

(19) 日本国特許庁 (JP)

(12) 特 許 公 報 (B2)

(11) 特許番号

特許第5645365号  
(P5645365)

(45) 発行日 平成26年12月24日 (2014. 12. 24)

(24) 登録日 平成26年11月14日 (2014. 11. 14)

(51) Int. Cl.

F I

H O 1 L 51/50 (2006. 01)

H O 5 B 33/14 B

H O 1 L 51/46 (2006. 01)

H O 5 B 33/22 A

C O 7 C 15/30 (2006. 01)

H O 5 B 33/22 C

C O 7 C 15/38 (2006. 01)

H O 1 L 31/04 1 5 4 A

C O 9 K 11/06 (2006. 01)

H O 1 L 31/04 1 5 4 B

請求項の数 12 外国語出願 (全 122 頁) 最終頁に続く

(21) 出願番号 特願2009-440 (P2009-440)  
 (22) 出願日 平成21年1月5日 (2009. 1. 5)  
 (65) 公開番号 特開2009-283899 (P2009-283899A)  
 (43) 公開日 平成21年12月3日 (2009. 12. 3)  
 審査請求日 平成24年1月4日 (2012. 1. 4)  
 (31) 優先権主張番号 10-2008-0023831  
 (32) 優先日 平成20年3月14日 (2008. 3. 14)  
 (33) 優先権主張国 韓国 (KR)  
 (31) 優先権主張番号 10-2008-0106223  
 (32) 優先日 平成20年10月29日 (2008. 10. 29)  
 (33) 優先権主張国 韓国 (KR)

(73) 特許権者 507256407  
 グレイセル・ディスプレイ・インコーポレ  
 ーテッド  
 GRACEL DISPLAY INC.  
 大韓民国, ソウル・133-833, ソン  
 ドン・グウ, ソンスー・2 ガー・3 ドン・2  
 84-25, サムヤン・テクノ・タウン・  
 フィフス・フロア  
 (74) 代理人 110000589  
 特許業務法人センダ国際特許事務所  
 (72) 発明者 リ, ス・ヨン  
 大韓民国, ギョンギド・472-120  
 , ナミャンジュシ, ホピョン・ドン・2  
 98-6

最終頁に続く

(54) 【発明の名称】 新規な有機電界発光化合物及びこれを使用する有機電界発光素子

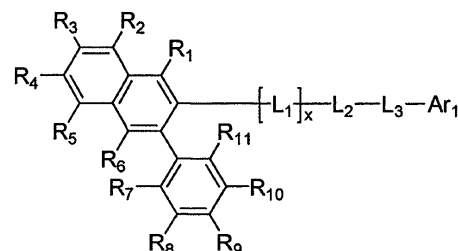
(57) 【特許請求の範囲】

【請求項 1】

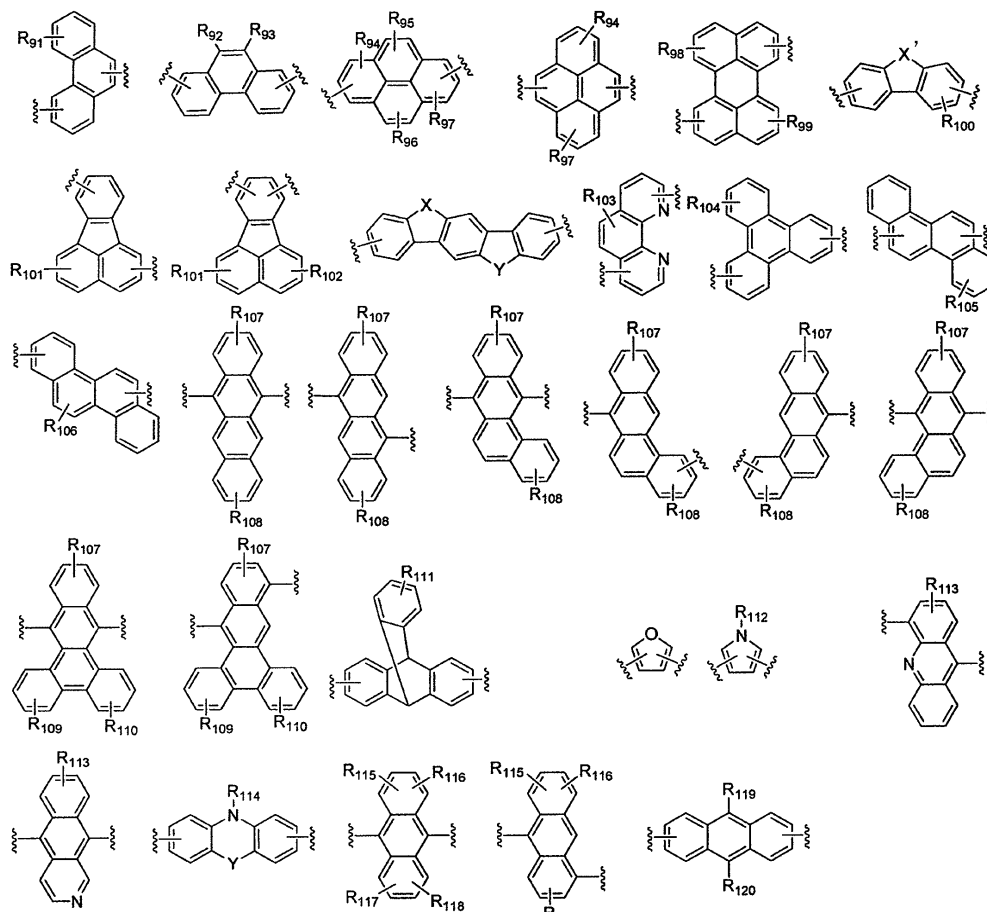
下記化学式 1 により表される有機電界発光化合物：

【化 1】

化学式 1

式中、 $L_1$  は、下記構造から選択され、

## 【化 2】



10

20

(前記の  $L_1$  を表す式において、 $X$  及び  $Y$  は、互いに独立して、 $-(CR_{71}R_{72})_m$ 、 $-N(R_{73})-$ 、 $-S-$ 、 $-O-$ 、 $-Si(R_{74})(R_{75})-$ 、 $-P(R_{76})-$ 、または  $-(R_{84})C=C(R_{85})-$  を表し、及び  $X'$  は、 $-N(R_{73})-$ 、 $-S-$ 、 $-O-$ 、 $-Si(R_{74})(R_{75})-$ 、 $-P(R_{76})-$ 、または  $-(R_{84})C=C(R_{85})-$  を表し；

30

$R_{71}$  乃至  $R_{76}$ 、 $R_{84}$ 、 $R_{85}$  及び  $m$  はそれぞれ、下記式における  $R_{71}$  乃至  $R_{76}$ 、 $R_{84}$ 、 $R_{85}$  及び  $m$  と同様に定義され；

$R_{91}$  乃至  $R_{120}$  は、互いに独立して、水素、重水素、ハロゲン、 $(C1-C60)$  アルキル、 $(C6-C60)$  アリール、 $N$ 、 $O$  及び  $S$  から選択された一つ以上のヘテロ原子を含む  $(C3-C60)$  ヘテロアリール、モルホリノ、チオモルホリノ、 $N$ 、 $O$  及び  $S$  から選択された一つ以上のヘテロ原子を含む 5 員もしくは 6 員のヘテロシクロアルキル、 $(C3-C60)$  シクロアルキル、トリ  $(C1-C60)$  アルキルシリル、ジ  $(C1-C60)$  アルキル  $(C6-C60)$  アリールシリル、トリ  $(C6-C60)$  アリールシリル、アダマンチル、 $(C7-C60)$  ビシクロアルキル、 $(C2-C60)$  アルケニル、 $(C2-C60)$  アルキニル、シアノ、 $(C1-C60)$  アルキルアミノ、 $(C6-C60)$  アリールアミノ、 $(C6-C60)$  アリール  $(C1-C60)$  アルキル、 $(C1-C60)$  アルキルオキシ、 $(C1-C60)$  アルキルチオ、 $(C6-C60)$  アリールオキシ、 $(C6-C60)$  アリールチオ、 $(C1-C60)$  アルコキシカルボニル、 $(C1-C60)$  アルキルカルボニル、 $(C6-C60)$  アリールカルボニル、カルボキシル、ニトロもしくはヒドロキシルを表すか、または  $R_{91}$  乃至  $R_{120}$  は縮合環を含むかもしくは含まない  $(C3-C60)$  アルキレンもしくは  $(C3-C60)$  アルケニレンで連結されて、脂環式環または単環式もしくは多環式芳香族環を形成することができる。)

40

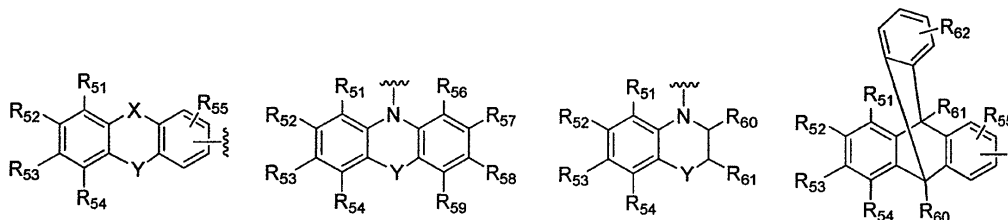
$L_2$  及び  $L_3$  は、互いに独立して、化学結合を表すか、または  $(C1-C60)$  アルキレンオキシ、 $(C1-C60)$  アルキレンチオ、 $(C6-C60)$  アリーレンオキシ、(

50

C 6 - C 6 0) アリーレンチオ、(C 6 - C 6 0) アリーレン、もしくはN、O及びSから選択された一つ以上のヘテロ原子を含む(C 3 - C 6 0) ヘテロアリーレンを表し；

Ar<sub>1</sub>は、NR<sub>4 1</sub>R<sub>4 2</sub>、(C 6 - C 6 0) アリール、N、O及びSから選択された一つ以上のヘテロ原子を含む(C 3 - C 6 0) ヘテロアリール、N、O及びSから選択された一つ以上のヘテロ原子を含む5員もしくは6員のヘテロシクロアルキル、(C 3 - C 6 0) シクロアルキル、アダマンチル、(C 7 - C 6 0) ビシクロアルキル、または下記構造から選択される置換基を表し；

【化3】



10

R<sub>1</sub>乃至R<sub>1 1</sub>は、互いに独立して、水素、重水素、ハロゲン、(C 1 - C 6 0) アルキル、(C 6 - C 6 0) アリール、N、O及びSから選択された一つ以上のヘテロ原子を含む(C 3 - C 6 0) ヘテロアリール、モルホリノ、チオモルホリノ、N、O及びSから選択された一つ以上のヘテロ原子を含む5員もしくは6員のヘテロシクロアルキル、(C 3 - C 6 0) シクロアルキル、トリ(C 1 - C 6 0) アルキルシリル、ジ(C 1 - C 6 0) アルキル(C 6 - C 6 0) アリールシリル、トリ(C 6 - C 6 0) アリールシリル、アダマンチル、(C 7 - C 6 0) ビシクロアルキル、(C 2 - C 6 0) アルケニル、(C 2 - C 6 0) アルキニル、シアノ、(C 1 - C 6 0) アルキルアミノ、(C 6 - C 6 0) アリールアミノ、(C 6 - C 6 0) アリール(C 1 - C 6 0) アルキル、(C 1 - C 6 0) アルキルオキシ、(C 1 - C 6 0) アルキルチオ、(C 6 - C 6 0) アリールオキシ、(C 6 - C 6 0) アリールチオ、(C 1 - C 6 0) アルコキシカルボニル、(C 1 - C 6 0) アルキルカルボニル、(C 6 - C 6 0) アリールカルボニル、カルボキシル、ニトロもしくはヒドロキシルを表すか、またはR<sub>1</sub>乃至R<sub>1 1</sub>は隣接した置換基と、縮合環を含むかもしくは含まない(C 3 - C 6 0) アルキレンもしくは(C 3 - C 6 0) アルケニレンで連結されて、脂環式環または単環式もしくは多環式芳香族環を形成することができ；

20

30

R<sub>4 1</sub>及びR<sub>4 2</sub>は、互いに独立して、水素、重水素、ハロゲン、(C 1 - C 6 0) アルキル、(C 6 - C 6 0) アリール、N、O及びSから選択された一つ以上のヘテロ原子を含む(C 3 - C 6 0) ヘテロアリール、モルホリノ、チオモルホリノ、N、O及びSから選択された一つ以上のヘテロ原子を含む5員もしくは6員のヘテロシクロアルキル、(C 3 - C 6 0) シクロアルキル、トリ(C 1 - C 6 0) アルキルシリル、ジ(C 1 - C 6 0) アルキル(C 6 - C 6 0) アリールシリル、トリ(C 6 - C 6 0) アリールシリル、アダマンチル、(C 7 - C 6 0) ビシクロアルキル、(C 2 - C 6 0) アルケニル、(C 2 - C 6 0) アルキニル、シアノ、(C 1 - C 6 0) アルキルアミノ、(C 6 - C 6 0) アリールアミノ、(C 6 - C 6 0) アリール(C 1 - C 6 0) アルキル、(C 1 - C 6 0) アルキルオキシ、(C 1 - C 6 0) アルキルチオ、(C 6 - C 6 0) アリールオキシ、(C 6 - C 6 0) アリールチオ、(C 1 - C 6 0) アルコキシカルボニル、(C 1 - C 6 0) アルキルカルボニル、(C 6 - C 6 0) アリールカルボニル、カルボキシル、ニトロもしくはヒドロキシルを表すか、またはR<sub>4 1</sub>とR<sub>4 2</sub>は、縮合環を含むかもしくは含まない(C 3 - C 6 0) アルキレンもしくは(C 3 - C 6 0) アルケニレンで連結されて、脂環式環または単環式もしくは多環式芳香族環を形成することができ；

40

R<sub>5 1</sub>乃至R<sub>6 2</sub>は、互いに独立して、水素、重水素、ハロゲン、(C 1 - C 6 0) アルキル、(C 6 - C 6 0) アリール、N、O及びSから選択された一つ以上のヘテロ原子を含む(C 3 - C 6 0) ヘテロアリール、モルホリノ、チオモルホリノ、N、O及びSから選択された一つ以上のヘテロ原子を含む5員もしくは6員のヘテロシクロアルキル、(C 3 - C 6 0) シクロアルキル、トリ(C 1 - C 6 0) アルキルシリル、ジ(C 1 - C 6

50

0) アルキル (C 6 - C 6 0) アリールシリル、トリ (C 6 - C 6 0) アリールシリル、アダマンチル、(C 7 - C 6 0) ビシクロアルキル、(C 2 - C 6 0) アルケニル、(C 2 - C 6 0) アルキニル、シアノ、(C 1 - C 6 0) アルキルアミノ、(C 6 - C 6 0) アリールアミノ、(C 6 - C 6 0) アリール (C 1 - C 6 0) アルキル、(C 1 - C 6 0) アルキルオキシ、(C 1 - C 6 0) アルキルチオ、(C 6 - C 6 0) アリールオキシ、(C 6 - C 6 0) アリールチオ、(C 1 - C 6 0) アルコキシカルボニル、(C 1 - C 6 0) アルキルカルボニル、(C 6 - C 6 0) アリールカルボニル、カルボキシル、ニトロもしくはヒドロキシルを表すか、または  $R_{51}$  乃至  $R_{62}$  は隣接した置換基と、縮合環を含むかもしくは含まない (C 3 - C 6 0) アルキレンもしくは (C 3 - C 6 0) アルケニレンで連結されて、脂環式環または単環式もしくは多環式芳香族環を形成することができ

10

X 及び Y は、互いに独立して、化学結合を表すか、または - (C  $R_{71}$   $R_{72}$ )  $m$  -、- N ( $R_{73}$ ) -、- S -、- O -、- Si ( $R_{74}$ ) ( $R_{75}$ ) -、- P ( $R_{76}$ ) -、- C (=O) -、- B ( $R_{77}$ ) -、- In ( $R_{78}$ ) -、- Se -、- Ge ( $R_{79}$ ) ( $R_{80}$ ) -、- Sn ( $R_{81}$ ) ( $R_{82}$ ) -、- Ga ( $R_{83}$ ) - もしくは - ( $R_{84}$ ) C = C ( $R_{85}$ ) - を表し；

$R_{71}$  乃至  $R_{85}$  は、互いに独立して、水素、重水素、ハロゲン、(C 1 - C 6 0) アルキル、(C 6 - C 6 0) アリール、N、O 及び S から選択された一つ以上のヘテロ原子を含む (C 3 - C 6 0) ヘテロアリール、モルホリノ、チオモルホリノ、N、O 及び S から選択された一つ以上のヘテロ原子を含む 5 員もしくは 6 員のヘテロシクロアルキル、(C 3 - C 6 0) シクロアルキル、トリ (C 1 - C 6 0) アルキルシリル、ジ (C 1 - C 6 0) アルキル (C 6 - C 6 0) アリールシリル、トリ (C 6 - C 6 0) アリールシリル、アダマンチル、(C 7 - C 6 0) ビシクロアルキル、(C 2 - C 6 0) アルケニル、(C 2 - C 6 0) アルキニル、シアノ、(C 1 - C 6 0) アルキルアミノ、(C 6 - C 6 0) アリールアミノ、(C 6 - C 6 0) アリール (C 1 - C 6 0) アルキル、(C 1 - C 6 0) アルキルオキシ、(C 1 - C 6 0) アルキルチオ、(C 6 - C 6 0) アリールオキシ、(C 6 - C 6 0) アリールチオ、(C 1 - C 6 0) アルコキシカルボニル、(C 1 - C 6 0) アルキルカルボニル、(C 6 - C 6 0) アリールカルボニル、カルボキシル、ニトロもしくはヒドロキシルを表すか、または  $R_{71}$  と  $R_{72}$ 、 $R_{74}$  と  $R_{75}$ 、 $R_{79}$  と  $R_{80}$ 、 $R_{81}$  と  $R_{82}$ 、もしくは  $R_{84}$  と  $R_{85}$  は、縮合環を含むかしくは含まない (C 3 - C 6 0) アルキレンもしくは (C 3 - C 6 0) アルケニレンで連結されて、脂環式環または単環式もしくは多環式芳香族環を形成することができ；

20

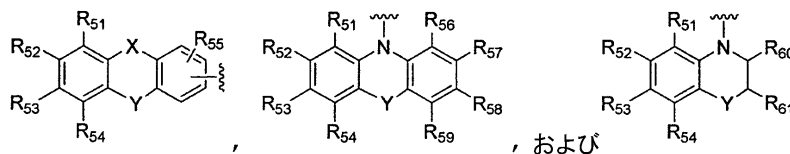
30

$L_2$  及び  $L_3$  のアリーレンもしくはヘテロアリーレン、 $Ar_1$  のアリールもしくはヘテロアリール、または  $R_1$  乃至  $R_{11}$ 、 $R_{41}$ 、 $R_{42}$ 、 $R_{51}$  乃至  $R_{62}$ 、および  $R_{71}$  乃至  $R_{85}$  のアルキル、アリール、ヘテロアリール、ヘテロシクロアルキル、シクロアルキル、トリアルキルシリル、ジアルキルアリールシリル、トリアリールシリル、アルケニル、アルキニル、アルキルアミノもしくはアリールアミノは、重水素、ハロゲン、(C 1 - C 6 0) アルキル、ハロ (C 1 - C 6 0) アルキル、(C 6 - C 6 0) アリール、N、O 及び S から選択された一つ以上のヘテロ原子を含み (C 6 - C 6 0) アリール置換基を有するもしくは有しない (C 3 - C 6 0) ヘテロアリール、モルホリノ、チオモルホリノ、N、O 及び S から選択された一つ以上のヘテロ原子を含む 5 員もしくは 6 員のヘテロシクロアルキル、(C 3 - C 6 0) シクロアルキル、トリ (C 1 - C 6 0) アルキルシリル、ジ (C 1 - C 6 0) アルキル (C 6 - C 6 0) アリールシリル、トリ (C 6 - C 6 0) アリールシリル、アダマンチル、(C 7 - C 6 0) ビシクロアルキル、(C 2 - C 6 0) アルケニル、(C 2 - C 6 0) アルキニル、シアノ、(C 1 - C 6 0) アルキルアミノ、(C 6 - C 6 0) アリールアミノ、(C 6 - C 6 0) アリール (C 1 - C 6 0) アルキル、(C 1 - C 6 0) アルキルオキシ、(C 1 - C 6 0) アルキルチオ、(C 6 - C 6 0) アリールオキシ、(C 6 - C 6 0) アリールチオ、(C 1 - C 6 0) アルコキシカルボニル、(C 1 - C 6 0) アルキルカルボニル、(C 6 - C 6 0) アリールカルボニル、カルボキシル、ニトロ、ヒドロキシル、

40

50

## 【化 4】



から選ばれた 1 種以上の置換基によってさらに置換されてよく；

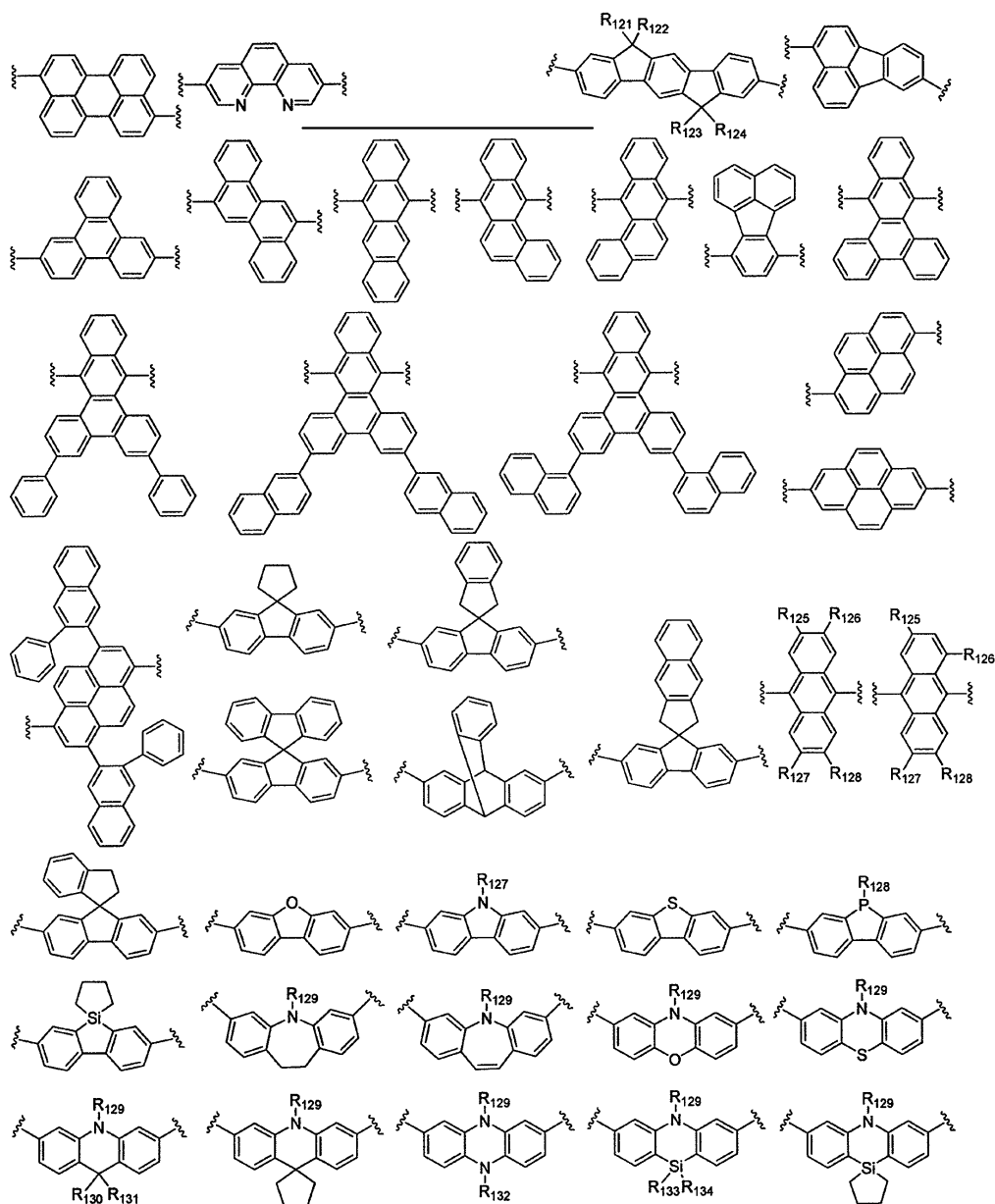
m は、1 ～ 4 の整数であって；

x は、1 ～ 4 の整数である。

## 【請求項 2】

L<sub>1</sub> が下記構造から選択される、請求項 1 に記載の有機電界発光化合物：

## 【化 5】



式中、R<sub>121</sub> 乃至 R<sub>134</sub> は、互いに独立して、水素、重水素、(C<sub>1</sub> - C<sub>60</sub>) アルキルまたは (C<sub>6</sub> - C<sub>60</sub>) アリールを表し；

R<sub>121</sub> 乃至 R<sub>134</sub> のアルキルまたはアリールは、重水素、ハロゲン、(C<sub>1</sub> - C<sub>60</sub>) アルキル、ハロ (C<sub>1</sub> - C<sub>60</sub>) アルキル、(C<sub>6</sub> - C<sub>60</sub>) アリール、N、O 及び S から選択された一つ以上のヘテロ原子を含む (C<sub>3</sub> - C<sub>60</sub>) ヘテロアリール、モルホ

10

20

30

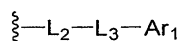
40

50

リノ、チオモルホリノ、N、O及びSから選択された一つ以上のヘテロ原子を含む5員もしくは6員のヘテロシクロアルキル、(C3-C60)シクロアルキル、トリ(C1-C60)アルキルシリル、ジ(C1-C60)アルキル(C6-C60)アリールシリル、トリ(C6-C60)アリールシリル、アダマンチル、(C7-C60)ピシクロアルキル、(C2-C60)アルケニル、(C2-C60)アルキニル、シアノ、(C1-C60)アルキルアミノ、(C6-C60)アリールアミノ、(C6-C60)アリール(C1-C60)アルキル、(C1-C60)アルキルオキシ、(C1-C60)アルキルチオ、(C6-C60)アリールオキシ、(C6-C60)アリールチオ、(C1-C60)アルコキシカルボニル、(C1-C60)アルキルカルボニル、(C6-C60)アリールカルボニル、カルボキシル、ニトロおよびヒドロキシルから選択された1種以上の置換基によってさらに置換されてよい。

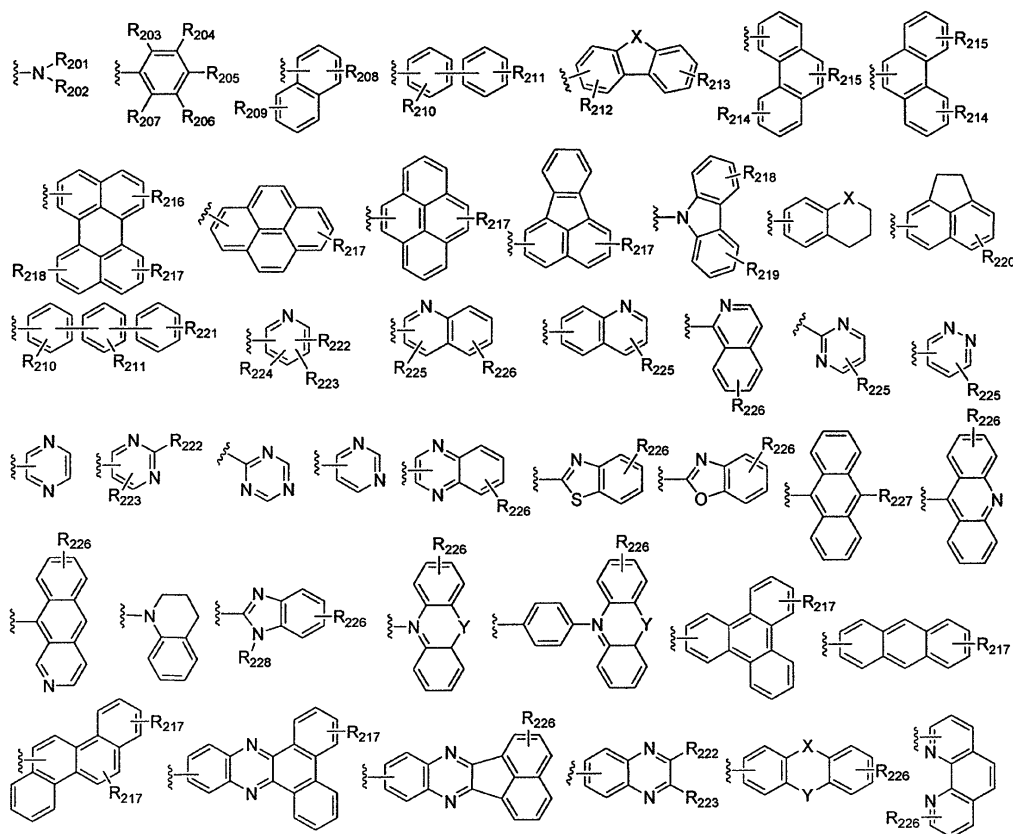
【請求項3】

【化6】



が下記構造から選択される、請求項1に記載の有機電界発光化合物：

【化7】



式中、X及びYは、互いに独立して、-(CR<sub>71</sub>R<sub>72</sub>)<sub>m</sub>-、-N(R<sub>73</sub>)-、-S-、-O-、-Si(R<sub>74</sub>)(R<sub>75</sub>)-、-P(R<sub>76</sub>)-、もしくは-(R<sub>84</sub>)<sub>4</sub>C=C(R<sub>85</sub>)-を表し；

R<sub>71</sub>乃至R<sub>76</sub>、R<sub>84</sub>、R<sub>85</sub>及びmは請求項1におけるように定義され；

R<sub>201</sub>およびR<sub>202</sub>は、互いに独立して、水素、重水素、(C1-C60)アルキル、(C3-C60)シクロアルキル、(C6-C60)アリールもしくはN、O及びSから選択された一つ以上のヘテロ原子を含む(C3-C60)ヘテロアリールを表し；

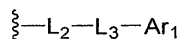
R<sub>203</sub>乃至R<sub>228</sub>は、互いに独立して、水素、重水素、ハロゲン、(C1-C60)アルキル、(C6-C60)アリール、N、O及びSから選択された一つ以上のヘテロ原子を含む(C3-C60)ヘテロアリール、モルホリノ、チオモルホリノ、N、O及びSから選択された一つ以上のヘテロ原子を含む5員もしくは6員のヘテロシクロアルキル

、(C 3 - C 6 0)シクロアルキル、トリ(C 1 - C 6 0)アルキルシリル、ジ(C 1 - C 6 0)アルキル(C 6 - C 6 0)アリールシリル、トリ(C 6 - C 6 0)アリールシリル、アダマンチル、(C 7 - C 6 0)ビスシクロアルキル、(C 2 - C 6 0)アルケニル、(C 2 - C 6 0)アルキニル、シアノ、(C 1 - C 6 0)アルキルアミノ、(C 6 - C 6 0)アリールアミノ、(C 6 - C 6 0)アリール(C 1 - C 6 0)アルキル、(C 1 - C 6 0)アルキルオキシ、(C 1 - C 6 0)アルキルチオ、(C 6 - C 6 0)アリールオキシ、(C 6 - C 6 0)アリールチオ、(C 1 - C 6 0)アルコキシカルボニル、(C 1 - C 6 0)アルキルカルボニル、(C 6 - C 6 0)アリールカルボニル、カルボキシル、ニトロもしくはヒドロキシルを表し；

前記 R<sub>201</sub>、R<sub>202</sub> 及び R<sub>203</sub> 乃至 R<sub>228</sub> のアルキル、アリール、ヘテロアリール、ヘテロシクロアルキル、シクロアルキル、トリアルキルシリル、ジアルキルアリールシリル、トリアリールシリル、アルケニル、アルキニル、アルキルアミノもしくはアリールアミノは、重水素、ハロゲン、(C 1 - C 6 0)アルキル、ハロ(C 1 - C 6 0)アルキル、(C 6 - C 6 0)アリール、N、O 及び S から選択された一つ以上のヘテロ原子を含み(C 6 - C 6 0)アリール置換基を有するもしくは有しない(C 3 - C 6 0)ヘテロアリール、モルホリノ、チオモルホリノ、N、O 及び S から選択された一つ以上のヘテロ原子を含む 5 員もしくは 6 員のヘテロシクロアルキル、(C 3 - C 6 0)シクロアルキル、トリ(C 1 - C 6 0)アルキルシリル、ジ(C 1 - C 6 0)アルキル(C 6 - C 6 0)アリールシリル、トリ(C 6 - C 6 0)アリールシリル、アダマンチル、(C 7 - C 6 0)ビスシクロアルキル、(C 2 - C 6 0)アルケニル、(C 2 - C 6 0)アルキニル、シアノ、(C 1 - C 6 0)アルキルアミノ、(C 6 - C 6 0)アリールアミノ、(C 6 - C 6 0)アリール(C 1 - C 6 0)アルキル、(C 1 - C 6 0)アルキルオキシ、(C 1 - C 6 0)アルキルチオ、(C 6 - C 6 0)アリールオキシ、(C 6 - C 6 0)アリールチオ、(C 1 - C 6 0)アルコキシカルボニル、(C 1 - C 6 0)アルキルカルボニル、(C 6 - C 6 0)アリールカルボニル、カルボキシル、ニトロおよびヒドロキシルから選ばれた 1 種以上の置換基によってさらに置換されてもよい。

【請求項 4】

【化 8】



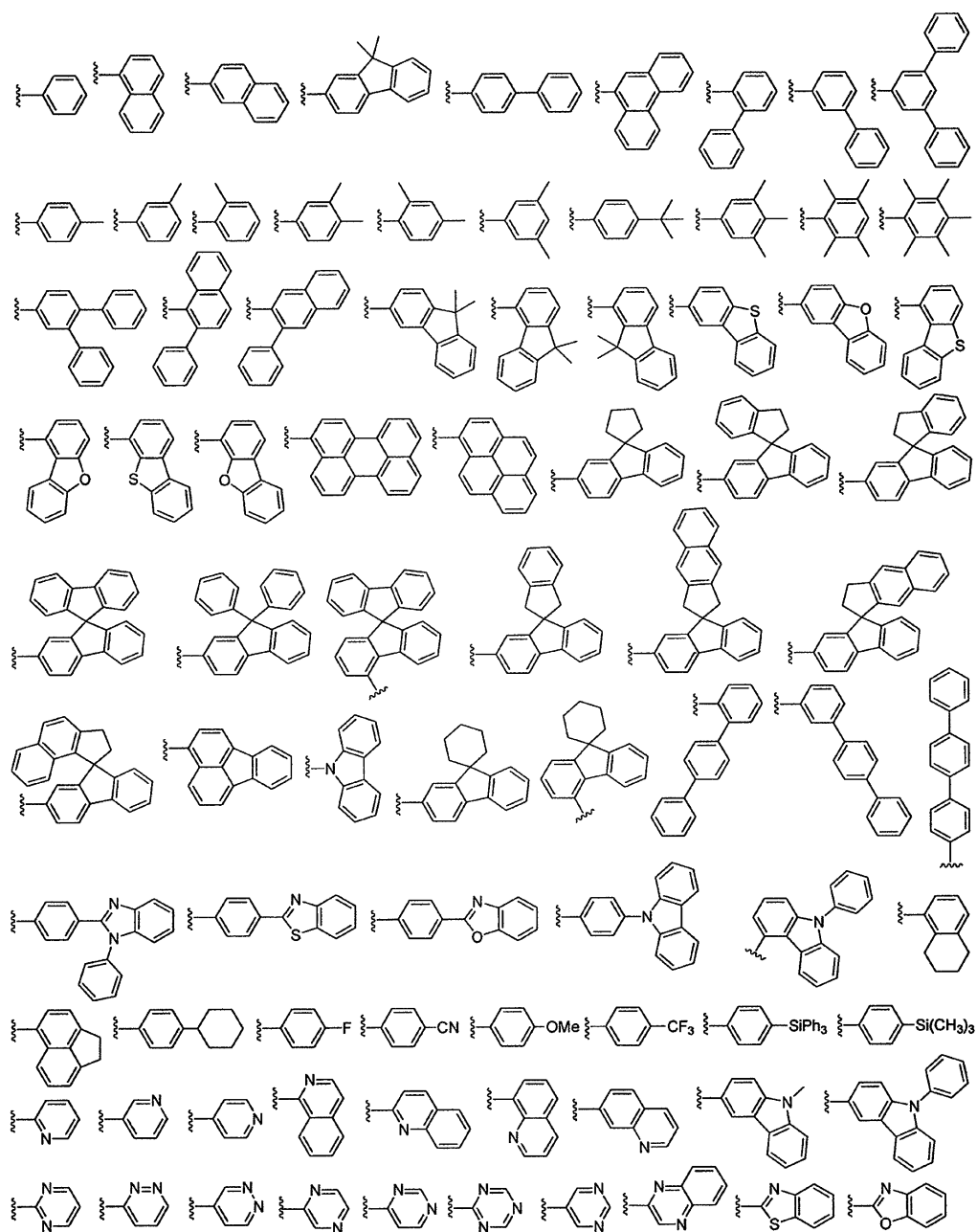
が下記構造から選択される、請求項 1 に記載の有機電界発光化合物：

10

20

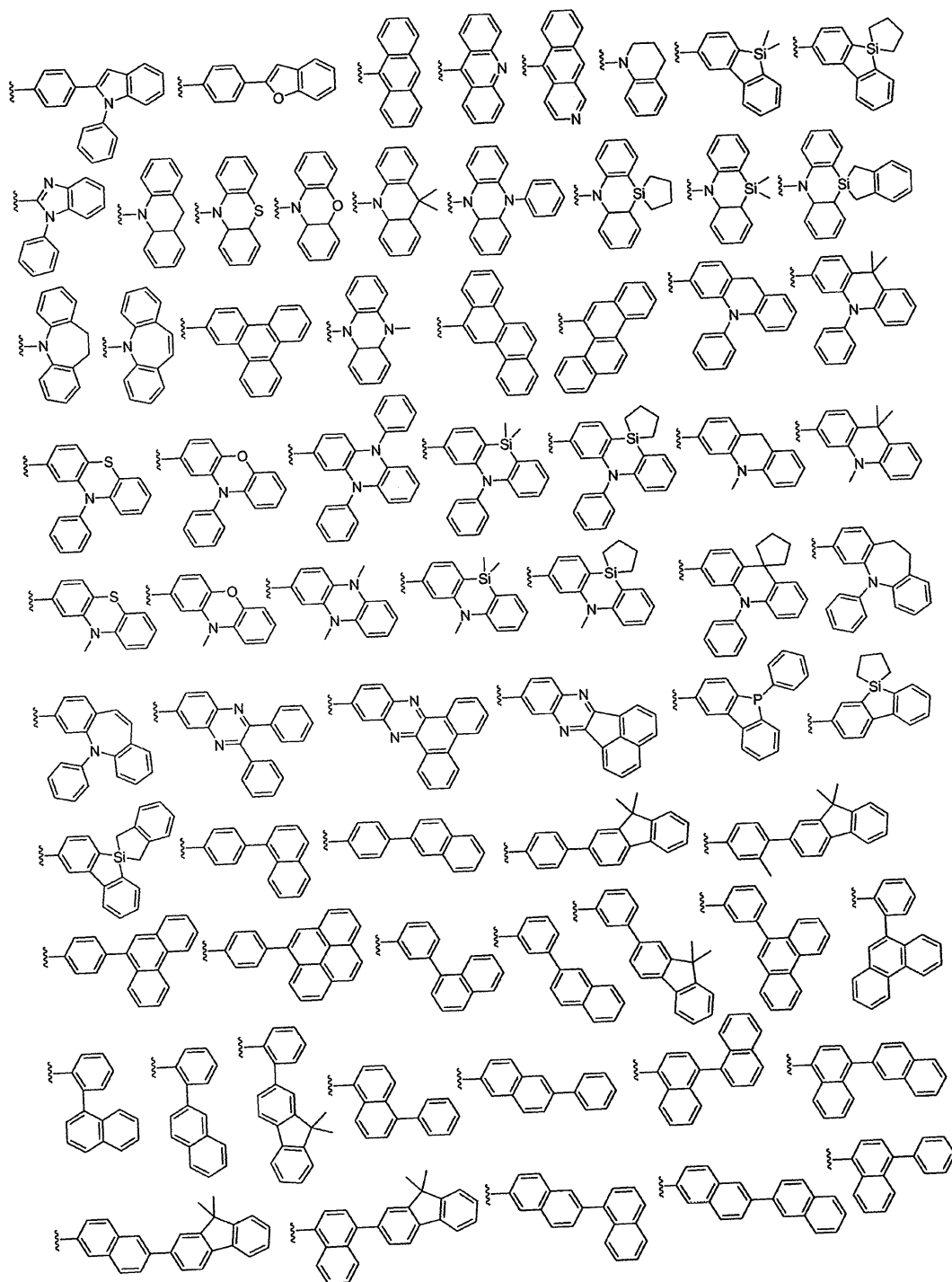
30

## 【化 9】





【化 10】

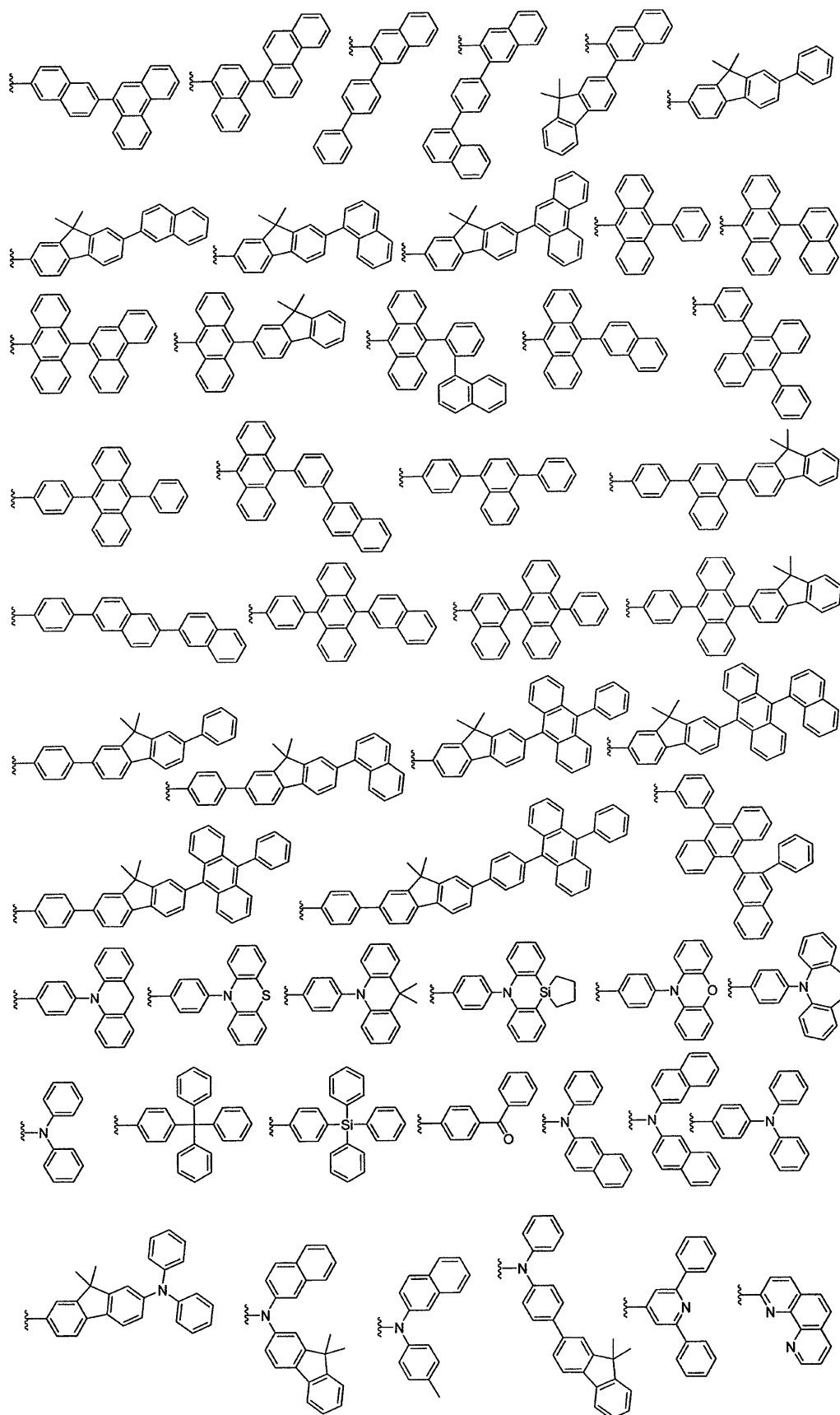


10

20

30

## 【化 1 1】



## 【請求項 5】

$R_1$  乃至  $R_{11}$  が、互いに独立して、水素、重水素、フルオロ、クロロ、メチル、エチル、 $n$ -プロピル、 $i$ -プロピル、 $n$ -ブチル、 $i$ -ブチル、 $t$ -ブチル、 $n$ -ペンチル、 $i$ -ペンチル、 $n$ -ヘキシル、 $n$ -ヘプチル、 $n$ -オクチル、2-エチルヘキシル、 $n$

10

20

30

40

50

- ノニル、デシル、ドデシル、ヘキサデシル、ベンジル、トリフルオロメチル、ペルフルオロエチル、トリフルオロエチル、ペルフルオロプロピル、ペルフルオロブチル、メトキシ、エトキシ、n - プロポキシ、i - プロポキシ、n - ブトキシ、i - ブトキシ、t - ブトキシ、n - ペントキシ、i - ペントキシ、n - ヘキシルオキシ、n - ペプチルオキシ、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、シクロヘプチル、シクロオクチル、シクロノニル、シクロデシル、モルホリノ、チオモルホリノ、モルホリニル、チオモルホリニル、トリメチルシリル、トリエチルシリル、トリプロピルシリル、トリ(t - ブチル)シリル、t - ブチルジメチルシリル、ジメチルフェニルシリル、トリフェニルシリル、ピシクロ[2.2.1]ヘプチル、ピシクロ[2.2.2]オクチル、ピシクロ[5.2.0]ノニル、ピシクロ[4.2.2]デシル、4 - ペンチルピシクロ[2.2.2]オクチル、エテニル、フェニルエテニル、エチニル、フェニルエチニル、シアノ、メチルチオ、フェニルオキシ、フェニルチオ、メトキシカルボニル、エトキシカルボニル、t - ブトキシカルボニル、メチルカルボニル、エチルカルボニル、ベンジルカルボニル、フェニルカルボニル、カルボキシル、ニトロまたはヒドロキシルを表す、請求項 1 に記載の有機電界発光化合物。

10

【請求項 6】

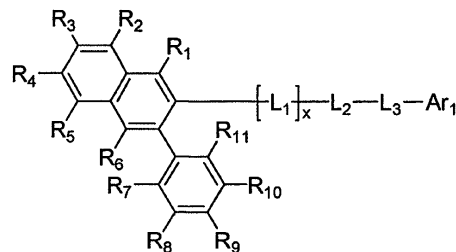
下記化学式 1 により表される有機電界発光化合物を含む有機発光ダイオードであって、当該有機発光ダイオードが第 1 の電極；第 2 の電極；及び前記第 1 の電極と第 2 の電極との間に設けられる少なくとも 1 つの有機層；を含み；

前記有機層が、1 種以上の有機電界発光化合物と、化学式 2 乃至 4 のものにより表される化合物から選択される 1 種以上のドーパントとを含む、有機発光ダイオード；

20

【化 1 2】

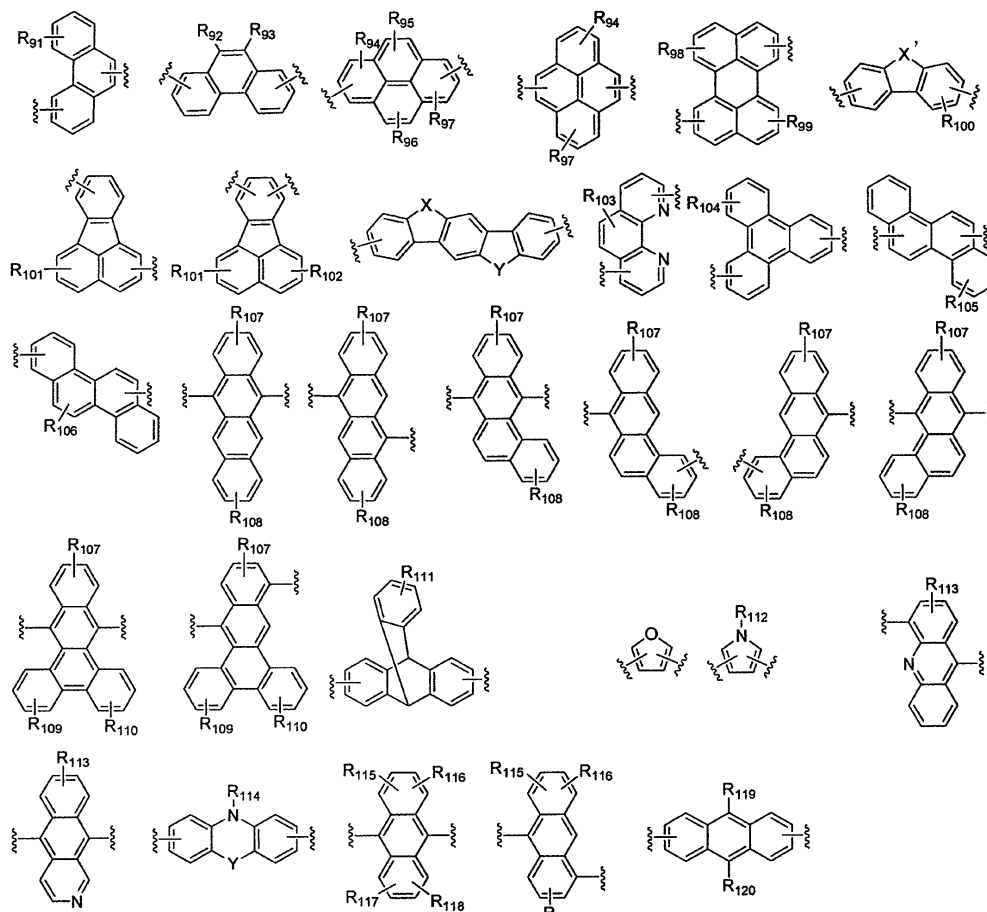
化学式 1



30

(化学式 1 において、 $L_1$  は、下記構造から選択され、

## 【化 13】



10

20

(前記の  $L_1$  を表す式において、 $X$  及び  $Y$  は、互いに独立して、 $-(CR_{71}R_{72})_m$ 、 $-N(R_{73})-$ 、 $-S-$ 、 $-O-$ 、 $-Si(R_{74})(R_{75})-$ 、 $-P(R_{76})-$ 、または  $-(R_{84})C=C(R_{85})-$  を表し、及び  $X'$  は、 $-N(R_{73})-$ 、 $-S-$ 、 $-O-$ 、 $-Si(R_{74})(R_{75})-$ 、 $-P(R_{76})-$ 、または  $-(R_{84})C=C(R_{85})-$  を表し；

30

$R_{71}$  乃至  $R_{76}$ 、 $R_{84}$ 、 $R_{85}$  及び  $m$  はそれぞれ、下記式における  $R_{71}$  乃至  $R_{76}$ 、 $R_{84}$ 、 $R_{85}$  及び  $m$  と同様に定義され；

$R_{91}$  乃至  $R_{120}$  は、互いに独立して、水素、重水素、ハロゲン、 $(C1-C60)$  アルキル、 $(C6-C60)$  アリール、 $N$ 、 $O$  及び  $S$  から選択された一つ以上のヘテロ原子を含む  $(C3-C60)$  ヘテロアリール、モルホリノ、チオモルホリノ、 $N$ 、 $O$  及び  $S$  から選択された一つ以上のヘテロ原子を含む 5 員もしくは 6 員のヘテロシクロアルキル、 $(C3-C60)$  シクロアルキル、トリ  $(C1-C60)$  アルキルシリル、ジ  $(C1-C60)$  アルキル  $(C6-C60)$  アリールシリル、トリ  $(C6-C60)$  アリールシリル、アダマンチル、 $(C7-C60)$  ビシクロアルキル、 $(C2-C60)$  アルケニル、 $(C2-C60)$  アルキニル、シアノ、 $(C1-C60)$  アルキルアミノ、 $(C6-C60)$  アリールアミノ、 $(C6-C60)$  アリール  $(C1-C60)$  アルキル、 $(C1-C60)$  アルキルオキシ、 $(C1-C60)$  アルキルチオ、 $(C6-C60)$  アリールオキシ、 $(C6-C60)$  アリールチオ、 $(C1-C60)$  アルコキシカルボニル、 $(C1-C60)$  アルキルカルボニル、 $(C6-C60)$  アリールカルボニル、カルボキシル、ニトロもしくはヒドロキシルを表すか、または  $R_{91}$  乃至  $R_{120}$  は縮合環を含むかもしくは含まない  $(C3-C60)$  アルキレンもしくは  $(C3-C60)$  アルケニレンで連結されて、脂環式環または単環式もしくは多環式芳香族環を形成することができる。)

40

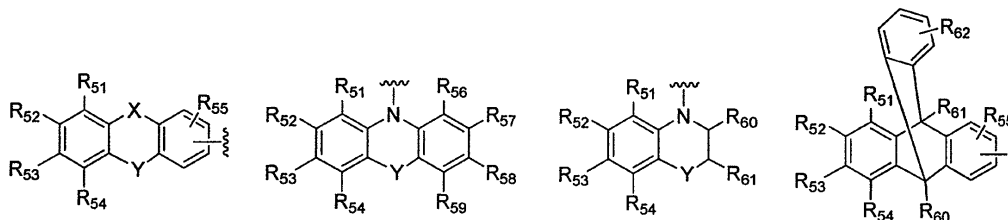
$L_2$  及び  $L_3$  は、互いに独立して、化学結合を表すか、または  $(C1-C60)$  アルキレンオキシ、 $(C1-C60)$  アルキレンチオ、 $(C6-C60)$  アリーレンオキシ、(

50

C 6 - C 6 0) アリーレンチオ、(C 6 - C 6 0) アリーレン、もしくは N、O 及び S から選択された一つ以上のヘテロ原子を含む (C 3 - C 6 0) ヘテロアリーレンを表し；

Ar<sub>1</sub> は、NR<sub>4 1</sub>R<sub>4 2</sub>、(C 6 - C 6 0) アリール、N、O 及び S から選択された一つ以上のヘテロ原子を含む (C 3 - C 6 0) ヘテロアリール、N、O 及び S から選択された一つ以上のヘテロ原子を含む 5 員もしくは 6 員のヘテロシクロアルキル、(C 3 - C 6 0) シクロアルキル、アダマンチル、(C 7 - C 6 0) ビシクロアルキル、または下記構造から選択される置換基を表し；

【化 1 4】



10

R<sub>1</sub> 乃至 R<sub>1 1</sub> は、互いに独立して、水素、重水素、ハロゲン、(C 1 - C 6 0) アルキル、(C 6 - C 6 0) アリール、N、O 及び S から選択された一つ以上のヘテロ原子を含む (C 3 - C 6 0) ヘテロアリール、モルホリノ、チオモルホリノ、N、O 及び S から選択された一つ以上のヘテロ原子を含む 5 員もしくは 6 員のヘテロシクロアルキル、(C 3 - C 6 0) シクロアルキル、トリ (C 1 - C 6 0) アルキルシリル、ジ (C 1 - C 6 0) アルキル (C 6 - C 6 0) アリールシリル、トリ (C 6 - C 6 0) アリールシリル、アダマンチル、(C 7 - C 6 0) ビシクロアルキル、(C 2 - C 6 0) アルケニル、(C 2 - C 6 0) アルキニル、シアノ、(C 1 - C 6 0) アルキルアミノ、(C 6 - C 6 0) アリールアミノ、(C 6 - C 6 0) アリール (C 1 - C 6 0) アルキル、(C 1 - C 6 0) アルキルオキシ、(C 1 - C 6 0) アルキルチオ、(C 6 - C 6 0) アリールオキシ、(C 6 - C 6 0) アリールチオ、(C 1 - C 6 0) アルコキシカルボニル、(C 1 - C 6 0) アルキルカルボニル、(C 6 - C 6 0) アリールカルボニル、カルボキシル、ニトロもしくはヒドロキシルを表すか、または R<sub>1</sub> 乃至 R<sub>1 1</sub> は隣接した置換基と、縮合環を含むかもしくは含まない (C 3 - C 6 0) アルキレンもしくは (C 3 - C 6 0) アルケニレンで連結されて、脂環式環または単環式もしくは多環式芳香族環を形成することができ；

20

30

R<sub>4 1</sub> 及び R<sub>4 2</sub> は、互いに独立して、水素、重水素、ハロゲン、(C 1 - C 6 0) アルキル、(C 6 - C 6 0) アリール、N、O 及び S から選択された一つ以上のヘテロ原子を含む (C 3 - C 6 0) ヘテロアリール、モルホリノ、チオモルホリノ、N、O 及び S から選択された一つ以上のヘテロ原子を含む 5 員もしくは 6 員のヘテロシクロアルキル、(C 3 - C 6 0) シクロアルキル、トリ (C 1 - C 6 0) アルキルシリル、ジ (C 1 - C 6 0) アルキル (C 6 - C 6 0) アリールシリル、トリ (C 6 - C 6 0) アリールシリル、アダマンチル、(C 7 - C 6 0) ビシクロアルキル、(C 2 - C 6 0) アルケニル、(C 2 - C 6 0) アルキニル、シアノ、(C 1 - C 6 0) アルキルアミノ、(C 6 - C 6 0) アリールアミノ、(C 6 - C 6 0) アリール (C 1 - C 6 0) アルキル、(C 1 - C 6 0) アルキルオキシ、(C 1 - C 6 0) アルキルチオ、(C 6 - C 6 0) アリールオキシ、(C 6 - C 6 0) アリールチオ、(C 1 - C 6 0) アルコキシカルボニル、(C 1 - C 6 0) アルキルカルボニル、(C 6 - C 6 0) アリールカルボニル、カルボキシル、ニトロもしくはヒドロキシルを表すか、または R<sub>4 1</sub> と R<sub>4 2</sub> は、縮合環を含むかもしくは含まない (C 3 - C 6 0) アルキレンもしくは (C 3 - C 6 0) アルケニレンで連結されて、脂環式環または単環式もしくは多環式芳香族環を形成することができ；

40

R<sub>5 1</sub> 乃至 R<sub>6 2</sub> は、互いに独立して、水素、重水素、ハロゲン、(C 1 - C 6 0) アルキル、(C 6 - C 6 0) アリール、N、O 及び S から選択された一つ以上のヘテロ原子を含む (C 3 - C 6 0) ヘテロアリール、モルホリノ、チオモルホリノ、N、O 及び S から選択された一つ以上のヘテロ原子を含む 5 員もしくは 6 員のヘテロシクロアルキル、(C 3 - C 6 0) シクロアルキル、トリ (C 1 - C 6 0) アルキルシリル、ジ (C 1 - C 6

50

0) アルキル (C 6 - C 6 0) アリールシリル、トリ (C 6 - C 6 0) アリールシリル、アダマンチル、(C 7 - C 6 0) ビシクロアルキル、(C 2 - C 6 0) アルケニル、(C 2 - C 6 0) アルキニル、シアノ、(C 1 - C 6 0) アルキルアミノ、(C 6 - C 6 0) アリールアミノ、(C 6 - C 6 0) アリール (C 1 - C 6 0) アルキル、(C 1 - C 6 0) アルキルオキシ、(C 1 - C 6 0) アルキルチオ、(C 6 - C 6 0) アリールオキシ、(C 6 - C 6 0) アリールチオ、(C 1 - C 6 0) アルコキシカルボニル、(C 1 - C 6 0) アルキルカルボニル、(C 6 - C 6 0) アリールカルボニル、カルボキシル、ニトロもしくはヒドロキシルを表すか、または R<sub>5 1</sub> 乃至 R<sub>6 2</sub> は隣接した置換基と、縮合環を含むかもしくは含まない (C 3 - C 6 0) アルキレンもしくは (C 3 - C 6 0) アルケニレンで連結されて、脂環式環または単環式もしくは多環式芳香族環を形成することができ

