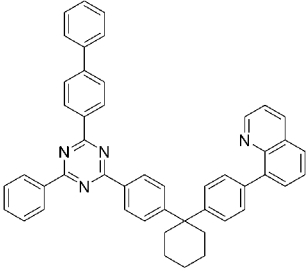
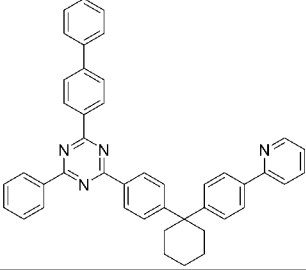
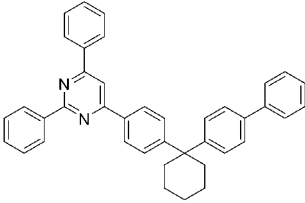
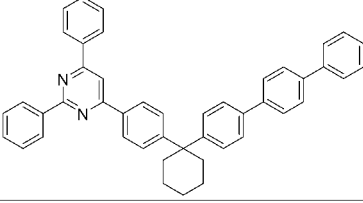
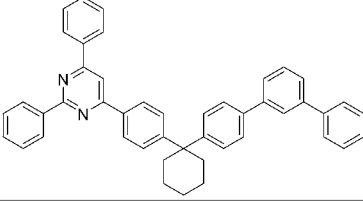
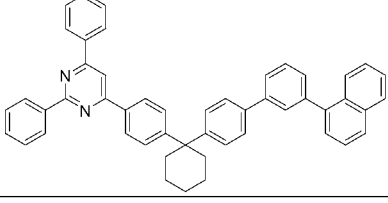
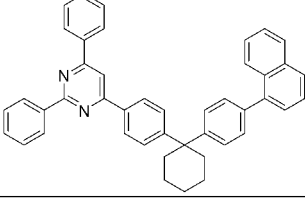
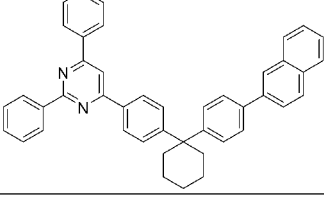
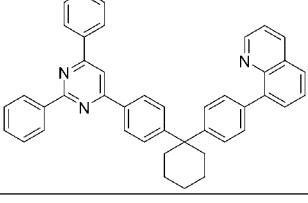
化合物 141	化合物 142
	
化合物 143	化合物 144
	
化合物 145	化合物 146
	
化合物 147	化合物 148
	
化合物 149	化合物 150
	

10

20

30

【表 1 6】

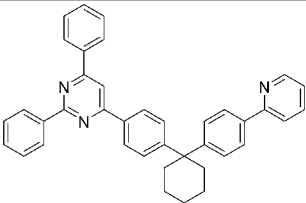
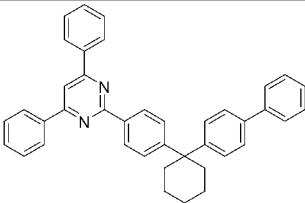
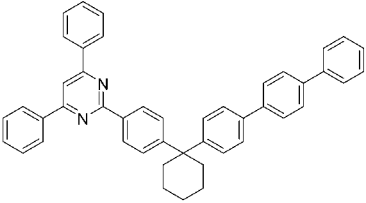
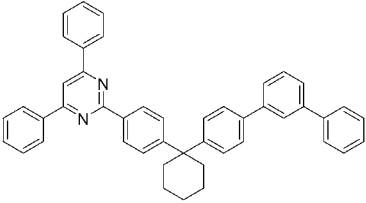
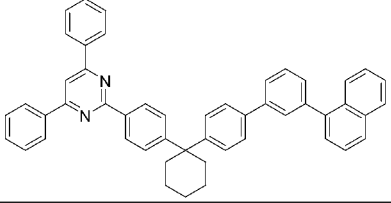
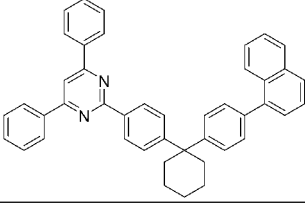
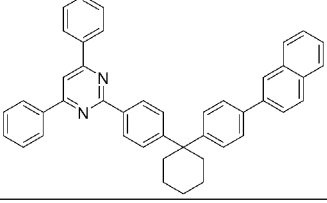
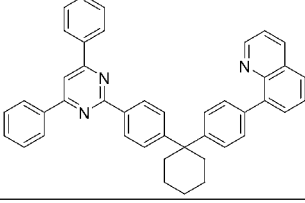
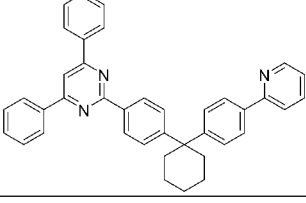
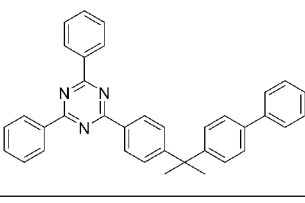
化合物 151	化合物 152
	
化合物 153	化合物 154
	
化合物 155	化合物 156
	
化合物 157	化合物 158
	
化合物 159	化合物 160
	

10

20

30

【表 1 7】

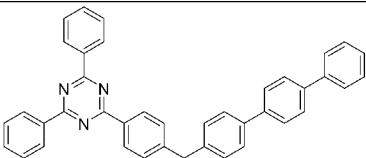
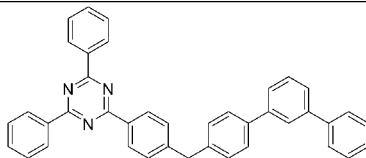
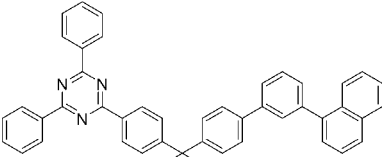
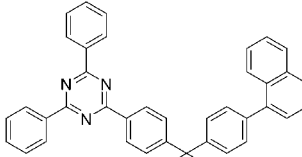
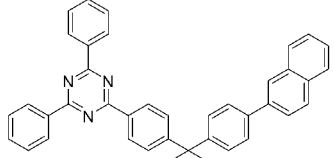
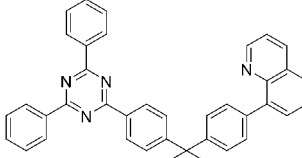
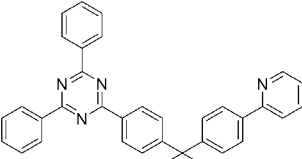
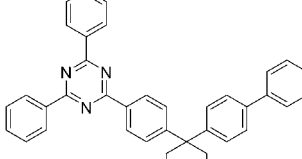
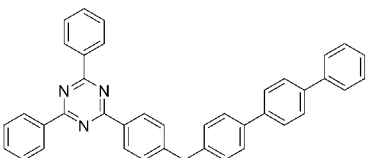
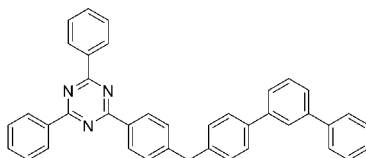
化合物 161	化合物 162
	
化合物 163	化合物 164
	
化合物 165	化合物 166
	
化合物 167	化合物 168
	
化合物 169	化合物 170
	

10

20

30

【表 1 8】

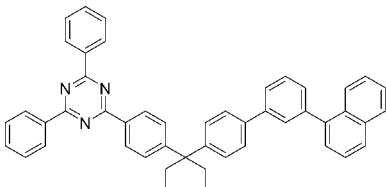
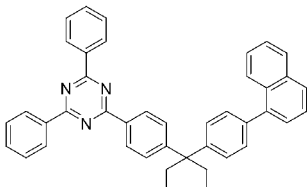
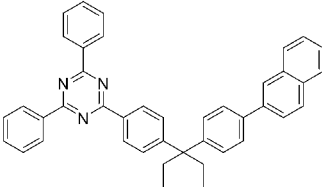
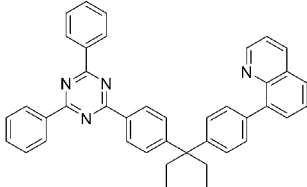
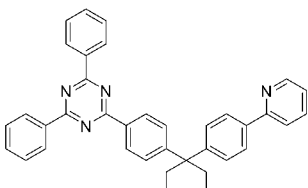
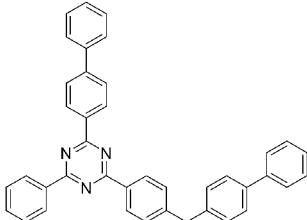
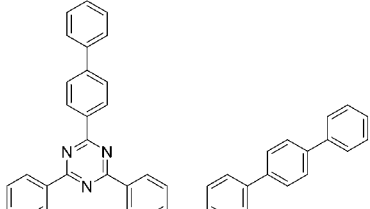
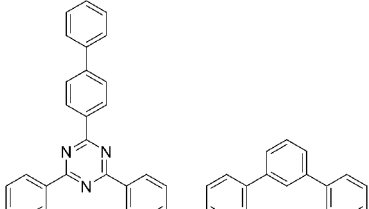
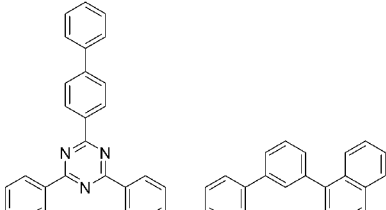
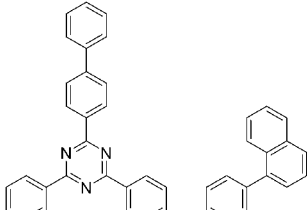
化合物 171	化合物 172
	
化合物 173	化合物 174
	
化合物 175	化合物 176
	
化合物 177	化合物 178
	
化合物 179	化合物 180
	

10

20

30

【表 1 9】

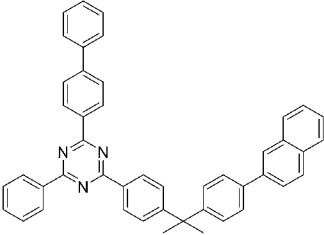
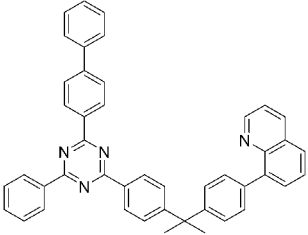
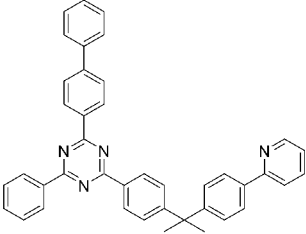
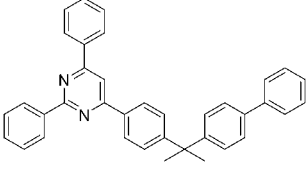
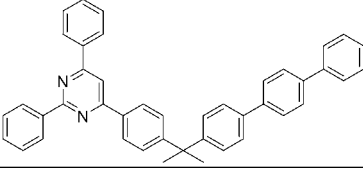
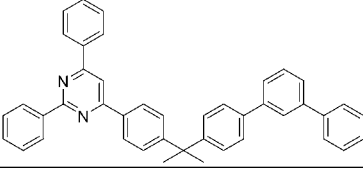
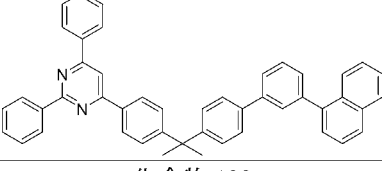
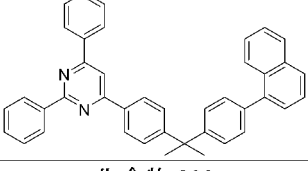
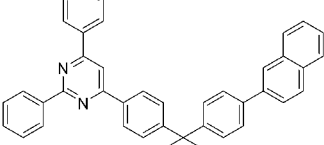
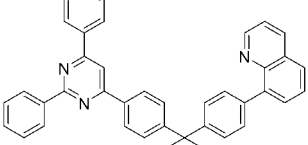
化合物 181	化合物 182
	
