(19)日本国特許庁(JP)

(12)特許公報(B2)

(11)特許番号
特許第7009708号
(P7009708)

(45)発行日　令和4年1月26日(2022.1.26)

(24)登録日　令和4年1月17日(2022.1.17)

(51)国際特許分類

C07D 403/14	*(2006.01)*	C07D	403/14		CSP
C09K 11/06	*(2006.01)*	C09K	11/06	690	
H01L 51/50	*(2006.01)*	H05B	33/14	B	

請求項の数　4　（全87頁）

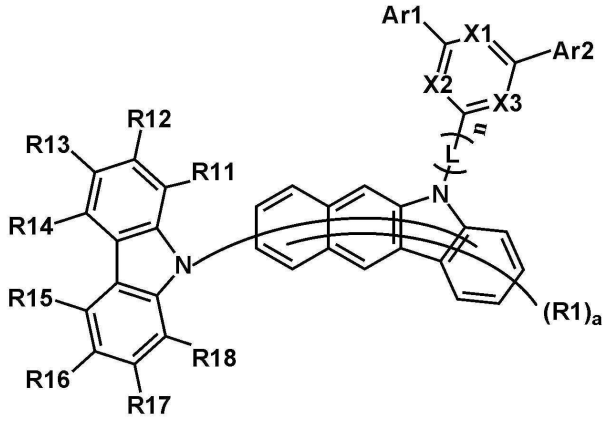
(21)出願番号　特願2020-547043(P2020-547043)
(86)(22)出願日　平成31年4月4日(2019.4.4)
(65)公表番号　特表2021-515776(P2021-515776A)
(43)公表日　令和3年6月24日(2021.6.24)
(86)国際出願番号　PCT/KR2019/003998
(87)国際公開番号　WO2019/194599
(87)国際公開日　令和1年10月10日(2019.10.10)
審査請求日　令和2年9月16日(2020.9.16)
(31)優先権主張番号　10-2018-0039621
(32)優先日　平成30年4月5日(2018.4.5)
(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，ヨンドゥンポーグ，ヨイ－デロ　１２８
(74)代理人　110000877
龍華国際特許業務法人
(72)発明者　キム、ミンジュン
大韓民国　０７３３６　ソウル，ヨンドゥンポーグ，ヨイ－デロ　１２８　エルジー・ケム・リミテッド内
(72)発明者　キム、コンキョム
大韓民国　０７３３６　ソウル，ヨンドゥンポーグ，ヨイ－デロ　１２８　エルジー・ケム・リミテッド内
(72)発明者　リー、ミン　ウー

最終頁に続く

(54)【発明の名称】　カルバゾール系化合物およびこれを含む有機発光素子

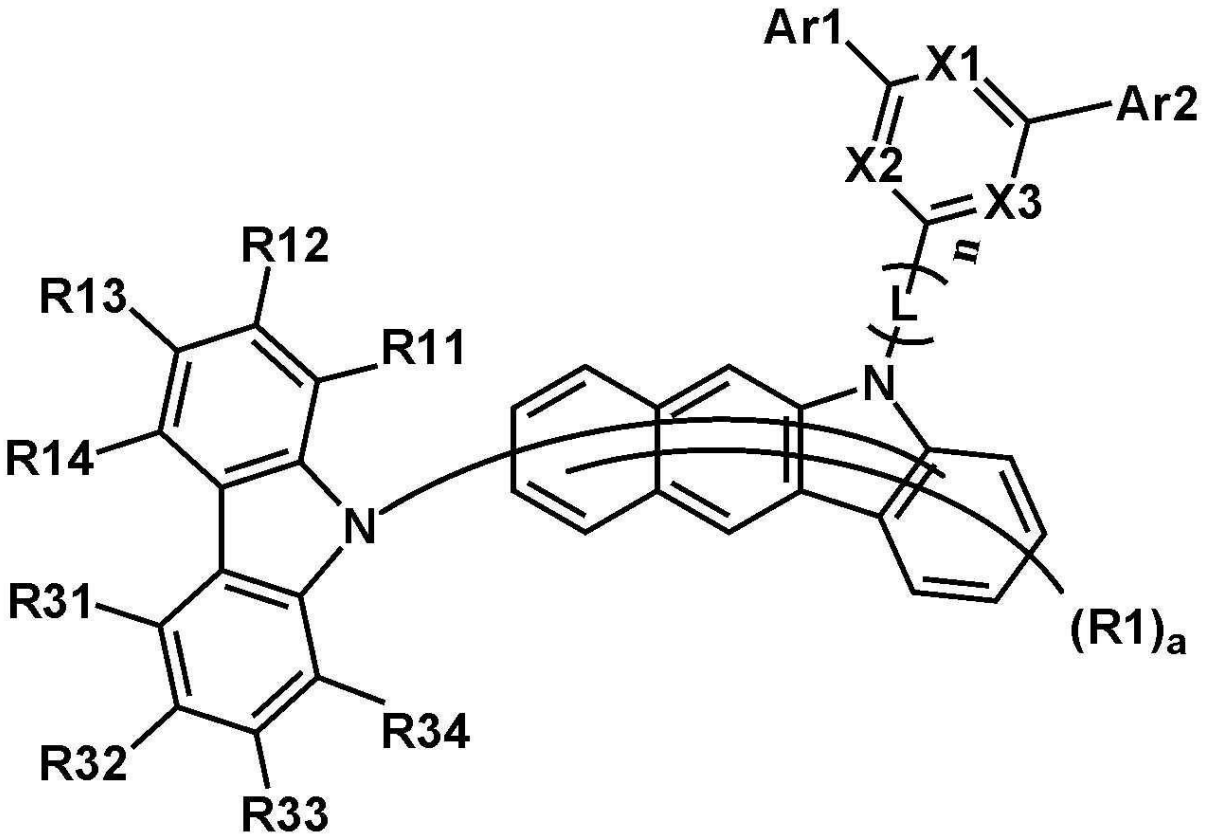
(57)【特許請求の範囲】
【請求項１】
下記［化学式１］で表される
化合物：
［化学式１］
【化１】



前記［化学式１］において、
Ｘ１は、ＮまたはＣＲであり、

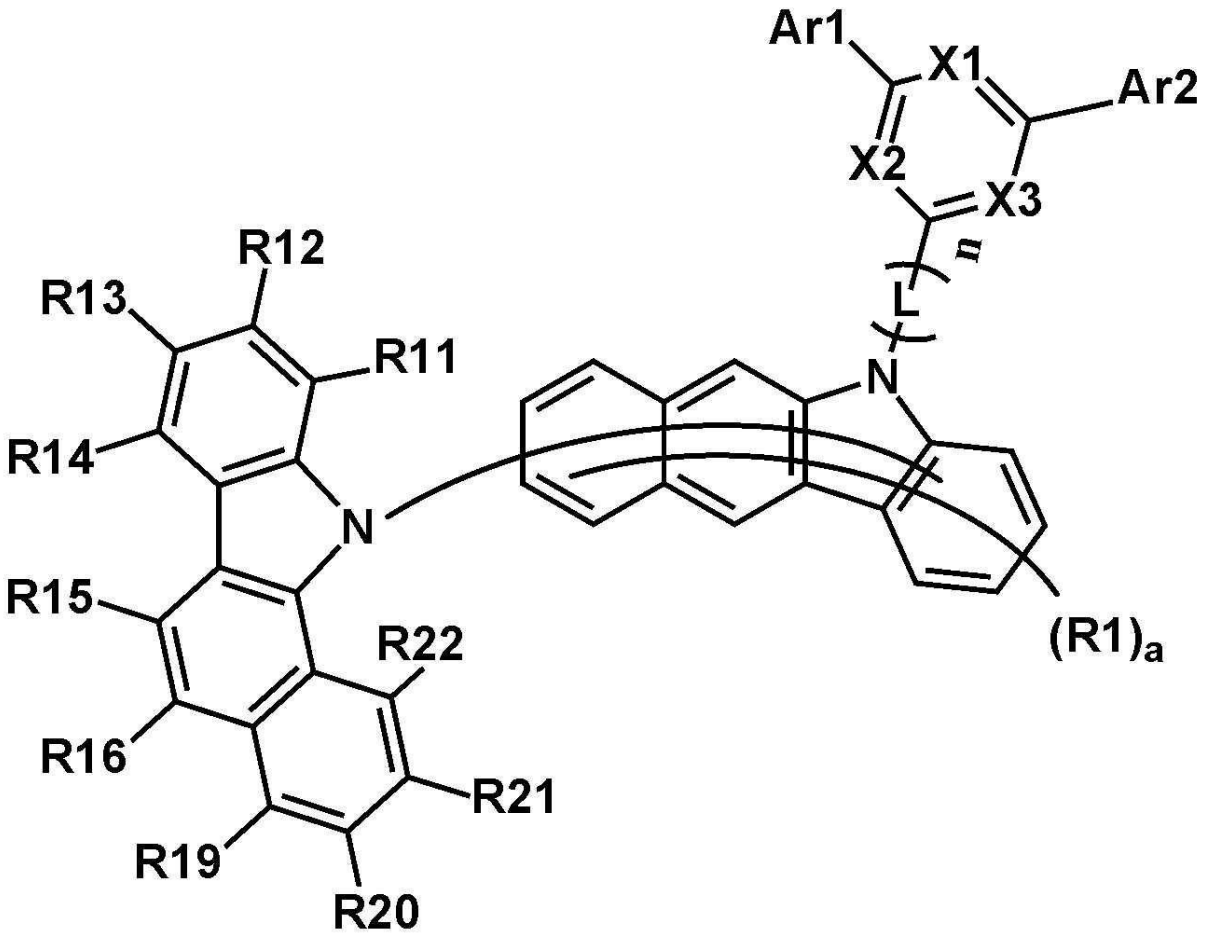
Ｘ２は、ＮまたはＣＲ'であり、
Ｘ３は、ＮまたはＣＲ"であり、
Ｘ１～Ｘ３のうちの２つ以上は、Ｎであり、
Ｒ、Ｒ'およびＲ"は、互いに同一または異なり、それぞれ独立して、水素または重水素であり、
Ｒ１は、重水素であり、
ａは、０～９の整数であり、
ａが２以上の場合、Ｒ１は、互いに同一または異なり、
Ａｒ１およびＡｒ２は、互いに同一または異なり、それぞれ独立して、置換もしくは非置換のアリール基であり、
Ｌは、直接結合；または置換もしくは非置換のアリーレン基であり、
ｎは、１～３の整数であり、
ｎが２または３の場合、Ｌは、互いに同一または異なり、
Ｒ１１～Ｒ１８は、互いに同一または異なり、それぞれ独立して、水素；重水素；ニトリル基；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直鎖、分岐鎖、もしくは、環鎖のアルコキシ基；置換もしくは非置換のアリールオキシ基；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アリール基であるか、隣接する基と互いに結合して置換もしくは非置換のベンゼン環を形成する。

【請求項２】
前記化合物は、下記［化学式２］～［化学式５］のうちの１つで表される、
請求項１に記載の化合物：
［化学式２］
【化２】



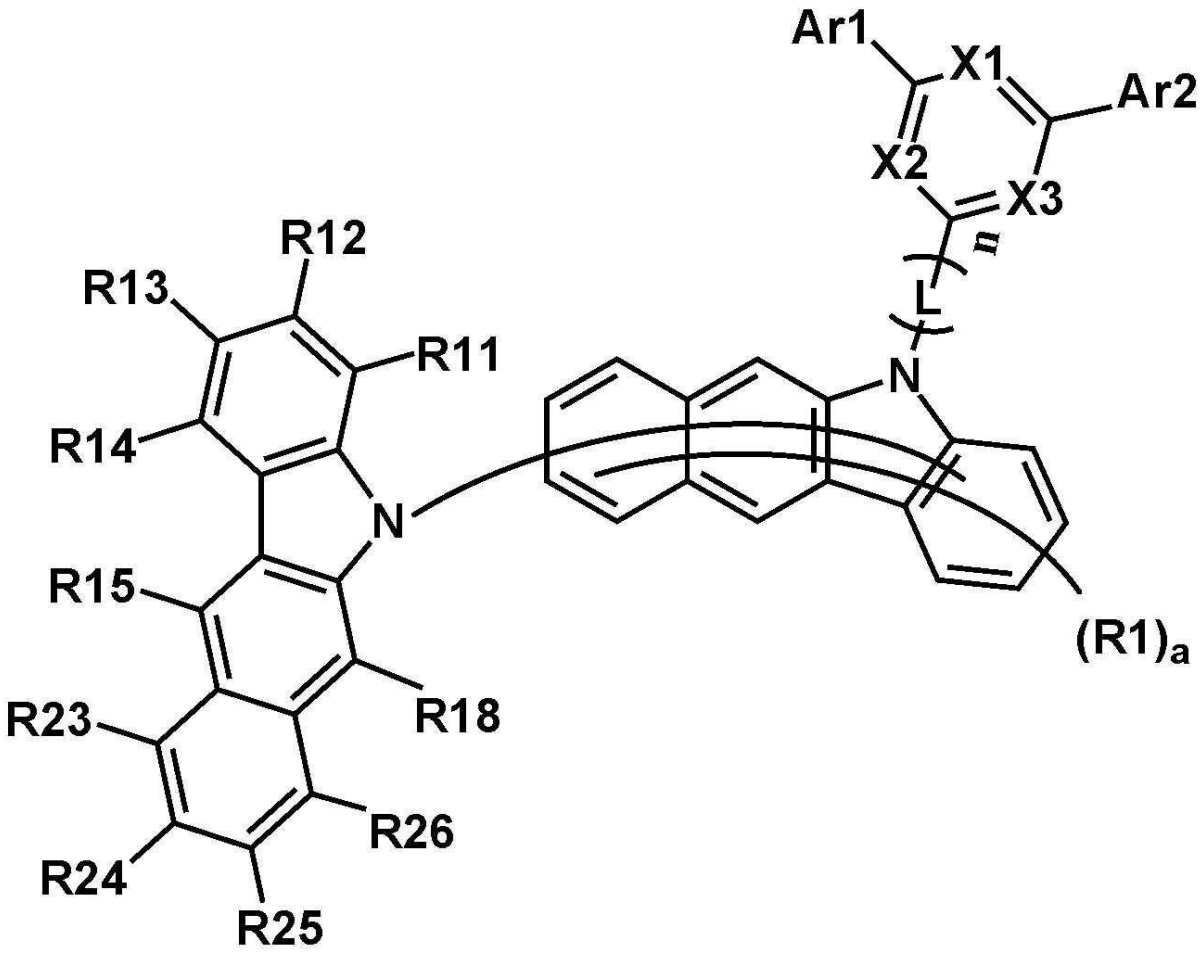
［化学式３］

【化３】



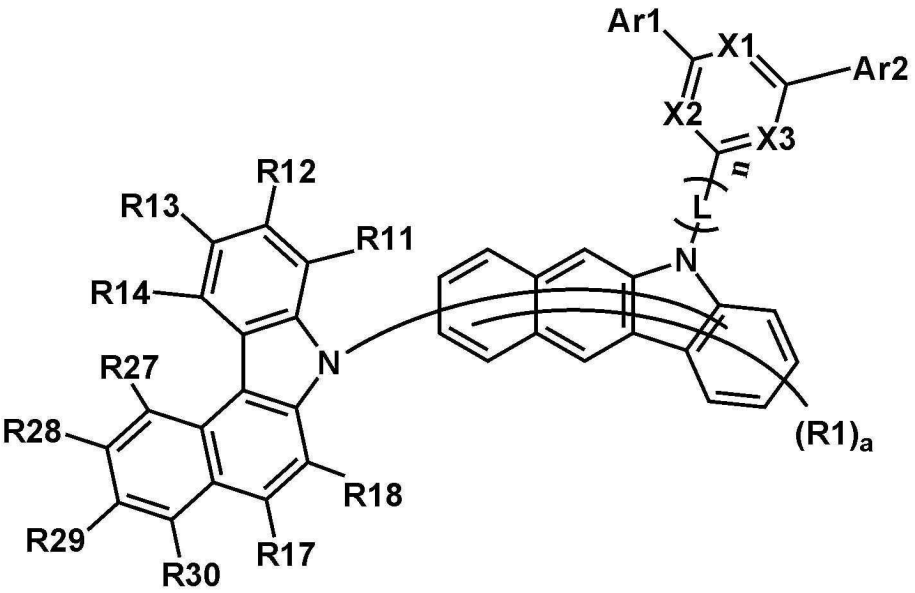
［化学式４］

【化４】



［化学式５］

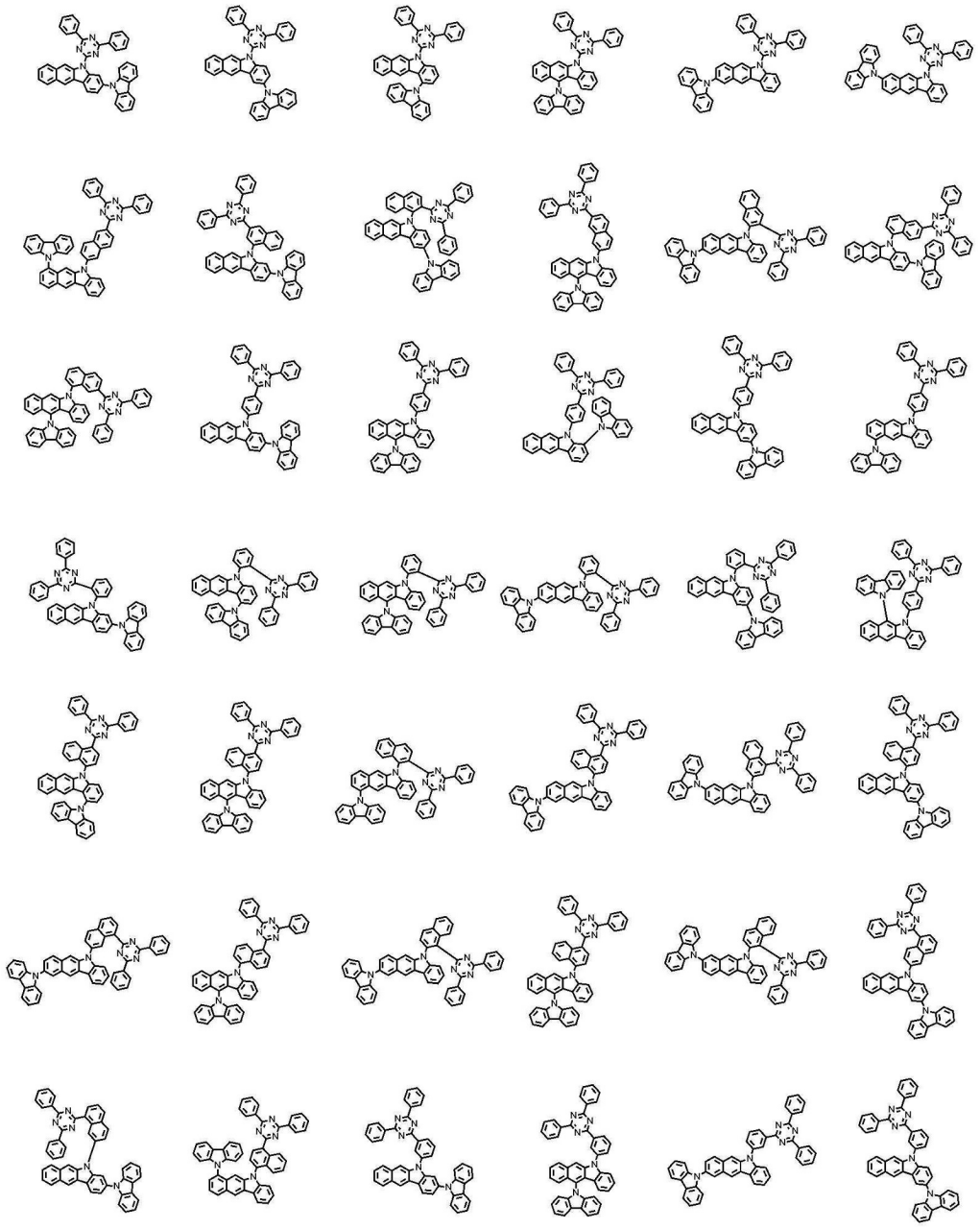
【化５】



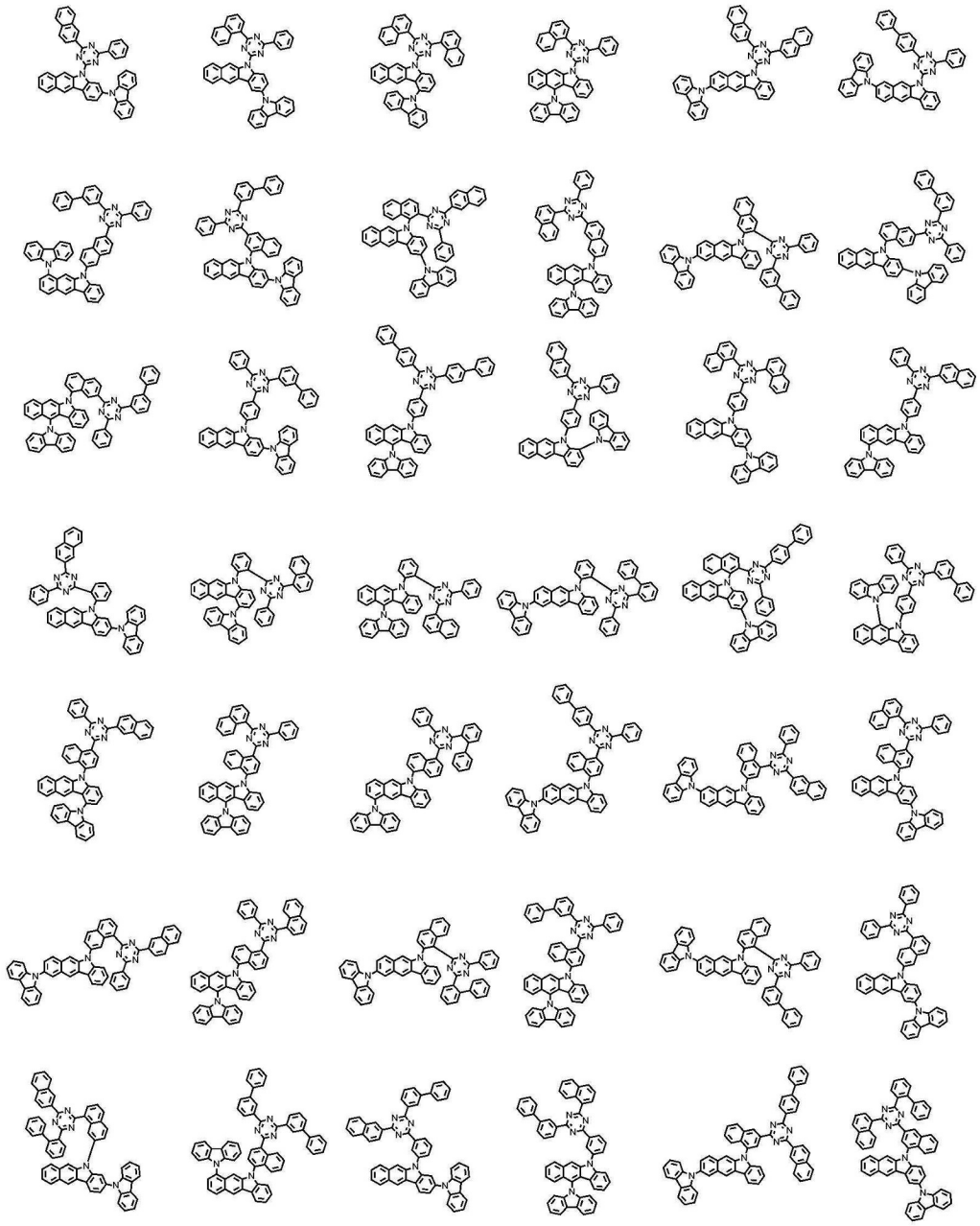
前記［化学式２］～［化学式５］において、

Ｒ１９～Ｒ３４は、互いに同一または異なり、それぞれ独立して、水素；重水素；ニトリル基；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直鎖、分岐鎖、もしくは、環鎖のアルコキシ基；置換もしくは非置換のアリールオキシ基；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

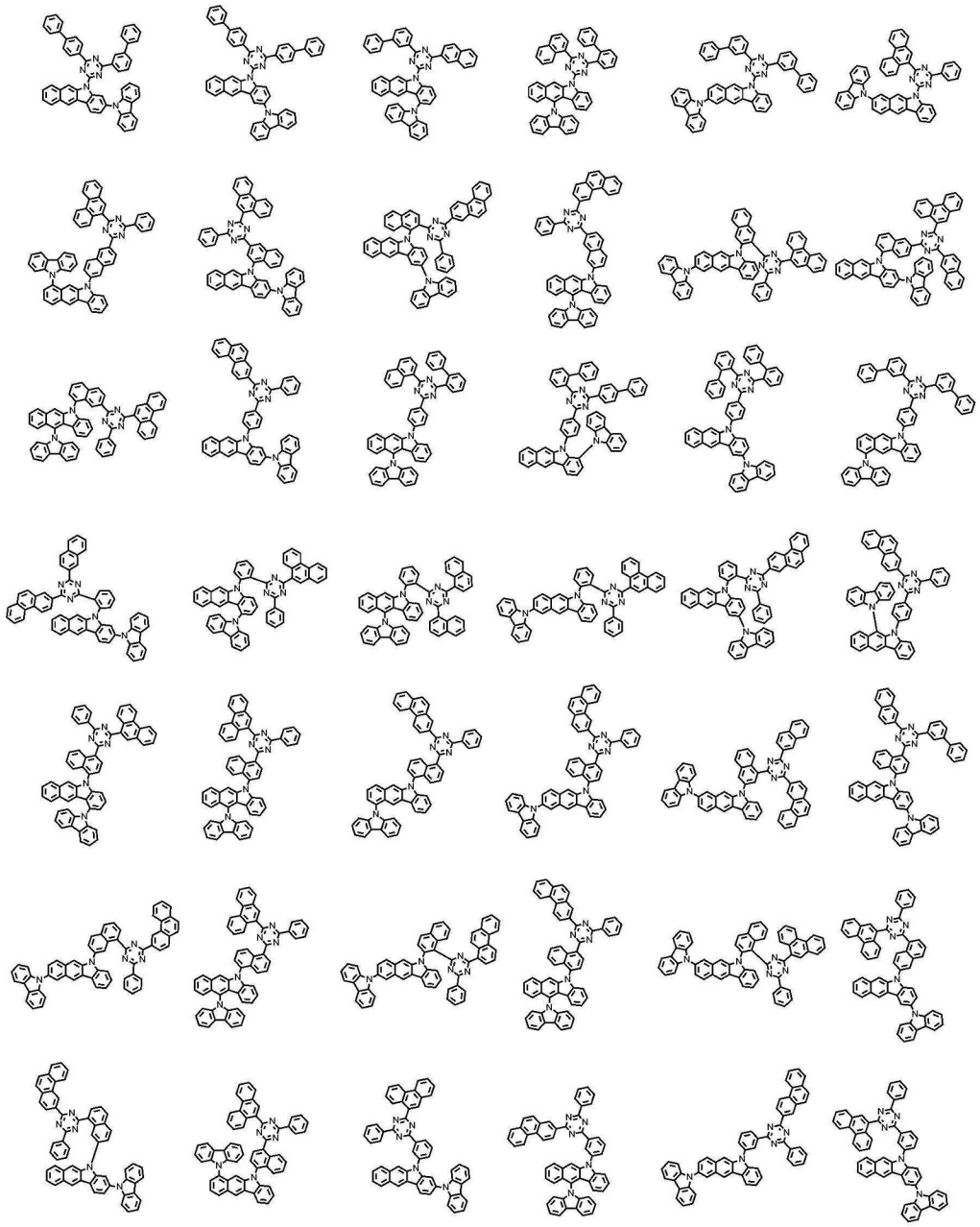
ロアリール基であり、
Ｘ１、Ｘ２、Ｘ３、Ｒ１、ａ、Ａｒ１、Ａｒ２、Ｌ、ｎ、およびＲ１１～Ｒ１８は、請求項１で定義した通りである。
【請求項３】
前記化合物は、下記構造式から選択される、
請求項１に記載の化合物：
【化６】



