

(19) 日本国特許庁(JP)

(12) 公 開 特 許 公 報(A)

(11) 特許出願公開番号
特開2007-84828
(P2007-84828A)

(43) 公開日 平成19年4月5日(2007.4.5)

(51) Int.Cl.	F I	テーマコード (参考)
CO9K 11/06 (2006.01)	CO9K 11/06 610	3K107
HO1L 51/50 (2006.01)	HO5B 33/14 B	4C204
CO7D 333/54 (2006.01)	HO5B 33/22 D	
CO7D 209/08 (2006.01)	CO9K 11/06 620	
CO7D 333/58 (2006.01)	CO9K 11/06 635	
審査請求 未請求 請求項の数 12 O L (全 71 頁) 最終頁に続く		

(21) 出願番号 特願2006-258135 (P2006-258135)	(71) 出願人 590002817
(22) 出願日 平成18年9月22日 (2006.9.22)	三星エスディアイ株式会社
(31) 優先権主張番号 10-2005-0088718	大韓民国京畿道水原市靈通区▲しん▼洞5
(32) 優先日 平成17年9月23日 (2005.9.23)	75番地
(33) 優先権主張国 韓国 (KR)	(74) 代理人 100072349
(31) 優先権主張番号 10-2006-0077128	弁理士 八田 幹雄
(32) 優先日 平成18年8月16日 (2006.8.16)	(74) 代理人 100110995
(33) 優先権主張国 韓国 (KR)	弁理士 奈良 泰男
	(74) 代理人 100114649
	弁理士 宇谷 勝幸
	(72) 発明者 金 明 淑
	大韓民国京畿道水原市靈通区靈通洞972
	-2番地 ビョクゾクゴル8団地アパート
	802棟606号
	最終頁に続く

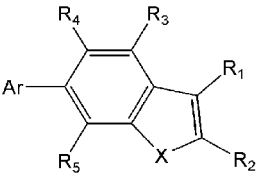
(54) 【発明の名称】 有機発光化合物及びこれを備えた有機発光素子

(57) 【要約】 (修正有)

【課題】 有機発光化合物及びこれを備えた有機発光素子を提供する。

【解決手段】 下記化学式 1 :

<化学式 1>



第2電極
電子注入層
電子輸送層
発光層
正孔注入層
第1電極

で表示される有機発光化合物を用いて、低い駆動電圧、優秀な効率及び色純度を持つ有機発光素子を得ることができる。

【選択図】 図1 A

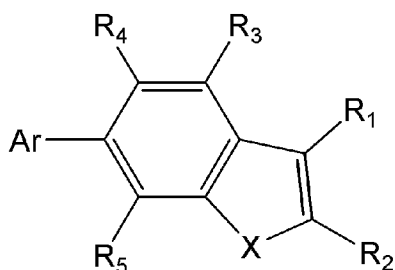
【特許請求の範囲】

【請求項 1】

下記化学式 1 :

【化 1】

<化学式 1>



10

<化学式 1>

前記式中、Ar は、置換または非置換の炭素数 6 ~ 50 のアリール基であり、

R₁、R₂、R₃、R₄ 及び R₅ は、それぞれ互いに独立して、水素原子、ハロゲン原子、シアノ基、ニトロ基、ヒドロキシ基、置換もしくは非置換の炭素数 1 ~ 50 のアルキル基、置換もしくは非置換の炭素数 1 ~ 50 のアルコキシ基、置換もしくは非置換の炭素数 5 ~ 50 のシクロアルキル基、置換もしくは非置換の炭素数 5 ~ 50 のヘテロシクロアルキル基、置換もしくは非置換の炭素数 6 ~ 50 のアリール基、置換もしくは非置換の炭素数 2 ~ 50 のヘテロアリール基、-N(Z₁)(Z₂)、または-Si(Z₃)(Z₄)(Z₅)であり、

20

前記 Z₁、Z₂、Z₃、Z₄ 及び Z₅ はそれぞれ互いに独立して、水素原子、置換もしくは非置換の炭素数 1 ~ 50 のアルキル基、置換もしくは非置換の炭素数 6 ~ 50 のアリール基、置換もしくは非置換の炭素数 2 ~ 50 のヘテロアリール基、置換もしくは非置換の炭素数 5 ~ 50 のシクロアルキル基、または置換もしくは非置換の炭素数 5 ~ 50 のヘテロシクロアルキル基であり、

X は、C(Z₆)(Z₇)、N(Z₈)、O、S、SO₂、Se、または SeO₂ であり、

30

前記 Z₆、Z₇ 及び Z₈ は、それぞれ互いに独立して、水素原子、置換もしくは非置換の炭素数 1 ~ 50 のアルキル基または置換もしくは非置換の炭素数 6 ~ 50 のアリール基であり、

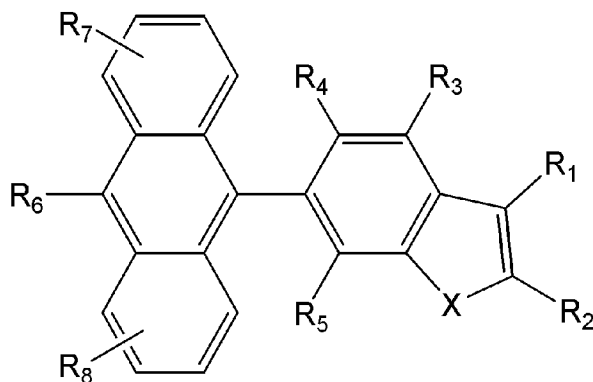
但し、前記 R₂ がアントリル基である場合は除外する、
で表示される有機発光化合物。

【請求項 2】

下記化学式 2 :

【化 2】

<化学式 2>



40

50

前記式中、 R_1 、 R_2 、 R_3 、 R_4 、 R_5 、 R_6 、 R_7 及び R_8 はそれぞれ互いに独立して、水素原子、ハロゲン原子、シアノ基、ニトロ基、ヒドロキシ基、置換もしくは非置換の炭素数 1 ~ 50 のアルキル基、置換もしくは非置換の炭素数 1 ~ 50 のアルコキシ基、置換もしくは非置換の炭素数 5 ~ 50 のシクロアルキル基、置換もしくは非置換の炭素数 5 ~ 50 のヘテロシクロアルキル基、置換もしくは非置換の炭素数 6 ~ 50 のアリール基、置換もしくは非置換の炭素数 2 ~ 50 のヘテロアリール基、 $-N(Z_1)(Z_2)$ 、または $-Si(Z_3)(Z_4)(Z_5)$ であり、

前記 Z_1 、 Z_2 、 Z_3 、 Z_4 及び Z_5 は、それぞれ互いに独立して、水素原子、置換もしくは非置換の炭素数 1 ~ 50 のアルキル基、置換もしくは非置換の炭素数 6 ~ 50 のアリール基、置換もしくは非置換の炭素数 2 ~ 50 のヘテロアリール基、置換もしくは非置換の炭素数 5 ~ 50 のシクロアルキル基、または置換もしくは非置換の炭素数 5 ~ 50 のヘテロシクロアルキル基であり、

10

X は、 $C(Z_6)(Z_7)$ 、 $N(Z_8)$ 、 O 、 S 、 SO_2 、 Se 、または SeO_2 であり、

前記 Z_6 、 Z_7 及び Z_8 は、それぞれ互いに独立して、水素原子、置換もしくは非置換の炭素数 1 ~ 50 のアルキル基、または置換もしくは非置換の炭素数 6 ~ 50 のアリール基であり、

但し、前記で R_2 がアントリル基である場合は除外する、
で表示されることを特徴とする請求項 1 に記載の有機発光化合物。

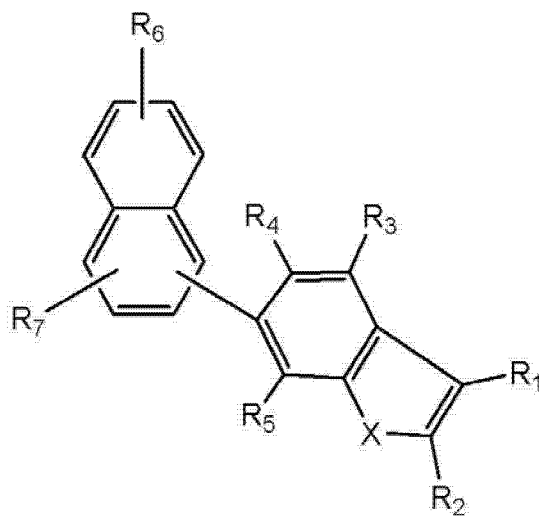
20

【請求項 3】

下記化学式 3：

【化 3】

<化学式 3>



30

前記式中、 R_1 、 R_2 、 R_3 、 R_4 、 R_5 、 R_6 及び R_7 はそれぞれ互いに独立して、水素原子、ハロゲン原子、シアノ基、ニトロ基、ヒドロキシ基、置換もしくは非置換の炭素数 1 ~ 50 のアルキル基、置換もしくは非置換の炭素数 1 ~ 50 のアルコキシ基、置換もしくは非置換の炭素数 5 ~ 50 のシクロアルキル基、置換もしくは非置換の炭素数 5 ~ 50 のヘテロシクロアルキル基、置換もしくは非置換の炭素数 6 ~ 50 のアリール基、置換もしくは非置換の炭素数 2 ~ 50 のヘテロアリール基、 $-N(Z_1)(Z_2)$ 、または $-Si(Z_3)(Z_4)(Z_5)$ であり、

40

前記 Z_1 、 Z_2 、 Z_3 、 Z_4 及び Z_5 は、それぞれ互いに独立して、水素原子、置換もしくは非置換の炭素数 1 ~ 50 のアルキル基、置換もしくは非置換の炭素数 6 ~ 50 のアリール基、置換もしくは非置換の炭素数 2 ~ 50 のヘテロアリール基、置換もしくは非置換の炭素数 5 ~ 50 のシクロアルキル基、または置換もしくは非置換の炭素数 5 ~ 50 の

50

ヘテロシクロアルキル基であり、

Xは、C (Z₆) (Z₇)、N (Z₈)、O、S、S O₂、S e、またはS e O₂ であり、

前記Z₆、Z₇及びZ₈は、それぞれ互いに独立して、水素原子、置換もしくは非置換の炭素数1～50のアルキル基、または置換もしくは非置換の炭素数1～50のアリール基であり、

但し、前記でR₂がアントリル基である場合は除外する、

で表示されることを特徴とする請求項1または2に記載の有機発光化合物。

【請求項4】

前記アルキル基、アルコキシ基、アリール基、ヘテロアリール基、シクロアルキル基及びヘテロシクロアルキル基の置換基は、- F；- Cl；- Br；- CN；- NO₂；- OH；非置換または- F、- Cl、- Br、- CN、- NO₂または- OHで置換された炭素数1～50のアルキル基；非置換または- F、- Cl、- Br、- CN、- NO₂または- OHで置換された炭素数1～50のアルコキシ基；非置換または炭素数1～50のアルキル基、炭素数1～50のアルコキシ基、- F、- Cl、- Br、- CN、- NO₂または- OHで置換された炭素数6～50のアリール基；非置換または炭素数1～50のアルキル基、炭素数1～50のアルコキシ基、- F、- Cl、- Br、- CN、- NO₂または- OHで置換された炭素数2～50のヘテロアリール基；非置換または炭素数1～50のアルキル基、炭素数1～50のアルコキシ基、- F、- Cl、- Br、- CN、- NO₂または- OHで置換された炭素数5～50のシクロアルキル基；非置換またはC₁-C₂₀アルキル基、C₁-C₂₀アルコキシ基、- F、- Cl、- Br、- CN、- NO₂または- OHで置換された炭素数5～50のヘテロシクロアルキル基；および- N (Z₉) (Z₁₀)で表示される基からなる群から選択された一つ以上であり、

前記Z₉及びZ₁₀は、それぞれ互いに独立して、水素原子、炭素数1～50のアルキル基、または炭素数1～50のアルキル基で置換された炭素数6～50のアリール基であることを特徴とする請求項1ないし3のうちいずれか1項に記載の有機発光化合物。

【請求項5】

前記R₁、R₂、R₃、R₄、R₅、R₆、R₇及びR₈は、それぞれ互いに独立して、水素原子、炭素数1～50のアルキル基、炭素数1～50のアルコキシ基、フェニル基、トリル基、ピフェニル基、N，N-ジフェニルアミノ基、ペンタレニル基、トリフェニルシリル基、9，10-ジヒドロ-9，10-オルト-ベンゼノ-2-アントリル基、9，9-ジメチル-3-フルオレニル基、4-N，N-ジトリルアミノフェニル基、p-(4，5-ジフェニルイミダゾリジン-2-イル)-フェニル基、インデニル基、ナフチル基、ピフェニル基、アントリル基、アズレニル基、ヘプタレニル基、アセナフチレニル基、ペナレニル基、フルオレニル基、メチルアントリル基、フェナントレニル基、トリフェニレニル基、ピレニル基、クリセニル基、エチル-クリセニル基、ピセニル基、ペリレニル基、クロロペリレニル基、ペンタフェニル基、ペンタセニル基、テトラフェニレニル基、ヘキサフェニル基、ヘキサセニル基、ルピセニル基、コロネニル基、トリナフチルレニル基、ヘプタフェニル基、ヘプタセニル基、フルオレニル基、ピラントレニル基、オバレニル基、カルバゾリル基、チオフェニル基、インドリル基、プリニル基、ベンズイミダゾリル基、キノリニル基、ベンゾチオフェニル基、パラチアジニル基、ピロリル基、ピラゾリル基、イミダゾリル基、イミダゾリニル基、オキサゾリル基、チアゾリル基、トリアゾリル基、テトラゾリル基、オキサジアゾリル基、ピリジニル基、ピリダジニル基、ピリミジニル基、ピラジニル基、チアントレニル基、シクロペンチル基、シクロヘキシル基、オキシラニル基、ピロリジニル基、ピラゾリジニル基、イミダゾリジニル基、ピペリジニル基、ピペラジニル基、モルホリニル基、ジ(炭素数6～50のアリール)アミノ基、トリ(炭素数6～50のアリール)シリル基、及びこれらの誘導体からなる群から選択されたことを特徴とする請求項1ないし4のうちいずれか1項に記載の有機発光化合物。

【請求項6】

前記R₁、R₂、R₃、R₄、R₅、R₆、R₇及びR₈は、それぞれ互いに独立して

、メチル、メトキシ、フェニル基、トリル基、ナフチル基、ピレニル基、フェナントレニル基、フルオレニル基、イミダゾリニル基、インドリル基、キノリニル基、ジフェニルアミノ基、2,3-ジ-p-トリルアミノフェニル基及びトリフェニルシリル基、9,10-ジヒドロ-9,10-オルト-ベンゼノ-2-アントリル基、9,9-ジメチル-3-フルオレニル基、p-(4,5-ジフェニルイミダゾリジン-2-イル)-フェニル基及びこれらの誘導体からなる群から選択されたことを特徴とする請求項1ないし5のうちいずれか1項に記載の有機発光化合物。

【請求項7】

前記Xは、 CH_2 、 $\text{C}(\text{CH}_3)_2$ 、 $\text{C}(\text{C}_6\text{H}_5)_2$ 、 $\text{N}-\text{CH}_3$ 、 $\text{N}-\text{C}_6\text{H}_5$ 、 O 、 S または SO_2 であることを特徴とする請求項1ないし6のうちいずれか1項に記載の有機発光化合物。