10

X 及び Y は、互いに独立して、化学結合を表すか、または - (C R<sub>7 1</sub> R<sub>7 2</sub>)<sub>m</sub> -、- N (R<sub>7 3</sub>) -、- S -、- O -、- Si (R<sub>7 4</sub>) (R<sub>7 5</sub>) -、- P (R<sub>7 6</sub>) -、- C (=O) -、- B (R<sub>7 7</sub>) -、- In (R<sub>7 8</sub>) -、- Se -、- Ge (R<sub>7 9</sub>) (R<sub>8 0</sub>) -、- Sn (R<sub>8 1</sub>) (R<sub>8 2</sub>) -、- Ga (R<sub>8 3</sub>) - もしくは - (R<sub>8 4</sub>) C = C (R<sub>8 5</sub>) - を表し；

R<sub>7 1</sub> 乃至 R<sub>8 5</sub> は、互いに独立して、水素、重水素、ハロゲン、(C 1 - C 6 0) アルキル、(C 6 - C 6 0) アリール、N、O 及び S から選択された一つ以上のヘテロ原子を含む (C 3 - C 6 0) ヘテロアリール、モルホリノ、チオモルホリノ、N、O 及び S から選択された一つ以上のヘテロ原子を含む 5 員もしくは 6 員のヘテロシクロアルキル、(C 3 - C 6 0) シクロアルキル、トリ (C 1 - C 6 0) アルキルシリル、ジ (C 1 - C 6 0) アルキル (C 6 - C 6 0) アリールシリル、トリ (C 6 - C 6 0) アリールシリル、アダマンチル、(C 7 - C 6 0) ビシクロアルキル、(C 2 - C 6 0) アルケニル、(C 2 - C 6 0) アルキニル、シアノ、(C 1 - C 6 0) アルキルアミノ、(C 6 - C 6 0) アリールアミノ、(C 6 - C 6 0) アリール (C 1 - C 6 0) アルキル、(C 1 - C 6 0) アルキルオキシ、(C 1 - C 6 0) アルキルチオ、(C 6 - C 6 0) アリールオキシ、(C 6 - C 6 0) アリールチオ、(C 1 - C 6 0) アルコキシカルボニル、(C 1 - C 6 0) アルキルカルボニル、(C 6 - C 6 0) アリールカルボニル、カルボキシル、ニトロもしくはヒドロキシルを表すか、または R<sub>7 1</sub> と R<sub>7 2</sub>、R<sub>7 4</sub> と R<sub>7 5</sub>、R<sub>7 9</sub> と R<sub>8 0</sub>、R<sub>8 1</sub> と R<sub>8 2</sub>、もしくは R<sub>8 4</sub> と R<sub>8 5</sub> は、縮合環を含むかしくは含まない (C 3 - C 6 0) アルキレンもしくは (C 3 - C 6 0) アルケニレンで連結されて、脂環式環または単環式もしくは多環式芳香族環を形成することができ；

20

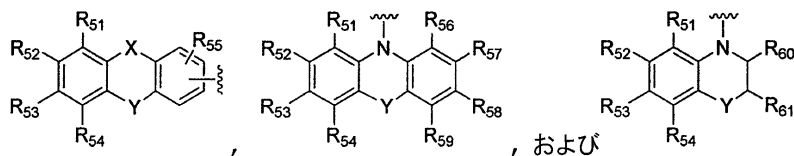
30

L<sub>2</sub> 及び L<sub>3</sub> のアリーレンもしくはヘテロアリーレン、Ar<sub>1</sub> のアリールもしくはヘテロアリール、または R<sub>1</sub> 乃至 R<sub>1 1</sub>、R<sub>4 1</sub>、R<sub>4 2</sub>、R<sub>5 1</sub> 乃至 R<sub>6 2</sub>、および R<sub>7 1</sub> 乃至 R<sub>8 5</sub> のアルキル、アリール、ヘテロアリール、ヘテロシクロアルキル、シクロアルキル、トリアルキルシリル、ジアルキルアリールシリル、トリアリールシリル、アルケニル、アルキニル、アルキルアミノもしくはアリールアミノは、重水素、ハロゲン、(C 1 - C 6 0) アルキル、ハロ (C 1 - C 6 0) アルキル、(C 6 - C 6 0) アリール、N、O 及び S から選択された一つ以上のヘテロ原子を含み (C 6 - C 6 0) アリール置換基を有するもしくは有しない (C 3 - C 6 0) ヘテロアリール、モルホリノ、チオモルホリノ、N、O 及び S から選択された一つ以上のヘテロ原子を含む 5 員もしくは 6 員のヘテロシクロアルキル、(C 3 - C 6 0) シクロアルキル、トリ (C 1 - C 6 0) アルキルシリル、ジ (C 1 - C 6 0) アルキル (C 6 - C 6 0) アリールシリル、トリ (C 6 - C 6 0) アリールシリル、アダマンチル、(C 7 - C 6 0) ビシクロアルキル、(C 2 - C 6 0) アルケニル、(C 2 - C 6 0) アルキニル、シアノ、(C 1 - C 6 0) アルキルアミノ、(C 6 - C 6 0) アリールアミノ、(C 6 - C 6 0) アリール (C 1 - C 6 0) アルキル、(C 1 - C 6 0) アルキルオキシ、(C 1 - C 6 0) アルキルチオ、(C 6 - C 6 0) アリールオキシ、(C 6 - C 6 0) アリールチオ、(C 1 - C 6 0) アルコキシカルボニル、(C 1 - C 6 0) アルキルカルボニル、(C 6 - C 6 0) アリールカルボニル、カルボキシル、ニトロ、ヒドロキシル、

40

50

## 【化 15】



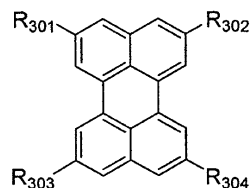
から選ばれた 1 種以上の置換基によってさらに置換されてよく；

m は、1 ~ 4 の整数であって；

x は、1 ~ 4 の整数である）；

## 【化 16】

化学式 2



( 化学式 2 において、 $R_{301}$  乃至  $R_{304}$  は、互いに独立して、水素、重水素、ハロゲン、(C1 - C60) アルキル、(C6 - C60) アリール、N、O 及び S から選択された一つ以上のヘテロ原子を含む (C4 - C60) ヘテロアリール、N、O 及び S から選択された一つ以上のヘテロ原子を含む 5 員もしくは 6 員のヘテロシクロアルキル、(C3 - C60) シクロアルキル、トリ (C1 - C60) アルキルシリル、ジ (C1 - C60) アルキル (C6 - C60) アリールシリル、トリ (C6 - C60) アリールシリル、アダマンチル、(C7 - C60) ビシクロアルキル、(C2 - C60) アルケニル、(C2 - C60) アルキニル、シアノ、(C1 - C60) アルキルアミノ、(C6 - C60) アリールアミノ、(C6 - C60) アリール (C1 - C60) アルキル、(C6 - C60) アリールオキシ、(C1 - C60) アルキルオキシ、(C1 - C60) アルキルチオ、(C6 - C60) アリールチオ、(C1 - C60) アルコキシカルボニル、(C1 - C60) アルキルカルボニル、(C6 - C60) アリールカルボニル、カルボキシル、ニトロもしくはヒドロキシルを表すか、または  $R_{301}$  乃至  $R_{304}$  は隣接した置換基と縮合環を含むかもしくは含まない (C3 - C60) アルキレンもしくは (C3 - C60) アルケニレンで連結されて、脂環式環または単環式もしくは多環式芳香族環を形成することができ；

前記  $R_{301}$  乃至  $R_{304}$  のアルキル、アルケニル、アルキニル、シクロアルキル、ヘテロシクロアルキル、アリール、ヘテロアリール、アリールシリル、アルキルシリル、アルキルオキシ、アリールオキシ、アリールチオ、アルキルアミノ、アリールアミノ、または隣接した置換基と縮合環を含むかもしくは含まない (C3 - C60) アルキレンもしくは (C3 - C60) アルケニレンで連結されてそこから形成された前記脂環式環または前記単環式もしくは多環式芳香族環は、重水素、ハロゲン、(C1 - C60) アルキル、(C6 - C60) アリール、N、O 及び S から選択された一つ以上のヘテロ原子を含む (C4 - C60) ヘテロアリール、N、O 及び S から選択された一つ以上のヘテロ原子を含む 5 員もしくは 6 員のヘテロシクロアルキル、(C3 - C60) シクロアルキル、トリ (C1 - C60) アルキルシリル、ジ (C1 - C60) アルキル (C6 - C60) アリールシリル、トリ (C6 - C60) アリールシリル、アダマンチル、(C7 - C60) ビシクロアルキル、(C2 - C60) アルケニル、(C2 - C60) アルキニル、シアノ、(C1 - C60) アルキルアミノ、(C6 - C60) アリールアミノ、(C6 - C60) アリール (C1 - C60) アルキル、(C6 - C60) アリールオキシ、(C1 - C60) アルキルオキシ、(C1 - C60) アルキルチオ、(C6 - C60) アリールチオ、(C1 - C60) アルコキシカルボニル、(C1 - C60) アルキルカルボニル、(C6 - C60) アリールカルボニル、カルボキシル、ニトロおよびヒドロキシルから選択される 1 種以上の置換基によってさらに置換されてよい）；

10

20

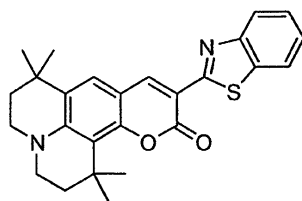
30

40

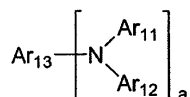
50

## 【化 17】

化学式3



化学式4



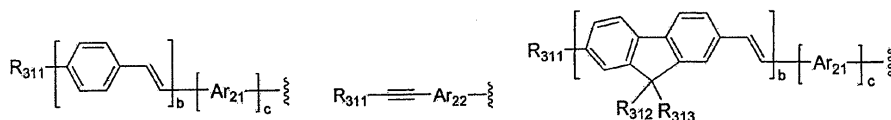
10

(化学式4において、 $\text{Ar}_{11}$  及び  $\text{Ar}_{12}$  は、互いに独立して、(C1 - C60) アルキル、(C6 - C60) アリール、N、O 及び S から選択された一つ以上のヘテロ原子を含む (C4 - C60) ヘテロアリール、(C6 - C60) アリールアミノ、(C1 - C60) アルキルアミノ、N、O 及び S から選択された一つ以上のヘテロ原子を含む5員もしくは6員のヘテロシクロアルキル、または (C3 - C60) シクロアルキルを表すか、または  $\text{Ar}_{11}$  と  $\text{Ar}_{12}$  は、縮合環を含むかもしくは含まない (C3 - C60) アルキレンもしくは (C3 - C60) アルケニレンで連結されて、脂環式環または単環式もしくは多環式芳香族環を形成することができ；

20

a が1である場合には、 $\text{Ar}_{13}$  は、(C6 - C60) アリール、(C4 - C60) ヘテロアリール、または下記構造

## 【化 18】

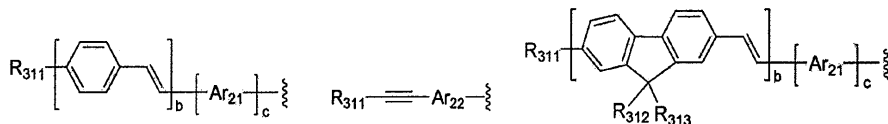


30

から選択される置換基を表し；

a が2である場合には、 $\text{Ar}_{13}$  は、(C6 - C60) アリーレン、N、O 及び S から選択された一つ以上のヘテロ原子を含む (C4 - C60) ヘテロアリーレン、または下記構造

## 【化 19】



40

から選択される置換基を表し；

式中、 $\text{Ar}_{21}$  及び  $\text{Ar}_{22}$  は、互いに独立して、(C6 - C60) アリーレンまたは N、O 及び S から選択された一つ以上のヘテロ原子を含む (C4 - C60) ヘテロアリーレンを表し；

$\text{R}_{311}$  乃至  $\text{R}_{315}$  は、互いに独立して、水素、重水素、(C1 - C60) アルキルまたは (C6 - C60) アリールを表し；

b は1～4の整数であり、c は0または1の整数であり、d は0または1の整数であり；

前記  $\text{Ar}_{11}$  及び  $\text{Ar}_{12}$  のアルキル、アリール、ヘテロアリール、アリールアミノ、アルキルアミノ、シクロアルキルもしくはヘテロシクロアルキル、前記  $\text{Ar}_{13}$  のアリール、ヘテロアリール、アリーレンもしくはヘテロアリーレン、前記  $\text{Ar}_{21}$  及び  $\text{Ar}_{22}$

50



のアリーレンもしくはヘテロアリーレン、または  $R_{311}$  乃至  $R_{315}$  のアルキルもしくはアリールは、重水素、ハロゲン、(C1 - C60) アルキル、(C6 - C60) アリール、N、O 及び S から選択された一つ以上のヘテロ原子を含む (C4 - C60) ヘテロアリール、N、O 及び S から選択された一つ以上のヘテロ原子を含む 5 員もしくは 6 員のヘテロシクロアルキル、(C3 - C60) シクロアルキル、トリ (C1 - C60) アルキルシリル、ジ (C1 - C60) アルキル (C6 - C60) アリールシリル、トリ (C6 - C60) アリールシリル、アダマンチル、(C7 - C60) ビシクロアルキル、(C2 - C60) アルケニル、(C2 - C60) アルキニル、シアノ、(C1 - C60) アルキルアミノ、(C6 - C60) アリールアミノ、(C6 - C60) アリール (C1 - C60) アルキル、(C6 - C60) アリールオキシ、(C1 - C60) アルキルオキシ、(C1 - C60) アリールチオ、(C6 - C60) アルキルチオ、(C1 - C60) アルコキシカルボニル、(C1 - C60) アルキルカルボニル、(C6 - C60) アリールカルボニル、カルボキシル、ニトロおよびヒドロキシルから選択される 1 種以上の置換基によってさらに置換されてよい。

【請求項 7】

有機層が、アリールアミン系化合物およ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 1 種以上の化合物を含む、請求項 6 に記載の有機発光ダイオード。

【請求項 8】

有機層が、第 1 族、第 2 族、第 4 周期および第 5 周期遷移金属、ランタン系金属、並びに d - 遷移元素の有機金属からなる群から選択される 1 種以上の金属を含む、請求項 6 に記載の有機発光ダイオード。

【請求項 9】

有機電界発光化合物と、560 nm 以上の波長の電界発光ピークを有する化合物とを同時に含む有機ディスプレイである、請求項 6 に記載の有機発光ダイオード。

【請求項 10】

有機層が、電界発光層と電荷発生層の両方を含む、請求項 6 に記載の有機発光ダイオード。

【請求項 11】

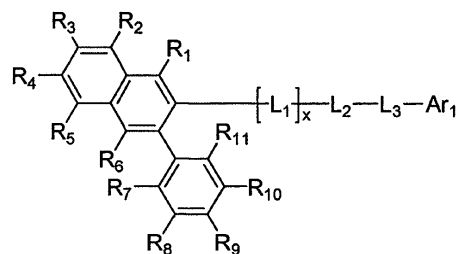
還元性ドーパントと有機物質との混合領域、または酸化性ドーパントと有機物質との混合領域が、電極の対のうちの一方もしくは両方の内側表面上に配置されている、請求項 6 に記載の有機発光ダイオード。

【請求項 12】

下記化学式 1 により表される有機電界発光化合物を含む有機太陽電池：

【化 20】

化学式 1



式中、 $L_1$  は、下記構造から選択され、

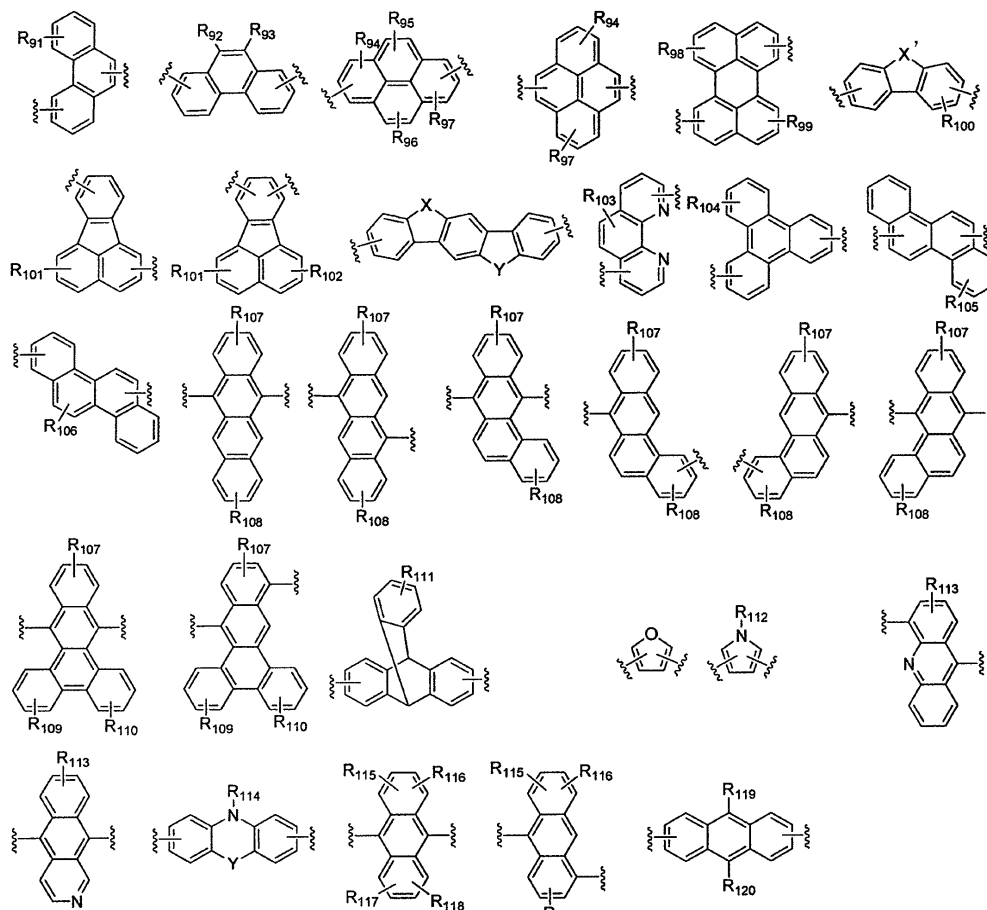
10

20

30

40

## 【化 2 1】



10

20

(前記の  $L_1$  を表す式において、 $X$  及び  $Y$  は、互いに独立して、 $-(CR_{71}R_{72})_m$ 、 $-N(R_{73})-$ 、 $-S-$ 、 $-O-$ 、 $-Si(R_{74})(R_{75})-$ 、 $-P(R_{76})-$ 、または  $-(R_{84})C=C(R_{85})-$  を表し、及び  $X'$  は、 $-N(R_{73})-$ 、 $-S-$ 、 $-O-$ 、 $-Si(R_{74})(R_{75})-$ 、 $-P(R_{76})-$ 、または  $-(R_{84})C=C(R_{85})-$  を表し；

30

$R_{71}$  乃至  $R_{76}$ 、 $R_{84}$ 、 $R_{85}$  及び  $m$  はそれぞれ、下記式における  $R_{71}$  乃至  $R_{76}$ 、 $R_{84}$ 、 $R_{85}$  及び  $m$  と同様に定義され；

$R_{91}$  乃至  $R_{120}$  は、互いに独立して、水素、重水素、ハロゲン、 $(C1-C60)$  アルキル、 $(C6-C60)$  アリール、 $N$ 、 $O$  及び  $S$  から選択された一つ以上のヘテロ原子を含む  $(C3-C60)$  ヘテロアリール、モルホリノ、チオモルホリノ、 $N$ 、 $O$  及び  $S$  から選択された一つ以上のヘテロ原子を含む 5 員もしくは 6 員のヘテロシクロアルキル、 $(C3-C60)$  シクロアルキル、トリ  $(C1-C60)$  アルキルシリル、ジ  $(C1-C60)$  アルキル  $(C6-C60)$  アリールシリル、トリ  $(C6-C60)$  アリールシリル、アダマンチル、 $(C7-C60)$  ビシクロアルキル、 $(C2-C60)$  アルケニル、 $(C2-C60)$  アルキニル、シアノ、 $(C1-C60)$  アルキルアミノ、 $(C6-C60)$  アリールアミノ、 $(C6-C60)$  アリール  $(C1-C60)$  アルキル、 $(C1-C60)$  アルキルオキシ、 $(C1-C60)$  アルキルチオ、 $(C6-C60)$  アリールオキシ、 $(C6-C60)$  アリールチオ、 $(C1-C60)$  アルコキシカルボニル、 $(C1-C60)$  アルキルカルボニル、 $(C6-C60)$  アリールカルボニル、カルボキシル、ニトロもしくはヒドロキシルを表すか、または  $R_{91}$  乃至  $R_{120}$  は縮合環を含むかもしくは含まない  $(C3-C60)$  アルキレンもしくは  $(C3-C60)$  アルケニレンで連結されて、脂環式環または単環式もしくは多環式芳香族環を形成することができる。)

40

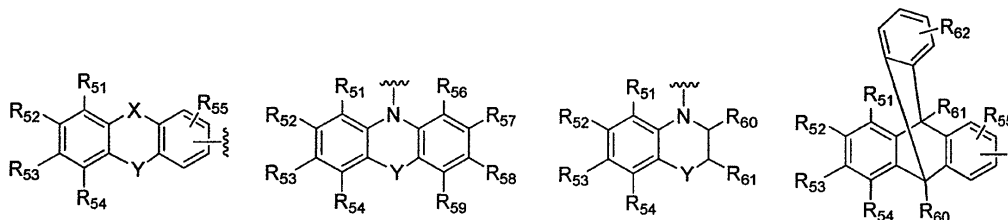
$L_2$  及び  $L_3$  は、互いに独立して、化学結合を表すか、または  $(C1-C60)$  アルキレンオキシ、 $(C1-C60)$  アルキレンチオ、 $(C6-C60)$  アリーレンオキシ、(

50

C 6 - C 6 0) アリーレンチオ、(C 6 - C 6 0) アリーレン、もしくはN、O及びSから選択された一つ以上のヘテロ原子を含む(C 3 - C 6 0) ヘテロアリーレンを表し；

Ar<sub>1</sub>は、NR<sub>4 1</sub>R<sub>4 2</sub>、(C 6 - C 6 0) アリール、N、O及びSから選択された一つ以上のヘテロ原子を含む(C 3 - C 6 0) ヘテロアリール、N、O及びSから選択された一つ以上のヘテロ原子を含む5員もしくは6員のヘテロシクロアルキル、(C 3 - C 6 0) シクロアルキル、アダマンチル、(C 7 - C 6 0) ビシクロアルキル、または下記構造から選択される置換基を表し；

【化 2 2】



10

R<sub>1</sub>乃至R<sub>1 1</sub>は、互いに独立して、水素、重水素、ハロゲン、(C 1 - C 6 0) アルキル、(C 6 - C 6 0) アリール、N、O及びSから選択された一つ以上のヘテロ原子を含む(C 3 - C 6 0) ヘテロアリール、モルホリノ、チオモルホリノ、N、O及びSから選択された一つ以上のヘテロ原子を含む5員もしくは6員のヘテロシクロアルキル、(C 3 - C 6 0) シクロアルキル、トリ(C 1 - C 6 0) アルキルシリル、ジ(C 1 - C 6 0) アルキル(C 6 - C 6 0) アリールシリル、トリ(C 6 - C 6 0) アリールシリル、アダマンチル、(C 7 - C 6 0) ビシクロアルキル、(C 2 - C 6 0) アルケニル、(C 2 - C 6 0) アルキニル、シアノ、(C 1 - C 6 0) アルキルアミノ、(C 6 - C 6 0) アリールアミノ、(C 6 - C 6 0) アリール(C 1 - C 6 0) アルキル、(C 1 - C 6 0) アルキルオキシ、(C 1 - C 6 0) アルキルチオ、(C 6 - C 6 0) アリールオキシ、(C 6 - C 6 0) アリールチオ、(C 1 - C 6 0) アルコキシカルボニル、(C 1 - C 6 0) アルキルカルボニル、(C 6 - C 6 0) アリールカルボニル、カルボキシル、ニトロもしくはヒドロキシルを表すか、またはR<sub>1</sub>乃至R<sub>1 1</sub>は隣接した置換基と、縮合環を含むかもしくは含まない(C 3 - C 6 0) アルキレンもしくは(C 3 - C 6 0) アルケニレンで連結されて、脂環式環または単環式もしくは多環式芳香族環を形成することができ；

20

30

R<sub>4 1</sub>及びR<sub>4 2</sub>は、互いに独立して、水素、重水素、ハロゲン、(C 1 - C 6 0) アルキル、(C 6 - C 6 0) アリール、N、O及びSから選択された一つ以上のヘテロ原子を含む(C 3 - C 6 0) ヘテロアリール、モルホリノ、チオモルホリノ、N、O及びSから選択された一つ以上のヘテロ原子を含む5員もしくは6員のヘテロシクロアルキル、(C 3 - C 6 0) シクロアルキル、トリ(C 1 - C 6 0) アルキルシリル、ジ(C 1 - C 6 0) アルキル(C 6 - C 6 0) アリールシリル、トリ(C 6 - C 6 0) アリールシリル、アダマンチル、(C 7 - C 6 0) ビシクロアルキル、(C 2 - C 6 0) アルケニル、(C 2 - C 6 0) アルキニル、シアノ、(C 1 - C 6 0) アルキルアミノ、(C 6 - C 6 0) アリールアミノ、(C 6 - C 6 0) アリール(C 1 - C 6 0) アルキル、(C 1 - C 6 0) アルキルオキシ、(C 1 - C 6 0) アルキルチオ、(C 6 - C 6 0) アリールオキシ、(C 6 - C 6 0) アリールチオ、(C 1 - C 6 0) アルコキシカルボニル、(C 1 - C 6 0) アルキルカルボニル、(C 6 - C 6 0) アリールカルボニル、カルボキシル、ニトロもしくはヒドロキシルを表すか、またはR<sub>4 1</sub>とR<sub>4 2</sub>は、縮合環を含むかもしくは含まない(C 3 - C 6 0) アルキレンもしくは(C 3 - C 6 0) アルケニレンで連結されて、脂環式環または単環式もしくは多環式芳香族環を形成することができ；

40

R<sub>5 1</sub>乃至R<sub>6 2</sub>は、互いに独立して、水素、重水素、ハロゲン、(C 1 - C 6 0) アルキル、(C 6 - C 6 0) アリール、N、O及びSから選択された一つ以上のヘテロ原子を含む(C 3 - C 6 0) ヘテロアリール、モルホリノ、チオモルホリノ、N、O及びSから選択された一つ以上のヘテロ原子を含む5員もしくは6員のヘテロシクロアルキル、(C 3 - C 6 0) シクロアルキル、トリ(C 1 - C 6 0) アルキルシリル、ジ(C 1 - C 6 0) アルキル(C 6 - C 6 0) アリールシリル、トリ(C 6 - C 6 0) アリールシリル、アダマンチル、(C 7 - C 6 0) ビシクロアルキル、(C 2 - C 6 0) アルケニル、(C 2 - C 6 0) アルキニル、シアノ、(C 1 - C 6 0) アルキルアミノ、(C 6 - C 6 0) アリールアミノ、(C 6 - C 6 0) アリール(C 1 - C 6 0) アルキル、(C 1 - C 6 0) アルキルオキシ、(C 1 - C 6 0) アルキルチオ、(C 6 - C 6 0) アリールオキシ、(C 6 - C 6 0) アリールチオ、(C 1 - C 6 0) アルコキシカルボニル、(C 1 - C 6 0) アルキルカルボニル、(C 6 - C 6 0) アリールカルボニル、カルボキシル、ニトロもしくはヒドロキシルを表すか、またはR<sub>5 1</sub>とR<sub>5 2</sub>は、縮合環を含むかもしくは含まない(C 3 - C 6 0) アルキレンもしくは(C 3 - C 6 0) アルケニレンで連結されて、脂環式環または単環式もしくは多環式芳香族環を形成することができ；

50

0) アルキル (C 6 - C 6 0) アリールシリル、トリ (C 6 - C 6 0) アリールシリル、アダマンチル、(C 7 - C 6 0) ビシクロアルキル、(C 2 - C 6 0) アルケニル、(C 2 - C 6 0) アルキニル、シアノ、(C 1 - C 6 0) アルキルアミノ、(C 6 - C 6 0) アリールアミノ、(C 6 - C 6 0) アリール (C 1 - C 6 0) アルキル、(C 1 - C 6 0) アルキルオキシ、(C 1 - C 6 0) アルキルチオ、(C 6 - C 6 0) アリールオキシ、(C 6 - C 6 0) アリールチオ、(C 1 - C 6 0) アルコキシカルボニル、(C 1 - C 6 0) アルキルカルボニル、(C 6 - C 6 0) アリールカルボニル、カルボキシル、ニトロもしくはヒドロキシルを表すか、または  $R_{51}$  乃至  $R_{62}$  は隣接した置換基と、縮合環を含むかもしくは含まない (C 3 - C 6 0) アルキレンもしくは (C 3 - C 6 0) アルケニレンで連結されて、脂環式環または単環式もしくは多環式芳香族環を形成することができ

10

X 及び Y は、互いに独立して、化学結合を表すか、または - (C  $R_{71}$   $R_{72}$ )  $m$  -、- N ( $R_{73}$ ) -、- S -、- O -、- Si ( $R_{74}$ ) ( $R_{75}$ ) -、- P ( $R_{76}$ ) -、- C (=O) -、- B ( $R_{77}$ ) -、- In ( $R_{78}$ ) -、- Se -、- Ge ( $R_{79}$ ) ( $R_{80}$ ) -、- Sn ( $R_{81}$ ) ( $R_{82}$ ) -、- Ga ( $R_{83}$ ) - もしくは - ( $R_{84}$ ) C = C ( $R_{85}$ ) - を表し；

$R_{71}$  乃至  $R_{85}$  は、互いに独立して、水素、重水素、ハロゲン、(C 1 - C 6 0) アルキル、(C 6 - C 6 0) アリール、N、O 及び S から選択された一つ以上のヘテロ原子を含む (C 3 - C 6 0) ヘテロアリール、モルホリノ、チオモルホリノ、N、O 及び S から選択された一つ以上のヘテロ原子を含む 5 員もしくは 6 員のヘテロシクロアルキル、(C 3 - C 6 0) シクロアルキル、トリ (C 1 - C 6 0) アルキルシリル、ジ (C 1 - C 6 0) アルキル (C 6 - C 6 0) アリールシリル、トリ (C 6 - C 6 0) アリールシリル、アダマンチル、(C 7 - C 6 0) ビシクロアルキル、(C 2 - C 6 0) アルケニル、(C 2 - C 6 0) アルキニル、シアノ、(C 1 - C 6 0) アルキルアミノ、(C 6 - C 6 0) アリールアミノ、(C 6 - C 6 0) アリール (C 1 - C 6 0) アルキル、(C 1 - C 6 0) アルキルオキシ、(C 1 - C 6 0) アルキルチオ、(C 6 - C 6 0) アリールオキシ、(C 6 - C 6 0) アリールチオ、(C 1 - C 6 0) アルコキシカルボニル、(C 1 - C 6 0) アルキルカルボニル、(C 6 - C 6 0) アリールカルボニル、カルボキシル、ニトロもしくはヒドロキシルを表すか、または  $R_{71}$  と  $R_{72}$ 、 $R_{74}$  と  $R_{75}$ 、 $R_{79}$  と  $R_{80}$ 、 $R_{81}$  と  $R_{82}$ 、もしくは  $R_{84}$  と  $R_{85}$  は、縮合環を含むかしくは含まない (C 3 - C 6 0) アルキレンもしくは (C 3 - C 6 0) アルケニレンで連結されて、脂環式環または単環式もしくは多環式芳香族環を形成することができ；

20

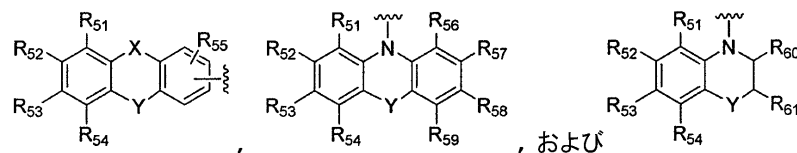
30

$L_2$  及び  $L_3$  のアリーレンもしくはヘテロアリーレン、 $Ar_1$  のアリールもしくはヘテロアリール、または  $R_1$  乃至  $R_{11}$ 、 $R_{41}$ 、 $R_{42}$ 、 $R_{51}$  乃至  $R_{62}$ 、および  $R_{71}$  乃至  $R_{85}$  のアルキル、アリール、ヘテロアリール、ヘテロシクロアルキル、シクロアルキル、トリアルキルシリル、ジアルキルアリールシリル、トリアリールシリル、アルケニル、アルキニル、アルキルアミノもしくはアリールアミノは、重水素、ハロゲン、(C 1 - C 6 0) アルキル、ハロ (C 1 - C 6 0) アルキル、(C 6 - C 6 0) アリール、N、O 及び S から選択された一つ以上のヘテロ原子を含み (C 6 - C 6 0) アリール置換基を有するもしくは有しない (C 3 - C 6 0) ヘテロアリール、モルホリノ、チオモルホリノ、N、O 及び S から選択された一つ以上のヘテロ原子を含む 5 員もしくは 6 員のヘテロシクロアルキル、(C 3 - C 6 0) シクロアルキル、トリ (C 1 - C 6 0) アルキルシリル、ジ (C 1 - C 6 0) アルキル (C 6 - C 6 0) アリールシリル、トリ (C 6 - C 6 0) アリールシリル、アダマンチル、(C 7 - C 6 0) ビシクロアルキル、(C 2 - C 6 0) アルケニル、(C 2 - C 6 0) アルキニル、シアノ、(C 1 - C 6 0) アルキルアミノ、(C 6 - C 6 0) アリールアミノ、(C 6 - C 6 0) アリール (C 1 - C 6 0) アルキル、(C 1 - C 6 0) アルキルオキシ、(C 1 - C 6 0) アルキルチオ、(C 6 - C 6 0) アリールオキシ、(C 6 - C 6 0) アリールチオ、(C 1 - C 6 0) アルコキシカルボニル、(C 1 - C 6 0) アルキルカルボニル、(C 6 - C 6 0) アリールカルボニル、カルボキシル、ニトロ、ヒドロキシル、

40

50

## 【化 2 3】



から選ばれた 1 種以上の置換基によってさらに置換されてよく；

m は、1 ～ 4 の整数であって；

x は、1 ～ 4 の整数である。

## 【発明の詳細な説明】

10

## 【技術分野】

## 【0001】

本発明は、新規な有機電界発光化合物及びこれを含む有機電界発光素子に関する。

## 【背景技術】

## 【0002】

表示素子の中で、電界発光素子 (electroluminescence device: EL 素子) は、自己発光型表示素子であって、LCD と比較して、視野角が広く、コントラストに優れ、かつ応答速度が速いという長所を有している。1987 年に、イーストマンコダックは、EL 層形成用材料として、低分子量の芳香族ジアミンとアルミニウム錯体とを使用する有機 EL 素子を最初に開発した [Appl. Phys. Lett. 51, 913, 1987]。

20

## 【0003】

有機 EL 素子は、電子注入電極 (陰極) と正孔注入電極 (陽極) の間に形成された有機膜に電荷を適用すると、電子と正孔が対をなした後消滅しながら光を出す素子である。プラスチックのようなフレキシブルな透明基体上に素子を形成することができる。その素子は、プラズマディスプレイパネルまたは無機 EL ディスプレイに比べて、より低い電圧 (10 V 以下) で駆動が可能であり、電力消耗が相対的に少ないが、色純度に優れている。

## 【0004】

有機 EL 素子において、発光効率、寿命などを決定する最も重要な要因は、電界発光材料である。このような電界発光材料に求められるいくつかの特性には、その材料が固体状態で高い蛍光量子収率を有し、電子と正孔の高い移動度を有し、真空蒸着の間に容易に分解されず、かつ均一で安定な薄膜を形成することが挙げられる。

30

## 【0005】

有機電界発光材料は、概して、高分子材料と低分子材料とに分けられうる。低分子材料は、分子構造の観点から、金属錯体、および金属を含まない完全有機電界発光材料がある。このような電界発光材料には、トリス (8 - キノリノラト) アルミニウム錯体などのキレート錯体、クマリン誘導体、テトラフェニルブタジエン誘導体、ビス (スチリルアアリーレン) 誘導体、オキサジアゾール誘導体が挙げられる。これらの材料からは、青色から赤色までの可視領域の発光が得られうると報告されている。

## 【0006】

40

フルカラー OLED ディスプレイを実現するためには、3 つの EL 材料 (赤色、緑色および青色) が使用され、高効率、長寿命の EL 材料の開発が、有機電界発光全体の特性を増強させるための重要な課題である。EL 材料は、機能的な側面で、ホスト材料とドーパント材料とに分けられうる。最も優れた EL 特性を有する素子構造は、ホストにドーパントをドーピングして製造された EL 層で製造されうることが一般的に知られている。最近、高効率、長寿命の有機 EL 素子の開発が緊急の課題として表面化しており、特に急を要するのが、中～大型 OLED パネルで要求されている EL 特性を考慮すると、既存の EL 材料と比べて非常に優れた EL 特性の材料の開発である。

## 【0007】

このような観点から、ホスト材料の開発が、解決すべき最も重要な要素の一つである。

50

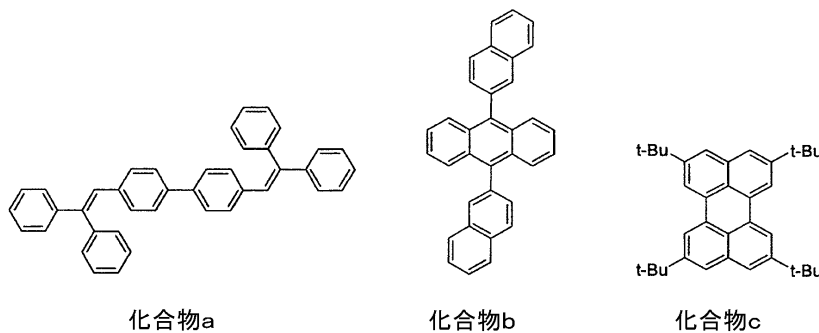
ここで、固体状態の溶媒として及びエネルギー伝達子としての役割をするホスト材料に望まれる特性は、高純度、および真空蒸着ができるように適切な分子量である。また、ガラス転移温度と熱分解温度は、熱的安定性を確保する高さであるべきである。さらに、ホスト材料は長寿命化のために、高い電気化学的安定性を有するべきである。隣接する他の材料との高い接着性を有し、層間移動がない非晶質薄膜を形成するのは容易である。

【 0 0 0 8 】

一方、従来の青色材料に関して、出光興産によるジフェニルビニル - ビフェニル (DPVB i) (化学式 a) の開発以後、多くの材料が開発され、商業化されている。出光興産からの青色材料系だけでなく、ジナフチルアントラセン (DNA、化学式 b)、テトラ (t - ブチル) ペリレン (化学式 c) 系などが知られている。しかし、これらの材料に関してさらなる研究開発が行われるべきである。今まで最も高い効率を有すると知られていた出光興産のディストリル (distryl) 化合物系は、6 (lm/W) の電力効率、および 30,000 時間を超える有利な素子寿命を有する。しかし、フルカラーディスプレイに適用される場合、駆動時間による色純度の低下により、寿命はわずか数千時間に過ぎない。青色電界発光においては、電界発光波長が長波長側に少しだけ移動する場合には、発光効率の観点からは有利でなる。しかし、青色の満足できない色純度のため、その材料を高品質のディスプレイに適用するのは容易ではない。さらに、色純度、効率および熱安定性に問題があるので、そのような材料の研究および開発が緊急に求められている。

【 0 0 0 9 】

【 化 1 】



【 0 0 1 0 】

高効率、長寿命のホスト材料について、多様な骨格を有する様々な物質、例えば、ジスピロ - フルオレン - アントラセン (TBSA)、タースピロフルオレン (TSF)、ピトリフェニレン (BTP) などが開発されたが、それらは色純度及び発光効率の点で、満足いくものではなかった。

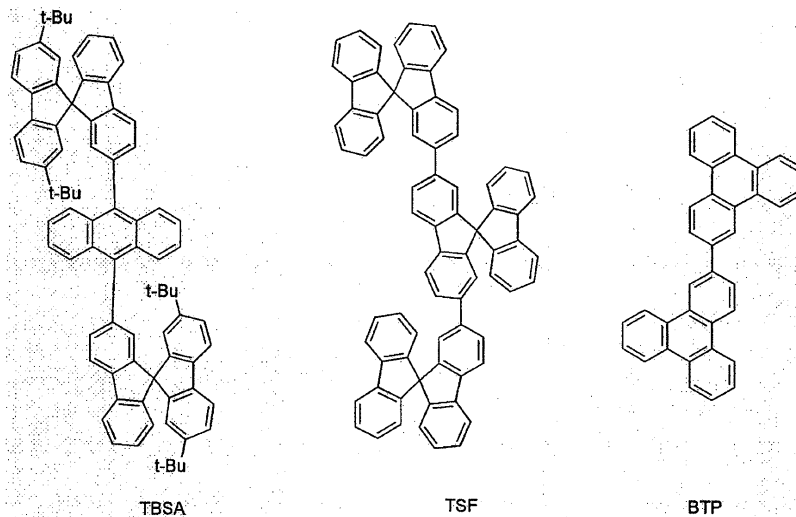
【 0 0 1 1 】

10

20

30

## 【化 2】



10

## 【0012】

キョンサン大学校（韓国）と三星SDIにより報告された化合物TBSA（Kwon, S. K. et al., Advanced Materials, 2001, 13, 1690; 特開2002-121547号）は、7.7Vで3cd/Aの発光効率と（0.15、0.11）の比較的良好な色度座標を示したが、これは単層の材料として適用された例であって、実用には適していない。

20

国立台湾大により報告された化合物TSF（Wu, C.-C. et al., Advanced Materials, 2004, 16, 61; 米国特許出願公開第2005040392号）は、5.3%の比較的良好な外部量子効率を示したが、実用には未だ不十分であった。

台湾の国立清華大により報告された化合物BTP（Cheng, C.-H, et al., Advanced Materials, 2002, 14, 1409; 米国特許出願公開第2004076852号）は、2.76cd/Aの発光効率と（0.16、0.14）の比較的良好な色度座標を示したが、実用には未だ不十分であった。

30

上述のように、従来の材料は、ホスト-ドーパント薄層を形成せず、単層で構成されており、色純度及び効率の観点から実際に使用されるのが困難である。その長寿命に対する信頼性あるデータも不備である。

## 【0013】

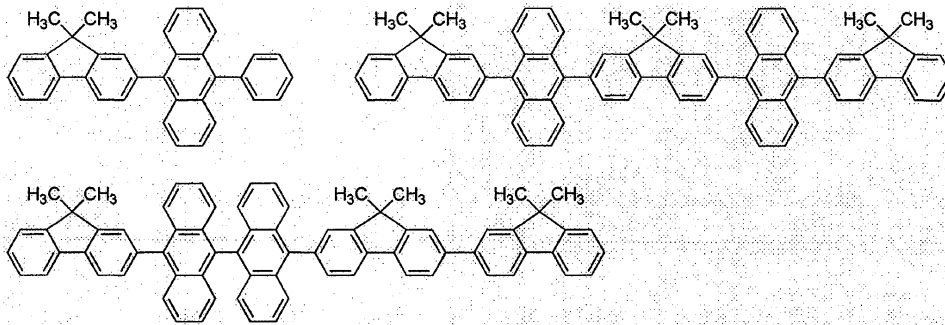
一方、三井化学（日本国）の特許出願（米国特許第7,166,240号）によると、下記の化合物が390乃至430nmの吸収スペクトルを有して、4.6cd/Aの発光効率を有している。しかしながら、このデータに基づくと、上記の吸収波長範囲の化合物の場合、緑青色の電界発光が予想され、その特許公報はその色を青みがかった緑色と示している。

特に、その特許公報の対称構造では、純青色の具現が不可能であり、純青色の発光をもたらしすることができない材料は、フルカラーディスプレイに実際に適用されるには不適切である。

40

## 【0014】

## 【化 3】



10

## 【先行技術文献】

## 【特許文献】

## 【0015】

【特許文献1】特開2002-121547号公報

【特許文献2】米国特許出願公開第2005/040392号明細書

【特許文献3】米国特許出願公開第2004/076852号明細書

【特許文献4】米国特許第7,166,240号明細書

## 【非特許文献】

## 【0016】

20

【非特許文献1】Appl. Phys. Lett. 51, 913, 1987

【非特許文献2】Kwon, S. K. et al., Advanced Materials, 2001, 13, 1690

【非特許文献3】Wu, C.-C. et al., Advanced Materials, 2004, 16, 61

【非特許文献4】Cheng, C.-H, et al., Advanced Materials, 2002, 14, 1409

## 【発明の概要】

## 【発明が解決しようとする課題】

## 【0017】

30

したがって、本発明の第1の目的は、上記の問題点を克服し、かつ既存のホスト材料と比較して、より優れた発光効率、素子寿命および適切な色度座標を得るための優れた骨格を含む有機電界発光化合物を提供することである。

本発明の第2の目的は、前記有機電界発光化合物をEL材料として使用することにより、高効率かつ長寿命の有機電界発光素子を提供することである。

第3の目的は、前記有機EL化合物を電界発光層に使用する有機EL素子を提供することである。

第4の目的は、前記有機電界発光化合物を含む太陽電池を提供することである。

## 【課題を解決するための手段】

## 【0018】

40

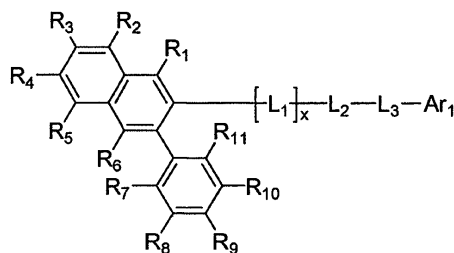
よって、本発明は、下記化学式1で表される有機電界発光化合物(organic electroluminescent compound)及びこれを含む有機電界発光素子(organic electroluminescent device)に関する。本発明による有機電界発光化合物は、高い発光効率、材料の優れた色純度及び寿命特性を示し、駆動寿命が非常に優秀なOLEDをそれから製造することができる。

## 【0019】



## 【化4】

化学式1



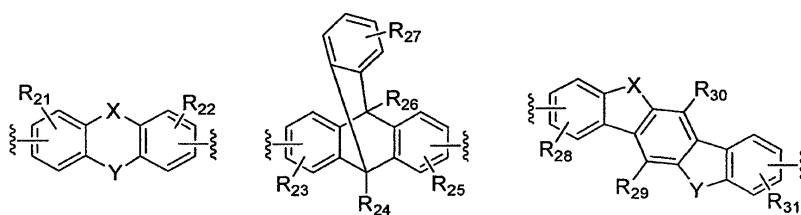
## 【0020】

10

式中、 $L_1$  は、(C6 - C60) アリーレンもしくはN、O及びSから選択された一つ以上のヘテロ原子を含む(C3 - C60) ヘテロアリーレンを表すか、または下記構造から選択される2価基を表し；

## 【0021】

## 【化5】



20

## 【0022】

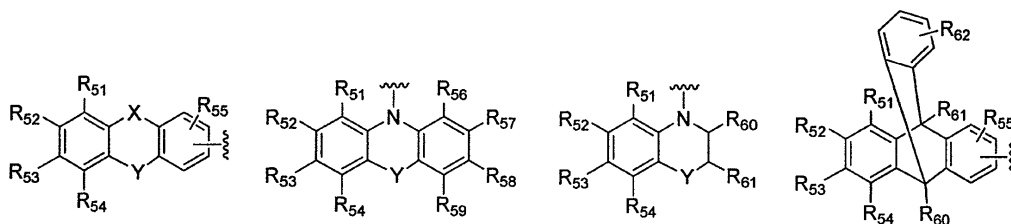
$L_2$  及び  $L_3$  は、互いに独立して、化学結合を表すか、または(C1 - C60) アルキレンオキシ、(C1 - C60) アルキレンチオ、(C6 - C60) アリーレンオキシ、(C6 - C60) アリーレンチオ、(C6 - C60) アリーレン、もしくはN、O及びSから選択された一つ以上のヘテロ原子を含む(C3 - C60) ヘテロアリーレンを表し；

$Ar_1$  は、 $NR_{41}R_{42}$ 、(C6 - C60) アリール、N、O及びSから選択された一つ以上のヘテロ原子を含む(C3 - C60) ヘテロアリール、N、O及びSから選択された一つ以上のヘテロ原子を含む5員もしくは6員のヘテロシクロアルキル、(C3 - C60) シクロアルキル、アダマンチル、(C7 - C60) ビシクロアルキル、または下記構造から選択される置換基を表し；

30

## 【0023】

## 【化6】



40

## 【0024】

$R_1$  乃至  $R_{11}$  は、互いに独立して、水素、重水素、ハロゲン、(C1 - C60) アルキル、(C6 - C60) アリール、N、O及びSから選択された一つ以上のヘテロ原子を含む(C3 - C60) ヘテロアリール、モルホリノ、チオモルホリノ、N、O及びSから選択された一つ以上のヘテロ原子を含む5員もしくは6員のヘテロシクロアルキル、(C3 - C60) シクロアルキル、トリ(C1 - C60) アルキルシリル、ジ(C1 - C60) アルキル(C6 - C60) アリールシリル、トリ(C6 - C60) アリールシリル、アダマンチル、(C7 - C60) ビシクロアルキル、(C2 - C60) アルケニル、(C2 - C60) アルキニル、シアノ、(C1 - C60) アルキルアミノ、(C6 - C60) アリールアミノ、(C6 - C60) アリール(C1 - C60) アルキル、(C1 - C60)

50

アルキルオキシ、(C<sub>1</sub> - C<sub>60</sub>) アルキルチオ、(C<sub>6</sub> - C<sub>60</sub>) アリールオキシ、(C<sub>6</sub> - C<sub>60</sub>) アリールチオ、(C<sub>1</sub> - C<sub>60</sub>) アルコキシカルボニル、(C<sub>1</sub> - C<sub>60</sub>) アルキルカルボニル、(C<sub>6</sub> - C<sub>60</sub>) アリールカルボニル、カルボキシル、ニトロもしくはヒドロキシルを表すか、または R<sub>1</sub> 乃至 R<sub>11</sub> は隣接した置換基と、縮合環を含むかもしくは含まない (C<sub>3</sub> - C<sub>60</sub>) アルキレンもしくは (C<sub>3</sub> - C<sub>60</sub>) アルケニレンで連結されて、脂環式環または単環式もしくは多環式芳香族環を形成することができ；

R<sub>21</sub> 乃至 R<sub>31</sub> は、互いに独立して、水素、重水素、ハロゲン、(C<sub>1</sub> - C<sub>60</sub>) アルキル、(C<sub>6</sub> - C<sub>60</sub>) アリール、N、O 及び S から選択された一つ以上のヘテロ原子を含む (C<sub>3</sub> - C<sub>60</sub>) ヘテロアリール、モルホリノ、チオモルホリノ、N、O 及び S から選択された一つ以上のヘテロ原子を含む 5 員もしくは 6 員のヘテロシクロアルキル、(C<sub>3</sub> - C<sub>60</sub>) シクロアルキル、トリ (C<sub>1</sub> - C<sub>60</sub>) アルキルシリル、ジ (C<sub>1</sub> - C<sub>60</sub>) アルキル (C<sub>6</sub> - C<sub>60</sub>) アリールシリル、トリ (C<sub>6</sub> - C<sub>60</sub>) アリールシリル、アダマンチル、(C<sub>7</sub> - C<sub>60</sub>) ビシクロアルキル、(C<sub>2</sub> - C<sub>60</sub>) アルケニル、(C<sub>2</sub> - C<sub>60</sub>) アルキニル、シアノ、(C<sub>1</sub> - C<sub>60</sub>) アルキルアミノ、(C<sub>6</sub> - C<sub>60</sub>) アリールアミノ、(C<sub>6</sub> - C<sub>60</sub>) アリール (C<sub>1</sub> - C<sub>60</sub>) アルキル、(C<sub>1</sub> - C<sub>60</sub>) アルキルオキシ、(C<sub>1</sub> - C<sub>60</sub>) アルキルチオ、(C<sub>6</sub> - C<sub>60</sub>) アリールオキシ、(C<sub>6</sub> - C<sub>60</sub>) アリールチオ、(C<sub>1</sub> - C<sub>60</sub>) アルコキシカルボニル、(C<sub>1</sub> - C<sub>60</sub>) アルキルカルボニル、(C<sub>6</sub> - C<sub>60</sub>) アリールカルボニル、カルボキシル、ニトロもしくはヒドロキシルを表すか、または R<sub>21</sub> 乃至 R<sub>31</sub> は隣接した置換基と、縮合環を含むかしくは含まない (C<sub>3</sub> - C<sub>60</sub>) アルキレンもしくは (C<sub>3</sub> - C<sub>60</sub>) アルケニレンで連結されて、脂環式環または単環式もしくは多環式芳香族環を形成することができ；

R<sub>41</sub> 及び R<sub>42</sub> は、互いに独立して、水素、重水素、ハロゲン、(C<sub>1</sub> - C<sub>60</sub>) アルキル、(C<sub>6</sub> - C<sub>60</sub>) アリール、N、O 及び S から選択された一つ以上のヘテロ原子を含む (C<sub>3</sub> - C<sub>60</sub>) ヘテロアリール、モルホリノ、チオモルホリノ、N、O 及び S から選択された一つ以上のヘテロ原子を含む 5 員もしくは 6 員のヘテロシクロアルキル、(C<sub>3</sub> - C<sub>60</sub>) シクロアルキル、トリ (C<sub>1</sub> - C<sub>60</sub>) アルキルシリル、ジ (C<sub>1</sub> - C<sub>60</sub>) アルキル (C<sub>6</sub> - C<sub>60</sub>) アリールシリル、トリ (C<sub>6</sub> - C<sub>60</sub>) アリールシリル、アダマンチル、(C<sub>7</sub> - C<sub>60</sub>) ビシクロアルキル、(C<sub>2</sub> - C<sub>60</sub>) アルケニル、(C<sub>2</sub> - C<sub>60</sub>) アルキニル、シアノ、(C<sub>1</sub> - C<sub>60</sub>) アルキルアミノ、(C<sub>6</sub> - C<sub>60</sub>) アリールアミノ、(C<sub>6</sub> - C<sub>60</sub>) アリール (C<sub>1</sub> - C<sub>60</sub>) アルキル、(C<sub>1</sub> - C<sub>60</sub>) アルキルオキシ、(C<sub>1</sub> - C<sub>60</sub>) アルキルチオ、(C<sub>6</sub> - C<sub>60</sub>) アリールオキシ、(C<sub>6</sub> - C<sub>60</sub>) アリールチオ、(C<sub>1</sub> - C<sub>60</sub>) アルコキシカルボニル、(C<sub>1</sub> - C<sub>60</sub>) アルキルカルボニル、(C<sub>6</sub> - C<sub>60</sub>) アリールカルボニル、カルボキシル、ニトロもしくはヒドロキシルを表すか、または R<sub>41</sub> と R<sub>42</sub> は、縮合環を含むかしくは含まない (C<sub>3</sub> - C<sub>60</sub>) アルキレンもしくは (C<sub>3</sub> - C<sub>60</sub>) アルケニレンで連結されて、脂環式環または単環式もしくは多環式芳香族環を形成することができ；

R<sub>51</sub> 乃至 R<sub>62</sub> は、互いに独立して、水素、重水素、ハロゲン、(C<sub>1</sub> - C<sub>60</sub>) アルキル、(C<sub>6</sub> - C<sub>60</sub>) アリール、N、O 及び S から選択された一つ以上のヘテロ原子を含む (C<sub>3</sub> - C<sub>60</sub>) ヘテロアリール、モルホリノ、チオモルホリノ、N、O 及び S から選択された一つ以上のヘテロ原子を含む 5 員もしくは 6 員のヘテロシクロアルキル、(C<sub>3</sub> - C<sub>60</sub>) シクロアルキル、トリ (C<sub>1</sub> - C<sub>60</sub>) アルキルシリル、ジ (C<sub>1</sub> - C<sub>60</sub>) アルキル (C<sub>6</sub> - C<sub>60</sub>) アリールシリル、トリ (C<sub>6</sub> - C<sub>60</sub>) アリールシリル、アダマンチル、(C<sub>7</sub> - C<sub>60</sub>) ビシクロアルキル、(C<sub>2</sub> - C<sub>60</sub>) アルケニル、(C<sub>2</sub> - C<sub>60</sub>) アルキニル、シアノ、(C<sub>1</sub> - C<sub>60</sub>) アルキルアミノ、(C<sub>6</sub> - C<sub>60</sub>) アリールアミノ、(C<sub>6</sub> - C<sub>60</sub>) アリール (C<sub>1</sub> - C<sub>60</sub>) アルキル、(C<sub>1</sub> - C<sub>60</sub>) アルキルオキシ、(C<sub>1</sub> - C<sub>60</sub>) アルキルチオ、(C<sub>6</sub> - C<sub>60</sub>) アリールオキシ、(C<sub>6</sub> - C<sub>60</sub>) アリールチオ、(C<sub>1</sub> - C<sub>60</sub>) アルコキシカルボニル、(C<sub>1</sub> - C<sub>60</sub>) アルキルカルボニル、(C<sub>6</sub> - C<sub>60</sub>) アリールカルボニル、カルボキシル、ニトロもしくはヒドロキシルを表すか、または R<sub>51</sub> 乃至 R<sub>62</sub> は隣接した置換基と、縮合環を

10

20

30

40

50

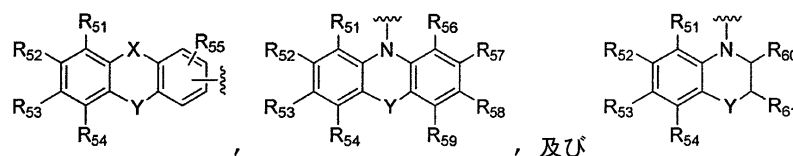
含むかもしくは含まない (C 3 - C 6 0) アルキレンもしくは (C 3 - C 6 0) アルケニレンで連結されて、脂環式環または単環式もしくは多環式芳香族環を形成することができ ;

X 及び Y は、互いに独立して、化学結合を表すか、または - (C R<sub>7 1</sub> R<sub>7 2</sub>)<sub>m</sub> - 、 - N (R<sub>7 3</sub>) - 、 - S - 、 - O - 、 - Si (R<sub>7 4</sub>) (R<sub>7 5</sub>) - 、 - P (R<sub>7 6</sub>) - 、 - C (=O) - 、 - B (R<sub>7 7</sub>) - 、 - In (R<sub>7 8</sub>) - 、 - Se - 、 - Ge (R<sub>7 9</sub>) (R<sub>8 0</sub>) - 、 - Sn (R<sub>8 1</sub>) (R<sub>8 2</sub>) - 、 - Ga (R<sub>8 3</sub>) - もしくは - (R<sub>8 4</sub>) C = C (R<sub>8 5</sub>) - を表し ;