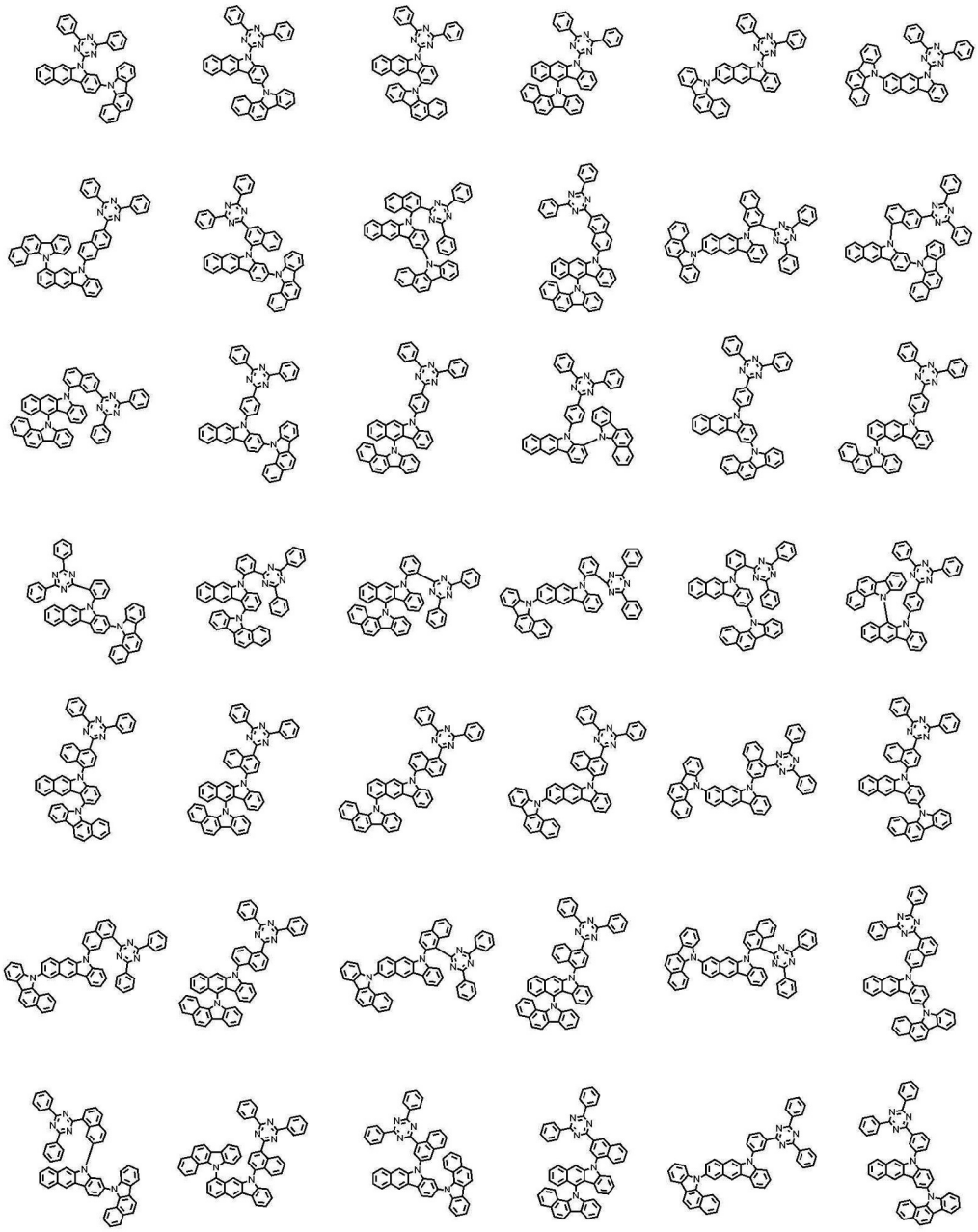
【化７】



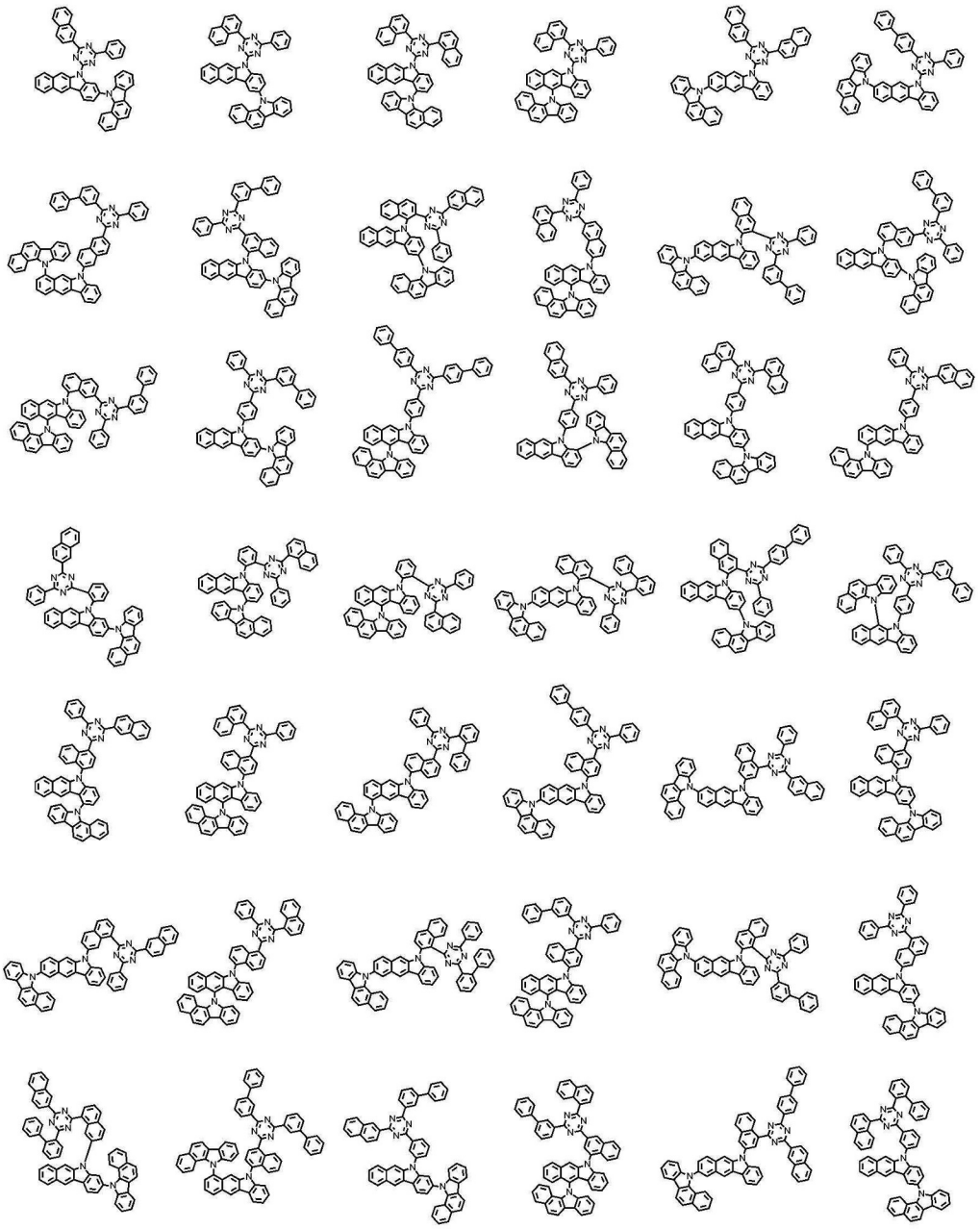
【化８】



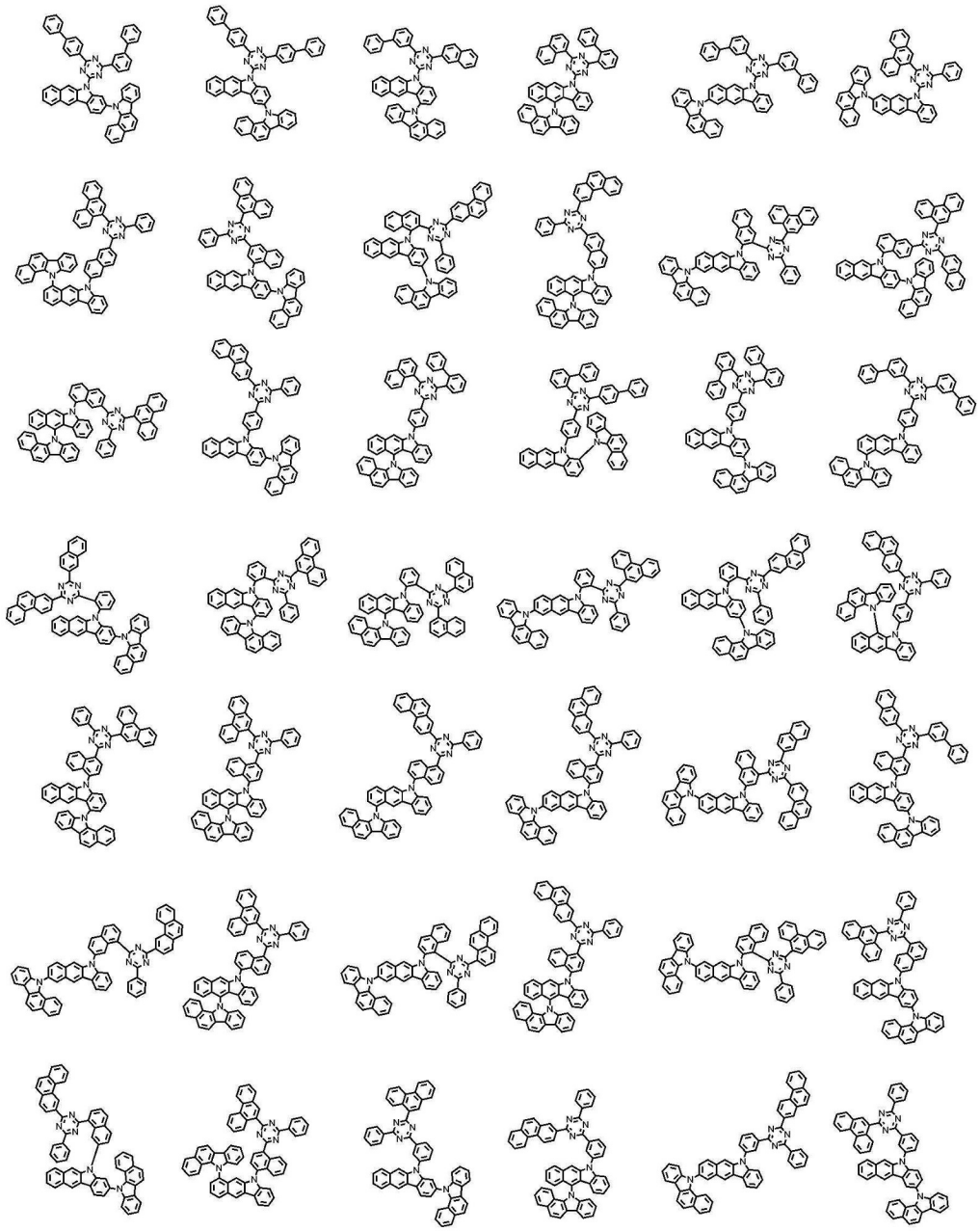
【化９】



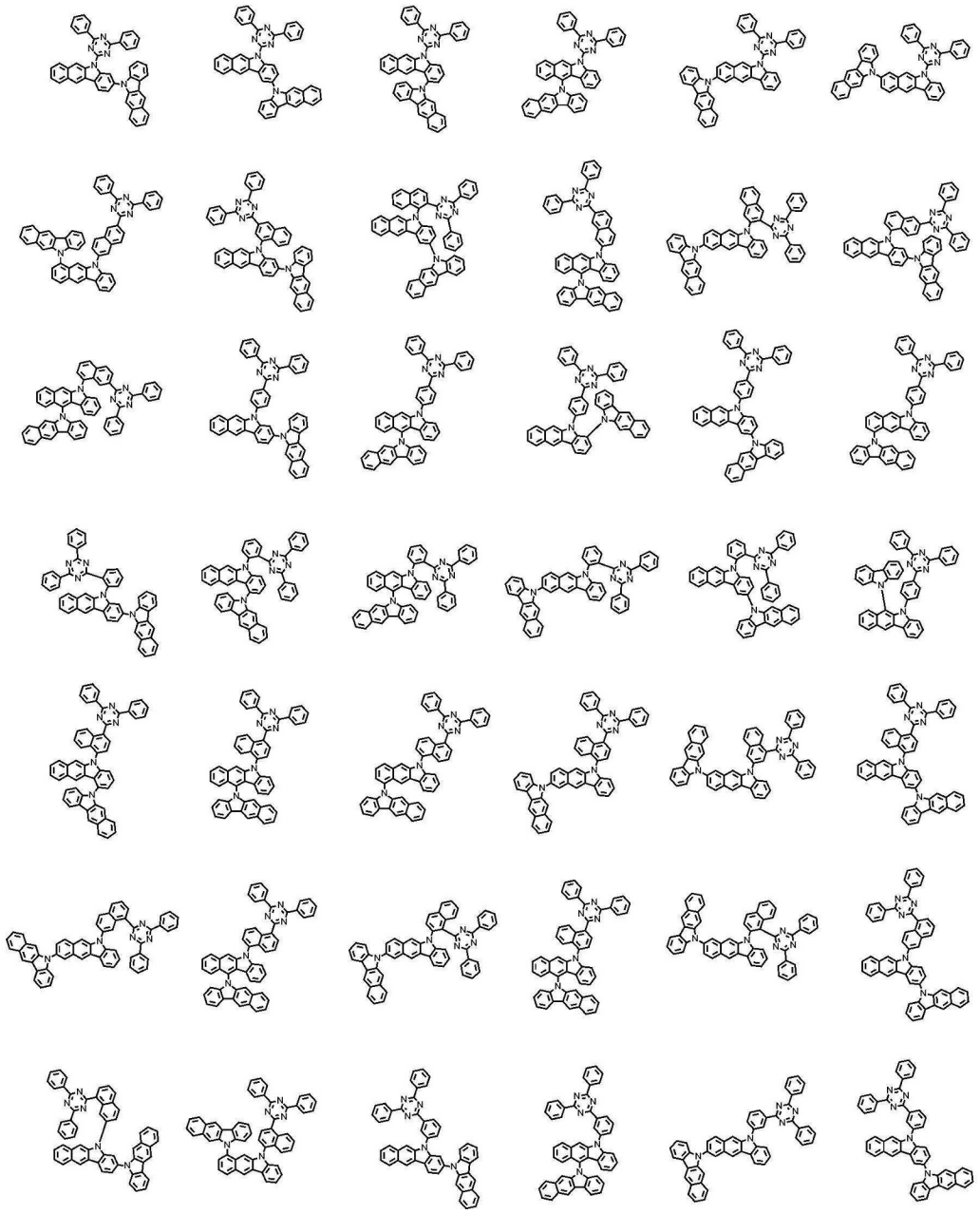
【化１０】



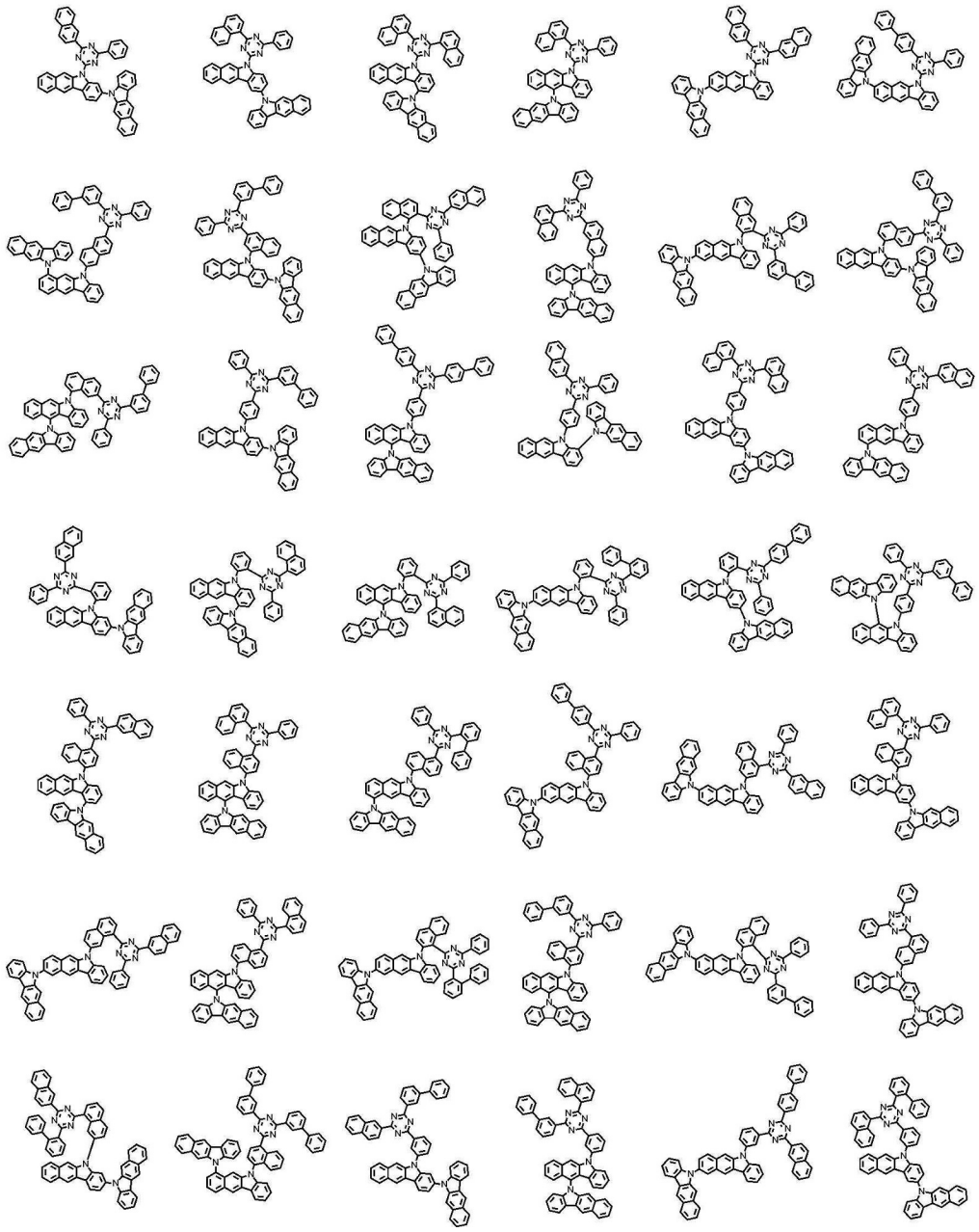
【化１１】



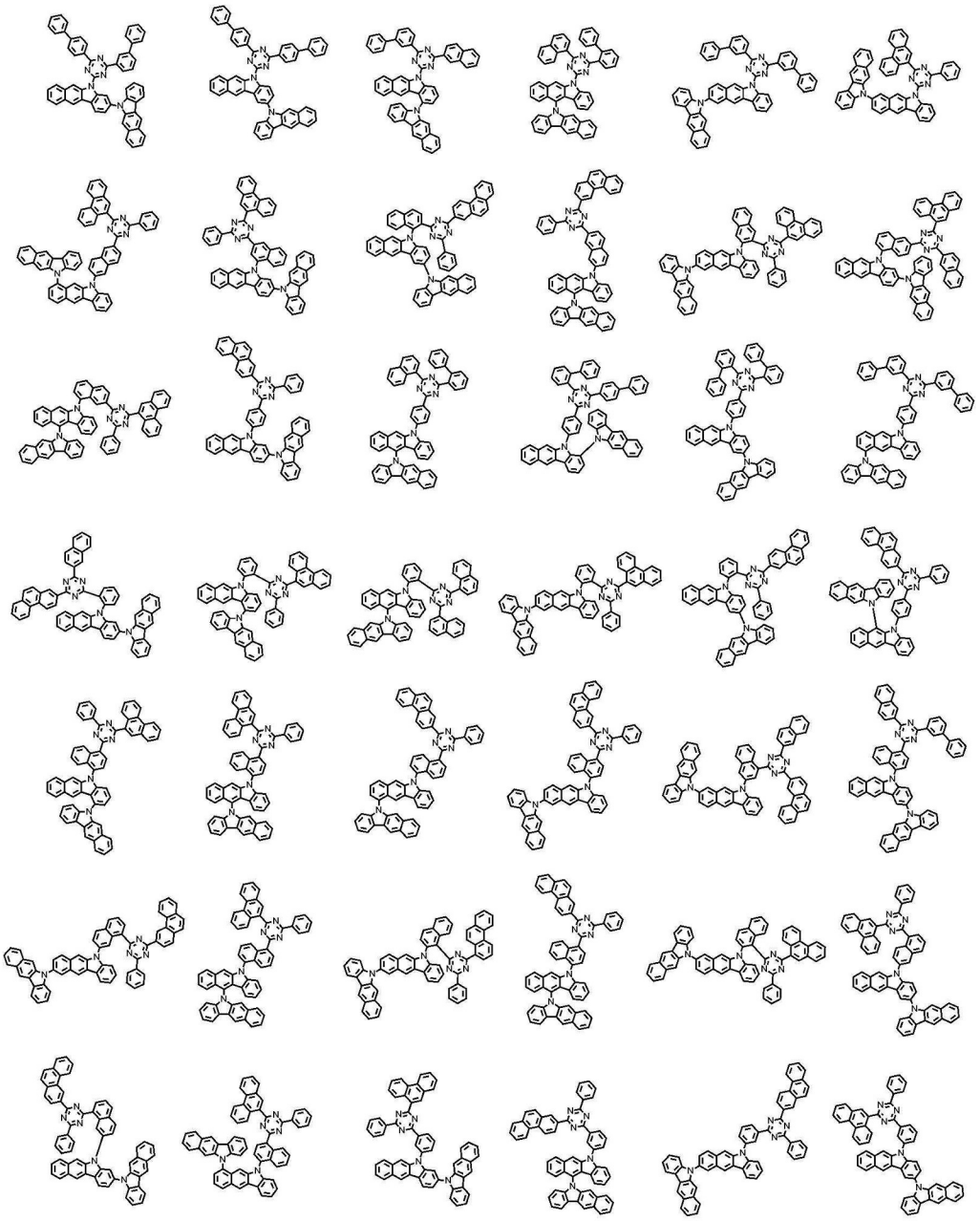
【化１２】



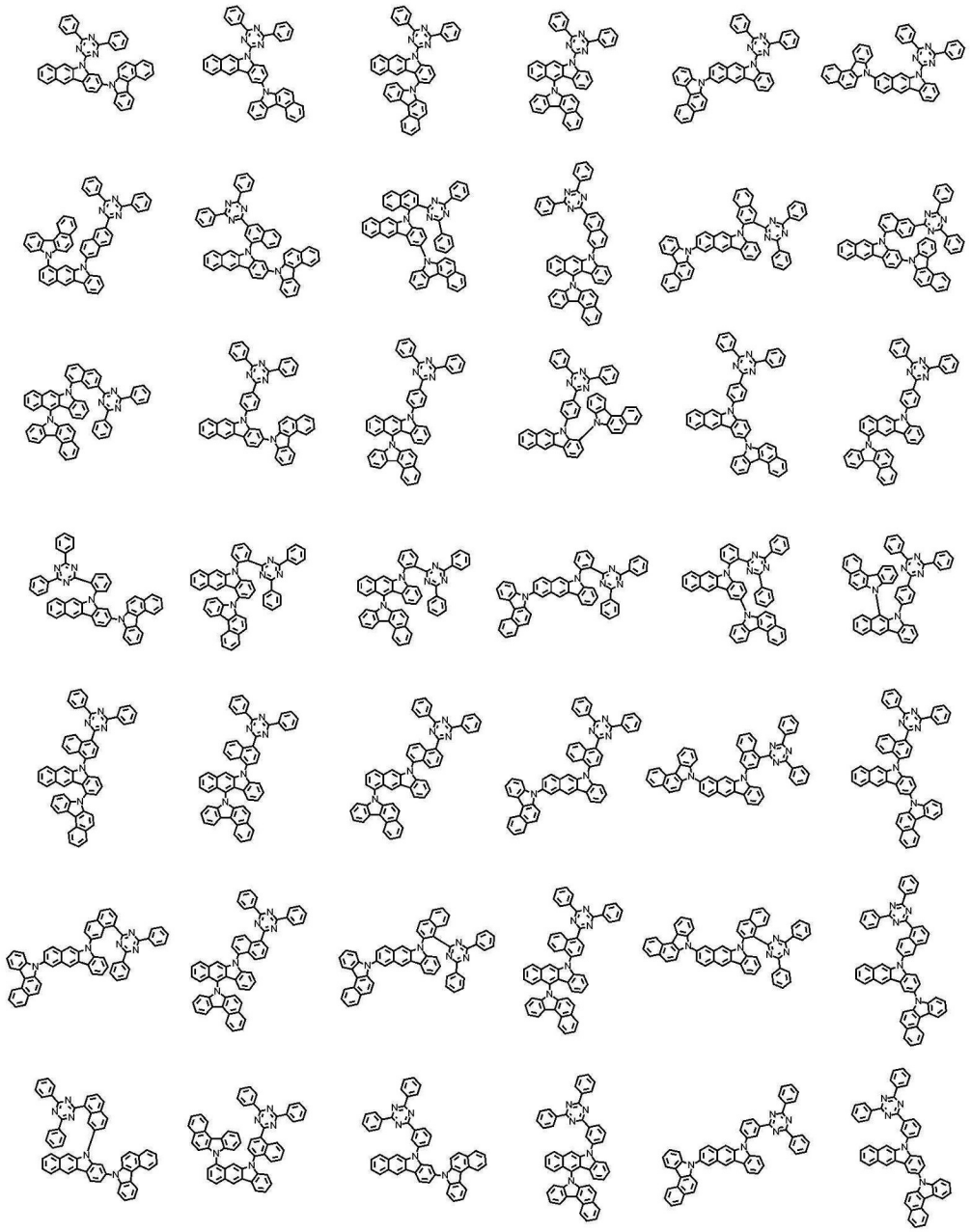
【化１３】



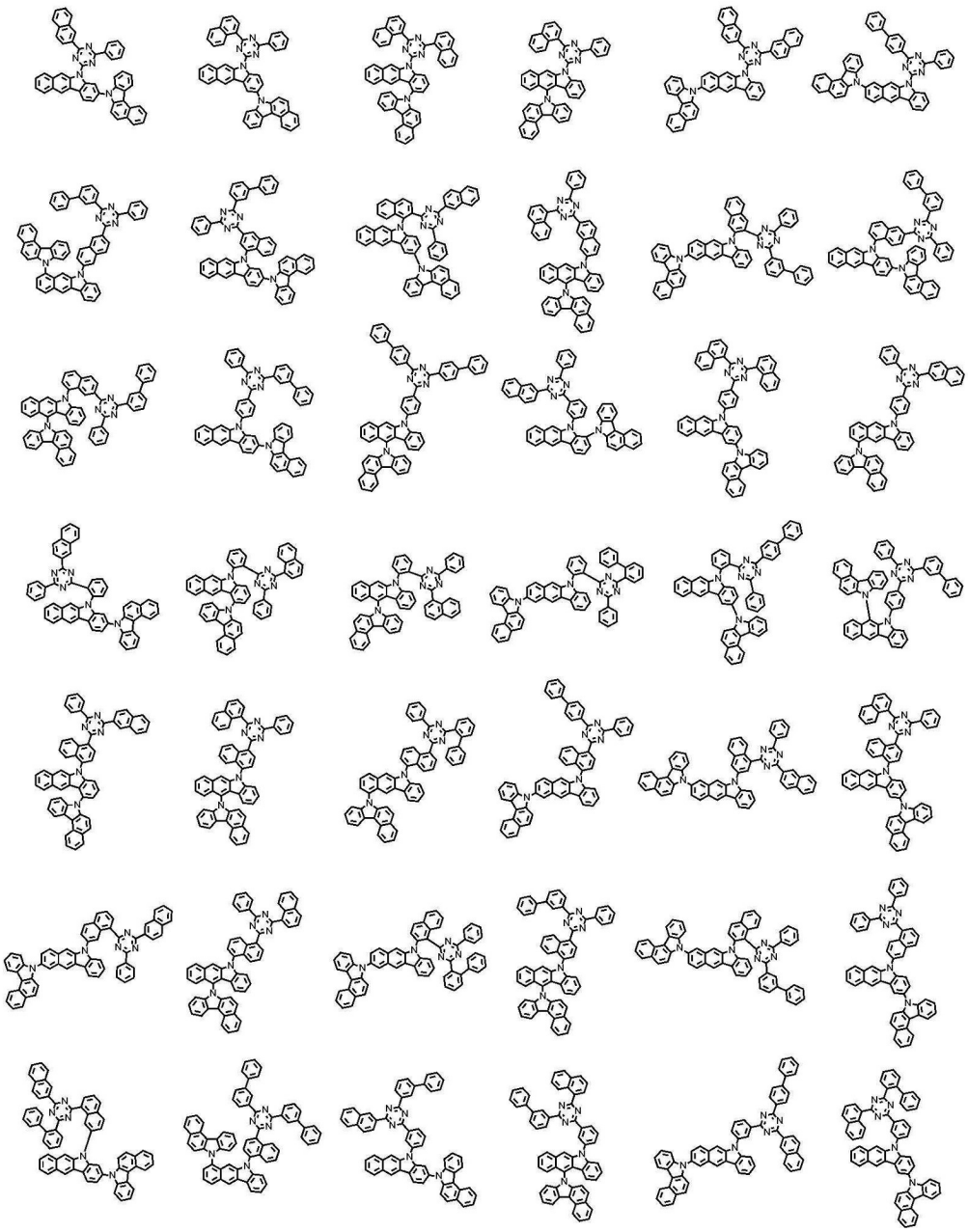
【化１４】



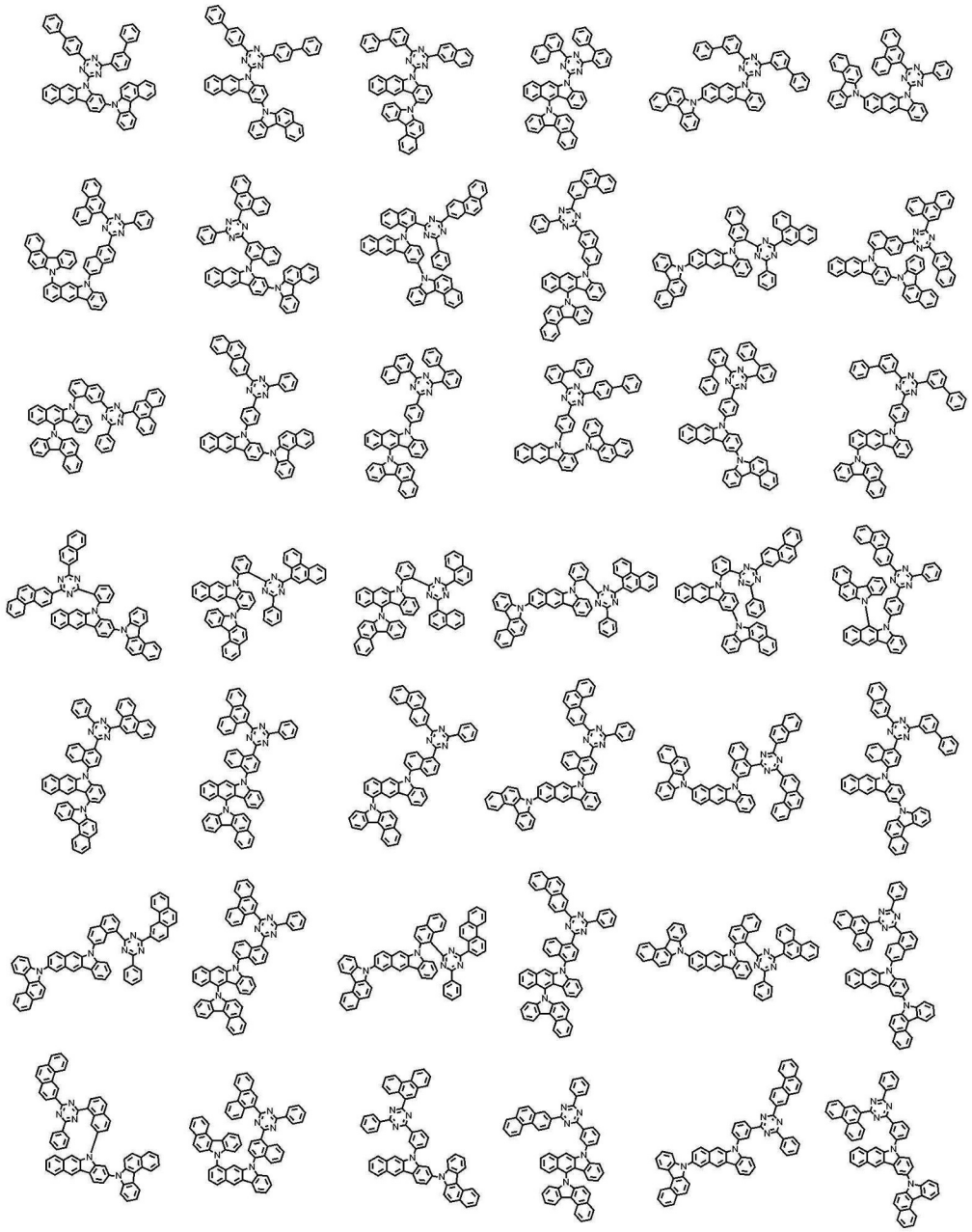
【化１５】



【化１６】



【化１７】



。

【請求項４】

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電極および第２電極の間に備えられた１層または２層以上の有機物層と

を含む

有機発光素子であって、

前記有機物層のうちの１層以上は、請求項１～３のいずれか１項に記載の化合物を含む

有機発光素子。

【発明の詳細な説明】

【技術分野】

【０００１】

本明細書は、カルバゾール系化合物およびこれを含む有機発光素子に関する。

【０００２】

本出願は、２０１８年４月５日付で韓国特許庁に提出された韓国特許出願第１０－２０１

８－００３９６２１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。

【背景技術】

【０００３】

一般的に、有機発光現象とは、有機物質を用いて電気エネルギーを光エネルギーに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、陽極と、陰極と、その間に有機物層とを含む構造を有する。ここで、有機物層は、有機発光素子の効率と安定性を高めるために、それぞれ異なる物質で構成された多層の構造からなる場合が多く、例えば、正孔注入層、正孔輸送層、発光層、電子輸送層、電子注入層などからなる。このような有機発光素子の構造において、２つの電極の間に電圧をかけると、陽極からは正孔が、陰極からは電子が有機物層に注入され、注入された正孔と電子が接した時、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、光を発する。

【０００４】

前記のような有機発光素子のための新たな材料の開発が求められ続けている。

【発明の概要】

【発明が解決しようとする課題】

【０００５】

本明細書は、カルバゾール系化合物およびこれを含む有機発光素子を提供する。

【課題を解決するための手段】

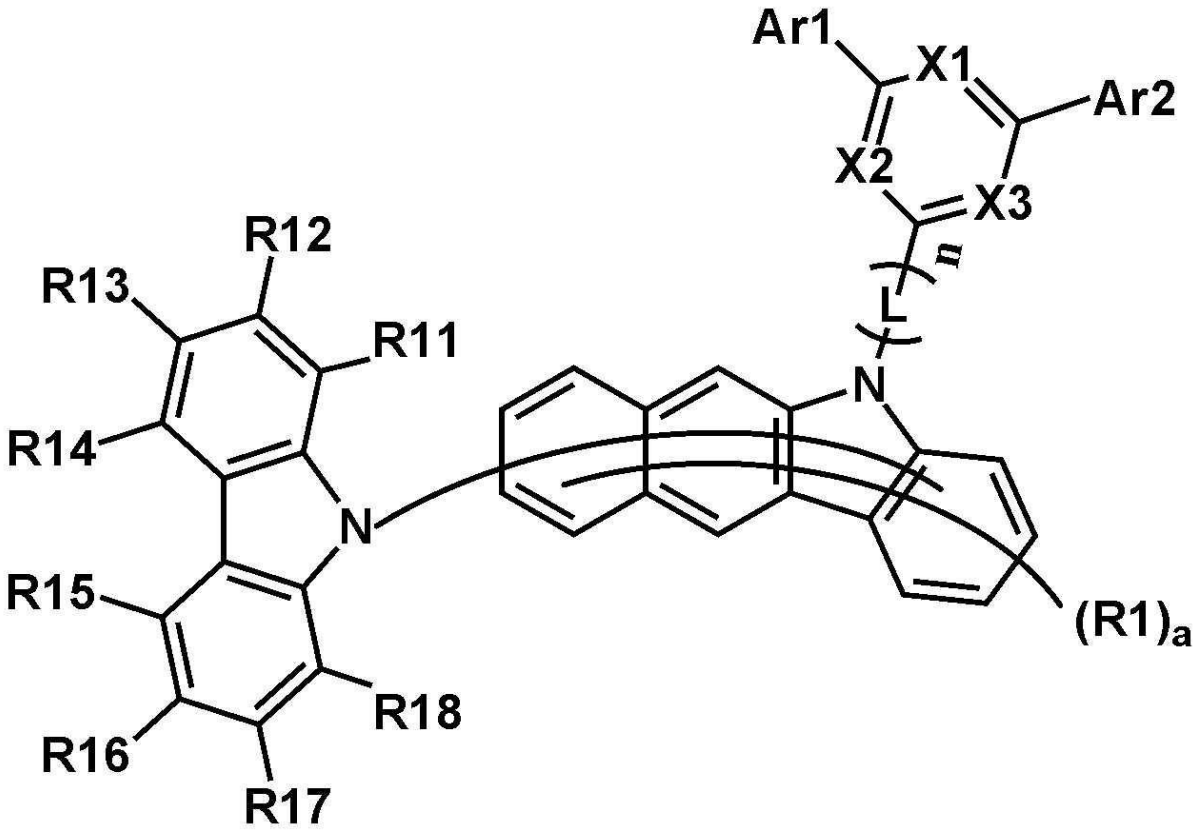
【０００６】

本明細書の一実施態様によれば、下記化学式１で表される化合物を提供する。

【０００７】

［化学式１］

【化１】



【０００８】

前記化学式１において、

Ｘ１は、ＮまたはＣＲであり、

Ｘ２は、ＮまたはＣＲ'であり、
Ｘ３は、ＮまたはＣＲ"であり、
Ｘ１～Ｘ３のうちの２つ以上は、Ｎであり、
Ｒ、Ｒ'およびＲ"は、互いに同一または異なり、それぞれ独立して、水素または重水素であり、
Ｒ１は、重水素であり、
ａは、０～９の整数であり、
ａが２以上の場合、Ｒ１は、互いに同一または異なり、
Ａｒ１およびＡｒ２は、互いに同一または異なり、それぞれ独立して、置換もしくは非置換のアリール基であり、
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り、
ｎは、１～３の整数であり、
ｎが２または３の場合、Ｌは、互いに同一または異なり、
Ｒ１１～Ｒ１８は、互いに同一または異なり、それぞれ独立して、水素；重水素；ニトリル基；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リールオキシ基；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アリール基であるか、隣接する基と互いに結合して置換もしくは非置換の環を形成する。

【０００９】

また、本明細書の一実施態様によれば、第１電極と、前記第１電極に対向して備えられた第２電極と、前記第１電極および第２電極の間に備えられた１層または２層以上の有機物層とを含む有機発光素子であって、前記有機物層のうちの１層以上は、前記化学式１で表される化合物を含む有機発光素子を提供する。

【発明の効果】

【００１０】

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

【図面の簡単な説明】

【００１１】

【図１】本明細書の実施態様に係る有機発光素子を示す図である。
【図２】本明細書の実施態様に係る有機発光素子を示す図である。
【図３】本明細書の実施態様に係る有機発光素子を示す図である。
【図４】本明細書の実施態様に係る有機発光素子を示す図である。

【発明を実施するための形態】

【００１２】

以下、本明細書についてより詳細に説明する。

【００１３】

本明細書の一実施態様は、前記化学式１で表される化合物を提供する。

【００１４】

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。

【００１５】

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。

【００１６】

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。

【００１７】

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変わることを意味し、置換される位置は水素原子の置換される位置、すなわち置換基が置換可能な位置であれば限定せず、２以上の置換基が置換される場合、２以上の置換基は、互いに同一または異なっていてもよい。

【００１８】

本明細書において、「置換もしくは非置換の」という用語は、重水素；ハロゲン基；ニトリル基；シリル基；アルキル基；シクロアルキル基；アルコキシ基；アリールオキシ基；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るか、前記群より選択された置換基のうちの２以上の置換基が連結された置換基で置換されるか、もしく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、アリール基で置換されたアリール基、ヘテロアリール基で置換されたアリール基、アリール基で置換されたヘテロ環基、アルキル基で置換されたアリール基などであってもよい。

【００１９】

本明細書において、ハロゲン基は、Ｆ、Ｃｌ、Ｉなどであってもよいし、好ましくは、Ｆである。

【００２０】

本明細書において、シリル基は、アルキルシリル基；またはアリールシリル基であってもよい。前記シリル基は、ＳｉＲａＲｂＲｃで表されてもよいし、Ｒａ～Ｒｃは、互いに同一または異なり、それぞれ独立して、水素、アルキル基、またはアリール基であってもよい。

【００２１】

本明細書において、アルキル基は、直鎖もしくは分枝鎖であってもよく、炭素数は特に限定されないが、１～３０のものが好ましい。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、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、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、これらに限定されるものではない。

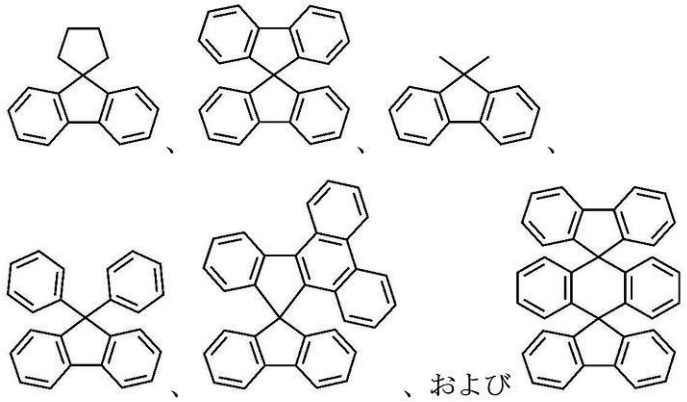
【００２２】

本明細書において、シクロアルキル基は特に限定されないが、炭素数３～３０のものが好ましく、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、これらに限定されるものではない。

【００２３】

本明細書において、アルコキシ基は、直鎖、分枝鎖もしくは環鎖であってもよい。アルコキシ基の炭素数は特に限定されないが、炭素数１～３０のものが好ましい。具体的には、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。

【００２４】
本明細書において、アリール基は特に限定されないが、炭素数６～３０のものが好ましく、前記アリール基は、単環式または多環式であってもよい。
【００２５】
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６～３０のものが好ましい。単環式アリール基としては、フェニル基、ビフェニル基、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。
【００２６】
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１０～３０のものが好ましい。多環式アリール基としては、ナフチル基、アントラセニル基、フェナントレニル基、トリフェニレニル基、ピレニル基、フェナレニル基、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。
【００２７】
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、隣接した基が互いに結合して環を形成してもよい。
【００２８】
前記フルオレニル基が置換される場合、
【化２】



などになってもよい。ただし、これらに限定されるものではない。
【００２９】
本明細書において、アリールオキシ基中のアリール基は、前述したアリール基の例示の通りである。具体的には、アリールオキシ基としては、フェノキシ基、ｐ－トリルオキシ基、ｍ－トリルオキシ基、３，５－ジメチルフェノキシ基、２，４，６－トリメチルフェノキシ基、ｐ－ｔｅｒｔ－ブチルフェノキシ基、３－ビフェニルオキシ基、４－ビフェニルオキシ基、１－ナフチルオキシ基、２－ナフチルオキシ基、４－メチル－１－ナフチルオキシ基、５－メチル－２－ナフチルオキシ基、１－アントラセニルオキシ基、２－アントラセニルオキシ基、９－アントラセニルオキシ基、１－フェナントレニルオキシ基、３－フェナントレニルオキシ基、９－フェナントレニルオキシ基などがある。
【００３０】
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、Ｓｅ、およびＳからなる群より選択される原子を１以上含むことができる。炭素数は特に限定されないが、２～３０のものが好ましく、前記ヘテロ環基は、単環式または多環式であってもよい。ヘテロ環基の例としては、チオフェニル基、フラニル基、ピロリル基、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、ピリジニル基、ビピリジニル基、ピリミジニル基、トリアジニル基、トリアゾリル基、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、イソキノリニル基、インドリル基、カルバゾリル基

、ベンゾオキサゾリル基、ベンゾイミダゾリル基、ベンゾチアゾリル基、ベンゾカルバゾリル基、ジベンゾピロリル基、インドリル基、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、ベンゾキノリル基；ベンゾナフトチオフェニル基、ベンゾナフトフラニル基、フェナントロリニル（ｐｈｅｎａｎｔｈｒｏｌｉｎｙｌ）基、チアゾリル基、イソオキサゾリル基、オキサジアゾリル基、チアジアゾリル基、ベンゾチアゾリル基、フェノキサジニル基、フェノチアジニル基、およびジベンゾフラニル基などがあるが、これらに限定されるものではない。

【００３１】

本明細書において、アリーレン基には、２価の基であることを除けば、前述したアリール基の例示が適用可能である。

【００３２】

本明細書において、ヘテロアリール基は、芳香族ヘテロ環基を意味する。

【００３３】

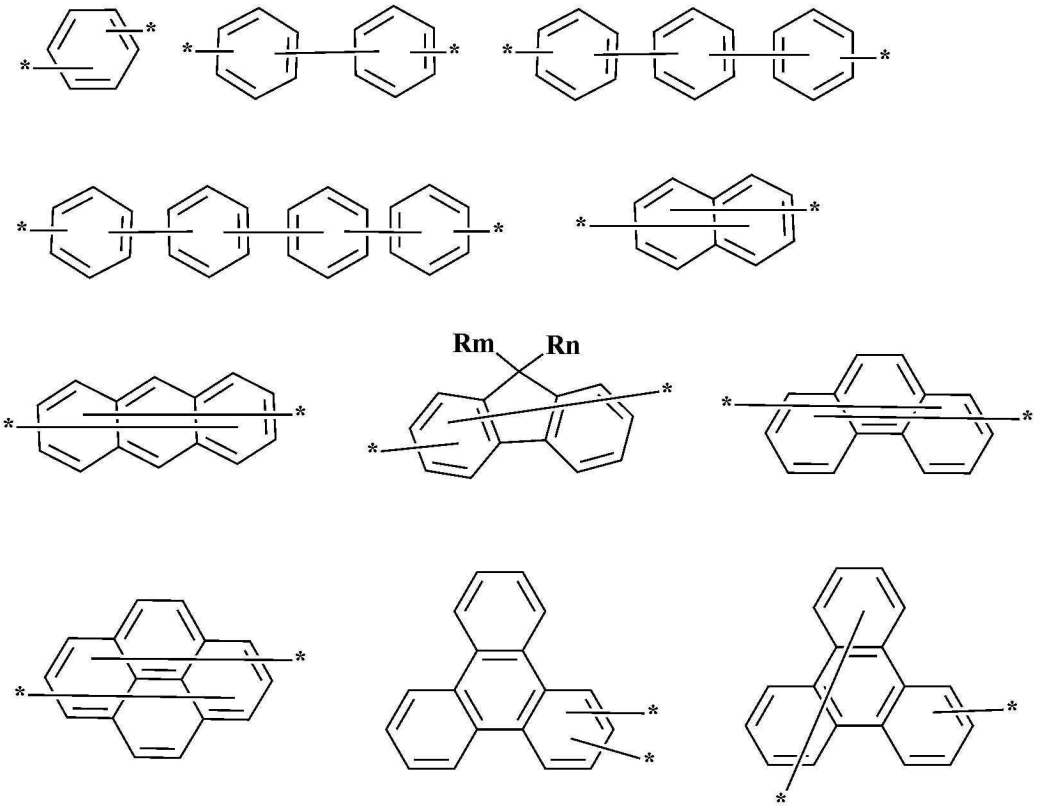
本明細書の一実施態様によれば、前記Ｌは、直接結合；フェニレン基；ビフェニレン基；ターフェニレン基；クォーターフェニレン基；２価のナフチル基；２価のアントラセニル基；アルキルまたはアリールで置換もしくは非置換の２価のフルオレニル基；２価のフェナントレニル基；２価のピレニル基；または２価のトリフェニレニル基である。

【００３４】

本明細書の一実施態様によれば、前記Ｌは、直接結合；または下記構造式から選択されたいずれか１つである。

【００３５】

【化３】



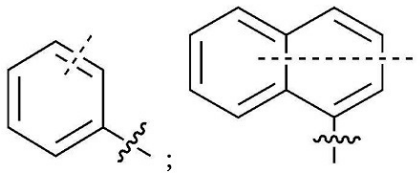
【００３６】

前記構造式において、いずれか１つの＊は、Ｎに連結される位置であり、他の１つの＊は、Ｃに連結される位置であり、

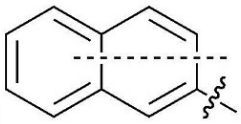
【００３７】

ＲｍおよびＲｎは、互いに同一または異なり、それぞれ独立して、アルキル基またはアリール基である。

【００３８】
本明細書の一実施態様によれば、前記ＲｍおよびＲｎは、互いに同一または異なり、それぞれ独立して、メチル基またはフェニル基である。
【００３９】
本明細書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；または置換もしくは非置換の２価のナフチル基である。
【００４０】
本明細書の一実施態様によれば、前記Ｌは、直接結合；フェニレン基；または２価のナフチル基である。
【００４１】
本明細書の一実施態様によれば、前記Ｌは、直接結合；フェニレン基；または２価のナフチル基である。
【００４２】
本明細書の一実施態様によれば、前記Ｌは、直接結合；
【化４】


