

(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2015-533262

(P2015-533262A)

(43) 公表日 平成27年11月19日(2015.11.19)

(51) Int. Cl.	F I	テーマコード (参考)
<b>HO 1 L 51/50 (2006.01)</b>	HO 5 B 33/14 B	3 K 1 0 7
<b>CO 7 D 471/10 (2006.01)</b>	CO 7 D 471/10 1 O 1	4 C O 6 5
<b>HO 1 L 51/46 (2006.01)</b>	CO 7 D 471/10 CSP	5 F 1 5 1
	HO 1 L 31/04 1 6 6	
	HO 1 L 31/04 1 6 8	

審査請求 未請求 予備審査請求 未請求 (全 55 頁) 最終頁に続く

(21) 出願番号 特願2015-535555 (P2015-535555)  
 (86) (22) 出願日 平成25年5月28日 (2013. 5. 28)  
 (85) 翻訳文提出日 平成27年5月29日 (2015. 5. 29)  
 (86) 国際出願番号 PCT/KR2013/004655  
 (87) 国際公開番号 W02014/058124  
 (87) 国際公開日 平成26年4月17日 (2014. 4. 17)  
 (31) 優先権主張番号 10-2012-0111342  
 (32) 優先日 平成24年10月8日 (2012. 10. 8)  
 (33) 優先権主張国 韓国 (KR)

(71) 出願人 500005066  
 チェイル インダストリーズ インコーポ  
 レイテッド  
 大韓民国 730-710 キョンサンブ  
 ッド クミーシ コンダンードン 290  
 (74) 代理人 110000671  
 八田国際特許業務法人  
 (72) 発明者 パク, ムージン  
 大韓民国, 437-711 キョンギード  
 , イワン-シ, コチョンードン 332-  
 2, チェイル インダストリーズ インコ  
 ーポレイテッド

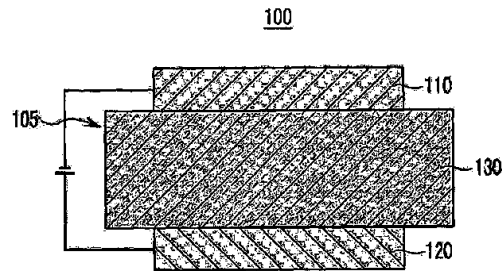
最終頁に続く

(54) 【発明の名称】 有機光電子素子用化合物、これを含む有機発光素子および前記有機発光素子を含む表示装置

(57) 【要約】

本発明は、優れた電気化学的および熱的安定性により寿命特性に優れ、低い駆動電圧でも高い発光効率を有する有機発光素子を製造することができる有機光電子素子用化合物、これを含む有機発光素子および前記有機発光素子を含む表示装置を提供する。

本発明の一実施形態に係る有機光電子素子用化合物は、化学式1で表される。化学式1および式中の各記号の説明は本明細書中で定義したとおりである。



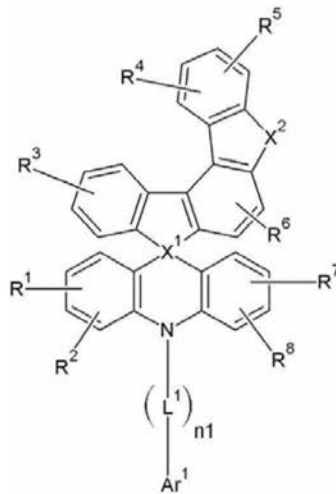
## 【特許請求の範囲】

## 【請求項 1】

下記化学式 1 で表される有機光電子素子用化合物：

## 【化 1】

【化学式 1】



10

前記化学式 1 で、

20

$X^1$  は、C または Si であり、

$X^2$  は、O、S、 $SO_2$  ( $O=S=O$ )、 $PO$  ( $P=O$ )、 $CR'R''$  または  $NR'$  であり、

$R'$ 、 $R''$  および  $R^1 \sim R^8$  は、互いに独立して、水素、重水素、ハロゲン基、シアノ基、ヒドロキシル基、アミノ基、置換もしくは非置換の C<sub>1</sub> ~ C<sub>20</sub> アミン基、ニトロ基、カルボキシル基、フェロセニル基、置換もしくは非置換の C<sub>1</sub> ~ C<sub>20</sub> アルキル基、置換もしくは非置換の C<sub>6</sub> ~ C<sub>30</sub> アリール基、置換もしくは非置換の C<sub>2</sub> ~ C<sub>30</sub> ヘテロアリール基、置換もしくは非置換の C<sub>1</sub> ~ C<sub>20</sub> アルコキシ基、置換もしくは非置換の C<sub>6</sub> ~ C<sub>20</sub> アリールオキシ基、置換もしくは非置換の C<sub>3</sub> ~ C<sub>40</sub> シリルオキシ基、置換もしくは非置換の C<sub>1</sub> ~ C<sub>20</sub> アシル基、置換もしくは非置換の C<sub>2</sub> ~ C<sub>20</sub> アルコキシカルボニル基、置換もしくは非置換の C<sub>2</sub> ~ C<sub>20</sub> アシルオキシ基、置換もしくは非置換の C<sub>2</sub> ~ C<sub>20</sub> のアシルアミノ基、置換もしくは非置換の C<sub>2</sub> ~ C<sub>20</sub> のアルコキシカルボニルアミノ基、置換もしくは非置換の C<sub>7</sub> ~ C<sub>20</sub> アリールオキシカルボニルアミノ基、置換もしくは非置換の C<sub>1</sub> ~ C<sub>20</sub> スルファモイルアミノ基、置換もしくは非置換の C<sub>1</sub> ~ C<sub>20</sub> スルホニル基、置換もしくは非置換の C<sub>1</sub> ~ C<sub>20</sub> のアルキルチオール基、置換もしくは非置換の C<sub>6</sub> ~ C<sub>20</sub> アリールチオール基、置換もしくは非置換の C<sub>1</sub> ~ C<sub>20</sub> ヘテロシクロチオール基、置換もしくは非置換の C<sub>1</sub> ~ C<sub>20</sub> のウレイド基、置換もしくは非置換の C<sub>3</sub> ~ C<sub>40</sub> シリル基またはこれらの組み合わせであり、

30

$L^1$  は、置換もしくは非置換の C<sub>2</sub> ~ C<sub>6</sub> アルケニレン基、置換もしくは非置換の C<sub>2</sub> ~ C<sub>6</sub> アルキニレン基、置換もしくは非置換の C<sub>6</sub> ~ C<sub>30</sub> アリーレン基、置換もしくは非置換の C<sub>2</sub> ~ C<sub>30</sub> ヘテロアリーレン基またはこれらの組み合わせであり、

40

$n_1$  は、0 ~ 3 のうちのいずれか一つの整数であり、

$Ar^1$  は、置換もしくは非置換の C<sub>6</sub> ~ C<sub>30</sub> アリール基または置換もしくは非置換の C<sub>2</sub> ~ C<sub>30</sub> ヘテロアリーレン基であり、

$Ar^1$ 、 $R^8$ 、および  $R'$  のうちの少なくともいずれか一つは、電子特性を有する置換もしくは非置換の C<sub>2</sub> ~ C<sub>30</sub> ヘテロアリーレン基である。

## 【請求項 2】

前記  $X^2$  は、O、S または  $NR'$  であり、

前記  $Ar^1$  は、電子特性を有する置換もしくは非置換の C<sub>2</sub> ~ C<sub>30</sub> ヘテロアリーレン基である、請求項 1 に記載の有機光電子素子用化合物。

50

## 【請求項 3】

前記  $X^2$  は、 $NR'$  であり、 $R'$  は、置換もしくは非置換の  $C_6 \sim C_{30}$  アリール基である、請求項 2 に記載の有機光電子素子用化合物。

## 【請求項 4】

前記  $X^2$  は、 $NR'$  であり、

前記  $R'$  は、電子特性を有する置換もしくは非置換の  $C_2 \sim C_{30}$  ヘテロアリール基である、請求項 1 に記載の有機光電子素子用化合物。

## 【請求項 5】

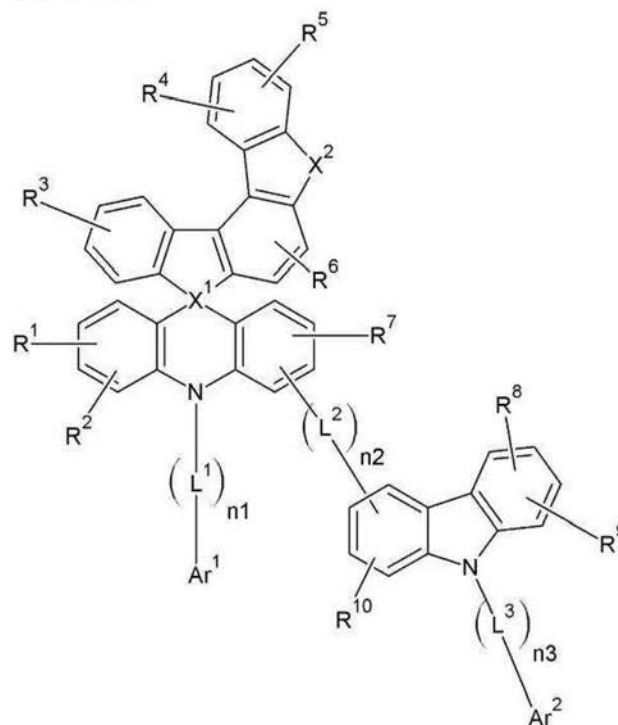
前記  $Ar^1$  は、置換もしくは非置換の  $C_6 \sim C_{30}$  アリール基である、請求項 4 に記載の有機光電子素子用化合物。

## 【請求項 6】

前記化学式 1 で表される化合物は、下記化学式 2 で表される、請求項 1 に記載の有機光電子素子用化合物：

## 【化 2】

【化学式 2】



前記化学式 2 で、

$X^1$  は、 $C$  または  $Si$  であり、

$X^2$  は、 $O$ 、 $S$ 、 $SO_2$  ( $O=S=O$ )、 $PO$  ( $P=O$ )、 $CR'R''$  または  $NR'$  であり、

$R'$ 、 $R''$  および  $R^1 \sim R^{10}$  は、互いに独立して、水素、重水素、ハロゲン基、シアノ基、ヒドロキシル基、アミノ基、置換もしくは非置換の  $C_1 \sim C_{20}$  アミン基、ニトロ基、カルボキシル基、フェロセニル基、置換もしくは非置換の  $C_1 \sim C_{20}$  アルキル基、置換もしくは非置換の  $C_6 \sim C_{30}$  アリール基、置換もしくは非置換の  $C_2 \sim C_{30}$  ヘテロアリール基、置換もしくは非置換の  $C_1 \sim C_{20}$  アルコキシ基、置換もしくは非置換の  $C_6 \sim C_{20}$  アリールオキシ基、置換もしくは非置換の  $C_3 \sim C_4$  シリルオキシ基、置換もしくは非置換の  $C_1 \sim C_{20}$  アシル基、置換もしくは非置換の  $C_2 \sim C_{20}$  アルコキシカルボニル基、置換もしくは非置換の  $C_2 \sim C_{20}$  アシルオキシ基、置換もしくは非置換の  $C_2 \sim C_{20}$  のアシルアミノ基、置換もしくは非置換の  $C_2 \sim C_{20}$  のアルコキシカルボニルアミノ基、置換もしくは非置換の  $C_7 \sim C_{20}$  アリールオキシカルボニルアミノ基、置換もしくは非置換の  $C_1 \sim C_{20}$  スルファモイルアミノ基、置換もしくは非置換の  $C_1 \sim C_{20}$  スルホニル基、置換もしくは非置換の  $C_1 \sim C_{20}$  のアルキルチオール基、

置換もしくは非置換の C<sub>6</sub> ~ C<sub>20</sub> アリールチオール基、置換もしくは非置換の C<sub>1</sub> ~ C<sub>20</sub> ヘテロシクロチオール基、置換もしくは非置換の C<sub>1</sub> ~ C<sub>20</sub> のウレイド基、置換もしくは非置換の C<sub>3</sub> ~ C<sub>40</sub> シリル基またはこれらの組み合わせであり、

L<sup>1</sup> ~ L<sup>3</sup> は、互いに独立して、置換もしくは非置換の C<sub>2</sub> ~ C<sub>6</sub> アルケニレン基、置換もしくは非置換の C<sub>2</sub> ~ C<sub>6</sub> アルキニレン基、置換もしくは非置換の C<sub>6</sub> ~ C<sub>30</sub> アリレン基、置換もしくは非置換の C<sub>2</sub> ~ C<sub>30</sub> ヘテロアリレン基またはこれらの組み合わせであり、

n<sub>1</sub> ~ n<sub>3</sub> は、互いに独立して、0 ~ 3 のうちのいずれか一つの整数であり、

Ar<sup>1</sup> および Ar<sup>2</sup> は、互いに独立して、置換もしくは非置換の C<sub>6</sub> ~ C<sub>30</sub> アリール基または置換もしくは非置換の C<sub>2</sub> ~ C<sub>30</sub> ヘテロアリール基であり、

Ar<sup>1</sup>、Ar<sup>2</sup>、R<sup>5</sup>、R<sup>8</sup>、および R' のうちの少なくともいずれか一つは、電子特性を有する置換もしくは非置換の C<sub>2</sub> ~ C<sub>30</sub> ヘテロアリール基である。

【請求項 7】

前記 X<sup>2</sup> は、O、S または C R' R'' であり、

前記 Ar<sup>1</sup> は、電子特性を有する置換もしくは非置換の C<sub>2</sub> ~ C<sub>30</sub> ヘテロアリール基である、請求項 6 に記載の有機光電子素子用化合物。

【請求項 8】

前記 X<sup>2</sup> は、O または S であり、前記 Ar<sup>2</sup> は、置換もしくは非置換の C<sub>6</sub> ~ C<sub>30</sub> アリール基である、請求項 7 に記載の有機光電子素子用化合物。

【請求項 9】

前記 X<sup>2</sup> は、O または S であり、前記 Ar<sup>2</sup> は、電子特性を有する置換もしくは非置換の C<sub>2</sub> ~ C<sub>30</sub> ヘテロアリール基であり、前記 Ar<sup>1</sup> は、置換もしくは非置換の C<sub>6</sub> ~ C<sub>30</sub> アリール基である、請求項 6 に記載の有機光電子素子用化合物。

【請求項 10】

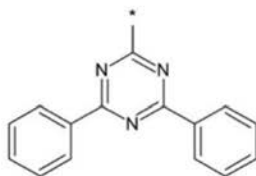
前記 X<sup>1</sup> は、C である、請求項 6 に記載の有機光電子素子用化合物。

【請求項 11】

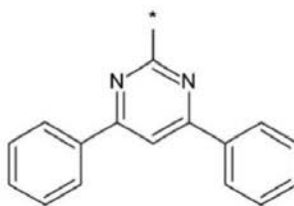
前記電子特性を有する置換もしくは非置換の C<sub>2</sub> ~ C<sub>30</sub> ヘテロアリール基は、下記化学式 3 ~ 7 のうちのいずれか一つで表される置換基である、請求項 1 に記載の有機光電子素子用化合物。

【化 3】

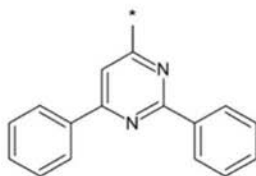
[化学式 3]



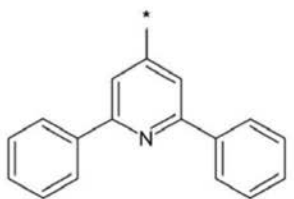
[化学式 4]



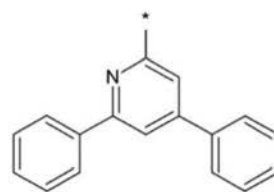
[化学式 5]



[化学式 6]



[化学式 7]



【請求項 12】

前記 Ar<sup>1</sup> および Ar<sup>2</sup> は、互いに独立して、置換もしくは非置換のフェニル基、置換もしくは非置換のナフチル基、置換もしくは非置換のアントラセニル基、置換もしくは非置換のフェナントリル基、置換もしくは非置換のナフタセニル基、置換もしくは非置換のピレニル基、置換もしくは非置換のビフェニル基、置換もしくは非置換の p - ターフェ

10

20

30

40

50

ニル基、置換もしくは非置換の *m*-ターフェニル基、置換もしくは非置換のクリセニル基、置換もしくは非置換のトリフェニレニル基、置換もしくは非置換のペリレニル基、置換もしくは非置換のインデニル基、置換もしくは非置換のフラニル基、置換もしくは非置換のチオフエニル基、置換または非置換のピロリル基、置換もしくは非置換のピラゾリル基、置換もしくは非置換のイミダゾリル基、置換もしくは非置換のトリアゾリル基、置換もしくは非置換のオキサゾリル基、置換もしくは非置換のチアゾリル基、置換もしくは非置換のオキサジアゾリル基、置換もしくは非置換のチアジアゾリル基、置換もしくは非置換のピリジル基、置換もしくは非置換のピリミジニル基、置換もしくは非置換のピラジニル基、置換もしくは非置換のトリアジニル基、置換もしくは非置換のベンゾフラニル基、置換もしくは非置換のベンゾチオフエニル基、置換もしくは非置換のベンズイミダゾリル基、置換もしくは非置換のインドリル基、置換もしくは非置換のキノリニル基、置換もしくは非置換のイソキノリニル基、置換もしくは非置換のキナゾリニル基、置換もしくは非置換のキノキサリニル基、置換もしくは非置換のナフチリジニル基、置換もしくは非置換のベンズオキサジニル基、置換もしくは非置換のベンズチアジニル基、置換もしくは非置換のアクリジニル基、置換もしくは非置換のフェナジニル基、置換もしくは非置換のフェノチアジニル基、置換もしくは非置換のフェノキサジニル基またはこれらの組み合わせである、請求項 6 に記載の有機光電子素子用化合物。

10

【請求項 13】

L<sup>1</sup> ~ L<sup>3</sup> は、互いに独立して、置換もしくは非置換のフェニレン基、置換もしくは非置換のピフェニレン基、置換もしくは非置換のターフェニレン基、置換もしくは非置換のナフチレン基、置換もしくは非置換のアントラセニレン基、置換もしくは非置換のフェナントリレン基、置換もしくは非置換のピレニレン基、置換もしくは非置換のフルオレニレン基、置換もしくは非置換のナфтаセニル基、置換もしくは非置換のクリセニル基、置換もしくは非置換のトリフェニレニル基、置換もしくは非置換のペリレニル基、置換もしくは非置換のインデニル基、置換もしくは非置換のフラニル基、置換もしくは非置換のチオフエニル基、置換もしくは非置換のピロリル基、置換もしくは非置換のピラゾリル基、置換もしくは非置換のイミダゾリル基、置換もしくは非置換のトリアゾリル基、置換もしくは非置換のオキサゾリル基、置換もしくは非置換のチアゾリル基、置換もしくは非置換のオキサジアゾリル基、置換もしくは非置換のチアジアゾリル基、置換もしくは非置換のピリジル基、置換もしくは非置換のピリミジニル基、置換もしくは非置換のピラジニル基、置換もしくは非置換のトリアジニル基、置換もしくは非置換のベンゾフラニル基、置換もしくは非置換のベンゾチオフエニル基、置換もしくは非置換のベンズイミダゾリル基、置換もしくは非置換のインドリル基、置換もしくは非置換のキノリニル基、置換もしくは非置換のイソキノリニル基、置換もしくは非置換のキナゾリニル基、置換もしくは非置換のキノキサリニル基、置換もしくは非置換のナフチリジニル基、置換もしくは非置換のベンズオキサジニル基、置換もしくは非置換のベンズチアジニル基、置換もしくは非置換のアクリジニル基、置換もしくは非置換のフェナジニル基、置換もしくは非置換のフェノチアジニル基および置換もしくは非置換のフェノキサジニル基である、請求項 6 に記載の有機光電子素子用化合物。

20

30

【請求項 14】

前記 R<sup>1</sup> ~ R<sup>10</sup> のうちの少なくともいずれか一つは、置換もしくは非置換の C<sub>3</sub> ~ C<sub>40</sub> シリル基である、請求項 6 に記載の有機光電子素子用化合物。

40

【請求項 15】

前記 R<sup>1</sup> ~ R<sup>10</sup> のうちの少なくともいずれか一つは、置換された C<sub>3</sub> ~ C<sub>40</sub> シリル基であり、

前記置換されたシリル基の水素のうちの少なくともいずれか一つは、C<sub>1</sub> ~ C<sub>10</sub> アルキル基または C<sub>6</sub> ~ C<sub>15</sub> アリール基で置換された、請求項 6 に記載の有機光電子素子用化合物。

【請求項 16】

前記有機光電子素子用化合物は、三重項励起エネルギー (T<sub>1</sub>) が 2.0 eV 以上であ

50

る、請求項 1 ~ 15 のいずれか一項に記載の有機光電子素子用化合物。

【請求項 17】

陽極、陰極および前記陽極と陰極との間に位置する少なくとも一層以上の有機薄膜層を含む有機発光素子において、

前記有機薄膜層のうちの少なくともいずれか一層は、請求項 1 ~ 15 のいずれか一項に記載の有機光電子素子用化合物を含む有機発光素子。

【請求項 18】

前記有機薄膜層は、発光層、正孔輸送層、正孔注入層、電子輸送層、電子注入層、正孔遮断層およびこれらの組み合わせからなる群より選ばれる、請求項 17 に記載の有機発光素子。

【請求項 19】

前記有機光電子素子用化合物は、発光層内に含まれる、請求項 17 に記載の有機発光素子。

【請求項 20】

請求項 17 に記載の有機発光素子を含む表示装置。

【発明の詳細な説明】

【技術分野】

【0001】

寿命、効率、電気化学的安定性および熱的安定性に優れた有機光電子素子を提供できる有機光電子素子用化合物、これを含む有機発光素子および前記有機発光素子を含む表示装置に関する。

【背景技術】

【0002】

有機光電子素子 (organic optoelectric device) とは、正孔または電子を用いた電極と有機物との間での電荷交流を必要とする素子を意味する。

【0003】

有機光電子素子は、動作原理に応じて次のように大きく 2 種類に分けることができる。第一は、外部の光源から素子に流入した光子により有機物層でエキシトン (exciton) が形成され、このエキシトンが電子と正孔に分離され、この電子と正孔がそれぞれ異なる電極に伝達されて電流源 (電圧源) として用いられる形態の電子素子である。

【0004】

第二は、二つ以上の電極に電圧または電流を加えて電極と界面をなす有機物半導体に正孔または電子を注入し、注入された電子と正孔により動作する形態の電子素子である。

【0005】

有機光電子素子の例としては、有機光電素子、有機発光素子、有機太陽電池、有機感光体ドラム (organic photoconductor drum)、有機トランジスタなどがあり、これらは全て素子の駆動のために正孔の注入もしくは輸送物質、電子の注入もしくは輸送物質、または発光物質を必要とする。

【0006】

特に、有機発光素子 (organic light emitting diode、OLED) は、最近、平板ディスプレイ (flat panel display) の需要が増加することに伴って注目されている。一般に有機発光とは、有機物質を用いて電気エネルギーを光エネルギーに変換させる現象をいう。

【0007】

このような有機発光素子は、有機発光材料に電流を加えて電気エネルギーを光に変換させる素子であって、通常、陽極 (anode) と陰極 (cathode) との間に機能性有機物層が挿入された構造からなる。ここで有機物層は、有機発光素子の効率と安全性を高めるために、それぞれ異なる物質で形成された多層の構造を有する場合が多く、例えば正孔注入層、正孔輸送層、発光層、電子輸送層、電子注入層などを有することができる。

【0008】

10

20

30

40

50

このような有機発光素子の構造で二つの電極の間に電圧をかけると、陽極からは正孔 (hole)、陰極からは電子 (electron) が有機物層に注入され、注入された正孔と電子が会って再結合 (recombination) によりエネルギーが高い励起子を形成するようになる。この時に形成された励起子が再び基底状態 (ground state) に移動しながら特定の波長を有する光が発生するようになる。