化合物 183	化合物 184
	
化合物 185	化合物 186
	
化合物 187	化合物 188
	
化合物 189	化合物 190
	

10

20

30

【表 2 0】

化合物 191	化合物 192
	
化合物 193	化合物 194
	
化合物 195	化合物 196
	
化合物 197	化合物 198
	
化合物 199	化合物 200
	

10

20

30

【表 2 1】

化合物 201	化合物 202
化合物 203	化合物 204
化合物 205	化合物 206
化合物 207	化合物 208
化合物 209	

【0092】

本明細書の一実施態様によれば、前記化学式 1 で表される環化合物を含む有機発光素子を提供する。

【0093】

本明細書の一実施態様によれば、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 電極と第 2 電極との間に備えられた 1 層または 2 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 で表される環化合物を含む。

【0094】

本明細書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た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、正孔阻止層、電子輸送層、電子注入層などを含む構造を有することができる。しかし、有機発光素子の構造はこれに限定されず、より少数の有機層を含むことができる。

【0095】

本明細書の一実施態様によれば、前記有機物層は、正孔注入層または正孔輸送層を含み、前記正孔注入層または正孔輸送層は、前記化学式 1 で表される環化合物を含む。

【0096】

本明細書の一実施態様によれば、前記有機物層は、発光層を含み、前記発光層は、前記化学式 1 で表される環化合物を含む。

【0097】

本明細書のもう一つの実施態様によれば、前記有機物層は、発光層を含み、前記発光層は、前記化学式 1 で表される環化合物を発光層のホストとして含む。

【0098】

本明細書の一実施態様によれば、前記有機物層は、電子輸送層または電子注入層を含み、前記電子輸送層または電子注入層は、前記化学式 1 で表される環化合物を含む。

【0099】

本明細書の一実施態様によれば、前記有機物層は、電子輸送層、電子注入層、または電子輸送および電子注入を同時に行う層を含み、前記電子輸送層、電子注入層、または電子輸送および電子注入を同時に行う層は、前記化学式 1 で表される環化合物を含む。

【0100】

本明細書の一実施態様によれば、前記有機物層は、正孔阻止層を含み、前記正孔阻止層は、前記化学式 1 で表される環化合物を含む。

【0101】

本明細書の一実施態様によれば、前記有機物層は、前記化学式 1 で表される環化合物を含む有機物層のほか、アリールアミノ基、カルバゾール基、またはベンゾカルバゾール基を含む化合物を含む正孔注入層または正孔輸送層をさらに含む。

【0102】

本明細書の一実施態様によれば、前記化学式 1 で表される環化合物を含む有機物層は、前記化学式 1 で表される環化合物をホストとして含み、他の有機化合物、金属、または金属化合物をドーパントとして含む。

【0103】

本明細書のもう一つの実施態様において、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発光層と、前記発光層と前記第 1 電極との間、または前記発光層と前記第 2 電極との間に備えられた 2 層以上の有機物層とを含む有機発光素子であって、前記 2 層以上の有機物層のうちの少なくとも 1 つは、前記化学式 1 で表される環化合物を含む。もう一つの実施態様において、前記 2 層以上の有機物層は、電子輸送層、電子注入層、電子輸送と電子注入を同時に行う層、および正孔阻止層からなる群より 2 以上が選択されてもよい。

【0104】

本明細書のもう一つの実施態様によれば、前記有機物層は、2 層以上の電子輸送層を含み、前記 2 層以上の電子輸送層のうちの少なくとも 1 つは、前記化学式 1 で表される環化合物を含む。具体的には、本明細書の一実施態様において、前記化学式 1 で表される環化合物は、前記 2 層以上の電子輸送層のうちの 1 層に含まれていてもよく、それぞれの 2 層以上の電子輸送層に含まれていてもよい。

【0105】

また、本明細書の一実施態様によれば、前記化学式 1 で表される環化合物が前記それぞれの 2 層以上の電子輸送層に含まれる場合、前記化学式 1 で表される環化合物を除いた他の材料は、互いに同一または異なってもよい。

【0106】

本明細書の有機発光素子は、有機物層のうちの 1 層以上が本明細書の環化合物すなわち、前記化学式 1 で表される環化合物を含むことを除けば、当技術分野で知られている材料と方法で製造できる。

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てもよい。

【0107】

例えば、本明細書の有機発光素子は、基板上に、第 1 電極、有機物層、および第 2 電極を順次に積層させることにより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) のような物理蒸着方法 (PVD: Physical Vapor Deposition) を利用して、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

10

20

30

40

50

て第1電極を形成し、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、その上に第2電極として使用可能な物質を蒸着させることにより製造できる。この方法以外にも、基板上に、陰極物質から有機物層、第1電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。また、前記化学式1で表される環化合物は、有機発光素子の製造時、真空蒸着法だけでなく、溶液塗布法によって有機物層に形成されてもよい。ここで、溶液塗布法とは、スピンドーティング、ディップコーティング、ドクターブレードニング、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。

【0108】

10

これらの方法以外にも、基板上に、陰極物質から有機物層、陽極物質を順に蒸着させて、有機発光素子を作ることにもできる（国際公開第2003/012890号）。ただし、製造方法がこれに限定されるものではない。

【0109】

本明細書の一実施態様によれば、前記第1電極は、陽極であり、前記第2電極は、陰極である。

【0110】

本明細書のもう一つの実施態様によれば、前記第1電極は、陰極であり、前記第2電極は、陽極である。

【0111】

20

前記陽極物質としては、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。本発明で使用可能な陽極物質の具体例としては、バナジウム、クロム、銅、亜鉛、金のような金属、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（登録商標））のような金属酸化物；ZnO:AlまたはSnO₂:Sbのような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のような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。

【0112】

前記陰極物質としては、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。陰極物質の具体例としては、マグネシウム、カルシウム、ナトリウム、カリウム、チタン、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、スズおよび鉛のような金属、またはこれらの合金；LiF/AlまたはLiO₂/Al、Mg/Agのような多層構造の物質などがあるが、これらにのみ限定されるものではない。

30

【0113】

前記正孔注入層の正孔注入物質としては、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、陽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、薄膜形成能力に優れた化合物が好ましい。正孔注入物質のHOMO（highest occupied molecular orbital）が、陽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例としては、金属ポルフィリン（porphyrin）、オリゴチオフェン、アリー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。

40

【0114】

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、陽極や正孔注入層から正孔が輸送されて発光層に移すことができ

50

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。具体例としては、アリー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あるブロック共重合体などがあるが、これらにのみ限定されるものではない。

【0115】

前記発光層の発光物質としては、正孔輸送層と電子輸送層から正孔と電子がそれぞれ輸送されて結合させることにより可視光線領域の光を発することができる物質であって、蛍光や燐光に対する量子効率の良い物質が好ましい。具体例としては、8-ヒドロキシキノリンアルミニウム錯体 (Alq_3) ; カルバゾール系化合物 ; 二量体化スチリル (dimerized styryl) 化合物 ; $BAlq$; 10-ヒドロキシベンゾキノリン金属化合物 ; ベンゾキサゾール、ベンズチアゾール、およびベンズイミダゾール系の化合物 ; ポリ (p-フェニレンビニレン) (PPV) 系の高分子 ; スピロ (spiro) 化合物 ; ポリフルオレン、ルブレンなどがあるが、これらにのみ限定されるものではない。

10

【0116】

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。ホスト材料は、縮合芳香族環誘導体またはヘテロ環含有化合物などがある。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。

20

【0117】

前記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、置換もしく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、置換もしく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もしくは非置換である。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、スチリルトetra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。

30

【0118】

前記電子輸送層の電子輸送物質としては、電子注入層から電子を受け取って発光層まで電子を輸送する層で、電子輸送物質としては、陰極から電子がよく注入されて発光層に移すことができる物質であって、電子に対する移動性の大きい物質が好適である。具体例としては、8-ヒドロキシキノリンの Al 錯体 ; Alq_3 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などがあるが、これらにのみ限定されるものではない。電子輸送層は、従来技術により使用されているように、任意の所望するカソード物質と共に使用できる。特に、適切なカソード物質の例は、低い仕事関数を有し、アルミニウム層またはシルバー層が後に続く通常の物質である。具体的には、セシウム、バリウム、カルシウム、イッテルビウム、およびサマリウムであり、それぞれの場合、アルミニウム層またはシルバー層が後に続く。

40

【0119】

前記電子注入層は、電極から電子を注入する層で、電子を輸送する能力を有し、陰極からの電子注入効果、発光層または発光材料に対して優れた電子注入効果を有し、発光層で生成された励起子の正孔注入層への移動を防止し、また、薄膜形成能力に優れた化合物が好ましい。具体的には、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員環誘導体などがあるが、これらに限定されない。

【0120】

50

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チウム、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-キノリナト)クロロガリウム、ビス(2-メチル-8-キノリナト)(o-クレゾラート)ガリウム、ビス(2-メチル-8-キノリナト)(1-ナフトラート)アルミニウム、ビス(2-メチル-8-キノリナト)(2-ナフトラート)ガリウムなどがあるが、これらに限定されない。

10

【0121】

前記正孔阻止層は、正孔の陰極到達を阻止する層で、一般的に、正孔注入層と同じ条件で形成されてもよい。具体的には、オキサジアゾール誘導体やトリアゾール誘導体、フェナントリン誘導体、BCP、アルミニウム錯体(aluminum complex)などがあるが、これらに限定されない。

【0122】

本明細書に係る有機発光素子は、使用される材料によって、前面発光型、後面発光型、または両面発光型であってもよい。

【0123】

本明細書の一実施態様によれば、前記化学式1で表される環化合物は、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に含まれていてもよい。

