

(19) 日本国特許庁(JP)

(12) 特 許 公 報(B2)

(11) 特許番号

特許第6687233号  
(P6687233)

(45) 発行日 令和2年4月22日(2020.4.22)

(24) 登録日 令和2年4月6日(2020.4.6)

(51) Int. Cl.

F I

<b>C07D 487/04</b>	<b>(2006.01)</b>	C O 7 D	487/04	1 4 4
<b>C07F 9/6561</b>	<b>(2006.01)</b>	C O 7 F	9/6561	C S P Z
<b>C09K 11/06</b>	<b>(2006.01)</b>	C O 9 K	11/06	6 4 O
<b>H01L 51/50</b>	<b>(2006.01)</b>	H O 5 B	33/22	D
		H O 5 B	33/14	B

請求項の数 22 (全 184 頁) 最終頁に続く

(21) 出願番号 特願2017-560164 (P2017-560164)  
 (86) (22) 出願日 平成28年6月7日(2016.6.7)  
 (65) 公表番号 特表2018-521002 (P2018-521002A)  
 (43) 公表日 平成30年8月2日(2018.8.2)  
 (86) 国際出願番号 PCT/KR2016/006014  
 (87) 国際公開番号 W02016/195461  
 (87) 国際公開日 平成28年12月8日(2016.12.8)  
 審査請求日 平成30年1月15日(2018.1.15)  
 (31) 優先権主張番号 10-2015-0080126  
 (32) 優先日 平成27年6月5日(2015.6.5)  
 (33) 優先権主張国・地域又は機関  
 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, ヨイデロ 128  
 (74) 代理人 110000877  
 龍華国際特許業務法人  
 (72) 発明者 チャ、ヨンバム  
 大韓民国・ソウル・ヨンドウ  
 ンポグ・ヨイデロ・128 エル  
 ジー・ケム・リミテッド内  
 (72) 発明者 ホン、スン キル  
 大韓民国・ソウル・ヨンドウ  
 ンポグ・ヨイデロ・128 エル  
 ジー・ケム・リミテッド内

最終頁に続く

(54) 【発明の名称】 化合物およびこれを含む有機電子素子

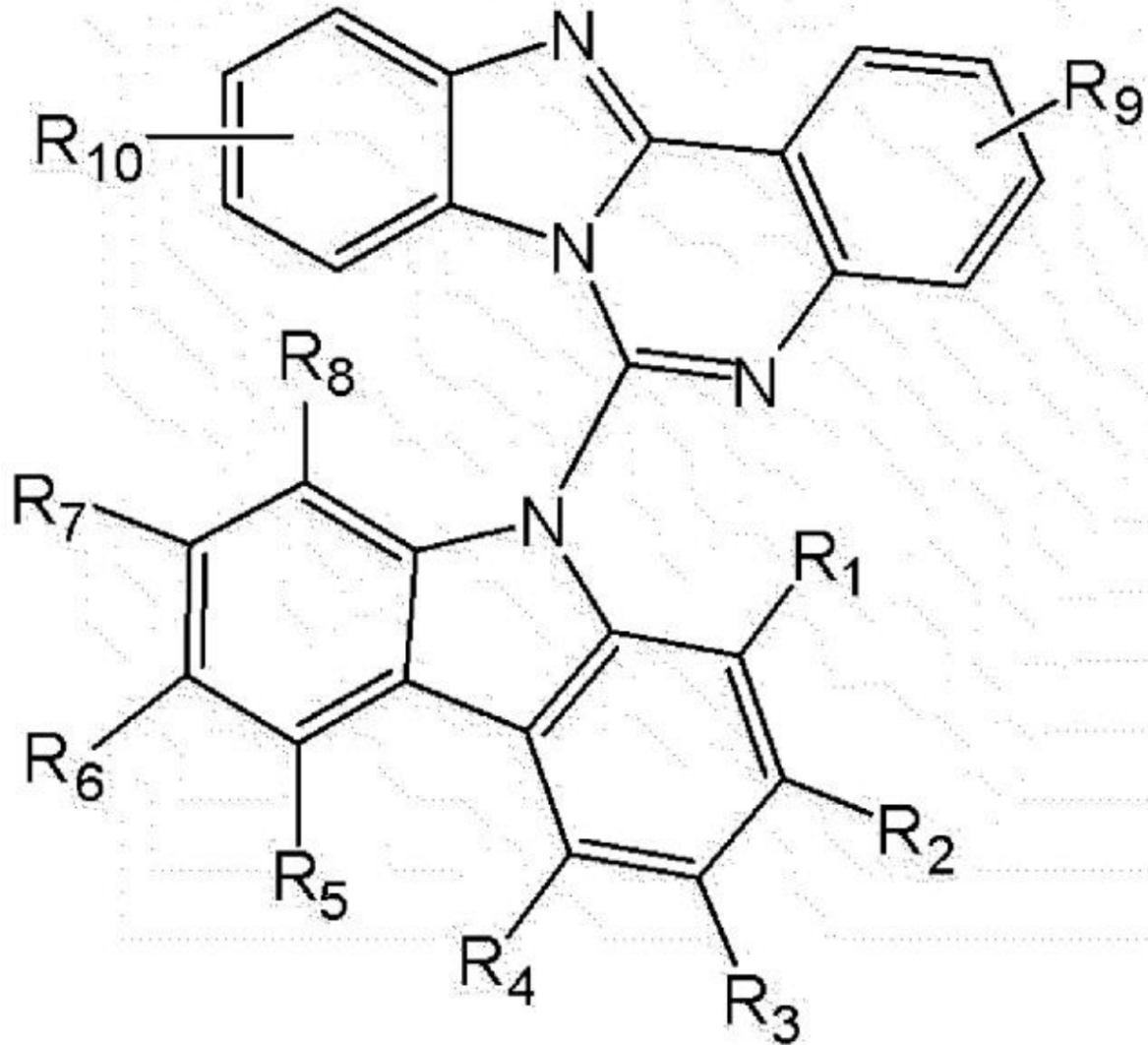
(57) 【特許請求の範囲】

【請求項1】

下記化学式1で表される化合物：

[ 化学式 1 ]

【化1】



10

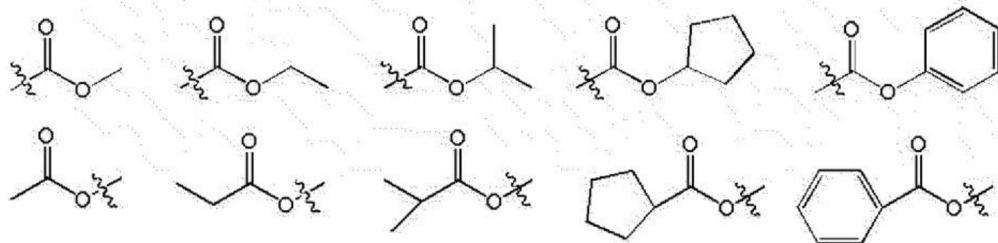
20

30

化学式1において、

$R_1 \sim R_8$  のうちの少なくとも1つは、 $-(L)_m - (Ar)_n$  であり、残りは、互いに同一または異なり、それぞれ独立に、水素；重水素；ハロゲン基；ニトロ基；シアノ基；下記構造

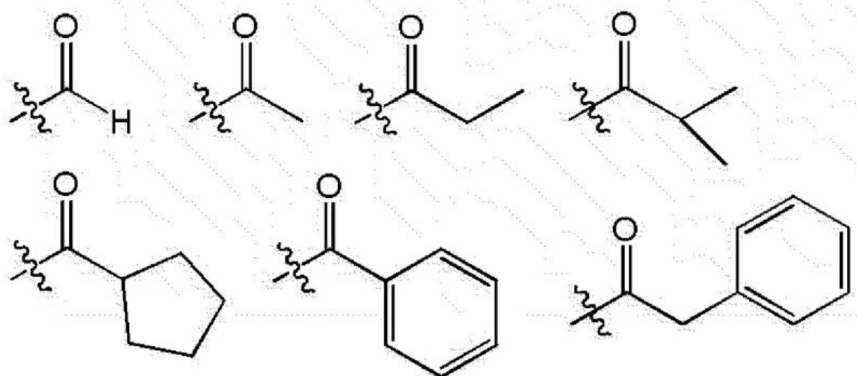
【化2】



40

のいずれかから選択されるエステル基；下記構造

## 【化3】



10

のいずれかから選択されるカルボニル基；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リール基；または置換もしくは非置換のヘテロ環基であるか、隣接した基と結合して環を形成し、

Lは、直接結合；置換もしくは非置換のアリーレン基；または置換もしくは非置換の2価のヘテロ環基であり、

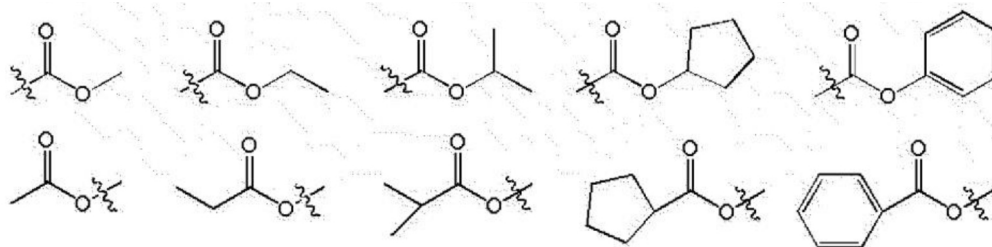
mは、1～3の整数であり、

mが2以上の整数の場合、複数のLは、互いに同一または異なり、

Arは、重水素；ハロゲン基；ニトロ基；シアノ基；下記構造

20

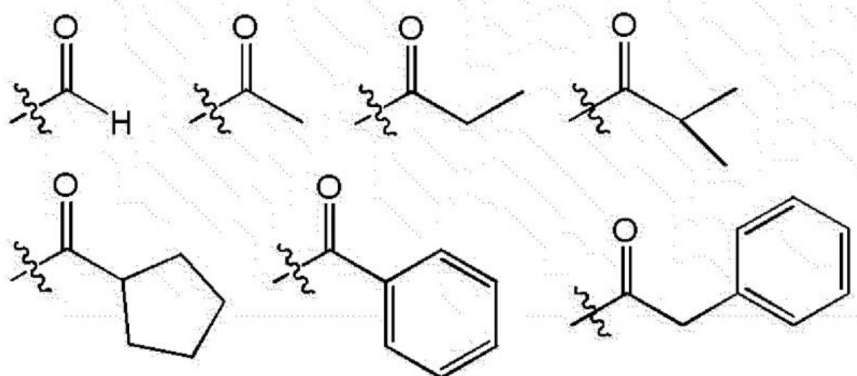
## 【化4】



のいずれかから選択されるエステル基；下記構造

30

## 【化5】



40

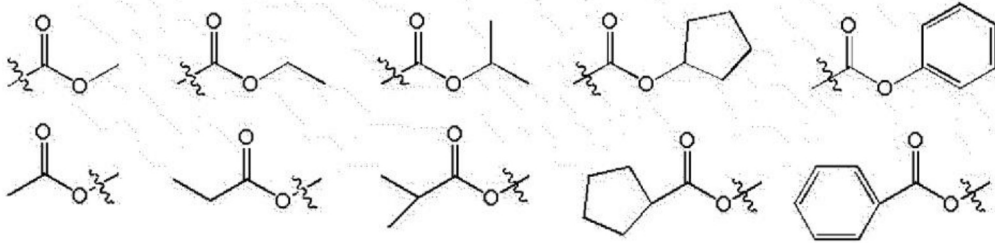
のいずれかから選択されるカルボニル基；置換もしくは非置換のアルキル基；置換もしくは非置換のシクロアルキル基；置換もしくは非置換のアルコキシ基；置換もしくは非置換のアルケニル基；置換された単環のアリール基；置換もしくは非置換の多環のアリール基；置換もしくは非置換のヘテロ環基；置換もしくは非置換のアミン基；置換もしくは非置換のシリル基；または置換もしくは非置換のホスホリル基であり、

nは、1または2であり、nが2の場合、複数のArは、互いに同一または異なり、

R<sub>9</sub>およびR<sub>10</sub>は、互いに同一または異なり、それぞれ独立に、水素；重水素；ハロゲン基；ニトロ基；シアノ基；下記構造

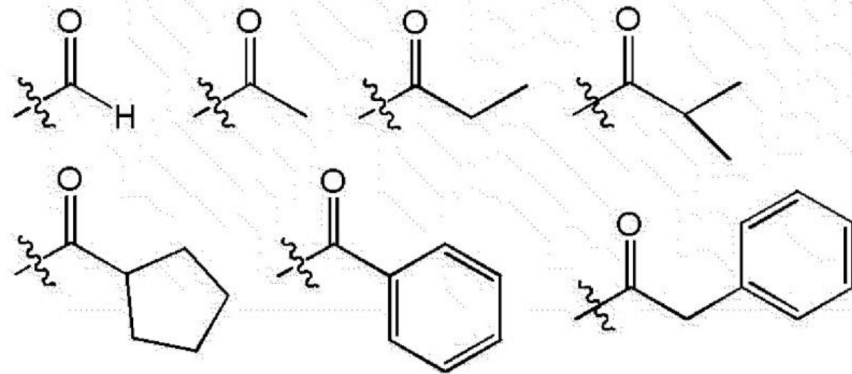
50

## 【化 6】



のいずれかから選択されるエステル基；下記構造

## 【化 7】



のいずれかから選択されるカルボニル基；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リール基；または置換もしくは非置換のヘテロ環基である。

## 【請求項 2】

前記化学式 1 は、下記化学式 2 または 3 で表されるものである、請求項 1 に記載の化合物：

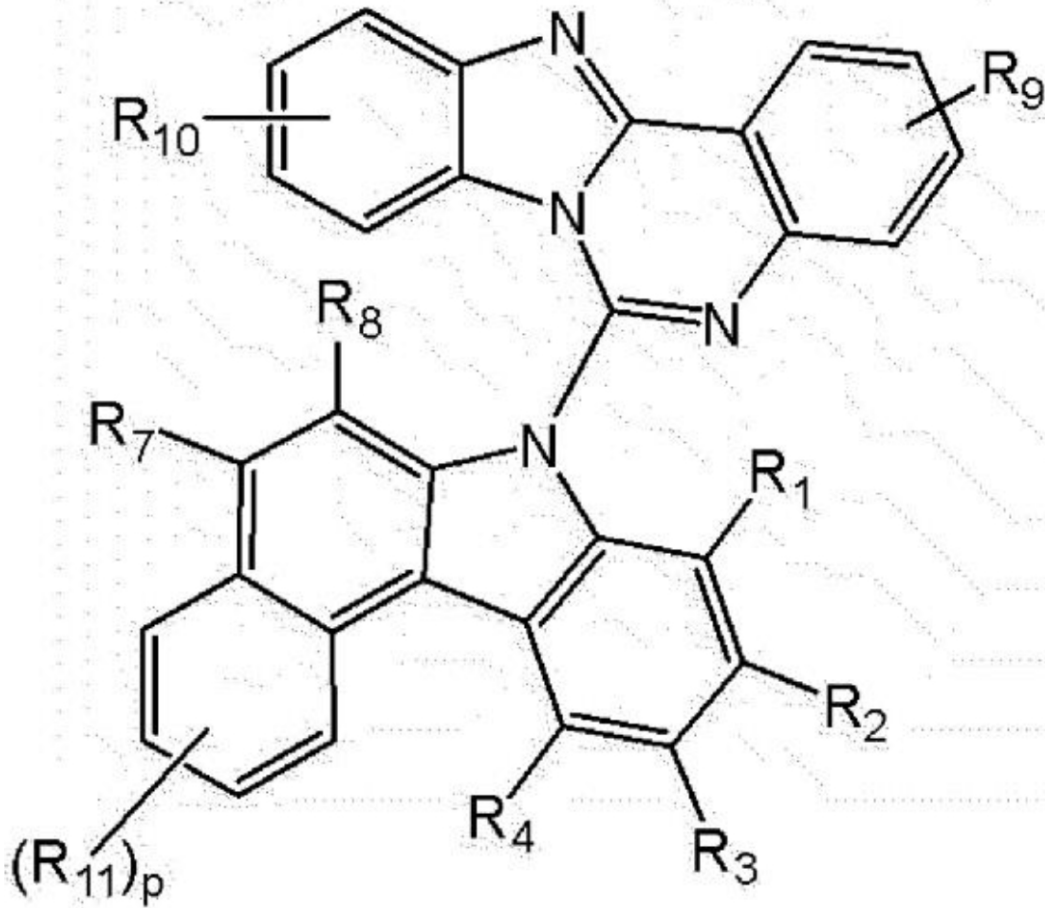
[ 化学式 2 ]

10

20

30

【化 8】

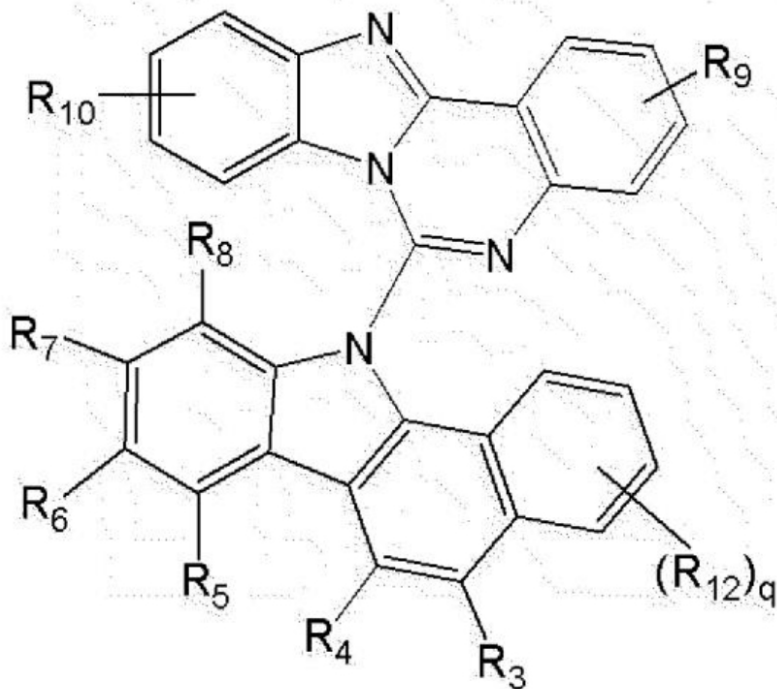


10

20

[ 化学式 3 ]

【化 9】



30

40

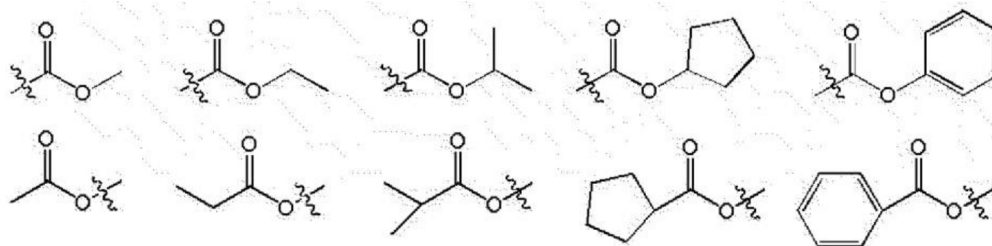
前記化学式 2 および 3 において、

R<sub>1</sub> ~ R<sub>10</sub> は、化学式 1 で定義したのと同じであり、R<sub>11</sub> および R<sub>12</sub> は、互いに同一または異なり、それぞれ独立に、水素；重水素；八

50

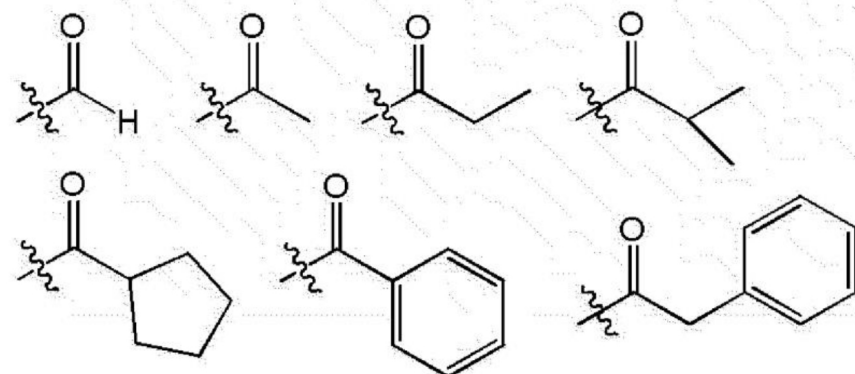
ロゲン基；ニトロ基；シアノ基；下記構造

【化10】



のいずれかから選択されるエステル基；下記構造

【化11】



のいずれかから選択されるカルボニル基；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リール基；または置換もしくは非置換のヘテロ環基であり、

p および q はそれぞれ、0 ~ 4 の整数である。

【請求項3】

前記 R<sub>3</sub> は、- ( L )<sub>m</sub> - ( A r )<sub>n</sub> である、請求項1に記載の化合物。

【請求項4】

前記 R<sub>2</sub> は、- ( L )<sub>m</sub> - ( A r )<sub>n</sub> である、請求項1に記載の化合物。

【請求項5】

前記 R<sub>3</sub> および R<sub>6</sub> は、- ( L )<sub>m</sub> - ( A r )<sub>n</sub> であり、前記 R<sub>3</sub> および R<sub>6</sub> は、互いに同一または異なるものである、請求項1に記載の化合物。

【請求項6】

前記 R<sub>2</sub> および R<sub>7</sub> は、- ( L )<sub>m</sub> - ( A r )<sub>n</sub> であり、前記 R<sub>2</sub> および R<sub>7</sub> は、互いに同一または異なるものである、請求項1に記載の化合物。

【請求項7】

前記 L は、直接結合、または置換もしくは非置換のアリーレン基である、請求項1に記載の化合物。

【請求項8】

前記 L は、直接結合；フェニレン基；ピフェニレン基；ナフチレン基；アントラセニレン基；フルオレニレン基；フェナントレニレン基；ピレニレン基；およびクリセニレン基からなる群より選択されるいずれか1つである、請求項1に記載の化合物。

【請求項9】

前記 A r は、置換された単環のアリール基；置換もしくは非置換の多環のアリール基；置換もしくは非置換のヘテロ環基；置換もしくは非置換のアミン基；置換もしくは非置換のシリル基；または置換もしくは非置換のホスホリル基である、請求項1に記載の化合物。

【請求項10】

10

20

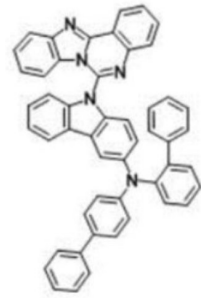
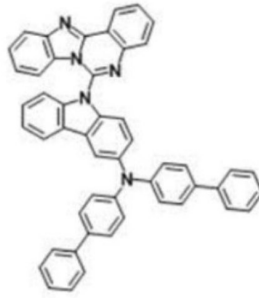
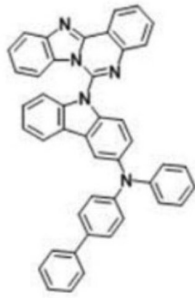
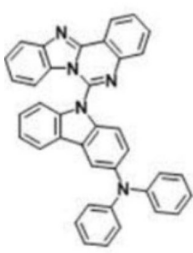
30

40

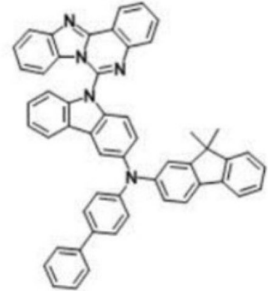
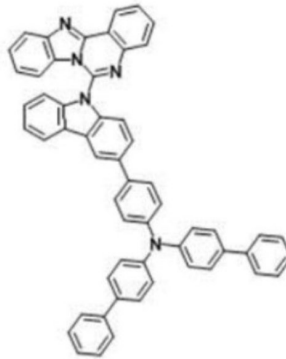
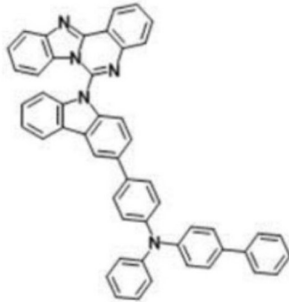
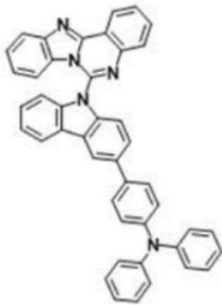
50

前記化学式 1 で表される化合物は、下記構造式の中から選択されるいずれか 1 つである、請求項 1 に記載の化合物：

【化 1 2】

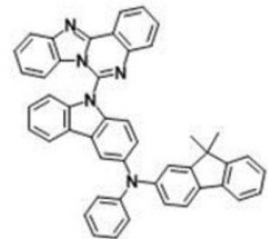
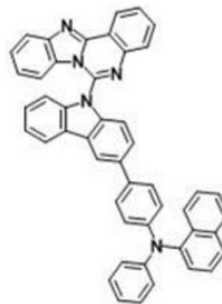
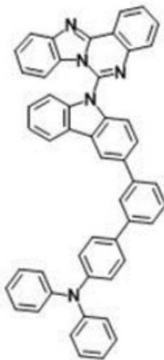
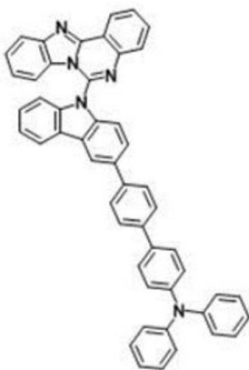


10

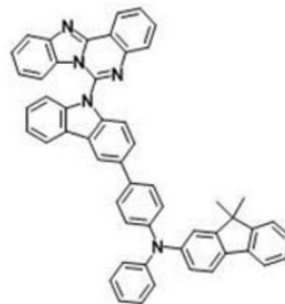
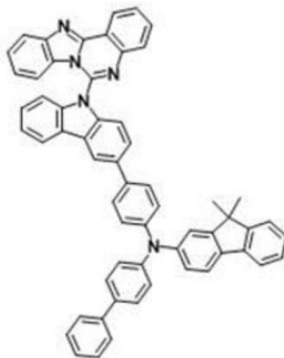
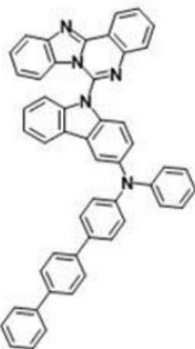


20

【化 1 3】

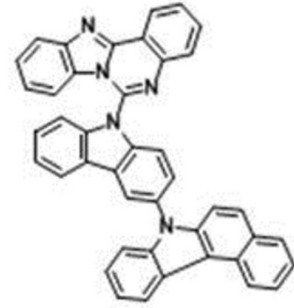
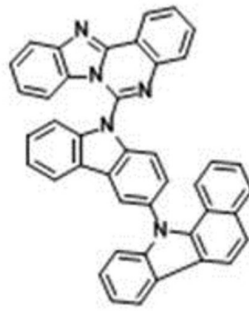
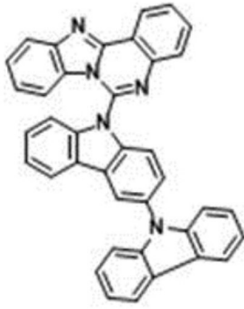


30

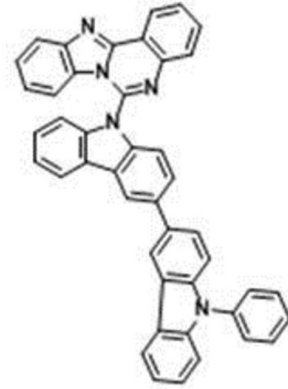
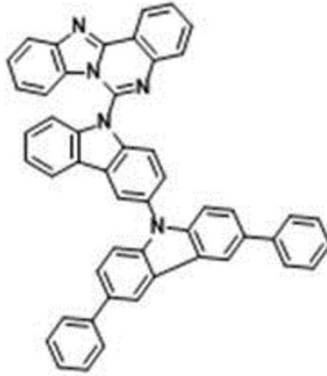
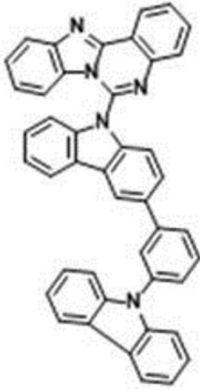


40

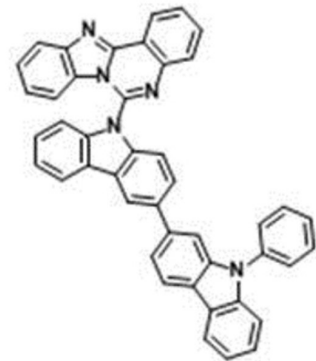
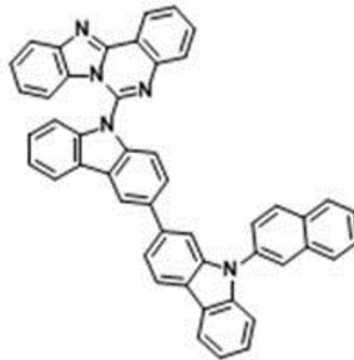
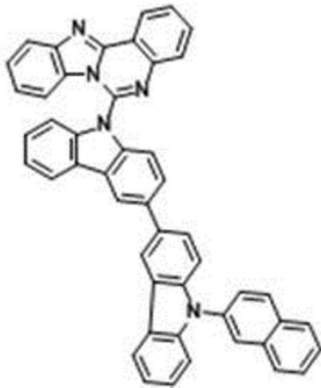
## 【化 1 4】



10

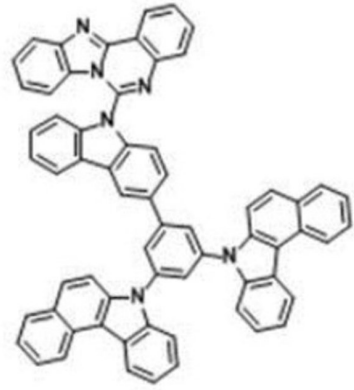
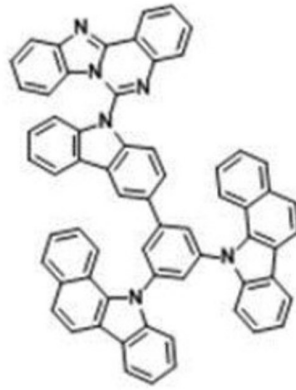
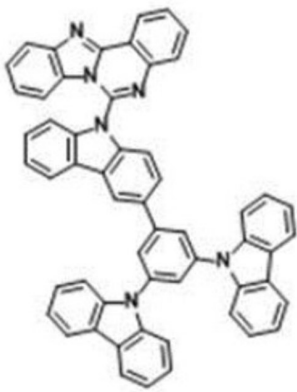


20

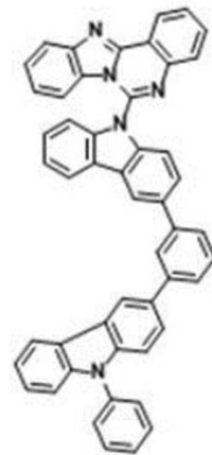
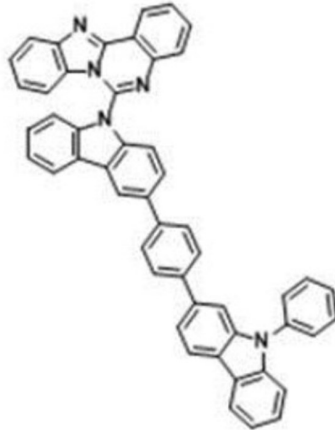
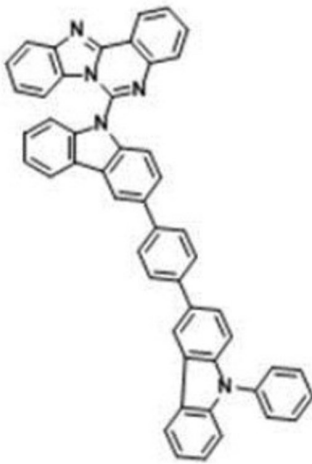


30

【化 1 5】

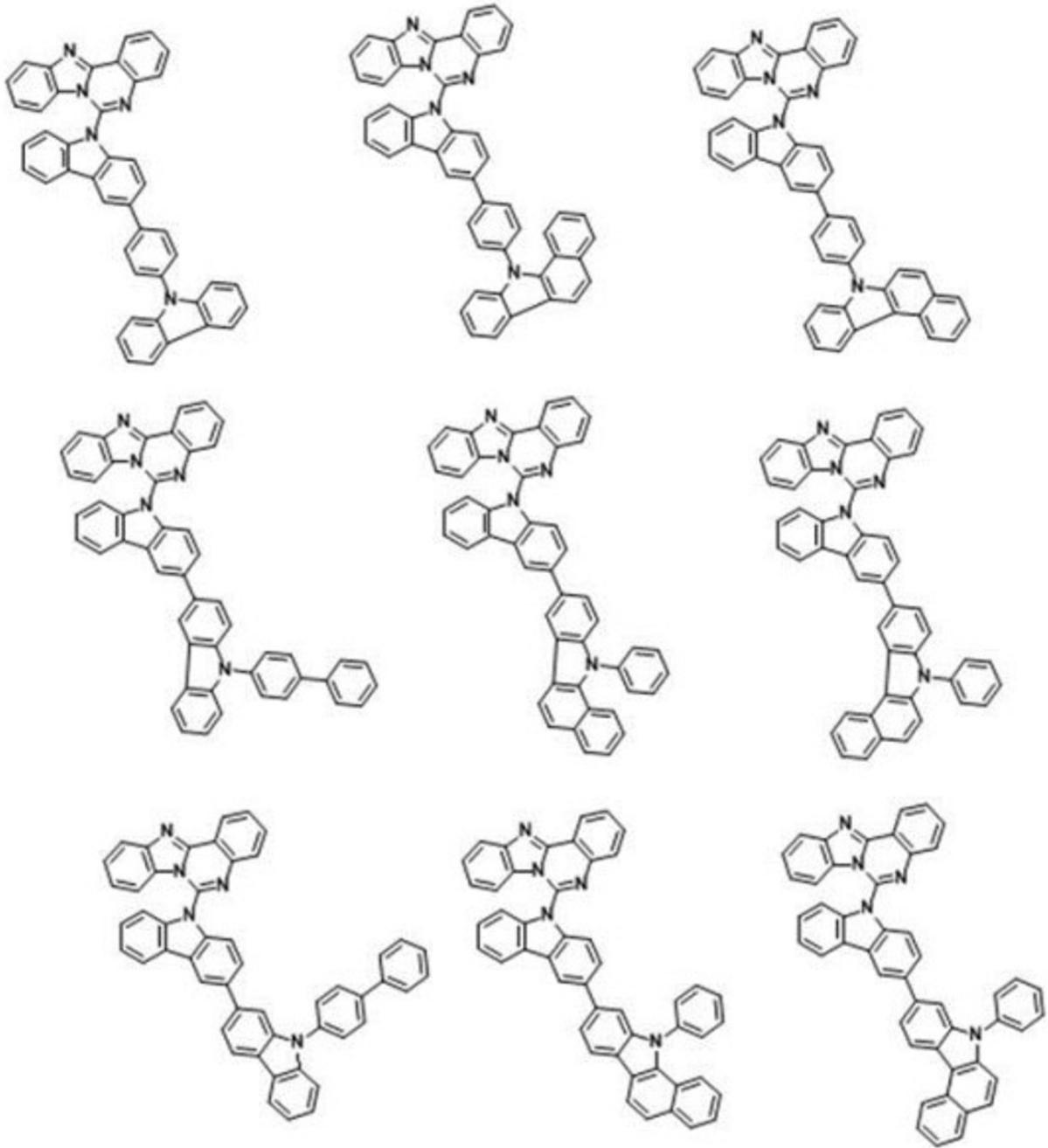


10

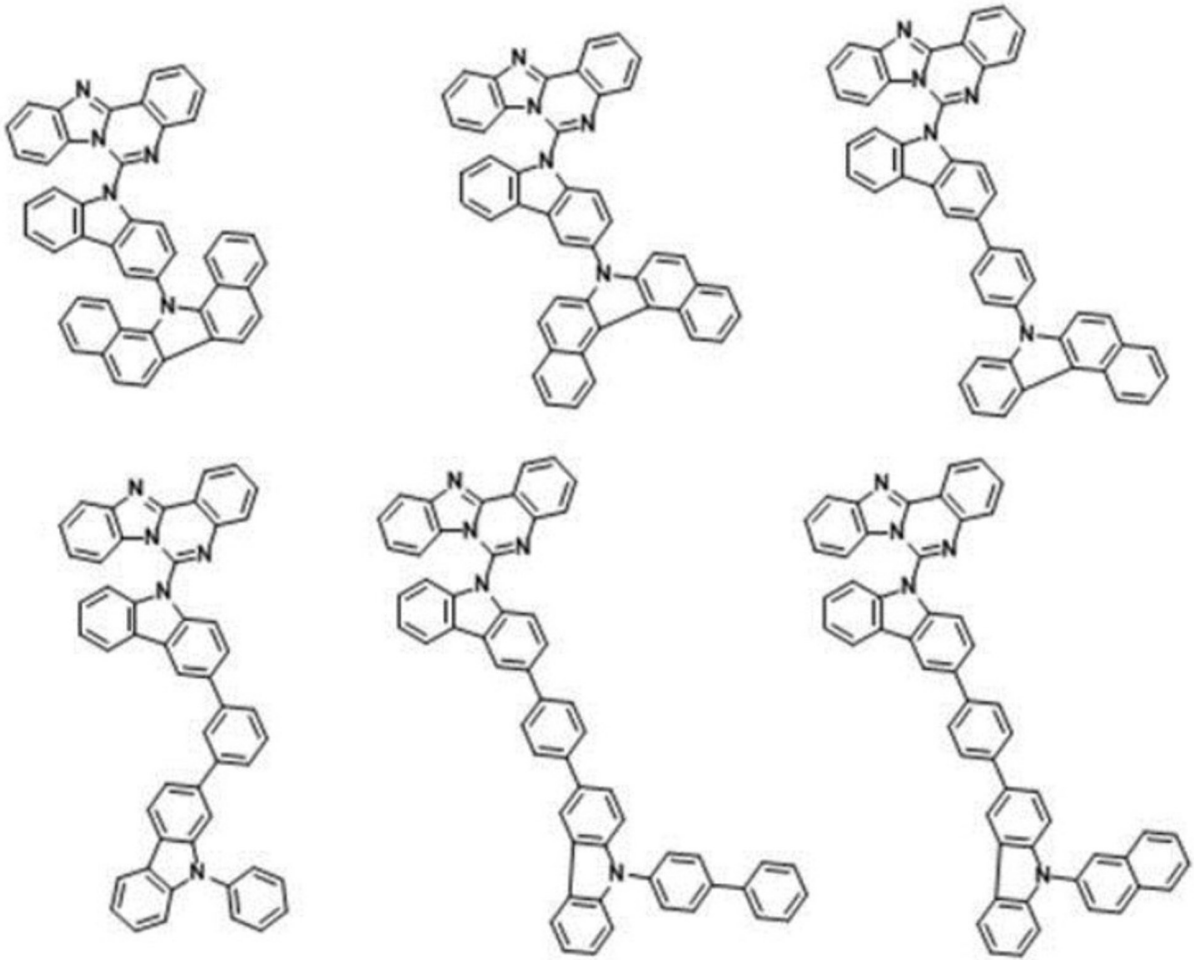


20

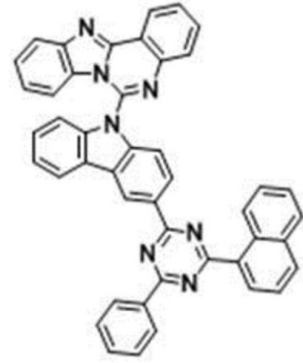
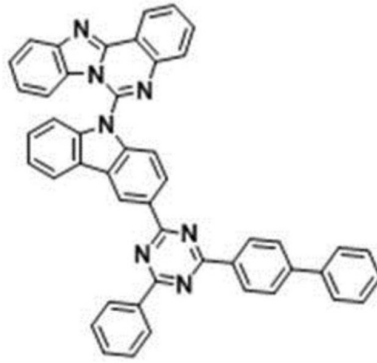
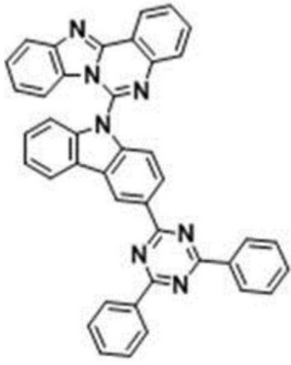
【化 1 6】



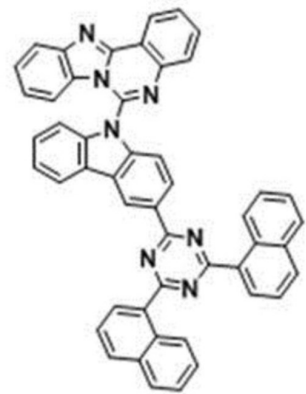
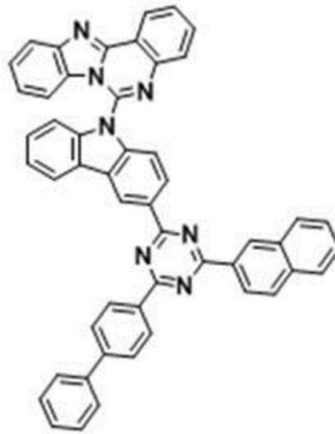
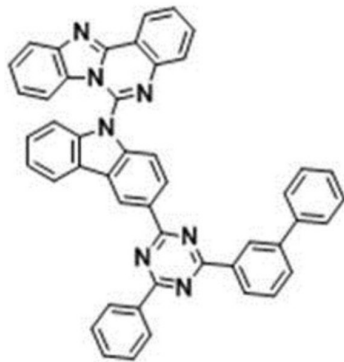
【化 17】



【化 1 8】

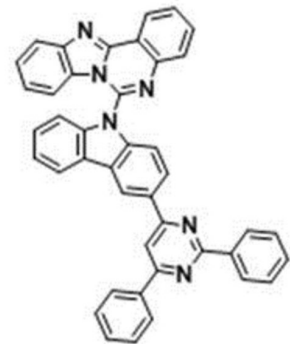
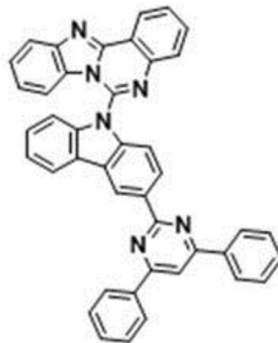
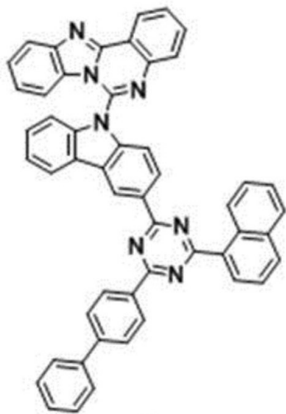


10

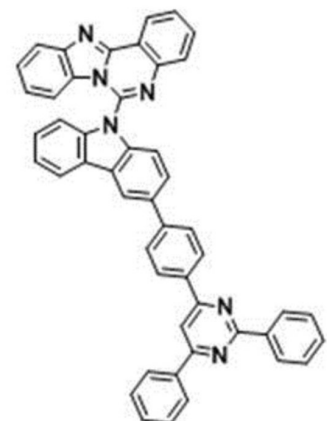
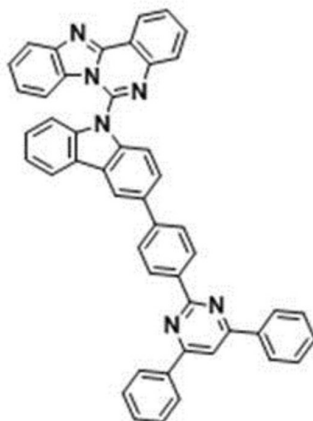
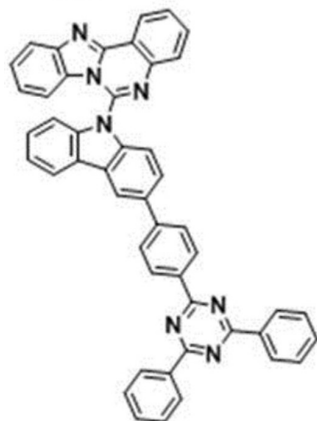


20

【化 1 9】



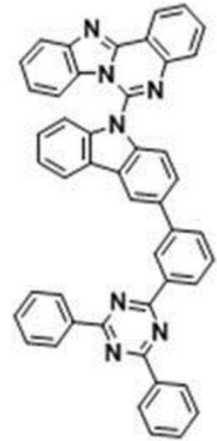
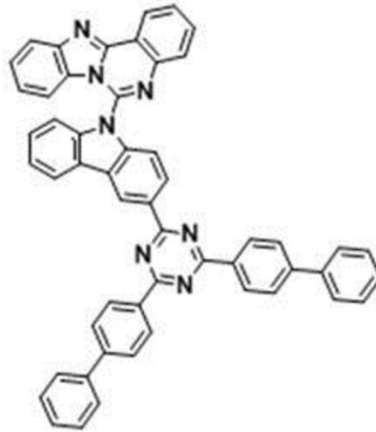
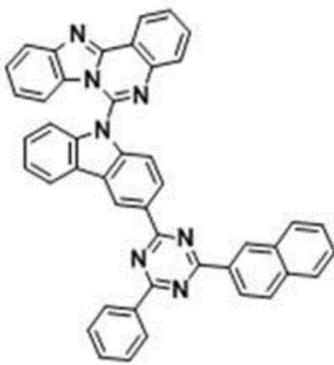
30



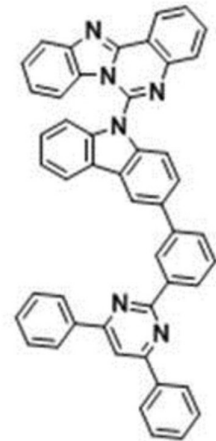
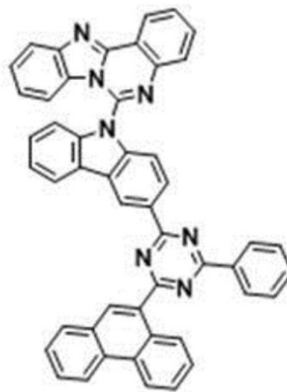
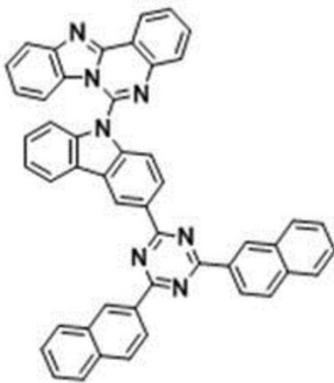
40

50

【化 2 0】

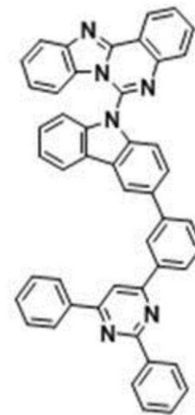
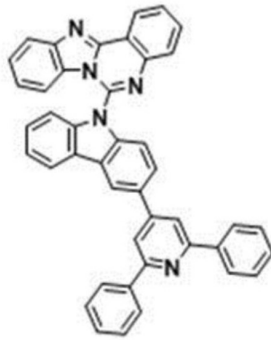
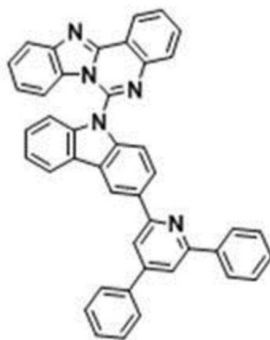


10

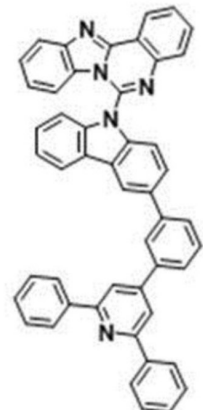
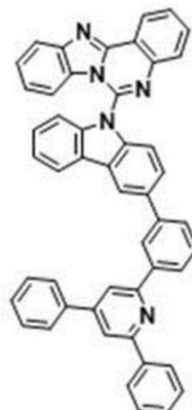
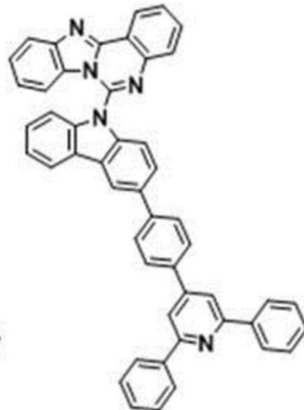
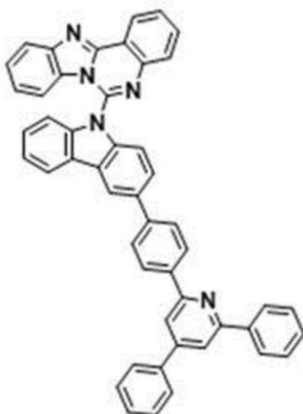


20

【化 2 1】

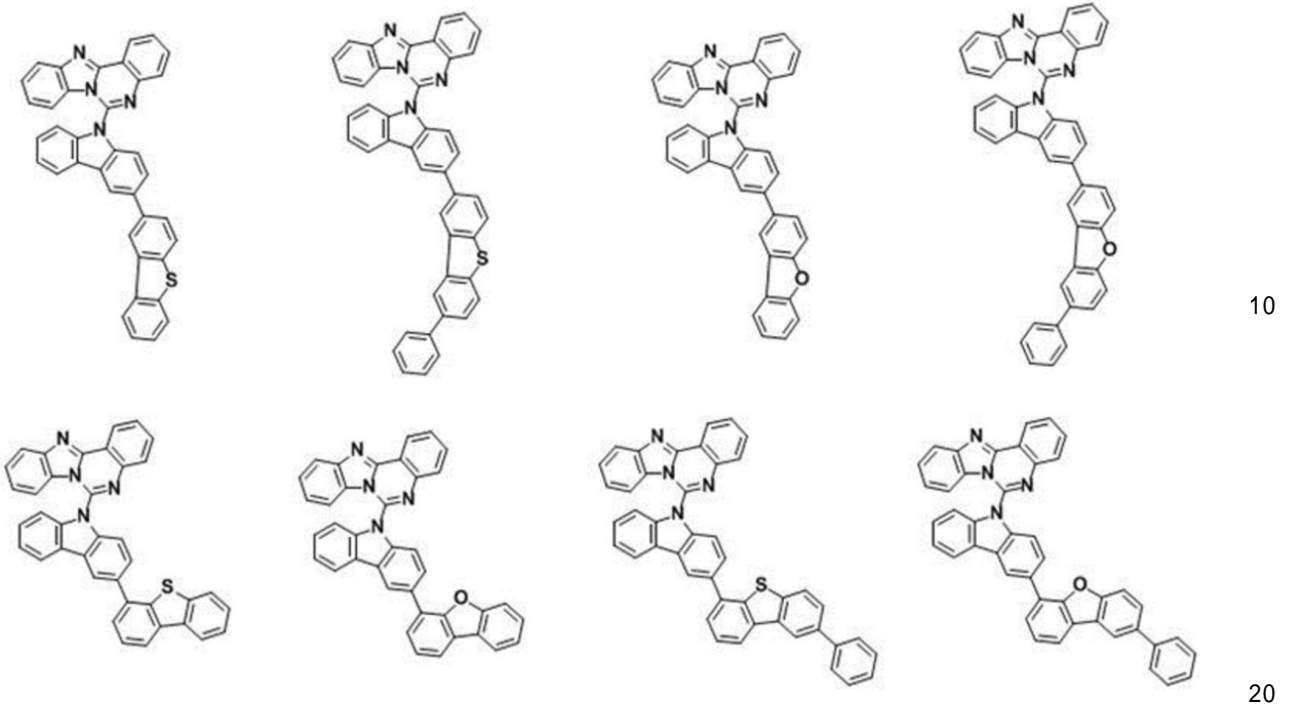


30

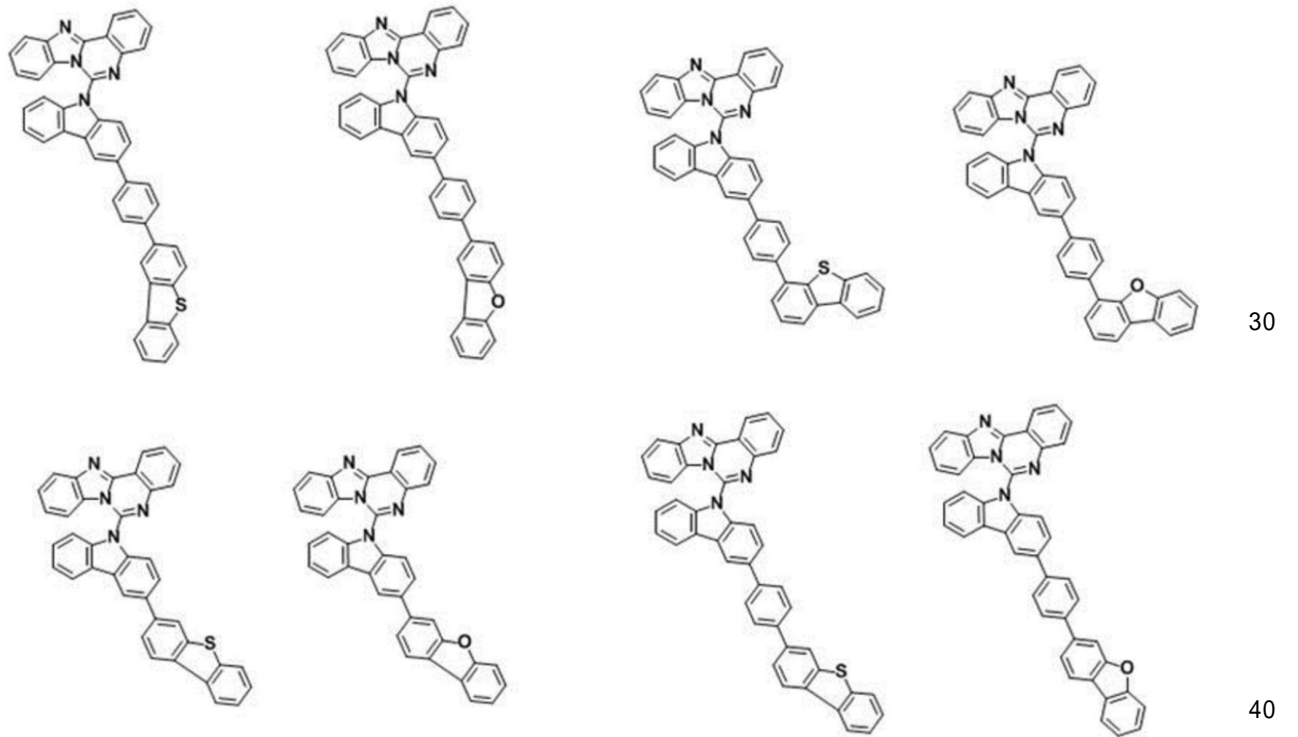


40

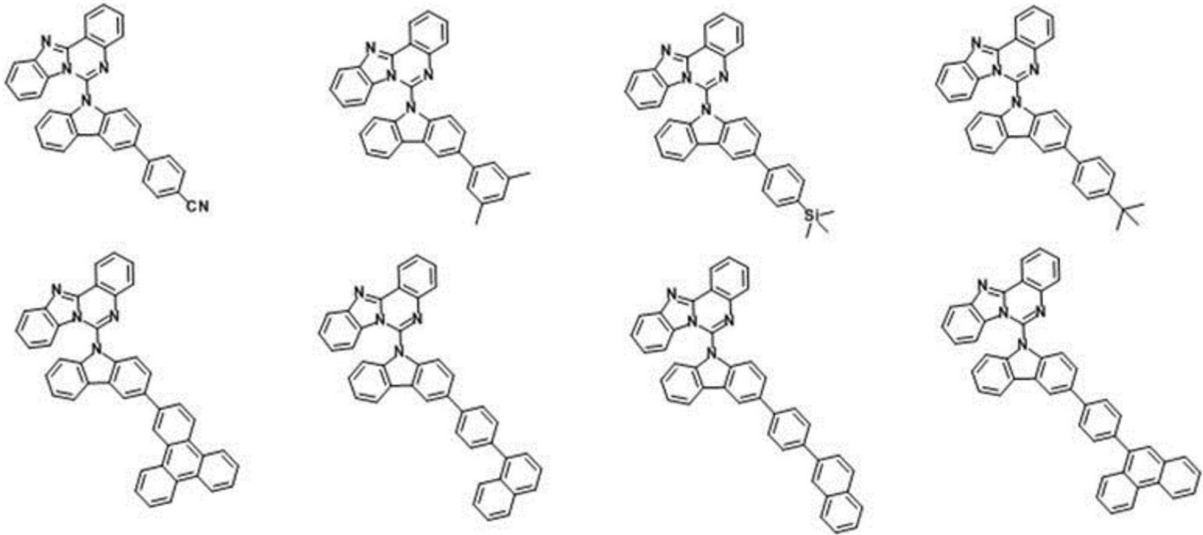
【化 2 2】



【化 2 3】

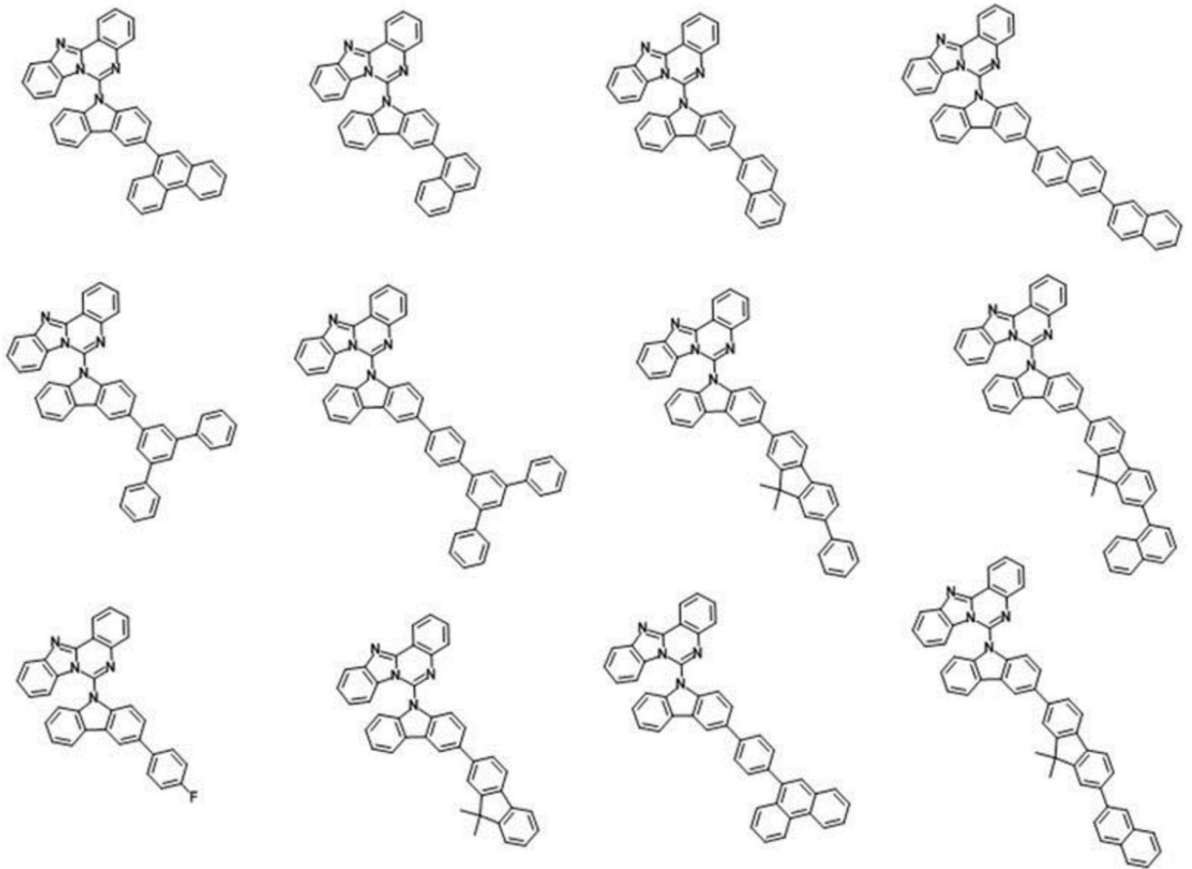


【化 2 4】



10

【化 2 5】

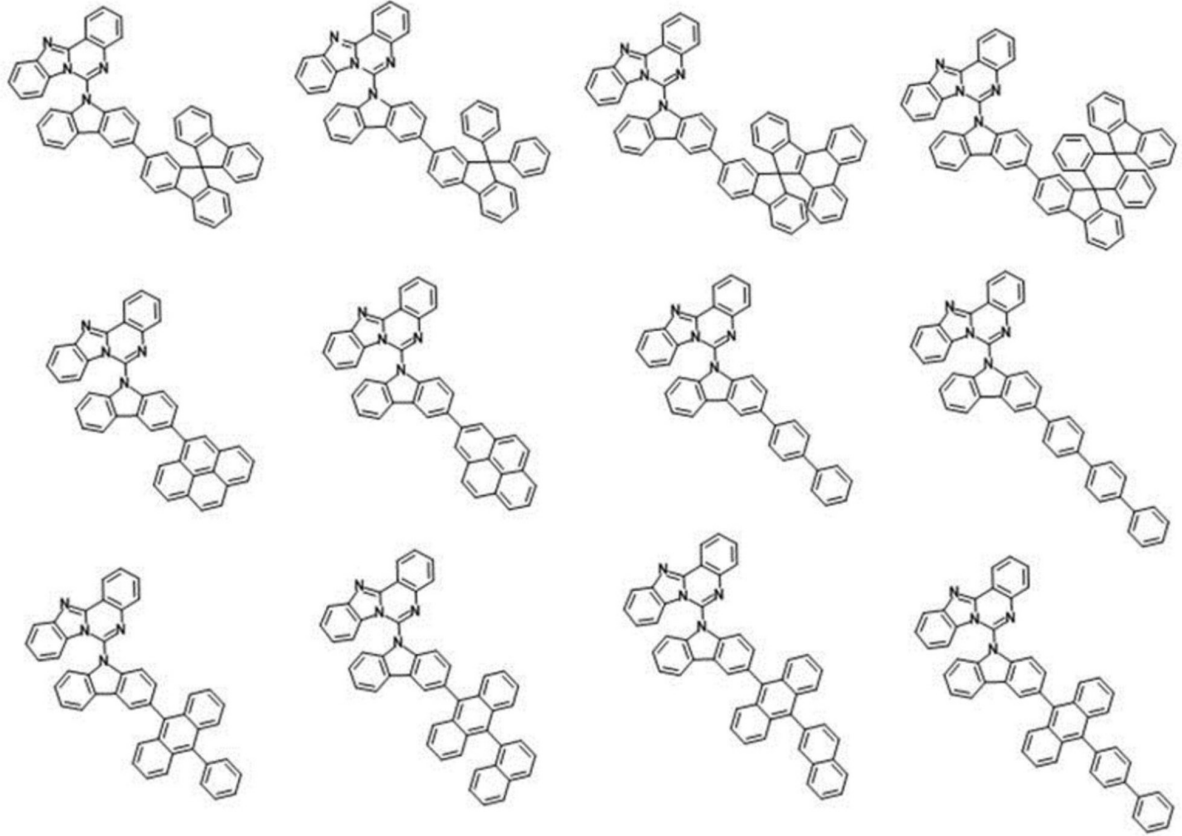


20

30

40

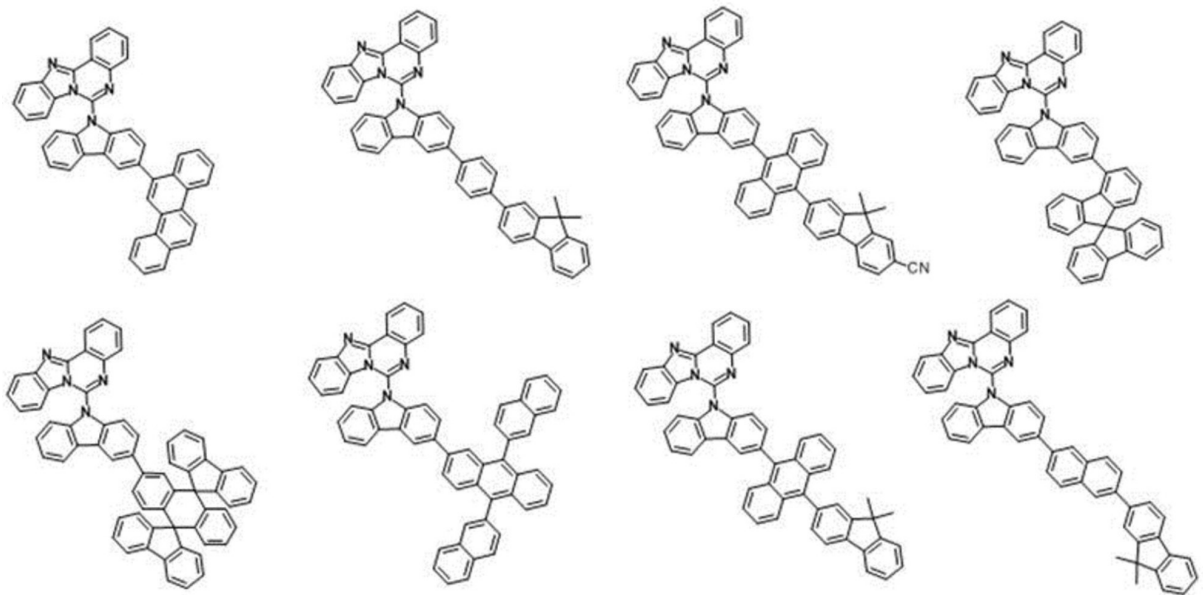
【化 2 6】



10

20

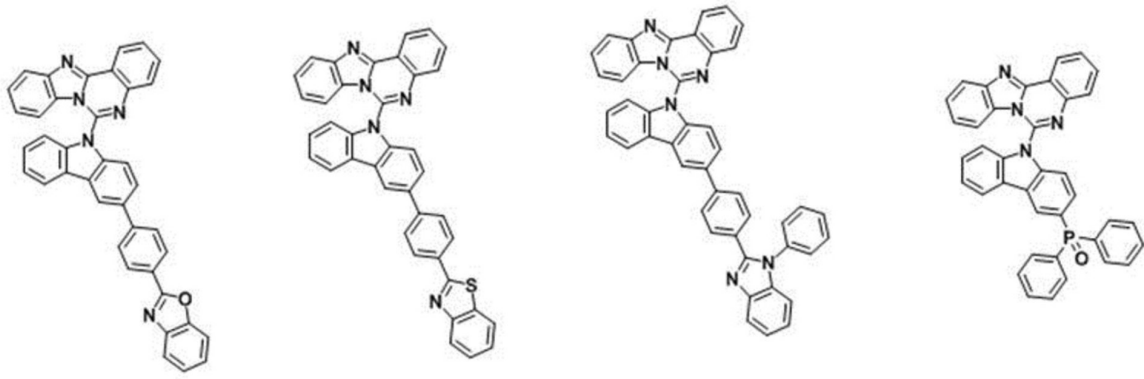
【化 2 7】



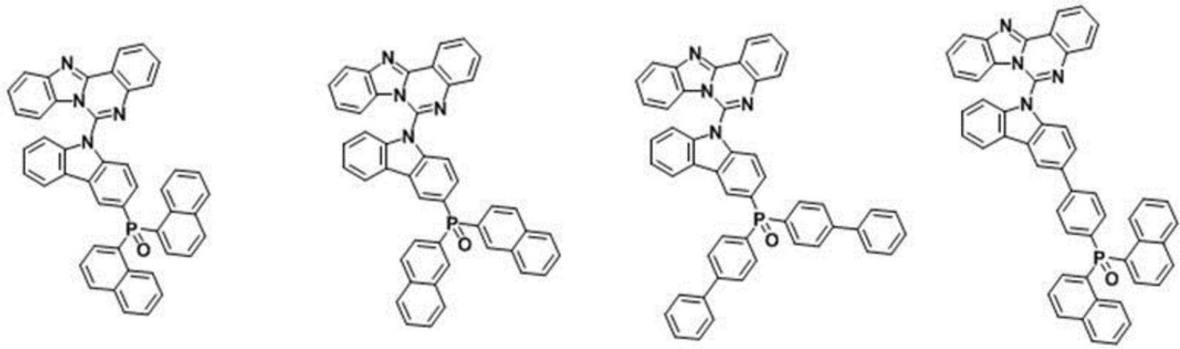
30

40

【化 2 8】

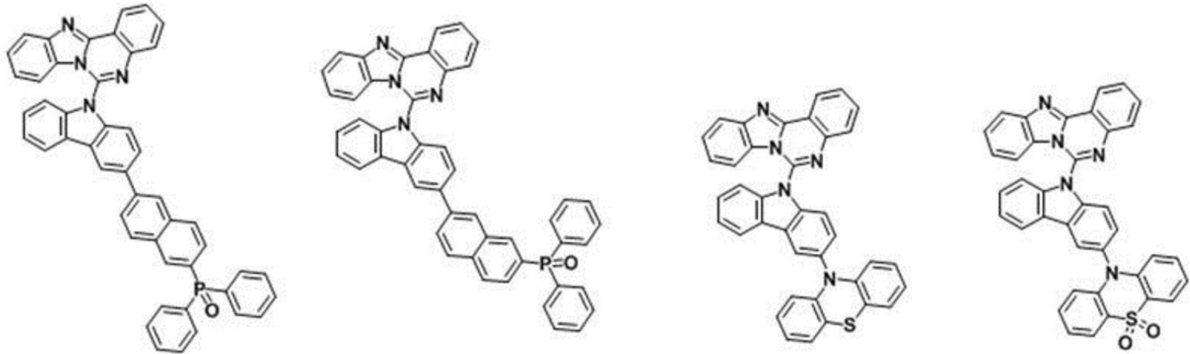


10

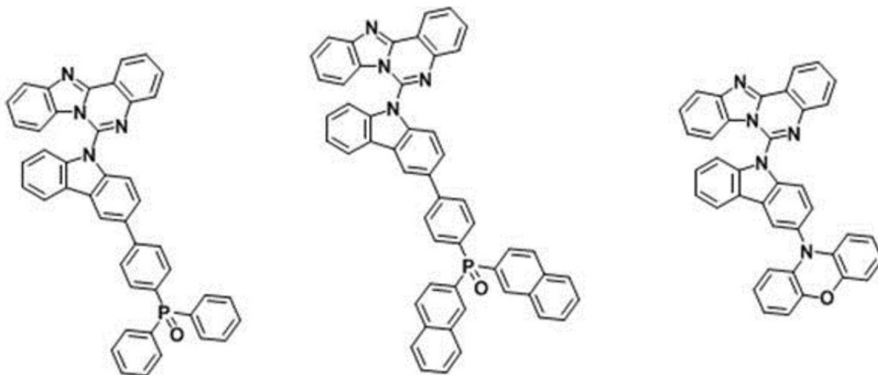


20

【化 2 9】

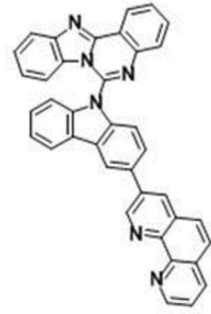
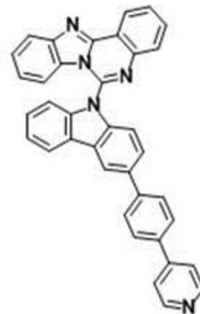
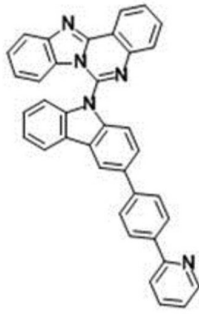
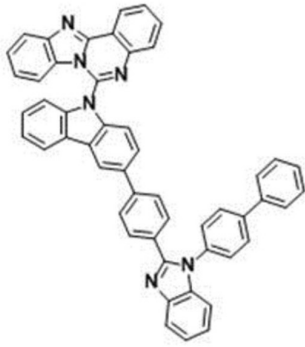


30

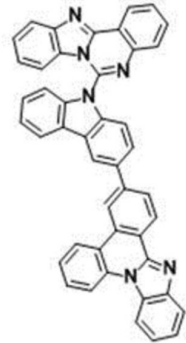
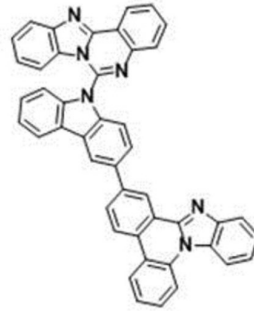
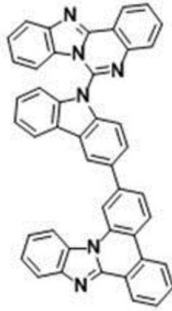
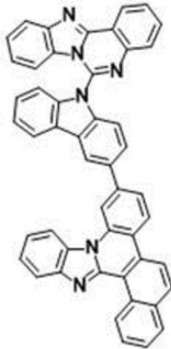


40

【化 3 0】

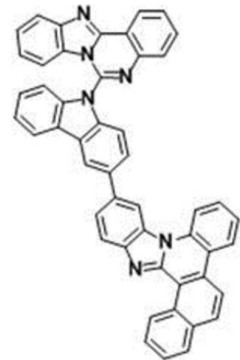
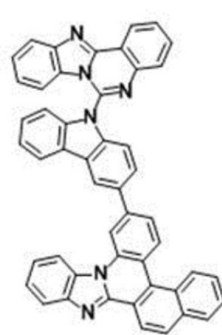
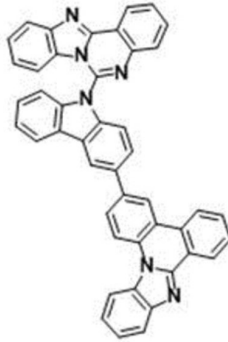
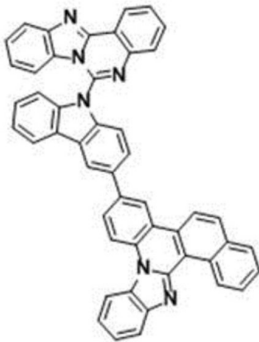


10

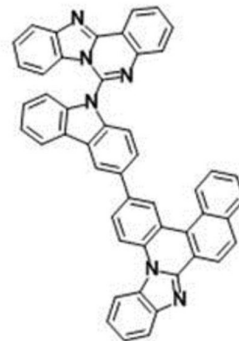
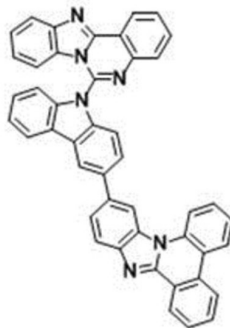
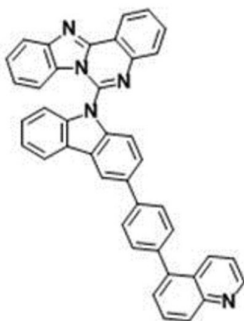


20

【化 3 1】

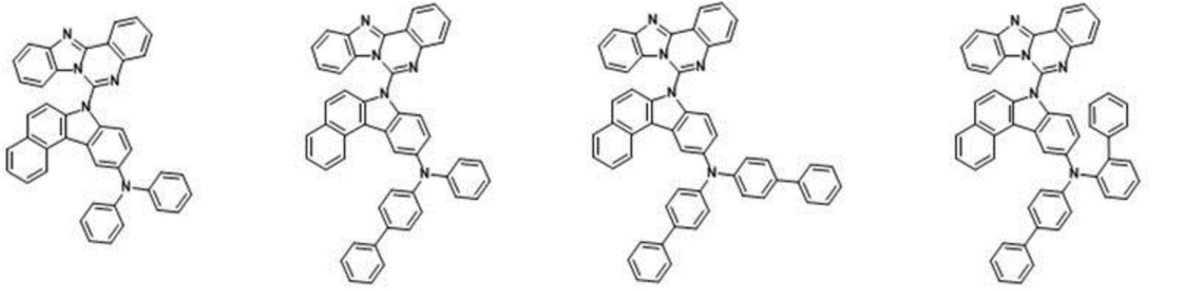


30

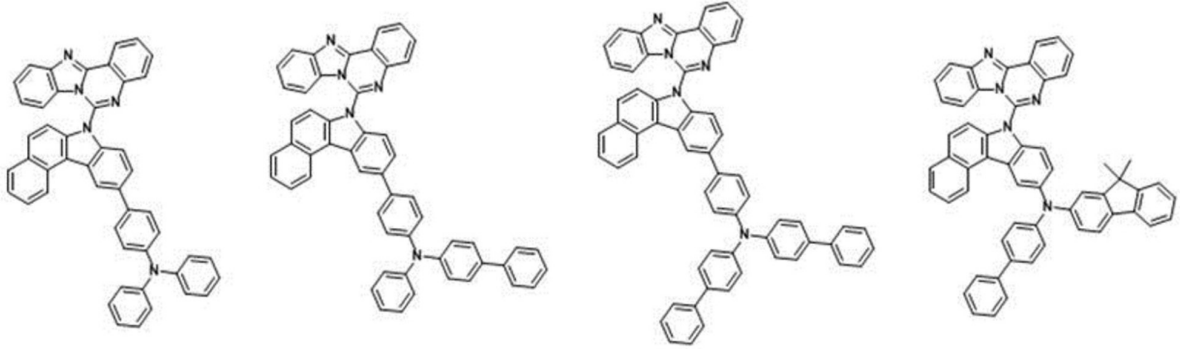


40

【化 3 2】

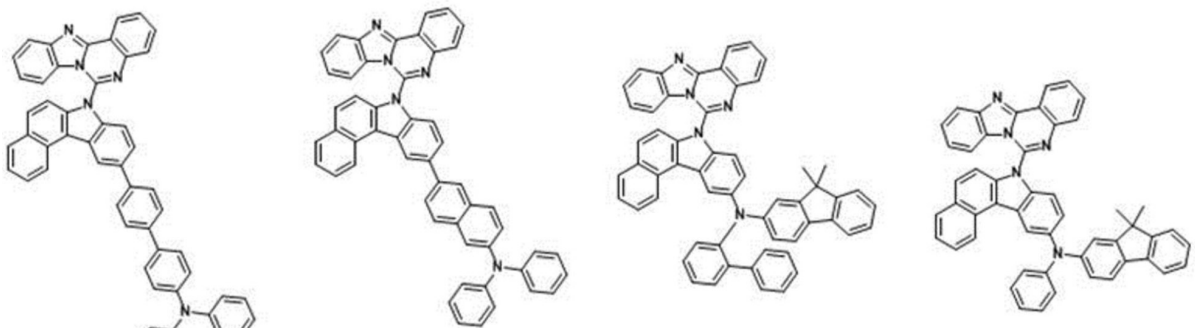


10

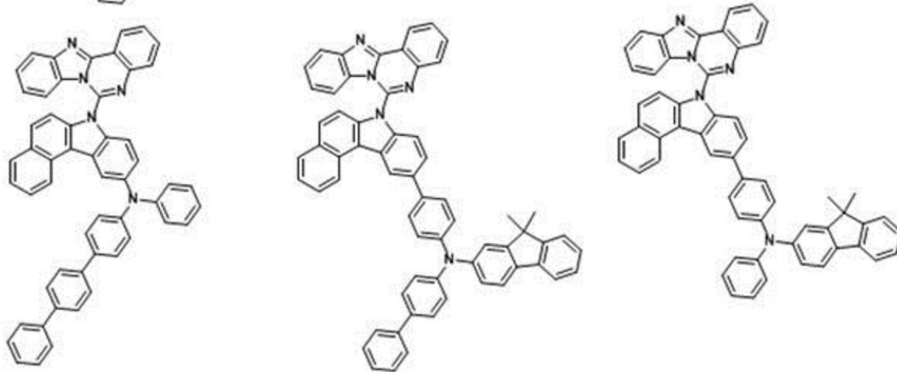


20

【化 3 3】

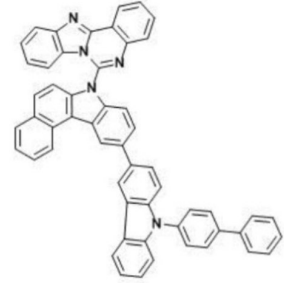
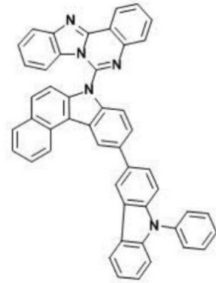
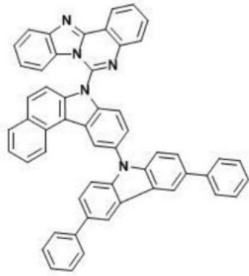
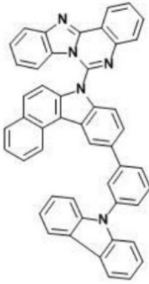
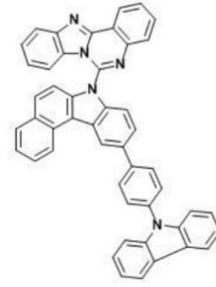
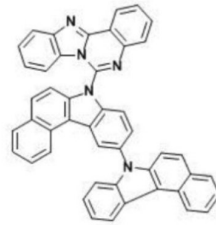
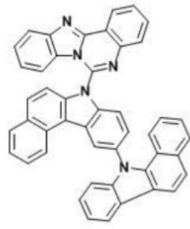
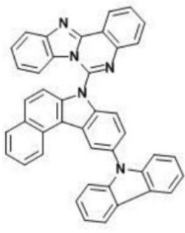


30

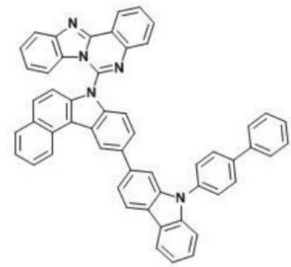
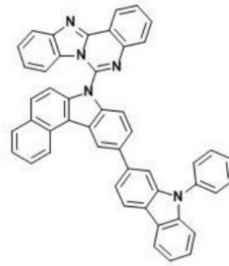
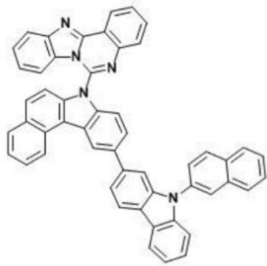
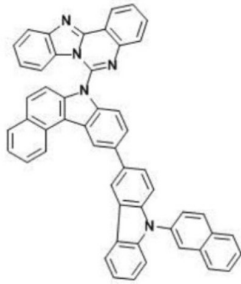


40

【化 3 4】

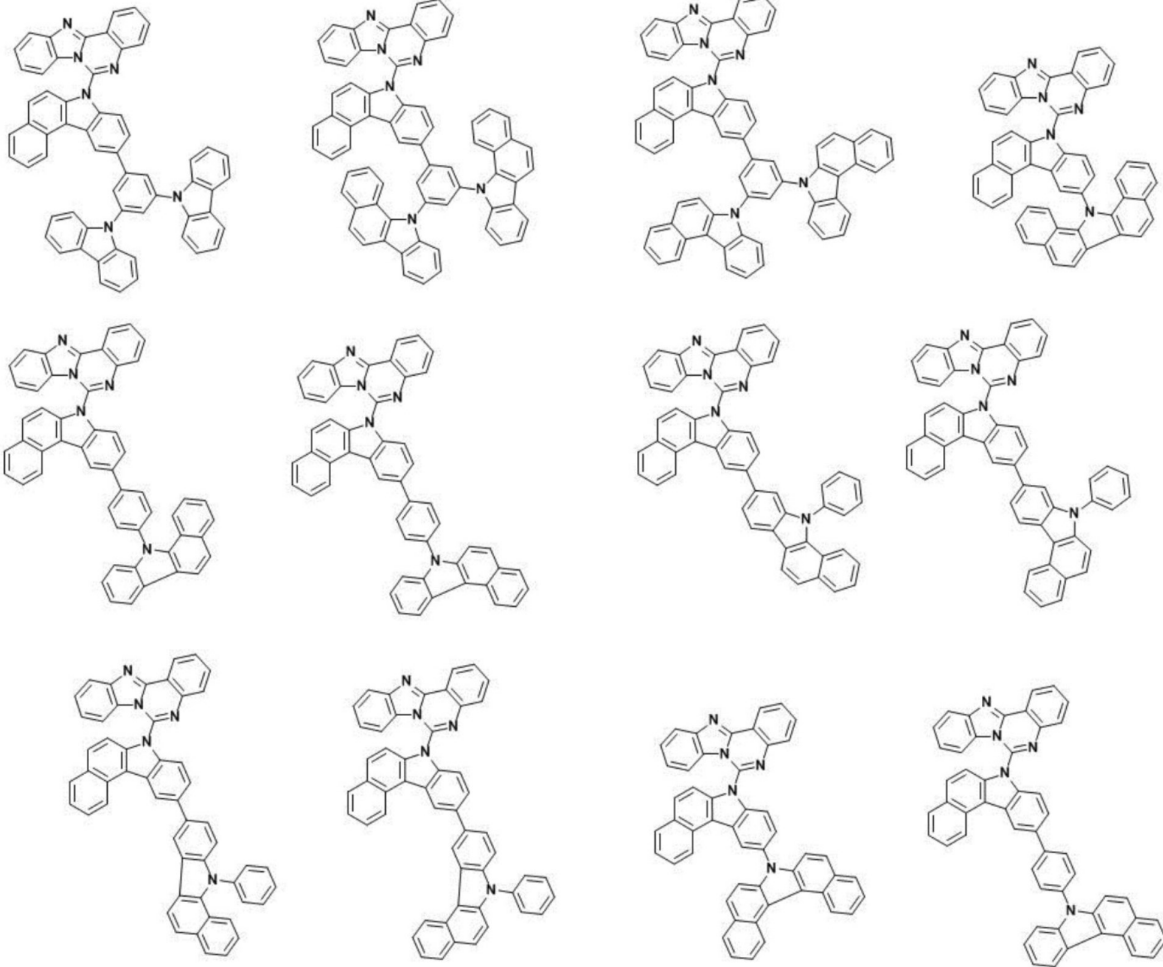


10

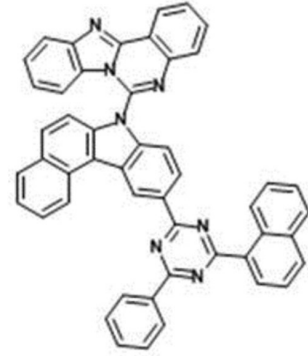
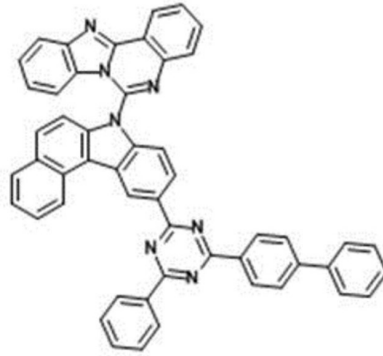
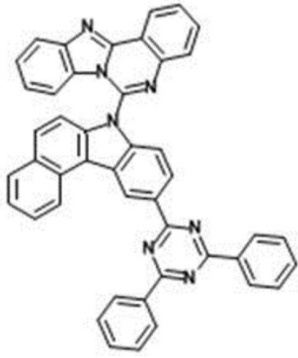