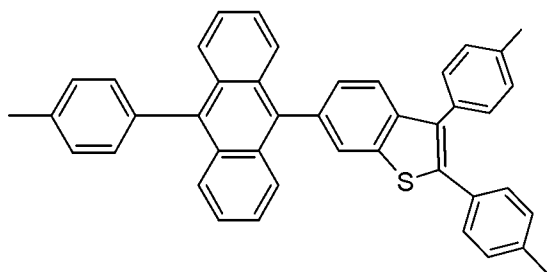
10

【請求項8】

下記化学式4ないし100：

【化4】

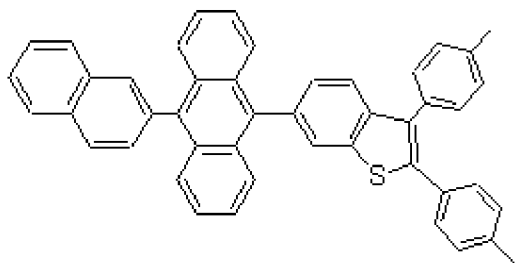
<化学式4>



20

【化5】

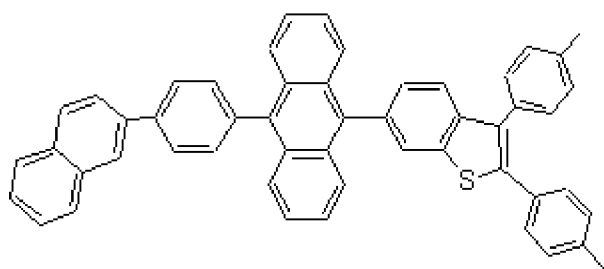
<化学式5>



30

【化6】

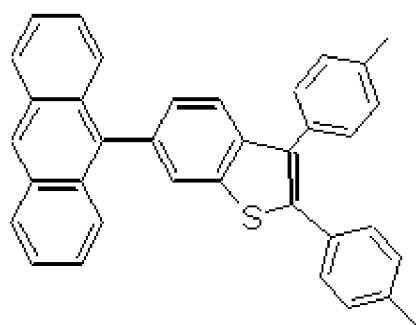
<化学式6>



40

【化 7】

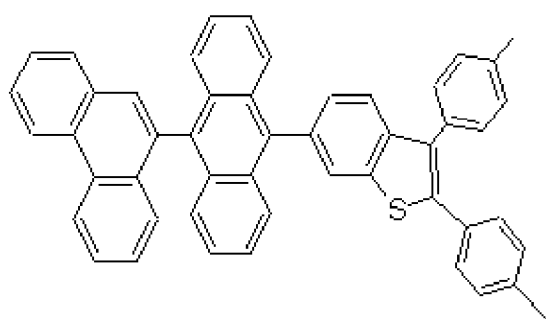
<化学式 7>



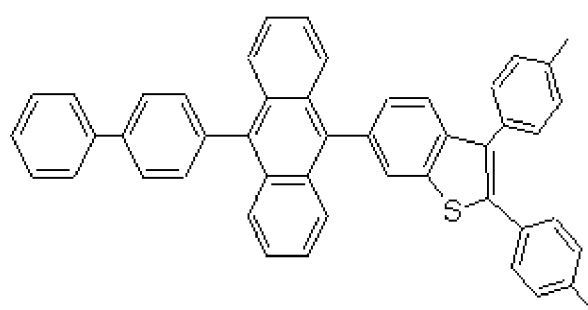
10

【化 8】

<化学式 8>



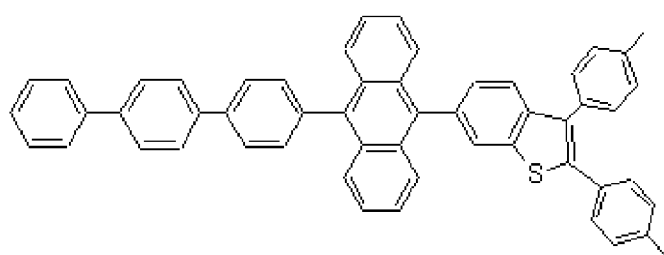
<化学式 9>



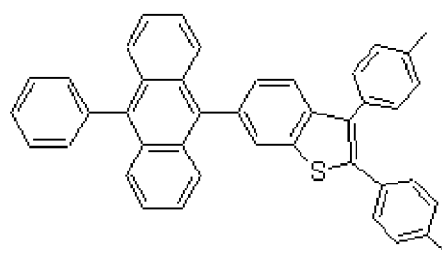
20

【化 9】

<化学式 10>



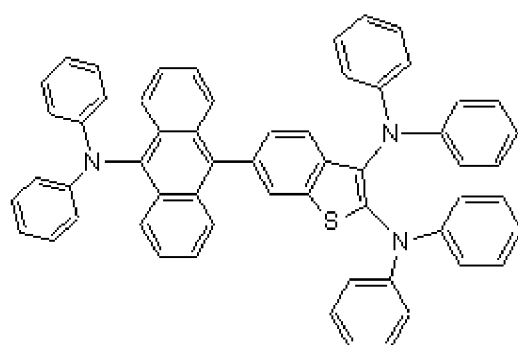
<化学式 11>



30

【化 10】

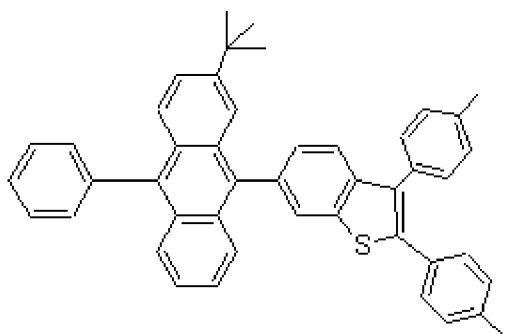
<化学式 12>



40

【化 1 1】

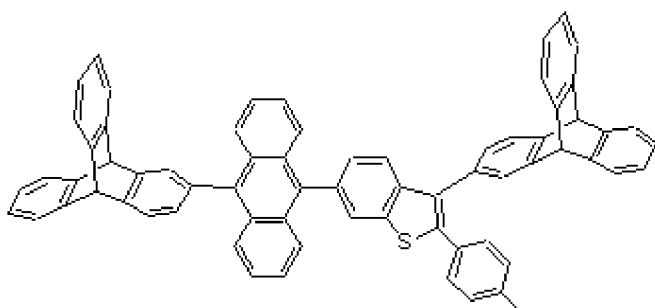
<化学式 1 3>



10

【化 1 2】

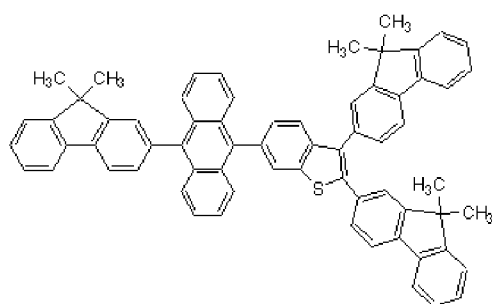
<化学式 1 4>



20

【化 1 3】

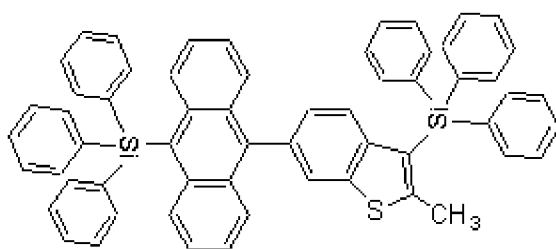
<化学式 1 5>



30

【化 1 4】

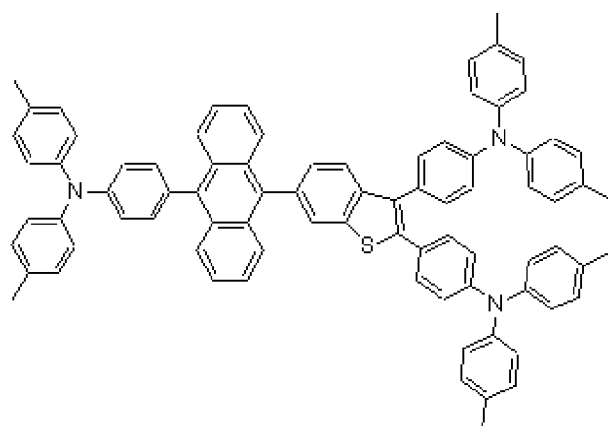
<化学式 1 6>



40

【化 1 5】

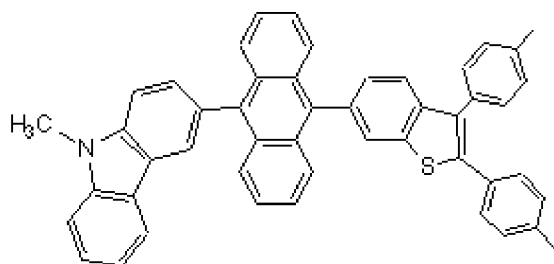
<化学式 1 7>



10

【化 1 6】

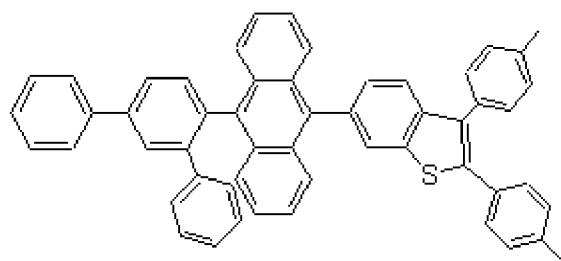
<化学式 1 8>



20

【化 1 7】

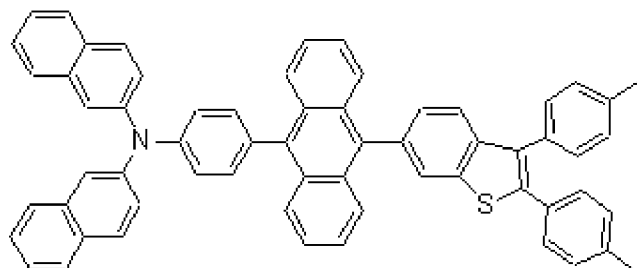
<化学式 1 9>



30

【化 1 8】

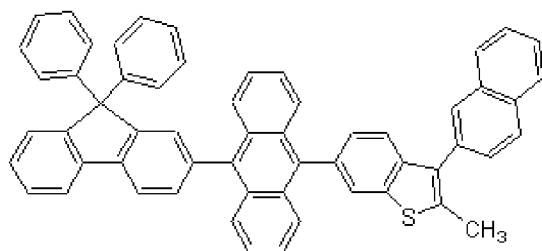
<化学式 2 0>



40

【化 1 9】

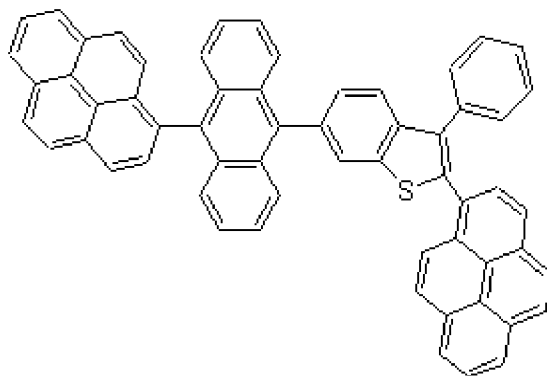
<化学式 2 1>



10

【化 2 0】

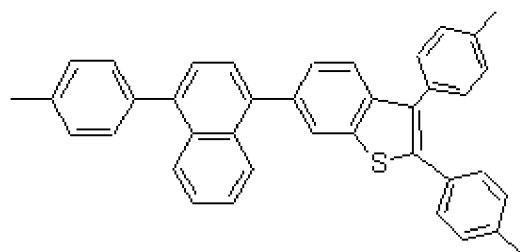
<化学式 2 2>



20

【化 2 1】

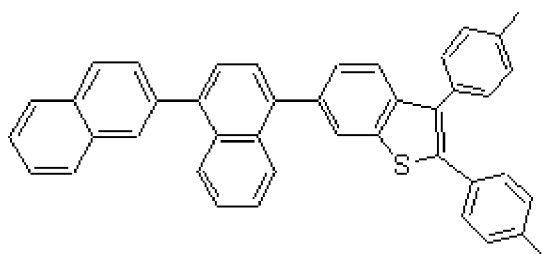
<化学式 2 3>



30

【化 2 2】

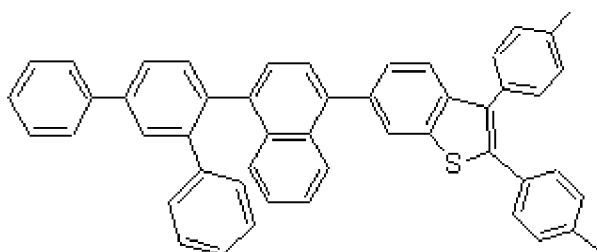
<化学式 2 4>



40

【化 2 3】

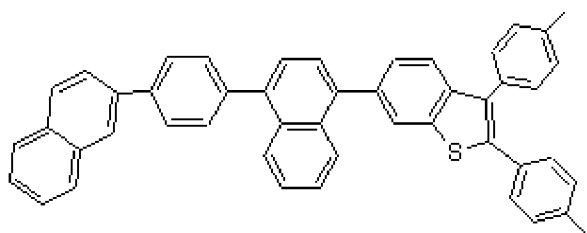
<化学式 2 5>



10

【化 2 4】

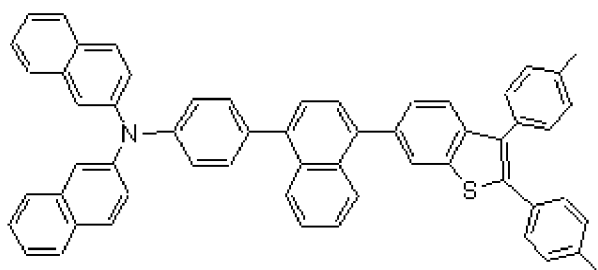
<化学式 2 6>



20

【化 2 5】

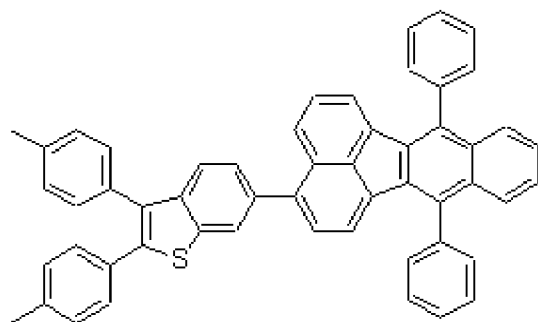
<化学式 2 7>



30

【化 2 6】

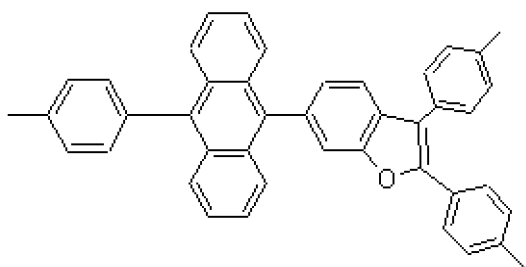
<化学式 2 8>



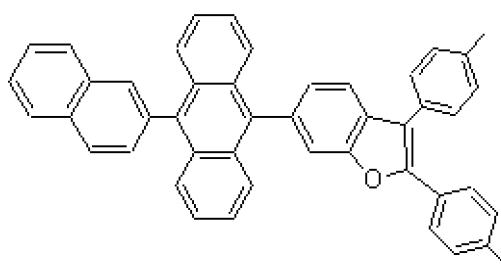
40

【化 2 7】

<化学式 2 9>



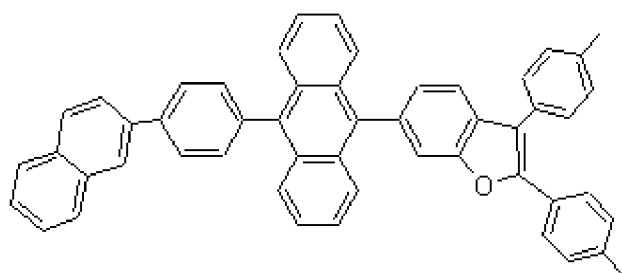
<化学式 3 0>



10

【化 2 8】

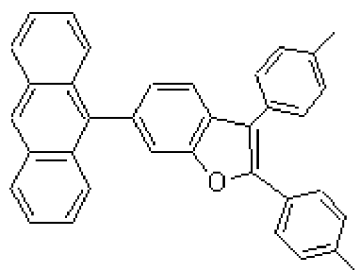
<化学式 3 1>



20

【化 2 9】

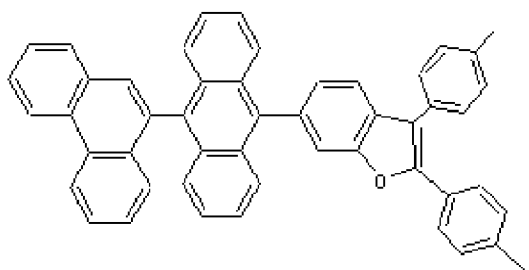
<化学式 3 2>



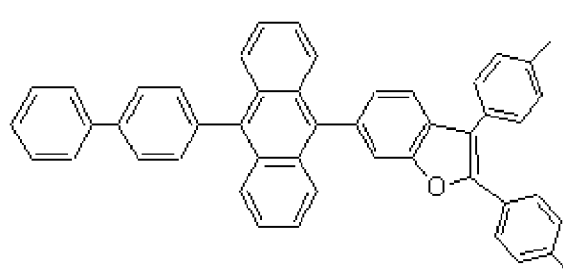
30

【化 3 0】

<化学式 3 3>



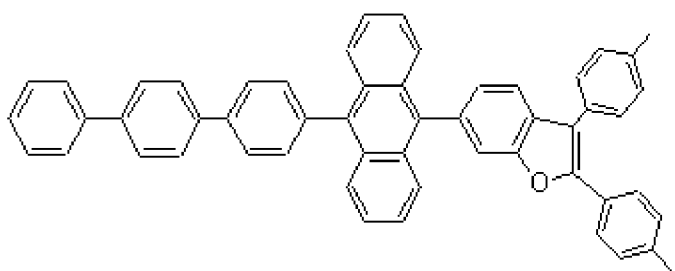
<化学式 3 4>



40

【化 3 1】

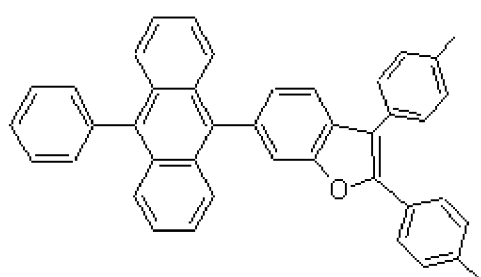
<化学式 3 5>



10

【化 3 2】

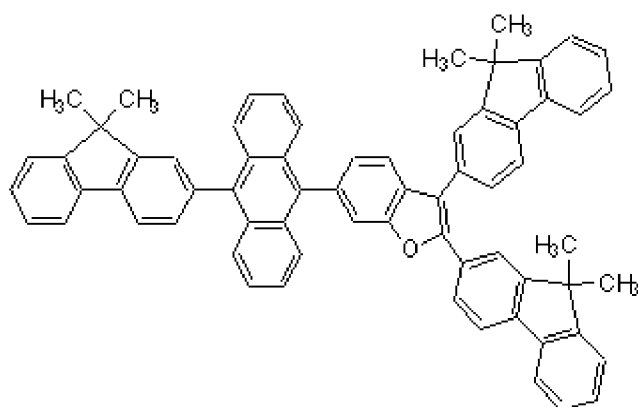
<化学式 3 6>



20

【化 3 3】

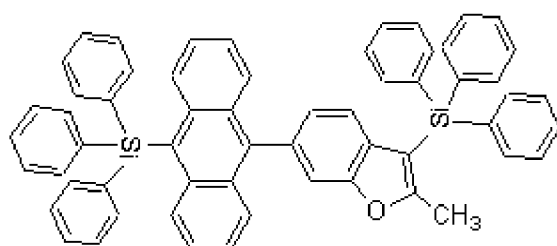
<化学式 3 7>



30

【化 3 4】

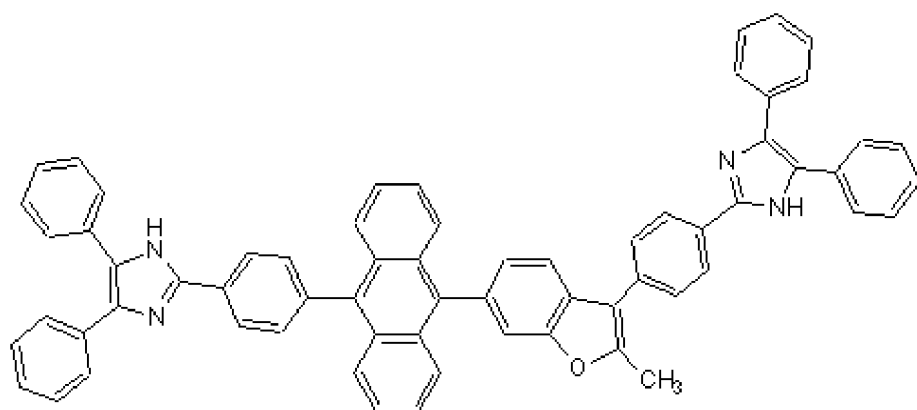
<化学式 3 8>



40

【化 3 5】

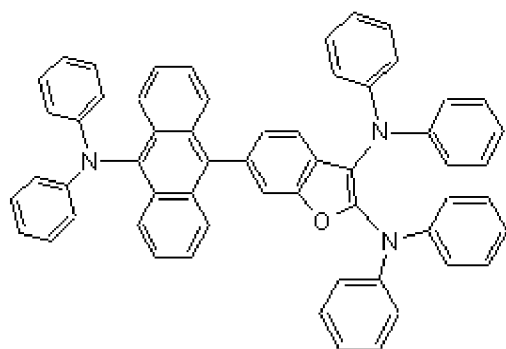
<化学式 3 9>



10

【化 3 6】

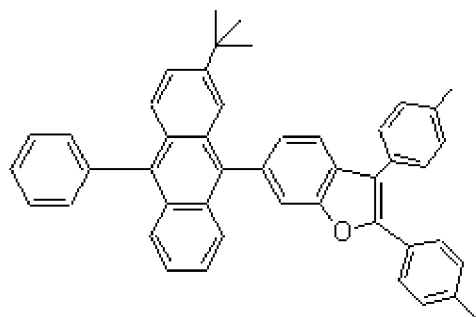
<化学式 4 0>



20

【化 3 7】

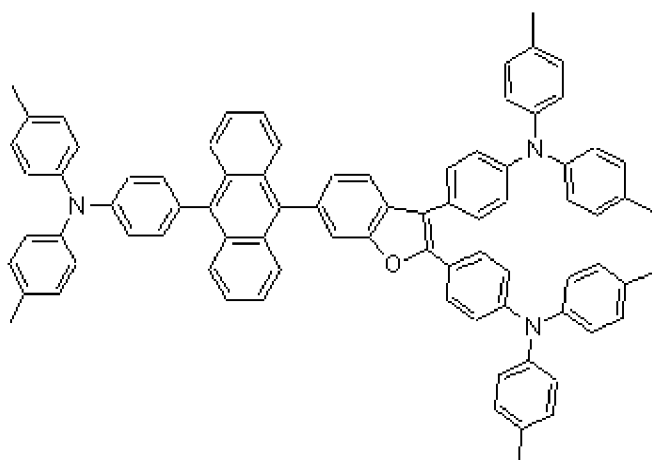
<化学式 4 1>



30

【化 3 8】

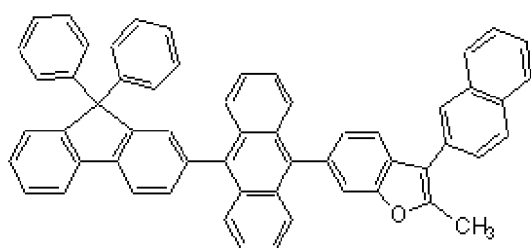
<化学式 4 2>



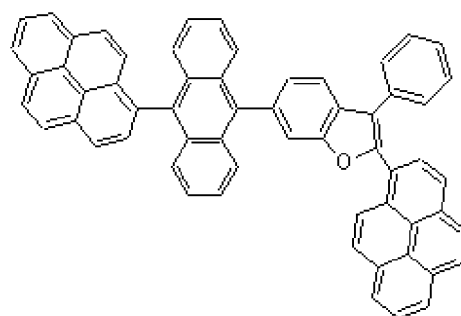
10

【化 3 9】

<化学式 4 3>



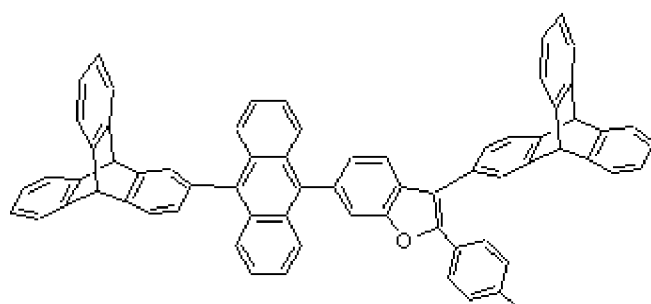
<化学式 4 4>



20

【化 4 0】

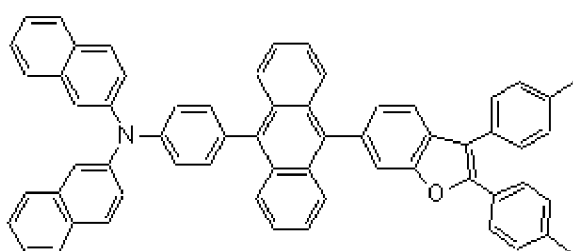
<化学式 4 5>



30

【化 4 1】

<化学式 4 6>

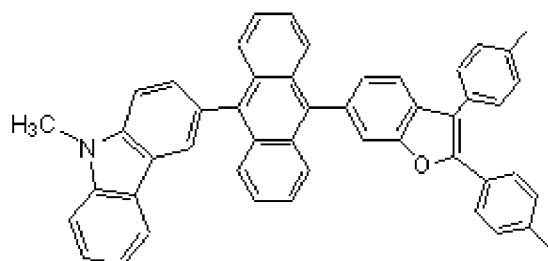


40

50

【化 4 2】

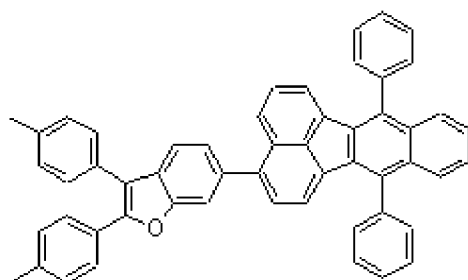
<化学式 4 7>



10

【化 4 3】

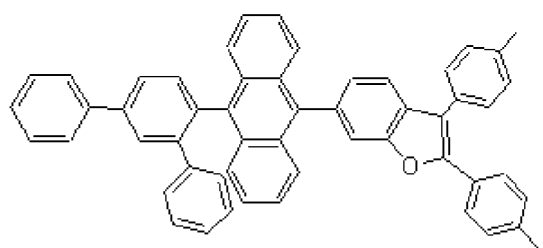
<化学式 4 8>



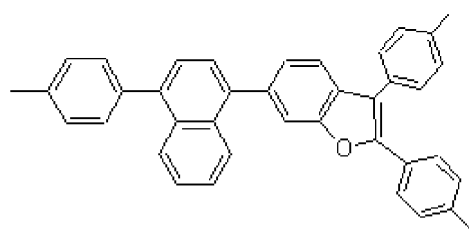
20

【化 4 4】

<化学式 4 9>



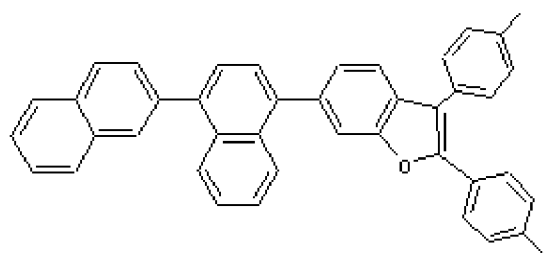
<化学式 5 0>



30

【化 4 5】

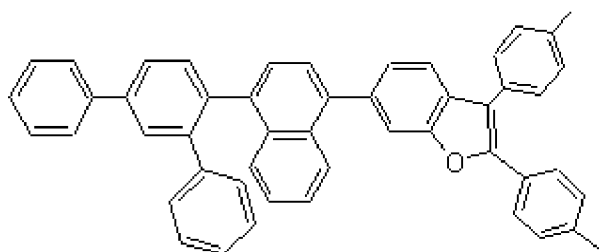
<化学式 5 1>



40

【化 4 6】

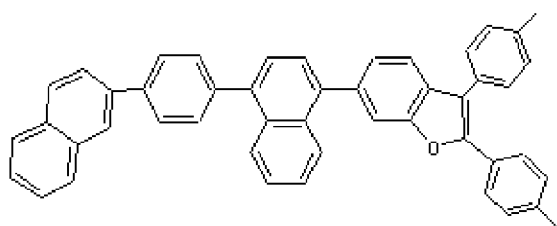
<化学式 5 2>



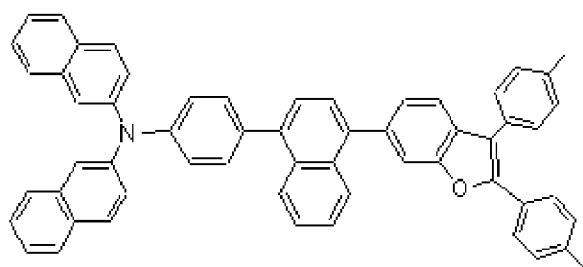
10

【化 4 7】

<化学式 5 3>



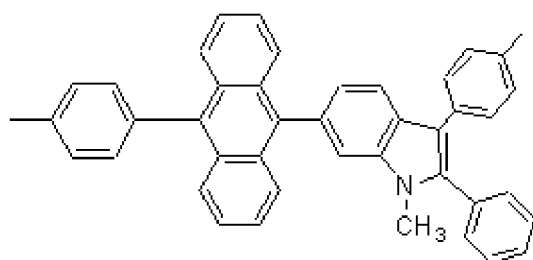
<化学式 5 4>



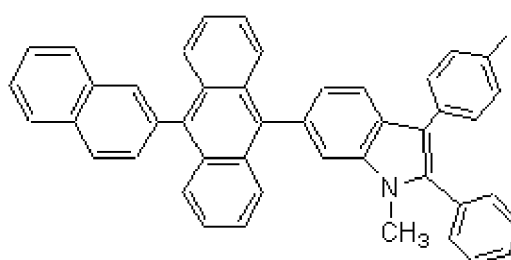
20

【化 4 8】

<化学式 5 5>



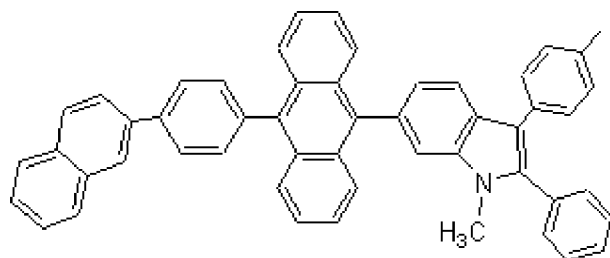
<化学式 5 6>



30

【化 4 9】

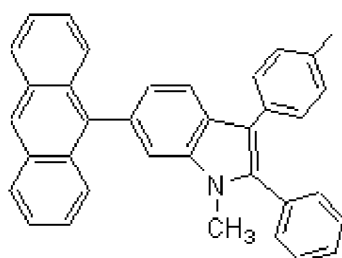
<化学式 5 7>



40

【化 5 0】

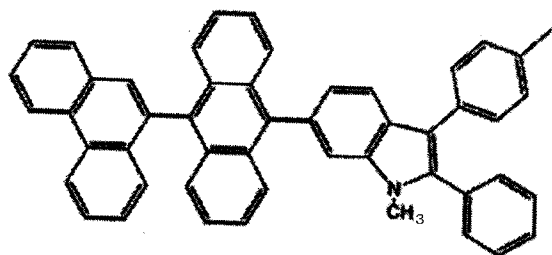
<化学式 5 8>



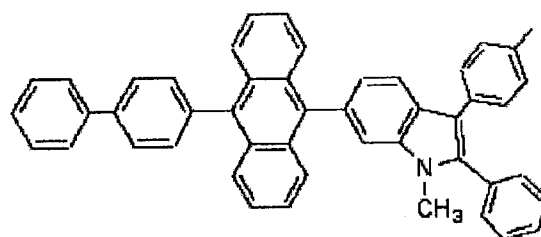
10

【化 5 1】

<化学式 5 9>



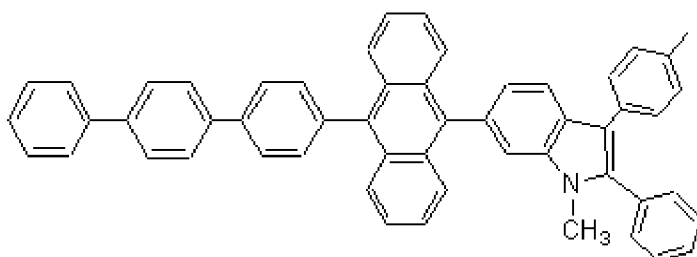
<化学式 6 0>



20

【化 5 2】

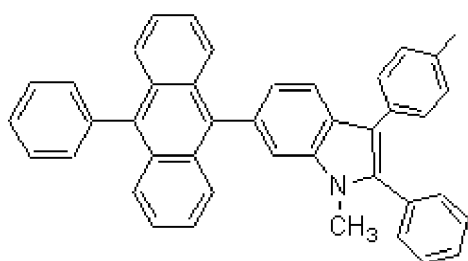
<化学式 6 1>



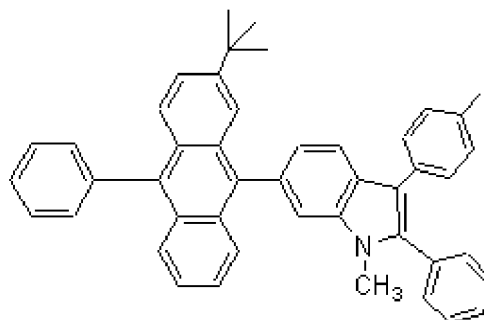
30

【化 5 3】

<化学式 6 2>



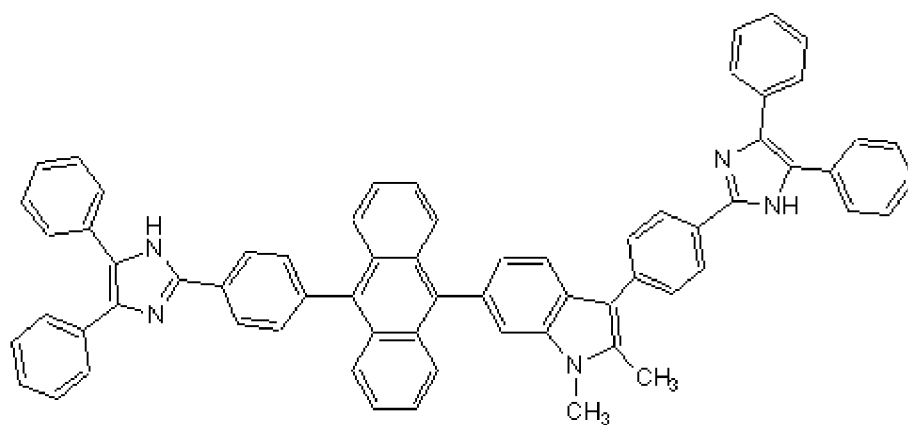
<化学式 6 3>



40

【化 5 4】

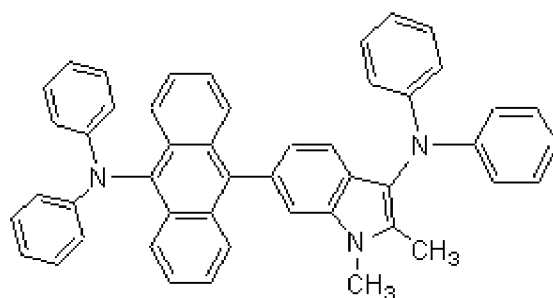
<化学式 6 4>



10

【化 5 5】

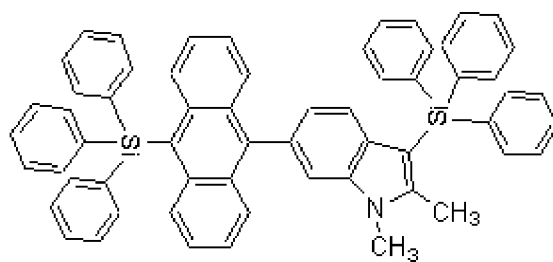
<化学式 6 5>



20

【化 5 6】

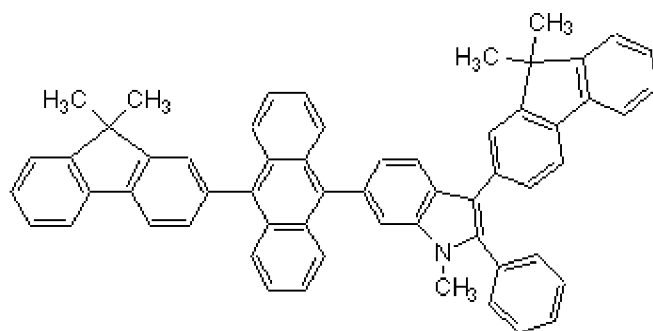
<化学式 6 6>



30

【化 5 7】

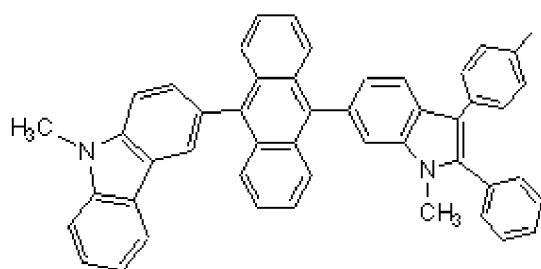
<化学式 6 7>



40

【化 5 8】

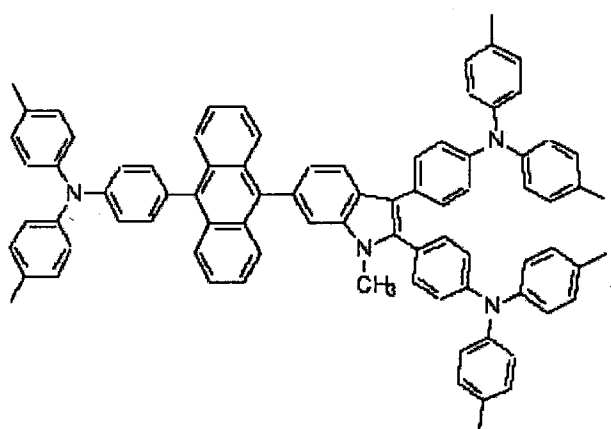
<化学式 6 8>



10

【化 5 9】

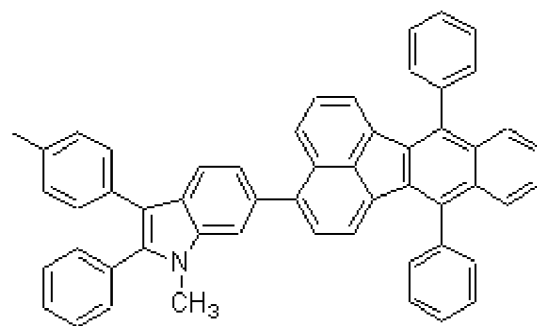
<化学式 6 9>



20

【化 6 0】

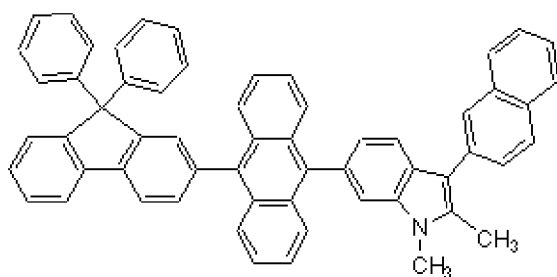
<化学式 7 0>



30

【化 6 1】

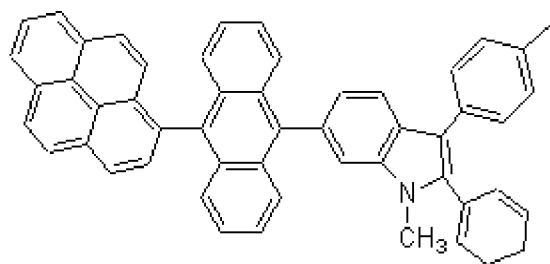
<化学式 7 1>



40

【化 6 2】

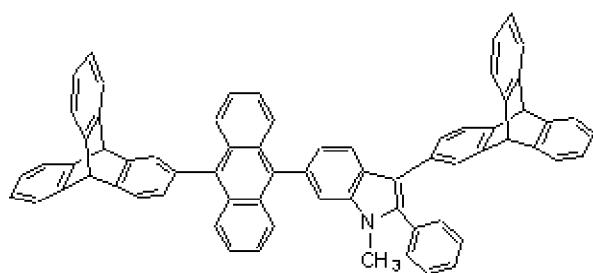
<化学式 7 2>



10

【化 6 3】

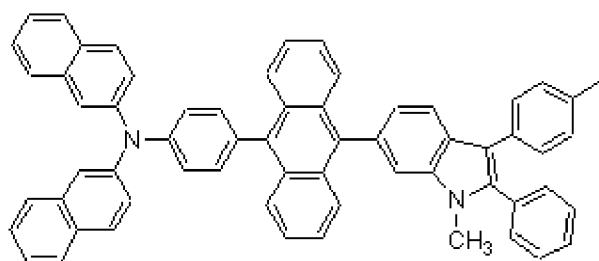
<化学式 7 3>



20

【化 6 4】

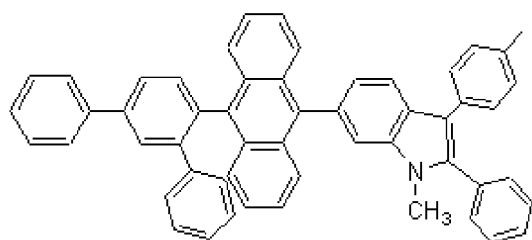
<化学式 7 4>



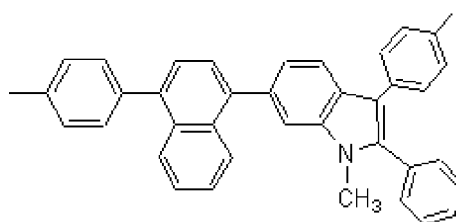
30

【化 6 5】

<化学式 7 5>



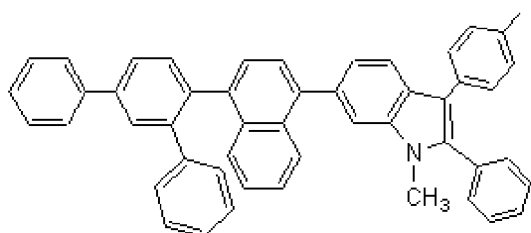
<化学式 7 6>



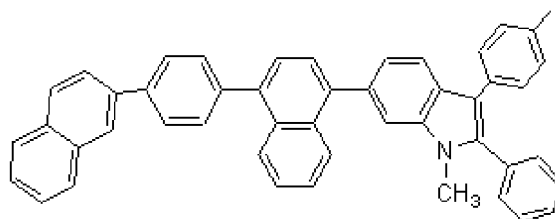
40

【化 6 6】

<化学式 7 7>



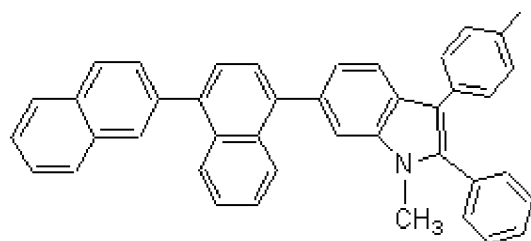
<化学式 7 8>



10

【化 6 7】

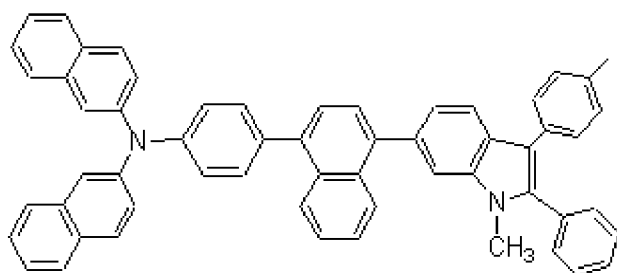
<化学式 7 9>



20

【化 6 8】

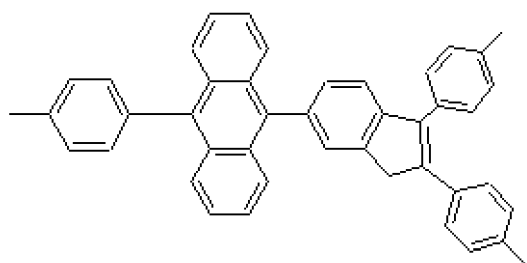
<化学式 8 0>



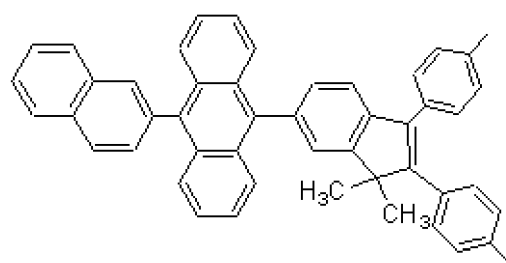
30

【化 6 9】

<化学式 8 1>



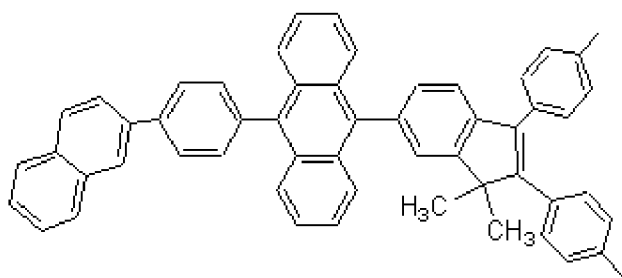
<化学式 8 2>



