

(19) 日本国特許庁 (JP)

(12) 特 許 公 報 (B2)

(11) 特許番号

特許第6575969号
(P6575969)

(45) 発行日 令和1年9月18日 (2019.9.18)

(24) 登録日 令和1年8月30日 (2019.8.30)

(51) Int. Cl.	F I
CO7D 307/91 (2006.01)	CO7D 307/91 C S P
CO7D 333/76 (2006.01)	CO7D 333/76
CO7D 407/12 (2006.01)	CO7D 407/12
CO7D 409/12 (2006.01)	CO7D 409/12
CO9K 11/06 (2006.01)	CO9K 11/06 6 9 0
請求項の数 9 (全 76 頁) 最終頁に続く	

(21) 出願番号	特願2016-566263 (P2016-566263)	(73) 特許権者	514278061
(86) (22) 出願日	平成27年4月13日 (2015.4.13)		サムスン エスディアイ カンパニー, リ
(65) 公表番号	特表2017-518279 (P2017-518279A)		ミテッド
(43) 公表日	平成29年7月6日 (2017.7.6)		SAMSUNG SDI CO., LTD
(86) 国際出願番号	PCT/KR2015/003678		.
(87) 国際公開番号	W02015/174640		大韓民国, 17084, キョンギード, ヨ
(87) 国際公開日	平成27年11月19日 (2015.11.19)		ンインーシ, キフンーク, コンセーロ 1
審査請求日	平成30年4月2日 (2018.4.2)		50-20
(31) 優先権主張番号	10-2014-0057324		150-20, Gongse-ro, G
(32) 優先日	平成26年5月13日 (2014.5.13)		iheung-gu, Yongin-si
(33) 優先権主張国・地域又は機関	韓国 (KR)		, Gyeonggi-do 17084,
			Republic of Korea
(31) 優先権主張番号	10-2015-0051095	(74) 代理人	110000671
(32) 優先日	平成27年4月10日 (2015.4.10)		八田国際特許業務法人
(33) 優先権主張国・地域又は機関	韓国 (KR)		最終頁に続く

(54) 【発明の名称】 化合物、これを含む有機光電子素子および表示装置

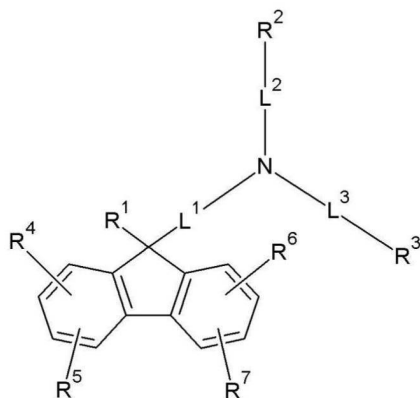
(57) 【特許請求の範囲】

【請求項 1】

下記の化学式 1 で表される化合物：

【化 1】

【化学式 1】



前記化学式 1 中、

$L^1 \sim L^3$ は、それぞれ独立して、単結合、非置換のフェニレン基、非置換のビフェニレン基、または非置換のナフチレン基であり、

R^1 は、非置換の C 1 ～ C 30 アルキル基または非置換の C 6 ～ C 30 アリール基であり、

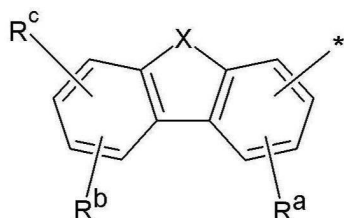
R^2 および R^3 は、それぞれ独立して、置換もしくは非置換の C 6 ～ C 30 アリール基または置換もしくは非置換の C 2 ～ C 30 ヘテロ環基であり、

$R^4 \sim R^7$ は、それぞれ独立して、水素、重水素、置換もしくは非置換の C 1 ～ C 30 アルキル基または置換もしくは非置換の C 6 ～ C 30 アリール基であり、

R^2 および R^3 のうちの少なくとも一つは、下記の化学式 2 で表される；

【化 2】

[化学式 2]



10

前記化学式 2 中、

* は、連結地点であり、

X は、O または S であり、

$R^a \sim R^c$ は、それぞれ独立して、水素、重水素、置換もしくは非置換の C 1 ～ C 30 アルキル基または置換もしくは非置換の C 6 ～ C 30 アリール基である。

20

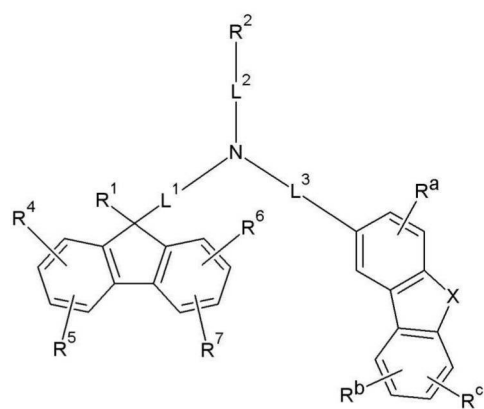
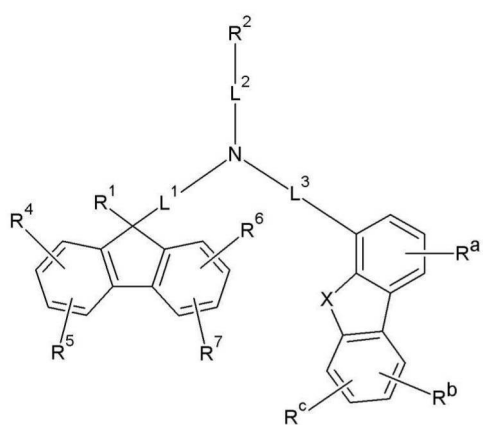
【請求項 2】

前記化学式 1 は、下記の化学式 4 ～ 8、11 および 12 のうちのいずれか一つで表される、請求項 1 に記載の化合物：

【化 3 - 1】

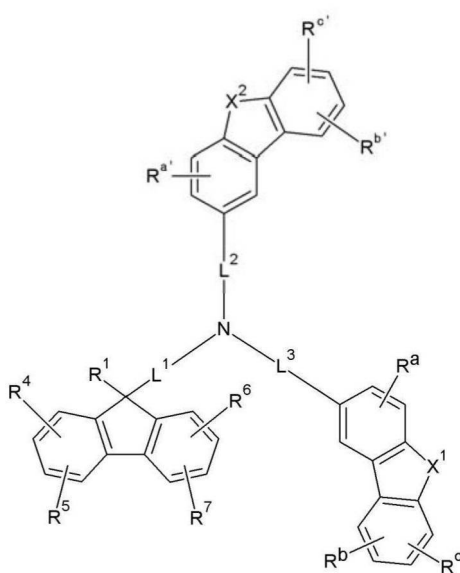
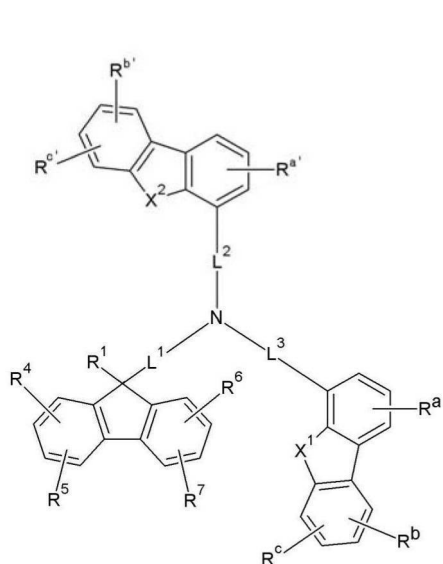
[化学式 4]

[化学式 5]

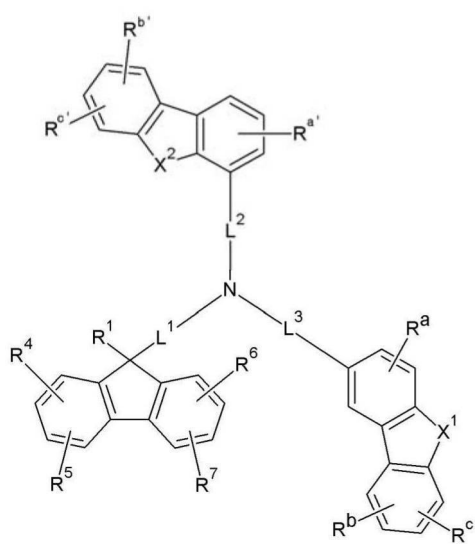


[化学式 6]

[化学式 7]



[化学式 8]



10

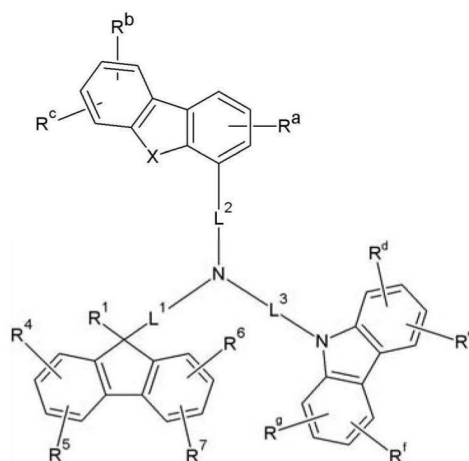
20

30

40

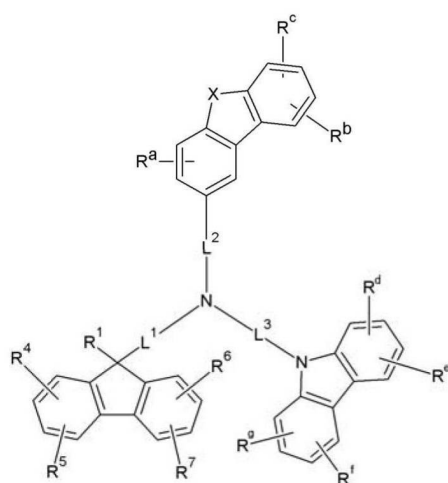
【化 3 - 2】

【化学式 11】



10

【化学式 12】



20

30

前記化学式 4 ～ 8、11 および 12 中、

X、X¹ および X² は、それぞれ独立して、O または S であり、

L¹ ～ L³ は、それぞれ独立して、単結合、非置換のフェニレン基、非置換のビフェニレン基、または非置換のナフチレン基であり、

R¹ は、非置換の C1 ～ C30 アルキル基または非置換の C6 ～ C30 アリール基であり、

R² は、置換もしくは非置換の C6 ～ C30 アリール基または置換もしくは非置換の C2 ～ C30 ヘテロ環基であり、

R⁴ ～ R⁷、R^a ～ R^g、および R^{a'} ～ R^{c'} は、それぞれ独立して、水素、重水素、置換もしくは非置換の C1 ～ C30 アルキル基または置換もしくは非置換の C6 ～ C30 アリール基である。

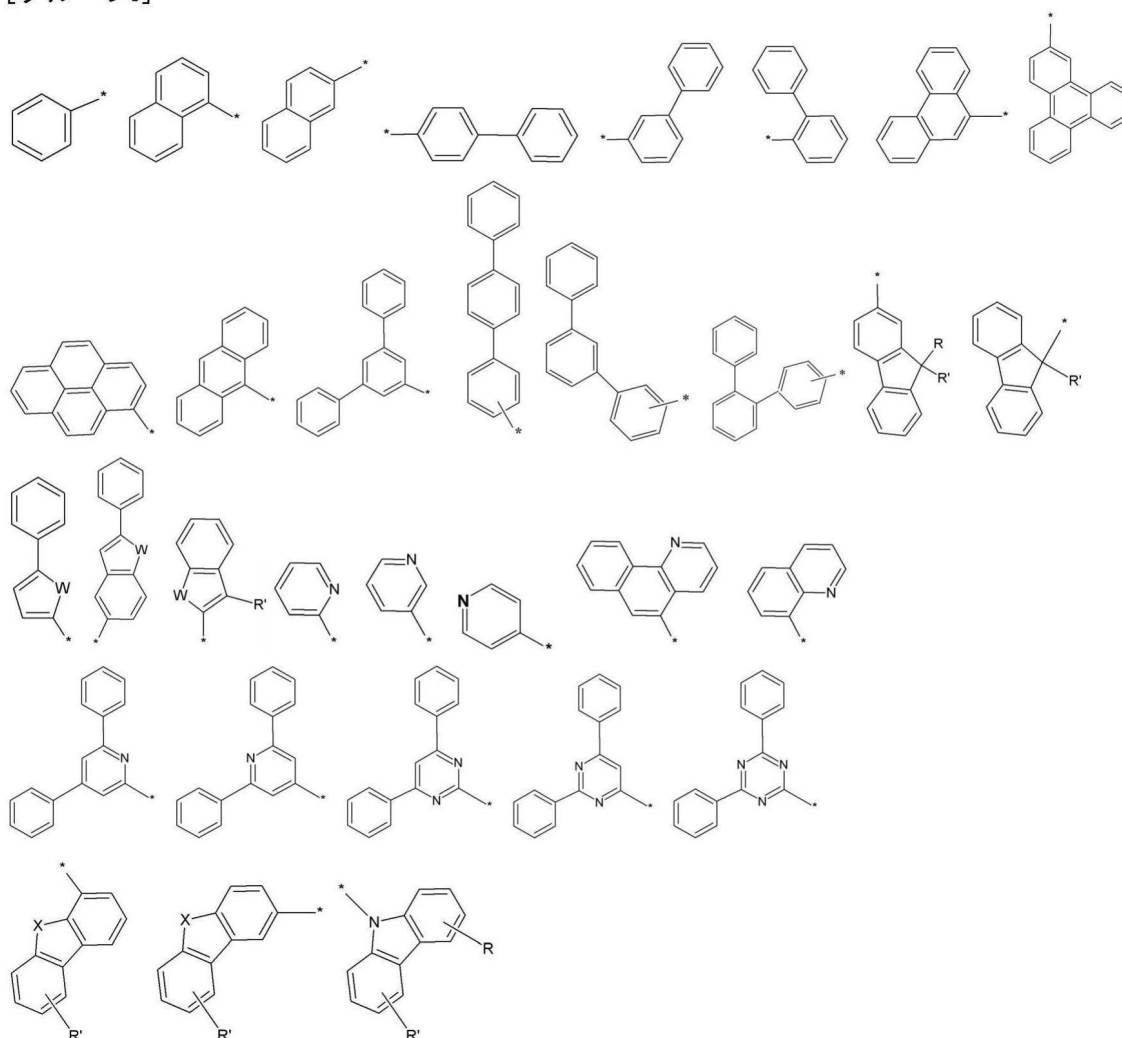
40

【請求項 3】

前記 R² および R³ は、それぞれ独立して、下記グループ I に羅列された置換もしくは非置換の基から選択され、

R² および R³ のうちの少なくとも一つは、下記グループ I-1 に羅列された置換もしくは非置換の基から選択された一つである、請求項 1 に記載の化合物：

【化 4 - 1】
[グループI]

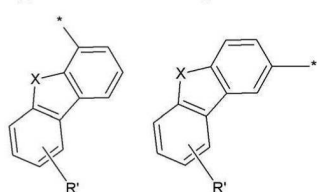


10

20

30

【化 4 - 2】
[グループI-1]



前記グループ I および I - 1 中、
X および W は、それぞれ独立して、O または S であり、
R および R' は、それぞれ独立して、水素、重水素、置換もしくは非置換の C 1 ~ C 3
0 アルキル基または置換もしくは非置換の C 6 ~ C 30 アリール基であり、
* は、連結地点である。

40

【請求項 4】

前記 R¹ は、メチル基、エチル基、非置換のフェニル基、非置換のビフェニル基、または非置換のナフチル基である、請求項 1 に記載の化合物。

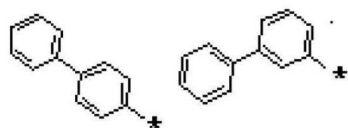
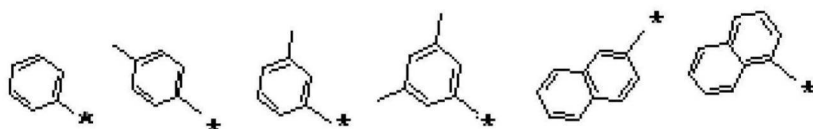
【請求項 5】

前記 R¹ は、メチル基、エチル基、または下記グループ I I に羅列された基から選択された一つである、請求項 1 に記載の化合物：

50

【化 5】

[グループII]



10

前記グループ I I 中、*は、連結地点である。

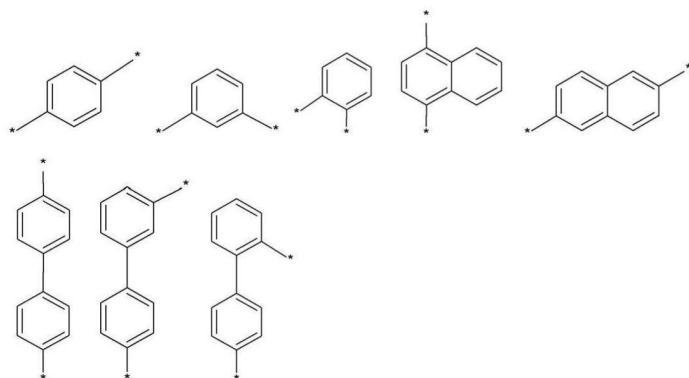
【請求項 6】

前記 $L^1 \sim L^3$ は、それぞれ独立して、単結合、または下記グループ I I I に羅列された置換もしくは非置換の基から選択された一つである、請求項 1 に記載の化合物：

【化 6】

20

[グループIII]



30

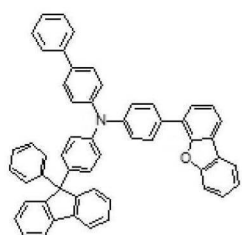
前記グループ I I I 中、*は、連結地点である。

【請求項 7】

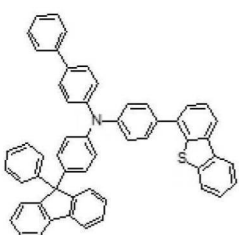
前記化学式 1 で表される化合物は、下記の化学式 A-5 ~ A-32、A-49 ~ A-76、A-137 ~ A-164、および B-1 ~ B-24 から選択された一つである、請求項 1 に記載の化合物。

【化 7 - 1】

[A-5]



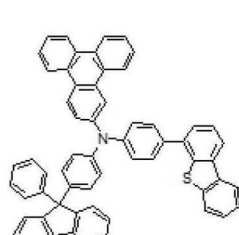
[A-6]



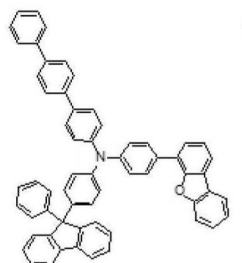
[A-7]



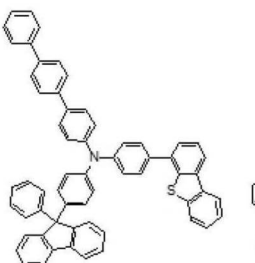
[A-8]



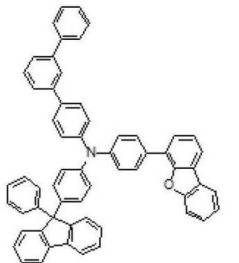
[A-9]



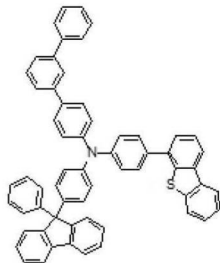
[A-10]



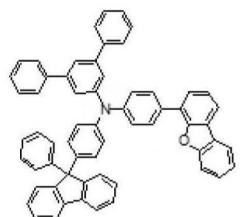
[A-11]



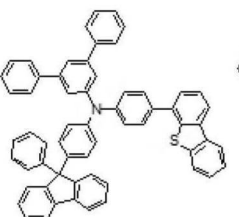
[A-12]



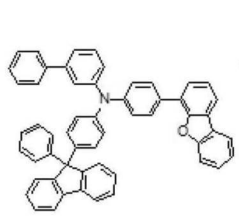
[A-13]



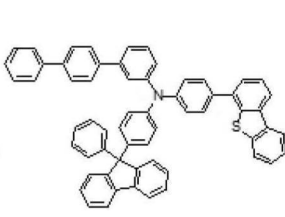
[A-14]



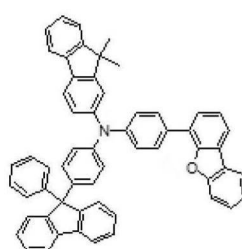
[A-15]



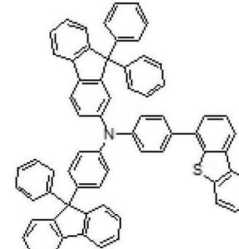
[A-16]



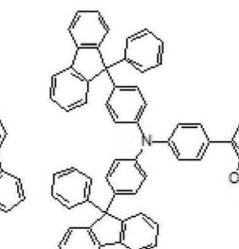
[A-17]



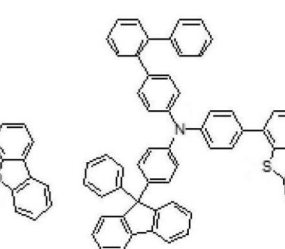
[A-18]



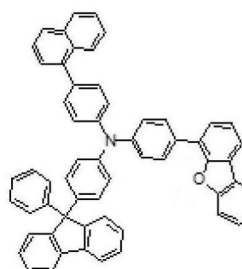
[A-19]



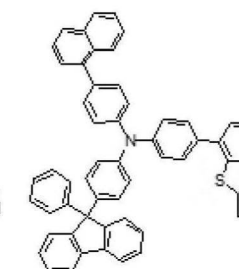
[A-20]



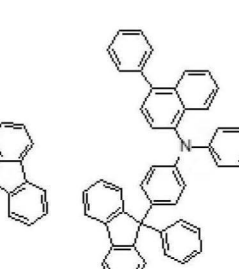
[A-21]



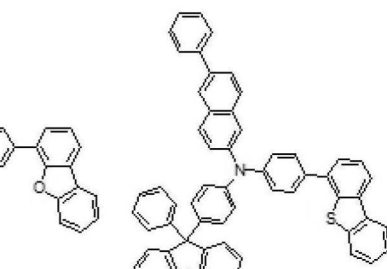
[A-22]



[A-23]



[A-24]



10

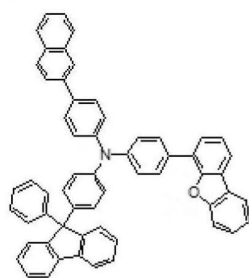
20

30

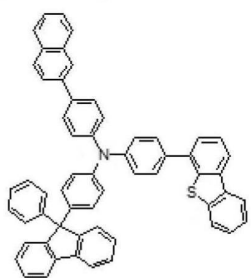
40

【化 7 - 2】

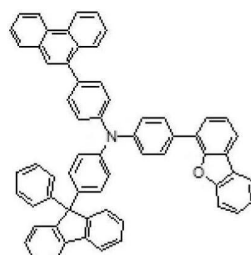
[A-25]



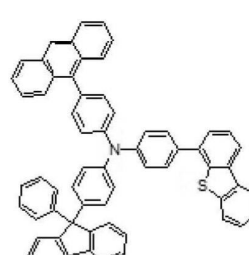
[A-26]



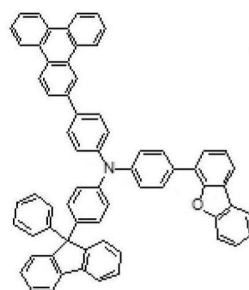
[A-27]



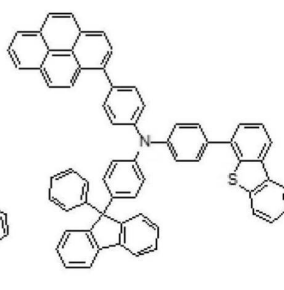
[A-28]



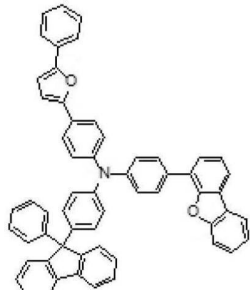
[A-29]



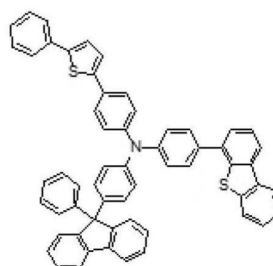
[A-30]



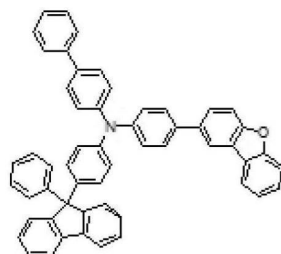
[A-31]



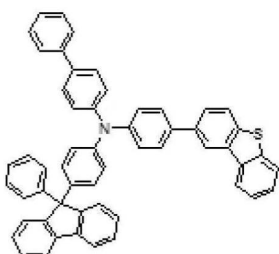
[A-32]



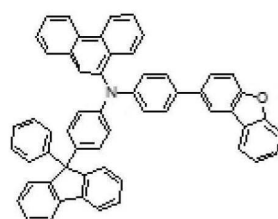
[A-49]



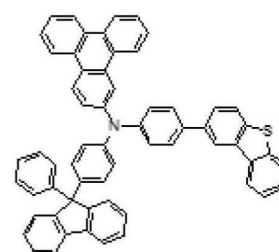
[A-50]



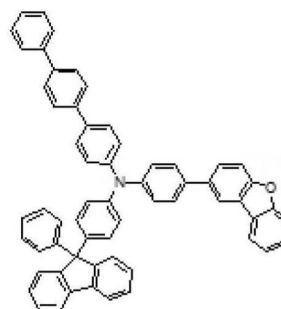
[A-51]



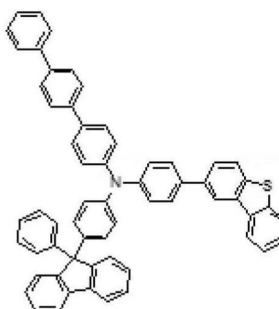
[A-52]



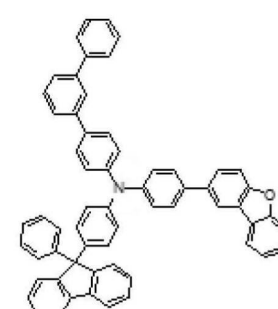
[A-53]



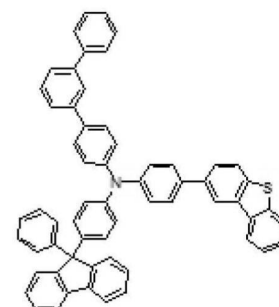
[A-54]



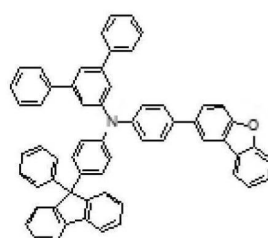
[A-55]



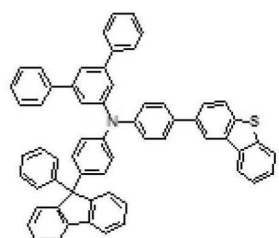
[A-56]



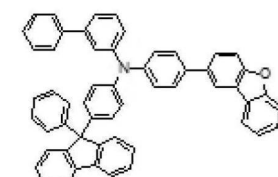
[A-57]



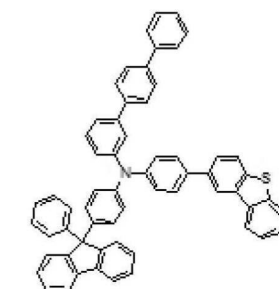
[A-58]



[A-59]



[A-60]



10

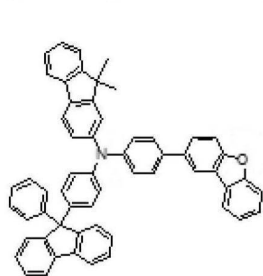
20

30

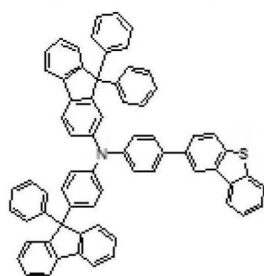
40

【化 7 - 3】

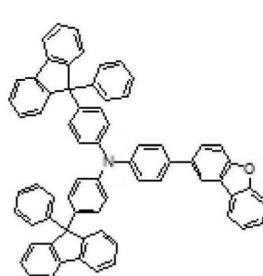
[A-61]



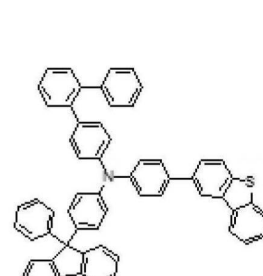
[A-62]



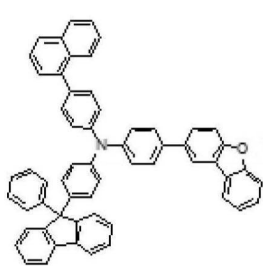
[A-63]



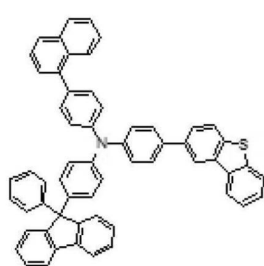
[A-64]



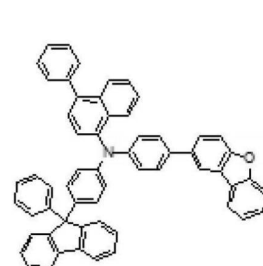
[A-65]



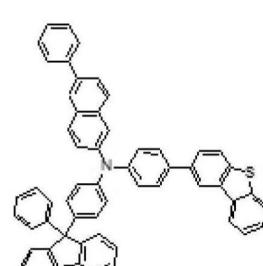
[A-66]



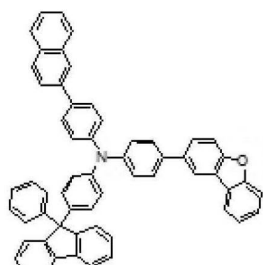
[A-67]



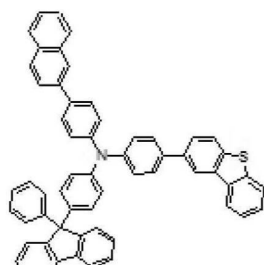
[A-68]



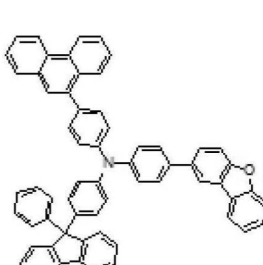
[A-69]



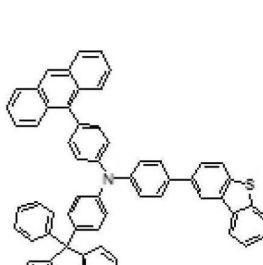
[A-70]



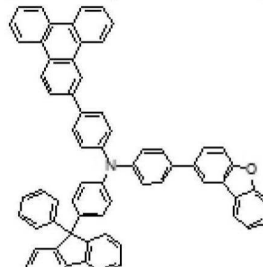
[A-71]



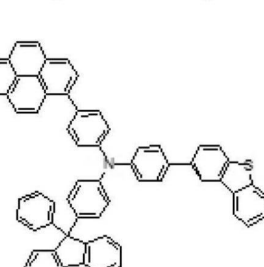
[A-72]



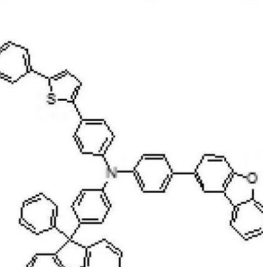
[A-73]



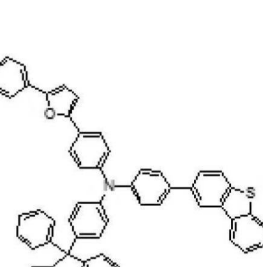
[A-74]



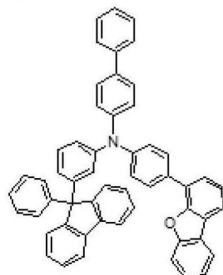
[A-75]



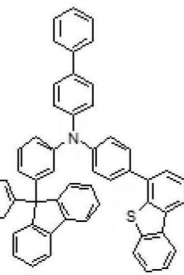
[A-76]



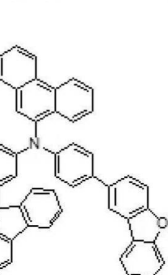
[A-137]



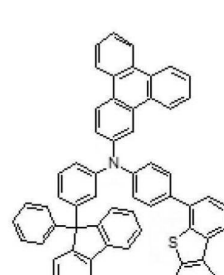
[A-138]



[A-139]



[A-140]



10

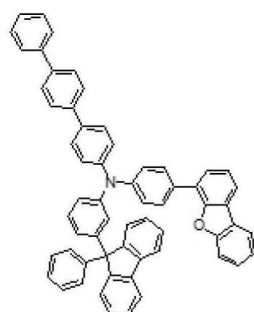
20

30

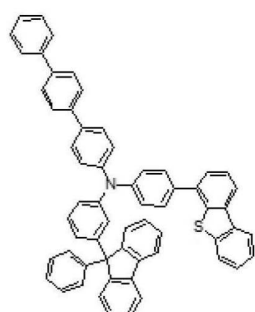
40

【化 7 - 4】

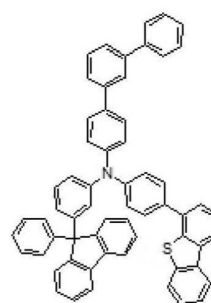
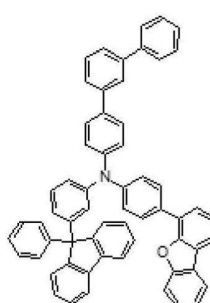
[A-141]



[A-142]

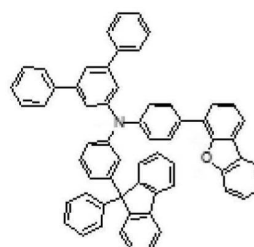


[A-143] [A-144]

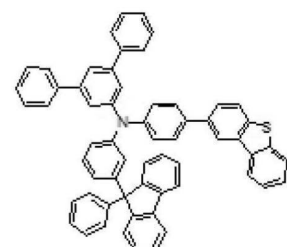


10

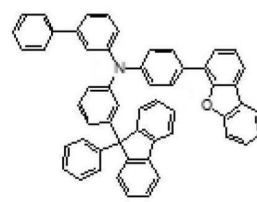
[A-145]



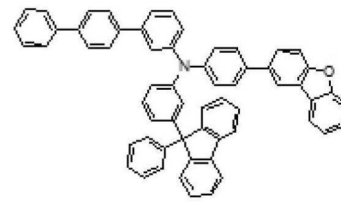
[A-146]



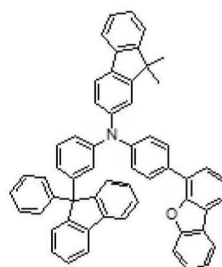
[A-147]



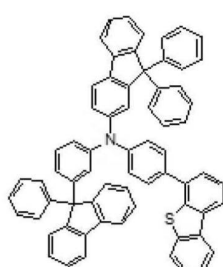
[A-148]



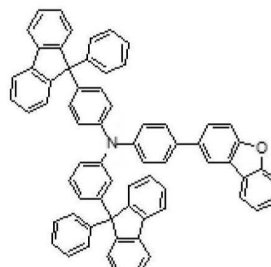
[A-149]



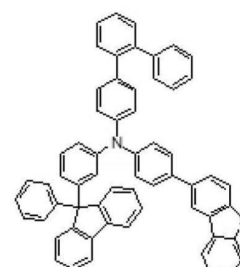
[A-150]



[A-151]

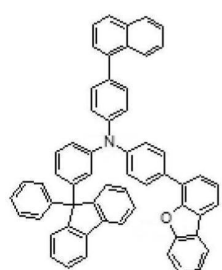


[A-152]

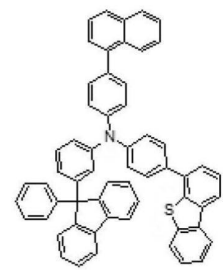


20

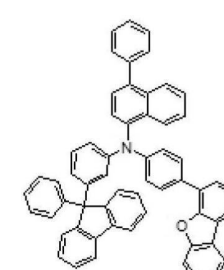
[A-153]



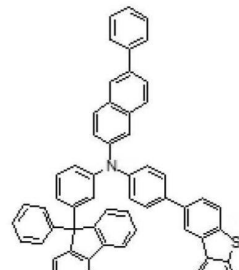
[A-154]



[A-155]

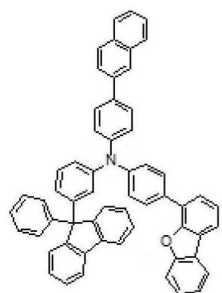


[A-156]

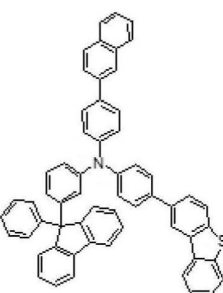


30

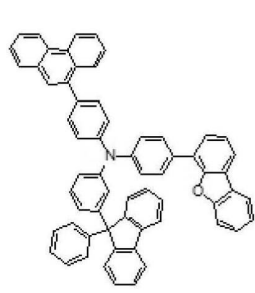
[A-157]



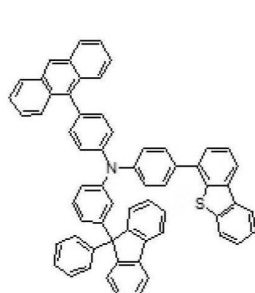
[A-158]



[A-159]



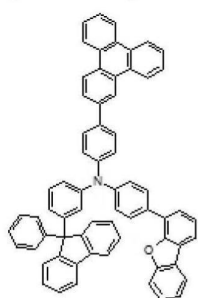
[A-160]



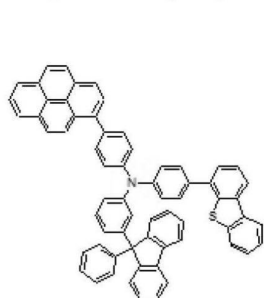
40

【化 7 - 5】

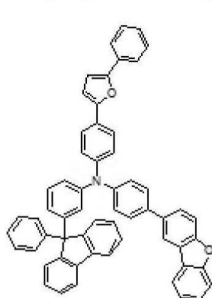
[A-161]



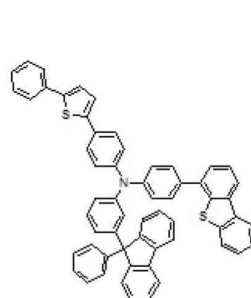
[A-162]