；

；または

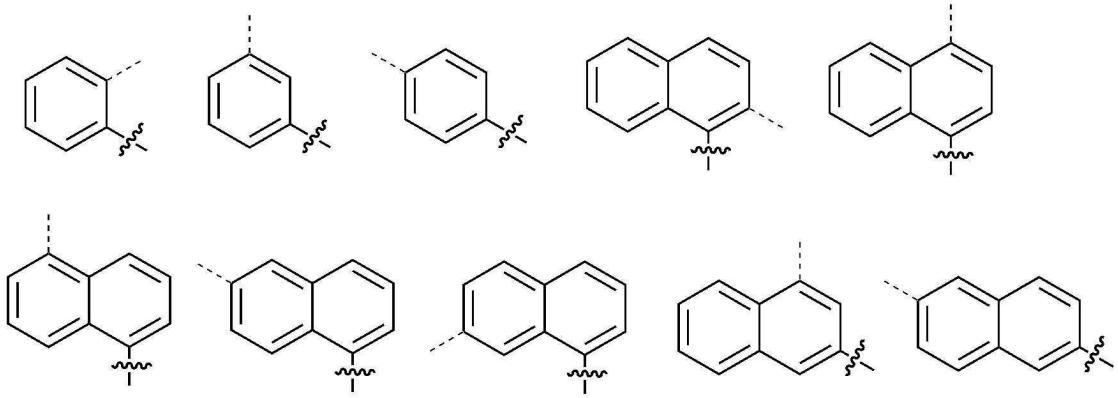

であり、

【化５】

ここで、 は、Ｎに連結される位置であり、

----は、Ｃに連結される位置

である。
【００４３】
本明細書の一実施態様によれば、前記Ｌは、直接結合；または下記構造式の中から選択されたいずれか１つであり、
【化６】



前記構造式において、
【化７】

ここで、 は、Ｎに連結される位置であり、

----は、Ｃに連結される位置

である。

【００４４】

本明細書の一実施態様によれば、Ｘ１およびＸ２は、Ｎであり、Ｘ３は、ＣＨである。

【００４５】

本明細書の一実施態様によれば、Ｘ２およびＸ３は、Ｎであり、Ｘ１は、ＣＨである。

【００４６】

本明細書の一実施態様によれば、Ｘ１～Ｘ３は、Ｎである。

【００４７】

本明細書の一実施態様によれば、Ｒ１およびＲ１１～Ｒ１８は、水素である。

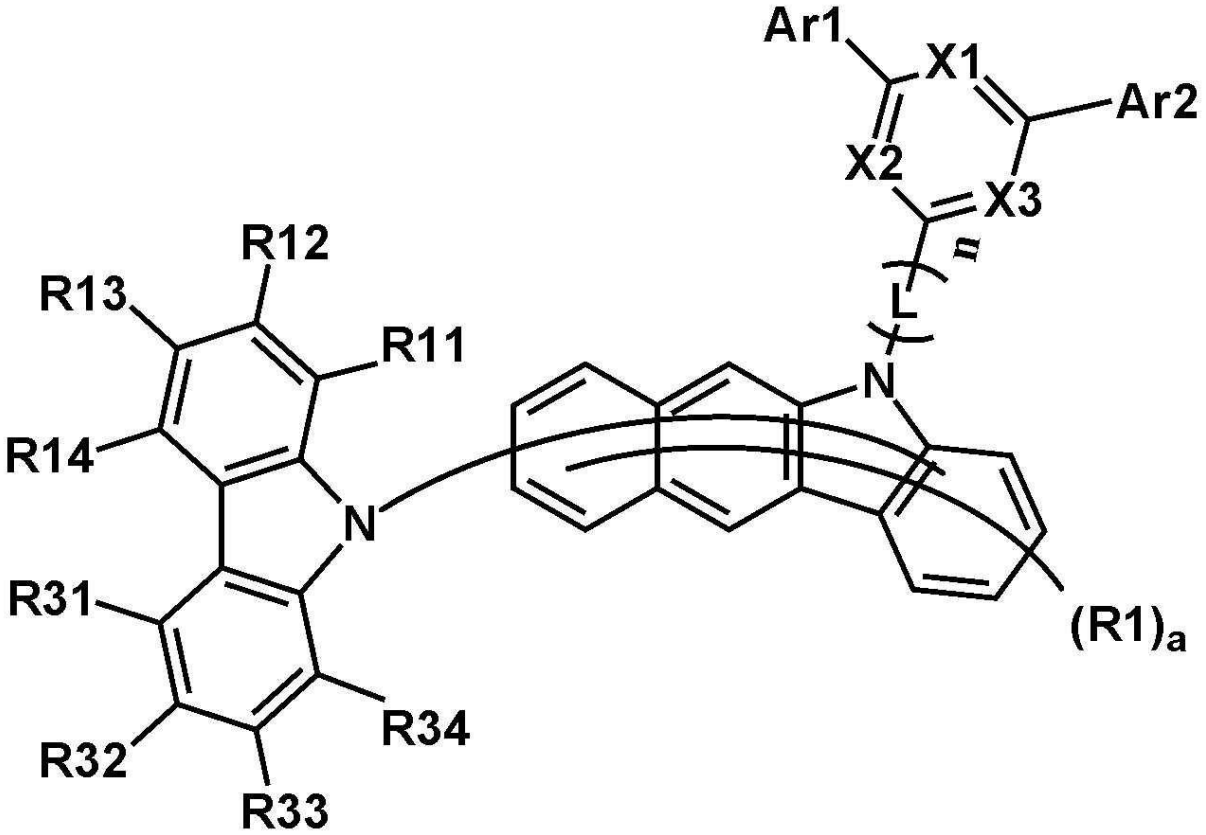
【００４８】

本明細書の一実施態様によれば、前記化学式１は、下記化学式２～５のうちの１つで表される。

【００４９】

［化学式２］

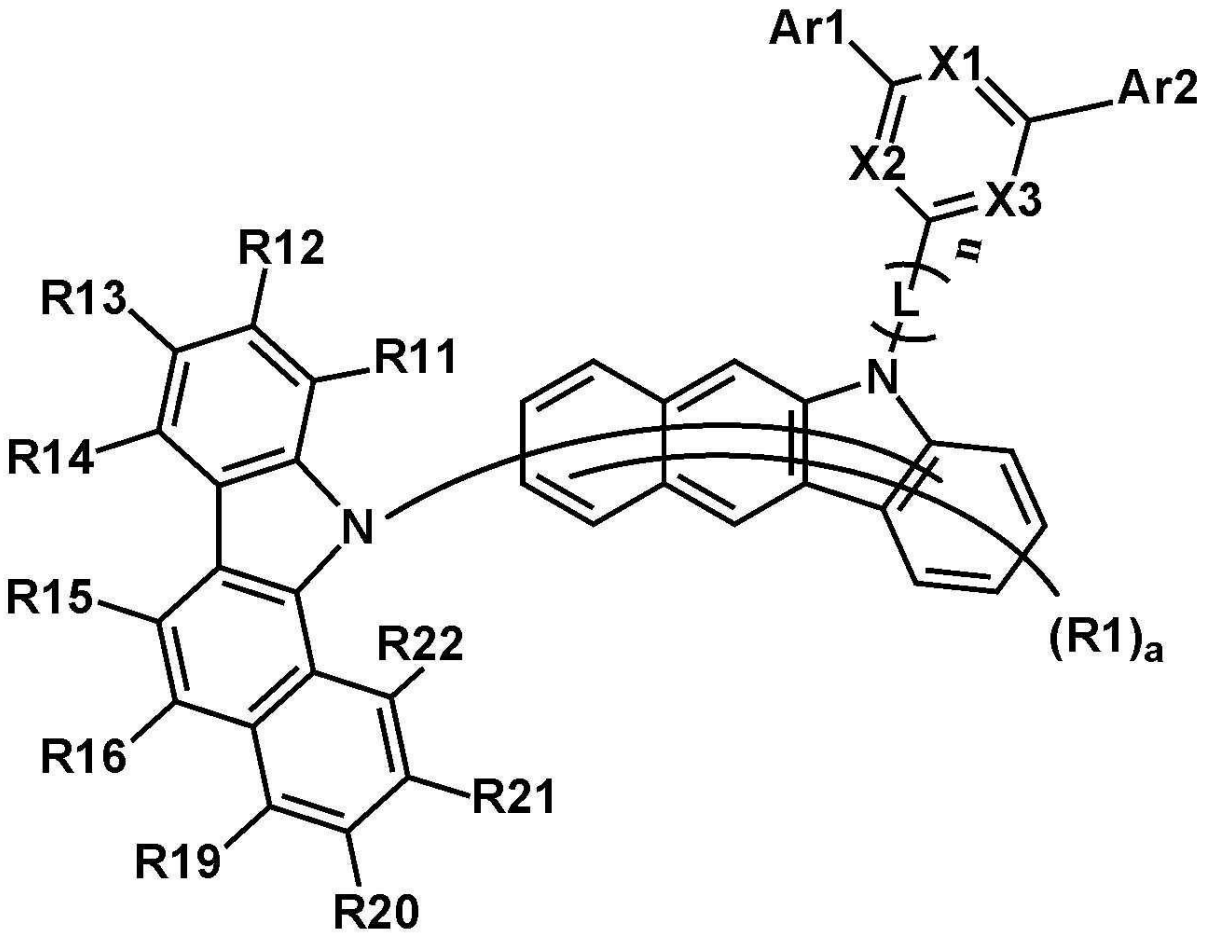
【化８】



【００５０】

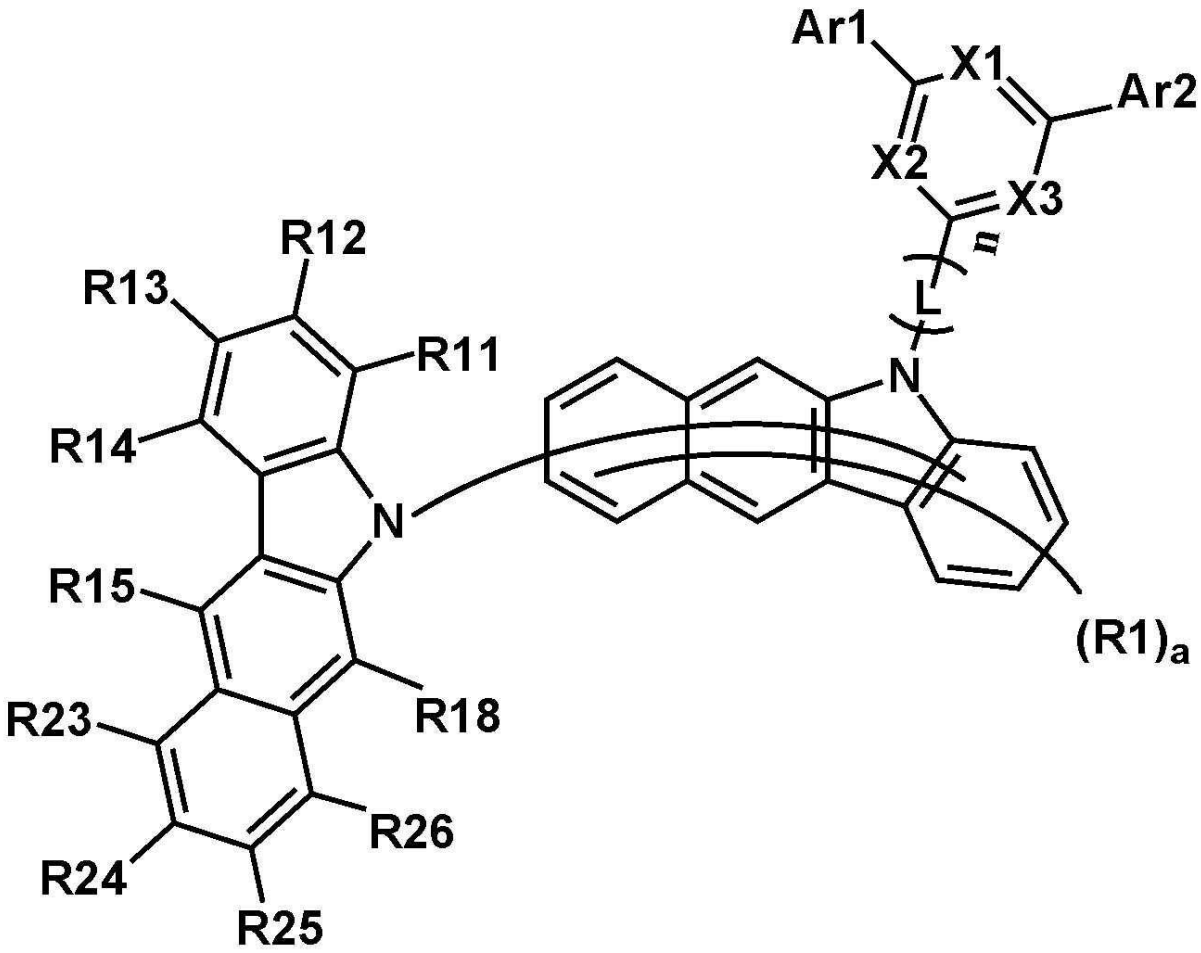
［化学式３］

【化９】



【００５１】
［化学式４］

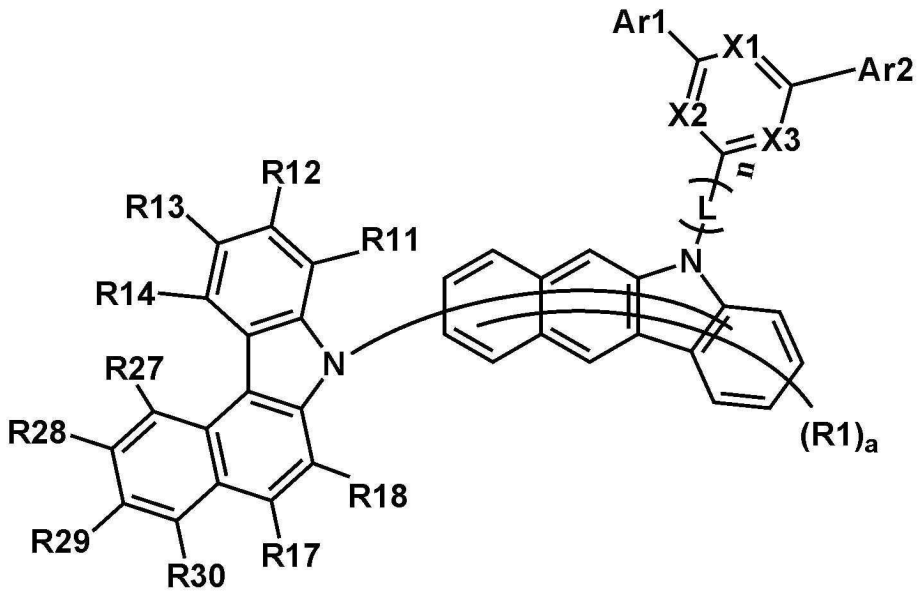
【化１０】



【００５２】

［化学式５］

【化１１】



【００５３】

前記化学式２～５において、

Ｒ１９～Ｒ３４は、互いに同一または異なり、それぞれ独立して、水素；重水素；ニトリル基；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リールオキシ基；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アリール基であり、

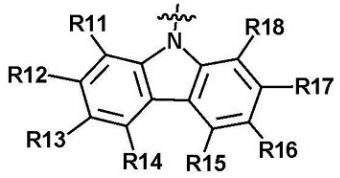
【００５４】

残りの置換基は、上記で定義した通りである。

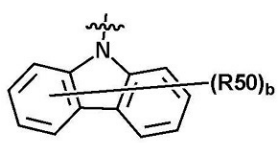
【００５５】

本明細書の一実施態様によれば、前記

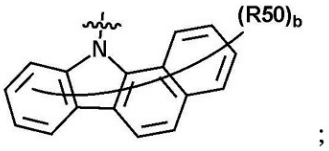
【化１２】



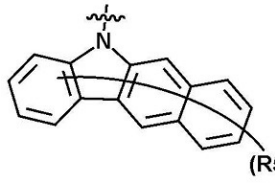
は、



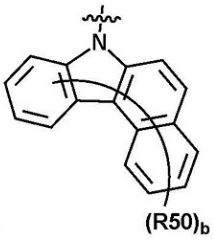
；



；

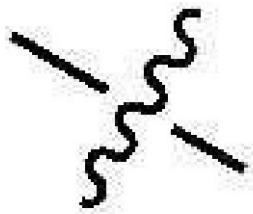


；または



であり、ここで、

【化１３】



は、連結される位置であり、Ｒ５０は、水素；重水素；アルキル基；シクロアルキル基；またはアリール基であり、ｂは、０～１０の整数であり、ｂが２以上であれば、Ｒ５０は、互いに同一または異なる。

【００５６】

本明細書の一実施態様によれば、前記Ｒ５０は、水素である。

【００５７】

本明細書の一実施態様によれば、前記ｂは、０である。

【００５８】

本明細書の一実施態様によれば、前記Ｒ１およびＲ１１～Ｒ３４は、水素である。

【００５９】

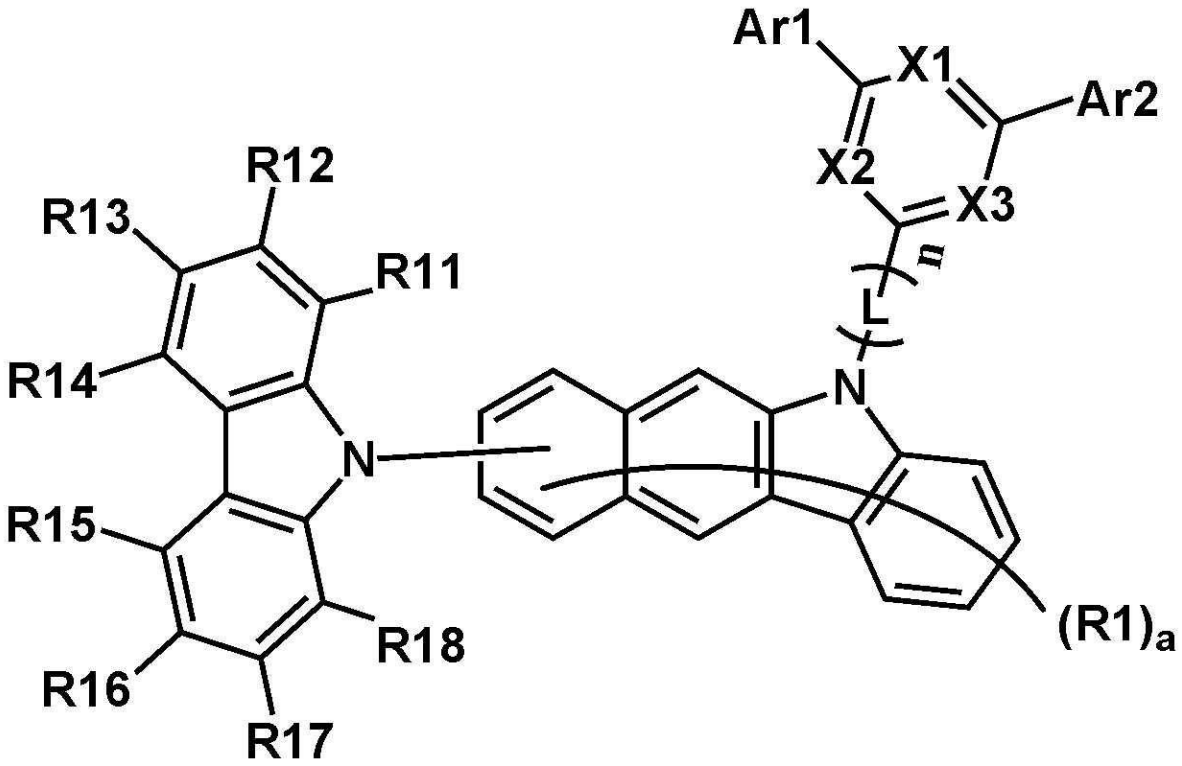
本明細書の一実施態様によれば、前記Ａｒ１およびＡｒ２は、互いに同一または異なり、それぞれ独立して、置換もしくは非置換のＣ６－Ｃ３０のアリール基である。

【００６０】

本明細書の一実施態様によれば、前記Ａｒ１およびＡｒ２は、互いに同一または異なり、

それぞれ独立して、置換もしくは非置換のＣ６－Ｃ２２のアリール基である。
【００６１】
本明細書の一実施態様によれば、前記Ａｒ１およびＡｒ２は、互いに同一または異なり、それぞれ独立して、置換もしくは非置換のＣ６－Ｃ１８のアリール基である。
【００６２】
本明細書の一実施態様によれば、前記Ａｒ１およびＡｒ２は、互いに同一または異なり、それぞれ独立して、置換もしくは非置換のＣ６－Ｃ１４のアリール基である。
【００６３】
本明細書の一実施態様によれば、前記Ａｒ１およびＡｒ２は、互いに同一または異なり、それぞれ独立して、重水素、ニトリル基、アリール基、またはヘテロアリール基で置換もしくは非置換のアリール基である。
【００６４】
本明細書の一実施態様によれば、前記Ａｒ１およびＡｒ２は、互いに同一または異なり、それぞれ独立して、Ｃ６－Ｃ１４のアリール基である。
【００６５】
本明細書の一実施態様によれば、前記Ａｒ１およびＡｒ２は、互いに同一または異なり、それぞれ独立して、フェニル基；ビフェニル基；ナフチル基；またはフェナントレニル基である。
【００６６】
本明細書の一実施態様によれば、前記Ａｒ１およびＡｒ２は、互いに同一または異なり、それぞれ独立して、フェニル基；１－ナフチル基；２－ナフチル基；ビフェニル基；［１，１'－ビフェニル］－４－イル基；［１，１'－ビフェニル］－３－イル基；［１，１'－ビフェニル］－２－イル基；フェナントレン－１－イル基；フェナントレン－２－イル基；フェナントレン－３－イル基；またはフェナントレン－９－イル基である。
【００６７】
本明細書の一実施態様によれば、前記Ａｒ１およびＡｒ２のうちの少なくとも１つは、置換されたフェニル基；または多環のアリール基である。
【００６８】
本明細書の一実施態様によれば、前記Ａｒ１およびＡｒ２のうちの少なくとも１つは、アリール基で置換されたフェニル基；または多環のアリール基である。
【００６９】
本明細書の一実施態様によれば、前記化学式１は、化学式６－１～６－３のうちの１つで表される。
【００７０】
［化学式６－１］

