

(19)日本国特許庁(JP)

## (12)特許公報(B2)

(11)特許番号  
特許第7172000号  
(P7172000)

(45)発行日 令和4年11月16日(2022.11.16)

(24)登録日 令和4年11月8日(2022.11.8)

(51)国際特許分類	F I
C 0 7 D 405/14 (2006.01)	C 0 7 D 405/14
C 0 7 D 409/14 (2006.01)	C 0 7 D 409/14 C S P
C 0 7 D 487/04 (2006.01)	C 0 7 D 487/04 1 3 7
H 0 1 L 51/50 (2006.01)	H 0 5 B 33/14 B
C 0 9 K 11/06 (2006.01)	H 0 5 B 33/22 D
請求項の数 9 (全119頁) 最終頁に続く	

(21)出願番号	特願2021-512731(P2021-512731)	(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, ヨンドゥンボ-グ, ヨイ-デロ 128
(86)(22)出願日	令和1年9月20日(2019.9.20)	(74)代理人	110000877弁理士法人R Y U K A国際特許事務所
(65)公表番号	特表2021-535915(P2021-535915 A)	(72)発明者	ハン、ス ジン 大韓民国 07336 ソウル, ヨンドゥンボ-グ, ヨイ-デロ 128 エルジー・ケム・リミテッド内
(43)公表日	令和3年12月23日(2021.12.23)	(72)発明者	リー、ドン フン 大韓民国 07336 ソウル, ヨンドゥンボ-グ, ヨイ-デロ 128 エルジー・ケム・リミテッド内
(86)国際出願番号	PCT/KR2019/012236	(72)発明者	ジャン、ブーン ジェ
(87)国際公開番号	WO2020/060286		
(87)国際公開日	令和2年3月26日(2020.3.26)		
審査請求日	令和3年3月16日(2021.3.16)		
(31)優先権主張番号	10-2018-0114411		
(32)優先日	平成30年9月21日(2018.9.21)		
(33)優先権主張国・地域又は機関	韓国(KR)		
(31)優先権主張番号	10-2019-0115650		
(32)優先日	令和1年9月19日(2019.9.19)		
	最終頁に続く		最終頁に続く

(54)【発明の名称】 新規なヘテロ環化合物およびこれを利用した有機発光素子

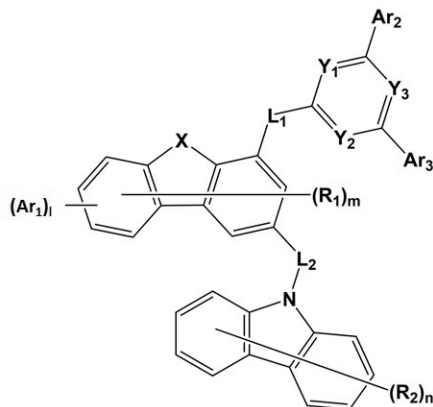
## (57)【特許請求の範囲】

## 【請求項1】

下記化学式1で表される化合物：

[化学式1]

## 【化1】



前記化学式1中、

Xは、OまたはSであり、

Y<sub>1</sub>、Y<sub>2</sub>およびY<sub>3</sub>はそれぞれ独立して、CH；またはNであり、ただし、Y<sub>1</sub>、Y<sub>2</sub>

および $Y_3$ のうちの一つ以上がNであり、

$L_1$ および $L_2$ はそれぞれ独立して、直接結合；置換または非置換の炭素数6～60のアリーレン；またはN、OおよびSで構成される群から選択される一つ以上のヘテロ原子を含む置換または非置換の炭素数5～60のヘテロアリーレンであり、

$Ar_1$ は、置換または非置換の炭素数6～60のアリールであり、

$Ar_2$ および $Ar_3$ はそれぞれ独立して、置換または非置換の炭素数6～60のアリール；またはN、OおよびSで構成される群から選択される一つ以上のヘテロ原子を含む置換または非置換の炭素数5～60のヘテロアリールであり、

ただし、 $Ar_1$ 、 $Ar_2$ および $Ar_3$ の全てが置換または非置換の炭素数6～60のアリールの場合、 $Ar_1$ 、 $Ar_2$ および $Ar_3$ のうちの一つは重水素で4以上置換され

10

、  
 $R_1$ はそれぞれ独立して、水素；重水素；ハロゲン；または置換または非置換の炭素数1～60のアルキルであり、

$R_2$ はそれぞれ独立して、水素；重水素；ハロゲン；シアノ；置換または非置換の炭素数1～60のアルキル；置換または非置換の炭素数1～60のアルコキシ；置換または非置換の炭素数3～60のシクロアルキル；置換または非置換の炭素数1～60のハロアルキル；置換または非置換の炭素数1～60のハロアルコキシ；置換または非置換の炭素数6～60のアリールアミン；置換または非置換の炭素数1～60のアルキルアミン；炭素数1～60のトリフルオロアルキル；炭素数1～60のトリフルオロアルコキシ；置換または非置換の炭素数6～60のアリール；またはN、OおよびSのうちの一つ以上を含む置換または非置換の炭素数5～60のヘテロアリールであり、これらはカルバゾールの炭素原子と結合して縮合環を形成することができ、

20

$m$ は0～3の整数であり、

$n$ は0～6の整数であり

$l$ は1または2である。

#### 【請求項2】

前記化学式1で表される化合物は、下記化学式2～8で表される化合物の中から選択されるいずれか一つである、

請求項1に記載の化合物：

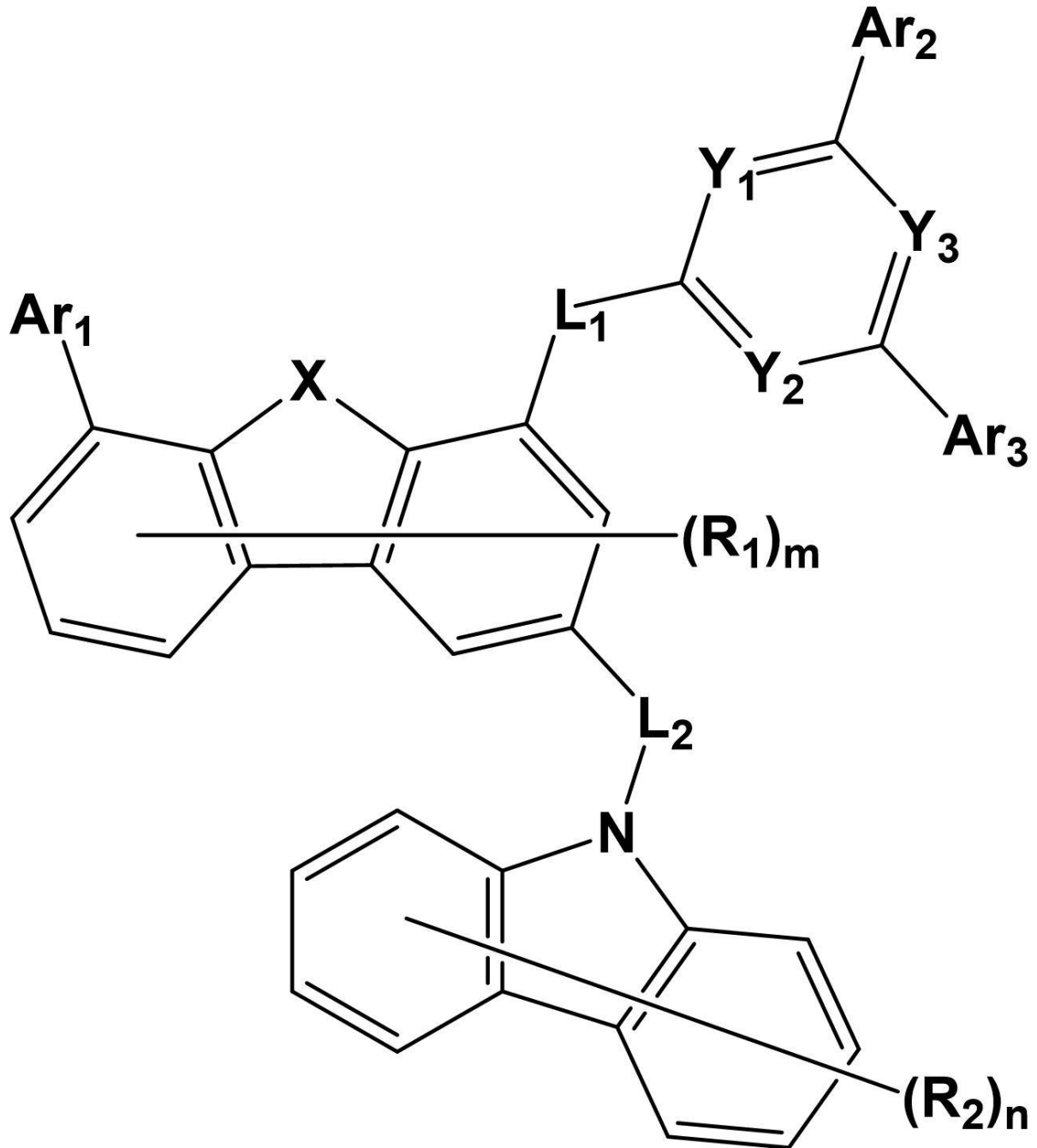
[化学式2]

30

40

50

【化 2】



[ 化学式 3 ]

10

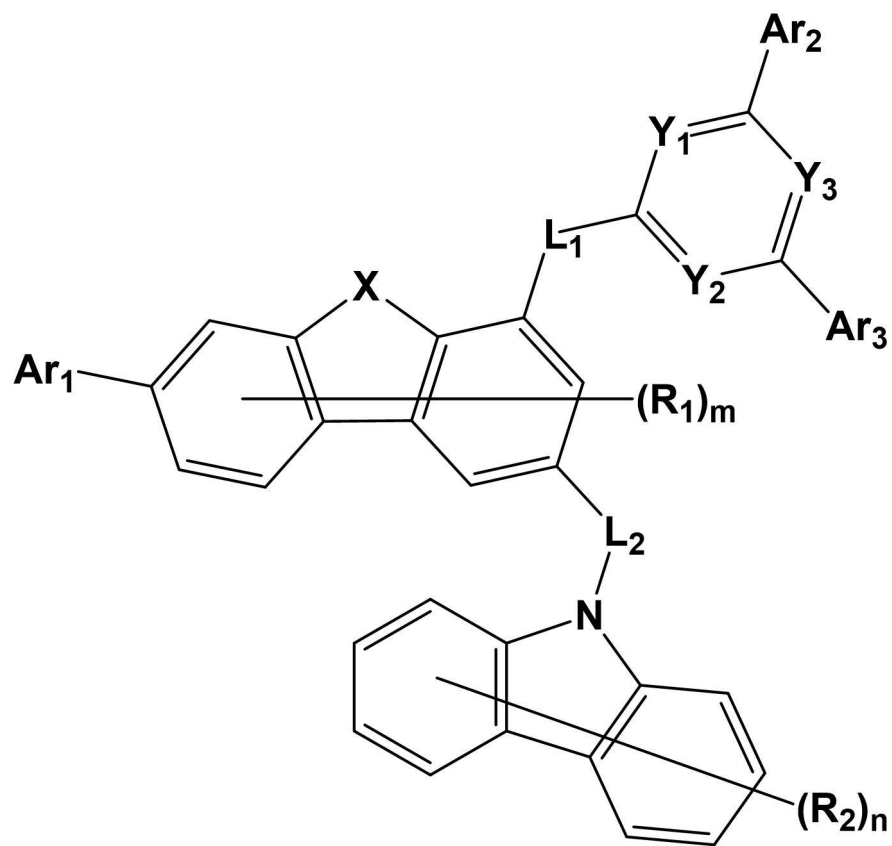
20

30

40

50

【化 3】



10

20

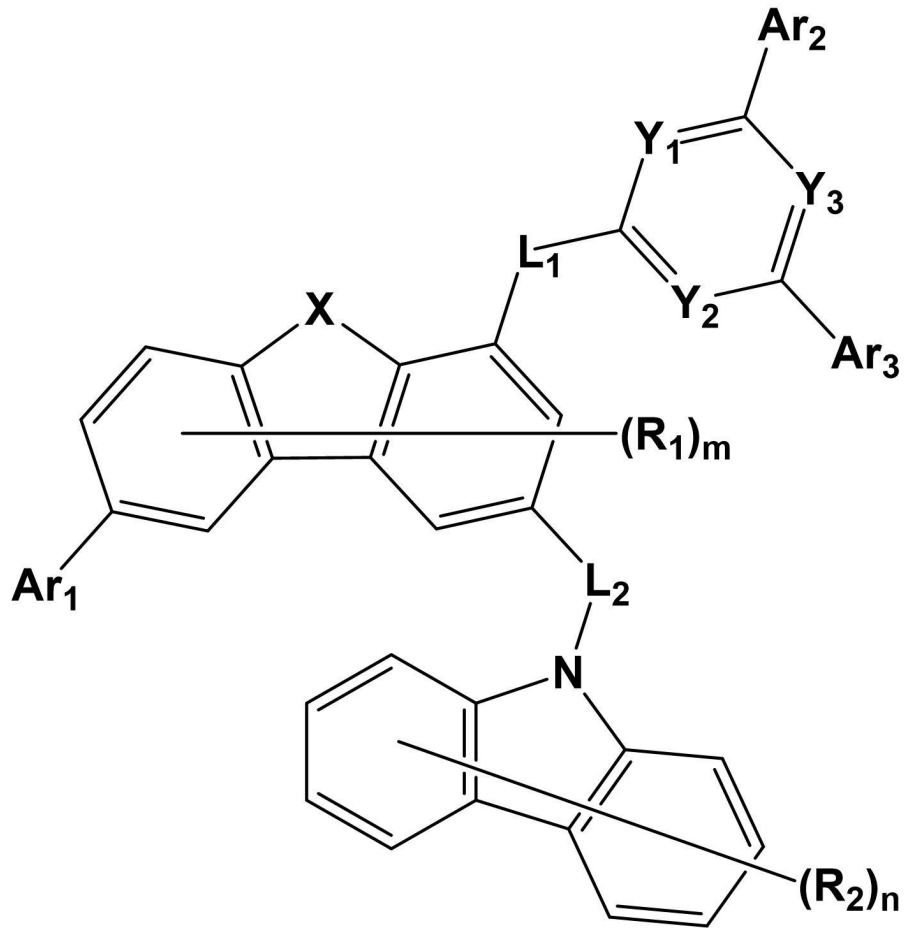
[ 化学式 4 ]

30

40

50

【化 4】



[ 化学式 5 ]

10

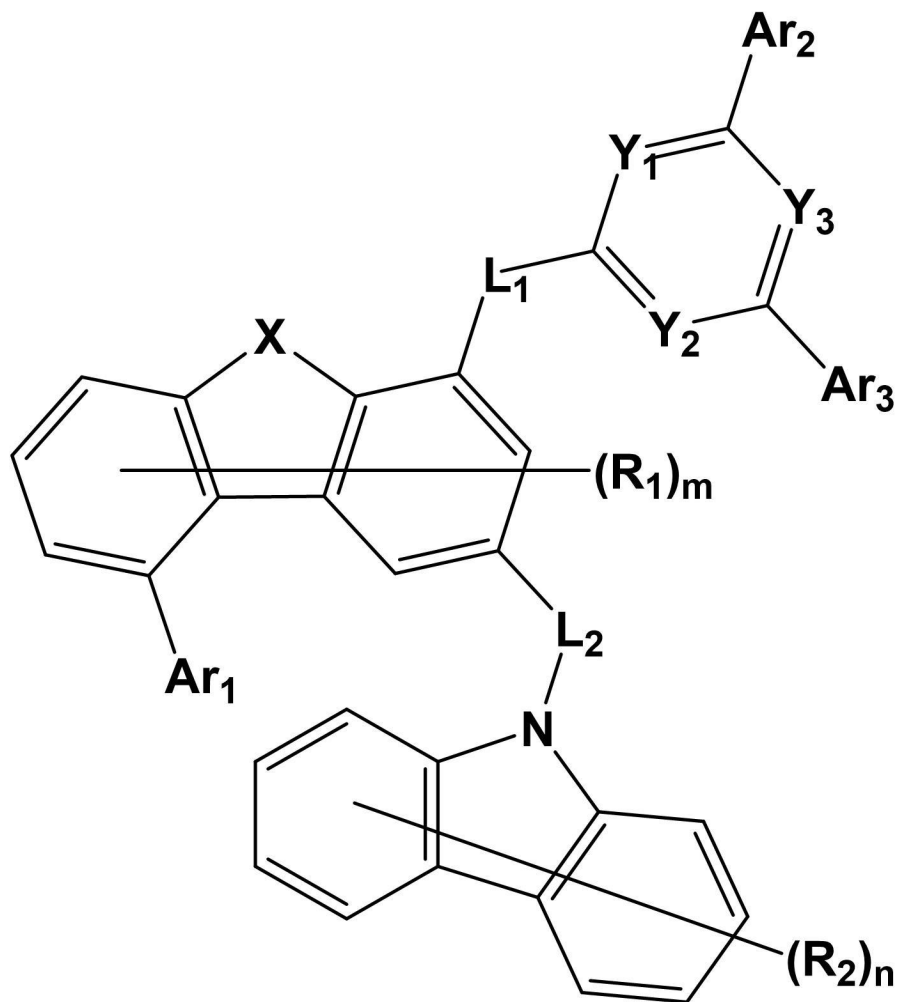
20

30

40

50

【化 5】



[ 化学式 6 ]

10

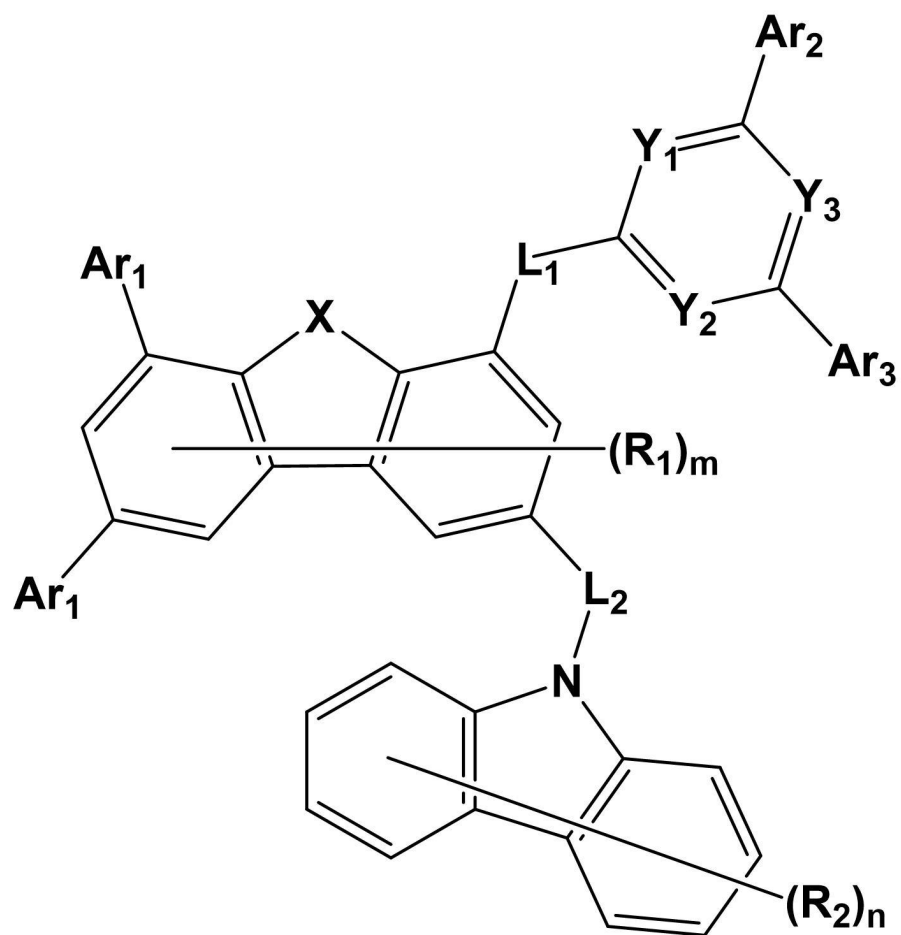
20

30

40

50

【化 6】



[ 化学式 7 ]

10

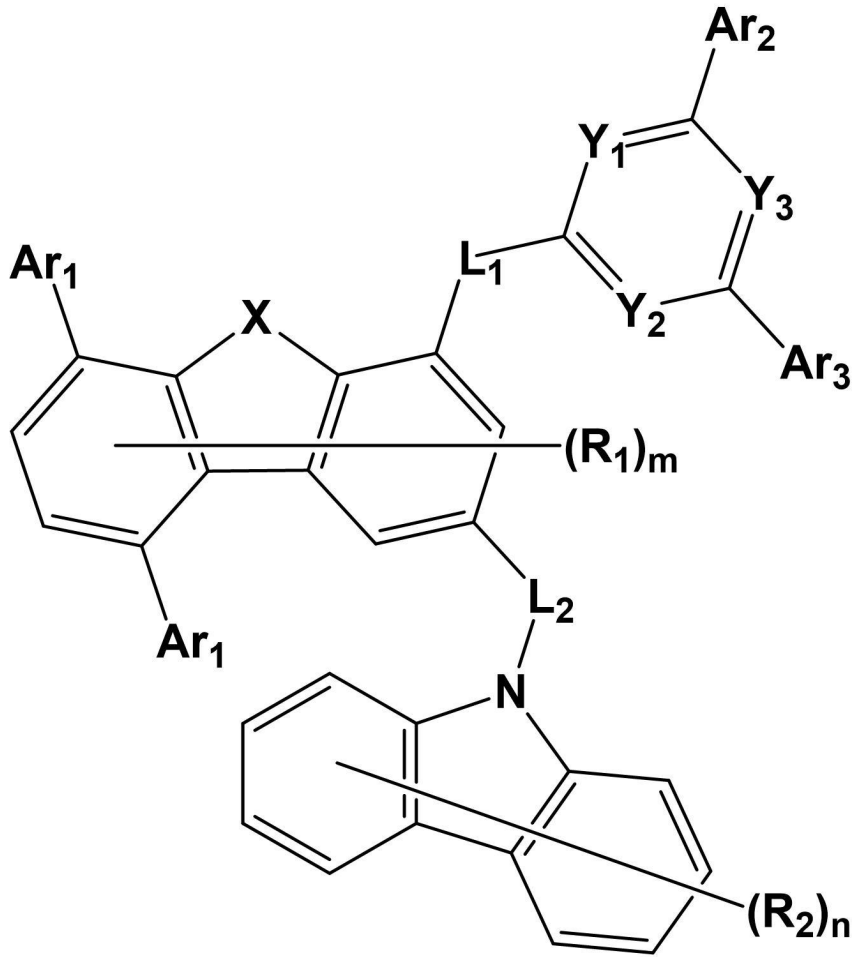
20

30

40

50

【化 7】



[ 化学式 8 ]

10

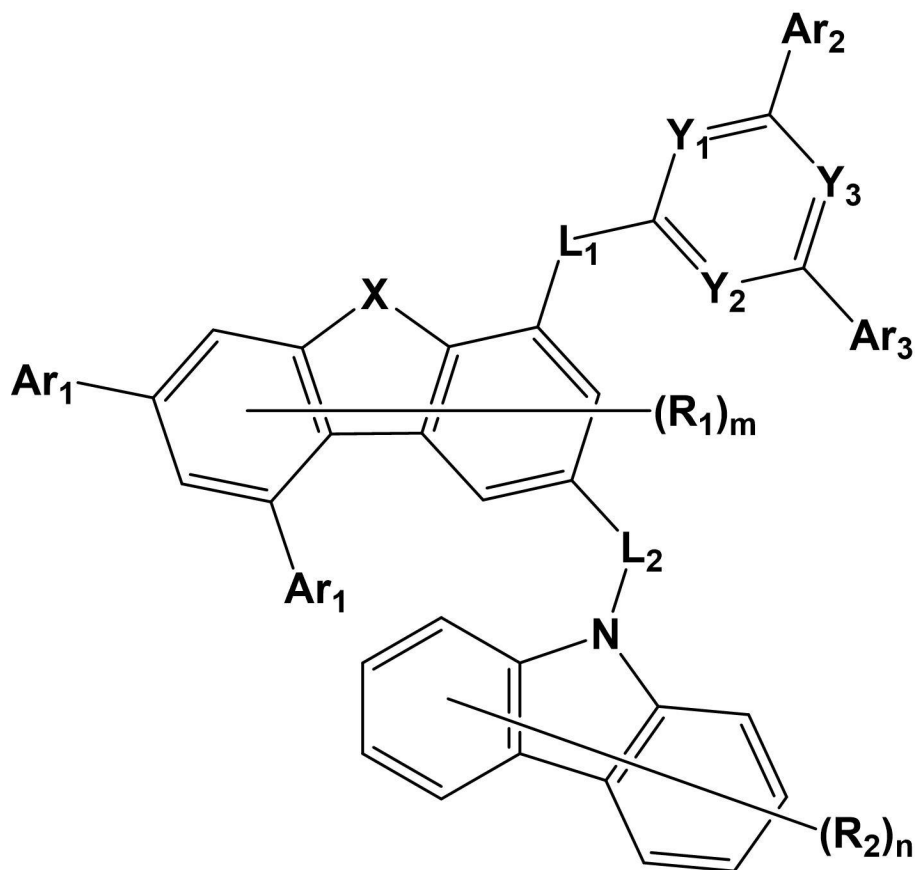
20

30

40

50

## 【化 8】



10

20

前記化学式 2 ~ 8 中、

X、Y<sub>1</sub>、Y<sub>2</sub>、Y<sub>3</sub>、L<sub>1</sub>、L<sub>2</sub>、Ar<sub>1</sub>、Ar<sub>2</sub>、Ar<sub>3</sub>、R<sub>1</sub>、R<sub>2</sub>、mおよびnは請求項 1 で定義したとおりである。

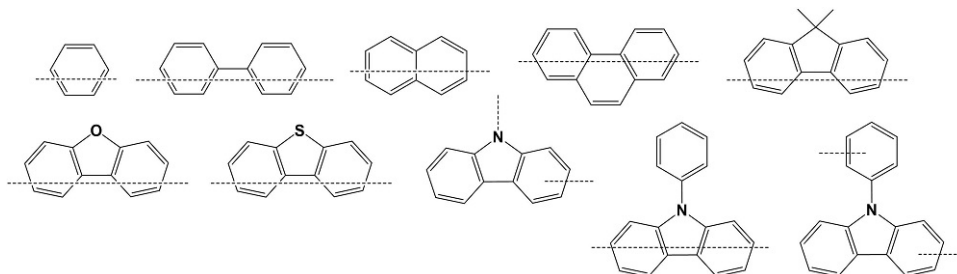
## 【請求項 3】

L<sub>1</sub>およびL<sub>2</sub>はそれぞれ独立して、直接結合または下記からなる群から選択されるいずれか一つである、

30

請求項 1 または 2 に記載の化合物：

## 【化 9】



40

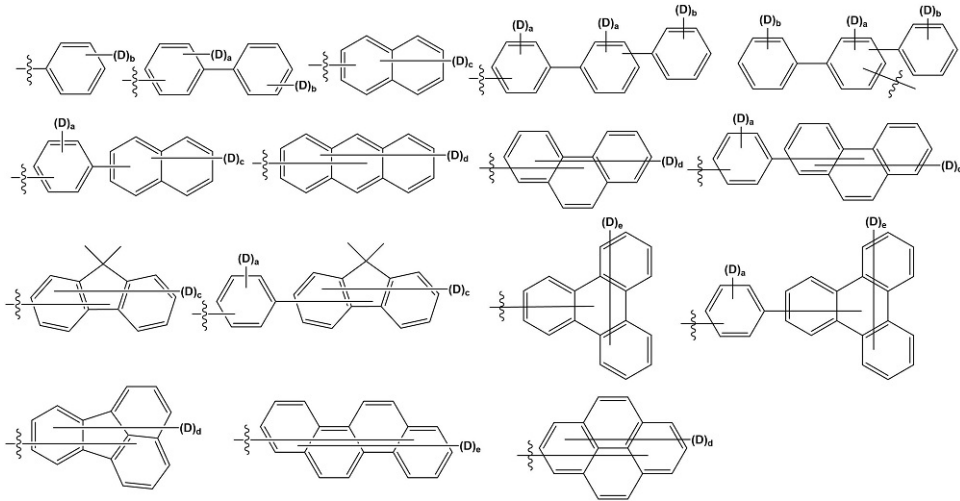
## 【請求項 4】

Ar<sub>1</sub>は下記からなる群から選択されるいずれか一つである、

請求項 1 から 3 のいずれか 1 項に記載の化合物：

50

## 【化 1 0】



10

前記式中、

a は 0 ~ 4 の整数であり、

b は 0 ~ 5 の整数であり、

c は 0 ~ 7 の整数であり、

d は 0 ~ 9 の整数であり、

e は 0 ~ 11 の整数である。

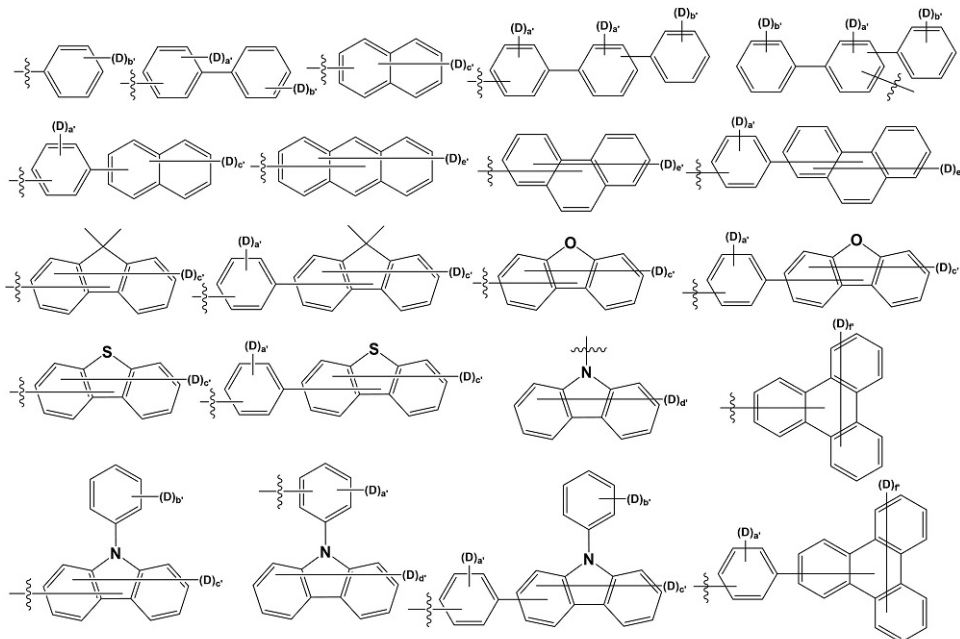
20

## 【請求項 5】

$Ar_2$  および  $Ar_3$  はそれぞれ独立して、下記からなる群から選択されるいずれか一つである、

請求項 1 から 4 のいずれか 1 項に記載の化合物：

## 【化 1 1】



30

40

前記式中、

a' は 0 ~ 4 の整数であり、

b' は 0 ~ 5 の整数であり、

c' は 0 ~ 7 の整数であり、

d' は 0 ~ 8 の整数であり、

e' は 0 ~ 9 の整数であり、

50

f'は0～11の整数である。

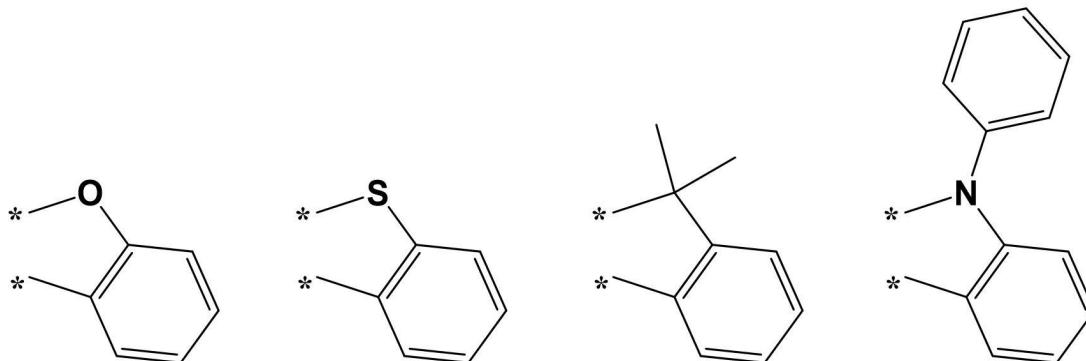
【請求項6】

R<sub>1</sub>はそれぞれ独立して、水素または重水素である、  
請求項1から5のいずれか1項に記載の化合物。

【請求項7】

R<sub>2</sub>はそれぞれ独立して、水素；重水素；ハロゲン；シアノ；メトキシ；トリフルオロメチル；トリフルオロメトキシ；フェニル；ピリジニル；イソキノリニル；または下記からなる群から選択されるいずれか一つであり、

【化12】



10

前記式中の2個の\*は、化学式1のカルバゾールの隣接炭素とそれぞれ連結され、  
前記フェニルはハロゲン、シアノ、メトキシ、トリフルオロメチルおよびトリフルオロメトキシからなる群から選択されるいずれか一つで置換される、  
請求項1から6のいずれか1項に記載の化合物。

