

(19) 日本国特許庁(JP)

(12) 特許公報(B2)

(11) 特許番号

特許第6648882号
(P6648882)

(45) 発行日 令和2年2月14日(2020.2.14)

(24) 登録日 令和2年1月20日(2020.1.20)

(51) Int. Cl.	F I
<i>H O 1 L 51/50 (2006.01)</i>	H O 5 B 33/22 B
<i>C O 7 D 251/24 (2006.01)</i>	H O 5 B 33/14 B
<i>C O 7 D 405/10 (2006.01)</i>	C O 7 D 251/24
<i>C O 7 D 403/14 (2006.01)</i>	C O 7 D 405/10
<i>C O 7 D 403/10 (2006.01)</i>	C O 7 D 403/14

請求項の数 16 (全 127 頁) 最終頁に続く

(21) 出願番号 特願2018-518469 (P2018-518469)	(73) 特許権者 500239823 エルジー・ケム・リミテッド
(86) (22) 出願日 平成28年10月27日 (2016.10.27)	大韓民国 07336 ソウル, ヨンドウ ンポグ, ヨイデロ 128
(65) 公表番号 特表2019-501513 (P2019-501513A)	(74) 代理人 110000877 龍華国際特許業務法人
(43) 公表日 平成31年1月17日 (2019.1.17)	(72) 発明者 ハン、ミヨン 大韓民国・ソウル・ヨンドウ ンポグ・ヨイデロ・128 エルジー・ケム・リミ テッド内
(86) 国際出願番号 PCT/KR2016/012154	(72) 発明者 リー、ドン ホーン 大韓民国・ソウル・ヨンドウ ンポグ・ヨイデロ・128 エルジー・ケム・リミ テッド内
(87) 国際公開番号 W02017/074052	
(87) 国際公開日 平成29年5月4日 (2017.5.4)	
審査請求日 平成30年4月24日 (2018.4.24)	
(31) 優先権主張番号 10-2015-0149714	
(32) 優先日 平成27年10月27日 (2015.10.27)	
(33) 優先権主張国・地域又は機関 韓国 (KR)	

最終頁に続く

(54) 【発明の名称】 有機発光素子

(57) 【特許請求の範囲】

【請求項 1】

陽極と、前記陽極に対向して備えられた陰極と、前記陽極と前記陰極との間に有機物層とを含む有機発光素子であって、

前記有機物層は、発光層を含み、

前記有機物層は、前記発光層および陰極の間に備えられた電子調節層および電子輸送層をさらに含み、

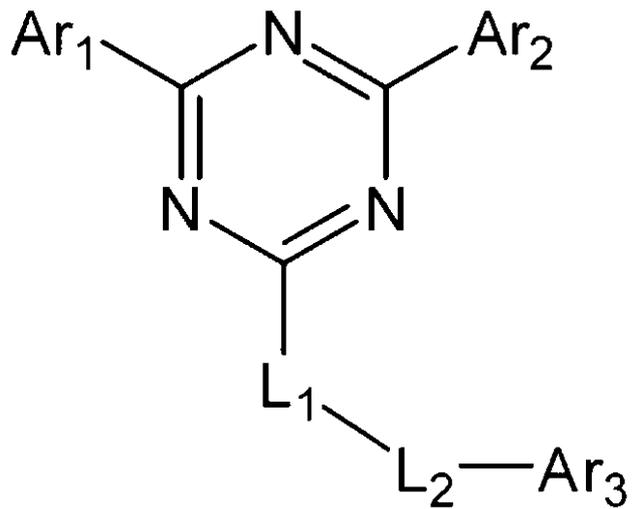
前記電子調節層は、下記の化学式 1 で表される化合物を含み、

前記電子輸送層は、下記の化学式 1 1 で表される化合物を含む、

有機発光素子：

[化学式 1]

【化1】



10

化学式 1 において、

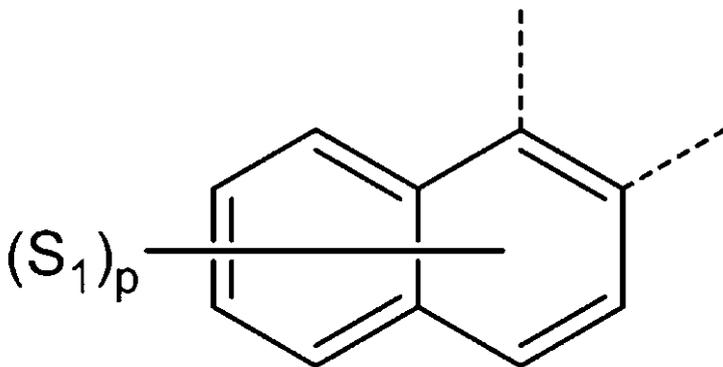
Ar_1 および Ar_2 は、互いに同一または異なり、それぞれ独立に、置換もしくは非置換のアリール基；または置換もしくは非置換のヘテロ環基であり、

