(19)日本国特許庁(JP)　(12)公開特許公報(A)　(11)特許出願公開番号
特開2007-332139
(P2007-332139A)
(43)公開日　平成19年12月27日(2007.12.27)

(51)Int.Cl.		F I		テーマコード（参考）
C07C 211/54	(2006.01)	C07C 211/54	CSP	4H006
C09K 11/06	(2006.01)	C09K 11/06	620	
C07C 211/61	(2006.01)	C09K 11/06	655	
		C09K 11/06	645	
		C07C 211/61		

審査請求 未請求　請求項の数 7　ＯＬ　（全 46 頁）

(21)出願番号　特願2007-149728 (P2007-149728)
(22)出願日　平成19年6月5日 (2007.6.5)
(31)優先権主張番号　10-2006-0053900
(32)優先日　平成18年6月15日 (2006.6.15)
(33)優先権主張国　韓国 (KR)
(31)優先権主張番号　10-2006-0113901
(32)優先日　平成18年11月17日 (2006.11.17)
(33)優先権主張国　韓国 (KR)

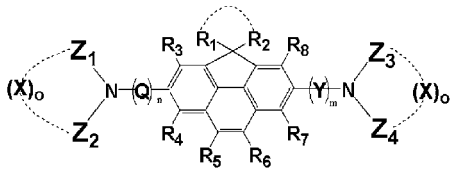
(71)出願人　590002817
三星エスディアイ株式会社
大韓民国京畿道水原市靈通区▲しん▼洞５７５番地
(74)代理人　100072349
弁理士　八田　幹雄
(74)代理人　100110995
弁理士　奈良　泰男
(74)代理人　100114649
弁理士　宇谷　勝幸
(74)代理人　100129126
弁理士　藤田　健
(74)代理人　100130971
弁理士　都祭　正則

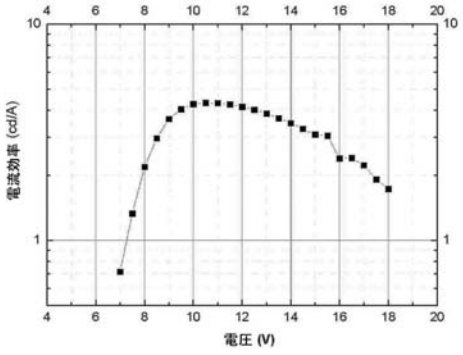
最終頁に続く

(54)【発明の名称】シクロペンタフェナントレン系化合物及びそれを利用した有機電界発光素子

(57)【要約】
【課題】ドライ及びウェット加工が可能であり、熱的安定性に優れ、優秀な電荷移動特性及び発光特性を有するシクロペンタフェナントレン構造を有する化合物及びそれを採用した有機ＥＬ素子を提供する。
【解決手段】下記化学式１で表される有機化合物である。

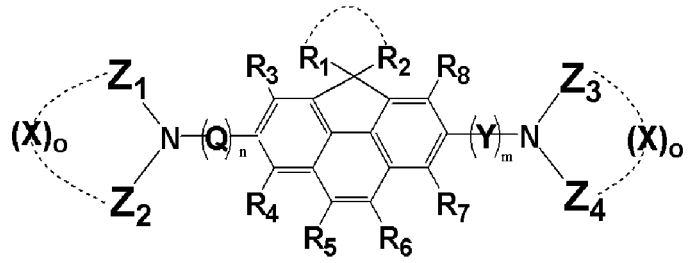
＜化学式１＞





【選択図】図２Ａ

【特許請求の範囲】
【請求項１】
下記化学式１で表される有機化合物：
【化１】
＜化学式１＞



＜化学式１＞
前記化学式１において、
Ｑ及びＹは、互いに独立して置換もしくは非置換のＣ２ないしＣ３０のアルキレン基、置換もしくは非置換のＣ６ないしＣ３０のシクロアルキレン基、置換もしくは非置換のＣ６ないしＣ３０のアリーレン基、置換もしくは非置換のＣ２ないしＣ３０のヘテロアリーレン基、置換もしくは非置換のＣ２ないしＣ３０のアルケニレン基であり、
ｍおよびｎは、それぞれ独立して０ないし５の整数であり、
R_1 及びR_2 は、それぞれ独立して、水素原子、ハロゲン原子、シアノ基、ヒドロキシル基、置換もしくは非置換のＣ１ないしＣ２０のアルキル基、置換もしくは非置換のＣ３ないしＣ２０のシクロアルキル基、置換もしくは非置換のＣ５ないしＣ３０のヘテロシクロアルキル基、置換もしくは非置換のＣ１ないしＣ２０のアルコキシ基、置換もしくは非置換のＣ６ないしＣ３０のアリール基、置換もしくは非置換のＣ６ないしＣ３０のアラルキル基、または置換もしくは非置換のＣ２ないしＣ３０のヘテロアリール基であり、
R_1 及びR_2 は共に環を形成してもよく、
R_3 ないしR_8 は、それぞれ独立して、水素原子、ハロゲン原子、シアノ基、ヒドロキシル基、置換もしくは非置換のＣ１ないしＣ２０のアルキル基、置換もしくは非置換のＣ３ないしＣ２０のシクロアルキル基、置換もしくは非置換のＣ５ないしＣ３０のヘテロシクロアルキル基、置換もしくは非置換のＣ１ないしＣ２０のアルコキシ基、置換もしくは非置換のＣ６ないしＣ３０のアリール基、置換もしくは非置換のＣ６ないしＣ３０のアラルキル基、置換もしくは非置換のＣ２ないしＣ３０のヘテロアリール基、－Ｎ（G_1）（G_2）または－Ｓｉ（G_3）（G_4）（G_5）であり、前記G_1、G_2、G_3、G_4及びG_5は、互いに独立して、水素、置換もしくは非置換のＣ１ないしＣ２０のアルキル基、置換もしくは非置換のＣ６ないしＣ３０のアリール基、置換もしくは非置換のＣ２ないしＣ３０のヘテロアリール基、置換もしくは非置換のＣ５ないしＣ２０のシクロアルキル基、または置換もしくは非置換のＣ５ないしＣ３０のヘテロシクロアルキル基であり、
Z_1 ないしZ_4 は、それぞれ独立して、置換もしくは非置換のＣ１ないしＣ２０のアルキル基、置換もしくは非置換のＣ３ないしＣ２０のシクロアルキル基、置換もしくは非置換のＣ５ないしＣ３０のヘテロシクロアルキル基、置換もしくは非置換のＣ１ないしＣ２０のアルコキシ基、置換もしくは非置換のＣ６ないしＣ３０のアリール基、置換もしくは非置換のＣ２ないしＣ３０のヘテロアリール基、置換もしくは非置換のＣ６ないしＣ３０のアラルキル基、置換もしくは非置換のＣ８ないしＣ３０のアリルアリール基、置換もしくは非置換のＣ１ないしＣ２０のアルキレン基、置換もしくは非置換のＣ６ないしＣ３０のアリーレン基、置換もしくは非置換のＣ２ないしＣ３０のヘテロアリーレン基であり、
Ｘは、単結合、－ＣＨ＝ＣＨ－、－Ｏ－、－Ｓ－、－Ｓｅ－、－Ｃ（Ｒ’）（Ｒ”）－であり、ここで、Ｒ’及びＲ”は、R_3 と同じであるか、または－（CH_2）$_p$－であり、ｐは１ないし１０の整数であり、
ｏは、０または１であり、

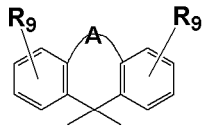
R_1及びR_2が共に環を形成する場合、置換もしくは非置換のＣ３ないしＣ２０の脂肪族環、置換もしくは非置換のＣ１ないしＣ３０のヘテロ脂肪族環、置換もしくは非置換のＣ６ないしＣ３０の芳香族環、または置換もしくは非置換のＣ１ないしＣ３０のヘテロ芳香族環を形成する。

【請求項２】

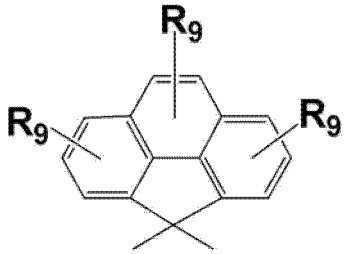
前記化学式１においてR_1及びR_2が共に環を形成する場合、前記環が下記化学式２ないし化学式５で表されることを特徴とする請求項１に記載の化合物：

【化２】

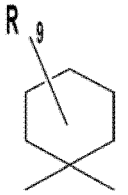
＜化学式２＞



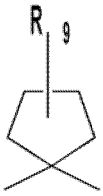
＜化学式３＞



＜化学式４＞



＜化学式５＞



前記化学式２ないし化学式５において、

R_9は、それぞれ独立して、水素、ハロゲン、シアノ基、ヒドロキシル基、置換もしくは非置換のＣ１ないしＣ２０のアルキル基、置換もしくは非置換のＣ３ないしＣ２０のシクロアルキル基、置換もしくは非置換のＣ５ないしＣ３０のヘテロシクロアルキル基、置換もしくは非置換のＣ１ないしＣ２０のアルコキシ基、置換もしくは非置換のＣ６ないしＣ３０のアリール基、置換もしくは非置換のＣ６ないしＣ３０のアラルキル基、置換もしくは非置換のＣ２ないしＣ３０のヘテロアリール基、－Ｎ（G_1）（G_2）または－Ｓｉ（G_3）（G_4）（G_5）であり、前記G_1、G_2、G_3、G_4及びG_5は、互いに独立して、水素、置換もしくは非置換のＣ１ないしＣ２０のアルキル基、置換もしくは非置換のＣ６ないしＣ３０のアリール基、置換もしくは非置換のＣ２ないしＣ３０のヘテロアリール基、置換もしくは非置換のＣ５ないしＣ２０のシクロアルキル基、または置換もしくは非置換のＣ５ないしＣ３０のヘテロシクロアルキル基であり、

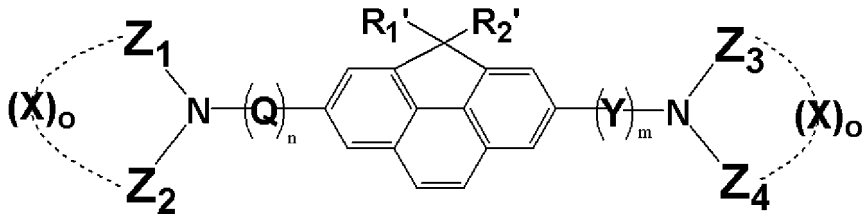
Ａは、単結合、－Ｏ－、－Ｓ－、－（CH_2）$_s$－であり、ここで、ｓは１ないし５の整数である。

【請求項３】

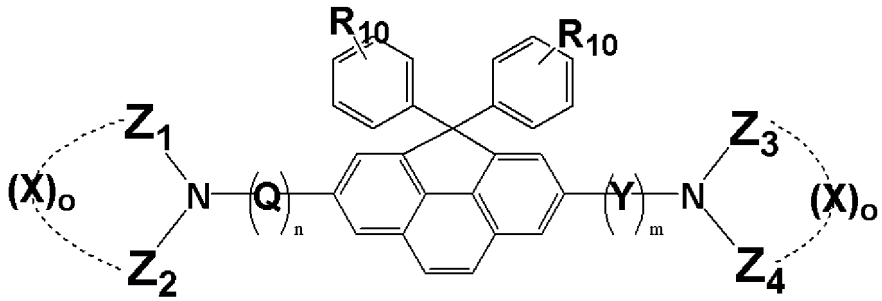
前記化学式１で表される化合物が下記化学式６ないし化学式８で表される化合物であることを特徴とする請求項１に記載の化合物：

【化３】

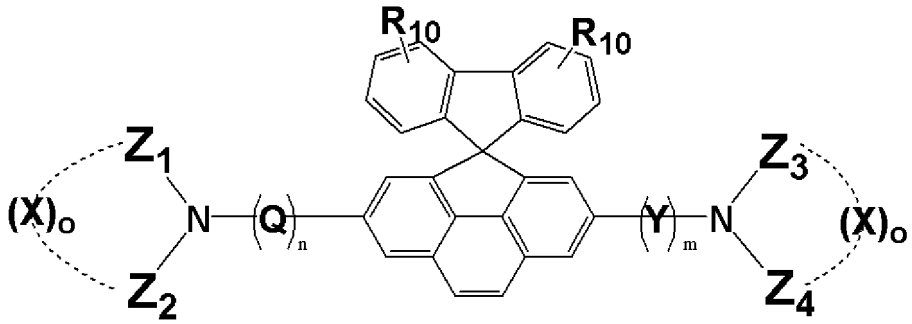
＜化学式６＞



＜化学式７＞



＜化学式８＞



前記化学式６ないし化学式８において、

R_1’及びR_2’は、それぞれ独立して、水素原子、ハロゲン原子、シアノ基、ヒドロキシル基、置換もしくは非置換のＣ１ないしＣ２０のアルキル基、置換もしくは非置換のＣ３ないしＣ２０のシクロアルキル基、置換もしくは非置換のＣ５ないしＣ３０のヘテロシクロアルキル基、置換もしくは非置換のＣ１ないしＣ２０のアルコキシ基、置換もしくは非置換のＣ６ないしＣ３０のアリール基、置換もしくは非置換のＣ６ないしＣ３０のアラルキル基、または置換もしくは非置換のＣ２ないしＣ３０のヘテロアリール基であり、

R_{10}は、互いに独立して、水素原子、ハロゲン原子、シアノ基、ヒドロキシル基、置換もしくは非置換のＣ１ないしＣ２０のアルキル基、置換もしくは非置換のＣ３ないしＣ２０のシクロアルキル基、置換もしくは非置換のＣ５ないしＣ３０のヘテロシクロアルキル基、置換もしくは非置換のＣ１ないしＣ２０のアルコキシ基、置換もしくは非置換のＣ６ないしＣ３０のアリール基、置換もしくは非置換のＣ６ないしＣ３０のアラルキル基、置換もしくは非置換のＣ２ないしＣ３０のヘテロアリール基、－Ｎ（G_1）（G_2）または－Ｓｉ（G_3）（G_4）（G_5）であり、前記G_1、G_2、G_3、G_4及びG_5は、互いに独立して、水素、置換もしくは非置換のＣ１ないしＣ２０のアルキル基、置換もしくは非置換のＣ６ないしＣ３０のアリール基、置換もしくは非置換のＣ２ないしＣ３０のヘテロアリール基、置換もしくは非置換のＣ５ないしＣ２０のシクロアルキル基、または置換もしくは非置換のＣ５ないしＣ３０のヘテロシクロアルキル基であり、

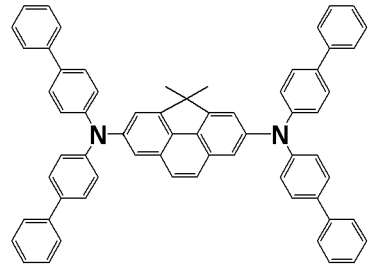
Ｑ、Ｙ、ｍ、ｎ、Z_1ないしZ_4、Ｘ、およびｏは上記化学式１と同様である。

【請求項４】

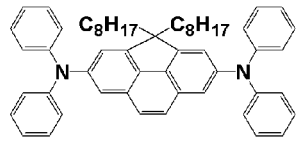
前記化学式１で表される化合物が下記化学式９ないし化学式４６で表される化合物のうちいずれか一つであることを特徴とする請求項１に記載の化合物。