40

【化 7 0】

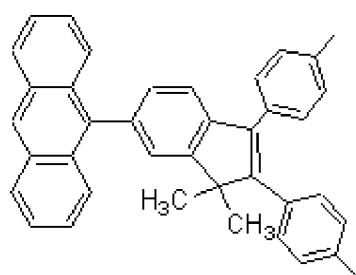
<化学式 8 3>



10

【化 7 1】

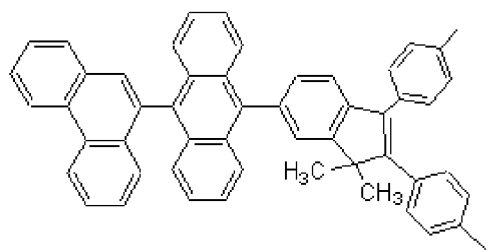
<化学式 8 4>



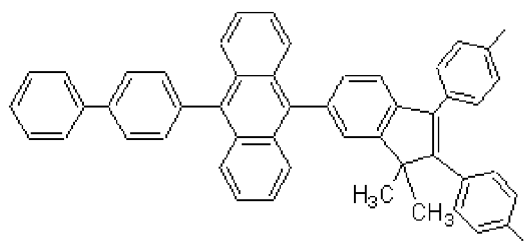
20

【化 7 2】

<化学式 8 5>



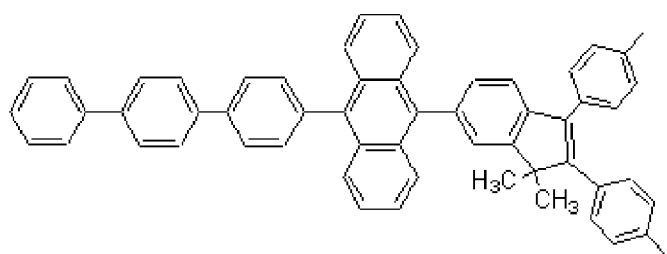
<化学式 8 6>



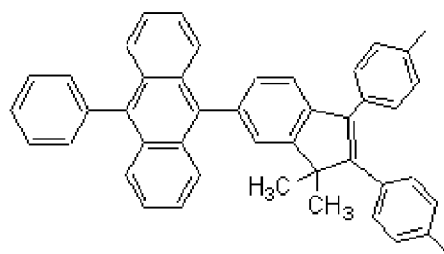
30

【化 7 3】

<化学式 8 7>



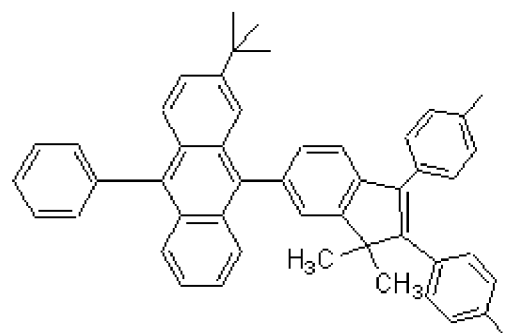
<化学式 8 8>



40

【化 7 4】

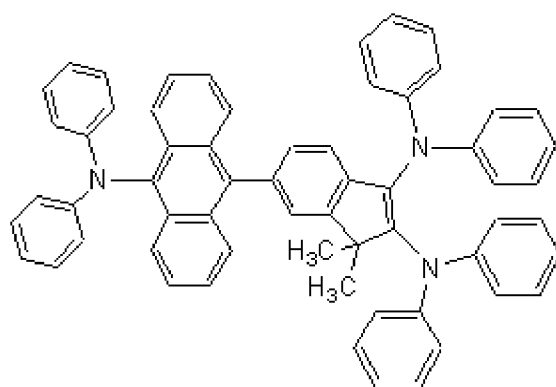
<化学式 8 9>



10

【化 7 5】

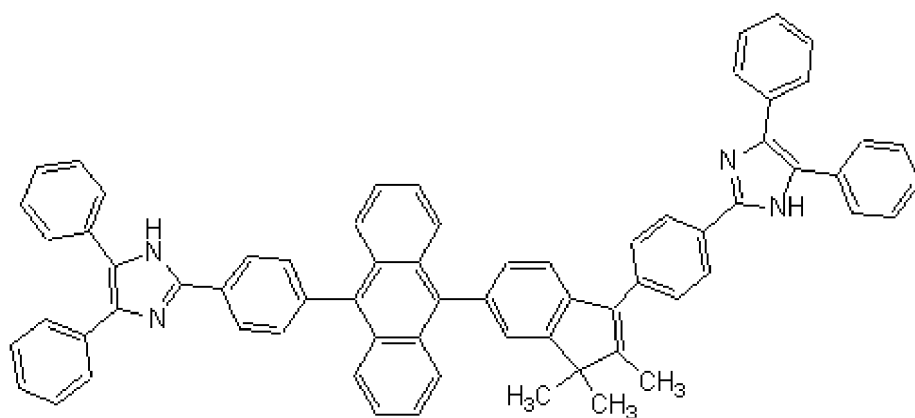
<化学式 9 0>



20

【化 7 6】

<化学式 9 1>

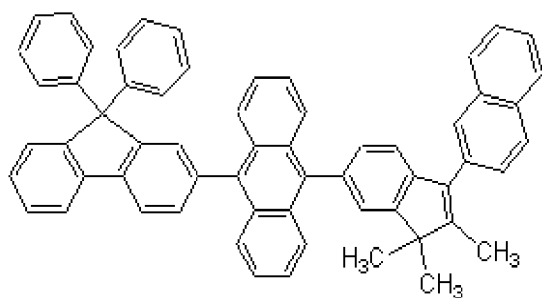


30

40

【化 7 7】

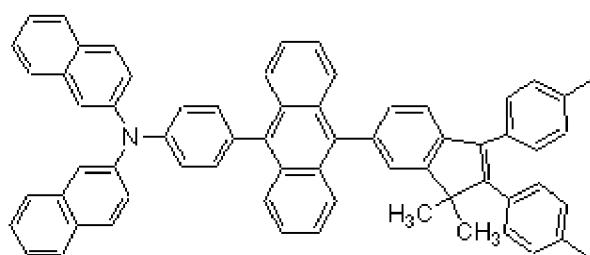
<化学式 9 2>



10

【化 7 8】

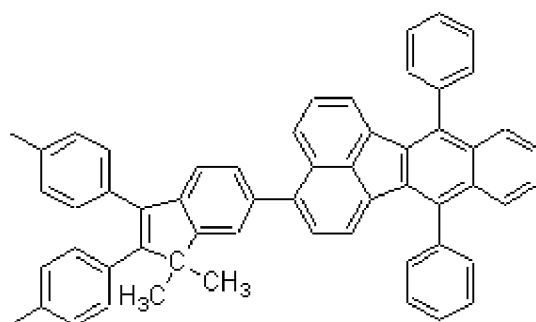
<化学式 9 3>



20

【化 7 9】

<化学式 9 4>

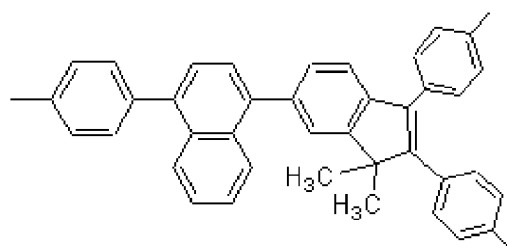
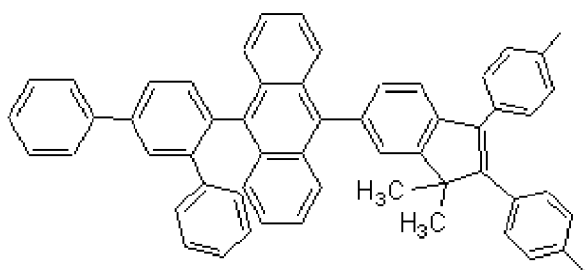


30

【化 8 0】

<化学式 9 5>

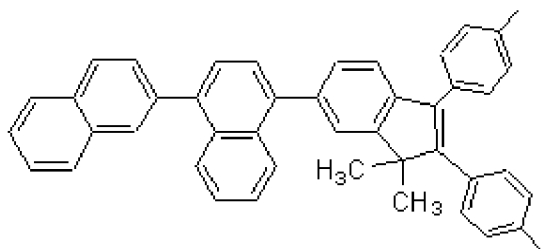
<化学式 9 6>



40

【化 8 1】

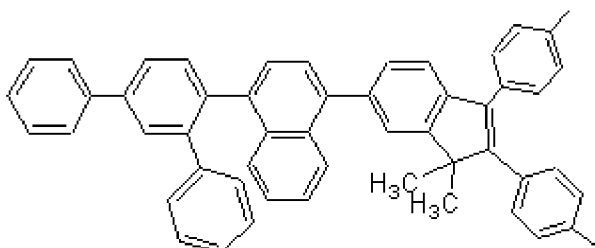
<化学式 9 7>



10

【化 8 2】

<化学式 9 8>

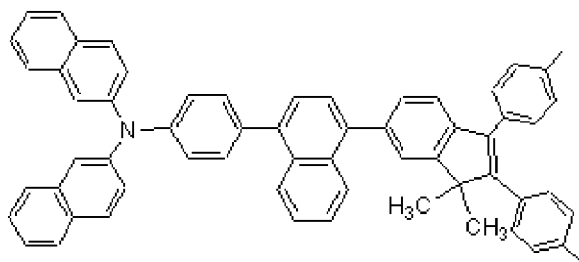
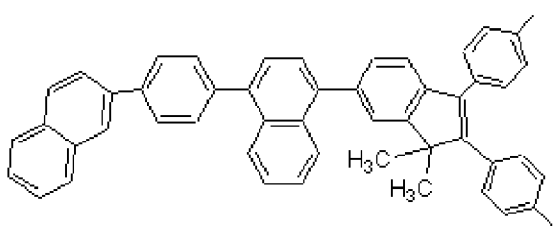


20

【化 8 3】

<化学式 9 9>

<化学式 1 0 0>



30

の少なくとも一つで表示されることを特徴とする請求項 1 ないし 3 のうちいずれか 1 項に記載の有機発光化合物。

【請求項 9】

第 1 電極と、第 2 電極と、前記第 1 電極と前記第 2 電極との間に少なくとも一層の有機膜層と、を備える有機発光素子であり、前記有機膜は請求項 1 ないし 8 のうちいずれか 1 項に記載の化合物を含むことを特徴とする有機発光素子。

【請求項 1 0】

前記有機膜層は、発光層、正孔注入層および正孔輸送層からなる群から選択される少なくとも一つの層であることを特徴とする請求項 9 に記載の有機発光素子。

40

【請求項 1 1】

前記第 1 電極と第 2 電極との間に、発光層、正孔注入層、正孔輸送層、電子阻止層、正孔阻止層、電子輸送層及び電子注入層からなる群から選択された一つ以上の層をさらに備えることを特徴とする請求項 9 または 1 0 に記載の有機発光素子。

【請求項 1 2】

前記有機発光素子は、第 1 電極、正孔注入層、発光層、電子輸送層、電子注入層、および第 2 電極が順次積層されてなる構造、

第 1 電極、正孔注入層、正孔輸送層、発光層、電子輸送層、電子注入層、および第 2 電極が順次積層されてなる構造、または第 1 電極、正孔注入層、正孔輸送層、発光層、正孔阻止層、電子輸送層、電子注入層および第 2 電極が順次積層されてなる構造を持つことを特

50

徴とする請求項 9 ~ 11 のいずれか 1 項に記載の有機発光素子。

【発明の詳細な説明】

【技術分野】

【0001】

本発明は、有機発光化合物及びこれを備えた有機発光素子 (Organic Light Emitting Device: OLED) に係り、より詳細には、優秀な電気的特性、熱安定性及び光化学安定性を持ち、OLED の適用時、優秀な駆動電圧及び色純度特性を表すことができる有機発光化合物と、該化合物を含む有機膜を採用した OLED とに関する。

【背景技術】

10

【0002】

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

【0003】

OLED は、一般的にアノード / 有機発光層 / カソードの積層構造を持ち、アノード / 正孔注入層 / 正孔輸送層 / 発光層 / 電子輸送層 / 電子注入層 / カソード、またはアノード / 正孔注入層 / 正孔輸送層 / 発光層 / 正孔阻止層 / 電子輸送層 / 電子注入層 / カソードの

20

【0004】

OLED に使用する物質は、有機膜の製造方法によって真空蒸着性物質と溶液塗布性物質とに大別できる。真空蒸着性物質は、500 以下で 10^{-6} torr 以上の蒸気圧を持たねばならず、主に分子量 1200 以下の低分子物質が望ましい。溶液塗布性物質としては、溶剤に対する溶解性が高く、溶液中で製造可能でなければならず、主に芳香族または複素環を含む。

【0005】

真空蒸着方法を使用して OLED を使用する場合、真空システムの使用でコスト高になり、天然色ディスプレイ用ピクセルを製造するためにシャドーマスクを使用する場合、高解像度のピクセルを製造し難い。これに対し、インクジェットプリンティング、スクリーンプリンティング、スピンコーティングのような溶液塗布法の場合には、製造が容易でコスト低になり、シャドーマスクを使用する場合より相対的に優秀な解像度を得ることができる。

30

【0006】

しかし、溶液塗布法に使用できる物質の場合、青色発光分子の性能が、熱的安定性、色純度などの側面で真空蒸着法に使用できる物質に比べて劣った。また、前記性能が優秀な場合にも、有機膜として製造した後に順次結晶化して結晶の大きさが可視光線波長の範囲に該当すれば、可視光線を散乱させて白濁現象を示すことがあり、ピンホールなどが形成されて素子の劣化を招きやすいという問題点があった。

40

【0007】

特許文献 1 には、発光層または正孔注入層に使われうる化合物として、2 つのナフチル基で置換されたアントラセンが開示されている。しかし、前記化合物は溶剤溶解性が不十分だけでなく、これを採用した OLED の特性などは満足すべきほどのレベルに到達していない。

【0008】

したがって、熱的安定性などが優秀でありながら優秀な有機膜の生成が可能な青色発光化合物を使用して、優秀な駆動電圧、輝度、効率及び色純度特性を向上させた OLED の開発が依然として要求される。

【特許文献 1】特開 1999 - 003782 号公報

50

【発明の開示】

【発明が解決しようとする課題】

【0009】

前記従来技術の問題点を解決するために、本発明が解決しようとする第1の技術的課題は、溶解性及び熱安定性の優秀な有機発光化合物を提供することである。

【0010】

本発明が解決しようとする第2の技術的課題は、駆動電圧、効率及び色純度特性が向上したOLEDを提供することである。

【課題を解決するための手段】

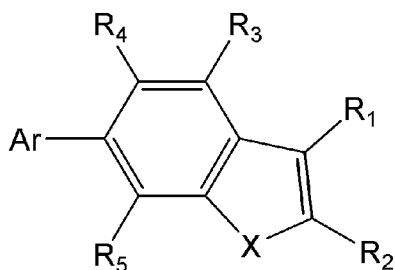
【0011】

前記本発明の課題を解決するために、本発明の第1態様は、下記化学式1で表示される有機発光化合物を提供する。

【0012】

【化1】

<化学式1>



【0013】

前記式中、Arは、置換または非置換の炭素数6～50のアリール基であり、

R₁、R₂、R₃、R₄及びR₅は、それぞれ互いに独立して、水素原子、ハロゲン原子、シアノ基、ニトロ基、ヒドロキシ基、置換または非置換の炭素数1～50のアルキル基、置換または非置換の炭素数1～50のアルコキシ基、置換または非置換の炭素数5～50のシクロアルキル基、置換または非置換の炭素数5～50のヘテロシクロアルキル基、置換または非置換の炭素数6～50のアリール基、置換または非置換の炭素数2～50のヘテロアリール基、または-N(Z₁)(Z₂)または-Si(Z₃)(Z₄)(Z₅)であり、

前記Z₁、Z₂、Z₃、Z₄及びZ₅は互いに独立であって、水素原子、置換または非置換の炭素数1～50のアルキル基、置換または非置換の炭素数6～50のアリール基、置換または非置換の炭素数2～50のヘテロアリール基、置換または非置換の炭素数5～50のシクロアルキル基または置換または非置換の炭素数5～50のヘテロシクロアルキル基であり、

Xは、C(Z₆)(Z₇)、N(Z₈)、O、S、SO₂、Se、またはSeO₂であり、

前記Z₆、Z₇及びZ₈は、それぞれ互いに独立して、水素原子、置換または非置換の炭素数1～50のアルキル基または置換または非置換の炭素数6～50のアリール基であり、

但し、前記でR₂がアントラセン基である場合は除外する。

【0014】

前記本発明のさらに他の課題を解決するために、本発明の第2態様は、第1電極と、第2電極と、前記第1電極と前記第2電極との間に少なくとも一層の有機膜層と、を備えるOLEDであり、前記有機膜が前述したような化合物を含むOLEDを提供する。

【発明の効果】

【0015】

10

20

30

40

50

本発明による化学式 1 で表示される化合物は、溶解性が優秀なだけでなく優秀な発光特性及び熱安定性を持つ。したがって、本発明による化合物を利用すれば、低い駆動電圧、優秀な色純度を持つ OLED を得ることができる。

【発明を実施するための最良の形態】

【0016】

以下、本発明をより詳細に説明する。

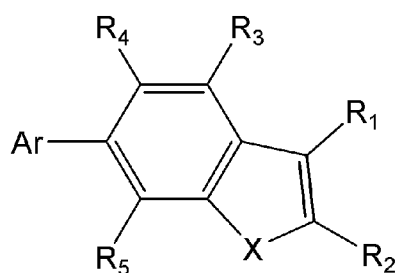
【0017】

本発明に係る有機発光化合物は、下記化学式 1

【0018】

【化 2】

<化学式 1>



【0019】

前記式中、Ar は、置換または非置換の炭素数 6 ~ 50 のアリール基であり、

R₁、R₂、R₃、R₄ 及び R₅ は、互いに独立して、水素原子、ハロゲン原子、シアノ基、ニトロ基、ヒドロキシル基、置換もしくは非置換の炭素数 1 ~ 50 のアルキル基、置換もしくは非置換の炭素数 1 ~ 50 のアルコキシ基、置換もしくは非置換の炭素数 5 ~ 50 のシクロアルキル基、置換もしくは非置換の炭素数 5 ~ 50 のヘテロシクロアルキル基、置換もしくは非置換の炭素数 6 ~ 50 のアリール基、置換もしくは非置換の炭素数 2 ~ 50 のヘテロアリール基、は -N(Z₁)(Z₂)、または -Si(Z₃)(Z₄)(Z₅) であり、

前記 Z₁、Z₂、Z₃、Z₄ 及び Z₅ はそれぞれ互いに独立して、水素原子、置換もしくは非置換の炭素数 1 ~ 50 のアルキル基、置換もしくは非置換の炭素数 6 ~ 50 のアリール基、置換もしくは非置換の炭素数 2 ~ 50 のヘテロアリール基、置換もしくは非置換の炭素数 5 ~ 50 のシクロアルキル基、または置換もしくは非置換の炭素数 5 ~ 50 のヘテロシクロアルキル基であり、

X は、C(Z₆)(Z₇)、N(Z₈)、O、S、SO₂、Se、または SeO₂ であり、

前記 Z₆、Z₇ 及び Z₈ は、互いに独立して、水素原子、置換または非置換の炭素数 1 ~ 50 のアルキル基または置換もしくは非置換の炭素数 1 ~ 50 のアリール基、好ましくは 6 ~ 50 のアリール基であり、但し、前記で R₂ がアントリル基である場合は除外する、で表示される。