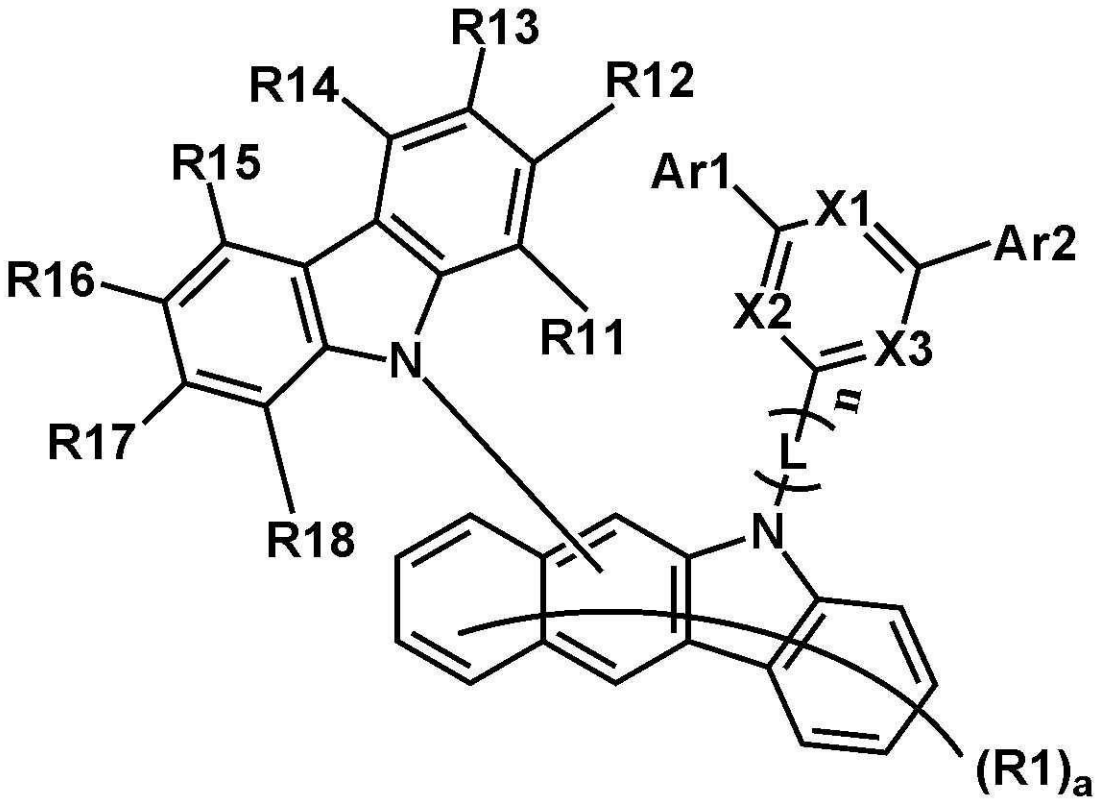
【化１４】



【００７１】

［化学式６－２］

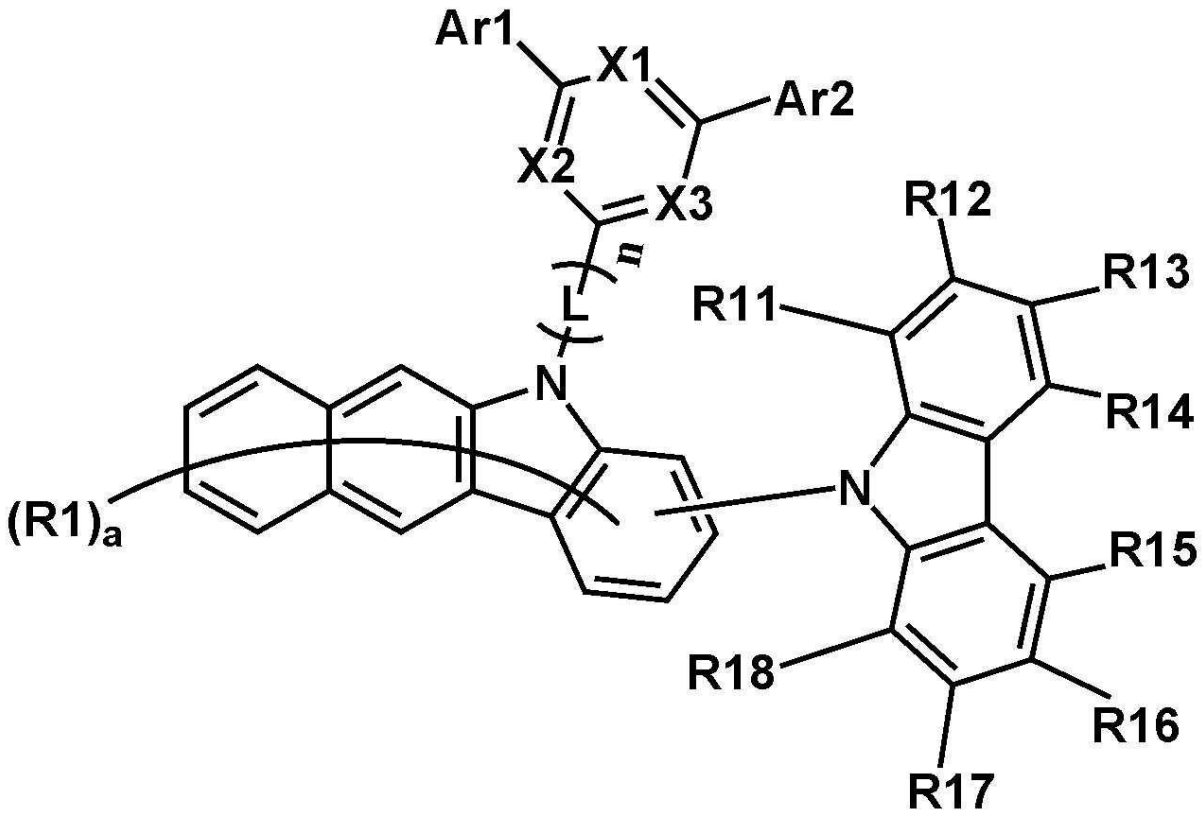
【化１５】



【００７２】

［化学式６－３］

【化１６】



【００７３】

前記化学式６－１～６－３において、Ｘ１～Ｘ３、Ｌ、ｎ、Ａｒ１、Ａｒ２、Ｒ１、ａ、およびＲ１１～Ｒ１８の定義は、化学式１で定義した通りである。

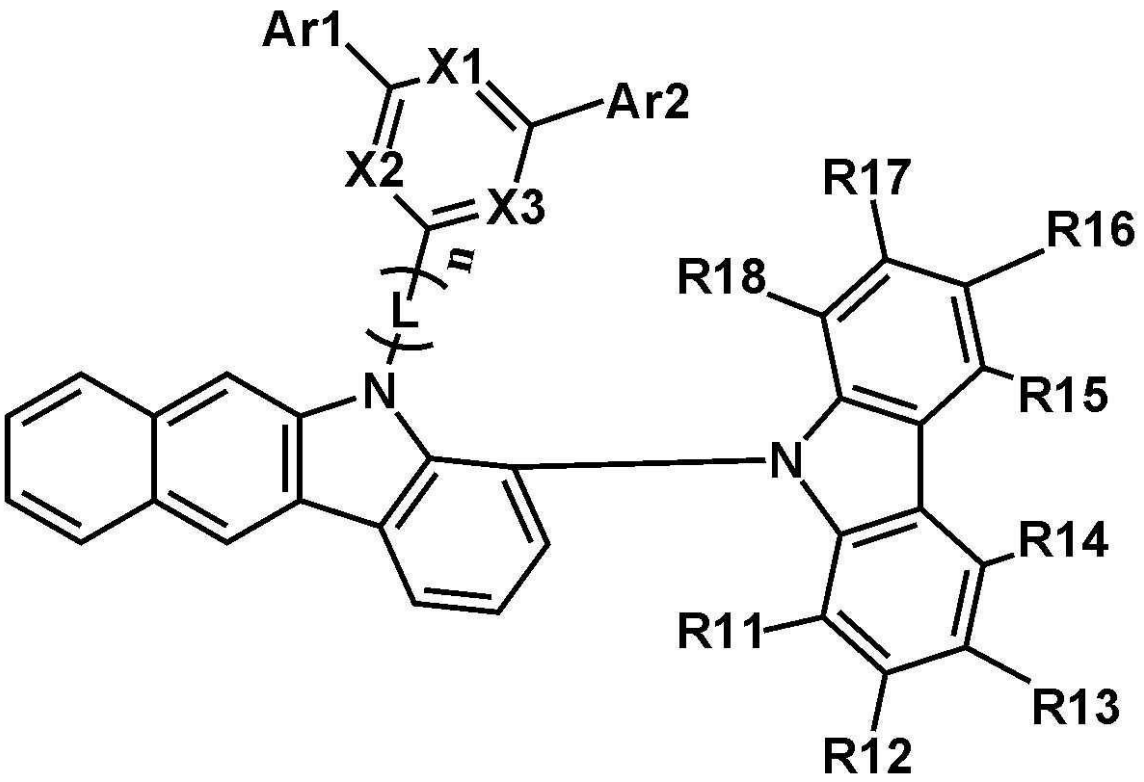
【００７４】

本明細書の一実施態様によれば、前記化学式１は、下記化学式７－１～７－１０のうちのいずれか１つで表される。

【００７５】

［化学式７－１］

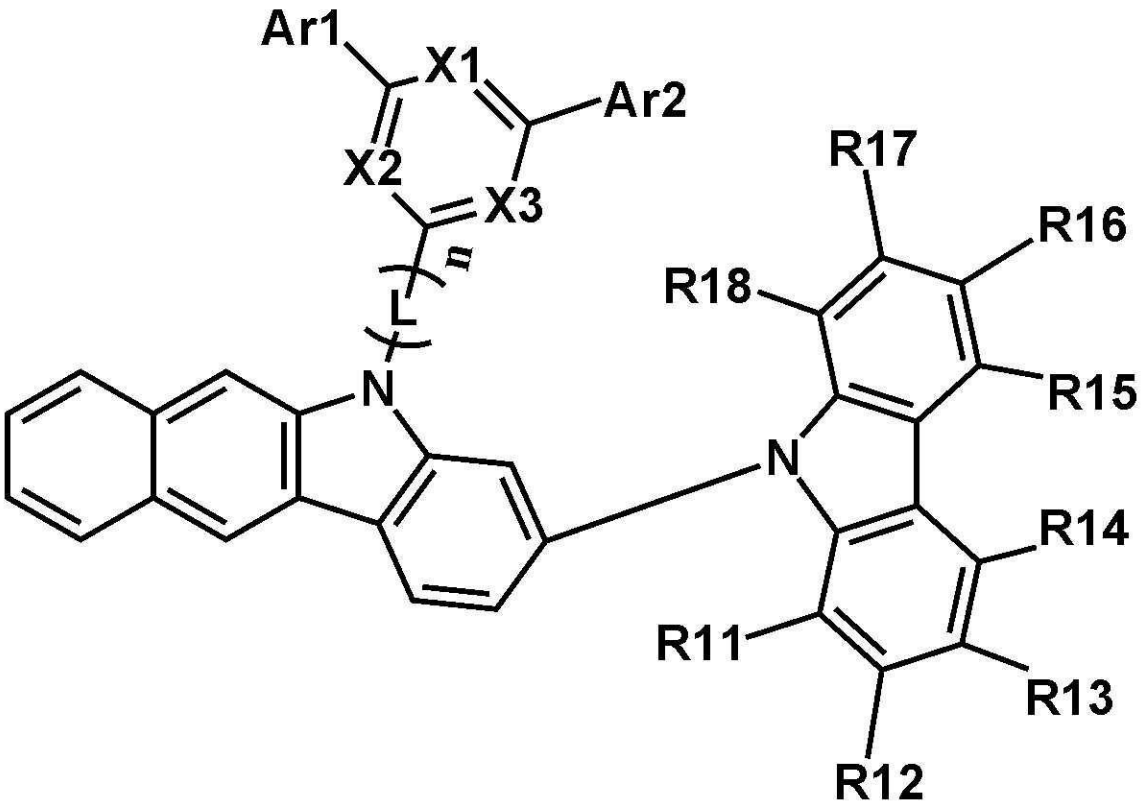
【化１７】



【００７６】

［化学式７－２］

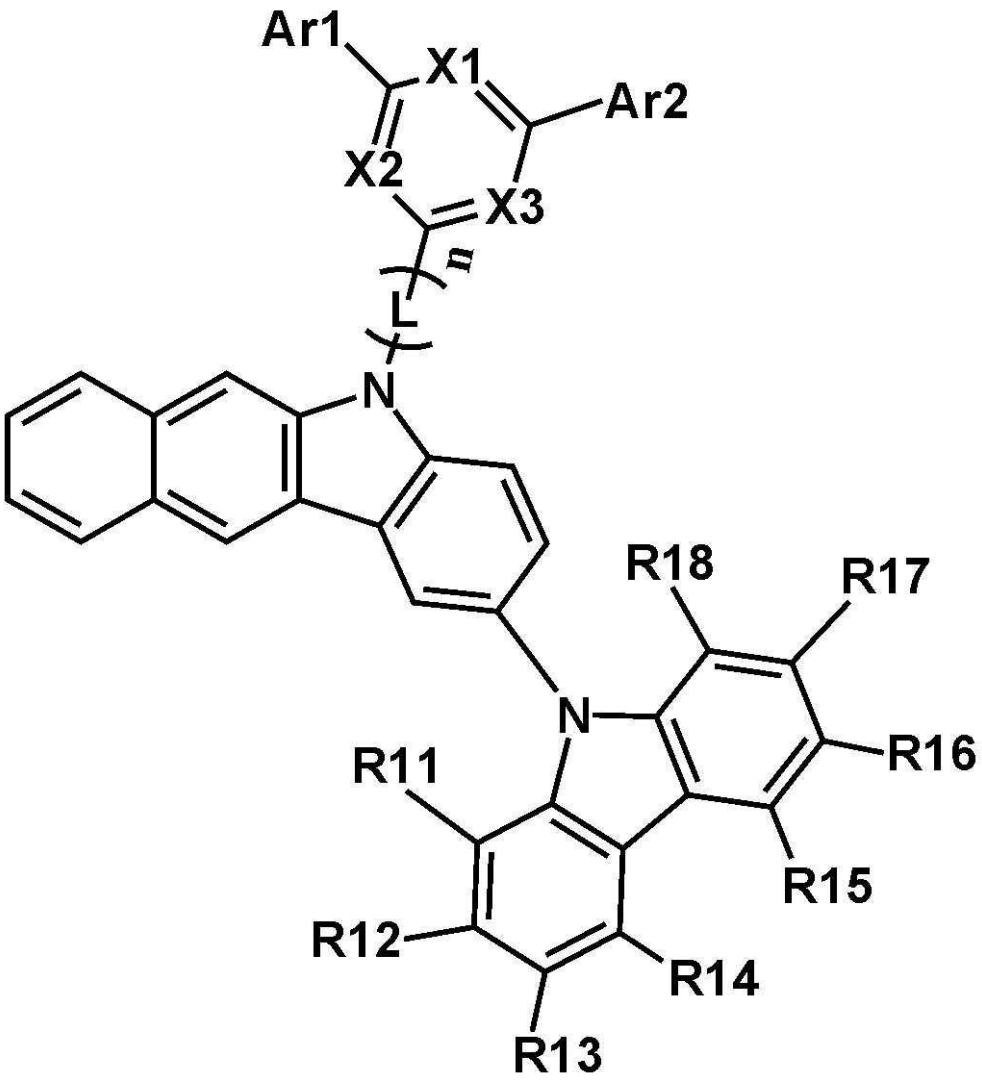
【化１８】



【００７７】

［化学式７－３］

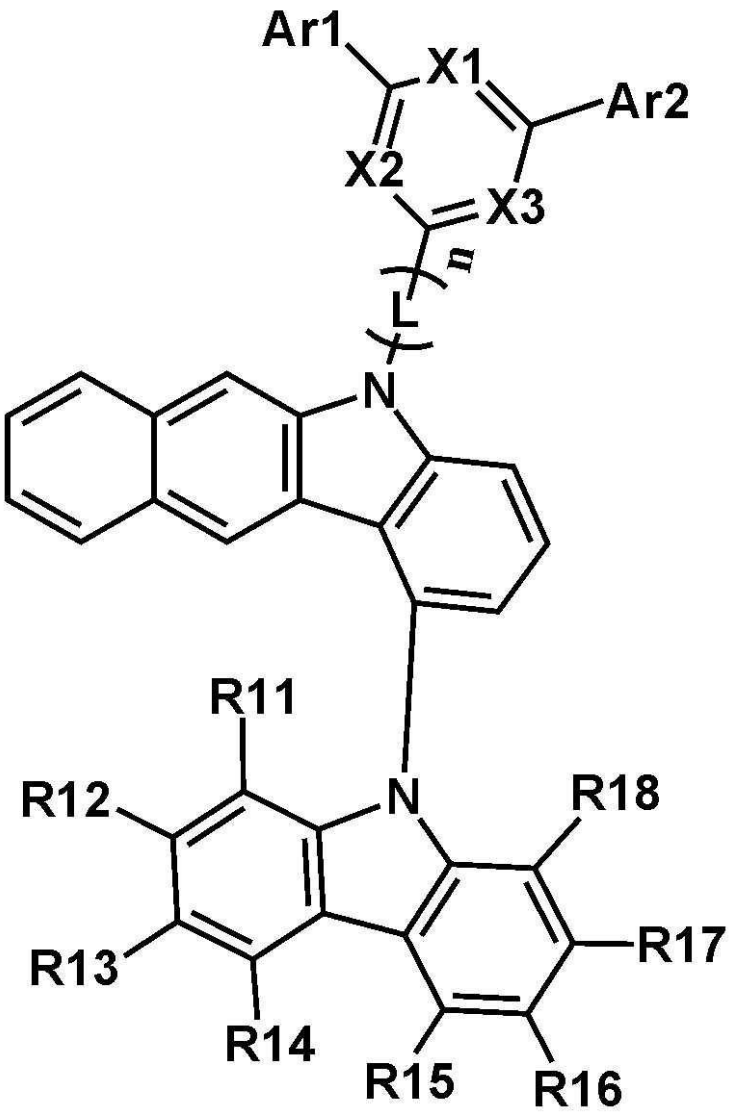
【化１９】



【００７８】

［化学式７－４］

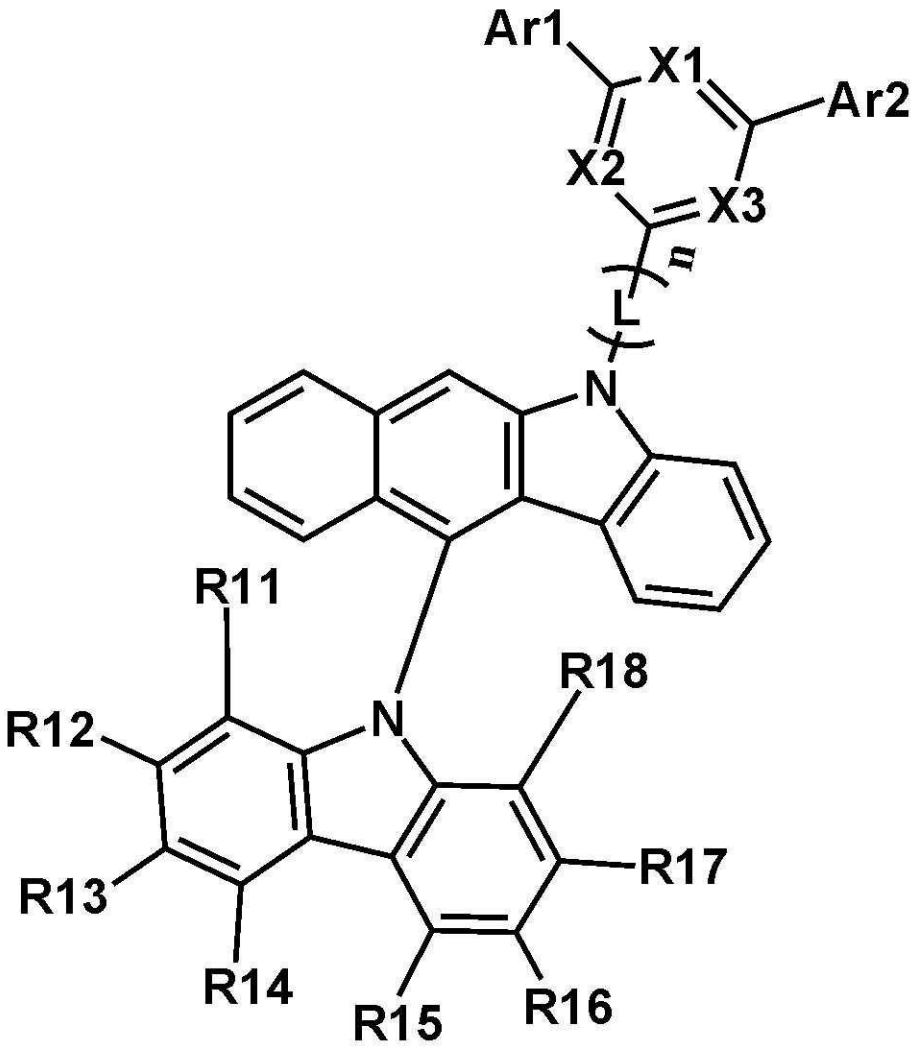
【化２０】



【００７９】

［化学式７－５］

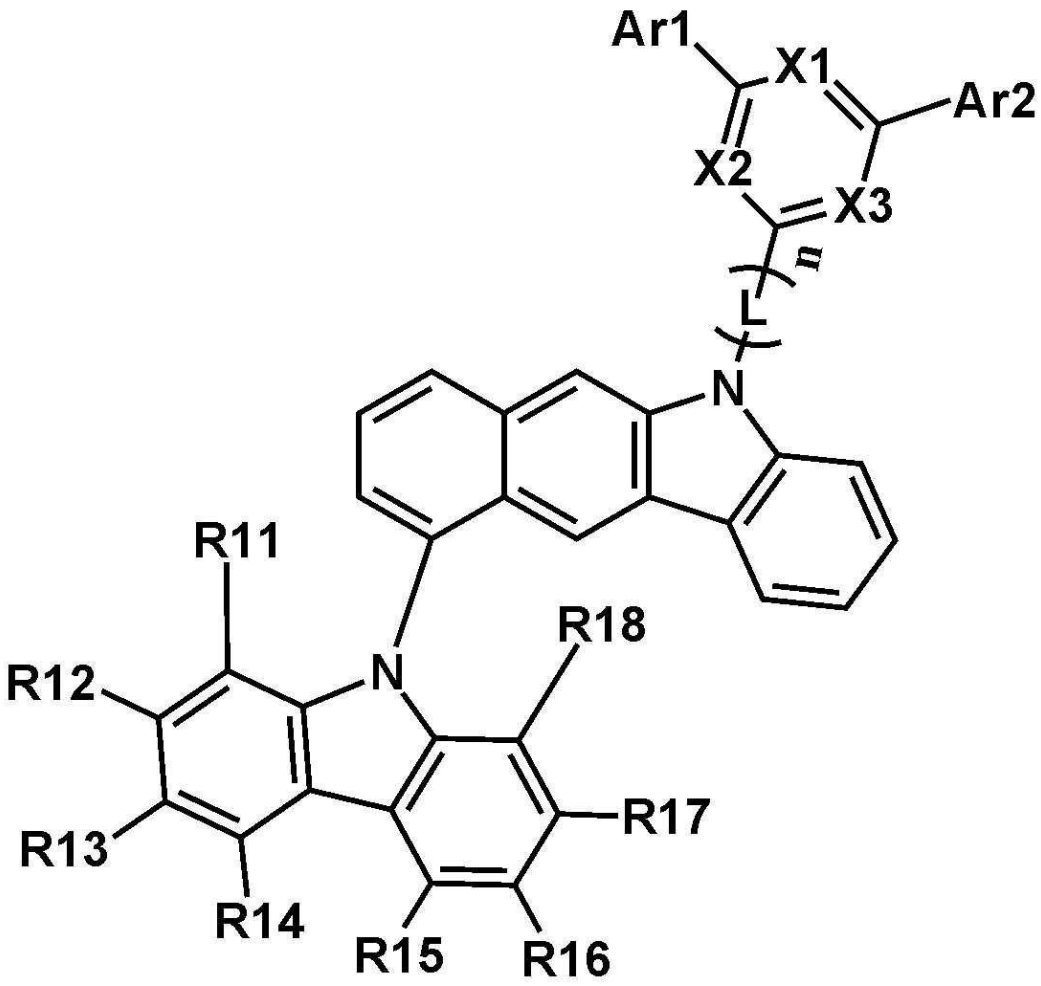
【化２１】



【００８０】

［化学式７－６］

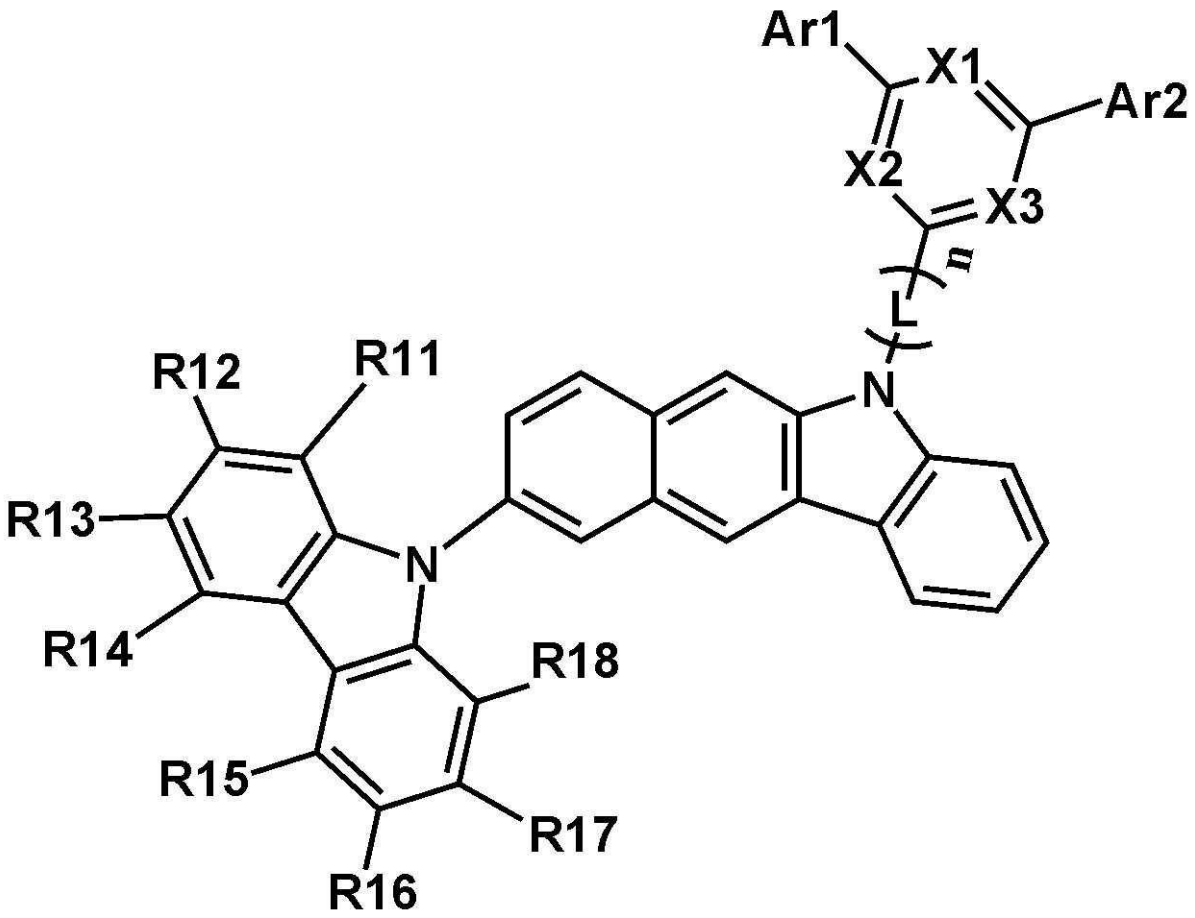
【化２２】



【００８１】

［化学式７－７］

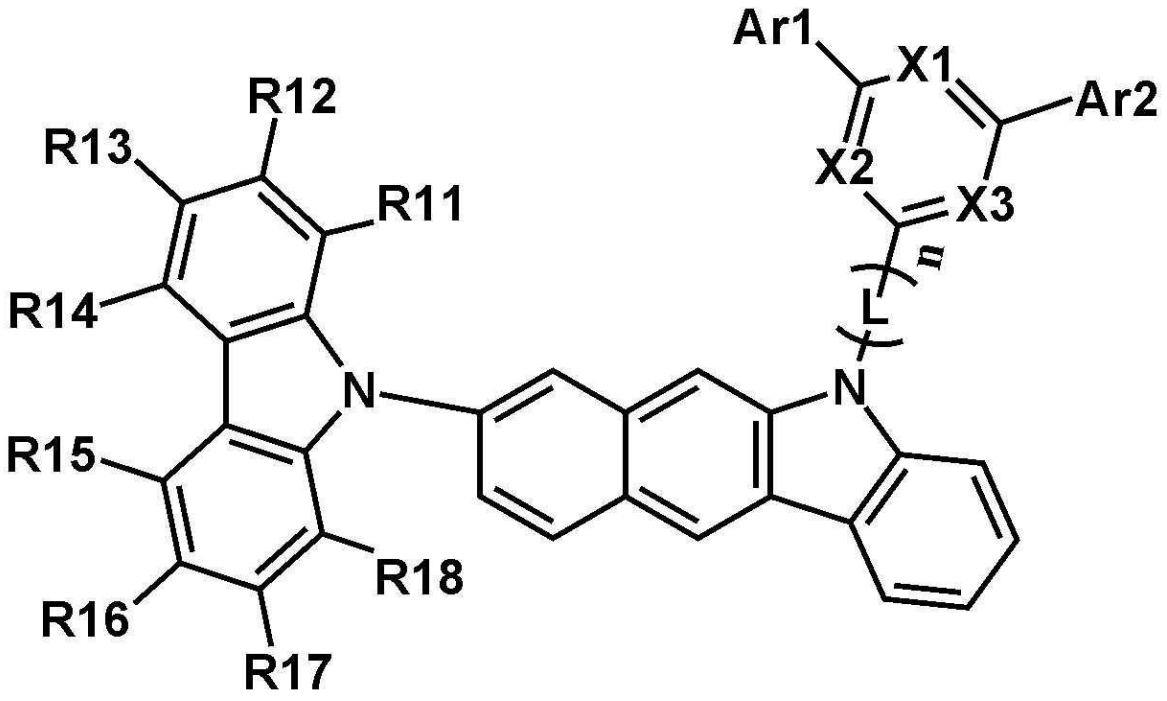
【化２３】



【００８２】

［化学式７－８］

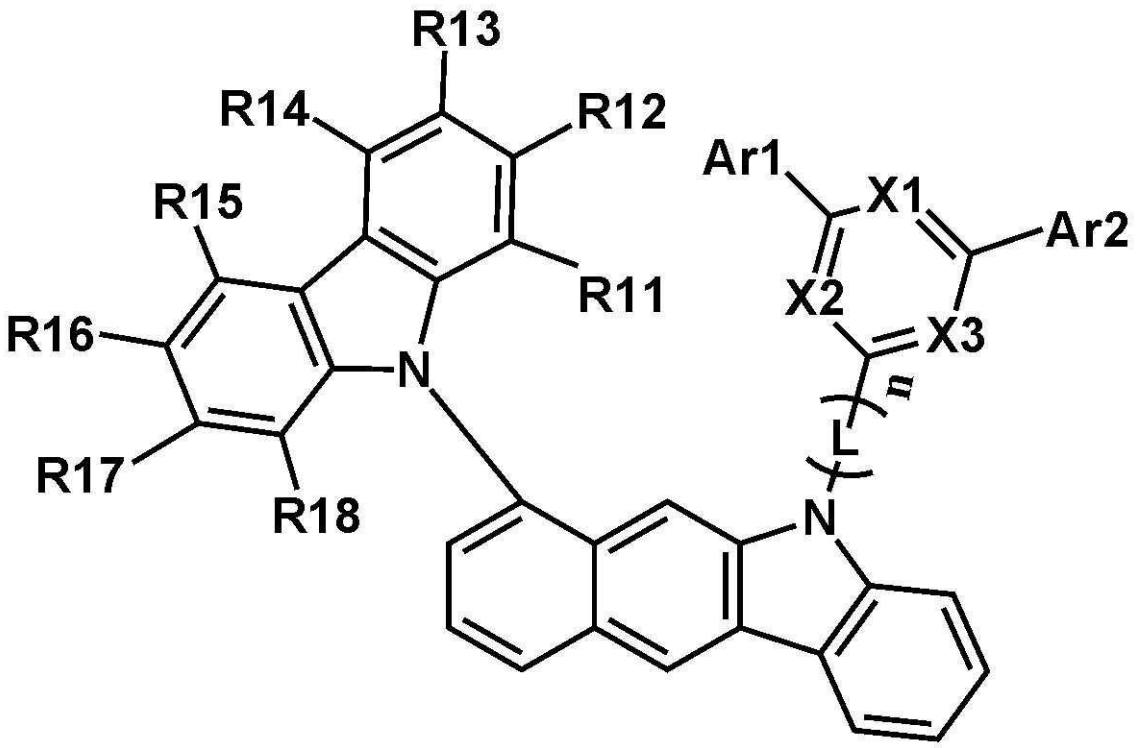
【化２４】



【００８３】

［化学式７－９］

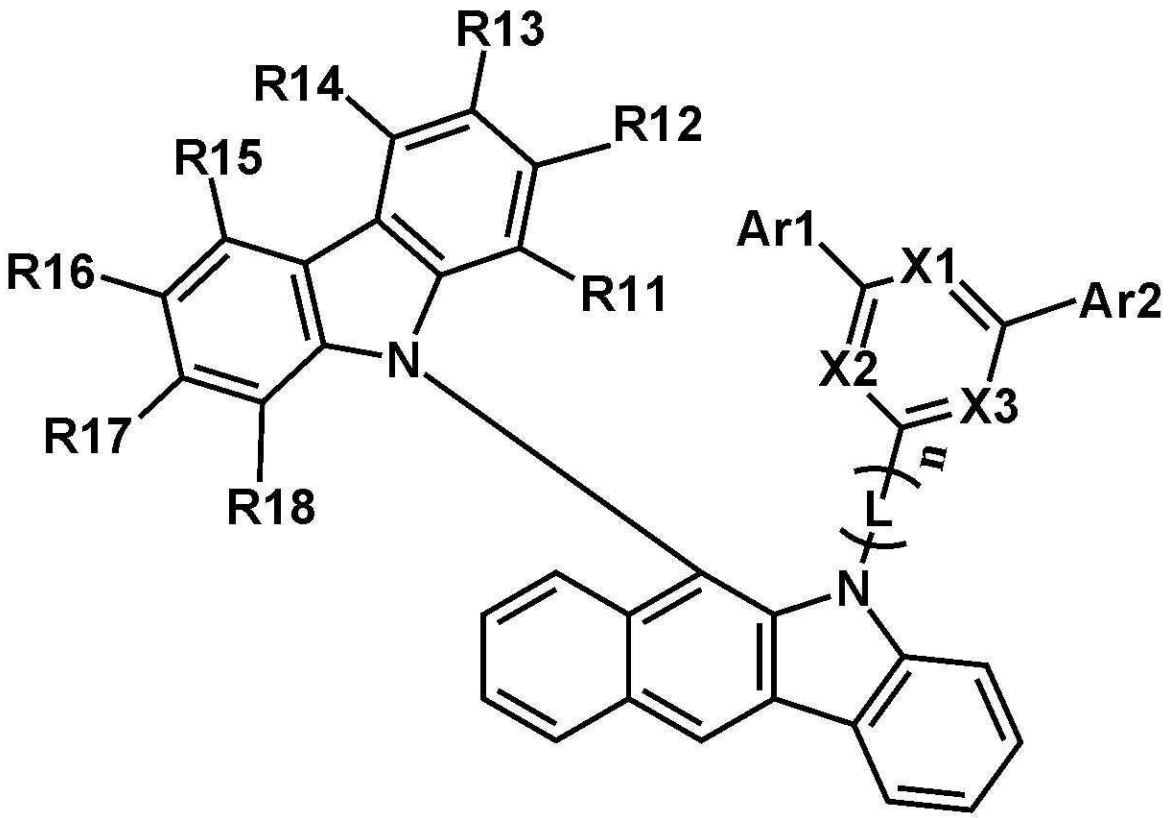
【化２５】



【００８４】

[化学式７－１０]

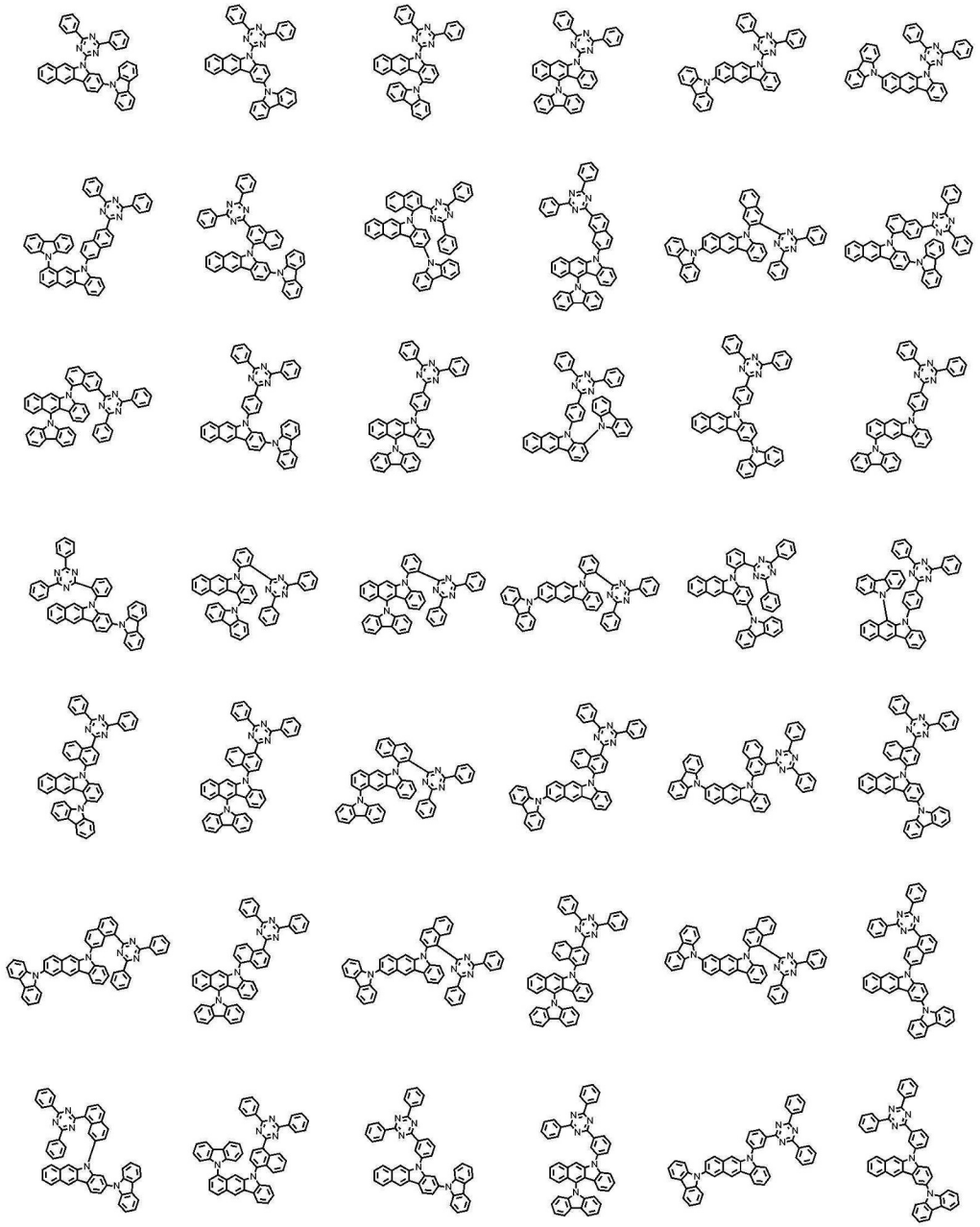
【化２６】



【００８５】

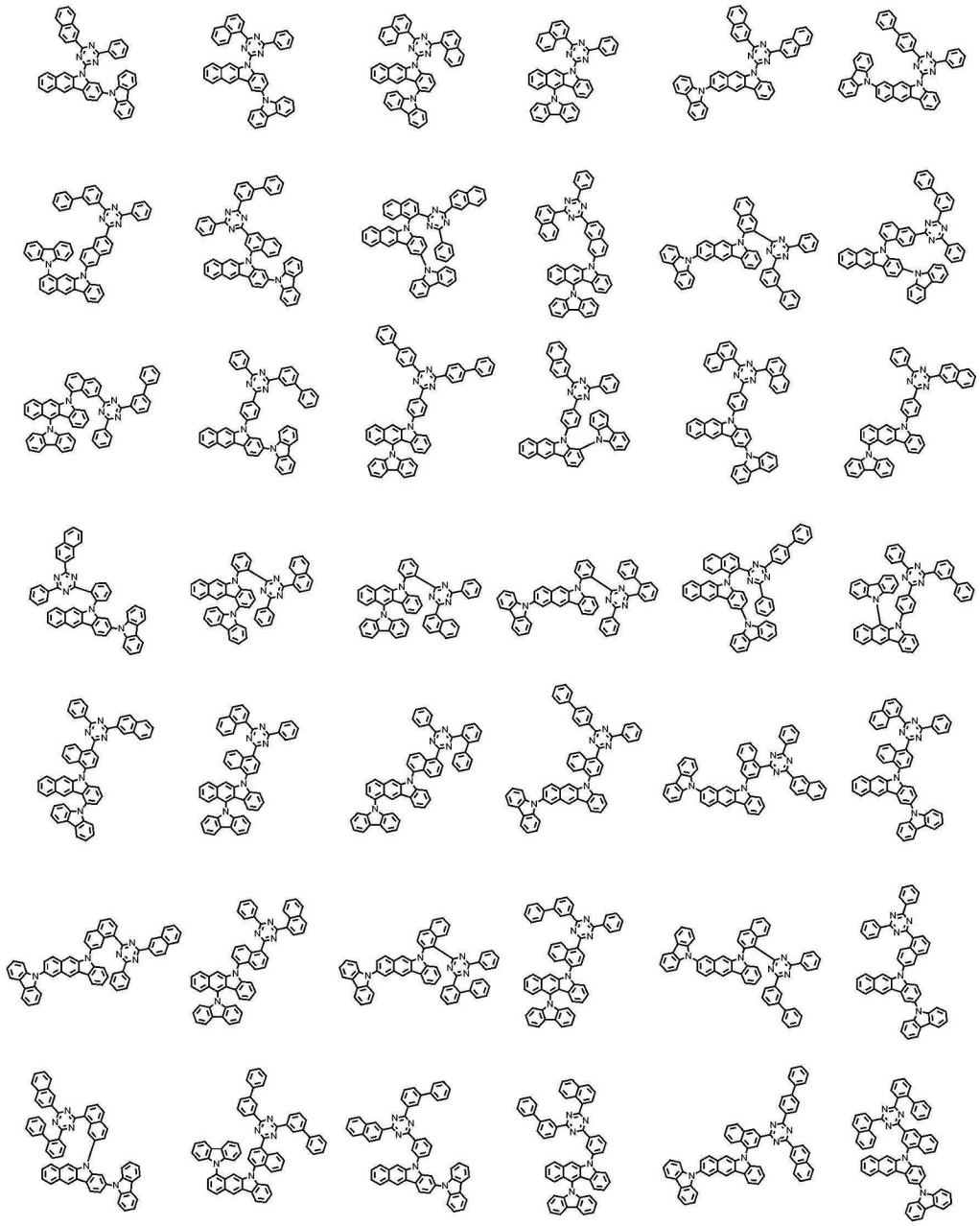
前記化学式７－１～７－１０において、Ｘ１～Ｘ３、Ｌ、ｎ、Ａｒ１、Ａｒ２およびＲ１１～Ｒ１の定義は、化学式１で定義した通りである。