20

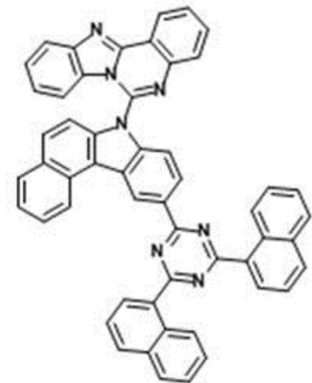
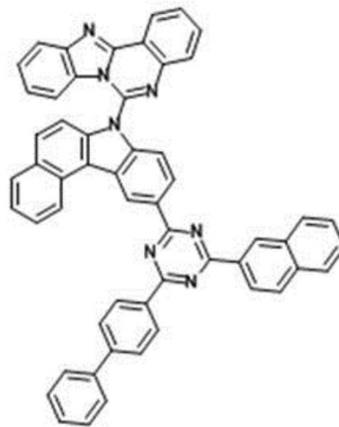
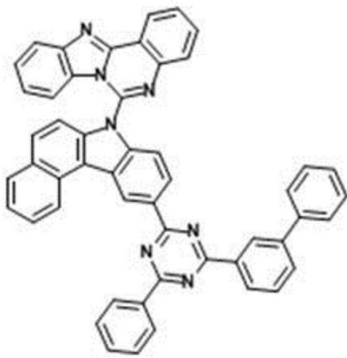
【化 3 5】



【化 3 6】

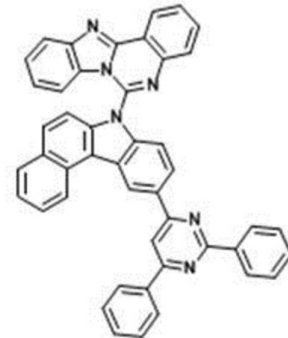
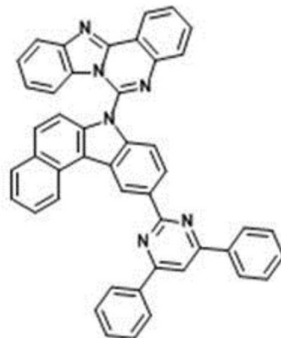
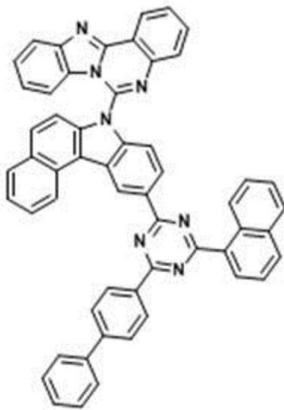


10

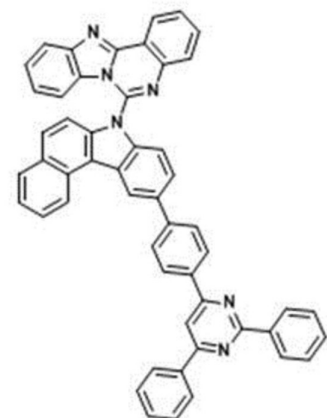
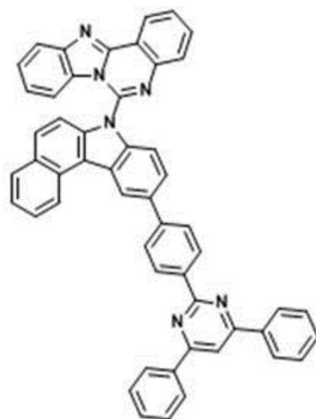
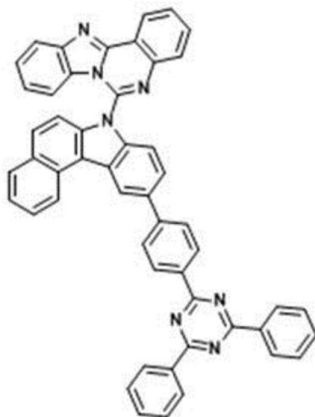


20

【化 3 7】



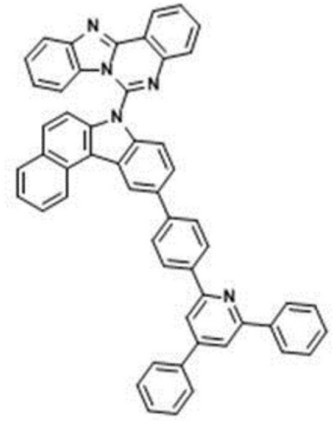
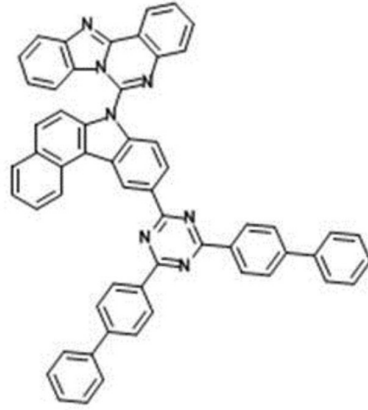
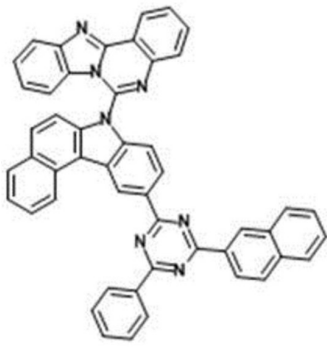
30



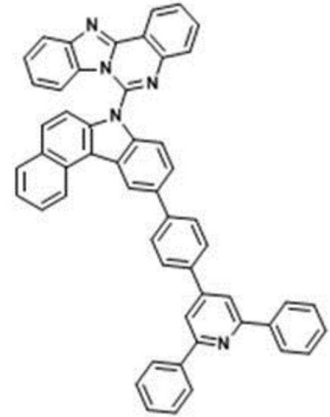
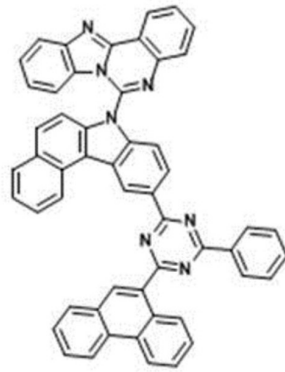
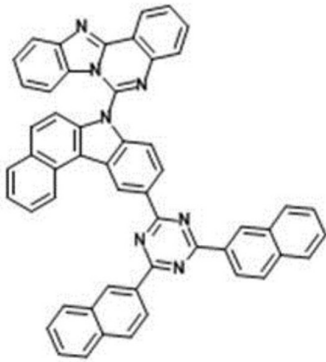
40

50

【化 3 8】

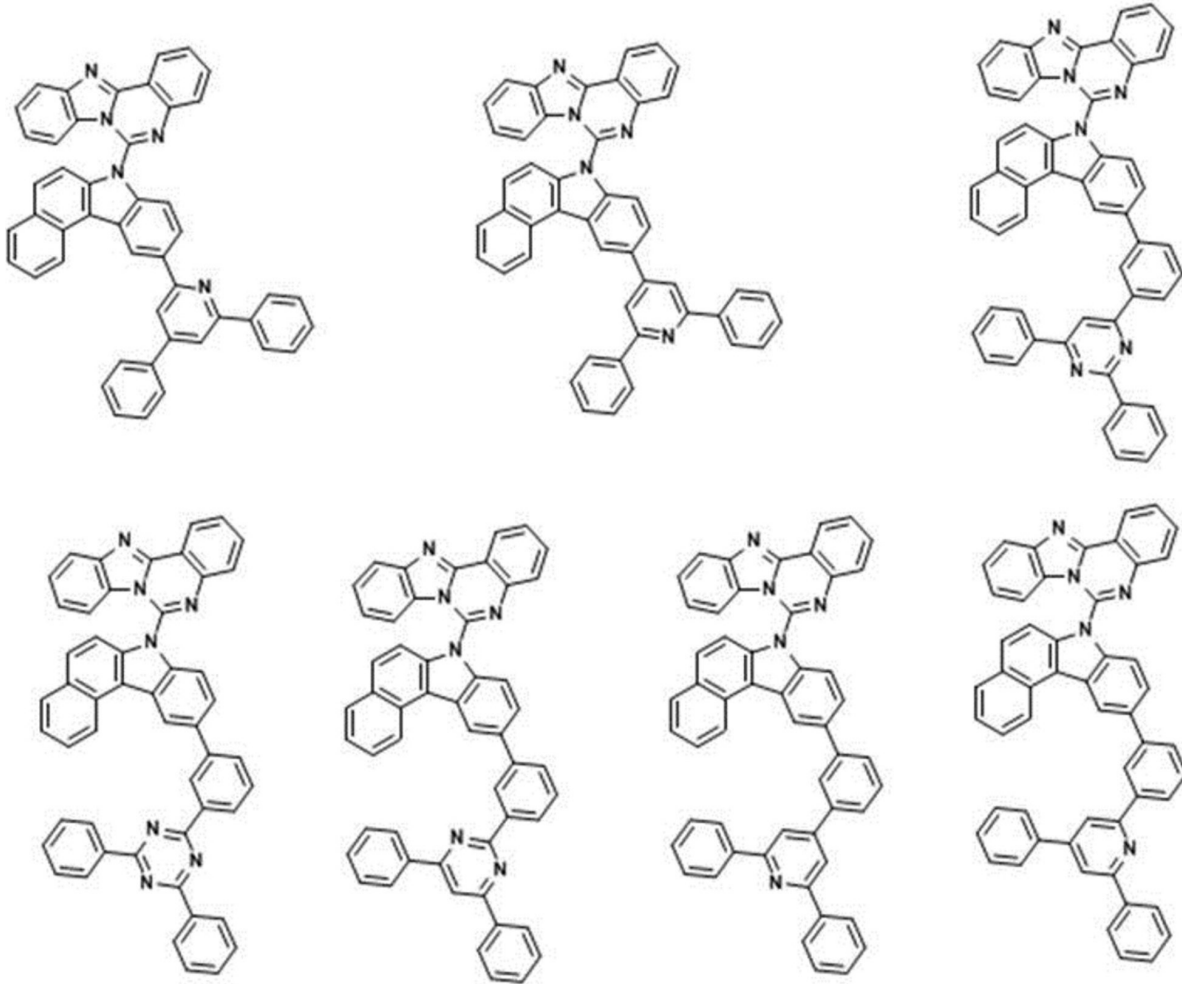


10

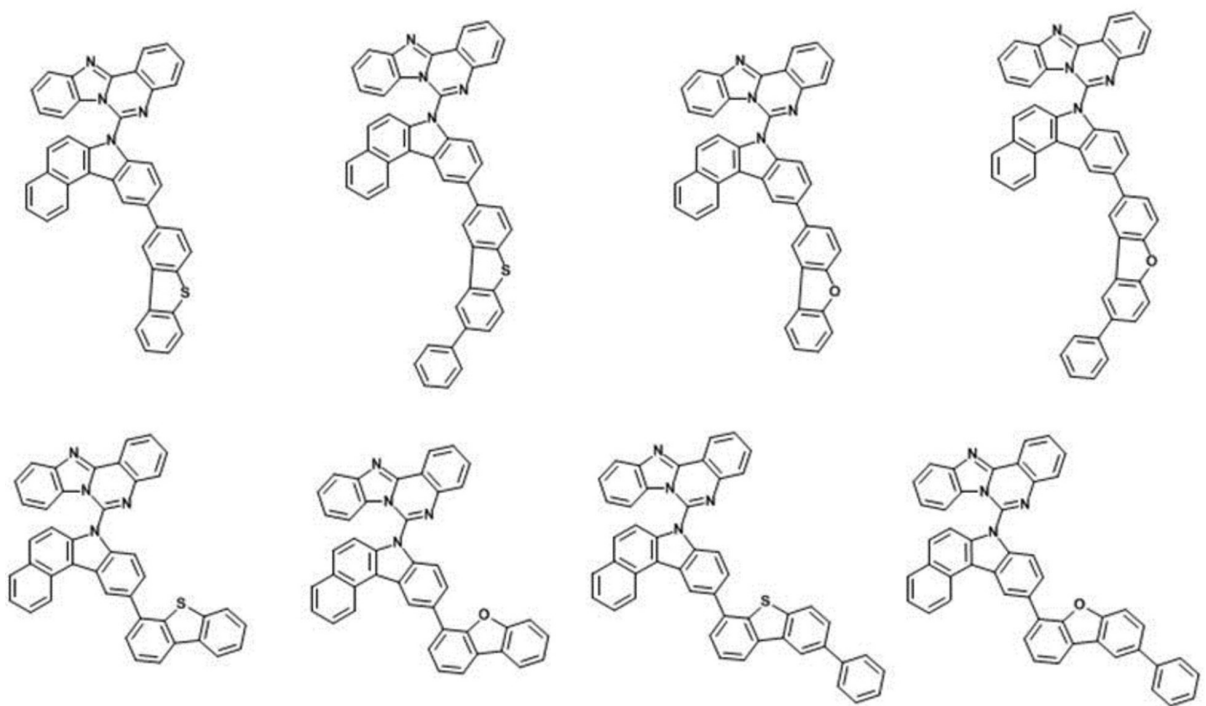


20

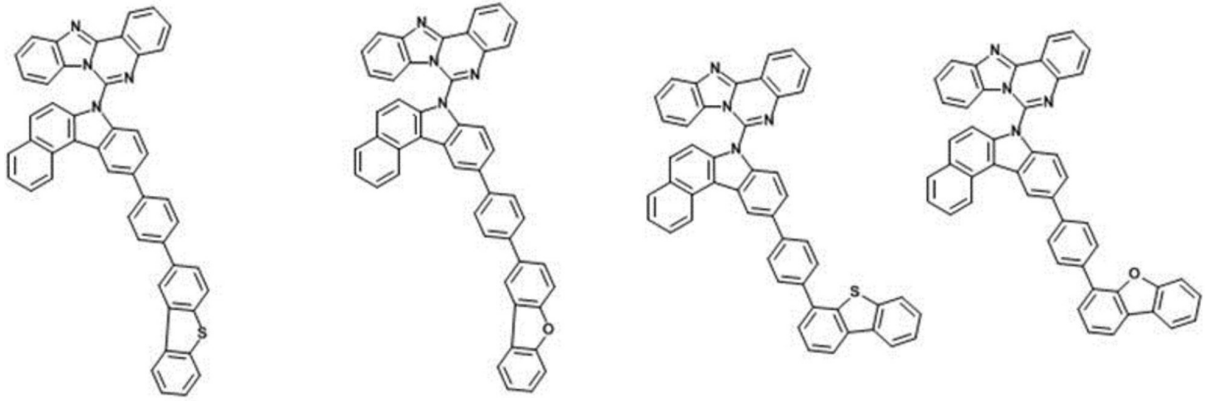
【化 3 9】



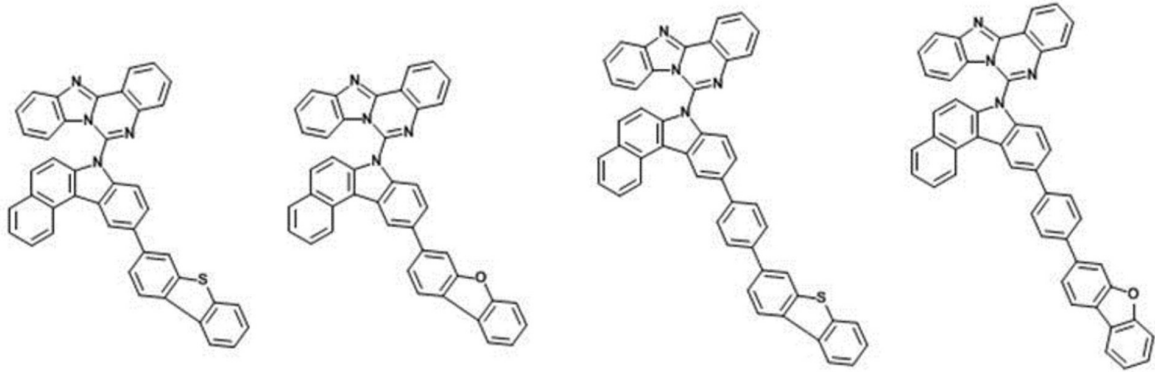
【化 4 0】



【化 4 1】

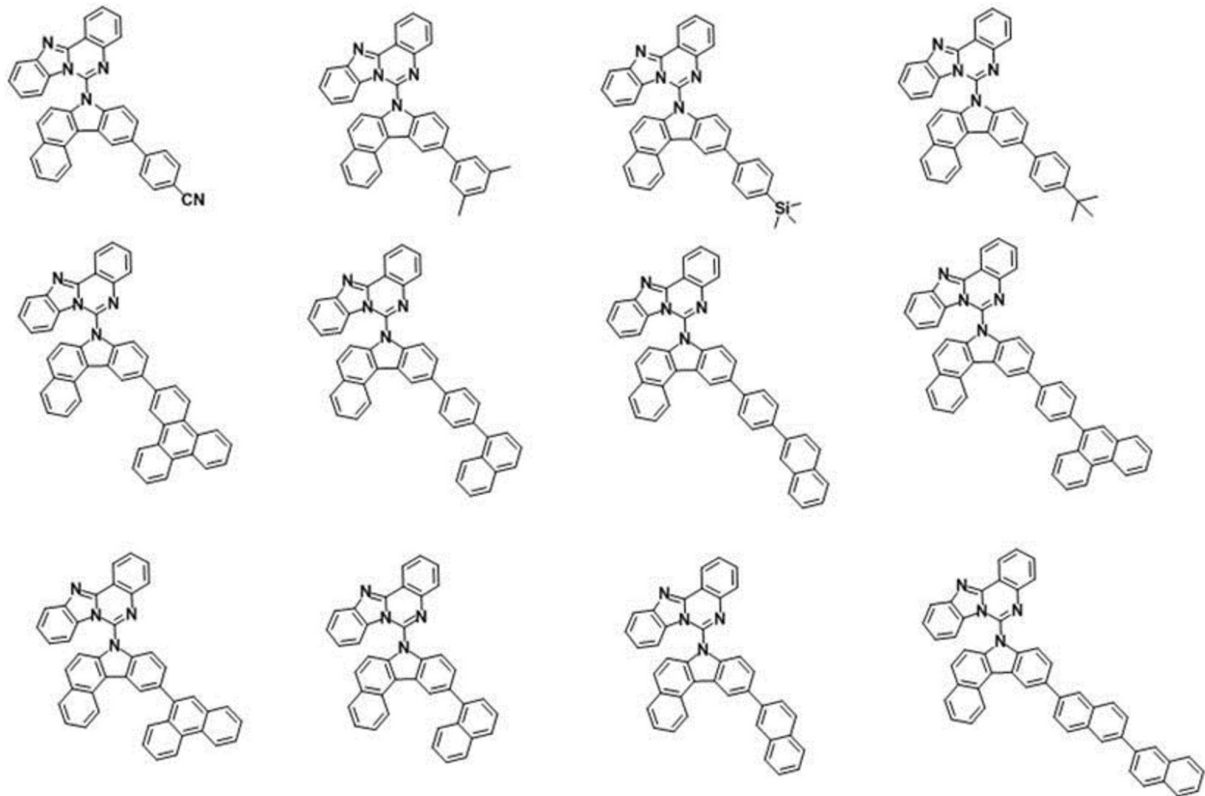


10



20

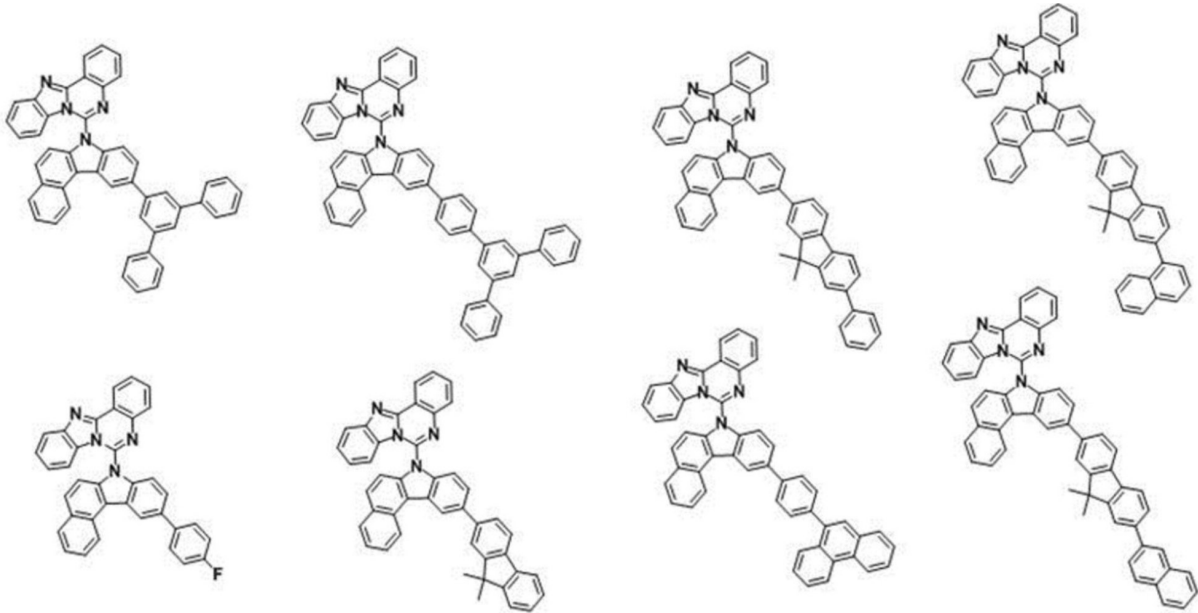
【化 4 2】



30

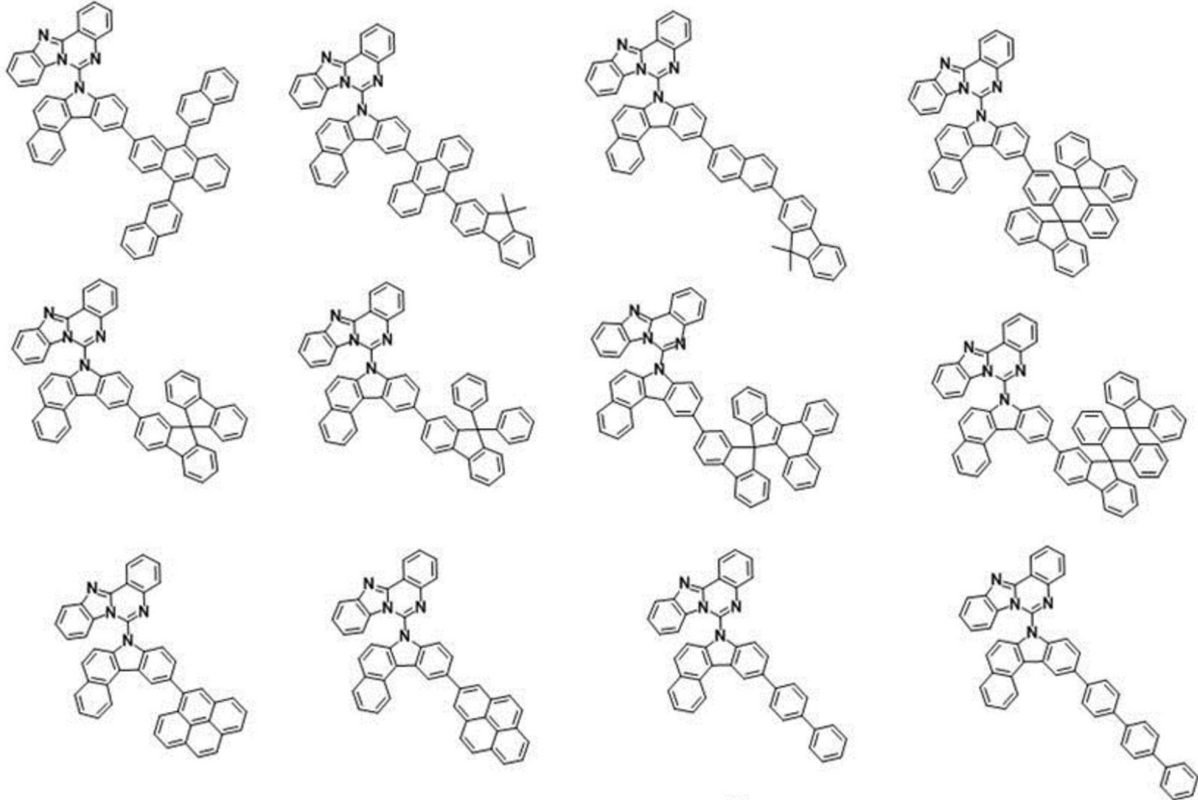
40

【化 4 3】



10

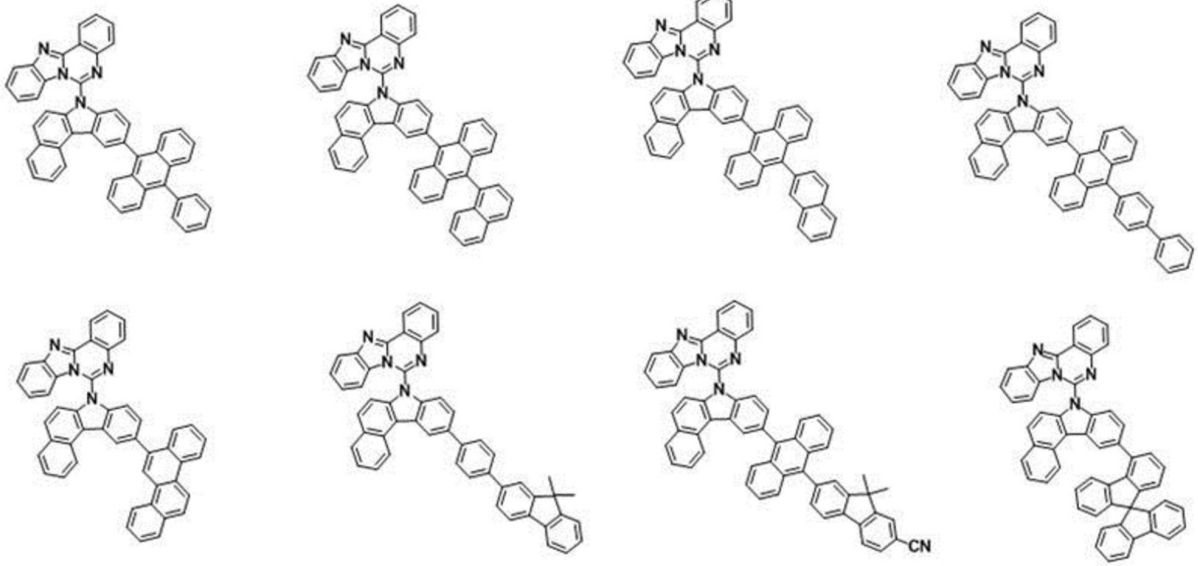
【化 4 4】



20

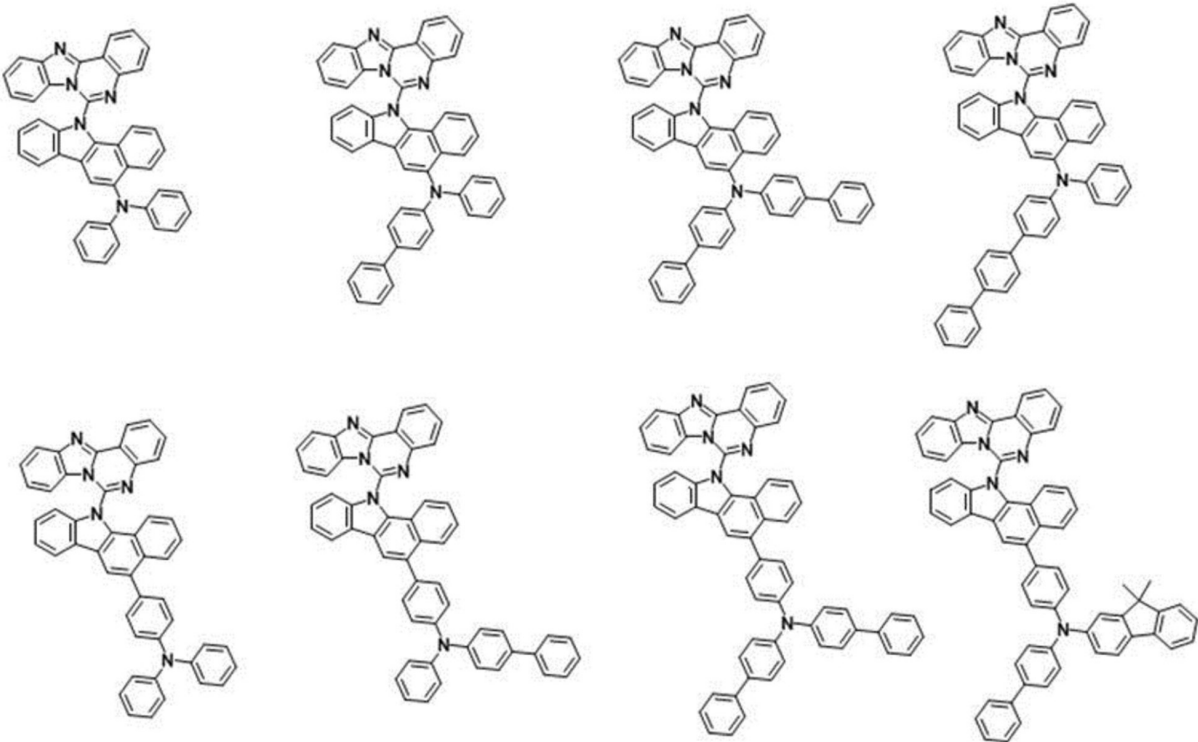
30

【化 4 5】



10

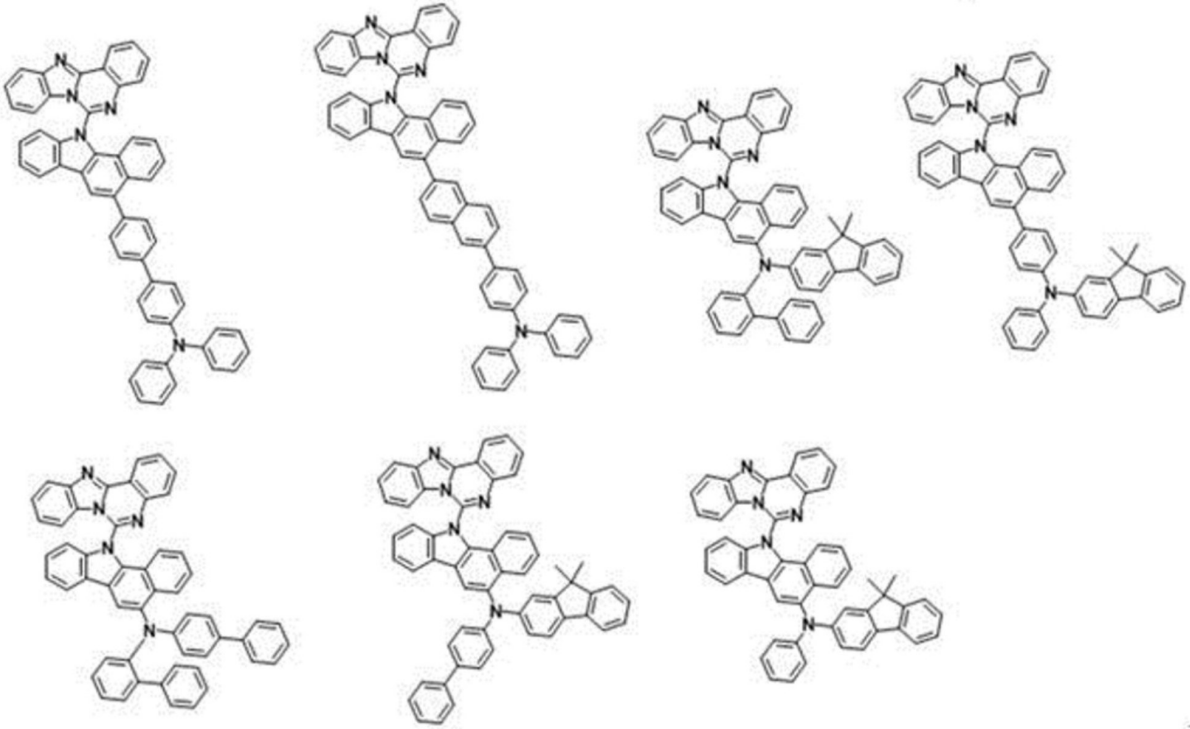
【化 4 6】



20

30

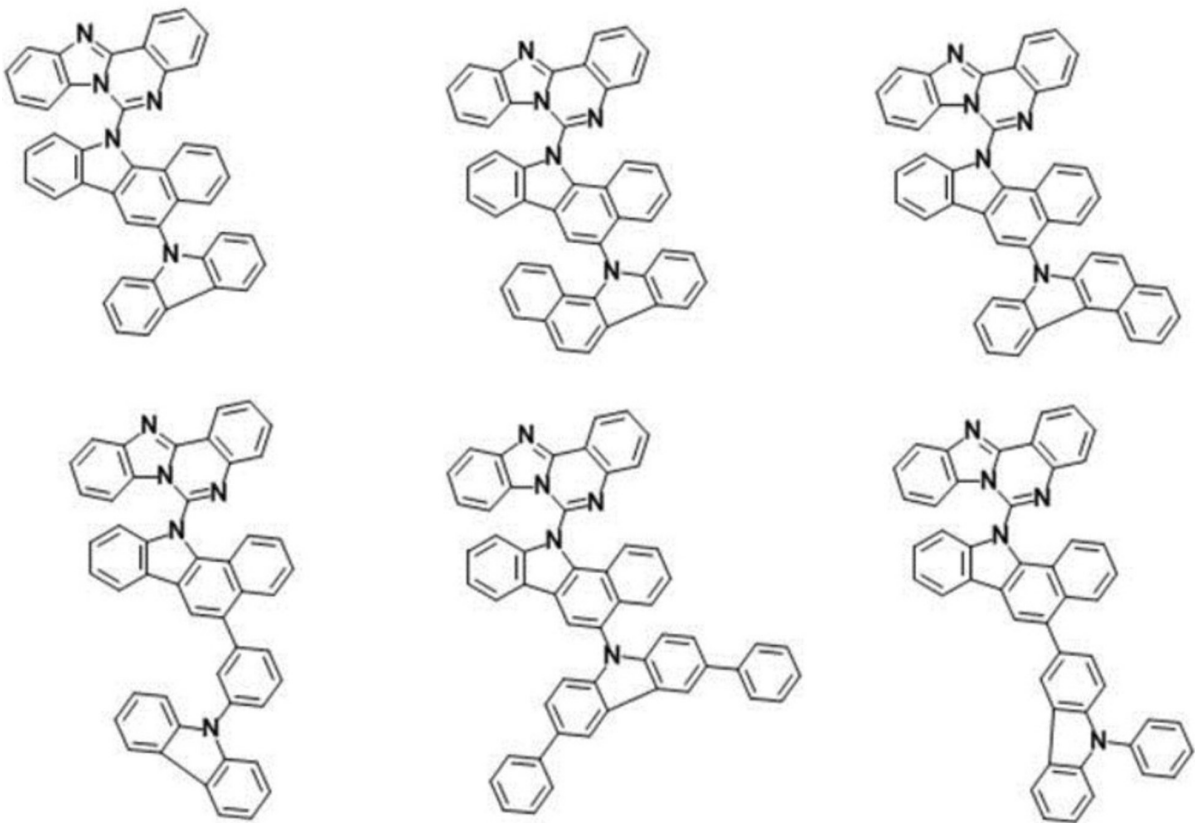
【化 4 7】



10

20

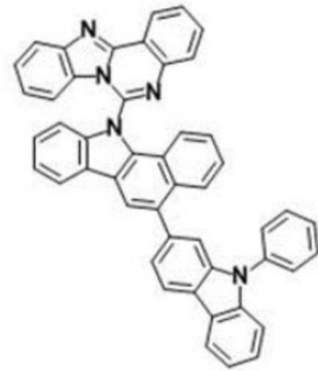
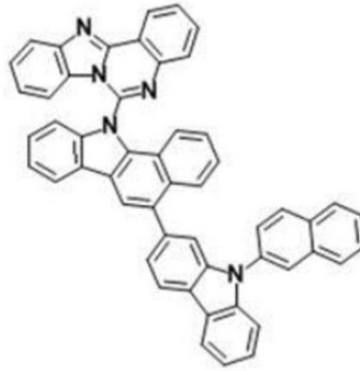
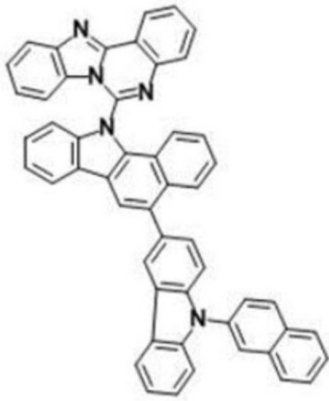
【化 4 8】



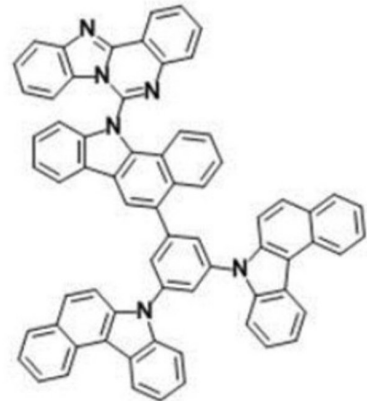
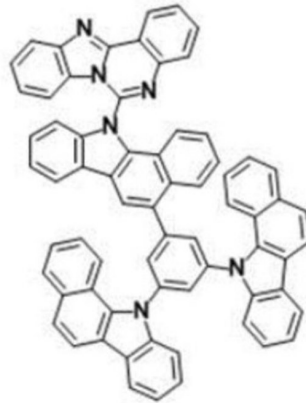
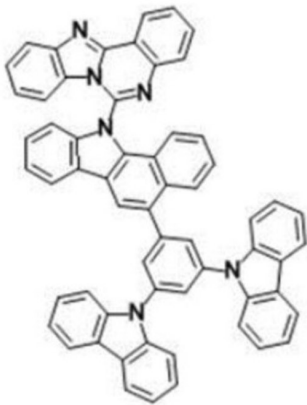
30

40

【化 4 9】

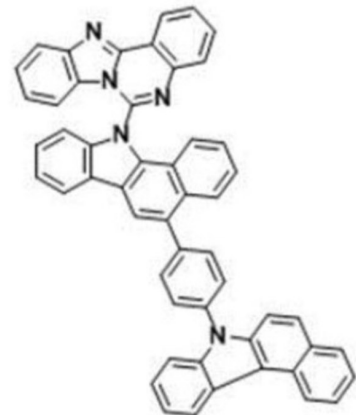
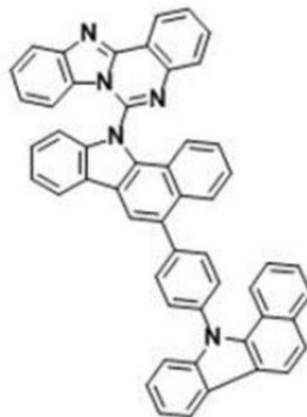
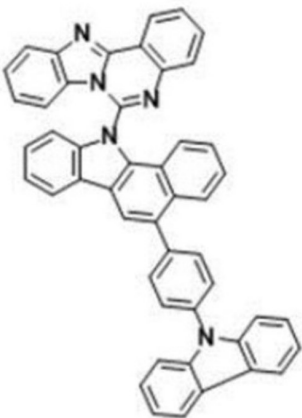


10

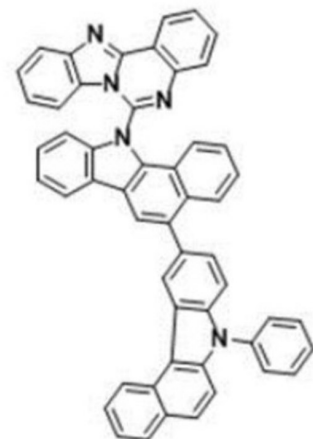
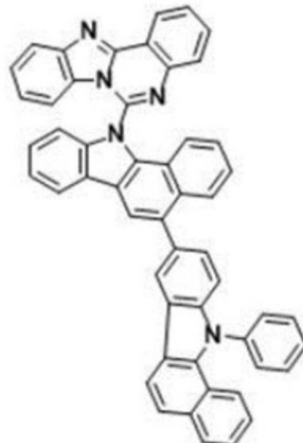
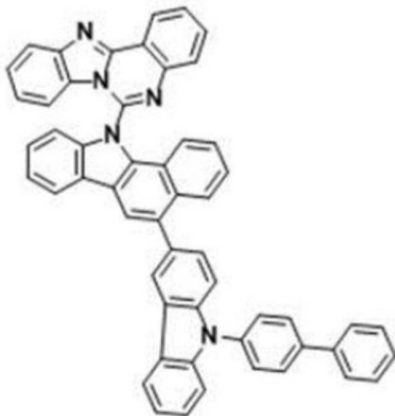


20

【化 5 0】



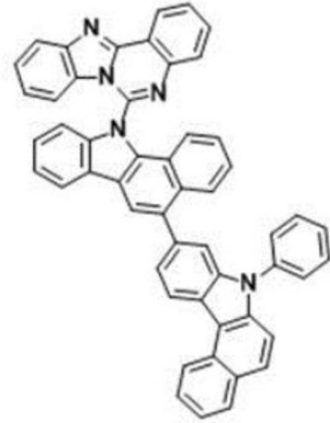
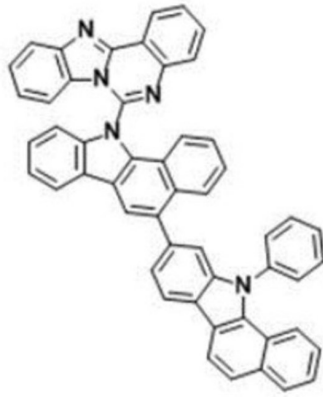
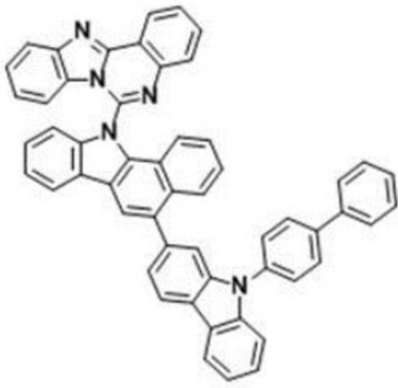
30



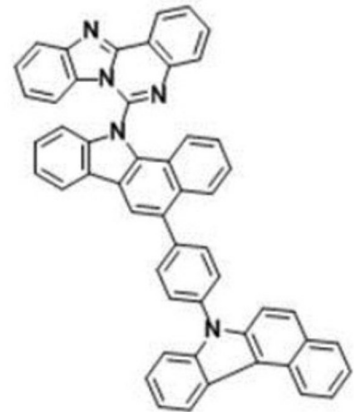
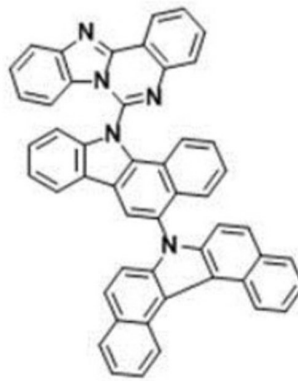
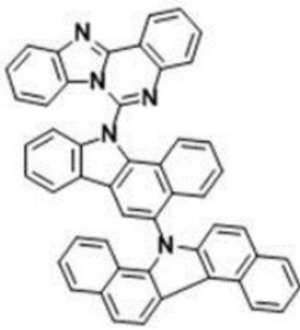
40

50

【化 5 1】

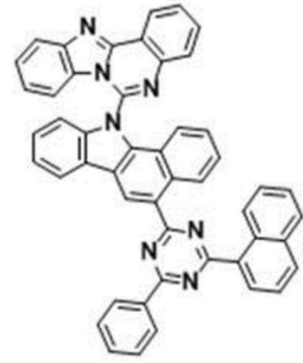
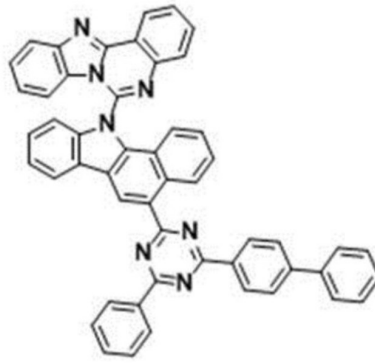
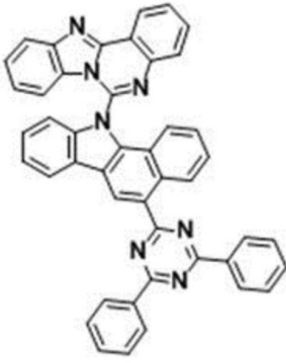


10

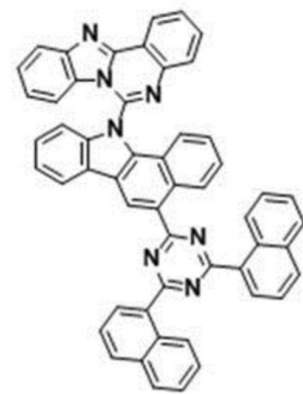
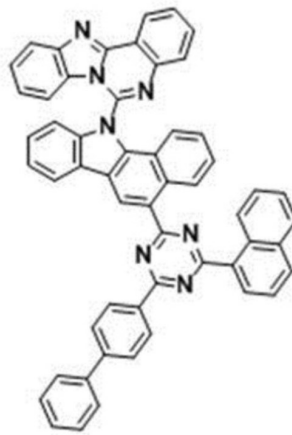
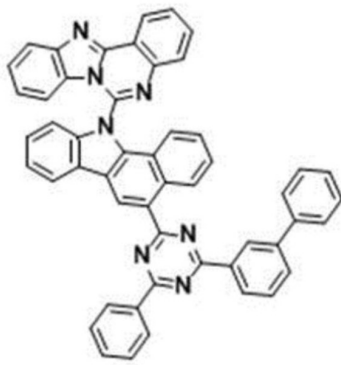


20

【化 5 2】

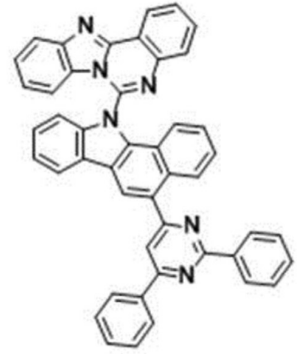
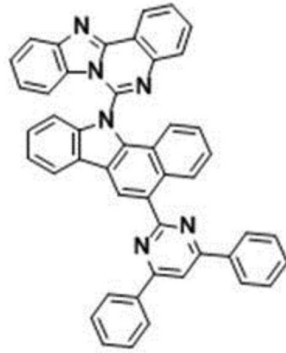
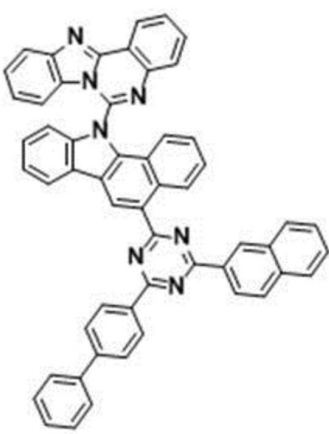


10

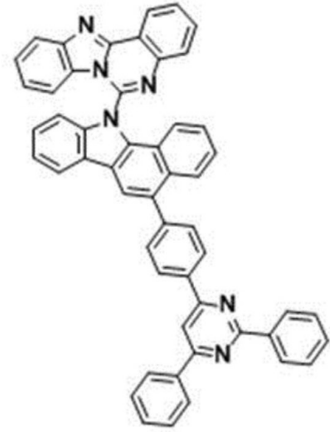
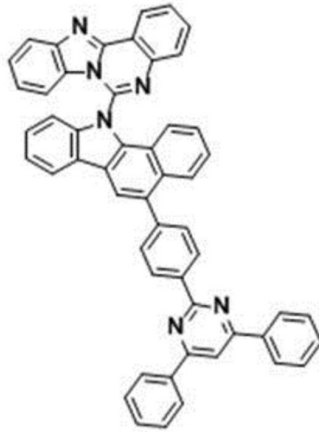
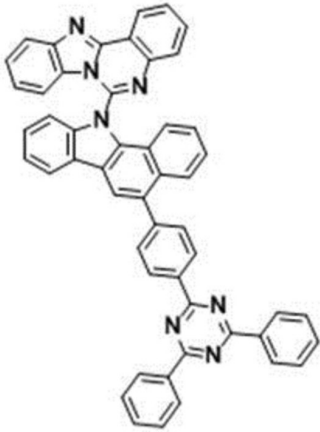


20

【化 5 3】

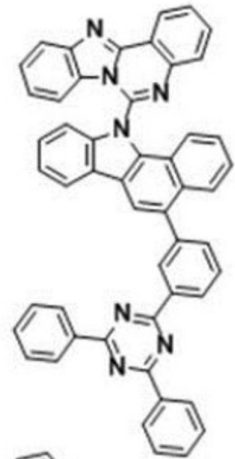
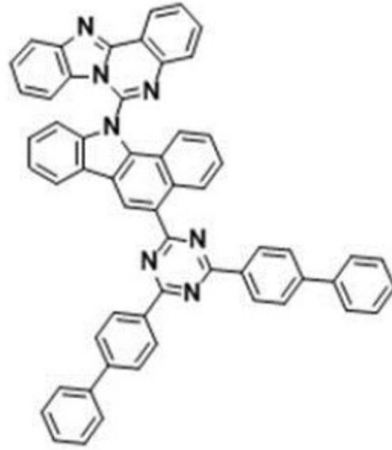
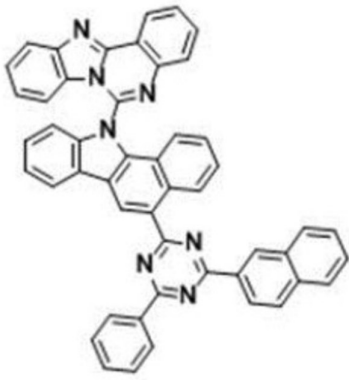


10

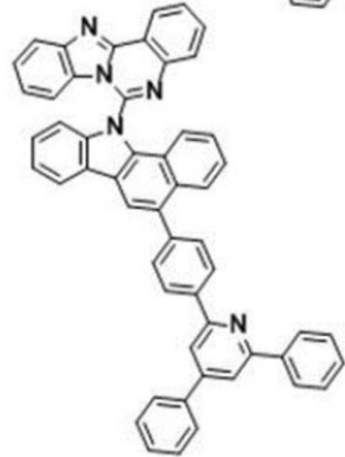
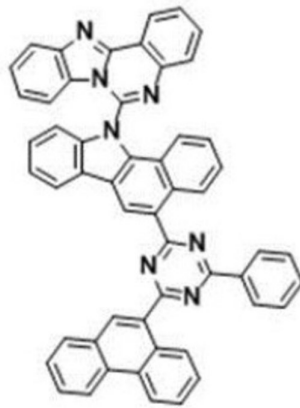
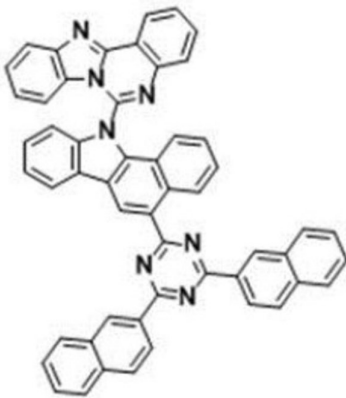


20

【化 5 4】

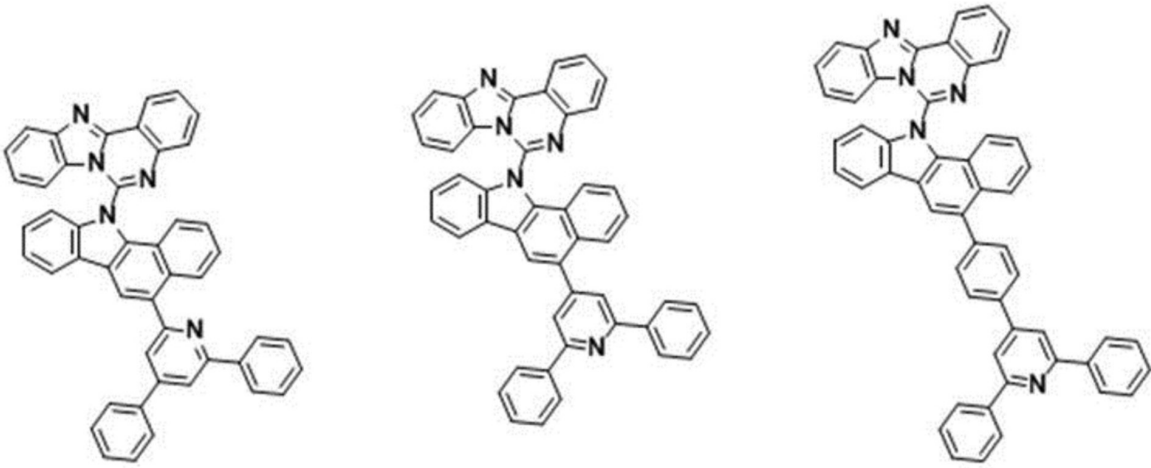


10

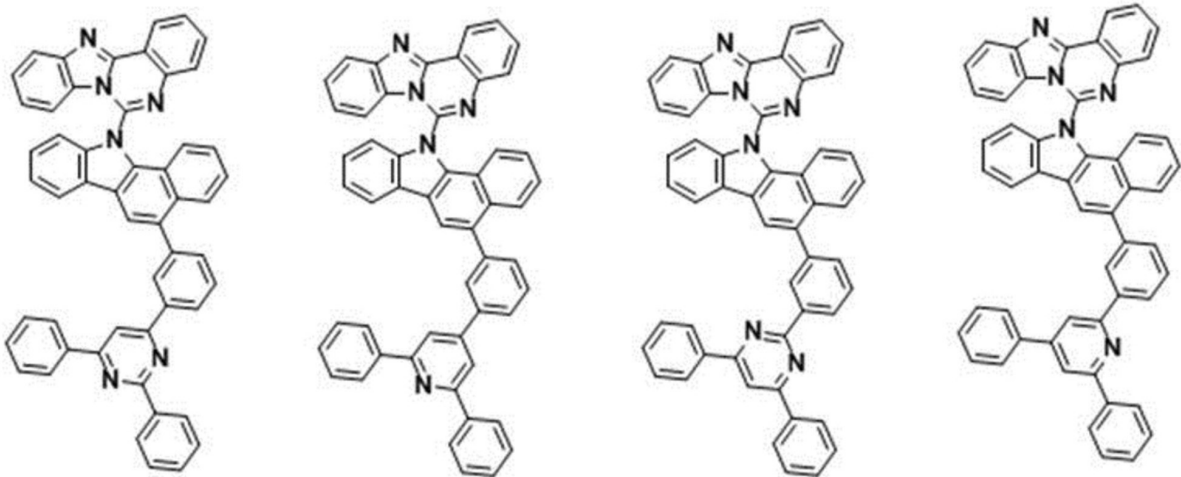


20

【化 5 5】

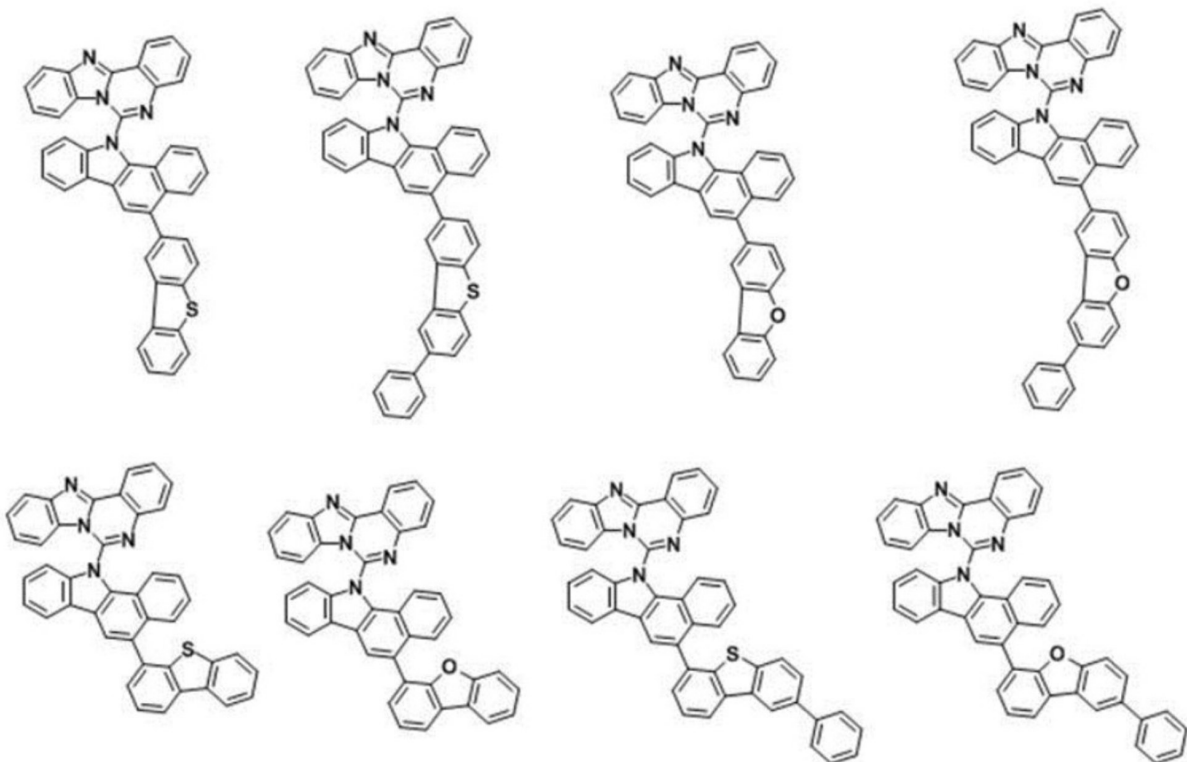


10



20

【化 5 6】

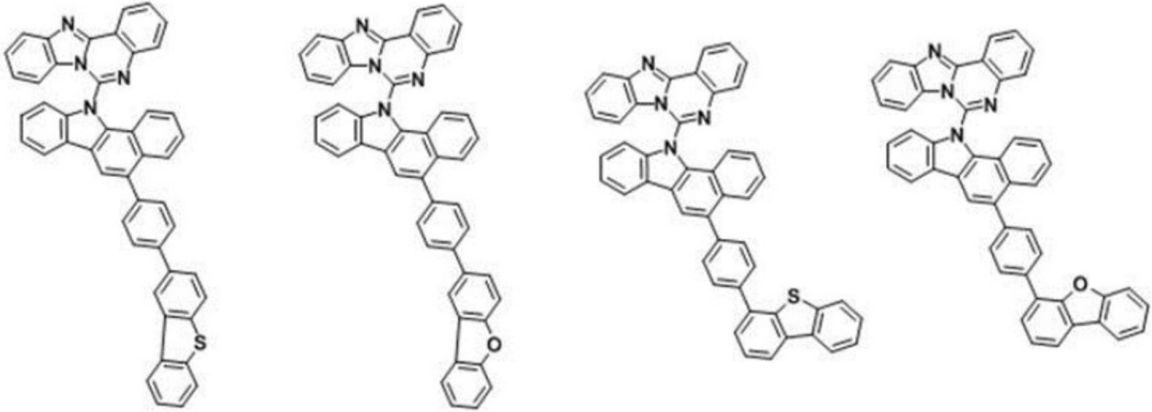


30

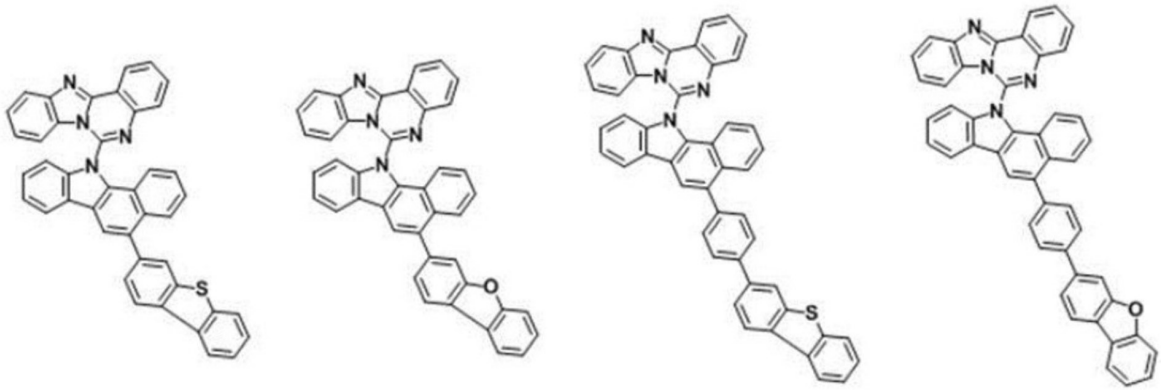
40

50

【化 5 7】

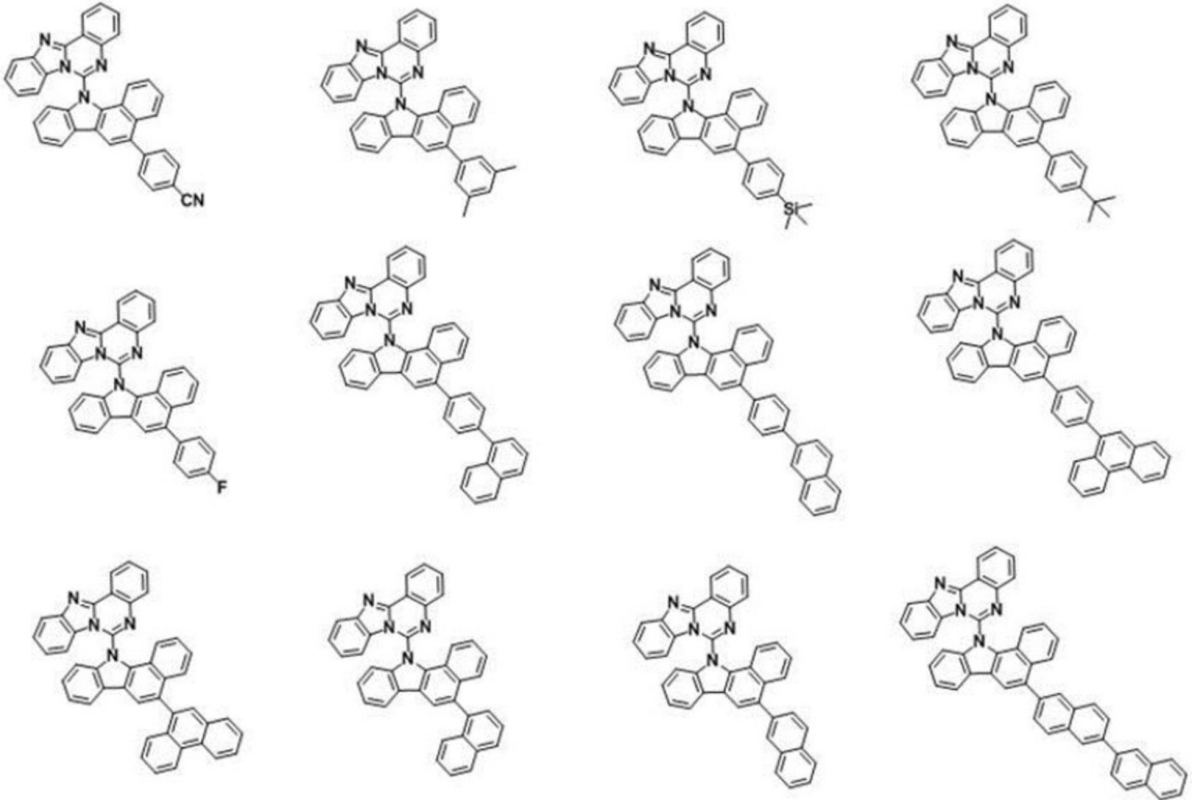


10



20

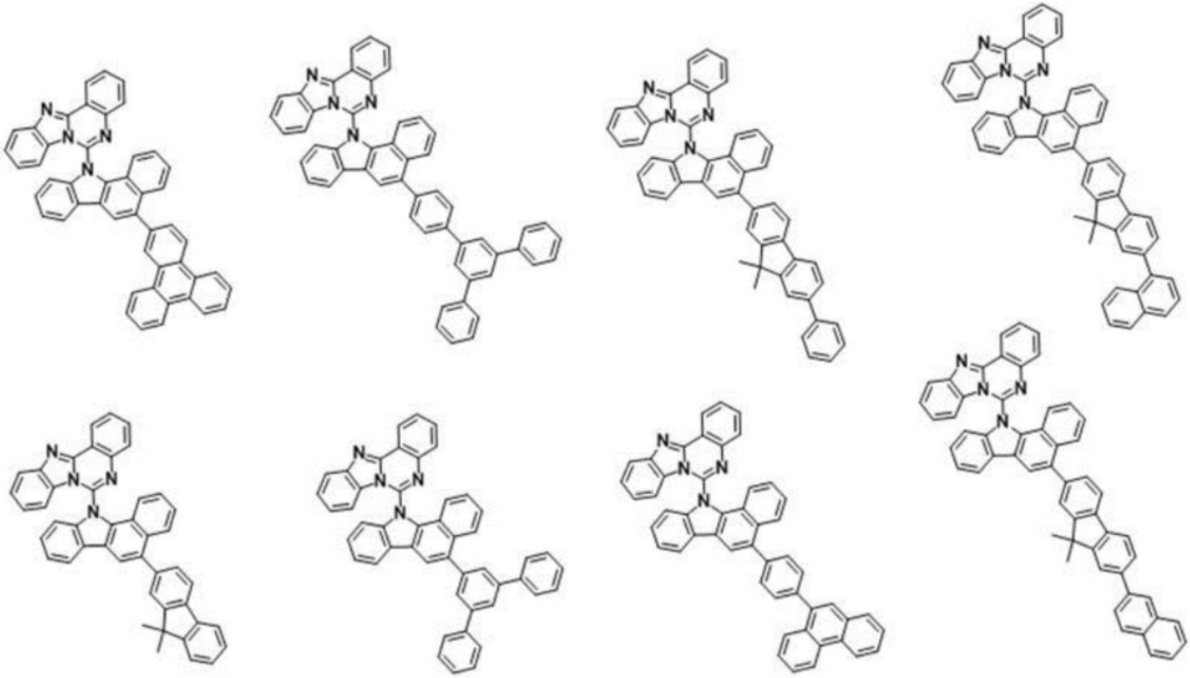
【化 5 8】



30

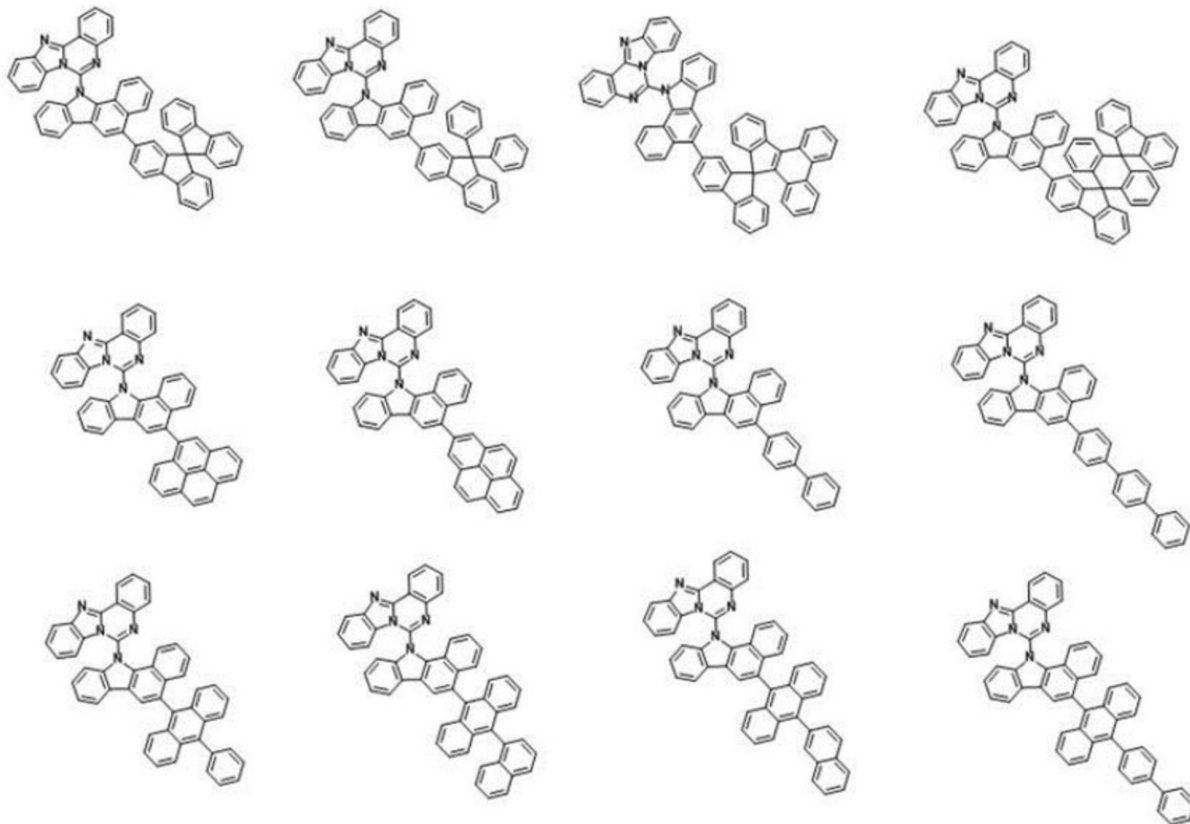
40

【化 5 9】



10

【化 6 0】

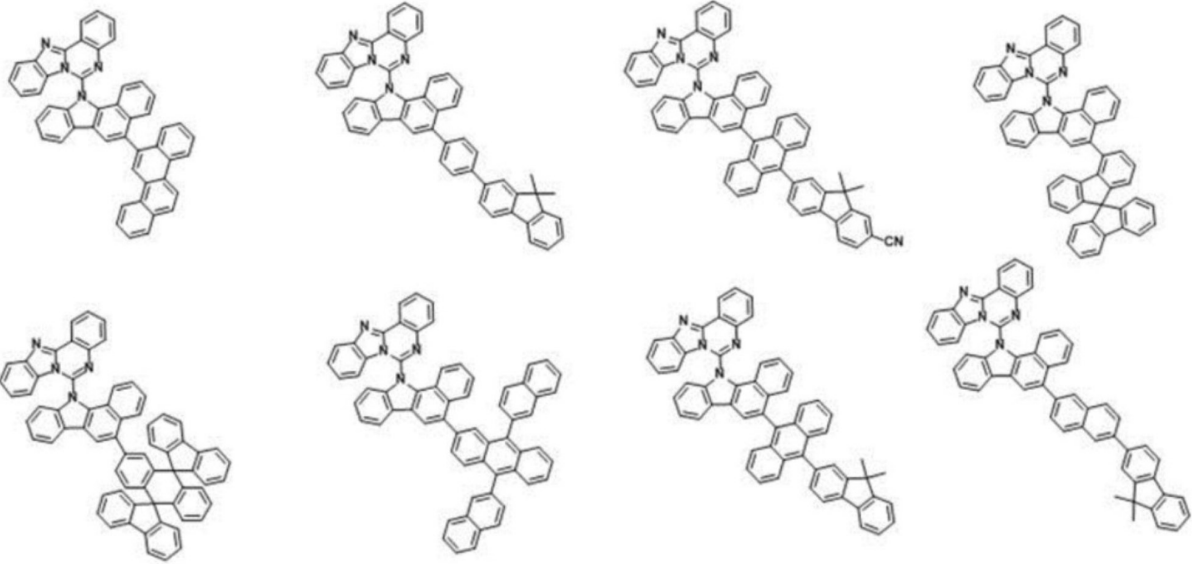


20

30

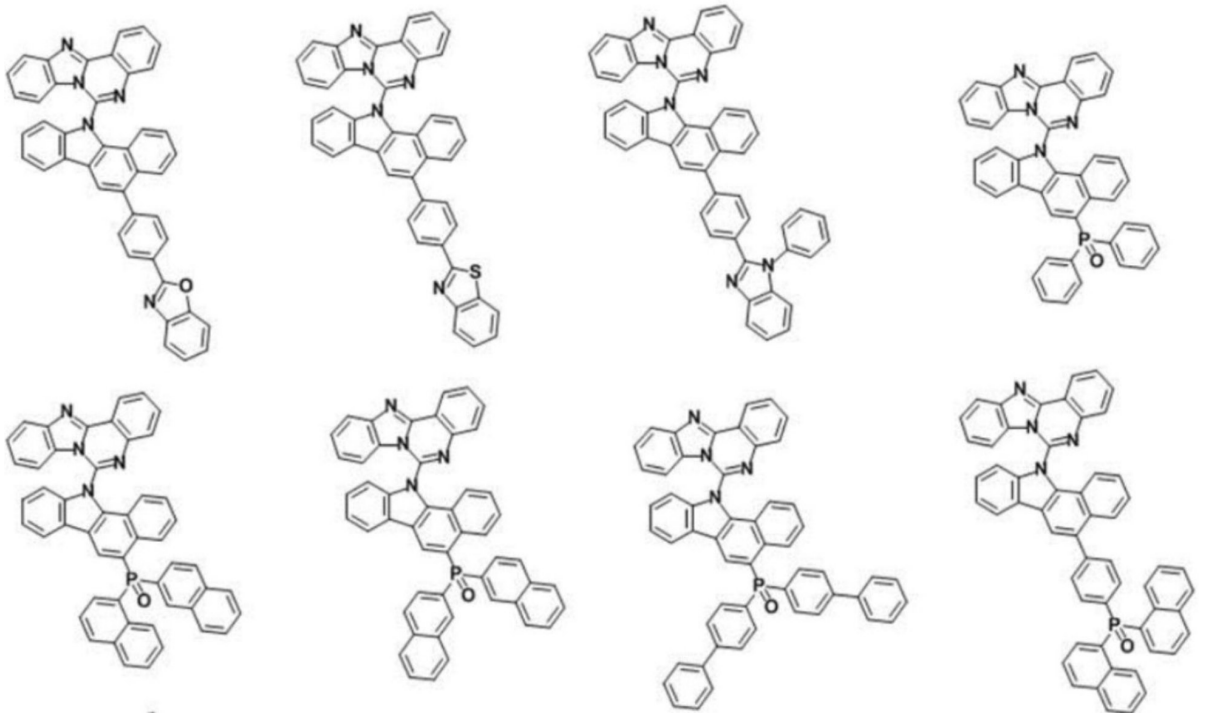
40

【化 6 1】



10

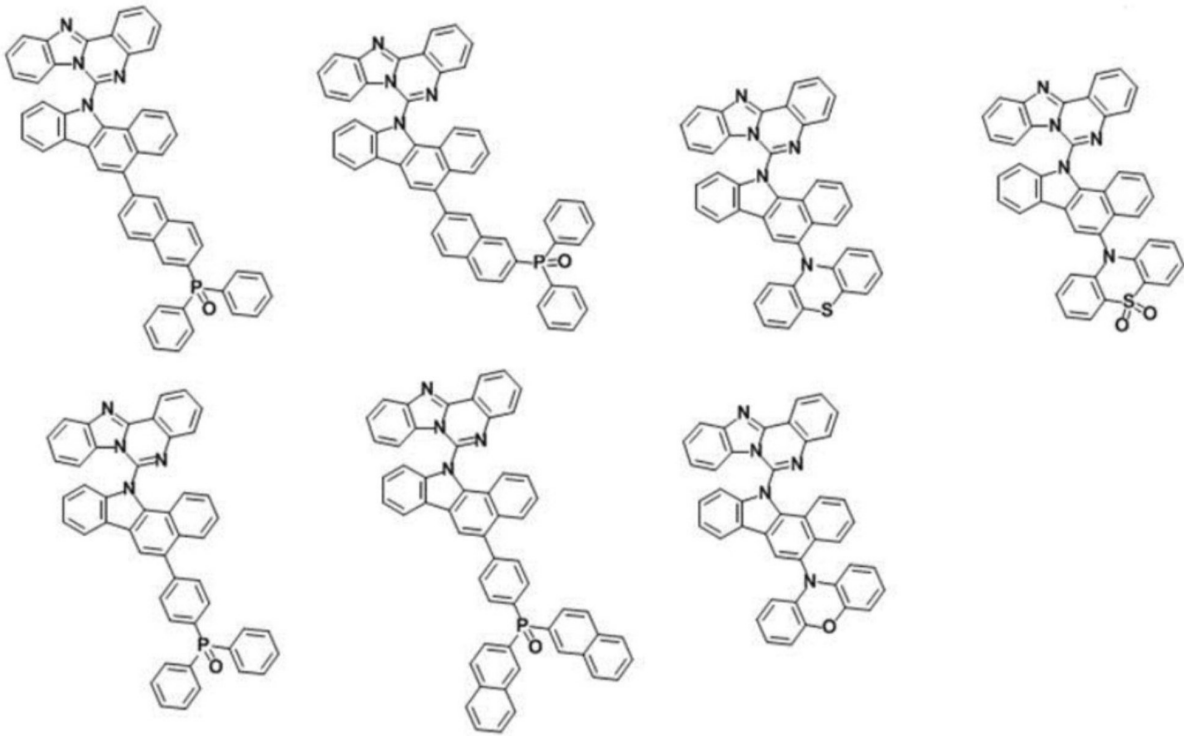
【化 6 2】



20

30

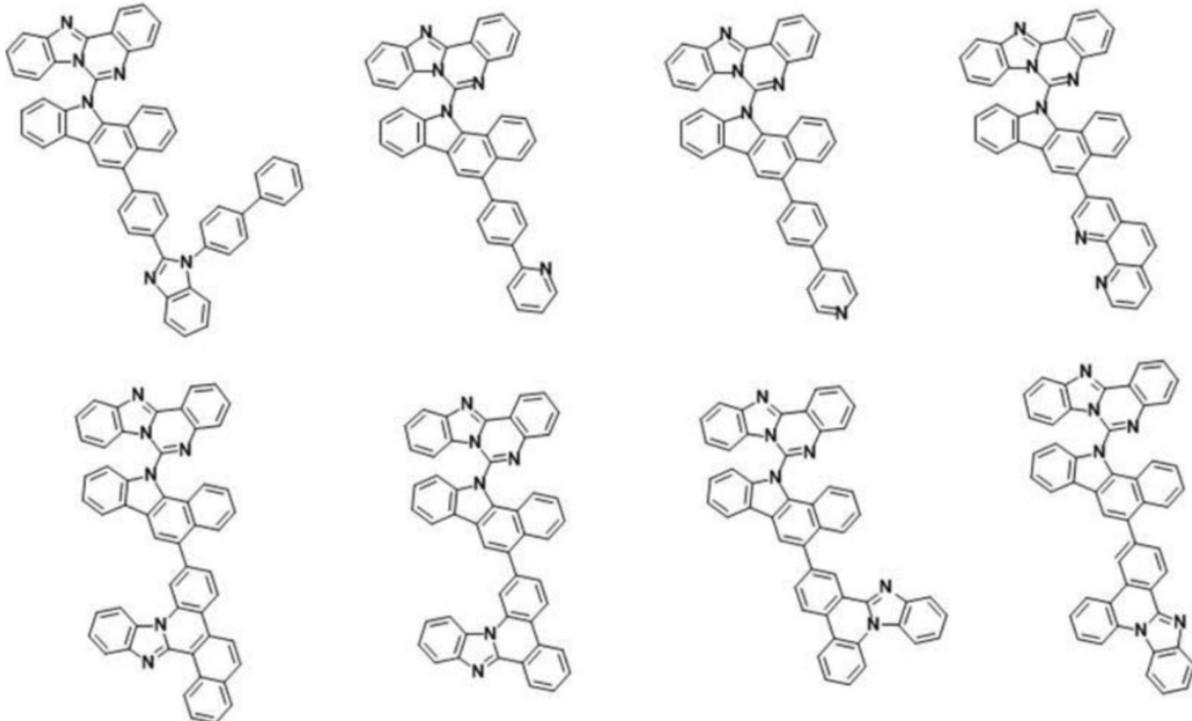
【化 6 3】



10

20

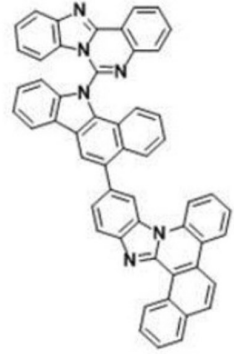
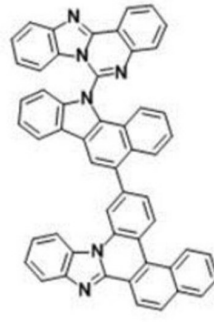
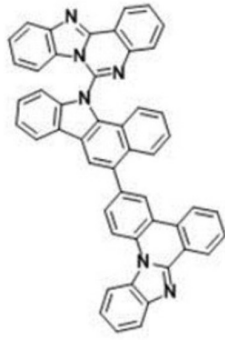
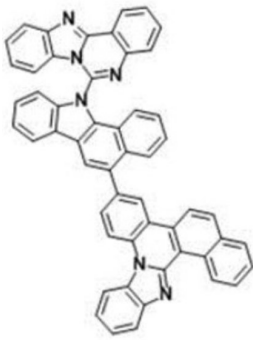
【化 6 4】



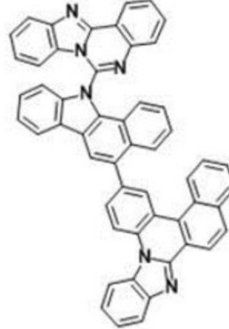
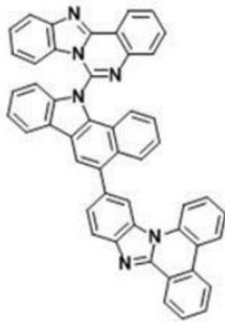
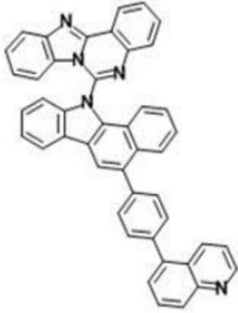
30

40

【化 6 5】

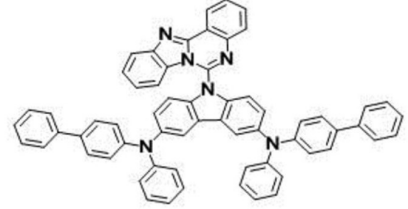
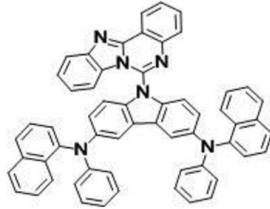
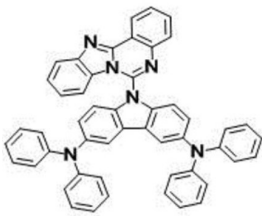


10

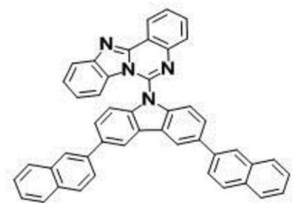
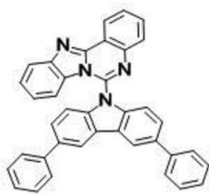
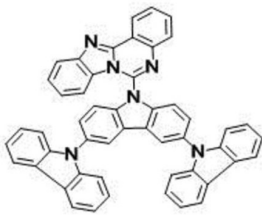