【0020】

前記化学式 1 のうち、Ar とこれに連結されたヘテロアリール基とは、前記化学式 1 で表示される化合物の熱安定性、光化学安定性を高める役割を行い、前記置換基である R₁ ないし R₅ は、前記化学式 1 で表示される化合物の溶解性及びアモルファス特性を高めてフィルム形成能力を向上させる役割を行う。

【0021】

上記化学式 1 において、Ar や、R₁、R₂、R₃、R₄ 及び R₅ は、置換または非置換の炭素数 6 ~ 50 のアリール基であるが、本発明に係るアリール基は、例えば単環式もしくは多環式アリール基、例えばフェニル基、ベンジル基、フェネチル基、o-、m- 若しくは p-トリル基、2,3-若しくは 2,4-キシリル基、メシチル基、ナフチル基、

10

20

30

40

50

アントリル基、フェナントリル基、ピフェニル基、ベンズヒドリル基、トリチル基、ピレニル基、クロロフェニル基、ジクロロフェニル基、トリクロロフェニル基、ブromoフェニル基、フロロフェニル基、ペンタフロロフェニル基、ヨウ化フェニル基等のハロゲン化フェニル基、トリル基、キシリル基、メシチル基、エチルフェニル基、ジメチルエチルフェニル基、i s o - プロピルフェニル基、t - ブチルフェニル基、t - ブチルメチルフェニル基、オクチルフェニル基、ノニルフェニル基、トリフロロメチルフェニル基、等のアルキル誘導体置換フェニル基、メトキシフェニル基、エトキシフェニル基、プロポキシフェニル基、ヘキシルオキシフェニル基、シクロヘキシルオキシフェニル基、オクチルオキシフェニル基、2 - エチルヘキシルオキシフェニル基、3, 5, 5 - トリメチルヘキシルオキシフェニル基、メチルエトキシフェニル基、ジメトキシフェニル基、1 - エトキシ - 4 - メトキシフェニル基、クロロメトキシフェニル基、エトキシエトキシフェニル基、エトキシエトキシエトキシフェニル基等のアルコキシ基置換フェニル基、等が挙げられる。なかでも、上記化学式 1 において Ar は、置換または非置換のフェニル、ナフチル、アントリルおよびフルオレニル基が好ましい。更に、上記アリール基は更なる置換基を担持することができる。

10

【0022】

上記化学式 1 において、本発明に係るアルキル基の例としては、メチル基、エチル基、n - プロピル基、i s o - プロピル基、n - ブチル基、i s o - ブチル基、s e c - ブチル基、t - ブチル基、n - ペンチル基、i s o - ペンチル基、n e o - ペンチル基、1, 2 - ジメチルプロピル基、n - ヘキシル基、c y c l o - ヘキシル基、1, 3 - ジメチルブチル基、1 - i s o - プロピルプロピル基、1, 2 - ジメチルブチル基、n - ヘブチル基、1, 4 - ジメチルペンチル基、2 - メチル - 1 - i s o - プロピルプロピル基、1 - エチル - 3 - メチルブチル基、n - オクチル基、2 - エチルヘキシル基、3 - メチル - 1 - i s o - プロピルブチル基、2 - メチル - 1 - i s o - プロピル基、1 - t - ブチル - 2 - メチルプロピル基、n - ノニル基、3, 5, 5 - トリメチルヘキシル基、等の炭素数 1 ~ 50 の直鎖、分岐の炭化水素基が挙げられる。更に、上記アルキル基は更なる置換基を担持することができる。

20

【0023】

上記化学式 1 において、本発明に係るアルコキシ基は、メトキシ基、エトキシ基、n - プロピルオキシ基、i s o - プロピルオキシ基、n - ブチルオキシ基、i s o - ブチルオキシ基、s e c - ブチルオキシ基、t - ブチルオキシ基、n - ペンチルオキシ基、i s o - ペンチルオキシ基、n e o - ペンチルオキシ基、1, 2 - ジメチル - プロピルオキシ基、n - ヘキシルオキシ基、c y c l o - ヘキシルオキシ基、1, 3 - ジメチルブチルオキシ基、1 - i s o - プロピルプロピルオキシ基、1, 2 - ジメチルブチルオキシ基、n - ヘブチルオキシ基、1, 4 - ジメチルペンチルオキシ基、2 - メチル - 1 - i s o - プロピルプロピルオキシ基、1 - エチル - 3 - メチルブチルオキシ基、n - オクチルオキシ基、2 - エチルヘキシルオキシ基、3 - メチル - 1 - i s o - プロピルブチルオキシ基、2 - メチル - 1 - i s o - プロピルオキシ基、1 - t - ブチル - 2 - メチルプロピルオキシ基、n - ノニルオキシ基等の炭素数 1 ~ 50 の直鎖、分岐、環状のアルコキシ基等が挙げられる。更に、上記アルコキシ基は更なる置換基を担持することができる。

30

40

【0024】

上記化学式 1 において、本発明に係るヘテロアリール基は、当業者に知られた 2 ~ 50 個の炭素原子を有するすべての単環式もしくは多環式複素環式芳香族、例えばチエニル、ピリジル、フラニル、ピラニル、チアゾリル、ピロリル、オキサゾリル、イソオキサゾリル、ピラゾリル、イミダゾリル、1, 2, 3 - トリアゾリル、1, 2, 4 - トリアゾリル、ベンゾフラニル、チアナフテニル、ジベンゾフラニル、インドリル、ベンズイミダゾリル、インダゾ、リル、キノリルおよびイソキノリル基である。更に、ヘテロアリール基は更なる置換基を有することができる。

【0025】

上記化学式 1 において、本発明に係るシクロアルキル基の例としては、シクロプロピル

50

基、シクロブチル基、シクロペンチル基、シクロヘキシル基、シクロヘプチル基及びシクロオクチル基等が挙げられる。更に、シクロアルキル基は更なる置換基を有することができる。

【0026】

上記化学式1において、本発明に係るヘテロシクロアルキル基の例としては、上記シクロアルキル基の1以上の炭素がN、SまたはOなどのヘテロ原子で置換されているものが挙げられる。更に、ヘテロシクロアルキル基は更なる置換基を有することができる。

【0027】

前記アリール基は、芳香族環を持つ1価の基であり、2以上の環を含むことができ、前記2以上の環は、互いに結合または融合された形態で存在できる。前記ヘテロアリール基は、前記アリール基のうち一つ以上の炭素がN、O、S及びPからなる群から選択された一つ以上で置換された基を示す。一方、シクロアルキル基は、環構造を持つアルキル基を示し、前記ヘテロシクロアルキル基は、前記シクロアルキル基のうち一つ以上の炭素がN、O、S及びPからなる群から選択された一つ以上で置換された基を示す。

10

【0028】

また、本明細書の「置換もしくは非置換の」における置換基としては、下記に示す置換基で置換されることが好ましい。さらに、前記置換基に、上記に列挙した本発明に係るアルキル基、アルコキシ基、アリール基、ヘテロアリール基、シクロアルキル基、およびヘテロシクロアルキル基を含めても良いが、この場合に、置換された本発明に係るアルキル基およびアルコキシ基の炭素数の合計は1～50であり、置換された本発明に係るアリール基の炭素数の合計は6～30であり、置換された本発明に係るヘテロアリール基の合計の炭素数は2～50であり、置換された本発明に係るシクロアルキル基およびヘテロシクロアルキル基の炭素数の合計は5～50であることはいうまでもない。

20

【0029】

前記アルキル基、アルコキシ基、アリール基、ヘテロアリール基、シクロアルキル基及びヘテロシクロアルキル基が置換される場合、すなわち本明細書の「置換もしくは非置換の」におけるこれらの置換基は、-F；-Cl；-Br；-CN；-NO₂；-OH；非置換もしくは-F、-Cl、-Br、-CN、-NO₂もしくは-OHで置換された炭素数1～50のアルキル基（好ましくは炭素数1～44のアルキル基）；非置換もしくは-F、-Cl、-Br、-CN、-NO₂もしくは-OHで置換された炭素数1～50のアルコキシ基（好ましくは炭素数1～44のアルコキシ基）；非置換もしくは炭素数1～50のアルキル基（好ましくは炭素数1～44のアルキル基）、炭素数1～50のアルコキシ基（好ましくは炭素数1～44のアルコキシ基）、-F、-Cl、-Br、-CN、-NO₂もしくは-OHで置換された炭素数6～50のアリール基（好ましくは炭素数6～44のアリール基）；非置換もしくは炭素数1～50のアルキル基（好ましくは炭素数1～44のアルキル基）、炭素数1～50のアルコキシ基（好ましくは炭素数1～44のアルコキシ基）、-F、-Cl、-Br、-CN、-NO₂もしくは-OHで置換された炭素数5～50のシクロアルキル基（好ましくは炭素数5～44のシクロアルキル基）；非置換もしくは炭素数1～20（C₁-C₂₀）アルキル基、炭素数1～20（C₁-C₂₀）アルコキシ基、-F、-Cl、-Br、-CN、-NO₂または-OHで置換された炭素数5～50のヘテロシクロアルキル基（炭素数5～44のヘテロシクロアルキル基）；および-N（Z₉）（Z₁₀）で表示される基からなる群から選択された一つ以上である。このとき、前記Z₉及びZ₁₀は、それぞれ互いに独立して、水素原子、炭素数1～50のアルキル基（炭素数5～44のアルキル基）、または炭素数1～50のアルキル基（炭素数1～44のアルキル基）で置換された炭素数6～50のアリール基（炭素数6～44のアリール基）であることが好ましい。

30

40

50

【 0 0 3 0 】

本発明に係る化学式 1 中において、 R_1 、 R_2 、 R_3 、 R_4 、 R_5 、 R_6 、 R_7 及び R_8 は、それぞれ互いに独立して、水素原子、炭素数 1 ~ 50 のアルキル基、炭素数 1 ~ 50 のアルコキシ基、フェニル基、トリル基、ピフェニル基、N, N - ジフェニルアミノ基、ペンタレニル基、トリフェニルシリル基、9, 10 - ジヒドロ - 9, 10 - オルト - ベンゼノ - 2 - アントリル基、9, 9 - ジメチル - 3 - フルオレニル基、4 - N, N - ジトリルアミノフェニル基、p - (4, 5 - ジフェニルイミダゾリジン - 2 - イル - フェニル基、インデニル基、ナフチル基、ピフェニル基、アントリル基、アズレニル基、ヘプタレニル基、アセナフチレニル基、ペナレニル基、フルオレニル基、メチルアントリル基、フェナントレニル基、トリフェニレニル基、ピレニル基、クリセニル基、エチル - クリセニル基、ピセニル基、ペリレニル基、クロロペリレニル基、ペンタフェニル基、ペンタセニル基、テトラフェニレニル基、ヘキサフェニル基、ヘキサセニル基、ルピセニル基、コロネニル基、トリナフチルレニル基、ヘプタフェニル基、ヘプタセニル基、フルオレニル基、ピラントレニル基、オバレニル基、カルバゾリル基、チオフェニル基、インドリル基、ブリニル基、ベンズイミダゾリル基、キノリニル基、ベンゾチオフェニル基、パラチアジニル基、ピロリル基、ピラゾリル基、イミダゾリル基、イミダゾリニル基、オキサゾリル基、チアゾリル基、トリアゾリル基、テトラゾリル基、オキサジアゾリル基、ピリジニル基、ピリダジニル基、ピリミジニル基、ピラジニル基、チアントレニル基、シクロペンチル基、シクロヘキシル基、オキシラニル基、ピロリジニル基、ピラゾリジニル基、イミダゾリジニル基、ビペリジニル基、ビペラジニル基、モルホリニル基、ジ(炭素数 6 ~ 50 のアリール)アミノ基、トリ(炭素数 6 ~ 50 のアリール)シリル基、及びこれらの誘導体からなる群から選択されたことが好ましい。

【 0 0 3 1 】

さらに、前記 R_1 、 R_2 、 R_3 、 R_4 、 R_5 、 R_6 、 R_7 及び R_8 は、それぞれ互いに独立して、メチル、メトキシ、フェニル基、トリル基、ナフチル基、ピレニル基、フェナントレニル基、フルオレニル基、イミダゾリニル基、インドリル基、キノリニル基、ジフェニルアミノ基、2, 3 - ジ - p - トリルアミノフェニル基及びトリフェニルシリル基、9, 10 - ジヒドロ - 9, 10 - オルト - ベンゼノ - 2 - アントリル基、9, 9 - ジメチル - 3 - フルオレニル基、p - (4, 5 - ジフェニルイミダゾリジン - 2 - イル - フェニル基及びこれらの誘導体からなる群から選択されたことがより好ましい。

【 0 0 3 2 】

本明細書において、前記“誘導体”という用語は、前記羅列した基のうち一つ以上の水素原子が前述したような置換基で置換された基を示すものである。

【 0 0 3 3 】

上記化学式 1 中、X は、 $C(Z_6)(Z_7)$ 、 $N(Z_8)$ 、O、S、 SO_2 、Se、または SeO_2 であり、前記 Z_6 、 Z_7 及び Z_8 は、それぞれ互いに独立して、水素原子、置換もしくは非置換の炭素数 1 ~ 50 のアルキル基または置換もしくは非置換の炭素数 6 ~ 50 のアリール基である。このとき、X は、 CH_2 、 $C(CH_3)_2$ 、 $C(C_6H_5)_2$ 、 $N-CH_3$ 、 $N-C_6H_5$ 、O、S または SO_2 であることが好ましい。

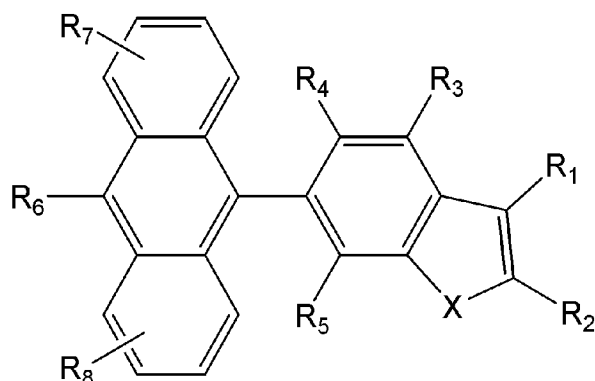
【 0 0 3 4 】

本発明に係る有機発光化合物は、望ましくは、下記化学式 2 または 3 の構造を持つ。

【 0 0 3 5 】

【化 3】

<化学式 2>

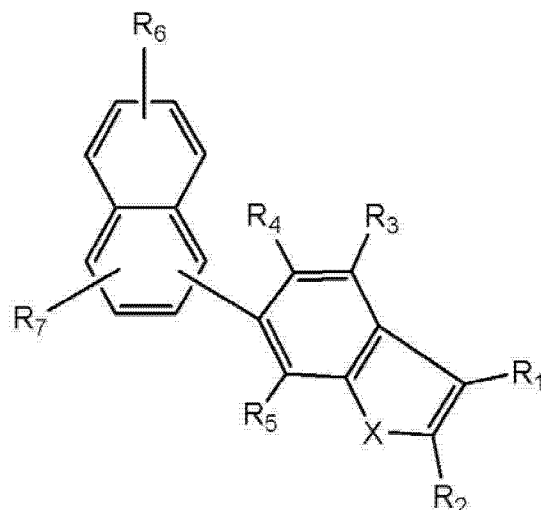


10

【 0 0 3 6 】

【化 4】

<化学式 3>



20

30

【 0 0 3 7 】

前記化学式 2 及び 3 のうち、 R_1 、 R_2 、 R_3 、 R_4 、 R_5 、 R_6 、 R_7 及び R_8 はそれぞれ互いに独立して、水素原子、ハロゲン原子、シアノ基、ニトロ基、ヒドロキシ基、置換もしくは非置換の炭素数 1 ~ 50 のアルキル基、置換もしくは非置換の炭素数 1 ~ 50 のアルコキシ基、置換もしくは非置換の炭素数 5 ~ 50 のシクロアルキル基、置換もしくは非置換の炭素数 5 ~ 50 のヘテロシクロアルキル基、置換もしくは非置換の炭素数 6 ~ 50 のアリール基、置換もしくは非置換の炭素数 2 ~ 50 のヘテロアリール基、 $-N(Z_1)(Z_2)$ または $-Si(Z_3)(Z_4)(Z_5)$ であり、前記 Z_1 、 Z_2 、 Z_3 、 Z_4 及び Z_5 は、それぞれ互いに独立して、水素原子、置換もしくは非置換の炭素数 1 ~ 50 のアルキル基、置換もしくは非置換の炭素数 6 ~ 50 のアリール基、置換もしくは非置換の炭素数 2 ~ 50 のヘテロアリール基、置換もしくは非置換の炭素数 5 ~ 50 のシクロアルキル基または置換もしくは非置換の炭素数 5 ~ 50 のヘテロシクロアルキル基であり、 X は、 $C(Z_6)(Z_7)$ 、 $N(Z_8)$ 、 O 、 S 、 SO_2 、 Se 、または SeO_2 であり、前記 Z_6 、 Z_7 及び Z_8 は、それぞれ互いに独立して、水素原子、置換または非置換の炭素数 1 ~ 50 のアルキル基または置換または非置換の炭素数 6 ~ 50 のアリール基であり、但し、前記 R_2 がアントリル基である場合は除外する。なお、前記 R_6 、 R_7 及び R_8 は、上記の R_1 、 R_2 、 R_3 、 R_4 及び R_5 と同様のアルキル基、アルコキシ基、シクロアルキル基、ヘテロシクロアルキル基、アリール基、ヘテロアリール基であって

40

50

もよいのでここでの説明は省略する。

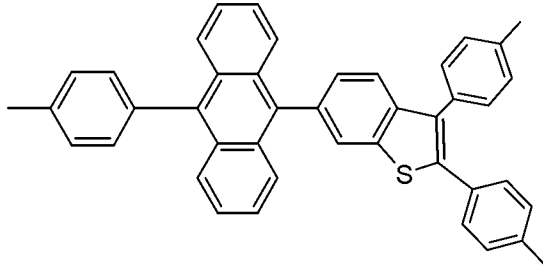
【 0 0 3 8 】

さらに詳細に本発明の一具現例によれば、本発明の有機発光化合物は、下記化学式 4 ないし 1 0 0 の少なくとも一つであってよいが、これに限定されるものではない。

