

(19) 日本国特許庁 (JP)

(12) 公表特許公報 (A)

(11) 特許出願公表番号

特表2020-515073

(P2020-515073A)

(43) 公表日 令和2年5月21日 (2020.5.21)

(51) Int.Cl.	F I	テーマコード (参考)
H01L 51/50 (2006.01)	H05B 33/22 B	3K107
H05B 33/10 (2006.01)	H05B 33/14 B	4C050
C07D 405/14 (2006.01)	H05B 33/10	4C063
C07D 487/04 (2006.01)	C07D 405/14	4C071
C07D 491/048 (2006.01)	C07D 487/04 137	4C204
審査請求 未請求 予備審査請求 未請求 (全 111 頁) 最終頁に続く		

(21) 出願番号 特願2019-552108 (P2019-552108)
 (86) (22) 出願日 平成30年3月26日 (2018.3.26)
 (85) 翻訳文提出日 令和1年10月17日 (2019.10.17)
 (86) 国際出願番号 PCT/KR2018/003534
 (87) 国際公開番号 WO2018/174679
 (87) 国際公開日 平成30年9月27日 (2018.9.27)
 (31) 優先権主張番号 10-2017-0037979
 (32) 優先日 平成29年3月24日 (2017.3.24)
 (33) 優先権主張国・地域又は機関
 韓国 (KR)
 (31) 優先権主張番号 10-2018-0018786
 (32) 優先日 平成30年2月14日 (2018.2.14)
 (33) 優先権主張国・地域又は機関
 韓国 (KR)

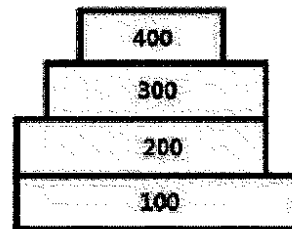
(71) 出願人 513298491
 エルティー・マテリアルズ・カンパニー・
 リミテッド
 LT Materials Co., L
 td.
 大韓民国、キョンギード 17118、ヨ
 ンインーシ、チョインーグ、ナムサーミョ
 ン、ダンハーロ 113-19
 113-19, Dangha-Ro,
 Namsa-Myeon, Cheoin
 -Gu, Yongin-si, Gye
 onggi-do 17118, kor
 ea
 (74) 代理人 110001508
 特許業務法人 津国

最終頁に続く

(54) 【発明の名称】 有機発光素子および有機発光素子の有機物層用組成物

(57) 【要約】

本明細書は、第1電極と、第2電極と、前記第1電極および第2電極の間に備えられた1層以上の有機物層とを含む有機発光素子であって、有機物層のうちの1層以上が、化学式1で表されるヘテロ環化合物、および化学式2で表されるヘテロ環化合物を同時に含むものである有機発光素子および有機発光素子の有機物層用組成物に関する。



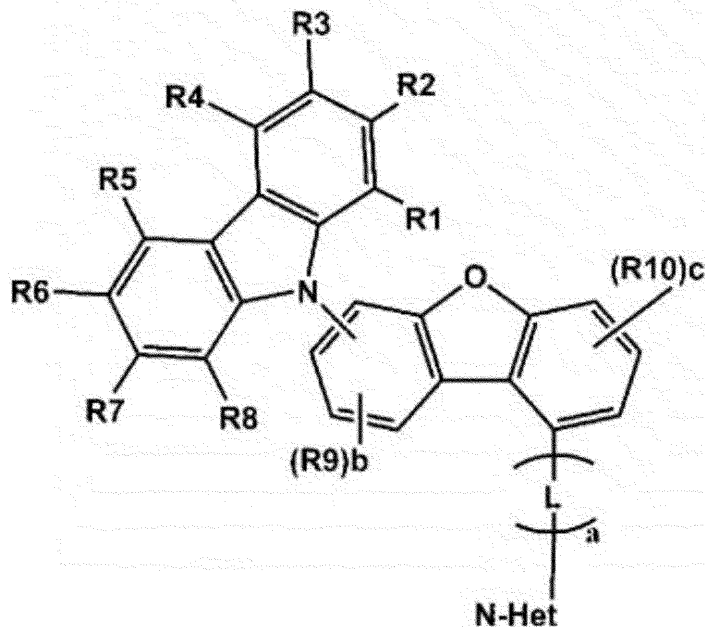
【特許請求の範囲】

【請求項 1】

第 1 電極と、第 2 電極と、前記第 1 電極および第 2 電極の間に備えられた 1 層以上の有機物層とを含む有機発光素子であって、

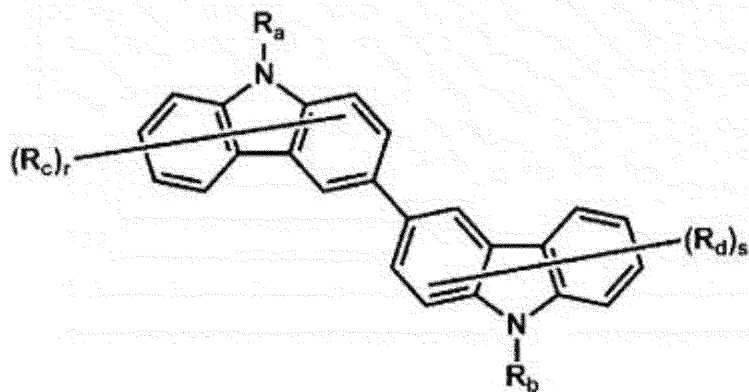
前記有機物層のうちの 1 層以上が、下記化学式 1 で表されるヘテロ環化合物、および下記化学式 2 で表されるヘテロ環化合物を同時に含むものである有機発光素子；

【化 1】



化学式 1

【化 2】



化学式 2

前記化学式 1 および 2 において、

N - H e t は、置換もしくは非置換であり、N を 1 個以上含む単環もしくは多環のヘテロ環基であり、

L は、直接結合；置換もしくは非置換のアリーレン基；または置換もしくは非置換のヘテロアリーレン基であり、a は、1 ~ 3 の整数であり、a が 2 以上の場合、L は、互いに同一または異なり、

R_a および R_b は、互いに同一または異なり、それぞれ独立に、置換もしくは非置換のアリール基；または置換もしくは非置換のヘテロアリール基であり、

R₁ ~ R₁₀、R_c および R_d は、互いに同一または異なり、それぞれ独立に、水素；重水素；ハロゲン；シアノ基；置換もしくは非置換のアルキル基；置換もしくは非置換の

10

20

30

40

50

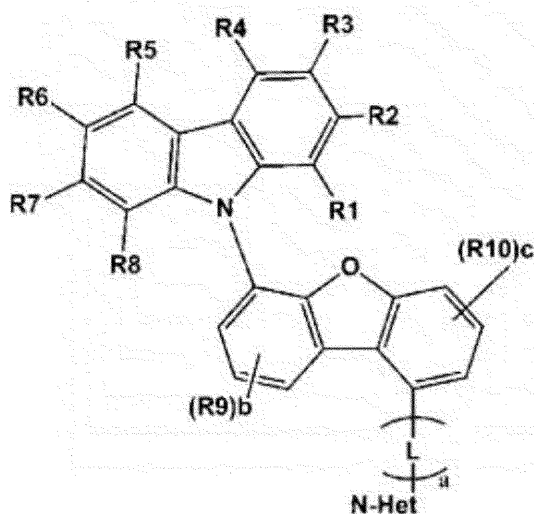
アルケニル基；置換もしくは非置換のアルキニル基；置換もしくは非置換のアルコキシ基；置換もしくは非置換のシクロアルキル基；置換もしくは非置換のヘテロシクロアルキル基；置換もしくは非置換のアリール基；置換もしくは非置換のヘテロアリール基；置換もしくは非置換のシリル基；置換もしくは非置換のホスフィンオキシド基；および置換もしくは非置換のアミン基からなる群より選択されるか、互いに隣接する2以上の基は、互いに結合して置換もしくは非置換の脂肪族または芳香族炭化水素環もしくはヘテロ環を形成し、bおよびcはそれぞれ、1～3の整数であり、bが2以上の場合、R₉は、互いに同一または異なり、cが2以上の場合、R₁₀は、互いに同一または異なり、rおよびsは、0～7の整数であり、rが2以上の場合、R_cは、互いに同一または異なり、sが2以上の場合、R_dは、互いに同一または異なる。

10

【請求項2】

前記化学式1は、下記化学式3～6のうちの1つで表されるものである、請求項1に記載の有機発光素子：

【化3】

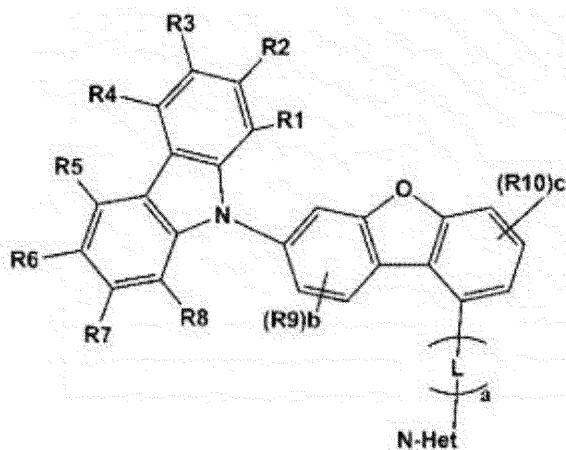


20

化学式3

30

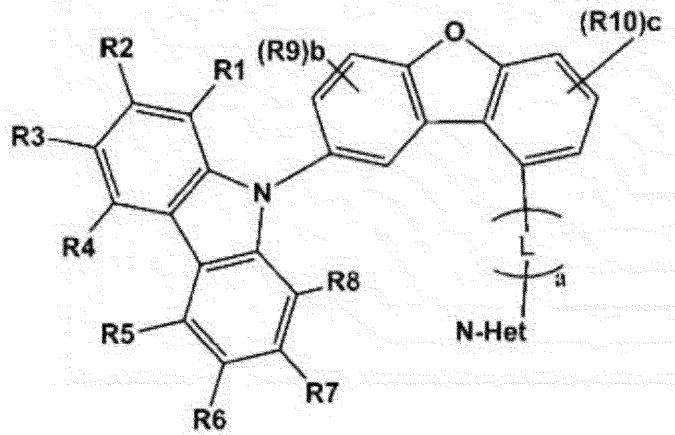
【化4】



40

化学式4

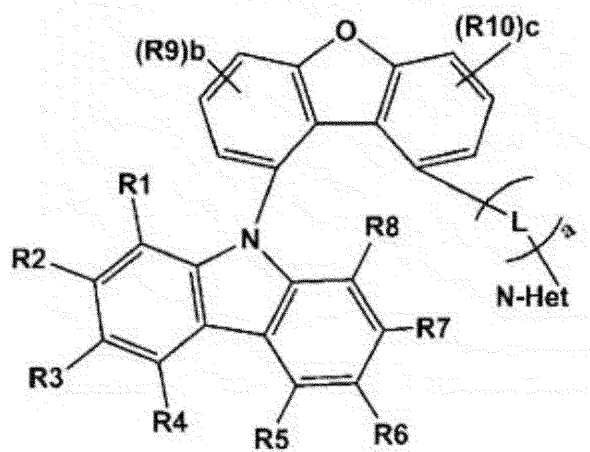
【化 5】



10

化学式 5

【化 6】



20

化学式 6

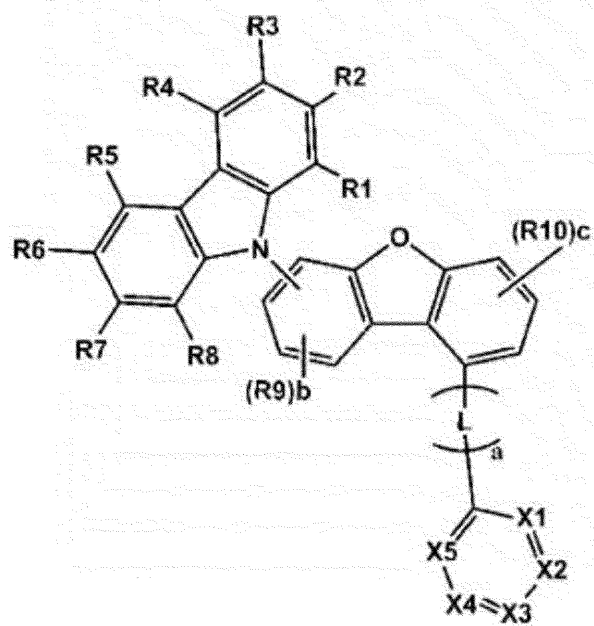
30

前記化学式 3 ~ 6 において、置換基は、前記化学式 1 で定義した通りである。

【請求項 3】

前記化学式 1 は、下記化学式 7 ~ 9 のうちの 1 つで表されるものである、請求項 1 に記載の有機発光素子：

【化 7】

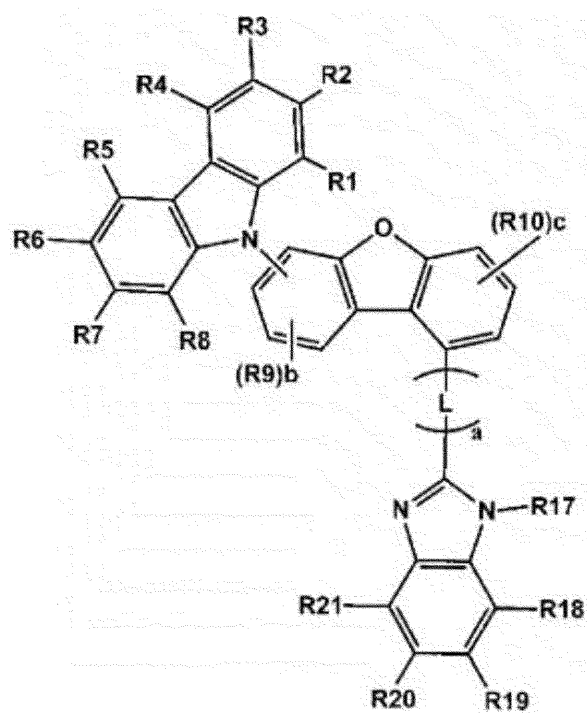


化学式 7

10

20

【化 8】

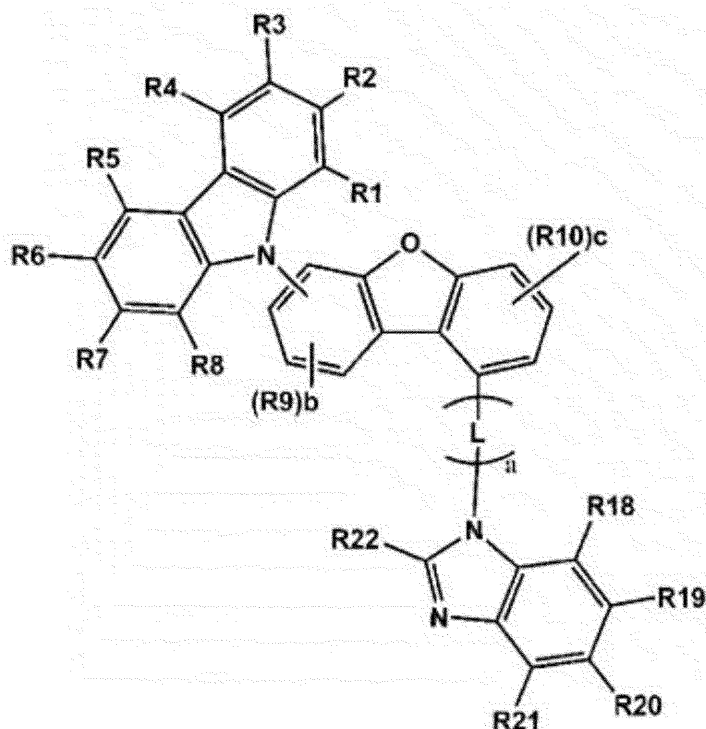


化学式 8

30

40

【化 9】



化学式 9

前記化学式 7 ~ 9 において、

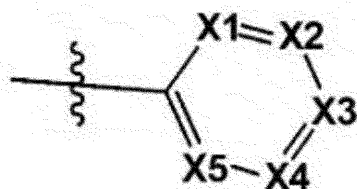
R 1 ~ R 1 0、L、a、b および c の定義は、前記化学式 1 における定義と同じであり、

X 1 は、C R 1 1 または N であり、X 2 は、C R 1 2 または N であり、X 3 は、C R 1 3 または N であり、X 4 は、C R 1 4 または N であり、X 5 は、C R 1 5 または N であり、

R 1 1 ~ R 1 5 および R 1 7 ~ R 2 2 は、互いに同一または異なり、それぞれ独立に、水素；重水素；ハロゲン；シアノ基；置換もしくは非置換のアルキル基；置換もしくは非置換のアルケニル基；置換もしくは非置換のアルキニル基；置換もしくは非置換のアルコキシ基；置換もしくは非置換のシクロアルキル基；置換もしくは非置換のヘテロシクロアルキル基；置換もしくは非置換のアリール基；置換もしくは非置換のヘテロアリール基；置換もしくは非置換のホスフィンオキシド基；および置換もしくは非置換のアミン基からなる群より選択されるか、互いに隣接する 2 以上の基は、互いに結合して置換もしくは非置換の脂肪族または芳香族炭化水素環もしくはヘテロ環を形成する。

【請求項 4】

【化 1 0】



は、下記化学式 1 0 ~ 1 3 のうちの 1 つで表されるものである、請求項 3 に記載の有機発光素子：

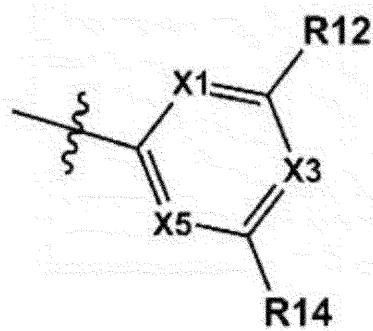
10

20

30

40

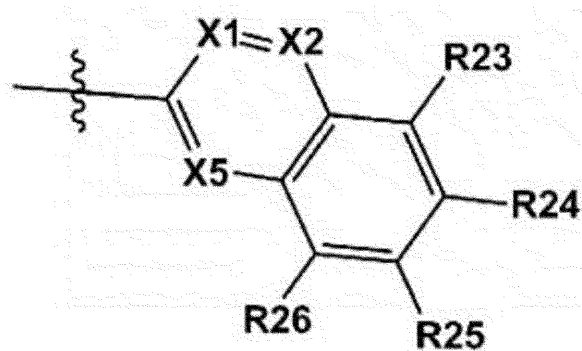
【化 1 1】



化学式 1 0

10

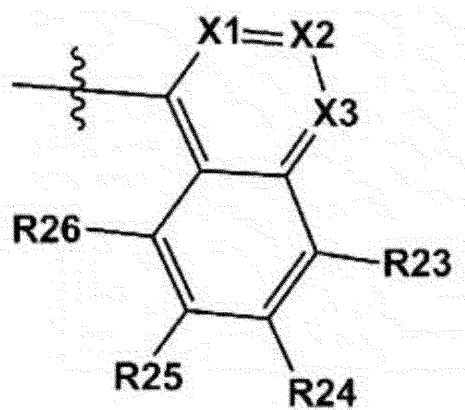
【化 1 2】



化学式 1 1

20

【化 1 3】

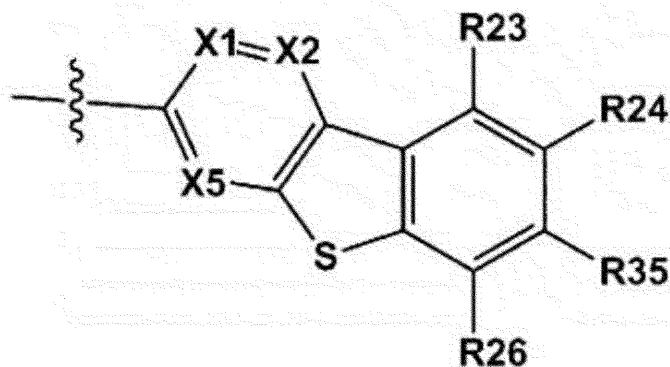


化学式 1 2

30

40

【化 1 4】



化学式 1 3

10

前記化学式 1 0 において、X 1、X 3 および X 5 のうちの 1 つ以上は、N であり、残りは、前記化学式 7 で定義した通りであり、

前記化学式 1 1 において、X 1、X 2 および X 5 のうちの 1 つ以上は、N であり、残りは、前記化学式 7 で定義した通りであり、

前記化学式 1 2 において、X 1 ~ X 3 のうちの 1 つ以上は、N であり、残りは、前記化学式 7 で定義した通りであり、

前記化学式 1 3 において、X 1、X 2 および X 5 のうちの 1 つ以上は、N であり、残りは、前記化学式 7 で定義した通りであり、

20

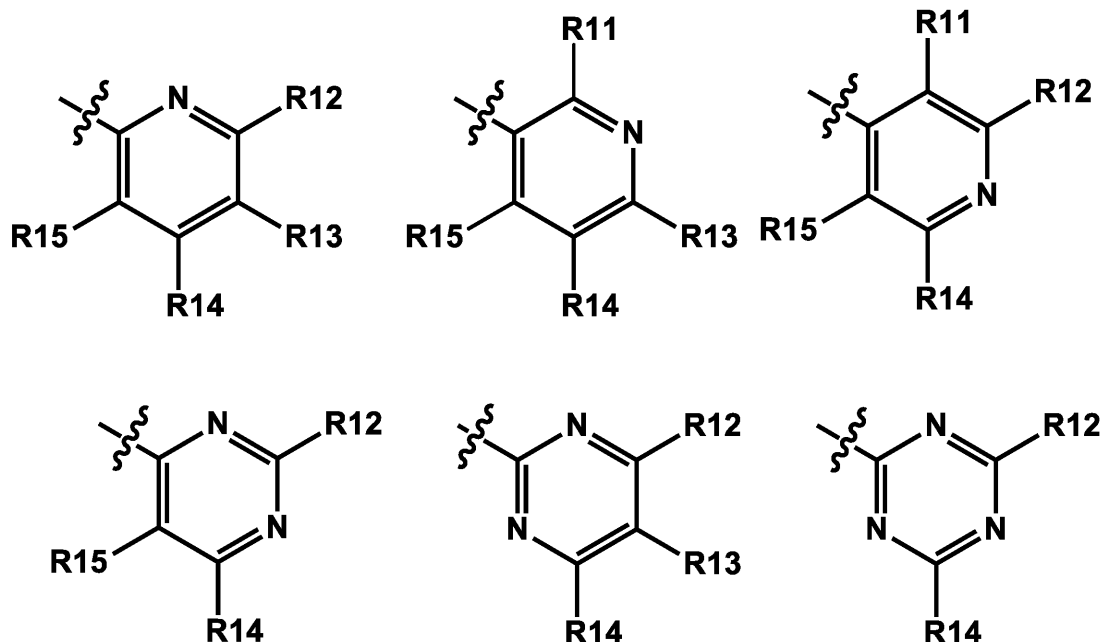
R 1 2、R 1 4 および R 2 3 ~ R 2 6 は、互いに同一または異なり、それぞれ独立に、水素；重水素；ハロゲン；シアノ基；置換もしくは非置換のアルキル基；置換もしくは非置換のアルケニル基；置換もしくは非置換のアルキニル基；置換もしくは非置換のアルコキシ基；置換もしくは非置換のシクロアルキル基；置換もしくは非置換のヘテロシクロアルキル基；置換もしくは非置換のアリール基；置換もしくは非置換のヘテロアリール基；置換もしくは非置換のホスフィンオキシド基；および置換もしくは非置換のアミン基からなる群より選択されるか、互いに隣接する 2 以上の基は、互いに結合して置換もしくは非置換の脂肪族または芳香族炭化水素環もしくはヘテロ環を形成する。

30

【請求項 5】

前記化学式 1 0 は、下記構造式から選択されるものである、請求項 4 に記載の有機発光素子：

【化 1 5】



40

50

前記構造式において、 $R_{11} \sim R_{15}$ は、互いに同一または異なり、それぞれ独立に、水素；重水素；ハロゲン；シアノ基；置換もしくは非置換のアルキル基；置換もしくは非置換のアルケニル基；置換もしくは非置換のアルキニル基；置換もしくは非置換のアルコキシ基；置換もしくは非置換のシクロアルキル基；置換もしくは非置換のヘテロシクロアルキル基；置換もしくは非置換のアリール基；置換もしくは非置換のヘテロアリール基；置換もしくは非置換のホスフィンオキシド基；および置換もしくは非置換のアミン基からなる群より選択されるか、互いに隣接する2以上の基は、互いに結合して置換もしくは非置換の脂肪族または芳香族炭化水素環もしくはヘテロ環を形成する。

【請求項6】

10

前記化学式2の R_c および R_d は、水素である、請求項1に記載の有機発光素子。

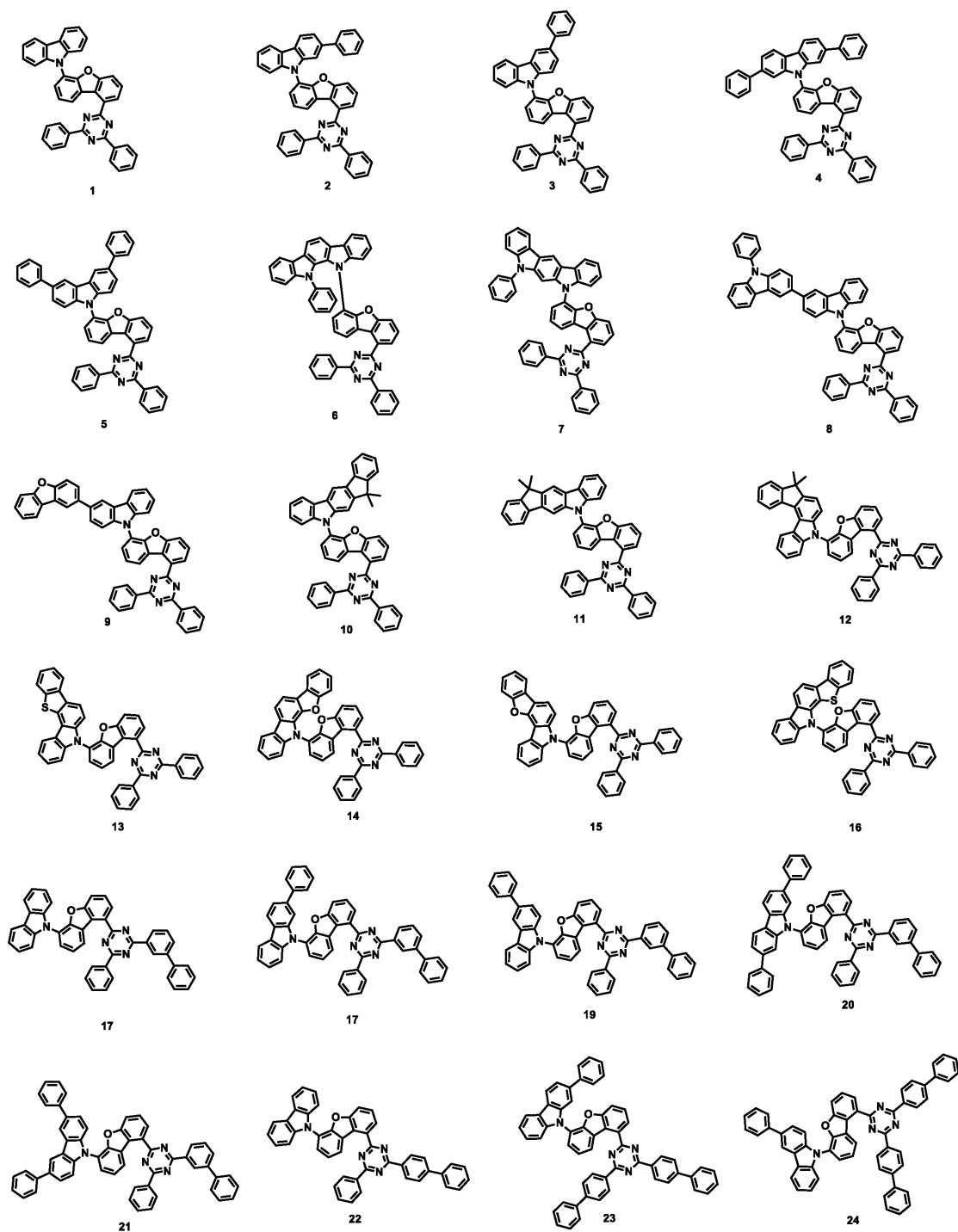
【請求項7】

前記化学式2の R_a および R_b は、互いに同一または異なり、それぞれ独立に、置換もしくは非置換の $C_6 \sim C_{40}$ のアリール基である、請求項1に記載の有機発光素子。

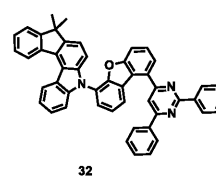
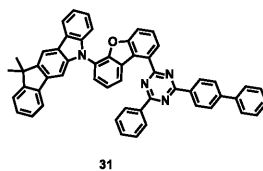
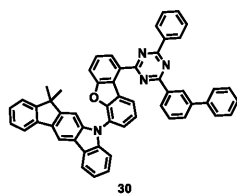
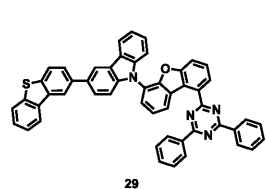
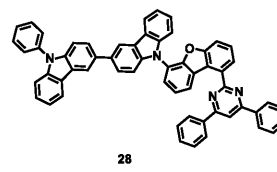
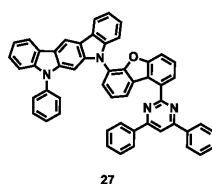
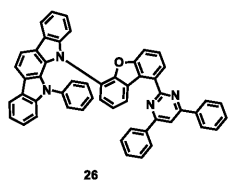
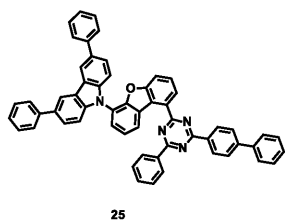
【請求項8】

前記化学式1は、下記の化合物のうちのいずれか1つで表されるものである、請求項1に記載の有機発光素子：

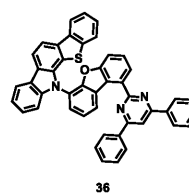
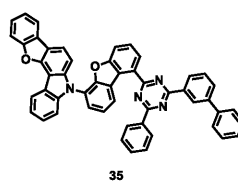
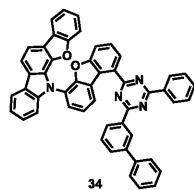
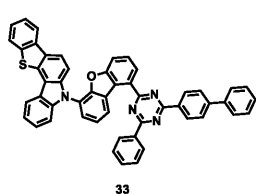
【化 16】



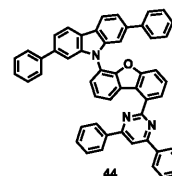
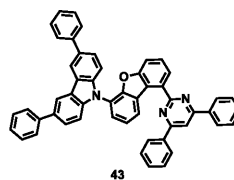
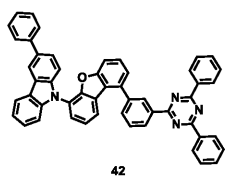
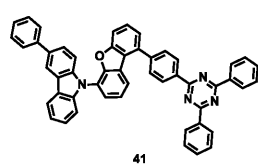
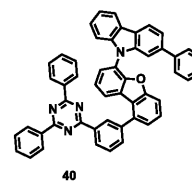
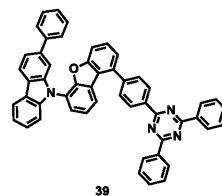
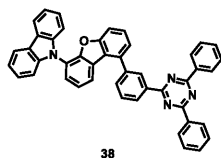
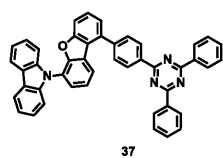
【化 17】



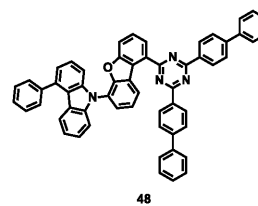
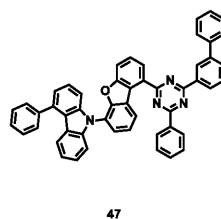
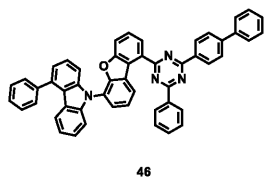
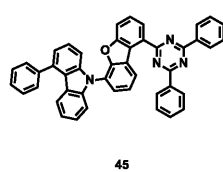
10



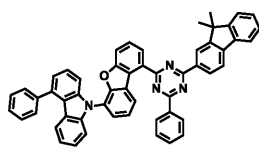
20



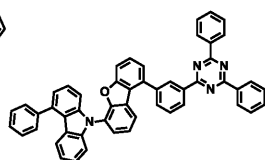
30



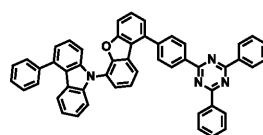
【化 18】



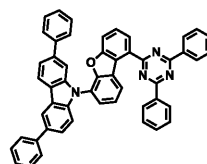
49



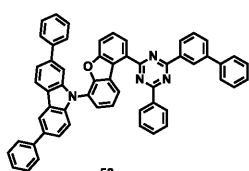
50



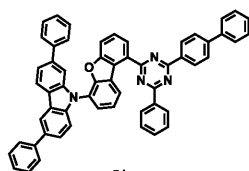
51



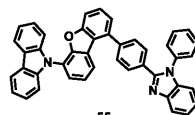
52



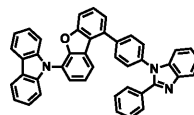
53



54

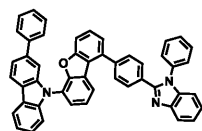


55

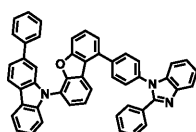


56

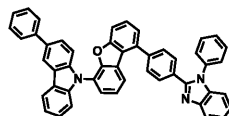
10



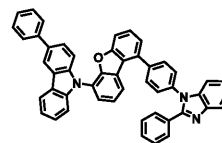
57



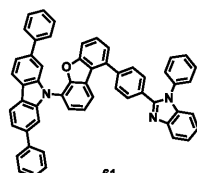
58



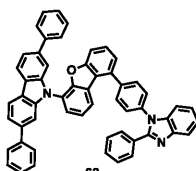
59



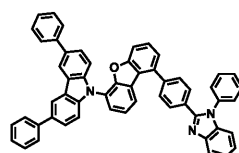
60



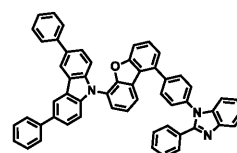
61



62

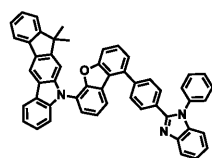


63

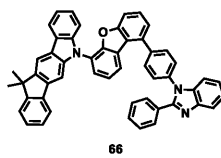


64

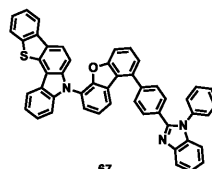
20



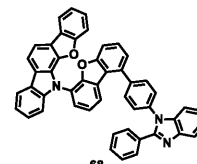
65



66

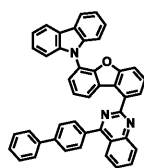


67

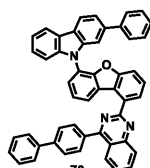


68

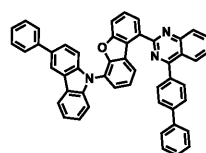
30



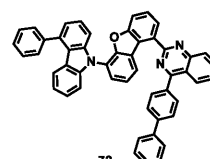
69



70

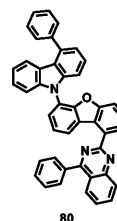
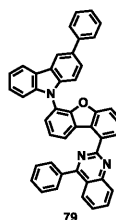
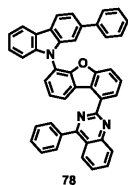
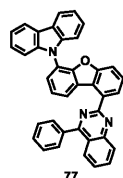
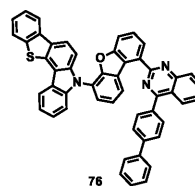
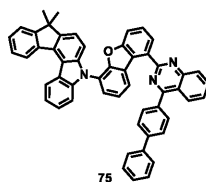
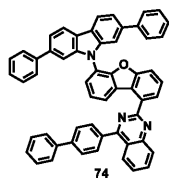
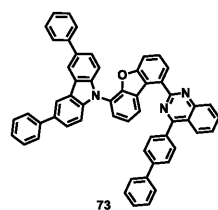


71

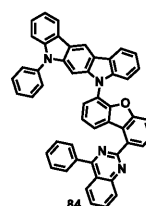
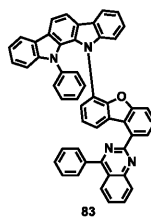
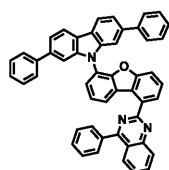
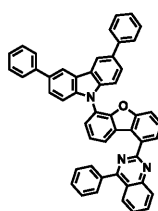


72

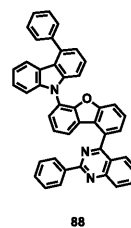
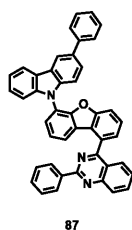
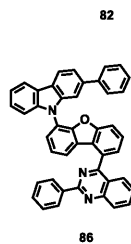
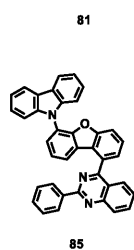
【化 19】



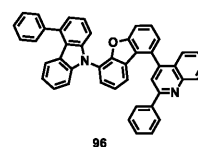
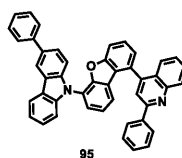
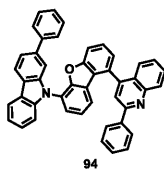
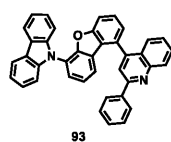
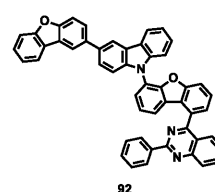
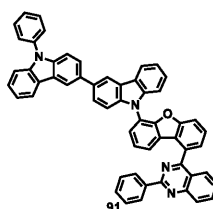
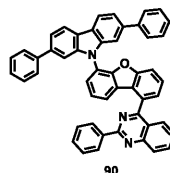
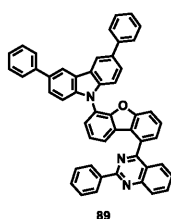
10



20

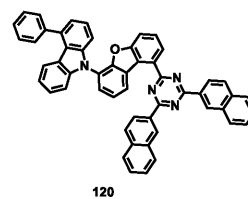
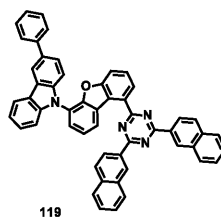
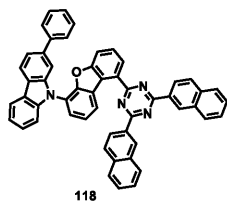
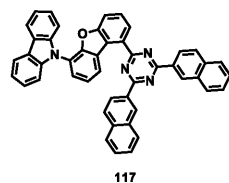
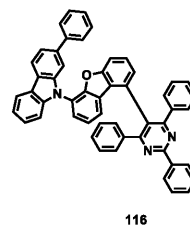
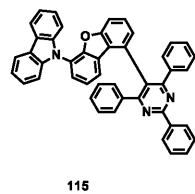
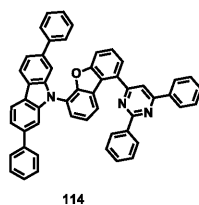
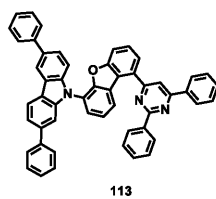
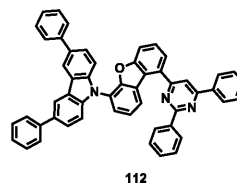
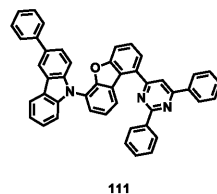
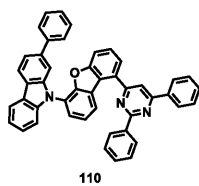
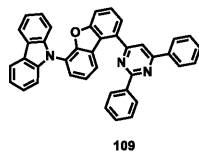
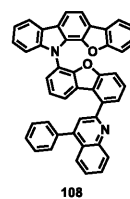
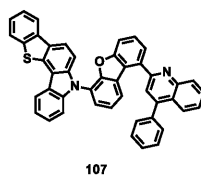
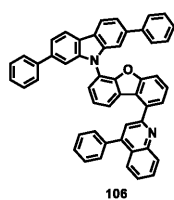
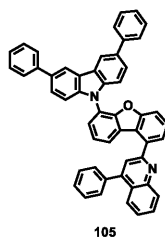
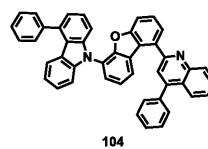
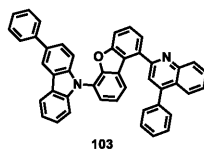
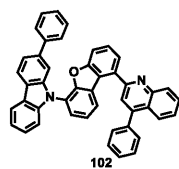
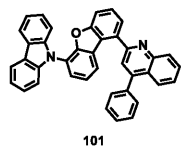
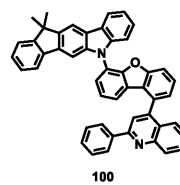
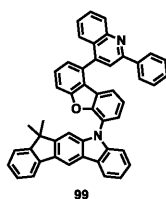
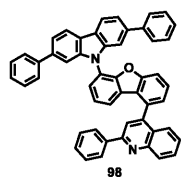
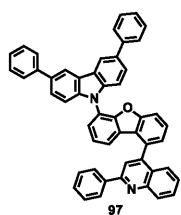