【００８６】
本明細書の一実施態様によれば、前記化学式１は、下記の化合物の中から選択されたいずれか１つである。
【００８７】
【化２７】



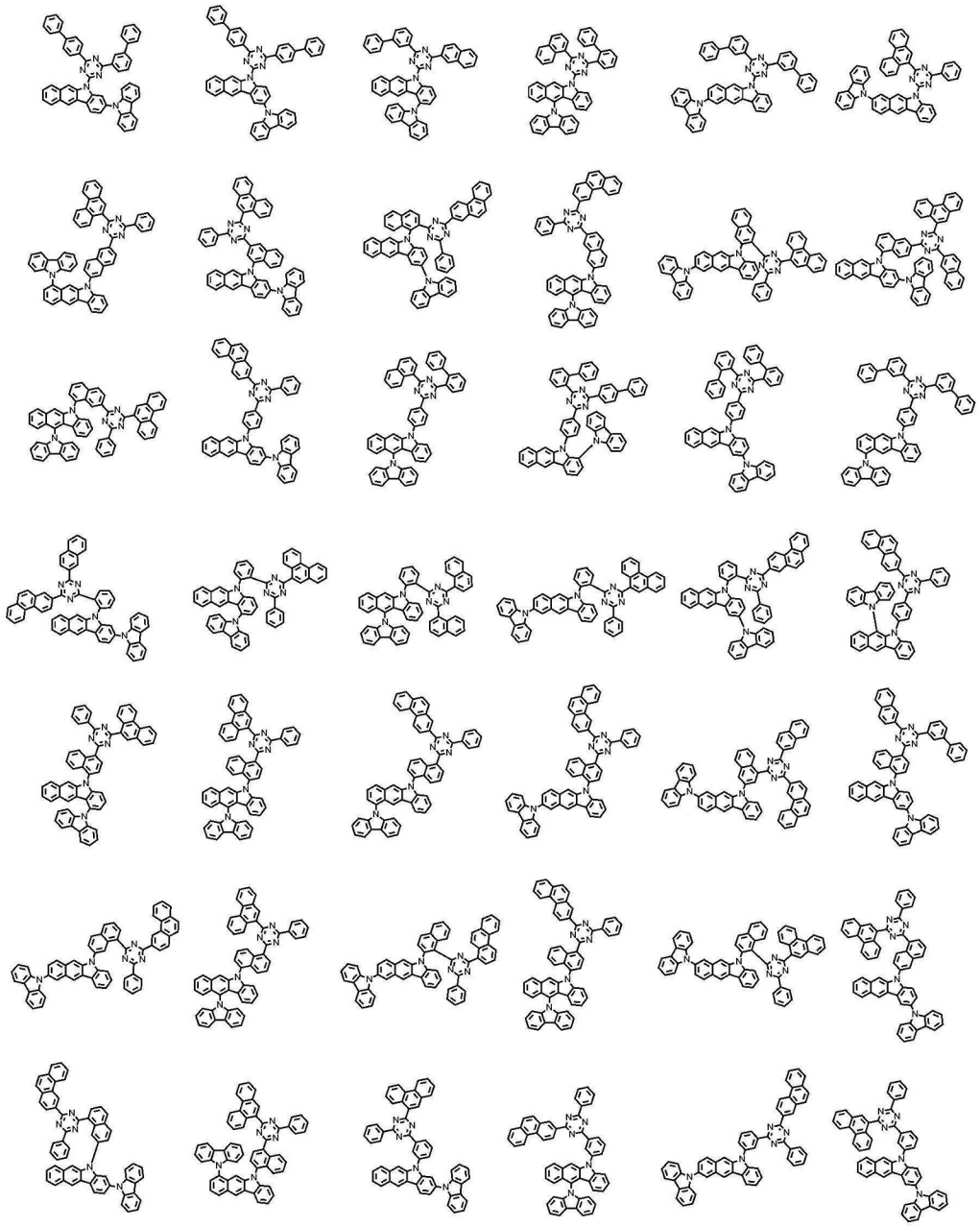
【００８８】

【化２８】



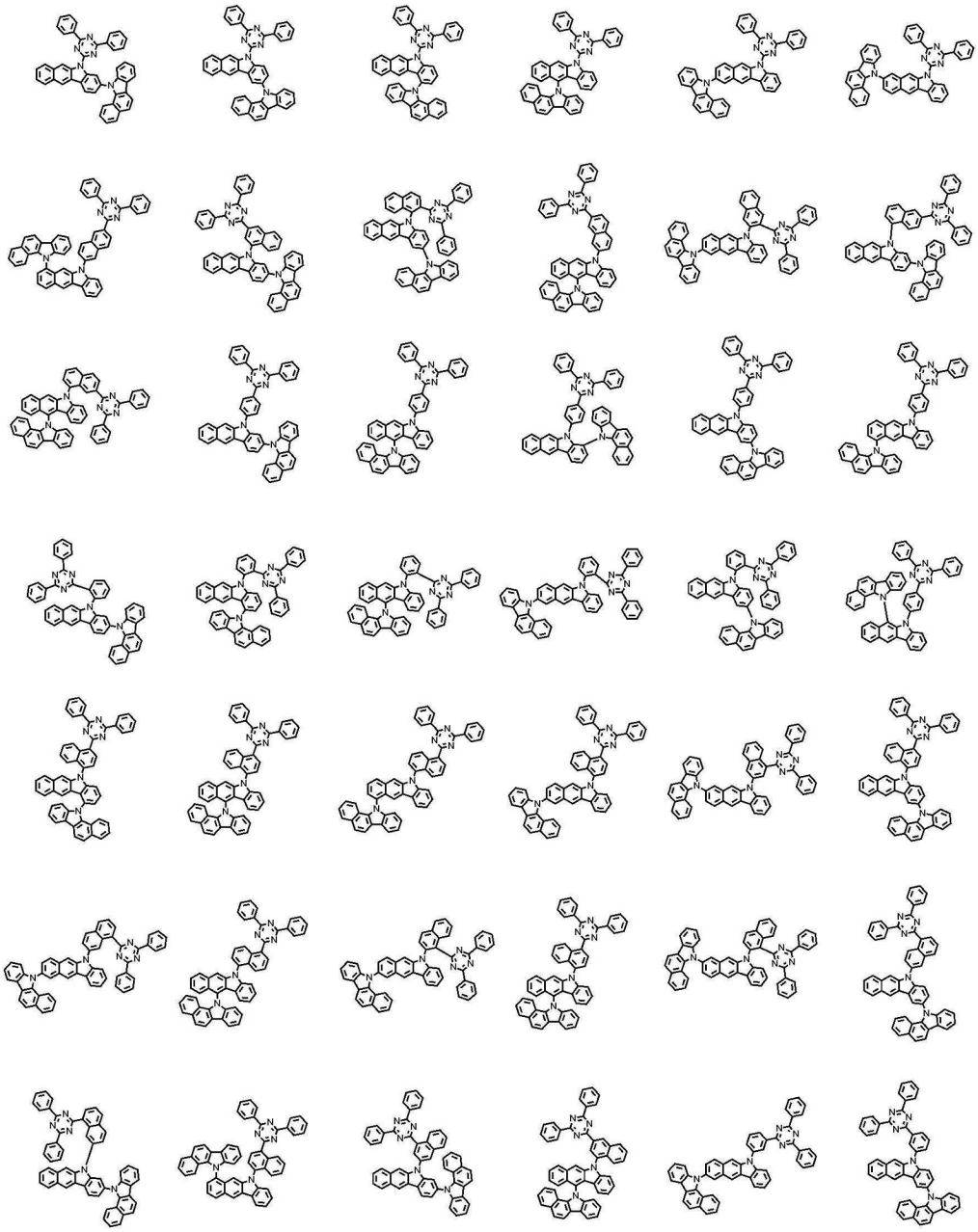
【００８９】

【化２９】



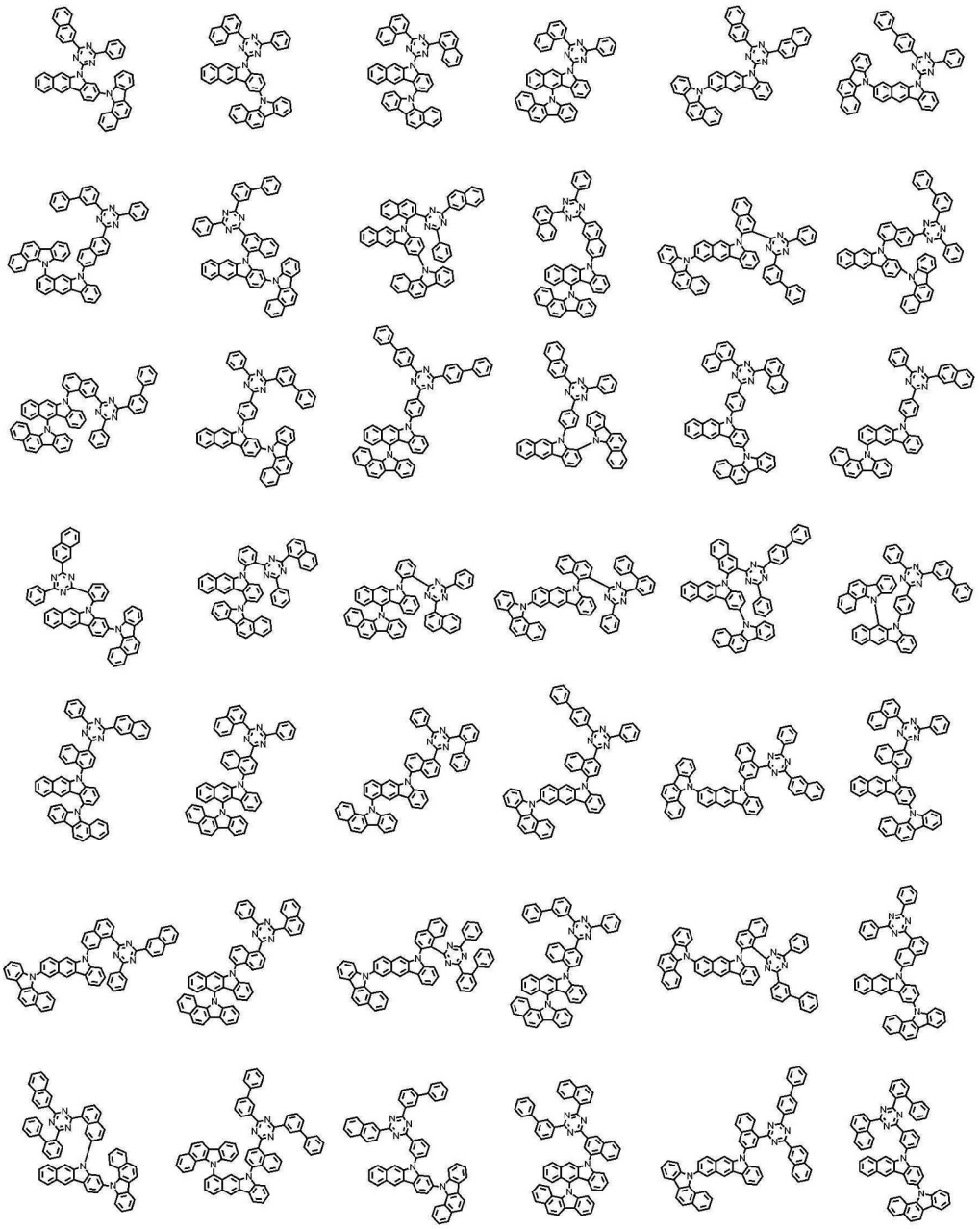
【００９０】

【化３０】



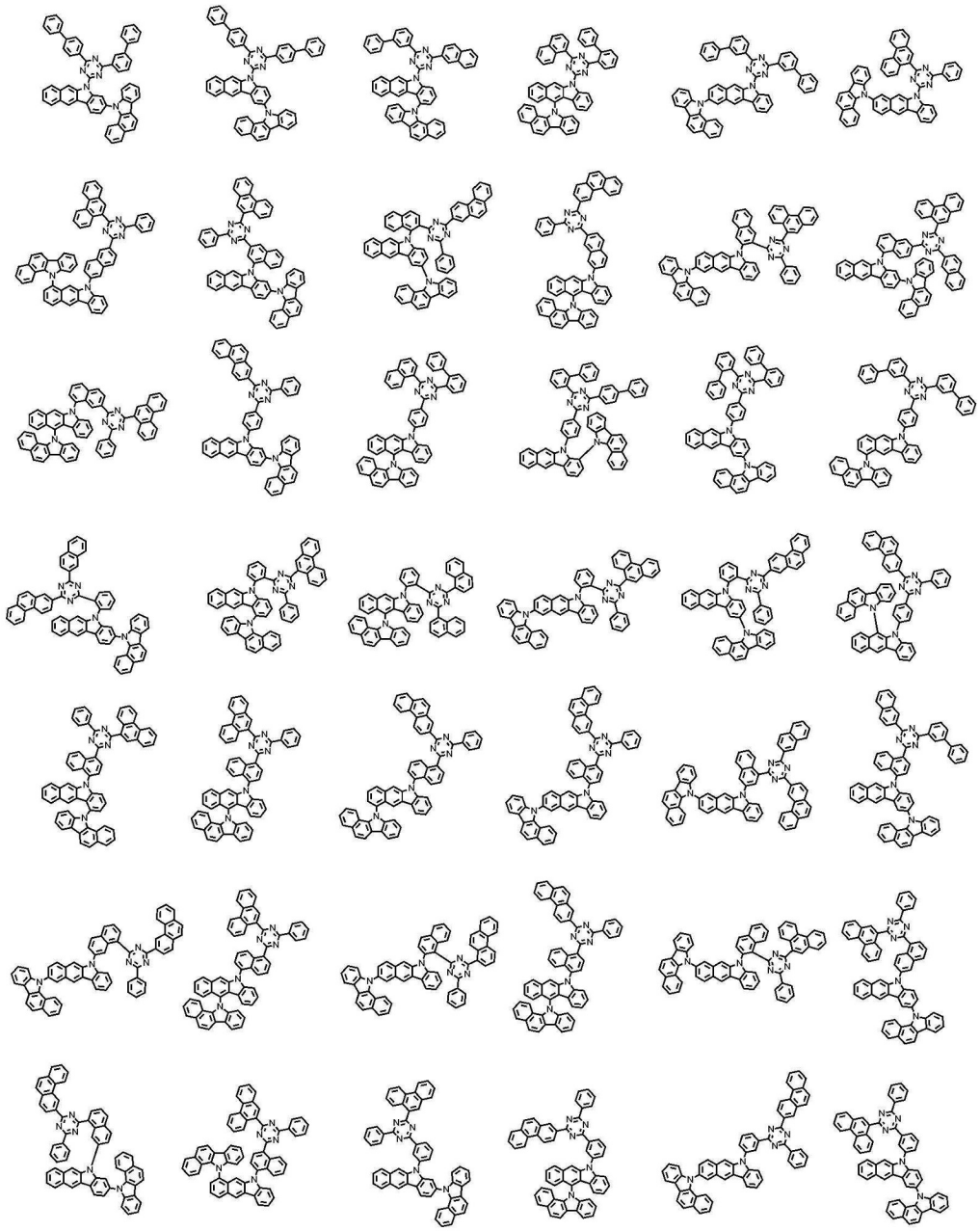
【００９１】

【化３１】



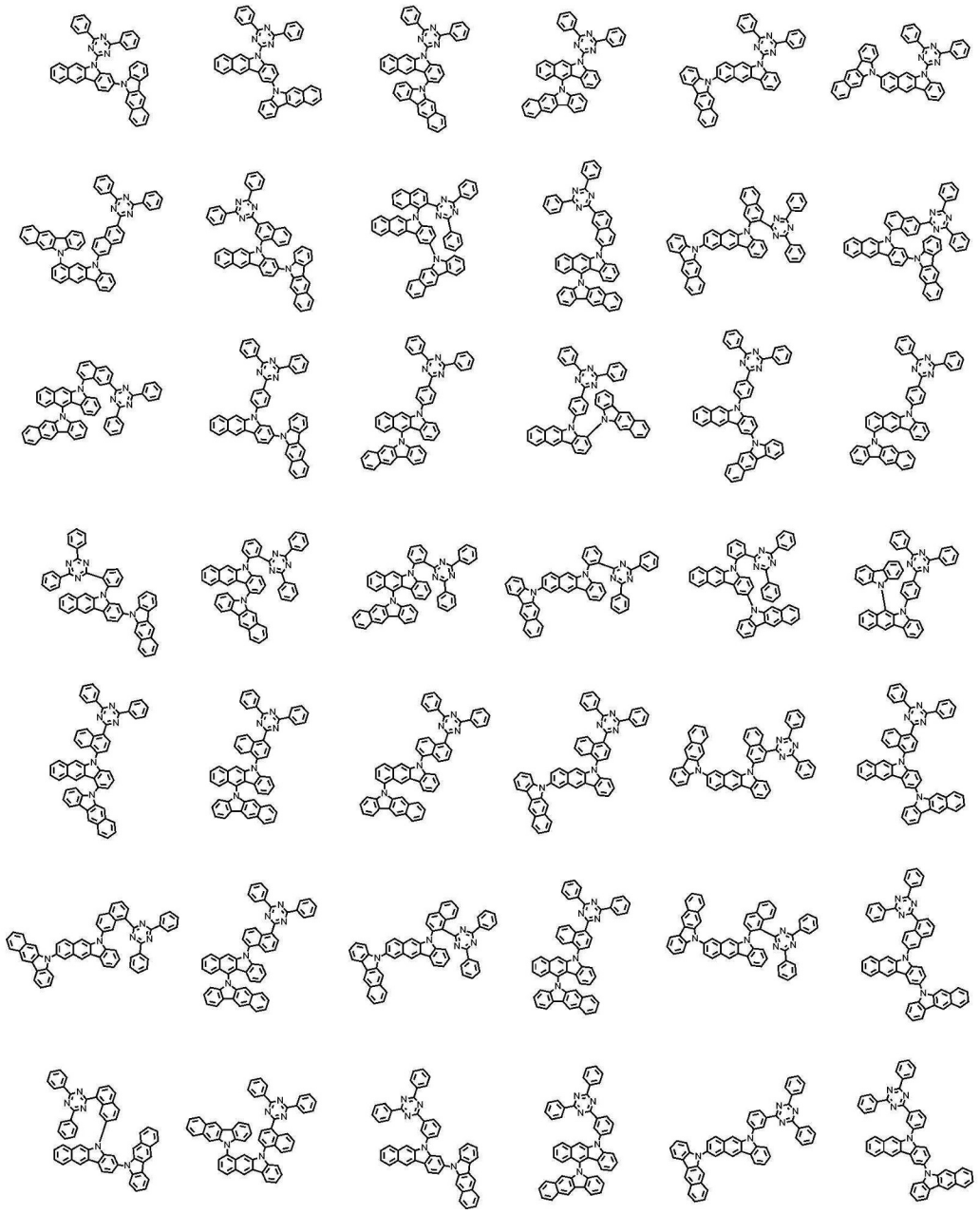
【００９２】

【化３２】



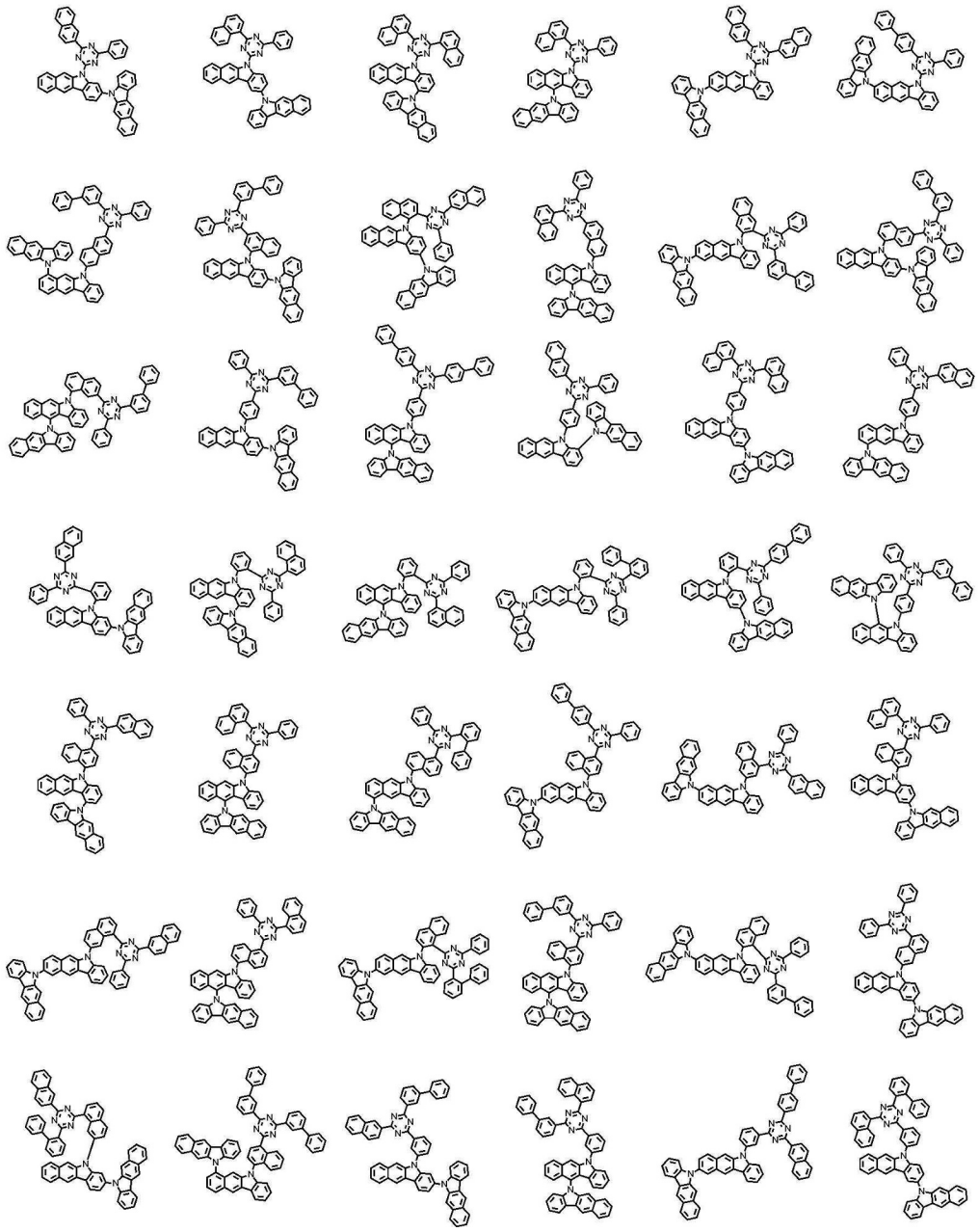
【００９３】

【化３３】



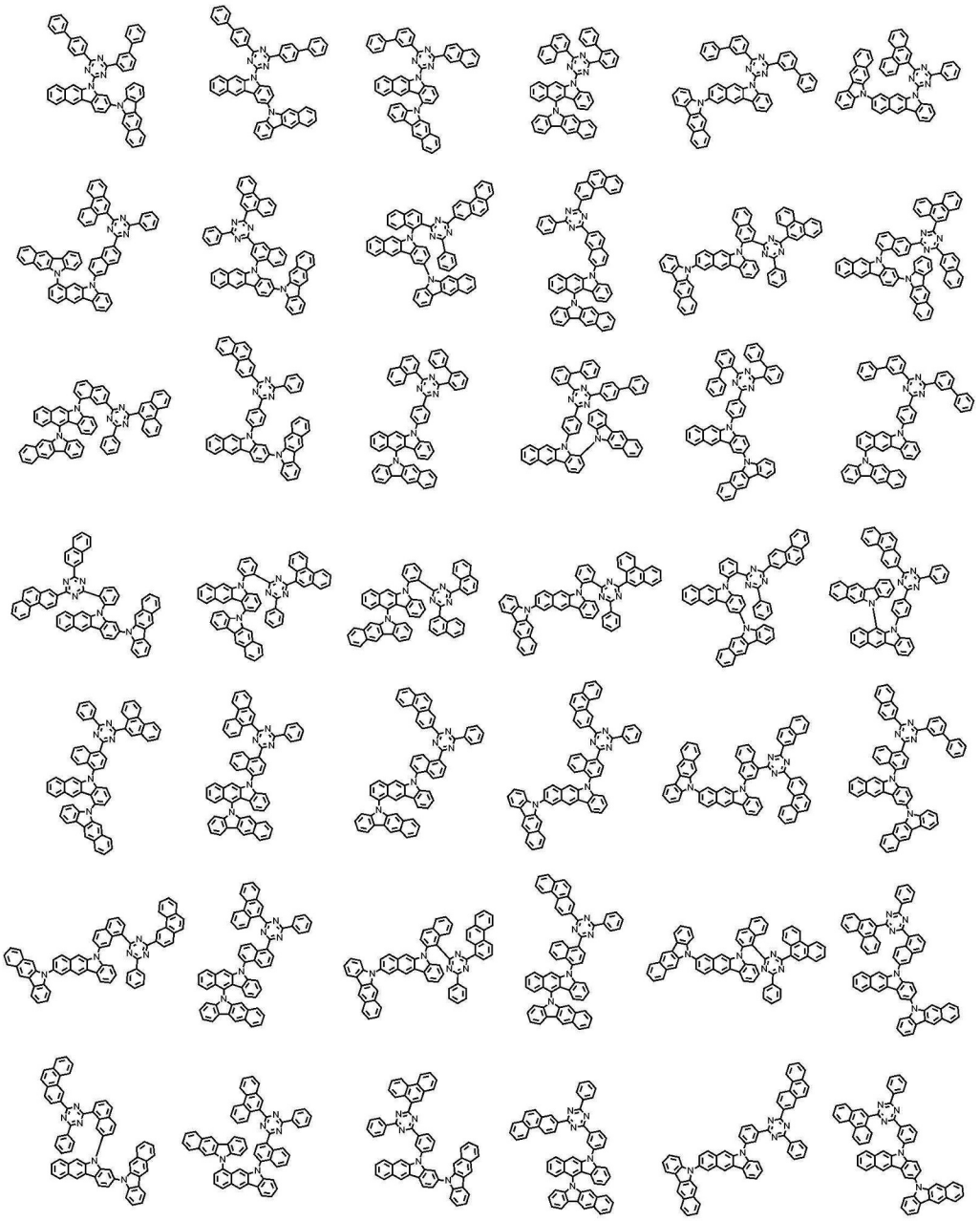
【００９４】

【化３４】



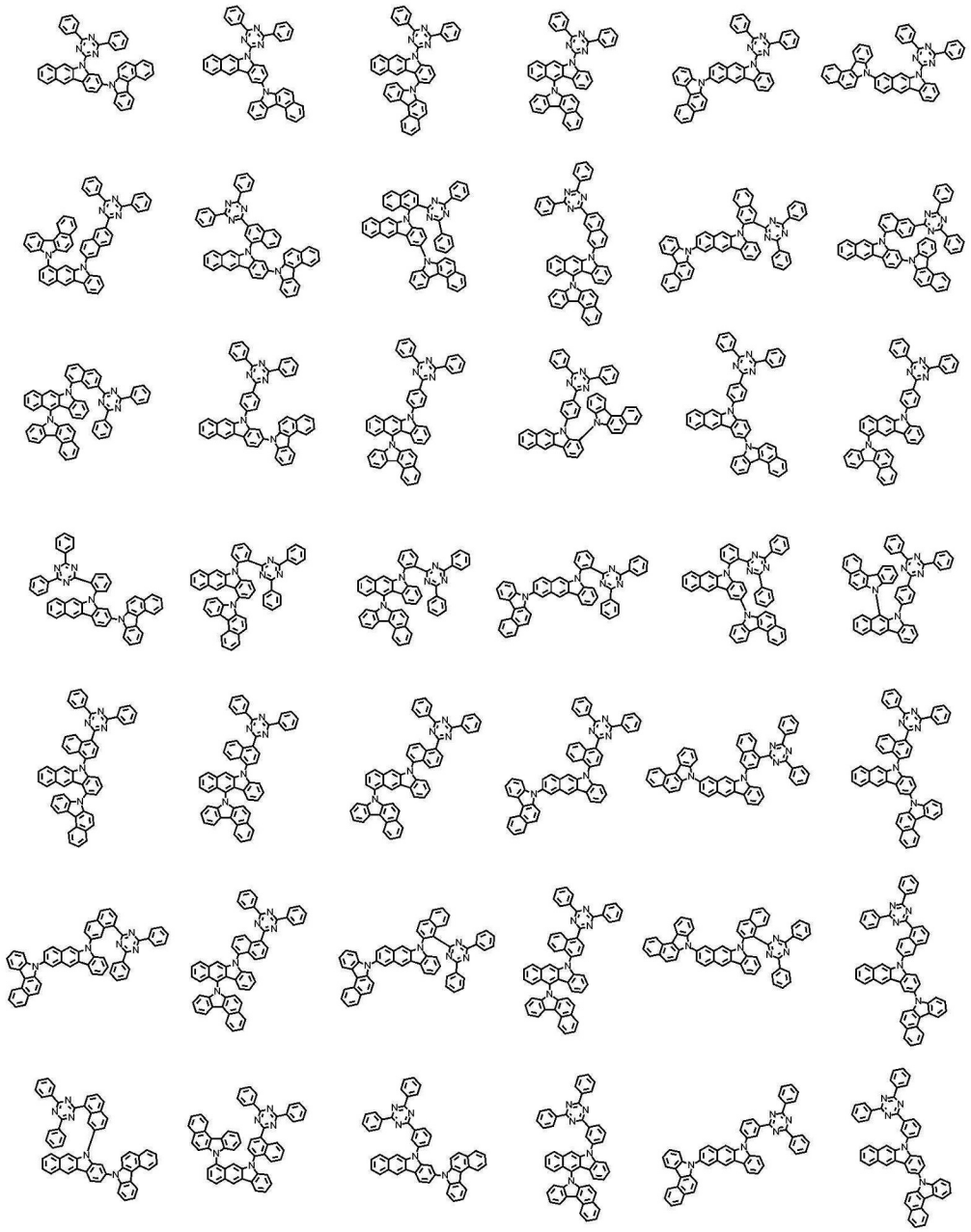
【００９５】

【化３５】



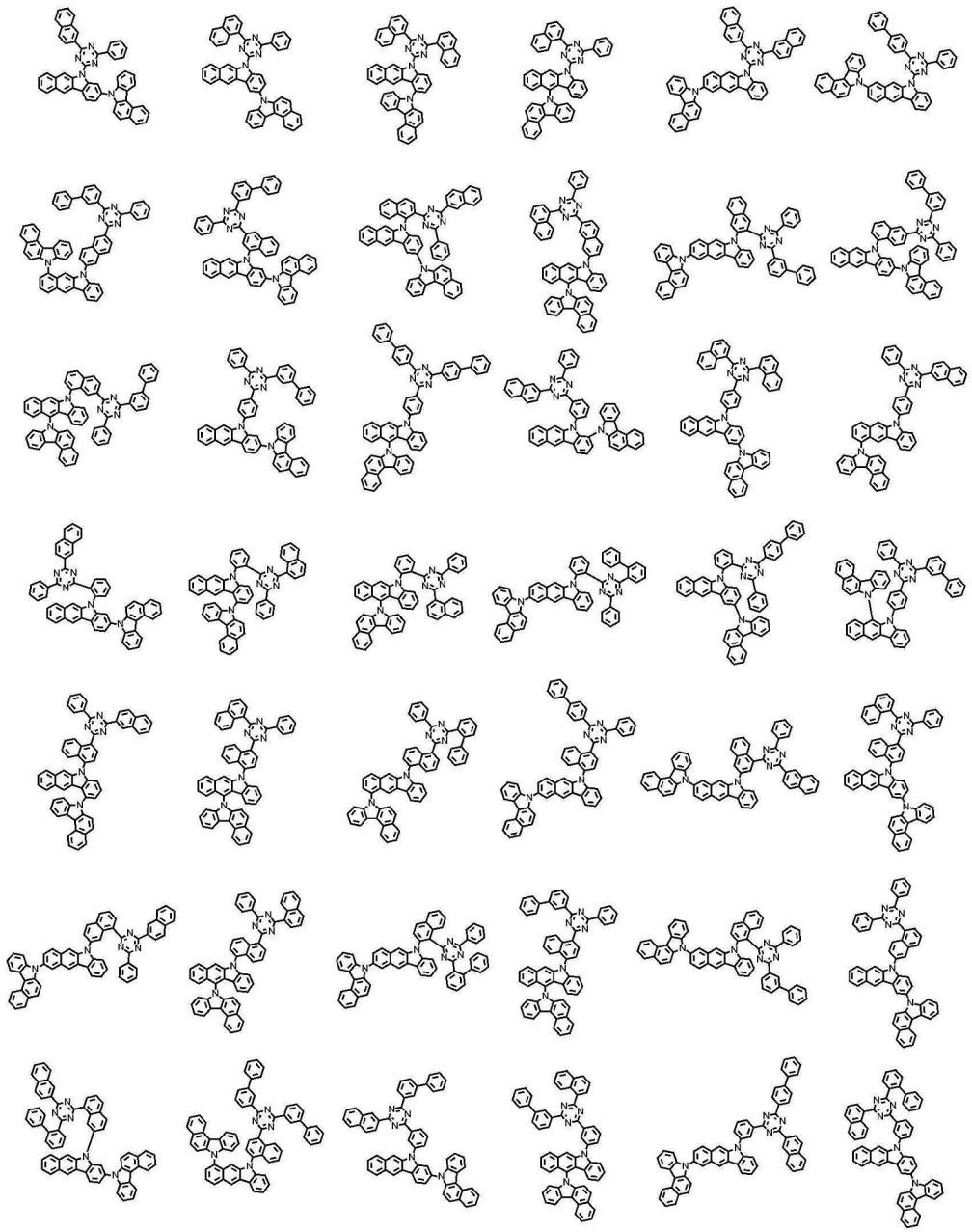
【００９６】

【化３６】



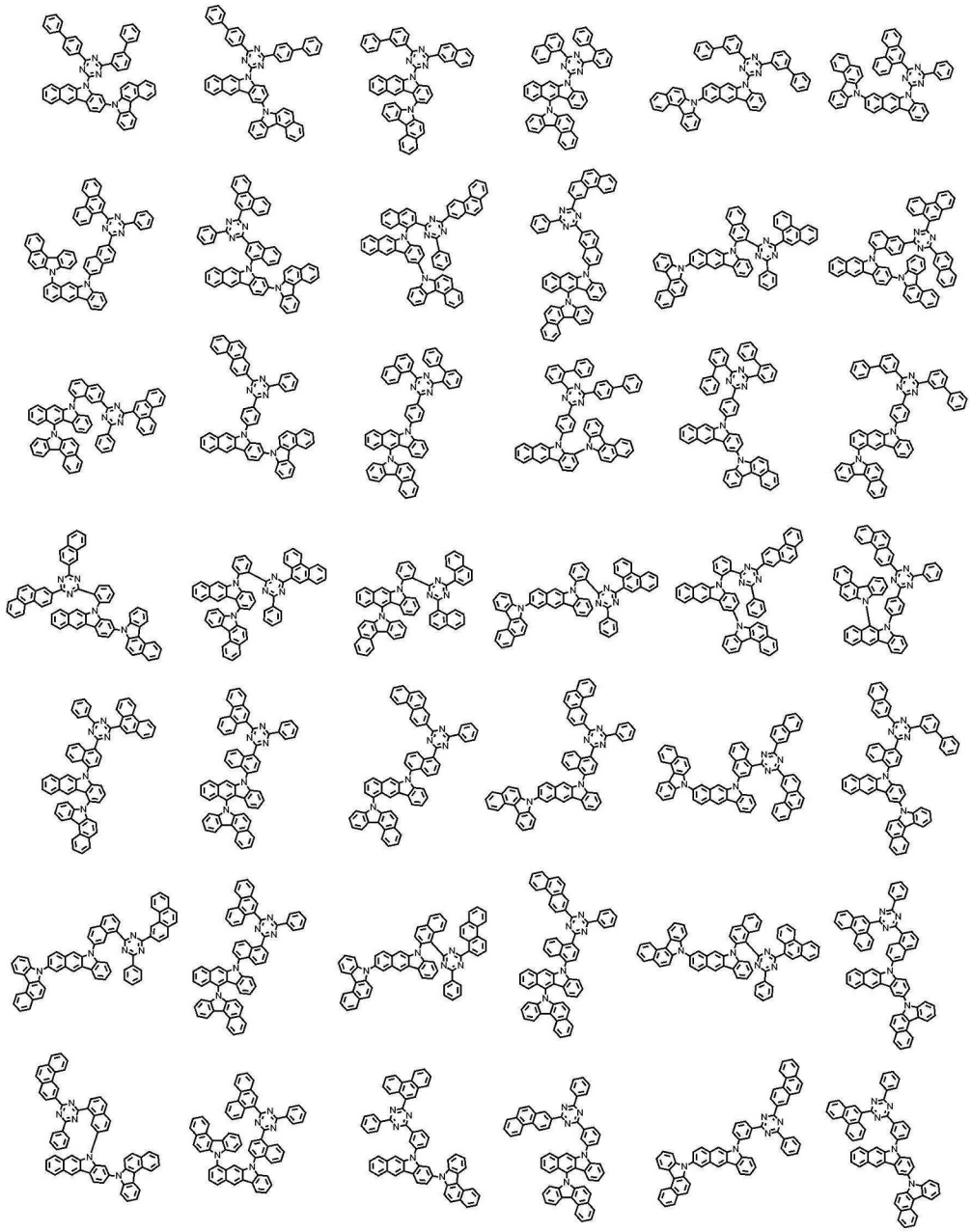
【００９７】

【化３７】



【００９８】

【化３８】



【００９９】
本明細書の一実施態様によれば、第１電極と、前記第１電極に対向して備えられた第２電極と、前記第１電極および第２電極の間に備えられた１層または２層以上の有機物層とを含む有機発光素子であって、前記有機物層のうちの１層以上は、前述した化学式１で表される化合物を含む有機発光素子を提供する。

【０１００】
本明細書の一実施態様によれば、本明細書の有機発光素子の有機物層は、単層構造からなってもよいが、２層以上の有機物層が積層された多層構造からなってもよい。例えば、本発明の有機発光素子は、有機物層として、正孔注入層、正孔輸送層、電子阻止層、発光層、正孔阻止層、電子輸送層、電子注入層などを含む構造を有することができる。しかし、有機発光素子の構造はこれに限定されず、より少ないか多い数の有機層を含んでもよい。

【０１０１】
例えば、本明細書の有機発光素子の構造は、図１～図４に示されるような構造を有することができるが、これのみに限定されるものではない。

【０１０２】

図１には、基板１上に、陽極２、発光層３、および陰極４が順次に積層された有機発光素子の構造が例示されている。前記図１は、本明細書の一実施態様に係る有機発光素子の例示的な構造であり、他の有機物層をさらに含んでもよい。このような構造において、化学式１の化合物は、発光層に含まれる。

【０１０３】

図２には、基板１上に、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構造が例示されている。前記図２は、本明細書の実施態様に係る例示的な構造であり、他の有機物層をさらに含んでもよい。ここで、化学式１の化合物は、正孔注入層、正孔輸送層、発光層、または電子輸送層に含まれる。

【０１０４】

図３には、基板１上に、陽極２、正孔注入層５、正孔輸送層６、電子阻止層８、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構造が例示されている。前記図３は、本明細書の実施態様に係る例示的な構造であり、他の有機物層をさらに含んでもよい。ここで、化学式１の化合物は、正孔注入層、正孔輸送層、電子阻止層、発光層、または電子輸送層に含まれる。

【０１０５】

図４には、基板１上に、陽極２、正孔注入層５、正孔輸送層６、電子阻止層８、発光層３、正孔阻止層９、電子注入および輸送層１０、および陰極４が順次に積層された有機発光素子の構造が例示されている。ここで、化学式１の化合物は、正孔注入層、正孔輸送層、電子阻止層、発光層、正孔阻止層、または電子注入および輸送層に含まれる。

【０１０６】

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

【０１０７】

本明細書の一実施態様によれば、前記有機物層は、発光層を含み、前記発光層は、前記化学式１で表される化合物を含む。この場合、前記化学式１で表される化合物の含有量は、前記発光層の１００重量部対比５０重量部～１００重量部である。

【０１０８】

本明細書の一実施態様によれば、前記有機物層は、発光層を含み、前記発光層は、前記化学式１で表される化合物を発光層のホストとして含む。

【０１０９】

本明細書の一実施態様によれば、前記有機物層は、発光層を含み、前記発光層は、前記化学式１で表される化合物；およびドーパントを含む。

【０１１０】

本明細書の一実施態様によれば、前記ドーパントの含有量は、前記化学式１で表される化合物の１００重量部対比０．０１重量部～１０重量部である。

【０１１１】

本明細書の一実施態様によれば、前記ドーパントの発光波長は限定されず、前記ドーパントは、燐光ドーパントまたは蛍光ドーパントであってもよい。

【０１１２】

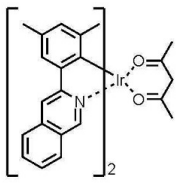
本明細書の一実施態様によれば、前記ドーパントは、イリジウム錯体であってもよい。

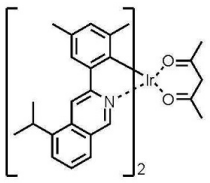
【０１１３】

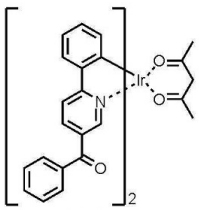
本明細書の一実施態様によれば、前記ドーパントは、下記の構造の中から選択された１種または２種以上であってもよいが、これに限定されない。

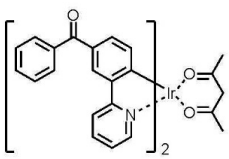
【０１１４】

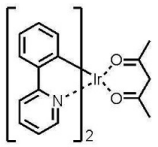
【化３９】

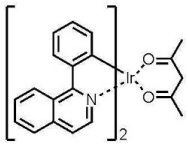

Dp-1

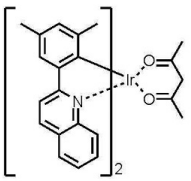

Dp-2

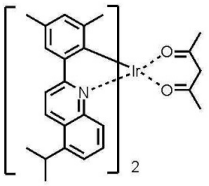

Dp-3

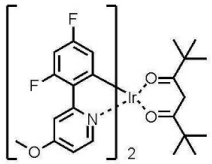

Dp-4

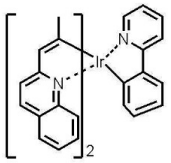

Dp-5

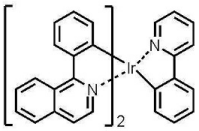

Dp-6

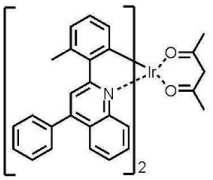

Dp-7

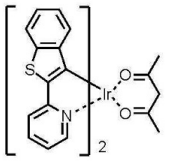

Dp-8

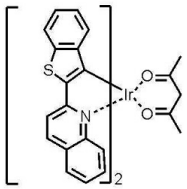

Dp-9

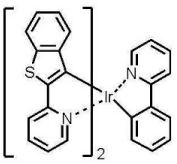

Dp-10

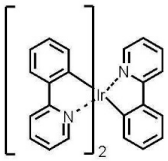

Dp-11

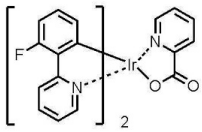

Dp-12

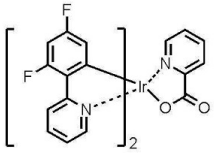

Dp-13

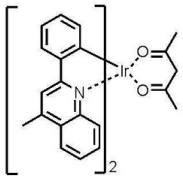

Dp-14

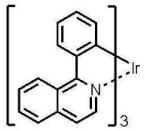

Dp-15

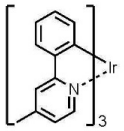

Dp-16

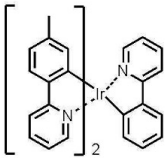

Dp-17

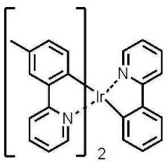

Dp-18

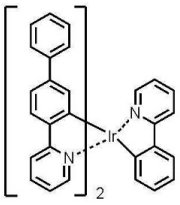

Dp-19


Dp-20


Dp-21

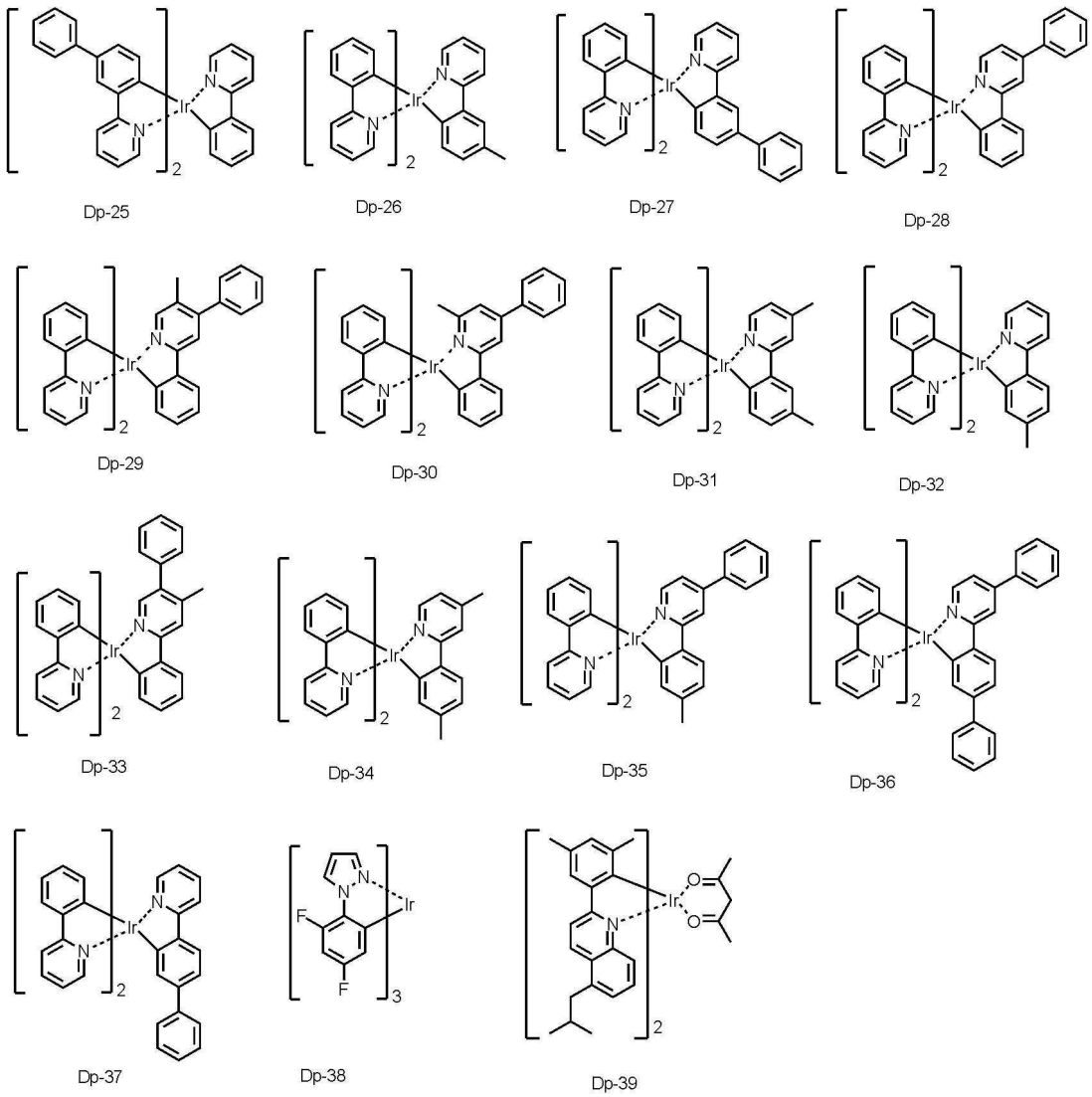

DP-22


Dp-23


Dp-24

【０１１５】

【化４０】



【０１１６】
本明細書の一実施態様によれば、前記有機物層は、正孔阻止層、電子輸送層、電子注入層、または電子注入および輸送層を含み、前記正孔阻止層、電子輸送層、電子注入層、または電子注入および輸送層は、前記化学式１で表される化合物を含む。
【０１１７】
本明細書の一実施態様によれば、前記有機物層は、正孔注入層、正孔輸送層、電子阻止層、正孔阻止層、電子輸送層、および電子注入層からなる群より選択される１層以上をさらに含んでもよい。
【０１１８】
本明細書の有機発光素子は、有機物層のうちの１層または２層以上が本明細書の化合物、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。
【０１１９】
前記有機発光素子が複数の有機物層を含む場合、前記有機物層は、同一の物質または異なる物質で形成されてもよい。
【０１２０】
例えば、本明細書の有機発光素子は、基板上に第１電極、有機物層、および第２電極を順次に積層させることにより製造することができる。この時、スパッタリング法（ｓｐｕｔｔｅｒｉｎｇ）や電子ビーム蒸発法（ｅ－ｂｅａｍ　ｅｖａｐｏｒａｔｉｏｎ）のような

物理蒸着方法（ＰＶＤ：Ｐｈｙｓｉｃａｌ　Ｖａｐｏｒ　Ｄｅｐｏｓｉｔｉｏｎ）を利用して、基板上に金属または導電性を有する金属酸化物、またはこれらの合金を蒸着させて第１電極を形成し、その上に正孔注入層、正孔輸送層、発光層、および電子輸送層を含む有機物層を形成した後、その上に第２電極として使用可能な物質を蒸着させることにより製造できる。このような方法以外にも、基板上に、第２電極物質から有機物層、第１電極物質を順に蒸着させて有機発光素子を作ることができる。また、前記化学式１で表される化合物は、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、ドクターブレーディング、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、これらのみに限定されるものではない。

【０１２１】

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

【０１２２】

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

【０１２３】

前記陽極物質としては、通常、有機物層への正孔注入が円滑となるように仕事関数の大きい物質が好ましい。本発明で使用可能な陽極物質の具体例としては、バナジウム、クロム、銅、亜鉛、金のような金属、またはこれらの合金；亜鉛酸化物、インジウム酸化物、インジウムスズ酸化物（ＩＴＯ）、インジウム亜鉛酸化物（ＩＺＯ）のような金属酸化物；ＺｎＯ：ＡｌまたはＳｎO_2：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、これらのみに限定されるのではない。

【０１２４】

前記陰極物質としては、通常、有機物層への電子注入が容易となるように仕事関数の小さい物質であることが好ましい。陰極物質の具体例としては、マグネシウム、カルシウム、ナトリウム、カリウム、チタン、インジウム、イットリウム、リチウム、ガドリニウム、アルミニウム、銀、スズおよび鉛のような金属、またはこれらの合金；ＬｉＦ／ＡｌまたはＬｉO_2／Ａｌ、Ｍｇ／Ａｇのような多層構造の物質などがあるが、これらのみに限定されるものではない。

【０１２５】

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、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エキシトン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の有機物層のＨＯＭＯとの間であることが好ましい。正孔注入物質の具体例としては、金属ポルフィリン（ｐｏｒｐｈｙｒｉｎ）、オリゴチオフェン、アリールアミン系の有機物、ヘキサニトリルヘキサアザトリフェニレン系の有機物、キナクリドン（ｑｕｉｎａｃｒｉｄｏｎｅ）系の有機物、ペリレン（ｐｅｒｙｌｅｎｅ）系の有機物、アントラキノンおよびポリアニリンとポリチオフェン系の導電性高分子などがあるが、これらのみに限定されるものではない。

【０１２６】

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。具体例としては、アリールアミン系の有機物、導電性高分子、および共役部分と非共役部分が共にあるブロック共重合体などがあるが、これらのみに限定されるものではない。

【０１２７】
前記電子阻止層は、発光層を通過した過剰電子が正孔輸送層の方向に移動するのを防止する層である。前記電子阻止物質としては、正孔輸送層より低いＬＵＭＯ（Ｌｏｗｅｓｔ Ｕｎｏｃｃｕｐｉｅｄ Ｍｏｌｅｃｕｌａｒ Ｏｒｂｉｔａｌ）準位を有する物質が好ましく、周辺層のエネルギー準位を考慮して適切な物質として選択可能である。一実施態様において、アリールアミン系の有機物が使用できるが、これに限定されるものではない。
【０１２８】
本明細書の一実施態様によれば、前記正孔輸送層；正孔注入層；電子阻止層；または正孔注入および輸送層は、ｐ型ドーパントをさらに含んでもよい。ｐ型ドーパントとしては、当技術分野で知られているものが使用可能であり、例えば、アリールアミン系誘導体とシアノ基を含む化合物などであってもよい。前記ｐ型ドーパントは、前記電子輸送層、電子注入層、または電子注入および輸送層に０．１重量％～７５重量％、好ましくは３０重量％～５５重量％含まれる。
【０１２９】
本明細書の一実施態様において、正孔注入および輸送層は、正孔注入および輸送を同時に行う層を意味する。前記正孔注入および輸送層には、前述した正孔注入層と正孔輸送層の材料を使用することができる。
【０１３０】
前記発光層の発光物質としては、正孔輸送層と電子輸送層から正孔と電子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。具体例としては、８－ヒドロキシキノリンアルミニウム錯体（Ａｌｑ３）；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；ベンズオキサゾール、ベンゾ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、これらのみに限定されるものではない。
【０１３１】
本明細書の一実施態様において、前記有機物層は、２層以上の発光層を含むことができ、前記２層以上の発光層は、水平に備えられてもよく、垂直に備えられてもよい。
【０１３２】
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。
【０１３３】
前記ドーパント材料としては、芳香族アミン誘導体、スチリルアミン化合物，ホウ素錯体、フルオランテン化合物、金属錯体などがある。芳香族アミン誘導体としては、置換もしくは非置換のアリールアミノ基を有する縮合芳香族環誘導体であって、アリールアミノ基を有するピレン、アントラセン、クリセン、ペリフランテンなどがある。スチリルアミン化合物は、置換もしくは非置換のアリールアミンに少なくとも１つのアリールビニル基が置換されている化合物であってもよいし、アリール基、シリル基、アルキル基、シクロアルキル基、およびアリールアミノ基からなる群より１または２以上選択される置換基が置換もしくは非置換であってもよい。前記スチリルアミン化合物としては、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。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。
【０１３４】
前記正孔阻止層は、有機発光素子の駆動過程において正孔が発光層を通過して陰極に流入

するのを防止する役割を果たす。前記正孔阻止物質としては、ＨＯＭＯ（Ｈｉｇｈｅｓｔ Ｏｃｃｕｐｉｅｄ Ｍｏｌｅｃｕｌａｒ Ｏｒｂｉｔａｌ）レベルが非常に低い物質を使用することが好ましい。前記正孔阻止物質は、具体的には、ＴＰＢｉ、ＢＣＰ、ＣＢＰ、ＰＢＤ、ＰＴＣＢＩ、ＢＰｈｅｎなどであってもよいが、これらのみに限定されるものではない。

【０１３５】

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、陰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。具体例としては、８－ヒドロキシキノリンのＡｌ錯体；$Ａｌｑ_3$を含む錯体；有機ラジカル化合物；ヒドロキシフラボン－金属錯体などがあるが、これらのみに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。

【０１３６】

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エキシトン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、フレ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。

【０１３７】

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

【０１３８】

本明細書の一実施態様において、電子注入および輸送層は、電子注入および輸送を同時に行う層を意味する。前記電子注入および輸送層には、前述した電子注入層と電子輸送層の材料を使用することができる。

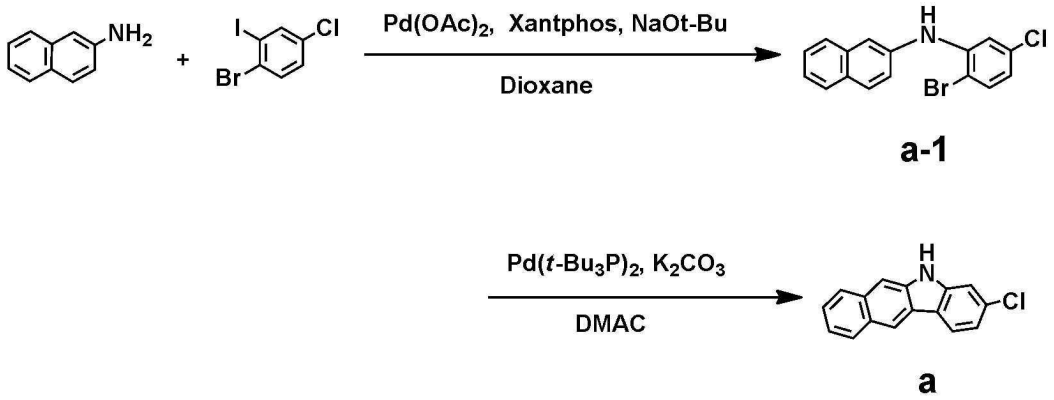
【０１３９】

本明細書の一実施態様によれば、前記電子輸送層；電子注入層；正孔阻止層；または電子注入および輸送層は、ｎ型ドーパントをさらに含んでもよい。ｎ型ドーパントとしては、当技術分野で知られているものが使用可能であり、例えば、アルカリ金属、アルカリ土類金属、アルカリ金属化合物、アルカリ土類金属化合物、アルカリ金属錯体、またはアルカリ土類金属錯体などが使用可能である。前記金属化合物としては、酸化物、ハロゲン化物などが使用可能であり、前記錯体は、有機リガンドをさらに含んでもよい。例えば、ＬｉＱなどが使用できる。前記ｎ型ドーパントは、前記電子輸送層、電子注入層、または電子注入および輸送層に０．１重量％～７５重量％、好ましくは３０重量％～５５重量％含まれる。