【化４－１】

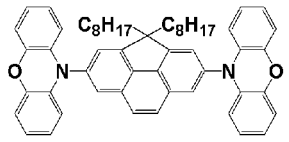
＜化学式９＞



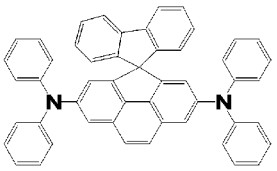
＜化学式１０＞



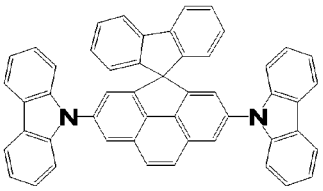
＜化学式１１＞



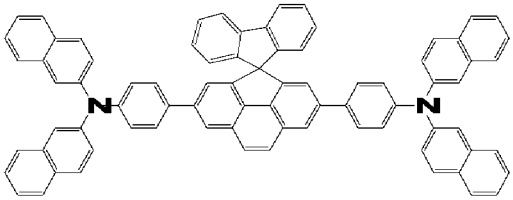
＜化学式１２＞



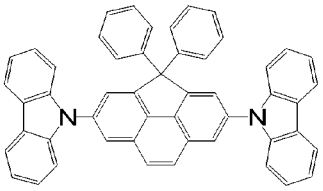
＜化学式１３＞



＜化学式１４＞

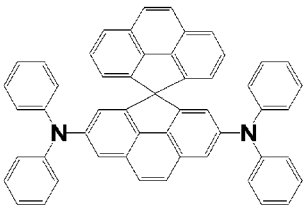


＜化学式１５＞

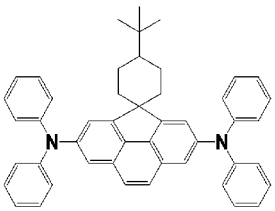


【化４－２】

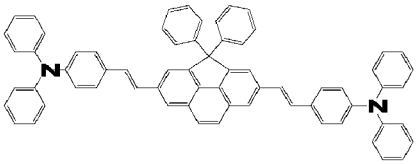
＜化学式１６＞



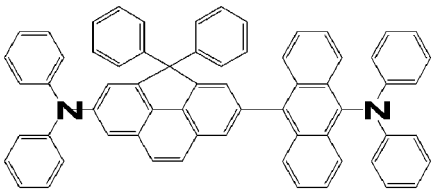
＜化学式１７＞



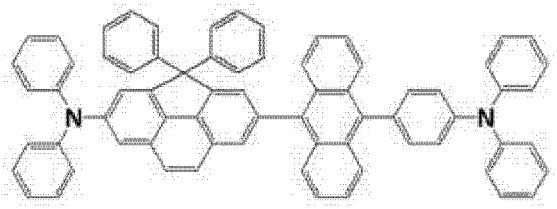
＜化学式１８＞



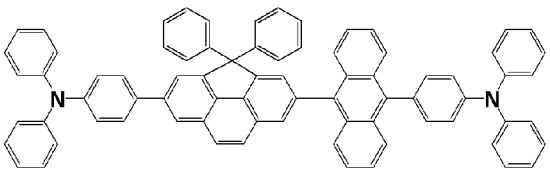
＜化学式１９＞



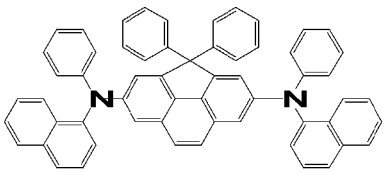
＜化学式２０＞



＜化学式２１＞

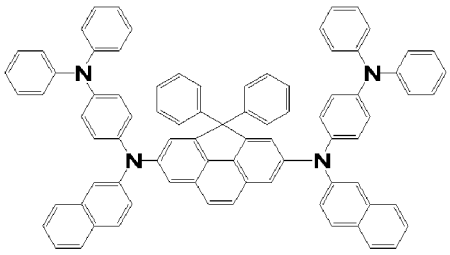


＜化学式２２＞

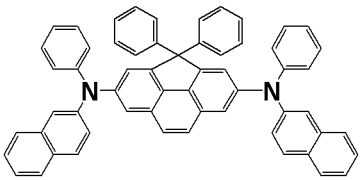


【化４－３】

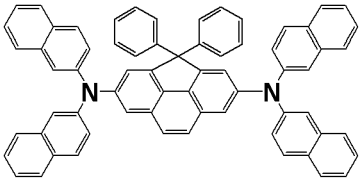
＜化学式２３＞



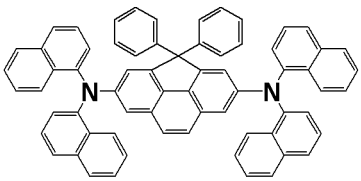
＜化学式２４＞



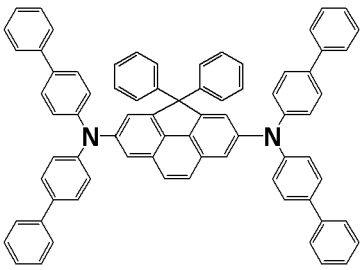
＜化学式２５＞



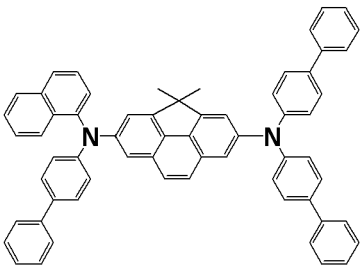
＜化学式２６＞



＜化学式２７＞

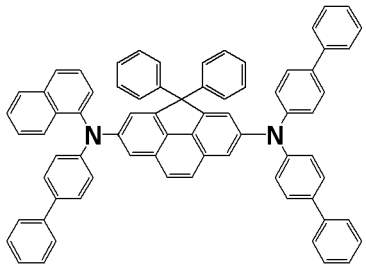


＜化学式２８＞

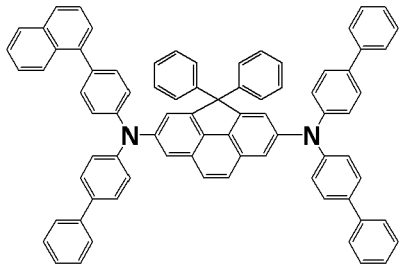


【化４－４】

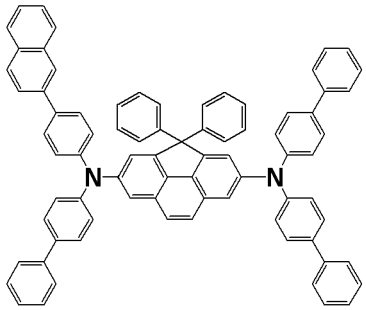
＜化学式２９＞



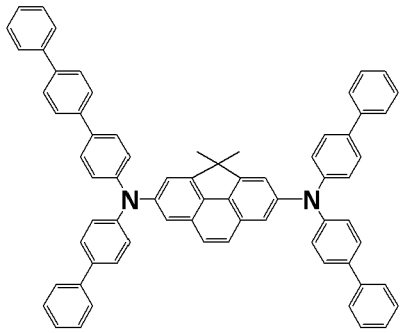
＜化学式３０＞



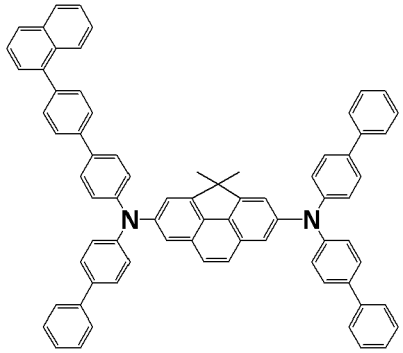
＜化学式３１＞



＜化学式３２＞

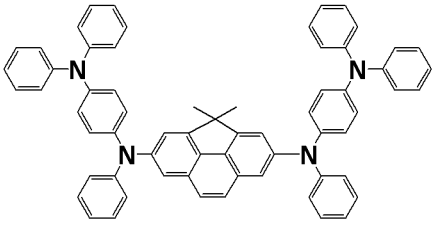


＜化学式３３＞

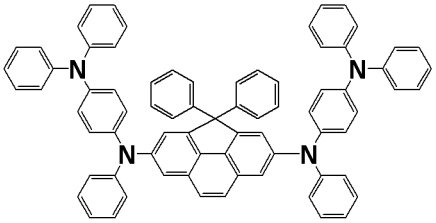


【化４－５】

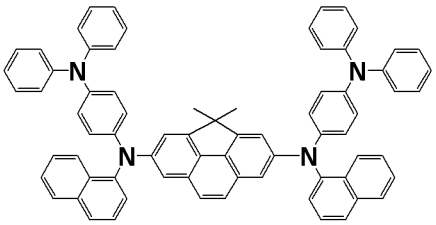
＜化学式３４＞



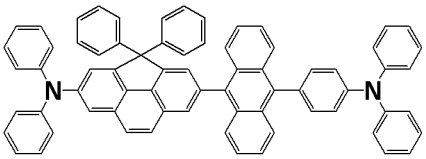
＜化学式３５＞



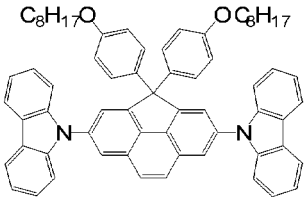
＜化学式３６＞



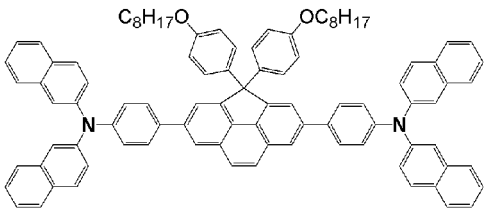
＜化学式３７＞



＜化学式３８＞

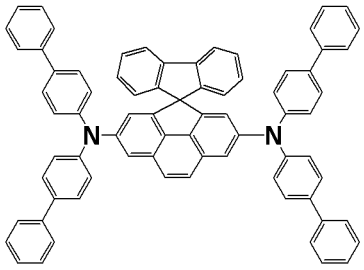


＜化学式３９＞

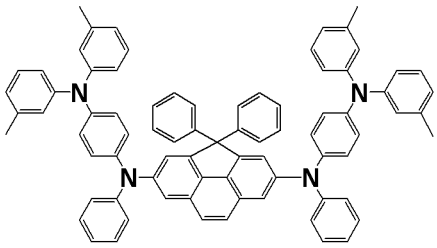


【化４－６】

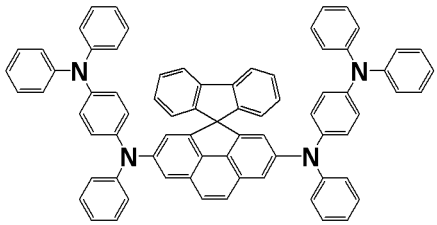
＜化学式４０＞



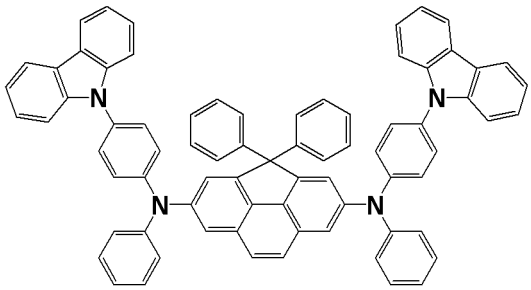
＜化学式４１＞



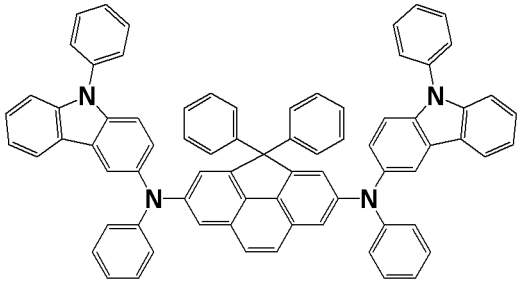
＜化学式４２＞



＜化学式４３＞

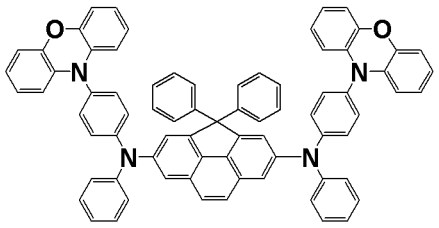


＜化学式４４＞

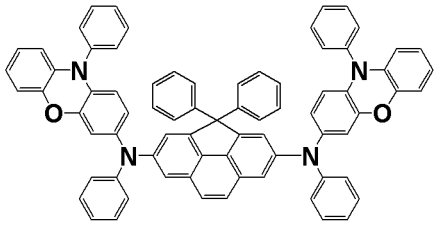


【化４－７】

＜化学式４５＞



＜化学式４６＞



【請求項５】

第１電極と、

第２電極と、

前記第１電極と前記第２電極との間に介在する少なくとも一層の有機膜と、を備える有機電界発光素子であって、

前記有機膜は、請求項１～４のいずれか１項に記載の化合物を含むことを特徴とする有機電界発光素子。

【請求項６】

前記有機膜は、発光層、正孔注入層または正孔輸送層であることを特徴とする請求項５に記載の有機電界発光素子。

【請求項７】

前記第１電極と前記第２電極との間に正孔注入層、正孔輸送層、電子阻止層、正孔阻止層、電子輸送層及び電子注入層からなる群から選択された一つ以上の前記有機層と異なる層をさらに備えることを特徴とする請求項５または６に記載の有機電界発光素子。

【発明の詳細な説明】

【技術分野】

【０００１】

本発明は、シクロペンタフェナントレン系化合物及びそれを利用した有機電界発光素子に係り、特にシクロペンタフェナントレン系化合物及びそれを利用して形成された有機膜を備える有機電界発光素子に関する。

【背景技術】

【０００２】

有機電界発光（ＥＬ）素子は、蛍光性または燐光性の有機化合物薄膜（以下、有機膜という）に電流を流した場合に、電子とホールとが有機膜で結合して光が発生する現象を利用した能動発光型表示素子であって、軽量化が可能であり、部品が簡素であり、製作工程が簡単であり、高画質および広視野角を確保できるという長所を有する。また、動画を具現でき、高色純度の具現が可能であり、低消費電力であり低電圧駆動が可能であるので、携帯用電子機器に適した電気的特性を有している。

【０００３】

イーストマンコダック社では、アルミニウムキノリノル錯化合物層とトリフェニルアミン誘導体層とを利用した多層構造の有機ＥＬ素子を開発した（特許文献１参照）。有機発光層の形成時に低分子を利用することによって紫外から赤外領域に至るまでの多様な発光が可能になった（特許文献２、特許文献３参照）。

【０００４】

発光素子は、自発光型素子であって、視野角が広く、コントラストが優秀であるだけでなく、応答時間が速いという長所を有している。前記発光素子には、発光層に無機化合物を使用する無機発光素子と、有機化合物を使用する有機発光素子（Ｏｒｇａｎｉｃ　Ｌｉｇｈｔ　Ｅｍｉｔｔｉｎｇ　Ｄｅｖｅｉｃｅ：ＯＬＥＤ）とがあるが、ＯＬＥＤは、無機発光素子に比べて輝度、駆動電圧及び応答速度特性が優秀であり、多色化が可能であるという点で多くの研究が行われている。

【０００５】

ＯＬＥＤは、一般的にアノード／有機発光層／カソードの積層構造を有し、アノード／正孔注入層／正孔輸送層／発光層／電子輸送層／電子注入層／カソード、またはアノード／正孔注入層／正孔輸送層／発光層／正孔阻止層／電子輸送層／電子注入層／カソードのような多様な構造も有しうる。

【特許文献１】米国特許第４，８８５，２１１号明細書

【特許文献２】米国特許第５，１５１，６２９号明細書

【特許文献３】特開平１１－３７８２号公報

【発明の開示】

【発明が解決しようとする課題】

【０００６】

ＯＬＥＤに使用される物質は、有機膜の製造方法によって真空蒸着性物質と溶液塗布性物質とに分けられる。真空蒸着性物質は、５００℃以下で10^{-6}Ｔｏｒｒ以上の蒸気圧を有し、主に分子量１２００以下の低分子物質が好ましい。溶液塗布性物質としては、溶剤に対する溶解性が高く溶液に調製できる必要があり、主に芳香族または複素環化合物が挙げられる。

【０００７】

真空蒸着法を使用してＯＬＥＤを製造する場合、真空系の使用により製造コストが増加し、天然色ディスプレイ用のピクセルを製造するためにシャドウマスクを使用する場合、高解像度のピクセルを製造することが困難である。これに対し、インクジェットプリンティング、スクリーンプリンティング、スピンコーティングのような溶液塗布法の場合には、製造が容易であり、製造コストが低く、シャドウマスクを使用する場合より相対的に優れた解像度が得られる。

【０００８】

しかし、溶液塗布法に使用可能な物質の場合、発光分子の性能が熱的安定性、色純度などの側面で真空蒸着法に使用可能な物質に比べて劣る場合がある。また、前記性能に優れた場合にも、有機膜で製造した後に次第に結晶化し、結晶のサイズが可視光線波長の範囲に該当して可視光線を散乱させて白濁現象を見せ、ピンホールなどが形成されて素子の劣化をもたらすという問題点があった。

【０００９】

特許文献３には、発光層または正孔注入層に使われる化合物として、二つのナフチル基により置換されたアントラセンが開示されている。しかし、前記化合物は、溶剤への溶解性が不十分であるだけでなく、それを採用したＯＬＥＤの特性などは満足すべきレベルに達していない。

【００１０】

したがって、熱的安定性に優れ、かつ駆動電圧、輝度、効率及び色純度特性を向上させた有機ＥＬ素子の開発が依然として要求されている。

【００１１】

本発明が解決しようとする課題は、ドライ及びウェット加工が可能であり、熱的安定性に優れ、優秀な電荷移動特性及び発光特性を有する化合物及びそれを採用した有機ＥＬ素子を提供することである。

【課題を解決するための手段】

【００１２】

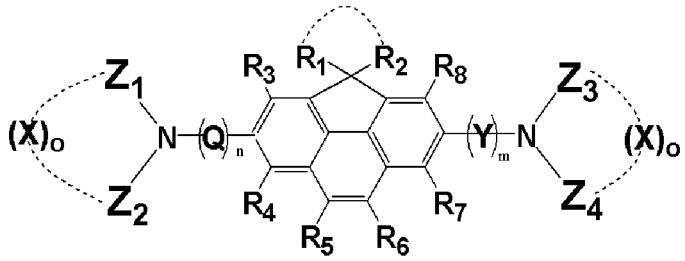
前記課題を解決するために、本発明では、下記化学式１で表されるシクロペンタフェナ

ントレン系化合物を提供する。

【００１３】

【化１】

＜化学式１＞



【００１４】

前記化学式１において、Ｑ及びＹは、互いに独立して、置換もしくは非置換のＣ２ないしＣ３０のアルキレン基、置換もしくは非置換のＣ６ないしＣ３０のシクロアルキレン基、置換もしくは非置換のＣ６ないしＣ３０のアリーレン基、置換もしくは非置換のＣ２ないしＣ３０のヘテロアリーレン基、置換もしくは非置換のＣ２ないしＣ３０のアルケニレン基であり、ｍおよびｎはそれぞれ独立して、０ないし５の整数であり、R_1及びR_2は、独立して、それぞれ水素原子、ハロゲン原子、シアノ基、ヒドロキシル基、置換もしくは非置換のＣ１ないしＣ２０のアルキル基、置換もしくは非置換のＣ３ないしＣ２０のシクロアルキル基、置換もしくは非置換のＣ５ないしＣ３０のヘテロシクロアルキル基、置換もしくは非置換のＣ１ないしＣ２０のアルコキシ基、置換もしくは非置換のＣ６ないしＣ３０のアリール基、置換もしくは非置換のＣ６ないしＣ３０のアラルキル基、置換もしくは非置換のＣ２ないしＣ３０のヘテロアリール基であり、R_1及びR_2は共に環を形成してもよく、R_3ないしR_8は、それぞれ独立して、水素原子、ハロゲン原子、シアノ基、ヒドロキシル基、置換もしくは非置換のＣ１ないしＣ２０のアルキル基、置換もしくは非置換のＣ３ないしＣ２０のシクロアルキル基、置換もしくは非置換のＣ５ないしＣ３０のヘテロシクロアルキル基、置換もしくは非置換のＣ１ないしＣ２０のアルコキシ基、置換もしくは非置換のＣ６ないしＣ３０のアリール基、置換もしくは非置換のＣ６ないしＣ３０のアラルキル基、置換もしくは非置換のＣ２ないしＣ３０のヘテロアリール基、－Ｎ（G_1）（G_2）または－Ｓｉ（G_3）（G_4）（G_5）であり、前記G_1、G_2、G_3、G_4及びG_5は、互いに独立して、水素、置換もしくは非置換のＣ１ないしＣ２０のアルキル基、置換もしくは非置換のＣ６ないしＣ３０のアリール基、置換もしくは非置換のＣ２ないしＣ３０のヘテロアリール基、置換もしくは非置換のＣ５ないしＣ２０のシクロアルキル基、または置換もしくは非置換のＣ５ないしＣ３０のヘテロシクロアルキル基であり、Z_1ないしZ_4は、それぞれ独立して、置換もしくは非置換のＣ１ないしＣ２０のアルキル基、置換もしくは非置換のＣ３ないしＣ２０のシクロアルキル基、置換もしくは非置換のＣ５ないしＣ３０のヘテロシクロアルキル基、置換もしくは非置換のＣ１ないしＣ２０のアルコキシ基、置換もしくは非置換のＣ６ないしＣ３０のアリール基、置換もしくは非置換のＣ２ないしＣ３０のヘテロアリール基、置換もしくは非置換のＣ６ないしＣ３０のアラルキル基、置換もしくは非置換のＣ８ないしＣ３０のアリルアリール基、置換もしくは非置換のＣ１ないしＣ２０のアルキレン基、置換もしくは非置換のＣ６ないしＣ３０のアリーレン基、置換もしくは非置換のＣ２ないしＣ３０のヘテロアリーレン基であり、Ｘは、単結合、－ＣＨ＝ＣＨ－、－Ｏ－、－Ｓ－、－Ｓｅ－、－Ｃ（Ｒ’）（Ｒ”）－であり、ここで、Ｒ’及びＲ”は、R_3と同じであるか、または－（CH_2）$_p$－であり、ｐは１ないし１０の整数であり、ｏは、０または１であり、R_1及びR_2が共に環を形成する場合、置換もしくは非置換のＣ３ないしＣ２０の脂肪族環、置換もしくは非置換のＣ１ないしＣ３０のヘテロ脂肪族環、置換もしくは非置換のＣ６ないしＣ３０の芳香族環、置換もしくは非置換のＣ１ないしＣ３０のヘテロ芳香族環である。