R<sub>7 1</sub> 乃至 R<sub>8 5</sub> は、互いに独立して、水素、重水素、ハロゲン、(C 1 - C 6 0) アルキル、(C 6 - C 6 0) アリール、N、O 及び S から選択された一つ以上のヘテロ原子を含む (C 3 - C 6 0) ヘテロアリール、モルホリノ、チオモルホリノ、N、O 及び S から選択された一つ以上のヘテロ原子を含む 5 員もしくは 6 員のヘテロシクロアルキル、(C 3 - C 6 0) シクロアルキル、トリ (C 1 - C 6 0) アルキルシリル、ジ (C 1 - C 6 0) アルキル (C 6 - C 6 0) アリールシリル、トリ (C 6 - C 6 0) アリールシリル、アダマンチル、(C 7 - C 6 0) ビシクロアルキル、(C 2 - C 6 0) アルケニル、(C 2 - C 6 0) アルキニル、シアノ、(C 1 - C 6 0) アルキルアミノ、(C 6 - C 6 0) アリールアミノ、(C 6 - C 6 0) アリール (C 1 - C 6 0) アルキル、(C 1 - C 6 0) アルキルオキシ、(C 1 - C 6 0) アルキルチオ、(C 6 - C 6 0) アリールオキシ、(C 6 - C 6 0) アリールチオ、(C 1 - C 6 0) アルコキシカルボニル、(C 1 - C 6 0) アルキルカルボニル、(C 6 - C 6 0) アリールカルボニル、カルボキシル、ニトロもしくはヒドロキシルを表すか、または R<sub>7 1</sub> と R<sub>7 2</sub>、R<sub>7 4</sub> と R<sub>7 5</sub>、R<sub>7 9</sub> と R<sub>8 0</sub>、R<sub>8 1</sub> と R<sub>8 2</sub>、もしくは R<sub>8 4</sub> と R<sub>8 5</sub> は、縮合環を含むかもしくは含まない (C 3 - C 6 0) アルキレンもしくは (C 3 - C 6 0) アルケニレンで連結されて、脂環式環または単環式もしくは多環式芳香族環を形成することができ ;

L<sub>1</sub> 乃至 L<sub>3</sub> のアリーレンもしくはヘテロアリーレン、Ar<sub>1</sub> のアリールもしくはヘテロアリール、または R<sub>1</sub> 乃至 R<sub>1 1</sub>、R<sub>2 1</sub> 乃至 R<sub>3 1</sub>、R<sub>4 1</sub>、R<sub>4 2</sub>、R<sub>5 1</sub> 乃至 R<sub>6 2</sub>、および R<sub>7 1</sub> 乃至 R<sub>8 5</sub> のアルキル、アリール、ヘテロアリール、ヘテロシクロアルキル、シクロアルキル、トリアルキルシリル、ジアルキルアリールシリル、トリアリールシリル、アルケニル、アルキニル、アルキルアミノもしくはアリールアミノは、重水素、ハロゲン、(C 1 - C 6 0) アルキル、ハロ (C 1 - C 6 0) アルキル、(C 6 - C 6 0) アリール、N、O 及び S から選択された一つ以上のヘテロ原子を含み (C 6 - C 6 0) アリール置換基を有するもしくは有しない (C 3 - C 6 0) ヘテロアリール、モルホリノ、チオモルホリノ、N、O 及び S から選択された一つ以上のヘテロ原子を含む 5 員もしくは 6 員のヘテロシクロアルキル、(C 3 - C 6 0) シクロアルキル、トリ (C 1 - C 6 0) アルキルシリル、ジ (C 1 - C 6 0) アルキル (C 6 - C 6 0) アリールシリル、トリ (C 6 - C 6 0) アリールシリル、アダマンチル、(C 7 - C 6 0) ビシクロアルキル、(C 2 - C 6 0) アルケニル、(C 2 - C 6 0) アルキニル、シアノ、(C 1 - C 6 0) アルキルアミノ、(C 6 - C 6 0) アリールアミノ、(C 6 - C 6 0) アリール (C 1 - C 6 0) アルキル、(C 1 - C 6 0) アルキルオキシ、(C 1 - C 6 0) アルキルチオ、(C 6 - C 6 0) アリールオキシ、(C 6 - C 6 0) アリールチオ、(C 1 - C 6 0) アルコキシカルボニル、(C 1 - C 6 0) アルキルカルボニル、(C 6 - C 6 0) アリールカルボニル、カルボキシル、ニトロ、ヒドロキシル、

【化 7】



から選ばれた 1 種以上の置換基によってさらに置換されてよく ;

m は、1 ~ 4 の整数であって ;

10

20

30

40

50

x は、1 ~ 4 の整数である。

【図面の簡単な説明】

【0025】

【図1】図1はOLEDの断面図である。

【発明を実施するための形態】

【0026】

図面を参照すると、図1は、ガラス1、透明電極2、正孔注入層3、正孔輸送層4、電界発光層5、電子輸送層6、電子注入層7及びAl陰極8を含有する、本発明のOLEDの断面図を示す。

【0027】

本明細書に記載される用語「アルキル」及び「アルキル」部分を含むあらゆる置換基は、直鎖または分岐鎖の種類の両方を含む。

本明細書に記載される用語「アリール」は、一つの水素原子の除去により芳香族炭化水素から誘導された有機基を意味する。各環は4 ~ 7個、好ましくは5 ~ 6個の環原子を含む単環系または縮合環系を含む。具体的な例には、フェニル、ナフチル、ビフェニル、アントリル、テトラヒドロナフチル、インデニル、フルオレニル、フェナントリル、トリフェニレニル、ピレニル、ペリレニル、クリセニル、ナフタセニル、およびフルオランテニルが挙げられるが、これらに限定されない。

【0028】

本明細書に記載の用語「ヘテロアリール」は、芳香族環骨格原子としてN、O及びSから選択される1 ~ 4個のヘテロ原子、並びに残りの芳香族環骨格原子としての炭素原子を含むアリール基を意味する。ヘテロアリールは5員または6員の単環式ヘテロアリール、または一つ以上のベンゼン環と縮合されている多環式ヘテロアリールであってよく、部分的に飽和されていてもよい。ヘテロアリール基は、そのヘテロ原子が酸化されるか、または第4級化されて、N-オキシドまたは第4級塩を形成しうる2価アリール基を含みうる。具体的な例としては、フリル、チオフェニル、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、ピリジル、ピラジニル、ピリミジニル、ピリダジニルなどの単環式ヘテロアリール基；ベンゾフラニル、ベンゾチオフェニル、イソベンゾフラニル、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、フェナントリジニルおよびベンゾジオキサリルなどの多環式ヘテロアリール基；並びにこれらの対応するN-オキシド（例えば、ピリジルN-オキシド、キノリルN-オキシド）、およびこれらの第4級塩が挙げられるが、これらに限定されるものではない。

【0029】

化学式1のナフチルは、1-ナフチルもしくは2-ナフチルであってよく；アントリルは1-アントリル、2-アントリルもしくは9-アントリルであってよく；フルオレニルは1-フルオレニル、2-フルオレニル、3-フルオレニル、4-フルオレニルもしくは9-フルオレニルであってよい。

【0030】

本明細書に記載されている「(C1 - C60)アルキル」部分を含む置換基は、1 ~ 60個の炭素原子を有してもよく、1 ~ 20個の炭素原子を有してもよく、もしくは1 ~ 10個の炭素原子を有してもよい。「(C6 - C60)アリール」部分を含む置換基は、6 ~ 60個の炭素原子を有してもよく、6 ~ 20個の炭素原子を有してもよく、もしくは6 ~ 12個の炭素原子を有してもよい。「(C3 - C60)ヘテロアリール」部分を含む置換基は、3 ~ 60個の炭素原子を有してもよく、4 ~ 20個の炭素原子を有してもよく、もしくは4 ~ 12個の炭素原子を有してもよい。「(C3 - C60)シクロアルキル」部分を含む置換基は、3 ~ 60個の炭素原子を有してもよく、3 ~ 20個の炭素原子を有し

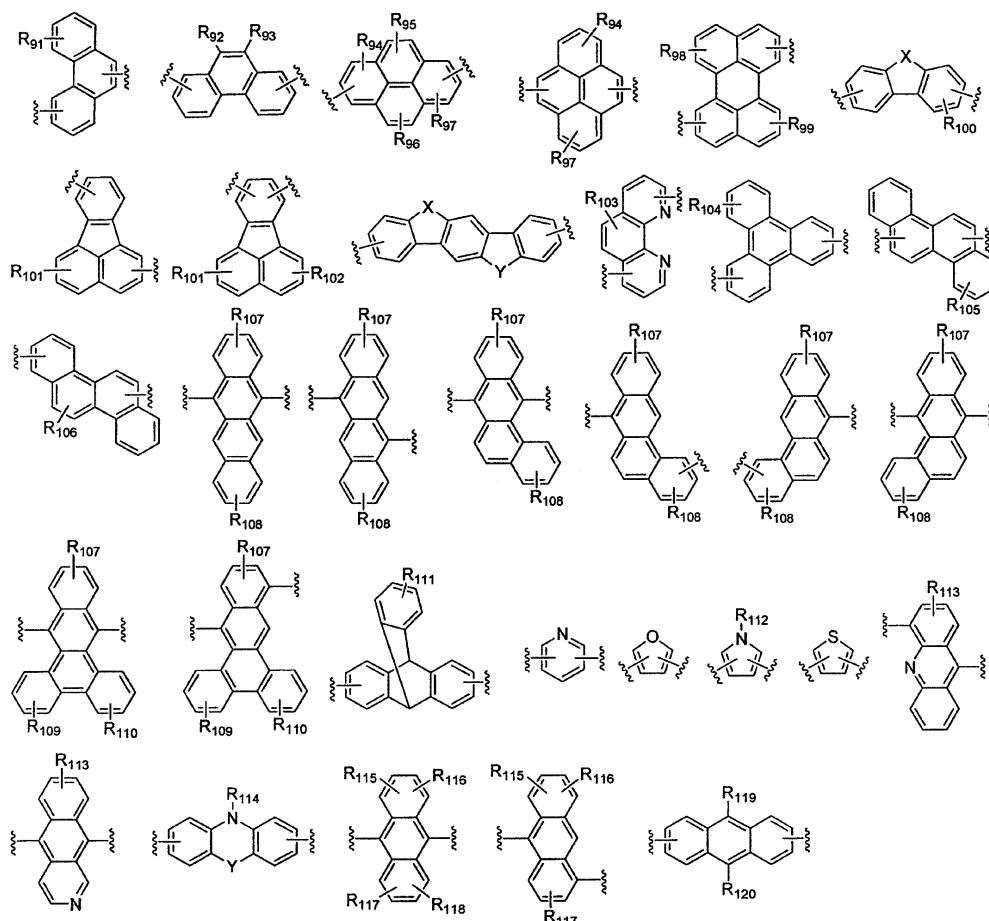
てもよく、もしくは3～7個の炭素原子を有してもよい。「(C2-C60)アルケニル  
もしくはアルキニル」部分を含む置換基は、2～60個の炭素原子を有してもよく、2～  
20個の炭素原子を有してもよく、もしくは2～10個の炭素原子を有してもよい。

【0031】

L<sub>1</sub> は下記構造から選択されうるが、これに限定されるものではない。

【0032】

【化8】



10

20

30

【0033】

式中、X及びYは、互いに独立して、-(CR<sub>71</sub>R<sub>72</sub>)<sub>m</sub>-、-N(R<sub>73</sub>)-、  
-S-、-O-、-Si(R<sub>74</sub>)(R<sub>75</sub>)-、-P(R<sub>76</sub>)-、または-(R<sub>84</sub>  
)C=C(R<sub>85</sub>)-を表し；

R<sub>71</sub>乃至R<sub>76</sub>、R<sub>84</sub>、R<sub>85</sub>及びmは、化学式1におけるように定義され；

R<sub>91</sub>乃至R<sub>120</sub>は、互いに独立して、水素、重水素、ハロゲン、(C1-C60)  
アルキル、(C6-C60)アリール、N、O及びSから選択された一つ以上のヘテロ原  
子を含む(C3-C60)ヘテロアリール、モルホリノ、チオモルホリノ、N、O及びS  
から選択された一つ以上のヘテロ原子を含む5員もしくは6員のヘテロシクロアルキル、  
(C3-C60)シクロアルキル、トリ(C1-C60)アルキルシリル、ジ(C1-C  
60)アルキル(C6-C60)アリールシリル、トリ(C6-C60)アリールシリル  
、アダマンチル、(C7-C60)ビスシクロアルキル、(C2-C60)アルケニル、(C  
2-C60)アルキニル、シアノ、(C1-C60)アルキルアミノ、(C6-C60)  
)アリールアミノ、(C6-C60)アリール(C1-C60)アルキル、(C1-C6  
0)アルキルオキシ、(C1-C60)アルキルチオ、(C6-C60)アリールオキシ  
、(C6-C60)アリールチオ、(C1-C60)アルコキシカルボニル、(C1-C  
60)アルキルカルボニル、(C6-C60)アリールカルボニル、カルボキシル、ニト  
ロもしくはヒドロキシルを表すか、またはR<sub>91</sub>乃至R<sub>120</sub>は縮合環を含むかもしくは

40

50

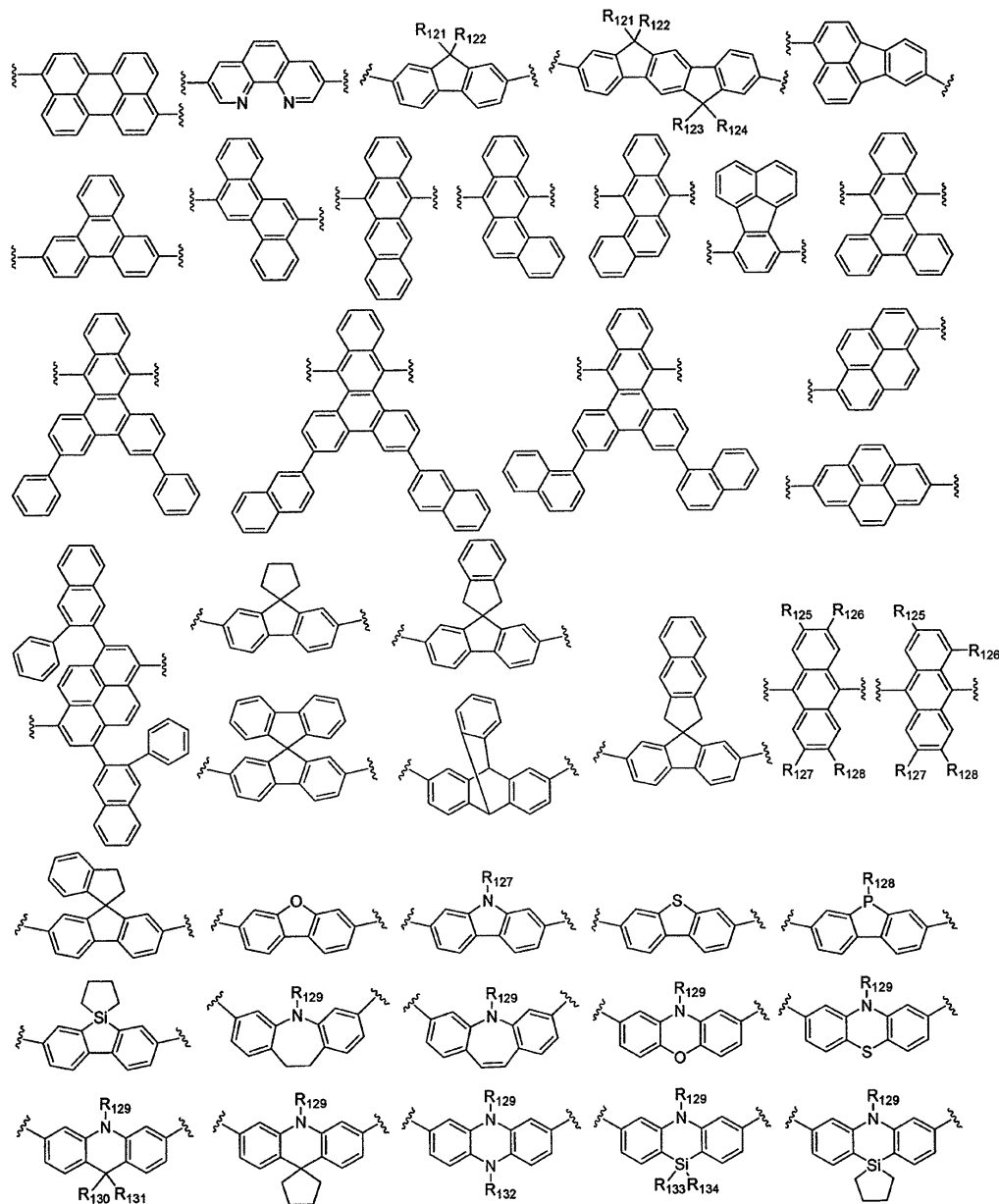
含まない(C3 - C60)アルキレンもしくは(C3 - C60)アルケニレンで連結されて、脂環式環または単環式もしくは多環式芳香族環を形成することができる。

【0034】

より具体的に、 $L_1$  は下記構造から選択されるが、これに限定されるものではない。

【0035】

【化9】



【0036】

式中、 $R_{121}$  乃至  $R_{134}$  は、互いに独立して、水素、重水素、(C1 - C60)アルキルまたは(C6 - C60)アリールを表し；

$R_{121}$  乃至  $R_{134}$  のアルキルまたはアリールは、重水素、ハロゲン、(C1 - C60)アルキル、ハロ(C1 - C60)アルキル、(C6 - C60)アリール、N、O及びSから選択された一つ以上のヘテロ原子を含む(C3 - C60)ヘテロアリール、モルホリノ、チオモルホリノ、N、O及びSから選択された一つ以上のヘテロ原子を含む5員もしくは6員のヘテロシクロアルキル、(C3 - C60)シクロアルキル、トリ(C1 - C60)アルキルシリル、ジ(C1 - C60)アルキル(C6 - C60)アリールシリル、トリ(C6 - C60)アリールシリル、アダマンチル、(C7 - C60)ビスシクロアルキル、(C2 - C60)アルケニル、(C2 - C60)アルキニル、シアノ、(C1 - C60)アルキルアミノ、(C6 - C60)アリールアミノ、(C6 - C60)アリール(C

10

20

30

40

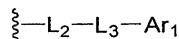
50

1 - C 6 0 ) アルキル、( C 1 - C 6 0 ) アルキルオキシ、( C 1 - C 6 0 ) アルキルチオ、( C 6 - C 6 0 ) アリールオキシ、( C 6 - C 6 0 ) アリールチオ、( C 1 - C 6 0 ) アルコシカルボニル、( C 1 - C 6 0 ) アルキルカルボニル、( C 6 - C 6 0 ) アリールカルボニル、カルボキシル、ニトロおよびヒドロキシルから選択された 1 種以上の置換基によってさらに置換されてよい。

【 0 0 3 7 】

基

【 化 1 0 】

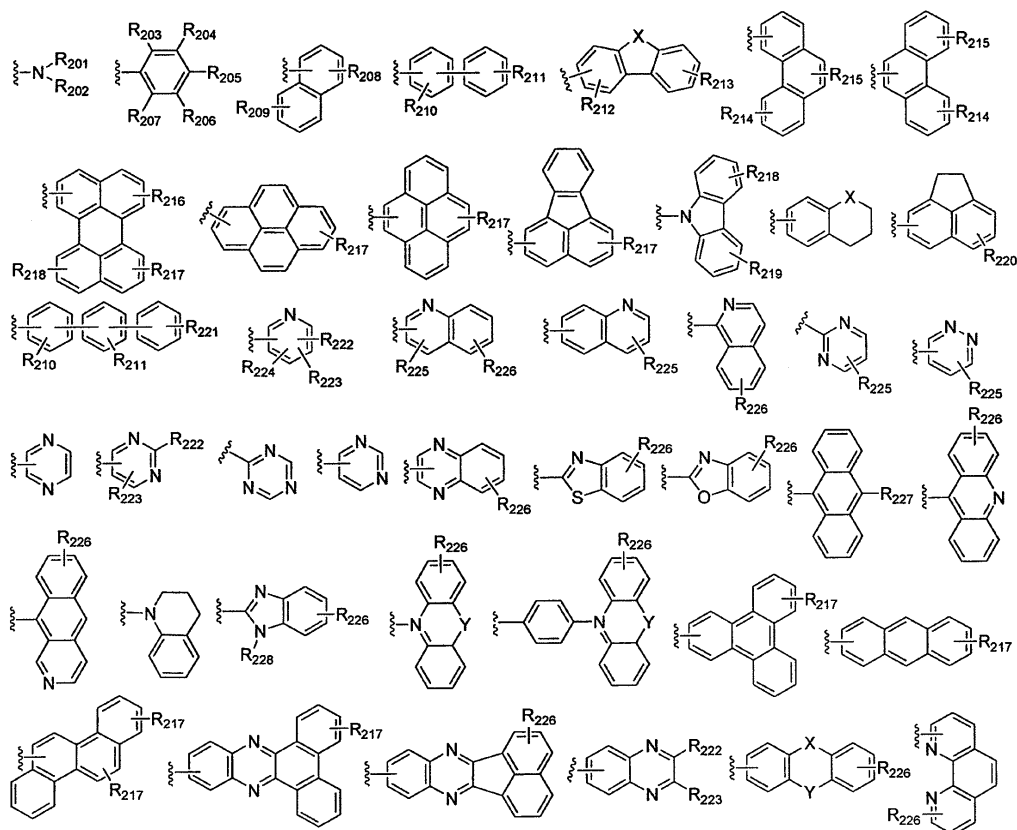


10

は、下記構造から選択されうるが、これに限定されるものではない。

【 0 0 3 8 】

【 化 1 1 】



20

30

【 0 0 3 9 】

式中、X 及び Y は、互いに独立して、- ( C R <sub>7 1</sub> R <sub>7 2</sub> ) <sub>m</sub> -、- N ( R <sub>7 3</sub> ) -、- S -、- O -、- Si ( R <sub>7 4</sub> ) ( R <sub>7 5</sub> ) -、- P ( R <sub>7 6</sub> ) -、もしくは - ( R <sub>8 4</sub> ) C = C ( R <sub>8 5</sub> ) - を表し；

R <sub>7 1</sub> 乃至 R <sub>7 6</sub>、R <sub>8 4</sub>、R <sub>8 5</sub> 及び m は化学式 1 におけるように定義され；

40

R <sub>2 0 1</sub> および R <sub>2 0 2</sub> は、互いに独立して、水素、重水素、( C 1 - C 6 0 ) アルキル、( C 3 - C 6 0 ) シクロアルキル、( C 6 - C 6 0 ) アリールもしくは N、O 及び S から選択された一つ以上のヘテロ原子を含む ( C 3 - C 6 0 ) ヘテロアリールを表し；

R <sub>2 0 3</sub> 乃至 R <sub>2 2 8</sub> は、互いに独立して、水素、重水素、ハロゲン、( C 1 - C 6 0 ) アルキル、( C 6 - C 6 0 ) アリール、N、O 及び S から選択された一つ以上のヘテロ原子を含む ( C 3 - C 6 0 ) ヘテロアリール、モルホリノ、チオモルホリノ、N、O 及び S から選択された一つ以上のヘテロ原子を含む 5 員もしくは 6 員のヘテロシクロアルキル、( C 3 - C 6 0 ) シクロアルキル、トリ ( C 1 - C 6 0 ) アルキルシリル、ジ ( C 1 - C 6 0 ) アルキル ( C 6 - C 6 0 ) アリールシリル、トリ ( C 6 - C 6 0 ) アリールシリル、アダマンチル、( C 7 - C 6 0 ) ビシクロアルキル、( C 2 - C 6 0 ) アルケニル、

50

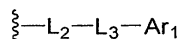
(C 2 - C 6 0) アルキニル、シアノ、(C 1 - C 6 0) アルキルアミノ、(C 6 - C 6 0) アリールアミノ、(C 6 - C 6 0) アリール(C 1 - C 6 0) アルキル、(C 1 - C 6 0) アルキルオキシ、(C 1 - C 6 0) アルキルチオ、(C 6 - C 6 0) アリールオキシ、(C 6 - C 6 0) アリールチオ、(C 1 - C 6 0) アルコキシカルボニル、(C 1 - C 6 0) アルキルカルボニル、(C 6 - C 6 0) アリールカルボニル、カルボキシル、ニトロもしくはヒドロキシルを表し；

前記 R<sub>201</sub>、R<sub>202</sub> 及び R<sub>203</sub> 乃至 R<sub>228</sub> のアルキル、アリール、ヘテロアリール、ヘテロシクロアルキル、シクロアルキル、トリアルキルシリル、ジアルキルアリールシリル、トリアリールシリル、アルケニル、アルキニル、アルキルアミノもしくはアリールアミノは、重水素、ハロゲン、(C 1 - C 6 0) アルキル、ハロ(C 1 - C 6 0) アルキル、(C 6 - C 6 0) アリール、N、O 及び S から選択された一つ以上のヘテロ原子を含み(C 6 - C 6 0) アリール置換基を有するもしくは有しない(C 3 - C 6 0) ヘテロアリール、モルホリノ、チオモルホリノ、N、O 及び S から選択された一つ以上のヘテロ原子を含む 5 員もしくは 6 員のヘテロシクロアルキル、(C 3 - C 6 0) シクロアルキル、トリ(C 1 - C 6 0) アルキルシリル、ジ(C 1 - C 6 0) アルキル(C 6 - C 6 0) アリールシリル、トリ(C 6 - C 6 0) アリールシリル、アダマンチル、(C 7 - C 6 0) ビシクロアルキル、(C 2 - C 6 0) アルケニル、(C 2 - C 6 0) アルキニル、シアノ、(C 1 - C 6 0) アルキルアミノ、(C 6 - C 6 0) アリールアミノ、(C 6 - C 6 0) アリール(C 1 - C 6 0) アルキル、(C 1 - C 6 0) アルキルオキシ、(C 1 - C 6 0) アルキルチオ、(C 6 - C 6 0) アリールオキシ、(C 6 - C 6 0) アリールチオ、(C 1 - C 6 0) アルコキシカルボニル、(C 1 - C 6 0) アルキルカルボニル、(C 6 - C 6 0) アリールカルボニル、カルボキシル、ニトロおよびヒドロキシルから選ばれた 1 種以上の置換基によってさらに置換されてもよい。

【0040】

基

【化12】



は、より具体的には、下記構造から独立して選択されるが、これに限定されるものではない。

【0041】

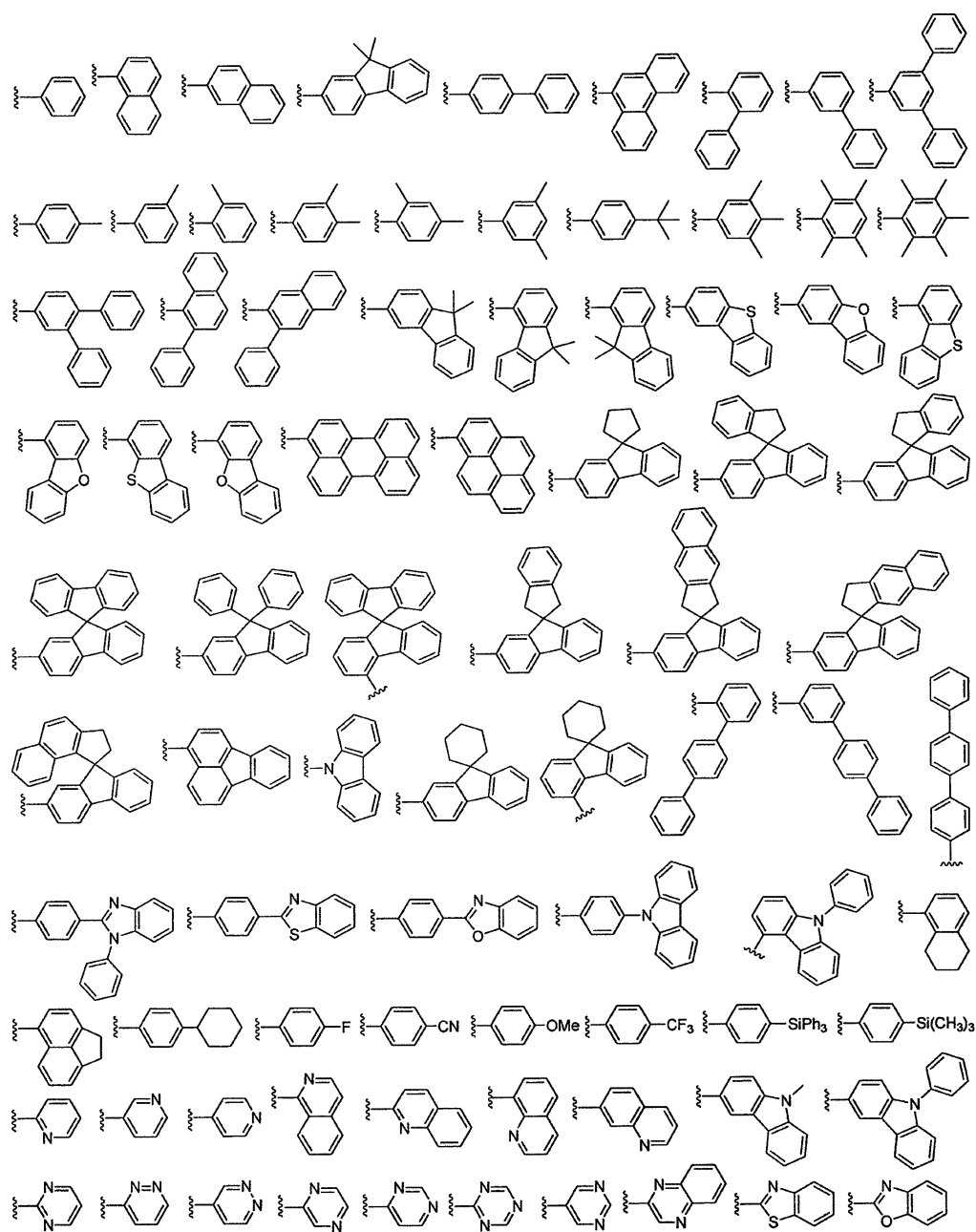
10

20

30



【化 1 3】



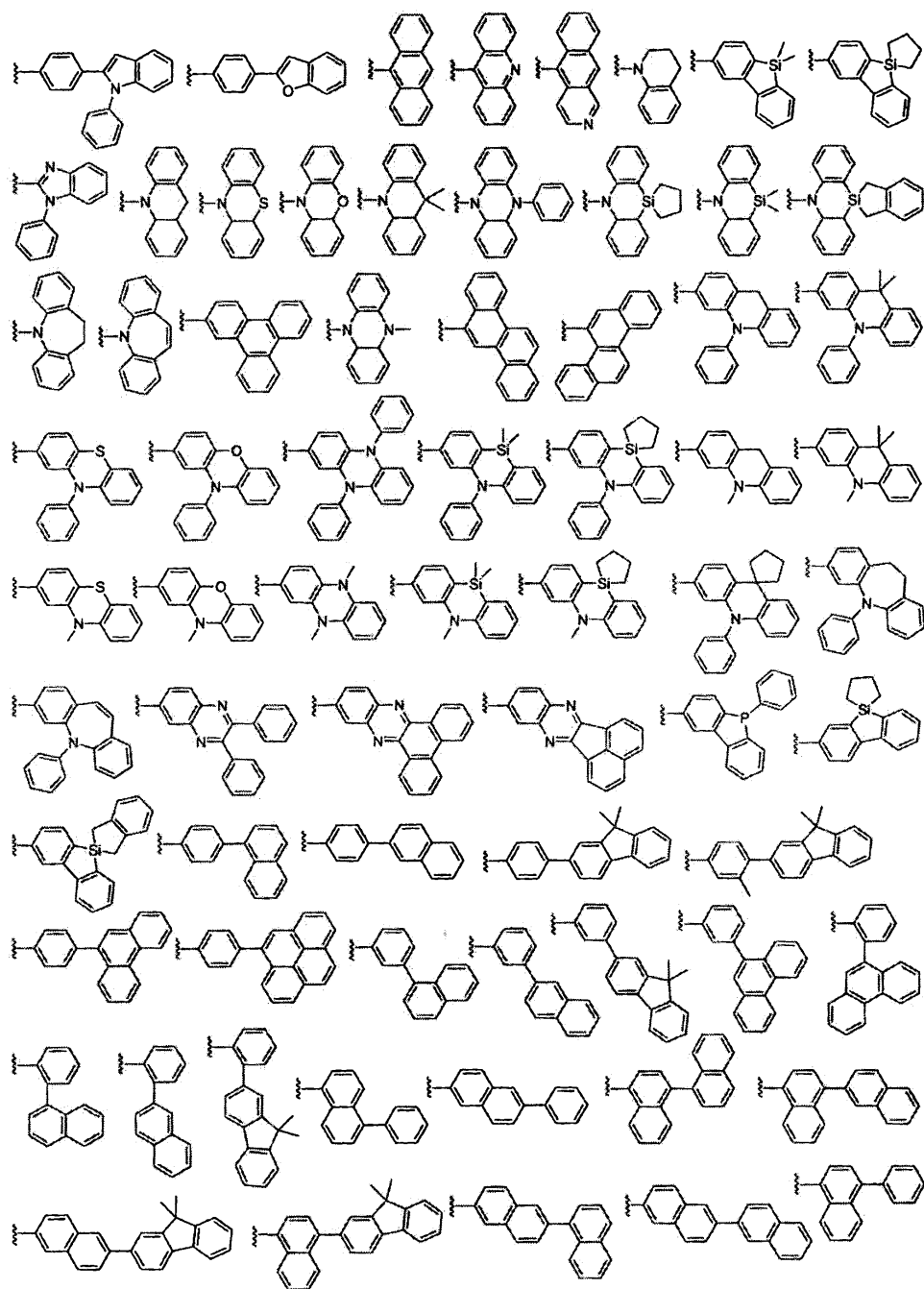
10

20

30

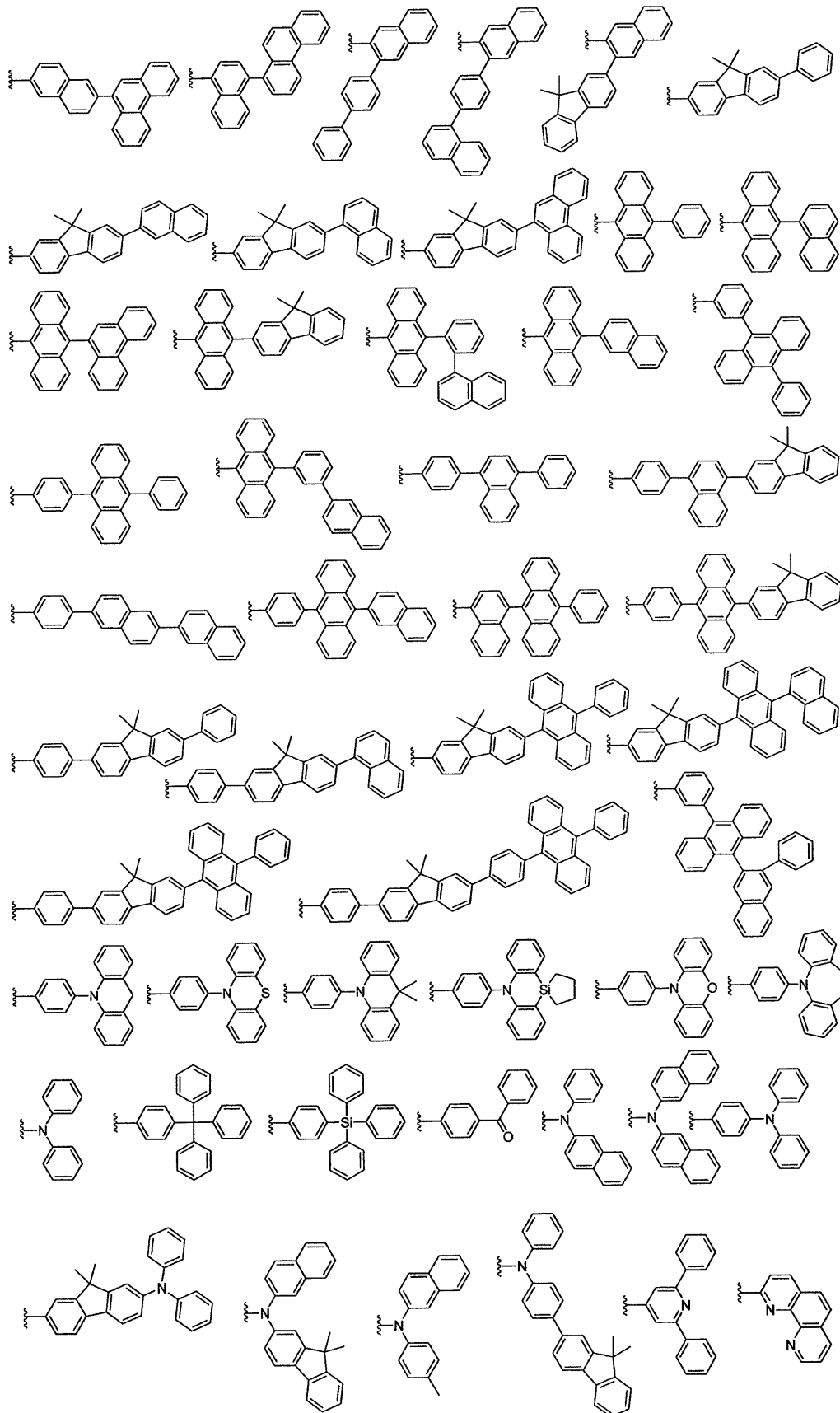
【 0 0 4 2 】

【化 1 4】



【 0 0 4 3 】

## 【化 1 5】



## 【0044】

$R_1$  乃至  $R_{11}$  は、互いに独立して、水素、重水素、フルオロ、クロロ、メチル、エチル、*n*-プロピル、*i*-プロピル、*n*-ブチル、*i*-ブチル、*t*-ブチル、*n*-ペンチル、*i*-ペンチル、*n*-ヘキシル、*n*-ヘプチル、*n*-オクチル、2-エチルヘキシル、*n*

10

20

30

40

50

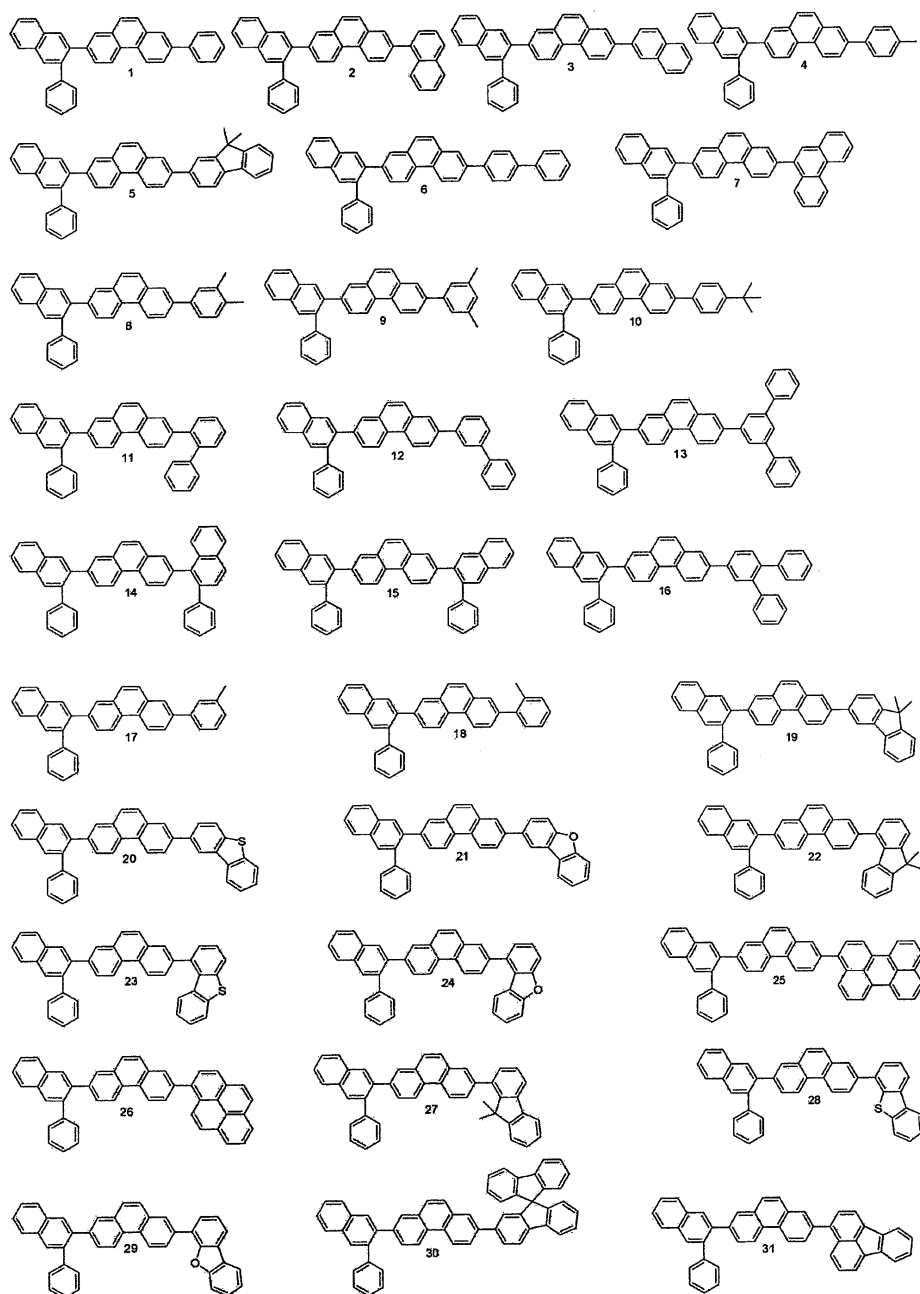
- ノニル、デシル、ドデシル、ヘキサデシル、ベンジル、トリフルオロメチル、ペルフルオロエチル、トリフルオロエチル、ペルフルオロプロピル、ペルフルオロブチル、メトキシ、エトキシ、n - プロポキシ、i - プロポキシ、n - ブトキシ、i - ブトキシ、t - ブトキシ、n - ペントキシ、i - ペントキシ、n - ヘキシルオキシ、n - ペプチルオキシ、シクロプロピル、シクロブチル、シクロペンチル、シクロヘキシル、シクロヘプチル、シクロオクチル、シクロノニル、シクロデシル、モルホリノ、チオモルホリノ、モルホリニル、チオモルホリニル、トリメチルシリル、トリエチルシリル、トリプロピルシリル、トリ(t - ブチル)シリル、t - ブチルジメチルシリル、ジメチルフェニルシリル、トリフェニルシリル、ピシクロ[2.2.1]ヘプチル、ピシクロ[2.2.2]オクチル、ピシクロ[5.2.0]ノニル、ピシクロ[4.2.2]デシル、4 - ペンチルピシクロ[2.2.2]オクチル、エテニル、フェニルエテニル、エチニル、フェニルエチニル、シアノ、メチルチオ、フェニルオキシ、フェニルチオ、メトキシカルボニル、エトキシカルボニル、t - ブトキシカルボニル、メチルカルボニル、エチルカルボニル、ベンジルカルボニル、フェニルカルボニル、カルボキシル、ニトロまたはヒドロキシルを表す。