#### 【0009】

最近では、蛍光発光物質だけでなく、燐光発光物質も有機発光素子の発光物質として使用可能であることが知られており、このような燐光発光は、基底状態から励起状態 (excited state) に電子が遷移した後、項間交差 (intersystem crossing) を通じて一重項励起子が三重項励起子に非発光遷移した後、三重項励起子が基底状態に遷移しながら発光するメカニズムからなる。

10

#### 【0010】

前述したように有機発光素子で有機物層として用いられる材料は、機能に応じて、発光材料と電荷輸送材料、例えば正孔注入材料、正孔輸送材料、電子輸送材料、電子注入材料などに分類され得る。

#### 【0011】

また、発光材料は、発光色に応じて、青色、緑色、赤色発光材料と、さらに改善された天然色を具現するために必要な黄色および樺色発光材料に分類され得る。

#### 【0012】

一方、発光材料として一つの物質だけ用いる場合、分子間相互作用により最大発光波長が長波長に移動し、色純度が低下したり、発光減衰効果により素子の効率が減少する問題が発生するため、色純度の増加とエネルギー遷移を通じた発光効率と安定性を増加させるために発光材料としてホスト/ドープメント系を用いることができる。

20

#### 【0013】

有機発光素子が前述した優れた特徴を十分に発揮するためには、素子内有機物層を構成する物質、例えば正孔注入物質、正孔輸送物質、発光物質、電子輸送物質、電子注入物質、発光材料中のホストおよび/またはドープメントなどが安定的且つ効率的な材料により裏付けられるのが先行されなければならないが、まだ安定的且つ効率的な有機発光素子用有機物層材料の開発が十分ではない状態であり、したがって新たな材料の開発が継続的に要求されている。このような材料開発の必要性は前述した他の有機光電子素子でも同様である。

30

#### 【0014】

また、低分子有機発光素子は、真空蒸着法により薄膜の形態で素子を製造するため効率および寿命性能がよく、高分子有機発光素子は、インクジェット (inkjet) またはスピンコーティング (spin coating) 法を用いて初期投資費が少なく、大面積化に有利な長所がある。

#### 【0015】

低分子有機発光素子および高分子有機発光素子は、共に自発光、高速応答、広視野角、超薄型、高画質、耐久性、広い駆動温度範囲などの長所を有しているため、次世代ディスプレイとして注目されている。特に既存のLCD (liquid crystal display) と比較して自発光型であることから、暗い場所や外部の光が入っても視認性がよく、バックライトが不要であることから、LCDの1/3水準に厚さおよび重量を減らすことができる。

40

#### 【0016】

また、応答速度がLCDに比べて1000倍以上速いマイクロ秒単位であるため、残像がない完璧な動画を実現することができる。したがって、最近の本格的なマルチメディア時代に合わせて最適のディスプレイとして脚光を浴びると期待され、このような長所を土台に1980年代後半の最初開発以降、効率80倍、寿命100倍以上に至る急激な技術発展を成し遂げてきており、最近では40インチの有機発光素子パネルが発表されるなど大型化が急速に進められている。

50

## 【0017】

大型化のためには、発光効率の増大および素子の寿命向上が伴わなければならない。この時、素子の発光効率は発光層内の正孔と電子の結合が円滑に行われなければならない。しかし、一般に有機物の電子移動度は正孔移動度に比べて遅いため、発光層内の正孔と電子の結合が効率的に行われるためには、効率的な電子輸送層を用いて陰極からの電子注入および移動度を高めると同時に、正孔の移動を遮断することが必要である。

## 【0018】

また、寿命向上のためには、素子の駆動時に発生するジュール熱 (Joule heat) により材料が結晶化されることを防止しなければならない。したがって、電子の注入および移動性に優れ、電気化学的安定性の高い有機化合物に対する開発が必要である。

10

## 【発明の概要】

## 【発明が解決しようとする課題】

## 【0019】

正孔注入および輸送の役割または電子注入および輸送の役割を果たすことができ、適切なドーパントと共に発光ホストとしての役割を果たすことができる有機光電子素子用化合物を提供する。

## 【0020】

寿命、効率、駆動電圧、電気化学的安定性および熱的安定性に優れた有機発光素子およびこれを含む表示装置を提供する。

## 【課題を解決するための手段】

20

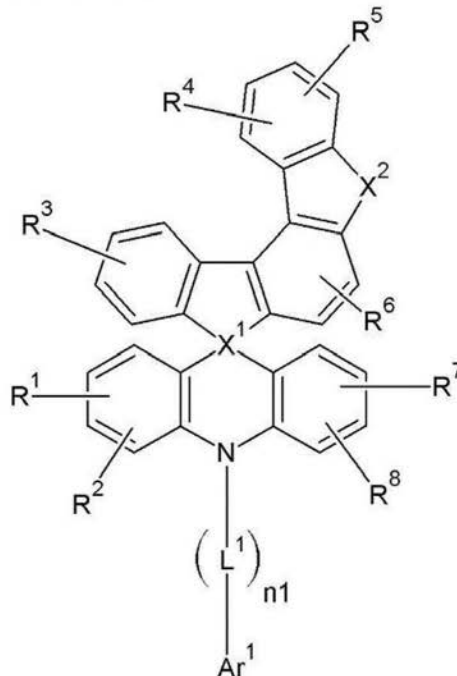
## 【0021】

本発明の一実施形態は、下記化学式1で表される有機光電子素子用化合物を提供する。

## 【0022】

## 【化1】

[化学式1]



30

40

## 【0023】

前記化学式1で、 $X^1$ は、CまたはSiであり、 $X^2$ は、O、S、 $SO_2$  ( $O=S=O$ )、 $PO$  ( $P=O$ )、 $CR'R''$ または $NR'$ であり、 $R'$ 、 $R''$ および $R^1 \sim R^8$ は、互いに独立して、水素、重水素、ハロゲン基、シアノ基、ヒドロキシル基、アミノ基、置換もしくは非置換のC1~C20アミン基、ニトロ基、カルボキシル基、フェロセニル基、置換もしくは非置換のC1~C20アルキル基、置換もしくは非置換のC6~C30アリール基、置換もしくは非置換のC2~C30ヘテロアリール基、置換もしくは非置換のC

50

1 ~ C 2 0 アルコキシ基、置換もしくは非置換の C 6 ~ C 2 0 アリールオキシ基、置換もしくは非置換の C 3 ~ C 4 0 シリルオキシ基、置換または非置換の C 1 ~ C 2 0 アシル基、置換もしくは非置換の C 2 ~ C 2 0 アルコキシカルボニル基、置換もしくは非置換の C 2 ~ C 2 0 アシルオキシ基、置換もしくは非置換の C 2 ~ C 2 0 のアシルアミノ基、置換もしくは非置換の C 2 ~ C 2 0 のアルコキシカルボニルアミノ基、置換もしくは非置換の C 7 ~ C 2 0 アリールオキシカルボニルアミノ基、置換もしくは非置換の C 1 ~ C 2 0 スルファモイルアミノ基、置換もしくは非置換の C 1 ~ C 2 0 スルホニル基、置換もしくは非置換の C 1 ~ C 2 0 のアルキルチオール基、置換もしくは非置換の C 6 ~ C 2 0 アリールチオール基、置換もしくは非置換の C 1 ~ C 2 0 ヘテロシクロチオール基、置換もしくは非置換の C 1 ~ C 2 0 のウレイド基、置換もしくは非置換の C 3 ~ C 4 0 シリル基またはこれらの組み合わせであり、L<sup>1</sup> は、置換もしくは非置換の C 2 ~ C 6 アルケニレン基、置換もしくは非置換の C 2 ~ C 6 アルキニレン基、置換もしくは非置換の C 6 ~ C 3 0 アリーレン基、置換もしくは非置換の C 2 ~ C 3 0 ヘテロアリーレン基またはこれらの組み合わせであり、n<sup>1</sup> は、0 ~ 3 のうちのいずれか一つの整数であり、Ar<sup>1</sup> は、置換もしくは非置換の C 6 ~ C 3 0 アリール基または置換もしくは非置換の C 2 ~ C 3 0 ヘテロアリーレン基であり、Ar<sup>1</sup>、R<sup>8</sup>、および R'<sup>8</sup> のうちの少なくともいずれか一つは、電子特性を有する置換または非置換の C 2 ~ C 3 0 ヘテロアリーレン基である。

10

## 【0024】

前記 X<sup>2</sup> は、O、S または NR'<sup>2</sup> であり、前記 Ar<sup>1</sup> は、電子特性を有する置換もしくは非置換の C 2 ~ C 3 0 ヘテロアリーレン基であり得る。

20

## 【0025】

前記 X<sup>2</sup> は、NR'<sup>2</sup> であり、R'<sup>2</sup> は、置換もしくは非置換の C 6 ~ C 3 0 アリール基であり得る。

## 【0026】

前記 X<sup>2</sup> は、NR'<sup>2</sup> であり、前記 R'<sup>2</sup> は、電子特性を有する置換もしくは非置換の C 2 ~ C 3 0 ヘテロアリーレン基であり得る。

## 【0027】

前記 Ar<sup>1</sup> は、置換もしくは非置換の C 6 ~ C 3 0 アリール基であり得る。

## 【0028】

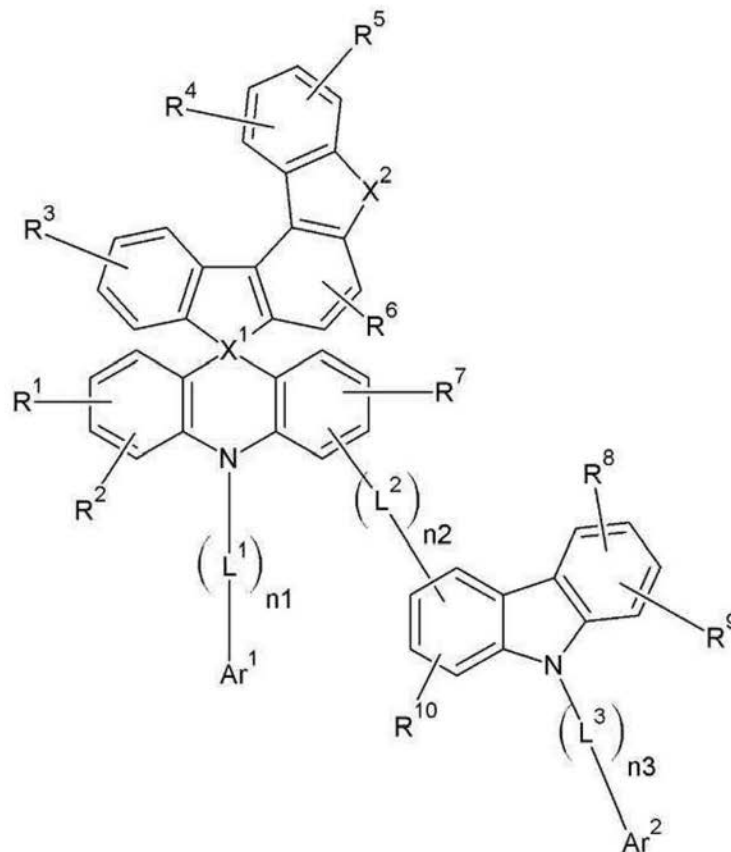
前記化学式 1 で表される化合物は、下記化学式 2 で表され得る。

30

## 【0029】

## 【化2】

[化学式2]



10

20

## 【0030】

前記化学式2で、 $X^1$ は、CまたはSiであり、 $X^2$ は、O、S、 $SO_2$  ( $O=S=O$ )、 $PO$  ( $P=O$ )、 $CR'R''$ または $NR'$ であり、 $R'$ 、 $R''$ および $R^1 \sim R^{10}$ は、互いに独立して、水素、重水素、ハロゲン基、シアノ基、ヒドロキシル基、アミノ基、置換もしくは非置換のC1~C20アミン基、ニトロ基、カルボキシル基、フェロセニル基、置換もしくは非置換のC1~C20アルキル基、置換もしくは非置換のC6~C30アリール基、置換もしくは非置換のC2~C30ヘテロアリール基、置換もしくは非置換のC1~C20アルコキシ基、置換もしくは非置換のC6~C20アリールオキシ基、置換もしくは非置換のC3~C40シリルオキシ基、置換もしくは非置換のC1~C20アシル基、置換もしくは非置換のC2~C20アルコキシカルボニル基、置換もしくは非置換のC2~C20アシルオキシ基、置換もしくは非置換のC2~C20のアシルアミノ基、置換もしくは非置換のC2~C20のアルコキシカルボニルアミノ基、置換もしくは非置換のC7~C20アリールオキシカルボニルアミノ基、置換もしくは非置換のC1~C20スルファモイルアミノ基、置換もしくは非置換のC1~C20スルホニル基、置換もしくは非置換のC1~C20のアルキルチオール基、置換もしくは非置換のC6~C20アリールチオール基、置換もしくは非置換のC1~C20ヘテロシクロチオール基、置換もしくは非置換のC1~C20のウレイド基、置換もしくは非置換のC3~C40シリル基またはこれらの組み合わせであり、 $L^1 \sim L^3$ は、互いに独立して、置換もしくは非置換のC2~C6アルケニレン基、置換もしくは非置換のC2~C6アルキニレン基、置換もしくは非置換のC6~C30アリーレン基、置換もしくは非置換のC2~C30ヘテロアリーレン基またはこれらの組み合わせであり、 $n_1 \sim n_3$ は、互いに独立して、0~3のうちいずれか一つの整数であり、 $Ar^1$ および $Ar^2$ は、互いに独立して、置換もしくは非置換のC6~C30アリール基または置換もしくは非置換のC2~C30ヘテロアリール基であり、 $Ar^1$ 、 $Ar^2$ 、 $R^5$ 、 $R^8$ 、および $R'$ のうち少なくともいずれか一つは、電子特性を有する置換もしくは非置換のC2~C30ヘテロアリール基である。

30

40

50

## 【0031】

前記  $X^2$  は、O、S または  $CR'R''$  であり、前記  $Ar^1$  は、電子特性を有する置換もしくは非置換の  $C_2 \sim C_{30}$  ヘテロアリール基であり得る。

## 【0032】

前記  $X^2$  は、O または S であり、前記  $Ar^2$  は、置換もしくは非置換の  $C_6 \sim C_{30}$  アリール基であり得る。

## 【0033】

前記  $X^2$  は、O または S であり、前記  $Ar^2$  は、電子特性を有する置換もしくは非置換の  $C_2 \sim C_{30}$  ヘテロアリール基であり、前記  $Ar^1$  は、置換もしくは非置換の  $C_6 \sim C_{30}$  アリール基であり得る。

10

## 【0034】

前記  $X^1$  は、C であり得る。

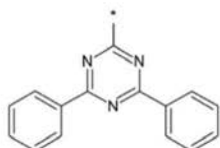
## 【0035】

前記電子特性を有する置換もしくは非置換の  $C_2 \sim C_{30}$  ヘテロアリール基は、下記化学式 3 ~ 7 のうちのいずれか一つで表され得る。

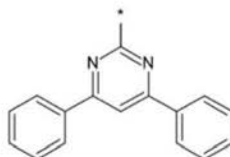
## 【0036】

## 【化3】

[化学式3]



[化学式4]

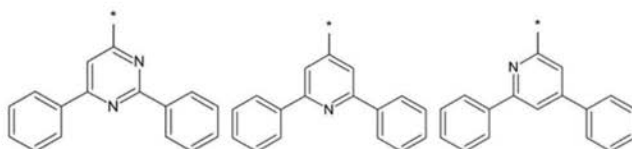


20

[化学式5]

[化学式6]

[化学式7]



30

## 【0037】

前記  $Ar^1$  および  $Ar^2$  は、互いに独立して、置換もしくは非置換のフェニル基、置換もしくは非置換のナフチル基、置換もしくは非置換のアントラセニル基、置換もしくは非置換のフェナントリル基、置換もしくは非置換のナフタセニル基、置換もしくは非置換のピレニル基、置換もしくは非置換のピフェニル基、置換もしくは非置換の *p*-ターフェニル基、置換もしくは非置換の *m*-ターフェニル基、置換もしくは非置換のクリセニル基、置換もしくは非置換のトリフェニレニル基、置換もしくは非置換のペリレニル基、置換もしくは非置換のインデニル基、置換もしくは非置換のフラニル基、置換もしくは非置換のチオフェニル基、置換または非置換のピロリル基、置換もしくは非置換のピラゾリル基、置換もしくは非置換のイミダゾリル基、置換もしくは非置換のトリアゾリル基、置換もしくは非置換のオキサゾリル基、置換もしくは非置換のチアゾリル基、置換もしくは非置換のオキサジアゾリル基、置換もしくは非置換のチアジアゾリル基、置換もしくは非置換のピリジル基、置換もしくは非置換のピリミジニル基、置換もしくは非置換のピラジニル基、置換もしくは非置換のトリアジニル基、置換もしくは非置換のベンゾフラニル基、置換もしくは非置換のベンゾチオフェニル基、置換もしくは非置換のベンズイミダゾリル基、置換もしくは非置換のインドリル基、置換もしくは非置換のキノリニル基、置換もしくは非置換のイソキノリニル基、置換もしくは非置換のキナゾリニル基、置換もしくは非置換のキノキサリニル基、置換もしくは非置換のナフチリジニル基、置換もしくは非置換のベンズオキサジニル基、置換もしくは非置換のベンズチアジニル基、置換もしくは非置換のアクリジニル基、置換もしくは非置換のフェナジニル基、置換もしくは非置換のフェノ

40

50

チアジニル基、置換もしくは非置換のフェノキサジニル基またはこれらの組み合わせであり得る。

【0038】

$L^1 \sim L^3$  は、互いに独立して、置換もしくは非置換のフェニレン基、置換もしくは非置換のピフェニレン基、置換もしくは非置換のターフェニレン基、置換もしくは非置換のナフチレン基、置換もしくは非置換のアントラセニレン基、置換もしくは非置換のフェナントリレン基、置換もしくは非置換のピレニレン基、置換もしくは非置換のフルオレニレン基、置換もしくは非置換のナフタセニル基、置換もしくは非置換のクリセニル基、置換もしくは非置換のトリフェニレニル基、置換もしくは非置換のペリレニル基、置換もしくは非置換のインデニル基、置換もしくは非置換のフラニル基、置換もしくは非置換のチオフェニル基、置換もしくは非置換のピロリル基、置換もしくは非置換のピラゾリル基、置換もしくは非置換のイミダゾリル基、置換もしくは非置換のトリアゾリル基、置換もしくは非置換のオキサゾリル基、置換もしくは非置換のチアゾリル基、置換もしくは非置換のオキサジアゾリル基、置換もしくは非置換のチアジアゾリル基、置換もしくは非置換のピリジル基、置換もしくは非置換のピリミジニル基、置換もしくは非置換のピラジニル基、置換もしくは非置換のトリアジニル基、置換もしくは非置換のベンゾフラニル基、置換もしくは非置換のベンゾチオフェニル基、置換もしくは非置換のベンズイミダゾリル基、置換もしくは非置換のインドリル基、置換もしくは非置換のキノリニル基、置換もしくは非置換のイソキノリニル基、置換もしくは非置換のキナゾリニル基、置換もしくは非置換のキノキサリニル基、置換もしくは非置換のナフチリジニル基、置換もしくは非置換のベンズオキサジニル基、置換もしくは非置換のベンズチアジニル基、置換もしくは非置換のアクリジニル基、置換もしくは非置換のフェナジニル基、置換もしくは非置換のフェノチアジニル基および置換もしくは非置換のフェノキサジニル基であり得る。

10

20

【0039】

前記  $R^1 \sim R^{10}$  のうちの少なくともいずれか一つは、置換もしくは非置換の  $C_3 \sim C_{40}$  シリル基であり得る。

【0040】

前記  $R^1 \sim R^{10}$  のうちの少なくともいずれか一つは、置換された  $C_3 \sim C_{40}$  シリル基であり、前記置換されたシリル基の水素のうちの少なくともいずれか一つは、 $C_1 \sim C_{10}$  アルキル基または  $C_6 \sim C_{15}$  アリール基で置換されたものであり得る。

30

【0041】

前記有機光電子素子用化合物は、三重項励起エネルギー ( $T_1$ ) が  $2.0 \text{ eV}$  以上であり得る。

【0042】

本発明の他の一実施形態では、陽極、陰極および前記陽極と陰極との間に位置する少なくとも一層以上の有機薄膜層を含む有機発光素子において、前記有機薄膜層のうちの少なくともいずれか一層は、前述した本発明の一実施形態に係る有機光電子素子用化合物を含む有機発光素子を提供する。

【0043】

前記有機薄膜層は、発光層、正孔輸送層、正孔注入層、電子輸送層、電子注入層、正孔遮断層およびこれらの組み合わせからなる群より選ばれ得る。

40

【0044】

前記有機光電子素子用化合物は、発光層内に含まれ得る。

【0045】

本発明のさらに他の一実施形態では、前述した本発明の一実施形態に係る有機発光素子を含む表示装置を提供する。

【発明の効果】

【0046】

高い正孔または電子輸送性、膜安定性、熱的安定性および高い三重項励起エネルギーを有する化合物を提供することができる。

50

## 【0047】

このような化合物は、発光層の正孔注入/輸送材料、ホスト材料、または電子注入/輸送材料として用いられ得る。これを用いた有機光電子素子は、優れた電気化学的および熱的安定性を有するようになり、寿命特性に優れ、低い駆動電圧でも高い発光効率を有することができる。

## 【図面の簡単な説明】

## 【0048】

【図1】本発明の一実施形態に係る有機光電子素子用化合物を用いて製造可能な有機発光素子に対する多様な実施形態を示す断面図である。

【図2】本発明の一実施形態に係る有機光電子素子用化合物を用いて製造可能な有機発光素子に対する多様な実施形態を示す断面図である。

【図3】本発明の一実施形態に係る有機光電子素子用化合物を用いて製造可能な有機発光素子に対する多様な実施形態を示す断面図である。

【図4】本発明の一実施形態に係る有機光電子素子用化合物を用いて製造可能な有機発光素子に対する多様な実施形態を示す断面図である。

【図5】本発明の一実施形態に係る有機光電子素子用化合物を用いて製造可能な有機発光素子に対する多様な実施形態を示す断面図である。

## 【符号の説明】

## 【0049】

100：有機発光素子

110：陰極

120：陽極

105：有機薄膜層

130：発光層

140：正孔輸送層

150：電子輸送層

160：電子注入層

170：正孔注入層

230：発光層+電子輸送層。

## 【発明を実施するための形態】

## 【0050】

以下、本発明の実施形態を詳細に説明する。ただし、これは例示として提示されるものであり、本発明は、これによって制限されず、後述する特許請求の範囲の範疇のみにより定義される。

## 【0051】

本明細書で「置換」とは、別途の定義がない限り、置換基または化合物のうちの少なくとも一つの水素が重水素、ハロゲン基、ヒドロキシ基、アミノ基、置換もしくは非置換のC1~C30アミン基、ニトロ基、置換もしくは非置換のC3~C40シリル基、C1~C30アルキル基、C1~C10アルキルシリル基、C3~C30シクロアルキル基、C6~C30アリール基、C1~C20アルコキシ基、フルオロ基、トリフルオロメチル基などのC1~C10トリフルオロアルキル基またはシアノ基で置換されたものを意味する。

## 【0052】

また、前記置換されたハロゲン基、ヒドロキシ基、アミノ基、置換もしくは非置換のC1~C20アミン基、ニトロ基、置換もしくは非置換のC3~C40シリル基、C1~C30アルキル基、C1~C10アルキルシリル基、C3~C30シクロアルキル基、C6~C30アリール基、C1~C20アルコキシ基、フルオロ基、トリフルオロメチル基などのC1~C10トリフルオロアルキル基またはシアノ基のうちの隣接した二つの置換基が融合して環を形成することもできる。