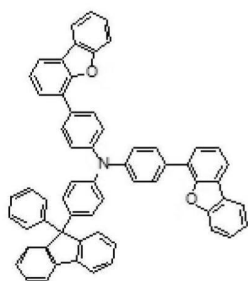
[A-163]



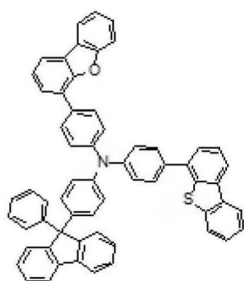
[A-164]



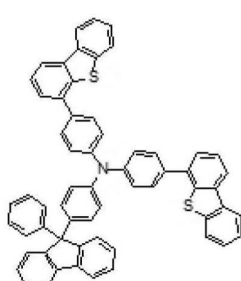
[B-1]



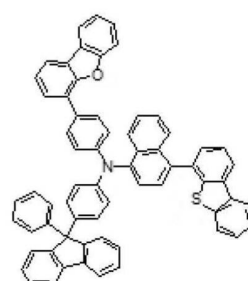
[B-2]



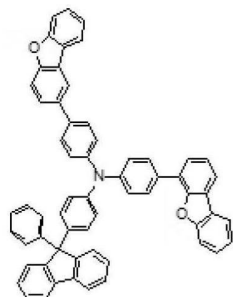
[B-3]



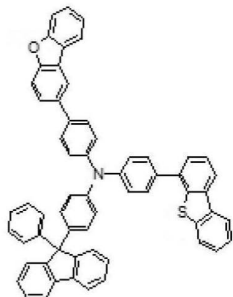
[B-4]



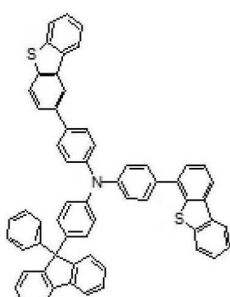
[B-5]



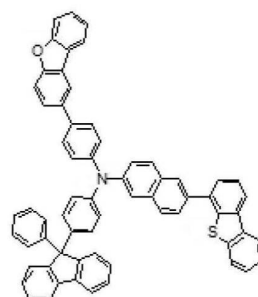
[B-6]



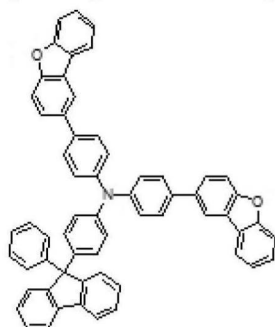
[B-7]



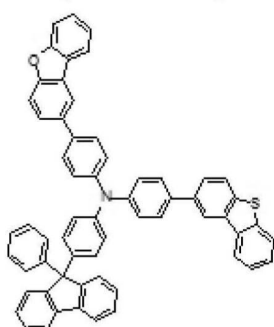
[B-8]



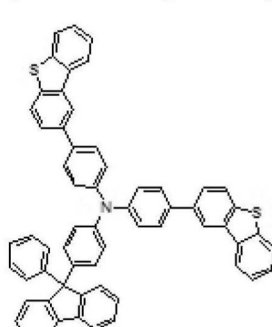
[B-9]



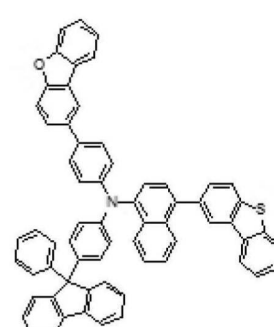
[B-10]



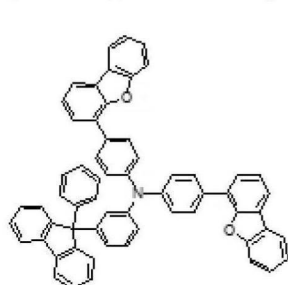
[B-11]



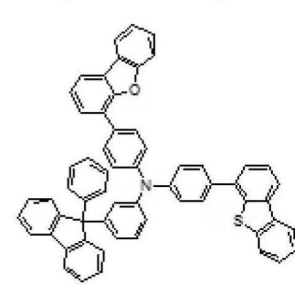
[B-12]



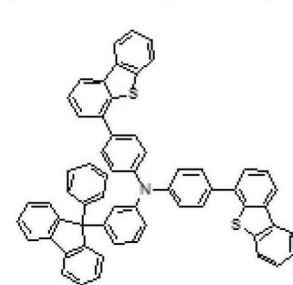
[B-13]



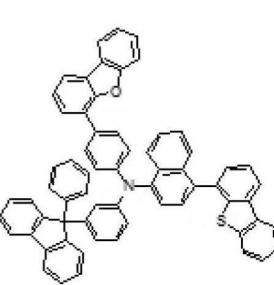
[B-14]



[B-15]



[B-16]



10

20

30

40

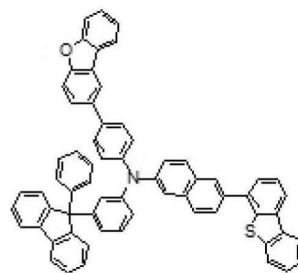
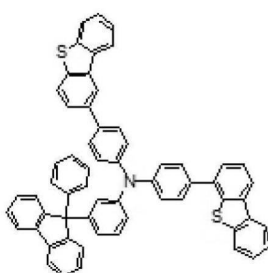
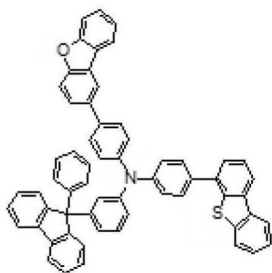
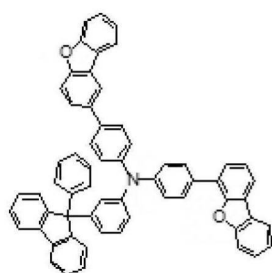
【化 7 - 6】

[B-17]

[B-18]

[B-19]

[B-20]



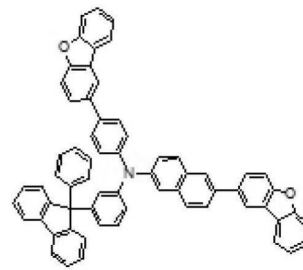
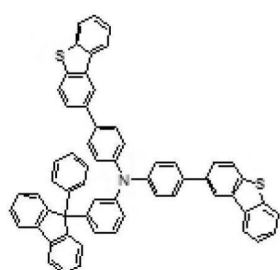
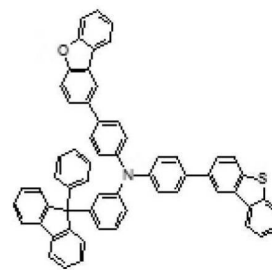
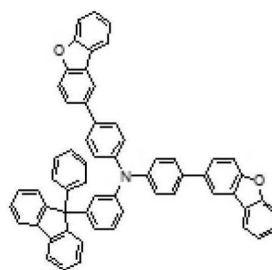
10

[B-21]

[B-22]

[B-23]

[B-24]



【請求項 8】

20

前記化学式 1 で表される化合物は、下記の化学式 D-1 ~ D-8 および D-17 ~ D-24 から選択された一つである、請求項 1 に記載の化合物。

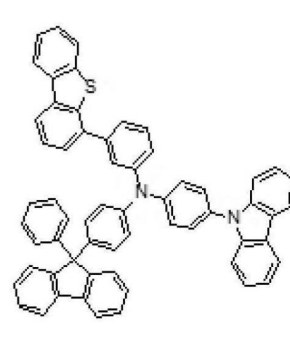
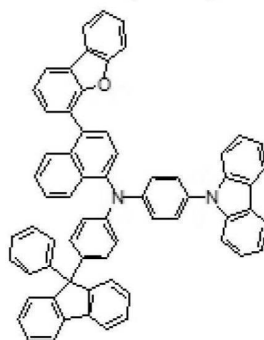
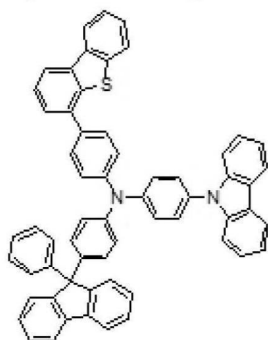
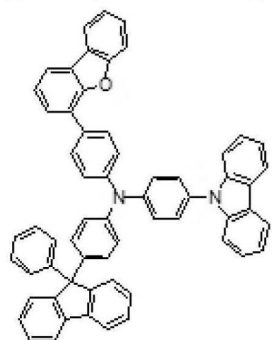
【化 8 - 1】

[D-1]

[D-2]

[D-3]

[D-4]



30

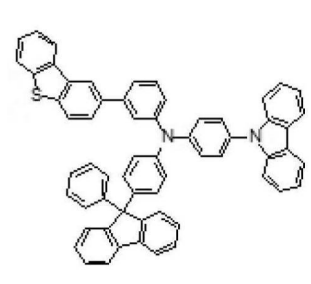
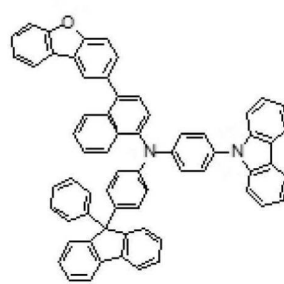
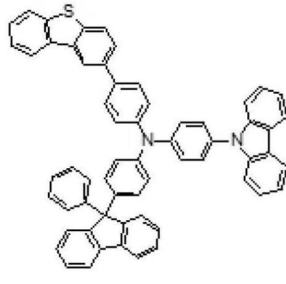
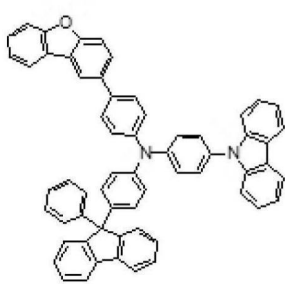
【化 8 - 2】

[D-5]

[D-6]

[D-7]

[D-8]



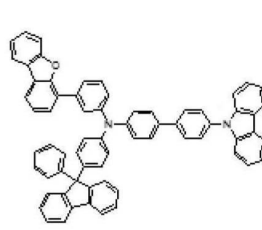
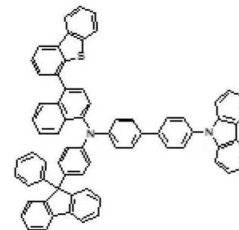
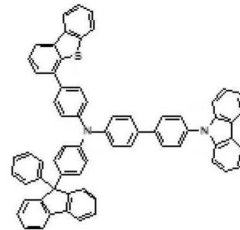
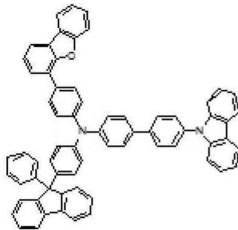
10

[D-17]

[D-18]

[D-19]

[D-20]

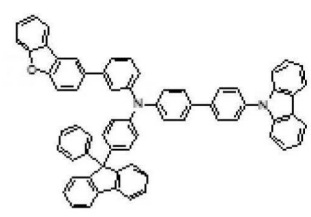
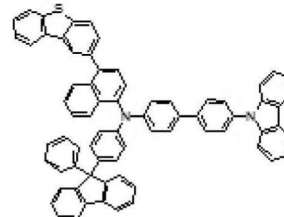
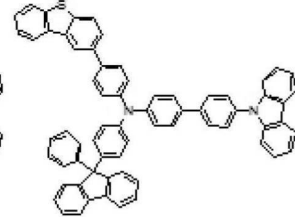
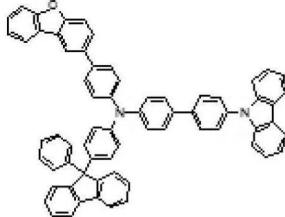


[D-21]

[D-22]

[D-23]

[D-24]



20

【請求項 9】

請求項 1 ～ 8 のいずれか一項に記載の化合物は、有機光電子素子用である化合物。

【発明の詳細な説明】

【技術分野】

【0001】

本発明は、化合物、有機光電子素子および表示装置に関する。

【背景技術】

【0002】

有機光電子素子 (organic optoelectric diode) とは、電気エネルギーと光エネルギーとを相互変換することができる素子である。

【0003】

有機光電子素子は、動作原理に応じて大きく 2 種類に分けることができる。一つは、光エネルギーにより形成されたエキシトン (exciton) が電子と正孔に分離され、前記電子と正孔がそれぞれ異なる電極に伝達されて電気エネルギーを発生する光電素子であり、他の一つは、電極に電圧または電流を供給して電気エネルギーから光エネルギーを発生する発光素子である。

40

【0004】

有機光電子素子の例としては、有機光電素子、有機発光素子、有機太陽電池および有機感光体ドラム (organic photo conductor drum) などが挙げられる。

【0005】

このうち、有機発光素子 (organic light emitting diode、OLED) は、近年、平板表示装置 (flat panel display device) の需要増加に伴って大きく注目されている。前記有機発光素子は、有機発光材料に電流を加えて電気エネルギーを光に変換させる素子であって、通常、陽極 (anod

50

e)と陰極(cathode)との間に有機層が挿入された構造からなる。ここで有機層は、発光層と選択的に補助層を含むことができ、前記補助層は、例えば有機発光素子の効率と安全性を高めるための正孔注入層、正孔輸送層、電子遮断層、電子輸送層、電子注入層および正孔遮断層から選択された少なくとも1層を含むことができる。

【0006】

有機発光素子の性能は、前記有機層の特性により影響を多く受け、その中でも前記有機層に含まれている有機材料により影響を多く受けている。

【0007】

特に、前記有機発光素子が大型の平板表示装置に適用されるためには、正孔および電子の移動性を高めると同時に、電気化学的安全性を高めることができる有機材料の開発が必要である。

10

【発明の概要】

【発明が解決しようとする課題】

【0008】

本発明の目的は、高効率、長寿命などの特性を有する有機光電子素子を提供することができる化合物を提供することにある。

【0009】

本発明の他の目的は、前記化合物を含む有機光電子素子および前記有機光電子素子を含む表示装置を提供することにある。

【課題を解決するための手段】

20

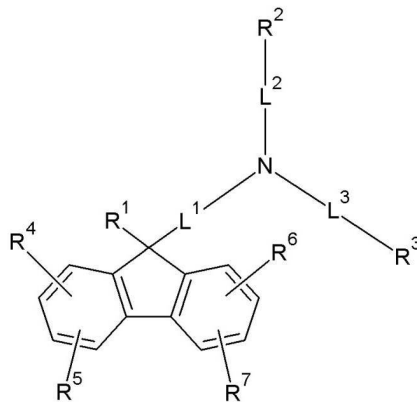
【0010】

本発明の一実施形態では、下記の化学式1で表される化合物を提供する。

【0011】

【化1】

【化学式1】



30

【0012】

$L^1 \sim L^3$ は、それぞれ独立して、単結合、置換もしくは非置換のC1～C30アルキレン基、置換もしくは非置換のC3～C30シクロアルキレン基、置換もしくは非置換のC6～C30アリーレン基、置換もしくは非置換のC2～C30ヘテロアリーレン基、置換もしくは非置換のC6～C30アリーレンアミン基、置換もしくは非置換のC1～C30アルコキシレン基、置換もしくは非置換のC1～C30アリールオキシレン基、置換もしくは非置換のC2～C30アルケニレン基、置換もしくは非置換のC2～C30アルキニレン基、またはこれらの組み合わせであり、

40

$R^1 \sim R^7$ は、それぞれ独立して、水素、重水素、置換もしくは非置換のC1～C30アルキル基、置換もしくは非置換のC3～C30シクロアルキル基、置換もしくは非置換のC2～C30ヘテロ環基、置換もしくは非置換のC6～C30アリール基、置換もしくは非置換のC6～C30アリールアミン基、置換もしくは非置換のC1～C30アルコキシ基、置換もしくは非置換のC2～C30アルコキシカルボニル基、置換もしくは非置換のC2～C30アルコキシカルボニルアミノ基、置換もしくは非置換のC7～C30アリ

50

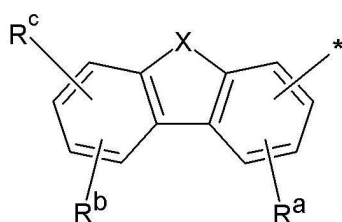
ールオキシカルボニルアミノ基、置換もしくは非置換のC 1～C 30スルファモイルアミノ基、置換もしくは非置換のC 2～C 30アルケニル基、置換もしくは非置換のC 2～C 30アルキニル基、置換もしくは非置換のC 3～C 40シリル基、置換もしくは非置換のC 3～C 40シリルオキシ基、置換もしくは非置換のC 1～C 30アシル基、置換もしくは非置換のC 1～C 20アシルオキシ基、置換もしくは非置換のC 1～C 20アシルアミノ基、置換もしくは非置換のC 1～C 30スルホニル基、置換もしくは非置換のC 1～C 30アルキルチオール基、置換もしくは非置換のC 6～C 30アリールチオール基、置換もしくは非置換のC 1～C 30ウレイド基、ハロゲン基、ハロゲン含有基、シアノ基、ヒドロキシ基、アミノ基、ニトロ基、カルボキシ基、フェロセニル基、またはこれらの組み合わせであり、

R²およびR³のうちの少なくとも一つは、下記の化学式2または下記の化学式3で表される。

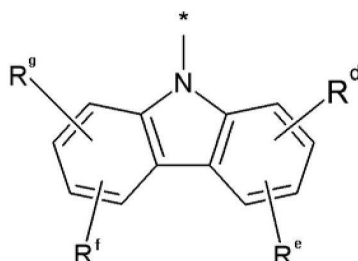
【0013】

【化2】

〔化学式2〕



〔化学式3〕



【0014】

前記化学式2および3中、

*は、連結地点であり、

Xは、OまたはSであり、

R^a～R^gは、それぞれ独立して、水素、重水素、置換もしくは非置換のC 1～C 30アルキル基、置換もしくは非置換のC 3～C 30シクロアルキル基、置換もしくは非置換のC 2～C 30ヘテロ環基、置換もしくは非置換のC 6～C 30アリール基、置換もしくは非置換のC 6～C 30アリールアミン基、置換もしくは非置換のC 1～C 30アルコキシ基、置換もしくは非置換のC 2～C 30アルコキシカルボニル基、置換もしくは非置換のC 2～C 30アルコキシカルボニルアミノ基、置換もしくは非置換のC 7～C 30アリールオキシカルボニルアミノ基、置換もしくは非置換のC 1～C 30スルファモイルアミノ基、置換もしくは非置換のC 2～C 30アルケニル基、置換もしくは非置換のC 2～C 30アルキニル基、置換もしくは非置換のC 3～C 40シリル基、置換もしくは非置換のC 3～C 40シリルオキシ基、置換もしくは非置換のC 1～C 30アシル基、置換もしくは非置換のC 1～C 20アシルオキシ基、置換もしくは非置換のC 1～C 20アシルアミノ基、置換もしくは非置換のC 1～C 30スルホニル基、置換もしくは非置換のC 1～C 30アルキルチオール基、置換もしくは非置換のC 6～C 30アリールチオール基、置換もしくは非置換のC 1～C 30ウレイド基、ハロゲン基、ハロゲン含有基、シアノ基、ヒドロキシ基、アミノ基、ニトロ基、カルボキシ基、フェロセニル基、またはこれらの組み合わせである。

【0015】

本発明の一実施形態に係る化合物は、有機光電子素子用であってもよい。

【0016】

本発明の他の一実施形態では、互いに向き合う陽極および陰極と、前記陽極と前記陰極との間に位置する少なくとも一層の有機層と、を含み、前記有機層は、発光層と、正孔注入層、正孔輸送層、電子遮断層、電子輸送層、電子注入層および正孔遮断層から選択された少なくとも一つの補助層と、を含み、前記補助層は、前記化合物を含む有機光電子素子を提供する。

【0017】

本発明のまた他の一実施形態では、前述した有機光電子素子を含む表示装置を提供する。

10

【発明の効果】

【0018】

本発明によれば、高効率および長寿命の有機光電子素子を実現することができる。

【図面の簡単な説明】

【0019】

【図1】本発明の一実施形態に係る有機発光素子に対する多様な実施形態を示す断面図である。

【図2】本発明の一実施形態に係る有機発光素子に対する多様な実施形態を示す断面図である。

【図3】本発明の一実施形態に係る化合物のPL波長測定結果を示すグラフである。

20

【発明を実施するための形態】

【0020】

以下、本発明の実施形態を詳細に説明する。ただし、これは例示として提示されるものであり、本発明は、これによって制限されず、特許請求の範囲の範疇のみによって定義される。

【0021】

本明細書で「置換」とは、別途の定義がない限り、置換基または化合物のうちの少なくとも一つの水素が重水素、ハロゲン基、ヒドロキシ基、アミノ基、置換もしくは非置換のC1～C30アミン基、ニトロ基、置換もしくは非置換のC1～C40シリル基、C1～C30アルキル基、C1～C10アルキルシリル基、C3～C30シクロアルキル基、C6～C30アリール基、C1～C20アルコキシ基、フルオロ基、トリフルオロメチル基などのC1～C10トリフルオロアルキル基またはシアノ基で置換されたことを意味する。

30

【0022】

本明細書で「ヘテロ」とは、別途の定義がない限り、一つの作用基内にN、O、S、PおよびSiからなる群より選択されるヘテロ原子を1～3個含有し、残りは炭素であるものを意味する。

【0023】

本明細書で「アルキル(alkyl)基」とは、別途の定義がない限り、脂肪族炭化水素基を意味する。アルキル基は、いかなる二重結合や三重結合を含んでいない「飽和アルキル(saturated alkyl)基」であってもよい。

40

【0024】

前記アルキル基は、C1～C20であるアルキル基であってもよい。より具体的に、アルキル基は、C1～C10アルキル基またはC1～C6アルキル基であってもよい。例えば、C1～C4アルキル基は、アルキル鎖に1～4個の炭素原子が含まれるものを意味し、メチル、エチル、プロピル、イソプロピル、n-ブチル、イソブチル、sec-ブチルおよびt-ブチルからなる群より選択されるものを示す。

【0025】

前記アルキル基は、具体的な例を挙げると、メチル基、エチル基、プロピル基、イソプロピル基、ブチル基、イソブチル基、t-ブチル基、ペンチル基、ヘキシル基、シクロブ

50

ロピル基、シクロブチル基、シクロペンチル基、シクロヘキシル基などを意味する。

【0026】

本明細書で「アリール (a r y l) 基」とは、環状である置換基のすべての元素が p 軌道を有しており、これらの p 軌道が共役 (c o n j u g a t i o n) を形成している置換基を意味し、モノサイクリックまたは融合環ポリサイクリック (つまり、炭素原子の隣接した対を共有する環) 作用基を含む。

【0027】

本明細書で「ヘテロ環基 (h e t e r o c y c l i c g r o u p)」とは、アリール基、シクロアルキル基、これらの融合環またはこれらの組み合わせのような環化合物内に N、O、S、P および S i からなる群より選択されるヘテロ原子を少なくとも一つを含有し、残りは炭素であるものを意味する。前記ヘテロ環基が融合環である場合、前記ヘテロ環基全体またはそれぞれの環ごとにヘテロ原子を 1 個以上含むことができる。したがって、ヘテロ環基は、ヘテロアリール基を包括する上位概念である。

【0028】

より具体的に、置換もしくは非置換の C 6 ~ C 3 0 アリール基および／または置換もしくは非置換の C 2 ~ C 3 0 ヘテロ環基は、置換もしくは非置換のフェニル基、置換もしくは非置換のナフチル基、置換もしくは非置換のアントラセニル基、置換もしくは非置換のフェナントリレン基、置換もしくは非置換のナフタセニル基、置換もしくは非置換のピレニル基、置換もしくは非置換のビフェニル基、置換もしくは非置換の p -ターフェニル基、置換もしくは非置換の m -ターフェニル基、置換もしくは非置換のクリセニル基、置換もしくは非置換のトリフェニレニル基、置換もしくは非置換のペリレニル基、置換もしくは非置換のインデニル基、置換もしくは非置換のフラニル基、置換もしくは非置換のチオフェニル基、置換もしくは非置換のピロリル基、置換もしくは非置換のピラゾリル基、置換もしくは非置換のイミダゾリル基、置換もしくは非置換のトリアゾリル基、置換もしくは非置換のオキサゾリル基、置換もしくは非置換のチアゾリル基、置換もしくは非置換のオキサジアゾリル基、置換もしくは非置換のチアジアゾリル基、置換もしくは非置換のピリジル基、置換もしくは非置換のピリミジニル基、置換もしくは非置換のピラジニル基、置換もしくは非置換のトリアジニル基、置換もしくは非置換のベンゾフラニル基、置換もしくは非置換のベンゾチオフェニル基、置換もしくは非置換のベンズイミダゾリル基、置換もしくは非置換のインドリル基、置換もしくは非置換のキノリニル基、置換もしくは非置換のイソキノリニル基、置換もしくは非置換のキナゾリニル基、置換もしくは非置換のキノキサリニル基、置換もしくは非置換のナフチリジニル基、置換もしくは非置換のベンズオキサジニル基、置換もしくは非置換のベンズチアジニル基、置換もしくは非置換のアクリジニル基、置換もしくは非置換のフェナジニル基、置換もしくは非置換のフェノチアジニル基、置換もしくは非置換のフェノキサジニル基、置換もしくは非置換のフルオレニル基、置換もしくは非置換のカルバゾリル基、置換もしくは非置換のジベンゾフラニル基、置換もしくは非置換のジベンゾチオフェニル基、これらの組み合わせまたはこれらの組み合わせが融合された形態であってもよいが、これに制限されない。

【0029】

本明細書で、単結合とは、炭素または炭素以外のヘテロ原子を経由せずに直接連結される結合を意味するものであり、具体的に、L が単結合であるという意味は、L と連結される置換基が中心コアに直接連結されることを意味する。つまり、本明細書で「単結合」とは、炭素を経由するメチレンなどを意味するものではない。

【0030】

本明細書で、正孔特性とは、電場 (e l e c t r i c f i e l d) を加えた時、電子を供与して正孔を形成することができる特性をいい、HOMO 準位に応じて伝導特性を有して陽極で形成された正孔の発光層への注入、発光層で形成された正孔の陽極への移動および発光層での移動を容易にする特性を意味する。

【0031】

また電子特性とは、電場を加えた時、電子を受けることができる特性をいい、LUMO

10

20

30

40

50

準位に応じて伝導特性を有して陰極で形成された電子の発光層への注入、発光層で形成された電子の陰極への移動および発光層での移動を容易にする特性を意味する。

【0032】

以下、本発明の一実施形態に係る化合物を説明する。

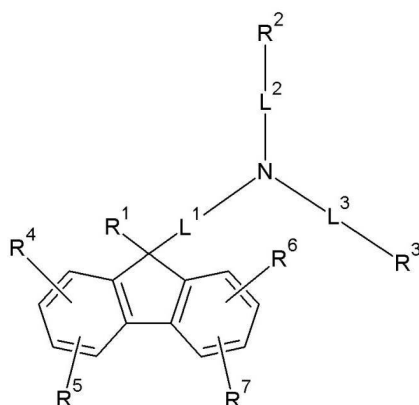
【0033】

本発明の一実施形態では、下記の化学式1で表される化合物を提供することができる。

【0034】

【化3】

[化学式1]



【0035】

前記化学式1中、

$L^1 \sim L^3$ は、それぞれ独立して、単結合、置換もしくは非置換のC1～C30アルキレン基、置換もしくは非置換のC3～C30シクロアルキレン基、置換もしくは非置換のC6～C30アリーレン基、置換もしくは非置換のC2～C30ヘテロアリーレン基、置換もしくは非置換のC6～C30アリーレンアミン基、置換もしくは非置換のC1～C30アルコキシレン基、置換もしくは非置換のC1～C30アリアルオキシレン基、置換もしくは非置換のC2～C30アルケニレン基、置換もしくは非置換のC2～C30アルキニレン基、またはこれらの組み合わせであり、

$R^1 \sim R^7$ は、それぞれ独立して、水素、重水素、置換もしくは非置換のC1～C30アルキル基、置換もしくは非置換のC3～C30シクロアルキル基、置換もしくは非置換のC2～C30ヘテロ環基、置換もしくは非置換のC6～C30アリアル基、置換もしくは非置換のC6～C30アリアルアミン基、置換もしくは非置換のC1～C30アルコキシ基、置換もしくは非置換のC2～C30アルコキシカルボニル基、置換もしくは非置換のC2～C30アルコキシカルボニルアミノ基、置換もしくは非置換のC7～C30アリアルオキシカルボニルアミノ基、置換もしくは非置換のC1～C30スルファモイルアミノ基、置換もしくは非置換のC2～C30アルケニル基、置換もしくは非置換のC2～C30アルキニル基、置換もしくは非置換のC3～C40シリル基、置換もしくは非置換のC3～C40シリルオキシ基、置換もしくは非置換のC1～C30アシル基、置換もしくは非置換のC1～C20アシルオキシ基、置換もしくは非置換のC1～C20アシルアミノ基、置換もしくは非置換のC1～C30スルホニル基、置換もしくは非置換のC1～C30アルキルチオール基、置換もしくは非置換のC6～C30アリアルチオール基、置換もしくは非置換のC1～C30ウレイド基、ハロゲン基、ハロゲン含有基、シアノ基、ヒドロキシ基、アミノ基、ニトロ基、カルボキシ基、フェロセニル基、またはこれらの組み合わせであり、

R^2 および R^3 のうちの少なくとも一つは、下記の化学式2または下記の化学式3で表される。

【0036】

10

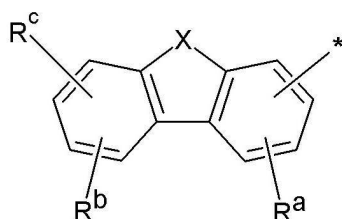
20

30

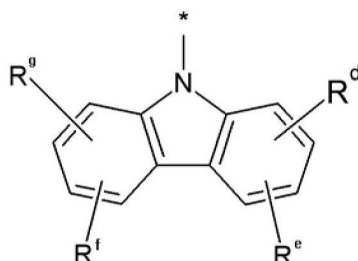
40

【化 4】

[化学式2]



[化学式3]



【0037】

前記化学式2および3中、

＊は、連結地点であり、

Xは、OまたはSであり、

R^a～R^gは、それぞれ独立して、水素、重水素、置換もしくは非置換のC1～C30アルキル基、置換もしくは非置換のC3～C30シクロアルキル基、置換もしくは非置換のC2～C30ヘテロ環基、置換もしくは非置換のC6～C30アリール基、置換もしくは非置換のC6～C30アリールアミン基、置換もしくは非置換のC1～C30アルコキシ基、置換もしくは非置換のC2～C30アルコキシカルボニル基、置換もしくは非置換のC2～C30アルコキシカルボニルアミノ基、置換もしくは非置換のC7～C30アリールオキシカルボニルアミノ基、置換もしくは非置換のC1～C30スルファモイルアミノ基、置換もしくは非置換のC2～C30アルケニル基、置換もしくは非置換のC2～C30アルキニル基、置換もしくは非置換のC3～C40シリル基、置換もしくは非置換のC3～C40シリルオキシ基、置換もしくは非置換のC1～C30アシル基、置換もしくは非置換のC1～C20アシルオキシ基、置換もしくは非置換のC1～C20アシルアミノ基、置換もしくは非置換のC1～C30スルホニル基、置換もしくは非置換のC1～C30アルキルチオール基、置換もしくは非置換のC6～C30アリールチオール基、置換もしくは非置換のC1～C30ウレイド基、ハロゲン基、ハロゲン含有基、シアノ基、ヒドロキシ基、アミノ基、ニトロ基、カルボキシ基、フェロセニル基、またはこれらの組み合わせである。

【0038】

前記本発明の一実施形態に係る化合物は、R²およびR³のうちの少なくとも一つが前記化学式2または化学式3で表されることによって、分子の正孔輸送性を増加させて有機光電子素子の正孔輸送層および正孔輸送性の発光ホストとして適用する場合、優れた効率を示すことができる。

【0039】

特に、R²およびR³のすべてがアリール基である化合物に比べて正孔輸送性を向上させながらガラス化転移温度を増加させて有機光電子素子に薄膜適用する場合、熱的安定性が向上して長寿命、高効率特性を示すことができ、R²およびR³のうちの少なくとも一つがフルオレニル基である化合物に比べて熱分解に対する耐熱安定性に優れ、真空加熱蒸着法により薄膜形成する場合、より向上した加工性と素子安定性とを確保することができる。

【0040】

これによって、前記化合物を適用した有機光電子素子の高効率、長寿命の長所および低

10

20

30

40

50

電圧で駆動可能な特性を調節することができる。

【0041】

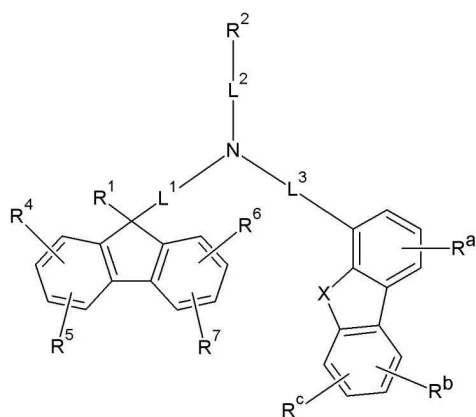
前記化学式1は、具体的に、下記の化学式4～12のうちのいずれか一つで表されてもよい。

【0042】

【化5-1】

【化学式4】

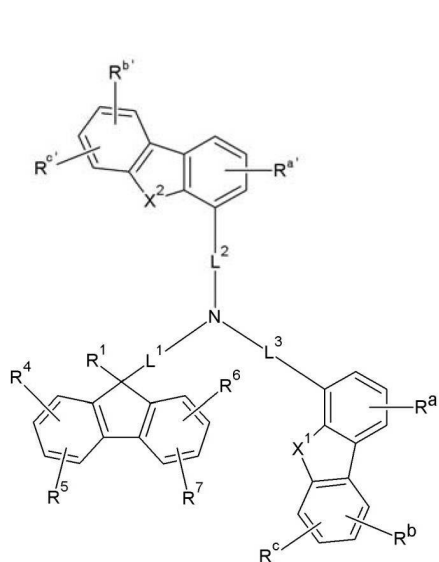
【化学式5】



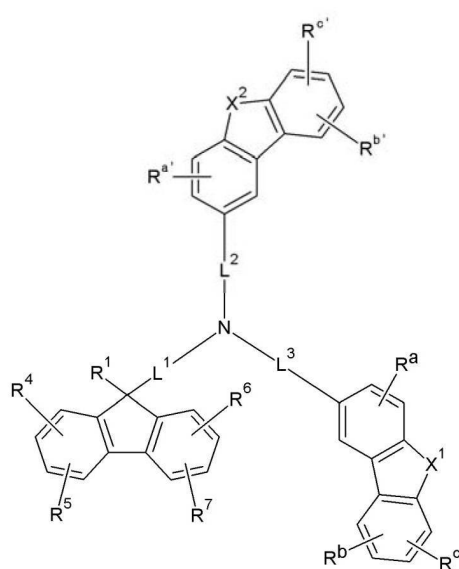
10

【化学式6】

【化学式7】



20



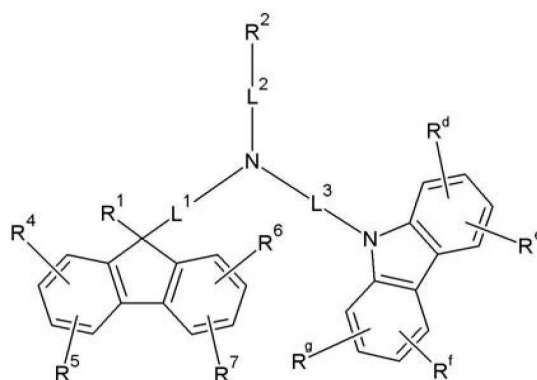
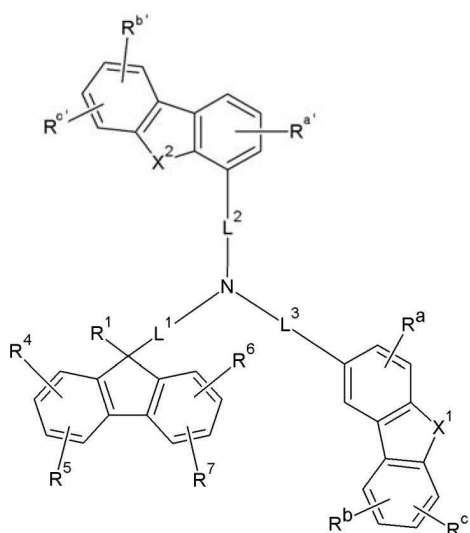
30

【0043】

【化 5 - 2】

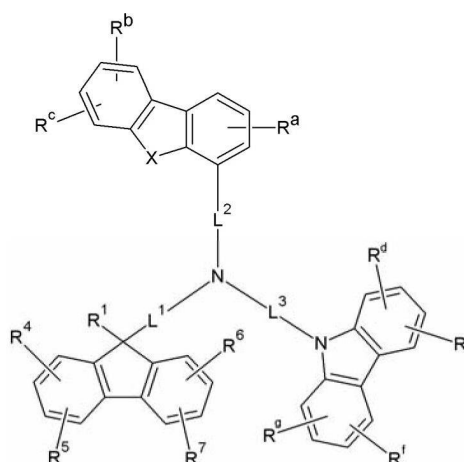
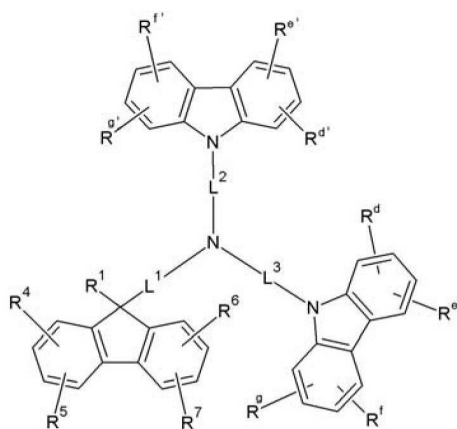
[化学式 8]

[化学式 9]



[化学式 10]

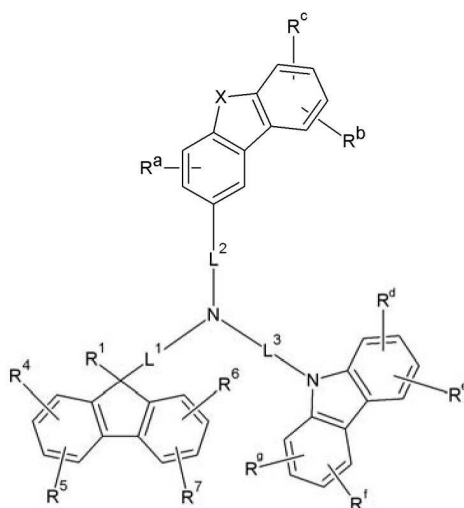
[化学式 11]