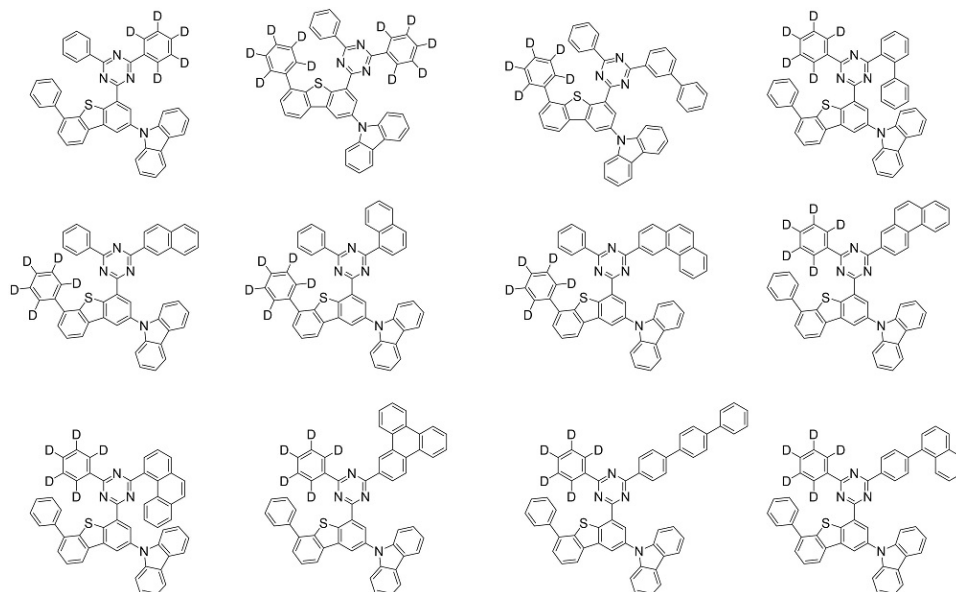
20

【請求項8】

前記化学式1で表される化合物は、下記で構成される群から選択されるいずれか一つである、

請求項1に記載の化合物：

【化13】

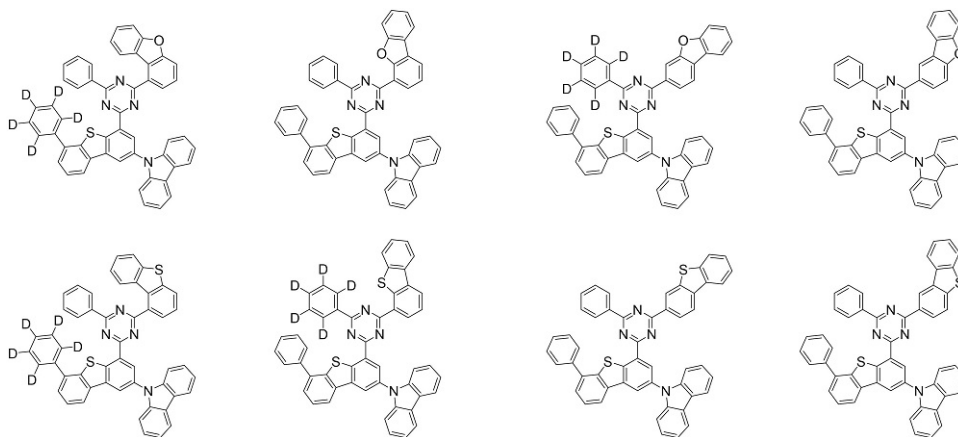


30

40

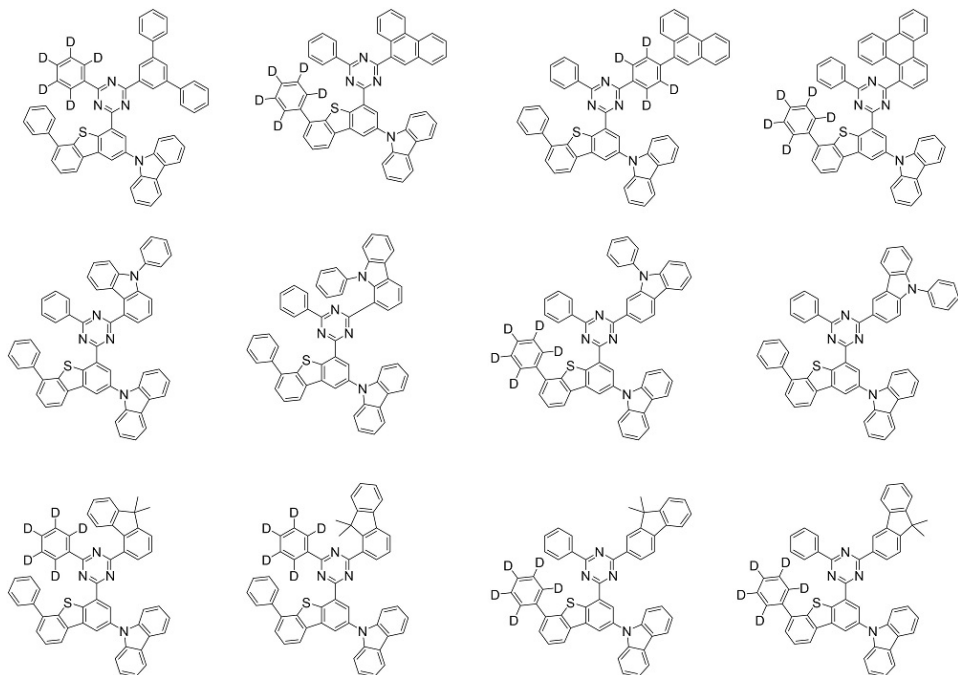
50

【化 1 4】



10

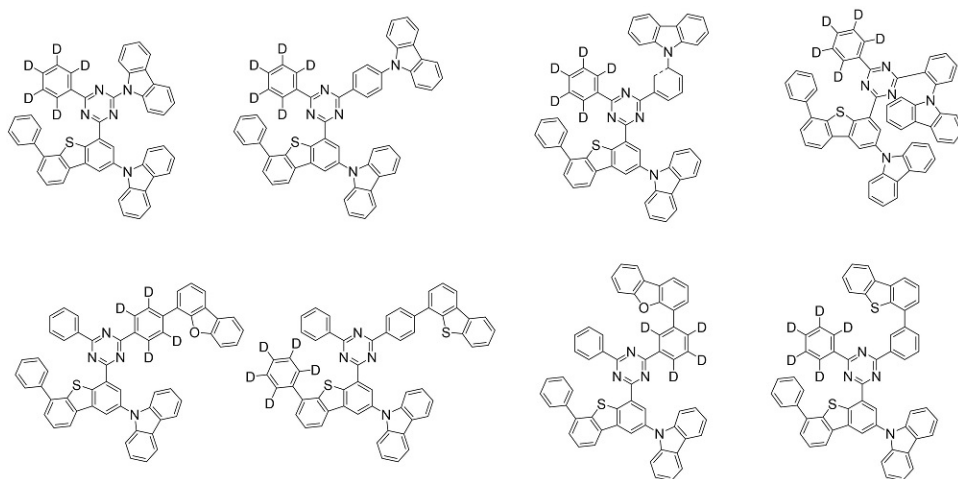
【化 1 5】



20

30

【化 1 6】

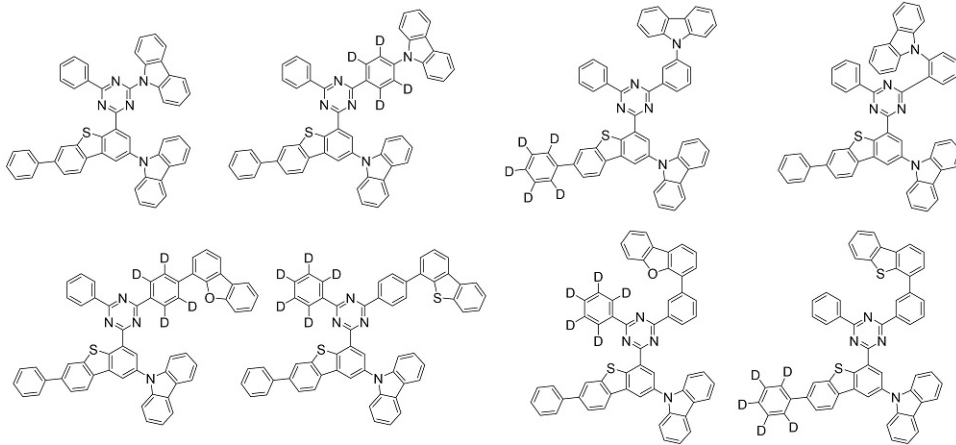


40

50

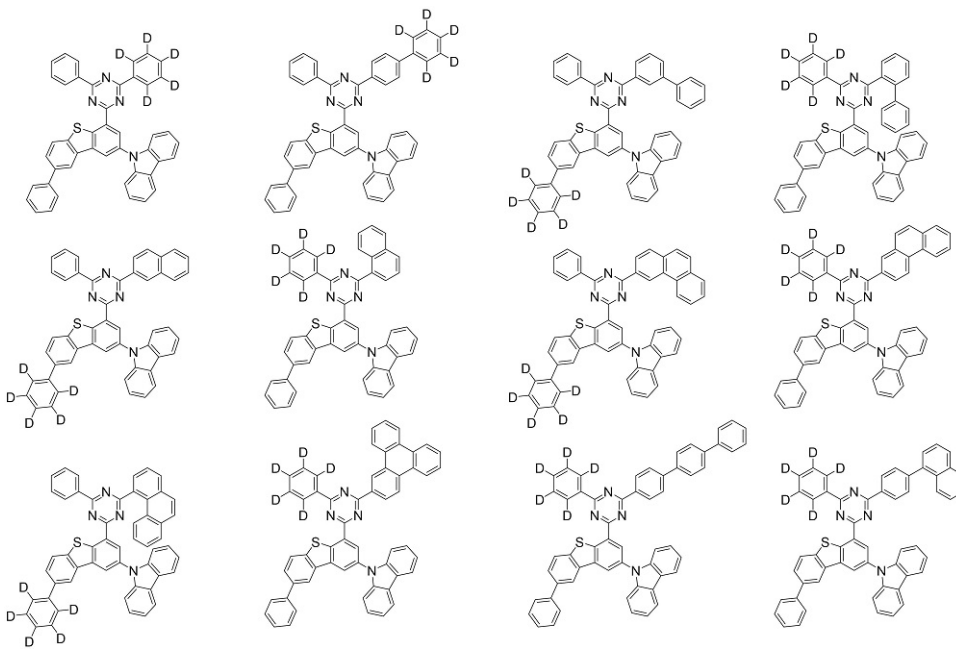


【化 2 0】



10

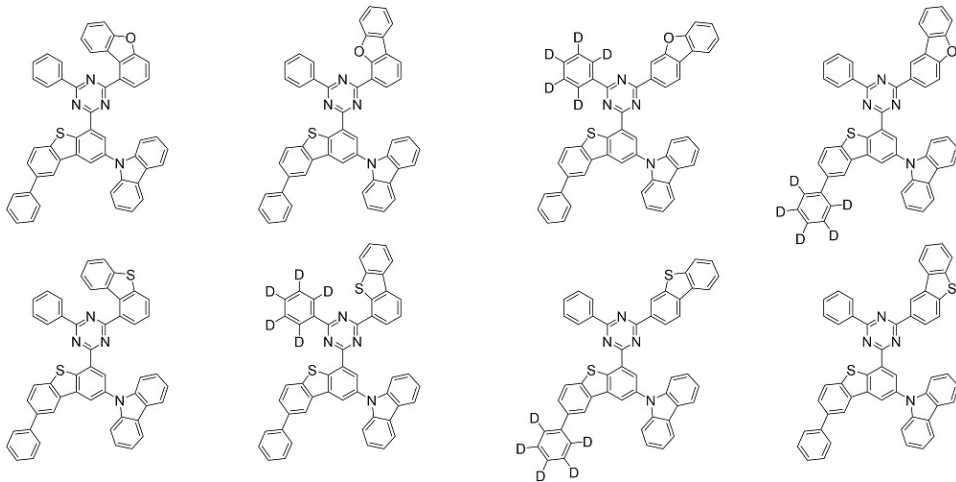
【化 2 1】



20

30

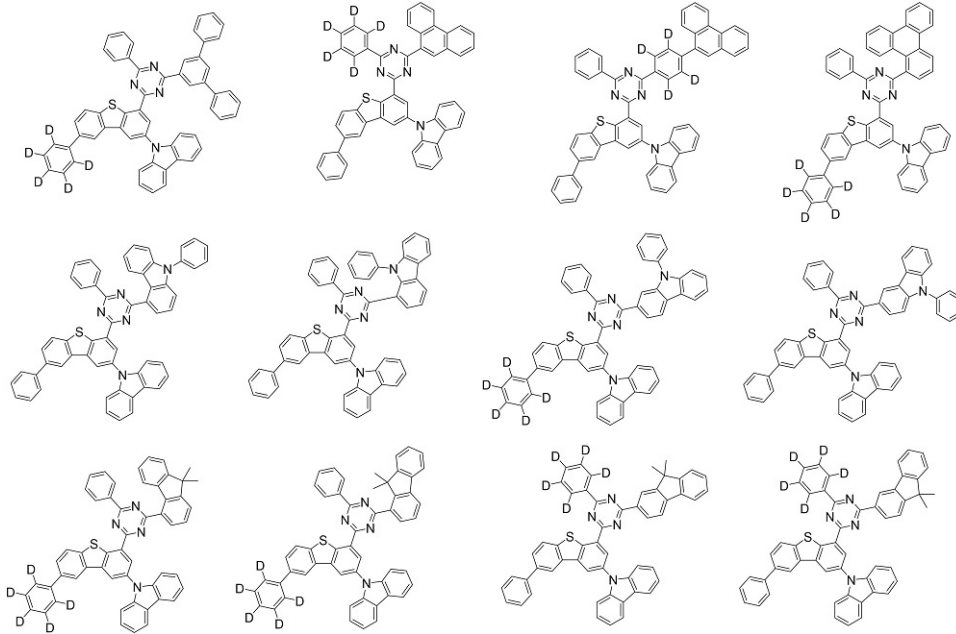
【化 2 2】



40

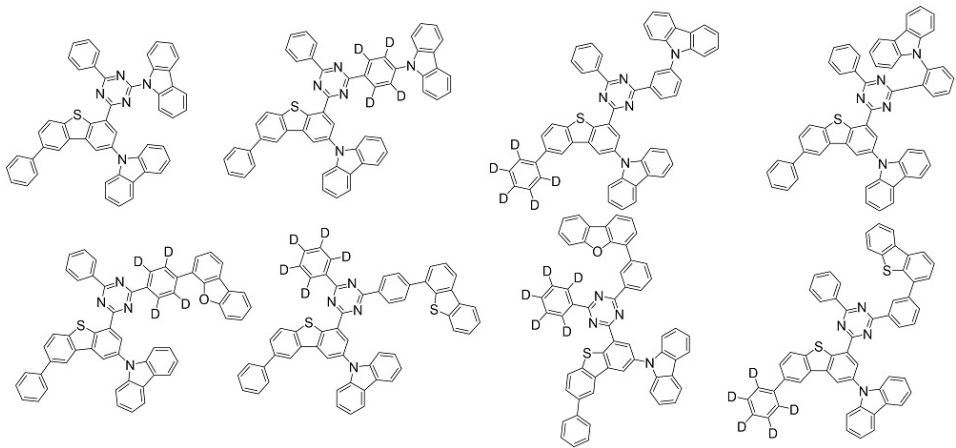
50

【化 2 3】



10

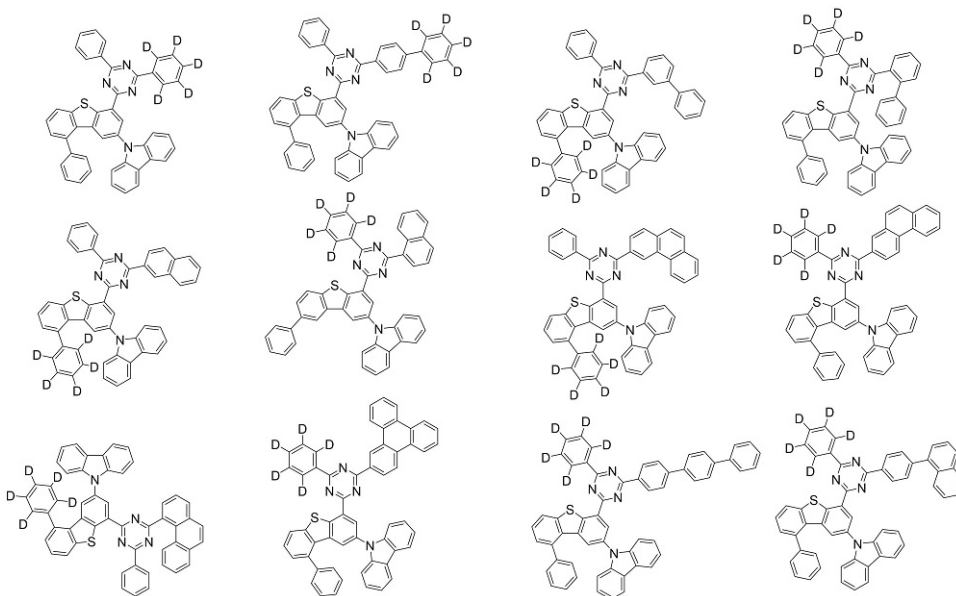
【化 2 4】



20

30

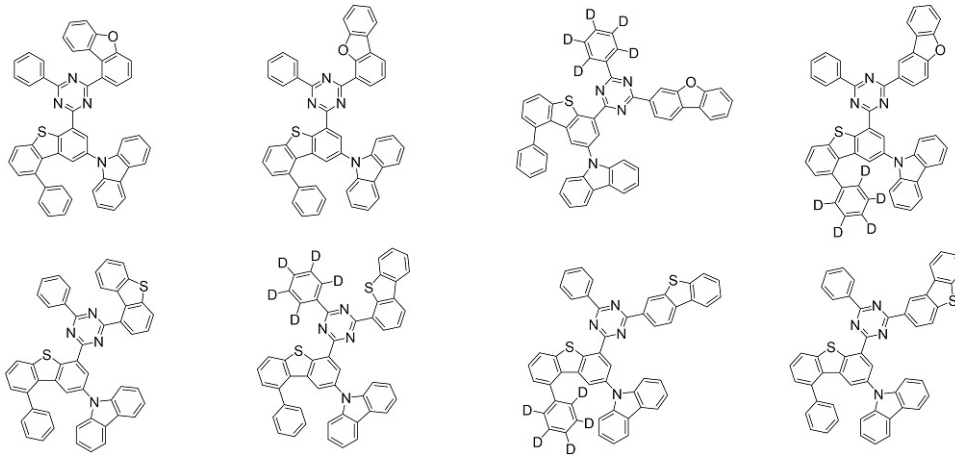
【化 2 5】



40

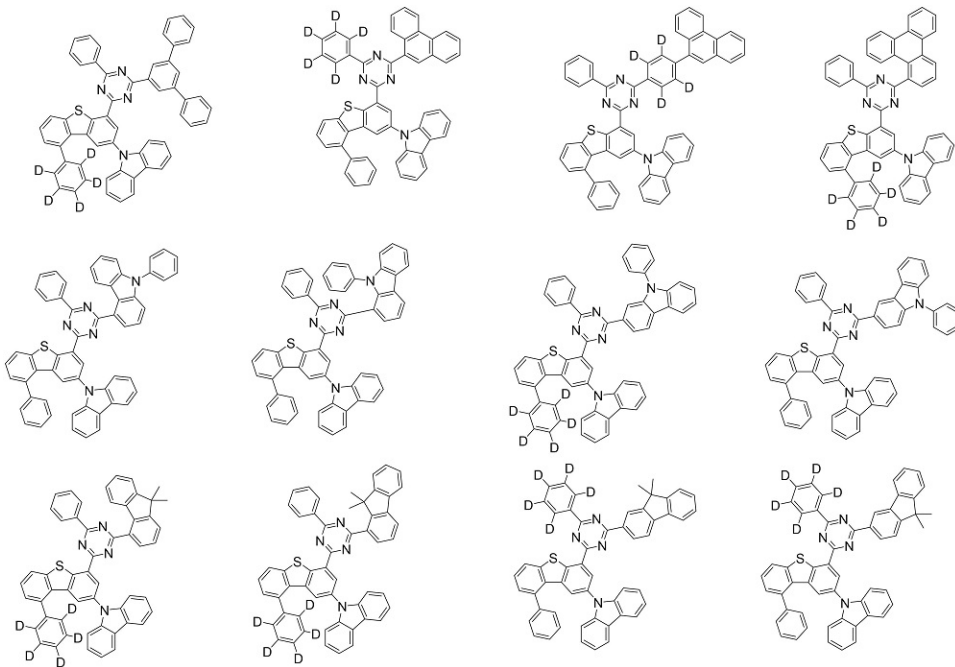
50

【化 2 6】



10

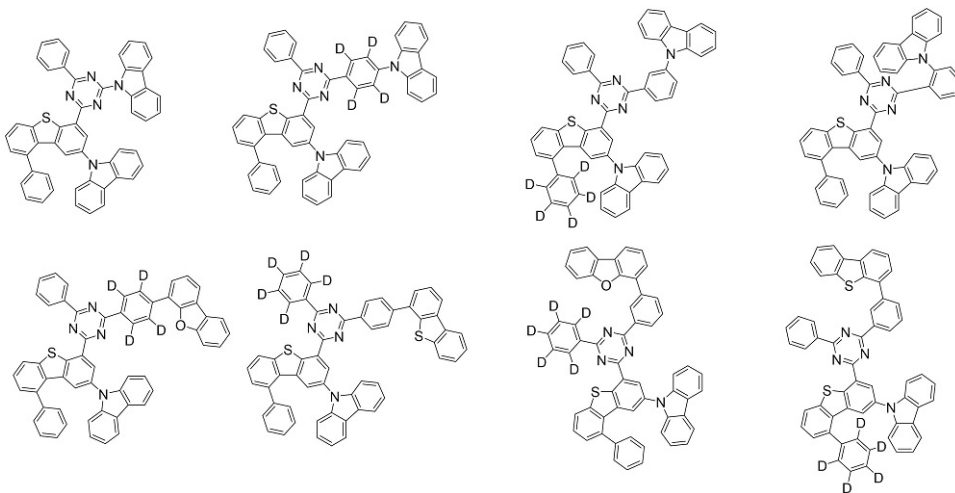
【化 2 7】



20

30

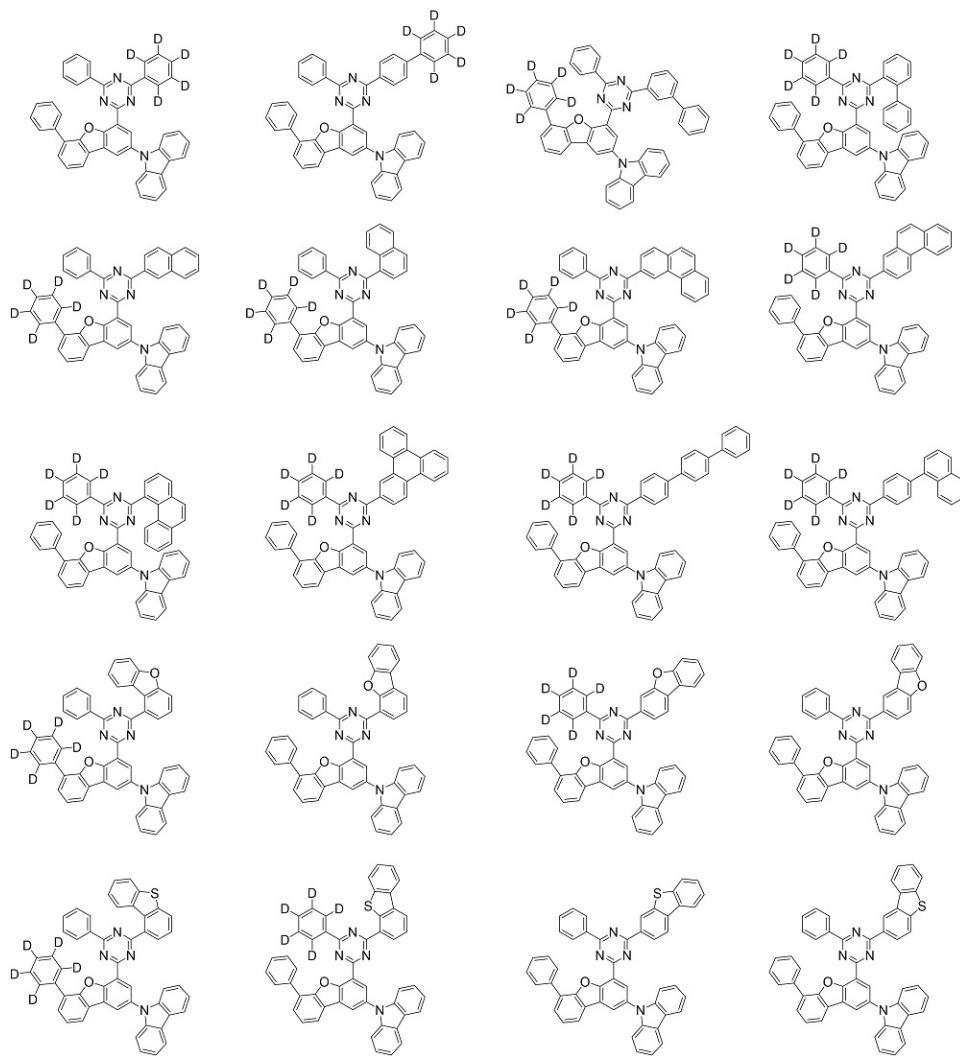
【化 2 8】



40

50

【化 2 9】



10

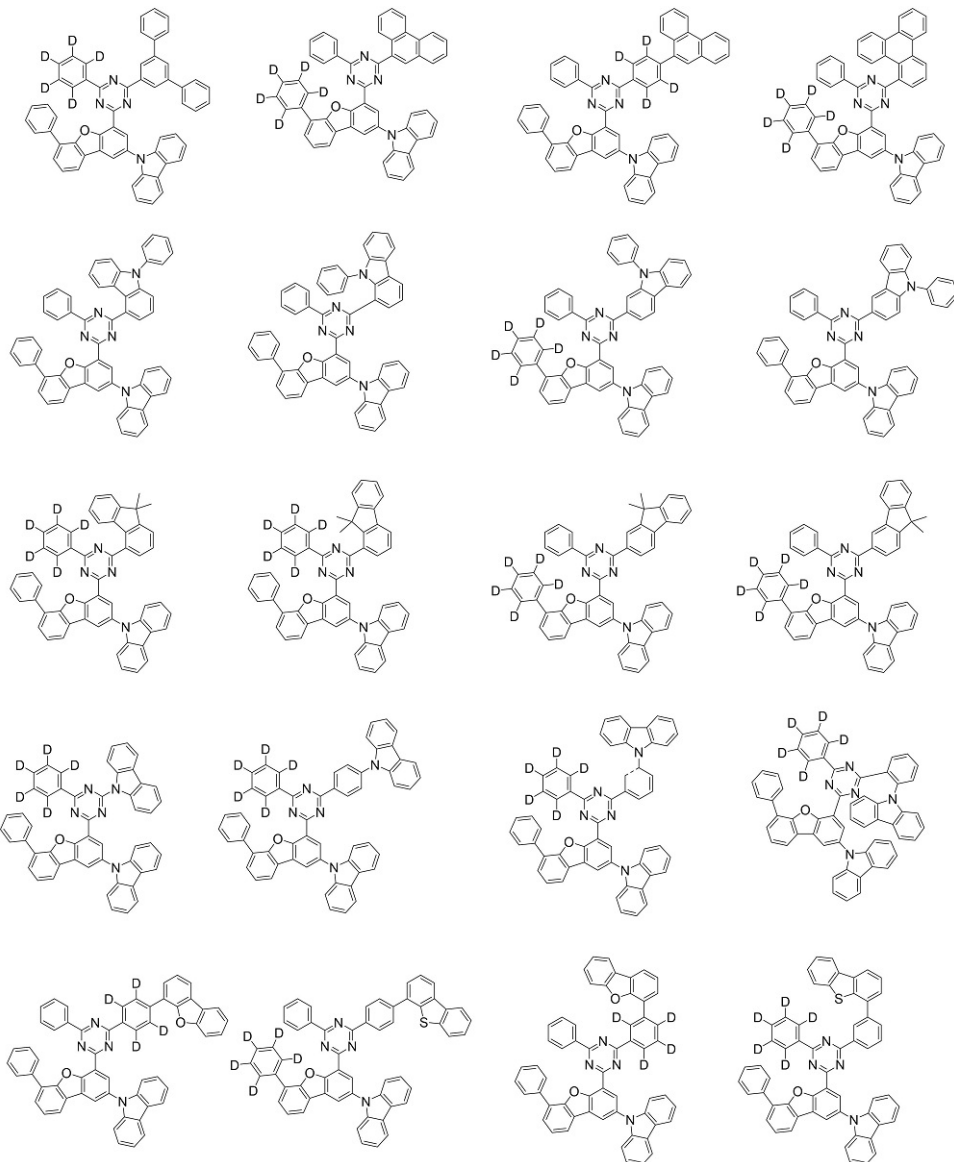
20

30

40

50

【化 3 0】



10

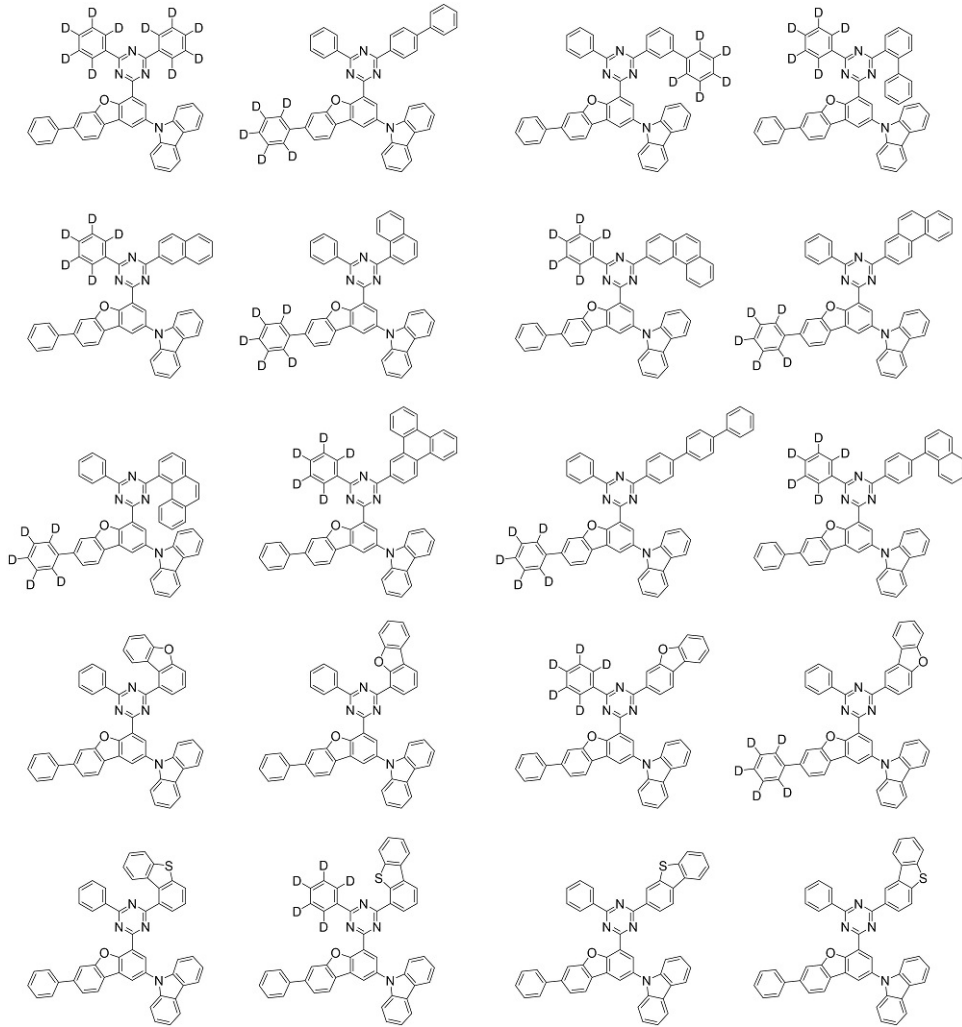
20

30

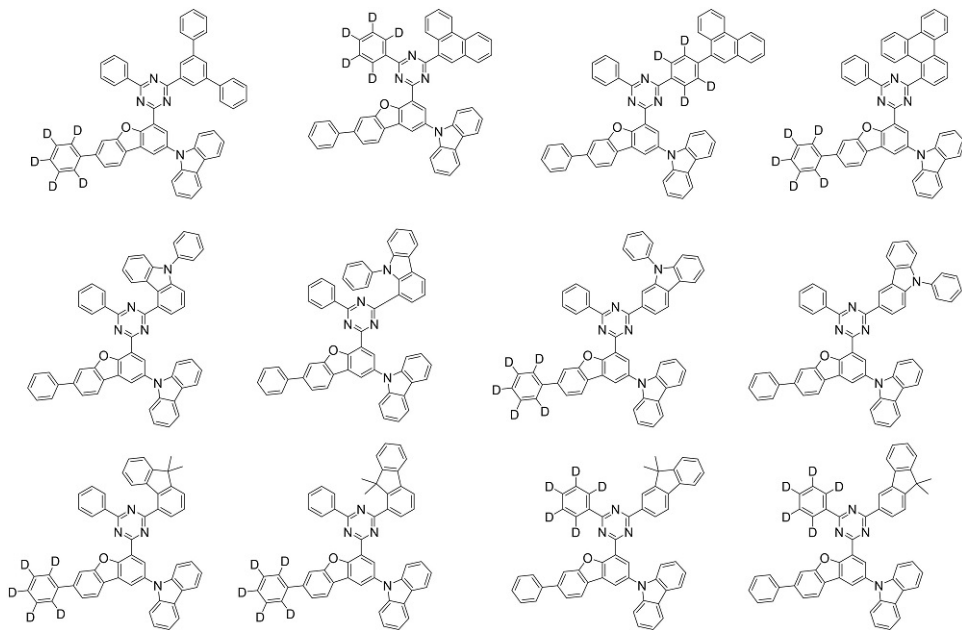
40

50

【化 3 1】



【化 3 2】



10

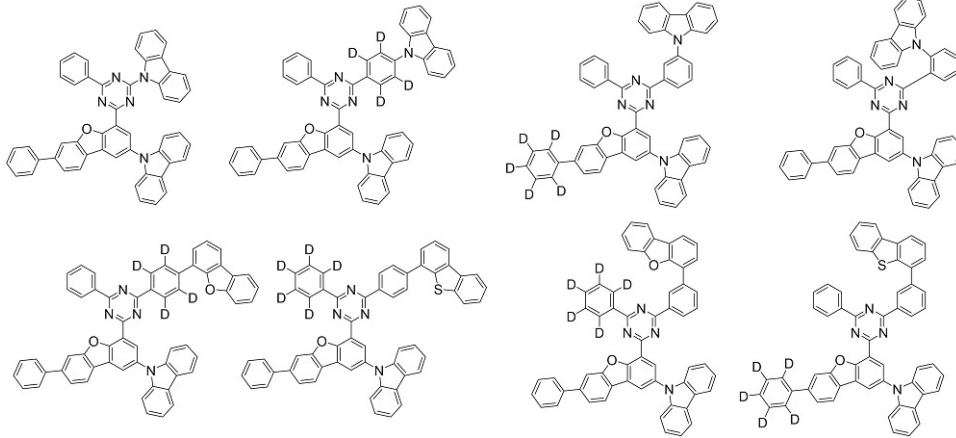
20

30

40

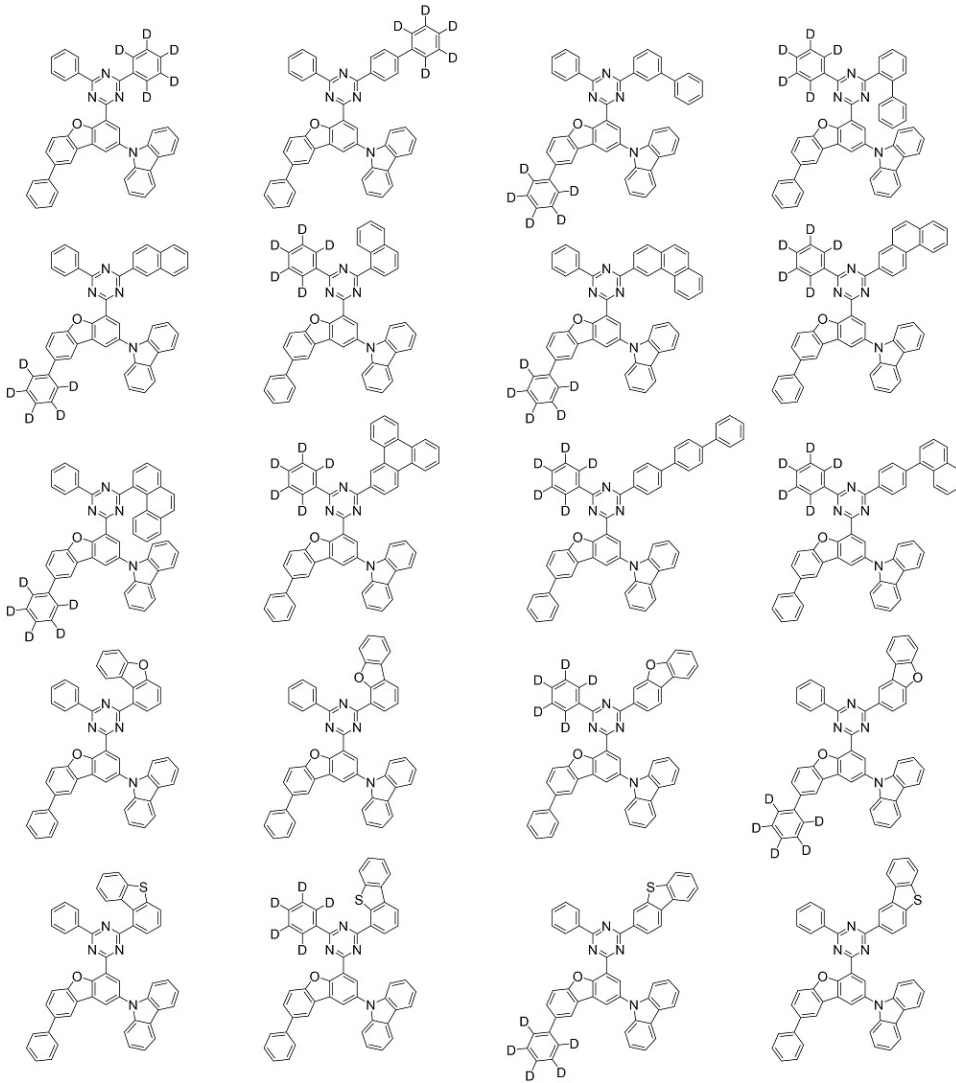
50

【化 3 3】



10

【化 3 4】



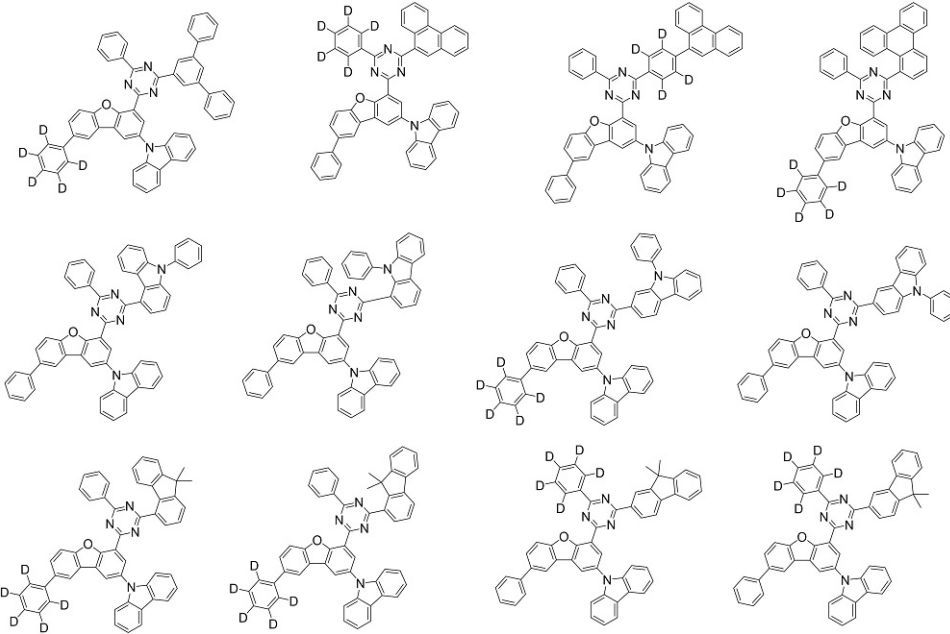
20

30

40

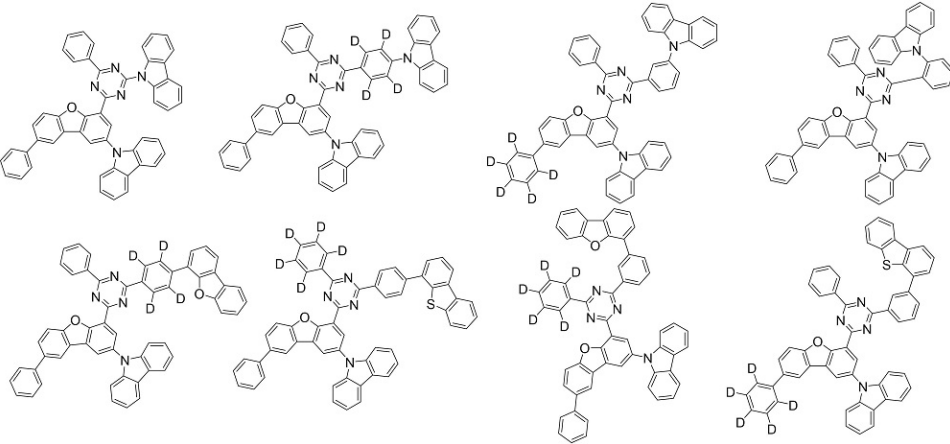
50

【化 3 5】



10

【化 3 6】



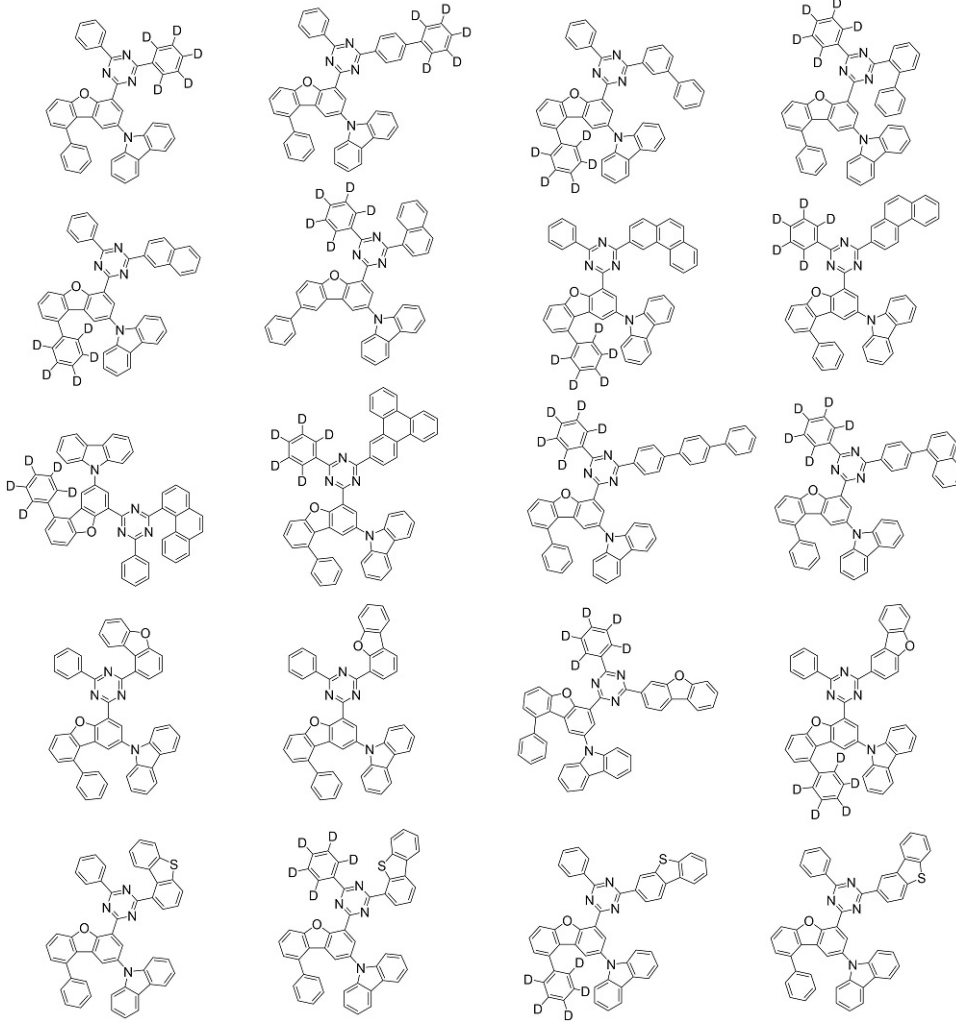
20

30

40

50

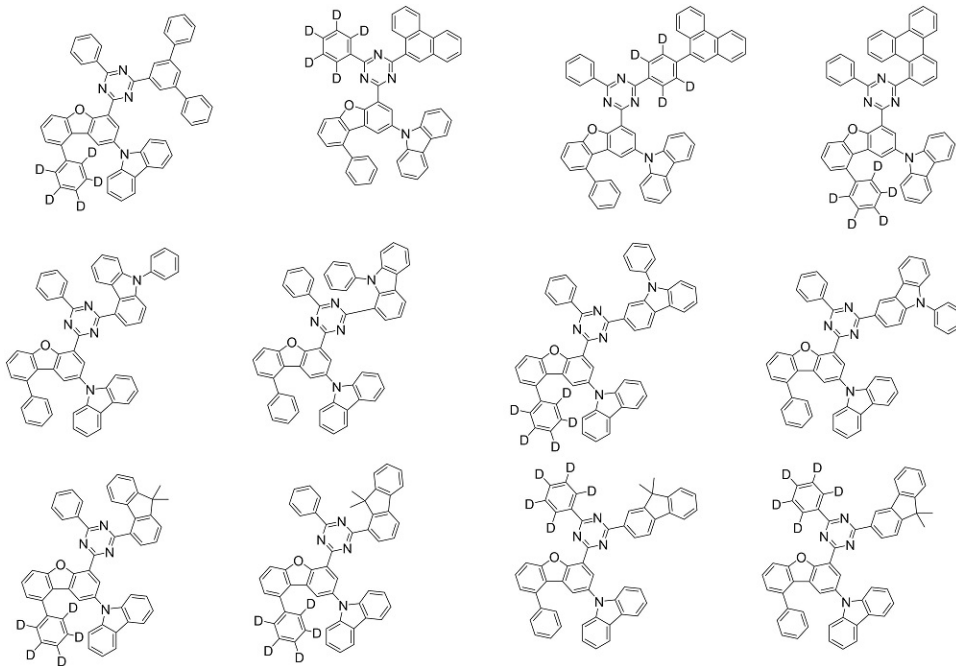
【化 3 7】



10

20

【化 3 8】

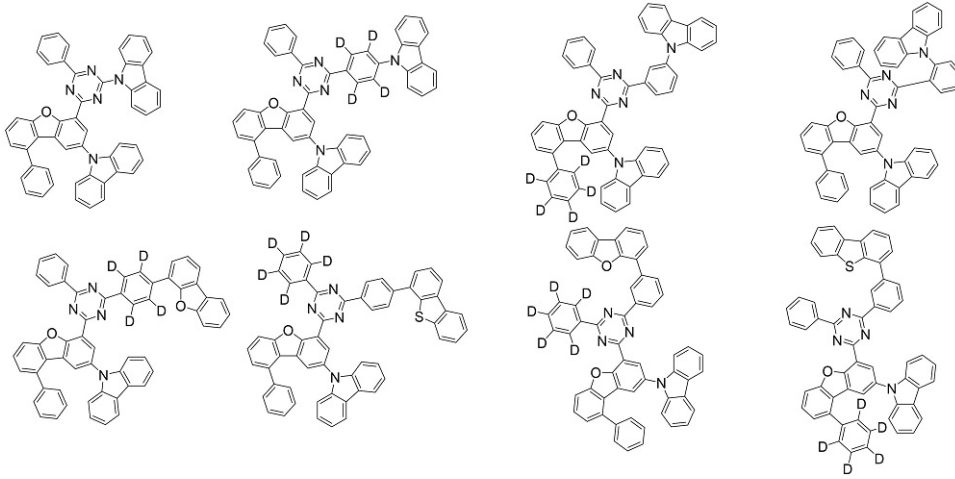


30

40

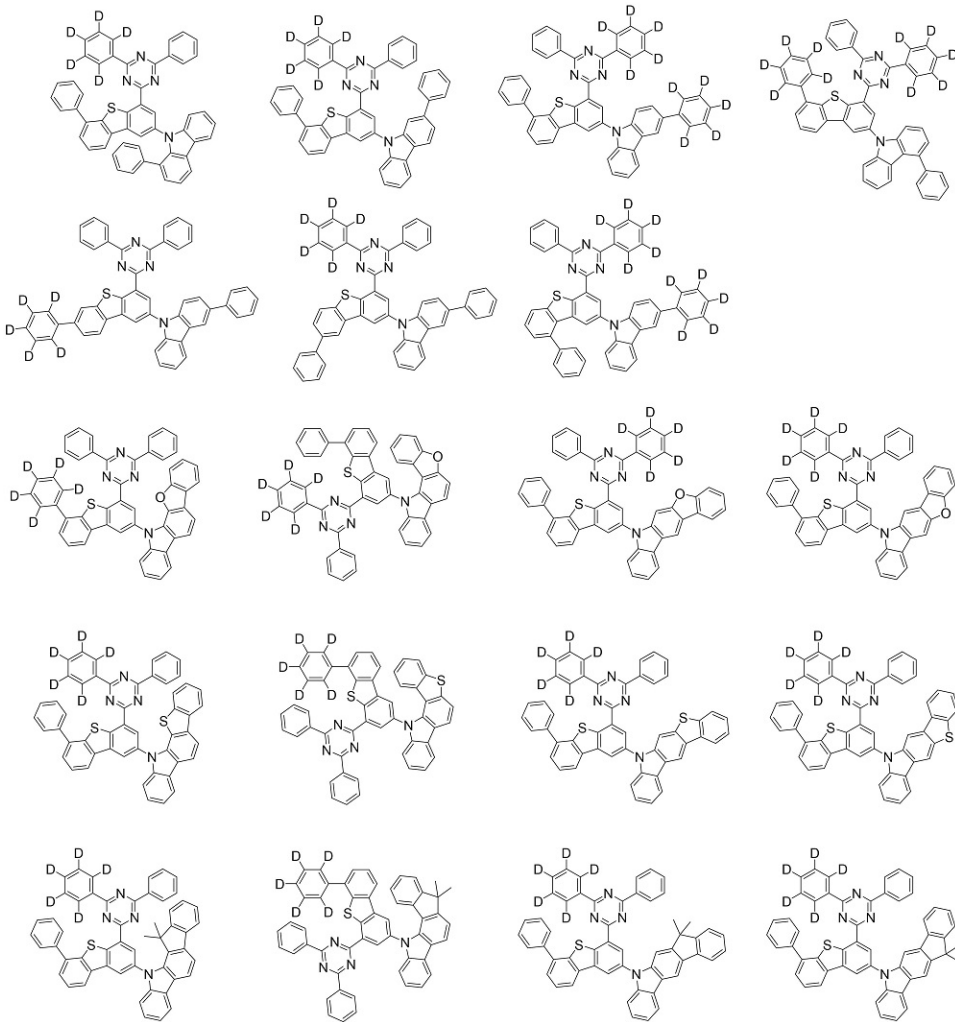
50

【化 3 9】



10

【化 4 0】



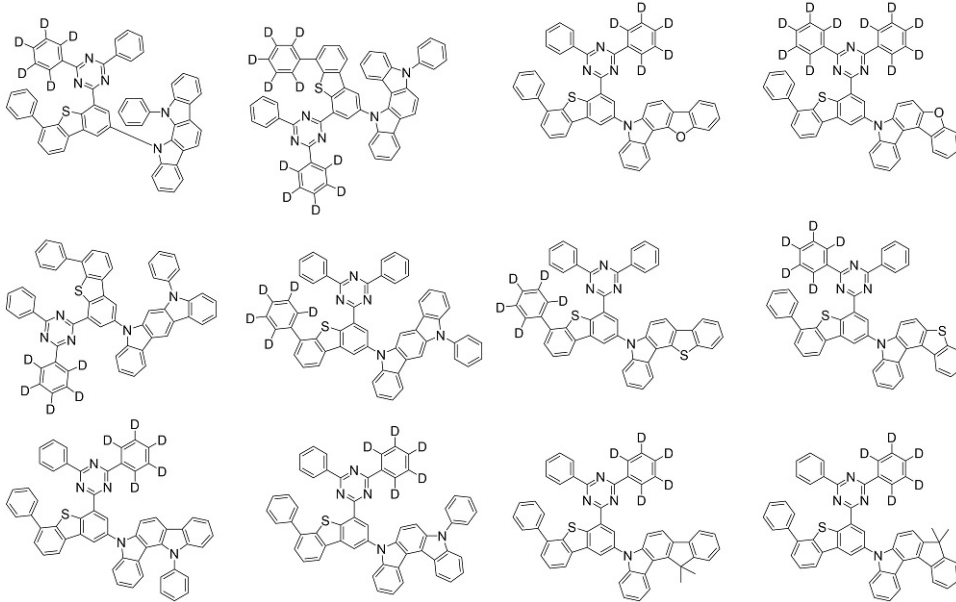
20

30

40

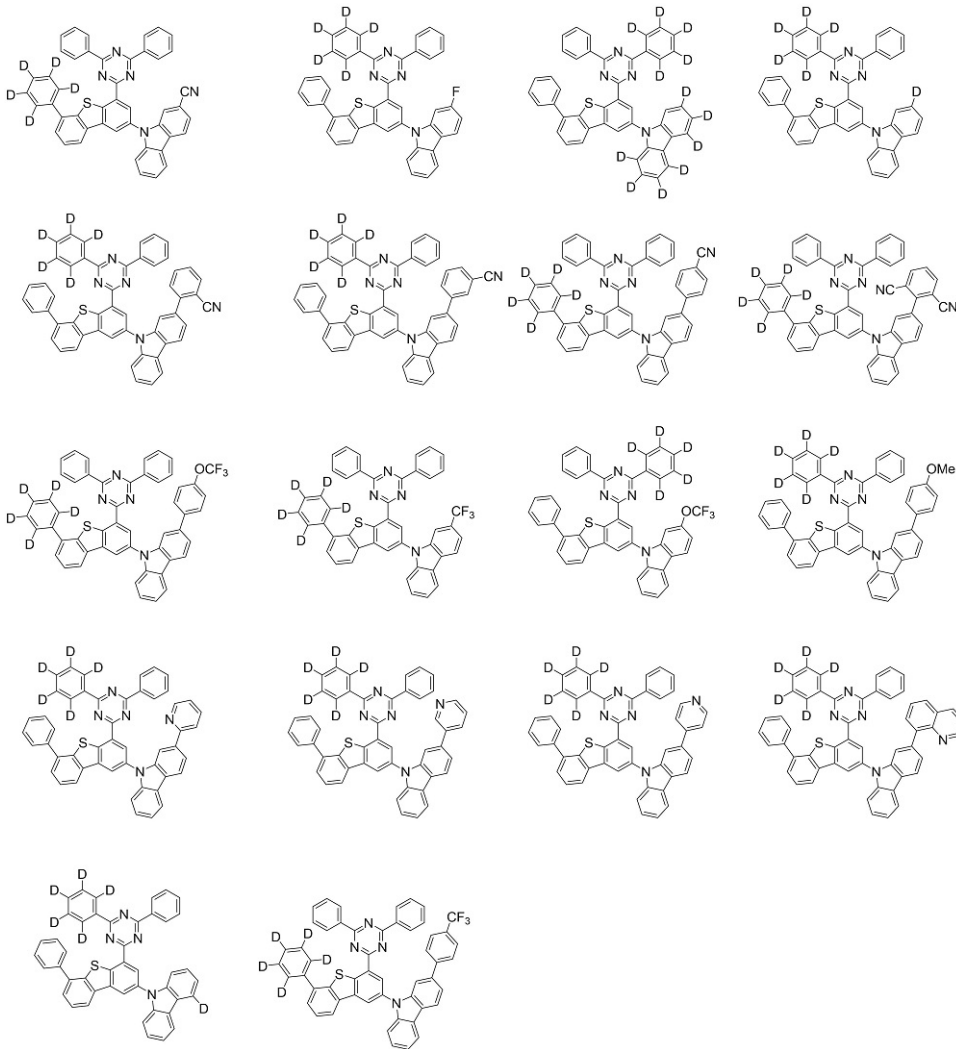
50

【化 4 1】



10

【化 4 2】



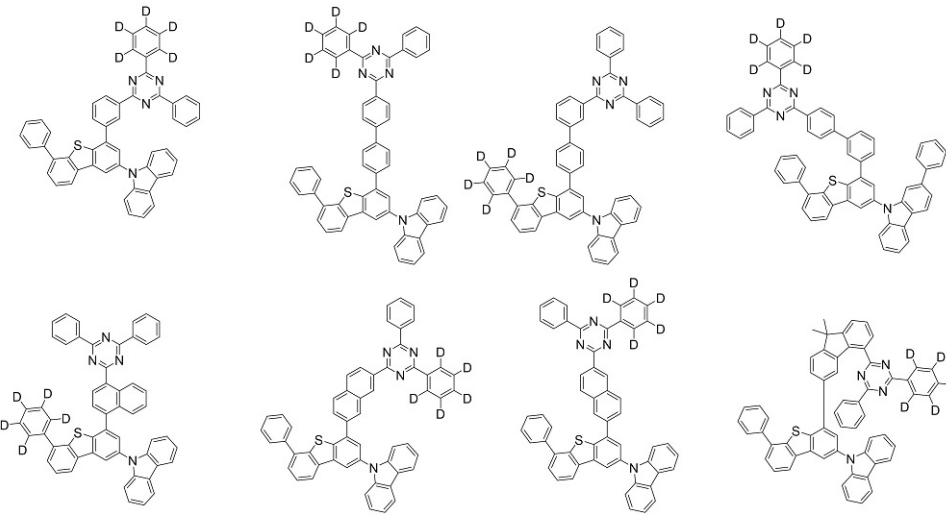