【０１４０】

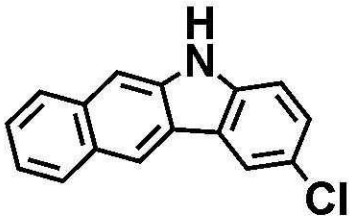
本明細書に係る有機発光素子は、使用される材料によって、前面発光型、後面発光型、または両面発光型であってもよい。

【実施例】
【０１４１】
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は、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。
【０１４２】
本発明の化合物は、代表的な反応として、バックワルド・ハートウィッグカップリング反応（Ｂｕｃｈｗａｌｄ－Ｈａｒｔｗｉｇ ｃｏｕｐｌｉｎｇ ｒｅａｃｔｉｏｎ）、ヘックカップリング反応（Ｈｅｃｋ ｃｏｕｐｌｉｎｇ ｒｅａｃｔｉｏｎ）、スズキカップリング反応（Ｓｕｚｕｋｉ ｃｏｕｐｌｉｎｇ ｒｅａｃｔｉｏｎ）などを利用して製造することができる。
【０１４３】
＜化合物ａの製造＞
【０１４４】
【化４１】



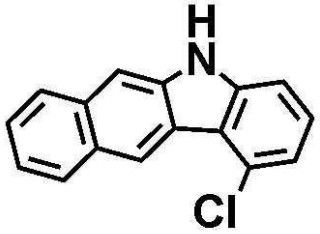
【０１４５】
１）化合物ａ－１の製造
【０１４６】
ナフタレン－２－アミン２００ｇ（１．０ｅｑ）、１－ブロモ－４－クロロ－２－ヨードベンゼン４４３．２５ｇ（１ｅｑ）、ＮａＯｔ－Ｂｕ２０１．３ｇ（１．５ｅｑ）、Ｐｄ（ＯＡｃ）$_2$ ３．１３ｇ（０．０１ｅｑ）、およびキサントホス（Ｘａｎｔｐｈｏｓ）８．０８ｇ（０．０１ｅｑ）を、１，４－ジオキサン（１，４－ｄｉｏｘａｎｅ）４Ｌに溶かし、還流して撹拌した。３時間後反応が終了すると、減圧して溶媒を除去した。この後、エチルアセテートに完全に溶かし、水で洗い、再度減圧して溶媒を７０％程度除去した。再度還流状態でヘキサンを入れて結晶を落とし、冷やした後に濾過した。これをカラムクロマトグラフィーして、化合物ａ－１ ２８３．４１ｇ（収率６１％）を得た。［Ｍ＋Ｈ］＋＝３３３
【０１４７】
２）化合物ａの製造
【０１４８】
化合物ａ－１ ２８３．４１ｇ（１ｅｑ）に、Ｐｄ（ｔ－Ｂｕ$_3$Ｐ）$_2$ ３．９ｇ（０．０１ｅｑ）、炭酸カリウム（Ｋ$_2$ＣＯ$_3$）２１１．１１ｇ（２ｅｑ）を、ジエチルアセトアミド（Ｄｉｍｅｔｈｙｌａｃｅｔａｍｉｄｅ）２Ｌに入れて、還流して撹拌した。３時間後反応物を水に注いで結晶を落とし、濾過した。濾過した固体を１，２－ジクロロベンゼンに完全に溶かした後、水で洗い、生成物の溶けている溶液を減圧濃縮して結晶を落とし、冷やした後に濾過した。これをカラムクロマトグラフィーで精製して、化合物ａ（３－クロロ－５Ｈ－ベンゾ［ｂ］カルバゾール）７４．９７ｇ（収率３９％）を得た。［Ｍ＋Ｈ］＋＝２５２

【０１４９】
＜化合物ｂの製造＞
【０１５０】
【化４２】



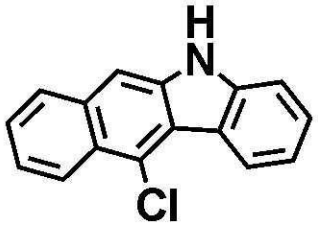
b

【０１５１】
１－ブロモ－４－クロロ－２－ヨードベンゼンの代わりに２－ブロモ－４－クロロ－１－ヨードベンゼンを用いたことを除けば、化合物ａの製造方法と同様の方法で化合物ｂを合成した。
【０１５２】
＜化合物ｃの製造＞
【０１５３】
【化４３】



c

【０１５４】
１－ブロモ－４－クロロ－２－ヨードベンゼンの代わりに２－ブロモ－１－クロロ－３－ヨードベンゼンを用いたことを除けば、化合物ａの製造方法と同様の方法で化合物ｃを合成した。
【０１５５】
＜化合物ｄの製造＞
【０１５６】
【化４４】



d

【０１５６】
ナフタレン－２－アミンの代わりに４－クロロナフタレン－２－アミンを用い、１－ブロ

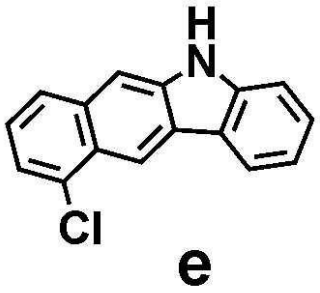
モ－４－クロロ－２－ヨードベンゼンの代わりに１－ブロモ－２－ヨードベンゼンを用いたことを除けば、化合物ａの製造方法と同様の方法で化合物ｄを合成した。

【０１５７】

＜化合物ｅの製造＞

【０１５８】

【化４５】



e

【０１５９】

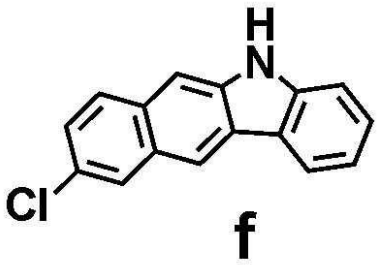
ナフタレン－２－アミンの代わりに５－クロロナフタレン－２－アミンを用い、１－ブロモ－４－クロロ－２－ヨードベンゼンの代わりに１－ブロモ－２－ヨードベンゼンを用いたことを除けば、化合物ａの製造方法と同様の方法で化合物ｅを合成した。

【０１６０】

＜化合物ｆの製造＞

【０１６１】

【化４６】



f

【０１６２】

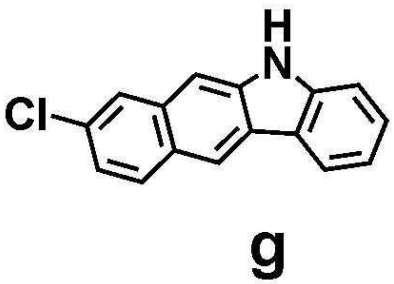
ナフタレン－２－アミンの代わりに６－クロロナフタレン－２－アミンを用い、１－ブロモ－４－クロロ－２－ヨードベンゼンの代わりに１－ブロモ－２－ヨードベンゼンを用いたことを除けば、化合物ａの製造方法と同様の方法で化合物ｆを合成した。

【０１６３】

＜化合物ｇの製造＞

【０１６４】

【化４７】



g

【０１６５】

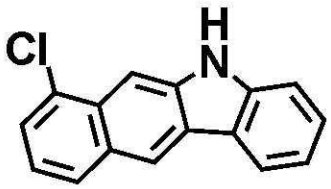
ナフタレン－２－アミンの代わりに７－クロロナフタレン－２－アミンを用い、１－ブロモ－４－クロロ４－ヨードベンゼンの代わりに１－ブロモ－２－ヨードベンゼンを用いたことを除けば、化合物ａの製造方法と同様の方法で化合物ｇを合成した。

【０１６６】

＜化学式ｈの製造＞

【０１６７】

【化４８】



h

【０１６８】

ナフタレン－２－アミンの代わりに８－クロロナフタレン－２－アミンを用い、１－ブロモ－４－クロロ－２－ヨードベンゼンの代わりに１－ブロモ－２－ヨードベンゼンを用いたことを除けば、化合物ａの製造方法と同様の方法で化合物ｈを合成した。

【０１６９】

＜化合物ｉの製造＞

【０１７０】

【化４９】



i

【０１７１】

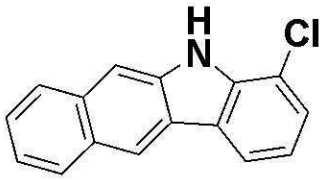
ナフタレン－２－アミンの代わりに１－クロロナフタレン－２－アミンを用い、１－ブロモ－４－クロロ－２－ヨードベンゼンの代わりに１－ブロモ－２－ヨードベンゼンを用いたことを除けば、化合物ａの製造方法と同様の方法で化合物ｉを合成した。

【０１７２】

＜化合物ｊの製造＞

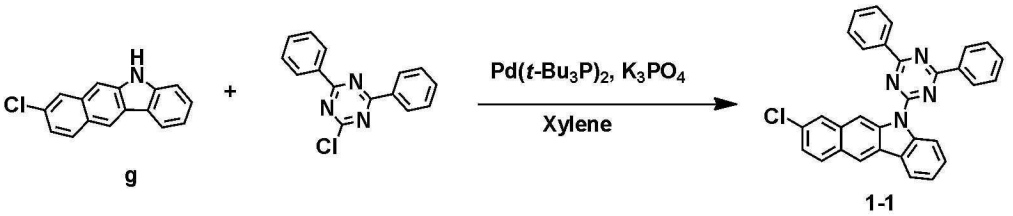
【０１７３】

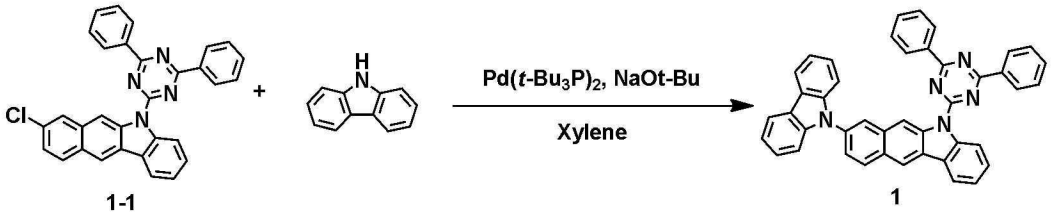
【化５０】



j

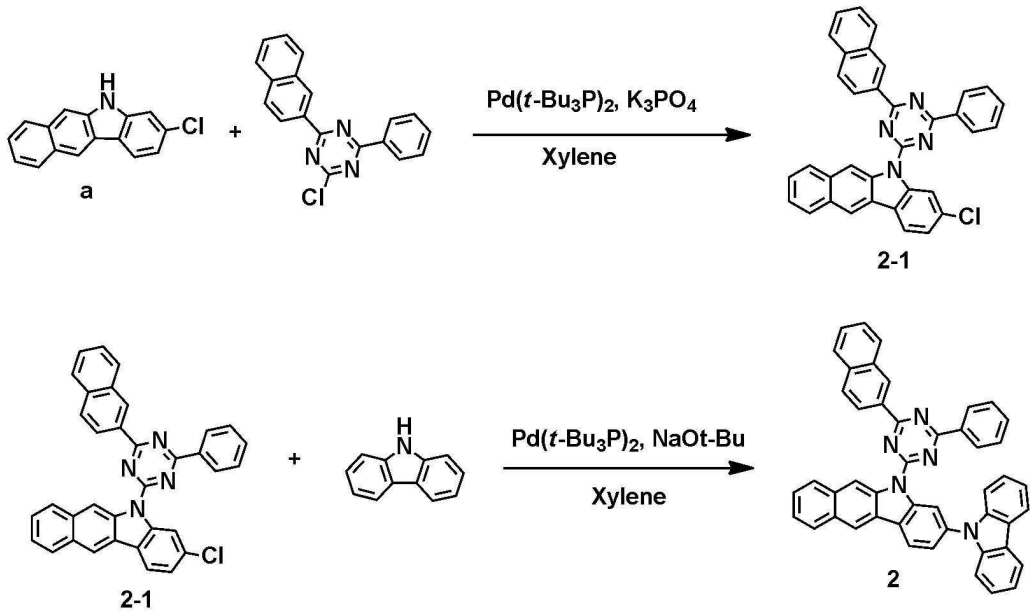
【０１７４】
１－ブロモ－４－クロロ－２－ヨードベンゼンの代わりに１－ブロモ－３－クロロ－２－ヨードベンゼンを用いたことを除けば、化合物ａの製造方法と同様の方法で化合物ｊを合成した。
【０１７５】
＜合成例＞
【０１７６】
合成例１
【０１７７】
【化５１】





【０１７８】
化学式ｇ　１０ｇ（１ｅｑ）、２－クロロ－４，６－ジフェニル－１，３，５－トリアジン１１．６９ｇ（１．１ｅｑ）、第三リン酸カリウム（Ｋ３ＰＯ４）１６．８６ｇ（２ｅｑ）、ビス（トリ－タート－ブチルホスフィン）パラジウム（０）（Ｐｄ（ｔ－Ｂｕ３Ｐ）２）０．０４ｇ（０．００２ｅｑ）を、キシレン（Ｘｙｌｅｎｅ）２５０ｍｌに溶かし、還流して撹拌した。３時間後反応が終了すると、減圧して溶媒を除去した。この後、クロロホルム（ＣＨＣｌ３）に完全に溶かし、水で洗い、再度減圧して溶媒を５０％程度除去した。再度還流状態でエチルアセテートを入れて結晶を落とし、冷やした後に濾過した。これをカラムクロマトグラフィーして、化合物１－１　１３．８１ｇ（収率７２％）を得た。［Ｍ＋Ｈ］＋＝４８３
【０１７９】
化合物１－１　１３．８１ｇ（１．０ｅｑ）、９Ｈ－カルバゾール５．２６ｇ（１．１ｅｑ）、Ｐｄ（ｔ－Ｂｕ３Ｐ）２　０．１５ｇ（０．０１ｅｑ）、およびＮａＯｔ－Ｂｕ５．４９ｇ（２ｅｑ）を、キシレン２５０ｍｌに入れて、還流して撹拌した。２時間後反応が終了すると、減圧して溶媒を除去した。この後、クロロホルム（ＣＨＣｌ３）に完全に溶かし、水で洗い、再度減圧して溶媒を５０％程度除去した。再度還流状態でエチルアセテートを入れて結晶を落とし、冷やした後に濾過した。これをカラムクロマトグラフィーして、化合物１　１１．７６ｇ（収率６７％）を得た。［Ｍ＋Ｈ］＋＝６１４
【０１８０】
合成例２
【０１８１】

【化５２】



【０１８２】

化学式ａ　１０ｇ（１．０ｅｑ）、２－クロロ－４－（ナフタレン－２－イル）－６－フェニル－１，３，５－トリアジン１３．８８ｇ（１．１ｅｑ）、およびＫ３ＰＯ４　１６．８６ｇ（２ｅｑ）、Ｐｄ（ｔ－Ｂｕ３Ｐ）２　０．０４ｇ（０．００２ｅｑ）を、キシレン（Ｘｙｌｅｎｅ）２５０ｍｌに溶かし、還流して撹拌した。３時間後反応が終了すると、減圧して溶媒を除去した。この後、クロロホルム（ＣＨＣｌ３）に完全に溶かし、水で洗い、再度減圧して溶媒を５０％程度除去した。再度還流状態でエチルアセテートを入れて結晶を落とし、冷やした後に濾過した。これをカラムクロマトグラフィーして、化合物２－１　１４．８２ｇ（収率７０％）を得た。［Ｍ＋Ｈ］＋＝５３４

【０１８３】

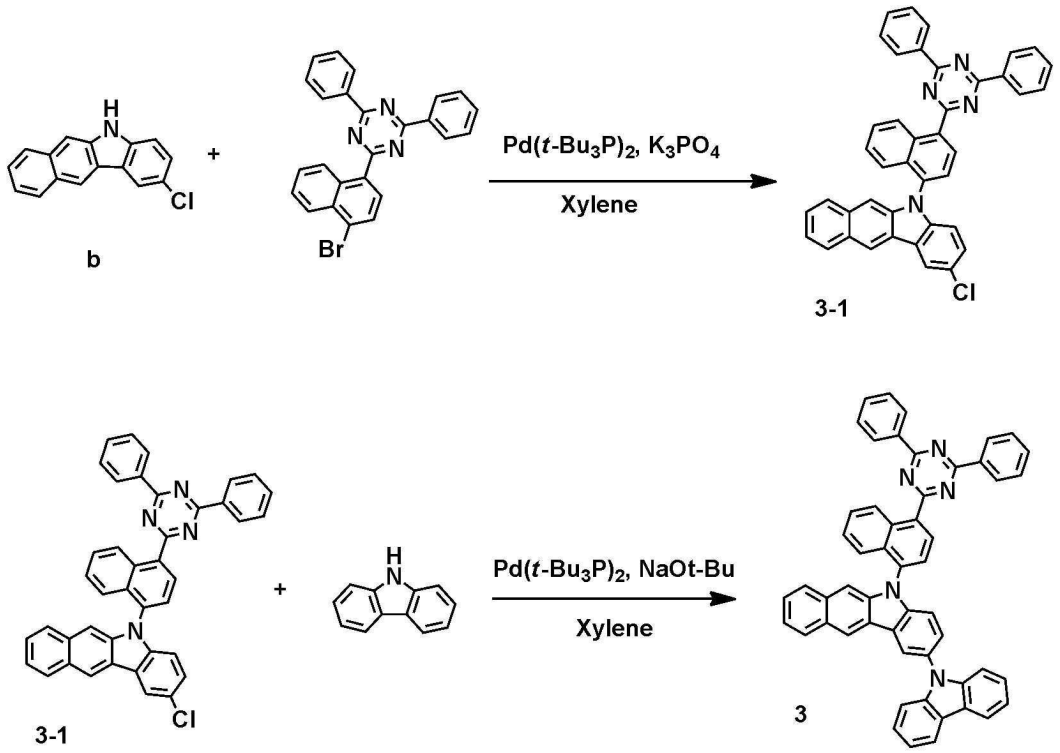
化合物２－１　１４．８２ｇ（１ｅｑ）、９Ｈ－カルバゾール５．１１ｇ（１．１ｅｑ）、Ｐｄ（ｔ－Ｂｕ３Ｐ）２　０．１４ｇ（０．０１ｅｑ）、およびＮａＯｔ－Ｂｕ５．３４ｇ（２ｅｑ）を、キシレン２５０ｍｌに入れて、還流して撹拌した。２時間後反応が終了すると、減圧して溶媒を除去した。この後、クロロホルム（ＣＨＣｌ３）に完全に溶かし、水で洗い、再度減圧して溶媒を５０％程度除去した。再度還流状態でエチルアセテートを入れて結晶を落とし、冷やした後に濾過した。これをカラムクロマトグラフィーして、化合物２　１１．９９ｇ（収率６５％）を得た。［Ｍ＋Ｈ］＋＝６６４

【０１８４】

合成例３

【０１８５】

【化５３】



【０１８６】

化学式ｂ　１０ｇ（１ｅｑ）、２－（４－ブロモナフタレン－１－イル）－４，６－ジフェニル－１，３，５－トリアジン１９．１５ｇ（１．１ｅｑ）、Ｋ３ＰＯ４　１６．８６ｇ（２ｅｑ）、およびＰｄ（ｔ－Ｂｕ３Ｐ）２　０．０４ｇ（０．００２ｅｑ）を、キシレン（Ｘｙｌｅｎｅ）２５０ｍｌに溶かし、還流して撹拌した。３時間後反応が終了すると、減圧して溶媒を除去した。この後、クロロホルム（ＣＨＣｌ３）に完全に溶かし、水で洗い、再度減圧して溶媒を５０％程度除去した。再度還流状態でエチルアセテートを入れて結晶を落とし、冷やした後に濾過した。これをカラムクロマトグラフィーして、化合物３－１　１８．１４ｇ（収率７５％）を得た。［Ｍ＋Ｈ］＋＝６１０

【０１８７】

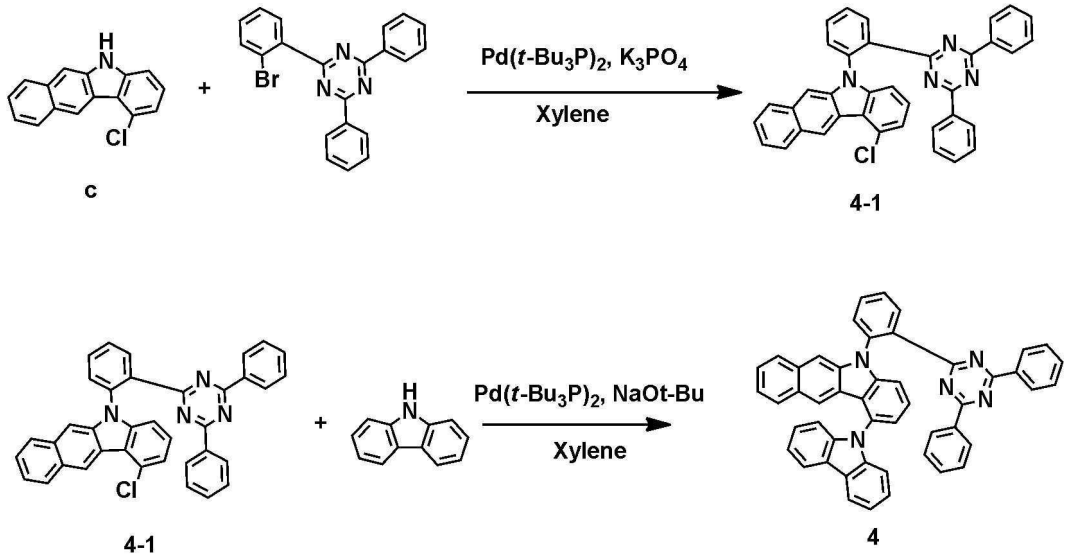
化合物３－１　１８．１４ｇ（１ｅｑ）、９Ｈ－カルバゾール５．４８ｇ（１．１ｅｑ）、Ｐｄ（ｔ－Ｂｕ３Ｐ）２　０．１５ｇ（０．０１ｅｑ）、およびＮａＯｔ－Ｂｕ５．７２ｇ（２ｅｑ）を、キシレン２５０ｍｌに入れて、還流して撹拌した。２時間後反応が終了すると、減圧して溶媒を除去した。この後、クロロホルム（ＣＨＣｌ３）に完全に溶かし、水で洗い、再度減圧して溶媒を５０％程度除去した。再度還流状態でエチルアセテートを入れて結晶を落とし、冷やした後に濾過した。これをカラムクロマトグラフィーして、化合物３　１６．３１ｇ（収率７４％）を得た。［Ｍ＋Ｈ］＋＝７４０

【０１８８】

合成例４

【０１８９】

【化５４】



【０１９０】

化学式ｃ　１０ｇ（１．０ｅｑ）、２－（２－ブロモフェニル）－４，６－ジフェニル－１，３，５－トリアジン１６．９６ｇ（１．１ｅｑ）、Ｋ３ＰＯ４　１６．８６ｇ（２ｅｑ）、およびＰｄ（ｔ－Ｂｕ３Ｐ）２　０．０４ｇ（０．００２ｅｑ）を、キシレン（Ｘｙｌｅｎｅ）２５０ｍｌに溶かし、還流して撹拌した。３時間後反応が終了すると、減圧して溶媒を除去した。この後、クロロホルム（ＣＨＣｌ３）に完全に溶かし、水で洗い、再度減圧して溶媒を５０％程度除去した。再度還流状態でエチルアセテートを入れて結晶を落とし、冷やした後に濾過した。これをカラムクロマトグラフィーして、化合物４－１　１３．５４ｇ（収率６１％）を得た。［Ｍ＋Ｈ］＋＝６００

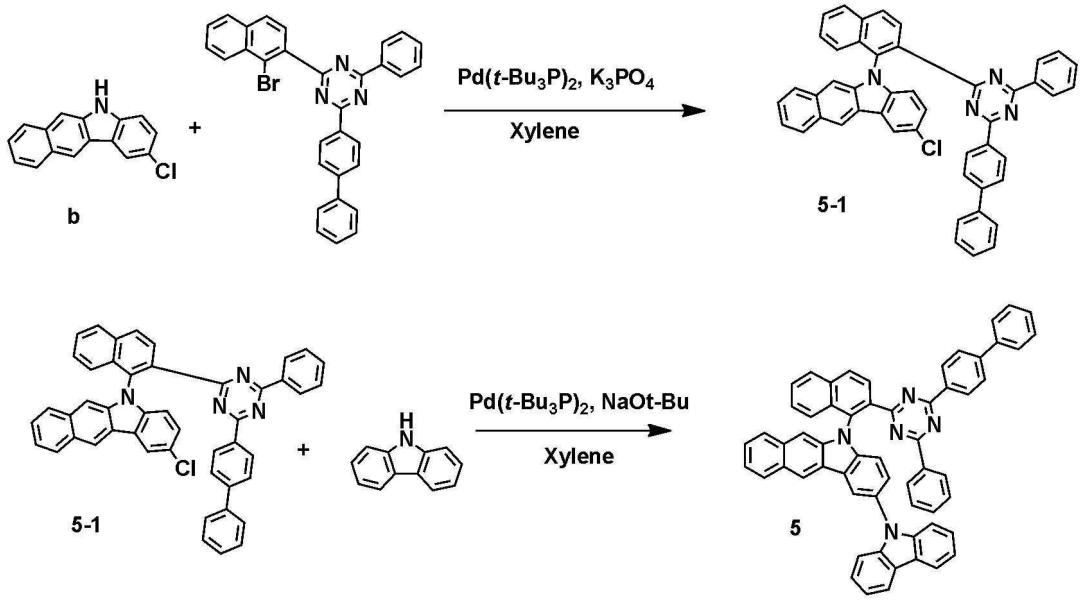
【０１９１】

化合物４－１　１３．５４ｇ（１ｅｑ）、９Ｈ－カルバゾール４．４５ｇ（１．１ｅｑ）、Ｐｄ（ｔ－Ｂｕ３Ｐ）２　０．１２ｇ（０．０１ｅｑ）、およびＮａＯｔ－Ｂｕ４．６５ｇ（２ｅｑ）を、Ｘｙｌｅｎｅ２５０ｍｌに入れて、還流して撹拌した。２時間後反応が終了すると、減圧して溶媒を除去した。この後、クロロホルム（ＣＨＣｌ３）に完全に溶かし、水で洗い、再度減圧して溶媒を５０％程度除去した。再度還流状態でエチルアセテートを入れて結晶を落とし、冷やした後に濾過した。これをカラムクロマトグラフィーして、化合物４　１２．０３ｇ（収率７２％）を得た。［Ｍ＋Ｈ］＋＝６９０

合成例５

【０１９２】

【化５５】



【０１９３】

化学式ｂ　１０ｇ（１ｅｑ）、２－（［１，１'－ビフェニル］－４－イル）－４－（１－ブロモナフタレン－２－イル）－６－フェニル－１，３，５－トリアジン２２．４８ｇ（１．１ｅｑ）、Ｋ３ＰＯ４　１６．８６ｇ（２ｅｑ）、およびＰｄ（ｔ－Ｂｕ３Ｐ）２　０．０４ｇ（０．００２ｅｑ）を、キシレン（Ｘｙｌｅｎｅ）２５０ｍｌに溶かし、還流して撹拌した。３時間後反応が終了すると、減圧して溶媒を除去した。この後、クロロホルム（ＣＨＣｌ３）に完全に溶かし、水で洗い、再度減圧して溶媒を５０％程度除去した。再度還流状態でエチルアセテートを入れて結晶を落とし、冷やした後に濾過した。これをカラムクロマトグラフィーして、化合物５－１　１７．１５ｇ（収率６３％）を得た。［Ｍ＋Ｈ］＋＝６８６

【０１９４】

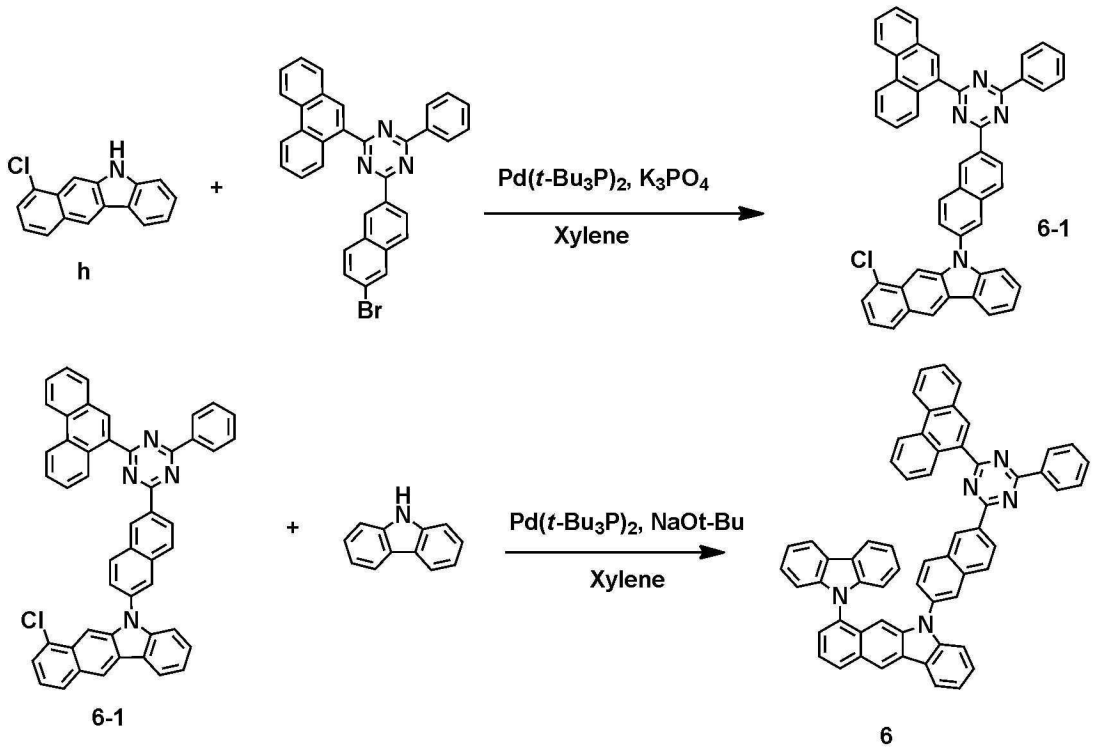
化合物５－１　１７．１５ｇ（１ｅｑ）、９Ｈ－ｃａｒｂａｚｏｌｅ４．６ｇ（１．１ｅｑ）、Ｐｄ（ｔ－Ｂｕ３Ｐ）２　０．１２ｇ（０．０１ｅｑ）、およびＮａＯｔ－Ｂｕ４．６ｇ（２ｅｑ）を、キシレン２５０ｍｌに入れて、還流して撹拌した。２時間後反応が終了すると、減圧して溶媒を除去した。この後、クロロホルム（ＣＨＣｌ３）に完全に溶かし、水で洗い、再度減圧して溶媒を５０％程度除去した。再度還流状態でエチルアセテートを入れて結晶を落とし、冷やした後に濾過した。これをカラムクロマトグラフィーして、化合物５　１３．６８ｇ（収率６７％）を得た。［Ｍ＋Ｈ］＋＝８１６

【０１９５】

合成例６

【０１９６】

【化５６】



【０１９７】

化学式ｈ　１０ｇ（１ｅｑ）、２－（６－ブロモナフタレン－２－イル）－４－（フェナントレン－９－イル）－６－フェニル－１，３，５－トリアジン２３．５３ｇ（１．１ｅｑ）、Ｋ３ＰＯ４　１６．８６ｇ（２ｅｑ）、およびＰｄ（ｔ－Ｂｕ３Ｐ）２　０．０４ｇ（０．００２ｅｑ）を、キシレン（Ｘｙｌｅｎｅ）２５０ｍｌに溶かし、還流して撹拌した。３時間後反応が終了すると、減圧して溶媒を除去した。この後、クロロホルム（ＣＨＣｌ３）に完全に溶かし、水で洗い、再度減圧して溶媒を５０％程度除去した。再度還流状態でエチルアセテートを入れて結晶を落とし、冷やした後に濾過した。これをカラムクロマトグラフィーして、化合物６－１　２０．８５ｇ（収率７４％）を得た。［Ｍ＋Ｈ］＋＝７１０

【０１９８】

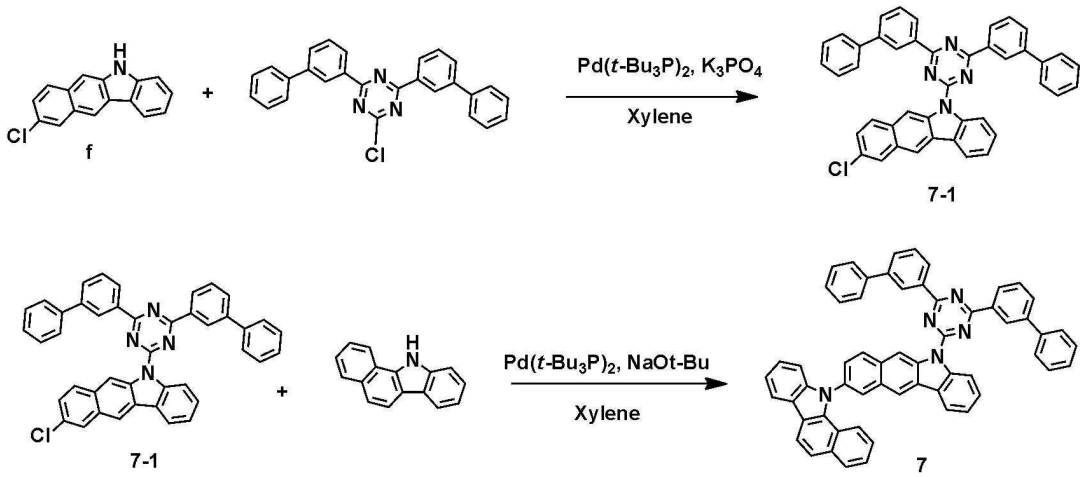
化合物６－１　２０．８５ｇ（１ｅｑ）、９Ｈ－カルバゾール５．４ｇ（１．１ｅｑ）、Ｐｄ（ｔ－Ｂｕ３Ｐ）２　０．１５ｇ（０．０１ｅｑ）、およびＮａＯｔ－Ｂｕ５．６５ｇ（２ｅｑ）を、キシレン２５０ｍｌに入れて、還流して撹拌した。２時間後反応が終了すると、減圧して溶媒を除去した。この後、クロロホルム（ＣＨＣｌ３）に完全に溶かし、水で洗い、再度減圧して溶媒を５０％程度除去した。再度還流状態でエチルアセテートを入れて結晶を落とし、冷やした後に濾過した。これをカラムクロマトグラフィーして、化合物６　１５．０６ｇ（収率６１％）を得た。［Ｍ＋Ｈ］＋＝８４１

【０１９９】

合成例７

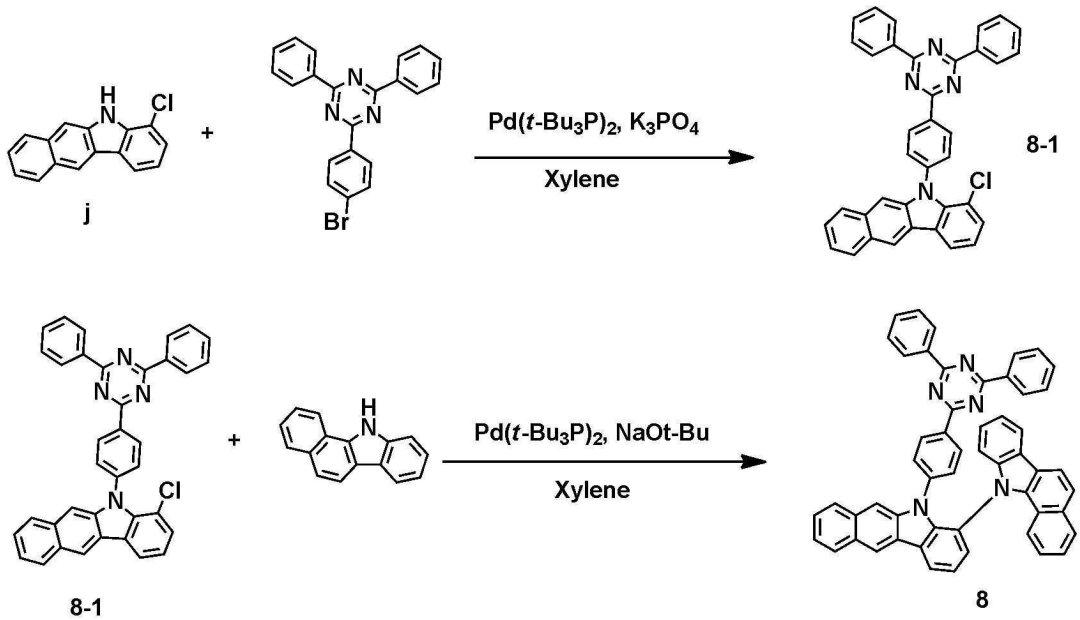
【０２００】

【化５７】



【０２０１】
化学式ｆ　１０ｇ（１ｅｑ）、２，４－ジ（［１，１'－ビフェニル］－３－イル）－６－クロロ－１，３，５－トリアジン１８．３５ｇ（１．１ｅｑ）、Ｋ３ＰＯ４　１６．８６ｇ（２ｅｑ）、およびＰｄ（ｔ－Ｂｕ３Ｐ）２　０．０４ｇ（０．００２ｅｑ）を、キシレン（Ｘｙｌｅｎｅ）２５０ｍｌに溶かし、還流して撹拌した。３時間後反応が終了すると、減圧して溶媒を除去した。この後、クロロホルム（ＣＨＣｌ３）に完全に溶かし、水で洗い、再度減圧して溶媒を５０％程度除去した。再度還流状態でエチルアセテートを入れて結晶を落とし、冷やした後に濾過した。これをカラムクロマトグラフィーして、化合物７－１　１９．４３ｇ（収率７７％）を得た。［Ｍ＋Ｈ］＋＝６３５．１７
【０２０２】
化合物７－１　１９．４３ｇ（１ｅｑ）、１１Ｈ－ベンゾ［ａ］カルバゾール７．３１ｇ（１．１ｅｑ）、Ｐｄ（ｔ－Ｂｕ３Ｐ）２　０．１６ｇ（０．０１ｅｑ）、およびＮａＯｔ－Ｂｕ５．８７ｇ（２ｅｑ）を、キシレン２５０ｍｌに入れて、還流して撹拌した。２時間後反応が終了すると、減圧して溶媒を除去した。この後、クロロホルム（ＣＨＣｌ３）に完全に溶かし、水で洗い、再度減圧して溶媒を５０％程度除去した。再度還流状態でエチルアセテートを入れて結晶を落とし、冷やした後に濾過した。これをカラムクロマトグラフィーして、化合物７　１６．７２ｇ（収率６７％）を得た。［Ｍ＋Ｈ］＋＝８１６
【０２０３】
合成例８
【０２０４】

【化５８】



【０２０５】

化学式ｊ　１０ｇ（１ｅｑ）、２－（４－ブロモフェニル）－４，６－ジフェニル－１，３，５－トリアジン１６．９６ｇ（１．１ｅｑ）、Ｋ３ＰＯ４　１６．８６ｇ（２ｅｑ）、およびＰｄ（ｔ－Ｂｕ３Ｐ）２　０．０４ｇ（０．００２ｅｑ）を、キシレン（Ｘｙｌｅｎｅ）２５０ｍｌに溶かし、還流して撹拌した。３時間後反応が終了すると、減圧して溶媒を除去した。この後、クロロホルム（ＣＨＣｌ３）に完全に溶かし、水で洗い、再度減圧して溶媒を５０％程度除去した。再度還流状態でエチルアセテートを入れて結晶を落とし、冷やした後に濾過した。これをカラムクロマトグラフィーして、化合物８－１　１６．４３ｇ（収率７４％）を得た。［Ｍ＋Ｈ］＋＝５６０