20

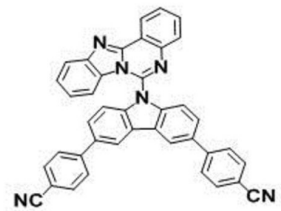
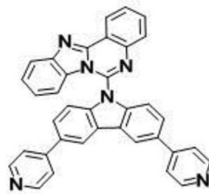
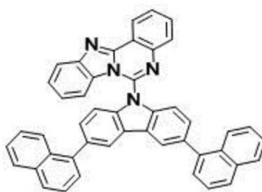
【化 6 6】



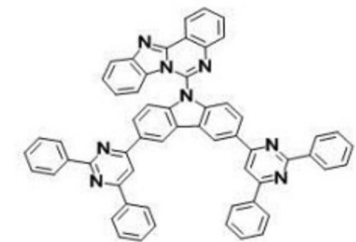
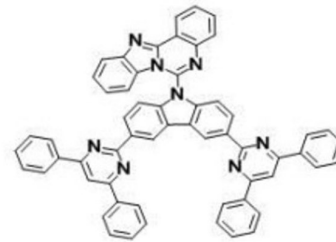
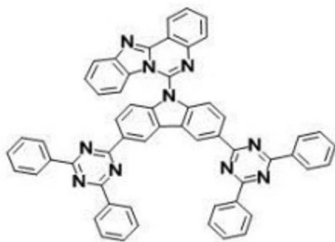
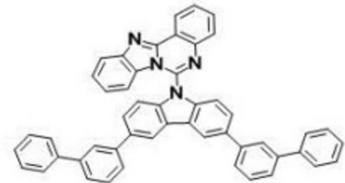
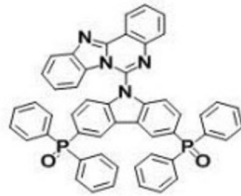
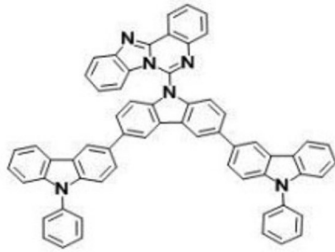
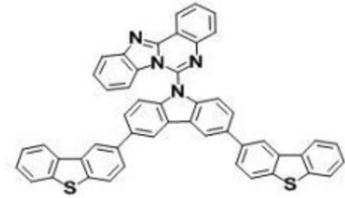
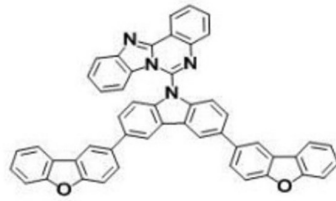
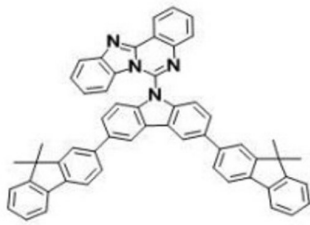
30



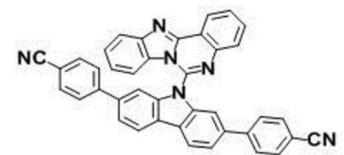
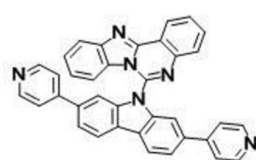
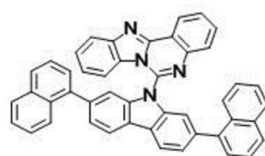
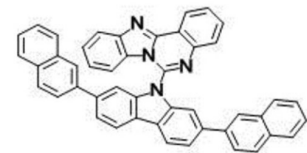
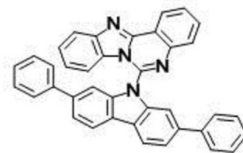
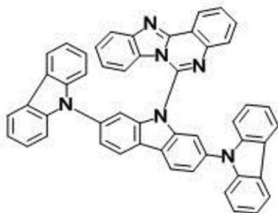
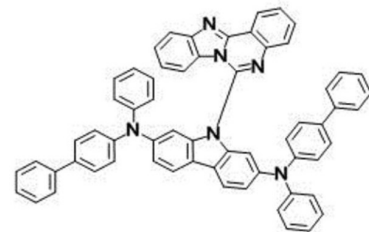
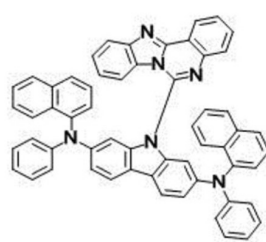
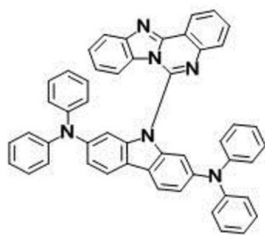
40



【化 6 7】



【化 6 8】



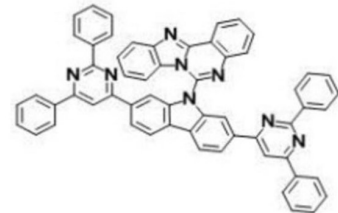
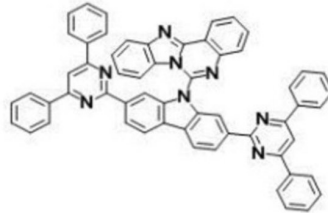
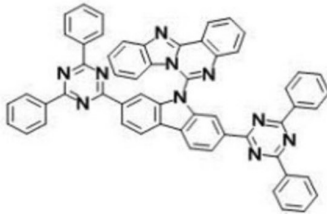
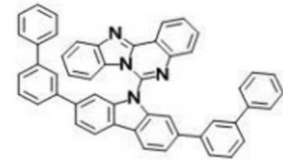
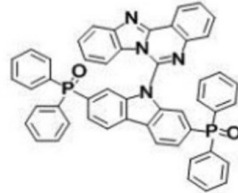
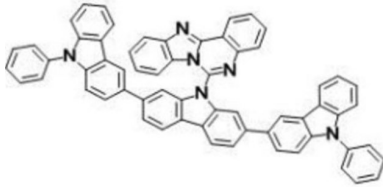
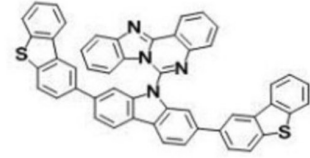
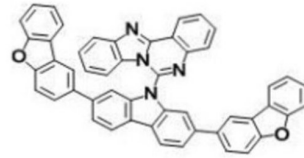
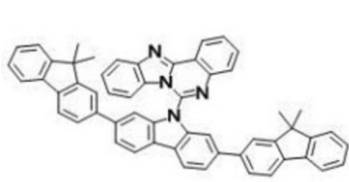
10

20

30

40

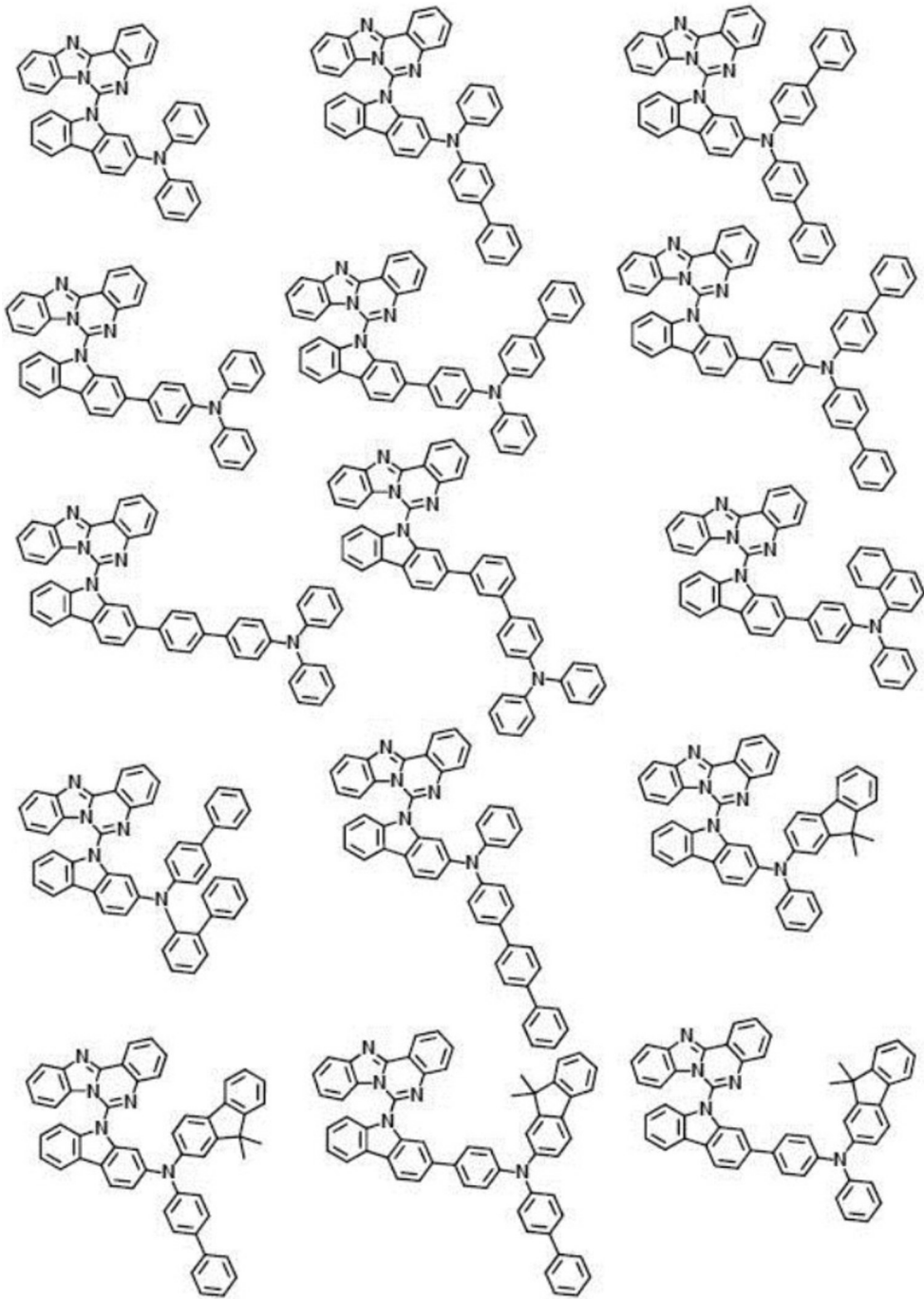
【化 6 9】



10

20

【化70】

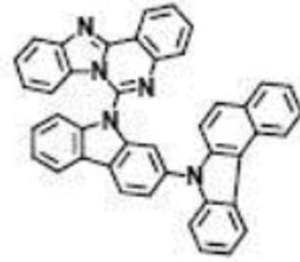
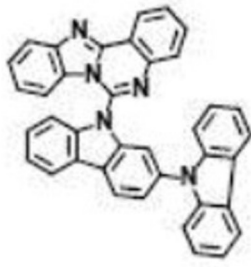


10

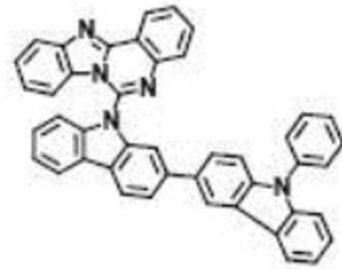
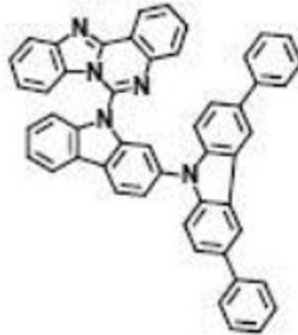
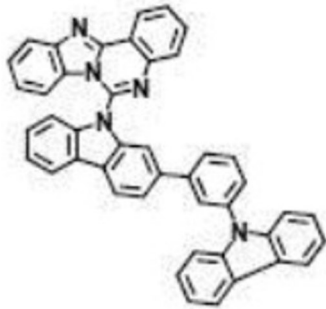
20

30

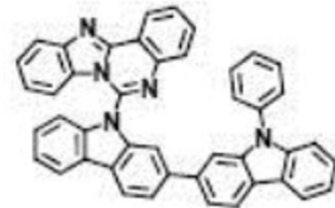
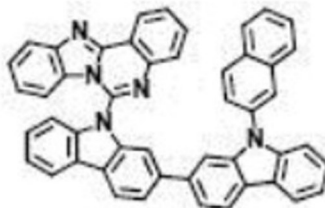
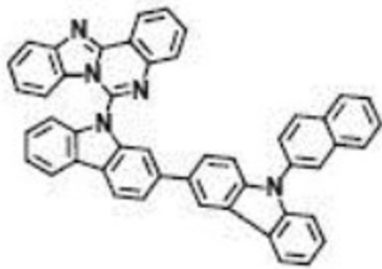
【化 7 1】



10

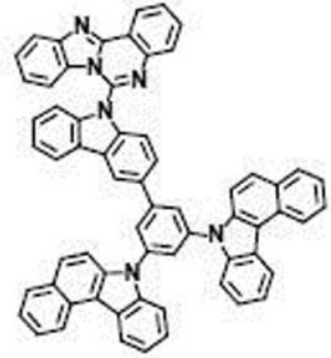
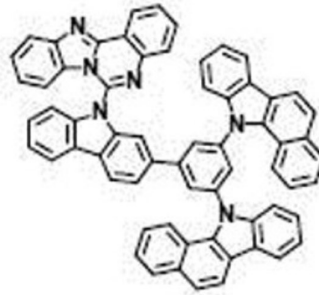
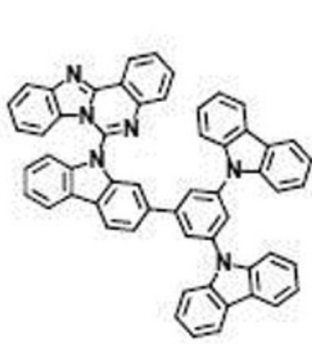


20

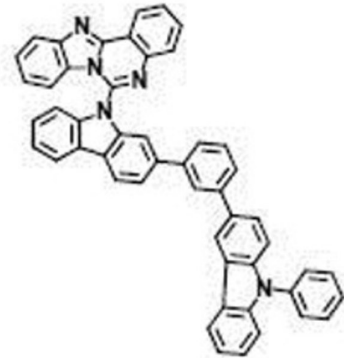
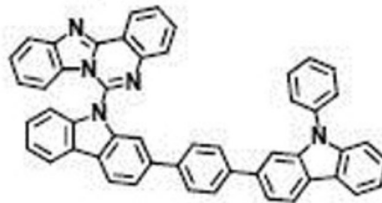
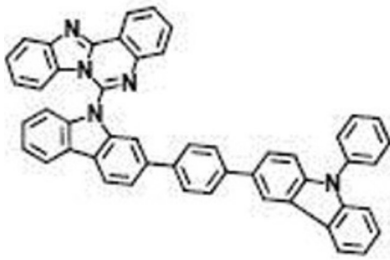


30

【化 7 2】

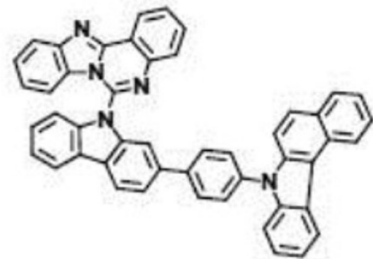
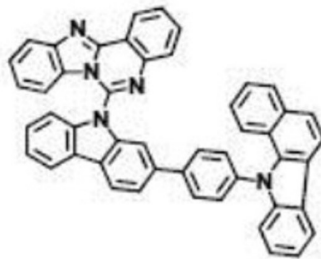
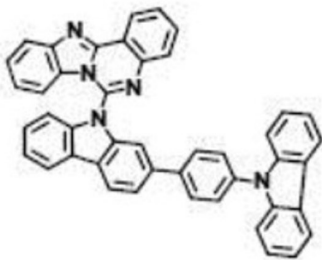


10

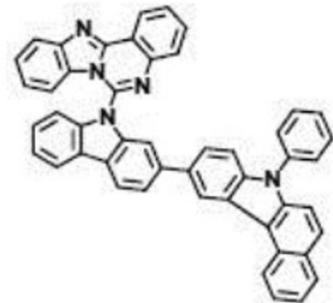
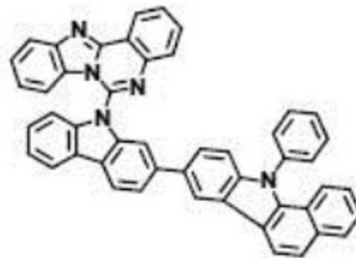
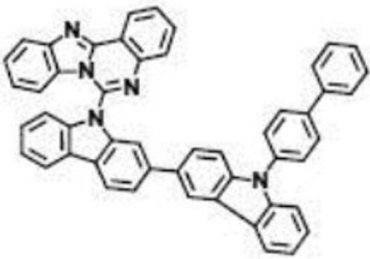


20

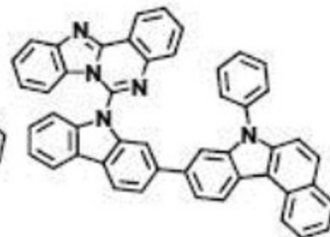
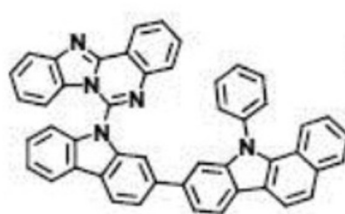
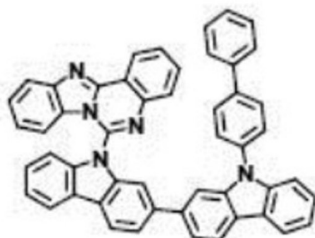
【化 7 3】



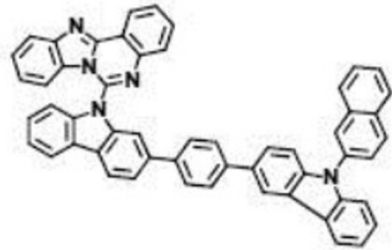
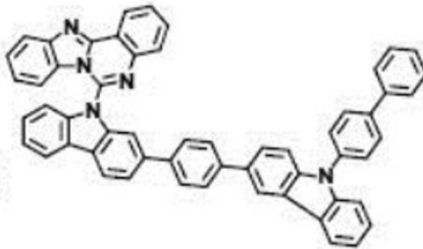
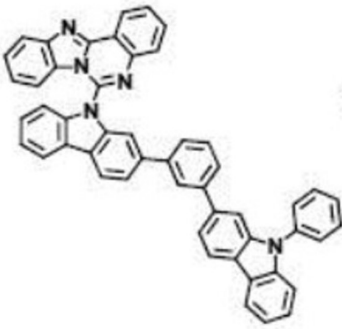
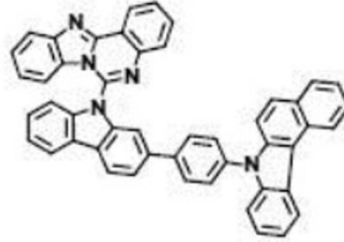
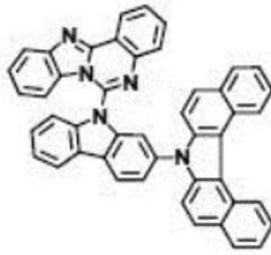
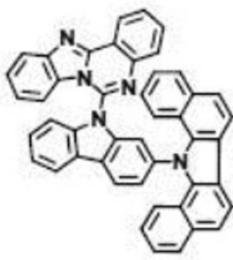
30



40

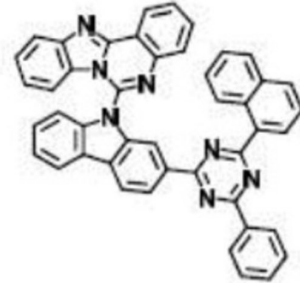
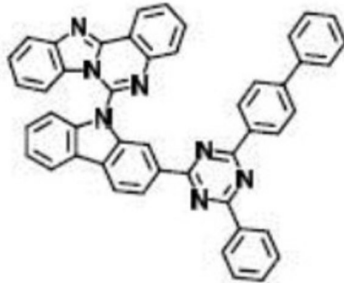
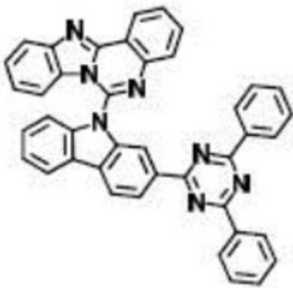


【化 7 4】

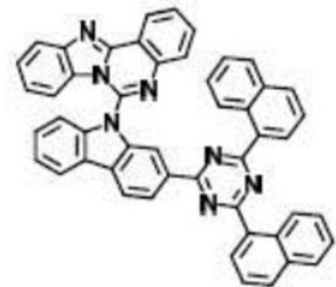
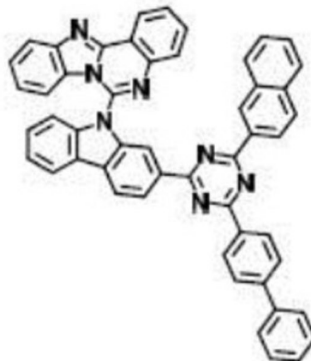
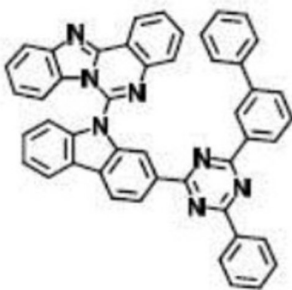


10

【化 7 5】



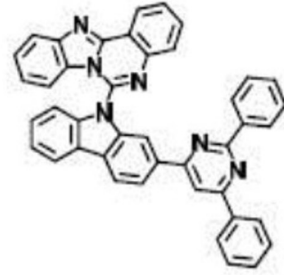
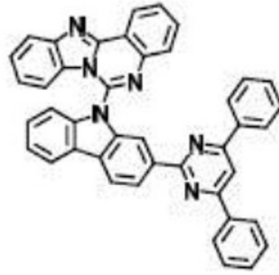
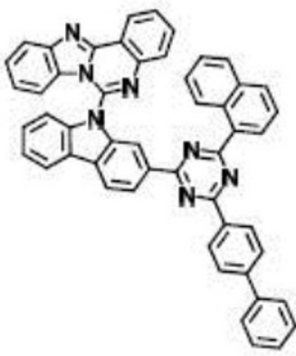
20



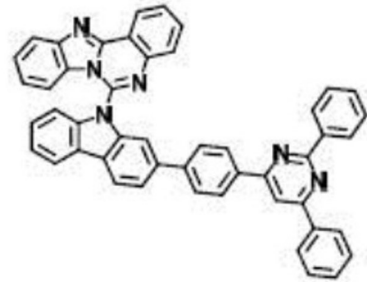
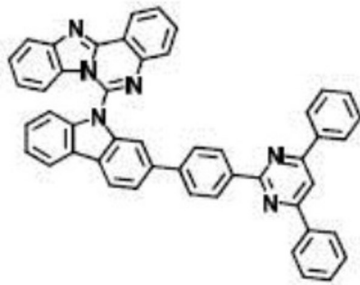
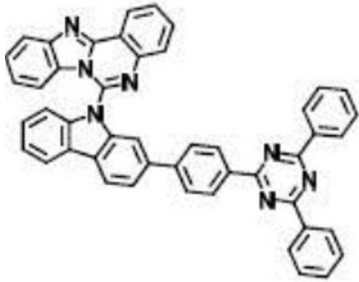
30

40

【化 7 6】

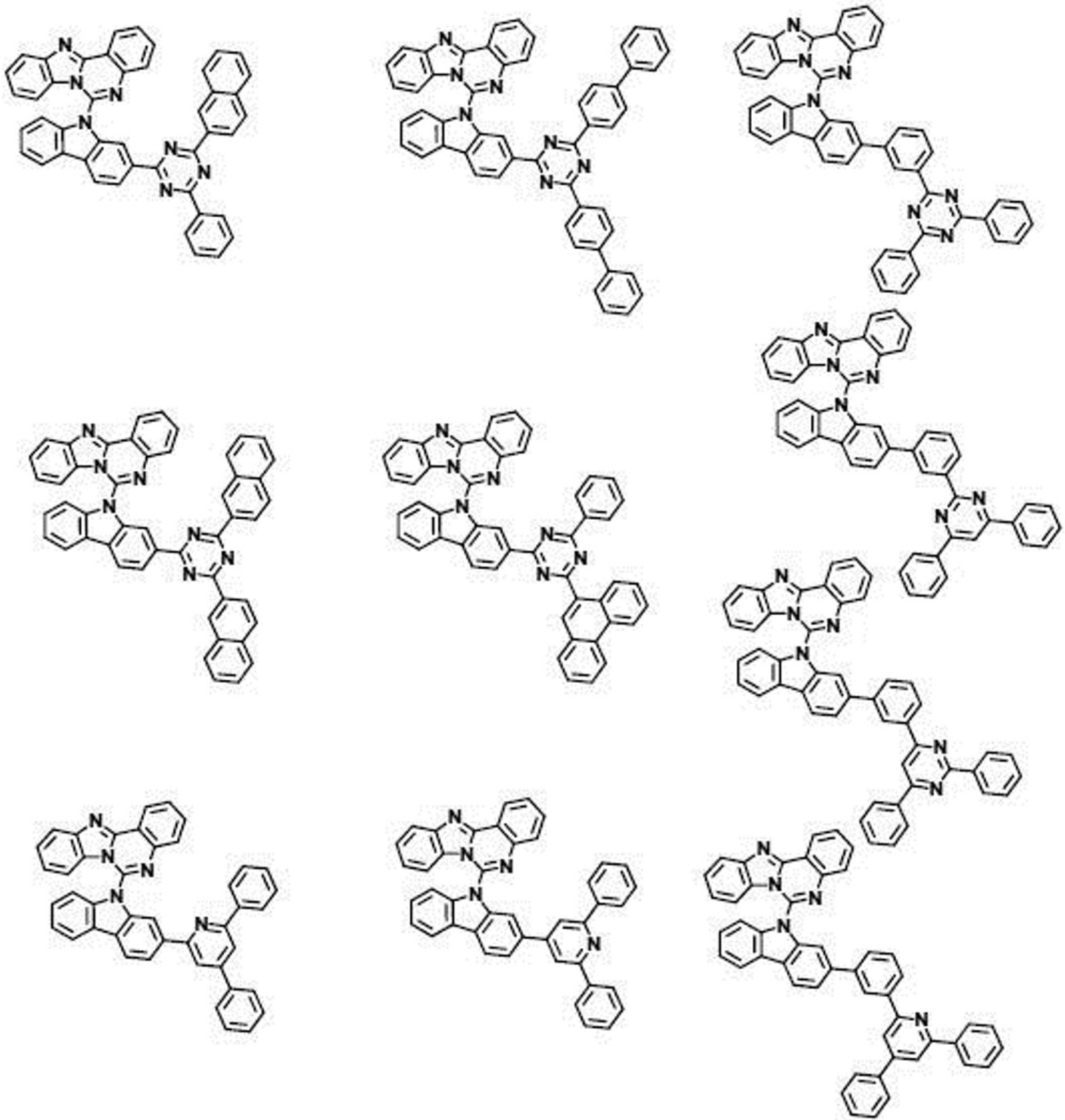


10

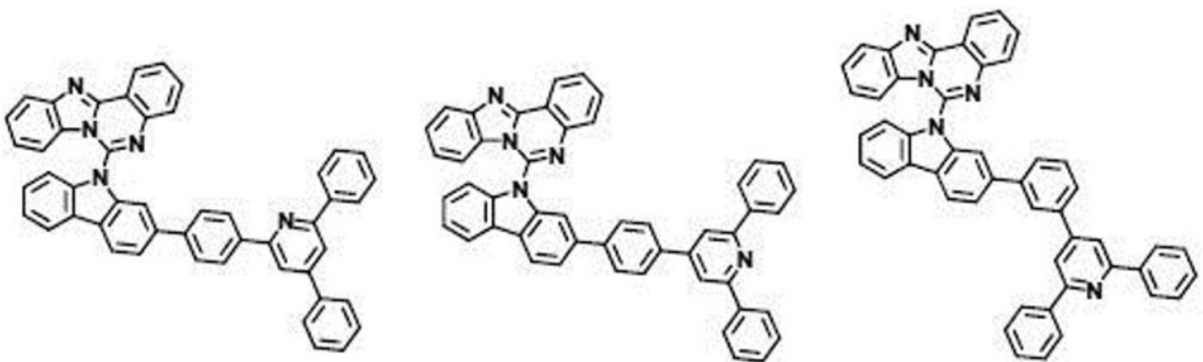


20

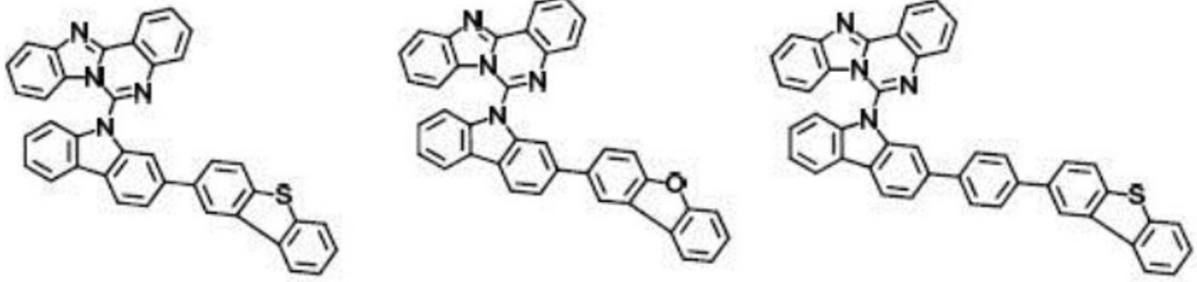
【化 7 7】



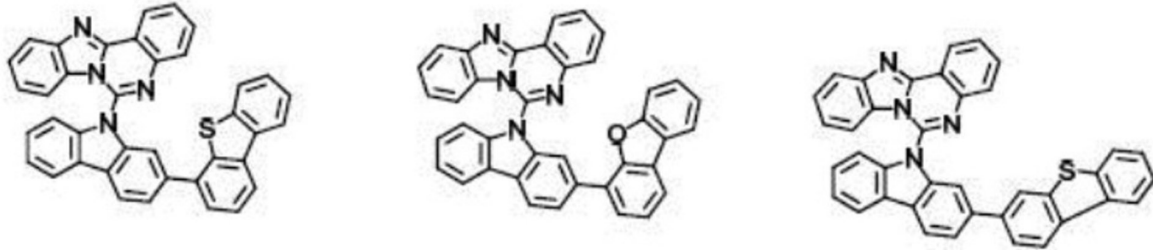
【化 7 8】



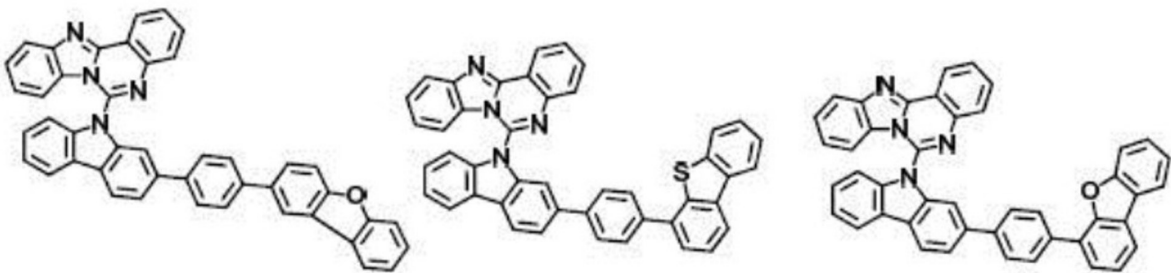
【化79】



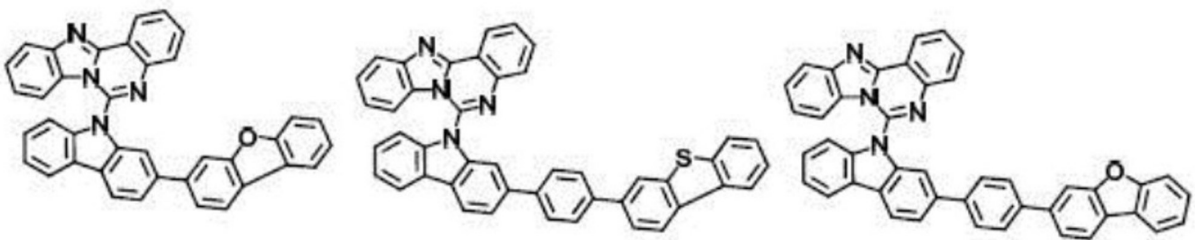
10



【化80】

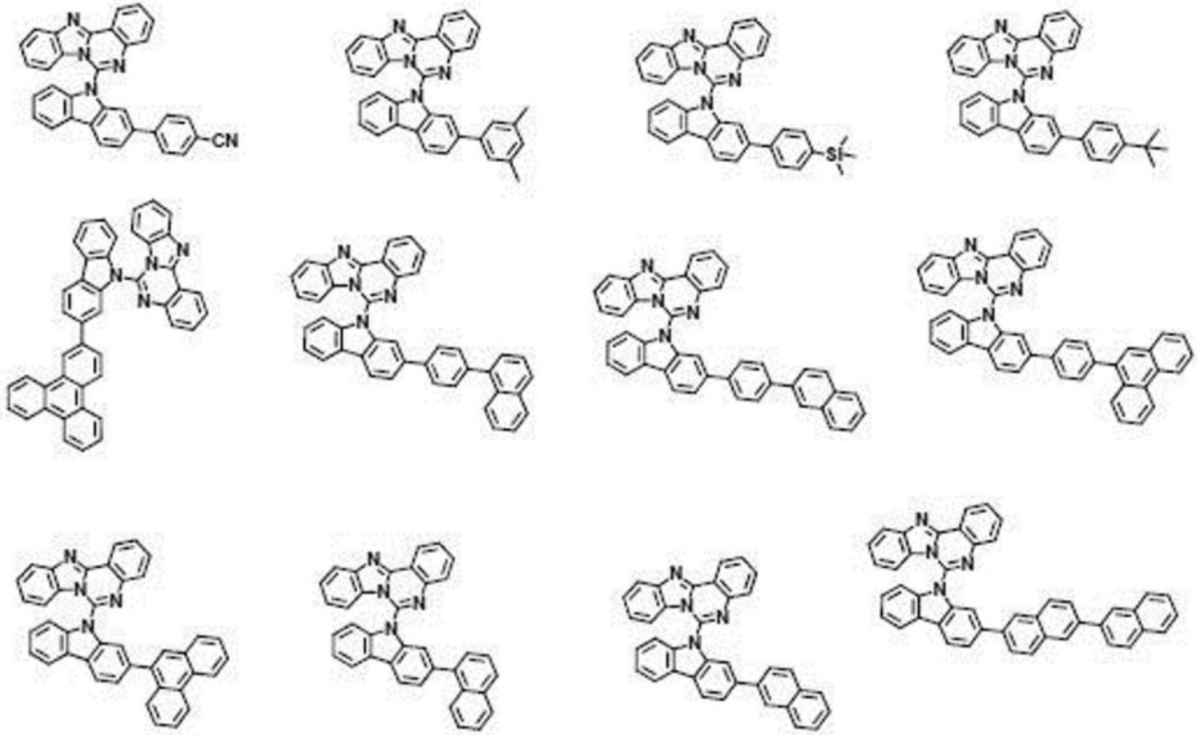


20

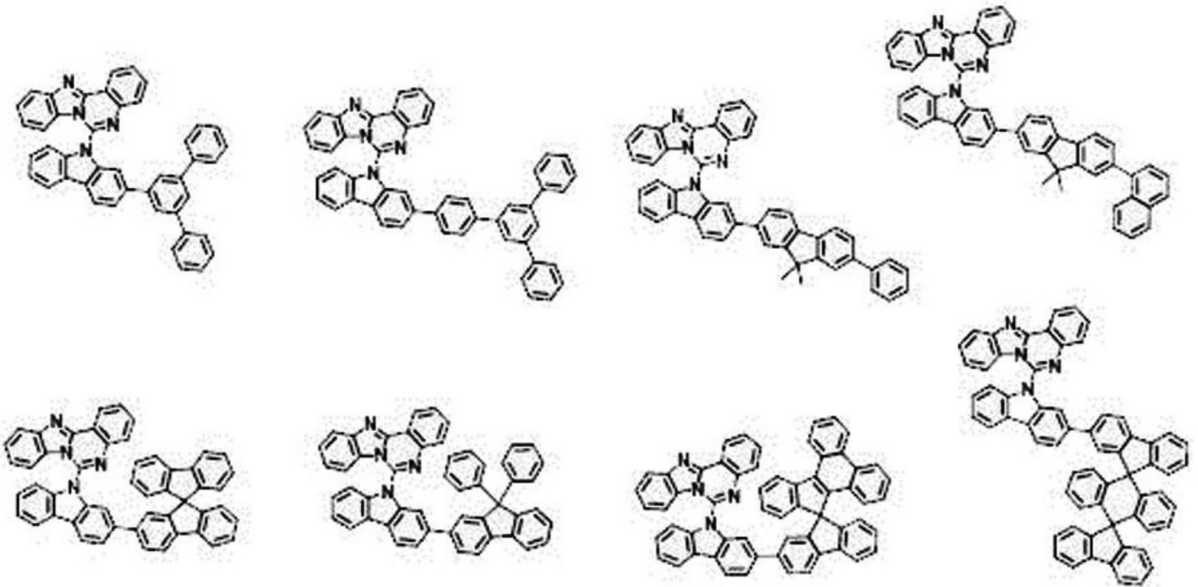


30

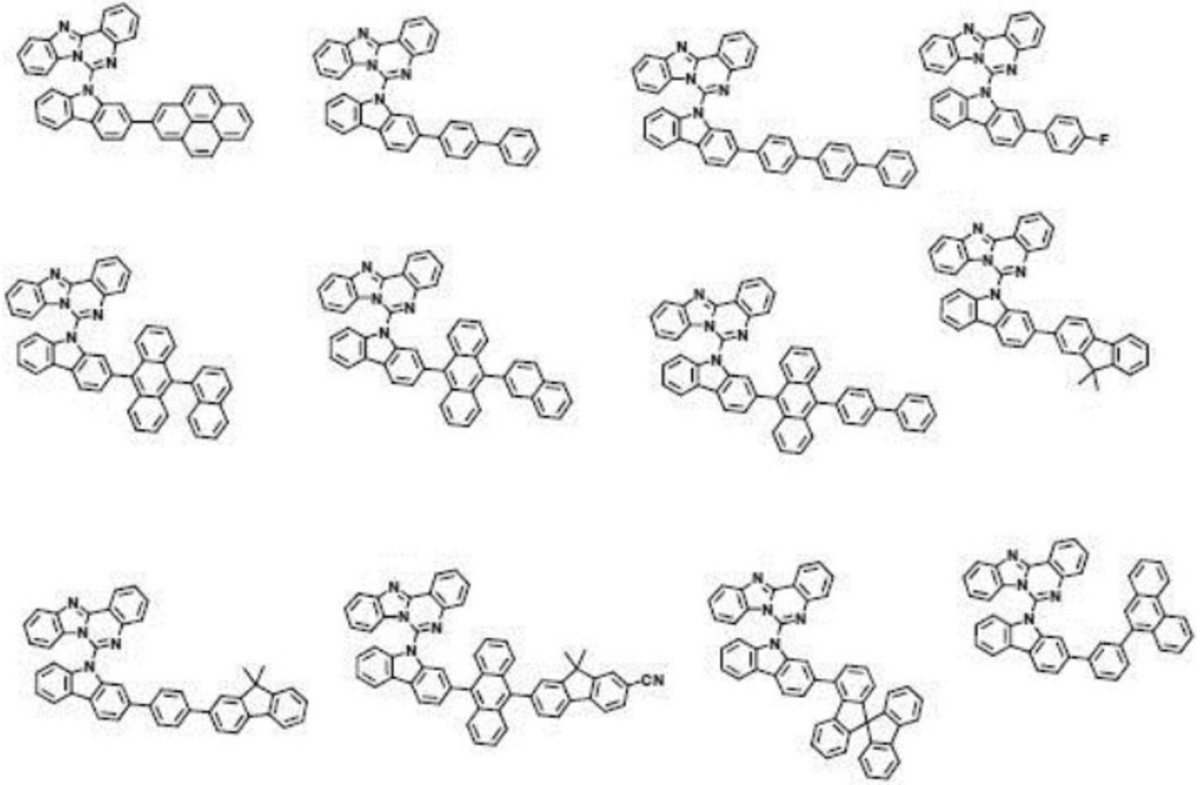
【化 8 1】



【化 8 2】



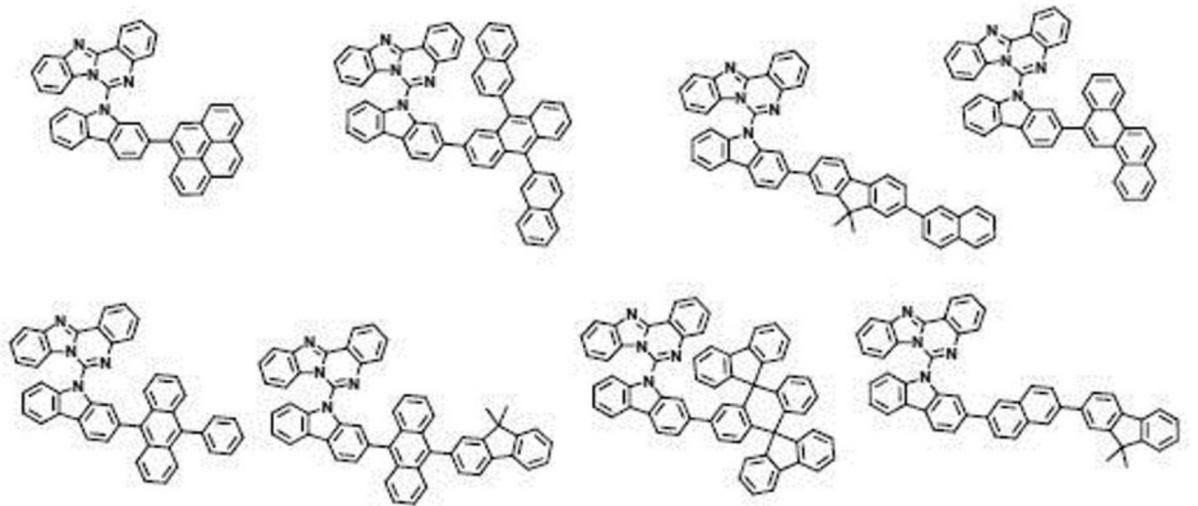
【化 8 3】



10

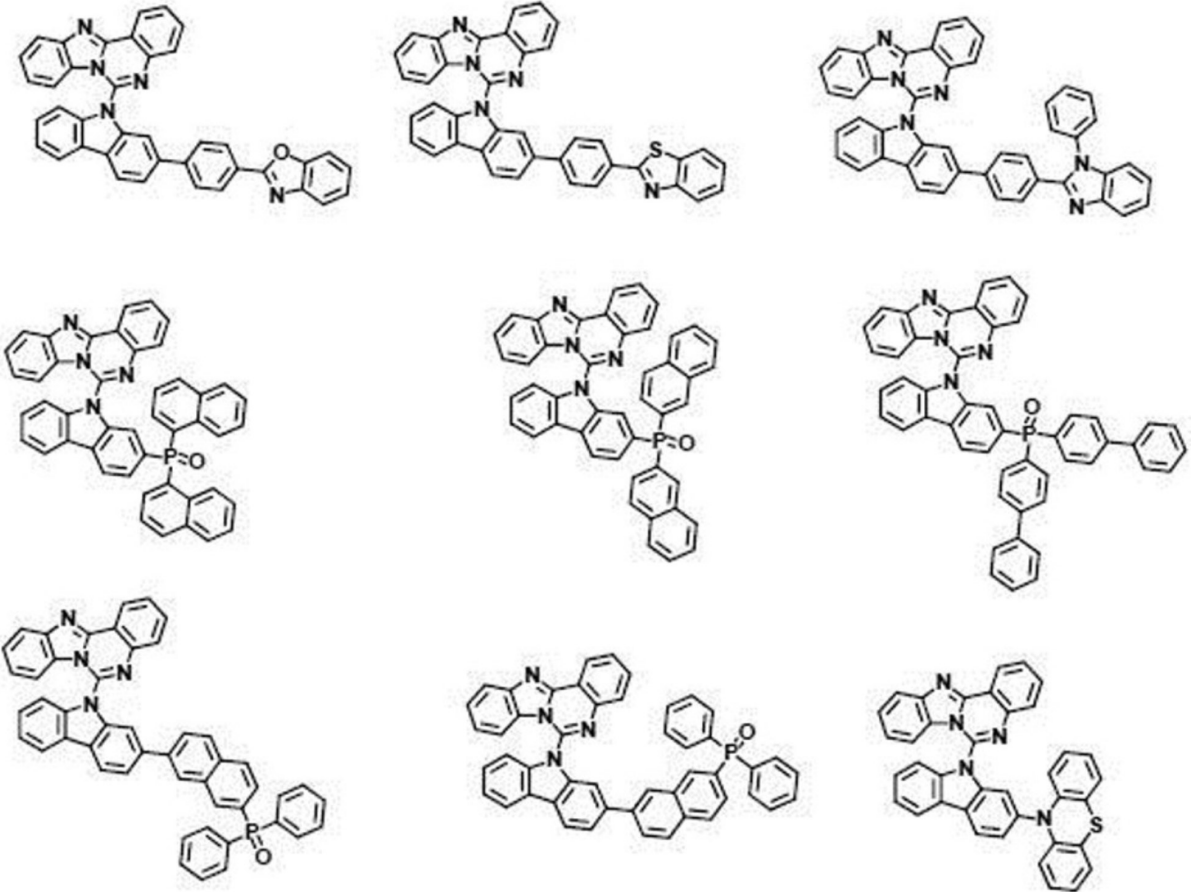
20

【化 8 4】

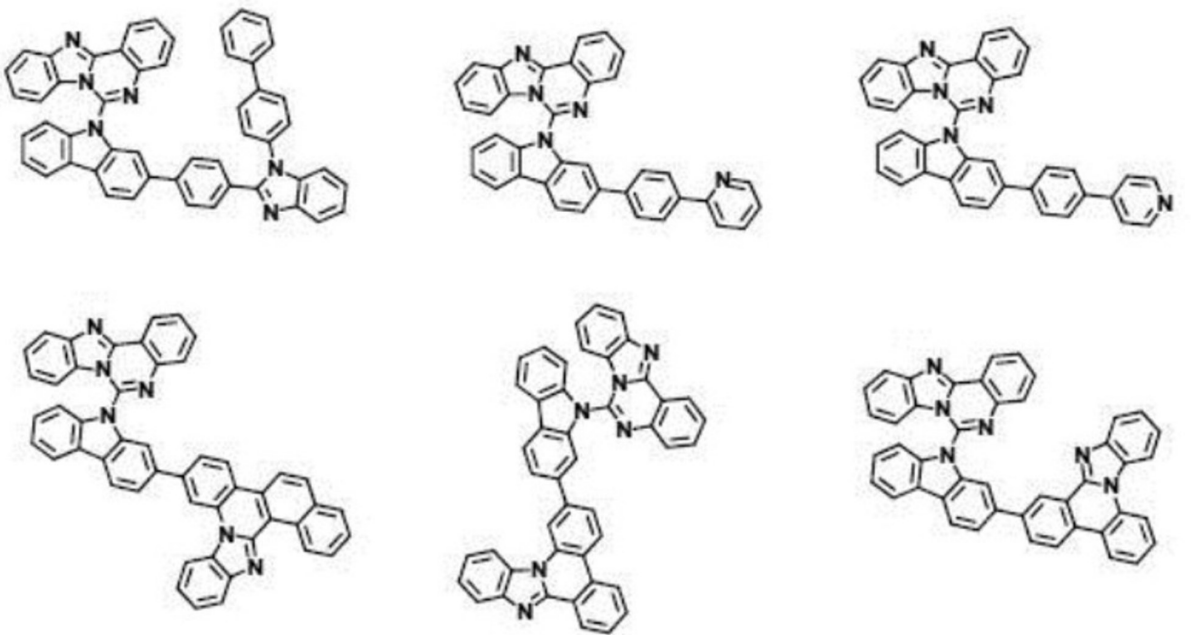


30

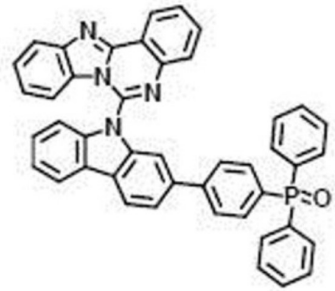
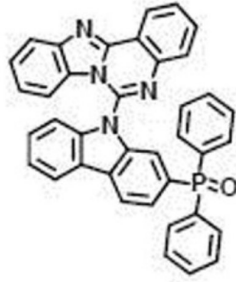
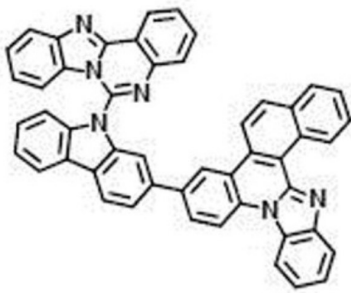
【化 8 5】



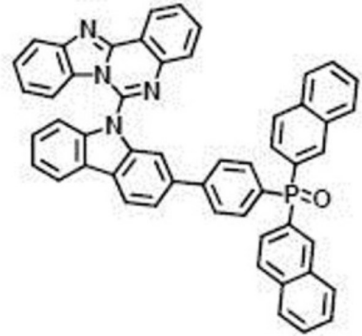
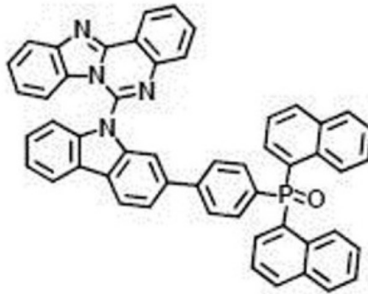
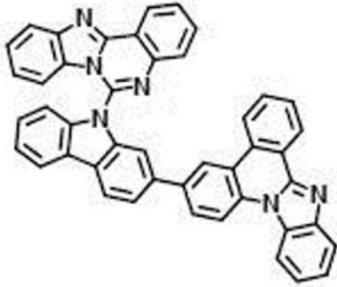
【化 8 6】



【化 8 7】

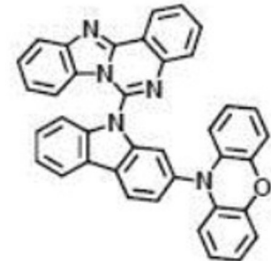
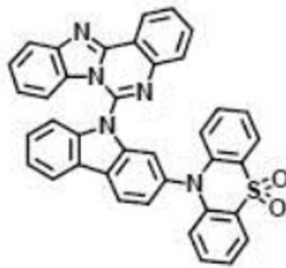
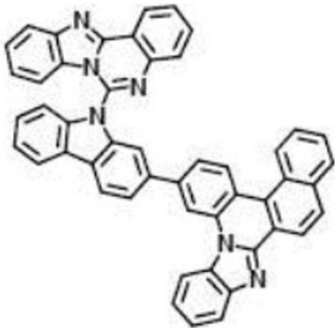


10

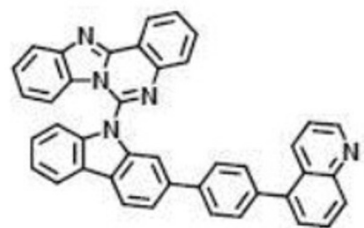
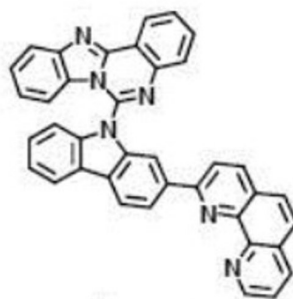
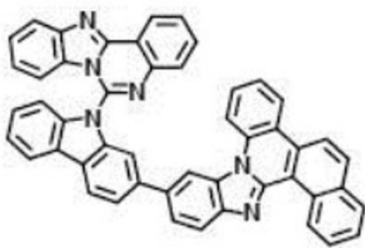


20

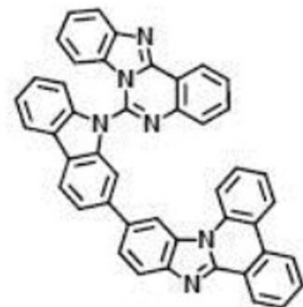
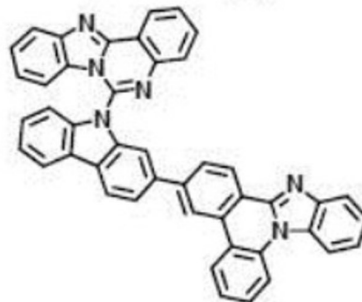
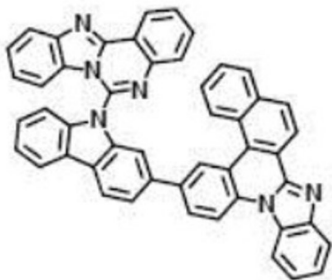
【化 8 8】



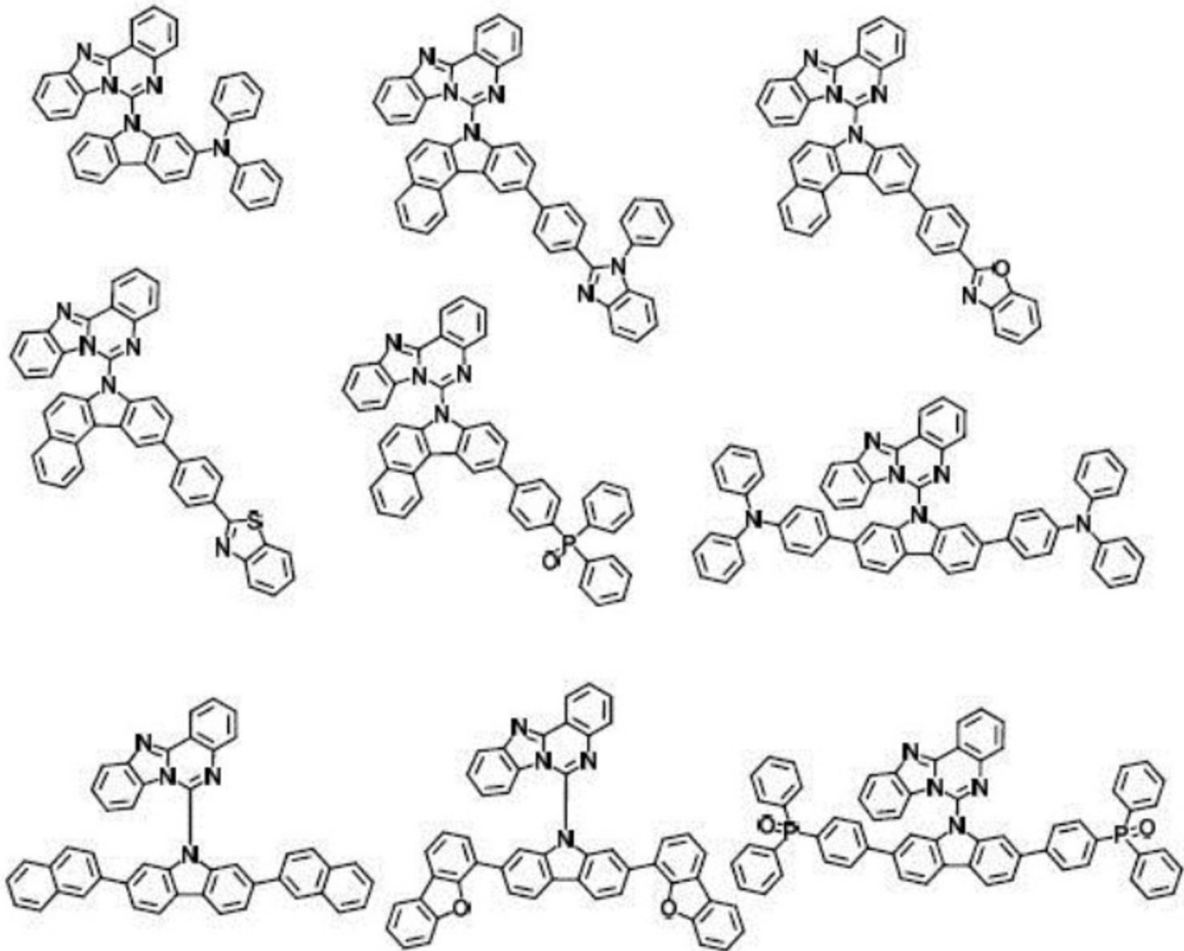
30



40



## 【化 8 9】



10

20

## 【請求項 1 1】

第 1 電極と、前記第 1 電極に対向して備えられた第 2 電極と、前記第 1 電極と前記第 2 電極との間に備えられた 1 層以上の有機物層とを含む有機発光素子であって、前記有機物層のうちの 1 層以上は、請求項 1 ~ 1 0 のいずれか 1 項に記載の化合物を含むものである有機電子素子。

30

## 【請求項 1 2】

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、前記化合物を含むものである、請求項 1 1 に記載の有機電子素子。

## 【請求項 1 3】

前記有機物層は、発光層を含み、

前記発光層は、前記化合物を含むものである、請求項 1 1 に記載の有機電子素子。

## 【請求項 1 4】

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、前記化合物を含むものである、請求項 1 1 に記載の有機電子素子。

40

## 【請求項 1 5】

前記有機電子素子は、正孔注入層、正孔輸送層、発光層、電子輸送層、電子注入層、電子阻止層、および正孔阻止層からなる群より選択される 2 層以上を含むものである、請求項 1 1 に記載の有機電子素子。

## 【請求項 1 6】

前記有機電子素子は、有機発光素子、有機燐光素子、有機太陽電池、有機感光体 (OPC)、および有機トランジスタからなる群より選択されるものである、請求項 1 1 に記載

50

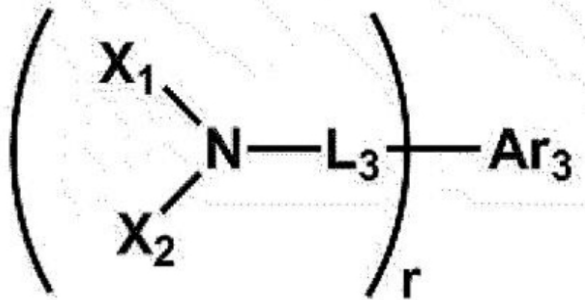
の有機電子素子。

【請求項 17】

前記有機物層は、下記化学式 4 の化合物を含む発光層を含むものである、請求項 11 に記載の有機電子素子。

[化学式 4]

【化 90】



10

前記化学式 4 において、

$Ar_3$  は、ベンゾフルオレン骨格、フルオランテン骨格、ピレン骨格、またはクリセン骨格であり、

$L_3$  は、単一結合、 $C_6 \sim C_{30}$  のアリーレン基、または  $C_5 \sim C_{30}$  の 2 価のヘテロ環基であり、

20

$X_1$  および  $X_2$  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  $C_6 \sim C_{30}$  のアリール基、置換もしくは非置換の  $C_5 \sim C_{30}$  のヘテロ環基、置換もしくは非置換の  $C_1 \sim C_{30}$  のアルキル基、および置換もしくは非置換の  $C_7 \sim C_{30}$  のアラルキル基からなる群より選択され、 $X_1$  および  $X_2$  は、互いに結合して飽和または不飽和環を形成してもよく、

$r$  は、1 以上の整数であり、

前記  $r$  が 2 以上の場合、 $X_1$  は、互いに同一または異なり、 $X_2$  は、互いに同一または異なる。

【請求項 18】

前記  $Ar_3$  は、ピレン骨格であり、 $L_3$  は、単一結合であり、 $X_1$  および  $X_2$  は、互いに同一または異なり、それぞれ独立に、ゲルマニウム基で置換もしくは非置換のアリール基であり、 $r$  が 2 である、請求項 17 に記載の有機電子素子。

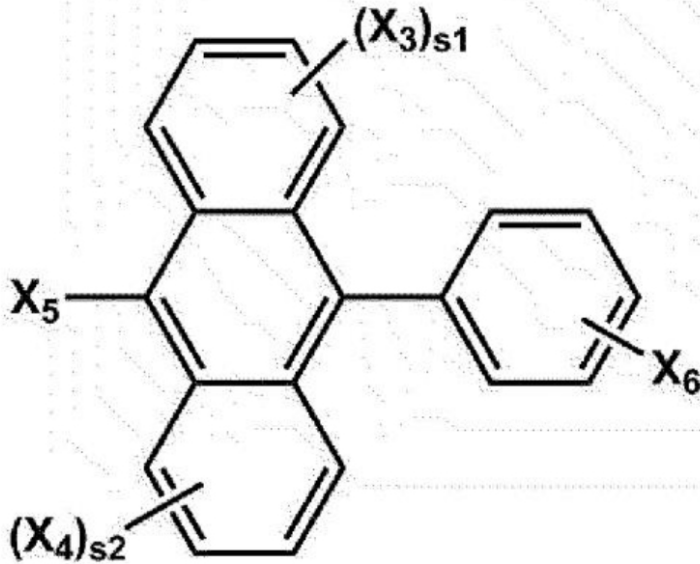
30

【請求項 19】

前記有機物層は、下記化学式 5 の化合物を含む発光層を含むものである、請求項 11 に記載の有機電子素子。

[化学式 5]

【化 9 1】



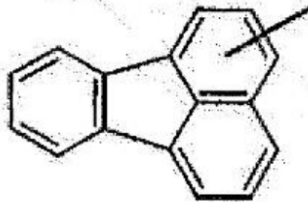
10

前記化学式 5 において、

$X_5$  は、置換もしくは非置換の 1 - ナフチル基、置換もしくは非置換の 2 - ナフチル基、置換もしくは非置換の 1 - アントリル基、置換もしくは非置換の 2 - アントリル基、置換もしくは非置換の 1 - フェナントリル基、置換もしくは非置換の 2 - フェナントリル基、置換もしくは非置換の 3 - フェナントリル基、置換もしくは非置換の 4 - フェナントリル基、置換もしくは非置換の 9 - フェナントリル基、置換もしくは非置換の 1 - ナфтаセニル基、置換もしくは非置換の 2 - ナфтаセニル基、置換もしくは非置換の 9 - ナфтаセニル基、置換もしくは非置換の 1 - ピレニル基、置換もしくは非置換の 2 - ピレニル基、置換もしくは非置換の 4 - ピレニル基、置換もしくは非置換の 3 - メチル - 2 - ナフチル基、置換もしくは非置換の 4 - メチル - 1 - ナフチル基、または下記構造式

20

【化 9 2】



30

であり、

$X_6$  は、フェニル基、1 - ナフチル基、2 - ナフチル基、1 - アントリル基、2 - アントリル基、9 - アントリル基、1 - フェナントリル基、2 - フェナントリル基、3 - フェナントリル基、4 - フェナントリル基、9 - フェナントリル基、1 - ナфтаセニル基、2 - ナфтаセニル基、9 - ナфтаセニル基、1 - ピレニル基、2 - ピレニル基、4 - ピレニル基、2 - ビフェニリル基、3 - ビフェニリル基、4 - ビフェニリル基、p - ターフェニル - 4 - イル基、p - ターフェニル - 3 - イル基、p - ターフェニル - 2 - イル基、m - ターフェニル - 4 - イル基、m - ターフェニル - 3 - イル基、m - ターフェニル - 2 - イル基、o - トリル基、m - トリル基、p - トリル基、p - t - ブチルフェニル基、p - (2 - フェニルプロピル) フェニル基、3 - メチル - 2 - ナフチル基、4 - メチル - 1 - ナフチル基、4 - メチル - 1 - アントリル基、4' - メチルビフェニリル基、4' - t - ブチル - p - ターフェニル - 4 - イル基、および 3 - フルオランテニル基からなる群より選択される基であり、

40

$X_3$  および  $X_4$  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 6 ~ 50 のアリール基、置換もしくは非置換の核原子数 5 ~ 50 のヘテロアリール基、置換もしくは非置換の炭素数 1 ~ 50 のアルキル基、置換もしくは非置換の炭素数 1

50

～ 50 のアルコキシ基、置換もしくは非置換の炭素数 6 ～ 50 のアラルキル基、置換もしくは非置換の核原子数 5 ～ 50 のアリールオキシ基、置換もしくは非置換の核原子数 5 ～ 50 のアリールチオ基、置換もしくは非置換の炭素数 1 ～ 50 のアルコキシカルボニル基、カルボキシル基、ハロゲン原子、シアノ基、ニトロ基、またはヒドロキシル基であり、 $s_1$  および  $s_2$  はそれぞれ、0 ～ 4 の整数である。

【請求項 20】

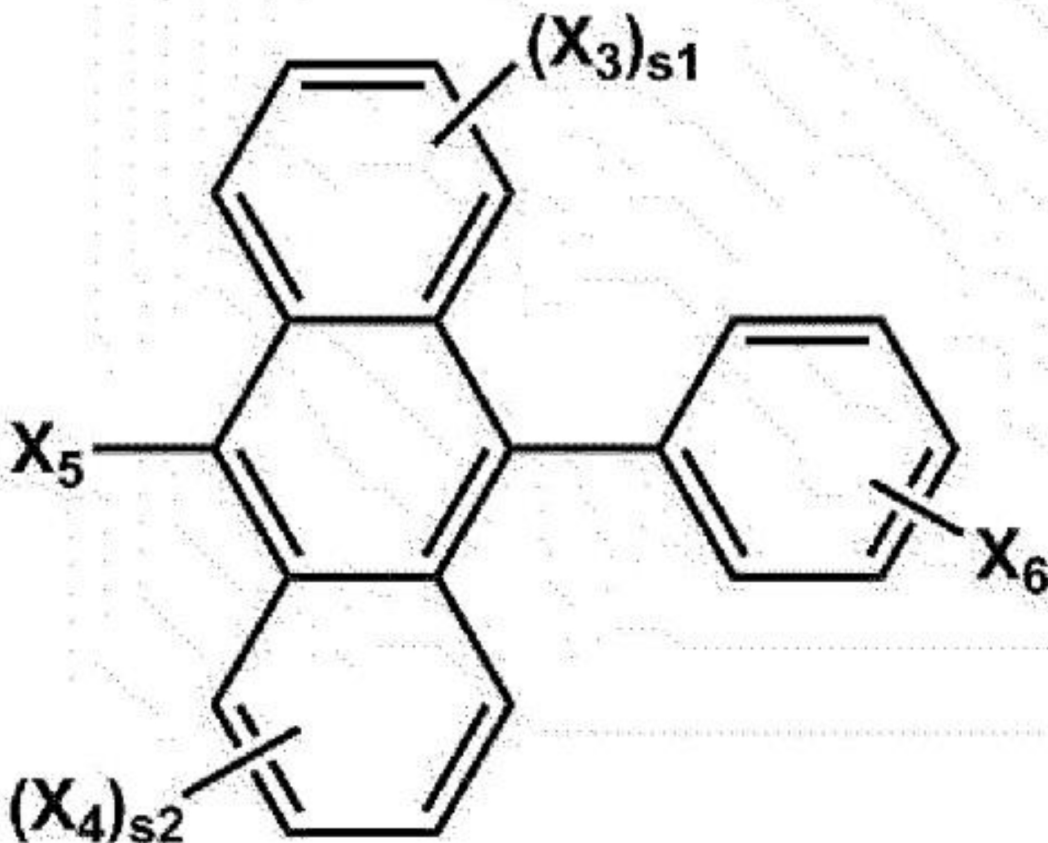
前記  $X_5$  および  $X_6$  は、互いに同一または異なり、それぞれ独立に、1 - ナフチル基または 2 - ナフチル基であり、 $s_1$  および  $s_2$  は、0 である、請求項 19 に記載の有機電子素子。

【請求項 21】

前記発光層は、下記化学式 5 の化合物をさらに含むものである、請求項 17 に記載の有機電子素子。

[化学式 5]

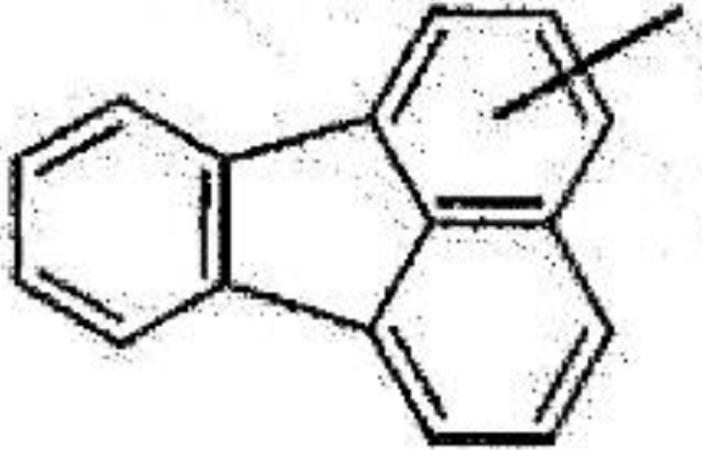
【化 9 3】



前記化学式 5 において、

$X_5$  は、置換もしくは非置換の 1 - ナフチル基、置換もしくは非置換の 2 - ナフチル基、置換もしくは非置換の 1 - アントリル基、置換もしくは非置換の 2 - アントリル基、置換もしくは非置換の 1 - フェナントリル基、置換もしくは非置換の 2 - フェナントリル基、置換もしくは非置換の 3 - フェナントリル基、置換もしくは非置換の 4 - フェナントリル基、置換もしくは非置換の 9 - フェナントリル基、置換もしくは非置換の 1 - ナфтаセニル基、置換もしくは非置換の 2 - ナфтаセニル基、置換もしくは非置換の 9 - ナфтаセニル基、置換もしくは非置換の 1 - ピレニル基、置換もしくは非置換の 2 - ピレニル基、置換もしくは非置換の 4 - ピレニル基、置換もしくは非置換の 3 - メチル - 2 - ナフチル基、置換もしくは非置換の 4 - メチル - 1 - ナフチル基、または下記化学式

## 【化 9 4】



10

であり、

$X_6$  は、フェニル基、1 - ナフチル基、2 - ナフチル基、1 - アントリル基、2 - アントリル基、9 - アントリル基、1 - フェナントリル基、2 - フェナントリル基、3 - フェナントリル基、4 - フェナントリル基、9 - フェナントリル基、1 - ナфтаセニル基、2 - ナфтаセニル基、9 - ナфтаセニル基、1 - ビレニル基、2 - ビレニル基、4 - ビレニル基、2 - ビフェニリル基、3 - ビフェニリル基、4 - ビフェニリル基、p - ターフェニル - 4 - イル基、p - ターフェニル - 3 - イル基、p - ターフェニル - 2 - イル基、m - ターフェニル - 4 - イル基、m - ターフェニル - 3 - イル基、m - ターフェニル - 2 - イル基、o - トリル基、m - トリル基、p - トリル基、p - t - ブチルフェニル基、p - (2 - フェニルプロピル) フェニル基、3 - メチル - 2 - ナフチル基、4 - メチル - 1 - ナフチル基、4 - メチル - 1 - アントリル基、4' - メチルビフェニリル基、4' - t - ブチル - p - ターフェニル - 4 - イル基、および 3 - フルオランテニル基からなる群より選択される基であり、

20

$X_3$  および  $X_4$  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 6 ~ 50 のアリール基、置換もしくは非置換の核原子数 5 ~ 50 のヘテロアリール基、置換もしくは非置換の炭素数 1 ~ 50 のアルキル基、置換もしくは非置換の炭素数 1 ~ 50 のアルコキシ基、置換もしくは非置換の炭素数 6 ~ 50 のアラルキル基、置換もしくは非置換の核原子数 5 ~ 50 のアリールオキシ基、置換もしくは非置換の核原子数 5 ~ 50 のアリールチオ基、置換もしくは非置換の炭素数 1 ~ 50 のアルコキシカルボニル基、カルボキシル基、ハロゲン原子、シアノ基、ニトロ基、またはヒドロキシ基であり、 $s_1$  および  $s_2$  はそれぞれ、0 ~ 4 の整数である。

30

## 【請求項 2 2】

前記化学式 4 の  $A r_3$  は、ピレン骨格であり、 $L_3$  は、単一結合であり、 $X_1$  および  $X_2$  は、互いに同一または異なり、それぞれ独立に、ゲルマニウム基で置換もしくは非置換のアリール基であり、 $r$  が 2 であり、

前記化学式 5 の  $X_5$  および  $X_6$  は、互いに同一または異なり、それぞれ独立に、1 - ナフチル基または 2 - ナフチル基であり、 $s_1$  および  $s_2$  は、0 である、請求項 2 1 に記載の有機電子素子。

40

## 【発明の詳細な説明】

## 【技術分野】

## 【0001】

本明細書は、2015年6月5日付で韓国特許庁に提出された韓国特許出願第10-2015-0080126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】

本出願は、化合物およびこれを含む有機電子素子に関する。

50

## 【背景技術】

## 【0003】

有機電子素子の代表例としては、有機発光素子がある。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変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、そ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から構成された多層の構造からなる場合が多く、例えば、正孔注入層、正孔輸送層、発光層、電子輸送層、電子注入層などからなる。このような有機発光素子の構造において、2つの電極の間に電圧をかけると、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接した時、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。

10

## 【0004】

有機発光素子で使用される物質は、ほとんどが純粋有機物質または有機物質と金属とが錯体をなす錯化合物である。前記有機発光素子に使用される物質は、用途に応じて、正孔注入物質、正孔輸送物質、発光物質、電子輸送物質、電子注入物質などに区分される。ここで、正孔注入物質や正孔輸送物質としては、p-タイプの性質を有する有機物質、すなわち、酸化しやすく、酸化時に電気化学的に安定した状態を有する有機物が主に使用されている。一方、電子注入物質や電子輸送物質としては、n-タイプの性質を有する有機物質、すなわち、還元しやすく、還元時に電気化学的に安定した状態を有する有機物が主に使用されている。発光層物質としては、p-タイプの性質とn-タイプの性質を同時に有する物質、すなわち、酸化および還元状態ですべて安定した形態を有する物質が好ましく、エキシトンが形成された時、これを光に変換する発光効率が高い物質が好ましい。

20

## 【0005】

前記で言及したものの以外にも、有機発光素子で使用される物質は、次のような性質を追加的に有することが好ましい。

## 【0006】

第一に、有機発光素子で使用される物質は、熱的安定性に優れていることが好ましい。有機発光素子内では、電荷の移動によるジュール熱 (joule heating) が発生するからである。現在、有機発光素子の正孔輸送層物質として主に使用されるNPBは、ガラス転移温度が100以下の値を有するため、高い電流を必要とする有機発光素子では使用しにくい問題がある。

30

## 【0007】

第二に、低電圧で駆動可能な高効率の有機発光素子を得るためには、有機発光素子内に注入された正孔または電子が円滑に発光層に伝達されると同時に、注入された正孔と電子が発光層の外部に抜け出ないようにしなければならない。そのために、有機発光素子に使用される物質は、適切なバンドギャップ (band gap) とHOMOまたはLUMOエネルギー準位を有しなければならない。現在、溶液塗布法によって製造される有機発光素子で正孔輸送物質として使用されるPEDOT:PSSの場合、発光層物質として使用される有機物のLUMOエネルギー準位に比べてLUMOエネルギー準位が低いため、高効率および長寿命の有機発光素子の製造に困難がある。

40

## 【0008】

その他にも、有機発光素子で使用される物質は、化学的安定性、電荷移動度、電極や隣接した層との界面特性などに優れていなければならない。すなわち、有機発光素子で使用される物質は、水分や酸素による物質の変形が少なくなければならぬ。また、適切な正孔または電子移動度を有することにより、有機発光素子の発光層で正孔と電子の密度がバランスを取るようにしてエキシトンの形成を極大化しなければならない。そして、素子の安定性のために、金属または金属酸化物を含む電極との界面を良くしなければならない。

## 【0009】

当技術分野では、前記のような要件を備えた有機物の開発が要求されている。

## 【発明の概要】

50

【発明が解決しようとする課題】

【0010】

本出願の化合物およびこれを含む有機電子素子を提供する。

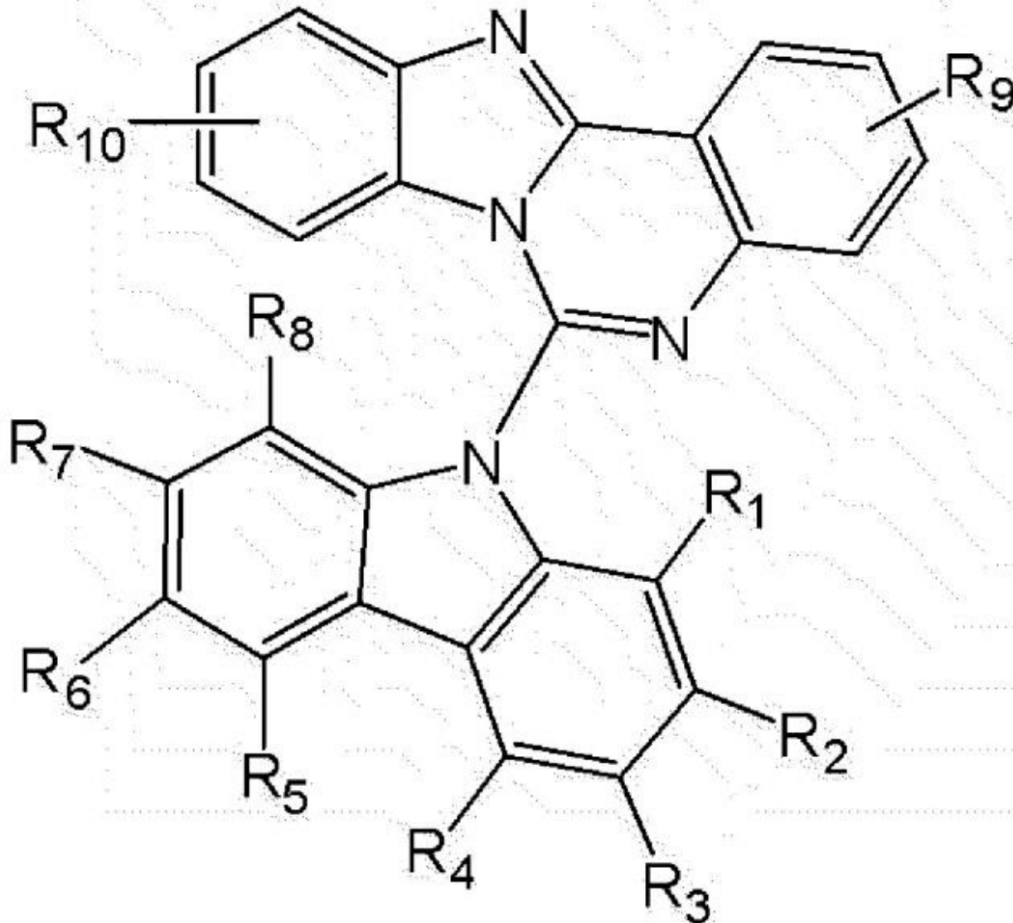
【課題を解決するための手段】

【0011】

本出願は、下記化学式1で表される化合物を提供する。

[化学式1]

【化1】



化学式1において、

$R_1 \sim R_8$  のうちの少なくとも1つは、 $-(L)_m - (Ar)_n$  であり、残りは、互いに同一または異なり、それぞれ独立に、水素；重水素；ハロゲン基；ニトロ基；シアノ基；エステル基；カルボニル基；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リール基；または置換もしくは非置換のヘテロ環基であるか、隣接した基と結合して環を形成し、

前記Lは、直接結合；置換もしくは非置換のアリーレン基；または置換もしくは非置換の2価のヘテロ環基であり、

mは、1～3の整数であり、

mが2以上の整数の場合、複数のLは、互いに同一または異なり、

Arは、水素；重水素；ハロゲン基；ニトロ基；シアノ基；エステル基；カルボニル基；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；置換された単環のアリール基；置換もしくは非置換の多環のアリール基；置換もしくは非置換のヘテロ環基；置換もしくは非置換のアミン基；置換もしくは非置換のシリル基；または置換もしくは非置換のホスホリル基であり、

10

20

30

40

50

n は、1 または 2 であり、n が 2 の場合、複数の Ar は、互いに同一または異なり、R<sub>9</sub> および R<sub>10</sub> は、互いに同一または異なり、それぞれ独立に、水素；重水素；ハロゲン基；ニトロ基；シアノ基；エステル基；カルボニル基；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リール基；または置換もしくは非置換のヘテロ環基である。

【0012】

また、本出願は、第1電極と、前記第1電極に対向して備えられた第2電極と、前記第1電極と前記第2電極との間に備えられた1層以上の有機物層とを含む有機電子素子であって、前記有機物層のうちの1層以上は、前述の化合物を含むものである有機電子素子を提供する。

10

【発明の効果】

【0013】

本出願の一実施態様に係る化合物は、有機発光素子をはじめとする有機電子素子に使用され、有機電子素子の駆動電圧を低くし、光効率を向上させ、化合物の熱的安定性によって素子の寿命特性を向上させることができる。

【図面の簡単な説明】

【0014】

【図1】基板1、陽極2、発光層3、陰極4が順次に積層された有機発光素子の例を示すものである。

20

【図2】基板1、陽極2、正孔注入層5、正孔輸送層6、発光層3、電子輸送層7、および陰極4が順次に積層された有機発光素子の例を示すものである。

【発明を実施するための形態】

【0015】

以下、本明細書についてより詳細に説明する。

【0016】

本明細書は、前記化学式1で表される化合物を提供する。

【0017】

本出願の一実施態様によれば、前記化学式1の化合物は、イミダゾキナゾリン基とカルバゾール基が直接連結されたコア構造を有することにより、コンジュゲーション (conjugation) を制限する役割を果たす。化合物のコンジュゲーション長とエネルギーバンドギャップは密接な関係がある。具体的には、化合物のコンジュゲーション長が長いほどエネルギーバンドギャップが小さくなる。前述のように、前記化学式1の化合物のコアは制限されたコンジュゲーションを含んでいるので、エネルギーバンドギャップが大きい性質を有する。通常、エネルギーバンドギャップが大きいコア構造に置換基を導入してエネルギーバンドギャップを調節することは容易であるが、コア構造のエネルギーバンドギャップが小さい場合には、置換基を導入してエネルギーバンドギャップを大きく調節することが困難である。この観点から、前記化学式1の化合物はバンドギャップが大きい構造を有するので、バンドギャップの調節が容易であり、例えば、化学式1のR<sub>1</sub>~R<sub>8</sub>位置に多様な置換基を導入することにより多様なエネルギーバンドギャップを有する化合物を合成することができる。したがって、前記化学式1のR<sub>1</sub>~R<sub>8</sub>および多様な置換基を導入することにより、化合物のHOMOおよびLUMOエネルギー準位も調節可能である。

30

40

【0018】

例えば、有機発光素子の製造時に使用される正孔注入層物質、正孔輸送層物質、発光層物質、電子輸送層物質に主に使用される置換基を前記コア構造に導入することにより、各有機物層で要求する条件を満たす物質を合成することができる。例えば、前記化学式1がコア構造にアリーールアミン構造を含んでいれば、有機発光素子で正孔注入および/または正孔輸送物質としての適切なエネルギー準位を有することができる。したがって、本出願では、前記化学式1の化合物中の置換基によって適切なエネルギー準位を有する化合物を

50

選択して有機発光素子に使用することにより、駆動電圧が低くて光効率が高い素子を実現することができる。

【0019】

また、前記コア構造に多様な置換基を対称または非対称に導入することにより、エネルギーバンドギャップを微細に調節可能にし、一方で、有機物の間における界面での特性を向上させ、物質の用途を多様にできる。

【0020】

さらに、前記化学式1の化合物は、安定した酸化還元特性を示す。酸化還元に対する安定性は、CV(cyclic voltammetry)方法を利用して確認することができる。具体例として、前記化学式1の化合物は、複数回の繰り返し酸化電圧を加えた時、同一の電圧で酸化が起こり、同じ電流量を示すことが明らかになり、これは前記化合物の酸化に対する安定性が優れていることを示す。

10

【0021】

一方、前記化学式1の化合物は、ガラス転移温度(T<sub>g</sub>)が高くて熱的安定性に優れている。例えば、化学式1の化合物はガラス転移温度が131度であって、従来一般的に使用されていたNPB(T<sub>g</sub>:96度)に比べて著しく高いことが分かる。このような熱的安定性の増加は、素子に駆動安定性を提供する重要な要因となる。

【0022】

また、前記化学式1の化合物は、素子の製造工程中に用いられる溶媒、例えば、キシレン、ジクロロエタン、あるいはNMPなどといった極性溶媒などに対する溶解度が非常に優れ、溶液を用いた方法による薄膜形成に容易である特性を有する。それによって、製造時、真空蒸着法だけでなく、溶液塗布法を用いることができる。ここで、溶液塗布法とは、スピンコーティング、ディップコーティング、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。通常、溶液塗布法によって形成された薄膜や固体状態での発光波長は、分子間の相互作用によって、溶液状態の発光波長に比べて長波長に移動することをよく見受けられるが、前記化学式1の化合物のような構造を有する化合物では、前記のような波長の移動がほとんど現れないという利点がある。

20

【0023】

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。

30

【0024】

前記「置換」という用語は、化合物の炭素原子に結合した水素原子が他の置換基に置き換わることを意味し、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せず、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。

【0025】

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；シアノ基；ニトロ基；ヒドロキシ基；ゲルマニウム基；アルキル基；シクロアルキル基；アルケニル基；アミン基；シリル基；ホスホリル基；アリール基；および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2以上の置換基が連結された置換基で置換されているか、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解釈されてもよい。