20

30

40

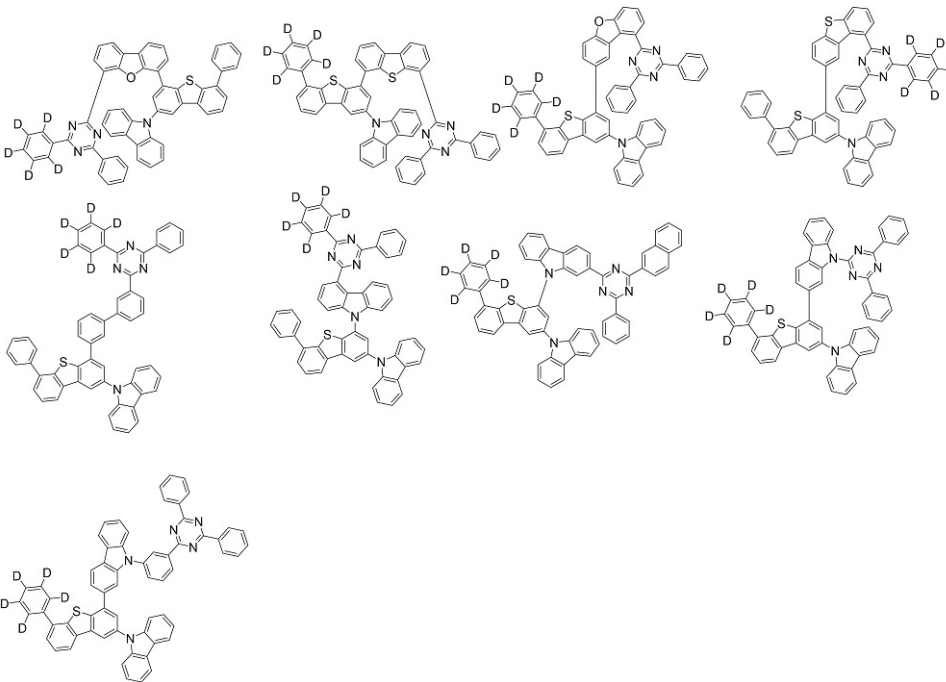
50

【化 4 3】



10

【化 4 4】



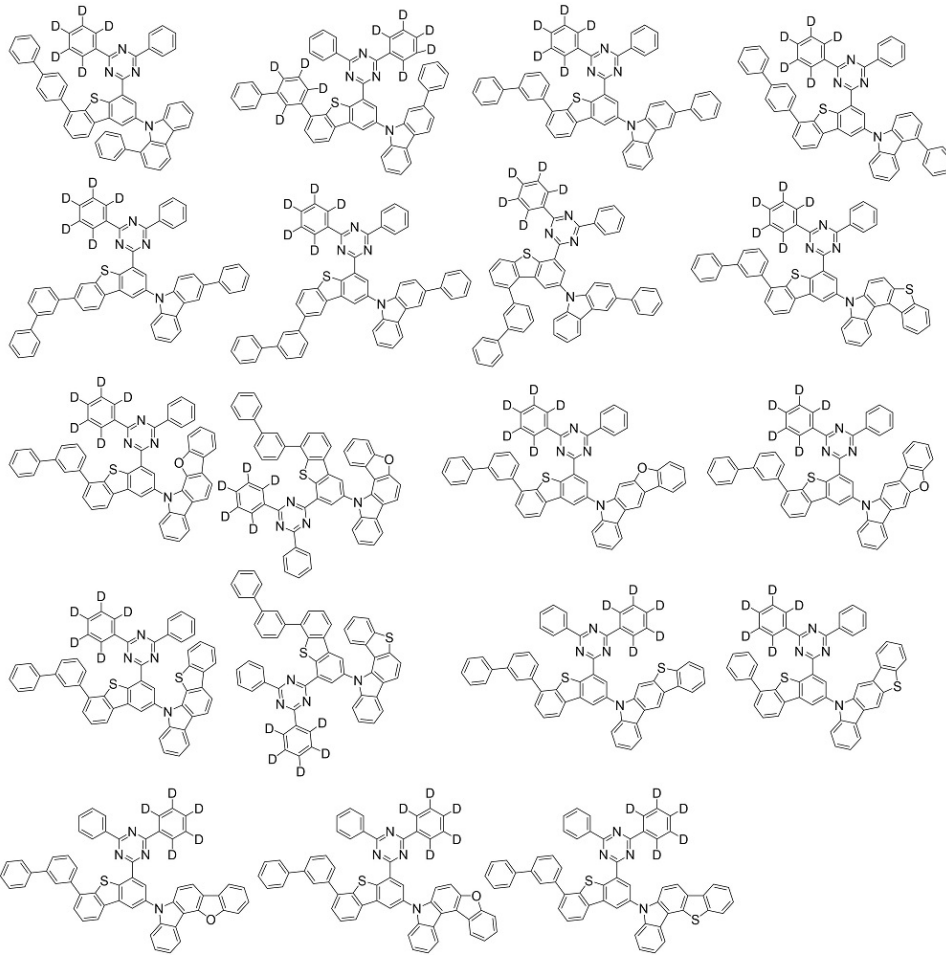
20

30

40

50

【化 4 5】



10

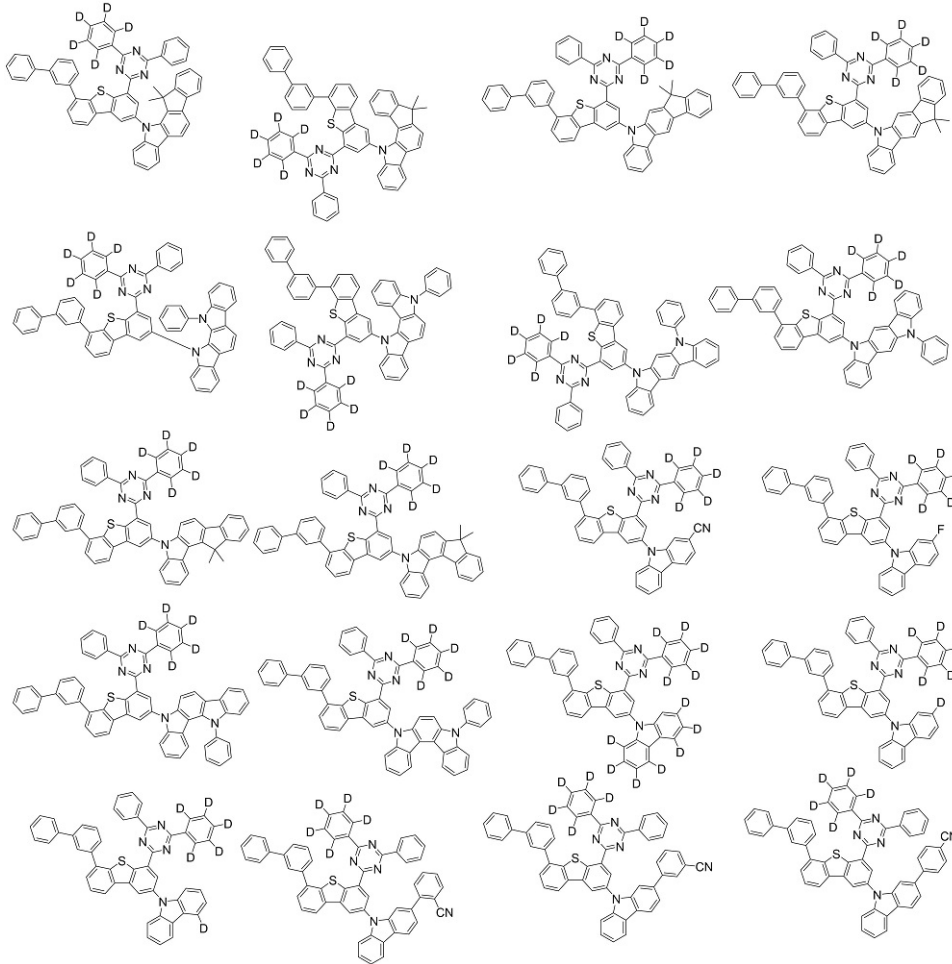
20

30

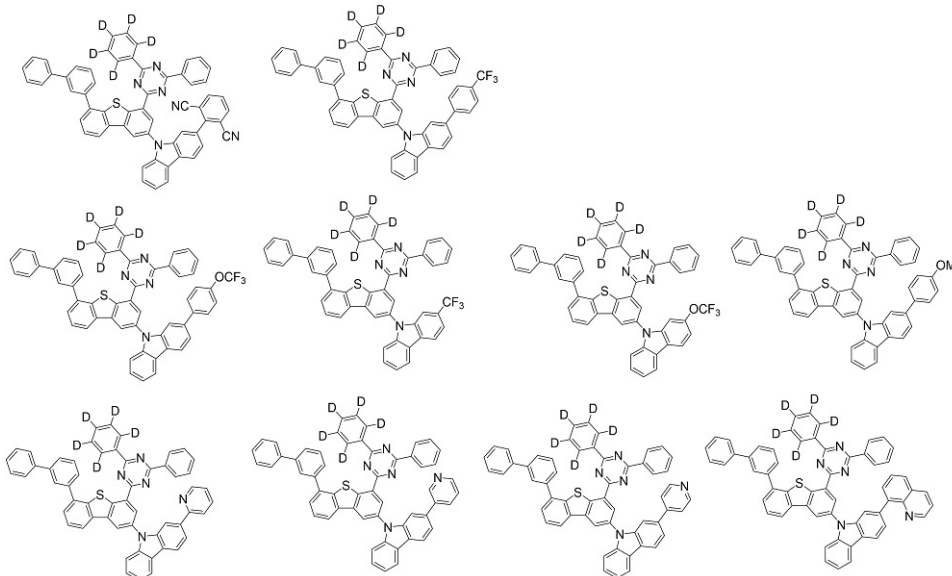
40

50

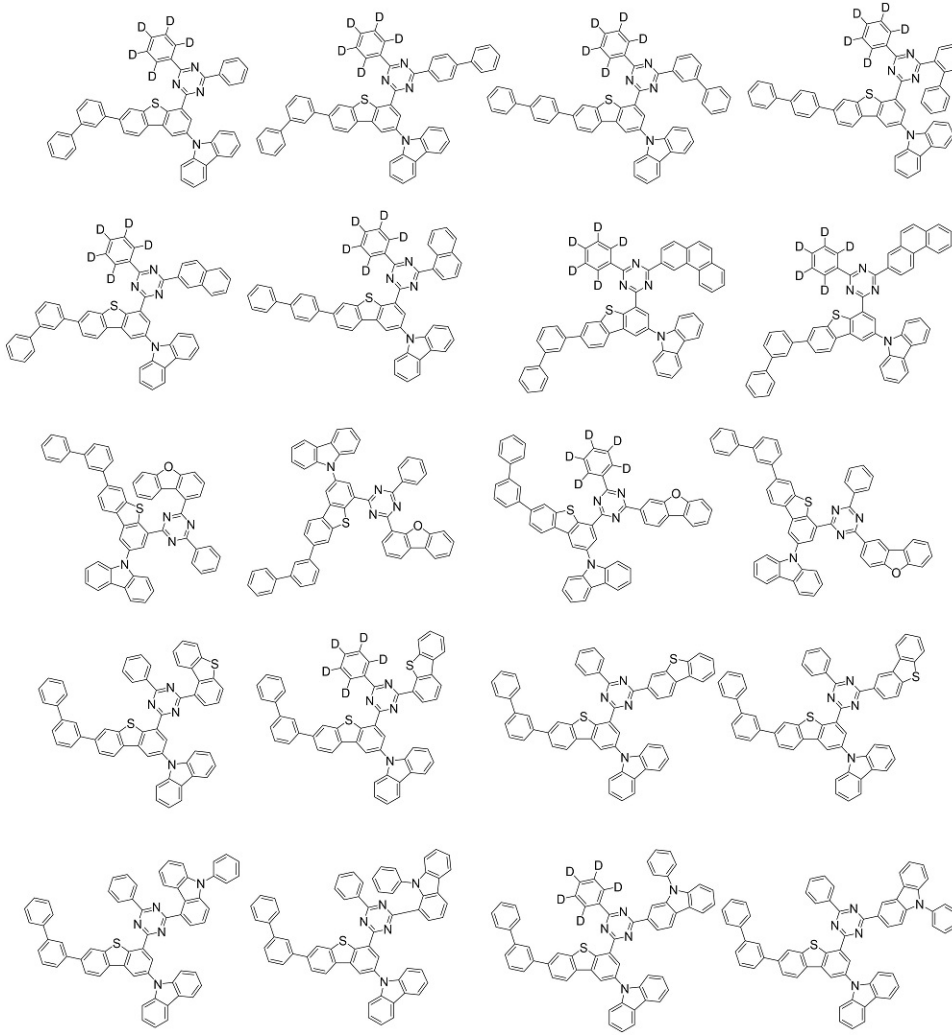
【化 4 6】



【化 4 7】



【化 4 8】



10

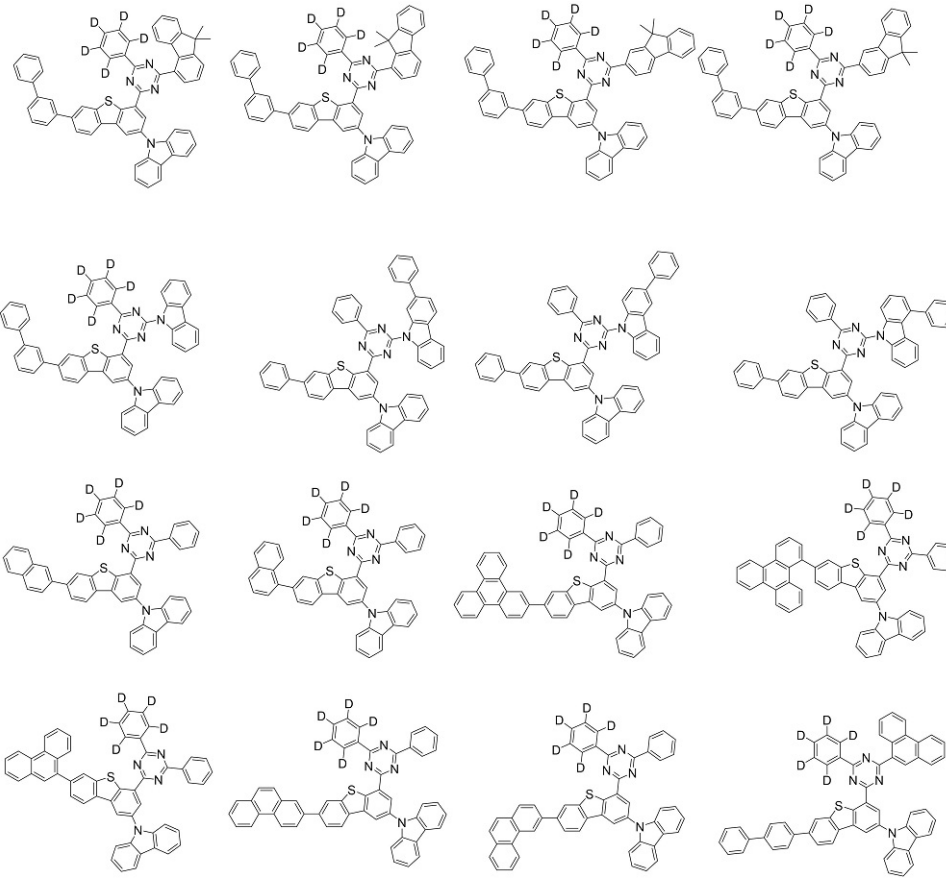
20

30

40

50

【化 4 9】



10

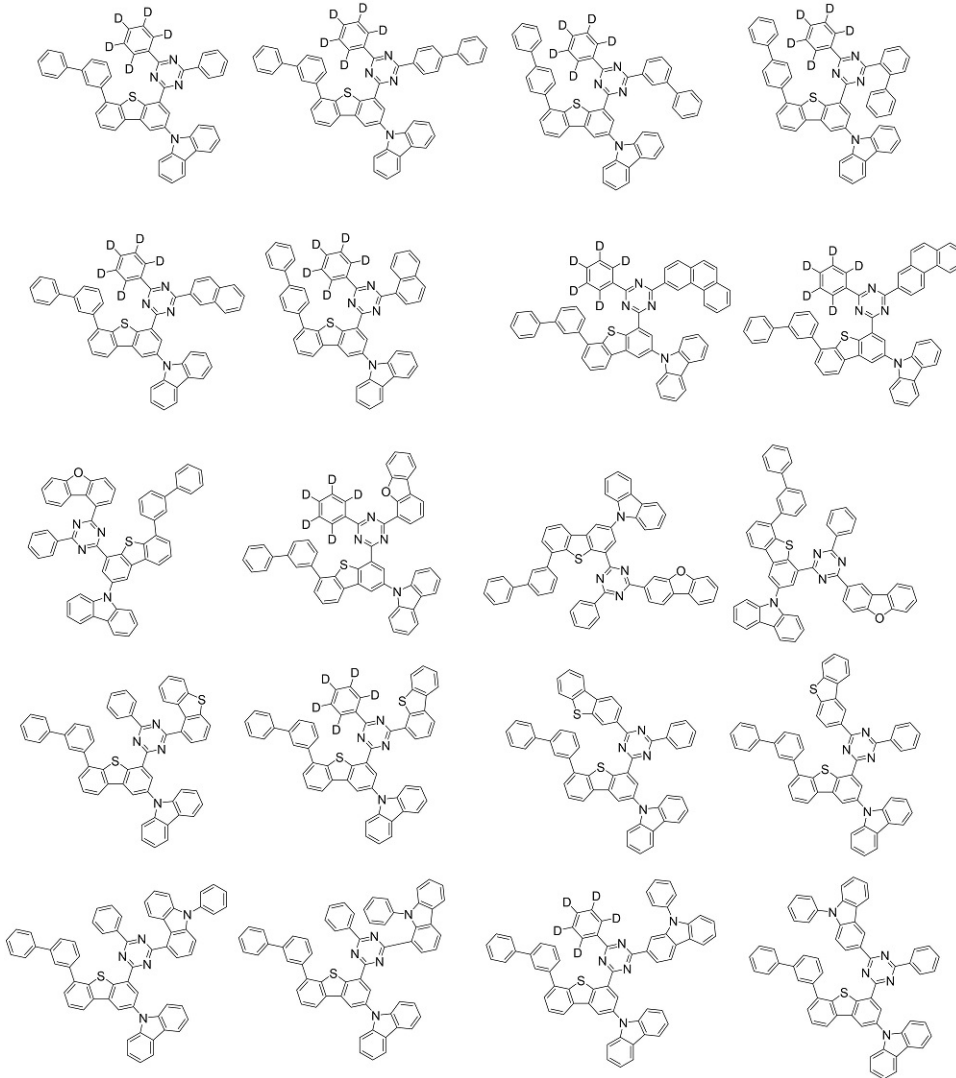
20

30

40

50

【化 5 0】



10

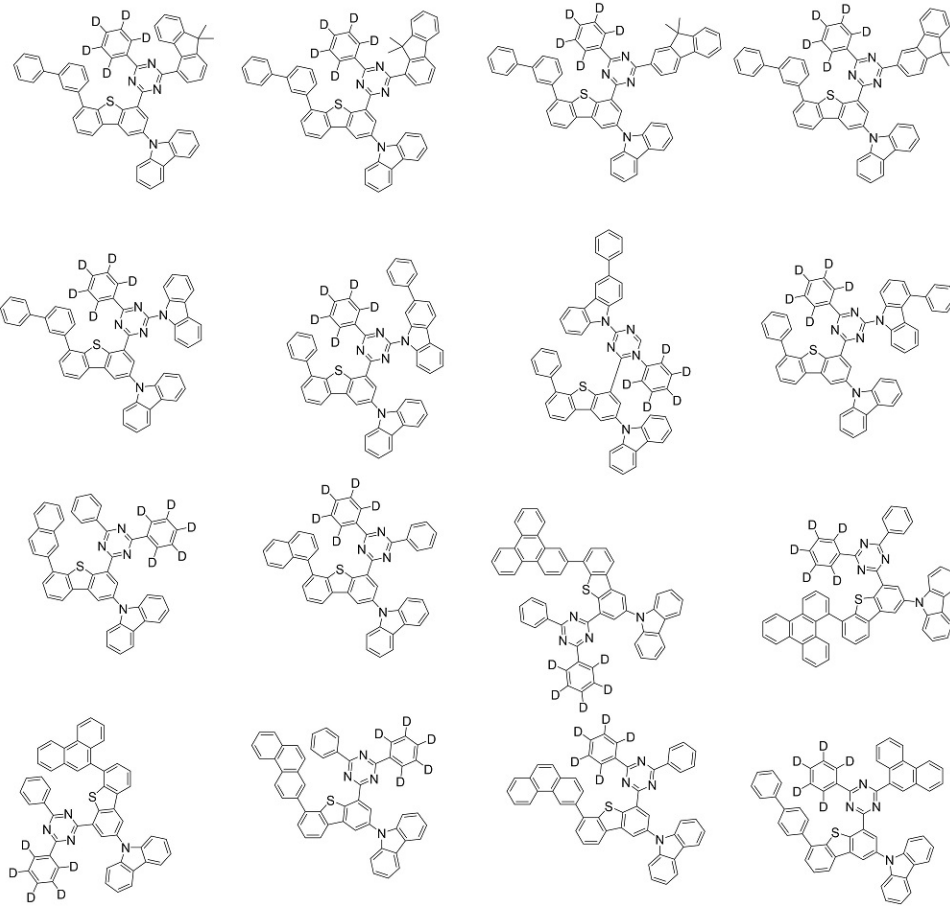
20

30

40

50

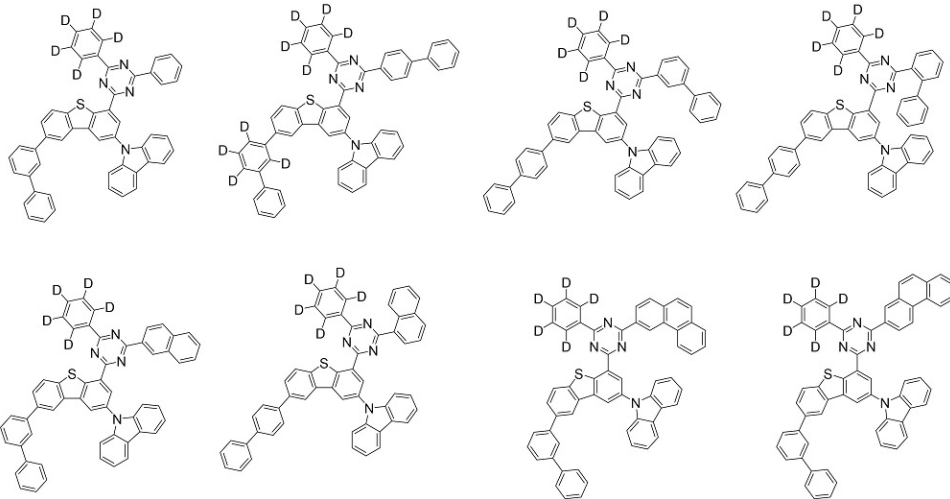
【化 5 1】



10

20

【化 5 2】

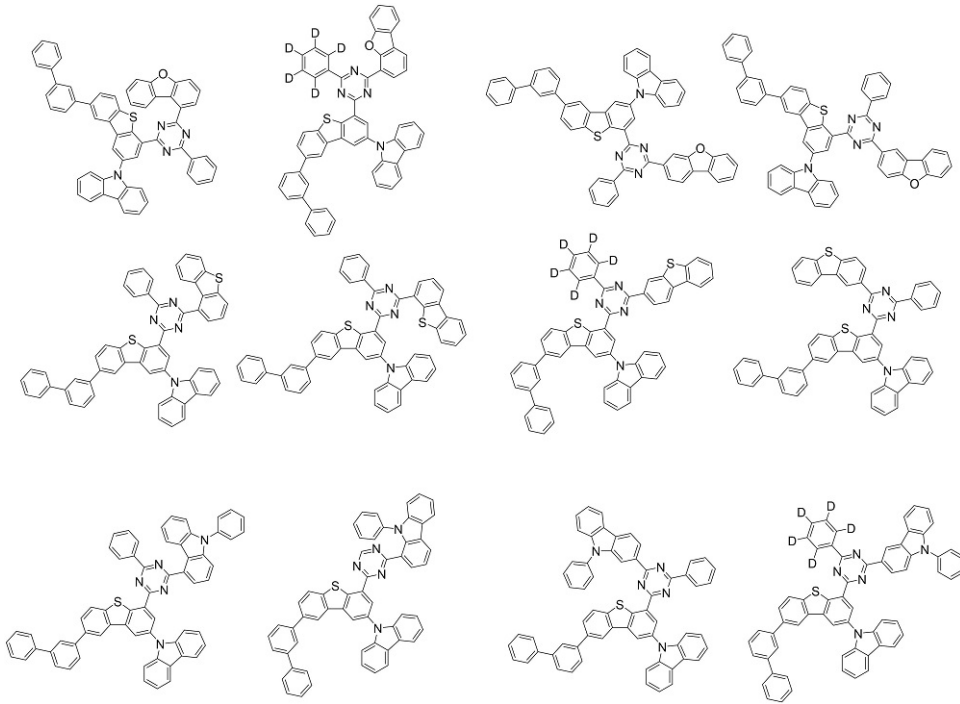


30

40

50

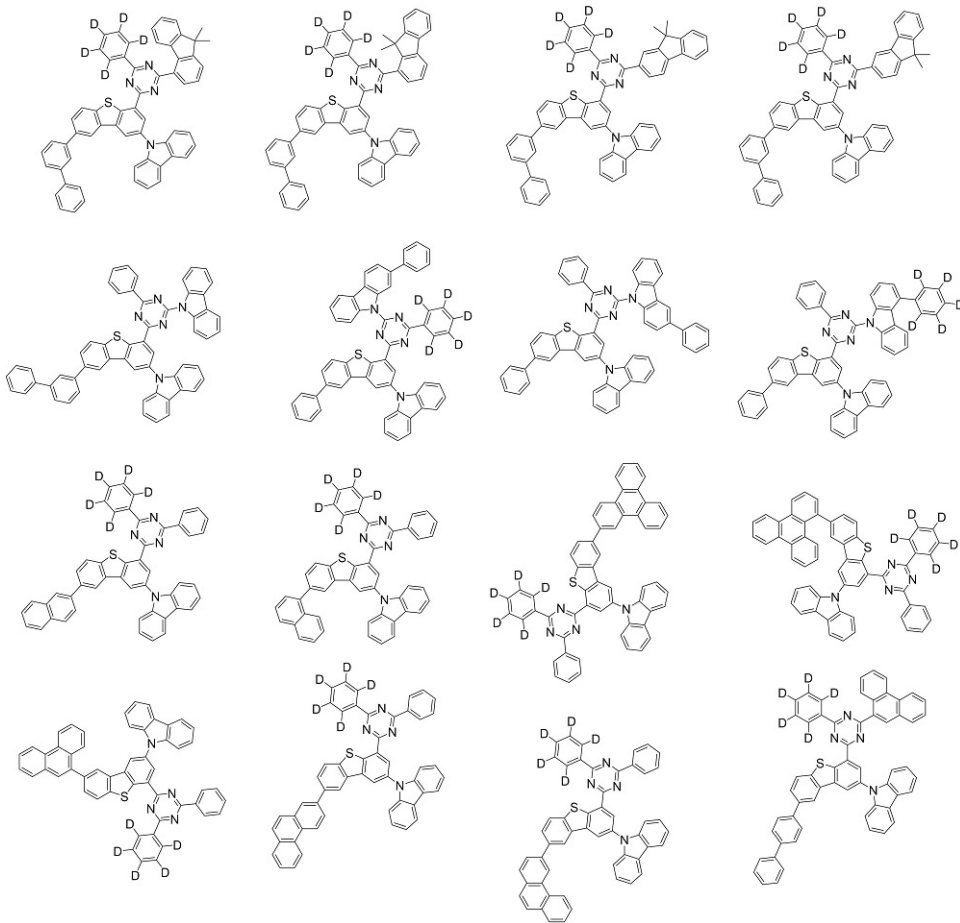
【化 5 3】



10

20

【化 5 4】

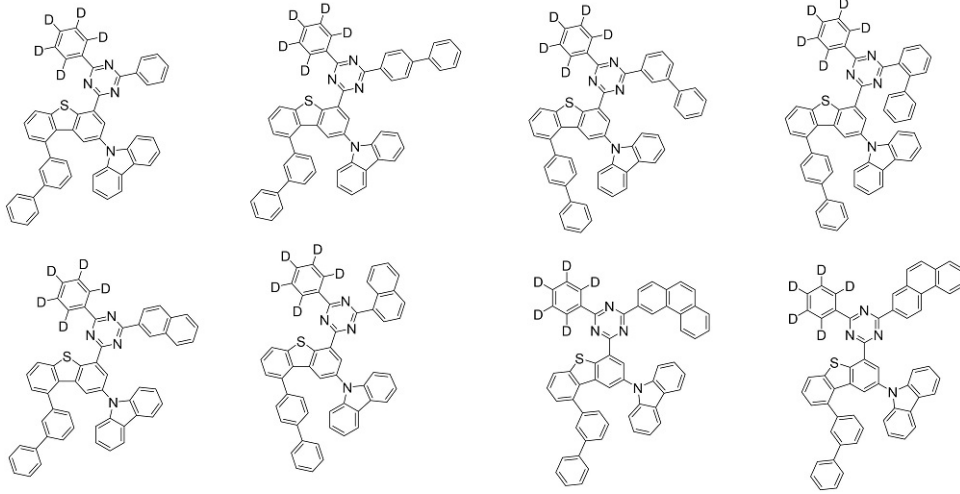


30

40

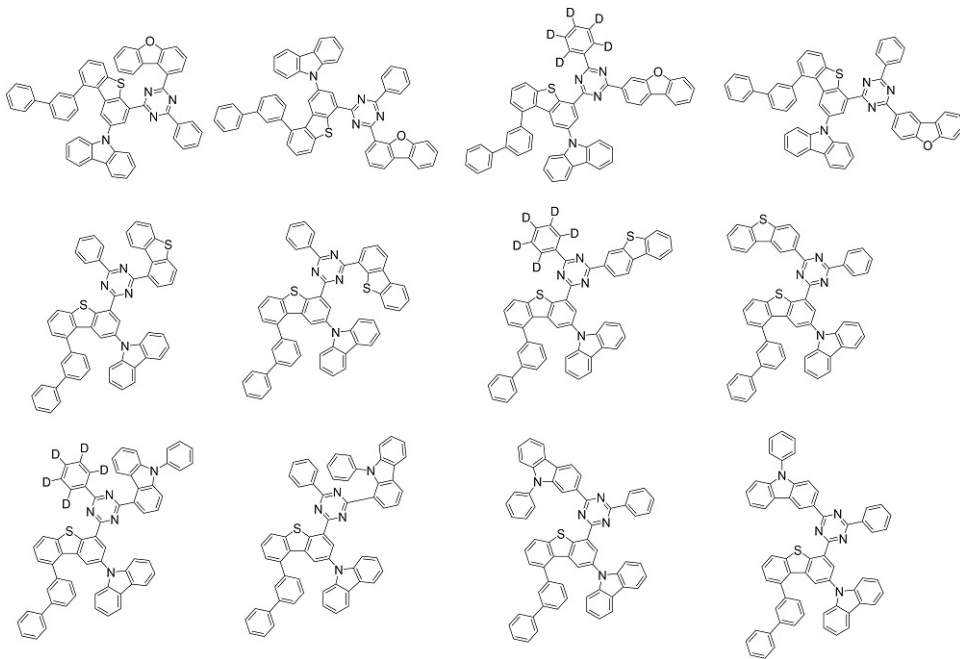
50

【化 5 5】



10

【化 5 6】



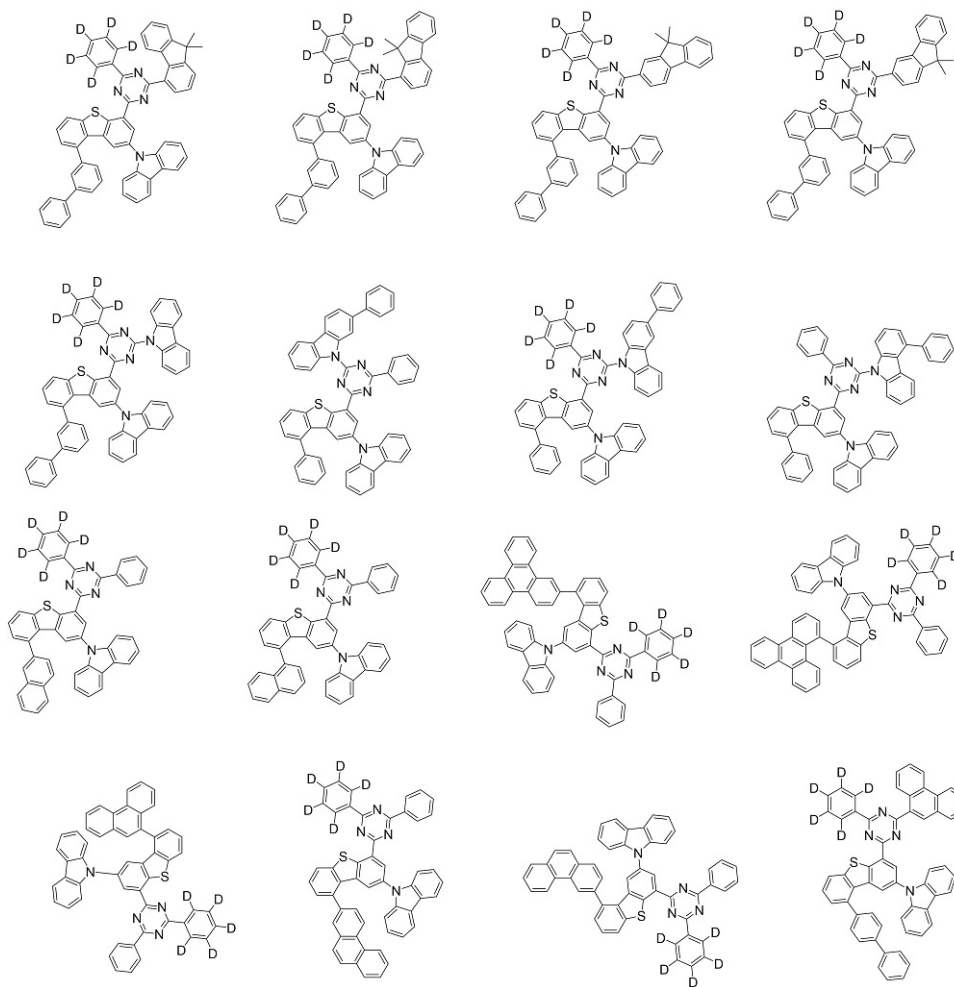
20

30

40

50

【化 5 7】



10

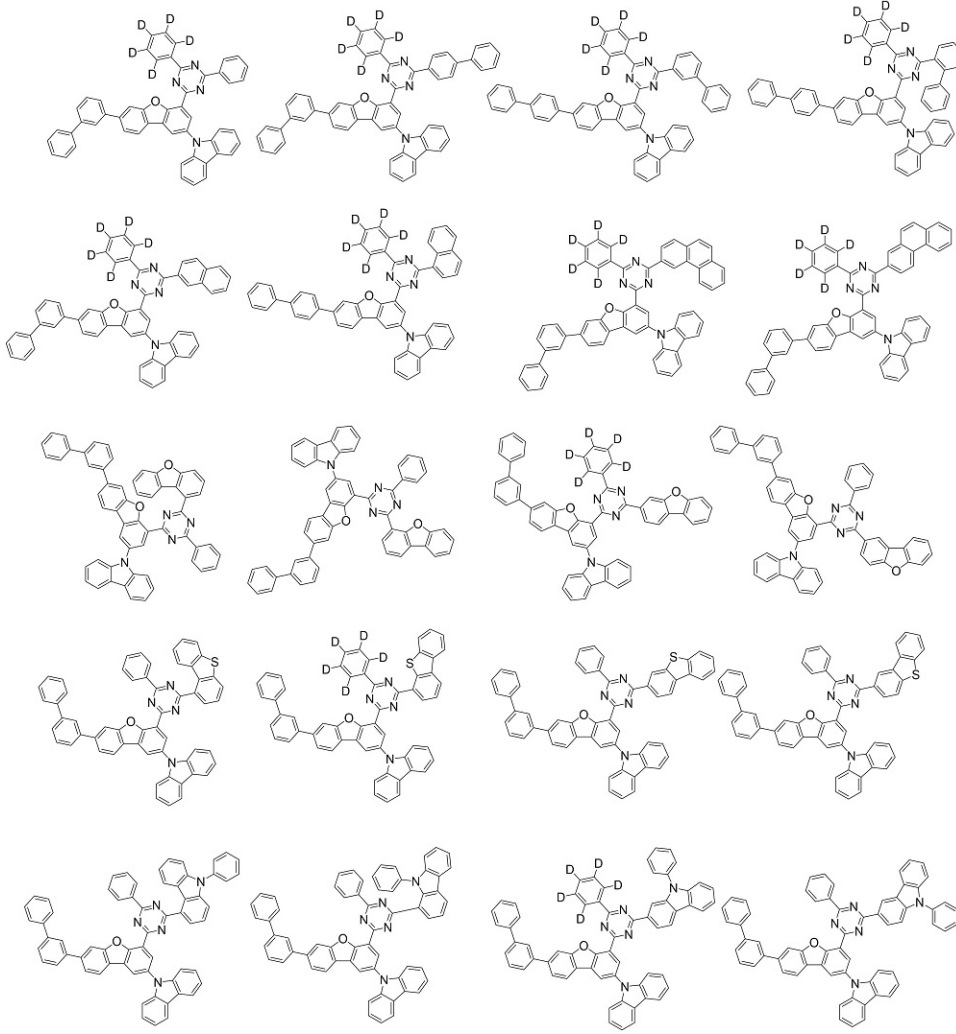
20

30

40

50

【化 5 8】



10

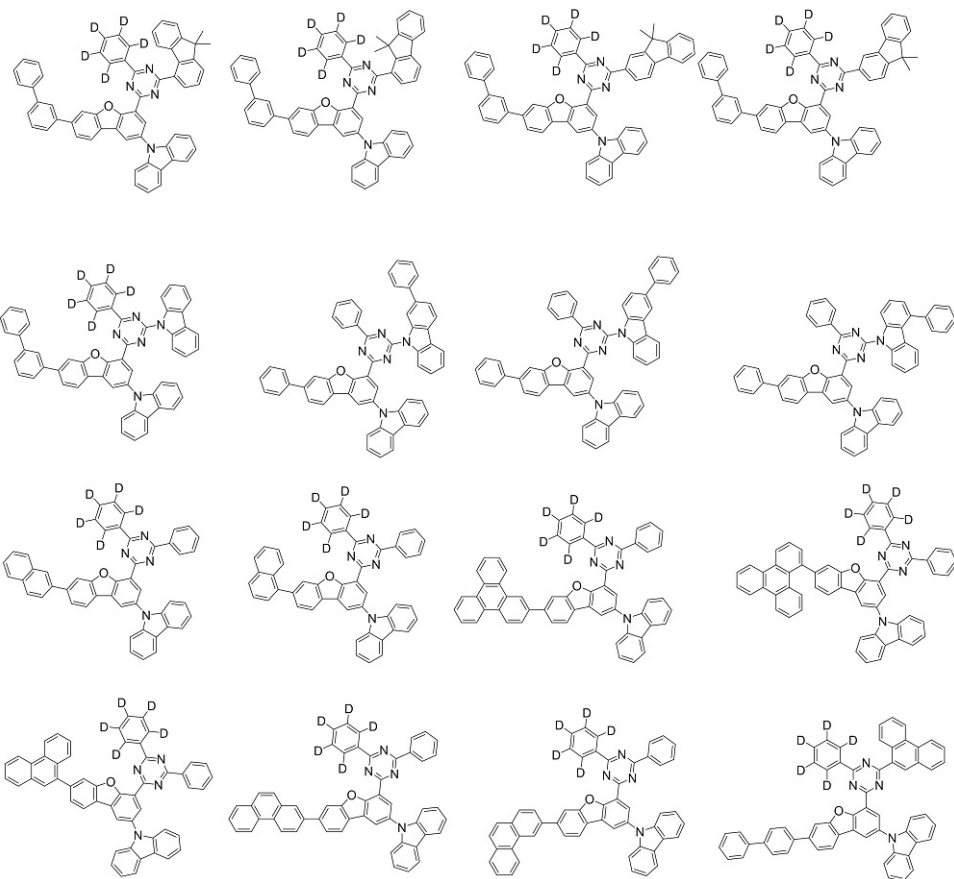
20

30

40

50

【化 5 9】



10

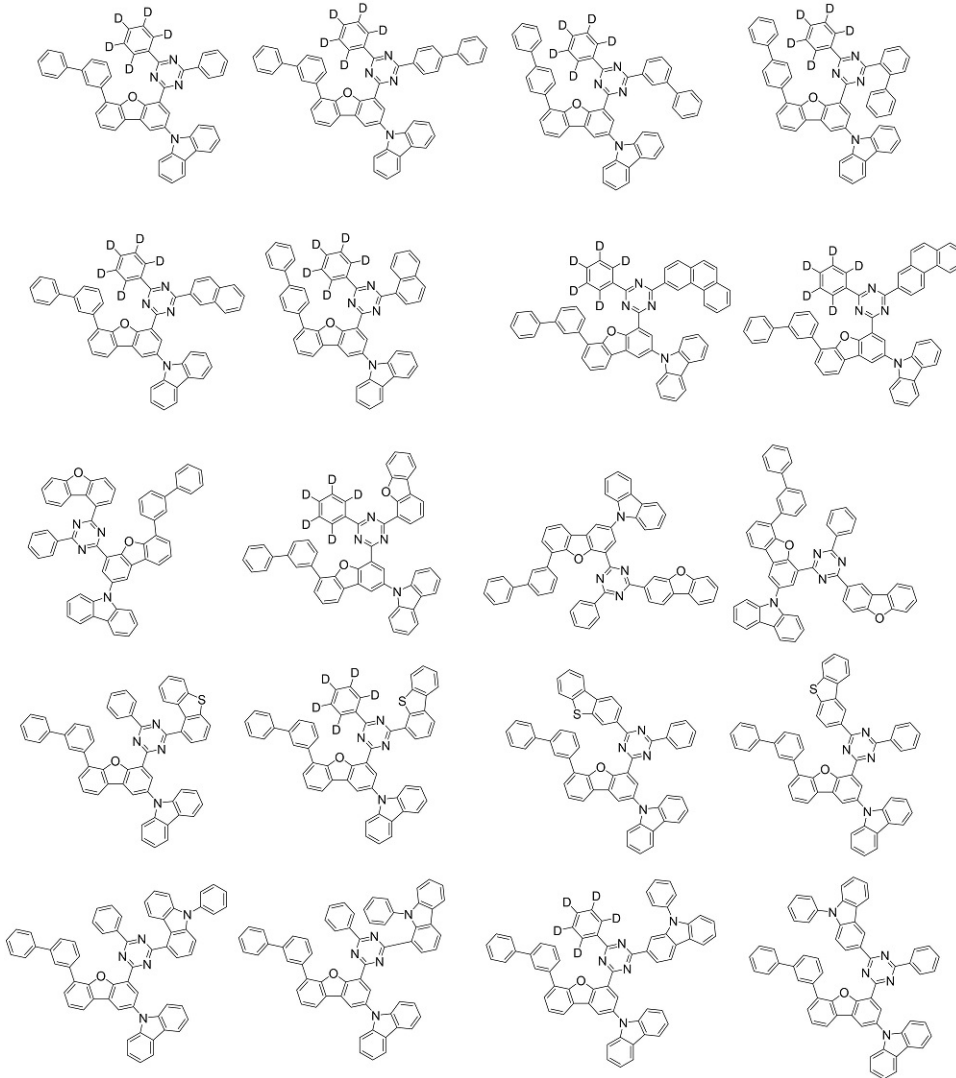
20

30

40

50

【化 6 0】



10

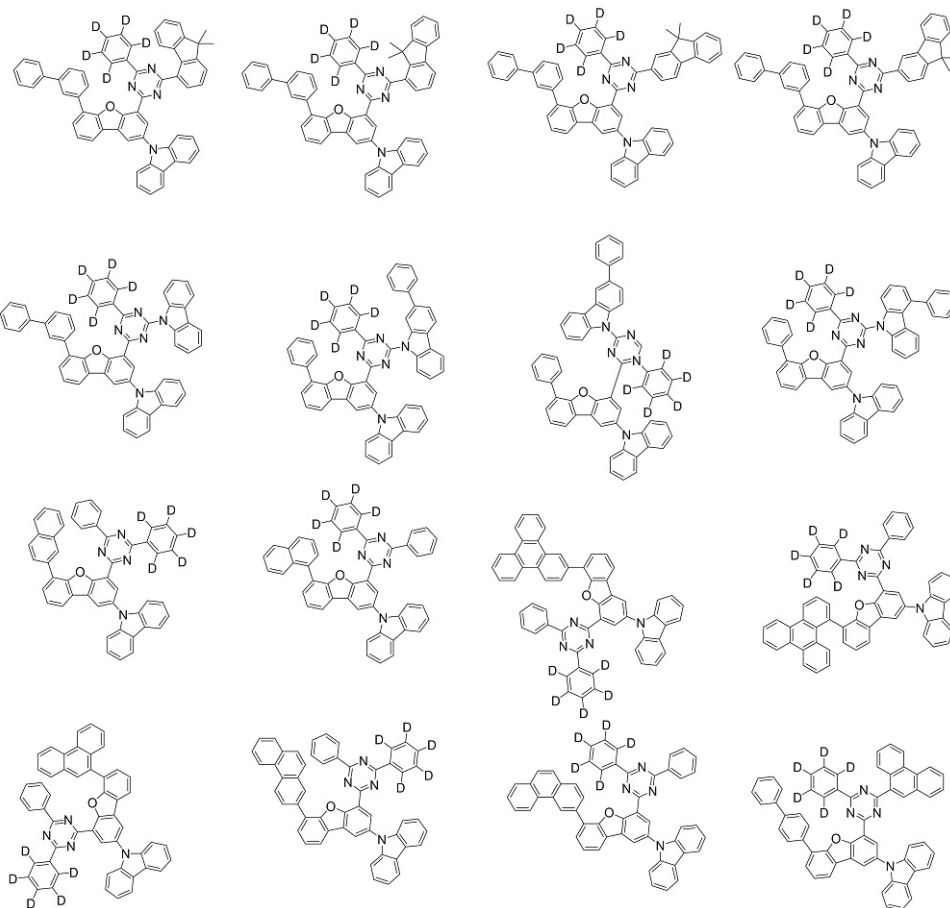
20

30

40

50

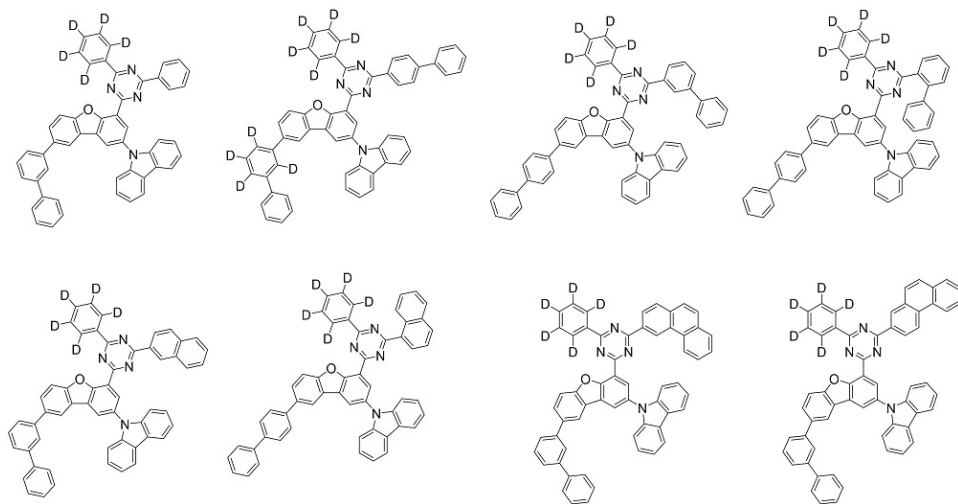
【化 6 1】



10

20

【化 6 2】

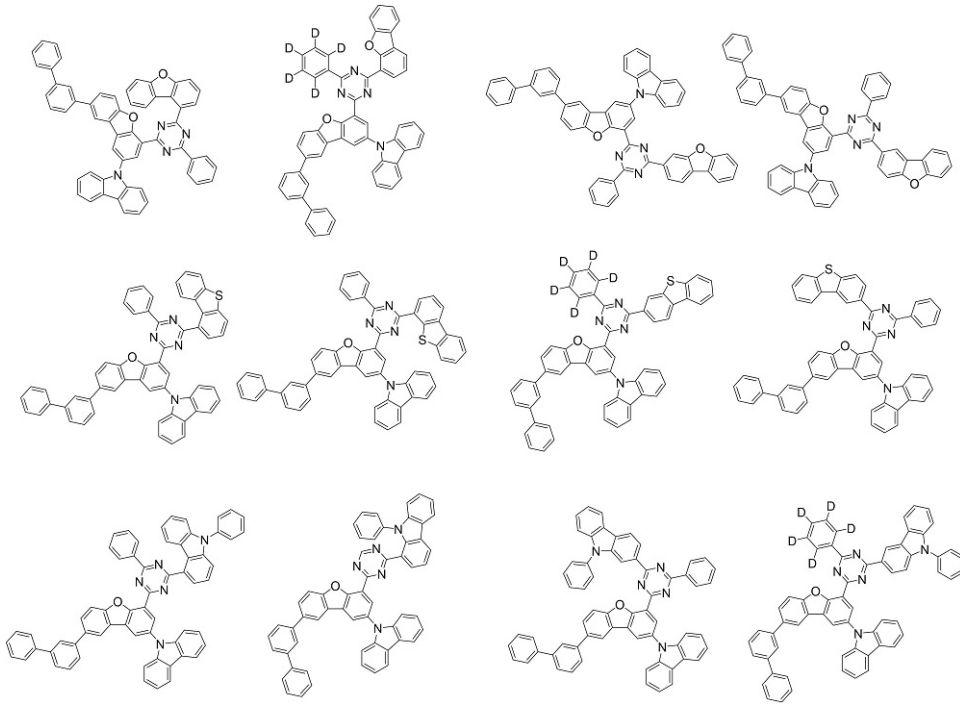


30

40

50

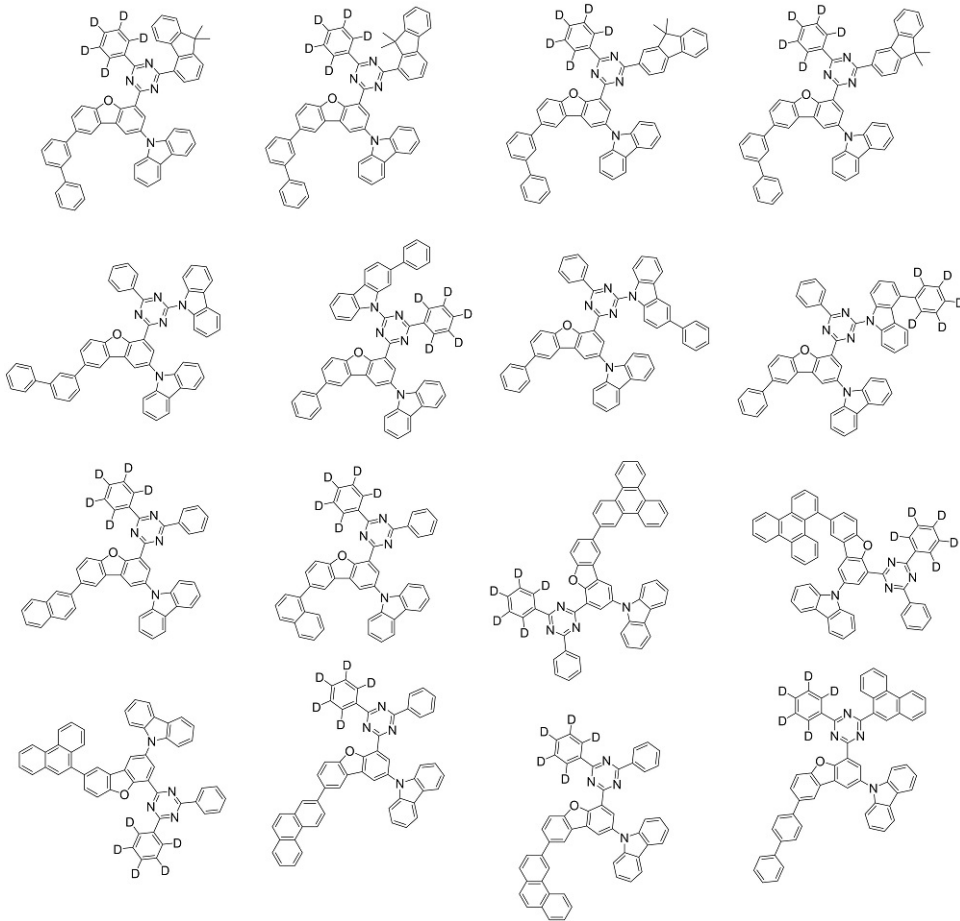
【化 6 3】



10

20

【化 6 4】

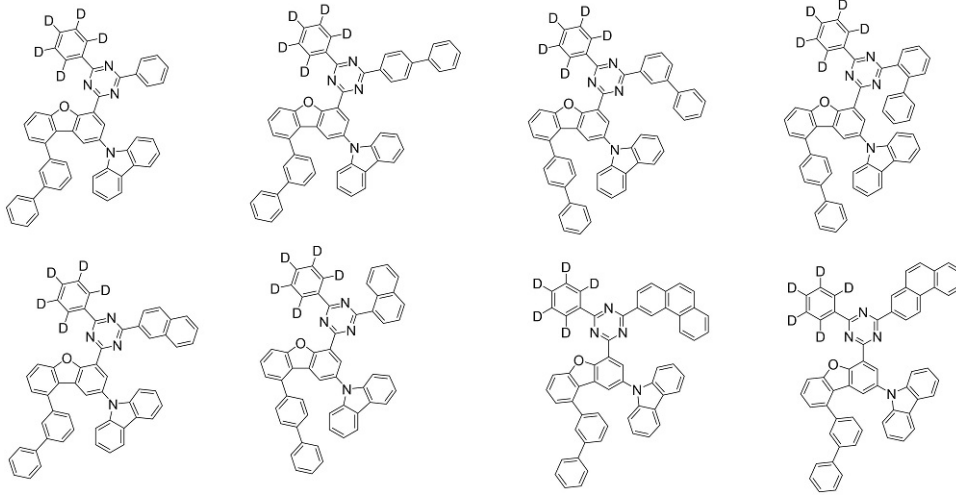


30

40

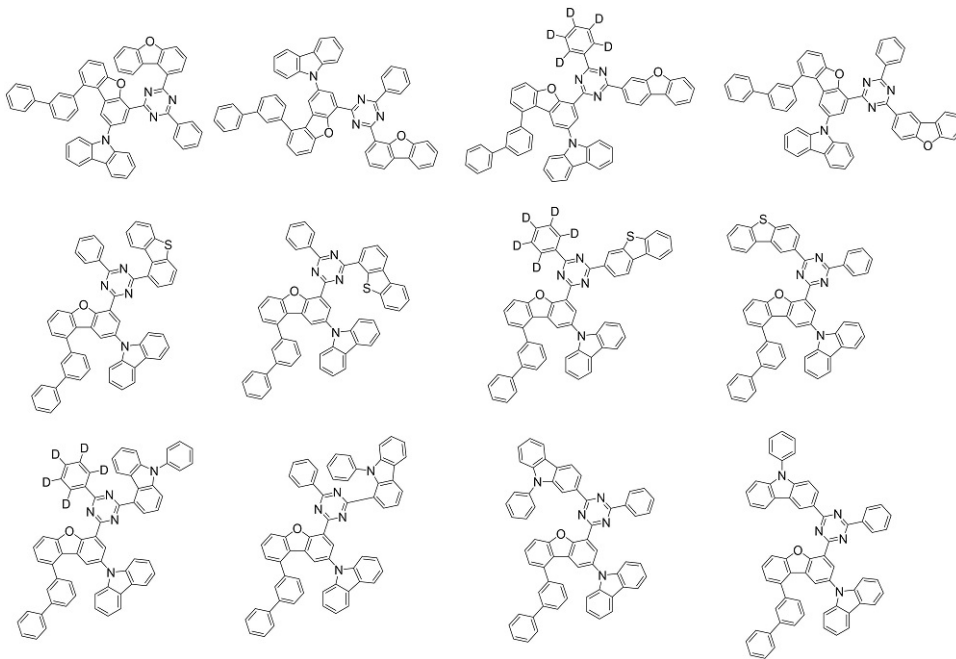
50

【化 6 5】



10

【化 6 6】



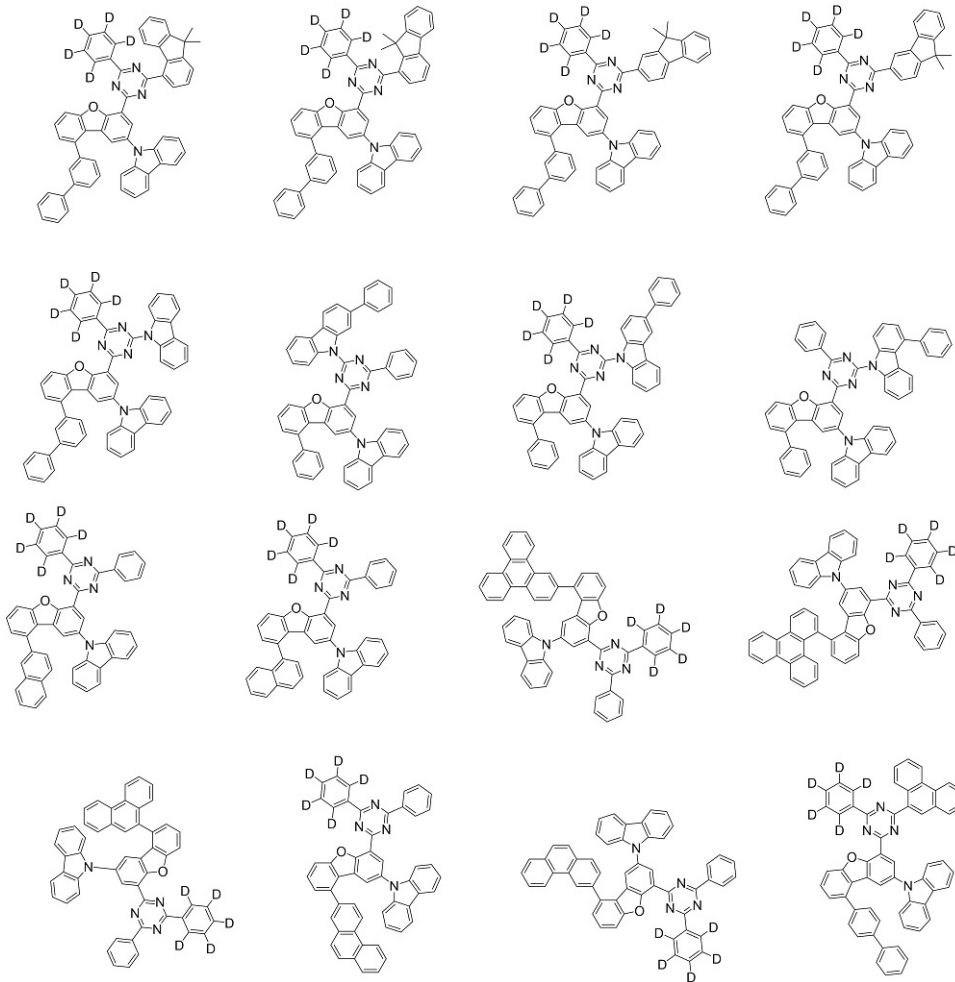
20

30

40

50

## 【化 6 7】



10

20

## 【請求項 9】

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 ~ 8 のいずれか 1 項に記載の化合物を含む

ものである、

有機発光素子。

## 【発明の詳細な説明】

## 【技術分野】

## 【0001】

[関連出願の相互参照]

