

(19) 日本国特許庁(JP)

(12) 公表特許公報(A)

(11) 特許出願公表番号

特表2017-502509

(P2017-502509A)

(43) 公表日 平成29年1月19日(2017.1.19)

(51) Int.Cl.	F I	テーマコード (参考)
H01L 51/50 (2006.01)	H05B 33/14	B 3K107
C07D 495/14 (2006.01)	C07D 495/14	C 4C050
C07D 491/147 (2006.01)	C07D 495/14	A 4C063
C07D 491/14 (2006.01)	C07D 491/147	4C071
C07D 519/00 (2006.01)	C07D 491/14	4C072

審査請求 未請求 予備審査請求 未請求 (全 64 頁) 最終頁に続く

(21) 出願番号	特願2016-538577 (P2016-538577)	(71) 出願人	509266480
(86) (22) 出願日	平成26年12月26日 (2014.12.26)		ローム・アンド・ハース・エレクトロニク・マテリアルズ・コリア・リミテッド
(85) 翻訳文提出日	平成28年6月10日 (2016.6.10)		大韓民国 331-980 チュンチョンナムード チョナンシ ソブクーク 3コンダン 1-ロ 56
(86) 国際出願番号	PCT/KR2014/012933	(74) 代理人	110000589
(87) 国際公開番号	W02015/099507		特許業務法人センダ国際特許事務所
(87) 国際公開日	平成27年7月2日 (2015.7.2)	(72) 発明者	ヒーリョン・カン
(31) 優先権主張番号	10-2013-0165394		大韓民国 151-815 ソウル クアナクーク インハン・12ナージル 31
(32) 優先日	平成25年12月27日 (2013.12.27)	(72) 発明者	ミージャ・リー
(33) 優先権主張国	韓国 (KR)		大韓民国 445-739 キョンギードファソンシ ヨントンロ・26ベオンシ 24 305-1503
(31) 優先権主張番号	10-2014-0130114		最終頁に続く
(32) 優先日	平成26年9月29日 (2014.9.29)		
(33) 優先権主張国	韓国 (KR)		

(54) 【発明の名称】 新規有機エレクトロルミネッセンス化合物、ならびにそれを含む多成分ホスト材料及び有機エレクトロルミネッセンス素子

(57) 【要約】

本開示は、有機エレクトロルミネッセンス化合物、ならびにそれを含む多成分ホスト材料及び有機エレクトロルミネッセンス素子に関する。本開示の有機エレクトロルミネッセンス化合物は、良好な発光効率を有し、発光層のホストとして使用することができる。本開示による有機エレクトロルミネッセンス化合物を使用することにより、有機エレクトロルミネッセンス素子は、高い色純度、低い駆動電圧、長い寿命、ならびに改善された電流効率及び電力効率を有することができる。

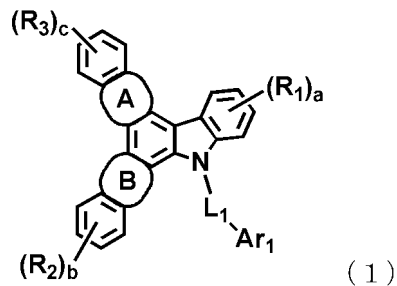
【選択図】 なし

【特許請求の範囲】

【請求項 1】

以下の式 1 によって表される有機エレクトロルミネッセンス化合物であって、

【化 1】



10

式中、 Ar_1 は、置換もしくは非置換の (3 ~ 30 員) ヘテロアリーール、または置換もしくは非置換の (C6 - C30) アリーールを表し；

L_1 は、単結合、置換もしくは非置換の (C6 - C30) アリーレン、または置換もしくは非置換の (3 ~ 30 員) ヘテロアリーレンを表し；

環 A は、

【化 2】



を表し；環 B は、

20

【化 3】



を表し；

Y は、O、S、N (R_6)、または C (R_4) (R_5) を表し； X は、O、S、N (R_6)、または C (R_7) (R_8) を表すが；但し、 X 及び Y の両方が同時に N (R_6) であることはできないものとし；

30

$R_1 \sim R_3$ は、それぞれ独立して、水素、重水素、ハロゲン、シアノ、カルボキシ、ニトロ、ヒドロキシ、置換もしくは非置換の (C1 - C30) アルキル、置換もしくは非置換の (C3 - C30) シクロアルキル、置換もしくは非置換の (C3 - C30) シクロアルケニル、置換もしくは非置換の (3 ~ 7 員) ヘテロシクロアルキル、置換もしくは非置換の (C6 - C30) アリーール、置換もしくは非置換の (3 ~ 30 員) ヘテロアリーール、 $-NR_9R_{10}$ 、または $-SiR_{11}R_{12}R_{13}$ を表すが、あるいは隣接する置換基 (複数可) と結合して、置換または非置換の (C3 - C30) の、単環式または多環式の脂環式環または芳香環を形成してもよく；

$R_4 \sim R_{13}$ は、それぞれ独立して、水素、重水素、ハロゲン、置換もしくは非置換の (C1 - C30) アルキル、置換もしくは非置換の (C6 - C30) アリーール、置換もしくは非置換の (3 ~ 30 員) ヘテロアリーール、置換もしくは非置換の (C3 - C30) シクロアルキル、置換もしくは非置換の (5 ~ 7 員) ヘテロシクロアルキル、置換もしくは非置換の (C6 - C30) アリーール (C1 - C30) アルキル、 $-NR_{14}R_{15}$ 、 $-SiR_{16}R_{17}R_{18}$ 、シアノ、ニトロ、またはヒドロキシを表すが、あるいは隣接する置換基 (複数可) と結合して、置換または非置換の (C3 - C30) の、単環式または多環式の脂環式環または芳香環を形成してもよく；

40

$R_{14} \sim R_{18}$ は、 $R_4 \sim R_{13}$ と同じ定義を有し；

前記脂環式環または芳香環の炭素原子 (複数可) は、窒素、酸素、及び硫黄から選択される少なくとも 1 つのヘテロ原子で置き換えられてもよく；

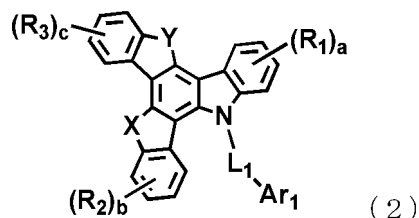
50

前記ヘテロアリール（ヘテロアリーレン）及びヘテロシクロアルキルは、B、N、O、S、P（=O）、Si、及びPから選択される少なくとも1つのヘテロ原子を含有し；

a、b、及びcは、それぞれ独立して、1～4の整数を表し；a、b、またはcは、2以上の整数を表し、R₁、R₂、またはR₃の各々は、同じかまたは異なってもよいが；

但し、上記式1の前記化合物は、以下の式2によって表され、R₁～R₃のうちのいずれか1つと隣接する置換基（複数可）との間に形成されてもよい環は、置換されたナフタレン環ではないものとする、前記有機エレクトロルミネッセンス化合物。

【化4】

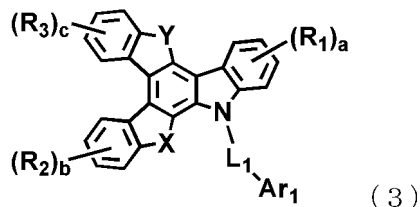
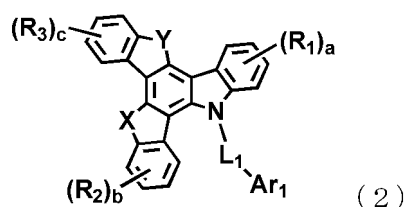


10

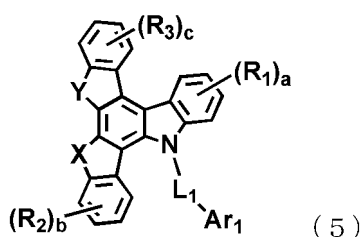
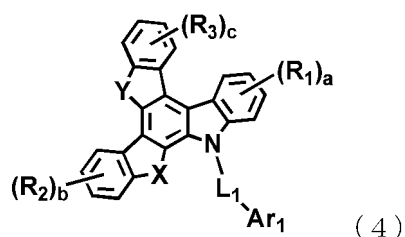
【請求項2】

前記式1の化合物は、以下の式2～5

【化5】



20



30

（式中、Ar₁、L₁、X、Y、R₁～R₃、a、b、及びcは、請求項1に定義される通りである）のいずれか1つによって表される、請求項1に記載の前記有機エレクトロルミネッセンス化合物。

【請求項3】

Ar₁は、置換もしくは非置換の（5～20員）ヘテロアリール、または置換もしくは非置換の（C6～C20）アリールを表し；

L₁は、単結合、置換もしくは非置換の（C6～C20）アリーレン、または置換もしくは非置換の（5～20員）ヘテロアリーレンを表し；

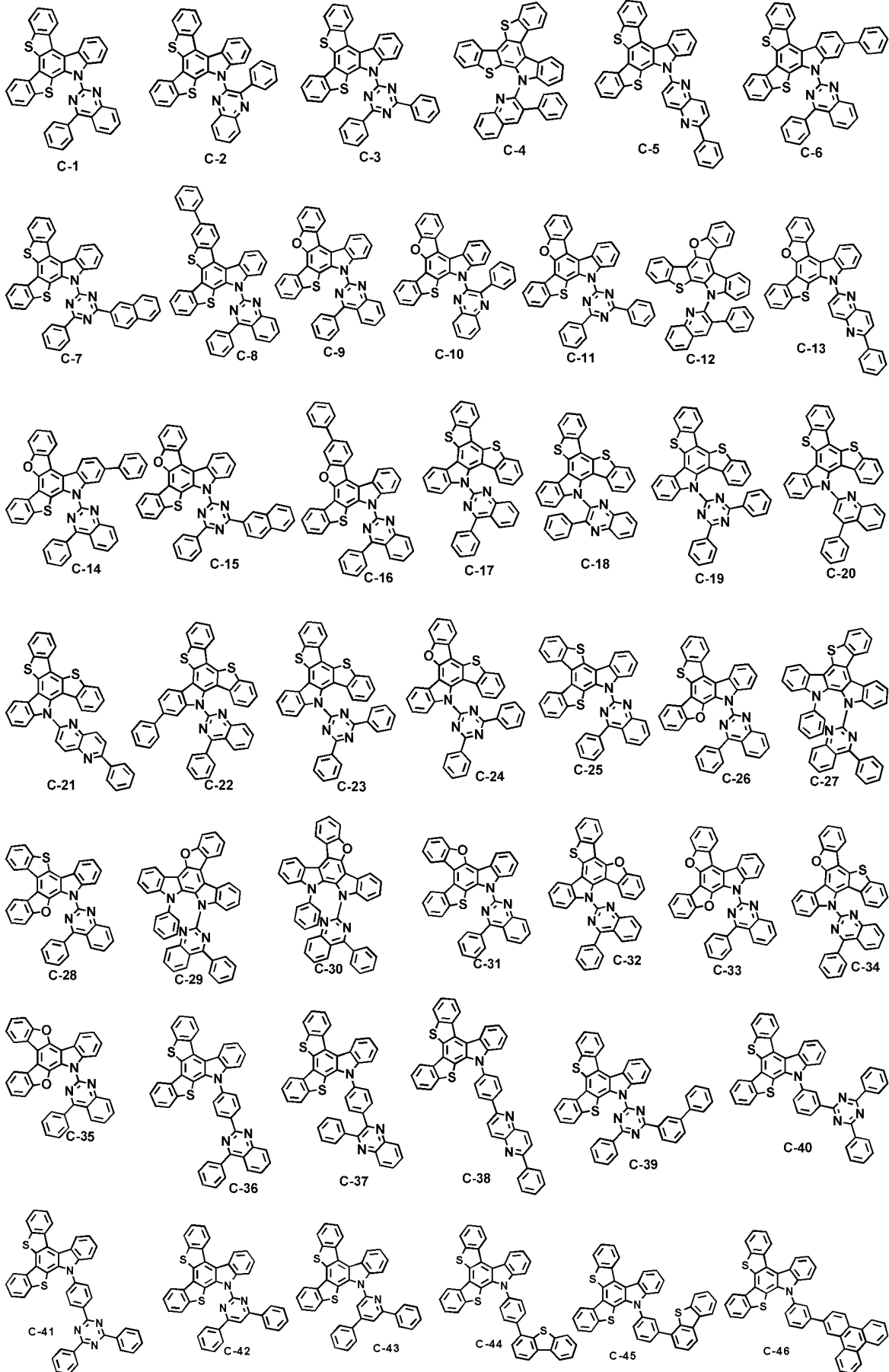
R₁～R₃は、それぞれ独立して、水素、重水素、置換もしくは非置換の（C1～C20）アルキル、置換もしくは非置換の（C3～C20）シクロアルキル、置換もしくは非置換の（C6～C30）アリール、置換もしくは非置換の（3～30員）ヘテロアリール、-NR₉R₁₀、または-SiR₁₁R₁₂R₁₃を表すか、あるいは隣接する置換基（複数可）と結合して、（C3～C20）の、単環式または多環式の脂環式環または芳香環を形成してもよい、請求項1に記載の前記有機エレクトロルミネッセンス化合物。

40

【請求項4】

前記式1の化合物は、

【化 6 - 1】



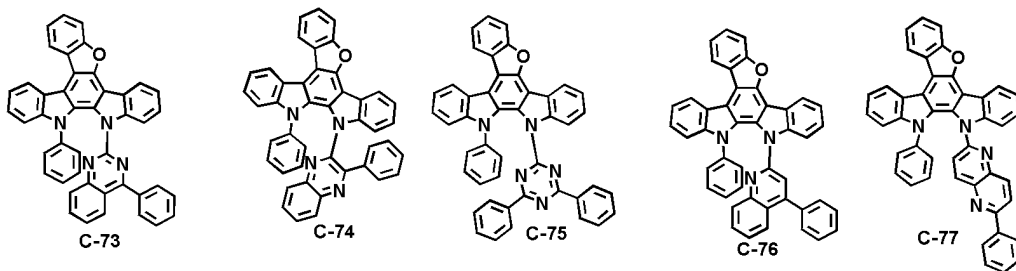
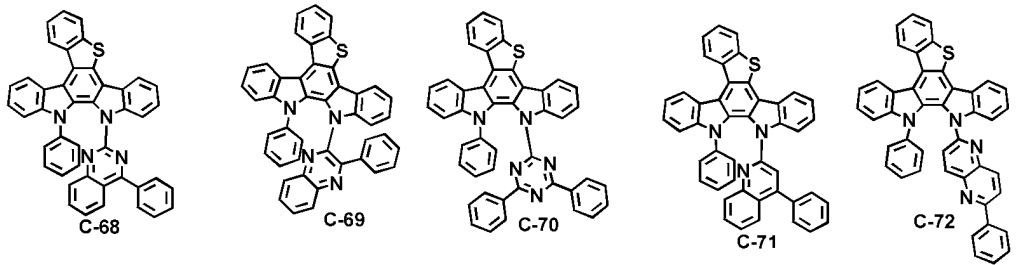
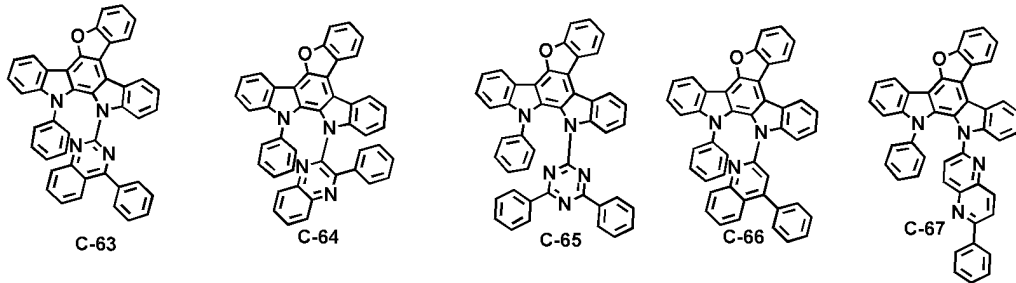
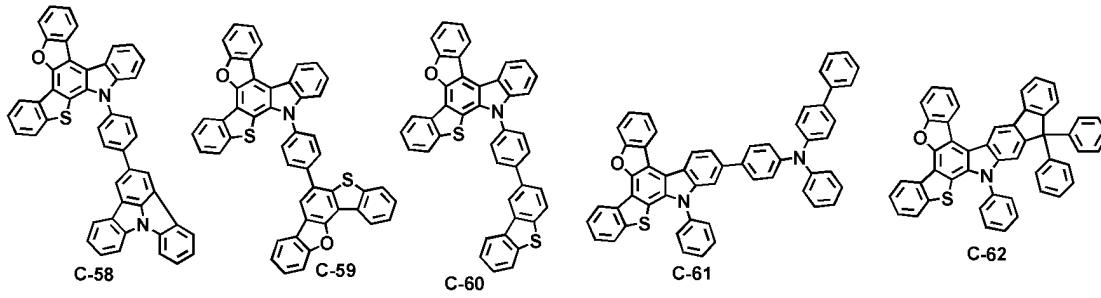
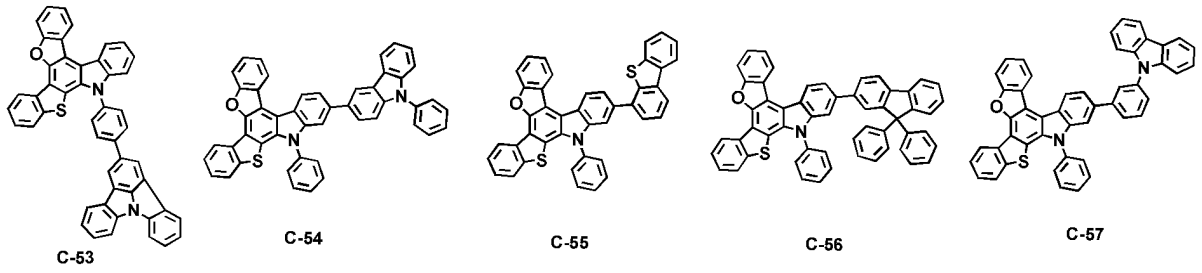
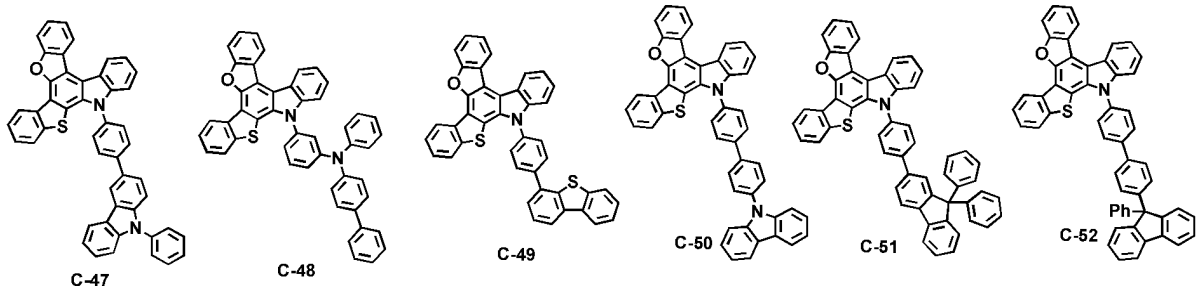
10

20

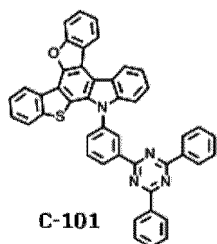
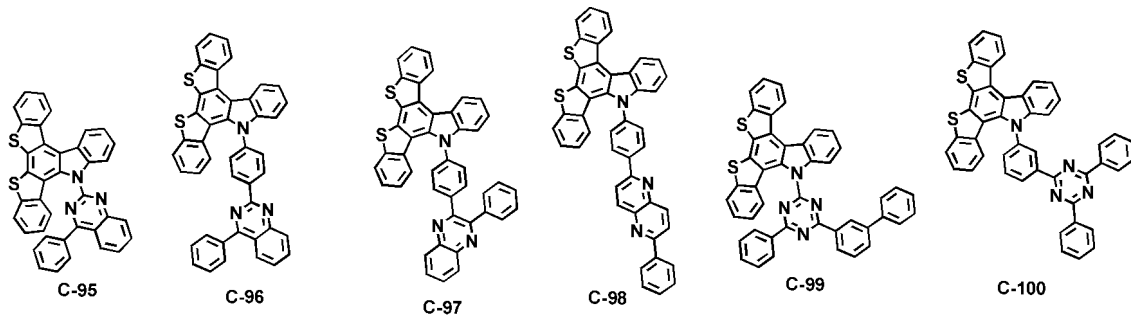
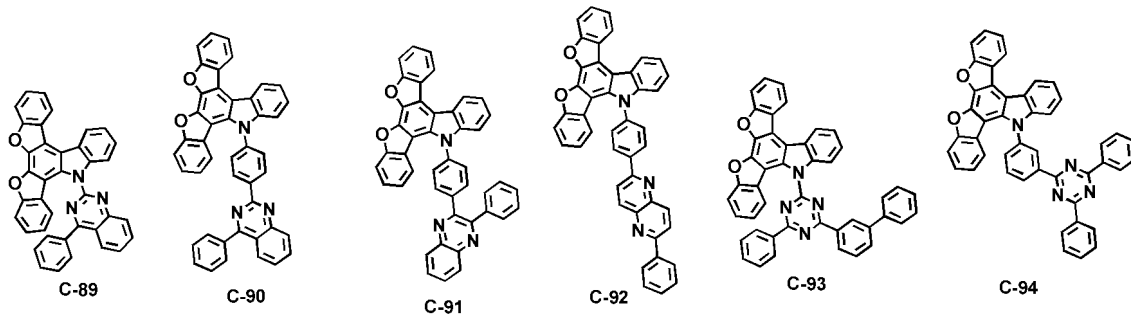
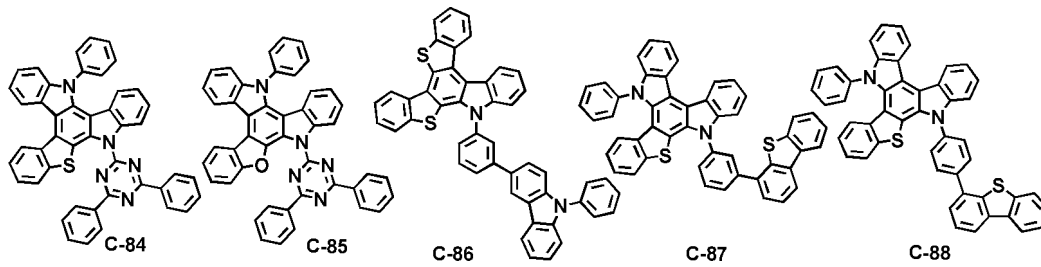
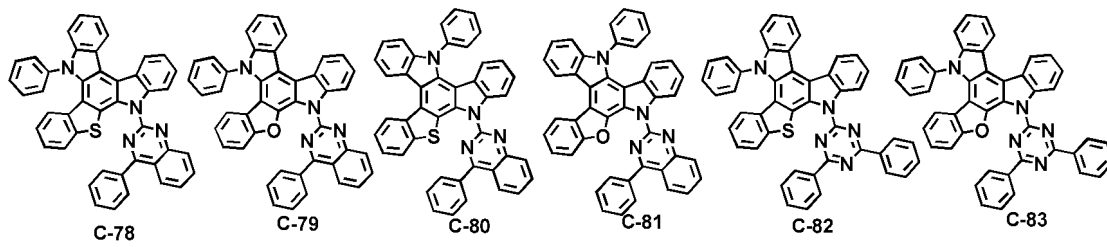
30

40

【化 6 - 2】



【化 6 - 3】



10

20

30

40

からなる群から選択される、請求項 1 に記載の前記有機エレクトロルミネッセンス化合物。

【請求項 5】

請求項 1 に記載の前記有機エレクトロルミネッセンス化合物を含む、有機エレクトロルミネッセンス素子。

【請求項 6】

陽極と、陰極と、前記陽極と陰極との間に配置された有機層とを備える有機エレクトロルミネッセンス素子であって、前記有機層は、1つ以上の発光層を備え；少なくとも1つ

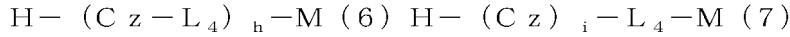
50

の発光層は、1つ以上のドーパント化合物及び2つ以上のホスト化合物を含み；前記2つ以上のホスト化合物の第1のホスト化合物は、請求項1に記載の式1によって表される前記有機エレクトロルミネッセンス化合物である、前記有機エレクトロルミネッセンス素子。

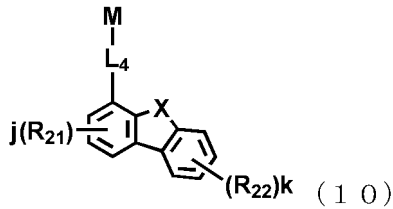
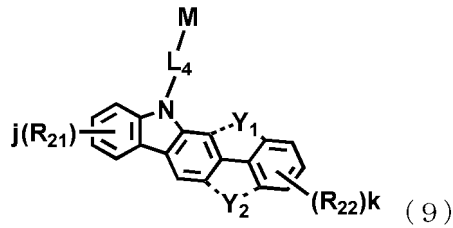
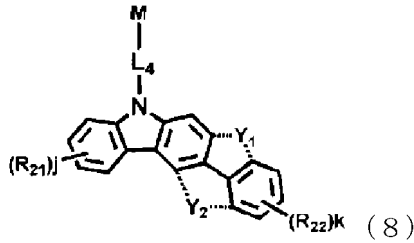
【請求項7】

前記2つ以上のホスト化合物の第1のホスト化合物は、式1によって表される前記有機エレクトロルミネッセンス化合物であり、第2のホスト化合物は、以下の式6～10

【化7】



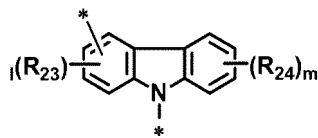
10



20

(式中、 C_z は、以下の構造を表し：

【化8】



30

L_4 は、単結合、置換もしくは非置換の($C_6 - C_{30}$)アリーレン、または置換もしくは非置換の($5 \sim 30$ 員)ヘテロアリーレンを表し；

M は、置換もしくは非置換の($C_6 - C_{30}$)アリール、または置換もしくは非置換の($5 \sim 30$ 員)ヘテロアリールを表し；

Y_1 及び Y_2 は、それぞれ独立して、 $-O-$ 、 $-S-$ 、 $-N(R_{31})-$ 、または $-C(R_{32})(R_{33})-$ を表すが、但し、 Y_1 及び Y_2 の両方が同時に存在することはできないものとし；

X は、 O または S を表し；

$R_{21} \sim R_{24}$ は、それぞれ独立して、水素、重水素、ハロゲン、シアノ、置換もしくは非置換の($C_1 - C_{30}$)アルキル、置換もしくは非置換の($C_3 - C_{30}$)シクロアルキル、置換もしくは非置換の($C_6 - C_{30}$)アリール、置換もしくは非置換の($5 \sim 30$ 員)ヘテロアリール、または $R_{25}R_{26}R_{27}Si-$ を表すか；あるいは隣接する置換基(複数可)と結合して、その炭素原子(複数可)が窒素、酸素、及び硫黄から選択される少なくとも1つのヘテロ原子で置き換えられてもよい、($C_3 - C_{30}$)の単環式または多環式の脂環式環または芳香環を形成してもよいが；但し、式6の h または式7の i が1である場合、 R_{23} または R_{24} は、式8及び9の Y_1 または Y_2 を含有する環を形成せず、式10の R_{22} は、式8及び9の R_{21} に連結されたインドール環を形成しないものとし；

40

$R_{25} \sim R_{27}$ は、それぞれ独立して、置換もしくは非置換の($C_1 - C_{30}$)アルキ

50

ル、または置換もしくは非置換の(C6 - C30)アリアルを表し；

R₃₁ ~ R₃₃は、それぞれ独立して、水素、置換もしくは非置換の(C1 - C30)アルキル、置換もしくは非置換の(C6 - C30)アリアル、または置換もしくは非置換の(5 ~ 30員)ヘテロアリアルを表すか；あるいは隣接する置換基(複数可)と結合して、その炭素原子(複数可)が窒素、酸素、及び硫黄から選択される少なくとも1つのヘテロ原子で置き換えられてもよい、(C5 - C30)の単環式または多環式の脂環式環または芳香環を形成してもよく；R₃₂及びR₃₃は、同じかまたは異なってもよく；

前記ヘテロアリアル(ヘテロアリーレン)は、B、N、O、S、P(=O)、Si、及びPから選択される少なくとも1つのヘテロ原子を含有し；

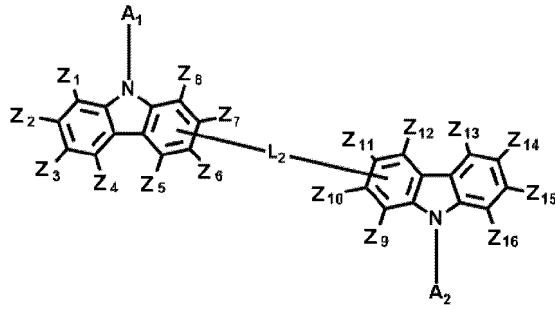
h及びiは、それぞれ独立して、1 ~ 3の整数を表し；j、k、l、及びmは、それぞれ独立して、0 ~ 4の整数を表し；h、i、j、k、l、またはmが2以上の整数である場合、(Cz - L₄)の各々、(Cz)の各々、R₂₁の各々、R₂₂の各々、R₂₃の各々、またはR₂₄の各々は、同じかまたは異なってもよい)によって表される化合物から選択される、請求項6に記載の前記有機エレクトロルミネッセンス素子。

10

【請求項8】

前記第2のホスト化合物は、以下の式11

【化9】



20

(式中、A₁及びA₂は、それぞれ独立して、置換または非置換の(C6 - C30)アリアルを表すが；但し、A₁及びA₂の置換された基の置換基は、窒素含有ヘテロアリアルではないものとし；

L₂は、単結合または置換もしくは非置換の(C6 - C30)アリーレンを表し；

30

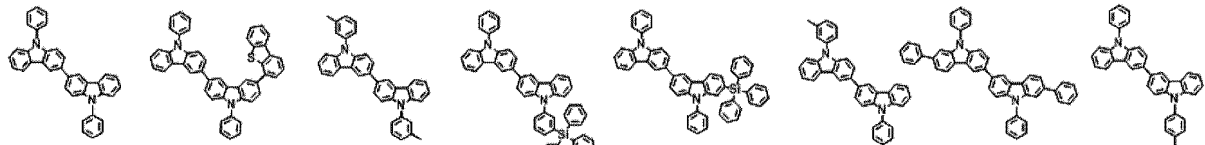
Z₁ ~ Z₁₆は、それぞれ独立して、水素、重水素、ハロゲン、シアノ、置換もしくは非置換の(C1 - C30)アルキル、置換もしくは非置換の(C2 - C30)アルケニル、置換もしくは非置換の(C2 - C30)アルキニル、置換もしくは非置換の(C3 - C30)シクロアルキル、置換もしくは非置換の(C6 - C60)アリアル、置換もしくは非置換の(3 ~ 30員)ヘテロアリアル、置換もしくは非置換のトリ(C1 - C30)アルキルシリル、置換もしくは非置換のトリ(C6 - C30)アリアルシリル、置換もしくは非置換のジ(C1 - C30)アルキル(C6 - C30)アリアルシリル、置換もしくは非置換の(C1 - C30)アルキルジ(C6 - C30)アリアルシリル、または置換もしくは非置換のモノもしくはジ(C6 - C30)アリアルアミノを表すか；あるいは隣接する置換基(複数可)と結合して、置換または非置換の(C3 - C30)の、単環式または多環式の脂環式環または芳香環を形成してもよい)によって表される、請求項7に記載の前記有機エレクトロルミネッセンス素子。