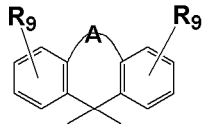
【００１５】

前記化学式１においてＲ$_1$及びＲ$_2$が共に環を形成する場合は、前記環は、好ましくは下記化学式２ないし５で表される。

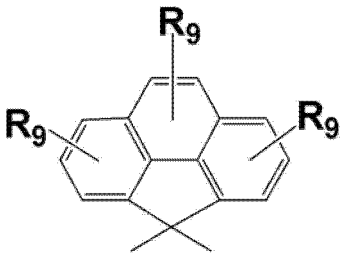
【００１６】

【化２】

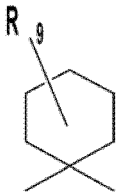
＜化学式２＞



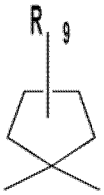
＜化学式３＞



＜化学式４＞



＜化学式５＞



【００１７】

前記化学式２ないし化学式５において、Ｒ$_9$は、それぞれ独立して、水素原子、ハロゲン原子、シアノ基、ヒドロキシル基、置換もしくは非置換のＣ１ないしＣ２０のアルキル基、置換もしくは非置換のＣ３ないしＣ２０のシクロアルキル基、置換もしくは非置換のＣ５ないしＣ３０のヘテロシクロアルキル基、置換もしくは非置換のＣ１ないしＣ２０のアルコキシ基、置換もしくは非置換のＣ６ないしＣ３０のアリール基、置換もしくは非置換のＣ６ないしＣ３０のアラルキル基、置換もしくは非置換のＣ２ないしＣ３０のヘテロアリール基、－Ｎ（Ｇ$_1$）（Ｇ$_2$）または－Ｓｉ（Ｇ$_3$）（Ｇ$_4$）（Ｇ$_5$）であり、前記Ｇ$_1$、Ｇ$_2$、Ｇ$_3$、Ｇ$_4$及びＧ$_5$は、互いに独立して、水素、置換もしくは非置換のＣ１ないしＣ２０のアルキル基、置換もしくは非置換のＣ６ないしＣ３０のアリール基、置換もしくは非置換のＣ２ないしＣ３０のヘテロアリール基、置換もしくは非置換のＣ５ないしＣ２０のシクロアルキル基、または置換もしくは非置換のＣ５ないしＣ３０のヘテロシクロアルキル基であり、Ａは、単結合、－Ｏ－、－Ｓ－、－（ＣＨ$_2$）$_s$－であり、ここで、ｓは１ないし５の整数である。１つの環が２以上のＲ$_9$を有していてもよい。

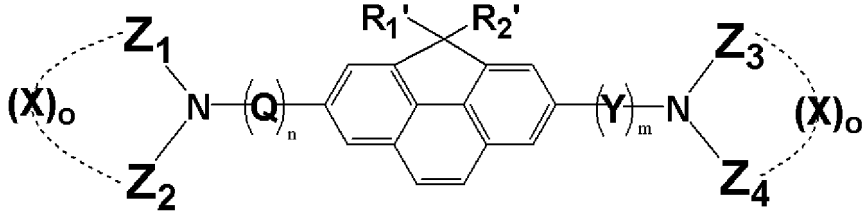
【００１８】

本発明の一実施形態によれば、前記化学式１で表される化合物は、好ましくは下記化学式６ないし化学式８で表される化合物でありうる。

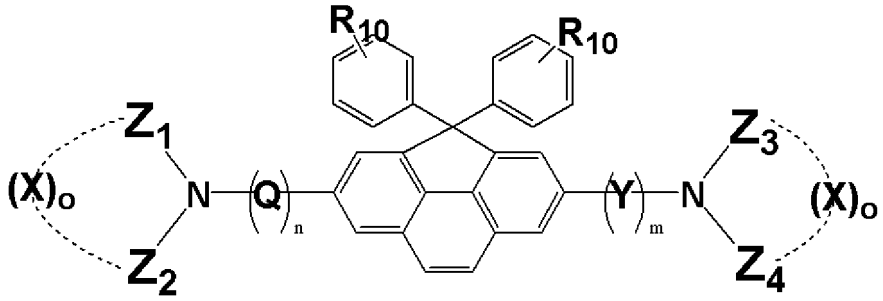
【００１９】

【化３】

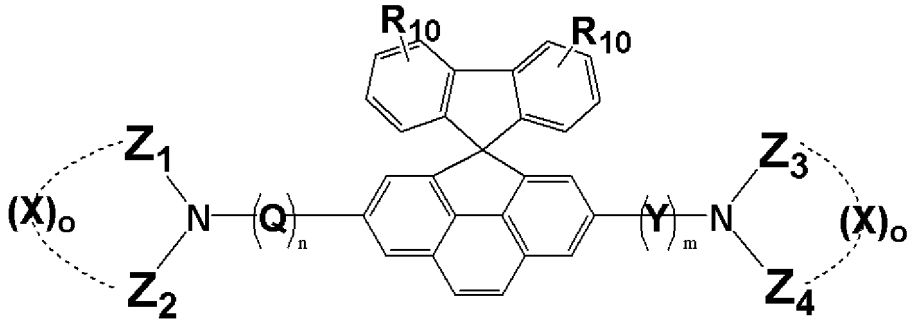
＜化学式６＞



＜化学式７＞



＜化学式８＞



【００２０】

前記化学式６ないし化学式８においてR_1’及びR_2’は、それぞれ独立して、水素原子、ハロゲン原子、シアノ基、ヒドロキシル基、置換もしくは非置換のＣ１ないしＣ２０のアルキル基、置換もしくは非置換のＣ３ないしＣ２０のシクロアルキル基、置換もしくは非置換のＣ５ないしＣ３０のヘテロシクロアルキル基、置換もしくは非置換のＣ１ないしＣ２０のアルコキシ基、置換もしくは非置換のＣ６ないしＣ３０のアリール基、置換もしくは非置換のＣ６ないしＣ３０のアラルキル基、または置換もしくは非置換のＣ２ないしＣ３０のヘテロアリール基であり、R_{10}は、互いに独立して、水素原子、ハロゲン原子、シアノ基、ヒドロキシル基、置換もしくは非置換のＣ１ないしＣ２０のアルキル基、置換もしくは非置換のＣ３ないしＣ２０のシクロアルキル基、置換もしくは非置換のＣ５ないしＣ３０のヘテロシクロアルキル基、置換もしくは非置換のＣ１ないしＣ２０のアルコキシ基、置換もしくは非置換のＣ６ないしＣ３０のアリール基、置換もしくは非置換のＣ６ないしＣ３０のアラルキル基、置換もしくは非置換のＣ２ないしＣ３０のヘテロアリール基、－Ｎ（G_1）（G_2）または－Ｓｉ（G_3）（G_4）（G_5）であり、前記G_1、G_2、G_3、G_4及びG_5は、互いに独立して、水素、置換もしくは非置換のＣ１ないしＣ２０のアルキル基、置換もしくは非置換のＣ６ないしＣ３０のアリール基、置換もしくは非置換のＣ２ないしＣ３０のヘテロアリール基、置換もしくは非置換のＣ５ないしＣ２０のシクロアルキル基、または置換もしくは非置換のＣ５ないしＣ３０のヘテロシクロアルキル基であり、Ｑ、Ｙ、ｍ、ｎ、Z_1ないしZ_4、Ｘ、およびｏは上記化学式１と同様である。

【００２１】

前記課題を解決するために、本発明では、第１電極と、第２電極と、前記第１電極と前

記第２電極との間に介在する少なくとも一層の有機膜と、を備える有機ＥＬ素子であって、前記有機膜は、前述したような有機発光化合物を含む有機ＥＬ素子を提供する。

【発明の効果】

【００２２】

本発明による化学式１で表される化合物は、ドライ及びウェット加工が可能であり、優秀な発光特性及び熱安定性を有する。したがって、本発明による化合物を利用すれば、低い駆動電圧、優秀な色純度及び効率を有する有機ＥＬ素子が得られる。

【発明を実施するための最良の形態】

【００２３】

以下、本発明についてさらに詳細に説明する。

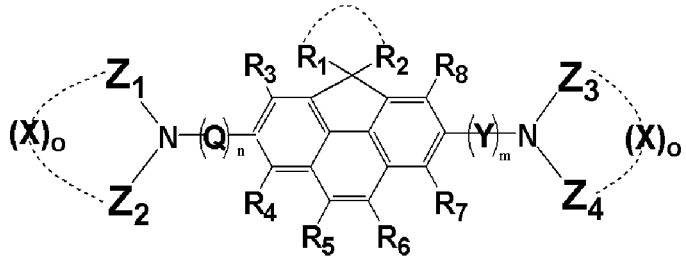
【００２４】

本発明では、下記化学式１のシクロペンタフェナントレン系化合物を提供する。

【００２５】

【化４】

＜化学式１＞



【００２６】

前記化学式１において、ＱおよびＹは、互いに独立して、置換もしくは非置換のＣ２ないしＣ３０のアルキレン基、置換もしくは非置換のＣ６ないしＣ３０のシクロアルキレン基、置換もしくは非置換のＣ６ないしＣ３０のアリーレン基、置換もしくは非置換のＣ２ないしＣ３０のヘテロアリーレン基、置換もしくは非置換のＣ２ないしＣ３０のアルケニレン基であり、ｍおよびｎは、それぞれ独立して０ないし５の整数、好ましくは０ないし２の整数であり、R_1 及びR_2 は、それぞれ独立して、水素原子、ハロゲン原子、シアノ基、ヒドロキシル基、置換もしくは非置換のＣ１ないしＣ２０のアルキル基、置換もしくは非置換のＣ３ないしＣ２０のシクロアルキル基、置換もしくは非置換のＣ５ないしＣ３０のヘテロシクロアルキル基、置換もしくは非置換のＣ１ないしＣ２０のアルコキシ基、置換もしくは非置換のＣ６ないしＣ３０のアリール基、置換もしくは非置換のＣ６ないしＣ３０のアラルキル基、置換もしくは非置換のＣ２ないしＣ３０のヘテロアリール基であり、R_1 及びR_2 は共に環を形成してもよく、R_3 ないしR_8 は、それぞれ独立して、水素原子、ハロゲン原子、シアノ基、ヒドロキシル基、置換もしくは非置換のＣ１ないしＣ２０のアルキル基、置換もしくは非置換のＣ３ないしＣ２０のシクロアルキル基、置換もしくは非置換のＣ５ないしＣ３０のヘテロシクロアルキル基、置換もしくは非置換のＣ１ないしＣ２０のアルコキシ基、置換もしくは非置換のＣ６ないしＣ３０のアリール基、置換もしくは非置換のＣ６ないしＣ３０のアラルキル基、置換もしくは非置換のＣ２ないしＣ３０のヘテロアリール基、－Ｎ（G_1）（G_2）または－Ｓｉ（G_3）（G_4）（G_5）であり、前記G_1、G_2、G_3、G_4 及びG_5 は、互いに独立して、水素、置換もしくは非置換のＣ１ないしＣ２０のアルキル基、置換もしくは非置換のＣ６ないしＣ３０のアリール基、置換もしくは非置換のＣ２ないしＣ３０のヘテロアリール基、置換もしくは非置換のＣ５ないしＣ２０のシクロアルキル基、または置換もしくは非置換のＣ５ないしＣ３０のヘテロシクロアルキル基であり、Z_1 ないしZ_4 は、それぞれ独立して、置換もしくは非置換のＣ１ないしＣ２０のアルキル基、置換もしくは非置換のＣ３ないしＣ２０のシクロアルキル基、置換もしくは非置換のＣ５ないしＣ３０のヘテロシクロアルキル基、置換もしくは非置換のＣ１ないしＣ２０のアルコキシ基、置換もしくは非置換のＣ６ない

しＣ３０のアリール基、置換もしくは非置換のＣ２ないしＣ３０のヘテロアリール基、置換もしくは非置換のＣ６ないしＣ３０のアラルキル基、置換もしくは非置換のＣ８ないしＣ３０のアリルアリール基、置換もしくは非置換のＣ１ないしＣ２０のアルキレン基、置換もしくは非置換のＣ６ないしＣ３０のアリーレン基、置換もしくは非置換のＣ２ないしＣ３０のヘテロアリーレン基であり、Ｘは、単結合、－ＣＨ＝ＣＨ－、－Ｏ－、－Ｓ－、－Ｓｅ－、－Ｃ（Ｒ’）（Ｒ”）－であり、ここで、Ｒ’及びＲ”は、R_3と同じであるか、または－（CH_2）$_p$－であり、ｐは１ないし１０の整数であり、ｏは、０または１であり、R_1及びR_2が共に環を形成する場合、置換もしくは非置換のＣ３ないしＣ２０の脂肪族環、置換もしくは非置換のＣ１ないしＣ３０のヘテロ脂肪族環、置換もしくは非置換のＣ６ないしＣ３０の芳香族環、または置換もしくは非置換のＣ１ないしＣ３０のヘテロ芳香族環を形成する。

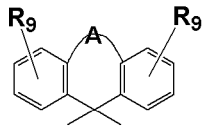
【００２７】

前記化学式１においてR_1及びR_2が共に環を形成する場合、前記環は、好ましくは下記化学式２ないし化学式５で表される。

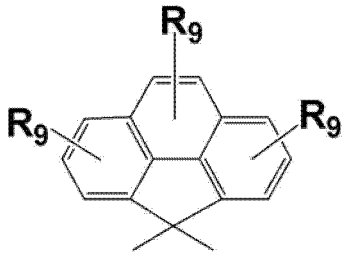
【００２８】

【化５】

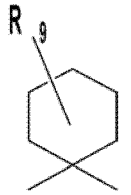
＜化学式２＞



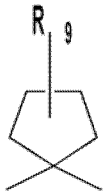
＜化学式３＞



＜化学式４＞



＜化学式５＞



【００２９】

前記化学式２ないし化学式５において、R_9は、それぞれ独立して、水素原子、ハロゲン原子、シアノ基、ヒドロキシル基、置換もしくは非置換のＣ１ないしＣ２０のアルキル基、置換もしくは非置換のＣ３ないしＣ２０のシクロアルキル基、置換もしくは非置換のＣ５ないしＣ３０のヘテロシクロアルキル基、置換もしくは非置換のＣ１ないしＣ２０のアルコキシ基、置換もしくは非置換のＣ６ないしＣ３０のアリール基、置換もしくは非置換のＣ６ないしＣ３０のアラルキル基、置換もしくは非置換のＣ２ないしＣ３０のヘテロ

アリール基、－Ｎ（Ｇ$_1$）（Ｇ$_2$）または－Ｓｉ（Ｇ$_3$）（Ｇ$_4$）（Ｇ$_5$）であり、前記Ｇ$_1$、Ｇ$_2$、Ｇ$_3$、Ｇ$_4$及びＧ$_5$は、互いに独立して、水素、置換もしくは非置換のＣ１ないしＣ２０のアルキル基、置換もしくは非置換のＣ６ないしＣ３０のアリール基、置換もしくは非置換のＣ２ないしＣ３０のヘテロアリール基、置換もしくは非置換のＣ５ないしＣ２０のシクロアルキル基、または置換もしくは非置換のＣ５ないしＣ３０のヘテロシクロアルキル基であり、Ａは、単結合、－Ｏ－、－Ｓ－、－（ＣＨ$_2$）$_s$－であり、ここで、ｓは１ないし１０の整数である。