40

【0026】

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

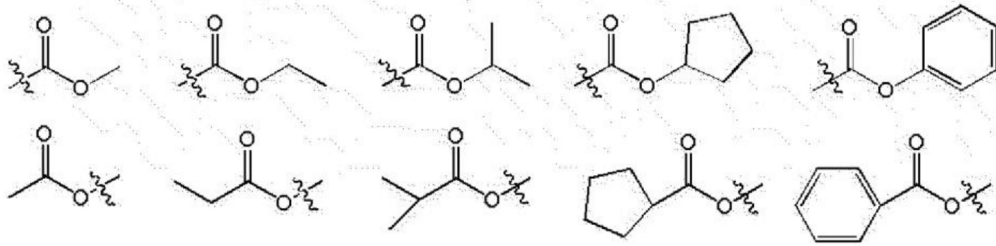
【0027】

本明細書において、エステル基の炭素数は特に限定されないが、炭素数1~50である

50

ことが好ましい。具体的には、下記構造式の化合物になってもよいが、これに限定されるものではない。

【化 2】

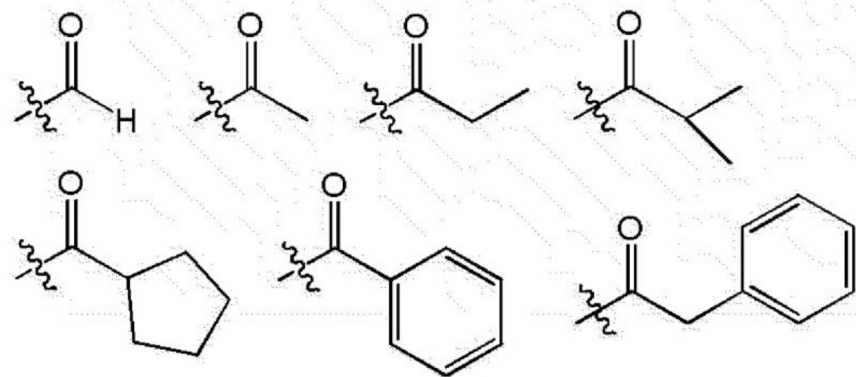


10

【0028】

本明細書において、カルボニル基の炭素数は特に限定されないが、炭素数 1 ~ 50 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もよいが、これに限定されるものではない。

【化 3】



20

【0029】

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 ~ 50 であることが好ましい。具体例としては、メチル基、エチル基、プロピル基、*n*-プロピル基、イソプロピル基、ブチル基、*n*-ブチル基、イソブチル基、*tert*-ブチル基、*sec*-ブチル基、1-メチル-ブチル基、1-エチル-ブチル基、ペンチル基、*n*-ペンチル基、イソペンチル基、ネオペンチル基、*tert*-ペンチル基、ヘキシル基、*n*-ヘキシル基、1-メチルペンチル基、2-メチルペンチル基、4-メチル-2-ペンチル基、3,3-ジメチルブチル基、2-エチルブチル基、ヘプチル基、*n*-ヘプチル基、1-メチルヘキシル基、シクロペンチルメチル基、シクロヘキシルメチル基、オクチル基、*n*-オクチル基、*tert*-オクチル基、1-メチルヘプチル基、2-エチルヘキシル基、2-プロピルペンチル基、*n*-ノニル基、2,2-ジメチルヘプチル基、1-エチル-プロピル基、1,1-ジメチル-プロピル基、イソヘキシル基、2-メチルペンチル基、4-メチルヘキシル基、5-メチルヘキシル基などがあるが、これらに限定されない。

30

40

【0030】

本明細書において、シクロアルキル基は特に限定されないが、炭素数 3 ~ 60 であることが好ましく、具体的には、シクロプロピル基、シクロブチル基、シクロペンチル基、3-メチルシクロペンチル基、2,3-ジメチルシクロペンチル基、シクロヘキシル基、3-メチルシクロヘキシル基、4-メチルシクロヘキシル基、2,3-ジメチルシクロヘキシル基、3,4,5-トリメチルシクロヘキシル基、4-*tert*-ブチルシクロヘキシル基、シクロヘプチル基、シクロオクチル基などがあるが、これらに限定されない。

【0031】

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 ~ 20 であることが好ましい。具

50

体的には、メトキシ基、エトキシ基、*n*-プロポキシ基、イソプロポキシ基、*i*-プロピルオキシ基、*n*-ブトキシ基、イソブトキシ基、*tert*-ブトキシ基、*sec*-ブトキシ基、*n*-ペンチルオキシ基、ネオペンチルオキシ基、イソペンチルオキシ基、*n*-ヘキシルオキシ基、3,3-ジメチルブチルオキシ基、2-エチルブチルオキシ基、*n*-オクチルオキシ基、*n*-ノニルオキシ基、*n*-デシルオキシ基、ベンジルオキシ基、*p*-メチルベンジルオキシ基などになってもよいが、これらに限定されるものではない。

【0032】

本明細書において、前記アルケニル基は、直鎖もしくは分枝鎖であってもよく、炭素数は特に限定されないが、2~40であることが好ましい。具体例としては、ビニル基、1-プロペニル基、イソプロペニル基、1-ブテニル基、2-ブテニル基、3-ブテニル基、1-ペンテニル基、2-ペンテニル基、3-ペンテニル基、3-メチル-1-ブテニル基、1,3-ブタジエニル基、アリル基、1-フェニルビニル-1-イル基、2-フェニルビニル-1-イル基、2,2-ジフェニルビニル-1-イル基、2-フェニル-2-(ナフチル-1-イル)ビニル-1-イル基、2,2-ビス(ジフェニル-1-イル)ビニル-1-イル基、スチルベニル基、スチレニル基などがあるが、これらに限定されない。

【0033】

本明細書において、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もよいが、これらに限定されるものではない。

【0034】

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、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もよいが、これらに限定されるものではない。

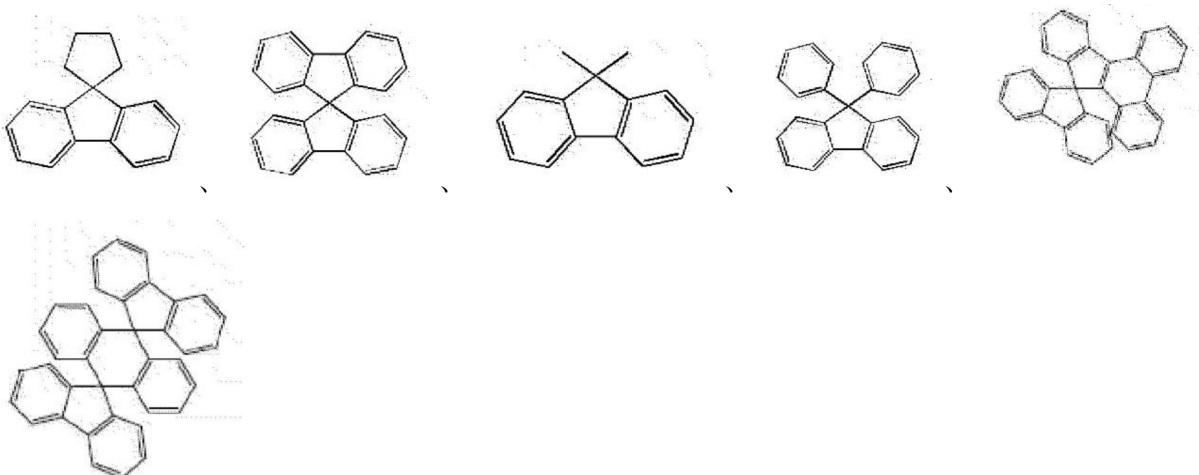
【0035】

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。

【0036】

前記フルオレニル基が置換される場合、

【化4】



などになってもよいが、これらに限定されるものではない。

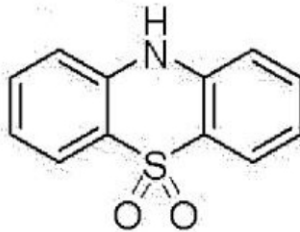
【0037】

本明細書において、ヘテロ環基は、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、S、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。ヘテロ環基の炭素数は特に限定されないが、炭素数2~60であることが好ましい。ヘテロ環基の例としては、チオフェニル基、フラニル基、

ピロール基、イミダゾリル基、チアゾリル基、オキサゾリル基、オキサジアゾリル基、トリアゾリル基、ピリジル基、ピピリジル基、ピリミジル基、トリアジニル基、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、キナゾリニル基、キノキサリニル基、フタラジニル基、ピリドピリミジニル基、ピリドピラジニル基、ピラジノピラジニル基、イソキノリニル基、インドール基、カルバゾリル基、ベンズオキサゾリル基、ベンズイミダゾリル基、ベンゾチアゾリル基、ベンゾカルバゾリル基、ジベンゾカルバゾリル基、ベンゾチオフェニル基、ジベンゾチオフェニル基、ベンゾフラニル基、フェナントロリニル基 (phenanthrolinyl group)、チアゾリル基、イソオキサゾリル基、オキサジアゾリル基、チアジアゾリル基、ベンゾチアゾリル基、フェノチアジニル基、フェノオキサジニル基、ジベンゾフラン基、およびこれらの縮合構造などがあるが、これらにのみ限定されるものではない。その他にも、ヘテロ環基の例として、スルホニル基を含むヘテロ環構造、例えば、

10

【化5】



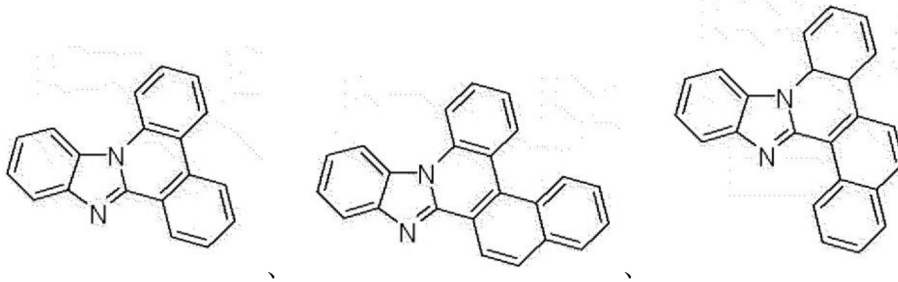
20

などがある。

【0038】

本明細書において、前記縮合構造は、当該置換基に芳香族炭化水素環が縮合された構造であってもよい。例えば、ベンズイミダゾールの縮合環として、

【化6】



30

などになってもよいが、これらに限定されるものではない。

【0039】

本明細書において、「隣接した」基は、当該置換基が置換された原子と直接連結された原子に置換された置換基、当該置換基と立体構造的に最も近く位置した置換基、または当該置換基が置換された原子に置換された他の置換基を意味することができる。例えば、ベンゼン環におけるオルト (ortho) 位に置換された2個の置換基、および脂肪族環における同一炭素に置換された2個の置換基は、互いに「隣接した」基と解釈されてもよい。

40

【0040】

本明細書において、隣接した基が互いに結合して環を形成することの意味は、前述のように、隣接した基が互いに結合して、5員～8員の炭化水素環または5員～8員のヘテロ環を形成することを意味し、単環もしくは多環であってもよいし、脂肪族、芳香族、またはこれらの縮合された形態であってもよいし、これを限定しない。

【0041】

本明細書において、炭化水素環またはヘテロ環は、1価の基であることを除き、前述のシクロアルキル基、アリール基、またはヘテロ環基の例示の中から選択されてもよいし、

50

単環もしくは多環、脂肪族または芳香族、またはこれらの縮合された形態であってもよいが、これらにのみ限定されるものではない。

【0042】

本明細書において、アミン基は、アミノ基(-NH<sub>2</sub>)の少なくとも1つの水素原子が他の置換体で置換された1価のアミンを意味する。例えば、前記アミン基は、-NR<sub>100</sub>R<sub>101</sub>で表され、R<sub>100</sub>およびR<sub>101</sub>は、互いに同一または異なり、それぞれ独立に、水素；重水素；ハロゲン基；アルキル基；アルケニル基；アルコキシ基；シクロアルキル基；アリール基；およびヘテロ環基のうちの少なくとも1つからなる置換基であってもよい(ただし、R<sub>100</sub>およびR<sub>101</sub>のうちの少なくとも1つは、水素でない)。例えば、前記アミン基が置換体としてアルキル基およびアリール基を有する場合の具体例としては、ジフェニルアミン基、ビフェニルビフェニルアミン基、フェニルビフェニルアミン基、フェニルターフェニルアミン基、フェニルフルオレニルアミン、フェニル(ジメチルフルオレニル)アミン基、ビフェニル(ジメチルフルオレニル)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

【0043】

本明細書において、ホスホリル基は、P(=O)を含み、前記P原子がラジカルとして直接連結される置換基であり、-P(=O)R<sub>102</sub>R<sub>103</sub>で表され、R<sub>102</sub>およびR<sub>103</sub>は、互いに同一または異なり、それぞれ独立に、水素；重水素；ハロゲン基；アルキル基；アルケニル基；アルコキシ基；シクロアルキル基；アリール基；およびヘテロ環基のうちの少なくとも1つからなる置換基であってもよい。例えば、前記ホスホリル基が置換体としてアリール基を有する場合の具体例としては、ジフェニルホスホリル基、フェニルビフェニルホスホリル基、ビフェニルビフェニルホスホリル基、フェニルターフェニルホスホリル基、ピフェニルターフェニルホスホリル基などがあるが、これらにのみ限定されるものではない。

20

【0044】

本明細書において、シリル基は、Siを含み、前記Si原子がラジカルとして直接連結される置換基であり、-SiR<sub>104</sub>R<sub>105</sub>R<sub>106</sub>で表され、R<sub>104</sub>~R<sub>106</sub>は、互いに同一または異なり、それぞれ独立に、水素；重水素；ハロゲン基；アルキル基；アルケニル基；アルコキシ基；シクロアルキル基；アリール基；およびヘテロ環基のうちの少なくとも1つからなる置換基であってもよい。例えば、前記シリル基が置換体としてアルキル基を有する場合の具体例としては、トリメチルシリル基があるが、これにのみ限定されるものではない。また、前記シリル基が置換体としてアリール基を有する場合の具体例としては、トリフェニルシリル基があるが、これにのみ限定されるものではない。

30

【0045】

本明細書において、ゲルマニウム基は、-GeR<sub>a</sub>R<sub>b</sub>R<sub>c</sub>の化学式で表されてもよく、前記R<sub>a</sub>、R<sub>b</sub>およびR<sub>c</sub>はそれぞれ、水素；置換もしくは非置換のアルキル基；または置換もしくは非置換のアリール基であってもよい。前記ゲルマニウム基は、具体的には、トリメチルゲルマニウム基、トリエチルゲルマニウム基、t-ブチルジメチルゲルマニウム基などがあるが、これらに限定されない。

【0046】

本明細書において、アリーロキシ基、アリールチオ基中のアリール基は、前述のアリール基に関する説明が適用可能である。

40

【0047】

本明細書において、アラルキル基中のアルキル基は、前述のアルキル基に関する説明が適用可能である。

【0048】

本明細書において、ヘテロアリール基は、芳香族であることを除けば、前述のヘテロ環基に関する説明が適用可能である。

【0049】

本明細書において、アルコキシカルボニル基中のアルコキシ基は、前述のアルキル基に

50

関する説明が適用され、アルコキシカルボニル基中のカルボニル基は、前述のカルボニル基に関する説明が適用可能である。

【0050】

本出願の一実施態様によれば、 $R_1 \sim R_4$ のうちの隣接した1つの対は、互いに結合して環を形成する。

【0051】

本出願の一実施態様によれば、 $R_1 \sim R_4$ のうちの隣接した1つの対は、互いに結合して芳香族炭化水素環を形成する。

【0052】

本出願の一実施態様によれば、 $R_1 \sim R_4$ のうちの隣接した1つの対は、互いに結合して芳香族6員環を形成する。

10

【0053】

本出願の一実施態様によれば、 $R_5 \sim R_8$ のうちの隣接した1つの対は、互いに結合して環を形成する。

【0054】

本出願の一実施態様によれば、 $R_5 \sim R_8$ のうちの隣接した1つの対は、互いに結合して芳香族炭化水素環を形成する。

【0055】

本出願の一実施態様によれば、 $R_5 \sim R_8$ のうちの隣接した1つの対は、互いに結合して芳香族6員環を形成する。

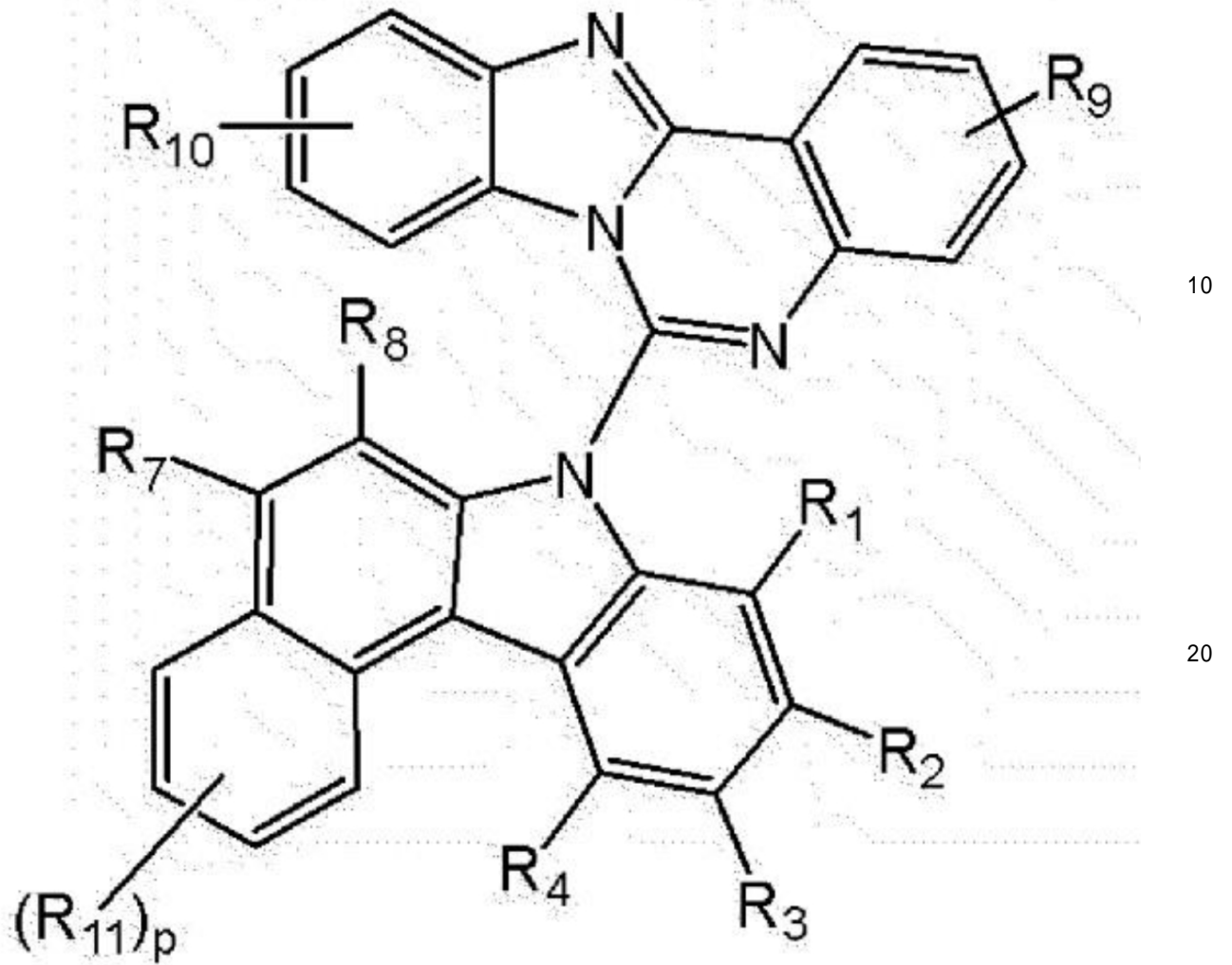
20

【0056】

本出願の一実施態様によれば、前記化学式1は、下記化学式2または3で表される。

[化学式2]

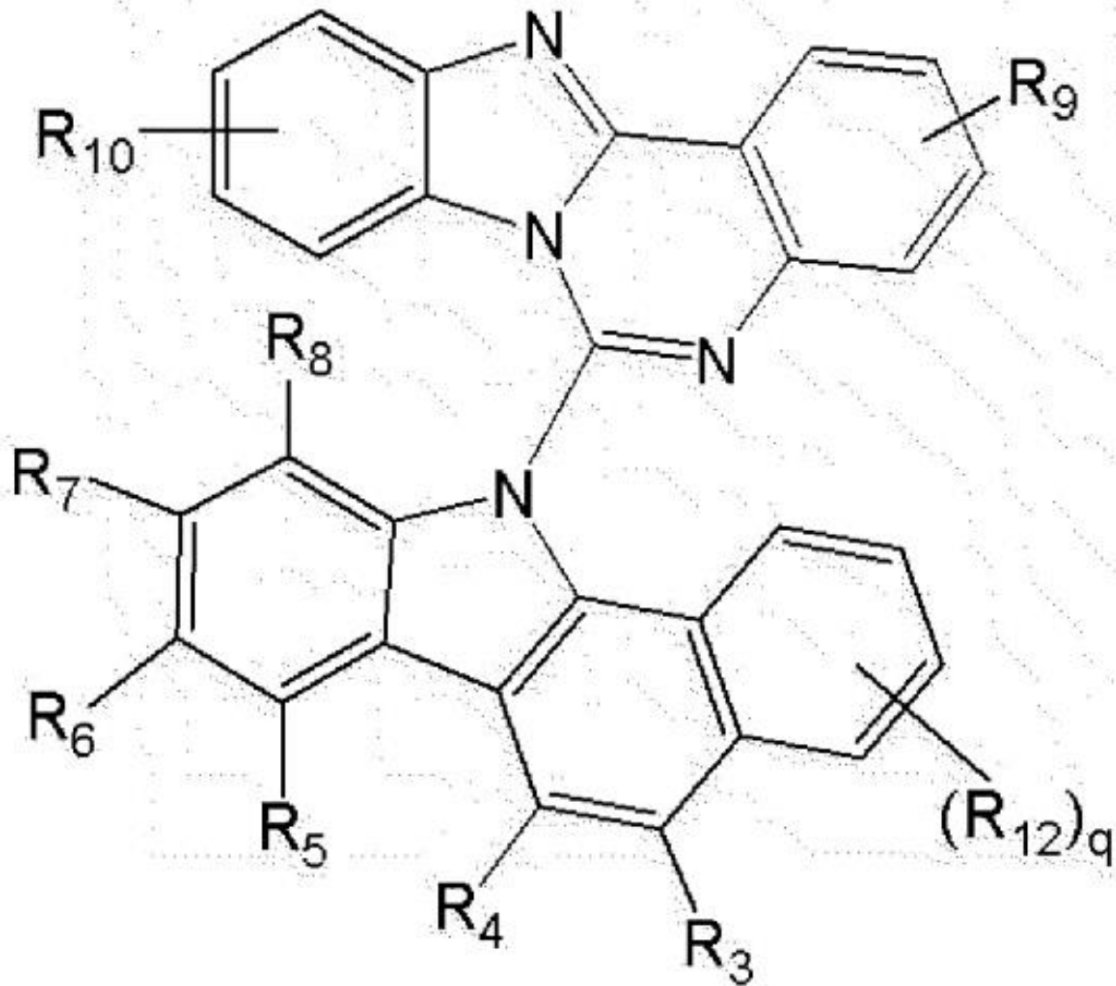
【化7】



【化学式 3】

30

【化 8】



10

20

前記化学式 2 および 3 において、

$R_1 \sim R_{10}$  は、化学式 1 で定義したのと同じであり、

30

$R_{11}$  および  $R_{12}$  は、互いに同一または異なり、それぞれ独立に、水素；重水素；ハロゲン基；ニトロ基；シアノ基；エステル基；カルボニル基；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リール基；または置換もしくは非置換のヘテロ環基であり、

$p$  および  $q$  はそれぞれ、0 ~ 4 の整数である。

【0057】

本出願の一実施態様によれば、前記  $R_3$  は、 $-(L)_m - (Ar)_n$  である。

【0058】

本出願の一実施態様によれば、前記  $R_2$  は、 $-(L)_m - (Ar)_n$  である。

40

【0059】

本出願の一実施態様によれば、前記  $R_3$  および  $R_6$  は、 $-(L)_m - (Ar)_n$  であり、前記  $R_3$  および  $R_6$  は、互いに同一または異なる。

【0060】

本出願の一実施態様によれば、前記  $R_2$  および  $R_7$  は、 $-(L)_m - (Ar)_n$  であり、前記  $R_2$  および  $R_7$  は、互いに同一または異なる。

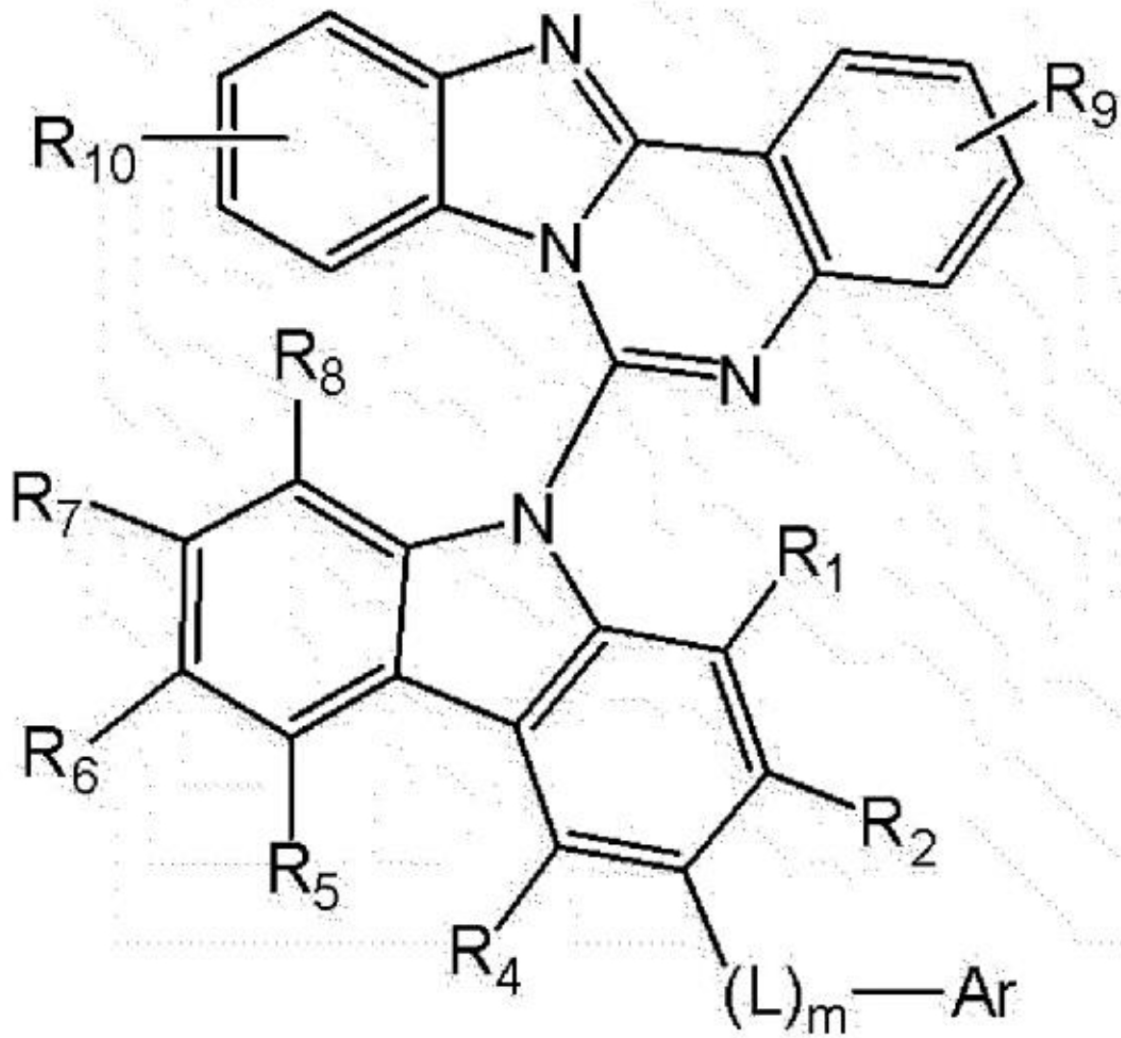
【0061】

本出願の一実施態様によれば、前記化学式 1 は、下記化学式 4 ~ 7 のうちのいずれか 1 つで表される。

[化学式 4]

50

【化 9】



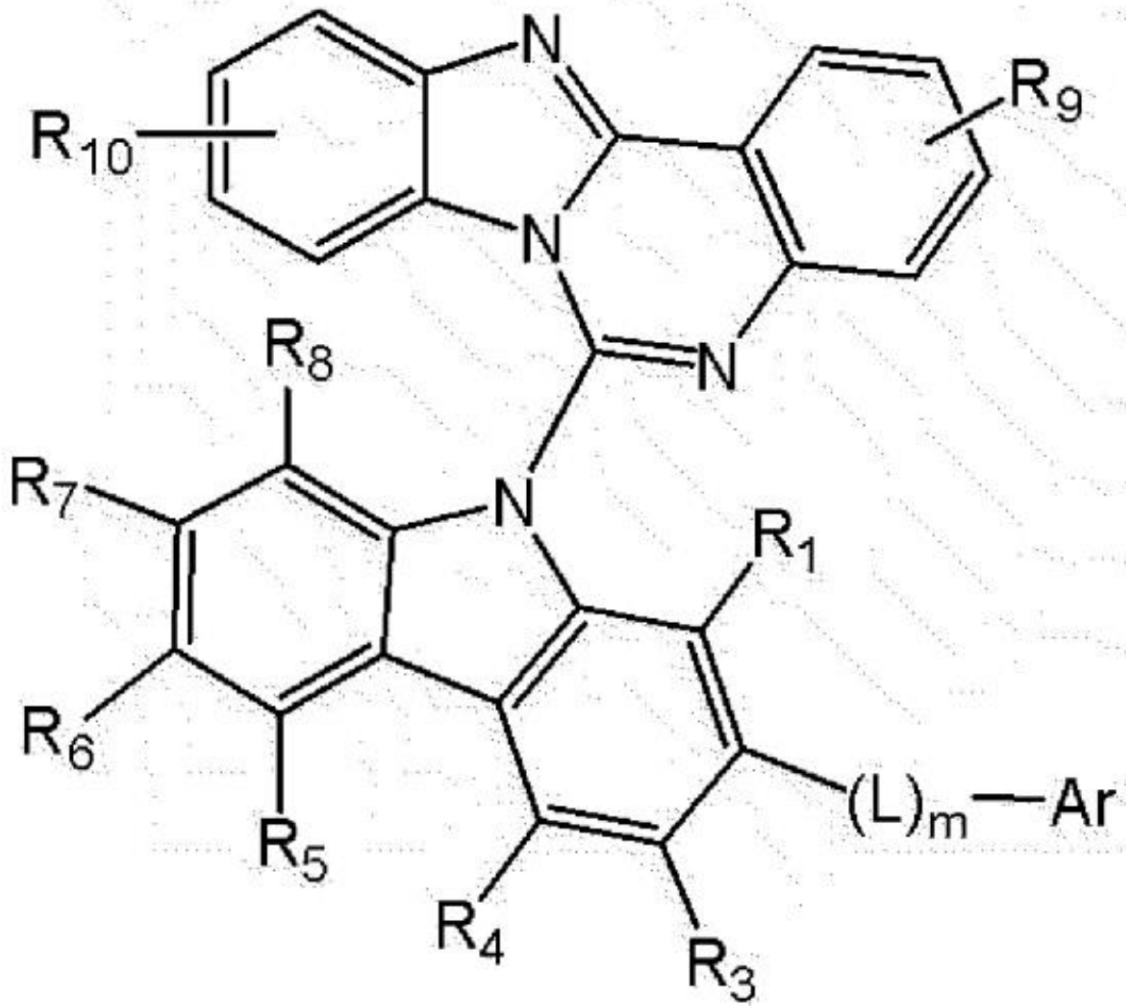
10

20

【化学式 5】

30

【化 1 0】



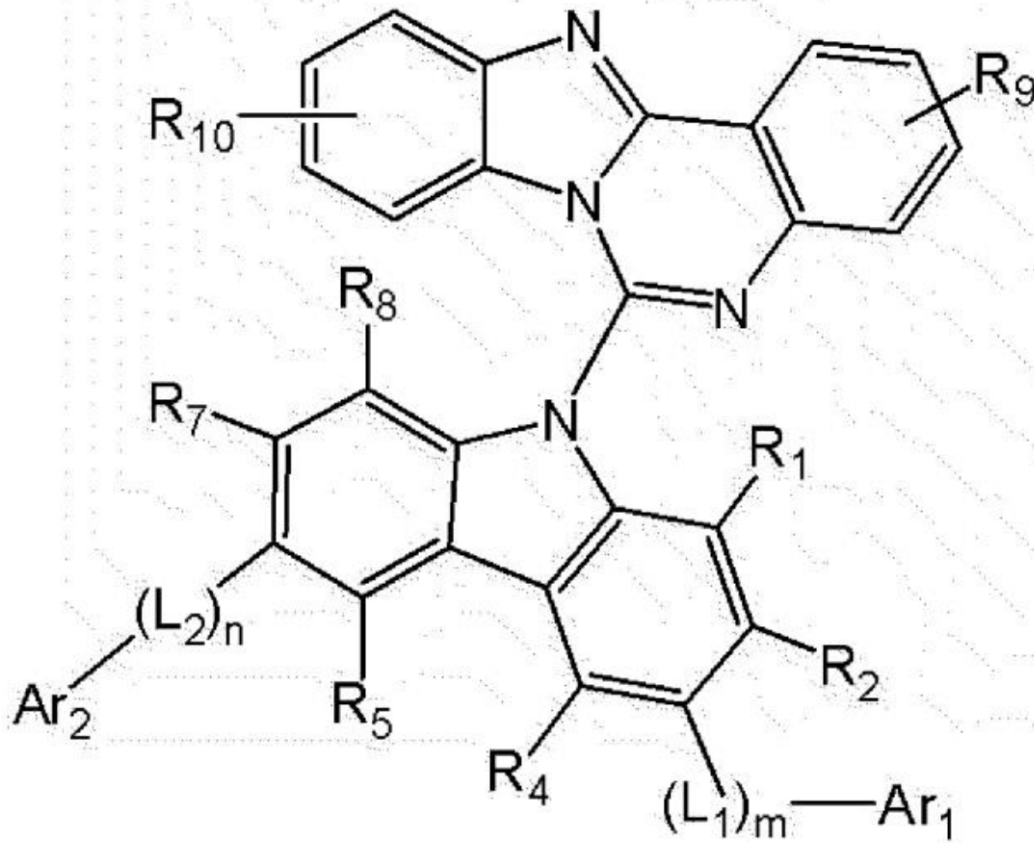
10

20

[ 化学式 6 ]

30

【化 1 1】

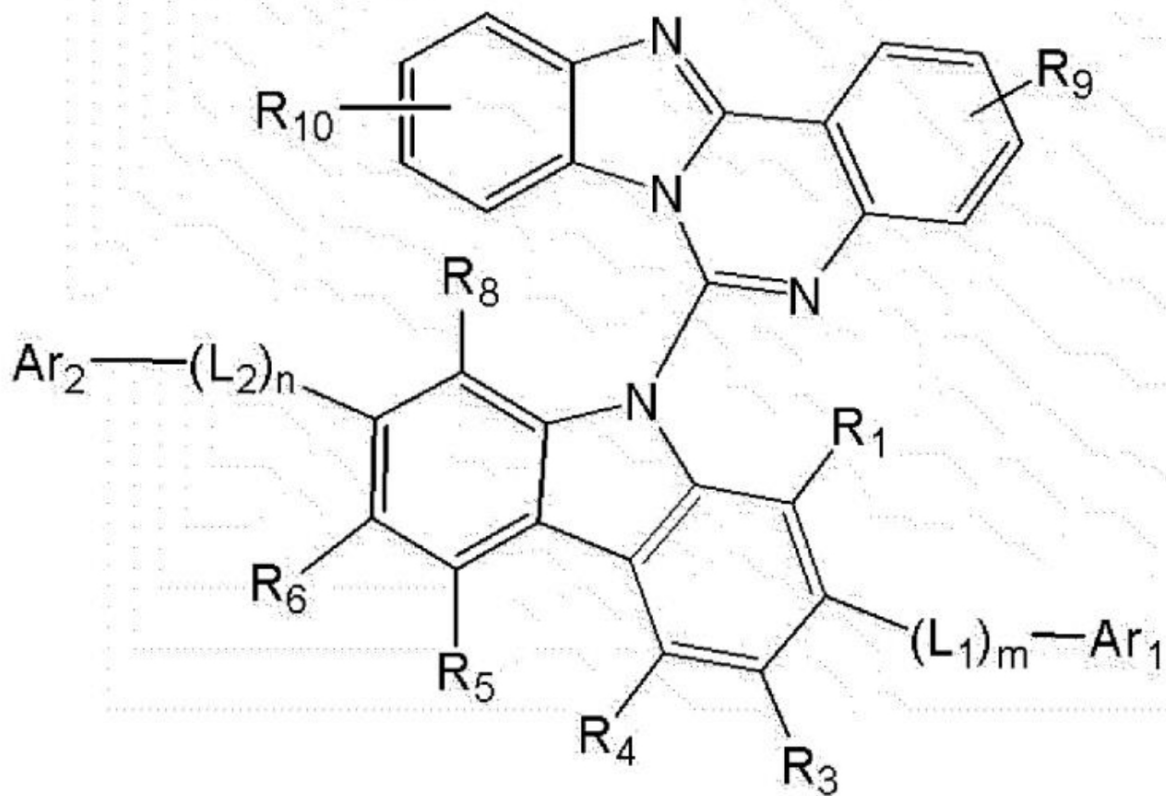


10

20

[ 化学式 7 ]

【化 1 2】



30

40

【 0 0 6 2 】

前記化学式 4 ~ 7 において、L、L<sub>1</sub> および L<sub>2</sub> は、前記化学式 1 の L の定義と同じで

50

あり、 $A_r$ 、 $A_{r_1}$  および  $A_{r_2}$  は、前記化学式 1 の  $A_r$  の定義と同じであり、 $m$  および  $n$  は、化学式 1 の  $m$  および  $n$  の定義と同じであり、 $R_1 \sim R_{10}$  は、化学式 1 で定義したのと同じである。

## 【0063】

本出願の一実施態様によれば、前記  $L$  は、直接結合、または置換もしくは非置換のアリール基である。

## 【0064】

本出願の一実施態様によれば、前記  $L$  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ピフェニレン基；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アントラセニレン基；置換もしくは非置換のフルオレニレン基；置換もしくは非置換のフェナントレニレン基；置換もしくは非置換のピレニレン基；および置換もしくは非置換のクリセニレン基からなる群より選択される。

10

## 【0065】

本出願の一実施態様によれば、前記  $L$  は、直接結合；フェニレン基；ピフェニレン基；ナフチレン基；アントラセニレン基；フルオレニレン基；フェナントレニレン基；ピレニレン基；およびクリセニレン基からなる群より選択される。

## 【0066】

本出願の一実施態様によれば、前記  $L$  は、直接結合；または置換もしくは非置換のフェニレン基である。

## 【0067】

本出願の一実施態様によれば、前記  $L$  は、直接結合；またはフェニレン基である。

20

## 【0068】

本出願の一実施態様によれば、 $m$  は、1 である。

## 【0069】

本出願の一実施態様によれば、 $m$  は、2 であり、2 個の  $L$  は、互いに同一または異なる。

## 【0070】

本出願の一実施態様によれば、 $m$  は、3 であり、3 個の  $L$  は、互いに同一または異なる。

## 【0071】

本出願の一実施態様によれば、前記  $L_1$  および  $L_2$  は、前述の  $L$  の定義と同じである。

30

## 【0072】

本出願の一実施態様によれば、前記  $A_r$  は、置換された単環のアリール基；置換もしくは非置換の多環のアリール基；置換もしくは非置換のヘテロ環基；置換もしくは非置換のアミン基；置換もしくは非置換のシリル基；または置換もしくは非置換のホスホリル基である。

## 【0073】

本出願の一実施態様によれば、前記  $A_r$  は、置換された単環のアリール基；置換もしくは非置換の多環のアリール基；置換もしくは非置換のヘテロ環基；置換もしくは非置換のアミン基；置換もしくは非置換のシリル基；または置換もしくは非置換のホスホリル基であり、前記置換もしくは非置換のは、重水素；ハロゲン基；シアノ基； $C_1 \sim C_{60}$  のアルキル基； $C_6 \sim C_{60}$  のシクロアルキル基； $C_6 \sim C_{60}$  のアリール基；および  $C_2 \sim C_{60}$  のヘテロ環基からなる群より選択される少なくとも 1 つで置換もしくは非置換のものを意味する。

40

## 【0074】

本出願の一実施態様によれば、前記  $A_r$  は、置換された単環のアリール基；置換もしくは非置換の多環のアリール基；置換もしくは非置換のヘテロ環基；置換もしくは非置換のアミン基；置換もしくは非置換のシリル基；または置換もしくは非置換のホスホリル基であり、前記置換もしくは非置換のは、重水素；ハロゲン基； $C_1 \sim C_{20}$  のアルキル基；シアノ基； $C_6 \sim C_{20}$  のアリール基；および  $C_2 \sim C_{20}$  のヘテロ環基からなる群より

50

選択される少なくとも1つで置換もしくは非置換のものを意味する。

【0075】

本出願の一実施態様によれば、前記置換された単環のアリール基は、重水素；ハロゲン基； $C_1 \sim C_{20}$ のアルキル基；シアノ基； $C_6 \sim C_{20}$ のアリール基；および $C_2 \sim C_{20}$ のヘテロ環基からなる群より選択される少なくとも1つで置換されたフェニル基である。

【0076】

本出願の一実施態様によれば、前記置換された単環のアリール基は、重水素；ハロゲン基；メチル基；*t*-ブチル基；シアノ基；フェニル基；ピフェニル基；ナフチル基；アントラセニル基；フェナントレニル基；ピリジル基；ピリミジル基；およびトリアジニル基からなる群より選択される少なくとも1つで置換されたフェニル基である。

10

【0077】

本出願の一実施態様によれば、前記多環のアリール基は、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アントラセニル基；置換もしくは非置換のフェナントレニル基；置換もしくは非置換のクリセニル基；置換もしくは非置換のピレニル基；置換もしくは非置換のトリフェニレニル基；または置換もしくは非置換のフルオレニル基である。

【0078】

本出願の一実施態様によれば、前記多環のアリール基は、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アントラセニル基；置換もしくは非置換のフェナントレニル基；置換もしくは非置換のクリセニル基；置換もしくは非置換のピレニル基；置換もしくは非置換のトリフェニレニル基；または置換もしくは非置換のフルオレニル基であり、前記置換もしくは非置換のは、重水素；ハロゲン基； $C_1 \sim C_{20}$ のアルキル基；シアノ基； $C_6 \sim C_{20}$ のアリール基；および $C_2 \sim C_{20}$ のヘテロ環基からなる群より選択される少なくとも1つで置換もしくは非置換のものを意味する。

20

【0079】

本出願の一実施態様によれば、前記多環のアリール基は、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アントラセニル基；置換もしくは非置換のフェナントレニル基；置換もしくは非置換のクリセニル基；置換もしくは非置換のピレニル基；置換もしくは非置換のトリフェニレニル基；または置換もしくは非置換のフルオレニル基であり、前記置換もしくは非置換のは、重水素；ハロゲン基；メチル基；*t*-ブチル基；シアノ基；フェニル基；ピフェニル基；ナフチル基；アントラセニル基；フェナントレニル基；ピリジル基；ピリミジル基；およびトリアジニル基からなる群より選択される少なくとも1つで置換もしくは非置換のものを意味する。

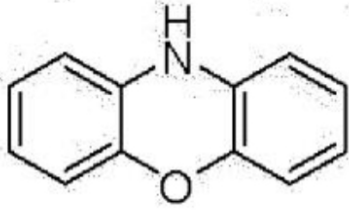
30

【0080】

本出願の一実施態様によれば、前記ヘテロ環基は、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チオフェニル基；置換もしくは非置換のフラニル基；置換もしくは非置換のベンゾフラニル基；置換もしくは非置換のベンゾチオフェニル基；置換もしくは非置換のジベンゾフラニル基；置換もしくは非置換のジベンゾチオフェニル基；置換もしくは非置換のカルバゾリル基；置換もしくは非置換のベンゾカルバゾリル基；置換もしくは非置換のジベンゾカルバゾリル基；置換もしくは非置換のイミダゾリル基；置換もしくは非置換のベンズイミダゾリル基；置換もしくは非置換のチアゾリル基；置換もしくは非置換のベンゾチアゾリル基；置換もしくは非置換のオキサゾリル基；置換もしくは非置換のベンズオキサゾリル基；置換もしくは非置換のフェナントロリル基；置換もしくは非置換のフェノチアジニル基；置換もしくは非置換のフェノキサジニル基；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1価の

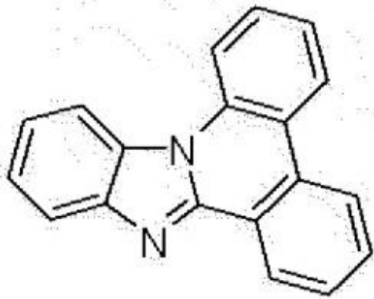
40

## 【化 1 3】



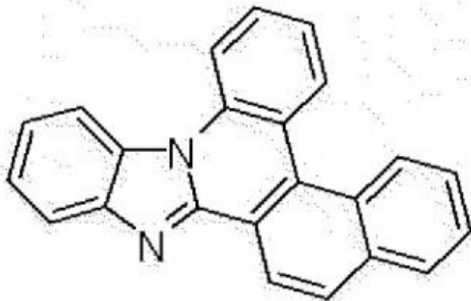
基；置換もしくは非置換の 1 価の

## 【化 1 4】



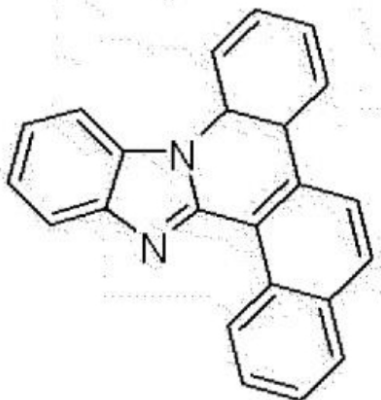
基；置換もしくは非置換の 1 価の

## 【化 1 5】



基；または置換もしくは非置換の 1 価の

## 【化 1 6】



基であり、前記置換もしくは非置換のは、重水素；ハロゲン基； $C_1 \sim C_{20}$  のアルキル基；シアノ基； $C_6 \sim C_{20}$  のアリール基；および  $C_2 \sim C_{20}$  のヘテロ環基からなる群より選択される少なくとも 1 つで置換もしくは非置換のものを意味する。

## 【0081】

本出願の一実施態様によれば、前記ヘテロ環基は、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チオフェニル基；置換もしくは非置換のフラニル基；置換もしくは非置換のベンゾフラニル基；置換もしくは非置換のベンゾチオフェニル基；置換もしくは非置換のジ

10

20

30

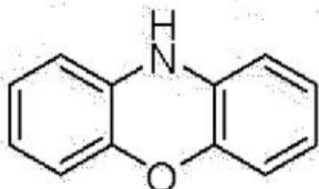
40

50

ベンゾフラニル基；置換もしくは非置換のジベンゾチオフェニル基；置換もしくは非置換のカルバゾリル基；置換もしくは非置換のベンゾカルバゾリル基；置換もしくは非置換のジベンゾカルバゾリル基；置換もしくは非置換のイミダゾリル基；置換もしくは非置換のベンズイミダゾリル基；置換もしくは非置換のジベンズイミダゾリル基；置換もしくは非置換のチアゾリル基；置換もしくは非置換のベンゾチアゾリル基；置換もしくは非置換のオキサゾリル基；置換もしくは非置換のベンズオキサゾリル基；置換もしくは非置換のフェナントロリル基；置換もしくは非置換のフェノチアジニル基；置換もしくは非置換のフェノキサジニル基；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1価の

【化17】

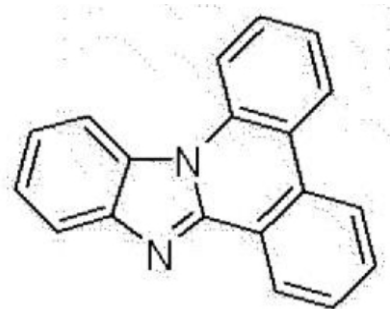
10



基；置換もしくは非置換の1価の

【化18】

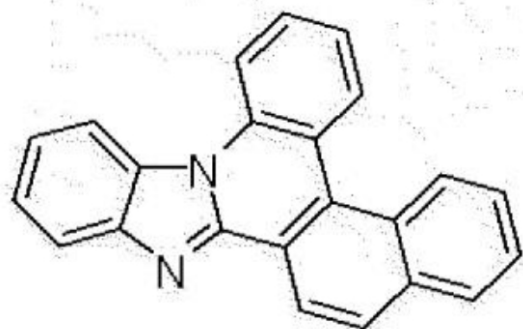
20



基；置換もしくは非置換の1価の

【化19】

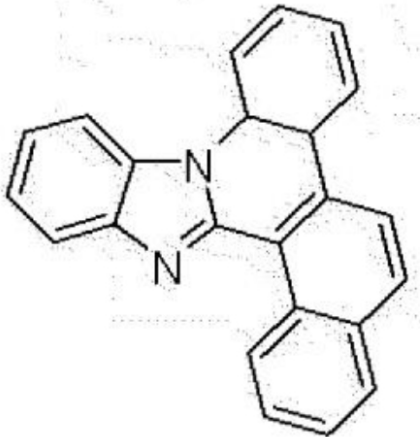
30



基；または置換もしくは非置換の1価の

40

## 【化20】



10

基であり、前記置換もしくは非置換のは、重水素；ハロゲン基；メチル基；*t*-ブチル基；シアノ基；フェニル基；ピフェニル基；ナフチル基；アントラセニル基；フェナントレニル基；ピリジル基；ピリミジル基；およびトリアジニル基からなる群より選択される少なくとも1つで置換もしくは非置換のものを意味する。

## 【0082】

本出願の一実施態様によれば、前記  $Ar_1$  および  $Ar_2$  は、前述の  $Ar$  の定義と同じである。

20

## 【0083】

本出願の一実施態様によれば、前記アミン基は、 $-NR_{100}R_{101}$  で表され、前記  $R_{100}$  および  $R_{101}$  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  $C_1 \sim C_{60}$  のアルキル基；置換もしくは非置換の  $C_6 \sim C_{60}$  のシクロアルキル基；置換もしくは非置換の  $C_6 \sim C_{60}$  のアリール基；または置換もしくは非置換の  $C_2 \sim C_{60}$  のヘテロ環基であってもよい。

## 【0084】

本出願の一実施態様によれば、前記  $R_{100}$  および  $R_{101}$  は、置換もしくは非置換の  $C_6 \sim C_{60}$  のアリール基であり、 $R_{100}$  および  $R_{101}$  は、互いに同一または異なってもよい。

30

## 【0085】

本出願の一実施態様によれば、前記  $R_{100}$  および  $R_{101}$  は、 $C_1 \sim C_{60}$  のアルキル基で置換もしくは非置換の  $C_6 \sim C_{60}$  のアリール基であり、前記  $R_{100}$  および  $R_{101}$  は、互いに同一または異なってもよい。

## 【0086】

本出願の一実施態様によれば、前記  $R_{100}$  および  $R_{101}$  は、互いに同一または異なり、それぞれ独立に、フェニル基、ピフェニル基、ナフチル基、ターフェニル基、フルオレニル基、またはジメチルフルオレニル基であってもよい。

## 【0087】

本出願の一実施態様によれば、前記ホスホリル基は、 $-P(=O)R_{102}R_{103}$  で表され、前記  $R_{102}$  および  $R_{103}$  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  $C_1 \sim C_{60}$  のアルキル基；置換もしくは非置換の  $C_6 \sim C_{60}$  のシクロアルキル基；置換もしくは非置換の  $C_6 \sim C_{60}$  のアリール基；または置換もしくは非置換の  $C_2 \sim C_{60}$  のヘテロ環基であってもよい。

40

## 【0088】

本出願の一実施態様によれば、前記  $R_{102}$  および  $R_{103}$  は、置換もしくは非置換の  $C_6 \sim C_{60}$  のアリール基であり、 $R_{102}$  および  $R_{103}$  は、互いに同一または異なってもよい。

## 【0089】

本出願の一実施態様によれば、前記  $R_{102}$  および  $R_{103}$  は、互いに同一または異な

50

り、それぞれ独立に、フェニル基、ビフェニル基、ナフチル基、ターフェニル基、フルオレン基、またはジメチルフルオレン基であってもよい。

【0090】

本出願の一実施態様によれば、前記シリル基は、 $-SiR_{104}R_{105}R_{106}$ で表され、前記 $R_{104} \sim R_{106}$ 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 $C_1 \sim C_{60}$ のアルキル基；置換もしくは非置換の $C_6 \sim C_{60}$ のシクロアルキル基；置換もしくは非置換の $C_6 \sim C_{60}$ のアリール基；または置換もしくは非置換の $C_2 \sim C_{60}$ のヘテロ環基であってもよい。

【0091】

本出願の一実施態様によれば、前記 $R_{104} \sim R_{106}$ 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 $C_1 \sim C_{60}$ のアルキル基；または置換もしくは非置換の $C_6 \sim C_{60}$ のアリール基である。

10

【0092】

本出願の一実施態様によれば、前記 $R_{104} \sim R_{106}$ は、互いに同一または異なり、それぞれ独立に、メチル基、エチル基、フェニル基、ビフェニル基、ナフチル基、ターフェニル基、フルオレン基、またはジメチルフルオレン基であってもよい。

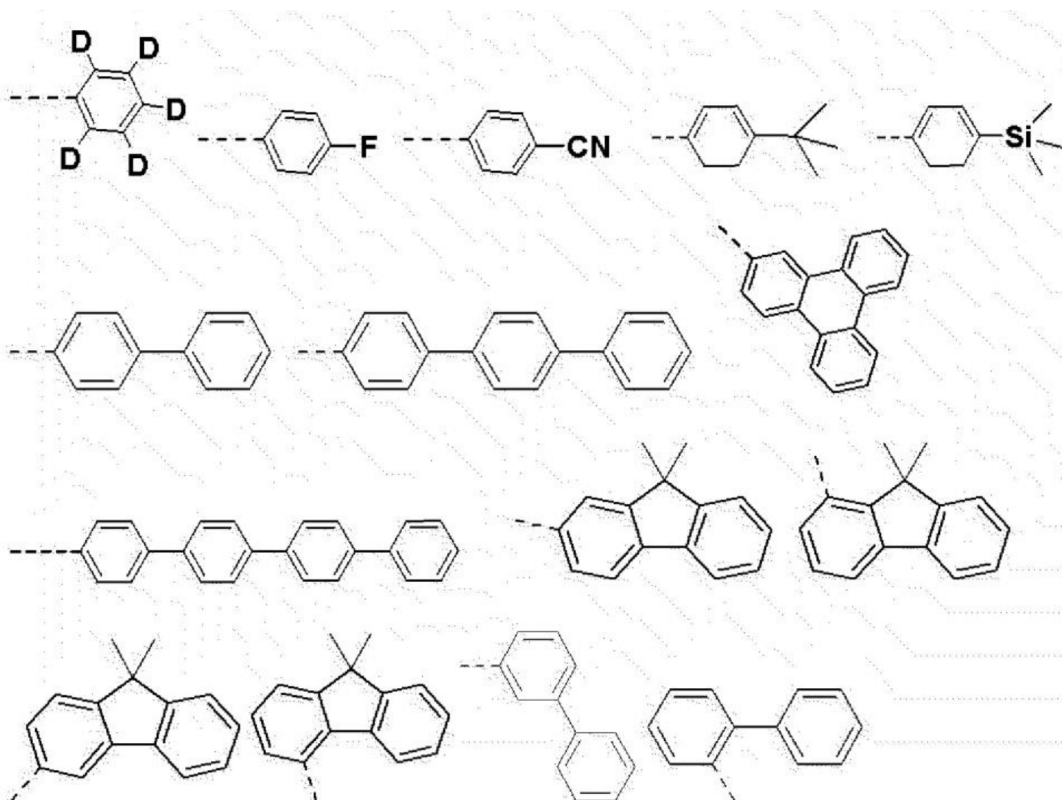
【0093】

本出願の一実施態様によれば、前記 $(L)_m - (Ar)_n$ は、下記グループ1～4の構造式の中から選択されるいずれか1つであってもよい。

[グループ1]

20

【化21】

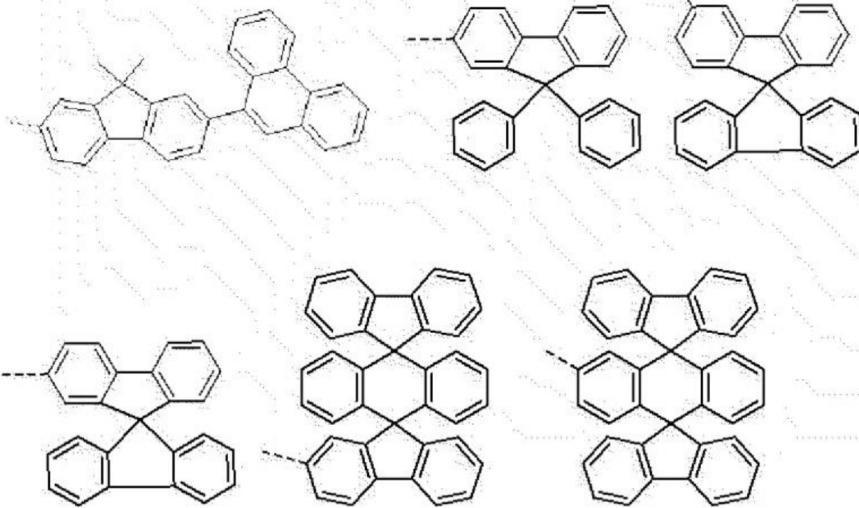


30

40



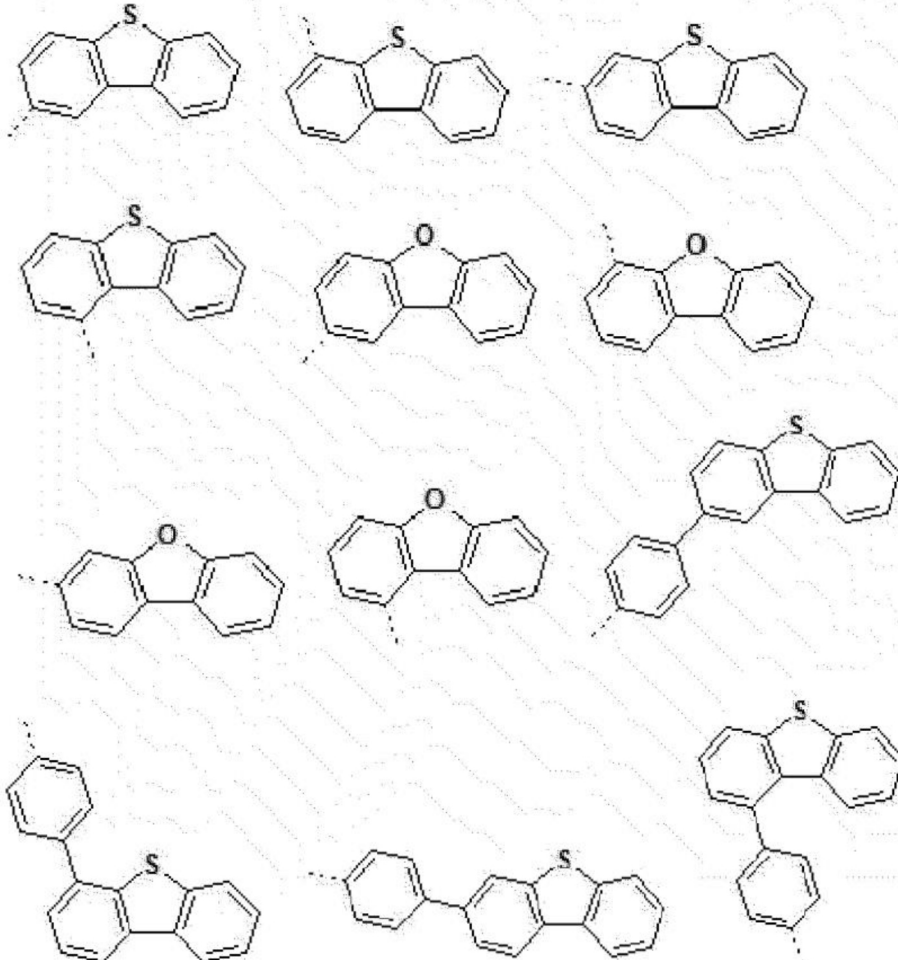
【化 2 4】



10

[グループ 2]

【化 2 5】

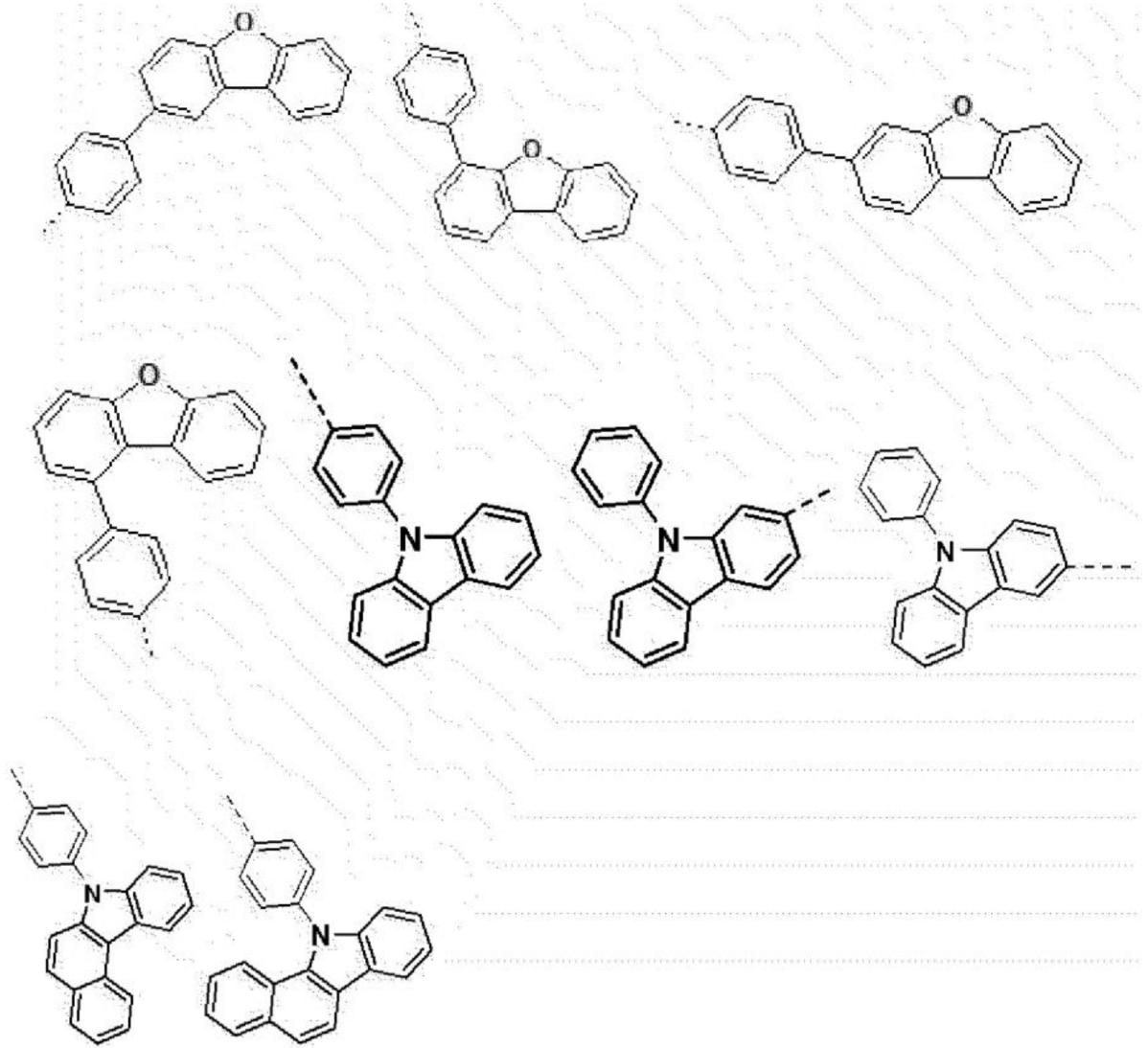


20

30

40

【化 2 6】

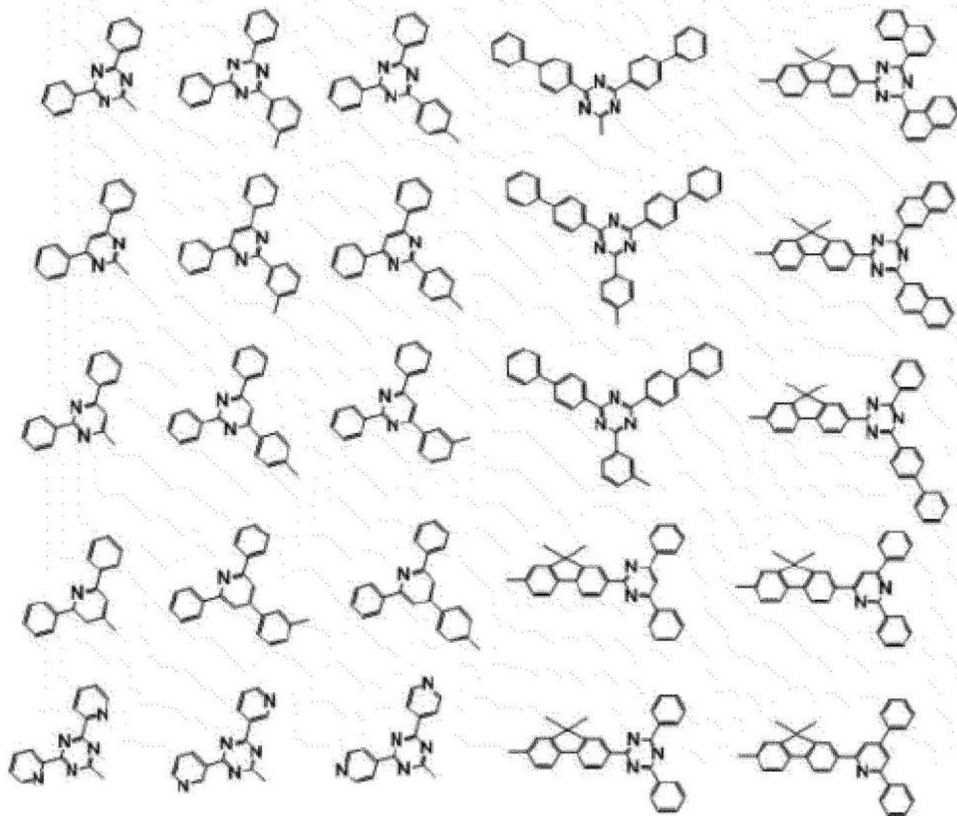


10

20

30

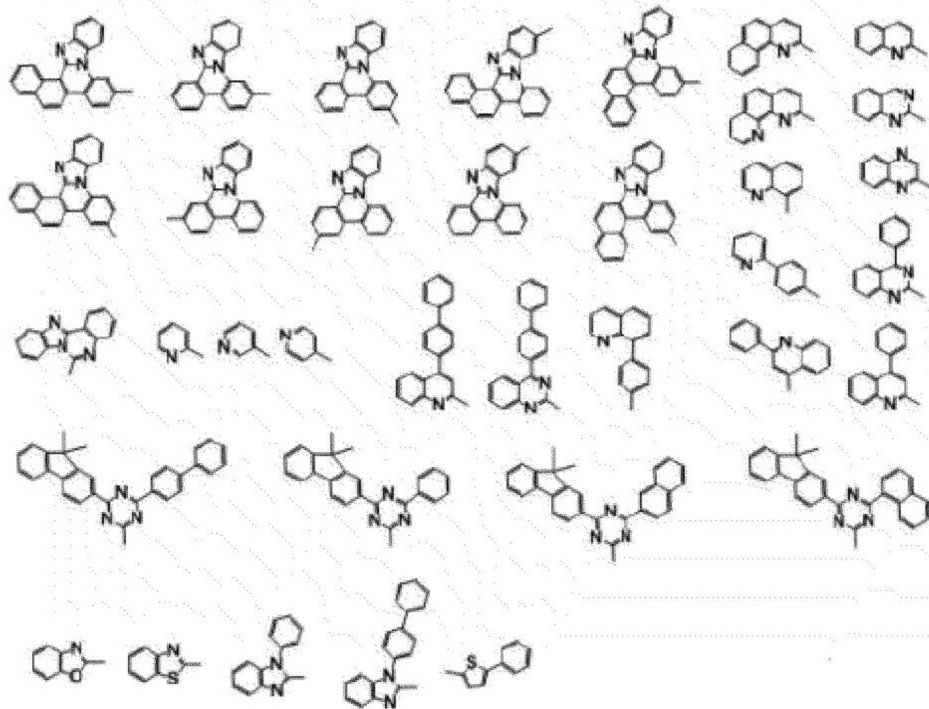
【化 2 7】



10

20

【化 2 8】

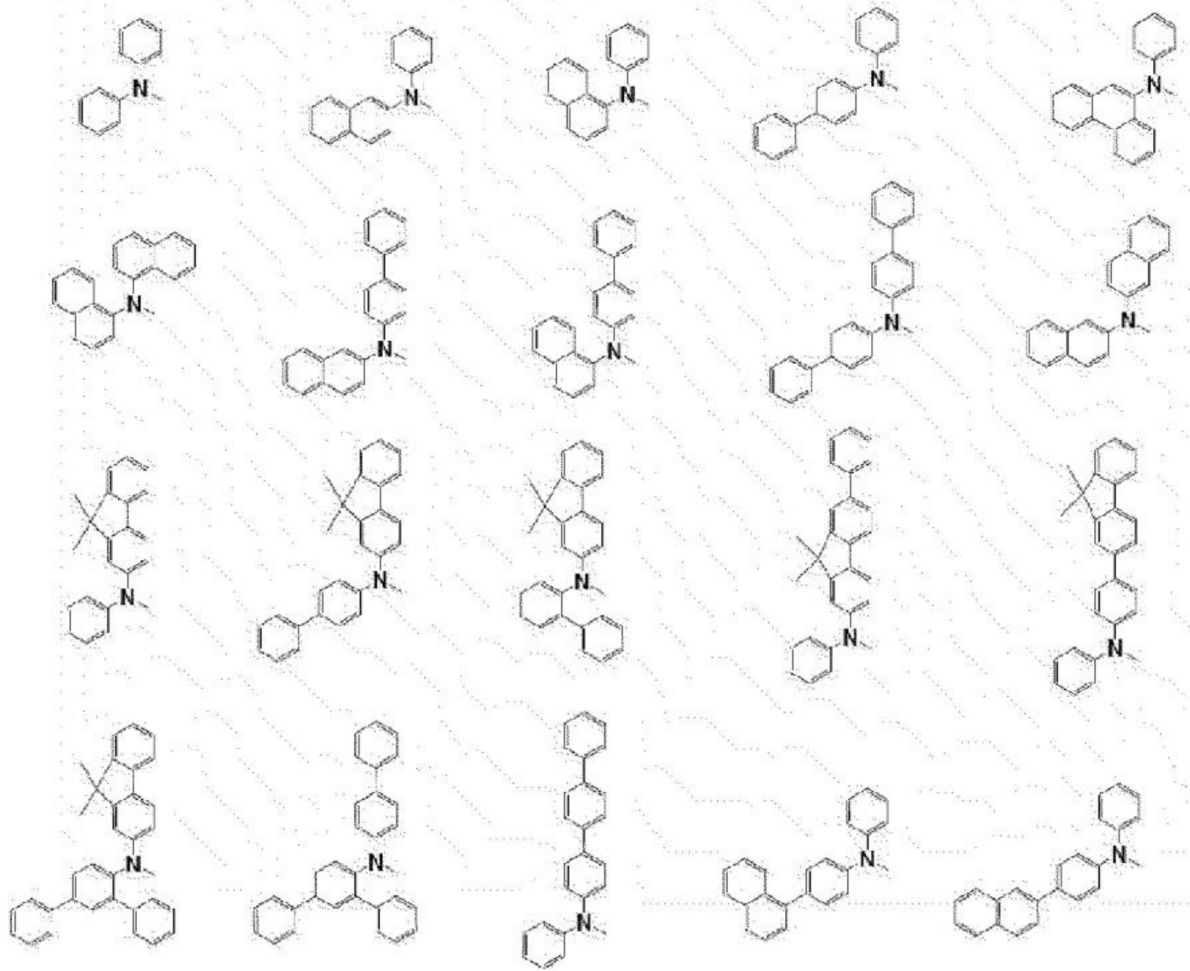


30

40

[ グループ 3 ]