## 【0053】

10

20

30

40

50

本明細書で「ヘテロ」とは、別途の定義がない限り、一つの作用基内にN、O、SおよびPからなる群より選ばれるヘテロ原子を1～3個含有し、残りは炭素であるものを意味する。

【0054】

本明細書で「これらの組み合わせ」とは、別途の定義がない限り、2以上の置換基が連結基で結合されていたり、2以上の置換基が縮合して結合されているものを意味する。

【0055】

本明細書で「アルキル(alkyl)基」とは、別途の定義がない限り、脂肪族炭化水素基を意味する。アルキル基は、いかなる二重結合や三重結合を含んでいない「飽和アルキル(saturated alkyl)基」であり得る。

10

【0056】

前記アルキル基は、分枝状、直鎖状または環状であり得る。

【0057】

「アルケニル(alkenyl)基」とは、少なくとも二つの炭素原子が少なくとも一つの炭素-炭素二重結合からなる作用基を意味し、「アルキニル(alkynyl)基」とは、少なくとも二つの炭素原子が少なくとも一つの炭素-炭素三重結合からなる作用基を意味する。

【0058】

アルキル基は、C1～C20であるアルキル基であり得る。より具体的にアルキル基は、C1～C10アルキル基またはC1～C6アルキル基であってもよい。

20

【0059】

例えば、C1～C4アルキル基は、アルキル鎖に1～4個の炭素原子、つまり、アルキル鎖はメチル、エチル、プロピル、イソ-プロピル、n-ブチル、イソ-ブチル、sec-ブチルおよびt-ブチルからなる群より選ばれるものを示す。

【0060】

前記アルキル基は、具体的な例を挙げると、メチル基、エチル基、プロピル基、イソプロピル基、ブチル基、イソブチル基、t-ブチル基、ペンチル基、ヘキシル基、シクロプロピル基、シクロブチル基、シクロペンチル基、シクロヘキシル基などを意味する。

【0061】

「芳香族基」は、環状の作用基のすべての元素がp-オービタルを有しており、これらp-オービタルが共役(conjugation)を形成している作用基を意味する。具体的な例としてアリール基とヘテロアリール基がある。

30

【0062】

「アリール(aryl)基」とは、環状の置換基のすべての元素がp-オービタルを有しており、これらp-オービタルが共役(conjugation)を形成している置換基を意味し、モノサイクリックまたは融合環ポリサイクリック(つまり、炭素原子の隣接した対を共有する環)作用基を含む。

【0063】

「ヘテロアリール(heteroaryl)基」とは、アリール基内にN、O、SおよびPからなる群より選ばれるヘテロ原子を1～3個含有し、残りは炭素であるものを意味する。前記ヘテロアリール基が融合環である場合、それぞれの環ごとに前記ヘテロ原子を1～3個含むことができる。

40

【0064】

本明細書でカルバゾール系誘導体とは、置換もしくは非置換のカルバゾリル基の窒素原子が窒素でないヘテロ原子または炭素で置換された構造を意味する。具体的な例を挙げると、ジベンゾフラン(ジベンゾフラン基)、ジベンゾチオフェン(ジベンゾチオフェニル基)、フルオレン(フルオレニル基)などである。具体的な例を挙げると、前記ヘテロ原子は、-O-、-S-、-S(O)-、-S(O)<sub>2</sub>-または-NR'-を含むことができる。

【0065】

50

本明細書で、正孔特性とは、HOMO準位に応じて伝導特性を有して陽極で形成された正孔の発光層への注入および発光層での移動を容易にする特性を意味する。より具体的に、電子を押し出す特性とも類似してられる。

【0066】

また電子特性とは、LUMO準位に応じて伝導特性を有して陰極で形成された電子の発光層への注入および発光層での移動を容易にする特性を意味する。より具体的に、電子を引き寄せる特性とも類似してられる。

【0067】

本発明の一実施形態に係る有機光電子素子用化合物は、融合環コアに多様な置換基を選択的に含む構造であり得る。

10

【0068】

前記コア構造は、有機光電子素子の発光材料、正孔注入材料または正孔輸送材料として用いられ得る。特に正孔注入材料または正孔輸送材料に適してられる。

【0069】

また、前記有機光電子素子用化合物は、コア部分とコア部分に置換された置換基に多様なさらに他の置換基を導入することによって多様なエネルギーバンドギャップを有する化合物になり得る。

【0070】

前記化合物の置換基に応じて適切なエネルギー準位を有する化合物を有機光電子素子に用いることによって、正孔伝達能力または電子伝達能力が強化されて効率および駆動電圧の面で優れた効果を有し、電気化学的および熱的安定性に優れて有機光電子素子の駆動時に寿命特性を向上させることができる。

20

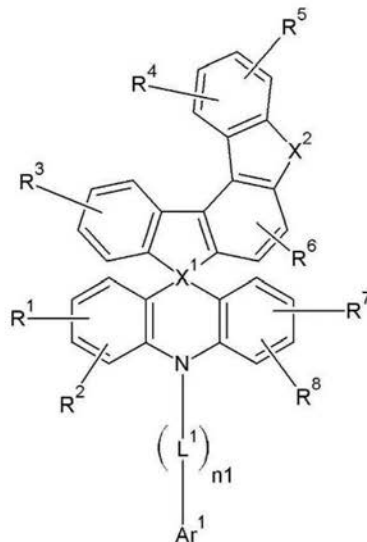
【0071】

本発明の一実施形態によれば、前記有機光電子素子用化合物は、下記化学式1で表され得る。

【0072】

【化4】

[化学式1]



30

40

【0073】

前記化学式1で、X<sup>1</sup>は、CまたはSiであり、X<sup>2</sup>は、O、S、SO<sub>2</sub> (O=S=O)、PO (P=O)、CR'R''またはNR'であり、R'、R''およびR<sup>1</sup>~R<sup>8</sup>は、互いに独立して、水素、重水素、ハロゲン基、シアノ基、ヒドロキシル基、アミノ基、置換もしくは非置換のC<sub>1</sub>~C<sub>20</sub>アミン基、ニトロ基、カルボキシル基、フェロセニル基、置換もしくは非置換のC<sub>1</sub>~C<sub>20</sub>アルキル基、置換もしくは非置換のC<sub>6</sub>~C<sub>30</sub>アリール基、置換もしくは非置換のC<sub>2</sub>~C<sub>30</sub>ヘテロアリール基、置換もしくは非置換のC

50

1 ~ C 2 0 アルコキシ基、置換もしくは非置換の C 6 ~ C 2 0 アリールオキシ基、置換もしくは非置換の C 3 ~ C 4 0 シリルオキシ基、置換または非置換の C 1 ~ C 2 0 アシル基、置換もしくは非置換の C 2 ~ C 2 0 アルコキシカルボニル基、置換もしくは非置換の C 2 ~ C 2 0 アシルオキシ基、置換もしくは非置換の C 2 ~ C 2 0 のアシルアミノ基、置換もしくは非置換の C 2 ~ C 2 0 のアルコキシカルボニルアミノ基、置換もしくは非置換の C 7 ~ C 2 0 アリールオキシカルボニルアミノ基、置換もしくは非置換の C 1 ~ C 2 0 スルファモイルアミノ基、置換もしくは非置換の C 1 ~ C 2 0 スルホニル基、置換もしくは非置換の C 1 ~ C 2 0 のアルキルチオール基、置換もしくは非置換の C 6 ~ C 2 0 アリールチオール基、置換もしくは非置換の C 1 ~ C 2 0 ヘテロシクロチオール基、置換もしくは非置換の C 1 ~ C 2 0 のウレイド基、置換もしくは非置換の C 3 ~ C 4 0 シリル基またはこれらの組み合わせであり、L<sup>1</sup> は、置換もしくは非置換の C 2 ~ C 6 アルケニレン基、置換もしくは非置換の C 2 ~ C 6 アルキニレン基、置換もしくは非置換の C 6 ~ C 3 0 アリーレン基、置換もしくは非置換の C 2 ~ C 3 0 ヘテロアリーレン基またはこれらの組み合わせであり、n<sup>1</sup> は、0 ~ 3 のうちのいずれか一つの整数であり、Ar<sup>1</sup> は、置換もしくは非置換の C 6 ~ C 3 0 アリール基または置換もしくは非置換の C 2 ~ C 3 0 ヘテロアリーレン基であり、Ar<sup>1</sup>、R<sup>8</sup>、および R'<sup>8</sup> のうちの少なくともいずれか一つは、電子特性を有する置換または非置換の C 2 ~ C 3 0 ヘテロアリーレン基である。

10

## 【0074】

前記化学式 1 のような構造の場合、パイポーラ構造を有し、これによって不足した電子輸送（または注入）特性が増加して素子の効率を改善させることができる。

20

## 【0075】

より具体的に、前記 X<sup>2</sup> は、O、S または NR' であり、前記 Ar<sup>1</sup> は、電子特性を有する置換もしくは非置換の C 2 ~ C 3 0 ヘテロアリーレン基であり得る。つまり、電子特性を有する置換基が Ar<sup>1</sup> に位置する場合、電子と正孔の分布が分離されて効率的な正孔および / または電荷の移動が予想され、これによって素子の効率が改善されると考えられる。

## 【0076】

より具体的に、前記 X<sup>2</sup> は、NR' であり、R' は、置換もしくは非置換の C 6 ~ C 3 0 アリール基であり得る。

## 【0077】

より具体的に、前記 X<sup>2</sup> は、NR' であり、前記 R' は、電子特性を有する置換もしくは非置換の C 2 ~ C 3 0 ヘテロアリーレン基であり、前記 Ar<sup>1</sup> は、置換もしくは非置換の C 6 ~ C 3 0 アリール基であり得る。つまり、電子特性を有する置換基が NR' の R' に位置する場合、電子と正孔の分布が分離されて効率的な正孔および / または電荷の移動が予想され、これによって素子の効率が改善されると考えられる。

30

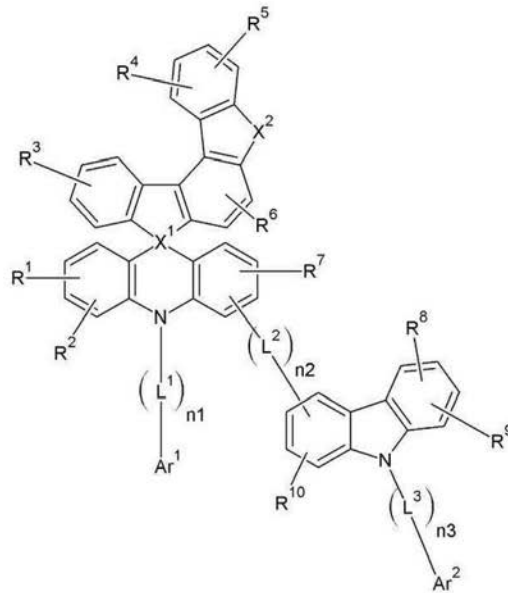
## 【0078】

より具体的に、前記化学式 1 で表される化合物は、下記化学式 2 で表され得る。

## 【0079】

## 【化5】

【化学式2】



10

## 【0080】

前記化学式2で、 $X^1$ は、CまたはSiであり、 $X^2$ は、O、S、 $SO_2$  ( $O=S=O$ )、 $PO$  ( $P=O$ )、 $CR'R''$ または $NR'$ であり、 $R'$ 、 $R''$ および $R^1 \sim R^{10}$ は、互いに独立して、水素、重水素、ハロゲン基、シアノ基、ヒドロキシ基、アミノ基、置換もしくは非置換のC1～C20アミン基、ニトロ基、カルボキシ基、フェロセニル基、置換もしくは非置換のC1～C20アルキル基、置換もしくは非置換のC6～C30アリール基、置換もしくは非置換のC2～C30ヘテロアリール基、置換もしくは非置換のC1～C20アルコキシ基、置換もしくは非置換のC6～C20アリールオキシ基、置換もしくは非置換のC3～C40シリルオキシ基、置換もしくは非置換のC1～C20アシル基、置換もしくは非置換のC2～C20アルコキシカルボニル基、置換もしくは非置換のC2～C20アシルオキシ基、置換もしくは非置換のC2～C20のアシルアミノ基、置換もしくは非置換のC2～C20のアルコキシカルボニルアミノ基、置換もしくは非置換のC7～C20アリールオキシカルボニルアミノ基、置換もしくは非置換のC1～C20スルファモイルアミノ基、置換もしくは非置換のC1～C20スルホニル基、置換もしくは非置換のC1～C20のアルキルチオール基、置換もしくは非置換のC6～C20アリールチオール基、置換もしくは非置換のC1～C20ヘテロシクロチオール基、置換もしくは非置換のC1～C20のウレイド基、置換もしくは非置換のC3～C40シリル基またはこれらの組み合わせであり、 $L^1 \sim L^3$ は、互いに独立して、置換もしくは非置換のC2～C6アルケニレン基、置換もしくは非置換のC2～C6アルキニレン基、置換もしくは非置換のC6～C30アリーレン基、置換もしくは非置換のC2～C30ヘテロアリーレン基またはこれらの組み合わせであり、 $n1 \sim n3$ は、互いに独立して、0～3のうちいずれか一つの整数であり、 $Ar^1$ および $Ar^2$ は、互いに独立して、置換もしくは非置換のC6～C30アリール基または置換もしくは非置換のC2～C30ヘテロアリール基であり、 $Ar^1$ 、 $Ar^2$ 、 $R^5$ 、 $R^8$ 、および $R'$ のうち少なくともいずれか一つは、電子特性を有する置換もしくは非置換のC2～C30ヘテロアリール基である。

30

40

## 【0081】

前記化学式2のように別途のカルバゾリル基を含む場合、化合物に多様な置換基の導入が容易であり、電子と正孔の移動経路が分離されて素子の効率が改善され得る。

## 【0082】

前記 $X^2$ は、O、Sまたは $CR'R''$ であり、前記 $Ar^1$ は、電子特性を有する置換もしくは非置換のC2～C30ヘテロアリール基であり得る。つまり、電子特性を有する置換基が $Ar^1$ に位置する場合、電子と正孔の移動経路が分離されて素子の効率が改善され

50

得る。

【0083】

本発明の一実施形態で、前記 $X^2$ は、OまたはSであり、前記 $Ar^2$ は、置換もしくは非置換のC<sub>6</sub>~C<sub>30</sub>アリール基であり得る。

【0084】

本発明の一実施形態で、前記 $X^2$ は、OまたはSであり、前記 $Ar^2$ は、電子特性を有する置換もしくは非置換のC<sub>2</sub>~C<sub>30</sub>ヘテロアリール基であり、前記 $Ar^1$ は、置換もしくは非置換のC<sub>6</sub>~C<sub>30</sub>アリール基であり得る。つまり、電子特性を有する置換基が $Ar^2$ に位置する場合、電子と正孔の移動経路が分離されて素子の効率が改善され得る。

【0085】

前記 $X^1$ は、Cであり得るが、これに制限されない。

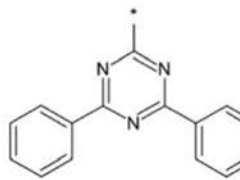
【0086】

前記電子特性を有する置換もしくは非置換のC<sub>2</sub>~C<sub>30</sub>ヘテロアリール基は、下記化学式3~7のうちのいずれか一つで表される置換基であり得るが、これに制限されない。

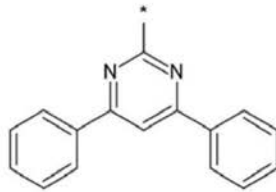
【0087】

【化6】

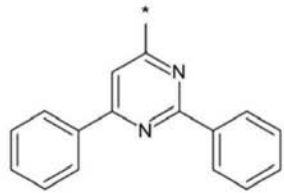
[化学式3]



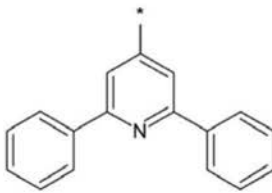
[化学式4]



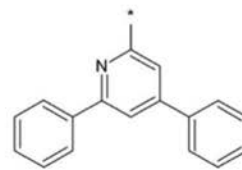
[化学式5]



[化学式6]



[化学式7]



【0088】

前記化合物は、比較的分子量が大きいいため、化合物の蒸着時の分解を抑制することができる。

【0089】

前記 $L^1$ ~ $L^3$ を選択的に調節して化合物全体の共役 (conjugation) の長さを決定することができ、これから三重項 (triplet) エネルギーバンドギャップを調節することができる。これによって、有機光電素子で必要とする材料の特性を実現することができる。また、オルト、パラ、メタの結合位置変更を通じても三重項エネルギーバンドギャップを調節することができる。

【0090】

前記 $L^1$ ~ $L^3$ の具体的な例は、置換もしくは非置換のフェニレン基、置換もしくは非置換のビフェニレン基、置換もしくは非置換のターフェニレン基、置換もしくは非置換のナフチレン基、置換もしくは非置換のアントラセニレン基、置換もしくは非置換のフェナントリレン基、置換もしくは非置換のピレニレン基、置換もしくは非置換のフルオレニレン基、置換もしくは非置換のナфтаセニル基、置換もしくは非置換のクリセニル基、置換もしくは非置換のトリフェニレニル基、置換もしくは非置換のペリレニル基、置換もしくは非置換のインデニル基、置換もしくは非置換のフラニル基、置換もしくは非置換のチオフェニル基、置換もしくは非置換のピロリル基、置換もしくは非置換のピラゾリル基、置換もしくは非置換のイミダゾリル基、置換もしくは非置換のトリアゾリル基、置換もしくは非置換のオキサゾリル基、置換もしくは非置換のチアゾリル基、置換もしくは非置換のオキサジアゾリル基、置換もしくは非置換のチアジアゾリル基、置換もしくは非置換のピ

10

20

30

40

50

リジル基、置換もしくは非置換のピリミジニル基、置換もしくは非置換のピラジニル基、置換もしくは非置換のトリアジニル基、置換もしくは非置換のベンゾフラニル基、置換もしくは非置換のベンゾチオフェニル基、置換もしくは非置換のベンズイミダゾリル基、置換もしくは非置換のインドリル基、置換もしくは非置換のキノリニル基、置換もしくは非置換のイソキノリニル基、置換もしくは非置換のキナゾリニル基、置換もしくは非置換のキノキサリニル基、置換もしくは非置換のナフチリジニル基、置換もしくは非置換のベンズオキサジニル基、置換もしくは非置換のベンズチアジニル基、置換もしくは非置換のアクリジニル基、置換もしくは非置換のフェナジニル基、置換もしくは非置換のフェノチアジニル基および置換もしくは非置換のフェノキサジニル基などである。

【0091】

また、前記化合物は、立体障害性を有しているため、分子間の相互作用が小さくて結晶化が抑制され得る。これによって、素子を製造する収率を向上させることができる。また、製造された素子の寿命特性が改善され得る。

【0092】

また、前記化合物は、比較的分子量が大きいため、化合物の蒸着時の分解を抑制することができる。

【0093】

前記  $Ar^1$  および  $Ar^2$  は、互いに独立して、置換もしくは非置換のフェニル基、置換もしくは非置換のナフチル基、置換もしくは非置換のアントラセニル基、置換もしくは非置換のフェナントリル基、置換もしくは非置換のナフタセニル基、置換もしくは非置換のピレニル基、置換もしくは非置換のピフェニル基、置換もしくは非置換の *p*-ターフェニル基、置換もしくは非置換の *m*-ターフェニル基、置換もしくは非置換のクリセニル基、置換もしくは非置換のトリフェニレニル基、置換もしくは非置換のペリレニル基、置換もしくは非置換のインデニル基、置換もしくは非置換のフラニル基、置換もしくは非置換のチオフェニル基、置換または非置換のピロリル基、置換もしくは非置換のピラゾリル基、置換もしくは非置換のイミダゾリル基、置換もしくは非置換のトリアゾリル基、置換もしくは非置換のオキサゾリル基、置換もしくは非置換のチアゾリル基、置換もしくは非置換のオキサジアゾリル基、置換もしくは非置換のチアジアゾリル基、置換もしくは非置換のピリジニル基、置換もしくは非置換のピリミジニル基、置換もしくは非置換のピラジニル基、置換もしくは非置換のトリアジニル基、置換もしくは非置換のベンゾフラニル基、置換もしくは非置換のベンゾチオフェニル基、置換もしくは非置換のベンズイミダゾリル基、置換もしくは非置換のインドリル基、置換もしくは非置換のキノリニル基、置換もしくは非置換のイソキノリニル基、置換もしくは非置換のキナゾリニル基、置換もしくは非置換のキノキサリニル基、置換もしくは非置換のナフチリジニル基、置換もしくは非置換のベンズオキサジニル基、置換もしくは非置換のベンズチアジニル基、置換もしくは非置換のアクリジニル基、置換もしくは非置換のフェナジニル基、置換もしくは非置換のフェノチアジニル基、置換もしくは非置換のフェノキサジニル基またはこれらの組み合わせであり得るが、これに制限されない。

【0094】

より具体的に、前記  $Ar^1$  および  $Ar^2$  のうちの少なくともいずれか一つは、置換もしくは非置換のピフェニル基であり得る。

【0095】

または、前記  $Ar^1$  および  $Ar^2$  のうちの少なくともいずれか一つは、置換もしくは非置換のフルオレニル基であり得る。

【0096】

前記  $R^1 \sim R^{10}$  のうちの少なくともいずれか一つは、置換もしくは非置換の  $C_3 \sim C_4$  シリル基であり得る。

【0097】

前記シリル基は、有機光電子素子の製造時に蒸着温度を低めることができ、溶媒に対する溶解度を増加させて素子の製造工程を溶液工程に転換させることができる。

10

20

30

40

50

## 【 0 0 9 8 】

より具体的に、前記  $R^1 \sim R^{10}$  のうちの少なくともいずれか一つは、置換された  $C_3 \sim C_{40}$  シリル基であり、前記置換されたシリル基の水素のうちの少なくともいずれか一つは、 $C_1 \sim C_{10}$  アルキル基または  $C_6 \sim C_{15}$  アリール基で置換されたものであり得る。

## 【 0 0 9 9 】

前記置換されたシリル基の具体的な例としては、トリメチルシリル基、トリフェニルシリル基などがある。

## 【 0 1 0 0 】

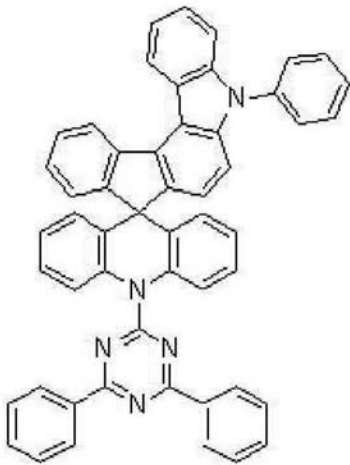
前記有機光電子素子用化合物の具体的な例は、下記のとおりであり、これに制限されない。

10

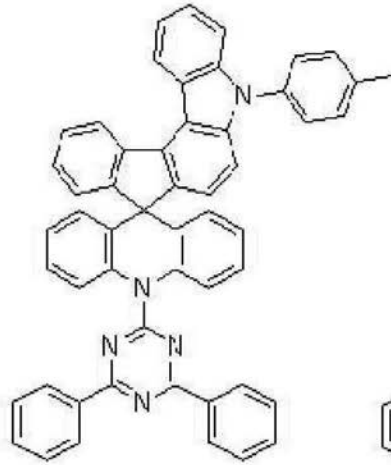
## 【 0 1 0 1 】

【化 7】

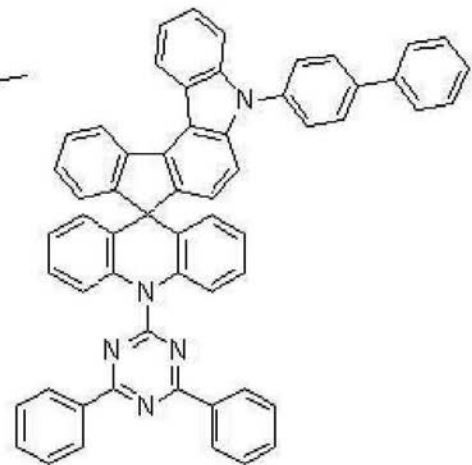
[A-1]