【００３０】

特に、前記化学式１ないし化学式５において、Ｒ$_1$ないしＲ$_9$は、化合物の溶解性及びアモルファス特性を向上させてフィルム形成能力を向上させる役割を有する。

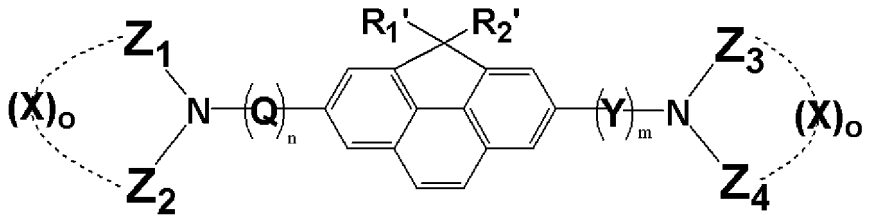
【００３１】

本発明による前記化学式１で表される化合物は、好ましくは、下記化学式６ないし８で表される化合物でありうる。

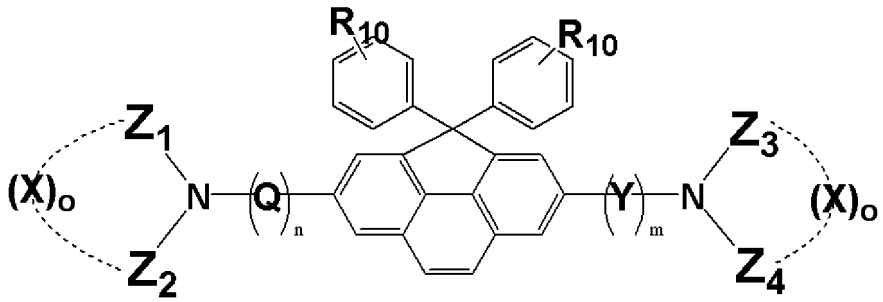
【００３２】

【化６】

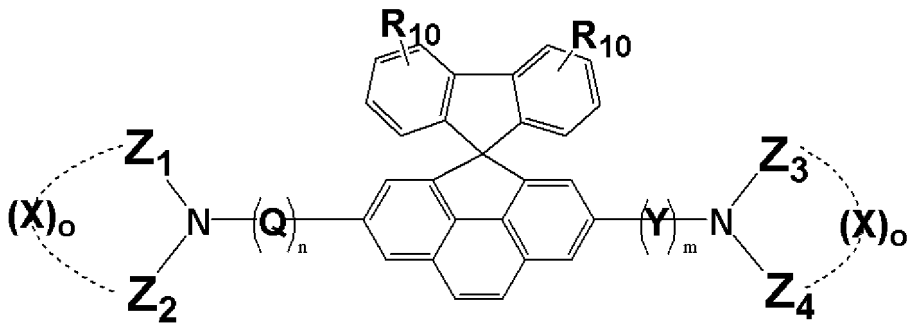
＜化学式６＞



＜化学式７＞



＜化学式８＞



【００３３】

前記化学式６ないし化学式８において、Ｒ$_1$’及びＲ$_2$’は、それぞれ独立して、水素原子、ハロゲン原子、シアノ基、ヒドロキシル基、置換もしくは非置換のＣ１ないしＣ２０のアルキル基、置換もしくは非置換のＣ３ないしＣ２０のシクロアルキル基、置換もしくは非置換のＣ５ないしＣ３０のヘテロシクロアルキル基、置換もしくは非置換のＣ１ないしＣ２０のアルコキシ基、置換もしくは非置換のＣ６ないしＣ３０のアリール基、置換もしくは非置換のＣ６ないしＣ３０のアラルキル基、置換もしくは非置換のＣ２ないしＣ３０のヘテロアリール基であり、Ｒ$_{10}$は、互いに独立して、それぞれ水素、ハロゲン、

シアノ基、ヒドロキシル基、置換もしくは非置換のＣ１ないしＣ２０のアルキル基、置換もしくは非置換のＣ３ないしＣ２０のシクロアルキル基、置換もしくは非置換のＣ５ないしＣ３０のヘテロシクロアルキル基、置換もしくは非置換のＣ１ないしＣ２０のアルコキシ基、置換もしくは非置換のＣ６ないしＣ３０のアリール基、置換もしくは非置換のＣ６ないしＣ３０のアラルキル基、置換もしくは非置換のＣ２ないしＣ３０のヘテロアリール基、－Ｎ（G_1）（G_2）または－Ｓｉ（G_3）（G_4）（G_5）であり、前記G_1、G_2、G_3、G_4及びG_5は、互いに独立して、水素、置換もしくは非置換のＣ１ないしＣ２０のアルキル基、置換もしくは非置換のＣ６ないしＣ３０のアリール基、置換もしくは非置換のＣ２ないしＣ３０のヘテロアリール基、置換もしくは非置換のＣ５ないしＣ２０のシクロアルキル基、または置換もしくは非置換のＣ５ないしＣ３０のヘテロシクロアルキル基であり、Ｑ、Ｙ、ｍ、ｎ、Z_1ないしZ_4、Ｘ、およびｏは上記化学式１と同様である。

【００３４】

前記化学式１ないし８において、アリール基は、芳香環を有する１価の基であって、好ましくは２以上の環を備え、前記２以上の環は、互いに結合または縮合された形態で存在しうる。前記ヘテロアリール基は、前記アリール基の芳香環を形成する一つ以上の炭素がＮ、Ｏ、Ｓ及びＰからなる群から選択された一つ以上の原子で置換された基を指す。

【００３５】

一方、シクロアルキル基は、環構造を有するアルキル基を指し、ヘテロシクロアルキル基は、前記シクロアルキル基の環構造を形成する一つ以上の炭素がＮ、Ｏ、Ｓ及びＰからなる群から選択された一つ以上の原子で置換された基を指す。

【００３６】

前記化学式１ないし８において、アルキル基、アルコキシ基、アリール基、ヘテロアリール基、シクロアルキル基及びヘテロシクロアルキル基が置換される場合、それらの置換基は、好ましくは、－Ｆ；－Ｃｌ；－Ｂｒ；－ＣＮ；－NO_2；－ＯＨ；非置換または－Ｆ、－Ｃｌ、－Ｂｒ、－ＣＮ、－NO_2もしくは－ＯＨにより置換されたＣ１ないしＣ２０のアルキル基；非置換または－Ｆ、－Ｃｌ、－Ｂｒ、－ＣＮ、－NO_2もしくは－ＯＨにより置換されたＣ１ないしＣ２０のアルコキシ基；非置換またはＣ１ないしＣ２０のアルキル基、Ｃ１ないしＣ２０のアルコキシ基、－Ｆ、－Ｃｌ、－Ｂｒ、－ＣＮ、－NO_2もしくは－ＯＨにより置換されたＣ６ないしＣ３０のアリール基；非置換またはＣ１ないしＣ２０のアルキル基、Ｃ１ないしＣ２０のアルコキシ基、－Ｆ、－Ｃｌ、－Ｂｒ、－ＣＮ、－NO_2もしくは－ＯＨにより置換されたＣ２ないしＣ３０のヘテロアリール基；非置換またはＣ１ないしＣ２０のアルキル基、Ｃ１ないしＣ２０のアルコキシ基、－Ｆ、－Ｃｌ、－Ｂｒ、－ＣＮ、－NO_2もしくは－ＯＨにより置換されたＣ５ないしＣ２０のシクロアルキル基；非置換またはＣ１ないしＣ２０のアルキル基、Ｃ１ないしＣ２０のアルコキシ基、－Ｆ、－Ｃｌ、－Ｂｒ、－ＣＮ、－NO_2もしくは－ＯＨにより置換されたＣ５ないしＣ３０のヘテロシクロアルキル基、及び－Ｎ（G_6）（G_7）で表される基からなる群から選択された一つ以上でありうる。この際、前記G_6及びG_7は、好ましくは、それぞれ独立して水素原子；Ｃ１ないしＣ１０のアルキル基；またはＣ１ないしＣ１０のアルキル基により置換されたＣ６ないしＣ３０のアリール基でありうる。

【００３７】

さらに具体的には、R_1ないしR_{10}は、好ましくは、それぞれ独立して水素原子、ハロゲン原子、シアノ基、ヒドロキシル基、Ｃ１ないしＣ１０のアルキル基、Ｃ１ないしＣ１０のアルコキシ基であるか、あるいは、置換または非置換の次のような置換基：フェニル基、ビフェニル基、ペンタレニル基、インデニル基、ナフチル基、ビフェニレニル基、アントラセニル基、アズレニル基、ヘプタレニル基、アセナフチルレニル基、フェナレニル基、フルオレニル基、メチルアントリル基、フェナントレニル基、トリフェニルレニル基、ピレニル基、クリセニル基、エチル－クリセニル基、ピセニル基、ペリレニル基、クロロペリレニル基、ペンタフェニル基、ペンタセニル基、テトラフェニルレニル基、ヘキサフェニル基、ヘキサセニル基、ルビーセニル基、コロネニル基、トリナフチルレニル

基、ヘプタフェニル基、ヘプタセニル基、フルオレニル基、ピラントレニル基、オバレニル基、カルバゾリル基、チオフェニル基、インドリル基、プリニル基、ベンズイミダゾリル基、キノリニル基、ベンゾチオフェニル基、パラチアジニル基、ピロリル基、ピラゾリル基、イミダゾリル基、イミダゾリニル基、オキサゾリル基、チアゾリル基、トリアゾリル基、テトラゾリル基、オキサジアゾリル基、ピリジニル基、ピリダジニル基、ピリミジニル基、ピラジニル基、チアントレニル基、シクロペンチル基、シクロヘキシル基、オキシラニル基、ピロリジニル基、ピラゾリジニル基、イミダゾリジニル基、ピペリジニル基、ピペラジニル基、モルホリニル基、ジ（Ｃ６ないし３０のアリール）アミノ基、トリ（Ｃ６ないし３０のアリール）シリル基及びそれらの誘導体からなる群から選択されうる。