## 【0002】

本出願は、2018年9月21日付の韓国特許出願第10-2018-0114411号および2019年9月19日付の韓国特許出願第10-2019-0115650号に基づく優先権の利益を主張し、当該韓国特許出願の文献に開示された全ての内容は本明細書の一部として含まれる。

## 【0003】

本発明は、新規なヘテロ環化合物およびこれを含む有機発光素子に関する。

## 【背景技術】

## 【0004】

一般的に、有機発光現象とは、有機物質を利用して電気エネルギーを光エネルギーに転

30

40

50

換させる現象をいう。有機発光現象を利用する有機発光素子は、広い視野角、優れたコントラスト、速い応答時間を有し、輝度、駆動電圧および応答速度特性に優れて多くの研究が進められている。

【 0 0 0 5 】

有機発光素子は、一般的に正極と負極および前記正極と負極との間に有機物層を含む構造を有する。前記有機物層は、有機発光素子の効率と安全性を高めるために、それぞれ異なる物質から構成された多層の構造からなる場合が多く、例えば、正孔注入層、正孔輸送層、発光層、電子輸送層、電子注入層などからなる。このような有機発光素子の構造において、2つの電極の間に電圧をかけると、正極からは正孔が、負極からは電子が有機物層に注入され、注入された正孔と電子が接した時、エキシトン ( e x c i t o n ) が形成され、このエキシトンが再び底状態に落ちる時、光が出るようになる。

10

【 0 0 0 6 】

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

【先行技術文献】

【特許文献】

【 0 0 0 7 】

【文献】韓国特許公開第 1 0 - 2 0 1 3 - 0 7 3 5 3 7 号

【発明の概要】

【発明が解決しようとする課題】

20

【 0 0 0 8 】

本発明は、新規なヘテロ環化合物およびこれを含む有機発光素子に関する。

【課題を解決するための手段】

【 0 0 0 9 】

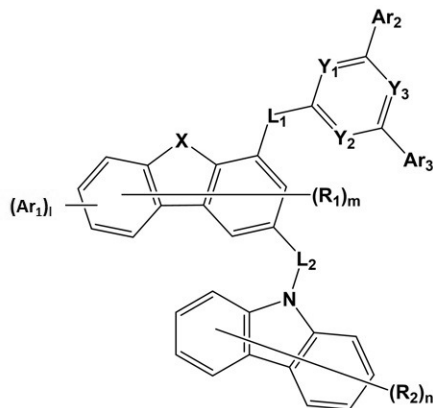
本発明は、下記化学式 1 で表される化合物を提供する：

【 0 0 1 0 】

[ 化学式 1 ]

【 0 0 1 1 】

【化 1】



30

【 0 0 1 2 】

上記化学式 1 中、

X は、O または S であり、

Y<sub>1</sub>、Y<sub>2</sub> および Y<sub>3</sub> はそれぞれ独立して、CH；または N であり、ただし、Y<sub>1</sub>、Y<sub>2</sub> および Y<sub>3</sub> のうちの二つ以上が N であり、

L<sub>1</sub> および L<sub>2</sub> はそれぞれ独立して、直接結合；置換または非置換の炭素数 6 ~ 60 のアリーレン；または N、O および S で構成される群から選択される一つ以上のヘテロ原子を含む置換または非置換の炭素数 5 ~ 60 のヘテロアリーレンであり、

Ar<sub>1</sub> は、置換または非置換の炭素数 6 ~ 60 のアリールであり、

50

$A r_2$  および  $A r_3$  はそれぞれ独立して、置換または非置換の炭素数 6 ~ 60 のアリー  
ル；または N、O および S で構成される群から選択される一つ以上のヘテロ原子を含む置  
換または非置換の炭素数 5 ~ 60 のヘテロアリールであり、

ただし、 $A r_1$ 、 $A r_2$  および  $A r_3$  の全てが置換または非置換の炭素数 6 ~ 60 のアリ  
ールの場合、 $A r_1$ 、 $A r_2$  および  $A r_3$  のうちのいずれか一つは重水素で 4 以上置換され

、  
 $R_1$  はそれぞれ独立して、水素；重水素；ハロゲン；または置換または非置換の炭素数  
1 ~ 60 のアルキルであり、

$R_2$  はそれぞれ独立して、水素；重水素；ハロゲン；シアノ；置換または非置換の炭素  
数 1 ~ 60 のアルキル；置換または非置換の炭素数 1 ~ 60 のアルコキシ；置換または非  
置換の炭素数 3 ~ 60 のシクロアルキル；置換または非置換の炭素数 1 ~ 60 のハロアル  
キル；置換または非置換の炭素数 1 ~ 60 のハロアルコキシ；置換または非置換の炭素数  
6 ~ 60 のアリールアミン；置換または非置換の炭素数 1 ~ 60 のアルキルアミン；炭素  
数 1 ~ 60 のトリフルオロアルキル；炭素数 1 ~ 60 のトリフルオロアルコキシ；置換ま  
たは非置換の炭素数 6 ~ 60 のアリール；または N、O および S のうちの 1 個以上を含む  
置換または非置換の炭素数 5 ~ 60 のヘテロアリールであり、これらはカルバゾールの炭  
素原子と結合して縮合環を形成することができ、

$m$  は 0 ~ 3 の整数であり、

$n$  は 0 ~ 6 の整数であり

$l$  は 1 または 2 である。

【0013】

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

【発明の効果】

【0014】

上記化学式 1 で表される化合物は、有機発光素子の有機物層の材料として用いられ、有  
機発光素子において効率の向上、低い駆動電圧および / または寿命特性を向上させること  
ができる。特に、上記化学式 1 で表される化合物は、正孔注入、正孔輸送、正孔注入およ  
び輸送、発光、電子輸送、または電子注入材料として使用できる。

【図面の簡単な説明】

【0015】

【図 1】基板 1、正極 2、発光層 3、負極 4 からなる有機発光素子の例を示すものである。

【図 2】基板 1、正極 2、正孔注入層 5、正孔輸送層 6、発光層 7、電子輸送層 8 および  
負極 4 からなる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】

【0016】

以下、本発明の理解を助けるためにより詳しく説明する。

【0017】

本発明は、下記化学式 1 で表される化合物を提供する。

【0018】

[化学式 1]

10

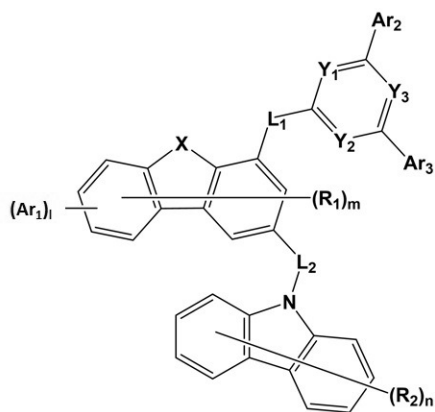
20

30

40

50

## 【化2】



10

## 【0019】

上記化学式1中、

Xは、OまたはSであり、

Y<sub>1</sub>、Y<sub>2</sub>およびY<sub>3</sub>はそれぞれ独立して、CH；またはNであり、ただし、Y<sub>1</sub>、Y<sub>2</sub>およびY<sub>3</sub>のうちの一つ以上がNであり、

L<sub>1</sub>およびL<sub>2</sub>はそれぞれ独立して、直接結合；置換または非置換の炭素数6～60のアリーレン；またはN、OおよびSで構成される群から選択される一つ以上のヘテロ原子を含む置換または非置換の炭素数5～60のヘテロアリーレンであり、

20

Ar<sub>1</sub>は、置換または非置換の炭素数6～60のアリールであり、

Ar<sub>2</sub>およびAr<sub>3</sub>はそれぞれ独立して、置換または非置換の炭素数6～60のアリール；またはN、OおよびSで構成される群から選択される一つ以上のヘテロ原子を含む置換または非置換の炭素数5～60のヘテロアリールであり、

ただし、Ar<sub>1</sub>、Ar<sub>2</sub>およびAr<sub>3</sub>の全てが置換または非置換の炭素数6～60のアリールの場合、Ar<sub>1</sub>、Ar<sub>2</sub>およびAr<sub>3</sub>のうちいずれか一つは重水素で4以上置換され、ここで、Ar<sub>1</sub>、Ar<sub>2</sub>およびAr<sub>3</sub>の全てが置換または非置換の炭素数6～60のアリールの場合、これらが同一または異なる置換または非置換の炭素数6～60のアリールである場合を意味する。

30

## 【0020】

R<sub>1</sub>はそれぞれ独立して、水素；重水素；ハロゲン；または置換または非置換の炭素数1～60のアルキルであり、

R<sub>2</sub>はそれぞれ独立して、水素；重水素；ハロゲン；シアノ；置換または非置換の炭素数1～60のアルキル；置換または非置換の炭素数1～60のアルコキシ；置換または非置換の炭素数3～60のシクロアルキル；置換または非置換の炭素数1～60のハロアルキル；置換または非置換の炭素数1～60のハロアルコキシ；置換または非置換の炭素数6～60のアリールアミン；置換または非置換の炭素数1～60のアルキルアミン；炭素数1～60のトリフルオロアルキル；炭素数1～60のトリフルオロアルコキシ；置換または非置換の炭素数6～60のアリール；またはN、OおよびSのうち1個以上を含む置換または非置換の炭素数5～60のヘテロアリールであり、これらはカルバゾールの炭素原子と結合して縮合環を形成することができ、

40

mは0～3の整数であり、

nは0～6の整数であり

lは1または2である。

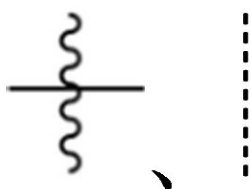
## 【0021】

上記中のAr<sub>1</sub>、Ar<sub>2</sub>およびAr<sub>3</sub>が置換または非置換の炭素数6～60のアリールである場合はAr<sub>1</sub>、Ar<sub>2</sub>およびAr<sub>3</sub>の全てが、同一または異なる置換または非置換の炭素数6～60のアリールである場合を意味する。

## 【0022】

50

本明細書において、  
【化 3】



は、他の置換基に連結される結合を意味する。

10

【0023】

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

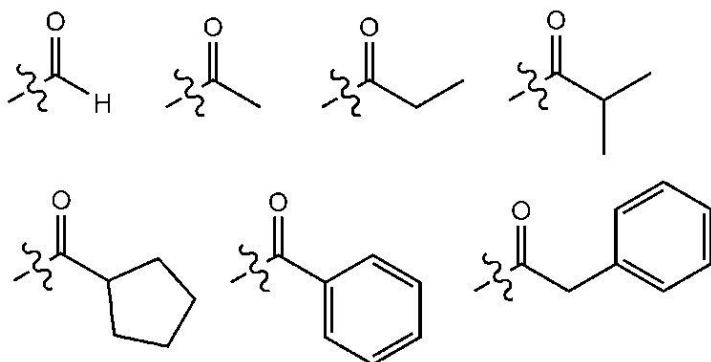
20

【0024】

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

【0025】

【化 4】



30

【0026】

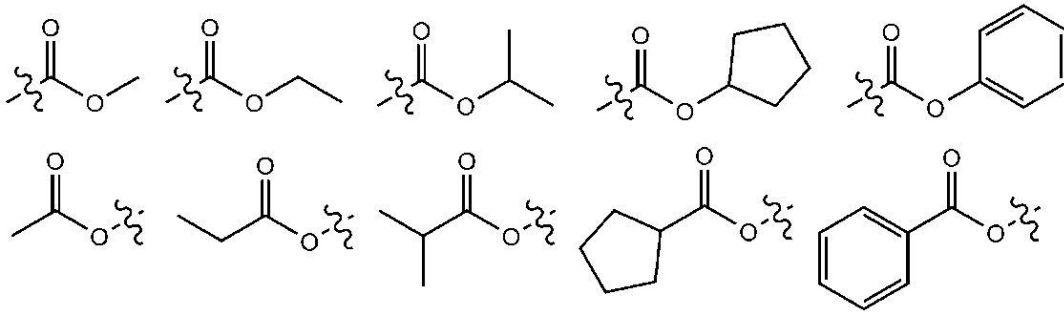
本明細書において、エステル基は、エステル基の酸素が、炭素数1～25の直鎖、分枝鎖もしくは環鎖アルキル基、または炭素数6～25のアリール基で置換されていてもよい。具体的には、下記構造式の化合物であってもよいが、これに限定されるものではない。

40

【0027】

50

## 【化5】



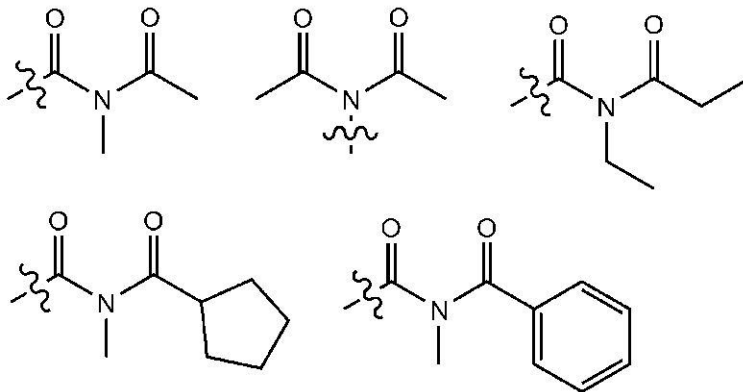
10

## 【0028】

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

## 【0029】

## 【化6】



20

## 【0030】

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

30

## 【0031】

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

## 【0032】

本明細書において、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。

## 【0033】

本明細書において、前記アルキル基は、直鎖もしくは分枝鎖であってもよく、炭素数は特に限定されないが、1～40であることが好ましい。一実施形態によれば、前記アルキル基の炭素数は1～20である。また一つの実施形態によれば、前記アルキル基の炭素数は1～10である。また一つの実施形態によれば、前記アルキル基の炭素数は1～6である。アルキル基の具体的な例としては、メチル、エチル、プロピル、*n*-プロピル、イソプロピル、ブチル、*n*-ブチル、イソブチル、*tert*-ブチル、*sec*-ブチル、1-メチルブチル、1-エチルブチル、ペンチル、*n*-ペンチル、イソペンチル、ネオペンチル、*tert*-ペンチル、ヘキシル、*n*-ヘキシル、1-メチルペンチル、2-メチルペンチル、4-メチル-2-ペンチル、3,3-ジメチルブチル、2-エチルブチル、ヘプチル、*n*-ヘプチル、1-メチルヘキシル、シクロペンチルメチル、シクロヘキシルメチ

40

50

ル、オクチル、*n*-オクチル、*tert*-オクチル、1-メチルヘプチル、2-エチルヘキシル、2-プロピルペンチル、*n*-ノニル、2,2-ジメチルヘプチル、1-エチルプロピル、1,1-ジメチルプロピル、イソヘキシル、2-メチルペンチル、4-メチルヘキシル、5-メチルヘキシルなどがあるが、これらに限定されるものではない。

【0034】

本明細書において、前記アルケニル基は、直鎖もしくは分枝鎖であってもよく、炭素数は特に限定されないが、2~40であることが好ましい。一実施形態によれば、前記アルケニル基の炭素数は2~20である。また一つの実施形態によれば、前記アルケニル基の炭素数は2~10である。また一つの実施形態によれば、前記アルケニル基の炭素数は2~6である。具体的な例としては、ビニル、1-プロペニル、イソプロペニル、1-ブテニル、2-ブテニル、3-ブテニル、1-ペンテニル、2-ペンテニル、3-ペンテニル、3-メチル-1-ブテニル、1,3-ブタジエニル、アリル、1-フェニルビニル-1-イル、2-フェニルビニル-1-イル、2,2-ジフェニルビニル-1-イル、2-フェニル-2-(ナフチル-1-イル)ビニル-1-イル、2,2-ビス(ジフェニル-1-イル)ビニル-1-イル、スチルベニル基、スチレニル基などがあるが、これらに限定されるものではない。

10

【0035】

本明細書において、シクロアルキル基は特に限定されないが、炭素数3~60であることが好ましく、一実施形態によれば、前記シクロアルキル基の炭素数は3~30である。また一つの実施形態によれば、前記シクロアルキル基の炭素数は3~20である。また一つの実施形態によれば、前記シクロアルキル基の炭素数は3~6である。具体的には、シクロプロピル、シクロブチル、シクロペンチル、3-メチルシクロペンチル、2,3-ジメチルシクロペンチル、シクロヘキシル、3-メチルシクロヘキシル、4-メチルシクロヘキシル、2,3-ジメチルシクロヘキシル、3,4,5-トリメチルシクロヘキシル、4-*tert*-ブチルシクロヘキシル、シクロヘプチル、シクロオクチルなどがあるが、これらに限定されるものではない。

20

【0036】

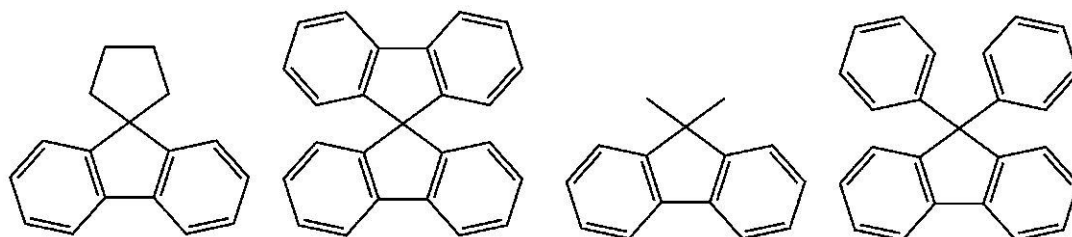
本明細書において、アリール基は特に限定されないが、炭素数6~60であることが好ましく、単環式アリール基または多環式アリール基であってもよい。一実施形態によれば、前記アリール基の炭素数は6~30である。一実施形態によれば、前記アリール基の炭素数は6~20である。前記単環式アリール基としては、フェニル基、ピフェニル基、ターフェニル基などであってもよいが、これらに限定されるものではない。前記多環式アリール基としては、ナフチル基、アントラセニル基、フェナントリル基、ピレニル基、ペリレニル基、クリセニル基、フルオレニル基などであってもよいが、これらに限定されるものではない。

30

【0037】

本明細書において、フルオレニル基は置換されていてよく、置換基2個が互いに結合してスピロ構造を形成してもよい。前記フルオレニル基が置換される場合、

【化7】



40

などであってもよい。ただし、これらに限定されるものではない。

【0038】

本明細書において、ヘテロ環基は、異種元素としてO、N、SiおよびSのうちの1個以上を含むヘテロ環基であって、炭素数は特に限定されないが、炭素数2~60であるこ

50

とが好ましい。ヘテロ環基の例としては、チオフエン基、フラニル基、ピロール基、イミダゾール基、チアゾール基、オキサゾール基、オキサジアゾール基、トリアゾール基、ピリジル基、ビピリジル基、ピリミジル基、トリアジニル基、アクリジニル基、ピリダジニル基、ピラジニル基、キノリニル基、キナゾリニル基、キノキサリニル基、フタラジニル基、ピリドピリミジニル基、ピリドピラジニル基、ピラジノピラジニル基、イソキノリル基、インドール基、カルバゾール基、ベンゾオキサゾール基、ベンゾイミダゾール基、ベンゾチアゾール基、ベンゾカルバゾール基、ベンゾチオフエン基、ジベンゾチオフエン基、ベンゾフラニル基、フェナントロリン基 (phenanthroline)、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、およびジベンゾフラニル基などがあるが、これらにのみ限定されるものではない。

10

## 【0039】

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

20

## 【0040】

好ましくは、上記化学式 1 で表される化合物は、下記化学式 2 ~ 8 で表される化合物の中から選択されるいずれか一つであり得る：

## 【0041】

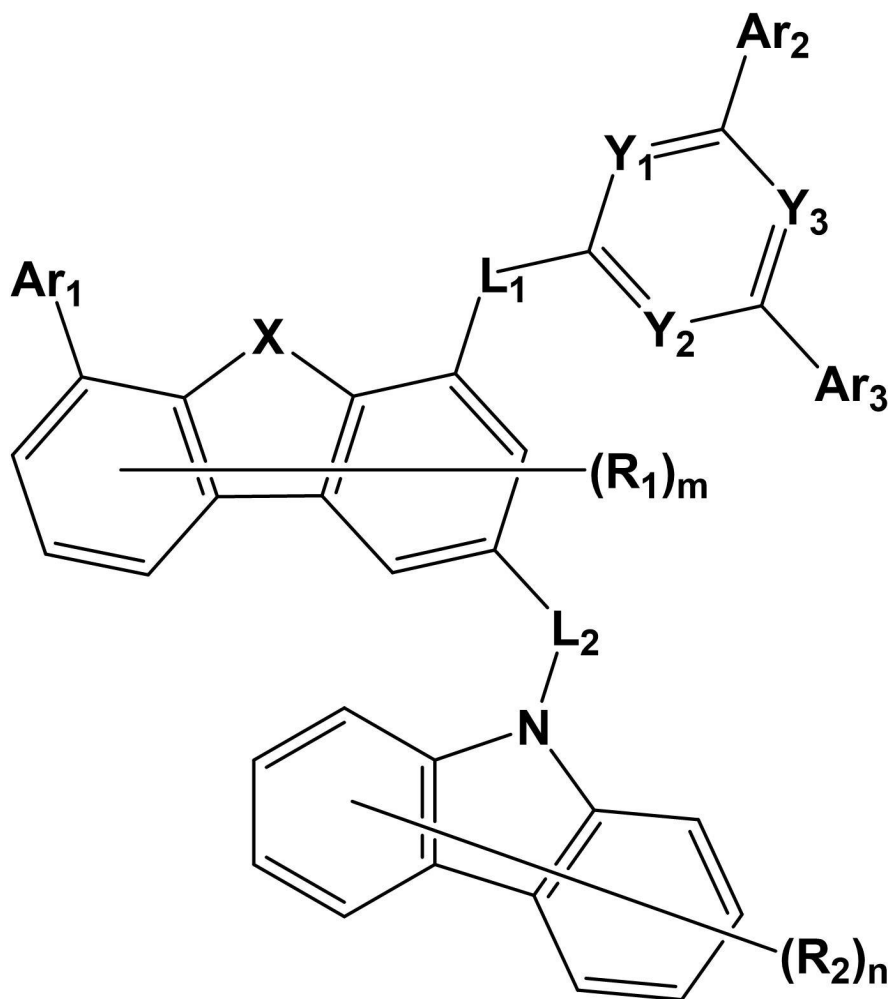
[ 化学式 2 ]

30

40

50

【化 8】



10

20

【 0 0 4 2 】

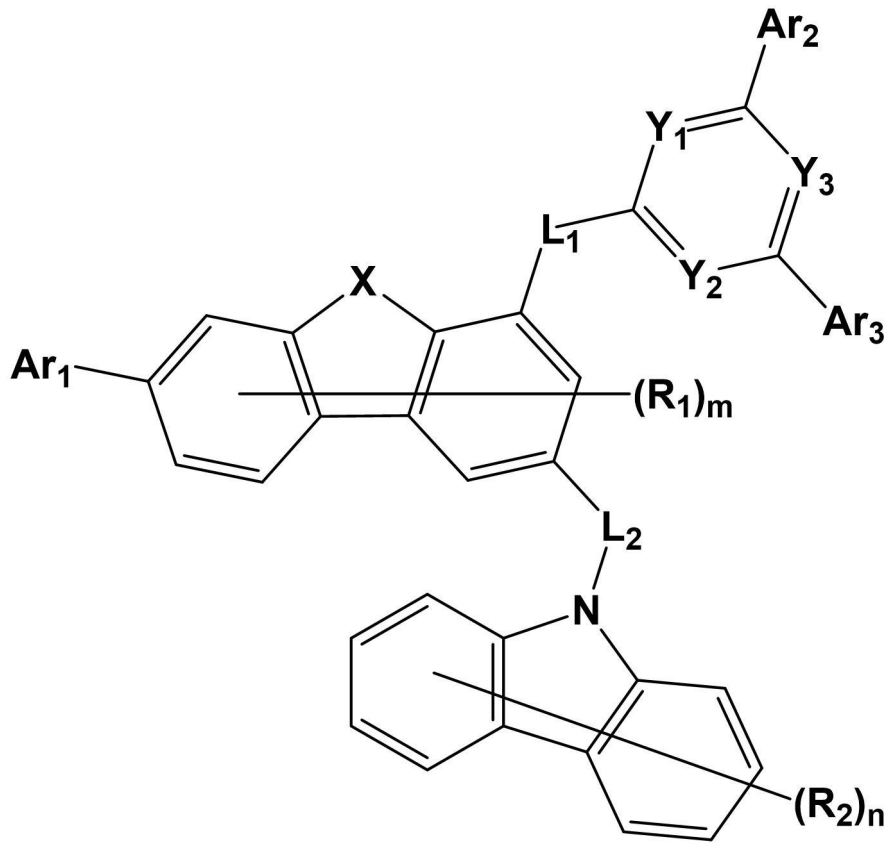
[ 化学式 3 ]

30

40

50

【化 9】



10

20

【 0 0 4 3】

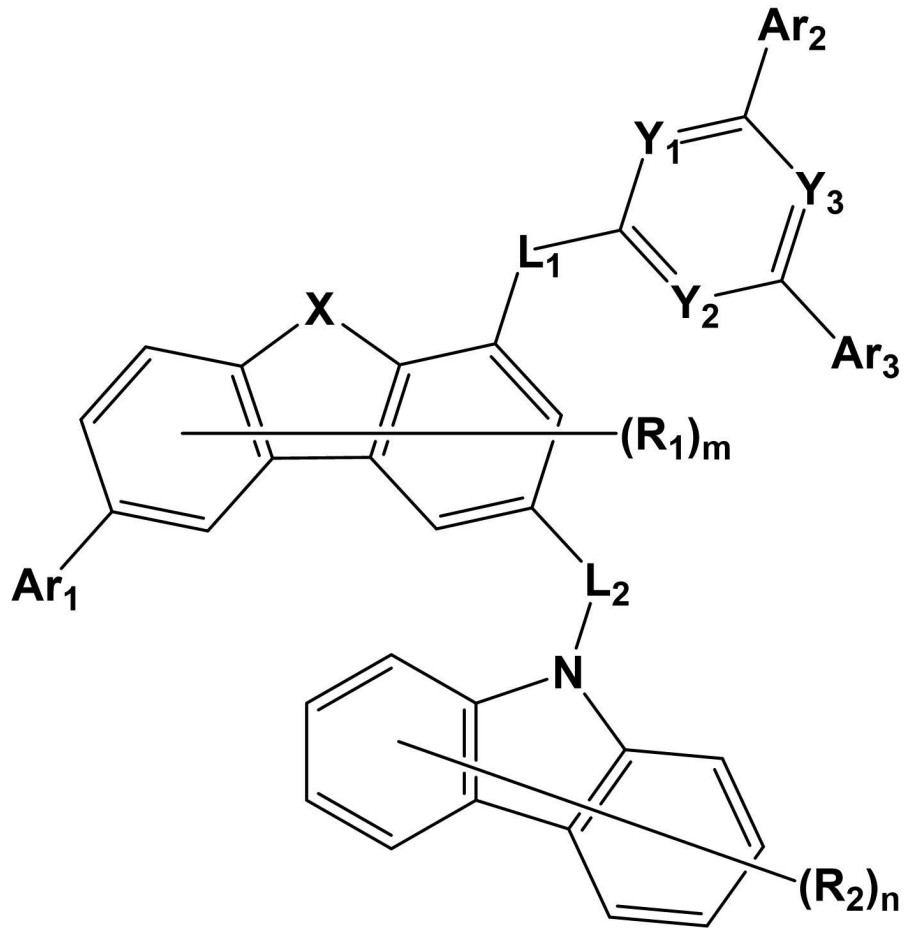
[ 化学式 4 ]

30

40

50

【化 1 0】

【 0 0 4 4 】  
[ 化学式 5 ]

10

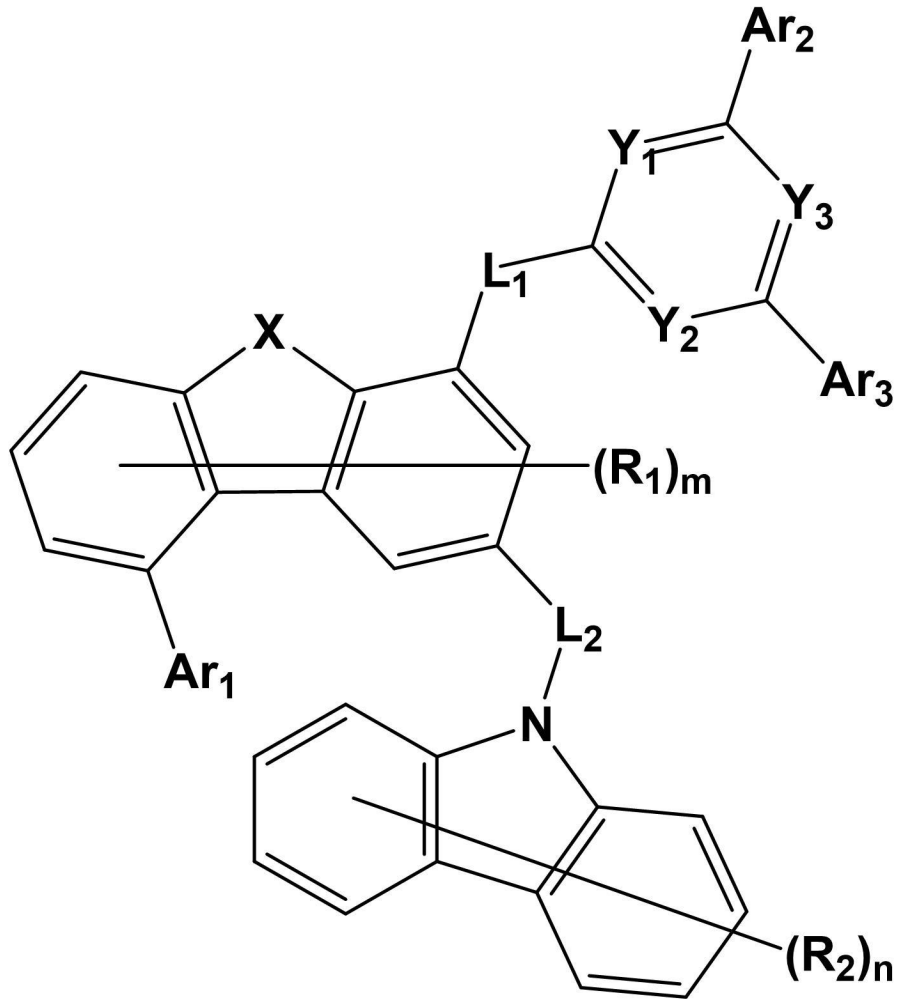
20

30

40

50

【化 1 1】



10

20

【 0 0 4 5】

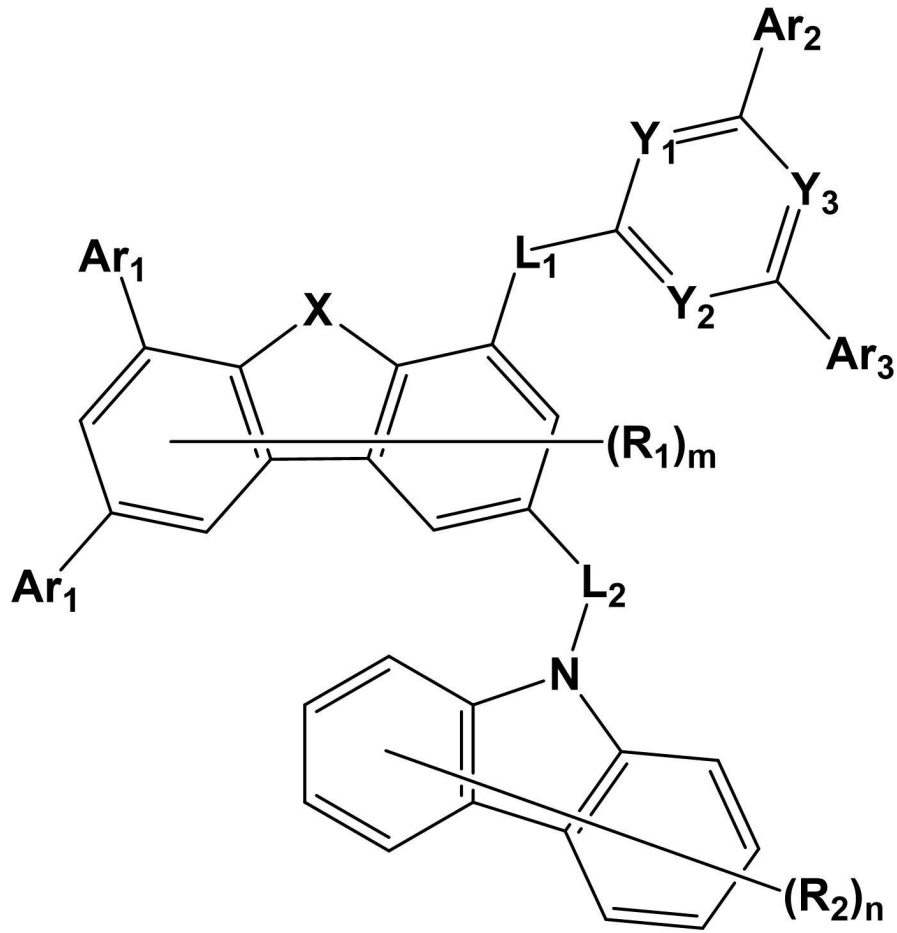
[ 化学式 6 ]

30

40

50

【化 1 2】



10

20

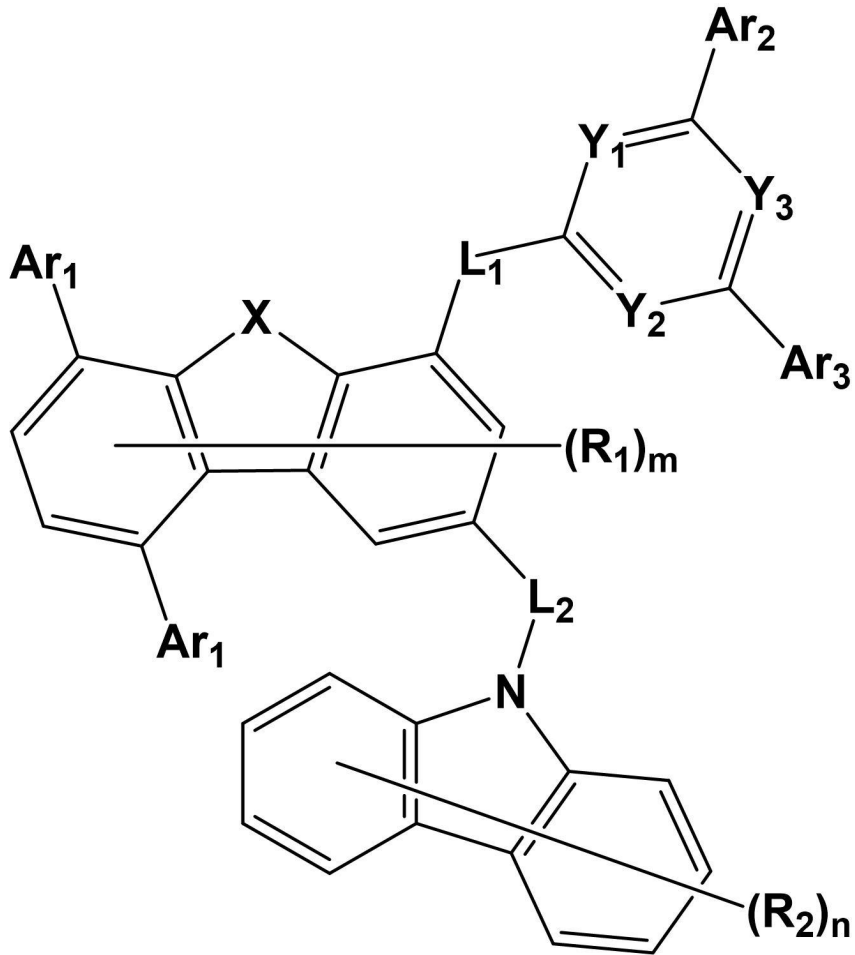
【 0 0 4 6 】  
[ 化学式 7 ]

30

40

50

【化 1 3】



10

20

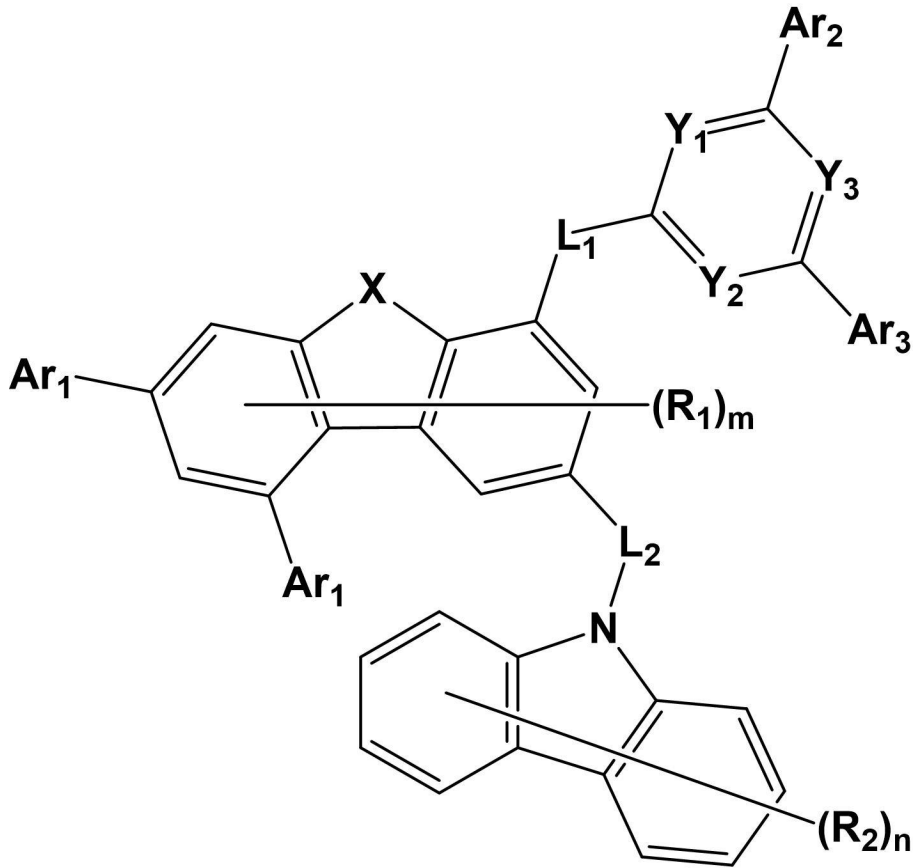
【 0 0 4 7 】  
[ 化学式 8 ]

30

40

50

## 【化 1 4】



10

20

## 【0048】

上記化学式 2 ~ 8 中、

$X$ 、 $Y_1$ 、 $Y_2$ 、 $Y_3$ 、 $L_1$ 、 $L_2$ 、 $Ar_1$ 、 $Ar_2$ 、 $Ar_3$ 、 $R_1$ 、 $R_2$ 、 $m$ および  $n$  は先に定義したとおりである。

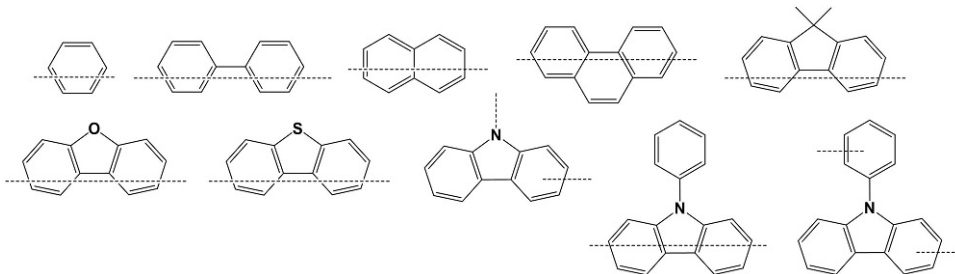
## 【0049】

好ましくは、 $L_1$  および  $L_2$  はそれぞれ独立して、直接結合または下記からなる群から選択されるいずれか一つであり得る：

30

## 【0050】

## 【化 1 5】



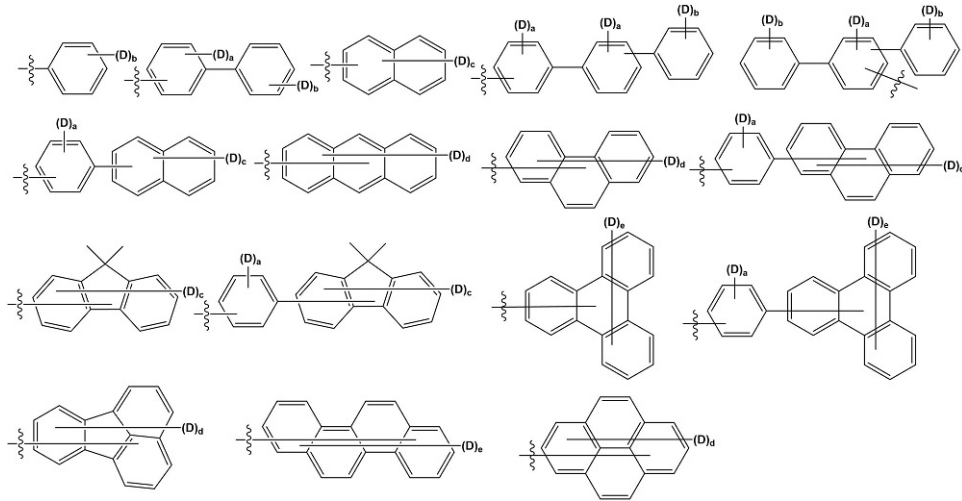
40

## 【0051】

好ましくは、 $Ar_1$  は、下記からなる群から選択されるいずれか一つであり得る：

50

【化16】



10

【0052】

上記式中、

- a は 0 ~ 4 の整数であり、
- b は 0 ~ 5 の整数であり、
- c は 0 ~ 7 の整数であり、
- d は 0 ~ 9 の整数であり、
- e は 0 ~ 11 個の整数である。

20

【0053】

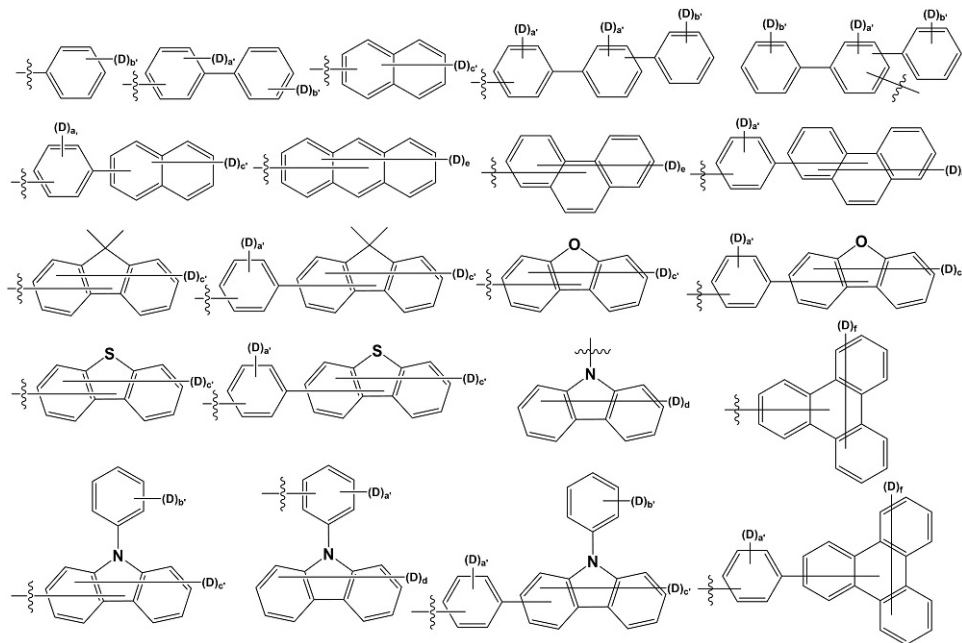
好ましくは、Ar<sub>1</sub>はそれぞれ独立して、フェニル、ピフェニリル、ナフチル、フェナントレニルまたはトリフェニレニルであり、これらは重水素で置換または非置換される。

【0054】

好ましくは、Ar<sub>2</sub>およびAr<sub>3</sub>はそれぞれ独立して、下記からなる群から選択されるいずれか一つであり得る：

【0055】

【化17】



30

40

【0056】

上記式中、

50

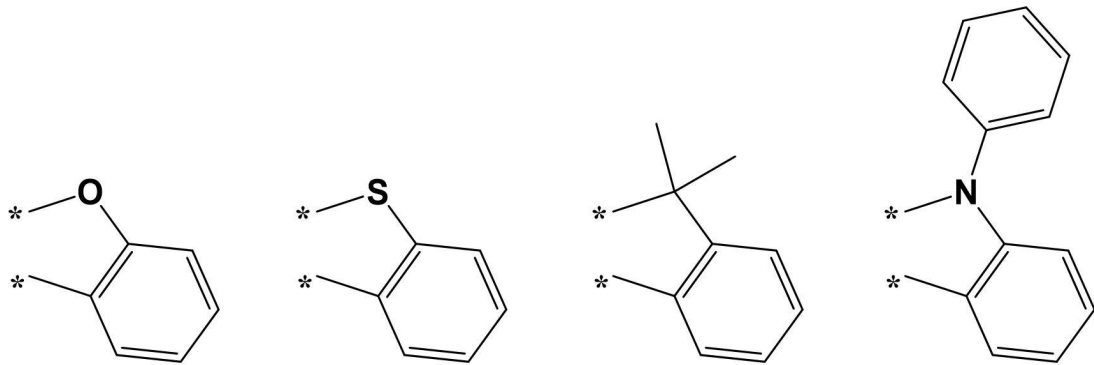
- a'は0～4の整数であり、  
 b'は0～5の整数であり、  
 c'は0～7の整数であり、  
 d'は0～8の整数であり、  
 e'は0～9の整数であり、  
 f'は0～11の整数である。

好ましくは、 $R_1$ はそれぞれ独立して、水素または重水素、より好ましくは水素であり得る。

【0057】

好ましくは、 $R_2$ はそれぞれ独立して、水素；重水素；ハロゲン；シアノ；メトキシ；トリフルオロメチル；トリフルオロメトキシ；フェニル；ピリジニル；イソキノリニル；または下記からなる群から選択されるいずれか一つであり、

【化18】



上記式中の2個の\*は、化学式1のカルバゾールの隣接炭素とそれぞれ連結され、前記フェニルはハロゲン、シアノ、メトキシ、トリフルオロメチルおよびトリフルオロメトキシからなる群から選択されるいずれか一つで置換され得る。