20

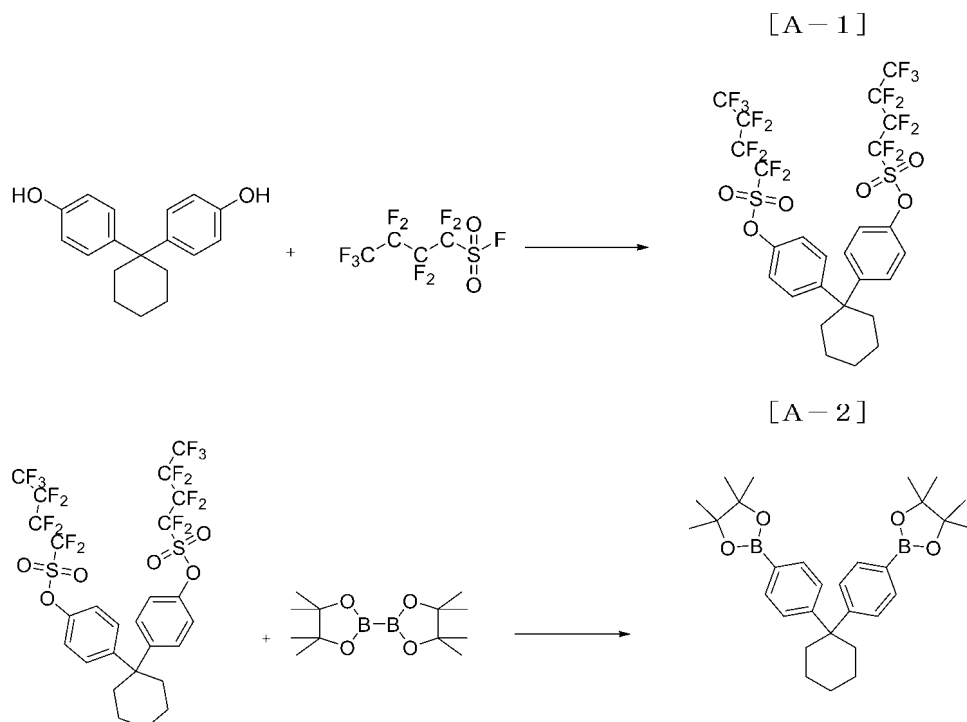
【0124】

以下、本明細書を具体的に説明するために、実施例を挙げて詳細に説明する。しかし、本明細書に係る実施例は種々の異なる形態に変形可能であり、本明細書の範囲が以下に詳述する実施例に限定されると解釈されない。本明細書の実施例は、当業界における平均的な知識を有する者に本明細書をより完全に説明するために提供されるものである。

【0125】

合成例1. 化合物A-2の合成

【化6】



【0126】

50

1) 化合物A-1の合成

窒素雰囲気下、前記化合物4, 4'-(シクロヘキサン-1, 1-ジイル)ジフェノール(100g、0.372mol)をアセトニトリル1000mlに溶かした後、炭酸カリウム(154.5g、1.117mol)を水300mlに溶解させて添加し、1, 1, 2, 2, 3, 3, 4, 4, 4-ノナフルオロブタン-1-スルホニルフルオリド(270g、0.894mmol)をゆっくり滴加した後、1時間攪拌した。水層を除去し、無水硫酸マグネシウムで乾燥した後、減圧濃縮して、前記化合物A-1(279g、収率：90%)を製造した。

MS $[M+H]^+ = 833$

【0127】

10

2) 化合物A-2の合成

窒素雰囲気下、前記化合物A-1(144.1g、0.173mol)、ビス(ピナコラト)ジボロン(105.5g、0.415mmol)、および酢酸カリウム(101.9g、1.084mmol)を混ぜてジオキサン1000mlに添加し、攪拌しながら加熱した。還流する状態で、ビス(ジベンジリデンアセトン)パラジウム(6.0g、0.0104mmol)とトリシクロヘキシルホスフィン(5.8g、0.0208mmol)を入れて、10時間加熱、攪拌した。反応終了後、常温に温度を下げた後、濾過した。濾過液を水に注いでクロロホルムで抽出し、有機層を無水硫酸マグネシウムで乾燥した。減圧蒸留後、エタノールで再結晶して、前記化合物A-2(50.7g、収率：60%)を製造した。

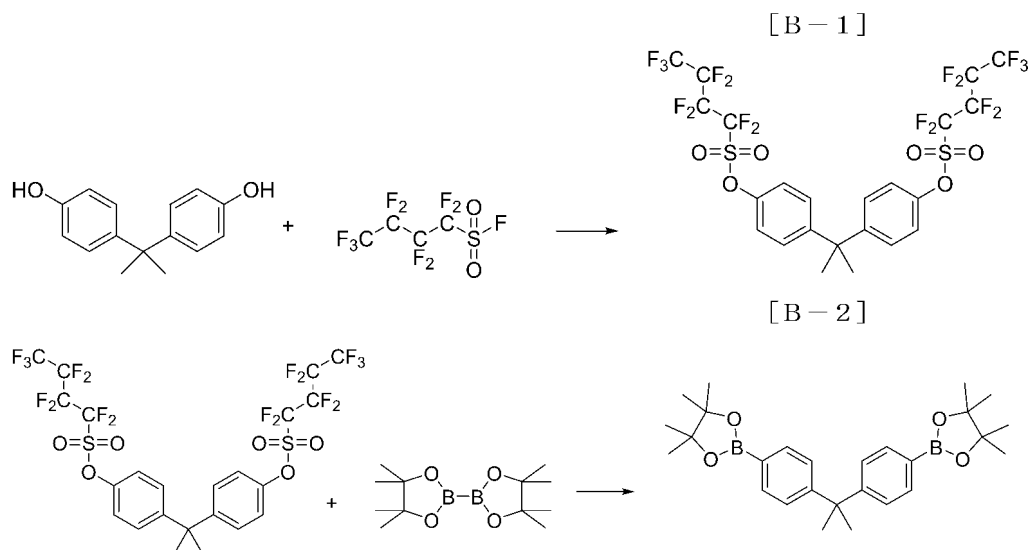
MS $[M+H]^+ = 489$

【0128】

20

合成例2. 化合物B-2の合成

【化7】



30

【0129】

40

1) 化合物B-1の合成

窒素雰囲気下、前記化合物のビスフェノールA(85g、0.372mol)をアセトニトリル900mlに溶かした後、炭酸カリウム(154.5g、1.117mol)を水300mlに溶解させて添加し、1, 1, 2, 2, 3, 3, 4, 4, 4-ノナフルオロブタン-1-スルホニルフルオリド(270g、0.894mmol)をゆっくり滴加した後、1時間攪拌した。水層を除去し、無水硫酸マグネシウムで乾燥した後、減圧濃縮して、前記化合物B-1(265g、収率：90%)を製造した。

MS $[M+H]^+ = 792$

【0130】

2) 化合物B-2の合成

50

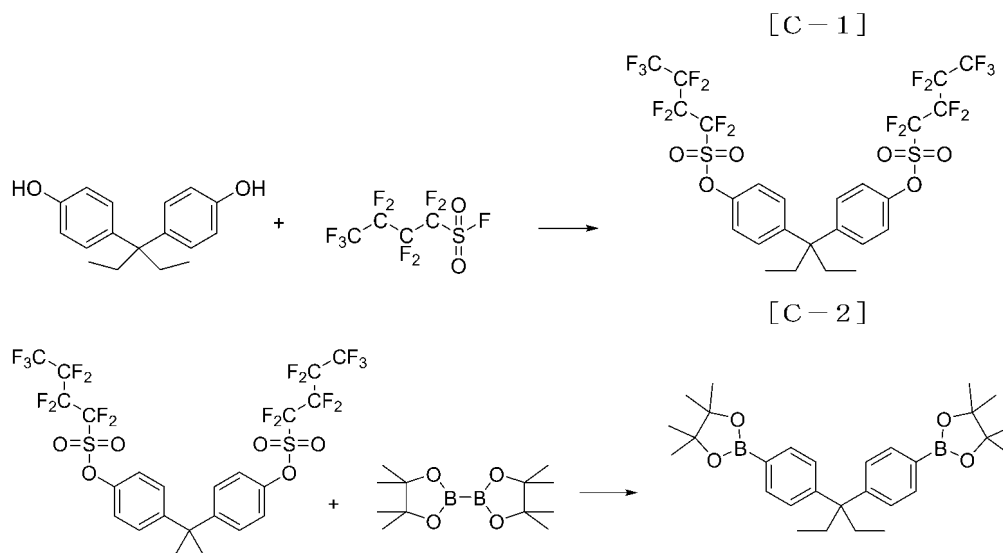
窒素雰囲気下、前記化合物 B-1 (137.1 g、0.173 mol)、ビス(ピナコラト)ジボロン(105.5 g、0.415 mmol)、および酢酸カリウム(101.9 g、1.084 mmol)を混ぜてジオキサン1000 mlに添加し、攪拌しながら加熱した。還流する状態で、ビス(ジベンジリデンアセトン)パラジウム(6.0 g、0.0104 mmol)とトリシクロヘキシルホスフィン(5.8 g、0.0208 mmol)を入れて、10時間加熱、攪拌した。反応終了後、常温に温度を下げた後、濾過した。濾過液を水に注いでクロロホルムで抽出し、有機層を無水硫酸マグネシウムで乾燥した。減圧蒸留後、エタノールで再結晶して、前記化合物 B-2 (45 g、収率：58%)を製造した。

MS $[M+H]^+ = 449$

【0131】

合成例3. 化合物 C-2 の合成

【化8】



【0132】

1) 化合物 C-1 の合成

窒素雰囲気下、前記化合物 4, 4'- (ペンタン-3, 3'-ジイル) ジフェノール (95 g、0.372 mol) をアセトニトリル1000 mlに溶かした後、炭酸カリウム(154.5 g、1.117 mol)を水300 mlに溶解させて添加し、1, 1, 2, 2, 3, 3, 4, 4, 4'-ノナフルオロブタン-1-スルホニルフルオリド(270 g、0.894 mmol)をゆっくり滴加した後、1時間攪拌した。水層を除去し、無水硫酸マグネシウムで乾燥した後、減圧濃縮して、前記化合物 C-1 (271 g、収率：89%)を製造した。

MS $[M+H]^+ = 821$

【0133】

2) 化合物 C-2 の合成

窒素雰囲気下、前記化合物 C-1 (142 g、0.173 mol)、ビス(ピナコラト)ジボロン(105.5 g、0.415 mmol)、および酢酸カリウム(101.9 g、1.084 mmol)を混ぜてジオキサン1000 mlに添加し、攪拌しながら加熱した。還流する状態で、ビス(ジベンジリデンアセトン)パラジウム(6.0 g、0.0104 mmol)とトリシクロヘキシルホスフィン(5.8 g、0.0208 mmol)を入れて、10時間加熱、攪拌した。反応終了後、常温に温度を下げた後、濾過した。濾過液を水に注いでクロロホルムで抽出し、有機層を無水硫酸マグネシウムで乾燥した。減圧蒸留後、エタノールで再結晶して、前記化合物 C-2 (48.6 g、収率：59%)を製造した。

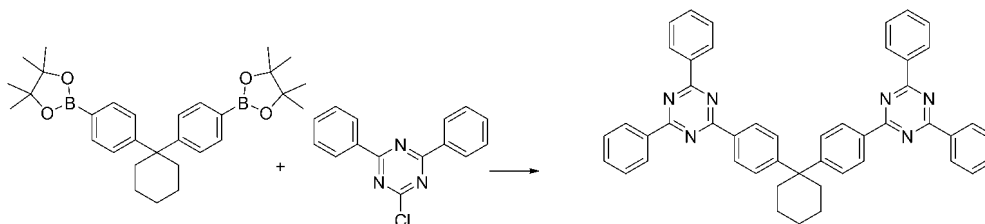
MS $[M+H]^+ = 477$

【0134】

製造例1. 化合物1の製造

【化9】

[化合物1]