【 0 0 3 9 】

【 化 5 】

<化学式 4>

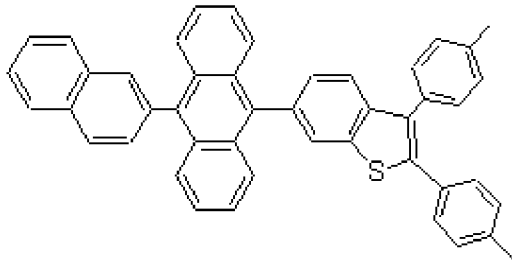


10

【 0 0 4 0 】

【 化 6 】

<化学式 5>

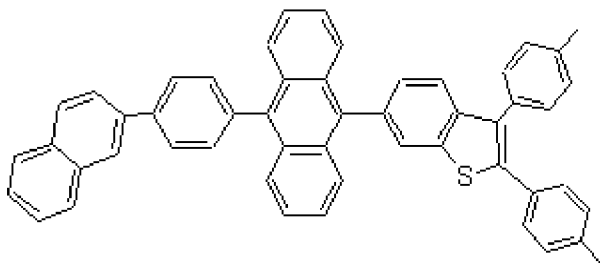


20

【 0 0 4 1 】

【 化 7 】

<化学式 6>

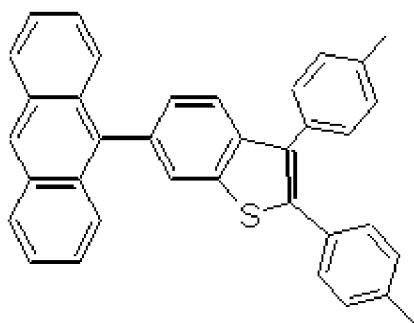


40

【 0 0 4 2 】

【化 8】

<化学式 7>

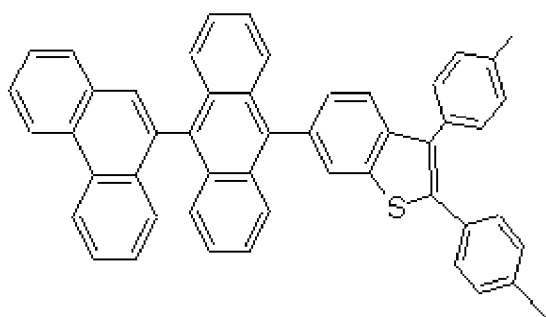


10

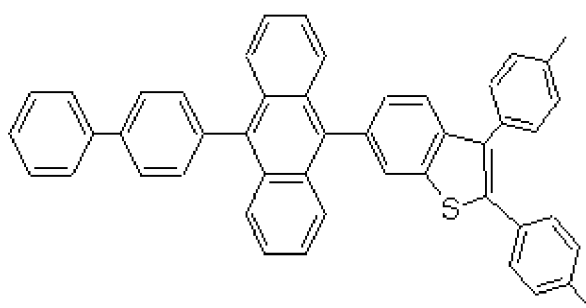
【 0 0 4 3 】

【化 9】

<化学式 8>



<化学式 9>

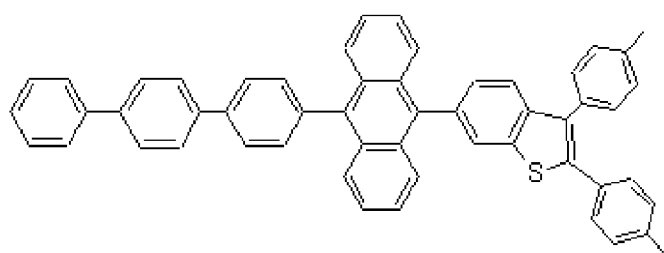


20

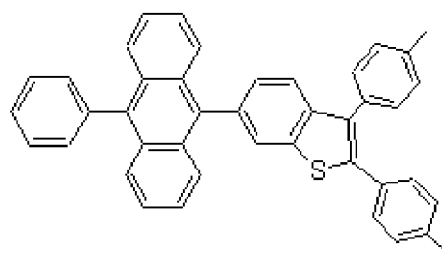
【 0 0 4 4 】

【化 1 0】

<化学式 1 0>



<化学式 1 1>

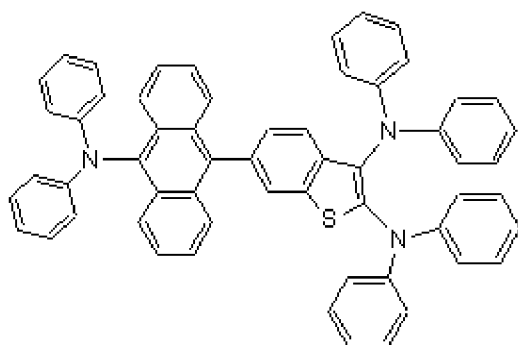


30

【 0 0 4 5 】

【化 1 1】

<化学式 1 2>

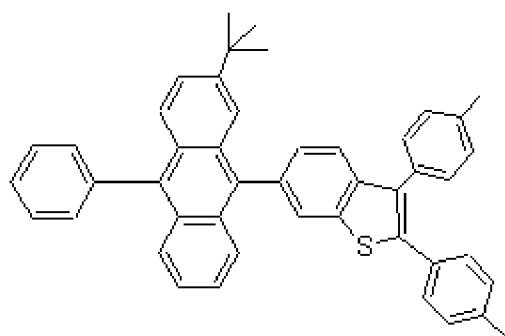


10

【 0 0 4 6】

【化 1 2】

<化学式 1 3>

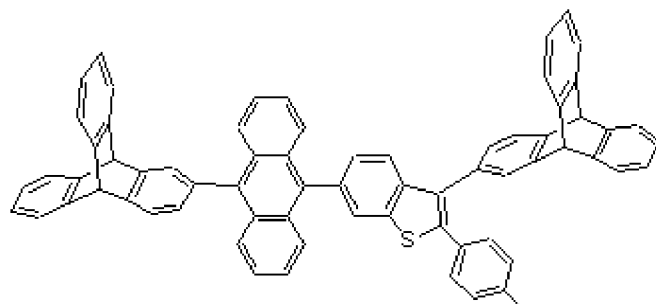


20

【 0 0 4 7】

【化 1 3】

<化学式 1 4>



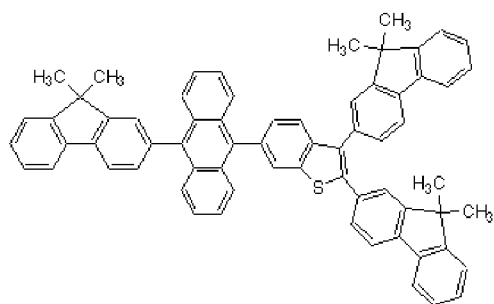
30

【 0 0 4 8】

40

【化 1 4】

<化学式 1 5>

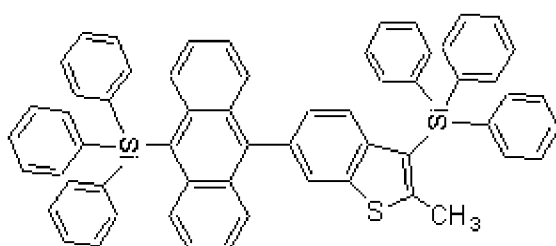


10

【 0 0 4 9】

【化 1 5】

<化学式 1 6>

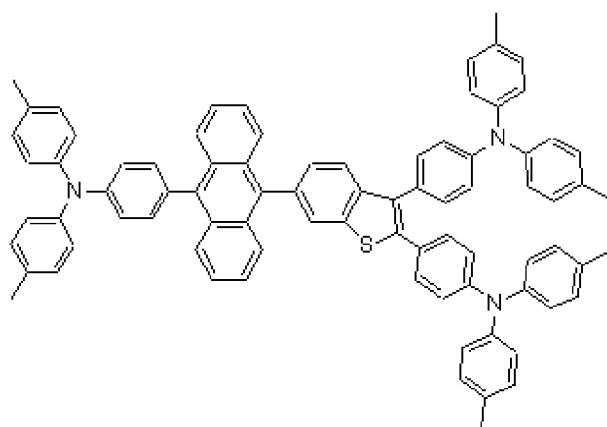


20

【 0 0 5 0】

【化 1 6】

<化学式 1 7>

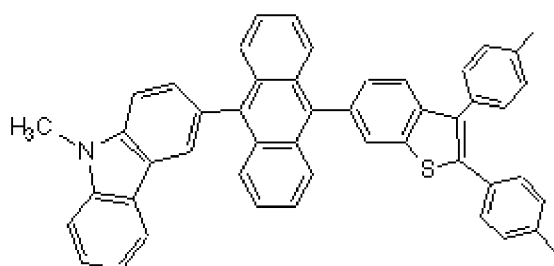


30

【 0 0 5 1】

【化 1 7】

<化学式 1 8>

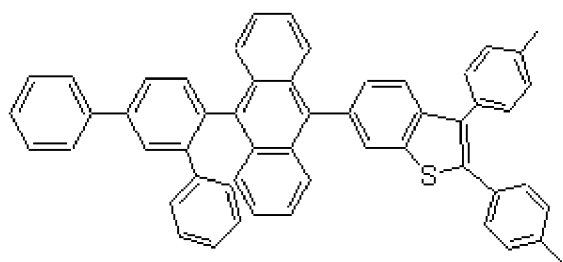


50

【 0 0 5 2 】

【 化 1 8 】

<化学式 1 9>

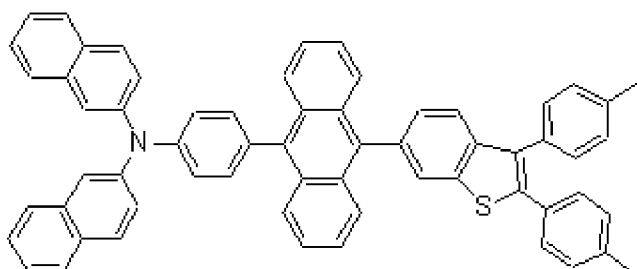


10

【 0 0 5 3 】

【 化 1 9 】

<化学式 2 0>

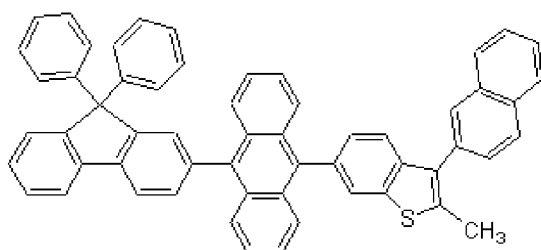


20

【 0 0 5 4 】

【 化 2 0 】

<化学式 2 1>

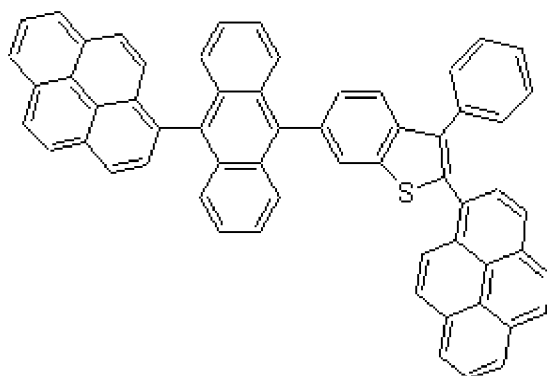


30

【 0 0 5 5 】

【 化 2 1 】

<化学式 2 2>

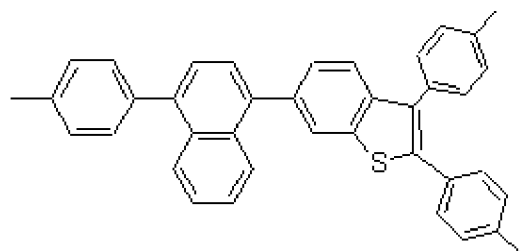


40

【 0 0 5 6 】

【化 2 2】

<化学式 2 3>

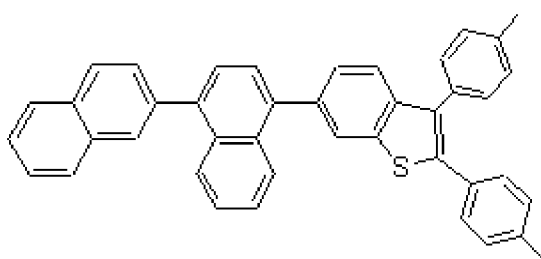


10

【 0 0 5 7】

【化 2 3】

<化学式 2 4>

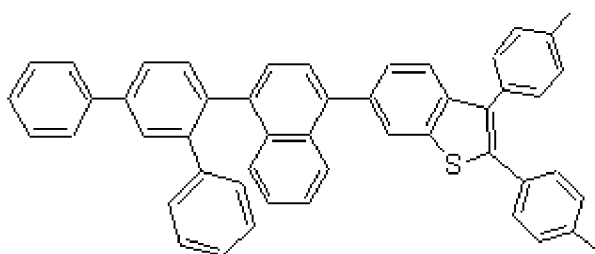


20

【 0 0 5 8】

【化 2 4】

<化学式 2 5>

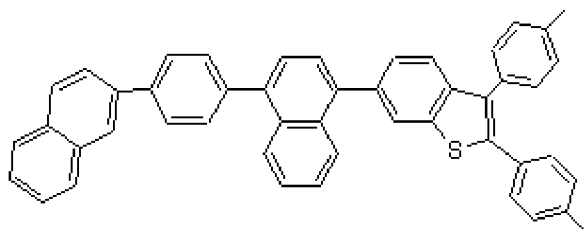


30

【 0 0 5 9】

【化 2 5】

<化学式 2 6>

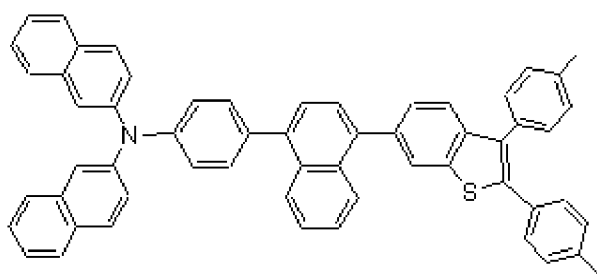


40

【 0 0 6 0】

【化 2 6】

<化学式 2 7>

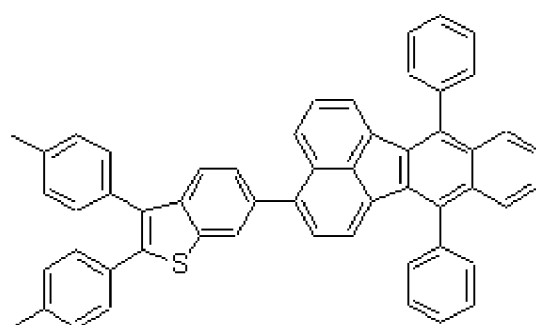


10

【 0 0 6 1】

【化 2 7】

<化学式 2 8>



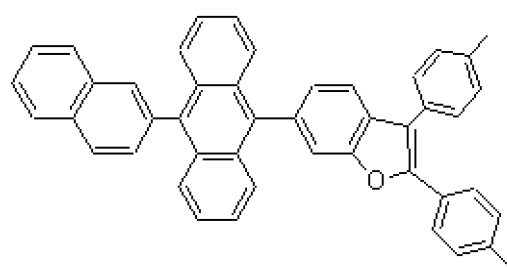
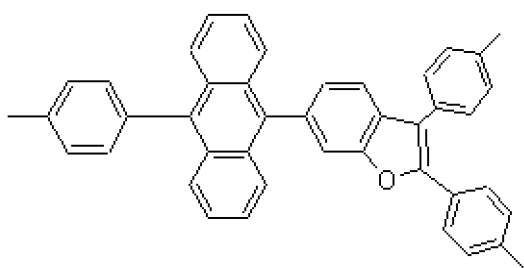
20