40

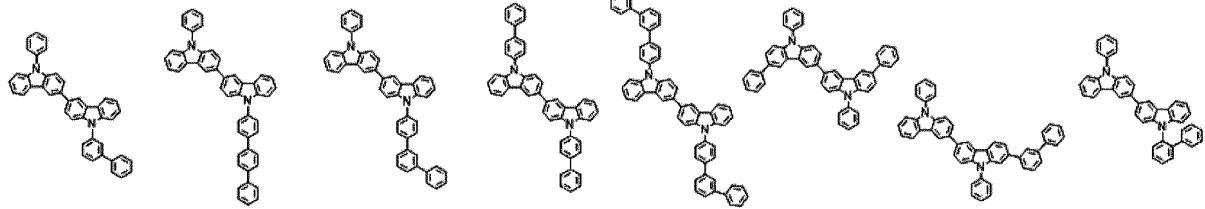
【請求項9】

式6 ~ 10によって表される前記化合物は、

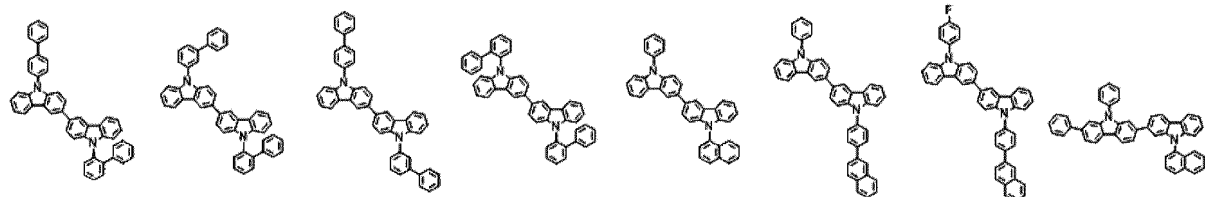
【化 1 0 - 1】



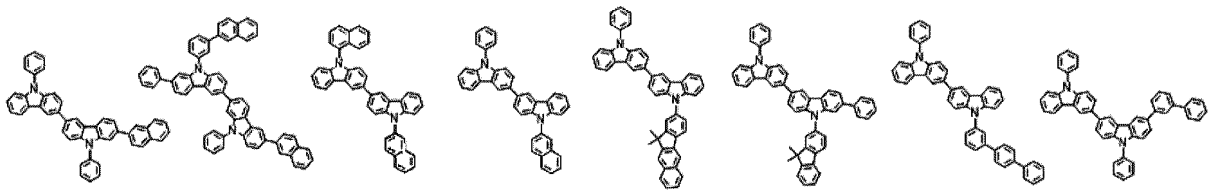
H1-1 H1-2 H1-3 H1-4 H1-5 H1-6 H1-7 H1-8



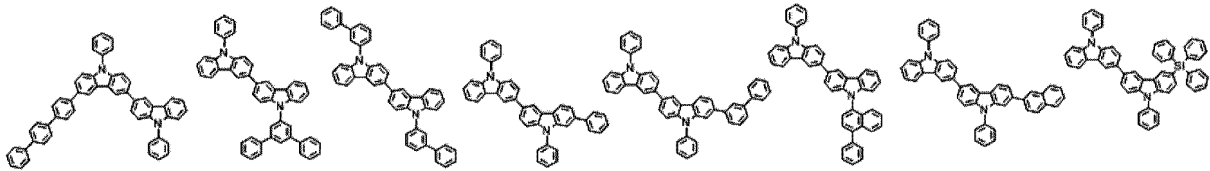
H1-9 H1-10 H1-11 H1-12 H1-13 H1-14 H1-15 H1-16



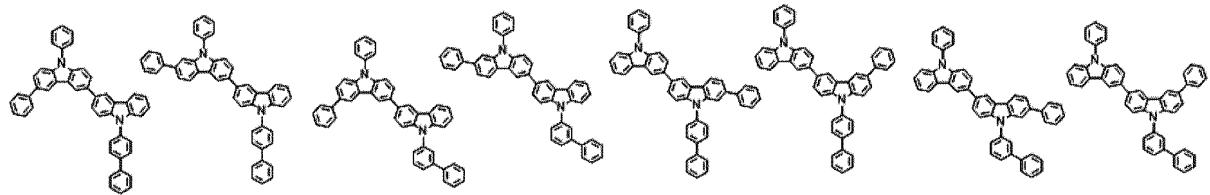
H1-17 H1-18 H1-19 H1-20 H1-21 H1-22 H1-23 H1-24



H1-25 H1-26 H1-27 H1-28 H1-29 H1-30 H1-31 H1-32



H1-33 H1-34 H1-35 H1-36 H1-37 H1-38 H1-39 H1-40



H1-41 H1-42 H1-43 H1-44 H1-45 H1-46 H1-47 H1-48

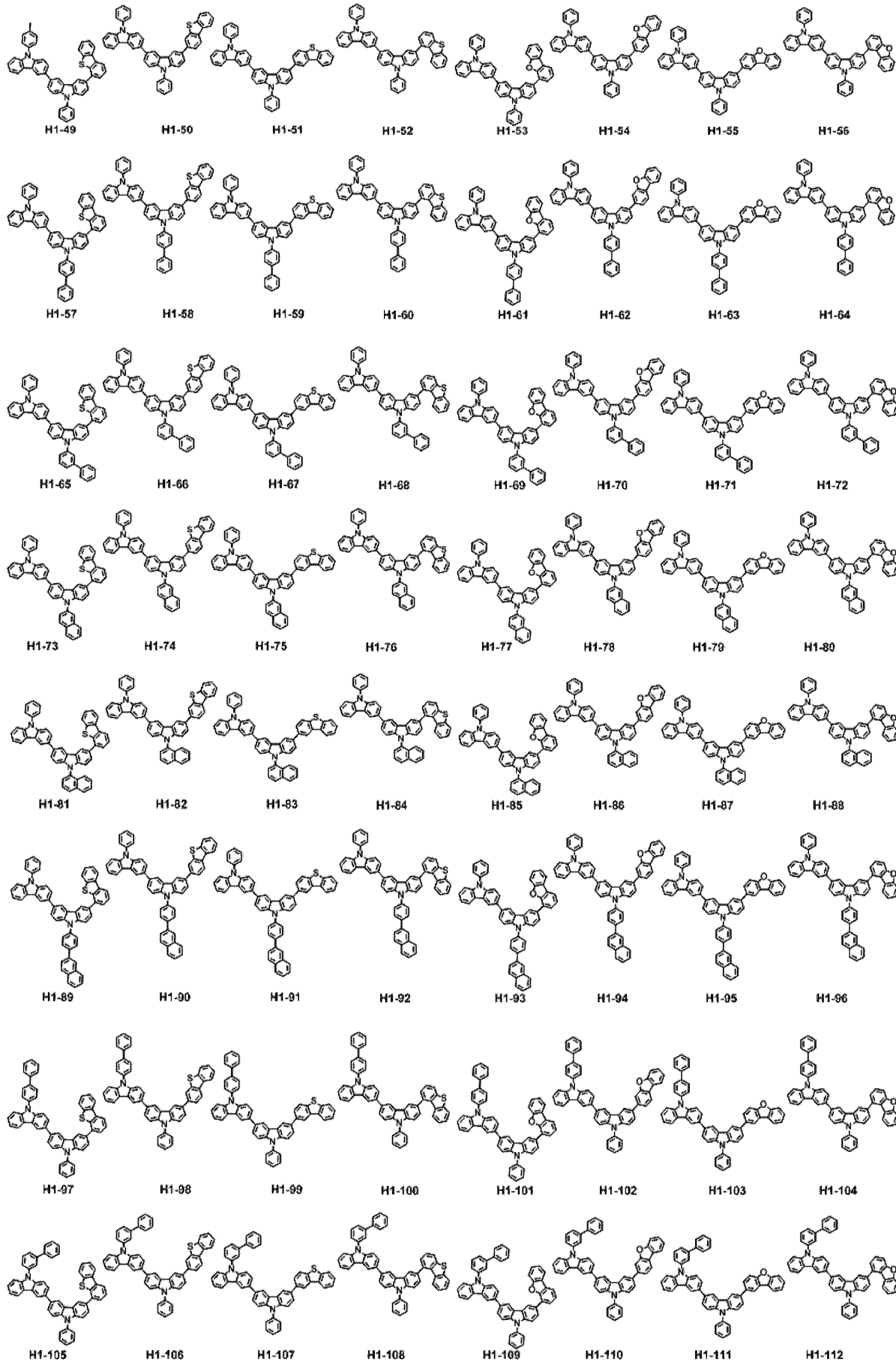
10

20

30

40

【化 1 0 - 2】



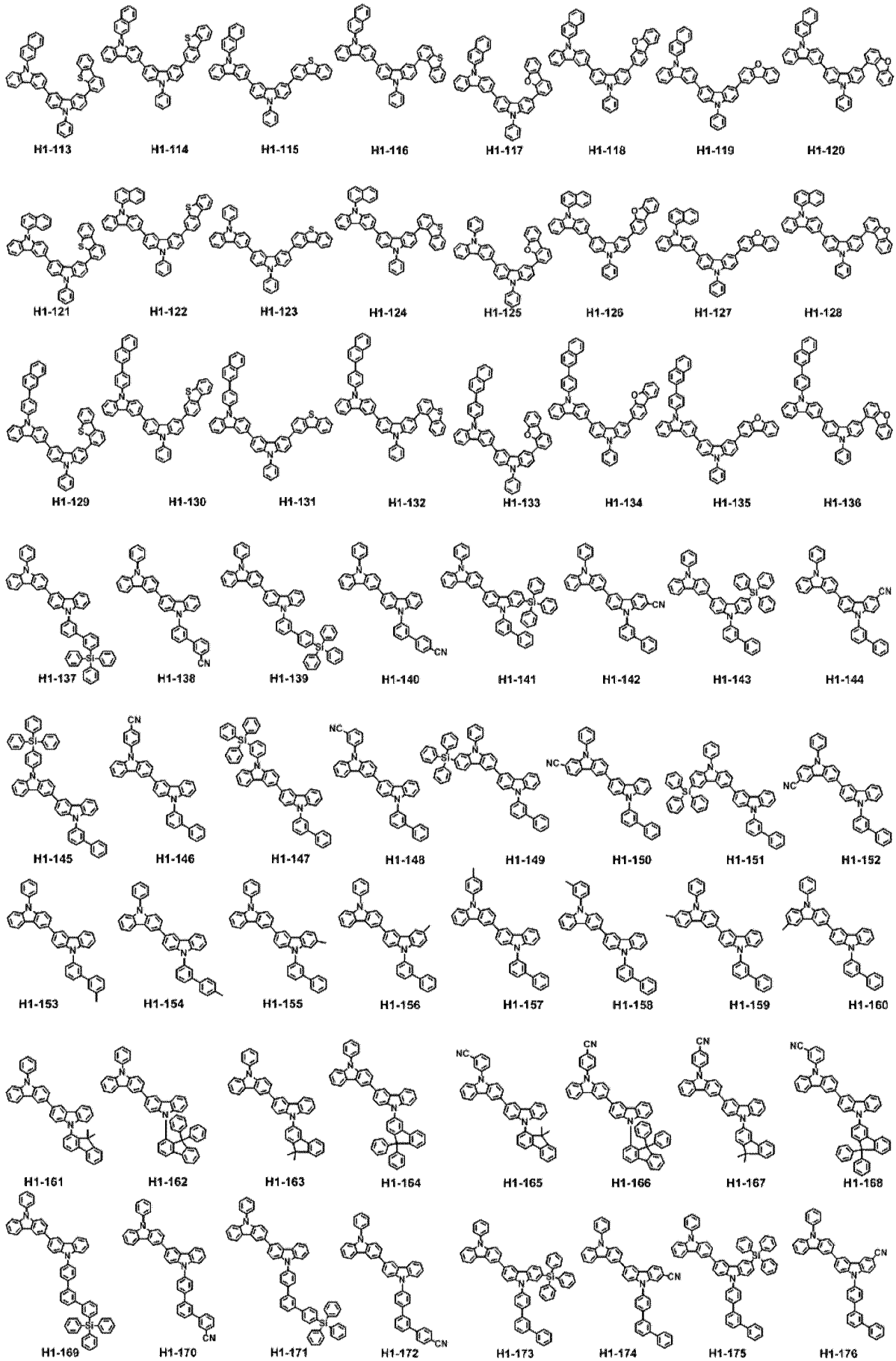
10

20

30

40

【化 1 0 - 3】



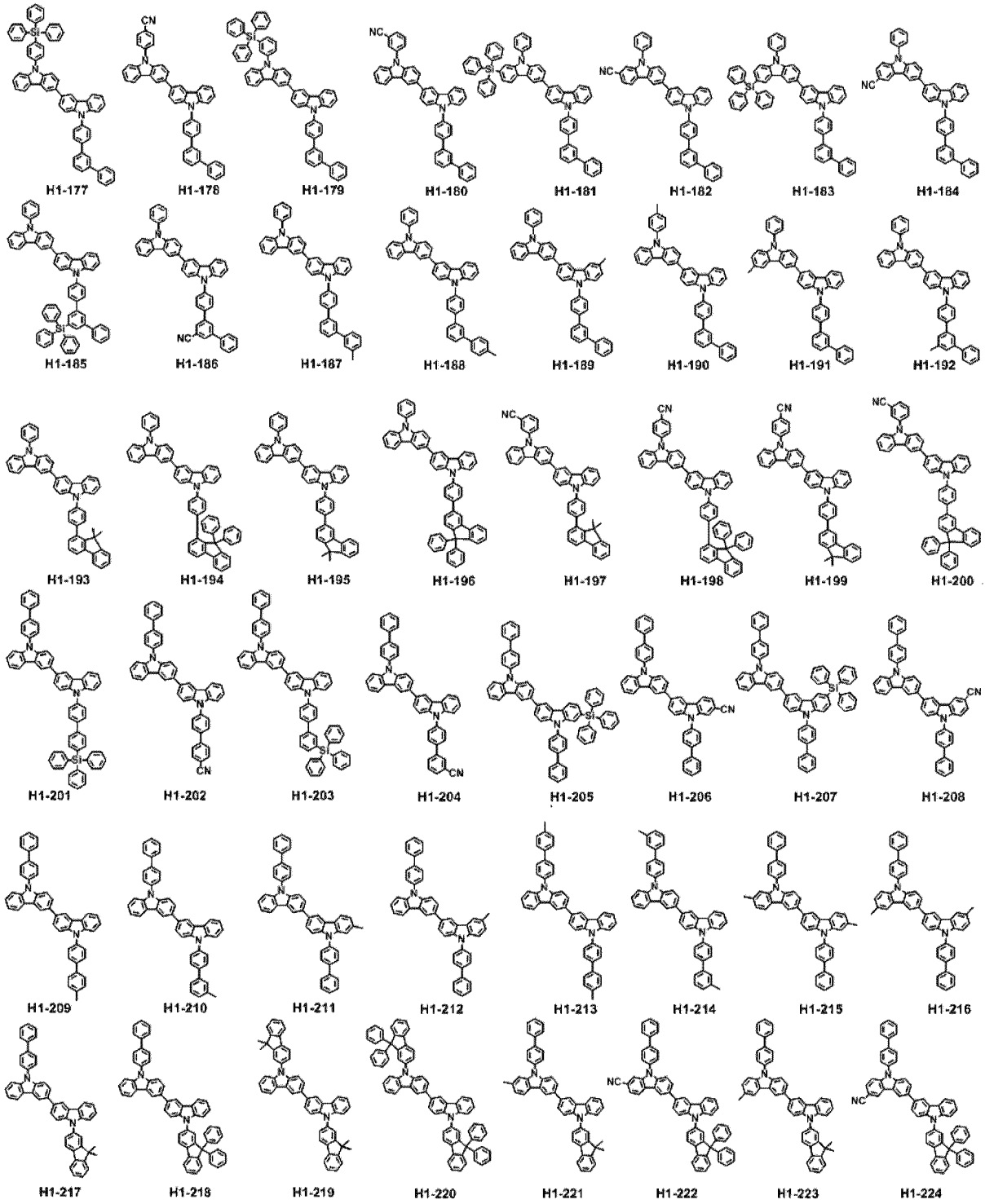
10

20

30

40

【化 1 0 - 4】



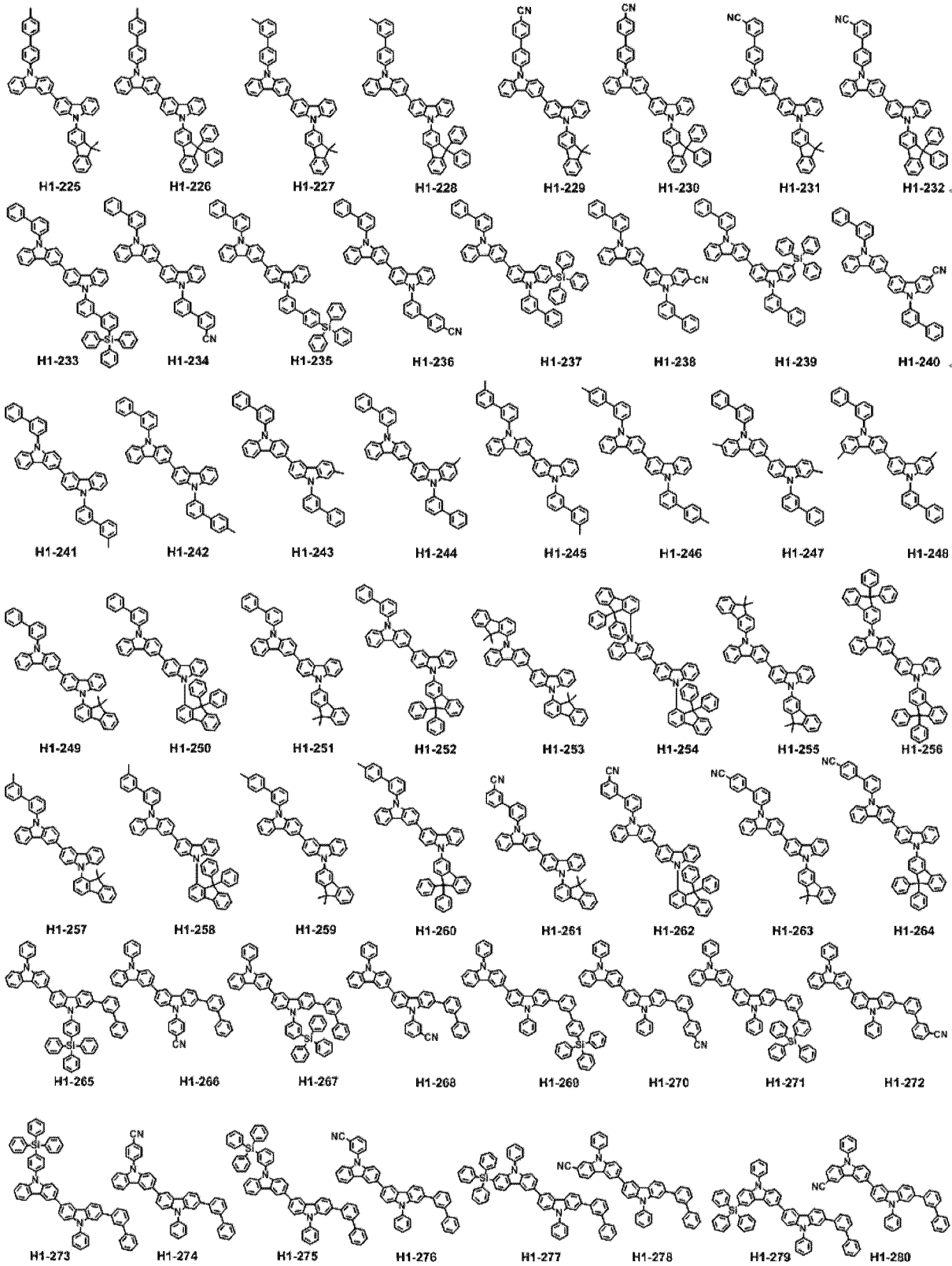
10

20

30

40

【化 1 0 - 5】



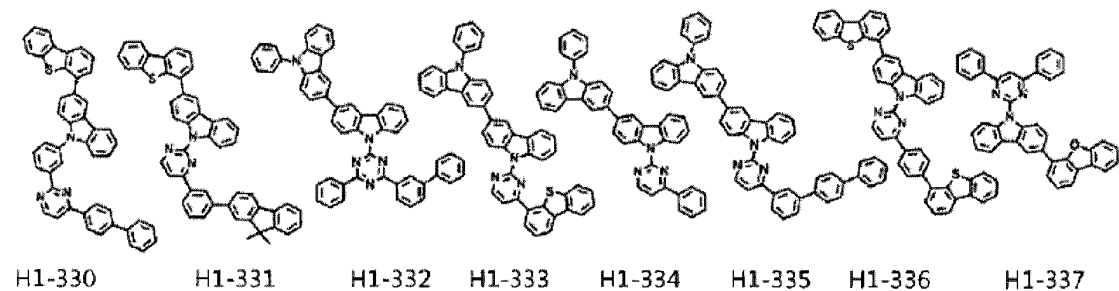
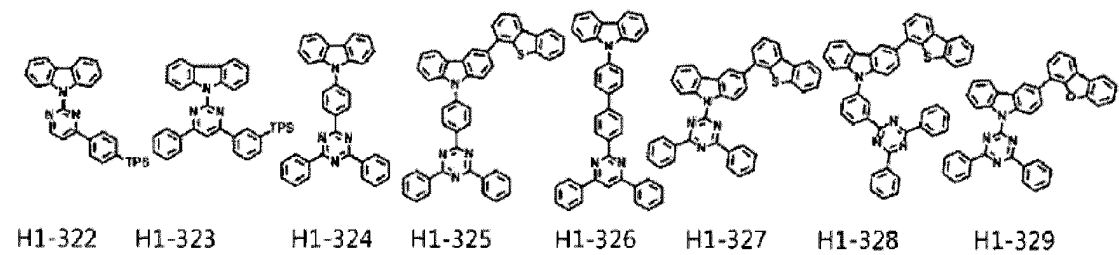
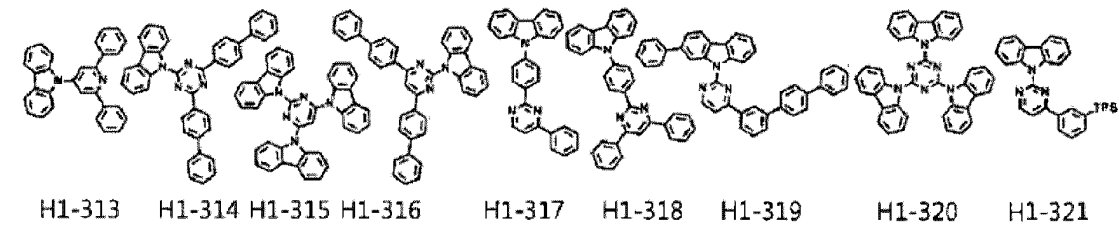
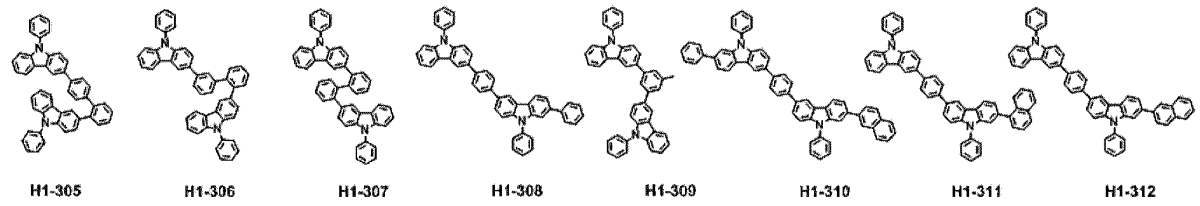
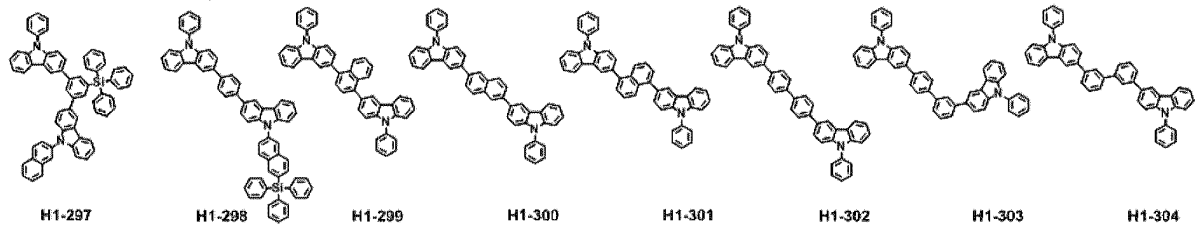
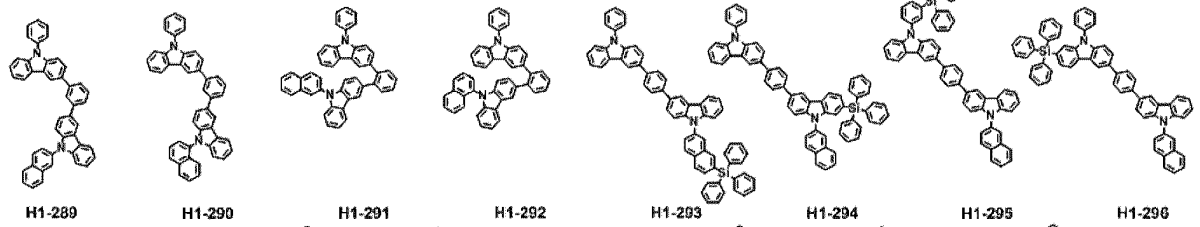
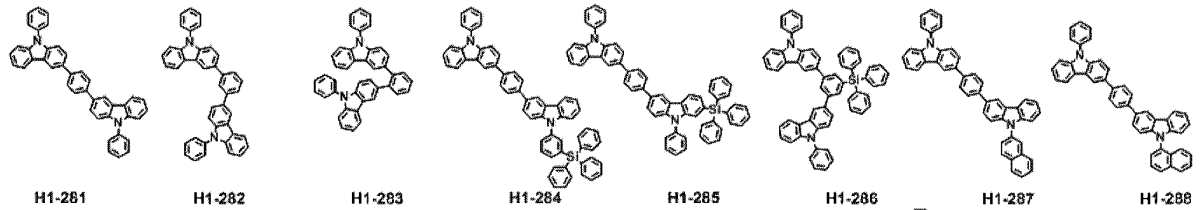
10

20

30

40

【化 1 0 - 6】



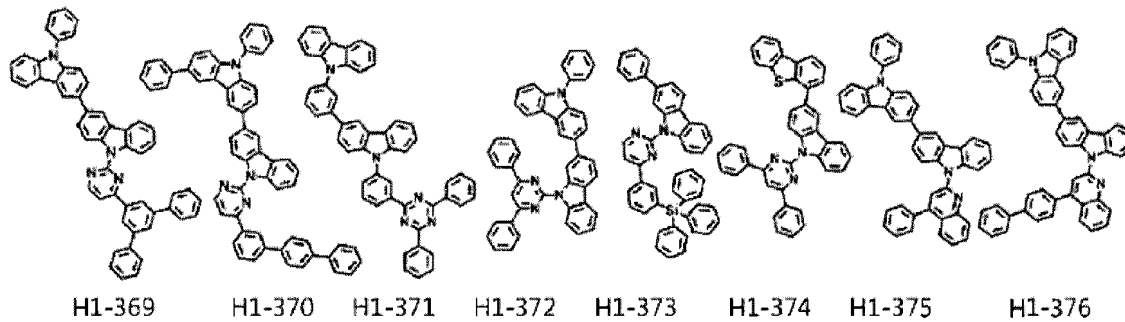
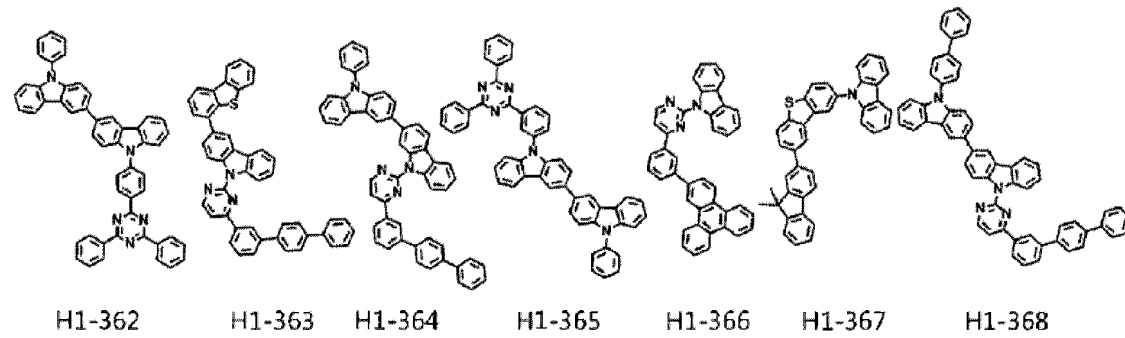
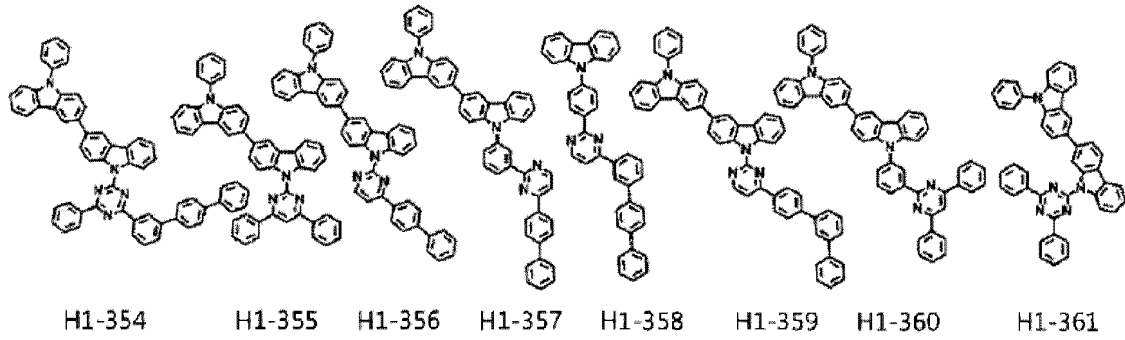
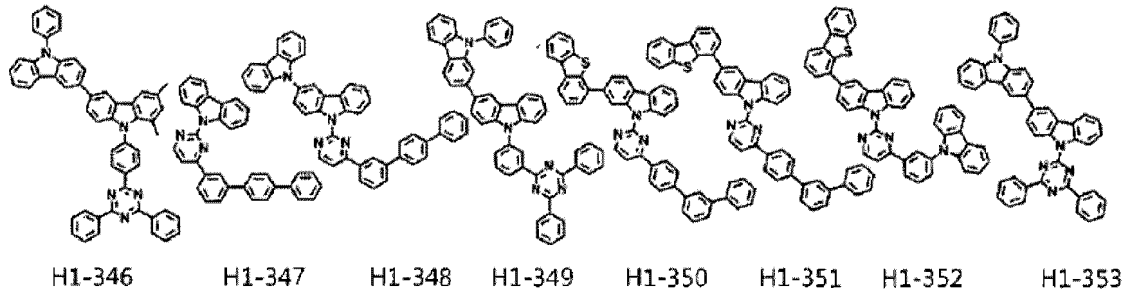
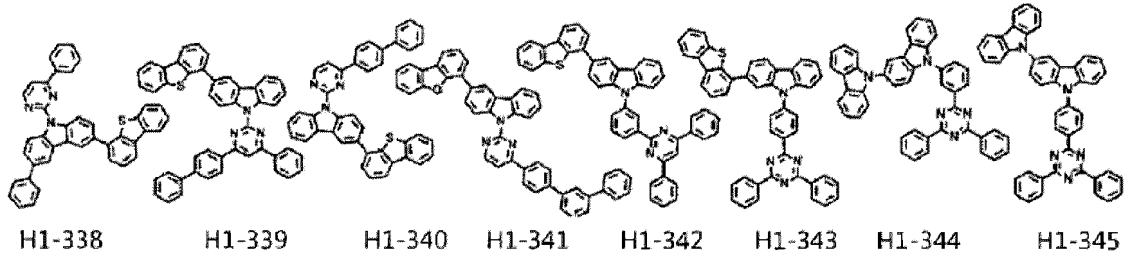
10