10

窒素雰囲気下、前記化合物A-2 (30 g、0.0614 mol) と2-クロロ-4,6-ジフェニル-1,3,5-トリアジン (32.9 g、0.123 mol) をテトラヒドロフラン (600 ml) に完全に溶かした後、炭酸カリウム (25.5 g、0.184 mol) を水200 ml に溶解させて添加し、テトラキストリフェニルホスフィノパラジウム (2.1 g、0.00184 mmol) を入れた後、4時間加熱撹拌した。常温に温度を下げて反応を終結した後、炭酸カリウム水溶液を除去して、前記白色固体を濾過した。濾過した白色固体をテトラヒドロフランとエチルアセテートでそれぞれ2回ずつ洗浄して、前記化合物1 (31.7 g、収率74%) を製造した。

MS [M+H]⁺ = 699

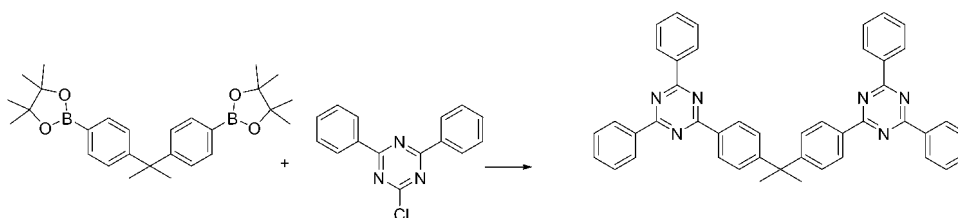
20

【0135】

製造例2. 化合物2の製造

【化10】

[化合物2]



30

前記製造例1における化合物A-2の代わりにB-2を使用したことを除き、前記製造例1と同様に製造して、前記化合物2を製造した。

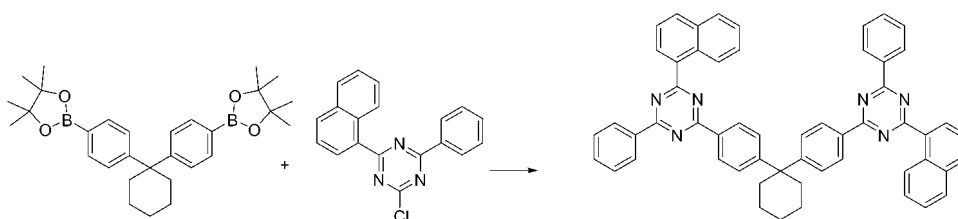
MS [M+H]⁺ = 659

【0136】

製造例3. 化合物6の製造

【化11】

[化合物6]



40

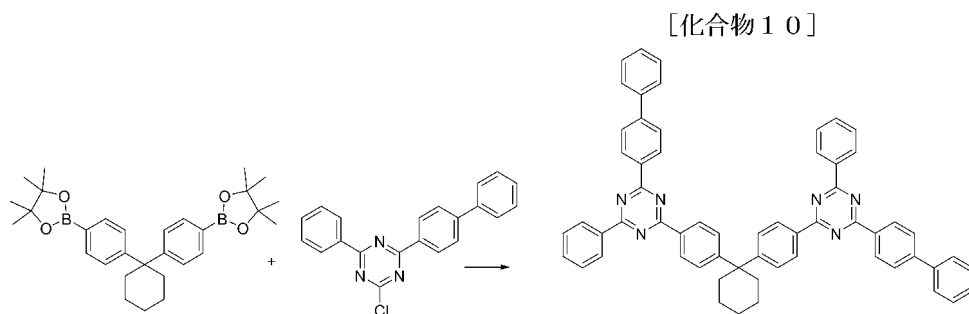
前記製造例1における2-クロロ-4,6-ジフェニル-1,3,5-トリアジンの代わりに2-クロロ-4-(ナフタレン-1-イル)-6-フェニル-1,3,5-トリアジンを使用したことを除き、前記製造例1と同様に製造して、前記化合物6を製造した。

MS [M+H]⁺ = 799

【0137】

50

製造例 4. 化合物 10 の製造
【化 1 2】



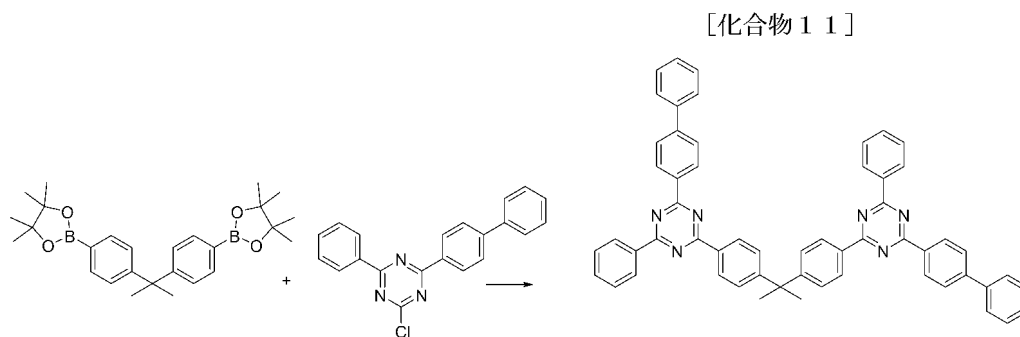
10

前記製造例 1 における 2-クロロ-4,6-ジフェニル-1,3,5-トリアジンの代わりに 2-([1,1'-ビフェニル]-4-イル)-4-クロロ-6-フェニル-1,3,5-トリアジンを使用したことを除き、前記製造例 1 と同様に製造して、化合物 10 を製造した。

MS [M+H]⁺ = 851

【0138】

製造例 5. 化合物 11 の製造
【化 1 3】



20

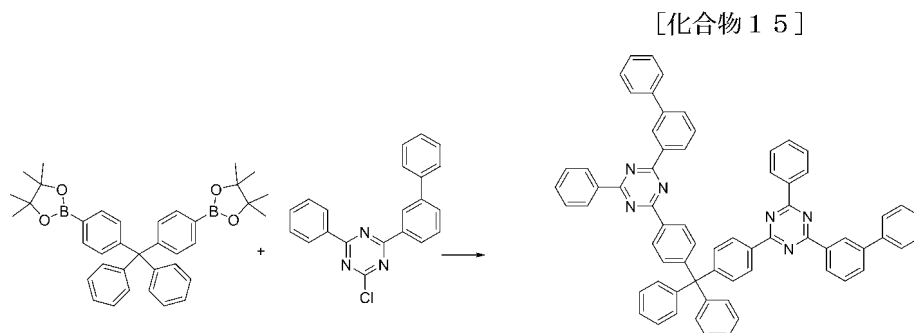
前記製造例 3 における 2-クロロ-4,6-ジフェニル-1,3,5-トリアジンの代わりに 2-([1,1'-ビフェニル]-4-イル)-4-クロロ-6-フェニル-1,3,5-トリアジンを使用したことを除き、前記製造例 2 と同様に製造して、前記化合物 11 を製造した。

30

MS [M+H]⁺ = 811

【0139】

製造例 6. 化合物 15 の製造
【化 1 4】



40

前記製造例 1 における化合物 A-2 の代わりにジフェニルビス(4-(4,4,5,5-テトラメチル-1,3,2-ジオキサボロラン-2-イル)フェニル)メタンを使用し、2-クロロ-4,6-ジフェニル-1,3,5-トリアジンの代わりに 2-([1,1'-

50

「ービフェニル」ー4ーイル)ー4ークロロー6ーフェニルー1, 3, 5ートリアジンを
使用したことを除き、前記製造例1と同様に製造して、前記化合物15を製造した。

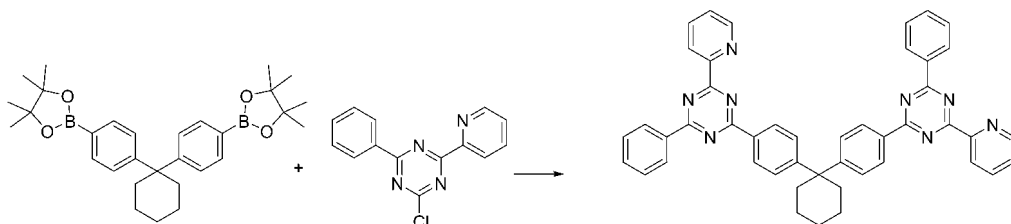
MS [M+H]⁺ = 935

【0140】

製造例7. 化合物17の製造

【化15】

【化合物17】



10

前記製造例1における2ークロロー4, 6ージフェニルー1, 3, 5ートリアジンの代
わりに2ークロロー4ーフェニルー6ー(ピリジンー2ーイル)ー1, 3, 5ートリアジ
ンを使用したことを除き、前記製造例1と同様に製造して、前記化合物17を製造した。

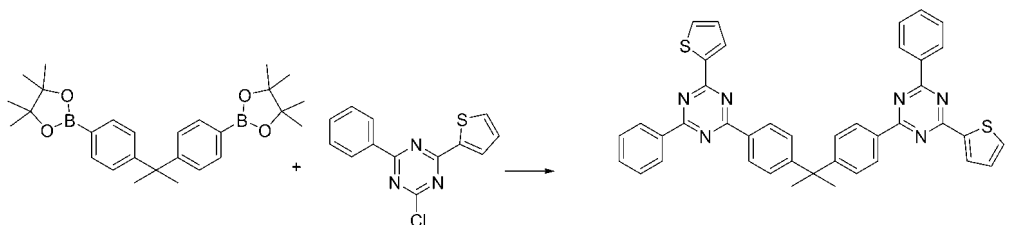
MS [M+H]⁺ = 701

【0141】

製造例8. 化合物22の製造

【化16】

【化合物22】



20

前記製造例2における2ークロロー4, 6ージフェニルー1, 3, 5ートリアジンの代
わりに2ークロロー4ーフェニルー6ー(チオフェンー2ーイル)ー1, 3, 5ートリア
ジンを使用したことを除き、前記製造例2と同様に製造して、前記化合物22を製造した
。

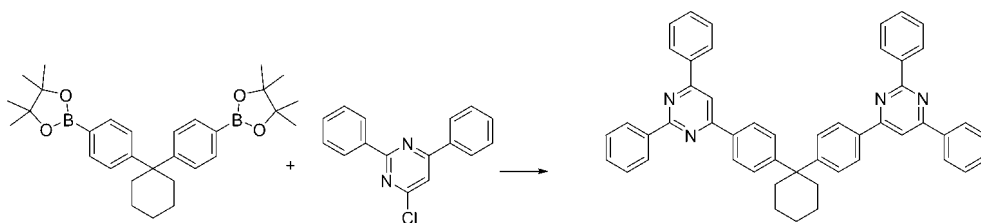
MS [M+H]⁺ = 671

【0142】

製造例9. 化合物24の製造

【化17】

【化合物24】



30

40

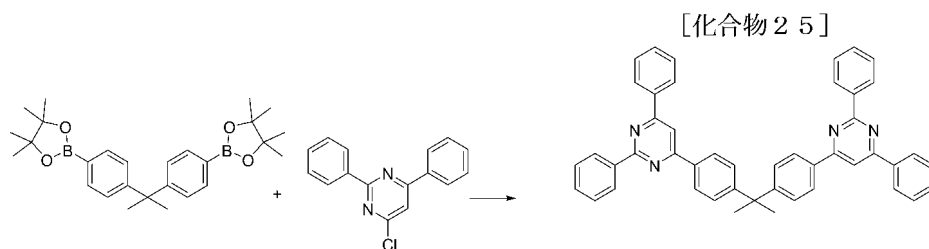
前記製造例1における2ークロロー4, 6ージフェニルー1, 3, 5ートリアジンの代
わりに4ークロロー2, 6ージフェニルピリミジンを使用したことを除き、前記製造例1
と同様に製造して、前記化合物24を製造した。