【0045】

本発明による有機電界発光化合物は、下記の化合物で具体的に例示できるが、これらに限定されない。

【0046】

## 【化 1 6】



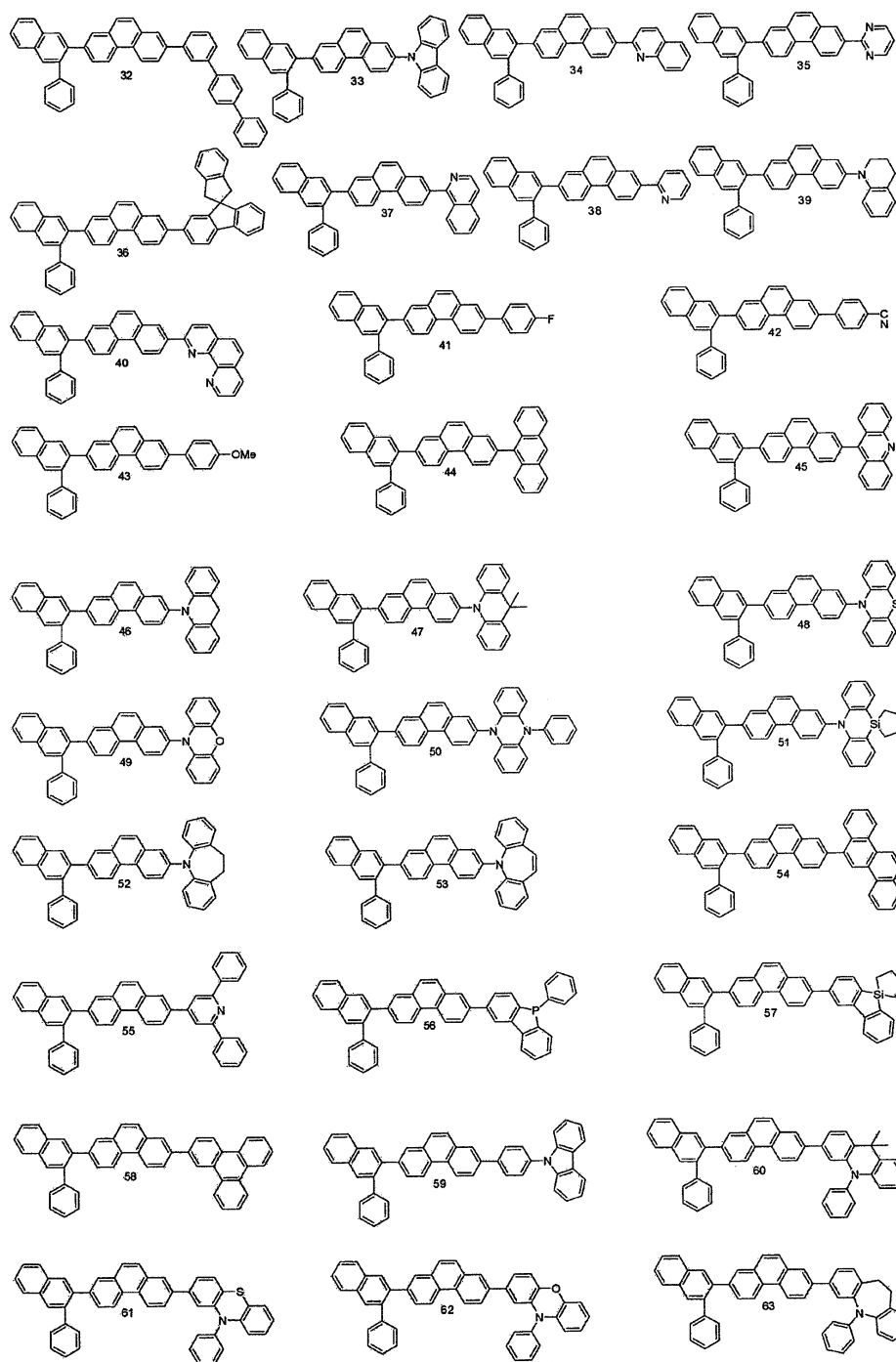
10

20

30

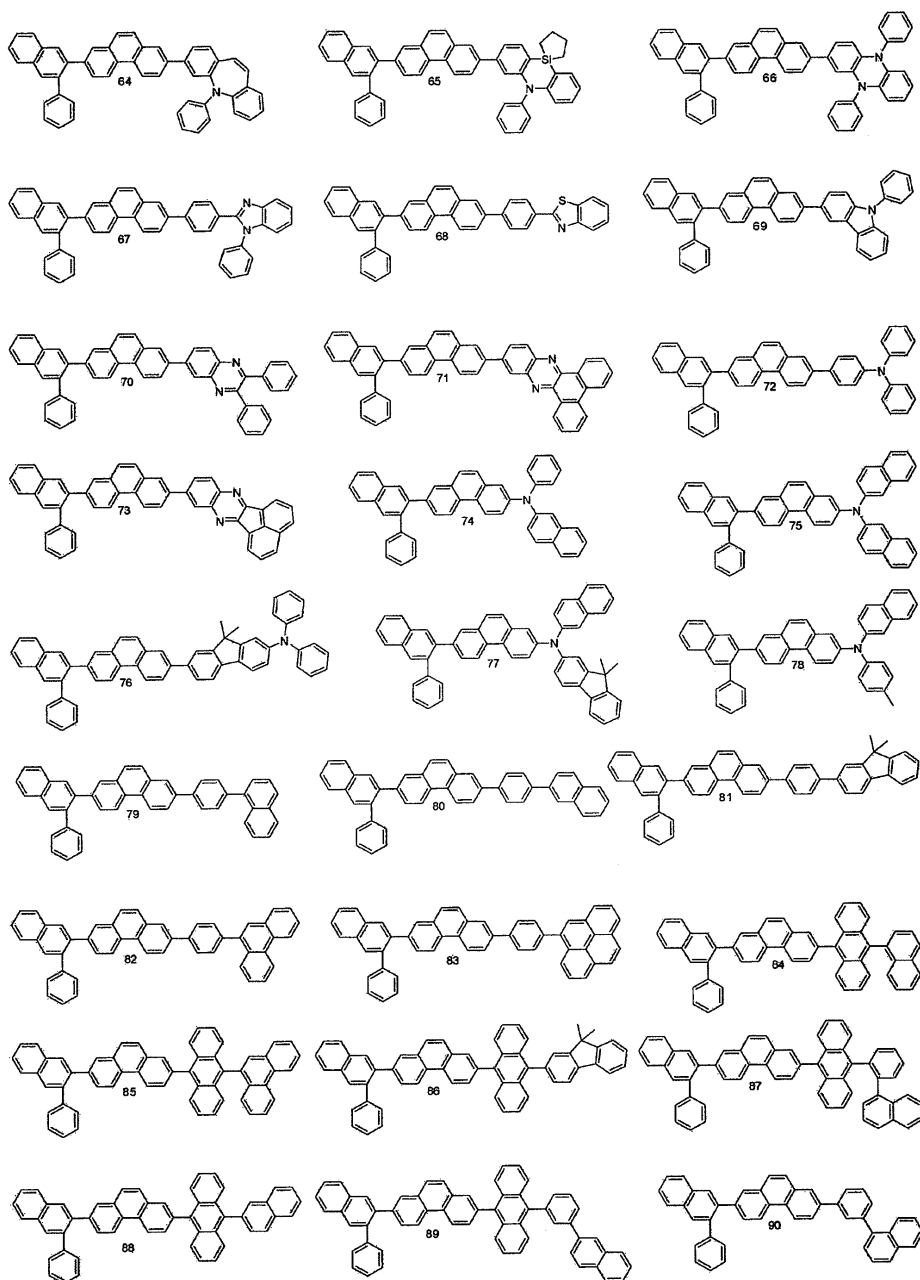
## 【 0 0 4 7 】

【化 17】



【 0 0 4 8 】

【化 18】



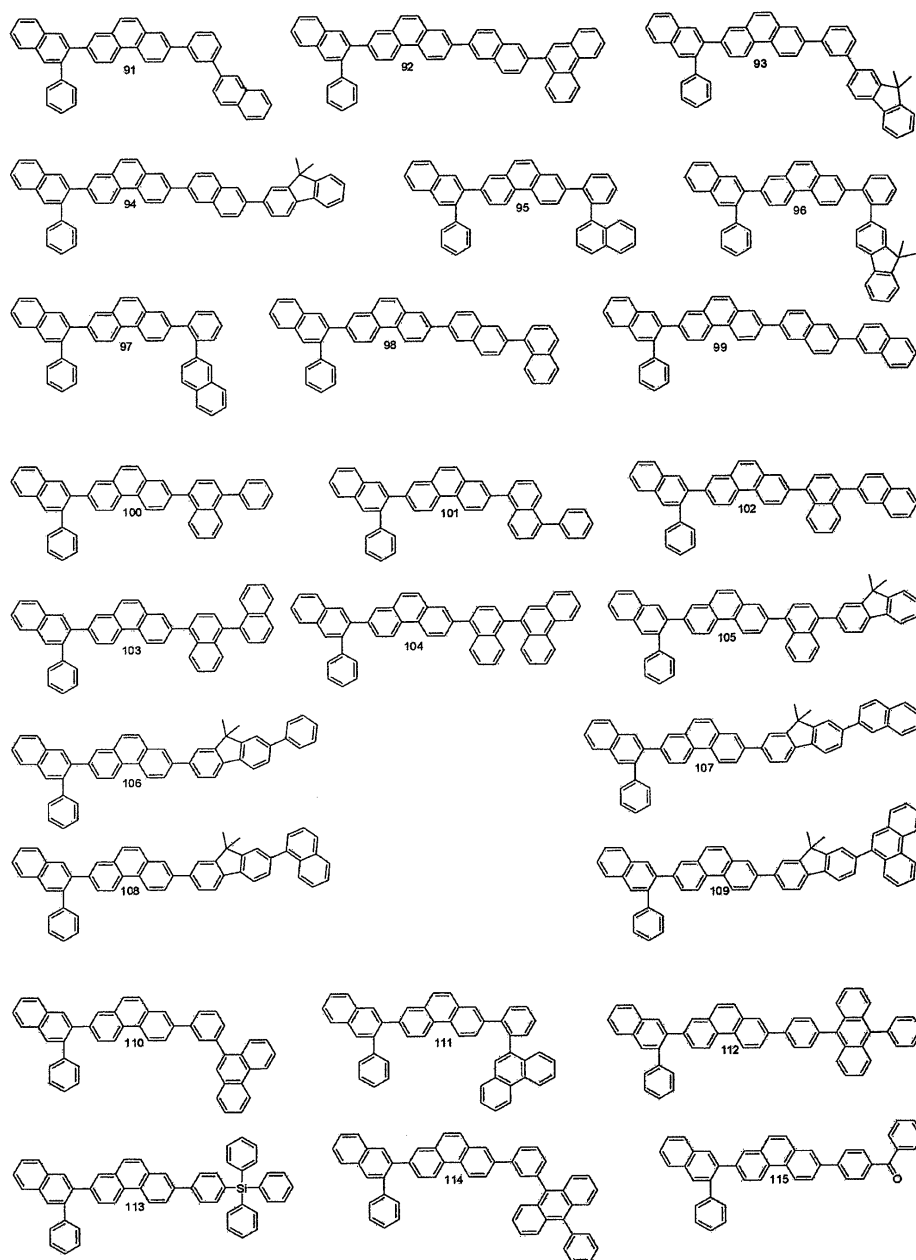
10

20

30

【 0 0 4 9 】

## 【化 19】



10

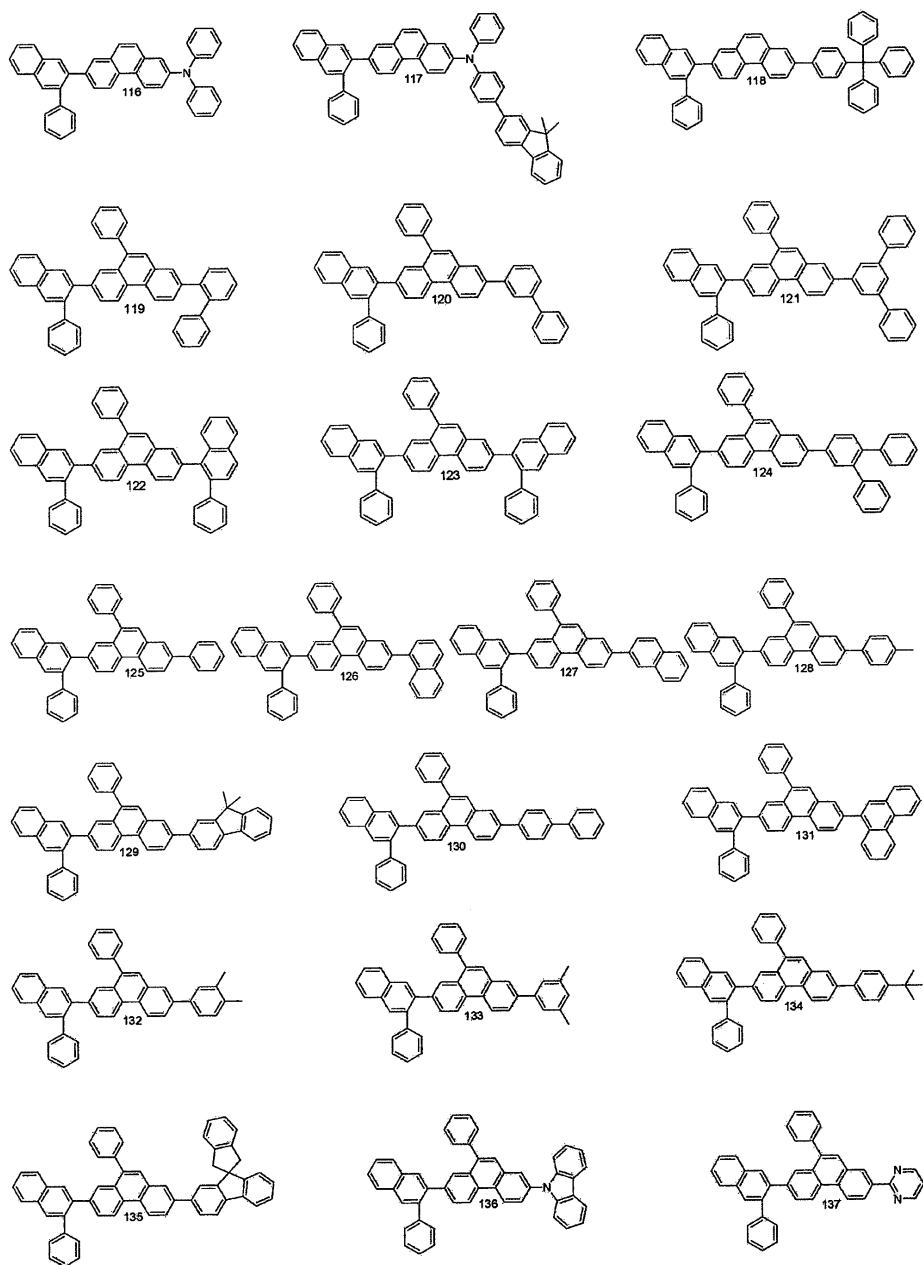
20

30

## 【 0 0 5 0 】



【化 20】



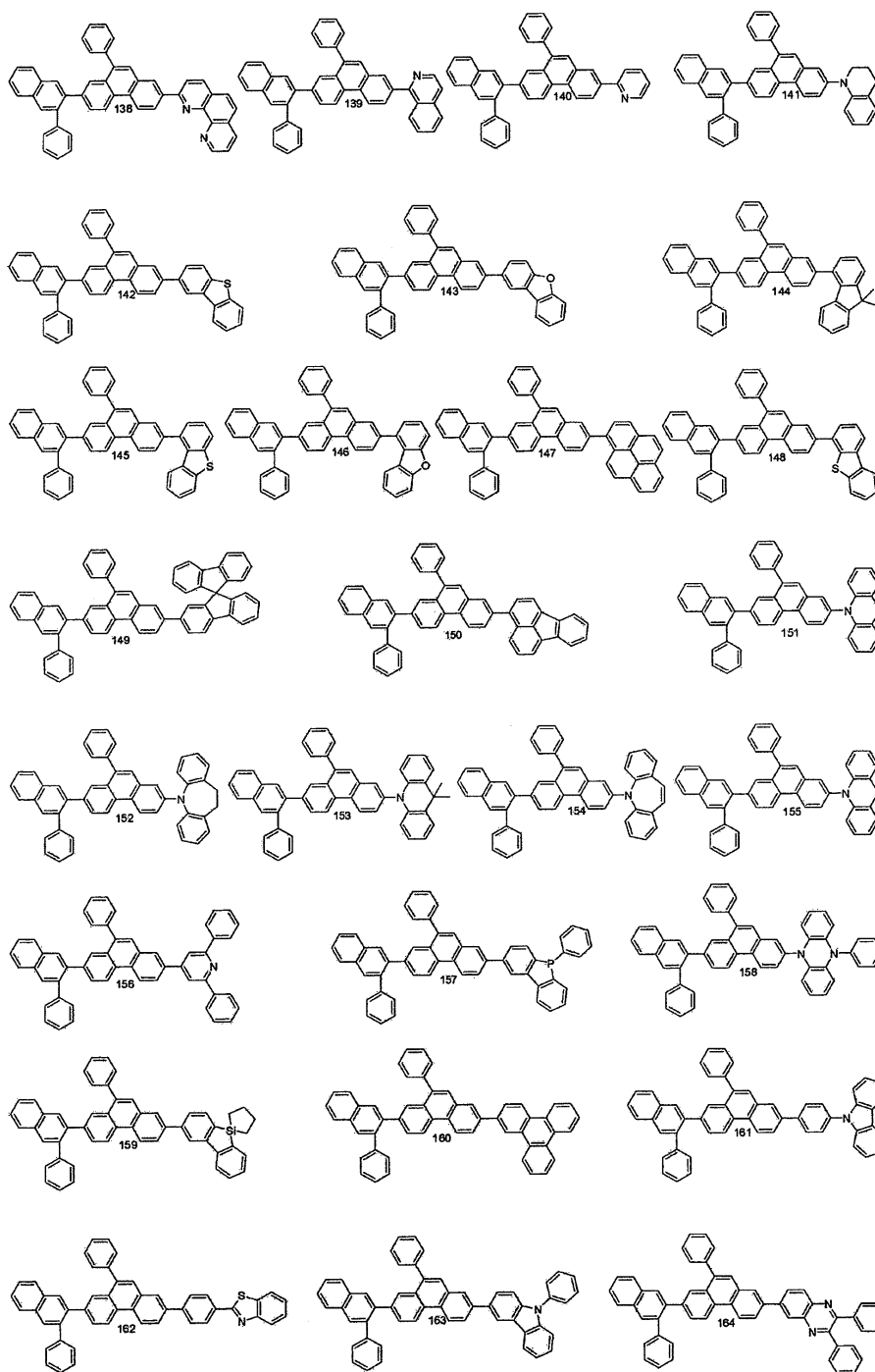
10

20

30

【 0 0 5 1 】

【化 2 1】



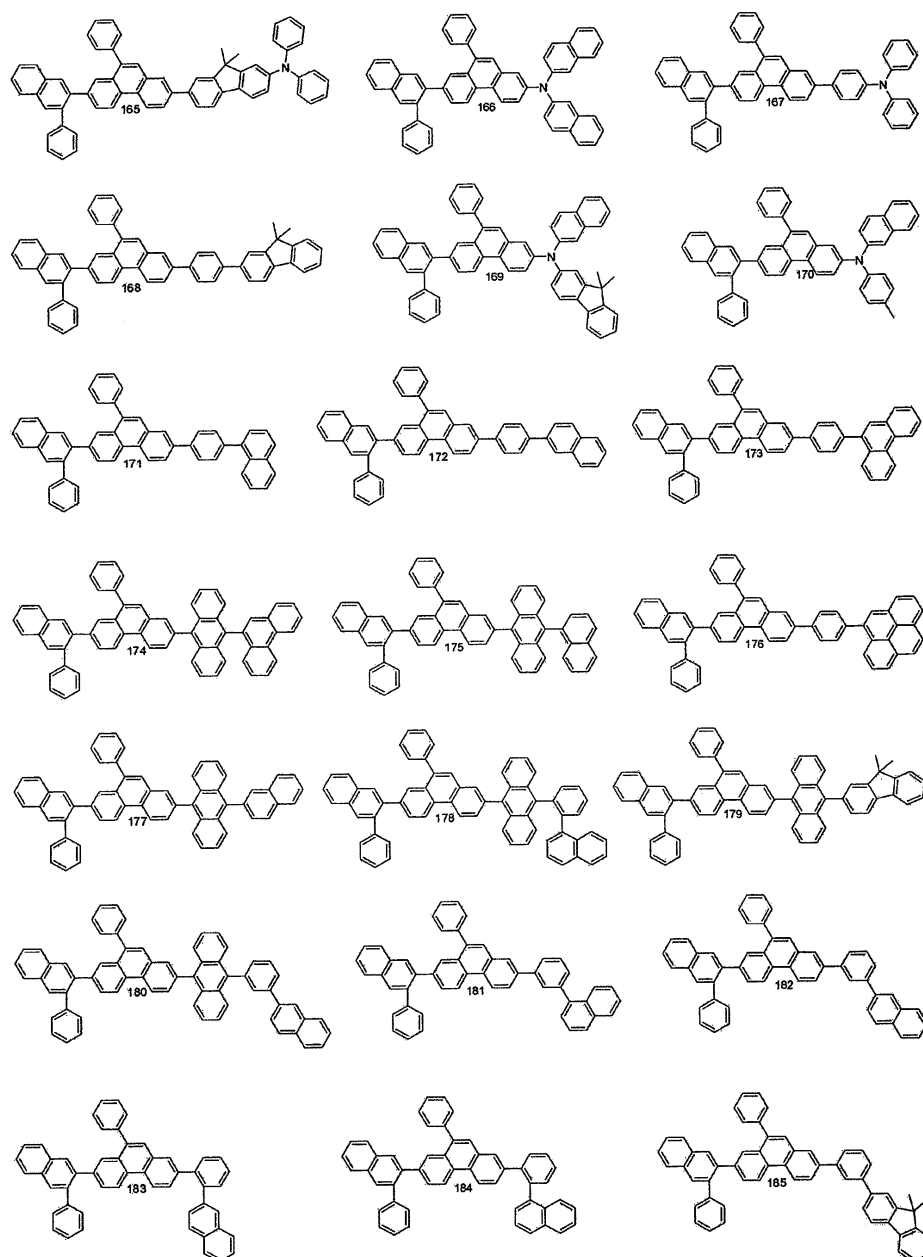
10

20

30

【 0 0 5 2 】

【化 2 2】



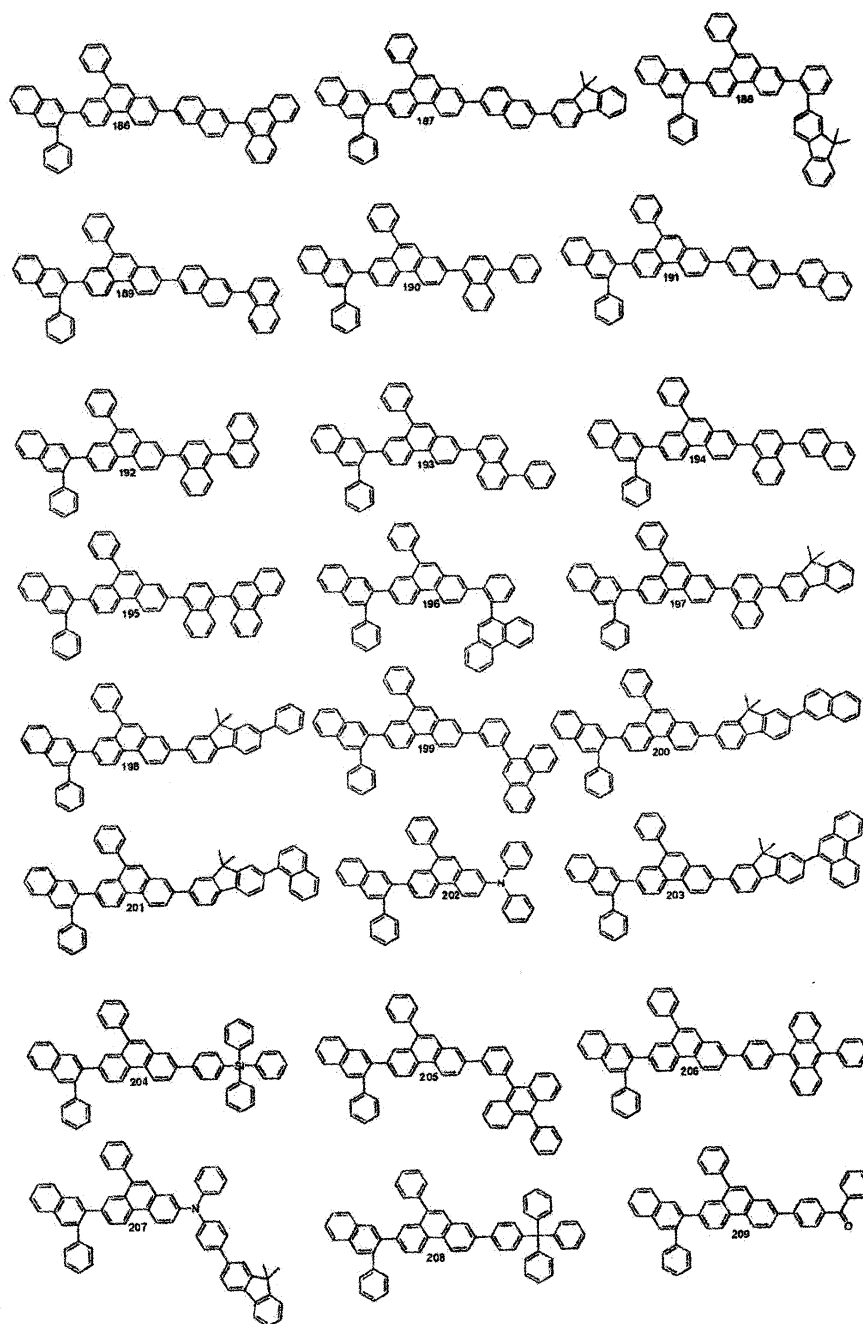
10

20

30

【 0 0 5 3 】

【化 2 3】



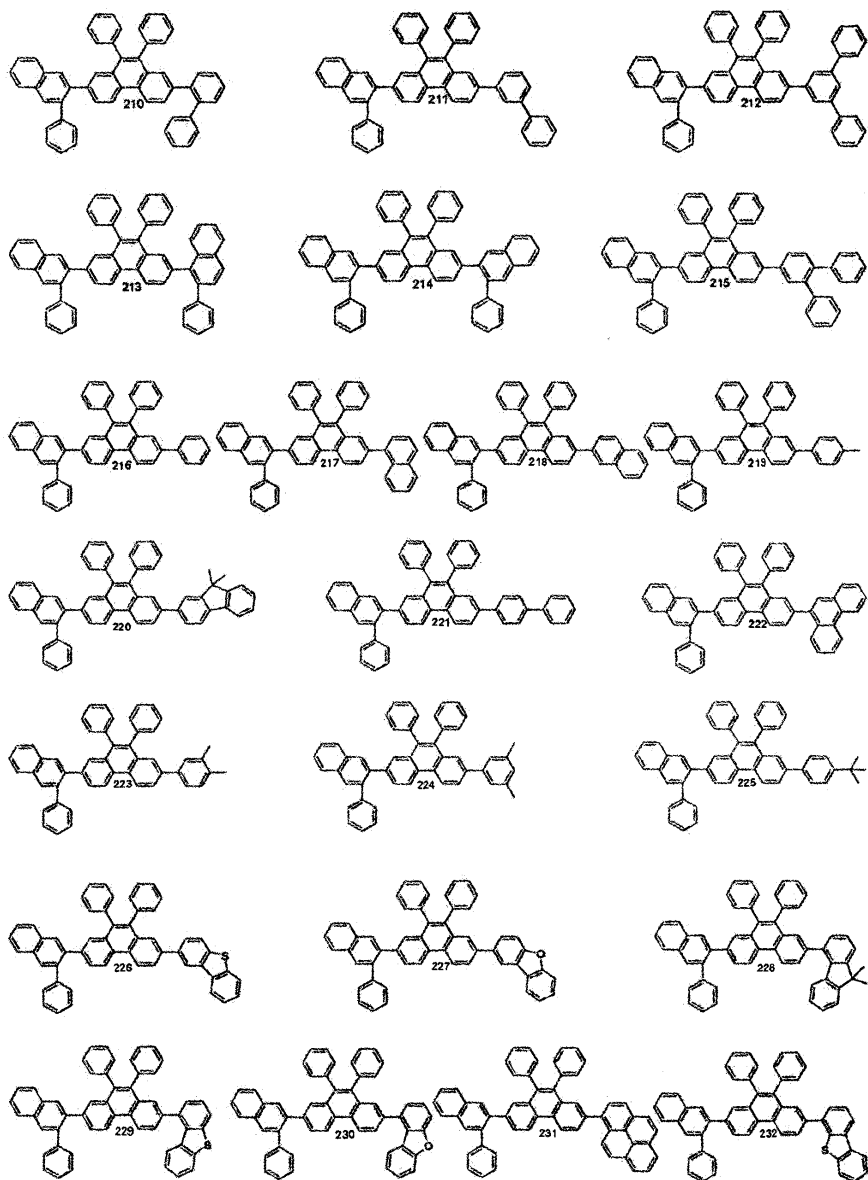
10

20

30

【 0 0 5 4】

【化 2 4】



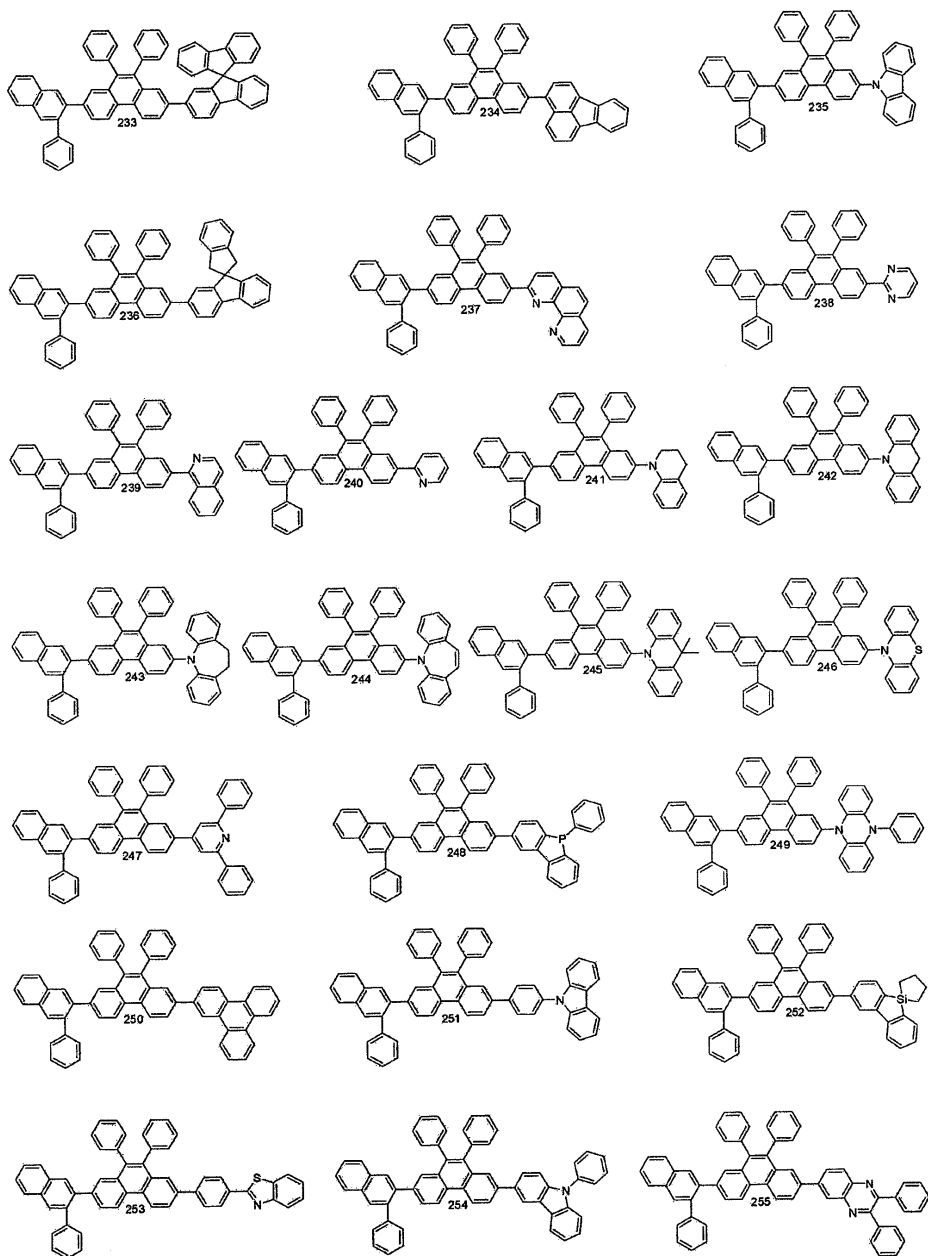
10

20

30

【 0 0 5 5 】

【化 2 5】



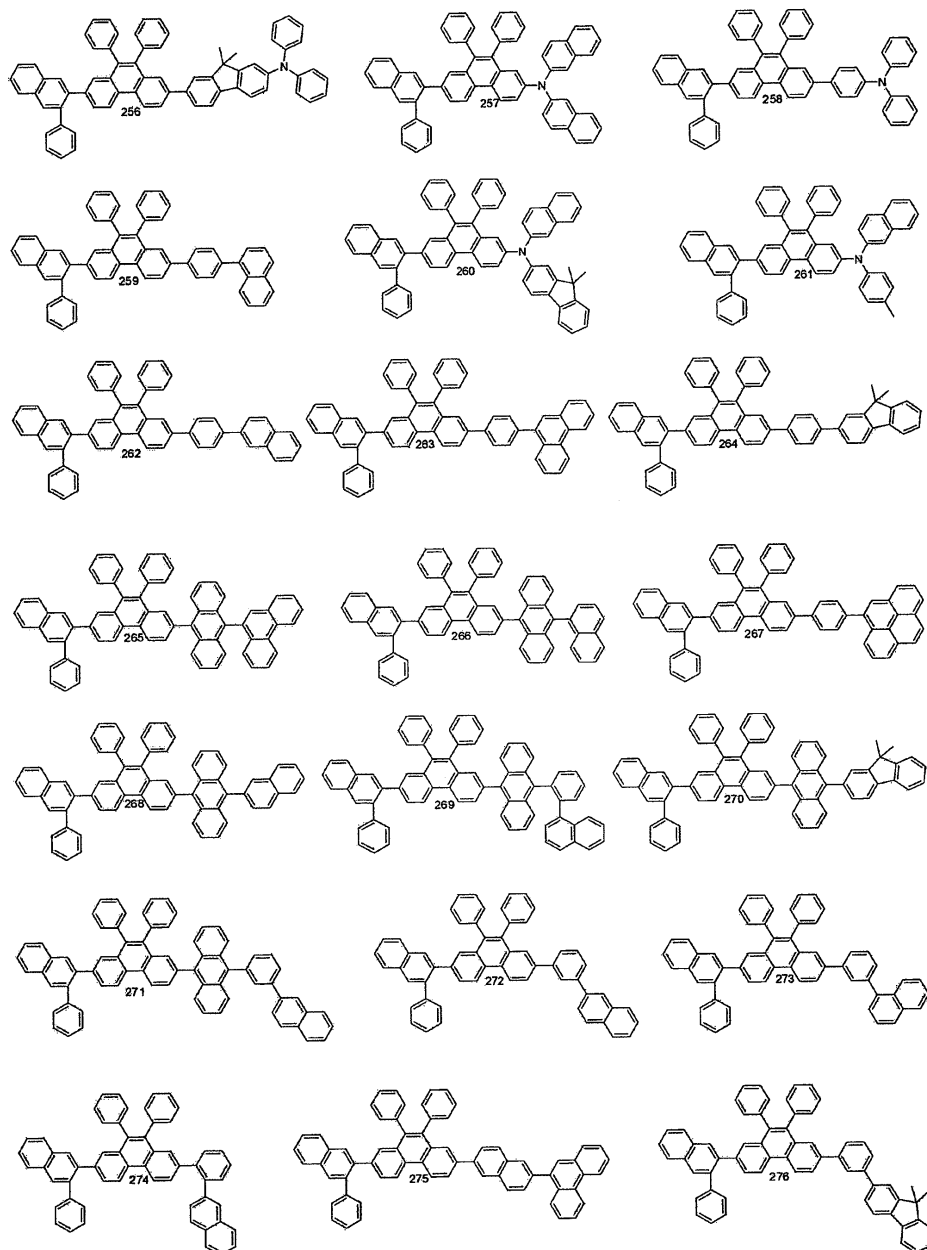
10

20

30

【 0 0 5 6】

【化 2 6】



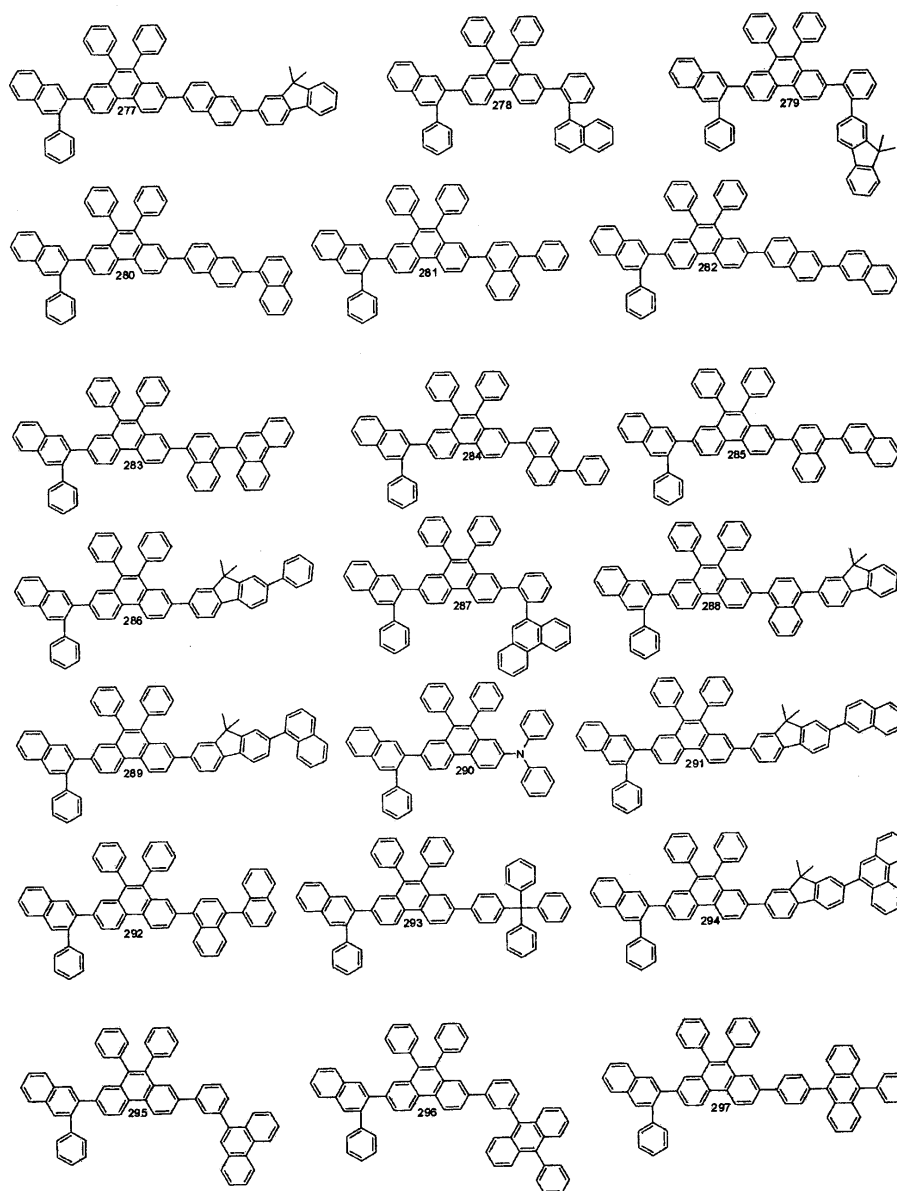
10

20

30

【 0 0 5 7】

【化 27】



10

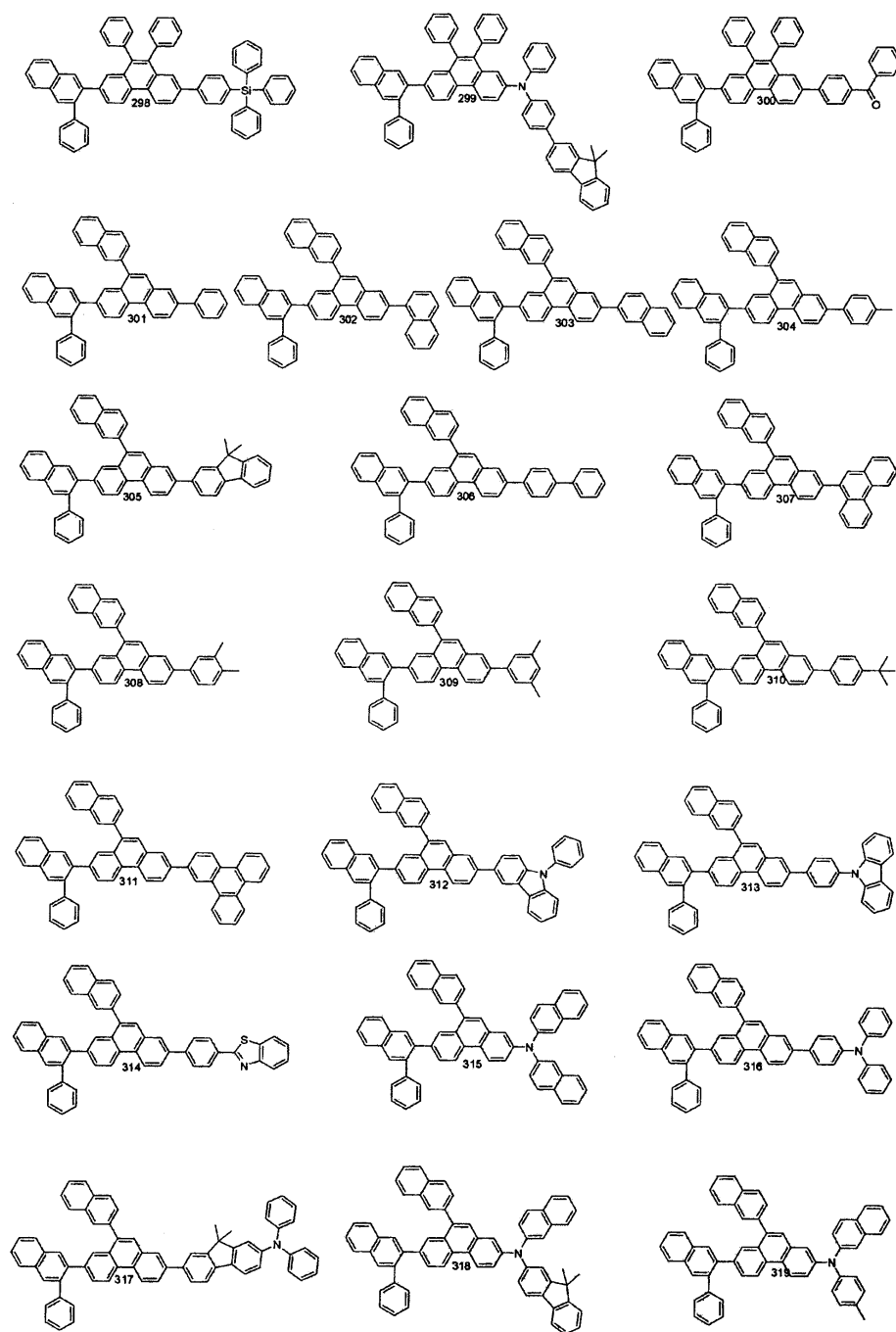
20

30

【 0 0 5 8 】



【化 28】



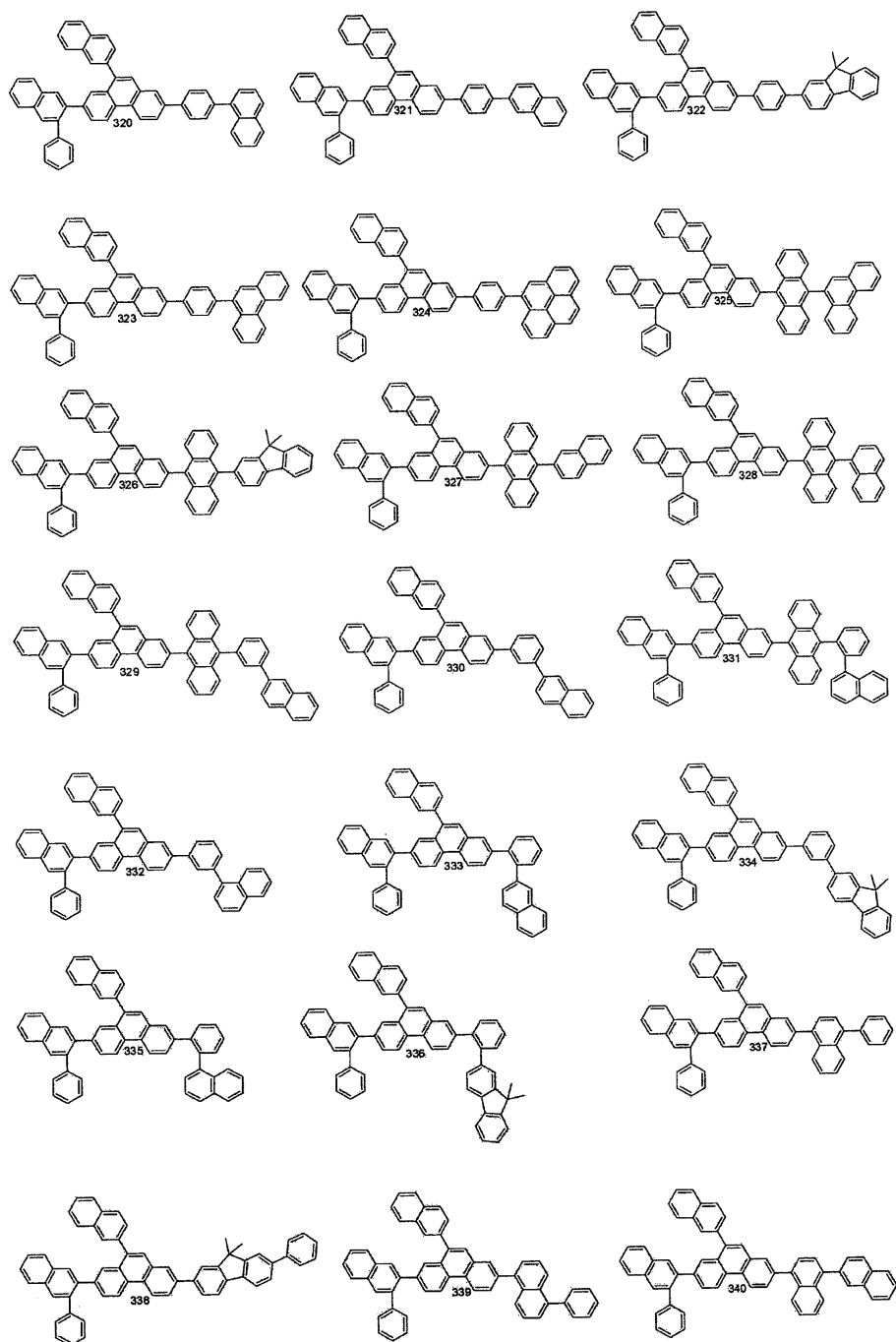
10

20

30

【 0 0 5 9 】

## 【化 2 9】



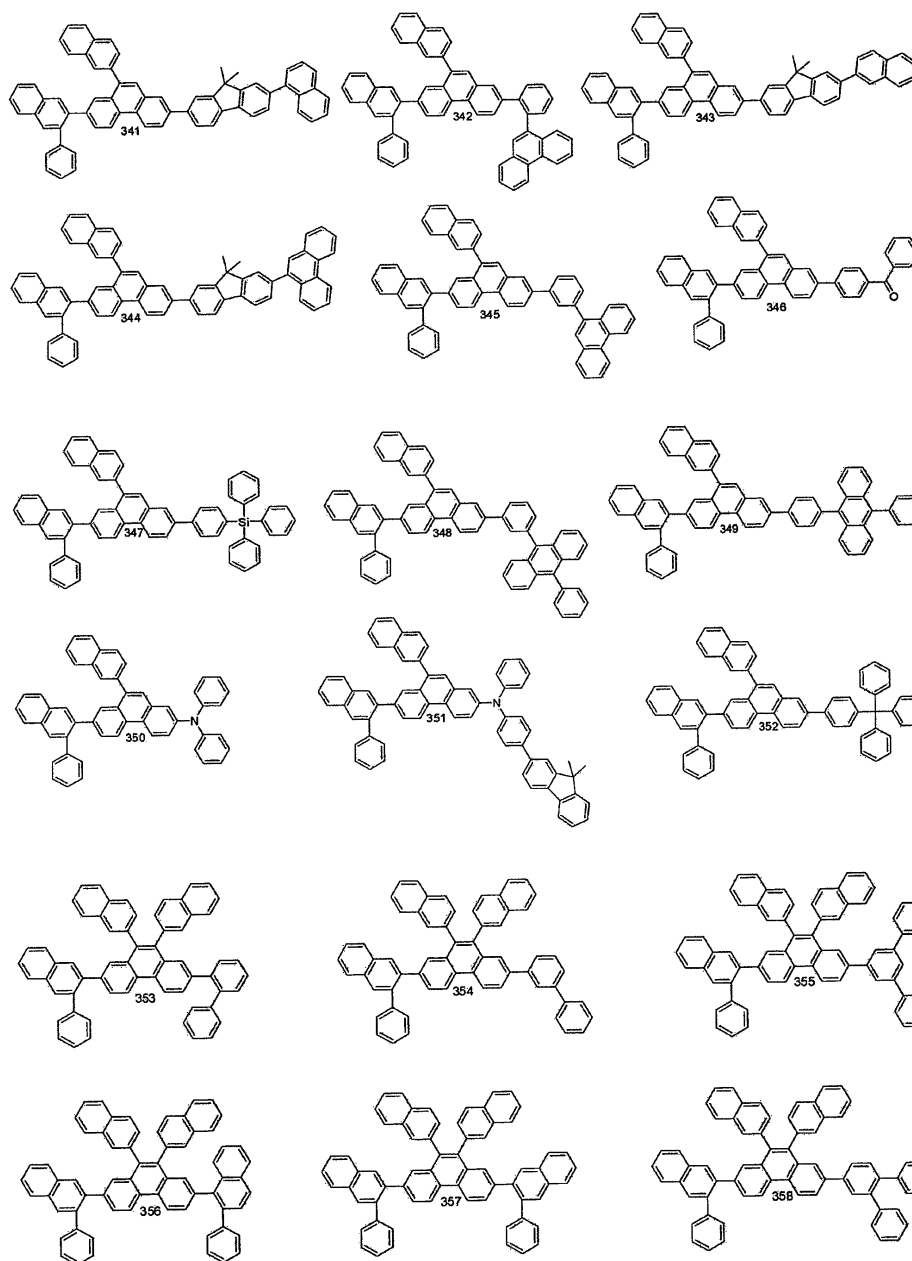
10

20

30

## 【 0 0 6 0 】

【化 3 0】



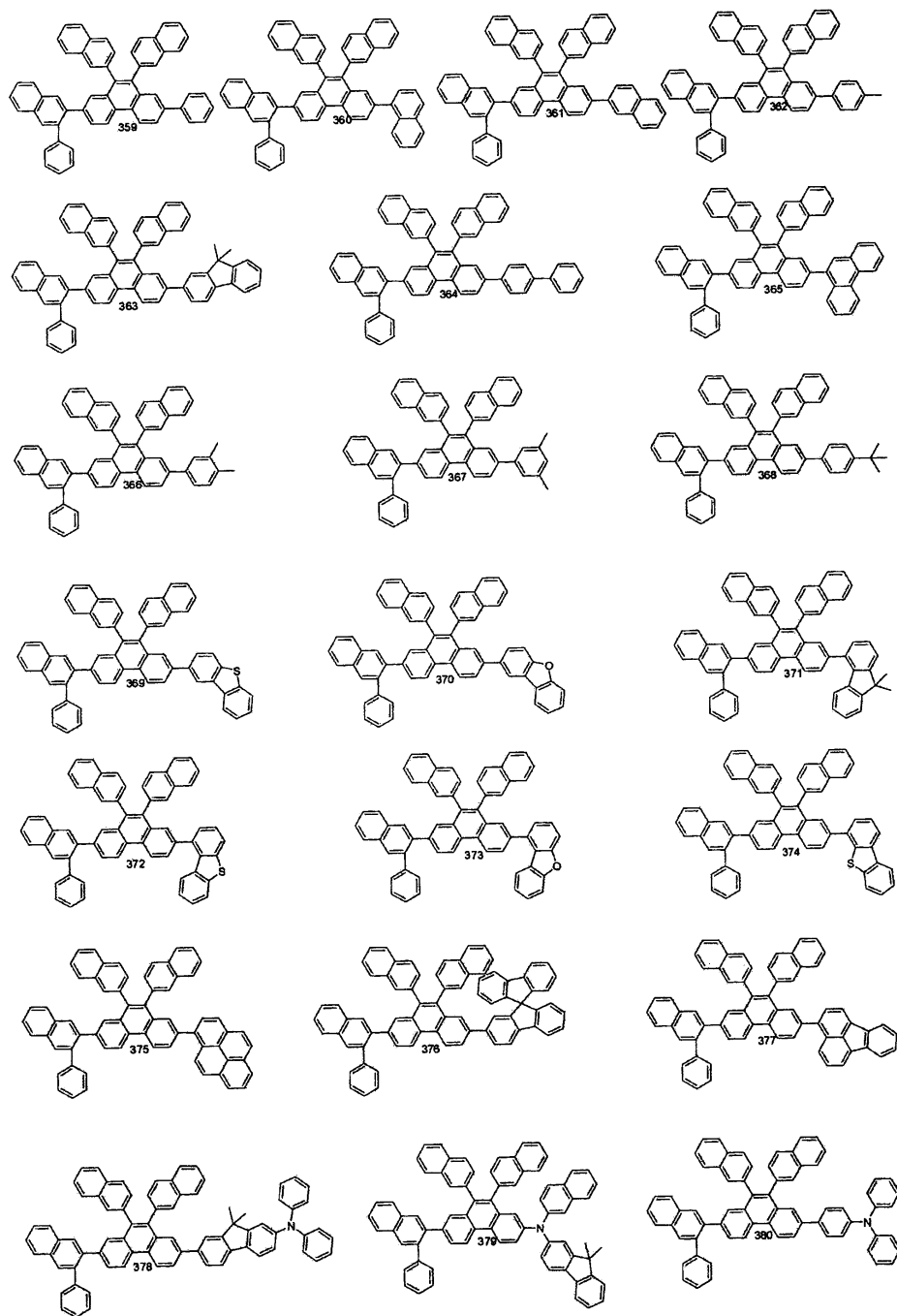
10

20

30

【 0 0 6 1】

## 【化 3 1】



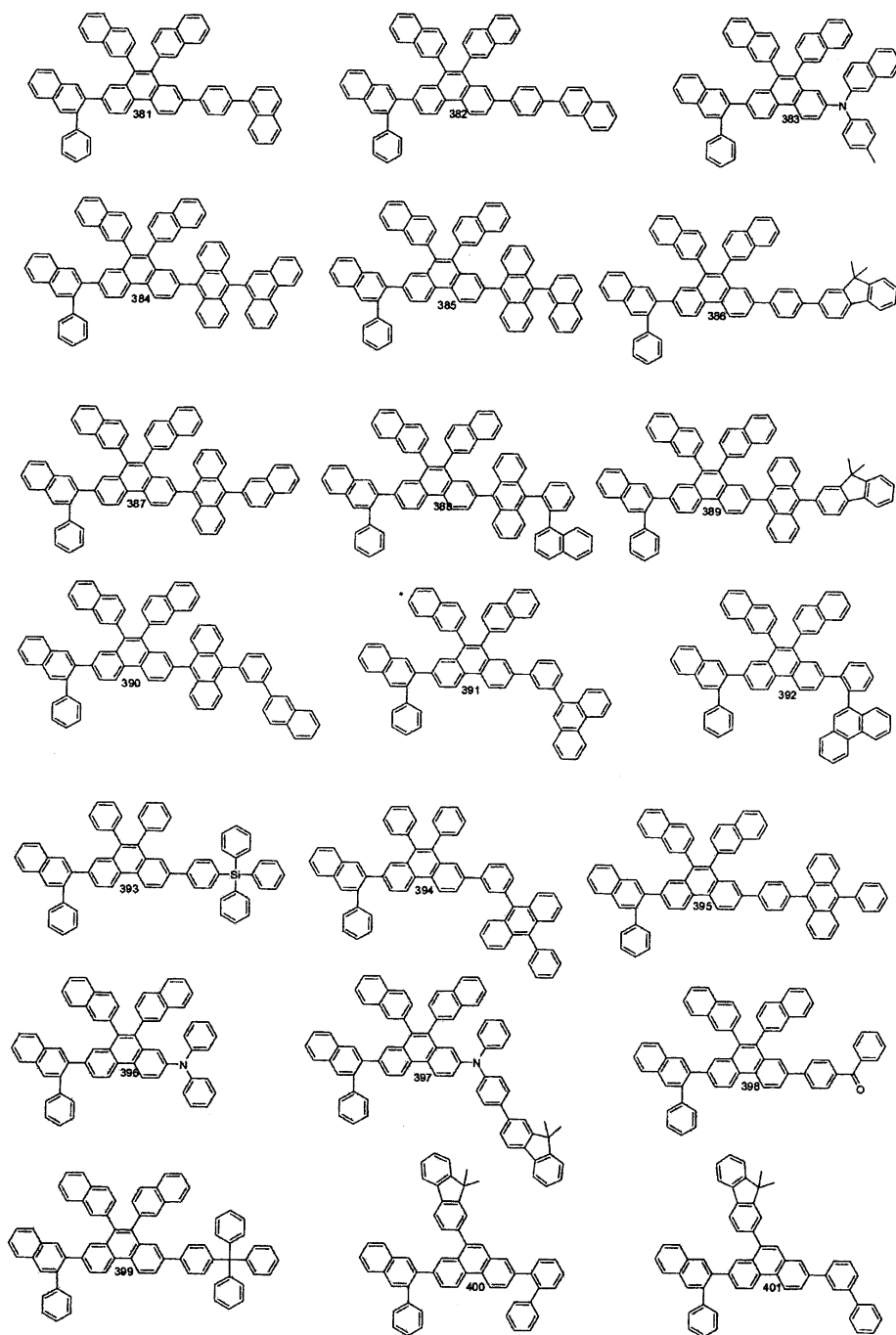
10

20

30

## 【 0 0 6 2 】

## 【化 3 2】



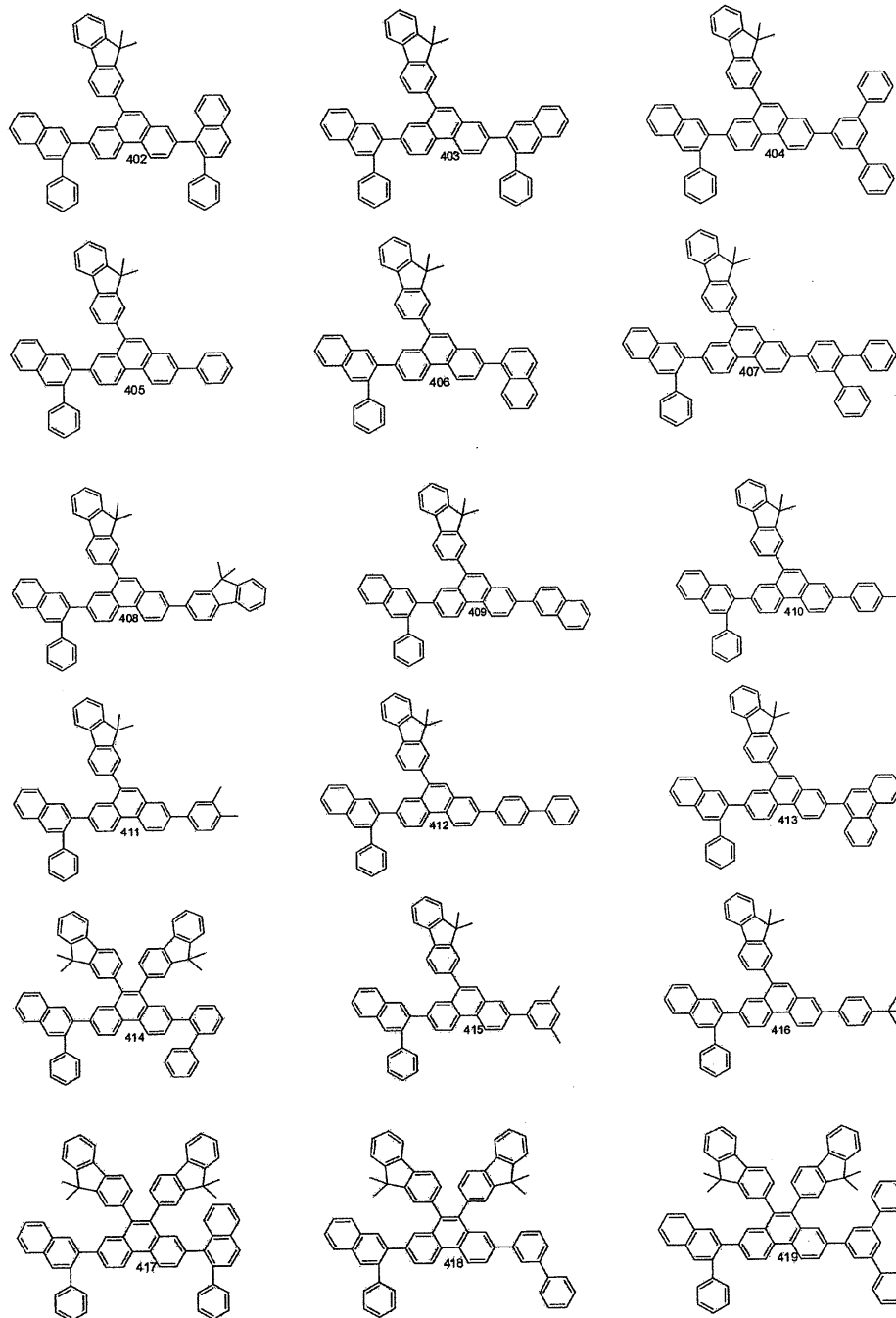
10

20

30

## 【 0 0 6 3 】

## 【化 3 3】



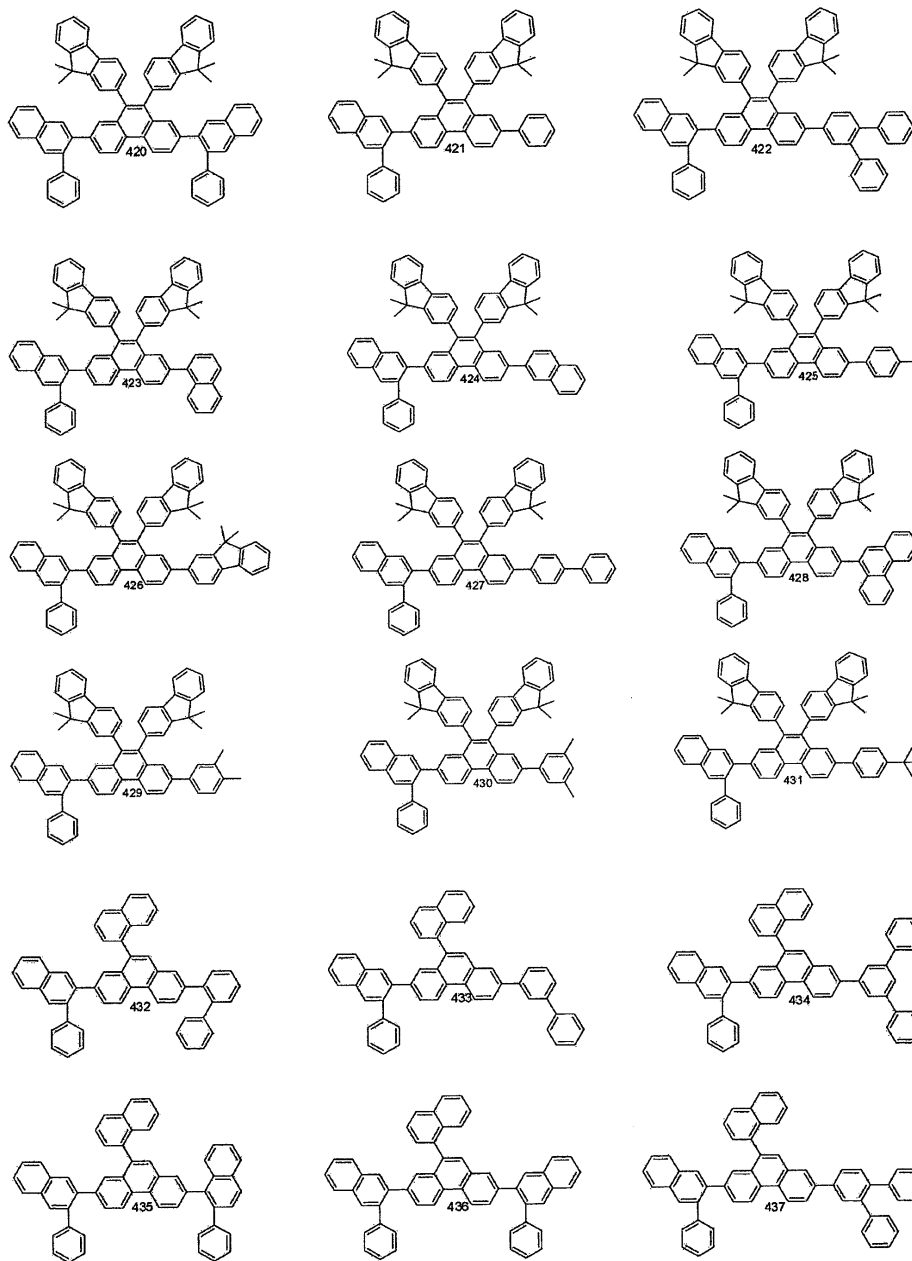
10

20

30

## 【 0 0 6 4 】

【化 3 4】



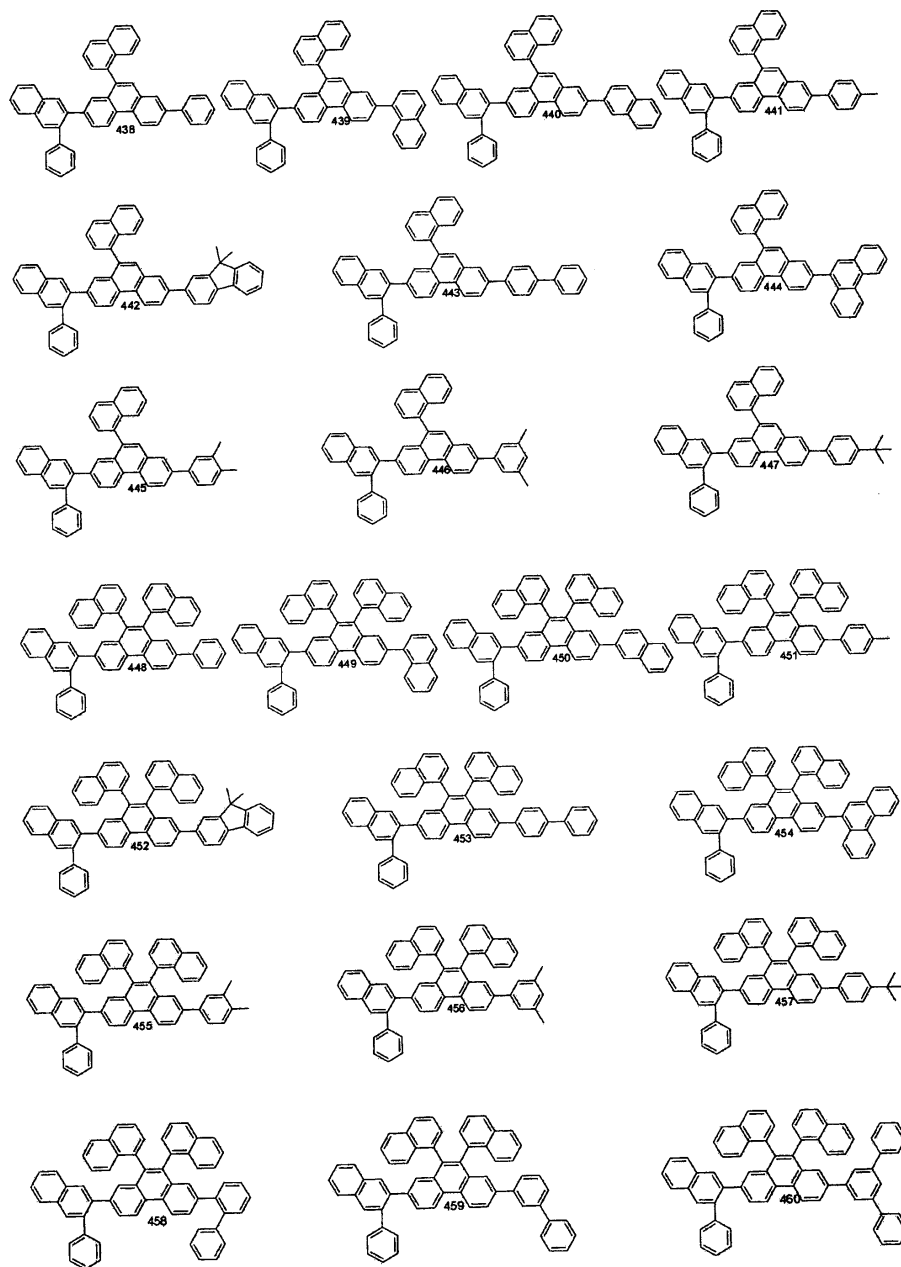
10

20

30

【 0 0 6 5 】

【化 3 5】



10

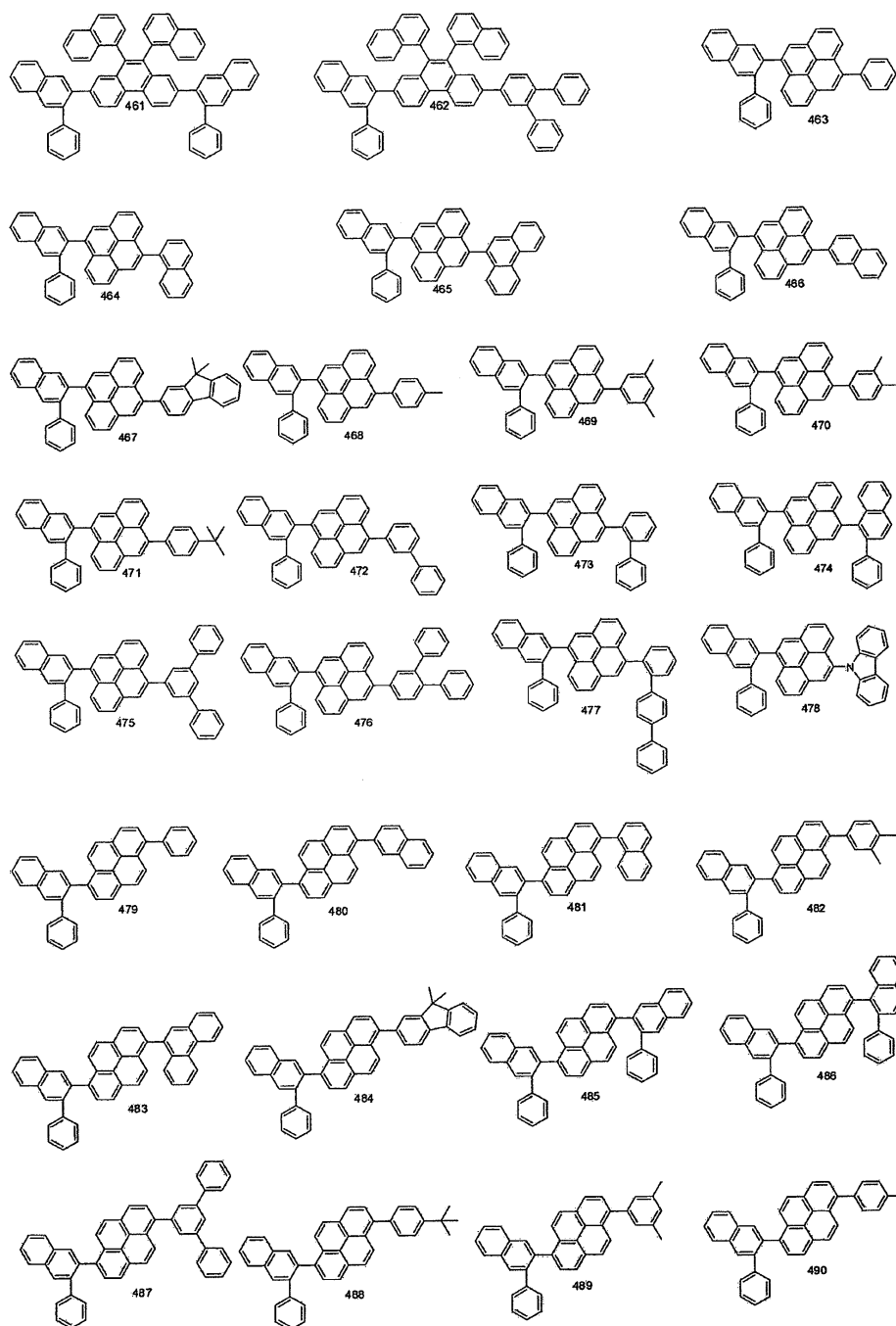
20

30

【 0 0 6 6 】



## 【化 3 6】



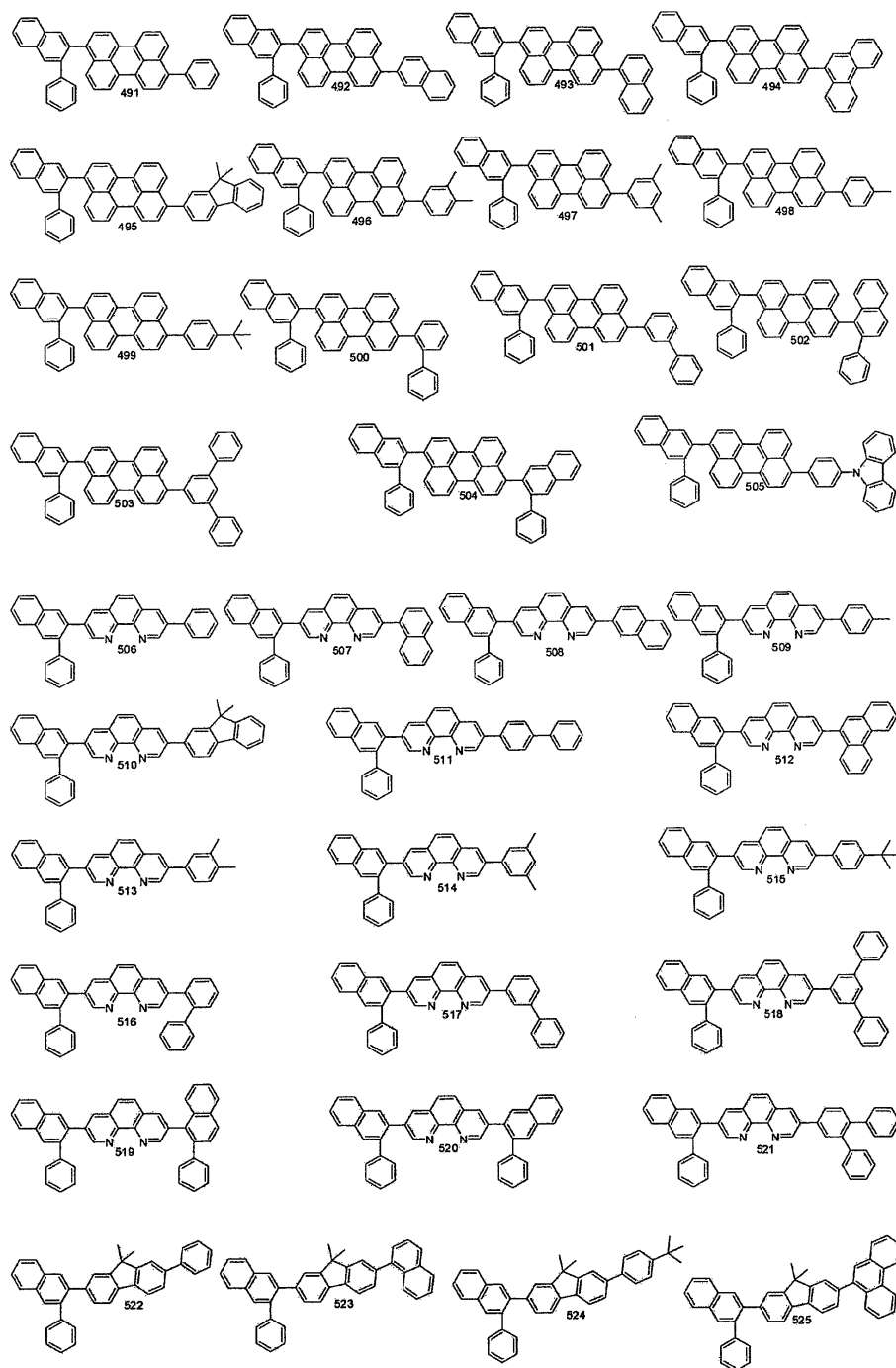
10

20

30

## 【 0 0 6 7】

【化 3 7】



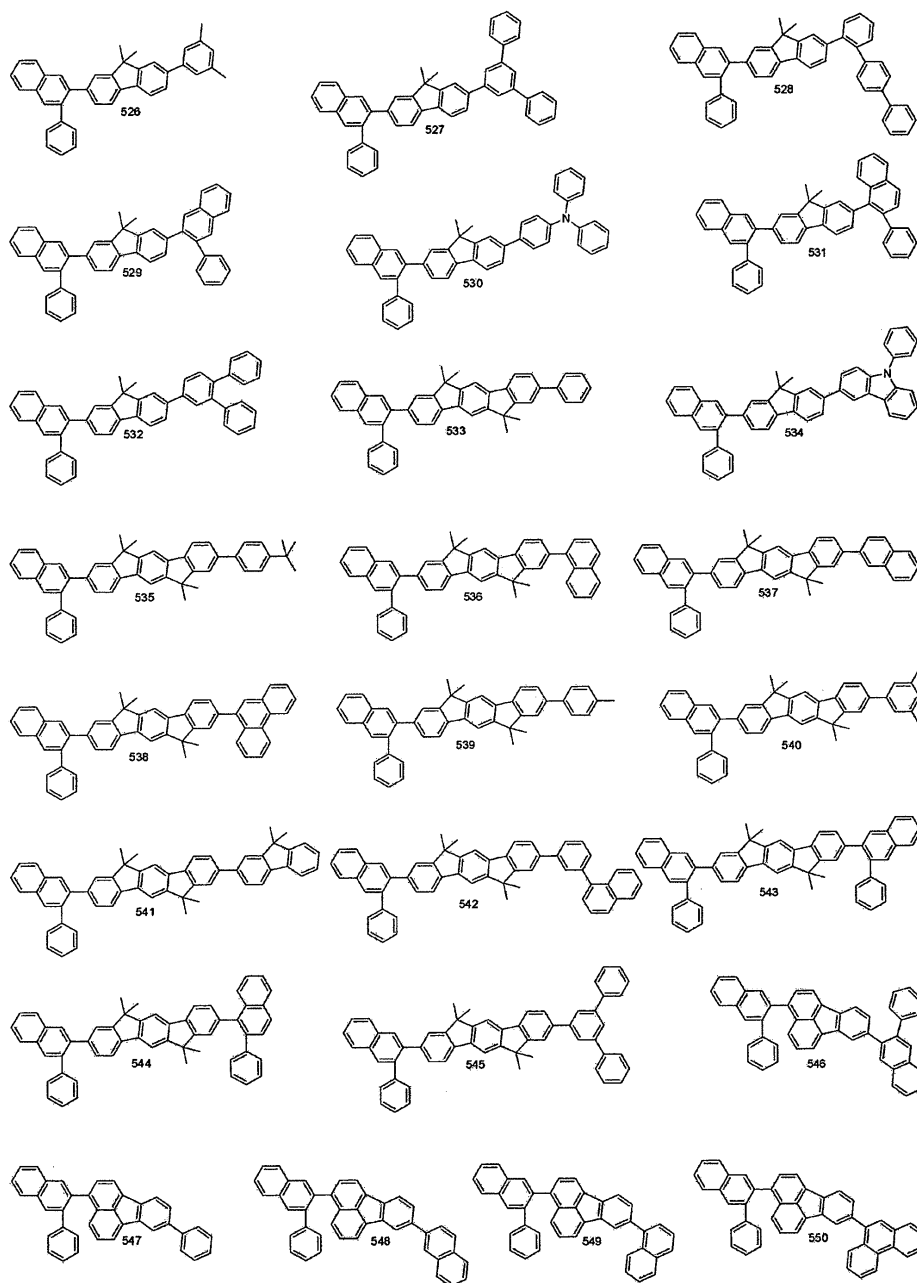
10

20

30

【 0 0 6 8 】

【化 3 8】



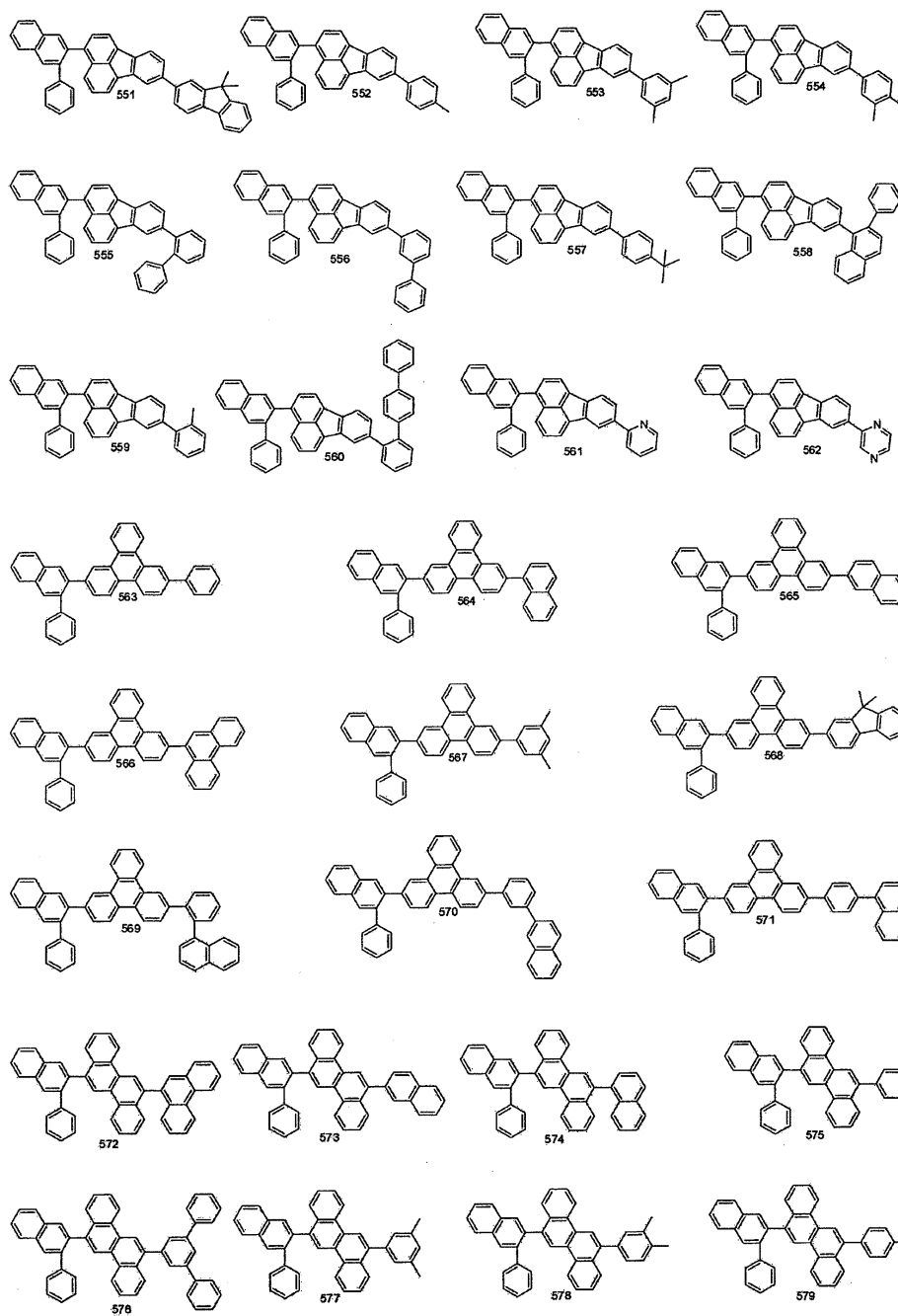
10

20

30

【 0 0 6 9 】

## 【化 3 9】



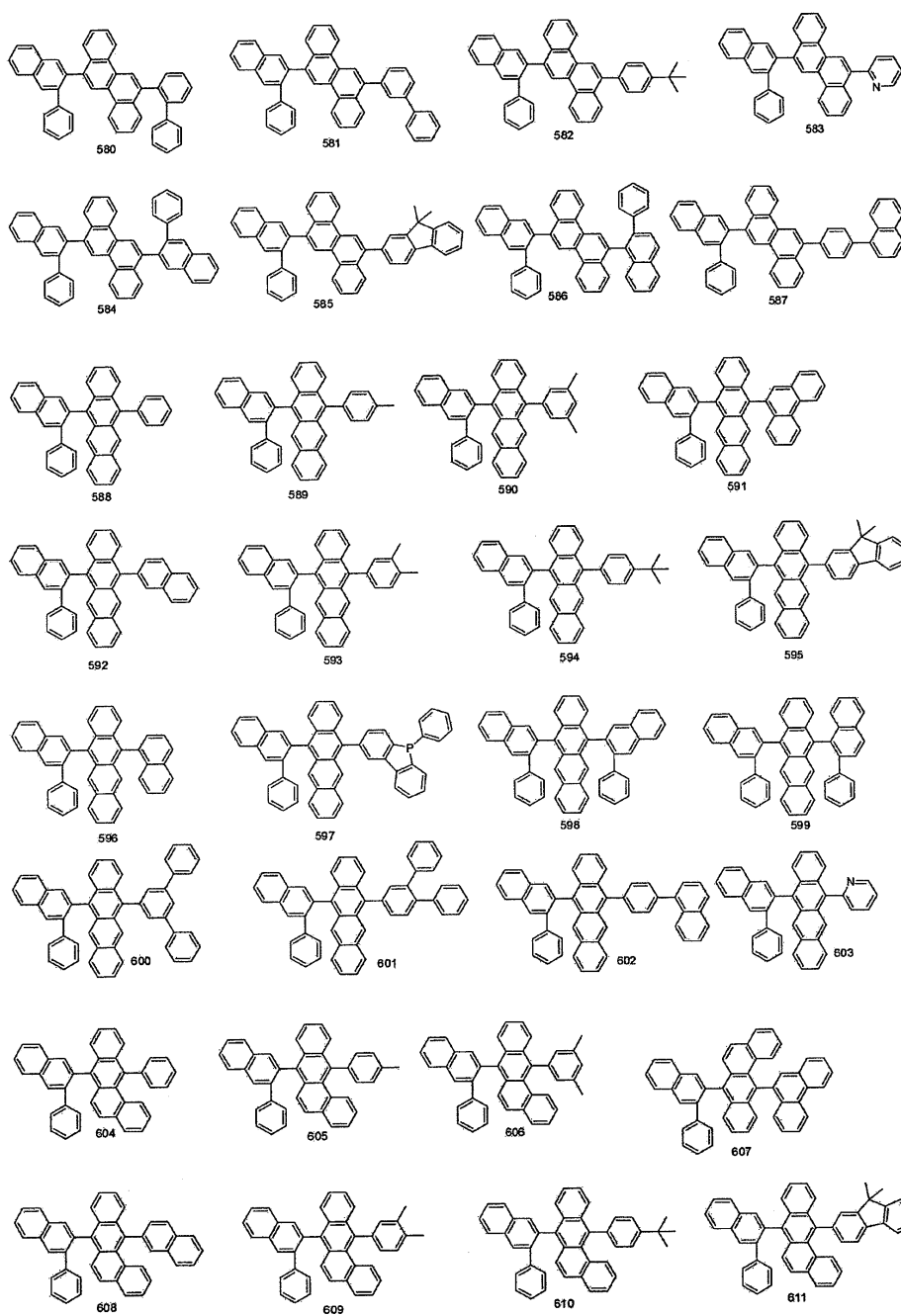
10

20

30

## 【 0 0 7 0 】

【化 40】



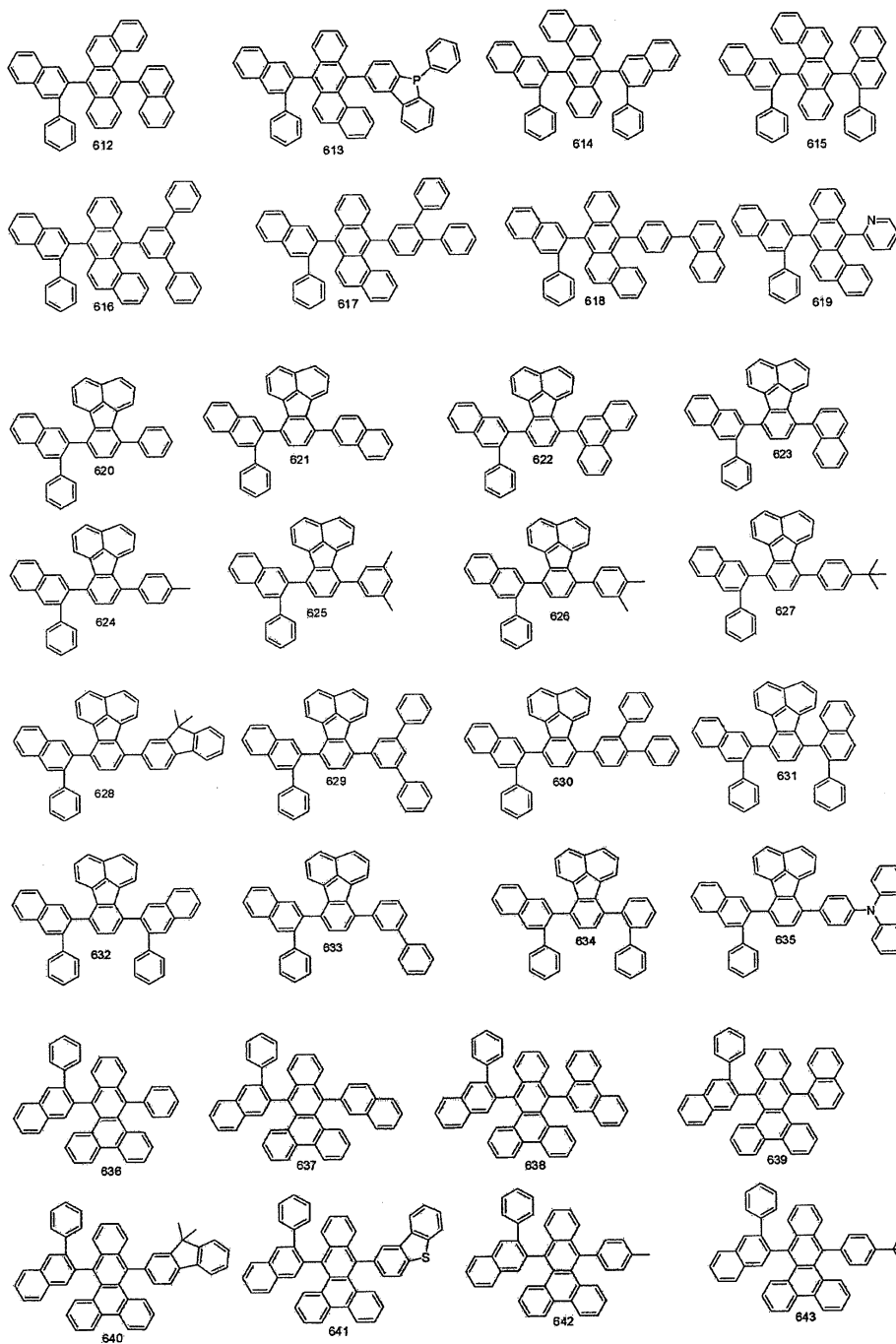
10

20

30

【 0 0 7 1 】

## 【化 4 1】



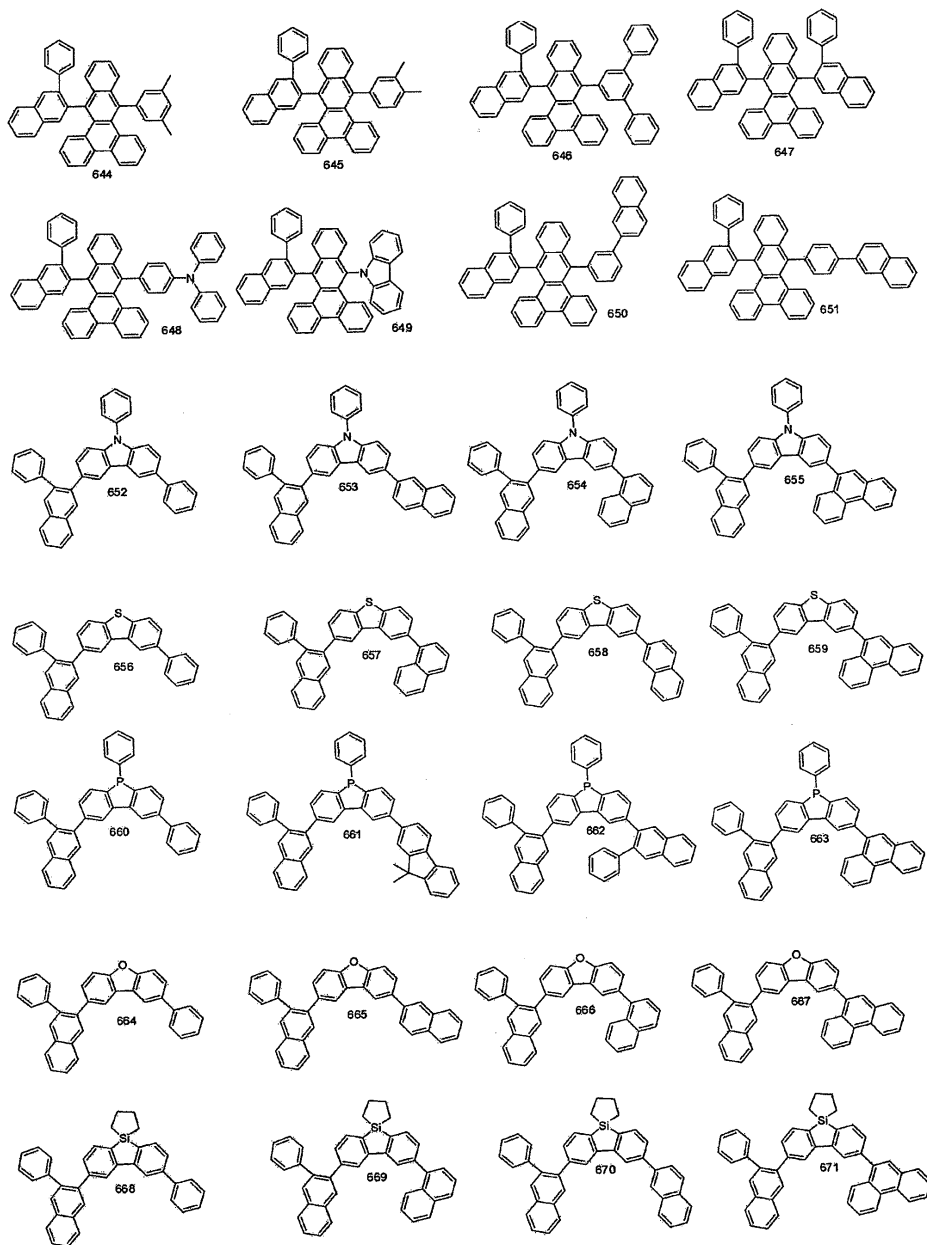
10

20

30

## 【 0 0 7 2 】

【化 4 2】



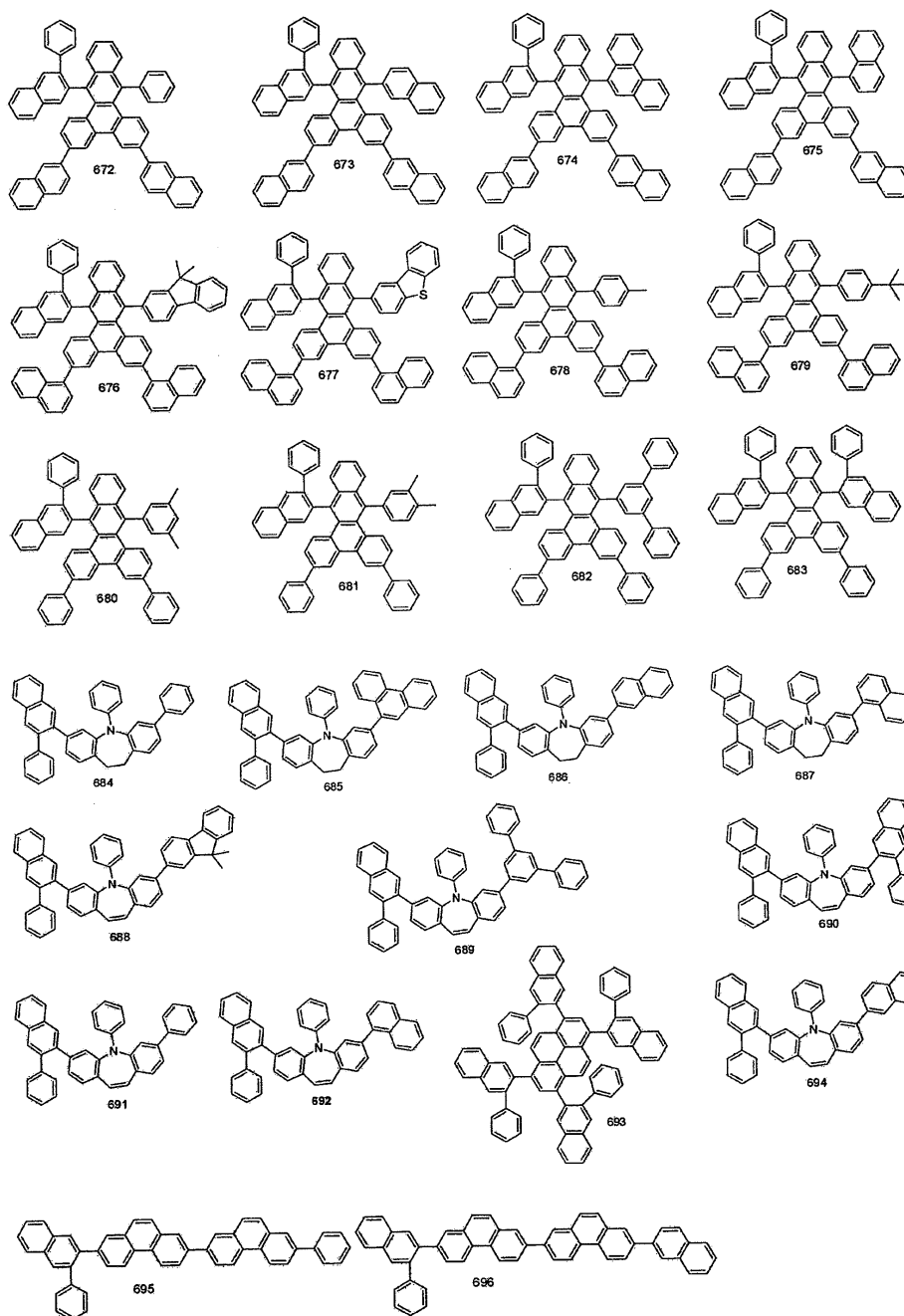
10

20

30

【 0 0 7 3 】

## 【化 4 3】



10

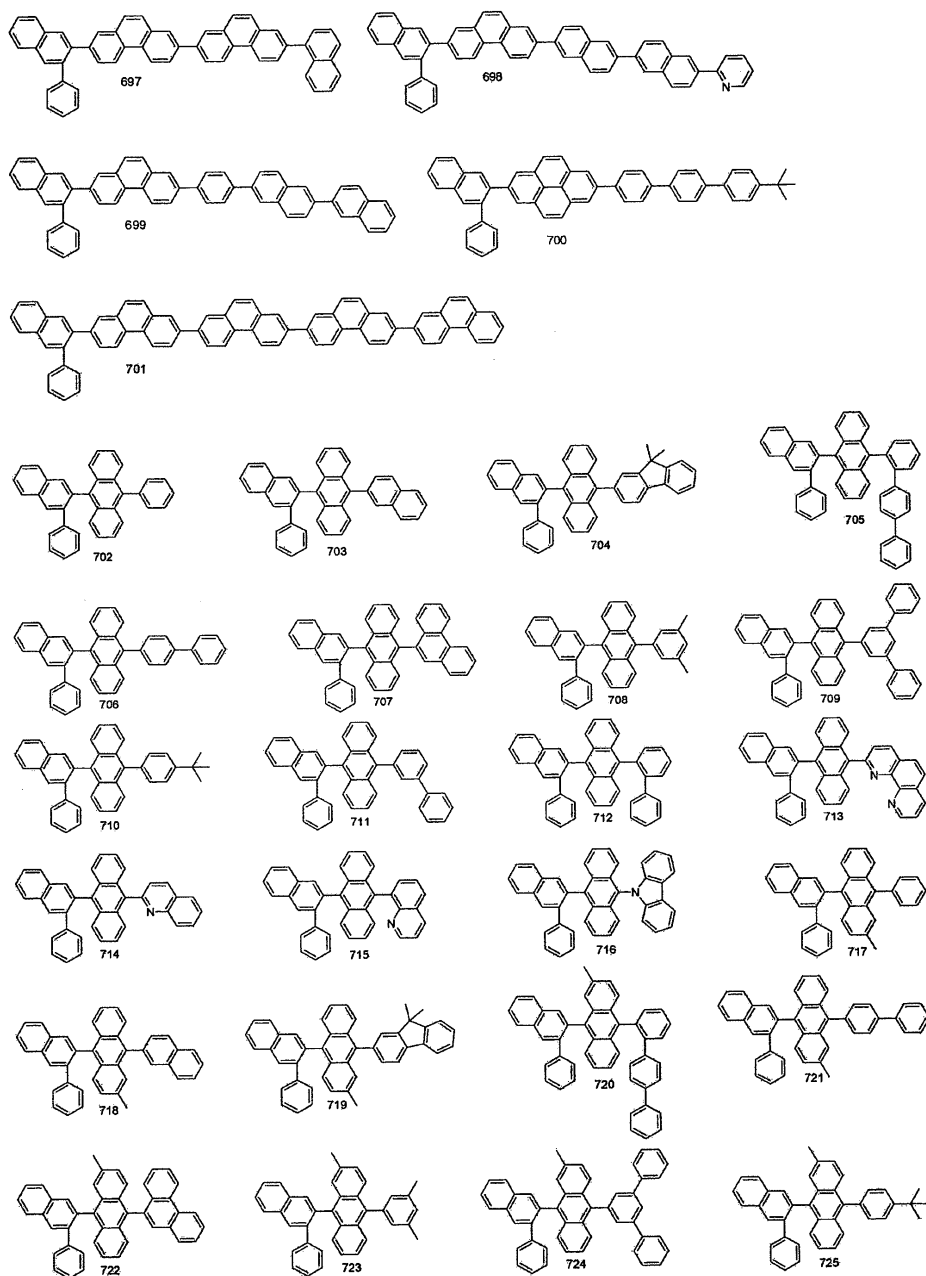
20

30

## 【 0 0 7 4 】



## 【化 4 4】



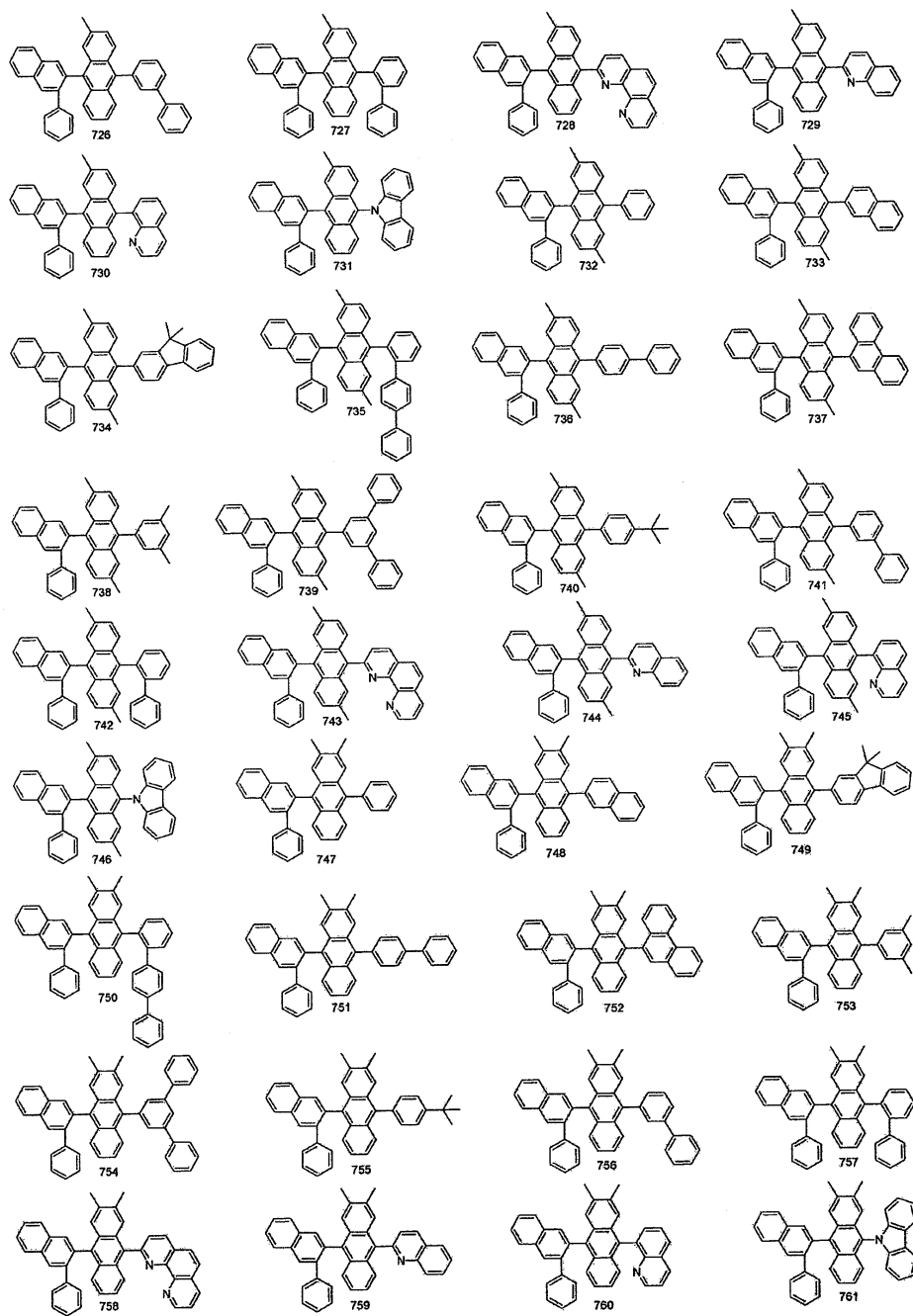
10

20

30

## 【 0 0 7 5 】

## 【化 4 5】



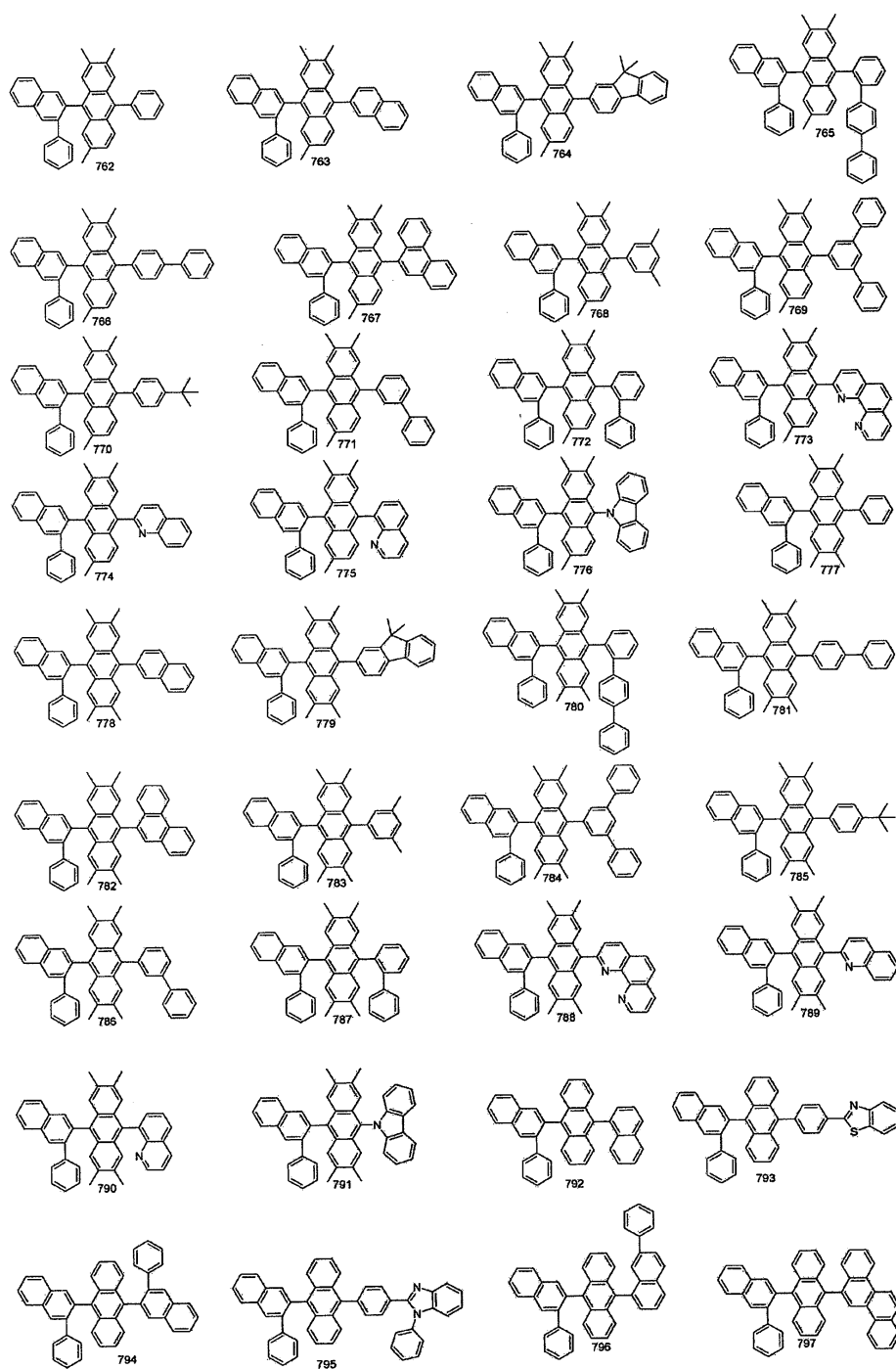
10

20

30

## 【 0 0 7 6 】

【化 4 6】



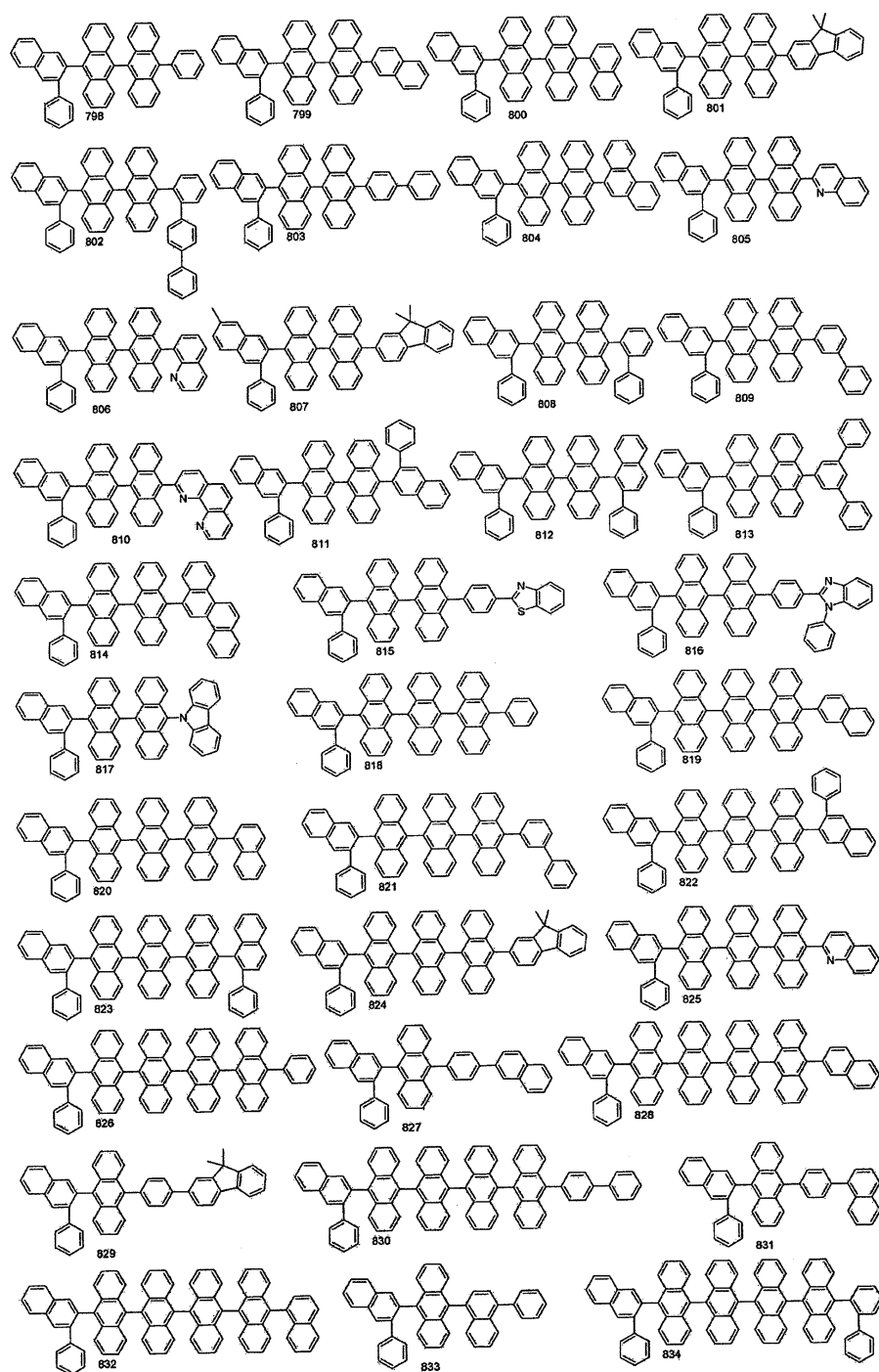
10

20

30

【 0 0 7 7 】

【化 4 7】



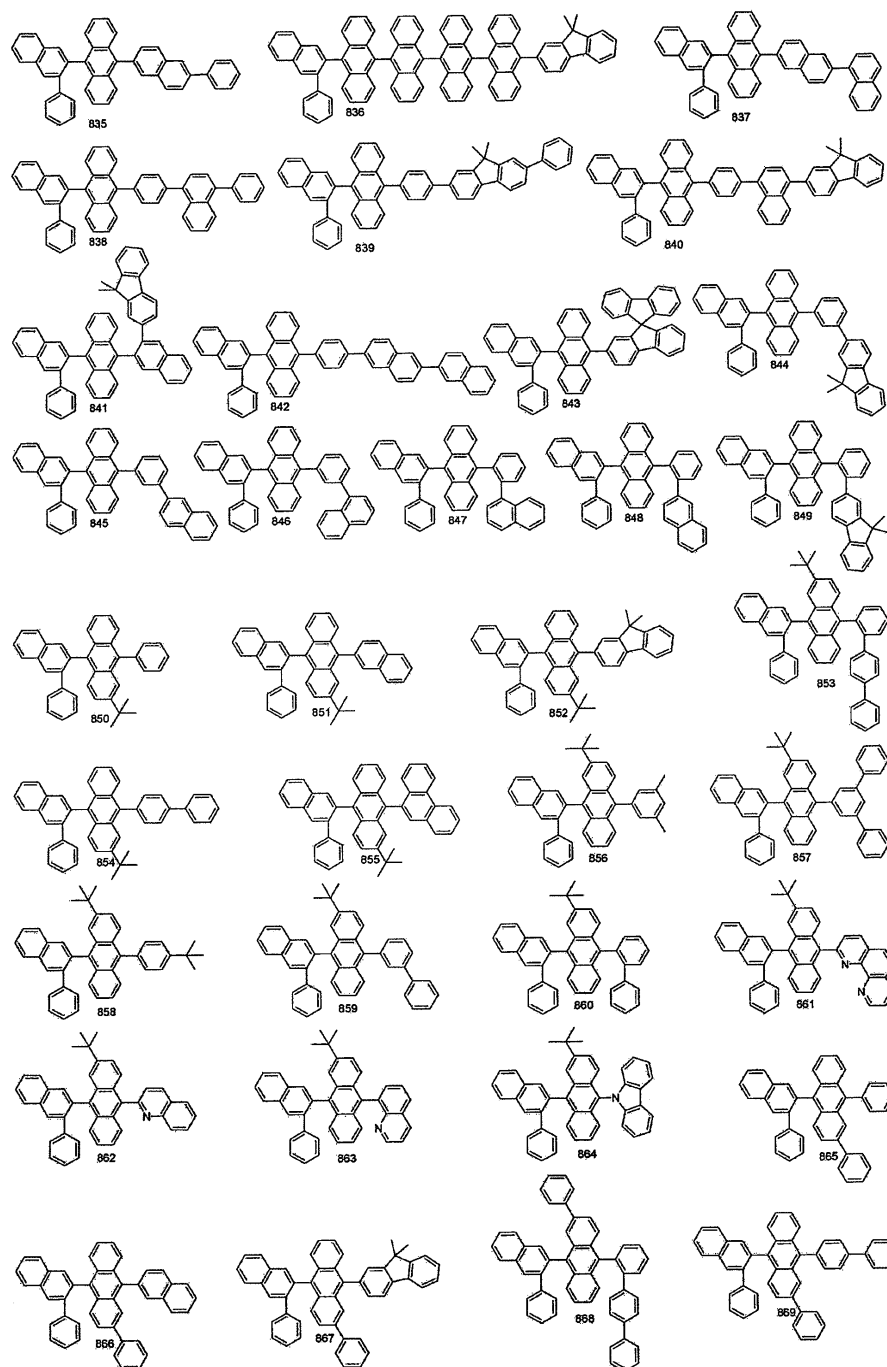
10

20

30

【 0 0 7 8 】

## 【化 4 8】



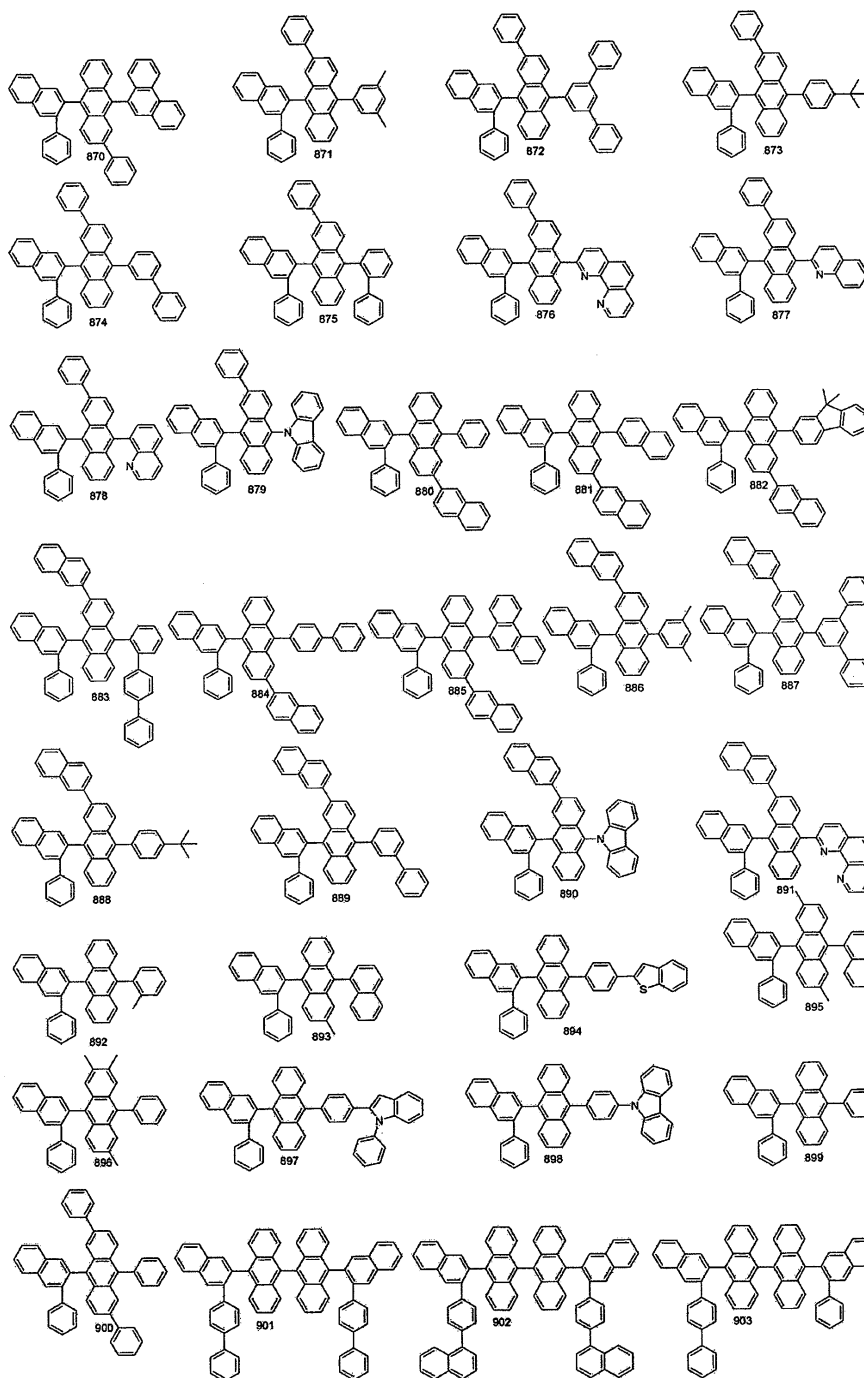
10

20

30

## 【 0 0 7 9 】

【化 4 9】



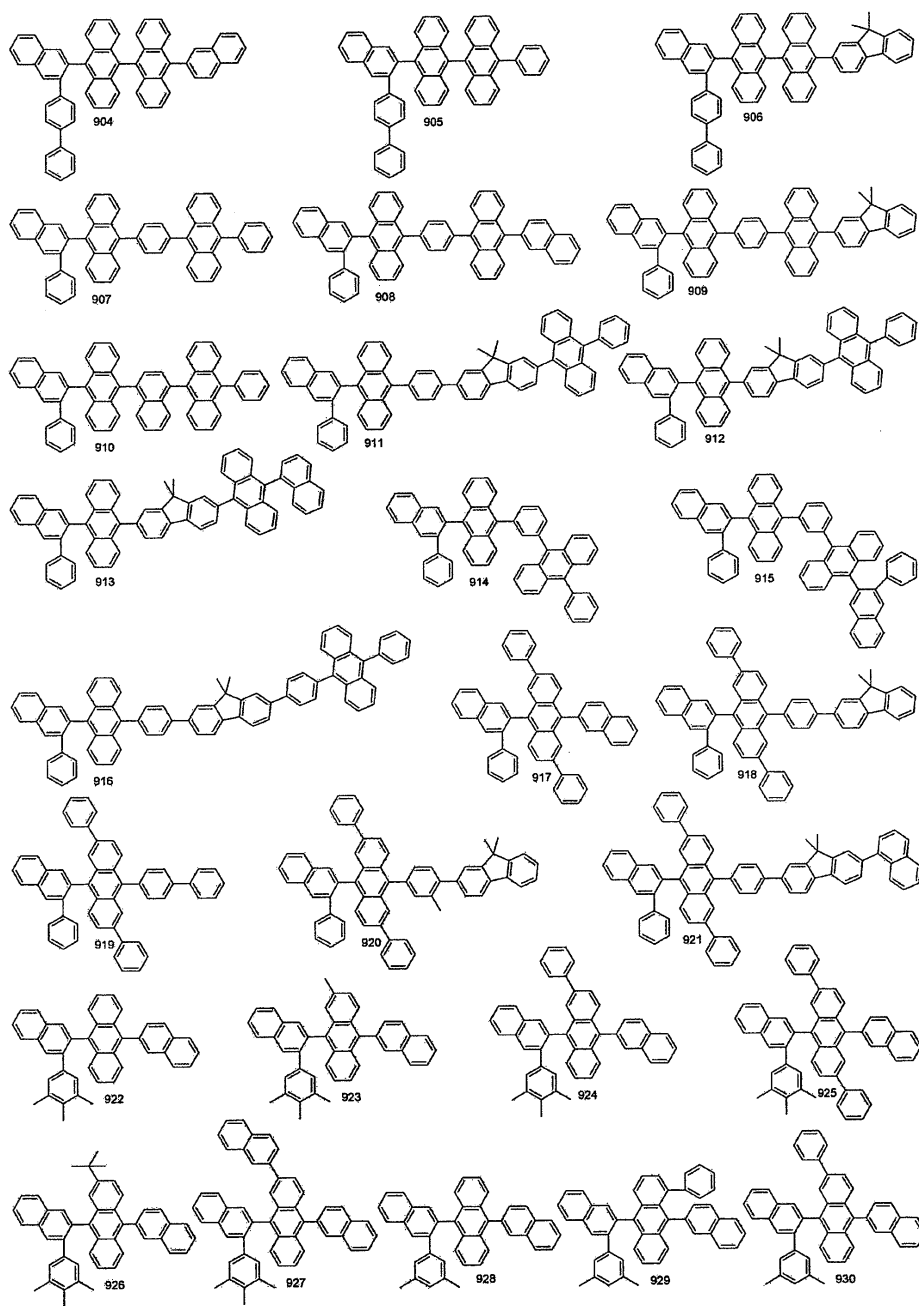
10

20

30

【 0 0 8 0 】

【化 5 0】



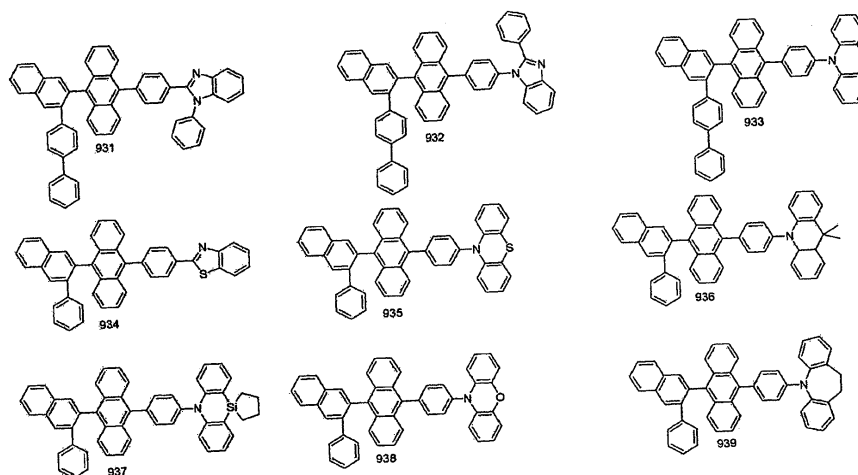
10

20

30

【 0 0 8 1】

## 【化 5 1】



10

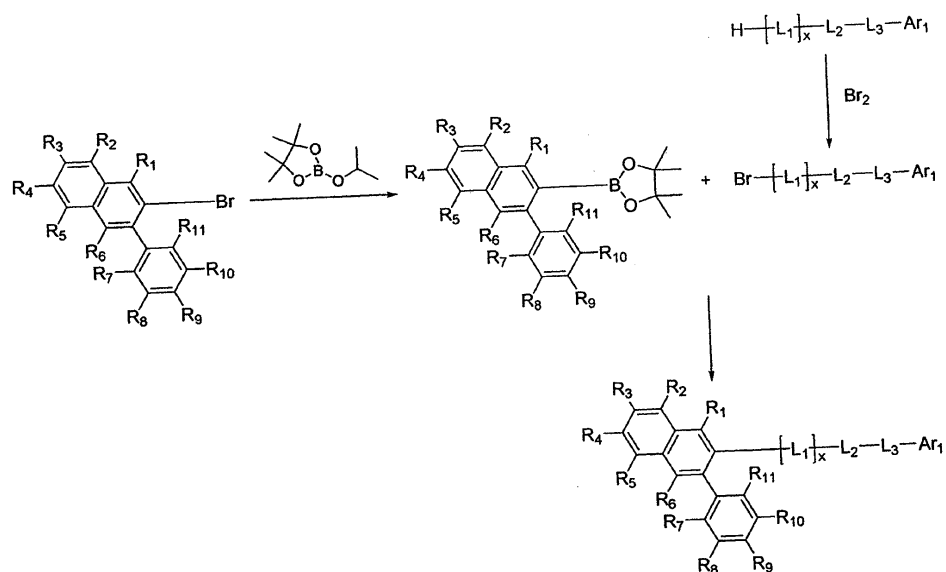
## 【0082】

本発明による有機電界発光化合物は、下記反応式 1 または 2 に示されるように製造できるが、これらの反応式は限定的なものではない。

## 【0083】

## 【化 5 2】

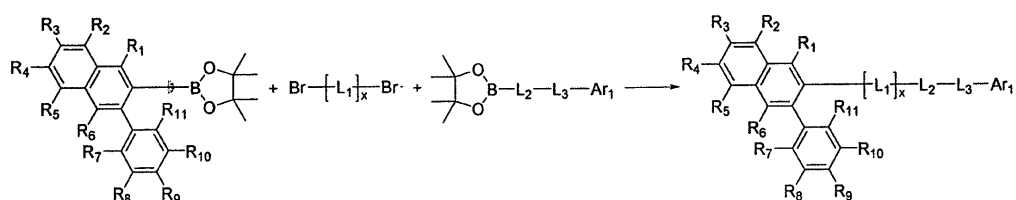
反応式 1



30

## 【化 5 3】

反応式 2



40