[A-2]

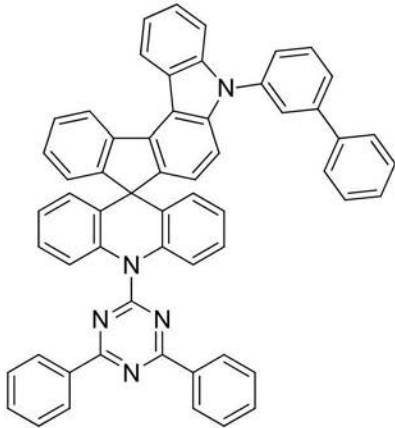


[A-3]

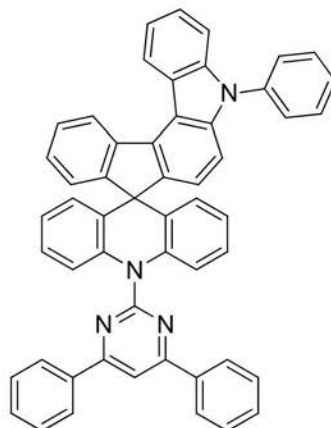


10

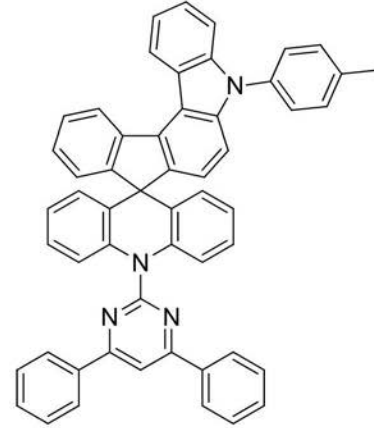
[A-4]



[A-5]

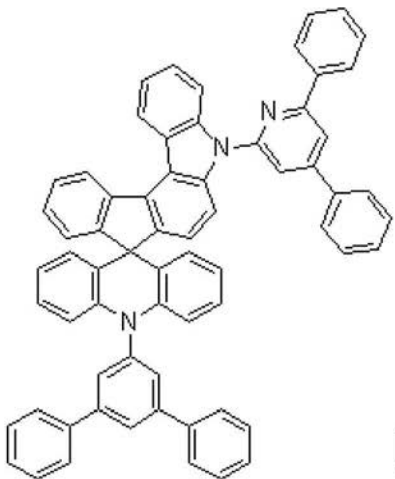


[A-6]

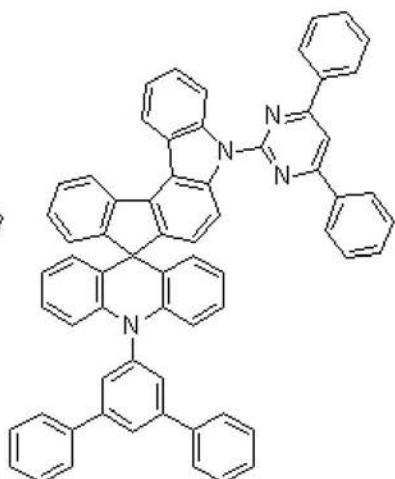


20

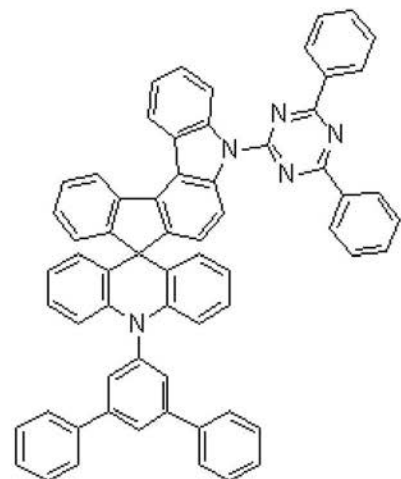
[A-7]



[A-8]



[A-9]



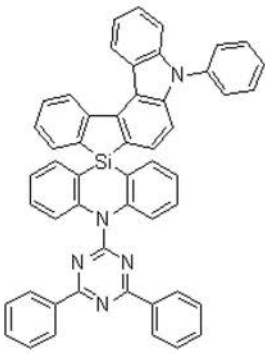
30

【 0 1 0 2 】

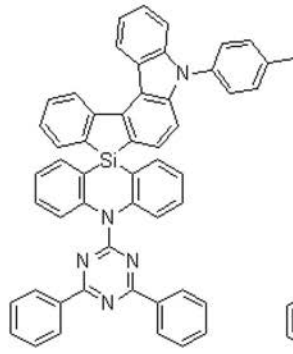
40

【化 8】

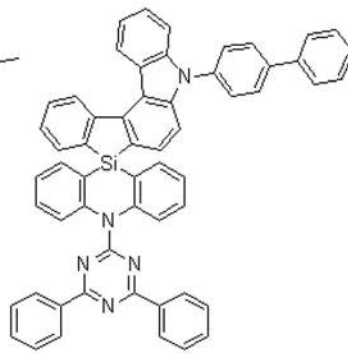
[A-10]



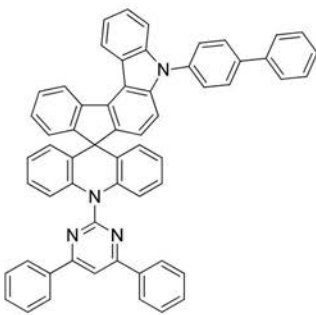
[A-11]



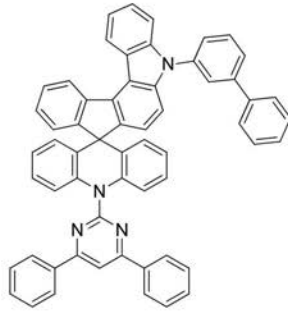
[A-12]



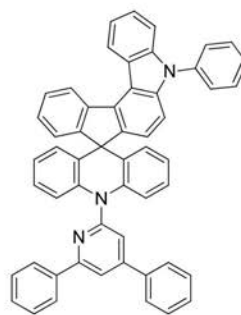
[A-13]



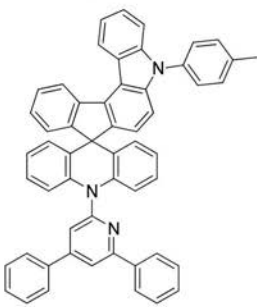
[A-14]



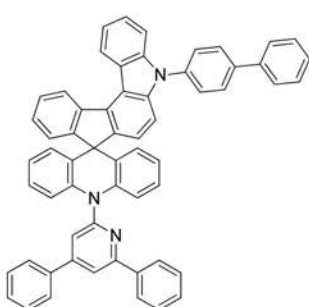
[A-15]



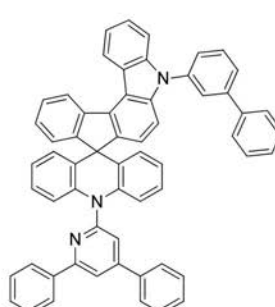
[A-16]



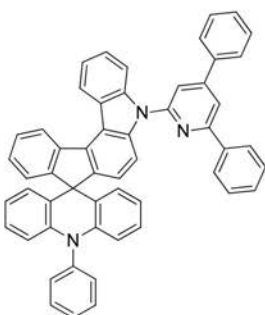
[A-17]



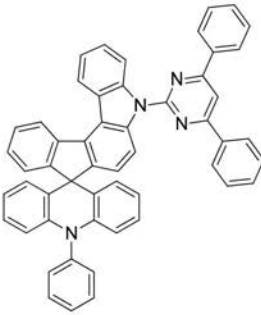
[A-18]



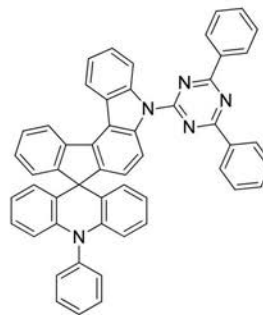
[A-19]



[A-20]



[A-21]



【 0 1 0 3 】

10

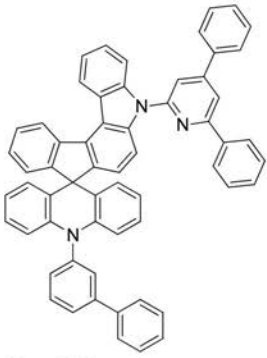
20

30

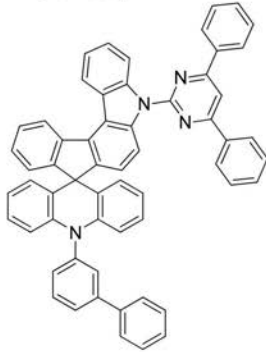
40

【化 9】

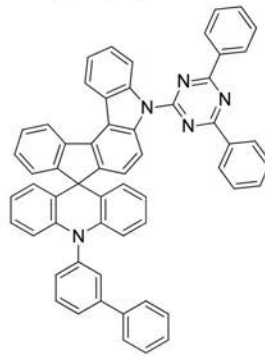
[A-22]



[A-23]

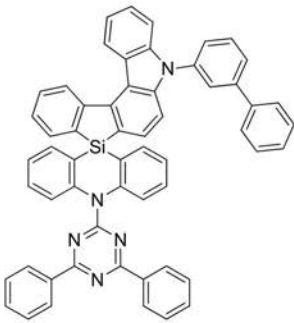


[A-24]

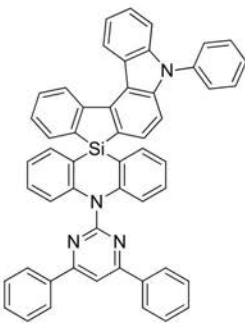


10

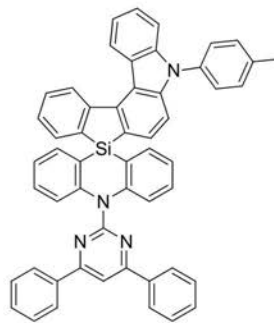
[A-25]



[A-26]

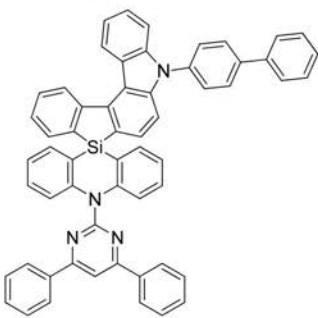


[A-27]

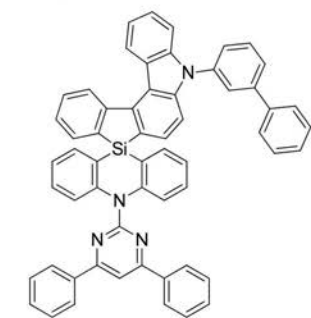


20

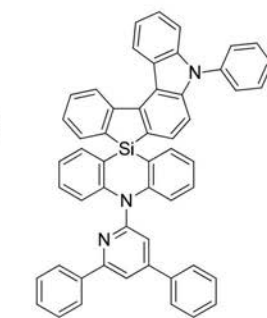
[A-28]



[A-29]

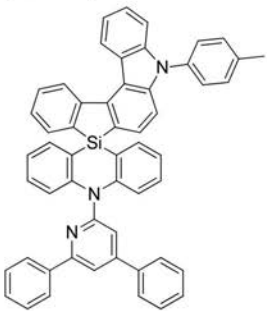


[A-30]

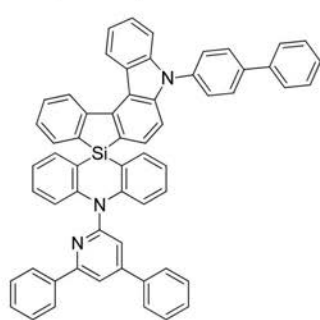


30

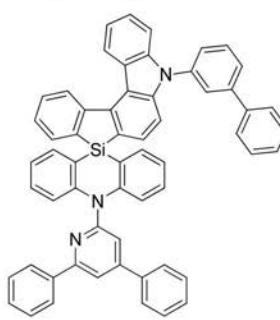
[A-31]



[A-32]



[A-33]

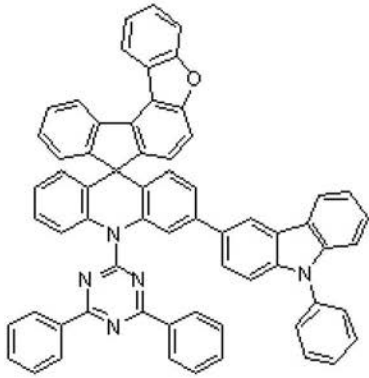


40

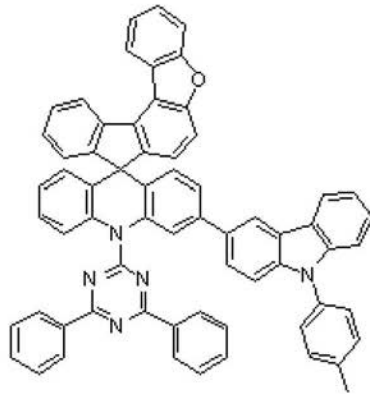
【 0 1 0 4 】

【化 1 0】

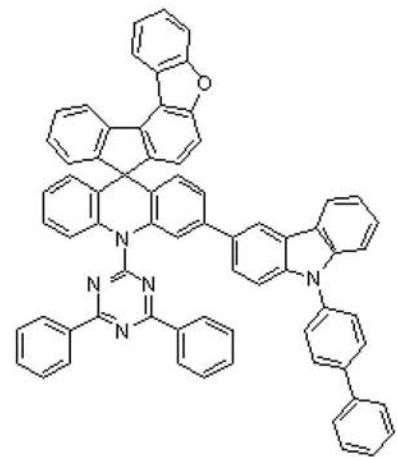
[B-1]



[B-2]

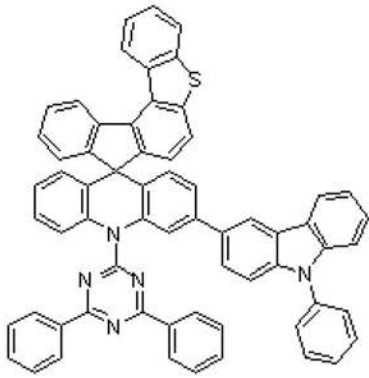


[B-3]

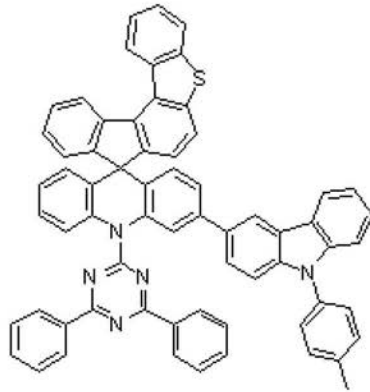


10

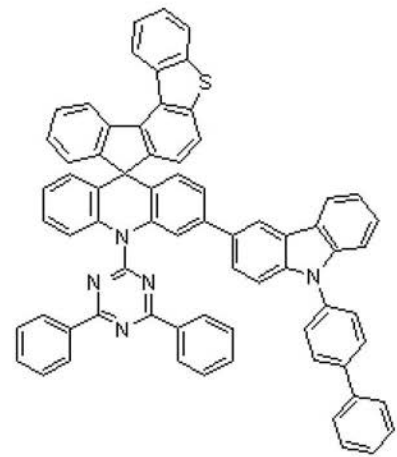
[B-4]



[B-5]

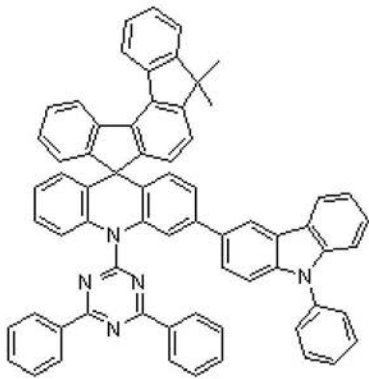


[B-6]

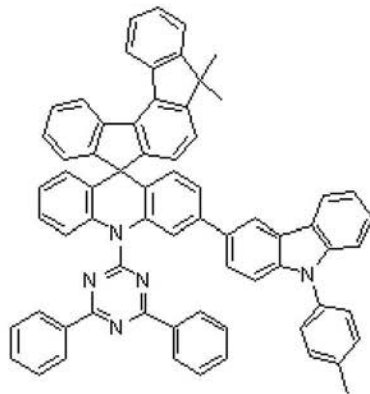


20

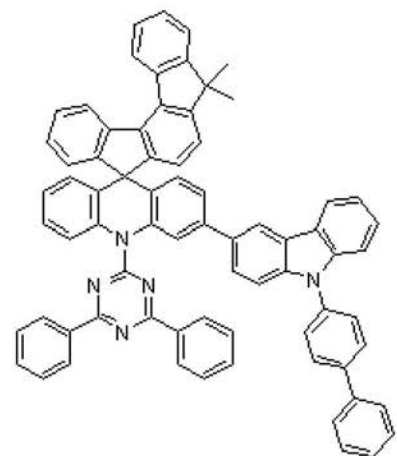
[B-7]



[B-8]



[B-9]



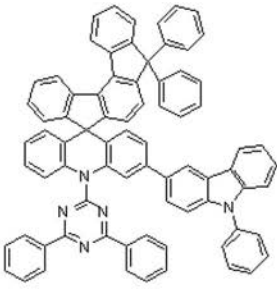
30

40

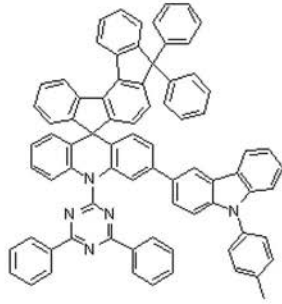
【 0 1 0 5】

【化 1 1】

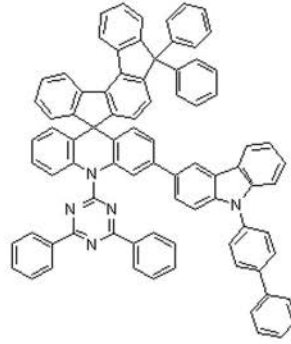
[B-10]



[B-11]

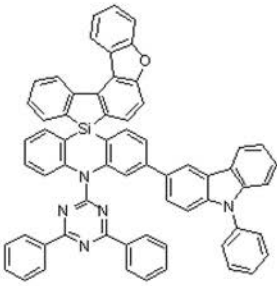


[B-12]

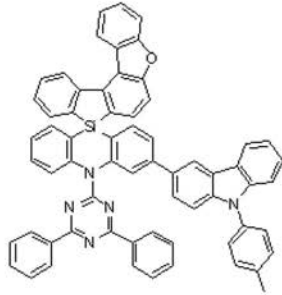


10

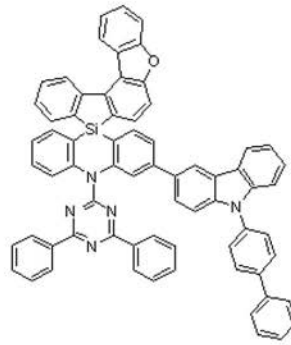
[B-13]



[B-14]

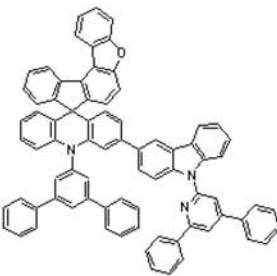


[B-15]

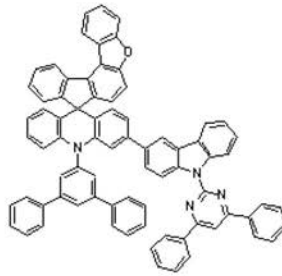


20

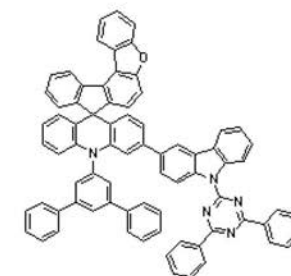
[B-16]



[B-17]

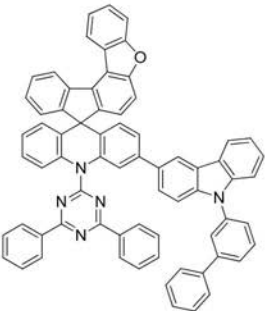


[B-18]

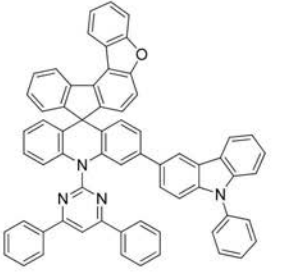


30

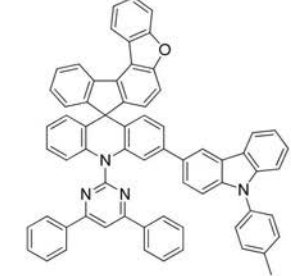
[B-19]



[B-20]



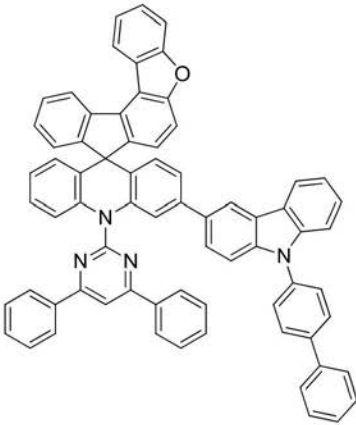
[B-21]



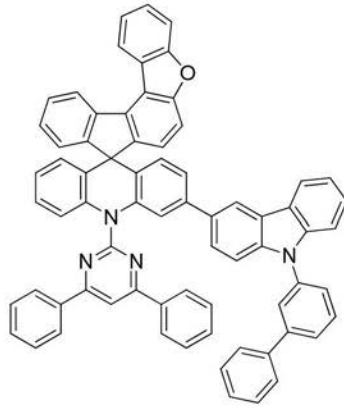
40

【 0 1 0 6 】

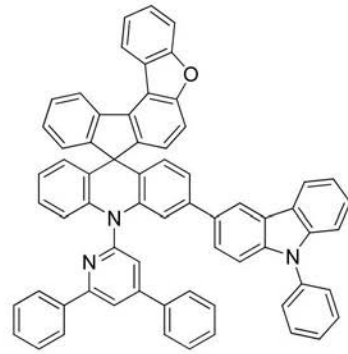
【化 1 2】  
[B-22]



[B-23]

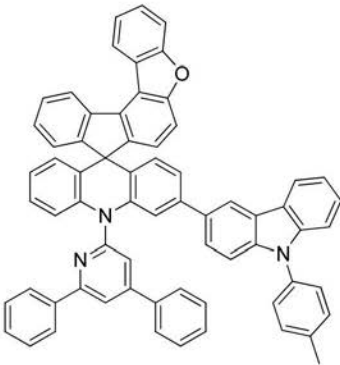


[B-24]

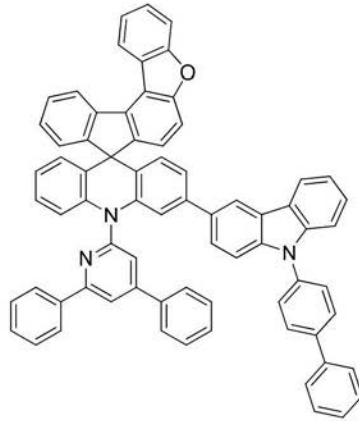


10

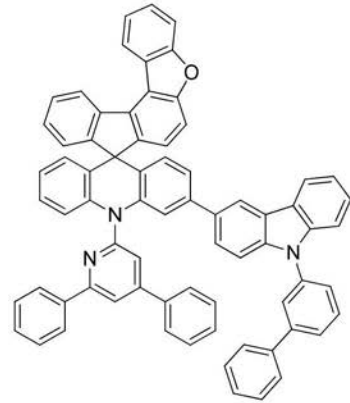
[B-25]



[B-26]