30



40

【化 20】



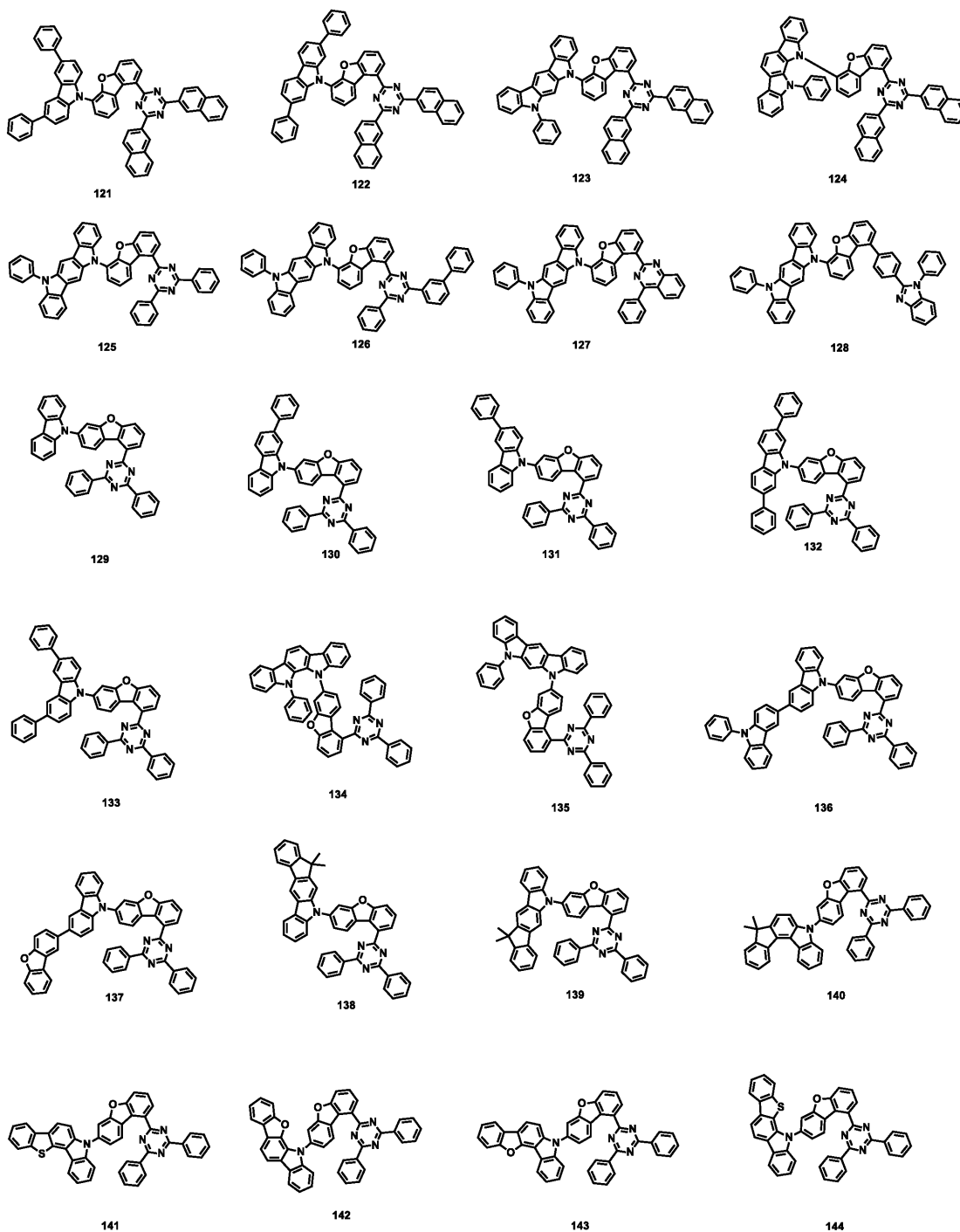
10

20

30

40

【化 2 1】

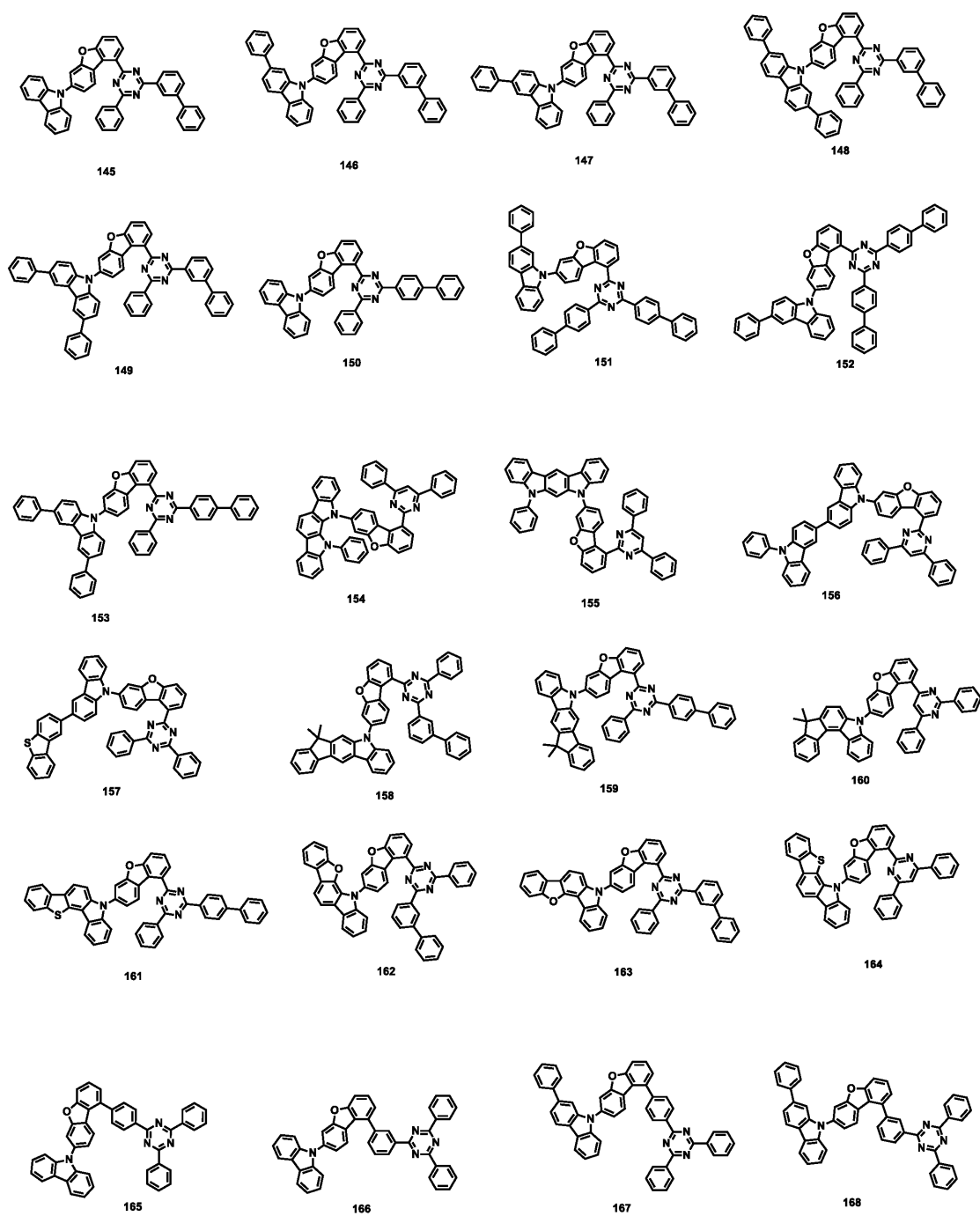


10

20

30

【化 2 2】

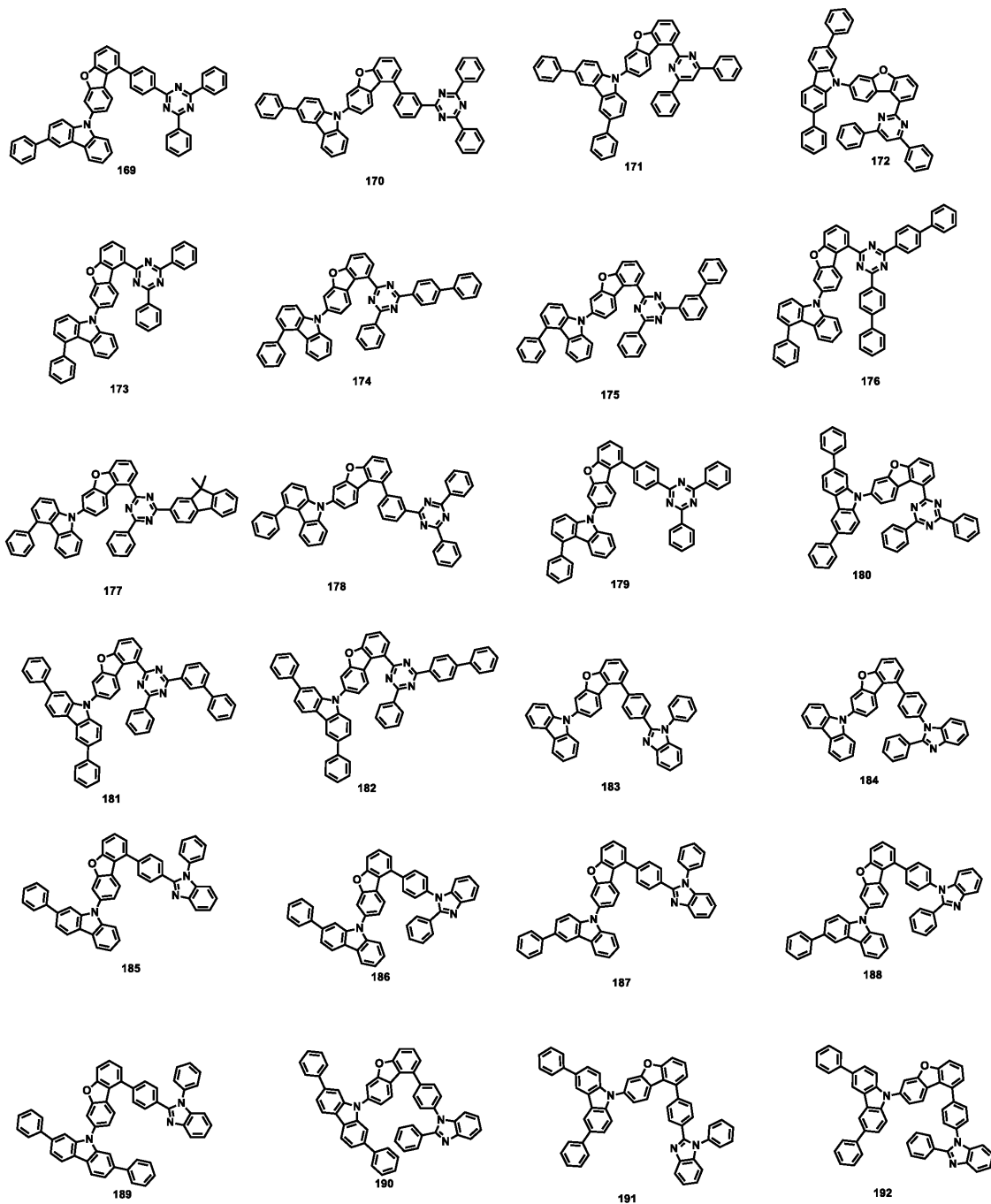


10

20

30

【化 2 3】

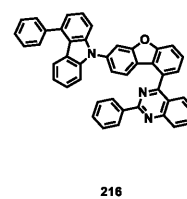
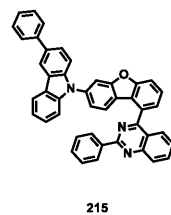
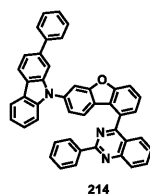
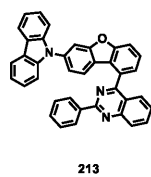
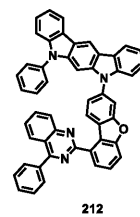
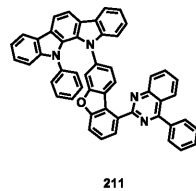
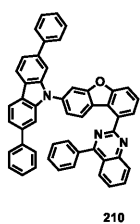
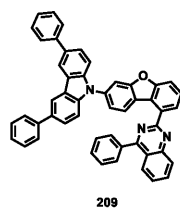
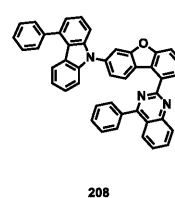
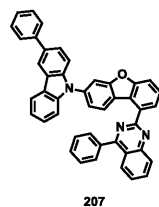
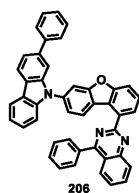
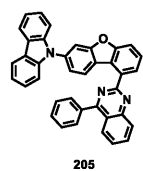
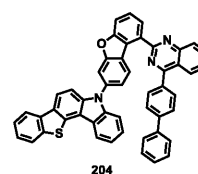
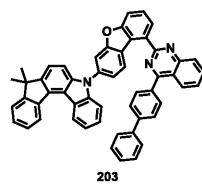
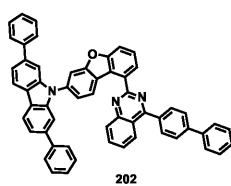
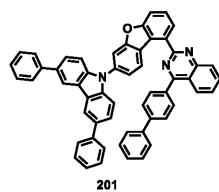
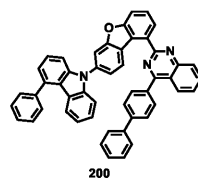
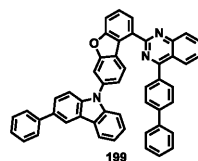
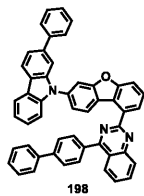
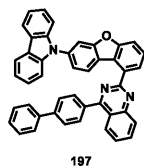
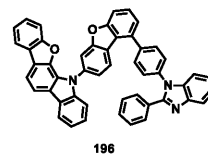
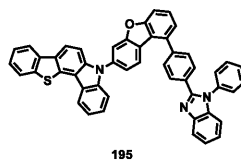
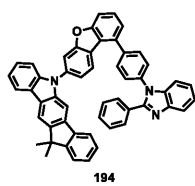
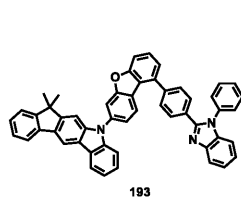


10

20

30

【化 2 4】

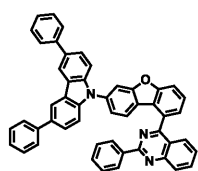


10

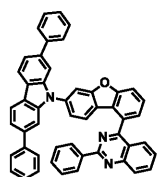
20

30

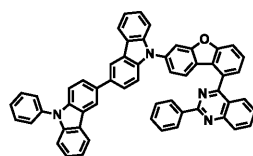
【化 25】



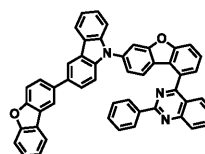
217



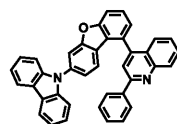
218



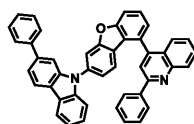
219



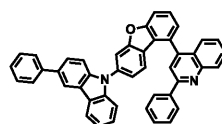
220



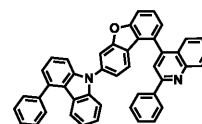
221



222

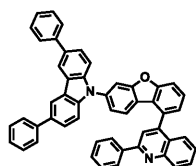


223

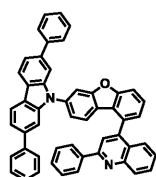


224

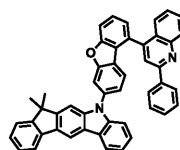
10



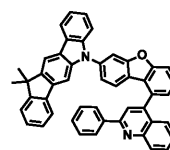
225



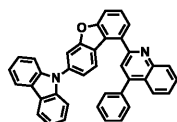
226



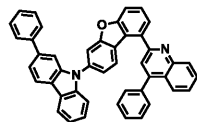
227



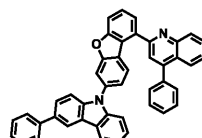
228



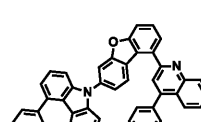
229



230

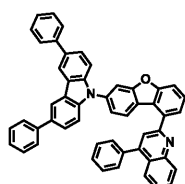


231

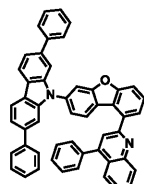


232

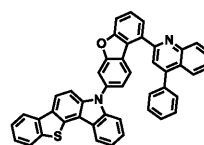
20



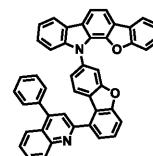
233



234

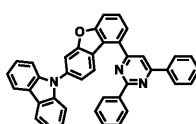


235

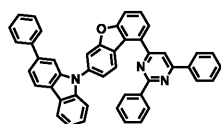


236

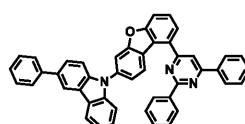
30



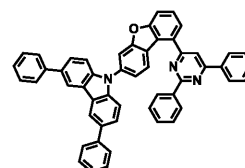
237



238

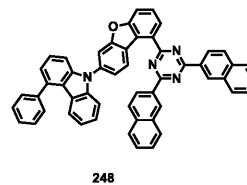
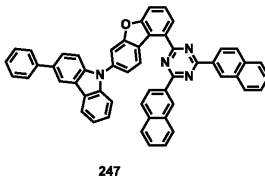
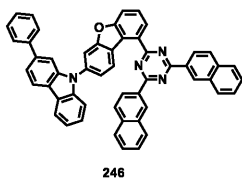
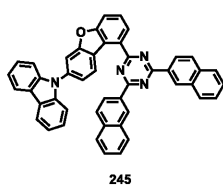
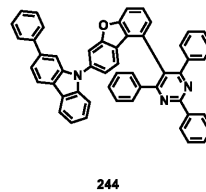
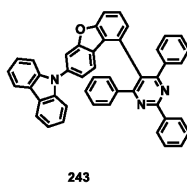
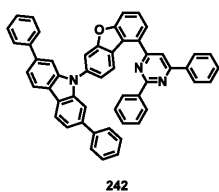
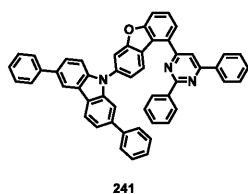


239

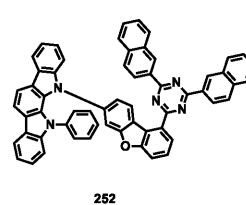
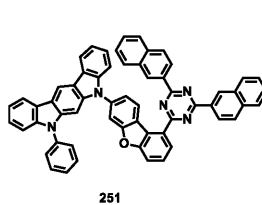
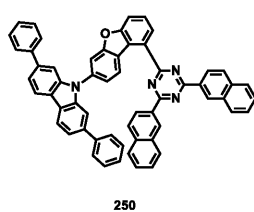
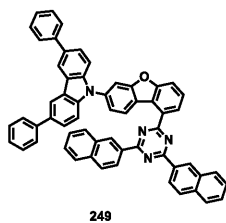


240

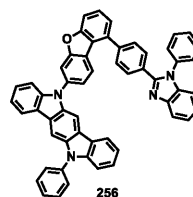
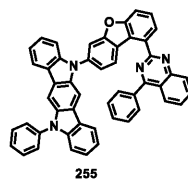
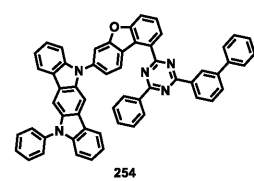
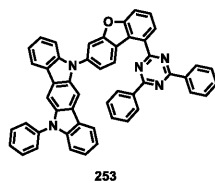
【化 2 6】



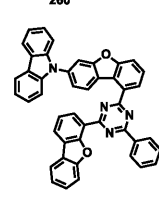
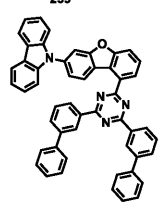
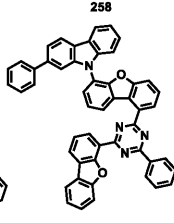
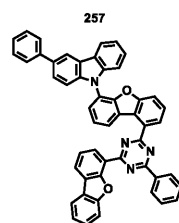
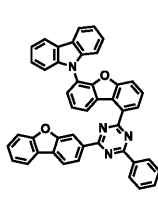
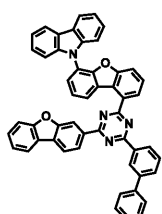
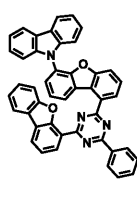
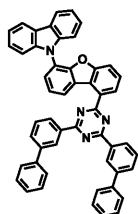
10



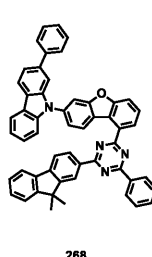
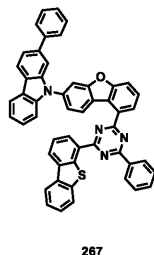
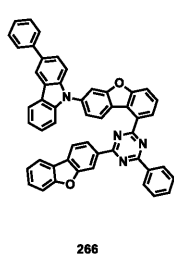
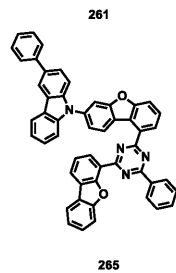
20



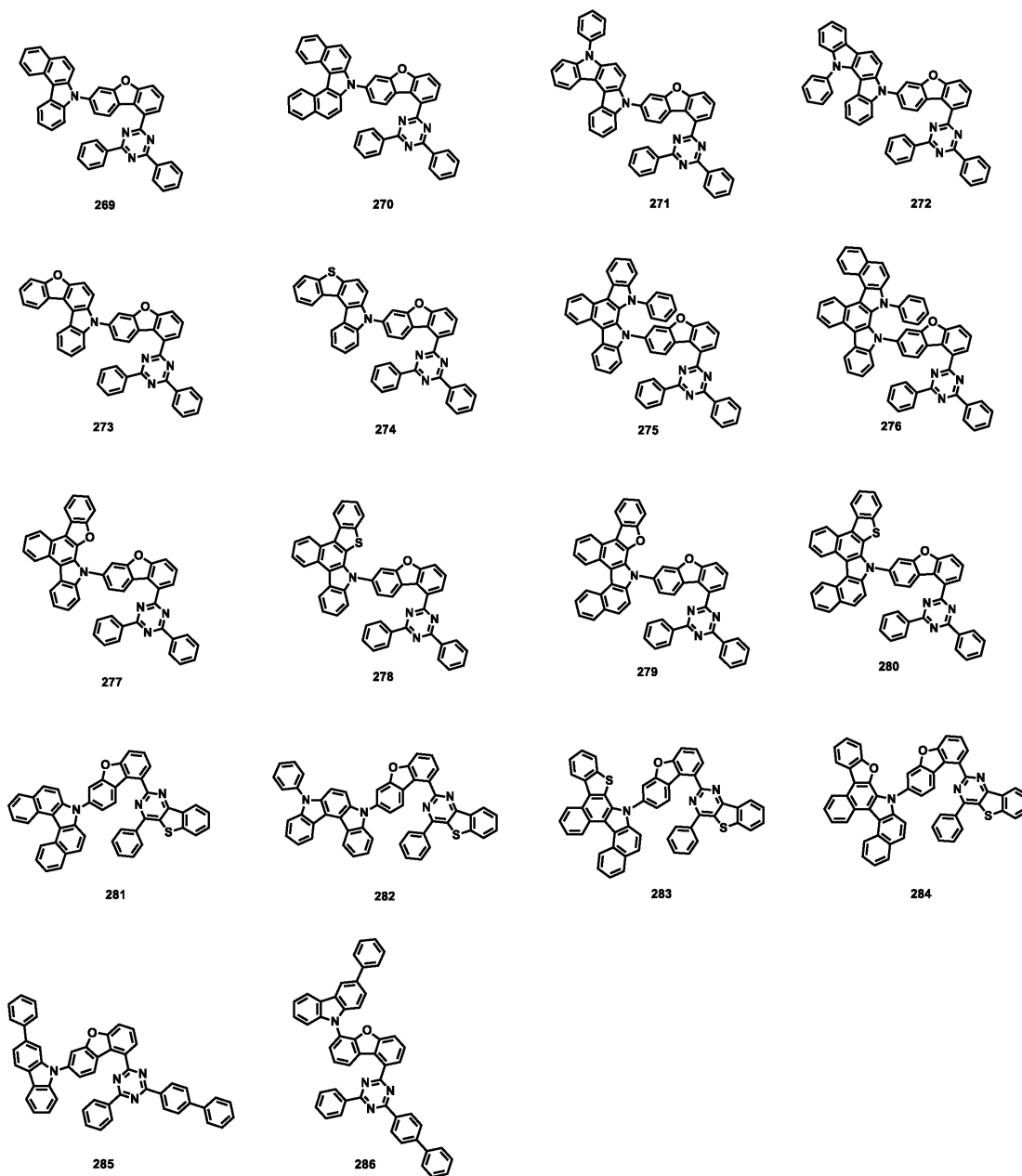
30



40



【化 27】



10

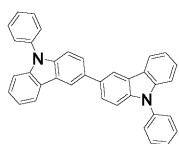
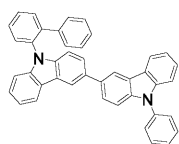
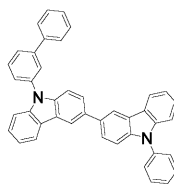
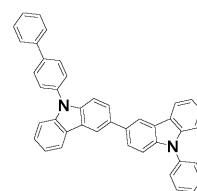
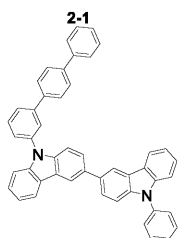
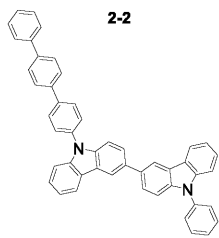
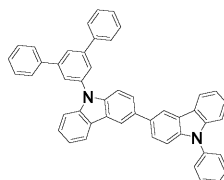
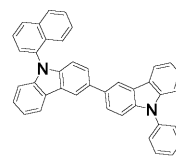
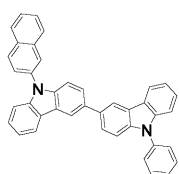
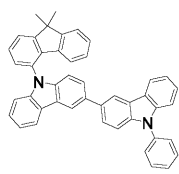
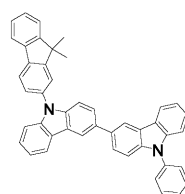
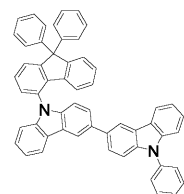
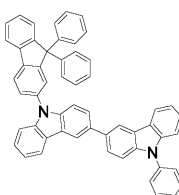
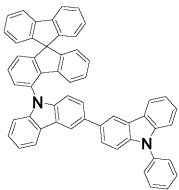
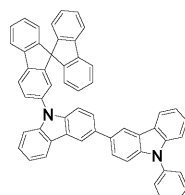
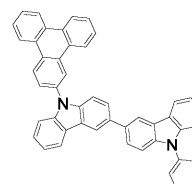
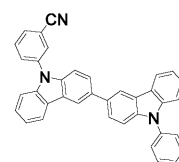
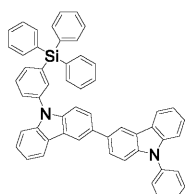
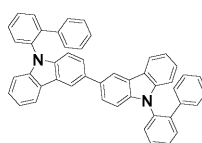
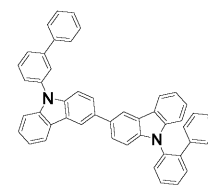
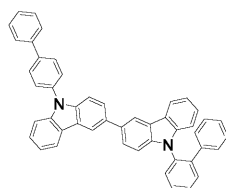
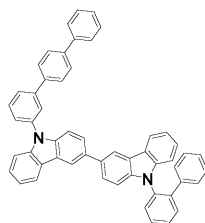
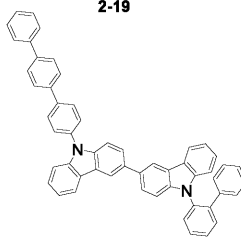
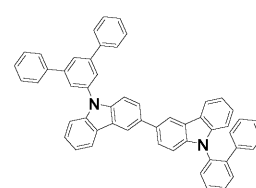
20

30

【請求項 9】

前記化学式 2 は、下記の化合物のうちのいずれか 1 つで表されるものである、請求項 1 に記載の有機発光素子：

【化 2 8】

**2-1****2-2****2-3****2-4****2-5****2-6****2-7****2-8****2-9****2-10****2-11****2-12****2-13****2-14****2-15****2-16****2-17****2-18****2-19****2-20****2-21****2-22****2-23****2-24**

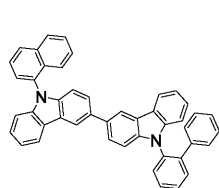
10

20

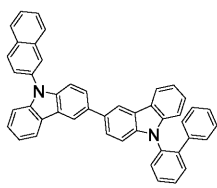
30

40

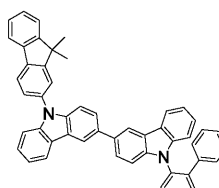
【化 2 9】



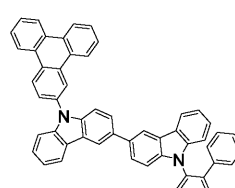
2-25



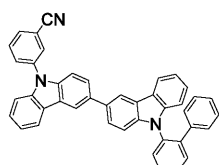
2-26



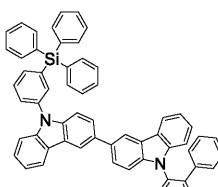
2-27



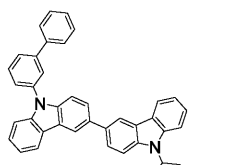
2-28



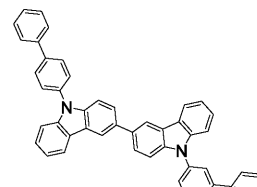
2-29



2-30

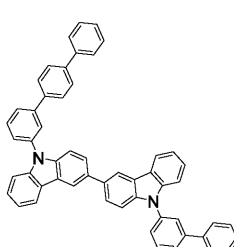


2-31

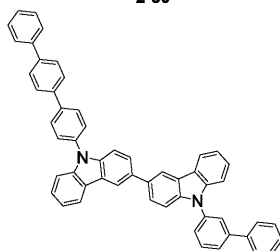


2-32

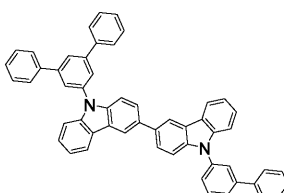
10



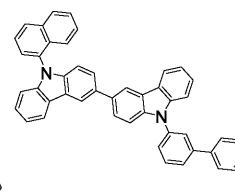
2-33



2-34

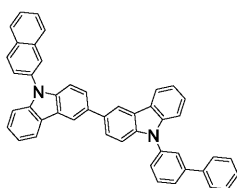


2-35

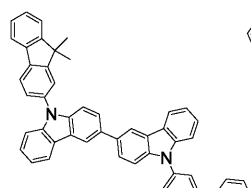


2-36

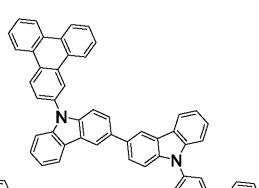
20



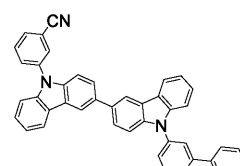
2-37



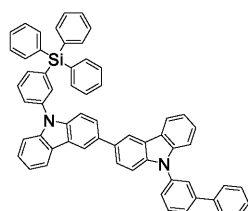
2-38



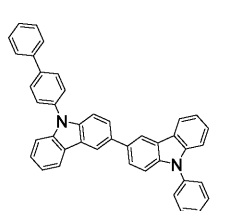
2-39



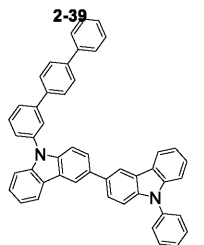
2-40



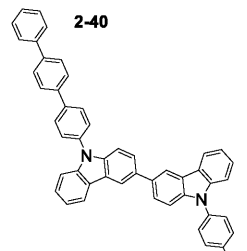
2-41



2-42

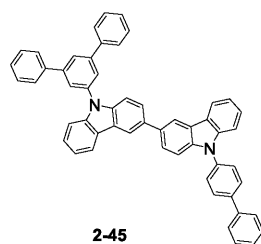


2-43

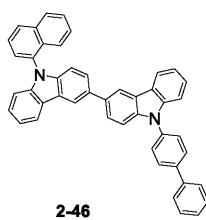


2-44

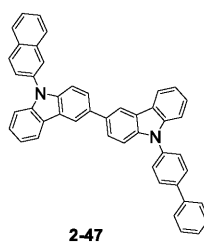
30



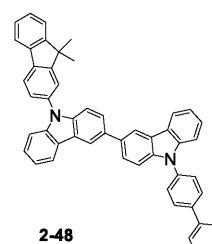
2-45



2-46



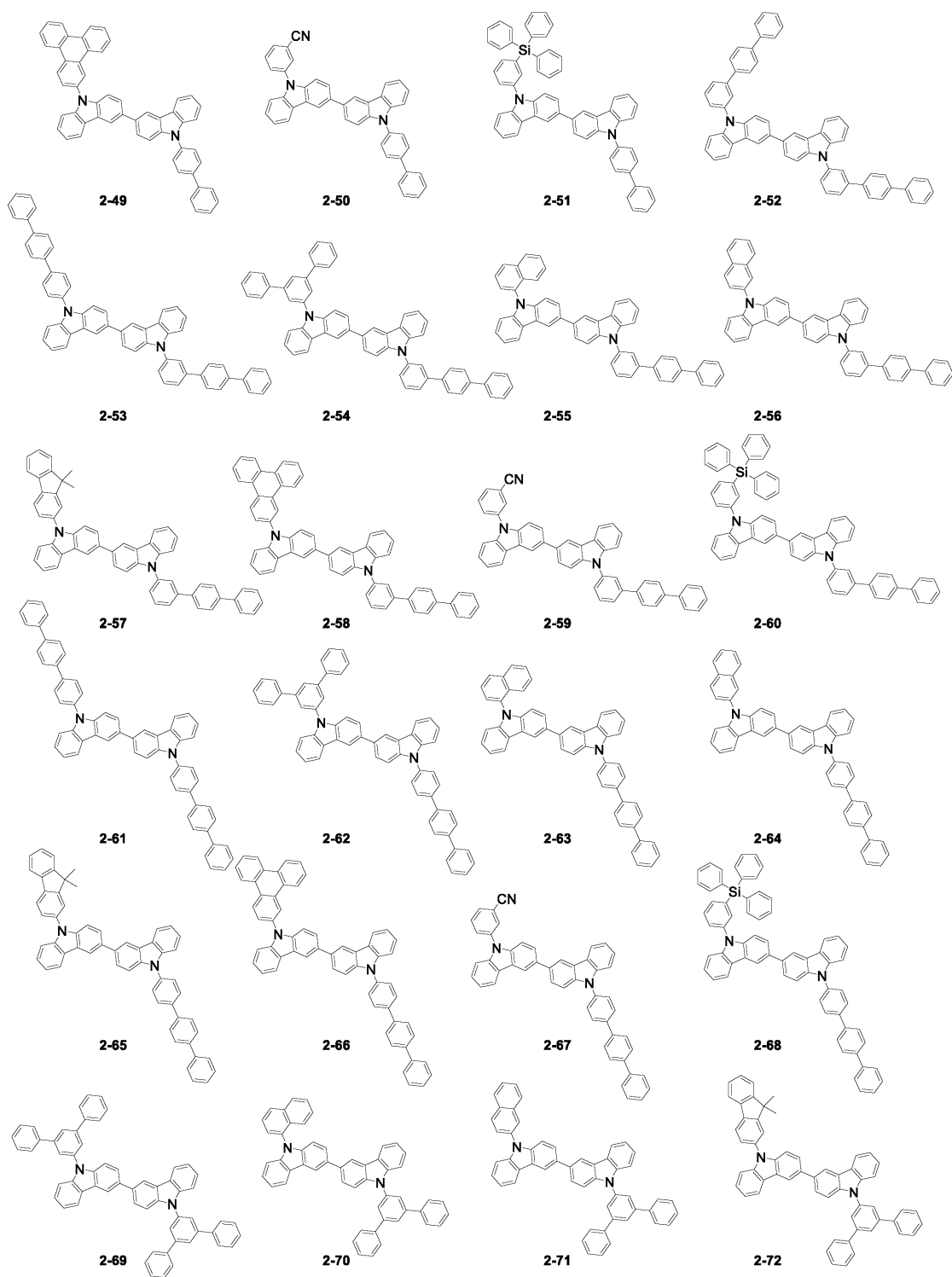
2-47



2-48

40

【化 3 0】



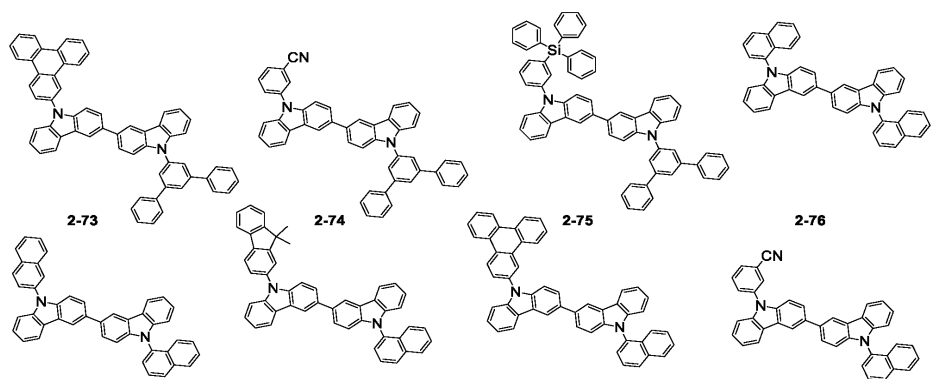
10

20

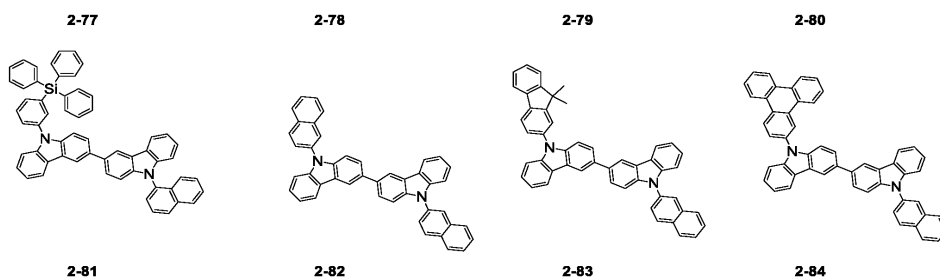
30

40

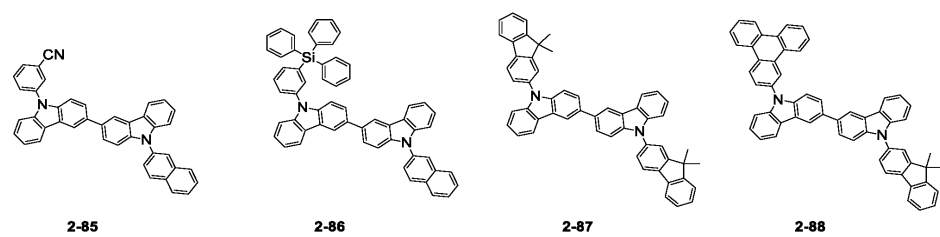
【化 3 1】



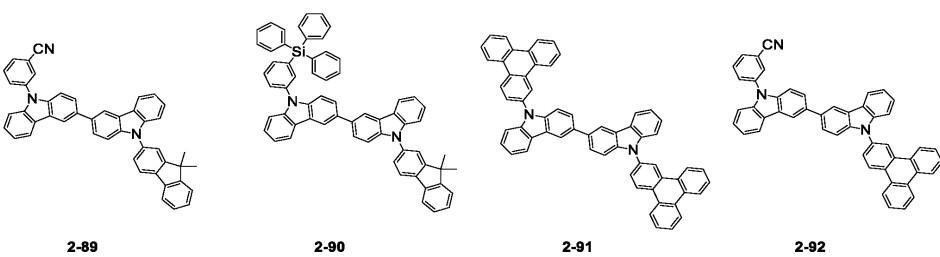
10



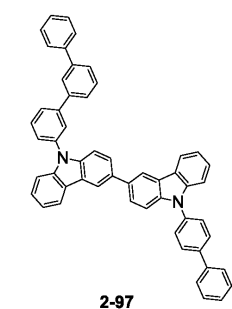
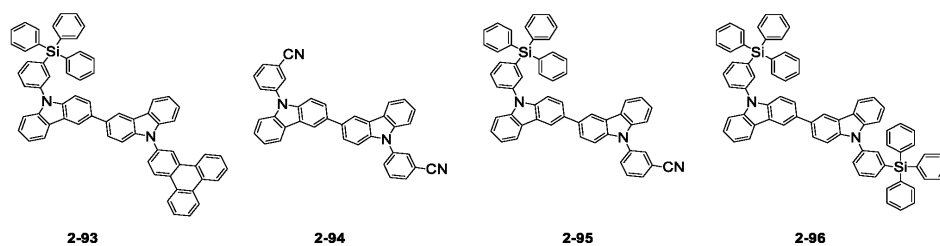
20



30



40



50

【請求項 1 0】

前記有機物層は、正孔阻止層、電子注入層、および電子輸送層のうちの少なくとも１層を含み、前記正孔阻止層、電子注入層、および電子輸送層のうちの少なくとも１層が、前記化学式１で表されるヘテロ環化合物、および前記化学式２で表されるヘテロ環化合物を同時に含むものである、請求項１に記載の有機発光素子。

【請求項１１】

前記有機物層は、発光層を含み、前記発光層は、前記化学式１で表されるヘテロ環化合物、および前記化学式２で表されるヘテロ環化合物を同時に含むものである、請求項１に記載の有機発光素子。

【請求項１２】

前記有機物層は、発光層を含み、前記発光層は、ホスト物質を含み、前記ホスト物質は、前記化学式１で表されるヘテロ環化合物、および前記化学式２で表されるヘテロ環化合物を同時に含むものである、請求項１に記載の有機発光素子。