## 【0084】

前記反応式 1 及び 2 において、R<sub>1</sub> 乃至 R<sub>11</sub>、L<sub>1</sub>、L<sub>2</sub>、L<sub>3</sub>、Ar<sub>1</sub> 及び x は、化学式 1 における様に定義される。

## 【0085】

また、本発明は、化学式 1 により表される有機電界発光化合物の 1 種以上を含む有機大

50



陽電池を提供する。

【 0 0 8 6 】

本発明は、第 1 の電極；第 2 の電極；及び前記第 1 の電極と第 2 の電極との間に設けられる少なくとも 1 つの有機層；を含んでなる有機電界発光素子であって、前記有機層が、化学式 1 により表される 1 種以上の有機電界発光化合物を含む、有機電界発光素子を提供する。有機電界発光化合物は電界発光層のためのホスト材料として使用される。

さらに、前記有機層は電界発光層を含み、当該電界発光層は化学式 1 により表される 1 種以上の有機電界発光化合物と共に、1 種以上のドーパントをさらに含む。本発明の有機電界発光素子に使用されるドーパントは、特に制限されない。

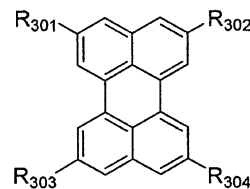
【 0 0 8 7 】

本発明の有機電界発光素子に使用されるドーパントは、下記化学式 2 乃至 4 ののものにより表される化合物から好ましくは選択される。

【 0 0 8 8 】

【 化 5 4 】

化学式 2



【 0 0 8 9 】

式中、R<sub>301</sub> 乃至 R<sub>304</sub> は、互いに独立して、水素、重水素、ハロゲン、(C<sub>1</sub> - C<sub>60</sub>) アルキル、(C<sub>6</sub> - C<sub>60</sub>) アリール、N、O 及び S から選択された一つ以上のヘテロ原子を含む (C<sub>4</sub> - C<sub>60</sub>) ヘテロアリール、N、O 及び S から選択された一つ以上のヘテロ原子を含む 5 員もしくは 6 員のヘテロシクロアルキル、(C<sub>3</sub> - C<sub>60</sub>) シクロアルキル、トリ (C<sub>1</sub> - C<sub>60</sub>) アルキルシリル、ジ (C<sub>1</sub> - C<sub>60</sub>) アルキル (C<sub>6</sub> - C<sub>60</sub>) アリールシリル、トリ (C<sub>6</sub> - C<sub>60</sub>) アリールシリル、アダマンチル、(C<sub>7</sub> - C<sub>60</sub>) ビシクロアルキル、(C<sub>2</sub> - C<sub>60</sub>) アルケニル、(C<sub>2</sub> - C<sub>60</sub>) アルキニル、シアノ、(C<sub>1</sub> - C<sub>60</sub>) アルキルアミノ、(C<sub>6</sub> - C<sub>60</sub>) アリールアミノ、(C<sub>6</sub> - C<sub>60</sub>) アリール (C<sub>1</sub> - C<sub>60</sub>) アルキル、(C<sub>6</sub> - C<sub>60</sub>) アリールオキシ、(C<sub>1</sub> - C<sub>60</sub>) アルキルオキシ、(C<sub>1</sub> - C<sub>60</sub>) アルキルチオ、(C<sub>6</sub> - C<sub>60</sub>) アリールチオ、(C<sub>1</sub> - C<sub>60</sub>) アルコキシカルボニル、(C<sub>1</sub> - C<sub>60</sub>) アルキルカルボニル、(C<sub>6</sub> - C<sub>60</sub>) アリールカルボニル、カルボキシル、ニトロもしくはヒドロキシルを表すか、または R<sub>301</sub> 乃至 R<sub>304</sub> は隣接した置換基と縮合環を含むかもしくは含まない (C<sub>3</sub> - C<sub>60</sub>) アルキレンもしくは (C<sub>3</sub> - C<sub>60</sub>) アルケニレンで連結されて、脂環式環または単環式もしくは多環式芳香族環を形成することができ；

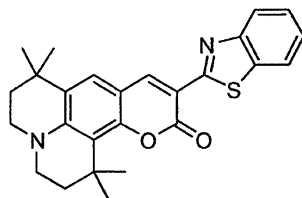
前記 R<sub>301</sub> 乃至 R<sub>304</sub> のアルキル、アルケニル、アルキニル、シクロアルキル、ヘテロシクロアルキル、アリール、ヘテロアリール、アリールシリル、アルキルシリル、アルキルオキシ、アリールオキシ、アリールチオ、アルキルアミノ、アリールアミノ、または隣接した置換基と縮合環を含むかもしくは含まない (C<sub>3</sub> - C<sub>60</sub>) アルキレンもしくは (C<sub>3</sub> - C<sub>60</sub>) アルケニレンで連結されてそこから形成された前記脂環式環または前記単環式もしくは多環式芳香族環は、重水素、ハロゲン、(C<sub>1</sub> - C<sub>60</sub>) アルキル、(C<sub>6</sub> - C<sub>60</sub>) アリール、N、O 及び S から選択された一つ以上のヘテロ原子を含む (C<sub>4</sub> - C<sub>60</sub>) ヘテロアリール、N、O 及び S から選択された一つ以上のヘテロ原子を含む 5 員もしくは 6 員のヘテロシクロアルキル、(C<sub>3</sub> - C<sub>60</sub>) シクロアルキル、トリ (C<sub>1</sub> - C<sub>60</sub>) アルキルシリル、ジ (C<sub>1</sub> - C<sub>60</sub>) アルキル (C<sub>6</sub> - C<sub>60</sub>) アリールシリル、トリ (C<sub>6</sub> - C<sub>60</sub>) アリールシリル、アダマンチル、(C<sub>7</sub> - C<sub>60</sub>) ビシクロアルキル、(C<sub>2</sub> - C<sub>60</sub>) アルケニル、(C<sub>2</sub> - C<sub>60</sub>) アルキニル、シアノ、(C<sub>1</sub> - C<sub>60</sub>) アルキルアミノ、(C<sub>6</sub> - C<sub>60</sub>) アリールアミノ、(C<sub>6</sub> - C<sub>60</sub>) アリー

ル(C1 - C60)アルキル、(C6 - C60)アリールオキシ、(C1 - C60)アルキルオキシ、(C1 - C60)アルキルチオ、(C6 - C60)アリールチオ、(C1 - C60)アルコキシカルボニル、(C1 - C60)アルキルカルボニル、(C6 - C60)アリールカルボニル、カルボキシル、ニトロおよびヒドロキシルから選択される1種以上の置換基によってさらに置換されてよい。