【 0 0 4 4】

【化 5 - 3】

[化学式 12]



【 0 0 4 5】

前記化学式 4 ~ 1 2 中、

10

20

30

40

50

X、 X^1 および X^2 は、それぞれ独立して、O または S であり、

R^1 、 R^2 、 $R^4 \sim R^7$ 、 $R^a \sim R^g$ 、および $R^{a'} \sim R^{g'}$ は、それぞれ独立して、水素、重水素、置換もしくは非置換の C1～C30 アルキル基、置換もしくは非置換の C3～C30 シクロアルキル基、置換もしくは非置換の C2～C30 ヘテロ環基、置換もしくは非置換の C6～C30 アリール基、置換もしくは非置換の C6～C30 アリールアミン基、置換もしくは非置換の C1～C30 アルコキシ基、置換もしくは非置換の C2～C30 アルコキシカルボニル基、置換もしくは非置換の C2～C30 アルコキシカルボニルアミノ基、置換もしくは非置換の C7～C30 アリールオキシカルボニルアミノ基、置換または非置換の C1～C30 スルファモイルアミノ基、置換もしくは非置換の C2～C30 アルケニル基、置換もしくは非置換の C2～C30 アルキニル基、置換もしくは非置換の C3～C40 シリル基、置換もしくは非置換の C3～C40 シリルオキシ基、置換もしくは非置換の C1～C30 アシル基、置換もしくは非置換の C1～C20 アシルオキシ基、置換もしくは非置換の C1～C20 アシルアミノ基、置換もしくは非置換の C1～C30 スルホニル基、置換もしくは非置換の C1～C30 アルキルチオール基、置換もしくは非置換の C6～C30 アリールチオール基、置換もしくは非置換の C1～C30 ウレイド基、ハロゲン基、ハロゲン含有基、シアノ基、ヒドロキシ基、アミノ基、ニトロ基、カルボキシ基、フェロセニル基、またはこれらの組み合わせであり、

$L^1 \sim L^3$ は、前記化学式 1 の定義と同様である。

【0046】

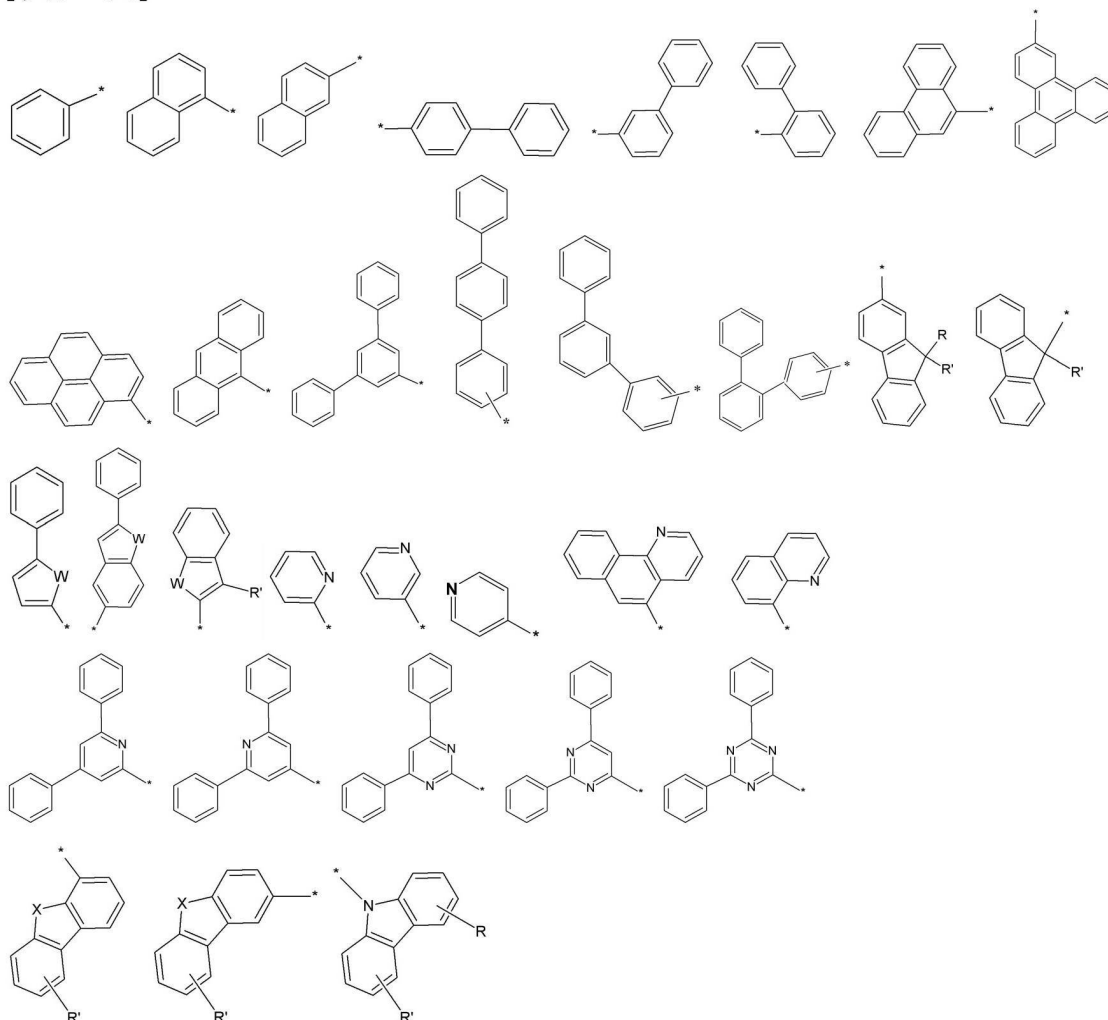
例えば、前記 R^2 および R^3 は、それぞれ独立して、置換もしくは非置換の C2～C30 ヘテロ環基または置換もしくは非置換の C6～C30 アリール基から選択されてもよく、置換もしくは非置換のフェニル基、置換もしくは非置換のナフタレン基、置換もしくは非置換のビフェニル基、置換もしくは非置換のターフェニル基、置換もしくは非置換のトリフェニレニル基、置換もしくは非置換のアントラセニル基、置換もしくは非置換のピレニル基、置換もしくは非置換のジベンゾフラニル基、置換もしくは非置換のジベンゾチオフエニル基、置換もしくは非置換のチオフエニル基、置換もしくは非置換のフラニル基、置換または非置換のベンゾチオフエニル基、置換もしくは非置換のベンゾフラニル基、置換もしくは非置換のキノリニル基、置換もしくは非置換のイソキノリニル基、置換もしくは非置換のベンゾキノリニル基、置換もしくは非置換のベンゾイソキノリニル基、置換もしくは非置換のピリジニル基、置換もしくは非置換のピリミジニル基、置換もしくは非置換のトリアジニル基、置換もしくは非置換のフルオレニル基、置換もしくは非置換のカルバゾリル基などから選択されたものであってもよい。

【0047】

例えば、前記 R^2 および R^3 は、それぞれ独立して、下記グループ I に羅列された置換もしくは非置換の基から選択され、 R^2 および R^3 のうちの少なくとも一つは、下記グループ I-1 に羅列された置換もしくは非置換の基から選択されてもよい。

【0048】

【化 6 - 1】
[グループI]

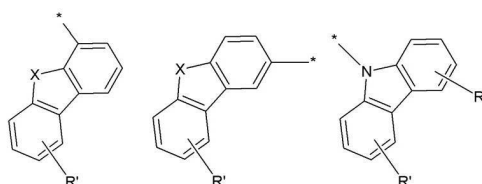


10

20

【0049】
【化 6 - 2】

[グループI-1]



【0050】

前記グループ I および I - 1 中、

X および W は、それぞれ独立して、O または S であり、R および R' は、それぞれ独立して、水素、重水素、置換もしくは非置換の C 1 ~ C 30 アルキル基、置換もしくは非置換の C 6 ~ C 30 アリール基、置換もしくは非置換の C 3 ~ C 30 ヘテロ環基、またはこれらの組み合わせであり、* は、連結地点である。

40

【0051】

前記 R¹ は、置換もしくは非置換の C 1 ~ C 30 アルキル基、置換もしくは非置換の C 3 ~ C 30 シクロアルキル基、置換もしくは非置換の C 2 ~ C 30 ヘテロアリール基、置換もしくは非置換の C 6 ~ C 30 アリール基、またはこれらの組み合わせであってもよい。

【0052】

具体的に、前記 R¹ は、メチル基、エチル基、置換もしくは非置換のシクロペンチル基

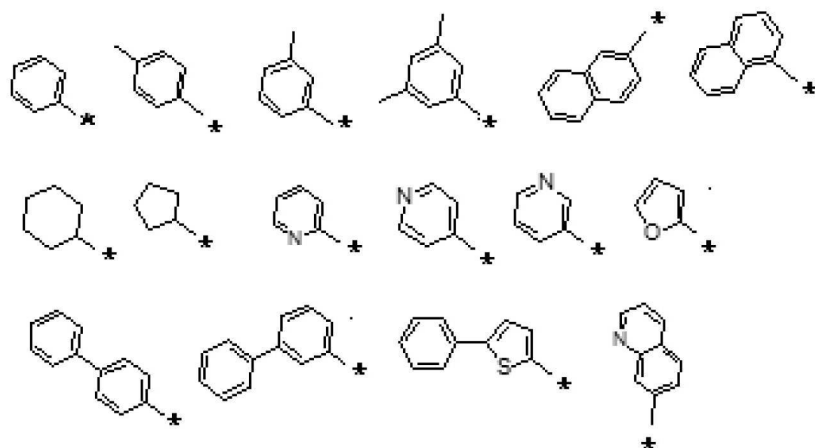
50

、置換もしくは非置換のシクロヘキシル基、置換もしくは非置換のフェニル基、置換もしくは非置換のビフェニル基、置換もしくは非置換のナフチル基、置換もしくは非置換のピリジル基、置換もしくは非置換のフラニル基、置換もしくは非置換のチオフェニル基、置換もしくは非置換のキノリニル基、またはこれらの組み合わせであってもよく、例えば、メチル基、エチル基、または下記グループ I I に羅列された基から選択された一つであってもよい。

【0053】

【化7】

[グループII]



10

20

【0054】

前記グループ I I 中、*は、連結地点である。

【0055】

本発明の一例において、前記化学式 1、および化学式 4～12 の $R^4 \sim R^7$ 、 $R^a \sim R^g$ 、および $R^{a'} \sim R^{g'}$ は、それぞれ独立して、水素、重水素、置換もしくは非置換の $C1 \sim C10$ アルキル基、置換もしくは非置換の $C3 \sim C12$ シクロアルキル基、置換もしくは非置換の $C2 \sim C12$ ヘテロ環基、または置換もしくは非置換の $C6 \sim C12$ アリール基であってもよい。

【0056】

また、前記化学式 1、および化学式 4～12 の $R^4 \sim R^7$ 、 $R^a \sim R^g$ 、および $R^{a'} \sim R^{g'}$ は、それぞれ独立して、水素、重水素、置換もしくは非置換の $C1 \sim C10$ アルキル基、または置換もしくは非置換の $C6 \sim C12$ アリール基であってもよい。

【0057】

本発明の一例において、前記化学式 1、および化学式 4～12 の $L^1 \sim L^3$ は、それぞれ独立して、単結合、置換もしくは非置換の $C6 \sim C30$ アリーレン基、または置換もしくは非置換の $C2 \sim C30$ ヘテロアリーレン基であってもよい。

【0058】

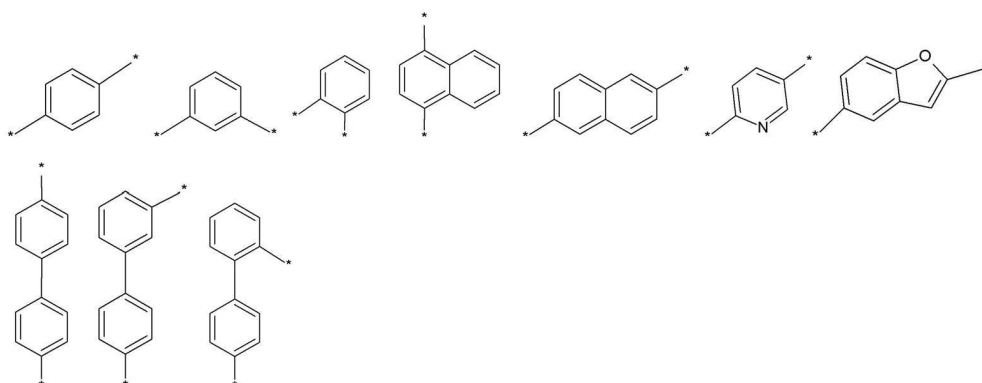
前記 $L^1 \sim L^3$ は、それぞれ独立して、単結合、置換もしくは非置換のフェニレン基、置換もしくは非置換のビフェニレン基、置換もしくは非置換のナフチレン基、置換もしくは非置換のピリジレン基、置換もしくは非置換のピリミジレン基、置換もしくは非置換のベンゾフラニレン基、またはこれらの組み合わせであってもよく、例えば、単結合、または下記グループ I I I に羅列された置換もしくは非置換の基から選択されてもよい。

【0059】

30

40

[グループIII]



【 0 0 6 0^{*}】

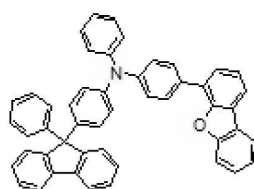
【 0 0 6 1 】

前記化学式 1 で表される化合物は、例えば、下記に羅列された化合物であってもよいが、これに限定されない。

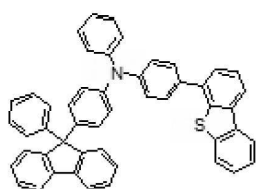
【 0 0 6 2 】

【化 9 - 1】

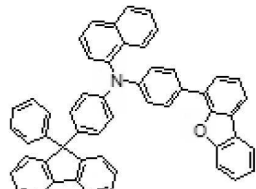
[A-1]



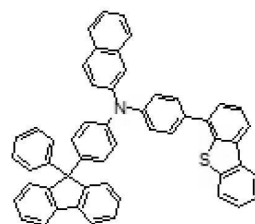
[A-2]



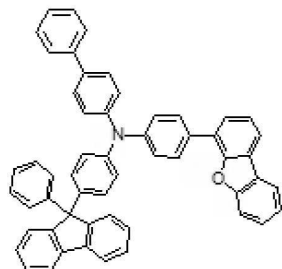
[A-3]



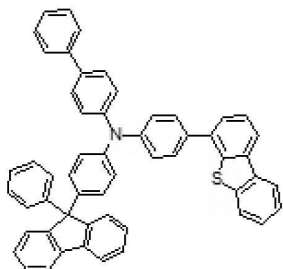
[A-4]



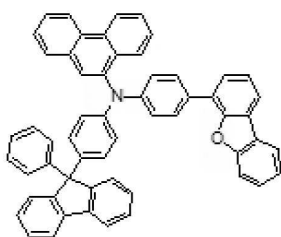
[A-5]



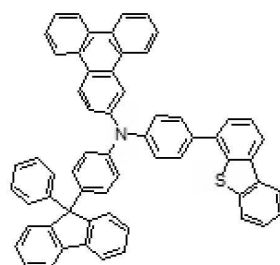
[A-6]



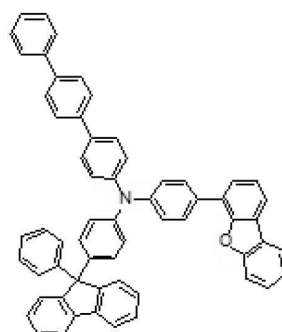
[A-7]



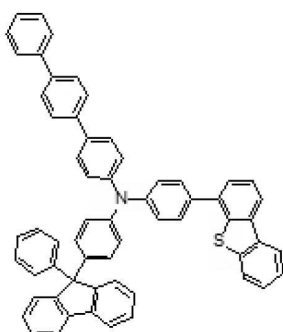
[A-8]



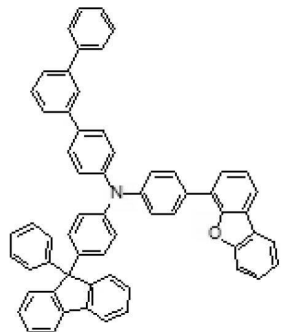
[A-9]



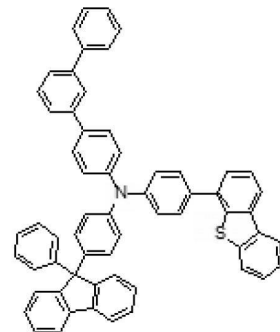
[A-10]



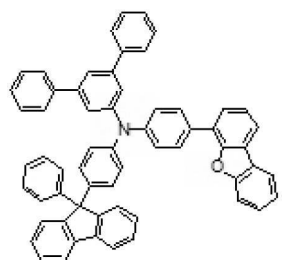
[A-11]



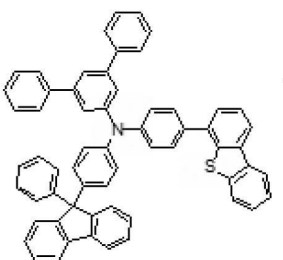
[A-12]



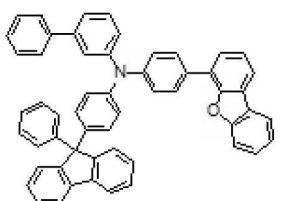
[A-13]



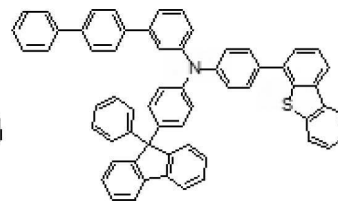
[A-14]



[A-15]



[A-16]



【0063】

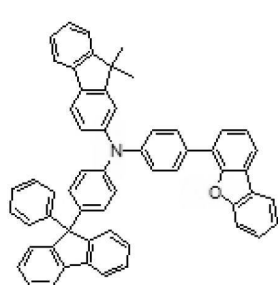
10

20

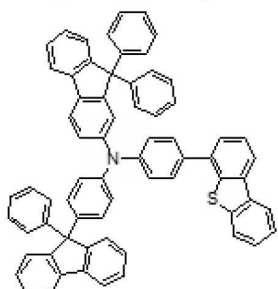
30

【化 9 - 2】

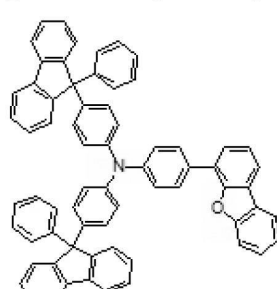
[A-17]



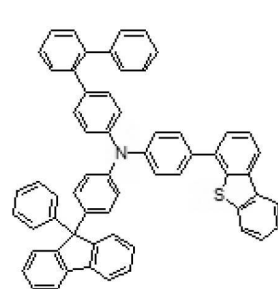
[A-18]



[A-19]

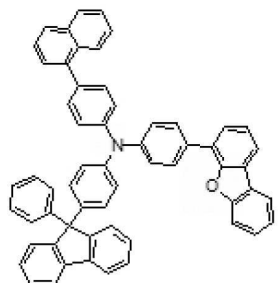


[A-20]

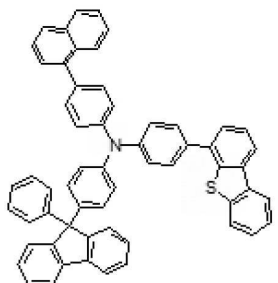


10

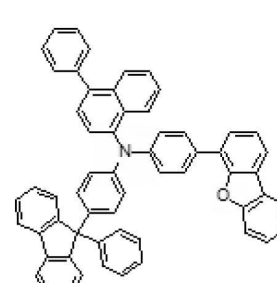
[A-21]



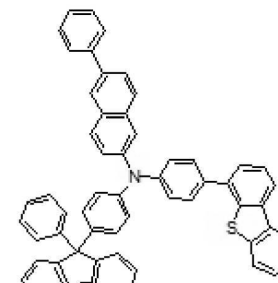
[A-22]



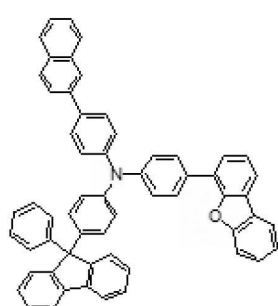
[A-23]



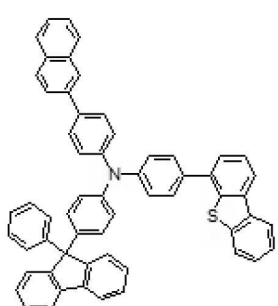
[A-24]



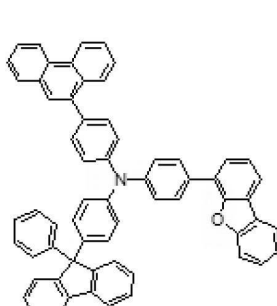
[A-25]



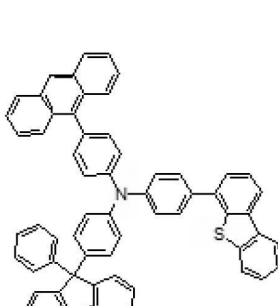
[A-26]



[A-27]

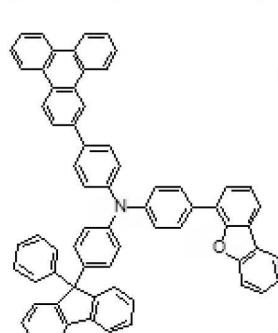


[A-28]

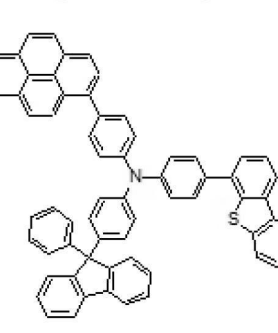


20

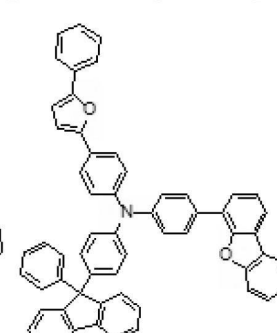
[A-29]



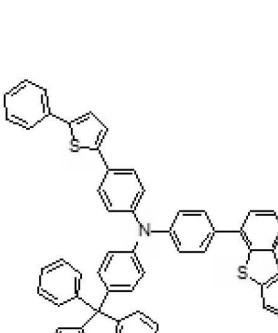
[A-30]



[A-31]



[A-32]



30

【 0 0 6 4】

40

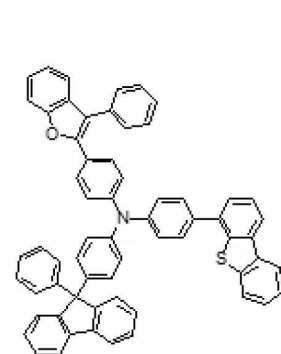
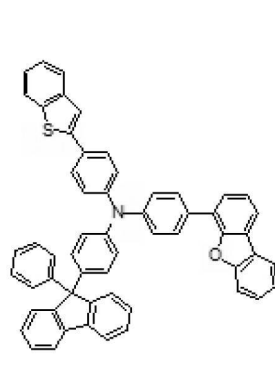
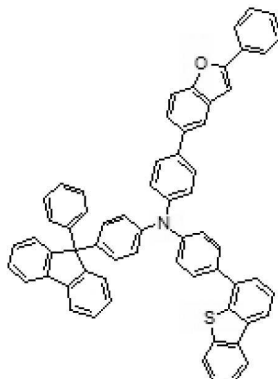
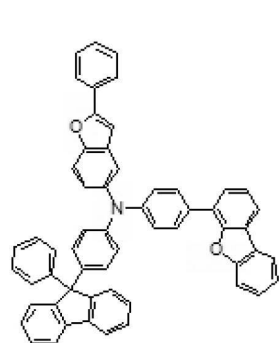
【化 9 - 3】

[A-33]

[A-34]

[A-35]

[A-36]



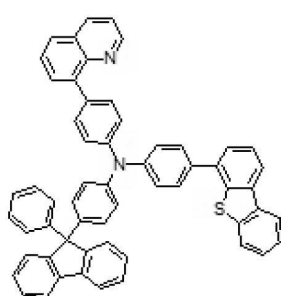
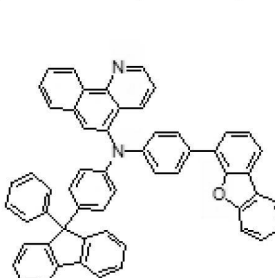
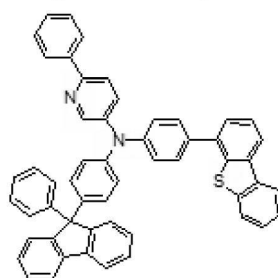
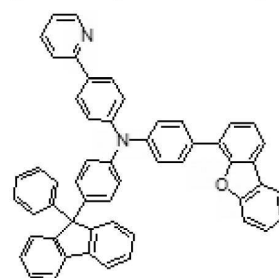
10

[A-37]

[A-38]

[A-39]

[A-40]



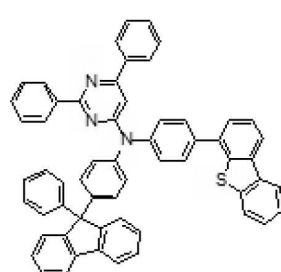
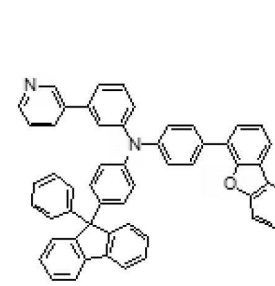
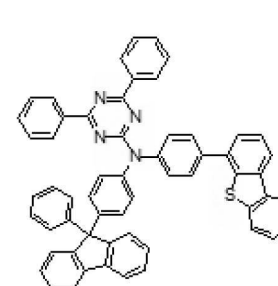
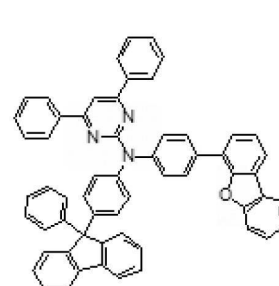
20

[A-41]

[A-42]

[A-43]

[A-44]



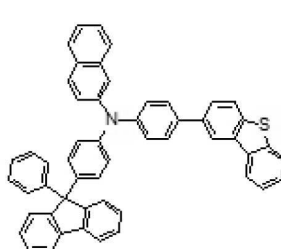
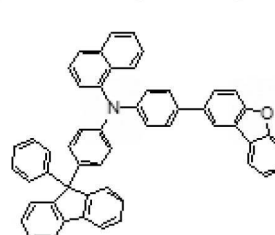
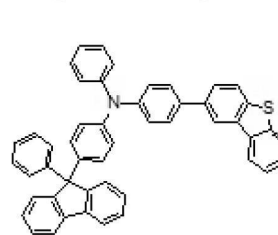
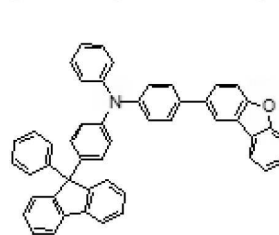
30

[A-45]

[A-46]

[A-47]

[A-48]

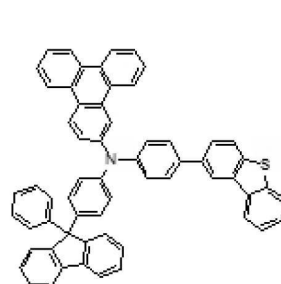
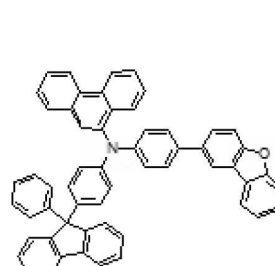
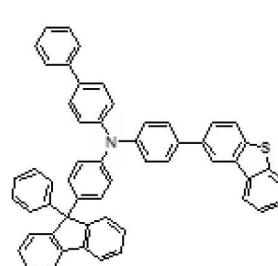
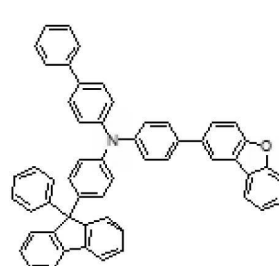


[A-49]

[A-50]

[A-51]

[A-52]



40

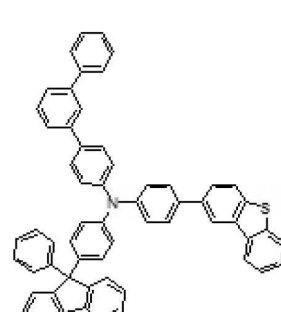
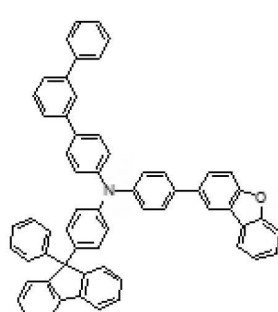
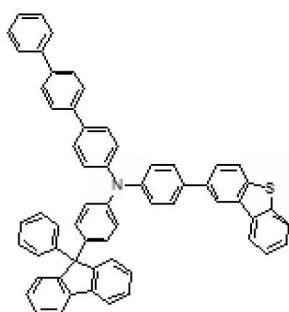
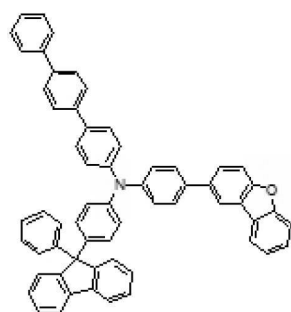
【 0 0 6 5】

[A-53]

[A-54]

[A-55]

[A-56]



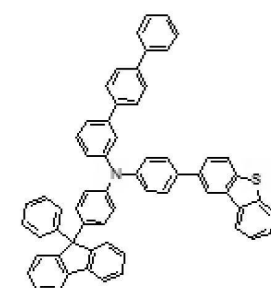
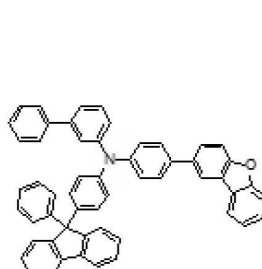
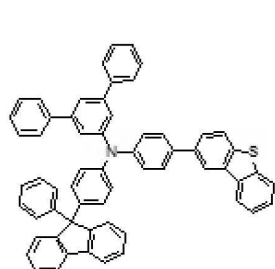
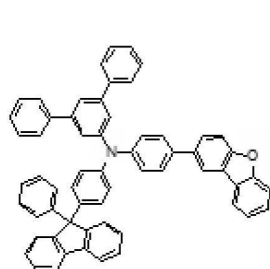
10

[A-57]

[A-58]

[A-59]

[A-60]



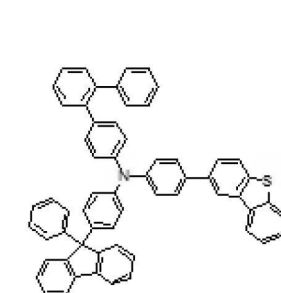
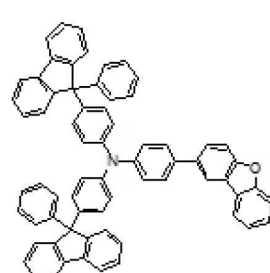
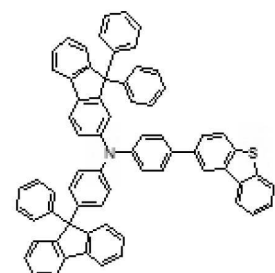
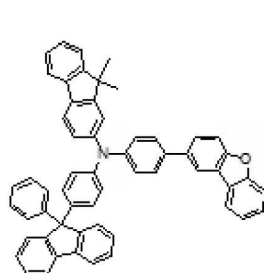
20

[A-61]

[A-62]

[A-63]

[A-64]



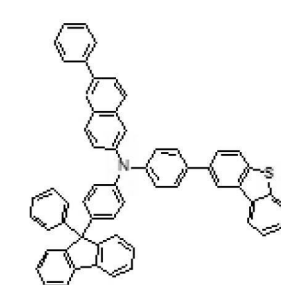
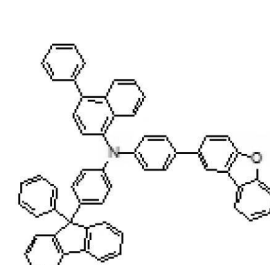
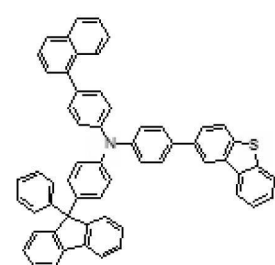
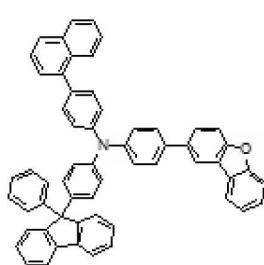
30

[A-65]

[A-66]

[A-67]

[A-68]



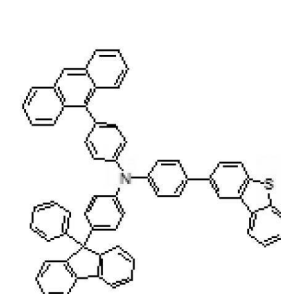
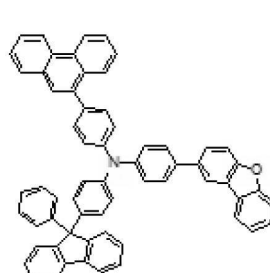
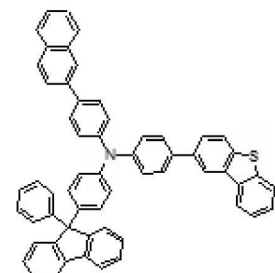
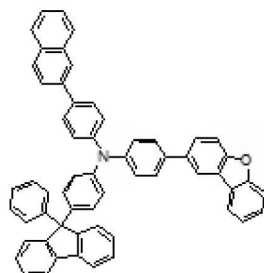
40

[A-69]

[A-70]

[A-71]

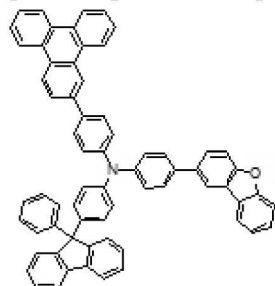
[A-72]



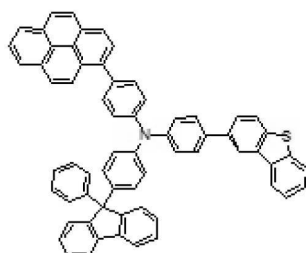
【 0 0 6 6 】

【化 9 - 5】

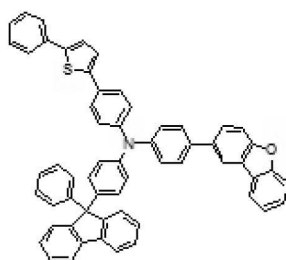
[A-73]



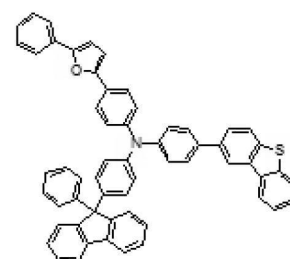
[A-74]



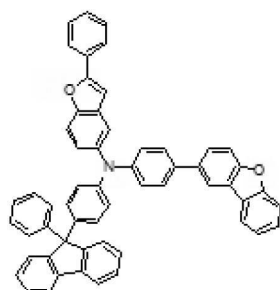
[A-75]



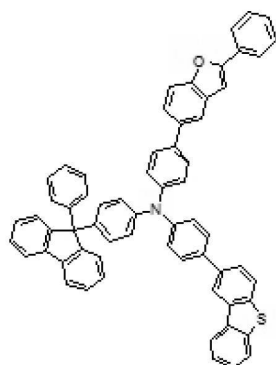
[A-76]



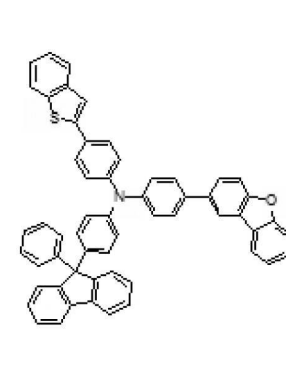
[A-77]



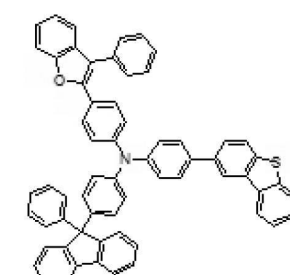
[A-78]



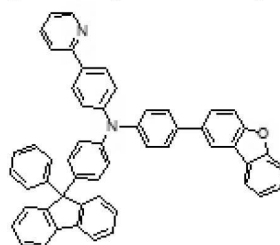
[A-79]



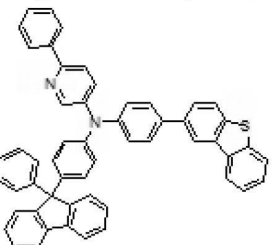
[A-80]



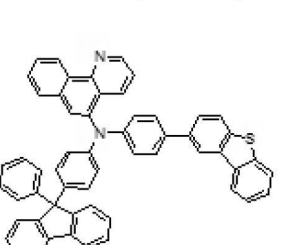
[A-81]



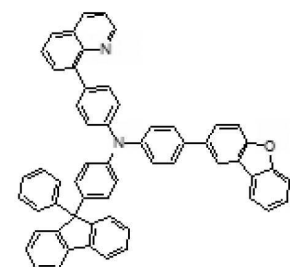
[A-82]



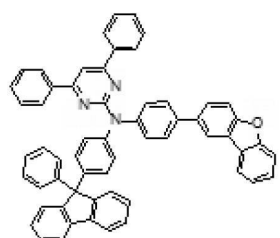
[A-83]



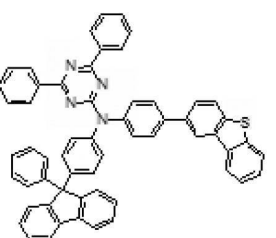
[A-84]



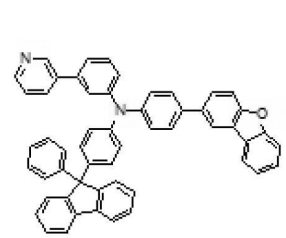
[A-85]



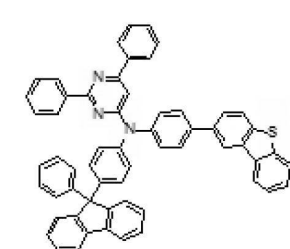
[A-86]