10

【請求項１３】

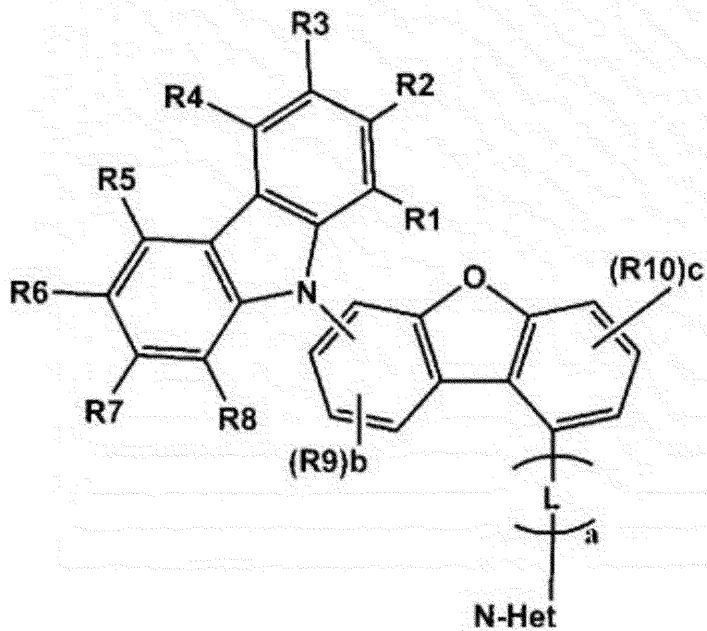
前記有機発光素子は、発光層、正孔注入層、正孔輸送層、電子注入層、電子輸送層、電子ブロック層、および正孔ブロック層からなる群より選択される１層または２層以上をさらに含むものである、請求項１に記載の有機発光素子。

【請求項１４】

下記化学式１で表されるヘテロ環化合物、および下記化学式２で表される化合物を同時に含むものである有機発光素子の有機物層用組成物：

20

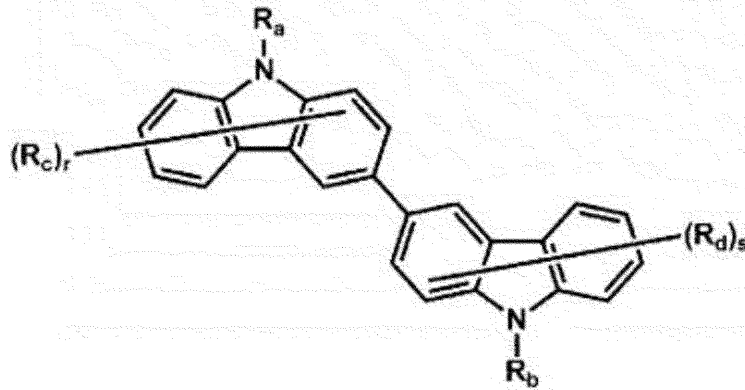
【化３２】



化学式 1

30

【化 3 3】



化学式 2

10

前記化学式 1 および 2 において、

N - H e t は、置換もしくは非置換であり、N を 1 個以上含む単環もしくは多環のヘテロ環基であり、

L は、直接結合；置換もしくは非置換のアリーレン基；または置換もしくは非置換のヘテロアリーレン基であり、a は、1 ~ 3 の整数であり、a が 2 以上の場合、L は、互いに同一または異なり、

20

R_a および R_b は、互いに同一または異なり、それぞれ独立に、置換もしくは非置換のアリール基；または置換もしくは非置換のヘテロアリール基であり、

R₁ ~ R₁₀、R_c および R_d は、互いに同一または異なり、それぞれ独立に、水素；重水素；ハロゲン；シアノ基；置換もしくは非置換のアルキル基；置換もしくは非置換のアルケニル基；置換もしくは非置換のアルキニル基；置換もしくは非置換のアルコキシ基；置換もしくは非置換のシクロアルキル基；置換もしくは非置換のヘテロシクロアルキル基；置換もしくは非置換のアリール基；置換もしくは非置換のヘテロアリール基；置換もしくは非置換のシリル基；置換もしくは非置換のホスフィンオキシド基；および置換もしくは非置換のアミン基からなる群より選択されるか、互いに隣接する 2 以上の基は、互いに結合して置換もしくは非置換の脂肪族または芳香族炭化水素環もしくはヘテロ環を形成し、b および c はそれぞれ、1 ~ 3 の整数であり、b が 2 以上の場合、R₉ は、互いに同一または異なり、c が 2 以上の場合、R₁₀ は、互いに同一または異なり、r および s は、0 ~ 7 の整数であり、r が 2 以上の場合、R_c は、互いに同一または異なり、s が 2 以上の場合、R_d は、互いに同一または異なる。

30

【請求項 15】

前記組成物内の前記化学式 1 で表されるヘテロ環化合物：前記化学式 2 で表される化合物の重量比は、1 : 10 ~ 10 : 1 である、請求項 14 に記載の有機発光素子の有機物層用組成物。

【請求項 16】

基板を用意するステップと、

40

前記基板上に第 1 電極を形成するステップと、

前記第 1 電極上に 1 層以上の有機物層を形成するステップと、

前記有機物層上に第 2 電極を形成するステップとを含み、

前記有機物層を形成するステップは、請求項 14 に記載の有機物層用組成物を用いて 1 層以上の有機物層を形成するステップを含むものである有機発光素子の製造方法。

【請求項 17】

前記有機物層を形成するステップは、前記化学式 1 のヘテロ環化合物および前記化学式 2 のヘテロ環化合物を予備混合 (pre-mixed) して、熱真空蒸着方法を利用して形成するものである、請求項 16 に記載の有機発光素子の製造方法。

【発明の詳細な説明】

50

【技術分野】

【0001】

本出願は、2017年3月24日付で韓国特許庁に提出された韓国特許出願第10-2017-0037979号、2018年2月14日付で韓国特許庁に提出された韓国特許出願第10-2018-0018786号、および2018年2月14日付で韓国特許庁に提出された韓国特許出願第10-2018-0018782号の出願日の利益を主張し、その内容のすべては本明細書に組み込まれる。

本明細書は、有機発光素子および有機発光素子の有機物層用組成物に関する。

【背景技術】

【0002】

電界発光素子は、自発光型表示素子の一種であって、視野角が広く、コントラストに優れているだけでなく、応答速度が速いという利点がある。

有機発光素子は、2つの電極の間に有機薄膜を配置させた構造を有している。このような構造の有機発光素子に電圧が印加されると、2つの電極から注入された電子と正孔が有機薄膜で結合して対をなした後、消滅しながら光を発する。前記有機薄膜は、必要に応じて単層または多層から構成される。

有機薄膜の材料は、必要に応じて発光機能を有することができる。例えば、有機薄膜材料としては、それ自体が単独で発光層を構成可能な化合物が使用されてもよく、またはホスト-ドーパント系発光層のホストまたはドーパントの役割を果たす化合物が使用されてもよい。その他にも、有機薄膜の材料として、正孔注入、正孔輸送、電子ブロック、正孔ブロック、電子輸送、電子注入などの役割を果たす化合物が使用されてもよい。

有機発光素子の性能、寿命または効率を向上させるために、有機薄膜の材料の開発が求められ続けている。

【発明の概要】

【発明が解決しようとする課題】

【0003】

有機発光素子において使用可能な物質に要求される条件、例えば、適切なエネルギー準位、電気化学的安定性および熱的安定性などを満足させることができ、置換基によって有機発光素子で要求される多様な役割を果たす化学構造を有する化合物を含む有機発光素子に関する研究が必要である。

【課題を解決するための手段】

【0004】

本出願の一実施態様は、第1電極と、第2電極と、前記第1電極および第2電極の間に備えられた1層以上の有機物層とを含む有機発光素子であって、

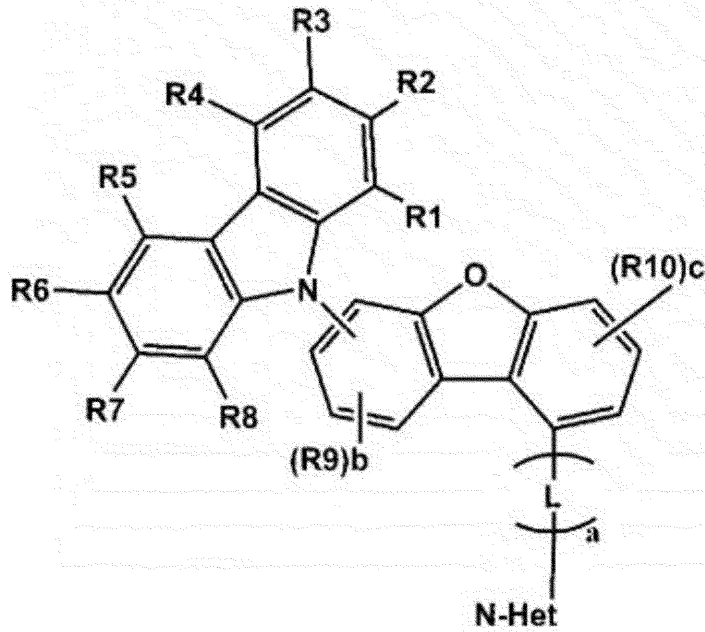
前記有機物層のうちの1層以上が、下記化学式1で表されるヘテロ環化合物、および下記化学式2で表されるヘテロ環化合物を同時に含むものである有機発光素子を提供する。

10

20

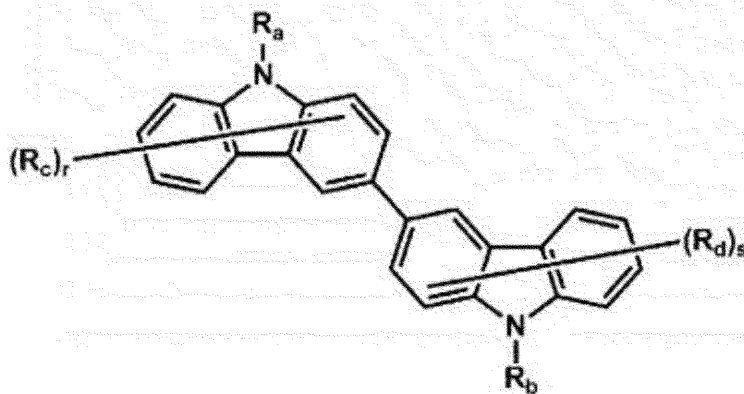
30

【化 1】



化学式 1

【化 2】



化学式 2

前記化学式 1 および 2 において、

N - H e t は、置換もしくは非置換であり、N を 1 個以上含む単環もしくは多環のヘテロ環基であり、

L は、直接結合；置換もしくは非置換のアリーレン基；または置換もしくは非置換のヘテロアリーレン基であり、a は、1 ～ 3 の整数であり、a が 2 以上の場合、L は、互いに同一または異なり、

R_a および R_b は、互いに同一または異なり、それぞれ独立に、置換もしくは非置換のアリール基；または置換もしくは非置換のヘテロアリール基であり、

R₁ ～ R₁₀、R_c および R_d は、互いに同一または異なり、それぞれ独立に、水素；重水素；ハロゲン；シアノ基；置換もしくは非置換のアルキル基；置換もしくは非置換のアルケニル基；置換もしくは非置換のアルキニル基；置換もしくは非置換のアルコキシ基；置換もしくは非置換のシクロアルキル基；置換もしくは非置換のヘテロシクロアルキル基；置換もしくは非置換のアリール基；置換もしくは非置換のヘテロアリール基；置換もしくは非置換のシリル基；置換もしくは非置換のホスフィンオキシド基；および置換もしくは非置換のアミン基からなる群より選択されるか、互いに隣接する 2 以上の基は、互いに結合して置換もしくは非置換の脂肪族または芳香族炭化水素環もしくはヘテロ環を形成

し、 b および c はそれぞれ、 $1 \sim 3$ の整数であり、 b が 2 以上の場合、 R_9 は、互いに同一または異なり、 c が 2 以上の場合、 R_{10} は、互いに同一または異なり、 r および s は、 $0 \sim 7$ の整数であり、 r が 2 以上の場合、 R_c は、互いに同一または異なり、 s が 2 以上の場合、 R_d は、互いに同一または異なる。

【0005】

また、本出願の他の実施態様は、前記化学式 1 で表されるヘテロ環化合物、および前記化学式 2 で表される化合物を同時に含むものである有機発光素子の有機物層用組成物を提供する。

【0006】

最後に、本出願の一実施態様は、基板を用意するステップと、前記基板上に第 1 電極を形成するステップと、前記第 1 電極上に 1 層以上の有機物層を形成するステップと、前記有機物層上に第 2 電極を形成するステップとを含み、前記有機物層を形成するステップは、本出願の一実施態様に係る有機物層用組成物を用いて 1 層以上の有機物層を形成するステップを含むものである有機発光素子の製造方法を提供する。

10

【発明の効果】

【0007】

本出願の一実施態様に係るヘテロ環化合物は、有機発光素子の有機物層材料として使用することができる。前記ヘテロ環化合物は、有機発光素子において正孔注入層、正孔輸送層、発光層、電子輸送層、電子注入層、電荷生成層などの材料として使用可能である。特に、前記化学式 1 で表されるヘテロ環化合物、および前記化学式 2 で表される化合物は、同時に有機発光素子の発光層の材料として使用可能である。また、前記化学式 1 で表されるヘテロ環化合物と前記化学式 2 で表されるヘテロ環化合物を同時に有機発光素子に使用する場合、素子の駆動電圧を低下させ、光効率を向上させ、化合物の熱的安定性によって素子の寿命特性を向上させることができる。

20

特に、前記化学式 1 で表されるヘテロ環化合物は、ジベンゾフラン構造の 1 番炭素位置に N 含有環が置換され、前記ジベンゾフランの構造中、 N 含有環が置換されていないベンゼンにカルバゾール構造が置換されることでさらに電子安定性の構造を有し、これによって素子寿命を向上させることができる。

【図面の簡単な説明】

【0008】

30

【図 1】本出願の一実施態様に係る有機発光素子の積層構造を概略的に示す図である。

【図 2】本出願の一実施態様に係る有機発光素子の積層構造を概略的に示す図である。

【図 3】本出願の一実施態様に係る有機発光素子の積層構造を概略的に示す図である。

【発明を実施するための形態】

【0009】

以下、本出願について詳細に説明する。

前記「置換」という用語は、化合物の炭素原子に結合した水素原子が他の置換基に変わることを意味し、置換される位置は、水素原子の置換される位置、すなわち置換基が置換可能な位置であれば限定せず、2 以上置換される場合、2 以上の置換基は、互いに同一でも異なってもよい。

40

【0010】

本明細書において、前記ハロゲンは、フッ素、塩素、臭素、またはヨウ素であってもよい。

【0011】

本明細書において、前記アルキル基は、炭素数 $1 \sim 60$ の直鎖もしくは分枝鎖を含み、他の置換基によって追加的に置換されていてもよい。前記アルキル基の炭素数は $1 \sim 60$ 、具体的には $1 \sim 40$ 、さらに具体的には $1 \sim 20$ であってもよい。具体例としては、メチル基、エチル基、プロピル基、 n -プロピル基、イソプロピル基、ブチル基、 n -ブチル基、イソブチル基、 $tert$ -ブチル基、 sec -ブチル基、1-メチル-ブチル基、1-エチル-ブチル基、ペンチル基、 n -ペンチル基、イソペンチル基、ネオペンチル基

50

、tert - ペンチル基、ヘキシル基、n - ヘキシル基、1 - メチルペンチル基、2 - メチルペンチル基、4 - メチル - 2 - ペンチル基、3, 3 - ジメチルブチル基、2 - エチルブチル基、ヘブチル基、n - ヘブチル基、1 - メチルヘキシル基、シクロペンチルメチル基、シクロヘキシルメチル基、オクチル基、n - オクチル基、tert - オクチル基、1 - メチルヘブチル基、2 - エチルヘキシル基、2 - プロピルペンチル基、n - ノニル基、2, 2 - ジメチルヘブチル基、1 - エチル - プロピル基、1, 1 - ジメチル - プロピル基、イソヘキシル基、2 - メチルペンチル基、4 - メチルヘキシル基、5 - メチルヘキシル基などがあるが、これらにのみ限定されるものではない。

【0012】

本明細書において、前記アルケニル基は、炭素数2～60の直鎖もしくは分枝鎖を含み、他の置換基によって追加的に置換されていてもよい。前記アルケニル基の炭素数は2～60、具体的には2～40、さらに具体的には2～20であってもよい。具体例としては、ビニル基、1 - プロペニル基、イソプロペニル基、1 - ブテニル基、2 - ブテニル基、3 - ブテニル基、1 - ペンテニル基、2 - ペンテニル基、3 - ペンテニル基、3 - メチル - 1 - ブテニル基、1, 3 - ブタジエニル基、アリル基、1 - フェニルビニル - 1 - イル基、2 - フェニルビニル - 1 - イル基、2, 2 - ジフェニルビニル - 1 - イル基、2 - フェニル - 2 - (ナフチル - 1 - イル) ビニル - 1 - イル基、2, 2 - ビス(ジフェニル - 1 - イル) ビニル - 1 - イル基、スチルベニル基、スチレニル基などがあるが、これらに限定されない。

10

【0013】

本明細書において、前記アルキニル基は、炭素数2～60の直鎖もしくは分枝鎖を含み、他の置換基によって追加的に置換されていてもよい。前記アルキニル基の炭素数は2～60、具体的には2～40、さらに具体的には2～20であってもよい。

20

【0014】

本明細書において、アルコキシ基は、直鎖、分枝鎖もしくは環鎖であってもよい。アルコキシ基の炭素数は特に限定されないが、炭素数1～20のものが好ましい。具体的には、メトキシ、エトキシ、n - プロポキシ、イソプロポキシ、i - プロピルオキシ、n - ブトキシ、イソブトキシ、tert - ブトキシ、sec - ブトキシ、n - ペンチルオキシ、ネオペンチルオキシ、イソペンチルオキシ、n - ヘキシルオキシ、3, 3 - ジメチルブチルオキシ、2 - エチルブチルオキシ、n - オクチルオキシ、n - ノニルオキシ、n - デシルオキシ、ベンジルオキシ、p - メチルベンジルオキシなどになってもよいが、これらに限定されるものではない。

30

【0015】

本明細書において、前記シクロアルキル基は、炭素数3～60の単環もしくは多環を含み、他の置換基によって追加的に置換されていてもよい。ここで、多環とは、シクロアルキル基が他の環基と直接連結または縮合された基を意味する。ここで、他の環基とは、シクロアルキル基であってもよいが、他の種類の環基、例えば、ヘテロシクロアルキル基、アリール基、ヘテロアリール基などであってもよい。前記シクロアルキル基の炭素数は3～60、具体的には3～40、さらに具体的には5～20であってもよい。具体的には、シクロプロピル基、シクロブチル基、シクロペンチル基、3 - メチルシクロペンチル基、2, 3 - ジメチルシクロペンチル基、シクロヘキシル基、3 - メチルシクロヘキシル基、4 - メチルシクロヘキシル基、2, 3 - ジメチルシクロヘキシル基、3, 4, 5 - トリメチルシクロヘキシル基、4 - tert - ブチルシクロヘキシル基、シクロヘブチル基、シクロオクチル基などがあるが、これらに限定されない。

40

【0016】

本明細書において、前記ヘテロシクロアルキル基は、ヘテロ原子としてO、S、Se、N、またはSiを含み、炭素数2～60の単環もしくは多環を含み、他の置換基によって追加的に置換されていてもよい。ここで、多環とは、ヘテロシクロアルキル基が他の環基と直接連結または縮合された基を意味する。ここで、他の環基とは、ヘテロシクロアルキル基であってもよいが、他の種類の環基、例えば、シクロアルキル基、アリール基、ヘテ

50

ロアリール基などであってもよい。前記ヘテロシクロアルキル基の炭素数は2～60、具体的には2～40、さらに具体的には3～20であってもよい。

【0017】

本明細書において、前記アリール基は、炭素数6～60の単環もしくは多環を含み、他の置換基によって追加的に置換されていてもよい。ここで、多環とは、アリール基が他の環基と直接連結または縮合された基を意味する。ここで、他の環基とは、アリール基であってもよいが、他の種類の環基、例えば、シクロアルキル基、ヘテロシクロアルキル基、ヘテロアリール基などであってもよい。前記アリール基は、スピロ基を含む。前記アリール基の炭素数は6～60、具体的には6～40、さらに具体的には6～25であってもよい。前記アリール基の具体例としては、フェニル基、ビフェニル基、トリフェニル基、ナフチル基、アントリル基、クリセニル基、フェナントレニル基、ペリレニル基、フルオランテニル基、トリフェニレニル基、フェナレニル基、ピレニル基、テトラセニル基、ペンタセニル基、フルオレニル基、インデニル基、アセナフチレニル基、ベンゾフルオレニル基、スピロビフルオレニル基、2,3-ジヒドロ-1H-インデニル基、これらの縮合環基などが挙げられるが、これらにのみ限定されるものではない。

10

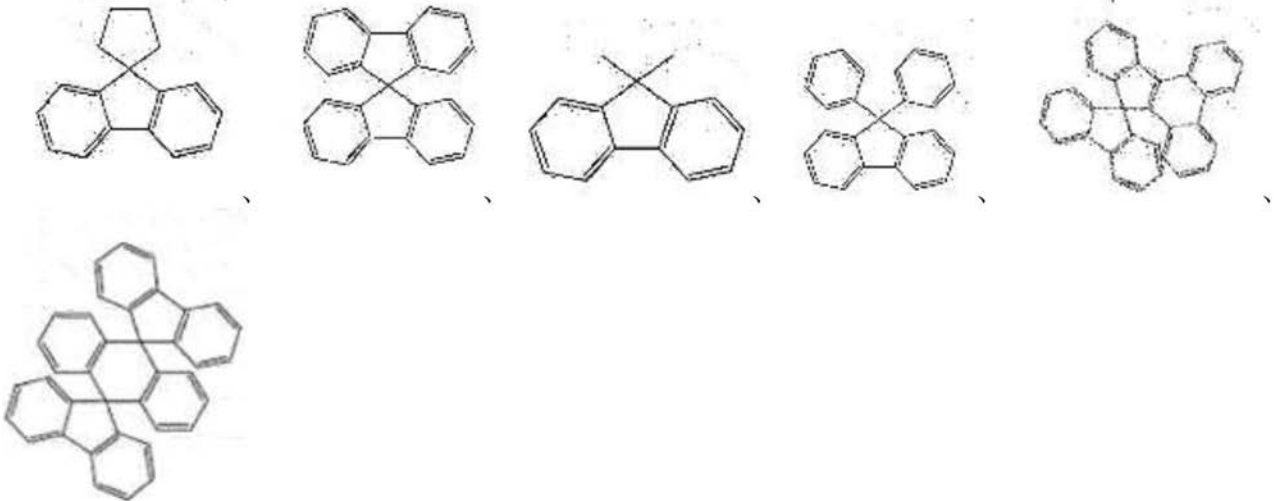
【0018】

本明細書において、前記フルオレニル基は置換されていてもよいし、隣接した置換基が互いに結合して環を形成してもよい。

前記フルオレニル基が置換される場合、

【化3】

20



30

などになってもよいが、これらに限定されるものではない。

【0019】

本明細書において、前記ヘテロアリール基は、ヘテロ原子としてS、O、Se、N、またはSiを含み、炭素数2～60の単環もしくは多環を含み、他の置換基によって追加的に置換されていてもよい。ここで、前記多環とは、ヘテロアリール基が他の環基と直接連結または縮合された基を意味する。ここで、他の環基とは、ヘテロアリール基であってもよいが、他の種類の環基、例えば、シクロアルキル基、ヘテロシクロアルキル基、アリール基などであってもよい。前記ヘテロアリール基の炭素数は2～60、具体的には2～40、さらに具体的には3～25であってもよい。前記ヘテロアリール基の具体例としては、ピリジル基、ピロリル基、ピリミジル基、ピリダジニル基、フラニル基、チオフェン基、イミダゾリル基、ピラゾリル基、オキサゾリル基、イソキサゾリル基、チアゾリル基、イソチアゾリル基、トリアゾリル基、フラザニル基、オキサジアゾリル基、チアジアゾリル基、ジチアゾリル基、テトラゾリル基、ピラニル基、チオピラニル基、ジアジニル基、オキサジニル基、チアジニル基、ジオキシニル基、トリアジニル基、テトラジニル基、キノリル基、イソキノリル基、キナゾリニル基、イソキナゾリニル基、キノゾリリル基、ナ

40

50

フチリジル基、アクリジニル基、フェナントリジニル基、イミダゾピリジニル基、ジアザナフタレニル基、トリアザインデン基、インドリル基、インドリジニル基、ベンゾチアゾリル基、ベンズオキサゾリル基、ベンズイミダゾリル基、ベンゾチオフエン基、ベンゾフラン基、ジベンゾチオフエン基、ジベンゾフラン基、カルバゾリル基、ベンゾカルバゾリル基、ジベンゾカルバゾリル基、フェナジニル基、ジベンゾシロール基、スピロビ（ジベンゾシロール）、ジヒドロフェナジニル基、フェノキサジニル基、フェナントリジル基、イミダゾピリジニル基、チエニル基、インドロ〔2, 3 - a〕カルバゾリル基、インドロ〔2, 3 - b〕カルバゾリル基、インドリニル基、10, 11 - ジヒドロ - ジベンゾ〔b, f〕アゼピン基、9, 10 - ジヒドロアクリジニル基、フェナントラジニル基、フェノチアチアジニル基、フタラジニル基、ナフチリジニル基、フェナントロリニル基、ベンゾ〔c〕〔1, 2, 5〕チアジアゾリル基、5, 10 - ジヒドロジベンゾ〔b, e〕〔1, 4〕アザシリニル、ピラゾロ〔1, 5 - c〕キナゾリニル基、ピリド〔1, 2 - b〕インドゾリル基、ピリド〔1, 2 - a〕イミダゾ〔1, 2 - e〕インドリニル基、5, 11 - ジヒドロインデノ〔1, 2 - b〕カルバゾリル基などが挙げられるが、これらにのみ限定されるものではない。

10

【0020】

本明細書において、前記アミン基は、モノアルキルアミン基；モノアリールアミン基；モノヘテロアリールアミン基； $-NH_2$ ；ジアルキルアミン基；ジアリールアミン基；ジヘテロアリールアミン基；アルキルアリールアミン基；アルキルヘテロアリールアミン基；およびアリールヘテロアリールアミン基からなる群より選択されてもよいし、炭素数は特に限定されないが、1～30のものが好ましい。前記アミン基の具体例としては、メチルアミン基、ジメチルアミン基、エチルアミン基、ジエチルアミン基、フェニルアミン基、ナフチルアミン基、ピフェニルアミン基、ジピフェニルアミン基、アントラセニルアミン基、9 - メチル - アントラセニルアミン基、ジフェニルアミン基、フェニルナフチルアミン基、ジトリルアミン基、フェニルトリルアミン基、トリフェニルアミン基、ピフェニルナフチルアミン基、フェニルピフェニルアミン基、ピフェニルフルオレニルアミン基、フェニルトリフェニルアミン基、ピフェニルトリフェニルアミン基などがあるが、これらにのみ限定されるものではない。

20

【0021】

本明細書において、アリーレン基は、アリール基に結合位置が2つあるもの、すなわち2価の基を意味する。これらはそれぞれ、2価の基であることを除けば、前述したアリール基の説明が適用可能である。また、ヘテロアリーレン基は、ヘテロアリール基に結合位置が2つあるもの、すなわち2価の基を意味する。これらはそれぞれ、2価の基であることを除けば、前述したヘテロアリール基の説明が適用可能である。

30

【0022】

本明細書において、ホスフィンオキシド基は、具体的には、アリール基で置換されていてもよいし、前記アリール基は、前述した例示が適用可能である。例えば、ホスフィンオキシド基は、ジフェニルホスフィンオキシド基、ジナフチルホスフィンオキシドなどがあるが、これらに限定されるものではない。

40

【0023】

本明細書において、シリル基は、Siを含み、前記Si原子がラジカルとして直接連結される置換基であり、 $-SiR_{104}R_{105}R_{106}$ で表され、 $R_{104} \sim R_{106}$ は、互いに同一または異なり、それぞれ独立に、水素；重水素；ハロゲン基；アルキル基；アルケニル基；アルコキシ基；シクロアルキル基；アリール基；およびヘテロ環基のうちの少なくとも1つからなる置換基であってもよい。シリル基の具体例としては、トリメチルシリル基、トリエチルシリル基、t - ブチルジメチルシリル基、ビニルジメチルシリル基、プロピルジメチルシリル基、トリフェニルシリル基、ジフェニルシリル基、フェニルシリル基などがあるが、これらに限定されるものではない。

【0024】

本明細書において、「隣接した」基は、当該置換基が置換された原子と直接連結された

50

原子に置換された置換基、当該置換基と立体構造的に最も近く位置した置換基、または当該置換基が置換された原子に置換された他の置換基を意味することができる。例えば、ベンゼン環におけるオルト（ortho）位に置換された２個の置換基、および脂肪族環における同一炭素に置換された２個の置換基は、互いに「隣接した」基と解釈される。

【 0 0 2 5 】

隣接した基が形成可能な脂肪族または芳香族炭化水素環もしくはヘテロ環は、１価の基でないことを除けば、前述したシクロアルキル基、シクロヘテロアルキル基、アリール基、およびヘテロアリール基に例示された構造が適用可能である。

【 0 0 2 6 】

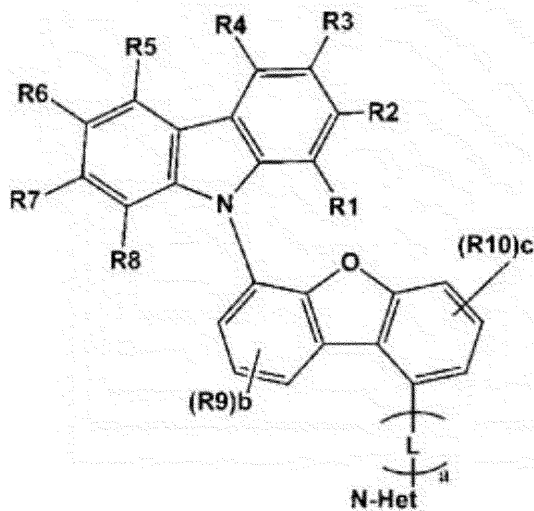
本出願の一実施態様は、第１電極と、第２電極と、前記第１電極および第２電極の間に備えられた１層以上の有機物層とを含む有機発光素子であって、前記有機物層のうちの１層以上が、前記化学式１で表されるヘテロ環化合物、および前記化学式２で表されるヘテロ環化合物を同時に含むものである有機発光素子を提供する。

10

【 0 0 2 7 】

本出願の一実施態様において、前記化学式１は、下記化学式３～６のうちの１つで表されてもよい。

【 化 ４ 】

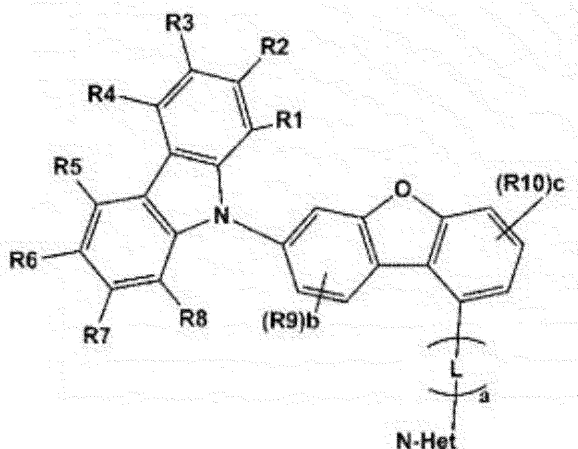


20

化学式 3

30

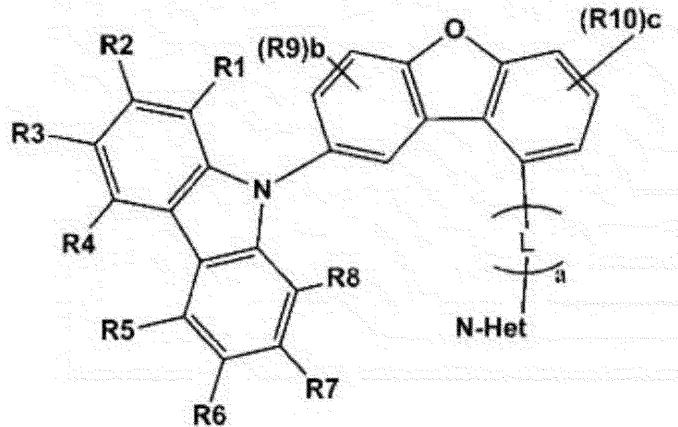
【 化 ５ 】



40

化学式 4

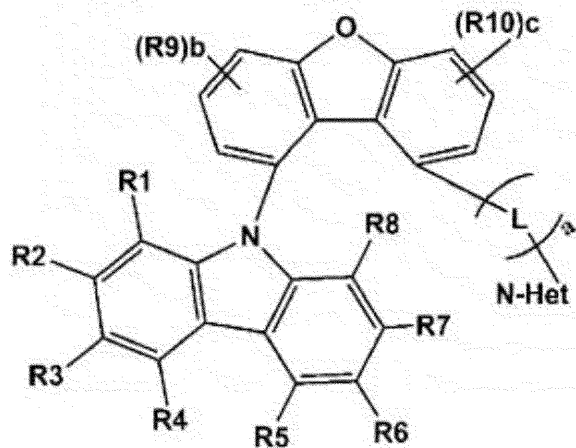
【化 6】



化学式 5

10

【化 7】



化学式 6

20

【0028】

前記化学式 3 ~ 6 において、置換基は、前記化学式 1 で定義した通りである。

30

【0029】

本出願の一実施態様において、N - H e t は、置換もしくは非置換であり、N を 1 個以上含む単環もしくは多環のヘテロ環である。

【0030】

他の実施態様において、N - H e t は、アリール基およびヘテロアリール基からなる群より選択される 1 以上の置換基で置換もしくは非置換であり、N を 1 個以上含む単環もしくは多環のヘテロ環である。

【0031】

さらに他の実施態様において、N - H e t は、フェニル基、ビフェニル基、ナフチル基、ジメチルフルオレン基、ジベンゾフラン基、およびジベンゾチオフェン基からなる群より選択される 1 以上の置換基で置換もしくは非置換であり、N を 1 個以上含む単環もしくは多環のヘテロ環である。

40

【0032】

さらに他の実施態様において、N - H e t は、フェニル基、ビフェニル基、ナフチル基、ジメチルフルオレン基、ジベンゾフラン基、およびジベンゾチオフェン基からなる群より選択される 1 以上の置換基で置換もしくは非置換であり、N を 1 個以上 3 個以下で含む単環もしくは多環のヘテロ環である。

【0033】

本出願の一実施態様において、N - H e t は、置換もしくは非置換であり、N を 1 個以

50

上含む単環ヘテロ環である。

【0034】

本出願の一実施態様において、N - H e t は、置換もしくは非置換であり、Nを1個以上含む2環以上のヘテロ環である。

【0035】

本出願の一実施態様において、N - H e t は、置換もしくは非置換であり、Nを2個以上含む単環もしくは多環のヘテロ環である。

【0036】

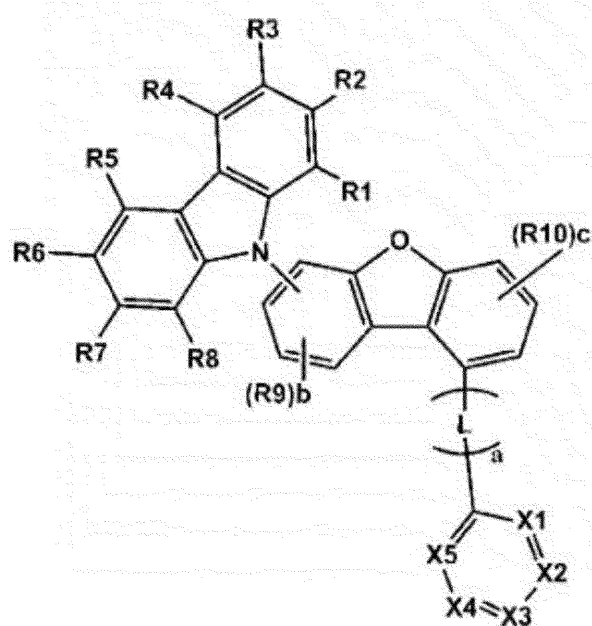
本出願の一実施態様において、N - H e t は、Nを2個以上含む2環以上の多環ヘテロ環である。

10

【0037】

本出願の一実施態様において、前記化学式1は、下記化学式7～9のうちの1つで表される。

【化8】

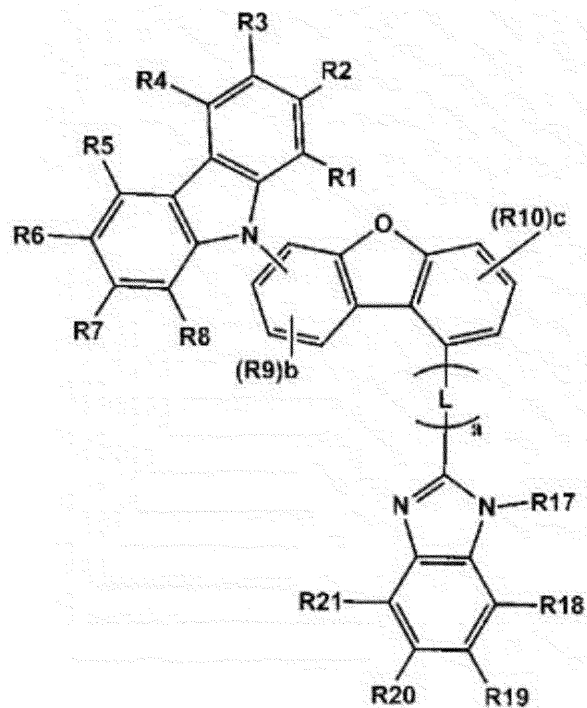


20

化学式7

30

【化 9】

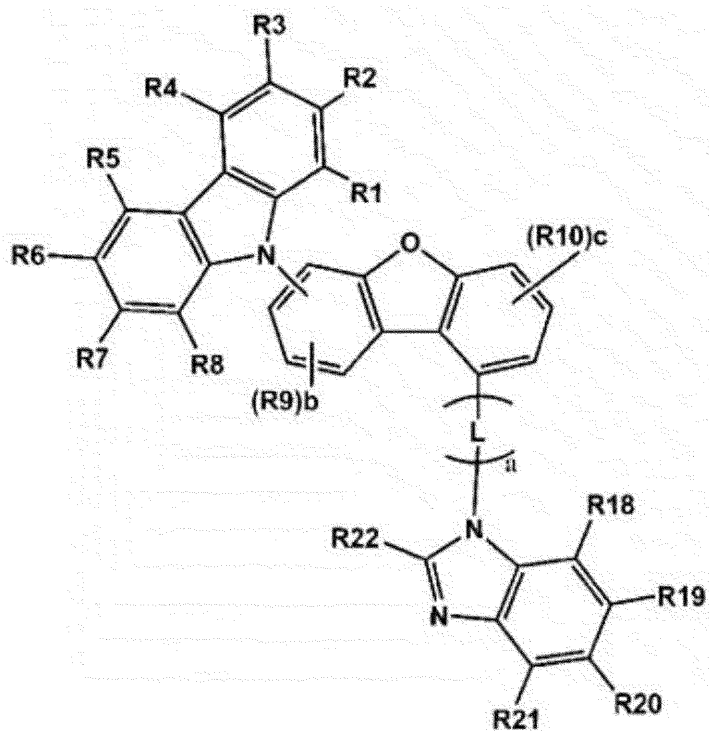


化学式 8

10

20

【化 10】



化学式 9

30

40

【0038】

前記化学式 7 ~ 9 において、

R 1 ~ R 10、L、a、b および c の定義は、前記化学式 1 における定義と同じであり、

、

X 1 は、C R 1 1 または N であり、X 2 は、C R 1 2 または N であり、X 3 は、C R 1 3 または N であり、X 4 は、C R 1 4 または N であり、X 5 は、C R 1 5 または N であり、

、

50

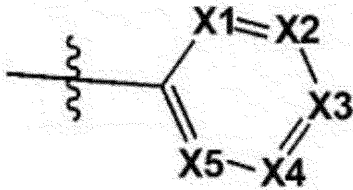
R 1 1 ~ R 1 5 および R 1 7 ~ R 2 2 は、互いに同一または異なり、それぞれ独立に、水素；重水素；ハロゲン；シアノ基；置換もしくは非置換のアルキル基；置換もしくは非置換のアルケニル基；置換もしくは非置換のアルキニル基；置換もしくは非置換のアルコキシ基；置換もしくは非置換のシクロアルキル基；置換もしくは非置換のヘテロシクロアルキル基；置換もしくは非置換のアリール基；置換もしくは非置換のヘテロアリール基；置換もしくは非置換のホスフィンオキシド基；および置換もしくは非置換のアミン基からなる群より選択されるか、互いに隣接する 2 以上の基は、互いに結合して置換もしくは非置換の脂肪族または芳香族炭化水素環もしくはヘテロ環を形成する。