【0090】

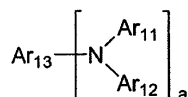
【化55】

化学式3



10

化学式4



20

【0091】

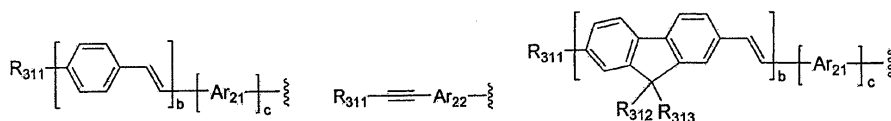
化学式4において、 $Ar_{11}$ 及び $Ar_{12}$ は、互いに独立して、(C1 - C60)アルキル、(C6 - C60)アリール、N、O及びSから選択された一つ以上のヘテロ原子を含む(C4 - C60)ヘテロアリール、(C6 - C60)アリールアミノ、(C1 - C60)アルキルアミノ、N、O及びSから選択された一つ以上のヘテロ原子を含む5員もしくは6員のヘテロシクロアルキル、または(C3 - C60)シクロアルキルを表すが、または $Ar_{11}$ 及び $Ar_{12}$ は、縮合環を含むかもしくは含まない(C3 - C60)アルキレンもしくは(C3 - C60)アルケニレンで連結されて、脂環式環または単環式もしくは多環式芳香族環を形成することができ；

30

aが1である場合には、 $Ar_{13}$ は、(C6 - C60)アリール、(C4 - C60)ヘテロアリール、または下記構造

【0092】

【化56】



【0093】

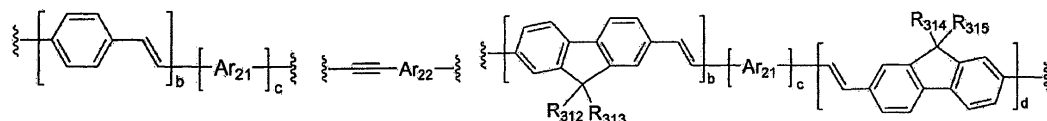
から選択される置換基を表し；

40

aが2である場合には、 $Ar_{13}$ は、(C6 - C60)アリーレン、N、O及びSから選択された一つ以上のヘテロ原子を含む(C4 - C60)ヘテロアリーレン、または下記構造

【0094】

【化57】



【0095】

50

から選択される置換基を表し；

式中、 $Ar_{21}$  及び  $Ar_{22}$  は、互いに独立して、(C6 - C60) アリーレンまたは N、O 及び S から選択された一つ以上のヘテロ原子を含む (C4 - C60) ヘテロアリーレンを表し；

$R_{311}$  乃至  $R_{315}$  は、互いに独立して、水素、重水素、(C1 - C60) アルキルまたは (C6 - C60) アリールを表し；

b は 1 ~ 4 の整数であり、c は 0 または 1 の整数であり、d は 0 または 1 の整数であり；

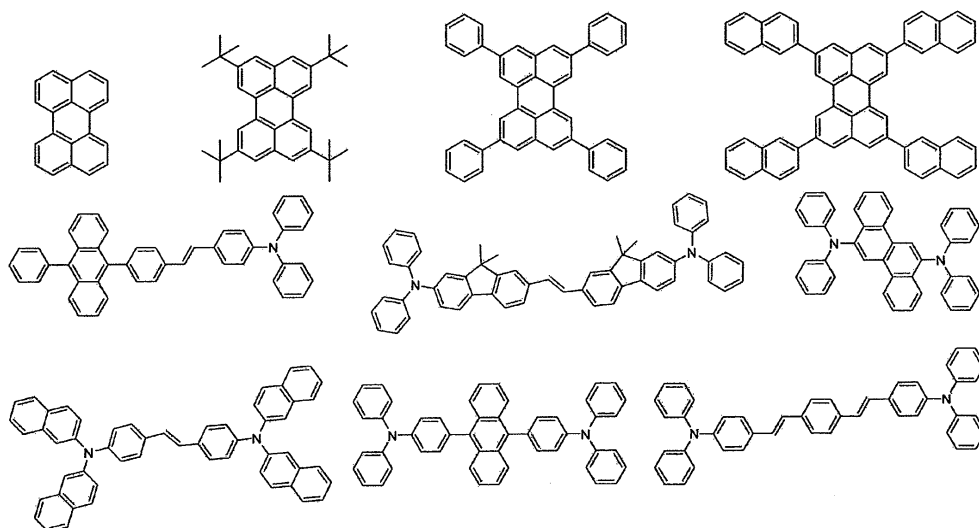
前記  $Ar_{11}$  及び  $Ar_{12}$  のアルキル、アリール、ヘテロアリール、アリールアミノ、アルキルアミノ、シクロアルキルもしくはヘテロシクロアルキル、前記  $Ar_{13}$  のアリー  
 10  
 ル、ヘテロアリール、アリーレンもしくはヘテロアリーレン、前記  $Ar_{21}$  及び  $Ar_{22}$   
 のアリーレンもしくはヘテロアリーレン、または  $R_{311}$  乃至  $R_{315}$  のアルキルもしくは  
 はアリールは、重水素、ハロゲン、(C1 - C60) アルキル、(C6 - C60) アリール、  
 N、O 及び S から選択された一つ以上のヘテロ原子を含む (C4 - C60) ヘテロア  
 リール、N、O 及び S から選択された一つ以上のヘテロ原子を含む 5 員もしくは 6 員のヘ  
 テロシクロアルキル、(C3 - C60) シクロアルキル、トリ (C1 - C60) アルキル  
 シリル、ジ (C1 - C60) アルキル (C6 - C60) アリールシリル、トリ (C6 - C  
 60) アリールシリル、アダマンチル、(C7 - C60) ビシクロアルキル、(C2 - C  
 60) アルケニル、(C2 - C60) アルキニル、シアノ、(C1 - C60) アルキルア  
 ミノ、(C6 - C60) アリールアミノ、(C6 - C60) アリール (C1 - C60) アル  
 20  
 キル、(C6 - C60) アリールオキシ、(C1 - C60) アルキルオキシ、(C1 -  
 C60) アリールチオ、(C6 - C60) アルキルチオ、(C1 - C60) アルコキシカル  
 ボニル、(C1 - C60) アルキルカルボニル、(C6 - C60) アリールカルボニル  
 、カルボキシル、ニトロおよびヒドロキシルから選択される 1 種以上の置換基によってさ  
 らに置換されてよい。

#### 【0096】

上記化学式 2 乃至 4 のものにより表されるドーパント化合物は、下記構造のいずれかを  
 有する化合物により具体的に例示されうるが、これに限定されるものではない。

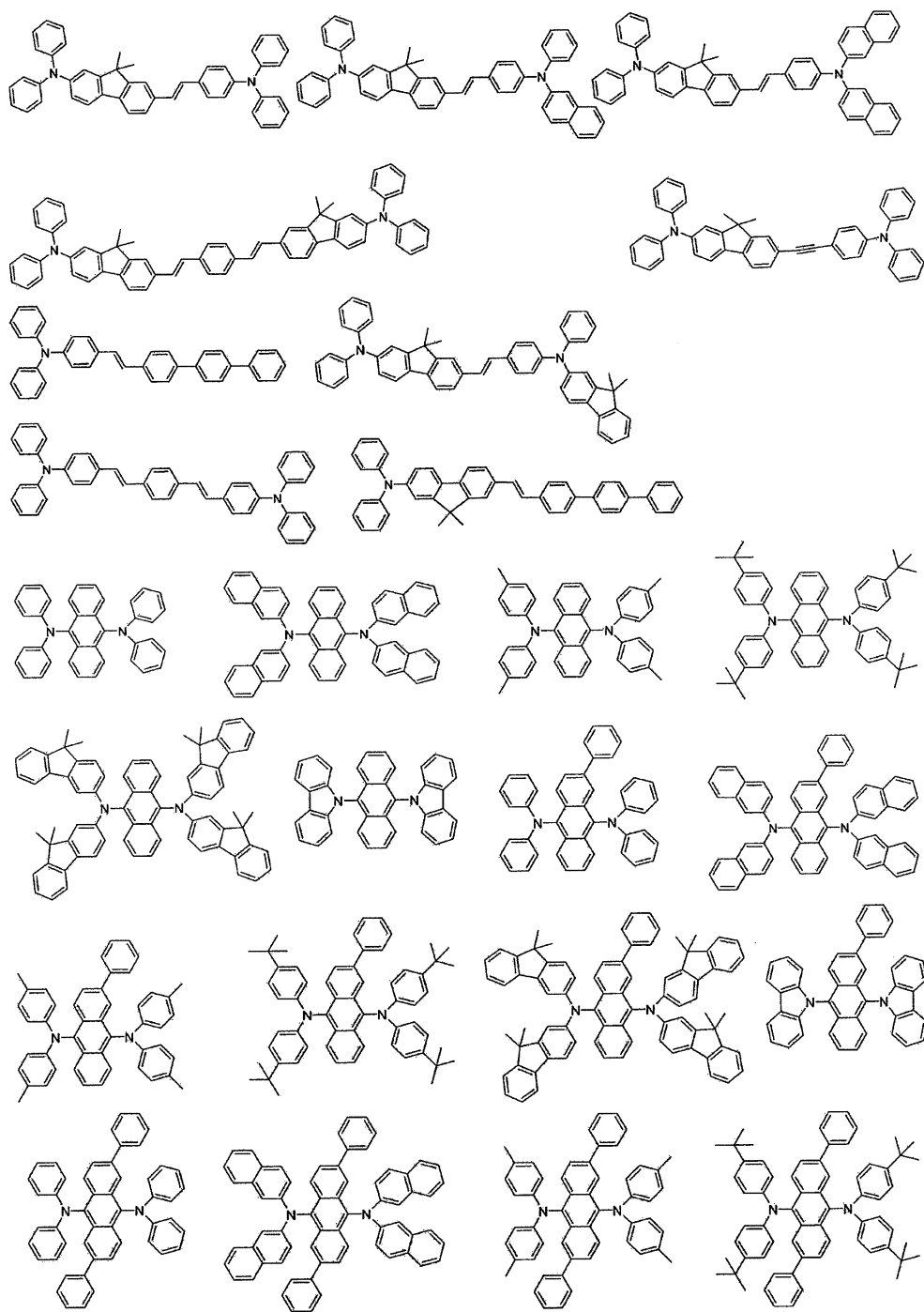
#### 【0097】

#### 【化 58】



#### 【0098】

【化 5 9】



【 0 0 9 9 】

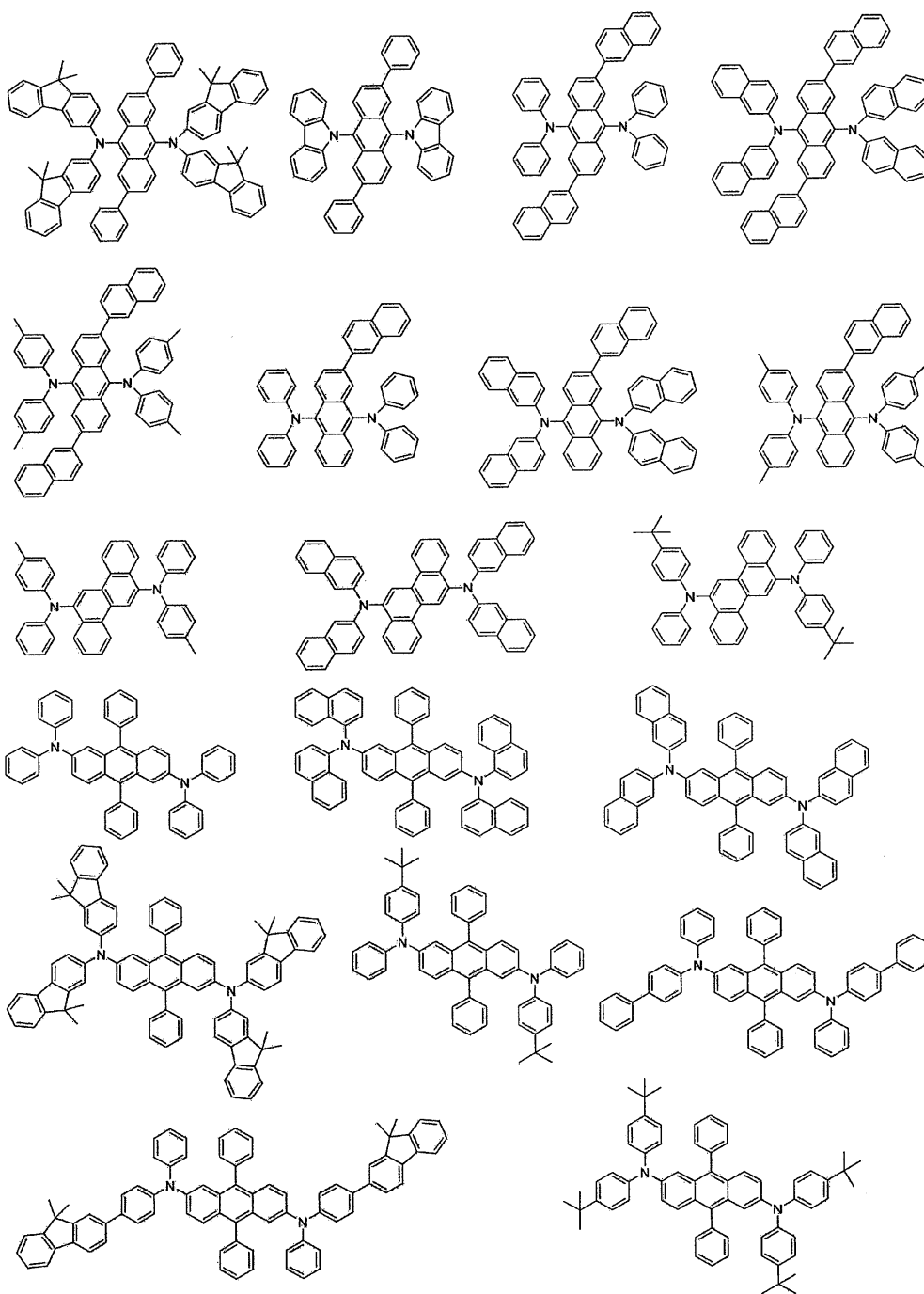
10

20

30

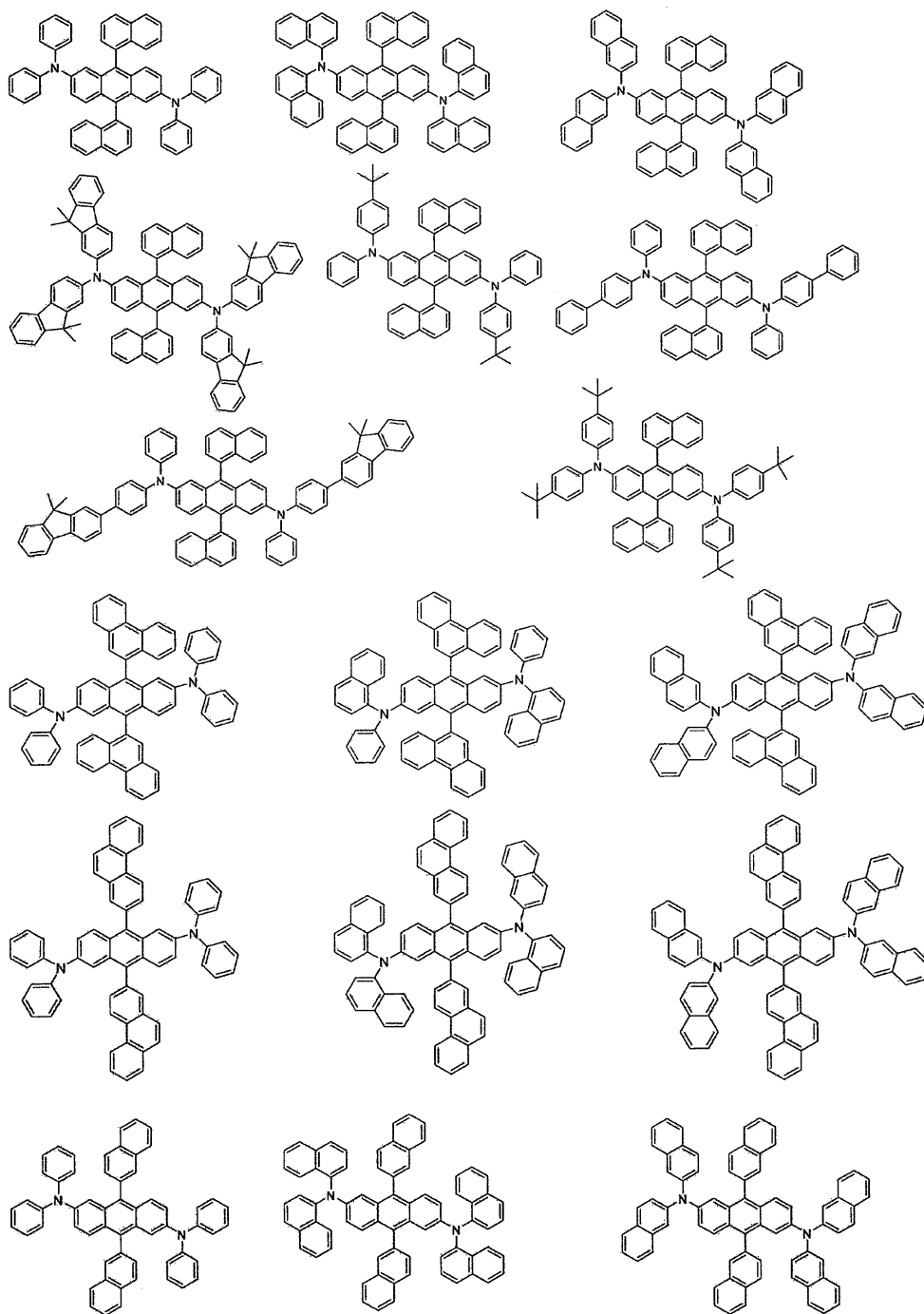
40

【化 6 0】



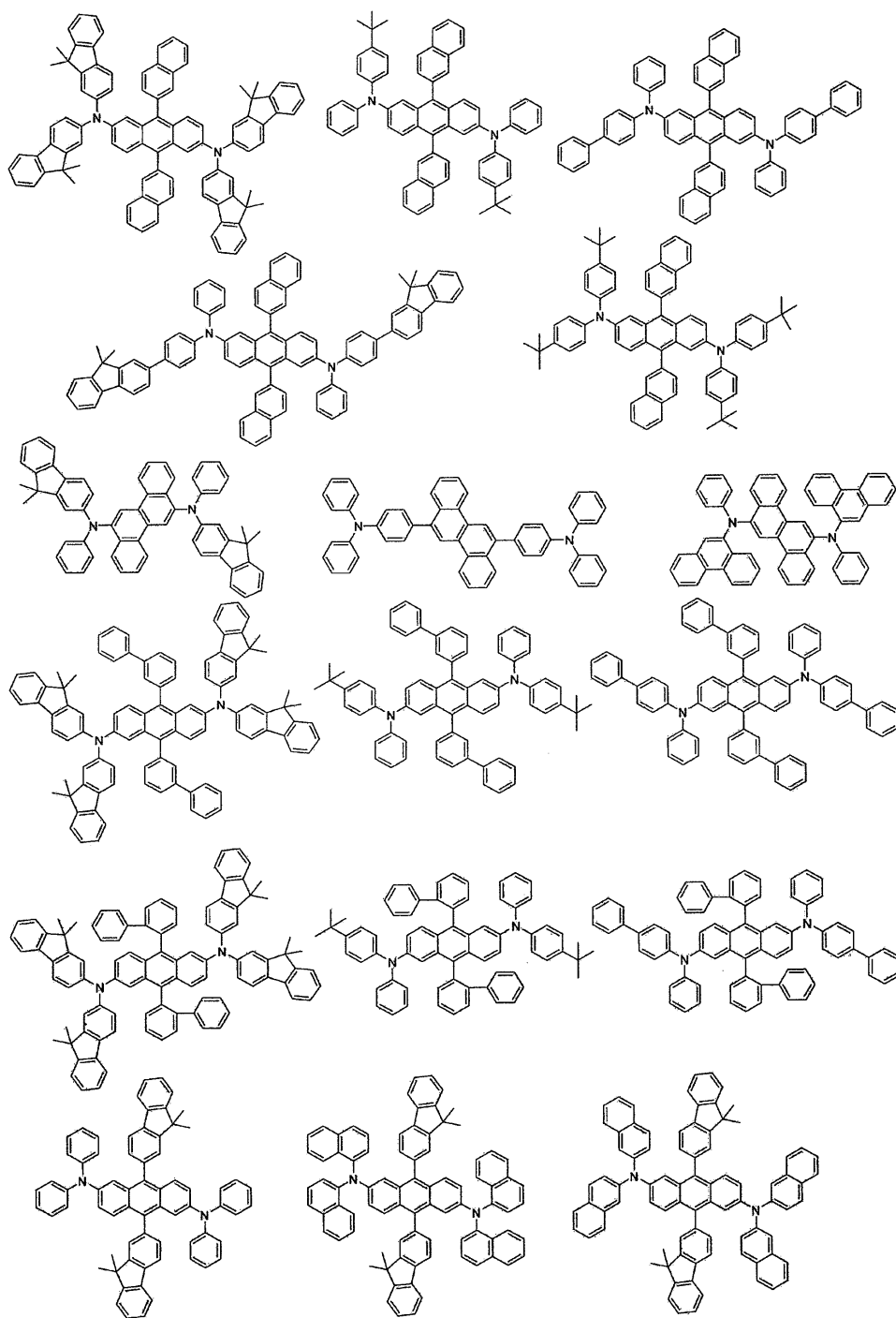
【 0 1 0 0】

## 【化 6 1】



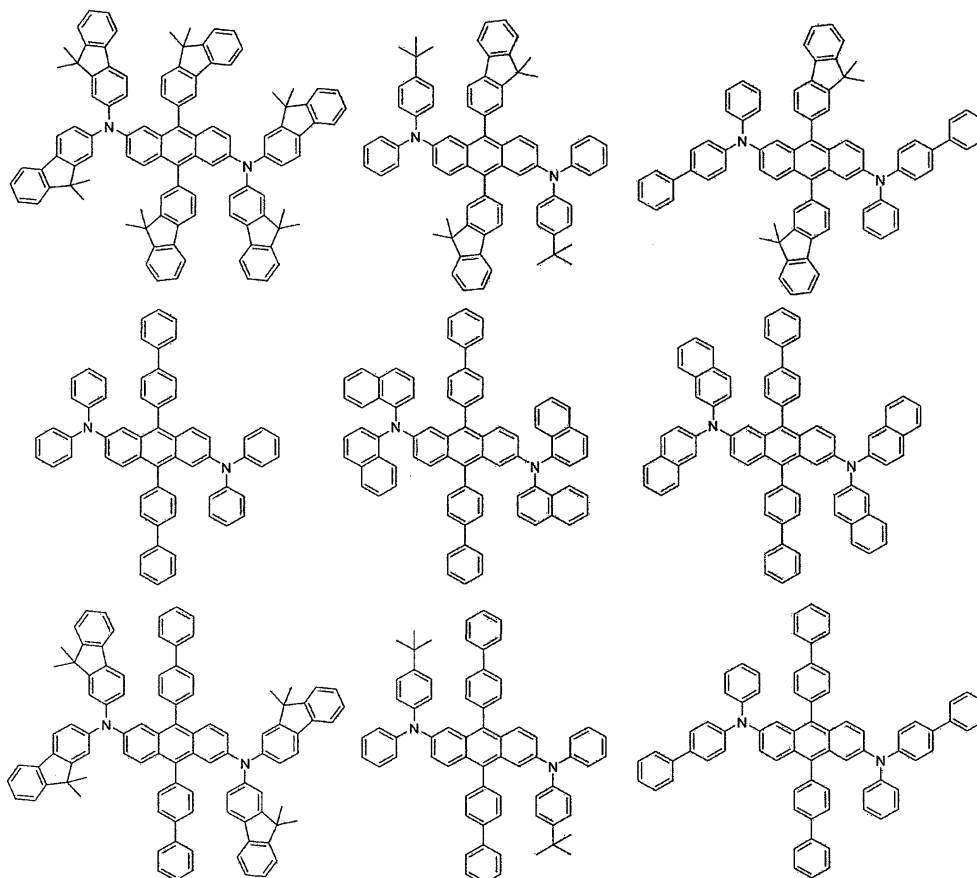
## 【 0 1 0 1】

## 【化 6 2】



## 【 0 1 0 2】

## 【化 6 3】



10

20

## 【0103】

電界発光層は電界発光が起こる層を意味し、これは単層でも、二以上の層が積層されて構成される複数層でもよい。ホスト-ドーパントの混合物を本発明の構成に従って使用する場合、本発明の電界発光ホストによる発光効率の著しい改善を確認することができた。これは、0.5~10重量%のドーピング濃度で達成することができる。本発明のホストは、既存の他のホスト材料に比べて、より高い正孔および電子伝導性、物質の優れた安定性を示し、発光効率だけではなく、素子寿命も著しく改善させる。

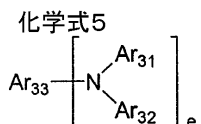
30

## 【0104】

本発明の有機電界発光素子は、化学式1により表される有機電界発光化合物を含むだけでなく、さらに、アリールアミン系化合物およびスチリルアリールアミン系化合物から選択された一種以上の化合物を含むことができる。アリールアミン系化合物またはスチリルアリールアミン系化合物の例として、下記の化学式5により表される化合物が挙げられるが、これに限定されるものではない。

## 【0105】

## 【化 6 4】



40

## 【0106】

式中、 $\text{Ar}_{31}$  及び  $\text{Ar}_{32}$  は、互いに独立して、(C1-C60)アルキル、(C6-C60)アリール、(C4-C60)ヘテロアリール、(C6-C60)アリールアミノ、(C1-C60)アルキルアミノ、N、O及びSから選択された一つ以上のヘテロ原子を含む5員もしくは6員のヘテロシクロアルキル、もしくは(C3-C60)シクロアルキルを表すか、または  $\text{Ar}_{31}$  と  $\text{Ar}_{32}$  は、縮合環を含むかもしくは含まない(C3

50

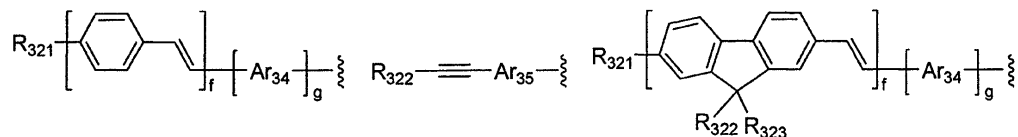


- C 6 0 ) アルキレンもしくは ( C 3 - C 6 0 ) アルケニレンで連結されて、脂環式環または単環式もしくは多環式芳香族環を形成することができ；

e が 1 である場合には、 $Ar_{33}$  は ( C 6 - C 6 0 ) アリール、( C 4 - C 6 0 ) ヘテロアリールまたは下記構造

【 0 1 0 7 】

【 化 6 5 】



10

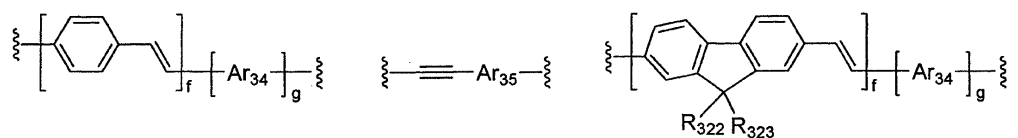
【 0 1 0 8 】

から選択される置換基を表し；

e が 2 である場合には、 $Ar_{33}$  は ( C 6 - C 6 0 ) アリーレン、( C 4 - C 6 0 ) ヘテロアリーレンまたは下記構造

【 0 1 0 9 】

【 化 6 6 】



20

【 0 1 1 0 】

から選択される置換基を表し；

$Ar_{34}$  及び  $Ar_{35}$  は、互いに独立して、( C 6 - C 6 0 ) アリーレンまたは ( C 4 - C 6 0 ) ヘテロアリーレンを表し；

$R_{321}$ 、 $R_{322}$  および  $R_{323}$  は、互いに独立して、水素、( C 1 - C 6 0 ) アルキルまたは ( C 6 - C 6 0 ) アリールを表し；

f は 1 ~ 4 の整数であり、g は 0 または 1 の整数であり；

前記  $Ar_{31}$  及び  $Ar_{32}$  のアルキル、アリール、ヘテロアリール、アリールアミノ、アルキルアミノ、シクロアルキルもしくはヘテロシクロアルキル、または前記  $Ar_{33}$  のアリール、ヘテロアリール、アリーレンもしくはヘテロアリーレン、または前記  $Ar_{34}$  及び  $Ar_{35}$  のアリーレンもしくはヘテロアリーレン、または  $R_{321}$  乃至  $R_{323}$  のアルキルもしくはアリールは、重水素、ハロゲン、( C 1 - C 6 0 ) アルキル、( C 6 - C 6 0 ) アリール、( C 4 - C 6 0 ) ヘテロアリール、N、O 及び S から選択された一つ以上のヘテロ原子を含む 5 員もしくは 6 員のヘテロシクロアルキル、( C 3 - C 6 0 ) シクロアルキル、トリ ( C 1 - C 6 0 ) アルキルシリル、ジ ( C 1 - C 6 0 ) アルキル ( C 6 - C 6 0 ) アリールシリル、トリ ( C 6 - C 6 0 ) アリールシリル、アダマンチル、( C 7 - C 6 0 ) ビシクロアルキル、( C 2 - C 6 0 ) アルケニル、( C 2 - C 6 0 ) アルキニル、シアノ、( C 1 - C 6 0 ) アルキルアミノ、( C 6 - C 6 0 ) アリールアミノ、( C 6 - C 6 0 ) アリール ( C 1 - C 6 0 ) アルキル、( C 6 - C 6 0 ) アリールオキシ、( C 1 - C 6 0 ) アルキルオキシ、( C 6 - C 6 0 ) アリールチオ、( C 1 - C 6 0 ) アルキルチオ、( C 1 - C 6 0 ) アルコキシカルボニル、( C 1 - C 6 0 ) アルキルカルボニル、( C 6 - C 6 0 ) アリールカルボニル、カルボキシル、ニトロおよびヒドロキシルからなる群から選択される一種以上の置換基によってさらに置換されてよい。

【 0 1 1 1 】

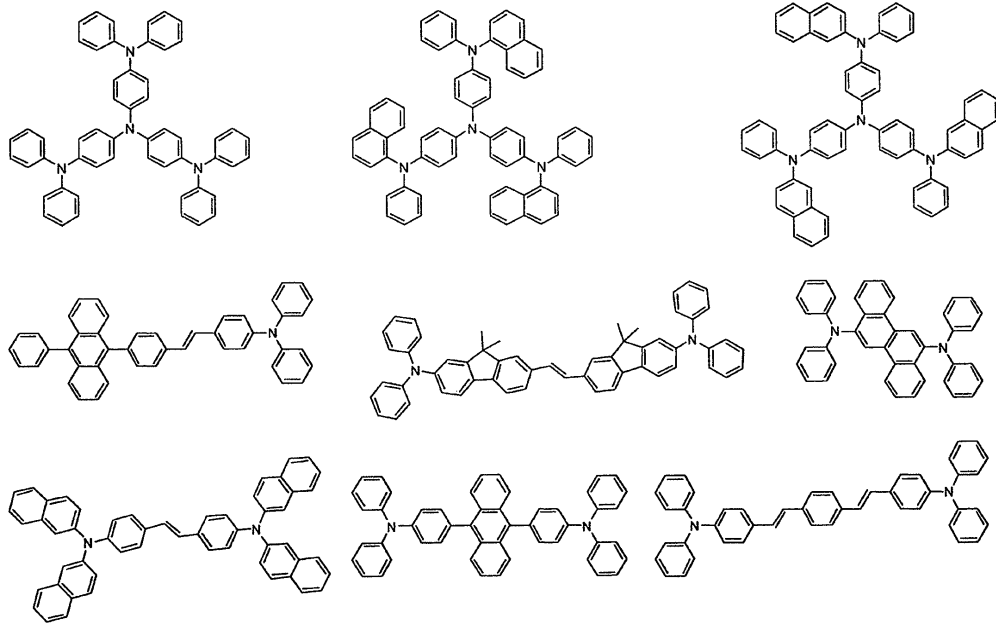
アリールアミン系化合物およびスチリルアリールアミン系化合物は、より具体的に下記の化合物で例示できるが、これらに限定されるものではない。

【 0 1 1 2 】

30

40

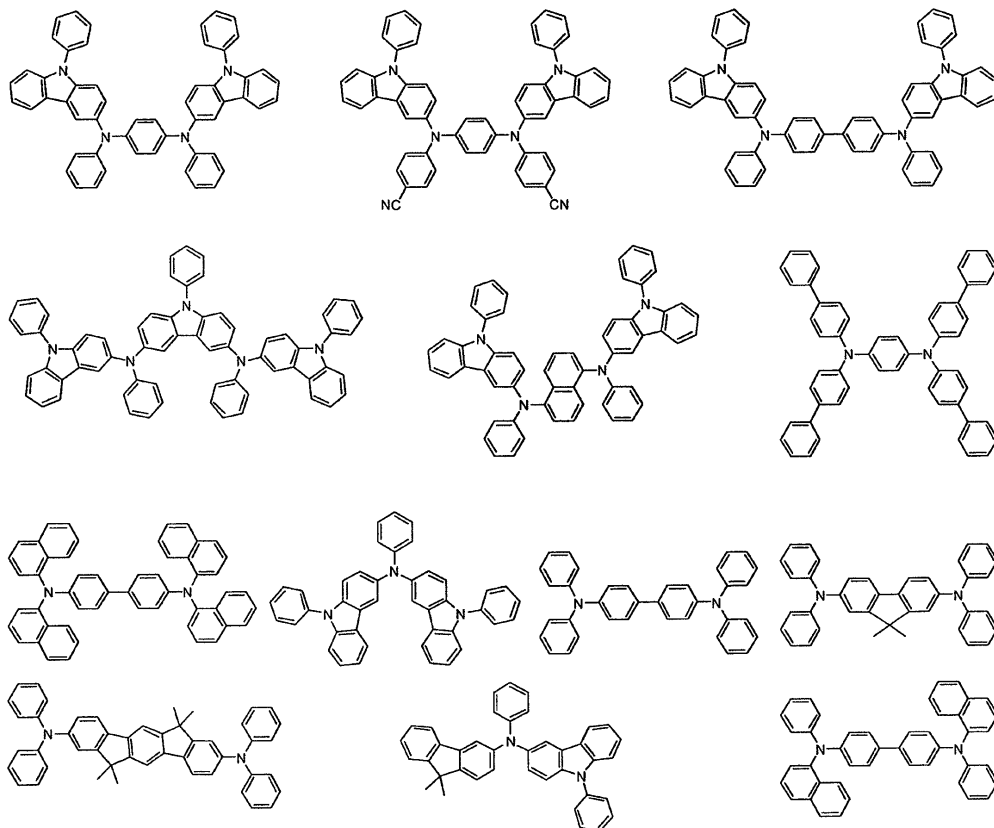
## 【化 6 7】



10

## 【 0 1 1 3】

## 【化 6 8】



20

30

40

## 【 0 1 1 4】

本発明の有機電界発光素子において、有機層は、化学式 1 により表される有機電界発光化合物と共に、第 1 族、第 2 族、第 4 周期および第 5 周期遷移金属、ランタン系列金属、並びに d - 遷移元素の有機金属からなる群から選択される一種以上の金属をさらに含むことができる。有機層は、電界発光層と共に、電荷発生層 (charge generating layer) を含むことができる。

## 【 0 1 1 5】

本発明は、化学式 1 の化合物を含む有機電界発光素子をサブピクセルとして、並びに、

50

アリールアミン系化合物およ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１種以上の化合物を含むサブピクセルの一つ以上を同時に並列にパターンニングして含む、独立発光方式のピクセル構造を有する電界発光素子を実現することができる。

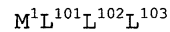
【０１１６】

さらに、本発明の有機電界発光素子は、５６０ｎｍ以上の波長の電界発光ピークを有する化合物をさらに含む有機ディスプレイである。５６０ｎｍ以上の波長のＥＬピークを有する化合物は、下記化学式６乃至１０のそれぞれにより表される化合物によって例示できるが、これらに限定されるものではない。

【０１１７】

【化６９】

化学式６

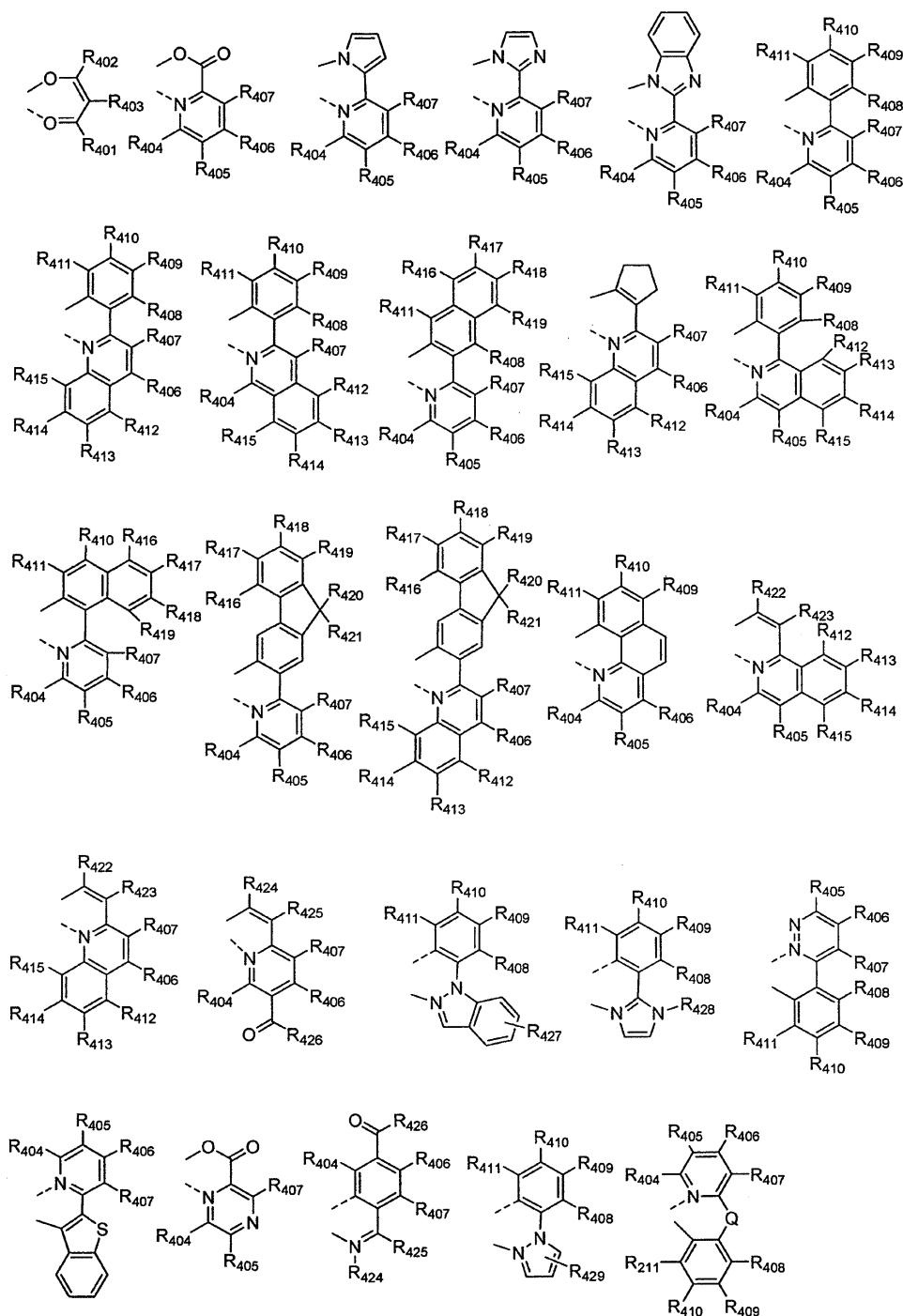


【０１１８】

化学式６において、 $M^1$ は、元素の周期表の第７族、第８族、第９族、第１０族、第１１族、第１３族、第１４族、第１５族及び第１６族から選択され、リガンド $L^{101}$ 、 $L^{102}$ 及び $L^{103}$ は、互いに独立して、下記構造から選択される：

【０１１９】

## 【化 70】



## 【0120】

式中、R<sub>401</sub>乃至R<sub>403</sub>は、互いに独立して、水素、重水素、ハロゲン置換基を有するもしくは有しない(C1-C60)アルキル、(C1-C60)アルキル置換基を有するもしくは有しない(C6-C60)アリールまたはハロゲンを表し；

R<sub>404</sub>乃至R<sub>419</sub>は、互いに独立して、水素、重水素、(C1-C60)アルキル、(C1-C30)アルコキシ、(C3-C60)シクロアルキル、(C2-C30)アルケニル、(C6-C60)アリール、モノもしくはジ(C1-C30)アルキルアミノ、モノもしくはジ(C6-C30)アリールアミノ、SF<sub>5</sub>、トリ(C1-C30)アルキルシリル、ジ(C1-C30)アルキル(C6-C30)アリールシリル、トリ(C6-C30)アリールシリル、シアノまたはハロゲンを表し、前記R<sub>404</sub>乃至R<sub>419</sub>のアルキル、シクロアルキル、アルケニルまたはアリールは、重水素、(C1-C60)アルキル、(C6-C60)アリールおよびハロゲンから選択される1種以上の置換基によ

10

20

30

40

50

ってさらに置換されてよく；

$R_{420}$  乃至  $R_{423}$  は、互いに独立して、水素、重水素、ハロゲン置換基を有するもしくは有しない ( $C1 - C60$ ) アルキル、または ( $C1 - C60$ ) アルキル置換基を有するもしくは有しない ( $C6 - C60$ ) アリールを表し；

$R_{424}$  及び  $R_{425}$  は、互いに独立して、水素、重水素、( $C1 - C60$ ) アルキル、( $C6 - C60$ ) アリールもしくはハロゲンを表すか、または  $R_{424}$  と  $R_{425}$  は、縮合環を含むかもしくは含まない ( $C3 - C12$ ) アルキレンもしくは ( $C3 - C12$ ) アルケニレンで連結されて、脂環式環または単環式もしくは多環式芳香族環を形成することができ；

前記  $R_{424}$  及び  $R_{425}$  のアルキルもしくはアリール、または縮合環を含むかもしくは含まない ( $C3 - C12$ ) アルキレンもしくは ( $C3 - C12$ ) アルケニレンで連結されてそこから形成された前記脂環式環または前記単環式もしくは多環式芳香族環は、重水素、ハロゲン置換基を有するもしくは有しない ( $C1 - C60$ ) アルキル、( $C1 - C30$ ) アルコキシ、ハロゲン、トリ ( $C1 - C30$ ) アルキルシリル、トリ ( $C6 - C30$ ) アリールシリル及び ( $C6 - C60$ ) アリールから選択される 1 種以上の置換基によってさらに置換されてよく；

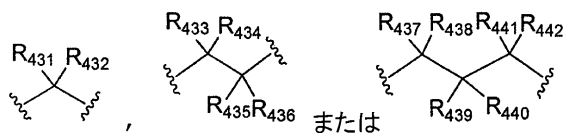
$R_{426}$  は、( $C1 - C60$ ) アルキル、( $C6 - C60$ ) アリール、( $C5 - C60$ ) ヘテロアリールまたはハロゲンを表し；

$R_{427}$  乃至  $R_{429}$  は、互いに独立して、水素、重水素、( $C1 - C60$ ) アルキル、( $C6 - C60$ ) アリールまたはハロゲンを表し、前記  $R_{426}$  乃至  $R_{429}$  のアルキルもしくはアリールは、ハロゲンまたは ( $C1 - C60$ ) アルキルでさらに置換されてよく；

【0121】

Q は、

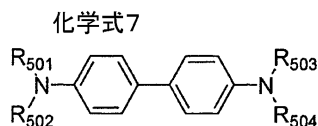
【化71】



を表し、 $R_{431}$  乃至  $R_{442}$  は、互いに独立して、水素、重水素、ハロゲン置換基を有するもしくは有しない ( $C1 - C60$ ) アルキル、( $C1 - C30$ ) アルコキシ、ハロゲン、( $C6 - C60$ ) アリール、シアノもしくは ( $C5 - C60$ ) シクロアルキルを表すか、または  $R_{431}$  乃至  $R_{442}$  のそれぞれは隣接した置換基と、アルキレンまたはアルケニレンで連結されて、( $C5 - C7$ ) スピロ環もしくは ( $C5 - C9$ ) 縮合環を形成することができるか、またはそのそれぞれは  $R_{407}$  もしくは  $R_{408}$  とアルキレンもしくはアルケニレンで連結されて、( $C5 - C7$ ) 縮合環を形成することができる。

【0122】

【化72】



【0123】

化学式7において、 $R_{501}$  乃至  $R_{504}$  は、互いに独立して、( $C1 - C60$ ) アルキルもしくは ( $C6 - C60$ ) アリールを表すか、またはそのそれぞれは隣接した置換基と、縮合環を含むかもしくは含まない ( $C3 - C60$ ) アルキレンもしくは ( $C3 - C60$ ) アルケニレンで連結されて、脂環式環または単環式もしくは多環式芳香族環を形成することができ；

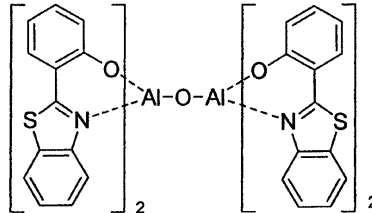
前記  $R_{501}$  乃至  $R_{504}$  のアルキルもしくはアリール、または縮合環を含むかもしくは含まない ( $C3 - C60$ ) アルキレンもしくは ( $C3 - C60$ ) アルケニレンで連結さ

れてそこから形成された前記脂環式環または前記単環式もしくは多環式芳香族環は、重水素、ハロゲン置換基を有するもしくは有しない（C 1 - C 6 0）アルキル、（C 1 - C 6 0）アルコキシ、ハロゲン、トリ（C 1 - C 6 0）アルキルシリル、トリ（C 6 - C 6 0）アリールシリル及び（C 6 - C 6 0）アリールから選択される１種以上の置換基によってさらに置換されてよい。

【 0 1 2 4 】

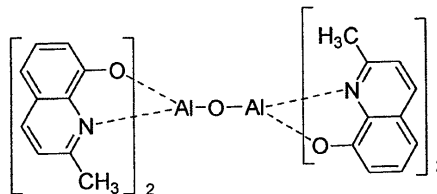
【 化 7 3 】

化学式8



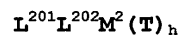
10

化学式9



20

化学式10

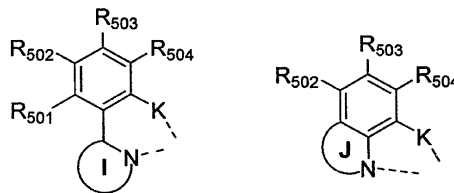


【 0 1 2 5 】

化学式 1 0 において、リガンド  $L^{201}$  及び  $L^{202}$  は、互いに独立して下記構造から選択され、

【 0 1 2 6 】

【 化 7 4 】



30

【 0 1 2 7 】

$M^2$  は、2 価または 3 価金属であり；

$M^2$  が 2 価金属である場合には、 $h$  は 0 であり、 $M^2$  が 3 価金属である場合には、 $h$  は 1 であり；

40

$T$  は、（C 6 - C 6 0）アリールオキシまたはトリ（C 6 - C 6 0）アリールシリルを表し、前記  $T$  のアリールオキシ及びトリアリールシリルは、（C 1 - C 6 0）アルキルまたは（C 6 - C 6 0）アリールによってさらに置換されてよく；

$K$  は、O、S または Se を表し；

環  $I$  は、オキサゾール、チアゾール、イミダゾール、オキサジアゾール、チアジアゾール、ベンゾオキサゾール、ベンゾチアゾール、ベンゾイミダゾール、ピリジン、またはキノリンを表し；

環  $J$  は、ピリジンまたはキノリンを表し、前記環  $J$  は、（C 1 - C 6 0）アルキル、（C 1 - C 6 0）アルキル置換基を有するもしくは有しないフェニルまたはナフチルによってさらに置換されてよく；

50

$R_{501}$  乃至  $R_{504}$  は、互いに独立して、水素、重水素、(C1 - C60) アルキル、ハロゲン、トリ(C1 - C60) アルキルシリル、トリ(C6 - C60) アリールシリルもしくは(C6 - C60) アリールを表すか、またはそのそれぞれは隣接した置換基と、(C3 - C60) アルキレンもしくは(C3 - C60) アルケニレンで連結されて縮合環を形成することができ、前記ピリジンまたはキノリンは、 $R_{501}$  と化学結合をなして縮合環を形成することができ；

環 I または  $R_{501}$  乃至  $R_{504}$  のアリール基は、重水素、(C1 - C60) アルキル、ハロゲン、ハロゲン置換基を有する(C1 - C60) アルキル、フェニル、ナフチル、トリ(C1 - C60) アルキルシリル、トリ(C6 - C60) アリールシリルまたはアミノ基でさらに置換されてよい。

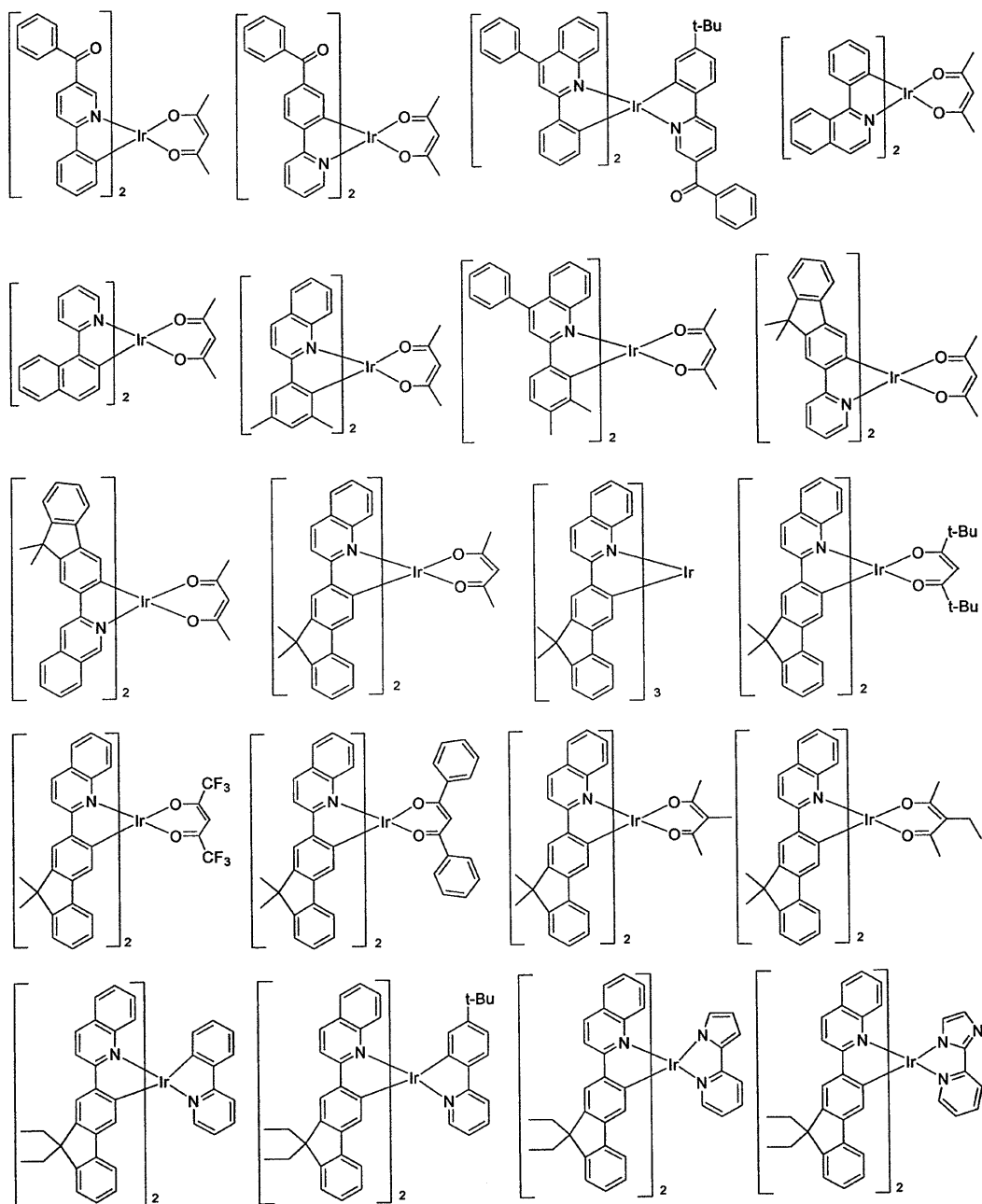
10

## 【0128】

560 nm 以上の波長の電界発光ピークを有する化合物は、下記化合物で例示できるが、これらに限定されるものではない。

## 【0129】

## 【化75】



20

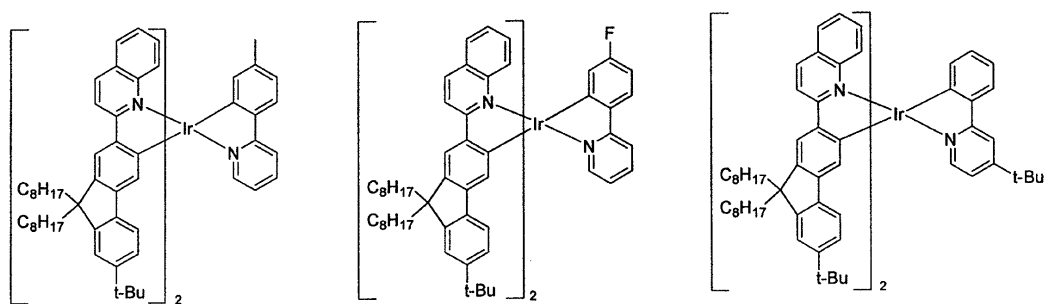
30

40

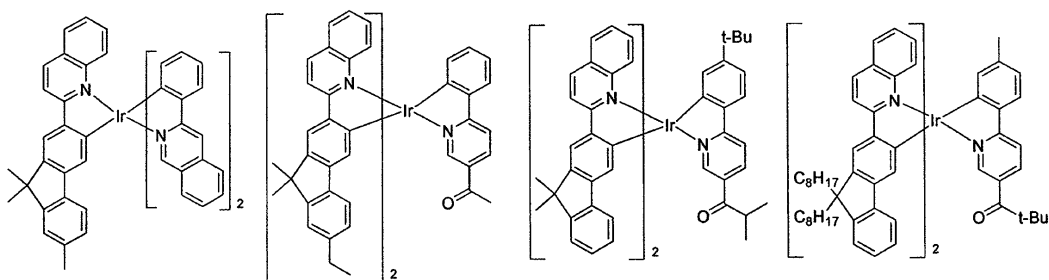
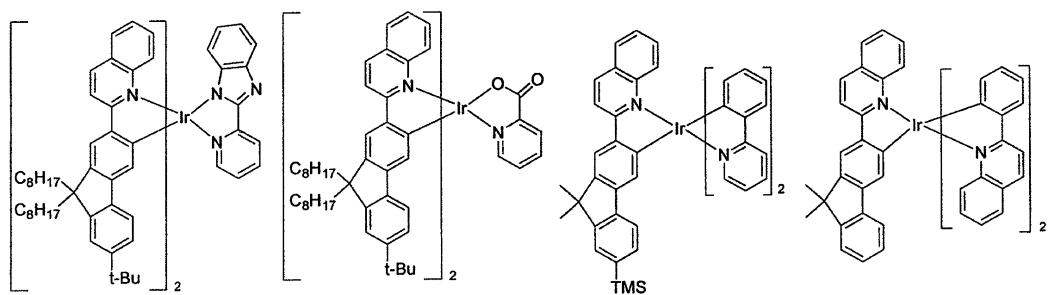
50