【化 29】

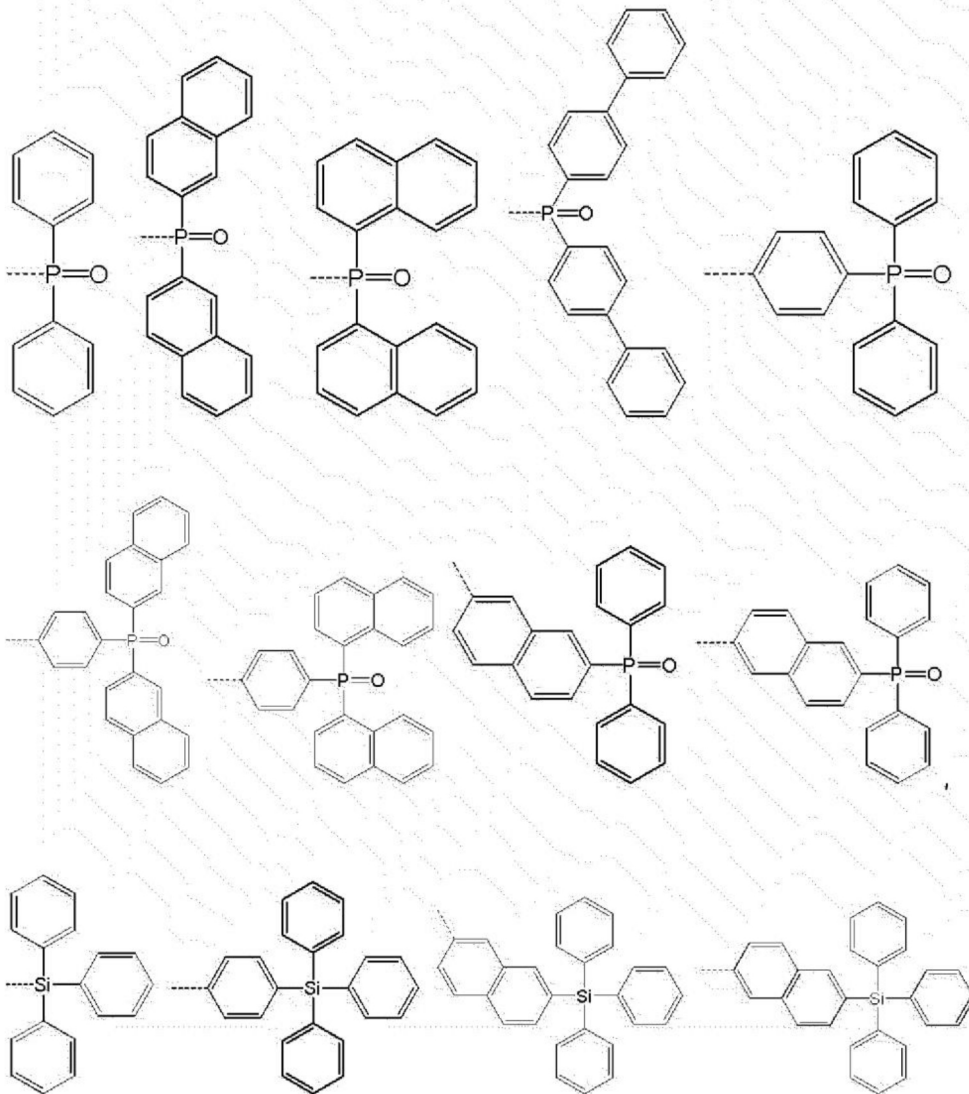


10

20

【グループ 4】

【化30】



10

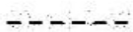
20

30

【0094】

前記グループ1、2および4において、「

【化31】



」は、結合する位置を意味する。

【0095】

前記グループ2において、フルオレン基に置換されたメチル基を除いた「

【化32】



」は、結合する位置を意味する。

【0096】

前記グループ3において、フルオレン基に置換されたメチル基を除いた「

【化33】



」は、結合する位置を意味する。すなわち、Nに連結された「

40

50

## 【化34】

」は、結合する位置を意味する。

## 【0097】

本出願の一実施態様によれば、 $n$ は、1である。

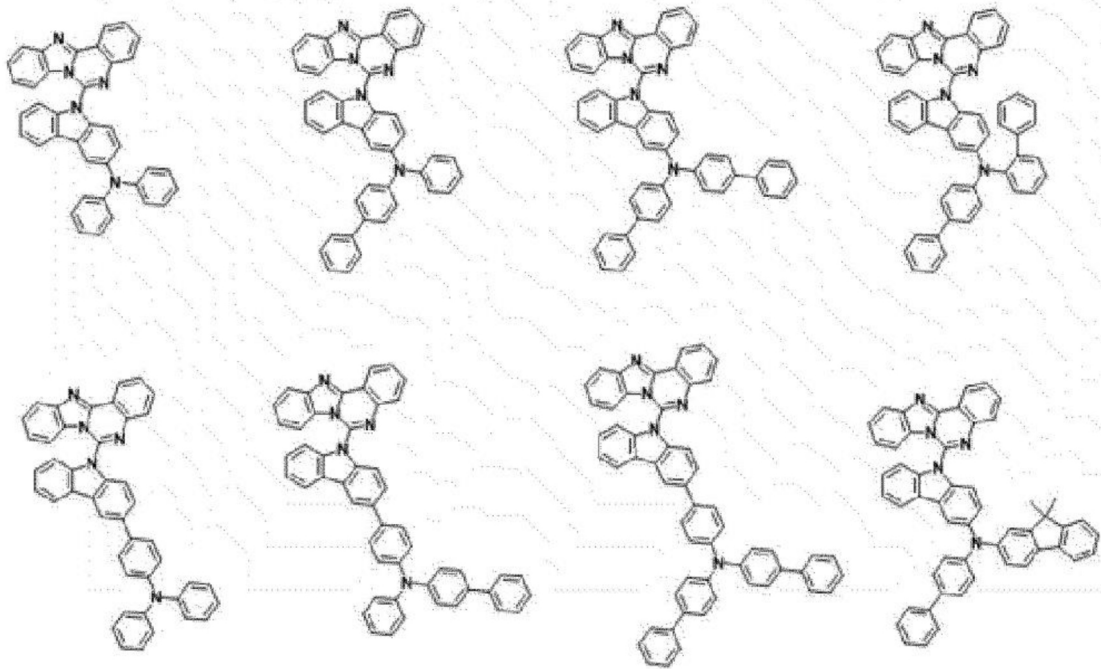
## 【0098】

本出願の一実施態様によれば、 $n$ は、2であり、2個のArは、互いに同一または異なる。

## 【0099】

本出願の一実施態様によれば、前記化学式1で表される化合物は、下記構造式の中から選択されるいずれか1つであってもよい。

## 【化35】

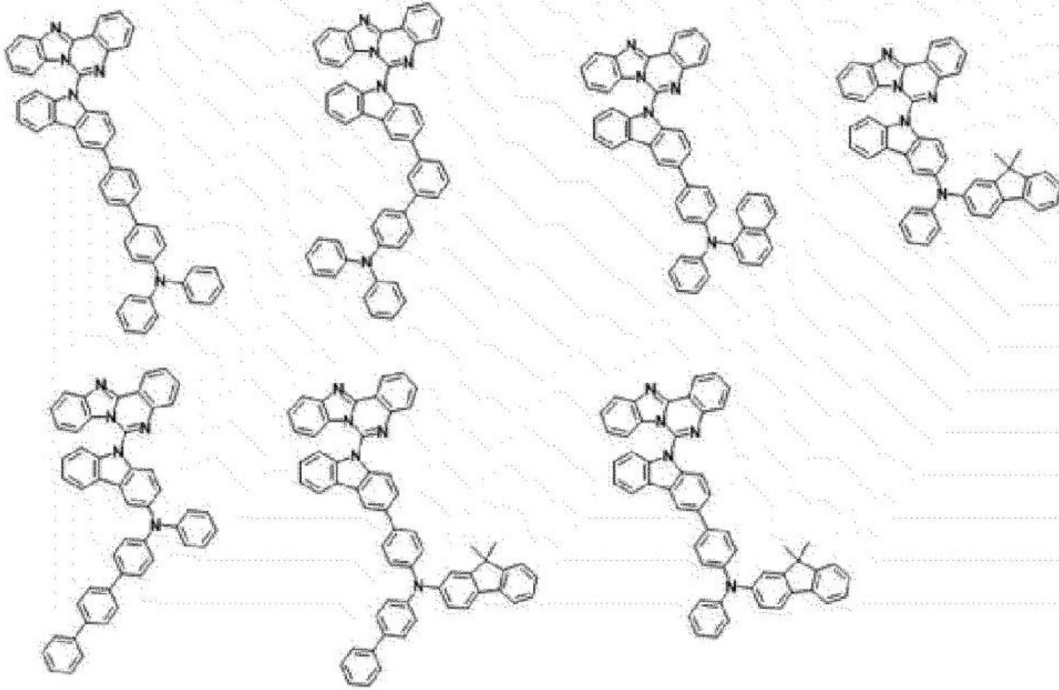


10

20

30

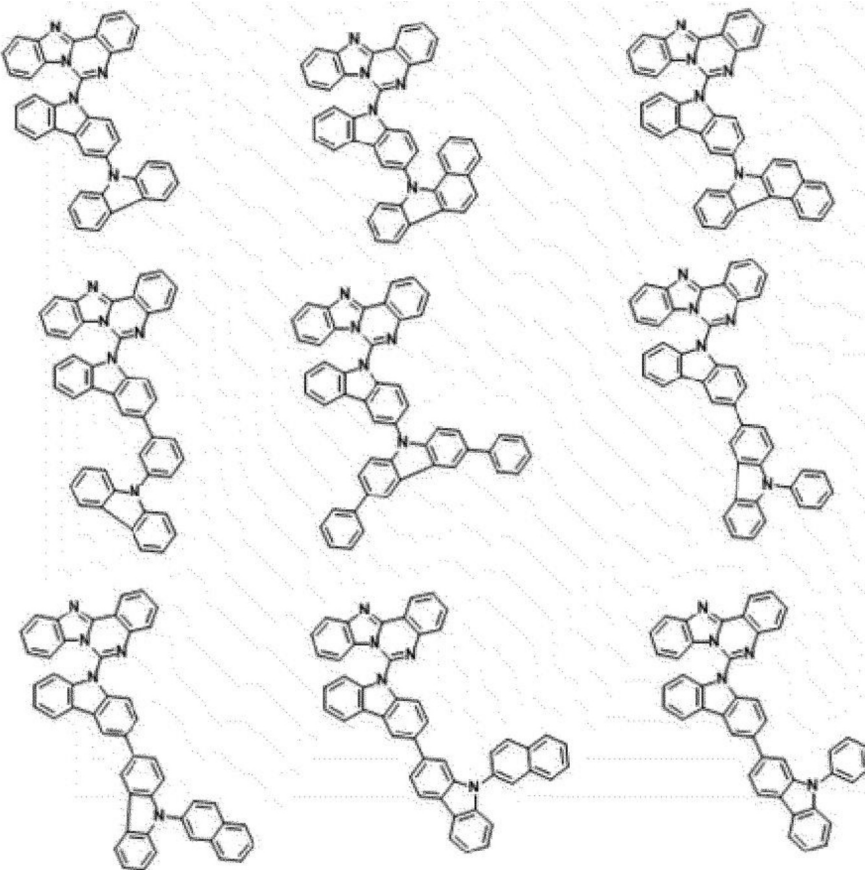
【化 3 6】



10

20

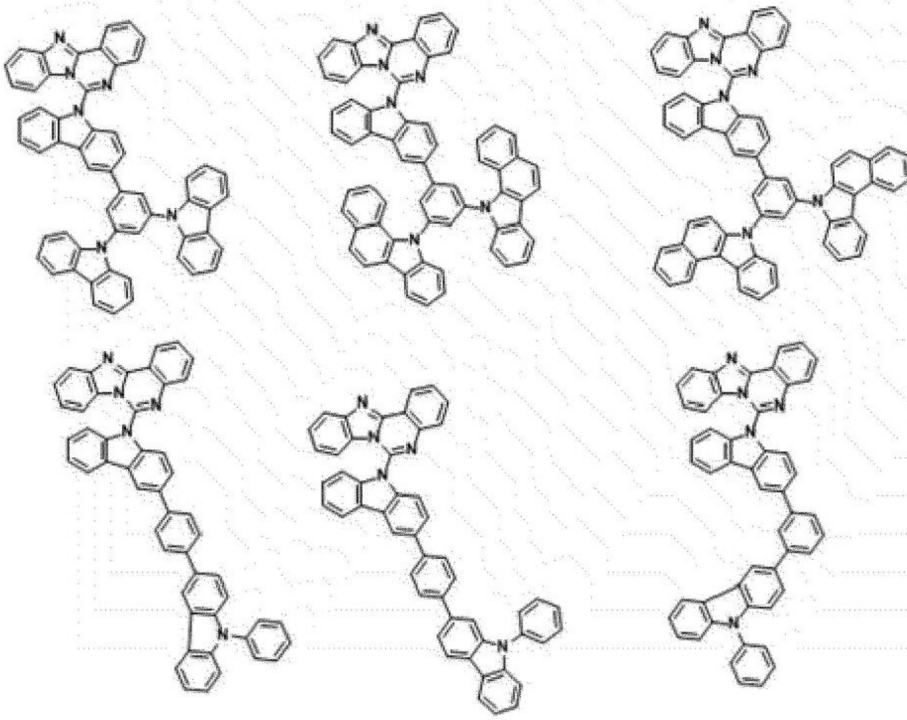
【化 3 7】



30

40

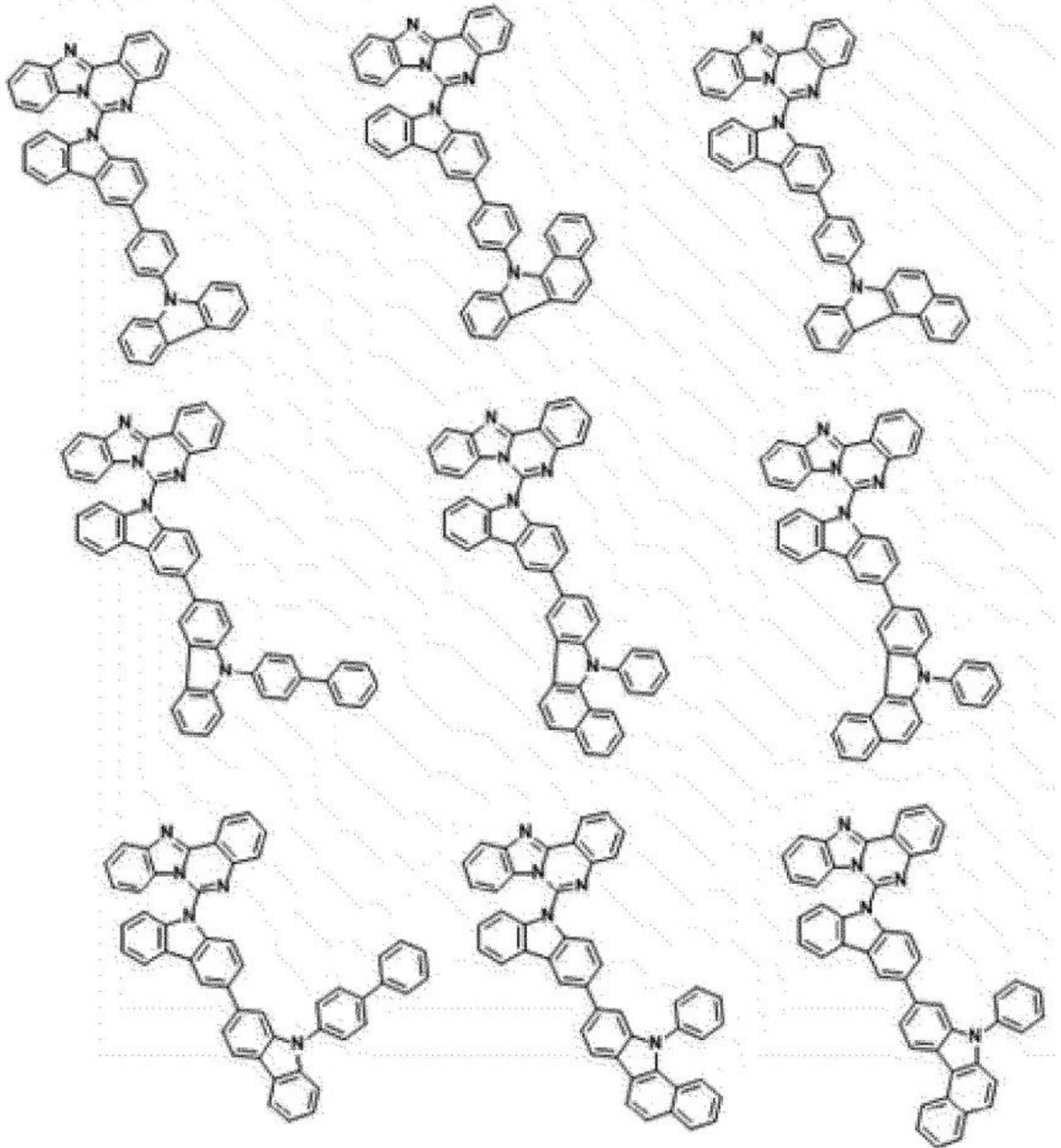
【化 3 8】



10

20

【化 3 9】

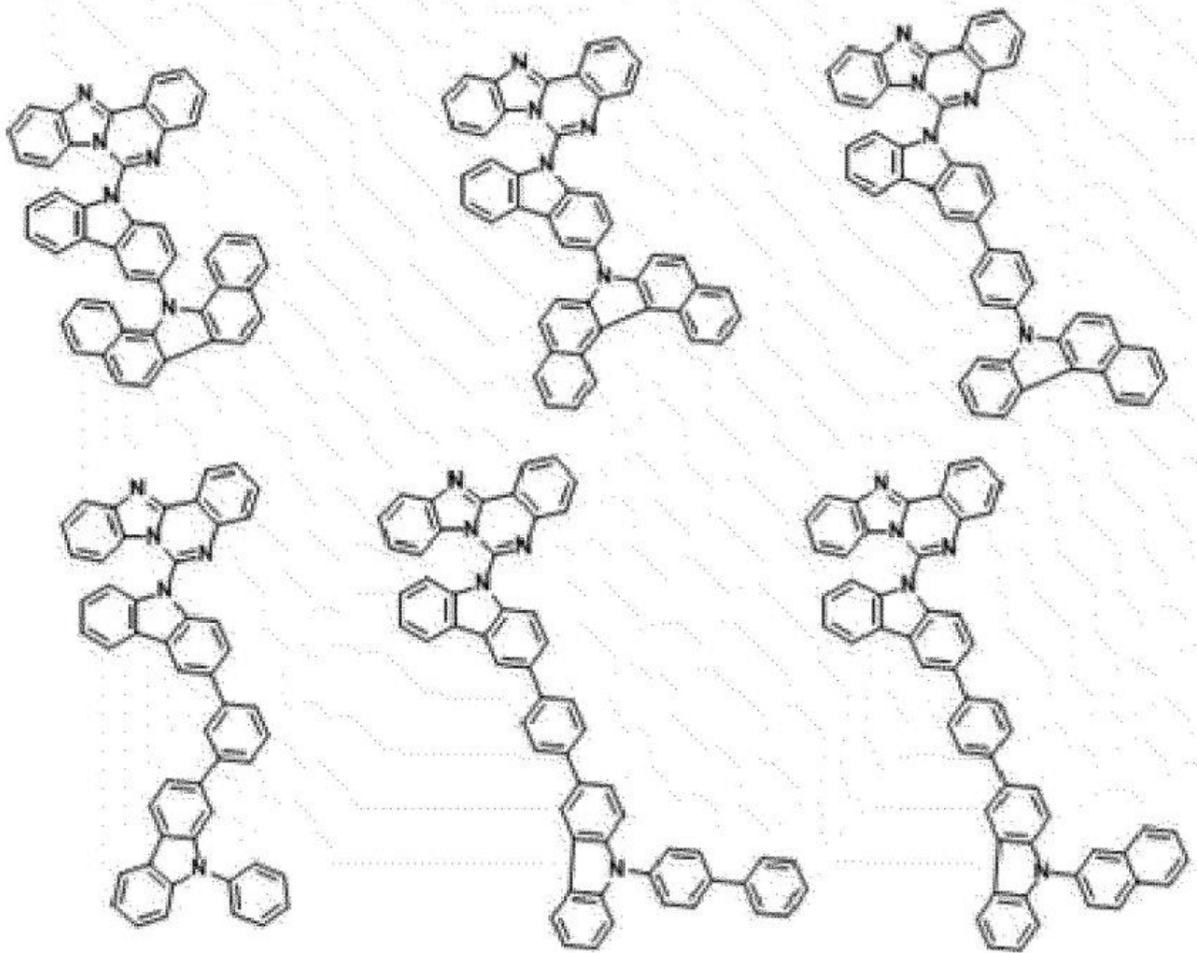


10

20

30

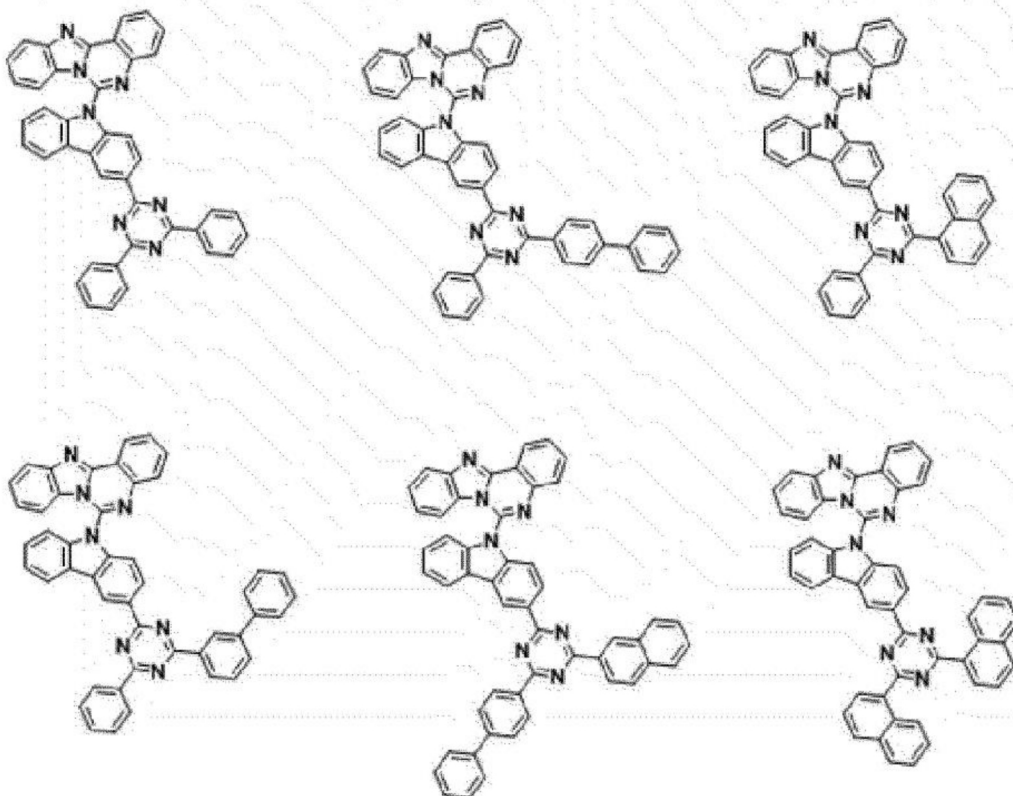
【化 4 0】



10

20

【化 4 1】

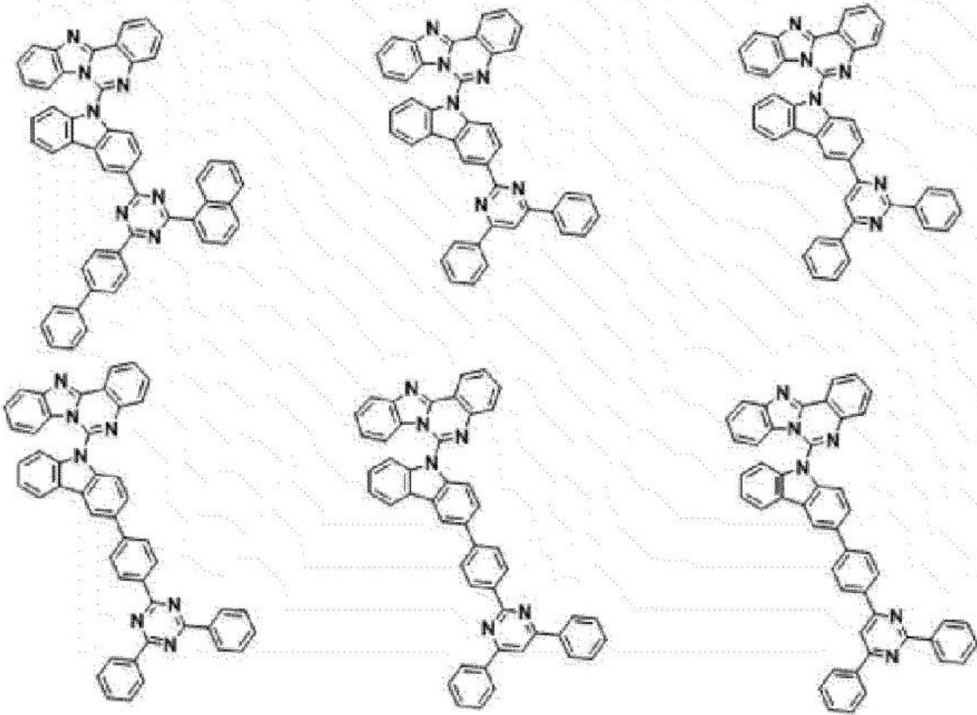


30

40

50

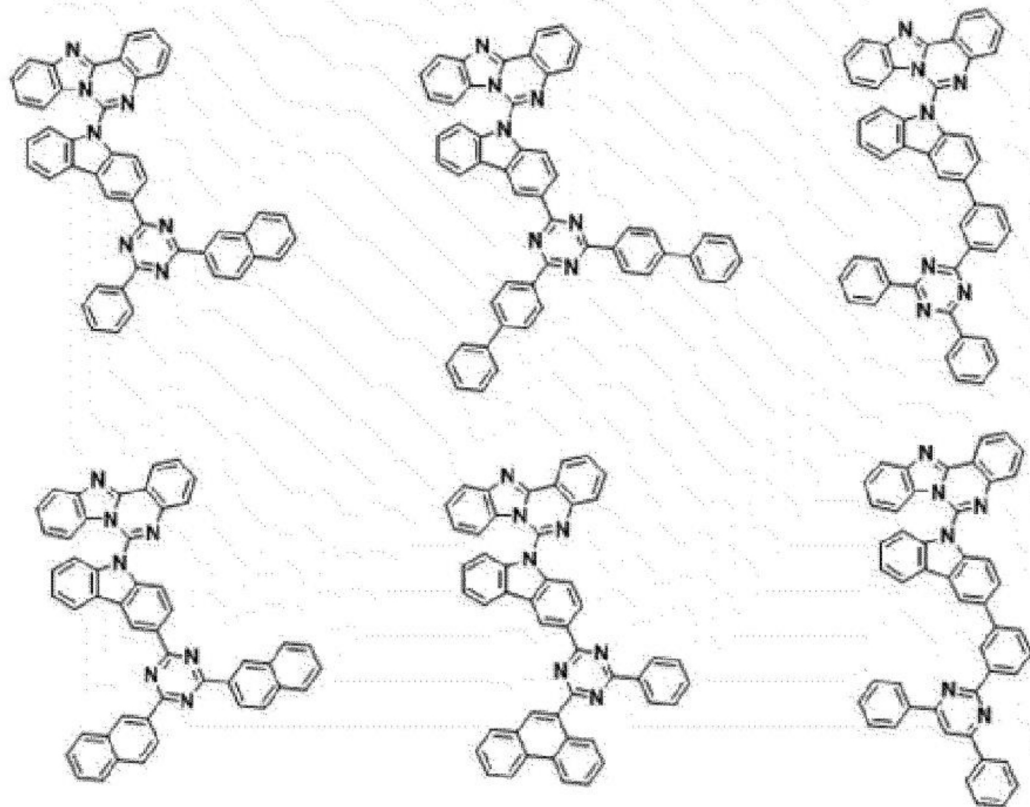
【化 4 2】



10

20

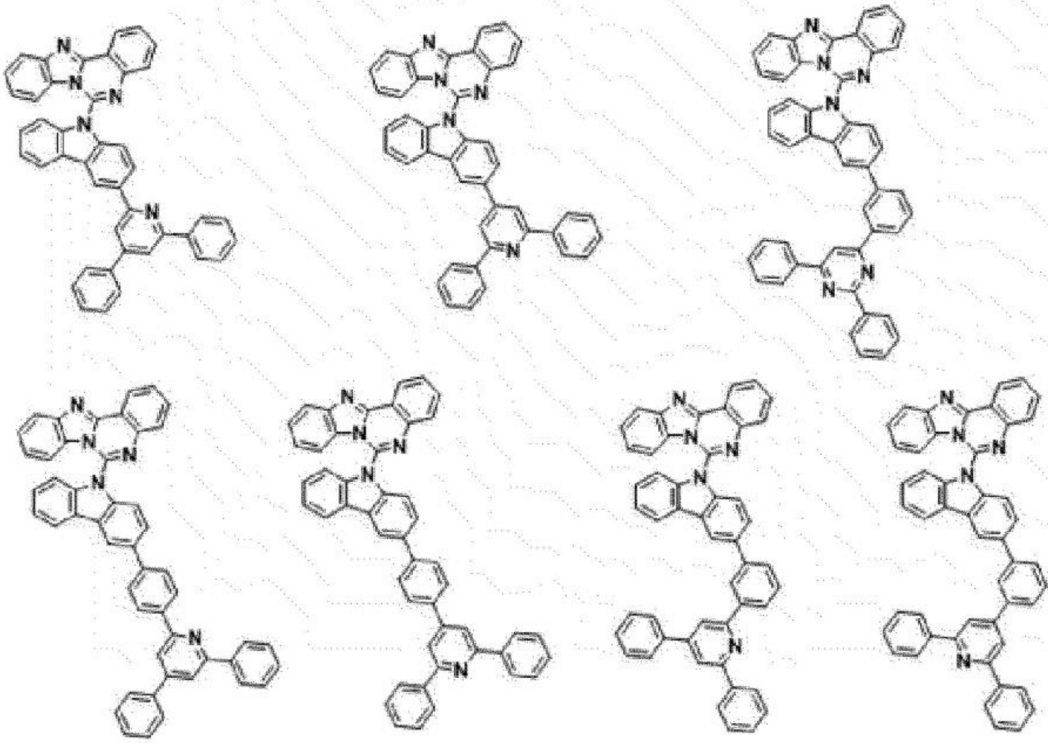
【化 4 3】



30

40

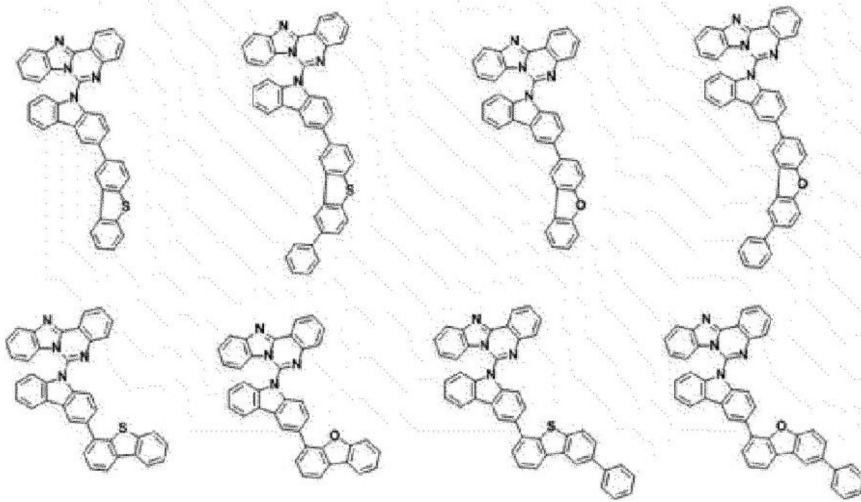
【化 4 4】



10

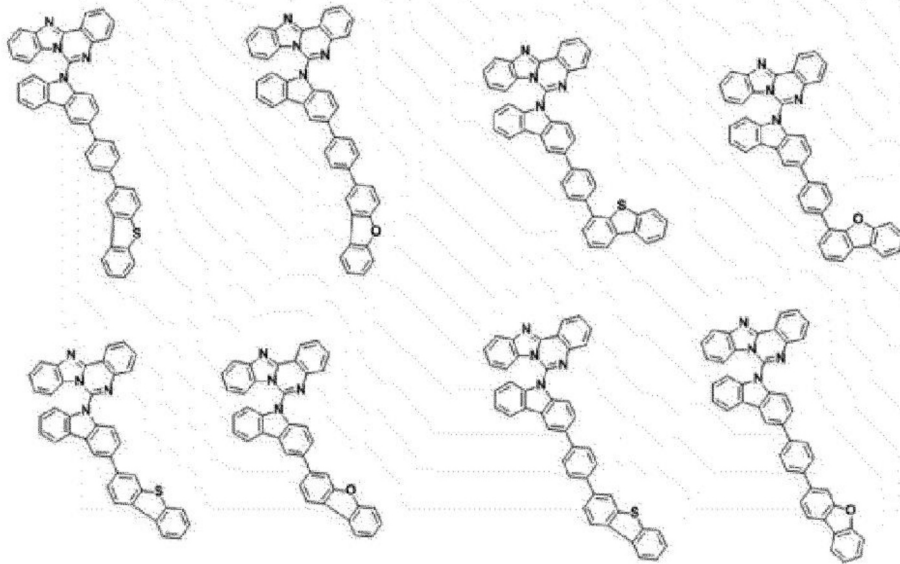
20

【化 4 5】



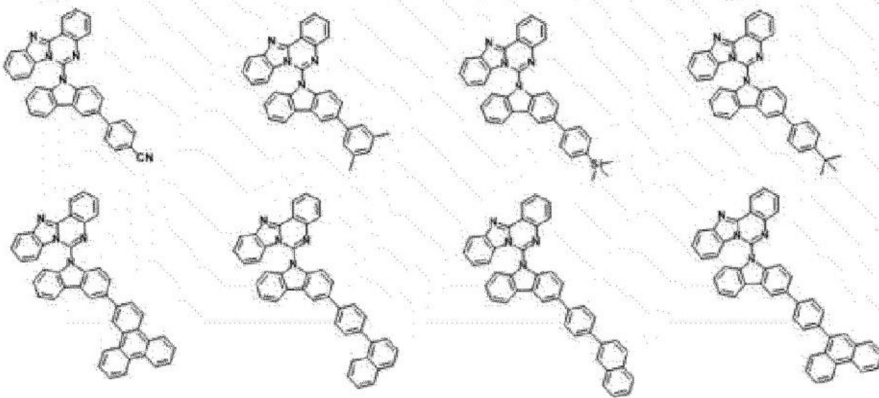
30

【化 4 6】



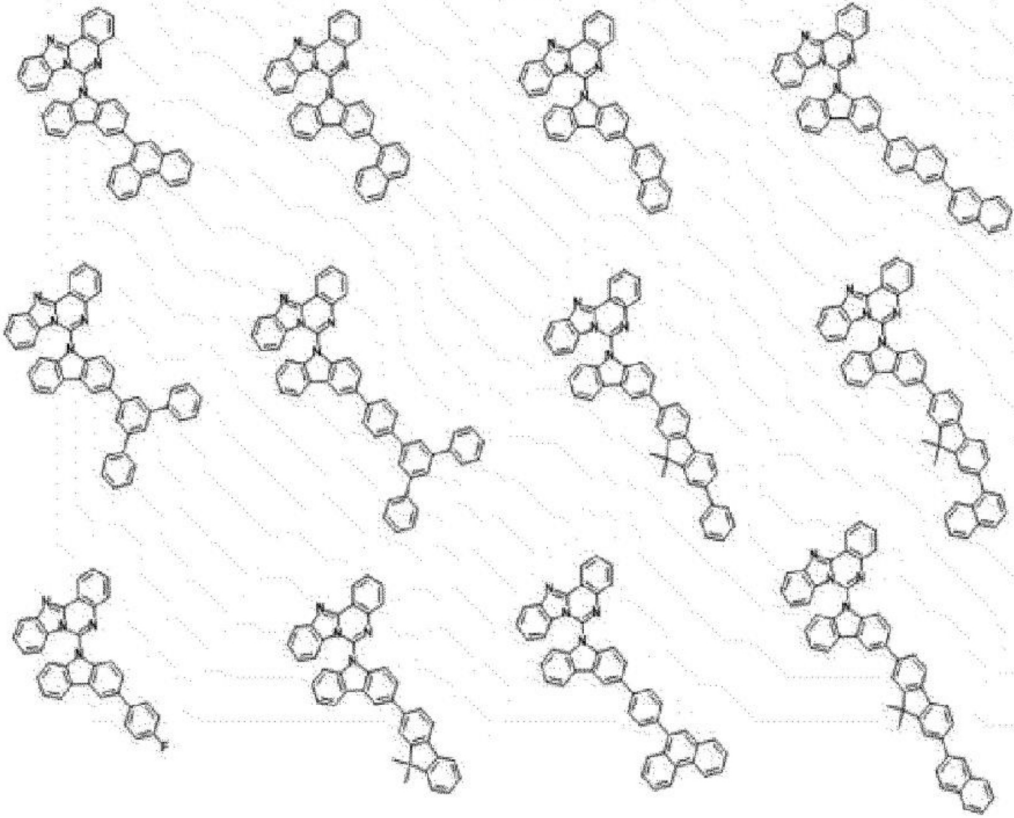
10

【化 4 7】



20

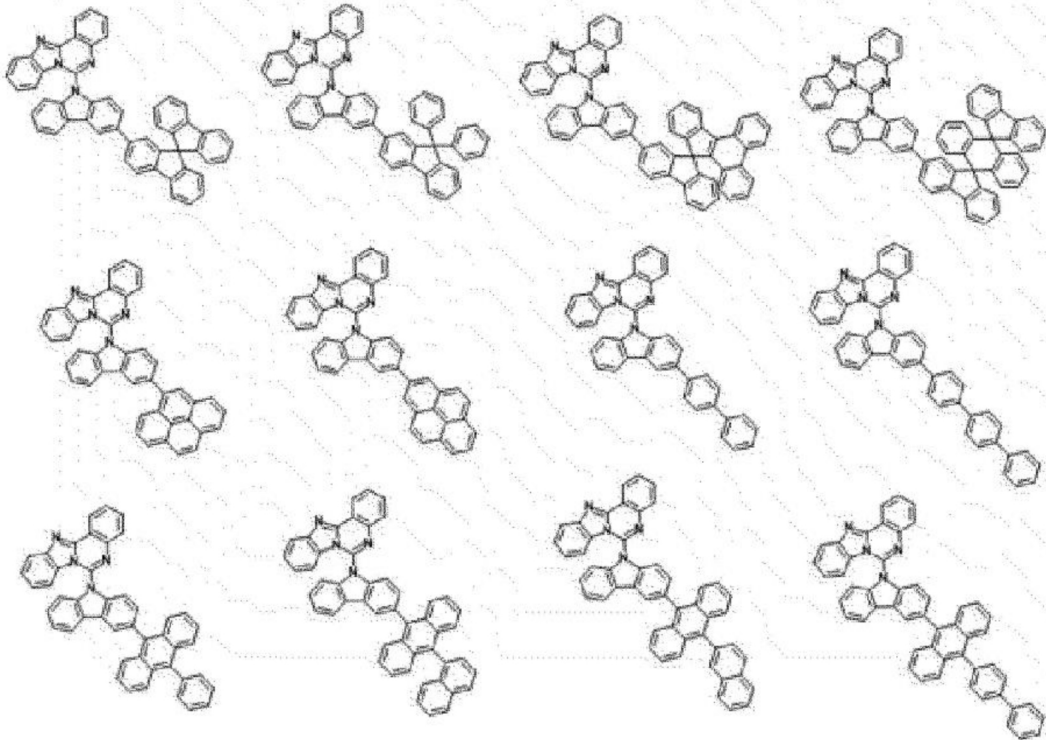
【化 4 8】



10

20

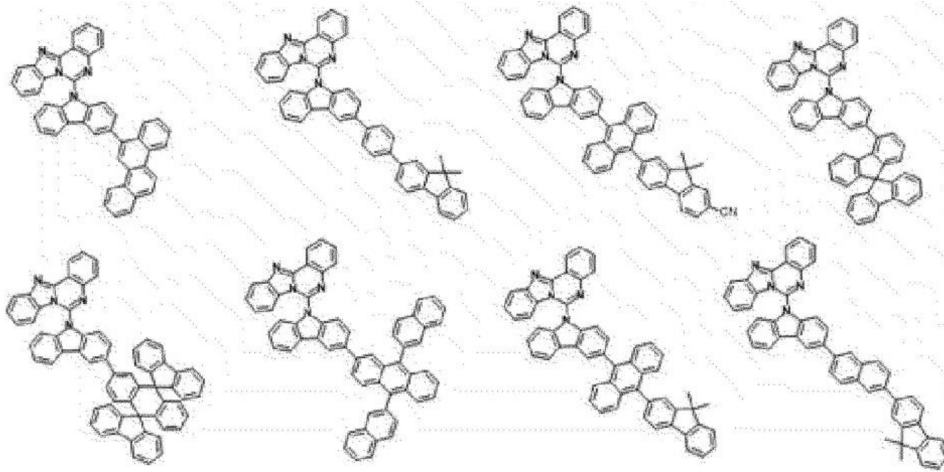
【化 4 9】



30

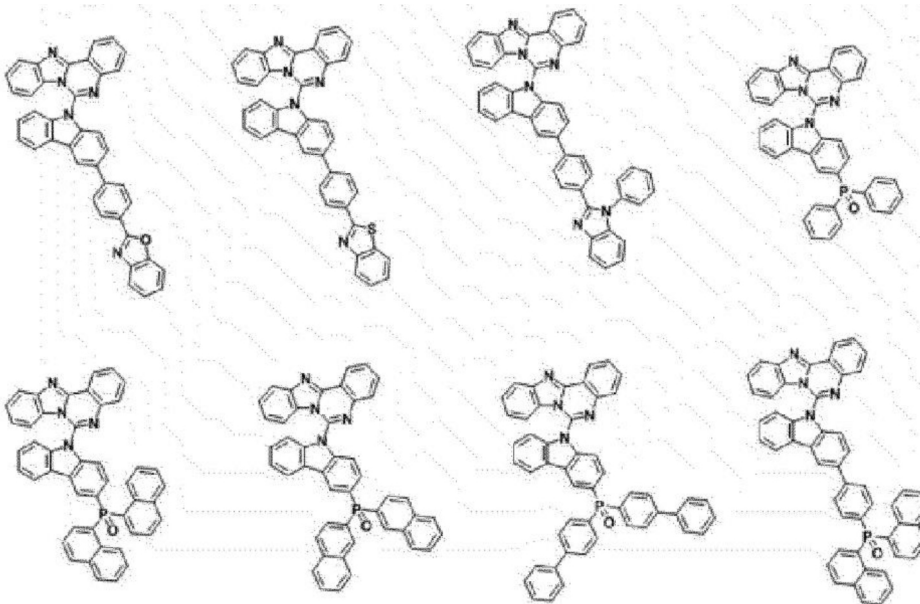
40

【化50】



10

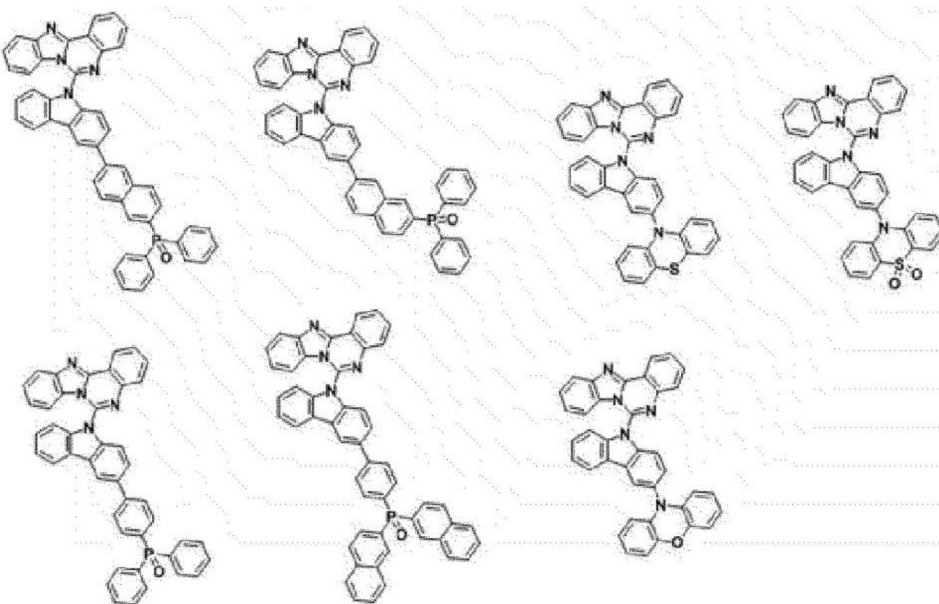
【化51】



20

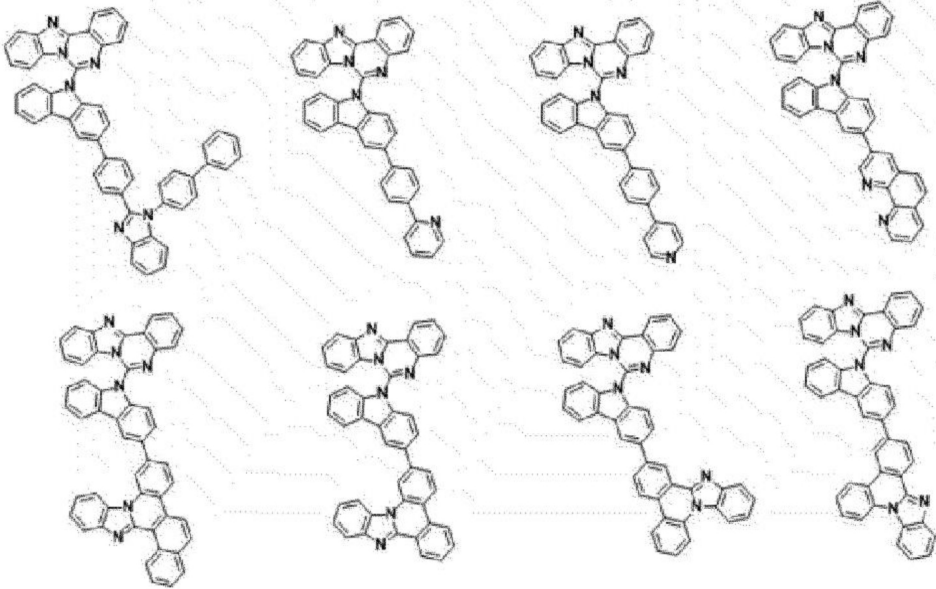
30

【化52】



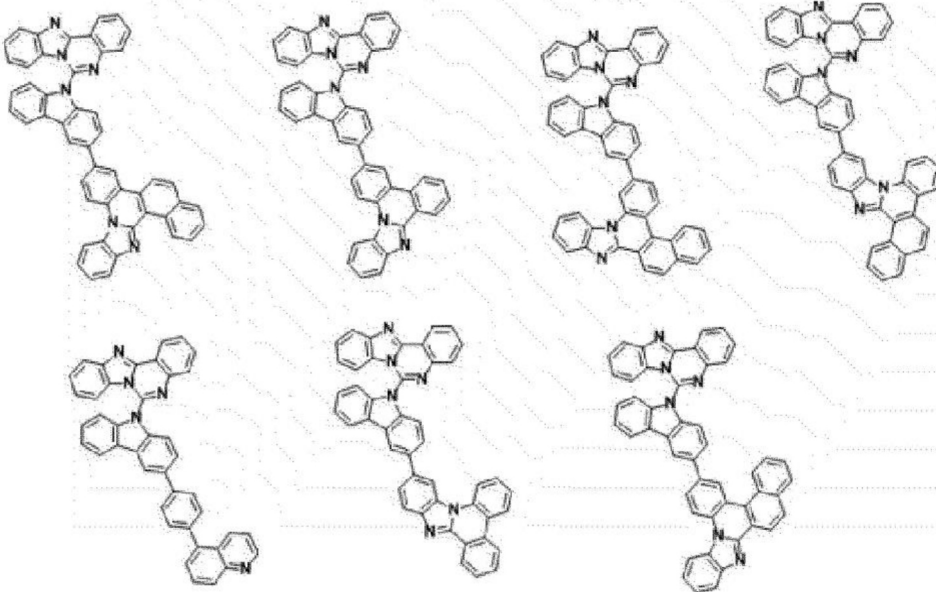
40

【化 5 3】



10

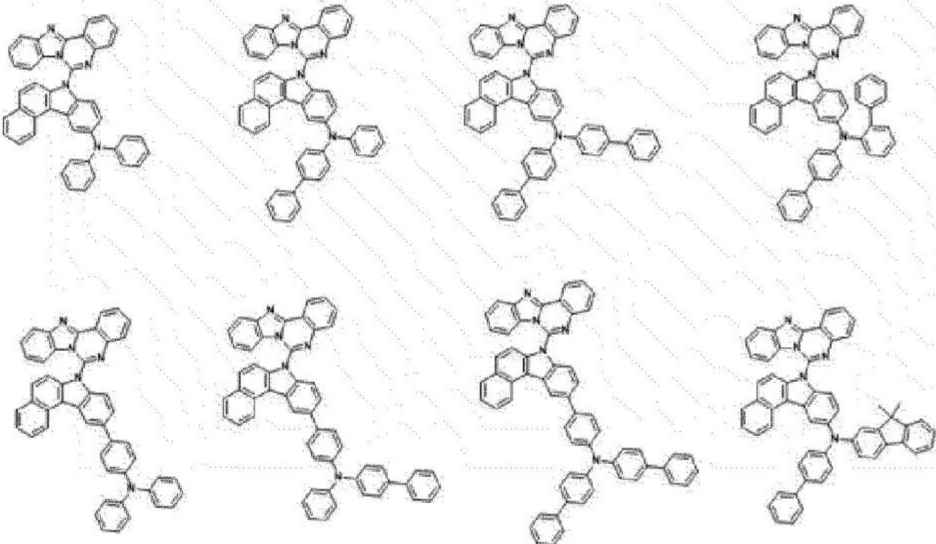
【化 5 4】



20

30

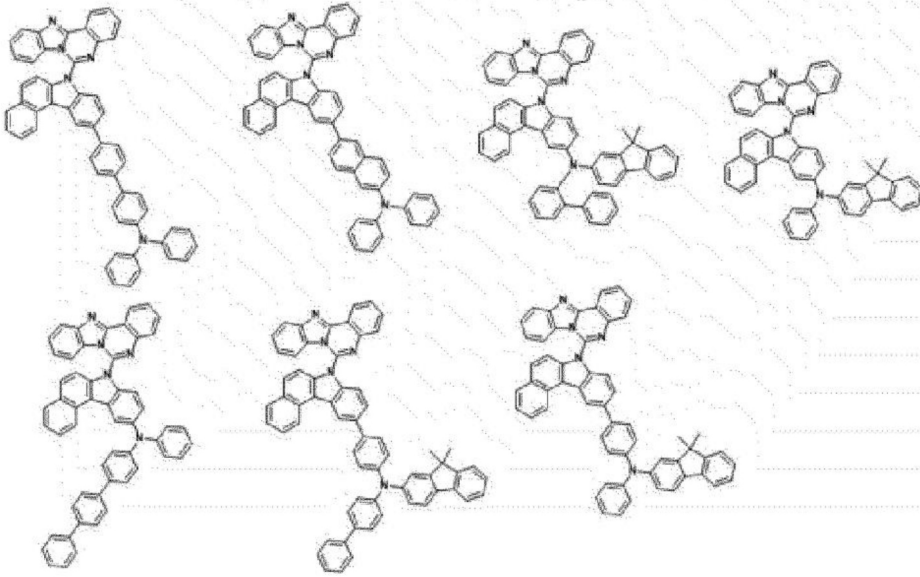
【化 5 5】



40

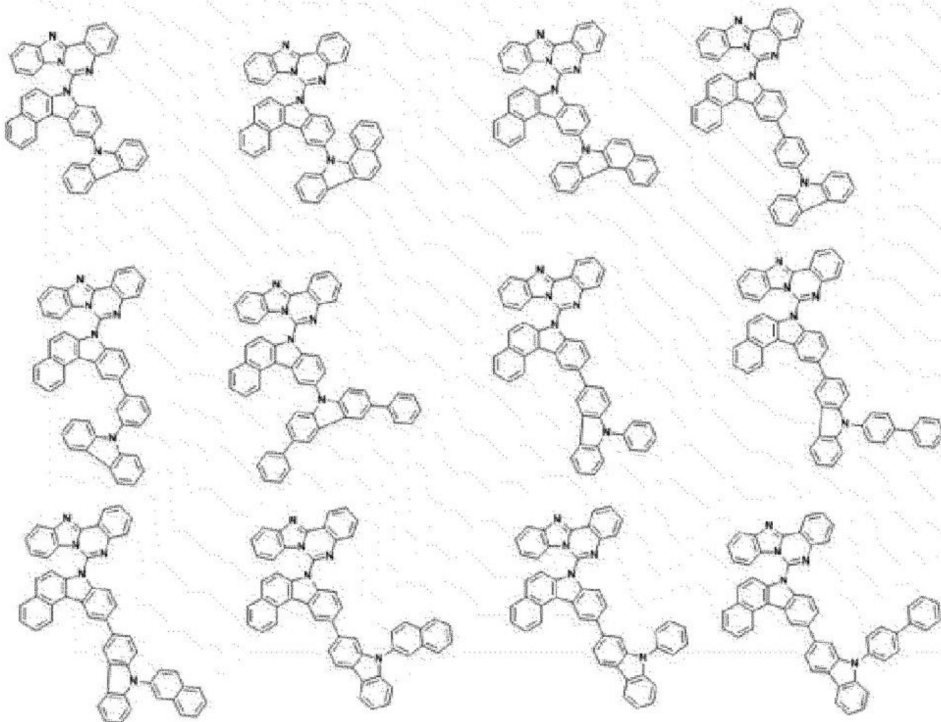
50

【化 5 6】



10

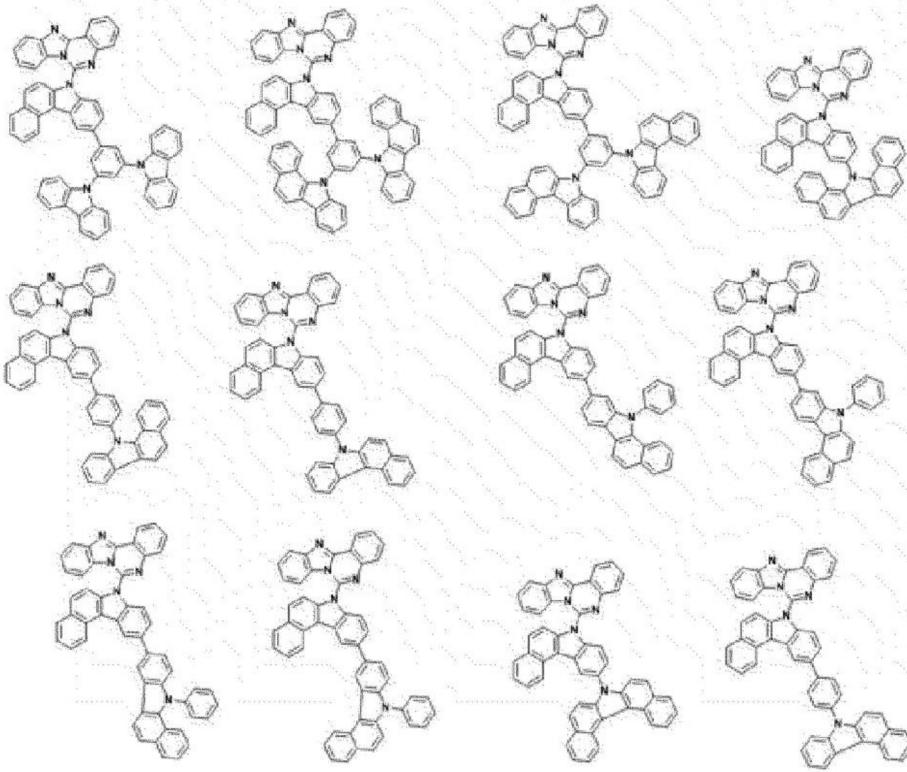
【化 5 7】



20

30

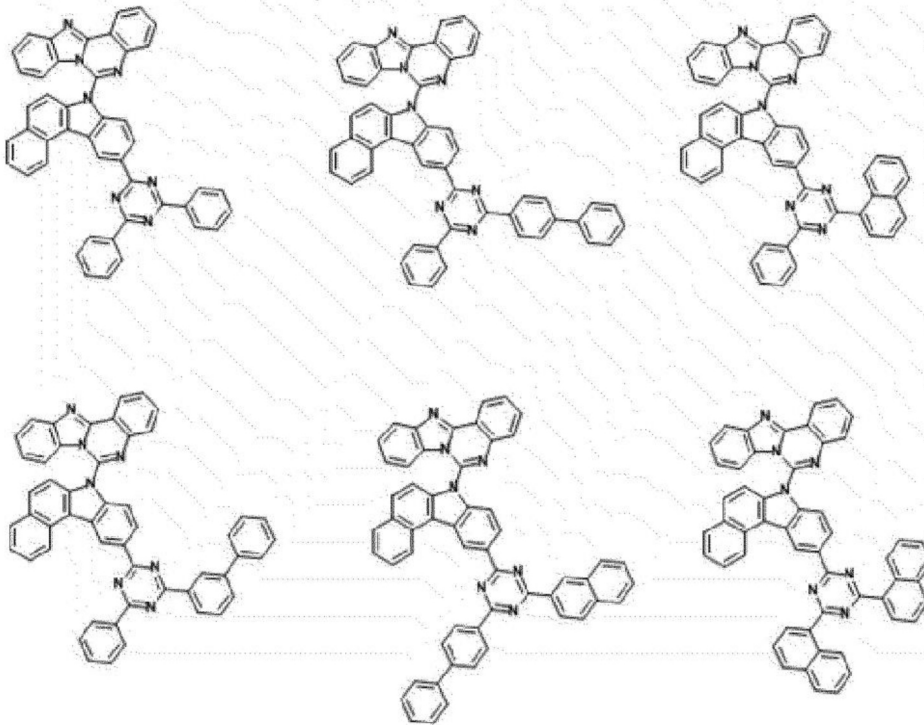
【化 5 8】



10

20

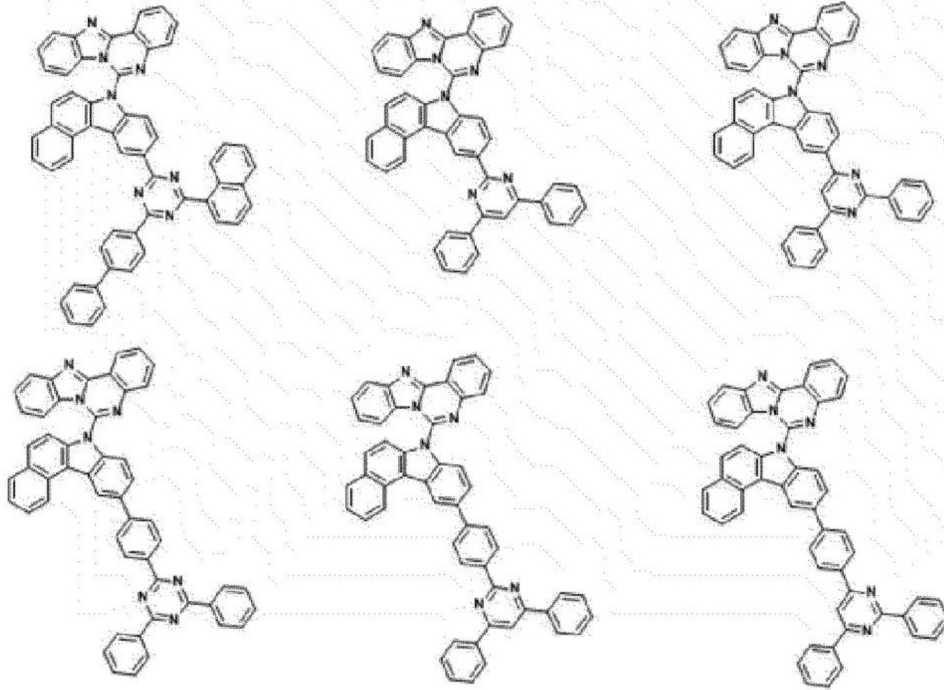
【化 5 9】



30

40

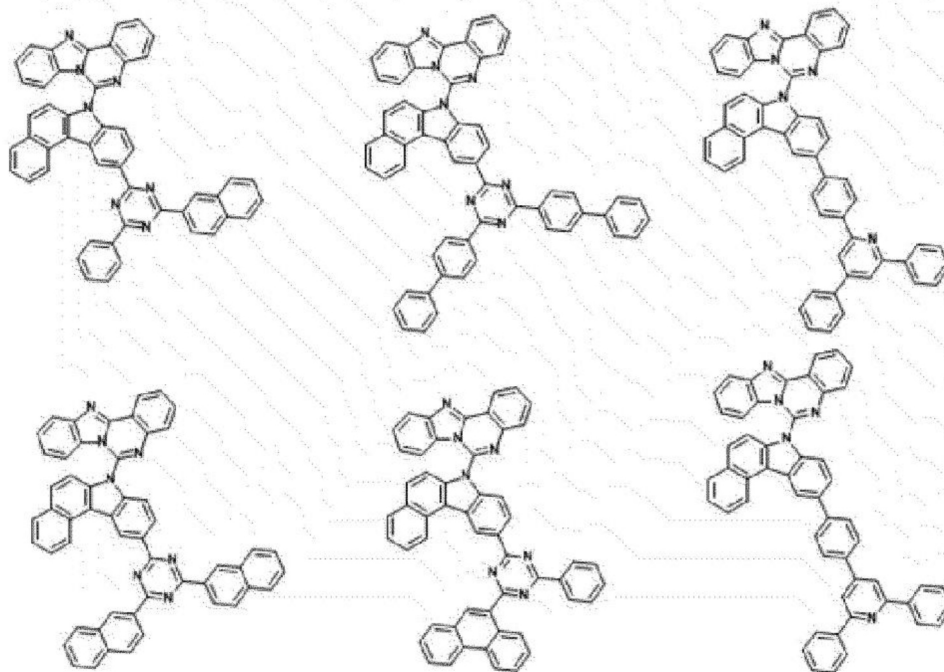
【化 6 0】



10

20

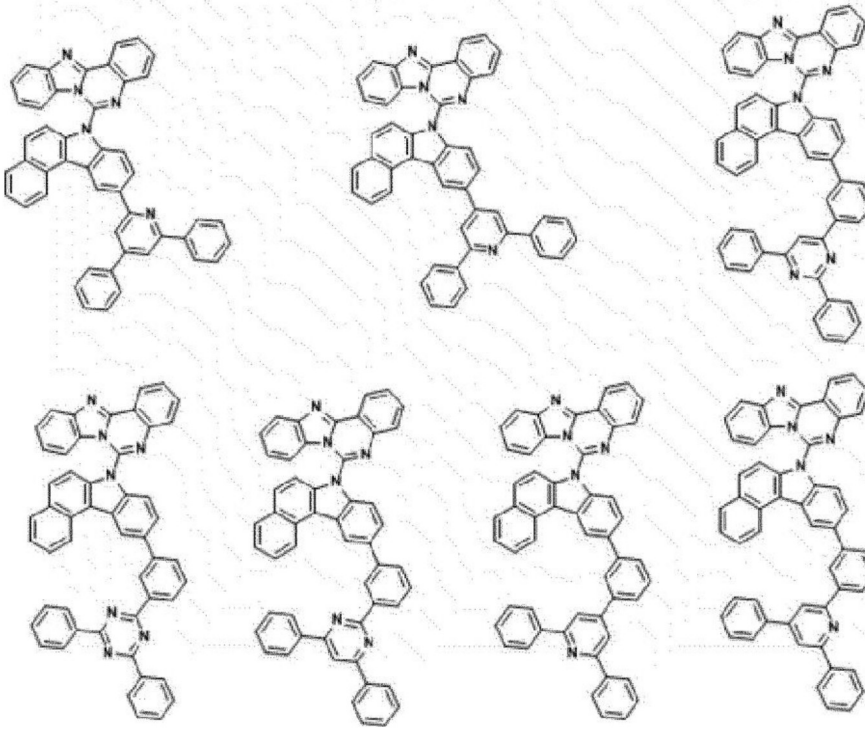
【化 6 1】



30

40

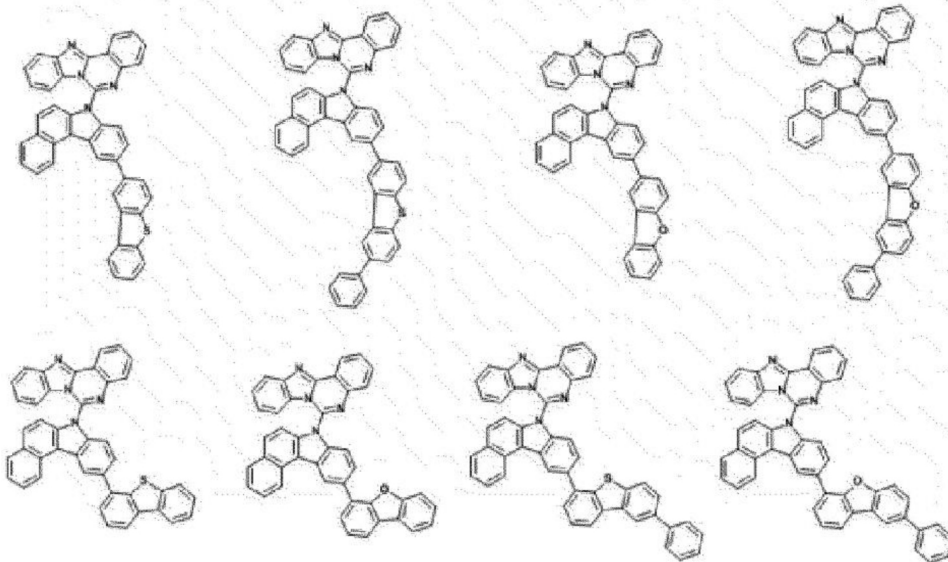
【化 6 2】



10

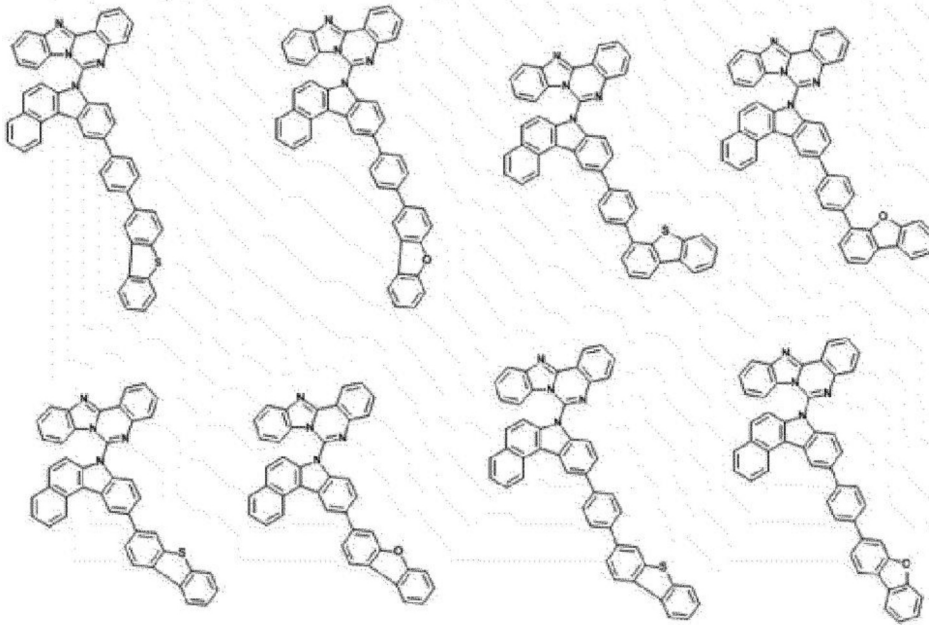
20

【化 6 3】



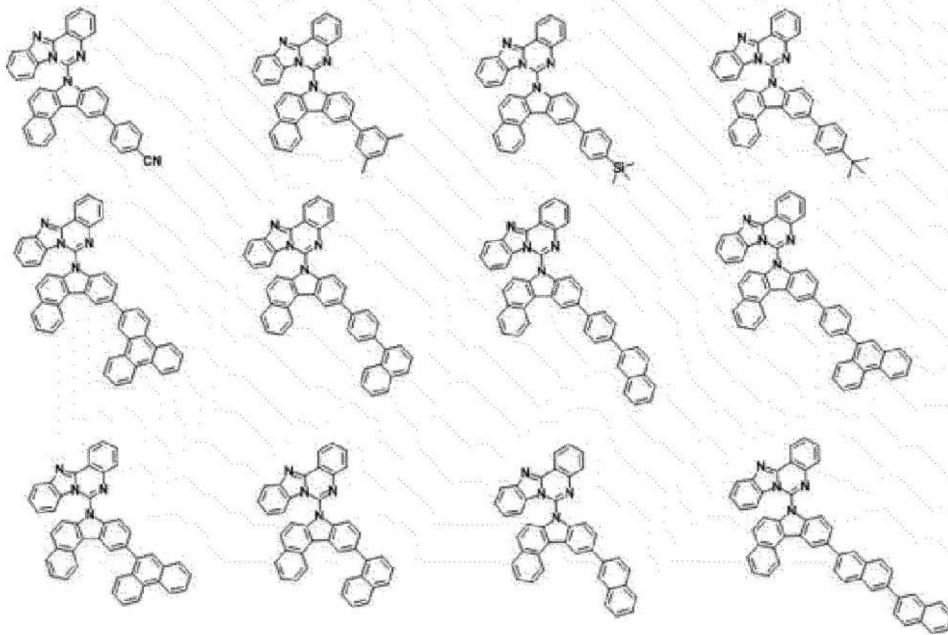
30

【化 6 4】



10

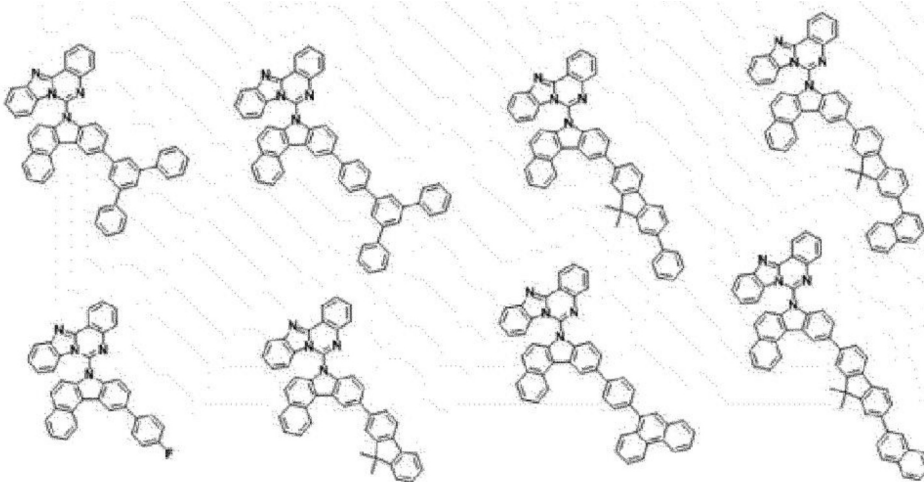
【化 6 5】



20

30

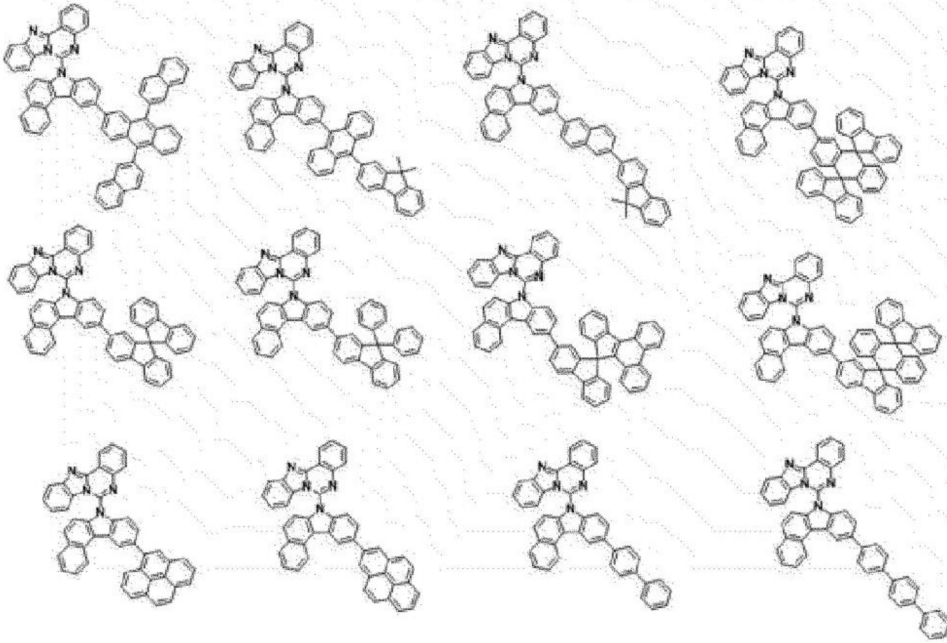
【化 6 6】



40

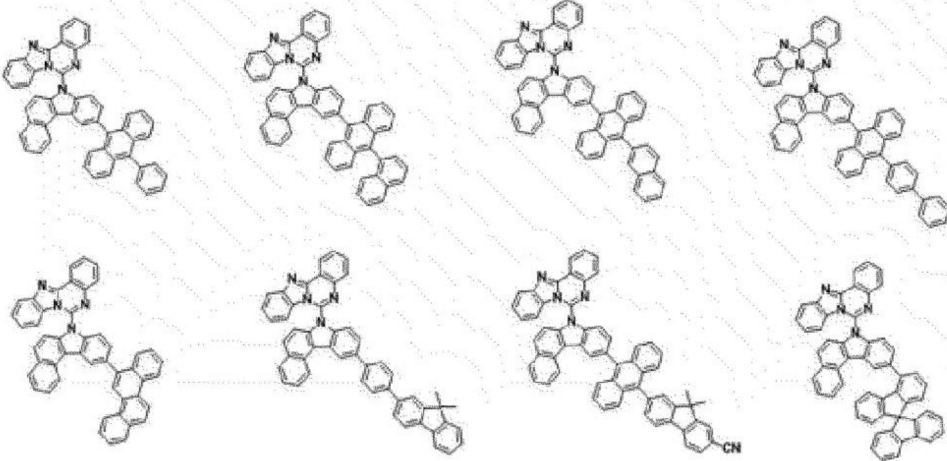
50

【化 6 7】



10

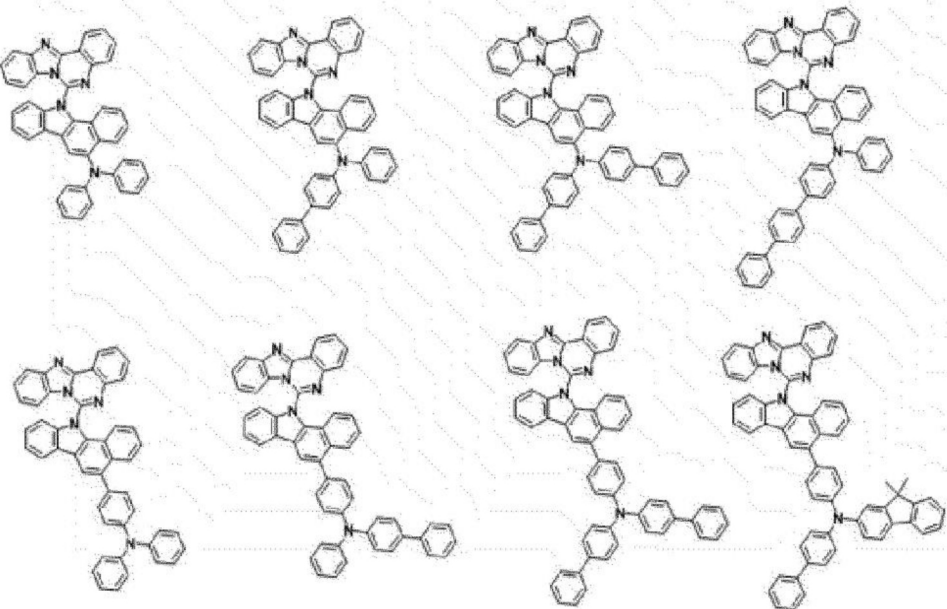
【化 6 8】



20

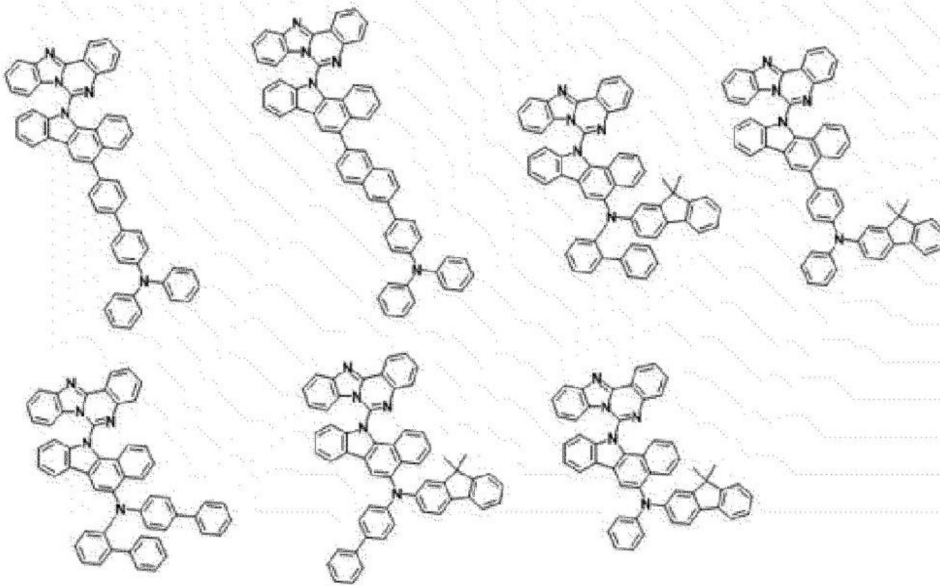
30

【化 6 9】



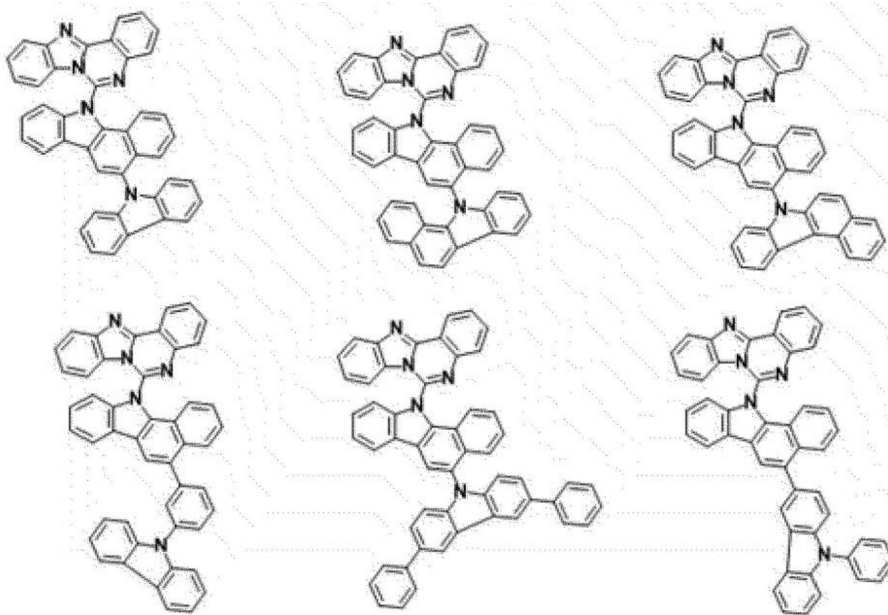
40

【化70】



10

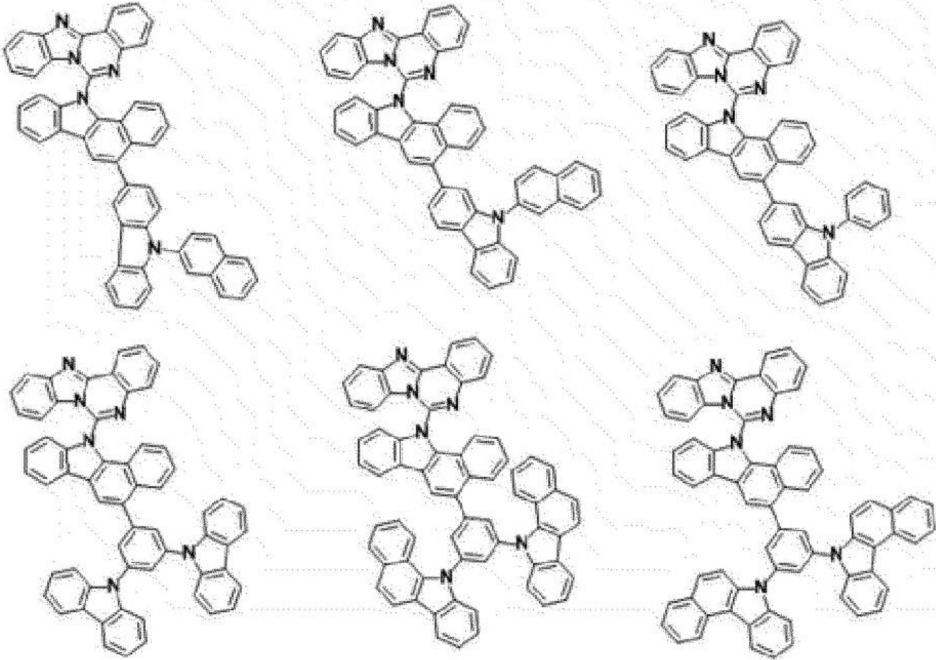
【化71】



20

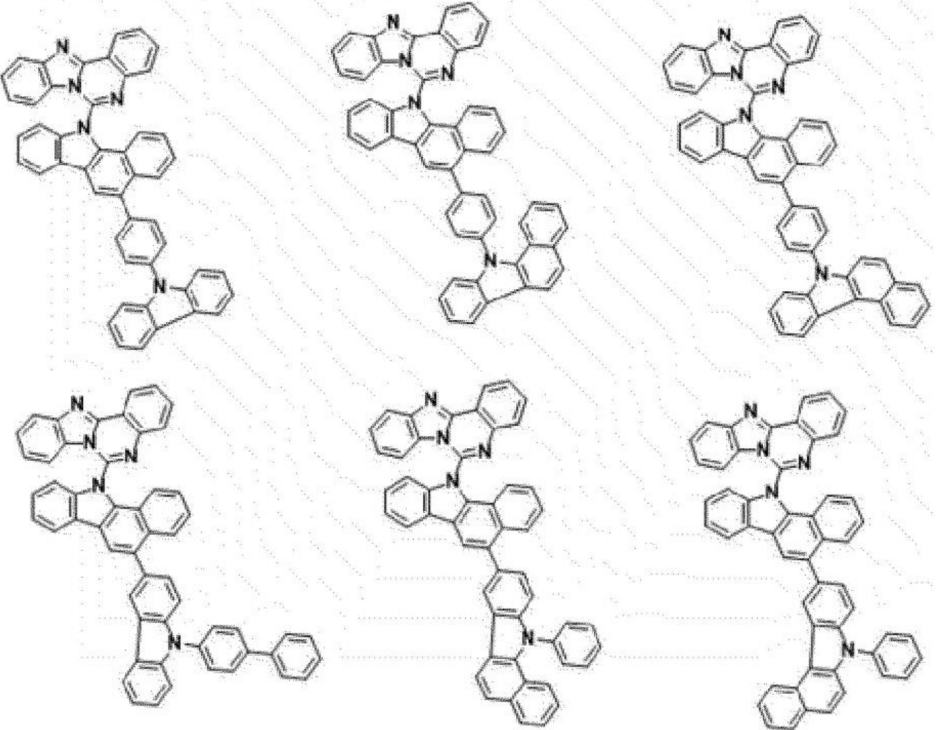
30

【化72】



10

【化73】

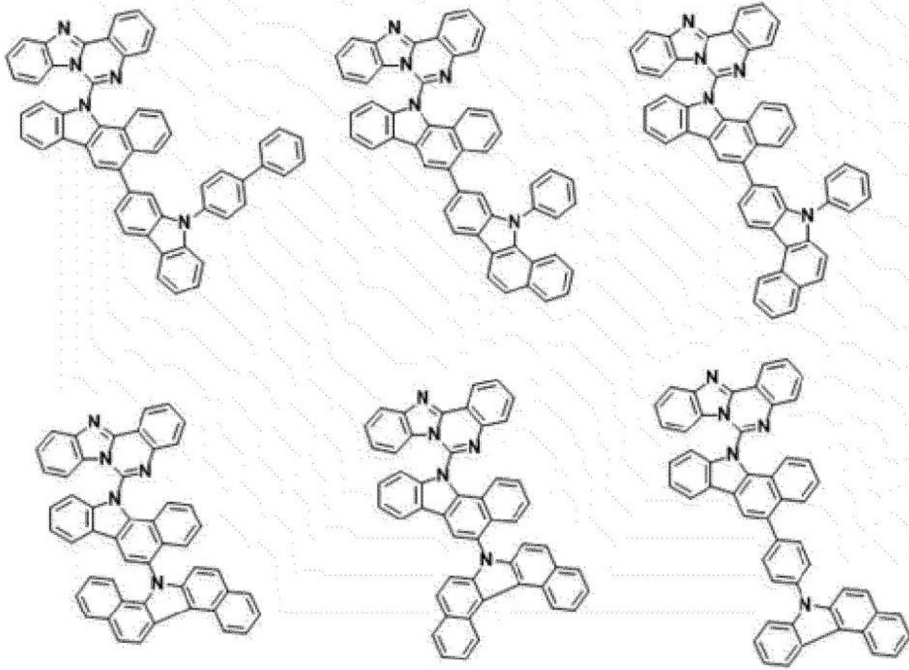


20

30

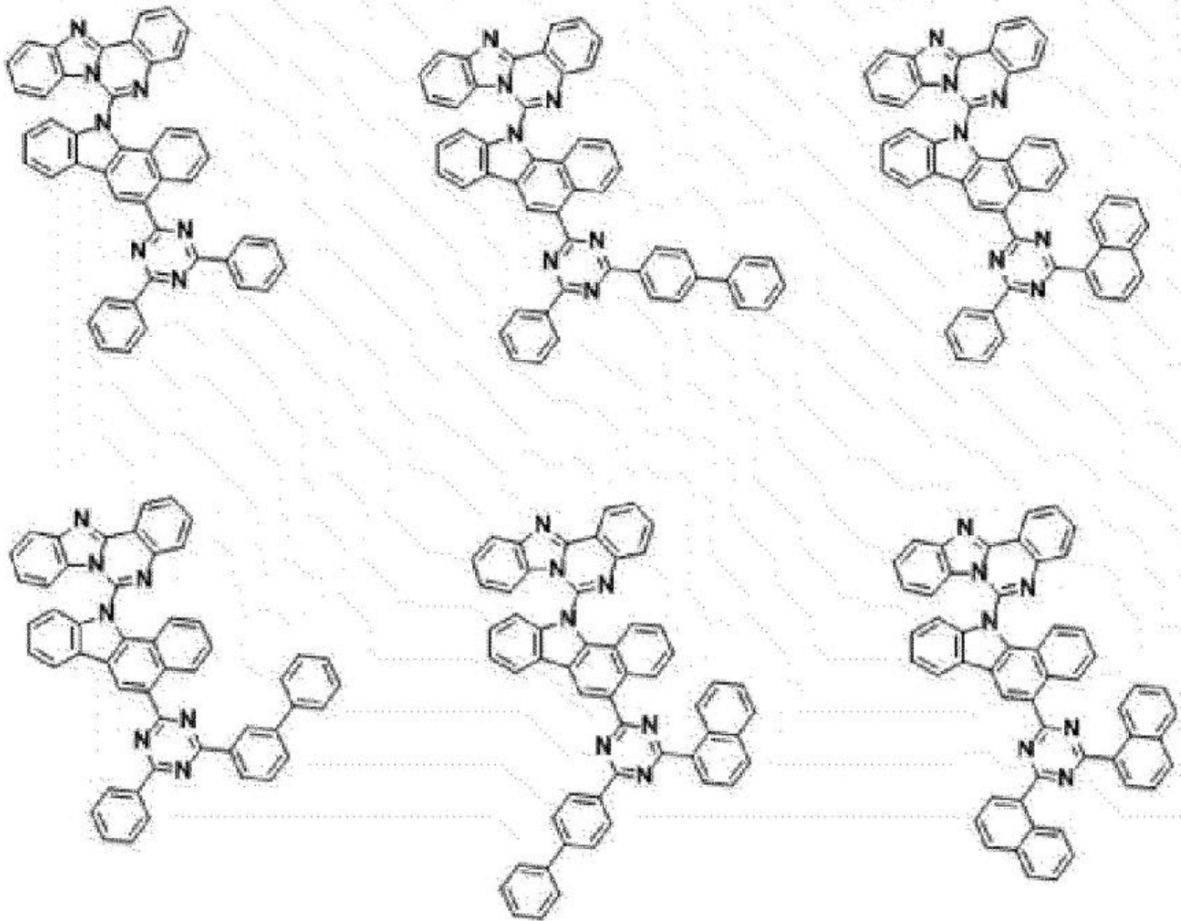
40

【化74】



10

【化75】

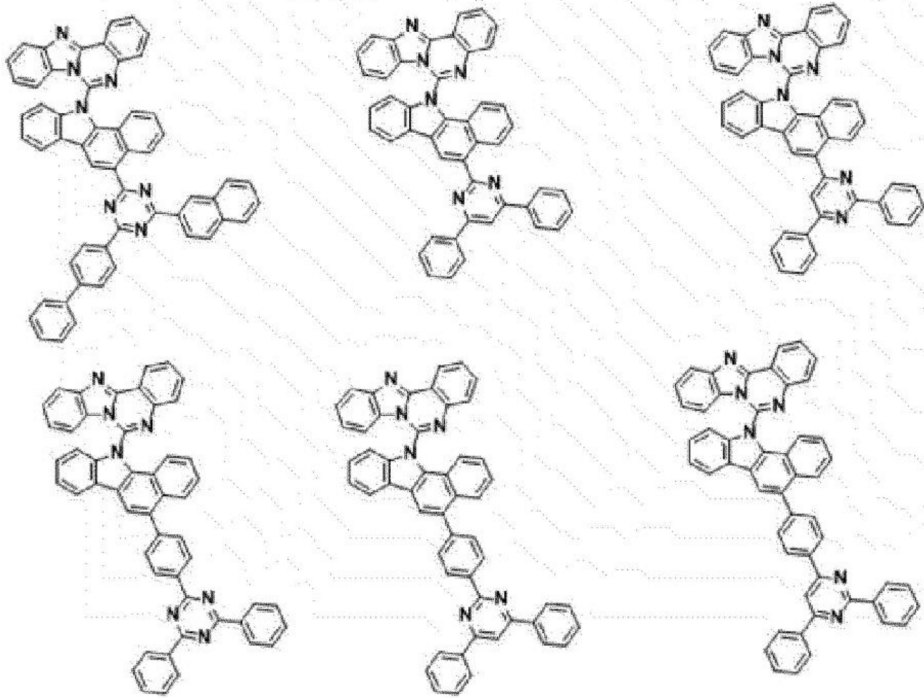


20

30

40

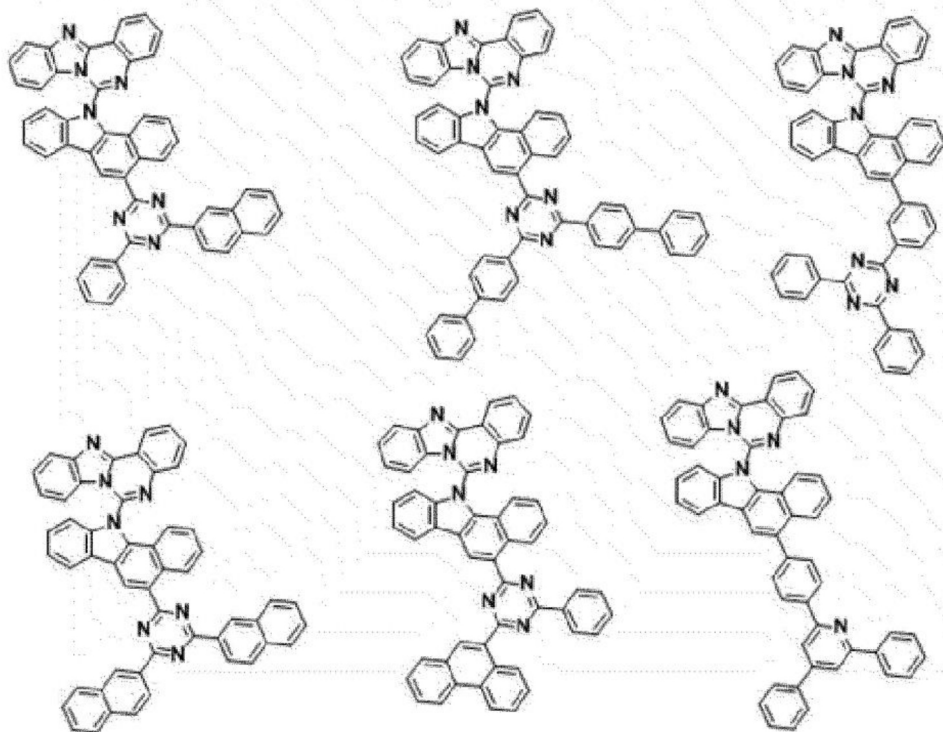
【化76】



10

20

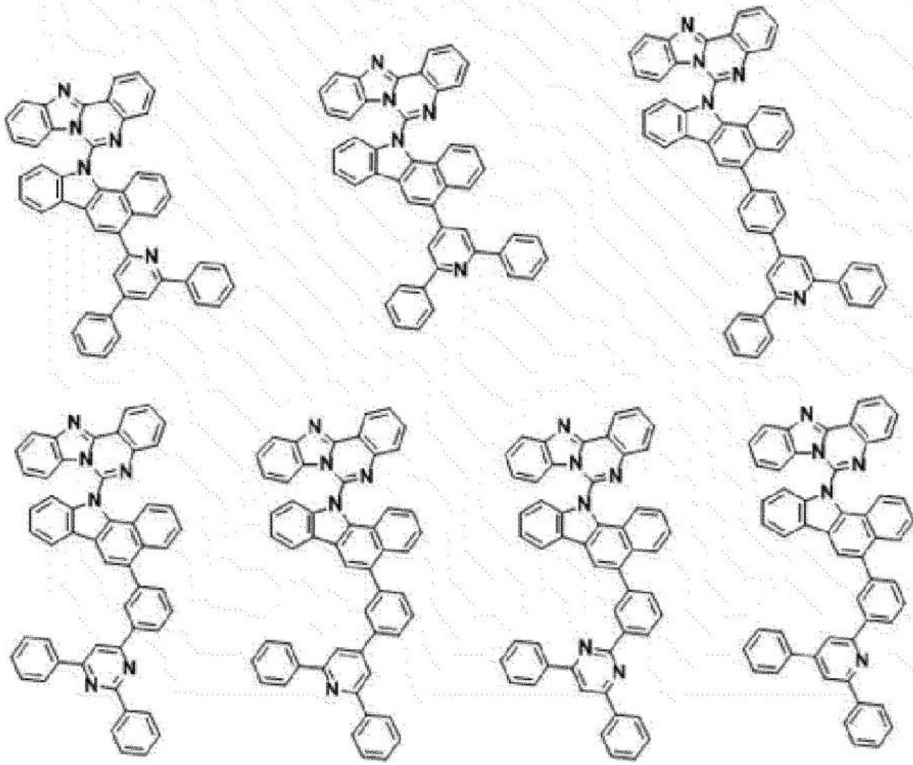
【化77】



30

40

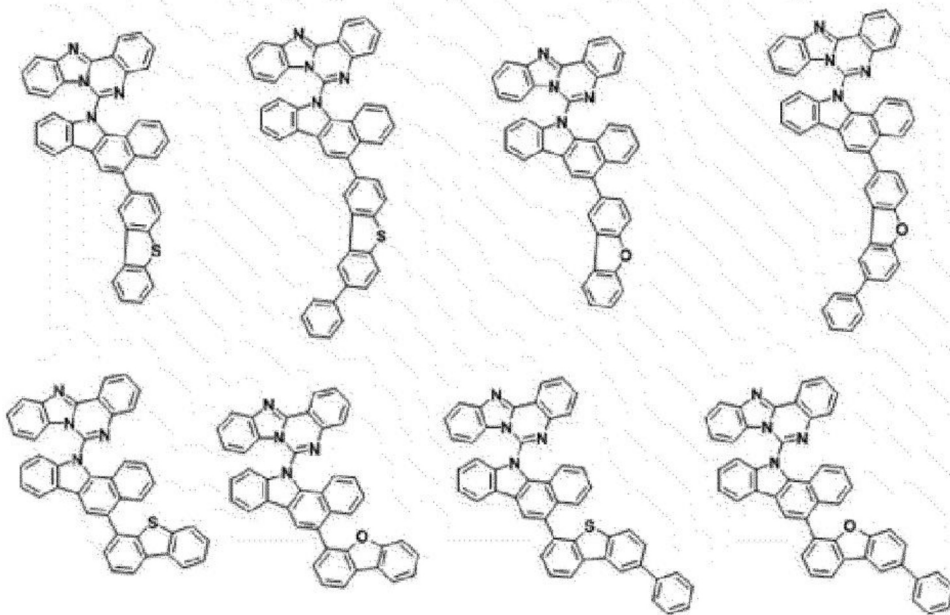
【化 7 8】



10

20

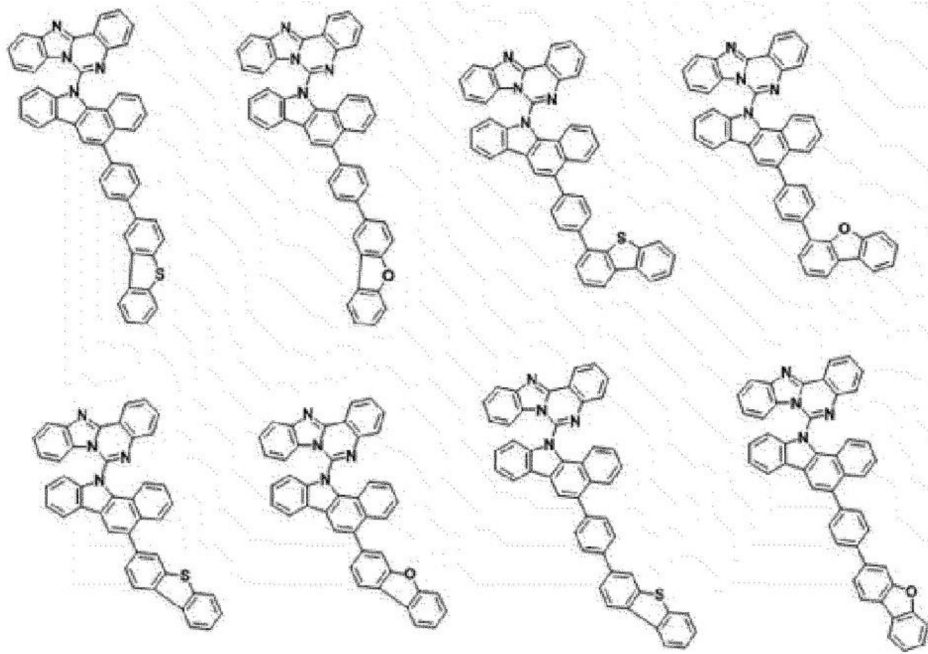
【化 7 9】



30

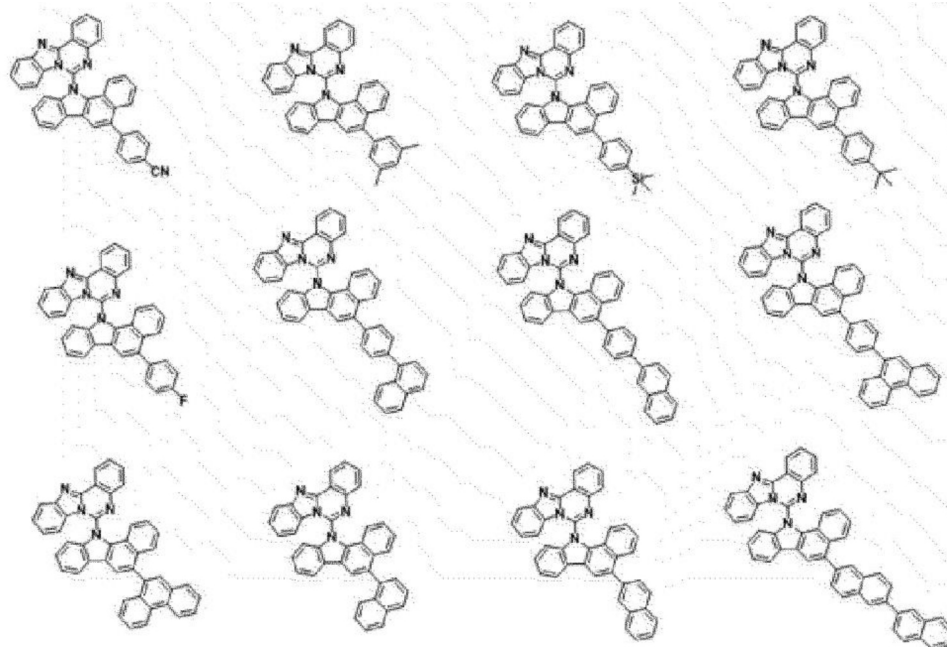
40

【化 8 0】



10

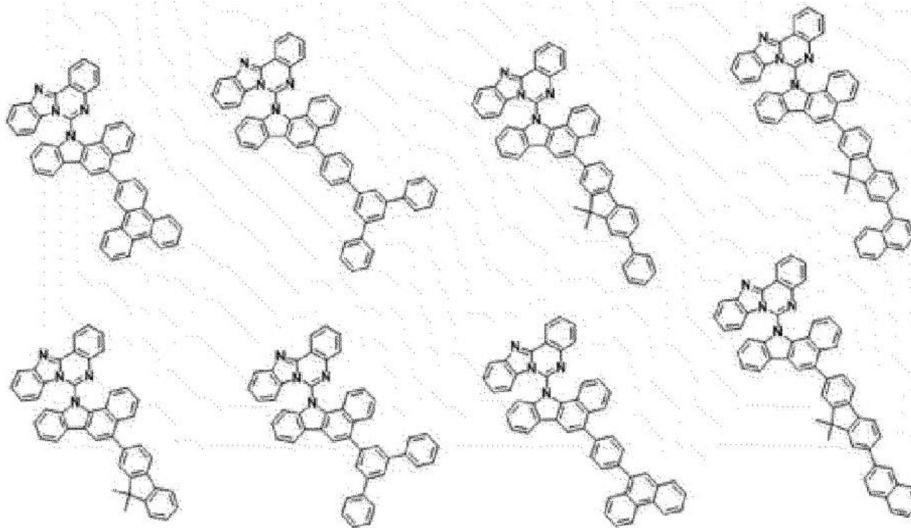
【化 8 1】



20

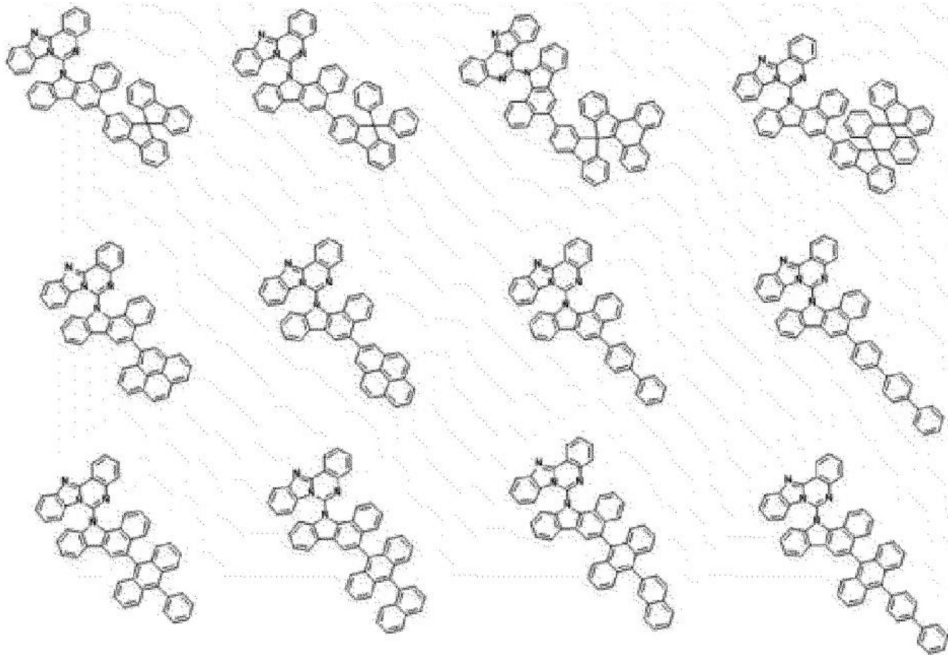
30

【化 8 2】



10

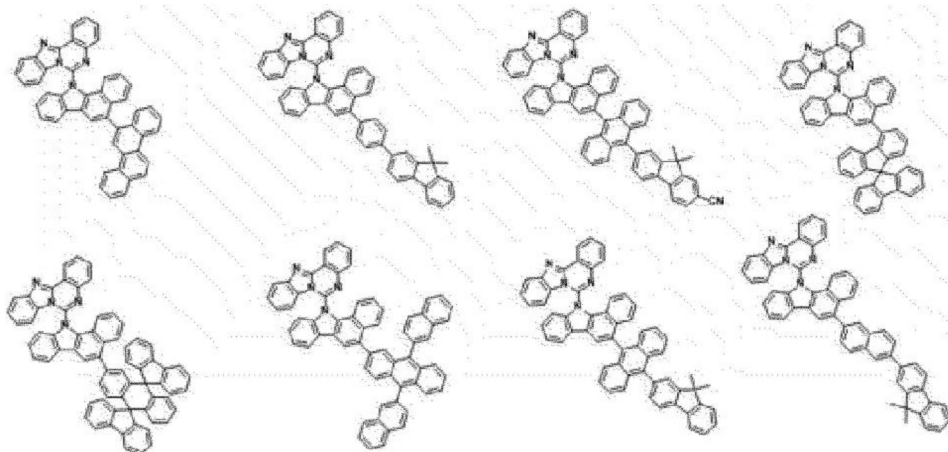
【化 8 3】



20

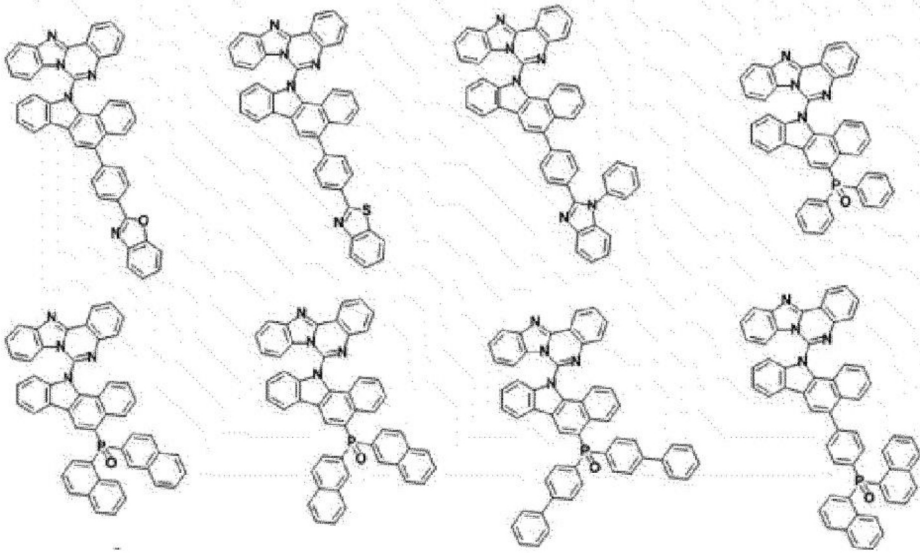
30

【化 8 4】



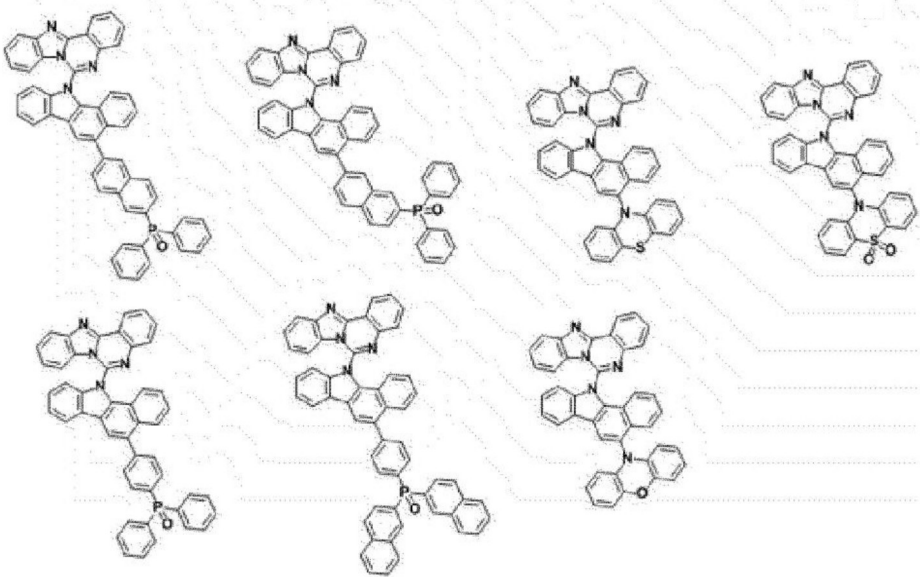
40

【化 8 5】



10

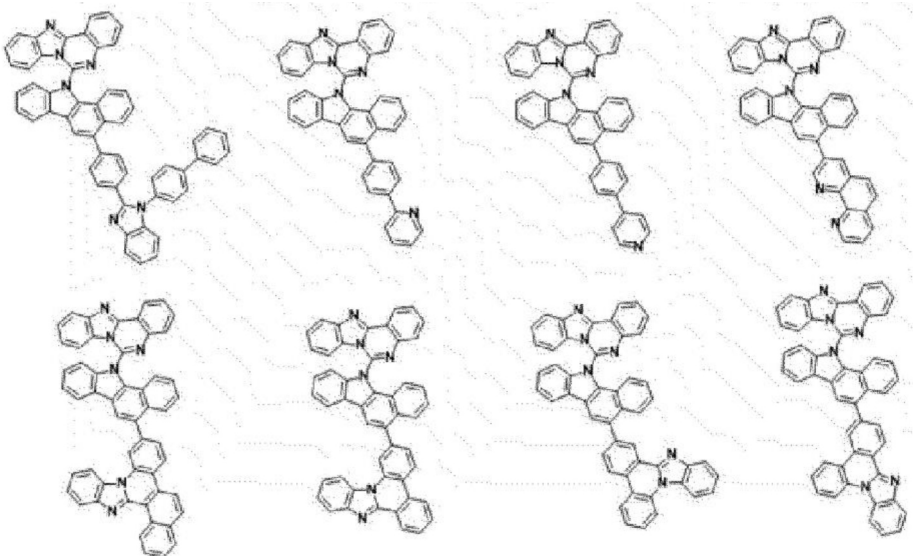
【化 8 6】



20

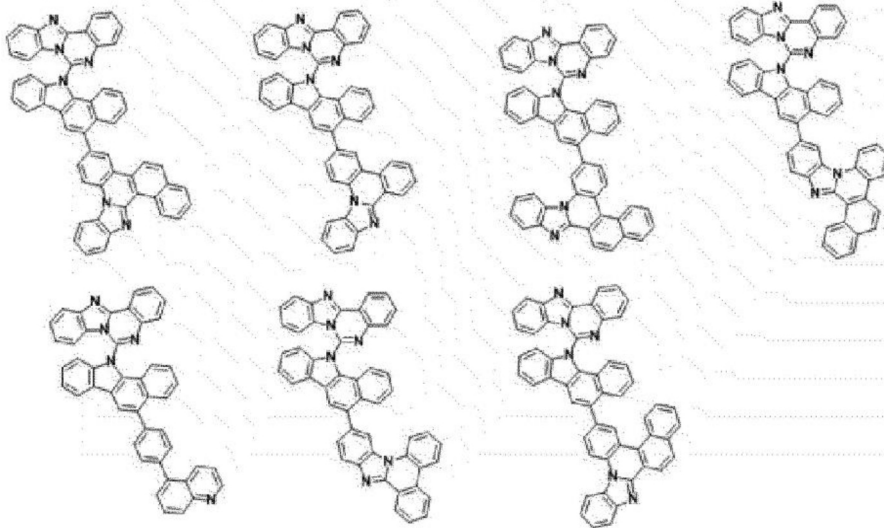
30

【化 8 7】



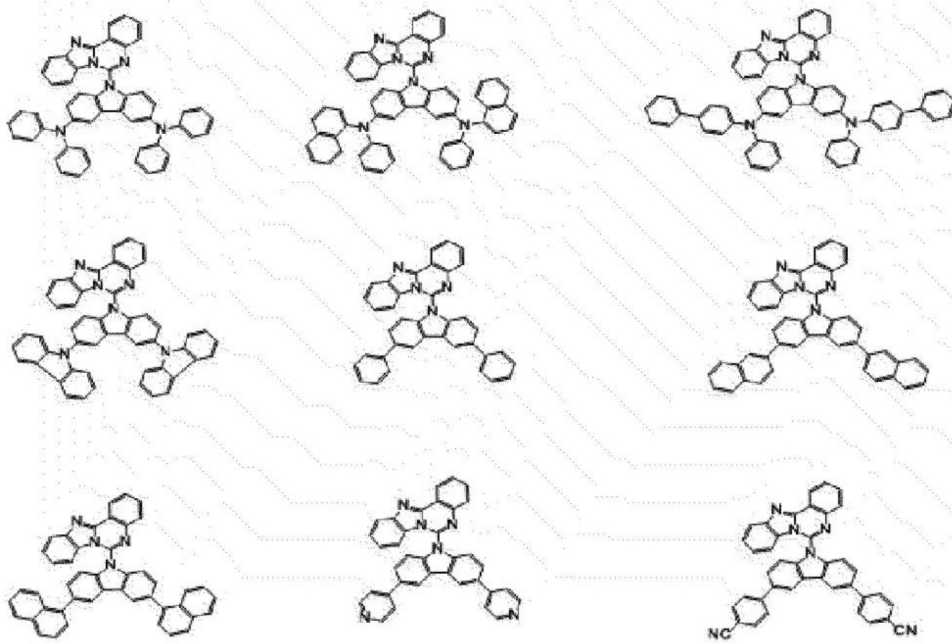
40

【化 8 8】



10

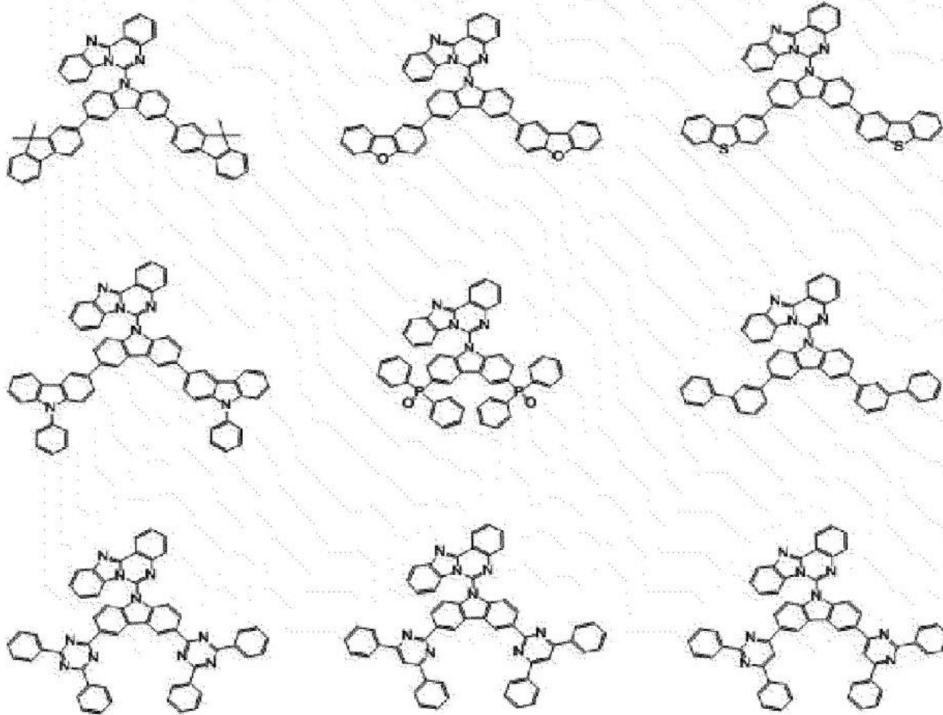
【化 8 9】



20

30

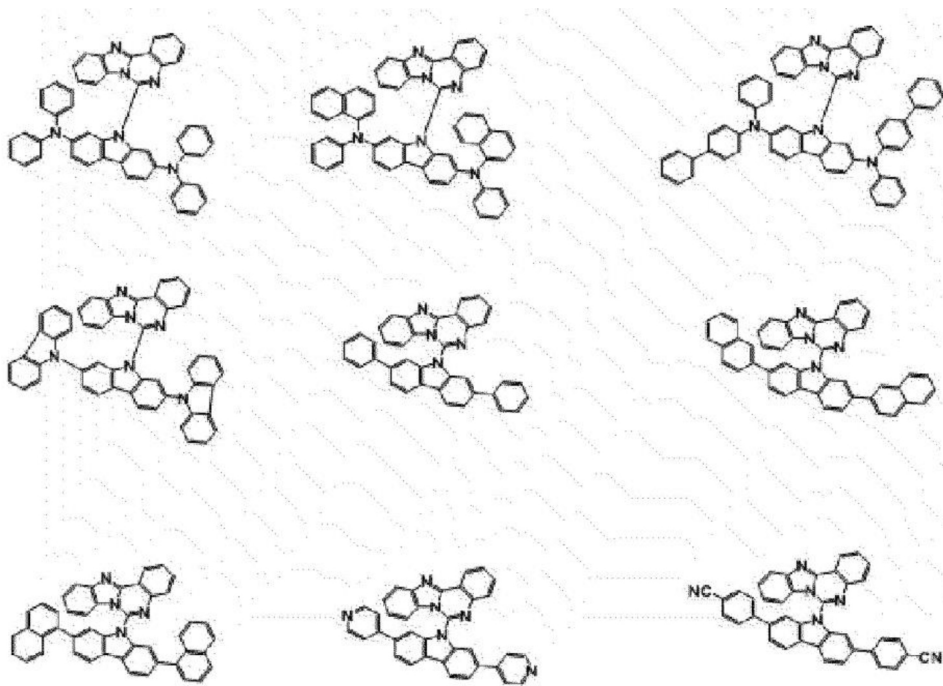
【化90】



10

20

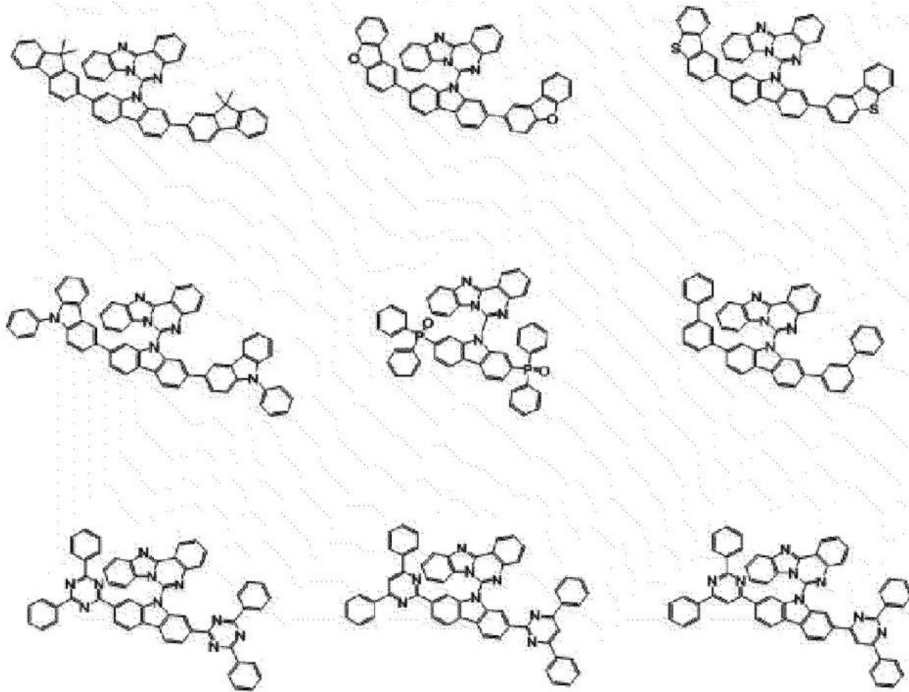
【化91】



30

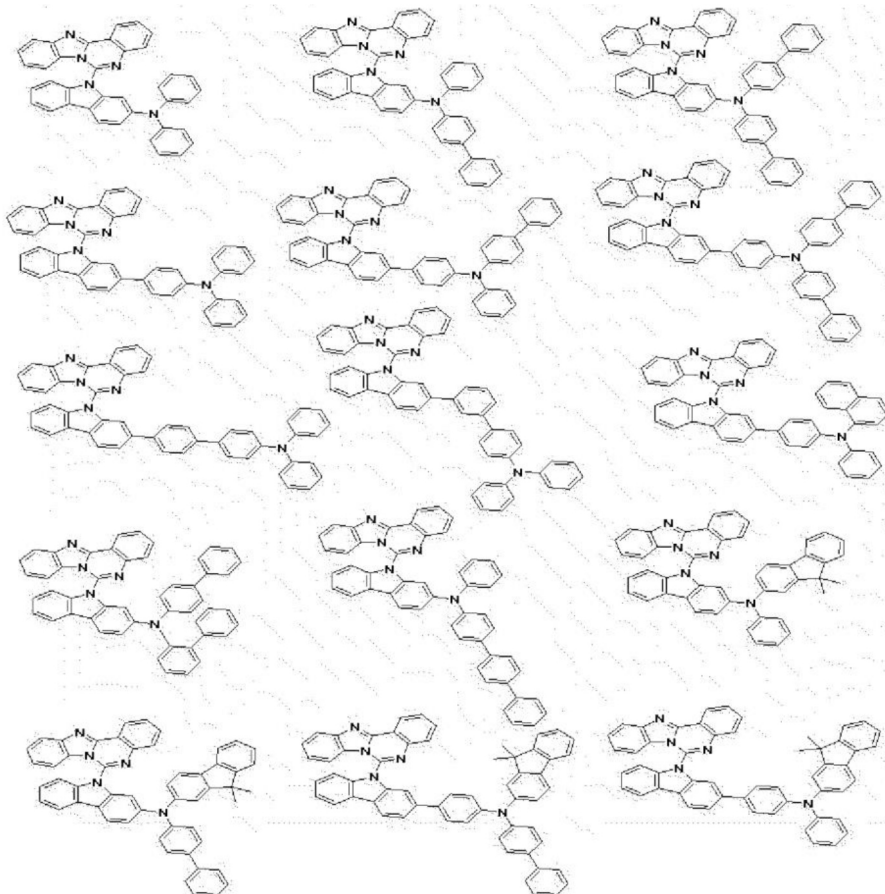
40

【化92】



10

【化93】

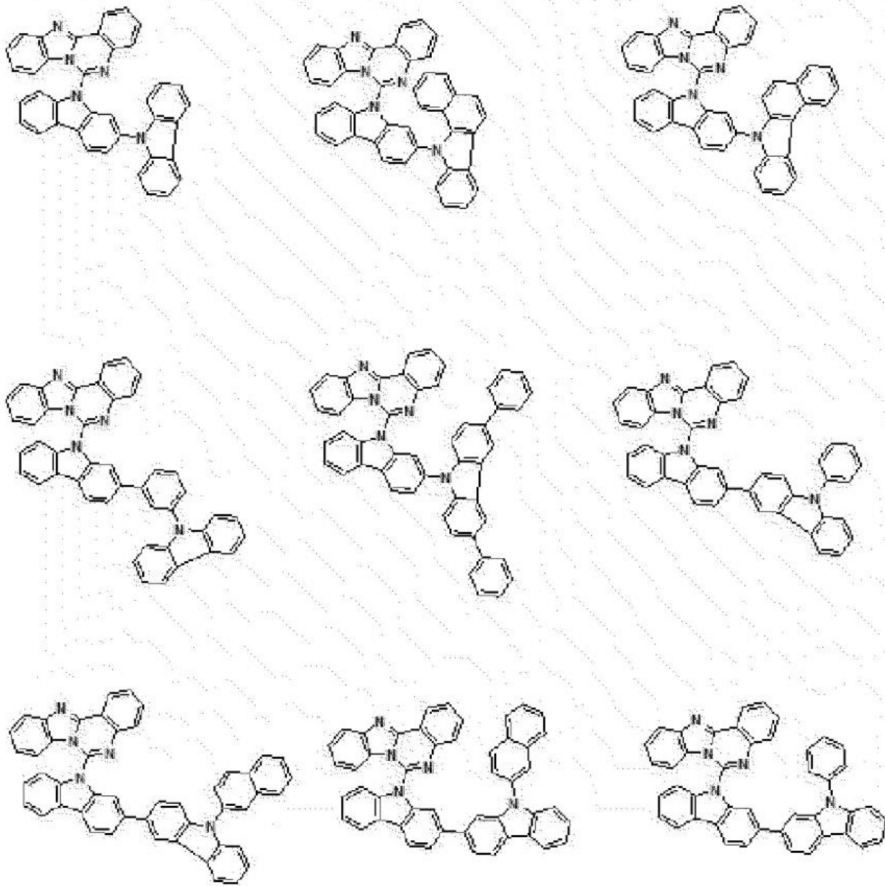


20

30

40

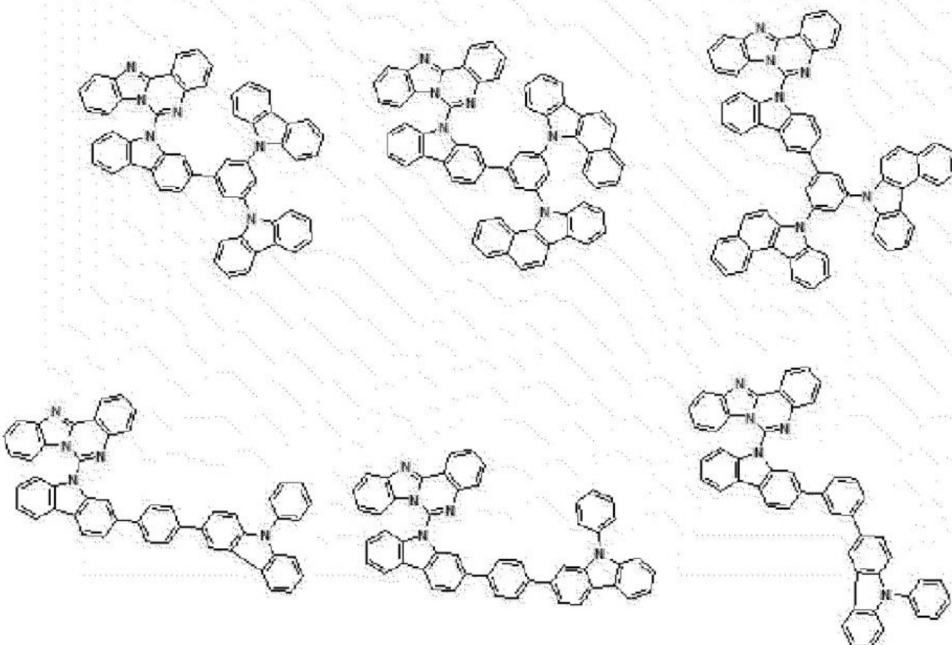
【化 9 4】



10

20

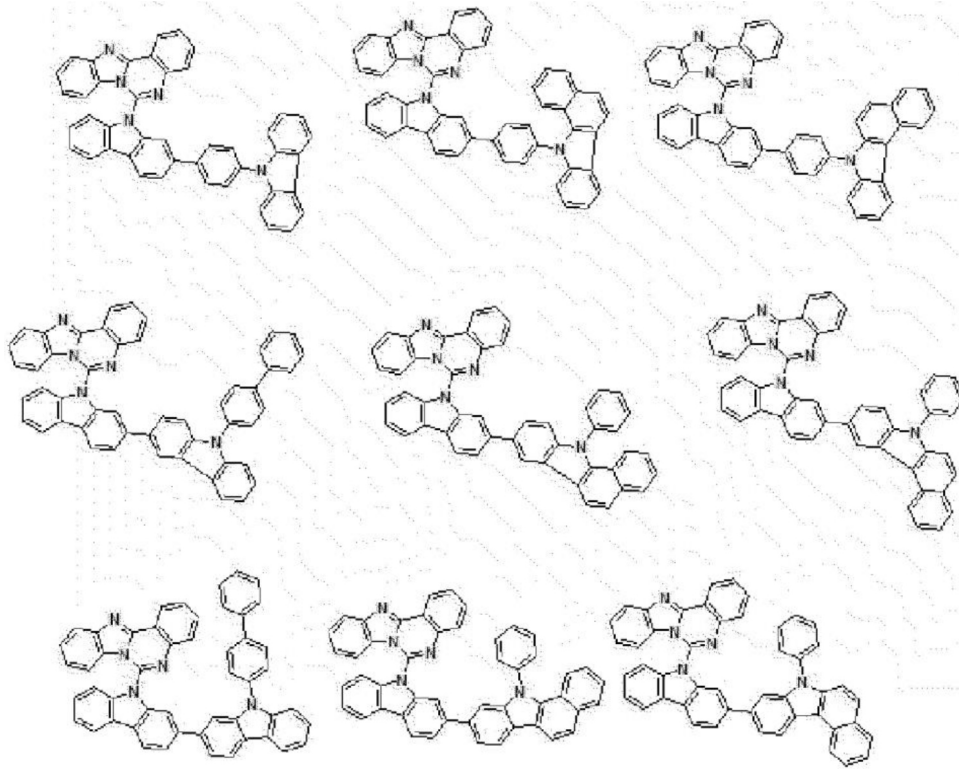
【化 9 5】



30

40

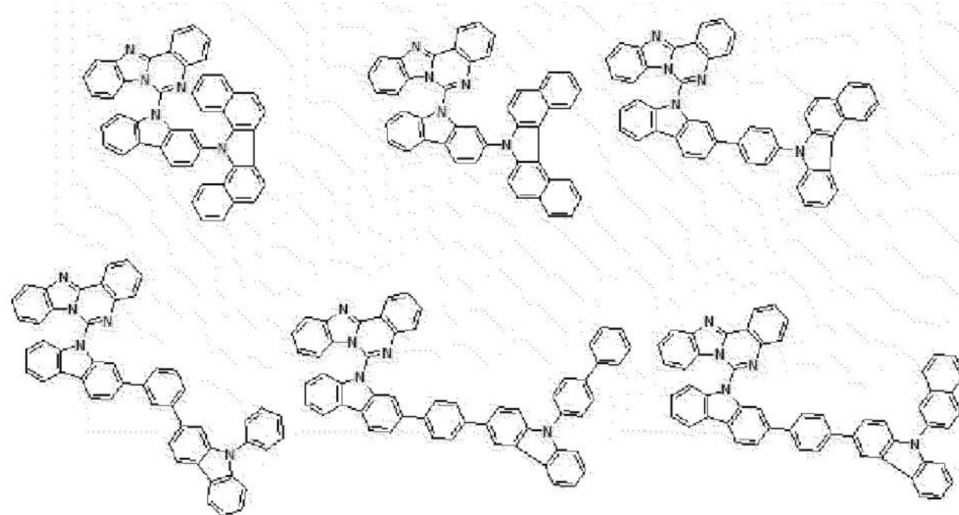
【化 9 6】



10

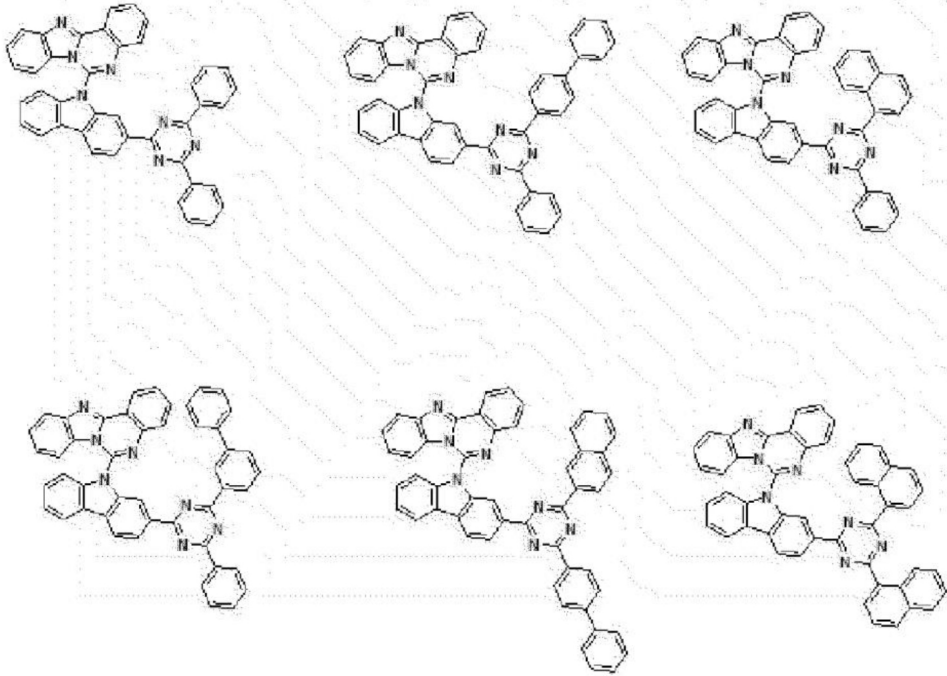
20

【化 9 7】



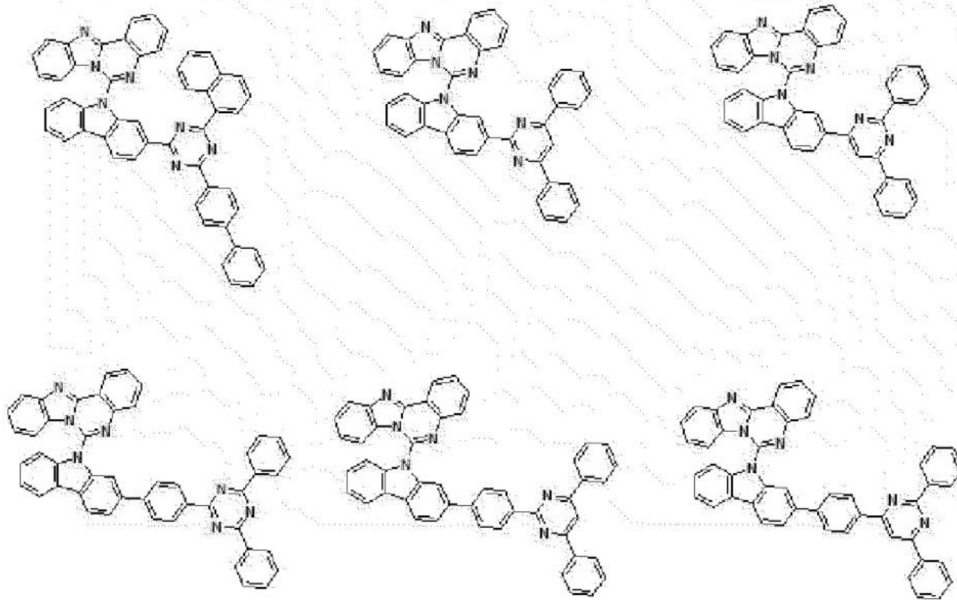
30

【化98】



10

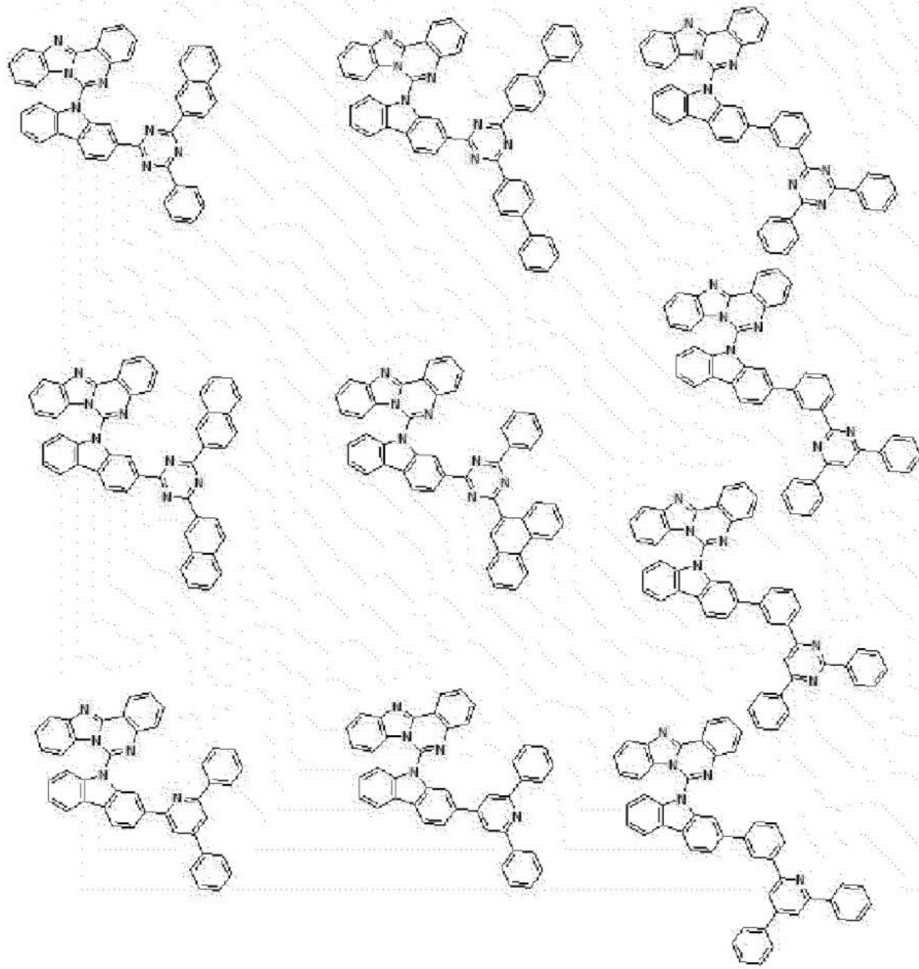
【化99】



20

30

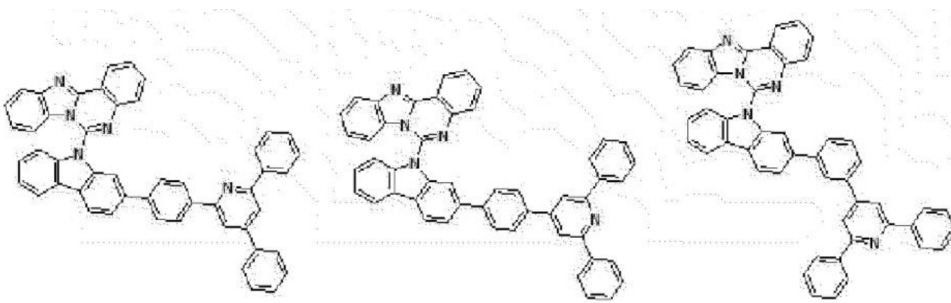
【化100】



10

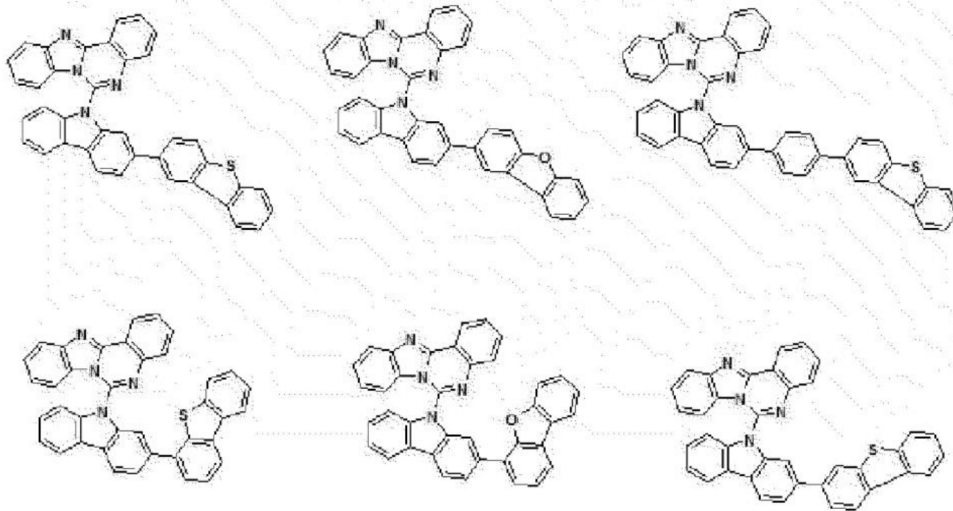
20

【化101】



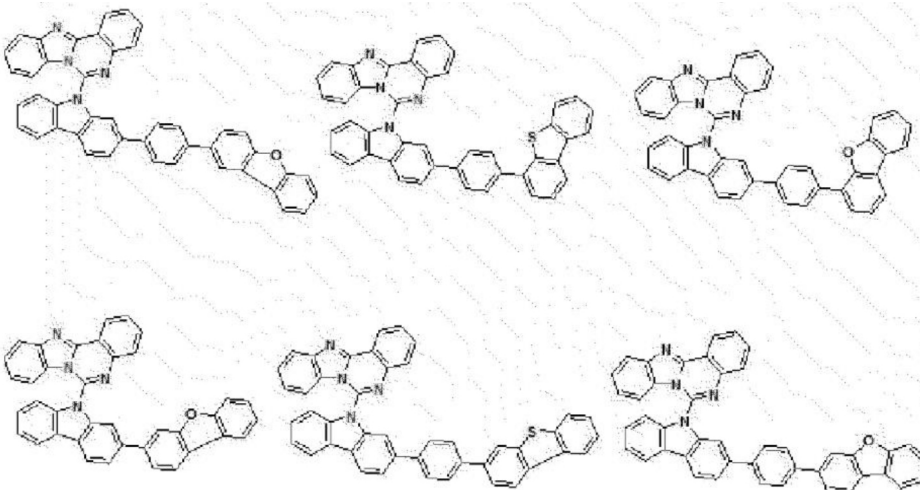
30

【化 1 0 2】



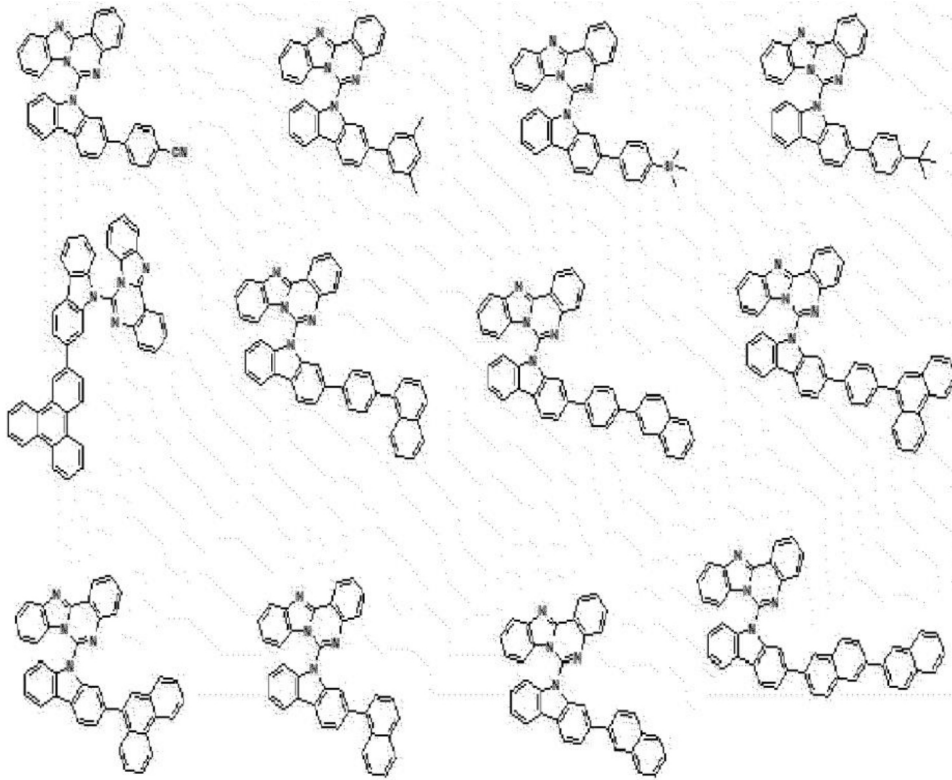
10

【化 1 0 3】



20

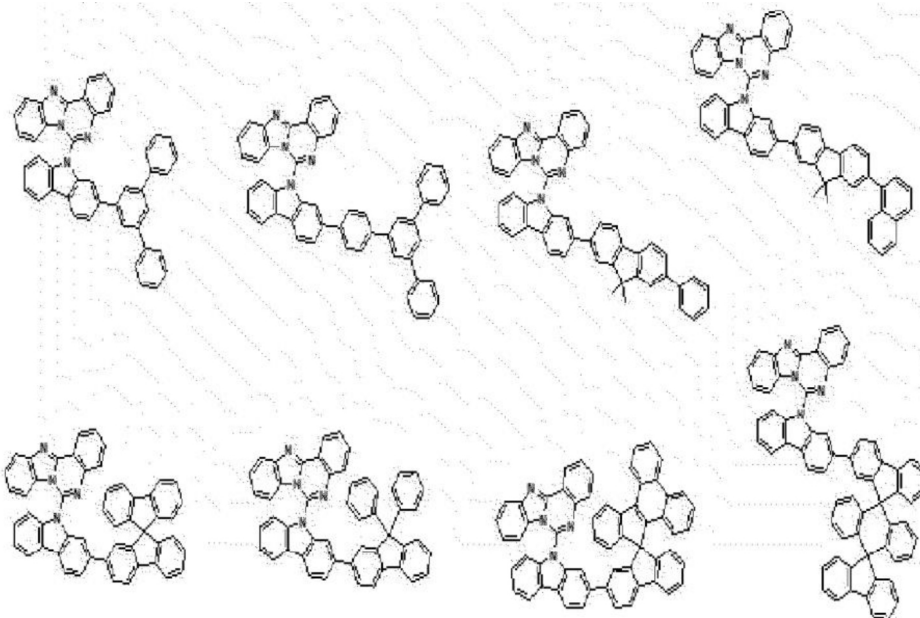
【化 1 0 4】



10

20

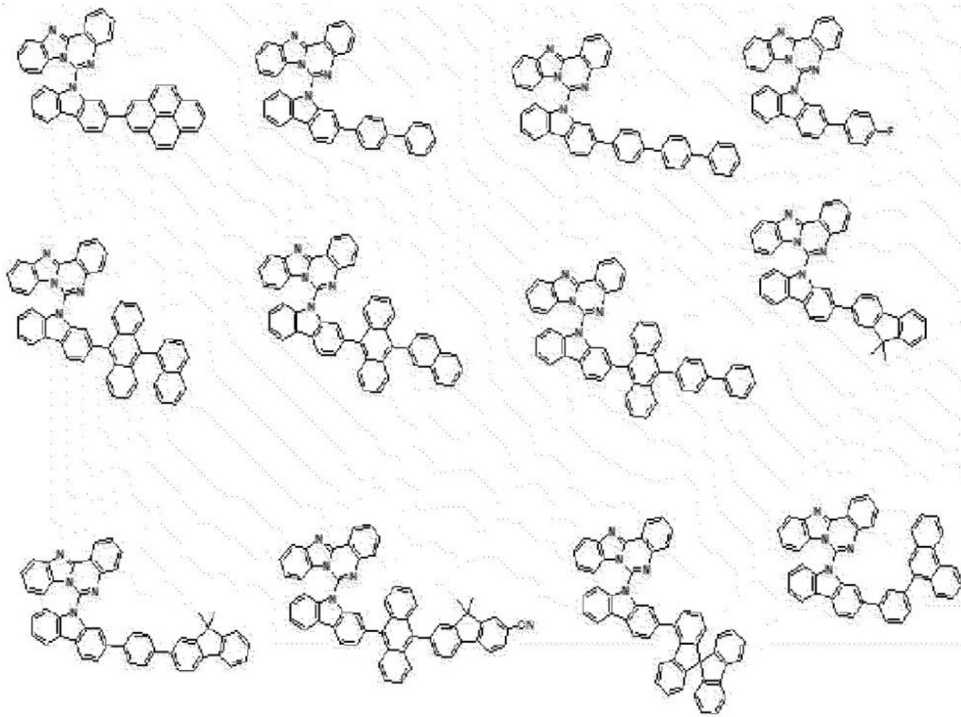
【化 1 0 5】



30

40

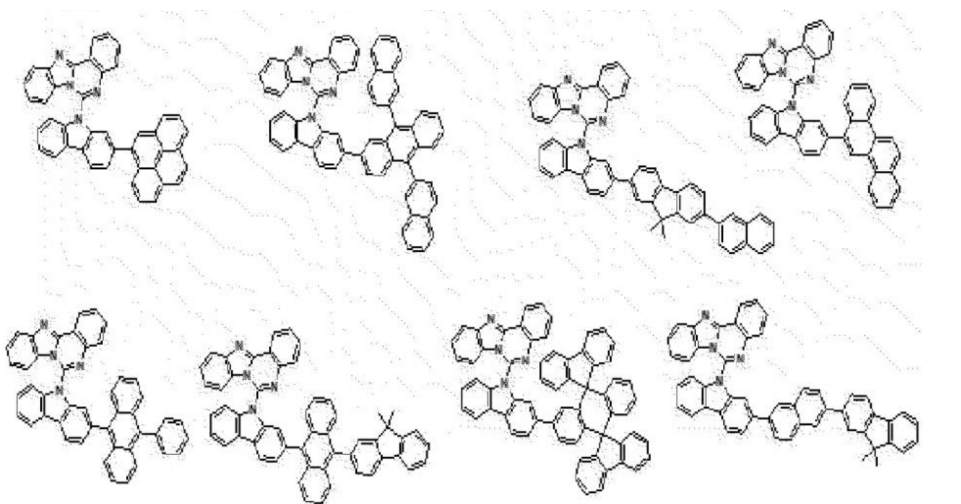
【化 1 0 6】



10

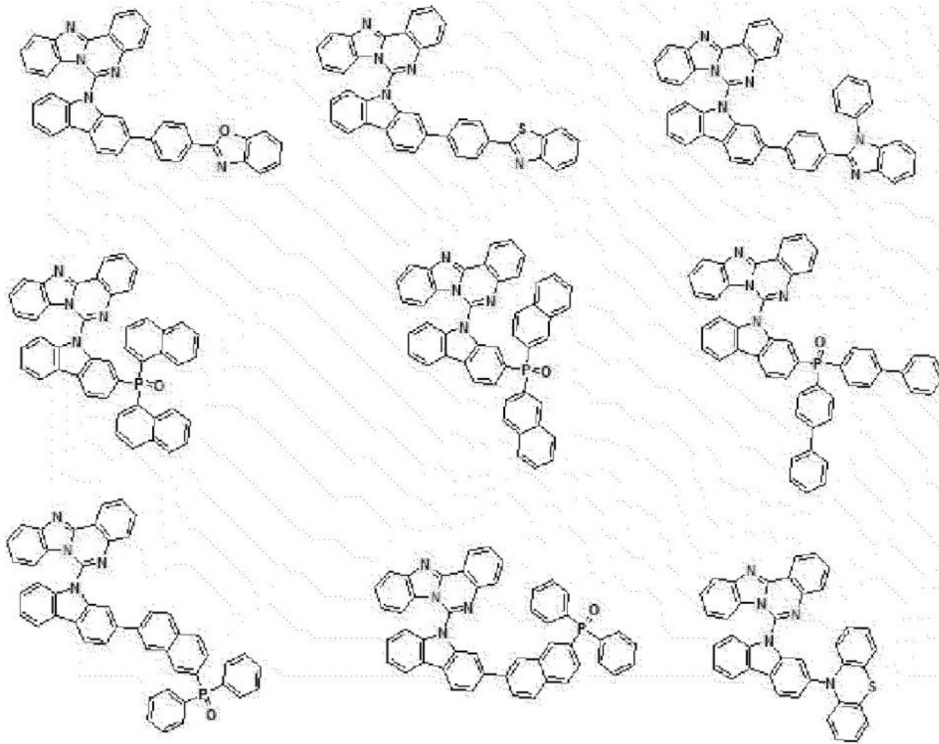
20

【化 1 0 7】



30

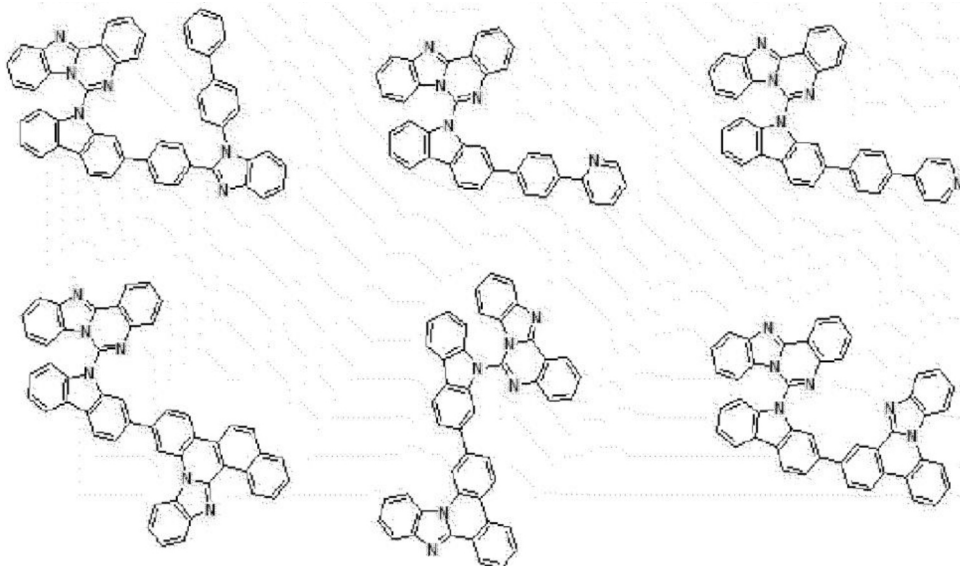
【化108】



10

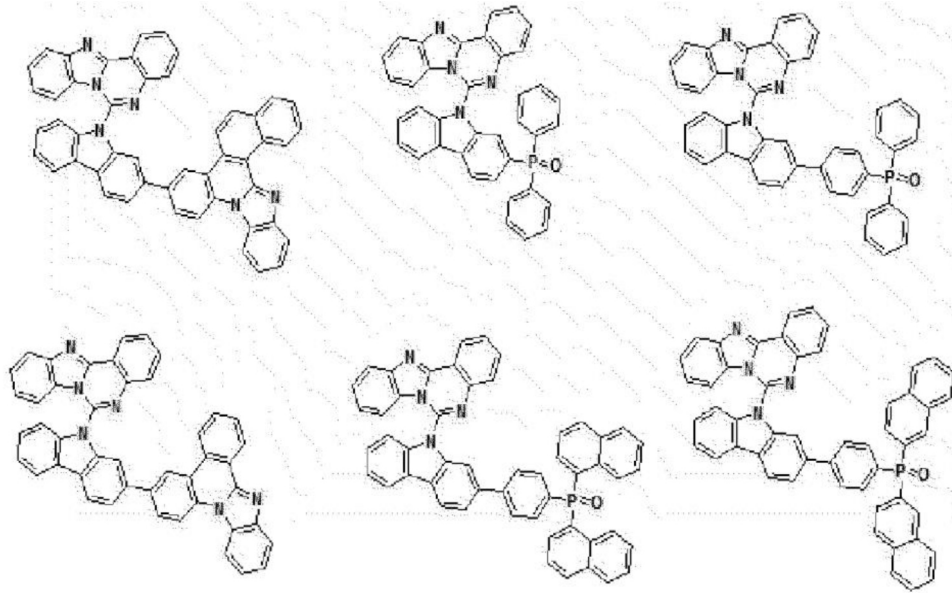
20

【化109】



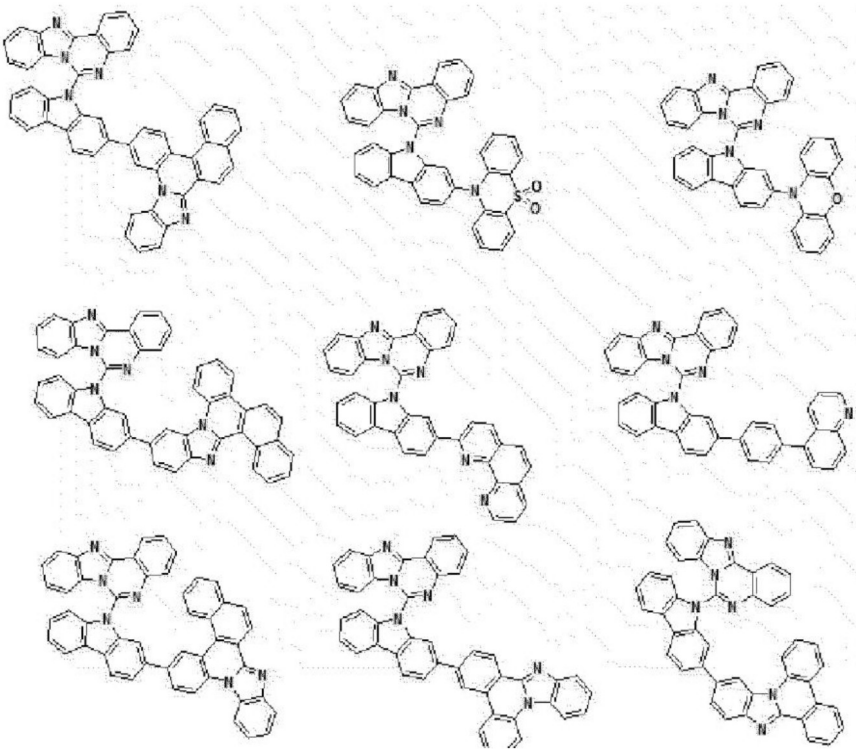
30

【化 1 1 0】



10

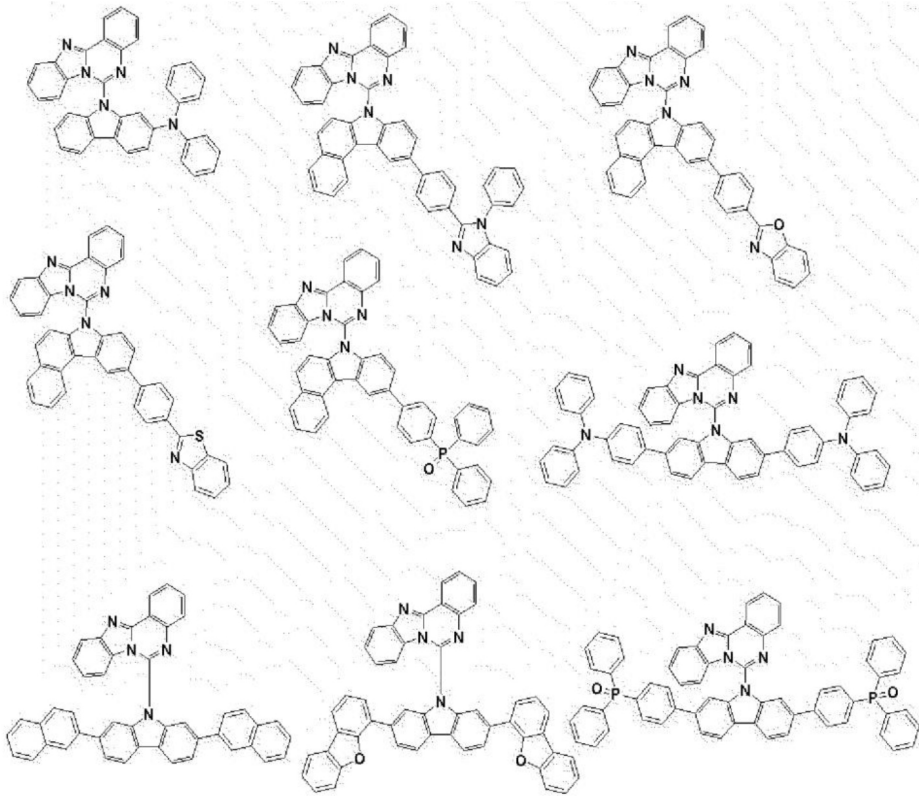
【化 1 1 1】



20

30

## 【化 1 1 2】



10

20

## 【0 1 0 0】

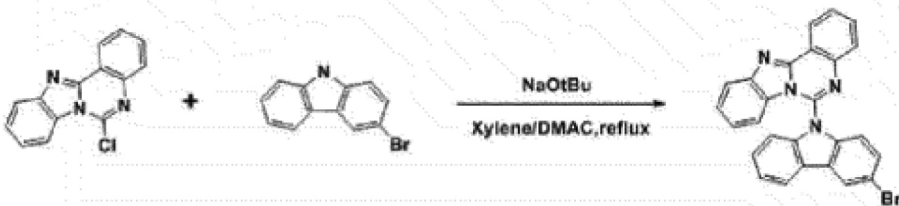
本出願の一実施態様に係る化合物は、後述する製造方法で製造できる。

## 【0 1 0 1】

例えば、前記化学式 1 の化合物は、下記一般式 1 ~ 6 のようなコア構造が製造できる。置換基は、当技術分野で知られている方法によって結合することができ、置換基の種類、位置または個数は、当技術分野で知られている技術によって変更可能である。

[一般式 1]

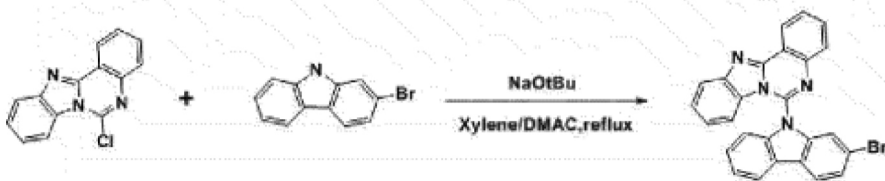
## 【化 1 1 3】



化合物 A

[一般式 2]

## 【化 1 1 4】



化合物 B

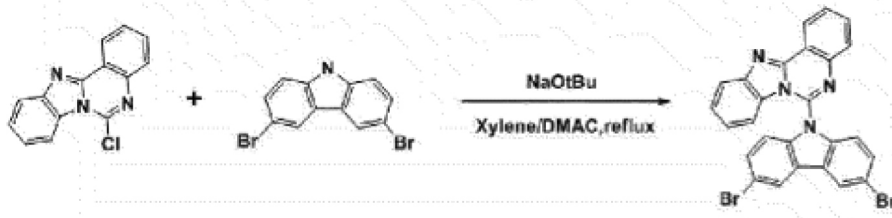
[一般式 3]

30

40

50

## 【化 1 1 5】

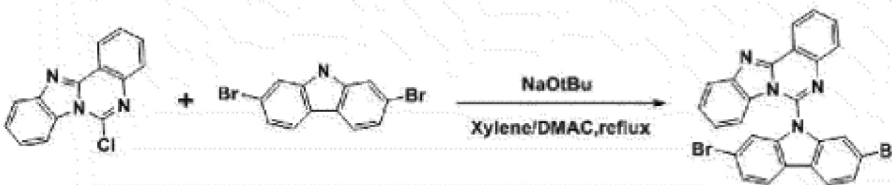


化合物 C

## [ 一般式 4 ]

10

## 【化 1 1 6】

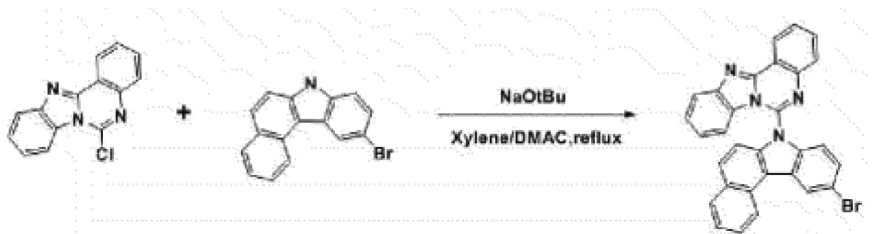


化合物 D

## [ 一般式 5 ]

20