【 0 0 3 9 】

本出願の一実施態様において、

10

【 化 1 1 】



は、下記化学式 1 0 ~ 1 3 のうちの 1 つで表されてもよい。

【 0 0 4 0 】

20

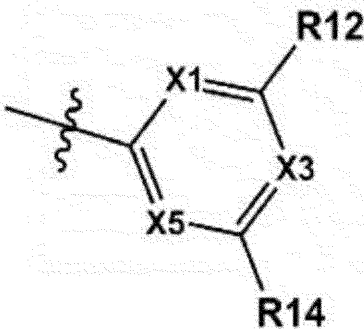
ここで、

【 化 1 2 】



は、L に連結される部位である。

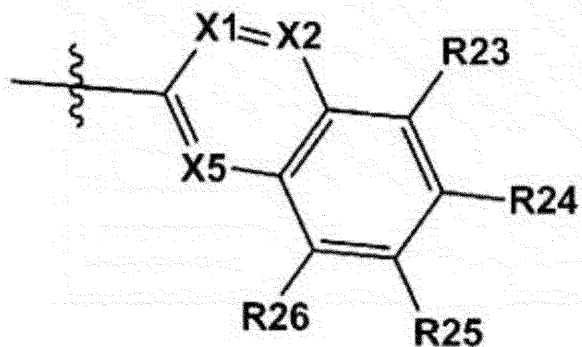
【 化 1 3 】



30

化学式 1 0

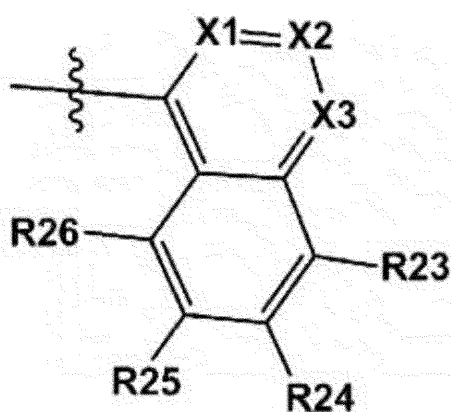
【化 1 4】



化学式 1 1

10

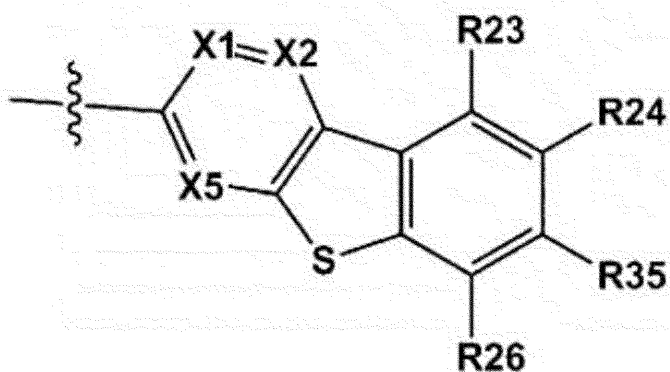
【化 1 5】



化学式 1 2

20

【化 1 6】



化学式 1 3

30

40

【0041】

化学式 1 0 において、X 1、X 3 および X 5 のうちの 1 つ以上は、N であり、残りは、化学式 7 で定義した通りであり、

【0042】

化学式 1 1 において、X 1、X 2 および X 5 のうちの 1 つ以上は、N であり、残りは、化学式 7 で定義した通りであり、

【0043】

化学式 1 2 において、X 1 ~ X 3 のうちの 1 つ以上は、N であり、残りは、化学式 7 で定義した通りであり、

【0044】

50

化学式 13 において、X 1、X 2 および X 5 のうちの 1 つ以上は、N であり、残りは、化学式 7 で定義した通りであり、

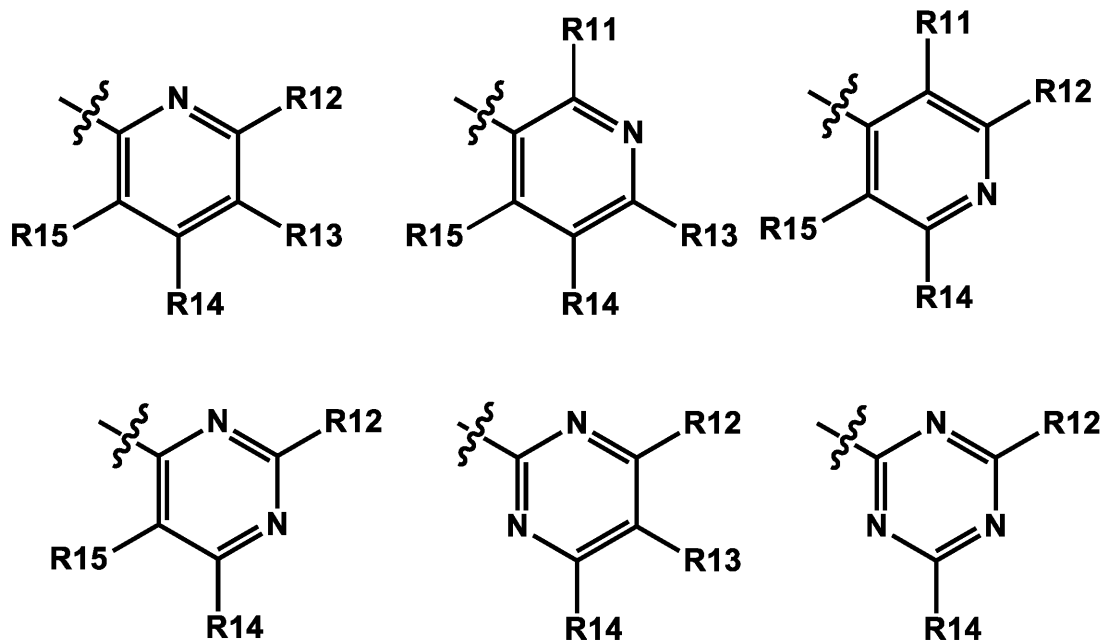
【 0 0 4 5 】

R 1 2、R 1 4 および R 2 3 ~ R 2 6 は、互いに同一または異なり、それぞれ独立に、水素；重水素；ハロゲン；シアノ基；置換もしくは非置換のアルキル基；置換もしくは非置換のアルケニル基；置換もしくは非置換のアルキニル基；置換もしくは非置換のアルコキシ基；置換もしくは非置換のシクロアルキル基；置換もしくは非置換のヘテロシクロアルキル基；置換もしくは非置換のアリール基；置換もしくは非置換のヘテロアリール基；置換もしくは非置換のホスフィンオキシド基；および置換もしくは非置換のアミン基からなる群より選択されるか、互いに隣接する 2 以上の基は、互いに結合して置換もしくは非置換の脂肪族または芳香族炭化水素環もしくはヘテロ環を形成する。

【 0 0 4 6 】

本出願の一実施態様において、前記化学式 10 は、下記構造式から選択されてもよい。

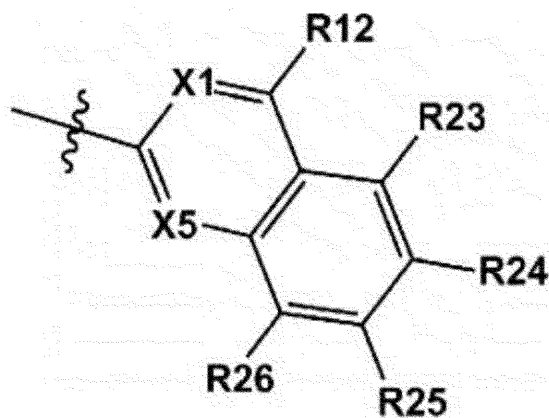
【 化 1 7 】



【 0 0 4 7 】

本出願の一実施態様において、前記化学式 11 は、下記化学式 14 で表されてもよい。

【 化 1 8 】



化学式 14

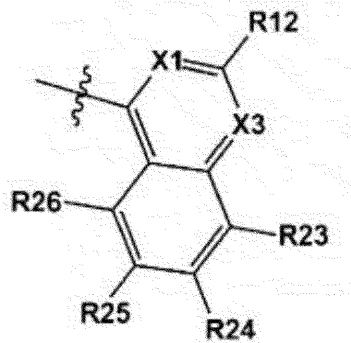
【 0 0 4 8 】

前記化学式 14 の置換基は、化学式 11 で定義した通りである。

【 0 0 4 9 】

本出願の一実施態様において、前記化学式 1 2 は、下記化学式 1 5 で表されてもよい。

【化 1 9】



化学式 1 5

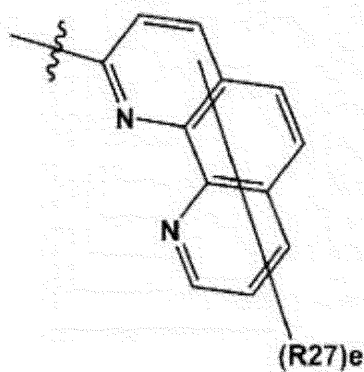
【 0 0 5 0 】

前記化学式 1 5 の置換基は、化学式 1 2 で定義した通りである。

【 0 0 5 1 】

本出願の一実施態様において、前記化学式 1 1 は、下記化学式 1 6 で表されてもよい。

【化 2 0】



化学式 1 6

【 0 0 5 2 】

化学式 1 6 において、R 2 7 は、互いに同一または異なり、水素；重水素；ハロゲン；シアノ基；置換もしくは非置換のアルキル基；置換もしくは非置換のアルケニル基；置換もしくは非置換のアルキニル基；置換もしくは非置換のアルコキシ基；置換もしくは非置換のシクロアルキル基；置換もしくは非置換のヘテロシクロアルキル基；置換もしくは非置換のアリール基；置換もしくは非置換のヘテロアリール基；置換もしくは非置換のホスフィンオキシド基；および置換もしくは非置換のアミン基からなる群より選択されるか、互いに隣接する 2 以上の基は、互いに結合して置換もしくは非置換の脂肪族または芳香族炭化水素環もしくはヘテロ環を形成し、e は、0 ~ 7 の整数であり、e が 2 以上の場合、R 2 7 は、互いに同一または異なる。

【 0 0 5 3 】

本出願の一実施態様において、前記化学式 1 3 は、下記化学式 1 7 で表されてもよい。

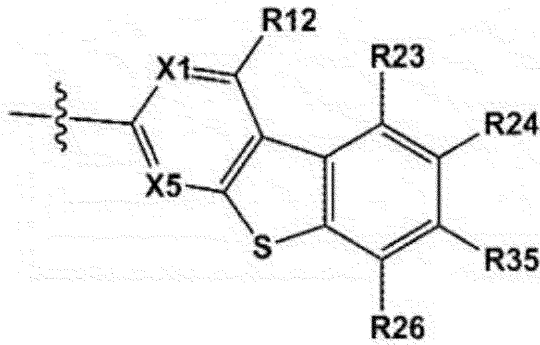
10

20

30

40

【化 2 1】



化学式 1 7

10

【 0 0 5 4 】

前記化学式 1 7 の置換基は、化学式 1 3 で定義した通りである。

【 0 0 5 5 】

他の実施態様において、L は、直接結合またはアリーレン基である。

さらに他の実施態様において、L は、直接結合またはフェニレン基である。

さらに他の実施態様において、R 9 および R 1 0 は、水素；または重水素である。

さらに他の実施態様において、R 9 および R 1 0 は、水素である。

さらに他の実施態様において、R 1 ~ R 8 は、水素；重水素；アルキル基、アリール基、またはヘテロアリール基で置換もしくは非置換のアリール基；またはアリール基またはヘテロアリール基で置換もしくは非置換のヘテロアリール基である。

20

さらに他の実施態様において、R 1 ~ R 8 は、水素；重水素；アリール基；ヘテロアリール基；またはアリール基で置換されたヘテロアリール基である。

さらに他の実施態様において、R 1 ~ R 8 は、水素；重水素；フェニル基；ジベンゾフラン基；ジベンゾチオフェン基；カルバゾール基；またはフェニルで置換されたカルバゾール基である。

さらに他の実施態様において、R 1 ~ R 8 は、水素；重水素；フェニル基；ジベンゾフラン基；またはフェニルで置換されたカルバゾール基である。

さらに他の実施態様において、R 1 ~ R 8 のうちの隣接する 2 個の置換基は、互いに結合して置換もしくは非置換の環を形成する。

30

さらに他の実施態様において、R 1 ~ R 8 のうちの隣接する 2 個の置換基は、互いに結合してアリール基またはアルキル基で置換もしくは非置換の環を形成する。

さらに他の実施態様において、R 1 ~ R 8 のうちの隣接する 2 個の置換基は、互いに結合してアリール基またはアルキル基で置換もしくは非置換の芳香族炭化水素環もしくはヘテロ環を形成する。

さらに他の実施態様において、R 1 ~ R 8 のうちの隣接する 2 個の置換基は、互いに結合してフェニル基またはメチル基で置換もしくは非置換の芳香族炭化水素環もしくはヘテロ環を形成する。

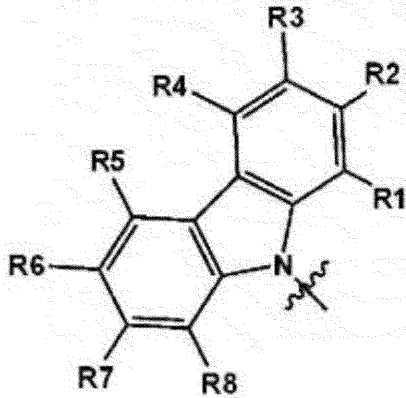
さらに他の実施態様において、R 1 ~ R 8 のうちの隣接する 2 個の置換基は、互いに結合してベンゼン環；フェニル基で置換もしくは非置換のインドール環；ベンゾチオフェン環；ベンゾフラン環；またはメチル基で置換もしくは非置換のインデン環を形成してもよい。

40

【 0 0 5 6 】

さらに他の実施態様において、

【化 2 2】



10

は、下記化学式 1 8 で表されてもよい。ここで、

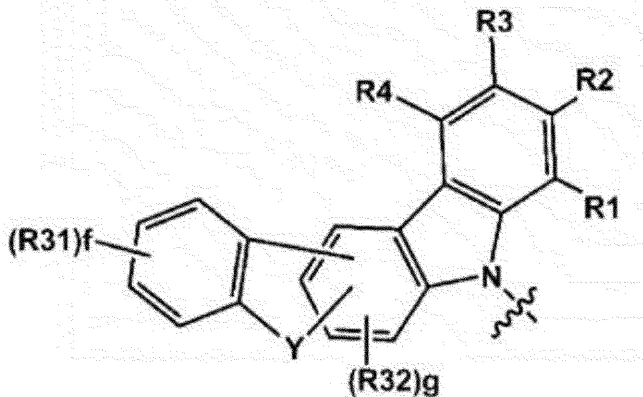
【化 2 3】



は、ジベンゾフラン構造に連結される部位である。

20

【化 2 4】



30

化学式 1 8

【 0 0 5 7】

前記化学式 1 8 において、

R 1 ~ R 4 は、化学式 1 で定義した通りであり、

Y は、O、S、NR、または CR' R'' であり、

R、R'、R''、R 3 1 および R 3 2 は、互いに同一または異なり、水素；重水素；ハロゲン；シアノ基；置換もしくは非置換のアルキル基；置換もしくは非置換のアルケニル基；置換もしくは非置換のアルキニル基；置換もしくは非置換のアルコキシ基；置換もしくは非置換のシクロアルキル基；置換もしくは非置換のヘテロシクロアルキル基；置換もしくは非置換のアリール基；置換もしくは非置換のヘテロアリール基；置換もしくは非置換のホスフィンオキシド基；および置換もしくは非置換のアミン基からなる群より選択されるか、互いに隣接する 2 以上の基は、互いに結合して置換もしくは非置換の脂肪族または芳香族炭化水素環もしくはヘテロ環を形成し、f は、0 ~ 4 の整数であり、f が 2 以上の場合、R 3 1 は、互いに同一または異なり、g は、0 ~ 2 の整数であり、g が 2 以上の場合、R 3 2 は、互いに同一または異なる。

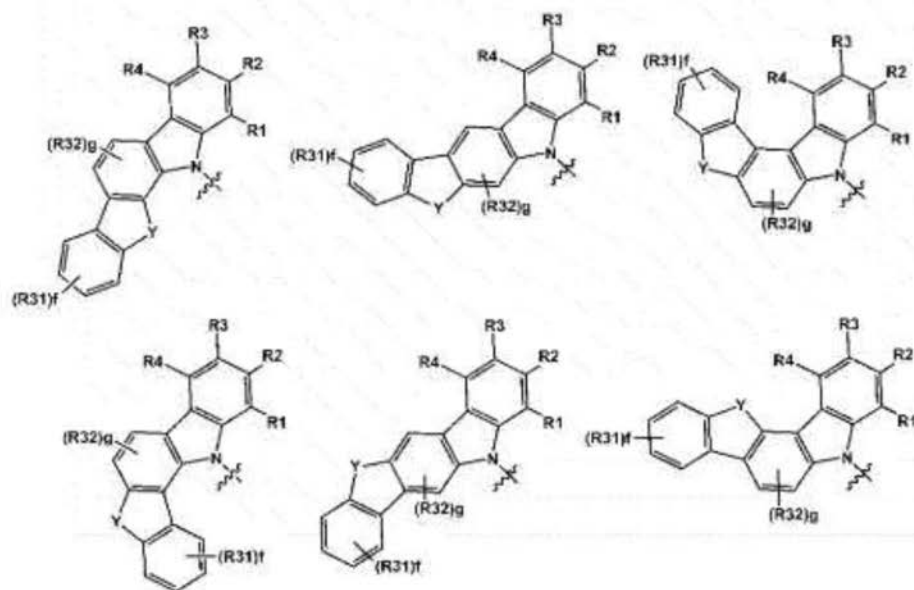
40

【 0 0 5 8】

さらに他の実施態様において、前記化学式 1 8 は、下記構造式の中から選択されてもよい。

50

【化 2 5】



10

【 0 0 5 9】

さらに他の実施態様において、R 1 8 ~ R 2 1 は、互いに同一または異なり、それぞれ独立に、水素；重水素；アリール基；またはヘテロアリール基である。

20

さらに他の実施態様において、R 1 8 ~ R 2 1 は、互いに同一または異なり、それぞれ独立に、水素；または重水素である。

さらに他の実施態様において、R 1 8 ~ R 2 1 は、水素である。

さらに他の実施態様において、R 1 7 および R 2 2 は、互いに同一または異なり、それぞれ独立に、水素；重水素；アリール基；またはヘテロアリール基である。

さらに他の実施態様において、R 1 7 および R 2 2 は、互いに同一または異なり、それぞれ独立に、アリール基；またはヘテロアリール基である。

さらに他の実施態様において、R 1 7 および R 2 2 は、互いに同一または異なり、それぞれ独立に、アリール基である。

さらに他の実施態様において、R 1 7 および R 2 2 は、フェニル基である。

30

さらに他の実施態様において、R 1 1 ~ R 1 5 は、互いに同一または異なり、それぞれ独立に、水素；重水素；アルキル基で置換もしくは非置換のアリール基；または置換もしくは非置換のヘテロアリール基である。

さらに他の実施態様において、R 1 1 ~ R 1 5 は、互いに同一または異なり、それぞれ独立に、水素；重水素；アルキル基で置換もしくは非置換のアリール基；またはヘテロアリール基である。

さらに他の実施態様において、R 1 1 ~ R 1 5 は、互いに同一または異なり、それぞれ独立に、水素；メチル基で置換もしくは非置換のアリール基；またはヘテロアリール基である。

さらに他の実施態様において、R 1 1 ~ R 1 5 は、互いに同一または異なり、それぞれ独立に、水素；フェニル基；ビフェニル基；ナフチル基；ジメチルフルオレニル基；ジベンゾフラン基；またはジベンゾチオフェン基である。

40

さらに他の実施態様において、R 1 2 および R 1 4 は、互いに同一または異なり、それぞれ独立に、アルキル基で置換もしくは非置換のアリール基；またはヘテロアリール基である。

さらに他の実施態様において、R 1 2 および R 1 4 は、互いに同一または異なり、それぞれ独立に、フェニル基、ビフェニル基、ナフチル基、ジメチルフルオレニル基；ジベンゾフラン基；またはジベンゾチオフェン基である。

さらに他の実施態様において、R 2 3 ~ R 2 6 は、互いに同一または異なり、それぞれ独立に、水素；重水素；アリール基；またはヘテロアリール基である。

50

さらに他の実施態様において、 $R_{23} \sim R_{26}$ は、互いに同一または異なり、それぞれ独立に、水素；重水素；またはアリール基である。

さらに他の実施態様において、 $R_{23} \sim R_{26}$ は、互いに同一または異なり、それぞれ独立に、水素；またはアリール基である。

さらに他の実施態様において、 $R_{23} \sim R_{26}$ は、互いに同一または異なり、それぞれ独立に、水素；フェニル基；またはピフェニル基である。

【0060】

他の実施態様において、 R_{27} は、水素；重水素；アリール基；またはヘテロアリール基である。

さらに他の実施態様において、 R_{27} は、水素；重水素；またはアリール基である。

さらに他の実施態様において、 R_{27} は、水素；またはアリール基である。

さらに他の実施態様において、 R_{27} は、水素；またはフェニル基である。

さらに他の実施態様において、 Y は、 O または S である。

さらに他の実施態様において、 Y は、 NR であり、 R は、アリール基である。

さらに他の実施態様において、 Y は、 NR であり、 R は、フェニル基である。

さらに他の実施態様において、 Y は、 $CR'R''$ であり、 R' および R'' は、アルキル基である。

さらに他の実施態様において、 Y は、 $CR'R''$ であり、 R' および R'' は、メチル基である。

さらに他の実施態様において、 R_{31} は、水素；重水素；アリール基；またはヘテロアリール基である。

さらに他の実施態様において、 R_{31} は、水素；重水素；またはアリール基である。

さらに他の実施態様において、 R_{31} は、水素；またはフェニル基である。

さらに他の実施態様において、 R_{32} は、水素；または重水素である。

さらに他の実施態様において、 R_{32} は、水素である。

【0061】

本出願の一実施態様において、前記化学式2の R_c および R_d は、水素であってもよい。

本出願の一実施態様において、前記化学式2の R_a および R_b は、互いに同一または異なり、それぞれ独立に、置換もしくは非置換のアリール基であってもよい。

他の実施態様において、前記化学式2の R_a および R_b は、互いに同一または異なり、それぞれ独立に、置換もしくは非置換の $C_6 \sim C_{60}$ のアリール基であってもよい。

さらに他の実施態様において、前記化学式2の R_a および R_b は、互いに同一または異なり、それぞれ独立に、置換もしくは非置換の $C_6 \sim C_{40}$ のアリール基であってもよい。

さらに他の実施態様において、前記化学式2の R_a および R_b は、互いに同一または異なり、それぞれ独立に、 $C_1 \sim C_{40}$ のアルキル基、 $C_6 \sim C_{40}$ のアリール基、 $-CN$ 、および $-SiR_{101}R_{102}R_{103}$ からなる群より選択される1以上の置換基で置換もしくは非置換の $C_6 \sim C_{40}$ のアリール基であってもよい。

さらに他の実施態様において、前記化学式2の R_a および R_b は、互いに同一または異なり、それぞれ独立に、フェニル基、 $-CN$ 、または $-SiR_{101}R_{102}R_{103}$ で置換もしくは非置換のフェニル基；フェニル基で置換もしくは非置換のピフェニル基；ナフチル基；メチル基またはフェニル基で置換もしくは非置換のフルオレン基；スピロピフルオレン基；またはトリフェニレン基であってもよい。

本出願の一実施態様において、前記化学式2の R_{101} 、 R_{102} 、および R_{103} は、フェニル基であってもよい。

【0062】

前記化学式1の化合物および前記化学式2の化合物を同時に有機発光素子の有機物層に含む場合、より優れた効率および寿命効果を示す。この結果は、2つの化合物を同時に含む場合、エキシプレックス(exci-plex)現象が起こることを予想することができ

10

20

30

40

50

る。

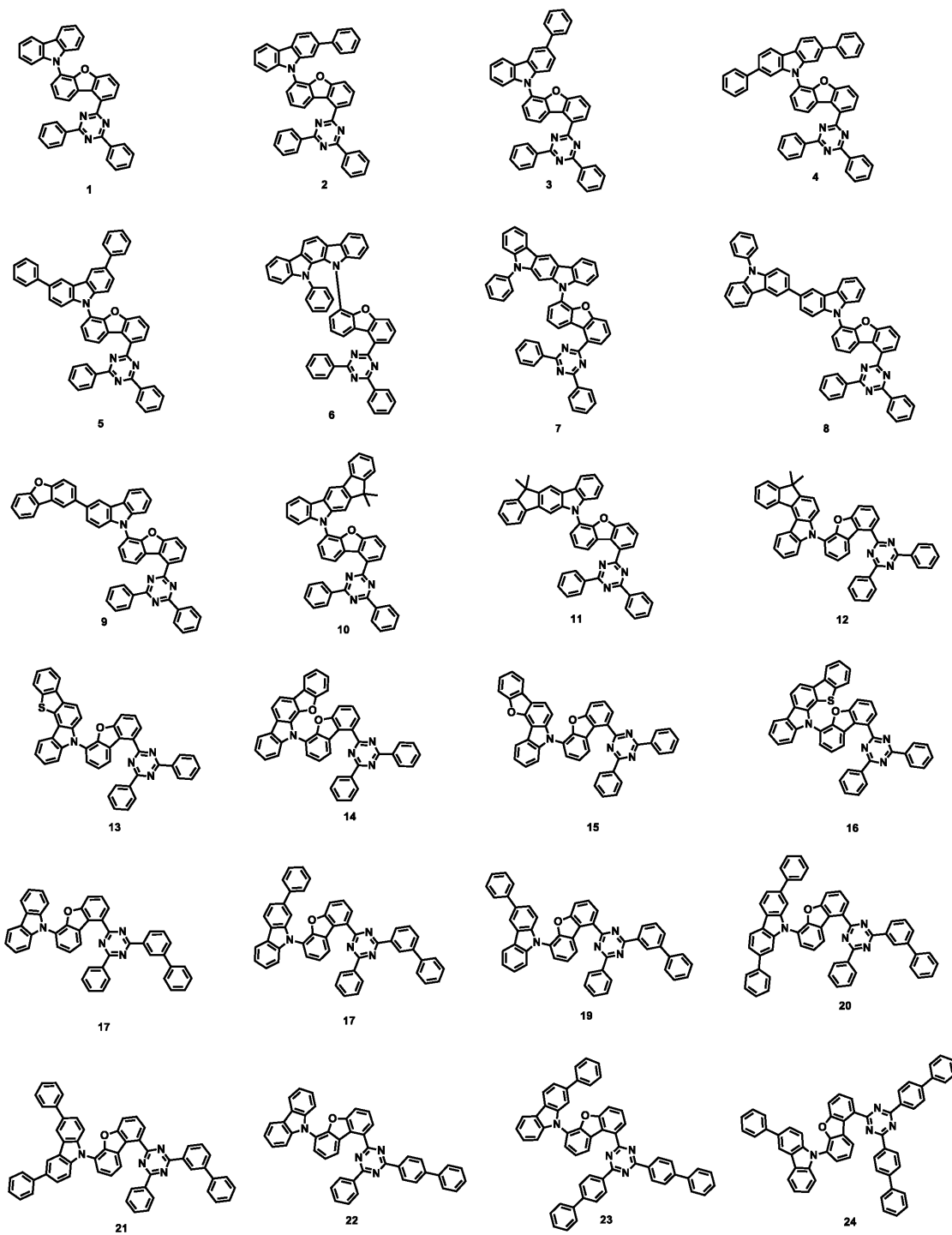
前記エキシプレックス (exciplex) 現象は、2つの分子間の電子交換により donor (p - host) の HOMO level、acceptor (n - host) LUMO level 大きさのエネルギーを放出する現象である。2つの分子間のエキシプレックス (exciplex) 現象が起こると、Reverse Intersystem Crossing (RISC) が起こり、これによって蛍光の内部量子効率が 100% まで上昇できる。正孔輸送能力が良い donor (p - host) と電子輸送能力が良い acceptor (n - host) が発光層のホストとして用いられる場合、正孔は p - host に注入され、電子は n - host に注入されるため、駆動電圧を低下させることができ、それによって寿命向上に役立つことができる。

10

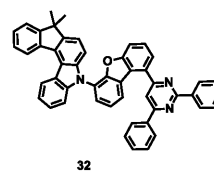
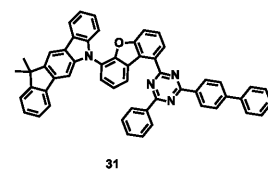
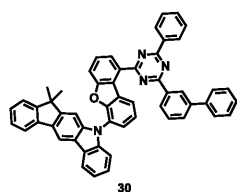
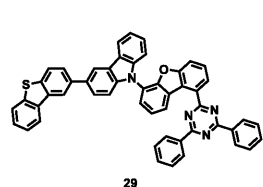
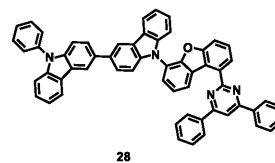
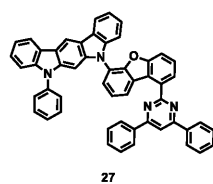
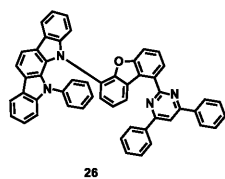
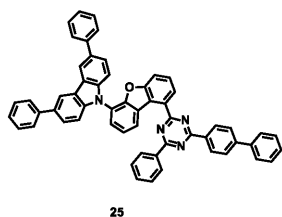
【0063】

本出願の一実施態様によれば、前記化学式 1 は、下記の化合物のうちのいずれか 1 つで表されてもよいが、これにのみ限定されるものではない。

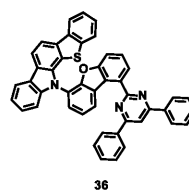
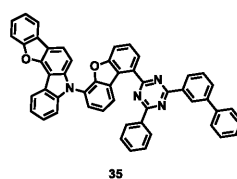
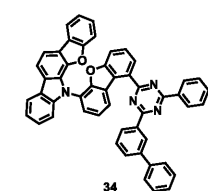
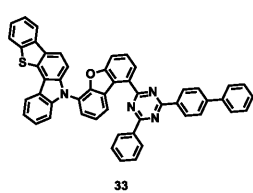
【化 2 6】



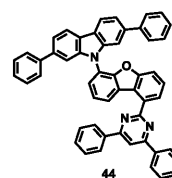
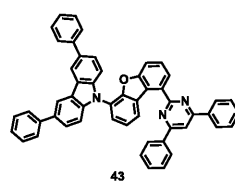
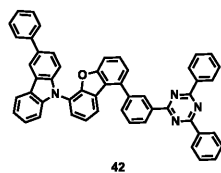
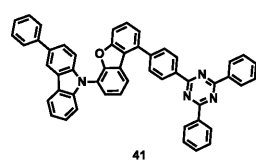
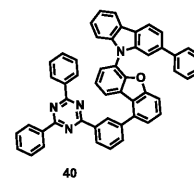
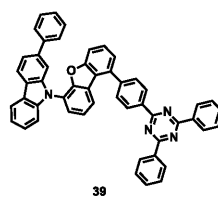
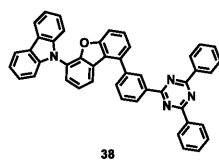
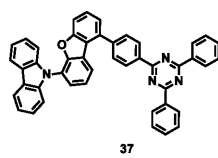
【化 27】



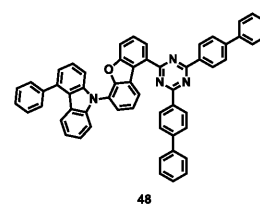
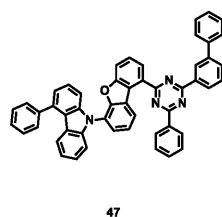
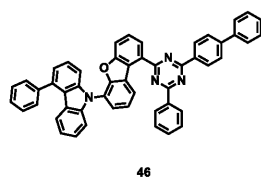
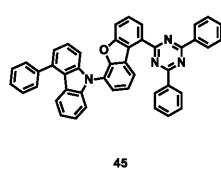
10



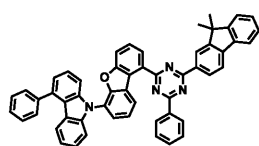
20



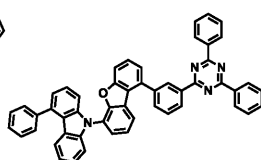
30



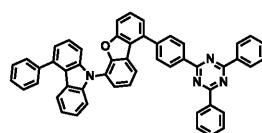
【化 28】



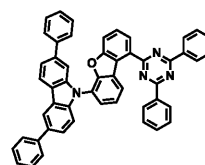
49



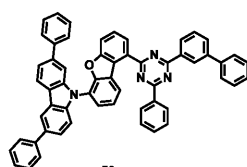
50



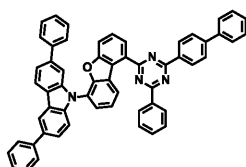
51



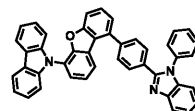
52



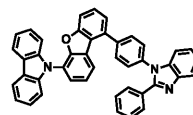
53



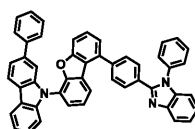
54



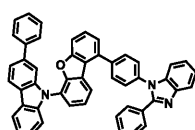
55



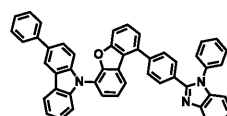
56



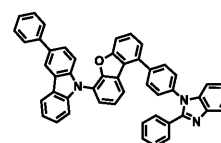
57



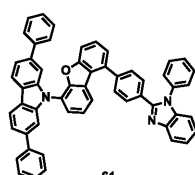
58



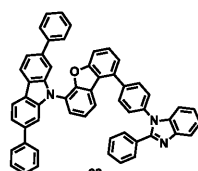
59



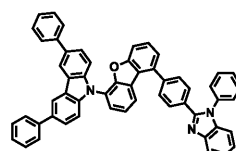
60



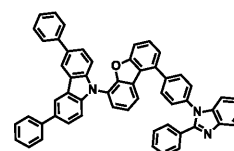
61



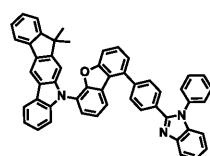
62



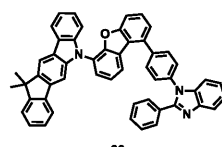
63



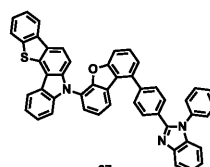
64



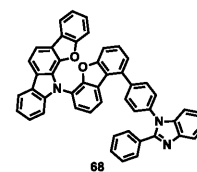
65



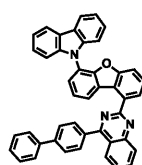
66



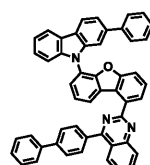
67



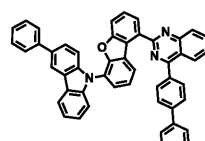
68



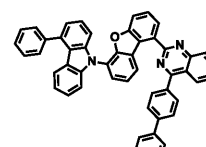
69



70



71



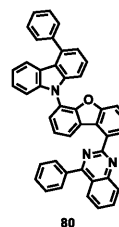
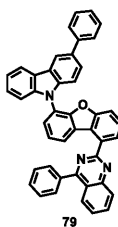
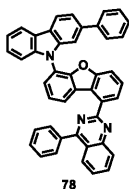
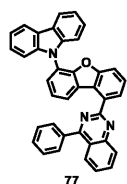
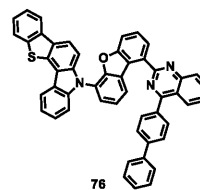
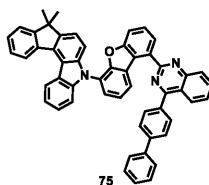
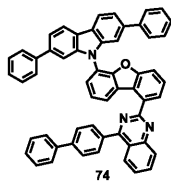
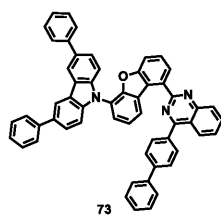
72

10

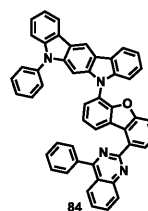
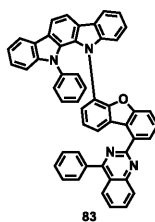
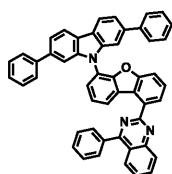
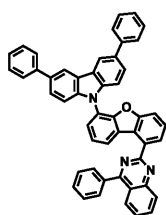
20

30

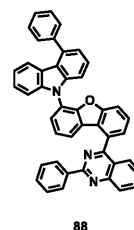
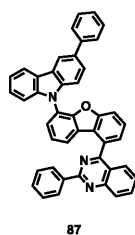
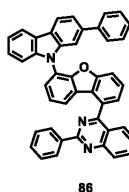
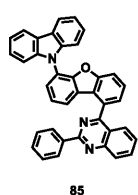
【化 29】



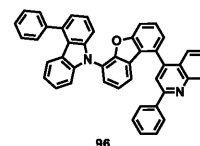
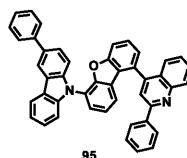
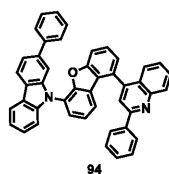
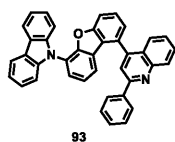
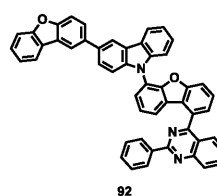
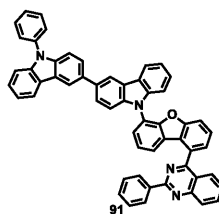
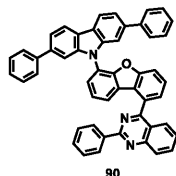
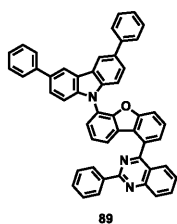
10



20

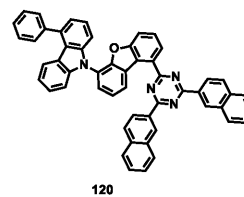
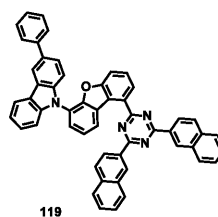
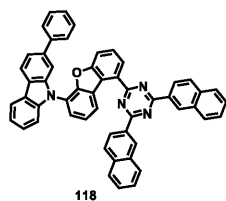
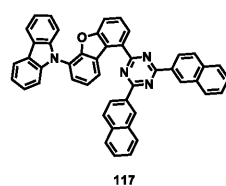
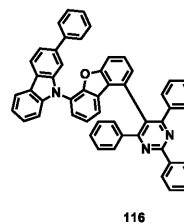
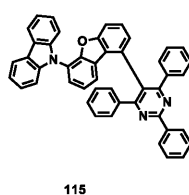
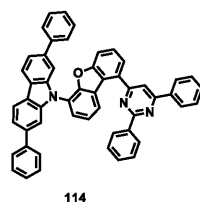
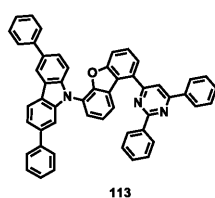
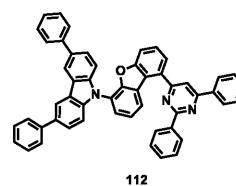
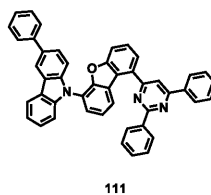
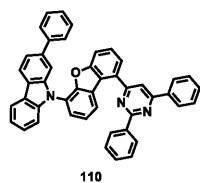
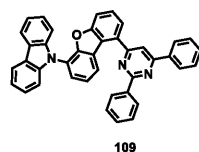
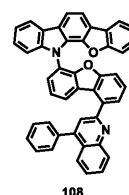
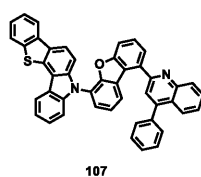
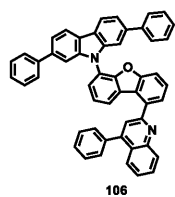
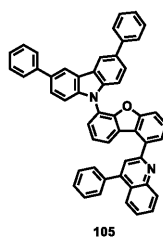
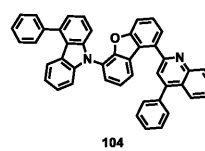
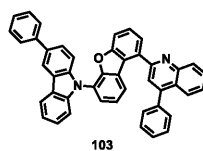
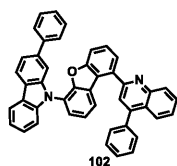
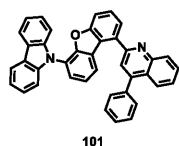
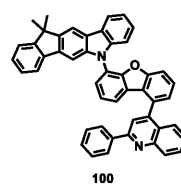
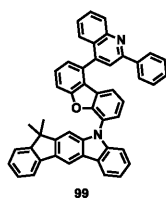
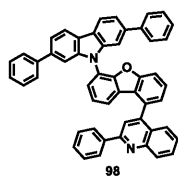
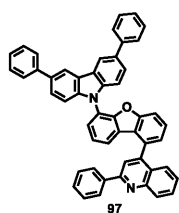