20

30

40

【化 1 0 - 7】



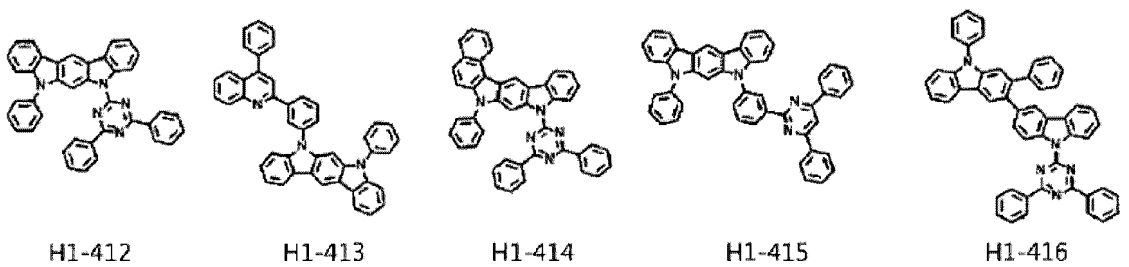
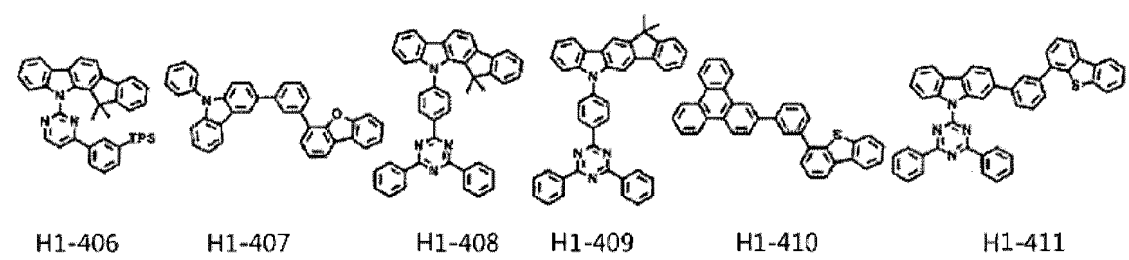
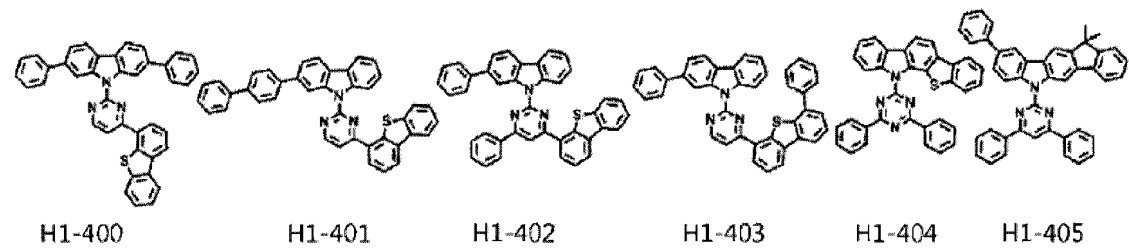
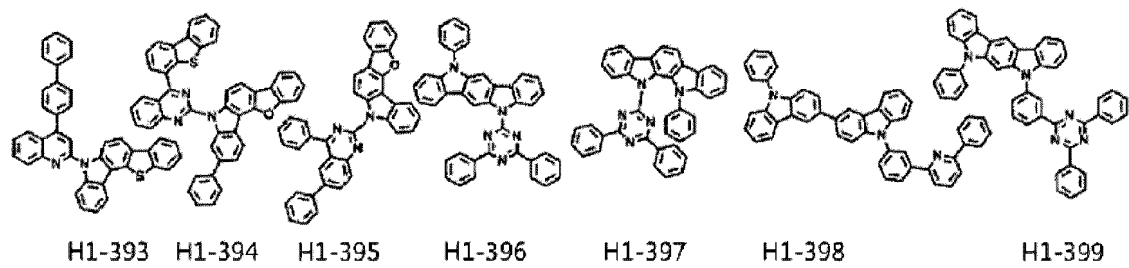
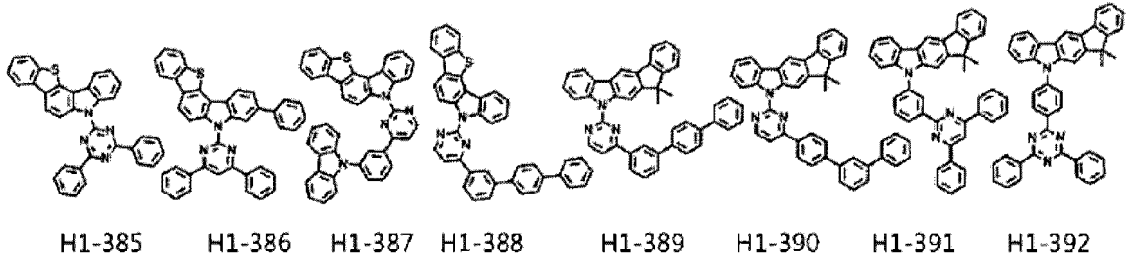
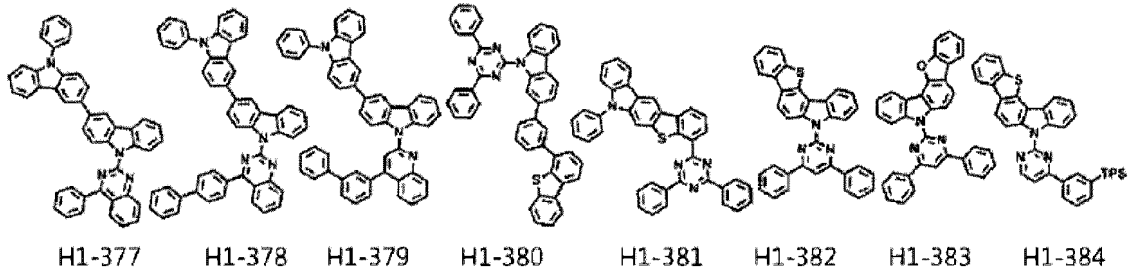
10

20

30

40

【化 1 0 - 8】



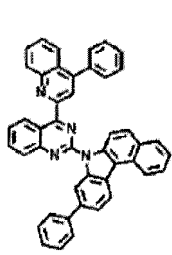
10

20

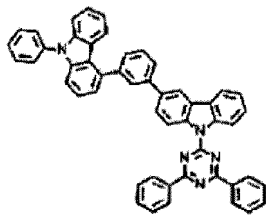
30

40

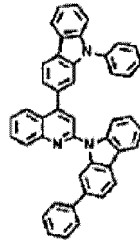
【化 1 0 - 9】



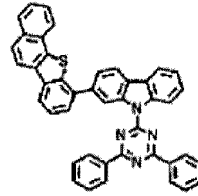
H1-417



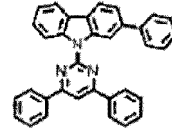
H1-418



H1-419

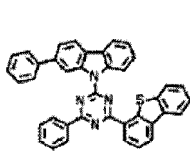


H1-420

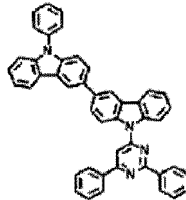


H1-421

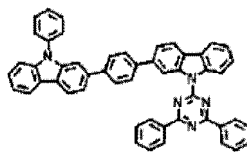
10



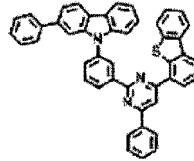
H1-422



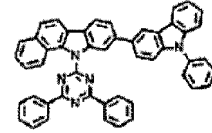
H1-423



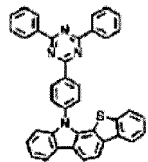
H1-424



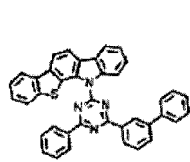
H1-425



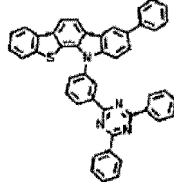
H1-426



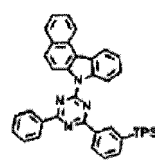
H1-427



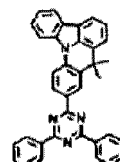
H1-428



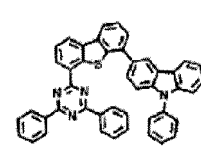
H1-429



H1-430

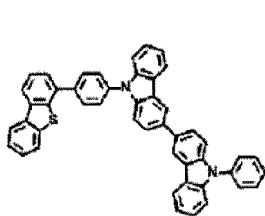


H1-431

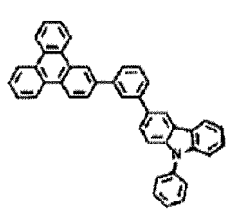


H1-432

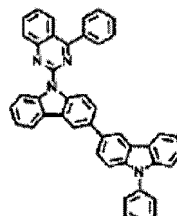
20



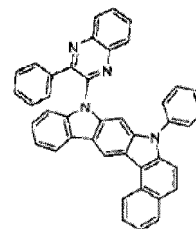
H1-433



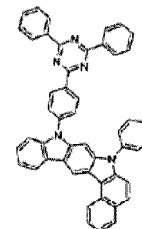
H1-434



H1-435



H1-436



H1-437

30

(式中、TPSはトリフェニルシリルを表す)からなる群から選択される、請求項7に記載の前記有機エレクトロルミネッセンス素子。

【発明の詳細な説明】

【技術分野】

【0001】

本開示は、新規有機エレクトロルミネッセンス化合物、並びにそれを含む多成分ホスト材料及び有機エレクトロルミネッセンス素子に関する。

40

【背景技術】

【0002】

エレクトロルミネッセンス(EL)素子は、より広い視野角、より高いコントラスト比、及びより迅速な応答時間を提供するという点で利点がある自発光素子である。有機EL素子は、発光層を形成するための材料として小さな芳香族ジアミン分子及びアルミニウム錯体を用いて、Eastman Kodakによって最初に開発された[Appl. Phys. Lett. 51, 913, 1987]。

【0003】

一般的に、有機EL素子は、陽極と、陰極と、陽極と陰極との間に配置された有機層とを備える構造を有する。正孔及び電子は、それぞれ、陽極及び陰極から有機層に注入され

50

、化合物は、正孔と電子との再結合によって励起状態となり、励起状態の減衰により、エネルギーは、発光を伴って基底状態に緩和する。有機EL素子の有機層は、正孔注入層、正孔輸送層、電子阻止層、発光層、正孔阻止層、電子輸送層、電子注入層等を備える。有機層を調製するための材料は、正孔注入材料、正孔輸送材料、電子阻止材料、発光材料、正孔阻止材料、電子輸送材料、電子注入材料等を含む。

【0004】

有機EL素子の発光効率を決定する最も重要な要因は、発光材料である。発光材料は、高い量子効率、高い電子移動度、及び高い正孔移動度を有する必要がある。さらに、発光材料によって形成される発光層は、均一かつ安定でなければならない。発光によって可視化される色に依存して、発光材料は、青色、緑色、または赤色発光材料として分類することができ、黄色または橙色発光材料が、その中にさらに含まれてもよい。さらに、励起状態に依存して、発光材料は、蛍光材料（一重項状態）及びリン光材料（三重項状態）として分類することができる。蛍光材料は、有機EL素子に広く使用されてきた。しかしながら、リン光材料は、蛍光材料と比較して、電気を光に変換するための発光効率を4倍に高め、より長い寿命を有するように電力消費を低減することができるため、リン光発光材料の開発は広く研究されている。

10

【0005】

それぞれ、赤色、緑色、及び青色発光材料として、ビス（2-（2'-ベンゾチエニル）-ピリジナト-N, C3'）イリジウム（アセチルアセトナト）（（acac）Ir（btpp）₂）、トリス（2-フェニルピリジン）イリジウム（Ir（ppy）₃）、及びビス（4,6-ジフルオロフェニルピリジナト-N, C2）ピコリナトイリジウム（Firpic）を含むイリジウム（III）錯体が、リン光材料として広く知られている。

20

【0006】

発光材料は、色純度、発光効率、及び安定性を向上させるようにホスト材料とドーパントとを組み合わせることによって調製することができる。ホスト材料/ドーパント系を発光材料として使用する場合、ホスト材料がEL素子の効率及び性能に大きく影響するため、それらの選択は重要である。現在のところ、4,4'-N,N'-ジカルバゾル-ピフェニル（CBP）が、最も広く知られているリン光材料のホスト材料である。最近、Pioneer（Japan）らが、正孔阻止材料として知られるバソクプロイン（BCP）及びアルミニウム（III）ビス（2-メチル-8-キノリネート）（4-フェニルフェノレート）（BALq）等をホスト材料として使用して、高性能有機EL素子を開発した。

30

【0007】

従来のリン光ホスト材料は、良好な発光特性を提供するが、それらは以下の欠点を有する：（1）それらのガラス転移温度が低く、熱安定性が不良であるため、真空での高温蒸着プロセスの間に劣化が生じる可能性がある。（2）有機EL素子の電力効率は、 $[(\text{電圧}) \times \text{電流効率}]$ によって得られ、電力効率は電圧に反比例する。リン光ホスト材料を含む有機EL素子は、蛍光材料を含む素子よりも高い電流効率（cd/A）を提供するが、著しく高い駆動電圧が必要である。よって、電力効率（lm/W）の観点において利点は存在しない。（3）さらに、有機EL素子の動作寿命は短く、発光効率はなおも改善を必要とする。

40

【0008】

したがって、良好な特性を有する有機EL素子を提供するためには、有機EL素子内の有機層を調製するための材料、特に、発光層を調製するためのホストまたはドーパントが、適切に選択されなければならない。

【0009】

韓国特許出願公開第10-2010-0105099号は、発光層のホスト材料として、縮合5環を有する複素環化合物を開示している。しかしながら、前記参考文献の化合物を使用した有機エレクトロルミネッセンス素子は、電力効率、発光効率、寿命、色純度において満足できるものではない。

50

【発明の開示】

【発明が解決しようとする課題】

【0010】

本開示の目的は、低い駆動電圧、長い寿命、高い色純度、ならびに良好な電流効率及び電力効率を示す有機エレクトロルミネッセンス素子を提供することができる有機エレクトロルミネッセンス化合物、ならびにそれを含む多成分ホスト材料及び有機エレクトロルミネッセンス素子を提供することである。

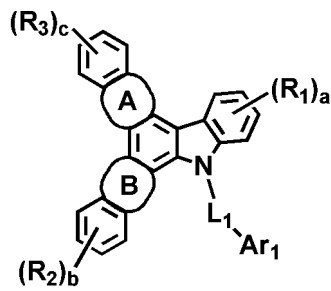
【課題を解決するための手段】

【0011】

本発明者は、以下の式1によって表される有機エレクトロルミネッセンス化合物によって上記目的を達成することができることを発見した。

【0012】

【化1】



【0013】

式中、 Ar_1 は、置換もしくは非置換の(3~30員)ヘテロアリール、または置換もしくは非置換の(C6-C30)アリールを表し；

【0014】

L_1 は、単結合、置換もしくは非置換の(C6-C30)アリーレン、または置換もしくは非置換の(3~30員)ヘテロアリーレンを表し；

【0015】

環Aは、

【0016】

【化2】



【0017】

を表し；環Bは、

【0018】

【化3】



【0019】

を表し；

【0020】

Yは、O、S、N(R_6)、またはC(R_4)(R_5)を表し；Xは、O、S、N(R_6)、またはC(R_7)(R_8)を表すが；但し、X及びYの両方が同時にN(R_6)であることはできないものとし；

【0021】

$R_1 \sim R_3$ は、それぞれ独立して、水素、重水素、ハロゲン、シアノ、カルボキシ、ニトロ、ヒドロキシ、置換もしくは非置換の(C1-C30)アルキル、置換もしくは非置

10

20

30

40

50

換の (C₃ - C₃₀) シクロアルキル、置換もしくは非置換の (C₃ - C₃₀) シクロアルケニル、置換もしくは非置換の (3 ~ 7 員) ヘテロシクロアルキル、置換もしくは非置換の (C₆ - C₃₀) アリール、置換もしくは非置換の (3 ~ 30 員) ヘテロアリール、-NR₉R₁₀、または -SiR₁₁R₁₂R₁₃ を表すか、あるいは隣接する置換基 (複数可) と結合して、置換または非置換の (C₃ - C₃₀) の、単環式または多環式の脂環式環または芳香環を形成してもよく；

【0022】

R₄ ~ R₁₃ は、それぞれ独立して、水素、重水素、ハロゲン、置換もしくは非置換の (C₁ - C₃₀) アルキル、置換もしくは非置換の (C₆ - C₃₀) アリール、置換もしくは非置換の (3 ~ 30 員) ヘテロアリール、置換もしくは非置換の (C₃ - C₃₀) シクロアルキル、置換もしくは非置換の (5 ~ 7 員) ヘテロシクロアルキル、置換もしくは非置換の (C₆ - C₃₀) アリール (C₁ - C₃₀) アルキル、-NR₁₄R₁₅、-SiR₁₆R₁₇R₁₈、シアノ、ニトロ、またはヒドロキシを表すか、あるいは隣接する置換基 (複数可) と結合して、置換または非置換の (C₃ - C₃₀) の、単環式または多環式の脂環式環または芳香環を形成してもよく；

10

【0023】

R₁₄ ~ R₁₈ は、R₄ ~ R₁₃ と同じ定義を有し；

【0024】

脂環式環または芳香環の炭素原子 (複数可) は、窒素、酸素、及び硫黄から選択される少なくとも1つのヘテロ原子で置き換えられてもよく；

20

【0025】

ヘテロアリール (ヘテロアリーレン) 及びヘテロシクロアルキルは、B、N、O、S、P (=O)、Si、及びPから選択される少なくとも1つのヘテロ原子を含有し；

【0026】

a、b、及びcは、それぞれ独立して、1 ~ 4の整数を表し；a、b、またはcは、2以上の整数を表し、R₁、R₂、またはR₃の各々は、同じかまたは異なってもよいが；

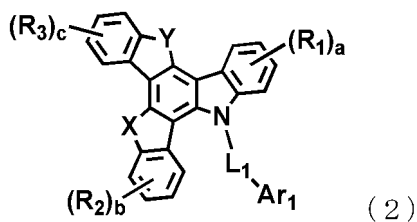
【0027】

但し、上記式1の化合物は、以下の式2によって表され、R₁ ~ R₃のうちのいずれか1つと隣接する置換基 (複数可) との間に形成されてもよい環は、置換されたナフタレン環ではないものとする。

30

【0028】

【化4】



【発明の効果】

40

【0029】

本開示の有機エレクトロルミネッセンス化合物は、従来の化合物と比べて、より高い色純度、より長い寿命、及びより良好な発光効率を提供することができる。従って、本開示の化合物を発光層のホスト材料として使用する有機エレクトロルミネッセンス素子は、より高い色純度、より低い駆動電圧、より長い寿命、より良好な発光効率、特に、より良好な電流効率及び改善された電力消費を示すことができる。

【発明を実施するための最良の形態】

【0030】

これ以降、本開示を詳細に記載する。しかしながら、以下の記載は、本開示を説明することを意図するものであって、決して本開示の範囲を制限することを意味するものではな

50

い。

【0031】

本開示は、上記式1の有機エレクトロルミネッセンス化合物、それを含む有機エレクトロルミネッセンス材料、及び該材料を含む有機エレクトロルミネッセンス素子を提供する。

【0032】

本明細書において、「(C1 - C30)アルキル(アルキレン)」は、1~30個、好ましくは1~20個、より好ましくは1~10個の炭素原子を有する直鎖または分岐鎖のアルキル(アルキレン)を示し、メチル、エチル、n-プロピル、イソプロピル、n-ブチル、イソブチル、tert-ブチル等を含む。「(C2 - C30)アルケニル」は、2~30個、好ましくは2~20個、より好ましくは、2~10個の炭素原子を有する直鎖または分岐鎖のアルケニルを示し、ビニル、1-プロペニル、2-プロペニル、1-ブテニル、2-ブテニル、3-ブテニル、2-メチル-2-ブテニル等を含む。「(C2 - C30)アルキニル」は、2~30個、好ましくは2~20個、より好ましくは、2~10個の炭素原子を有する直鎖または分岐鎖のアルキニルを示し、エチニル、1-プロピニル、2-プロピニル、1-ブチニル、2-ブチニル、3-ブチニル、1-メチル-2-ペンチニル等を含む。「(C3 - C30)シクロアルキル」は、3~30個、好ましくは3~20個、より好ましくは3~7個の炭素原子を有する単環式または多環式の炭化水素を意味し、シクロプロピル、シクロブチル、シクロペンチル、シクロヘキシル等を含む。「(3~7員)ヘテロシクロアルキル」は、B、N、O、S、P(=O)、Si、及びPからなる群から選択される少なくとも1つのヘテロ原子、好ましくは、O、S、及びNを含む、3~7個、好ましくは5~7個の環骨格原子を有するシクロアルキルを意味し、テトラヒドロフラン、ピロリジン、チオラン、テトラヒドロピラン等を含む。さらに、「(C6 - C30)アリール(アリーレン)」は、芳香族炭化水素に由来する、6~30個、好ましくは6~20個、より好ましくは6~15個の環骨格炭素原子を有する単環式環または縮合環を意味し、フェニル、ビフェニル、ターフェニル、ナフチル、フルオレニル、フェナントレニル、アントラセニル、インデニル、トリフェニレニル、ピレニル、テトラセニル、ペリレニル、クリセニル、ナフタセニル、フルオランテニル等を含む。「(3~30員)ヘテロアリール(ヘテロアリーレン)」は、B、N、O、S、P(=O)、Si、及びPからなる群から選択される少なくとも1つ、好ましくは1~4個のヘテロ原子を含む、3~30個、好ましくは3~20個、より好ましくは3~15個の環骨格原子を有するアリール基を示し；単環式環、または少なくとも1つのベンゼン環と縮合した縮合環であってもよく；部分的に飽和していてもよく、少なくとも1つのヘテロアリールまたはアリール基を単結合(複数可)によってヘテロアリール基に結合させることによって形成されたものであってもよく；単環式環型ヘテロアリール、例えば、フリル、チオフエニル、ピロリル、イミダゾリル、ピラゾリル、チアゾリル、チアジアゾリル、イソチアゾリル、イソオキサゾリル、オキサゾリル、オキサジアゾリル、トリアジニル、テトラジニル、トリアゾリル、テトラゾリル、フラザニル、ピリジニル、ピラジニル、ピリミジニル、ピリダジニル等、及び縮合環型ヘテロアリール、例えば、ベンゾフラニル、ベンゾチオフエニル、イソベンゾフラニル、ジベンゾフラニル、ジベンゾチオフエニル、ベンゾナフトフラニル、ベンゾナフトフラニルチオフエニル、ベンゾイミダゾリル、ベンゾチアゾリル、ベンゾイソチアゾリル、ベンゾイソオキサゾリル、ベンゾオキサゾリル、イソインドリル、インドリル、インダゾリル、ベンゾチアジアゾリル、キノリル、イソキノリル、シンノリニル、キナゾリニル、キノキサリニル、カルバゾリル、ベンゾカルバゾリル、ナフチリジニル、フェノキサジニル、カルバゾリル、ベンゾジオキサソリル等を含む。さらに、「ハロゲン」は、F、Cl、Br、及びIを含む。

【0033】

本明細書において、「置換または非置換の」という表現における「置換」は、特定の官能基の水素原子が、別の原子または基、すなわち置換基で置き換えられていることを意味する。本開示の式1において、Ar₁、L₁、X、Y、及びR₁~R₃における置換(C

10

20

30

40

50

1 - C 3 0) アルキル、置換 (C 3 - C 3 0) シクロアルキル、置換 (C 3 - C 3 0) シクロアルケニル、置換 (3 ~ 7 員) ヘテロシクロアルキル、置換 (C 6 - C 3 0) アリール (アリーレン)、置換 (3 ~ 3 0 員) ヘテロアリール (ヘテロアリーレン)、置換 (C 6 - C 3 0) アリール (C 1 - C 3 0) アルキル、または置換 (C 3 - C 3 0) の、単環式もしくは多環式の脂環式環もしくは芳香環の置換基は、それぞれ独立して、重水素、ハロゲン、シアノ、カルボキシ、ニトロ、ヒドロキシ、(C 1 - C 3 0) アルキル、ハロ (C 1 - C 3 0) アルキル、(C 2 - C 3 0) アルケニル、(C 2 - C 3 0) アルキニル、(C 1 - C 3 0) アルコキシ、(C 1 - C 3 0) アルキルチオ、(C 3 - C 3 0) シクロアルキル、(C 3 - C 3 0) シクロアルケニル、(3 ~ 7 員) ヘテロシクロアルキル、(C 6 - C 3 0) アリールオキシ、(C 6 - C 3 0) アリールチオ、(C 6 - C 3 0) アリールで置換されていないかまたは置換された (3 ~ 3 0 員) ヘテロアリール、(3 ~ 3 0 員) ヘテロアリールで置換されていないかまたは置換された (C 6 - C 3 0) アリール、トリ (C 1 - C 3 0) アルキルシリル、トリ (C 6 - C 3 0) アリールシリル、ジ (C 1 - C 3 0) アルキル (C 6 - C 3 0) アリールシリル、(C 1 - C 3 0) アルキルジ (C 6 - C 3 0) アリールシリル、アミノ、モノまたはジ (C 1 - C 3 0) アルキルアミノ、モノまたはジ (C 6 - C 3 0) アリールアミノ、(C 1 - C 3 0) アルキル (C 6 - C 3 0) アリールアミノ、(C 1 - C 3 0) アルキルカルボニル、(C 1 - C 3 0) アルコキシカルボニル、(C 6 - C 3 0) アリールカルボニル、ジ (C 6 - C 3 0) アリールボロニル、ジ (C 1 - C 3 0) アルキルボロニル、(C 1 - C 3 0) アルキル (C 6 - C 3 0) アリールボロニル、(C 6 - C 3 0) アリール (C 1 - C 3 0) アルキル、及び (C 1 - C 3 0) アルキル (C 6 - C 3 0) アリールからなる群から選択される少なくとも1つである。

10

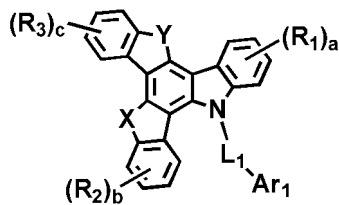
20

【 0 0 3 4 】

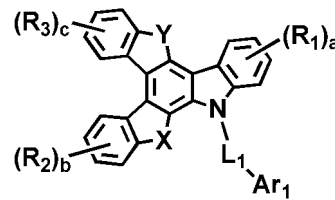
好ましくは、式 1 の化合物は、以下の式 2 ~ 5 のいずれか 1 つによって表されてもよく、

【 0 0 3 5 】

【 化 5 】

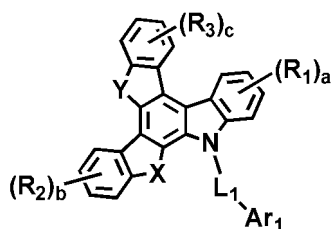


(2)

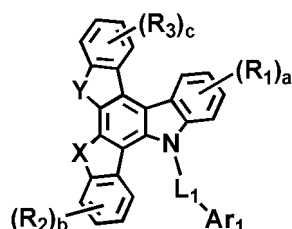


(3)

30



(4)



(5)

40

【 0 0 3 6 】

式中、Ar₁、L₁、X、Y、R₁ ~ R₃、a、b、及びcは、式1に定義される通りである。

【 0 0 3 7 】

Ar₁は、好ましくは、置換もしくは非置換の(5 ~ 20員)ヘテロアリール、または置換もしくは非置換の(C6 - C20)アリールを表してもよい。Ar₁の置換された基の置換基は、(C6 - C20)アリール、(6 ~ 20員)ヘテロアリール、またはモノモ

50

しくはジ - (C₆ - C₂₀)アリアルアミノであってもよい。本開示の一実施形態によれば、Ar₁は、置換または非置換の窒素含有(5~20員)ヘテロアリアルを表してもよく;具体的には、置換または非置換のトリアジニル、置換または非置換のピリミジニル、置換または非置換のピリジニル、置換または非置換のピラジニル、置換または非置換のキノリル、置換または非置換のイソキノリル、置換または非置換のキナゾリニル、置換または非置換のナフチリジニル、及び置換または非置換のキノキサリニルからなる群から選択されてもよい。上記実施形態において、Ar₁の置換された基の置換基は、好ましくは(C₆ - C₂₀)アリアルまたは(5~20員)ヘテロアリアルであってもよく、具体的には、フェニル、ナフチル、ピフェニル、ベンゾフラニル、ベンゾチオフエニル、ジベンゾフラニル、及びジベンゾチオフエニルから選択される少なくとも1つであってもよい。

10

【0038】

L₁は、好ましくは、単結合、置換もしくは非置換の(C₆ - C₂₀)アリーレン、または置換もしくは非置換の(5~20員)ヘテロアリーレン;より好ましくは、単結合、または置換もしくは非置換の(C₆ - C₂₀)アリーレンを表してもよい。具体的には、L₁は、単結合、置換もしくは非置換のフェニレン、置換もしくは非置換のピフェニレン、または置換もしくは非置換のナフチレンを表してもよい。

【0039】

好ましくは、X及びYは、それぞれ独立して、O、S、及びN(R₆)から選択されてもよいが;但し、X及びYの両方が同時にN(R₆)であることはできないものとする。本開示の一実施形態によれば、X及びYは、それぞれ独立して、O及びSから選択されてもよい。本開示の別の実施形態によれば、X及びYは、それぞれ独立して、O及びSから選択されてもよく、X及びYのうちの少なくとも1つは、Sであってもよい。R₆は、好ましくは、置換もしくは非置換の(C₆ - C₃₀)アリアル、具体的には、置換もしくは非置換のフェニル、置換もしくは非置換のナフチル、または置換もしくは非置換のピフェニルを表してもよい。