【0058】

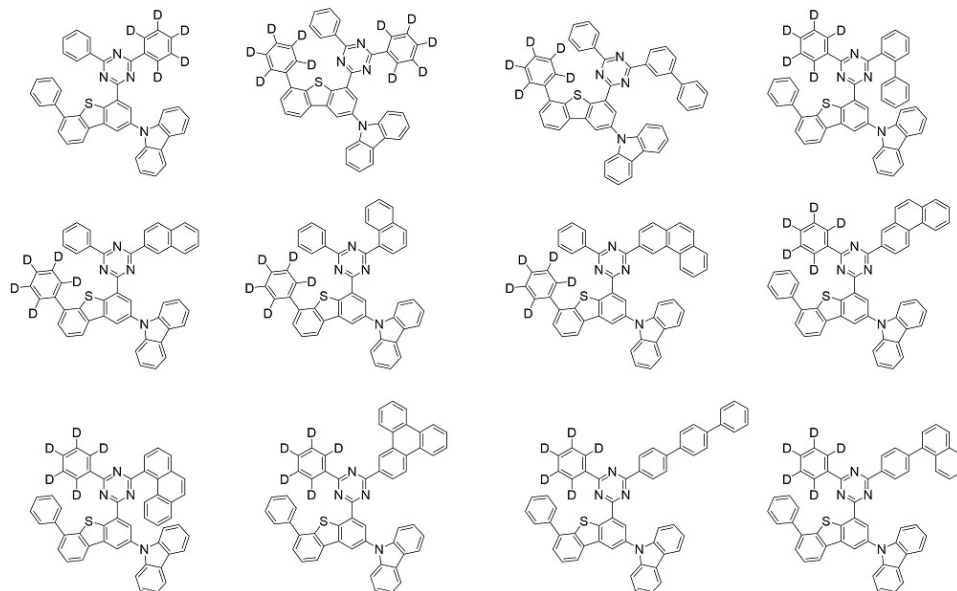
好ましくは、上記化学式1で表される化合物中、 $L_1$ 、 $A_{r2}$ および $A_{r3}$ のうちの一つ以上は、N、OおよびSで構成される群から選択される一つ以上のヘテロ原子を含み得る。