30



40

【化 3 0】



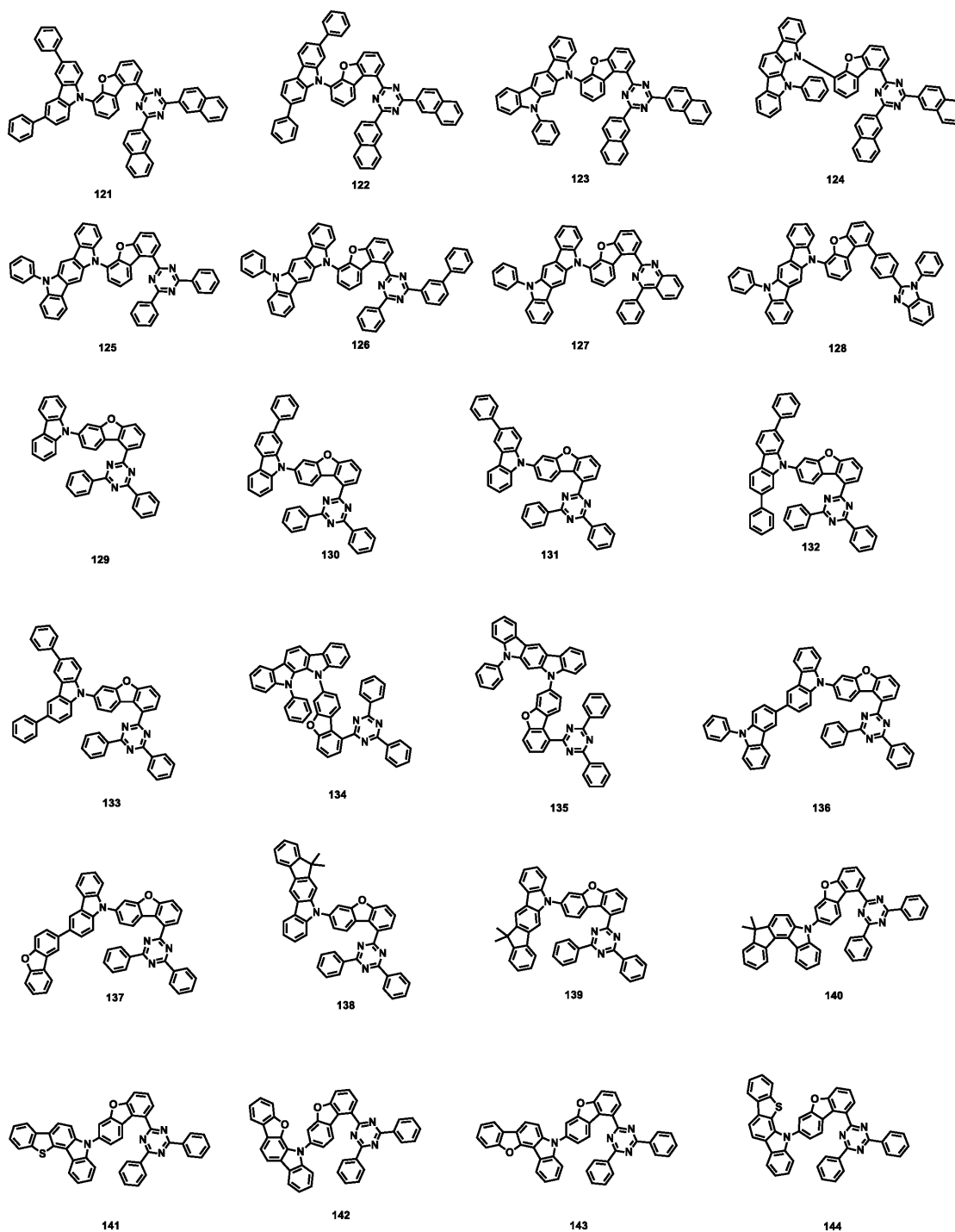
10

20

30

40

【化 3 1】

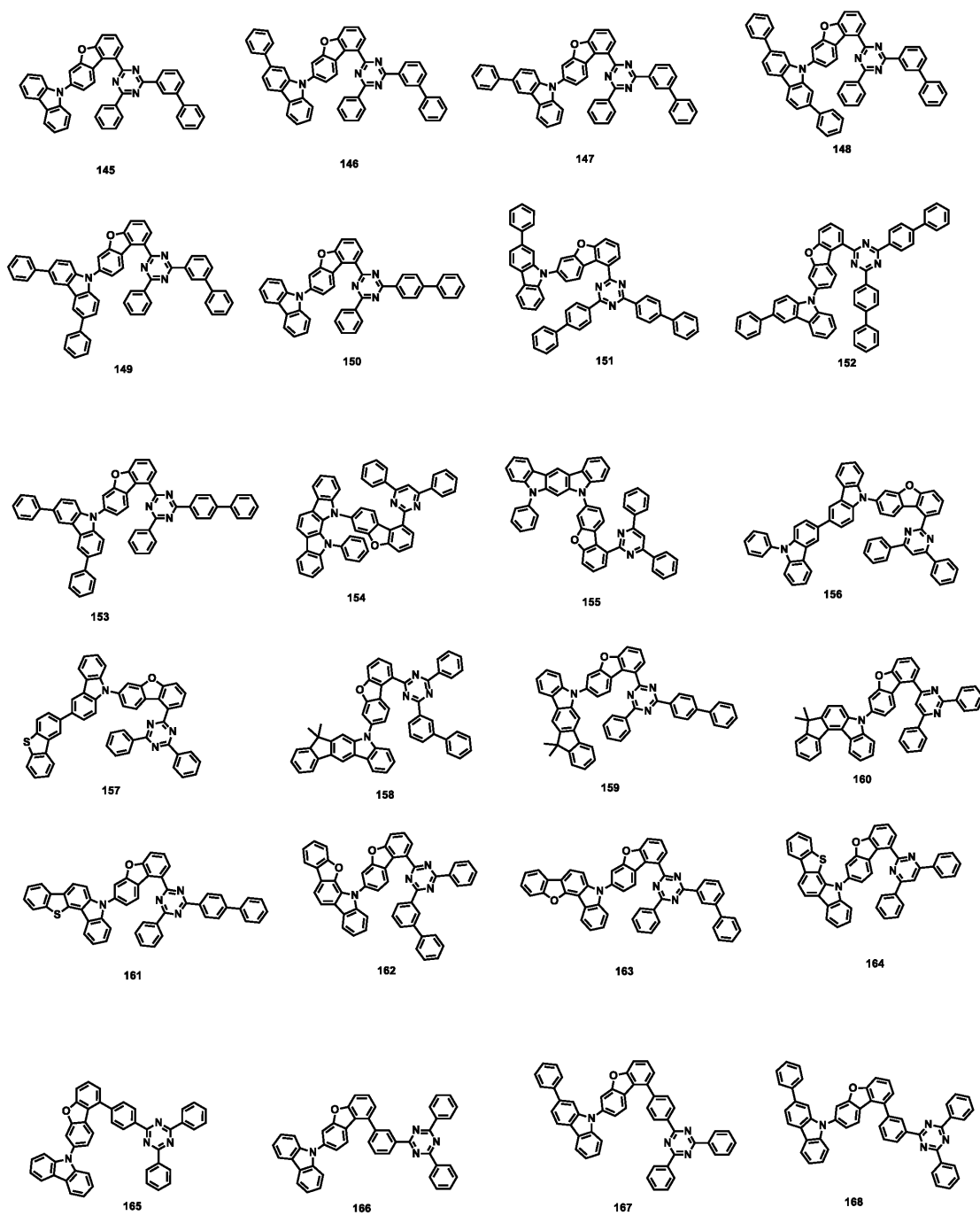


10

20

30

【化 3 2】

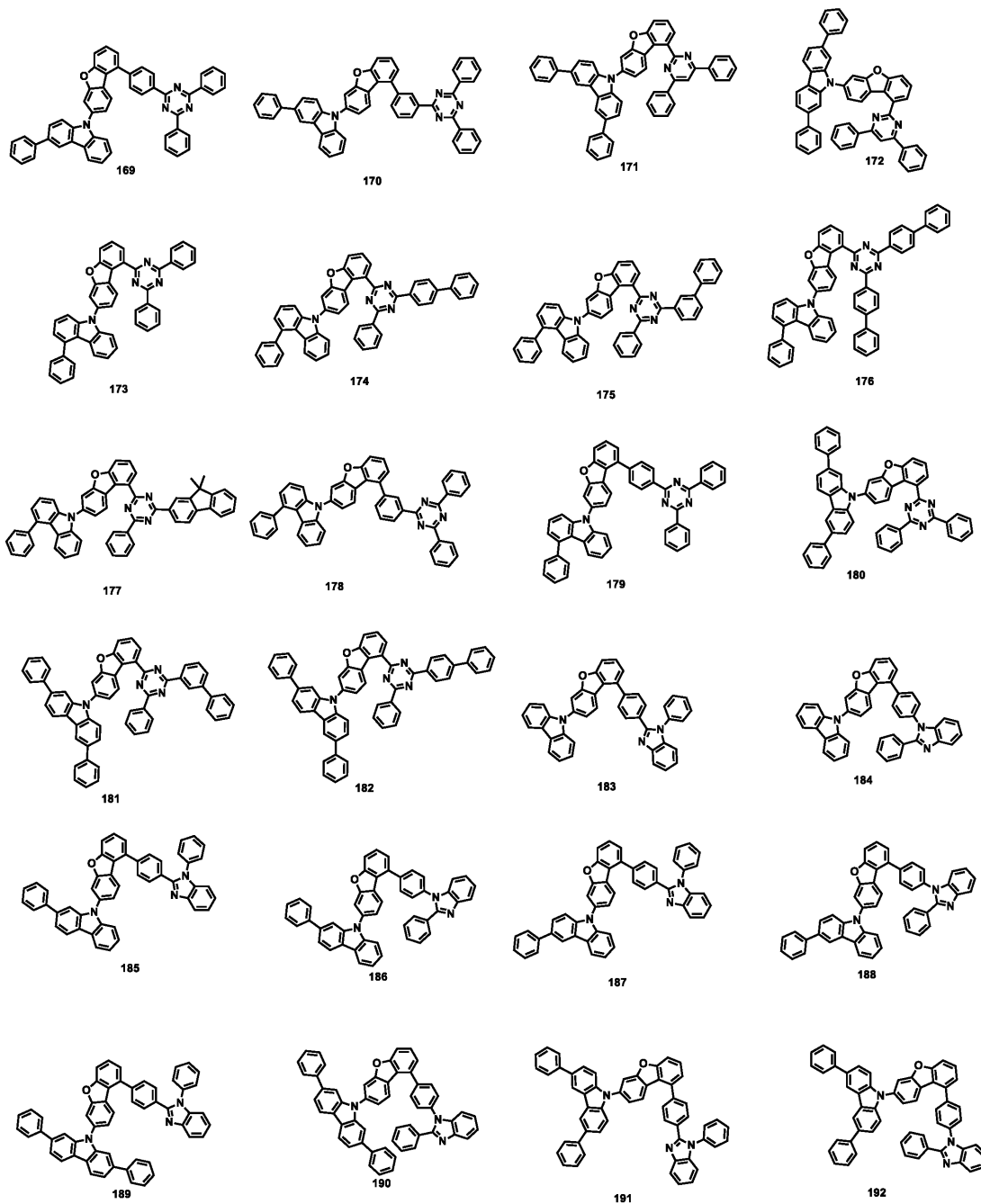


10

20

30

【化 3 3】

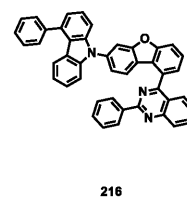
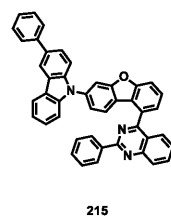
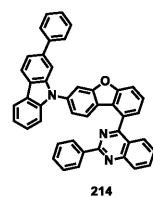
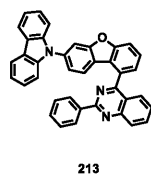
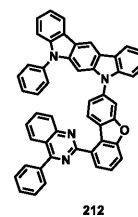
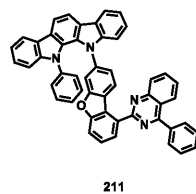
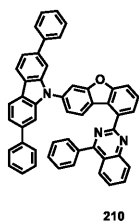
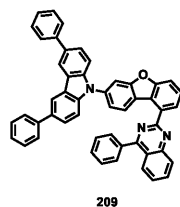
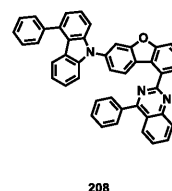
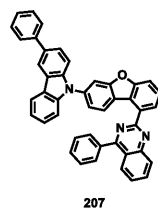
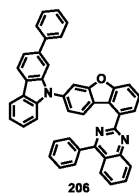
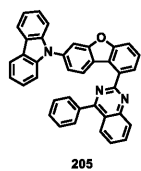
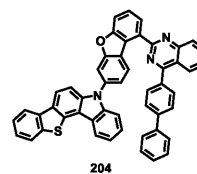
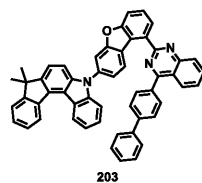
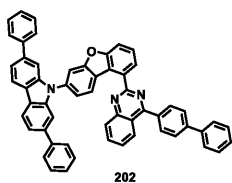
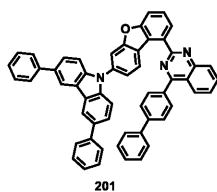
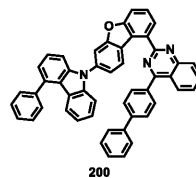
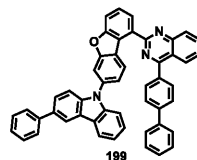
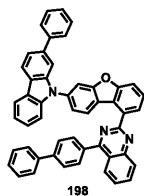
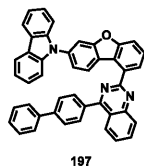
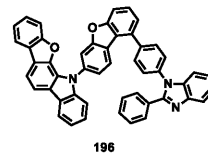
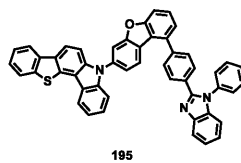
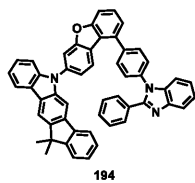
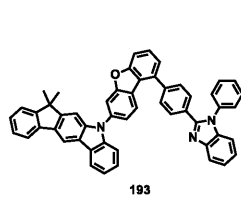


10

20

30

【化 3 4】

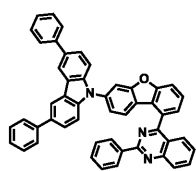


10

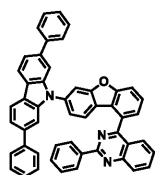
20

30

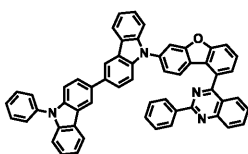
【化 3 5】



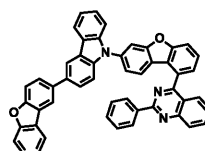
217



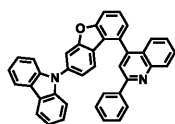
218



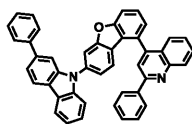
219



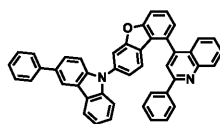
220



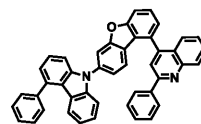
221



222

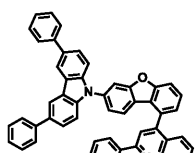


223

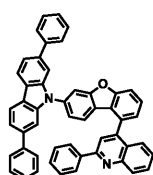


224

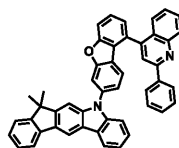
10



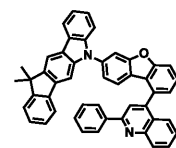
225



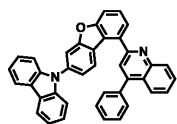
226



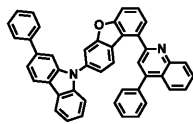
227



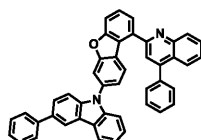
228



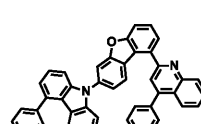
229



230

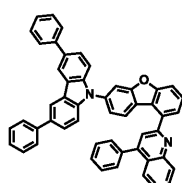


231

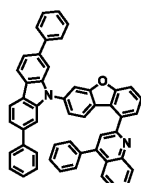


232

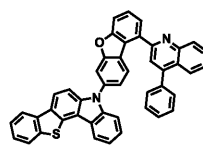
20



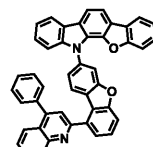
233



234

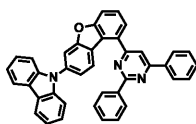


235

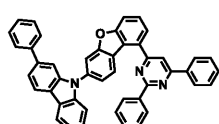


236

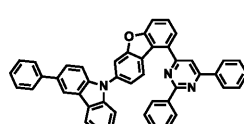
30



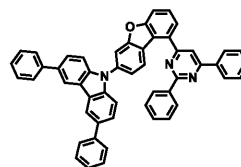
237



238

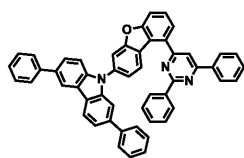


239

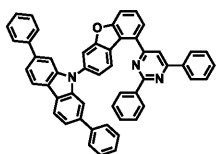


240

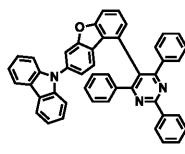
【化 3 6】



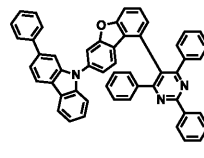
241



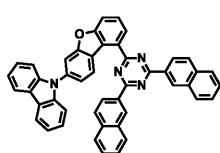
242



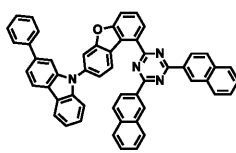
243



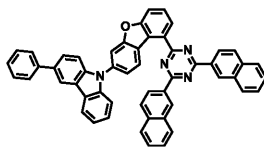
244



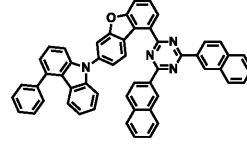
245



246

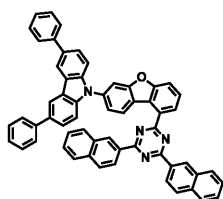


247

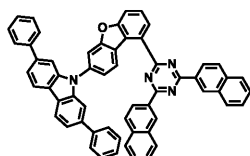


248

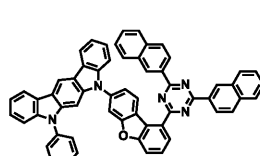
10



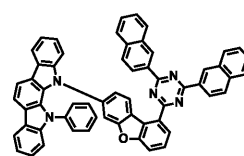
249



250

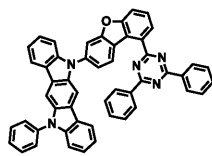


251

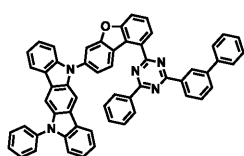


252

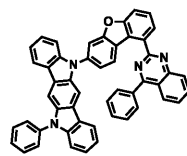
20



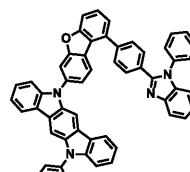
253



254

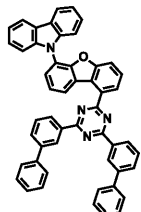


255

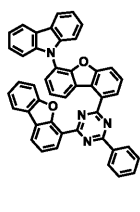


256

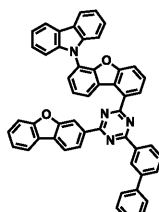
30



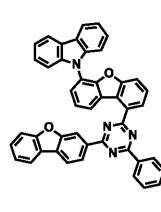
257



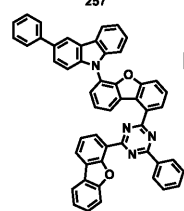
258



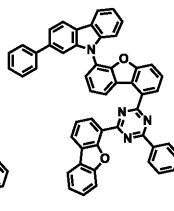
259



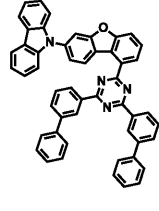
260



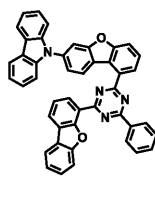
261



262

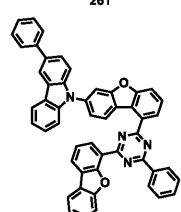


263

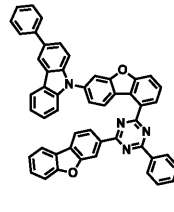


264

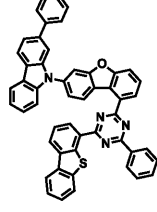
40



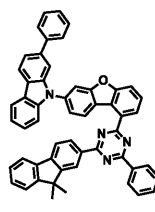
265



266

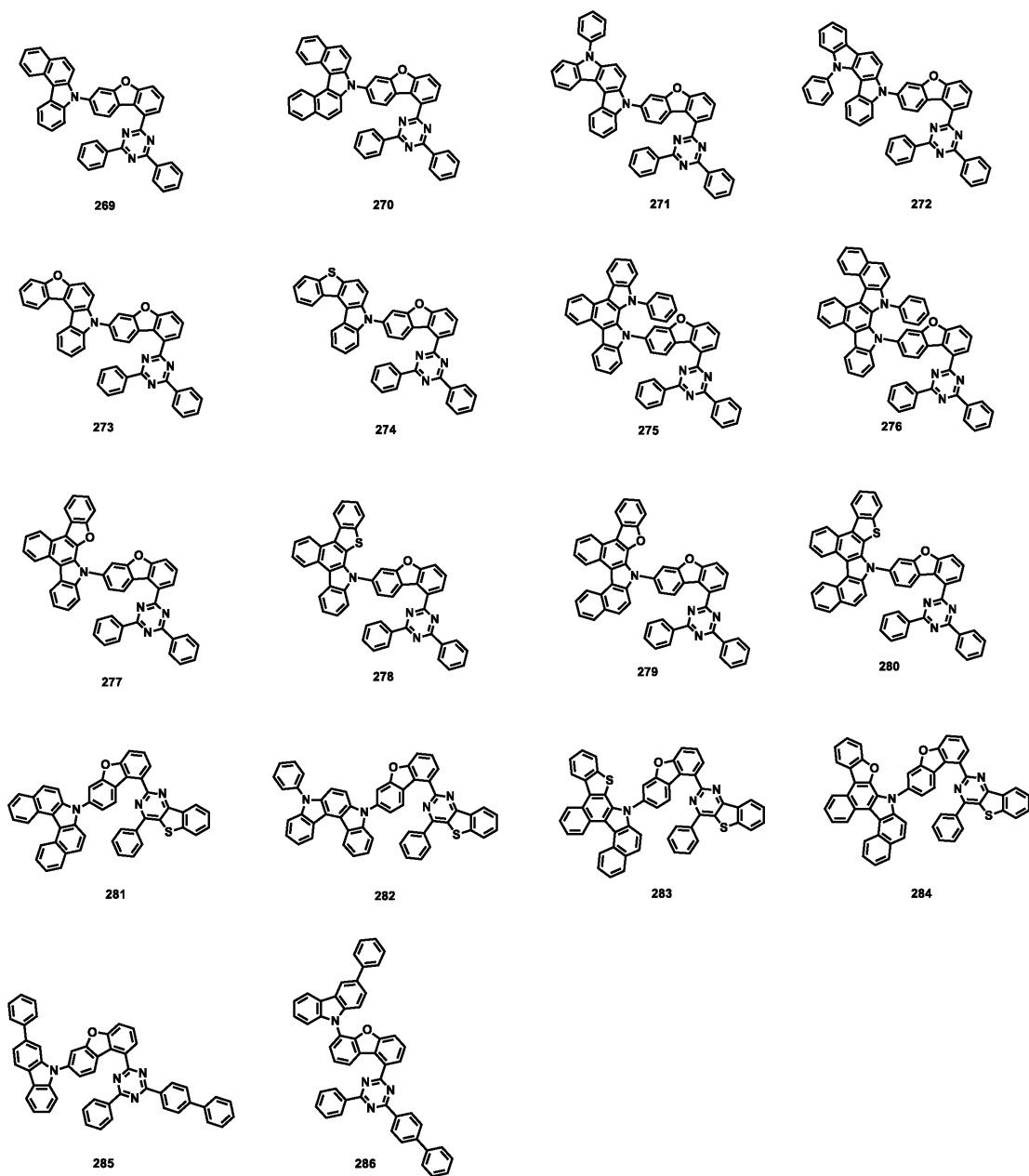


267



268

【化 3 7】



10

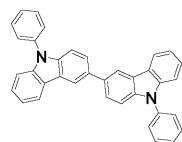
20

30

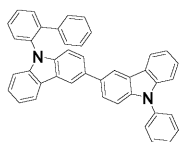
【0064】

本出願の一実施態様において、前記化学式 2 は、下記の化合物のうちのいずれか 1 つで表されてもよいが、これにのみ限定されるものではない。

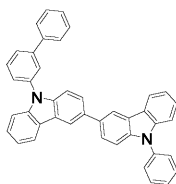
【化 3 8】



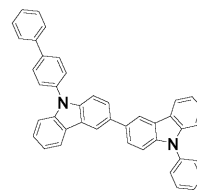
2-1



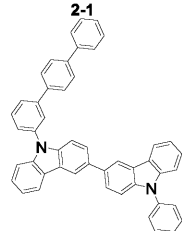
2-2



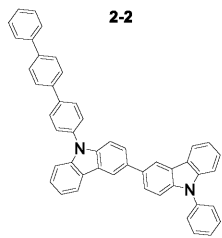
2-3



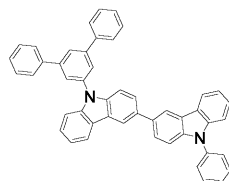
2-4



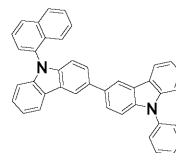
2-5



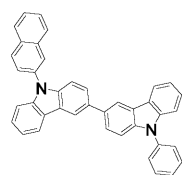
2-6



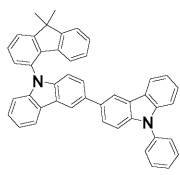
2-7



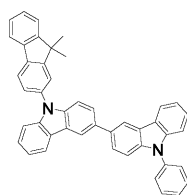
2-8



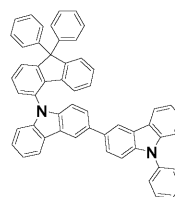
2-9



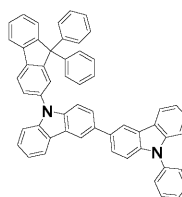
2-10



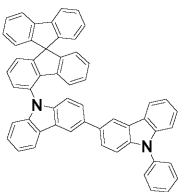
2-11



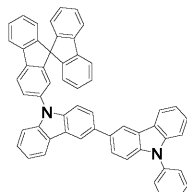
2-12



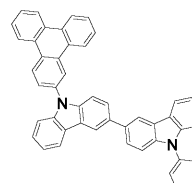
2-13



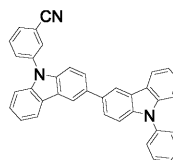
2-14



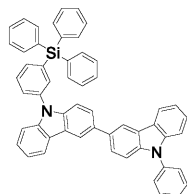
2-15



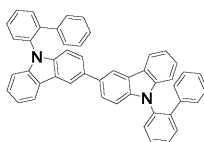
2-16



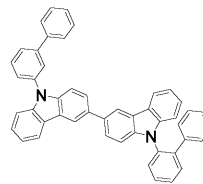
2-17



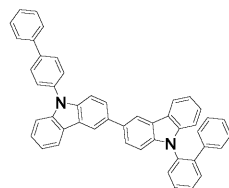
2-18



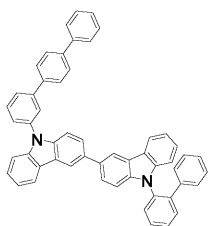
2-19



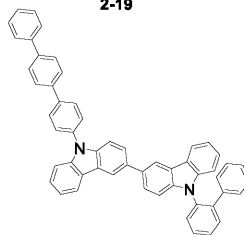
2-20



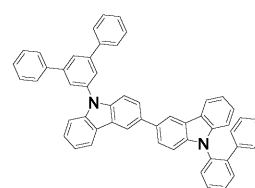
2-21



2-22



2-23



2-24

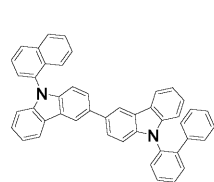
10

20

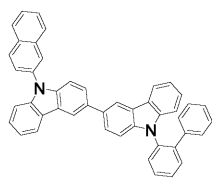
30

40

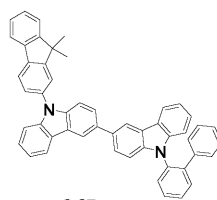
【化 3 9】



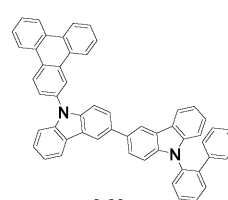
2-25



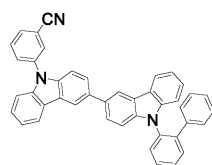
2-26



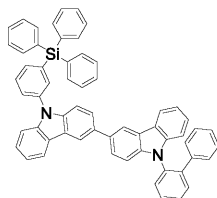
2-27



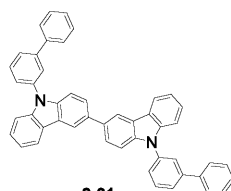
2-28



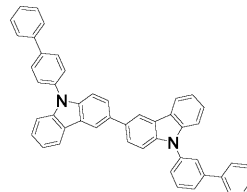
2-29



2-30

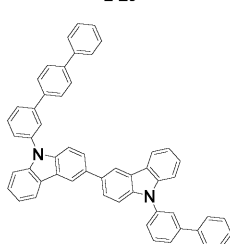


2-31

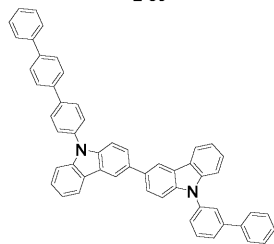


2-32

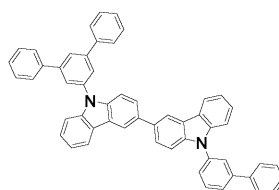
10



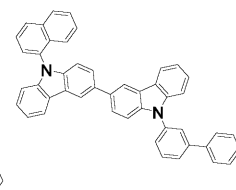
2-33



2-34

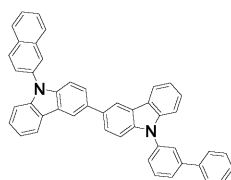


2-35

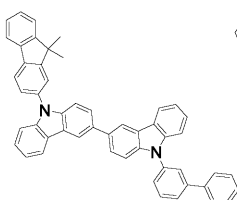


2-36

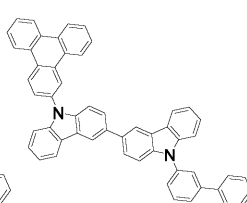
20



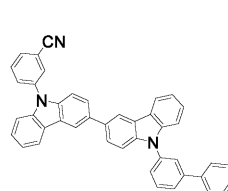
2-37



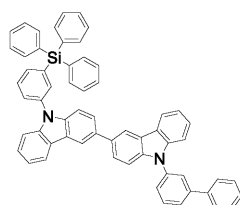
2-38



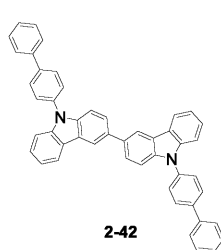
2-39



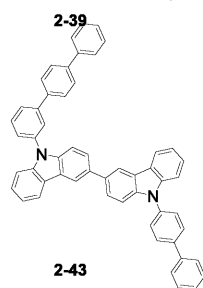
2-40



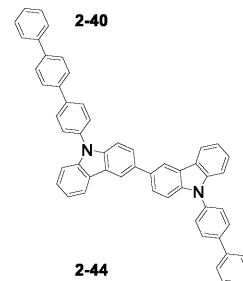
2-41



2-42

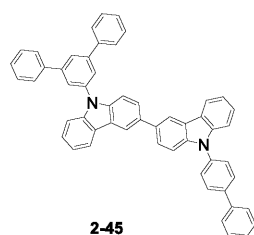


2-43

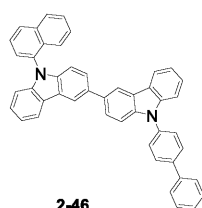


2-44

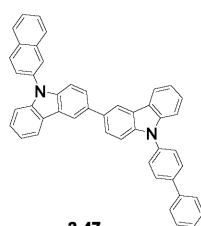
30



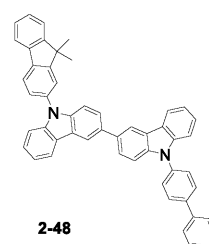
2-45



2-46



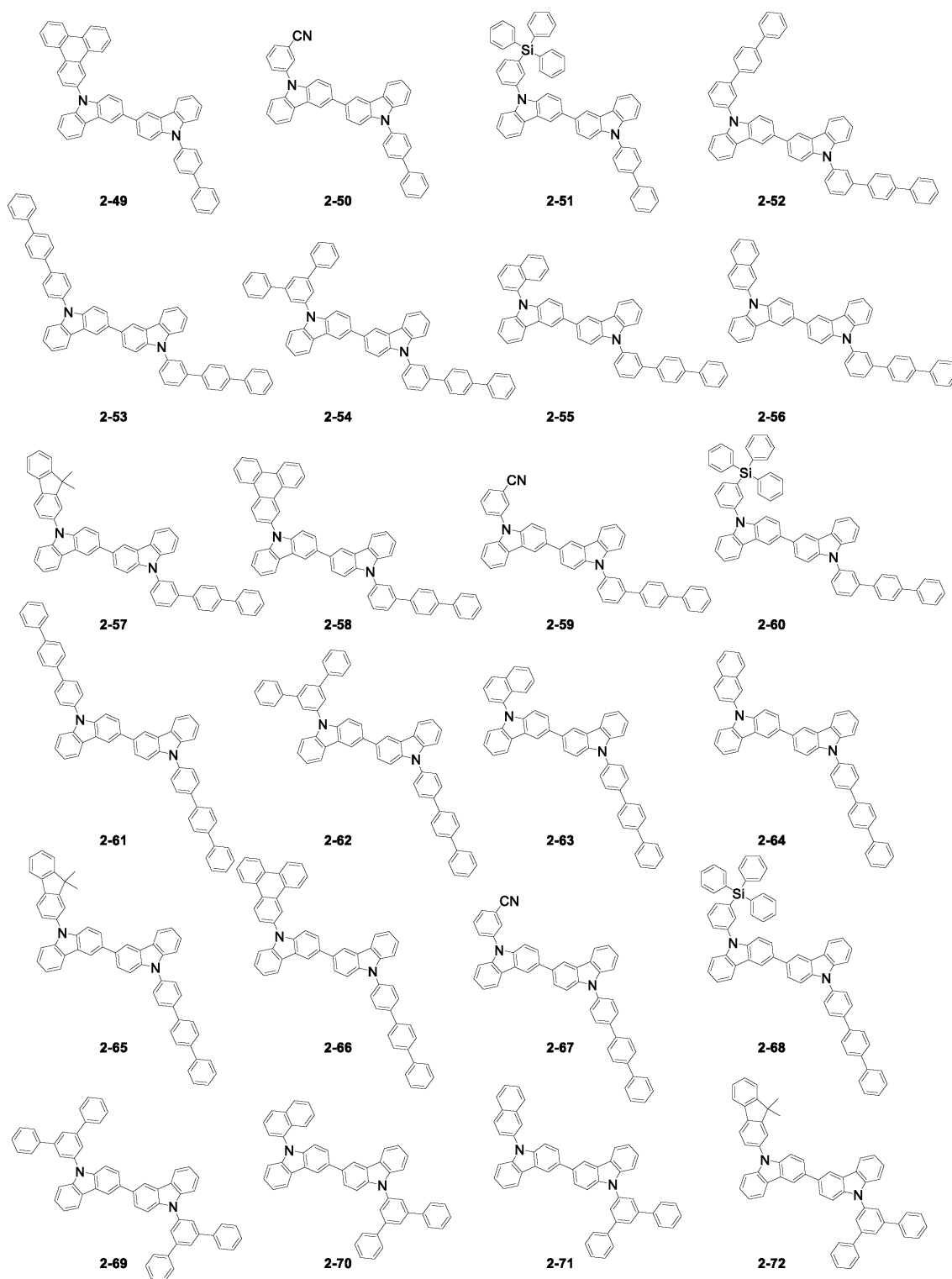
2-47



2-48

40

【化 40】



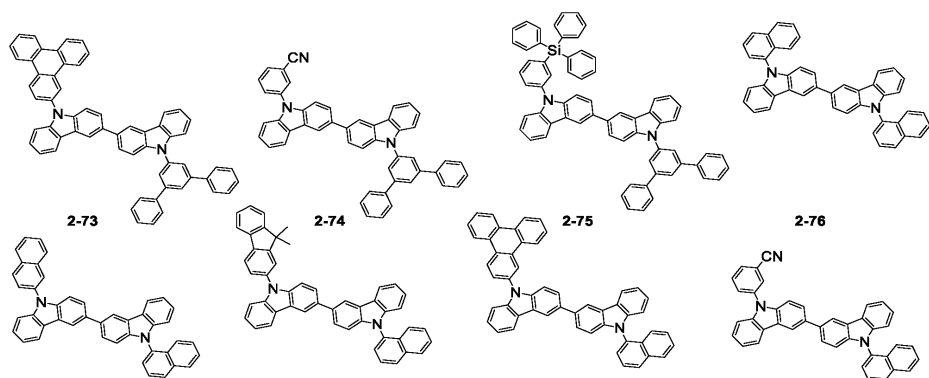
10

20

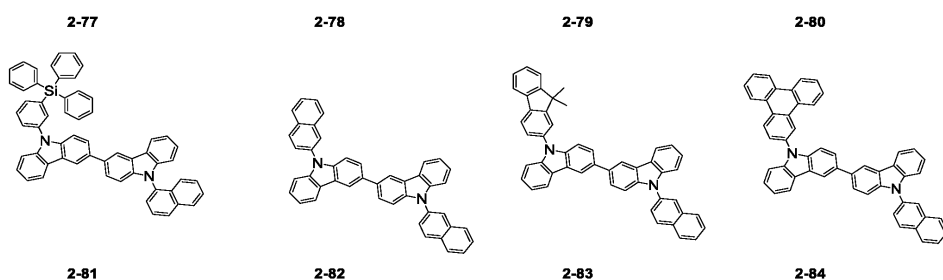
30

40

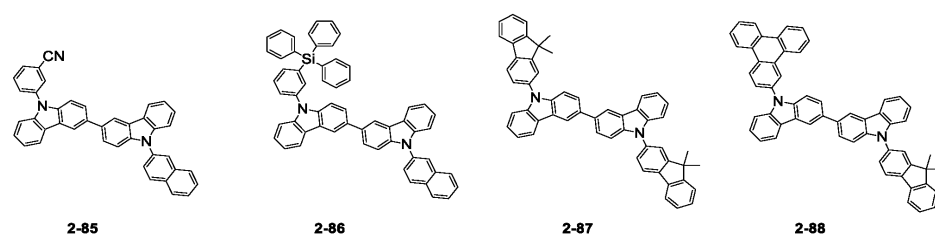
【化 4 1】



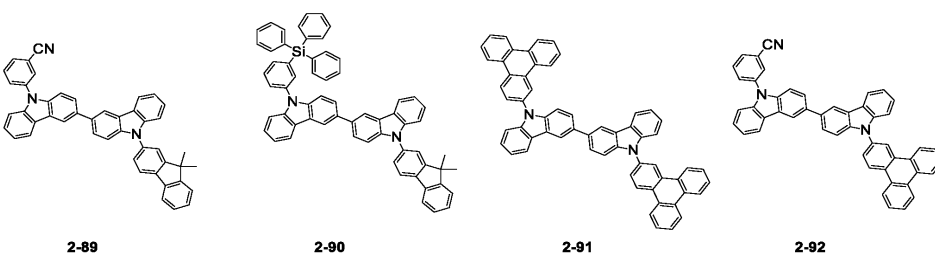
10



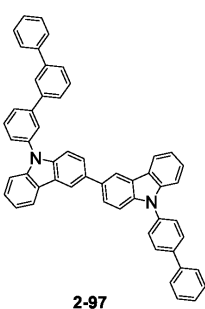
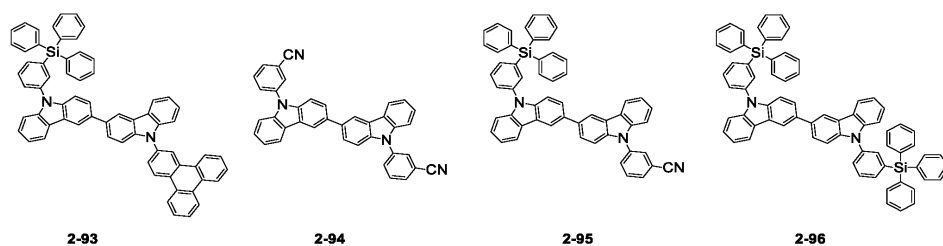
20



30



40



50

【 0 0 6 5 】

また、前記化学式 1 および 2 の構造に多様な置換基を導入することにより、導入された置換基固有の特性を有する化合物を合成することができる。例えば、有機発光素子の製造時に使用される正孔注入層物質、正孔輸送層物質、発光層物質、電子輸送層物質、および電荷生成層物質に主に使用される置換基を前記コア構造に導入することにより、各有機物層で要求する条件を満たす物質を合成することができる。

【0066】

また、前記化学式 1 および 2 の構造に多様な置換基を導入することにより、エネルギーバンドギャップを微細に調節可能にし、一方で、有機物間における界面での特性を向上させ、物質の用途を多様化することができる。

【0067】

一方、前記ヘテロ環化合物は、ガラス転移温度 (T_g) が高く、熱的安定性に優れる。このような熱的安定性の増加は、素子に駆動安定性を提供する重要な要因となる。

【0068】

本出願の一実施態様に係るヘテロ環化合物は、多段階の化学反応で製造することができる。一部の中間体化合物が先に製造され、その中間体化合物から化学式 1 または 2 の化合物が製造される。より具体的には、本出願の一実施態様に係るヘテロ環化合物は、後述する製造例に基づいて製造される。

【0069】

また、本出願の他の実施態様は、前記化学式 1 で表されるヘテロ環化合物、および前記化学式 2 で表される化合物を同時に含むものである有機発光素子の有機物層用組成物を提供する。

【0070】

前記化学式 1 で表されるヘテロ環化合物、および前記化学式 2 で表される化合物に関する具体的な内容は、前述したものと同一である。

【0071】

前記組成物内の前記化学式 1 で表されるヘテロ環化合物：前記化学式 2 で表される化合物の重量比は、1 : 10 ~ 10 : 1 であってもよく、1 : 8 ~ 8 : 1 であってもよく、1 : 5 ~ 5 : 1 であってもよいし、1 : 2 ~ 2 : 1 であってもよいが、これにのみ限定されるものではない。

【0072】

前記組成物は、有機発光素子の有機物の形成時に用いることができ、特に、発光層のホストの形成時により好ましく用いることができる。

【0073】

前記組成物は、2 以上の化合物が単純混合されている形態であり、有機発光素子の有機物層の形成前にパウダー状態の材料を混合することもでき、適正温度以上で液相状態になっている化合物を混合することができる。前記組成物は、各材料の融点以下では固体状態であり、温度を調整すれば液状に維持することができる。

【0074】

前記組成物は、追加的に、溶媒、添加剤など、当技術分野で公知の材料が追加的に含まれてもよい。

【0075】

本出願の一実施態様に係る有機発光素子は、前述した化学式 1 で表されるヘテロ環化合物、および化学式 2 で表されるヘテロ環化合物を用いて 1 層以上の有機物層を形成することを除けば、通常の有機発光素子の製造方法および材料によって製造される。