MS [M+H]⁺ = 697

【0143】

50

製造例 10. 化合物 25 の製造
【化 18】

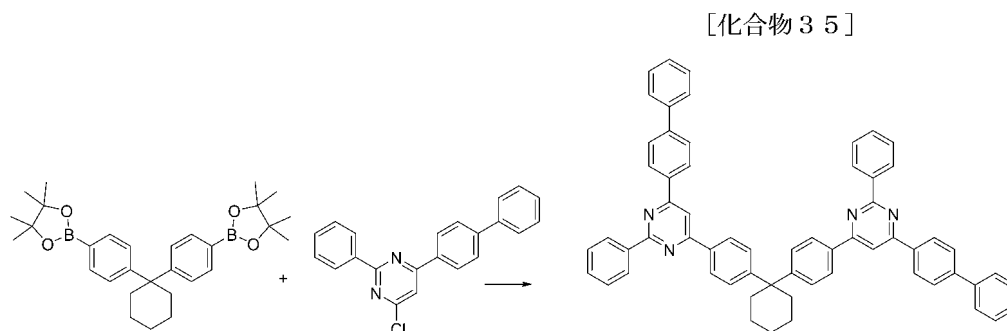


前記製造例 2 における 2-クロロ-4,6-ジフェニル-1,3,5-トリアジンの代わりに 4-クロロ-2,6-ジフェニルピリミジンを使用したことを除き、前記製造例 2 と同様に製造して、前記化合物 25 を製造した。

MS $[M+H]^+ = 657$

【0144】

製造例 11. 化合物 35 の製造
【化 19】

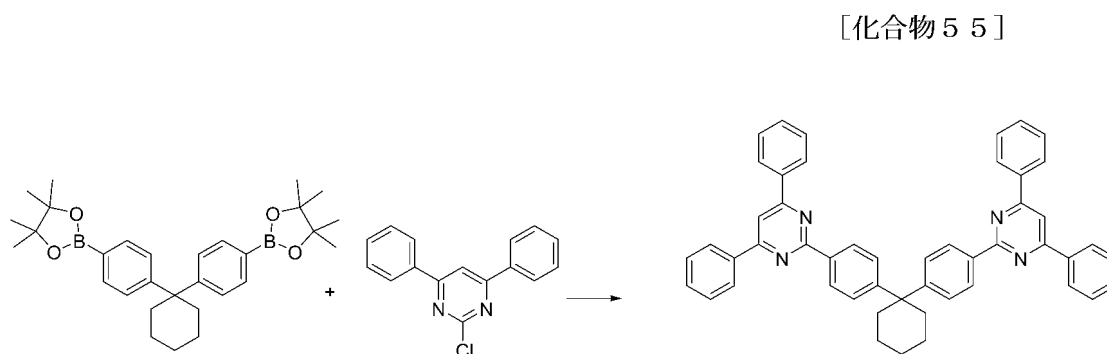


前記製造例 1 における 2-クロロ-4,6-ジフェニル-1,3,5-トリアジンの代わりに 4-([1,1'-ビフェニル]-4-イル)-6-クロロ-2-フェニルピリミジンを使用したことを除き、前記製造例 1 と同様に製造して、前記化合物 35 を製造した。

MS $[M+H]^+ = 849$

【0145】

製造例 12. 化合物 55 の製造
【化 20】



前記製造例 1 における 2-クロロ-4,6-ジフェニル-1,3,5-トリアジンの代わりに 2-クロロ-4,6-ジフェニルピリミジンを使用したことを除き、前記製造例 1 と同様に製造して、前記化合物 55 を製造した。

MS $[M+H]^+ = 697$

【0146】

製造例 13. 化合物 56 の製造

10

20

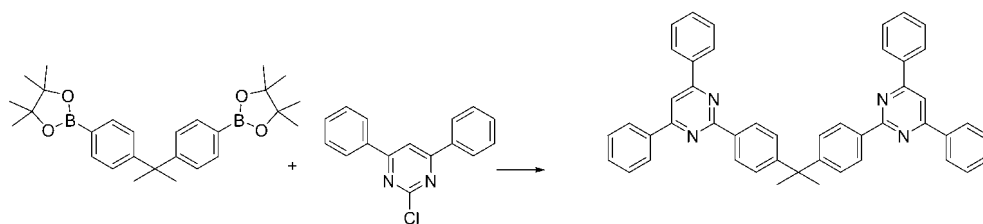
30

40

50

【化 2 1】

[化合物 5 6]



前記製造例 2 における 2-クロロ-4,6-ジフェニル-1,3,5-トリアジンの代
わりに 2-クロロ-4,6-ジフェニルピリミジンを使用したことを除き、前記製造例 2
と同様に製造して、前記化合物 5 6 を製造した。

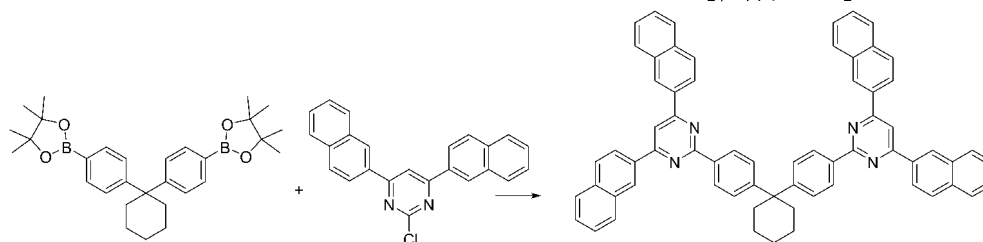
MS $[M+H]^+ = 657$

【0147】

製造例 14. 化合物 7 2 の製造

【化 2 2】

[化合物 7 2]



前記製造例 1 における 2-クロロ-4,6-ジフェニル-1,3,5-トリアジンの代
わりに 2-クロロ-4,6-ジ(ナフタレン-2-イル)ピリミジンを使用したことを除
き、前記製造例 1 と同様に製造して、前記化合物 7 2 を製造した。

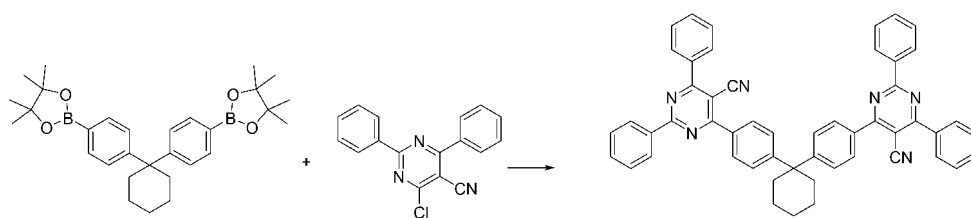
MS $[M+H]^+ = 897$

【0148】

製造例 15. 化合物 7 4 の製造

【化 2 3】

[化合物 7 4]



前記製造例 1 における 2-クロロ-4,6-ジフェニル-1,3,5-トリアジンの代
わりに 4-クロロ-2,6-ジフェニルピリミジン-5-カルボニトリルを使用したこと
を除き、前記製造例 1 と同様に製造して、前記化合物 7 4 を製造した。

MS $[M+H]^+ = 747$

【0149】

製造例 16. 化合物 7 5 の製造

10

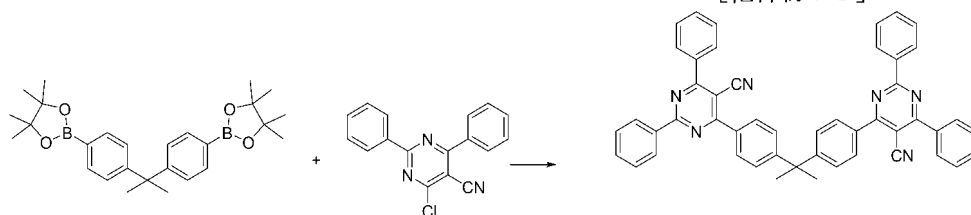
20

30

40

【化 2 4】

[化合物 7 5]



前記製造例 2 における 2-クロロ-4,6-ジフェニル-1,3,5-トリアジンの代わりに 4-クロロ-2,6-ジフェニルピリミジン-5-カルボニトリルを使用したことを除き、前記製造例 2 と同様に製造して、前記化合物 7 5 を製造した。

10

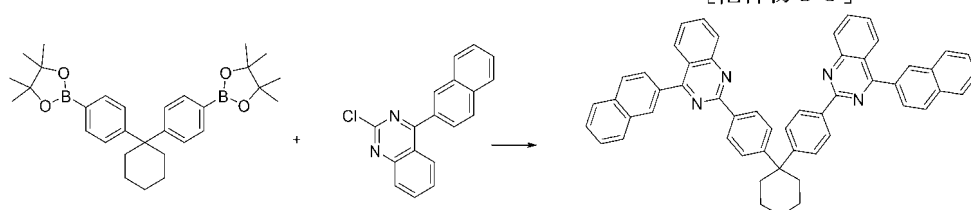
MS $[M+H]^+ = 707$

【0150】

製造例 17. 化合物 8 5 の製造

【化 2 5】

[化合物 8 5]



20

前記製造例 1 における 2-クロロ-4,6-ジフェニル-1,3,5-トリアジンの代わりに 2-クロロ-4-(ナフタレン-2-イル)キナゾリンを使用したことを除き、前記製造例 1 と同様に製造して、前記化合物 8 5 を製造した。

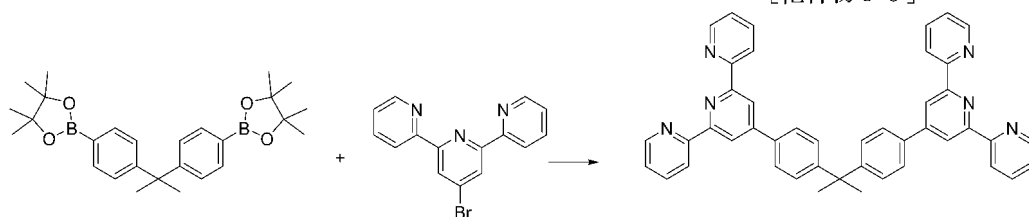
MS $[M+H]^+ = 745$

【0151】

製造例 18. 化合物 9 0 の製造

【化 2 6】

[化合物 9 0]



30

前記製造例 2 における 2-クロロ-4,6-ジフェニル-1,3,5-トリアジンの代わりに 4'-ブromo-2,2':6'2"-ターピリジンを使用したことを除き、前記製造例 2 と同様に製造して、前記化合物 9 0 を製造した。

MS $[M+H]^+ = 659$

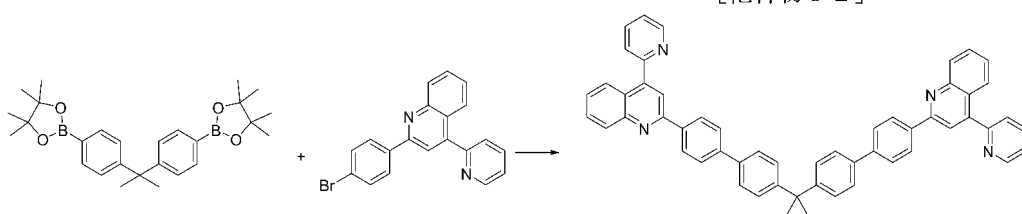
40

【0152】

製造例 19. 化合物 9 2 の製造

【化 2 7】

[化合物 9 2]