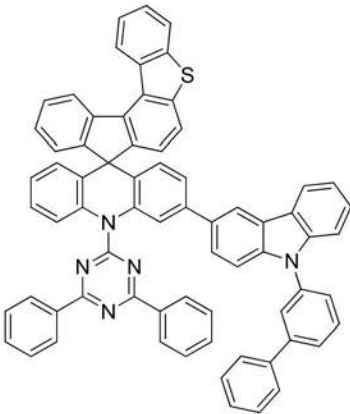


[B-27]

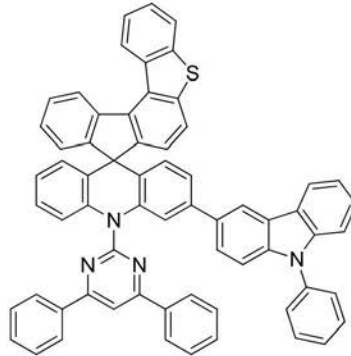


20

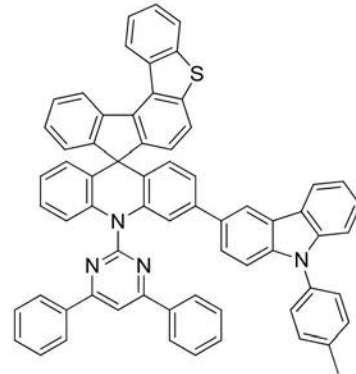
[B-28]



[B-29]



[B-30]



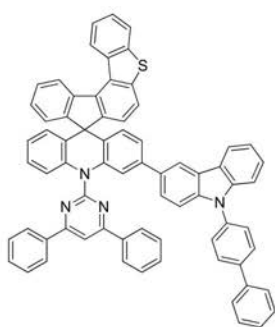
30

【 0 1 0 7 】

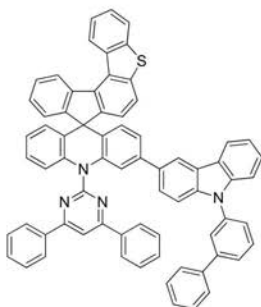
40

## 【化 1 3】

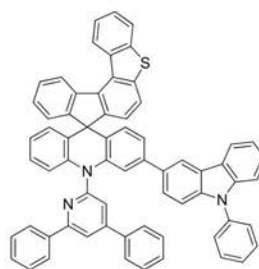
[B-31]



[B-32]

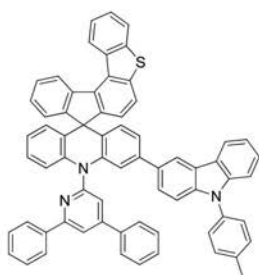


[B-33]

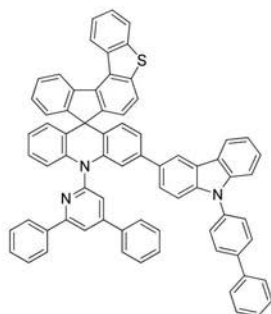


10

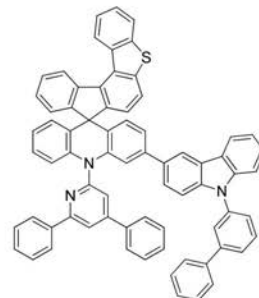
[B-34]



[B-35]

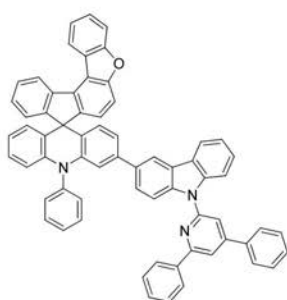


[B-36]

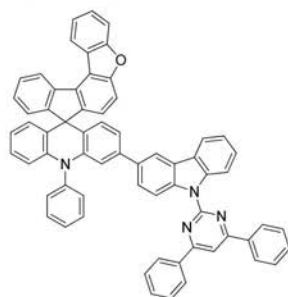


20

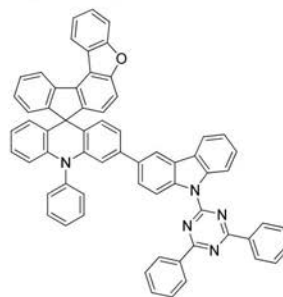
[B-37]



[B-38]

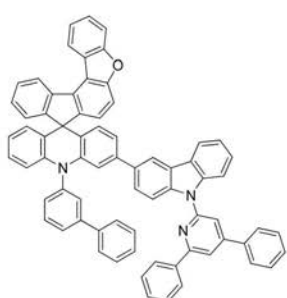


[B-39]

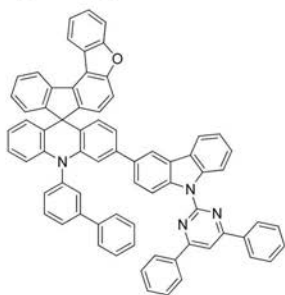


30

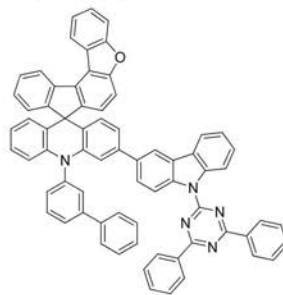
[B-40]



[B-41]



[B-42]



40

## 【0108】

前述した本発明の一実施形態に係る有機光電子素子用化合物は、最大発光波長が約320～500nm範囲を示し、三重項励起エネルギー（T1）が2.0eV以上、より具体的に2.0～4.0eV範囲であることから、高い三重項励起エネルギーを有するホストの電荷がドープントによく伝達されてドープントの発光効率を高めることができ、材料のホモ（HOMO）とルモ（LUMO）エネルギー準位を自由に調節して駆動電圧を下げるができるという利点があるため、ホスト材料または電荷輸送材料として非常に有用に用いられ得る。

## 【0109】

しかも、前記有機光電子素子用化合物は、光活性および電気的な活性を有しているため、非線形光学素材、電極材料、変色材料、光スイッチ、センサー、モジュール、ウェーブ

50

ガイド、有機トランジスタ、レーザ、光吸収体、誘電体および分離膜 ( m e m b r a n e ) などの材料としても非常に有用に適用され得る。

【 0 1 1 0 】

このような化合物を含む有機光電子素子用化合物は、ガラス転移温度が 9 0 以上であり、熱分解温度が 4 0 0 以上で熱的安定性に優れている。これによって、高効率の有機光電素子の実現が可能である。

【 0 1 1 1 】

このような化合物を含む有機光電子素子用化合物は、発光、または電子注入および/または輸送の役割を果たすことができ、適切なドーパントと共に発光ホストとしての役割も果たすことができる。つまり、前記有機光電子素子用化合物は、燐光または蛍光のホスト材料、青色の発光ドーパント材料、または電子輸送材料として用いられ得る。

10

【 0 1 1 2 】

本発明の一実施形態に係る有機光電子素子用化合物は、有機薄膜層に使用されて有機光電子素子の寿命特性、効率特性、電気化学的安定性および熱的安定性を向上させ、駆動電圧を低めることができる。

【 0 1 1 3 】

これによって、本発明の一実施形態は、前記有機光電子素子用化合物を含む有機光電子素子を提供する。この時、前記有機光電子素子とは、有機光電素子、有機発光素子、有機太陽電池、有機トランジスタ、有機感光体ドラム、有機メモリ素子などを意味する。特に、有機太陽電池の場合には本発明の一実施形態に係る有機光電子素子用化合物が電極や電極バッファ層に含まれて量子効率を増加させ、有機トランジスタの場合にはゲート、ソース・ドレイン電極などで電極物質として用いられ得る。

20

【 0 1 1 4 】

以下、有機発光素子について具体的に説明する。

【 0 1 1 5 】

本発明の他の一実施形態は、陽極、陰極および前記陽極と陰極との間に位置する少なくとも一層以上の有機薄膜層を含む有機発光素子において、前記有機薄膜層のうちの少なくともいずれか一層は、本発明の一実施形態に係る有機光電子素子用化合物を含む有機発光素子を提供する。

【 0 1 1 6 】

前記有機光電子素子用化合物を含むことができる有機薄膜層としては、発光層、正孔輸送層、正孔注入層、電子輸送層、電子注入層、正孔遮断層およびこれらの組み合わせからなる群より選ばれる層を含むことができる。この中で少なくともいずれか一層は本発明による有機光電子素子用化合物を含む。特に、正孔輸送層または正孔注入層に本発明の一実施形態に係る有機光電子素子用化合物を含むことができる。また、前記有機光電子素子用化合物が発光層内に含まれる場合、前記有機光電子素子用化合物は、燐光または蛍光ホストとして含まれ、特に、蛍光青色ドーパント材料として含まれ得る。

30

【 0 1 1 7 】

図 1 乃至図 5 は、本発明の一実施形態に係る有機光電子素子用化合物を含む有機発光素子の断面図である。

40

【 0 1 1 8 】

図 1 乃至図 5 を参照すれば、本発明の一実施形態に係る有機発光素子 1 0 0 、 2 0 0 、 3 0 0 、 4 0 0 、 5 0 0 は、陽極 1 2 0 、 陰極 1 1 0 、 およびこの陽極と陰極との間に位置する少なくとも一層の有機薄膜層 1 0 5 を含む構造を有する。

【 0 1 1 9 】

前記陽極 1 2 0 は、陽極物質を含み、この陽極物質としては、通常、有機薄膜層へ正孔注入が円滑に行われるように仕事関数が高い物質が好ましい。前記陽極物質の具体的な例としては、ニッケル、白金、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が挙げられ、亜鉛酸化物、インジウム酸化物、インジウム錫酸化物 ( I T O ) 、 インジウム亜鉛酸化物 ( I Z O ) のような金属酸化物が挙げられ、 Z n O と A l または

50

$\text{SnO}_2$  と  $\text{Sb}$  のような金属と酸化物の組み合わせが挙げられ、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](ポリエチレンジオキシチオフェン:PEDT)、ポリピロールおよびポリアニリンのような伝導性高分子などが挙げられるが、これに限定されない。好ましくは、前記陽極としてITO(インジウム錫酸化物)を含む透明電極を用いることができる。

#### 【0120】

前記陰極110は、陰極物質を含み、この陰極物質としては、通常、有機薄膜層へ電子注入が容易に行われるように仕事関数が小さい物質が好ましい。陰極物質の具体的な例としては、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、錫、鉛、セシウム、バリウムなどのような金属またはこれらの合金が挙げられ、 $\text{LiF}/\text{Al}$ 、 $\text{LiO}_2/\text{Al}$ 、 $\text{LiF}/\text{Ca}$ 、 $\text{LiF}/\text{Al}$  および  $\text{BaF}_2/\text{Ca}$  のような多層構造物質などが挙げられるが、これに限定されない。好ましくは、前記陰極としてアルミニウムなどのような金属電極を用いることができる。

10

#### 【0121】

まず、図1を参照すれば、図1は、有機薄膜層105として発光層130だけが存在する有機発光素子100を示したものであり、前記有機薄膜層105は発光層130だけで存在することができる。

#### 【0122】

図2を参照すれば、図2は、有機薄膜層105として電子輸送層を含む発光層230と正孔輸送層140とが存在する2層型有機発光素子200を示したものであり、図2に示されているように、有機薄膜層105は、発光層230および正孔輸送層140を含む2層型であってもよい。この場合、発光層130は、電子輸送層の機能を果たし、正孔輸送層140は、ITOのような透明電極との接合性および正孔輸送性を向上させる機能を果たす。

20

#### 【0123】

図3を参照すれば、図3は、有機薄膜層105として電子輸送層150、発光層130および正孔輸送層140が存在する3層型有機発光素子300であって、前記有機薄膜層105で発光層130は独立した形態からなっており、電子輸送性や正孔輸送性に優れた膜(電子輸送層150および正孔輸送層140)を別途の層で積んだ形態を示している。

30

#### 【0124】

図4を参照すれば、図4は、有機薄膜層105として電子注入層160、発光層130、正孔輸送層140および正孔注入層170が存在する4層型有機発光素子400であって、前記正孔注入層170は、陽極として用いられるITOとの接合性を向上させることができる。

#### 【0125】

図5を参照すれば、図5は、有機薄膜層105として電子注入層160、電子輸送層150、発光層130、正孔輸送層140および正孔注入層170のようなそれぞれ異なる機能を果たす5層が存在する5層型有機発光素子500を示しており、前記有機発光素子500は、電子注入層160を別途に形成して低電圧化に効果的である。

40

#### 【0126】

前記図1乃至図5で前記有機薄膜層105を形成する電子輸送層150、電子注入層160、発光層130、230、正孔輸送層140、正孔注入層170およびこれらの組み合わせからなる群より選ばれるいずれか一つは、前記有機光電子素子用化合物を含む。この時、前記有機光電子素子用化合物は、前記電子輸送層150または電子注入層160を含む電子輸送層150に使用可能であり、その中でも電子輸送層に含まれる場合、正孔遮断層(図示せず)を別途に形成する必要がないため、単純化した構造の有機発光素子を提供することができるため好ましい。

#### 【0127】

また、前記有機光電子素子用化合物が発光層130、230内に含まれる場合、前記有

50

機光電子素子用化合物は、燐光または蛍光ホストとして含まれ、または蛍光青色ドーパントとして含まれ得る。

【0128】

前述した有機発光素子は、基板に陽極を形成した後、真空蒸着法 (evaporation)、スパッタリング (sputtering)、プラズマメッキおよびイオンメッキのような乾式成膜法；またはスピンコーティング (spin coating)、浸漬法 (dipping)、フローコーティング法 (flow coating) のような湿式成膜法などで有機薄膜層を形成した後、その上に陰極を形成して製造することができる。

【0129】

本発明のさらに他の一実施形態によれば、前記有機発光素子を含む表示装置を提供する。

10

【実施例】

【0130】

以下、本発明の具体的な実施例を提示する。ただし、下記に記載された実施例は、本発明を具体的に例示したり説明するためのものに過ぎず、これによって本発明が制限されることはない。

【0131】

(有機光電子素子用化合物の製造)

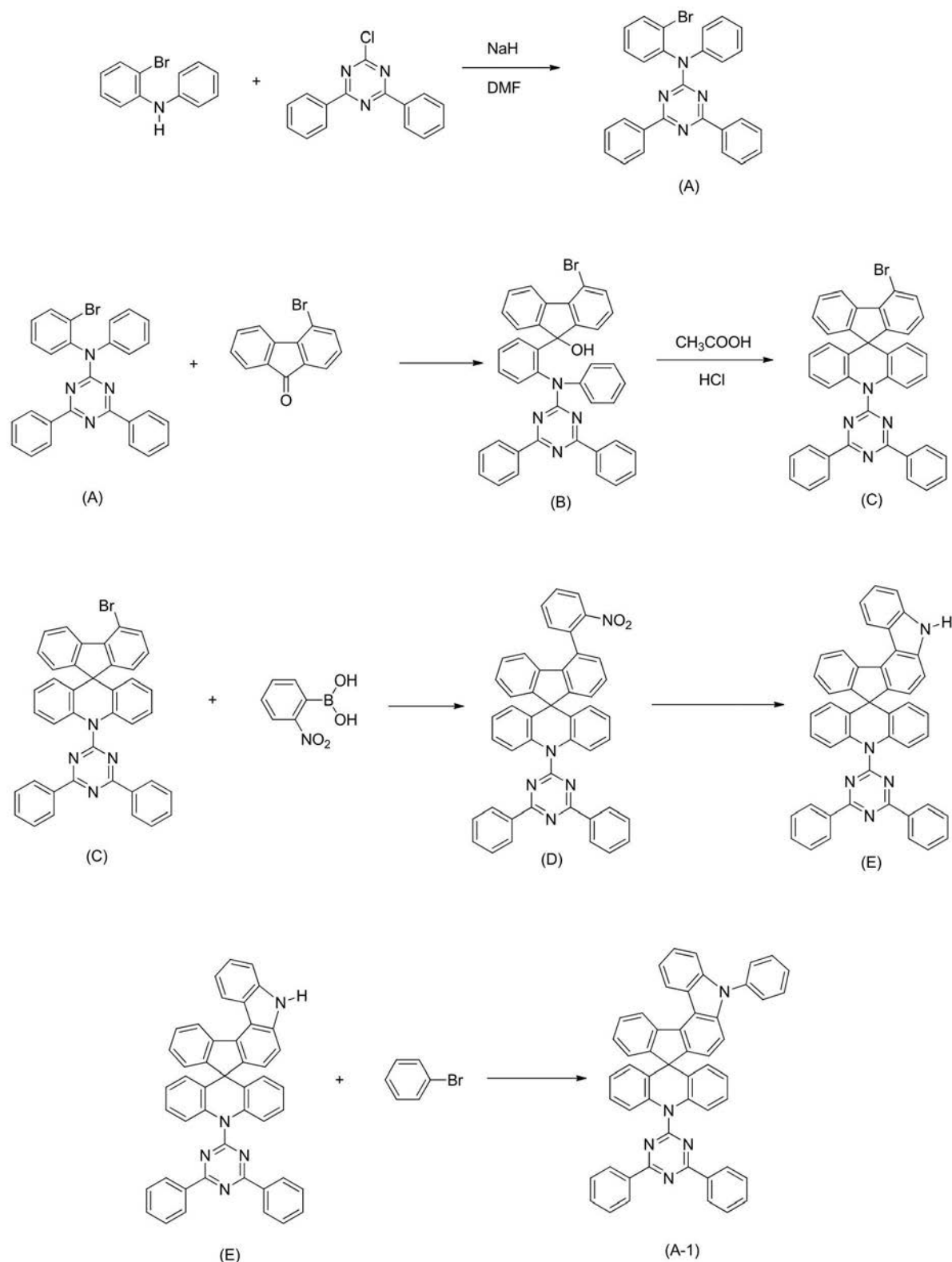
実施例1：化学式(A-1)で表される化合物の合成

本発明の有機光電子素子用化合物のより具体的な例として提示された前記化学式(A-1)で表される化合物は、下記の反応式1のような方法を通じて合成された。

20

【0132】

【化 1 4】  
[反応式 1]



10

20

30

40

【 0 1 3 3 】

第 1 段階：化合物 ( A ) の合成

2000 mL の丸いフラスコで 2 - プロモ - N - フェニルアニリン 30 g ( 120 mmol )、1 - クロロ - 3, 5 - フェニルトリアジン 38. 8 g ( 150 mmol )、水素化ナトリウム 7. 3 g ( 300 mmol ) をジメチルホルムアルデヒド 900 mL に攪拌しながら常温で 24 時間攪拌した。反応溶液を蒸留水に徐々に滴下して未反応水素化ナトリウムを除去した後、再び過量の蒸留水に反応溶液を注いだ後、フィルターを実施する。

50

得られた固体を過量のメチレンクロライドに溶かした後、ホットフィルターを実施し、再びメチレンクロライドを除去し、メタノールで沈澱した後、得られた固体をフィルターして化合物(A) 40.5 g (収率70%)を得た。

【0134】

前記で得た(A)で表される化合物を元素分析で分析した結果は次のとおりである。

【0135】

calcd.  $C_{27}H_{19}BrN_4$ : C, 67.65; H, 4.00; Br, 16.67; N, 11.69; found: C, 67.35; H, 4.03; N, 10.88。

【0136】

第2段階: 化合物(C)の合成

化合物(A)で表される化合物30 g (62.5 mmol)を500 mLの丸いフラスコに入れ、窒素状態の反応雰囲気を作り、精製されたテトラヒドロフラン300 mLに溶かした後、反応器周囲温度を-78に維持した。その後、2.5 M-ノルマルブチルリチウム25 mLを徐々に滴下した。滴下完了後、30分間の攪拌を実施した後、4-プロモフルオレノン16.2 g (62.5 mmol)を200 mLの精製されたテトラヒドロフランに溶かした後、徐々に滴下した。反応溶液を-78に維持した状態で約1時間の攪拌後、常温に上げて翌朝まで攪拌を継続した。反応溶液に5 wt%の重炭酸ナトリウム水溶液を入れて反応を終了した後、メチレンクロライドを用いて分液抽出した。得られた有機層を硫酸マグネシウムを用いて残存する水を除去した後、減圧蒸留して中間体(B)を得ることができた。精製されていない中間体(B)を400 mLの酢酸に入れた後、触媒量の塩酸を滴下し、還流温度で12時間攪拌した。反応終了後、カラムクロマトグラフィーを用いて化合物(C) 24 g (収率62%)を得た。

10

20

【0137】

前記で得た(C)で表される化合物を元素分析で分析した結果は次のとおりである。

【0138】

calcd.  $C_{40}H_{25}BrN_4$ : C, 74.88; H, 3.93; Br, 12.45; N, 8.73; found: C, 74.65; H, 3.91; N, 8.75。

【0139】

第3段階: 化合物(E)の合成

化合物(C)で表される化合物20 g (31.1 mmol)、2-ニトロベンゼンボロン酸化合物6.3 g (31.1 mmol)、およびテトラキストリフェニルホスフィン1.8 g (1.2 mmol)をトルエン/テトラヒドロフラン400 mLに懸濁させ、2 M炭酸カリウム水溶液400 mLを入れた後、窒素気流下で24時間加熱して還流した。反応溶液をMeOH 2000 mLに加えて結晶化された固形分をフィルターした後、モノクロロベンゼンに溶かしてシリカゲル/セライトでフィルターした。有機溶媒を適量除去した後、MeOHで再結晶して化合物(D) 15 g (収率70%)を得た。

30

【0140】

前記で得た(D)で表される化合物15 g (20 mmol)をトリエチルホスファート18 g (100 mmol)と窒素気流下で攪拌しながら一晩中攪拌した。未反応トリエチルホスファートを真空蒸留法を用いて除去した後、フラスコに残っている固体をカラムクロマトグラフィー方法を用いて化合物(E) 8.52 g (13.1 mmol)を得た。

40

【0141】

前記で得た(E)を元素分析で分析した結果は次のとおりである。

【0142】

calcd.  $C_{46}H_{29}N_5$ : C, 84.77; H, 4.48; N, 10.75; found: C, 84.73; H, 4.45; N, 10.78。

【0143】

第4段階: 化合物(A-1)の合成

化合物(E)で表される化合物8.5 g (13 mmol)、プロモベンゼン2.5 g (15.6 mmol)、および炭酸カリウム2.8 g (19.5 mmol)をDMSO 25

50

0 ml に懸濁させ、1,10-フェナントリン 0.5 g (0.3 mmol) と塩化銅 0.3 g (0.3 mmol) を入れた後、窒素気流下で 12 時間加熱して還流した。反応溶液を MeOH 1000 ml に加えて結晶化された固形分をフィルターした後、モノクロロベンゼンに溶かしてシリカゲル/セライトでフィルターした。有機溶媒を適当量除去した後、MeOH で再結晶して化合物 (A-1) 5.7 g (収率 60%) を得た。

【0144】

前記で得た (A-1) で表される化合物を元素分析で分析した結果は次のとおりである。

。

【0145】

calcd. C<sub>52</sub>H<sub>33</sub>N<sub>5</sub>: C, 85.81; H, 4.57; N, 9.62; found: C, 85.76; H, 4.60; N, 9.58。