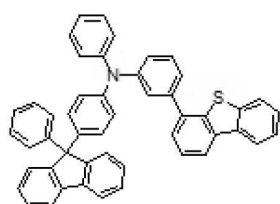
[A-87]



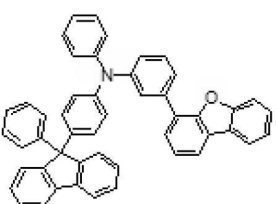
[A-88]



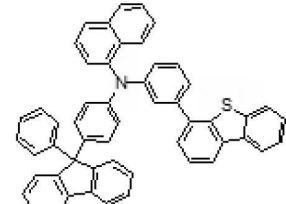
[A-89]



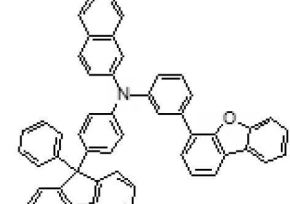
[A-90]



[A-91]



[A-92]



【0067】

10

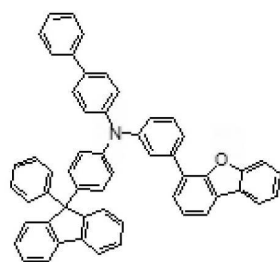
20

30

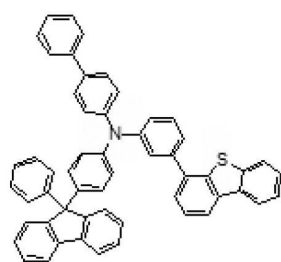
40

【化 9 - 6】

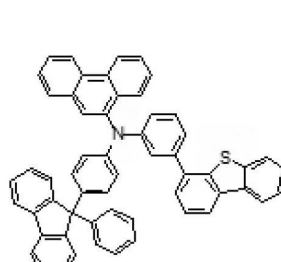
[A-93]



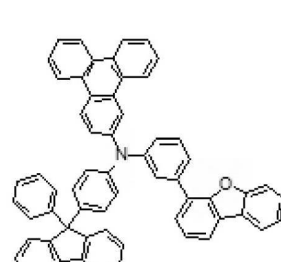
[A-94]



[A-95]

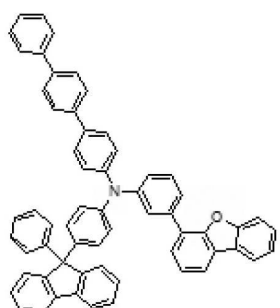


[A-96]

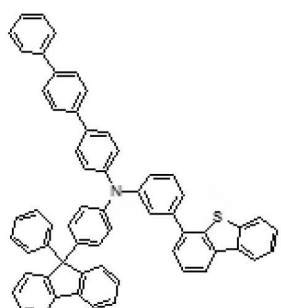


10

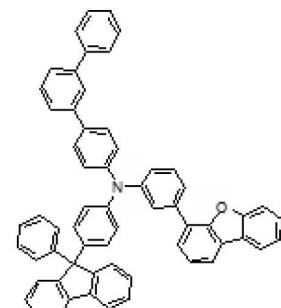
[A-97]



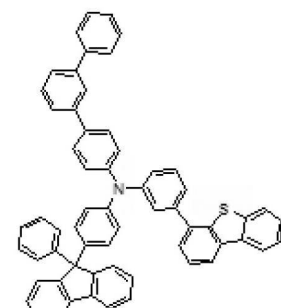
[A-98]



[A-99]

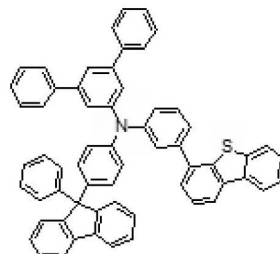


[A-100]

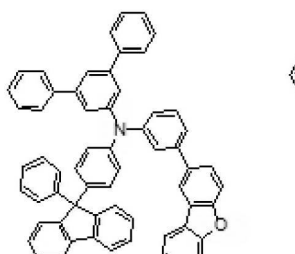


20

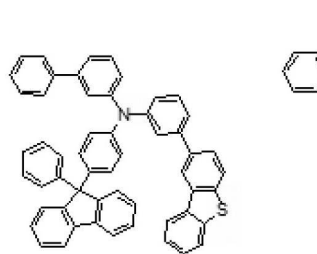
[A-101]



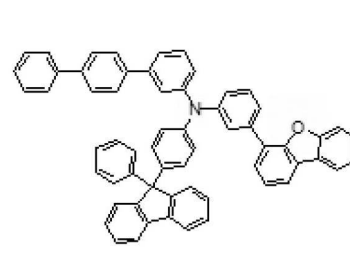
[A-102]



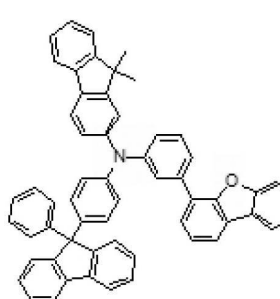
[A-103]



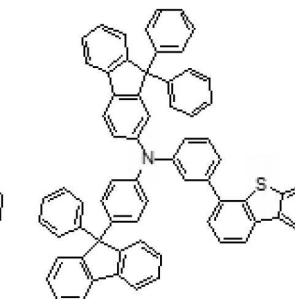
[A-104]



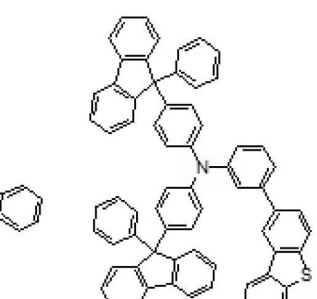
[A-105]



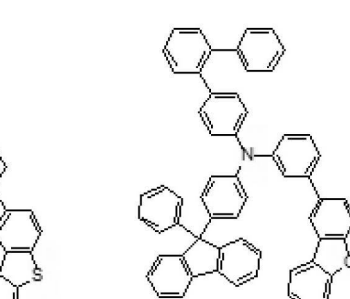
[A-106]



[A-107]

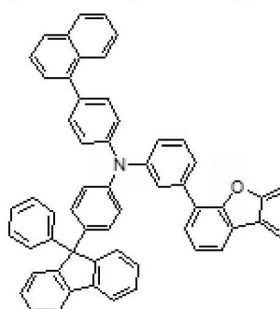


[A-108]

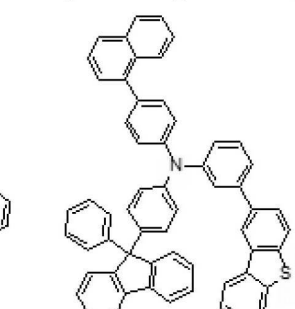


30

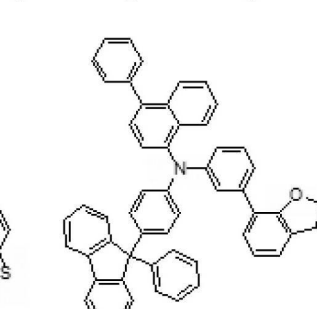
[A-109]



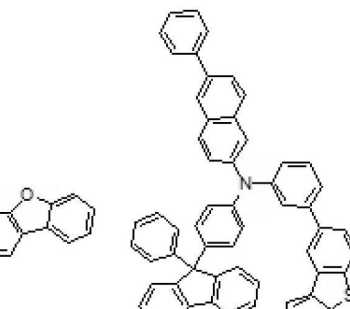
[A-110]



[A-111]



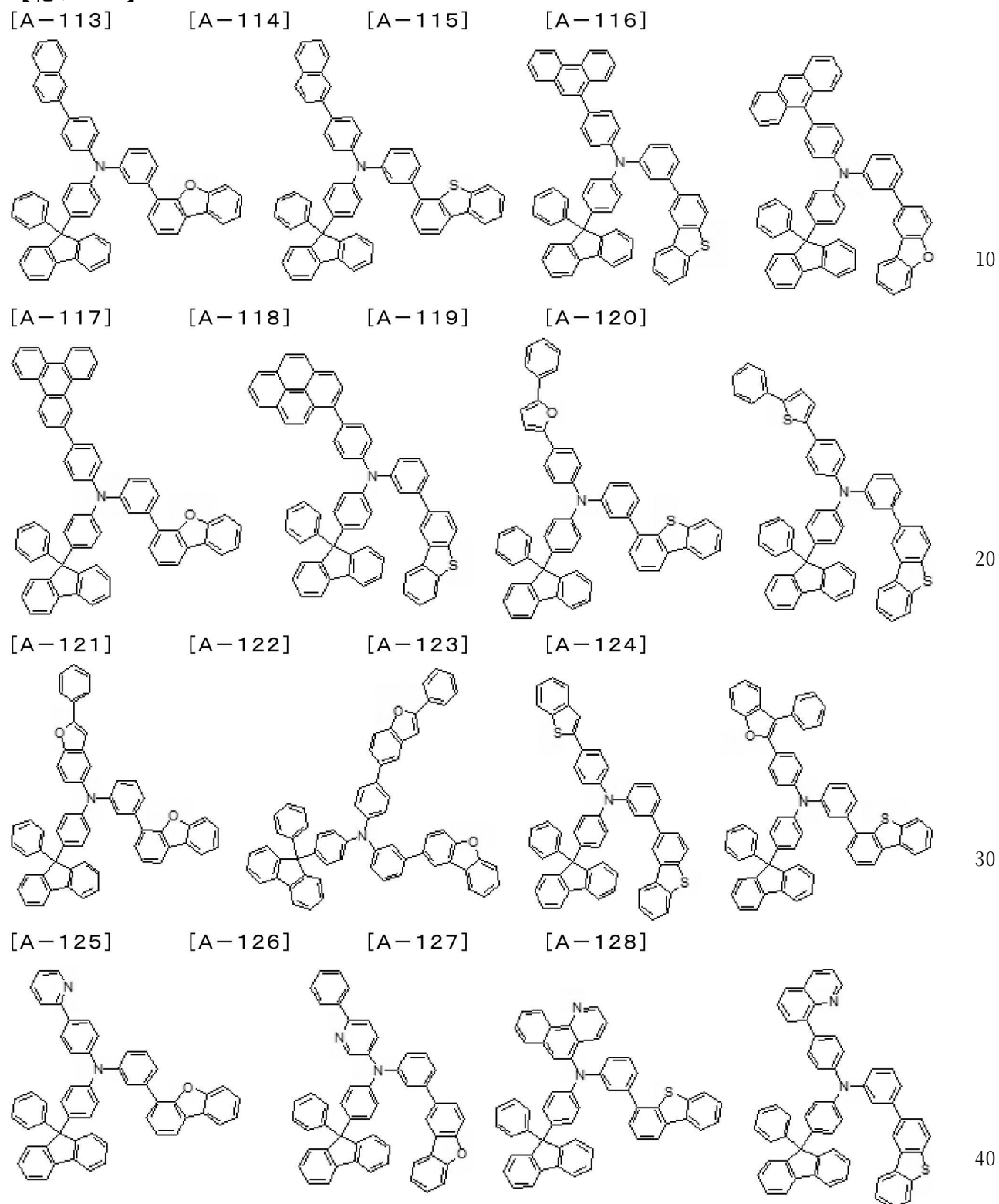
[A-112]



40

【0068】

【化 9 - 7】



【 0 0 6 9】

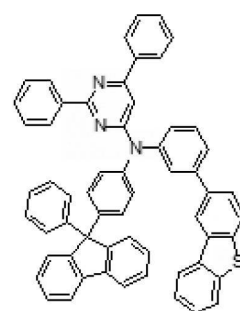
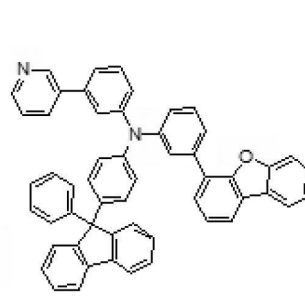
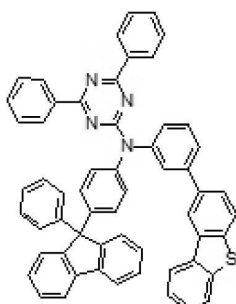
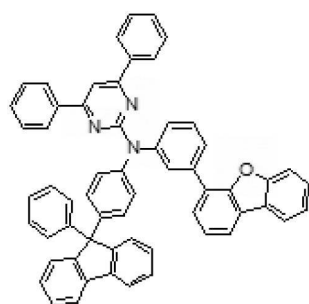
【化 9 - 8】

[A-129]

[A-130]

[A-131]

[A-132]



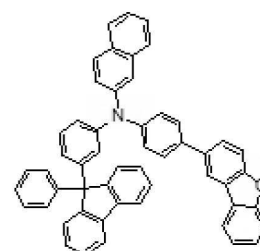
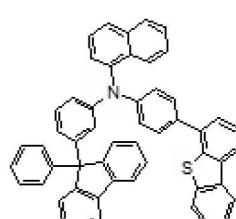
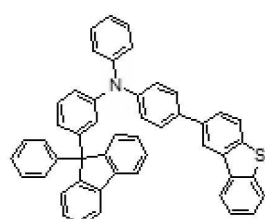
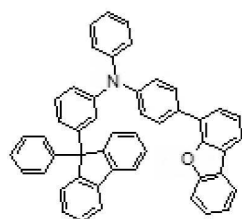
10

[A-133]

[A-134]

[A-135]

[A-136]



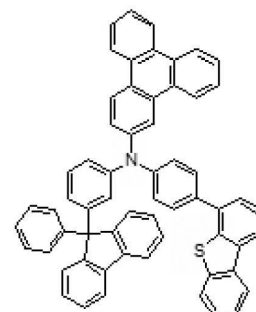
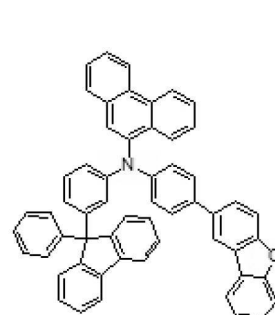
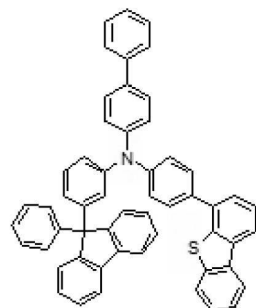
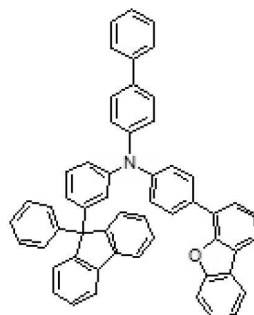
[A-137]

[A-138]

[A-139]

[A-140]

20



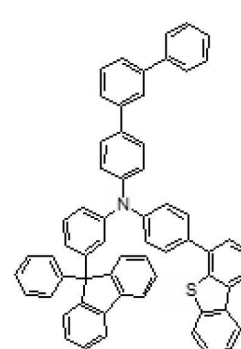
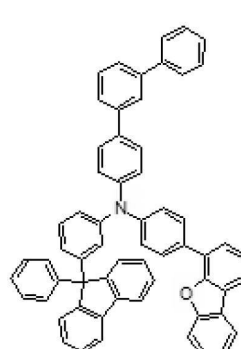
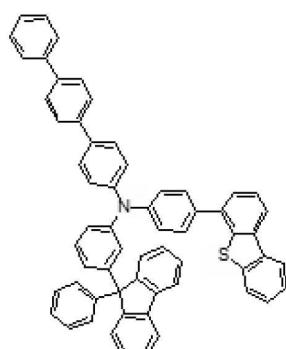
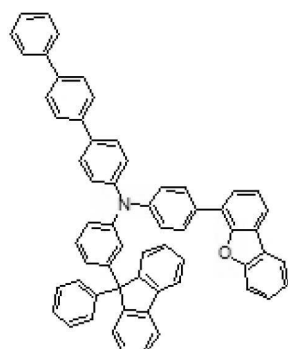
[A-141]

[A-142]

[A-143]

[A-144]

30



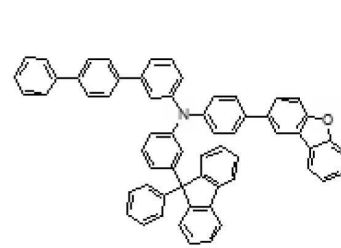
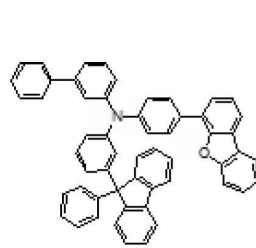
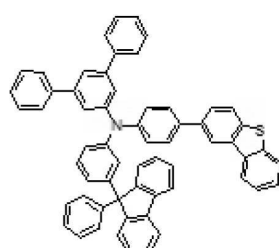
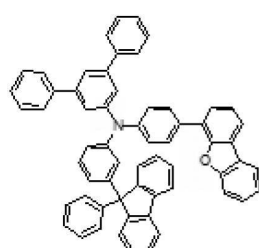
[A-145]

[A-146]

[A-147]

[A-148]

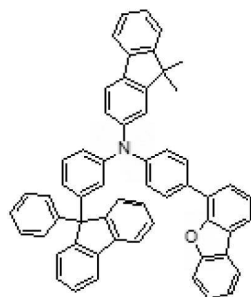
40



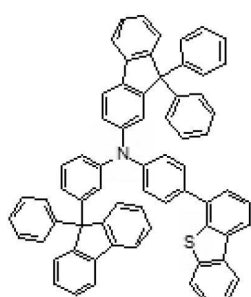
【 0 0 7 0】

【化 9 - 9】

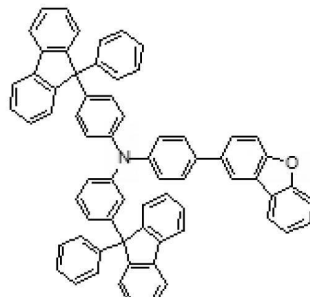
[A-149]



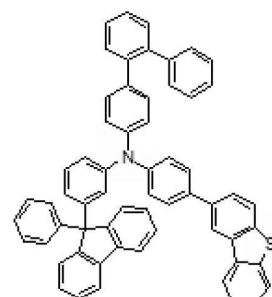
[A-150]



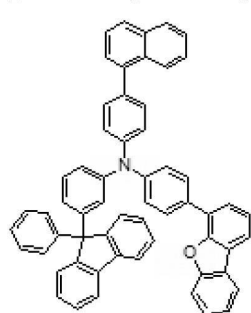
[A-151]



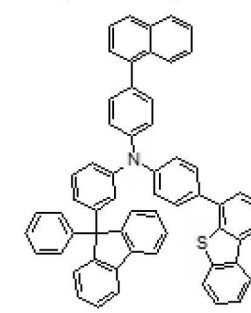
[A-152]



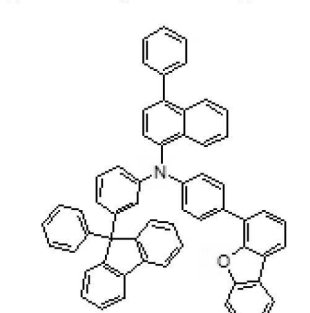
[A-153]



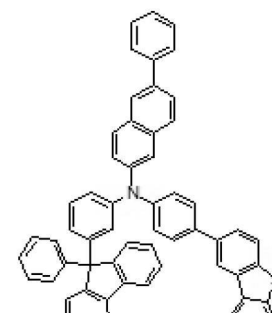
[A-154]



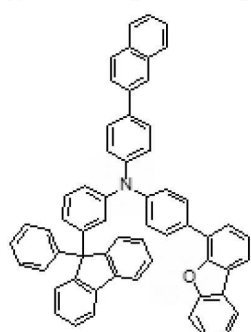
[A-155]



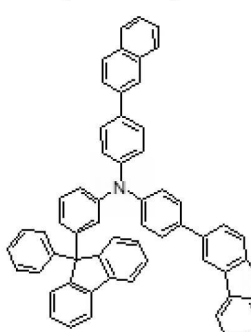
[A-156]



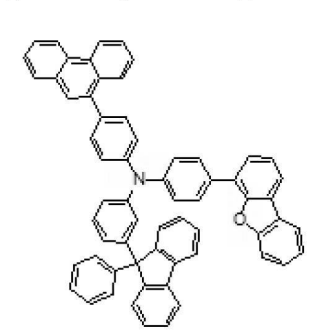
[A-157]



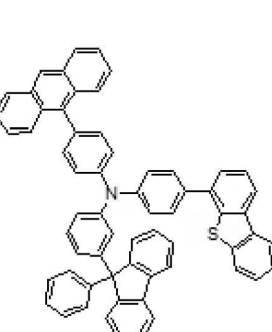
[A-158]



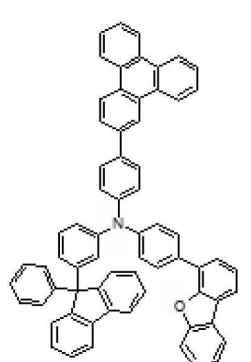
[A-159]



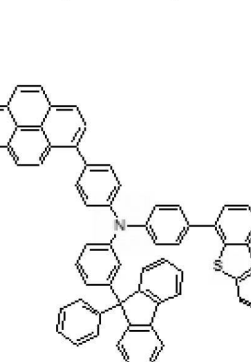
[A-160]



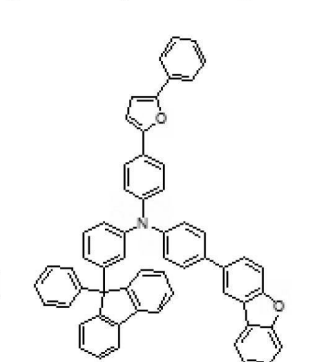
[A-161]



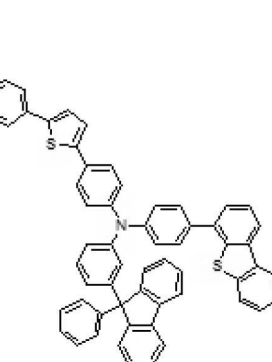
[A-162]



[A-163]



[A-164]



【0 0 7 1】

10

20

30

40

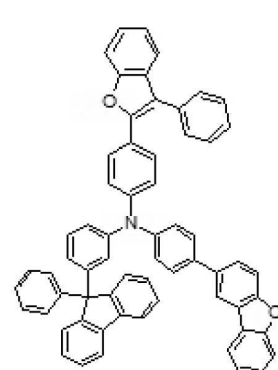
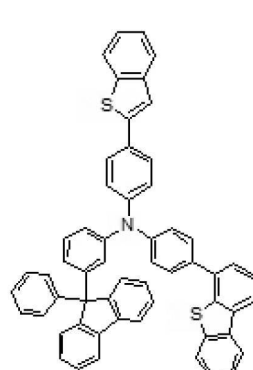
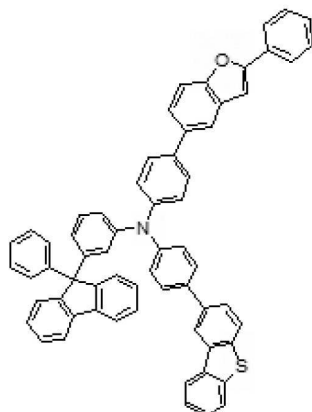
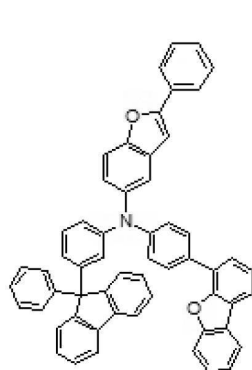
【化 9 - 1 0】

[A-165]

[A-166]

[A-167]

[A-168]



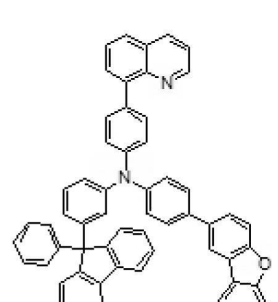
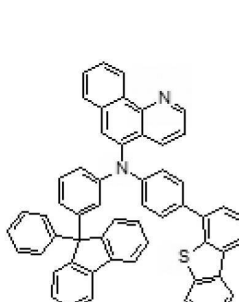
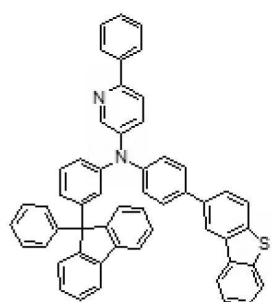
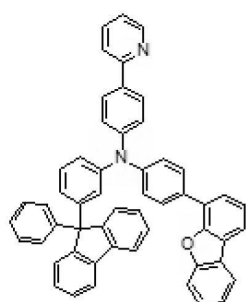
10

[A-169]

[A-170]

[A-171]

[A-172]



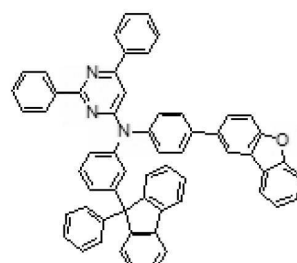
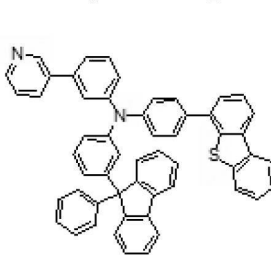
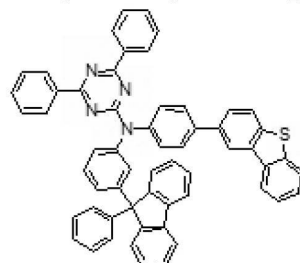
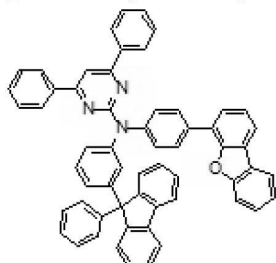
20

[A-173]

[A-174]

[A-175]

[A-176]



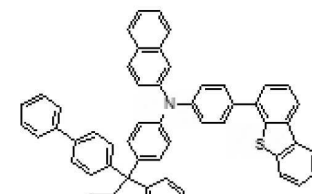
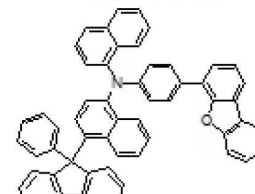
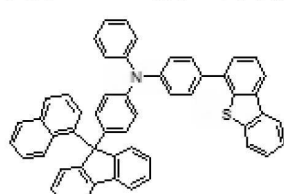
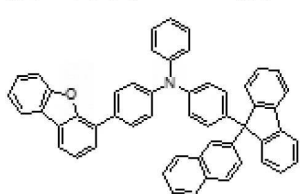
30

[A-177]

[A-178]

[A-179]

[A-180]

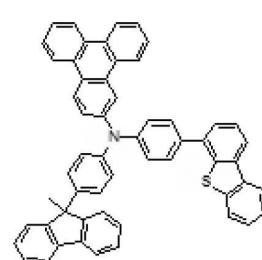
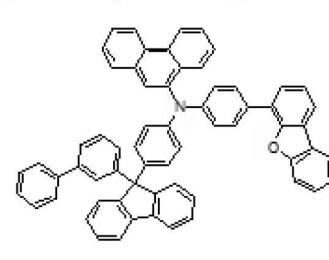
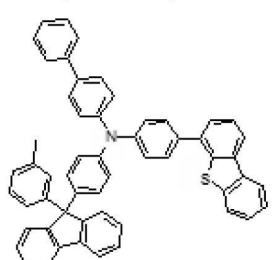
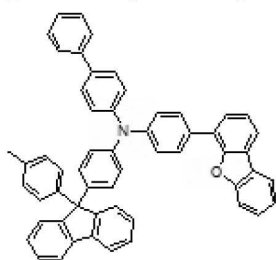


[A-181]

[A-182]

[A-183]

[A-184]



40

【0 0 7 2】

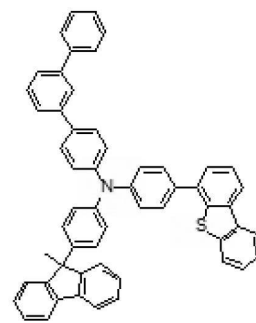
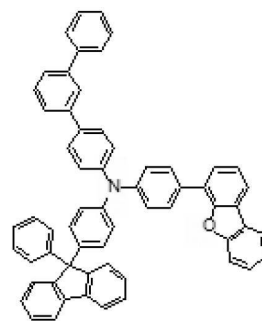
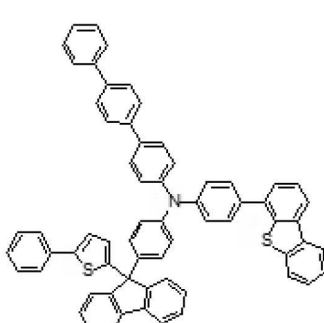
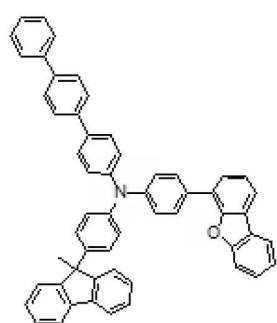
【化 9 - 1 1】

[A-185]

[A-186]

[A-187]

[A-188]



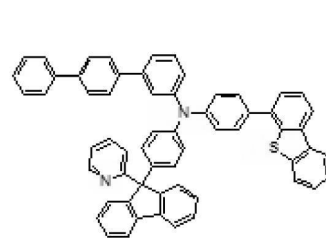
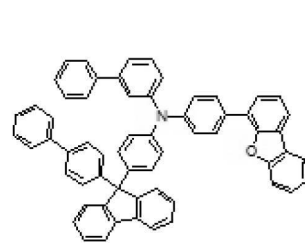
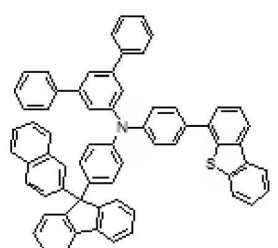
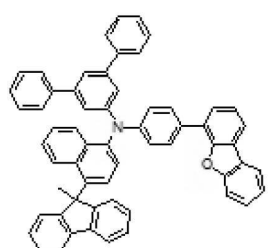
10

[A-189]

[A-190]

[A-191]

[A-192]

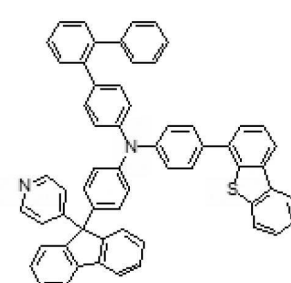
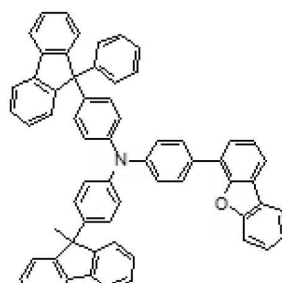
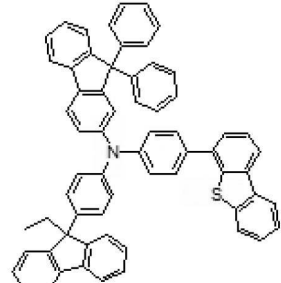
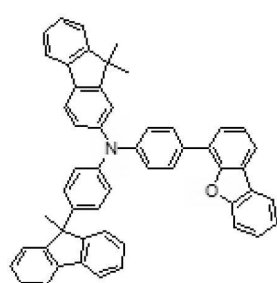


[A-193]

[A-194]

[A-195]

[A-196]



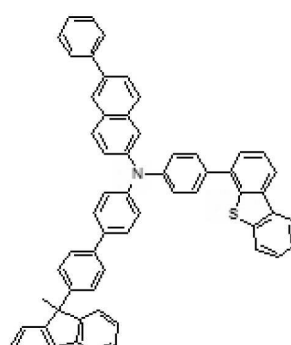
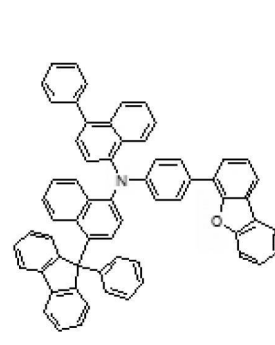
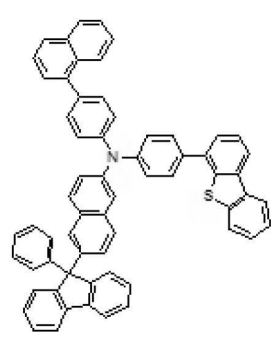
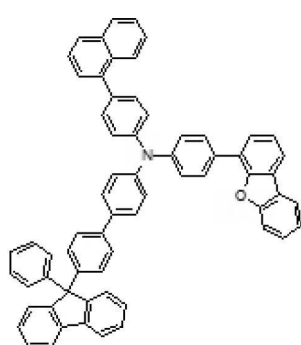
20

[A-197]

[A-198]

[A-199]

[A-200]



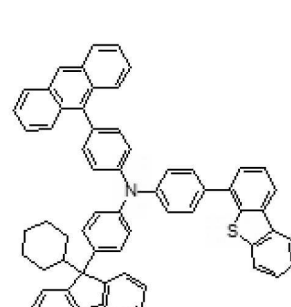
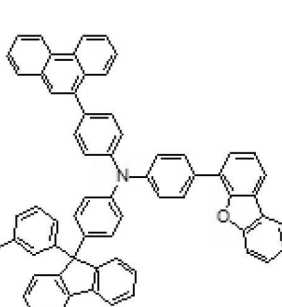
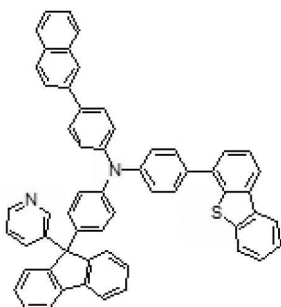
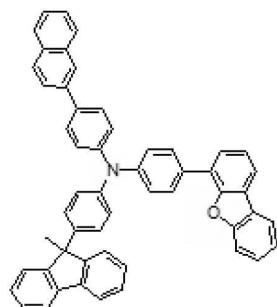
30

[A-201]

[A-202]

[A-203]

[A-204]



40

【0 0 7 3】

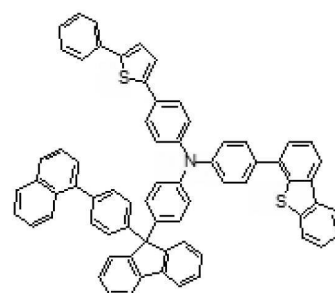
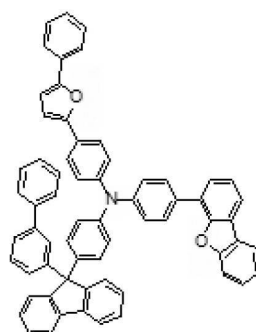
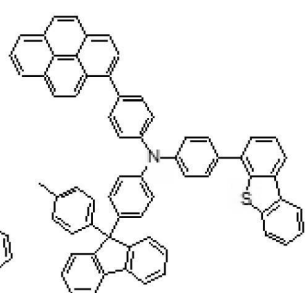
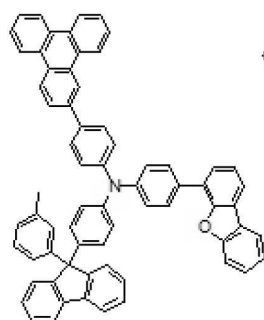
【化 9 - 1 2】

[A-205]

[A-206]

[A-207]

[A-208]



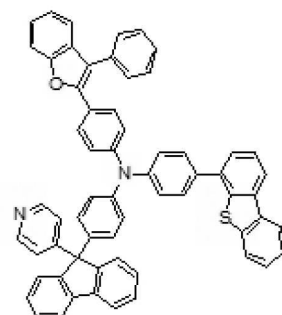
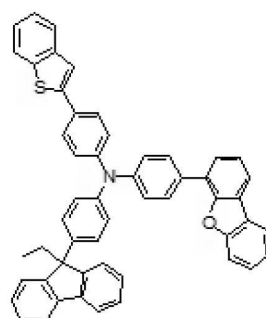
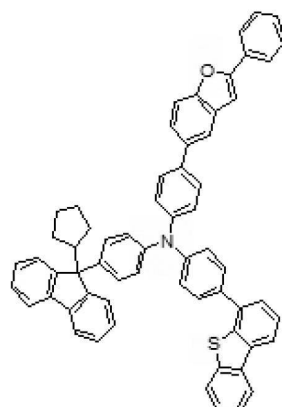
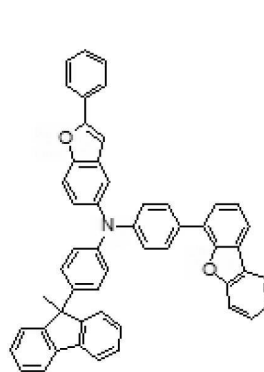
10

[A-209]

[A-210]

[A-211]

[A-212]



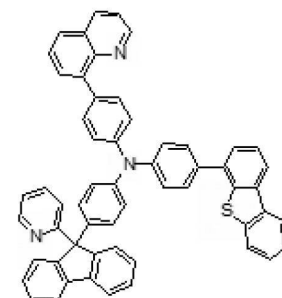
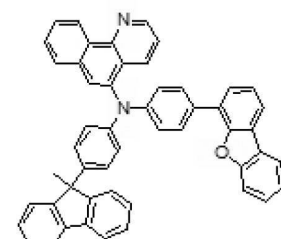
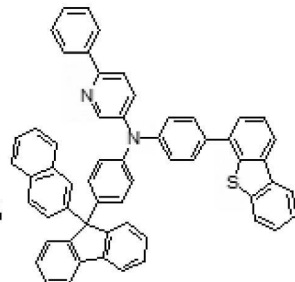
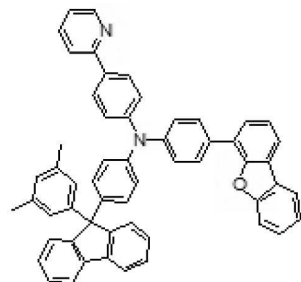
20

[A-213]

[A-214]

[A-215]

[A-216]



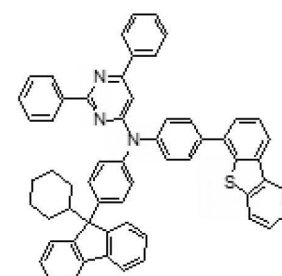
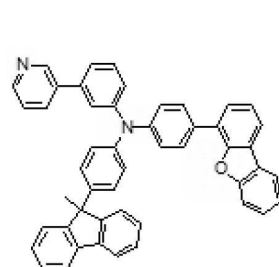
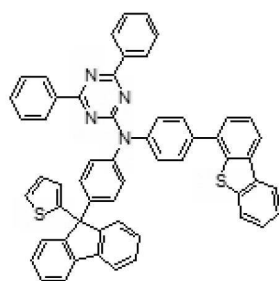
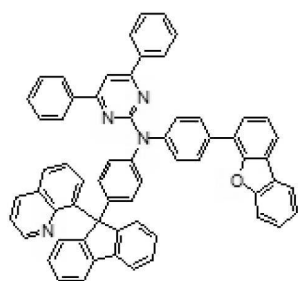
30