50

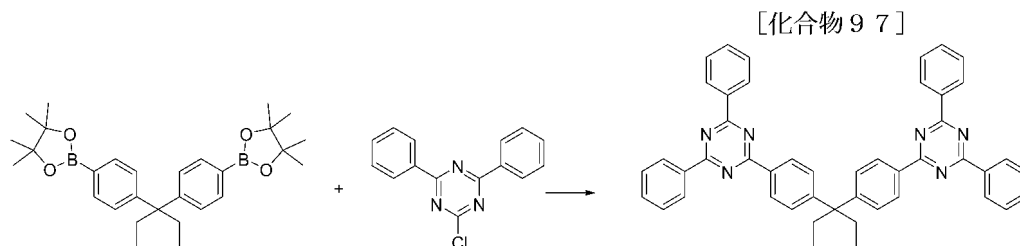
前記製造例 2 における 2-クロロ-4, 6-ジフェニル-1, 3, 5-トリアジンの代わりに 2-(4-ブロモフェニル)-4-(ピリジン-2-イル)キノリンを使用したことを除き、前記製造例 2 と同様に製造して、前記化合物 9 2 を製造した。

MS $[M+H]^+ = 659$

【0153】

製造例 20. 化合物 9 7 の製造

【化 2 8】



10

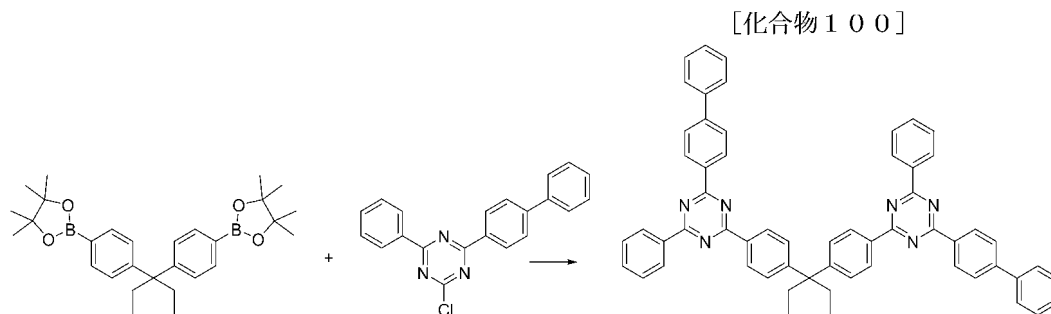
前記製造例 1 における化合物 A-2 の代わりに C-2 を使用したことを除き、前記製造例 1 と同様に製造して、前記化合物 9 7 を製造した。

MS $[M+H]^+ = 687$

【0154】

製造例 21. 化合物 100 の製造

【化 2 9】



20

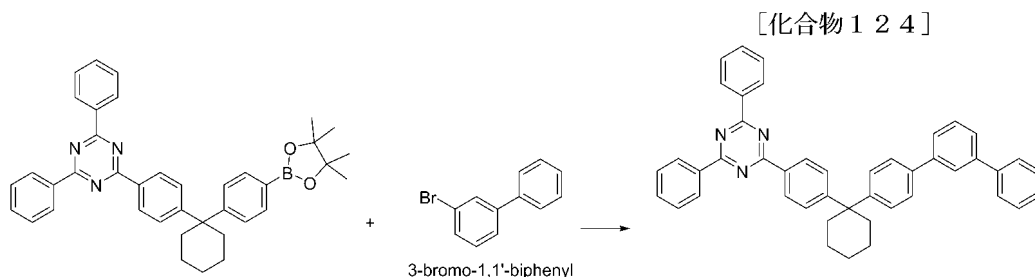
前記製造例 5 における化合物 A-2 の代わりに C-2 を使用したことを除き、前記製造例 5 と同様に製造して、前記化合物 100 を製造した。

MS $[M+H]^+ = 839$

【0155】

製造例 22. 化合物 124 の製造

【化 30】



30

40

窒素雰囲気下、前記化合物 2, 4-ジフェニル-6-(4-(4, 4, 5, 5-テトラメチル-1, 3, 2-ジオキサボロラン-2-イル)フェニル)シクロヘキシルフェニル 1, 3, 5-トリアジン (30 g、0.0505 mol) と 3-ブロモ-1, 1'-ビフェニル (11.8 g、0.0505 mol) をテトラヒドロフラン (600 ml) に完全に溶かした後、炭酸カリウム (21 g、0.152 mol) を水 200 ml に溶解させて添加し、テトラキストリフェニルホスフィノパラジウム (1.8 g、0.00152 mmol) を入れた後、4 時間加熱撹拌した。常温に温度を下げて反応を終結した後、

50

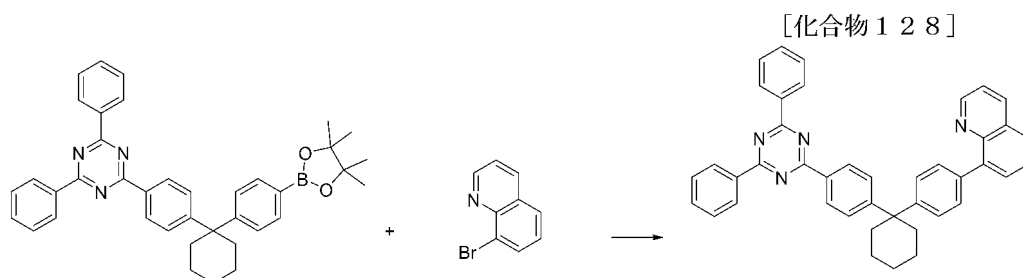
炭酸カリウム水溶液を除去して、前記白色固体を濾過した。濾過した白色固体をテトラヒドロフランとエチルアセレートでそれぞれ2回ずつ洗浄して、前記化合物124(23.1g、収率74%)を製造した。

MS $[M+H]^+ = 620$

【0156】

製造例23. 化合物128の製造

【化31】



10

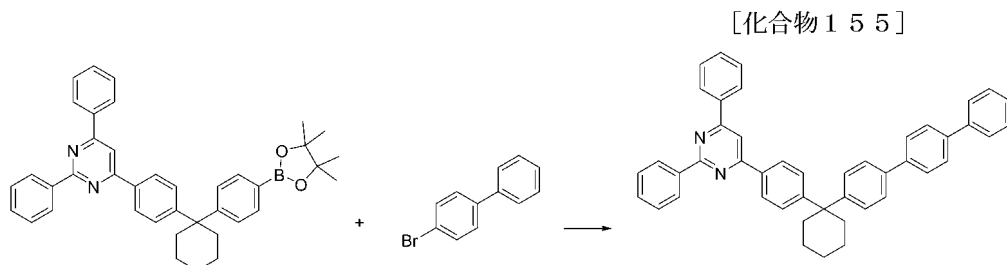
前記製造例22における3-ブromo-1,1'-ビフェニルの代わりに8-ブromoキノリンを使用したことを除き、前記製造例22と同様に製造して、前記化合物128を製造した。

MS $[M+H]^+ = 595$

【0157】

製造例24. 化合物155の製造

【化32】



30

窒素雰囲気下、前記化合物2, 4-ジフェニル-6-(4-(4,4,5,5-テトラメチル-1,3,2-ジオキサボロラン-2-イル)フェニル)シクロヘキシル)フェニル)ピリミジン(29.9g、0.0505mol)と4-ブromo-1,1'-ビフェニル(11.8g、0.0505mol)をテトラヒドロフラン(600ml)に完全に溶かした後、炭酸カリウム(21g、0.152mol)を水200mlに溶解させて添加し、テトラキストリフェニルホスフィノパラジウム(1.8g、0.00152mmol)を入れた後、4時間加熱撹拌した。常温に温度を下げて反応を終結した後、炭酸カリウム水溶液を除去して、前記白色固体を濾過した。濾過した白色固体をテトラヒドロフランとエチルアセレートでそれぞれ2回ずつ洗浄して、前記化合物155(22.1g、収率71%)を製造した。

MS $[M+H]^+ = 619$

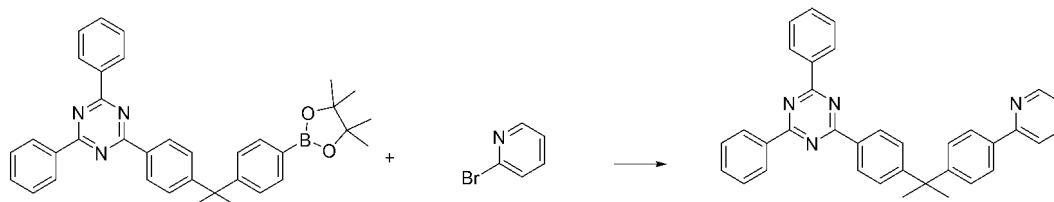
【0158】

製造例25. 化合物177の製造

40

【化 3 3】

[化合物 1 7 7]



窒素雰囲気下、前記化合物 2，4-ジフェニル-6-(4-(2-(4-(4,4,5,5-テトラメチル-1,3,2-ジオキサボロラン-2-イル)フェニル)プロパン-2-イル)フェニル)-1,3,5-トリアジン(28.0g、0.0505mol)と2-ブロモピリジン(8.0g、0.0505mol)をテトラヒドロフラン(600ml)に完全に溶かした後、炭酸カリウム(21g、0.152mol)を水200mlに溶解させて添加し、テトラキストリフェニル-ホスフィノパラジウム(1.8g、0.00152mmol)を入れた後、4時間加熱撹拌した。常温に温度を下げて反応を終結した後、炭酸カリウム水溶液を除去して、前記白色固体を濾過した。濾過した白色固体をテトラヒドロフランとエチルアセテートでそれぞれ2回ずつ洗浄して、前記化合物 1 7 7 (17g、収率69%)を製造した。

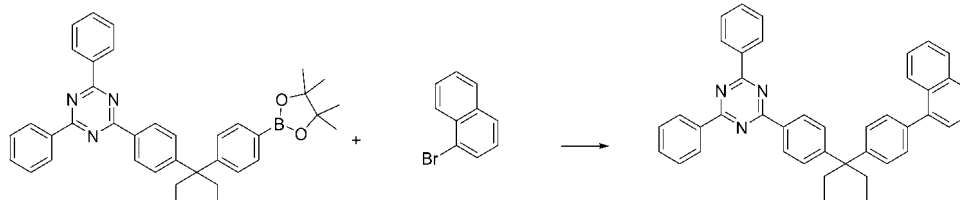
MS [M+H]⁺ = 504

【0159】

製造例 26. 化合物 1 8 2 の製造

【化 3 4】

[化合物 1 8 2]