10

【0146】

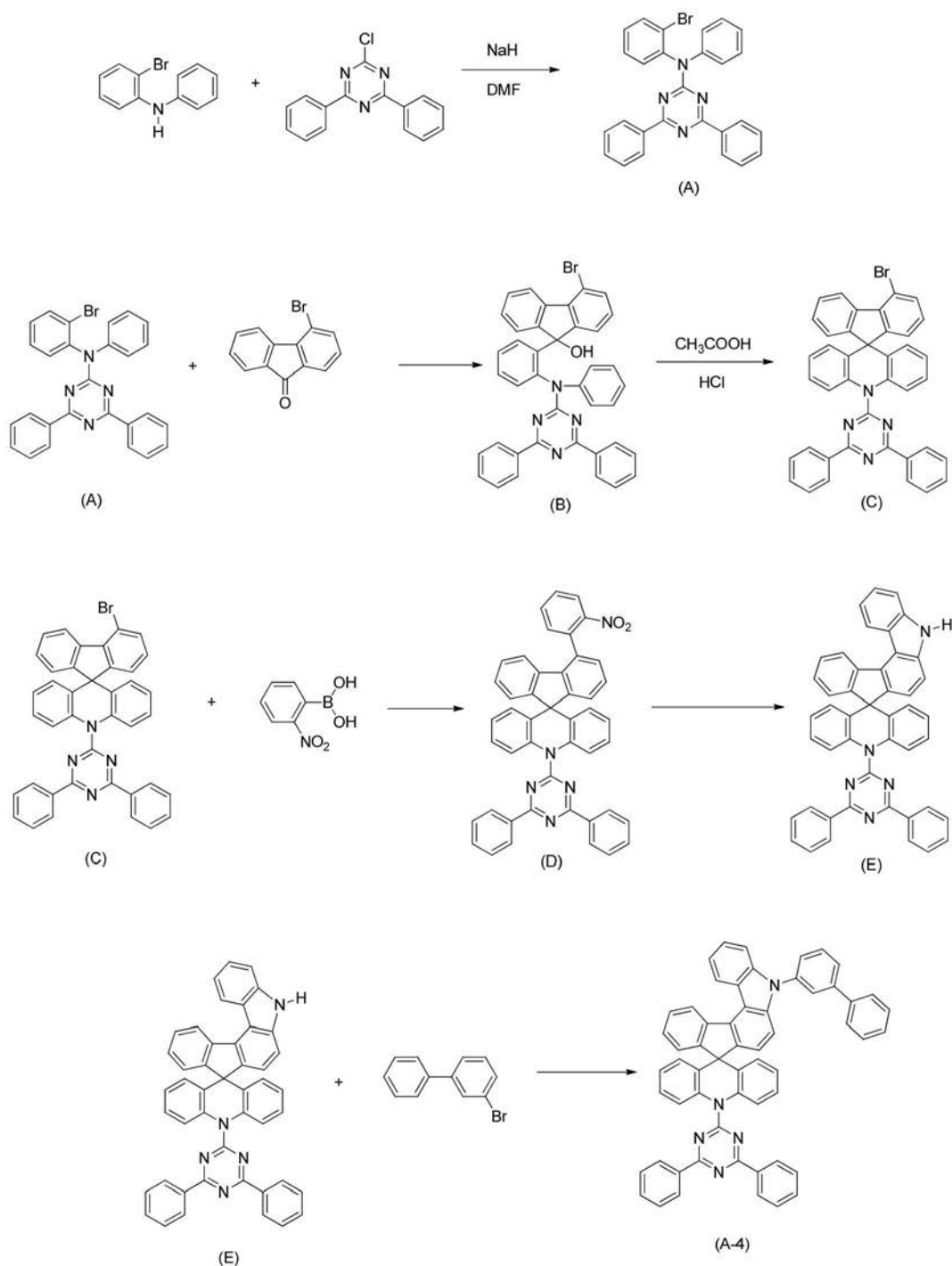
実施例 2: 化学式 (A-4) で表される化合物の合成

本発明の有機光電子素子用化合物のより具体的な例として提示された前記化学式 (A-4) で表される化合物は、下記の反応式 2 のような方法を通じて合成された。

【0147】

## 【化 1 5】

## [反応式 2]



10

20

30

40

50

## 【 0 1 4 8】

第 1 段階：化合物 (A - 4) の合成

実施例 1 で 1 段階、2 段階および 3 段階を経て合成された化合物 (E) で表される化合物 8.5 g (13 mmol)、3-ブロモビフェニル 3 g (15.6 mmol)、および炭酸カリウム 2.8 g (19.5 mmol) を DMSO 250 ml に懸濁させ、1,10-フェナントロリン 0.5 g (0.3 mmol) と塩化銅 0.3 g (0.3 mmol) を入れた後、窒素気流下で 12 時間加熱して還流した。反応溶液を MeOH 1000 ml に加えて結晶化された固形分をフィルターした後、モノクロロベンゼンに溶かしてシリカゲル/セライトでフィルターした。有機溶媒を適量除去した後、MeOH で再結晶して化合物 (A - 4) 6.3 g (収率 60%) を得た。

## 【 0 1 4 9】

前記で得た ( A - 4 ) で表される化合物を元素分析で分析した結果は次のとおりである。

【 0 1 5 0 】

calcd. C<sub>58</sub>H<sub>37</sub>N<sub>5</sub>: C, 86.65; H, 4.64; N, 8.71; found: C, 86.67; H, 4.61; N, 8.73。

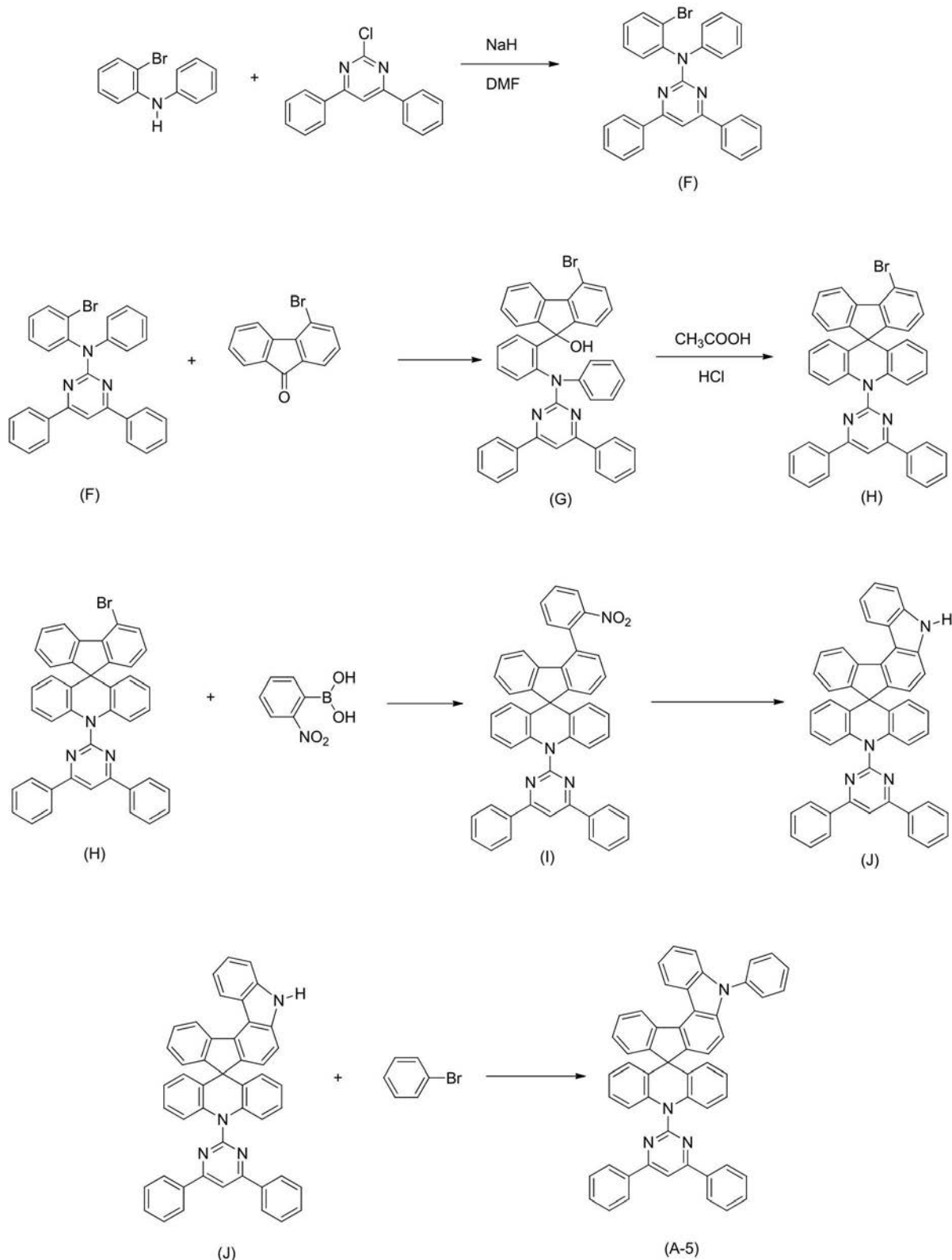
【 0 1 5 1 】

実施例 3 : 化学式 ( A - 5 ) で表される化合物の合成

本発明の有機光電子素子用化合物のより具体的な例として提示された前記化学式 ( A - 5 ) で表される化合物は、下記の反応式 3 のような方法を通じて合成された。

【 0 1 5 2 】

【化 1 6】  
【反応式 3】



10

20

30

40

【 0 1 5 3 】

第 1 段階：化合物 ( F ) の合成

2000 mL の丸いフラスコで 2 - プロモ - N - フェニルアニリン 30 g ( 120 mmol )、1 - クロロ - 3, 5 - フェニルピリミジン 38.8 g ( 150 mmol )、水素化ナトリウム 7.3 g ( 300 mmol ) をジメチルホルムアルデヒド 900 mL に攪拌しながら常温で 24 時間攪拌した。反応溶液を蒸留水に徐々に滴下して未反応水素化ナト

50

リウムを除去した後、再び過量の蒸留水に反応溶液を注ぎ、フィルターを実施した。得られた固体を過量のメチレンクロライドに溶かした後、ホットフィルターを実施し、再びメチレンクロライドを除去し、メタノールで沈澱した後、得られた固体をフィルターして化合物(D) 36.5 g (収率66%)を得た。

【0154】

前記で得た(D)で表される化合物を元素分析で分析した結果は次のとおりである。

【0155】

calcd.  $C_{28}H_{20}BrN_3$ : C, 70.30; H, 4.21; Br, 16.70; N, 8.78; found: C, 70.32; H, 4.20; N, 8.90。

【0156】

第2段階：化合物(H)の合成

化合物(F)で表される化合物30 g (62.5 mmol)を500 mLの丸いフラスコに入れた後、窒素状態の反応雰囲気を作り、精製されたテトラヒドロフラン300 mLに溶かした後、反応器周囲温度を-78に維持した。その後、2.5 M - ノルマルブチルリチウム25 mLを徐々に滴下した。滴下完了後、30分間の攪拌を実施した後、4-プロモフルオレノン16.2 g (62.5 mmol)を200 mLの精製されたテトラヒドロフランに溶かした後、徐々に滴下した。反応溶液を-78に維持した状態で約1時間の攪拌後、常温に上げて翌朝まで攪拌を継続した。反応溶液に5 wt%の重炭酸ナトリウム水溶液を入れて反応を終了した後、メチレンクロライドを用いて分液抽出した。得られた有機層を硫酸マグネシウムを用いて残存する水を除去した後、減圧蒸留して中間体(G)を得ることができた。精製されていない中間体(G)を400 mLの酢酸に入れた後、触媒量の塩酸を滴下し、還流温度で12時間攪拌した。反応終了後、カラムクロマトグラフィーを用いて化合物(H) 28 g (収率64%)を得た。

【0157】

前記で得た(H)で表される化合物を元素分析で分析した結果は次のとおりである。

【0158】

calcd.  $C_{41}H_{26}BrN_3$ : C, 76.88; H, 4.09; Br, 12.47; N, 6.56; found: C, 76.72; H, 4.15; N, 6.61。

【0159】

第3段階：化合物(J)の合成

化合物(H)で表される化合物20 g (31.1 mmol)、2-ニトロベンゼンボロン酸化合物6.3 g (31.1 mmol)、およびテトラキストリフェニルホスフィン1.8 g (1.2 mmol)をトルエン/テトラヒドロフラン400 mLに懸濁させ、2 M炭酸カリウム水溶液400 mLを入れた後、窒素気流下で24時間加熱して還流した。反応溶液をMeOH 2000 mLに加えて結晶化された固形分をフィルターした後、モノクロロベンゼンに溶かしてシリカゲル/セライトでフィルターした。有機溶媒を適当量除去した後、MeOHで再結晶して化合物(I) 14.7 g (収率70%)を得た。

【0160】

前記で得た(I)で表される化合物14.7 g (20 mmol)をトリエチルホスファート18 g (100 mmol)と窒素気流下で攪拌しながら一晩中の攪拌をした。未反応トリエチルホスファートを真空蒸留法を用いて除去した後、フラスコに残っている固体をカラムクロマトグラフィー方法を用いて化合物(J) 8.5 g (13.2 mmol)を得た。

【0161】

前記で得た(J)を元素分析で分析した結果は次のとおりである。

【0162】

calcd.  $C_{46}H_{29}N_5$ : C, 84.77; H, 4.48; N, 10.75; found: C, 84.73; H, 4.45; N, 10.78。

【0163】

第4段階：化合物(A-5)の合成

10

20

30

40

50

化合物 ( J ) で表される化合物 8 . 5 g ( 1 3 m m o l ) 、プロモベンゼン 2 . 5 g ( 1 5 . 6 m m o l ) 、および炭酸カリウム 2 . 8 g ( 1 9 . 5 m m o l ) を D M S O 2 5 0 m l に懸濁させ、1 , 1 0 - フェナントリン 0 . 5 g ( 0 . 3 m m o l ) と塩化銅 0 . 3 g ( 0 . 3 m m o l ) を入れた後、窒素気流下で 1 2 時間加熱して還流した。反応液を Me O H 1 0 0 0 m l に加えて結晶化された固形分をフィルターした後、モノクロロベンゼンに溶かしてシリカゲル / セライトでフィルターした。有機溶媒を適当量除去した後、Me O H で再結晶して化合物 ( A - 5 ) 5 . 5 g ( 収率 6 0 % ) を得た。

【 0 1 6 4 】

前記で得た ( A - 5 ) で表される化合物を元素分析で分析した結果は次のとおりである。

10

【 0 1 6 5 】

calcd . C<sub>53</sub>H<sub>34</sub>N<sub>4</sub> : C , 8 7 . 5 8 ; H , 4 . 7 1 ; N , 7 . 7 1 ; found : C , 8 7 . 5 4 ; H , 4 . 6 8 ; N , 7 . 7 4 .

【 0 1 6 6 】

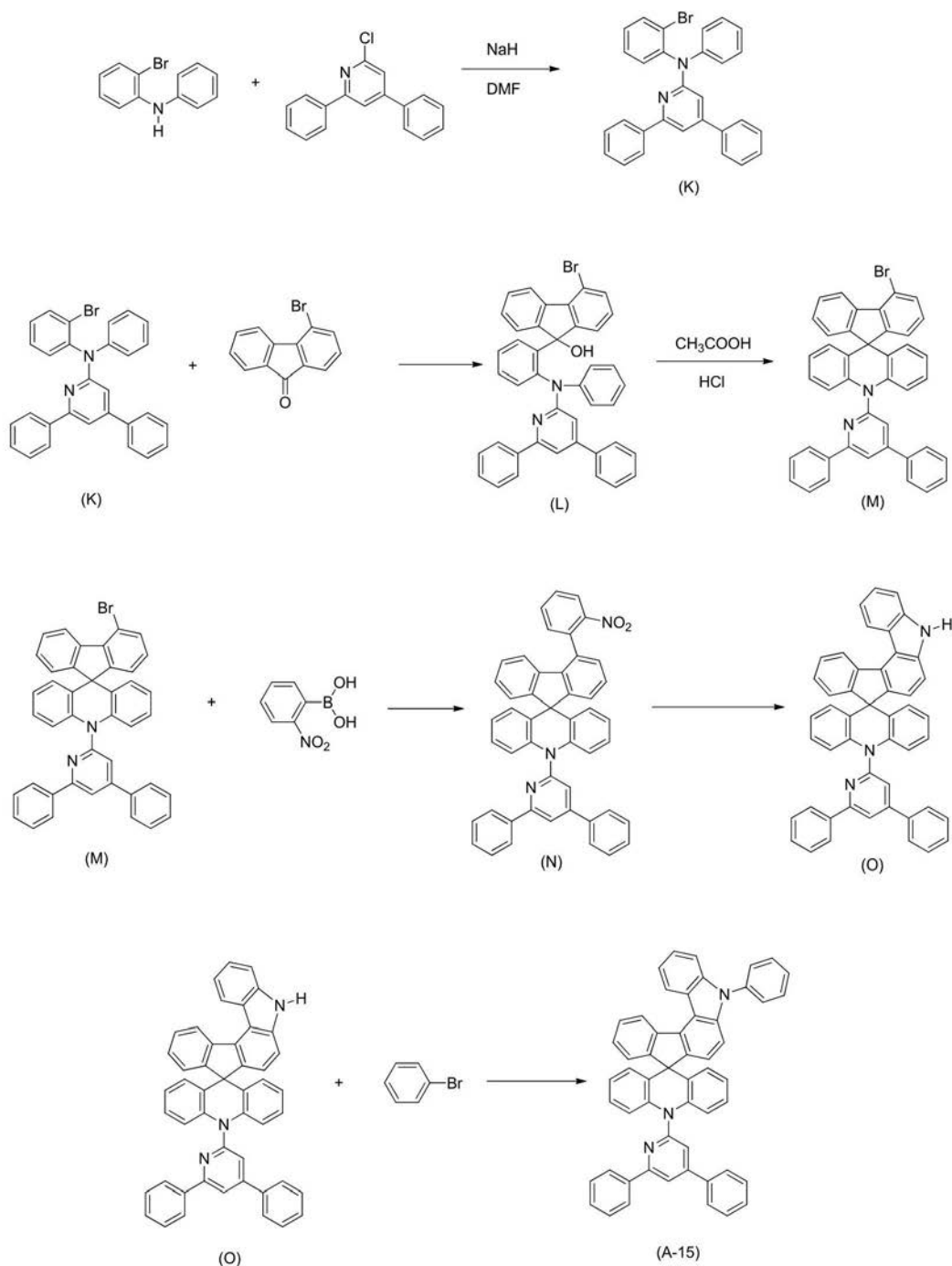
実施例 4 : 化学式 ( A - 1 5 ) で表される化合物の合成

本発明の有機光電子素子用化合物のより具体的な例として提示された前記化学式 ( A - 1 5 ) で表される化合物は、下記の反応式 4 のような方法を通じて合成された。

【 0 1 6 7 】

## 【化 17】

## [反応式 4]



10

20

30

40

50

## 【0168】

第1段階：化合物(K)の合成

2000 mLの丸いフラスコで2-ブロモ-N-フェニルアニリン30 g (120 mmol)、1-クロロ-3,5-フェニルピリジン38.3 g (150 mmol)、水素化ナトリウム7.3 g (300 mmol)をジメチルホルムアルデヒド900 mLに攪拌しながら常温で24時間攪拌した。反応溶液を蒸留水に徐々に滴下して未反応水素化ナトリウムを除去した後、再び過量の蒸留水に反応溶液を注ぎ、フィルターを実施した。得られた固体を過量のメチレンクロライドに溶かした後、ホットフィルターを実施し、再びメチレンクロライドを除去し、メタノールで沈澱した後、得られた固体をフィルターして化合物(K)35.9 g (収率66%)を得た。

## 【0169】

前記で得た(K)で表される化合物を元素分析で分析した結果は次のとおりである。

## 【0170】

calcd.  $C_{29}H_{21}BrN_2$ : C, 72.96; H, 4.43; Br, 16.74; N, 5.87; found: C, 72.94; H, 4.41; Br, 16.74; N, 5.88.

## 【0171】

第2段階：化合物(L)の合成

化合物(K)で表される化合物29.4g(62.5mmol)を500mLの丸いフラスコに入れた後、窒素状態の反応雰囲気を作り、精製されたテトラヒドロフラン300mLに溶かした後、反応器周囲温度を-78に維持した。その後、2.5M-ノルマルブチルリチウム25mLを徐々に滴下した。滴下完了後、30分間の攪拌を実施した後、4-プロモフルオレノン16.2g(62.5mmol)を200mLの精製されたテトラヒドロフランに溶かした後、徐々に滴下した。反応溶液を-78に維持した状態で約1時間の攪拌後、常温に上げて翌朝まで攪拌を継続した。反応溶液に5wt%の重炭酸ナトリウム水溶液を入れて反応を終了した後、メチレンクロライドを用いて分液抽出した。得られた有機層を硫酸マグネシウムを用いて残存する水を除去した後、減圧蒸留して中間体(L)を得ることができた。精製されていない中間体(L)を400mLの酢酸に入れた後、触媒量の塩酸を滴下し、還流温度で12時間攪拌した。反応終了後、カラムクロマトグラフィーを用いて化合物(M)27.3g(収率64%)を得た。

10

## 【0172】

前記で得た(M)で表される化合物を元素分析で分析した結果は次のとおりである。

20

## 【0173】

calcd.  $C_{42}H_{27}BrN_2$ : C, 78.87; H, 4.26; Br, 12.49; N, 4.38; found: C, 78.89; H, 4.25; N, 4.35.

## 【0174】

第3段階：化合物(O)の合成

化合物(M)で表される化合物19.4g(31.1mmol)、2-ニトロベンゼンボロン酸化合物6.3g(31.1mmol)、およびテトラキストリフェニルホスフィン1.8g(1.2mmol)をトルエン/テトラヒドロフラン400mLに懸濁させ、2M炭酸カリウム水溶液400mLを入れた後、窒素気流下で24時間加熱して還流した。反応溶液をMeOH2000mLに加えて結晶化された固形分をフィルターした後、モノクロロベンゼンに溶かしてシリカゲル/セライトでフィルターした。有機溶媒を適量除去した後、MeOHで再結晶して化合物(N)14.2g(収率70%)を得た。

30

## 【0175】

前記で得た(N)で表される化合物14.2g(20mmol)をトリエチルホスファート18g(100mmol)と窒素気流下で攪拌しながら一晩中の攪拌を実施した。未反応トリエチルホスファートを真空蒸留法を用いて除去した後、フラスコに残っている固体をカラムクロマトグラフィー方法を用いて化合物(O)8.2g(13.2mmol)を得た。

## 【0176】

前記で得た(O)を元素分析で分析した結果は次のとおりである。

40

## 【0177】

calcd.  $C_{48}H_{31}N_3$ : C, 88.72; H, 4.81; N, 6.47; found: C, 88.73; H, 4.82; N, 6.56.