【 0 0 6 2】

【化 2 8】

<化学式 2 9>

<化学式 3 0>

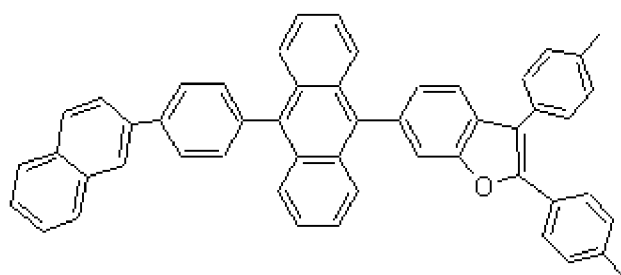


30

【 0 0 6 3】

【化 2 9】

<化学式 3 1>

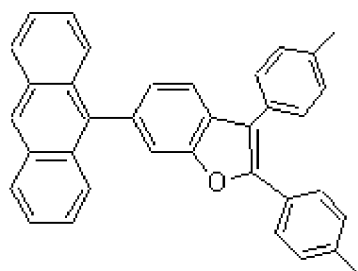


40

【 0 0 6 4】

【化 3 0】

<化学式 3 2>

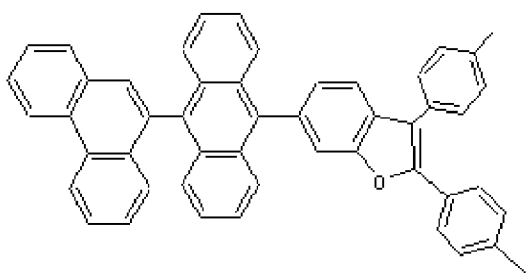


10

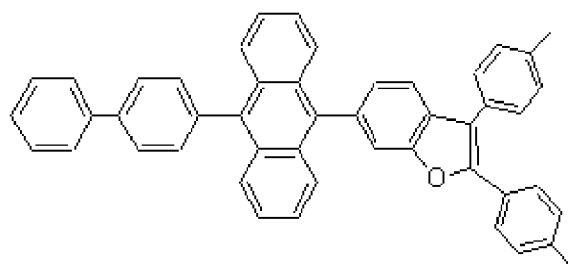
【 0 0 6 5】

【化 3 1】

<化学式 3 3>



<化学式 3 4>

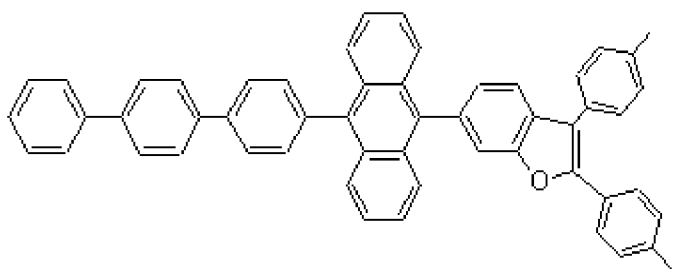


20

【 0 0 6 6】

【化 3 2】

<化学式 3 5>

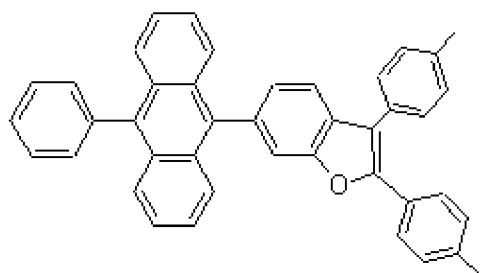


30

【 0 0 6 7】

【化 3 3】

<化学式 3 6>

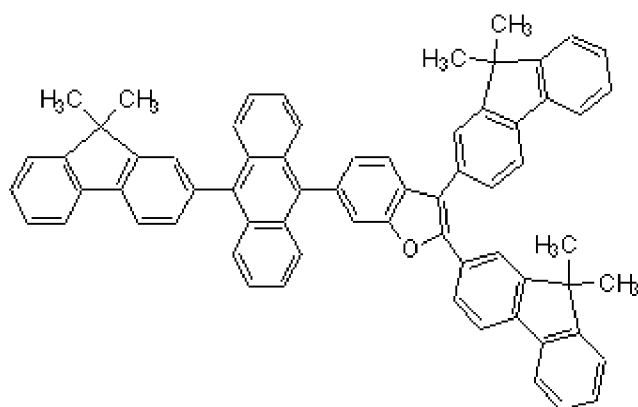


40

【 0 0 6 8】

【化 3 4】

<化学式 3 7>

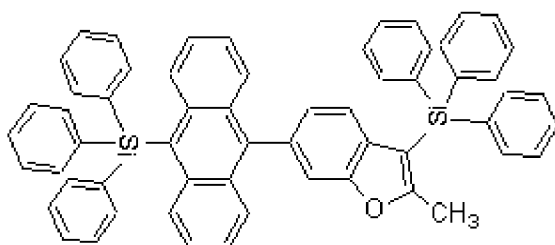


10

【 0 0 6 9 】

【化 3 5】

<化学式 3 8>

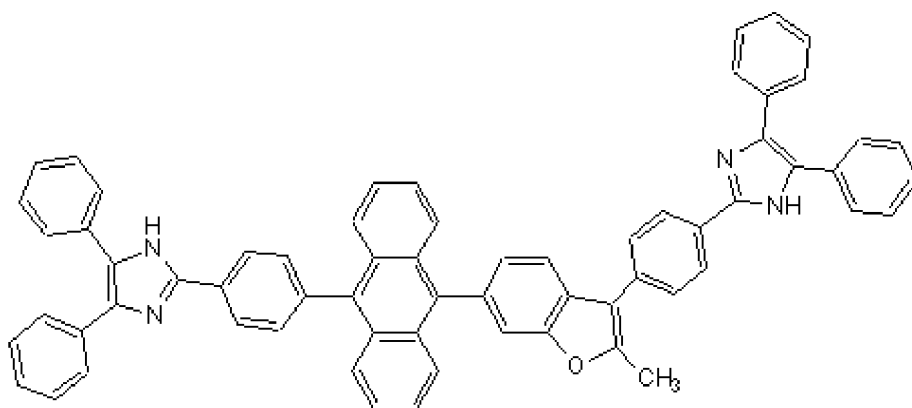


20

【 0 0 7 0 】

【化 3 6】

<化学式 3 9>



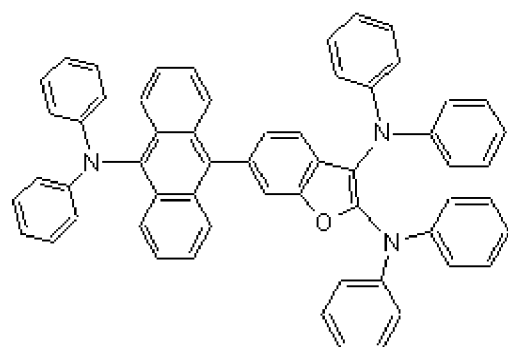
30

【 0 0 7 1 】

40

【化 3 7】

<化学式 4 0>

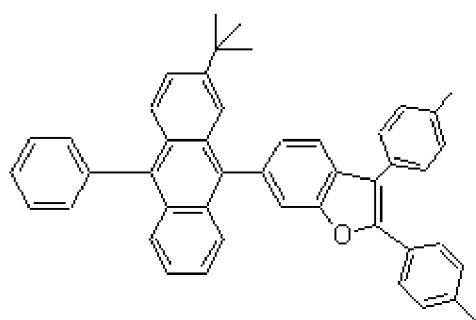


10

【 0 0 7 2】

【化 3 8】

<化学式 4 1>

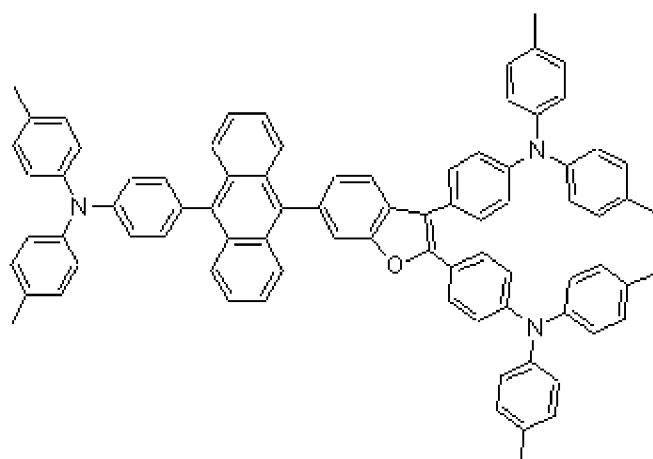


20

【 0 0 7 3】

【化 3 9】

<化学式 4 2>



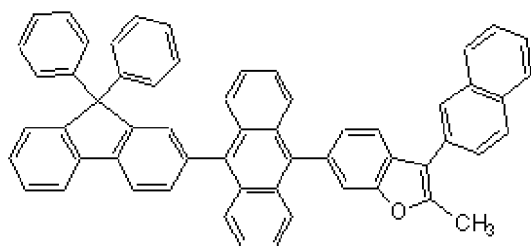
30

40

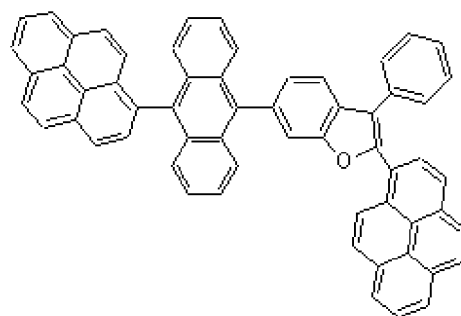
【 0 0 7 4】

【化 4 0】

<化学式 4 3>



<化学式 4 4>

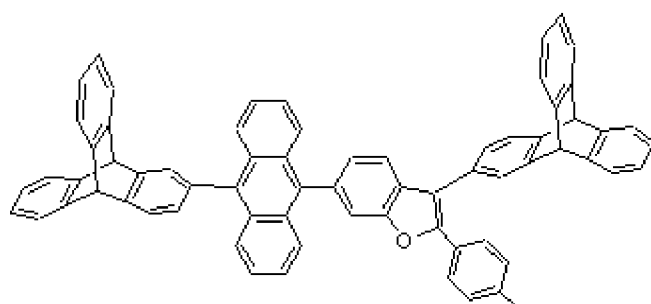


10

【 0 0 7 5】

【化 4 1】

<化学式 4 5>

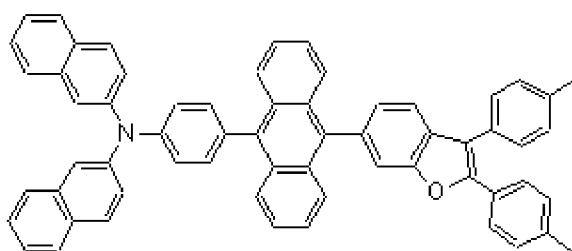


20

【 0 0 7 6】

【化 4 2】

<化学式 4 6>

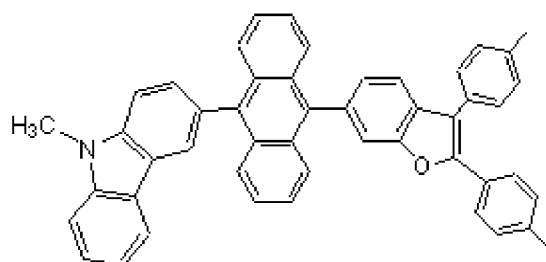


30

【 0 0 7 7】

【化 4 3】

<化学式 4 7>

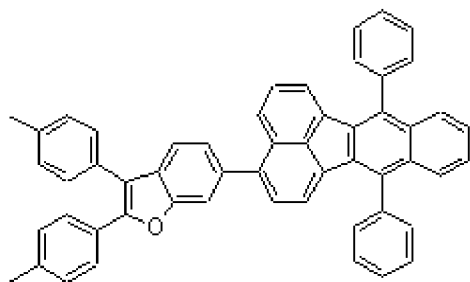


40

【 0 0 7 8】

【化 4 4】

<化学式 4 8>

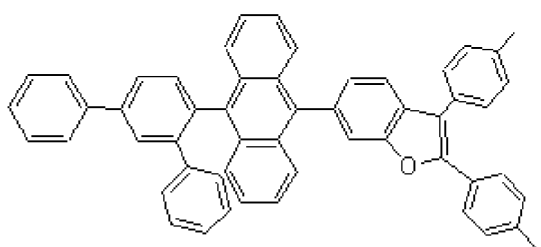


10

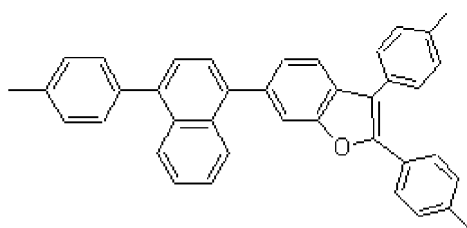
【 0 0 7 9】

【化 4 5】

<化学式 4 9>



<化学式 5 0>

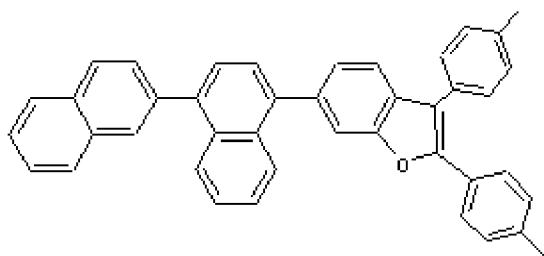


20

【 0 0 8 0】

【化 4 6】

<化学式 5 1>

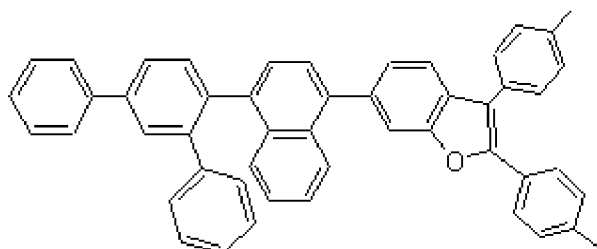


30

【 0 0 8 1】

【化 4 7】

<化学式 5 2>

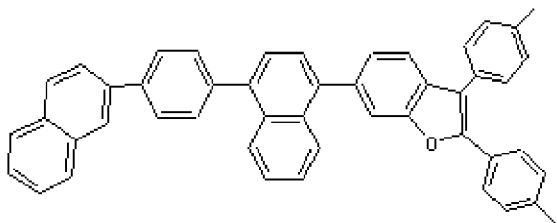


40

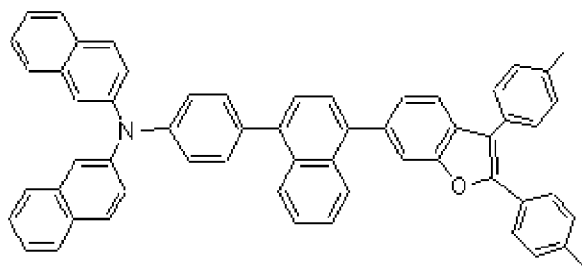
【 0 0 8 2】

【化 4 8】

<化学式 5 3>



<化学式 5 4>

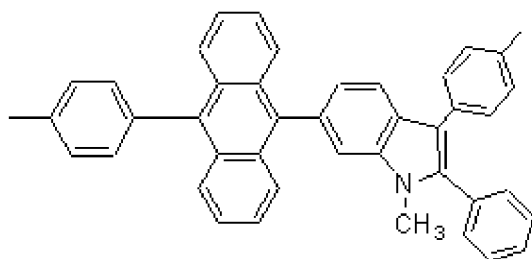


10

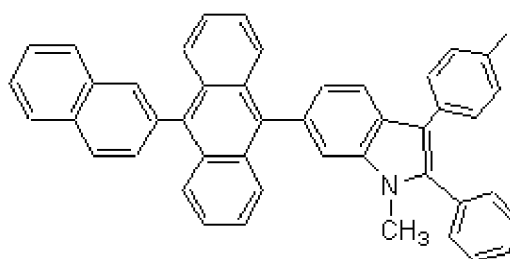
【 0 0 8 3】

【化 4 9】

<化学式 5 5>



<化学式 5 6>

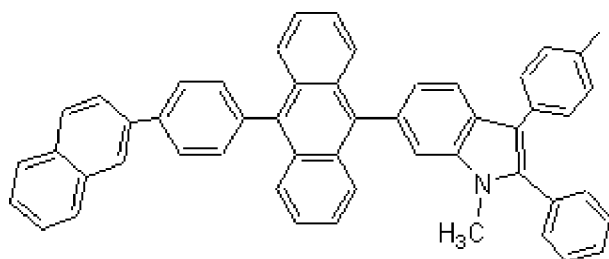


20

【 0 0 8 4】

【化 5 0】

<化学式 5 7>

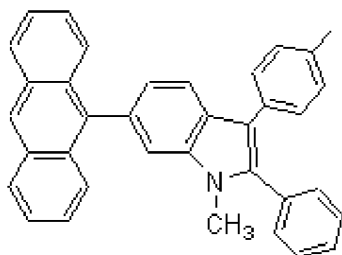


30

【 0 0 8 5】

【化 5 1】

<化学式 5 8>

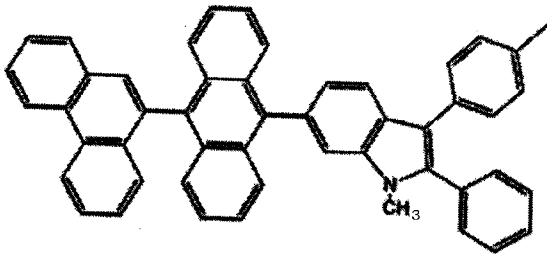


40

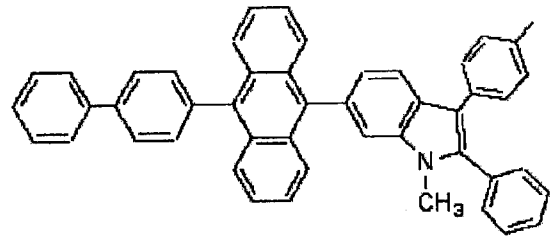
【 0 0 8 6】

【化 5 2】

<化学式 5 9>



<化学式 6 0>

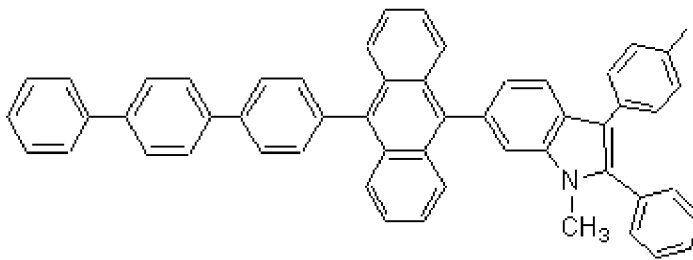


10

【 0 0 8 7】

【化 5 3】

<化学式 6 1>

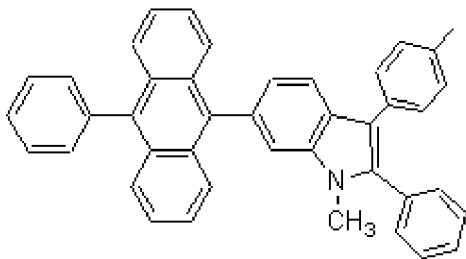


20

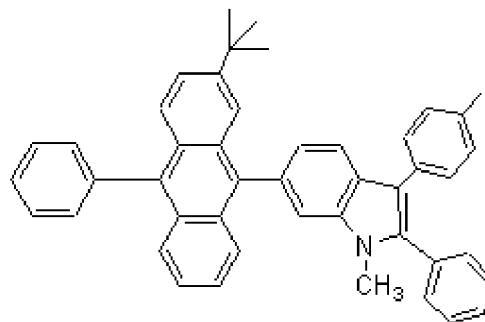
【 0 0 8 8】

【化 5 4】

<化学式 6 2>



<化学式 6 3>

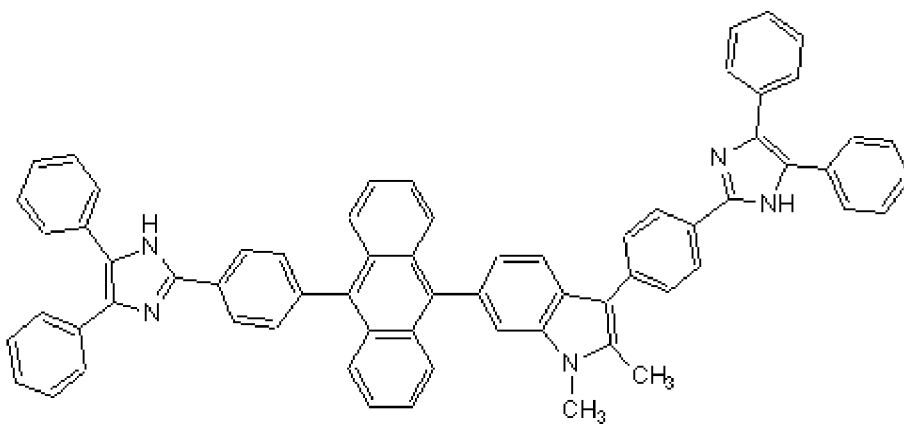


30

【 0 0 8 9】

【化 5 5】

<化学式 6 4>



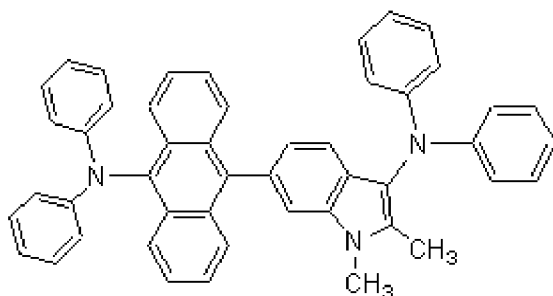
40

50

【 0 0 9 0 】

【 化 5 6 】

<化学式 6 5>

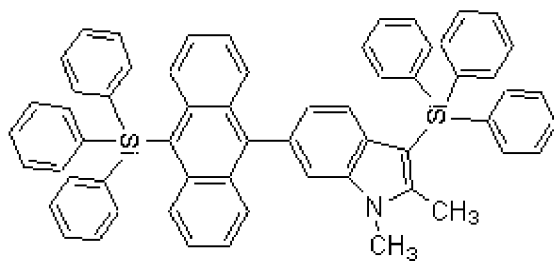


10

【 0 0 9 1 】

【 化 5 7 】

<化学式 6 6>

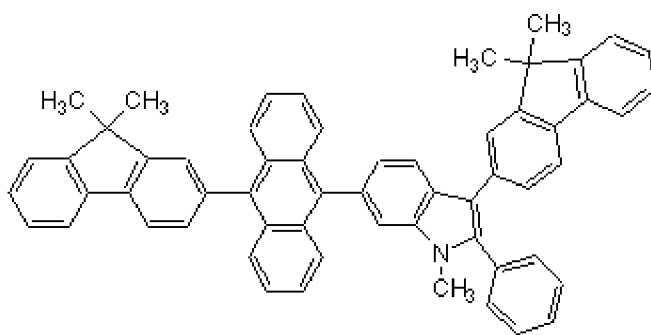


20

【 0 0 9 2 】

【 化 5 8 】

<化学式 6 7>

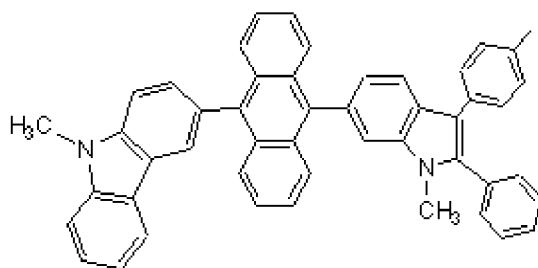


30

【 0 0 9 3 】

【 化 5 9 】

<化学式 6 8>

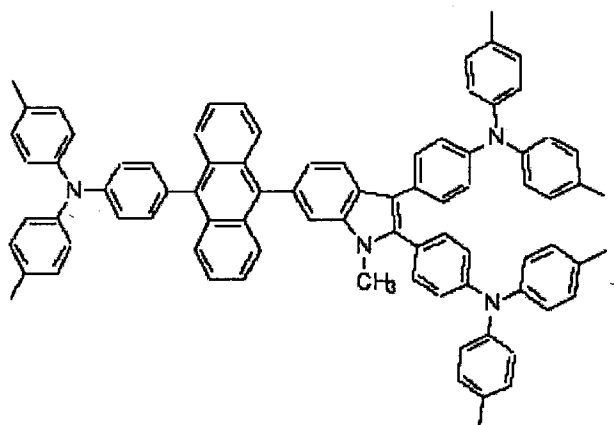


40

【 0 0 9 4 】

【化 6 0】

<化学式 6 9>

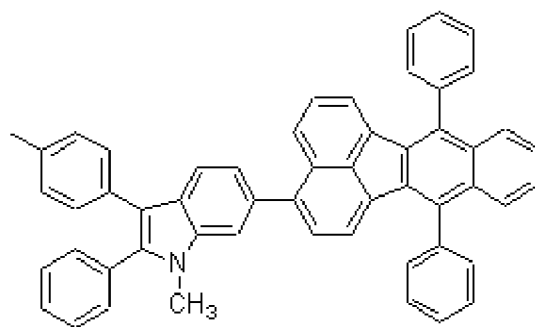


10

【 0 0 9 5】

【化 6 1】

<化学式 7 0>

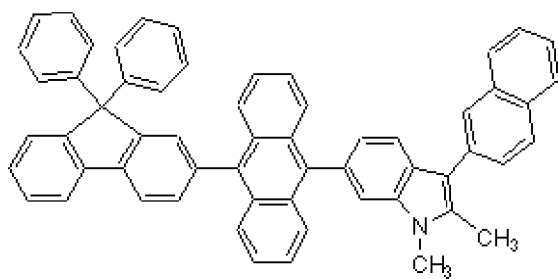


20

【 0 0 9 6】

【化 6 2】

<化学式 7 1>

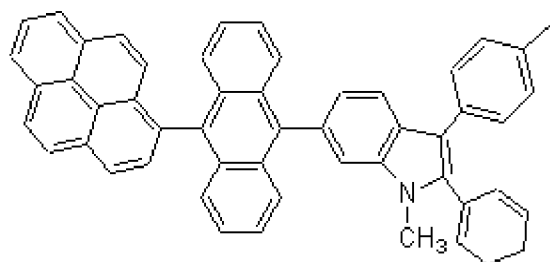


40

【 0 0 9 7】

【化 6 3】

<化学式 7 2>

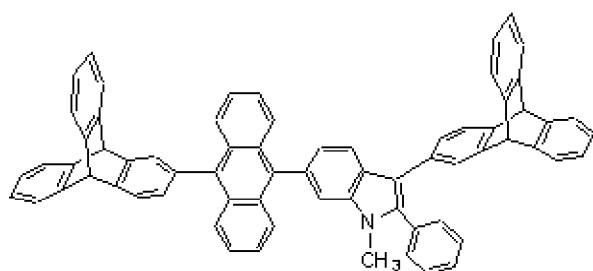


10

【 0 0 9 8】

【化 6 4】

<化学式 7 3>

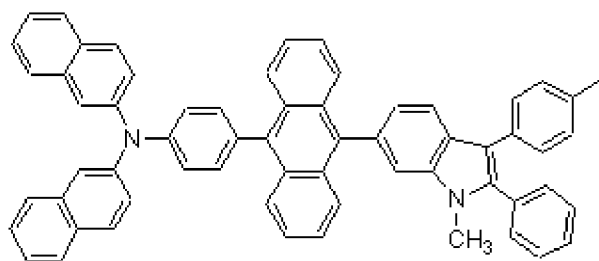


20

【 0 0 9 9】

【化 6 5】

<化学式 7 4>

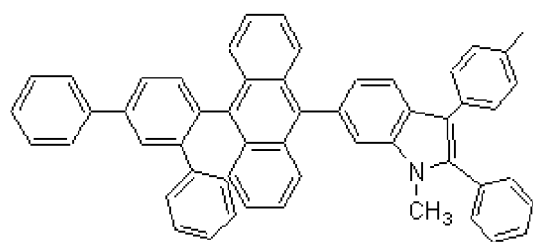


30

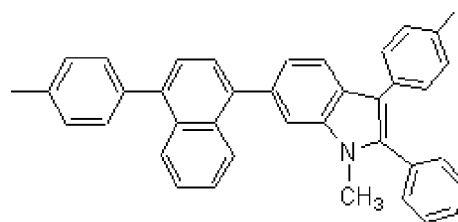
【 0 1 0 0】

【化 6 6】

<化学式 7 5>



<化学式 7 6>

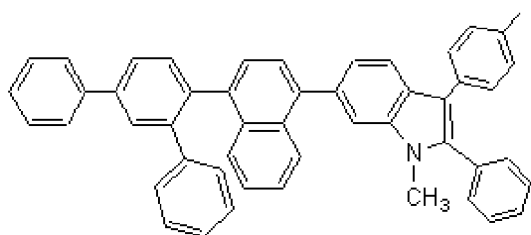


40

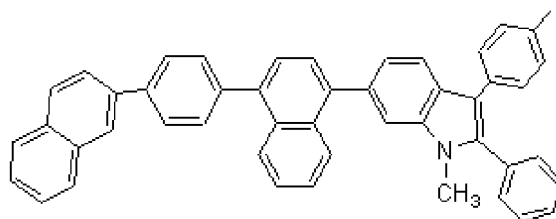
【 0 1 0 1】

【化 6 7】

<化学式 7 7>



<化学式 7 8>

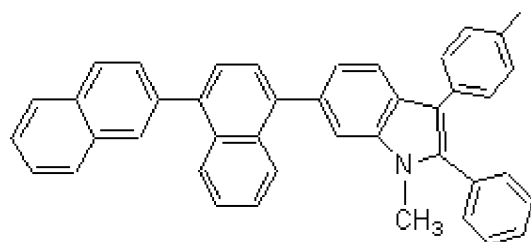


10

【 0 1 0 2】

【化 6 8】

<化学式 7 9>

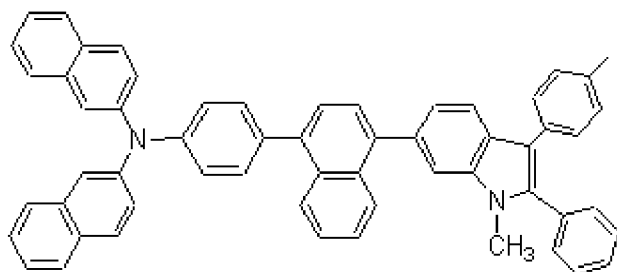


20

【 0 1 0 3】

【化 6 9】

<化学式 8 0>

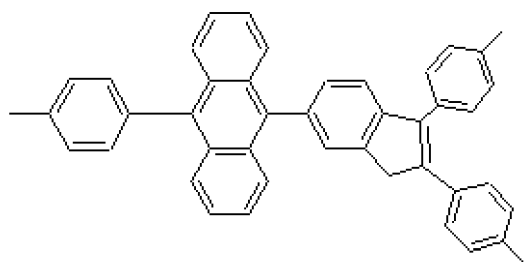


30

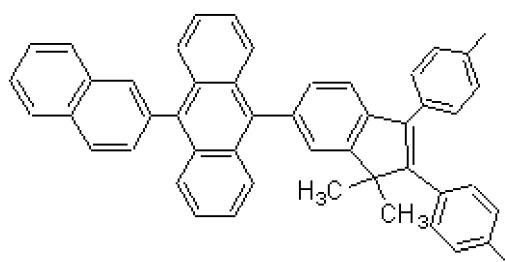
【 0 1 0 4】

【化 7 0】

<化学式 8 1>



<化学式 8 2>

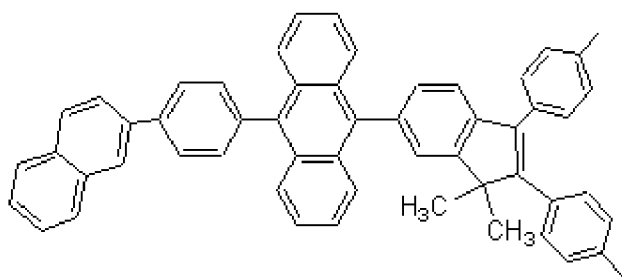


40

【 0 1 0 5】

【化 7 1】

<化学式 8 3>

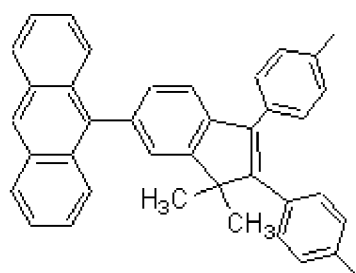


10

【 0 1 0 6】

【化 7 2】

<化学式 8 4>

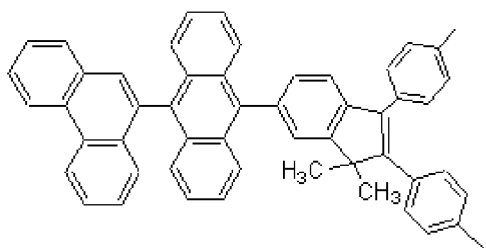


20

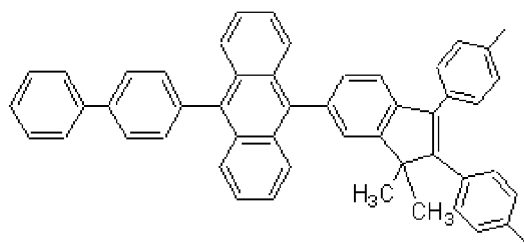
【 0 1 0 7】

【化 7 3】

<化学式 8 5>



<化学式 8 6>

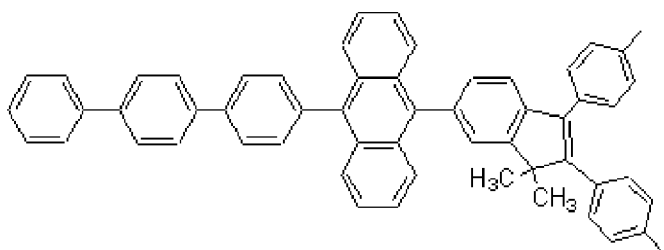


30

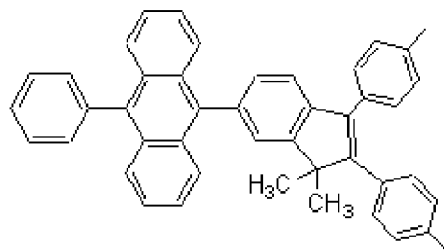
【 0 1 0 8】

【化 7 4】

<化学式 8 7>



<化学式 8 8>

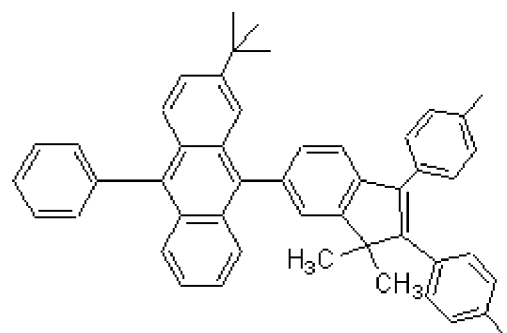


40

【 0 1 0 9】

【化 7 5】

<化学式 8 9>

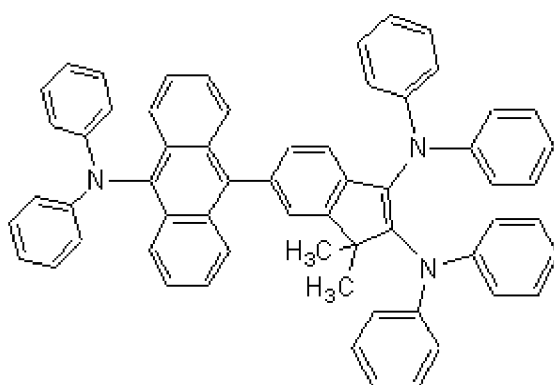


10

【 0 1 1 0】

【化 7 6】

<化学式 9 0>

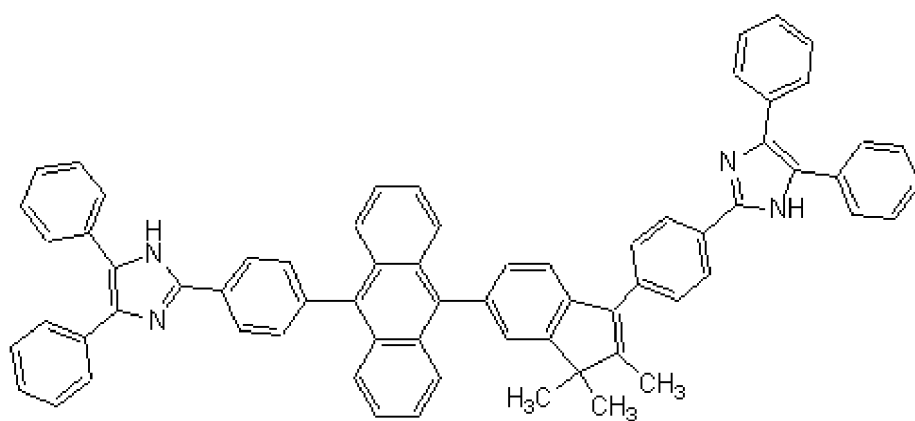


20

【 0 1 1 1】

【化 7 7】

<化学式 9 1>

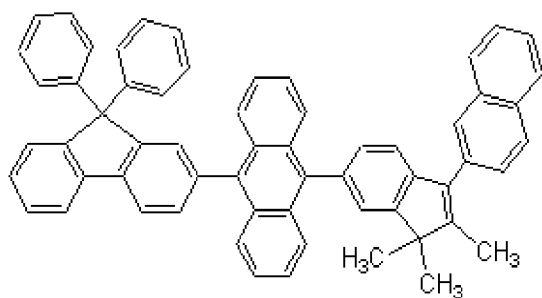


40

【 0 1 1 2】

【化 7 8】

<化学式 9 2>

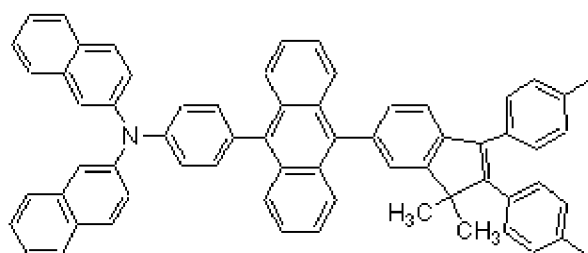


10

【 0 1 1 3】

【化 7 9】

<化学式 9 3>

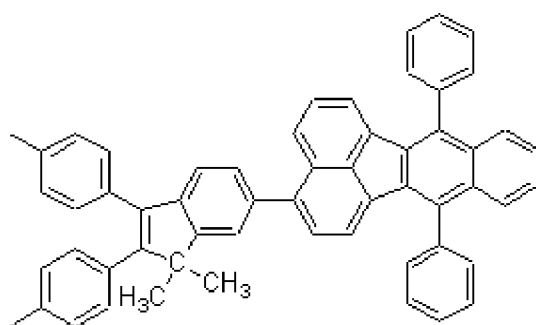


20

【 0 1 1 4】

【化 8 0】

<化学式 9 4>

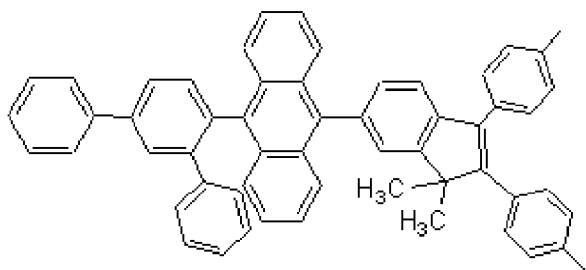


30

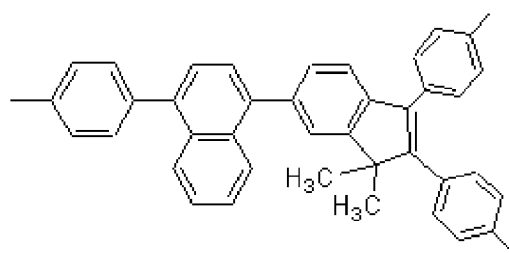
【 0 1 1 5】

【化 8 1】

<化学式 9 5>



<化学式 9 6>

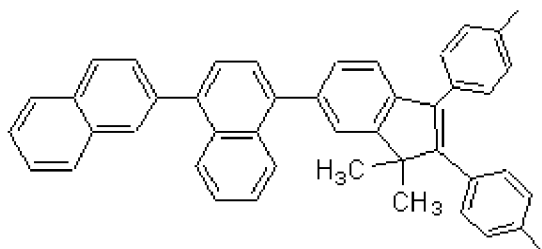


40

【 0 1 1 6】

【化 8 2】

<化学式 9 7>

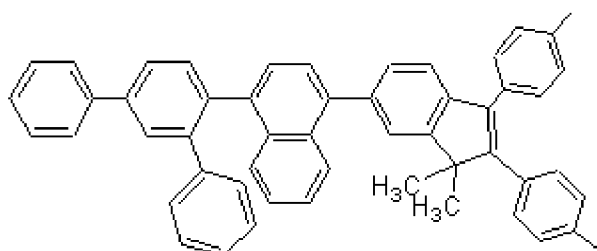


10

【 0 1 1 7】

【化 8 3】

<化学式 9 8>



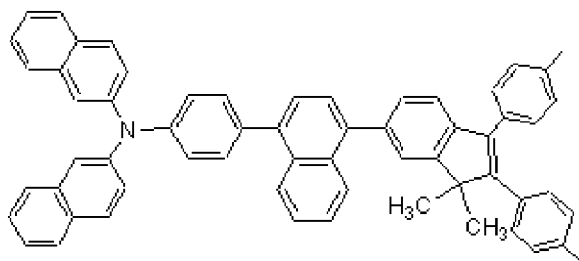
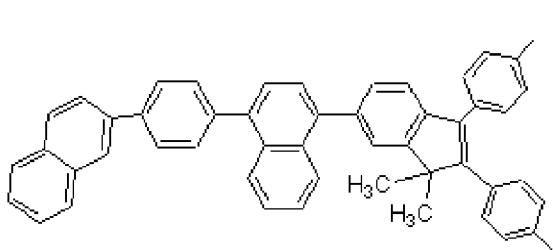
20

【 0 1 1 8】

【化 8 4】

<化学式 9 9>

<化学式 1 0 0>



30

【 0 1 1 9】

前記化学式 1 で表示される本発明による化合物は通常の方法を利用して合成でき、前記化合物のさらに詳細な合成経路は、下記の実施例における合成例の反応式を参照する。

【 0 1 2 0】

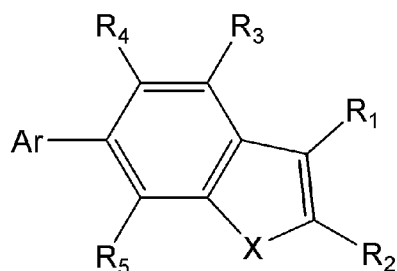
本発明に係る有機発光化合物を含む有機発光素子は、第 1 電極と、第 2 電極と、前記第 1 電極と前記第 2 電極との間に介在した有機膜層を少なくとも 1 層備える有機発光素子であり、前記有機膜は、下記化学式 1 で表示される化合物を一層以上含むことが好ましい。

40

【 0 1 2 1】

【化 8 5】

<化学式 1>



10

【0 1 2 2】

前記式中、Arは、置換または非置換の炭素数6～50のアリール基であり、R₁、R₂、R₃、R₄及びR₅は、それぞれ互いに独立して、水素原子、ハロゲン原子、シアノ基、ニトロ基、ヒドロキシル基、置換もしくは置換の炭素数1～50のアルキル基、置換もしくは非置換の炭素数1～50のアルコキシ基、置換もしくは非置換の炭素数5～50のシクロアルキル基、置換もしくは非置換の炭素数5～50のヘテロシクロアルキル基、置換もしくは非置換の炭素数6～50のアリール基、置換もしくは非置換の炭素数2～50のヘテロアリール基、-N(Z₁)(Z₂)または-Si(Z₃)(Z₄)(Z₅)であり、前記Z₁、Z₂、Z₃、Z₄及びZ₅はそれぞれ互いに独立して、水素原子、置換もしくは非置換の炭素数1～50のアルキル基、置換もしくは非置換の炭素数6～50のアリール基、置換もしくは非置換の炭素数2～50のヘテロアリール基、置換もしくは非置換の炭素数5～50のシクロアルキル基、または置換もしくは非置換の炭素数5～50のヘテロシクロアルキル基であり、Xは、C(Z₆)(Z₇)、N(Z₈)、O、S、SO₂、Se、またはSeO₂であり、前記Z₆、Z₇及びZ₈は、それぞれ互いに独立して、水素原子、置換もしくは非置換の炭素数1～50のアルキル基、または置換もしくは非置換の炭素数6～50のアリール基であり、但し、前記でR₂がアントリル基である場合は除外する。

20

【0 1 2 3】

本発明に係る前記化学式1で表示される化合物は、OLEDのうち第1電極と第2電極との間に介在された有機膜をなす物質が好ましい。前記化学式1の化合物は、OLEDの有機膜、特に発光層、正孔注入層または正孔輸送層に好適に使われ、ホスト材料だけでなくドーパント材料としても使われる。

30

【0 1 2 4】

前記化学式1の化合物は、OLEDの有機膜、特に発光層、正孔注入層または正孔輸送層に好適に使われる。

すなわち、本発明に係る有機膜層は、発光層、正孔注入層および正孔輸送層からなる群から選択される少なくとも一つの層であることが好ましく、前記第1電極と第2電極との間に、発光層、正孔注入層、正孔輸送層、電子阻止層、正孔阻止層、電子輸送層及び電子注入層からなる群から選択された一つ以上の層をさらに備えることがより好ましい。

40

【0 1 2 5】

本発明によるOLEDは、溶液塗布法で製造する場合、有機膜の安定性が落ちる従来のOLEDの場合とは異なって、優秀な溶解性及び熱安定性を持ちながらも安定な有機膜の形成が可能な有機発光化合物を含み、優秀な駆動電圧及び色純度などの向上した発光特性を提供できる。

【0 1 2 6】

本発明によるOLEDの構造は非常に多様である。前記第1電極と第2電極との間に正孔注入層、正孔輸送層、正孔阻止層、電子阻止層、電子輸送層及び電子注入層からなる群から選択された一つ以上の層をさらに備えることができる。

【0 1 2 7】

50

より具体的に、本発明によるO L E Dの具現例は、図1 Aないし図1 Cを参照する。図1 AのO L E Dは、第1電極/正孔注入層/発光層/電子輸送層/電子注入層/第2電極から形成される構造を持ち、図1 BのO L E Dは、第1電極/正孔注入層/正孔輸送層/発光層/電子輸送層/電子注入層/第2電極から形成される構造を持つ。また、図1 CのO L E Dは、第1電極/正孔注入層/正孔輸送層/発光層/正孔阻止層/電子輸送層/電子注入層/第2電極の構造を持つ。この時、前記発光層、正孔注入層及び正孔輸送層のうち一つ以上は、本発明による化合物を含むことができる。