## 【化 1 1 7】

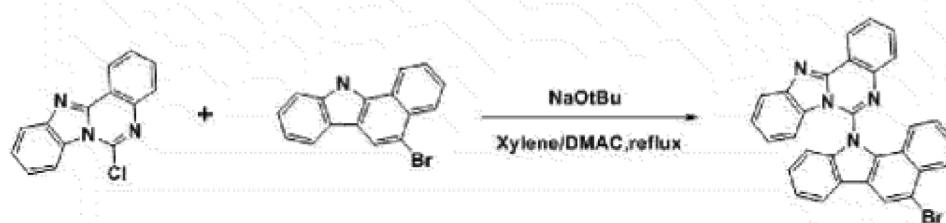


化合物 E

## [ 一般式 6 ]

30

## 【化 1 1 8】



化合物 F

## 【 0 1 0 2】

40

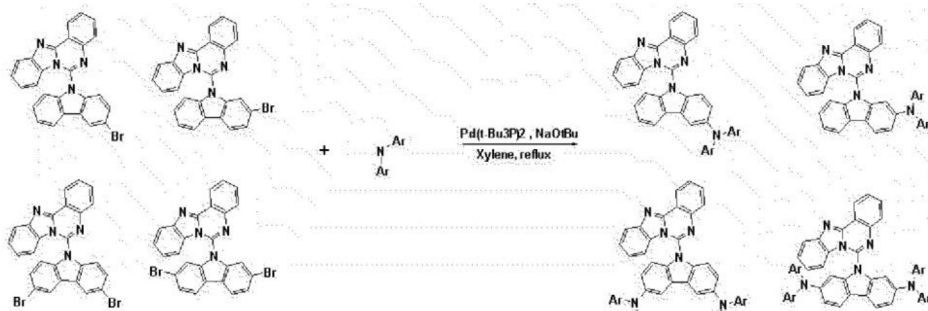
前記一般式 1 ~ 6 で製造されたコアにおいて、Br の位置が前記 - ( L )<sub>m</sub> - Ar で置換される位置であってもよい。

## 【 0 1 0 3】

前述のように、置換基は、当技術分野で知られている方法によって結合することができ、置換基の種類、位置または個数は、当技術分野で知られている技術によって変更可能である。例えば、下記一般式 7 ~ 9 によって、アミン基、アリール基、ヘテロ環基などの置換基を連結することができる。

## [ 一般式 7 ]

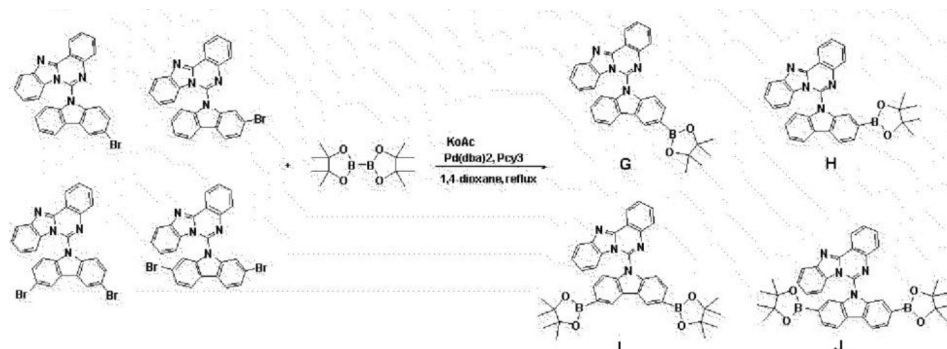
## 【化 1 1 9】



10

## [ 一般式 8 ]

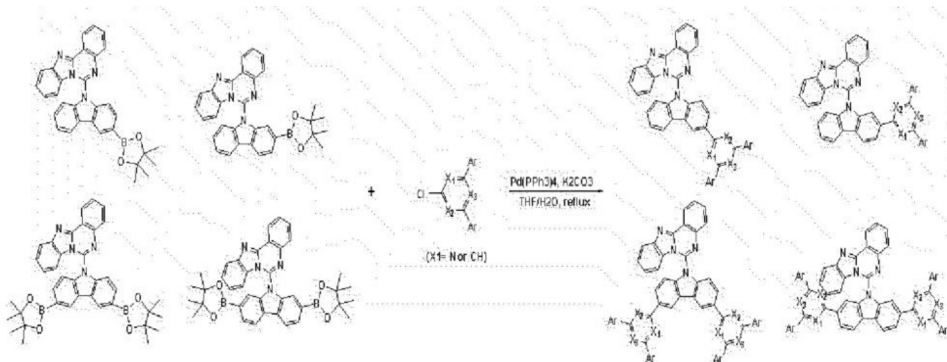
## 【化 1 2 0】



20

## [ 一般式 9 ]

## 【化 1 2 1】



30

## 【 0 1 0 4 】

前記一般式 7 は、バックワルドアミネーション (Buchwald amination) を利用して、アミン、アリールアミンなどの置換体を連結する反応式を示したものである。ここで、前記 Ar は、水素または追加の置換基を意味する。

## 【 0 1 0 5 】

前記一般式 8 および 9 は、ボリレーション方法およびスズキカップリング (Suzuki coupling) を利用して、アリール基、ヘテロ環基などの置換体を連結する反応式を示したものである。特に、前記一般式 9 は、単環のアリール基または単環の N 含有ヘテロ環基の置換体を連結する反応式を示したものである。前記 X<sub>1</sub> ~ X<sub>3</sub> は、炭素または窒素であり、前記 Ar は、水素または追加の置換基を意味する。

40

## 【 0 1 0 6 】

前記一般式 1 ~ 9 は、本出願の一実施態様に係る化合物のコア構造を製造し、置換体を連結する方法の例に過ぎず、これらにのみ限定されるものではない。

## 【 0 1 0 7 】

また、本明細書は、前記前述の化合物を含む有機電子素子を提供する。

## 【 0 1 0 8 】

50

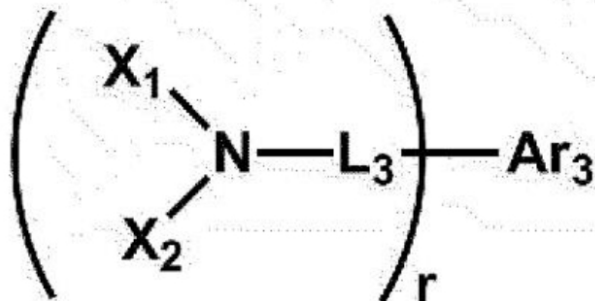
本出願の一実施態様において、第1電極と、前記第1電極に対向して備えられた第2電極と、前記第1電極と前記第2電極との間に備えられた1層以上の有機物層とを含む有機電子素子であって、前記有機物層のうちの1層以上は、前記化合物を含むものである有機電子素子を提供する。

【0109】

本明細書の一実施態様は、前記有機物層のうちの1層以上は、前記化学式1で表される化合物を含み、下記化学式4の化合物を含む発光層を含むものである有機電子素子である。

[化学式4]

【化122】



10

20

前記化学式4において、

$Ar_3$  は、ベンゾフルオレン骨格、フルオランテン骨格、ピレン骨格、またはクリセン骨格であり、

$L_3$  は、単一結合、 $C_6 \sim C_{30}$  のアリーレン基、または  $C_5 \sim C_{30}$  の2価のヘテロ環基であり、

$X_1$  および  $X_2$  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  $C_6 \sim C_{30}$  のアリール基、置換もしくは非置換の  $C_5 \sim C_{30}$  のヘテロ環基、置換もしくは非置換の  $C_1 \sim C_{30}$  のアルキル基、および置換もしくは非置換の  $C_7 \sim C_{30}$  のアラルキル基からなる群より選択され、 $X_1$  および  $X_2$  は、互いに結合して飽和または不飽和環を形成してもよく、

30

$r$  は、1以上の整数であり、

前記  $r$  が2以上の場合、 $X_1$  は、互いに同一または異なり、 $X_2$  は、互いに同一または異なる。

【0110】

本明細書の一実施態様において、前記  $L_3$  は、単一結合、または  $C_6 \sim C_{30}$  のアリーレン基である。

【0111】

もう一つの実施態様において、前記  $L_3$  は、単一結合である。

【0112】

本明細書の一実施態様において、前記  $Ar_3$  は、ベンゾフルオレン骨格、フルオランテン骨格、またはピレン骨格である。

40

【0113】

もう一つの実施態様において、前記  $Ar_3$  は、ピレン骨格である。

【0114】

本明細書の一実施態様において、前記  $X_1$  および  $X_2$  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  $C_6 \sim C_{30}$  のアリール基、置換もしくは非置換の  $C_5$  および  $C_{30}$  のヘテロ環基、または置換もしくは非置換の  $C_1 \sim C_{30}$  のアルキル基である。

【0115】

もう一つの実施態様において、前記  $X_1$  および  $X_2$  は、互いに同一または異なり、それ

50

それぞれ独立に、置換もしくは非置換の  $C_6 \sim C_{30}$  のアリール基である。

【0116】

もう一つの実施態様において、前記  $X_1$  および  $X_2$  は、互いに同一または異なり、それぞれ独立に、ゲルマニウム基で置換もしくは非置換のフェニル基である。

【0117】

もう一つの実施態様において、前記  $X_1$  および  $X_2$  は、互いに同一または異なり、それぞれ独立に、トリメチルゲルマニウム基で置換もしくは非置換のフェニル基である。

【0118】

本明細書の一実施態様において、前記  $Ar_3$  は、ピレン骨格であり、 $L_3$  は、単一結合であり、 $X_1$  および  $X_2$  は、互いに同一または異なり、それぞれ独立に、ゲルマニウム基で置換もしくは非置換のアリール基であり、 $r$  が 2 である有機電子素子である。

10

【0119】

もう一つの実施態様において、前記  $Ar_3$  は、ピレン骨格であり、 $L_3$  は、単一結合であり、 $X_1$  は、フェニル基であり、 $X_2$  は、トリメチルゲルマニウム基で置換されたフェニル基であり、 $r$  は、2 である有機電子素子である。

【0120】

本明細書の一実施態様において、前記化学式 4 の化合物を発光層のドーパントとして含むことができる。

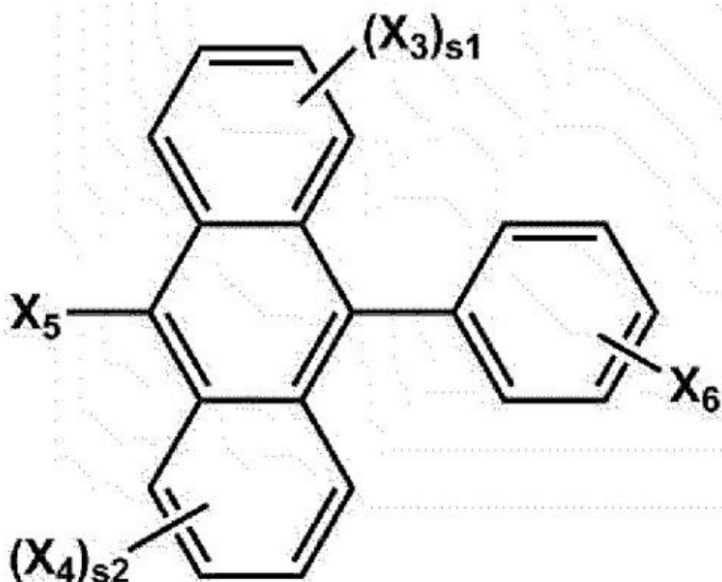
【0121】

本明細書の一実施態様は、前記有機物層のうちの 1 層以上は、前記化学式 1 で表される化合物を含み、下記化学式 5 の化合物を前記有機物層のうちの発光層に含むものである有機電子素子である。

20

[化学式 5]

【化 1 2 3】



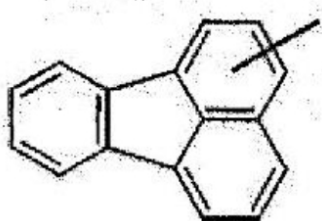
30

前記化学式 5 において、

$X_5$  は、置換もしくは非置換の 1 - ナフチル基、置換もしくは非置換の 2 - ナフチル基、置換もしくは非置換の 1 - アントリル基、置換もしくは非置換の 2 - アントリル基、置換もしくは非置換の 1 - フェナントリル基、置換もしくは非置換の 2 - フェナントリル基、置換もしくは非置換の 3 - フェナントリル基、置換もしくは非置換の 4 - フェナントリル基、置換もしくは非置換の 9 - フェナントリル基、置換もしくは非置換の 1 - ナфтаセニル基、置換もしくは非置換の 2 - ナфтаセニル基、置換もしくは非置換の 9 - ナфтаセニル基、置換もしくは非置換の 1 - ピレニル基、置換もしくは非置換の 2 - ピレニル基、置換もしくは非置換の 4 - ピレニル基、置換もしくは非置換の 3 - メチル - 2 - ナフチル基、置換もしくは非置換の 4 - メチル - 1 - ナフチル基、または下記構造式

50

## 【化 1 2 4】



であり、

$X_6$  は、フェニル基、1 - ナフチル基、2 - ナフチル基、1 - アントリル基、2 - アントリル基、9 - アントリル基、1 - フェナントリル基、2 - フェナントリル基、3 - フェナントリル基、4 - フェナントリル基、9 - フェナントリル基、1 - ナфтаセニル基、2 - ナфтаセニル基、9 - ナфтаセニル基、1 - ピレニル基、2 - ピレニル基、4 - ピレニル基、2 - ビフェニリル基、3 - ビフェニリル基、4 - ビフェニリル基、p - ターフェニル - 4 - イル基、p - ターフェニル - 3 - イル基、p - ターフェニル - 2 - イル基、m - ターフェニル - 4 - イル基、m - ターフェニル - 3 - イル基、m - ターフェニル - 2 - イル基、o - トリル基、m - トリル基、p - トリル基、p - t - ブチルフェニル基、p - (2 - フェニルプロピル) フェニル基、3 - メチル - 2 - ナフチル基、4 - メチル - 1 - ナフチル基、4 - メチル - 1 - アントリル基、4' - メチルビフェニリル基、4'' - t - ブチル - p - ターフェニル - 4 - イル基、および 3 - フルオランテニル基からなる群より選択される基であり、

$X_3$  および  $X_4$  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 6 ~ 50 のアリール基、置換もしくは非置換の核原子数 5 ~ 50 のヘテロアリール基、置換もしくは非置換の炭素数 1 ~ 50 のアルキル基、置換もしくは非置換の炭素数 1 ~ 50 のアルコキシ基、置換もしくは非置換の炭素数 6 ~ 50 のアラルキル基、置換もしくは非置換の核原子数 5 ~ 50 のアリールオキシ基、置換もしくは非置換の核原子数 5 ~ 50 のアリールチオ基、置換もしくは非置換の炭素数 1 ~ 50 のアルコキシカルボニル基、カルボキシ基、ハロゲン原子、シアノ基、ニトロ基、またはヒドロキシ基であり、 $s_1$  および  $s_2$  はそれぞれ、0 ~ 4 の整数である。

## 【0 1 2 2】

本明細書の一実施態様において、前記  $X_5$  は、置換もしくは非置換の 1 - ナフチル基、または置換もしくは非置換の 2 - ナフチル基である。

## 【0 1 2 3】

もう一つの実施態様において、前記  $X_5$  は、置換もしくは非置換の 1 - ナフチル基である。

## 【0 1 2 4】

もう一つの実施態様において、前記  $X_5$  は、1 - ナフチル基である。

## 【0 1 2 5】

本明細書の一実施態様において、前記  $X_6$  は、フェニル基、1 - ナフチル基、または 2 - ナフチル基である。

## 【0 1 2 6】

もう一つの実施態様において、前記  $X_6$  は、2 - ナフチル基である。

## 【0 1 2 7】

本明細書の一実施態様において、前記  $X_3$  および  $X_4$  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  $C_6 \sim C_{50}$  のアリール基、または置換もしくは非置換の  $C_5 \sim C_{50}$  のヘテロアリール基である。

## 【0 1 2 8】

本明細書の一実施態様において、前記  $s_1$  および  $s_2$  はそれぞれ、0 ~ 2 の整数である。

## 【0 1 2 9】

もう一つの実施態様において、前記 s 1 および s 2 は、0 である。

【0130】

本明細書の一実施態様において、前記 X<sub>5</sub> および X<sub>6</sub> は、互いに同一または異なり、それぞれ独立に、1 - ナフチル基または 2 - ナフチル基であり、s 1 および s 2 は、0 である有機電子素子である。

【0131】

本明細書の一実施態様において、前記化学式 5 の化合物は、発光層のホストとして含まれてもよい。

【0132】

本明細書の一実施態様において、前記有機物層のうちの 1 層以上は、前記化学式 1 で表される化合物を含み、前記化学式 4 の化合物および前記化学式 5 の化合物を前記有機物層のうちの発光層に含む有機電子素子である。