窒素雰囲気下、前記化合物 2，4-ジフェニル-6-(4-(3-(4-(4,4,5,5-テトラメチル-1,3,2-ジオキサボロラン-2-イル)フェニル)ペンタン-3-イル)フェニル)-1,3,5-トリアジン(29.4g、0.0505mol)と1-ブロモナフタレン(10.5g、0.0505mol)をテトラヒドロフラン(600ml)に完全に溶かした後、炭酸カリウム(21g、0.152mol)を水200mlに溶解させて添加し、テトラキストリフェニル-ホスフィノパラジウム(1.8g、0.00152mmol)を入れた後、4時間加熱撹拌した。常温に温度を下げて反応を終結した後、炭酸カリウム水溶液を除去して、前記白色固体を濾過した。濾過した白色固体をテトラヒドロフランとエチルアセテートでそれぞれ2回ずつ洗浄して、前記化合物 1 8 2 (19g、収率68%)を製造した。

MS [M+H]⁺ = 554

【0160】

<実験例 1-1>

ITO(indium tin oxide)が1,000Å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で洗浄した。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(Millipore Co.)製品のフィルタ(Filter)で2次濾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分間進行させた。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て乾燥させた後、プラズマ洗浄機に輸送させた。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、真空蒸着機に基板を輸送させた。

【0161】

このように用意されたITO透明電極上に、下記の化合物[HI-A]を600 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、下記化学式のヘキサニトリルヘキサアザトリフェニレン(hexaazatriphenylene; HAT)を50 Åおよび下記の化合物[HT-A](600 Å)を順次に真空蒸着して、正孔輸送層を形成した。

【0162】

次に、前記正孔輸送層上に、膜厚さ200 Åに下記の化合物[BH]と[BD]を25:1の重量比で真空蒸着して、発光層を形成した。

【0163】

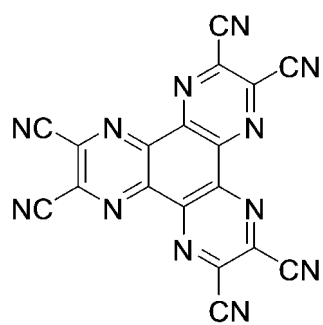
前記発光層上に、前記化合物1と下記の化合物[LiQ](Lithiumquinolate)を1:1の重量比で真空蒸着して、350 Åの厚さに電子注入および輸送層を形成した。前記電子注入および電子輸送層上に、順次に、10 Åの厚さにリチウムフルオライド(LiF)と1,000 Åの厚さにアルミニウムを蒸着して、陰極を形成した。

【0164】

前記過程において、有機物の蒸着速度は0.4~0.9 Å/secを維持し、陰極のリチウムフルオライドは0.3 Å/sec、アルミニウムは2 Å/secの蒸着速度を維持し、蒸着時の真空度は $1 \times 10^{-7} \sim 5 \times 10^{-8}$ torrを維持して、有機発光素子を作製した。

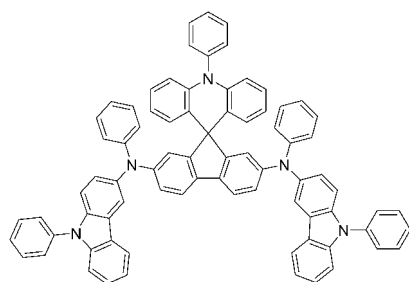
【化 3 5】

[HAT]

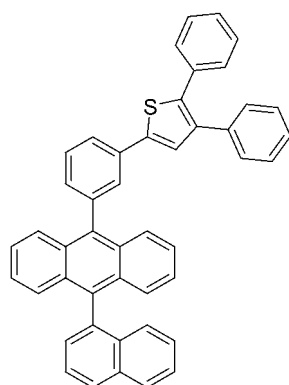


10

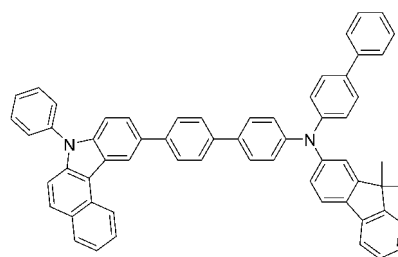
[HI-A]



[BH]

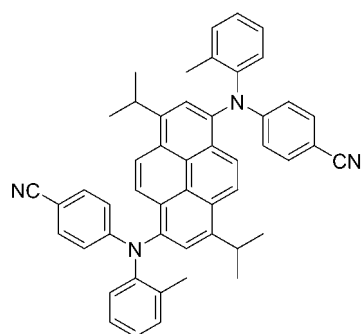


[HT-A]



20

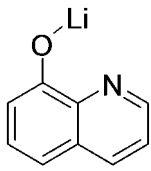
[BD]



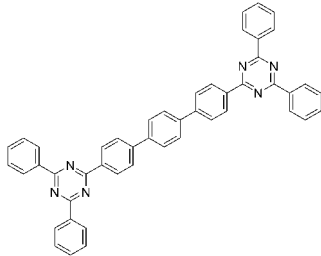
30

【化 3 6】

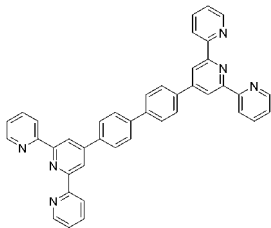
[L i Q]



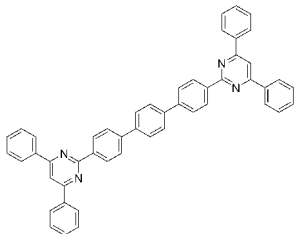
[ET-1-A]



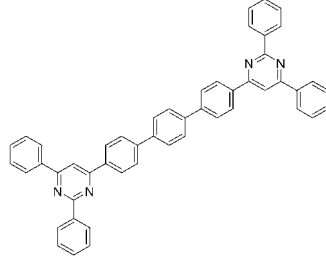
[ET-1-D]



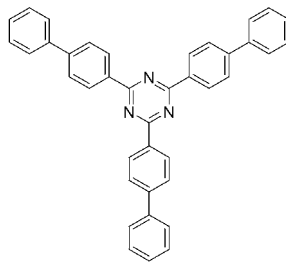
[ET-1-G]



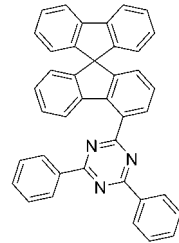
[ET-1-B]



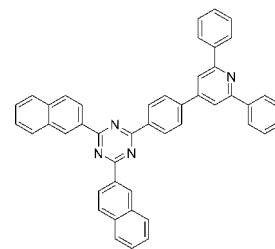
[ET-1-E]



[ET-1-C]



[ET-1-F]