## 【0178】

第4段階：化合物(A-15)の合成

化合物(O)で表される化合物8.2g(13mmol)、プロモベンゼン2.5g(15.6mmol)、および炭酸カリウム2.8g(19.5mmol)をDMSO250mLに懸濁させ、1,10-フェナントリン0.5g(0.3mmol)と塩化銅0.3g(0.3mmol)を入れた後、窒素気流下で12時間加熱して還流した。反応溶液をMeOH1000mLに加えて結晶化された固形分をフィルターした後、モノクロロ

50

ベンゼンに溶かしてシリカゲル/セライトでフィルターした。有機溶媒を適量除去した後、MeOHで再結晶して化合物(A-15) 5.2 g (収率60%)を得た。

【0179】

前記で得た(A-15)で表される化合物を元素分析で分析した結果は次のとおりである。

【0180】

calcd. C<sub>54</sub>H<sub>35</sub>N<sub>3</sub>: C, 89.35; H, 4.86; N, 5.79; found: C, 89.31; H, 4.84; N, 5.75。

【0181】

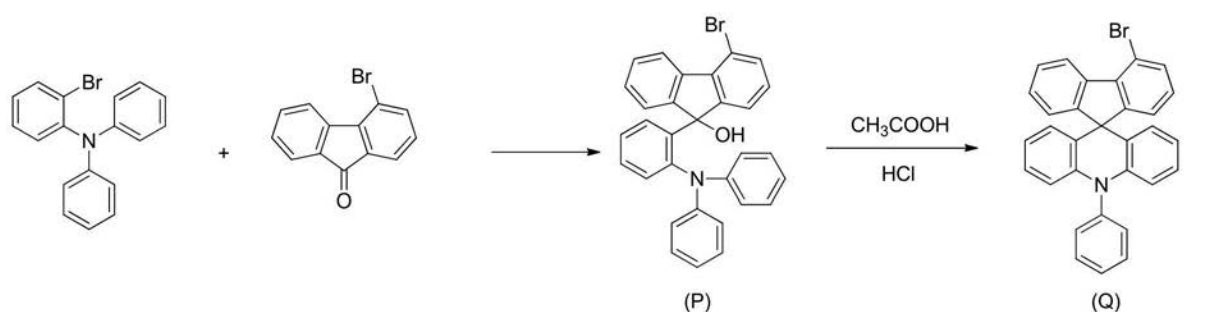
実施例5: 化学式(A-21)で表される化合物の合成

本発明の有機光電子素子用化合物のより具体的な例として提示された前記化学式(A-21)で表される化合物は、下記の反応式5のような方法を通じて合成された。

【0182】

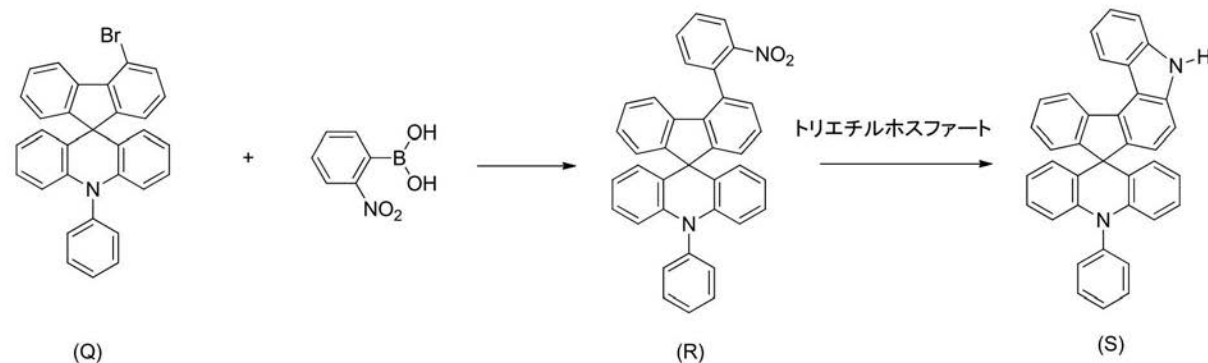
【化18】

[反応式5]



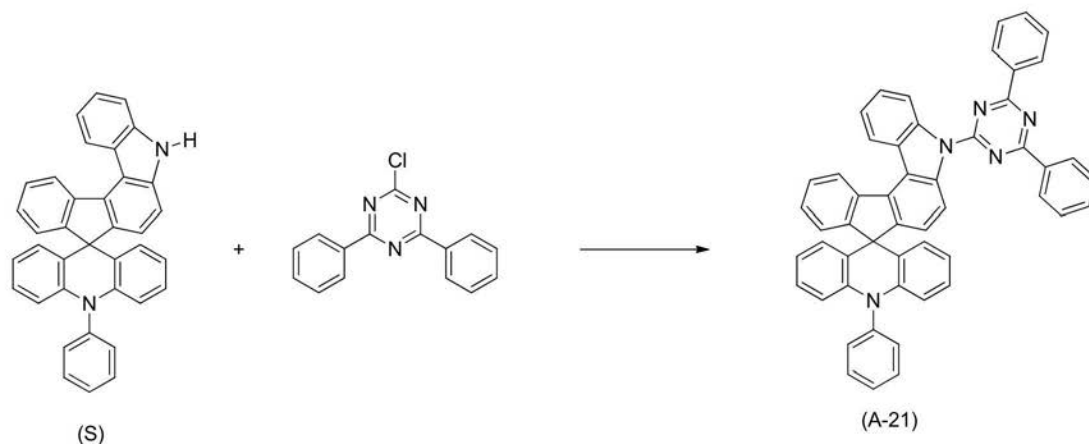
10

20



30

40



【0183】

第1段階: 化合物(Q)の合成

プロモトリフェニルアミン 20.3 g (62.5 mmol) を 500 mL の丸いフラス

50

コに入れた後、窒素状態の反応雰囲気を作り、精製されたテトラヒドロフラン300 mLに溶かした後、反応器周囲温度を-78 に維持した。その後、2.5 M - ノルマルブチルリチウム25 mLを徐々に滴下した。滴下完了後、30分間の攪拌を実施した後、4-プロモフルオレノン16.2 g (62.5 mmol)を200 mLの精製されたテトラヒドロフランに溶かし、徐々に滴下した。反応溶液を-78 に維持した状態で約1時間の攪拌後、常温に上げて翌朝まで攪拌を継続した。反応溶液に5 wt %の重炭酸ナトリウム水溶液を入れて反応を終了した後、メチレンクロライドを用いて分液抽出した。得られた有機層を硫酸マグネシウムを用いて残存する水を除去した後、減圧蒸留して中間体(P)を得ることができた。精製されていない中間体(P)を400 mLの酢酸に入れた後、触媒量の塩酸を滴下し、還流温度で12時間攪拌した。反応終了後、カラムクロマトグラフィーを用いて化合物(Q)19.5 g (収率64%)を得た。

10

## 【0184】

前記で得た(Q)で表される化合物を元素分析で分析した結果は次のとおりである。

## 【0185】

calcd.  $C_{31}H_{20}BrN$ : C, 76.55; H, 4.14; Br, 16.43; N, 2.88; found: C, 76.51; H, 4.11; N, 2.85。

## 【0186】

第2段階: 化合物(S)の合成

化合物(Q)で表される化合物15.1 g (31.1 mmol)、2-ニトロベンゼンボロン酸化合物6.3 g (31.1 mmol)、およびテトラキストリフェニルホスフィン1.8 g (1.2 mmol)をトルエン/テトラヒドロフラン400 mLに懸濁させ、2 M炭酸カリウム水溶液400 mLを入れた後、窒素気流下で24時間加熱して還流した。反応溶液をMeOH2000 mLに加えて結晶化された固形分をフィルターした後、モノクロロベンゼンに溶かしてシリカゲル/セライトでフィルターした。有機溶媒を適量除去した後、MeOHで再結晶して化合物(R)11.5 g (収率70%)を得た。

20

## 【0187】

前記で得た(R)で表される化合物11.5 g (20 mmol)をトリエチルホスファート18 g (100 mmol)と窒素気流下で攪拌しながら一晩中の攪拌を実施した。未反応トリエチルホスファートを真空蒸留法を用いて除去した後、フラスコに残っている固体をカラムクロマトグラフィー方法を用いて化合物(S)6.5 g (13.2 mmol)を得た。

30

## 【0188】

前記で得た(S)を元素分析で分析した結果は次のとおりである。

## 【0189】

calcd.  $C_{37}H_{24}N_2$ : C, 89.49; H, 4.87; N, 5.64; found: C, 89.49; H, 4.89; N, 5.61。

## 【0190】

第3段階: 化合物(A-21)の合成

化合物(S)で表される化合物6.5 g (13 mmol)、1-クロロ-3,5-フェニルトリアジン4.2 g (15.6 mmol)、および炭酸カリウム2.8 g (19.5 mmol)をDMSO250 mLに懸濁させ、1,10-フェナントロリン0.5 g (0.3 mmol)と塩化銅0.3 g (0.3 mmol)を入れた後、窒素気流下で12時間加熱して還流した。反応溶液をMeOH1000 mLに加えて結晶化された固形分をフィルターした後、モノクロロベンゼンに溶かしてシリカゲル/セライトでフィルターした。有機溶媒を適量除去した後、MeOHで再結晶して化合物(A-21)5.7 g (収率60%)を得た。

40

## 【0191】

前記で得た(A-21)で表される化合物を元素分析で分析した結果は次のとおりである。

## 【0192】

50

calcd. C<sub>52</sub>H<sub>33</sub>N<sub>5</sub>: C, 85.81; H, 4.57; N, 9.62; found: C, 85.83; H, 4.52; N, 9.59.

【0193】

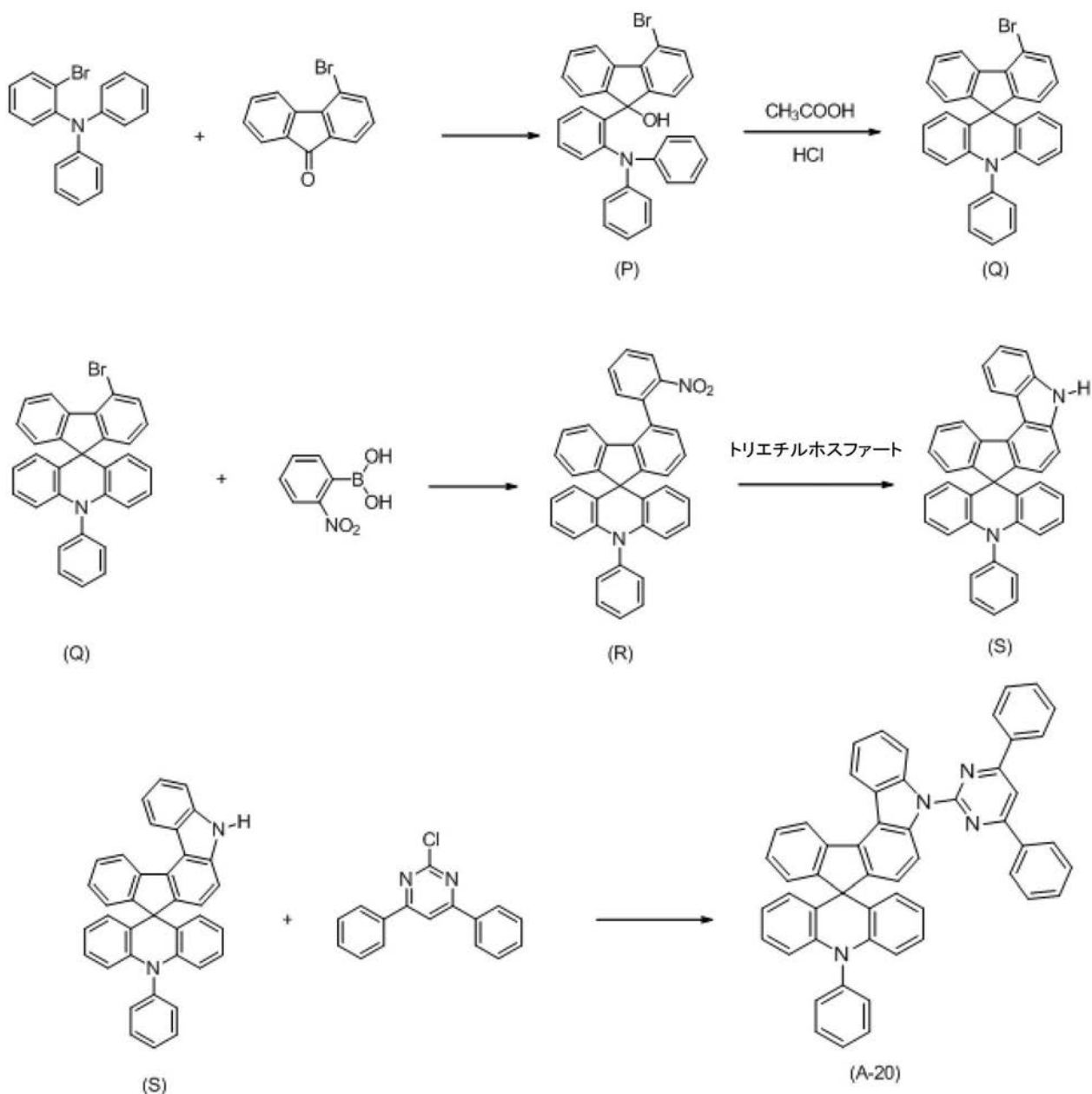
実施例6：化学式(A-20)で表される化合物の合成

本発明の有機光電子素子用化合物のより具体的な例として提示された前記化学式(A-20)で表される化合物は、下記の反応式6のような方法を通じて合成された。

【0194】

【化19】

[反応式6]



10

20

30

40

50

【0195】

第1段階：化合物(A-20)の合成

実施例5で1段階および2段階を経て合成された(S)で表される化合物6.5g(13mmol)、1-クロロ-3,5-フェニルピリミジン4.2g(15.6mmol)、および炭酸カリウム2.8g(19.5mmol)をDMSO250mlに懸濁させ、1,10-フェナントリン0.5g(0.3mmol)と塩化銅0.3g(0.3mmol)を入れた後、窒素気流下で12時間加熱して還流した。反応溶液をMeOH1000mlに加えて結晶化された固形分をフィルターした後、モノクロロベンゼンに溶かして

シリカゲル/セライトでフィルターした。有機溶媒を適量除去した後、MeOHで再結晶して化合物(A-20) 5.6g(収率60%)を得た。

【0196】

前記で得た(A-20)で表される化合物を元素分析で分析した結果は次のとおりである。

【0197】

calcd. C<sub>53</sub>H<sub>34</sub>N<sub>4</sub>: C, 87.58; H, 4.71; N, 7.71; found: C, 87.55; H, 4.67; N, 7.74。

【0198】

実施例7: 化学式(A-19)で表される化合物の合成

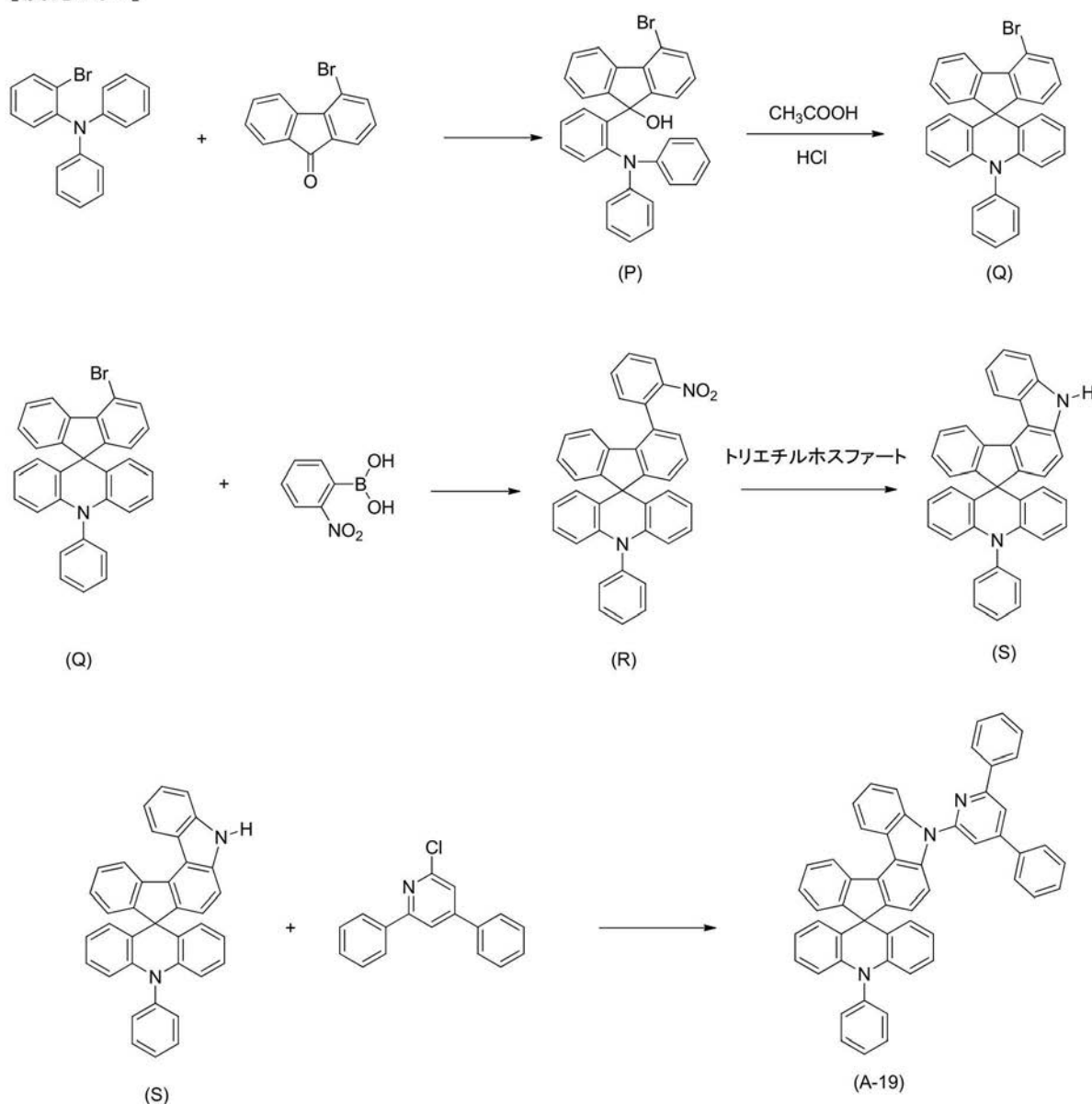
10

本発明の有機光電子素子用化合物のより具体的な例として提示された前記化学式(A-19)で表される化合物は、下記の反応式7のような方法を通じて合成された。

【0199】

【化20】

[反応式7]



20

30

40

【0200】

第1段階: 化合物(A-19)の合成

実施例5で1段階および2段階を経て合成された(S)で表される化合物6.5g(13mmol)、1-クロロ-3,5-フェニルピリジン4.1g(15.6mmol)、

50

および炭酸カリウム 2.8 g (19.5 mmol) を DMSO 250 ml に懸濁させ、1,10-フェナントロリン 0.5 g (0.3 mmol) と塩化銅 0.3 g (0.3 mmol) を入れた後、窒素気流下で 12 時間加熱して還流した。反応溶液を MeOH 1000 ml に加えて結晶化された固形分をフィルターした後、モノクロロベンゼンに溶かしてシリカゲル/セライトでフィルターした。有機溶媒を適量除去した後、MeOH で再結晶して化合物 (A-19) 5.5 g (収率 60%) を得た。

【0201】

前記で得た (A-19) で表される化合物を元素分析で分析した結果は次のとおりである。

【0202】

calcd. C<sub>54</sub>H<sub>35</sub>N<sub>3</sub>: C, 89.35; H, 4.86; N, 5.79; found: C, 89.37; H, 4.83; N, 5.82.

10

【0203】

(有機発光素子の製造)

実施例 8

具体的に、有機発光素子の製造方法を説明する。陽極は 15 / cm<sup>2</sup> の面抵抗値を有する ITO ガラス基板を 50 mm × 50 mm × 0.7 mm の大きさに切断してアセトンとイソプロピルアルコールと純水の中で各 15 分間の超音波洗浄を行った後、30 分間の UV オゾン洗浄を行って用いた。

20

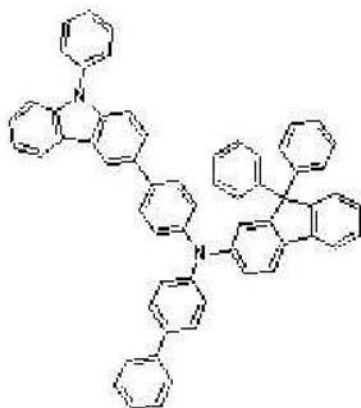
【0204】

このように準備された ITO 透明電極を陽極として用いて ITO 基板上部に下記 HTM 化合物を真空蒸着して 1200 の厚さの正孔注入層を形成した。

【0205】

【化 21】

[HTM]



30

【0206】

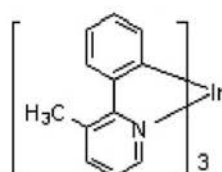
前記実施例 1 で合成された化合物をホストとして用い、燐光グリーンドーパントとして下記 PhGD 化合物を 7 重量% ドーピングして真空蒸着で 300 の厚さの発光層を形成した。陽極としては ITO を 1000 の厚さに用い、陰極としてはアルミニウム (Al) を 1000 の厚さに用いた。

40

【0207】

【化 22】

[PhGD]



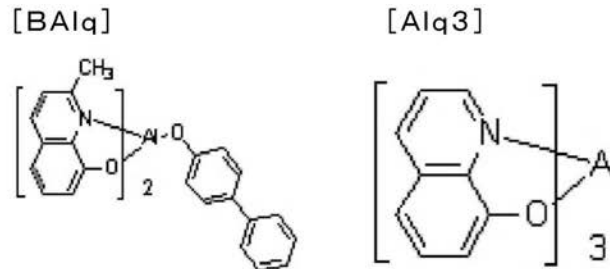
50

## 【0208】

その後、前記発光層上部にBA1q [ビス(2-メチル-8-キノリノラト-N1, O8) - (1, 1'-ビフェニル-4-オラト)アルミニウム]50 およびAlq3 [トリス(8-ヒドロキシキノリナト)アルミニウム]250 を順次に積層して電子輸送層を形成した。前記電子輸送層上部にLiF 5 とAl 1000 を順次に真空蒸着して陰極を形成することによって有機発光素子を製造した。

## 【0209】

## 【化23】



10

## 【0210】

## 実施例 9

前記実施例 8 で、実施例 1 による化合物の代わりに実施例 5 による化合物を用いた点を除き、前記実施例 9 と同様の方法で有機発光素子を製造した。

20

## 【0211】

## 比較例 1

前記実施例 1 で合成された化合物を発光層のホストとして用いる代わりに、4,4'-N,N-ジカルバゾールビフェニル(CBP)を発光層のホストとして用いた点を除き、前記実施例 8 と同様の方法で有機発光素子を製作した。

## 【0212】

## (有機発光素子の性能測定)

前記実施例 9 乃至 10 および比較例 1 で製造されたそれぞれの有機発光素子に対して電圧に応じた電流密度の変化、輝度の変化および発光効率を測定した。具体的な測定方法は次のとおりであり、その結果を下記表 1 に示した。

30

## 【0213】

## (1) 電圧変化に応じた電流密度の変化測定

製造された有機発光素子に対して、電圧を 0 V から 10 V まで上昇させながら電流 - 電圧計 (Keithley 2400) を用いて単位素子に流れる電流値を測定し、測定された電流値を面積で割って結果を得た。

## 【0214】

## (2) 電圧変化に応じた輝度の変化測定

製造された有機発光素子に対して、電圧を 0 V から 10 V まで上昇させながら輝度計 (Minolta Cs-1000A) を用いてその時の輝度を測定して結果を得た。

## 【0215】

## (3) 発光効率の測定

前記 (1) および (2) で測定された輝度と電流密度および電圧を用いて同一の電流密度 (10 mA/cm<sup>2</sup>) の電流効率 (cd/A) および電力効率 (lm/W) を計算した。

40

## 【0216】

【表 1】

分類	駆動電圧 (Vd, V)	電流効率 (cd/A)	電力効率 (lm/W)	輝度 (cd/m <sup>2</sup> )	色座標 (CIE <sub>x</sub> )	色座標 (CIE <sub>y</sub> )
比較例 1	4.05	37.1	34.1	3000	0.339	0.625
実施例 8	4.12	39.1	38.4	3000	0.351	0.617
実施例 9	4.16	38.6	38.2	3000	0.348	0.620