【０２０６】

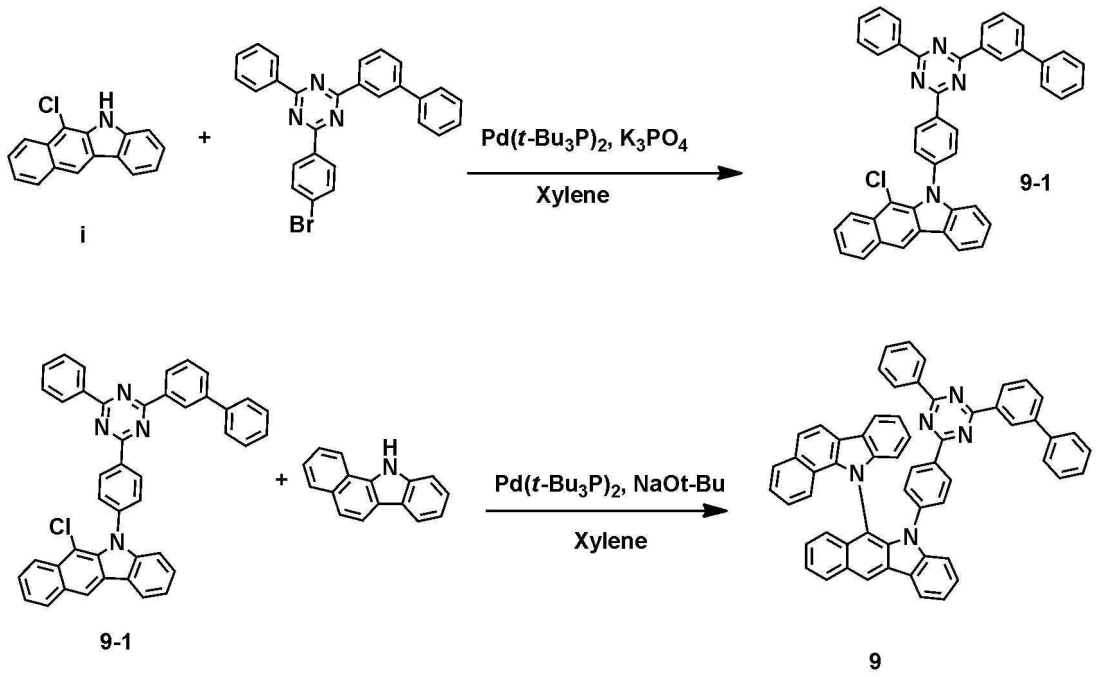
化合物８－１　１６．４３ｇ（１ｅｑ）、１１Ｈ－ベンゾ［ａ］カルバゾール７．０２ｇ（１．１ｅｑ）、Ｐｄ（ｔ－Ｂｕ３Ｐ）２　０．１５ｇ（０．０１ｅｑ）、およびＮａＯｔ－Ｂｕ５．６５ｇ（２ｅｑ）を、キシレン（Ｘｙｌｅｎｅ）２５０ｍｌに入れて、還流して撹拌した。２時間後反応が終了すると、減圧して溶媒を除去した。この後、クロロホルム（ＣＨＣｌ３）に完全に溶かし、水で洗い、再度減圧して溶媒を５０％程度除去した。再度還流状態でエチルアセテートを入れて結晶を落とし、冷やした後に濾過した。これをカラムクロマトグラフィーして、化合物８　１３．２６ｇ（収率６１％）を得た。［Ｍ＋Ｈ］＋＝７４０

【０２０７】

合成例９

【０２０８】

【化５９】



【０２０９】

化学式ｉ　１０ｇ（１．０ｅｑ）、２－（［１，１'－ビフェニル］－３－イル）－４－（４－ブロモフェニル）－６－フェニル－１，３，５－トリアジン２０．２９ｇ（１．１ｅｑ）、Ｋ３ＰＯ４　１６．８６ｇ（２．０ｅｑ）、およびＰｄ（ｔ－Ｂｕ３Ｐ）２　０．０４ｇ（０．００２ｅｑ）を、キシレン（Ｘｙｌｅｎｅ）２５０ｍｌに溶かし、還流して撹拌した。３時間後反応が終了すると、減圧して溶媒を除去した。この後、クロロホルム（ＣＨＣｌ３）に完全に溶かし、水で洗い、再度減圧して溶媒を５０％程度除去した。再度還流状態でエチルアセテートを入れて結晶を落とし、冷やした後に濾過した。これをカラムクロマトグラフィーして、化合物９－１　１８．１６ｇ（収率７２％）を得た。［Ｍ＋Ｈ］＋＝６３６

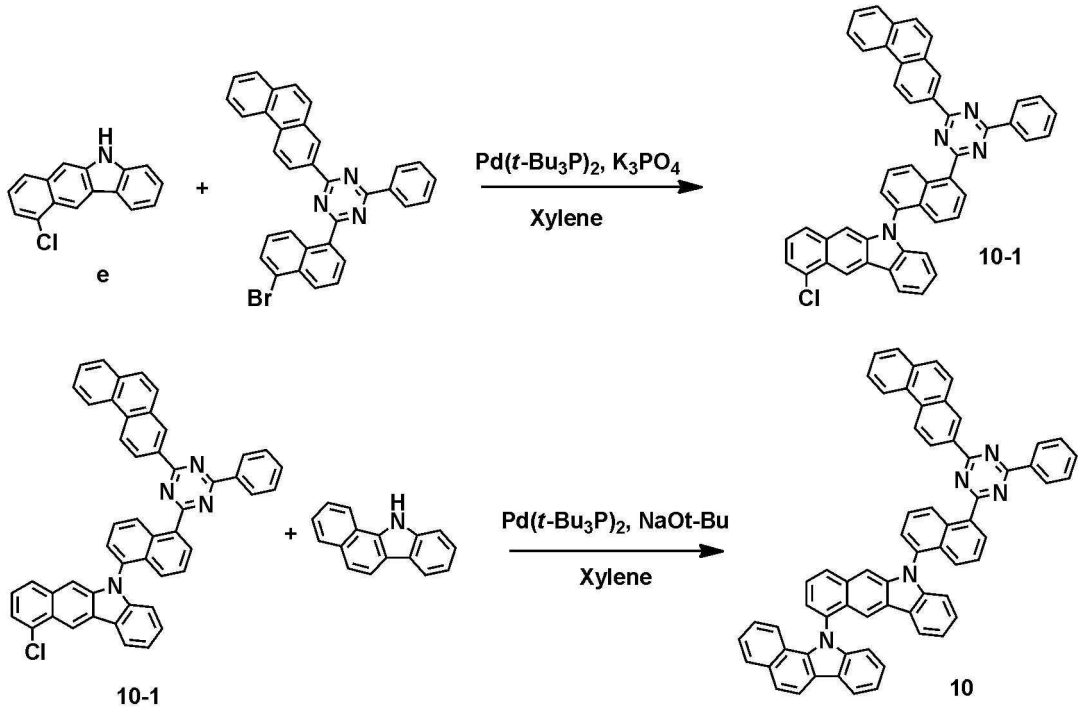
【０２１０】

化合物９－１　１８．１６ｇ（１ｅｑ）、１１Ｈ－ベンゾ［ａ］カルバゾール６．８３ｇ（１．１ｅｑ）、Ｐｄ（ｔ－Ｂｕ３Ｐ）２　０．１４ｇ（０．０１ｅｑ）、およびＮａＯｔ－Ｂｕ５．４９ｇ（２ｅｑ）を、キシレン２５０ｍｌに入れて、還流して撹拌した。２時間後反応が終了すると、減圧して溶媒を除去した。この後、クロロホルム（ＣＨＣｌ３）に完全に溶かし、水で洗い、再度減圧して溶媒を５０％程度除去した。再度還流状態でエチルアセテートを入れて結晶を落とし、冷やした後に濾過した。これをカラムクロマトグラフィーして、化合物９　１４．７ｇ（収率６３％）を得た。［Ｍ＋Ｈ］＋＝８１６

合成例１０

【０２１１】

【化６０】



【０２１２】

化学式ｅ　１０ｇ（１ｅｑ）、２－（５－ブロモナフタレン－１－イル）－４－（フェナントレン－２－イル）－６－フェニル－１，３，５－トリアジン２３．５３ｇ（１．１ｅｑ）、Ｋ３ＰＯ４　１６．８６ｇ（２ｅｑ）、およびＰｄ（ｔ－Ｂｕ３Ｐ）２　０．０４ｇ（０．００２ｅｑ）を、キシレン（Ｘｙｌｅｎｅ）２５０ｍｌに溶かし、還流して撹拌した。３時間後反応が終了すると、減圧して溶媒を除去した。この後、クロロホルム（ＣＨＣｌ３）に完全に溶かし、水で洗い、再度減圧して溶媒を５０％程度除去した。再度還流状態でエチルアセテートを入れて結晶を落とし、冷やした後に濾過した。これをカラムクロマトグラフィーして、化合物１０－１　１９．７２ｇ（収率７０％）を得た。［Ｍ＋Ｈ］＋＝７１０

【０２１３】

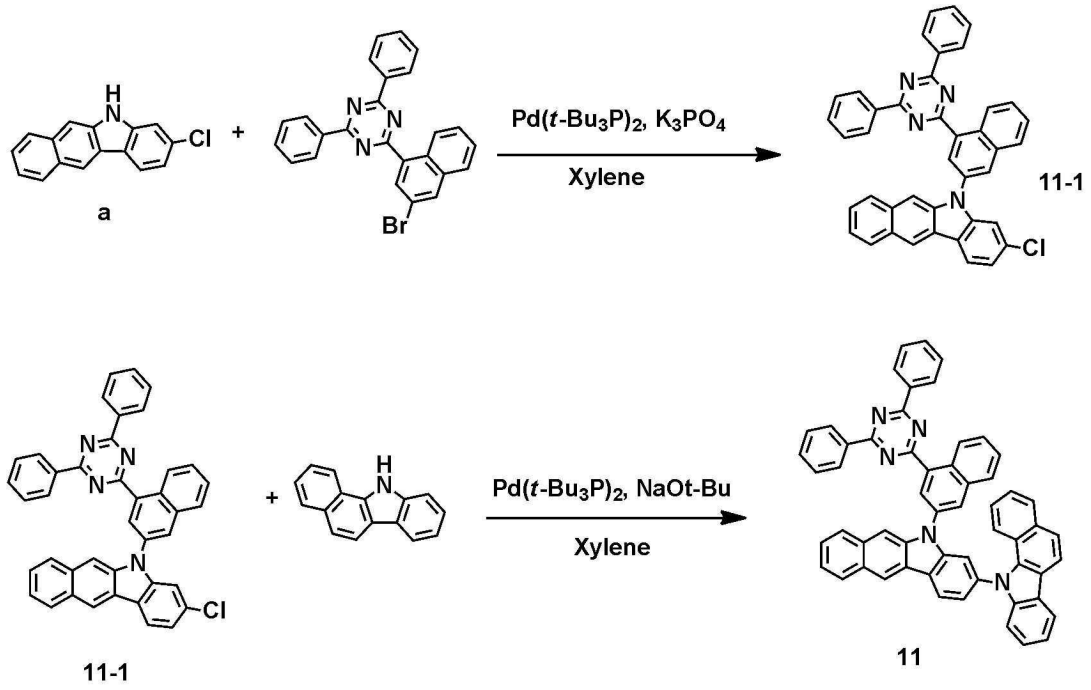
化合物１０－１　１９．７２ｇ（１ｅｑ）、１１Ｈ－ベンゾ［ａ］カルバゾール６．６４ｇ（１．１ｅｑ）、Ｐｄ（ｔ－Ｂｕ３Ｐ）２　０．１４ｇ（０．０１ｅｑ）、およびＮａＯｔ－Ｂｕ５．３４ｇ（２ｅｑ）を、キシレン２５０ｍｌに入れて、還流して撹拌した。２時間後反応が終了すると、減圧して溶媒を除去した。この後、クロロホルム（ＣＨＣｌ３）に完全に溶かし、水で洗い、再度減圧して溶媒を５０％程度除去した。再度還流状態でエチルアセテートを入れて結晶を落とし、冷やした後に濾過した。これをカラムクロマトグラフィーして、化合物１０　１６．０８ｇ（収率６５％）を得た。［Ｍ＋Ｈ］＋＝８９１

【０２１４】

合成例１１

【０２１５】

【化６１】



【０２１６】

化学式ａ　１０ｇ（１ｅｑ）、２－（３－ブロモナフタレン－１－イル）－４，６－ジフェニル－１，３，５－トリアジン１９．１５ｇ（１．１ｅｑ）、Ｋ３ＰＯ４　１６．８６ｇ（２ｅｑ）、およびＰｄ（ｔ－Ｂｕ３Ｐ）２　０．０４ｇ（０．００２ｅｑ）を、キシレン（Ｘｙｌｅｎｅ）２５０ｍｌに溶かし、還流して撹拌した。３時間後反応が終了すると、減圧して溶媒を除去した。この後、クロロホルム（ＣＨＣｌ３）に完全に溶かし、水で洗い、再度減圧して溶媒を５０％程度除去した。再度還流状態でエチルアセテートを入れて結晶を落とし、冷やした後に濾過した。これをカラムクロマトグラフィーして、化合物１１－１　１７．４２ｇ（収率７２％）を得た。［Ｍ＋Ｈ］＋＝６１０

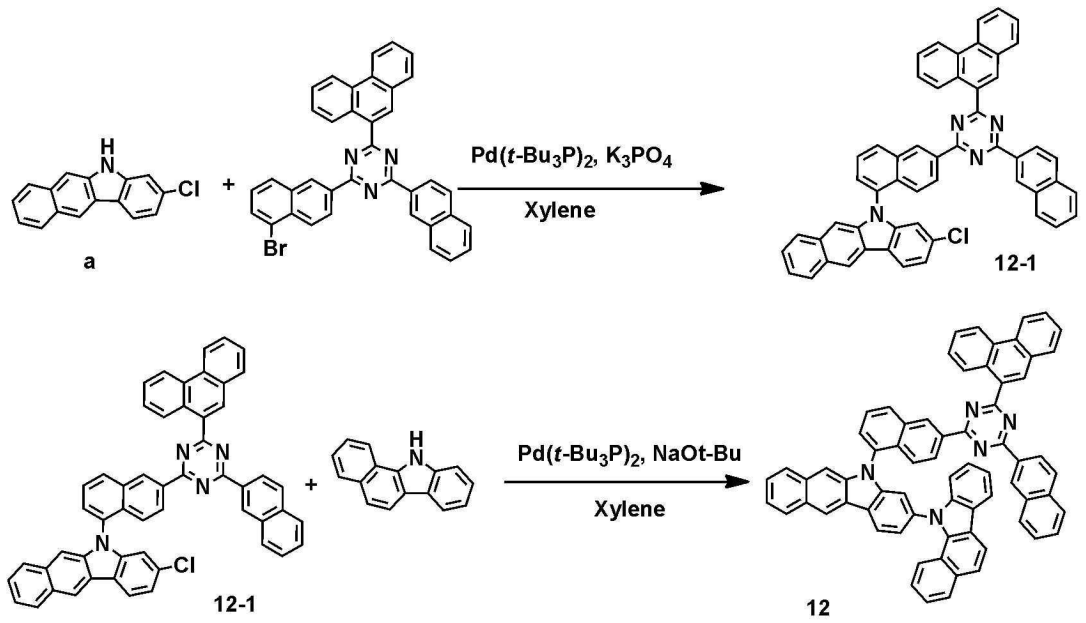
【０２１７】

化合物１１－１　１７．４２ｇ（１ｅｑ）、１１Ｈ－ベンゾ［ａ］カルバゾール６．８３ｇ（１．１ｅｑ）、Ｐｄ（ｔ－Ｂｕ３Ｐ）２　０．１４ｇ（０．０１ｅｑ）、およびＮａＯｔ－Ｂｕ５．４９ｇ（２ｅｑ）を、キシレン２５０ｍｌに入れて、還流して撹拌した。２時間後反応が終了すると、減圧して溶媒を除去した。この後、クロロホルム（ＣＨＣｌ３）に完全に溶かし、水で洗い、再度減圧して溶媒を５０％程度除去した。再度還流状態でエチルアセテートを入れて結晶を落とし、冷やした後に濾過した。これをカラムクロマトグラフィーして、化合物１１　１４．２３ｇ（収率６３％）を得た。［Ｍ＋Ｈ］＋＝７９０

合成例１２

【０２１８】

【化６２】



【０２１９】

化学式ａ　１０ｇ（１ｅｑ）、２－（５－ブロモナフタレン－２－イル）－４－（ナフタレン－２－イル）－６－（フェナントレン－９－イル）－１，３，５－トリアジン２５．７１ｇ（１．１ｅｑ）、Ｋ３ＰＯ４　１６．８６ｇ（２ｅｑ）、およびＰｄ（ｔ－Ｂｕ３Ｐ）２　０．０４ｇ（０．００２ｅｑ）を、キシレン（Ｘｙｌｅｎｅ）２５０ｍｌに溶かし、還流して撹拌した。３時間後反応が終了すると、減圧して溶媒を除去した。この後、クロロホルム（ＣＨＣｌ３）に完全に溶かし、水で洗い、再度減圧して溶媒を５０％程度除去した。再度還流状態でエチルアセテートを入れて結晶を落とし、冷やした後に濾過した。これをカラムクロマトグラフィーして、化合物１２－１　２０．２１ｇ（収率６７％）を得た。［Ｍ＋Ｈ］＋＝７６０

【０２２０】

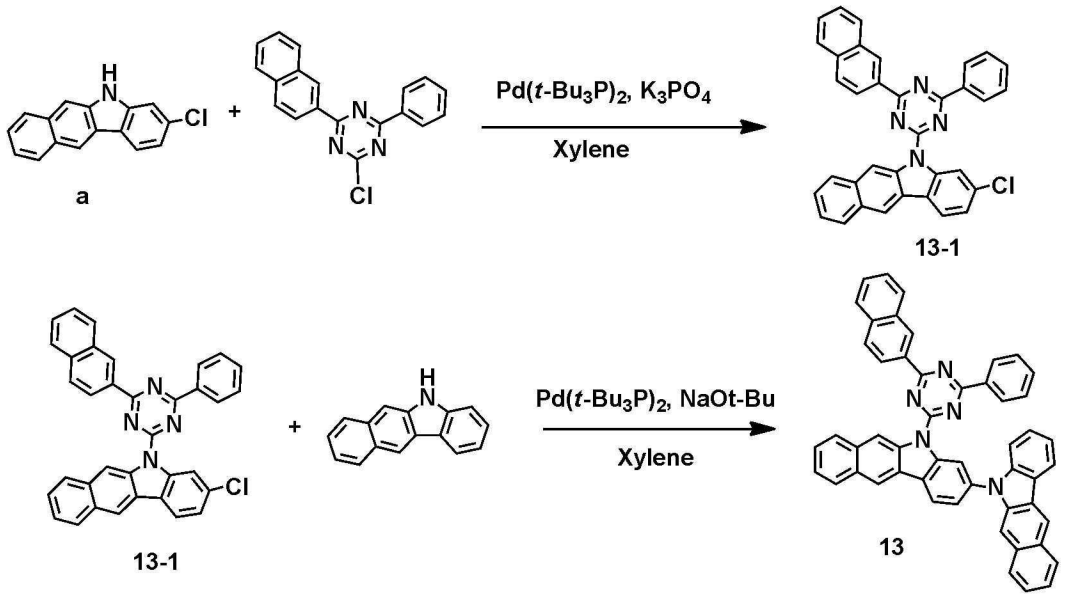
化合物１２－１　２０．２１ｇ（１ｅｑ）、１１Ｈ－ベンゾ［ａ］カルバゾール６．３６ｇ（１．１ｅｑ）、Ｐｄ（ｔ－Ｂｕ３Ｐ）２　０．１３ｇ（０．０１ｅｑ）、およびＮａＯｔ－Ｂｕ５．１１ｇ（２ｅｑ）を、キシレン２５０ｍｌに入れて、還流して撹拌した。２時間後反応が終了すると、減圧して溶媒を除去した。この後、クロロホルム（ＣＨＣｌ３）に完全に溶かし、水で洗い、再度減圧して溶媒を５０％程度除去した。再度還流状態でエチルアセテートを入れて結晶を落とし、冷やした後に濾過した。これをカラムクロマトグラフィーして、化合物１２　１５．０１ｇ（収率６０％）を得た。［Ｍ＋Ｈ］＋＝９４０

【０２２１】

合成例１３

【０２２２】

【化６３】



【０２２３】

化学式ａ　１０ｇ（１ｅｑ）、２－クロロ－４－（ナフタレン－２－イル）－６－フェニル－１，３，５－トリアジン１３．８８ｇ（１．１ｅｑ）、Ｋ３ＰＯ４　１６．８６ｇ（２ｅｑ）、およびＰｄ（ｔ－Ｂｕ３Ｐ）２　０．０４ｇ（０．００２ｅｑ）を、キシレン（Ｘｙｌｅｎｅ）２５０ｍｌに溶かし、還流して撹拌した。３時間後反応が終了すると、減圧して溶媒を除去した。この後、クロロホルム（ＣＨＣｌ３）に完全に溶かし、水で洗い、再度減圧して溶媒を５０％程度除去した。再度還流状態でエチルアセテートを入れて結晶を落とし、冷やした後に濾過した。これをカラムクロマトグラフィーして、化合物１３－１　１６．０９ｇ（収率７６％）を得た。［Ｍ＋Ｈ］＋＝５３４

【０２２４】

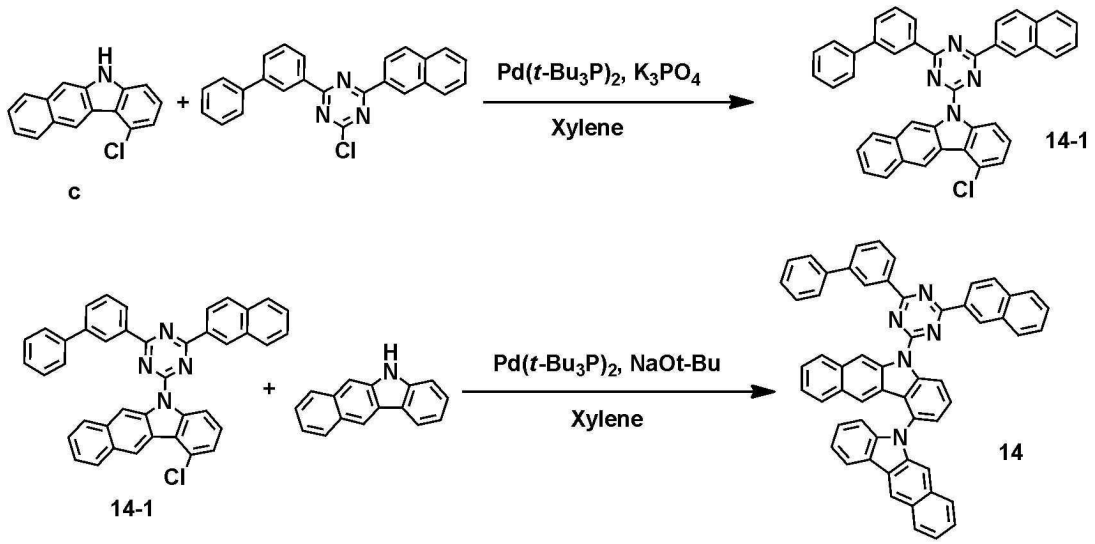
化合物１３－１　１６．０９ｇ（１ｅｑ）、５Ｈ－ベンゾ［ｂ］カルバゾール７．２１ｇ（１．１ｅｑ）、Ｐｄ（ｔ－Ｂｕ３Ｐ）２　０．１５ｇ（０．０１ｅｑ）、およびＮａＯｔ－Ｂｕ５．８ｇ（２ｅｑ）を、キシレン２５０ｍｌに入れて、還流して撹拌した。２時間後反応が終了すると、減圧して溶媒を除去した。この後、クロロホルム（ＣＨＣｌ３）に完全に溶かし、水で洗い、再度減圧して溶媒を５０％程度除去した。再度還流状態でエチルアセテートを入れて結晶を落とし、冷やした後に濾過した。これをカラムクロマトグラフィーして、化合物１３　１４．４４ｇ（収率６７％）を得た。［Ｍ＋Ｈ］＋＝７１４

【０２２５】

合成例１４

【０２２６】

【化６４】



【０２２７】

化学式ｃ　１０ｇ（１ｅｑ）、２－（［１，１'－ビフェニル］－３－イル）－４－クロロ－６－（ナフタレン－２－イル）－１，３，５－トリアジン１７．２１ｇ（１．１ｅｑ）、Ｋ３ＰＯ４　１６．８６ｇ（２ｅｑ）、およびＰｄ（ｔ－Ｂｕ３Ｐ）２　０．０４ｇ（０．００２ｅｑ）を、キシレン（Ｘｙｌｅｎｅ）２５０ｍｌに溶かし、還流して撹拌した。３時間後反応が終了すると、減圧して溶媒を除去した。この後、クロロホルム（ＣＨＣｌ３）に完全に溶かし、水で洗い、再度減圧して溶媒を５０％程度除去した。再度還流状態でエチルアセテートを入れて結晶を落とし、冷やした後に濾過した。これをカラムクロマトグラフィーして、化合物１４－１　１８．１４ｇ（収率７６％）を得た。［Ｍ＋Ｈ］＋＝６１０

【０２２８】

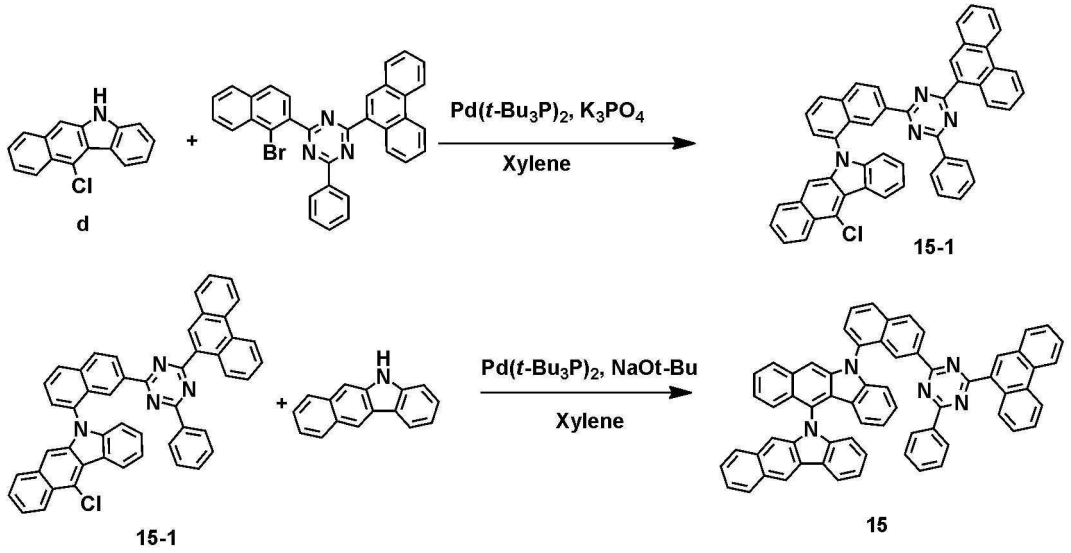
化合物１４－１　１８．１４ｇ（１ｅｑ）、５Ｈ－ベンゾ［ｂ］カルバゾール７．１２ｇ（１．１ｅｑ）、Ｐｄ（ｔ－Ｂｕ３Ｐ）２　０．１５ｇ（０．０１ｅｑ）、およびＮａＯｔ－Ｂｕ５．７２ｇ（２ｅｑ）を、キシレン２５０ｍｌに入れて、還流して撹拌した。２時間後反応が終了すると、減圧して溶媒を除去した。この後、クロロホルム（ＣＨＣｌ３）に完全に溶かし、水で洗い、再度減圧して溶媒を５０％程度除去した。再度還流状態でエチルアセテートを入れて結晶を落とし、冷やした後に濾過した。これをカラムクロマトグラフィーして、化合物１４　１６．２４ｇ（収率６９％）を得た。［Ｍ＋Ｈ］＋＝７９０

【０２２９】

合成例１５

【０２３０】

【化６５】



【０２３１】

化学式ｄ　１０ｇ（１ｅｑ）、２－（１－ブロモナフタレン－２－イル）－４－（フェナントレン－９－イル）－６－フェニル－１，３，５－トリアジン２３．５３ｇ（１．１ｅｑ）、Ｋ３ＰＯ４　１６．８６ｇ（２ｅｑ）、およびＰｄ（ｔ－Ｂｕ３Ｐ）２　０．０５ｇ（０．００２ｅｑ）を、キシレン（Ｘｙｌｅｎｅ）２５０ｍｌに溶かし、還流して撹拌した。３時間後反応が終了すると、減圧して溶媒を除去した。この後、クロロホルム（ＣＨＣｌ３）に完全に溶かし、水で洗い、再度減圧して溶媒を５０％程度除去した。再度還流状態でエチルアセテートを入れて結晶を落とし、冷やした後に濾過した。これをカラムクロマトグラフィーして、化合物１５－１　１７．１８ｇ（収率６１％）を得た。［Ｍ＋Ｈ］＋＝７１０

【０２３２】

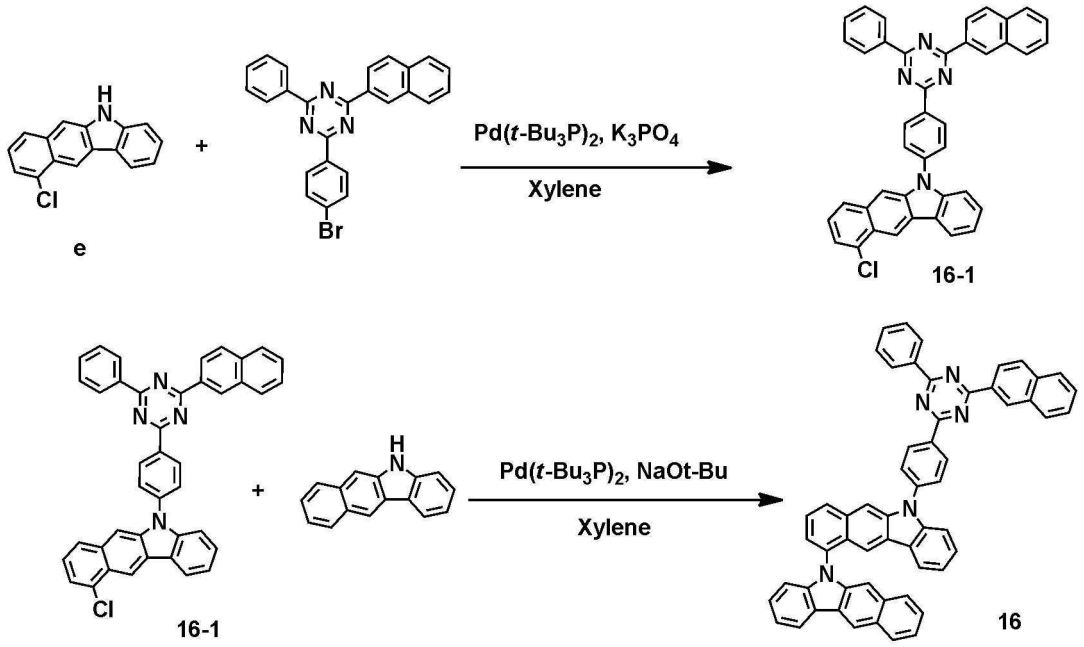
化合物１５－１　１７．１８ｇ（１ｅｑ）、５Ｈ－ベンゾ［ｂ］カルバゾール５．７９ｇ（１．１ｅｑ）、Ｐｄ（ｔ－Ｂｕ３Ｐ）２　０．１４ｇ（０．０１ｅｑ）、およびＮａＯｔ－Ｂｕ４．６５ｇ（２ｅｑ）を、キシレン２５０ｍｌに入れて、還流して撹拌した。２時間後反応が終了すると、減圧して溶媒を除去した。この後、クロロホルム（ＣＨＣｌ３）に完全に溶かし、水で洗い、再度減圧して溶媒を５０％程度除去した。再度還流状態でエチルアセテートを入れて結晶を落とし、冷やした後に濾過した。これをカラムクロマトグラフィーして、化合物１５　１４．４５ｇ（収率６７％）を得た。［Ｍ＋Ｈ］＋＝８９１

【０２３３】

合成例１６

【０２３４】

【化６６】



【０２３５】

化学式ｅ　１０ｇ（１ｅｑ）、２－（４－ブロモフェニル）－４－（フェナントレン－２－イル）－６－フェニル－１，３，５－トリアジン１９．１５ｇ（１．１ｅｑ）、Ｋ３ＰＯ４　１６．８６ｇ（２．０ｅｑ）、およびＰｄ（ｔ－Ｂｕ３Ｐ）２　０．０４ｇ（０．００２ｅｑ）を、キシレン（Ｘｙｌｅｎｅ）２５０ｍｌに溶かし、還流して撹拌した。３時間後反応が終了すると、減圧して溶媒を除去した。この後、クロロホルム（ＣＨＣｌ３）に完全に溶かし、水で洗い、再度減圧して溶媒を５０％程度除去した。再度還流状態でエチルアセテートを入れて結晶を落とし、冷やした後に濾過した。これをカラムクロマトグラフィーして、化合物１６－１　１７．９ｇ（収率７４％）を得た。［Ｍ＋Ｈ］＋＝６１０

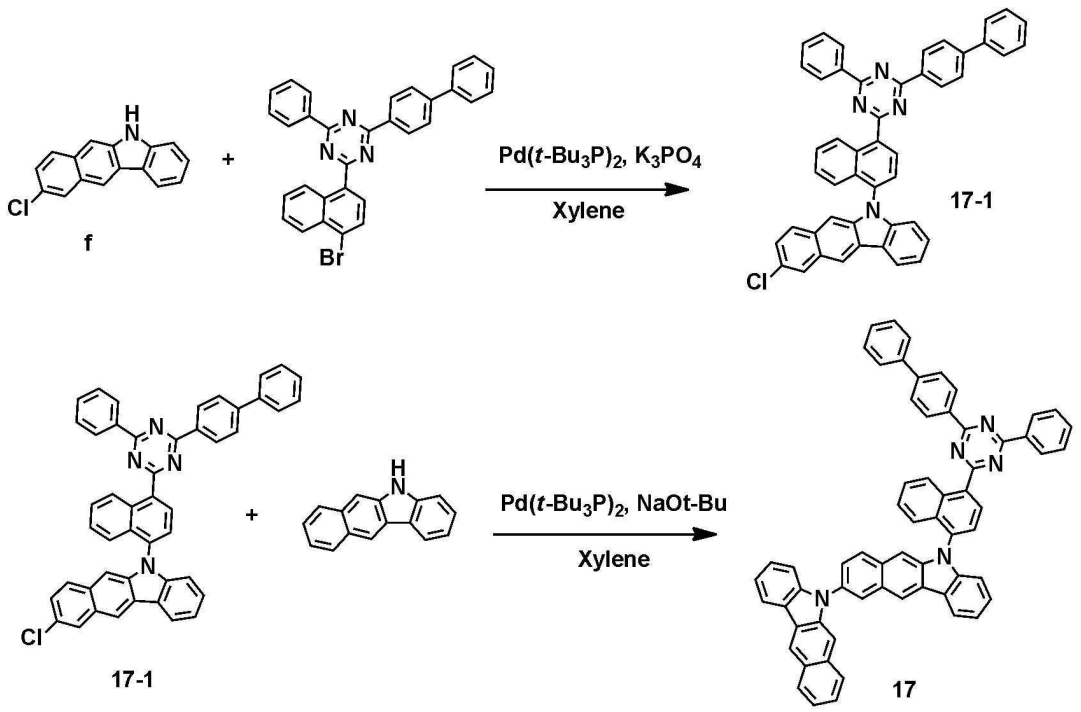
【０２３６】

化合物１６－１　１７．９０ｇ（１ｅｑ）、５Ｈ－ベンゾ［ｂ］カルバゾール７．０２ｇ（１．１ｅｑ）、Ｐｄ（ｔ－Ｂｕ３Ｐ）２　０．１４ｇ（０．０１ｅｑ）、およびＮａＯｔ－Ｂｕ５．６５ｇ（２ｅｑ）を、キシレン２５０ｍｌに入れて、還流して撹拌した。２時間後反応が終了すると、減圧して溶媒を除去した。この後、クロロホルム（ＣＨＣｌ３）に完全に溶かし、水で洗い、再度減圧して溶媒を５０％程度除去した。再度還流状態でエチルアセテートを入れて結晶を落とし、冷やした後に濾過した。これをカラムクロマトグラフィーして、化合物１６　１６．２５ｇ（収率７０％）を得た。［Ｍ＋Ｈ］＋＝７９０

合成例１７

【０２３７】

【化６７】



【０２３８】

化学式ｆ　１０ｇ（１．０ｅｑ）、２－（［１，１'－ビフェニル］－４－イル）－４－（４－ブロモナフタレン－１－イル）－６－フェニル－１，３，５－トリアジン２２．４８ｇ（１．１ｅｑ）、Ｋ３ＰＯ４　１６．８６ｇ（２．０ｅｑ）、およびＰｄ（ｔ－Ｂｕ３Ｐ）２　０．０５ｇ（０．００２ｅｑ）を、キシレン（Ｘｙｌｅｎｅ）２５０ｍｌに溶かし、還流して撹拌した。３時間後反応が終了すると、減圧して溶媒を除去した。この後、クロロホルム（ＣＨＣｌ３）に完全に溶かし、水で洗い、再度減圧して溶媒を５０％程度除去した。再度還流状態でエチルアセテートを入れて結晶を落とし、冷やした後に濾過した。これをカラムクロマトグラフィーして、化合物１７－１　１８．２３ｇ（収率６７％）を得た。［Ｍ＋Ｈ］＋＝６８６

【０２３９】

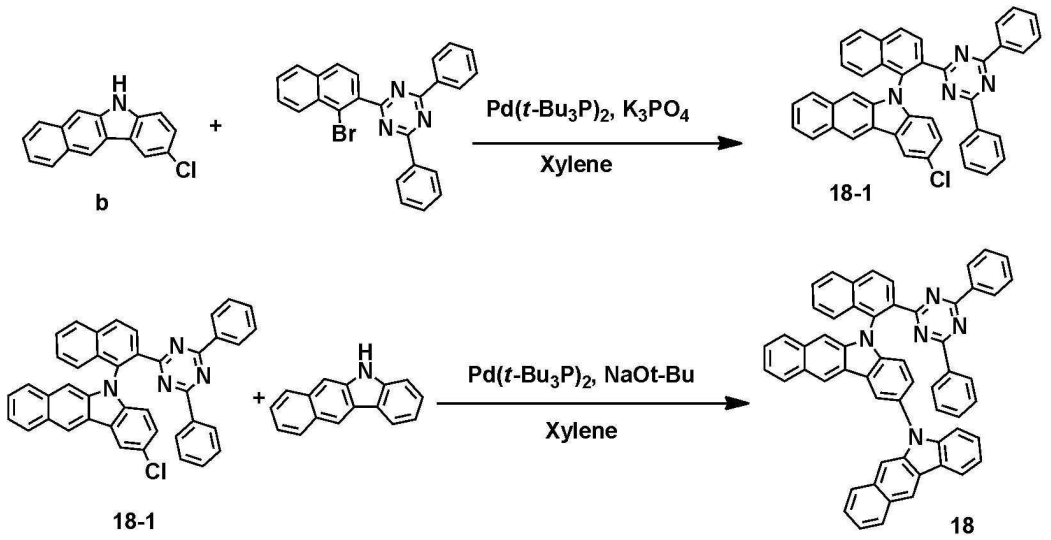
化合物１７－１　１８．２３ｇ（１ｅｑ）、５Ｈ－ベンゾ［ｂ］カルバゾール６．３６ｇ（１．１ｅｑ）、Ｐｄ（ｔ－Ｂｕ３Ｐ）２　０．１４ｇ（０．０１ｅｑ）、およびＮａＯｔ－Ｂｕ５．１１ｇ（２ｅｑ）を、キシレン２５０ｍｌに入れて、還流して撹拌した。２時間後反応が終了すると、減圧して溶媒を除去した。この後、クロロホルム（ＣＨＣｌ３）に完全に溶かし、水で洗い、再度減圧して溶媒を５０％程度除去した。再度還流状態でエチルアセテートを入れて結晶を落とし、冷やした後に濾過した。これをカラムクロマトグラフィーして、化合物１７　１６．３６ｇ（収率７１％）を得た。［Ｍ＋Ｈ］＋＝８６７