【0128】

本発明によるO L E Dの発光層は、赤色、緑色、青色または白色を含む燐光または蛍光ドーパントを含むことができる。このうち、前記燐光ドーパントは、I r、P t、O s、T i、Z r、H f、E u、T b及びT mからなる群から選択された一つ以上の元素を含む有機金属化合物であることが好ましい。

10

【0129】

以下、本発明によるO L E Dの製造方法を、図1 Cに図示されたO L E Dを参照して説明する。

【0130】

まず、基板の上部に大きい仕事関数を持つ第1電極用物質を蒸着法またはスパッタリング法により形成して第1電極を形成する。前記第1電極は、アノードであることが好ましい。ここで、基板としては、通常的なO L E Dで使われる基板を使用するが、機械的強度、熱的安定性、透明性、表面平滑性、取扱の容易性及び防水性の優秀なガラス基板または透明プラスチック基板が望ましい。第1電極用物質としては、透明で伝導性の優秀な酸化インジウムスズ(I T O)、酸化インジウム亜鉛(I Z O)、酸化スズ(S n O₂)、酸化亜鉛(Z n O)などを使用する。

20

【0131】

次いで、前記第1電極上部に真空蒸着法、スピンコーティング法、キャスト法、L B法のような多様な方法を利用して正孔注入層(H I L)を形成できる。

【0132】

真空蒸着法によって正孔注入層を形成する場合、その蒸着条件は、正孔注入層の材料として使用する化合物、目的とする正孔注入層の構造及び熱的特性によって異なるが、一般的に蒸着温度100ないし500、真空度10⁻⁸ないし10⁻³ t o r r、蒸着速度0.01ないし100 / s e c、膜厚さは通常10ないし5 μ m範囲で適切に選択することが望ましい。

30

【0133】

上記のスピンコーティング法によって正孔注入層を形成する場合、そのコーティング条件は、正孔注入層の材料として使用する化合物、目的とする正孔注入層の構造及び熱的特性によって異なるが、約2000 r p mないし5000 r p mのコーティング速度、コーティング後、溶媒除去のための熱処理温度は、約80ないし200の温度範囲で適切に選択することが望ましい。

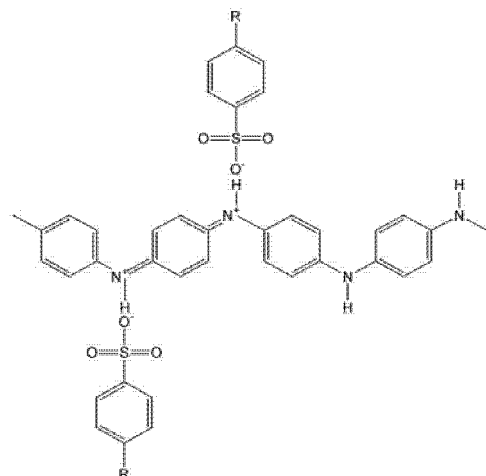
【0134】

前記正孔注入層の物質は、前述したような化学式1を持つ化合物でありうる。または、例えば、米国特許第4,356,429号明細書に開示された銅フタロシアニンなどのフタロシアニン化合物またはA d v a n c e d M a t e r i a l, 6, p. 677(1994)に記載されているスターバースト型アミン誘導体類であるT C T A、m - M T D A T A、m - M T D A P B、溶解性のある伝導性高分子であるP a n i / D B S A(ポリアニリン/ドデシルベンゼンスルホネート)またはP E D O T / P S S(ポリ(3,4-エチレンジオキシチオフエン)/ポリ(4-スチレンスルホネート))、P a n i / C S A(ポリアニリン/カンフルスルホネート)またはP A N I / P S S(ポリアニリン/ポリ(4-スチレンスルホネート))のような公知の正孔注入物質を使用できる。

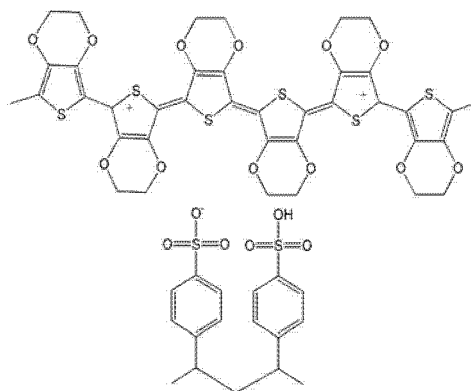
40

【0135】

【化 8 6】



P a n i / D B S A



P E D O T / P S S

10

【 0 1 3 6】

前記正孔注入層の厚さは、約 100 ないし 10000 が好ましく、より好ましくは、100 ないし 1000 でありうる。前記正孔注入層の厚さが 100 未満である場合、正孔注入特性が低下し、前記正孔注入層の厚さが 10000 を超過する場合、駆動電圧が上昇するためである。

20

【 0 1 3 7】

次いで、前記正孔注入層の上部に真空蒸着法、スピンコーティング法、キャスト法、LB法のような多様な方法を利用して正孔輸送層（HTL）を形成できる。真空蒸着法及びスピンコーティング法によって正孔輸送層を形成する場合、その蒸着条件及びコーティング条件は使用する化合物によって異なるが、一般的に正孔注入層の形成とほぼ同じ条件範囲中で選択される。

【 0 1 3 8】

前記正孔輸送層物質は、前述したような化学式 1 を持つ化合物であってもよい。または、例えば、N-フェニルカルバゾール、ポリビニルカルバゾールなどのカルバゾール誘導体、N,N'-ビス(3-メチルフェニル)-N,N'-ジフェニル-[1,1'-ビフェニル]-4,4'-ジアミン(TPD)、N,N'-ジ(ナフタレン-1-イル)-N,N'-ジフェニルベンジジン(-NPD)などの芳香族縮合環を持つ通常的なアミン誘導体のような公知の正孔輸送物質を使用できる。

30

【 0 1 3 9】

前記正孔輸送層の厚さは、約 50 ないし 1000 、望ましくは 100 ないし 600 でありうる。前記正孔輸送層の厚さが 50 未満である場合、正孔輸送特性が低下し、前記正孔輸送層の厚さが 1000 を超過する場合、駆動電圧が上昇するためである。

【 0 1 4 0】

次いで、前記正孔輸送層の上部に真空蒸着法、スピンコーティング法、キャスト法、LB法のような方法を利用して発光層（EML）を形成できる。真空蒸着法及びスピンコーティング法により発光層を形成する場合、その蒸着条件は使用する化合物によって異なるが、一般的に正孔注入層の形成とほぼ同じ条件範囲内で選択される。

40

【 0 1 4 1】

前記発光層は、前述したように本発明による化学式 1 の化合物を含むことができる。この時、化学式 1 の化合物に適した公知のホスト材料と共に使われるか、公知のドーパント材料と共に使われる。前記化学式 1 の化合物を単独で使用することもできる。ホスト材料の場合、例えば、Alq3またはCBP(4,4'-N,N'-ジカルバゾール-ビフェニル)、またはPVK(ポリ(n-ビニルカルバゾール))などを使用できる。ドーパント材料の場合、蛍光ドーパントとしては、出光社製のIDE102、IDE105及び

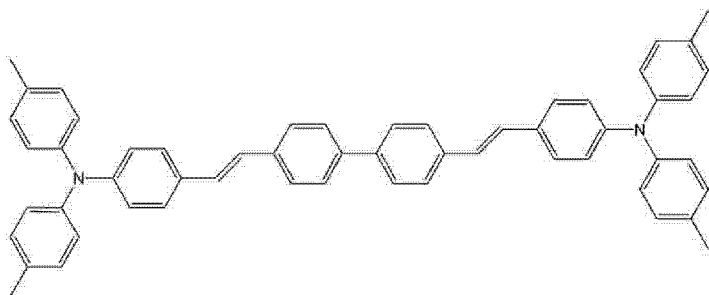
50

林原社製の C 5 4 5 T などを使用でき、燐光ドーパントとしては、赤色燐光ドーパント P t O E P、UDC 社製の R D 6 1、緑色燐光ドーパント I r (P P y) 3 (P P y = 2 - フェニルピリジン)、青色燐光ドーパントである F 2 I r p i c、UDC 社の赤色燐光ドーパント R D 6 1 などを使用できる。下記の化学式 1 0 1 は、ドーパントとして使用可能な D P A V B i の構造を表す。

【 0 1 4 2 】

【 化 8 7 】

<化学式 1 0 1>



10

【 0 1 4 3 】

ドーピング濃度は特別に制限されないが、通常的にホスト 1 0 0 質量部を基準として前記ドーパントの含有量は 0 . 0 1 ~ 1 5 質量部である。

20

【 0 1 4 4 】

前記発光層の厚さは、約 1 0 0 ないし 1 0 0 0 、望ましくは 2 0 0 ないし 6 0 0 でありうる。前記発光層の厚さが 1 0 0 未満である場合、発光特性が低下し、前記発光層の厚さが 1 0 0 0 を超過する場合、駆動電圧が上昇するためである。

【 0 1 4 5 】

発光層に燐光ドーパントと共に使用する場合には、三重項励起子または正孔が電子輸送層に広がる現象を防止するために、前記正孔輸送層の上部に真空蒸着法、スピンコーティング法、キャスト法、LB法のような方法を利用して正孔阻止層 (H B L) を形成できる。真空蒸着法及びスピンコーティング法により正孔阻止層を形成する場合、その条件は使用する化合物によって異なるが、一般的に正孔注入層の形成とほぼ同じ条件範囲内で選択される。使用可能な公知の正孔阻止材料、例えば、オキサジアゾール誘導体やトリアゾール誘導体、フェナントロリン誘導体、B C Pなどを挙げることができる。

30

【 0 1 4 6 】

前記正孔阻止層の厚さは約 5 0 ないし 1 0 0 0 、望ましくは 1 0 0 ないし 3 0 0 でありうる。前記正孔阻止層の厚さが 5 0 未満である場合、正孔阻止特性が低下し、前記正孔阻止層の厚さが 1 0 0 0 を超過する場合、駆動電圧が上昇するためである。

【 0 1 4 7 】

次いで、電子輸送層 (E T L) を真空蒸着法、またはスピンコーティング法、キャスト法などの多様な方法を利用して形成する。真空蒸着法及びスピンコーティング法により電子輸送層を形成する場合、その条件は使用する化合物によって異なるが、一般的に正孔注入層の形成とほぼ同じ条件範囲内で選択される。前記電子輸送層材料は、電子注入電極 (カソード) から注入された電子を安定的に輸送する機能を果たすものであって、キノリン誘導体、特にトリス (8 - キノリノレート) アルミニウム (A l q 3)、T A Z、B a l qのような公知の材料を使用することもできる。

40

【 0 1 4 8 】

前記電子輸送層の厚さは、約 1 0 0 ないし 1 0 0 0 、望ましくは 2 0 0 ないし 5 0 0 でありうる。前記電子輸送層の厚さが 1 0 0 未満である場合、電子輸送特性が低下し、前記電子輸送層の厚さが 1 0 0 0 を超過する場合、駆動電圧が上昇するためである。

50

【0149】

また、電子輸送層の上部に陰極から電子の注入を容易にする機能を持つ物質である電子注入層(EIL)が積層され、これは特別に材料を制限しない。

【0150】

電子注入層としては、LiF、NaCl、CsF、Li₂O、BaOのような電子注入層形成材料として公知の任意の物質を利用できる。前記電子注入層の蒸着条件は使用する化合物によって異なるが、一般的に正孔注入層の形成とほぼ同じ条件範囲内で選択される。

【0151】

前記電子注入層の厚さは、約1 nmないし100 nm、望ましくは5 nmないし50 nmでありうる。前記電子注入層の厚さが1 nm未満である場合、電子注入特性が低下し、前記電子注入層の厚さが100 nmを超過する場合、駆動電圧が上昇するためである。 10

【0152】

最後に、電子注入層の上部に真空蒸着法やスパッタリング法などの方法を利用して第2電極を形成できる。前記第2電極は、カソードとして使われうる。前記第2電極形成用金属としては、小さい仕事関数を持つ金属、合金、電気伝導性化合物及びこれらの混合物を使用できる。具体的な例としては、リチウム(Li)、マグネシウム(Mg)、アルミニウム(Al)、アルミニウム-リチウム(Al-Li)、カルシウム(Ca)、マグネシウム-インジウム(Mg-In)、マグネシウム-銀(Mg-Ag)などを挙げることができる。また、前面発光素子を得るために、ITO、IZOを使用した透過型カソードを使用してもよい。 20

【0153】

以下、本発明の合成例及び実施例を具体的に例示するが、本発明が下記の合成例及び実施例に限定されるものではない。

【実施例】

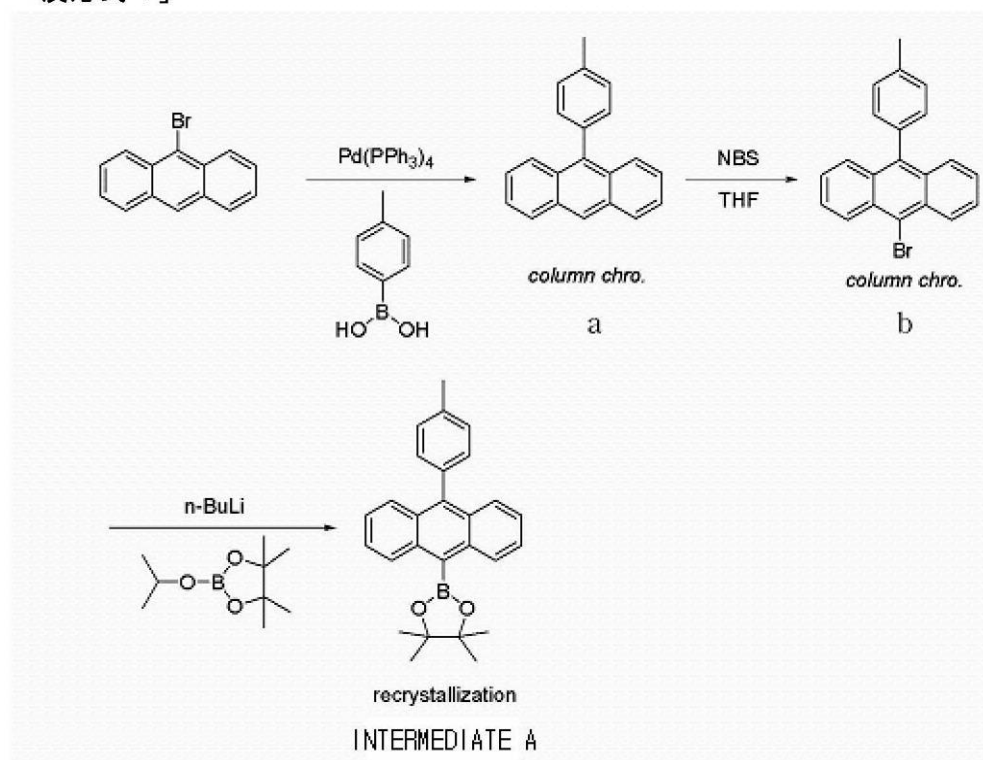
【0154】

合成例1

下記反応式1ないし3の反応経路によって、化学式4で表現される化合物4を合成した。

【0155】

【化 8 8】
「反応式 1」



10

20

【0156】

中間体 A の合成

9 - p - トリル - アントラセンの合成 (a)

アルゴンガス下で 500 ml の丸底フラスコに 9 - ブロモアントラセン 5 g (1 eq、15.6 mmol)、p - トリルボロン酸 3.61 g (1.7 eq、26.5 mmol)、 Na_2CO_3 2.15 g (1.3 eq、20.3 mmol)、テトラキス(トリフェニルホスフィン)パラジウム (0) 0.54 g (0.03 eq、0.47 mmol) を入れて、THF と水とを p - トリルボロン酸 1 mmol 当たりそれぞれ 5 ml、2.2 ml 入れて 85 で 16 時間還流させた。溶液の色が濃褐色に変わることを確認した後、水を添加してエチル酢酸で抽出した。その後、抽出した有機層を無水硫酸マグネシウムで乾燥させてろ過して溶媒を除去した。少量のトルエンに溶かしてカラムクロマトグラフィ(シリカ、ヘキサン)で分離して得た固体をトルエンとメタノールで再結晶して白色の固体 4.5 g (86%) を得た。

30

【0157】

9 - ブロモ - 10 - p - トリル - アントラセンの合成 (b)

500 ml の丸底フラスコに 9 - p - トリル - アントラセン 4 g (1 eq、14.9 mmol)、NBS 5.3 g (2 eq、29.8 mmol) を THF 200 ml に溶かして 1 時間攪拌した後、水 200 ml を添加して黄色の結晶を得た。生成された結晶をろ過した後、少量のトルエンに溶かしてカラムクロマトグラフィ(シリカ、ヘキサン)で分離して薄黄色の結晶 4.6 g (89%) を得た。

40

【0158】

4, 4, 5, 5 - テトラメチル - 2 - (10 - p - トリル - アントラセン - 9 - イル) - [1, 3, 2] - ジオキサボロランの合成 (中間体 A)

アルゴンガス下で 500 ml の丸底フラスコに 9 - ブロモ - 10 - p - トリル - アントラセン 4.6 g (1 eq、13.25 mmol) を THF 150 ml に溶かした後、-78 で n - BuLi 2.5 M (ヘキサン中) 6.36 ml (1.2 eq、15.9 mmol) を添加した。その後、-78 で 1 時間攪拌して 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 3.52 ml (1.3 eq、17.2 mmol) を添加した。その後、-78 で 1 時間攪拌して白色の結晶を得た。生成された結晶をろ過した後、少量のトルエンに溶かしてカラムクロマトグラフィ(シリカ、ヘキサン)で分離して白色の結晶 3.52 g (89%) を得た。

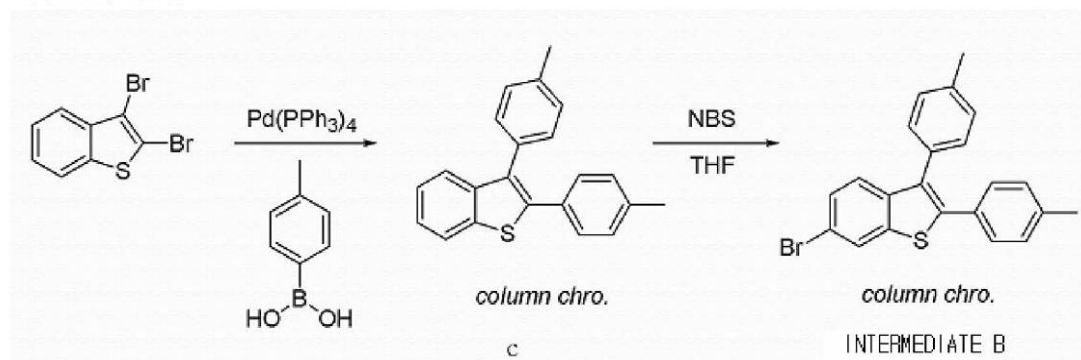
50

23 mmol) を添加して室温で2時間攪拌した。その後、水50 ml を添加して反応を終結し、ブライン (brine) と塩化メチレンとで抽出した。次いで抽出した有機層を無水硫酸マグネシウムで乾燥させてろ過して溶媒を除去した。少量のトルエンに溶かしてカラムクロマトグラフィ (シリカ、ヘキサン) で不純物を除去した後、展開溶媒の極性を高めて白色の固体 3.5 g (67%) 得た。

【0159】

【化89】

「反応式2」



10

【0160】

中間体 B の合成

2,3-ジ-p-トリル-ベンゾ[b]チオフェンの合成 (c)

アルゴンガス下で500 ml の丸底フラスコに2,3-ジプロモ-ベンゾ[b]チオフェン (1 eq, 10.27 mmol)、p-トリルボロン酸 4.89 g (3.5 eq, 35.95 mmol)、 Na_2CO_3 2.39 g (2.2 eq, 22.59 mmol)、テトラキス(トリフェニルホスフィン)パラジウム (0) 0.36 g (0.03 eq, 0.31 mmol) を入れて、THF と水とを p-トリルボロン酸 1 mmol 当たりそれぞれ 5 ml、2.2 ml 入れて 85 で 7 時間還流させた。この溶液の色が濃褐色に変わることを確認した後、水を添加してエチル酢酸で抽出した。その後、抽出した有機層を無水硫酸マグネシウムで乾燥させてろ過して溶媒を除去し、少量のトルエンに溶かしてカラムクロマトグラフィ (シリカ、ヘキサン) で分離して 2.8 g (87%) の白色固体を得た。

20

30

【0161】

6-プロモ-2,3-ジ-p-トリル-ベンゾ[b]チオフェンの合成 (中間体 B)

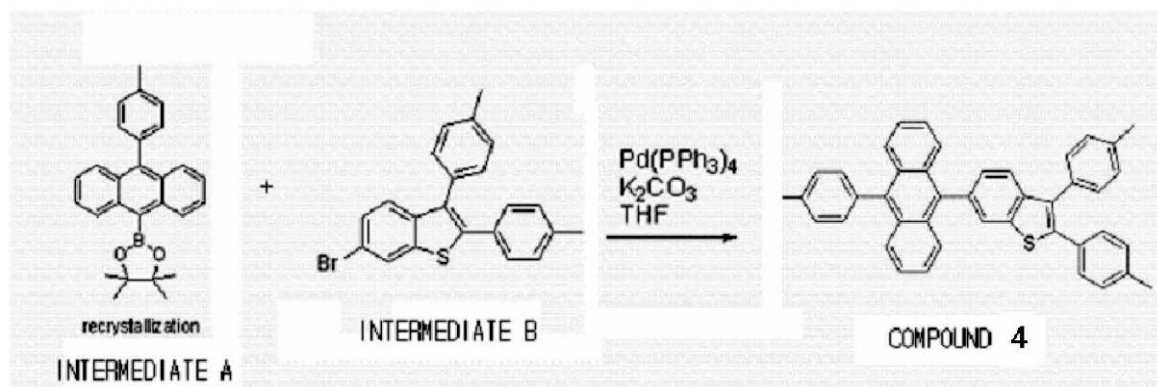
500 ml の丸底フラスコに2,3-ジ-p-トリル-ベンゾ[b]チオフェン 2.5 g (1 eq, 7.9 mmol)、NBS 14 g (10 eq, 79 mmol) を THF 200 ml に溶かして 6 時間攪拌した後、水 50 ml を添加して反応を終結し、ブラインと塩化メチレンとで抽出した。抽出した有機層を無水硫酸マグネシウムで乾燥させてろ過して溶媒を除去した。得られた固体を塩化メチレンとヘキサンとで再結晶し、少量の THF に溶かしてカラムクロマトグラフィ (シリカ、ヘキサン) で分離して黄色の固体 2.5 g (71%) を得た。

【0162】

40

【化 9 0】

「反応式 3」



10

【0 1 6 3】

化合物 4 の合成

前記中間体 B (2.2 mmol, 787 mg) を THF 70 ml に溶解させた後、中間体 A 867.5 mg (2.2 mmol)、テトラキス(トリフェニルホスフィン)パラジウム(0) 231 mg (0.2 mmol)、 K_2CO_3 8 mmol をトルエン 30 ml と水 4 ml とに溶解させて添加した後、還流温度で 24 時間攪拌した。常温まで冷却させた後、ジエチルエーテル 100 ml を添加し、水 100 ml で 2 回洗浄し、有機層を取

20

って無水硫酸マグネシウムで乾燥させた後、溶媒を蒸発させて粗生成物を得た後、シリカゲルカラムクロマトグラフィで分離精製した後、再結晶して 400 mg (収率 63%) の化合物 4 を得た。

$^1\text{H-NMR}$ (CDCl_3 , 300 MHz, ppm): 7.98 - 7.08 (m, 15H), 2.57 (s, 3H), 2.45 (s, 3H), 2.36 (s, 3H)

合成例 2

前記合成例 1 で中間体 B の合成の際、2,3-ジブromo-ベンゾ[b]チオフェンの代りに 6-ブromo-2-フェニル-3-p-トリル-メチルインドールを使用したことを除いては、合成例 1 と同じ方法を使用して化学式 55 で表現される化合物 55 を合成した。

30

【0 1 6 4】

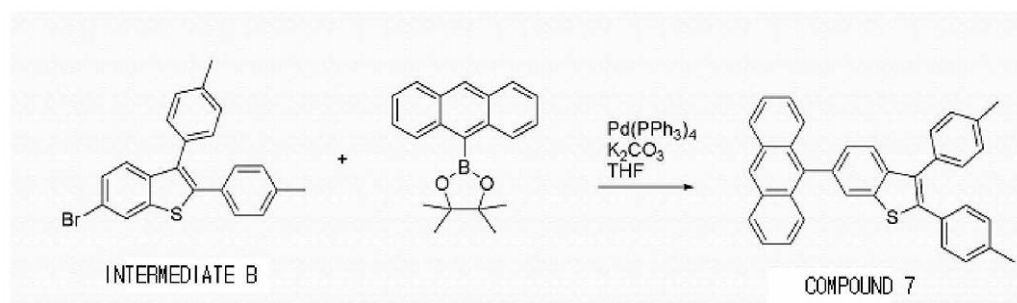
合成例 3

下記反応式 4 の反応経路によって化学式 7 で表現される化合物 7 を合成した。

【0 1 6 5】

【化 9 1】

「反応式 4」



40

【0 1 6 6】

前記中間体 B 787 mg (2.2 mmol) を THF 70 ml に溶解させた後、2-アントラセン-9-イル-4,4,5,5-テトラメチル-1,3,2-ジオキサボロラン 609 mg (2.2 mmol)、テトラキス(トリフェニルホスフィン)パラジウム(0) 231 mg (0.2 mmol)、 K_2CO_3 8 mmol をトルエン 30 ml と水 4 m

50

1 とに溶解させて添加した後、還流温度で 24 時間攪拌した。常温まで冷却させた後、ジエチルエーテル 100 ml を添加して水 100 ml で 2 回洗浄し、有機層を取って無水硫酸マグネシウムで乾燥させた後、溶媒を蒸発させて粗生成物を得た後、シリカゲルカラムクロマトグラフィで分離精製した後、再結晶して 400 mg (収率 81.5%) の化合物 7 を得た。

$^1\text{H-NMR}$ (CDCl_3 , 300 MHz, ppm): 8.52 - 7.09 (m, 12 H), 1.52 (s, 3 H), 1.53 (s, 3 H)

合成例 4

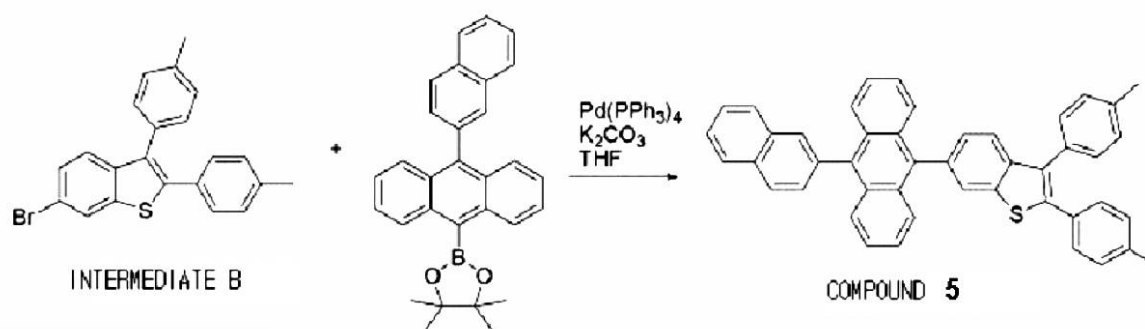
下記反応式 5 の反応経路によって化学式 5 で表現される化合物 5 を合成した。