## 【0217】

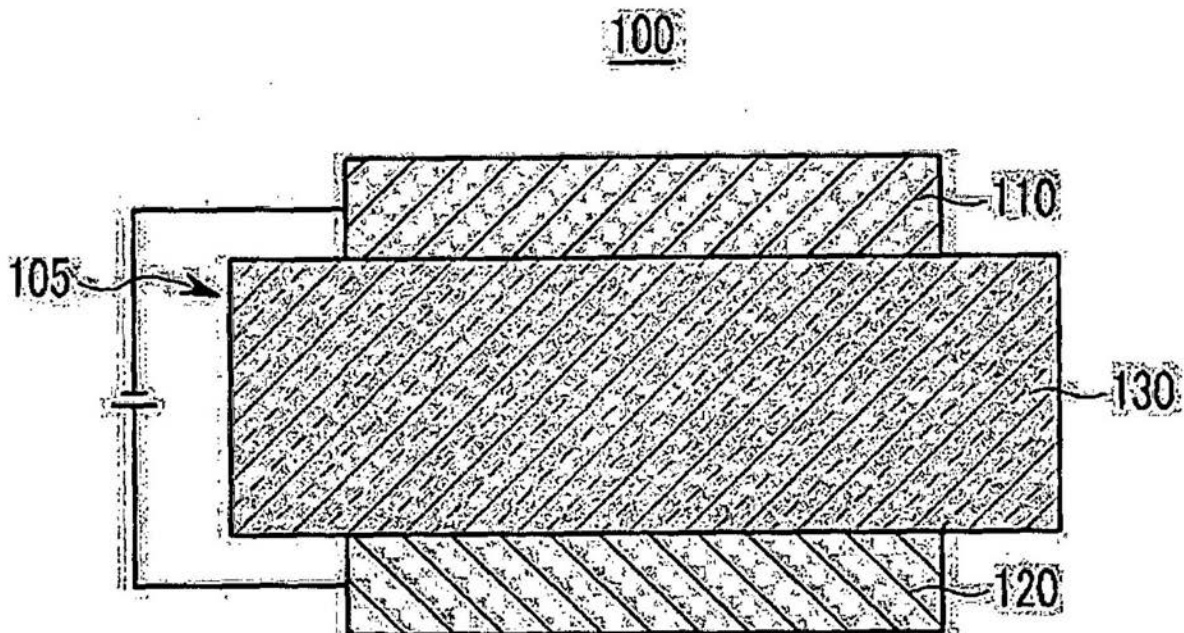
比較物質であるCBPを発光層のホストとして適用した比較例1よりも実施例8～9の素子で、素子の効率が向上することを確認した。

10

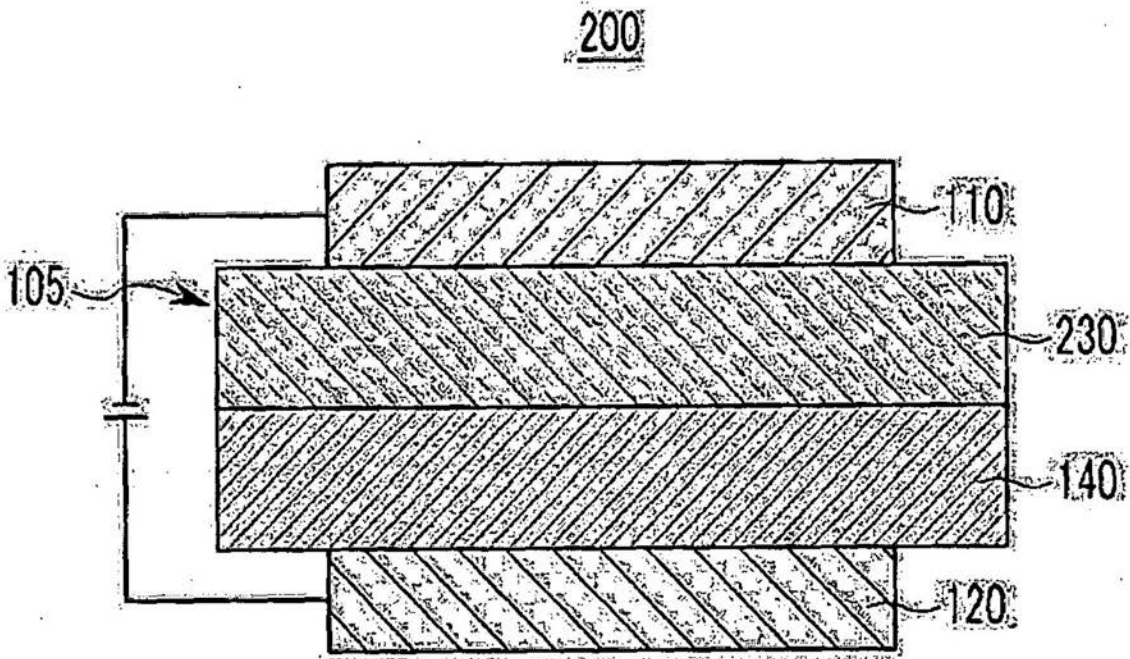
## 【0218】

本発明は、前記実施例に限定されず、互いに異なる多様な形態に製造されてもよく、本発明が属する技術分野における通常の知識を有する者は、本発明の技術的な思想や必須の特徴を変更せずに他の具体的な形態に実施可能であることを理解できるはずである。したがって、上述した実施例はすべての面で例示的なものであり、限定的ではないものと理解しなければならない。

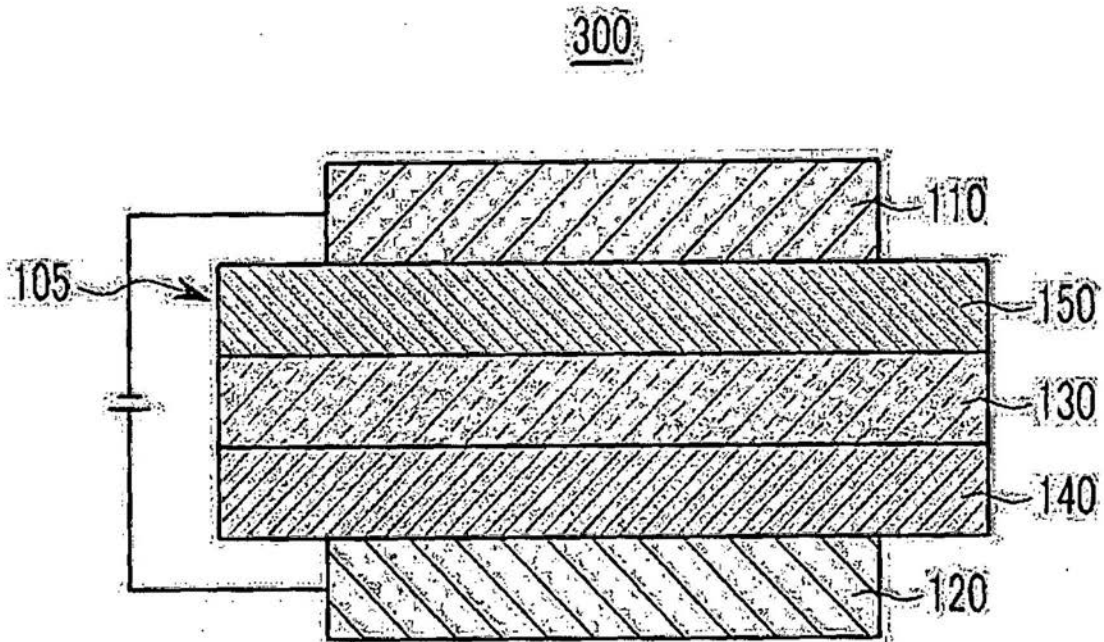
【図 1】



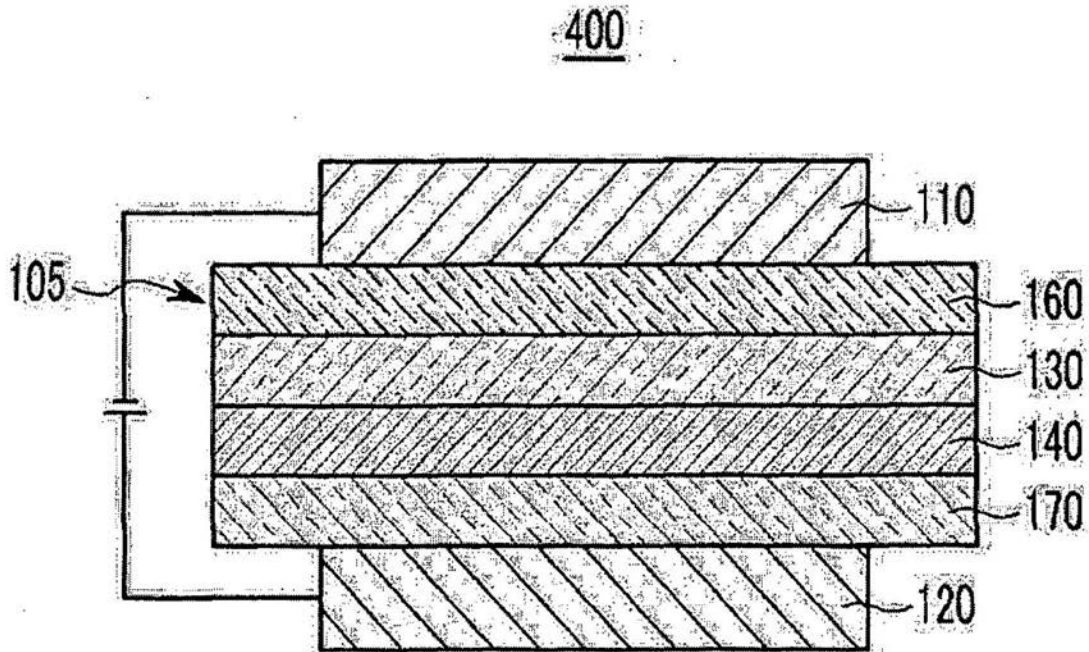
【 図 2 】



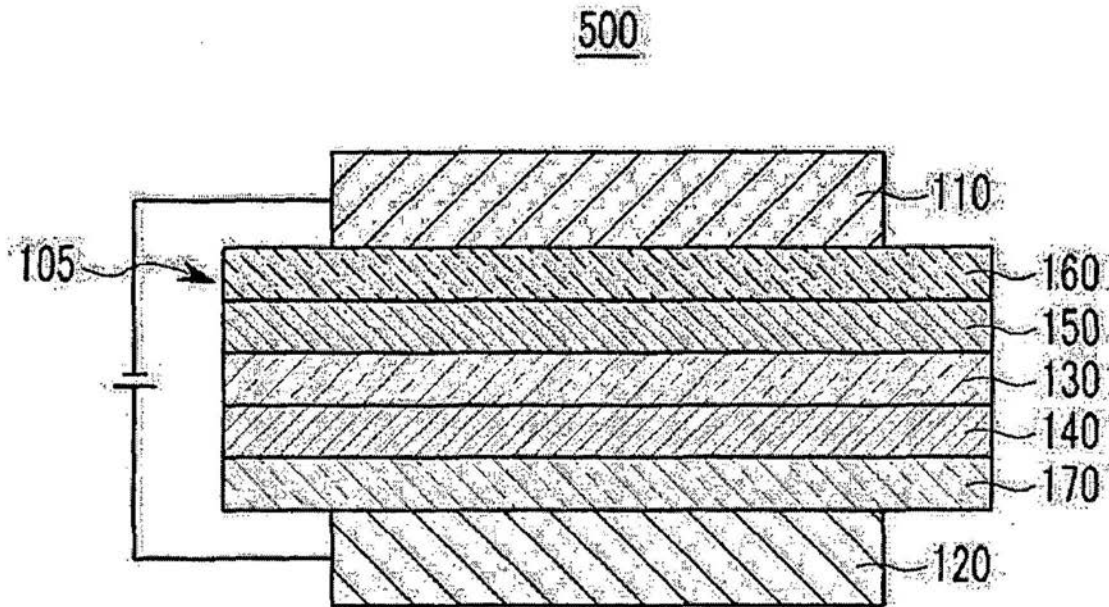
【 図 3 】



【 図 4 】



【 図 5 】



【 手続補正書 】

【 提出日 】 平成27年6月12日 (2015.6.12)

【 手続補正 1 】

【 補正対象書類名 】 明細書

【 補正対象項目名 】 0 1 2 2

【 補正方法 】 変更

## 【補正の内容】

## 【0122】

図2を参照すれば、図2は、有機薄膜層105として電子輸送層を含む発光層230と正孔輸送層140とが存在する2層型有機発光素子200を示したものであり、図2に示されているように、有機薄膜層105は、発光層230および正孔輸送層140を含む2層型であってもよい。この場合、発光層230は、電子輸送層の機能を果たし、正孔輸送層140は、ITOのような透明電極との接合性および正孔輸送性を向上させる機能を果たす。

## 【手続補正2】

【補正対象書類名】明細書

【補正対象項目名】0153

【補正方法】変更

## 【補正の内容】

## 【0153】

第1段階：化合物(F)の合成

2000 mLの丸いフラスコで2-プロモ-N-フェニルアニリン30 g (120 mmol)、1-クロロ-3,5-フェニルピリミジン38.8 g (150 mmol)、水素化ナトリウム7.3 g (300 mmol)をジメチルホルムアルデヒド900 mLに攪拌しながら常温で24時間攪拌した。反応溶液を蒸留水に徐々に滴下して未反応水素化ナトリウムを除去した後、再び過量の蒸留水に反応溶液を注ぎ、フィルターを実施した。得られた固体を過量のメチレンクロライドに溶かした後、ホットフィルターを実施し、再びメチレンクロライドを除去し、メタノールで沈澱した後、得られた固体をフィルターして化合物(F)36.5 g (収率66%)を得た。

## 【手続補正3】

【補正対象書類名】明細書

【補正対象項目名】0154

【補正方法】変更

## 【補正の内容】

## 【0154】


前記で得た(F)で表される化合物を元素分析で分析した結果は次のとおりである。

## 【 国際調査報告 】

## INTERNATIONAL SEARCH REPORT

International application No.

PCT/KR2013/004655

<b>A. CLASSIFICATION OF SUBJECT MATTER</b> <i>C09K 11/06(2006.01)i, H01L 51/50(2006.01)i</i> According to International Patent Classification (IPC) or to both national classification and IPC		
<b>B. FIELDS SEARCHED</b> Minimum documentation searched (classification system followed by classification symbols) C09K 11/06; H01L 51/54; H01L 51/50; C07D 401/10  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) & Keywords: organic optoelectric device, organic electroluminescence device, spiro compound		
<b>C. DOCUMENTS CONSIDERED TO BE RELEVANT</b>		
Category*	Citation of document, with indication, where appropriate, of the relevant passages	Relevant to claim No.
A	KR 10-2012-0078301 A (CHEIL INDUSTRIES INC.) 10 July 2012 See chemical formulas A-1 to A-55, claims 1-21.	1-20
A	KR 10-2011-0102055 A (CHEIL INDUSTRIES INC.) 16 September 2011 See chemical formulas 9, 10, 10-H and A-1 to A-39.	1-20
A	KR 10-2012-0015883 A (LG CHEM. LTD.) 22 February 2012 See chemical formulas 1, 1-1 to 1-40, claims 1-6.	1-20
A	US 2011-0198571 A1 (HUANG, Heh-Lung et al.) 18 August 2011 See chemical formula 1, claim 5.	1-20
A	KR 10-2011-0113469 A (SFC CO., LTD.) 17 October 2011 See [chemical formula 1] to [chemical formula 88], claims 1-9.	1-20
<input type="checkbox"/> Further documents are listed in the continuation of Box C. <input checked="" type="checkbox"/> See patent family annex.		
* Special categories of cited documents: "A" document defining the general state of the art which is not considered to be of particular relevance "E" earlier application or patent but published on or after the international filing date "L" document which may throw doubts on priority claim(s) or which is cited to establish the publication date of another citation or other special reason (as specified) "O" document referring to an oral disclosure, use, exhibition or other means "P" document published prior to the international filing date but later than the priority date claimed "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 26 SEPTEMBER 2013 (26.09.2013)		Date of mailing of the international search report 01 OCTOBER 2013 (01.10.2013)
Name and mailing address of the ISA/KR  Korean Intellectual Property Office Government Complex-Daejeon, 189 Seons-ro, Daejeon 302-701, Republic of Korea Facsimile No. 82-42-472-7140		Authorized officer  Telephone No.

**INTERNATIONAL SEARCH REPORT**  
Information on patent family members


International application No.

**PCT/KR2013/004655**

Patent document cited in search report	Publication date	Patent family member	Publication date
KR 10-2012-0078301 A	10/07/2012	NONE	
KR 10-2011-0102055 A	16/09/2011	NONE	
KR 10-2012-0015883 A	22/02/2012	NONE	
US 2011-0198571 A1	18/08/2011	TW 201127814 A US 8475936 B2	16/08/2011 02/07/2013
KR 10-2011-0113469 A	17/10/2011	NONE	

국제조사보고서

국제출원번호  
PCT/KR2013/004655

<b>A. 발명이 속하는 기술분류(국제특허분류(IPC))</b> C09K 11/06(2006.01)i, H01L 51/50(2006.01)i	
<b>B. 조사된 분야</b> 조사된 최소문헌(국제특허분류를 기재) C09K 11/06; H01L 51/54; H01L 51/50; C07D 401/10  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) & 키워드: 유기 광전자소자, 유기전계발광소자, 스피로 화합물	
<b>C. 관련 문헌</b>	
카테고리*	인용문헌명 및 관련 구절(해당하는 경우)의 기재  관련 청구항
A	KR 10-2012-0078301 A (제일모직주식회사) 2012.07.10 화학식 A-1 내지 A-55, 청구항 1-21 참조.  A KR 10-2011-0102055 A (제일모직주식회사) 2011.09.16 화학식 9, 10, 10-H 및 A-1 내지 A-39 참조.  A KR 10-2012-0015883 A (주식회사 엘지화학) 2012.02.22 화학식 1, 화학식 1-1 내지 1-40, 청구항 1-6 참조.  A US 2011-0198571 A1 (HUANG HEH-LUNG 외 5명) 2011.08.18 화학식 1, 청구항 5 참조.  A KR 10-2011-0113469 A (에스에프씨 주식회사) 2011.10.17 [화학식 1] 내지 [화학식 88], 청구항 1-9 참조.
<input type="checkbox"/> 추가 문헌이 C(계속)에 기재되어 있습니다. <input checked="" type="checkbox"/> 대응특허에 관한 별지를 참조하십시오.	
<p>* 인용된 문헌의 특별 카테고리:</p> <p>"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</p> <p>"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. "&amp;" 동일한 대응특허문헌에 속하는 문헌</p>	
국제조사의 실제 완료일 2013년 09월 26일 (26.09.2013)	국제조사보고서 발송일 2013년 10월 01일 (01.10.2013)
ISA/KR의 명칭 및 우편주소 대한민국 특허청 (302-701) 대전광역시 서구 청사로 189, 4동 (둔산동, 정부대전청사) 팩스 번호 +82-42-472-7140	심사관 오세주 전화번호 +82-42-481-5596 

서식 PCT/ISA/210 (두 번째 용지) (2009년 7월)

국제조사보고서  
대응특허에 관한 정보

국제출원번호  
**PCT/KR2013/004655**

국제조사보고서에서 인용된 특허문헌	공개일	대응특허문헌	공개일
KR 10-2012-0078301 A	2012/07/10	없음	
KR 10-2011-0102055 A	2011/09/16	없음	
KR 10-2012-0015883 A	2012/02/22	없음	
US 2011-0198571 A1	2011/08/18	TW 201127814 A US 8475936 B2	2011/08/16 2013/07/02
KR 10-2011-0113469 A	2011/10/17	없음	

## フロントページの続き

(51) Int.Cl. F I テーマコード(参考)

H 0 1 L	31/04	1 5 4 B
H 0 1 L	31/04	1 5 4 D
H 0 1 L	31/04	1 5 4 E
H 0 1 L	31/04	1 5 4 C

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

(72) 発明者 ユ, イン - スン  
大韓民国, 4 3 7 - 7 1 1 キョンギ - ド, イワン - シ, コチョン - ドン 3 3 2 - 2, チェイル  
インダストリーズ インコーポレイテッド

(72) 発明者 チェ, ミ - コン  
大韓民国, 4 3 7 - 7 1 1 キョンギ - ド, イワン - シ, コチョン - ドン 3 3 2 - 2, チェイル  
インダストリーズ インコーポレイテッド

(72) 発明者 キム, ビュン - ク  
大韓民国, 4 3 7 - 7 1 1 キョンギ - ド, イワン - シ, コチョン - ドン 3 3 2 - 2, チェイル  
インダストリーズ インコーポレイテッド

(72) 発明者 ソ, ヒョ - ジュ  
大韓民国, 4 3 7 - 7 1 1 キョンギ - ド, イワン - シ, コチョン - ドン 3 3 2 - 2, チェイル  
インダストリーズ インコーポレイテッド

(72) 発明者 ヤン, ジェ - ドウク  
大韓民国, 4 3 7 - 7 1 1 キョンギ - ド, イワン - シ, コチョン - ドン 3 3 2 - 2, チェイル  
インダストリーズ インコーポレイテッド

F ターム(参考) 3K107 AA01 BB01 CC04 CC22 CC24 DD53 DD59 DD67 DD68 FF20  
4C065 AA16 AA19 BB04 CC09 DD02 EE02 HH09 JJ01 KK09 LL01  
PP11 QQ01  
5F151 AA11

专利名称(译)	用于有机光电器件的化合物，包含该化合物的有机光发射器件		
公开(公告)号	<a href="#">JP2015533262A</a>	公开(公告)日	2015-11-19
申请号	JP2015535555	申请日	2013-05-28
[标]申请(专利权)人(译)	第一毛织株式会社		
申请(专利权)人(译)	第一毛织公司		
[标]发明人	パクムジン ユインスン チェミュン キムビユンク ソヒョジュ ヤンジエドゥク		
发明人	パク,ム-ジン ユ,イン-スン チェ,ミ-ユン キム,ビユン-ク ソ,ヒョ-ジュ ヤン,ジエ-ドゥク		
IPC分类号	H01L51/50 C07D471/10 H01L51/46		
CPC分类号	H01L51/0072 C07D401/14 C07D471/10 C07D491/107 C07D495/10 C07F7/0803 C09K11/06 C09K2211/1007 C09K2211/1011 C09K2211/1029 C09K2211/104 C09K2211/1044 C09K2211/1059 C09K2211/1092 C09K2211/1096 H01L51/0067 H01L51/0073 H01L51/0074 H01L51/0094 H01L51/5012 H01L51/5016 H05B33/10		
FI分类号	H05B33/14.B C07D471/10.101 C07D471/10.CSP H01L31/04.166 H01L31/04.168 H01L31/04.154.B H01L31/04.154.D H01L31/04.154.E H01L31/04.154.C		
F-TERM分类号	3K107/AA01 3K107/BB01 3K107/CC04 3K107/CC22 3K107/CC24 3K107/DD53 3K107/DD59 3K107/DD67 3K107/DD68 3K107/FF20 4C065/AA16 4C065/AA19 4C065/BB04 4C065/CC09 4C065/DD02 4C065/EE02 4C065/HH09 4C065/JJ01 4C065/KK09 4C065/LL01 4C065/PP11 4C065/QQ01 5F151/AA11		
优先权	1020120111342 2012-10-08 KR		
外部链接	<a href="#">Espacenet</a>		

#### 摘要(译)

本发明提供了一种用于有机光电装置的化合物，该化合物由于优异的电化学和热稳定性而具有优异的使用寿命特性，并且即使在低驱动电压下也可以生产具有高发光效率的有机发光装置，以及包括该化合物的有机发光装置。以及包括有机发光装置的显示装置。根据本发明实施方式的用于有机光电子器件的化合物由化学式1表示。化学式1和化学式中的每个符号的解释如本说明书中所定义。

(21) 出願番号	特願2015-53555 (P2015-53555)	(71) 出願人	50006066
(66) (22) 出願日	平成25年5月28日 (2013. 5. 28)		チェイル インダストリーズ インコーポ レイテッド
(65) 翻訳文提出日	平成27年5月29日 (2015. 5. 29)		大韓民国 730-710 キョンサンブ ッド クミ-シ コンダン-ドン 290
(66) 国際出願番号	PCT/KR2013/004655		
(87) 国際公開番号	WO2014/058124		
(87) 国際公開日	平成26年4月17日 (2014. 4. 17)	(74) 代理人	110000671
(31) 優先権主張番号	10-2012-0111342		八田国際特許業務法人
(32) 優先日	平成24年10月8日 (2012. 10. 8)	(72) 発明者	パク, ム-ジン
(33) 優先権主張国	韓国 (KR)		大韓民国, 437-711 キョンギ-ド , イワン-シ, コチョン-ドン 332- 2, チェイル インダストリーズ インコ -ポレイテッド

最終頁に続く