20

【0040】

R₁~R₃は、それぞれ独立して、好ましくは、水素、重水素、置換もしくは非置換の(C₁ - C₂₀)アルキル、置換もしくは非置換の(C₃ - C₂₀)シクロアルキル、置換もしくは非置換の(C₆ - C₃₀)アリアル、置換もしくは非置換の(3~30員)ヘテロアリアル、-NR₉R₁₀、または-SiR₁₁R₁₂R₁₃を表してもよいが、あるいは隣接する置換基(複数可)と結合して、置換または非置換の(C₃ - C₃₀)の、単環式または多環式の脂環式環または芳香環を形成してもよい。より好ましくは、R₁~R₃の定義における単環式または多環式の芳香環は、ナフタレン環及びフェナントレン環ではない。R₉~R₁₃は、好ましくは、置換または非置換の(C₆ - C₃₀)アリアルを表してもよい。具体的には、R₁~R₃は、水素を表してもよい。

30

【0041】

本開示の一実施形態によれば、Ar₁は、置換もしくは非置換の(5~20員)ヘテロアリアル、または置換もしくは非置換の(C₆ - C₂₀)アリアルを表し;L₁は、単結合、置換もしくは非置換の(C₆ - C₂₀)アリーレン、または置換もしくは非置換の(5~20員)ヘテロアリーレンを表し;R₁~R₃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 - C₂₀)アルキル、置換もしくは非置換の(C₃ - C₂₀)シクロアルキル、置換もしくは非置換の(C₆ - C₃₀)アリアル、置換もしくは非置換の(3~30員)ヘテロアリアル、-NR₉R₁₀、または-SiR₁₁R₁₂R₁₃を表すか、あるいは隣接する置換基(複数可)と結合して、置換または非置換の(C₃ - C₃₀)の、単環式または多環式の脂環式環または芳香環を形成してもよい。

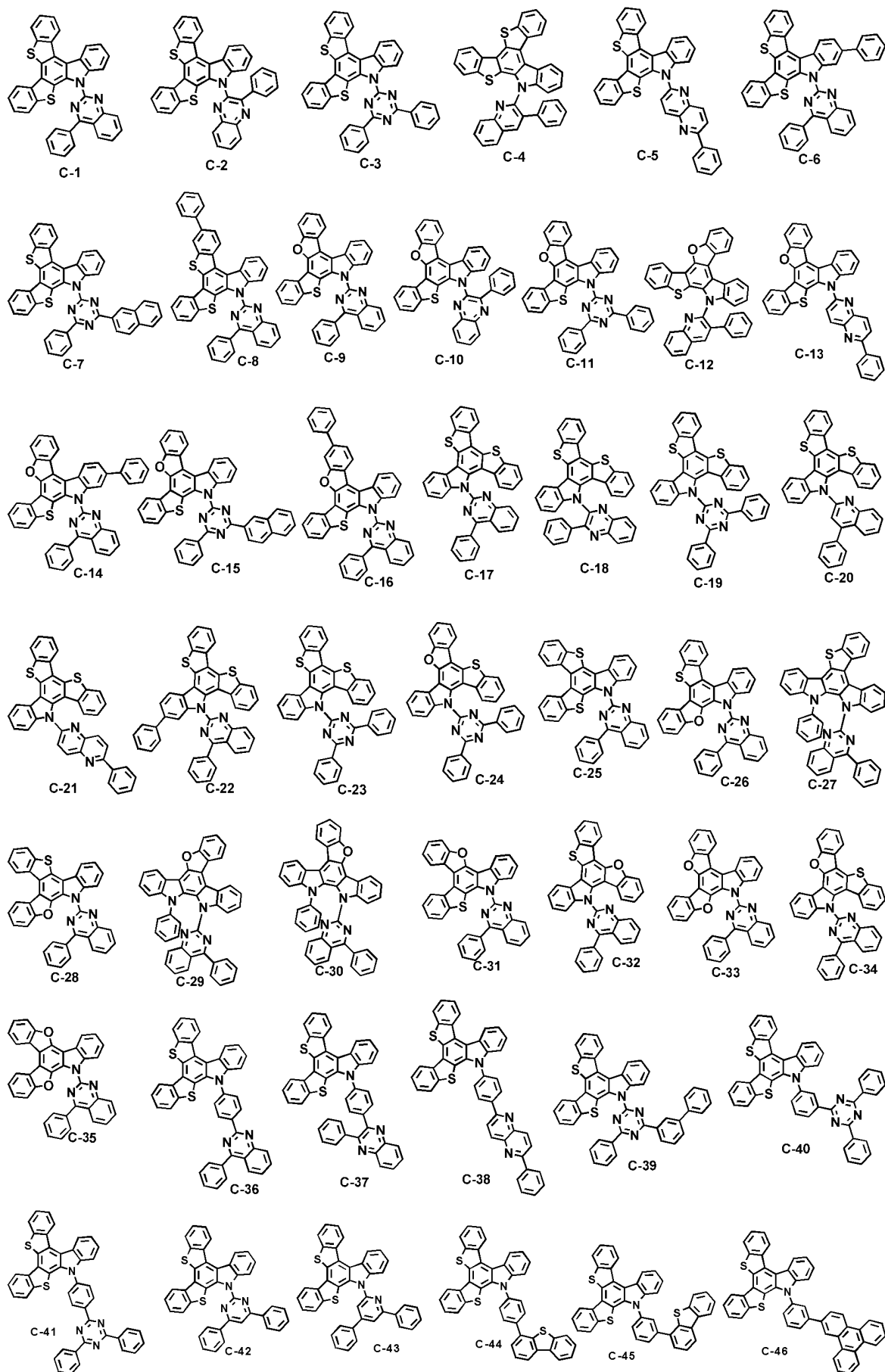
40

【0042】

式1によって表される化合物は、以下を含むが、これらに限定されない。

【0043】

【化 6 - 1】



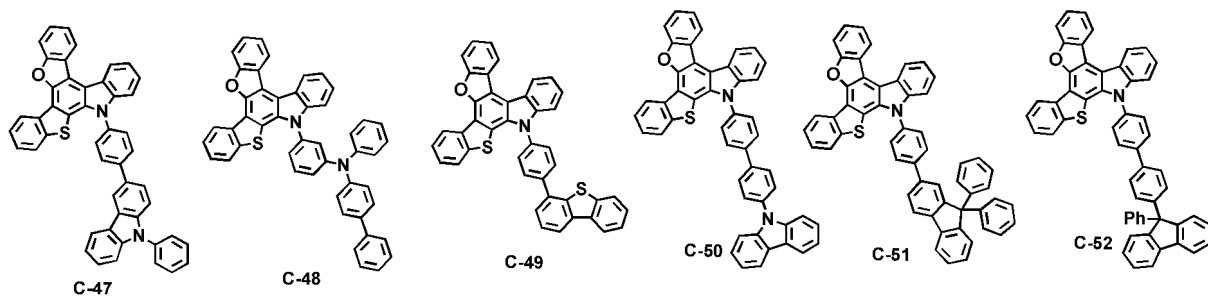
10

20

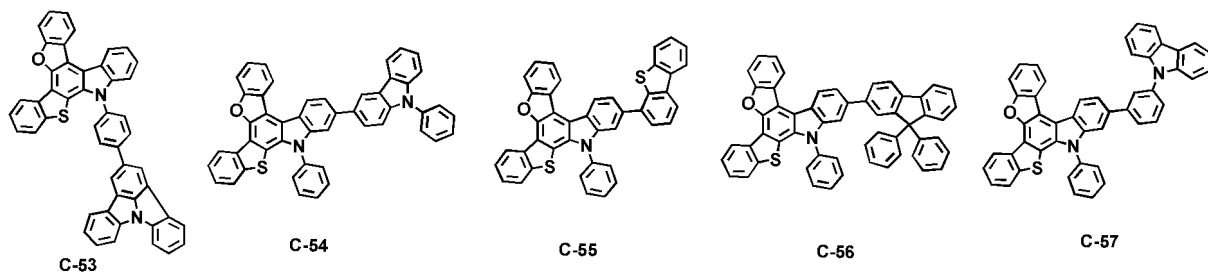
30

40

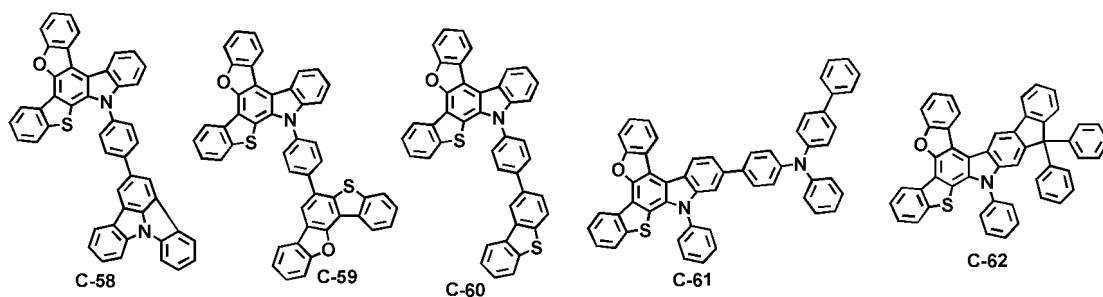
【化 6 - 2】



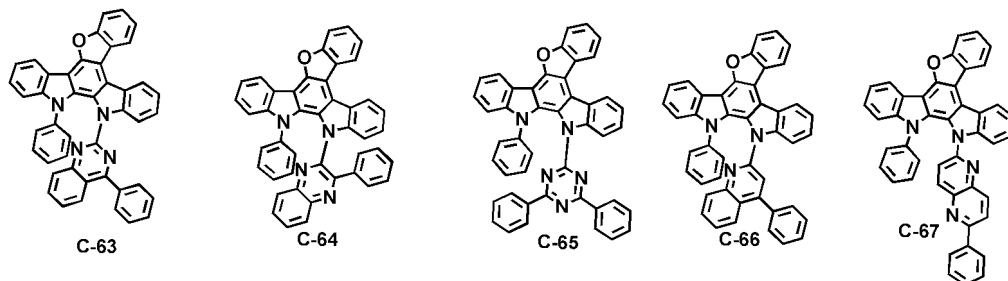
10



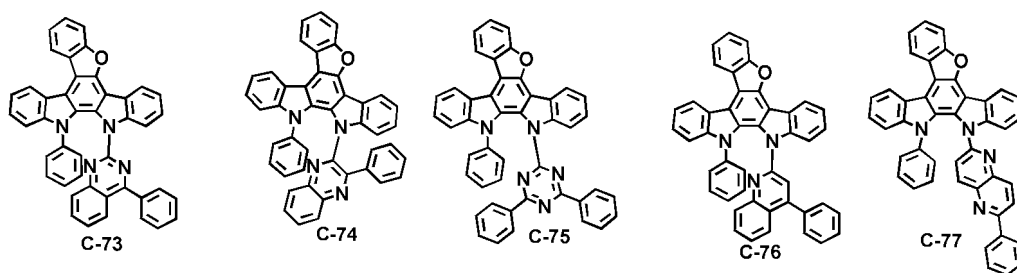
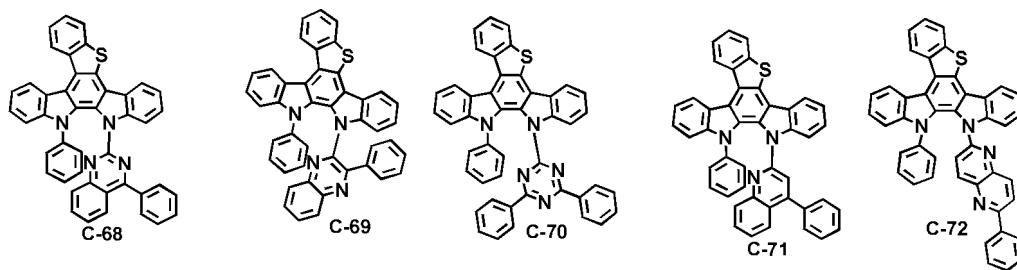
20



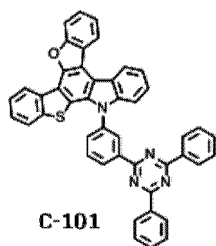
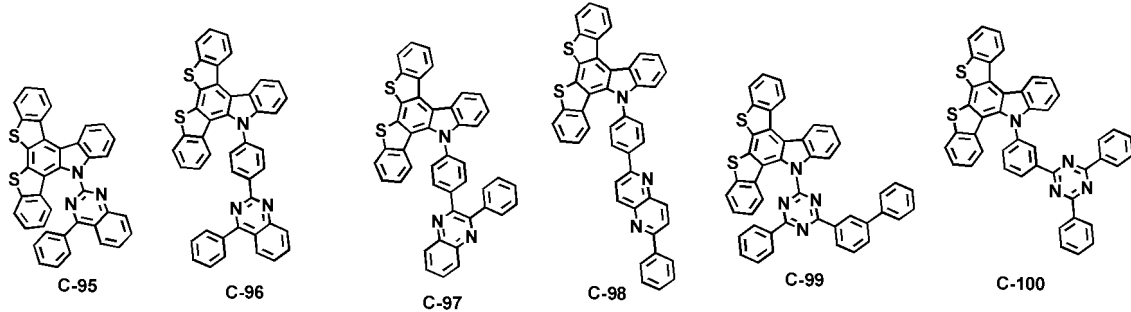
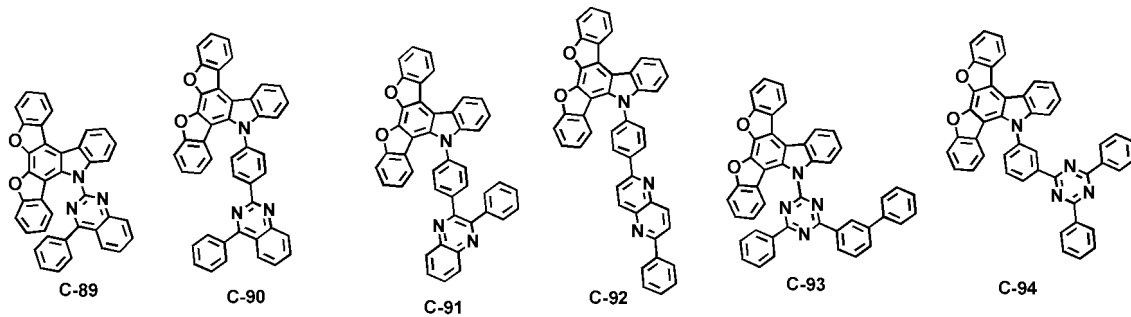
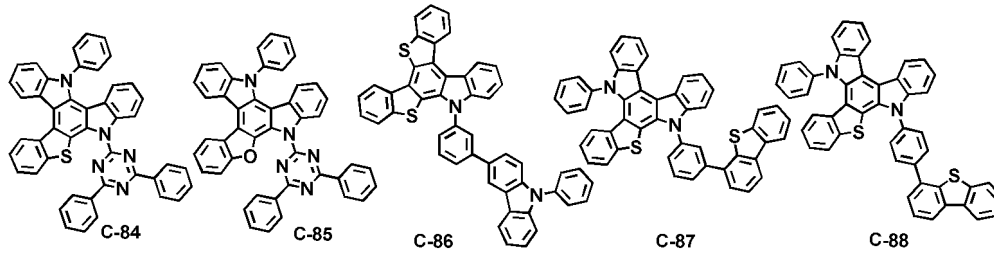
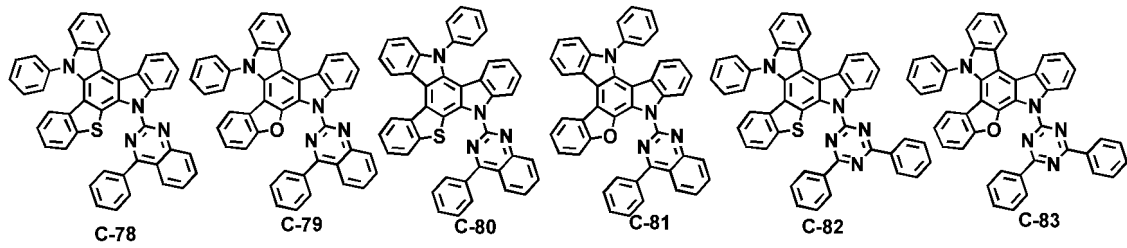
30



40



【化 6 - 3】



10

20

30

40

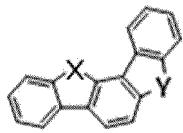
【0046】

本開示の有機エレクトロルミネッセンス化合物は、例えば、臭素化、鈴木反応、ブッフバルト・ハートウィッグ反応、ウルマン反応等の、当業者に既知の合成方法によって調製することができる。例えば、式1の化合物は、以下の通りに調製することができる：式Aによって表される5環縮合化合物を調製した後、式Aの化合物を臭素化に供し、式Bによって表される化合物を得る；式Bの化合物を、インデン環、インドール環、ベンゾフラン環、またはベンゾチオフェン環と縮合して、式1の母核構造を得る；次いで、 $^* - L_1 - Ar_1$ を調製した母核構造に連結し、それによって式1の化合物を得る。

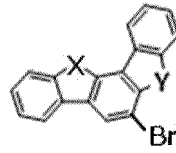
【0047】

50

【化 7】



(A)



(B)

【0048】

式 A 及び B において、X 及び Y は、それぞれ独立して、O、S、N (R₆)、C (R₄) (R₅)、及び C (R₇) (R₈) から選択されてもよい。

10

【0049】

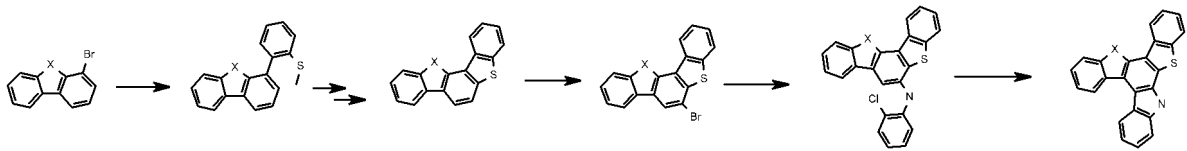
前述の本開示の化合物を調製するための方法は、以下の反応スキーム 1 ~ 4 に例示することができる。

【0050】

[反応スキーム 1]

【0051】

【化 8】



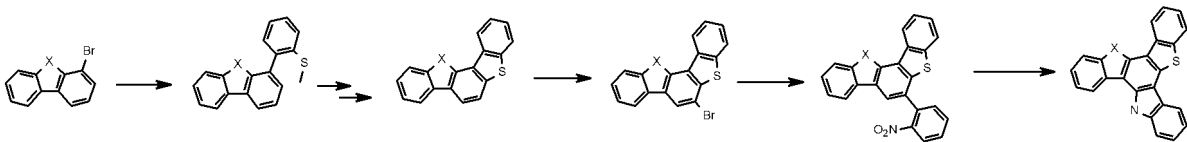
20

【0052】

[反応スキーム 2]

【0053】

【化 9】



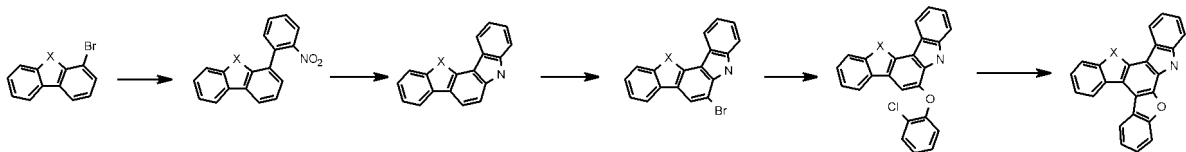
30

【0054】

[反応スキーム 3]

【0055】

【化 10】



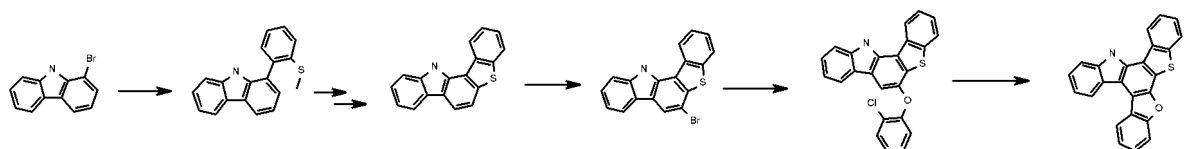
40

【0056】

[反応スキーム 4]

【0057】

【化 11】



【0058】

50

上記反応スキーム 1 ~ 4 において、X は、O、S、N (R₆)、及び C (R₇) (R₈) から選択することができる。

【0059】

本開示の別の態様によれば、式 1 の有機エレクトロルミネッセンス化合物を含む有機エレクトロルミネッセンス材料と、該材料を含む有機エレクトロルミネッセンス素子とが提供される。

【0060】

材料は、式 1 の有機エレクトロルミネッセンス化合物から選択される 1 つ以上の化合物を含んでもよい。材料は、有機エレクトロルミネッセンス材料のために含まれてきた従来の化合物 (複数可) をさらに含んでもよい。有機エレクトロルミネッセンス材料は、好ましくは、ホスト材料であってもよい。有機エレクトロルミネッセンス材料がホスト材料として使用される場合、本開示の式 1 の化合物以外の第 2 のホスト材料をさらに含んでもよく、その詳細については後述する。

10

【0061】

本開示の有機エレクトロルミネッセンス素子は、第 1 の電極と、第 2 の電極と、第 1 の電極と第 2 の電極との間に配置された少なくとも 1 つの有機層とを備えてもよく、該有機層は、式 1 の少なくとも 1 つの化合物を含んでもよい。

【0062】

第 1 及び第 2 の電極のうち的一方は陽極であってもよく、他方は陰極であってもよい。有機層は、発光層を備えてもよく、正孔注入層、正孔輸送層、電子阻止層、電子輸送層、電子注入層、中間層、電子バッファ層、及び正孔阻止層から選択される少なくとも 1 つの層をさらに備えてもよい。

20

【0063】

本開示の式 1 の有機エレクトロルミネッセンス化合物は、発光層内のホスト材料として含まれてもよい。好ましくは、発光層は、少なくとも 1 つのドーパントをさらに含んでもよい。好ましくは、発光層は、本開示の式 1 の有機エレクトロルミネッセンス化合物 (第 1 のホスト材料) に加えて、第 2 のホスト材料を含んでもよい。第 1 のホスト材料と第 2 のホスト材料との重量比は、駆動電圧、寿命、及び発光効率を考慮すると、1 : 99 ~ 99 : 1、及び好ましくは 30 : 70 ~ 70 : 30 の範囲である。

【0064】

本開示の別の態様によれば、有機エレクトロルミネッセンス素子を調製するための材料が提供される。材料は、本開示の化合物を含む。材料は、有機エレクトロルミネッセンス素子の発光層を調製するための材料であってもよい。本開示の化合物が、有機エレクトロルミネッセンス素子の発光層を調製するための材料に含まれる場合、本開示の化合物は、ホスト材料として含まれてもよい。本開示の化合物がホスト材料として含まれる場合、材料は、第 2 のホスト材料をさらに含んでもよい。本開示の化合物と第 2 のホスト材料との重量比は、駆動電圧、寿命、及び発光効率を考慮すると、1 : 99 ~ 99 : 1、及び好ましくは 30 : 70 ~ 70 : 30 の範囲である。

30

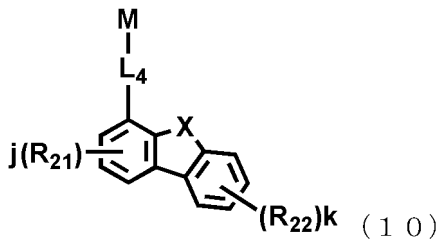
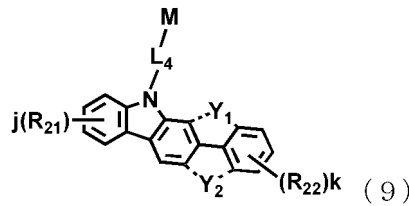
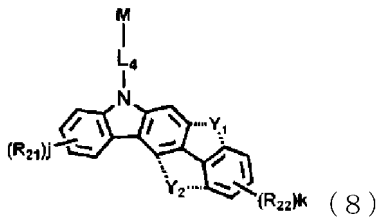
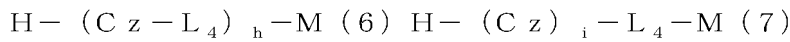
【0065】

当該技術分野で既知のリン光ホスト材料が、第 2 のホスト材料として使用されてもよい。下の式 6 ~ 10 の化合物からなる群から選択される化合物は、駆動電圧、寿命、及び発光効率を考慮すると、第 2 のホスト材料として好ましい。

40

【0066】

【化 1 2】



10

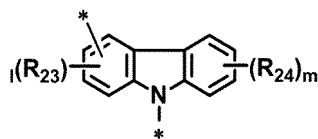
【 0 0 6 7】

式中、 C_z は、以下の構造を表し：

【 0 0 6 8】

20

【化 1 3】



【 0 0 6 9】

L_4 は、単結合、置換もしくは非置換の ($\text{C}_6 - \text{C}_{30}$) アリーレン、または置換もしくは非置換の ($5 \sim 30$ 員) ヘテロアリーレンを表し； M は、置換もしくは非置換の ($\text{C}_6 - \text{C}_{30}$) アリール、または置換もしくは非置換の ($5 \sim 30$ 員) ヘテロアリールを表し； Y_1 及び Y_2 は、それぞれ独立して、 $-\text{O}-$ 、 $-\text{S}-$ 、 $-\text{N}(\text{R}_{31})-$ 、または $-\text{C}(\text{R}_{32})(\text{R}_{33})-$ を表すが、但し、 Y_1 及び Y_2 の両方が同時に存在することはできないものとし； X は、 O または S を表し； $\text{R}_{21} \sim \text{R}_{24}$ は、それぞれ独立して、水素、重水素、ハロゲン、シアノ、置換もしくは非置換の ($\text{C}_1 - \text{C}_{30}$) アルキル、置換もしくは非置換の ($\text{C}_3 - \text{C}_{30}$) シクロアルキル、置換もしくは非置換の ($\text{C}_6 - \text{C}_{30}$) アリール、置換もしくは非置換の ($5 \sim 30$ 員) ヘテロアリール、または $\text{R}_{25} \text{R}_{26} \text{R}_{27} \text{Si}$ を表すか；あるいは隣接する置換基 (複数可) と結合して、その炭素原子 (複数可) が窒素、酸素、及び硫黄から選択される少なくとも 1 つのヘテロ原子で置き換えられてもよい、($\text{C}_3 - \text{C}_{30}$) の単環式または多環式の脂環式環または芳香環を形成してもよいが；但し、式 6 の h または式 7 の i が 1 である場合、 R_{23} または R_{24} は、式 8 及び 9 の Y_1 または Y_2 を含有する環を形成せず、式 10 の R_{22} は、式 8 及び 9 の R_{21} に連結されたインドール環を形成しないものとし； $\text{R}_{25} \sim \text{R}_{27}$ は、それぞれ独立して、置換もしくは非置換の ($\text{C}_1 - \text{C}_{30}$) アルキル、または置換もしくは非置換の ($\text{C}_6 - \text{C}_{30}$) アリールを表し； $\text{R}_{31} \sim \text{R}_{33}$ は、それぞれ独立して、水素、置換もしくは非置換の ($\text{C}_1 - \text{C}_{30}$) アルキル、置換もしくは非置換の ($\text{C}_6 - \text{C}_{30}$) アリール、または置換もしくは非置換の ($5 \sim 30$ 員) ヘテロアリールを表すか；あるいは隣接する置換基 (複数可) と結合して、その炭素原子 (複数可) が窒素、酸素、及び硫黄から選択される少なくとも 1 つのヘテロ原子で置き換えられてもよい、($\text{C}_5 - \text{C}_{30}$) の単環式または多環式の脂環式環または芳香環を形成してもよく； R_{32} 及び R_{33} は、同じかまたは異なってもよく；ヘテロアリール (ヘテロアリーレン) は、 B 、 N 、 O 、 S 、

30

40

50

P (= O)、S i、及び P から選択される少なくとも 1 つのヘテロ原子を含有し；h 及び i は、それぞれ独立して、1 ~ 3 の整数を表し；j、k、l、及び m は、それぞれ独立して、0 ~ 4 の整数を表し；h、i、j、k、l、または m が 2 以上の整数である場合、(C_z-L₄) の各々、(C_z) の各々、R_{2 1} の各々、R_{2 2} の各々、R_{2 3} の各々、または R_{2 4} の各々は、同じかまたは異なってもよい。

【0070】

好ましくは、式 6 ~ 10 において、M は、置換または非置換の窒素含有 (6 ~ 20 員) ヘテロアリアルを表してもよい。好ましくは、M の置換された基の置換基は、(C₁ ~ C₂₀) アルキル；(C₁ - C₁₀) アルキル、トリ (C₆ - C₁₃) アリアルシリル、または (6 ~ 13 員) ヘテロアリアルで置換されていないかもしくは置換された (C₆ - C₂₄) アリアル；あるいは (C₁ - C₁₀) アルキル、トリ (C₆ - C₁₃) アリアルシリル、または (C₆ - C₂₄) アリアルで置換されていないかもしくは置換された (6 ~ 20 員) ヘテロアリアル；あるいはトリ (C₆ - C₂₀) アリアルシリルであってもよい。具体的には、M は、置換もしくは非置換のピリジル、置換もしくは非置換のピリミジニル、置換もしくは非置換のトリアジニル、置換もしくは非置換のピラジニル、置換もしくは非置換のキノリル、置換もしくは非置換のイソキノリル、置換もしくは非置換のキナゾリニル、置換もしくは非置換のキノキサリニル、置換もしくは非置換のナフチリジニル、または置換もしくは非置換のフェナントロリニルを表してもよい。

10

【0071】

好ましくは、式 6 及び 7 の R_{2 3} 及び R_{2 4} のうちの少なくとも 1 つ、または式 8 ~ 10 の R_{2 1} 及び R_{2 2} のうちの少なくとも 1 つは、置換もしくは非置換のカルバゾリル、置換もしくは非置換のベンゾカルバゾリル、置換もしくは非置換のジベンゾチオフエニル、置換もしくは非置換のベンゾナフトチオフエニル、置換もしくは非置換のジベンゾフラニル、置換もしくは非置換のベンゾナフトフラニル、置換もしくは非置換のカルバゾリルで置換された (C₆ - C₁₈) アリアル、置換もしくは非置換のベンゾカルバゾリルで置換された (C₆ - C₁₈) アリアル、置換もしくは非置換のジベンゾチオフエニルで置換された (C₆ - C₁₈) アリアル、置換もしくは非置換のベンゾナフトチオフエニルで置換された (C₆ - C₁₈) アリアル、置換もしくは非置換のジベンゾフラニルで置換された (C₆ - C₁₈) アリアル、または置換もしくは非置換のベンゾナフトフラニルで置換された (C₆ - C₁₈) アリアルを表してもよい。M がアリアルである場合、R_{2 3} 及び R_{2 4} のうちの少なくとも 1 つ、もしくは R_{2 1} 及び R_{2 2} のうちの少なくとも 1 つは、置換もしくは非置換の窒素含有 (6 ~ 20 員) ヘテロアリアルを表してもよいか；または置換基として、置換もしくは非置換の窒素含有 (6 ~ 20 員) ヘテロアリアルを有してもよい。具体的には、置換もしくは非置換の窒素含有ヘテロアリアルは、置換もしくは非置換のピリジル、置換もしくは非置換のピリミジニル、置換もしくは非置換のトリアジニル、置換もしくは非置換のピラジニル、置換もしくは非置換のキノリル、置換もしくは非置換のイソキノリル、置換もしくは非置換のキナゾリニル、置換もしくは非置換のキノキサリニル、置換もしくは非置換のナフチリジニル、または置換もしくは非置換のフェナントロリニルを表してもよい。