[A-217]

[A-218]

[A-219]

[A-220]

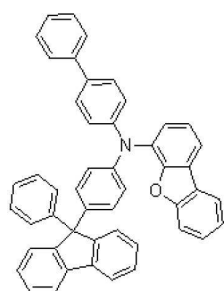


40

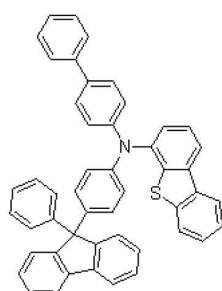
【0074】

【化 9 - 1 3】

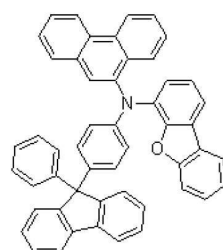
[A-221]



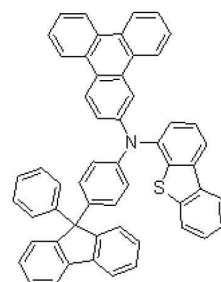
[A-222]



[A-223]

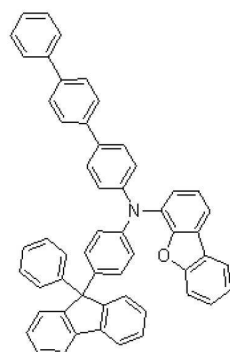


[A-224]

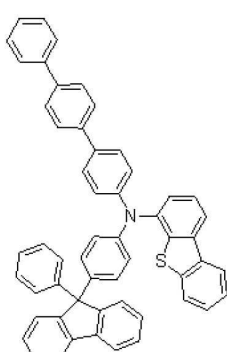


10

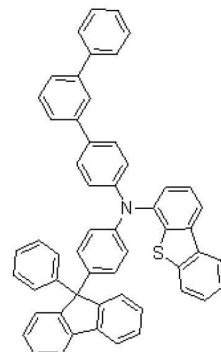
[A-225]



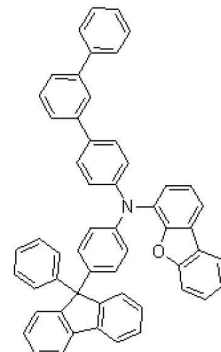
[A-226]



[A-227]

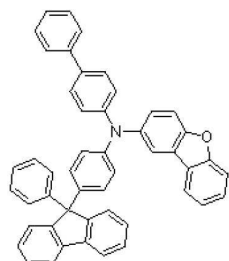


[A-228]

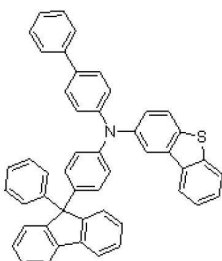


20

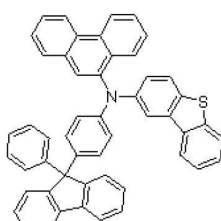
[A-229]



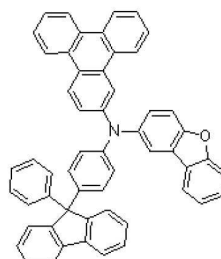
[A-230]



[A-231]

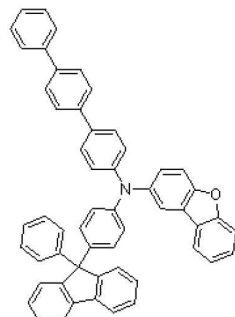


[A-232]

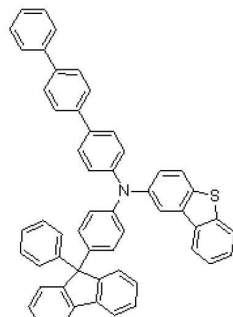


30

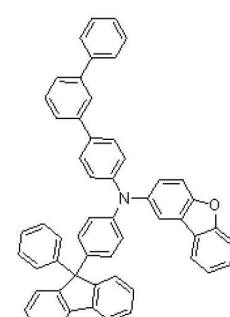
[A-233]



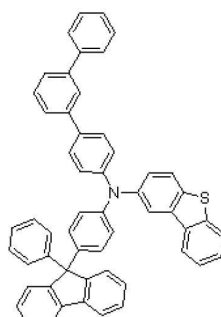
[A-234]



[A-235]

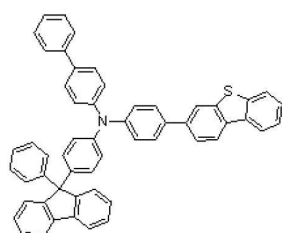


[A-236]

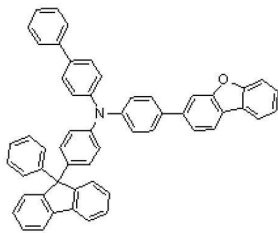


40

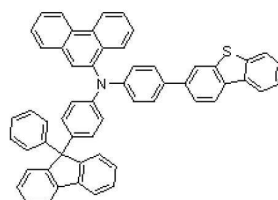
[A-237]



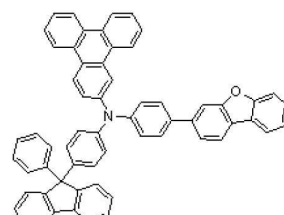
[A-238]



[A-239]



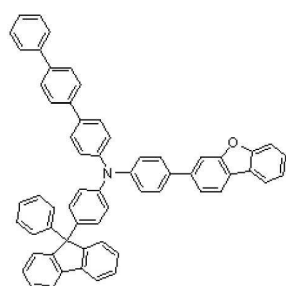
[A-240]



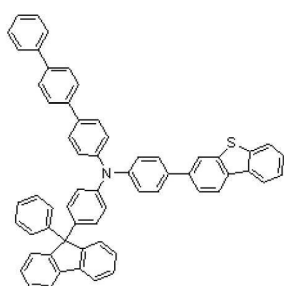
【 0 0 7 5】

【化 9 - 1 4】

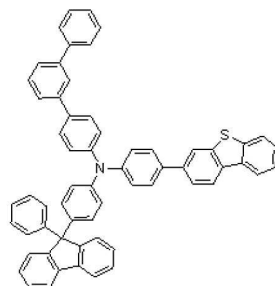
[A-241]



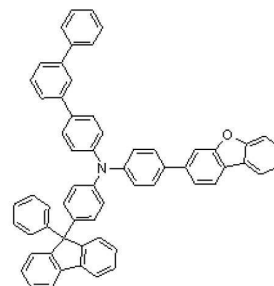
[A-242]



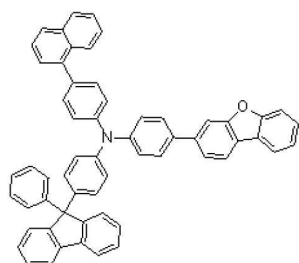
[A-243]



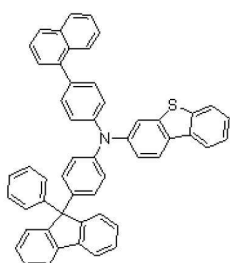
[A-244]



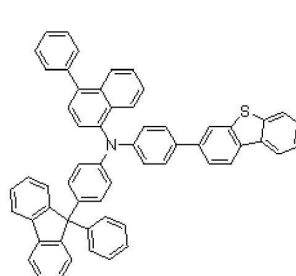
[A-245]



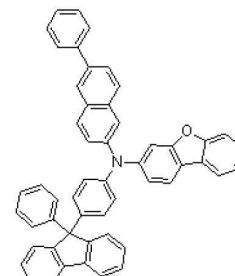
[A-246]



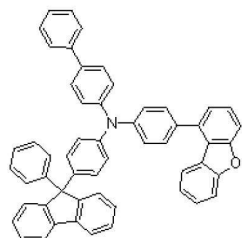
[A-247]



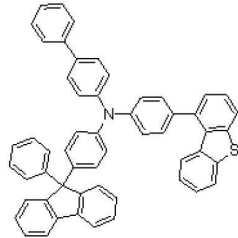
[A-248]



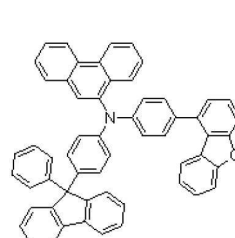
[A-249]



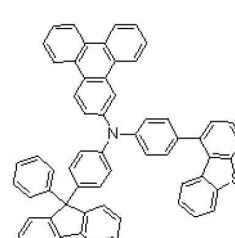
[A-250]



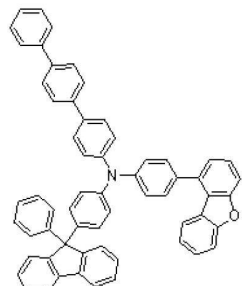
[A-251]



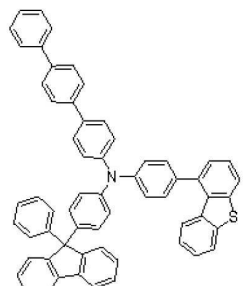
[A-252]



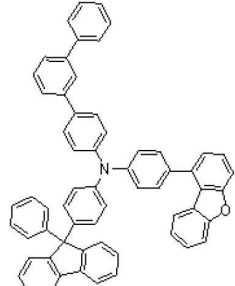
[A-253]



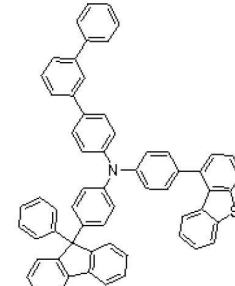
[A-254]



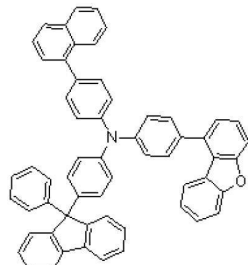
[A-255]



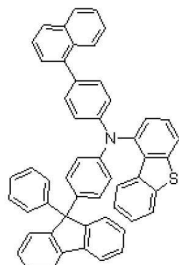
[A-256]



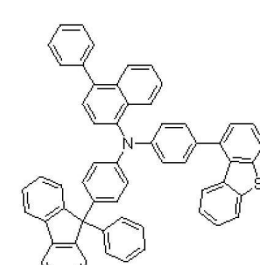
[A-257]



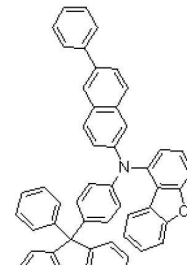
[A-258]



[A-259]



[A-260]



【0 0 7 6】

10

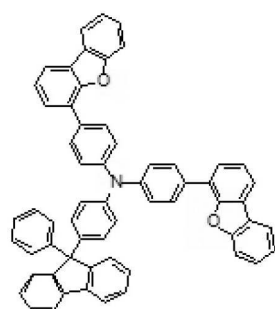
20

30

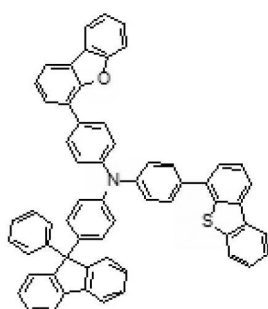
40

【化 9 - 1 5】

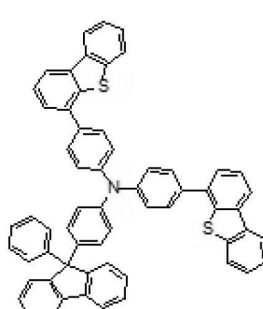
[B-1]



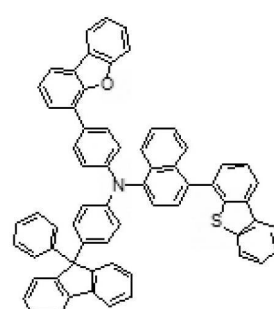
[B-2]



[B-3]

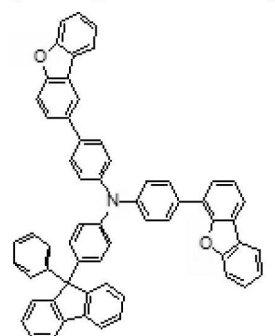


[B-4]

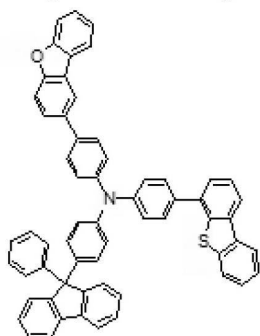


10

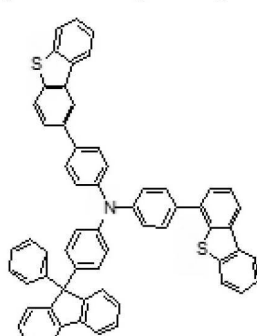
[B-5]



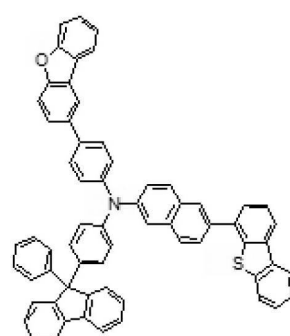
[B-6]



[B-7]

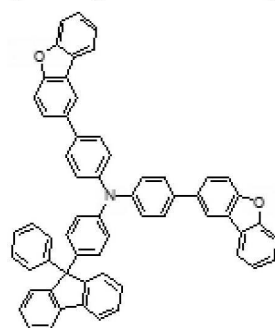


[B-8]

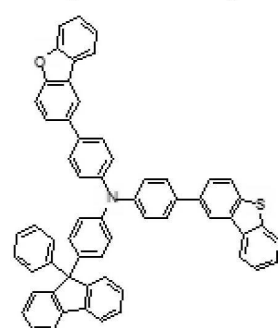


20

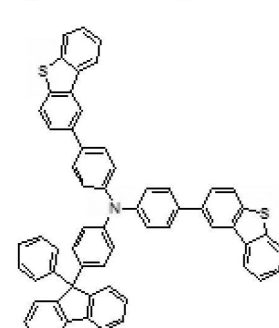
[B-9]



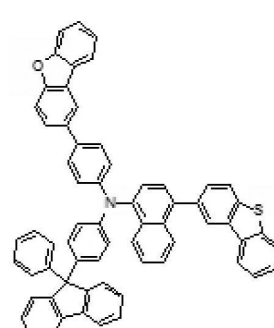
[B-10]



[B-11]

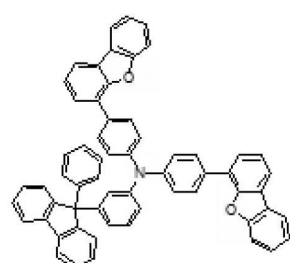


[B-12]

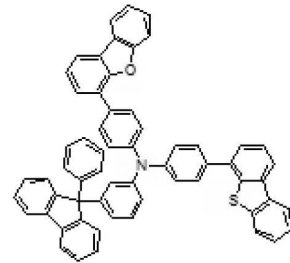


30

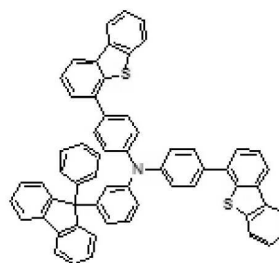
[B-13]



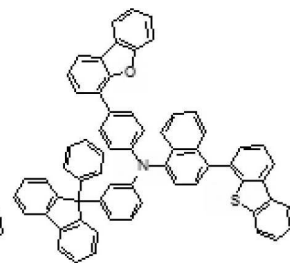
[B-14]



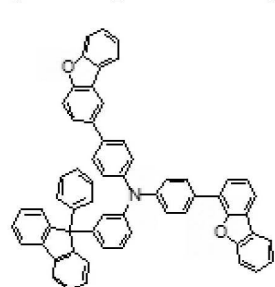
[B-15]



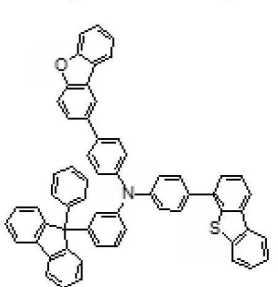
[B-16]



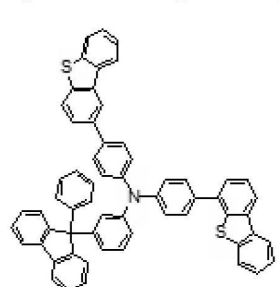
[B-17]



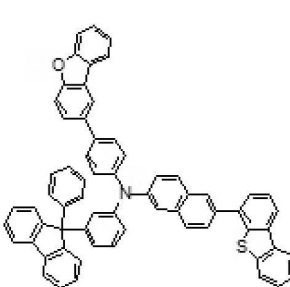
[B-18]



[B-19]



[B-20]

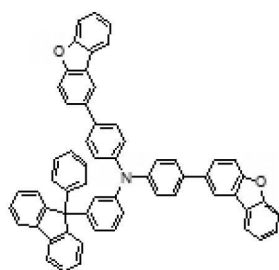


40

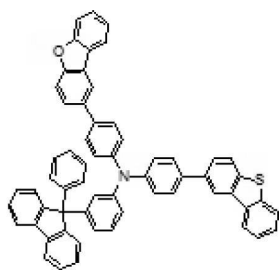
【 0 0 7 7】

【化 9 - 1 6】

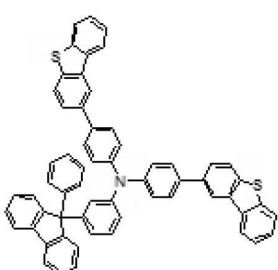
[B-21]



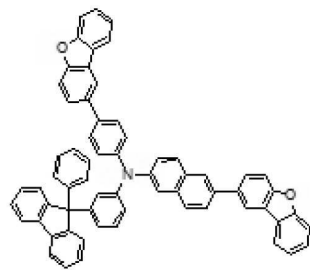
[B-22]



[B-23]

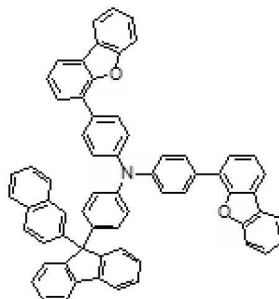


[B-24]

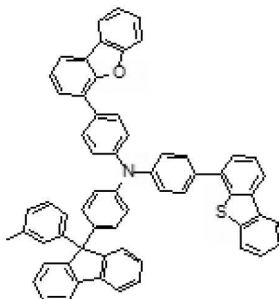


10

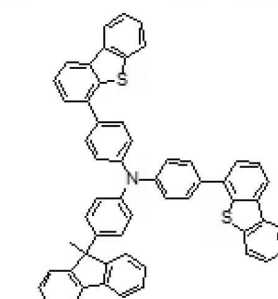
[B-25]



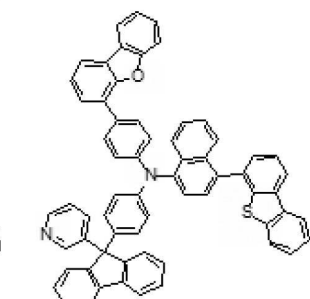
[B-26]



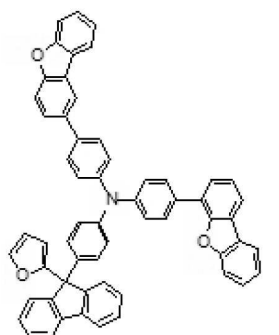
[B-27]



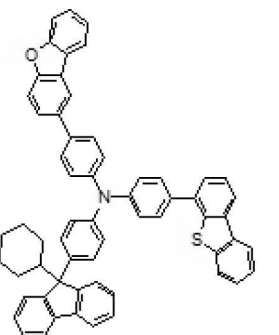
[B-28]



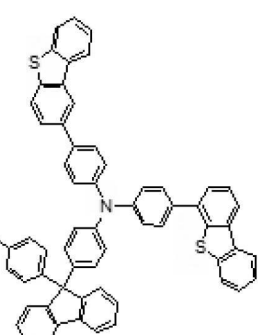
[B-29]



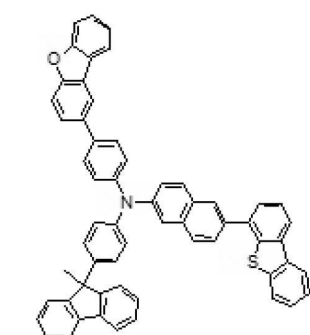
[B-30]



[B-31]

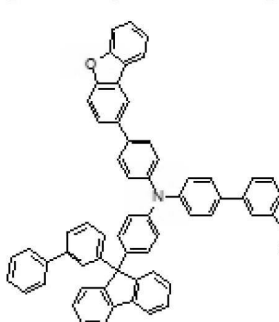


[B-32]

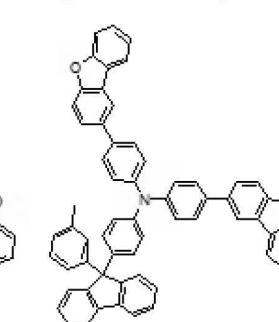


20

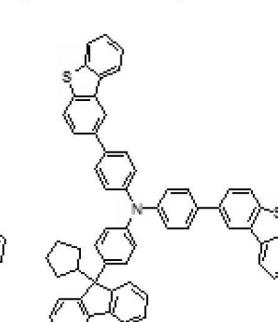
[B-33]



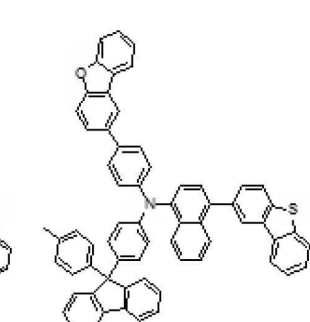
[B-34]



[B-35]

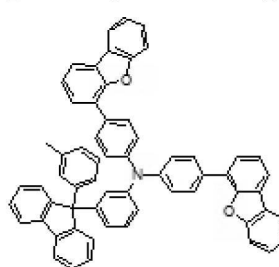


[B-36]

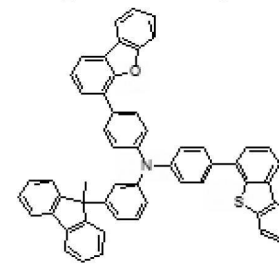


30

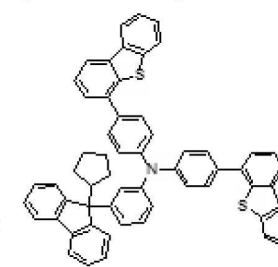
[B-37]



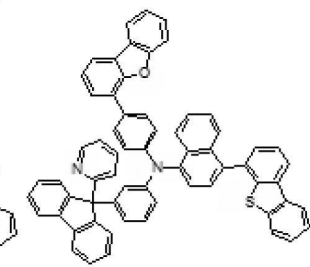
[B-38]



[B-39]



[B-40]

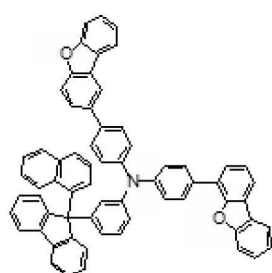


40

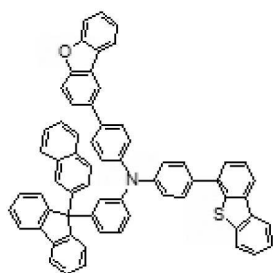
【 0 0 7 8】

【化 9 - 1 7】

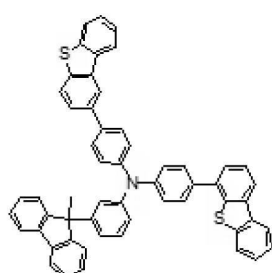
[B-41]



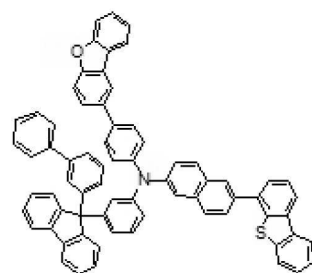
[B-42]



[B-43]

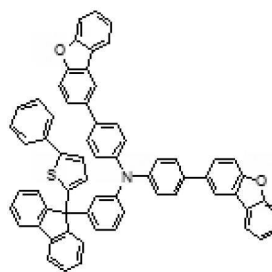


[B-44]

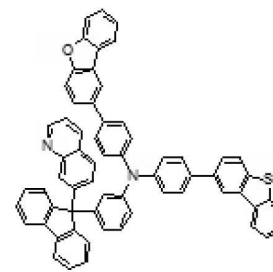


10

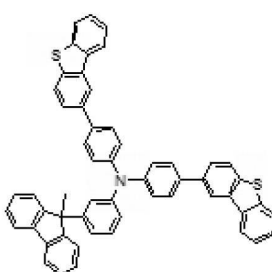
[B-45]



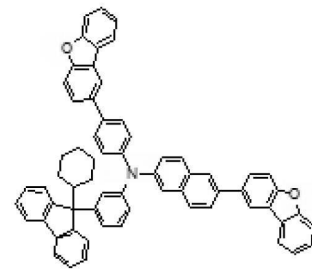
[B-46]



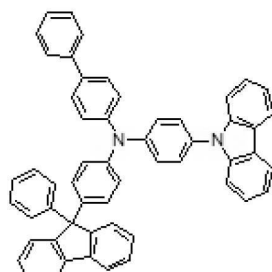
[B-47]



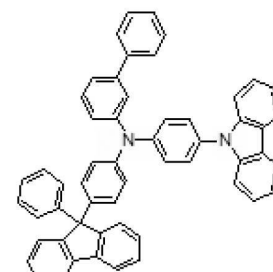
[B-48]



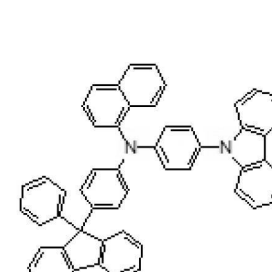
[C-1]



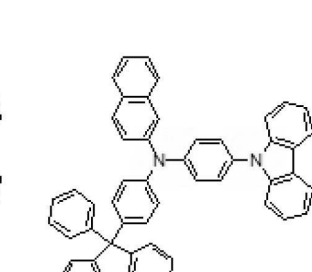
[C-2]



[C-3]

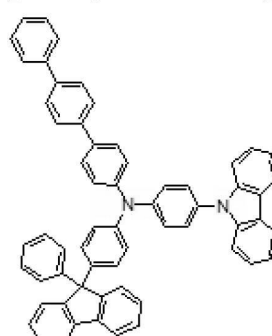


[C-4]

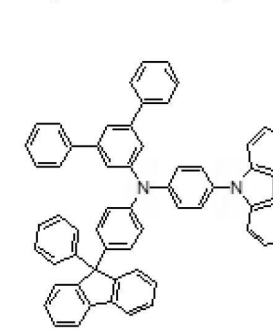


20

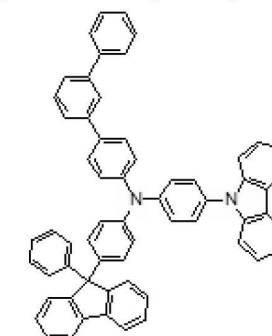
[C-5]



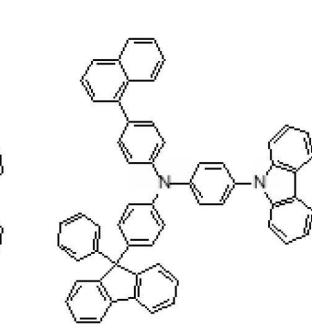
[C-6]



[C-7]

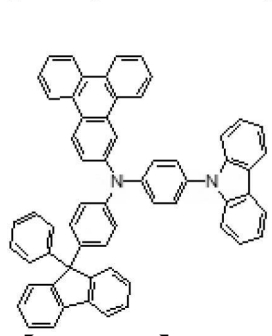


[C-8]

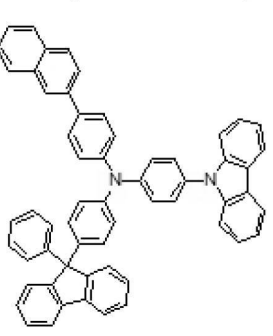


30

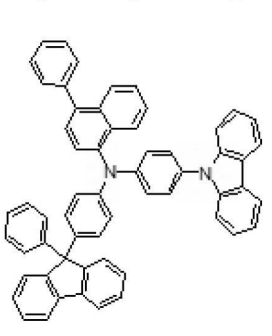
[C-9]



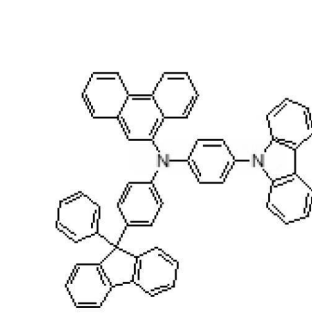
[C-10]



[C-11]



[C-12]

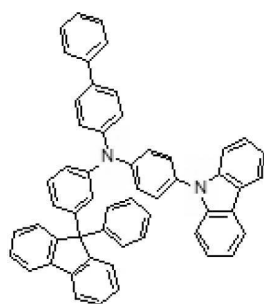


40

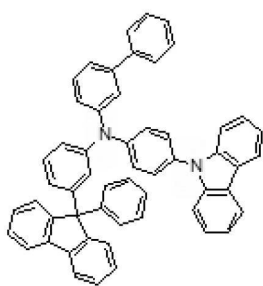
【 0 0 7 9】

【化 9 - 1 8】

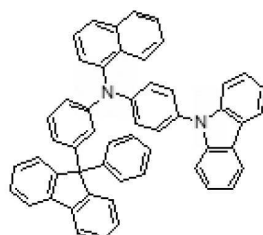
[C-13]



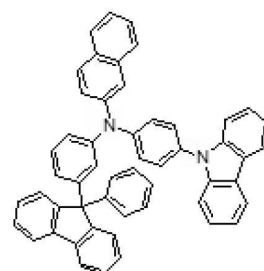
[C-14]



[C-15]

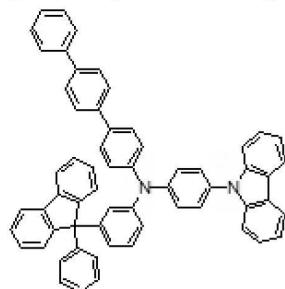


[C-16]

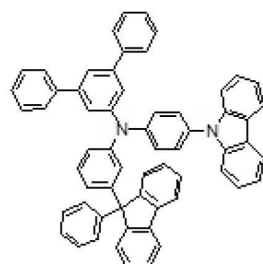


10

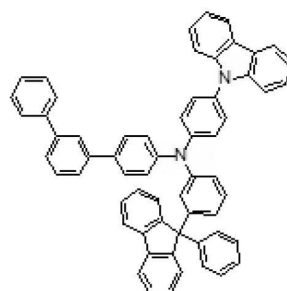
[C-17]



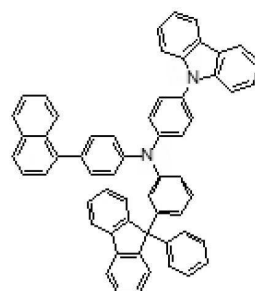
[C-18]



[C-19]

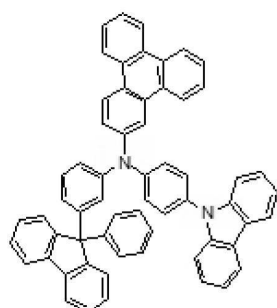


[C-20]

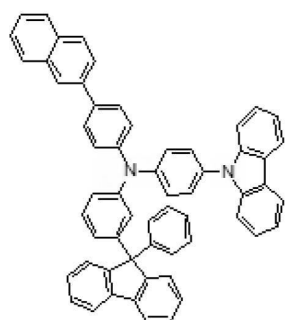


20

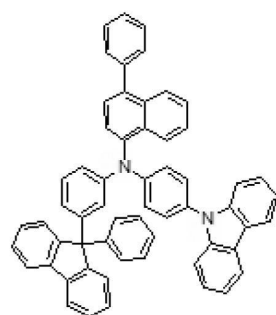
[C-21]



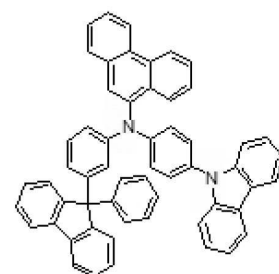
[C-22]



[C-23]

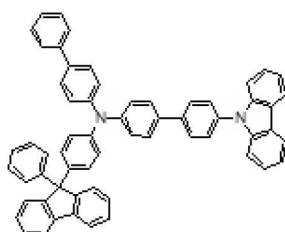


[C-24]

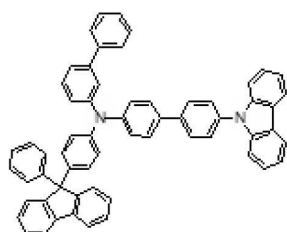


30

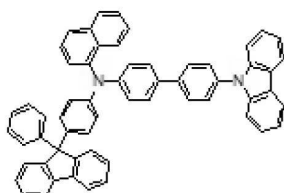
[C-25]



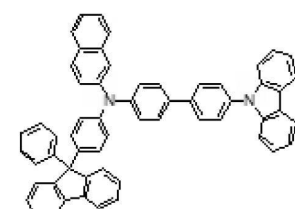
[C-26]



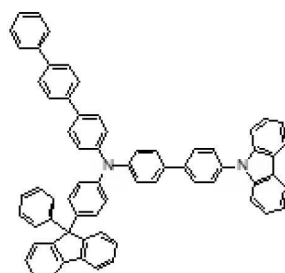
[C-27]



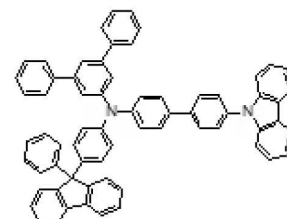
[C-28]



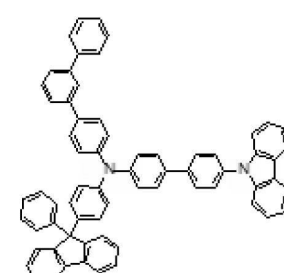
[C-29]



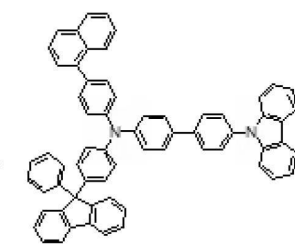
[C-30]



[C-31]



[C-32]

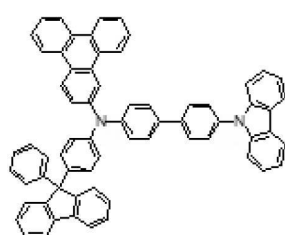


40

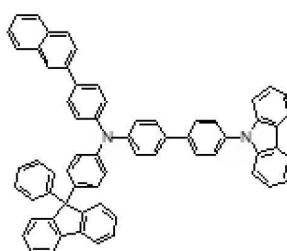
【 0 0 8 0】

【化 9 - 1 9】

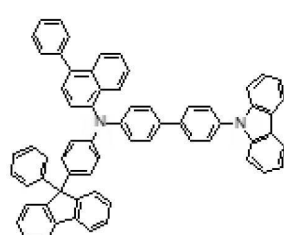
[C-33]



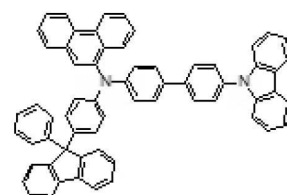
[C-34]



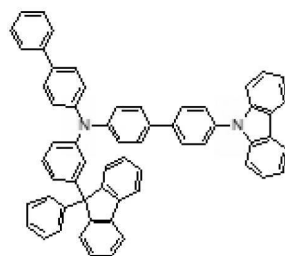
[C-35]



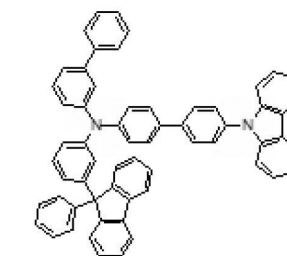
[C-36]



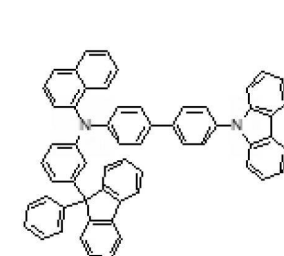
[C-37]



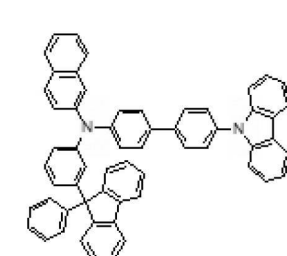
[C-38]



[C-39]

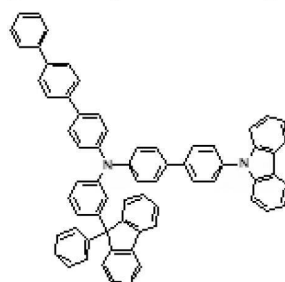


[C-40]

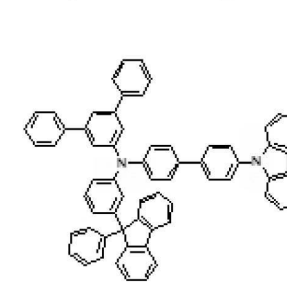


10

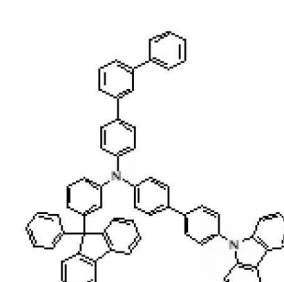
[C-41]



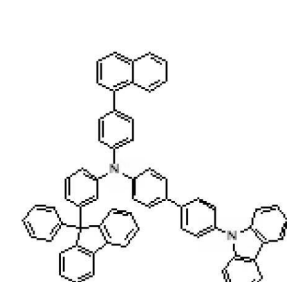
[C-42]



[C-43]

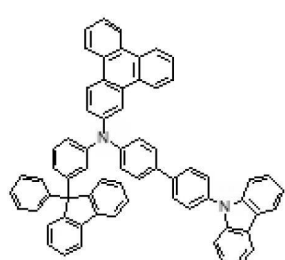


[C-44]

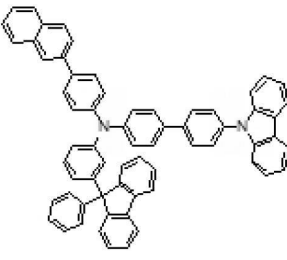


20

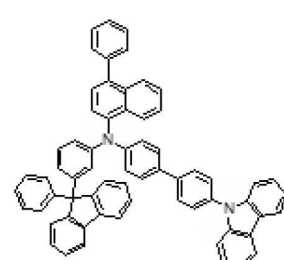
[C-45]