【0059】

好ましくは、上記化学式1で表される化合物は、下記で構成される群から選択されるいずれか一つであり得る：

【0060】

【化19】



10

20

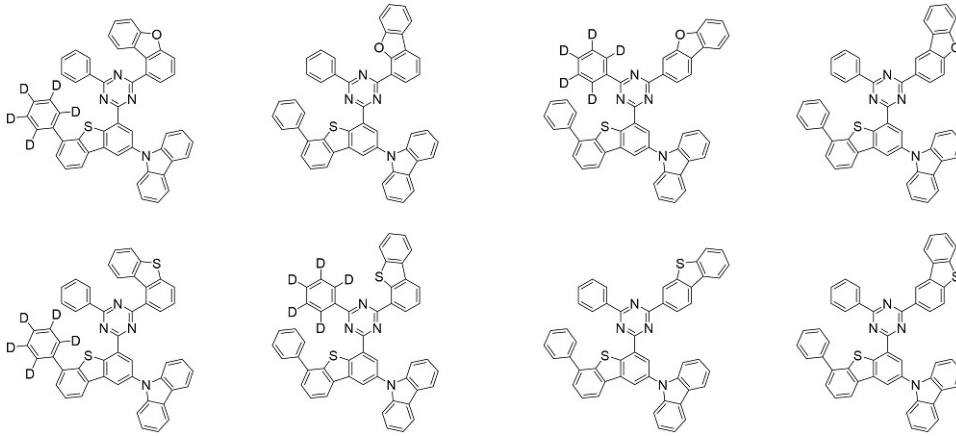
30

40

50

【 0 0 6 1 】

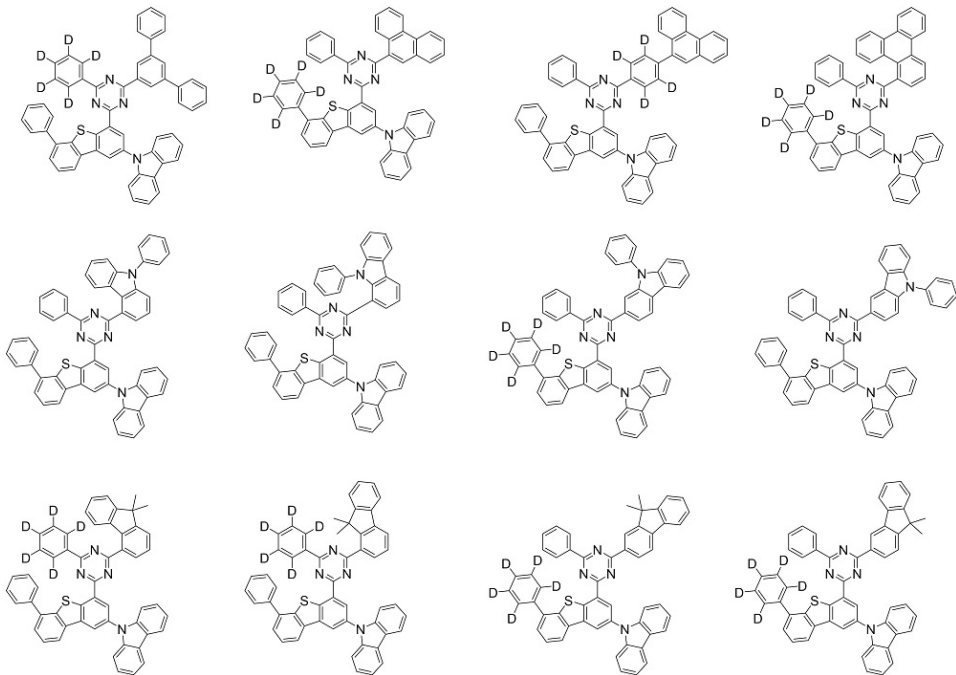
【 化 2 0 】



10

【 0 0 6 2 】

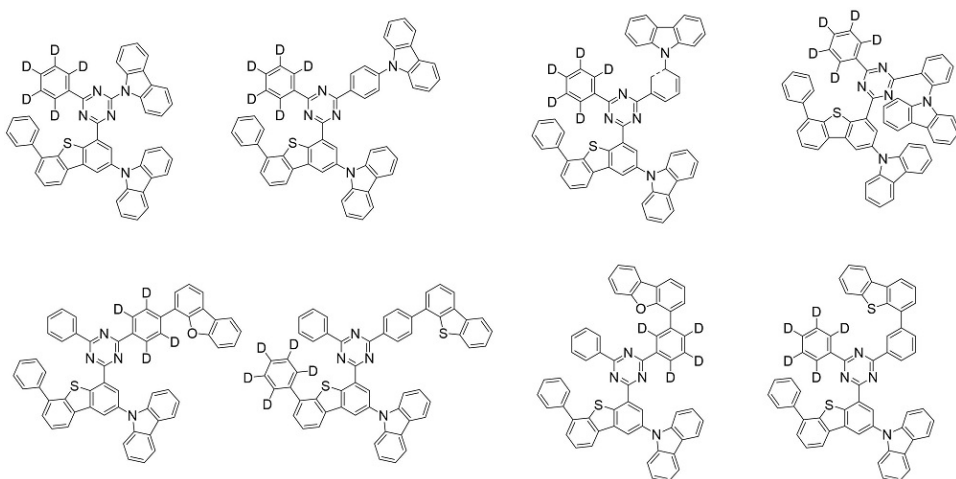
【 化 2 1 】



20

【 0 0 6 3 】

【 化 2 2 】

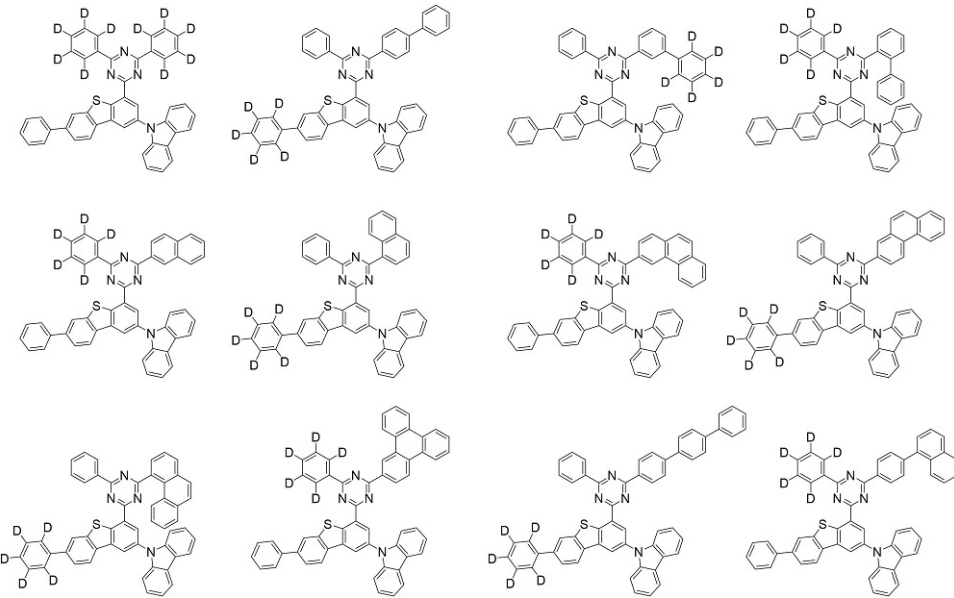


40

【 0 0 6 4 】

50

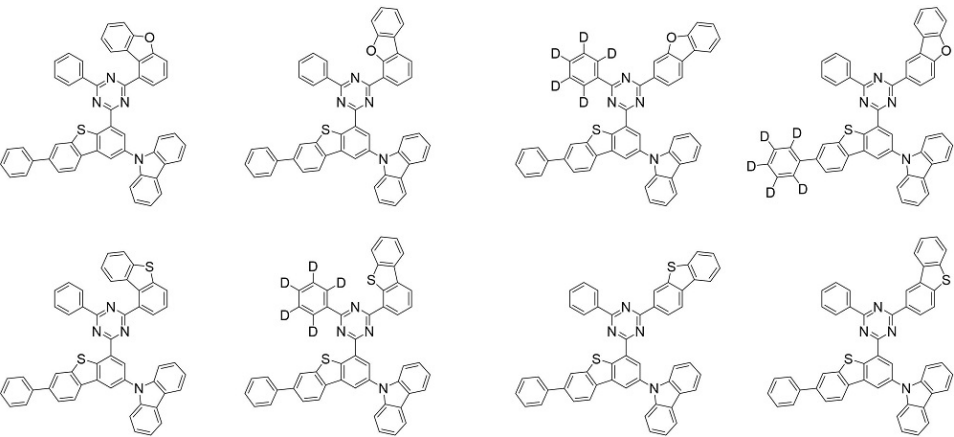
【化 2 3】



10

【 0 0 6 5】

【化 2 4】



20

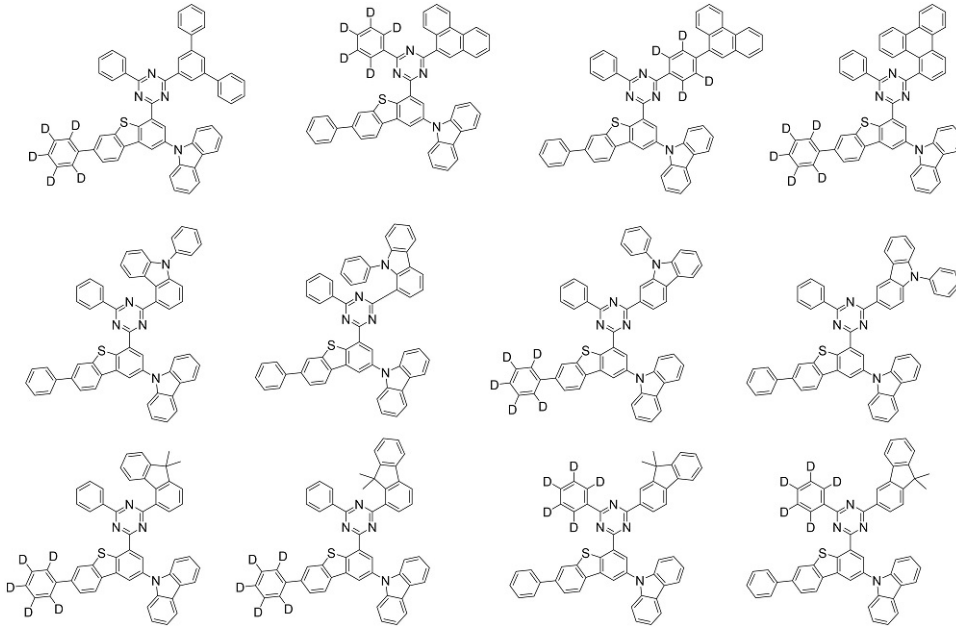
30

【 0 0 6 6】

40

50

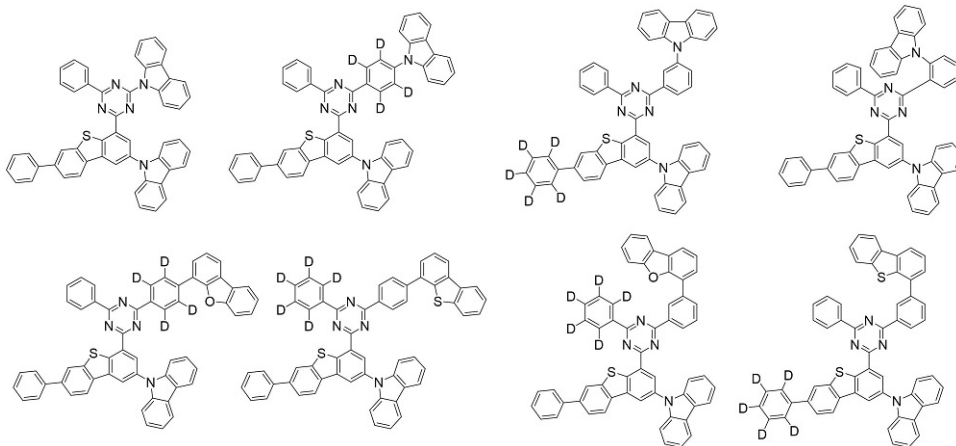
【化 2 5】



10

【 0 0 6 7】

【化 2 6】



20

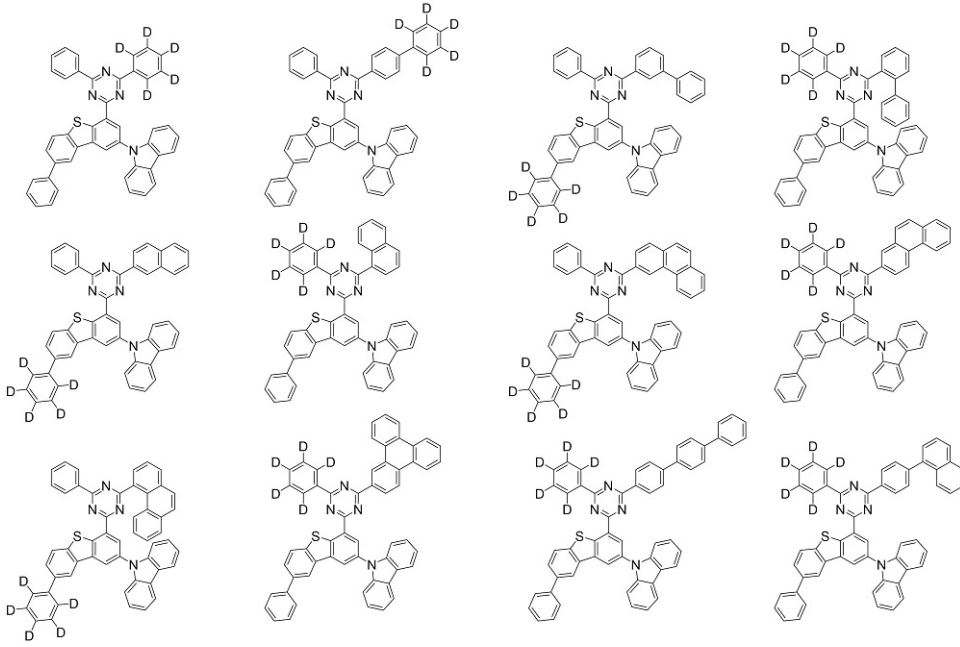
30

【 0 0 6 8】

40

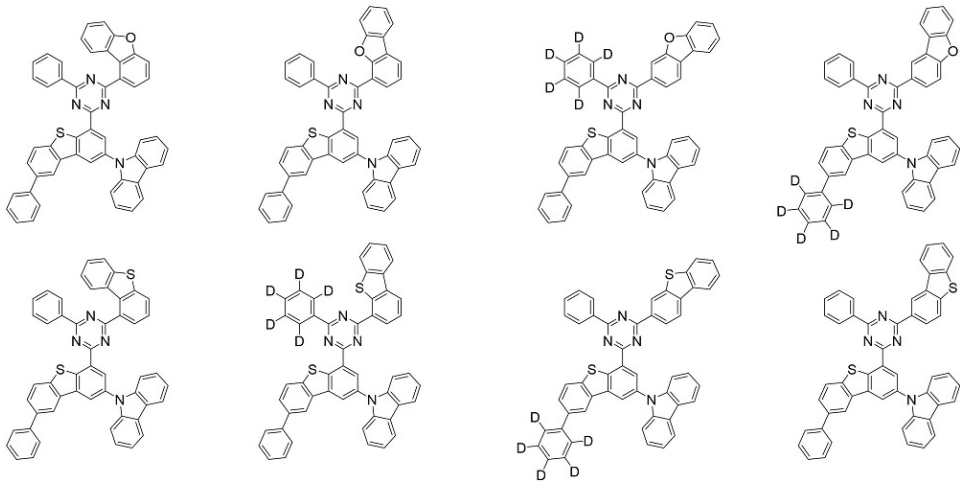
50

【化 2 7】



【 0 0 6 9】

【化 2 8】



【 0 0 7 0】

10

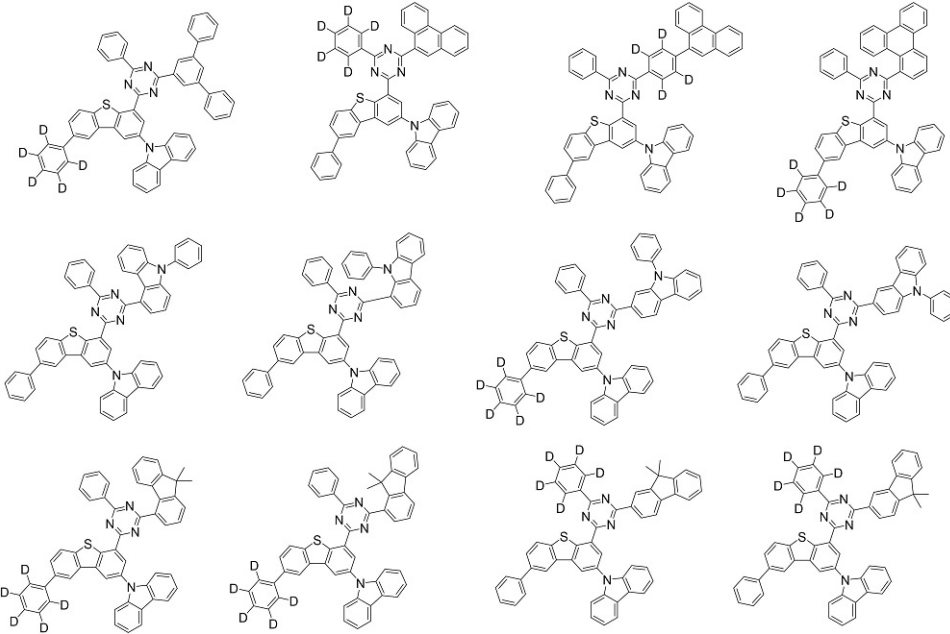
20

30

40

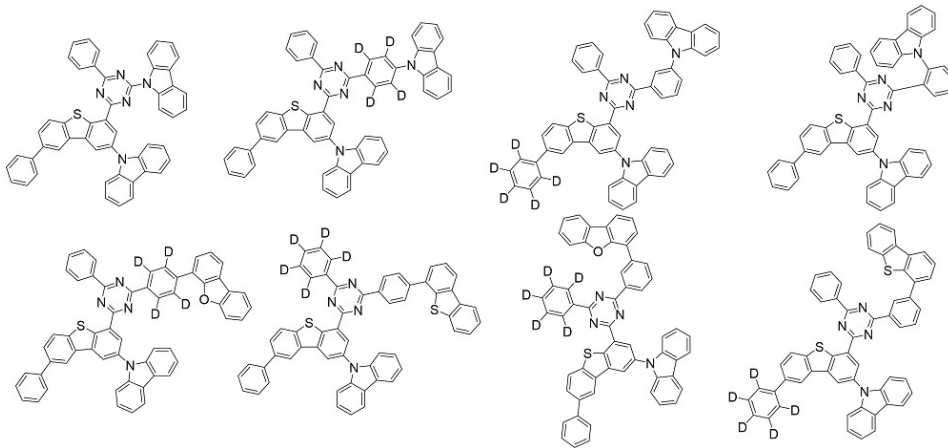
50

【化 2 9】



10

【 0 0 7 1 】  
【化 3 0】



20

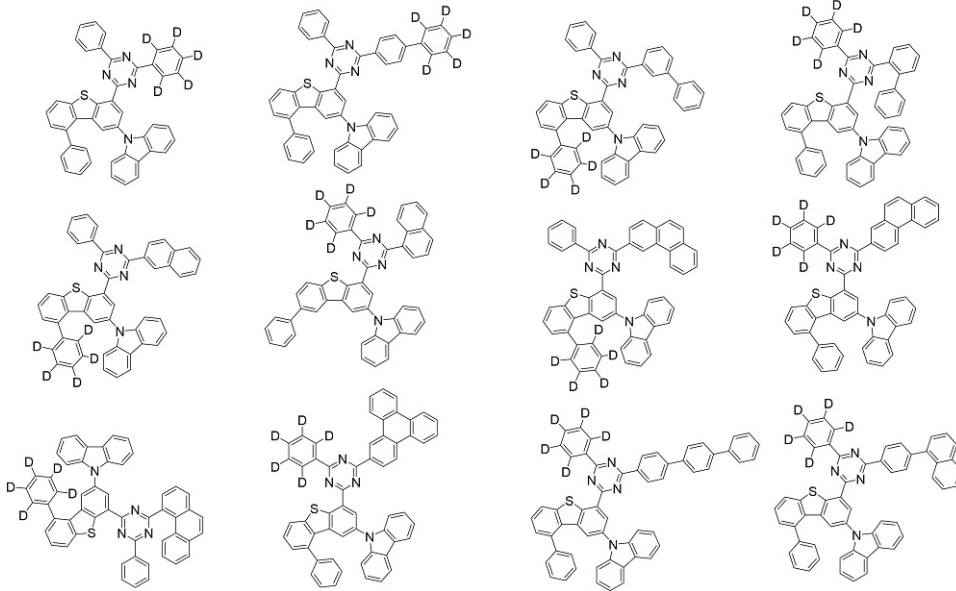
30

【 0 0 7 2 】

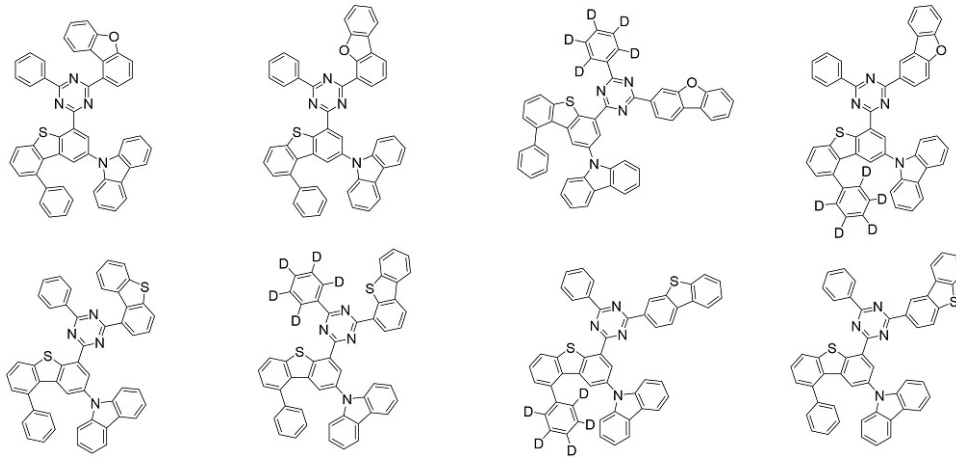
40

50

【化 3 1】



【 0 0 7 3 】  
【化 3 2】

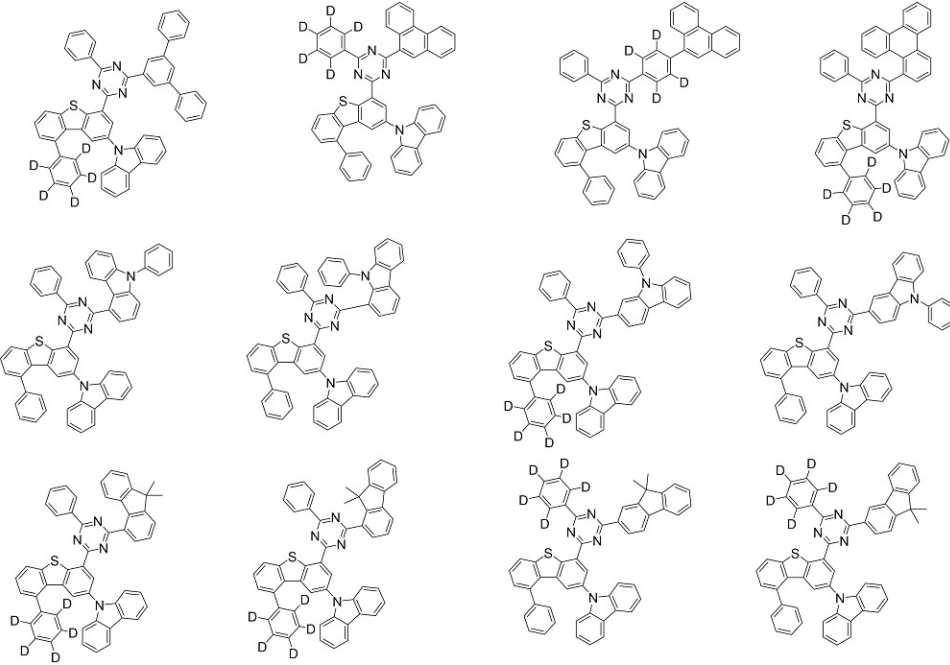


【 0 0 7 4 】

40

50

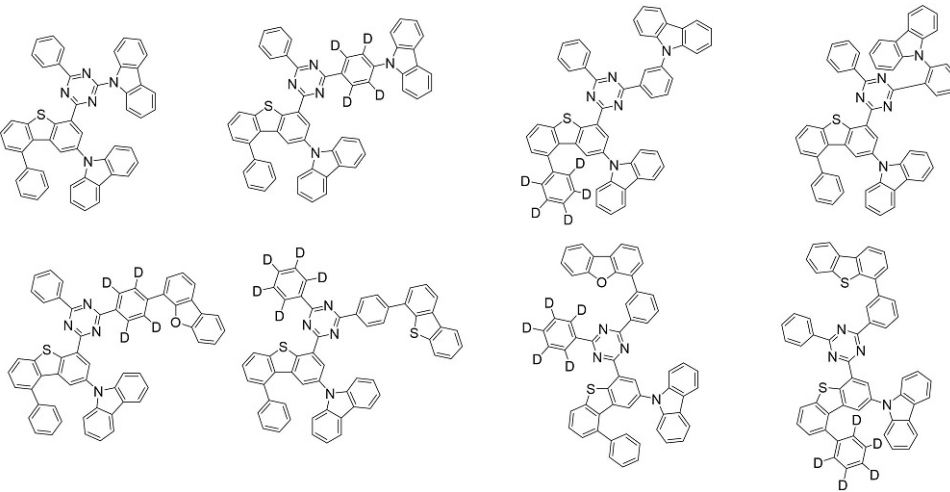
【化 3 3】



10

【 0 0 7 5】

【化 3 4】



20

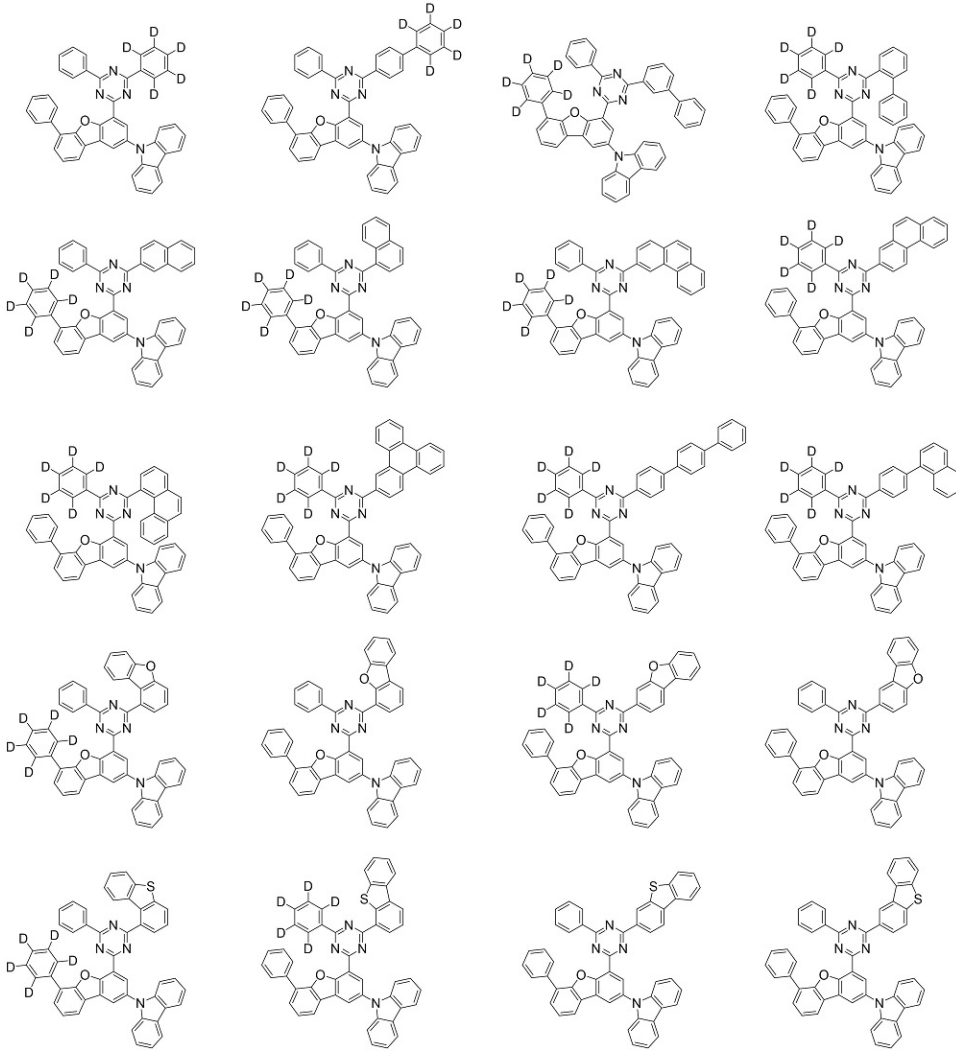
30

【 0 0 7 6】

40

50

【化 3 5】



10

20

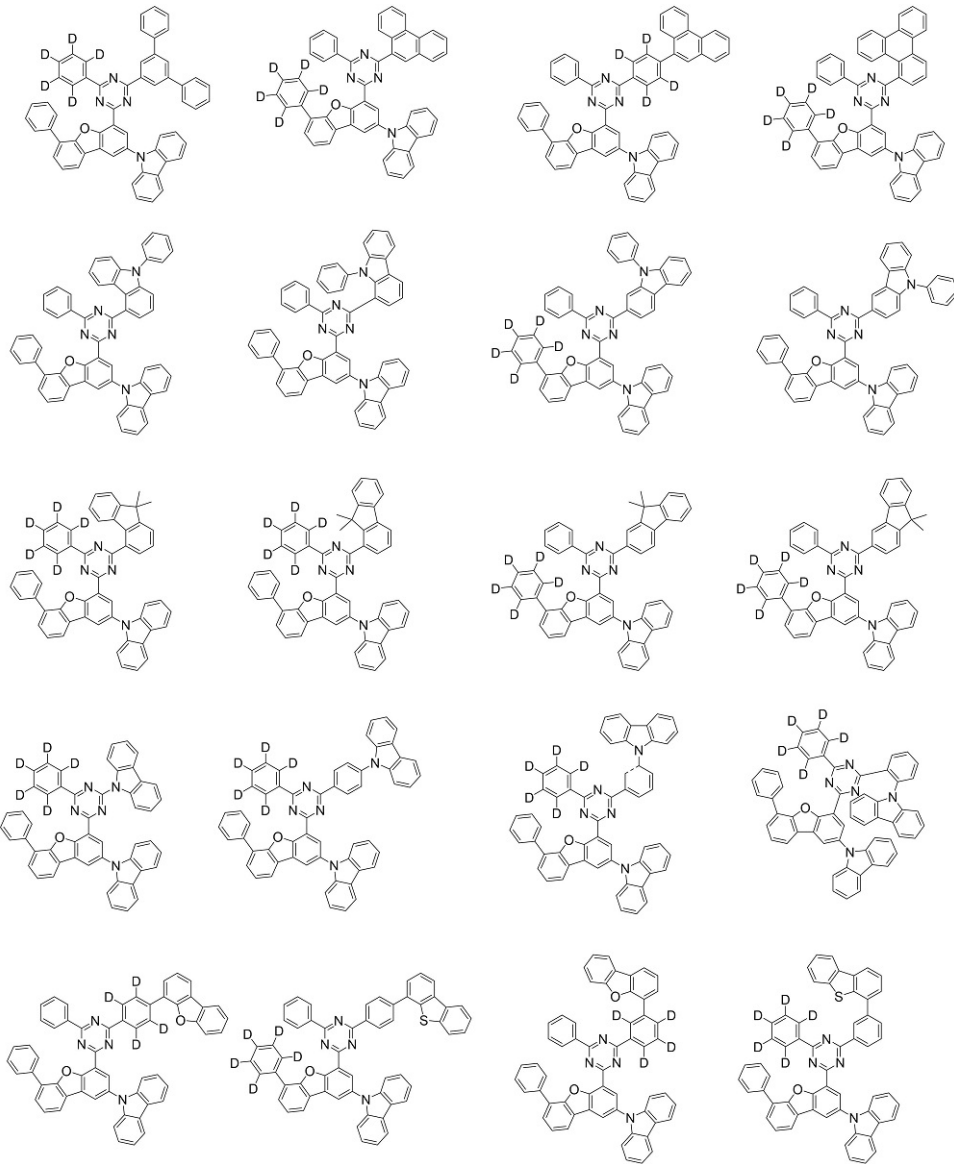
【 0 0 7 7】

30

40

50

【化 3 6】



【 0 0 7 8 】

10

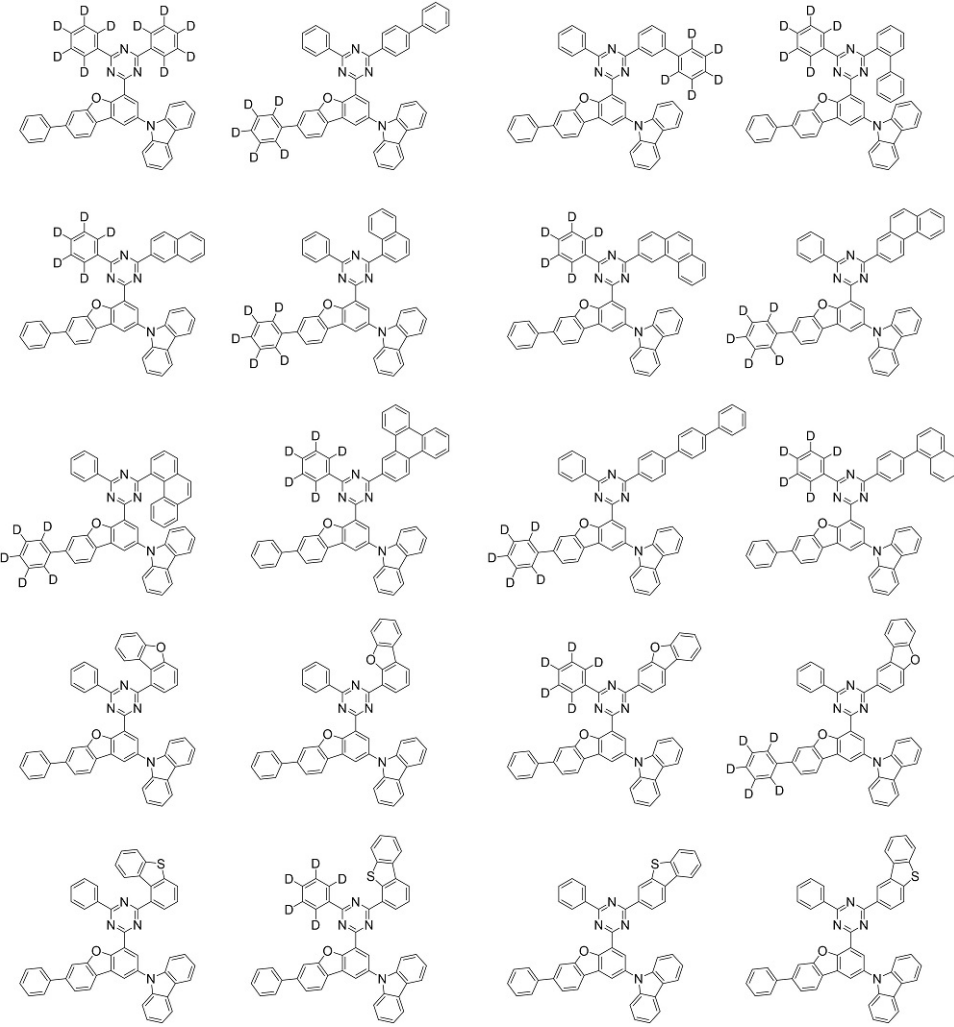
20

30

40

50

【化 3 7】

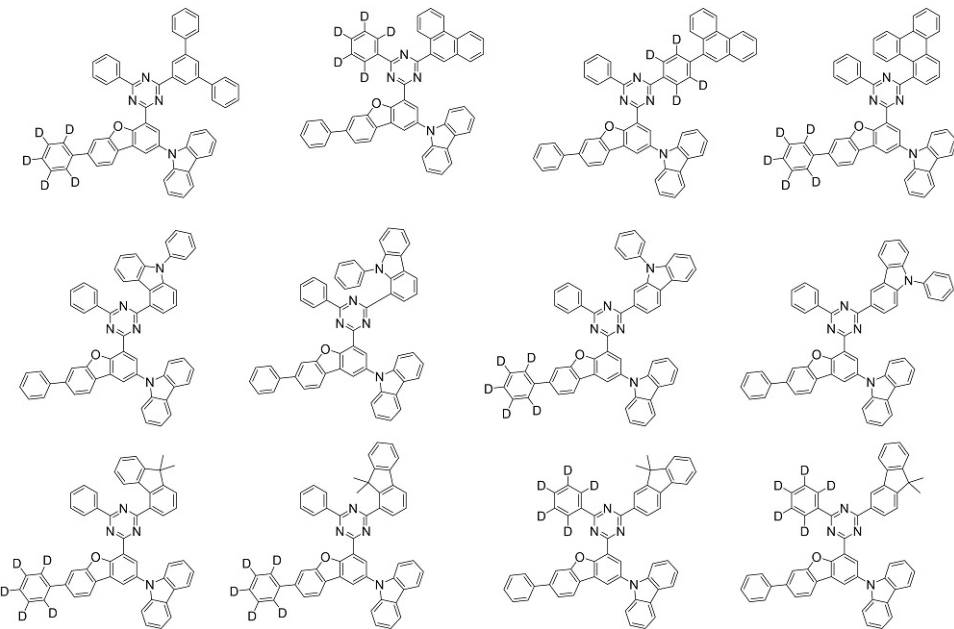


10

20

【 0 0 7 9】

【化 3 8】



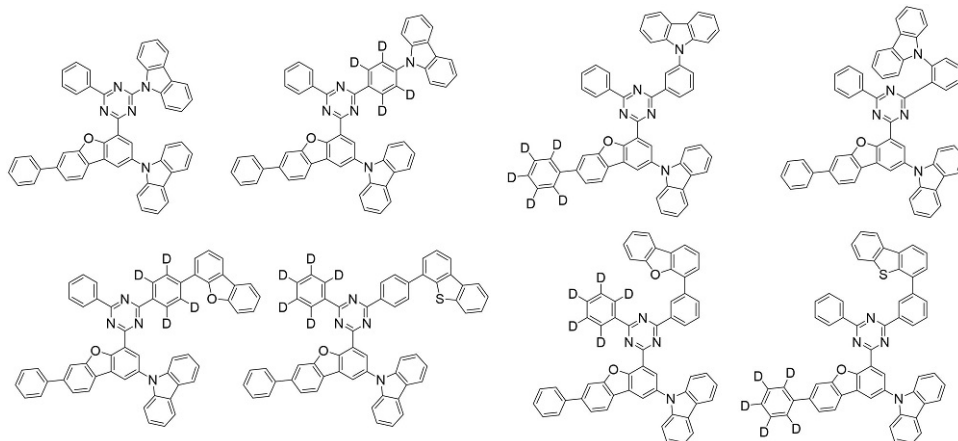
30

40

【 0 0 8 0】

50

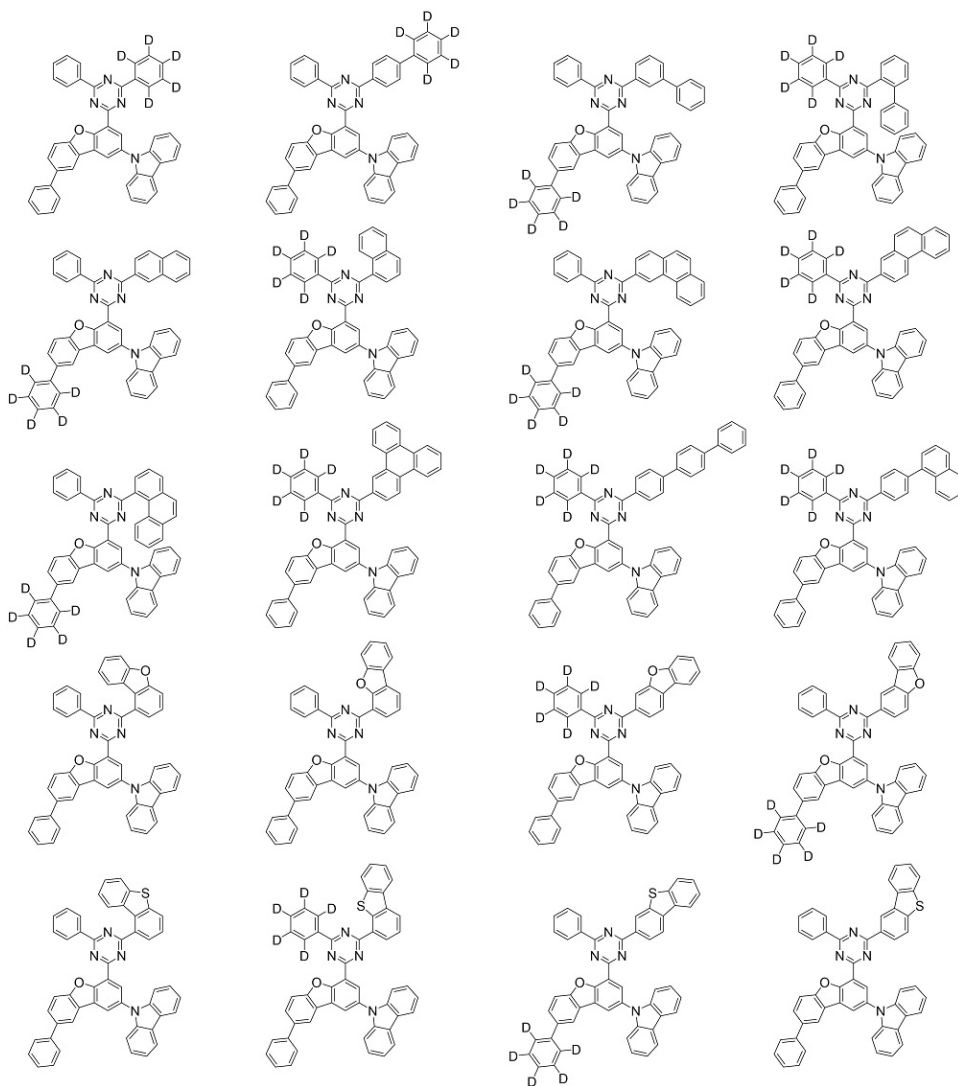
【化 3 9】



10

【 0 0 8 1】

【化 4 0】



20

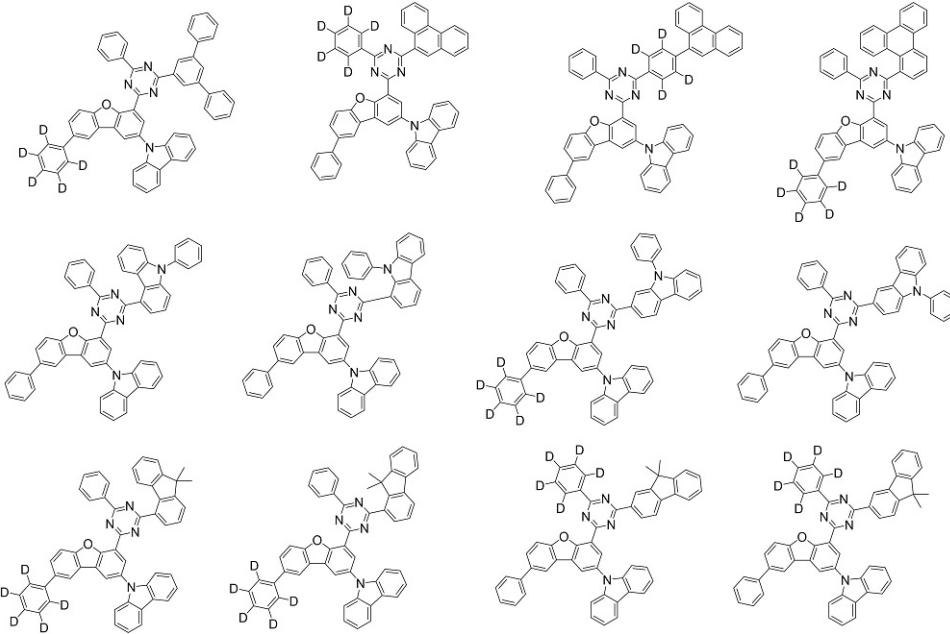
30

40

【 0 0 8 2】

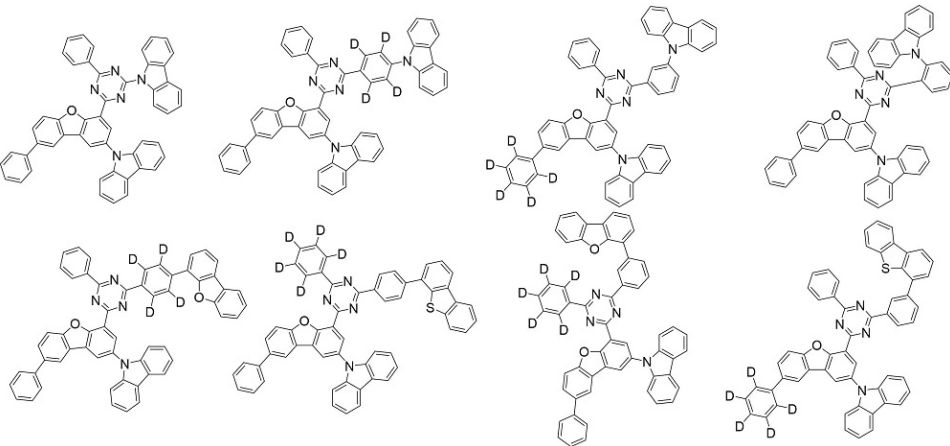
50

【化 4 1】



10

【 0 0 8 3 】  
【化 4 2】



20

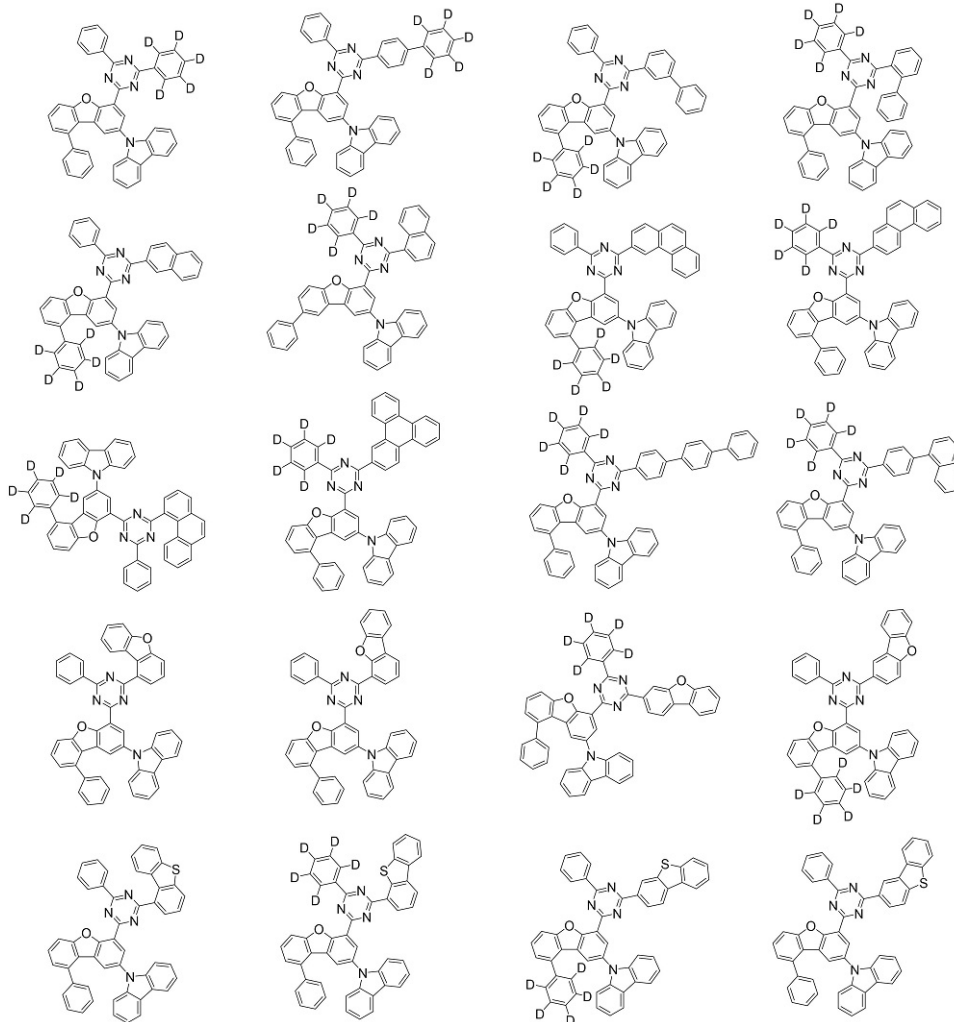
30

【 0 0 8 4 】

40

50

【化 4 3】

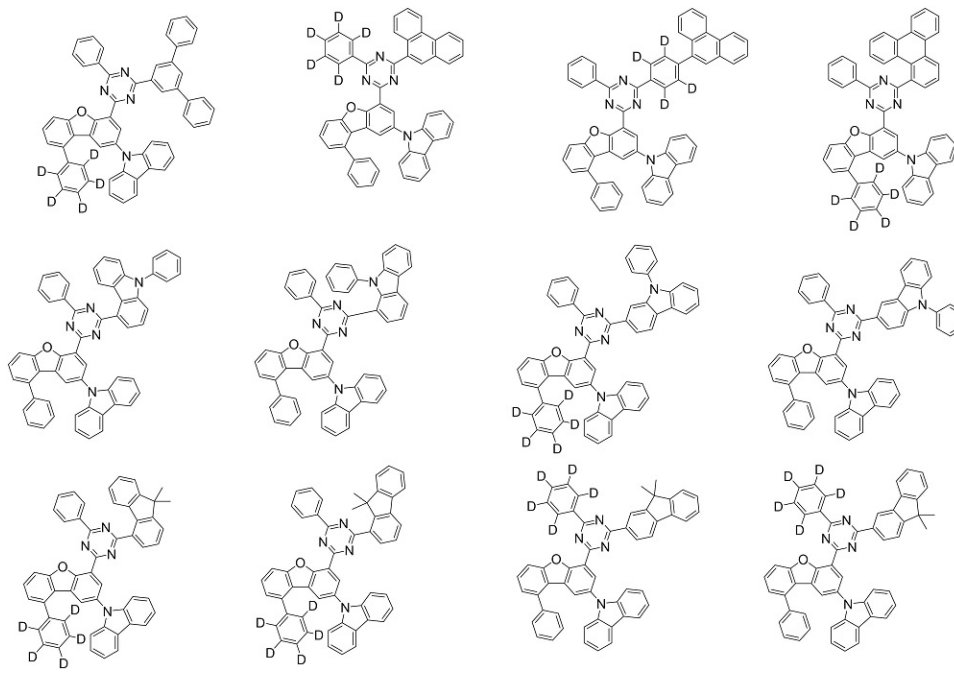


10

20

【 0 0 8 5】

【化 4 4】



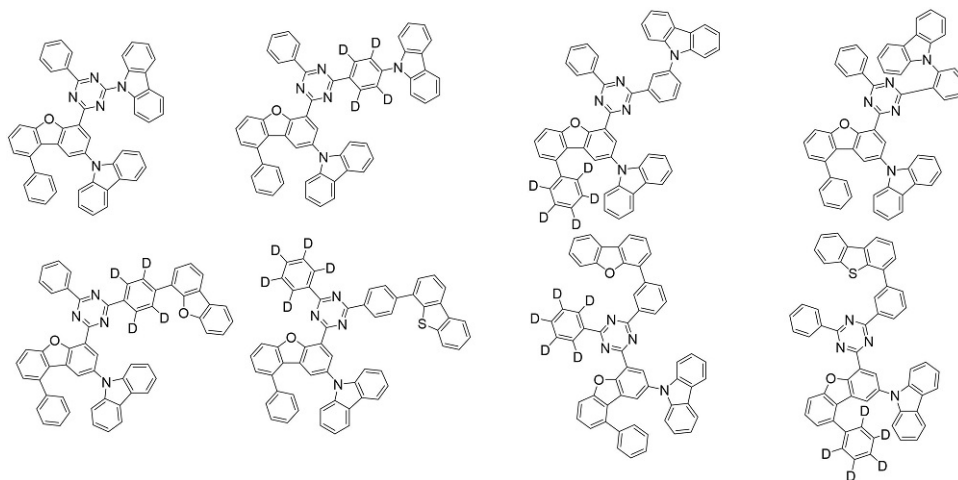
30

40

【 0 0 8 6】

50

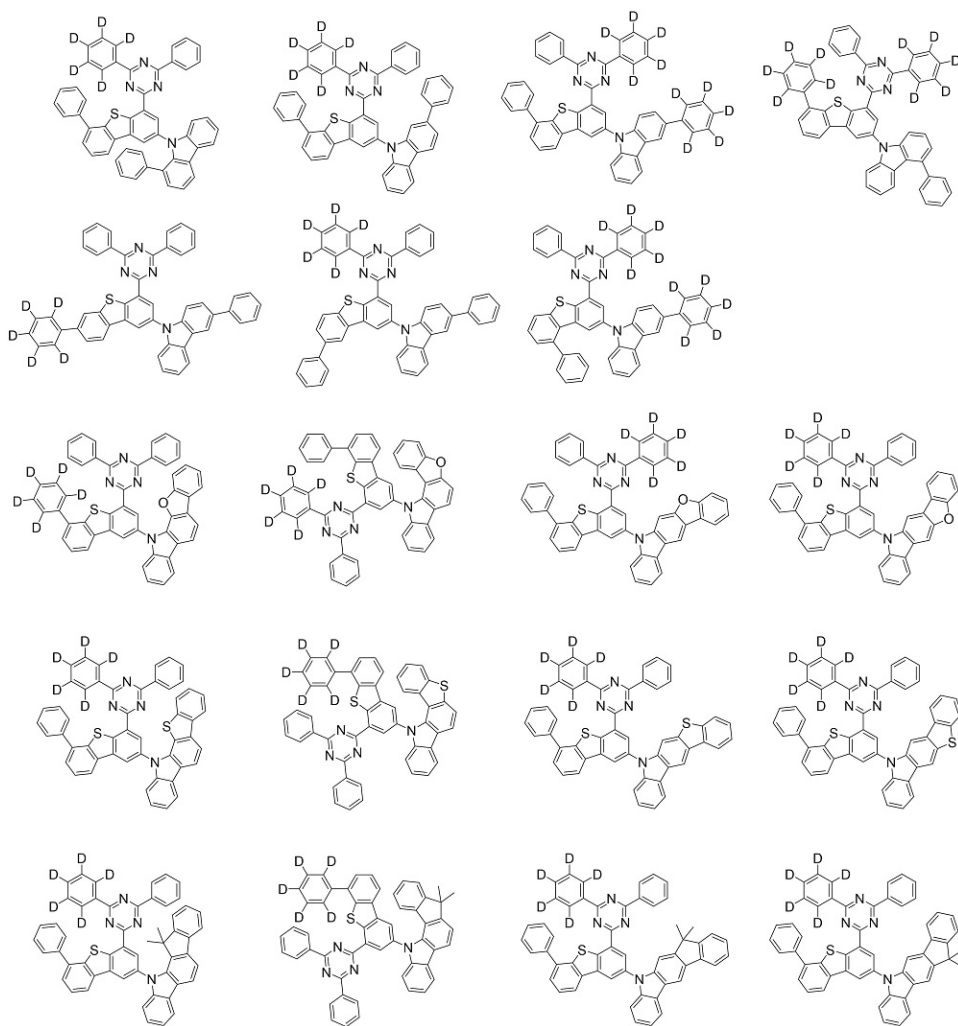
【化 4 5】



10

【 0 0 8 7】

【化 4 6】



20

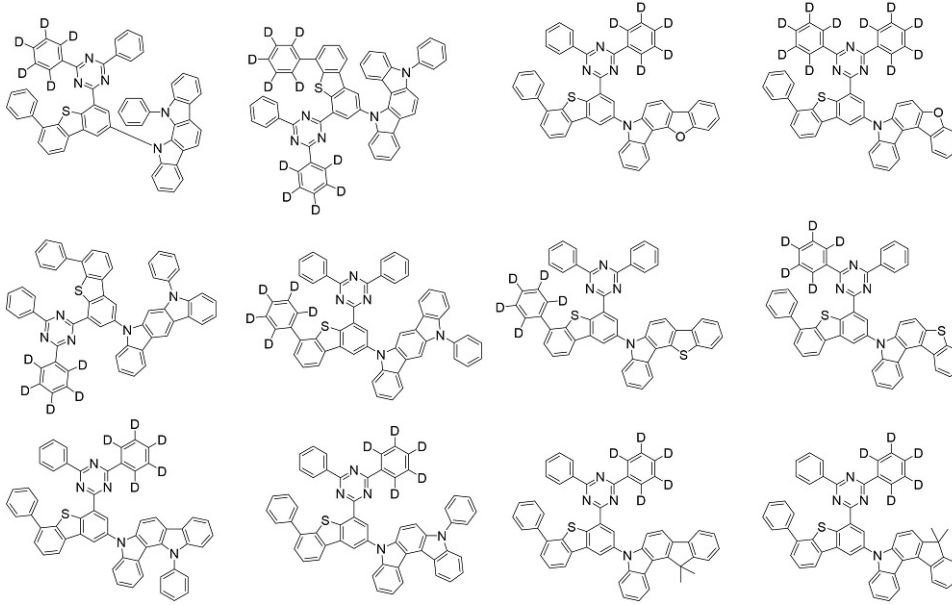
30

40

【 0 0 8 8】

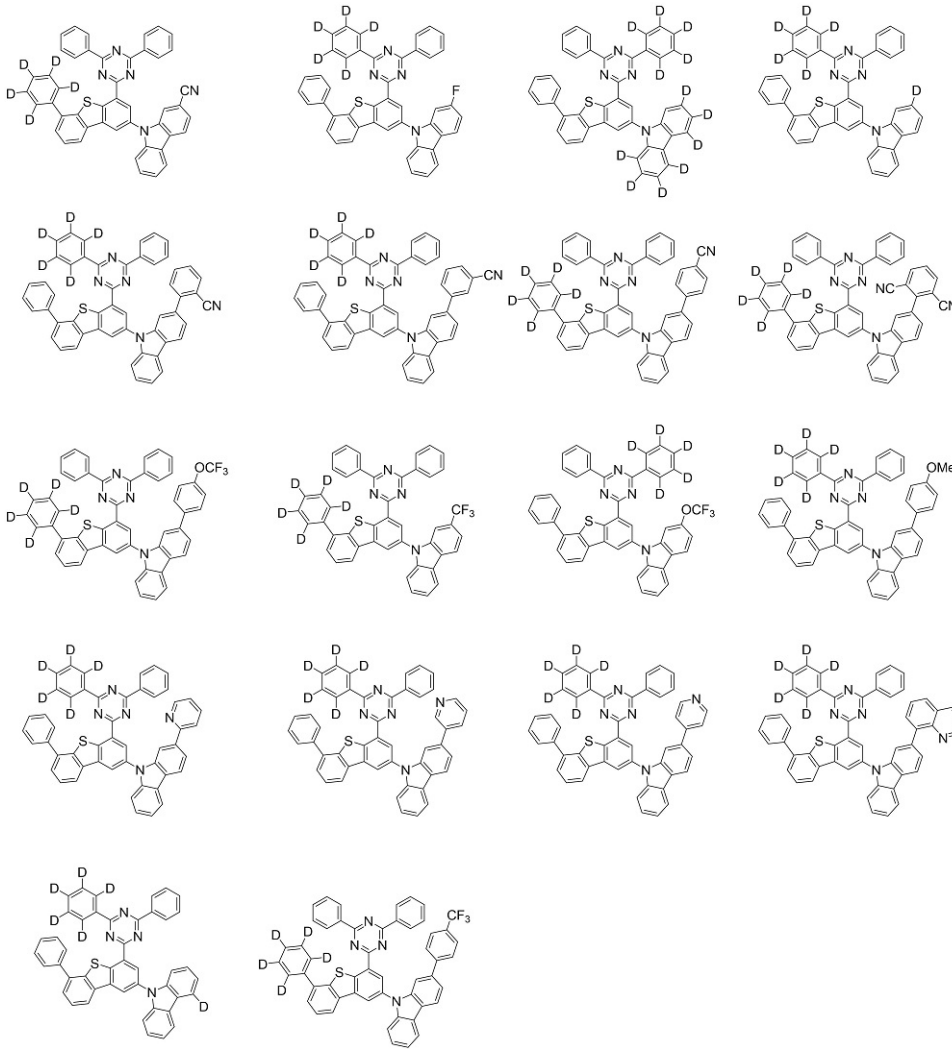
50

【化 4 7】



10

【 0 0 8 9 】  
【化 4 8】



20

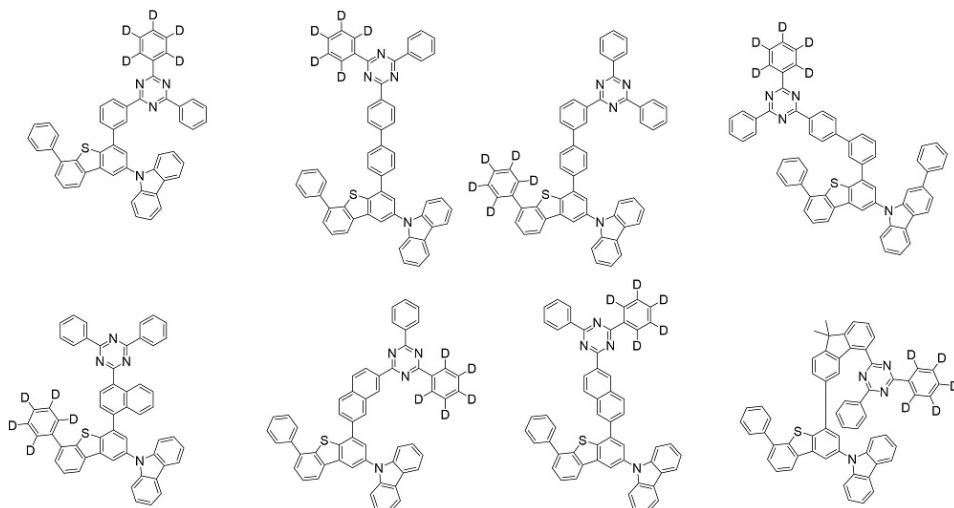
30

40

【 0 0 9 0 】

50

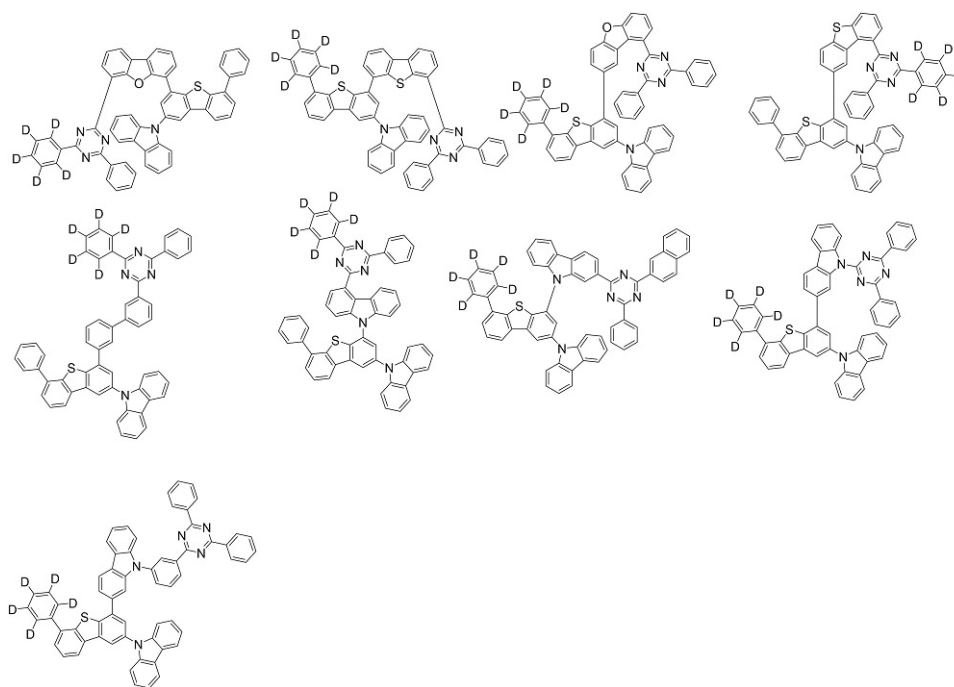
【化 4 9】



10

【 0 0 9 1】

【化 5 0】



20

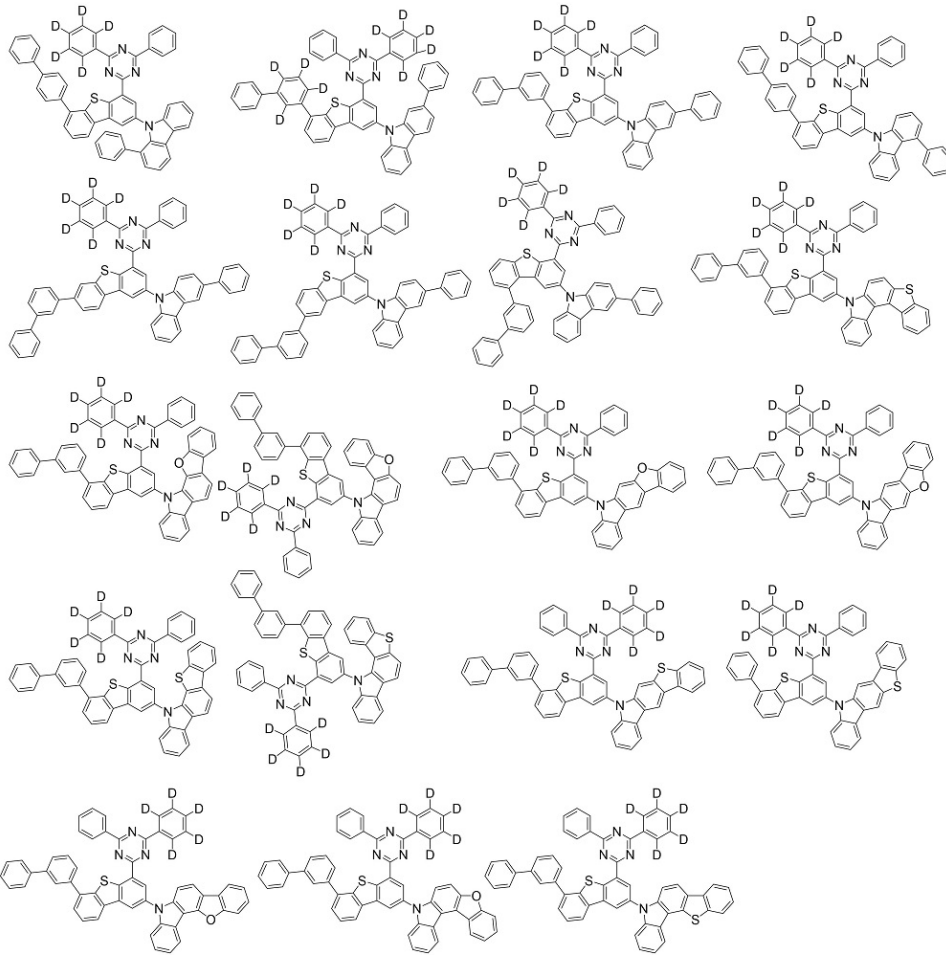
30

【 0 0 9 2】

40

50

【化 5 1】



10

20

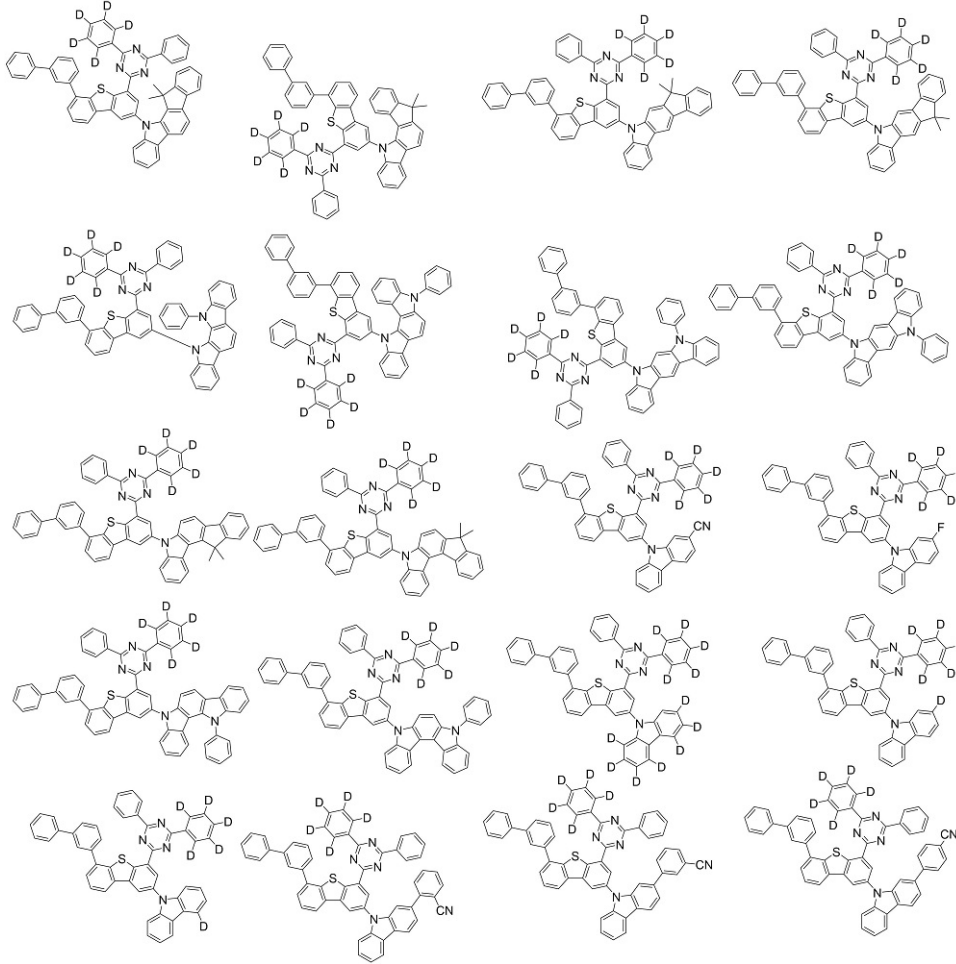
【 0 0 9 3】

30

40

50

【化 5 2】

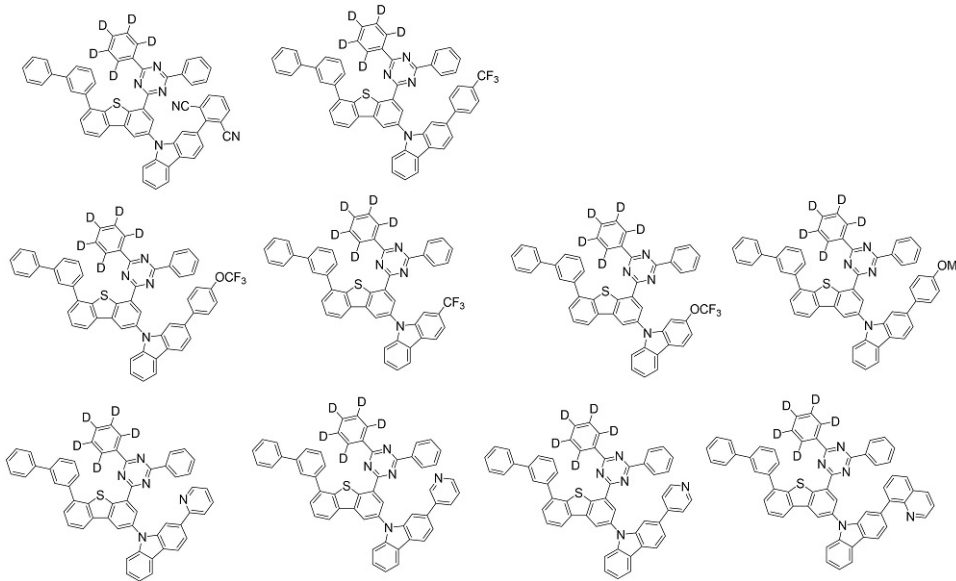


10

20

【 0 0 9 4】

【化 5 3】



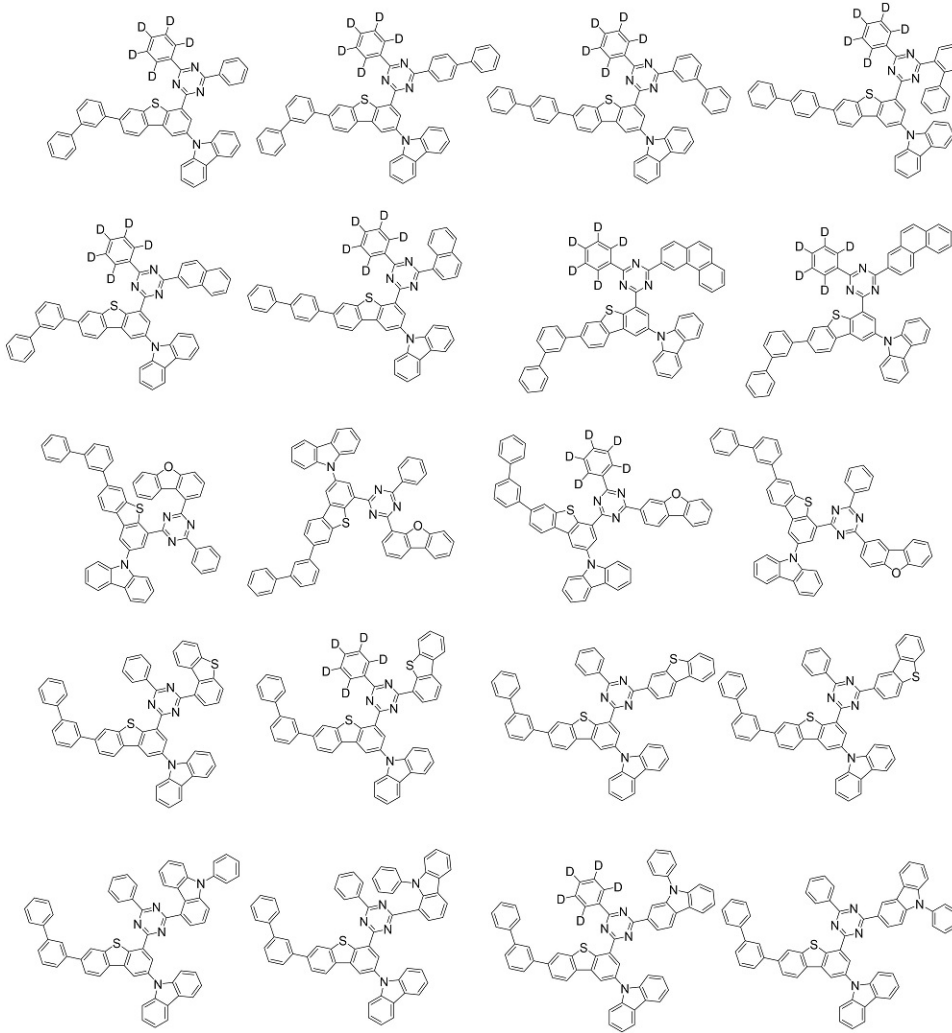
30

40

【 0 0 9 5】

50

【化 5 4】



10

20

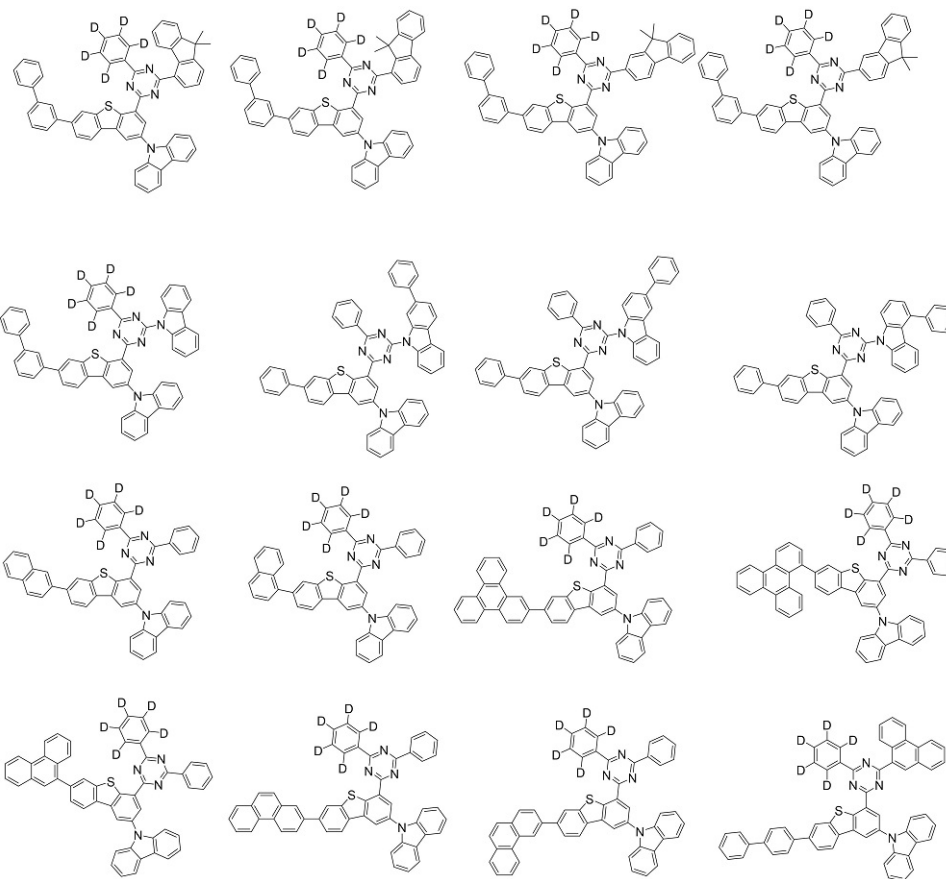
【 0 0 9 6 】

30

40

50

【化 5 5】



10

20

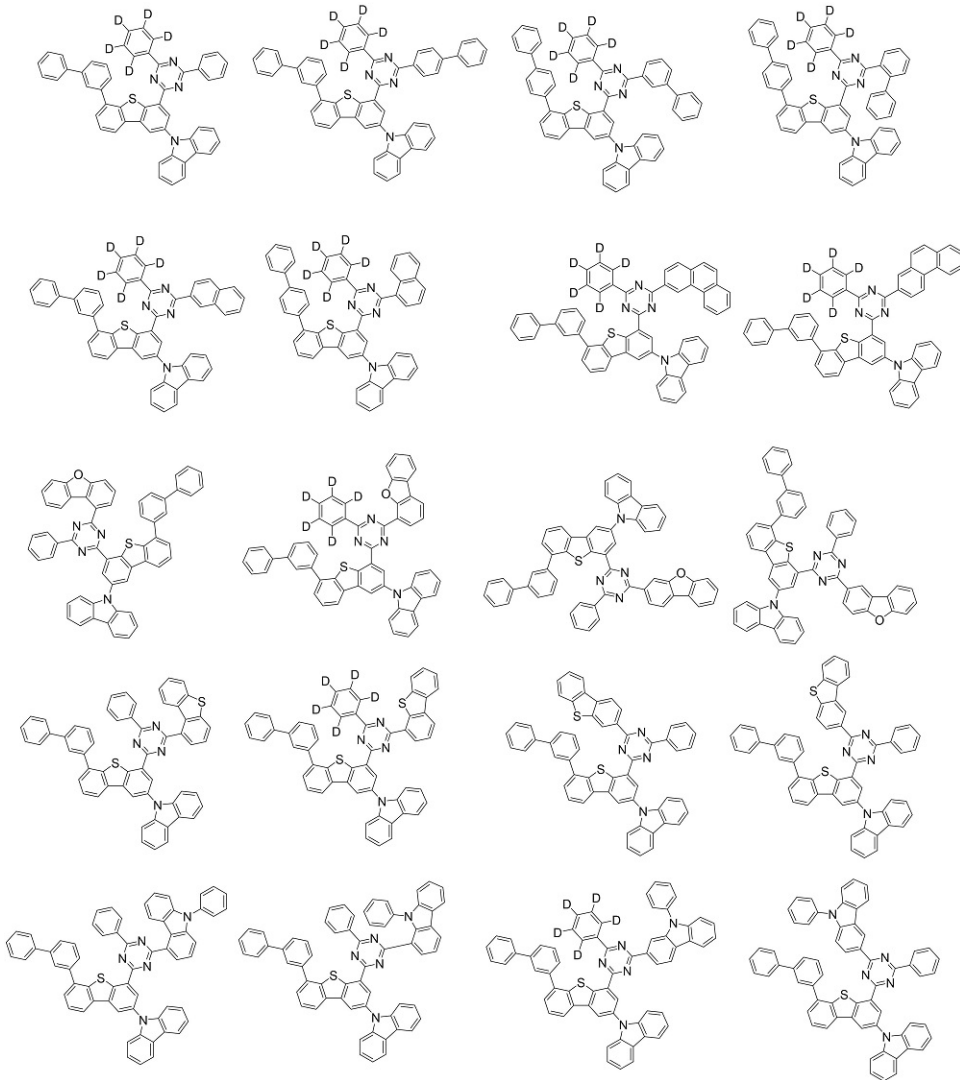
【 0 0 9 7 】

30

40

50

【化 5 6】



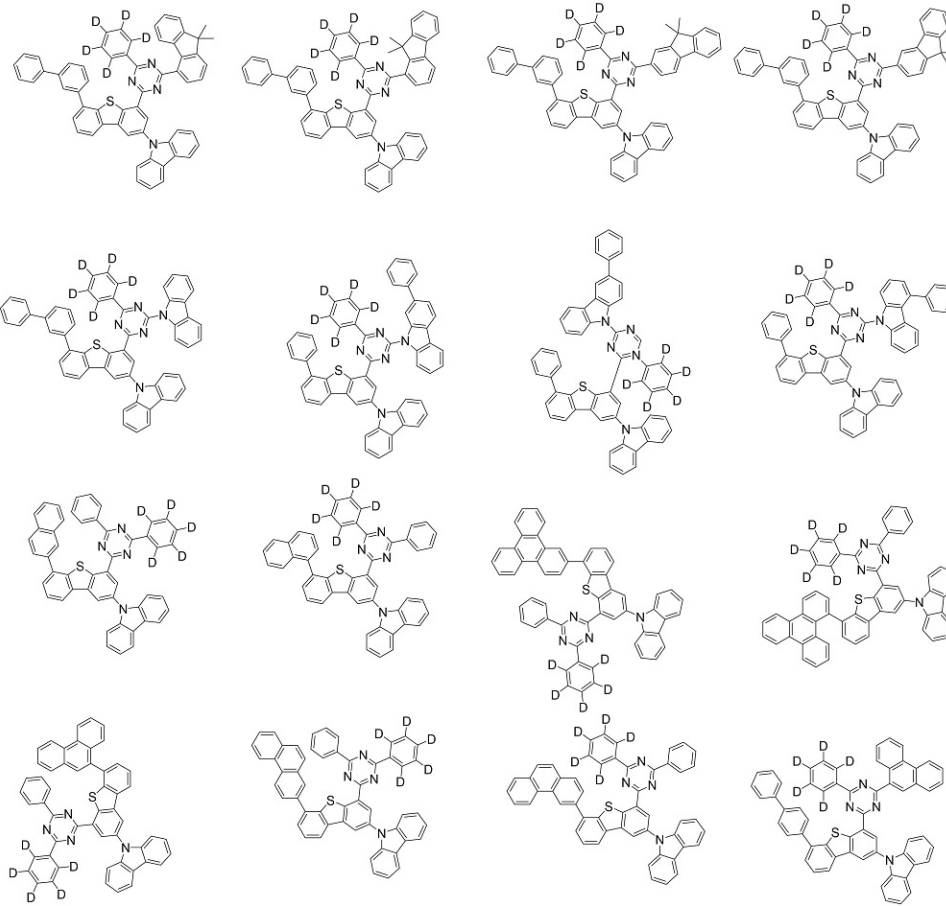
【 0 0 9 8 】

30

40

50

【化 5 7】

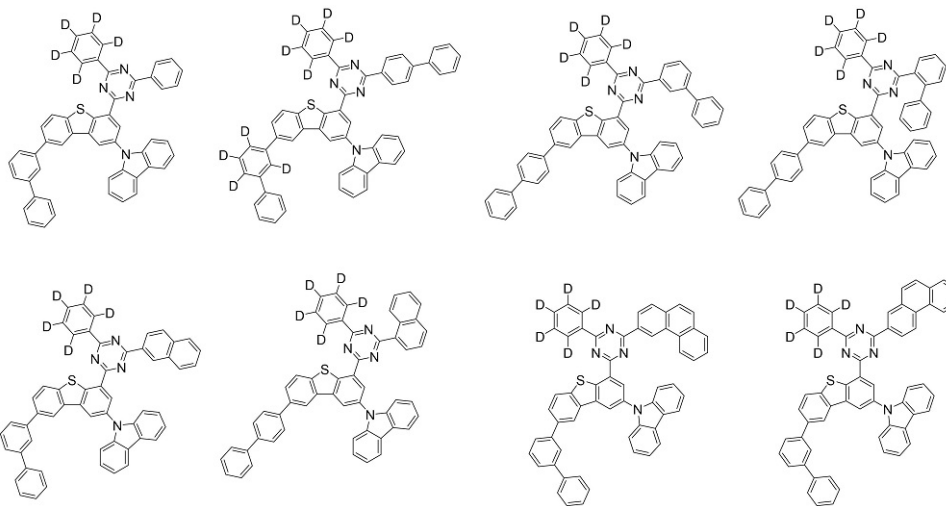


10

20

【 0 0 9 9】

【化 5 8】



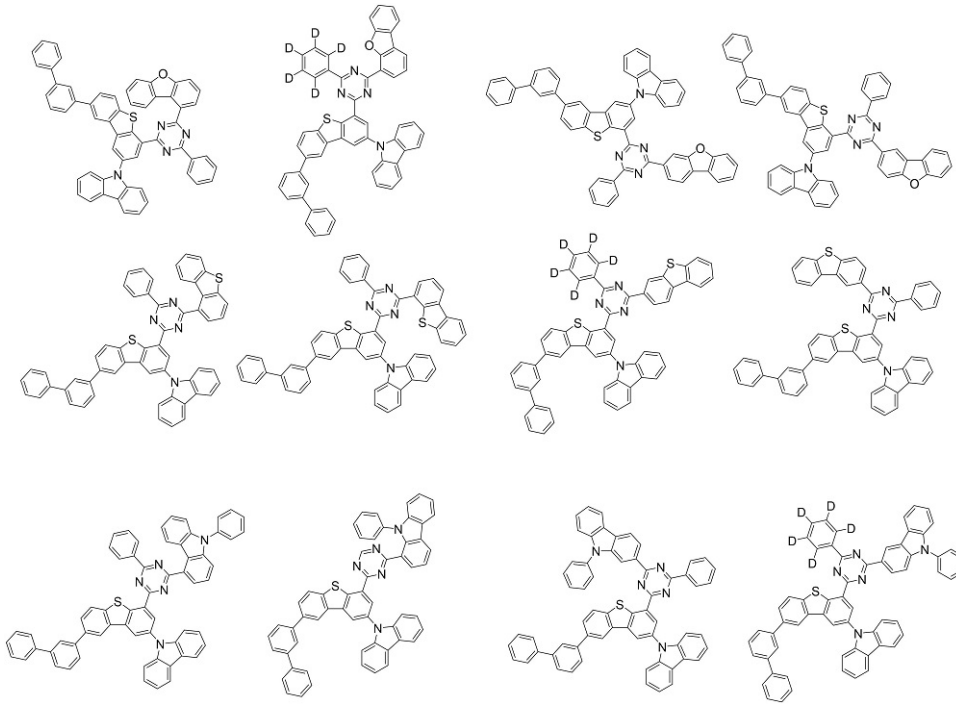
30

40

【 0 1 0 0】

50

【化 5 9】

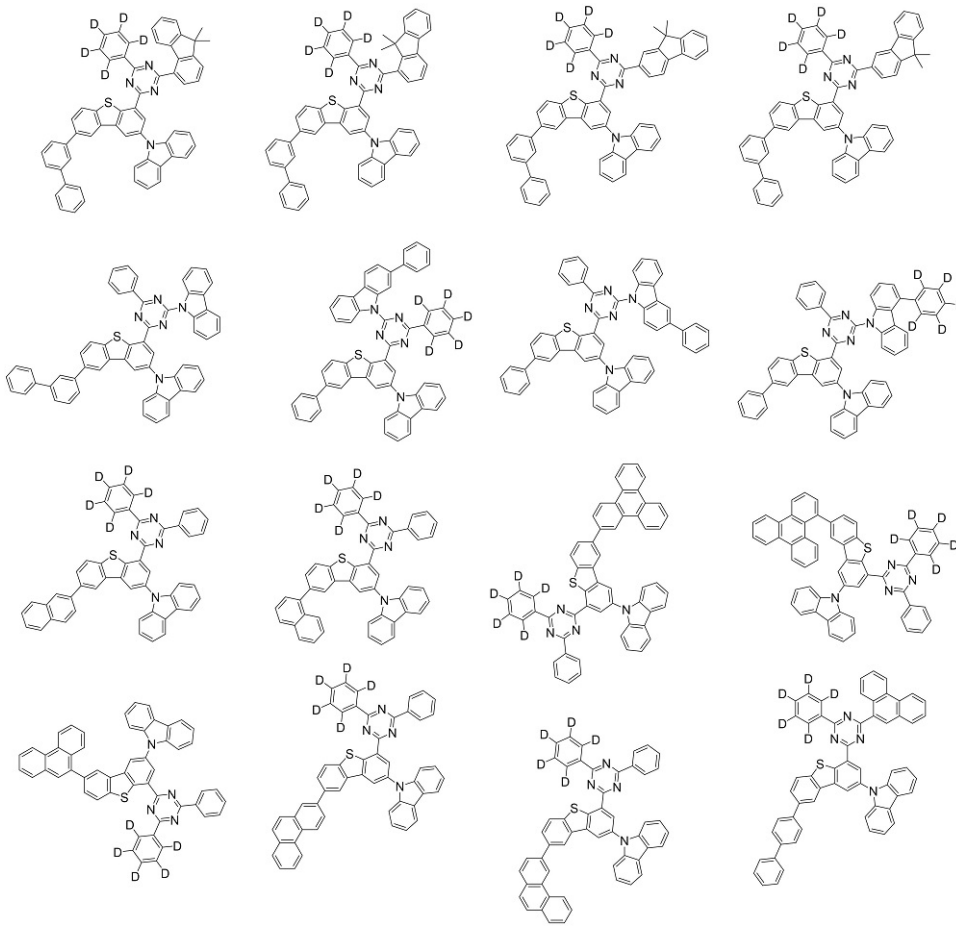


10

20

【 0 1 0 1】

【化 6 0】



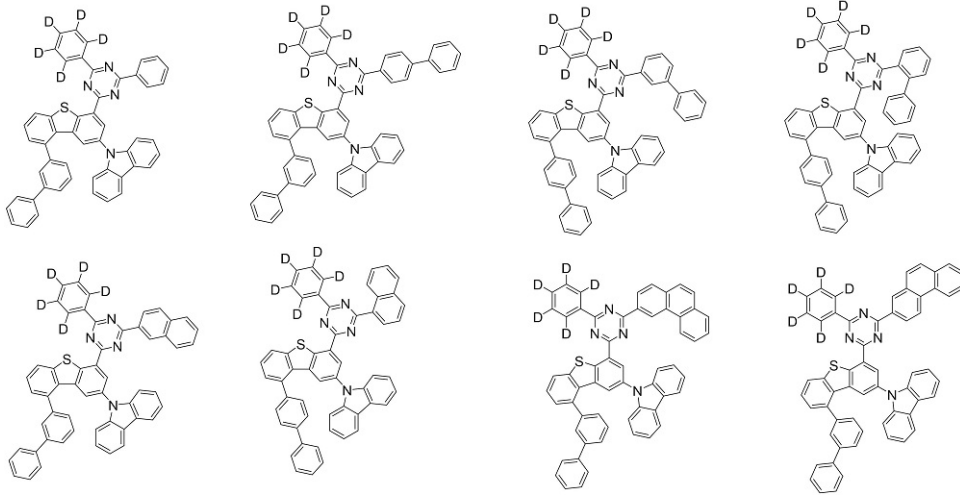
30

40

【 0 1 0 2】

50

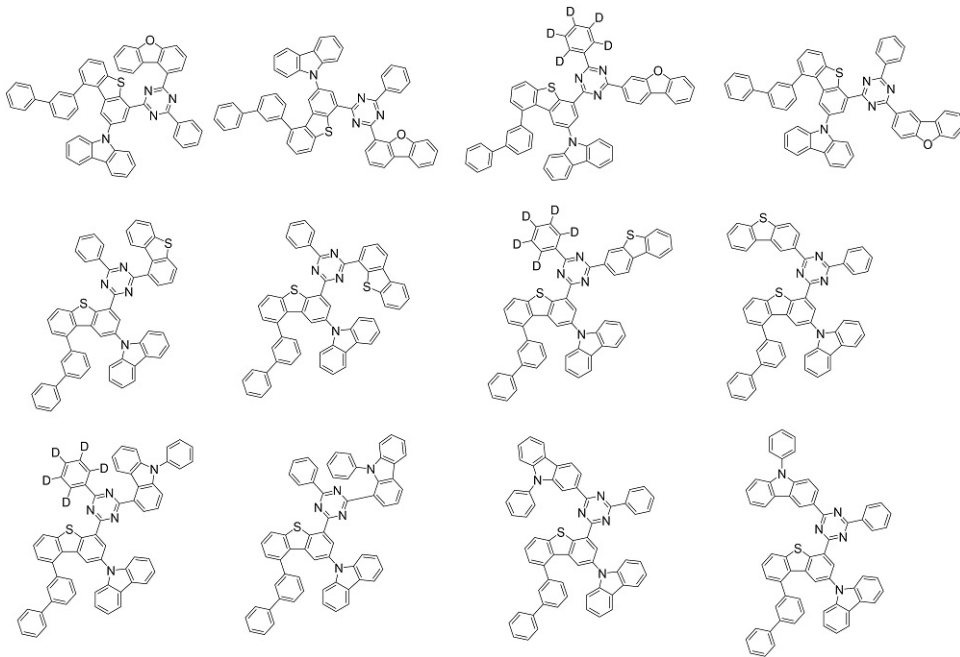
【化 6 1】



10

【 0 1 0 3】

【化 6 2】



20

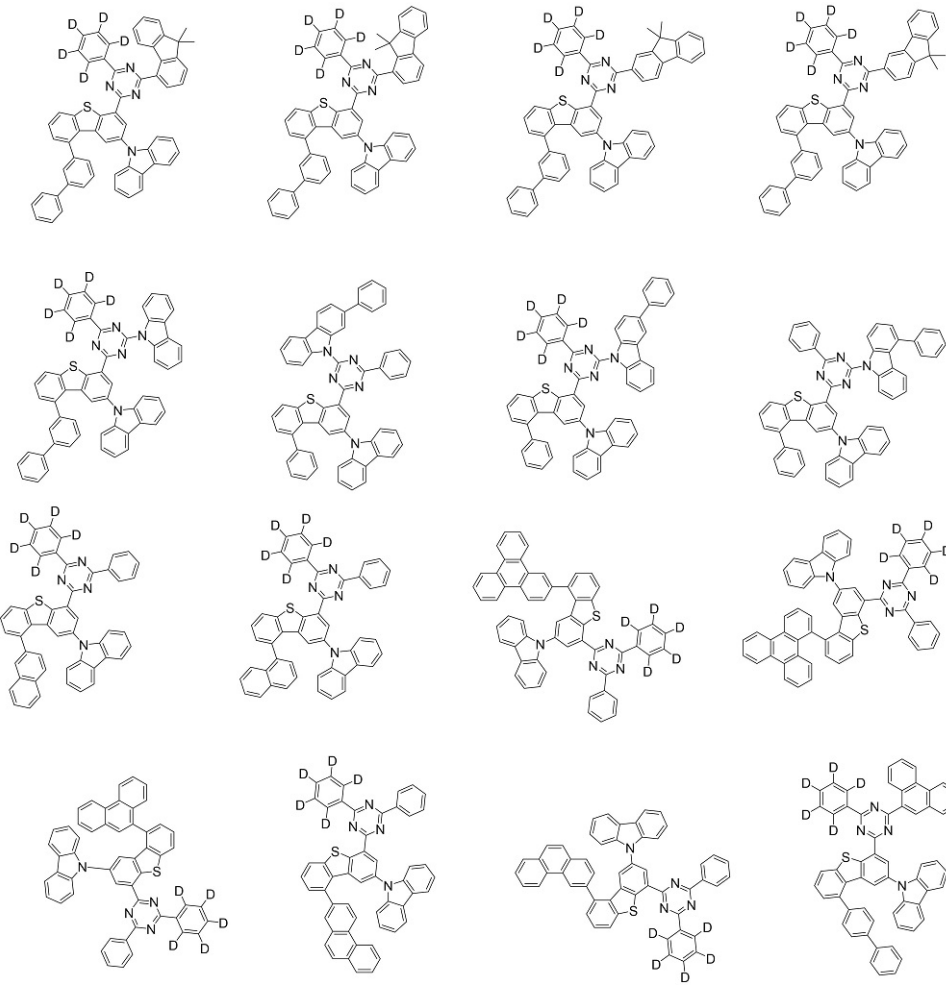
30

【 0 1 0 4】

40

50

【化 6 3】



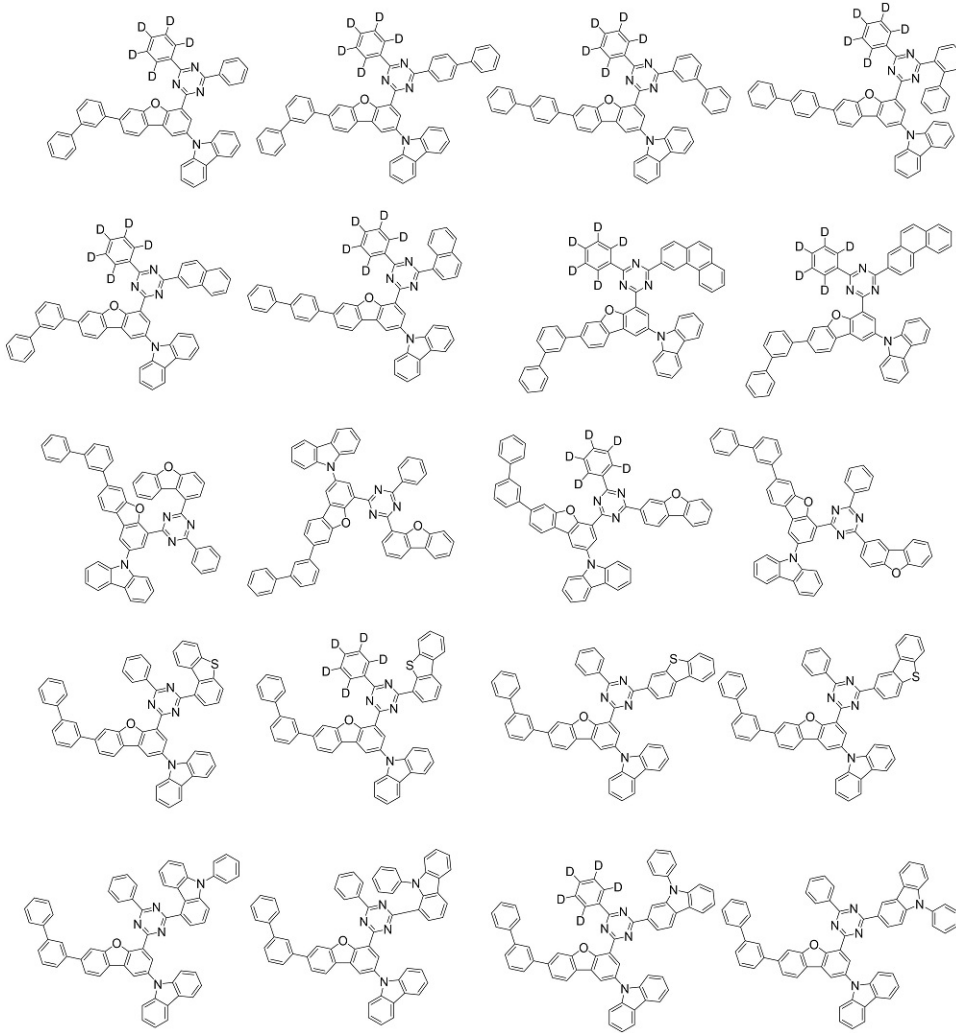
【 0 1 0 5】

30

40

50

【化 6 4】



【 0 1 0 6 】

10

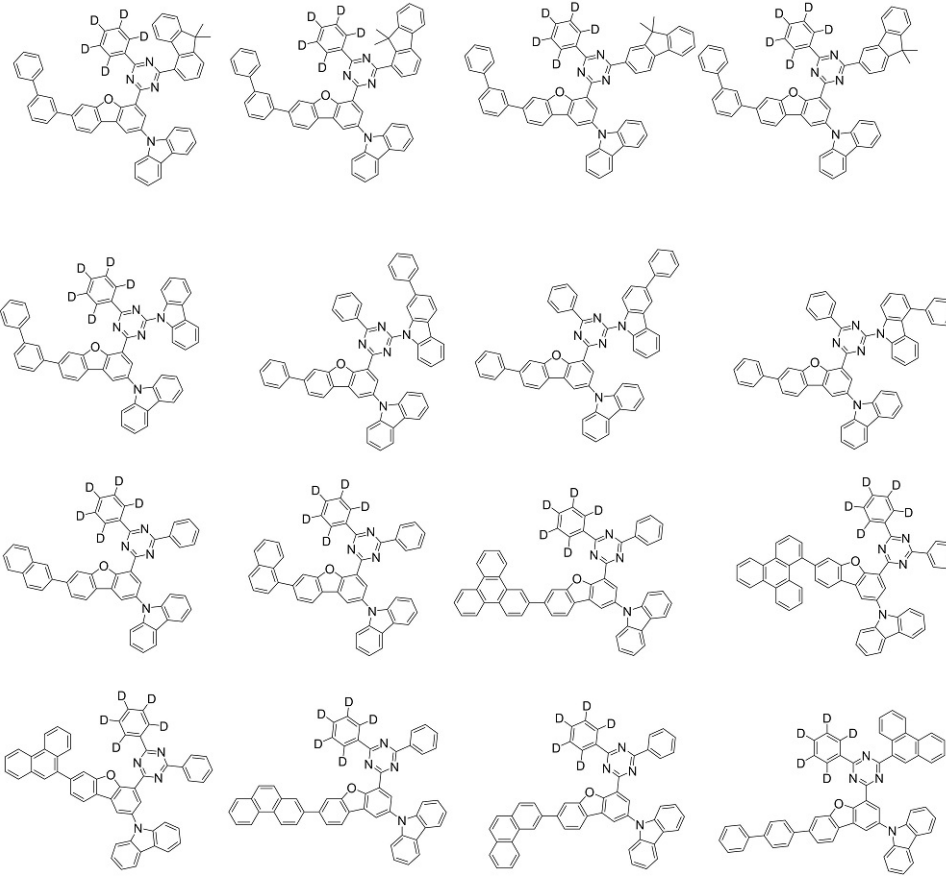
20

30

40

50

【化 6 5】



10

20

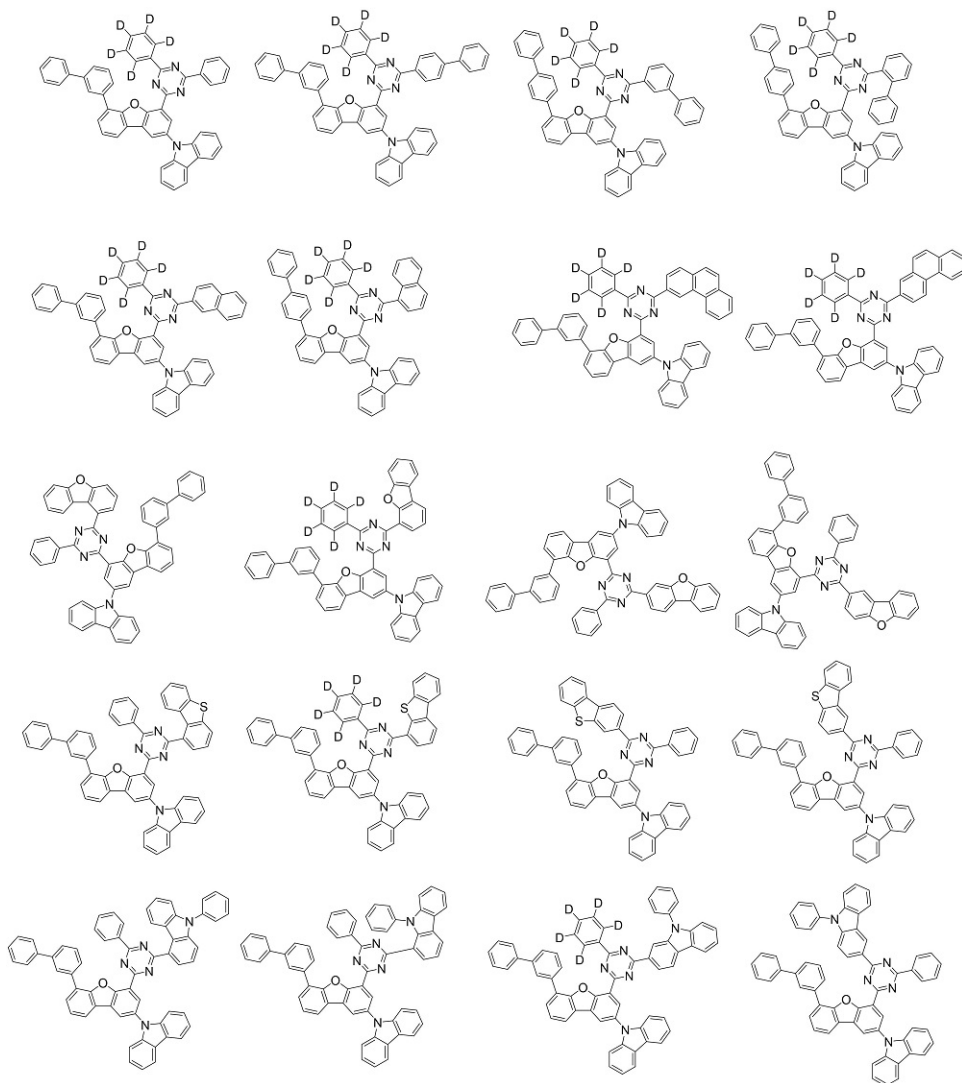
【 0 1 0 7】

30

40

50

【化 6 6】



【 0 1 0 8 】

10

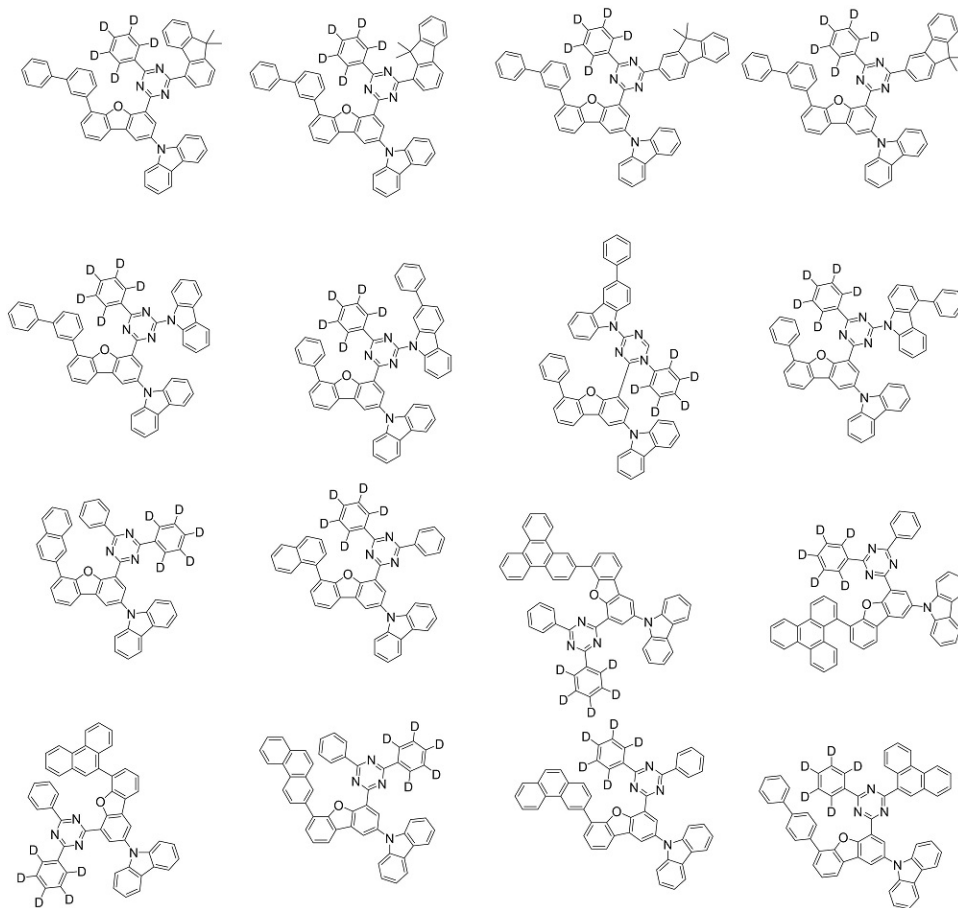
20

30

40

50

【化 6 7】

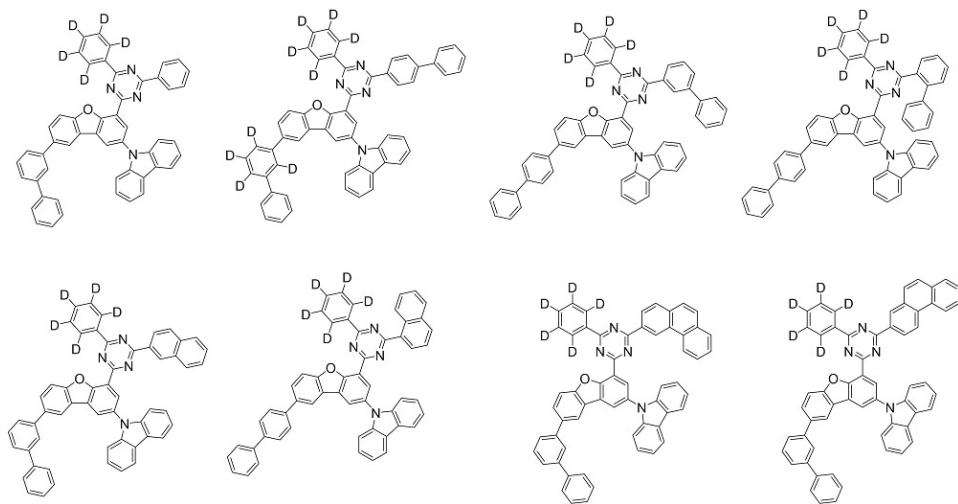


10

20

【 0 1 0 9】

【化 6 8】



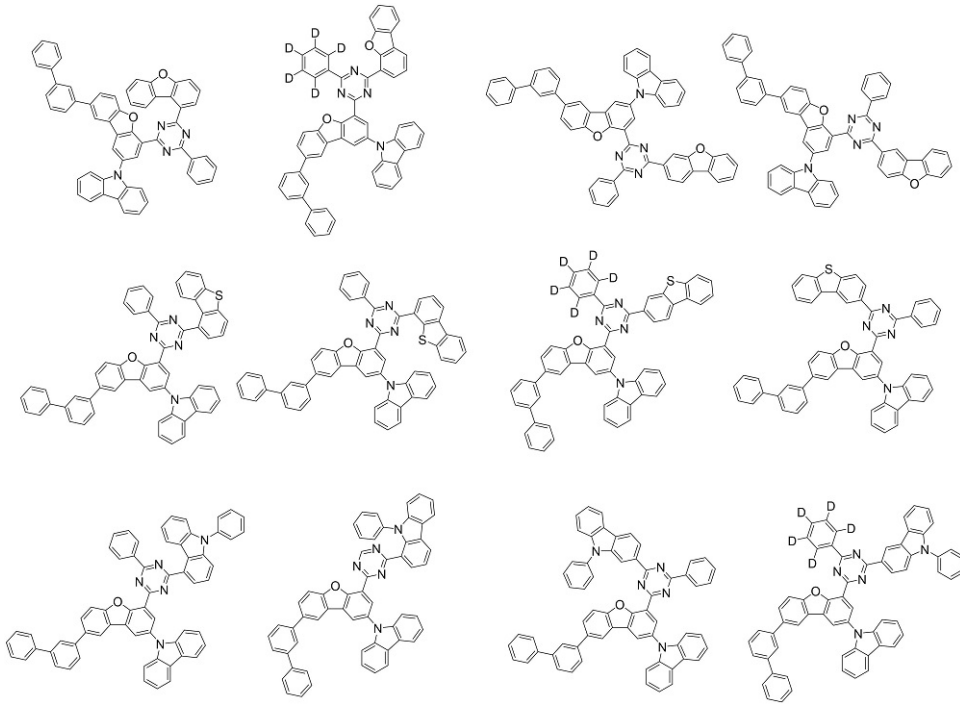
30

40

【 0 1 1 0】

50

【化69】

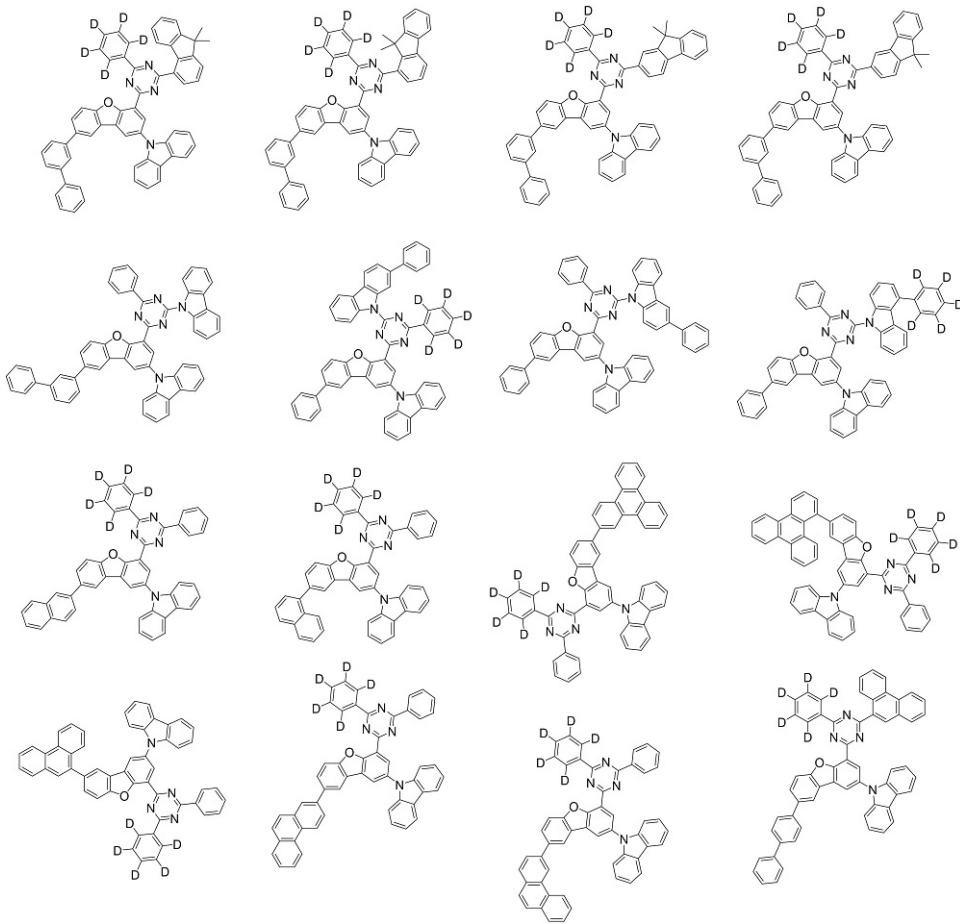


10

20

【0111】

【化70】



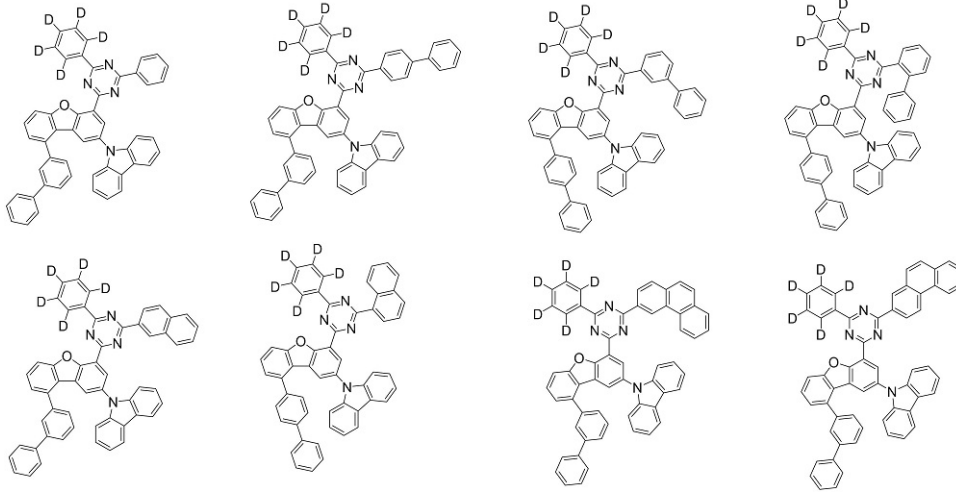
30

40

【0112】

50

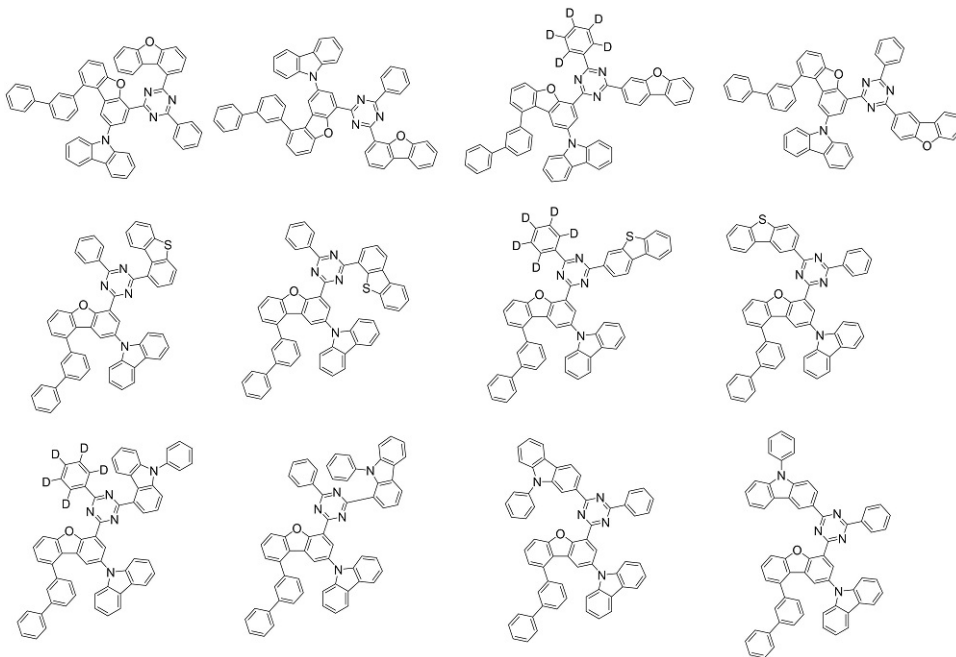
【化 7 1】



10

【 0 1 1 3】

【化 7 2】



20

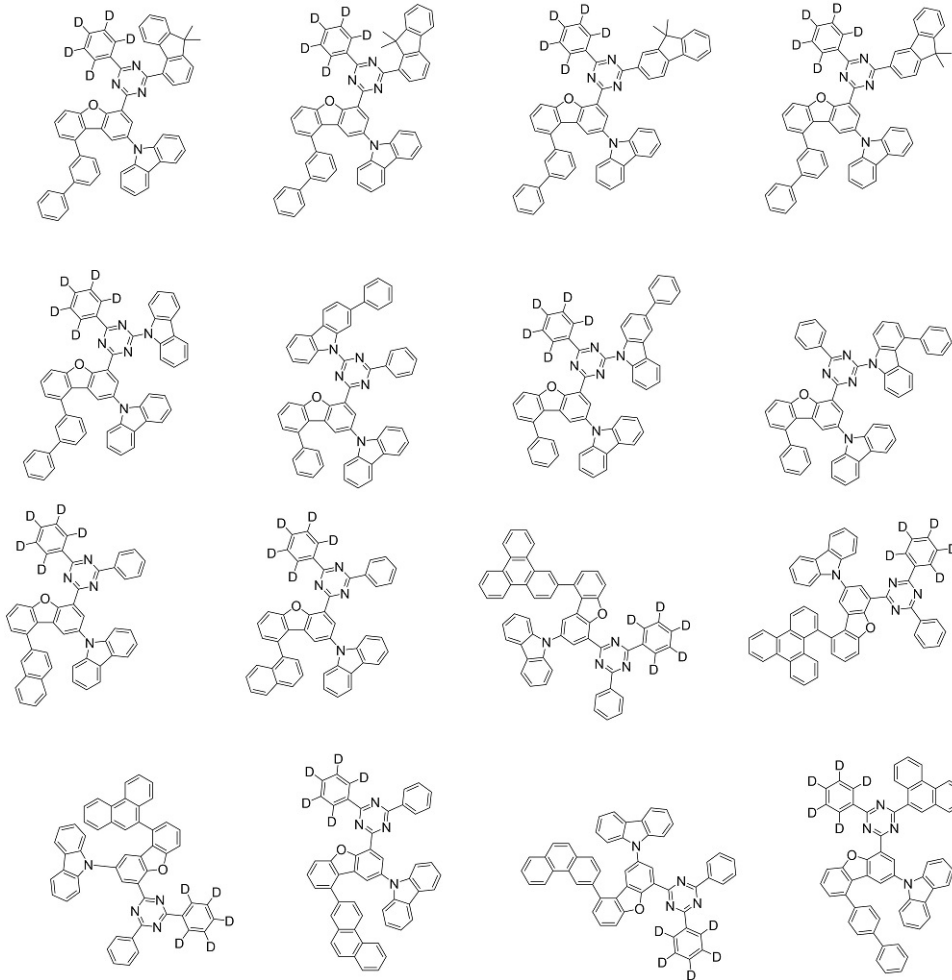
30

【 0 1 1 4】

40

50

## 【化 7 3】



10

20

## 【0 1 1 5】

本発明に係る化学式 1 で表される化合物は、ジベンゾフラン（ジベンゾチオフェン）のコア構造の片側のベンゼン環にカルbazool系置換基およびトリアジン（ピリミジン）系置換基を同時に含み、もう片側のベンゼン環にアリール置換基を含む構造的特性で熱安定性が改善され、かつ高効率、低駆動電圧、高輝度および長寿命などを有し得る。特に、本発明において  $Ar_1$ 、 $Ar_2$  および  $Ar_3$  の全てが、同一または異なる置換または非置換の炭素数 6 ~ 60 のアリールである場合、 $Ar_1$ 、 $Ar_2$  および  $Ar_3$  のうちのいずれか一つは重水素で 4 以上置換されるが、これから LUMO が安定化されるので重水素が置換されず、末端  $Ar_1$ 、 $Ar_2$  および  $Ar_3$  の全てがアリール構造の化合物を採用した有機発光素子に比べて、改善された長寿命特性を有する。また、電子特性が強いトリアジンにヘテロアリール基を置換することで、正孔と電子のバランスがよくとられて素子の効率および寿命側面において長所を有する。

30

## 【0 1 1 6】

上記化学式 1 で表される化合物は、下記反応式 1 - 1 および反応式 1 - 2 を経て製造することができる。

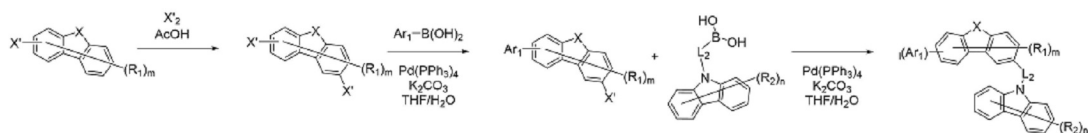
40

## 【0 1 1 7】

[ 反応式 1 - 1 ]

## 【0 1 1 8】

## 【化 7 4】



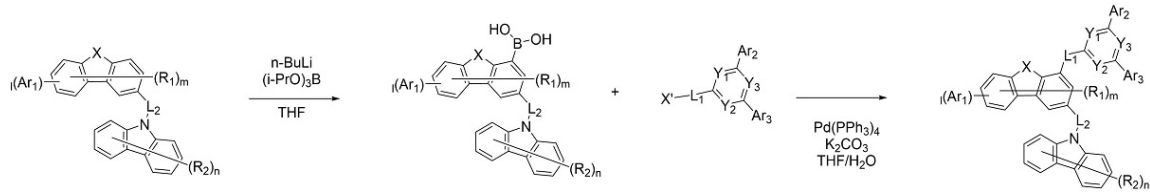
50

【 0 1 1 9 】

[ 反 応 式 1 - 2 ]

【 0 1 2 0 】

【 化 7 5 】



10

【 0 1 2 1 】

上記反応式 1 - 1 および 1 - 2 中の X' はハロゲンであり、好ましくは臭素または塩素であり、残りの置換基に対する説明は先に定義したとおりである。

【 0 1 2 2 】

前記反応は、鈴木カップリング ( Suzuki coupling ) 反応で、パラジウム触媒と塩基の存在下で行うことが好ましく、前記反応のための反応物および触媒などは当業界で公知のものによって変更可能である。前記製造方法は、後述する製造例でより具体化される。なお、置換基を複数個導入する場合、当該段階を繰り返し行って具現される (例えば、複数個の Ar<sub>1</sub> 導入は、反応式 1 - 1 で最初の段階を何回行って具現される。この場合、目的とする構造を導入するため、当該分野で公知の保護基および脱保護基反応も一緒に行うことができる。 )。

20

【 0 1 2 3 】

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

【 0 1 2 4 】

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

30

【 0 1 2 5 】

また、前記有機物層は、正孔注入層、正孔輸送層、または正孔注入および輸送を同時に行う層を含み、前記正孔注入層、正孔輸送層、または正孔注入および輸送を同時に行う層は、前記化学式 1 で表される化合物を含む。

【 0 1 2 6 】

また、前記有機物層は発光層を含み、前記発光層は、前記化学式 1 で表される化合物を含む。

40

【 0 1 2 7 】

また、前記有機物層は、電子輸送層または電子注入層を含み、前記電子輸送層または電子注入層は、前記化学式 1 で表される化合物を含む。

【 0 1 2 8 】

また、前記電子輸送層、電子注入層、または電子注入および電子輸送を同時に行う層は、前記化学式 1 で表される化合物を含む。特に、本発明に係る化学式 1 で表される化合物は熱的安定性に優れて、6 . 0 e V 以上の深い HOMO 準位、高い三重項エネルギー ( E T )、および正孔の安定性を有している。また、前記化学式 1 で表される化合物を電子注入および電子輸送を同時に行うことができる有機物層に用いる場合、当業界で使用する n 型ドーパントを混合して使用することができる。

50

## 【0129】

また、前記有機物層は発光層および電子輸送層を含み、前記電子輸送層は、前記化学式1で表される化合物を含み得る。

## 【0130】

また、本発明に係る有機発光素子は、基板上に、正極、1層以上の有機物層、および負極が順次に積層された構造(normal type)の有機発光素子であり得る。また、本発明に係る有機発光素子は、基板上に、負極、1層以上の有機物層、および正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り得る。例えば、本発明の一実施形態によ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。

10

## 【0131】

図1は、基板1、正極2、発光層3、負極4からなる有機発光素子の構造が例示されている。この構造において、前記化学式1で表される化合物は、前記発光層に含まれ得る。

## 【0132】

図2は、基板1、正極2、正孔注入層5、正孔輸送層6、発光層7、電子輸送層8、および負極4からなる有機発光素子の構造が例示されている。この構造において、前記化学式1で表される化合物は、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層以上に含まれ得る。

## 【0133】

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

20

## 【0134】

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

30

## 【0135】

また、前記化学式1で表される化合物は、有機発光素子の製造時、真空蒸着法のみならず、溶液塗布法によって有機物層に形成され得る。ここで、溶液塗布法とは、スピンコーティング、ディップコーティング、ドクターブレードイング、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。

## 【0136】

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

40

## 【0137】

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

## 【0138】

前記正極物質としては、通常有機物層への正孔注入が円滑となるように仕事関数の大きい物質が好ましい。前記正極物質の具体的な例としては、バナジウム、クロム、銅、亜鉛、金などの金属、またはこれらの合金；亜鉛酸化物、インジウム酸化物、インジウムスズ

50