20

30

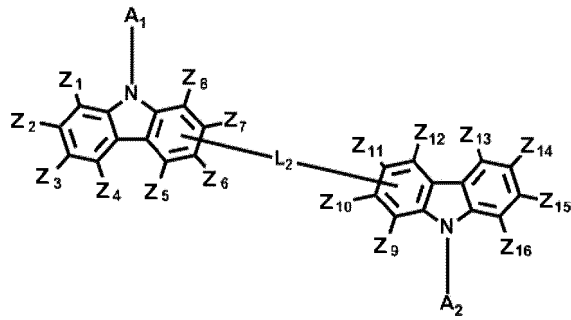
【0072】

具体的には、第 2 の宿主材料は、上記式 6 によって、より具体的には、以下の式 11 によって表されてもよい。

40

【0073】

【化 1 4】



(11)

10

【0074】

式中、 A_1 及び A_2 は、それぞれ独立して、置換または非置換の (C6 - C30) アリールを表すが；但し、 A_1 及び A_2 の置換された基の置換基は、窒素含有ヘテロアリールではないものとし；

【0075】

L_2 は、単結合または置換もしくは非置換の (C6 - C30) アリーレンを表し；

【0076】

$Z_1 \sim Z_{16}$ は、それぞれ独立して、水素、重水素、ハロゲン、シアノ、置換もしくは非置換の (C1 - C30) アルキル、置換もしくは非置換の (C2 - C30) アルケニル、置換もしくは非置換の (C2 - C30) アルキニル、置換もしくは非置換の (C3 - C30) シクロアルキル、置換もしくは非置換の (C6 - C60) アリール、置換もしくは非置換の (3 ~ 30員) ヘテロアリール、置換もしくは非置換のトリ (C1 - C30) アルキルシリル、置換もしくは非置換のトリ (C6 - C30) アリールシリル、置換もしくは非置換のジ (C1 - C30) アルキル (C6 - C30) アリールシリル、置換もしくは非置換の (C1 - C30) アルキルジ (C6 - C30) アリールシリル、または置換もしくは非置換のモノもしくはジ (C6 - C30) アリールアミノを表すが；あるいは隣接する置換基 (複数可) と結合して、置換または非置換の (C3 - C30) の、単環式または多環式の脂環式環または芳香環を形成してもよい。

20

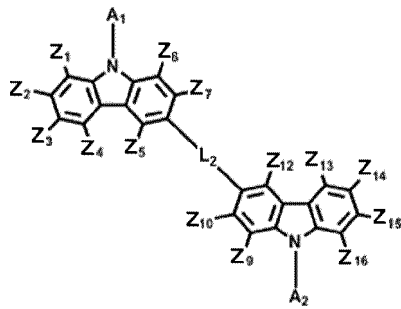
【0077】

本開示の一実施形態によれば、式 11 の化合物は、以下の式 12、13、14、及び 15 のうちのいずれか 1 つによって表されてもよい。

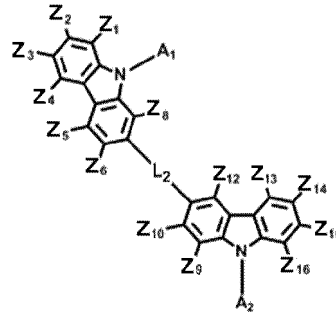
30

【0078】

【化 15】

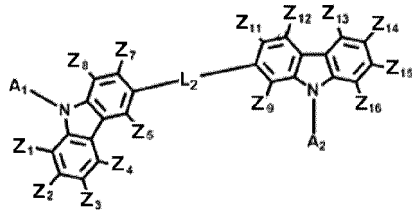


(12)

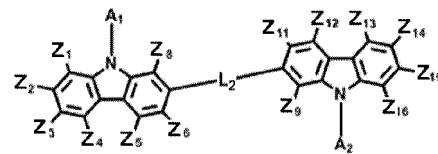


(13)

10



(14)



(15)

【0079】

式中、 A_1 、 A_2 、 L_2 、及び $Z_1 \sim Z_{16}$ は、上記式 11 に定義される通りである。

20

【0080】

A_1 及び A_2 は、それぞれ独立して、好ましくは、置換もしくは非置換の (C6 - C18) アリール、またより好ましくは、シアノ、ハロゲン、(C1 - C6) アルキル、(C6 - C12) アリール、もしくはトリ (C6 - C12) アリールシリルで置換されていないかもしくは置換された (C6 - C18) アリールを表す。具体的には、 A_1 及び A_2 は、それぞれ独立して、置換または非置換のフェニル、置換または非置換のビフェニル、置換または非置換のターフェニル、置換または非置換のナフチル、置換または非置換のフルオレニル、置換または非置換のベンゾフルオレニル、置換または非置換のフェナントレニル、置換または非置換のアントラセニル、置換または非置換のインデニル、置換または非置換のトリトリフェニレニル、置換または非置換のピレニル、置換または非置換のテトラセニル、置換または非置換のペリレニル、置換または非置換のクリセニル、置換または非置換のフェニルナフチル、置換または非置換のナフチルフェニル、及び置換または非置換のフルオランテニルからなる群から選択されてもよい。 A_1 及び A_2 の置換フェニル等の置換された基の置換基は、シアノ、ハロゲン、(C1 - C6) アルキル、(C6 - 12) アリール、またはトリ (C6 - C12) アリールシリルであってもよい。

30

【0081】

$Z_1 \sim Z_{16}$ は、それぞれ独立して、好ましくは、水素、シアノ、置換もしくは非置換の (C1 - C10) アルキル、置換もしくは非置換の (C6 - C20) アリール、置換もしくは非置換の (5 ~ 20 員) ヘテロアリール、または置換もしくは非置換のトリ (C6 - C12) アリールシリルを表す。 $Z_1 \sim Z_{16}$ は、それぞれ独立して、より好ましくは、水素；シアノ；(C1 - C10) アルキル；シアノ、(C1 - C10) アルキル、もしくはトリ (C6 - C12) アリールシリルで置換されていないかもしくは置換された (C6 - C20) アリール；(C1 - C10) アルキル、(C6 - C15) アリール、もしくはトリ (C6 - C12) アリールシリルで置換されていないかもしくは置換された (5 ~ 20 員) ヘテロアリール；または (C1 - C10) アルキルで置換されていないかもしくは置換されたトリ (C6 - C12) アリールシリルを表す。具体的には、 $Z_1 \sim Z_{16}$ は、それぞれ独立して、水素；シアノ；(C1 - C6) アルキル；シアノ、(C1 - C6) アルキル、もしくはトリフェニルシリルで置換されていないかもしくは置換されたフェニル、ビフェニル、ターフェニル、もしくはナフチル；(C1 - C6) アルキル、フェニル、ビフェニル、ナフチル、もしくはトリフェニルシリルで置換されていないかもしくは置

40

50

換されたジベンゾチオフェニルもしくはジベンゾフラニル；または(C 1 - C 6)アルキルで置換されていないかもしくは置換されたトリフェニルシリルを表してもよい。

【0082】

L₂は、好ましくは、単結合、または置換もしくは非置換の(C 6 - C 15)アリーレンを表す。具体的には、L₂は、単結合、置換もしくは非置換のフェニレン、置換もしくは非置換のナフチレン、または置換もしくは非置換のビフェニレンを表してもよい。

【0083】

本開示の一実施形態によれば、A₁及びA₂は、それぞれ独立して、置換もしくは非置換の(C 6 - C 18)アリールをあらわしてもよく；Z₁ ~ Z₁₆は、それぞれ独立して、水素、シアノ、置換もしくは非置換の(C 1 - C 10)アルキル、置換もしくは非置換の(C 6 - C 20)アリール、置換もしくは非置換の(5 ~ 20員)ヘテロアリール、または置換もしくは非置換のトリ(C 6 - C 12)アリールシリルを表してもよく；L₂は、単結合、または置換もしくは非置換の(C 6 - C 15)アリーレンを表してもよい。

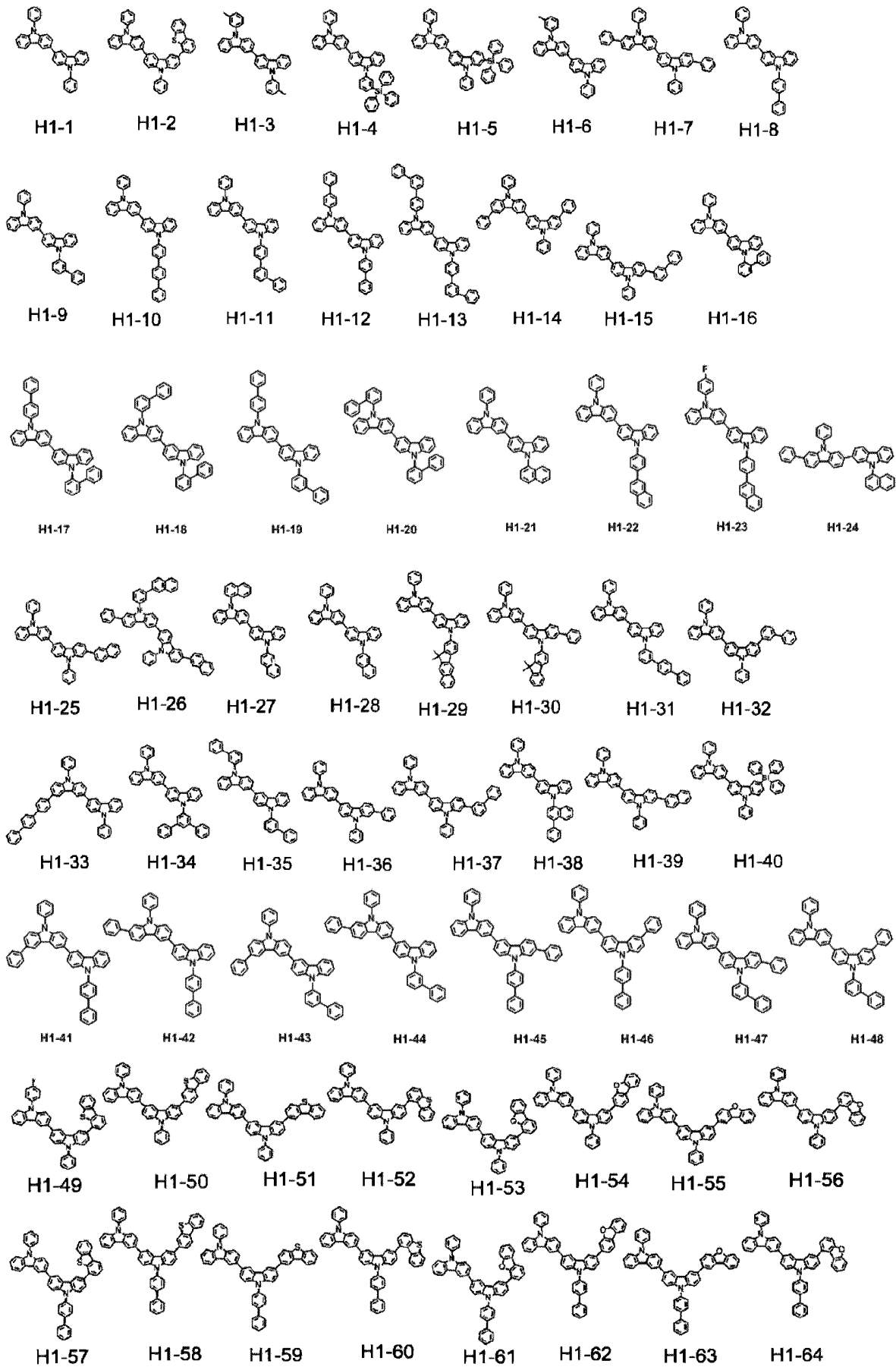
10

【0084】

具体的には、式6 ~ 10によって表される第2の宿主材料の好ましい例は、以下を含むが、これらに限定されない：

【0085】

【化 1 6 - 1】



10

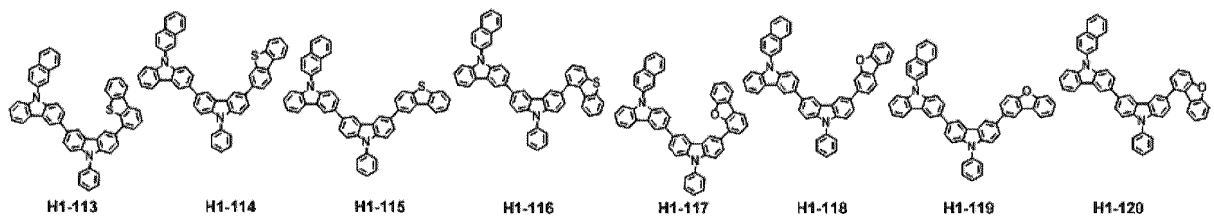
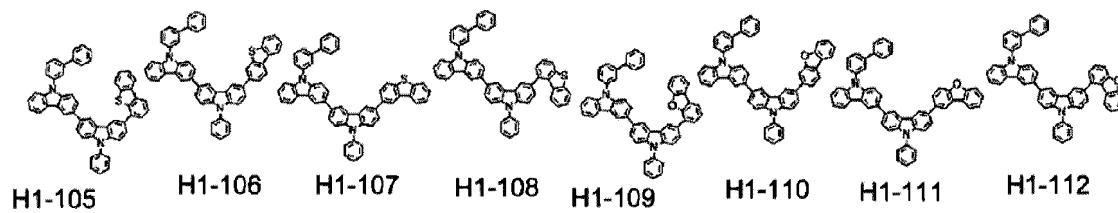
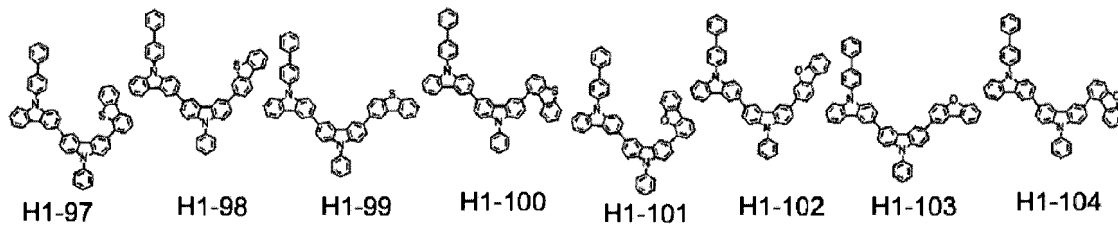
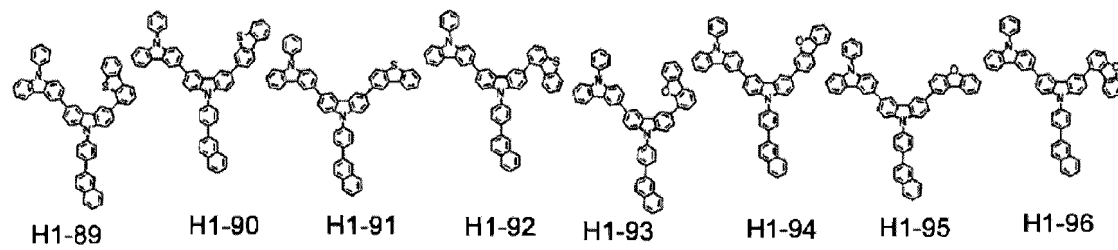
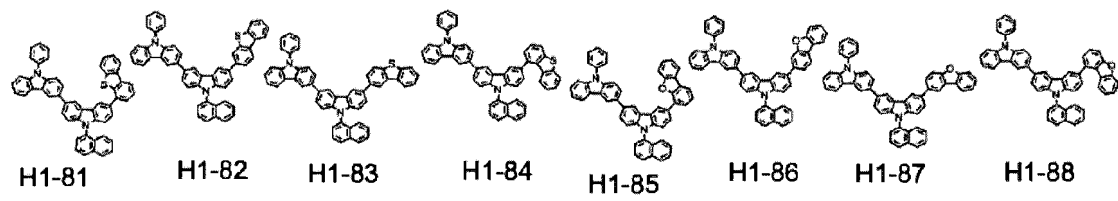
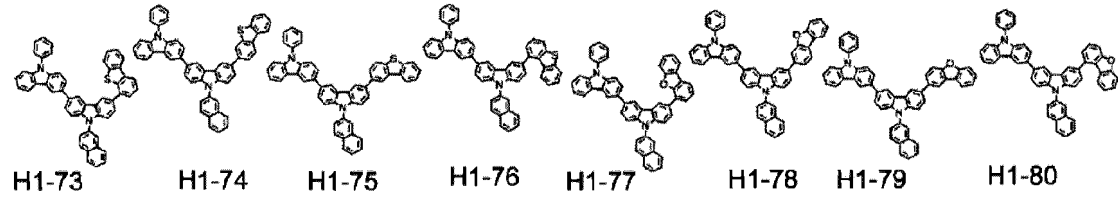
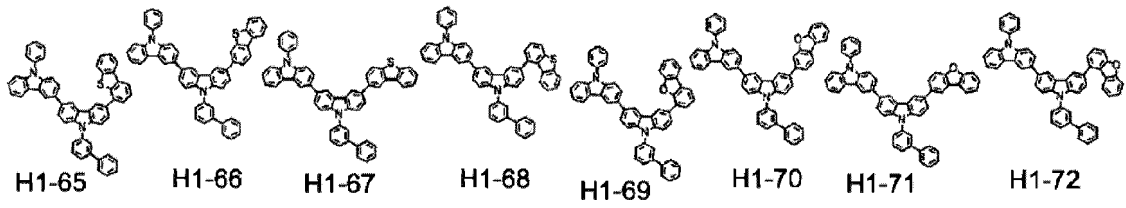
20

30

40

50

【化 1 6 - 2】



10

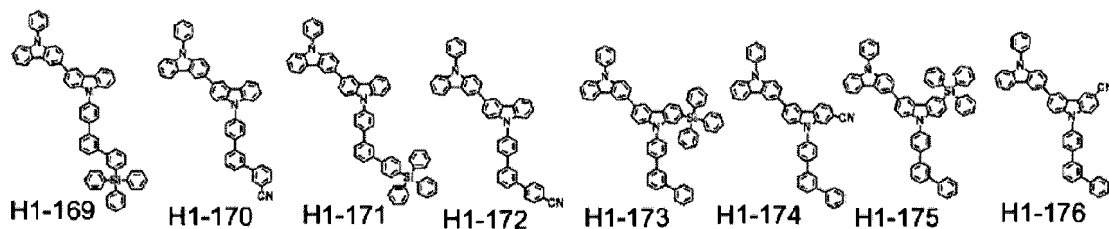
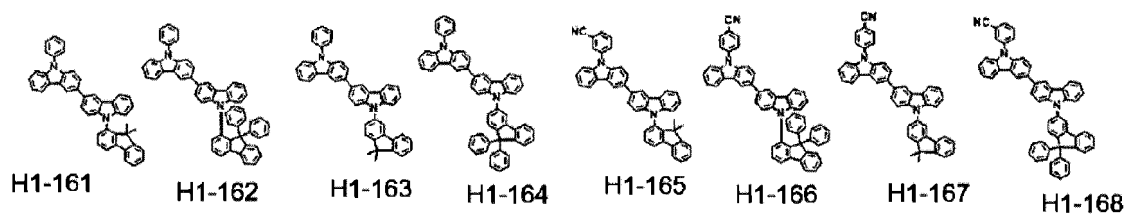
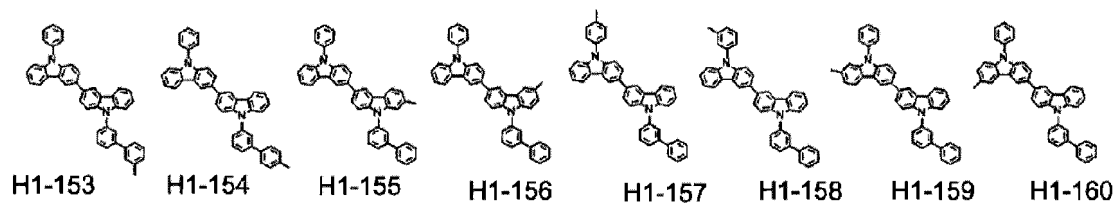
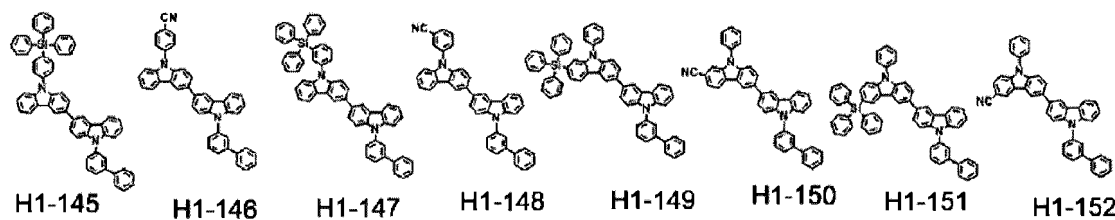
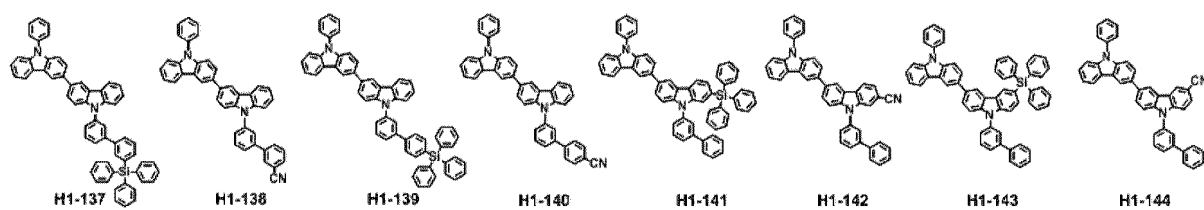
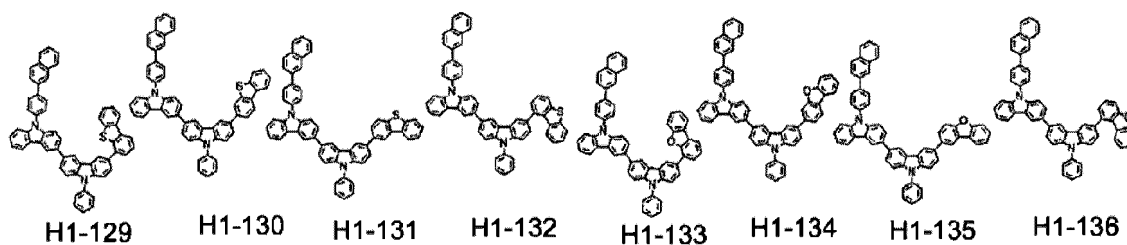
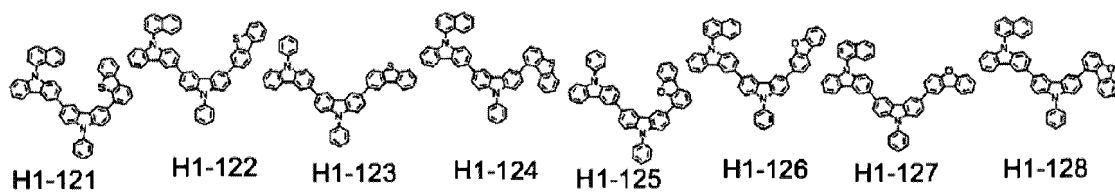
20