【００３８】

本明細書において、前記「誘導体」という用語は、上記で列挙した基のうち一つ以上の水素が前述したような置換基により置換された基をいう。

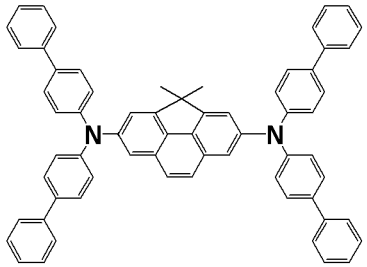
【００３９】

本発明による化合物は、好ましくは下記化学式９ないし化学式４６で表される化合物でありうるが、これに限定されるものではない。

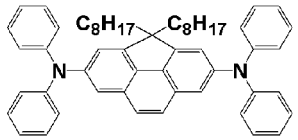
【００４０】

【化７－１】

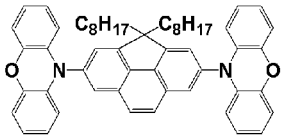
＜化学式９＞



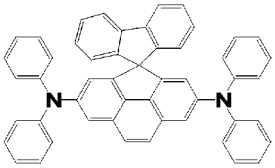
＜化学式１０＞



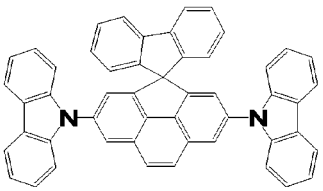
＜化学式１１＞



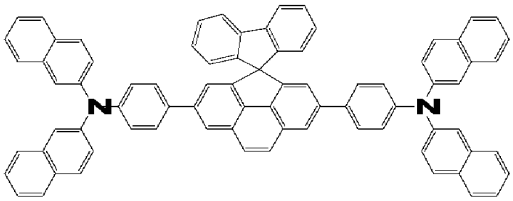
＜化学式１２＞



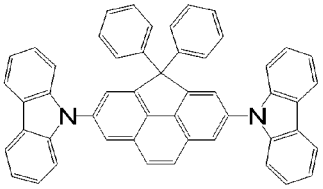
＜化学式１３＞



＜化学式１４＞



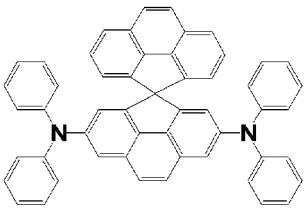
＜化学式１５＞



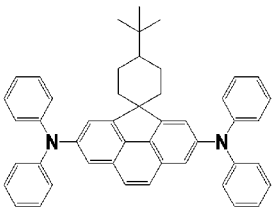
【００４１】

【化７－２】

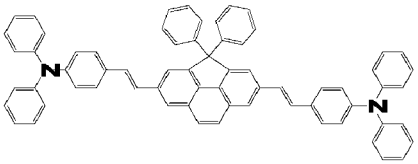
＜化学式１６＞



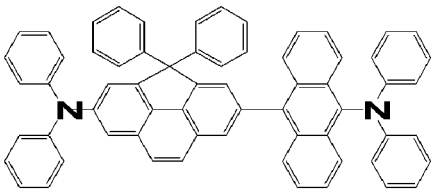
＜化学式１７＞



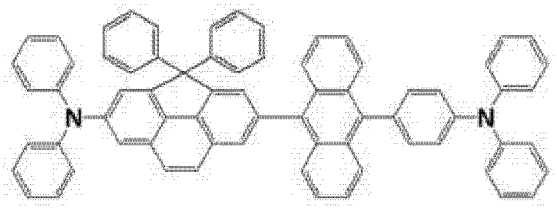
＜化学式１８＞



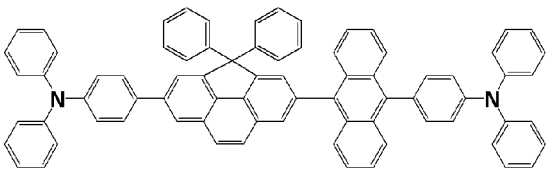
＜化学式１９＞



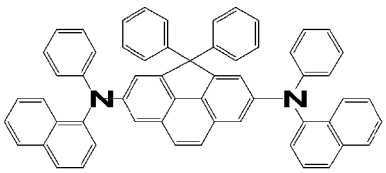
＜化学式２０＞



＜化学式２１＞



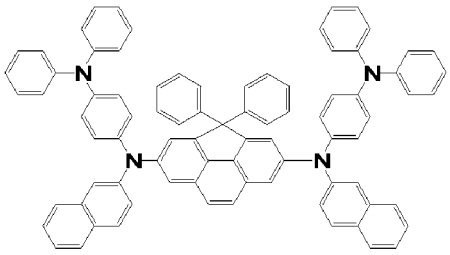
＜化学式２２＞



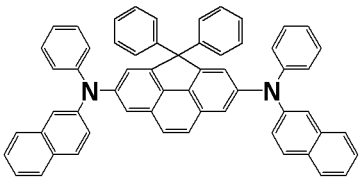
【００４２】

【化７－３】

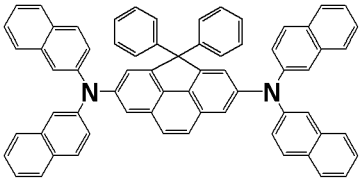
＜化学式２３＞



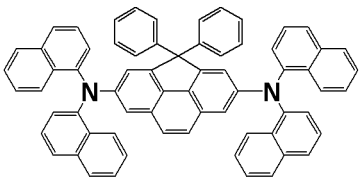
＜化学式２４＞



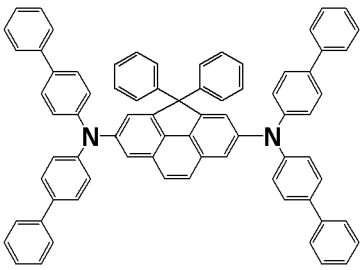
＜化学式２５＞



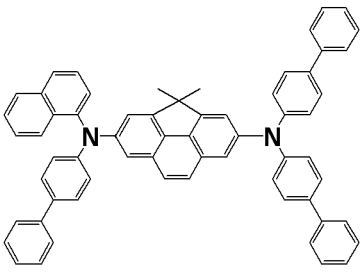
＜化学式２６＞



＜化学式２７＞



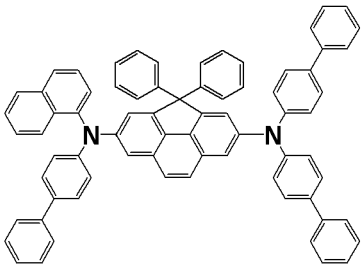
＜化学式２８＞



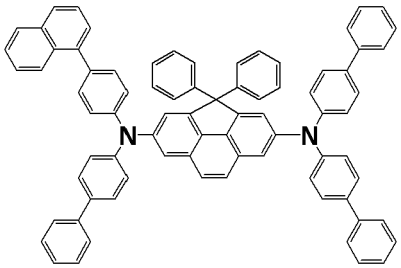
【００４３】

【化７－４】

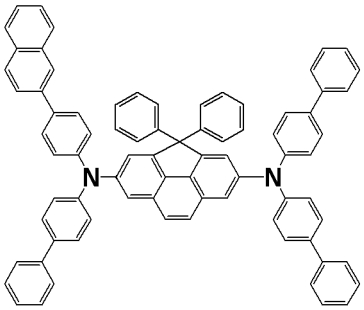
＜化学式２９＞



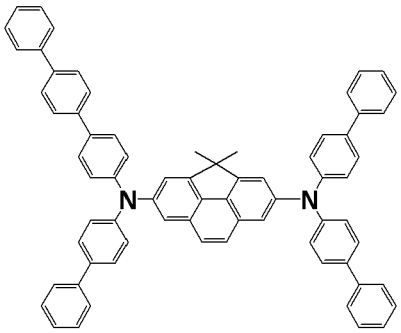
＜化学式３０＞



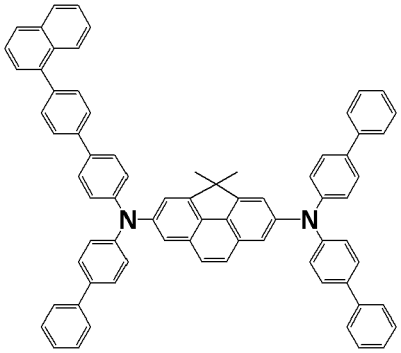
＜化学式３１＞



＜化学式３２＞



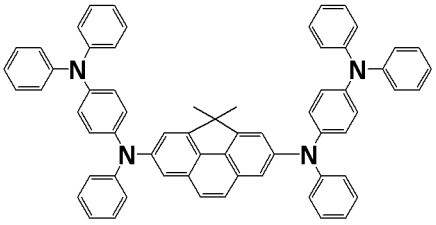
＜化学式３３＞



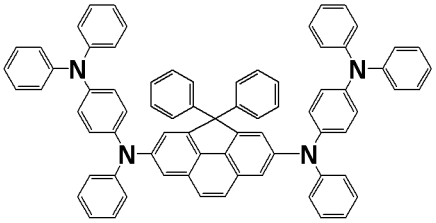
【００４４】

【化７－５】

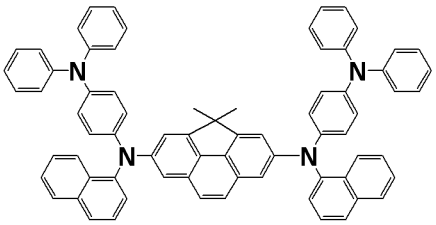
＜化学式３４＞



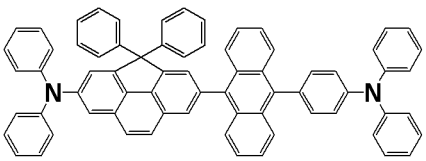
＜化学式３５＞



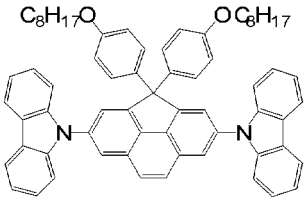
＜化学式３６＞



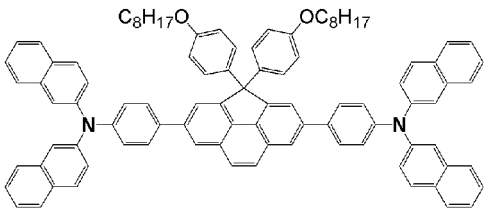
＜化学式３７＞



＜化学式３８＞



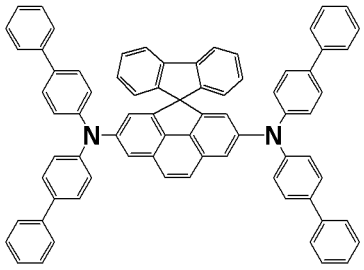
＜化学式３９＞



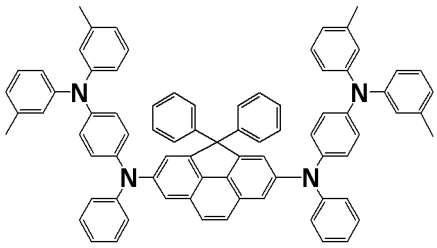
【００４５】

【化７－６】

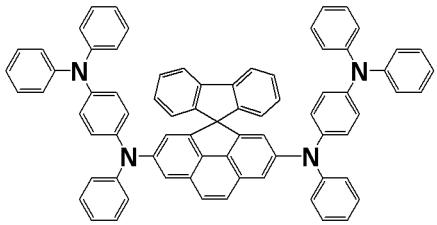
＜化学式４０＞



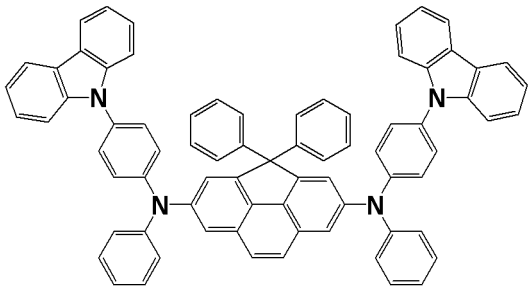
＜化学式４１＞



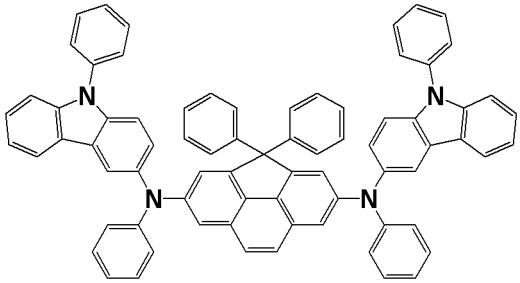
＜化学式４２＞



＜化学式４３＞



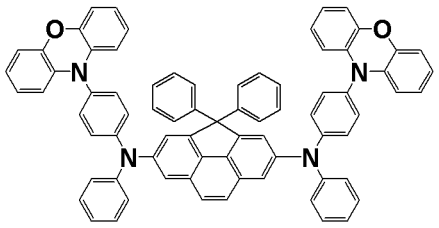
＜化学式４４＞



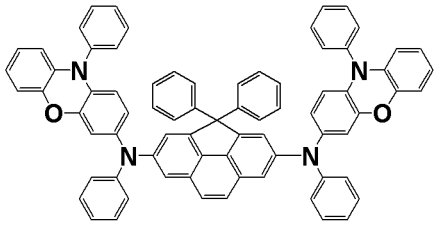
【００４６】

【化７－７】

＜化学式４５＞



＜化学式４６＞



【００４７】

前記化学式１で表される本発明による化合物は、好ましくは通常の合成方法を利用して合成され、前記化合物のさらに詳細な合成経路としては、例えば、下記合成例の反応式を参照する。

【００４８】

本発明の有機ＥＬ素子は、第１電極と、第２電極と、前記第１電極と前記第２電極との間に介在する有機膜と、を備える有機ＥＬ素子であって、前記有機膜は、前記化学式１で表される化合物を一つ以上含むことを特徴とする。

【００４９】

前記化学式１で表される化合物は、有機ＥＬ素子の有機膜、特に発光層、正孔注入層または正孔輸送層として使われるのに適している。

【００５０】

本発明による有機ＥＬ素子は、溶液塗布法で製造する場合、有機膜の安定性が低下する従来の有機ＥＬ素子の場合と異なり、優秀な溶解性及び熱安定性を有し、安定した有機膜の形成が可能な化合物を含むため、優秀な駆動電圧及び色純度などの向上した発光特性を提供できる。

【００５１】

本発明による有機ＥＬ素子の構造は、非常に多様でありうる。すなわち、前記第１電極と第２電極との間に正孔注入層、正孔輸送層、正孔阻止層、電子阻止層、電子輸送層及び電子注入層からなる群から選択された一つ以上の層をさらに備えうる。

【００５２】

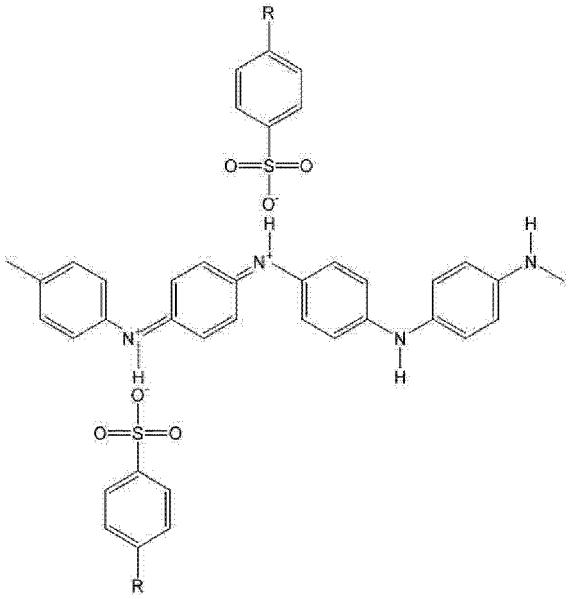
本発明による有機ＥＬ素子の具体的な例としては、図１Ａ、図１Ｂ及び図１Ｃが参照されうる。図１Ａの有機ＥＬ素子は、第１電極／正孔注入層／正孔輸送層／発光層／電子輸送層／電子注入層／第２電極がこの順に積層された構造を有し、図１Ｂの有機ＥＬ素子は、第１電極／正孔注入層／発光層／電子輸送層／電子注入層／第２電極がこの順に積層された構造を有する。また、図１Ｃの有機ＥＬ素子は、第１電極／正孔注入層／正孔輸送層／発光層／正孔阻止層／電子輸送層／電子注入層／第２電極がこの順に積層された構造を有する。この際、好ましくは、前記発光層、正孔注入層及び正孔輸送層のうち一つ以上は、本発明による化合物を含みうる。

【００５３】

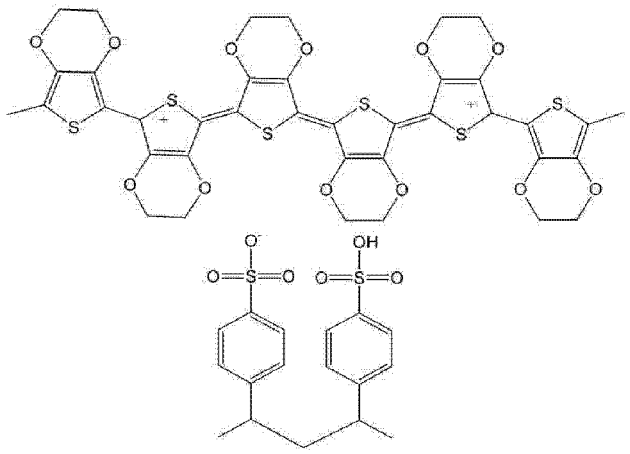
本発明による有機ＥＬ素子の発光層は、赤色、緑色、青色または白色を含む燐光または蛍光ドーパントを含みうる。そのうち、前記燐光ドーパントは、好ましくはＩｒ、Ｐｔ、Ｏｓ、Ｔｉ、Ｚｒ、Ｈｆ、Ｅｕ、Ｔｂ及びＴｍからなる群から選択された一つ以上の元素を含む有機金属化合物でありうる。

【００５４】
以下、本発明による有機ＥＬ素子の製造方法を、図１Ｃに示した有機ＥＬ素子を参照して説明する。
【００５５】
まず、基板の上部に高い仕事関数を有する第１電極用物質を例えば蒸着法またはスパッタリング法により形成して、第１電極を形成する。前記第１電極は、アノードでありうる。ここで、基板としては、通常の有機ＥＬ素子で使われる基板を使用するが、機械的強度、熱的安定性、透明性、表面平滑性、取扱容易性及び防水性に優れたガラス基板または透明プラスチック基板が好ましい。第１電極用物質としては、好ましくは、透明であり、かつ伝導性に優れた酸化インジウムスズ（ＩＴＯ）、酸化インジウム亜鉛（ＩＺＯ）、酸化スズ（SnO_2）、酸化亜鉛（ＺｎＯ）などを使用する。
【００５６】
次いで、好ましくは、前記第１電極の上部に例えば真空蒸着法、スピンコーティング法、キャスト法、ＬＢ（Ｌａｎｇｍｕｉｒ－Ｂｌｏｄｇｅｔｔ）法のような多様な方法を利用して正孔注入層を形成しうる。
【００５７】
真空蒸着法により正孔注入層を形成する場合、その蒸着条件は、正孔注入層の材料として使用する化合物、目的とする正孔注入層の構造及び熱的特性によって異なるが、一般的に、蒸着温度１００ないし５００℃、真空度10^{-8}ないし10^{-3}Ｔｏｒｒ、蒸着速度０．０１ないし１００Å／ｓｅｃで行うことが好ましい。膜厚は、通常１０Åないし５μｍの範囲で適切に選択することが好ましい。
【００５８】
スピンコーティング法により正孔注入層を形成する場合、そのコーティング条件は、正孔注入層の材料として使用する化合物、目的とする正孔注入層の構造及び熱的特性によって異なるが、約２０００ｒｐｍないし５０００ｒｐｍのコーティング速度で行い、コーティング後の溶媒除去のための熱処理温度は、約８０℃ないし２００℃の温度範囲で適切に選択することが好ましい。
【００５９】
前記正孔注入層を形成する物質は、前述したような化学式１で表される化合物でありうる。または、例えば米国特許第４，３５６，４２９号明細書に開示された銅フタロシアニンなどのフタロシアニン化合物、またはＡｄｖａｎｃｅｄ Ｍａｔｅｒｉａｌｓ，６，ｐ．６７７（１９９４）に記載されているスターバスト型アミン誘導体類であるＴＣＴＡ，ｍ－ＭＴＤＡＴＡ、ｍ－ＭＴＤＡＰＢ、溶解性のある伝導性高分子であるＰａｎｉ／ＤＢＳＡ（ポリアニリン／ドデシルベンゼンスルホン酸）またはＰＥＤＯＴ／ＰＳＳ（ポリ（３，４－エチレンジオキシチオフェン）／ポリ（４－スチレンスルホネート））、Ｐａｎｉ／ＣＳＡ（ポリアニリン／カンファスルホン酸）またはＰＡＮＩ／ＰＳＳ（ポリアニリン）／ポリ（４－スチレンスルホネート））のような公知の正孔注入物質を使用しうる。
【００６０】

【化８】



Ｐａｎｉ／ＤＢＳＡ



ＰＥＤＯＴ／ＰＳＳ

【００６１】

前記正孔注入層の厚さは、好ましくは約１００Åないし１００００Åであり、より好ましくは１００Åないし１０００Åでありうる。前記正孔注入層の厚さが１００Å未満である場合、正孔注入特性が低下し、前記正孔注入層の厚さが１００００Åを超える場合、駆動電圧が上昇する場合がある。

【００６２】

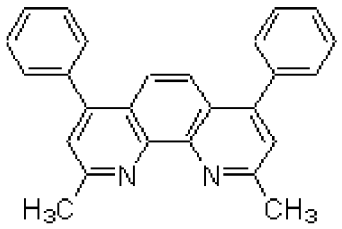
次いで、好ましくは前記正孔注入層の上部に、例えば真空蒸着法、スピンコーティング法、キャスト法、ＬＢ法のような多様な方法を利用して正孔輸送層を形成しうる。真空蒸着法及びスピンコーティング法により正孔輸送層を形成する場合、その蒸着条件及びコーティング条件は、使用する化合物によって異なるが、一般的に正孔注入層の形成とほぼ同じ範囲から選択されうる。

【００６３】

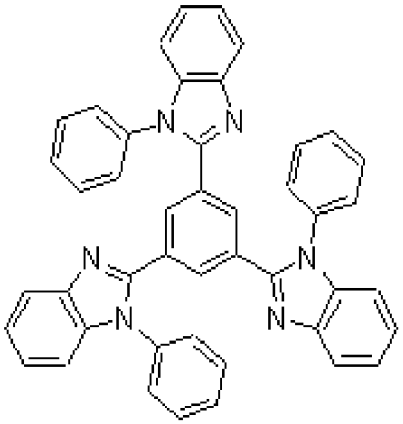
前記正孔輸送層を構成する物質は、前述したような前記化学式１で表される化合物でありうる。または、例えばＮ－フェニルカルバゾール、ポリビニルカルバゾールなどのカルバゾール誘導体、Ｎ，Ｎ’－ビス（３－メチルフェニル）－Ｎ，Ｎ’－ジフェニル－［１，１－ビフェニル］－４，４’－ジアミン（ＴＰＤ）、Ｎ，Ｎ’－ジ（ナフタレン－１－イル）－Ｎ，Ｎ’－ジフェニルベンジジン（α－ＮＰＤ）などの芳香族縮合環を有する通常のアミン誘導体のような公知の正孔輸送物質が使用できる。

【００６４】
前記正孔輸送層の厚さは、好ましくは約５０Åないし１０００Åであり、より好ましくは１００Åないし６００Åである。前記正孔輸送層の厚さが５０Å未満である場合、正孔輸送特性が低下し、前記正孔輸送層の厚さが１０００Åを超える場合、駆動電圧が上昇する場合がある。
【００６５】
次いで、好ましくは、前記正孔輸送層の上部に例えば真空蒸着法、スピンコーティング法、キャスト法、ＬＢ法のような方法を利用して発光層を形成しうる。真空蒸着法及びスピンコーティング法により発光層を形成する場合、その蒸着条件は、使用する化合物によって異なるが、一般的に正孔注入層の形成とほぼ同じ範囲から選択されうる。
【００６６】
前記発光層は、前述したように本発明による化学式１で表される化合物を含みうる。この際、化学式１で表される化合物に適した公知の蛍光ホスト材料が共に用いられるか、または公知のドーパント材料が共に用いられうる。前記化学式１で表される化合物は、燐光ホストとして単独でまたはＣＢＰ（４，４’－Ｎ，Ｎ’－ジカルバゾール－ビフェニル）、またはＰＶＫ（ポリ（ｎ－ビニルカルバゾール））などと共に使用されうる。燐光ドーパントとしては、例えば赤色燐光ドーパントであるＰｔＯＥＰ、ＵＤＣ社製のＲＤ６１、緑色燐光ドーパントである$Ir(PPy)_3$（ＰＰｙ＝２－フェニルピリジン）、青色燐光ドーパントであるＦ２Ｉｒｐｉｃ、ＵＤＣ社製の赤色燐光ドーパントであるＲＤ６１などが使用できる。
【００６７】
前記化学式１で表される化合物をドーパントとして使用する場合、ドーピング濃度は、特に制限されないが、好ましくはホストの１００質量部を基準として、前記ドーパントの含量は０．０１ないし１５質量部である。また、前記化学式１で表される化合物を単独ホストとして使用する場合、ドーピング濃度は、特に制限されないが、好ましくは前記ホストの１００質量部を基準として、前記ドーパントの含量は０．０１ないし１５質量部であり、単独ホストでない場合、前記化学式１で表される化合物は、好ましくはホスト全体の１００質量部を基準として３０ないし９９質量部である。
【００６８】
前記発光層の厚さは、好ましくは約１００Åないし１０００Åであり、より好ましくは２００Åないし６００Åである。前記発光層の厚さが１００Å未満である場合、発光特性が低下し、前記発光層の厚さが１０００Åを超える場合、駆動電圧が上昇する場合がある。
【００６９】
発光層に前記化学式１で表される化合物を燐光ドーパントと共に使用する場合には、三重項励起子または正孔が電子輸送層に拡散される現象を防止するために、好ましくは前記発光層の上部に、例えば真空蒸着法、スピンコーティング法、キャスト法、ＬＢ法のような方法を利用して正孔阻止層を形成する。真空蒸着法及びスピンコーティング法により正孔阻止層を形成する場合、その条件は、使用する化合物によって異なるが、一般的に正孔注入層の形成とほぼ同じ範囲から選択されうる。正孔阻止層を構成する物質としては、使用可能な公知の正孔阻止材料、例えばイミダゾール誘導体、オキサジアゾール誘導体やトリアゾール誘導体、フェナントロリン誘導体、ＢＣＰ、アルミニウム錯体（例えばＢＡｌｑ）などが用いられうる。
【００７０】