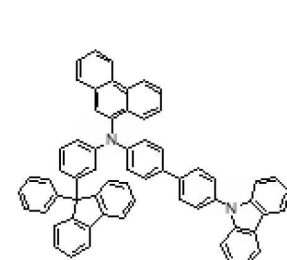
[C-46]



[C-47]

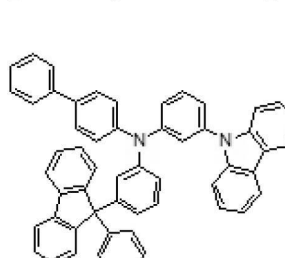


[C-48]

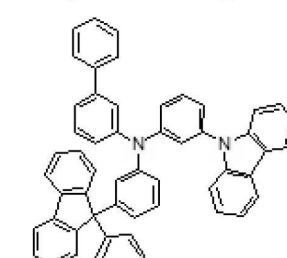


30

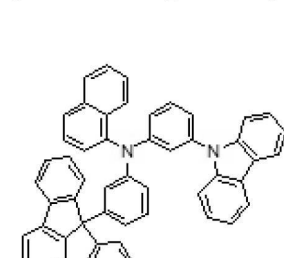
[C-49]



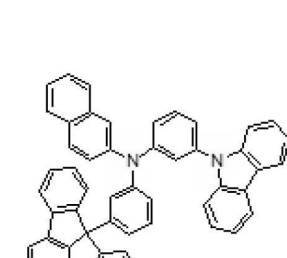
[C-50]



[C-51]



[C-52]

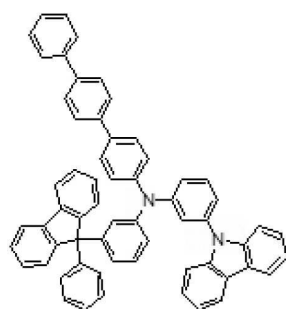


40

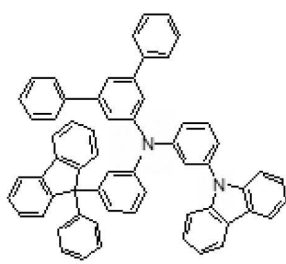
【 0 0 8 1】

【化 9 - 2 0】

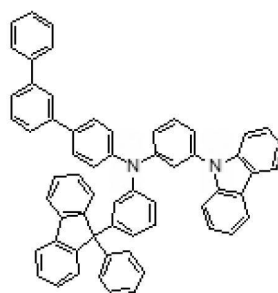
[C-53]



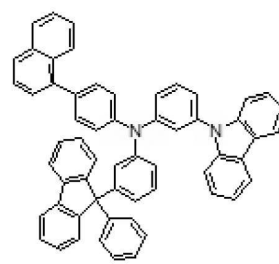
[C-54]



[C-55]

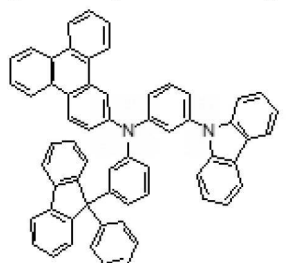


[C-56]

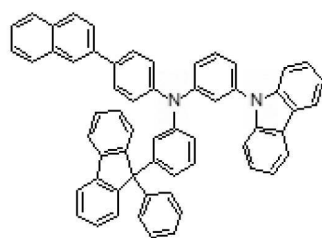


10

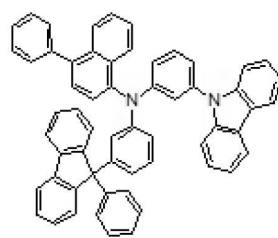
[C-57]



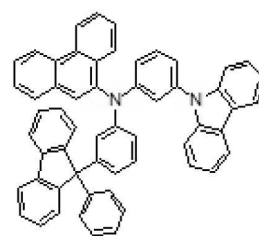
[C-58]



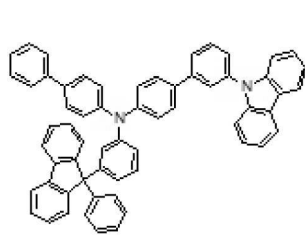
[C-59]



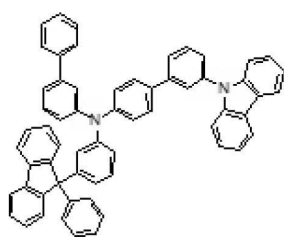
[C-60]



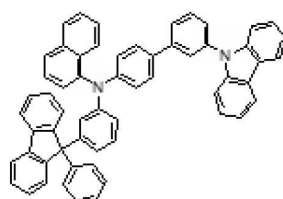
[C-61]



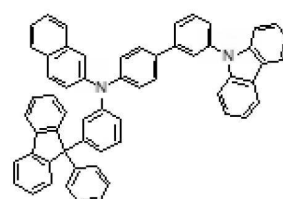
[C-62]



[C-63]

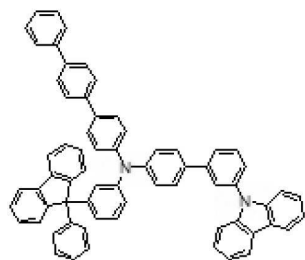


[C-64]

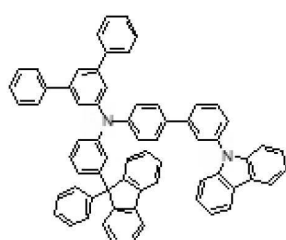


20

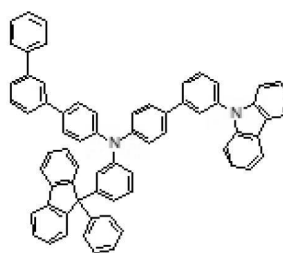
[C-65]



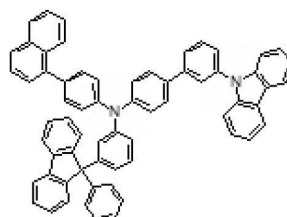
[C-66]



[C-67]

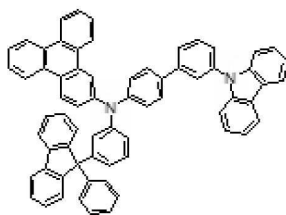


[C-68]

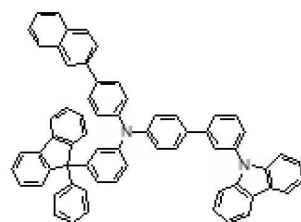


30

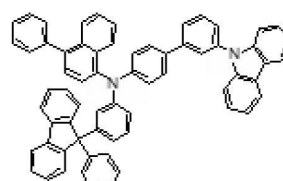
[C-69]



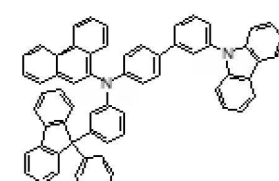
[C-70]



[C-71]



[C-72]

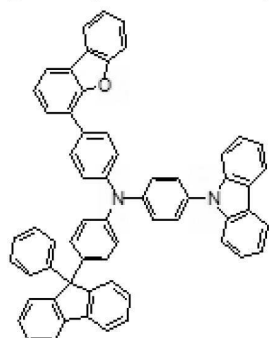


40

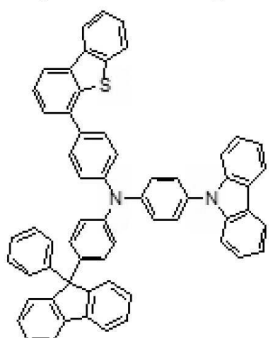
【 0 0 8 2】

【化 9 - 2 1】

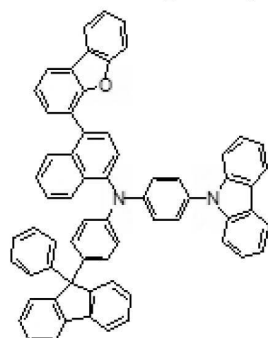
[D-1]



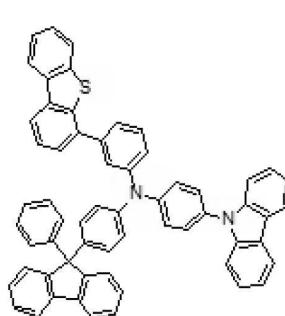
[D-2]



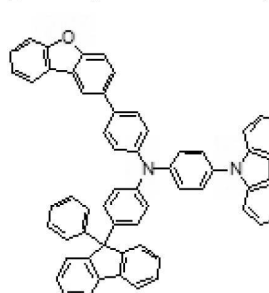
[D-3]



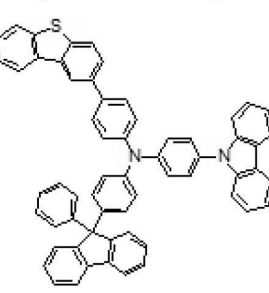
[D-4]



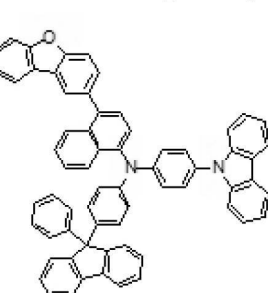
[D-5]



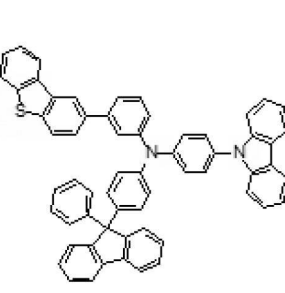
[D-6]



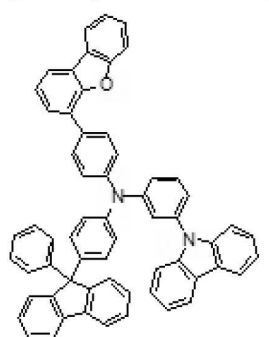
[D-7]



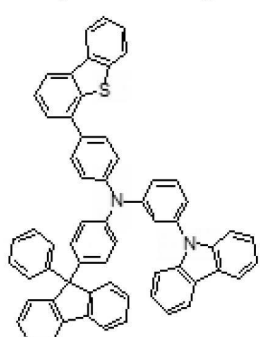
[D-8]



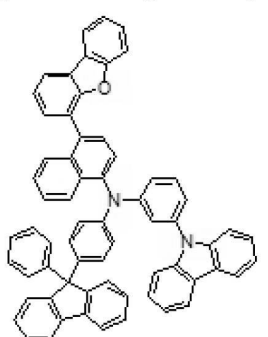
[D-9]



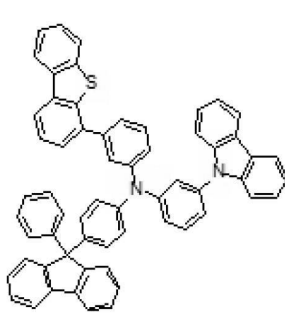
[D-10]



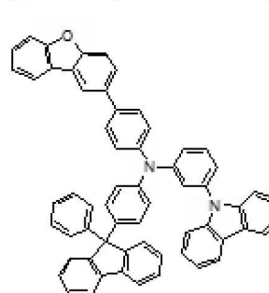
[D-11]



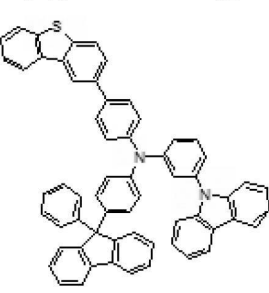
[D-12]



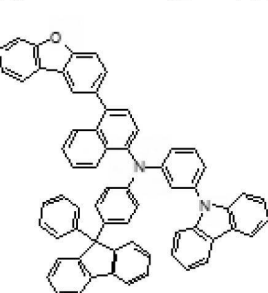
[D-13]



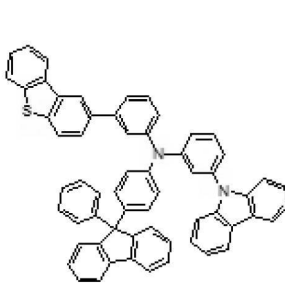
[D-14]



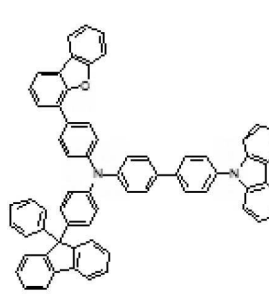
[D-15]



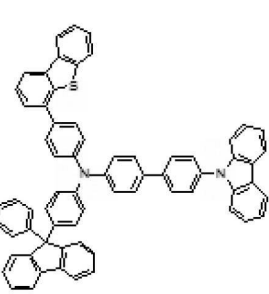
[D-16]



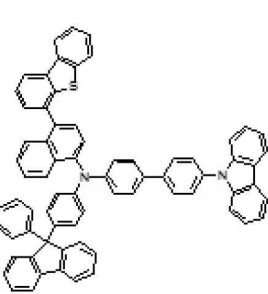
[D-17]



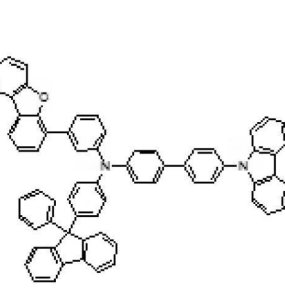
[D-18]



[D-19]



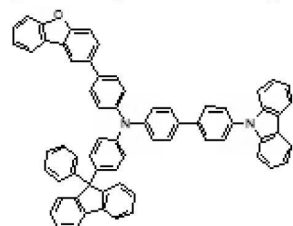
[D-20]



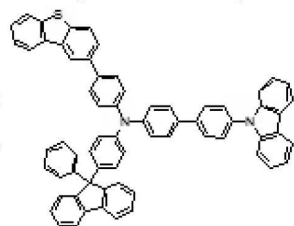
【0 0 8 3】

【化 9 - 2 2】

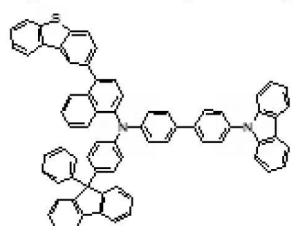
[D-21]



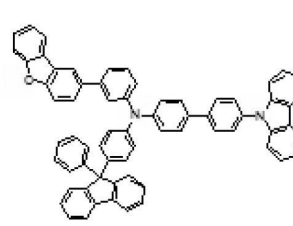
[D-22]



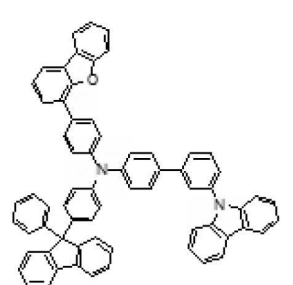
[D-23]



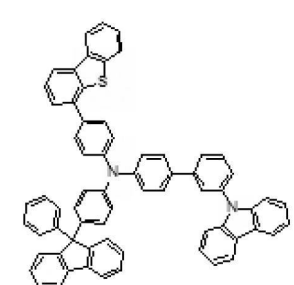
[D-24]



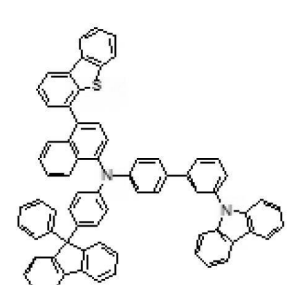
[D-25]



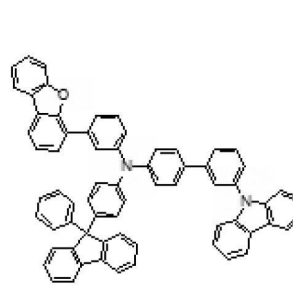
[D-26]



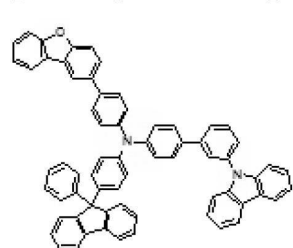
[D-27]



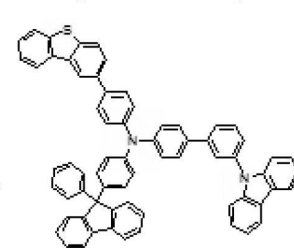
[D-28]



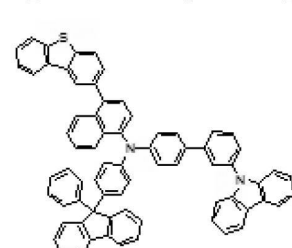
[D-29]



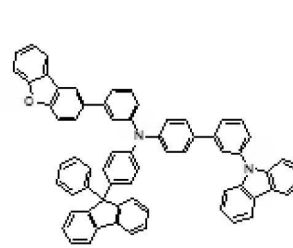
[D-30]



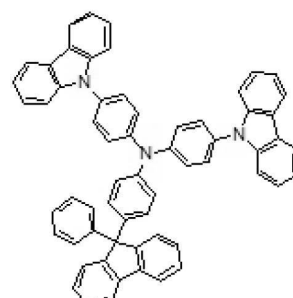
[D-31]



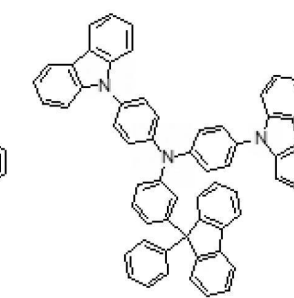
[D-32]



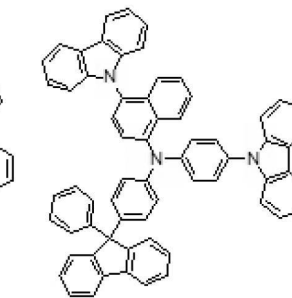
[E-1]



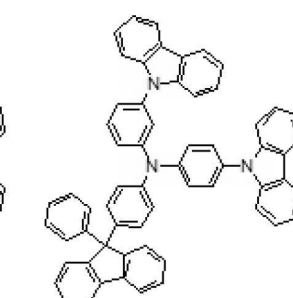
[E-2]



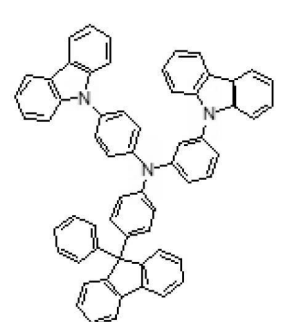
[E-3]



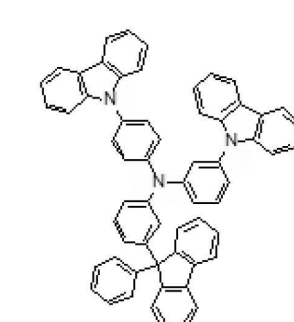
[E-4]



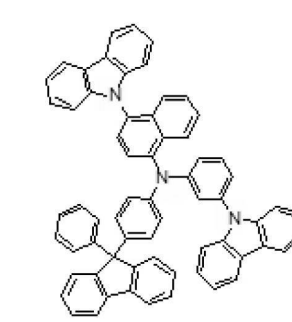
[E-5]



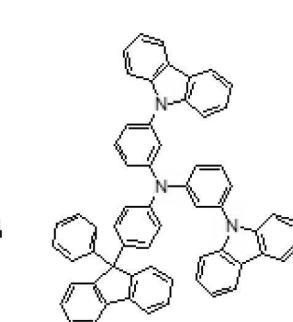
[E-6]



[E-7]



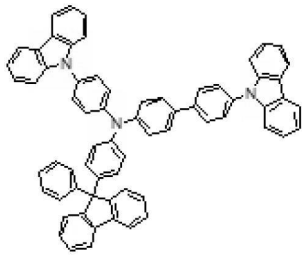
[E-8]



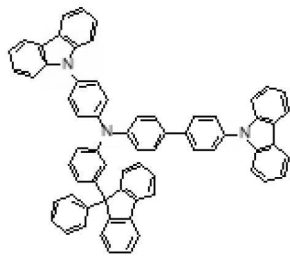
【 0 0 8 4】

【化 9 - 2 3】

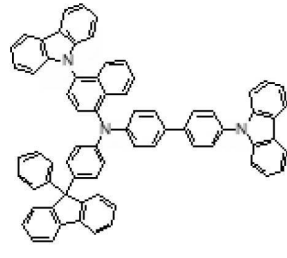
[E-9]



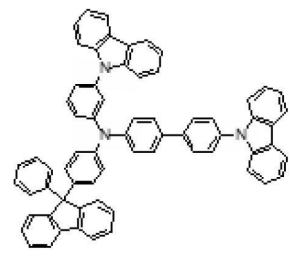
[E-10]



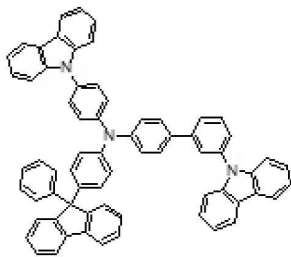
[E-11]



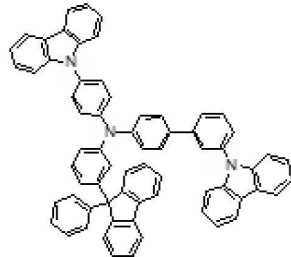
[E-12]



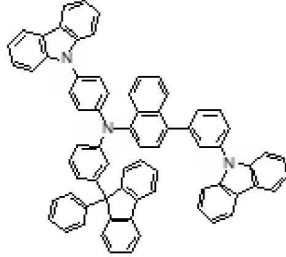
[E-13]



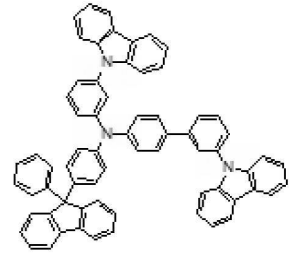
[E-14]



[E-15]



[E-16]



10

【0085】

前述した化合物は、有機光電子素子用であってもよい。

【0086】

20

以下、前述した化合物を適用した有機光電子素子について説明する。

【0087】

本発明の他の一実施形態では、互いに向き合う陽極および陰極と、前記陽極と前記陰極との間に位置する少なくとも一層の有機層と、を含み、前記有機層は、発光層と、正孔注入層、正孔輸送層、電子遮断層、電子輸送層、電子注入層および正孔遮断層から選択された少なくとも一つの補助層と、を含み、前記補助層は、前述した化合物を含む有機光電子素子を提供する。

【0088】

具体的に、前記補助層は、正孔輸送層であってもよい。

【0089】

30

前記有機光電子素子は、電気エネルギーと光エネルギーとを相互変換することができる素子であれば特に限定されず、例えば、有機光電素子、有機発光素子、有機太陽電池および有機感光体ドラムなどが挙げられる。

【0090】

ここでは有機光電子素子の一例である有機発光素子を図面を参照して説明する。

【0091】

図1および図2は、本発明の一実施形態に係る有機発光素子を示す断面図である。

【0092】

図1を参照すると、本発明の一実施形態に係る有機光電子素子100は、互いに向き合う陽極120および陰極110と、陽極120と陰極110との間に位置する有機層105と、を含む。

40

【0093】

陽極120は、例えば、正孔注入が円滑に行われるように仕事関数が高い導電体で作られ、例えば、金属、金属酸化物および／または導電性高分子で作られてもよい。陽極120は、例えば、ニッケル、白金、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が挙げられ、亜鉛酸化物、インジウム酸化物、インジウム錫酸化物（ITO）、インジウム亜鉛酸化物（IZO）のような金属酸化物が挙げられ、ZnOおよびAlまたはSnO₂およびSbのような金属および酸化物の組み合わせが挙げられ、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）（polyethylenedioxythiophene: PEDT）、ポリピロールお

50

よびポリアニリンのような導電性高分子などが挙げられるが、これに限定されない。

【0094】

陰極110は、例えば、電子注入が円滑に行われるように仕事関数が低い導電体で作られ、例えば、金属、金属酸化物および／または導電性高分子で作られてもよい。陰極110は、例えば、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、錫、鉛、セシウム、バリウムなどのような金属またはこれらの合金が挙げられ、 LiF/Al 、 LiO_2/Al 、 LiF/Ca 、 LiF/Al および BaF_2/Ca のような多層構造物質が挙げられるが、これに限定されない。

【0095】

有機層105は、発光層130を含む。

【0096】

発光層130は、例えば、化合物を単独で含むこともでき、2種類を混合して含むこともできる。2種類を混合して含む場合、例えば、ホスト(host)とドーパント(dopant)の形態で含まれ得る。前記ホストは、例えば、燐光ホストまたは蛍光ホストであってもよい。

【0097】

ドーパントは、無機、有機、有無機化合物であってもよく、公知のドーパントの中で選択されてもよい。

【0098】

図2を参照すると、有機発光素子200は、発光層230以外に正孔補助層140をさらに含む。正孔補助層140は、陽極120と発光層230との間の正孔注入および／または正孔移動性をさらに高め、電子を遮断することができる。正孔補助層140は、例えば、正孔輸送層、正孔注入層および／または電子遮断層であってもよく、少なくとも1層を含むことができる。前述した化合物は、正孔補助層140に含まれてもよい。

【0099】

図1または図2の有機層105は、図示してはいないが、電子注入層、電子輸送層、補助電子輸送層、正孔輸送層、補助正孔輸送層、正孔注入層またはこれらの組み合わせ層を追加的にさらに含むことができる。前述した化合物は、補助正孔輸送層に含まれてもよい。

【0100】

前記発光層230と前記補助正孔輸送層とは、隣接して位置することができる。

【0101】

本発明の化合物は、これらの有機層に含まれてもよい。有機発光素子100、200は、基板上に陽極または陰極を形成した後、真空蒸着法(evaporation)、スパッタリング(sputtering)、プラズマメッキおよびイオンメッキのような乾式成膜法、またはスピニング(spin coating)、浸漬法(dipping)、流動コーティング法(flow coating)のような湿式成膜法などで有機層を形成した後、その上に陰極または陽極を形成して製造することができる。

【0102】

前述した化合物は、蛍光材料として含まれてもよい。

【0103】

前記蛍光材料は、最大発光波長が550nm以下であってもよく、具体的には420nm～550nmの範囲で最大発光波長が現れ得る。

【0104】

前記化学式1で表される化合物のHOMO準位は、5.4eV以上5.8eV以下であってもよい。

【0105】

前記化学式1で表される化合物の三重項励起エネルギー(T1)は、2.4eV以上2.7eV以下であってもよい。

10

20

30

40

50

【0106】

前述した有機発光素子は、有機発光表示装置に適用され得る。

【実施例】

【0107】

以下、本発明の具体的な実施例を提示する。ただし、下記に記載された実施例は、本発明を具体的に例示または説明するためのものに過ぎず、これによって本発明が制限されることはない。

【0108】

以下、実施例および合成例で用いられた出発物質および反応物質は、特別な言及がない限り、シグマアルドリッチ社（Sigma-Aldrich社）、TCI社または市販で購入して使用するか公知の方法により製造した。

【0109】

（化合物の製造）

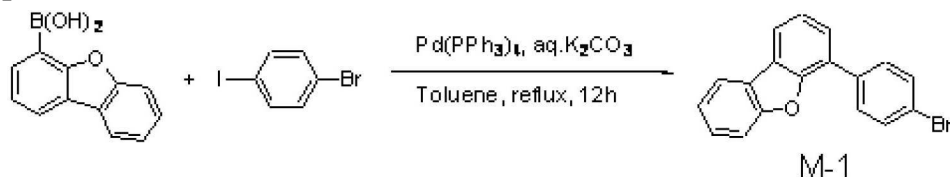
本発明の化合物のより具体的な例として提示された化合物を下記の段階を通じて合成した。

【0110】

合成例1：中間体M-1の合成

【0111】

【化10】



【0112】

丸底フラスコに4-ジベンゾフランボロン酸20g（94.3mmol）、1-ブロモ-4-ヨードベンゼン26.7g（94.3mmol）を入れてトルエン（313ml）を加えて溶解させた後、炭酸カリウム19.5g（141.5mmol）を溶かした水溶液117mlを添加させて攪拌した。ここにテトラキストリフェニルホスフィンパラジウム1.09g（0.94mmol）を加えた後、窒素雰囲気下で12時間還流攪拌した。反応終了後、酢酸エチルで抽出後、抽出液をマグネシウムスルフェートで乾燥および濾過し、濾過液を減圧濃縮した。生成物をn-ヘキサン/ジクロロメタン（9：1体積比）のシリカゲルカラムクロマトグラフィーで精製して目的化合物である中間体M-1を白色固体で27g（収率89%）得た：

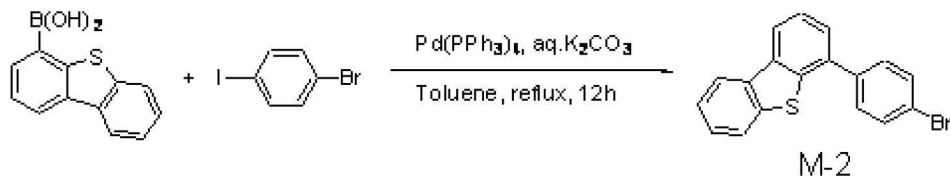
LC-Mass（理論値：322.00g/mol、測定値：M+=322.09g/mol、M+2=324.04g/mol）。

【0113】

合成例2：中間体M-2の合成

【0114】

【化11】



【0115】

丸底フラスコに4-ジベンゾチオフェンボロン酸21.5g（94.3mmol）、1-ブロモ-4-ヨードベンゼン26.7g（94.3mmol）を入れてトルエン（313ml）を加えて溶解させた後、炭酸カリウム19.5g（141.5mmol）を溶かした水溶液117mlを添加させて攪拌した。ここにテトラキストリフェニルホスフィン

パラジウム 1.09 g (0.94 mmol) を加えた後、窒素雰囲気下で 12 時間還流攪拌した。反応終了後、酢酸エチルで抽出後、抽出液をマグネシウムスルフェートで乾燥および濾過し、濾過液を減圧濃縮した。生成物を n-ヘキサン/ジクロロメタン (9:1 体積比) のシリカゲルカラムクロマトグラフィーで精製して目的化合物である中間体 M-2 を白色固体で 2.9 g (収率 91%) 得た:

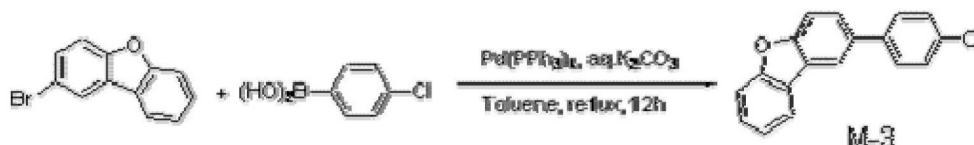
LC-Mass (理論値: 337.98 g/mol、測定値: M+ = 338.04 g/mol、M+2 = 340.11 g/mol)。

【0116】

合成例 3: 中間体 M-3 の合成

【0117】

【化 12】



【0118】

丸底フラスコに 4-クロロフェニルボロン酸 14.7 g (94.3 mmol)、2-ブロモジベンゾフラン 23.3 g (94.3 mmol) を入れてトルエン (313 ml) を加えて溶解させた後、炭酸カリウム 19.5 g (141.5 mmol) を溶かした水溶液 117 ml を添加させて攪拌した。ここにテトラキストリフェニルホスフィンパラジウム 1.09 g (0.94 mmol) を加えた後、窒素雰囲気下で 12 時間還流攪拌した。反応終了後、酢酸エチルで抽出後、抽出液をマグネシウムスルフェートで乾燥および濾過し、濾過液を減圧濃縮した。生成物を n-ヘキサン/ジクロロメタン (9:1 体積比) のシリカゲルカラムクロマトグラフィーで精製して目的化合物である中間体 M-3 を白色固体で 23.9 g (収率 91%) 得た:

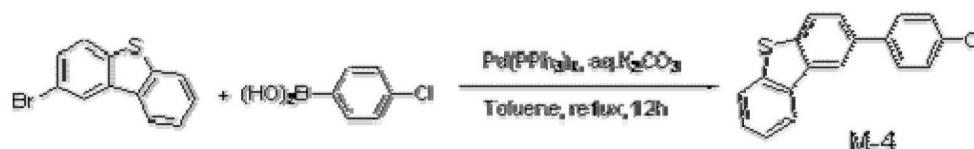
LC-Mass (理論値: 278.05 g/mol、測定値: M+ = 278.12 g/mol、M+2 = 280.13 g/mol)。

【0119】

合成例 4: 中間体 M-4 の合成

【0120】

【化 13】



【0121】

丸底フラスコに 4-クロロフェニルボロン酸 14.7 g (94.3 mmol)、2-ブロモジベンゾチオフェン 24.8 g (94.3 mmol) を入れてトルエン (313 ml) を加えて溶解させた後、炭酸カリウム 19.5 g (141.5 mmol) を溶かした水溶液 117 ml を添加させて攪拌した。ここにテトラキストリフェニルホスフィンパラジウム 1.09 g (0.94 mmol) を加えた後、窒素雰囲気下で 12 時間還流攪拌した。反応終了後、酢酸エチルで抽出後、抽出液をマグネシウムスルフェートで乾燥および濾過し、濾過液を減圧濃縮した。生成物を n-ヘキサン/ジクロロメタン (9:1 体積比) のシリカゲルカラムクロマトグラフィーで精製して目的化合物である中間体 M-4 を白色固体で 25.6 g (収率 92%) 得た:

LC-Mass (理論値: 294.03 g/mol、測定値: M+ = 294.16 g/mol、M+2 = 296.13 g/mol)。

【0122】

合成例 5: 中間体 M-5 の合成

【0123】

10

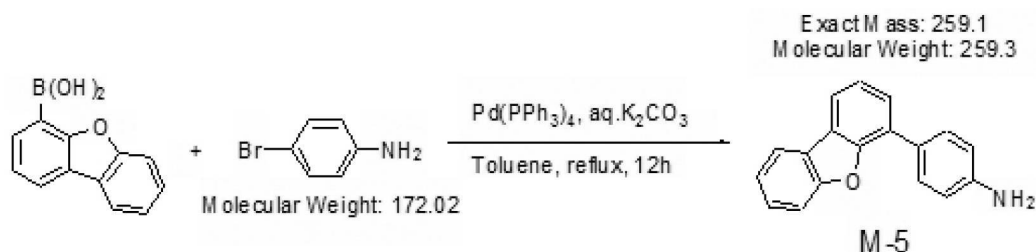
20

30

40

50

【化 1 4】



【0 1 2 4】

丸底フラスコに4-ジベンゾフランボロン酸20g(94.3mmol)、4-ブロモアニリン16.2g(94.3mmol)を入れてトルエン(300ml)を加えて溶解させた後、炭酸カリウム19.5g(141.5mmol)を溶かした水溶液117mlを添加させて攪拌した。ここにテトラキストリフェニルホスフィンパラジウム1.09g(0.94mmol)を加えた後、窒素雰囲気下で12時間還流攪拌した。反応終了後、酢酸エチルで抽出後、抽出液をマグネシウムスルフェートで乾燥および濾過し、濾過液を減圧濃縮した。生成物をn-ヘキサン/ジクロロメタン(9:1体積比)のシリカゲルカラムクロマトグラフィーで精製して目的化合物である中間体M-5を白色固体で17.4g(収率71%)得た：

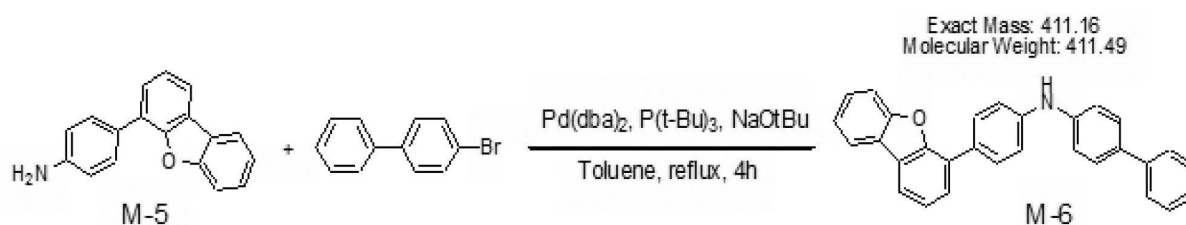
LC-Mass(理論値:259.1g/mol、測定値:M+=259.21g/mol)。

【0 1 2 5】

合成例6:中間体M-6の合成

【0 1 2 6】

【化 1 5】



【0 1 2 7】

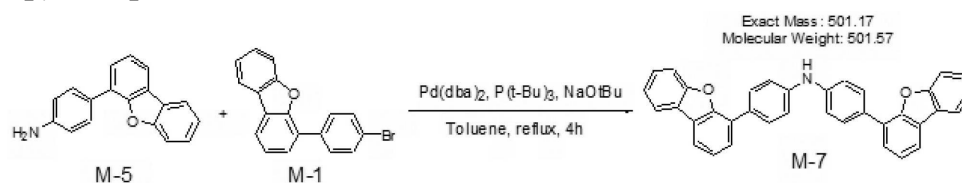
丸底フラスコに4-ブロモビフェニル7.2g(30.9mmol)と中間体M-59.6g(37.08mmol)、ナトリウムt-ブトキシド5.35g(55.6mmol)を入れてトルエン155mlを加えて溶解させた。ここにPd(dba)30.178g(0.31mmol)とトリ-tert-ブチルホスフィン0.125g(0.62mmol)とを順次に入れた後、窒素雰囲気下で4時間還流攪拌させた。反応終了後、トルエンと蒸留水とで抽出後、有機層をマグネシウムスルフェートで乾燥および濾過し、濾過液を減圧濃縮した。生成物をn-ヘキサン/ジクロロメタン(7:3体積比)のシリカゲルカラムクロマトグラフィーで精製して目的化合物である中間体M-6を白色固体で11.1g得た。

【0 1 2 8】

合成例7:中間体M-7の合成

【0 1 2 9】

【化 1 6】



【0 1 3 0】

10

20

30

40

50

丸底フラスコに中間体M-1 10 g (30.9 mmol)と中間体M-5 9.6 g (37.08 mmol)、ナトリウムt-ブトキシド5.35 g (55.6 mmol)を入れてトルエン155 mlを加えて溶解させた。ここにPd(dba)₂ 0.178 g (0.31 mmol)とトリ-tert-ブチルホスフィン0.125 g (0.62 mmol)とを順次に入れた後、窒素雰囲気下で4時間還流撹拌させた。反応終了後、トルエンと蒸留水とで抽出後、有機層をマグネシウムスルフェートで乾燥および濾過し、濾過液を減圧濃縮した。生成物をn-ヘキサン/ジクロロメタン(7:3体積比)のシリカゲルカラムクロマトグラフィーで精製して目的化合物である中間体M-7を白色固体で11.2 g (収率72%)得た:

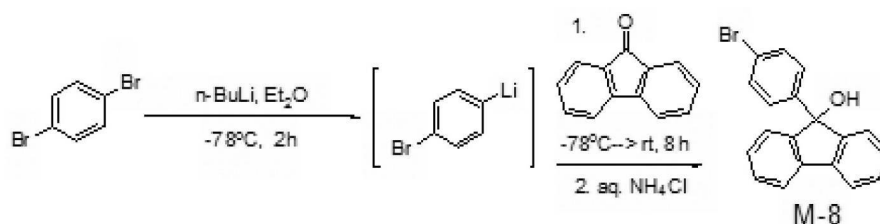
LC-Mass (理論値: 501.17 g/mol、測定値: M+ = 501.31 g/mol)。

【0131】

合成例8: 中間体M-8の合成

【0132】

【化17】



【0133】

加熱減圧乾燥した丸底フラスコに1,4-ジブロモベンゼン56.2 g (238.1 mmol)を入れて無水ジエチルエーテル(500 ml)を加えて溶解させ、-78°Cに冷却した後、窒素雰囲気下で撹拌した。ここに2.5 Mのn-ブチリチウムノルマルヘキサン溶液100 ml (250 mmol)を徐々に加えた後、-78°C、窒素雰囲気下で2時間撹拌した。ここに無水テトラヒドロフラン100 mlに溶かした9-フルオレノン41 g (226 mmol)を徐々に加えた後、常温、窒素雰囲気下で8時間撹拌した。反応液を0°Cに冷却し、ここに1.0 Mの塩化アンモニウム水溶液250 mlを加え、ジエチルエーテルで抽出後、有機層をマグネシウムスルフェートで乾燥および濾過し、濾過液を減圧濃縮した。残留物を10%酢酸エチル/ノルマルヘキサン溶液のシリカゲルカラムクロマトグラフィーで分離して目的化合物である中間体M-8を70 g (収率92%)得た:

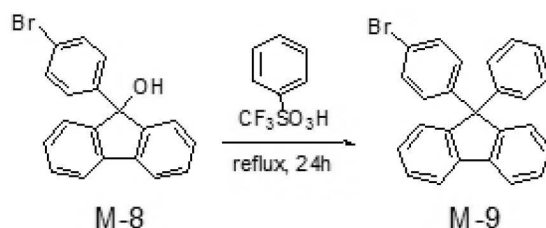
LC-Mass (理論値: 336.01 g/mol、測定値: M+ = 336.17 g/mol)。

【0134】

合成例9: 中間体M-9の合成

【0135】

【化18】



【0136】

丸底フラスコに中間体M-8 67.4 g (200 mmol)を入れてベンゼン534 mLを加えて溶解させた。ここにトリフルオロメタンスルホン酸30 g (200 mmol)を徐々に加えた後、窒素雰囲気下で24時間還流撹拌させた。反応終了後、反応液に1.0 Mの炭酸水素ナトリウム水溶液240 mlを徐々に加え、酢酸エチルと蒸留水とで抽

出後、有機層をマグネシウムスルフェートで乾燥および濾過し、濾過液を減圧濃縮した。生成物をn-ヘキサン/ジクロロメタン（9：1体積比）のシリカゲルカラムクロマトグラフィーで精製して目的化合物であるM-9を27.8g（収率35%）得た：

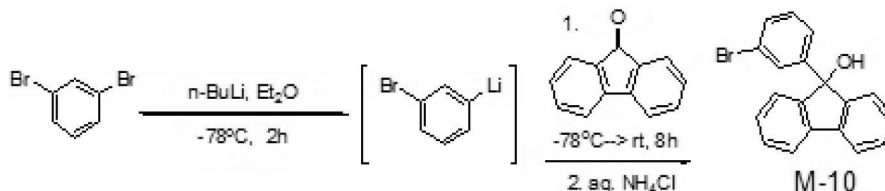
LC-Mass（理論値：396.05g/mol、測定値：M+=396.14g/mol）。

【0137】

合成例10：中間体M-10の合成

【0138】

【化19】



10

【0139】

加熱減圧乾燥した丸底フラスコに1,3-ジブロモベンゼン56.2g（238.1mmol）を入れて無水ジエチルエーテル（500ml）を加えて溶解させ、-78°Cに冷却した後、窒素雰囲気下で攪拌した。ここに2.5Mのn-ブチルリチウムノルマルヘキサン溶液100ml（250mmol）を徐々に加えた後、-78°C、窒素雰囲気下で2時間攪拌した。ここに無水テトラヒドロフラン100mlに溶かした9-フルオレノン41g（226mmol）を徐々に加えた後、常温、窒素雰囲気下で8時間攪拌した。反応液を0°Cに冷却し、ここに1.0Mの塩化アンモニウム水溶液250mlを加えてジエチルエーテルで抽出後、有機層をマグネシウムスルフェートで乾燥および濾過し、濾過液を減圧濃縮した。残留物を10%酢酸エチル/ノルマルヘキサン溶液のシリカゲルカラムクロマトグラフィーで分離して目的化合物である中間体M-10を65g（収率85%）得た：

20

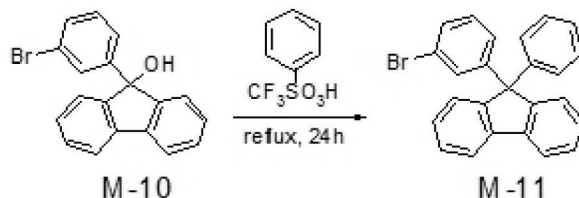
LC-Mass（理論値：336.01g/mol、測定値：M+=336.21g/mol）。

【0140】

合成例11：中間体M-11の合成

【0141】

【化20】



30

【0142】

丸底フラスコに中間体M-10 60g（178mmol）を入れてベンゼン476mlを加えて溶解させた。ここにトリフルオロメタンスルホン酸26.7g（200mmol）を徐々に加えた後、窒素雰囲気下で24時間還流攪拌させた。反応終了後、反応液に1.0Mの炭酸水素ナトリウム水溶液214mlを徐々に加え、酢酸エチルと蒸留水とで抽出後、有機層をマグネシウムスルフェートで乾燥および濾過し、濾過液を減圧濃縮した。生成物をn-ヘキサン/ジクロロメタン（9：1体積比）のシリカゲルカラムクロマトグラフィーで精製して目的化合物であるM-11を30.4g（収率43%）得た：

40

LC-Mass（理論値：396.05g/mol、測定値：M+=396.19g/mol）。

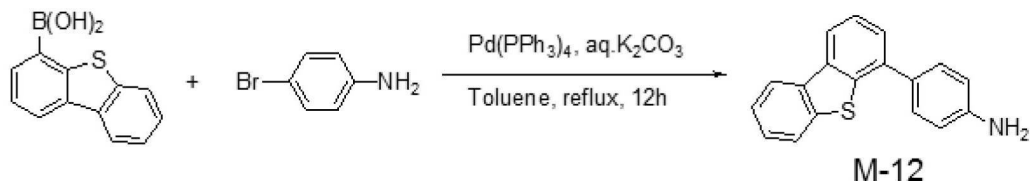
【0143】

50

合成例 12：中間体 M-12 の合成

【0144】

【化21】



【0145】

丸底フラスコに 4-ジベンゾチオフェンボロン酸 21.5 g (94.3 mmol) と、4-ブロモアニリン 16.2 g (94.3 mmol) とを入れてトルエン (300 ml) を加えて溶解させた後、炭酸カリウム 19.5 g (141.5 mmol) を溶かした水溶液 117 ml を添加させて攪拌した。ここにテトラキストリフェニルホスフィンパラジウム 1.09 g (0.94 mmol) を加えた後、窒素雰囲気下で 12 時間還流攪拌した。反応終了後、酢酸エチルで抽出後、抽出液をマグネシウムスルフェートで乾燥および濾過し、濾過液を減圧濃縮した。生成物を n-ヘキサン/ジクロロメタン (7:3 体積比) のシリカゲルカラムクロマトグラフィーで精製して目的化合物である中間体 M-12 を白色固体で 19.2 g (収率 74%) 得た：

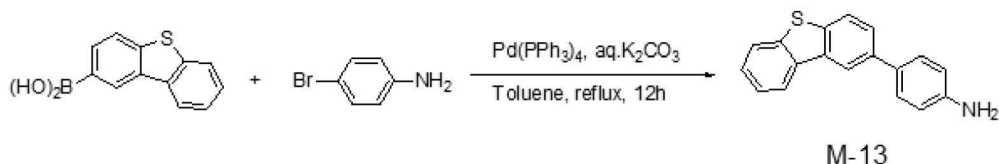
LC-Mass (理論値：275.08 g/mol、測定値：M+ = 275.14 g/mol)。

【0146】

合成例 13：中間体 M-13 の合成

【0147】

【化22】



【0148】

丸底フラスコに 2-ジベンゾチオフェンボロン酸 21.5 g (94.3 mmol) と、4-ブロモアニリン 16.2 g (94.3 mmol) とを入れてトルエン (300 ml) を加えて溶解させた後、炭酸カリウム 19.5 g (141.5 mmol) を溶かした水溶液 117 ml を添加させて攪拌した。ここにテトラキストリフェニルホスフィンパラジウム 1.09 g (0.94 mmol) を加えた後、窒素雰囲気下で 12 時間還流攪拌した。反応終了後、酢酸エチルで抽出後、抽出液をマグネシウムスルフェートで乾燥および濾過し、濾過液を減圧濃縮した。生成物を n-ヘキサン/ジクロロメタン (7:3 体積比) のシリカゲルカラムクロマトグラフィーで精製して目的化合物である中間体 M-13 を白色固体で 17.9 g (収率 69%) 得た：

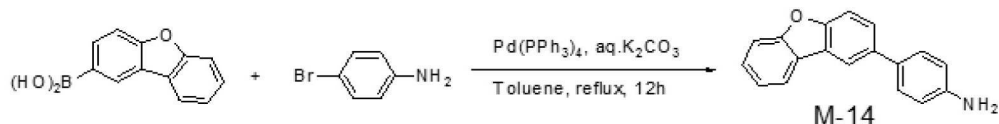
LC-Mass (理論値：275.08 g/mol、測定値：M+ = 275.21 g/mol)。

【0149】

合成例 14：中間体 M-14 の合成

【0150】

【化23】



【0151】

10

20

30

40

50

丸底フラスコに2-ジベンゾフランボロン酸20g(94.3mmol)と、4-ブロモアニリン16.2g(94.3mmol)とを入れてトルエン(300ml)を加えて溶解させた後、炭酸カリウム19.5g(141.5mmol)を溶かした水溶液117mlを添加させて攪拌した。ここにテトラキストリフェニルホスフィンパラジウム1.09g(0.94mmol)を加えた後、窒素雰囲気下で12時間還流攪拌した。反応終了後、酢酸エチルで抽出後、抽出液をマグネシウムスルフェートで乾燥および濾過し、濾過液を減圧濃縮した。生成物をn-ヘキサン/ジクロロメタン(7:3体積比)のシリカゲルカラムクロマトグラフィーで精製して目的化合物である中間体M-14を白色固体で17.4g(収率71%)を得た:

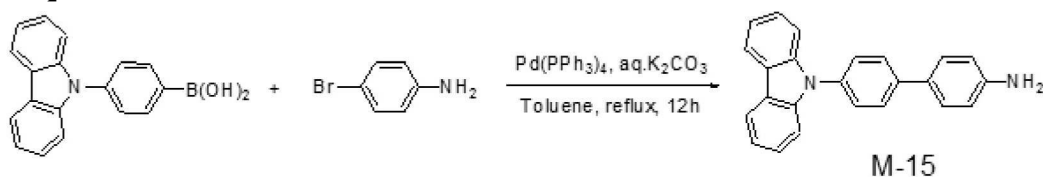
LC-Mass (理論値: 259.1/mol、測定値: $M+ = 259.12$ g/mol)。

【0152】

合成例15: 中間体M-15の合成

【0153】

【化24】



【0154】

丸底フラスコに4-(9H-カルバゾール-9-イル)フェニルボロン酸27.1g(94.3mmol)、4-ブロモアニリン16.2g(94.3mmol)を入れてトルエン(300ml)を加えて溶解させた後、炭酸カリウム19.5g(141.5mmol)を溶かした水溶液117mlを添加させて攪拌した。ここにテトラキストリフェニルホスフィンパラジウム1.09g(0.94mmol)を加えた後、窒素雰囲気下で12時間還流攪拌した。反応終了後、酢酸エチルで抽出後、抽出液をマグネシウムスルフェートで乾燥および濾過し、濾過液を減圧濃縮した。生成物をn-ヘキサン/ジクロロメタン(7:3体積比)のシリカゲルカラムクロマトグラフィーで精製して目的化合物である中間体M-15を白色固体で23.3g(収率74%)得た:

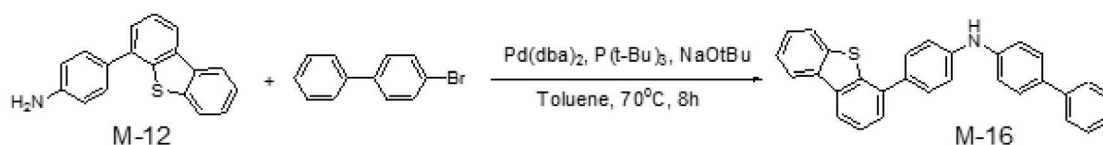
LC-Mass (理論値: 334.15 g/mol、測定値: $M+ = 334.23$ g/mol)。

【0155】

合成例16: 中間体M-16の合成

【0156】

【化25】



【0157】

丸底フラスコに4-ブロモビフェニル7.2g(30.9mmol)と、中間体M-12 10.2g(37.08mmol)と、ナトリウムt-ブトキシド5.35g(55.6mmol)とを入れてトルエン155mlを加えて溶解させた。ここにPd(dba)3 0.178g(0.31mmol)とトリ-t-ブチルホスフィン0.125g(0.62mmol)とを順次に入れた後、窒素雰囲気下で8時間かけて70°Cで攪拌させた。反応終了後、トルエンと蒸留水とで抽出後、有機層をマグネシウムスルフェートで乾燥および濾過し、濾過液を減圧濃縮した。生成物をn-ヘキサン/ジクロロメタン(7:3体積比)のシリカゲルカラムクロマトグラフィーで精製して目的化合物である中間体M-16を白色固体で10g(収率: 76%)得た:

10

20

30

40

50

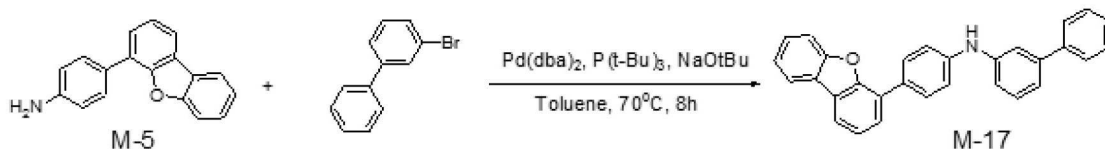
LC-Mass (理論値: 427.14 g/mol、測定値: $M+ = 427.25$ g/mol)。

【0158】

合成例17: 中間体M-17の合成

【0159】

【化26】



10

【0160】

丸底フラスコに3-ブロモビフェニル7.2 g (30.9 mmol)と、中間体M-5 9.6 g (37.08 mmol)と、ナトリウムt-ブトキシド5.35 g (55.6 mmol)を入れてトルエン155 mlを加えて溶解させた。ここにPd(dba)₃ 0.178 g (0.31 mmol)とトリ-tert-ブチルホスフィン0.125 g (0.62 mmol)とを順次に入れた後、窒素雰囲気下で8時間かけて70°Cで攪拌させた。反応終了後、トルエンと蒸留水とで抽出後、有機層をマグネシウムスルフェートで乾燥および濾過し、濾過液を減圧濃縮した。生成物をn-ヘキサン/ジクロロメタン(7:3体積比)のシリカゲルカラムクロマトグラフィーで精製して目的化合物である中間体M-17を白色固体で9.7 g (収率: 76%)得た:

20

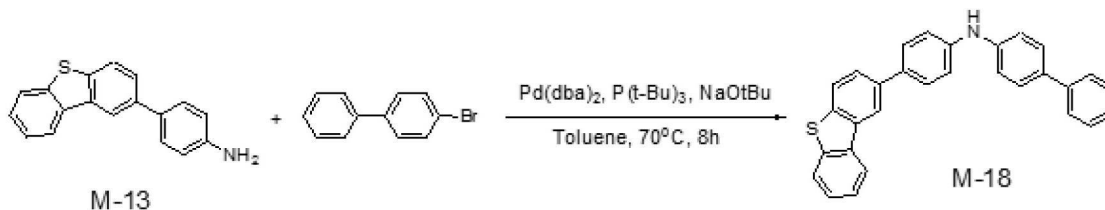
LC-Mass (理論値: 411.16 g/mol、測定値: $M+ = 411.24$ g/mol)。

【0161】

合成例18: 中間体M-18の合成

【0162】

【化27】



30

【0163】

丸底フラスコに4-ブロモビフェニル7.2 g (30.9 mmol)と、中間体M-13 10.2 g (37.08 mmol)と、ナトリウムt-ブトキシド5.35 g (55.6 mmol)とを入れてトルエン155 mlを加えて溶解させた。ここにPd(dba)₃ 0.178 g (0.31 mmol)とトリ-tert-ブチルホスフィン0.125 g (0.62 mmol)とを順次に入れた後、窒素雰囲気下で8時間かけて70°Cで攪拌させた。反応終了後、トルエンと蒸留水とで抽出後、有機層をマグネシウムスルフェートで乾燥および濾過し、濾過液を減圧濃縮した。生成物をn-ヘキサン/ジクロロメタン(7:3体積比)のシリカゲルカラムクロマトグラフィーで精製して目的化合物である中間体M-18を白色固体で9.8 g (収率: 74%)得た:

40

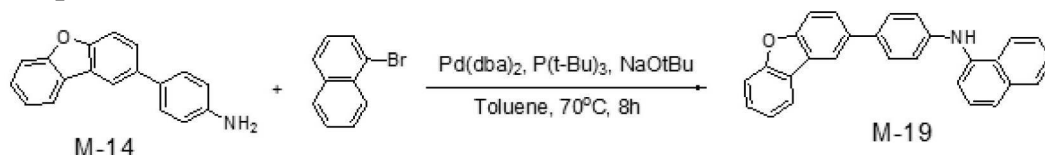
LC-Mass (理論値: 427.14 g/mol、測定値: $M+ = 427.21$ g/mol)。

【0164】

合成例19: 中間体M-19の合成

【0165】

【化 28】



【0166】

丸底フラスコに1-ブロモナフタレン6.4g(30.9mmol)と、中間体M-14 9.6g(37.08mmol)と、ナトリウムt-ブトキシド5.35g(55.6mmol)とを入れてトルエン155mlを加えて溶解させた。ここにPd(dba)₂ 0.178g(0.31mmol)とトリ-tert-ブチルホスフィン0.125g(0.62mmol)とを順次に入れた後、窒素雰囲気下で8時間かけて70℃で攪拌させた。反応終了後、トルエンと蒸留水とで抽出後、有機層をマグネシウムスルフェートで乾燥および濾過し、濾過液を減圧濃縮した。生成物をn-ヘキサン/ジクロロメタン(7:3体積比)のシリカゲルカラムクロマトグラフィーで精製して目的化合物である中間体M-19を白色固体で9.2g(収率:77%)得た:

10

LC-Mass(理論値:385.15g/mol、測定値:M+=385.28g/mol)。

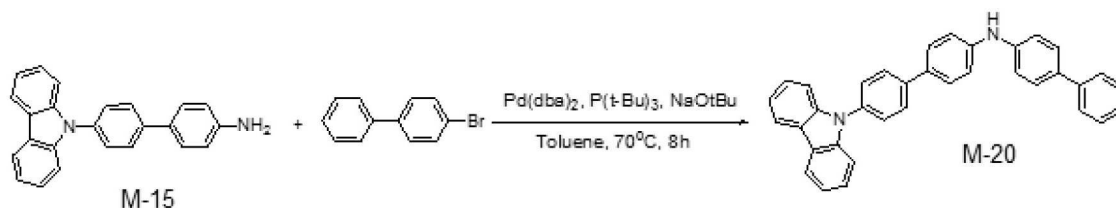
【0167】

合成例20:中間体M-20の合成

【0168】

20

【化 29】



【0169】

丸底フラスコに4-ブロモビフェニル7.2g(30.9mmol)と、中間体M-15 12.4g(37.08mmol)と、ナトリウムt-ブトキシド5.35g(55.6mmol)とを入れてトルエン155mlを加えて溶解させた。ここにPd(dba)₂ 0.178g(0.31mmol)とトリ-tert-ブチルホスフィン0.125g(0.62mmol)とを順次に入れた後、窒素雰囲気下で8時間かけて70℃で攪拌させた。反応終了後、トルエンと蒸留水とで抽出後、有機層をマグネシウムスルフェートで乾燥および濾過し、濾過液を減圧濃縮した。生成物をn-ヘキサン/ジクロロメタン(7:3体積比)のシリカゲルカラムクロマトグラフィーで精製して目的化合物である中間体M-20を白色固体で10.5g(収率:70%)を得た:

30

LC-Mass(理論値:486.21g/mol、測定値:M+=486.21g/mol)。

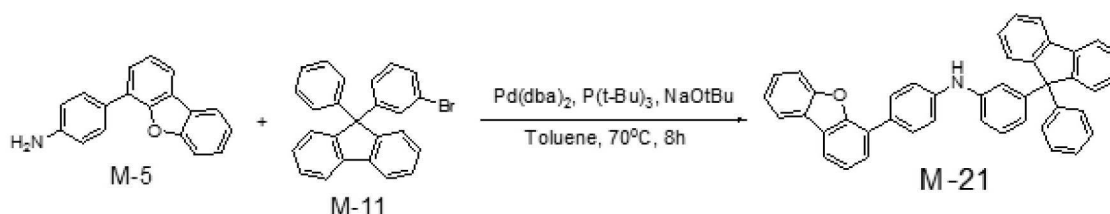
【0170】

40

合成例21:中間体M-21の合成

【0171】

【化 30】



【0172】

50

丸底フラスコに中間体M-11 12.3 g (30.9 mmol)と、中間体M-5 9.6 g (37.08 mmol)と、ナトリウムt-ブトキシド5.35 g (55.6 mmol)とを入れてトルエン155 mlを加えて溶解させた。ここにPd(dba)₂ 0.178 g (0.31 mmol)とトリ-tert-ブチルホスフィン0.125 g (0.62 mmol)とを順次に入れた後、窒素雰囲気下で8時間かけて70℃で攪拌させた。反応終了後、トルエンと蒸留水とで抽出後、有機層をマグネシウムスルフェートで乾燥および濾過し、濾過液を減圧濃縮した。生成物をn-ヘキサン/ジクロロメタン(7:3体積比)のシリカゲルカラムクロマトグラフィーで精製して目的化合物である中間体M-21を白色固体で12.5 g (収率: 70%)得た:

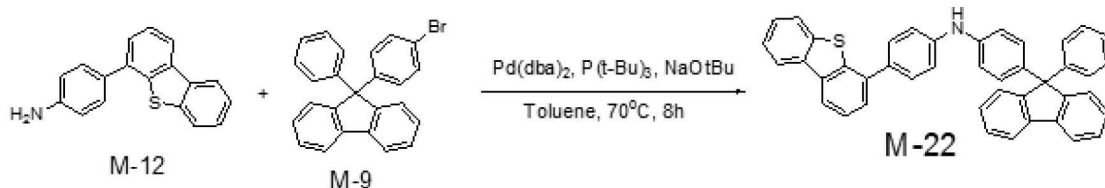
LC-Mass (理論値: 575.22 g/mol、測定値: M+ = 575.24 g/mol)。

【0173】

合成例22: 中間体M-22の合成

【0174】

【化31】



【0175】

丸底フラスコに中間体M-9 12.3 g (30.9 mmol)と、中間体M-12 10.2 g (37.08 mmol)と、ナトリウムt-ブトキシド5.35 g (55.6 mmol)とを入れてトルエン155 mlを加えて溶解させた。ここにPd(dba)₂ 0.178 g (0.31 mmol)とトリ-tert-ブチルホスフィン0.125 g (0.62 mmol)とを順次に入れた後、窒素雰囲気下で8時間かけて70℃で攪拌させた。反応終了後、トルエンと蒸留水とで抽出後、有機層をマグネシウムスルフェートで乾燥および濾過し、濾過液を減圧濃縮した。生成物をn-ヘキサン/ジクロロメタン(7:3体積比)のシリカゲルカラムクロマトグラフィーで精製して目的化合物である中間体M-22を白色固体で13.2 g (収率: 72%)得た:

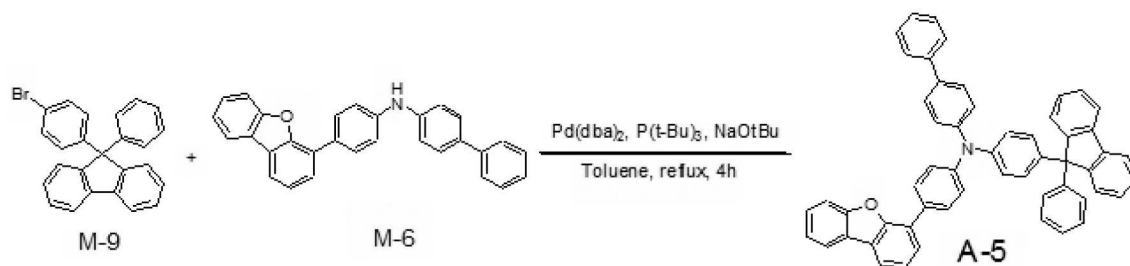
LC-Mass (理論値: 591.2 g/mol、測定値: M+ = 591.31 g/mol)。

【0176】

実施例1: 化合物A-5の合成

【0177】

【化32】



【0178】

丸底フラスコに中間体M-9 7.95 g (20 mmol)と、中間体M-6 8.23 g (20 mmol)と、ナトリウムt-ブトキシド2.9 g (30 mmol)とを入れてトルエン155 mlを加えて溶解させた。ここにPd(dba)₂ 0.115 g (0.2 mmol)とトリ-tert-ブチルホスフィン0.101 g (0.5 mmol)とを順次に入れた後、窒素雰囲気下で4時間還流攪拌させた。反応終了後、トルエンと蒸留水とで抽出後、有機層をマグネシウムスルフェートで乾燥および濾過し、濾過液を減圧濃縮

した。生成物を *n*-ヘキサン/ジクロロメタン（８：２体積比）のシリカゲルカラムクロマトグラフィーで精製して目的化合物である A-5 を 13.5 g（収率 93%）得た：

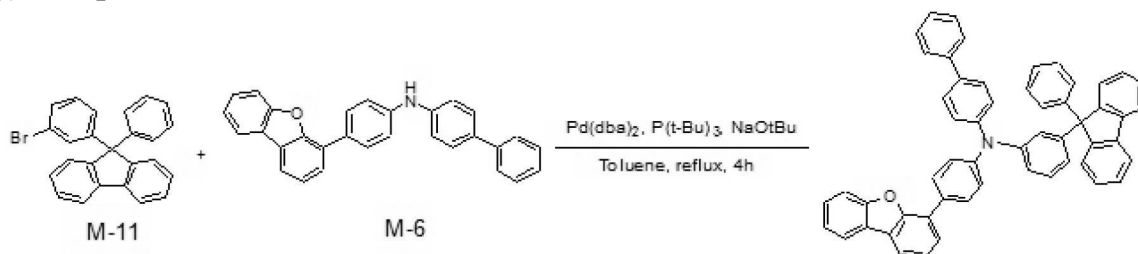
LC-Mass（理論値：727.29 g/mol、測定値：M+=727.34 g/mol）。

【0179】

実施例 2：化合物 A-137 の合成

【0180】

【化 33】



10

【0181】

丸底フラスコに中間体 M-11 7.95 g（20 mmol）と、中間体 M-6 8.23 g（20 mmol）と、ナトリウム *t*-ブトキシド 2.9 g（30 mmol）とを入れてトルエン 155 ml を加えて溶解させた。ここに Pd(dba)₃ 0.115 g（0.2 mmol）とトリ-*t*-ブチルホスフィン 0.101 g（0.5 mmol）とを順次に入れた後、窒素雰囲気下で 4 時間還流撹拌させた。反応終了後、トルエンと蒸留水とで抽出後、有機層をマグネシウムスルフェートで乾燥および濾過し、濾過液を減圧濃縮した。生成物を *n*-ヘキサン/ジクロロメタン（８：２体積比）のシリカゲルカラムクロマトグラフィーで精製して目的化合物である A-137 を 13.2 g（収率 91%）得た：

20

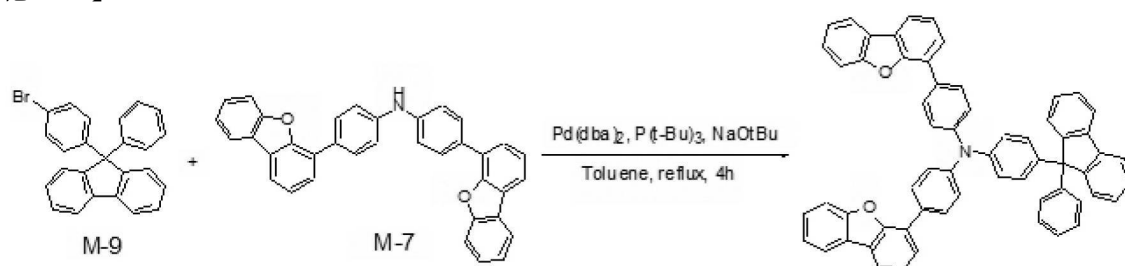
LC-Mass（理論値：727.29 g/mol、測定値：M+=727.31 g/mol）。

【0182】

実施例 3：化合物 B-1 の合成

【0183】

【化 34】



30

【0184】

丸底フラスコに中間体 M-9 7.95 g（20 mmol）と、中間体 M-7 10 g（20 mmol）と、ナトリウム *t*-ブトキシド 2.9 g（30 mmol）とを入れてトルエン 155 ml を加えて溶解させた。ここに Pd(dba)₃ 0.115 g（0.2 mmol）とトリ-*t*-ブチルホスフィン 0.101 g（0.5 mmol）とを順次に入れた後、窒素雰囲気下で 4 時間還流撹拌させた。反応終了後、トルエンと蒸留水とで抽出後、有機層をマグネシウムスルフェートで乾燥および濾過し、濾過液を減圧濃縮した。生成物を *n*-ヘキサン/ジクロロメタン（８：２体積比）のシリカゲルカラムクロマトグラフィーで精製して目的化合物である B-1 を 15.1 g（収率 92%）得た：

40

LC-Mass（理論値：817.30 g/mol、測定値：M+=817.36 g/mol）。

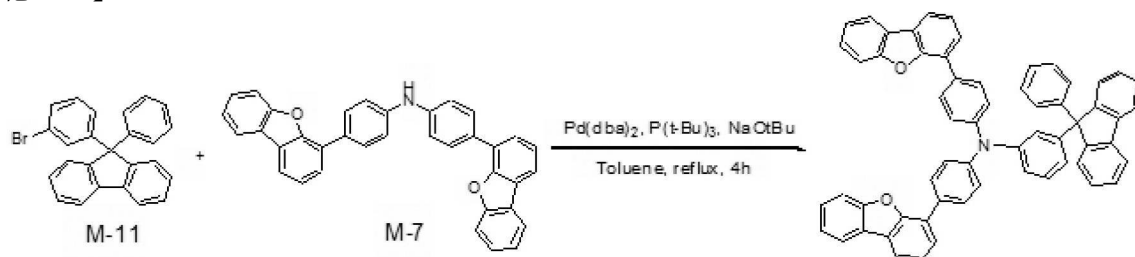
【0185】

50

実施例 4：化合物 B-13 の合成

【0186】

【化35】



10

【0187】

丸底フラスコに中間体M-11 7.95 g (20 mmol)と、中間体M-7 10 g (20 mmol)と、ナトリウムt-ブトキシド2.9 g (30 mmol)とを入れてトルエン155 mlを加えて溶解させた。ここにPd(dba)₂ 0.115 g (0.2 mmol)とトリ-tert-ブチルホスフィン0.101 g (0.5 mmol)とを順次に入れた後、窒素雰囲気下で4時間還流撹拌させた。反応終了後、トルエンと蒸留水とで抽出後、有機層をマグネシウムスルフェートで乾燥および濾過し、濾過液を減圧濃縮した。生成物をn-ヘキサン/ジクロロメタン(8:2体積比)のシリカゲルカラムクロマトグラフィーで精製して目的化合物であるB-13を14.7 g (収率90%)得た：

LC-Mass (理論値：817.30 g/mol、測定値：M+=817.38 g/mol)。

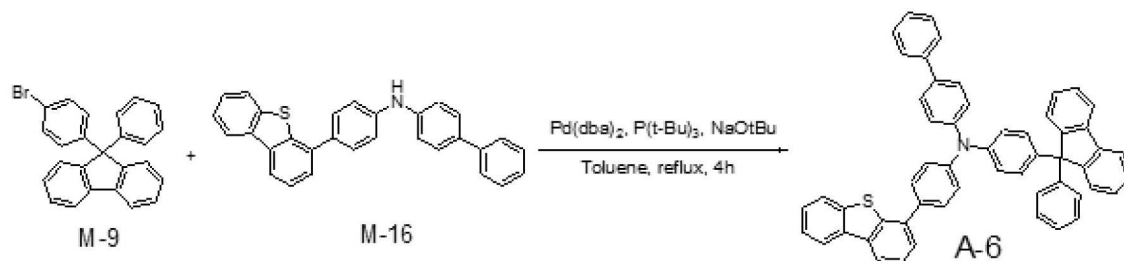
20

【0188】

実施例 ad-1：化合物 A-6 の合成

【0189】

【化36】



30

【0190】

丸底フラスコに中間体M-9 7.95 g (20 mmol)と、中間体M-16 8.6 g (20 mmol)と、ナトリウムt-ブトキシド2.9 g (30 mmol)とを入れてトルエン155 mlを加えて溶解させた。ここにPd(dba)₂ 0.115 g (0.2 mmol)とトリ-tert-ブチルホスフィン0.101 g (0.5 mmol)とを順次に入れた後、窒素雰囲気下で4時間還流撹拌させた。反応終了後、トルエンと蒸留水とで抽出後、有機層をマグネシウムスルフェートで乾燥および濾過し、濾過液を減圧濃縮した。生成物をn-ヘキサン/ジクロロメタン(8:2体積比)のシリカゲルカラムクロマトグラフィーで精製して目的化合物であるA-6を13.8 g (収率93%)得た：

40

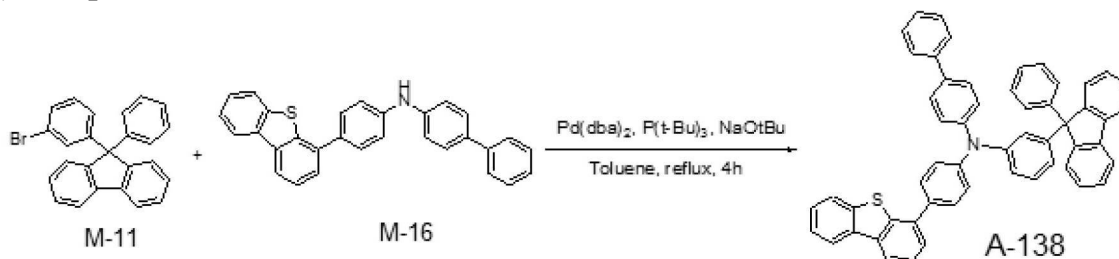
LC-Mass (理論値：743.26 g/mol、測定値：M+=743.12 g/mol)。

【0191】

実施例 ad-2：化合物 A-138 の合成

【0192】

【化 3 7】



【0193】

丸底フラスコに中間体M-11 7.95 g (20 mmol)と、中間体M-16 8.6 g (20 mmol)と、ナトリウムt-ブトキシド2.9 g (30 mmol)とを入れてトルエン155 mlを加えて溶解させた。ここにPd(dba)₂ 0.115 g (0.2 mmol)とトリ-tert-ブチルホスフィン0.101 g (0.5 mmol)とを順次に入れた後、窒素雰囲気下で4時間還流攪拌させた。反応終了後、トルエンと蒸留水とで抽出後、有機層をマグネシウムスルフェートで乾燥および濾過し、濾過液を減圧濃縮した。生成物をn-ヘキサン/ジクロロメタン(8:2体積比)のシリカゲルカラムクロマトグラフィーで精製して目的化合物であるA-138を14 g (収率94%)得た：

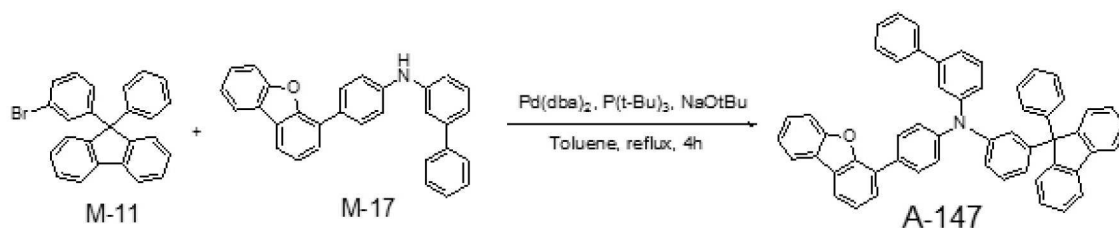
LC-Mass (理論値：743.26 g/mol、測定値：M+=743.29 g/mol)。

【0194】

実施例ad-3：化合物A-147の合成

【0195】

【化 3 8】



【0196】

丸底フラスコに中間体M-11 7.95 g (20 mmol)と、中間体M-17 8.22 g (20 mmol)と、ナトリウムt-ブトキシド2.9 g (30 mmol)とを入れてトルエン155 mlを加えて溶解させた。ここにPd(dba)₂ 0.115 g (0.2 mmol)とトリ-tert-ブチルホスフィン0.101 g (0.5 mmol)とを順次に入れた後、窒素雰囲気下で4時間還流攪拌させた。反応終了後、トルエンと蒸留水とで抽出後、有機層をマグネシウムスルフェートで乾燥および濾過し、濾過液を減圧濃縮した。生成物をn-ヘキサン/ジクロロメタン(8:2体積比)のシリカゲルカラムクロマトグラフィーで精製して目的化合物であるA-147を13.2 g (収率91%)得た：