30

40

【 0 0 8 7 】

【化 1 6 - 3】



10

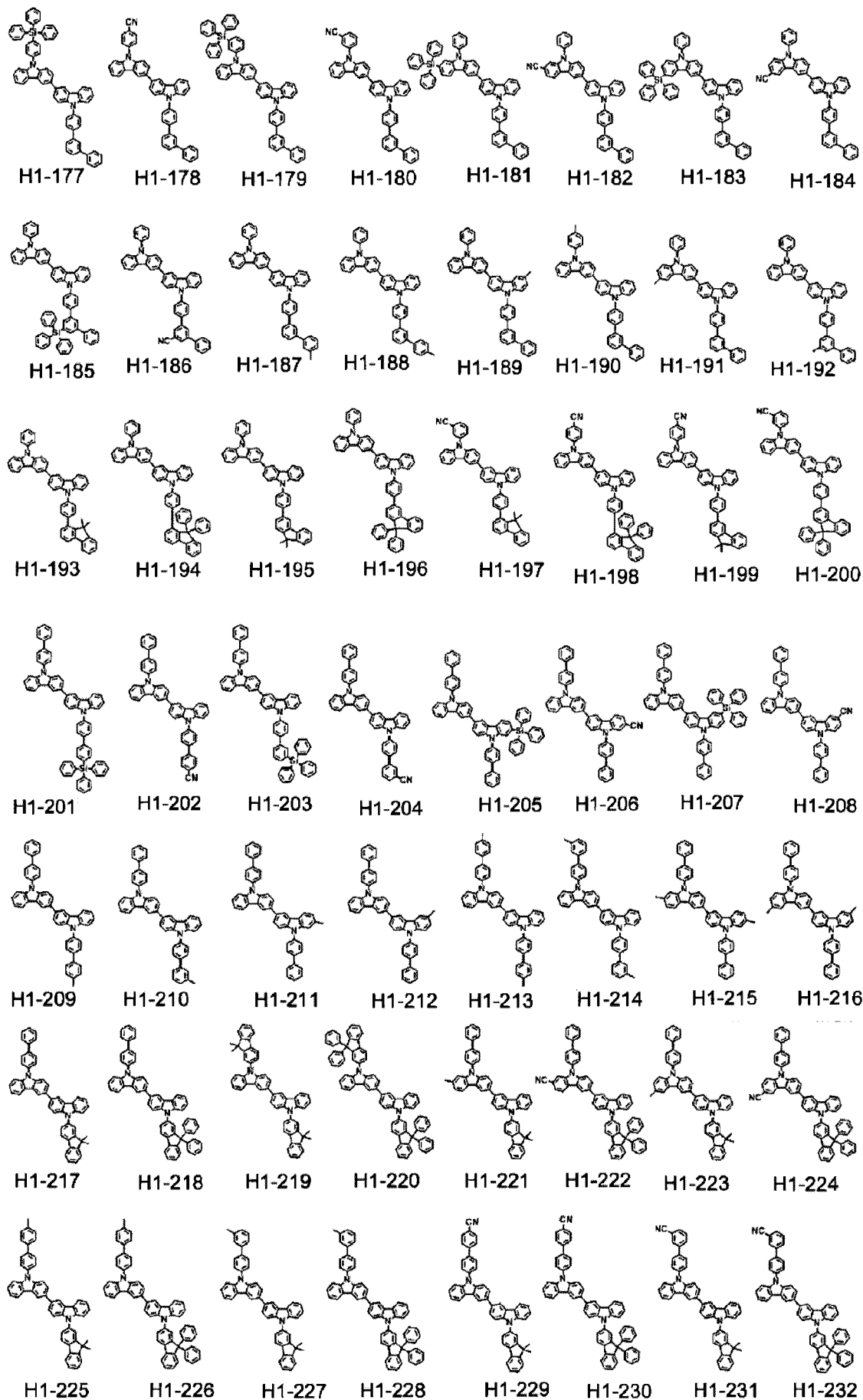
20

30

40

【 0 0 8 8 】

【化 1 6 - 4】



10

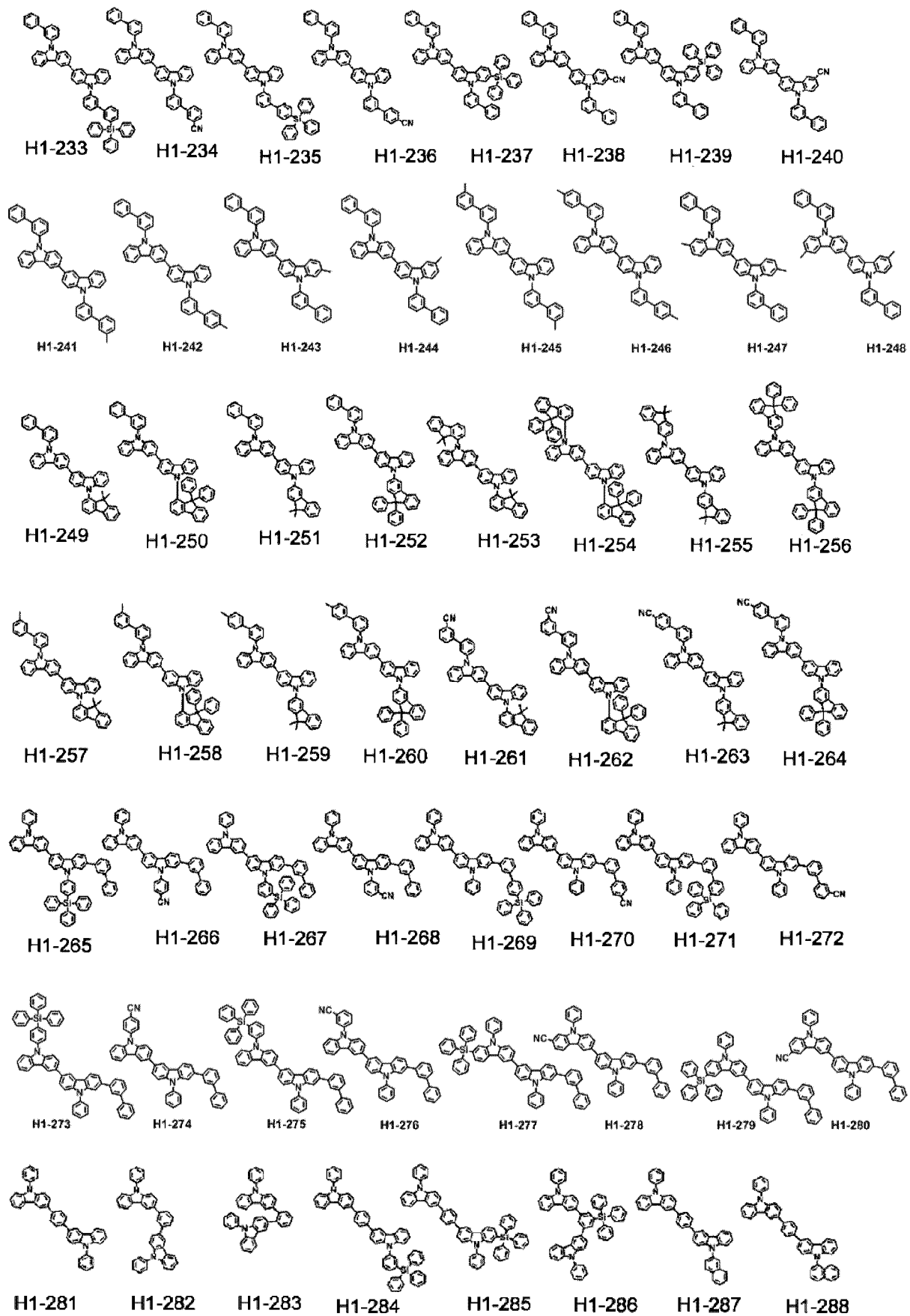
20

30

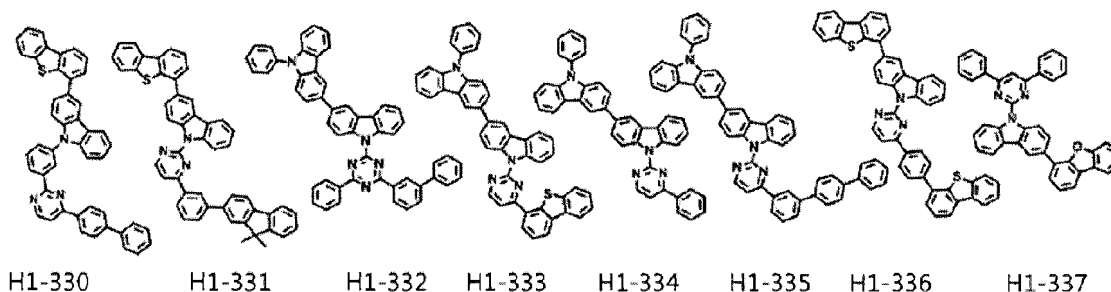
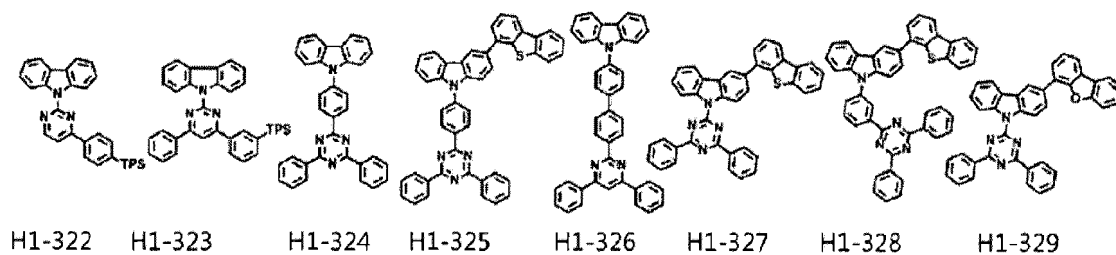
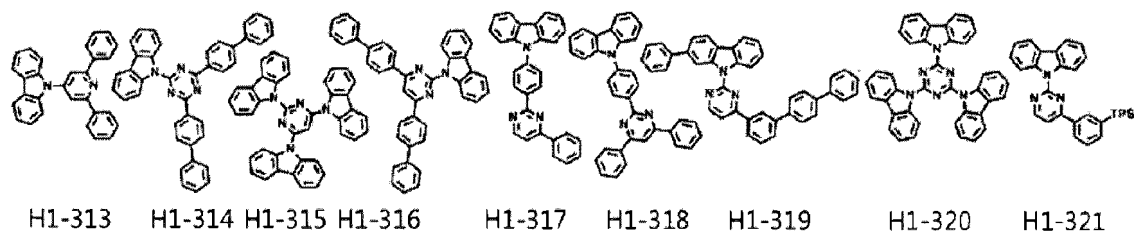
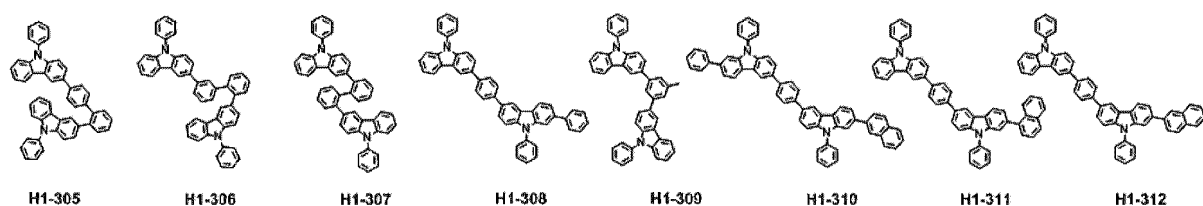
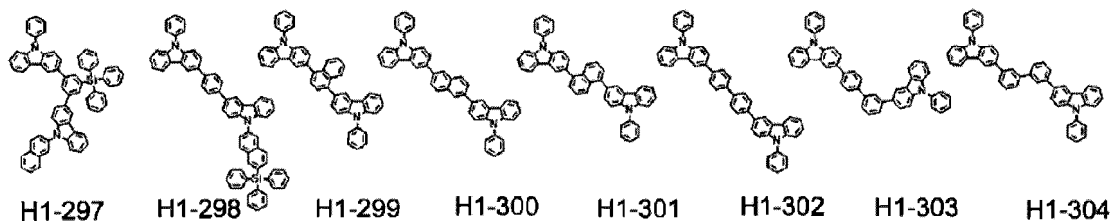
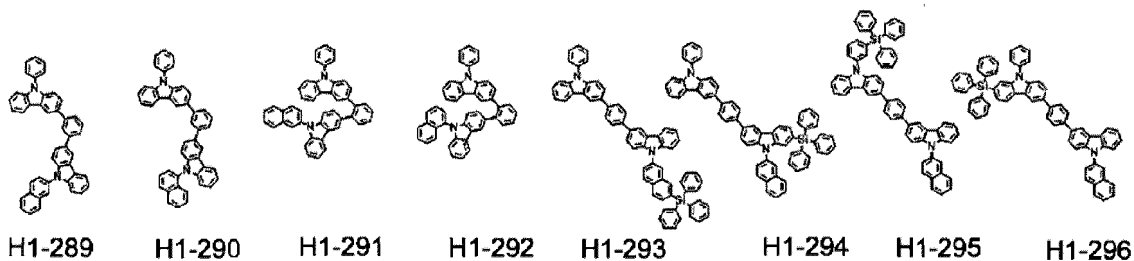
40

50

【化 1 6 - 5】



【化 1 6 - 6】



【 0 0 9 1】

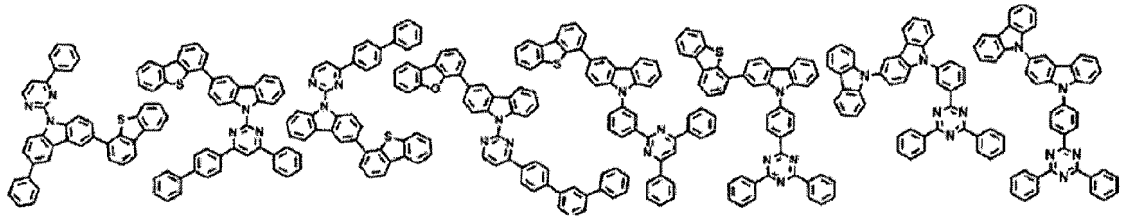
10

20

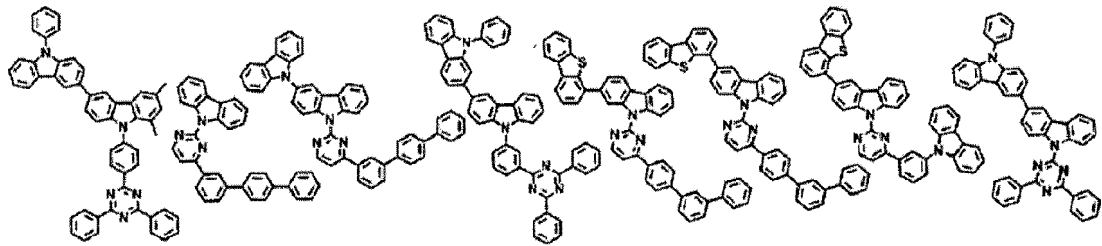
30

40

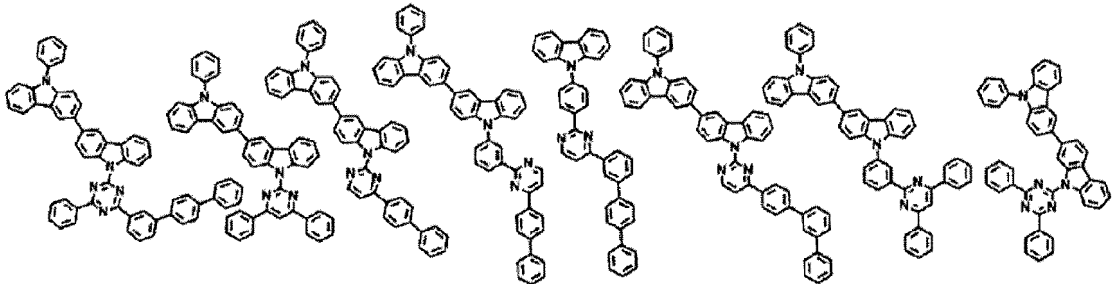
【化 1 6 - 7】



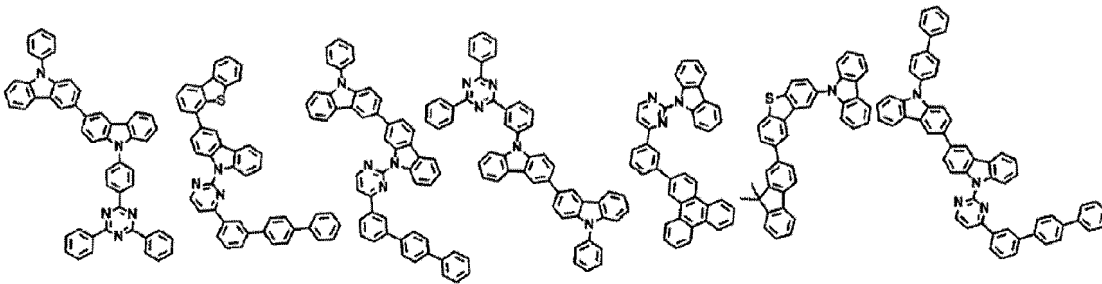
H1-338 H1-339 H1-340 H1-341 H1-342 H1-343 H1-344 H1-345



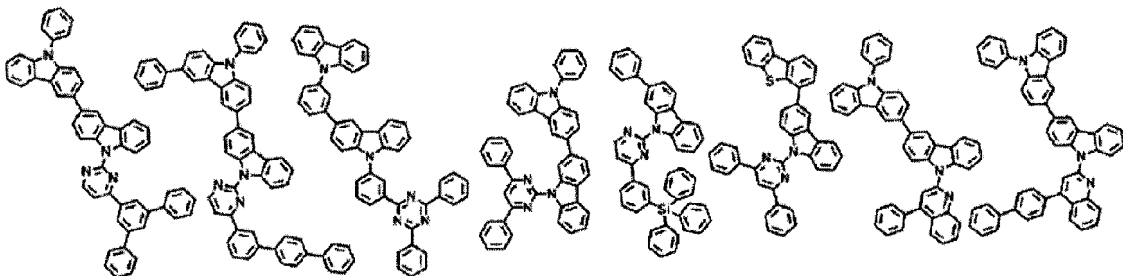
H1-346 H1-347 H1-348 H1-349 H1-350 H1-351 H1-352 H1-353



H1-354 H1-355 H1-356 H1-357 H1-358 H1-359 H1-360 H1-361



H1-362 H1-363 H1-364 H1-365 H1-366 H1-367 H1-368



H1-369 H1-370 H1-371 H1-372 H1-373 H1-374 H1-375 H1-376

【 0 0 9 2 】

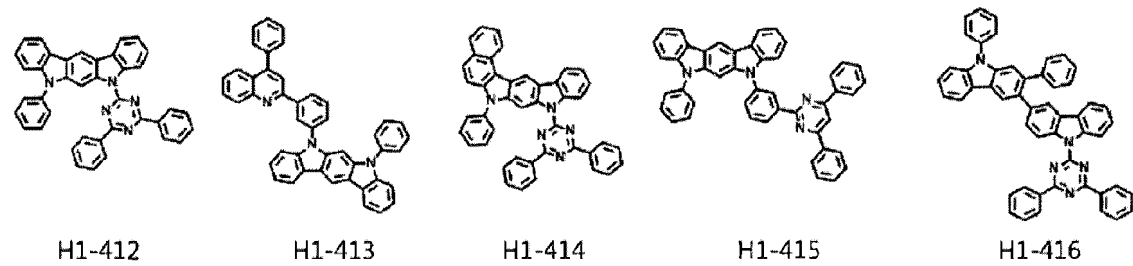
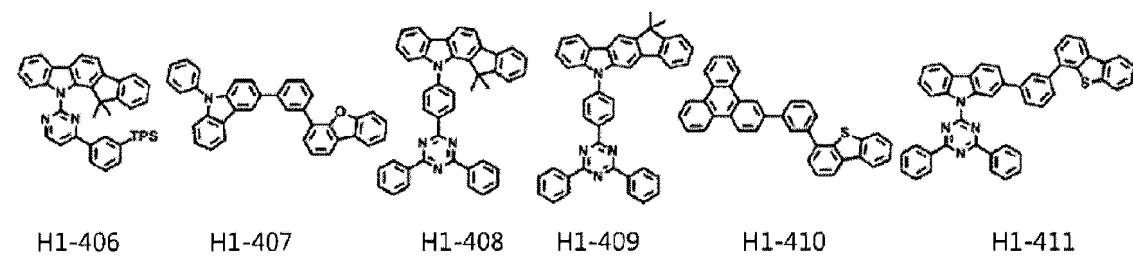
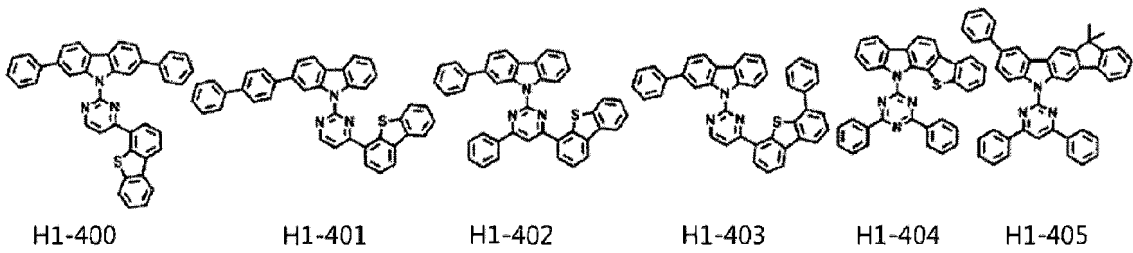
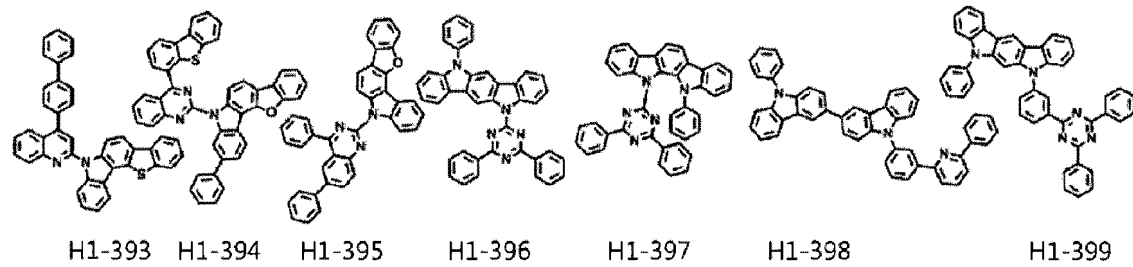
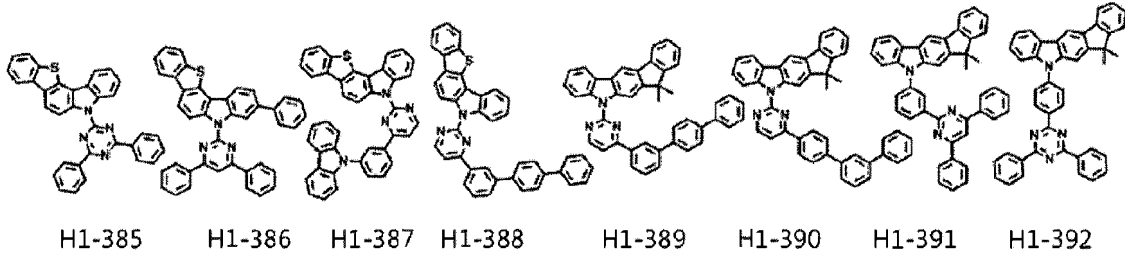
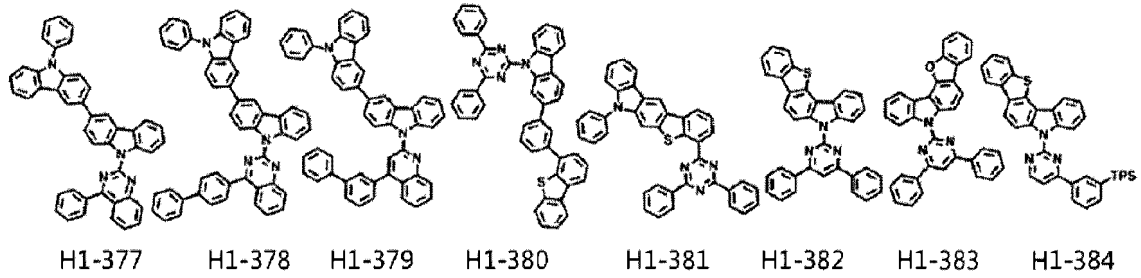
10

20

30

40

【化 1 6 - 8】



【 0 0 9 3】

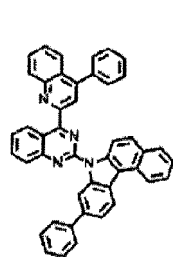
10

20

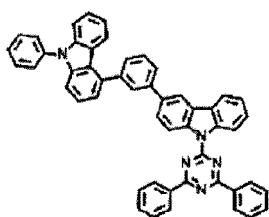
30

40

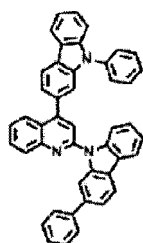
【化 1 6 - 9】



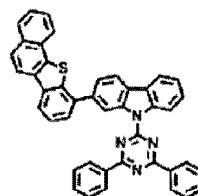
H1-417



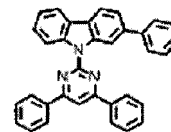
H1-418



H1-419

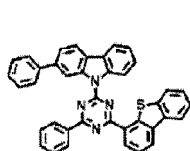


H1-420

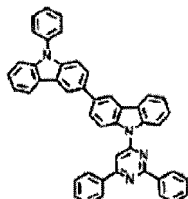


H1-421

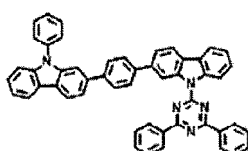
10



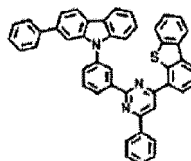
H1-422



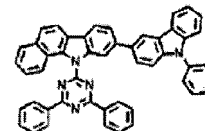
H1-423



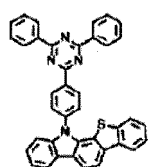
H1-424



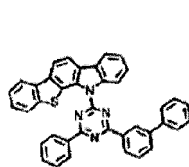
H1-425



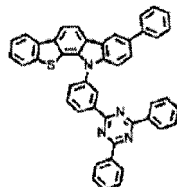
H1-426



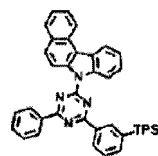
H1-427



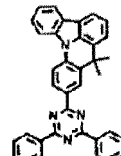
H1-428



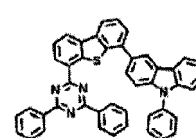
H1-429



H1-430

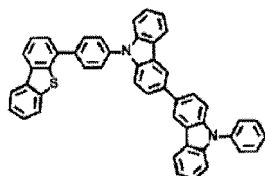


H1-431

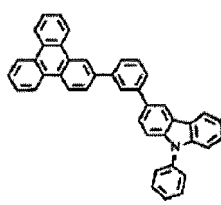


H1-432

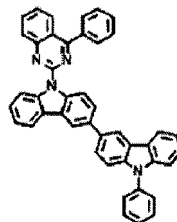
20



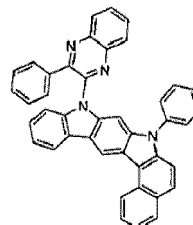
H1-433



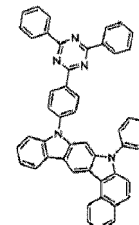
H1-434



H1-435



H1-436



H1-437

30

【 0 0 9 4】

(式中、TPSは、トリフェニルシリルを表す)。

【 0 0 9 5】

ドーパントは、好ましくは、少なくとも1つのリン光ドーパントである。本開示の有機エレクトロルミネッセンス素子のリン光ドーパント材料は、限定されないが、好ましくは、イリジウム(Ir)、オスmium(Os)、銅(Cu)、または白金(Pt)の金属錯体化合物から選択されてもよく、より好ましくは、イリジウム(Ir)、オスmium(Os)、銅(Cu)、または白金(Pt)のオルト金属錯体化合物から選択されてもよく、さらにより好ましくは、オルト金属イリジウム錯体化合物から選択されてもよい。

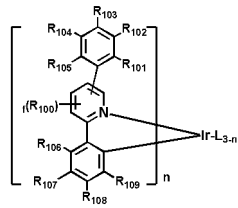
40

【 0 0 9 6】

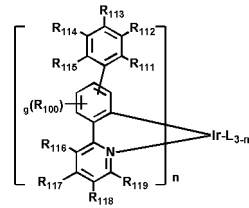
本開示の有機エレクトロルミネッセンス素子に含まれるべきドーパントは、以下の式16~18によって表される化合物からなる群から選択されてもよい。

【 0 0 9 7】

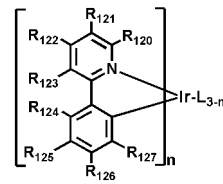
【化 17】



(16)



(17)



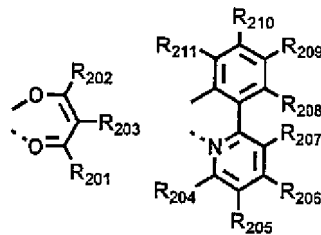
(18)

【0098】

式中、Lは、以下の構造から選択される：

【0099】

【化 18】



【0100】

R₁₀₀は、水素、置換もしくは非置換の(C1 - C30)アルキル、または置換もしくは非置換の(C3 - C30)シクロアルキルを表し；R₁₀₁ ~ R₁₀₉、及びR₁₁₀ ~ R₁₂₃は、それぞれ独立して、水素、重水素、ハロゲン、ハロゲンで置換されていないかもしくは置換された(C1 - C30)アルキル、置換もしくは非置換の(C3 - C30)シクロアルキル、シアノ、置換もしくは非置換の(C6 - C30)アリール、または置換もしくは非置換の(C1 - C30)アルコキシを表し；R₁₀₆ ~ R₁₀₉は、隣接する置換基(複数可)と結合して、置換もしくは非置換の縮合環、例えば、置換もしくは非置換のフルオレン、置換もしくは非置換のジベンゾチオフェン、または置換もしくは非置換のジベンゾフランを形成してもよく；R₁₂₀ ~ R₁₂₃は、隣接する置換基(複数可)と結合して、置換または非置換の縮合環、例えば、置換または非置換のキノリンを形成してもよく；R₁₂₄ ~ R₁₂₇は、それぞれ独立して、水素、重水素、ハロゲン、置換もしくは非置換の(C1 - C30)アルキル、または置換もしくは非置換の(C6 - C30)アリールを表し；R₁₂₄ ~ R₁₂₇は、隣接する置換基(複数可)と結合して、置換もしくは非置換の縮合環、例えば、置換もしくは非置換のフルオレン、置換もしくは非置換のジベンゾチオフェン、または置換もしくは非置換のジベンゾフランを形成してもよく；R₂₀₀ ~ R₂₁₁は、それぞれ独立して、水素、重水素、ハロゲン、ハロゲンで置換されていないかもしくは置換された(C1 - C30)アルキル、置換もしくは非置換の(C3 - C30)シクロアルキル、または置換もしくは非置換の(C6 - C30)アリールを表し、R₂₀₈ ~ R₂₁₁は、隣接する置換基(複数可)と結合して、置換もしくは非置換の縮合環、例えば、置換もしくは非置換のフルオレン、置換もしくは非置換のジベンゾチオフェン、または置換もしくは非置換のジベンゾフランを形成してもよく；f及びgは、それぞれ独立して、1 ~ 3の整数を表し；fまたはgが2以上の整数である場合、R₁₀₀の各々は、同じかまたは異なってもよく；nは、1 ~ 3の整数を表す。

【0101】

具体的には、リン光ドーパント材料は、以下を含む：

【0102】

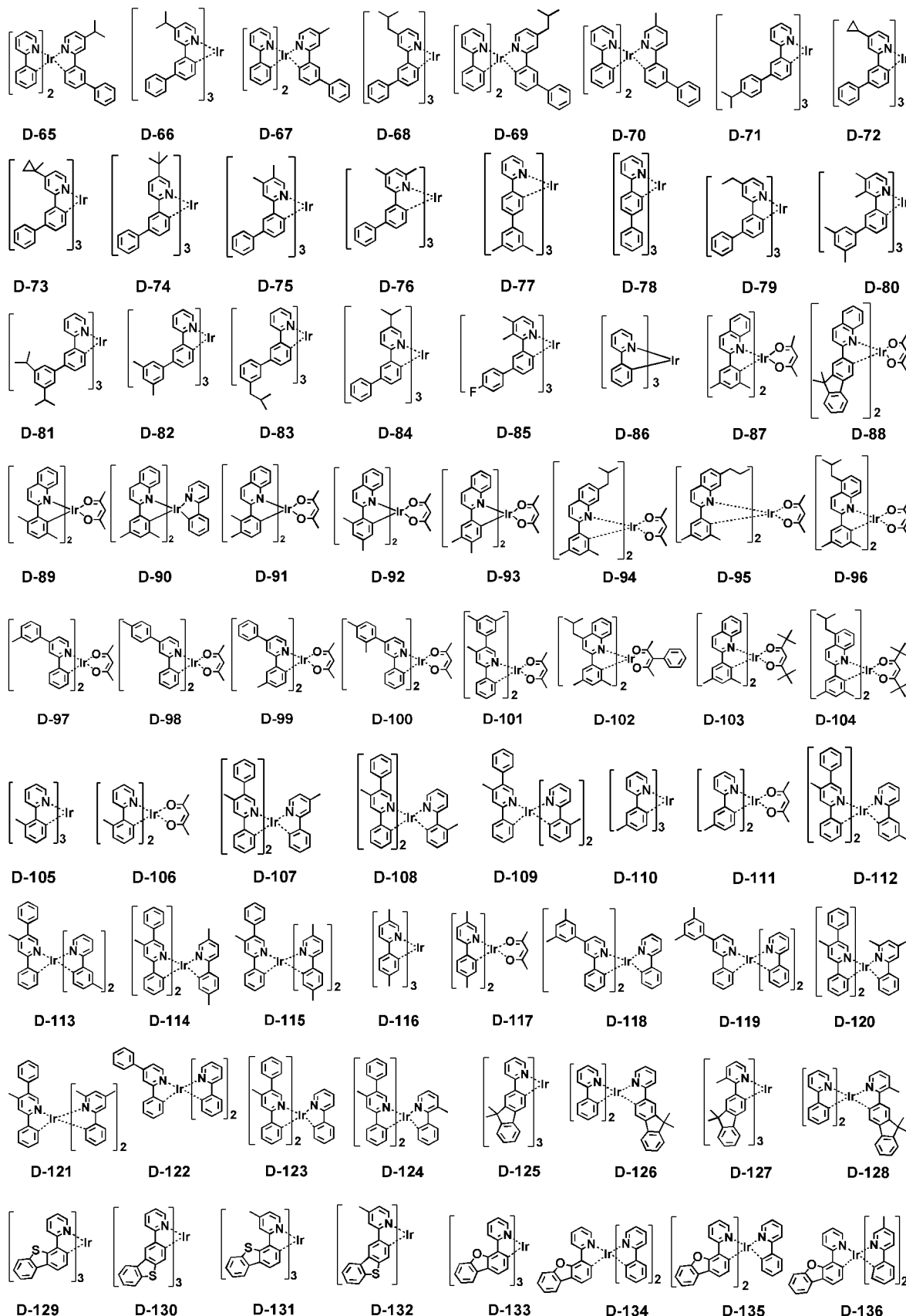
10

20

30

40

【化 1 9 - 2】



10

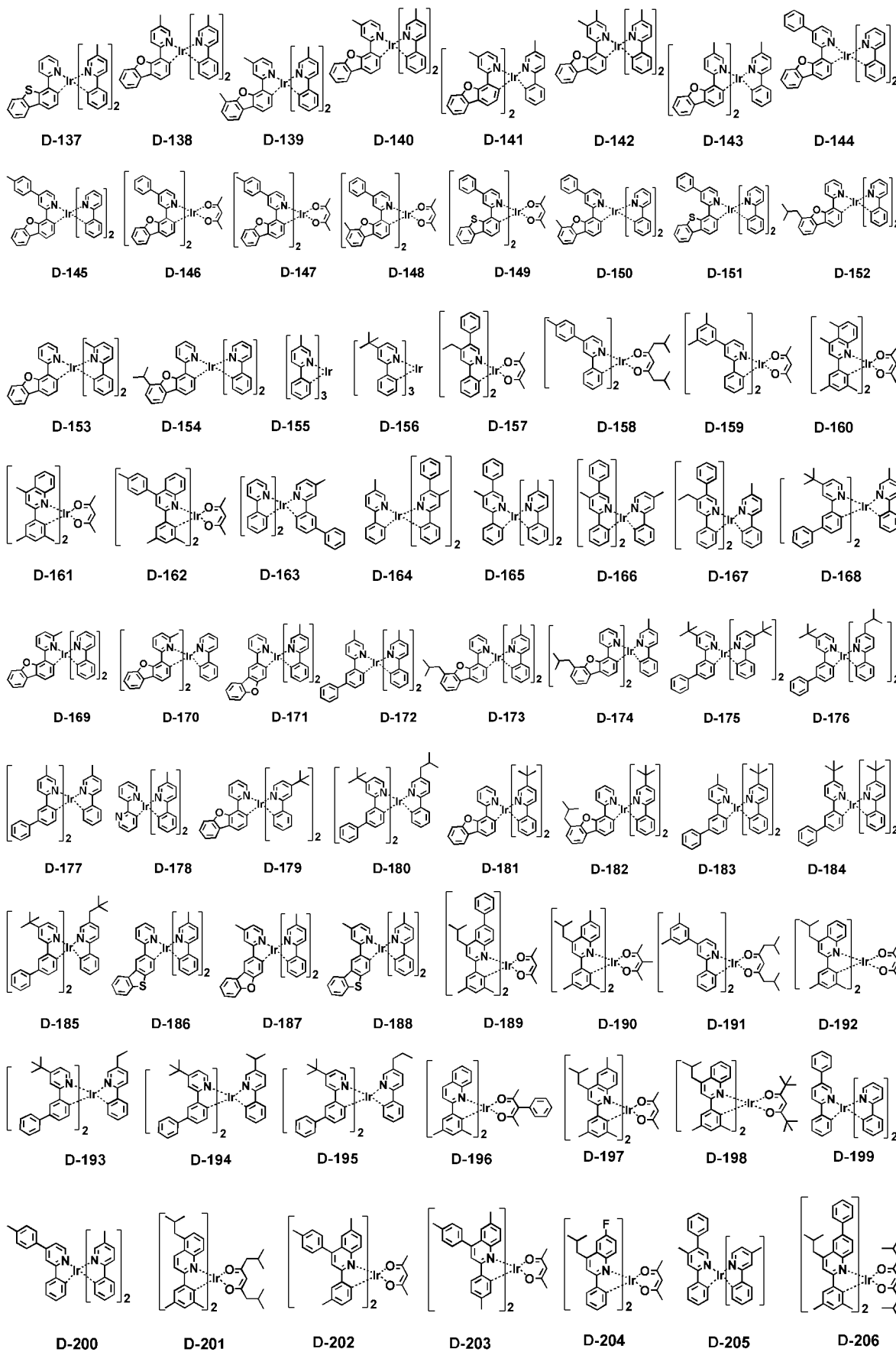
20

30

40

【 0 1 0 4】

【化 1 9 - 3】



10

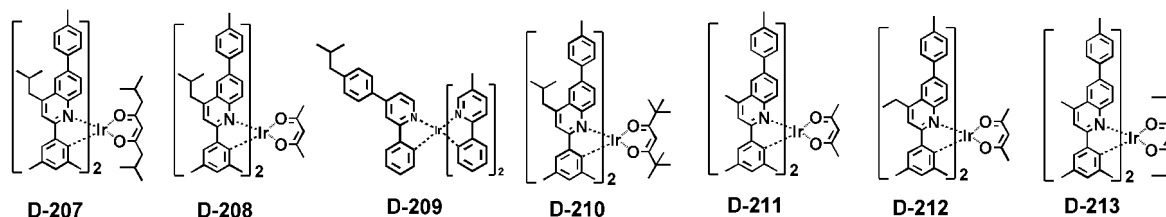
20

30

40

【 0 1 0 5】

【化 19 - 4】



【0106】

10

本開示の別の態様によれば、陽極と、陰極と、陽極と陰極との間に配置された有機層とを備える有機エレクトロルミネッセンス素子であって、有機層は、1つ以上の発光層を備え；少なくとも1つの発光層は、1つ以上のドーパント化合物及び2つ以上のホスト化合物を含み；2つ以上のホスト化合物の第1のホスト化合物は、式1によって表される有機エレクトロルミネッセンス化合物である、有機エレクトロルミネッセンス素子が提供される。