10

【0133】

もう一つの実施態様において、前記有機物層のうちの 1 層以上は、前記化学式 1 で表される化合物を含み、前記化学式 4 の Ar<sub>3</sub> は、ピレン骨格であり、L<sub>3</sub> は、単一結合であり、X<sub>1</sub> および X<sub>2</sub> は、ゲルマニウム基で置換もしくは非置換のアリール基であり、r は、2 である化合物、および前記化学式 5 の X<sub>5</sub> および X<sub>6</sub> は、互いに同一または異なり、それぞれ独立に、1 - ナフチル基または 2 - ナフチル基であり、s 1 および s 2 は、0 である有機電子素子である。

【0134】

20

本明細書において、ある部材が他の部材の「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。

【0135】

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、特に反対の記載がない限り、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。

【0136】

本出願の有機電子素子の有機物層は、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、本出願の有機電子素子の代表例として、有機発光素子は、有機物層として、正孔注入層、正孔輸送層、発光層、電子輸送層、電子注入層などを含む構造を有することができる。しかし、有機電子素子の構造はこれに限定されず、より少数の有機層を含んでもよい。

30

【0137】

本出願の一実施態様によれば、前記有機電子素子は、有機発光素子、有機燐光素子、有機太陽電池、有機感光体 (OPC)、および有機トランジスタからなる群より選択されてもよい。

【0138】

以下、有機発光素子について例示する。

【0139】

40

本出願の一実施態様において、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、前記化合物を含む。

【0140】

本出願の一実施態様において、前記有機物層は、発光層を含み、前記発光層は、前記化合物を含む。

【0141】

もう一つの実施態様において、前記有機物層は、発光層を含み、前記発光層は、前記化合物を含む。

【0142】

本出願の一実施態様において、前記有機物層は、電子輸送層または電子注入層を含み、

50

前記電子輸送層または電子注入層は、前記化合物を含む。

【0143】

本出願の一実施態様において、前記有機発光素子は、正孔注入層、正孔輸送層、発光層、電子輸送層、電子注入層、電子阻止層、および正孔阻止層からなる群より選択される2層以上を含む。

【0144】

本出願の一実施態様において、前記有機発光素子は、第1電極と、前記第1電極に対向して備えられた第2電極と、前記第1電極と前記第2電極との間に備えられた発光層と、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み、前記2層以上の有機物層のうちの少なくとも1つは、前記化合物を含む。本出願の一実施態様において、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。

10

【0145】

本出願の一実施態様において、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層に含まれてもよいし、それぞれの2層以上の電子輸送層に含まれてもよい。

【0146】

また、本出願の一実施態様において、前記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。

20

【0147】

本出願の一実施態様において、前記有機物層は、前記化合物を含む有機物層の他に、アリアルミノ基、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。

【0148】

もう一つの実施態様において、有機発光素子は、基板上に、陽極、1層以上の有機物層、および陰極が順次に積層された構造(normal type)の有機発光素子であってもよい。

30

【0149】

もう一つの実施態様において、有機発光素子は、基板上に、陰極、1層以上の有機物層、および陽極が順次に積層された逆方向構造(inverted type)の有機発光素子であってもよい。

【0150】

例えば、本出願の一実施態様に係る有機発光素子の構造は、図1および2に例示されている。

【0151】

図1は、基板1、陽極2、発光層3、陰極4が順次に積層された有機電子素子の構造が例示されている。このような構造において、前記化合物は、前記発光層3に含まれてもよい。

40

【0152】

図2は、基板1、陽極2、正孔注入層5、正孔輸送層6、発光層3、電子輸送層7、および陰極4が順次に積層された有機電子素子の構造が例示されている。このような構造において、前記化合物は、前記正孔注入層5、正孔輸送層6、発光層3、および電子輸送層7のうちの1層以上に含まれてもよい。

【0153】

このような構造において、前記化合物は、前記正孔注入層、正孔輸送層、発光層、および電子輸送層のうちの1層以上に含まれてもよい。

【0154】

50

本出願の有機発光素子は、有機物層のうちの1層以上が本出願の化合物、すなわち前記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および方法で製造できる。

【0155】

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る。

【0156】

本出願の有機発光素子は、有機物層のうちの1層以上が前記化合物、すなわち前記化学式1で表される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および方法で製造できる。

【0157】

例えば、本出願の有機発光素子は、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PVD(Physical Vapor Deposition)方法を利用して、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て陽極を形成し、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、その上に陰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、陽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。

【0158】

また、前記化学式1の化合物は、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る。ここで、溶液塗布法とは、スピンコーティング、ディップコーティング、ドクターブレード法、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。

【0159】

このような方法以外にも、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ってもよい(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。

【0160】

本出願の一実施態様において、前記第1電極は、陽極であり、前記第2電極は、陰極である。

【0161】

もう一つの実施態様において、前記第1電極は、陰極であり、前記第2電極は、陽極である。

【0162】

前記陽極物質としては、通常、有機物層に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。本出願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SnO<sub>2</sub>: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。

【0163】

前記陰極物質としては、通常、有機物層に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LiO<sub>2</sub>/Al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

10

20

30

40

50

はない。

【0164】

前記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、薄膜形成能力の優れた化合物が好ましい。正孔注入物質のHOMO (highest occupied molecular orbital) が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、アリアルアミン系の有機物、ヘキサニトリルヘキサアザトリフェニレン系の有機物、キナクリドン (quinacridone) 系の有機物、ペリレン (perylene) 系の有機物、アントラキノ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。

10

【0165】

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を受けて発光層に移し得る物質で、正孔に対する移動性の大きい物質が好適である。具体例としては、アリアルアミン系の有機物、導電性高分子、および共役部分と非共役部分が共に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。

【0166】

前記発光物質としては、正孔輸送層と電子輸送層から正孔と電子をそれぞれ受けて結合させることにより、可視光線領域の光を発し得る物質であって、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<sub>3</sub>) ; 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。

20

【0167】

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、ペントセン誘導体、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、化合物、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。

30

【0168】

前記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し得る物質であって、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<sub>3</sub>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たように、任意の所望のカソード物質と共に使用することができる。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、各場合、アルミニウム層またはシルバー層が後に続く。

40

【0169】

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、薄膜形成能力の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

50

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。

【0170】

前記金属錯体化合物としては、8-ヒドロキシキノリナートリチウム、ビス(8-ヒドロキシキノリナート)亜鉛、ビス(8-ヒドロキシキノリナート)銅、ビス(8-ヒドロキシキノリナート)マンガン、トリス(8-ヒドロキシキノリナート)アルミニウム、トリス(2-メチル-8-ヒドロキシキノリナート)アルミニウム、トリス(8-ヒドロキシキノリナート)ガリウム、ビス(10-ヒドロキシベンゾ[h]キノリナート)ベリリウム、ビス(10-ヒドロキシベンゾ[h]キノリナート)亜鉛、ビス(2-メチル-8-キノリナート)クロロガリウム、ビス(2-メチル-8-キノリナート)(o-クレゾラート)ガリウム、ビス(2-メチル-8-キノリナート)(1-ナフトラート)アルミニウム、ビス(2-メチル-8-キノリナート)(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

【0171】

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、正孔注入層と同様の条件で形成される。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、フェナントロリン誘導体、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。

20

【0172】

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。

【0173】

本出願の一実施態様において、前記化合物は、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もよい。

30

【0174】

本出願に係る化合物は、有機発光素子、有機太陽電池、有機感光体、有機トランジスタなどをはじめとする有機電子素子においても、有機発光素子に適用されるのと類似の原理で作用することができる。

【実施例】

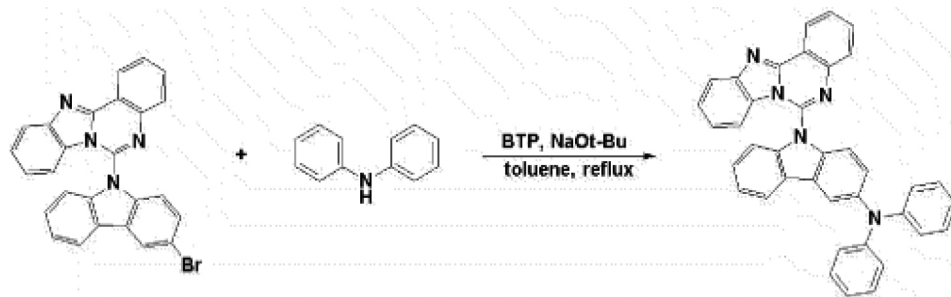
【0175】

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、本出願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。本出願の実施例は、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。

【0176】

<製造例1>化合物1の合成

【化125】



化合物 1

40

化合物 A (10 g、21.6 mmol)、ジフェニルアミン(4.03 g、23.81 mmol)、そして NaOt-Bu (2.51 g、25.9 mmol) をトルエン 200

50

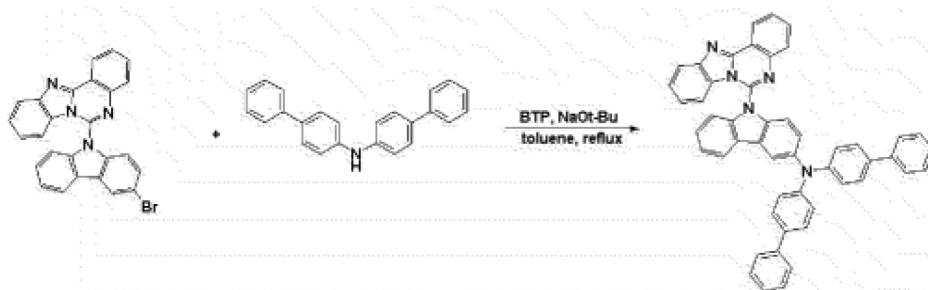
m l に入れた後、攪拌しながら温度を上昇させた。昇温した後、還流しはじめると、ビス(トリ-tert-ブチルホスフィン)パラジウム(0.06 g、0.11 mmol)をゆっくり滴下して入れた。3時間後に反応を終了し、温度を常温に下げて減圧下で濃縮した後、カラム精製して、9.64 g(81%)の化合物1を製造した。

MS[M+H]<sup>+</sup> = 552

【0177】

<製造例2>化合物2の合成

【化126】



化合物2

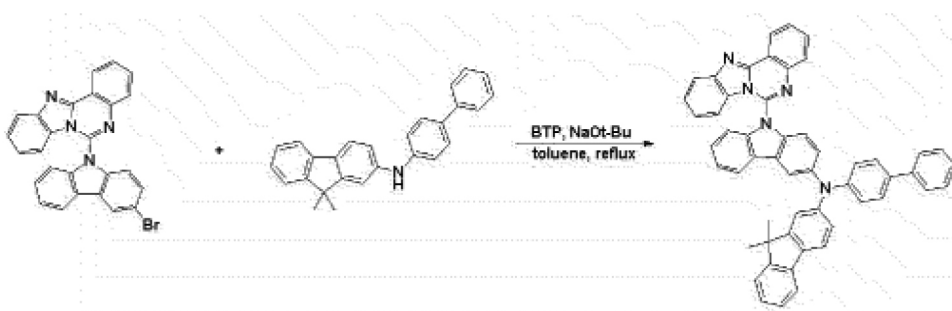
化合物A(10 g、21.6 mmol)、ビスビフェニルアミン(8.08 g、23.81 mmol)、そしてNaOt-Bu(2.51 g、25.9 mmol)をトルエン200 mlに入れた後、攪拌しながら温度を上昇させた。昇温した後、還流しはじめると、ビス(トリ-tert-ブチルホスフィン)パラジウム(0.06 g、0.11 mmol)をゆっくり滴下して入れた。3時間後に反応を終了し、温度を常温に下げて減圧下で濃縮した後、カラム精製して、13.85 g(91%)の化合物2を製造した。

MS[M+H]<sup>+</sup> = 704

【0178】

<製造例3>化合物3の合成

【化127】



化合物3

化合物A(10 g、21.6 mmol)、9,9-ジメチルフルオレンビフェニルアミン(9.05 g、23.81 mmol)、そしてNaOt-Bu(2.51 g、25.9 mmol)をトルエン200 mlに入れた後、攪拌しながら温度を上昇させた。昇温した後、還流しはじめると、ビス(トリ-tert-ブチルホスフィン)パラジウム(0.06 g、0.11 mmol)をゆっくり滴下して入れた。3時間後に反応を終了し、温度を常温に下げて減圧下で濃縮した後、カラム精製して、14.77 g(92%)の化合物3を製造した。

MS[M+H]<sup>+</sup> = 744

【0179】

<製造例4>化合物4の合成

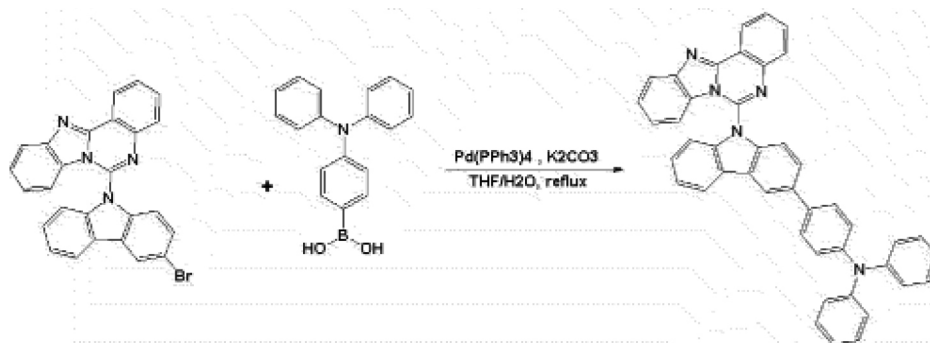
10

20

30

40

## 【化 1 2 8】



10

## 化合物 4

窒素雰囲気下、500 ml の丸底フラスコに、化合物 A (10 g、21.6 mmol)、(4-(ジフェニルアミノ)フェニル)ボロン酸(6.88 g、23.81 mmol)をテトラヒドロフラン 200 ml に完全に溶かした後、2 M 炭酸カリウム水溶液(100 ml)を添加し、テトラキス-(トリフェニルホスフィン)パラジウム(0.75 g、0.65 mmol)を入れた後、3 時間加熱撹拌した。常温に温度を下げて水層を除去し、無水硫酸マグネシウムで乾燥した後、減圧濃縮させ、エタノール 300 ml で再結晶して、化合物 4 (11.31 g、83%)を製造した。

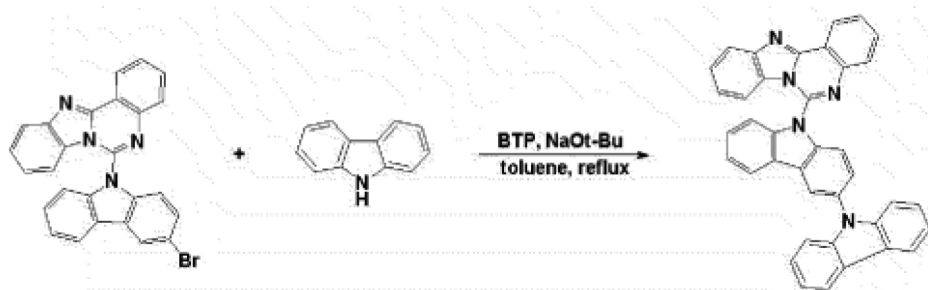
MS [M + H]<sup>+</sup> = 628

20

## 【0 1 8 0】

< 製造例 5 > 化合物 5 の合成

## 【化 1 2 9】



30

## 化合物 5

化合物 A (10 g、21.6 mmol)、カルバゾール(4.01 g、23.81 mmol)、そして NaOt-Bu (2.51 g、25.9 mmol) をトルエン 200 ml に入れた後、撹拌しながら温度を上昇させた。昇温した後、還流しはじめると、ビス(トリ-tert-ブチルホスフィン)パラジウム(0.06 g、0.11 mmol)をゆっくり滴下して入れた。5 時間後に反応を終了し、温度を常温に下げて減圧下で濃縮した後、カラム精製して、10.72 g (90%) の化合物 5 を製造した。

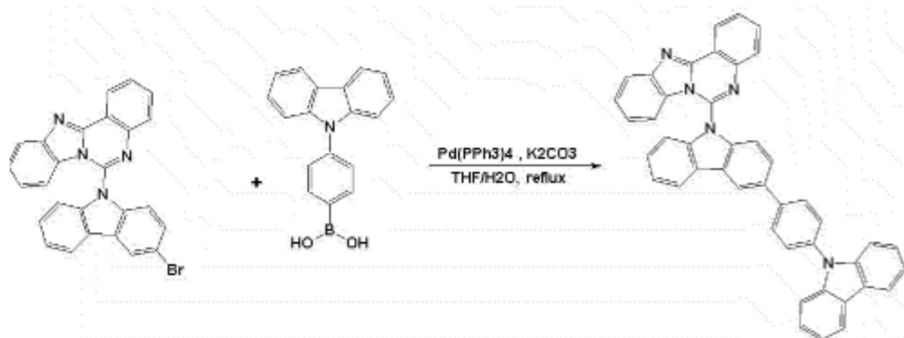
MS [M + H]<sup>+</sup> = 550

40

## 【0 1 8 1】

< 製造例 6 > 化合物 6 の合成

## 【化130】



化合物6

10

窒素雰囲気下、500 mlの丸底フラスコに、化合物A (10 g、21.6 mmol)、(4-(9H-カルバゾール-9-yl)フェニル)ボロン酸 (6.88 g、23.81 mmol) をテトラヒドロフラン280 mlに完全に溶かした後、2 M炭酸カリウム水溶液 (140 ml) を添加し、テトラキス-(トリフェニルホスフィン)パラジウム (0.75 g、0.65 mmol) を入れた後、6時間加熱撹拌した。常温に温度を下げて水層を除去し、無水硫酸マグネシウムで乾燥した後、減圧濃縮させ、エチルアセテート200 mlで再結晶して、化合物6 (10.31 g、78%) を製造した。

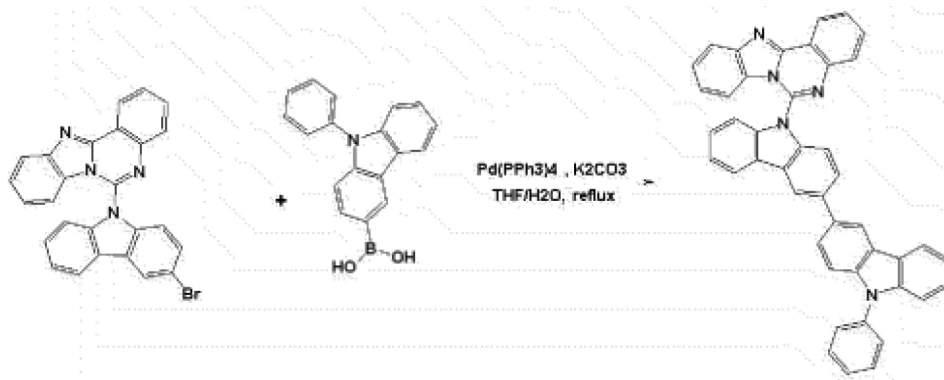
MS [M + H]<sup>+</sup> = 626

20

## 【0182】

< 製造例7 > 化合物7の合成

## 【化131】



化合物7

30

窒素雰囲気下、500 mlの丸底フラスコに、化合物A (10 g、21.6 mmol)、(9-フェニル-9H-カルバゾール-3-yl)ボロン酸 (6.88 g、23.81 mmol) をテトラヒドロフラン300 mlに完全に溶かした後、2 M炭酸カリウム水溶液 (150 ml) を添加し、テトラキス-(トリフェニルホスフィン)パラジウム (0.75 g、0.65 mmol) を入れた後、2時間加熱撹拌した。常温に温度を下げて水層を除去し、無水硫酸マグネシウムで乾燥した後、減圧濃縮させ、エチルアセテート200 mlで再結晶して、化合物7 (12.09 g、91%) を製造した。

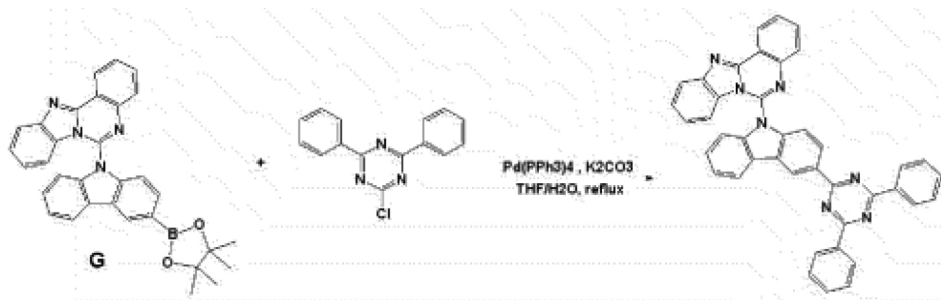
MS [M + H]<sup>+</sup> = 626

40

## 【0183】

< 製造例8 > 化合物8の合成

## 【化 1 3 2】



化合物 8

10

窒素雰囲気下、500 ml の丸底フラスコに、化合物 G (10 g、19.61 mmol)、2-クロロ-4,6-ジフェニル-1,3,5-トリアジン(4.76 g、17.83 mmol)をテトラヒドロフラン300 mlに完全に溶かした後、2 M炭酸カリウム水溶液(150 ml)を添加し、テトラキス-(トリフェニルホスフィン)パラジウム(0.62 g、0.53 mmol)を入れた後、8時間加熱撹拌した。常温に温度を下げて水層を除去し、無水硫酸マグネシウムで乾燥した後、減圧濃縮させ、エチルアセテート300 mlで再結晶して、化合物 8(12.41 g、93%)を製造した。

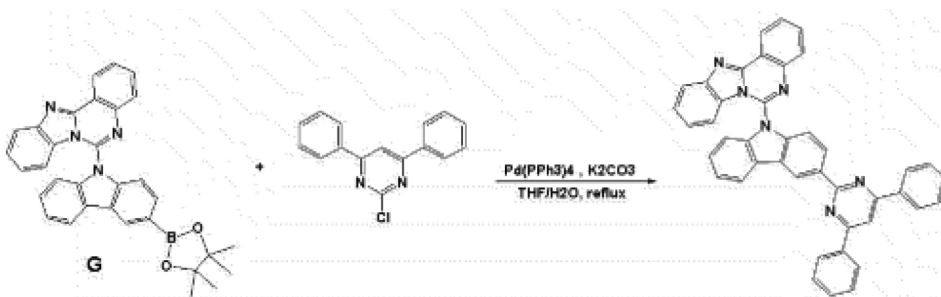
MS [M + H]<sup>+</sup> = 616

## 【0184】

20

< 製造例 9 > 化合物 9 の合成

## 【化 1 3 3】



化合物 9

30

窒素雰囲気下、500 ml の丸底フラスコに、化合物 G (10 g、19.61 mmol)、2-クロロ-4,6-ジフェニルピリミジン(4.74 g、17.83 mmol)をテトラヒドロフラン300 mlに完全に溶かした後、2 M炭酸カリウム水溶液(150 ml)を添加し、テトラキス-(トリフェニルホスフィン)パラジウム(0.62 g、0.53 mmol)を入れた後、5時間加熱撹拌した。常温に温度を下げて水層を除去し、無水硫酸マグネシウムで乾燥した後、減圧濃縮させ、エチルアセテート250 mlで再結晶して、化合物 9(10.15 g、78%)を製造した。

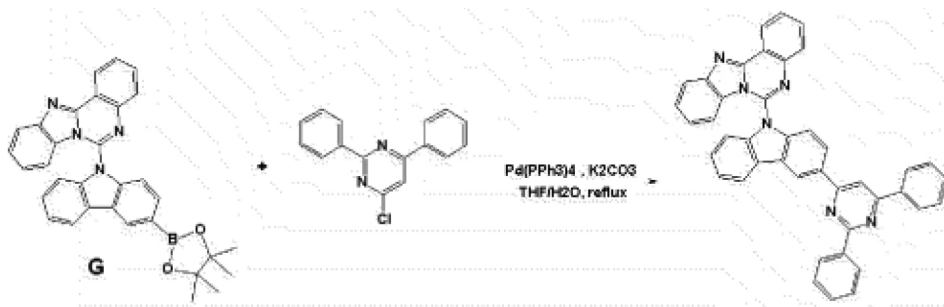
MS [M + H]<sup>+</sup> = 615

## 【0185】

40

< 製造例 10 > 化合物 10 の合成

## 【化 1 3 4】



化合物 10

10

窒素雰囲気下、500 ml の丸底フラスコに、化合物 G (10 g、19.61 mmol)、4-クロロ-2,6-ジフェニルピリミジン(4.74 g、17.83 mmol) をテトラヒドロフラン 300 ml に完全に溶かした後、2 M 炭酸カリウム水溶液(150 ml) を添加し、テトラキス-(トリフェニルホスフィン)パラジウム(0.62 g、0.53 mmol) を入れた後、4 時間加熱撹拌した。常温に温度を下げて水層を除去し、無水硫酸マグネシウムで乾燥した後、減圧濃縮させ、エチルアセテート 250 ml で再結晶して、化合物 10 (11.32 g、86%) を製造した。

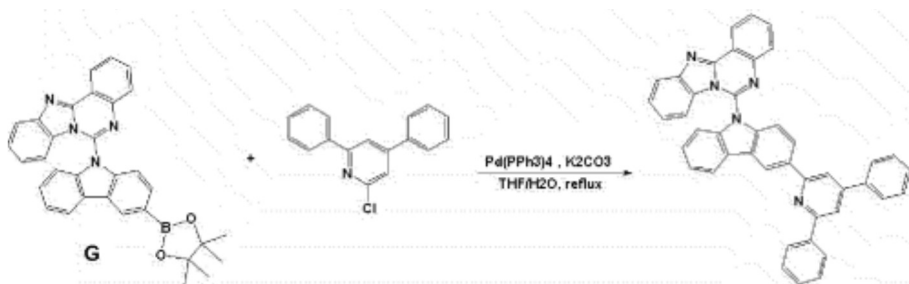
MS [M + H]<sup>+</sup> = 615

## 【0186】

20

< 製造例 11 > 化合物 11 の合成

## 【化 1 3 5】



化合物 11

30

窒素雰囲気下、500 ml の丸底フラスコに、化合物 G (10 g、19.61 mmol)、2-クロロ-4,6-ジフェニルピリミジン(4.71 g、17.83 mmol) をテトラヒドロフラン 300 ml に完全に溶かした後、2 M 炭酸カリウム水溶液(150 ml) を添加し、テトラキス-(トリフェニルホスフィン)パラジウム(0.62 g、0.53 mmol) を入れた後、2 時間加熱撹拌した。常温に温度を下げて水層を除去し、無水硫酸マグネシウムで乾燥した後、減圧濃縮させ、エチルアセテート 280 ml で再結晶して、化合物 11 (11.32 g、86%) を製造した。

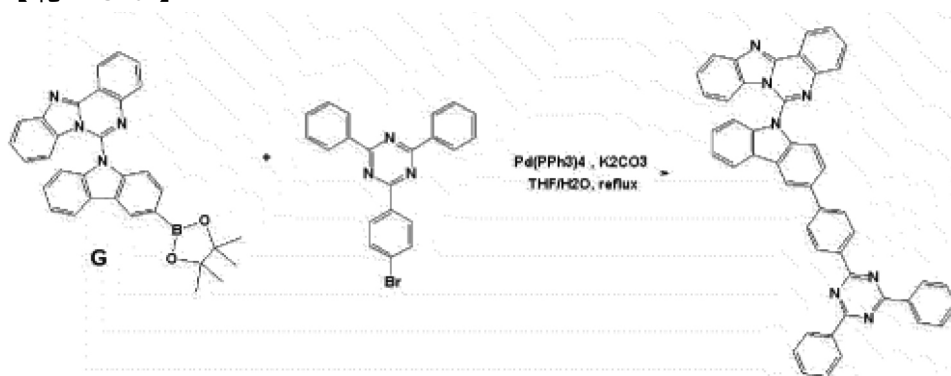
MS [M + H]<sup>+</sup> = 614

## 【0187】

40

< 製造例 12 > 化合物 12 の合成

## 【化 1 3 6】



化合物 12

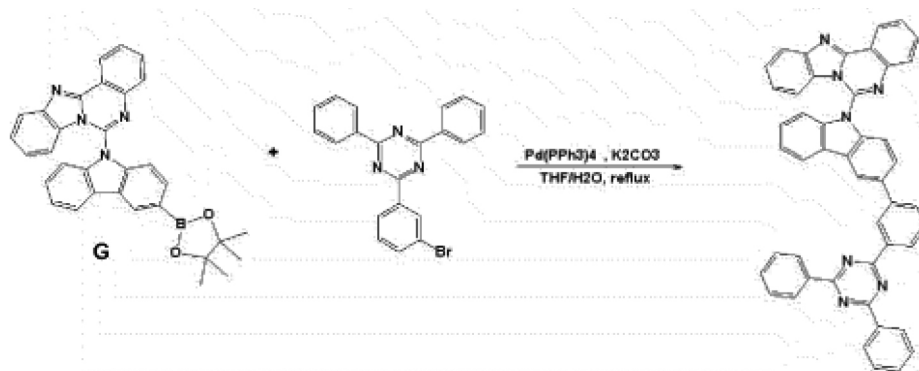
窒素雰囲気下、500 ml の丸底フラスコに、化合物 G (10 g、19.61 mmol)、2-(4-プロモフェニル)-4,6-ジフェニル-1,3,5-トリアジン(6.91 g、17.83 mmol) をテトラヒドロフラン 400 ml に完全に溶かした後、2 M 炭酸カリウム水溶液(200 ml) を添加し、テトラキス-(トリフェニルホスフィン)パラジウム(1.24 g、1.06 mmol) を入れた後、12 時間加熱撹拌した。常温に温度を下げて水層を除去し、無水硫酸マグネシウムで乾燥した後、減圧濃縮させ、エチルアセテート 500 ml で再結晶して、化合物 12 (12.41 g、93%) を製造した。

MS [M + H]<sup>+</sup> = 692

## 【0188】

< 製造例 13 > 化合物 13 の合成

## 【化 1 3 7】



化合物 13

窒素雰囲気下、500 ml の丸底フラスコに、化合物 G (10 g、19.61 mmol)、2-(3-プロモフェニル)-4,6-ジフェニル-1,3,5-トリアジン(6.91 g、17.83 mmol) をテトラヒドロフラン 400 ml に完全に溶かした後、2 M 炭酸カリウム水溶液(200 ml) を添加し、テトラキス-(トリフェニルホスフィン)パラジウム(1.24 g、1.06 mmol) を入れた後、7 時間加熱撹拌した。常温に温度を下げて水層を除去し、無水硫酸マグネシウムで乾燥した後、減圧濃縮させ、エチルアセテート 400 ml で再結晶して、化合物 13 (9.55 g、64%) を製造した。

MS [M + H]<sup>+</sup> = 693

## 【0189】

< 製造例 14 > 化合物 14 の合成

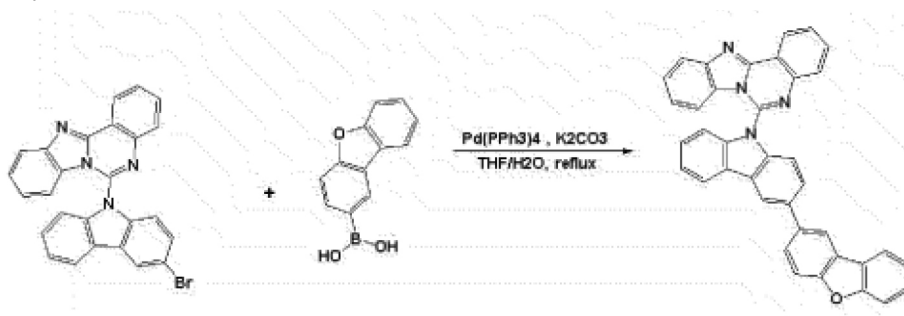
10

20

30

40

## 【化138】



化合物 14

10

窒素雰囲気下、500 ml の丸底フラスコに、化合物 A (10 g、21.6 mmol)、ジベンゾ[*b*, *d*]フラン-2-イルボロン酸 (5.26 g、23.81 mmol) をテトラヒドロフラン 300 ml に完全に溶かした後、2 M 炭酸カリウム水溶液 (150 ml) を添加し、テトラキス-(トリフェニルホスフィン)パラジウム (0.75 g、0.65 mmol) を入れた後、6 時間加熱撹拌した。常温に温度を下げて水層を除去し、無水硫酸マグネシウムで乾燥した後、減圧濃縮させ、エチルアセテート 300 ml で再結晶して、化合物 14 (10.82 g、91%) を製造した。

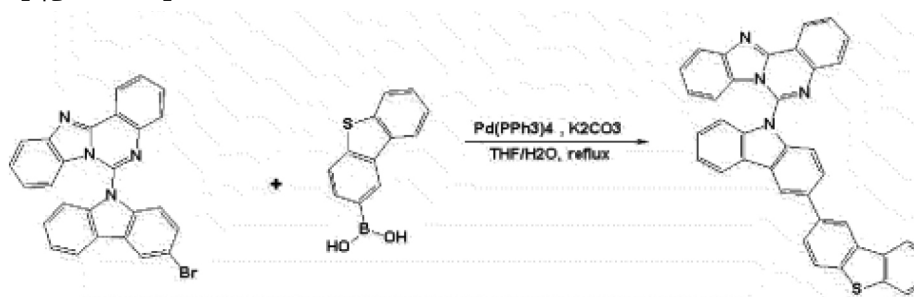
MS [M + H]<sup>+</sup> = 551

## 【0190】

20

< 製造例 15 > 化合物 15 の合成

## 【化139】



化合物 15

30

窒素雰囲気下、500 ml の丸底フラスコに、化合物 A (10 g、21.6 mmol)、ジベンゾ[*b*, *d*]チオフェン-2-イルボロン酸 (5.32 g、23.81 mmol) をテトラヒドロフラン 300 ml に完全に溶かした後、2 M 炭酸カリウム水溶液 (150 ml) を添加し、テトラキス-(トリフェニルホスフィン)パラジウム (0.75 g、0.65 mmol) を入れた後、5 時間加熱撹拌した。常温に温度を下げて水層を除去し、無水硫酸マグネシウムで乾燥した後、減圧濃縮させ、エチルアセテート 200 ml で再結晶して、化合物 15 (9.44 g、80%) を製造した。

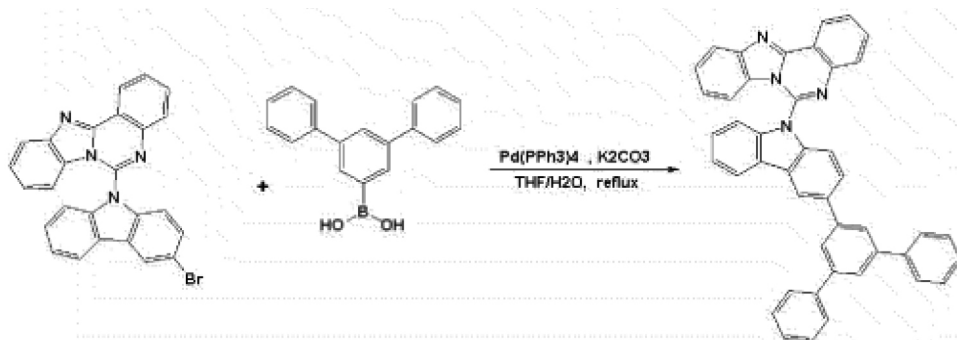
MS [M + H]<sup>+</sup> = 567

40

## 【0191】

< 製造例 16 > 化合物 16 の合成

## 【化140】



化合物 16

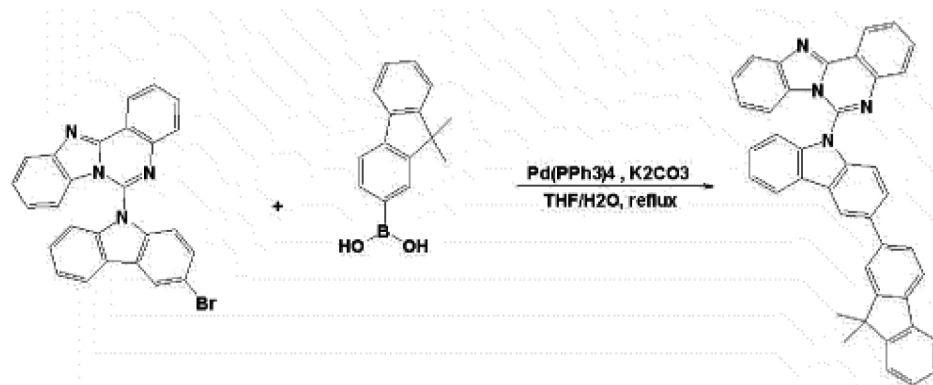
窒素雰囲気下、500 ml の丸底フラスコに、化合物 A (10 g、21.6 mmol)、[1,1':3',1''-ターフェニル]-5'-イルボロン酸 (6.52 g、23.81 mmol) をテトラヒドロフラン 300 ml に完全に溶かした後、2 M 炭酸カリウム水溶液 (150 ml) を添加し、テトラキス-(トリフェニルホスフィン)パラジウム (0.75 g、0.65 mmol) を入れた後、6 時間加熱撹拌した。常温に温度を下げて水層を除去し、無水硫酸マグネシウムで乾燥した後、減圧濃縮させ、エチルアセテート 200 ml で再結晶して、化合物 16 (10.42 g、78%) を製造した。

MS [M + H]<sup>+</sup> = 613

## 【0192】

< 製造例 17 > 化合物 17 の合成

## 【化141】



化合物 17

窒素雰囲気下、500 ml の丸底フラスコに、化合物 A (10 g、21.6 mmol)、(9,9-ジメチル-9H-フルオレン-2-イル)ボロン酸 (5.66 g、23.81 mmol) をテトラヒドロフラン 320 ml に完全に溶かした後、2 M 炭酸カリウム水溶液 (160 ml) を添加し、テトラキス-(トリフェニルホスフィン)パラジウム (0.75 g、0.65 mmol) を入れた後、3 時間加熱撹拌した。常温に温度を下げて水層を除去し、無水硫酸マグネシウムで乾燥した後、減圧濃縮させ、エチルアセテート 200 ml で再結晶して、化合物 17 (9.56 g、76%) を製造した。

MS [M + H]<sup>+</sup> = 577

## 【0193】

< 製造例 18 > 化合物 18 の合成

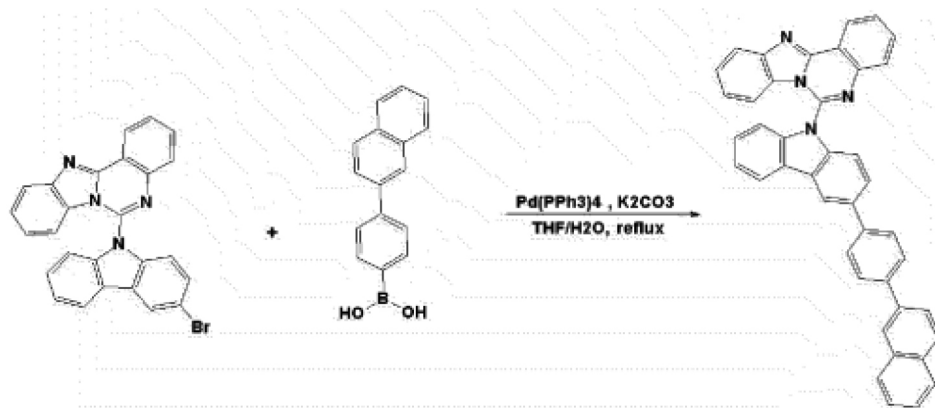
10

20

30

40

## 【化 1 4 2】



化合物 18

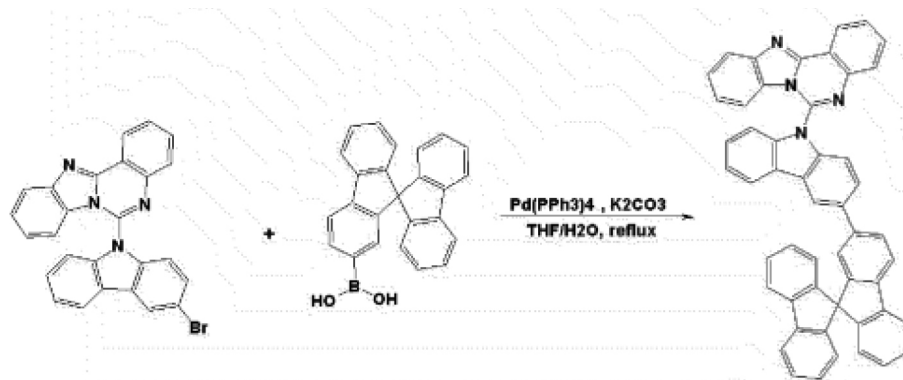
窒素雰囲気下、500 ml の丸底フラスコに、化合物 A (10 g、21.6 mmol)、(4-(ナフタレン-2-イル)フェニル)ボロン酸(6.51 g、23.81 mmol)をテトラヒドロフラン320 ml に完全に溶かした後、2 M 炭酸カリウム水溶液(160 ml)を添加し、テトラキス-(トリフェニルホスフィン)パラジウム(0.75 g、0.65 mmol)を入れた後、5 時間加熱撹拌した。常温に温度を下げて水層を除去し、無水硫酸マグネシウムで乾燥した後、減圧濃縮させ、エチルアセテート300 ml で再結晶して、化合物 18 (10.22 g、84%)を製造した。

MS [M + H]<sup>+</sup> = 587

## 【0194】

< 製造例 19 > 化合物 19 の合成

## 【化 1 4 3】



化合物 19

窒素雰囲気下、500 ml の丸底フラスコに、化合物 A (10 g、21.6 mmol)、9,9'-スピロビ[フルオレン]-2-イルボロン酸(8.57 g、23.81 mmol)をテトラヒドロフラン400 ml に完全に溶かした後、2 M 炭酸カリウム水溶液(200 ml)を添加し、テトラキス-(トリフェニルホスフィン)パラジウム(0.75 g、0.65 mmol)を入れた後、5 時間加熱撹拌した。常温に温度を下げて水層を除去し、無水硫酸マグネシウムで乾燥した後、減圧濃縮させ、エチルアセテート300 ml で再結晶して、化合物 19 (13.74 g、91%)を製造した。

MS [M + H]<sup>+</sup> = 699

## 【0195】

< 製造例 20 > 化合物 20 の合成

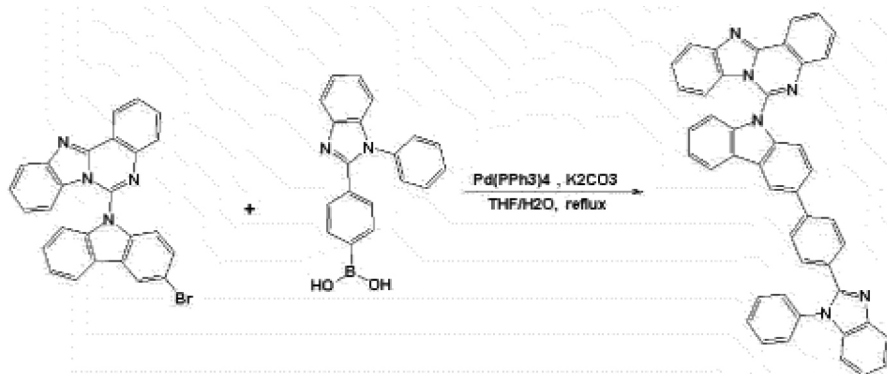
10

20

30

40

## 【化 1 4 4】



化合物 20

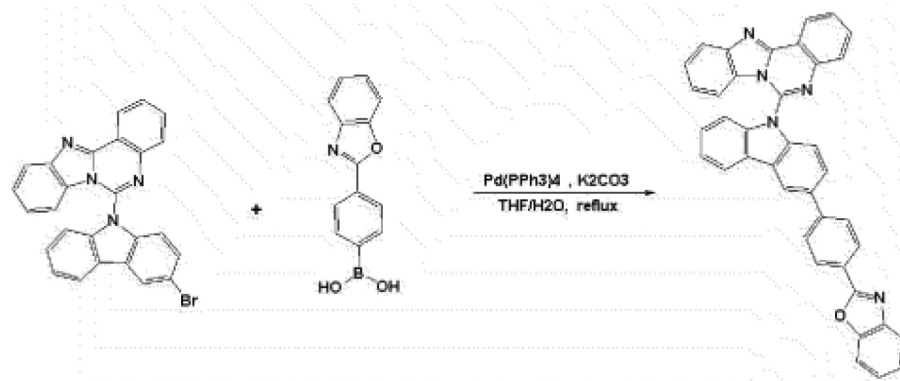
窒素雰囲気下、500 ml の丸底フラスコに、化合物 A (10 g、21.6 mmol)、(4-(1-フェニル-1H-benzo[d]イミダゾール-2-イル)フェニル)ボロン酸 (7.48 g、23.81 mmol) をテトラヒドロフラン 300 ml に完全に溶かした後、2 M 炭酸カリウム水溶液 (140 ml) を添加し、テトラキス-(トリフェニルホスフィン)パラジウム (0.75 g、0.65 mmol) を入れた後、8 時間加熱攪拌した。常温に温度を下げて水層を除去し、無水硫酸マグネシウムで乾燥した後、減圧濃縮させ、エチルアセテート 200 ml で再結晶して、化合物 20 (12.42 g、87%) を製造した。

MS [M + H]<sup>+</sup> = 653

## 【0196】

< 製造例 21 > 化合物 21 の合成

## 【化 1 4 5】



化合物 21

窒素雰囲気下、500 ml の丸底フラスコに、化合物 A (10 g、21.6 mmol)、(4-(ベンゾ[d]オキサゾール-2-イル)フェニル)ボロン酸 (5.69 g、23.81 mmol) をテトラヒドロフラン 300 ml に完全に溶かした後、2 M 炭酸カリウム水溶液 (140 ml) を添加し、テトラキス-(トリフェニルホスフィン)パラジウム (0.75 g、0.65 mmol) を入れた後、3 時間加熱攪拌した。常温に温度を下げて水層を除去し、無水硫酸マグネシウムで乾燥した後、減圧濃縮させ、エチルアセテート 200 ml で再結晶して、化合物 21 (10.11 g、81%) を製造した。

MS [M + H]<sup>+</sup> = 578

## 【0197】

< 製造例 22 > 化合物 22 の合成

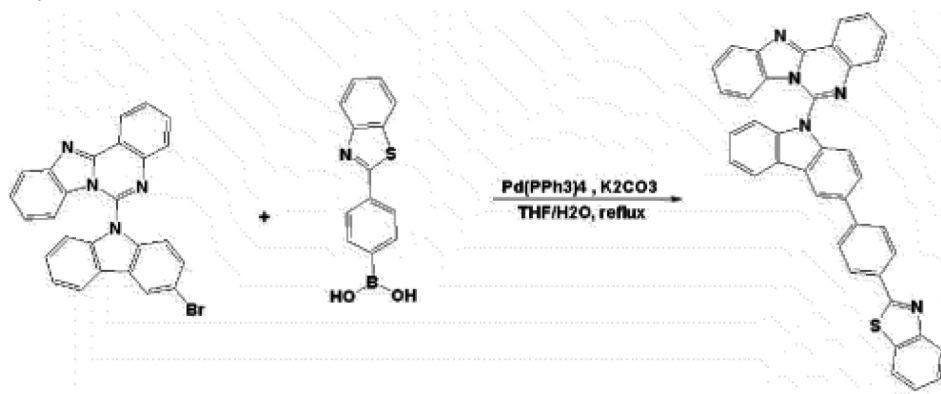
10

20

30

40

## 【化 1 4 6】



化合物 22

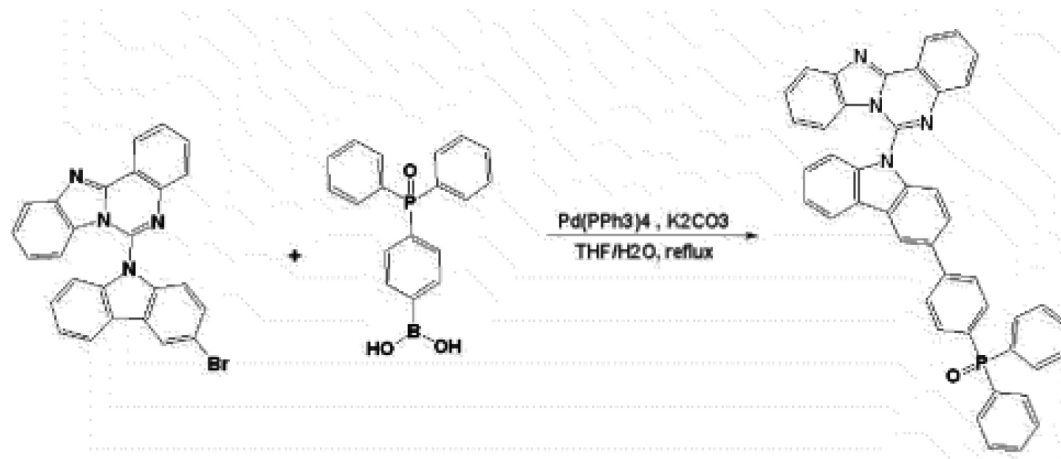
窒素雰囲気下、500 ml の丸底フラスコに、化合物 A (10 g、21.6 mmol)、(4-(ベンゾ[d]チアゾール-2-イル)フェニル)ボロン酸 (5.69 g、23.81 mmol) をテトラヒドロフラン 300 ml に完全に溶かした後、2 M 炭酸カリウム水溶液 (140 ml) を添加し、テトラキス-(トリフェニルホスフィン)パラジウム (0.75 g、0.65 mmol) を入れた後、3 時間加熱撹拌した。常温に温度を下げ、水層を除去し、無水硫酸マグネシウムで乾燥した後、減圧濃縮させ、エチルアセテート 200 ml で再結晶して、化合物 22 (9.53 g、74%) を製造した。

MS [M + H]<sup>+</sup> = 594

## 【0198】

< 製造例 23 > 化合物 23 の合成

## 【化 1 4 7】



化合物 23

窒素雰囲気下、500 ml の丸底フラスコに、化合物 A (10 g、21.6 mmol)、(4-(ベンゾ[d]チアゾール-2-イル)フェニル)ボロン酸 (6.84 g、23.81 mmol) をテトラヒドロフラン 300 ml に完全に溶かした後、2 M 炭酸カリウム水溶液 (140 ml) を添加し、テトラキス-(トリフェニルホスフィン)パラジウム (0.75 g、0.65 mmol) を入れた後、2 時間加熱撹拌した。常温に温度を下げ、水層を除去し、無水硫酸マグネシウムで乾燥した後、減圧濃縮させ、エチルアセテート 200 ml で再結晶して、化合物 23 (9.53 g、74%) を製造した。

MS [M + H]<sup>+</sup> = 662

## 【0199】

< 製造例 24 > 化合物 24 ~ 46 の合成

製造例 1 ~ 23 における出発物質を、化合物 A の代わりに化合物 B を使い、化合物 G の代わりに化合物 H を用いたことを除き、前記化合物 1 ~ 23 を製造する方法と同様にして

10

20

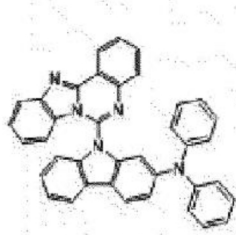
30

40

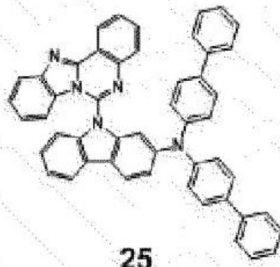
50

下記化合物 24 ~ 46 を製造した。

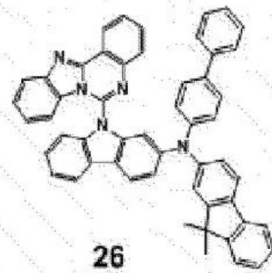
【化 1 4 8】



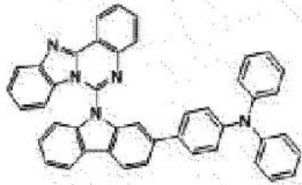
24



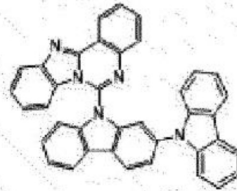
25



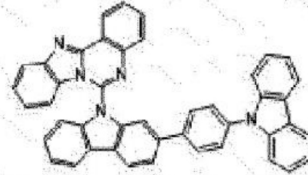
26



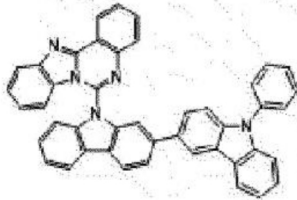
27



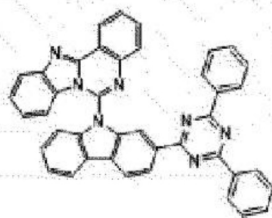
28



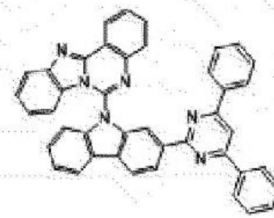
29



30

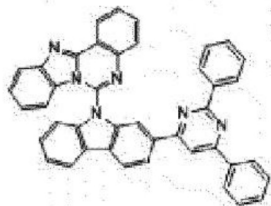


31

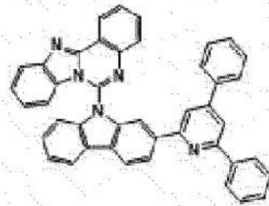


32

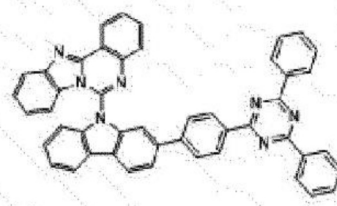
【化 1 4 9】



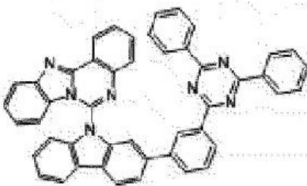
33



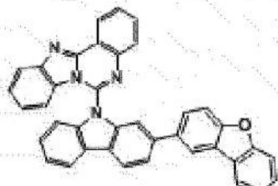
34



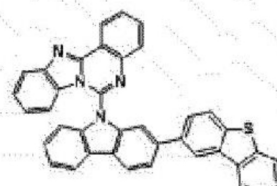
35



36



37



38

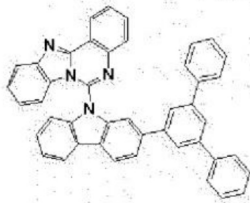
10

20

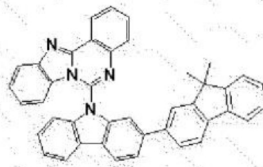
30

40

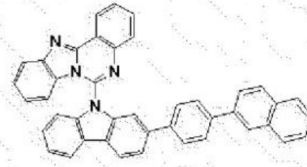
## 【化 1 5 0】



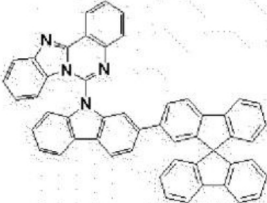
39



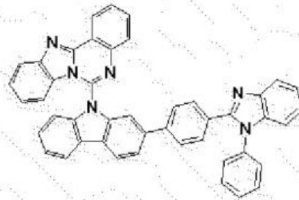
40



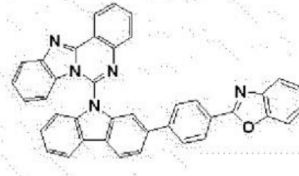
41



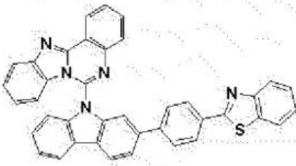
42



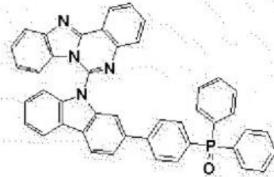
43



44



45



46

## 【 0 2 0 0】

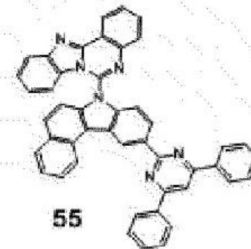
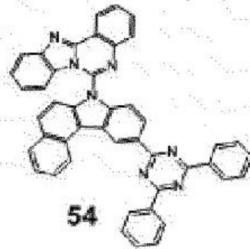
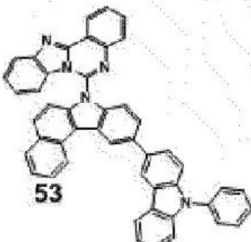
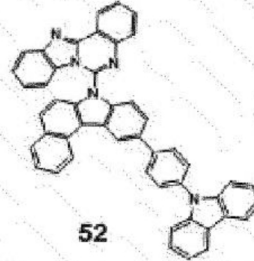
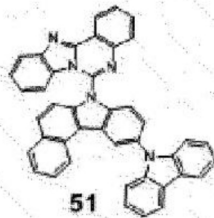
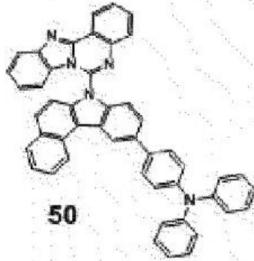
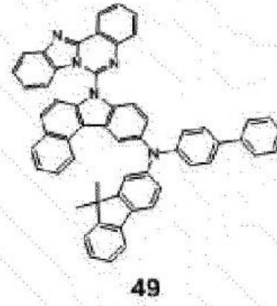
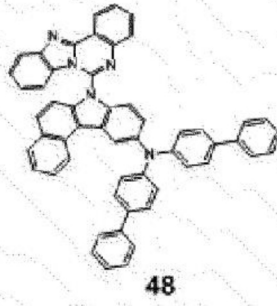
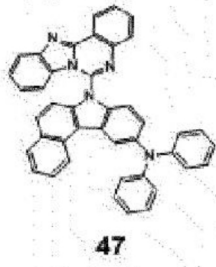
< 製造例 2 5 > 化合物 4 7 ~ 6 9 の合成

製造例 1 ~ 2 3 における出発物質を、化合物 A の代わりに化合物 E を用いたことを除き、前記化合物 1 ~ 2 3 を製造する方法と同様にして下記化合物 4 7 ~ 6 9 を製造した。

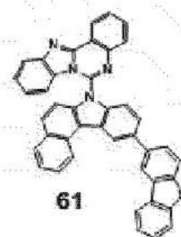
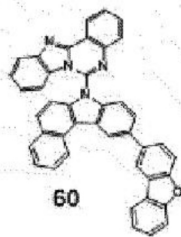
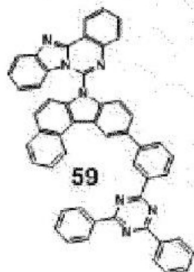
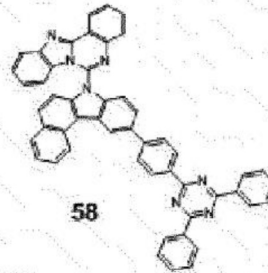
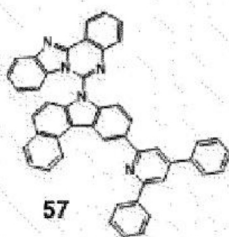
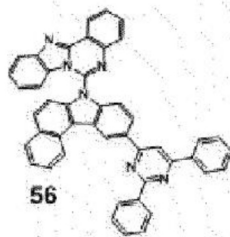
10

20

【化 1 5 1】



【化 1 5 2】



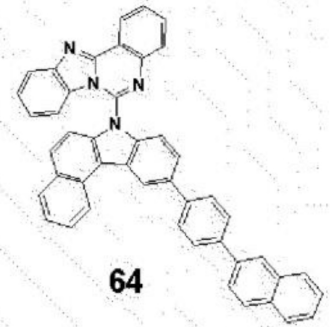
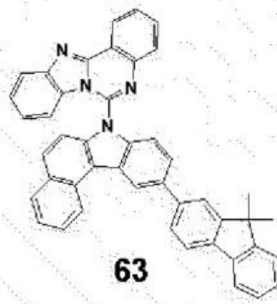
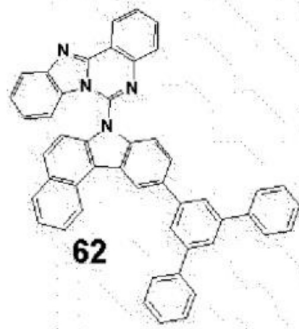
10

20

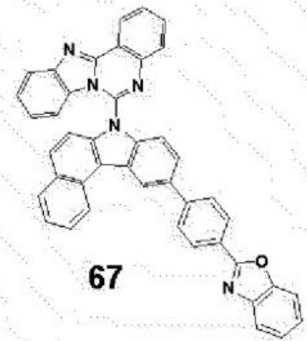
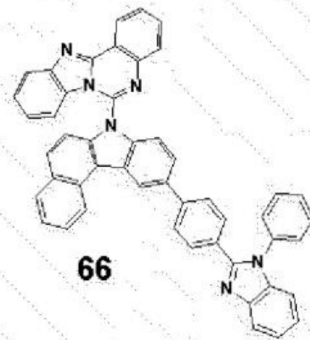
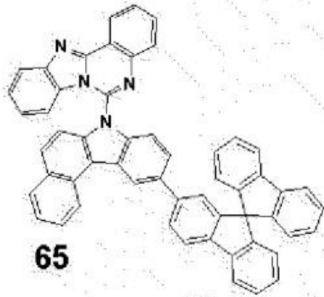
30

40

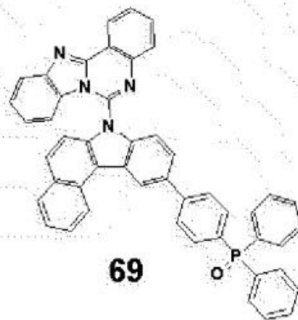
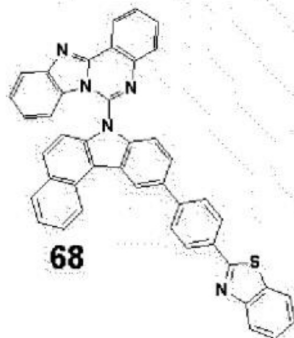
## 【化 1 5 3】



10



20



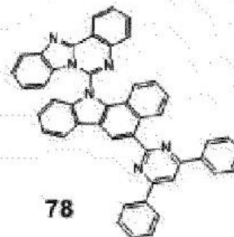
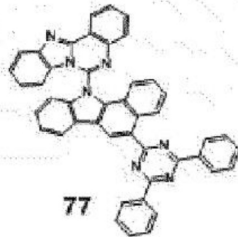
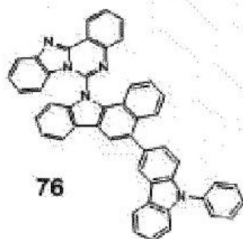
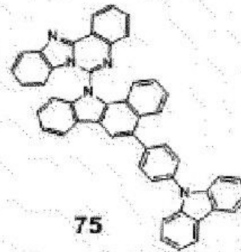
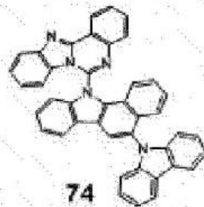
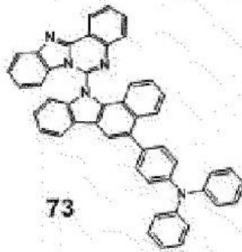
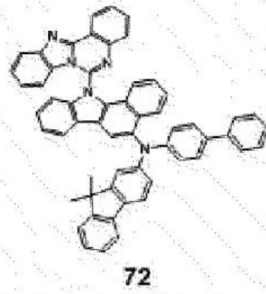
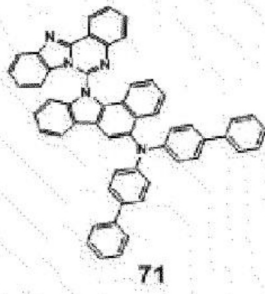
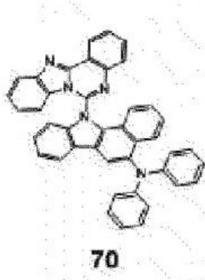
30

## 【 0 2 0 1】

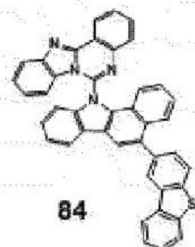
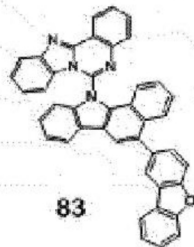
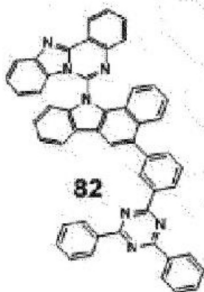
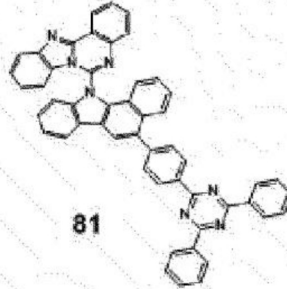
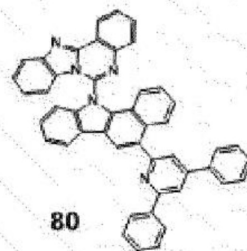
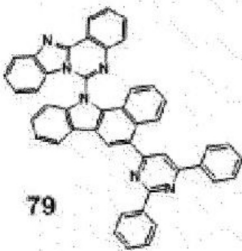
< 製造例 2 6 > 化合物 7 0 ~ 9 2 の合成

製造例 1 ~ 2 3 における出発物質を、化合物 A の代わりに化合物 F を用いたことを除き、前記化合物 1 ~ 2 3 を製造する方法と同様にして下記化合物 7 0 ~ 9 2 を製造した。

【化 1 5 4】



【化 1 5 5】



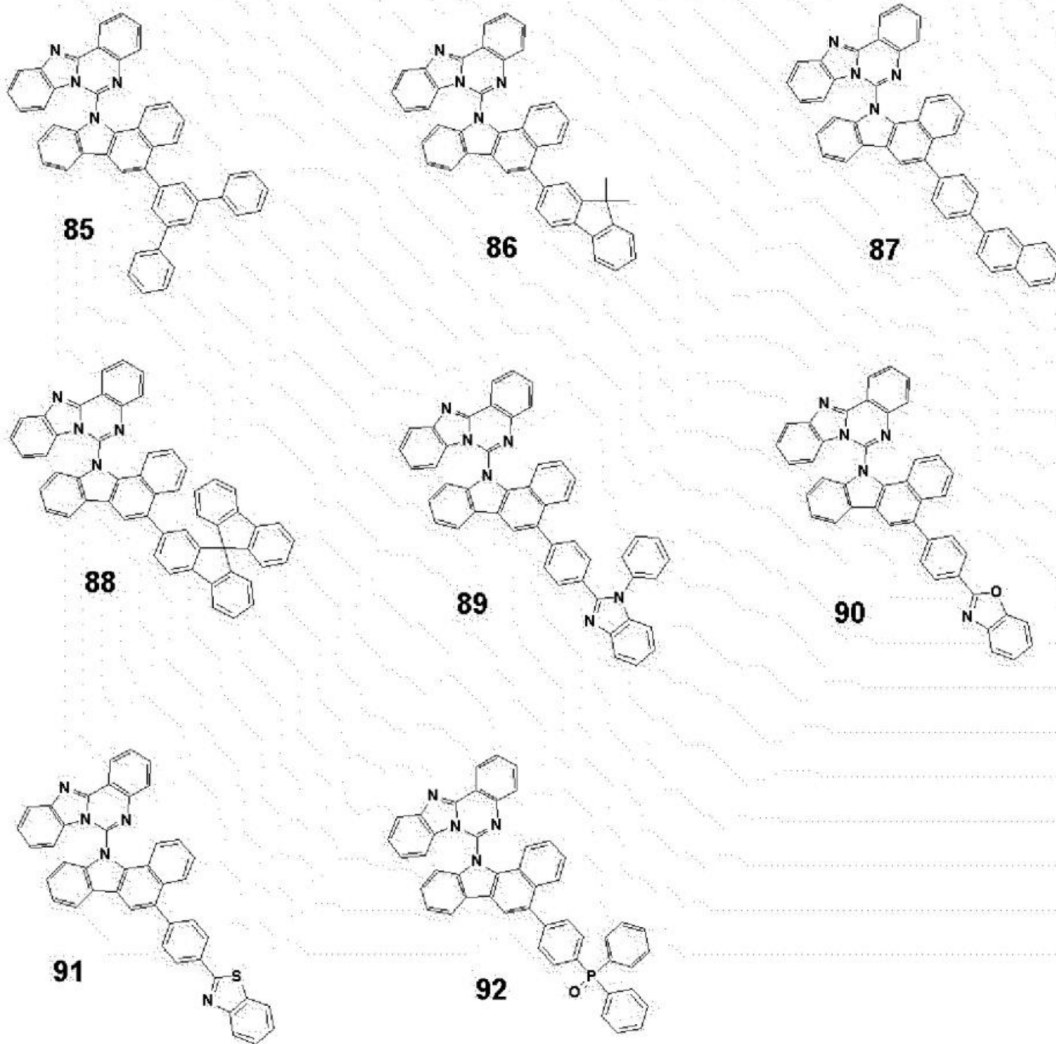
10

20

30

40

## 【化 1 5 6】



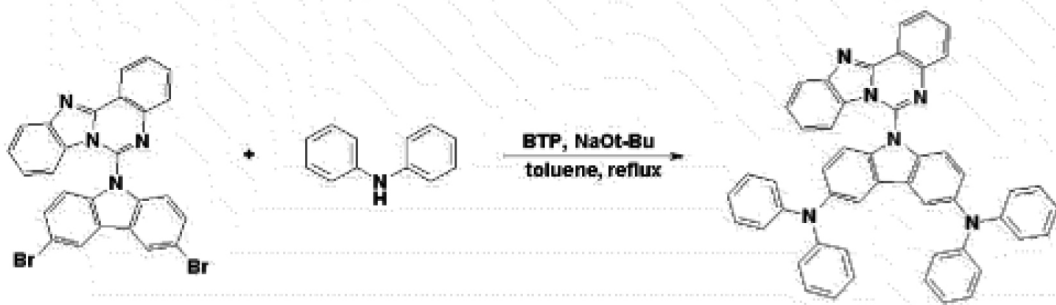
10

20

## 【 0 2 0 2】

&lt; 製造例 2 7 &gt; 化合物 9 3 の合成

## 【化 1 5 7】



30

40

化合物 93

化合物 C (10 g、18.52 mmol)、ジフェニルアミン (6.88 g、40.74 mmol)、そして NaOt-Bu (4.62 g、48.2 mmol) をトルエン 200 ml に入れた後、攪拌しながら温度を上昇させた。昇温した後、還流しはじめると、ビス(トリ-tert-ブチルホスフィン)パラジウム (0.09 g、0.18 mmol) をゆっくり滴下して入れた。5 時間後に反応を終了し、温度を常温に下げて減圧下で濃縮した後、カラム精製して、10.42 g (80%) の化合物 93 を製造した。

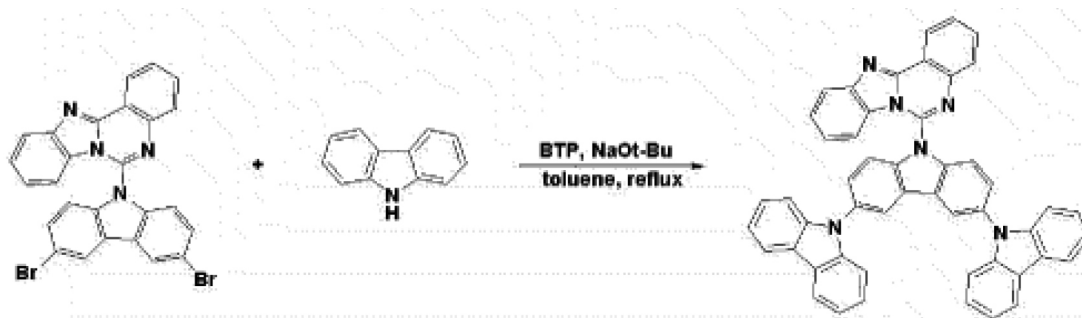
MS [M+H]<sup>+</sup> = 719

50

## 【 0 2 0 3 】

&lt; 製造例 2 8 &gt; 化合物 9 4 の合成

## 【 化 1 5 8 】



10

化合物 94

化合物 C ( 1 0 g 、 1 8 . 5 2 m m o l ) 、 カルバゾール ( 6 . 8 5 g 、 4 0 . 7 4 m o l ) 、 そし て N a O t - B u ( 4 . 6 2 g 、 4 8 . 2 m m o l ) を トルエン 2 0 0 m l に 入 れ た 後 、 攪 拌 し な が ら 温 度 を 上 昇 さ せ た 。 昇 温 し た 後 、 還 流 し は じ め る と 、 ビ ス ( ト リ - t e r t - ブ チ ル ホ ス フ ィ ン ) パ ラ ジ ウ ム ( 0 . 0 9 g 、 0 . 1 8 m m o l ) を ゆ っ く り 滴 下 し て 入 れ た 。 5 時 間 後 に 反 応 を 終 了 し 、 温 度 を 常 温 に 下 げ て 減 圧 下 で 濃 縮 し た 後 、 カ ラ ム 精 製 し て 、 8 . 4 2 g ( 7 1 % ) の 化 合 物 9 4 を 製 造 し た 。

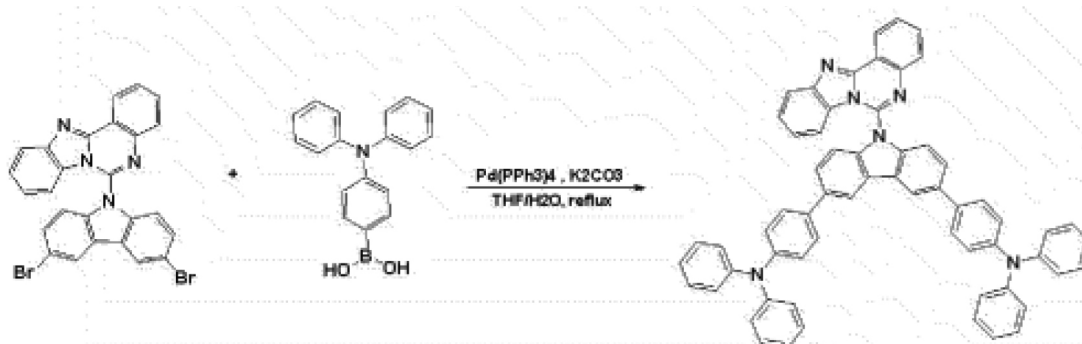
20

M S [ M + H ] <sup>+</sup> = 7 1 5

## 【 0 2 0 4 】

&lt; 製造例 2 9 &gt; 化合物 9 5 の合成

## 【 化 1 5 9 】



30

化合物 95

窒 素 雰 囲 気 下 、 5 0 0 m l の 丸 底 フ ラ ス コ に 、 化 合 物 C ( 1 0 g 、 1 8 . 5 2 m m o l ) 、 ( 4 - ( ジ フェ ニ ル ア ミ ノ ) フェ ニ ル ) ボ ロ ン 酸 ( 1 1 . 4 0 g 、 4 0 . 7 4 m m o l ) を テ ト ラ ヒ ド ロ フ ラ ン 3 2 0 m l に 完 全 に 溶 か し た 後 、 2 M 炭 酸 カ リ ウ ム 水 溶 液 ( 1 1 0 m l ) を 添 加 し 、 テ ト ラ キ ス - ( ト リ フェ ニ ル ホ ス フ ィ ン ) パ ラ ジ ウ ム ( 0 . 6 5 g 、 0 . 5 6 m m o l ) を 入 れ た 後 、 3 時 間 加 熱 攪 拌 し た 。 常 温 に 温 度 を 下 げ て 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 さ せ 、 エ チ ル ア セ テ ー ト 2 0 0 m l で 再 結 晶 し て 、 化 合 物 9 5 ( 1 3 . 5 4 g 、 8 4 % ) を 製 造 し た 。

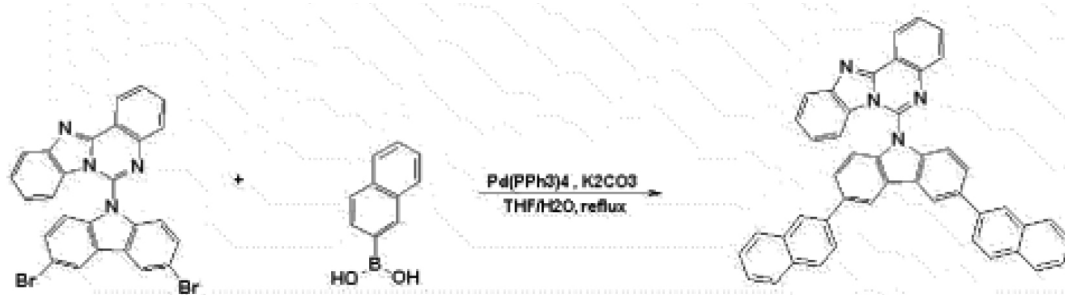
40

M S [ M + H ] <sup>+</sup> = 8 7 1

## 【 0 2 0 5 】

&lt; 製造例 3 0 &gt; 化合物 9 6 の合成

## 【化160】



化合物 96

10

窒素雰囲気下、500 ml の丸底フラスコに、化合物 C (10 g、18.52 mmol)、ナフタレン-イルボロン酸 (7.01 g、40.74 mmol) をテトラヒドロフラン 280 ml に完全に溶かした後、2 M 炭酸カリウム水溶液 (120 ml) を添加し、テトラキス-(トリフェニルホスフィン)パラジウム (0.65 g、0.56 mmol) を入れた後、1 時間加熱撹拌した。常温に温度を下げて水層を除去し、無水硫酸マグネシウムで乾燥した後、減圧濃縮させ、エチルアセテート 300 ml で再結晶して、化合物 96 (9.45 g、80%) を製造した。

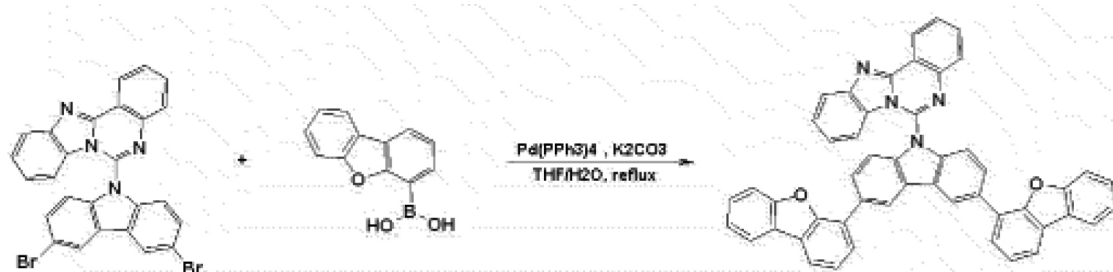
MS [M + H]<sup>+</sup> = 637

## 【0206】

20

< 製造例 31 > 化合物 97 の合成

## 【化161】



化合物 97

30

窒素雰囲気下、500 ml の丸底フラスコに、化合物 C (10 g、18.52 mmol)、ジベンゾ [b, d] フラン-4-イルボロン酸 (8.64 g、40.74 mmol) をテトラヒドロフラン 300 ml に完全に溶かした後、2 M 炭酸カリウム水溶液 (150 ml) を添加し、テトラキス-(トリフェニルホスフィン)パラジウム (0.65 g、0.56 mmol) を入れた後、3 時間加熱撹拌した。常温に温度を下げて水層を除去し、無水硫酸マグネシウムで乾燥した後、減圧濃縮させ、エチルアセテート 300 ml で再結晶して、化合物 97 (11.24 g、84%) を製造した。

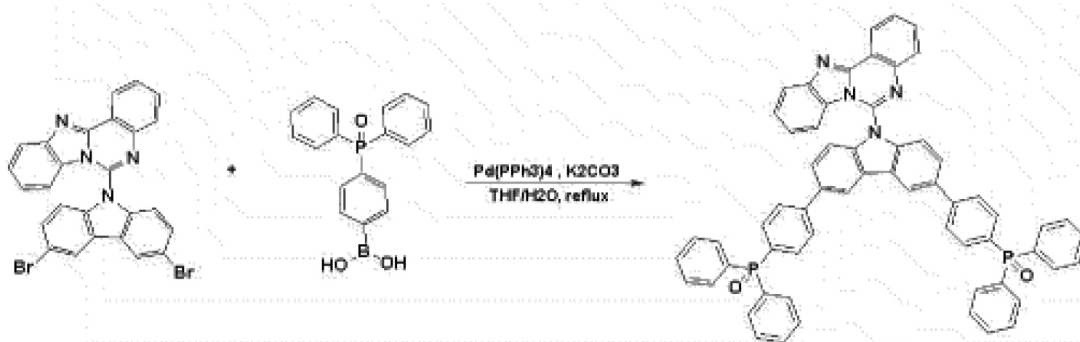
MS [M + H]<sup>+</sup> = 717

40

## 【0207】

< 製造例 32 > 化合物 98 の合成

## 【化162】



化合物 98

窒素雰囲気下、500 ml の丸底フラスコに、化合物 C (10 g、18.52 mmol)、ジベンゾ [b, d] フラン - 4 - イルポロン酸 (13.12 g、40.74 mmol) をテトラヒドロフラン 360 ml に完全に溶かした後、2 M 炭酸カリウム水溶液 (180 ml) を添加し、テトラキス - (トリフェニルホスフィン) パラジウム (0.65 g、0.56 mmol) を入れた後、15 時間加熱撹拌した。常温に温度を下げて水層を除去し、無水硫酸マグネシウムで乾燥した後、減圧濃縮させ、エチルアセテート 300 ml で再結晶して、化合物 98 (14.15 g、81%) を製造した。

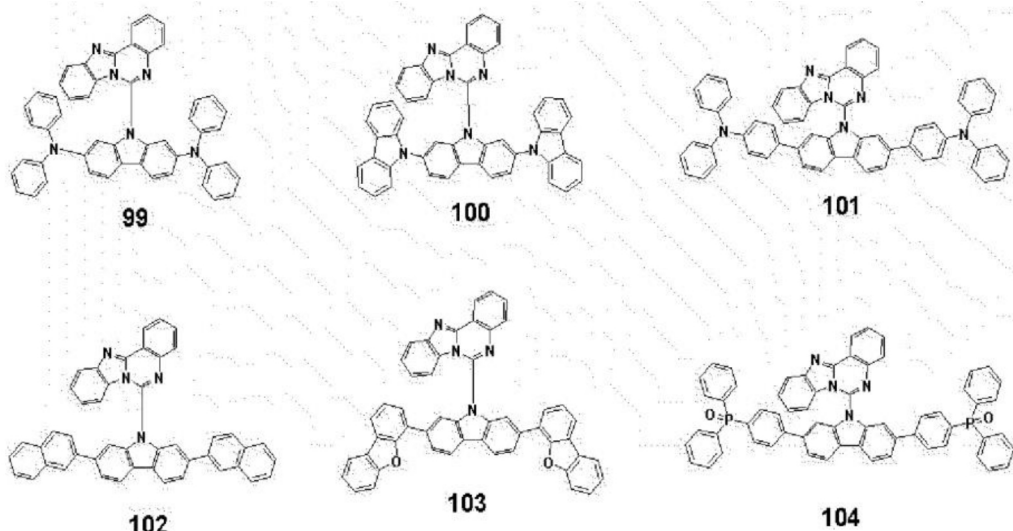
MS [M + H]<sup>+</sup> = 937

## 【0208】

< 製造例 33 > 化合物 99 ~ 104 の合成

製造例 27 ~ 32 における出発物質を、化合物 C の代わりに化合物 D を用いたことを除き、前記化合物 93 ~ 98 を製造する方法と同様にして下記化合物 99 ~ 104 を製造した。

## 【化163】



## 【0209】

< 実験例 1 - 1 >

ITO (indium tin oxide) が 1,000 の厚さに薄膜コーティングされたガラス基板を、洗剤を溶かした蒸留水に入れて超音波洗浄した。この時、洗剤としてはフィッシャー社 (Fischer Co.) 製品を使用し、蒸留水としてはミリポア社 (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乾燥させた後、プラズマ洗浄機に輸送させた。また、酸素プ

10

20

30

40

50

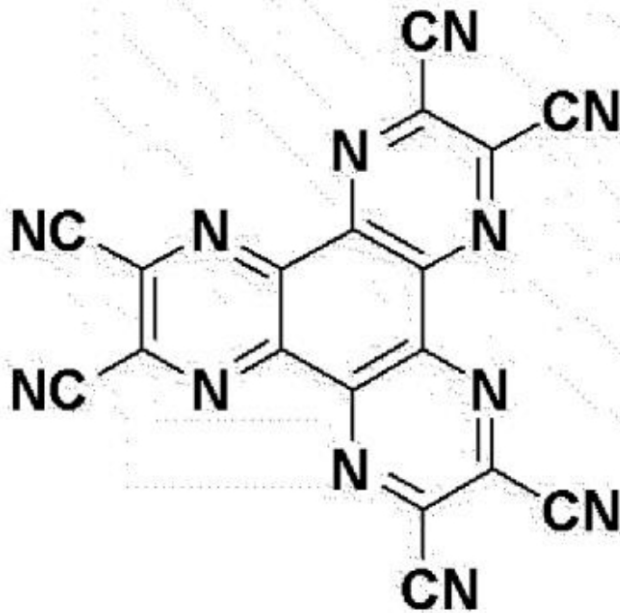
ラズマを用いて前記基板を5分間洗浄した後、真空蒸着機に基板を輸送させた。

【0210】

こうして用意されたITO透明電極上に、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500 の厚さに熱真空蒸着して、正孔注入層を形成した。

[HAT]