10

20

30

【0165】

<実験例 1-2>

前記実験例 1-1 における化合物 1 の化合物の代わりに化合物 2 を使用したことを除けば、実験例 1-1 と同様の方法で有機発光素子を作製した。

【0166】

<実験例 1-3>

前記実験例 1-1 における化合物 1 の化合物の代わりに化合物 6 を使用したことを除けば、実験例 1-1 と同様の方法で有機発光素子を作製した。

【0167】

<実験例 1-4>

前記実験例 1-1 における化合物 1 の化合物の代わりに化合物 10 を使用したことを除けば、実験例 1-1 と同様の方法で有機発光素子を作製した。

【0168】

<実験例 1-5>

前記実験例 1-1 における化合物 1 の化合物の代わりに化合物 11 を使用したことを除けば、実験例 1-1 と同様の方法で有機発光素子を作製した。

【0169】

<実験例 1-6>

前記実験例 1-1 における化合物 1 の化合物の代わりに化合物 15 を使用したことを除

40

50

けば、実験例 1-1 と同様の方法で有機発光素子を作製した。

【0170】

＜実験例 1-7＞

前記実験例 1-1 における化合物 1 の化合物の代わりに化合物 17 を使用したことを除けば、実験例 1-1 と同様の方法で有機発光素子を作製した。

【0171】

＜実験例 1-8＞

前記実験例 1-1 における化合物 1 の化合物の代わりに化合物 22 を使用したことを除けば、実験例 1-1 と同様の方法で有機発光素子を作製した。

【0172】

＜実験例 1-9＞

前記実験例 1-1 における化合物 1 の化合物の代わりに化合物 24 を使用したことを除けば、実験例 1-1 と同様の方法で有機発光素子を作製した。

【0173】

＜実験例 1-10＞

前記実験例 1-1 における化合物 1 の化合物の代わりに化合物 25 を使用したことを除けば、実験例 1-1 と同様の方法で有機発光素子を作製した。

【0174】

＜実験例 1-11＞

前記実験例 1-1 における化合物 1 の化合物の代わりに化合物 35 を使用したことを除けば、実験例 1-1 と同様の方法で有機発光素子を作製した。

【0175】

＜実験例 1-12＞

前記実験例 1-1 における化合物 1 の化合物の代わりに化合物 55 を使用したことを除けば、実験例 1-1 と同様の方法で有機発光素子を作製した。

【0176】

＜実験例 1-13＞

前記実験例 1-1 における化合物 1 の化合物の代わりに化合物 56 を使用したことを除けば、実験例 1-1 と同様の方法で有機発光素子を作製した。

【0177】

＜実験例 1-14＞

前記実験例 1-1 における化合物 1 の化合物の代わりに化合物 72 を使用したことを除けば、実験例 1-1 と同様の方法で有機発光素子を作製した。

【0178】

＜実験例 1-15＞

前記実験例 1-1 における化合物 1 の化合物の代わりに化合物 74 を使用したことを除けば、実験例 1-1 と同様の方法で有機発光素子を作製した。

【0179】

＜実験例 1-16＞

前記実験例 1-1 における化合物 1 の化合物の代わりに化合物 75 を使用したことを除けば、実験例 1-1 と同様の方法で有機発光素子を作製した。

【0180】

＜実験例 1-17＞

前記実験例 1-1 における化合物 1 の化合物の代わりに化合物 85 を使用したことを除けば、実験例 1-1 と同様の方法で有機発光素子を作製した。

【0181】

＜実験例 1-18＞

前記実験例 1-1 における化合物 1 の化合物の代わりに化合物 90 を使用したことを除けば、実験例 1-1 と同様の方法で有機発光素子を作製した。

【0182】

10

20

30

40

50

<実験例 1-19>

前記実験例 1-1 における化合物 1 の化合物の代わりに化合物 92 を使用したことを除けば、実験例 1-1 と同様の方法で有機発光素子を作製した。

【0183】

<実験例 1-20>

前記実験例 1-1 における化合物 1 の化合物の代わりに化合物 97 を使用したことを除けば、実験例 1-1 と同様の方法で有機発光素子を作製した。

【0184】

<実験例 1-21>

前記実験例 1-1 における化合物 1 の化合物の代わりに化合物 100 を使用したことを除けば、実験例 1-1 と同様の方法で有機発光素子を作製した。

10

【0185】

<実験例 1-22>

前記実験例 1-1 における化合物 1 の化合物の代わりに化合物 124 を使用したことを除けば、実験例 1-1 と同様の方法で有機発光素子を作製した。

【0186】

<実験例 1-23>

前記実験例 1-1 における化合物 1 の化合物の代わりに化合物 128 を使用したことを除けば、実験例 1-1 と同様の方法で有機発光素子を作製した。

【0187】

20

<実験例 1-24>

前記実験例 1-1 における化合物 1 の化合物の代わりに化合物 155 を使用したことを除けば、実験例 1-1 と同様の方法で有機発光素子を作製した。

【0188】

<実験例 1-25>

前記実験例 1-1 における化合物 1 の化合物の代わりに化合物 177 を使用したことを除けば、実験例 1-1 と同様の方法で有機発光素子を作製した。

【0189】

<実験例 1-26>

前記実験例 1-1 における化合物 1 の化合物の代わりに化合物 182 を使用したことを除けば、実験例 1-1 と同様の方法で有機発光素子を作製した。

30

【0190】

<比較例 1-1>

前記実験例 1-1 における化合物 1 の化合物の代わりに化合物 ET-1-A を使用したことを除けば、実験例 1-1 と同様の方法で有機発光素子を作製した。

【0191】

<比較例 1-2>

前記実験例 1-1 における化合物 1 の化合物の代わりに化合物 ET-1-B を使用したことを除けば、実験例 1-1 と同様の方法で有機発光素子を作製した。

【0192】

40

<比較例 1-3>

前記実験例 1-1 における化合物 1 の化合物の代わりに化合物 ET-1-C を使用したことを除けば、実験例 1-1 と同様の方法で有機発光素子を作製した。

【0193】

<比較例 1-4>

前記実験例 1-1 における化合物 1 の化合物の代わりに化合物 ET-1-D を使用したことを除けば、実験例 1-1 と同様の方法で有機発光素子を作製した。

【0194】

<比較例 1-5>

前記実験例 1-1 における化合物 1 の化合物の代わりに化合物 ET-1-E を使用した

50

ことを除けば、実験例 1-1 と同様の方法で有機発光素子を作製した。

【0195】

＜比較例 1-6＞

前記実験例 1-1 における化合物 1 の化合物の代わりに化合物 ET-1-F を使用したことを除けば、実験例 1-1 と同様の方法で有機発光素子を作製した。

【0196】

＜比較例 1-7＞

前記実験例 1-1 における化合物 1 の化合物の代わりに化合物 ET-1-G を使用したことを除けば、実験例 1-1 と同様の方法で有機発光素子を作製した。

【0197】

上述した方法で製造した有機発光素子を 10 mA/cm^2 の電流密度で駆動電圧と発光効率を測定し、 20 mA/cm^2 の電流密度で初期輝度対比 90% となる時間 (T_{90}) を測定した。その結果を下記表 22 に示した。

【0198】

【表 2 2】

	化合物	電圧 (V@10mA/cm ²)	効率 (cd/A@10mA/cm ²)	色座標 (x, y)	寿命(h) T ₉₀ at 20mA/cm ²
実験例 1-1	1	3.3	7.27	(0.142, 0.097)	140
実験例 1-2	2	3.2	7.32	(0.142, 0.096)	139
実験例 1-3	6	3.4	7.02	(0.142, 0.096)	151
実験例 1-4	10	3.35	7.17	(0.142, 0.096)	164
実験例 1-5	11	3.31	7.20	(0.142, 0.096)	153
実験例 1-6	15	3.74	6.24	(0.142, 0.097)	128
実験例 1-7	17	3.47	6.87	(0.142, 0.096)	187
実験例 1-8	22	3.58	6.76	(0.142, 0.099)	201
実験例 1-9	24	3.34	7.34	(0.142, 0.096)	138
実験例 1-10	25	3.32	7.37	(0.142, 0.098)	137
実験例 1-11	35	3.37	7.10	(0.142, 0.096)	154
実験例 1-12	55	3.62	6.85	(0.142, 0.097)	184
実験例 1-13	56	3.61	6.94	(0.142, 0.096)	181
実験例 1-14	72	3.67	6.88	(0.142, 0.097)	179
実験例 1-15	74	3.78	6.21	(0.142, 0.098)	211
実験例 1-16	75	3.79	6.24	(0.142, 0.097)	207
実験例 1-17	85	3.57	6.91	(0.142, 0.097)	141
実験例 1-18	90	3.40	7.00	(0.142, 0.096)	185
実験例 1-19	92	3.24	7.07	(0.142, 0.096)	151
実験例 1-20	97	3.28	7.26	(0.142, 0.096)	137
実験例 1-21	100	3.40	7.11	(0.142, 0.096)	144
実験例 1-22	124	3.14	7.34	(0.142, 0.096)	127
実験例 1-23	128	3.34	7.16	(0.142, 0.096)	138
実験例 1-24	155	3.37	7.15	(0.142, 0.096)	140
実験例 1-25	177	3.31	7.23	(0.142, 0.096)	137
実験例 1-26	182	3.27	7.19	(0.142, 0.096)	142
比較例 1-1	ET-1-A	4.5	3.91	(0.142, 0.098)	114
比較例 1-2	ET-1-B	4.6	3.81	(0.142, 0.102)	75
比較例 1-3	ET-1-C	3.9	5.87	(0.142, 0.096)	81
比較例 1-4	ET-1-D	4.42	4.01	(0.142, 0.096)	110
比較例 1-5	ET-1-E	3.95	5.65	(0.142, 0.096)	90
比較例 1-6	ET-1-F	4.01	5.10	(0.142, 0.096)	115
比較例 1-7	ET-1-G	4.51	5.01	(0.142, 0.096)	102

【0199】

前記表 2 2 の結果から、本明細書の一実施態様に係る化学式 1 で表される化合物は、有機発光素子の電子注入および電子輸送を同時に行うことができる有機物層に使用可能であることを確認することができた。

【0200】

また、前記実験例 1-1～1-26 および比較例 1-1～1-7 により、本明細書の一実施態様に係る非コンジュゲーション基を含む化学式 1 で表される化合物の場合に、高い効率、低い駆動電圧および長寿命の有機発光素子を提供可能であることを確認することができた。

【0201】

具体的には、実験例 1-1、1-2 および比較例 1-1 と、実験例 1-9、1-10 および比較例 1-2 と、実験例 1-12、1-13 および比較例 1-7 と、実験例 1-18 および比較例 1-4 を比較すると、非コンジュゲーション基を含む前記化学式 1 で表され

る化合物の場合に、他の構造の完全なコンジュゲーション基を含む化合物に比べて、有機発光素子における駆動電圧、効率および寿命の面で優れた特性を示すことを確認することができた。前記のような結果は、オービタルの重なりが少なくなつて三重項エネルギーが増加し、光学的バンドギャップを広く形成させることができるからである。

【0202】

また、実験例1-22、1-24、1-26および比較例1-5と、実験例1-23、1-25および比較例1-6を比較すると、非コンジュゲーション基を含む前記化学式1で表される化合物の場合に、他の構造の完全なコンジュゲーション基を含む化合物に比べて、有機発光素子における駆動電圧、効率および寿命の面で優れた特性を示すことを確認することができた。前記のような結果は、オービタルの重なりが少なくなつて三重項エネルギーが増加し、光学的バンドギャップを広く形成させることができるからである。

10

【0203】

本明細書の一実施態様に係る化学式1で表される化合物は、熱的安定性に優れ、6.0 eV以上の深いHOMO準位、高い三重項エネルギー（ET）、および正孔安定性を有して優れた特性を示すことができる。

【0204】

本明細書の一実施態様において、前記化学式1で表される化合物を電子注入および電子輸送を同時に行うことができる有機物層に使用する場合、n-型ドーパントを混ぜて使用可能である。これによって、化学式1で表される化合物は、低い駆動電圧および高い効率を有し、化合物の正孔安定性によって素子の安定性を向上させることができる。

20

【符号の説明】

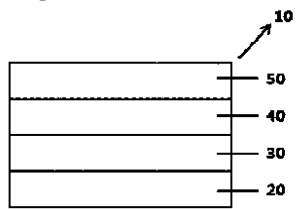
【0205】

- 10、11：有機発光素子
- 20：基板
- 30：第1電極
- 40：発光層
- 50：第2電極
- 60：正孔注入層
- 70：正孔輸送層
- 80：電子輸送層
- 90：電子注入層

30

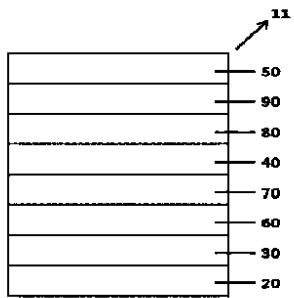
【図 1】

[図1]



【図 2】

[図2]



フロントページの続き

(51)Int.Cl.		F I	
<i>C 0 7 D</i>	<i>401/10</i>	<i>(2006.01)</i>	<i>C 0 7 D</i> 401/10
<i>C 0 9 K</i>	<i>11/06</i>	<i>(2006.01)</i>	<i>C 0 9 K</i> 11/06 6 9 0
<i>H 0 1 L</i>	<i>51/50</i>	<i>(2006.01)</i>	<i>H 0 5 B</i> 33/14 B
			<i>H 0 5 B</i> 33/22 B
			<i>H 0 5 B</i> 33/22 D

(72)発明者 フ、ジュンオ
大韓民国・ソウル・ヨンドゥンポグ・ヨイーデロ・１２８ エルジー・ケム・リミテッド内

(72)発明者 ジャン、ブンジェ
大韓民国・ソウル・ヨンドゥンポグ・ヨイーデロ・１２８ エルジー・ケム・リミテッド内

(72)発明者 カン、ミニョン
大韓民国・ソウル・ヨンドゥンポグ・ヨイーデロ・１２８ エルジー・ケム・リミテッド内

(72)発明者 ハン、ミヨン
大韓民国・ソウル・ヨンドゥンポグ・ヨイーデロ・１２８ エルジー・ケム・リミテッド内

審査官 伊佐地 公美

(56)参考文献 特表２０１１－５００５６３（ＪＰ，Ａ）
特開２０１１－０９３８５４（ＪＰ，Ａ）
特開２００４－１４６３６８（ＪＰ，Ａ）
特開２００５－０９３１５９（ＪＰ，Ａ）
韓国公開特許第１０－２０１０－００５０４８５（ＫＲ，Ａ）
国際公開第２００７／０２０７１８（ＷＯ，Ａ１）
特開２００７－０４９０５５（ＪＰ，Ａ）
特開２００２－１９８１７９（ＪＰ，Ａ）
中国特許出願公開第１０３３０５２１０（ＣＮ，Ａ）
特開２００３－２６１４７２（ＪＰ，Ａ）
特開２００７－２２３９０４（ＪＰ，Ａ）
特開平０５－３２６１４６（ＪＰ，Ａ）
特開２００３－２８２２７０（ＪＰ，Ａ）
特開２００３－２０６２７８（ＪＰ，Ａ）
国際公開第２００２／０４３４４９（ＷＯ，Ａ１）
米国特許出願公開第２００２／０１０２４３３（ＵＳ，Ａ１）
特開２００５－２２００８０（ＪＰ，Ａ）
特開２００５－０３２４８８（ＪＰ，Ａ）
特開２００４－３４２３９１（ＪＰ，Ａ）
特開２００８－０７４９３９（ＪＰ，Ａ）
国際公開第２００６／１０４１１８（ＷＯ，Ａ１）
特開２００９－１８２０８８（ＪＰ，Ａ）
特開２００７－２５４２９７（ＪＰ，Ａ）
特開２００５－１５８２８９（ＪＰ，Ａ）
HARTMAN, W. W. et al., Organic Synthesis, 1943年, Coll. Vol. 2, pp. 232-234
SUKEGAWA, J. et al., Chemistry Letters, 2014年12月 8日, Vol. 43, pp. 699-701

(58)調査した分野(Int.Cl., DB名)
C 0 7 D
C 0 9 K

H01L

CAplus/REGISTRY (STN)