【0107】

有機エレクトロルミネッセンス素子が2つのホスト化合物を含む場合、第1のホスト材料と第2のホスト材料との重量比は、駆動電圧、寿命、及び発光効率を考慮すると、1：99～99：1、及び好ましくは30：70～70：30の範囲である。

20

【0108】

本開示の一実施形態によれば、有機エレクトロルミネッセンス素子において、2つ以上のホスト化合物の第1のホスト化合物は、式1によって表される有機エレクトロルミネッセンス化合物であってもよく、第2のホスト化合物は、式6～10によって表される化合物から選択されてもよい。

【0109】

本開示の別の実施形態によれば、有機エレクトロルミネッセンス素子において、2つ以上のホスト化合物の第1のホスト化合物は、式1によって表される有機エレクトロルミネッセンス化合物であってもよく、第2のホスト化合物は、式11によって表される化合物であってもよい。

30

【0110】

本開示の別の実施形態によれば、有機エレクトロルミネッセンス素子において、1つ以上のドーパント化合物は、式12～15によって表される化合物から選択されてもよい。

【0111】

本開示の有機エレクトロルミネッセンス素子は、有機層に式1の化合物を含む。本開示の有機エレクトロルミネッセンス素子は、アリールアミン系化合物及びスチリルアリールアミン系化合物からなる群から選択される少なくとも1つの化合物をさらに含んでもよい。

【0112】

本開示の有機エレクトロルミネッセンス素子において、有機層は、式1の化合物に加えて、第1族金属、第2金属、第4周期の遷移金属、第5周期の遷移金属、ランタニド、及び周期表のd遷移金属の有機金属からなる群から選択される少なくとも1つの金属、または金属を含む少なくとも1つの錯体化合物をさらに含んでもよい。

40

【0113】

さらに、本開示の有機エレクトロルミネッセンス素子は、本開示の化合物の他に、当該技術分野で既知の青色エレクトロルミネッセンス化合物、赤色エレクトロルミネッセンス化合物、または緑色エレクトロルミネッセンス化合物を含む少なくとも1つの発光層をさらに備えることによって、白色光を放出することができる。必要であれば、素子は、橙色発光層または黄色発光層をさらに備えてもよい。

【0114】

50

本開示の有機エレクトロルミネッセンス素子において、好ましくは、カルコゲニド層、金属ハロゲン化物層、及び金属酸化物層から選択される少なくとも1つの層（これ以降、「表面層」と称する）が、一方または両方の電極（複数可）の内側表面（複数可）上に配置されてもよい。具体的には、ケイ素またはアルミニウムのカルコゲニド（酸化物を含む）層は、好ましくは、エレクトロルミネッセンス媒体層の陽極面上に配置され、金属ハロゲン化物層または金属酸化物層は、好ましくは、エレクトロルミネッセンス媒体層の陰極面上に配置される。そのような表面層は、有機エレクトロルミネッセンス素子に動作安定性を提供する。好ましくは、カルコゲニドは、 SiO_x （ $1 < x < 2$ ）、 AlO_x （ $1 < x < 1.5$ ）、 $SiON$ 、 $SiAlON$ 等を含み；金属ハロゲン化物は、 LiF 、 MgF_2 、 CaF_2 、希土類金属フッ化物等を含み；金属酸化物は、 Cs_2O 、 Li_2O 、 MgO 、 SrO 、 BaO 、 CaO 等を含む。

【0115】

本開示の有機エレクトロルミネッセンス素子において、電子輸送化合物と還元性ドーパントの混合領域、または正孔輸送化合物と酸化性ドーパントの混合領域は、一对の電極のうち少なくとも1つの表面上に配置されてもよい。この場合、電子輸送化合物は、還元されて陰イオンとなるため、混合領域からエレクトロルミネッセンス媒体に電子を注入及び輸送し易くなる。さらに、正孔輸送化合物は、酸化されて陽イオンとなるため、混合領域からエレクトロルミネッセンス媒体に正孔を注入及び輸送し易くなる。好ましくは、酸化性ドーパントは、種々のルイス酸及び受容体化合物を含み、還元性ドーパントは、アルカリ金属、アルカリ金属化合物、アルカリ土類金属、希土類金属、及びそれらの混合物を含む。還元性ドーパント層は、2つ以上の発光層を有し、かつ白色光を放出するエレクトロルミネッセンス素子を調製するための電荷発生層として用いられてもよい。

【0116】

本開示の有機エレクトロルミネッセンス素子の各層を形成するために、真空蒸着、スパッタリング、プラズマ及びイオンめっき法等の乾式成膜法、または、インクジェット印刷、ノズル印刷、スロットコーティング、スピンコーティング、ディップコーティング、及びフローコーティング法等の湿式成膜法を用いることができる。

【0117】

湿式成膜法を用いる場合、各層を形成する材料を、エタノール、クロロホルム、テトラヒドロフラン、ジオキサン等の任意の好適な溶媒に溶解または拡散させることによって、薄膜を形成することができる。溶媒は、各層を形成する材料を溶解または拡散させることができ、かつ成膜能力に問題のない、任意の溶媒であり得る。

【0118】

本開示の有機エレクトロルミネッセンス素子において、発光層のための2つ以上のホスト化合物は、共蒸着または混合蒸着されてもよい。本明細書において、共蒸着は、2つ以上の材料の各々をそれぞれの坩堝容器に導入し、蒸着させる各材料ごとに電流を容器に印加することによって、2つ以上の材料が混合物として蒸着されるプロセスを意味する。本明細書において、混合蒸着は、蒸着前に1つの坩堝容器内で2つ以上の材料を混合し、混合物が蒸着されるように容器に電流を印加することによって、2つ以上の材料が混合物として蒸着されるプロセスを意味する。

【0119】

本開示の有機エレクトロルミネッセンス素子を使用することによって、表示システムまたは照明システムを作製することができる。

【0120】

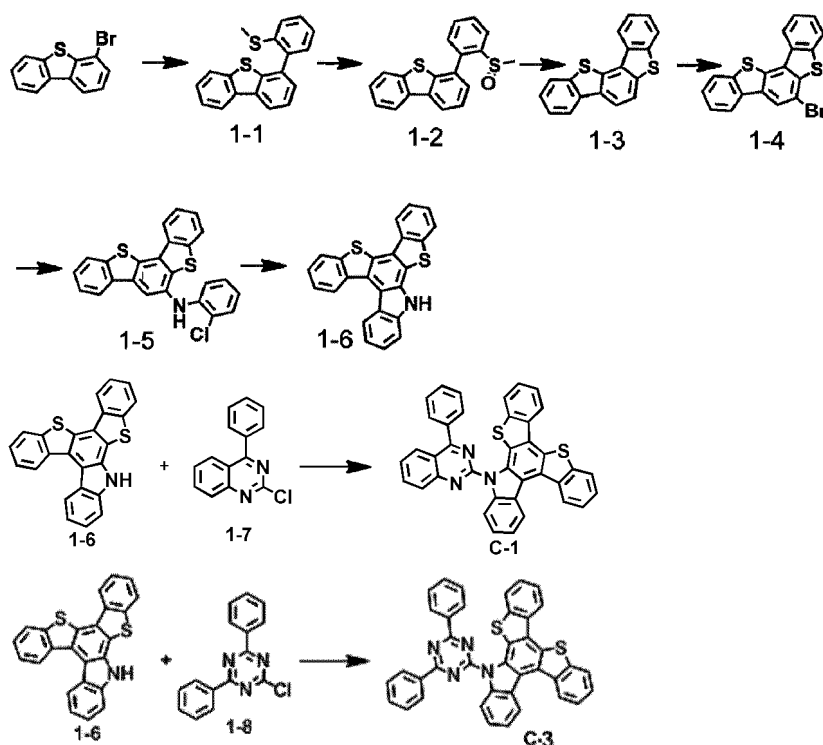
これ以降、本開示の有機エレクトロルミネッセンス化合物、該化合物の調製方法、及び素子の発光特性を、以下の実施例を参照して詳細に説明する。

【0121】

実施例1：化合物C-1及びC-3の調製

【0122】

【化 2 0】



10

20

【 0 1 2 3】

化合物 1 - 1 の調製

化合物 4 - ブロモジベンゾチオフェン (50 g、189.98 mmol)、2 - メチルチオフェニルボロン酸 (31.9 g、189.89 mmol)、テトラキス(トリフェニルホスフィン)パラジウム (11 g、9.499 mmol)、炭酸ナトリウム (60 g、569.94 mmol)、トルエン (900 mL)、エタノール (280 mL)、及び蒸留水 (280 mL) を反応容器に導入した後、混合物を 120 で 3 時間撹拌した。反応後、混合物を蒸留水で洗浄し、酢酸エチルで抽出した。得られた有機層を硫酸マグネシウムで乾燥させ、ロータリー・エバポレーターによりそこから溶媒を除去した。生成物をカラムクロマトグラフィーにより精製し、化合物 1 - 1 (58 g、99%) を得た。

30

【 0 1 2 4】

化合物 1 - 2 の調製

化合物 1 - 1 (58 g、189.98 mmol) をテトラヒドロフラン (THF) (500 mL) 及び酢酸 (580 mL) に溶解した後、過酸化水素 (35%) (23 mL) を滴下で徐々に混合物に加えた。混合物を室温で 10 時間撹拌した。反応後、混合物を濃縮して溶媒を除去し、ジクロロメタン及び純水で抽出した。得られた有機層から硫酸マグネシウムを用いて残りの水分を除去し、次いで、有機層を乾燥させ、濃縮し、次の反応に直接使用した。

40

【 0 1 2 5】

化合物 1 - 3 の調製

化合物 1 - 2 (58 g) をトリフルオロメタンスルホン酸 (300 mL) に溶解した後、混合物を室温で 2 日間撹拌し、次いで、ピリジン (600 mL) / 純水 (1.5 mL) の溶液に滴下で加えた。混合物を加熱し、120 で 4 時間還流させた。反応後、ジクロロメタンで混合物を抽出した。得られた有機層をカラムクロマトグラフィーにより精製し、化合物 1 - 3 (15.4 g、28%) を得た。

【 0 1 2 6】

化合物 1 - 4 の調製

化合物 1 - 3 (15.4 g、53.03 mmol) をクロロホルム (550 mL) に溶解

50

した後、混合物を0℃まで冷却した。臭素(2.7 mL、53.03 mmol)を滴下で徐々に混合物に加えた。反応後、混合物を室温まで徐々に加熱し、8時間攪拌した。反応後、チオ硫酸ナトリウム溶液を用いて混合物から臭素を除去した。生成物を濾過し、化合物1-4(12.8 g、65.4%)を得た。

【0127】

化合物1-5の調製

化合物1-4(12.8 g、34.66 mmol)、クロロアニリン(4.7 mL、45.06 mmol)、酢酸パラジウム(0.31 g、45.06 mmol)、t-ブチルホスフィン(50%) (1.4 mL、2.77 mmol)、及びナトリウムt-ブトキシド(8.3 g、86.65 mmol)をトルエン(170 mL)に導入した後、混合物を還流下で1日攪拌した。反応後、混合物を室温まで冷却し、蒸留水及び酢酸エチルで抽出した。得られた有機層を減圧下で蒸留し、カラムクロマトグラフィーにより精製し、化合物1-5(13.7 g、77%)を得た。

10

【0128】

化合物1-6の調製

化合物1-5(13.7 g、32.94 mmol)、酢酸パラジウム(0.4 g、1.646 mmol)、トリシクロヘキシルホスホニウムテトラフルオロボラート($C_{18}H_{34}P \cdot BF_4$) (1.21 g、3.29 mmol)、炭酸セシウム(32.1 g、98.82 mmol)、及びジメチルアセトアミド(DMA) (250 mL)を反応容器に導入した後、混合物を180℃で7時間攪拌した。反応後、混合物を酢酸エチルで抽出した。得られた有機層を硫酸マグネシウムで乾燥させ、減圧下で蒸留し、カラムクロマトグラフィーにより精製し、化合物1-6(5.6 g、45%)を得た。

20

【0129】

化合物C-1の調製

化合物1-6(5 g、13.17 mmol)、化合物1-7(4.6 g、15.81 mmol)、酢酸パラジウム(1.2 g、5.27 mmol)、50% t-ブチルホスフィン(5 mL、10.54 mmol)、及び炭酸セシウム(13 g、39.5 mmol)をトルエン(65 mL)に溶解した後、混合物を130℃で3時間還流させた。反応後、混合物をジクロロメタン/純水で抽出し、カラムクロマトグラフィーにより精製し、化合物C-1(4.4 g、57%)を得た。

30

【0130】

UV: 319 nm、PL: 525 nm、融点: 261℃、MS/EIMS実測値584; 計算値583

【0131】

化合物C-3の調製

化合物1-6(1.6 g、4.21 mmol)及び化合物1-8(1.7 g、6.32 mmol)をジメチルホルムアミド(DMF) (30 mL)に溶解した後、NaH(0.5 g、12.63 mmol、鉱油中60%)を混合物に加えた。混合物を室温で12時間攪拌し、メタノール及び蒸留水をそれに加えた。得られた固体を減圧下で濾過し、カラムクロマトグラフィーにより精製し、化合物C-3(1.4 g、54%)を得た。

40

【0132】

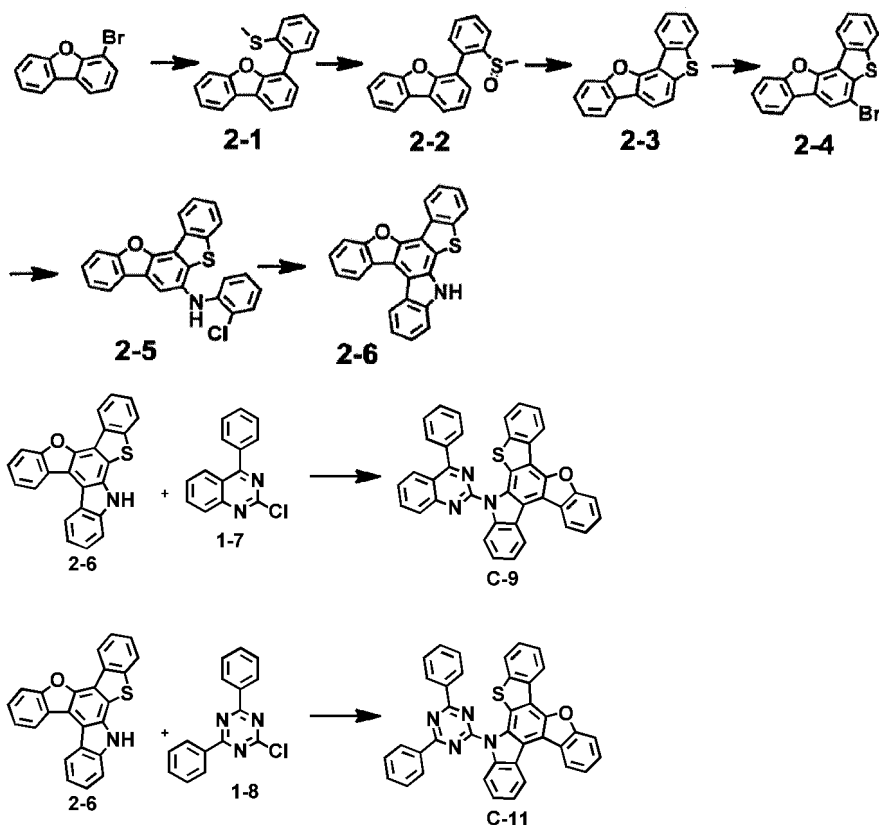
UV: 342 nm、PL: 528 nm、融点: 360℃、MS/EIMS実測値611; 計算値610

【0133】

実施例2: 化合物C-9及びC-11の調製

【0134】

【化 2 1】



10

20

【 0 1 3 5】

化合物 2 - 1 の調製

化合物 4 - ブロモジベンゾフラン (50 g、202.35 mmol)、2 - メチルチオフェニルボロン酸 (34 g、202.35 mmol)、テトラキス(トリフェニルホスフィン)パラジウム (11.7 g、10.117 mmol)、炭酸ナトリウム (64 g、607.06 mmol)、トルエン (1000 mL)、エタノール (300 mL)、及び蒸留水 (300 mL) を反応容器に導入した後、混合物を 120 で 3 時間撹拌した。反応後、混合物を蒸留水で洗浄し、酢酸エチルで抽出した。抽出した有機層を硫酸マグネシウムで乾燥させ、ロータリー・エバポレーターによりそこから溶媒を除去した。生成物をカラムクロマトグラフィーにより精製し、化合物 2 - 1 (58 g、99%) を得た。

30

【 0 1 3 6】

化合物 2 - 2 の調製

化合物 2 - 1 (58 g、202.35 mmol) を THF (580 mL) 及び酢酸 (580 mL) に溶解した後、過酸化水素 (35%) (26 mL) を滴下で徐々に混合物に加えた。混合物を室温で 10 時間撹拌し、濃縮して溶媒を除去し、次いで、ジクロロメタン及び純水で抽出した。得られた有機層から硫酸マグネシウムを用いて残りの水分を除去し、濃縮し、次の反応に直接使用した。

40

【 0 1 3 7】

化合物 2 - 3 の調製

ピリジン (600 mL) / 純水 (1.5 mL) の溶液を撹拌しながら、化合物 2 - 2 をそれに加えた。次いで、混合物を加熱し、120 で 4 時間還流させた。反応後、ジクロロメタンで混合物を抽出し、得られた有機層をカラムクロマトグラフィーに供し、化合物 2 - 3 (48.6 g、93%) を得た。

【 0 1 3 8】

化合物 2 - 4 の調製

化合物 2 - 3 (43.6 g、158.9 mmol) をクロロホルム (800 mL) に溶解した後、混合物を 0 まで冷却した。臭素 (8.55 mL、166.87 mmol) を

50

滴下で徐々に混合物に加えた。添加後、混合物を室温まで徐々に加熱し、8時間撈拌した。反応後、チオ硫酸ナトリウム溶液を用いて混合物から臭素を除去した。生成物を濾過し、化合物2-4(44g、70%)を得た。

【0139】

化合物2-5の調製

化合物2-4(20g、56.62mmol)、クロロアニリン(7.7mL、73.61mmol)、酢酸パラジウム(0.5g、2.26mmol)、t-ブチルホスフィン(50%) (2.2mL、4.53mmol)、及びナトリウムt-ブトキシド(13.6g、141.55mmol)をトルエン(280mL)に導入した後、混合物を還流下で1日撈拌した。反応後、混合物を室温まで冷却し、蒸留水及び酢酸エチルで抽出した。得られた有機層を減圧下で蒸留し、カラムクロマトグラフィーにより精製し、化合物2-5(11g、48.6%)を得た。

10

【0140】

化合物2-6の調製

化合物2-5(11g、27.5mmol)、酢酸パラジウム(0.3g、1.37mmol)、 $C_{18}H_{34}P \cdot BF_4$ (1g、2.75mmol)、炭酸セシウム(26g、82.5mmol)、及びDMA(135mL)を反応容器に導入した後、混合物を180で7時間撈拌した。反応後、混合物を酢酸エチルで抽出した。得られた有機層を硫酸マグネシウムで乾燥させ、減圧下で蒸留し、カラムクロマトグラフィーにより精製し、化合物2-6(4g、40%)を得た。

20

【0141】

化合物C-9の調製

化合物2-6(3.5g、9.63mmol)、化合物1-7(2.78g、11.55mmol)、酢酸パラジウム(0.86g、3.85mmol)、50% t-ブチルホスフィン(3.7mL、7.704mmol)、及び炭酸セシウム(9.4g、28.8mmol)をトルエン(100mL)に溶解した後、混合物を130で3時間還流させた。反応後、混合物をジクロロメタン/純水で抽出し、カラムクロマトグラフィーにより精製し、化合物C-9(2.5g、46%)を得た。

【0142】

UV: 296nm、PL: 535nm、融点: 290、MS/EIMS実測値568 ; 計算値567

30

【0143】

化合物C-11の調製

化合物2-6(3g、8.2mmol)及び化合物1-8(2.65g、9.9mmol)をジメチルホルムアミド(DMF)(40mL)に溶解した後、NaH(1g、24.76mmol、鉱油中60%)をそれに加えた。混合物を室温で12時間撈拌し、メタノール及び蒸留水を混合物に加えた。得られた固体を減圧下で濾過し、カラムクロマトグラフィーにより精製し、化合物C-11(3.1g、63%)を得た。

【0144】

UV: 342nm、PL: 532nm、融点: 353、MS/EIMS実測値595 ; 計算値594

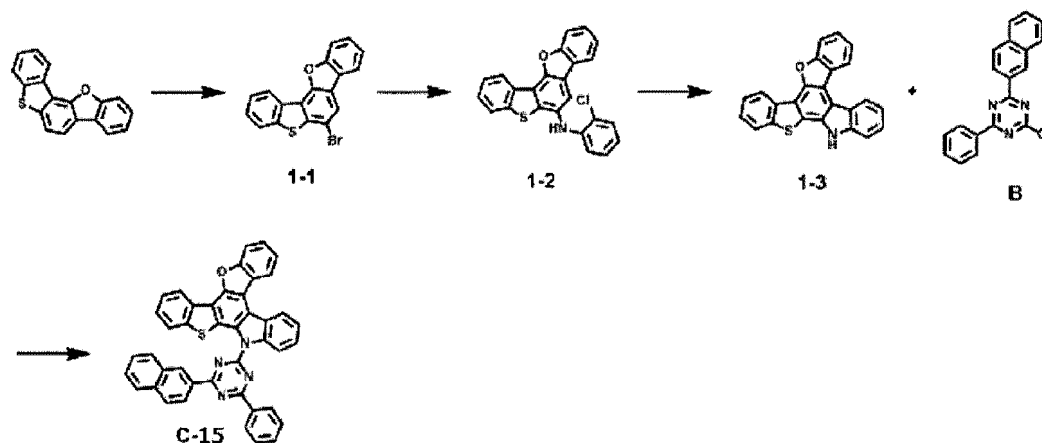
40

【0145】

実施例3: 化合物C-15の調製

【0146】

【化 2 2】



10

【0147】

化合物 1 - 1 の調製

ベンゾ[*b*][1]ベンゾシアノ[2,3-*g*]ベンゾフラン(30 g、109 mmol)及びクロロホルム(540 mL)をフラスコに導入した後、混合物を0℃まで冷却した。臭素(5.8 mL、114 mmol)を滴下で徐々に混合物に加えた。次いで、混合物を3時間撹拌した。反応後、混合物を酢酸エチルで抽出し、硫酸マグネシウムで乾燥させ、減圧下で蒸留した。カラムクロマトグラフィーにより混合物から生成物を分離し、化合物 1 - 1(23 g、収率：60%)を得た。

20

【0148】

化合物 1 - 2 の調製

化合物 1 - 1(18 g、52.1 mmol)、2 - クロロアニリン(8.2 mL、78.1 mmol)、酢酸パラジウム(1.1 g、5.21 mmol)、トリ-*tert*-ブチルホスフィン(5 mL)(50%)、10.4 mmol)、ナトリウム *tert*-ブトキシド(15 g、156 mmol)、及びトルエン(260 mL)をフラスコに導入した後、混合物を還流下で4時間撹拌した。反応後、混合物を塩化メチレン(MC)で抽出し、硫酸マグネシウムで乾燥させ、減圧下で蒸留した。カラムクロマトグラフィーにより混合物から生成物を分離し、化合物 1 - 2(18 g、収率：90%)を得た。

30

【0149】

化合物 1 - 3 の調製

化合物 1 - 2(18 g、47.0 mmol)、酢酸パラジウム(1.0 g、4.70 mmol)、トリシクロヘキシルホスホニウムテトラフルオロボラート(3.4 g、9.40 mmol)、炭酸セシウム(46 g、141 mmol)、及びジメチルアセトアミド(240 mL)をフラスコに導入した後、混合物を還流下で4時間撹拌した。反応後、混合物を塩化メチレン(MC)で抽出し、硫酸マグネシウムで乾燥させ、減圧下で蒸留した。カラムクロマトグラフィーにより混合物から生成物を分離し、化合物 1 - 3(6.7 g、収率：40%)を得た。

40

【0150】

化合物 C - 15 の調製

化合物 1 - 3(3 g、8.25 mmol)及び化合物 B(3.4 g、10.7 mmol)をフラスコ内のジメチルホルムアミド(DMF)(40 mL)に溶解した後、NaH(1 g、24.76 mmol、鉱油中60%)を混合物に加えた。次いで、混合物を室温で12時間撹拌し、メタノール及び蒸留水をそれに加えた。得られた固体を減圧下で濾過し、カラムクロマトグラフィーにより精製し、化合物 C - 15(3.6 g、67%)を得た。

【0151】

[表]

50

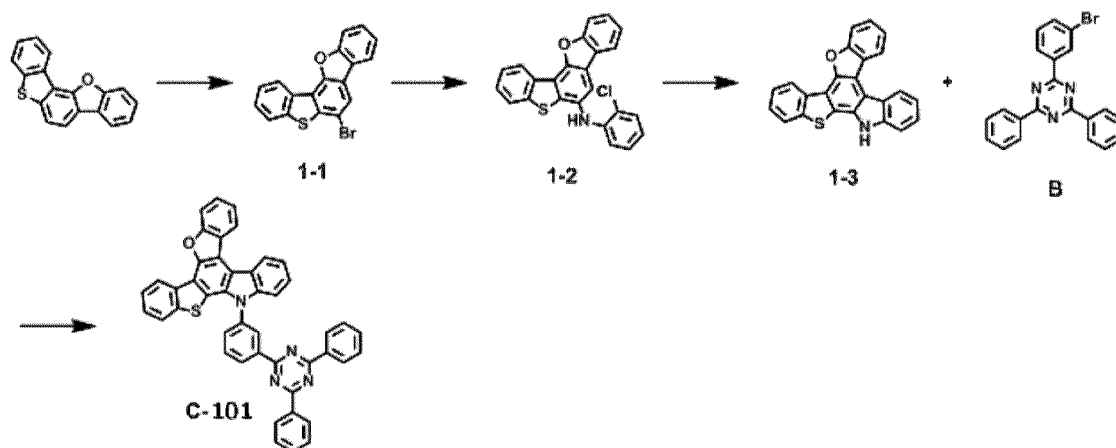
	分子量 (MW)	UV	PL	融点 (MP)
C-15	644.74	344 nm	535 nm	378°C

【0152】

実施例4：化合物C-101の調製

【0153】

【化23】



10

20

【0154】

化合物1-1の調製

ベンゾ[*b*][1ベンゾシアノ[2,3-*g*]]ベンゾフラン(30g、109mmol)及びクロロホルム(540mL)をフラスコに導入した後、混合物を0℃まで冷却した。臭素(5.8mL、114mmol)を滴下で徐々に混合物に加えた。次いで、混合物を3時間撹拌した。反応後、混合物を酢酸エチルで抽出した。得られた有機層を硫酸マグネシウムで乾燥させ、減圧下で蒸留した。カラムクロマトグラフィーにより混合物から生成物を分離し、化合物1-1(23g、収率：60%)を得た。

30

【0155】

化合物1-2の調製

化合物1-1(18g、52.1mmol)、2-クロロアニリン(8.2mL、78.1mmol)、酢酸パラジウム(1.1g、5.21mmol)、トリ-*tert*-ブチルホスフィン(5mL)(50%)、10.4mmol)、ナトリウム-*tert*-ブトキシド(15g、156mmol)及びトルエン(260mL)をフラスコに導入した後、混合物を還流下で4時間撹拌した。反応後、混合物を塩化メチレン(MC)で抽出し、硫酸マグネシウムで乾燥させ、減圧下で蒸留した。カラムクロマトグラフィーにより混合物から生成物を分離し、化合物1-2(18g、収率：90%)を得た。

40

【0156】

化合物1-3の調製

化合物1-2(18g、47.0mmol)、酢酸パラジウム(1.0g、4.70mmol)、トリシクロヘキシルホスホニウムテトラフルオロボラート(3.4g、9.40mmol)、炭酸セシウム(46g、141mmol)、及びジメチルアセトアミド(240mL)をフラスコに導入した後、混合物を還流下で4時間撹拌した。反応後、混合物を塩化メチレン(MC)で抽出し、硫酸マグネシウムで乾燥させ、次いで、減圧下で蒸留した。カラムクロマトグラフィーにより混合物から生成物を分離し、化合物1-3(6.7g、収率：40%)を得た。

【0157】

化合物C-101の調製

50

化合物 1 - 3 (6 . 7 g、18 . 4 mmol)、2 - (3 - プロモフェニル) - 4 , 6 - ジフェニル - 1 , 3 , 5 - トリアジン (7 . 8 g、20 . 2 mmol)、トリス (ジベンジルインデンアセトン) ジパラジウム (0 . 8 g、0 . 92 mmol)、トリ - tert - ブチルホスフィン (0 . 9 mL) (50 %)、1 . 84 mmol)、ナトリウム tert - ブトキシド (4 . 4 g、46 . 1 mmol)、及びトルエン (100 mL) をフラスコに導入した後、混合物を還流下で 3 時間攪拌した。反応後、混合物を塩化メチレン (MC) で抽出し、硫酸マグネシウムで乾燥させ、減圧下で蒸留した。カラムクロマトグラフィーにより混合物から生成物を分離し、化合物 C - 101 (8 . 3 g、収率 : 67 %) を得た。