【 0 1 3 0 】

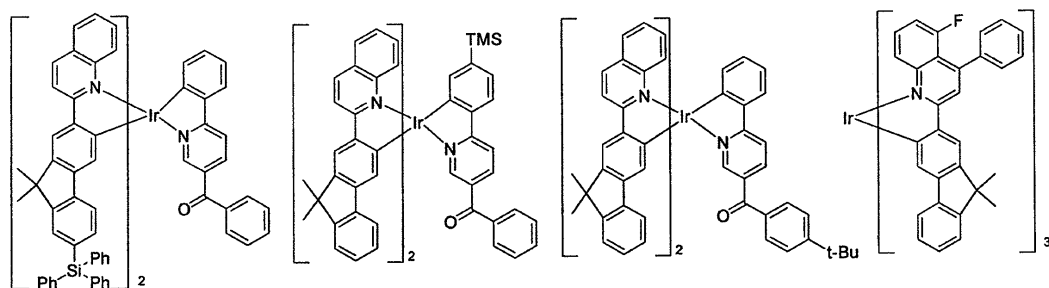
【 化 7 6 】



10



20

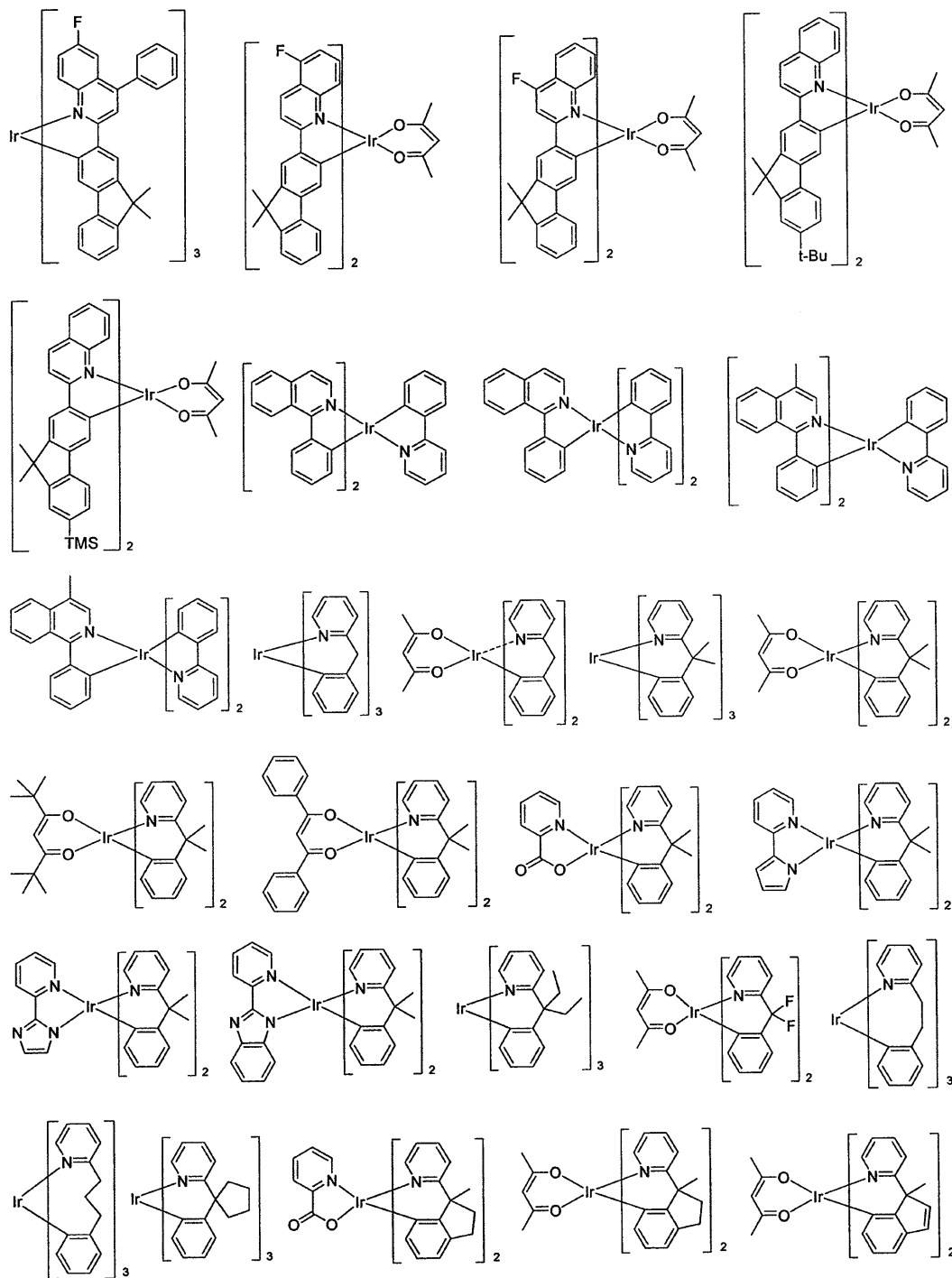


30

【 0 1 3 1 】

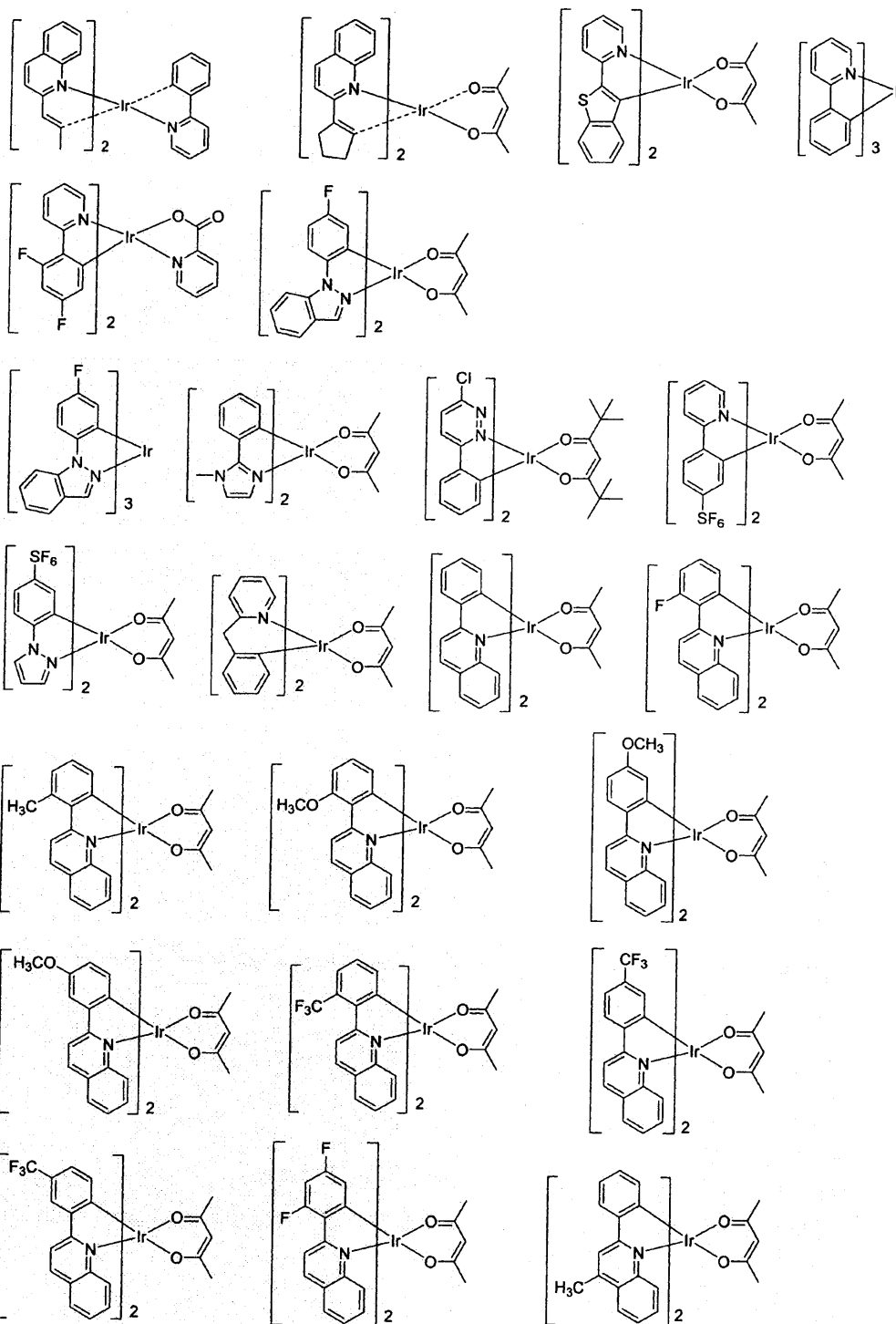


【化 77】



【 0 1 3 2 】

【化 7 8】



【 0 1 3 3 】

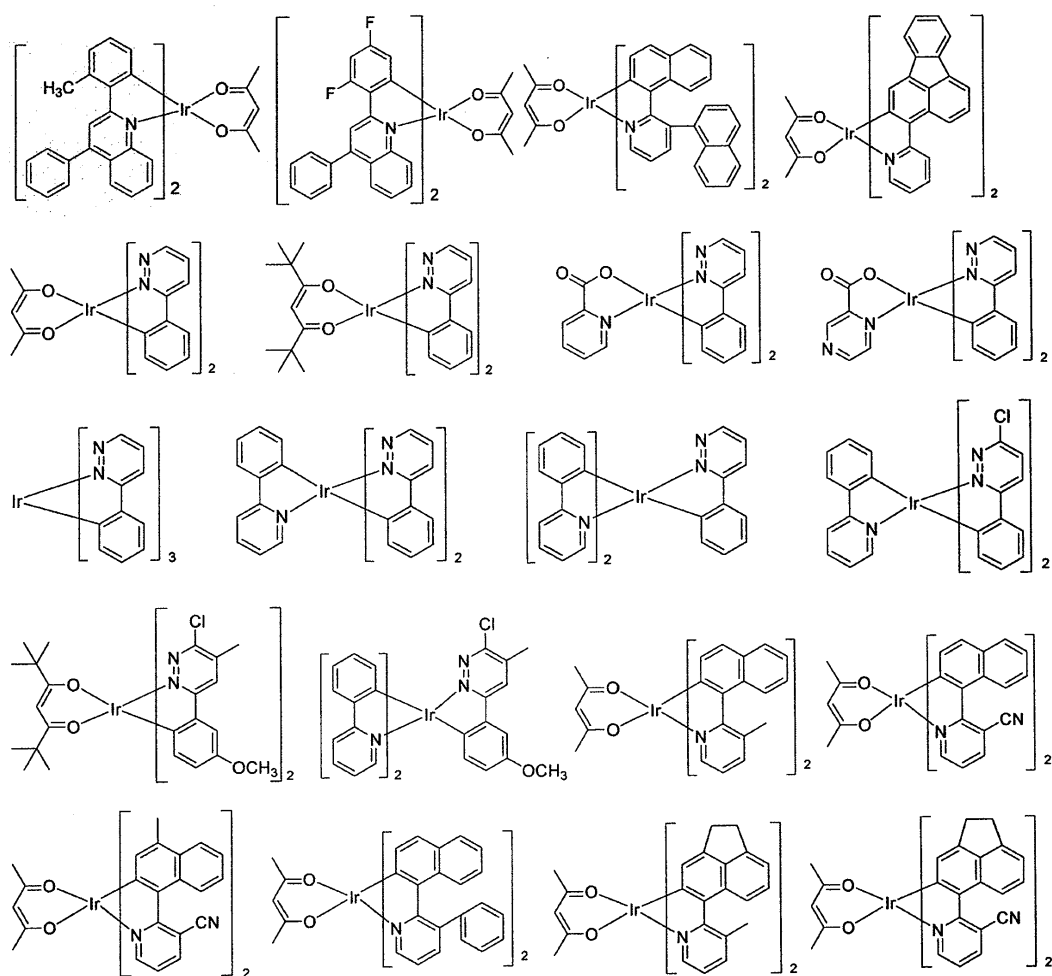
10

20

30

40

【化 7 9】



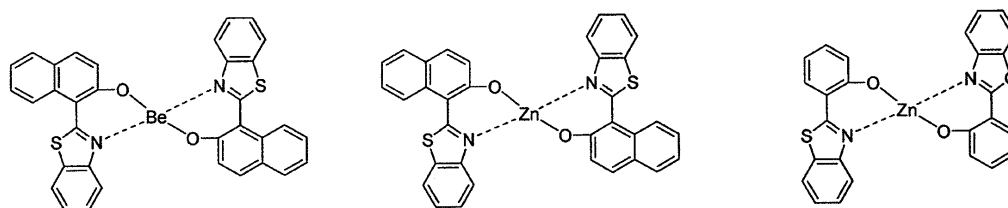
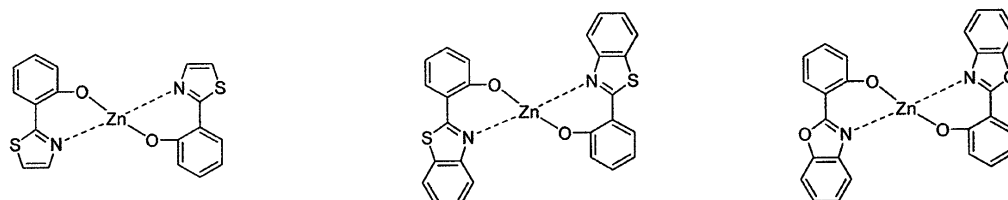
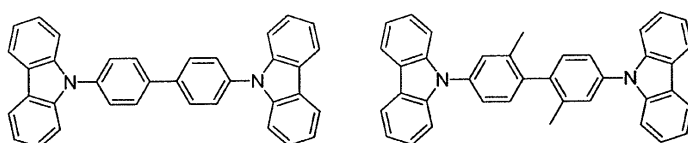
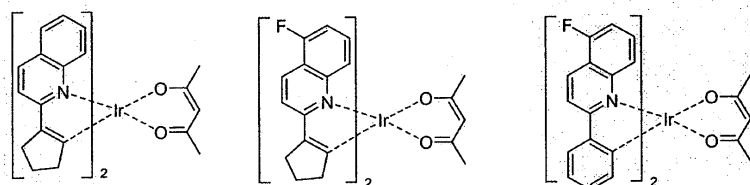
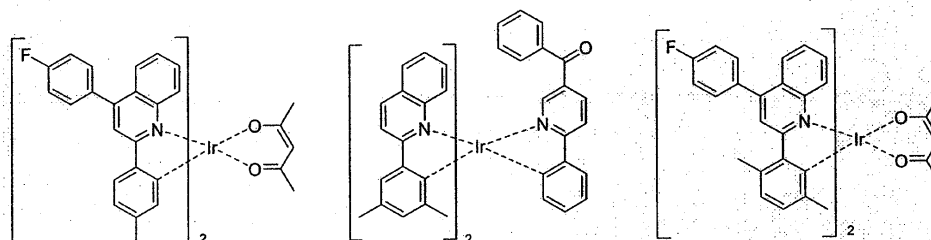
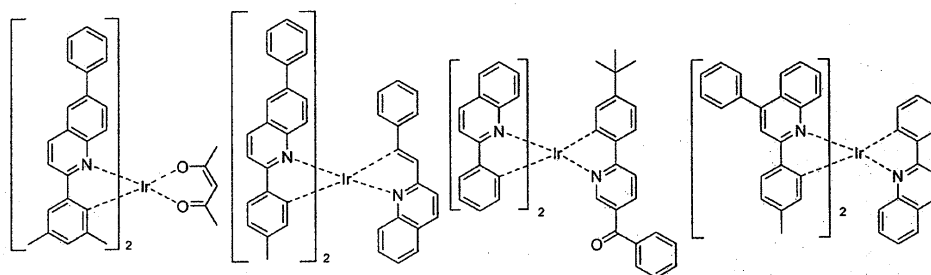
10

20

【 0 1 3 4】

30

【化 8 0】



【 0 1 3 5】

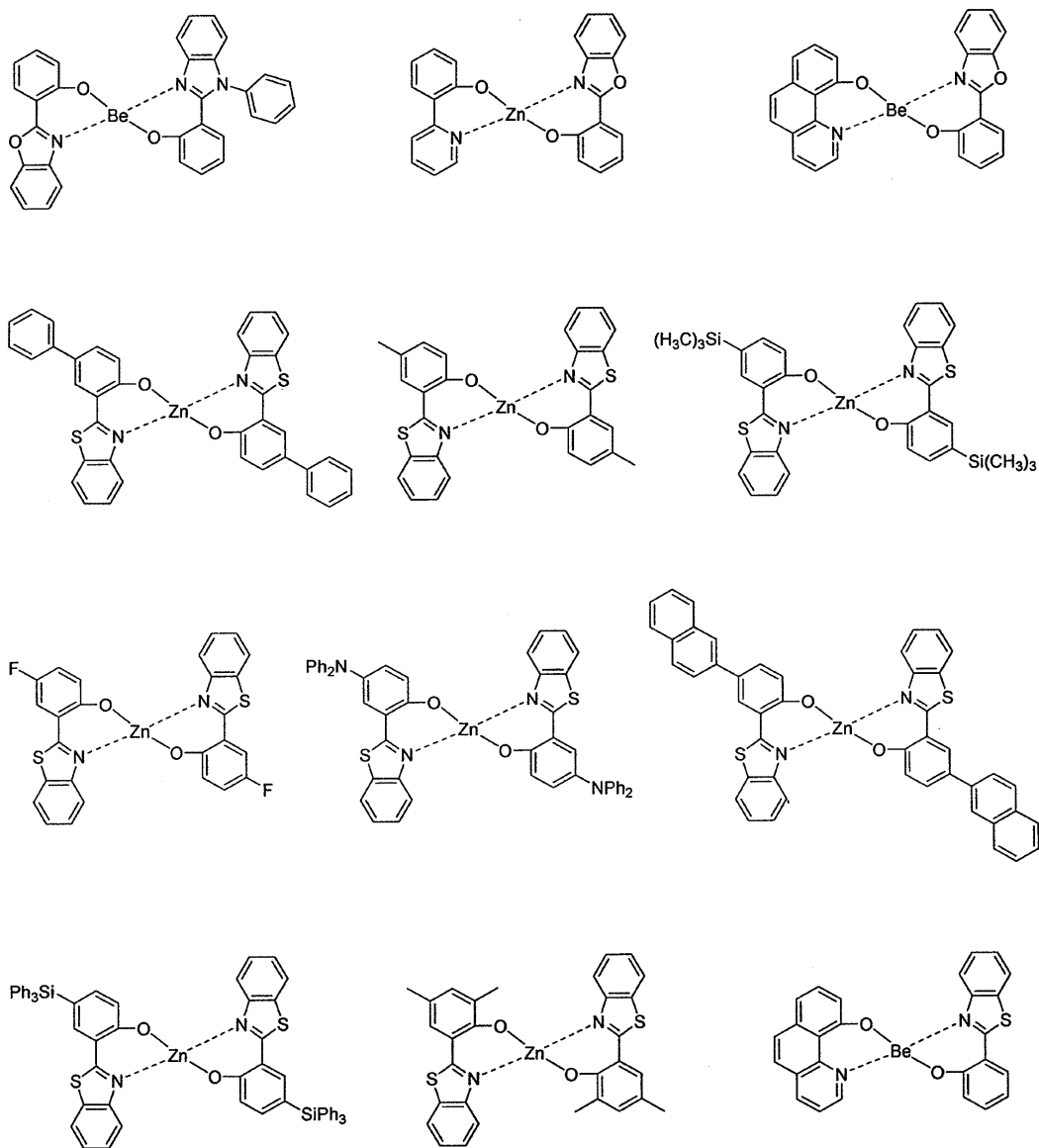
10

20

30

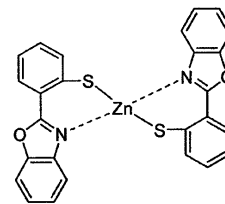
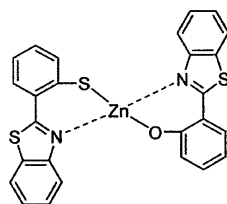
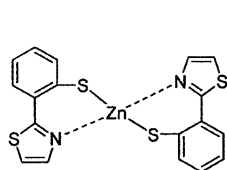
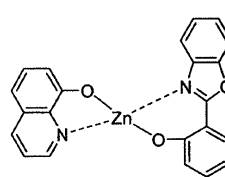
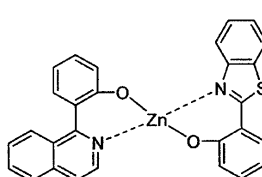
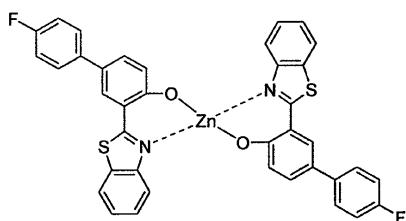
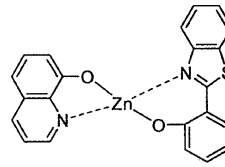
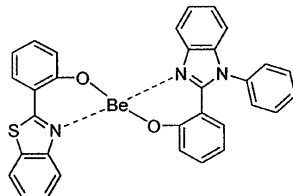
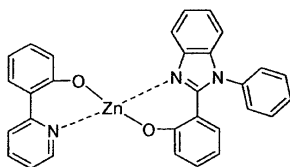
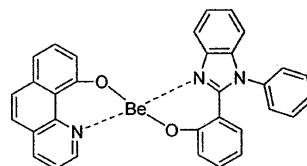
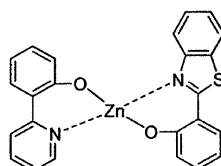
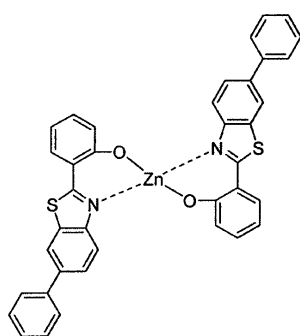
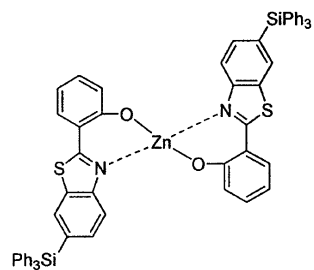
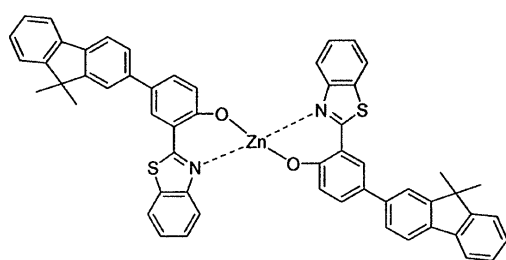
40

## 【化 8 1】



## 【 0 1 3 6 】

【化 8 2】



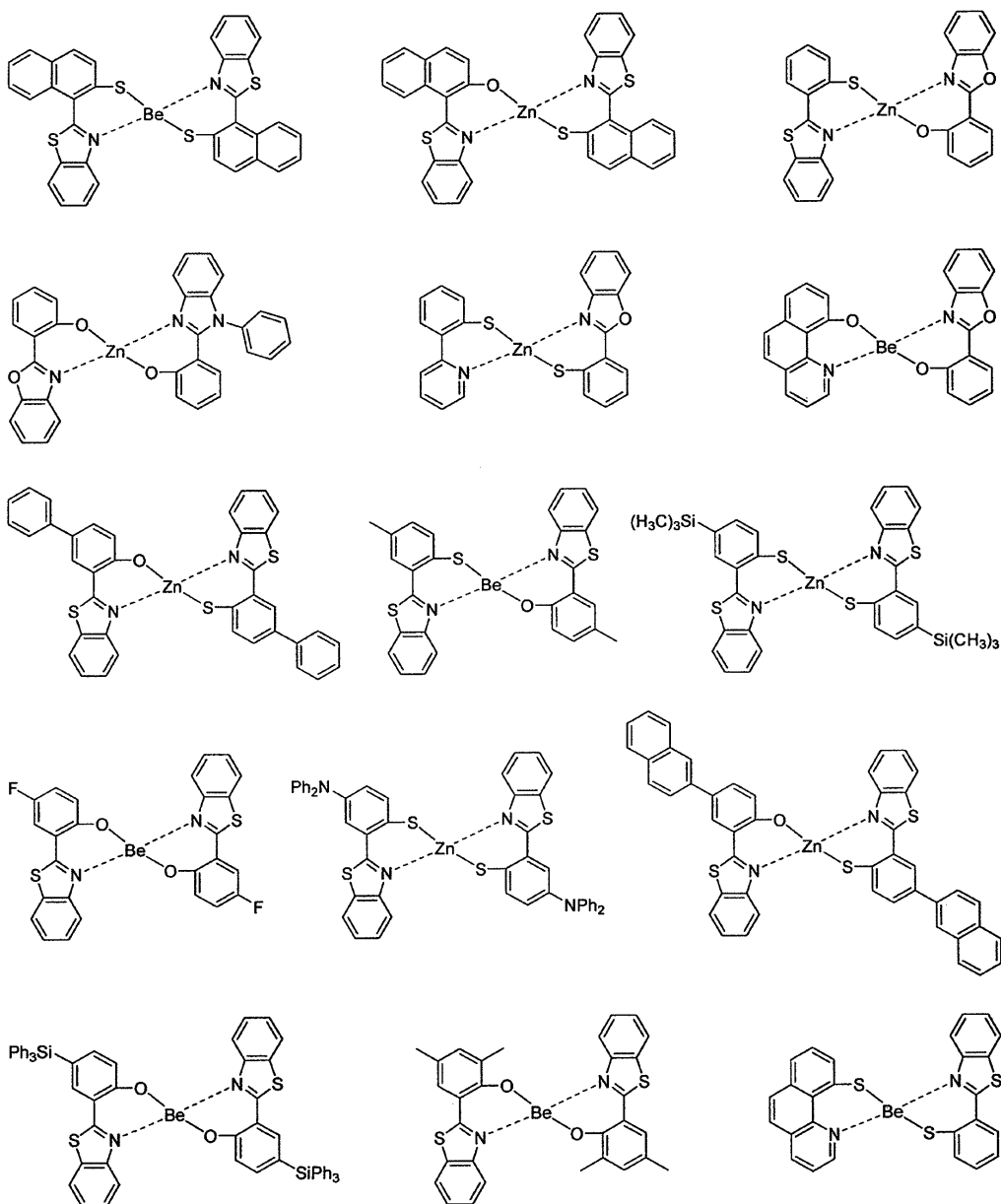
【 0 1 3 7 】

10

20

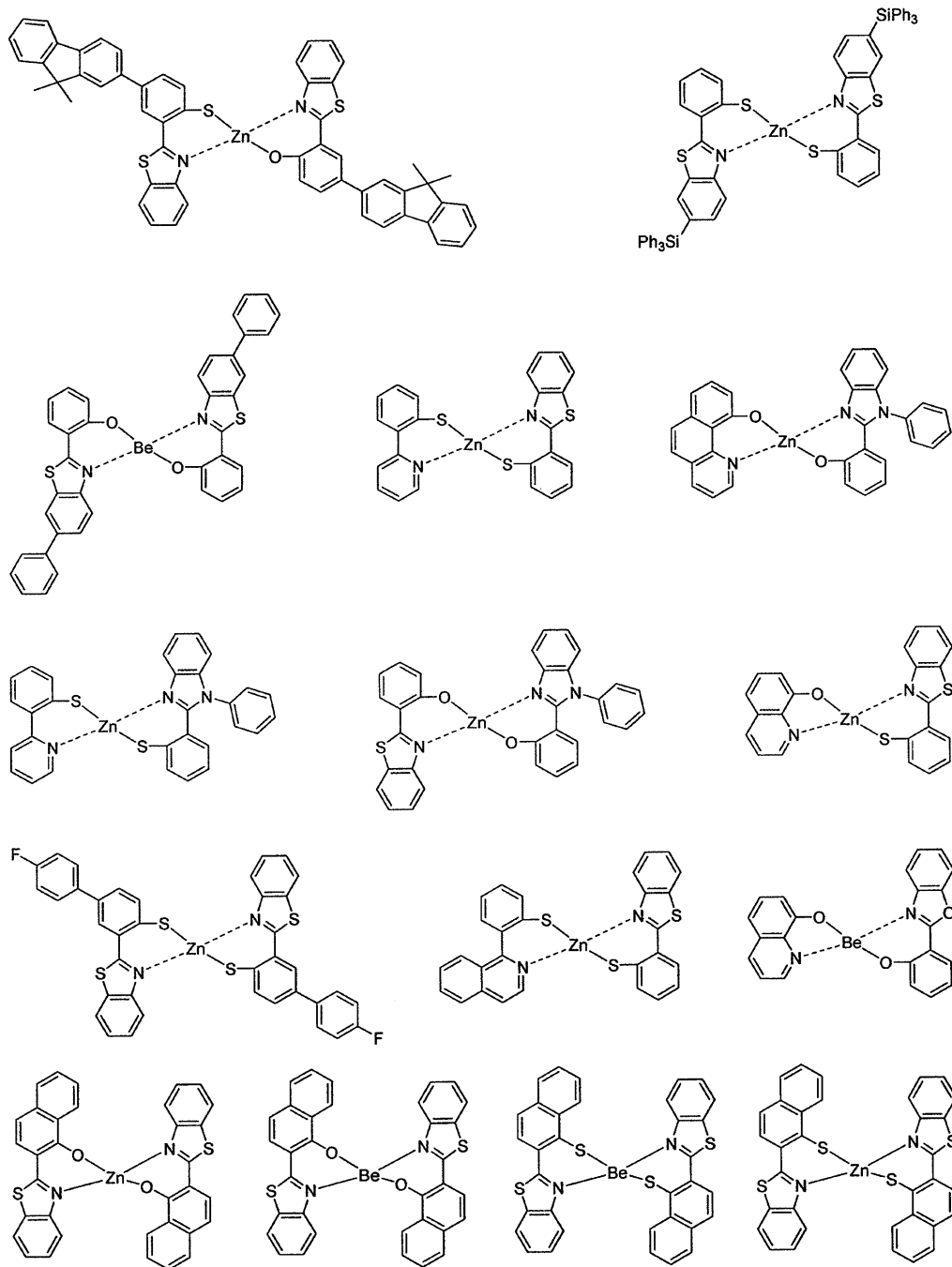
30

【化 8 3】



【 0 1 3 8 】

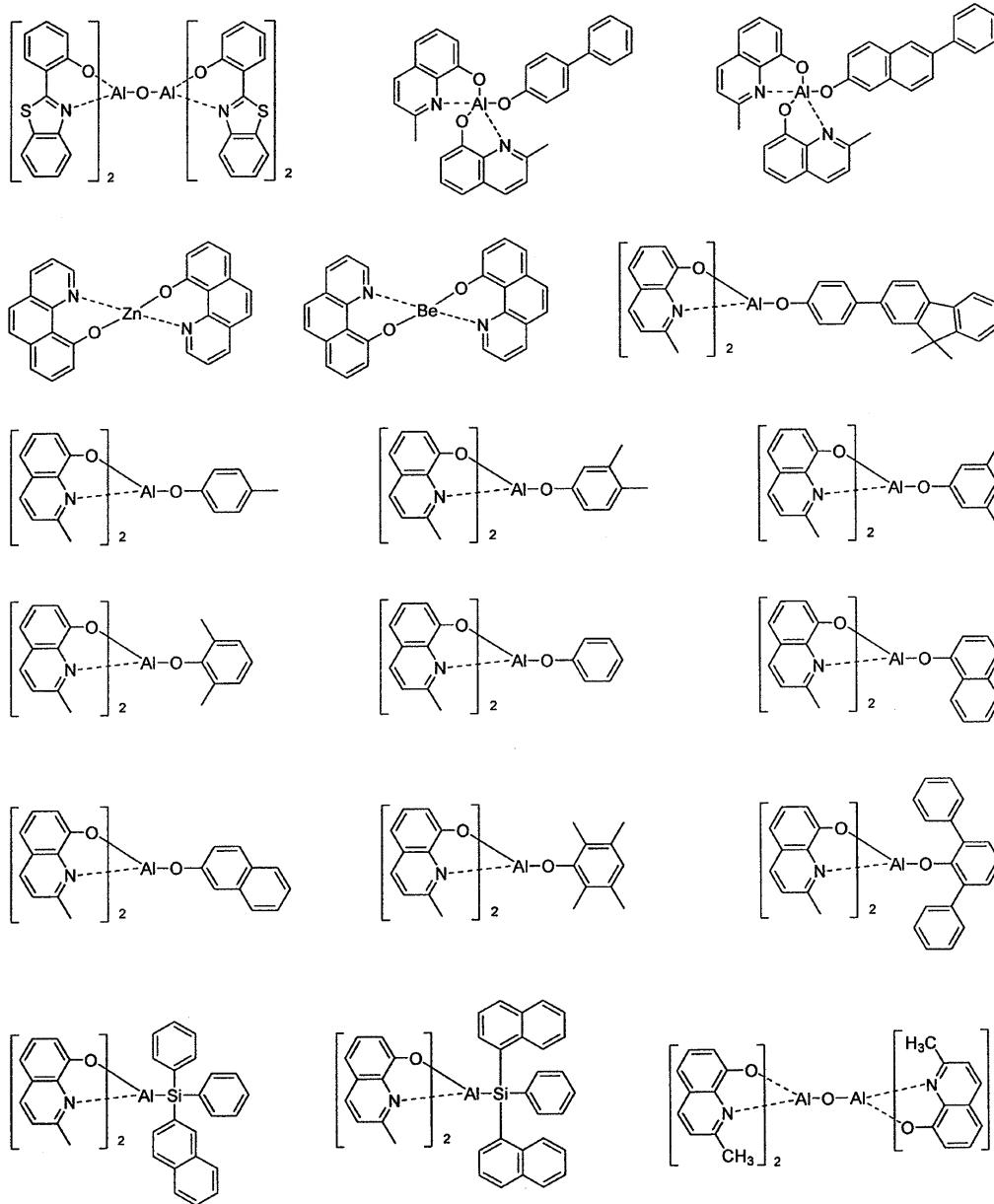
【化 8 4】



【 0 1 3 9 】



## 【化 8 5】



10

20

30

## 【0140】

本発明の有機電界発光素子において、カルコゲナイド (chalcogenide) 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1以上の層(以下、「表面層」とも称する)を、電極の対の少なくとも一方側の内側表面上に配置することが好ましい。特に、EL媒体層 (EL medium layer) の陽極表面上にケイ素及びアルミニウム金属のカルコゲナイド (酸化物を含む) 層を配置し、EL媒体層の陰極表面上に金属ハロゲン化物層又は金属酸化物層を配置することが好ましい。その結果、駆動の安定性が得られうる。

40

カルコゲナイドの例には、好ましくは、 $\text{SiO}_x$  ( $1 < x < 2$ )、 $\text{AlO}_x$  ( $1 < x < 1.5$ )、 $\text{SiON}$ 、 $\text{SiAlON}$ などが挙げられる。金属ハロゲン化物の例には、好ましくは、 $\text{LiF}$ 、 $\text{MgF}_2$ 、 $\text{CaF}_2$ 、ランタン系列 (lanthanides) のフッ化物などが挙げられる。金属酸化物の例には、好ましくは、 $\text{Cs}_2\text{O}$ 、 $\text{Li}_2\text{O}$ 、 $\text{MgO}$ 、 $\text{SrO}$ 、 $\text{BaO}$ 、 $\text{CaO}$ などが挙げられる。

## 【0141】

本発明の有機電界発光素子において、このようにして製造された電極の対の少なくとも一方の表面に、電子輸送化合物と還元性 (reductive) ドーパントとの混合領域

50

、または正孔輸送化合物と酸化性 ( o x i d a t i v e ) ドーパントとの混合領域を配置することも好ましい。これにより、電子輸送化合物はアニオンに還元されるので、この混合領域から E L 媒体への電子の注入及び輸送が容易になる。更に、正孔輸送化合物が酸化されてカチオンを形成するので、この混合領域から E L 媒体への正孔の注入及び輸送が容易になる。好ましい酸化性ドーパントとしては、種々のルイス酸及びアクセプター ( a c c e p t o r ) 化合物が挙げられる。好ましい還元性ドーパントとしては、アルカリ金属、アルカリ金属化合物、アルカリ土類金属、希土類金属及びこれらの混合物が挙げられる。

#### 【 0 1 4 2 】

本発明による有機電界発光化合物は、高い発光効率、並びに材料の優れた色純度及び寿命特性を示すので、非常に良好な駆動寿命を有する O L E D がそれから製造されうる。

#### 【 0 1 4 3 】

最良の形態

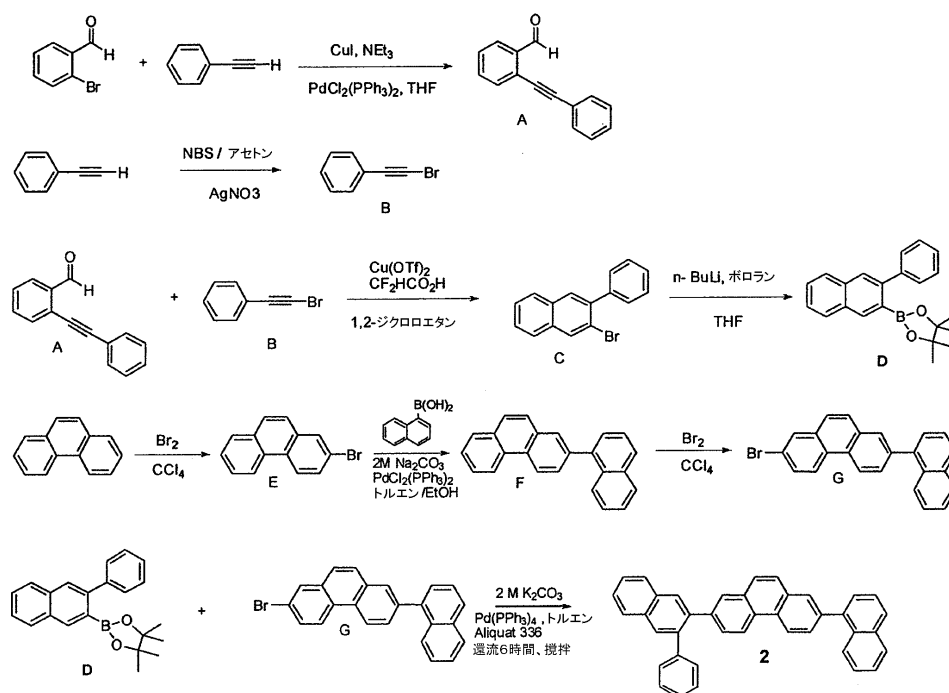
本発明による化合物、その製造方法、およびそれから製造された素子の電界発光特性に関して、本発明の代表的な化合物を参照することにより本発明がさらに説明されるが、これらは実施態様の例示のためだけに提供されるのであり、何らかの手段によって本発明の範囲を限定することを意図するものではない。

#### 【 0 1 4 4 】

製造例

[ 製造例 1 ] 化合物 2 の製造

【 化 8 6 】



#### 【 0 1 4 5 】

化合物 A の製造

2 - プロモベンズアルデヒド 25.0 g ( 140 mmol )、フェニルアセチレン 17.8 mL ( 162 mmol )、ジクロロビス(トリフェニルホスフィン)パラジウム ( II ) [  $\text{PdCl}_2(\text{PPh}_3)_2$  ] 2.8 g ( 4 mmol )、ヨウ化第一銅 [  $\text{CuI}$  ] 1.3 g ( 7 mmol )、およびトリエチルアミン 38 mL ( 270 mmol ) を、窒素雰囲気下でテトラヒドロフラン ( THF ) 670 mL に添加した後、その混合物を 80 で 3 時間還流下で攪拌した。反応混合物を蒸留水と酢酸エチルで洗浄し、カラムクロマトグラフィーで精製して、化合物 A 16.0 g ( 78 mmol ) を得た。

#### 【 0 1 4 6 】

## 化合物 B の製造

フェニルアセチレン 32.3 mL (294 mmol)、NBS (N-ブロモスクシンイミド) 58 g (323 mmol) および硝酸銀  $[AgNO_3]$  5.0 g (30 mmol) を、窒素雰囲気下でアセトンに添加した後、その混合物を 0 で攪拌した。反応終了後、n-ヘキサンをそれに添加し、混合物をろ過した。得られた固体を n-ヘキサンで 4 回洗浄し、化合物 B 16.0 g (93 mmol) を得た。

## 【0147】

## 化合物 C の製造

化合物 A 16.0 g (78 mmol)、トリフルオロメタンスルホン酸銅 (II)  $[Cu(OSO_2CF_3)_2]$  1.6 g (化合物 A の 1/10) および 1,2-ジクロロエタン 160 mL をフラスコに入れ、混合物を窒素雰囲気下に維持した。窒素雰囲気を維持しつつ、化合物 B 16.0 g (93 mmol)、ジフルオロ酢酸 5 mL、および 1,2-ジクロロエタン 160 mL を、別のフラスコに入れた。2つのフラスコの内容物を合わせ、得られた混合物を 100 で還流下、30 分間攪拌した。得られた化合物を蒸留水で洗浄した後、カラムクロマトグラフィーで精製し、化合物 C 7.3 g (26 mmol) を得た。

## 【0148】

## 化合物 D の製造

化合物 C 7.3 g (26 mmol) を THF 130 mL に溶かした後、それに n-ブチルリチウム 13.5 mL (33.8 mmol、ヘキサン中 2.5 M) を添加し、混合物を -78 で 1 時間攪拌した。1 時間後、2-イソプロポキシ-4,4,5,5-テトラメチル-1,3,2-ジオキサボロラン 7.9 mL (39 mmol) を添加し、得られた混合物を室温で 12 時間攪拌した。反応終了後、反応混合物を蒸留水と酢酸エチルで洗浄した。カラムクロマトグラフィーで精製して、化合物 D 4.8 g (14 mmol) を得た。

## 【0149】

## 化合物 E の製造

フェナントレン 10 g (0.056 mmol)、臭素 7.4 mL (0.15 mol) および  $CCl_4$  280 mL を反応容器に入れ、混合物を 100 以上の温度で還流下、4 時間攪拌した。反応終了後、チオ硫酸ナトリウム ( $Na_2S_2O_3$ ) 水溶液を添加し、得られた混合物を 1 時間攪拌した。混合物を酢酸エチルで抽出し、抽出物を蒸留水で 3 回洗浄した。このように得られた有機層を回転蒸発器で蒸発させ、カラムクロマトグラフィーで精製し、化合物 E 9 g (48%) を得た。

## 【0150】

## 化合物 F の製造

反応容器中で、化合物 E 8.3 g (0.025 mol)、2-ナフチルボロン酸 (2-naphthylboronic acid) 6.4 g (0.037 mol) およびテトラキス(トリフェニルホスフィン)パラジウム (0) ( $Pd[P(C_6H_5)_3]_4$ ) 0.9 g (0.001 mol) を窒素雰囲気下に保った。その後、2M  $Na_2CO_3$  溶液 50 mL とトルエン 130 mL とエタノール 65 mL をそれに添加し、混合物を 80 で還流下 12 時間攪拌した。反応終了後、反応混合物を酢酸エチルで抽出し、抽出物を蒸留水で 3 回洗浄した。このように得られた有機層を回転蒸発器で蒸発させ、カラムクロマトグラフィーで精製して、化合物 F 8 g (83.5%) を得た。

## 【0151】

## 化合物 G の製造

2-ブロモフェナントレン 6.3 g (0.021 mol) を、窒素雰囲気下で臭素 1.6 mL (0.31 mol) および  $CCl_4$  103 mL に添加して、混合物を 100 以上の温度で還流下 4 時間攪拌した。反応終了後、チオ硫酸ナトリウム ( $Na_2S_2O_3$ ) 水溶液をこれに添加し、混合物を 1 時間攪拌した。得られた混合物を酢酸エチルで抽出し、抽出物を蒸留水で 3 回洗浄した。このようにして得られた有機層を回転蒸発器で蒸

10

20

30

40

50

発させ、カラムクロマトグラフィーで精製して、化合物 G 5 g (62%) を得た。

#### 【0152】

##### 化合物 2 の製造

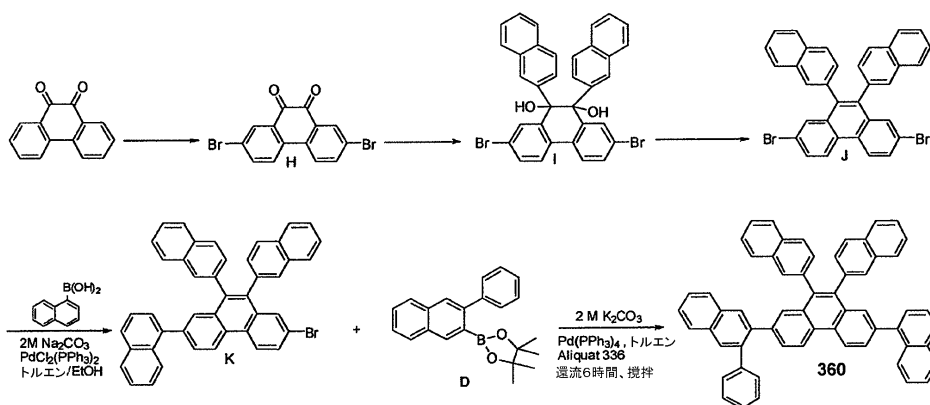
化合物 G 4.6 g (12 mmol)、化合物 D 4.8 g (14 mmol)、2 M 炭酸カリウム溶液 (18 mL)、およびテトラキス(トリフェニルホスフィン)パラジウム  $[Pd(PPh_3)_4]$  0.7 g (0.6 mmol) をトルエン 100 mL に添加した。それに Aliquat 336 (0.1 mL) を添加し、混合物を 80 で 12 時間還流下で攪拌した。このようにして得られた化合物を蒸留水と酢酸エチルで洗浄し、カラムクロマトグラフィーで精製して、目的化合物 (化合物 2) 3.2 g (5.5 mmol) を得た。

10

#### 【0153】

##### [製造例 2] 化合物 360 の製造

##### 【化 87】



20

#### 【0154】

##### 化合物 H の製造

9, 10 - フェナントレンキノン 7 g (0.0336 mol) にトリフルオロメタンスルホン酸 29.5 mL (0.33 mol) を 0 で徐々に添加した。温度を 0 に維持しながら、それに NBS 13.2 g (0.0742 mol) を徐々に添加した。次いで、反応混合物を常温に暖め、6 時間攪拌した。次いで、混合物を氷水に徐々に注ぎ、減圧下で濾過した。水とメタノールで洗浄し、化合物 H 10 g (81%) を得た。

30

#### 【0155】

##### 化合物 I の製造

2 - プロモナフタレン 16.9 g (0.0819 mol) を THF に溶かし、その溶液を -78 に冷却した。この溶液に n-BuLi (ヘキサン中 2.5 M) 28 mL を徐々に滴加した。30 分後、混合物を常温に暖め、さらに 30 分間攪拌した。化合物 H 10 g (0.0273 mol) を一度に添加して、混合物を常温で 12 時間攪拌した。酢酸エチル / 蒸留水で抽出後、抽出物を硫酸マグネシウム ( $MgSO_4$ ) で乾燥し、減圧下で濾過した。カラムクロマトグラフィーで精製して、固体の化合物 I 8 g (47%) を得た。

40

#### 【0156】

##### 化合物 J の製造

化合物 I 8 g (0.0129 mol) と酢酸 100 mL を還流下で加熱した。それに、亜鉛 12.3 g (0.194 mol) と HCl (35%, 50 mL) を徐々に添加した。30 分後、同じ量の Zn と HCl をそれにさらに添加した。還流下での 12 時間の加熱後、生成した固体はろ過され、 $Na_2CO_3$  (aq.) を添加することにより中和された。カラムクロマトグラフィーで精製し、固体の化合物 J 5 g (65.8%) を得た。

#### 【0157】

50

## 化合物 K の製造

化合物 J 5 g (8.5 mmol)、1-ナフタレンボロン酸 (1-naphthaleneboronic acid) 1.5 g (8.7 mmol)、 $\text{PdCl}_2(\text{PPh}_3)_2$  0.3 g (0.427 mmol)、2 M  $\text{K}_2\text{CO}_3$  溶液 12.5 mL、トルエン 40 mL、およびエタノール 20 mL を還流下 80 ° で 3 時間加熱した。反応終了後、反応混合物を酢酸エチル/蒸留水で抽出し、吸着カラムで精製し、固体の化合物 K 3 g (55.5%) を得た。

## 【0158】

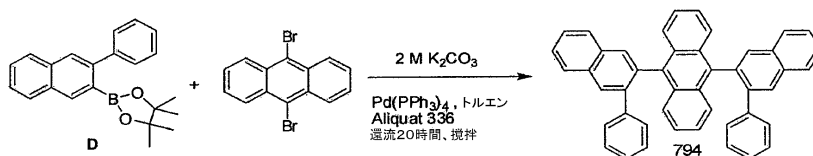
## 化合物 360 の製造

化合物 K 3 g (4.72 mmol)、化合物 D 2.3 g (9.27 mmol)、 $\text{Pd}(\text{PPh}_3)_4$  0.5 g (0.43 mmol)、2 M  $\text{K}_2\text{CO}_3$  (aq. 10 mL)、Aliquat 336 (0.05 mL)、トルエン 30 mL およびエタノール 15 mL を、還流下 90 ° で 6 時間加熱した。反応終了後、反応混合物を酢酸エチル/蒸留水で抽出し、吸着カラムで精製し、固体の目的化合物 (化合物 360) 1.8 g (50.2%) を得た。

## 【0159】

## [製造例 3] 化合物 794 の製造

## 【化 88】



## 【0160】

9,10-ジブロモアントラセン 4.6 g (12 mmol)、化合物 D 4.8 g (14 mmol)、2 M 炭酸カリウム溶液 (18 mL)、およびテトラキス(トリフェニルホスフィン)パラジウム [ $\text{Pd}(\text{PPh}_3)_4$ ] 0.7 g (0.6 mmol) を、窒素雰囲気下でトルエン 100 mL に添加した後、それに Aliquat 336 (0.1 mL) を添加した。得られた混合物を 80 ° で還流下 12 時間攪拌した。このようにして得られた化合物を、蒸留水と酢酸エチルで洗浄した後、カラムクロマトグラフィーで精製して、化合物 794 (3.2 g、5.5 mmol) を得た。

## 【0161】

前記製造例 1 乃至 3 と同様の手順に従って、有機電界発光化合物 (化合物 1 ~ 939) を製造した。その  $^1\text{H}$  NMR 及び MS/FAB データを表 1 に示す。

## 【0162】

【表 1】

表1

化合物 番号	<sup>1</sup> H NMR(CDCl <sub>3</sub> , 200 MHz)	MS/FAB	
		実測値	計算値
1	δ = 7.41(2H, m), 7.51~7.52(6H, m), 7.59(2H, m), 7.71(2H, m), 7.79(2H, m), 8(2H, m), 8.1(2H, m), 8.34(2H, m), 8.4(2H, m), 8.99(2H, m)	456.58	456.19
2	δ = 7.41(1H, m), 7.51~7.61(7H, m), 7.71(2H, m), 7.79(2H, m), 8~8.1(6H, m), 8.34(2H, m), 8.4~8.42(3H, m), 8.55(1H, m), 8.99(2H, m)	506.63	506.20
4	δ = 2.34(3H, s), 7.29~7.33(4H, m), 7.41(1H, m), 7.51(2H, m), 7.59(2H, m), 7.71(2H, m), 7.79(2H, m), 8(2H, m), 8.1(2H, m), 8.34(2H, m), 8.4(2H, m), 8.99(2H, m)	470.60	470.20
7	δ = 7.41(1H, m), 7.51(2H, m), 7.59(2H, m), 7.71(2H, m), 7.79~7.93(7H, m), 8(2H, m), 8.1~8.12(4H, m), 8.34(2H, m), 8.4(2H, m), 8.93(2H, m), 8.99(2H, m)	556.69	556.22
13	δ = 7.41(3H, m), 7.51~7.52(10H, m), 7.59(2H, m), 7.66~7.71(5H, m), 7.79(2H, m), 8(2H, m), 8.1(2H, m), 8.34(2H, m), 8.4(2H, m), 8.99(2H, m)	608.77	608.25
15	δ = 7.41(2H, m), 7.51(4H, m), 7.59(4H, m), 7.71(2H, m), 7.79(4H, m), 8(4H, m), 8.1(2H, m), 8.34(2H, m), 8.4(4H, m), 8.99(2H, m)	582.73	582.23
23	δ = 7.41(1H, m), 7.5~7.59(7H, m), 7.71(2H, m), 7.79~7.82(3H, m), 7.94~8(4H, m), 8.1(2H, m), 8.34(2H, m), 8.4~8.45(3H, m), 8.99(2H, m)	562.72	562.18
31	δ = 7.41(1H, m), 7.51(2H, m), 7.58~7.59(3H, m), 7.71(2H, m), 7.79~7.8(4H, m), 7.9~8(4H, m), 8.1(4H, m), 8.34(2H, m), 8.4~8.42(4H, m), 8.99(2H, m)	580.71	580.22
33	δ = 7.25~7.33(3H, m), 7.41(1H, m), 7.5~7.51(3H, m), 7.59~7.63(3H, m), 7.7(2H, m), 7.79(2H, m), 7.9~8(4H, m), 8.1~8.12(3H, m), 8.3(1H, m), 8.4(2H, m), 8.55(1H, m), 8.9(1H, m), 9(1H, m)	545.67	545.21

10

20

30

【 0 1 6 3 】

【表 2】

表1の続き

39	$\delta = 1.96(2H, m), 2.76(2H, m), 3.06(2H, m), 6.55(1H, m), 6.72(1H, m), 7.05\sim 7.07(3H, m), 7.29(1H, m), 7.41(1H, m), 7.51(2H, m), 7.59(2H, m), 7.71(2H, m), 7.79(2H, m), 8(2H, m), 8.1(1H, m), 8.34(1H, m), 8.4(2H, m), 8.71(1H, m), 8.99(1H, m)$	511.65	511.23
48	$\delta = 6.97(2H, m), 7.08(1H, m), 7.16\sim 7.21(6H, m), 7.32(1H, m), 7.41(1H, m), 7.51(2H, m), 7.59(2H, m), 7.71(2H, m), 7.79(2H, m), 8(2H, m), 8.1(1H, m), 8.34(1H, m), 8.4(2H, m), 8.68(1H, m), 8.99(1H, m)$	577.74	577.19
52	$\delta = 2.88(4H, m), 6.58(2H, m), 6.76(2H, m), 7.02\sim 7.08(5H, m), 7.32(1H, m), 7.41(1H, m), 7.51(2H, m), 7.59(2H, m), 7.71(2H, m), 7.79(2H, m), 8(2H, m), 8.1(1H, m), 8.34(1H, m), 8.4(2H, m), 8.68(1H, m), 8.99(1H, m)$	573.72	573.25
56	$\delta = 7.36\sim 7.42(4H, m), 7.48\sim 7.51(3H, m), 7.59(2H, m), 7.71\sim 7.84(9H, m), 8\sim 8.12(7H, m), 8.34(2H, m), 8.4(2H, m), 8.99(2H, m)$	638.73	638.22
70	$\delta = 7.41\sim 7.51(13H, m), 7.59(2H, m), 7.71\sim 7.79(5H, m), 7.89(1H, m), 8(2H, m), 8.1(2H, m), 8.28(1H, m), 8.34(2H, m), 8.4(2H, m), 8.99(2H, m)$	660.80	660.26
72	$\delta = 6.63(4H, m), 6.69(2H, m), 6.81(2H, m), 7.2(4H, m), 7.41(1H, m), 7.51\sim 7.59(6H, m), 7.71(2H, m), 7.79(2H, m), 8(2H, m), 8.1(2H, m), 8.34(2H, m), 8.4(2H, m), 8.99(2H, m)$	623.78	623.26
74	$\delta = 6.63(2H, m), 6.81(1H, m), 7.08(1H, m), 7.2(2H, m), 7.32\sim 7.41(3H, m), 7.49\sim 7.51(4H, m), 7.59(2H, m), 7.71\sim 7.88(8H, m), 8(2H, m), 8.1(1H, m), 8.34(1H, m), 8.4(2H, m), 8.68(1H, m), 8.99(1H, m)$	597.74	597.25
77	$\delta = 1.72(6H, s), 6.58(1H, m), 6.75(1H, m), 7.08(1H, m), 7.28\sim 7.41(5H, m), 7.49\sim 7.62(8H, m), 7.71\sim 7.88(9H, m), 8(2H, m), 8.1(1H, m), 8.34(1H, m), 8.4(2H, m), 8.68(1H, m), 8.99(1H, m)$	713.90	713.31
79	$\delta = 7.25(4H, m), 7.41(1H, m), 7.51\sim 7.61(7H, m), 7.71(2H, m), 7.79(2H, m), 8\sim 8.1(6H, m), 8.34(2H, m), 8.4\sim 8.42(3H, m), 8.55(1H, m), 8.99(2H, m)$	582.73	582.23
80	$\delta = 7.25(4H, m), 7.41(1H, m), 7.51(2H, m), 7.58\sim 7.59(5H, m), 7.71\sim 7.79(5H, m), 7.92(1H, m), 8(4H, m), 8.1(2H, m), 8.34(2H, m), 8.4(2H, m), 8.99(2H, m)$	582.73	582.23
82	$\delta = 7.25(4H, m), 7.41(1H, m), 7.51(2H, m), 7.59(2H, m), 7.71(2H, m), 7.79\sim 7.93(7H, m), 8(2H, m), 8.1\sim 8.12(4H, m), 8.34(2H, m), 8.4(2H, m), 8.93(2H, m), 8.99(2H, m)$	632.79	632.25

【 0 1 6 4 】

10

20

30

40

【表 3】

表1の続き

85	$\delta = 7.39\sim 7.41(5H, m), 7.51(2H, m), 7.59(2H, m), 7.71(2H, m), 7.79\sim 7.93(11H, m), 8(2H, m), 8.1\sim 8.12(4H, m), 8.34(2H, m), 8.4(2H, m), 8.93(2H, m), 8.99(2H, m)$	732.91	732.28
100	$\delta = 7.41(2H, m), 7.51\sim 7.59(8H, m), 7.71(2H, m), 7.79(4H, m), 8\sim 8.01(4H, m), 8.1(2H, m), 8.34(2H, m), 8.4(2H, m), 8.55(2H, m), 8.99(2H, m)$	582.73	582.23
106	$\delta = 1.72(6H, s), 7.41(2H, m), 7.51\sim 7.52(6H, m), 7.59\sim 7.63(4H, m), 7.71\sim 7.79(6H, m), 7.93(2H, m), 8(2H, m), 8.1(2H, m), 8.34(2H, m), 8.4(2H, m), 8.99(2H, m)$	648.83	648.28
110	$\delta = 7.41(1H, m), 7.48\sim 7.51(4H, m), 7.57\sim 7.59(3H, m), 7.7\sim 7.71(3H, m), 7.79\sim 7.93(7H, m), 8(2H, m), 8.1\sim 8.12(4H, m), 8.34(2H, m), 8.4(2H, m), 8.93(2H, m), 8.99(2H, m)$	632.79	632.25
113	$\delta = 7.37\sim 7.59(22H, m), 7.71(2H, m), 7.79(2H, m), 7.89(2H, m), 8(2H, m), 8.1(2H, m), 8.34(2H, m), 8.4(2H, m), 8.99(2H, m)$	714.97	714.27
114	$\delta = 7.39\sim 7.41(6H, m), 7.48\sim 7.59(11H, m), 7.7\sim 7.71(3H, m), 7.79(2H, m), 7.91(4H, m), 8(2H, m), 8.1(2H, m), 8.34(2H, m), 8.4(2H, m), 8.99(2H, m)$	708.89	708.28
115	$\delta = 7.41(1H, m), 7.51\sim 7.64(7H, m), 7.71\sim 7.84(10H, m), 8(2H, m), 8.1(2H, m), 8.34(2H, m), 8.4(2H, m), 8.99(2H, m)$	560.68	560.21
117	$\delta = 1.72(6H, s), 6.63(2H, m), 6.69(2H, m), 6.81(1H, m), 7.08(1H, m), 7.2(2H, m), 7.28\sim 7.41(4H, m), 7.51\sim 7.63(8H, m), 7.71\sim 7.79(5H, m), 7.87\sim 7.93(2H, m), 8(2H, m), 8.1(1H, m), 8.34(1H, m), 8.4(2H, m), 8.68(1H, m), 8.99(1H, m)$	739.94	739.32
121	$\delta = 7.41(4H, m), 7.51\sim 7.52(12H, m), 7.59(2H, m), 7.66(3H, m), 7.79(4H, m), 7.93(1H, m), 8(2H, m), 8.1(2H, m), 8.34(2H, m), 8.4(2H, m), 8.99(2H, m)$	684.86	684.28
131	$\delta = 7.41(2H, m), 7.51(4H, m), 7.59(2H, m), 7.79\sim 7.93(10H, m), 8(2H, m), 8.1\sim 8.12(4H, m), 8.34(2H, m), 8.4(2H, m), 8.93(2H, m), 8.99(2H, m)$	632.79	632.25
156	$\delta = 7.41\sim 7.59(14H, m), 7.79(4H, m), 7.93(1H, m), 8(2H, m), 8.1(2H, m), 8.2(2H, m), 8.3\sim 8.34(6H, m), 8.4(2H, m), 8.99(2H, m)$	685.85	685.28
160	$\delta = 7.41(2H, m), 7.51(4H, m), 7.59(2H, m), 7.79\sim 7.93(9H, m), 8\sim 8.04(3H, m), 8.1\sim 8.12(4H, m), 8.18(1H, m), 8.34(2H, m), 8.4(2H, m), 8.93(2H, m), 8.99(2H, m), 9.15(1H, m)$	682.85	682.27

【 0 1 6 5 】

10

20

30

40



【表 4】

表1の続き

173	$\delta = 7.25(4H, m), 7.41(2H, m), 7.51(4H, m), 7.59(2H, m), 7.79\sim 7.93(10H, m), 8(2H, m), 8.1\sim 8.12(4H, m), 8.34(2H, m), 8.4(2H, m), 8.93(2H, m), 8.99(2H, m)$	708.89	708.28
179	$\delta = 1.72(6H, s), 7.28(1H, m), 7.38\sim 7.41(7H, m), 7.51\sim 7.63(8H, m), 7.77\sim 7.79(5H, m), 7.87\sim 7.93(7H, m), 8(2H, m), 8.1(2H, m), 8.34(2H, m), 8.4(2H, m), 8.99(2H, m)$	825.04	824.34
182	$\delta = 7.41(2H, m), 7.48\sim 7.51(6H, m), 7.57\sim 7.59(6H, m), 7.7\sim 7.79(6H, m), 7.92\sim 7.93(2H, m), 8(4H, m), 8.1(2H, m), 8.34(2H, m), 8.4(2H, m), 8.99(2H, m)$	658.83	658.27
193	$\delta = 7.41(3H, m), 7.51(6H, m), 7.59\sim 7.61(4H, m), 7.79(6H, m), 7.93(1H, m), 8(2H, m), 8.1(2H, m), 8.34(2H, m), 8.4\sim 8.42(4H, m), 8.51(2H, m), 8.99(2H, m)$	658.83	658.27
202	$\delta = 6.63(4H, m), 6.81(2H, m), 7.08(1H, m), 7.2(4H, m), 7.32(1H, m), 7.41(2H, m), 7.51(4H, m), 7.59(2H, m), 7.79(4H, m), 7.93(1H, m), 8(2H, m), 8.1(1H, m), 8.34(1H, m), 8.4(2H, m), 8.68(1H, m), 8.99(1H, m)$	623.78	623.26
206	$\delta = 7.25(4H, m), 7.39\sim 7.41(7H, m), 7.51\sim 7.52(8H, m), 7.59(2H, m), 7.79(4H, m), 7.91\sim 7.93(5H, m), 8(2H, m), 8.1(2H, m), 8.34(2H, m), 8.4(2H, m), 8.99(2H, m)$	784.98	784.31
208	$\delta = 7.11(6H, m), 7.26\sim 7.33(13H, m), 7.41(2H, m), 7.51(4H, m), 7.59(2H, m), 7.79(4H, m), 7.93(1H, m), 8(2H, m), 8.1(2H, m), 8.34(2H, m), 8.4(2H, m), 8.99(2H, m)$	774.99	774.33
214	$\delta = 7.41(4H, m), 7.51\sim 7.52(12H, m), 7.59(4H, m), 7.79(4H, m), 8(4H, m), 8.1(2H, m), 8.34(2H, m), 8.4(4H, m), 8.99(2H, m)$	734.92	734.30
217	$\delta = 7.41(3H, m), 7.51\sim 7.61(15H, m), 7.79(2H, m), 8\sim 8.1(6H, m), 8.34(2H, m), 8.4\sim 8.42(3H, m), 8.55(1H, m), 8.99(2H, m)$	658.83	658.27
230	$\delta = 7.32\sim 7.44(6H, m), 7.51\sim 7.52(10H, m), 7.59\sim 7.66(4H, m), 7.75\sim 7.79(3H, m), 7.89(1H, m), 8(2H, m), 8.1(2H, m), 8.34(2H, m), 8.4(2H, m), 8.99(2H, m)$	698.85	698.26
248	$\delta = 7.36\sim 7.42(6H, m), 7.48\sim 7.52(11H, m), 7.59(2H, m), 7.74\sim 7.84(7H, m), 8\sim 8.12(7H, m), 8.34(2H, m), 8.4(2H, m), 8.99(2H, m)$	790.93	790.28
256	$\delta = 1.72(6H, s), 6.58\sim 6.63(5H, m), 6.75\sim 6.81(3H, m), 7.2(4H, m), 7.41(3H, m), 7.51\sim 7.52(10H, m), 7.59\sim 7.63(4H, m), 7.77\sim 7.79(3H, m), 7.93(1H, m), 8(2H, m), 8.1(2H, m), 8.34(2H, m), 8.4(2H, m), 8.99(2H, m)$	892.13	891.39