【０２４０】

合成例１８

【０２４１】

【化６８】



【０２４２】

化学式ｂ　１０ｇ（１ｅｑ）、２－（１－ブロモナフタレン－２－イル）－４，６－ジフェニル－１，３，５－トリアジン１９．１５ｇ（１．１ｅｑ）、Ｋ３ＰＯ４　１６．８６ｇ（２ｅｑ）、およびＰｄ（ｔ－Ｂｕ３Ｐ）２　０．０４ｇ（０．００２ｅｑ）を、キシレン（Ｘｙｌｅｎｅ）２５０ｍｌに溶かし、還流して撹拌した。３時間後反応が終了すると、減圧して溶媒を除去した。この後、クロロホルム（ＣＨＣｌ３）に完全に溶かし、水で洗い、再度減圧して溶媒を５０％程度除去した。再度還流状態でエチルアセテートを入れて結晶を落とし、冷やした後に濾過した。これをカラムクロマトグラフィーして、化合物１８－１　１４．７６ｇ（収率６１％）を得た。［Ｍ＋Ｈ］＋＝６１０

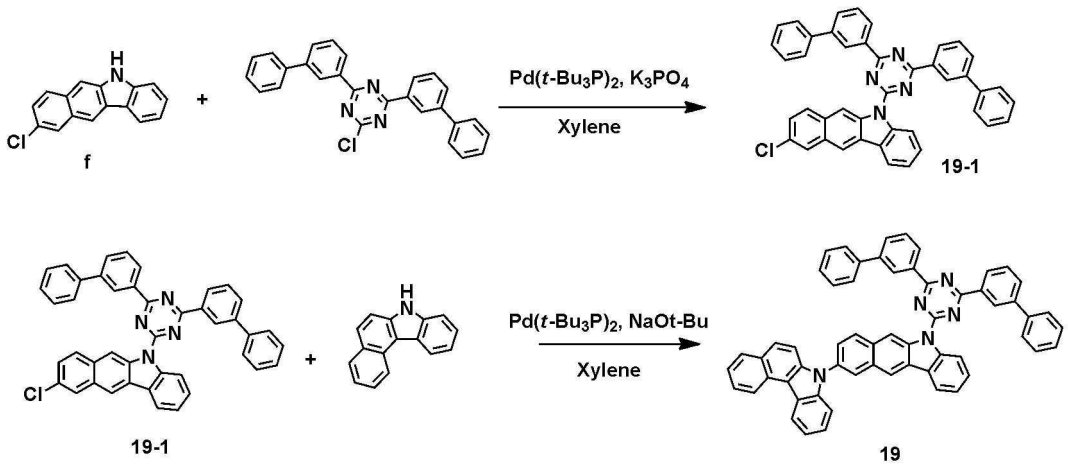
【０２４３】

化合物１８－１　１４．７６ｇ（１ｅｑ）、５Ｈ－ベンゾ［ｂ］カルバゾール５．７９ｇ（１．１ｅｑ）、Ｐｄ（ｔ－Ｂｕ３Ｐ）２　０．１２ｇ（０．０１ｅｑ）、およびＮａＯｔ－Ｂｕ４．６５ｇ（２ｅｑ）を、キシレン２５０ｍｌに入れて、還流して撹拌した。２時間後反応が終了すると、減圧して溶媒を除去した。この後、クロロホルム（ＣＨＣｌ３）に完全に溶かし、水で洗い、再度減圧して溶媒を５０％程度除去した。再度還流状態でエチルアセテートを入れて結晶を落とし、冷やした後に濾過した。これをカラムクロマトグラフィーして、化合物１８　１３．４ｇ（収率７０％）を得た。［Ｍ＋Ｈ］＋＝７９０

合成例１９

【０２４４】

【化６９】



【０２４５】

化学式ｆ　１０ｇ（１．０ｅｑ）、２，４－ジ（［１，１'－ビフェニル］－３－イル）－６－クロロ－１，３，５－トリアジン１８．３５ｇ（１．１ｅｑ）、Ｋ３ＰＯ４　１６．８６ｇ（２ｅｑ）、およびＰｄ（ｔ－Ｂｕ３Ｐ）２　０．０４ｇ（０．００２ｅｑ）を、キシレン（Ｘｙｌｅｎｅ）２５０ｍｌに溶かし、還流して撹拌した。３時間後反応が終了すると、減圧して溶媒を除去した。この後、クロロホルム（ＣＨＣｌ３）に完全に溶かし、水で洗い、再度減圧して溶媒を５０％程度除去した。再度還流状態でエチルアセテートを入れて結晶を落とし、冷やした後に濾過した。これをカラムクロマトグラフィーして、化合物１９－１　１９．４３ｇ（収率７７％）を得た。［Ｍ＋Ｈ］＋＝６３６

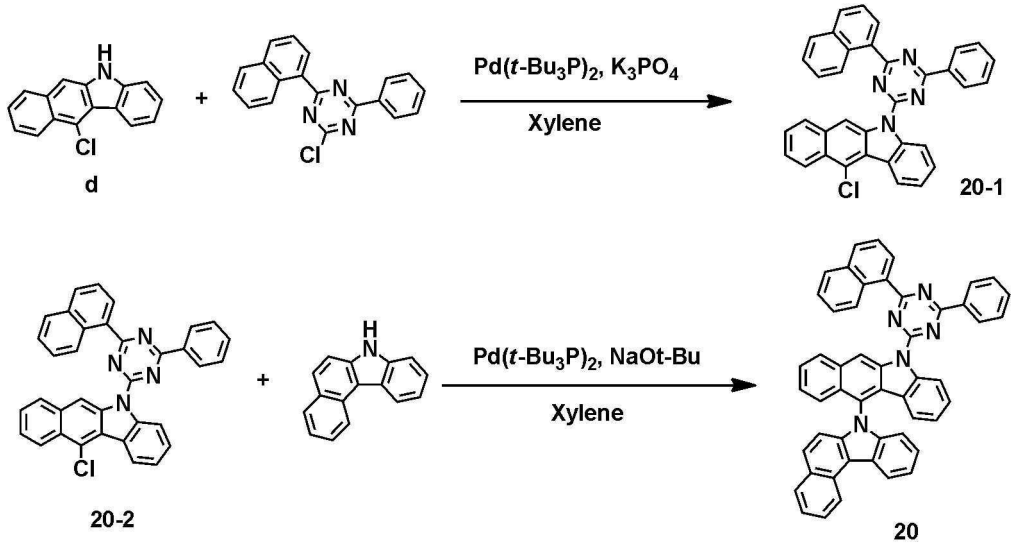
【０２４６】

化合物１９－１　１９．４３ｇ（１ｅｑ）、７Ｈ－ベンゾ［ｃ］カルバゾール７．３１ｇ（１．１ｅｑ）、Ｐｄ（ｔ－Ｂｕ３Ｐ）２　０．５４ｇ（０．０１ｅｑ）、およびＮａＯｔ－Ｂｕ５．８７ｇ（２ｅｑ）を、キシレン２５０ｍｌに入れて、還流して撹拌した。２時間後反応が終了すると、減圧して溶媒を除去した。この後、クロロホルム（ＣＨＣｌ３）に完全に溶かし、水で洗い、再度減圧して溶媒を５０％程度除去した。再度還流状態でエチルアセテートを入れて結晶を落とし、冷やした後に濾過した。これをカラムクロマトグラフィーして、化合物１９　１７．４７ｇ（収率７０％）を得た。［Ｍ＋Ｈ］＋＝８１６

合成例２０

【０２４７】

【化７０】



【０２４８】

化学式ｄ　１０ｇ（１ｅｑ）、２－クロロ－４－（ナフタレン－１－イル）－６－フェニル－１，３，５－トリアジン１３．８８ｇ（１．１ｅｑ）、Ｋ３ＰＯ４　１６．８６ｇ（２ｅｑ）、およびＰｄ（ｔ－Ｂｕ３Ｐ）２　０．０４ｇ（０．００２ｅｑ）を、キシレン（Ｘｙｌｅｎｅ）２５０ｍｌに溶かし、還流して撹拌した。３時間後反応が終了すると、減圧して溶媒を除去した。この後、クロロホルム（ＣＨＣｌ３）に完全に溶かし、水で洗い、再度減圧して溶媒を５０％程度除去した。再度還流状態でエチルアセテートを入れて結晶を落とし、冷やした後に濾過した。これをカラムクロマトグラフィーして、化合物２０－１　１５．８８ｇ（収率７５％）を得た。［Ｍ＋Ｈ］＋＝５３４

【０２４９】

化合物２０－１　１５．８８ｇ（１ｅｑ）、７Ｈ－ベンゾ［ｃ］カルバゾール７．１２ｇ（１．１ｅｑ）、Ｐｄ（ｔ－Ｂｕ３Ｐ）２　０．１５ｇ（０．０１ｅｑ）、およびＮａＯｔ－Ｂｕ５．７２ｇ（２ｅｑ）を、キシレン２５０ｍｌに入れて、還流して撹拌した。２時間後反応が終了すると、減圧して溶媒を除去した。この後、クロロホルム（ＣＨＣｌ３）に完全に溶かし、水で洗い、再度減圧して溶媒を５０％程度除去した。再度還流状態でエチルアセテートを入れて結晶を落とし、冷やした後に濾過した。これをカラムクロマト

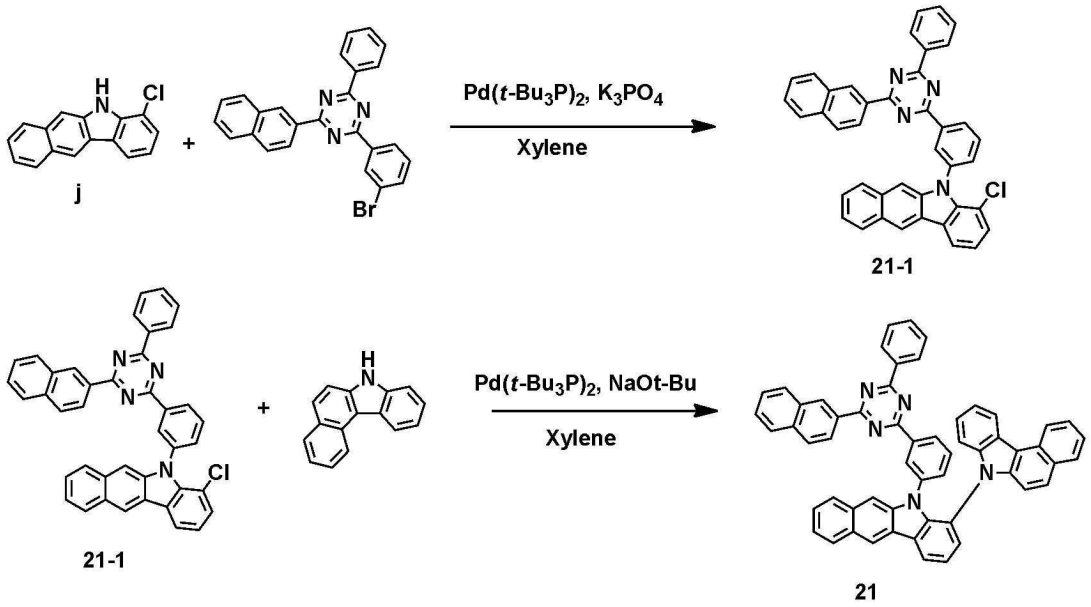
グラフィーして、化合物２０　１５．３１ｇ（収率７２％）を得た。［Ｍ＋Ｈ］＋＝７１４

【０２５０】

合成例２１

【０２５１】

【化７１】



j　21-1　21-1　21

【０２５２】

化学式ｊ　１０ｇ（１ｅｑ）、２－（３－ブロモフェニル）－４－（ナフタレン－２－イル）－６－フェニル－１，３，５－トリアジン１９．１１ｇ（１．１ｅｑ）、Ｋ３ＰＯ４　１６．８６ｇ（２ｅｑ）、およびＰｄ（ｔ－Ｂｕ３Ｐ）２　０．０４ｇ（０．００２ｅｑ）を、キシレン（Ｘｙｌｅｎｅ）２５０ｍｌに溶かし、還流して撹拌した。３時間後反応が終了すると、減圧して溶媒を除去した。この後、クロロホルム（ＣＨＣｌ３）に完全に溶かし、水で洗い、再度減圧して溶媒を５０％程度除去した。再度還流状態でエチルアセテートを入れて結晶を落とし、冷やした後に濾過した。これをカラムクロマトグラフィーして、化合物２１－１　１６．９３ｇ（収率７０％）を得た。［Ｍ＋Ｈ］＋＝６１０

【０２５３】

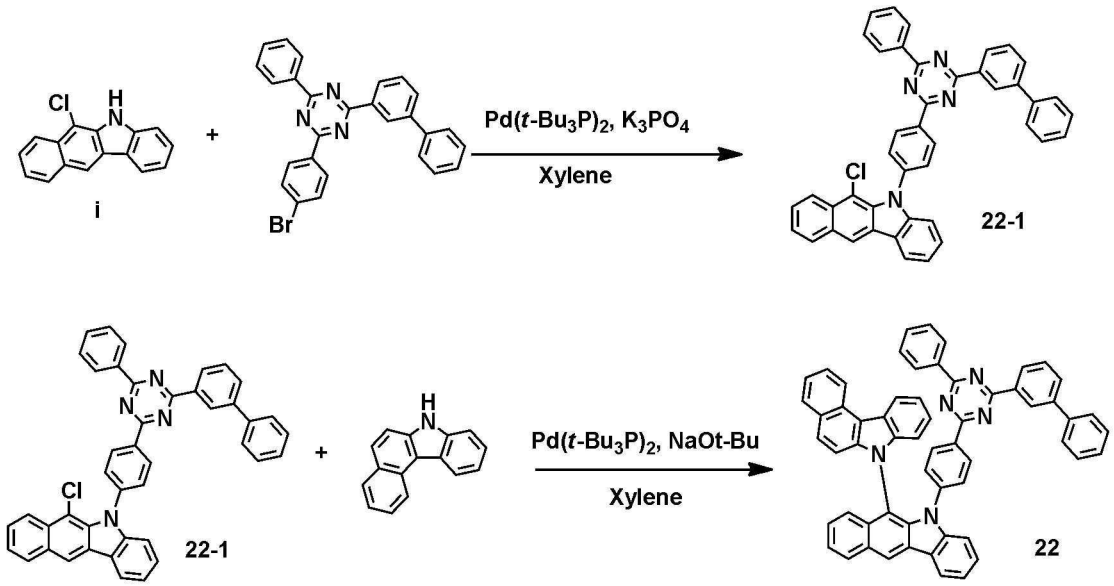
化合物２１－１　１６．９３ｇ（１ｅｑ）、７Ｈ－ベンゾ［ｃ］カルバゾール６．６４ｇ（１．１ｅｑ）、Ｐｄ（ｔ－Ｂｕ３Ｐ）２　０．１４ｇ（０．０１ｅｑ）、およびＮａＯｔ－Ｂｕ５．３４ｇ（２ｅｑ）を、キシレン２５０ｍｌに入れて、還流して撹拌した。２時間後反応が終了すると、減圧して溶媒を除去した。この後、クロロホルム（ＣＨＣｌ３）に完全に溶かし、水で洗い、再度減圧して溶媒を５０％程度除去した。再度還流状態でエチルアセテートを入れて結晶を落とし、冷やした後に濾過した。これをカラムクロマトグラフィーして、化合物２１　１３．４ｇ（収率６１％）を得た。［Ｍ＋Ｈ］＋＝７９０

【０２５４】

合成例２２

【０２５５】

【化７２】



【０２５６】

化学式ｉ　１０ｇ（１ｅｑ）、２－（［１，１'－ビフェニル］－３－イル）－４－（４－ブロモフェニル）－６－フェニル－１，３，５－トリアジン２０．２９ｇ（１．１ｅｑ）、Ｋ３ＰＯ４　１６．８６ｇ（２ｅｑ）、およびＰｄ（ｔ－Ｂｕ３Ｐ）２　０．０４ｇ（０．００２ｅｑ）を、キシレン（Ｘｙｌｅｎｅ）２５０ｍｌに溶かし、還流して撹拌した。３時間後反応が終了すると、減圧して溶媒を除去した。この後、クロロホルム（ＣＨＣｌ３）に完全に溶かし、水で洗い、再度減圧して溶媒を５０％程度除去した。再度還流状態でエチルアセテートを入れて結晶を落とし、冷やした後に濾過した。これをカラムクロマトグラフィーして、化合物２２－１　１６．１４ｇ（収率６４％）を得た。［Ｍ＋Ｈ］＋＝６３６

【０２５７】

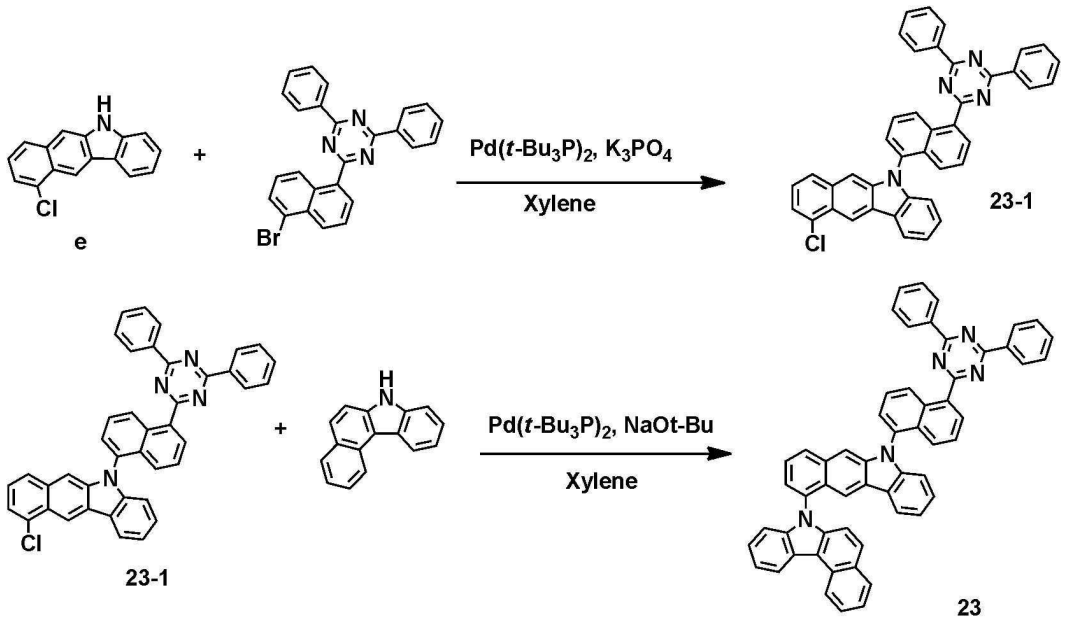
化合物２２－１　１６．１５ｇ（１ｅｑ）、７Ｈ－ベンゾ［ｃ］カルバゾール６．０７ｇ（１．１ｅｑ）、Ｐｄ（ｔ－Ｂｕ３Ｐ）２　０．１２ｇ（０．０１ｅｑ）、およびＮａＯｔ－Ｂｕ４．８８ｇ（２ｅｑ）を、キシレン２５０ｍｌに入れて、還流して撹拌した。２時間後反応が終了すると、減圧して溶媒を除去した。この後、クロロホルム（ＣＨＣｌ３）に完全に溶かし、水で洗い、再度減圧して溶媒を５０％程度除去した。再度還流状態でエチルアセテートを入れて結晶を落とし、冷やした後に濾過した。これをカラムクロマトグラフィーして、化合物２２　１２．４４ｇ（収率６０％）を得た。［Ｍ＋Ｈ］＋＝８１６

【０２５８】

合成例２３

【０２５９】

【化７３】



【０２６０】

化学式ｅ　１０ｇ（１ｅｑ）、２－（５－ブロモナフタレン－１－イル）－４，６－ジフェニル－１，３，５－トリアジン１９．１５ｇ（１．１ｅｑ）、Ｋ３ＰＯ４　１６．８６ｇ（２ｅｑ）、およびＰｄ（ｔ－Ｂｕ３Ｐ）２　０．０４ｇ（０．００２ｅｑ）を、キシレン（Ｘｙｌｅｎｅ）２５０ｍｌに溶かし、還流して撹拌した。３時間後反応が終了すると、減圧して溶媒を除去した。この後、クロロホルム（ＣＨＣｌ３）に完全に溶かし、水で洗い、再度減圧して溶媒を５０％程度除去した。再度還流状態でエチルアセテートを入れて結晶を落とし、冷やした後に濾過した。これをカラムクロマトグラフィーして、化合物２３－１　１６．６９ｇ（収率６９％）を得た。［Ｍ＋Ｈ］＋＝６１０

【０２６１】

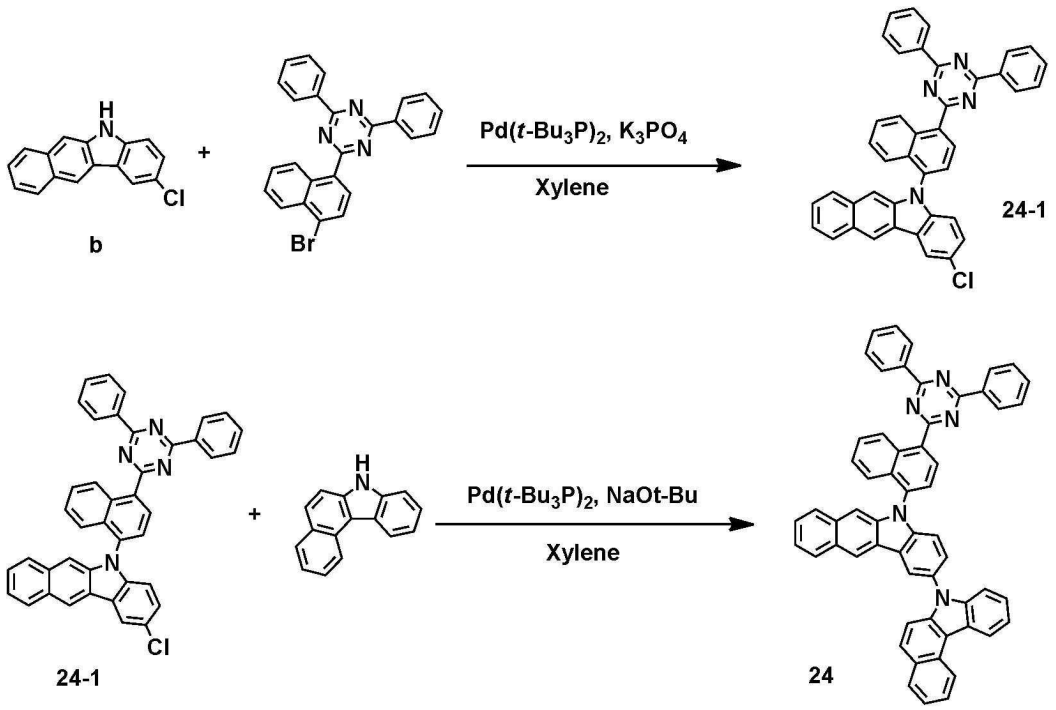
化合物２３－１　１６．６９ｇ（１ｅｑ）、７Ｈ－ベンゾ［ｃ］カルバゾール６．５５ｇ（１．１ｅｑ）、Ｐｄ（ｔ－Ｂｕ３Ｐ）２　０．１４ｇ（０．０１ｅｑ）、およびＮａＯｔ－Ｂｕ５．２６ｇ（２ｅｑ）を、キシレン２５０ｍｌに入れて、還流して撹拌した。２時間後反応が終了すると、減圧して溶媒を除去した。この後、クロロホルム（ＣＨＣｌ３）に完全に溶かし、水で洗い、再度減圧して溶媒を５０％程度除去した。再度還流状態でエチルアセテートを入れて結晶を落とし、冷やした後に濾過した。これをカラムクロマトグラフィーして、化合物２３　１４．０７ｇ（収率６５％）を得た。［Ｍ＋Ｈ］＋＝７９０

【０２６２】

合成例２４

【０２６３】

【化７４】



【０２６４】

化学式ｂ　１０ｇ（１ｅｑ）、２－（４－ブロモナフタレン－１－イル）－４，６－ジフェニル－１，３，５－トリアジン１９．１５ｇ（１．１ｅｑ）、Ｋ３ＰＯ４　１６．８６ｇ（２ｅｑ）、およびＰｄ（ｔ－Ｂｕ３Ｐ）２　０．０４ｇ（０．００２ｅｑ）を、キシレン（Ｘｙｌｅｎｅ）２５０ｍｌに溶かし、還流して撹拌した。３時間後反応が終了すると、減圧して溶媒を除去した。この後、クロロホルム（ＣＨＣｌ３）に完全に溶かし、水で洗い、再度減圧して溶媒を５０％程度除去した。再度還流状態でエチルアセテートを入れて結晶を落とし、冷やした後に濾過した。これをカラムクロマトグラフィーして、化合物２４－１　１６．２１ｇ（収率６７％）を得た。［Ｍ＋Ｈ］＋＝６１０

【０２６５】

化合物２４－１　１６．２１ｇ（１ｅｑ）、７Ｈ－ベンゾ［ｃ］カルバゾール６．３６ｇ（１．１ｅｑ）、Ｐｄ（ｔ－Ｂｕ３Ｐ）２　０．１３ｇ（０．０１ｅｑ）、およびＮａＯｔ－Ｂｕ５．１１ｇ（２ｅｑ）を、キシレン２５０ｍｌに入れて、還流して撹拌した。２時間後反応が終了すると、減圧して溶媒を除去した。この後、クロロホルム（ＣＨＣｌ３）に完全に溶かし、水で洗い、再度減圧して溶媒を５０％程度除去した。再度還流状態でエチルアセテートを入れて結晶を落とし、冷やした後に濾過した。これをカラムクロマトグラフィーして、化合物２４　１３．２４ｇ（収率６３％）を得た。［Ｍ＋Ｈ］＋＝７９０

【０２６６】

＜実験例＞

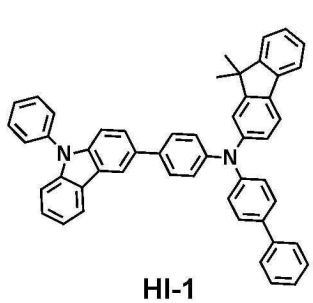
【０２６７】

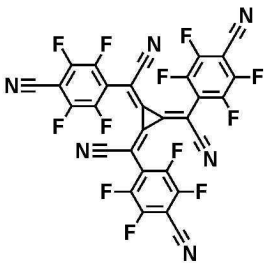
比較例１

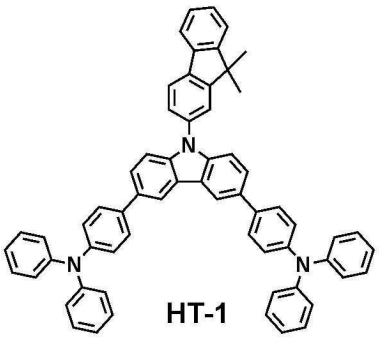
【０２６８】

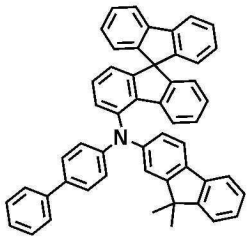
ＩＴＯ（ｉｎｄｉｕｍ　ｔｉｎ　ｏｘｉｄｅ）が１００ｎｍの厚さに薄膜コーティングされたガラス基板を、洗剤を溶かした蒸留水に入れて超音波洗浄した。この時、洗剤としてはフィッシャー社（Ｆｉｓｃｈｅｒ　Ｃｏ．）製品を使用し、蒸留水としてはミリポア社（Ｍｉｌｌｉｐｏｒｅ　Ｃｏ．）製品のフィルタ（Ｆｉｌｔｅｒ）で２次濾過した蒸留水を使用した。ＩＴＯを３０分間洗浄した後、蒸留水で２回繰り返し超音波洗浄を１０分間進行させた。蒸留水洗浄が終わった後、イソプロピルアルコール、アセトン、メタノールの溶剤で超音波洗浄をし乾燥させた後、プラズマ洗浄機に輸送させた。また、酸素プラズマを用いて前記基板を５分間洗浄した後、真空蒸着機に基板を輸送させた。

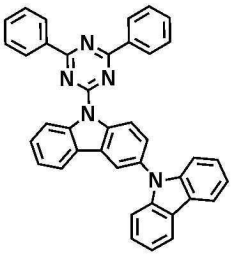
【０２６９】
このように用意されたＩＴＯ透明電極上に、正孔注入層として下記の化合物ＨＩ－１を１１５ｎｍの厚さに形成するが、下記の化合物Ａ－１を１．５％の濃度でｐ－ドーピングした。前記正孔注入層上に、下記の化合物ＨＴ－１を真空蒸着して膜厚さ８０ｎｍの正孔輸送層を形成した。次いで、前記正孔輸送層上に、膜厚さ１５ｎｍに下記の化合物ＥＢ－１を真空蒸着して電子阻止層を形成した。次いで、前記電子阻止層上に、下記の化合物ＲＨ－１と下記の化合物Ｄｐ－３９とを９８：２の重量比で真空蒸着して４０ｎｍの厚さの発光層を形成した。前記発光層上に膜厚さ３ｎｍに下記の化合物ＨＢ－１を真空蒸着して正孔阻止層を形成した。次いで、前記正孔阻止層上に、下記の化合物ＥＴ－１と下記の化合物ＬｉＱとを２：１の重量比で真空蒸着して３０ｎｍ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、１．２ｎｍの厚さにリチウムフルオライド（ＬｉＦ）と１００ｎｍの厚さにアルミニウムを蒸着して陰極を形成した。
【０２７０】
【化７５】

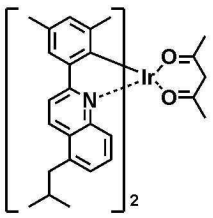

HI-1

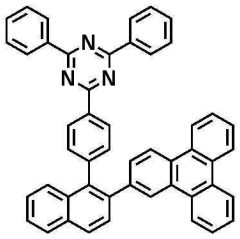

A-1

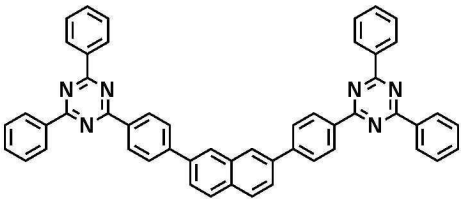

HT-1

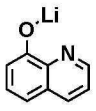

EB-1


RH-1


Dp-39


HB-1


ET-1


LiQ

【０２７１】
前記の過程で、有機物の蒸着速度は０．０４ｎｍ／ｓｅｃ～０．０７ｎｍ／ｓｅｃを維持し、陰極のリチウムフルオライドは０．０３ｎｍ／ｓｅｃ、アルミニウムは０．２ｎｍ／ｓｅｃの蒸着速度を維持し、蒸着時の真空度は２×１０－７ｔｏｒｒ～５×１０－６ｔｏｒｒを維持して、有機発光素子を作製した。
【０２７２】

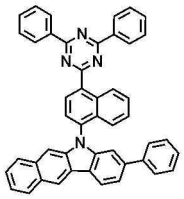
実施例１～２４および比較例２～１３

【０２７３】

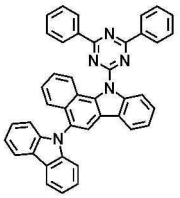
比較例１の有機発光素子において、化合物ＲＨ－１の代わりに下記表１に記載の化合物を用いることを除けば、前記比較例１と同様の方法で有機発光素子を製造した。

【０２７４】

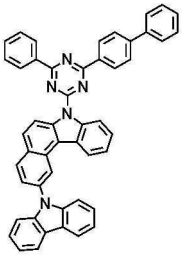
【化７６】



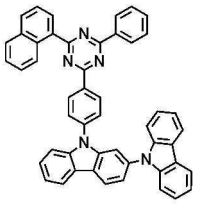
C-1



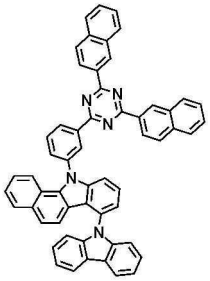
C-2



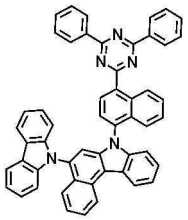
C-3



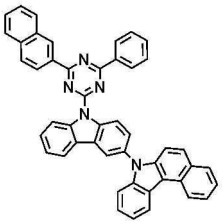
C-4



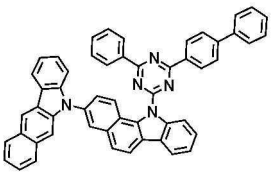
C-5



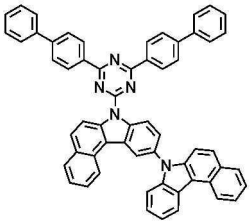
C-6



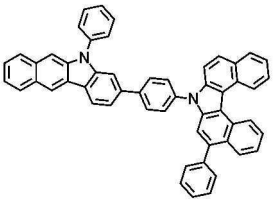
C-7



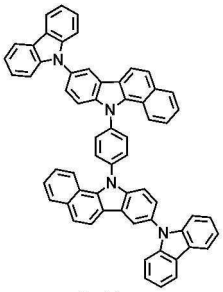
C-8



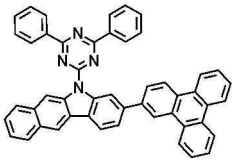
C-9



C-10



C-11



C-12

【０２７５】

前記実施例１～２４および比較例１～１３で製造した有機発光素子に電流を印加した時の電圧、効率および寿命を測定し、その結果を下記表１に示した。Ｔ９５は、輝度が初期輝度（１５０００ｎｉｔ）から９５％に減少するのにかかる時間を意味する。

【０２７６】

【表１】

区分	化合物	駆動電圧(V)	効率(cd/A)	寿命T95(h)	発光色
比較例1	RH-1	4.48	30.5	132	赤色
実施例1	1	3.93	37.5	194	赤色
実施例2	2	3.99	36.7	187	赤色
実施例3	3	4.01	34.8	287	赤色
実施例4	4	4.11	35.7	305	赤色
実施例5	5	4.23	33.3	246	赤色
実施例6	6	4.15	35.5	203	赤色
実施例7	7	3.87	38.4	184	赤色
実施例8	8	4.10	35.0	243	赤色
実施例9	9	4.15	34.9	237	赤色
実施例10	10	4.07	35.3	247	赤色
実施例11	11	4.17	37.1	240	赤色
実施例12	12	4.01	36.5	264	赤色
実施例13	13	3.81	39.1	179	赤色
実施例14	14	3.84	38.0	183	赤色
実施例15	15	4.03	34.7	259	赤色
実施例16	16	3.97	40.5	174	赤色
実施例17	17	4.11	37.1	227	赤色
実施例18	18	4.28	35.0	241	赤色
実施例19	19	3.85	40.3	188	赤色
実施例20	20	4.15	37.3	213	赤色
実施例21	21	3.99	36.5	294	赤色
実施例22	22	4.24	35.0	258	赤色
実施例23	23	4.19	37.3	269	赤色
実施例24	24	4.08	36.9	227	赤色
比較例2	C-1	4.51	31.5	73	赤色
比較例3	C-2	4.01	34.5	51	赤色
比較例4	C-3	4.11	34.5	79	赤色
比較例5	C-4	4.73	29.1	45	赤色
比較例6	C-5	4.60	30.5	52	赤色
比較例7	C-6	4.47	32.7	120	赤色
比較例8	C-7	4.29	29.5	57	赤色
比較例9	C-8	4.65	27.5	41	赤色
比較例10	C-9	4.31	32.5	64	赤色
比較例11	C-10	4.79	13.8	27	赤色
比較例12	C-11	4.73	15.3	29	赤色
比較例13	C-12	4.41	32.5	69	赤色

【０２７７】

前記比較例１の赤色有機発光素子は、従来広く用いられている化合物ＲＨ－１を使用し、電子阻止層として化合物ＥＢ－１、赤色発光層としてＲＨ－１／Ｄｐ－３９を使用した。比較例２～１３では、化合物ＲＨ－１の代わりに化合物Ｃ－１～Ｃ－１２を用いて有機発光素子を製造した。

【０２７８】

前記表１の結果をみると、本発明の化学式１の化合物を赤色発光層のホストとして用いた素子は、比較例の物質を発光層のホストとして含む素子に比べて、駆動電圧が大きくて２０％近く低くなり、効率の面でも２０％以上上昇したことを確認することができる。これは、本発明の化学式１の化合物（ホスト）において赤色ドーパントへのエネルギー伝達がより良く行われることを意味する。

【０２７９】

また、前記表１から、本発明の化学式１の化合物を含む素子は、高い効率を維持しながらも、特に寿命特性が大きく改善されたことを確認することができる。これは、本発明の化学式１の化合物が、比較例の化合物より電子と正孔に対する安定度が高く、赤色有機発光素子内で電子と正孔の移動のバランスがよくとれるからである。

【０２８０】

結論として、本発明の化合物を赤色発光層のホストとして用いた時、有機発光素子の駆動電圧、発光効率および／または寿命特性を改善できることを確認することができた。

【符号の説明】

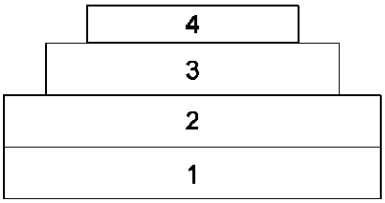
【０２８１】

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
８：電子阻止層
９：正孔阻止層
１０：電子注入および輸送層

【図面】

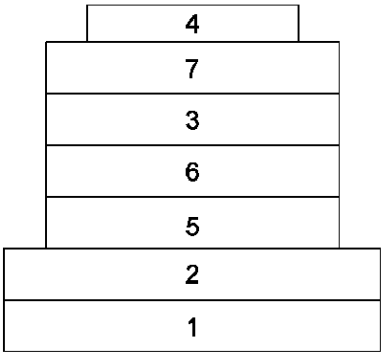
【図１】

[도1]



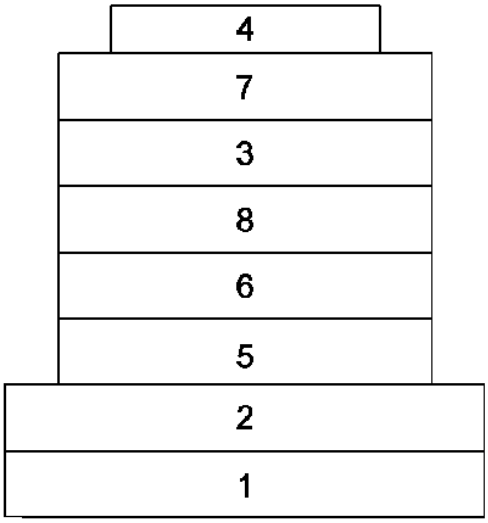
【図２】

[도2]



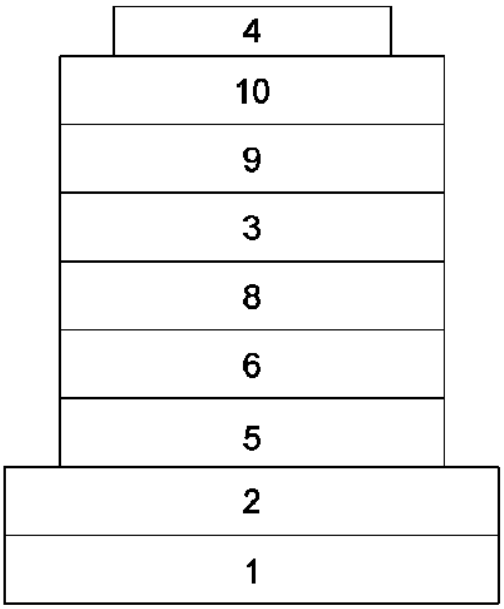
【図３】

[도3]



【図４】

[도4]



フロントページの続き

大韓民国 ０７３３６ ソウル，ヨンドゥンポ－グ，ヨイ－デロ １２８ エルジー・ケム・リミテッド内
(72)発明者 キム、ドンヒ
大韓民国 ０７３３６ ソウル，ヨンドゥンポ－グ，ヨイ－デロ １２８ エルジー・ケム・リミテッド内

審査官 谷尾 忍

(56)参考文献 韓国公開特許第１０－２０１６－００２９７２１（ＫＲ，Ａ）
韓国公開特許第１０－２０１５－０１４１１７９（ＫＲ，Ａ）
米国特許出願公開第２０１５／００５３９３４（ＵＳ，Ａ１）
国際公開第２０１０／１１４２６４（ＷＯ，Ａ２）
韓国公開特許第１０－２０１４－００８３８９７（ＫＲ，Ａ）

(58)調査した分野 (Int.Cl.，ＤＢ名)
Ｃ０７Ｄ ４０３／１４
Ｃ０９Ｋ １１／０６
Ｈ０１Ｌ ５１／５０
ＣＡｐｌｕｓ／ＲＥＧＩＳＴＲＹ（ＳＴＮ）