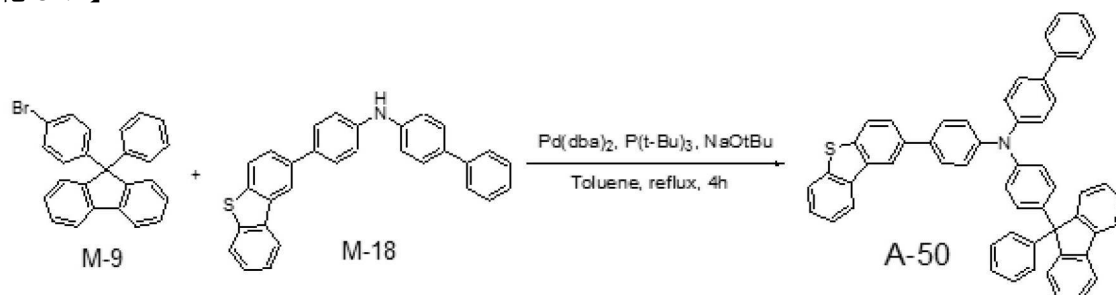
LC-Mass (理論値：727.29 g/mol、測定値：M+=727.34 g/mol)。

【0197】

実施例ad-4：化合物A-50の合成

【0198】

【化 3 9】



【0199】

10

丸底フラスコに中間体M-9 7.95 g (20 mmol)と、中間体M-18 8.6 g (20 mmol)と、ナトリウムt-ブトキシド2.9 g (30 mmol)とを入れてトルエン155 mlを加えて溶解させた。ここにPd(dba)₂ 0.115 g (0.2 mmol)とトリ-tert-ブチルホスフィン0.101 g (0.5 mmol)とを順次に入れた後、窒素雰囲気下で4時間還流撹拌させた。反応終了後、トルエンと蒸留水とで抽出後、有機層をマグネシウムスルフェートで乾燥および濾過し、濾過液を減圧濃縮した。生成物をn-ヘキサン/ジクロロメタン(8:2体積比)のシリカゲルカラムクロマトグラフィーで精製して目的化合物であるA-50を13.7 g (収率92%)得た：

LC-Mass (理論値：743.26 g/mol、測定値：M+=743.18 g/mol)。

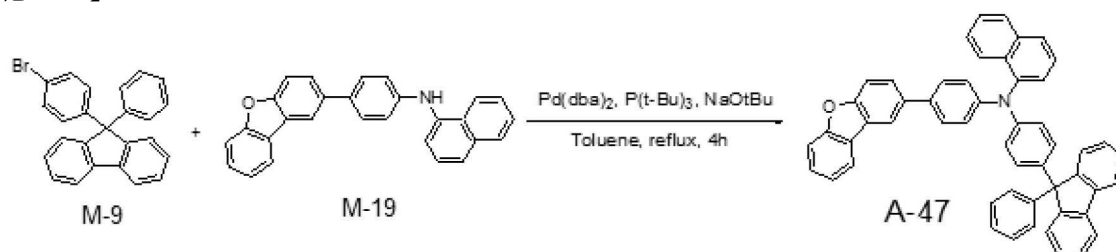
20

【0200】

実施例ad-5：化合物A-47の合成

【0201】

【化 4 0】



30

【0202】

丸底フラスコに中間体M-9 7.95 g (20 mmol)と、中間体M-19 7.7 g (20 mmol)と、ナトリウムt-ブトキシド2.9 g (30 mmol)とを入れてトルエン155 mlを加えて溶解させた。ここにPd(dba)₂ 0.115 g (0.2 mmol)とトリ-tert-ブチルホスフィン0.101 g (0.5 mmol)とを順次に入れた後、窒素雰囲気下で4時間還流撹拌させた。反応終了後、トルエンと蒸留水とで抽出後、有機層をマグネシウムスルフェートで乾燥および濾過し、濾過液を減圧濃縮した。生成物をn-ヘキサン/ジクロロメタン(8:2体積比)のシリカゲルカラムクロマトグラフィーで精製して目的化合物であるA-47を13.3 g (収率95%)得た：

40

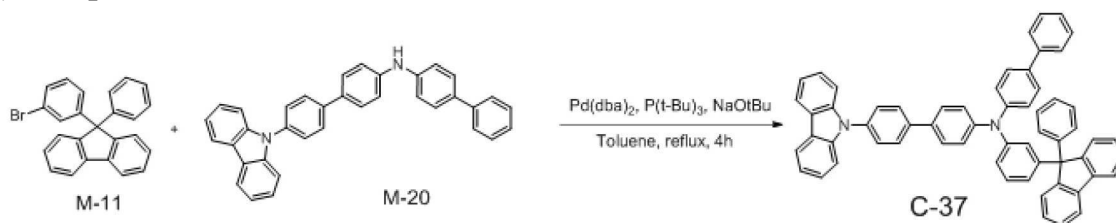
LC-Mass (理論値：701.27 g/mol、測定値：M+=701.15 g/mol)。

【0203】

実施例ad-6：化合物C-37の合成

【0204】

【化 4 1】



【0205】

丸底フラスコに中間体M-11 7.95 g (20 mmol)と、中間体M-20 9.7 g (20 mmol)と、ナトリウムt-ブトキシド2.9 g (30 mmol)とを入れてトルエン155 mlを加えて溶解させた。ここにPd(dba)₂ 0.115 g (0.2 mmol)とトリ-tert-ブチルホスフィン0.101 g (0.5 mmol)とを順次に入れた後、窒素雰囲気下で4時間還流撹拌させた。反応終了後、トルエンと蒸留水とで抽出後、有機層をマグネシウムスルフェートで乾燥および濾過し、濾過液を減圧濃縮した。生成物をn-ヘキサン/ジクロロメタン(8:2体積比)のシリカゲルカラムクロマトグラフィーで精製して目的化合物であるC-37を14.6 g (収率91%)得た：

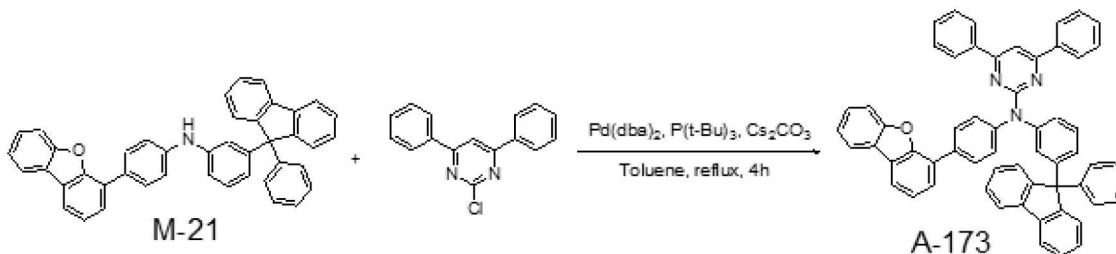
LC-Mass (理論値：802.23 g/mol、測定値：M+=803 g/mol)。

【0206】

実施例ad-7：化合物A-173の合成

【0207】

【化 4 2】



【0208】

丸底フラスコに中間体M-21 11.5 g (20 mmol)と、中間体2-クロロ-4,6-ジフェニルピリミジン5.3 g (20 mmol)と、炭酸セシウム9.8 g (30 mmol)とを入れてトルエン155 mlを加えて溶解させた。ここにPd(dba)₂ 0.115 g (0.2 mmol)とトリ-tert-ブチルホスフィン0.101 g (0.5 mmol)とを順次に入れた後、窒素雰囲気下で4時間還流撹拌させた。反応終了後、トルエンと蒸留水とで抽出後、有機層をマグネシウムスルフェートで乾燥および濾過し、濾過液を減圧濃縮した。生成物をn-ヘキサン/ジクロロメタン(8:2体積比)のシリカゲルカラムクロマトグラフィーで精製して目的化合物であるA-173を14.5 g (収率90%)得た：

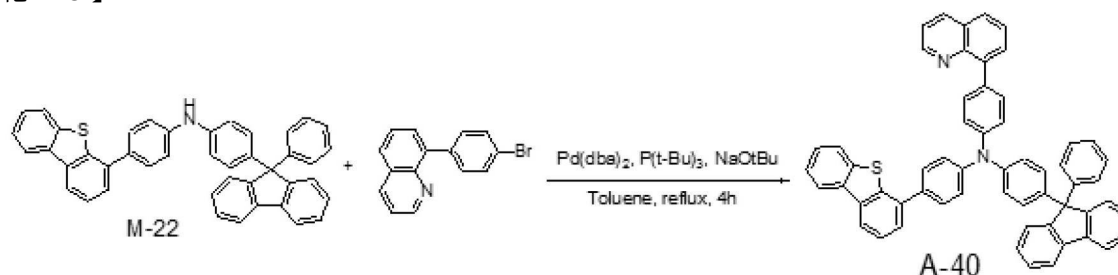
LC-Mass (理論値：805.31 g/mol、測定値：M+=805.23 g/mol)。

【0209】

実施例ad-8：化合物A-40の合成

【0210】

【化 4 3】



【0 2 1 1】

丸底フラスコに中間体M-22 11.8 g (20 mmol)と、8-(4-ブロモフェニル)キノリン5.7 g (20 mmol)と、ナトリウムt-ブトキシド2.9 g (30 mmol)とを入れてトルエン155 mlを加えて溶解させた。ここにPd(dba)₃ 0.115 g (0.2 mmol)とトリ-tert-ブチルホスフィン0.101 g (0.5 mmol)とを順次に入れた後、窒素雰囲気下で4時間還流撹拌させた。反応終了後、トルエンと蒸留水とで抽出後、有機層をマグネシウムスルフェートで乾燥および濾過し、濾過液を減圧濃縮した。生成物をn-ヘキサン/ジクロロメタン(8:2体積比)のシリカゲルカラムクロマトグラフィーで精製して目的化合物であるA-40を14.5 g (収率91%)得た：

LC-Mass (理論値：794.28 g/mol、測定値：M+=794.35 g/mol)。

【0 2 1 2】

(製造された化合物の分析および特性の測定)

1. 蛍光特性の分析

前記実施例1~4の蛍光特性を測定するために各化合物をTHFに溶かした後、HITACHI F-4500を用いてPL (photoluminescence) 波長を測定した。前記実施例2のA-137に対するPL波長測定結果を図3に示した。

【0 2 1 3】

2. 電気化学的特性の分析

スーパーコンピュータGAIA (IBM power 6)を用いてGaussian 09方法で各材料のエネルギー準位を計算し、その結果を下記表1に示した。

【0 2 1 4】

【表1】

[表1]

実験	化合物	HOMO (eV)	LUMO (eV)	T1 (eV)	S1 (eV)
実施例 1	A-5	-4.84	-1.12	2.70	3.30
実施例 2	A-137	-4.88	-1.12	2.70	3.33
実施例 3	B-1	-4.84	-1.17	2.65	3.24
実施例 4	B-13	-4.84	-1.15	2.65	3.25
比較例	HT-1	-4.70	-0.91	2.64	3.33
	HT-2	-4.74	-0.87	2.77	3.46

【0 2 1 5】

前記表1から分かるように、実施例1~4で合成された化合物である場合、比較例の化合物と比較してHOMOエネルギーレベルが0.1 eV以上差があり、有機光電子素子の正孔輸送層として用いられる場合、素子効率に影響を与えることができる。

【0 2 1 6】

(有機発光素子の製造)

実施例5：青色有機発光素子の製造

ITO (Indium tin oxide) が1500 Åの厚さが薄膜コーティングされたガラス基板を蒸留水超音波で洗浄した。蒸留水洗浄が終わるとイソプロピルアルコ

10

20

30

40

50

ール、アセトン、メタノールなどの溶剤で超音波洗浄を行い、乾燥させた後、プラズマ洗浄機に移送させた後、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移送した。このように準備されたITO透明電極を陽極として用いてITO基板上部に4, 4'-ビス[N-[4-{N, N-ビス(3-メチルフェニル)アミノ}-フェニル]-N-フェニルアミノ]ビフェニル(DNTPD)を真空蒸着して600 Åの厚さの正孔注入層を形成した。次に、HT-1を真空蒸着により250 Åの厚さの正孔輸送層を形成した。前記正孔輸送層の上部に実施例1で製造された化合物を用いて真空蒸着により50 Åの厚さの補助正孔輸送層を形成した。前記補助正孔輸送層の上部に9, 10-ジ(2-ナフチル)アントラセン(ADN)をホストとして用い、ドーパントとして2, 5, 8, 11-テトラ(tert-ブチル)ペリレン(TBPe)を3重量%にドーピングして真空蒸着により250 Åの厚さの発光層を形成した。

10

【0217】

その後、前記発光層の上部にAlq3を真空蒸着して250 Åの厚さの電子輸送層を形成した。前記電子輸送層の上部に10 ÅのLiFと1000 ÅのAlを順次に真空蒸着して陰極を形成することによって有機発光素子を製造した。

【0218】

前記有機発光素子は、5層の有機薄膜層を有する構造からなっており、具体的にAl(1000 Å)/LiF(10 Å)/Alq3(250 Å)/EML[ADN:TBPe=97:3](250 Å)/補助正孔輸送層(50 Å)/HT-1(250 Å)/DNTPD(600 Å)/ITO(1500 Å)の構造で製造した。

20

【0219】

実施例6

前記実施例5で、実施例1の代わりに実施例2を用いた点を除いては同様の方法で有機発光素子を製造した。

【0220】

実施例7

前記実施例5で、実施例1の代わりに実施例3を用いた点を除いては同様の方法で有機発光素子を製造した。

【0221】

実施例8

前記実施例5で、実施例1の代わりに実施例4を用いた点を除いては同様の方法で有機発光素子を製造した。

30

【0222】

実施例ad-9

前記実施例5で、実施例1の代わりに実施例ad-3を用いた点を除いては同様の方法で有機発光素子を製造した。

【0223】

実施例ad-10

前記実施例5で、実施例1の代わりに実施例ad-6を用いた点を除いては同様の方法で有機発光素子を製造した。

40

【0224】

比較例1

実施例1の化合物A-5の代わりにHT-1を用いた点を除いては実施例5と同様の方法で有機発光素子を製造した。

【0225】

比較例2

実施例1の化合物A-5の代わりにHT-2を用いた点を除いては実施例5と同様の方法で有機発光素子を製造した。

【0226】

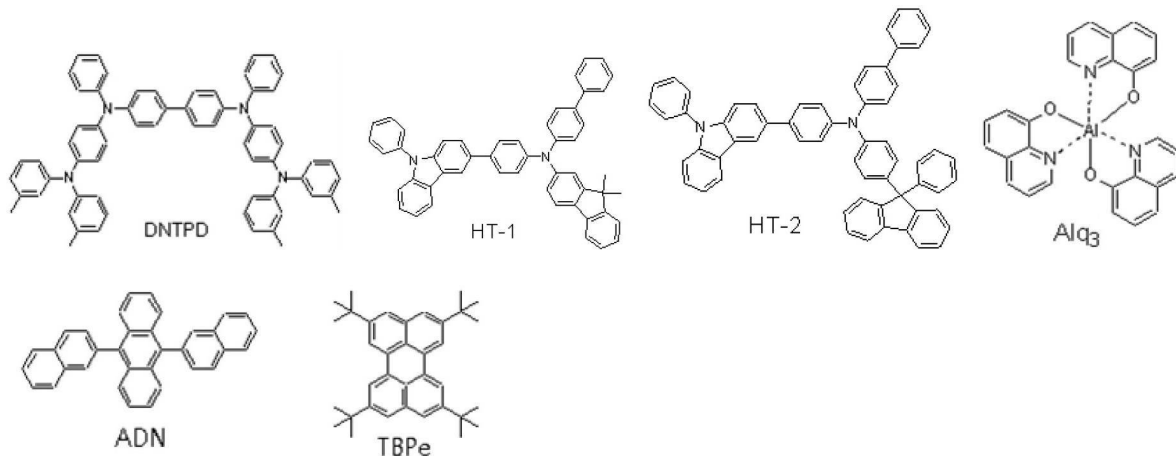
前記有機発光素子の製造に用いられたDNTPD、HT-1、HT-2、Alq3、A

50

DN、TBPeの構造は以下のとおりである。

【0227】

【化44】



10

【0228】

(青色有機発光素子の性能測定)

実施例5～8、実施例ad-9およびad-10、そして比較例1～2による有機発光素子の電圧に応じた電流密度の変化、輝度の変化、発光効率、および寿命を測定した。具体的な測定方法は、以下のとおりであり、その結果は表2に示した。

20

【0229】

1) 電圧変化に応じた電流密度の変化測定

製造された有機発光素子に対して、電圧を0Vから10Vまで上昇させながら電流-電圧計(Keithley 2400)を用いて単位素子に流れる電流値を測定し、測定された電流値を面積で割って結果を得た。

【0230】

2) 電圧変化に応じた輝度の変化測定

製造された有機発光素子に対して、電圧を0Vから10Vまで上昇させながら輝度計(Minolta Cs-1000A)を用いてその時の輝度を測定して結果を得た。

【0231】

3) 発光効率の測定

前記(1)および(2)から測定された輝度と電流密度および電圧を用いて同一の電流密度(10mA/cm²)の電流効率(cd/A)を計算した。

【0232】

4) 寿命測定

製造された有機発光素子に対してPolarOnyx寿命測定システムを用いて、実施例5～8、実施例ad-9およびad-10、ならびに比較例1および2の青色有機発光素子について、初期輝度1,000nitに発光させ、時間経過に応じた輝度の減少を測定して初期輝度に比べて1/2に輝度が減少した時点を実寿命として測定した。

【0233】

30

40

【表 2】

[表2]

素子	HTL	補助HTL	電圧(V)	発光色 (EL color)	効率 (cd/A)	半減寿命(h) @1000cd/m ²
実施例 5	HT-1	A-5	6.3	Blue	6.6	1,360
実施例 6	HT-1	A-137	6.3	Blue	6.5	1,390
実施例 7	HT-1	B-1	6.3	Blue	6.9	1,370
実施例 8	HT-1	B-13	6.4	Blue	6.7	1,400
実施例ad-9	HT-1	A-147	6.5	Blue	6.6	1,380
実施例ad-10	HT-1	C-37	6.2	Blue	6.5	1,360
比較例 1	HT-1	HT-1	6.4	Blue	5.8	1,310
比較例 2	HT-1	HT-2	6.4	Blue	6.0	1,120

電流密度: 10mA/cm²

【0234】

前記表 2 から分かるように、実施例 5～8、実施例 a d－9 および a d－10 は、比較例 1 および 2 に比べて発光効率が大きく改善され、寿命も同等またはそれ以上に改善された特性を示すことが分かる。特に実施例 5～8、実施例 a d－9 および a d－10 は、補助 H T L を用いない比較例 1 に比べて最低 13% 以上の効率増加を示し、補助 H T L として H T－2 を用いた比較例 2 に比べて最低 20% 以上の半減寿命が増加する効果を示した。

【0235】

実施例 a d－11：緑色有機発光素子の製造

I T O (I n d i u m t i n o x i d e) が 1500 Å の厚さに薄膜コーティングされたガラス基板を蒸留水超音波で洗浄した。蒸留水洗浄後、イソプロピルアルコール、アセトン、メタノールなどの溶剤で超音波洗浄を行い、乾燥させた後、プラズマ洗浄機に移送させた後、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移送した。このように準備された I T O 透明電極を陽極として使用して I T O 基板上部に H T－1 を真空蒸着して 700 Å の厚さの正孔注入および輸送層を形成した。次に、実施例 1 で製造された化合物を使用して真空蒸着により 100 Å の厚さの補助正孔輸送層を形成した。前記補助正孔輸送層の上部に (4, 4'-N, N'-ジカルバゾール) ビフェニル [C B P] をホストとして用い、ドーパントとしてトリス (2-フェニルピリジン) イリジウム (I I I) [I r (p p y)₃] を 5 重量% にドーピングして真空蒸着により 300 Å の厚さの発光層を形成した。

【0236】

その後、前記発光層の上部にビフェノキシビス (8-ヒドロキシキノリン) アルミニウム [B a l q] を真空蒸着して 50 Å の厚さの正孔阻止層を形成した。前記正孔阻止層の上部にトリス (8-ヒドロキシキノリン) アルミニウム [A l q₃] を真空蒸着して 250 Å の厚さの電子輸送層を形成し、前記電子輸送層の上部に 10 Å の L i F と 1000 Å の A l を順次に真空蒸着して陰極を形成することによって有機発光素子を製造した。

【0237】

前記有機発光素子は、5 層の有機薄膜層を有する構造からなっており、具体的に A l (1000 Å) / L i F (10 Å) / A l q₃ (250 Å) / B a l q (50 Å) / E M L [C B P : I r (p p y)₃ = 95 : 5] (300 Å) / 補助 H T L (100 Å) / H T

−1 (700 Å) / ITO (1500 Å) の構造で製造した。

【0238】

実施例 a d − 1 2

前記実施例 a d − 1 1 で、実施例 1 の代わりに実施例 2 を用いた点を除いては同様の方法で有機発光素子を製造した。

【0239】

実施例 a d − 1 3

前記実施例 a d − 1 1 で、実施例 1 の代わりに実施例 3 を用いた点を除いては同様の方法で有機発光素子を製造した。

【0240】

実施例 a d − 1 4

前記実施例 a d − 1 1 で、実施例 1 の代わりに実施例 a d − 1 を用いた点を除いては同様の方法で有機発光素子を製造した。

【0241】

実施例 a d − 1 5

前記実施例 a d − 1 1 で、実施例 1 の代わりに実施例 a d − 2 を用いた点を除いては同様の方法で有機発光素子を製造した。

【0242】

実施例 a d − 1 6

前記実施例 a d − 1 1 で、実施例 1 の代わりに実施例 a d − 3 を用いた点を除いては同様の方法で有機発光素子を製造した。

【0243】

実施例 a d − 1 7

前記実施例 a d − 1 1 で、実施例 1 の代わりに実施例 a d − 4 を用いた点を除いては同様の方法で有機発光素子を製造した。

【0244】

比較例 3

前記実施例 a d − 1 1 で、HT − 1 の代わりに N, N' − ジ (1 − ナフチル) − N, N' − ジフェニルベンジジン [NPB] を用い、実施例 1 の代わりに N, N' − ジ (1 − ナフチル) − N, N' − ジフェニルベンジジン [NPB] を用いた点を除いては同様の方法で有機発光素子を製造した。

【0245】

比較例 4

前記実施例 a d − 1 1 で、HT − 1 の代わりに N, N' − ジ (1 − ナフチル) − N, N' − ジフェニルベンジジン [NPB] を用い、実施例 1 の代わりに トリス (4, 4', 4'' − (9 − カルバゾリル)) − トリフェニルアミン [TCTA] を用いた点を除いては同様の方法で有機発光素子を製造した。

【0246】

比較例 5

前記実施例 a d − 1 1 で、実施例 1 の代わりに HT − 1 を用いた点を除いては同様の方法で有機発光素子を製造した。

【0247】

前記有機発光素子の製造に用いられた HT − 1 および Alq 3 は、前述したとおりであり、NPB、TCTA、CBP、Balq、Ir (ppy)₃ の構造は以下のとおりである。

【0248】

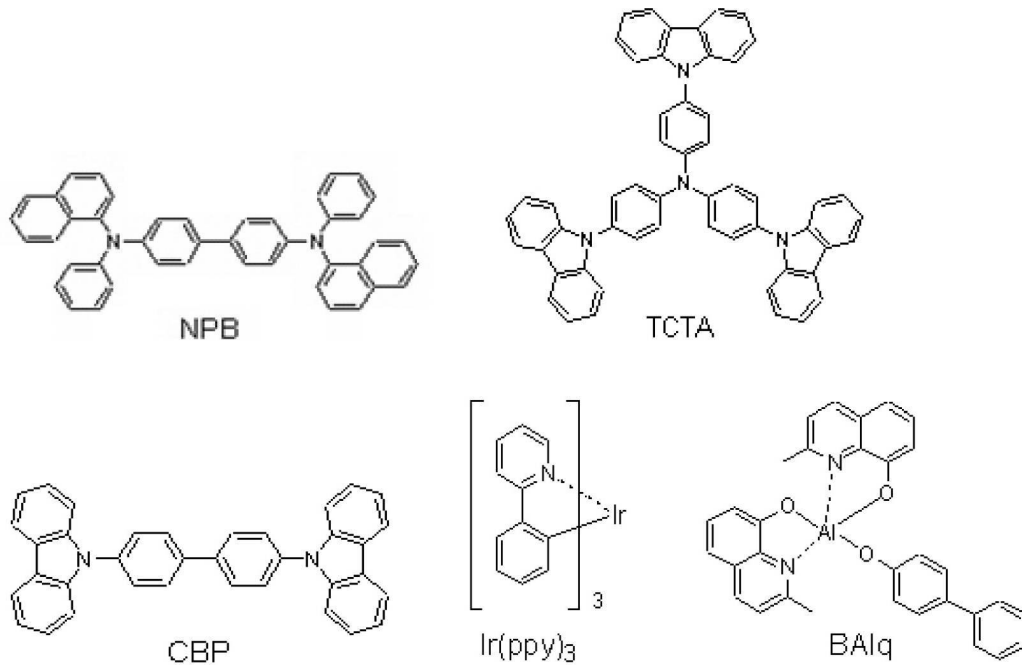
10

20

30

40

【化 4 5】



10

【0249】

(緑色有機発光素子の性能測定)

20

実施例 ad-11～ad-17、および比較例 3～5 による有機発光素子の電圧に応じた電流密度の変化、輝度の変化、発光効率、および寿命を測定した。電圧に応じた電流密度の変化、輝度の変化、および発光効率の測定方法は、前記青色有機発光素子での方法と同様であり、寿命測定方法は以下のとおりであり、その結果は表 3 に示した。

【0250】

寿命測定

製造された有機発光素子に対して PolarOnyx 寿命測定システムを用いて、実施例 ad-11～ad-17 および比較例 3～5 の緑色有機発光素子について、初期輝度 3,000nit に発光させ、時間経過に応じた輝度の減少を測定して初期輝度に比べて 1/2 に輝度が減少した時点を実寿命として測定した。

30

【0251】

【表 3】

【表 3】

素子	HTL	補助HTL	駆動電圧 (V)	発効効率 (cd/A)	EL peak (nm)	半減寿命(h) @3000nit
実施例 ad-11	HT-1	A-5	6.8	48.2	516	280
実施例 ad-12	HT-1	A-137	6.9	47.3	516	270
実施例 ad-13	HT-1	B-1	7.0	48.0	516	260
実施例 ad-14	HT-1	A-6	7.0	49.0	516	300
実施例 ad-15	HT-1	A-138	7.1	48.1	516	280
実施例 ad-16	HT-1	A-147	7.1	47.5	516	250
実施例 ad-17	HT-1	A-50	6.6	46.2	516	240
比較例 3	NPB	NPB	8.2	25.8	516	175
比較例 4	NPB	TCTA	7.1	45.0	516	181
比較例 5	HT-1	HT-1	7.2	37.8	516	220

40

【0252】

前記表 3 から分かるように、実施例 ad-11～ad-17 は、比較例 3～5 に比べて発光効率、駆動電圧、寿命の側面から改善された特性を示すことが分かる。特に実施例 ad-11～ad-17 は、補助 HTL を用いない比較例 3 に比べて最低 70% 以上の効率

50

増加を示し、比較例 5 に比べて最低 20 % 以上の効率増加を示した。補助 HTL として TCTA を用いた比較例 4 に比べてもより高い効率を示し、最低 30 % 以上の半減寿命が増加する効果を示した。

【0253】

実施例 ad-18：赤色有機発光素子の製造

ITO (Indium tin oxide) が 1500 Å の厚さに薄膜コーティングされたガラス基板を蒸留水超音波で洗浄した。蒸留水洗浄後、イソプロピルアルコール、アセトン、メタノールなどの溶剤で超音波洗浄を行い、乾燥させた後、プラズマ洗浄機に移送させた後、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移送した。このように準備された ITO 透明電極を陽極として使用して ITO 基板上部に 4, 4'-ビス [N- [4- {N, N'-ビス (3-メチルフェニル) アミノ} -フェニル] -N-フェニルアミノ] ビフェニル [DNTPD] を真空蒸着して 600 Å の厚さの正孔注入層を形成した。次に、HT-1 を真空蒸着により 200 Å の厚さの正孔輸送層を形成した。前記正孔輸送層の上部に実施例 1 で製造された化合物を使用して真空蒸着により 100 Å の厚さの補助正孔輸送層を形成した。前記補助正孔輸送層の上部に (4, 4'-N, N'-ジカルバゾール) ビフェニル [CBP] をホストとして用い、ドープアントとしてビス (2-フェニルキノリン) (アセチルアセトネート) イリジウム (III) [Ir (pq)₂acac] を 5 重量 % にドーピングして真空蒸着により 300 Å の厚さの発光層を形成した。

【0254】

その後、前記発光層の上部にビフェノキシビス (8-ヒドロキシキノリン) アルミニウム [Balq] を真空蒸着して 50 Å の厚さの正孔阻止層を形成した。前記正孔阻止層の上部にトリス (8-ヒドロキシキノリン) アルミニウム [Alq₃] を真空蒸着して 250 Å の厚さの電子輸送層を形成し、前記電子輸送層の上部に 10 Å の LiF と 1000 Å の Al を順次に真空蒸着して陰極を形成することによって有機発光素子を製造した。

【0255】

前記有機発光素子は、6 層の有機薄膜層を有する構造からなっており、具体的に Al (1000 Å) / LiF (10 Å) / Alq₃ (250 Å) / Balq (50 Å) / EML [CBP : Ir (pq)₂acac = 95 : 5] (300 Å) / 補助 HTL (100 Å) / HT-1 (700 Å) / DNTPD (600 Å) / ITO (1500 Å) の構造で製造した。

【0256】

実施例 ad-19

前記実施例 ad-18 で、実施例 1 の代わりに実施例 2 を用いた点を除いては同様の方法で有機発光素子を製造した。

【0257】

実施例 ad-20

前記実施例 ad-18 で、実施例 1 の代わりに実施例 4 を用いた点を除いては同様の方法で有機発光素子を製造した。

【0258】

実施例 ad-21

前記実施例 ad-18 で、実施例 1 の代わりに実施例 ad-1 を用いた点を除いては同様の方法で有機発光素子を製造した。

【0259】

実施例 ad-22

前記実施例 ad-18 で、実施例 1 の代わりに実施例 ad-3 を用いた点を除いては同様の方法で有機発光素子を製造した。

【0260】

実施例 ad-23

前記実施例 ad-18 で、実施例 1 の代わりに実施例 ad-5 を用いた点を除いては同

10

20

30

40

50

様の方法で有機発光素子を製造した。

【0261】

比較例6

前記実施例 a d - 1 8 で、H T - 1 の代わりに N, N' - ジ (1 - ナフチル) - N, N' - ジフェニルベンジジン [N P B] を用い、実施例 1 の代わりに N, N' - ジ (1 - ナフチル) - N, N' - ジフェニルベンジジン [N P B] を用いた点を除いては同様の方法で有機発光素子を製造した。

【0262】

比較例7

前記実施例 a d - 1 8 で、H T - 1 の代わりに N, N' - ジ (1 - ナフチル) - N, N' - ジフェニルベンジジン [N P B] を用い、実施例 1 の代わりに トリス (4, 4', 4'' - (9 - カルバゾリル)) - トリフェニルアミン [T C T A] を用いた点を除いては同様の方法で有機発光素子を製造した。

【0263】

比較例8

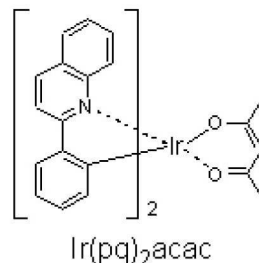
前記実施例 a d - 1 8 で、実施例 1 の代わりに H T - 1 を用いた点を除いては同様の方法で有機発光素子を製造した。

【0264】

前記有機発光素子の製造に用いられた D N T P D、N P B、H T - 1、T C T A、C B P、B a l q、および A l q 3 の構造は前述したとおりであり、I r (p q) ₂ a c a c の構造は以下のとおりである。

【0265】

【化46】



【0266】

(赤色有機発光素子の性能測定)

実施例 a d - 1 8 ~ a d - 2 3、および比較例 6 ~ 8 による有機発光素子の電圧に応じた電流密度の変化、輝度の変化、発光効率、および寿命を測定した。

【0267】

電圧に応じた電流密度の変化、輝度の変化、および発光効率の測定方法は、前記青色有機発光素子での方法と同様であり、寿命測定方法は以下のとおりであり、その結果は表 4 に示した。

【0268】

寿命測定

製造された有機発光素子に対して P o l a r O n y x 寿命測定システムを用いて、実施例 a d - 1 8 ~ a d - 2 3 と比較例 6 ~ 8 の赤色有機発光素子について、初期輝度 1, 0 0 0 n i t に発光させ、時間経過に応じた輝度の減少を測定して初期輝度に比べて 8 0 % に輝度が減少した時点を T 8 0 寿命として測定した。

【0269】

【表 4】

[表4]

素子	HTL	補助HTL	駆動電圧 (V)	発効効率 (cd/A)	ELpeak (nm)	T80 寿命(h) @1000nit
実施例ad-18	HT-1	A-5	8.1	17.9	600	890
実施例ad-19	HT-1	A-137	8.3	18.3	600	910
実施例ad-20	HT-1	B-13	8.4	18.5	600	870
実施例ad-21	HT-1	A-6	8.3	18.1	600	890
実施例ad-22	HT-1	A-147	8.4	18.9	600	880
実施例ad-23	HT-1	A-47	8.0	18.2	600	830
比較例 6	NPB	NPB	8.7	15.1	600	720
比較例 7	NPB	TCTA	9.1	17.3	600	650
比較例 8	HT-1	HT-1	8.4	16.6	600	800

10

【0270】

前記表4から分かるように、実施例ad-18～ad-23は、比較例6～8に比べて発光効率、駆動電圧、寿命の側面から改善された特性を示すことが分かる。特に実施例ad-18～ad-23は、補助HTLを用いない比較例6に比べて最低19%以上の効率増加を示し、比較例8に比べて最低8%以上の効率増加を示した。補助HTLとしてTCTAを用いた比較例7に比べてもより高い効率を示し、最低28%以上のT80寿命が増加する効果を示した。

20

本発明は、前記実施例に限定されず、互いに異なる多様な形態に製造されてもよく、本発明が属する技術分野における通常の知識を有する者は、本発明の技術的な思想や必須の特徴を変更せずに他の具体的な形態に実施可能であることを理解できるはずである。したがって、前述した実施例はすべての面で例示的なものであり、限定的なものではないことを理解しなければならない。

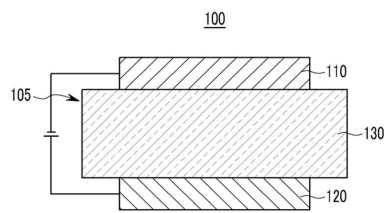
【符号の説明】

【0271】

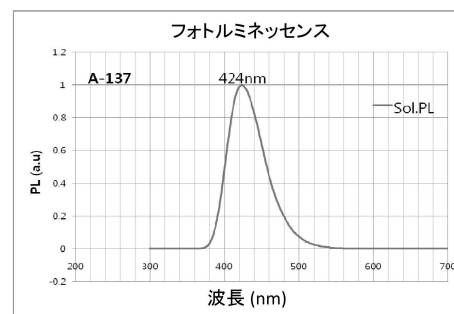
- 100：有機発光素子
- 200：有機発光素子
- 105：有機層
- 110：陰極
- 120：陽極
- 130：発光層
- 230：発光層
- 140：正孔補助層

30

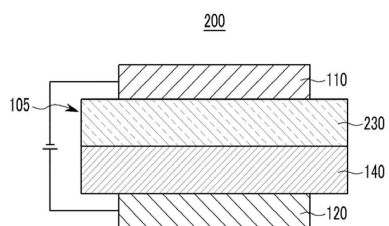
【図 1】



【図 3】



【図 2】



フロントページの続き

(51)Int.Cl. F I
H 0 1 L 51/50 (2006.01) H 0 5 B 33/14 A
H 0 5 B 33/22 D

(72)発明者 リュ, トン－ワン
大韓民国, 4 4 3－8 0 3 キョンギード, スウォン－シ, ヨントンーク, サムスン－ロ 1 3 0
(72)発明者 チョ, ヨン－キョン
大韓民国, 4 4 3－8 0 3 キョンギード, スウォン－シ, ヨントンーク, サムスン－ロ 1 3 0
(72)発明者 チョン, ソン－ヒョン
大韓民国, 4 4 3－8 0 3 キョンギード, スウォン－シ, ヨントンーク, サムスン－ロ 1 3 0
(72)発明者 シン, チャン－チュ
大韓民国, 4 4 3－8 0 3 キョンギード, スウォン－シ, ヨントンーク, サムスン－ロ 1 3 0
(72)発明者 イ, ハン－イル
大韓民国, 4 4 3－8 0 3 キョンギード, スウォン－シ, ヨントンーク, サムスン－ロ 1 3 0
(72)発明者 カン, ウィ－ス
大韓民国, 4 4 3－8 0 3 キョンギード, スウォン－シ, ヨントンーク, サムスン－ロ 1 3 0
(72)発明者 キム, チャン－ウ
大韓民国, 4 4 3－8 0 3 キョンギード, スウォン－シ, ヨントンーク, サムスン－ロ 1 3 0
(72)発明者 パク, ミン－チ
大韓民国, 4 4 3－8 0 3 キョンギード, スウォン－シ, ヨントンーク, サムスン－ロ 1 3 0
(72)発明者 ユ, ウン－ソン
大韓民国, 4 4 3－8 0 3 キョンギード, スウォン－シ, ヨントンーク, サムスン－ロ 1 3 0
(72)発明者 チョ, ピョン－ソク
大韓民国, 4 4 3－8 0 3 キョンギード, スウォン－シ, ヨントンーク, サムスン－ロ 1 3 0

審査官 伊藤 幸司

(56)参考文献 特開2005-120030 (JP, A)
特開2005-085599 (JP, A)
韓国公開特許第10-2014-0014959 (KR, A)
韓国公開特許第10-2014-0014956 (KR, A)
国際公開第2008/126393 (WO, A1)
米国特許出願公開第2012/0043531 (US, A1)
特開2013-035839 (JP, A)
韓国公開特許第10-2013-0078749 (KR, A)
国際公開第2014/051244 (WO, A1)
米国特許出願公開第2014/0042412 (US, A1)
国際公開第2009/041635 (WO, A1)
米国特許出願公開第2010/0314612 (US, A1)
米国特許出願公開第2013/0256645 (US, A1)
韓国公開特許第10-2011-0029831 (KR, A)
国際公開第2013/120577 (WO, A1)
Synthetic Metals, 2005年, 148, pp.155-160

(58)調査した分野(Int.Cl., DB名)
C 0 7 D
C 0 9 K
H 0 5 B

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