【0076】

前記化学式 1 で表される化合物および前記化学式 2 で表されるヘテロ環化合物は、有機発光素子の製造時、真空蒸着法だけでなく、溶液塗布法によって有機物層に形成される。ここで、溶液塗布法とは、スピンコーティング、ディップコーティング、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、スプレー法、ロールコーティングなどを意味するが、これらにのみ限定されるものではない。

10

20

30

40

50

【0077】

本発明の有機発光素子の有機物層は、単層構造からなってもよいが、2層以上の有機物層が積層された多層構造からなってもよい。例えば、本発明の有機発光素子は、有機物層として、正孔注入層、正孔輸送層、発光層、電子輸送層、電子注入層などを含む構造を有することができる。しかし、有機発光素子の構造はこれに限定されず、より少数の有機物層を含むことができる。

【0078】

具体的には、本出願の一実施態様に係る有機発光素子は、第1電極と、第2電極と、第1電極および第2電極の間に備えられた1層以上の有機物層とを含み、前記有機物層のうちの1層以上は、前記化学式1で表されるヘテロ環化合物、および前記化学式2で表されるヘテロ環化合物を含む。

10

【0079】

本出願の一実施態様において、前記第1電極は、陽極であってもよく、前記第2電極は、陰極であってもよい。

他の実施態様において、前記第1電極は、陰極であってもよく、前記第2電極は、陽極であってもよい。

本出願の一実施態様において、前記有機発光素子は、青色有機発光素子であってもよいし、前記化学式1によるヘテロ環化合物および前記化学式2によるヘテロ環化合物は、青色有機発光素子の材料として使用できる。

本出願の一実施態様において、前記有機発光素子は、緑色有機発光素子であってもよいし、前記化学式1で表される化合物および前記化学式2で表されるヘテロ環化合物は、緑色有機発光素子の材料として使用できる。

20

本出願の一実施態様において、前記有機発光素子は、赤色有機発光素子であってもよいし、前記化学式1で表される化合物および前記化学式2で表されるヘテロ環化合物は、赤色有機発光素子の材料として使用できる。

【0080】

本発明の有機発光素子は、発光層、正孔注入層、正孔輸送層、電子注入層、電子輸送層、電子ブロック層、および正孔ブロック層からなる群より選択される1層または2層以上をさらに含んでもよい。

本出願の一実施態様において、前記有機物層は、正孔阻止層、電子注入層、および電子輸送層のうちの少なくとも1層を含み、前記正孔阻止層、電子注入層、および電子輸送層のうちの少なくとも1層が、前記化学式1で表されるヘテロ環化合物、および前記化学式2で表されるヘテロ環化合物を同時に含むものである有機発光素子を提供する。

30

本出願の一実施態様において、前記有機物層は、発光層を含み、前記発光層は、前記化学式1で表されるヘテロ環化合物、および前記化学式2で表されるヘテロ環化合物を同時に含むものである有機発光素子を提供する。

本出願の一実施態様において、前記有機物層は、発光層を含み、前記発光層は、ホスト物質を含み、前記ホスト物質は、前記化学式1で表されるヘテロ環化合物、および前記化学式2で表されるヘテロ環化合物を同時に含むものである有機発光素子を提供する。

【0081】

40

図1～3に本出願の一実施態様に係る有機発光素子の電極と有機物層の積層順序を例示した。しかし、これらの図面によって本出願の範囲が限定されることを意図したわけではなく、当技術分野で知られている有機発光素子の構造が本出願にも適用可能である。

図1によれば、基板100上に、陽極200、有機物層300、および陰極400が順次に積層された有機発光素子が示される。しかし、このような構造にのみ限定されるものではなく、図2のように、基板上に、陰極、有機物層、および陽極が順次に積層された有機発光素子が実現されてもよい。

図3は、有機物層が多層の場合を例示するものである。図3による有機発光素子は、正孔注入層301、正孔輸送層302、発光層303、正孔阻止層304、電子輸送層305、および電子注入層306を含む。しかし、このような積層構造によって本出願の範囲

50

が限定されるものではなく、必要に応じて、発光層を除いた残りの層は省略されてもよく、必要な他の機能層がさらに追加されてもよい。

【0082】

本出願の一実施態様において、基板を用意するステップと、前記基板上に第1電極を形成するステップと、前記第1電極上に1層以上の有機物層を形成するステップと、前記有機物層上に第2電極を形成するステップとを含み、前記有機物層を形成するステップは、本出願の一実施態様に係る有機物層用組成物を用いて1層以上の有機物層を形成するステップを含むものである有機発光素子の製造方法を提供する。

【0083】

本出願の一実施態様において、前記有機物層を形成するステップは、前記化学式1のヘテロ環化合物および前記化学式2のヘテロ環化合物を予備混合 (pre-mixed) して、熱真空蒸着方法を利用して形成するものである有機発光素子の製造方法を提供する。

前記予備混合 (pre-mixed) は、前記化学式1のヘテロ環化合物および前記化学式2のヘテロ環化合物を有機物層に蒸着する前に、予め材料を混ぜて1つの供源に入れて混合することを意味する。

予備混合された材料は、本出願の一実施態様に係る有機物層用組成物と言及される。

【0084】

本出願の一実施態様に係る有機発光素子において、前記化学式1のヘテロ環化合物、および前記化学式2のヘテロ環化合物以外の材料を下記に例示するが、これらは例示のためのものに過ぎず、本出願の範囲を限定するためのものではなく、当技術分野で公知の材料に代替されてもよい。

【0085】

陽極材料としては、比較的仕事関数の大きい材料を用いることができ、透明導電性酸化物、金属または導電性高分子などを使用することができる。前記陽極材料の具体例としては、バナジウム、クロム、銅、亜鉛、金のような金属、またはこれらの合金；亜鉛酸化物、インジウム酸化物、インジウムスズ酸化物 (ITO)、インジウム亜鉛酸化物 (IZO) のような金属酸化物；ZnO:AlまたはSnO₂:Sbのような金属と酸化物との組み合わせ；ポリ(3-メチルチオフェン)、ポリ[3,4-(エチレン-1,2-ジオキシ)チオフェン] (PEDOT)、ポリピロールおよびポリアニリンのような導電性高分子などがあるが、これらにのみ限定されるものではない。

【0086】

陰極材料としては、比較的仕事関数の低い材料を用いることができ、金属、金属酸化物、または導電性高分子などを使用することができる。前記陰極材料の具体例としては、マグネシウム、カルシウム、ナトリウム、カリウム、チタン、インジウム、イットリウム、リチウム、ガドリニウム、アルミニウム、銀、スズおよび鉛のような金属、またはこれらの合金；LiF/AlまたはLiO₂/Alのような多層構造の物質などがあるが、これらにのみ限定されるものではない。

【0087】

正孔注入材料としては、公知の正孔注入材料を用いてもよいが、例えば、米国特許第4,356,429号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、または文献[Advanced Material、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、例えば、トリス(4-カルバゾイル-9-イルフェニル)アミン(TCTA)、4,4',4''-トリ[フェニル(m-トリル)アミノ]トリフェニルアミン(m-MTDATA)、1,3,5-トリス[4-(3-メチルフェニルフェニルアミノ)フェニル]ベンゼン(m-MTDAPB)、溶解性のある導電性高分子であるポリアニリン/ドデシルベンゼンスルホン酸(Polyaniline/Dodecylbenzenesulfonic acid)またはポリ(3,4-エチレンジオキシチオフェン)/ポリ(4-スチレンスルホネート)(Poly(3,4-ethylenedioxythiophene)/Poly(4-styrenesulfonate))、ポリアニリン/カンファースルホン酸(Polyaniline/Ca

10

20

30

40

50

m p h o r s u l f o n i c a c i d) またはポリアニリン / ポリ (4 - スチレンスルホネート) (P o l y a n i l i n e / P o l y (4 - s t y r e n e - s u l f o n a t e)) などを使用することができる。

【 0 0 8 8 】

正孔輸送材料としては、ピラゾリン誘導体、アリールアミン系誘導体、スチルベン誘導体、トリフェニルジアミン誘導体などが使用可能であり、低分子または高分子材料が使用されてもよい。

【 0 0 8 9 】

電子輸送材料としては、オキサジアゾール誘導体、アントラキノジメタンおよびその誘導体、ベンゾキノンおよびその誘導体、ナフトキノンおよびその誘導体、アントラキノンおよびその誘導体、テトラシアノアントラキノジメタンおよびその誘導体、フルオレノン誘導体、ジフェニルジシアノエチレンおよびその誘導体、ジフェノキノン誘導体、8 - ヒドロキシキノリンおよびその誘導体の金属錯体などが使用可能であり、低分子物質だけでなく、高分子物質が使用されてもよい。

10

【 0 0 9 0 】

電子注入材料としては、例えば、L i F が当業界で代表的に使用されるが、本出願がこれに限定されるものではない。

【 0 0 9 1 】

発光材料としては、赤色、緑色、または青色発光材料が使用可能であり、必要な場合、2 以上の発光材料を混合して使用することができる。この時、2 以上の発光材料を個別的な供給源として蒸着して使用したり、p r e - m i x e d して予備混合後、1 つの供給源として蒸着して使用することができる。また、発光材料として蛍光材料を使用してもよいが、燐光材料として使用してもよい。発光材料としては、単独として陽極と陰極からそれぞれ注入された正孔と電子を結合して発光させる材料が使用されてもよいが、ホスト材料とドーパント材料が共に発光に関与する材料が使用されてもよい。

20

【 0 0 9 2 】

発光材料のホストを混合して使用する場合には、同一系のホストを混合して使用してもよく、異なる系のホストを混合して使用してもよい。例えば、n タイプのホスト材料または p タイプのホスト材料いずれか 2 種類以上の材料を選択して発光層のホスト材料として使用することができる。

30

【 0 0 9 3 】

本出願の一実施態様に係る有機発光素子は、使用される材料によって、前面発光型、後面発光型、または両面発光型であってもよい。

【 0 0 9 4 】

本出願の一実施態様に係るヘテロ環化合物は、有機太陽電池、有機感光体、有機トランジスタなどをはじめとする有機電子素子においても、有機発光素子に適用されるのと類似の原理で作用することができる。

【 実施例 】

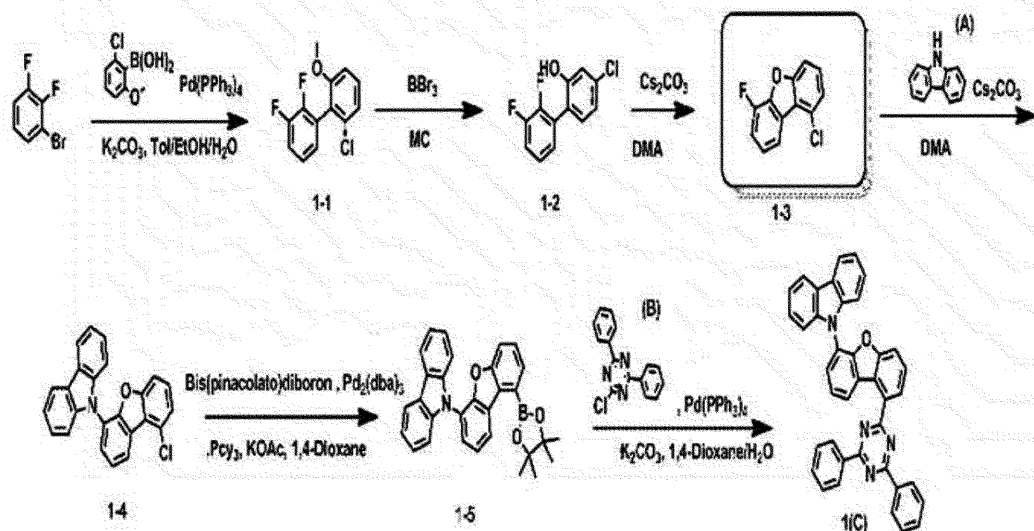
【 0 0 9 5 】

以下、実施例を通じて本明細書をより詳細に説明するが、これらは本出願を例示するためのものに過ぎず、本出願の範囲を限定するためのものではない。

40

【化 4 2】

【製造例1】 化合物 1(C) の製造



10

【0096】

化合物 1 - 1 の製造

20

一口の丸底フラスコ (One neck r. b. f) に、1 - プロモ - 2, 3 - ジフルオロベンゼン (40.5 g、209 mmol)、(2 - クロロ - 6 - メトキシフェニル) ボロン酸 (43 g、230 mmol)、テトラキス(トリフェニルホスフィン) パラジウム (0) (24 g、20.9 mmol)、ポタシウムカーボネート (57.9 g、419 mmol)、トルエン/エタノール/水 (500 ml / 100 ml / 100 ml) 混合物を、110 で還流した。ジクロロメタンで抽出し MgSO_4 で乾燥した。シリカゲルフィルタ後、濃縮して、化合物 1 - 1 を得た。(40.8 g、76%)

【0097】

化合物 1 - 2 の製造

30

一口の丸底フラスコ (One neck r. b. f) に、2' - クロロ - 2, 3 - difluoro - 6' - methoxy - 1, 1' - biphenyl (40.8 g、160 mmol)、MC (600 ml) の混合物を、0 に温度を下げて BBr_3 (30 mL、320 mmol) を滴加し、常温に昇温して1時間撹拌した。蒸留水で反応を終結し、ジクロロメタンで抽出し MgSO_4 で乾燥した。カラム精製 MC : HX = 1 : 1 として、化合物 1 - 2 を得た。(21 g、54%)

【0098】

化合物 1 - 3 の製造

40

一口の丸底フラスコ (One neck r. b. f) に、4 - クロロ - 2', 3' - ジフルオロ - [1, 1' - ビフェニル] - 2 - オール (21 g、87.2 mmol)、 Cs_2CO_3 (71 g、218 mmol) のジメチルアセトアミド (200 ml) 混合物を、120 で撹拌した。冷やした後、フィルタし、濾液の溶媒を除去した後、カラム精製 HX : MC = 4 : 1 として、化合物 1 - 3 を得た。(17 g、88%)

【0099】

化合物 1 - 4 の製造

一口の丸底フラスコ (One neck r. b. f) に、1 - クロロ - 6 - フルオロジベンゾ [b, d] フラン (6 g、27.19 mmol)、9H - カルバゾール (5 g、29.9 mmol)、 Cs_2CO_3 (22 g、101.7 mmol) のジメチルアセトアミド (60 ml) 混合物を、170 で12h還流した。冷やした後、フィルタし、濾液の溶媒を除去した後、カラム精製 HX : MC = 3 : 1 として、化合物 1 - 4 を得た。(9 g、90%)

50

【0100】

化合物1-5の製造

一口の丸底フラスコ(One neck r.b.f)に、9-(9-クロロジベンゾ[*b*,*d*]フラン-4-イル)-9*H*-カルバゾール(9 g、24.4 mmol)、ビス(ピナコラト)ジボロン(12.4 g、48.9 mmol)、Pcy₃(1.37 g、4.89 mmol)、ポタシウムアセテート(7.1 g、73 mmol)、Pd₂(dba)₃(2.2 g、2.44 mmol)の1,4-ジオキサン(100 ml)混合物を、140 で還流した。冷やした後、フィルタした濾液を濃縮して、カラム精製HX:MC=3:1として、化合物1-5を得た(7.2 g、64%)

【0101】

10

化合物1の製造

一口の丸底フラスコ(One neck r.b.f)に、9-(9-(4,4,5,5-テトラメチル-1,3,2-ジオキサボロラン-2-イル)ジベンゾ[*b*,*d*]フラン-4-イル)-9*H*-カルバゾール(7.2 g、15.6 mmol)、2-クロロ-4,6-ジフェニル-1,3,5-トリアジン(5 g、18.8 mmol)、テトラキス(トリフェニルホスフィン)パラジウム(0)(1.8 g、1.56 mmol)、ポタシウムカーボネート(4.3 g、31.2 mmol)、1,4-ジオキサン/水(100 ml/25 ml)混合物を、120 で4時間還流した。120 でフィルタ後、120 、1,4-ジオキサン、蒸留水、MeOHで洗って、化合物1(C)を得た。(6.6 g、75%)

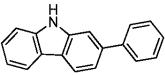
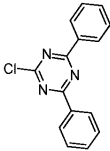
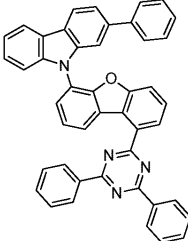
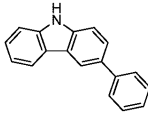
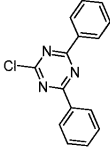
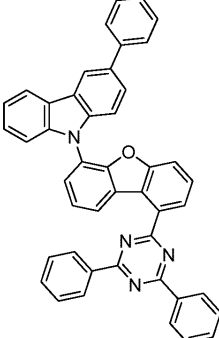
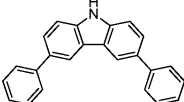
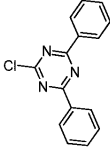
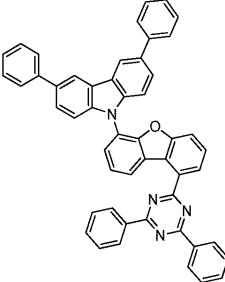
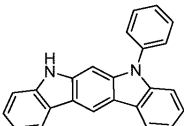
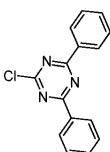
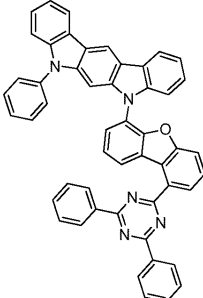
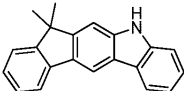
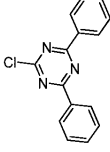
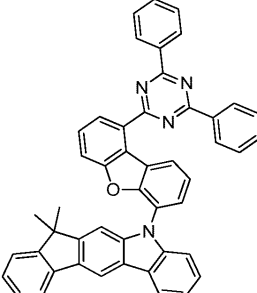
20

【0102】

前記製造例1において、下記表1～表7のA、Bを中間体として用いたことを除き、前記化合物1の製造と同様の方法で、下記の化合物Cを合成した。

【表 1】

[表 1]

化合物	A	B	C	収率 (1-3 to c)
2				69%
3				72%
5				70%
7				61%
10				63%

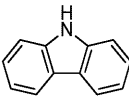
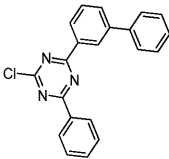
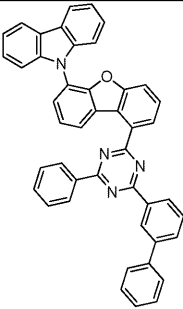
10

20

30

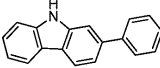
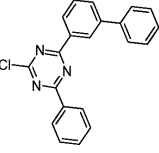
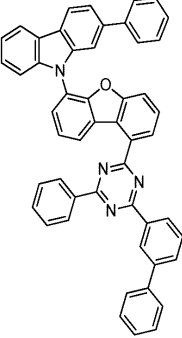
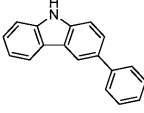
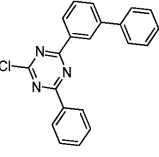
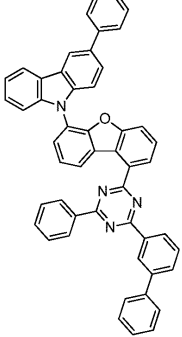
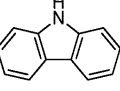
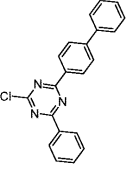
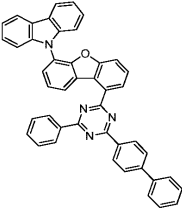
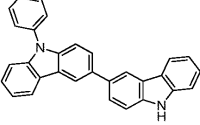
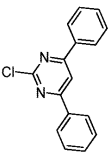
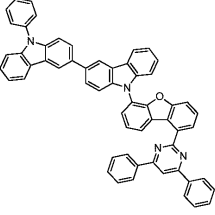
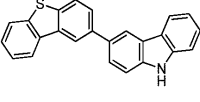
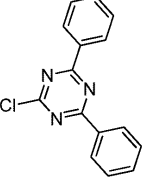
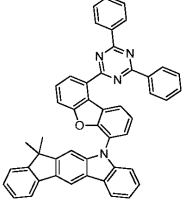
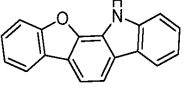
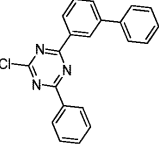
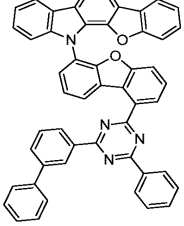
40

50

17				64%
----	---	---	--	-----

【表 2】

[表 2]

化合物	A	B	C	収率 (1-3 to C)
18				66%
19				69%
22				66%
28				69%
29				58%
34				62%

10

20

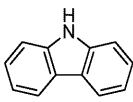
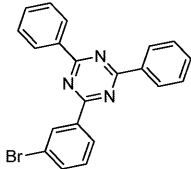
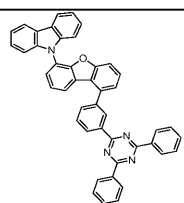
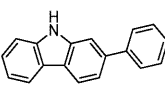
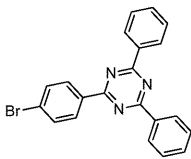
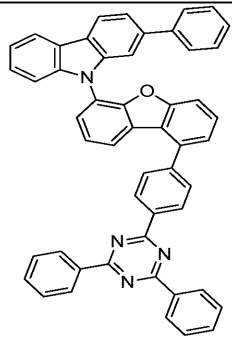
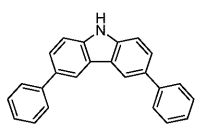
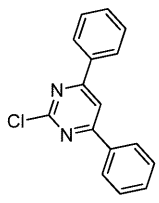
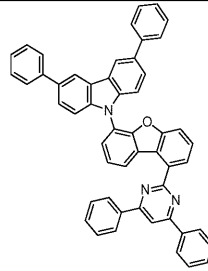
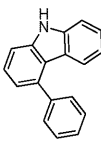
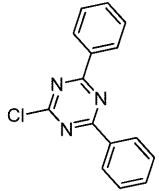
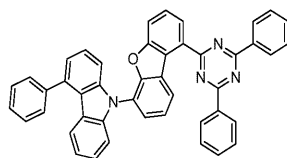
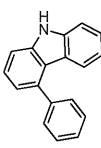
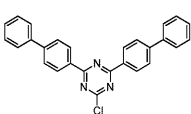
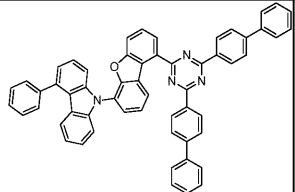
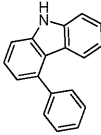
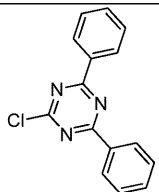
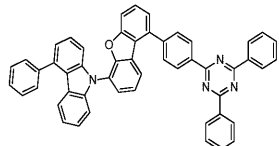
30

40

50

【表 3】

[表 3]

化合物	A	B	C	収率 (1-3 to C)
38				70%
39				71%
43				68%
45				42%
48				48%
51				53%

10

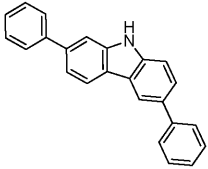
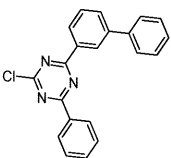
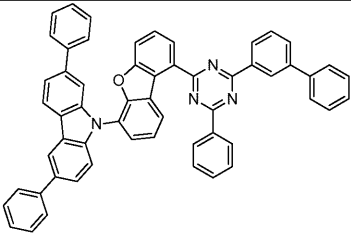
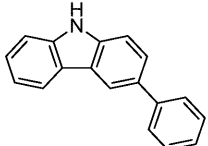
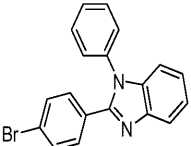
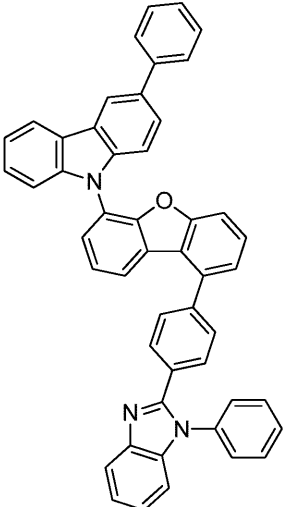
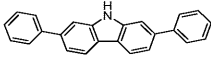
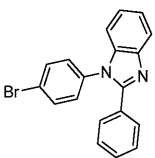
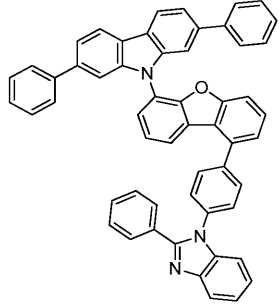
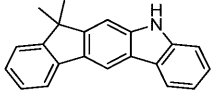
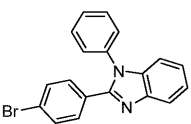
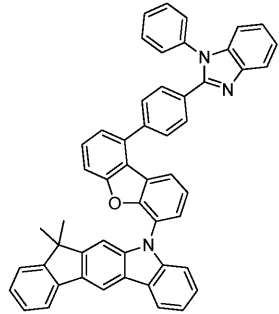
20

30

40

【表 4】

[表 4]

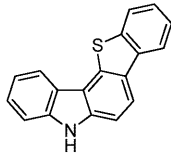
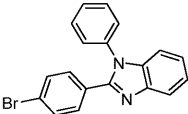
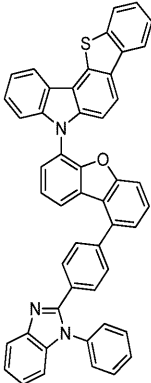
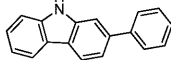
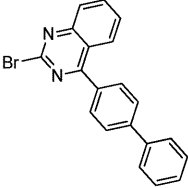
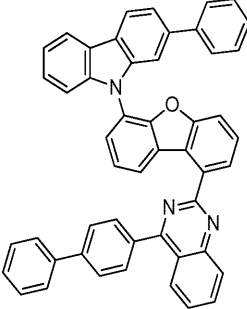
化合物	A	B	C	収率 (1-3 to C)
53				51%
59				66%
62				65%
65				67%

10

20

30

40

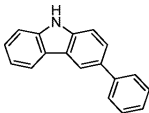
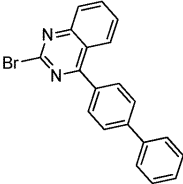
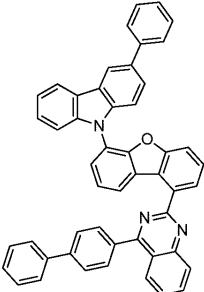
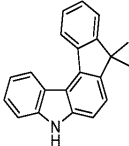
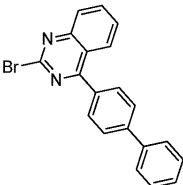
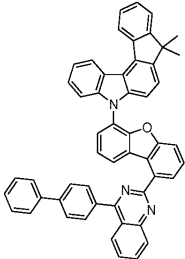
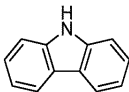
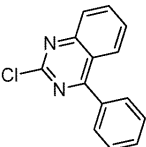
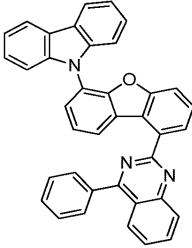
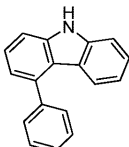
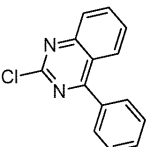
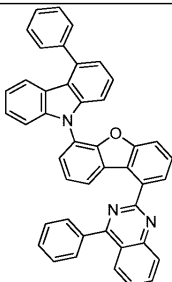
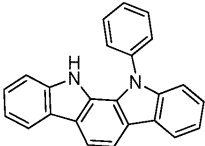
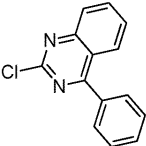
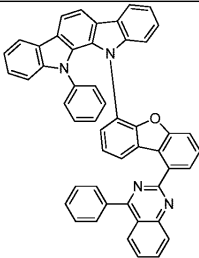
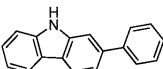
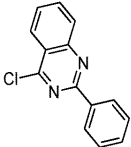
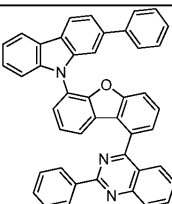
67	 <chem>c1ccc2c(c1)sc3cc4c(c2)c(c[nH]4)c5ccccc53</chem>	 <chem>Brc1ccc(cc1)-c2nc3ccccc3n2</chem>	 <chem>c1ccc2c(c1)sc3cc4c(c2)c(c[nH]4)c5ccccc53-c6cc7c(c(c6)O)c8ccccc8c7-c9cc(ccc9)-c10nnc10-c11ccccc11</chem>	61%
70	 <chem>c1ccc(cc1)-c2cc3c(c1)c[nH]3</chem>	 <chem>Brc1nc2ccccc2n1-c3ccc(cc3)-c4ccccc4</chem>	 <chem>c1ccc2c(c1)c3cc4c(c2)c(c[nH]4)c5ccccc53-c6cc7c(c(c6)O)c8ccccc8c7-c9cc(ccc9)-c10nnc10-c11ccccc11</chem>	69%

10

20

【表 5】

[表 5]

化合物	A	B	C	収率 (1-3 to C)
71				63%
75				64%
77				64%
80				70%
83				68%
86				60%

10

20

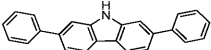
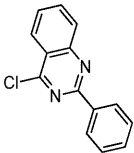
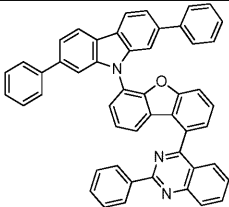
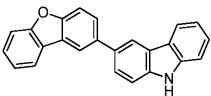
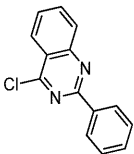
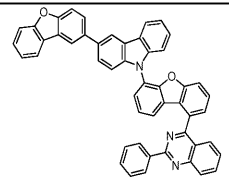
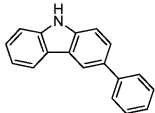
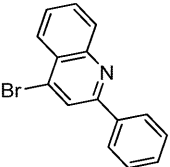
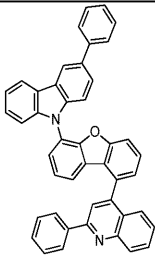
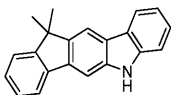
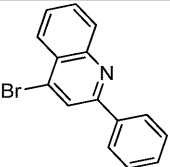
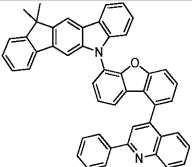
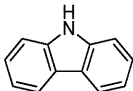
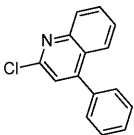
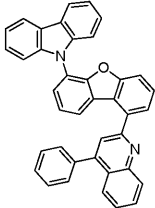
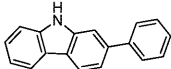
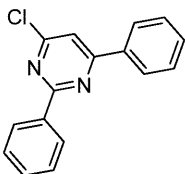
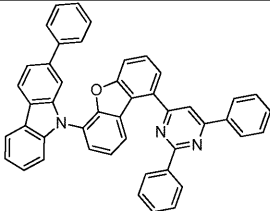
30

40

50

【表 6】

[表 6]

化合物	A	B	C	収率 (1-3 to C)
90				66%
92				61%
95				51%
100				54%
101				49%
110				54%

10

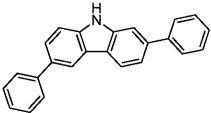
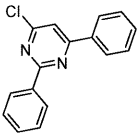
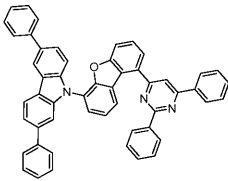
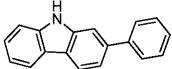
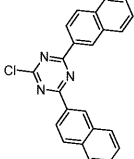
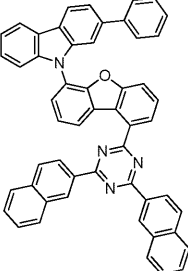
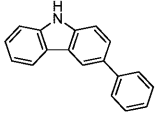
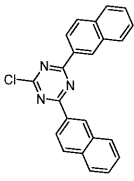
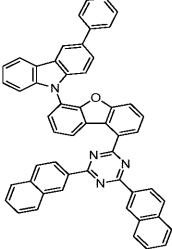
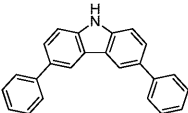
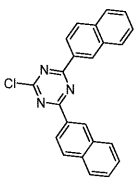
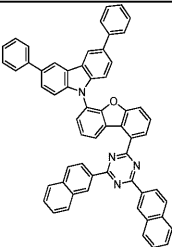
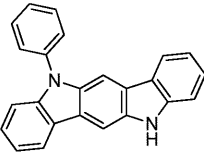
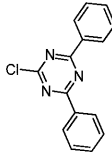
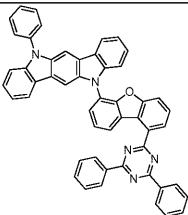
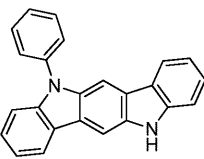
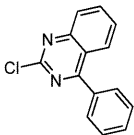
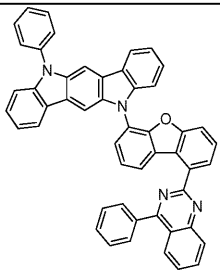
20

30

40

【表 7】

[表 7]

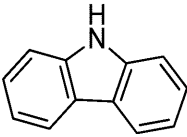
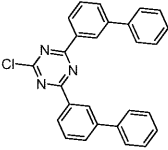
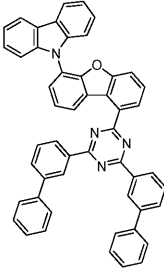
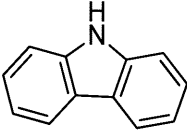
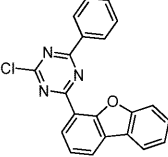
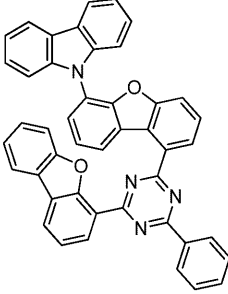
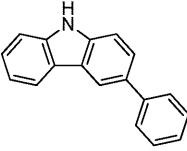
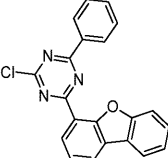
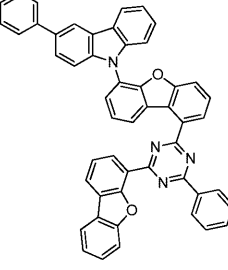
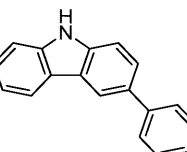
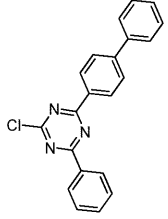
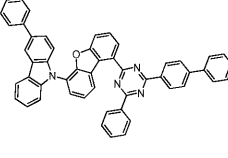
化合物	A	B	C	収率 (1-3 to c)
113				69%
118				60%
119				62%
121				63%
125				70%
127				64%

10

20

30

40

257				63%
258				69%
261				68%
286				71%

10

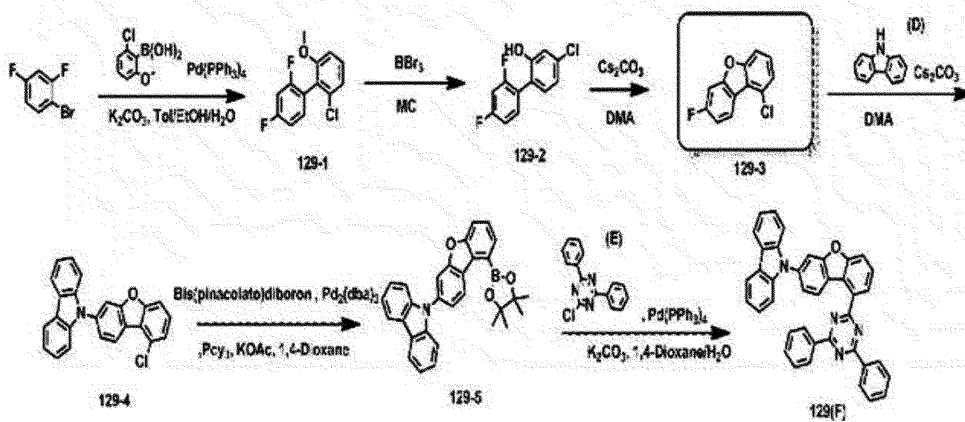
20

30

【 0 1 0 3 】

【 化 4 3 】

【製造例 2】化合物 129(F) の製造



40

【 0 1 0 4 】

化合物 129 - 1 の製造

一口の丸底フラスコ (One neck r . b . f) に、1 - プロモ - 2 , 4 - ジフルオロベンゼン (40 g、207 mmol)、(2 - クロロ - 6 - メトキシフェニル) ボ

50

ロン酸 (42.4 g、227 mmol)、テトラキス(トリフェニルホスフィン)パラジウム(0) (23 g、20.7 mmol)、ポタシウムカーボネート (57 g、414 mmol)、トルエン/エタノール/水 (600 ml / 150 ml / 150 ml) 混合物を、110 で還流した。

ジクロロメタンで抽出し MgSO_4 で乾燥した。シリカゲルフィルタ後、濃縮して、化合物 129-1 を得た。(50 g、94%)

【0105】

化合物 129-2 の製造

一口の丸底フラスコ (One neck r.b.f) に、2'-クロロ-2,4-ジフルオロ-6'-メトキシ-1,1'-ビフェニル (50 g、196 mmol)、ジクロロメタン (700 ml) の混合物を、0 に温度を下げて BBr_3 (28.3 mL、294 mmol) を滴加し、常温に昇温して2時間撹拌した。

蒸留水で反応を終結し、ジクロロメタンで抽出し MgSO_4 で乾燥した。シリカゲルフィルタして、化合物 129-2 を得た。(27.5 g、58%)

【0106】

化合物 129-3 の製造

一口の丸底フラスコ (One neck r.b.f) に、4-クロロ-2',4'-ジフルオロ-[1,1'-ビフェニル]-2-オール (27 g、114 mmol)、 Cs_2CO_3 (83 g、285 mmol) のジメチルアセトアミド (300 ml) 混合物を、120 で撹拌した。冷やした後、フィルタし、濾液の溶媒を除去した後、シリカゲルフィルタして、化合物 129-3 を得た。(23 g、92%)

【0107】

化合物 129-4 の製造

一口の丸底フラスコ (One neck r.b.f) に、1-クロロ-7-フルオロジベンゾ [b,d] フラン (5.5 g、24.9 mmol)、9H-カルバゾール (4.58 g、27.4 mmol)、 Cs_2CO_3 (20 g、62 mmol) のジメチルアセトアミド (60 ml) 混合物を、170 で6h還流した。冷やした後、フィルタし、濾液の溶媒を除去した後、カラム精製 $\text{HX}:\text{MC} = 3:1$ として、化合物 129-4 を得た。(7.6 g、83%)

【0108】

化合物 129-5 の製造

一口の丸底フラスコ (One neck r.b.f) に、9-(9-クロロジベンゾ [b,d] フラン-3-イル)-9H-カルバゾール (7.5 g、20.3 mmol)、ビス(ピナコラト)ジボロン (10.3 g、40.7 mmol)、 Pcy_3 (1.14 g、4.07 mmol)、ポタシウムアセテート (5.97 g、60.9 mmol)、 $\text{Pd}_2(\text{dba})_3$ (1.85 g、2.03 mmol) の1,4-ジオキサン (80 ml) 混合物を140 で還流した。冷やした後、フィルタした濾液を濃縮して、カラム精製 $\text{HX}:\text{MC} = 2:1$ として、化合物 129-5 を得た (6.5 g、70%)。

【0109】

化合物 129 の製造

一口の丸底フラスコ (One neck r.b.f) に、9-(9-(4,4,5,5-テトラメチル-1,3,2-ジオキサボロラン-2-イル)ジベンゾ [b,d] フラン-3-イル)-9H-カルバゾール (6.5 g、14.1 mmol)、2-クロロ-4,6-ジフェニル-1,3,5-トリアジン (4.54 g、16.9 mmol)、テトラキス(トリフェニルホスフィン)パラジウム(0) (1.6 g、1.41 mmol)、ポタシウムカーボネート (3.9 g、28.2 mmol)、1,4-ジオキサン/水 (80 ml / 28.2 ml) 混合物を、120 で4時間還流した。120 でフィルタ後、120、1,4-ジオキサン、蒸留水、MeOHで洗って、化合物 129 (F) を得た (5.4 g、68%)。

【0110】

10

20

30

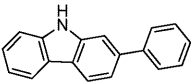
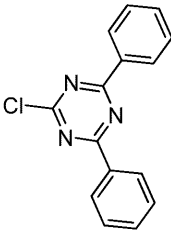
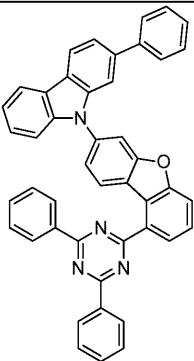
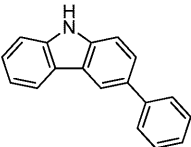
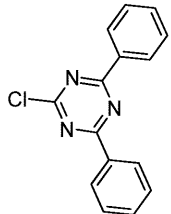
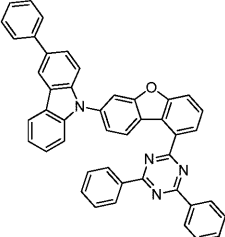
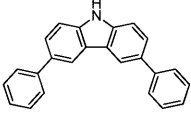
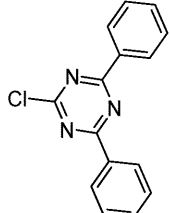
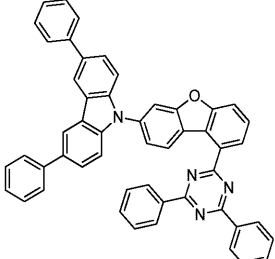
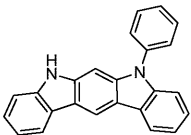
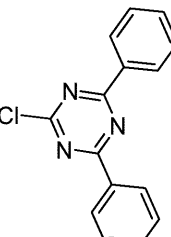
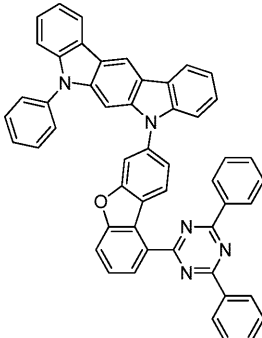
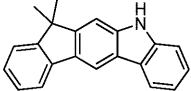
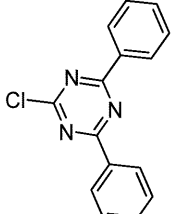
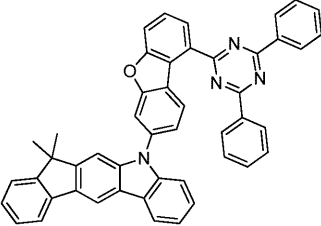
40