【化164】



10

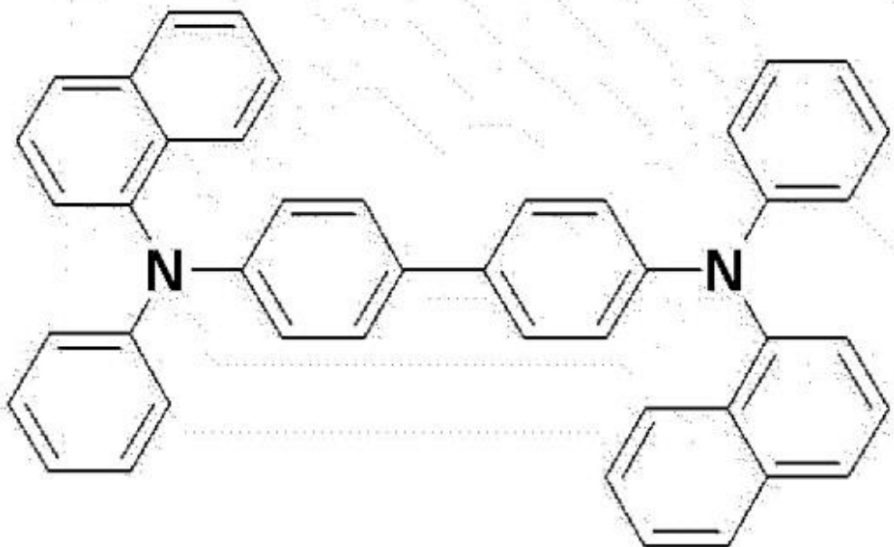
20

【0211】

前記正孔注入層上に、正孔を輸送する物質である下記化合物4-4'-ビス[N-(1-ナフチル)-N-フェニルアミノ]ビフェニル(NPB)(300 )を真空蒸着して、正孔輸送層を形成した。

[NPB]

【化165】



30

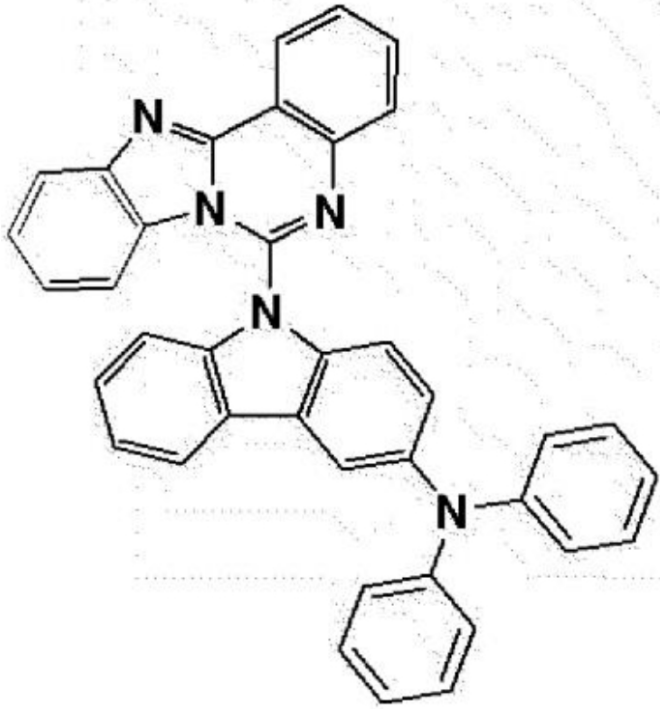
40

【0212】

次に、前記正孔輸送層上に、膜厚さ100 として下記化合物1を真空蒸着して、電子阻止層を形成した。

[化合物1]

【化 1 6 6】



10

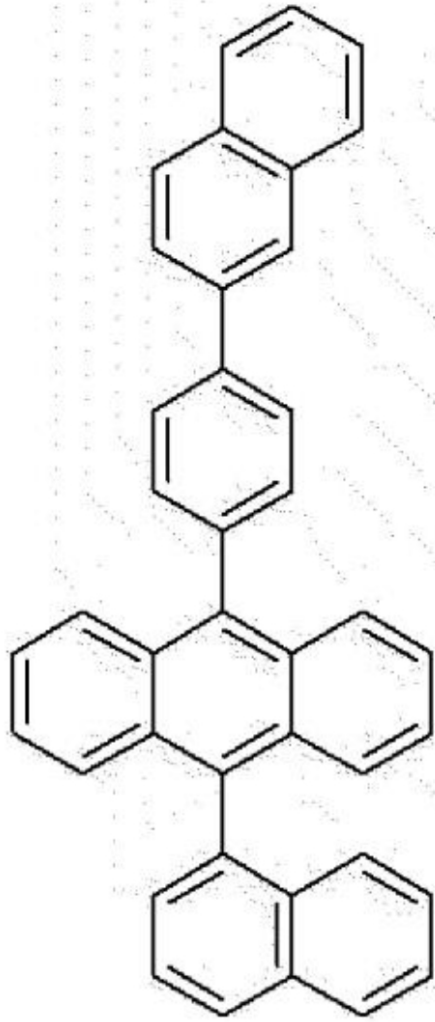
20

【 0 2 1 3 】

次に、前記電子阻止層上に、膜厚さ300として以下のような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。

[BH]

【化 1 6 7】



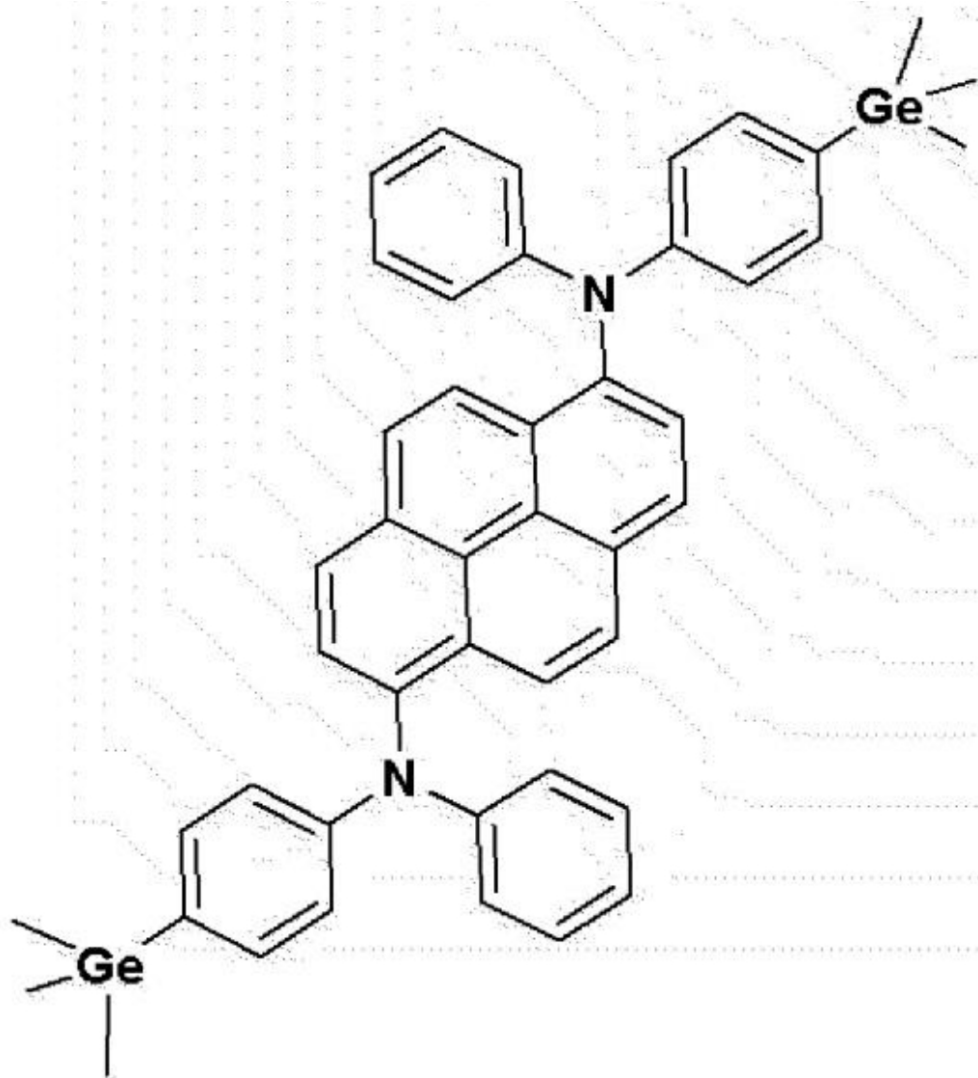
10

20

[ B D ]

30

【化 1 6 8】



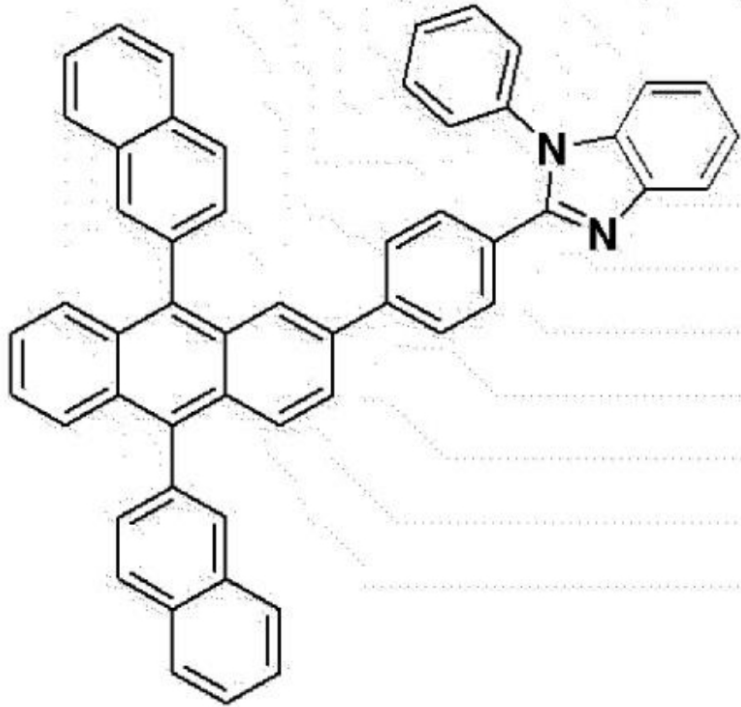
10

20

30

[ ET 1 ]

## 【化169】



10

20

## [LiQ]

## 【化170】



30

## 【0214】

前記発光層上に、前記化合物ET1と前記化合物LiQ(Lithium Quinolate)を1:1の重量比で真空蒸着して、300 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輸送層上に、順次に、12 の厚さにリチウムフルオライド(LiF)と、2,000 の厚さにアルミニウムを蒸着して、陰極を形成した。

## 【0215】

前記過程で、有機物の蒸着速度は0.4~0.7 /secを維持し、陰極のリチウムフルオライドは0.3 /sec、アルミニウムは2 /secの蒸着速度を維持し、蒸着時の真空度は $2 \times 10^{-7} \sim 5 \times 10^{-6}$  torrを維持して、有機発光素子を作製した。

40

## 【0216】

## &lt;実験例1-2&gt;

前記実験例1-1における化合物1の代わりに前記化合物2を用いたことを除けば、実験例1-1と同様の方法で有機発光素子を作製した。

## 【0217】

## &lt;実験例1-3&gt;

前記実験例1-1における化合物1の代わりに前記化合物3を用いたことを除けば、実験例1-1と同様の方法で有機発光素子を作製した。

## 【0218】

50

## &lt; 実験例 1 - 4 &gt;

前記実験例 1 - 1 における化合物 1 の代わりに前記化合物 4 を用いたことを除けば、実験例 1 - 1 と同様の方法で有機発光素子を作製した。

## 【 0 2 1 9 】

## &lt; 実験例 1 - 5 &gt;

前記実験例 1 - 1 における化合物 1 の代わりに前記化合物 5 を用いたことを除けば、実験例 1 - 1 と同様の方法で有機発光素子を作製した。

## 【 0 2 2 0 】

## &lt; 実験例 1 - 6 &gt;

前記実験例 1 - 1 における化合物 1 の代わりに前記化合物 6 を用いたことを除けば、実験例 1 - 1 と同様の方法で有機発光素子を作製した。

## 【 0 2 2 1 】

## &lt; 実験例 1 - 7 &gt;

前記実験例 1 - 1 における化合物 1 の代わりに前記化合物 7 を用いたことを除けば、実験例 1 - 1 と同様の方法で有機発光素子を作製した。

## 【 0 2 2 2 】

## &lt; 実験例 1 - 8 &gt;

前記実験例 1 - 1 における化合物 1 の代わりに前記化合物 2 4 を用いたことを除けば、実験例 1 - 1 と同様の方法で有機発光素子を作製した。

## 【 0 2 2 3 】

## &lt; 実験例 1 - 9 &gt;

前記実験例 1 - 1 における化合物 1 の代わりに前記化合物 2 5 を用いたことを除けば、実験例 1 - 1 と同様の方法で有機発光素子を作製した。

## 【 0 2 2 4 】

## &lt; 実験例 1 - 1 0 &gt;

前記実験例 1 - 1 における化合物 1 の代わりに前記化合物 2 6 を用いたことを除けば、実験例 1 - 1 と同様の方法で有機発光素子を作製した。

## 【 0 2 2 5 】

## &lt; 実験例 1 - 1 1 &gt;

前記実験例 1 - 1 における化合物 1 の代わりに前記化合物 2 7 を用いたことを除けば、実験例 1 - 1 と同様の方法で有機発光素子を作製した。

## 【 0 2 2 6 】

## &lt; 実験例 1 - 1 2 &gt;

前記実験例 1 - 1 における化合物 1 の代わりに前記化合物 2 8 を用いたことを除けば、実験例 1 - 1 と同様の方法で有機発光素子を作製した。

## 【 0 2 2 7 】

## &lt; 実験例 1 - 1 3 &gt;

前記実験例 1 - 1 における化合物 1 の代わりに前記化合物 2 9 を用いたことを除けば、実験例 1 - 1 と同様の方法で有機発光素子を作製した。

## 【 0 2 2 8 】

## &lt; 実験例 1 - 1 4 &gt;

前記実験例 1 - 1 における化合物 1 の代わりに前記化合物 3 0 を用いたことを除けば、実験例 1 - 1 と同様の方法で有機発光素子を作製した。

## 【 0 2 2 9 】

## &lt; 実験例 1 - 1 5 &gt;

前記実験例 1 - 1 における化合物 1 の代わりに前記化合物 4 7 を用いたことを除けば、実験例 1 - 1 と同様の方法で有機発光素子を作製した。

## 【 0 2 3 0 】

## &lt; 実験例 1 - 1 6 &gt;

前記実験例 1 - 1 における化合物 1 の代わりに前記化合物 4 8 を用いたことを除けば、

10

20

30

40

50

実験例 1 - 1 と同様の方法で有機発光素子を作製した。

【 0 2 3 1 】

< 実験例 1 - 1 7 >

前記実験例 1 - 1 における化合物 1 の代わりに前記化合物 4 9 を用いたことを除けば、  
実験例 1 - 1 と同様の方法で有機発光素子を作製した。

【 0 2 3 2 】

< 実験例 1 - 1 8 >

前記実験例 1 - 1 における化合物 1 の代わりに前記化合物 5 0 を用いたことを除けば、  
実験例 1 - 1 と同様の方法で有機発光素子を作製した。

【 0 2 3 3 】

< 実験例 1 - 1 9 >

前記実験例 1 - 1 における化合物 1 の代わりに前記化合物 5 1 を用いたことを除けば、  
実験例 1 - 1 と同様の方法で有機発光素子を作製した。

【 0 2 3 4 】

< 実験例 1 - 2 0 >

前記実験例 1 - 1 における化合物 1 の代わりに前記化合物 5 2 を用いたことを除けば、  
実験例 1 - 1 と同様の方法で有機発光素子を作製した。

【 0 2 3 5 】

< 実験例 1 - 2 1 >

前記実験例 1 - 1 における化合物 1 の代わりに前記化合物 5 3 を用いたことを除けば、  
実験例 1 - 1 と同様の方法で有機発光素子を作製した。

【 0 2 3 6 】

< 実験例 1 - 2 2 >

前記実験例 1 - 1 における化合物 1 の代わりに前記化合物 7 0 を用いたことを除けば、  
実験例 1 - 1 と同様の方法で有機発光素子を作製した。

【 0 2 3 7 】

< 実験例 1 - 2 3 >

前記実験例 1 - 1 における化合物 1 の代わりに前記化合物 7 1 を用いたことを除けば、  
実験例 1 - 1 と同様の方法で有機発光素子を作製した。

【 0 2 3 8 】

< 実験例 1 - 2 4 >

前記実験例 1 - 1 における化合物 1 の代わりに前記化合物 7 2 を用いたことを除けば、  
実験例 1 - 1 と同様の方法で有機発光素子を作製した。

【 0 2 3 9 】

< 実験例 1 - 2 5 >

前記実験例 1 - 1 における化合物 1 の代わりに前記化合物 7 3 を用いたことを除けば、  
実験例 1 - 1 と同様の方法で有機発光素子を作製した。

【 0 2 4 0 】

< 実験例 1 - 2 6 >

前記実験例 1 - 1 における化合物 1 の代わりに前記化合物 7 4 を用いたことを除けば、  
実験例 1 - 1 と同様の方法で有機発光素子を作製した。

【 0 2 4 1 】

< 実験例 1 - 2 7 >

前記実験例 1 - 1 における化合物 1 の代わりに前記化合物 7 5 を用いたことを除けば、  
実験例 1 - 1 と同様の方法で有機発光素子を作製した。

【 0 2 4 2 】

< 実験例 1 - 2 8 >

前記実験例 1 - 1 における化合物 1 の代わりに前記化合物 7 6 を用いたことを除けば、  
実験例 1 - 1 と同様の方法で有機発光素子を作製した。

【 0 2 4 3 】

10

20

30

40

50

## &lt; 実験例 1 - 2 9 &gt;

前記実験例 1 - 1 における化合物 1 の代わりに前記化合物 9 3 を用いたことを除けば、  
実験例 1 - 1 と同様の方法で有機発光素子を作製した。

## 【 0 2 4 4 】

## &lt; 実験例 1 - 3 0 &gt;

前記実験例 1 - 1 における化合物 1 の代わりに前記化合物 9 4 を用いたことを除けば、  
実験例 1 - 1 と同様の方法で有機発光素子を作製した。

## 【 0 2 4 5 】

## &lt; 実験例 1 - 3 1 &gt;

前記実験例 1 - 1 における化合物 1 の代わりに前記化合物 9 5 を用いたことを除けば、  
実験例 1 - 1 と同様の方法で有機発光素子を作製した。

10

## 【 0 2 4 6 】

## &lt; 実験例 1 - 3 2 &gt;

前記実験例 1 - 1 における化合物 1 の代わりに前記化合物 9 9 を用いたことを除けば、  
実験例 1 - 1 と同様の方法で有機発光素子を作製した。

## 【 0 2 4 7 】

## &lt; 実験例 1 - 3 3 &gt;

前記実験例 1 - 1 における化合物 1 の代わりに前記化合物 1 0 0 を用いたことを除けば、  
実験例 1 - 1 と同様の方法で有機発光素子を作製した。

## 【 0 2 4 8 】

## &lt; 実験例 1 - 3 4 &gt;

前記実験例 1 - 1 における化合物 1 の代わりに前記化合物 1 0 1 を用いたことを除けば、  
実験例 1 - 1 と同様の方法で有機発光素子を作製した。

20

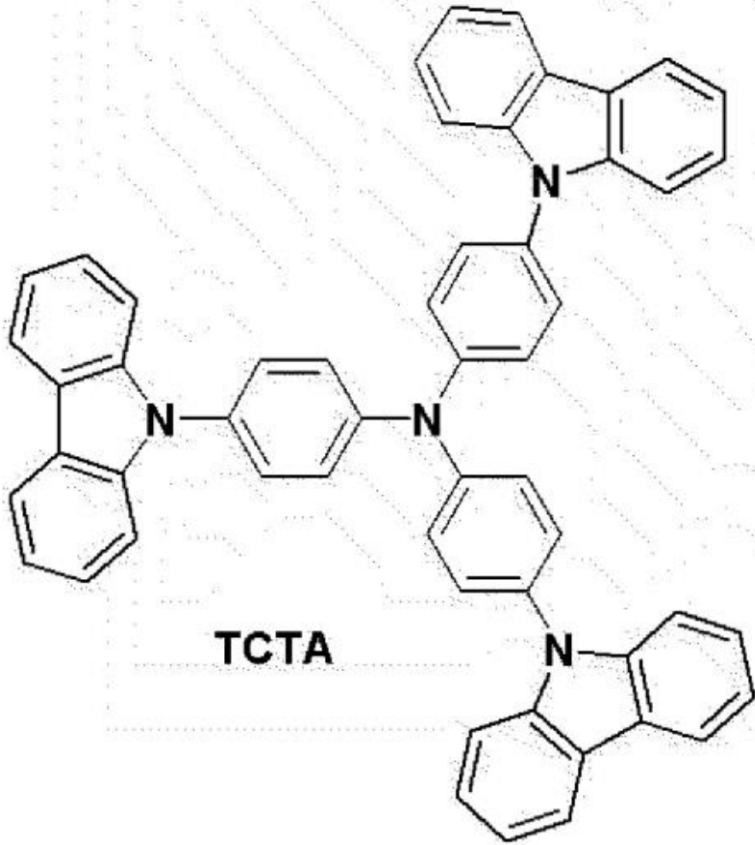
## 【 0 2 4 9 】

## &lt; 比較例 1 - 1 &gt;

前記実験例 1 - 1 における化合物 1 の代わりに下記化合物 E B 1 ( T C T A ) を用いた  
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。

## [ E B 1 ]

【化 1 7 1】



10

20

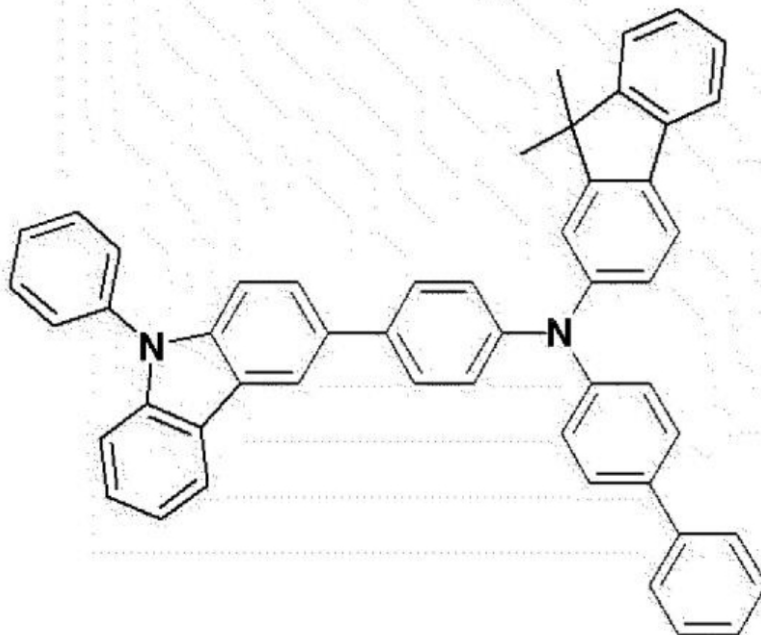
【 0 2 5 0】

< 比較例 1 - 2 >

前記実験例 1 - 1 における化合物 1 の代わりに下記化合物 E B 2 を用いたことを除けば、実験例 1 - 1 と同様の方法で有機発光素子を作製した。

[ E B 2 ]

【化 1 7 2】



30

40

【 0 2 5 1】

< 比較例 1 - 3 >

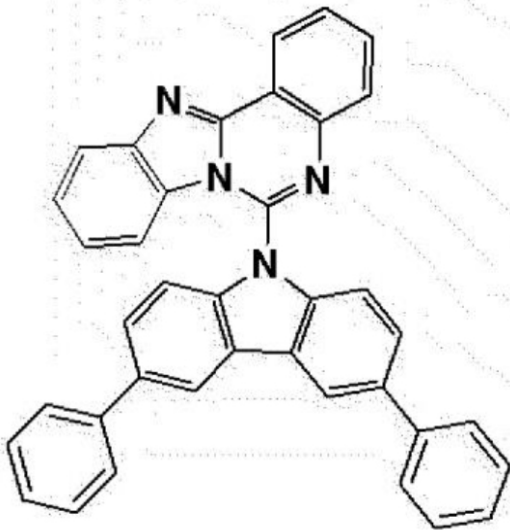
前記実験例 1 - 1 における化合物 1 の代わりに下記化合物 E B 3 を用いたことを除けば

50

、実験例 1 - 1 と同様の方法で有機発光素子を作製した。

[ E B 3 ]

【化 1 7 3】



10

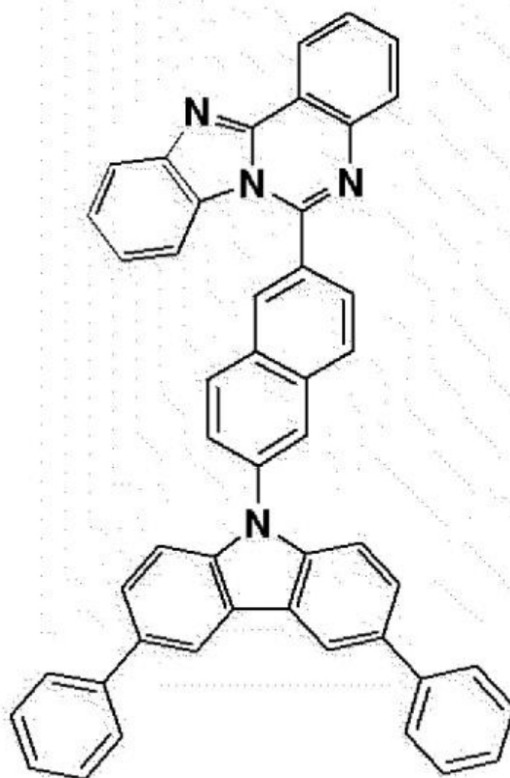
【 0 2 5 2 】

< 比較例 1 - 4 >

前記実験例 1 - 1 における化合物 1 の代わりに下記化合物 E B 4 を用いたことを除けば、実験例 1 - 1 と同様の方法で有機発光素子を作製した。

[ E B 4 ]

【化 1 7 4】



30

40

【 0 2 5 3 】

実験例 1 - 1 ~ 1 - 3 4 および比較例 1 - 1 から 1 - 4 により作製された有機発光素子に電流を印加した時、性能評価を下記表 1 に示した。

【 0 2 5 4 】

【表 1】

	化合物 (電子抑制層)	電圧 (V@10mA/cm <sup>2</sup> )	効率 (cd/A@10mA/cm <sup>2</sup> )	色座標 (x, y)
実験例 1-1	化合物 1	3.75	5.85	(0.139, 0.122)
実験例 1-2	化合物 2	3.72	5.88	(0.138, 0.126)
実験例 1-3	化合物 3	3.77	5.81	(0.138, 0.127)
実験例 1-4	化合物 4	3.78	5.82	(0.137, 0.125)
実験例 1-5	化合物 5	3.79	5.83	(0.136, 0.125)
実験例 1-6	化合物 6	3.74	5.87	(0.136, 0.127)
実験例 1-7	化合物 7	3.73	5.88	(0.136, 0.125)
実験例 1-8	化合物 24	3.74	5.71	(0.137, 0.125)
実験例 1-9	化合物 25	3.73	5.78	(0.138, 0.125)
実験例 1-10	化合物 26	3.74	5.62	(0.136, 0.125)
実験例 1-11	化合物 27	3.73	5.77	(0.137, 0.125)
実験例 1-12	化合物 28	3.85	5.75	(0.136, 0.125)
実験例 1-13	化合物 29	3.82	5.68	(0.138, 0.126)
実験例 1-14	化合物 30	3.87	5.71	(0.137, 0.125)
実験例 1-15	化合物 47	3.88	5.72	(0.136, 0.127)
実験例 1-16	化合物 48	3.89	5.73	(0.135, 0.127)
実験例 1-17	化合物 49	3.84	5.77	(0.138, 0.127)
実験例 1-18	化合物 50	3.83	5.78	(0.137, 0.125)
実験例 1-19	化合物 51	3.84	5.71	(0.137, 0.125)
実験例 1-20	化合物 52	3.83	5.78	(0.136, 0.127)
実験例 1-21	化合物 53	3.84	5.72	(0.135, 0.127)
実験例 1-22	化合物 70	3.83	5.77	(0.138, 0.127)
実験例 1-23	化合物 71	3.89	5.75	(0.137, 0.125)
実験例 1-24	化合物 72	3.88	5.78	(0.137, 0.125)
実験例 1-25	化合物 73	3.87	5.71	(0.136, 0.125)
実験例 1-26	化合物 74	3.61	5.65	(0.139, 0.122)
実験例 1-27	化合物 75	3.63	5.68	(0.138, 0.126)
実験例 1-28	化合物 76	3.62	5.61	(0.138, 0.127)
実験例 1-29	化合物 93	3.74	5.62	(0.137, 0.125)
実験例 1-30	化合物 94	3.70	5.63	(0.136, 0.125)
実験例 1-31	化合物 95	3.75	5.67	(0.136, 0.127)
実験例 1-32	化合物 99	3.80	5.58	(0.136, 0.125)
実験例 1-33	化合物 100	3.84	5.51	(0.137, 0.125)
実験例 1-34	化合物 101	3.82	5.54	(0.138, 0.125)
比較例 1-1	EB1	4.37	4.68	(0.138, 0.125)
比較例 1-2	EB2	4.15	4.85	(0.138, 0.125)
比較例 1-3	EB3	4.63	4.32	(0.138, 0.126)
比較例 1-4	EB4	4.52	4.41	(0.138, 0.125)

10

20

30

40

## 【 0 2 5 5 】

前記表 1 に示されているように、実験例 1 - 1 ~ 1 - 34 の化合物からなる有機発光素子は、電子抑制層としてよく使用される T C T A (比較例 1 - 1)、比較例 1 - 2、- L - A r がフェニル基である比較例 1 - 3、およびイミダゾキナゾリンとカルバゾールとの間にリンカーとしてナフタレンが連結された比較例 1 - 4 より、低電圧、高効率の特性を示すことが分かる。特に、化合物 A から製造された化合物 1 ~ 7 を用いた有機発光素子において低電圧高効率の特性が最も優れていることが分かる。

## 【 0 2 5 6 】

したがって、本出願に係る化学式の化合物誘導体は、電子抑制能力に優れて低電圧および高効率の特性を示し、有機発光素子に適用可能であることを確認することができた。

50

## 【0257】

&lt; 実験例 2 &gt;

&lt; 実験例 2 - 1 ~ 実験例 2 - 34 &gt;

前記実験例 1 - 1 において、電子阻止層として T C T A を用い、正孔輸送層として N P B の代わりに実験例 1 - 1 ~ 1 - 34 の化合物を用いたことを除けば、同様に実験した。

## 【0258】

&lt; 比較例 2 - 1 &gt;

前記実験例 1 - 1 において、電子阻止層として T C T A を用い、正孔輸送層として H T 1 ( N P B ) を用いたことを除けば、同様に実験した。

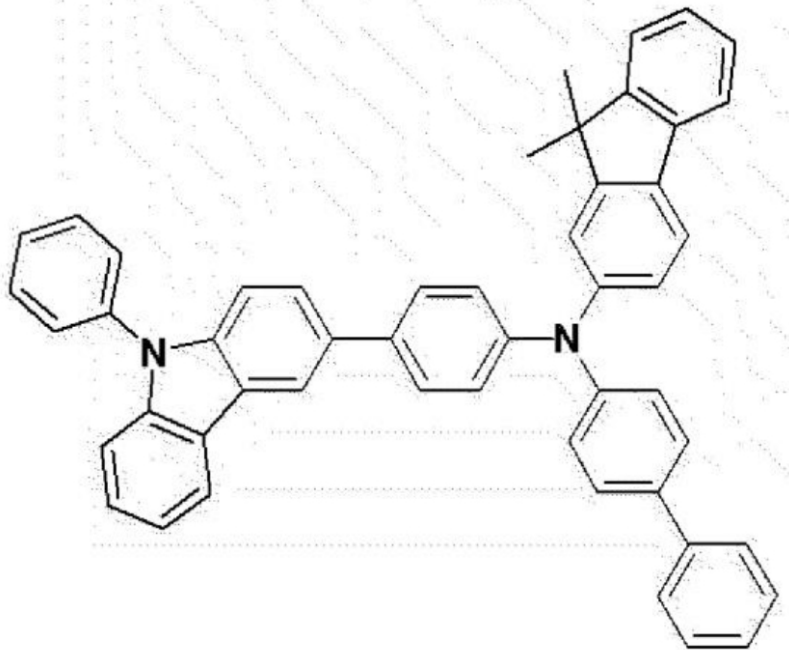
## 【0259】

&lt; 比較例 2 - 2 &gt;

前記実験例 1 - 1 において、電子阻止層として T C T A を用い、正孔輸送層として H T 2 を用いたことを除けば、同様に実験した。

[ H T 2 ]

## 【化 175】



## 【0260】

&lt; 比較例 2 - 3 &gt;

前記実験例 1 - 1 において、電子阻止層として T C T A を用い、正孔輸送層として H T 3 を用いたことを除けば、同様に実験した。

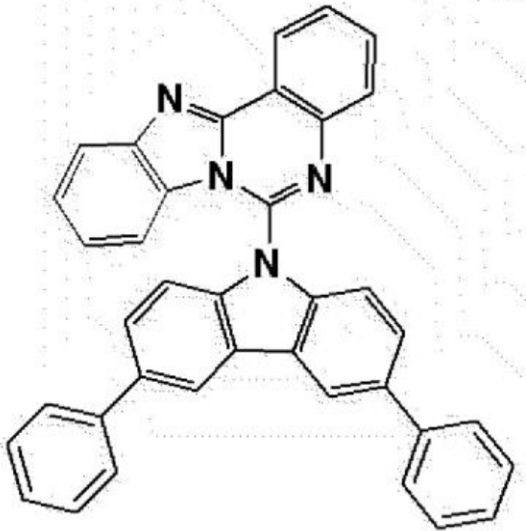
[ H T 3 ]

10

20

30

## 【化176】



10

## 【0261】

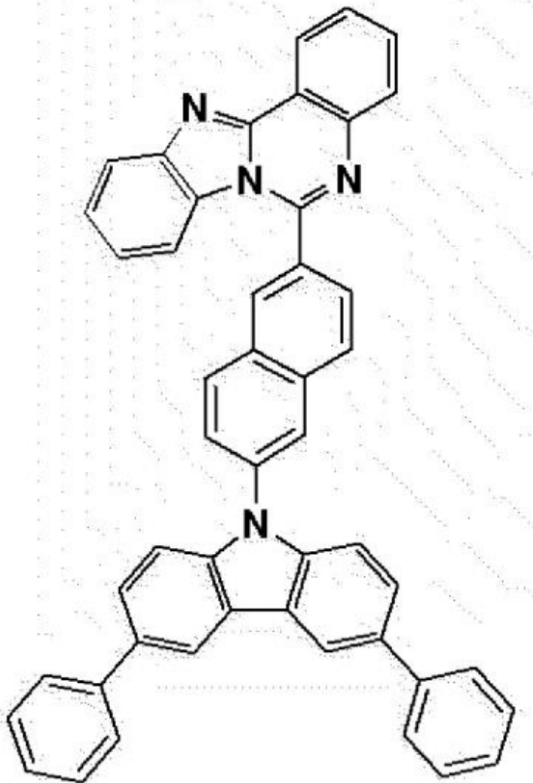
&lt; 比較例 2 - 4 &gt;

前記実験例 1 - 1 において、電子阻止層として T C T A を用い、正孔輸送層として H T 4 を用いたことを除けば、同様に実験した。

20

[ H T 4 ]

## 【化177】



30

40

## 【0262】

実験例 2 - 1 ~ 2 - 25 および比較例 2 - 1 から 2 - 4 により作製された有機発光素子に電流を印加した時、性能評価を下記表 2 に示した。

## 【0263】

【表 2】

	化合物 (正孔輸送層)	電圧 (V@10mA/cm <sup>2</sup> )	効率 (cd/A@10mA/cm <sup>2</sup> )	色座標 (x, y)
実験例 2-1	化合物 1	4.35	5.95	(0.139, 0.122)
実験例 2-2	化合物 2	4.32	5.98	(0.138, 0.126)
実験例 2-3	化合物 3	4.37	5.91	(0.138, 0.127)
実験例 2-4	化合物 4	4.38	5.92	(0.137, 0.125)
実験例 2-5	化合物 5	4.39	5.93	(0.136, 0.125)
実験例 2-6	化合物 6	4.34	5.97	(0.136, 0.127)
実験例 2-7	化合物 7	4.33	5.98	(0.136, 0.125)
実験例 2-8	化合物 24	4.34	5.91	(0.137, 0.125)
実験例 2-9	化合物 25	4.33	5.98	(0.138, 0.125)
実験例 2-10	化合物 26	4.34	5.92	(0.136, 0.125)
実験例 2-11	化合物 27	4.33	5.97	(0.137, 0.125)
実験例 2-12	化合物 28	4.45	5.85	(0.136, 0.125)
実験例 2-13	化合物 29	4.42	5.88	(0.138, 0.126)
実験例 2-14	化合物 30	4.47	5.81	(0.137, 0.125)
実験例 2-15	化合物 47	4.48	5.82	(0.136, 0.127)
実験例 2-16	化合物 48	4.49	5.83	(0.135, 0.127)
実験例 2-17	化合物 49	4.44	5.87	(0.138, 0.127)
実験例 2-18	化合物 50	4.43	5.88	(0.137, 0.125)
実験例 2-19	化合物 51	4.44	5.81	(0.137, 0.125)
実験例 2-20	化合物 52	4.43	5.88	(0.136, 0.127)
実験例 2-21	化合物 53	4.44	5.82	(0.135, 0.127)
実験例 2-22	化合物 70	4.43	5.87	(0.138, 0.127)
実験例 2-23	化合物 71	4.59	5.75	(0.137, 0.125)
実験例 2-24	化合物 72	4.48	5.88	(0.137, 0.125)
実験例 2-25	化合物 73	4.37	5.94	(0.136, 0.125)
実験例 2-26	化合物 74	4.35	5.95	(0.139, 0.122)
実験例 2-27	化合物 75	4.32	5.98	(0.138, 0.126)
実験例 2-28	化合物 76	4.37	5.91	(0.138, 0.127)
実験例 2-29	化合物 93	4.58	5.82	(0.137, 0.125)
実験例 2-30	化合物 94	4.59	5.83	(0.136, 0.125)
実験例 2-31	化合物 95	4.54	5.87	(0.136, 0.127)
実験例 2-32	化合物 99	4.53	5.88	(0.136, 0.125)
実験例 2-33	化合物 100	4.54	5.81	(0.137, 0.125)
実験例 2-34	化合物 101	4.53	5.88	(0.138, 0.125)
比較例 2-1	HT1	5.85	4.12	(0.136, 0.125)
比較例 2-2	HT2	5.63	4.37	(0.137, 0.125)
比較例 2-3	HT3	5.72	4.25	(0.136, 0.126)
比較例 2-4	HT4	5.56	4.43	(0.137, 0.126)

10

20

30

40

## 【0264】

前記表 2 に示されているように、実験例 2 - 1 ~ 2 - 3 4 の化合物からなる有機発光素子は、正孔輸送層としてよく使用される NPB (比較例 2 - 1)、比較例 2 - 2、- L - Ar がフェニル基である比較例 2 - 3、およびイミダゾキナゾリンとカルバゾールとの間にリンカーとしてナフタレンが連結された比較例 2 - 4 より、低電圧、高効率の特性を示すことが分かる。特に、化合物 A から製造された化合物 1 ~ 7 を使用した有機発光素子において低電圧高効率特性が最も優れていることが分かる。

## 【0265】

したがって、本出願に係る化学式の化合物誘導体は、電子抑制能力だけでなく、正孔輸送能力にも優れて低電圧および高効率の特性を示し、有機発光素子に適用可能であること

50

を確認することができた。

【0266】

< 実験例 3 - 1 >

合成例で合成された化合物を通常知られた方法で高純度昇華精製をした後、下記のような方法で緑色有機発光素子を製造した。

【0267】

ITO (indium tin oxide) が 1,000 の厚さに薄膜コーティングされたガラス基板を、洗剤を溶かした蒸留水に入れて超音波洗浄した。この時、洗剤としてはフィッシャー社 (Fischer Co.) 製品を使用し、蒸留水としてはミリポア社 (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。

10

【0268】

こうして用意された ITO 透明電極上に、化合物 5 をホストとして用いて、m-MTDATA (60 nm) / TCTA (80 nm) / 化合物 5 + 10% Ir (ppy)<sub>3</sub> (300 nm) / BCP (10 nm) / Alq<sub>3</sub> (30 nm) / LiF (1 nm) / Al (200 nm) の順に発光素子を構成して、有機 EL 素子を製造した。

【0269】

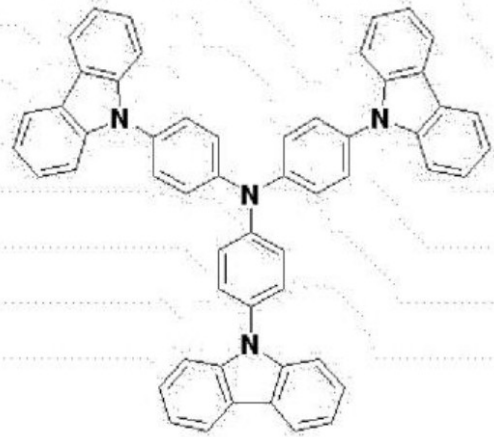
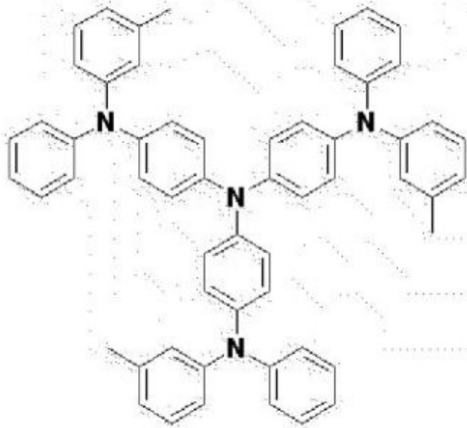
m-MTDATA、TCTA、Ir (ppy)<sub>3</sub>、および BCP の構造はそれぞれ、下記の通りである。

20

【化 1 7 8】

[m-MTDATA]

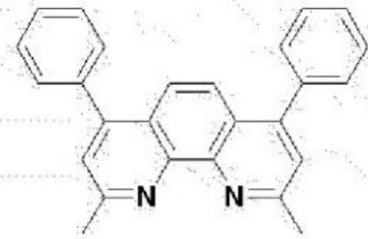
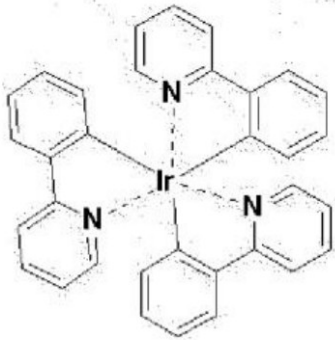
[TCTA]



10

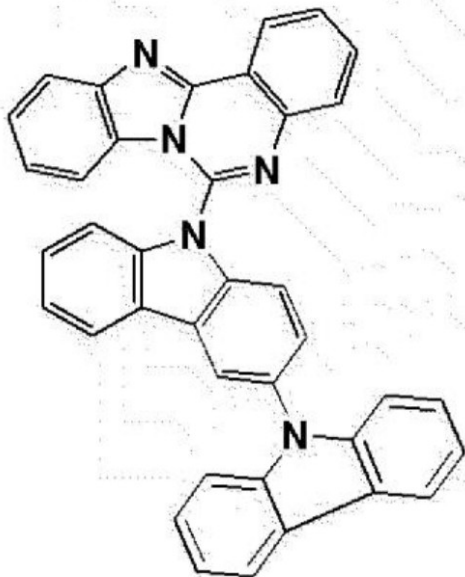
[Ir(ppy)<sub>3</sub>]

[BCP]



20

[化合物 5]



30

40

【0 2 7 0】

< 実験例 3 - 2 >

50

前記実験例 3 - 1 における化合物 5 の代わりに前記化合物 6 を用いたことを除けば、実験例 3 - 1 と同様の方法で有機発光素子を作製した。

【 0 2 7 1 】

< 実験例 3 - 3 >

前記実験例 3 - 1 における化合物 5 の代わりに前記化合物 7 を用いたことを除けば、実験例 3 - 1 と同様の方法で有機発光素子を作製した。

【 0 2 7 2 】

< 実験例 3 - 4 >

前記実験例 3 - 1 における化合物 5 の代わりに前記化合物 8 を用いたことを除けば、実験例 3 - 1 と同様の方法で有機発光素子を作製した。

10

【 0 2 7 3 】

< 実験例 3 - 5 >

【 0 2 7 4 】

前記実験例 3 - 1 における化合物 5 の代わりに前記化合物 9 を用いたことを除けば、実験例 3 - 1 と同様の方法で有機発光素子を作製した。

【 0 2 7 5 】

< 実験例 3 - 6 >

前記実験例 3 - 1 における化合物 5 の代わりに前記化合物 1 0 を用いたことを除けば、実験例 3 - 1 と同様の方法で有機発光素子を作製した。

【 0 2 7 6 】

20

< 実験例 3 - 7 >

前記実験例 3 - 1 における化合物 5 の代わりに前記化合物 1 1 を用いたことを除けば、実験例 3 - 1 と同様の方法で有機発光素子を作製した。

【 0 2 7 7 】

< 実験例 3 - 8 >

前記実験例 3 - 1 における化合物 5 の代わりに前記化合物 1 2 を用いたことを除けば、実験例 3 - 1 と同様の方法で有機発光素子を作製した。

【 0 2 7 8 】

< 実験例 3 - 9 >

前記実験例 3 - 1 における化合物 5 の代わりに前記化合物 1 3 を用いたことを除けば、実験例 3 - 1 と同様の方法で有機発光素子を作製した。

30

【 0 2 7 9 】

< 実験例 3 - 1 0 >

前記実験例 3 - 1 における化合物 5 の代わりに前記化合物 1 4 を用いたことを除けば、実験例 3 - 1 と同様の方法で有機発光素子を作製した。

【 0 2 8 0 】

< 実験例 3 - 1 1 >

前記実験例 3 - 1 における化合物 5 の代わりに前記化合物 1 5 を用いたことを除けば、実験例 3 - 1 と同様の方法で有機発光素子を作製した。

【 0 2 8 1 】

40

< 実験例 3 - 1 2 >

前記実験例 3 - 1 における化合物 5 の代わりに前記化合物 2 8 を用いたことを除けば、実験例 3 - 1 と同様の方法で有機発光素子を作製した。

【 0 2 8 2 】

< 実験例 3 - 1 3 >

前記実験例 3 - 1 における化合物 5 の代わりに前記化合物 2 9 を用いたことを除けば、実験例 3 - 1 と同様の方法で有機発光素子を作製した。

【 0 2 8 3 】

< 実験例 3 - 1 4 >

前記実験例 3 - 1 における化合物 5 の代わりに前記化合物 3 0 を用いたことを除けば、

50

実験例 3 - 1 と同様の方法で有機発光素子を作製した。

【 0 2 8 4 】

< 実験例 3 - 1 5 >

前記実験例 3 - 1 における化合物 5 の代わりに前記化合物 3 1 を用いたことを除けば、  
実験例 3 - 1 と同様の方法で有機発光素子を作製した。

【 0 2 8 5 】

< 実験例 3 - 1 6 >

前記実験例 3 - 1 における化合物 5 の代わりに前記化合物 3 2 を用いたことを除けば、  
実験例 3 - 1 と同様の方法で有機発光素子を作製した。

【 0 2 8 6 】

< 実験例 3 - 1 7 >

前記実験例 3 - 1 における化合物 5 の代わりに前記化合物 3 3 を用いたことを除けば、  
実験例 3 - 1 と同様の方法で有機発光素子を作製した。

【 0 2 8 7 】

< 実験例 3 - 1 8 >

前記実験例 3 - 1 における化合物 5 の代わりに前記化合物 3 4 を用いたことを除けば、  
実験例 3 - 1 と同様の方法で有機発光素子を作製した。

【 0 2 8 8 】

< 実験例 3 - 1 9 >

前記実験例 3 - 1 における化合物 5 の代わりに前記化合物 3 5 を用いたことを除けば、  
実験例 3 - 1 と同様の方法で有機発光素子を作製した。

【 0 2 8 9 】

< 実験例 3 - 2 0 >

前記実験例 3 - 1 における化合物 5 の代わりに前記化合物 3 6 を用いたことを除けば、  
実験例 3 - 1 と同様の方法で有機発光素子を作製した。

【 0 2 9 0 】

< 実験例 3 - 2 1 >

前記実験例 3 - 1 における化合物 5 の代わりに前記化合物 3 7 を用いたことを除けば、  
実験例 3 - 1 と同様の方法で有機発光素子を作製した。

【 0 2 9 1 】

< 実験例 3 - 2 2 >

前記実験例 3 - 1 における化合物 5 の代わりに前記化合物 3 8 を用いたことを除けば、  
実験例 3 - 1 と同様の方法で有機発光素子を作製した。

【 0 2 9 2 】

< 実験例 3 - 2 3 >

前記実験例 3 - 1 における化合物 5 の代わりに前記化合物 5 1 を用いたことを除けば、  
実験例 3 - 1 と同様の方法で有機発光素子を作製した。

【 0 2 9 3 】

< 実験例 3 - 2 4 >

前記実験例 3 - 1 における化合物 5 の代わりに前記化合物 5 2 を用いたことを除けば、  
実験例 3 - 1 と同様の方法で有機発光素子を作製した。

【 0 2 9 4 】

< 実験例 3 - 2 5 >

前記実験例 3 - 1 における化合物 5 の代わりに前記化合物 5 3 を用いたことを除けば、  
実験例 3 - 1 と同様の方法で有機発光素子を作製した。

【 0 2 9 5 】

< 実験例 3 - 2 6 >

前記実験例 3 - 1 における化合物 5 の代わりに前記化合物 5 4 を用いたことを除けば、  
実験例 3 - 1 と同様の方法で有機発光素子を作製した。

【 0 2 9 6 】

10

20

30

40

50

- < 実験例 3 - 27 >  
前記実験例 3 - 1 における化合物 5 の代わりに前記化合物 55 を用いたことを除けば、  
実験例 3 - 1 と同様の方法で有機発光素子を作製した。  
【0297】
- < 実験例 3 - 28 >  
前記実験例 3 - 1 における化合物 5 の代わりに前記化合物 56 を用いたことを除けば、  
実験例 3 - 1 と同様の方法で有機発光素子を作製した。  
【0298】
- < 実験例 3 - 29 >  
前記実験例 3 - 1 における化合物 5 の代わりに前記化合物 57 を用いたことを除けば、  
実験例 3 - 1 と同様の方法で有機発光素子を作製した。 10  
【0299】
- < 実験例 3 - 30 >  
前記実験例 3 - 1 における化合物 5 の代わりに前記化合物 58 を用いたことを除けば、  
実験例 3 - 1 と同様の方法で有機発光素子を作製した。  
【0300】
- < 実験例 3 - 31 >  
前記実験例 3 - 1 における化合物 5 の代わりに前記化合物 59 を用いたことを除けば、  
実験例 3 - 1 と同様の方法で有機発光素子を作製した。 20  
【0301】
- < 実験例 3 - 32 >  
前記実験例 3 - 1 における化合物 5 の代わりに前記化合物 60 を用いたことを除けば、  
実験例 3 - 1 と同様の方法で有機発光素子を作製した。  
【0302】
- < 実験例 3 - 33 >  
前記実験例 3 - 1 における化合物 5 の代わりに前記化合物 61 を用いたことを除けば、  
実験例 3 - 1 と同様の方法で有機発光素子を作製した。  
【0303】
- < 実験例 3 - 34 >  
前記実験例 3 - 1 における化合物 5 の代わりに前記化合物 74 を用いたことを除けば、  
実験例 3 - 1 と同様の方法で有機発光素子を作製した。 30  
【0304】
- < 実験例 3 - 35 >  
前記実験例 3 - 1 における化合物 5 の代わりに前記化合物 75 を用いたことを除けば、  
実験例 3 - 1 と同様の方法で有機発光素子を作製した。  
【0305】
- < 実験例 3 - 36 >  
前記実験例 3 - 1 における化合物 5 の代わりに前記化合物 76 を用いたことを除けば、  
実験例 3 - 1 と同様の方法で有機発光素子を作製した。  
【0306】 40
- < 実験例 3 - 37 >  
前記実験例 3 - 1 における化合物 5 の代わりに前記化合物 77 を用いたことを除けば、  
実験例 3 - 1 と同様の方法で有機発光素子を作製した。  
【0307】
- < 実験例 3 - 38 >  
前記実験例 3 - 1 における化合物 5 の代わりに前記化合物 78 を用いたことを除けば、  
実験例 3 - 1 と同様の方法で有機発光素子を作製した。  
【0308】
- < 実験例 3 - 39 >  
前記実験例 3 - 1 における化合物 5 の代わりに前記化合物 79 を用いたことを除けば、 50  
【0309】

実験例 3 - 1 と同様の方法で有機発光素子を作製した。

【 0 3 0 9 】

< 実験例 3 - 4 0 >

前記実験例 3 - 1 における化合物 5 の代わりに前記化合物 8 0 を用いたことを除けば、  
実験例 3 - 1 と同様の方法で有機発光素子を作製した。

【 0 3 1 0 】

< 実験例 3 - 4 1 >

前記実験例 3 - 1 における化合物 5 の代わりに前記化合物 8 1 を用いたことを除けば、  
実験例 3 - 1 と同様の方法で有機発光素子を作製した。

【 0 3 1 1 】

< 実験例 3 - 4 2 >

前記実験例 3 - 1 における化合物 5 の代わりに前記化合物 8 2 を用いたことを除けば、  
実験例 3 - 1 と同様の方法で有機発光素子を作製した。

【 0 3 1 2 】

< 実験例 3 - 4 3 >

前記実験例 3 - 1 における化合物 5 の代わりに前記化合物 8 3 を用いたことを除けば、  
実験例 3 - 1 と同様の方法で有機発光素子を作製した。

【 0 3 1 3 】

< 実験例 3 - 4 4 >

前記実験例 3 - 1 における化合物 5 の代わりに前記化合物 8 4 を用いたことを除けば、  
実験例 3 - 1 と同様の方法で有機発光素子を作製した。

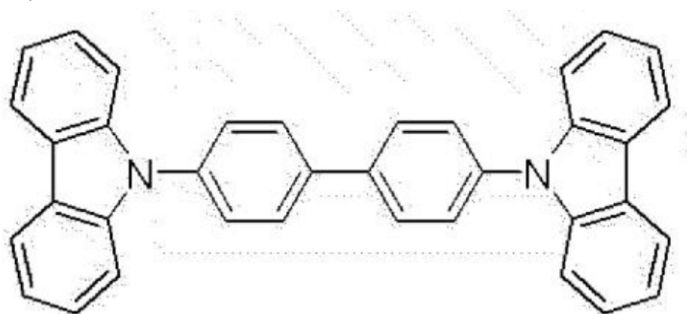
【 0 3 1 4 】

< 比較例 3 - 1 >

前記実験例 3 - 1 における化合物 5 の代わりに GH 1 ( C B P ) を用いたことを除けば、  
実験例 3 - 1 と同様の方法で有機発光素子を作製した。

[ GH 1 ]

【 化 1 7 9 】



【 0 3 1 5 】

実験例 3 - 1 ~ 3 - 4 4、比較例 3 - 1 ( C B P ) により作製された有機発光素子に電  
流を印加した時、性能評価を下記表 3 および 4 に示した。

【 0 3 1 6 】

10

20

30

40

【表 3】

	化合物 (ホスト)	電圧 (V@10mA/cm <sup>2</sup> )	効率 (cd/A@10mA/cm <sup>2</sup> )	EL ピーク (nm)
実験例 3-1	化合物 5	6.88	41.93	517
実験例 3-2	化合物 6	6.96	42.24	516
実験例 3-3	化合物 7	6.85	41.79	518
実験例 3-4	化合物 8	6.19	46.15	517
実験例 3-5	化合物 9	6.28	44.31	515
実験例 3-6	化合物 10	6.23	45.63	516
実験例 3-7	化合物 11	6.29	45.62	516
実験例 3-8	化合物 12	6.17	46.64	517
実験例 3-9	化合物 13	6.14	46.68	518
実験例 3-10	化合物 14	6.48	44.83	517
実験例 3-11	化合物 15	6.46	45.24	516
実験例 3-12	化合物 28	6.84	41.94	518
実験例 3-13	化合物 29	6.95	42.22	517
実験例 3-14	化合物 30	6.83	41.75	515
実験例 3-15	化合物 31	6.15	46.16	516
実験例 3-16	化合物 32	6.24	44.34	516
実験例 3-17	化合物 33	6.25	45.62	517
実験例 3-18	化合物 34	6.27	45.64	518
実験例 3-19	化合物 35	6.15	46.66	517
実験例 3-20	化合物 36	6.13	46.67	516
実験例 3-21	化合物 37	6.42	44.41	518
実験例 3-22	化合物 38	6.47	45.55	517
実験例 3-23	化合物 51	6.82	41.74	515
実験例 3-24	化合物 52	6.94	42.62	516
実験例 3-25	化合物 53	6.81	41.55	516

10

20

【表 4】

	化合物 (ホスト)	電圧 (V@10mA/cm <sup>2</sup> )	効率 (cd/A@10mA/cm <sup>2</sup> )	EL ピーク (nm)
実験例 3-26	化合物 54	6.18	46.16	517
実験例 3-27	化合物 55	6.27	44.94	518
実験例 3-28	化合物 56	6.23	45.32	517
実験例 3-29	化合物 57	6.24	45.14	516
実験例 3-30	化合物 58	6.11	46.46	518
実験例 3-31	化合物 59	6.16	46.37	517
実験例 3-32	化合物 60	6.45	44.71	515
実験例 3-33	化合物 61	6.44	45.65	516
実験例 3-34	化合物 74	6.85	41.44	516
実験例 3-35	化合物 75	6.9	42.82	517
実験例 3-36	化合物 76	6.81	41.65	518
実験例 3-37	化合物 77	6.16	46.46	518
実験例 3-38	化合物 78	6.24	44.54	517
実験例 3-39	化合物 79	6.28	45.32	515
実験例 3-40	化合物 80	6.24	45.44	516
実験例 3-41	化合物 81	6.16	46.16	516
実験例 3-42	化合物 82	6.15	46.67	517
実験例 3-43	化合物 83	6.41	44.71	518
実験例 3-44	化合物 84	6.43	45.55	518
比較例 3-1	GH 1(CBP)	7.27	32.52	517

10

20

## 【0317】

前記表 3 および 4 に示されているように、本出願の一実施態様に係る化合物を発光層の緑色ホスト物質として用いる実験例 3 - 1 ~ 3 - 44 の有機発光素子は、従来の CBP を用いる比較例 3 - 1 の有機発光素子より、電流効率および駆動電圧の面で優れた性能を示すことを確認することができた。

## 【0318】

< 実験例 4 - 1 >

ITO (indium tin oxide) が 1,000 の厚さに薄膜コーティングされたガラス基板を、洗剤を溶かした蒸留水に入れて超音波洗浄した。この時、洗剤としてはフィッシャー社 (Fischer Co.) 製品を使用し、蒸留水としてはミリポア社 (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。

30

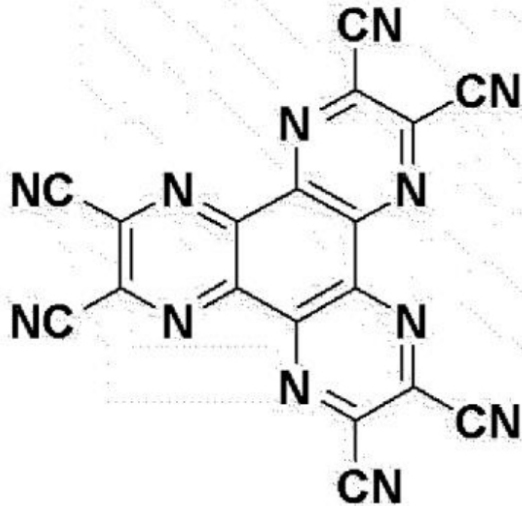
## 【0319】

こうして用意された ITO 透明電極上に、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 500 の厚さに熱真空蒸着して、正孔注入層を形成した。

40

[ H A T ]

【化 1 8 0】



10

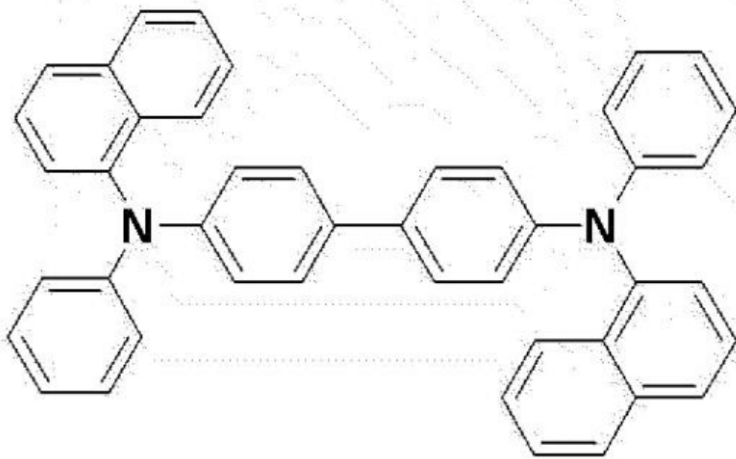
【 0 3 2 0】

前記正孔注入層上に、正孔を輸送する物質である下記化合物 4 - 4' - ビス [ N - ( 1 - ナフチル ) - N - フェニルアミノ ] ビフェニル ( N P B ) ( 4 0 0 ) を真空蒸着して、正孔輸送層を形成した。

[ N P B ]

20

【化 1 8 1】



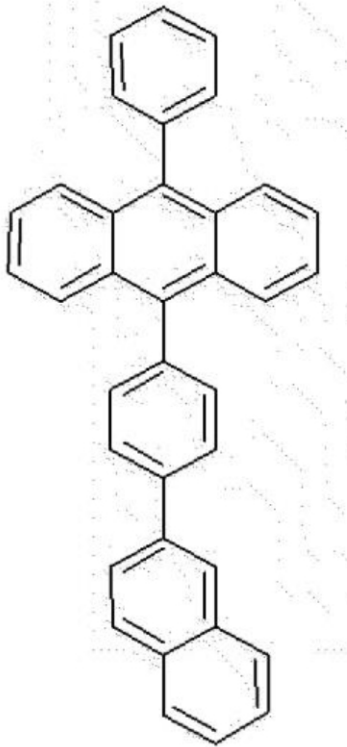
30

【 0 3 2 1】

次に、前記正孔輸送層上に、膜厚さ 3 0 0 で以下のような B H と B D を 2 5 : 1 の重量比で真空蒸着して、発光層を形成した。

[ B H ]

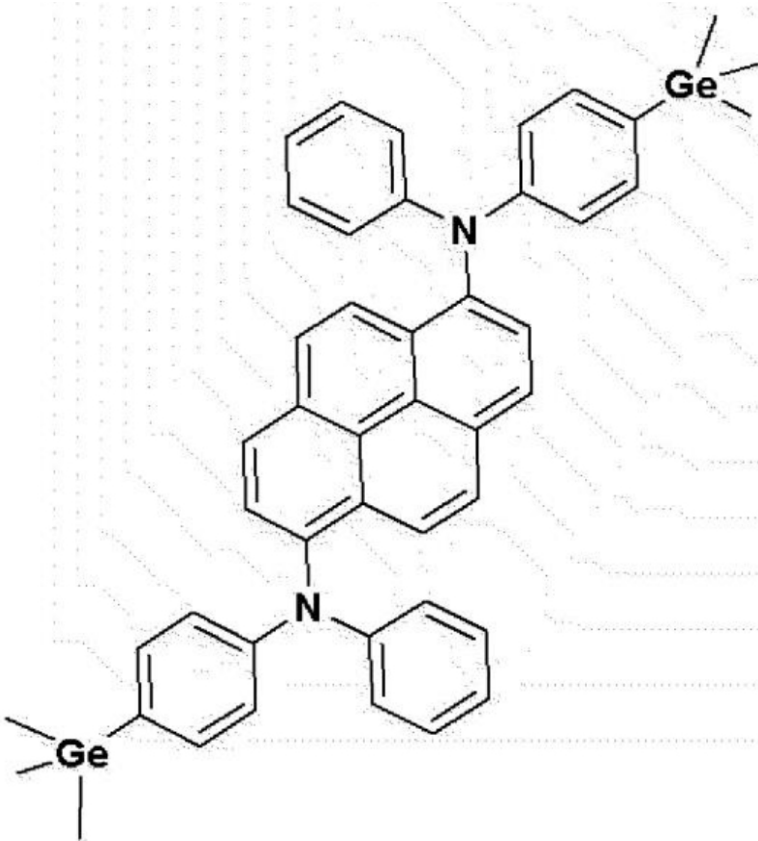
【化 1 8 2】



10

20

[ B D ]  
【化 1 8 3】



30

40

[ L i Q ]

## 【化 1 8 4】



10

## 【0 3 2 2】

前記発光層上に、製造例 8 で製造した化合物 8 と前記化合物 Li Q ( L i t h i u m Q u i n o l a t e ) を 1 : 1 の重量比で真空蒸着して、300 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輸送層上に、順次に、12 の厚さにリチウムフルオライド ( L i F ) と、2,000 の厚さにアルミニウムを蒸着して、陰極を形成した。

## 【0 3 2 3】

前記過程で、有機物の蒸着速度は 0.4 ~ 0.7 / s e c を維持し、陰極のリチウムフルオライドは 0.3 / s e c 、アルミニウムは 2 / s e c の蒸着速度を維持し、蒸着時の真空度は  $2 \times 10^{-7} \sim 5 \times 10^{-6}$  t o r r を維持して、有機発光素子を作製した。

20

## 【0 3 2 4】

## &lt; 実験例 4 - 2 &gt;

前記実験例 4 - 1 において、電子輸送層として化合物 8 の代わりに化合物 9 を用いたことを除けば、同様に実験した。

## 【0 3 2 5】

## &lt; 実験例 4 - 3 &gt;

前記実験例 4 - 1 において、電子輸送層として化合物 8 の代わりに化合物 10 を用いたことを除けば、同様に実験した。

30

## 【0 3 2 6】

## &lt; 実験例 4 - 4 &gt;

前記実験例 4 - 1 において、電子輸送層として化合物 8 の代わりに化合物 11 を用いたことを除けば、同様に実験した。

## 【0 3 2 7】

## &lt; 実験例 4 - 5 &gt;

前記実験例 4 - 1 において、電子輸送層として化合物 8 の代わりに化合物 12 を用いたことを除けば、同様に実験した。

## 【0 3 2 8】

## &lt; 実験例 4 - 6 &gt;

前記実験例 4 - 1 において、電子輸送層として化合物 8 の代わりに化合物 13 を用いたことを除けば、同様に実験した。

40

## 【0 3 2 9】

## &lt; 実験例 4 - 7 &gt;

前記実験例 4 - 1 において、電子輸送層として化合物 8 の代わりに化合物 14 を用いたことを除けば、同様に実験した。

## 【0 3 3 0】

## &lt; 実験例 4 - 8 &gt;

前記実験例 4 - 1 において、電子輸送層として化合物 8 の代わりに化合物 15 を用いたことを除けば、同様に実験した。

50

## 【0331】

< 実験例 4 - 9 >

前記実験例 4 - 1 において、電子輸送層として化合物 8 の代わりに化合物 16 を用いたことを除けば、同様に実験した。

## 【0332】

< 実験例 4 - 10 >

前記実験例 4 - 1 において、電子輸送層として化合物 8 の代わりに化合物 17 を用いたことを除けば、同様に実験した。

## 【0333】

< 実験例 4 - 11 >

前記実験例 4 - 1 において、電子輸送層として化合物 8 の代わりに化合物 19 を用いたことを除けば、同様に実験した。

10

## 【0334】

< 実験例 4 - 12 >

前記実験例 4 - 1 において、電子輸送層として化合物 8 の代わりに化合物 20 を用いたことを除けば、同様に実験した。

## 【0335】

< 実験例 4 - 13 >

前記実験例 4 - 1 において、電子輸送層として化合物 8 の代わりに化合物 21 を用いたことを除けば、同様に実験した。

20

## 【0336】

< 実験例 4 - 14 >

前記実験例 4 - 1 において、電子輸送層として化合物 8 の代わりに化合物 22 を用いたことを除けば、同様に実験した。

## 【0337】

< 実験例 4 - 15 >

前記実験例 4 - 1 において、電子輸送層として化合物 8 の代わりに化合物 23 を用いたことを除けば、同様に実験した。

## 【0338】

< 実験例 4 - 16 >

前記実験例 4 - 1 において、電子輸送層として化合物 8 の代わりに化合物 31 を用いたことを除けば、同様に実験した。

30

## 【0339】

< 実験例 4 - 17 >

前記実験例 4 - 1 において、電子輸送層として化合物 8 の代わりに化合物 35 を用いたことを除けば、同様に実験した。

## 【0340】

< 実験例 4 - 18 >

前記実験例 4 - 1 において、電子輸送層として化合物 8 の代わりに化合物 40 を用いたことを除けば、同様に実験した。

40

## 【0341】

< 実験例 4 - 19 >

前記実験例 4 - 1 において、電子輸送層として化合物 8 の代わりに化合物 42 を用いたことを除けば、同様に実験した。

## 【0342】

< 実験例 4 - 20 >

前記実験例 4 - 1 において、電子輸送層として化合物 8 の代わりに化合物 43 を用いたことを除けば、同様に実験した。

## 【0343】

< 実験例 4 - 21 >

50

前記実験例 4 - 1 において、電子輸送層として化合物 8 の代わりに化合物 4 4 を用いたことを除けば、同様に実験した。

【 0 3 4 4 】

< 実験例 4 - 2 2 >

前記実験例 4 - 1 において、電子輸送層として化合物 8 の代わりに化合物 4 5 を用いたことを除けば、同様に実験した。

【 0 3 4 5 】

< 実験例 4 - 2 3 >

前記実験例 4 - 1 において、電子輸送層として化合物 8 の代わりに化合物 4 6 を用いたことを除けば、同様に実験した。

【 0 3 4 6 】

< 実験例 4 - 2 4 >

前記実験例 4 - 1 において、電子輸送層として化合物 8 の代わりに化合物 5 4 を用いたことを除けば、同様に実験した。

【 0 3 4 7 】

< 実験例 4 - 2 5 >

前記実験例 4 - 1 において、電子輸送層として化合物 8 の代わりに化合物 5 8 を用いたことを除けば、同様に実験した。

【 0 3 4 8 】

< 実験例 4 - 2 6 >

前記実験例 4 - 1 において、電子輸送層として化合物 8 の代わりに化合物 6 3 を用いたことを除けば、同様に実験した。

【 0 3 4 9 】

< 実験例 4 - 2 7 >

前記実験例 4 - 1 において、電子輸送層として化合物 8 の代わりに化合物 6 5 を用いたことを除けば、同様に実験した。

【 0 3 5 0 】

< 実験例 4 - 2 8 >

前記実験例 4 - 1 において、電子輸送層として化合物 8 の代わりに化合物 6 6 を用いたことを除けば、同様に実験した。

【 0 3 5 1 】

< 実験例 4 - 2 9 >

前記実験例 4 - 1 において、電子輸送層として化合物 8 の代わりに化合物 6 7 を用いたことを除けば、同様に実験した。

【 0 3 5 2 】

< 実験例 4 - 3 0 >

前記実験例 4 - 1 において、電子輸送層として化合物 8 の代わりに化合物 6 8 を用いたことを除けば、同様に実験した。

【 0 3 5 3 】

< 実験例 4 - 3 1 >

前記実験例 4 - 1 において、電子輸送層として化合物 8 の代わりに化合物 6 9 を用いたことを除けば、同様に実験した。

【 0 3 5 4 】

< 実験例 4 - 3 2 >

前記実験例 4 - 1 において、電子輸送層として化合物 8 の代わりに化合物 7 7 を用いたことを除けば、同様に実験した。

【 0 3 5 5 】

< 実験例 4 - 3 3 >

前記実験例 4 - 1 において、電子輸送層として化合物 8 の代わりに化合物 8 1 を用いたことを除けば、同様に実験した。

10

20

30

40

50

## 【 0 3 5 6 】

&lt; 実験例 4 - 3 4 &gt;

前記実験例 4 - 1 において、電子輸送層として化合物 8 の代わりに化合物 8 4 を用いたことを除けば、同様に実験した。

## 【 0 3 5 7 】

&lt; 実験例 4 - 3 5 &gt;

前記実験例 4 - 1 において、電子輸送層として化合物 8 の代わりに化合物 8 5 を用いたことを除けば、同様に実験した。

## 【 0 3 5 8 】

&lt; 実験例 4 - 3 6 &gt;

前記実験例 4 - 1 において、電子輸送層として化合物 8 の代わりに化合物 8 6 を用いたことを除けば、同様に実験した。

10

## 【 0 3 5 9 】

&lt; 実験例 4 - 3 7 &gt;

前記実験例 4 - 1 において、電子輸送層として化合物 8 の代わりに化合物 8 8 を用いたことを除けば、同様に実験した。

## 【 0 3 6 0 】

&lt; 実験例 4 - 3 8 &gt;

前記実験例 4 - 1 において、電子輸送層として化合物 8 の代わりに化合物 8 9 を用いたことを除けば、同様に実験した。

20

## 【 0 3 6 1 】

&lt; 実験例 4 - 3 9 &gt;

前記実験例 4 - 1 において、電子輸送層として化合物 8 の代わりに化合物 9 0 を用いたことを除けば、同様に実験した。

## 【 0 3 6 2 】

&lt; 実験例 4 - 4 0 &gt;

前記実験例 4 - 1 において、電子輸送層として化合物 8 の代わりに化合物 9 1 を用いたことを除けば、同様に実験した。

## 【 0 3 6 3 】

&lt; 実験例 4 - 4 1 &gt;

前記実験例 4 - 1 において、電子輸送層として化合物 8 の代わりに化合物 9 2 を用いたことを除けば、同様に実験した。

30

## 【 0 3 6 4 】

&lt; 実験例 4 - 4 2 &gt;

前記実験例 4 - 1 において、電子輸送層として化合物 8 の代わりに化合物 9 4 を用いたことを除けば、同様に実験した。

## 【 0 3 6 5 】

&lt; 実験例 4 - 4 3 &gt;

前記実験例 4 - 1 において、電子輸送層として化合物 8 の代わりに化合物 9 8 を用いたことを除けば、同様に実験した。

40

## 【 0 3 6 6 】

&lt; 実験例 4 - 4 4 &gt;

前記実験例 4 - 1 において、電子輸送層として化合物 8 の代わりに化合物 1 0 0 を用いたことを除けば、同様に実験した。

## 【 0 3 6 7 】

&lt; 実験例 4 - 4 5 &gt;

前記実験例 4 - 1 において、電子輸送層として化合物 8 の代わりに化合物 1 0 4 を用いたことを除けば、同様に実験した。

## 【 0 3 6 8 】

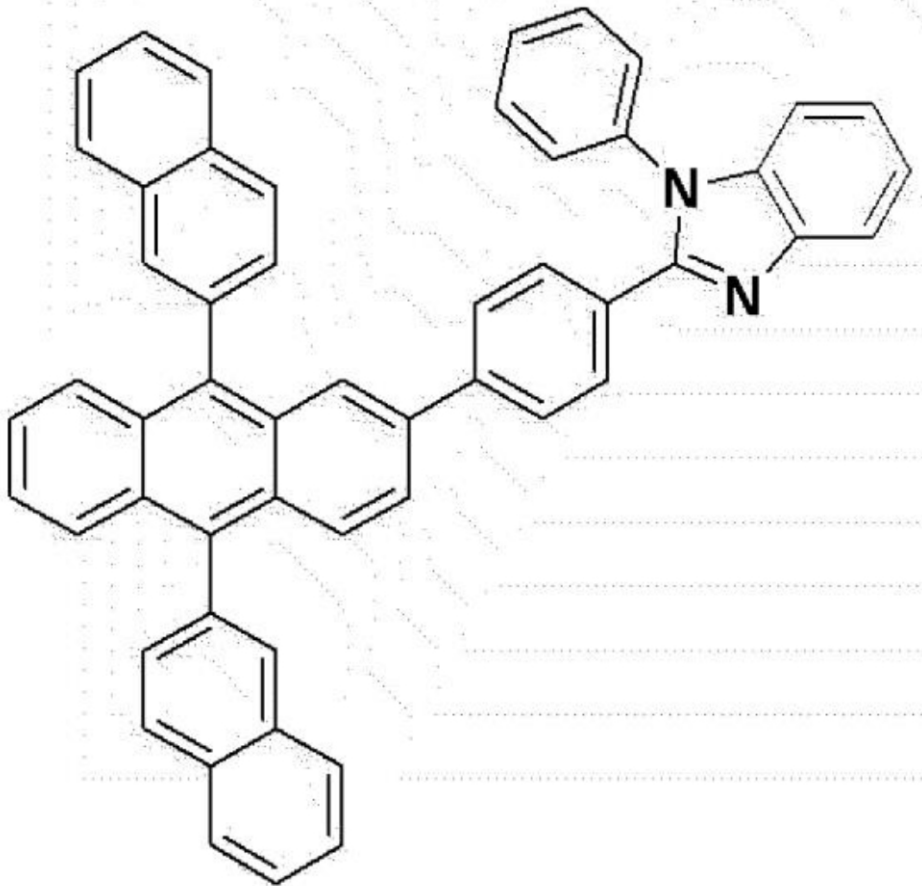
&lt; 比較例 4 - 1 &gt;

50

前記実験例 4 - 1 において、電子輸送層として化合物 8 の代わりに下記化合物 E T 1 を用いたことを除けば、同様に実験した。

[ E T 1 ]

【化 1 8 5】



10

20

【 0 3 6 9 】

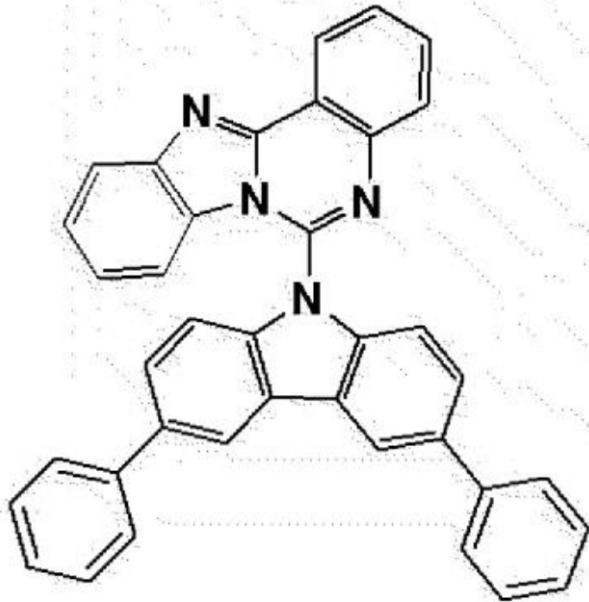
< 比較例 4 - 2 >

前記実験例 4 - 1 において、電子輸送層として化合物 8 の代わりに下記化合物 E T 2 を用いたことを除けば、同様に実験した。

[ E T 2 ]

30

## 【化 1 8 6】



10

## 【 0 3 7 0】

実験例 4 - 1 ~ 4 - 44、比較例 4 - 1 および 4 - 2 により作製された有機発光素子に電流を印加した時、表 5 および 6 の結果を得た。

20

## 【 0 3 7 1】

## 【表 5】

	化合物 (電子輸送層)	電圧 (V@10mA/cm <sup>2</sup> )	効率 (cd/A@10mA/cm <sup>2</sup> )	EL ピーク (nm)
実験例 4-1	化合物 8	6.88	41.93	517
実験例 4-2	化合物 9	6.96	42.24	516
実験例 4-3	化合物 10	6.85	41.79	518
実験例 4-4	化合物 11	6.19	46.15	517
実験例 4-5	化合物 12	6.28	44.31	515
実験例 4-6	化合物 13	6.23	45.63	516
実験例 4-7	化合物 14	6.29	45.62	516
実験例 4-8	化合物 15	6.17	46.64	517
実験例 4-9	化合物 17	6.14	46.68	518
実験例 4-10	化合物 19	6.48	44.83	517
実験例 4-11	化合物 20	6.46	45.24	516
実験例 4-12	化合物 21	6.84	41.94	518
実験例 4-13	化合物 22	6.95	42.22	517
実験例 4-14	化合物 23	6.83	41.75	515
実験例 4-15	化合物 31	6.15	46.16	516
実験例 4-16	化合物 35	6.24	44.34	516
実験例 4-17	化合物 40	6.25	45.62	517
実験例 4-18	化合物 42	6.27	45.64	518
実験例 4-19	化合物 43	6.15	46.66	517
実験例 4-20	化合物 44	6.13	46.67	516
実験例 4-21	化合物 45	6.42	44.41	518
実験例 4-22	化合物 46	6.47	45.55	517
実験例 4-23	化合物 54	6.82	41.74	515
実験例 4-24	化合物 58	6.94	42.62	516
実験例 4-25	化合物 63	6.81	41.55	516

30

40

50

【表 6】

	化合物 (電子輸送層)	電圧 (V@10mA/cm <sup>2</sup> )	効率 (cd/A@10mA/cm <sup>2</sup> )	EL ピーク (nm)
実験例 4-26	化合物 65	6.18	46.16	517
実験例 4-27	化合物 66	6.27	44.94	518
実験例 4-28	化合物 67	6.23	45.32	517
実験例 4-29	化合物 68	6.24	45.14	516
実験例 4-30	化合物 69	6.11	46.46	518
実験例 4-31	化合物 77	6.16	46.37	517
実験例 4-32	化合物 81	6.45	44.71	515
実験例 4-33	化合物 84	6.44	45.65	516
実験例 4-34	化合物 85	6.85	41.44	516
実験例 4-35	化合物 86	6.9	42.82	517
実験例 4-36	化合物 88	6.81	41.65	518
実験例 4-37	化合物 89	6.16	46.46	518
実験例 4-38	化合物 90	6.24	44.54	517
実験例 4-39	化合物 91	6.28	45.32	515
実験例 4-40	化合物 92	6.24	45.44	516
実験例 4-41	化合物 94	6.16	46.16	516
実験例 4-42	化合物 98	6.15	46.67	517
実験例 4-43	化合物 100	6.41	44.71	518
実験例 4-44	化合物 104	6.43	45.55	518
比較例 4-1	ET 1	7.27	32.52	517
比較例 4-2	ET 2	7.45	30.16	517

10

20

## 【0372】

前記表 5 および 6 に示されているように、本出願の一実施態様に係る化合物は、電子輸送および注入能力に優れて有機発光素子に適用可能であることを確認することができた。

## 【0373】

以上、本出願の好ましい実施例（電子抑制層、正孔輸送層、緑色発光層、赤色発光層、電子注入層）について説明したが、本出願はこれに限定されるものではなく、特許請求の範囲と発明の詳細な説明の範囲内で多様に変形して実施することが可能であり、これも出願の範疇に属する。

30

## 【符号の説明】

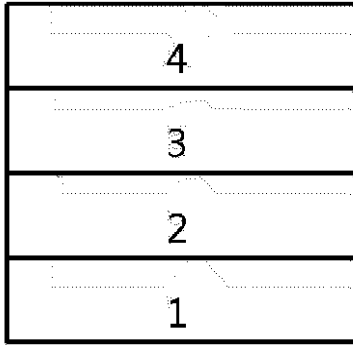
## 【0374】

- 1：基板
- 2：陽極
- 3：発光層
- 4：陰極
- 5：正孔注入層
- 6：正孔輸送層
- 7：電子輸送層

40

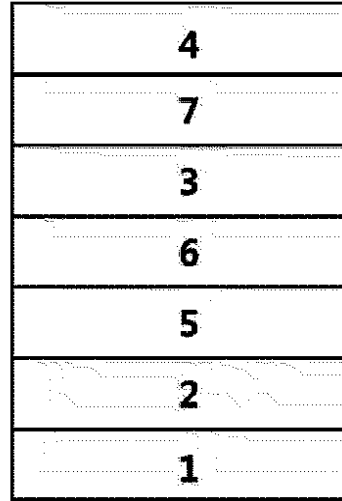
【 図 1 】

[ 図 1 ]



【 図 2 】

[ 図 2 ]



---

フロントページの続き

(51)Int.Cl. F I  
H 0 5 B 33/22 B

(72)発明者 クォン、ヒョク ジュン  
大韓民国・ソウル・ヨンドゥンポ - グ・ヨイ - デロ・1 2 8 エルジー・ケム・リミテッド内

(72)発明者 キム、ミンジュン  
大韓民国・ソウル・ヨンドゥンポ - グ・ヨイ - デロ・1 2 8 エルジー・ケム・リミテッド内

審査官 山本 吾一

(56)参考文献 国際公開第2011/010842(WO, A1)  
欧州特許出願公開第02719741(EP, A1)  
特表2009-516652(JP, A)  
特表2013-541539(JP, A)  
特表2013-531652(JP, A)  
特表2014-522569(JP, A)  
特表2011-528033(JP, A)  
国際公開第2015/009076(WO, A1)  
韓国公開特許第10-2014-0064686(KR, A)

(58)調査した分野(Int.Cl., DB名)

C 0 7 D

C 0 7 F

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