10

20

30

【表 5】

表1の続き

266	$\delta = 7.39\sim 7.41(7H, m), 7.51\sim 7.61(15H, m), 7.79(2H, m), 7.91(4H, m), 8\sim 8.1(6H, m), 8.34(2H, m), 8.4\sim 8.42(3H, m), 8.55(1H, m), 8.99(2H, m)$	835.04	834.33
273	$\delta = 7.41(3H, m), 7.48\sim 7.61(18H, m), 7.7(1H, m), 7.79(2H, m), 8\sim 8.1(6H, m), 8.34(2H, m), 8.4\sim 8.42(3H, m), 8.55(1H, m), 8.99(2H, m)$	734.92	734.30
281	$\delta = 7.41(4H, m), 7.51\sim 7.59(16H, m), 7.79(4H, m), 8\sim 8.01(4H, m), 8.1(2H, m), 8.34(2H, m), 8.4(2H, m), 8.55(2H, m), 8.99(2H, m)$	734.92	734.30
293	$\delta = 7.11(6H, m), 7.26\sim 7.33(13H, m), 7.41(3H, m), 7.51\sim 7.52(10H, m), 7.59(2H, m), 7.79(2H, m), 8(2H, m), 8.1(2H, m), 8.34(2H, m), 8.4(2H, m), 8.99(2H, m)$	851.08	850.36
297	$\delta = 7.25(4H, m), 7.39\sim 7.41(8H, m), 7.51\sim 7.52(14H, m), 7.59(2H, m), 7.79(2H, m), 7.91(4H, m), 8(2H, m), 8.1(2H, m), 8.34(2H, m), 8.4(2H, m), 8.99(2H, m)$	861.08	860.34
302	$\delta = 7.41(1H, m), 7.51\sim 7.61(10H, m), 7.73\sim 7.79(3H, m), 7.92\sim 7.93(2H, m), 8\sim 8.1(8H, m), 8.34(2H, m), 8.4\sim 8.42(3H, m), 8.55(1H, m), 8.99(2H, m)$	632.79	632.25
313	$\delta = 7.25\sim 7.33(3H, m), 7.41(1H, m), 7.5\sim 7.51(3H, m), 7.58\sim 7.79(13H, m), 7.92\sim 8(7H, m), 8.1\sim 8.12(3H, m), 8.34(2H, m), 8.4(2H, m), 8.55(1H, m), 8.99(2H, m)$	747.92	747.29
320	$\delta = 7.25(4H, m), 7.41(1H, m), 7.51\sim 7.61(10H, m), 7.73\sim 7.79(3H, m), 7.92\sim 7.93(2H, m), 8\sim 8.1(8H, m), 8.34(2H, m), 8.4\sim 8.42(3H, m), 8.55(1H, m), 8.99(2H, m)$	708.89	708.28
339	$\delta = 7.41(2H, m), 7.51(4H, m), 7.58\sim 7.61(7H, m), 7.73\sim 7.79(5H, m), 7.92\sim 7.93(2H, m), 8(4H, m), 8.1(2H, m), 8.34(2H, m), 8.4\sim 8.42(4H, m), 8.51(2H, m), 8.99(2H, m)$	708.89	708.28
351	$\delta = 1.72(6H, s), 6.63(2H, m), 6.69(2H, m), 6.81(1H, m), 7.08(1H, m), 7.2(2H, m), 7.28\sim 7.41(4H, m), 7.51\sim 7.63(11H, m), 7.73\sim 7.79(4H, m), 7.87\sim 7.93(4H, m), 8(4H, m), 8.1(1H, m), 8.34(1H, m), 8.4(2H, m), 8.68(1H, m), 8.99(1H, m)$	866.10	865.37
355	$\delta = 7.41(3H, m), 7.51\sim 7.52(10H, m), 7.58\sim 7.59(8H, m), 7.66(3H, m), 7.73\sim 7.79(4H, m), 7.92(2H, m), 8(6H, m), 8.1(2H, m), 8.34(2H, m), 8.4(2H, m), 8.99(2H, m)$	861.08	860.34
358	$\delta = 7.21(1H, m), 7.41(3H, m), 7.51(6H, m), 7.58\sim 7.59(8H, m), 7.73\sim 7.79(9H, m), 7.91\sim 7.92(3H, m), 8(6H, m), 8.1(2H, m), 8.34(2H, m), 8.4(2H, m), 8.99(2H, m)$	861.08	860.34

10

20

30

【表 6】

表1の続き

360	$\delta = 7.41(1H, m), 7.51\sim 7.61(13H, m), 7.73\sim 7.79(4H, m), 7.92(2H, m), 8\sim 8.1(10H, m), 8.34(2H, m), 8.4\sim 8.42(3H, m), 8.55(1H, m), 8.99(2H, m)$	758.94	758.30
372	$\delta = 7.41(1H, m), 7.5\sim 7.59(13H, m), 7.73\sim 7.82(5H, m), 7.92\sim 8(10H, m), 8.1(2H, m), 8.34(2H, m), 8.4\sim 8.45(3H, m), 8.99(2H, m)$	815.03	814.27
374	$\delta = 7.41(1H, m), 7.5\sim 7.52(4H, m), 7.58\sim 7.59(9H, m), 7.73\sim 7.79(4H, m), 7.92(2H, m), 7.98\sim 8(7H, m), 8.1(2H, m), 8.2(1H, m), 8.34(2H, m), 8.4\sim 8.45(4H, m), 8.99(2H, m)$	815.03	814.27
383	$\delta = 2.34(3H, m), 6.51(2H, m), 6.98(2H, m), 7.08(1H, m), 7.32\sim 7.41(3H, m), 7.49\sim 7.51(4H, m), 7.58\sim 7.59(8H, m), 7.73\sim 7.92(10H, m), 8(6H, m), 8.1(1H, m), 8.34(1H, m), 8.4(2H, m), 8.68(1H, m), 8.99(1H, m)$	864.08	863.36
393	$\delta = 7.37\sim 7.59(32H, m), 7.79(2H, m), 7.89(2H, m), 8(2H, m), 8.1(2H, m), 8.34(2H, m), 8.4(2H, m), 8.99(2H, m)$	867.16	866.34
398	$\delta = 7.41(1H, m), 7.51\sim 7.64(13H, m), 7.73\sim 7.84(10H, m), 7.92(2H, m), 8(6H, m), 8.1(2H, m), 8.34(2H, m), 8.4(2H, m), 8.99(2H, m)$	812.99	812.31
403	$\delta = 1.72(6H, s), 7.28(1H, m), 7.38\sim 7.41(3H, m), 7.51\sim 7.63(10H, m), 7.77\sim 7.79(5H, m), 7.87\sim 7.93(3H, m), 8(4H, m), 8.1(2H, m), 8.34(2H, m), 8.4(4H, m), 8.99(2H, m)$	774.99	774.33
407	$\delta = 1.72(6H, s), 7.21(1H, m), 7.28(1H, m), 7.38\sim 7.41(4H, m), 7.51\sim 7.63(10H, m), 7.76\sim 7.79(8H, m), 7.87\sim 7.93(4H, m), 8(2H, m), 8.1(2H, m), 8.34(2H, m), 8.4(2H, m), 8.99(2H, m)$	801.02	800.34
413	$\delta = 1.72(6H, s), 7.28(1H, m), 7.38\sim 7.41(2H, m), 7.51\sim 7.63(6H, m), 7.77\sim 7.93(11H, m), 8(2H, m), 8.1\sim 8.12(4H, m), 8.34(2H, m), 8.4(2H, m), 8.93(2H, m), 8.99(2H, m)$	748.95	748.31
424	$\delta = 1.72(12H, s), 7.28(2H, m), 7.38\sim 7.41(3H, m), 7.51\sim 7.63(11H, m), 7.73\sim 7.79(5H, m), 7.87\sim 7.93(5H, m), 8(4H, m), 8.1(2H, m), 8.34(2H, m), 8.4(2H, m), 8.99(2H, m)$	891.15	890.39
431	$\delta = 1.35(9H, s), 1.72(12H, s), 7.28(2H, m), 7.37\sim 7.41(7H, m), 7.51\sim 7.63(8H, m), 7.77\sim 7.79(4H, m), 7.87\sim 7.93(4H, m), 8(2H, m), 8.1(2H, m), 8.34(2H, m), 8.4(2H, m), 8.99(2H, m)$	897.19	896.44
440	$\delta = 7.41(1H, m), 7.51\sim 7.61(10H, m), 7.73\sim 7.79(3H, m), 7.92\sim 7.93(2H, m), 8\sim 8.1(8H, m), 8.34(2H, m), 8.4\sim 8.42(3H, m), 8.55(1H, m), 8.99(2H, m)$	632.79	632.25

【 0 1 6 8 】

10

20

30

40

【表 7】

表1の続き

452	$\delta = 1.72(6H, s), 7.28(1H, m), 7.38\sim 7.41(2H, m), 7.51\sim 7.63(12H, m), 7.77\sim 7.79(3H, m), 7.87\sim 7.93(2H, m), 8\sim 8.1(8H, m), 8.34(2H, m), 8.4\sim 8.42(4H, m), 8.55(2H, m), 8.99(2H, m)$	835.04	824.34
456	$\delta = 2.34(6H, s), 7.31(1H, m), 7.41(1H, m), 7.51\sim 7.61(12H, m), 7.79(2H, m), 8\sim 8.1(8H, m), 8.34(2H, m), 8.4\sim 8.42(4H, m), 8.55(2H, m), 8.99(2H, m)$	736.94	736.31
464	$\delta = 7.41(1H, m), 7.51\sim 7.61(7H, m), 7.79\sim 7.93(8H, m), 8\sim 8.12(6H, m), 8.4\sim 8.42(3H, m), 8.55(1H, m)$	530.66	530.20
465	$\delta = 7.41(1H, m), 7.51(2H, m), 7.59(2H, m), 7.79\sim 7.93(13H, m), 8(2H, m), 8.12(4H, m), 8.4(2H, m), 8.93(2H, m)$	580.71	580.22
478	$\delta = 7.25\sim 7.33(3H, m), 7.41(1H, m), 7.5\sim 7.51(3H, m), 7.59\sim 7.63(3H, m), 7.7(1H, m), 7.79\sim 7.8(4H, m), 7.9\sim 8(6H, m), 8.1\sim 8.12(3H, m), 8.4(2H, m), 8.55(1H, m)$	569.69	569.21
491	$\delta = 7.39\sim 7.41(6H, m), 7.51(4H, m), 7.59\sim 7.61(4H, m), 7.79(4H, m), 7.91\sim 8(6H, m), 8.4(2H, m)$	530.66	530.20
497	$\delta = 2.34(6H, s), 7.31(1H, m), 7.39\sim 7.41(5H, m), 7.51(2H, m), 7.59\sim 7.61(6H, m), 7.79(2H, m), 7.91\sim 8(6H, m), 8.4(2H, m)$	558.71	558.23
506	$\delta = 7.41(2H, m), 7.51\sim 7.52(6H, m), 7.59(2H, m), 7.79\sim 7.81(3H, m), 8(2H, m), 8.06(1H, m), 8.22(2H, m), 8.4(2H, m), 8.57(2H, m)$	458.55	458.18
514	$\delta = 2.34(6H, s), 7.31(1H, m), 7.41(1H, m), 7.51(2H, m), 7.59\sim 7.6(4H, m), 7.79\sim 7.81(3H, m), 8(2H, m), 8.06(1H, m), 8.22(2H, m), 8.4(2H, m), 8.57(2H, m)$	486.61	486.21
518	$\delta = 7.41(3H, m), 7.51\sim 7.52(10H, m), 7.59(2H, m), 7.66(3H, m), 7.79\sim 7.81(3H, m), 8(2H, m), 8.06(1H, m), 8.22(2H, m), 8.4(2H, m), 8.57(2H, m)$	610.74	610.24
523	$\delta = 1.72(6H, s), 7.41(1H, m), 7.51\sim 7.63(9H, m), 7.77\sim 7.79(4H, m), 7.93(2H, m), 8\sim 8.08(4H, m), 8.4\sim 8.42(3H, m), 8.55(1H, m)$	522.68	522.23
533	$\delta = 1.72(12H, s), 7.41(2H, m), 7.51\sim 7.52(6H, m), 7.59\sim 7.63(3H, m), 7.69(2H, s), 7.69(0H, m), 7.77(2H, s), 7.77\sim 7.83(3H, m), 7.93(1H, m), 8(2H, m), 8.15(1H, m), 8.4(2H, m)$	588.78	588.28
536	$\delta = 1.72(12H, s), 7.41(1H, m), 7.51\sim 7.63(8H, m), 7.69(2H, s), 7.69(0H, m), 7.77(2H, s), 7.77\sim 7.83(3H, m), 7.93(1H, m), 8\sim 8.08(4H, m), 8.15(1H, m), 8.4\sim 8.42(3H, m), 8.55(1H, m)$	638.84	638.30
553	$\delta = 2.34(6H, s), 7.19(1H, m), 7.31(1H, m), 7.41(1H, m), 7.48\sim 7.51(3H, m), 7.58\sim 7.63(6H, m), 7.79\sim 7.8(4H, m), 7.9\sim 8(4H, m), 8.4(2H, m)$	508.65	508.22

10

20

30

40

【表 8】

表1の続き

560	$\delta = 7.19\sim 7.25(5H, m), 7.41\sim 7.52(11H, m), 7.58\sim 7.63(4H, m), 7.79\sim 8(10H, m), 8.4(2H, m)$	632.79	632.25
564	$\delta = 7.41(1H, m), 7.51\sim 7.61(7H, m), 7.79\sim 7.88(4H, m), 8\sim 8.12(7H, m), 8.18(1H, m), 8.34(1H, m), 8.4\sim 8.42(3H, m), 8.55(1H, m), 8.93(1H, m), 8.99(1H, m), 9.15(1H, m)$	556.59	556.22
571	$\delta = 7.25(4H, m), 7.41(1H, m), 7.51\sim 7.61(7H, m), 7.79\sim 7.88(4H, m), 8\sim 8.12(7H, m), 8.18(1H, m), 8.34(1H, m), 8.4\sim 8.42(3H, m), 8.55(1H, m), 8.93(1H, m), 8.99(1H, m), 9.15(1H, m)$	632.79	632.25
573	$\delta = 7.41(1H, m), 7.51(2H, m), 7.58\sim 7.59(5H, m), 7.73\sim 7.92(8H, m), 7.93(1H, s), 8(4H, m), 8.12(2H, m), 8.4(2H, m), 8.93(2H, m), 9.15(1H, s)$	556.69	556.22
576	$\delta = 7.41(3H, m), 7.51\sim 7.52(10H, m), 7.59(2H, m), 7.66(3H, m), 7.79\sim 7.88(6H, m), 7.93(1H, s), 8(2H, m), 8.12(2H, m), 8.4(2H, m), 8.93(2H, m), 9.15(1H, s)$	658.83	658.27
591	$\delta = 7.39\sim 7.41(5H, m), 7.51(2H, m), 7.59(2H, m), 7.79\sim 7.93(11H, m), 8(2H, m), 8.12(2H, m), 8.31(2H, m), 8.4(2H, m), 8.93(2H, m)$	606.75	606.23
598	$\delta = 7.39\sim 7.41(6H, m), 7.51(4H, m), 7.59(4H, m), 7.79(4H, m), 7.91(4H, m), 8(4H, m), 8.31(2H, m), 8.4(4H, m)$	632.79	632.25
608	$\delta = 7.39\sim 7.41(4H, m), 7.51(2H, m), 7.58\sim 7.59(5H, m), 7.73\sim 7.92(9H, m), 8(4H, m), 8.12(1H, m), 8.4(2H, m), 8.93(1H, m)$	556.69	556.22
621	$\delta = 7.41(1H, m), 7.51(2H, m), 7.58\sim 7.59(7H, m), 7.73\sim 7.92(10H, m), 8(4H, m), 8.4(2H, m)$	530.66	530.20
630	$\delta = 7.21(1H, m), 7.41(3H, m), 7.51(6H, m), 7.58\sim 7.59(4H, m), 7.76\sim 7.91(14H, m), 8(2H, m), 8.4(2H, m)$	632.79	632.25
637	$\delta = 7.39\sim 7.41(3H, m), 7.51(2H, m), 7.58\sim 7.59(5H, m), 7.73\sim 7.92(10H, m), 8(4H, m), 8.12(2H, m), 8.4(2H, m), 8.93(2H, m)$	606.75	606.23
638	$\delta = 7.39\sim 7.41(3H, m), 7.51(2H, m), 7.59(2H, m), 7.79\sim 7.93(13H, m), 8(2H, m), 8.12(4H, m), 8.4(2H, m), 8.93(4H, m)$	656.81	656.25
653	$\delta = 7.41\sim 7.51(6H, m), 7.58\sim 7.59(7H, m), 7.69\sim 7.79(6H, m), 7.87\sim 7.92(2H, m), 8(5H, m), 8.18(1H, m), 8.4(2H, m)$	571.71	571.23
658	$\delta = 7.41(1H, m), 7.51(2H, m), 7.58\sim 7.59(5H, m), 7.73\sim 7.79(3H, m), 7.86\sim 7.92(3H, m), 8(8H, m), 8.4(2H, m)$	512.66	512.16

【 0 1 7 0 】

10

20

30

【表 9】

表1の続き

660	$\delta = 7.36 \sim 7.41 (4H, m), 7.48 \sim 7.52 (8H, m), 7.59 (2H, m), 7.78 \sim 7.79 (5H, m), 8 \sim 8.08 (6H, m), 8.4 (2H, m)$	538.62	538.19
667	$\delta = 7.41 (1H, m), 7.51 (2H, m), 7.59 (2H, m), 7.71 \sim 7.72 (4H, m), 7.79 \sim 7.93 (9H, m), 8 (2H, m), 8.12 (2H, m), 8.4 (2H, m), 8.93 (2H, m)$	546.66	546.20
670	$\delta = 1.3 (4H, m), 1.45 (4H, m), 7.41 (1H, m), 7.51 (2H, m), 7.58 \sim 7.59 (7H, m), 7.73 \sim 7.85 (7H, m), 7.92 (1H, m), 8 (4H, m), 8.4 (2H, m)$	564.79	564.23
672	$\delta = 7.39 \sim 7.41 (4H, m), 7.51 \sim 7.52 (6H, m), 7.58 \sim 7.59 (8H, m), 7.73 \sim 7.79 (4H, m), 7.91 \sim 7.92 (4H, m), 8 (6H, m), 8.1 (2H, m), 8.34 (2H, m), 8.4 (2H, m), 8.99 (2H, m)$	809.00	808.31
686	$\delta = 2.88 (4H, m), 6.63 (2H, m), 6.76 \sim 6.84 (5H, m), 7.1 (2H, m), 7.2 (2H, m), 7.41 (1H, m), 7.51 (2H, m), 7.58 \sim 7.59 (5H, m), 7.73 \sim 7.79 (3H, m), 7.92 (1H, m), 8 (4H, m), 8.4 (2H, m)$	599.76	599.26
693	$\delta = 7.41 (4H, m), 7.51 (8H, m), 7.59 (8H, m), 7.71 (4H, m), 7.79 (8H, m), 8 (8H, m), 8.26 (2H, s), 8.4 (8H, m)$	1011.25	1010.39
694	$\delta = 6.63 (2H, s), 6.81 (1H, m), 6.89 (2H, m), 6.99 \sim 7 (4H, m), 7.2 (2H, m), 7.31 (2H, m), 7.41 (1H, m), 7.51 (2H, m), 7.58 \sim 7.59 (5H, m), 7.73 \sim 7.79 (3H, m), 7.92 (1H, m), 8 (4H, m), 8.4 (2H, m)$	597.75	597.25
695	$\delta = 7.41 (2H, m), 7.51 \sim 7.52 (6H, m), 7.59 (2H, m), 7.71 (4H, m), 7.79 (2H, m), 8 (2H, m), 8.1 (4H, m), 8.34 (4H, m), 8.4 (2H, m), 8.99 (4H, m)$	632.79	632.25
699	$\delta = 7.25 (4H, m), 7.41 (1H, m), 7.51 (2H, m), 7.58 \sim 7.59 (7H, m), 7.71 \sim 7.79 (7H, m), 7.92 (3H, m), 8 (4H, m), 8.1 (2H, m), 8.34 (2H, m), 8.4 (2H, m), 8.99 (2H, m)$	708.89	708.28
701	$\delta = 7.41 (1H, m), 7.51 (2H, m), 7.59 (2H, m), 7.71 (8H, m), 7.79 \sim 7.88 (4H, m), 8 (2H, m), 8.1 \sim 8.12 (8H, m), 8.34 (7H, m), 8.4 (2H, m), 8.93 (1H, m), 8.99 (7H, m)$	909.12	908.34
702	$\delta = 7.4 (6H, m), 7.5 (6H, m), 7.6 (2H, m), 7.8 (2H, m), 7.9 (4H, m), 8.0 (2H, m), 8.4 (2H, m)$	456.58	456.19

10

20

30

40

【 0 1 7 1 】

【表 10】

表1の続き

703	$\delta = 7.4(5H, m), 7.5(2H, m), 7.6(5H, m), 7.7(1H, m), 7.8(2H, m), 7.9(5H, m), 8.0(4H, m), 8.4(2H, m)$	506.63	506.20
704	$\delta = 1.7(6H, s), 7.3(1H, m), 7.4(6H, m), 7.5(2H, m), 7.6(4H, m), 7.8(3H, m), 7.9(6H, m), 8.0(2H, m), 8.4(2H, m)$	572.74	572.25
705	$\delta = 7.3(4H, m), 7.4(6H, m), 7.5(8H, m), 7.6(2H, m), 7.8(2H, m), 7.9(6H, m), 8.0(2H, m), 8.4(2H, m)$	608.77	608.25
706	$\delta = 7.3(4H, m), 7.4(6H, m), 7.5(6H, m), 7.6(2H, m), 7.8(2H, m), 7.9(4H, m), 8.0(2H, m), 8.4(2H, m)$	532.67	532.22
707	$\delta = 7.4(5H, m), 7.5(2H, m), 7.6(2H, m), 7.8(4H, m), 7.9(7H, m), 8.0(2H, m), 8.1(2H, m), 8.4(2H, m), 8.9(2H, m)$	566.69	566.22
708	$\delta = 2.3(6H, m), 7.3(1H, m), 7.4(5H, m), 7.5(2H, m), 7.6(4H, m), 7.8(2H, m), 7.9(4H, m), 8.0(2H, m), 8.4(2H, m)$	484.63	484.22
709	$\delta = 7.4(7H, m), 7.5(10H, m), 7.6(2H, m), 7.7(3H, m), 7.8(2H, m), 7.9(4H, m), 8.0(2H, m), 8.4(2H, m)$	608.77	608.25
710	$\delta = 1.4(9H, s), 7.4(9H, m), 7.5(2H, m), 7.6(2H, m), 7.8(2H, m), 7.9(4H, m), 8.0(2H, m), 8.4(2H, m)$	512.68	512.25
711	$\delta = 7.4(6H, m), 7.5(8H, m), 7.6(3H, m), 7.7(1H, m), 7.8(2H, m), 7.9(4H, m), 8.0(2H, m), 8.4(2H, m)$	532.67	532.22
712	$\delta = 7.4(6H, m), 7.5(6H, m), 7.6(2H, m), 7.8(4H, m), 7.9(6H, m), 8.0(2H, m), 8.4(2H, m)$	532.67	532.22
713	$\delta = 7.4(6H, m), 7.5(2H, m), 7.6(3H, m), 7.8(3H, m), 7.9(4H, m), 8.0(2H, m), 8.1(2H, m), 8.4(3H, m), 8.8(1H, m)$	558.67	558.21
714	$\delta = 7.4(6H, m), 7.5(2H, m), 7.6(3H, m), 7.8(3H, m), 7.9(4H, m), 8.0(3H, m), 8.1(2H, m), 8.4(2H, m)$	507.62	507.20
715	$\delta = 7.4(5H, m), 7.5(2H, m), 7.6(3H, m), 7.7(1H, m), 7.8(2H, m), 7.9(4H, m), 8.0(3H, m), 8.2(1H, m), 8.4(3H, m), 8.8(1H, m)$	507.62	507.20
716	$\delta = 7.3(3H, m), 7.4(5H, m), 7.5(3H, m), 7.6(3H, m), 7.8(2H, m), 7.9(5H, m), 8.0(2H, m), 8.1(1H, m), 8.4(2H, m), 8.6(1H, m)$	545.67	545.21
721	$\delta = 2.5(3H, s), 7.3(5H, m), 7.4(4H, m), 7.5(6H, m), 7.6(2H, m), 7.7(1H, m), 7.8(2H, m), 7.9(3H, m), 8.0(2H, m), 8.4(2H, m)$	546.70	546.23
727	$\delta = 2.5(3H, s), 7.3(1H, m), 7.4(4H, m), 7.5(6H, m), 7.6(2H, m), 7.7(1H, m), 7.8(4H, m), 7.9(5H, m), 8.0(2H, m), 8.4(2H, m)$	546.70	546.23

10

20

30

【表 1 1】

表1の続き

739	$\delta = 2.5(6H, s), 7.3(2H, m), 7.4(3H, m), 7.5(10H, m), 7.6(2H, m), 7.7(5H, m), 7.8(2H, m), 7.9(2H, m), 8.0(2H, m), 8.4(2H, m)$	636.82	636.28
740	$\delta = 1.4(9H, s), 2.5(6H, s), 7.3(2H, m), 7.4(5H, m), 7.5(2H, m), 7.6(2H, m), 7.7(2H, m), 7.8(2H, m), 7.9(2H, m), 8.0(2H, m), 8.4(2H, m)$	540.74	540.28
758	$\delta = 2.5(6H, s), 7.4(4H, m), 7.5(2H, m), 7.6(5H, m), 7.8(3H, m), 7.9(2H, m), 8.0(2H, m), 8.1(2H, m), 8.4(3H, m), 8.8(1H, m)$	586.72	586.24
759	$\delta = 2.5(6H, s), 7.4(4H, m), 7.5(2H, m), 7.6(5H, m), 7.8(3H, m), 7.9(2H, m), 8.0(3H, m), 8.1(2H, m), 8.4(2H, m)$	535.68	535.23
775	$\delta = 2.5(9H, s), 7.3(1H, m), 7.4(1H, m), 7.5(2H, m), 7.6(5H, m), 7.7(2H, m), 7.8(2H, m), 7.9(1H, m), 8.0(3H, m), 8.2(1H, m), 8.4(3H, m), 8.8(1H, m)$	549.70	549.25
776	$\delta = 2.5(9H, s), 7.3(4H, m), 7.4(1H, m), 7.5(3H, m), 7.6(5H, m), 7.7(1H, m), 7.8(3H, m), 7.9(1H, m), 8.0(2H, m), 8.1(1H, m), 8.4(2H, m), 8.6(1H, m)$	587.75	587.26
777	$\delta = 2.5(12H, s), 7.4(2H, m), 7.5(6H, m), 7.59(2H, m), 7.64(4H, s), 7.8(2H, m), 8.0(2H, m), 8.4(2H, m)$	512.68	512.25
778	$\delta = 2.5(12H, s), 7.4(1H, m), 7.5(2H, m), 7.6(5H, m), 7.64(4H, s), 7.7(1H, m), 7.8(2H, m), 7.9(1H, m), 8.0(4H, m), 8.4(2H, m)$	562.74	562.27
792	$\delta = 7.4(5H, m), 7.5(2H, m), 7.6(5H, m), 7.8(2H, m), 7.9(4H, m), 8.0(3H, m), 8.1(1H, m), 8.4(3H, m), 8.6(1H, m)$	506.63	506.20
793	$\delta = 7.3(2H, m), 7.4(5H, m), 7.5(4H, m), 7.6(2H, m), 7.8(2H, m), 7.9(6H, m), 8.0(3H, m), 8.2(1H, m), 8.4(2H, m)$	589.75	589.19
794	$\delta = 7.4(6H, m), 7.5(4H, m), 7.6(4H, m), 7.8(4H, m), 7.9(4H, m), 8.0(4H, m), 8.4(4H, m)$	582.73	582.23
795	$\delta = 7.2(2H, m), 7.3(2H, m), 7.4(5H, m), 7.5(5H, m), 7.6(5H, m), 7.8(2H, m), 7.9(6H, m), 8.0(2H, m), 8.4(2H, m), 8.6(1H, m)$	648.79	648.26
796	$\delta = 7.4(6H, m), 7.5(4H, m), 7.6(4H, m), 7.8(4H, m), 7.9(4H, m), 8.0(3H, m), 8.1(2H, m), 8.4(2H, m), 8.6(1H, m)$	582.73	582.23
800	$\delta = 7.4(9H, m), 7.5(2H, m), 7.6(5H, m), 7.8(2H, m), 7.9(8H, m), 8.0(3H, m), 8.1(1H, m), 8.4(3H, m), 8.6(1H, m)$	682.85	682.27
801	$\delta = 1.7(6H, s), 7.3(1H, m), 7.4(10H, m), 7.5(2H, m), 7.6(4H, m), 7.8(3H, m), 7.9(10H, m), 8.0(2H, m), 8.4(2H, m)$	748.95	748.31
802	$\delta = 7.3(4H, m), 7.4(10H, m), 7.5(8H, m), 7.6(2H, m), 7.8(2H, m), 7.9(10H, m), 8.0(2H, m), 8.4(2H, m)$	784.98	784.31

10

20

30

40



【表 1 2】

表1の続き

808	$\delta = 7.4(10H,m), 7.5(6H,m), 7.6(2H,m), 7.8(4H,m), 7.9(10H,m), 8.0(2H,m), 8.4(2H,m)$	708.89	708.28
818	$\delta = 7.4(14H,m), 7.5(6H,m), 7.6(2H,m), 7.8(2H,m), 7.9(12H,m), 8.0(2H,m), 8.4(2H,m)$	809.00	808.31
819	$\delta = 7.4(13H,m), 7.5(2H,m), 7.6(5H,m), 7.7(1H,m), 7.8(2H,m), 7.9(13H,m), 8.0(4H,m), 8.4(2H,m)$	859.06	858.33
826	$\delta = 7.4(18H,m), 7.5(6H,m), 7.6(2H,m), 7.8(2H,m), 7.9(16H,m), 8.0(2H,m), 8.4(2H,m)$	985.22	984.38
827	$\delta = 7.3(4H,m), 7.4(5H,m), 7.5(2H,m), 7.6(5H,m), 7.7(1H,m), 7.8(2H,m), 7.9(5H,m), 8.0(4H,m), 8.4(2H,m)$	582.73	582.23
829	$\delta = 1.7(6H,s), 7.3(5H,m), 7.4(6H,m), 7.5(2H,m), 7.6(4H,m), 7.8(3H,m), 7.9(6H,m), 8.0(2H,m), 8.4(2H,m)$	648.83	648.28
831	$\delta = 7.3(4H,m), 7.4(5H,m), 7.5(2H,m), 7.6(5H,m), 7.8(2H,m), 7.9(4H,m), 8.0(3H,m), 8.1(1H,m), 8.4(3H,m), 8.6(1H,m)$	582.73	582.23
833	$\delta = 7.4(6H,m), 7.5(4H,m), 7.6(4H,m), 7.8(4H,m), 7.9(4H,m), 8.0(4H,m), 8.4(2H,m), 8.6(2H,m)$	582.73	582.23
835	$\delta = 7.4(6H,m), 7.5(6H,m), 7.6(4H,m), 7.7(2H,m), 7.8(2H,m), 7.9(6H,m), 8.0(2H,m), 8.4(2H,m)$	582.73	582.23
837	$\delta = 7.4(5H,m), 7.5(2H,m), 7.6(7H,m), 7.7(2H,m), 7.8(2H,m), 7.9(6H,m), 8.0(3H,m), 8.1(1H,m), 8.4(3H,m), 8.6(1H,m)$	632.79	632.25
838	$\delta = 7.3(4H,m), 7.4(6H,m), 7.5(4H,m), 7.6(4H,m), 7.8(4H,m), 7.9(4H,m), 8.0(4H,m), 8.4(2H,m), 8.6(2H,m)$	658.83	658.27
844	$\delta = 1.7(6H,s), 7.3(1H,m), 7.4(6H,m), 7.5(4H,m), 7.6(5H,m), 7.7(1H,m), 7.8(3H,m), 7.9(6H,m), 8.0(2H,m), 8.4(2H,m)$	648.83	648.28
849	$\delta = 1.7(6H,s), 7.3(1H,m), 7.4(6H,m), 7.5(4H,m), 7.6(5H,m), 7.7(1H,m), 7.8(3H,m), 7.9(6H,m), 8.0(2H,m), 8.4(2H,m)$	648.83	648.28
852	$\delta = 1.7(6H,s), 7.3(1H,m), 7.4(6H,m), 7.5(2H,m), 7.6(4H,m), 7.8(3H,m), 7.9(6H,m), 8.0(2H,m), 8.0(2H,m)$	572.74	572.25
866	$\delta = 7.4(4H,m), 7.5(6H,m), 7.6(6H,m), 7.7(1H,m), 7.8(2H,m), 7.9(3H,m), 8.0(5H,m), 8.1(1H,m), 8.4(2H,m)$	582.73	582.23
887	$\delta = 7.4(5H,m), 7.5(10H,m), 7.6(6H,m), 7.7(4H,m), 7.8(2H,m), 7.9(3H,m), 8.0(5H,m), 8.1(1H,m), 8.4(2H,m)$	734.92	734.30
894	$\delta = 7.3(2H,m), 7.4(5H,m), 7.5(4H,m), 7.6(2H,m), 7.7(1H,m), 7.8(3H,m), 7.9(6H,m), 8.0(3H,m), 8.4(2H,m)$	588.76	588.19

10

20

30

40

【 0 1 7 4 】

【表 13】

表1の続き

897	$\delta = 6.8(1H, m), 6.9(1H, m), 7.3(3H, m), 7.4(5H, m), 7.5(5H, m), 7.6(4H, m), 7.8(2H, m), 7.9(6H, m), 8.0(2H, m), 8.3(2H, m), 8.4(2H, m)$	647.80	647.26
900	$\delta = 7.4(4H, m), 7.5(14H, m), 7.6(4H, m), 7.8(2H, m), 8.0(4H, m), 8.1(2H, m), 8.4(2H, m)$	608.77	608.25
901	$\delta = 7.25(8H, m), 7.39(8H, m), 7.41(2H, m), 7.51(4H, m), 7.52(4H, m), 7.59(4H, m), 7.91(8H, m), 8(4H, m), 8.4(4H, m)$	910.36	910.14
904	$\delta = 7.3(4H, m), 7.4(9H, m), 7.5(4H, m), 7.6(5H, m), 7.7(1H, m), 7.9(9H, m), 8.0(4H, m), 8.4(2H, m)$	758.94	758.30
907	$\delta = 7.3(4H, m), 7.4(10H, m), 7.5(6H, m), 7.6(2H, m), 7.8(2H, m), 7.9(8H, m), 8.0(2H, m), 8.4(2H, m)$	708.89	708.28
908	$\delta = 7.3(4H, m), 7.4(9H, m), 7.5(2H, m), 7.6(5H, m), 7.7(1H, m), 7.8(2H, m), 7.9(9H, m), 8.0(4H, m), 8.4(2H, m)$	758.94	758.30
909	$\delta = 1.7(6H, s), 7.3(5H, m), 7.4(10H, m), 7.5(2H, m), 7.6(4H, m), 7.8(3H, m), 7.9(10H, m), 8.0(2H, m), 8.4(2H, m)$	824.34	824.04
911	$\delta = 1.7(6H, s), 7.3(4H, m), 7.4(10H, m), 7.5(6H, m), 7.6(4H, m), 7.8(4H, m), 7.9(10H, m), 8.0(2H, m), 8.4(2H, m)$	901.14	900.38
912	$\delta = 1.7(6H, s), 7.4(10H, m), 7.5(6H, m), 7.6(4H, m), 7.8(4H, m), 7.9(10H, m), 8.0(2H, m), 8.4(2H, m)$	825.04	824.34
913	$\delta = 1.7(6H, s), 7.4(9H, m), 7.5(2H, m), 7.6(7H, m), 7.8(4H, m), 7.9(10H, m), 8.0(3H, m), 8.1(1H, m), 8.4(3H, m), 8.6(1H, m)$	875.10	874.36
914	$\delta = 7.4(10H, m), 7.5(8H, m), 7.6(3H, m), 7.7(1H, m), 7.8(2H, m), 7.9(8H, m), 8.0(2H, m), 8.4(2H, m)$	708.89	708.28
916	$\delta = 1.7(6H, s), 7.3(8H, m), 7.4(10H, m), 7.5(6H, m), 7.6(4H, m), 7.8(4H, m), 7.9(10H, m), 8.0(2H, m), 8.4(2H, m)$	977.24	976.41
917	$\delta = 7.4(3H, m), 7.5(10H, m), 7.6(7H, m), 7.7(1H, m), 7.8(2H, m), 7.9(1H, m), 8.0(6H, m), 8.1(2H, m), 8.4(2H, m)$	658.83	658.27
919	$\delta = 7.25(4H, m), 7.41(4H, m), 7.51\sim 7.52(14H, m), 7.59\sim 7.61(4H, m), 7.79(2H, m), 7.97\sim 8(4H, m), 8.13(2H, m), 8.4(2H, m)$	684.86	684.28
922	$\delta = 2.18(3H, s), 2.34(6H, s), 7.39(4H, m), 7.48(2H, m), 7.58\sim 7.59(5H, m), 7.73(1H, m), 7.91\sim 7.92(5H, m), 8(4H, m), 8.4(2H, m)$	548.71	548.25

10

20

30

40

【 0 1 7 5 】

## 【表 1 4】

表1の続き

928	$\delta = 2.34 (6\text{H}, \text{s}), 7.31 (1\text{H}, \text{m}), 7.39 (4\text{H}, \text{m}), 7.58\sim 7.6 (7\text{H}, \text{m}), 7.73 (1\text{H}, \text{m}), 7.91\sim 7.92 (5\text{H}, \text{m}), 8 (4\text{H}, \text{m}), 8.4 (2\text{H}, \text{m})$	534.69	534.23
934	$\delta = 7.25 (2\text{H}, \text{m}), 7.39\sim 7.41 (5\text{H}, \text{m}), 7.51\sim 7.59 (6\text{H}, \text{m}), 7.79\sim 7.85 (4\text{H}, \text{m}), 7.91 (4\text{H}, \text{m}), 8\sim 8.01 (3\text{H}, \text{m}), 8.18 (1\text{H}, \text{m}), 8.4 (2\text{H}, \text{m})$	589.75	589.19
939	$\delta = 2.88 (4\text{H}, \text{m}), 6.58 (2\text{H}, \text{m}), 6.69 (2\text{H}, \text{m}), 6.76 (2\text{H}, \text{m}), 7.02\sim 7.04 (4\text{H}, \text{m}), 7.39\sim 7.41 (5\text{H}, \text{m}), 7.51\sim 7.59 (6\text{H}, \text{m}), 7.79 (2\text{H}, \text{m}), 7.91 (4\text{H}, \text{m}), 8 (2\text{H}, \text{m}), 8.4 (2\text{H}, \text{m})$	649.82	649.28

10

## 【0176】

## [実施例1] OLEDの製造1

本発明による有機電界発光化合物を使用することによりOLED素子が製造された。

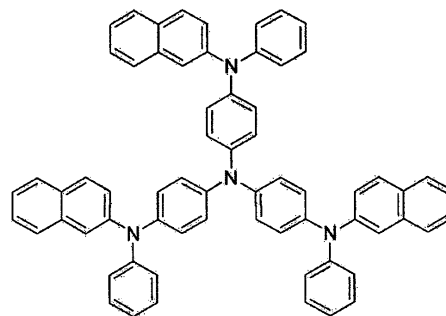
まず、OLED用ガラス(1)(三星・コーニング社製造)から製造された透明電極ITO薄膜(2)(15 / )を、トリクロロエチレン、アセトン、エタノール、蒸留水を順に使用して超音波洗浄を行った後、使用するまでイソプロパノールに入れて保管した。

20

次に、真空蒸着装置の基体フォルダにITO基体を備え付け、真空蒸着装置のセル内に4,4',4''-トリス(N,N-(2-ナフチル)-フェニルアミノ)トリフェニルアミン(2-TNATA)を入れて、次いで、チャンバー内の真空度が $10^{-6}$  torrに至るまで排気した。セルに電流を適用して2-TNATAを蒸発させ、それによりITO基体上に60 nm厚の正孔注入層(3)を蒸着した。

## 【0177】

## 【化89】



2-TNATA

30

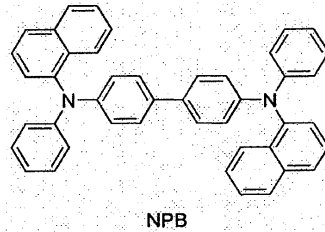
## 【0178】

次いで、真空蒸着装置の他のセルに、N,N'-ビス(2-ナフチル)-N,N'-ジフェニル-4,4'-ジアミン(NPB)を入れて、セルに電流を適用してNPBを蒸発させ、それにより正孔注入層上に20 nm厚の正孔輸送層(4)を蒸着した。

40

## 【0179】

## 【化 9 0】



## 【0180】

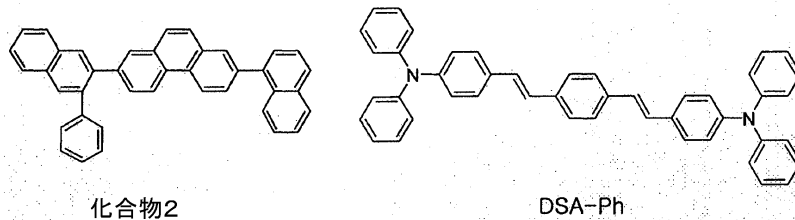
正孔注入層および正孔輸送層を形成した後、その上に電界発光層を次のようにして蒸着した。

10

真空蒸着装置の一方のセルに、電界発光材料として本発明に従った化合物（例えば、化合物 2）を入れて、他方のセルには、下記構造の DSA-Ph を入れた。その二つのセルを同時に加熱し、2～5 重量%の DSA-Ph の蒸着速度で、正孔輸送層上に 30 nm 厚の電界発光層（5）を蒸着した。

## 【0181】

## 【化 9 1】



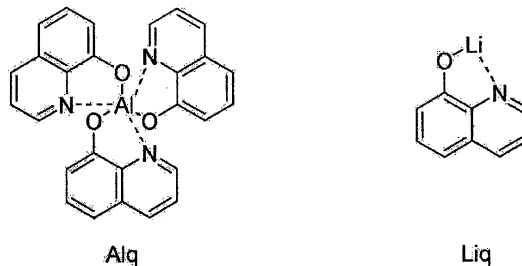
20

## 【0182】

次いで、電子輸送層（6）としてトリス（8-ヒドロキシキノリン）アルミニウム（III）（Alq）を 20 nm の厚さで蒸着した。その後、電子注入層（7）としてリチウムキノレート（Liq）を 1～2 nm の厚さで蒸着した。別の真空蒸着装置を用いてその上に Al 陰極（8）を 150 nm の厚さで蒸着して OLED を製造した。

## 【0183】

## 【化 9 2】



30

## 【0184】

それぞれの材料は、OLED のための電界発光材料として使用される前に、 $10^{-6}$  torr での真空昇華により精製された。

40

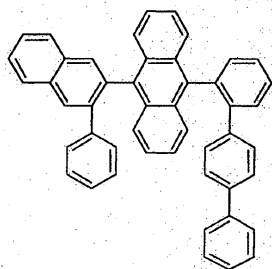
## 【0185】

〔実施例 2〕本発明による化合物を使用することによる OLED 製造

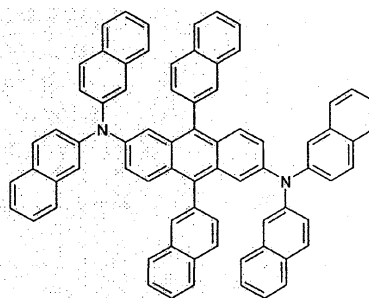
実施例 1 と同様の手順に従って正孔注入層および正孔輸送層を形成した後、前記真空蒸着装置の一方のセルに、本発明による化合物（例えば、化合物 705）を入れて、また他のセルには下記構造の化合物 E を入れた。二つの物質を異なる速度で蒸発させて、ホストを基準にして 2～5 重量%の濃度でのドーピングをもたらし、それにより、正孔輸送層上に 30 nm 厚の電界発光層を蒸着させた。

## 【0186】

## 【化 9 3】



化合物705



化合物E

10

## 【0187】

次いで、実施例1と同様の手順に従って、電子輸送層(6)および電子注入層(7)が蒸着され、別の真空蒸着装置を用いてAl陰極(8)を150nm厚で蒸着して、OLEDを製造した。

## 【0188】

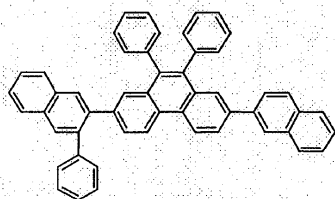
[実施例3] 本発明による化合物を使用したOLEDの製造

実施例1と同様の手順に従って、正孔注入層および正孔輸送層を形成した後、前記真空蒸着装置の一方のセルに、本発明による化合物(例えば、化合物218)を入れて、また他のセルには、下記構造の化合物Aを入れた。二つの物質を異なる速度で蒸発させて、ホストを基準にして2~5重量%の濃度でドーピングすることにより、正孔輸送層上に30

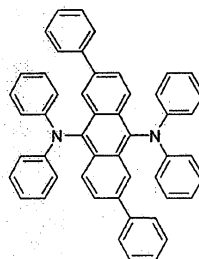
20

## 【0189】

## 【化 9 4】



化合物218



化合物A

30

## 【0190】

次いで、実施例1と同様の手順に従って、電子輸送層(6)および電子注入層(7)を蒸着し、別の真空蒸着装置を使用して、Al陰極(8)を150nm厚で蒸着してOLEDを製造した。

## 【0191】

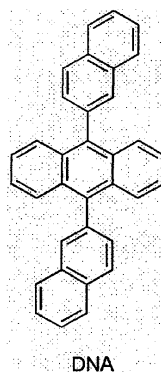
[比較例1] 従来の電界発光材料を使用することによるOLEDの製造

実施例1に記載されるのと同様の手順に従って、正孔注入層(3)および正孔輸送層(4)を形成した後、前記真空蒸着装置の一方のセルにジナフチルアントラセン(DNA)を入れて、実施例1におけるように他のセルにDSA-Phを入れた。次いで、100:3の蒸着割合で、正孔輸送層上に30nm厚の電界発光層(5)を蒸着した。

40

## 【0192】

## 【化 9 5】



10

## 【 0 1 9 3 】

次いで、実施例 1 と同様の手順に従って、電子輸送層（ 6 ）および電子注入層（ 7 ）を蒸着し、別の真空蒸着装置を使用して、A l 陰極（ 8 ）を 1 5 0 n m 厚で蒸着し、O L E D を製造した。

## 【 0 1 9 4 】

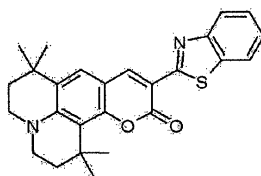
[ 比較例 2 ] 従来の電界発光材料を使用することによる O L E D の製造

実施例 2 に記載されるのと同様の手順に従って、正孔注入層および正孔輸送層を形成した後、前記真空蒸着装置の他のセルに、電界発光ホスト材料として A l q を入れて、一方、さらに別のセルにクマリン 5 4 5 T ( C o u m a r i n 5 4 5 T ; C 5 4 5 T ) を入

20

## 【 0 1 9 5 】

## 【化 9 6】



C545T

30

## 【 0 1 9 6 】

次いで、実施例 1 と同様の手順に従って、電子輸送層および電子注入層を蒸着し、別の真空蒸着装置を使用して、A l 陰極を 1 5 0 n m 厚で蒸着し、O L E D を製造した。

## 【 0 1 9 7 】

本発明による有機電界発光化合物を含む実施例 1 ～ 3 の O L E D の発光効率、および従来の電界発光化合物を含む比較例 1 および 2 から製造された O L E D の発光効率を 5 , 0 0 0 c d / m <sup>2</sup> で測定した。そして、その結果が表 2 に示される。

40

## 【 0 1 9 8 】

【表 15】

表2

番号		ホスト	ドーパント	ドーピング 濃度 (重量%)	発光効率 (cd/A)	色
					@5000cd/m <sup>2</sup>	
実施例 1	1	2	DSA-Ph	3	8.2	青色
	2	32	DSA-Ph	3	7.9	青色
	3	79	DSA-Ph	3	7.3	青色
	4	106	DSA-Ph	3	7.1	青色
	5	121	DSA-Ph	3	7.3	青色
	6	182	DSA-Ph	3	7.5	青色
	7	234	DSA-Ph	3	7.7	青色
	8	262	DSA-Ph	3	7.2	青色
	9	337	DSA-Ph	3	7.5	青色
	10	358	DSA-Ph	3	7.6	青色
	11	449	DSA-Ph	3	7.9	青色
	12	487	DSA-Ph	3	7.7	青色
	13	705	DSA-Ph	3	7.6	青色
	14	722	DSA-Ph	3	7.7	青色
	15	792	DSA-Ph	3	7.6	青色
	16	796	DSA-Ph	3	7.1	青色
	17	800	DSA-Ph	3	7.0	青色
	18	831	DSA-Ph	3	7.1	青色
	19	865	DSA-Ph	3	6.2	青色
	20	909	DSA-Ph	3	6.8	青色
	21	914	DSA-Ph	3	7.5	青色
実施例 2	1	6	化合物 E	3	19.5	緑色
	2	59	化合物 E	3	19.8	緑色
	3	100	化合物 E	3	21.5	緑色
	4	142	化合物 E	3	20.2	緑色

【表 16】

表2の続き

	5	218	化合物 E	3	19.8	緑色
	6	281	化合物 E	3	20.6	緑色
	7	346	化合物 E	3	19.9	緑色
	8	421	化合物 E	3	20.0	緑色
	9	525	化合物 E	3	21.1	緑色
	10	610	化合物 E	3	22.0	緑色
	11	705	化合物 E	3	22.0	緑色
	12	849	化合物 E	3	21.5	緑色
	13	897	化合物 E	3	19.8	緑色
	14	885	化合物 E	3	20.2	緑色
	15	900	化合物 E	3	21.5	緑色
実施例 3	1	13	化合物 A	3	18.2	緑色
	2	21	化合物 A	3	18.6	緑色
	3	127	化合物 A	3	18.2	緑色
	4	181	化合物 A	3	18.9	緑色
	5	218	化合物 A	3	19.3	緑色
	6	270	化合物 A	3	19.3	緑色
	7	307	化合物 A	3	19.8	緑色
	8	354	化合物 A	3	20.1	緑色
	9	443	化合物 A	3	19.5	緑色
	10	477	化合物 A	3	19.6	緑色
	11	525	化合物 A	3	19.2	緑色
	12	566	化合物 A	3	19.3	緑色
	13	634	化合物 A	3	20.1	緑色
	14	798	化合物 A	3	19.9	緑色
	15	867	化合物 A	3	19.8	緑色
比較例 1		DNA	DSA-Ph	3	7.3	ひすい色
比較例 2		Alq	化合物 C545T	1	10.3	緑色

【0200】

表2に示されうるように、同じ種類のDSA-Phでドーピングされている本発明の電界発光材料が青色電界発光素子に適用された場合、比較例1において使用される従来のEL材料としてのDNAと比較して、少なくとも同等の発光効率を維持しながら、色純度が著しく改善された。

3.0%のドーピング濃度で化合物Eまたは化合物Aでドーピングされている本発明の電界発光材料が緑色電界発光素子に適用される場合、従来の化合物であるAlq:C54

10

20

30

40

50



5 T（比較例 2）と比較して、少なくとも同等の色純度を維持しながら、発光効率が著しく向上された。

【 0 2 0 1 】

以上のように、本発明の有機電界発光化合物は、高効率の青色または緑色電界発光材料として使用でき、しかも、本発明のホスト材料が適用される電界発光素子は、色純度の点において著しい向上を示した。この色純度及び発光効率を向上させるという結果は、本発明の材料の優れた特性を立証する。

【符号の説明】

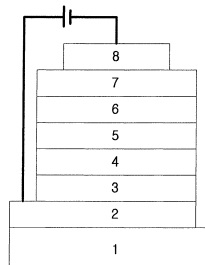
【 0 2 0 2 】

- 1 ガラス
- 2 透明電極
- 3 正孔注入層
- 4 正孔輸送層
- 5 電界発光層
- 6 電子輸送層
- 7 電子注入層
- 8 A 1 陰極

10

【 図 1 】

図1



## フロントページの続き

(51)Int.Cl.		F I	
G 0 9 F	9/30	(2006.01)	H 0 1 L 31/04 1 5 4 C
H 0 1 L	27/32	(2006.01)	H 0 1 L 31/04 1 5 4 D
			H 0 1 L 31/04 1 5 4 E
			C 0 7 C 15/30 C S P
			C 0 7 C 15/38
			C 0 9 K 11/06 6 9 0
			G 0 9 F 9/30 3 6 5

- (72)発明者 シン, ヒョ・ニム  
大韓民国, ソウル・136-060, ソンブク-グウ, ドナム-ドン・15-1, サムスン・アパートメント・101-1111
- (72)発明者 チョー, ヤン・チュン  
大韓民国, ソウル・136-060, ソンブク-グウ, ドナム-ドン・15-1, サムスン・アパートメント・101-1111
- (72)発明者 クォン, ヒョク・チュー  
大韓民国, ソウル・130-100, ドンデムン-グウ, チャンガン・ドン, サムスン・レミアン・2・チャ・アパートメント・224-2001
- (72)発明者 キム, ボン・ゴク  
大韓民国, ソウル・135-090, ガンナム-グウ, サムソン-ドン・4, ハンソル・アパートメント・101-1108
- (72)発明者 キム, ソン・ミン  
大韓民国, ソウル・157-886, カンソ-グウ, ファゴク・8-ドン, 392-27, サーレムハウス, 102-ホ
- (72)発明者 ユーン, スン・スー  
大韓民国, ソウル・135-884, ガンナム-グウ, スソ-ドン, サミク・アパートメント・405-1409

審査官 本田 博幸

- (56)参考文献 特開2005-302657(JP, A)  
国際公開第2005/009087(WO, A1)  
特開2007-084485(JP, A)  
特開2007-141790(JP, A)  
特開2007-207916(JP, A)  
特開2007-224282(JP, A)  
国際公開第2007/105884(WO, A1)  
特開2009-108014(JP, A)

## (58)調査した分野(Int.Cl., DB名)

H 0 1 L 5 1 / 5 0  
H 0 1 L 2 7 / 3 2  
H 0 1 L 5 1 / 4 6  
C 0 7 C 1 5 / 3 0  
C 0 7 C 1 5 / 3 8  
C 0 9 K 1 1 / 0 6  
G 0 9 F 9 / 3 0  
CAplus/REGISTRY(STN)

专利名称(译)	新型有机电致发光化合物和使用其的有机电致发光器件		
公开(公告)号	<a href="#">JP5645365B2</a>	公开(公告)日	2014-12-24
申请号	JP2009000440	申请日	2009-01-05
申请(专利权)人(译)	Guraseru显示公司		
当前申请(专利权)人(译)	Gureiseru显示公司		
[标]发明人	リスヨン シンヒヨニム チョーヤンチュン クォンヒョクチュー キムボンゴク キムソンミン ユーンスンスー		
发明人	リ,ス・ヨン シン,ヒヨ・ニム チョー,ヤン・チュン クォン,ヒョク・チュー キム,ボン・ゴク キム,ソン・ミン ユーン,スン・スー		
IPC分类号	H01L51/50 H01L51/46 C07C15/30 C07C15/38 C09K11/06 G09F9/30 H01L27/32		
CPC分类号	C07C13/567 C07C13/62 C07C13/72 C07C15/20 C07C15/28 C07C15/30 C07C15/38 C07C25/22 C07C49/784 C07C211/54 C07C211/61 C07C255/50 C07C2603/18 C07C2603/24 C07C2603/26 C07C2603/40 C07C2603/44 C07C2603/48 C07C2603/50 C07C2603/52 C07C2603/94 C07D209/86 C07D213/06 C07D215/04 C07D215/06 C07D217/02 C07D221/08 C07D235/08 C07D239/26 C07D241 /42 C07D241/46 C07D243/38 C07D265/38 C07D277/66 C07D279/36 C07D307/91 C07D333/76 C07D487/04 C07D491/06 C07F7/0807 C07F7/0814 C07F9/65683 C09K11/06 C09K2211/1007 C09K2211/1011 C09K2211/1022 C09K2211/1029 C09K2211/1033 C09K2211/1037 C09K2211/104 C09K2211/1044 H01L51/0058 H01L51/0059 H01L51/0077 H01L51/0081 H01L51/5012 H01L2251/308 H05B33/14 Y02E10/549		
FI分类号	H05B33/14.B H05B33/22.A H05B33/22.C H01L31/04.154.A H01L31/04.154.B H01L31/04.154.C H01L31/04.154.D H01L31/04.154.E C07C15/30.CSP C07C15/38 C09K11/06.690 G09F9/30.365 H01L27/32		
F-TERM分类号	3K107/AA01 3K107/BB01 3K107/CC04 3K107/CC07 3K107/CC21 3K107/DD52 3K107/DD53 3K107 /DD59 3K107/DD64 3K107/DD68 3K107/DD71 3K107/DD73 3K107/DD74 3K107/DD76 3K107/DD78 3K107/DD86 3K107/FF13 4H006/AA03 4H006/AB92 5C094/AA08 5C094/AA10 5C094/AA37 5C094 /BA27 5C094/FB01 5C094/JA11 5F151/AA11		
审查员(译)	本田博之		
优先权	1020080023831 2008-03-14 KR 1020080106223 2008-10-29 KR		
其他公开文献	JP2009283899A		
外部链接	<a href="#">Espacenet</a>		
摘要(译)			

要解决的问题：提供有机电致发光化合物，以获得比传统主体材料更高的发光效率，元件寿命和更合适的色度坐标。溶液：新型有机电致发光化合物由式（1）表示，有机发光二极管和有机太阳能电池包括它们。在该式中，L SB 1表示亚芳基，或含有一个或多个选自N，O和S的杂原子的亚杂芳基，选自特定结构的二价基团，和L SB 2和/或SBL SB 3独立地表示化学键，或亚烷基氧基，亚烷基硫基，亚芳氧基，亚芳基硫基，亚芳基或亚杂芳基，其含有一个或多个选自N，O和S的杂原子。

化学式1