50

前記製造例 2 において、下記表 8 ~ 表 14 の D、E を中間体として用いたことを除き、前記化合物 129 の製造と同様の方法で、下記の化合物 F を合成した。

【表 8】

[表 8]

化合物	D	E	F	収率 (129-3 to F)
130				69%
131				72%
133				70%
135				61%
138				63%

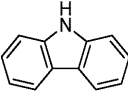
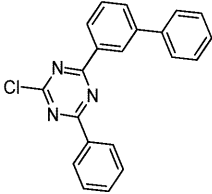
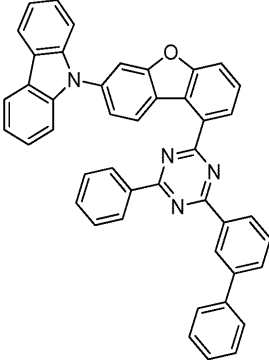
10

20

30

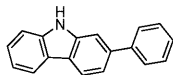
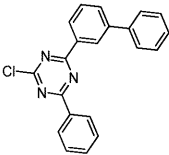
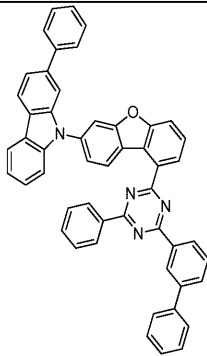
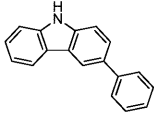
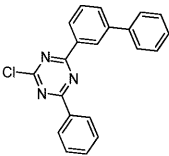
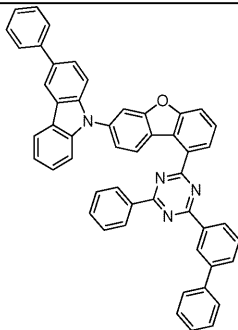
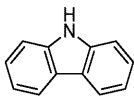
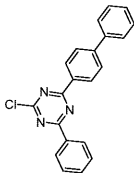
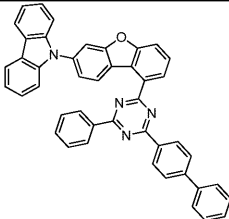
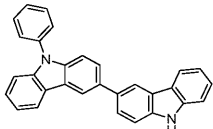
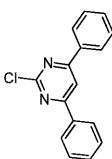
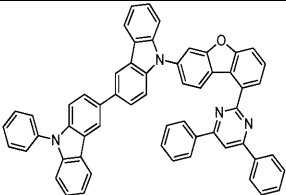
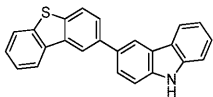
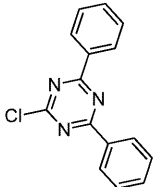
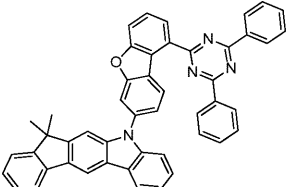
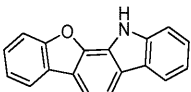
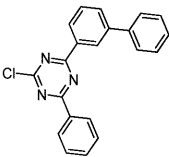
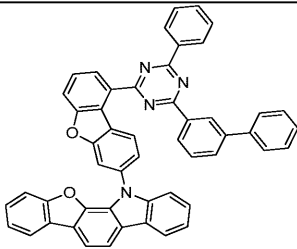
40

50

145				64%
-----	---	---	--	-----

【表 9】

[表 9]

化合物	D	E	F	収率 (129-3 to F)
146				70%
147				68%
150				66%
156				69%
157				58%
162				62%

10

20

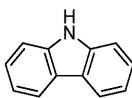
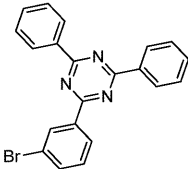
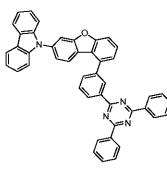
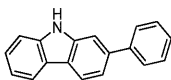
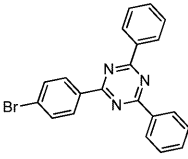
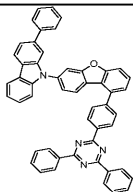
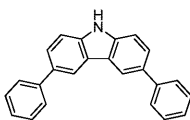
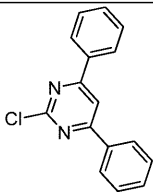
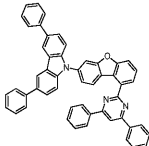
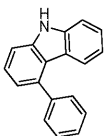
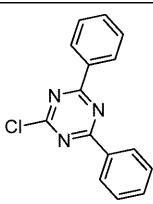
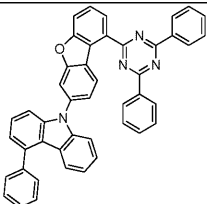
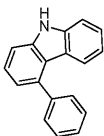
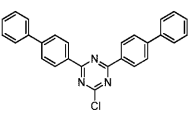
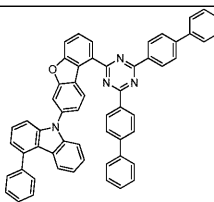
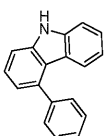
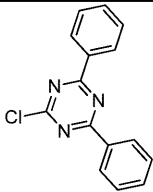
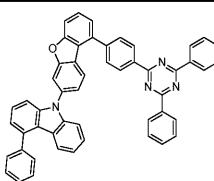
30

40

50

【表 10】

[表 10]

化合物	D	E	F	収率 (129-3 to F)
166				70%
167				71%
171				68%
173				42%
176				48%
179				53%

10

20

30

40

【表 1 1】

[表 11]

化合物	D	E	F	収率 (129-3 to F)
181				51%
187				66%
190				65%
193				67%
195				61%

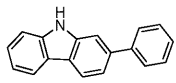
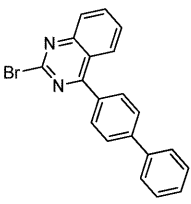
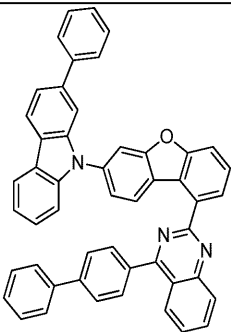
10

20

30

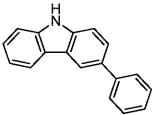
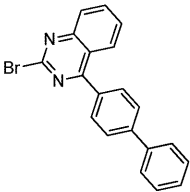
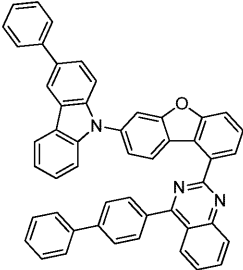
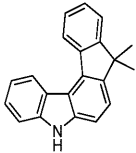
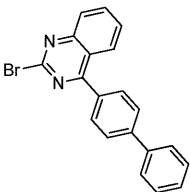
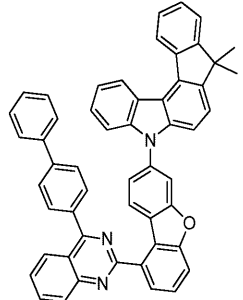
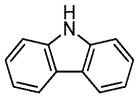
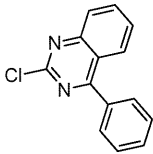
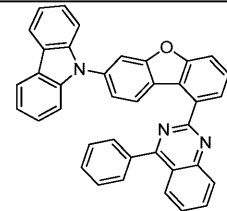
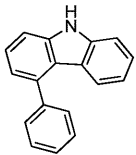
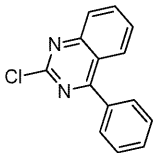
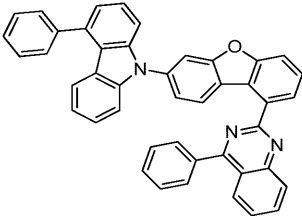
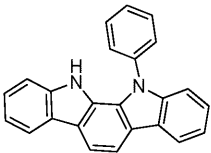
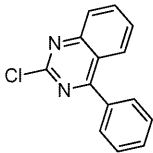
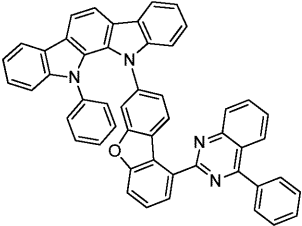
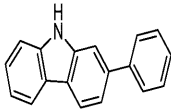
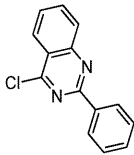
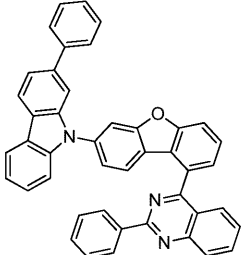
40

50

198	 <chem>c1ccc(cc1)-c2cc3ccccc3[nH]2</chem>	 <chem>Brc1nc2ccccc2n1-c3ccc(cc3)-c4ccccc4</chem>	 <chem>c1ccc(cc1)-c2cc3cc4c(cc3c2O)c5cc6c(cc5)nn(c6-c7ccccc7)-c8cc9ccccc9cc8</chem>	69%
-----	--	--	---	-----

【表 1 2】

[表 12]

化合物	D	E	F	収率 (129-3 to F)
199				63%
203				64%
205				64%
208				70%
211				68%
214				60%

10

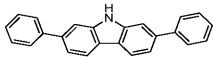
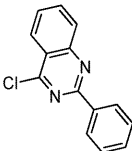
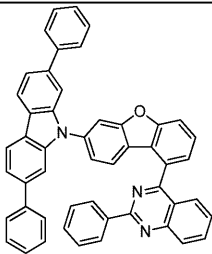
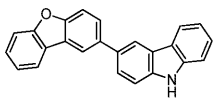
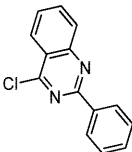
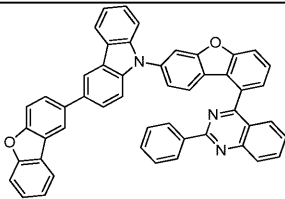
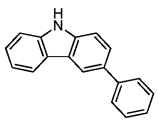
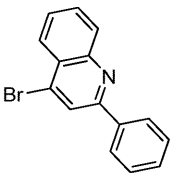
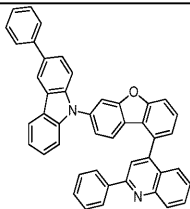
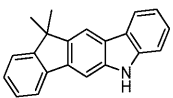
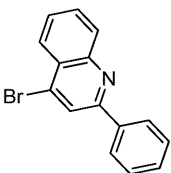
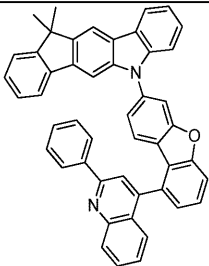
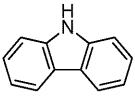
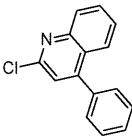
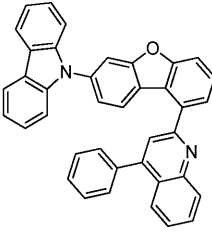
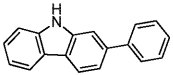
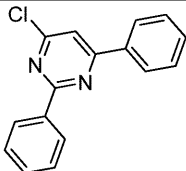
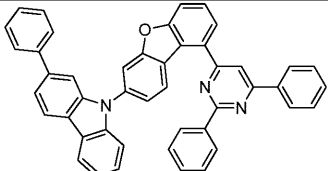
20

30

40

【表 1 3】

[表 13]

化合物	D	E	F	収率 (129-3 to F)
218				66%
220				61%
223				51%
228				54%
229				49%
238				54%

10

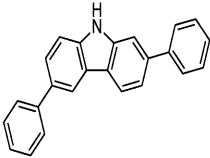
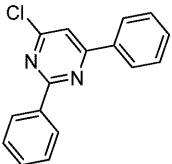
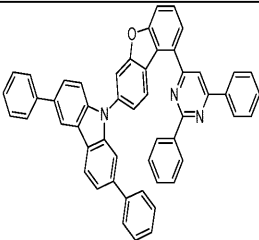
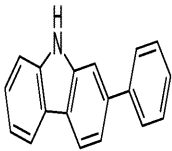
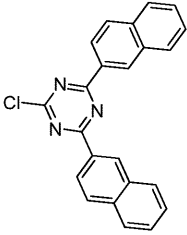
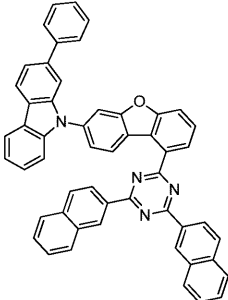
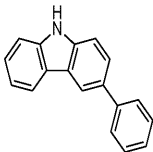
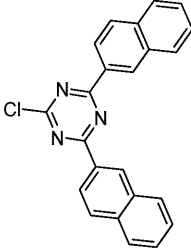
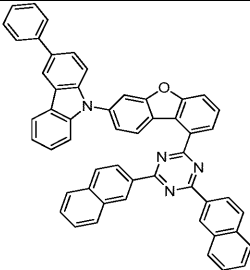
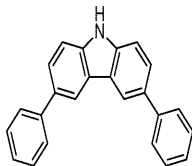
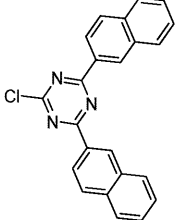
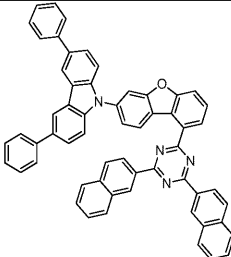
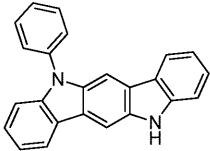
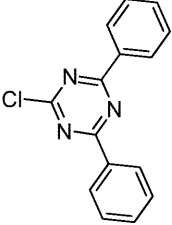
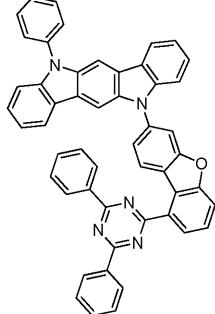
20

30

40

【表 1 4】

[表 14]

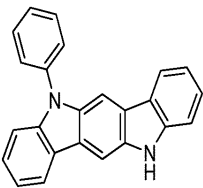
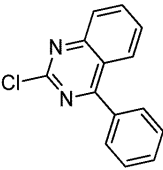
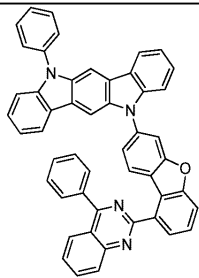
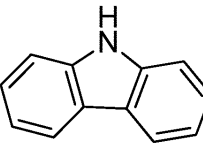
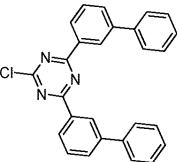
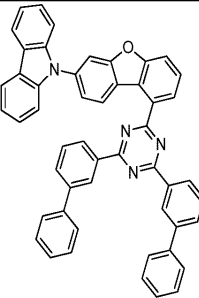
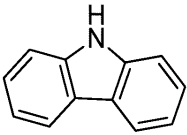
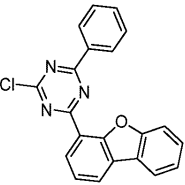
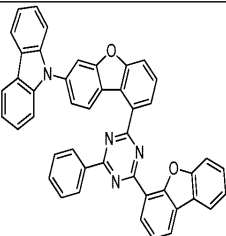
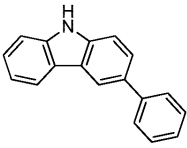
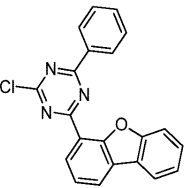
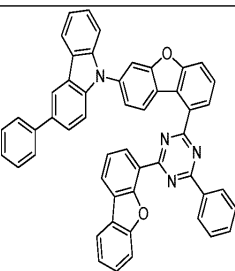
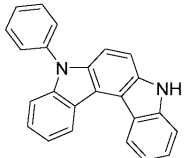
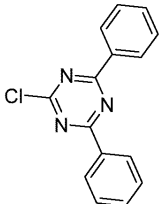
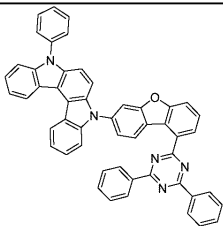
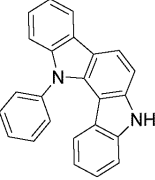
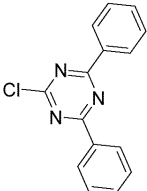
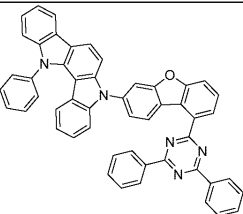
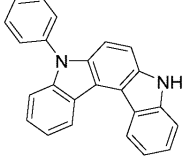
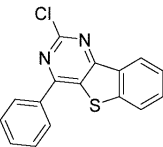
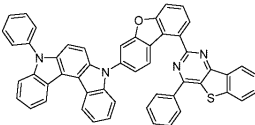
化合物	D	E	F	収率 (129-3 to F)
241				69%
246				60%
247				62%
249				63%
253				70%

10

20

30

40

255				64%
263				68%
264				71%
265				62%
271				60%
272				67%
282				62%

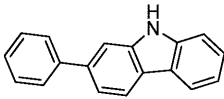
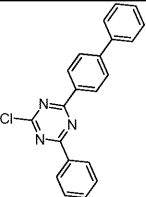
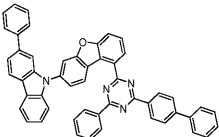
10

20

30

40

50

285				68%
-----	---	---	--	-----

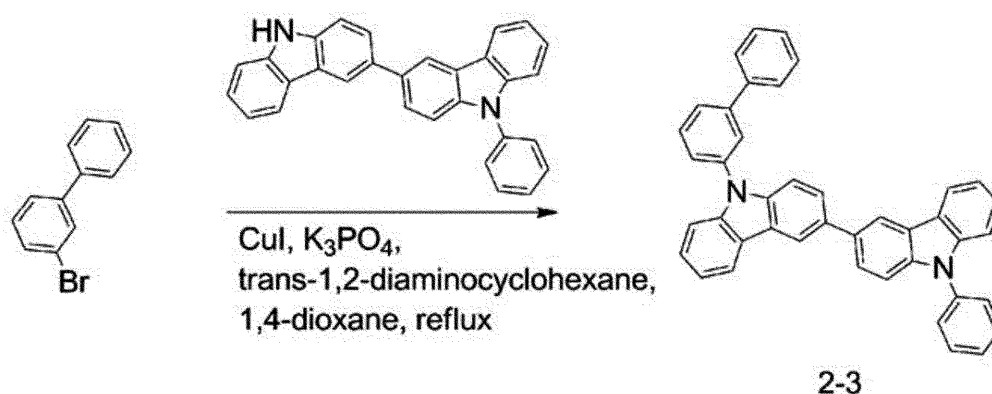
【 0 1 1 1 】

前記表 1 ~ 1 4 に記載の化合物以外の化合物 1 ~ 2 8 6 も、前述した製造例に記載の方法と同様に製造した。

10

【化 4 4】

<製造例 3> 化合物 2-3 の合成



20

【 0 1 1 2 】

1) 化合物 2 - 3 の製造

3 - プロモ - 1 , 1 ' - ビフェニル 3 . 7 g (1 5 . 8 m M) 、 9 - フェニル - 9 H , 9 ' H - 3 , 3 ' - ビカルバゾール 6 . 5 g (1 5 . 8 m M) 、 C u I 3 . 0 g (1 5 . 8 m M) 、 トランス - 1 , 2 - ジアミノシクロヘキサン 1 . 9 m L (1 5 . 8 m M) 、 K₃P O₄ 3 . 3 g (3 1 . 6 m M) を 1 , 4 - オキサン 1 0 0 m L に溶かした後、24 時間還流した。反応が完了した後、室温で蒸留水と D C M を入れて抽出し、有機層は M g S O₄ で乾燥させた後、回転蒸発器で溶媒を除去した。反応物はカラムクロマトグラフィー (D C M : H e x = 1 : 3) で精製し、メタノールで再結晶して、目的化合物 2 - 3 7 . 5 g (8 5 %) を得た。

30

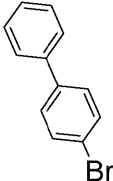
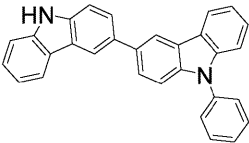
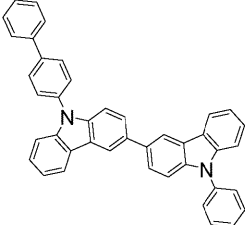
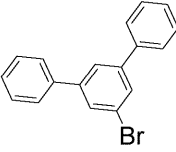
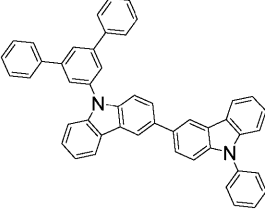
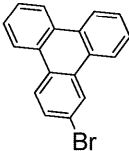
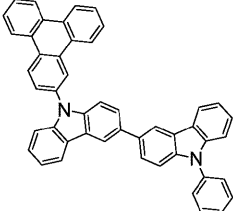
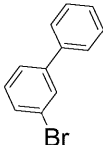
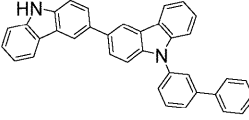
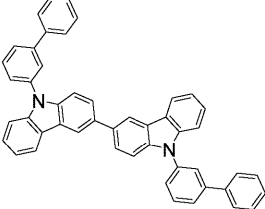
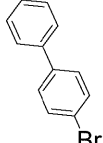
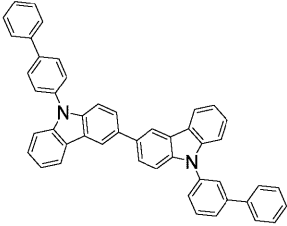
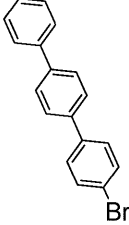
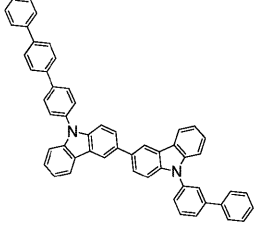
【 0 1 1 3 】

前記製造例 3 において、3 - プロモ - 1 , 1 ' - ビフェニルの代わりに下記表 1 5 の中間体 A を用い、9 - フェニル - 9 H , 9 ' H - 3 , 3 ' - ビカルバゾールの代わりに下記表 1 5 の中間体 B を用いたことを除き、製造例 3 の製造と同様の方法で製造して、目的化合物 A を合成した。

40

【表 15】

[表 15]

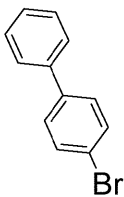
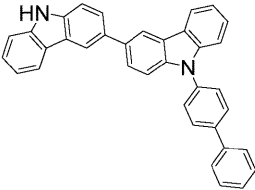
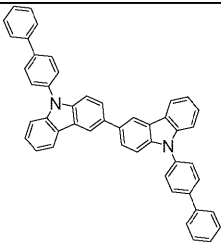
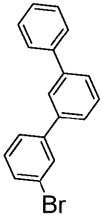
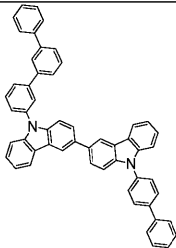
化合物 番号	中間体 A	中間体 B	目的化合物 A	全体 収率
2-4				83%
2-7				84%
2-16				80%
2-31				81%
2-32				80%
2-34				74%

10

20

30

40

2-42				82%
2-97				84%

10

【 0 1 1 4 】

前記表 1 5 に記載の化合物以外の化合物 2 - 1 ~ 2 - 9 7 も、前述した製造例に記載の方法と同様に製造した。

【 0 1 1 5 】

前記で製造された化合物の合成確認資料は、下記表 1 6 および表 1 7 に記載した通りである。

20

【表 16】

[表 16]

化合物	FD-Mass	化合物	FD-Mass
1	m/z= 564. 63 (C39H24N4O=564. 20)	2	m/z= 640. 73 (C45H28N4O=640. 23)
3	m/z= 640. 73 (C45H28N4O=640. 23)	4	m/z= 716. 83 (C51H32N4O=717. 26)
5	m/z= 716. 83 (C51H32N4O=717. 26)	6	m/z= 729. 82 (C51H31N5O=729. 25)
7	m/z= 729. 82 (C51H31N5O=729. 25)	8	m/z= 805. 92 (C57H35N5O=805. 28)
9	m/z= 730. 81 (C51H30N4O2=730. 81)	10	m/z= 680. 79 (C48H32N4O=680. 26)
11	m/z= 680. 79 (C48H32N4O=680. 26)	12	m/z= 680. 79 (C48H32N4O=680. 26)
13	m/z= 670. 78 (C45H26N4OS=670. 18)	14	m/z= 654. 71 (C45H26N4O2=654. 21)
15	m/z= 654. 71 (C45H26N4O2=654. 21)	16	m/z= 670. 78 (C45H26N4OS=670. 18)
17	m/z= 640. 73 (C45H2N4O=640. 23)	18	m/z= 716. 83 (C51H32N4O=716. 26)
19	m/z= 716. 83 (C51H32N4O=716. 26)	20	m/z= 792. 92 (C57H36N4O=792. 29)
21	m/z= 792. 92 (C57H36N4O=792. 29)	22	m/z= 640. 73 (C45H2N4O=640. 23)
23	m/z= 792. 92 (C57H36N4O=792. 29)	24	m/z= 792. 92 (C57H36N4O=792. 29)
25	m/z= 792. 92 (C57H36N4O=792. 29)	26	m/z= 728. 84 (C52H32N4O=728. 26)
27	m/z= 728. 84 (C52H32N4O=728. 26)	28	m/z= 804. 93 (C58H36N4O=804. 29)
29	m/z= 746. 21 (C51H30N4OS=746. 21)	30	m/z= 756. 89 (C54H36N4O=756. 29)
31	m/z= 756. 89 (C54H36N4O=756. 29)	32	m/z= 679. 81 (C49H33N3O=679. 26)
33	m/z= 746. 88 (C51H30N4OS=746. 21)	34	m/z= 730. 81 (C51H30N4O2=730. 24)
35	m/z= 730. 81 (C51H30N4O2=730. 24)	36	m/z= 669. 79 (C46H27N3OS=669. 19)
37	m/z= 640. 73 (C45H28N4O=640. 23)	38	m/z= 640. 73 (C45H28N4O=640. 23)
39	m/z= 716. 83 (C51H32N4O=717. 26)	40	m/z= 716. 83 (C51H32N4O=717. 26)
41	m/z= 716. 83 (C51H43N4O=716. 26)	42	m/z= 716. 83 (C51H32N4O=717. 26)
43	m/z= 715. 84 (C52H33N3O=715. 26)	44	m/z= 715. 84 (C52H33N3O=715. 26)
45	m/z= 640. 73 (C45H28N4O=640. 23)	46	m/z= 716. 83 (C51H32N4O=716. 26)
47	m/z= 716. 83 (C51H32N4O=716. 26)	48	m/z= 792. 92 (C57H36N4O=792. 29)
49	m/z= 756. 89 (C54H36N4O=756. 29)	50	m/z= 716. 83 (C51H32N4O=716. 26)
51	m/z= 716. 83 (C51H32N4O=716. 26)	52	m/z= 716. 83 (C51H32N4O=716. 26)
53	m/z= 792. 92 (C57H36N4O=792. 29)	54	m/z= 792. 92 (C57H36N4O=792. 29)
55	m/z= 601. 69 (C43H27N3O=601. 69)	56	m/z= 601. 69 (C43H27N3O=601. 69)
57	m/z= 677. 79 (C49H31N3O=677. 25)	58	m/z= 677. 79 (C49H31N3O=677. 25)
59	m/z= 677. 79 (C49H31N3O=677. 25)	60	m/z= 677. 79 (C49H31N3O=677. 25)

10

20

30

40

50

61	m/z= 753. 89 (C55H35N3O=753. 28)	62	m/z= 753. 89 (C55H35N3O=753. 28)
63	m/z= 753. 89 (C55H35N3O=753. 28)	64	m/z= 753. 89 (C55H35N3O=753. 28)
65	m/z= 717. 85 (C52H35N3O=717. 28)	66	m/z= 717. 85 (C52H35N3O=717. 28)
67	m/z= 707. 84 (C49H29N3O=707. 20)	68	m/z= 691. 77 (C49H29N3O=691. 23)
69	m/z= 613. 70 (C44H27N3O=613. 22)	70	m/z= 689. 80 (C50H31N3O=689. 25)
71	m/z= 689. 80 (C50H31N3O=689. 25)	72	m/z= 689. 80 (C50H31N3O=689. 25)
73	m/z= 765. 90 (C56H35N3O=765. 28)	74	m/z= 765. 90 (C56H35N3O=765. 28)
75	m/z= 729. 86 (C53H35N3O=729. 28)	76	m/z= 719. 20 (C50H29N3O=719. 20)
77	m/z= 537. 61 (C38H23N3O=537. 18)	78	m/z= 613. 70 (C44H27N3O=613. 22)
79	m/z= 613. 70 (C44H27N3O=613. 22)	80	m/z= 613. 70 (C44H27N3O=613. 22)
81	m/z= 689. 80 (C50H31N3O=689. 25)	82	m/z= 689. 80 (C50H31N3O=689. 25)
83	m/z= 702. 80 (C50H30N4O=702. 24)	84	m/z= 702. 80 (C50H30N4O=702. 24)
85	m/z= 537. 61 (C38H23N3O=537. 18)	86	m/z= 613. 70 (C44H27N3O=613. 22)
87	m/z= 613. 70 (C44H27N3O=613. 22)	88	m/z= 613. 70 (C44H27N3O=613. 22)
89	m/z= 689. 80 (C50H31N3O=689. 25)	90	m/z= 689. 80 (C50H31N3O=689. 25)
91	m/z= 778. 90 (C56H34N4O=78. 27)	92	m/z= 703. 78 (C50H29N3O=703. 23)
93	m/z= 536. 62 (C39H24N2O=536. 19)	94	m/z= 612. 72 (C45H28N2O=612. 22)
95	m/z= 612. 72 (C45H28N2O=612. 22)	96	m/z= 612. 72 (C45H28N2O=612. 22)
97	m/z= 688. 81 (C51H32N2O=688. 25)	98	m/z= 688. 81 (C51H32N2O=688. 25)
99	m/z= 652. 78 (C48H32N2O=652. 25)	100	m/z= 652. 78 (C48H32N2O=652. 25)
101	m/z= 536. 62 (C39H24N2O=536. 19)	102	m/z= 612. 72 (C45H28N2O=612. 22)
103	m/z= 612. 72 (C45H28N2O=612. 22)	104	m/z= 612. 72 (C45H28N2O=612. 22)
105	m/z= 688. 81 (C51H32N2O=688. 25)	106	m/z= 688. 81 (C51H32N2O=688. 25)
107	m/z= 642. 77 (C45H26N2O=642. 18)	108	m/z= 626. 70 (C45H27N2O=626. 20)
109	m/z= 563. 65 (C40H25N3O=563. 20)	110	m/z= 639. 73 (C46H29N3O=639. 23)
111	m/z= 639. 73 (C46H29N3O=639. 23)	112	m/z= 715. 84 (C52H33N3O=715. 26)
113	m/z= 715. 84 (C52H33N3O=715. 26)	114	m/z= 715. 84 (C52H33N3O=715. 26)
115	m/z= 639. 74 (C46H29N3O=639. 23)	116	m/z= 715. 84 (C52H33N3O=715. 26)
117	m/z= 664. 75 (C47H28N4O=664. 23)	118	m/z= 740. 85 (C53H32N4O=740. 26)
119	m/z= 740. 85 (C53H32N4O=740. 26)	120	m/z= 740. 85 (C53H32N4O=740. 26)
121	m/z= 816. 94 (C59H36N4O=816. 29)	122	m/z= 816. 94 (C59H36N4O=816. 29)
123	m/z= 829. 94 (C59H35N5O=829. 28)	124	m/z= 829. 94 (C59H35N5O=829. 28)
125	m/z= 729. 82 (C51H31N5O=729. 25)	126	m/z= 805. 92 (C57H35N5O=805. 28)

10

20

30

40

50

127	m/z= 702. 80 (C50H30N4O=702. 24)	128	m/z= 766. 27 (C55H34N4O=766. 27)
129	m/z= 564. 63 (C39H24N4O=564. 20)	130	m/z= 640. 73 (C45H28N4O=640. 23)
131	m/z= 640. 73 (C45H28N4O=640. 23)	132	m/z= 716. 83 (C51H32N4O=717. 26)
133	m/z= 716. 83 (C51H32N4O=717. 26)	134	m/z= 729. 82 (C51H31N5O=729. 25)
135	m/z= 729. 82 (C51H31N5O=729. 25)	136	m/z= 805. 92 (C57H35N5O=805. 28)
137	m/z= 730. 81 (C51H30N4O2=730. 81)	138	m/z= 680. 79 (C48H32N4O=680. 26)
139	m/z= 680. 79 (C48H32N4O=680. 26)	140	m/z= 680. 79 (C48H32N4O=680. 26)
141	m/z= 670. 78 (C45H26N4OS=670. 18)	142	m/z= 654. 71 (C45H26N4O2=654. 21)
143	m/z= 654. 71 (C45H26N4O2=654. 21)	144	m/z= 670. 78 (C45H26N4OS=670. 18)
145	m/z= 640. 73 (C45H2N4O=640. 23)	146	m/z= 716. 83 (C51H32N4O=716. 26)
147	m/z= 716. 83 (C51H32N4O=716. 26)	148	m/z= 792. 92 (C57H36N4O=792. 29)
149	m/z= 792. 92 (C57H36N4O=792. 29)	150	m/z= 640. 73 (C45H2N4O=640. 23)
151	m/z= 792. 92 (C57H36N4O=792. 29)	152	m/z= 792. 92 (C57H36N4O=792. 29)
153	m/z= 792. 92 (C57H36N4O=792. 29)	154	m/z= 728. 84 (C52H32N4O=728. 26)
155	m/z= 728. 84 (C52H32N4O=728. 26)	156	m/z= 804. 93 (C58H36N4O=804. 29)
157	m/z= 746. 21 (C51H30N4OS=746. 21)	158	m/z= 756. 89 (C54H36N4O=756. 29)
159	m/z= 756. 89 (C54H36N4O=756. 29)	160	m/z= 679. 81 (C49H33N3O=679. 26)
161	m/z= 746. 88 (C51H30N4OS=746. 21)	162	m/z= 730. 81 (C51H30N4O2=730. 24)
163	m/z= 730. 81 (C51H30N4O2=730. 24)	164	m/z= 669. 79 (C46H27N3OS=669. 19)
165	m/z= 640. 73 (C45H28N4O=640. 23)	166	m/z= 640. 73 (C45H28N4O=640. 23)
167	m/z= 716. 83 (C51H32N4O=717. 26)	168	m/z= 716. 83 (C51H32N4O=717. 26)
169	m/z= 716. 83 (C51H43N4O=716. 26)	170	m/z= 716. 83 (C51H32N4O=717. 26)
171	m/z= 715. 84 (C52H33N3O=715. 26)	172	m/z= 715. 84 (C52H33N3O=715. 26)
173	m/z= 640. 73 (C45H28N4O=640. 23)	174	m/z= 716. 83 (C51H32N4O=716. 26)
175	m/z= 716. 83 (C51H32N4O=716. 26)	176	m/z= 792. 92 (C57H36N4O=792. 29)
177	m/z= 756. 89 (C54H36N4O=756. 29)	178	m/z= 716. 83 (C51H32N4O=716. 26)
179	m/z= 716. 83 (C51H32N4O=716. 26)	180	m/z= 716. 83 (C51H32N4O=716. 26)
181	m/z= 792. 92 (C57H36N4O=792. 29)	182	m/z= 792. 92 (C57H36N4O=792. 29)
183	m/z= 601. 69 (C43H27N3O=601. 69)	184	m/z= 601. 69 (C43H27N3O=601. 69)
185	m/z= 677. 79 (C49H31N3O=677. 25)	186	m/z= 677. 79 (C49H31N3O=677. 25)
187	m/z= 677. 79 (C49H31N3O=677. 25)	188	m/z= 677. 79 (C49H31N3O=677. 25)
189	m/z= 753. 89 (C55H35N3O=753. 28)	190	m/z= 753. 89 (C55H35N3O=753. 28)
191	m/z= 753. 89 (C55H35N3O=753. 28)	192	m/z= 753. 89 (C55H35N3O=753. 28)

10

20

30

40

50

193	m/z= 717. 85 (C52H35N3O=717. 28)	194	m/z= 717. 85 (C52H35N3O=717. 28)
195	m/z= 707. 84 (C49H29N3O=707. 20)	196	m/z= 691. 77 (C49H29N3O=691. 23)
197	m/z= 613. 70 (C44H27N3O=613. 22)	198	m/z= 689. 80 (C50H31N3O=689. 25)
199	m/z= 689. 80 (C50H31N3O=689. 25)	200	m/z= 689. 80 (C50H31N3O=689. 25)
201	m/z= 765. 90 (C56H35N3O=765. 28)	202	m/z= 765. 90 (C56H35N3O=765. 28)
203	m/z= 729. 86 (C53H35N3O=729. 28)	204	m/z= 719. 20 (C50H29N3O=719. 20)
205	m/z= 537. 61 (C38H23N3O=537. 18)	206	m/z= 613. 70 (C44H27N3O=613. 22)
207	m/z= 613. 70 (C44H27N3O=613. 22)	208	m/z= 613. 70 (C44H27N3O=613. 22)
209	m/z= 689. 80 (C50H31N3O=689. 25)	210	m/z= 689. 80 (C50H31N3O=689. 25)
211	m/z= 702. 80 (C50H30N4O=702. 24)	212	m/z= 702. 80 (C50H30N4O=702. 24)
213	m/z= 537. 61 (C38H23N3O=537. 18)	214	m/z= 613. 70 (C44H27N3O=613. 22)
215	m/z= 613. 70 (C44H27N3O=613. 22)	216	m/z= 613. 70 (C44H27N3O=613. 22)
217	m/z= 689. 80 (C50H31N3O=689. 25)	218	m/z= 689. 80 (C50H31N3O=689. 25)
219	m/z= 778. 90 (C56H34N4O=78. 27)	220	m/z= 703. 78 (C50H29N3O=703. 23)
221	m/z= 536. 62 (C39H24N2O=536. 19)	222	m/z= 612. 72 (C45H28N2O=612. 22)
223	m/z= 612. 72 (C45H28N2O=612. 22)	224	m/z= 612. 72 (C45H28N2O=612. 22)
225	m/z= 688. 81 (C51H32N2O=688. 25)	226	m/z= 688. 81 (C51H32N2O=688. 25)
227	m/z= 652. 78 (C48H32N2O=652. 25)	228	m/z= 652. 78 (C48H32N2O=652. 25)
229	m/z= 536. 62 (C39H24N2O=536. 19)	230	m/z= 612. 72 (C45H28N2O=612. 22)
231	m/z= 612. 72 (C45H28N2O=612. 22)	232	m/z= 612. 72 (C45H28N2O=612. 22)
233	m/z= 688. 81 (C51H32N2O=688. 25)	234	m/z= 688. 81 (C51H32N2O=688. 25)
235	m/z= 642. 77 (C45H26N2O=642. 18)	236	m/z= 626. 70 (C45H27N2O=626. 20)
237	m/z= 563. 65 (C40H25N3O=563. 20)	238	m/z= 639. 73 (C46H29N3O=639. 23)
239	m/z= 639. 73 (C46H29N3O=639. 23)	240	m/z= 715. 84 (C52H33N3O=715. 26)
241	m/z= 715. 84 (C52H33N3O=715. 26)	242	m/z= 715. 84 (C52H33N3O=715. 26)
243	m/z= 639. 74 (C46H29N3O=639. 23)	244	m/z= 715. 84 (C52H33N3O=715. 26)
245	m/z= 664. 75 (C47H28N4O=664. 23)	246	m/z= 740. 85 (C53H32N4O=740. 26)
247	m/z= 740. 85 (C53H32N4O=740. 26)	248	m/z= 740. 85 (C53H32N4O=740. 26)
249	m/z= 816. 94 (C59H36N4O=816. 29)	250	m/z= 816. 94 (C59H36N4O=816. 29)
251	m/z= 829. 94 (C59H35N5O=829. 28)	252	m/z= 829. 94 (C59H35N5O=829. 28)
253	m/z= 729. 82 (C51H31N5O=729. 25)	254	m/z= 805. 92 (C57H35N5O=805. 28)
255	m/z= 702. 80 (C50H30N4O=702. 24)	256	m/z= 766. 27 (C55H34N4O=766. 27)
257	m/z= 716. 83 (C51H32N4O=716. 26)	258	m/z=654. 71 (C45H26N4O=654. 21)