【 0158 】

10

[表]

	MW	UV	PL	M.P
C-101	670.78	390nm	541nm	382°C

【 0159 】

[素子の実施例 1] 本開示の化合物を使用した OLED

以下のように、本開示の有機エレクトロルミネッセンス化合物を使用して OLED を作製した。有機発光ダイオード (OLED) のガラス基板上の透明電極用インジウムスズ酸化物 (ITO) 薄膜 (15 / sq) (Geomatec) を、トリクロロエチレン、アセトン、エタノール、及び蒸留水を逐次的に用いて超音波洗浄に供し、イソプロパノール中に保管した。次いで、ITO 基板を真空蒸着装置の基板ホルダ上に取り付けた。N¹, N^{1'} - ([1 , 1' - ビフェニル] - 4 , 4' - ジイル) ビス (N¹ - (ナフタレン - 1 - イル) - N⁴, N⁴ - ジフェニルベンゼン - 1 , 4 - ジアミン) を前記真空蒸着装置のセル内に導入し、次いで、前記装置のチャンバ内の圧力を 10⁻⁶ トールに調節した。その後、セルに電流を印加して上記導入した材料を蒸着させ、それによって ITO 基板の上に 60 nm の厚さを有する正孔注入層を形成した。次いで、N, N' - ジ (4 - ビフェニル) - N, N' - ジ (4 - ビフェニル) - 4 , 4' - ジアミノビフェニルを前記真空蒸着装置の別のセル内に導入し、セルに電流を印加することによって蒸着させ、それによって正孔注入層上に 20 nm の厚さを有する正孔輸送層を形成した。その後、真空蒸着装置の一方のセル内に化合物 C - 1 をホストとして導入し、別のセル内には化合物 D - 87 をドーパントとして導入した。2つの材料を異なる比率で蒸着させることにより、ホスト及びドーパントの総量に基づいて 4 wt % のドーピング量でドーパントが蒸着され、正孔輸送層上に 30 nm の厚さを有する発光層が形成された。次いで、2 - (4 - (9 , 10 - ジ (ナフタレン - 2 - イル) アントラセン - 2 - イル) フェニル) - 1 - フェニル - 1 H - ベンゾ [d] イミダゾールを一方のセル内に導入し、リチウムキノレートを別のセル内に導入した。2つの材料を同じ比率で蒸着させることにより、それらは、それぞれ 50 wt % のドーピング量で蒸着され、発光層上に 30 nm の厚さを有する電子輸送層が形成された。リチウムキノレートを 2 nm の厚さを有する電子注入層として電子輸送層上にドーピングした後、次いで、150 nm の厚さを有する Al 陰極を別の真空蒸着装置によって電子注入層上に蒸着した。このようにして、OLED を作製した。OLED を作製するために使用した全ての材料は、10⁻⁶ トールで真空昇華によって精製した。作製された OLED は、3.6 V の駆動電圧で 1,050 cd / m² の輝度及び 8.1 mA / cm² の電流密度を有する赤色の発光を示した。5,000 ニットの輝度が 90 % まで低下するのにかった最短時間は、200 時間であった。

20

30

40

【 0160 】

[比較例 1]

従来の有機エレクトロルミネッセンス化合物を使用した OLED

【 0161 】

以下に示す化合物 A - 1、及び化合物 D - 88 をホスト及びドーパントとして使用した

50

こと以外は素子の実施例 1 と同様の様式で O L E D を作製した。作製された O L E D は、 3.8 V の駆動電圧で 980 cd/m^2 の輝度及び 16.4 mA/cm^2 の電流密度を有する赤色の発光を示した。5,000ニットの輝度が90%まで低下するのにかかった最短時間は、12時間であった。

【0162】

[比較例 2]

従来の有機エレクトロルミネセンス化合物を使用した O L E D

【0163】

以下に示す化合物 A - 2、及び化合物 D - 88 をホスト及びドープントとして使用したこと以外は素子の実施例 1 と同様の様式で O L E D を作製した。作製された O L E D は、 4.1 V の駆動電圧で $1,020 \text{ cd/m}^2$ の輝度及び 13.1 mA/cm^2 の電流密度を有する赤色の発光を示した。5,000ニットの輝度が90%まで低下するのにかかった最短時間は、10時間であった。

10

【0164】

[比較例 3]

従来の有機エレクトロルミネセンス化合物を使用した O L E D

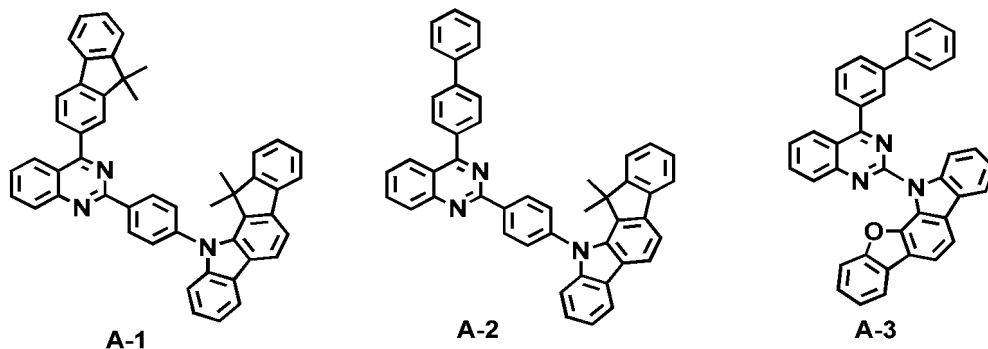
【0165】

以下に示す化合物 A - 3、及び化合物 D - 87 をホスト及びドープントとして使用したこと以外は素子の実施例 1 と同様の様式で O L E D を作製した。作製された O L E D は、 4.2 V の駆動電圧で $1,110 \text{ cd/m}^2$ の輝度及び 9.8 mA/cm^2 の電流密度を有する赤色の発光を示した。5,000ニットの輝度が90%まで低下するのにかかった最短時間は、10時間であった。

20

【0166】

【化 2 4】



30

【0167】

上で確認したように、本開示の有機エレクトロルミネセンス化合物は、従来の有機エレクトロルミネセンス化合物と比べて、より低い駆動電圧、より長い寿命、及びより良好な発光効率を提供する。本開示の有機エレクトロルミネセンス化合物を使用した有機エレクトロルミネセンス素子は、駆動電圧、寿命、及び発行特性、特に、電流効率及び電力効率において優越性を示す。

40

【0168】

[素子の実施例 1 - 1 ~ 1 - 7]

本開示の第 1 のホスト化合物及び第 2 のホスト化合物の共蒸着を使用することによって作製された O L E D

【0169】

以下のように、本開示の発光材料を使用して O L E D を作製した。有機発光ダイオード (O L E D) のガラス基板上の透明電極用インジウムスズ酸化物 (I T O) 薄膜 ($10 / \text{sq}$) (G e o m a t e c) を、トリクロロエチレン、アセトン、エタノール、及び蒸留水を逐次的に用いて超音波洗浄に供し、イソプロパノール中に保管した。次いで、I T O 基板を真空蒸着装置の基板ホルダ上に取り付けた。N⁴, N⁴' - ジフェニル - N⁴,

50

N⁴' - ビス(9 - フェニル - 9H - カルバゾール - 3 - イル) - [1, 1' - ビフェニル] - 4, 4' - ジアミン(HI - 1)を真空蒸着装置のセル内に導入し、次いで、装置のチャンバ内の圧力を10⁻⁶ トールに調節した。その後、セルに電流を印加して上記導入した材料を蒸着させ、それによってITO基板上に80 nmの厚さを有する正孔注入層を形成した。次いで、1, 4, 5, 8, 9, 12 - ヘキサアザトリフェニレン - ヘキサカルボニトリル(HI - 2)を真空蒸着装置の別のセル内に導入し、セルに電流を印加することによって蒸着させ、それによって第1の正孔注入層上に5 nmの厚さを有する第2の正孔注入層を形成した。真空蒸着装置の一方のセル内にN - ([1, 1' - ビフェニル] - 4 - yl) - 9, 9 - ジメチル - N - (4 - (9 - フェニル - 9H - カルバゾール - 3 - yl)フェニル) - 9H - フルオレン - 2 - アミン(HT - 1)を導入し、セルに電流を印加することによって蒸着させ、それによって第2の正孔注入層上に10 nmの厚さを有する第1の正孔輸送層を形成した。次いで、N, N - ジ([1, 1' - ビフェニル] - 4 - イル) - 4' - (9H - カルバゾール - 9 - イル) - [1, 1' - ビフェニル] - 4 - アミン(HT - 2)を真空蒸着装置の別のセル内に導入し、セルに電流を印加することによって蒸着させ、それによって第1の正孔輸送層上に60 nmの厚さを有する第2の正孔輸送層を形成した。ホスト材料として、下の表1に示す2つの化合物を、真空蒸着装置の2つのセル内に、それぞれ、第1のホスト化合物及び第2のホスト化合物として導入した。表1に示すドーパント化合物を別のセルに導入した。2つのホスト化合物を1 : 1の同じ比率で蒸着させる一方で、ドーパントをホスト化合物とは異なる比率で蒸着させることにより、ホスト及びドーパントの総量に基づいて3 wt %のドーピング量でドーパントが蒸着され、正孔輸送層に40 nmの厚さを有する発光層が形成された。2, 4 - ビス(9, 9 - ジメチル - 9H - フルオレン - 2 - yl) - 6 - (ナフタレン - 2 - yl) - 1, 3, 5 - トリアジン(ET - 1)及びリチウムキノレート(EI - 1)を真空蒸着装置の2つのセル内にそれぞれ導入し、1 : 1の同じ比率で蒸着させ、それによって発光層上に30 nmの厚さを有する電子輸送層が形成された。リチウムキノレート(EI - 1)を2 nmの厚さを有する電子注入層として電子輸送層上にドーピングした後、次いで、80 nmの厚さを有するAl陰極を別の真空蒸着装置によって電子注入層上に蒸着した。

10

20

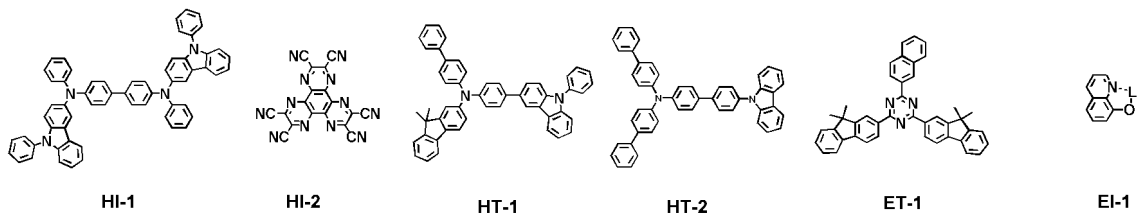
30

40

50

【0170】

【化25】



【0171】

[比較例1 - 1 ~ 1 - 4]

第2のホスト化合物を単一のホストとして使用したOLED

【0172】

下の表1に示す第2のホスト化合物のみを発光層のホストとして使用したこと以外は素子の実施例1 - 1 ~ 1 - 7と同様の様式でOLEDを作製した。

【0173】

[比較例2 - 1 ~ 2 - 2]

第1のホスト化合物を単一のホストとして使用したOLED

【0174】

下の表1に示す第1のホスト化合物のみを発光層のホストとして使用したこと以外は素子の実施例1 - 1 ~ 1 - 7と同様の様式でOLEDを作製した。

【0175】

素子の実施例1 - 1 ~ 1 - 7、比較例1 - 1 ~ 1 - 4、及び比較例2 - 1 ~ 2 - 2で作

製された有機エレクトロルミネッセンス素子の特性を、下の表 1 に示す。

【 0 1 7 6 】

【表 1】

[表1]

素子の 実施例番号	ホスト	ドーパント	電圧 (V)	電流効率 (cd/A)	色座標 (x, y)		輝度が100%か ら85%まで低下 するのにかかっ た最短時間
1-1	H1-28:C-3 (1:1)	D-96	3.6	26.5	665	335	410時間
1-2	H1-287:C-3 (1:1)	D-96	3.7	26.3	666	334	410時間
1-3	H1-35:C-9 (1:1)	D-96	4.2	24.7	655	344	1290時間
1-4	H1-28:C-9 (1:1)	D-96	4.2	24.5	655	344	1230時間
1-5	H1-287:C-9 (1:1)	D-96	4.3	25.4	658	341	1290時間
1-6	H1-287:C-15 (1:1)	D-96	4.1	28.7	668	332	520時間
1-7	H1-287:C-101 (1:1)	D-96	4.1	28.0	668	332	60時間

10

20

【 0 1 7 7 】

[表]

比較例 1-1	C-3	D-96	3.7	26.2	670	330	130時間
比較例 1-2	C-9	D-96	4.1	24.3	664	336	800時間
比較例 1-3	C-15	D-96	3.8	25.7	671	329	95時間
比較例 1-4	C-101	D-96	4	24.8	671	329	7時間
比較例 2-1	H1-28	D-96	8.5	2.4	640	342	X
比較例 2-2	H1-287	D-96	8.8	2.4	642	341	X

*Xは、電流効率が低過ぎるため、素子の寿命を測定することができないことを示す。

30

40

【 0 1 7 8 】

比較例 1 - 1 ~ 1 - 4 の素子を比較例 2 - 2 ~ 2 - 2 の素子と比較すると、本開示の 1

50

つの有機エレクトロルミネッセンス化合物を宿主材料として使用した有機エレクトロルミネッセンス素子は、駆動電圧、電流効率、色純度、及び寿命において改善を示した。しかしながら、素子の実施例 1 - 1 ~ 1 - 7 を比較例 1 - 1 ~ 1 - 4、2 - 1、及び 2 - 2 と比較すると、有機エレクトロルミネッセンス素子は、本開示の有機エレクトロルミネッセンス化合物を含む多成分宿主材料を使用することにより、性能、特に、有機エレクトロルミネッセンス素子の寿命において卓越性を示した。すなわち、多成分宿主材料を使用した有機エレクトロルミネッセンス素子は、1つの宿主化合物を使用した素子よりも長い寿命を示すことができる。

【 国際調査報告 】

INTERNATIONAL SEARCH REPORT		International application No. PCT/KR2014/012933
A. CLASSIFICATION OF SUBJECT MATTER <i>C07D 491/147 (2006.01) C07D 495/14 (2006.01) C07D 209/58 (2006.01) C07D 401/04 (2006.01) C07D 401/10 (2006.01)</i> <i>C07D 401/14 (2006.01) C07D 405/14 (2006.01) C07D 409/14 (2006.01) C07D 487/14 (2006.01) C07D 487/04 (2006.01)</i> <i>C07F 9/00 (2006.01) C07F 15/00 (2006.01) C09K 11/06 (2006.01) H01L 27/32 (2006.01) H01L 51/54 (2006.01)</i>		
According to International Patent Classification (IPC) or to both national classification and IPC		
B. FIELDS SEARCHED		
Minimum documentation searched (classification system followed by classification symbols)		
Documentation searched other than minimum documentation to the extent that such documents are included in the fields searched		
Electronic data base consulted during the international search (name of data base and, where practicable, search terms used)		
STN Registry and CAplus: Substructure search based on compounds of Formula (1)		
PatentScope and Espacenet: Inventor and Applicant Search		
C. DOCUMENTS CONSIDERED TO BE RELEVANT		
Category*	Citation of document, with indication, where appropriate, of the relevant passages	Relevant to claim No.
Documents are listed in the continuation of Box C		
<input checked="" type="checkbox"/> Further documents are listed in the continuation of Box C <input checked="" type="checkbox"/> See patent family annex		
* Special categories of cited documents: "A" document defining the general state of the art which is not considered to be of particular relevance "E" earlier application or patent but published on or after the international filing date "L" document which may throw doubts on priority claim(s) or which is cited to establish the publication date of another citation or other special reason (as specified) "O" document referring to an oral disclosure, use, exhibition or other means "P" document published prior to the international filing date but later than the priority date claimed	"I" later document published after the international filing date or priority date and not in conflict with the application but cited to understand the principle or theory underlying the invention "X" document of particular relevance; the claimed invention cannot be considered novel or cannot be considered to involve an inventive step when the document is taken alone "Y" document of particular relevance; the claimed invention cannot be considered to involve an inventive step when the document is combined with one or more other such documents, such combination being obvious to a person skilled in the art "&" document member of the same patent family	
Date of the actual completion of the international search 16 March 2015	Date of mailing of the international search report 16 March 2015	
Name and mailing address of the ISA/AU AUSTRALIAN PATENT OFFICE PO BOX 200, WODEN ACT 2606, AUSTRALIA Email address: pct@ipaustrialia.gov.au	Authorised officer Benjamin Harris AUSTRALIAN PATENT OFFICE (ISO 9001 Quality Certified Service) Telephone No. (02) 6283 2272	

INTERNATIONAL SEARCH REPORT		International application No.
C (Continuation). DOCUMENTS CONSIDERED TO BE RELEVANT		PCT/KR2014/012933
Category*	Citation of document, with indication, where appropriate, of the relevant passages	Relevant to claim No.
X	WO 2010/151011 A1 (DOW ADVANCED DISPLAY MATERIALS, LTD.) 29 December 2010 Compound 2-3, paragraphs [88]-[94]	1-3
P,X	US 2014/0353640 A1 (HAKETA et al.) 04 December 2014 Compounds 1-24 and relevant intermediates thereof, examples 1-24, paragraphs [0241]-[0317] and relevant compounds of paragraphs [0100] particularly Page 37, left-hand column, 2nd compound, and Page 49, right-hand column, 3rd compound; paragraphs [0104]-[0133] and example 48 paragraphs [0331]-[0334]	1-7
P,X	WO 2014/157708 A1 (IDEMITSU KOSAN CO., LTD.) 02 October 2014 Compounds 1-12 and 14-16 and relevant intermediates thereof, examples 1-12 and 14-16, paragraphs [0260]-[0297] and relevant compounds of paragraphs [0057]-[0161] particularly Page 23, last row, 1st compound and Page 66, last row, 4th compound; paragraphs [0162]-[0168] and [0182]-[0184]	1-7
P,X	KR 10-2014-0039622 A (DOOSAN CORPORATION) 02 April 2014 Compounds 1-34, 45-46 and 56-60 paragraphs [0038]-[0043], particularly compound 26, and examples 1-12, 14 and 15 paragraphs [0056]-[0344]; paragraphs [0044]-[0054] and evaluation example 1 paragraphs [0345]-[0361]	1-5
P,X	KR 10-2014-0000611 A (PIENEICHITEKEU CO., LTD) 03 January 2014 Compounds 38-39 and 41-79 paragraphs [0035]-[0042], and manufacturing examples 10-14 paragraphs [0155]-[0197]; paragraphs [0043]-[0094] and device embodiment 1 paragraphs [0260]-[0272]	1-3 and 5
Form PCT/ISA/210 (fifth sheet) (July 2009)		

INTERNATIONAL SEARCH REPORT Information on patent family members		International application No. PCT/KR2014/012933	
This Annex lists known patent family members relating to the patent documents cited in the above-mentioned international search report. The Australian Patent Office is in no way liable for these particulars which are merely given for the purpose of information.			
Patent Document/s Cited in Search Report		Patent Family Member/s	
Publication Number	Publication Date	Publication Number	Publication Date
WO 2010/151011 A1	29 December 2010	KR 20100137188 A TW 201109420 A	30 Dec 2010 16 Mar 2011
US 2014/0353640 A1	04 December 2014	JP 2015007036 A	15 Jan 2015
WO 2014/157708 A1	02 October 2014		
KR 10-2014-0039622 A	02 April 2014	None	
KR 10-2014-0000611 A	03 January 2014	None	
End of Annex			
<p><small>Due to data integration issues this family listing may not include 10 digit Australian applications filed since May 2001. Form PCT/ISA/210 (Family Annex)(July 2009)</small></p>			

フロントページの続き

(51) Int. Cl.		F I		テーマコード (参考)	
C 0 7 D 209/86	(2006.01)	C 0 7 D	519/00	3 0 1	4 C 2 0 4
C 0 7 D 409/14	(2006.01)	C 0 7 D	209/86		
C 0 7 D 405/14	(2006.01)	C 0 7 D	409/14		
C 0 7 D 401/04	(2006.01)	C 0 7 D	405/14		
C 0 7 D 405/04	(2006.01)	C 0 7 D	401/04		
C 0 7 D 405/10	(2006.01)	C 0 7 D	405/04		
		C 0 7 D	405/10		

(81) 指定国 AP (BW, GH, GM, KE, LR, LS, MW, MZ, NA, RW, SD, SL, ST, SZ, TZ, UG, ZM, ZW), EA (AM, AZ, BY, KG, KZ, RU, TJ, TM), EP (AL, AT, BE, BG, CH, CY, CZ, DE, DK, EE, ES, FI, FR, GB, GR, HR, HU, IE, IS, IT, LT, LU, LV, MC, MK, MT, NL, NO, PL, PT, RO, RS, SE, SI, SK, SM, TR), OA (BF, BJ, CF, CG, CI, CM, GA, GN, GQ, GW, KM, ML, MR, NE, SN, TD, TG), AE, AG, AL, AM, AO, AT, AU, AZ, BA, BB, BG, BH, BN, BR, BW, BY, BZ, CA, CH, CL, CN, CO, CR, CU, CZ, DE, DK, DM, DO, DZ, EC, EE, EG, ES, FI, GB, GD, GE, GH, GM, GT, HN, HR, HU, ID, IL, IN, IR, IS, JP, KE, KG, KN, KP, KZ, LA, LC, LK, LR, LS, LU, LY, MA, MD, ME, MG, MK, MN, MW, MX, MY, MZ, NA, NG, NI, NO, NZ, OM, PA, PE, PG, PH, PL, PT, QA, RO, RS, RU, RW, SA, SC, SD, SE, SG, SK, SL, SM, ST, SV, SY, TH, TJ, TM, TN, TR, TT, TZ, UA, UG, US, UZ

- (72) 発明者 ヒュン - ジュ・カン
大韓民国 4 2 3 - 7 6 6 キョンギ - ド クワンミョン - シ ハアン - ロ 1 9 8 2 0 5 - 1 0 0 1
- (72) 発明者 ヨン - ジル・キム
大韓民国 4 4 5 - 3 2 0 キョンギ - ド ファソン - シ ドンタンズブソク - ロ 9 5 - 1 8 1 2 - 1 1 3
- (72) 発明者 ヨン - ムク・リム
大韓民国 4 4 6 - 7 5 1 キョンギ - ド ヨンギン - シ ジフン - ク ドンベク・ロ 1 2 5 1 0 1 - 2 0 1
- (72) 発明者 ナム - キュン・キム
大韓民国 4 4 8 - 5 2 7 キョンギ - ド ヨンイン - シ スジ - ク ポエウン - ダエロ 2 1 9 3 0 2 - 1 8 0 1
- (72) 発明者 ビトナリ・キム
大韓民国 4 3 1 - 7 7 4 キョンギ - ド アンヤン - シ ドンガン - ク ドンガン - ロ 1 0 1 1 0 2 - 2 4 0 1
- (72) 発明者 チ - シク・キム
大韓民国 4 4 5 - 7 5 2 キョンギ - ド ファソン - シ ドンタンバンソク - ロ 7 1 4 4 1 - 1 2 0 1
- (72) 発明者 ヨン - ジュン・チョ
大韓民国 4 6 3 - 4 0 0 キョンギ - ド ソンナム - シ ブンダン - ク パンギョ - ロ 3 9 3 2 0 4 - 7 0 1
- (72) 発明者 キュン - ジュ・リー
大韓民国 1 2 1 - 7 7 3 ソウル マポ - ク サチャン - ロ・8 - ジル 7 2 2 1 0 - 1 0 0 1
- (72) 発明者 ホン - ヨブ・ナ
大韓民国 1 5 0 - 8 0 6 ソウル ヨンドンポ - ク グクホ - ダエロ・3 7 - ジル 2 2 1 0 3 - 4 0 1
- (72) 発明者 テ - ジン・リー
大韓民国 4 6 2 - 8 2 7 キョンギ - ド ソンナム - シ ジュンラン - グ 1 1 4 8 ベオン - ジル ソンナム - ダエロ 1 0 - 1
- (72) 発明者 ジェ - フーン・シム

大韓民国 150-796 ソウル ヨンドンポ - ク ガクジェウミュン - ロ 79 エイチ - 4
07

(72)発明者 キュン - フーン・チョイ

大韓民国 445-160 キョンギ - ド ファソン - シ ドンタンジュンカン - ロ 189 3
37-801

(72)発明者 ヒー - チュン・アン

大韓民国 443-400 ギョンギ - ド スウォン - シ ヨントン - ク ヨントン - ロ・174
ベオン - ジル 62

(72)発明者 ジ - ソン・ジュン

大韓民国 443-390 キョンギ - ド スウォン - シ ヨントン - ク ドギョン - ダエロ・1
483ベオン - ジル 97

(72)発明者 ヨン - クワン・キム

大韓民国 443-814 キョンギ - ド スウォン - シ ヨントン - ク マエヨン - ロ・415
ベオン - ジル 46 304

(72)発明者 ジン - リ・ホン

大韓民国 420-833 キョンギ - ド ブクヘン - シ ウォンミ - ク ジボン - ロ・143ベ
オン - ジル 38

Fターム(参考) 3K107 AA01 BB01 CC04 CC07 CC12 CC14 CC21 DD53 DD59 DD68
4C050 AA01 AA07 AA08 BB04 CC04 CC16 DD07 EE02 FF01 GG01
HH04
4C063 AA01 AA03 AA05 BB01 BB02 BB06 CC12 CC14 CC29 CC43
CC76 CC94 DD08 EE10
4C071 AA01 AA07 AA08 BB02 CC01 CC11 CC21 CC22 DD40 EE13
FF03 FF15 GG05 JJ01 JJ05 LL05
4C072 MM08
4C204 BB05 CB25 DB01 EB01 FB08 GB13

专利名称(译)	新型有机电致发光化合物，含有该组分的多组分主体材料和有机电致发光材料		
公开(公告)号	JP2017502509A	公开(公告)日	2017-01-19
申请号	JP2016538577	申请日	2014-12-26
[标]申请(专利权)人(译)	罗门哈斯电子材料有限公司		
申请(专利权)人(译)	罗门哈斯电子材料有限公司韩国		
[标]发明人	ヒーリョンカン ミジャリー ヒュンジュカン ヨンジルキム ヨンムクリム ナムキュンキム ビトナリキム チシクキム ヨンジュンチョ キュンジュリー ホンヨプナ テジンリー ジェフーンシム キュンフーンチョイ ヒーチュンアン ジソンジュン ヨンクワンキム ジンリホン		
发明人	ヒー-リョン-カン ミ-ジャ-リー ヒュン-ジュ-カン ヨン-ジル-キム ヨン-ムク-リム ナム-キュン-キム ビトナリ-キム チ-シク-キム ヨン-ジュン-チョ キュン-ジュ-リー ホン-ヨプ-ナ テ-ジン-リー ジェ-フーン-シム キュン-フーン-チョイ ヒー-チュン-アン ジ-ソン-ジュン ヨン-クワン-キム ジン-リ-ホン		
IPC分类号	H01L51/50 C07D495/14 C07D491/147 C07D491/14 C07D519/00 C07D209/86 C07D409/14 C07D405/14 C07D401/04 C07D405/04 C07D405/10		
FI分类号	H05B33/14.B C07D495/14.C C07D495/14.A C07D491/147 C07D491/14 C07D519/00.301 C07D209/86 C07D409/14 C07D405/14 C07D401/04 C07D405/04 C07D405/10		
F-TERM分类号	3K107/AA01 3K107/BB01 3K107/CC04 3K107/CC07 3K107/CC12 3K107/CC14 3K107/CC21 3K107/DD53 3K107/DD59 3K107/DD68 4C050/AA01 4C050/AA07 4C050/AA08 4C050/BB04 4C050/CC04		

4C050/CC16 4C050/DD07 4C050/EE02 4C050/FF01 4C050/GG01 4C050/HH04 4C063/AA01 4C063/AA03 4C063/AA05 4C063/BB01 4C063/BB02 4C063/BB06 4C063/CC12 4C063/CC14 4C063/CC29 4C063/CC43 4C063/CC76 4C063/CC94 4C063/DD08 4C063/EE10 4C071/AA01 4C071/AA07 4C071/AA08 4C071/BB02 4C071/CC01 4C071/CC11 4C071/CC21 4C071/CC22 4C071/DD40 4C071/EE13 4C071/FF03 4C071/FF15 4C071/GG05 4C071/JJ01 4C071/JJ05 4C071/LL05 4C072/MM08 4C204/BB05 4C204/CB25 4C204/DB01 4C204/EB01 4C204/FB08 4C204/GB13

優先権 1020130165394 2013-12-27 KR
1020140130114 2014-09-29 KR

其他公开文献 JP6592439B2

外部链接 Espacenet

摘要(译)

本公开涉及有机电致发光化合物，多组分主体材料和包含它们的有机电致发光器件。本公开的有机电致发光化合物具有良好的发光效率，并且可以用作发光层的主体。通过使用根据本公开的有机电致发光化合物，有机电致发光器件可以具有高的色纯度，低的驱动电压，长的寿命以及改善的电流效率和功率效率。[选择图]无

(19) 日本国特許庁 (JP)	(12) 公表特許公報 (A)	(11) 特許出願公表番号 特表2017-502509 (P2017-502509A) (43) 公表日 平成29年1月19日 (2017.1.19)
(51) Int. Cl. H01L 51/60 (2006.01) C07D 495/14 (2006.01) C07D 491/147 (2006.01) C07D 491/14 (2006.01) C07D 519/00 (2006.01)	F I H05B 33/14 C07D 495/14 C07D 495/14 C07D 491/147 C07D 491/14	テーマコード (参考) 3K107 4C050 4C063 4C071 4C072
(21) 出願番号 特願2016-538577 (P2016-538577)	(71) 出願人 509266480	審査請求 未請求 予備審査請求 未請求 (全 64 頁) 最終頁に続く
(86) (22) 出願日 平成26年12月26日 (2014.12.26)	(72) 発明者 ヒーリョン・カン	
(85) 翻訳文提出日 平成28年6月10日 (2016.6.10)	(72) 発明者 大韓民国 151-815 ソウル クァナク インハン・12ナージュル 31 ミージャ・リー	
(86) 国際出願番号 PCT/KR2014/012933	(72) 発明者 大韓民国 445-739 キョンギド ファソンシ ヨントネロ・26ベオージュル 24 305-1503	
(87) 国際公開番号 W02015/099507		
(87) 国際公開日 平成27年7月2日 (2015.7.2)		
(31) 優先権主張番号 10-2013-0165394		
(32) 優先日 平成25年12月27日 (2013.12.27)		
(33) 優先権主張国 韓国 (KR)		
(31) 優先権主張番号 10-2014-0130114		
(32) 優先日 平成26年9月29日 (2014.9.29)		
(33) 優先権主張国 韓国 (KR)		
(54) 【発明の名称】 新規有機エレクトロルミネッセンス化合物、ならびにそれを含む多成分ホスト材料及び有機エレクトロルミネッセンス素子		