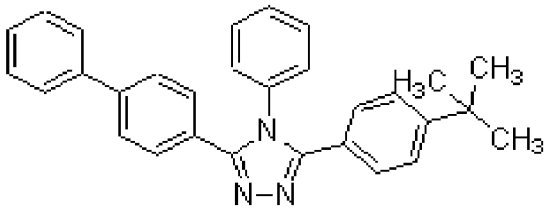
【化９】



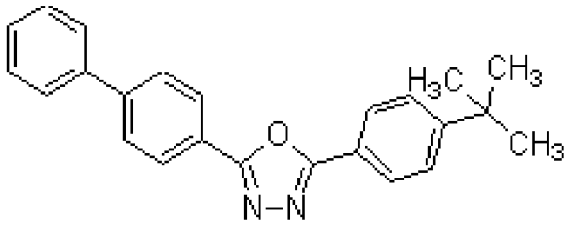
フェナントロリン誘導体



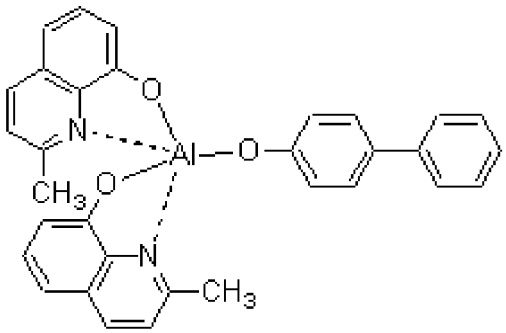
イミダゾール誘導体



トリアゾール誘導体



オキサジアゾール誘導体



ＢＡｌｑ

【００７１】

前記正孔阻止層の厚さは、好ましくは約５０Åないし１０００Åであり、より好ましくは１００Åないし３００Åである。前記正孔阻止層の厚さが５０Å未満である場合、正孔阻止特性が低下し、前記正孔阻止層の厚さが１０００Åを超える場合、駆動電圧が上昇す

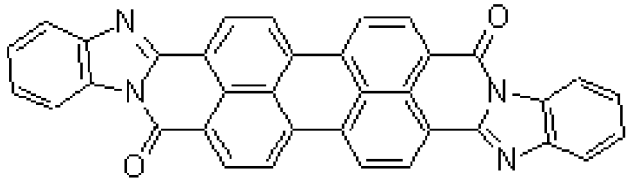
る場合がある。

【００７２】

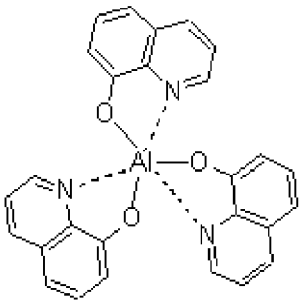
次いで、好ましくは電子輸送層を真空蒸着法、スピンコーティング法、キャスト法などの多様な方法を利用して形成する。真空蒸着法及びスピンコーティング法により電子輸送層を形成する場合、その条件は、使用する化合物によって異なるが、一般的に正孔注入層の形成とほぼ同じ範囲から選択されうる。前記電子輸送層を構成する材料は、電子注入電極（カソード）から注入された電子を安定して輸送する機能を行うものであって、例えばオキサゾール系化合物、イソオキサゾール系化合物、トリアゾール系化合物、イソチアゾール系化合物、オキサジアゾール系化合物、チアジアゾール系化合物、ペリレン系化合物、アルミニウム錯体（例：Ａｌｑ３（トリス（８－キノリノラート）－アルミニウム）ＢＡｌｑ、ＳＡｌｑ、Ａｌｍｑ３）、ガリウム錯体（例：Ｇａｑ’２ＯＰｉｖ、Ｇａｑ’２ＯＡｃ、２（Ｇａｑ’２））のような公知の材料を使用することもできる。

【００７３】

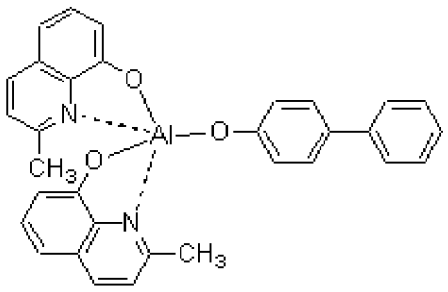
【化１０－１】



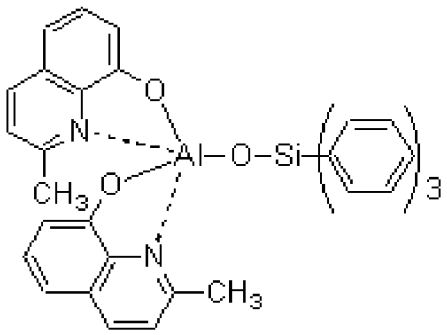
ペリレン系化合物



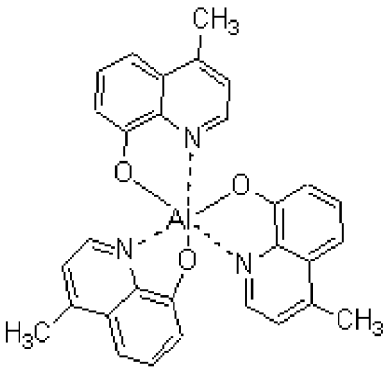
Ａｌｑ３



ＢＡｌｑ



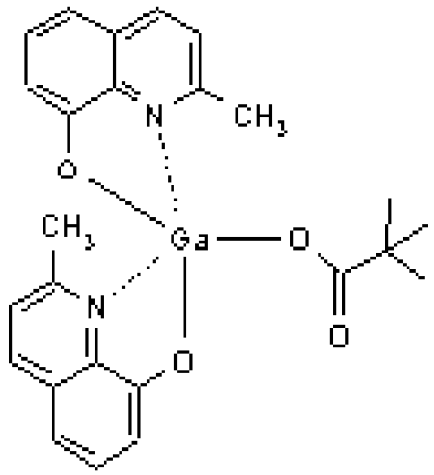
ＳＡｌｑ



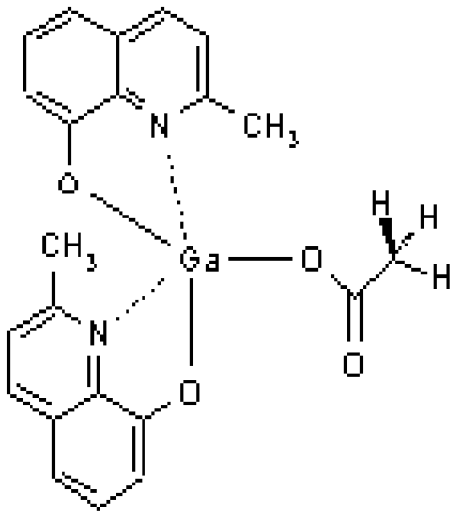
Ａｌｍｑ３

【００７４】

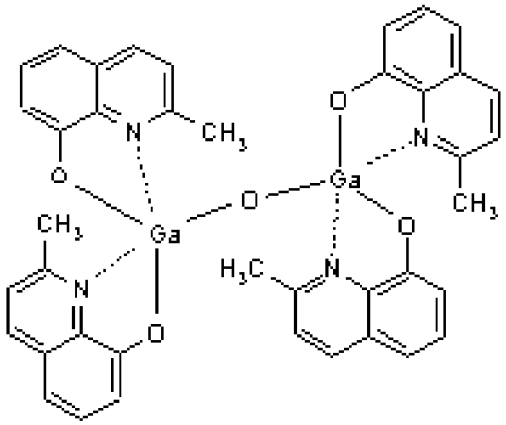
【化１０－２】



Ｇａｑ’２ＯＰｉｖ



Ｇａｑ’２Ｏａｃ



２（Ｇａｑ’２）

【００７５】

前記電子輸送層の厚さは、好ましくは約１００Åないし１０００Åであり、より好ましくは２００Åないし５００Åである。前記電子輸送層の厚さが１００Å未満である場合、電子輸送特性が低下し、前記電子輸送層の厚さが１０００Åを超える場合、駆動電圧が上昇する場合がある。

【００７６】

また、好ましくは電子輸送層の上部に負極から電子の注入を容易にする目的で電子注入層が積層される。

【００７７】

電子注入層を構成する材料しては、例えばＬｉＦ、ＮａＣｌ、ＣｓＦ、Li_2O、ＢａＯのような電子注入層の形成材料として公知の任意の物質が使用できる。前記電子注入層の蒸着条件は、使用する化合物によって異なるが、一般的に正孔注入層の形成とほぼ同じ範囲から選択されうる。

【００７８】

前記電子注入層の厚さは、好ましくは約１Åないし１００Åであり、より好ましくは５Åないし５０Åである。前記電子注入層の厚さが１Å未満である場合、電子注入特性が低

下し、前記電子注入層の厚さが１００Åを超える場合、駆動電圧が上昇する場合がある。

【００７９】

最後に、電子注入層の上部に、例えば真空蒸着法やスパッタリング法の方法を利用して第２電極を形成しうる。前記第２電極は、カソードとして使われうる。前記第２電極形成用の金属としては、好ましくは低い仕事関数を有する金属、合金、電気伝導性化合物及びそれらの混合物を使用しうる。具体的な例としては、Ｌｉ、Ｍｇ、Ａｌ、Ａｌ－Ｌｉ、Ｃａ、Ｍｇ－Ｉｎ、Ｍｇ－Ａｇなどが挙げられる。また、前面発光素子を得るために、ＩＴＯ、ＩＺＯを使用した透過型カソードを使用することもできる。

【実施例】

【００８０】

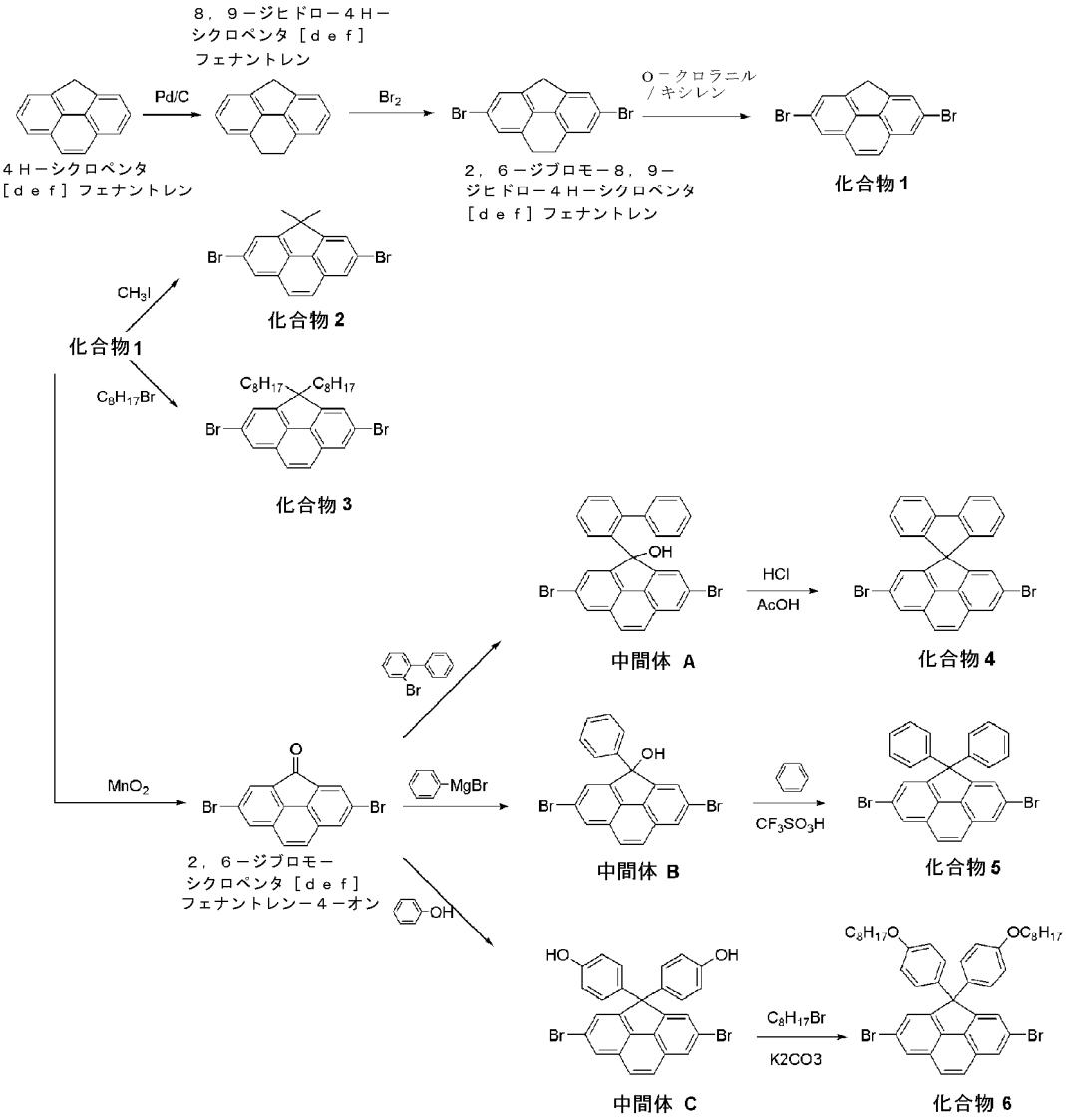
以下、下記の実施例を通じて本発明をさらに詳細に説明するが、下記の実施例及び合成例は、単に説明の目的のためのものであり、本発明を制限するためのものではない。

【００８１】

＜実施例１＞

【００８２】

【化１１】



【００８３】

１）８，９－ジヒドロ－４Ｈ－シクロペンタ［ｄｅｆ］フェナントレンの合成

４Ｈ－シクロペンタ［ｄｅｆ］フェナントレン（４．７５ｇ，２５ｍｍｏｌ）をＰａｒ反応器に入れた後、ＥｔＯＨ（２００ｍｌ）を加えた。５％のＰｄ／Ｃ（３．９９ｇ）を

前記反応液に添加し、水素圧を４０ｐｓｉに維持しつつ２４時間反応させた。反応終了後、反応液を濾過して濾液を減圧濃縮して白色の目的物（４．３２ｇ，９０％）を得た。

【００８４】

^{1}Ｈ－ＮＭＲ（３００ＭＨｚ，ＣＤＣｌ$_{3}$，δ）：７．３６（２Ｈ，ｄ），７．２１（２Ｈ，ｔ），７．１２（２Ｈ，ｄ），３．９０（２Ｈ，ｓ），３．１６（４Ｈ，ｓ）。

【００８５】

２）２，６－ジブロモ－８，９－ジヒドロ－４Ｈ－シクロペンタ［ｄｅｆ］フェナントレンの合成

２５０ｍｌの丸底フラスコに８，９－ジヒドロ－４Ｈ－シクロペンタ［ｄｅｆ］フェナントレン（４．３２ｇ，２３ｍｍｏｌ）を入れ、ＣＣｌ$_{4}$（１００ｍｌ）を加えて溶かした。前記反応液を０℃に冷却し、Ｂｒ$_{2}$（７．７２ｇ，４８ｍｍｏｌ）を反応液に滴下した。４時間反応させた後、１０％ＮａＳＯ$_{3}$溶液を加えて有機層を分離した。分離した有機層を減圧濃縮した後、ｎ－ヘキサンを利用して再結晶して目的物（４．４５ｇ，５５％）を得た。

【００８６】

^{1}Ｈ－ＮＭＲ（３００ＭＨｚ，ＣＤＣｌ$_{3}$，δ）：７．４８（２Ｈ，ｓ），７．２８（２Ｈ，ｓ），３．８５（２Ｈ，ｓ），３．１０（４Ｈ，ｓ）。

【００８７】

３）化合物１の合成

２５０ｍｌの丸底フラスコに２，６－ジブロモ－８，９－ジヒドロ－４Ｈ－シクロペンタ［ｄｅｆ］フェナントレン（４．４５ｇ，１２．７ｍｍｏｌ）をキシレンを加えて溶かし、常温でｏ－クロラニル（４．１５ｇ）を加えた。オイルバスを利用して加熱還流させつつ７２時間反応させた。反応終了後、反応液を冷却して減圧濃縮した。濃縮して得た残留物について、ｎ－ヘキサンを展開溶媒としてシリカゲルカラムクロマトグラフィを実施して化合物１（３．６ｇ，８１％）を得た。

【００８８】

^{1}Ｈ－ＮＭＲ（３００ＭＨｚ，ＣＤＣｌ$_{3}$，δ）：７．９８（２Ｈ，ｓ），７．７９（２Ｈ，ｓ），７．７３（２Ｈ，ｓ），４．２８（２Ｈ，ｓ）。

【００８９】

４）化合物２の合成

５０ｍｌの丸底フラスコに２，６－ジブロモ－４Ｈ－シクロペンタ［ｄｅｆ］フェナントレン（２．６ｇ，７．７ｍｍｏｌ）、カリウムｔｅｒｔ－ブトキシド（２０．８ｇ，６１．６ｍｍｏｌ）、ＤＭＳＯ（２０ｍｌ）及びＨＭＰＡ（ヘキサメチルリン酸トリアミド）（２０ｍｌ）を注射器で添加した後、５０分間常温で撹拌した後に反応温度を０℃に下げた。０℃でＣＨ$_{3}$Ｉ（３．７５ｍｌ，６１．６ｍｍｏｌ）を注射器で滴下した後、０℃で３０分間撹拌した。次いで、反応液に水（５０ｍｌ）と塩化メチレン（５０ｍｌ）とを入れて有機層を分離し、シリカゲルカラムクロマトグラフィを実施して化合物２（３．６ｇ，８０％）を得た。