10

20

30

40

50

259	m/z=730.81 (C51H30N4O2=730.24)	260	m/z=654.71 (C45H26N4O2=654.21)
261	m/z=730.81 (C51H30N4O2=730.24)	262	m/z=730.81 (C51H30N4O2=730.24)
263	m/z= 716.83 (C51H32N4O=716.26)	264	m/z=654.71 (C45H26N4O2=654.21)
265	m/z=730.81 (C51H30N4O2=730.24)	266	m/z=730.81 (C51H30N4O2=730.24)
267	m/z=746.88 (C51H30N4OS=741.21)	268	m/z=756.89 (C54H36N4O=756.29)
269	m/z=614.71 (C43H26N4O=614.21)	270	m/z=664.77 (C47H28N4O=664.23)
271	m/z=729.84 (C51H31N5O=729.25)	272	m/z=729.84 (C51H31N5O=729.25)
273	m/z=654.73 (C45H26N4O2=654.21)	274	m/z=670.79 (C45H26N4OS=670.18)
275	m/z=779.90 (C55H33N5O=779.27)	276	m/z=829.96 (C59H35N5O=829.28)
277	m/z=704.79 (C49H28N4O2=704.22)	278	m/z=720.85 (C49H28N4OS=720.20)
279	m/z=754.85 (C53H30N4O2=754.24)	280	m/z=770.91 (C53H30N4OS=770.21)
281	m/z=693.82 (C48H27N3OS=693.19)	282	m/z=758.90 (C52H30N4OS=758.21)
283	m/z=799.97 (C54H29N3OS2=799.18)	284	m/z=783.90 (C54H29N3OS2=783.20)
285	m/z= 716.83 (C51H32N4O=717.26)	286	m/z= 716.83 (C51H32N4O=717.26)
2-1	m/z= 484.19 (C36H24N2=484.60)	2-2	m/z= 560.23 (C42H28N2=560.70)
2-3	m/z= 560.23 (C42H28N2=560.70)	2-4	m/z= 560.23 (C42H28N2=560.70)
2-5	m/z= 636.26 (C48H32N2=636.80)	2-6	m/z= 636.26 (C48H32N2=636.80)
2-7	m/z= 636.26 (C48H32N2=636.80)	2-8	m/z= 534.21 (C40H26N2=534.66)
2-9	m/z= 534.21 (C40H26N2=534.66)	2-10	m/z= 600.26 (C45H32N2=600.76)
2-11	m/z= 600.26 (C45H32N2=600.76)	2-12	m/z= 724.29 (C55H36N2=724.91)
2-13	m/z= 724.29 (C55H36N2=724.91)	2-14	m/z= 722.27 (C55H34N2=722.89)
2-15	m/z= 722.27 (C55H34N2=722.89)	2-16	m/z= 634.24 (C48H30N2=634.78)
2-17	m/z= 509.19 (C37H23N3=509.61)	2-18	m/z= 742.28 (C54H38N2Si=743.00)
2-19	m/z= 636.26 (C48H32N2=636.80)	2-20	m/z= 636.26 (C48H32N2=636.80)
2-21	m/z= 636.26 (C48H32N2=636.80)	2-22	m/z= 712.29 (C54H36N2=712.90)
2-23	m/z= 712.29 (C54H36N2=712.90)	2-24	m/z= 712.29 (C54H36N2=712.90)
2-25	m/z= 610.24 (C46H30N2=610.76)	2-26	m/z= 610.24 (C46H30N2=610.76)
2-27	m/z= 676.29 (C51H36N2=676.86)	2-28	m/z= 710.27 (C54H34N2=710.88)
2-29	m/z= 585.22 (C43H27N3=585.71)	2-30	m/z= 818.31 (C60H42N2Si=819.10)
2-31	m/z= 636.26 (C48H32N2=636.80)	2-32	m/z= 636.26 (C48H32N2=636.80)
2-33	m/z= 712.29 (C54H36N2=712.90)	2-34	m/z= 712.29 (C54H36N2=712.90)
2-35	m/z= 712.29 (C54H36N2=712.90)	2-36	m/z= 610.24 (C46H30N2=610.76)
2-37	m/z= 610.24 (C46H30N2=610.76)	2-38	m/z= 676.29 (C51H36N2=676.86)
2-39	m/z= 710.27 (C54H34N2=710.88)	2-40	m/z= 585.22 (C43H27N3=585.71)

10

20

30

40

50

2-41	m/z= 818. 31 (C ₆₀ H ₄₂ N ₂ Si=819. 10)	2-42	m/z= 636. 26 (C ₄₈ H ₃₂ N ₂ =636. 80)
2-43	m/z= 712. 29 (C ₅₄ H ₃₆ N ₂ =712. 90)	2-44	m/z= 712. 29 (C ₅₄ H ₃₆ N ₂ =712. 90)
2-45	m/z= 712. 29 (C ₅₄ H ₃₆ N ₂ =712. 90)	2-46	m/z= 610. 24 (C ₄₆ H ₃₀ N ₂ =610. 76)
2-47	m/z= 610. 24 (C ₄₆ H ₃₀ N ₂ =610. 76)	2-48	m/z= 676. 29 (C ₅₁ H ₃₆ N ₂ =676. 86)
2-49	m/z= 710. 27 (C ₅₄ H ₃₄ N ₂ =710. 88)	2-50	m/z= 585. 22 (C ₄₃ H ₂₇ N ₃ =585. 71)
2-51	m/z= 818. 31 (C ₆₀ H ₄₂ N ₂ Si=819. 10)	2-52	m/z= 788. 32 (C ₆₀ H ₄₀ N ₂ =788. 99)
2-53	m/z= 788. 32 (C ₆₀ H ₄₀ N ₂ =788. 99)	2-54	m/z= 788. 32 (C ₆₀ H ₄₀ N ₂ =788. 99)
2-55	m/z= 686. 27 (C ₅₂ H ₃₄ N ₂ =686. 86)	2-56	m/z= 686. 27 (C ₅₂ H ₃₄ N ₂ =686. 86)
2-57	m/z= 752. 32 (C ₅₇ H ₄₀ N ₂ =752. 96)	2-58	m/z= 786. 30 (C ₆₀ H ₃₈ N ₂ =786. 98)
2-59	m/z= 661. 25 (C ₄₉ H ₃₁ N ₃ =661. 81)	2-60	m/z= 894. 34 (C ₆₆ H ₄₆ N ₂ Si=895. 19)
2-61	m/z= 788. 32 (C ₆₀ H ₄₀ N ₂ =788. 99)	2-62	m/z= 788. 32 (C ₆₀ H ₄₀ N ₂ =788. 99)
2-63	m/z= 686. 27 (C ₅₂ H ₃₄ N ₂ =686. 86)	2-64	m/z= 686. 27 (C ₅₂ H ₃₄ N ₂ =686. 86)
2-65	m/z= 752. 32 (C ₅₇ H ₄₀ N ₂ =752. 96)	2-66	m/z= 786. 30 (C ₆₀ H ₃₈ N ₂ =786. 98)
2-67	m/z= 661. 25 (C ₄₉ H ₃₁ N ₃ =661. 81)	2-68	m/z= 894. 34 (C ₆₆ H ₄₆ N ₂ Si=895. 19)
2-69	m/z= 788. 32 (C ₆₀ H ₄₀ N ₂ =788. 99)	2-70	m/z= 686. 27 (C ₅₂ H ₃₄ N ₂ =686. 86)
2-71	m/z= 686. 27 (C ₅₂ H ₃₄ N ₂ =686. 86)	2-72	m/z= 752. 32 (C ₅₇ H ₄₀ N ₂ =752. 96)
2-73	m/z= 786. 30 (C ₆₀ H ₃₈ N ₂ =786. 98)	2-74	m/z= 661. 25 (C ₄₉ H ₃₁ N ₃ =661. 81)
2-75	m/z= 894. 34 (C ₆₆ H ₄₆ N ₂ Si=895. 19)	2-76	m/z= 584. 23 (C ₄₄ H ₂₈ N ₂ =584. 72)
2-77	m/z= 584. 23 (C ₄₄ H ₂₈ N ₂ =584. 72)	2-78	m/z= 650. 27 (C ₄₉ H ₃₄ N ₂ =650. 83)
2-79	m/z= 684. 26 (C ₅₂ H ₃₂ N ₂ =684. 84)	2-80	m/z= 559. 20 (C ₄₁ H ₂₅ N ₃ =559. 67)
2-81	m/z= 792. 30 (C ₅₈ H ₄₀ N ₂ Si=793. 06)	2-82	m/z= 584. 23 (C ₄₄ H ₂₈ N ₂ =584. 72)
2-83	m/z= 650. 27 (C ₄₉ H ₃₄ N ₂ =650. 83)	2-84	m/z= 684. 26 (C ₅₂ H ₃₂ N ₂ =684. 84)
2-85	m/z= 559. 20 (C ₄₁ H ₂₅ N ₃ =559. 67)	2-86	m/z= 792. 30 (C ₅₈ H ₄₀ N ₂ Si=793. 06)
2-87	m/z= 716. 32 (C ₅₄ H ₄₀ N ₂ =716. 93)	2-88	m/z= 750. 30 (C ₅₇ H ₃₈ N ₂ =750. 94)
2-89	m/z= 625. 25 (C ₄₆ H ₃₁ N ₃ =625. 77)	2-90	m/z= 858. 34 (C ₆₃ H ₄₆ N ₂ Si=859. 16)
2-91	m/z= 784. 29 (C ₆₀ H ₃₆ N ₂ =784. 96)	2-92	m/z= 659. 24 (C ₄₉ H ₂₉ N ₃ =659. 79)
2-93	m/z= 892. 33 (C ₆₆ H ₄₄ N ₂ Si=893. 18)	2-94	m/z= 534. 18 (C ₃₈ H ₂₂ N ₄ =534. 62)
2-95	m/z= 767. 28 (C ₅₅ H ₃₇ N ₃ Si=768. 01)	2-96	m/z= 1000. 37 (C ₇₂ H ₅₂ N ₂ Si ₂ =1001. 39)
2-97	m/z=712. 88 (C ₅₄ H ₃₆ N ₂ =712. 29)		

10

20

30

40

【表 17】

[表 17]

化合物	^1H NMR(CDCl ₃ , 200Mz)
18	δ = 8.52 (1H, d), 8.28~8.24 (3H, m), 8.12 (1H, d), 7.94~7.89 (2H, d), 7.75~7.70 (2H, m), 7.62~7.25 (19H, m)
19	δ = 8.53 (1H, d), 8.28~8.18 (4H, m), 7.94~7.89 (2H, q), 7.79~7.70 (3H, m), 7.62~7.25 (22H, m)
131	δ = 8.55 (1H, d), 8.28 (4H, d), 7.94~7.87 (3H, m), 7.77~7.73 (5H, m), 7.52~7.25 (15H, m)
133	δ = 8.28 (4H, d), 8.18 (1H, d), 8.0 (1H, d), 7.89~7.87 (2H, t), 7.77~7.73 (5H, m), 7.62 (1H, m), 7.52~7.41 (18H, m)
135	δ = 8.55 (1H, d), 8.28 (4H, m), 8.12 (1H, d), 7.94~7.89 (2H, m), 7.75~7.73 (2H, d), 7.63~7.25 (21H, m)
138	δ = 8.39 (1H, d), 8.28 (4H, d), 8.12~8.09 (2H, t), 7.89 (1H, d), 7.75~7.61 (6H, m), 7.51~7.41 (10H, m)
147	δ = 8.55 (1H, d), 8.28~8.24 (3H, m), 7.94~7.87 (3H, m), 7.73~7.25 (25H, m)
150	δ = 8.55 (1H, d), 8.28 (2H, d), 8.12 (1H, d), 7.94~7.85 (4H, m), 7.75~7.73 (2H, d), 7.63~7.62 (2H, d), 7.52~7.25 (16H, m)
264	δ = 8.55 (1H, d), 8.28 (2H, d), 8.12 (1H, d), 7.94~7.25 (22H, m)
265	δ = 8.28 (2H, m), 8.18~8.12 (2H, m), 8.00 (1H, d), 7.89~7.73 (7H, m), 7.66~7.62 (3H, m), 7.51~7.29 (15H, m)
271	δ = 8.55 (2H, d), 8.36 (4H, t), 7.98~7.94 (3H, m), 7.82 (1H, d), 7.69~7.50 (15H, m), 7.35 (2H, t), 7.26~7.25 (2H, d), 7.16 (2H, t)
285	δ = 8.55 (1H, d), 8.28 (2H, d), 8.18 (1H, d), 7.94~7.73 (7H, m), 7.62 (2H, d), 7.52~7.25 (19H, m)
286	δ = 8.55 (1H, d), 8.28 (2H, d), 7.94~7.85 (5H, m), 7.77~7.69 (3H, m), 7.62 (1H, d), 7.51~7.25 (20H, m)
2-4	δ = 8.55 (1H, d), 8.30 (1H, d), 8.19~8.13 (2H, m), 7.99~7.89 (8H, m), 7.77~7.75 (3H, m), 7.62~7.35 (11H, m), 7.20~7.16 (2H, m)
2-7	δ = 8.55 (1H, d), 8.31~8.30 (3H, d), 8.19~8.13 (2H, m), 7.99~7.89 (5H, m), 7.77~7.75 (5H, m), 7.62~7.35 (14H, m), 7.20~7.16 (2H, m)
2-16	δ = 8.93~8.90 (3H, d), 8.55 (1H, d), 8.18~8.10 (5H, m), 8.00~7.77 (10H, m), 7.58~7.45 (8H, m), 7.33~7.29 (2H, m)

10

20

30

40

50

2-31	$\delta = 8.55(1\text{H}, d), 8.30(1\text{H}, d), 8.21\sim 8.13(4\text{H}, m), 7.99\sim 7.89(4\text{H}, m), 7.77\sim 7.35(20\text{H}, m), 7.20\sim 7.16(2\text{H}, m)$
2-42	$\delta = 8.55 (1\text{H}, d), 8.18\sim 8.12 (2\text{H}, m), 8.00\sim 7.87 (3\text{H}, m), 7.79\sim 7.77(6\text{H}, m), 7.69\sim 7.63 (6\text{H}, m), 7.52\sim 7.25 (14\text{H}, m)$
2-97	$\delta = 8.55 (1\text{H}, d), 8.18\sim 8.09 (3\text{H}, m), 8.00\sim 7.94 (2\text{H}, m), 7.87(1\text{H}, d), 7.79\sim 7.77 (4\text{H}, m), 7.57\sim 7.29 (25\text{H}, m)$

10

【 0 1 1 6 】

< 実験例 1 > 有機発光素子の作製

1, 500 の厚さにITOが薄膜コーティングされたガラス基板を蒸留水超音波洗浄した。蒸留水洗浄が終わると、アセトン、メタノール、イソプロピルアルコールなどの溶剤で超音波洗浄をし乾燥させた後、UV洗浄機でUVを用いて5分間UV処理した。この後、基板をプラズマ洗浄機(PT)に搬送させた後、真空状態でITOの仕事関数および残膜除去のためにプラズマ処理をして、有機蒸着用熱蒸着装置に搬送した。

前記ITO透明電極(陽極)上に、共通層の正孔注入層2-TNATA(4, 4', 4''', -Triis[2-naphthyl(phenyl)amino]triphenylamine)および正孔輸送層NPB(N, N'-Di(1-naphthyl)-N, N''-diphenyl-(1, 1''-biphenyl)-4, 4'''-diamine)を形成させた。

20

その上に、発光層を次のように熱真空蒸着させた。発光層は、ホストとして化学式1に記載の化合物1種と化学式2に記載の化合物1種をそれぞれの個別的な供給源で400蒸着し、緑色燐光ドーパントはIr(ppy)₃を7%ドーピングして蒸着した。この後、正孔阻止層としてBCPを60蒸着し、その上に、電子輸送層としてAlq₃を200蒸着した。最後に、電子輸送層上に、リチウムフルオライド(lithium fluoride: LiF)を10の厚さに蒸着して電子注入層を形成した後、電子注入層上に、アルミニウム(Al)陰極を1, 200の厚さに蒸着して陰極を形成することにより、有機電界発光素子を製造した。

30

一方、OLED素子の作製に必要なすべての有機化合物は、材料ごとに、それぞれ10⁻⁶~10⁻⁸ torr下で真空昇華精製して、OLEDの作製に使用した。

【 0 1 1 7 】

< 実験例 2 > 有機発光素子の作製

1, 500 の厚さにITOが薄膜コーティングされたガラス基板を蒸留水超音波洗浄した。蒸留水洗浄が終わると、アセトン、メタノール、イソプロピルアルコールなどの溶剤で超音波洗浄をし乾燥させた後、UV洗浄機でUVを用いて5分間UV処理した。この後、基板をプラズマ洗浄機(PT)に搬送させた後、真空状態でITOの仕事関数および残膜除去のためにプラズマ処理をして、有機蒸着用熱蒸着装置に搬送した。

前記ITO透明電極(陽極)上に、共通層の正孔注入層2-TNATA(4, 4', 4''', -Triis[2-naphthyl(phenyl)amino]triphenylamine)および正孔輸送層NPB(N, N'-Di(1-naphthyl)-N, N''-diphenyl-(1, 1''-biphenyl)-4, 4'''-diamine)を形成させた。

40

その上に、発光層を次のように熱真空蒸着させた。発光層は、ホストとして化学式1に記載の化合物1種と化学式2に記載の化合物1種を予備混合後、1つの供源で400蒸着し、緑色燐光ドーパントはIr(ppy)₃を7%ドーピングして蒸着した。この後、正孔阻止層としてBCPを60蒸着し、その上に、電子輸送層としてAlq₃を200蒸着した。最後に、電子輸送層上に、リチウムフルオライド(lithium fluoride: LiF)を10の厚さに蒸着して電子注入層を形成した後、電子注入層上

50

にアルミニウム（Ａ１）陰極を１，２００の厚さに蒸着して陰極を形成することにより、有機電界発光素子を製造した。

一方、ＯＬＥＤ素子の作製に必要なすべての有機化合物は、材料ごとに、それぞれ $10^{-6} \sim 10^{-8}$ torr 下で真空昇華精製して、ＯＬＥＤの作製に使用した。

前記実験例１および実験例２による有機電界発光素子の駆動電圧および発光効率は、下記表１９および表２０の通りである。

【０１１８】

前記のように作製された有機電界発光素子に対して、マックスサイエンス社のＭ７０００で電界発光（ＥＬ）特性を測定し、その測定結果をもってマックスサイエンス社製の寿命装備測定装置（Ｍ６０００）により、基準輝度が $6,000 \text{ cd/m}^2$ の時、 T_{90} を測定した。

本発明の有機電界発光素子の特性は、下記表１９および２０の通りである。下記表１９は、実験例１の２つのホスト化合物を個別的な供給源として同時蒸着した例であり、下記表２０は、実験例２の２つの発光層化合物をpre-mixedして予備混合後、１つの供給源として蒸着した例であり、下記表１８は、実験例１において単一ホスト物質を適用した例である。

【０１１９】

【表１８】

[表 18]

	発光層 化合物	駆動電圧 (V)	効率 (cd/A)	色座標 (x, y)	寿命 (T_{90})
比較例1	17	3.92	78.2	(0.276, 0.672)	147
比較例2	18	3.75	71.3	(0.278, 0.673)	173
比較例3	131	3.81	62.9	(0.283, 0.673)	155
比較例4	133	3.99	70.6	(0.274, 0.679)	169
比較例5	135	3.82	72.4	(0.272, 0.676)	168
比較例6	138	3.72	73.6	(0.273, 0.675)	174
比較例7	147	4.43	63.4	(0.283, 0.677)	132
比較例8	150	3.89	75.9	(0.284, 0.676)	142
比較例9	264	3.94	70.2	(0.273, 0.678)	154
比較例10	265	3.99	74.2	(0.274, 0.672)	166
比較例11	271	4.02	72.3	(0.275, 0.680)	146
比較例12	285	3.71	80.4	(0.274, 0.677)	180
比較例13	286	3.81	79.3	(0.275, 0.678)	178

【０１２０】

【表 19】

[表 19]

	発光層 化合物	比率	駆動電圧 (V)	効率 (cd/A)	色座標 (x, y)	寿命 (T ₉₀)
実施例1	17 : 2-42	1 : 8	4.72	99.4	(0.277, 0.684)	321
実施例2		1 : 5	4.43	101.1	(0.278, 0.683)	354
実施例3		1 : 2	3.36	104.3	(0.278, 0.678)	510
実施例4		1 : 1	3.42	111.4	(0.277, 0.678)	467
実施例5		2 : 1	3.59	113.2	(0.275, 0.675)	401
実施例6		5 : 1	4.42	100.8	(0.276, 0.678)	362
実施例7		8 : 1	4.87	102.7	(0.276, 0.678)	365
実施例8	19 : 2-4	1 : 2	3.53	103.1	(0.278, 0.677)	520
実施例9		1 : 1	3.47	110.3	(0.278, 0.679)	454
実施例10	131 : 2-7	1 : 2	3.43	103.5	(0.276, 0.679)	481
実施例11		1 : 1	3.66	112.6	(0.276, 0.680)	543
実施例12	18 : 2-16	1 : 2	3.38	105.3	(0.281, 0.676)	560
実施例13		1 : 1	3.39	115.3	(0.280, 0.676)	500
実施例14	133 : 2-16	1 : 2	3.56	102.8	(0.276, 0.678)	532
実施例15		1 : 1	3.58	116.6	(0.277, 0.677)	499
実施例16	135 : 2-16	1 : 2	3.42	108.4	(0.277, 0.679)	581
実施例17		1 : 1	3.38	119.5	(0.278, 0.678)	532
実施例18	138 : 2-7	1 : 2	3.72	103.4	(0.277, 0.680)	592
実施例19		1 : 1	3.89	115.6	(0.277, 0.679)	552
実施例20	147 : 2-16	1 : 2	3.63	100.7	(0.276, 0.678)	521
実施例21		1 : 1	3.68	109.6	(0.276, 0.678)	487
実施例22	150 : 2-7	1 : 2	3.53	106.7	(0.276, 0.680)	520
実施例23		1 : 1	3.50	112.8	(0.279, 0.681)	489
実施例24	264 : 2-31	1 : 2	3.46	110.5	(0.277, 0.678)	544
実施例25		1 : 1	3.43	118.7	(0.276, 0.677)	501
実施例26	265 : 2-97	1 : 2	3.22	113.8	(0.278, 0.680)	603
実施例27		1 : 1	3.24	120.3	(0.279, 0.681)	559
実施例28	271 : 2-31	1 : 2	3.45	105.3	(0.275, 0.682)	541
実施例29		1 : 1	3.44	115.4	(0.275, 0.680)	477
実施例30	285 : 2-16	1 : 2	3.03	114.4	(0.278, 0.679)	680
実施例31		1 : 1	3.08	123.3	(0.279, 0.678)	552
実施例32	286 : 2-16	1 : 2	3.12	114.8	(0.276, 0.677)	660
実施例33		1 : 1	3.16	120.6	(0.277, 0.675)	541

10

20

30

40

【表 20】

[表 20]

実施例34	19 : 2-4	1 : 2	3.58	103.7	(0.277, 0.677)	517
実施例35		1 : 1	3.46	110.6	(0.276, 0.675)	453
実施例36	135 : 2-16	1 : 2	3.45	108.4	(0.277, 0.676)	584
実施例37		1 : 1	3.37	119.3	(0.279, 0.679)	531
実施例38	264 : 2-31	1 : 2	3.42	110.1	(0.276, 0.676)	540
実施例39		1 : 1	3.41	118.6	(0.275, 0.676)	507
実施例 40	285 : 2-16	1 : 2	3.10	114.8	(0.279, 0.678)	684
実施例 41		1 : 1	3.09	123.4	(0.279, 0.677)	549

10

【0122】

前記化学式1の化合物および前記化学式2の化合物を同時に有機発光素子の有機物層に含む場合、より優れた効率および寿命効果を示す。この結果は、2つの化合物を同時に含む場合、エキシプレックス(exci-plex)現象が起こることを予想することができる。

前記エキシプレックス(exci-plex)現象は、2つの分子間の電子交換によりdonor(p-host)のHOMO level、acceptor(n-host)LUMO level大きさのエネルギーを放出する現象である。2つの分子間のエキシプレックス(exci-plex)現象が起こると、Reverse Intersystem Crossing(RISC)が起こり、これによって蛍光の内部量子効率が100%まで上昇できる。正孔輸送能力が良いdonor(p-host)と電子輸送能力が良いacceptor(n-host)が発光層のホストとして用いられる場合、正孔はp-hostに注入され、電子はn-hostに注入されるため、駆動電圧を低下させることができ、それによって寿命向上に役立つことができる。

20

【符号の説明】

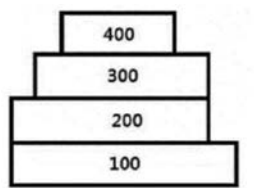
30

【0123】

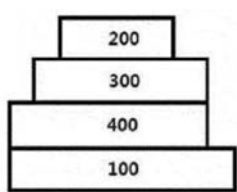
- 100 : 基板
- 200 : 陽極
- 300 : 有機物層
- 301 : 正孔注入層
- 302 : 正孔輸送層
- 303 : 発光層
- 304 : 正孔阻止層
- 305 : 電子輸送層
- 306 : 電子注入層
- 400 : 陰極

40

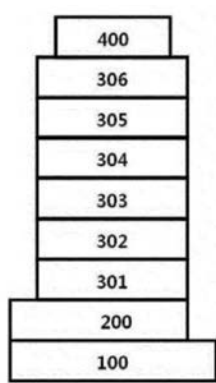
【 図 1 】



【 図 2 】



【 図 3 】



【 国際調査報告 】

INTERNATIONAL SEARCH REPORT

International application No.

PCT/KR2018/003534

A. CLASSIFICATION OF SUBJECT MATTER <i>C07D 405/14(2006.01); C07D 487/04(2006.01); C07D 495/04(2006.01); C09K 11/06(2006.01); H01L 51/00(2006.01); H01L 51/50(2006.01);</i> According to International Patent Classification (IPC) or to both national classification and IPC		
B. FIELDS SEARCHED Minimum documentation searched (classification system followed by classification symbols) C07D 405/14; C07D 403/14; C07D 409/14; H01L 51/00; H01L 51/50; C09K 11/06; C07D 401/14; H05B 33/20; C07D 487/04; C07D 495/04 Documentation searched other than minimum documentation to the extent that such documents are included in the fields searched Korean Utility models and applications for Utility models: IPC as above Japanese Utility models and applications for Utility models: IPC as above Electronic data base consulted during the international search (name of data base and, where practicable, search terms used) eKOMPASS (KIPO internal), STN (Registry, Caplus) & Keywords: carbazol-dibenzofuran, biscalbazol, pre-mixed, life, efficiency, organic light-emitting element		
C. DOCUMENTS CONSIDERED TO BE RELEVANT		
Category*	Citation of document, with indication, where appropriate, of the relevant passages	Relevant to claim No.
X	KR 10-2012-0057561 A (IDEMITSU KOSAN CO., LTD.) 05 June 2012 See claims 13, 15; tables 7, 10-12; and paragraphs [1090]-[1094], [1118].	1-17
X	US 2016-0149139 A1 (UNIVERSAL DISPLAY CORPORATION) 26 May 2016 See abstract; claims 28-29; page 238, right column, compound of second line; page 240, right column, compound of first line; and page 257, compound of second line.	1-17
A	JP 2016-225498 A (KONICA MINOLTA INC.) 28 December 2016 See paragraphs [0124]-[0133].	1-17
A	JP 2016-149473 A (KONICA MINOLTA INC.) 18 August 2016 See paragraph [0141].	1-17
A	WO 2016-015810 A1 (MERCK PATENT GMBH.) 04 February 2016 See claim 1; and pages 52-56, the compounds.	1-17
☐ Further documents are listed in the continuation of Box C. ☒ See patent family annex.		
* Special categories of cited documents: "A" document defining the general state of the art which is not considered to be of particular relevance "E" earlier application or patent but published on or after the international filing date "I" document which may throw doubts on priority claim(s) or which is cited to establish the publication date of another citation or other special reason (as specified) "O" document referring to an oral disclosure, use, exhibition or other means "P" document published prior to the international filing date but later than the priority date claimed "T" later document published after the international filing date or priority date and not in conflict with the application but cited to understand the principle or theory underlying the invention "X" document of particular relevance; the claimed invention cannot be considered novel or cannot be considered to involve an inventive step when the document is taken alone "Y" document of particular relevance; the claimed invention cannot be considered to involve an inventive step when the document is combined with one or more other such documents, such combination being obvious to a person skilled in the art "&" document member of the same patent family		
Date of the actual completion of the international search 24 JULY 2018 (24.07.2018)		Date of mailing of the international search report 25 JULY 2018 (25.07.2018)
Name and mailing address of the ISA/KR  Korean Intellectual Property Office Government Complex-Daejeon, 189 Seonsa-ro, Daejeon 302-701, Republic of Korea Facsimile No. +82-42-481-8578		Authorized officer Telephone No.

INTERNATIONAL SEARCH REPORT
Information on patent family members

International application No.

PCT/KR2018/003534

Patent document cited in search report	Publication date	Patent family member	Publication date
KR 10-2012-0057561 A	05/06/2012	CN 102421772 A	18/04/2012
		CN 102421772 B	25/11/2015
		CN 102439004 A	02/05/2012
		CN 104592206 A	06/05/2015
		EP 2415769 A1	08/02/2012
		EP 2415769 A4	13/02/2013
		EP 2415769 B1	28/10/2015
		EP 2423209 A1	29/02/2012
		EP 2423209 A4	13/02/2013
		EP 2423209 B1	05/08/2015
		JP 2013-030781 A	07/02/2013
		JP 2014-040423 A	06/03/2014
		JP 5074627 B2	14/11/2012
		JP 5390728 B1	18/10/2013
		JP 5405630 B2	05/02/2014
		JP 5562970 B2	30/07/2014
		KR 10-1421365 B1	18/07/2014
		KR 10-1441177 B1	17/09/2014
		KR 10-2012-0034648 A	12/04/2012
		KR 10-2012-0127746 A	23/11/2012
		TW 201141989 A	01/12/2011
		TW 201141990 A	01/12/2011
		TW 1477580 B	21/03/2015
		US 2011-0278555 A1	17/11/2011
		US 2011-0279020 A1	17/11/2011
		US 2012-0138911 A1	07/06/2012
		US 2012-0138912 A1	07/06/2012
		US 2015-0008423 A1	08/01/2015
		US 2015-0228912 A1	13/08/2015
		US 8652654 B2	18/02/2014
		US 8865323 B2	21/10/2014
		US 8877352 B2	04/11/2014
		US 8940414 B2	27/01/2015
		WO 2011-132683 A1	27/10/2011
		WO 2011-132684 A1	27/10/2011
US 2016-0149139 A1	26/05/2016	NONE	
JP 2016-225498 A	28/12/2016	NONE	
JP 2016-149473 A	18/08/2016	CN 107250132 A	13/10/2017
		EP 3257850 A1	20/12/2017
		EP 3257850 A4	20/12/2017
		JP 5831654 B1	06/11/2015
		KR 10-2017-0102000 A	06/09/2017
		US 2018-037546 A1	08/02/2018
WO 2016-015810 A1	04/02/2016	WO 2016-129672 A1	18/08/2016
		CN 106661006 A	10/05/2017

INTERNATIONAL SEARCH REPORT
Information on patent family members

International application No.

PCT/KR2018/003534

Patent document cited in search report	Publication date	Patent family member	Publication date
		EP 3174954 A1	07/06/2017
		JP 2017-524707 A	31/08/2017
		KR 10-2017-0039209 A	10/04/2017
		TW 201619152 A	01/06/2016
		US 2017-0207399 A1	20/07/2017

국제조사보고서

국제출원번호

PCT/KR2018/003534

A. 발명이 속하는 기술분류(국제특허분류(IPC)) C07D 405/14(2006.01)i, C07D 487/04(2006.01)i, C07D 495/04(2006.01)i, C09K 11/06(2006.01)i, H01L 51/00(2006.01)i, H01L 51/50(2006.01)i		
B. 조사된 분야 조사된 최소문헌(국제특허분류를 기재) C07D 405/14; C07D 403/14; C07D 409/14; H01L 51/00; H01L 51/50; C09K 11/06; C07D 401/14; H05B 33/20; C07D 487/04; C07D 495/04 조사된 기술분야에 속하는 최소문헌 이외의 문헌 한국등록실용신안공보 및 한국공개실용신안공보: 조사된 최소문헌란에 기재된 IPC 일본등록실용신안공보 및 일본공개실용신안공보: 조사된 최소문헌란에 기재된 IPC		
국제조사에 이용된 전산 데이터베이스(데이터베이스의 명칭 및 검색어(해당하는 경우)) eKOMPASS(특허청 내부 검색시스템), STN (Registry, Caplus) & 키워드: 카르바졸-디벤조퓨란, 비스 카르바졸, 예비혼합 (pre-mixed), 수명, 효율, 유기발광소자		
C. 관련 문헌		
카테고리*	인용문헌명 및 관련 구절(해당하는 경우)의 기재	관련 청구항
X	KR 10-2012-0057561 A (이데미쓰 고산 가부시키가이샤) 2012.06.05 청구항 13, 15; 표 7, 10-12; 및 단락 [1090]-[1094], [1118] 참조.	1-17
X	US 2016-0149139 A1 (UNIVERSAL DISPLAY CORPORATION) 2016.05.26 요약; 청구항 28-29; 페이지 238, 오른쪽 컬럼, 2번째줄 화합물; 페이지 240, 오른쪽 컬럼, 1번째줄 화합물; 및 페이지 257, 2번째줄 화합물 참조.	1-17
A	JP 2016-225498 A (KONICA MINOLTA INC.) 2016.12.28 단락 [0124]-[0133] 참조.	1-17
A	JP 2016-149473 A (KONICA MINOLTA INC) 2016.08.18 단락 [0141] 참조.	1-17
A	WO 2016-015810 A1 (MERCK PATENT GMBH) 2016.02.04 청구항 1; 및 페이지 52-56, 화합물 참조.	1-17
☐ 추가 문헌이 C(계속)에 기재되어 있습니다. ☒ 대응특허에 관한 별지를 참조하십시오.		
* 인용된 문헌의 특별 카테고리: “A” 특별히 관련이 없는 것으로 보이는 일반적인 기술수준을 정의한 문헌 “E” 국제출원일보다 빠른 출원일 또는 우선일을 가지나 국제출원일 이후에 공개된 선출원 또는 특허 문헌 “L” 우선권 주장에 의문을 제기하는 문헌 또는 다른 인용문헌의 공개일 또는 다른 특별한 이유(이유를 명시)를 밝히기 위하여 인용된 문헌 “O” 구두 개시, 사용, 전시 또는 기타 수단을 언급하고 있는 문헌 “P” 우선일 이후에 공개되었으나 국제출원일 이전에 공개된 문헌 “T” 국제출원일 또는 우선일 후에 공개된 문헌으로, 출원과 상충하지 않으며 발명의 기초가 되는 원리나 이론을 이해하기 위해 인용된 문헌 “X” 특별한 관련이 있는 문헌. 해당 문헌 하나만으로 청구된 발명의 신규성 또는 진보성이 없는 것으로 본다. “Y” 특별한 관련이 있는 문헌. 해당 문헌이 하나 이상의 다른 문헌과 조합하는 경우로 그 조합이 당업자에게 자명한 경우 청구된 발명은 진보성이 없는 것으로 본다. “&” 동일한 대응특허문헌에 속하는 문헌		
국제조사의 실제 완료일 2018년 07월 24일 (24.07.2018)		국제조사보고서 발송일 2018년 07월 25일 (25.07.2018)
ISA/KR의 명칭 및 우편주소 대한민국 특허청 (35208) 대전광역시 서구 청사로 189, 4동 (둔산동, 정부대전청사) 팩스 번호 +82-42-481-8578		심사관 감유림 전화번호 +82-42-481-3516

서식 PCT/ISA/210 (두 번째 용지) (2015년 1월)

국제조사보고서
대응특허에 관한 정보

국제출원번호
PCT/KR2018/003534

국제조사보고서에서 인용된 특허문헌	공개일	대응특허문헌	공개일
KR 10-2012-0057561 A	2012/06/05	CN 102421772 A CN 102421772 B CN 102439004 A CN 104592206 A EP 2415769 A1 EP 2415769 A4 EP 2415769 B1 EP 2423209 A1 EP 2423209 A4 EP 2423209 B1 JP 2013-030781 A JP 2014-040423 A JP 5074627 B2 JP 5390728 B1 JP 5405630 B2 JP 5562970 B2 KR 10-1421365 B1 KR 10-1441177 B1 KR 10-2012-0034648 A KR 10-2012-0127746 A TW 201141989 A TW 201141990 A TW I477580 B US 2011-0278555 A1 US 2011-0279020 A1 US 2012-0138911 A1 US 2012-0138912 A1 US 2015-0008423 A1 US 2015-0228912 A1 US 8652654 B2 US 8865323 B2 US 8877352 B2 US 8940414 B2 WO 2011-132683 A1 WO 2011-132684 A1	2012/04/18 2015/11/25 2012/05/02 2015/05/06 2012/02/08 2013/02/13 2015/10/28 2012/02/29 2013/02/13 2015/08/05 2013/02/07 2014/03/06 2012/11/14 2013/10/18 2014/02/05 2014/07/30 2014/07/18 2014/09/17 2012/04/12 2012/11/23 2011/12/01 2011/12/01 2015/03/21 2011/11/17 2011/11/17 2012/06/07 2012/06/07 2015/01/08 2015/08/13 2014/02/18 2014/10/21 2014/11/04 2015/01/27 2011/10/27 2011/10/27
US 2016-0149139 A1	2016/05/26	없음	
JP 2016-225498 A	2016/12/28	없음	
JP 2016-149473 A	2016/08/18	CN 107250132 A EP 3257850 A1 EP 3257850 A4 JP 5831654 B1 KR 10-2017-0102000 A US 2018-037546 A1 WO 2016-129672 A1	2017/10/13 2017/12/20 2017/12/20 2015/11/06 2017/09/06 2018/02/08 2016/08/18
WO 2016-015810 A1	2016/02/04	CN 106661006 A	2017/05/10

서식 PCT/ISA/210 (대응특허 추가용지) (2015년 1월)

국제조사보고서
대응특허에 관한 정보

국제출원번호
PCT/KR2018/003534

국제조사보고서에서 인용된 특허문헌	공개일	대응특허문헌	공개일
		EP 3174954 A1	2017/06/07
		JP 2017-524707 A	2017/08/31
		KR 10-2017-0039209 A	2017/04/10
		TW 201619152 A	2016/06/01
		US 2017-0207399 A1	2017/07/20

フロントページの続き

(51) Int.Cl.		F I	テーマコード (参考)
C 0 7 D 495/04	(2006.01)	C 0 7 D 491/048	
C 0 7 D 409/14	(2006.01)	C 0 7 D 495/04	1 0 3
C 0 7 D 209/88	(2006.01)	C 0 7 D 409/14	
C 0 9 K 11/06	(2006.01)	C 0 7 D 209/88	
		C 0 9 K 11/06	6 9 0

(31)優先権主張番号 10-2018-0018782

(32)優先日 平成30年2月14日(2018.2.14)

(33)優先権主張国・地域又は機関
韓国(KR)

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

(72)発明者 ノ, ヨンソク

大韓民国、1 8 1 2 0 キョンギ - ド、オサン - シ、クオリサ - ロ 9 8、ナンバー 5 0 4

(72)発明者 チャ, ジュヒョン

大韓民国、1 8 1 3 8 キョンギ - ド、オサン - シ、オサン - ロ・2 2 6 ボン - ギル 2 8、ナンバー 4 0 3

(72)発明者 キム, ドンジュン

大韓民国、1 7 1 1 8 キョンギ - ド、ヨンイン - シ、チョイン - グ、ナムサ - ミョン、タンハ - ロ 1 1 3 - 1 9

F ターム(参考) 3K107 AA01 BB01 BB02 CC04 CC12 CC22 DD53 DD59 DD68 DD76
DD78 FF14 GG04 GG28
4C050 AA08 BB04 CC04 CC16 EE02 FF05 GG01 HH04
4C063 AA03 AA05 CC76 CC92 DD08 EE10
4C071 AA08 BB01 BB07 CC01 CC21 EE13 FF03 GG03 JJ05 JJ06
LL05
4C204 BB05 CB25 DB01 EB02 FB08 GB13

专利名称(译)	有机发光器件和用于有机发光器件的有机材料层的组合物		
公开(公告)号	JP2020515073A	公开(公告)日	2020-05-21
申请号	JP2019552108	申请日	2018-03-26
发明人	ノ,ヨンソク チャ,ジュヒョン キム,ドンジュン		
IPC分类号	H01L51/50 H05B33/10 C07D405/14 C07D487/04 C07D491/048 C07D495/04 C07D409/14 C07D209/88 C09K11/06		
CPC分类号	C07D209/86 C07D405/14 C07D409/14 C07D487/04 C07D491/048 C07D495/04 C09K11/06 H01L51/0054 H01L51/0067 H01L51/0072 H01L51/0073 H01L51/0085 H01L51/5016 H01L2251/5384 H01L51/00 H01L51/50 C09K2211/1029 C09K2211/1088 H01L51/5024 H01L51/5072 H01L51/5088 C07D403/14 C09K2211/1018 H01L51/001 H01L51/0058 H01L51/0071 H01L51/0074 H01L51/5012 H01L51/5092 H01L51/5096		
FI分类号	H05B33/22.B H05B33/14.B H05B33/10 C07D405/14 C07D487/04.137 C07D491/048 C07D495/04.103 C07D409/14 C07D209/88 C09K11/06.690		
F-TERM分类号	3K107/AA01 3K107/BB01 3K107/BB02 3K107/CC04 3K107/CC12 3K107/CC22 3K107/DD53 3K107/DD59 3K107/DD68 3K107/DD76 3K107/DD78 3K107/FF14 3K107/GG04 3K107/GG28 4C050/AA08 4C050/BB04 4C050/CC04 4C050/CC16 4C050/EE02 4C050/FF05 4C050/GG01 4C050/HH04 4C063/AA03 4C063/AA05 4C063/CC76 4C063/CC92 4C063/DD08 4C063/EE10 4C071/AA08 4C071/BB01 4C071/BB07 4C071/CC01 4C071/CC21 4C071/EE13 4C071/FF03 4C071/GG03 4C071/JJ05 4C071/JJ06 4C071/LL05 4C204/BB05 4C204/CB25 4C204/DB01 4C204/EB02 4C204/FB08 4C204/GB13		
优先权	1020170037979 2017-03-24 KR 1020180018786 2018-02-14 KR 1020180018782 2018-02-14 KR		
外部链接	Espacenet		

摘要(译)

本说明书是一种有机发光器件，其包括第一电极，第二电极以及设置在第一电极和第二电极之间的一个或多个有机材料层，其中 有机发光器件和用于有机发光器件的有机材料层的组合物技术领域本发明涉及有机发光器件和用于有机发光器件的有机材料层的组合物，其中至少一层同时包含由化学式1表示的杂环化合物和由化学式2表示的杂环化合物。