酸化物 (ITO)、インジウム亜鉛酸化物 (IZO) などの金属酸化物; ZnO:Al または  $\text{SnO}_2$ :Sb などの金属と酸化物との組み合わせ; ポリ(3-メチルチオフェン)、ポリ[3,4-(エチレン-1,2-ジオキシ)チオフェン] (PEDOT)、ポリピロールおよびポリアニリンなどの導電性高分子などがあるが、これらにのみ限定されるものではない。

#### 【0139】

前記負極物質としては、通常有機物層への電子注入が容易となるように仕事関数の小さい物質であることが好ましい。前記負極物質の具体的な例としては、マグネシウム、カルシウム、ナトリウム、カリウム、チタニウム、インジウム、イットリウム、リチウム、ガドリニウム、アルミニウム、銀、スズおよび鉛などの金属、またはこれらの合金; LiF/Al または  $\text{LiO}_2$ /Al などの多層構造物質などがあるが、これらにのみ限定されるものではない。

10

#### 【0140】

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

20

#### 【0141】

前記正孔輸送層は、正孔注入層から正孔を受け取って発光層まで正孔を輸送する層で、正孔輸送物質としては、正極や正孔注入層から正孔輸送を受けて発光層に移し得る物質で、正孔に対する移動性の大きい物質が好適である。具体的な例としては、アリールアミン系の有機物、導電性高分子、および共役部分と非共役部分が共にい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。

30

#### 【0142】

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および電子の輸送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。具体的な例としては、8-ヒドロキシ-キノリンアルミニウム錯体 ( $\text{Alq}_3$ ); カルバゾール系化合物; 二量体化スチリル (dimerized styryl) 化合物;  $\text{BALq}$ ; 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。

#### 【0143】

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

40

#### 【0144】

ドーパント材料としては、芳香族アミン誘導体、スチリルアミン化合物、ホウ素錯体、フルオランテン化合物、金属錯体などがある。具体的には、芳香族アミン誘導体としては、置換または非置換のアリールアミノ基を有する縮合芳香族環誘導体であって、アリール

50

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

【0145】

前記電子輸送層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、負極から電子注入をよく受け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。具体的な例としては、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ているような、任意の所望するカソード物質と共に使用可能である。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。

10

【0146】

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、負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。

20

【0147】

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

30

【0148】

本発明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り得る。

【0149】

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

40

【0150】

前記化学式1で表される化合物およびこれを含む有機発光素子の製造を以下の実施例で具体的に説明する。しかし、下記の実施例は本発明を例示するためのものであり、本発明の範囲がこれらによって限定されるものではない。

【0151】

<製造例>

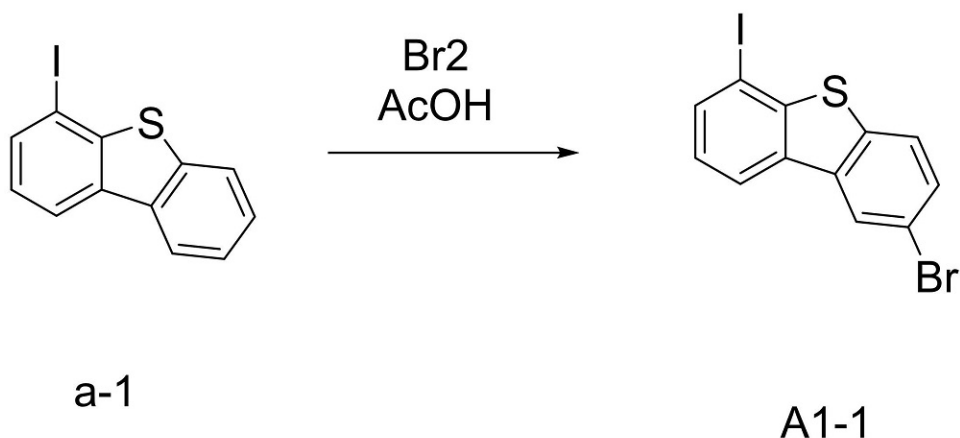
【0152】

製造例1-1：中間体化合物Bの製造

【0153】

50

【化 7 6】



10

【0154】

窒素雰囲気乾燥された丸いフラスコに、化合物 a - 1 (4 - ヨードジベンゾチオフェン) (20 g、96.73 mmol) を入れ、クロロホルム 500 ml を入れた。その後、臭素 (12.4 ml、24.1 mmol) 2.5 eq を滴下した後、常温で 12 時間反応させた。反応終了後、ジクロロメタンとチオ硫酸ナトリウム水溶液で抽出した後、有機層を無水硫酸マグネシウムで乾燥しろ過した。ろ過された有機層を減圧濃縮した後、酢酸エチルとヘキサンで結晶して、白い化合物 A 1 - 1 (28 g、75%、MS : [M + H]<sup>+</sup> = 388) を得た。

20

【0155】

製造例 1 - 2 ~ 1 - 8 : 中間体化合物 B の製造

【0156】

前記製造例 1 - 1 で反応物として化合物 a - 1 (4 - ヨードジベンゾチオフェン) の代わりに下記表 1 の反応物 A を使用したことを除いて、化合物 A 1 - 1 を製造する方法と同様の方法で、中間体化合物 B を製造した。

【0157】

[表 1]

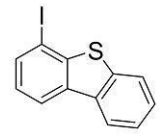

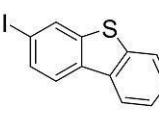

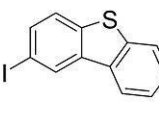
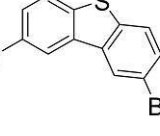
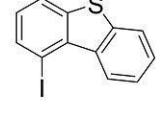
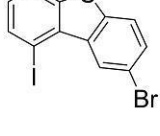
【0158】

30

40

50

【表 1】

区分	反応物A	中間体化合物B	色	収率(%)	MS: [M+H] <sup>+</sup>
製造例1-1	 a-1	 A1-1	白い	75%	388
製造例1-2	 a-2	 A1-2	白い	82%	388
製造例1-3	 a-3	 A1-3	白い	69%	388
製造例1-4	 a-4	 A1-4	白い	71%	388

【 0 1 5 9 】

10

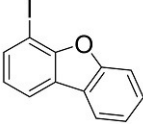
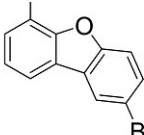
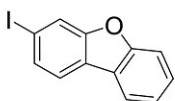
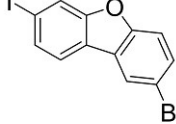
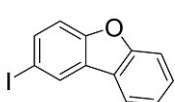
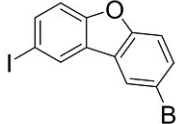
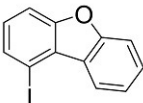
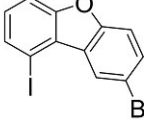
20

30

40

50

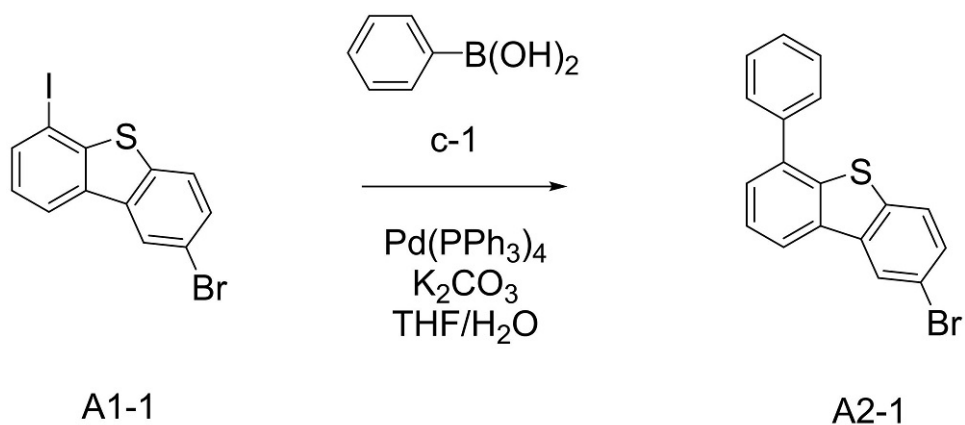
【表 2】

区分	反応物A	中間体化合物B	色	収率(%)	MS: [M+H] <sup>+</sup>
製造例1-5	 b-1	 B1-1	白い	55%	388
製造例1-6	 b-2	 B1-2	白い	60%	388
製造例1-7	 b-3	 B1-3	白い	62%	388
製造例1-8	 b-4	 B1-4	白い	59%	388

【0160】

製造例 2 - 1 : 中間体化合物 D の製造

【化 7 7】



【0161】

窒素雰囲気下で化合物 A 1 - 1 (20 g、51.41 mmol) と化合物 c - 1 (フェニルボロン酸) (6.27 g、51.41 mmol) をテトラヒドロフラン (150 mL) に溶かした後、炭酸カリウム (21.3 g、154.2 mmol) を水 (50 mL) に溶かして添加し、テトラキス(トリフェニルホスフィン)パラジウム (1.8 g、1.54

mmol)を入れた後、9時間、60℃で加熱および攪拌した。常温に温度を下げ、ろ過して水とエタノールで洗浄した後、乾燥して化合物A2-1を製造した(15.2g、収率87%、MS:[M+H]<sup>+</sup>=338)。

【0162】

製造例2-2~2-9: 中間体化合物Dの製造

【0163】

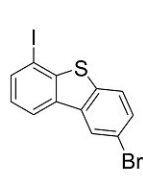
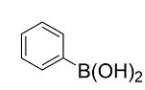
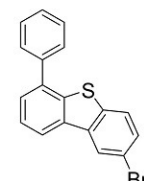
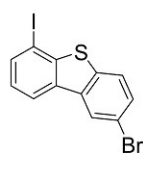
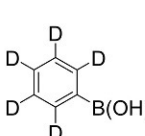
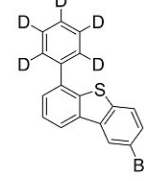
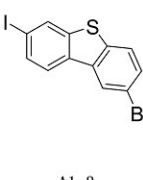
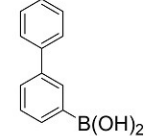
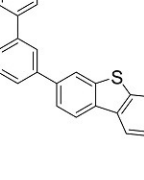
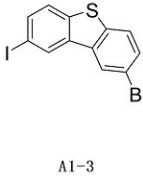
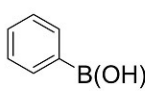
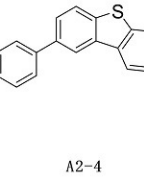
前記製造例2-1で化合物A1-1および化合物c-1(フェニルボロン酸)の代わりに下記表2の中間体化合物Bおよび中間体化合物Cを使用したことを除いて、製造例2-1と同様の方法で、中間体化合物Dを製造した。

【0164】

[表2]

【0165】

【表3】

区分	中間体化合物B	中間体化合物C	中間体化合物D	色	収率	MS :[M+H] <sup>+</sup>
製造例2-1	 A1-1	 c-1	 A2-1	白い	87%	338
製造例2-2	 A1-1	 c-2	 A2-2	白い	77%	344
製造例2-3	 A1-2	 c-3	 A2-3	白い	89%	415
製造例2-4	 A1-3	 c-1	 A2-4	白い	94%	338

【0166】

10

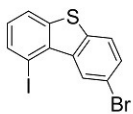
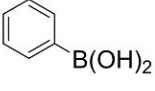
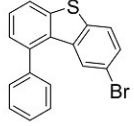
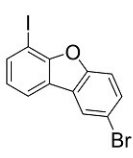
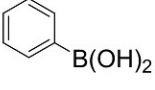
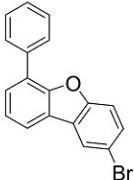
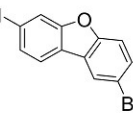
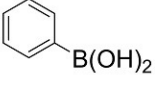
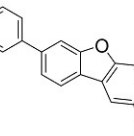
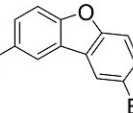
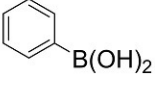
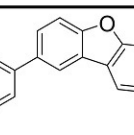
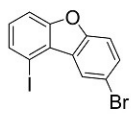
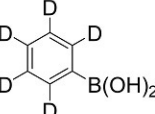
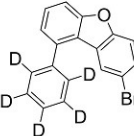
20

30

40

50

【表 4】

区分	中間体化合物B	中間体化合物C	中間体化合物D	色	収率	MS :[M+H] <sup>+</sup>
製造例2-5	 A1-4	 c-1	 A2-5	白い	81%	338
製造例2-6	 B1-1	 c-1	 B2-1	白い	87%	323
製造例2-7	 B1-2	 c-1	 B2-2	白い	92%	323
製造例2-8	 B1-3	 c-1	 B2-3	白い	90%	323
製造例2-9	 B1-4	 c-2	 B2-4	白い	89%	328

【 0 1 6 7 】

製造例 3 - 1 : 中間体化合物 F の製造

【 0 1 6 8 】

10

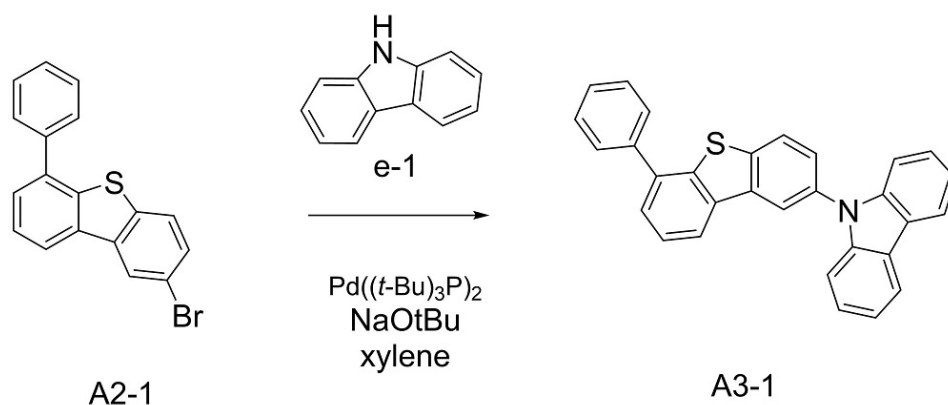
20

30

40

50

## 【化 7 8】



10

## 【0169】

窒素雰囲気下で化合物 A2-1 (15 g、44.22 mmol) と化合物 e-1 (9H-カルバゾール) (7.39 g、44.22 mmol) をキシレン (150 mL) に溶かした後、NaOtBu (6.4 g、66.32 mmol) を添加し、ビス(トリ-*t*-ブチルホスフィン)パラジウム(0) (0.7 g、1.33 mmol) を入れた後、12時間加熱および攪拌した。常温に温度を下げ、ろ過して水とエタノールで洗浄した後、乾燥して化合物 A3-1 を製造した (13.9 g、収率 74%、MS:  $[M+H]^+ = 426$ )。

20

## 【0170】

製造例 3-2 ~ 3-10: 中間体化合物 F の製造

## 【0171】

前記製造例 3-1 で化合物 A2-1 および化合物 e-1 (フェニルボロン酸) の代わりに下記表 3 の中間体化合物 D および中間体化合物 E を使用したことを除いて、製造例 3-1 と同様の方法で、中間体化合物 F を製造した。

## 【0172】

[表 3]

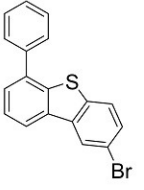
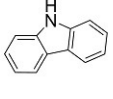
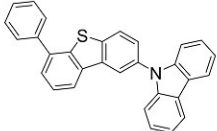
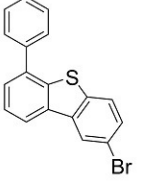
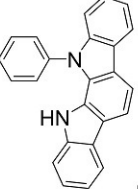
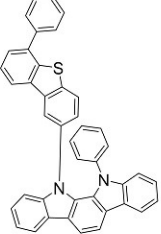
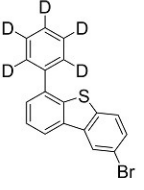
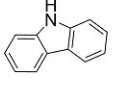
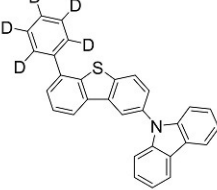
## 【0173】

30

40

50

【表 5】

区分	中間体化合物D	中間体化合物E	中間体化合物F	色	収率	MS :[M+H] <sup>+</sup>
製造例 3-1	 A2-1	 e-1	 A3-1	黄色	74%	426
製造例 3-2	 A2-1	 e-2	 A3-2	黄色	75%	591
製造例 3-3	 A2-2	 e-1	 A3-3	黄色	72%	431

【 0 1 7 4 】

10

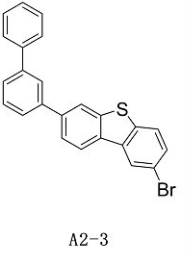
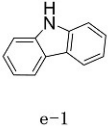
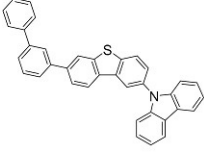
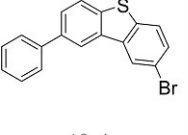
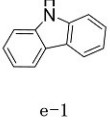
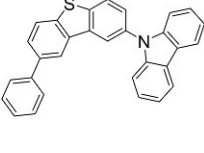
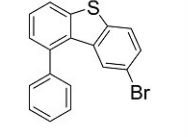
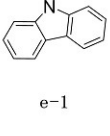
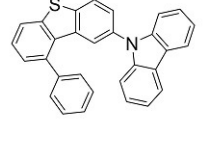
20