【００９０】

^{1}Ｈ－ＮＭＲ（３００ＭＨｚ，ＣＤＣｌ$_{3}$，δ）：７．９８（２Ｈ，ｓ），７．７９（２Ｈ，ｓ），７．７３（２Ｈ，ｓ），１．９３（ｍ，６Ｈ）。

【００９１】

５）材料１の合成（前記化学式９で表される化合物）

５０ｍｌの丸底フラスコに化合物２（０．６５ｇ，１．７４７ｍｍｏｌ）、ビス（４－ビフェニル）アミン（ＴＣＩ社製）（１．４０ｇ，４．３７ｍｍｏｌ）、ナトリウムｔｅｒｔ－ブトキシド（０．５１ｇ，０．５ｍｍｏｌ）、Ｐｄ（ｄｂａ）$_{2}$（トリス（ジベンジリジンアセトン）ジパラジウム（０））（０．０８ｇ，０．０８７ｍｍｏｌ）及びトリ（ｔｅｒｔ－ブチル）ホスフィン（０．０１７ｇ，０．０８７ｍｍｏｌ）をトルエン１０ｍＬに溶解させた後、１２時間還流反応させた。前記反応が完了した後、反応混合物を室温まで冷却させ、蒸溜水１００ｍｌを添加して有機層を抽出した。集められた有機層をＭ

ｇＳＯ$_4$で乾燥させた後に濃縮して、シリカゲルクロマトグラフィを実施した。ここで得た溶出液を濃縮、乾燥させて化学式９で表される材料１（１．１ｇ、収率：７５％）を得た。

【００９２】

^{1}Ｈ－ＮＭＲ（３００ＭＨｚ，ＣＤＣｌ$_3$，δ）：７．９０（２Ｈ，ｓ），７．７５（２Ｈ，ｓ），７．７２（２Ｈ，ｓ），７．４８－６．６２（ｍ，３６Ｈ），１．９２（ｍ，６Ｈ）。

【００９３】

＜実施例２＞

１）化合物３の合成

５０ｍｌの丸底フラスコに２，６－ジブロモ－４Ｈ－シクロペンタ［ｄｅｆ］フェナントレン（２．６ｇ，７．７ｍｍｏｌ）と臭化オクチル（３．６ｇ，１８．５ｍｍｏｌ）とをトルエン１０ｍｌと溶解させ、ＴＢＡＢ（臭化テトラブチルアンモニウム）（０．１２５ｇ，０．３８５ｍｍｏｌ）を添加した。前記反応混合物にＮａＯＨ（３．１ｇ，７７ｍｍｏｌ）を水５０ｍｌに溶解させた溶液を添加した後、２日間還流させた。前記反応が完了した後、クロロホルムで抽出した後、これから収得された有機層をＭｇＳＯ$_4$で乾燥及び濃縮させて、ｎ－ヘキサンを溶離液として使用してシリカゲルカラムクロマトグラフィを行った。ここで得た溶出液を減圧蒸留させて未反応の臭化オクチルを除去して、化合物３（３．６ｇ，８０％）を得た。

【００９４】

^{1}Ｈ－ＮＭＲ（３００ＭＨｚ，ＣＤＣｌ$_3$，δ）：７．９８（２Ｈ，ｓ），７．７９（２Ｈ，ｓ），７．７３（２Ｈ，ｓ），１．９３（ｍ，４Ｈ），１．２１（ｍ，２０Ｈ），０．８７（ｍ，６Ｈ），０．６５（ｂｒｏａｄ　ｓ，４Ｈ）。

【００９５】

２）材料２の合成（前記化学式１０で表される化合物）

５０ｍｌの丸底フラスコに化合物２（１ｇ，１．７４７ｍｍｏｌ）、ジフェニルアミン（０．８８ｇ，５．２４１ｍｍｏｌ）、ナトリウムｔｅｒｔ－ブトキシド（０．５１ｇ，０．５ｍｍｏｌ）、Ｐｄ（ｄｂａ）$_2$（０．０８ｇ，０．０８７ｍｍｏｌ）及びトリ（ｔｅｒｔ－ブチル）ホスフィン（０．０１７ｇ，０．０８７ｍｍｏｌ）をトルエン１０ｍＬに溶解させた後、１２時間還流反応させた。前記反応が完了した後、反応混合物を室温まで冷却させ、蒸溜水１００ｍｌを添加して有機層を抽出した。集められた有機層をＭｇＳＯ$_4$で乾燥させた後に濃縮して、シリカゲルカラムクロマトグラフィを実施した。ここで得た溶出液を濃縮、乾燥させて化学式１０で表される材料１（１０．９ｇ，収率：７０％）を得た。

【００９６】

^{1}Ｈ－ＮＭＲ（３００ＭＨｚ，ＣＤＣｌ$_3$，δ）：７．９８－６．７４（ｍ，２６Ｈ），１．９３（ｍ，４Ｈ），１．２１（ｍ，２０Ｈ），０．８７（ｍ，６Ｈ），０．６５（ｂｒｏａｄ　ｓ，４Ｈ）。

【００９７】

＜実施例３＞

１）２，６－ジブロモ－シクロペンタ［ｄｅｆ］フェナントレン－４－オンの合成

２５０ｍｌの丸底フラスコにベンゼン（２００ｍｌ）を入れ、化合物１（３．６ｇ，１０．４ｍｍｏｌ）を加えた。反応液にＭｎＯ$_2$（１５０ｇ）を添加した後、オイルバスを利用して加熱還流条件で１８時間反応させた。反応終了後、反応液を濾過してＭｎＯ$_2$を除去し、ＣＨＣｌ$_3$、ＴＨＦ、ＭｅＯＨの順に十分に洗浄した。濾液を減圧濃縮した後で得た残留物を、アセトンを利用して再結晶して目的物（１．４５ｇ，３９％）を得た。

【００９８】

^{1}Ｈ－ＮＭＲ（３００ＭＨｚ，ＣＤＣｌ$_3$，δ）：８．０８（２Ｈ，ｓ），７．８９（２Ｈ，ｓ），７．７４（２Ｈ，ｓ）。

【００９９】

２）中間体Ａの合成
２－ブロモビフェニル（０．６８ｇ，２．９５ｍｍｏｌ）を無水ＴＨＦ　１０ｍｌに溶かし、反応温度を－７８℃に冷却した。次いで、リチウムｔｅｒｔ－ブトキシド３．５ｍｌを徐々に滴加して１時間撹拌した後、２，６－ジブロモ－シクロペンタ［ｄｅｆ］フェナントレン－４－オン（１ｇ，２．９５ｍｍｏｌ）を無水ＴＨＦ　５ｍｌに溶かした溶液を反応液に３０分間滴加した。反応終結後、反応液を減圧濃縮し、残留物は、酢酸エチル及び塩物を加えて有機層を分離した。濃縮して得た残留物は、シリカゲルカラムクロマトグラフィを実施して中間体Ａ（３．６ｇ）を得た。

【０１００】
３）化合物４の合成
前記で得られた中間体Ａを酢酸３０ｍｌに溶かした後、反応液の温度を０℃に冷却した。次いで、１ｍｌのＨＣｌを反応液に滴下して２時間反応させた。反応終結後、反応中に生成された白色の固体を濾過して酢酸とメタノールとで洗浄して、化合物４の白色の固体２ｇ（８０％）を得た。

【０１０１】
４）材料３の合成（前記化学式１３で表される化合物）
前記合成例１の材料１の合成において、化合物２の代わりに化合物４、ビス（４－ビフェニル）アミンの代わりに９Ｈ－カルバゾールを使用する点を除いては、合成例１の材料１の合成と同じ方法を使用して化学式１３で表される材料３を合成した。

【０１０２】
^{1}Ｈ－ＮＭＲ（３００ＭＨｚ，ＣＤＣｌ$_{3}$，δ）：８．１０－６．８２（ｍ，３０Ｈ）
５）材料４の合成（前記化学式１４で表される化合物）
５０ｍｌの丸底フラスコに化合物４（１ｇ，１．７４７ｍｍｏｌ）、ジ－ナフタレン－２－イル－［４－（４，４，５，５－テトラメチル－［１，３，２］ジオキサボロラン－２－イル）－フェニル］－アミン（１．８１ｇ，３．８４３ｍｍｏｌ）、Ｋ$_{2}$ＣＯ$_{3}$（１．９３５ｇ，０．０１４ｍｍｏｌ）、テトラキス（トリフェニルホスフィン）パラジウム（０）（０．４ｇ，０．３５ｍｍｏｌ）及びＴＢＡＢ（１．１３ｇ，３．４９ｍｍｏｌ）をトルエン１０ｍｌとＴＨＦ１０ｍｌとに溶解させた後、１２時間還流反応させた。前記反応が完了した後、反応混合物を室温まで冷却させ、蒸溜水１００ｍｌを添加して有機層を抽出した。集められた有機層をＭｇＳＯ$_{4}$で乾燥させた後に濃縮して、シリカゲルカラムクロマトグラフィを実施した。ここで得た溶出液を濃縮、乾燥させて化学式１４で表される材料４（０．８ｇ，収率：４５％）を得た。

【０１０３】
^{1}Ｈ－ＮＭＲ（３００ＭＨｚ，ＣＤＣｌ$_{3}$，δ）：８．１５－６．５４（ｍ，５０Ｈ）。

【０１０４】
＜実施例４＞
１）中間体Ｂの合成
２，６－ジブロモ－シクロペンタ［ｄｅｆ］フェナントレン－４－オン（１．０ｇ，２．７６ｍｍｏｌ）を乾燥エーテル（３０ｍｌ）とＴＨＦ（１０ｍｌ）とに溶かし、窒素ガス下で臭化フェニルマグネシウム（エーテルに３．０Ｍ）を徐々に加えた後、３時間還流した。水を加えて反応を終結させ、１Ｎ－ＨＣｌ溶液でｐＨ３－４にした後、酢酸エチルで抽出した。有機層を無水硫酸ナトリウムで乾燥、濾過し、減圧下で濃縮して得られた固体をシリカゲルクロマトグラフィで精製して固体状態の０．７９ｇ（６５％）の目的化合物（中間体Ｂ）を得た。

【０１０５】
２）化合物５の合成
中間体Ｂ（０．７９ｇ，１．７９ｍｍｏｌ）を乾燥ベンゼン２０ｍｌに溶かし、トリフルオロメタンスルホン酸（０．４８ｍｌ，５．３８ｍｍｏｌ，３ｅｑ．）を滴下した後、８０℃で２時間反応させた。反応液を水に希釈して酢酸エチルで抽出した後、有機層を無

水硫酸ナトリウムで乾燥、濾過し、減圧下で濃縮して得られた固体をシリカゲルカラムクロマトグラフィで精製して得られた固体を酢酸エチル－ヘキサン混合溶媒で再結晶して、固体状態の０．６５ｇ（６３％）の目的化合物（化合物５）を得た。

【０１０６】

^{1}Ｈ－ＮＭＲ（３００ＭＨｚ，ＣＤＣｌ$_{3}$，δ）：７．２２－７．２６（ｍ，１０Ｈ），７．７０（ｓ，２Ｈ），７．８０（ｓ，３Ｈ），８．００（ｓ，２Ｈ）。

【０１０７】

３）材料５の合成（前記化学式１５で表される化合物）

前記合成例１の材料１の合成において、化合物２の代わりに化合物５、ビス（４－ビフェニル）アミンの代わりに９Ｈ－カルバゾールを使用する点を除いては、合成例１の材料１の合成と同じ方法を使用して化学式１５で表される材料５を合成した。

【０１０８】

^{1}Ｈ－ＮＭＲ（３００ＭＨｚ，ＣＤＣｌ$_{3}$，δ）：８．０２－６．８９（ｍ，３２Ｈ）。

【０１０９】

４）材料６の合成（前記化学式２７で表される化合物）

前記合成例１の材料１の合成において、化合物２の代わりに化合物５を使用する点を除いては、合成例１の材料１の合成と同じ方法を使用して化学式２７で表される材料６を合成した。

【０１１０】

^{1}Ｈ－ＮＭＲ（３００ＭＨｚ，ＣＤＣｌ$_{3}$，δ）：８．０５－７．７５（６Ｈ，ｍ），７．５５－６．６８（ｍ，３６Ｈ）。

【０１１１】

５）材料７の合成（前記化学式３５で表される化合物）

５００ｍｌの丸底フラスコに４－ブロモトリフェニルアミン（７．６ｇ，２３．４５ｍｍｏｌ）、アニリン（２１．８５ｇ，０．２３５ｍｏｌ）、ナトリウムｔｅｒｔ－ブトキシド（６．７６ｇ，７０ｍｍｏｌ）、Ｐｄ（ｄｂａ）$_{2}$（０．８６ｇ，０．９３８ｍｍｏｌ）及びトリ（ｔｅｒｔ－ブチル）ホスフィン（０．２３ｇ，１．１７３ｍｍｏｌ）をトルエン２００ｍＬに溶解させた後、１２時間還流反応させた。前記反応が完了した後、反応混合物を室温まで冷却させ、蒸溜水２００ｍｌを添加して有機層を抽出した。集められた有機層を$MgSO_4$で乾燥させた後で濃縮して、シリカゲルカラムクロマトグラフィを実施した。ここで得た溶出液を濃縮、乾燥させてＮ，Ｎ，Ｎ’－トリフェニル－ｐ－フェニルジアミン（６．７１ｇ，８５％）を得た。

【０１１２】

前記得られたＮ，Ｎ，Ｎ’－トリフェニル－ｐ－フェニルジアミン（３．３６ｇ，１０．０ｍｍｏｌ）、前記化合物５（２．０ｇ，４．０ｍｍｏｌ）、ナトリウムｔｅｒｔ－ブトキシド（１．１５ｇ，１２ｍｍｏｌ）、Ｐｄ（ｄｂａ）$_{2}$（０．１４ｇ，０．１６ｍｍｏｌ）及びトリ（ｔｅｒｔ－ブチル）ホスフィン（０．０４ｇ，０．２ｍｍｏｌ）を１００ｍｌの丸底フラスコに入れた後、トルエン５０ｍＬに溶解させ、１２時間還流反応させた。前記反応が完了した後、反応混合物を室温まで冷却させ、蒸溜水５０ｍｌを添加して有機層を抽出した。集められた有機層を$MgSO_4$で乾燥させた後で濃縮して、シリカゲルカラムクロマトグラフィを実施した。ここで得た溶出液を濃縮、乾燥させて化学式３５で表される材料７（２．９１ｇ、収率：７２％）を得た。

【０１１３】

^{1}Ｈ－ＮＭＲ（３００ＭＨｚ，ＣＤＣｌ$_{3}$，δ）：７．８６－７．７１（６Ｈ，ｍ），７．３２－６．６４（ｍ，４８Ｈ）。

【０１１４】

＜実施例５＞

１）中間体Ｃの合成

２５０ｍｌの３口丸底フラスコに２，６－ジブロモ－シクロペンタ［ｄｅｆ］フェナン

トレン－４－オン（０．９５ｇ，２．６２ｍｍｏｌ）とフェノール（３０ｍｌ）とを加えた。加熱された状態でＨＣｌガスを反応液に通過させつつ５時間反応させた。反応が終結した後、未反応のフェノールを減圧濃縮して除去した。濃縮してシリカゲルカラムクロマトグラフィを実施して、中間体Ｃ（０．５９ｇ，４２％）を分離した。

【０１１５】

２）化合物６の合成

１００ｍｌの丸底フラスコに中間体Ｃ（０．９５ｇ，２．６２ｍｍｏｌ）を入れ、ＤＭＦ（５ｍｌ）及びアセトニトリル（２０ｍｌ）を加えた。反応液にK_2CO_3（１．５２ｇ）、臭化オクチル（２．１１ｇ）を順次に添加した後、加熱還流条件で１８時間反応させた。反応終了後に有機層を分離し、分離した有機層について、シリカゲルカラムクロマトグラフィを実施して化合物６（０．６８ｇ，８２％）を得た。

【０１１６】

^{1}Ｈ－ＮＭＲ（３００ＭＨｚ，ＣＤＣｌ$_3$，δ）：７．７８（２Ｈ，ｄ）７．７９（２Ｈ，ｓ）７．６７（２Ｈ，ｄ）７．１１（４Ｈ，ｄｄ）３．８９（４Ｈ，ｔ）１．７４（４Ｈ，ｑ）１．２８（２０Ｈ，ｍ）０．８８（６Ｈ，ｍ）。

【０１１７】

３）材料８の合成（前記化学式３８で表される化合物）

前記合成例１の材料１の合成において、化合物２の代わりに化合物６、ビス（４－ビフェニル）アミンの代わりに９Ｈ－カルバゾールを使用する点を除いては、合成例１の材料１の合成と同じ方法を使用して化学式３８で表される材料８を合成した。

【０１１８】

^{1}Ｈ－ＮＭＲ（３００ＭＨｚ，ＣＤＣｌ$_3$，δ）：７．８５－６．９２（３０Ｈ，ｍ）（４Ｈ，ｄｄ）３．８９（４Ｈ，ｔ）１．７４（４Ｈ，ｑ）１．２８（２０Ｈ，ｍ）０．８８（６Ｈ，ｍ）。

【０１１９】

５）材料９の合成（前記化学式３９で表される化合物）

前記合成例３の材料４の合成において、化合物４の代わりに化合物６を使用する点を除いては、合成例３の材料４の合成と同じ方法を使用して化学式３９で表される材料９を合成した。

【０１２０】

^{1}Ｈ－ＮＭＲ（３００ＭＨｚ，ＣＤＣｌ$_3$，δ）：７．９５－６．７５（５０Ｈ，ｍ）（４Ｈ，ｄｄ）３．８９（４Ｈ，ｔ）１．７４（４Ｈ，ｑ）１．２８（２０Ｈ，ｍ）０．８８（６Ｈ，ｍ）。

【０１２１】

＜評価：材料の光学特性評価＞

溶液上及びフィルム上での材料のＰＬ（ｐｈｏｔｏｌｕｍｉｎｅｓｃｅｎｃｅ）スペクトルを評価することによって、各化合物の発光特性を評価した。

【０１２２】

溶液上の光学特性を評価するために、材料をトルエンで１０ｍＭの濃度に希釈して、キセノンランプが装着されているＩＳＣ　ＰＣ１スペクトロフルオロメーターを利用してＰＬスペクトルを測定した。また、フィルムの光学特性を評価するために、石英基板を準備してアセトンと純水とで洗浄した。次いで、前記材料を前記基板にスピンコーティングした後、１１０℃の温度で３０分間熱処理して、１０００Åの厚さのフィルムを形成した。前記フィルムに対してＰＬスペクトルを測定した。その結果を下記の表１に示した。これにより、本発明による材料は、有機ＥＬ素子に適用されるのに適した発光特性を有することを確認できる。