【0167】

10

【化 9 2】

「反応式 5」



20

【0168】

前記合成例 1 で中間体 A の合成の際、9 - p - トリル - アントラセンの代りに 9 - ナフチル - アントラセンを使用したことを除いては、合成例 1 と同じ方法を使用して化合物 8 を合成した。

$^1\text{H-NMR}$ (CDCl_3 , 300 MHz, ppm): 8.02 - 7.15 (m, 18 H), 2.47 (s, 3 H), 2.38 (s, 3 H)

30

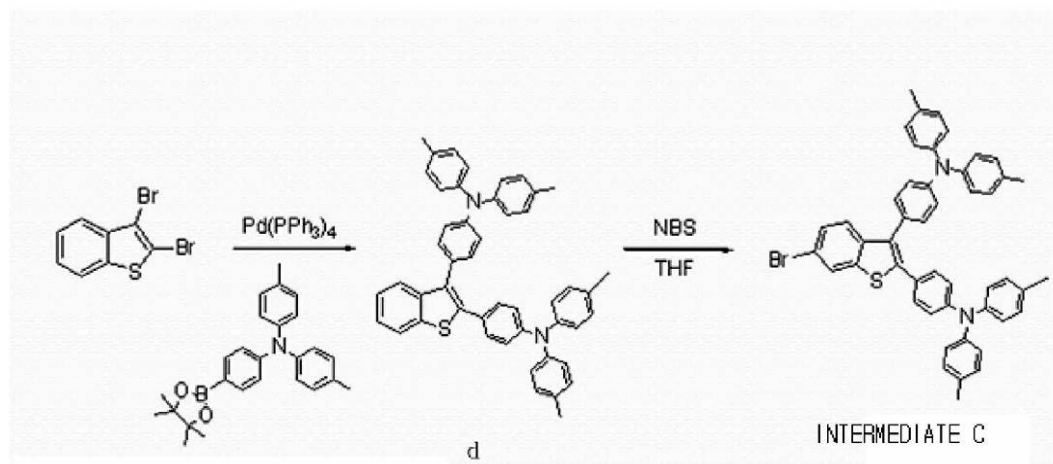
合成例 5

下記反応式 6、7 及び 8 の反応経路によって化学式 17 で表現される化合物 17 を合成した。

【0169】

【化 9 3】

「反応式 6」



40

50

【0170】

中間体 C の合成

2, 3 - ジ - p - トリルアミノフェニル - ベンゾ [b] チオフェンの合成 (d)

合成例 1 で中間体 B の合成の際、p - トリルボロン酸の代りに [4 - (4 , 4 , 5 , 5 - テトラメチル - 1 , 3 , 2 - ジオキサボロラン - 2 - イル) - フェニル] - ジ - p - トリルアミンを使用したことを除いては、合成例 1 と同じ方法を使用して 2 , 3 - ジ - p - トリルアミノフェニル - ベンゾ [b] チオフェンを合成した。

【0171】

6 - プロモ - 2 , 3 - ジ - p - トリルアミノフェニル - ベンゾ [b] チオフェンの合成 (中間体 C)

合成例 1 で中間体 B の合成の際、2 , 3 - ジ - p - トリル - ベンゾ [b] チオフェンの代りに 2 , 3 - ジ - p - トリルアミノフェニル - ベンゾ [b] チオフェンを使用したことを除いては、合成例 1 と同じ方法を使用して中間体 C を合成した。

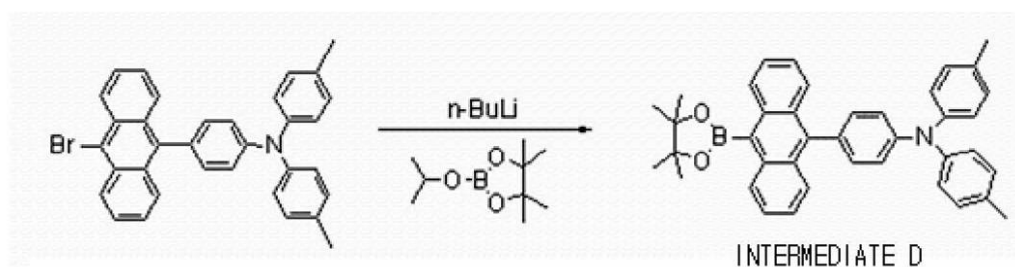
【0172】

中間体 D の合成

【0173】

【化 9 4】

「反応式 7」



【0174】

合成例 1 で中間体 A の合成の際、9 - プロモ - 10 - p - トリル - アントラセンの代りに [4 - (10 - プロモ - アントラセン - 9 - イル - フェニル) - ジ - p - トリルアミン] を使用したことを除いては、合成例 1 と同じ方法を使用して中間体 D を合成した。

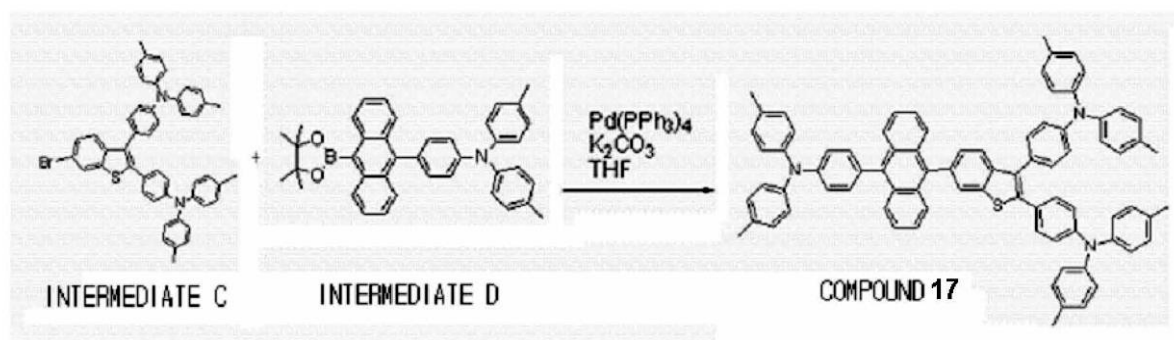
【0175】

化合物 17 の合成

【0176】

【化 9 5】

「反応式 8」



【0177】

前記中間体 C 1.6 g (2.2 mmol) を THF 100 ml に溶解させた後、中間体 D 1.2 g (2.2 mmol)、テトラキス(トリフェニルホスフィン)パラジウム

(0) 231 mg (0.2 mmol)、 K_2CO_3 8 mmol をトルエン 55 ml と水 4 ml とに溶解させて添加した後、還流温度で 24 時間攪拌した。常温まで冷却させた後にジエチルエーテル 100 ml を添加し、水 150 ml で 2 回洗浄し、有機層を取って無水硫酸マグネシウムで乾燥させた後、溶媒を蒸発させて粗生成物を得た後、シリカゲルカラムクロマトグラフィで分離精製した後に再結晶して 843 mg (収率 68%) の化合物 17 を得た。

【0178】

評価例 1 - 化合物の熱安定性評価

前記化合物の熱安定性を各化合物の T_g (ガラス転移温度) 及び T_m (融点) を測定することによって評価した。 T_g 及び T_m は、TGA (Thermo Gravimetric Analysis) 及び DSC (Differential Scanning Calorimetry) で熱分析を行って測定し、その結果を表 1 に示す。

10

【0179】

【表 1】

化合物No.	$T_g(^{\circ}C)$	$T_m(^{\circ}C)$
4	247	144
5	273	151
7	212	116
17	312	146
55	295	149

20

【0180】

これにより、本発明による化合物は、OLED に適した熱安定性を持っていることが分かる。

【0181】

評価例 2 : 化合物の発光特性評価

上記の合成した化合物の UV 吸収スペクトル及び PL (photoluminescence) スペクトルを評価することによって、各化合物の発光特性を評価した。まず、化合物 5 をトルエンで 0.2 mM の濃度に希釈させて、島津 UV-350 スペクトロメーターを利用して、UV 吸収スペクトルを測定した。これを、化合物 4 ないし 17 に対して反復した。一方、化合物 5 をトルエンで 10 mM 濃度に希釈させて、キセノン (Xenon) ランプが装着されている ISCCPC1 スペクトロフルオロメーターを利用して、PL スペクトルを測定した。その結果を下記の表 2 に示す。

30

【0182】

【表 2】

化合物No.	最大吸収波長 (nm)	最大 PL 波長 (nm)
4	378	432
5	375	430
7	368	420
17	378	440
55	388	457

40

【0183】

これにより、本発明による化合物は、OLED に好適に適用される発光特性を持つことを確認することができる。

【0184】

評価例 3 : 化合物の発光特性評価 (フィルム状態)

上記で合成した化合物のフィルムを形成して、前記フィルムの吸収スペクトル及び量子効率を評価した。

【0185】

50

まず、クォーツ (q u a r t z) 基板を準備してアセトンと純水とで洗浄した。この後、前記化合物を前記基板にスピンコーティングした後、110 の温度で30分間熱処理して1000 の厚さのフィルムを形成した。前記フィルムに対して吸収スペクトル及び量子効率を測定して、その結果を下記の表3に表した。特に、フィルム4、5及び7の吸収スペクトルは、図2Aないし図2Cにそれぞれ示す。

【0186】

【表3】

フィルムNo.	最大吸収波長 (nm)	最大PL波長 (nm)	量子効率 (%)
フィルム4	381	438	12
フィルム5	382	448	24
フィルム7	374	436	19
フィルム17	402	466	26
フィルム55	379	435	27

10

【0187】

これにより、本発明による化合物を利用してフィルムを形成した場合、O L E D に好適に適用される吸収スペクトル及び量子効率を持つということが分かる。

【0188】

実施例1

化学式101の化合物 (D P A V B i) を発光層のドーパントとして使用し、化合物4を発光層のホストとして使用し、次のような構造を持つO L E D を製作した：I T O / P E D O T (500) / 化合物4 __ドーパントD P A V B i (480) / A l q 3 (200) / L i F (10) / A l (2000) 。

20

【0189】

アノードは、15 / c m ² (1000) I T O ガラス基板を50mm x 50mm x 0.7mmサイズに切り取ってアセトンイソプロピルアルコールと純水の中で各15分間超音波洗浄した後、30分間UVオゾン洗浄して使用した。前記基板の上部にバイエル社製のP E D O T - P S S (A I 4083) をコーティングして110 で5分間大気中で熱処理し、200 、5分間窒素雰囲気中で熱処理して500 の正孔注入層を形成した。前記正孔注入層の上部に、ホスト化合物40.1gとドーパントD P A V B i 0.05gとを混合した混合物 (前記化合物4 100質量部当たり前記化学式101の化合物は5質量部) をスピンコーティングした後、100 で30分間熱処理して480 厚さの発光層を形成した。この後、前記発光層の上部にA l q 3化合物を200 の厚さに真空蒸着して電子輸送層を形成した。前記電子輸送層の上部にL i F 10 (電子注入層) とA l 2000 (カソード) とを順次に真空蒸着して、図1Aに示されたようなO L E D を製造した。これをサンプル1とする。

30

【0190】

実施例2

前記実施例1中、ホストとしてドーパントを使用せずに化合物4のみを発光層として使用したことを除いては、前記実施例1と同じ方法でI T O / P E D O T (500) / 化合物4 (480) / A l q 3 (200) / L i F (10) / A l (2000) の構造を持つO L E D を製造した。これをサンプル2とする。

40

【0191】

実施例3

前記実施例1中、ホストとして化合物4の代わりに化合物7を利用したという点を除いては前記実施例1と同じ方法で、I T O / P E D O T (500) / 化合物7 __ドーパントD P A V B i (480) / A l q 3 (200) / L i F (10) / A l (2000) の構造を持つO L E D を製造した。これをサンプル3とする。

【0192】

比較例1

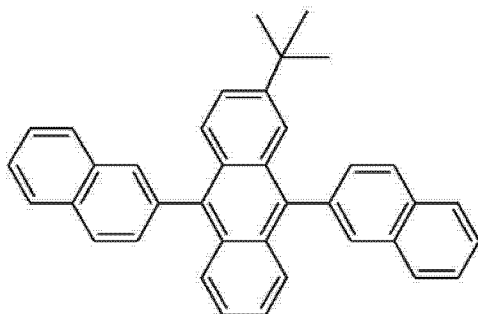
50

前記実施例 1 中、ホストとして化合物 4 の代わりに下記化学式 102 の化合物 102 を利用したという点を除いては、前記実施例 1 と同じ方法で、ITO / PEDOT (500) / 化合物 102 — ドーパント DPABi (480) / Alq3 (200) / LiF (10) / Al (2000) の構造を持つ OLED を製造した。これをサンプル 4 とする。

【0193】

【化96】

<化学式 102>



10

【0194】

評価例 4: サンプル 1 ないし 4 の特性評価

20

サンプル 1、2、3 及び比較サンプル 4 に対して、PR650 (Spectroscan) Source Measurement Unit を利用して駆動電圧、色純度、効率をそれぞれ評価して、その結果を下記の表 4 に表した。特に、サンプル 1、2 及び比較サンプル 4 の発光スペクトルは図 3 に示した。

【0195】

【表 4】

サンプルNo.	ターンオン電圧 (V)	CIE色座標 (~100cd/m ²)	効率 (cd/A)
1	3.2	(0.15, 0.27)	6.8Vで5.02
2	3.6	(0.15, 0.11)	6Vで1.60
3	3.4	(0.15, 0.27)	6.5Vで4.56
4	3.4	(0.15, 0.27)	5.4Vで4.16

30

【0196】

前記表 4 から、本発明によるサンプル 1 ないし 3 は優秀な電気的特性を持つということが分かる。

【0197】

実施例 4

厚さ 200 nm の ITO 透明電極 (正極) を持つガラス基板を中性洗剤、蒸留水、アセトン、エタノールの中で各 15 分間超音波洗浄を行った。その基板を窒素ガスを利用して乾燥した後、UV / オゾン処理した。次いで、蒸着装置の基板ホルダーに前記基板を固定して蒸着のために 3×10^{-6} Torr に減圧した。前記 ITO 基板上に MoO_3 を蒸着速度 0.1 nm/sec で 10 nm 厚さに蒸着して正孔注入層を形成した。次いで、前記正孔注入層の上に NPD を蒸着速度 0.1 nm/sec で 30 nm 厚さに蒸着して正孔輸送層を形成した。

40

【0198】

次いで、前記正孔輸送層上に例示化合物 4 とドーパント DPABi とをそれぞれ蒸着速度 3.0 nm/sec 及び 0.5 nm/sec で 20 nm 厚さに蒸着して発光層を形成した。

【0199】

次いで、前記発光層上に Alq3 を蒸着速度 0.1 nm/sec で 20 nm 厚さに蒸着

50

して電子輸送層を形成した。その上に CsCO_3 : BCPを蒸着速度 0.1 nm/sec で 20 nm の厚さに共蒸着して電子注入層を形成した。負極としてアルミニウムを蒸着速度 0.1 nm/sec で 200 nm 厚さに蒸着してOLEDを製作した。これをサンプル5とする。

【0200】

製作されたOLEDに直流電圧を印加して、室温、乾燥器雰囲気下で 1 mA の定電流で連続駆動した。初期には電圧値が 3.6 V であり、輝度は 2000 cd/m^2 の青色発光を確認した。輝度の半減寿命は 3500 時間であった。

【0201】

実施例5

実施例4に対して発光層を製作する際に、上記の化合物4を使用する代りに化合物5を使用したことを除いては、実施例4と同一にしてOLEDを製作した。これをサンプル6とする。素子で青色の発光が確認された。さらに、その特性を調べて表5に示す。

【0202】

実施例6

実施例4に対して発光層を製作する際に、上記の化合物4を使用する代りに化合物7を使用したことを除いては、実施例4と同一にしてOLEDを製作した。素子で青色の発光が確認された。これをサンプル7とする。さらに、その特性を調べて表5に示す。

【0203】

実施例7

実施例4に対して発光層を製作する際に、上記の化合物4を使用する代りに化合物17を使用したことを除いては、実施例4と同一にしてOLEDを製作した。これをサンプル8とする。素子で青色の発光が確認された。さらにその特性を調べて表5に示す。

【0204】

実施例8

実施例4に対して発光層を製作する際に、上記の化合物4を使用する代りに化合物55を使用したことを除いては、実施例4と同一にしてOLEDを製作した。これをサンプル9とする。素子で青色の発光が確認された。さらにその特性を調べて表5に示す。

【0205】

比較例2

実施例4に対して発光層を製作する際に、上記の化合物4を使用する代りに化合物102を使用したことを除いては、実施例4と同一にしてOLEDを製作した。これをサンプル10とする。素子で青色の発光が確認された。さらにその特性を調べて表5に示す。

【0206】

【表5】

サンプルNo.	ターンオン電圧(V)	CIE色座標($\sim 100 \text{ cd/m}^2$)	効率(cd/A@1000nit)
5	3.2	(0.14, 0.20)	7.58
6	3.6	(0.15, 0.22)	8.21
7	3.6	(0.14, 0.22)	7.36
8	3.4	(0.15, 0.27)	6.98
9	2.8	(0.14, 0.19)	7.15
10	4.0	(0.16, 0.29)	6.99

【0207】

前記表5から、本発明によるサンプル5ないし9は優秀な電気的特性を持つということが分かる。

【産業上の利用可能性】

【0208】

本発明は、OLED関連の技術分野に好適に用いられる。

【図面の簡単な説明】

【 0 2 0 9 】

【図 1 A】本発明による O L E D の一具現例の構造を簡略に示した断面図である。

【図 1 B】本発明による O L E D の一具現例の構造を簡略に示した断面図である。

【図 1 C】本発明による O L E D の一具現例の構造を簡略に示した断面図である。

【図 2 A】本発明による化合物の一具現例のフィルムでの吸収及び P L スペクトルを示した図面である。

【図 2 B】本発明による化合物の一具現例のフィルムでの吸収及び P L スペクトルを示した図面である。

【図 2 C】本発明による化合物の一具現例のフィルムでの吸収及び P L スペクトルを示した図面である。

【図 3】本発明による化合物の一具現例を含む O L E D の発光スペクトルをそれぞれ示した図面である。

10

【図 1 A】

第 2 電極
電子注入層
電子輸送層
発光層
正孔注入層
第 1 電極

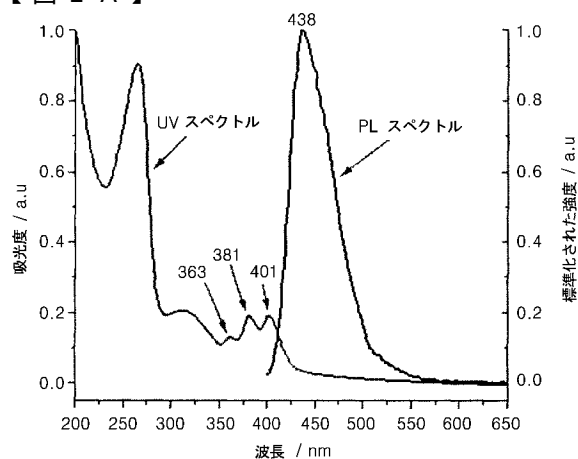
【図 1 C】

第 2 電極
電子注入層
電子輸送層
正孔阻止層
発光層
正孔輸送層
正孔注入層
第 1 電極

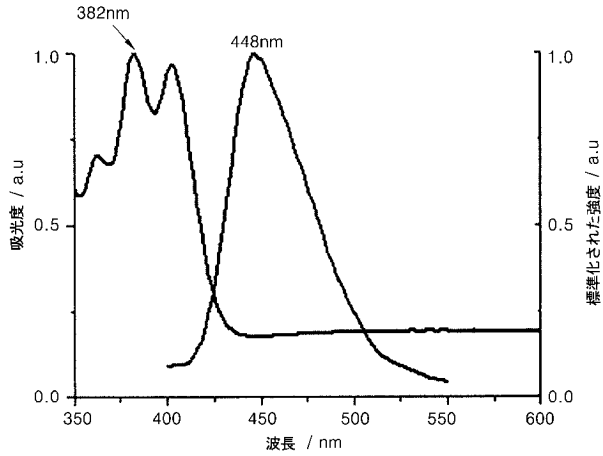
【図 1 B】

第 2 電極
電子注入層
電子輸送層
発光層
正孔輸送層
正孔注入層
第 1 電極

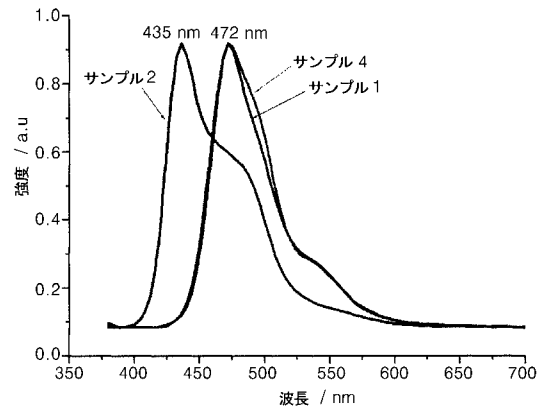
【図 2 A】



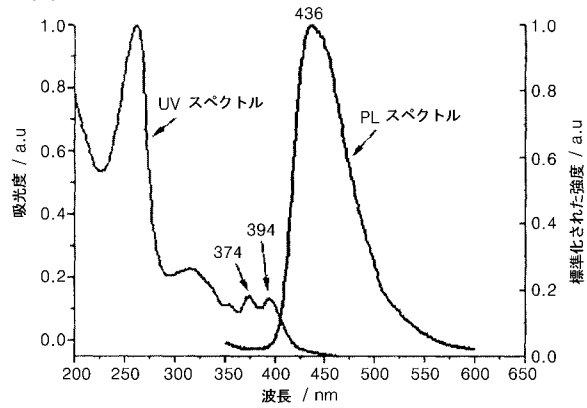
【図 2 B】



【図 3】



【図 2 C】



フロントページの続き

(51) Int.Cl.	F I	テーマコード(参考)
	C 0 9 K 11/06	6 4 5
	C 0 9 K 11/06	6 5 0
	C 0 7 D 333/54	C S P
	C 0 7 D 209/08	
	C 0 7 D 333/58	
(72)発明者 崔 炳 基		
大韓民国京畿道華城市半月洞 8 6 0 番地 現代タウンアパート 3 0 1 棟 1 2 0 2 号		
(72)発明者 朴 鍾 辰		
大韓民国京畿道龍仁市器興区上下洞 1 4 0 番地 信一アパート 1 0 7 棟 1 4 0 1 号		
(72)発明者 盧 泰 用		
大韓民国京畿道軍浦市山本洞 1 1 4 6 番地 率居アパート 7 2 3 棟 1 6 0 1 号		
(72)発明者 夫 龍 淳		
大韓民国京畿道水原市靈通区靈通洞 1 0 5 3 - 2 番地 凰谷マウル碧山アパート 3 3 7 棟 1 6 0 1 号		
(72)発明者 孫 準 模		
大韓民国京畿道龍仁市器興区寶亭洞山 9 3 - 9 番地 シャインヒルズアパート 1 1 2 棟 8 0 2 号		
(72)発明者 白 雲 仲		
大韓民国京畿道龍仁市器興邑農書里山 1 4 - 1 番地 三星綜合技術院内		
(72)発明者 孫 永 睦		
大韓民国京畿道華城市陳雁洞 4 1 2 - 1 番地 住公グリーンビルアパート 1 1 0 4 棟 9 0 2 号		
(72)発明者 權 五 げん		
大韓民国ソウル特別市松坡区蠶室 6 洞 7 番地 薔薇アパート 2 2 棟 7 0 3 号		
(72)発明者 梁 綵 恩		
大韓民国京畿道水原市靈通区網浦洞 9 2 6 - 9 番地 雙龍 3 次アパート 3 0 3 棟 4 0 8 号		
(72)発明者 田村 眞一郎		
大韓民国京畿道城南市盆唐区金谷洞 2 0 0 番地 雙龍アパート 1 0 2 棟 8 0 2 号		
F ターム(参考) 3K107 AA01 BB01 CC04 CC07 CC12 CC24 DD59 DD71 DD78 GG06		
4C204 CB03 DB07 EB03 FB03 GB07		

专利名称(译)	有机发光化合物和具有该有机发光化合物的有机发光装置		
公开(公告)号	JP2007084828A	公开(公告)日	2007-04-05
申请号	JP2006258135	申请日	2006-09-22
[标]申请(专利权)人(译)	三星斯笛爱股份有限公司		
申请(专利权)人(译)	三星エスディアイ株式会社		
[标]发明人	金明淑 崔炳基 朴鍾辰 盧泰用 夫龍淳 孫準模 白雲仲 孫永睦 權五げん 梁綵恩 田村眞一郎		
发明人	金 明 淑 崔 炳 基 朴 鍾 辰 盧 泰 用 夫 龍 淳 孫 準 模 白 雲 仲 孫 永 睦 權 五 ▲げん▼ 梁 綵 恩 田村 眞一郎		
IPC分类号	C09K11/06 H01L51/50 C07D333/54 C07D209/08 C07D333/58		
CPC分类号	C09K11/06 C09K2211/1007 C09K2211/1011 C09K2211/1014 C09K2211/1029 C09K2211/1044 C09K2211/1088 C09K2211/1092 H01L51/002 H01L51/0052 H01L51/006 H01L51/0061 H01L51/0071 H01L51/0074 H01L51/0081 H01L51/5012 H05B33/14 Y10S428/917		
FI分类号	C09K11/06.610 H05B33/14.B H05B33/22.D C09K11/06.620 C09K11/06.635 C09K11/06.645 C09K11/06.650 C07D333/54.CSP C07D209/08 C07D333/58 C07D209/08.CSP C07D333/54		
F-TERM分类号	3K107/AA01 3K107/BB01 3K107/CC04 3K107/CC07 3K107/CC12 3K107/CC24 3K107/DD59 3K107/DD71 3K107/DD78 3K107/GG06 4C204/CB03 4C204/DB07 4C204/EB03 4C204/FB03 4C204/GB07		
代理人(译)	宇谷 胜幸		
优先权	1020050088718 2005-09-23 KR 1020060077128 2006-08-16 KR		
其他公开文献	JP5089947B2		
外部链接	Espacenet		
摘要(译)			

提供了一种有机发光化合物和包括该有机发光化合物的有机发光装置。
解决方案：以下化学式1：通过使用以表示的有机发光化合物，可以获得具有低驱动电压，优异的效率和色纯度的有机发光器件。[选型图]图1A

第 2 電極
電子注入層
電子輸送層
発光層
正孔注入層
第 1 電極