30

40

50

【表 6】

区分	中間体化合物D	中間体化合物E	中間体化合物F	色	収率	MS : [M+H] <sup>+</sup>
製造例 3-4	 A2-3	 e-1	 A3-4	黄色	65%	502
製造例 3-5	 A2-4	 e-1	 A3-5	黄色	88%	426
製造例 3-6	 A2-5	 e-1	 A3-6	黄色	72%	338

【 0 1 7 5 】

10

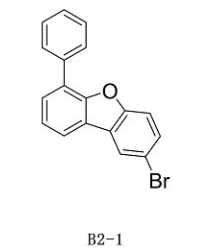
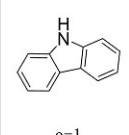
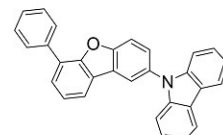
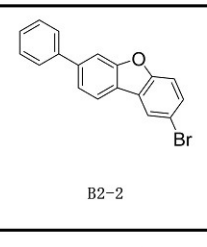
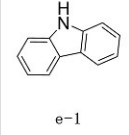
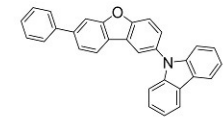
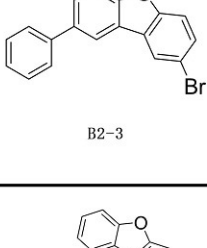
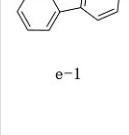
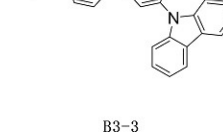
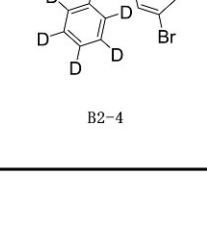
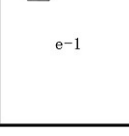
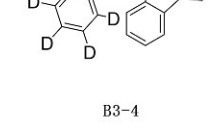
20

30

40

50

【表 7】

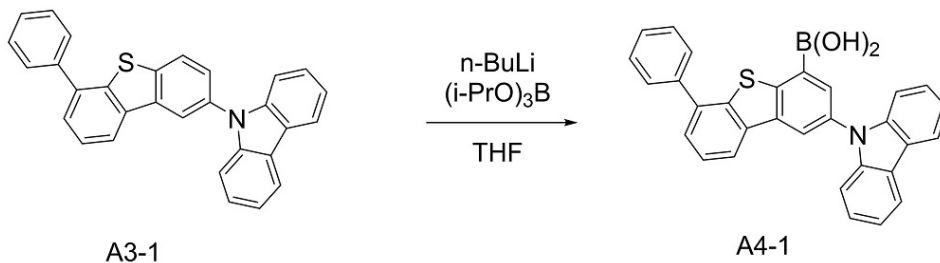
区分	中間体化合物D	中間体化合物E	中間体化合物F	色	収率	MS :[M+H] <sup>+</sup>
製造例 3-7	 B2-1	 e-1	 B3-1	黄色	86%	410
製造例 3-8	 B2-2	 e-1	 B3-2	黄色	81%	410
製造例 3-9	 B2-3	 e-1	 B3-3	黄色	79%	410
製造例 3-10	 B2-4	 e-1	 B3-4	黄色	77%	415

## 【0176】

製造例 4 - 1 : 化合物 A 1 - 4 の製造

## 【0177】

## 【化79】



## 【0178】

窒素雰囲気乾燥された丸底フラスコに、化合物 A 3 - 1 (14 g、32.90 mmol) を THF 150 mL に溶かした後、 $-78^\circ\text{C}$  で 1.6 M n-BuLi (26.73 mL、42.77 mmol) をゆっくり滴下した後、室温で 1 時間攪拌した。 $-78^\circ\text{C}$  で反応混合物にイソプロピルポラート (i-PrO)<sub>3</sub>B (26.5 mL、115.1 mmol) を滴下した後、室温で 1 時間攪拌した。反応終了後、室温で塩化アンモニウム水溶液で抽出した後、有機層は MgSO<sub>4</sub> で乾燥し濃縮した後、酢酸エチルで再結晶して、化合物 A 4 - 1 を得た (10 g、収率 65%、MS : [M+H]<sup>+</sup> = 470)。

10

20

30

40

50

【 0 1 7 9 】

製造例 4 - 2 ~ 3 - 1 0 : 中間体化合物 G の製造

【 0 1 8 0 】

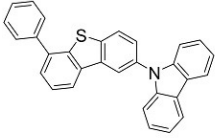
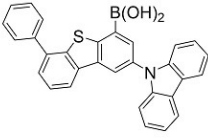
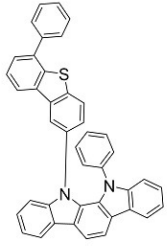
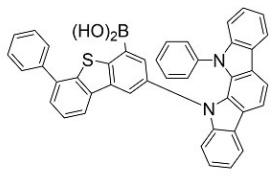
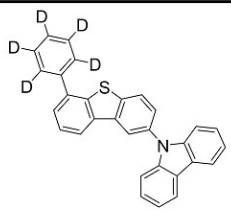
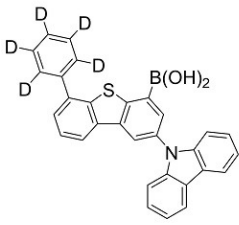
前記製造例 4 - 1 で化合物 A 3 - 1 および化合物の代わりに下記表 4 の中間体化合物 F を使用したことを除いて、製造例 4 - 1 と同様の方法で、中間体化合物 G を製造した。

【 0 1 8 1 】

[ 表 4 ]

【 0 1 8 2 】

【 表 8 】

区分	中間体化合物F	中間体化合物G	色	収率	MS : [M+H] <sup>+</sup>
製造例 4-1	 A3-1	 A4-1	白い	65%	470
製造例 4-2	 A3-2	 A4-2	白い	62%	635
製造例 4-3	 A3-3	 A4-3	白い	69%	475

10

20

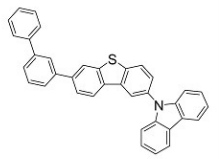
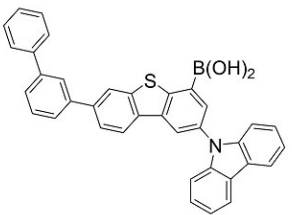
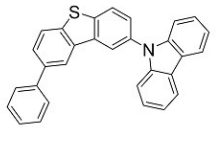
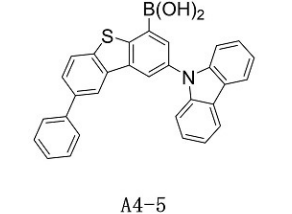
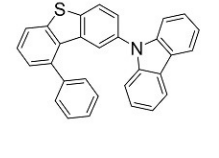
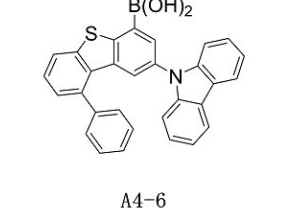
30

【 0 1 8 3 】

40

50

【表 9】

区分	中間体化合物F	中間体化合物G	色	収率	MS : [M+H] <sup>+</sup>
製造例 4-4	 A3-4	 A4-4	白い	70%	546
製造例 4-5	 A3-5	 A4-5	白い	67%	470
製造例 4-6	 A3-6	 A4-6	白い	63%	470

【 0 1 8 4 】

10

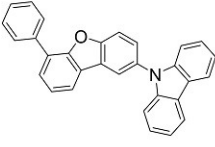
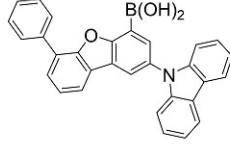
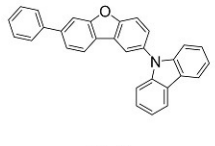
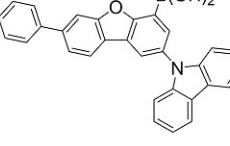
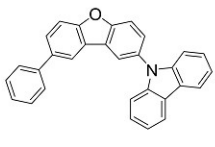
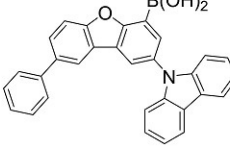
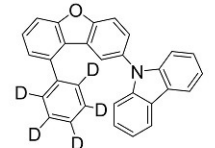
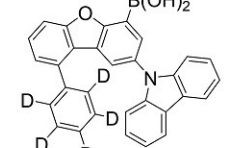
20

30

40

50

【表 10】

区分	中間体化合物F	中間体化合物G	色	収率	MS :[M+H] <sup>+</sup>
製造例 4-7	 B3-1	 B4-1	白い	71%	454
製造例4-8	 B3-2	 B4-2	白い	76%	454
製造例 4-9	 B3-3	 B4-3	白い	59%	454
製造例 4-10	 B3-4	 B4-4	白い	77%	459

【0185】

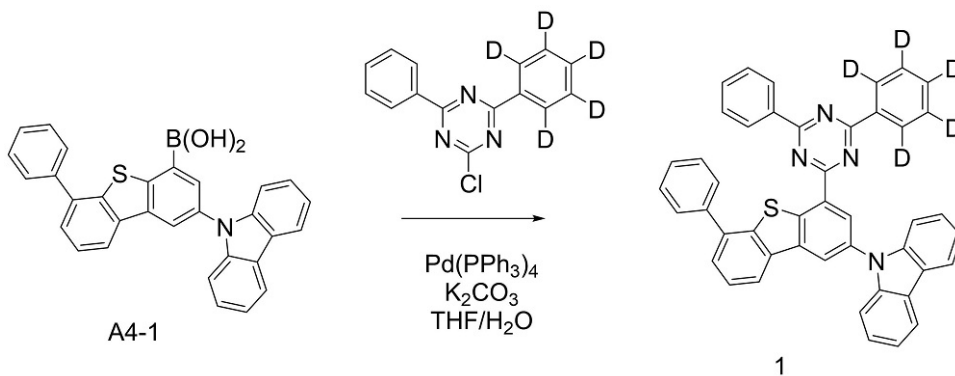
&lt; 実施例 &gt;

【0186】

実施例 1 : 化合物 1 の製造

【0187】

【化 80】



【0188】

化合物 A4-1 (15 g、31.96 mmol) と 2-chloro-4-phenyl-1,3,5-triazine-d<sub>5</sub> (8.71 g、31.

10

20

30

40

50

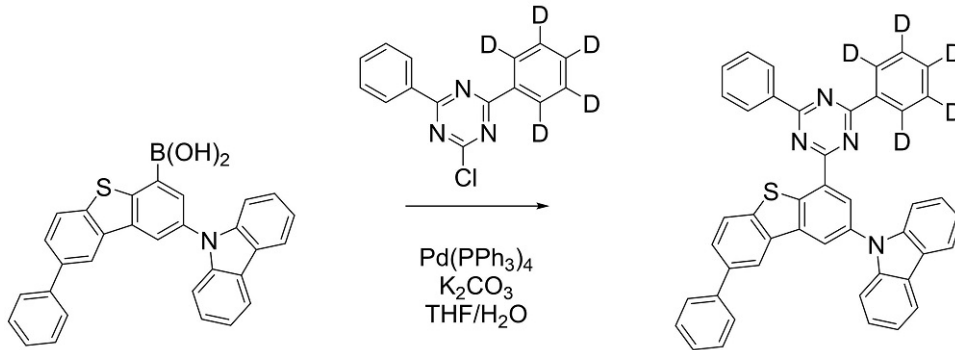
96 mmol) を THF (150 mL) に溶かした後、炭酸カリウム (Potassium carbonate) (13.3 g、211.10 mmol) を添加し、テトラキス(トリフェニルホスフィン)パラジウム (1.1 g、0.96 mmol) を入れた後、8 時間加熱および攪拌した。常温に温度を下げ、水層を分離して除去する。無水硫酸マグネシウムで乾燥した後、ろ過して減圧濃縮させ、酢酸エチルを用いて再結晶化した後、ろ過して乾燥した後、化合物 1 を製造した (15.7 g、収率 74%、MS:  $[M+H]^+ = 662$ )。

【0189】

実施例 2：化合物 2 の製造

【0190】

【化 8 1】



A4-5

2

【0191】

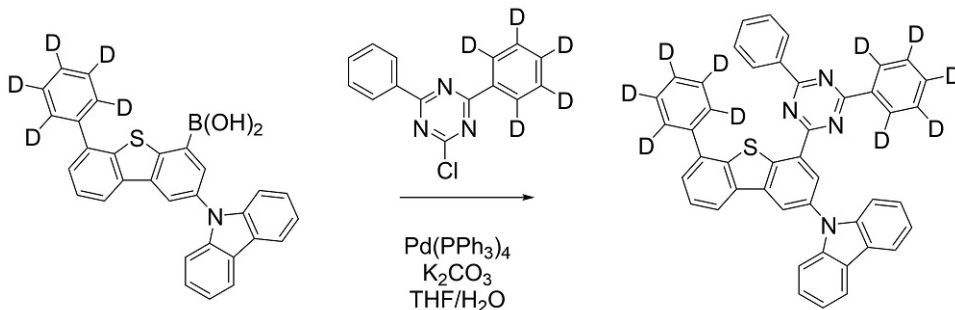
化合物 A4-1 の代わりに化合物 A4-5 を使用したことを除いて、化合物 1 を製造する方法と同様の方法で、化合物 2 を製造した (15.0 g、収率 71% ; MS:  $[M+H]^+ = 662$ )。

【0192】

実施例 3：化合物 3 の製造

【0193】

【化 8 2】



A4-3

3

【0194】

化合物 A4-1 の代わりに化合物 A4-3 を使用したことを除いて、化合物 1 を製造する方法と同様の方法で、化合物 3 を製造した (15.0 g、収率 71% ; MS:  $[M+H]^+ = 667$ )。

【0195】

実施例 4：化合物 4 の製造

【0196】

10

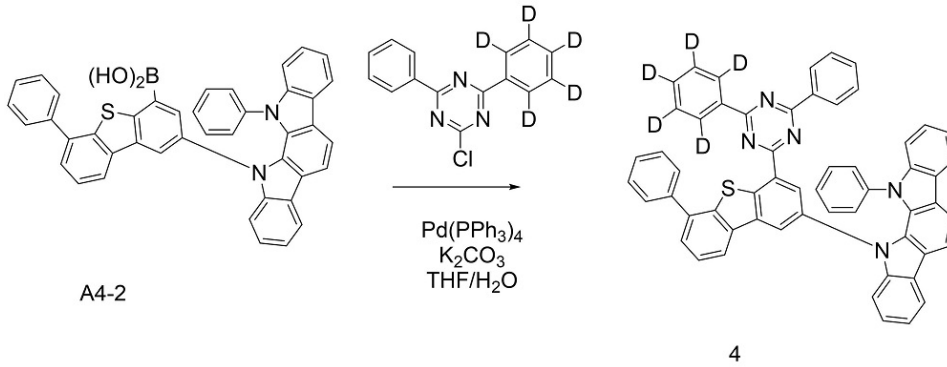
20

30

40

50

## 【化 8 3】



10

## 【 0 1 9 7】

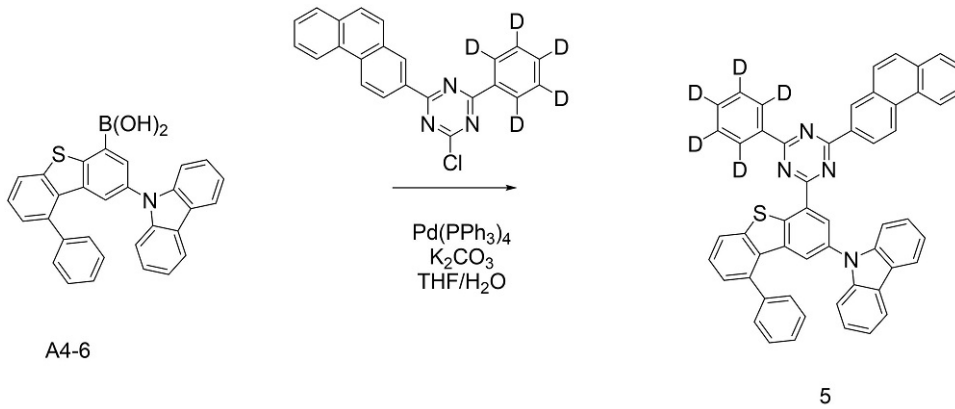
化合物 A 4 - 1 の代わりに化合物 A 4 - 2 を使用したことを除いて、化合物 1 を製造する方法と同様の方法で、化合物 4 を製造した ( 1 6 . 0 g 、 収率 8 2 % ; MS : [ M + H ] <sup>+</sup> = 8 2 7 ) 。

## 【 0 1 9 8】

実施例 5 : 化合物 5 の製造

## 【 0 1 9 9】

## 【化 8 4】



20

30

## 【 0 2 0 0】

化合物 A 4 - 2 および 2 - chloro - 4 - phenyl - 6 - ( phenyl - d 5 ) - 1 , 3 , 5 - triazine の代わりに化合物 A 4 - 6 および 2 - chloro - 4 - ( phenanthren - 2 - yl ) - 6 - ( phenyl - d 5 ) - 1 , 3 , 5 - triazine を使用したことを除いて、化合物 1 を製造する方法と同様の方法で、化合物 5 を製造した ( 1 6 . 0 g 、 収率 8 2 % ; MS : [ M + H ] <sup>+</sup> = 8 2 7 ) 。

## 【 0 2 0 1】

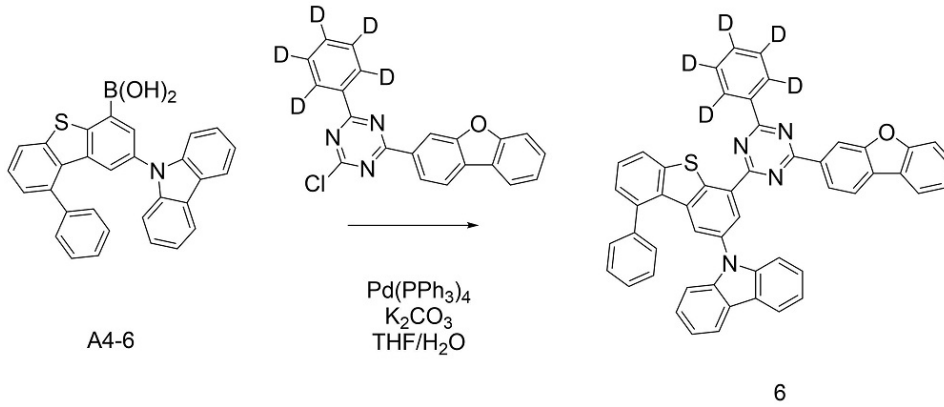
実施例 6 : 化合物 6 の製造

## 【 0 2 0 2】

40

50

## 【化 8 5】



10

## 【0203】

化合物 A4-1 および 2-chloro-4-phenyl-6-(phenyl-d5)-1,3,5-triazine の代わりに化合物 A4-6 および 2-chloro-4-(dibenzob[b,d]furan-3-yl)-6-(phenyl-d5)-1,3,5-triazine を使用したことを除いて、化合物 1 を製造する方法と同様の方法で、化合物 6 を製造した (17.8 g、収率 74% ; MS : [M+H]<sup>+</sup> = 752)。

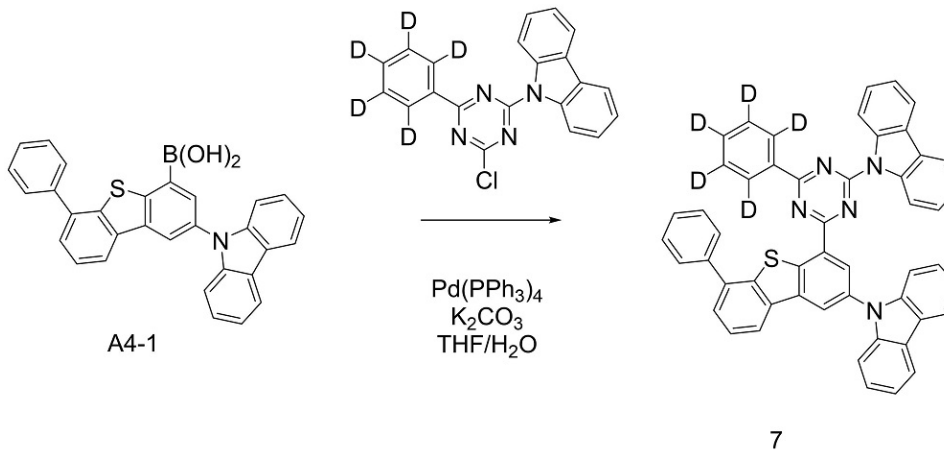
20

## 【0204】

実施例 7 : 化合物 7 の製造

## 【0205】

## 【化 8 6】



30

## 【0206】

2-chloro-4-phenyl-6-(phenyl-d5)-1,3,5-triazine の代わりに 9-(4-chloro-6-(phenyl-d5)-1,3,5-triazin-2-yl)-9H-carbazole を使用したことを除いて、化合物 1 を製造する方法と同様の方法で、化合物 7 を製造した (16.5 g、収率 69% ; MS : [M+H]<sup>+</sup> = 751)

40

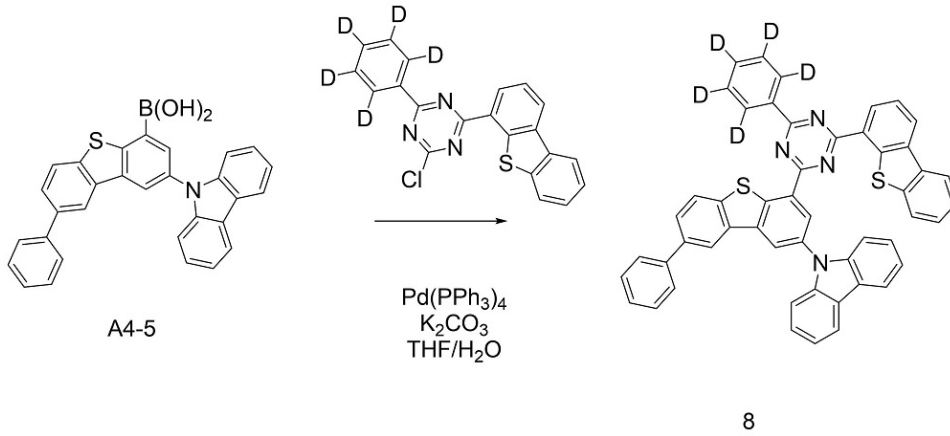
## 【0207】

実施例 8 : 化合物 8 の製造

## 【0208】

50

## 【化 8 7】



10

## 【0209】

化合物 A4-1 および 2-chloro-4-phenyl-6-(phenyl-d5)-1,3,5-triazine の代わりに化合物 A4-5 および 2-chloro-4-(dibenzothiophen-4-yl)-6-(phenyl-d5)-1,3,5-triazine を使用したことを除いて、化合物 1 を製造する方法と同様の方法で、化合物 8 を製造した (18.9 g、収率 77% ; MS : [M+H]<sup>+</sup> = 768)。

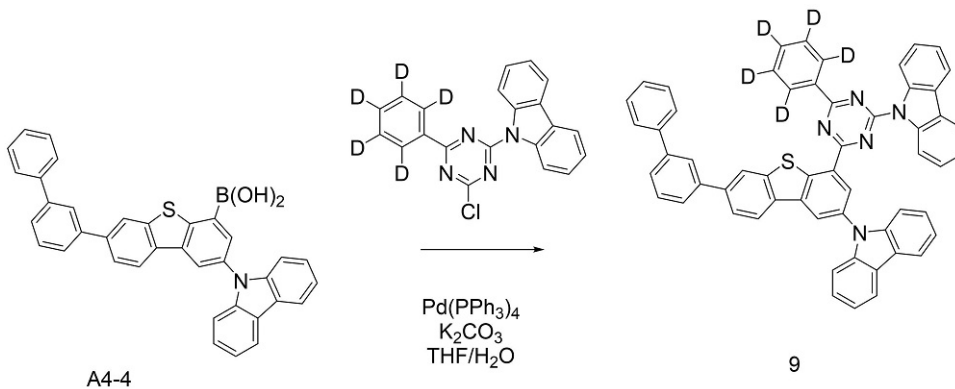
20

## 【0210】

実施例 9 : 化合物 9 の製造

## 【0211】

## 【化 8 8】



30

## 【0212】

化合物 A4-1 および 2-chloro-4-phenyl-6-(phenyl-d5)-1,3,5-triazine の代わりに化合物 A4-4 および 9-(4-chloro-6-(phenyl-d5)-1,3,5-triazin-2-yl)-9H-carbazole を使用したことを除いて、化合物 1 を製造する方法と同様の方法で、化合物 9 を製造した (14.8 g、収率 65% ; MS : [M+H]<sup>+</sup> = 827)。

40

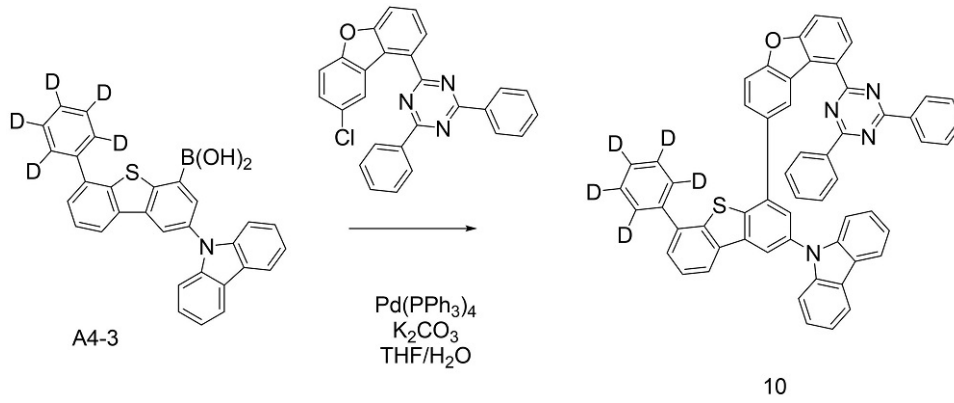
## 【0213】

実施例 10 : 化合物 10 の製造

## 【0214】

50

## 【化 8 9】



10

## 【 0 2 1 5】

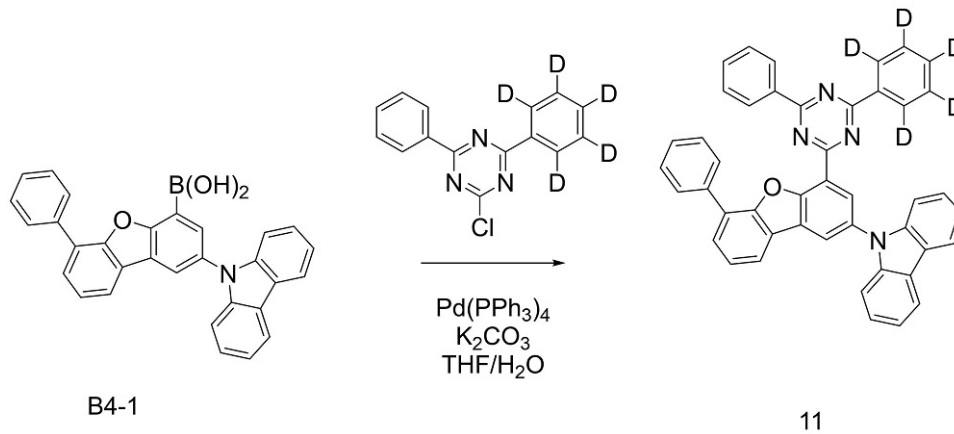
化合物 A 4 - 1 および 2 - chloro - 4 - phenyl - 6 - ( phenyl - d 5 ) - 1 , 3 , 5 - triazine の代わりに化合物 A 4 - 3 および 2 - ( 8 - chlorodibenzo [ b , d ] furan - 1 - yl ) - 4 , 6 - diphenyl - 1 , 3 , 5 - triazine を使用したことを除いて、化合物 1 を製造する方法と同様の方法で、化合物 1 0 を製造した ( 1 8 . 3 g 、 収率 7 0 % ; MS : [ M + H ] <sup>+</sup> = 8 2 8 ) 。

## 【 0 2 1 6】

実施例 1 1 : 化合物 1 1 の製造

20

## 【化 9 0】



30

## 【 0 2 1 7】

化合物 A 4 - 1 の代わりに化合物 B 4 - 1 を使用したことを除いて、化合物 1 を製造する方法と同様の方法で、化合物 1 1 を製造した ( 1 6 . 2 g 、 収率 7 6 % ; MS : [ M + H ] <sup>+</sup> = 6 4 6 ) 。

## 【 0 2 1 8】

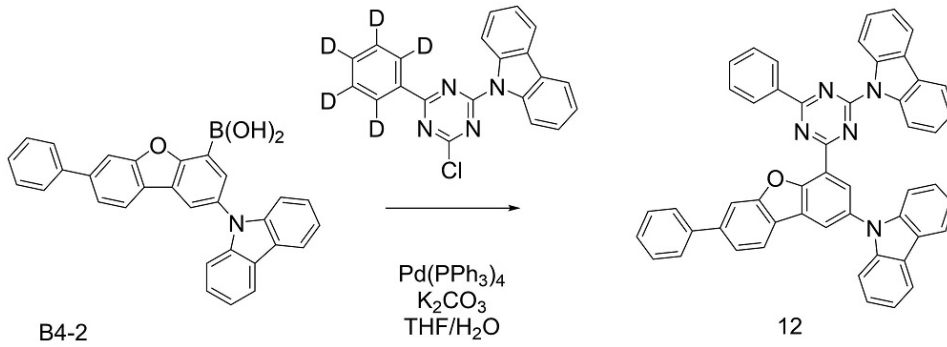
実施例 1 2 : 化合物 1 2 の製造

40

## 【 0 2 1 9】

50

## 【化 9 1】



B4-2

12

10

## 【0220】

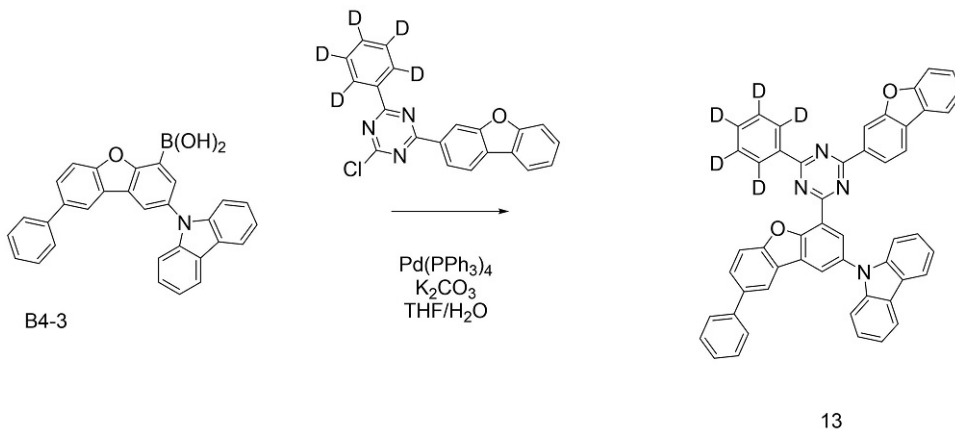
化合物 A 4 - 1 および 2 - chloro - 4 - phenyl - 6 - ( phenyl - d 5 ) - 1 , 3 , 5 - triazine の代わりに化合物 B 4 - 2 および 9 - ( 4 - chloro - 6 - ( phenyl - d 5 ) - 1 , 3 , 5 - triazin - 2 - yl ) - 9 H - carbazole を使用したことを除いて、化合物 1 を製造する方法と同様の方法で、化合物 1 2 を製造した ( 19 . 3 g 、 収率 80 % ; MS : [ M + H ] <sup>+</sup> = 730 ) 。

## 【0221】

実施例 1 3 : 化合物 1 3 の製造

## 【0222】

## 【化 9 2】



B4-3

13

30

## 【0223】

化合物 A 4 - 1 および 2 - chloro - 4 - phenyl - 6 - ( phenyl - d 5 ) - 1 , 3 , 5 - triazine の代わりに化合物 B 4 - 3 および 2 - chloro - 4 - ( dibenzo [ b , d ] furan - 3 - yl ) - 6 - ( phenyl - d 5 ) - 1 , 3 , 5 - triazine を使用したことを除いて、化合物 1 を製造する方法と同様の方法で、化合物 1 3 を製造した ( 16 . 6 g 、 収率 68 % ; MS : [ M + H ] <sup>+</sup> = 736 )

## 【0224】

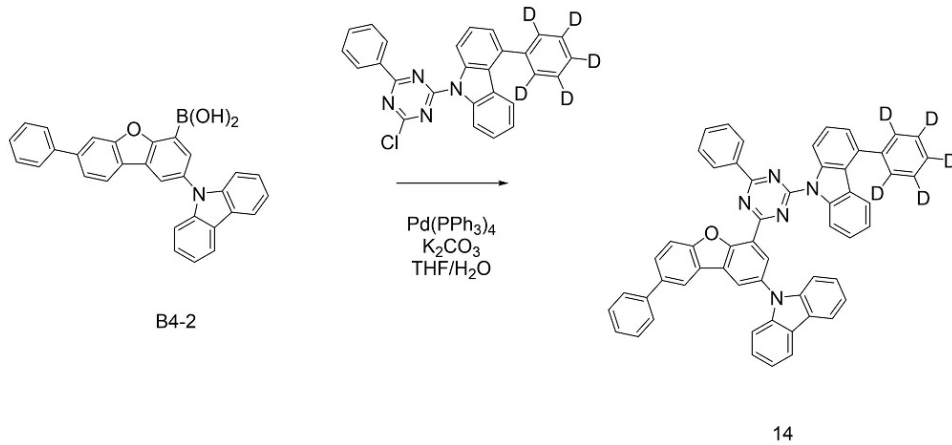
実施例 1 4 : 化合物 1 4 の製造

## 【0225】

40

50

## 【化93】



10

## 【0226】

化合物A4-1および2-chloro-4-phenyl-6-(phenyl-d5)-1,3,5-triazineの代わりに化合物B4-2および9-(4-chloro-6-phenyl-1,3,5-triazin-2-yl)-4-(phenyl-d5)-9H-carbazoleを使用したことを除いて、化合物1を製造する方法と同様の方法で、化合物14を製造した(19.3g、収率72%；MS：[M+H]<sup>+</sup>=811)。

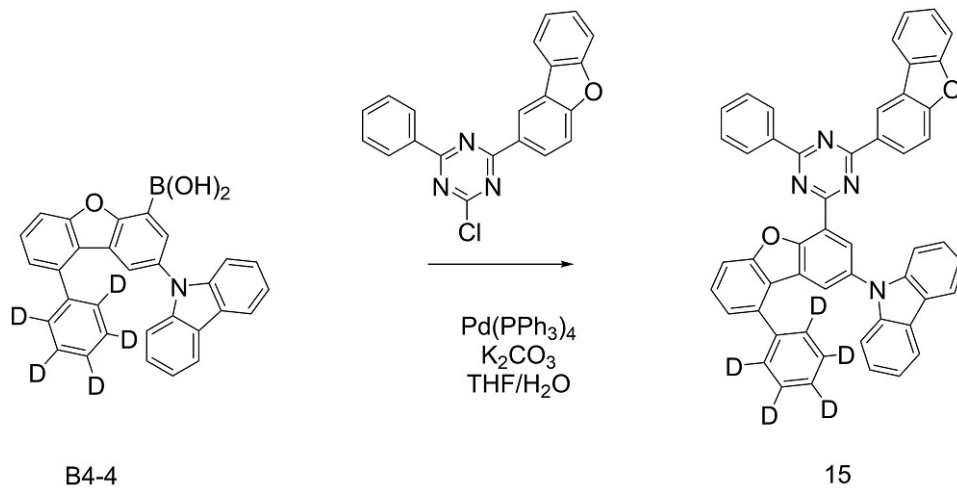
20

## 【0227】

実施例15：化合物15の製造

## 【0228】

## 【化94】



30

## 【0229】

化合物A4-4および2-chloro-4-phenyl-6-(phenyl-d5)-1,3,5-triazineの代わりに化合物B4-4および2-chloro-4-(dibenzo[b,d]furan-3-yl)-6-(phenyl-d5)-1,3,5-triazineを使用したことを除いて、化合物1を製造する方法と同様の方法で、化合物15を製造した(18.8g、収率78%；MS：[M+H]<sup>+</sup>=736)。

40

## 【0230】

[実験例]

## 【0231】

実験例1

50

## 【0232】

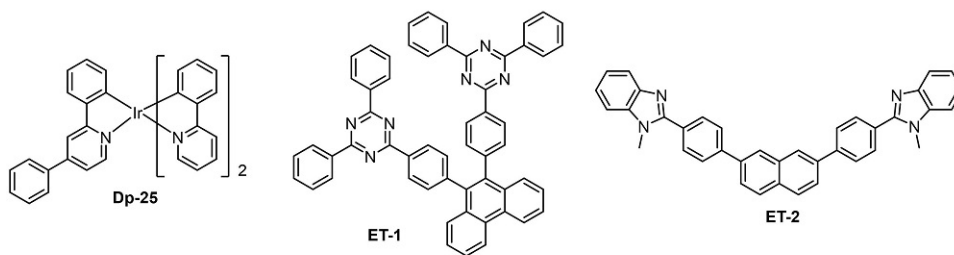
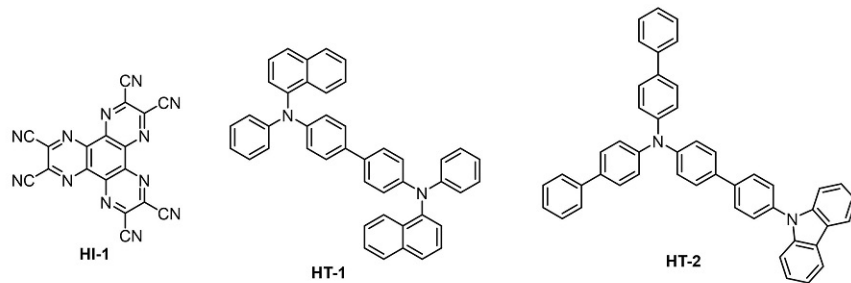
I T O ( i n d i u m t i n o x i d e ) が 1 3 0 n m の 厚 さ に 薄 膜 コー ティ ン グ さ れ た ガ ラ ス 基 板 を 洗 剤 を 溶 か し た 蒸 留 水 に 入 れ て 超 音 波 洗 浄 し た 。 こ の 時 、 洗 剤 と し て は フ ィ ッ シ ャ ー 社 ( F i s c h e r C o . ) 製 品 を 使 用 し 、 蒸 留 水 と し て は ミ リ ポ ア 社 ( M i l l i p o r e C o . ) 製 品 の フ ィ ル タ ( F i l t e r ) で 2 次 る 過 し た 蒸 留 水 を 使 用 し た 。 I T O を 3 0 分 間 洗 浄 し た 後 、 蒸 留 水 で 2 回 繰 り 返 し 超 音 波 洗 浄 を 1 0 分 間 進 行 し た 。 蒸 留 水 洗 浄 が 終 わ っ た 後 、 イ ソ プ ロ ピ ル ア ル コー ル 、 ア セ ト ン 、 メ タ ノー ル の 溶 剤 で 超 音 波 洗 浄 を し 乾 燥 さ せ た 後 、 プ ラ ズ マ 洗 浄 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 。

## 【0233】

こ う し て 準 備 さ れ た I T O 透 明 電 極 上 に 、 下 記 H I - 1 化 合 物 を 5 n m の 厚 さ に 熱 真 空 蒸 着 し て 、 正 孔 注 入 層 を 形 成 し た 。 前 記 正 孔 注 入 層 上 に 、 下 記 H I - 1 化 合 物 を 2 5 n m の 厚 さ に 熱 真 空 蒸 着 し て 正 孔 輸 送 層 を 形 成 し 、 H T - 1 蒸 着 膜 上 に 下 記 H T - 2 化 合 物 を 5 n m の 厚 さ に 真 空 蒸 着 し て 電 子 遮 断 層 を 形 成 し た 。 次 に 、 前 記 H T - 2 蒸 着 膜 上 に 前 記 製 造 し た 化 合 物 1 と 下 記 D p - 2 5 化 合 物 を 8 8 : 1 2 の 重 量 比 で 共 蒸 着 し て 4 0 n m 厚 さ の 発 光 層 を 形 成 し た 。 前 記 発 光 層 上 に 、 下 記 E T - 1 化 合 物 を 2 5 n m の 厚 さ に 真 空 蒸 着 し て 電 子 輸 送 層 を 形 成 し 、 そ の 上 に 下 記 E T - 2 化 合 物 と L i Q を 9 8 : 2 の 重 量 比 で 真 空 蒸 着 ( 厚 さ 1 0 n m ) し て 電 子 注 入 層 を 形 成 し た 。 前 記 電 子 注 入 層 上 に 、 1 0 0 n m 厚 さ に ア ル ミ ニ ウ ム を 蒸 着 し て 負 極 を 形 成 し た 。

## 【0234】

## 【化95】



LiQ

## 【0235】

前 記 過 程 で 、 有 機 物 の 蒸 着 速 度 は 0 . 0 4 n m / s e c ~ 0 . 0 7 n m / s e c を 維 持 し 、 ア ル ミ ニ ウ ム は 0 . 2 n m / s e c の 蒸 着 速 度 を 維 持 し 、 蒸 着 時 の 真 空 度 は  $1 \times 10^{-7}$  t o r r ~  $5 \times 10^{-8}$  t o r r を 維 持 し た 。

## 【0236】

実 験 例 2 ~ 2 1 お よ び 比 較 実 験 例 1 - 9

## 【0237】

前 記 実 験 例 1 で 化 合 物 1 の 代 わ り に 下 記 表 5 に 記 載 さ れ た 化 合 物 を 使 用 し た こ と を 除 い

10

20

30

40

50

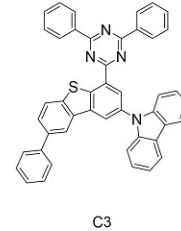
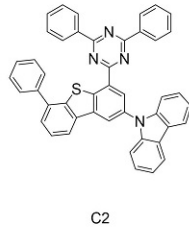
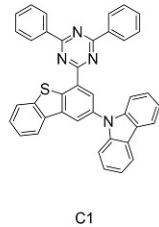
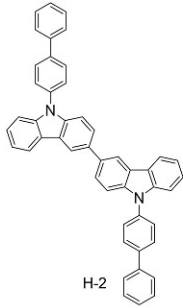
て、実験例 1 と同様の方法で有機発光素子を製作した。

【 0 2 3 8 】

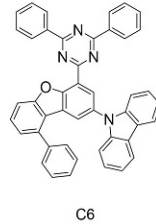
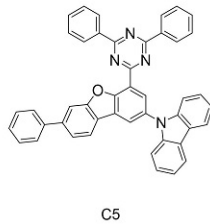
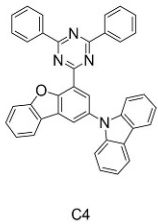
参考として、実験例 1 6 ~ 2 1 および比較実験例 7 ~ 9 では化合物 1 の代わりに下記表 5 に記載された化合物を 1 : 1 の重量比で使用して有機発光素子を製作した。実施例 1 6 を例に挙げると、実施例 1 で化合物 1 の代わりに化合物 1 および化合物 H - 2 を 1 : 1 の重量比で使用したものである。

【 0 2 3 9 】

【 化 9 6 】



10



20

【 0 2 4 0 】

前記実験例および比較実験例の有機発光素子に  $10 \text{ mA} / \text{cm}^2$  の電流密度を印加するときの電圧、効率、発光色および寿命を測定し、その結果を下記表 5 に示す。このとき、 $T_{95}$  は、電流密度  $20 \text{ mA} / \text{cm}^2$  での初期輝度を  $100\%$  としたとき、輝度が  $95\%$  となるまでにかかる時間を意味する。

30

【 0 2 4 1 】

[ 表 5 ]

【 0 2 4 2 】

40

50

【表 1 1】

区分	発光層 化合物	電圧(V) (@10mA/cm <sup>2</sup> )	効率(cd/A) (@10mA/cm <sup>2</sup> )	発光色	T <sub>95</sub> (@20mA/cm <sup>2</sup> )
実験例1	化合物1	3.01	65.9	緑色	75
実験例2	化合物2	3.00	65.8	緑色	79
実験例3	化合物3	3.06	66.6	緑色	69
実験例4	化合物4	2.97	66.1	緑色	67
実験例5	化合物5	2.89	64.0	緑色	66
実験例6	化合物6	2.84	66.1	緑色	79
実験例7	化合物7	3.11	67.2	緑色	68
実験例8	化合物8	2.98	67.9	緑色	63
実験例9	化合物9	2.92	66.9	緑色	65
実験例10	化合物10	3.05	68.0	緑色	58
実験例11	化合物11	3.03	65.9	緑色	63
実験例12	化合物12	3.04	63.5	緑色	62
実験例13	化合物13	2.98	64.9	緑色	62
実験例14	化合物14	2.94	63.1	緑色	66
実験例15	化合物15	3.01	66.2	緑色	59

10

20

30

【 0 2 4 3 】

40

50

【表 1 2】

区分	発光層 化合物	電圧 (V) (@10mA/cm <sup>2</sup> )	効率 (cd/A) (@10mA/cm <sup>2</sup> )	発光色	T <sub>95</sub> (@20mA/cm <sup>2</sup> )
比較実験例1	化合物C1	3.01	60.0	緑色	50
比較実験例2	化合物C2	3.07	62.5	緑色	60
比較実験例3	化合物C3	3.11	59.5	緑色	62
比較実験例4	化合物C4	3.06	59.2	緑色	51
比較実験例5	化合物C5	3.12	61.2	緑色	53
比較実験例6	化合物C6	3.09	60.9	緑色	55
実験例16	化合物1, 化合物H-2	3.29	72.1	緑色	160
実験例17	化合物2, 化合物H-2	3.20	74.8	緑色	169
実験例18	化合物6, 化合物H-2	3.28	74.0	緑色	161
実験例19	化合物10, 化合物H-2	3.32	74.7	緑色	165
実験例20	化合物11, 化合物H-2	3.48	74.9	緑色	169
実験例21	化合物15, 化合物H-2	3.26	74.1	緑色	171
比較実験例7	化合物C1, 化合物H-2	3.14	58.9	緑色	138
比較実験例8	化合物C2, 化合物H-2	3.50	65.0	緑色	154
比較実験例9	化合物C5, 化合物H-2	3.48	65.9	緑色	141

10

20

30

## 【0 2 4 4】

実験例 1 ~ 1 5 と比較実験例 1 ~ 6 は、発光層に単独ホストを使用した素子の例である。比較実験例 1 ~ 3 で使用した化合物 C 1 ~ C 3 は、ジベンゾチオフェンの Ar<sub>1</sub> が水素であるか、Ar<sub>1</sub>、Ar<sub>2</sub> および Ar<sub>3</sub> の全てが非置換アリール基のみで置換された化合物である。表 5 から実験例 1 ~ 3 の素子の例は、Ar<sub>1</sub>、Ar<sub>2</sub> および Ar<sub>3</sub> の全てがアリール基または重水素で置換された化合物であり、比較実験例 1 ~ 3 に比べて寿命特性が約 2 1 % ~ 4 0 % 程度優れていることを確認することができた。

## 【0 2 4 5】

比較実験例 4 ~ 6 で使用した化合物 C 4 ~ C 6 は、ジベンゾフランの Ar<sub>1</sub> が水素であるか、Ar<sub>1</sub>、Ar<sub>2</sub> および Ar<sub>3</sub> の全てが非置換アリール基のみで置換された化合物である。表 5 から実験例 1 1 の素子の例は、Ar<sub>1</sub>、Ar<sub>2</sub> および Ar<sub>3</sub> の全てがアリール基または重水素で置換された化合物である。比較実験例 1 ~ 3 に比べて寿命特性が約 1 1 % ~ 2 1 % 程度優れていることを確認することができた。

40

## 【0 2 4 6】

実験例 6 ~ 9 および実験例 1 2 ~ 1 5 で使用した化合物は、Ar<sub>1</sub> および Ar<sub>2</sub> が重水素またはヘテロアリール基で置換された化合物である。Ar<sub>1</sub> および Ar<sub>2</sub> がアリール基のみで置換された比較実験例 1 ~ 6 に比べて、寿命特性が約 1 1 % ~ 2 6 % 程度優れていることを確認することができた。

## 【0 2 4 7】

50

実験例 16 ~ 21 は、発光層に 2 種のホストを使用した素子の例である。発光層に 2 種のホストを使用する場合にも、本発明の化合物を使用した実験例 16 ~ 21 の素子が比較実験例 7 ~ 9 の素子に比べて、電流効率および寿命特性に優れていることを確認することができた。

【符号の説明】

【0248】

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

10

20

30

40

50

【図面】

【図 1】

【図 1】

4
3
2
1

【図 2】

【図 2】

4
8
7
6
5
2
1

10

20

30

40

50

## フロントページの続き

## (51)国際特許分類

F I  
 H 0 5 B 33/22 B  
 C 0 9 K 11/06 6 9 0

## (33)優先権主張国・地域又は機関

韓国(KR)

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

## (72)発明者 ホン、ワンピョ

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

## (72)発明者 ジョン、ミン ウー

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

## (72)発明者 リー、ジュンハ

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

## (72)発明者 パク、スルチャン

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

## (72)発明者 ホワン、スンヒュン

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

審査官 東 裕子

## (56)参考文献

特開 2 0 1 6 - 1 4 9 4 7 3 ( J P , A )

特開 2 0 1 7 - 1 0 3 4 3 7 ( J P , A )

特開 2 0 1 9 - 1 0 8 3 1 5 ( J P , A )

特開 2 0 1 7 - 1 2 3 4 6 0 ( J P , A )

国際公開第 2 0 1 9 / 0 9 3 6 6 6 ( W O , A 1 )

## (58)調査した分野 (Int.Cl., D B 名)

C 0 7 D

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