【０１２３】

【表１】

材料	溶液(λ_{max})(nm)	フィルム(λ_{max})(nm)
3	390	397
4	420	445
8	395	398
9	420	450

【０１２４】

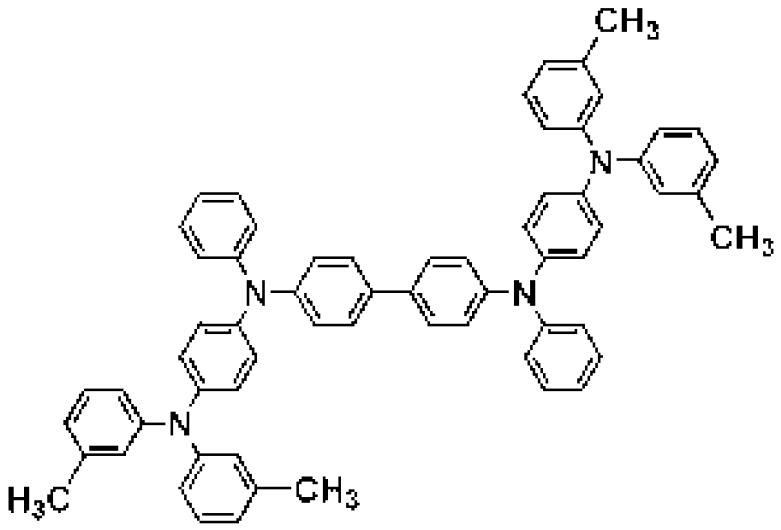
＜実施例６＞

前記材料１を正孔輸送層として、前記化学式４７で表される化合物を正孔注入層として、前記化学式４８および化学式４９で表される化合物をそれぞれ発光層のホストとドーパントとして使用して、次のような構造を有する有機ＥＬ素子を製作した：ＩＴＯ／化学式４７（２００Å）／材料１（３００Å）／化学式４８：化学式４９（３００Å）／Ａｌｑ３（４０Å）／ＬｉＦ（１０Å）／Ａｌ（２０００Å）。

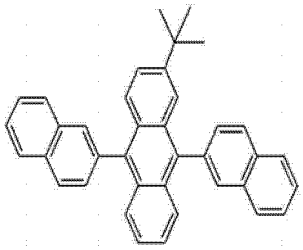
【０１２５】

【化１２】

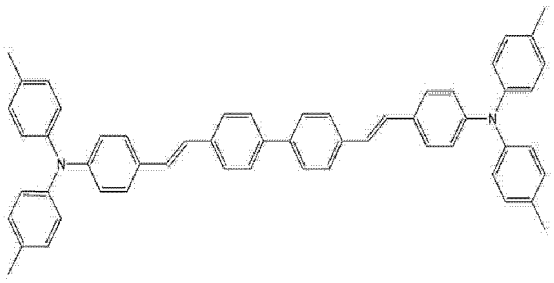
＜化学式４７＞



＜化学式４８＞



＜化学式４９＞



【０１２６】

アノードは、１５Ω／ｃｍ^2（１０００Å）のＩＴＯガラス基板を５０ｍｍ×５０ｍｍ×０．７ｍｍのサイズにカットして、アセトンイソプロピルアルコールと純水内で各１５分間超音波洗浄した後、３０分間ＵＶオゾン洗浄して使用した。前記基板の上部に前記化学式４７（正孔注入層）、材料１（正孔輸送層）をそれぞれ真空蒸着し、化学式４８と化学式４９とを質量比１００：５の割合で真空蒸着して発光層を形成した。次いで、前記発光層の上部にＡｌｑ３を４０Åの厚さに真空蒸着して、電子輸送層を形成した。前記電子輸送層の上部にＬｉＦの１０Å（電子注入層）とＡｌの２０００Å（カソード）とを順次に真空蒸着して、図１Ａに示したような有機ＥＬ素子を製造した。この素子で、電圧６．０Ｖで１４，０００ｃｄ／ｍ^{2}の青色発光が得られ、効率は５．４５ｃｄ／Ａであった。

【０１２７】

＜実施例７＞

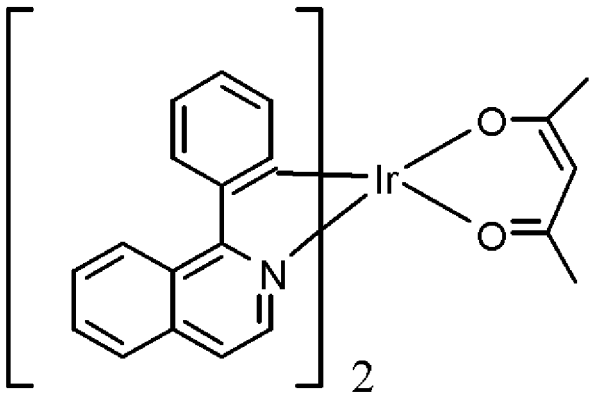
前記材料３を発光層のホストとして使用し、前記化学式５０で表される化合物を発光層のドーパントとして使用して、次のような構造を有する有機ＥＬ素子を製作した：ＩＴＯ

／化学式４７（２００Å）／α－ＮＰＤ（３００Å）／材料３：化学式５０（３００Å）／Ａｌｑ３（４０Å）／ＬｉＦ（１０Å）／Ａｌ（２０００Å）。

【０１２８】

【化１３】

＜化学式５０＞



【０１２９】

前記基板の上部に前記化学式４７（正孔注入層）、α－ＮＰＤ（正孔輸送層）をそれぞれ真空蒸着し、材料３とＲＤ１５（前記化学式５０）とを質量比１００：１０の割合で真空蒸着して発光層を形成した。次いで、前記発光層の上部にＡｌｑ３を４０Åの厚さに真空蒸着して、電子輸送層を形成した。前記電子輸送層の上部にＬｉＦの１０Å（電子注入層）とＡｌの２０００Å（カソード）とを順次に真空蒸着して、図１Ａに示したような有機ＥＬ素子を製造した。この素子で、電圧１０Ｖで１２００ｃｄ／ｍ^{2}の赤色発光が得られ、効率は４．３２ｃｄ／Ａであった。電圧－効率特性を図２Ａに示す。

【０１３０】

＜実施例８＞

前記実施例６中、正孔輸送層としてα－ＮＰＤを、発光層のドーパントとして前記材料４の化合物を使用した点を除いては、前記実施例６と同じ方法で次のような構造を有する有機ＥＬ素子を製作した：ＩＴＯ／化学式４７（２００Å）／α－ＮＰＤ（３００Å）／化学式４８：材料４（３００Å）／Ａｌｑ３（４０Å）／ＬｉＦ（１０Å）／Ａｌ（２０００Å）。この素子で、電圧８Ｖで４６００ｃｄ／ｍ^{2}の青色発光が得られ、効率は５．４ｃｄ／Ａであった。

【０１３１】

＜実施例９＞

前記実施例７中、発光層のホストとして前記材料３の代わりに材料５を使用した点を除いては、前記実施例７と同じ方法で次のような構造を有する有機ＥＬ素子を製作した：ＩＴＯ／化学式４７（２００Å）／α－ＮＰＤ（３００Å）／材料５：化学式５０（３００Å）／Ａｌｑ３（４０Å）／ＬｉＦ（１０Å）／Ａｌ（２０００Å）。この素子で、電圧１０Ｖで６５００ｃｄ／ｍ^{2}の赤色発光が得られ、効率は７．４８ｃｄ／Ａであった。

【０１３２】

＜実施例１０＞

前記実施例６中、正孔輸送層として材料６を使用した点を除いては、前記実施例６と同じ方法で次のような構造を有する有機ＥＬ素子を製作した：ＩＴＯ／化学式４７（２００Å）／材料６（３００Å）／化学式４８：化学式４９（３００Å）／Ａｌｑ３（４０Å）／ＬｉＦ（１０Å）／Ａｌ（２０００Å）。この素子で、電圧６．５Ｖで１５，８００ｃｄ／ｍ^{2}の青色発光が得られ、効率は７．６６ｃｄ／Ａであった。

【０１３３】

＜実施例１１＞

前記実施例６中、正孔注入層として材料７を、正孔輸送層としてα－ＮＰＤを使用した点を除いては、前記実施例６と同じ方法で次のような構造を有する有機ＥＬ素子を製作し

た：ＩＴＯ／材料７（２００Å）／α－ＮＰＤ（３００Å）／化学式４８：化学式４９（３００Å）／Ａｌｑ３（４０Å）／ＬｉＦ（１０Å）／Ａｌ（２０００Å）。この素子で、電圧６．０Ｖで１５，０００ｃｄ／ｍ^{2}の青色発光が得られ、効率は６．４８ｃｄ／Ａであった。

【０１３４】

＜実施例１２＞

前記材料８を発光層のホストとして使用し、前記化学式５０の化合物を発光層のドーパントとして使用して、次のような構造を有する有機ＥＬ素子を製作した：ＩＴＯ／ＰＥＤＯＴ（４００Å）／材料８：化学式５０（３００Å）／Ａｌｑ３（４０Å）／ＬｉＦ（１０Å）／Ａｌ（２０００Å）。

【０１３５】

アノードは、１５Ω／ｃｍ^2（１０００Å）のＩＴＯガラス基板を５０ｍｍ×５０ｍｍ×０．７ｍｍのサイズにカットして、アセトンイソプロピルアルコールと純水内で各１５分間超音波洗浄した後、３０分間ＵＶオゾン洗浄して使用した。前記基板の上部にＢａｙｅｒ社製のＰＥＤＯＴ－ＰＳＳ（ＡＩ４０８３）をコーティングして１１０℃で５分間大気中で熱処理し、２００℃で５分間窒素雰囲気で熱処理して４００Åの正孔注入層を形成した。前記正孔注入層の上部にホスト材料８（０．１ｇ）とドーパントとして化学式５０の化合物（０．０１ｇ）とを混合した混合物（前記材料８の１００質量部当たり前記化学式５０の化合物は１０質量部である）をスピンコーティングした後、１００℃で３０分間熱処理して、３００Åの厚さの発光層を形成した。次いで、前記発光層の上部にＡｌｑ３を４０Åの厚さに真空蒸着して、電子輸送層を形成した。前記電子輸送層の上部にＬｉＦの１０Å（電子注入層）とＡｌの２０００Å（カソード）とを順次に真空蒸着して、図１Ｂに示したような有機ＥＬ素子を製造した。この素子で、電圧９Ｖで１５００ｃｄ／ｍ^{2}の赤色発光が得られ、効率は４．１ｃｄ／Ａであった。電圧－効率特性を図２Ｂに示す。

【０１３６】

＜実施例１３＞

前記実施例１２中、発光層のホストとして前記化学式４８を使用し、発光層のドーパントとして材料９を使用した点を除いては、前記実施例１２と同じ方法で次のような構造を有する有機ＥＬ素子を製作した：ＩＴＯ／ＰＥＤＯＴ（４００Å）／化学式４８：材料９（３００Å）／Ａｌｑ３（４０Å）／ＬｉＦ（１０Å）／Ａｌ（２０００Å）。この素子で、電圧６Ｖで３７００ｃｄ／ｍ^{2}の青色発光が得られ、効率は４．２ｃｄ／Ａであった。

【０１３７】

以上の実施例から、本発明の材料は、燐光及び蛍光材料として優秀なＥＬ発光特性を有するということが分かった。

【産業上の利用可能性】

【０１３８】

本発明は、有機ＥＬ素子関連の技術分野に適用可能である。

【図面の簡単な説明】

【０１３９】

【図１Ａ】本発明の一実施形態による有機ＥＬ素子の積層構造を概略的に示す図面である。

【図１Ｂ】本発明の一実施形態による有機ＥＬ素子の積層構造を概略的に示す図面である。

【図１Ｃ】本発明の一実施形態による有機ＥＬ素子の積層構造を概略的に示す図面である。

【図２Ａ】本発明の一実施形態による有機ＥＬ素子の電圧－効率特性を示すグラフである。

【図２Ｂ】本発明の一実施形態による有機ＥＬ素子の電圧－効率特性を示すグラフである。

【図１Ａ】



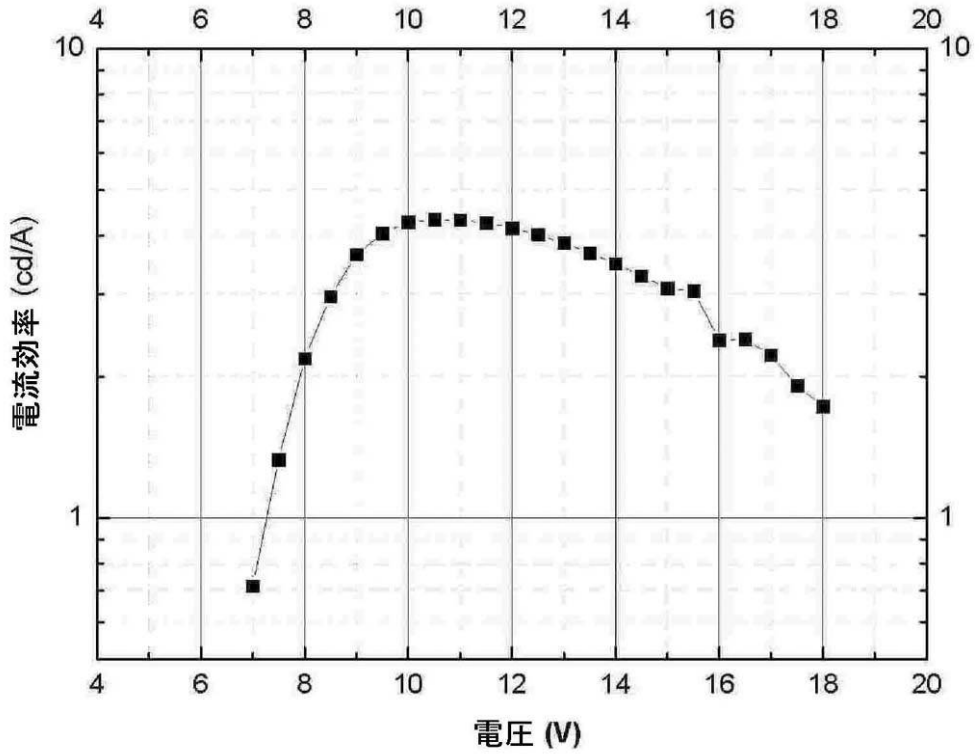
【図１Ｂ】



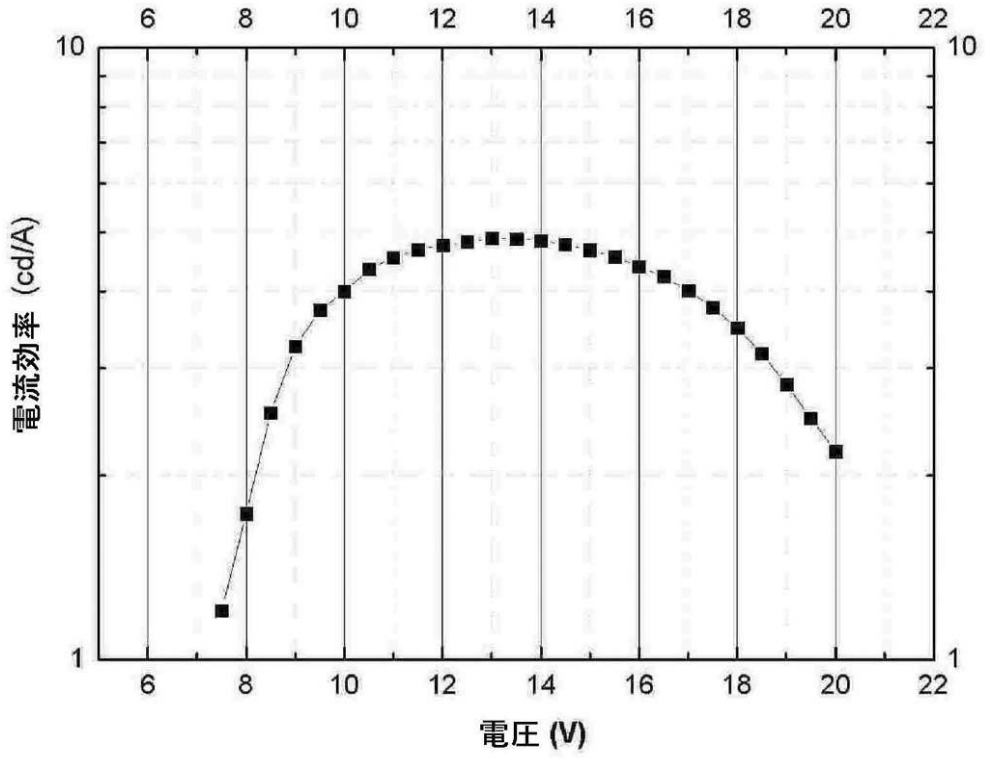
【図１Ｃ】



【図２Ａ】



【図２Ｂ】



フロントページの続き

(74)代理人 100134348
弁理士 長谷川 俊弘
(72)発明者 朴 商 勳
大韓民国京畿道龍仁市器興区農書洞山１４－１番地 三星綜合技術院内
(72)発明者 梁 賀 晋
大韓民国京畿道龍仁市器興区農書洞山１４－１番地 三星綜合技術院内
(72)発明者 朴 鍾 辰
大韓民国京畿道龍仁市器興区農書洞山１４－１番地 三星綜合技術院内
(72)発明者 孫 準 模
大韓民国京畿道龍仁市器興区農書洞山１４－１番地 三星綜合技術院内
(72)発明者 權 五 ▲げん▼
大韓民国京畿道龍仁市器興区農書洞山１４－１番地 三星綜合技術院内
(72)発明者 金 有 珍
大韓民国京畿道龍仁市器興区農書洞山１４－１番地 三星綜合技術院内
Ｆターム(参考) 4H006 AA01 AA03 AB92