L_1 は、下記の化学式 2 ~ 5 のうちのいずれか 1 つで表され、

20

【化学式 2】

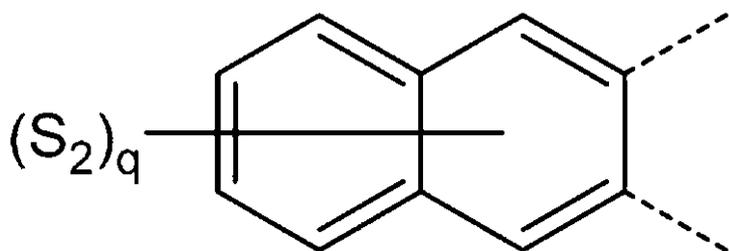
【化 2】



30

【化学式 3】

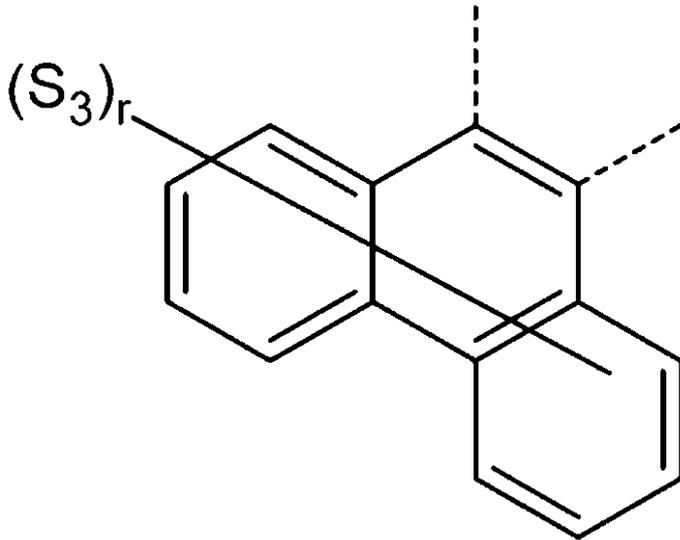
【化 3】



40

【化学式 4】

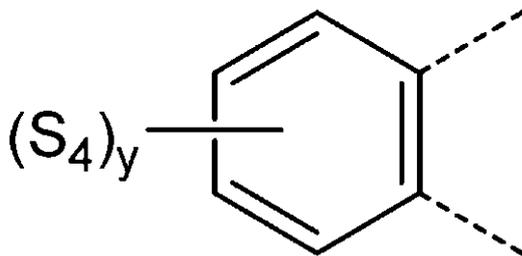
【化4】



10

[化学式5]

【化5】



20

前記化学式2～5において、
点線

【化6】

"-----"

30

はそれぞれ、化学式1のトリアジン基、または L_2 に結合される部位であり、

$S_1 \sim S_4$ 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；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リール基；または置換もしくは非置換のヘテロ環基であり、

p および q は、互いに同一または異なり、それぞれ独立に、0～6の整数であり、

r は、0～8の整数であり、

y は、0～4の整数であり、

p 、 q 、 r および y がそれぞれ、2以上の整数の時、複数の $S_1 \sim S_4$ それぞれは、互いに同一または異なり、

40

L_2 は、直接結合；または置換もしくは非置換のアリーレン基であり、

前記 Ar_3 は、 L_1 が化学式2～4の場合に、シアノ基で置換されたフェニル基；置換もしくは非置換のフルオレニル基；置換もしくは非置換のベンゾフルオレニル基；置換もしくは非置換のスピロビフルオレニル基；置換もしくは非置換のスピロフルオレンインデノフェナントレン基；置換もしくは非置換のジスピロフルオレンアントラセンフルオレン基； S または O を含む $C_4 \sim C_{20}$ のヘテロ環基；アリール基で置換されたカルバゾール基；または化学式6～10のうちのいずれか1つで表され、

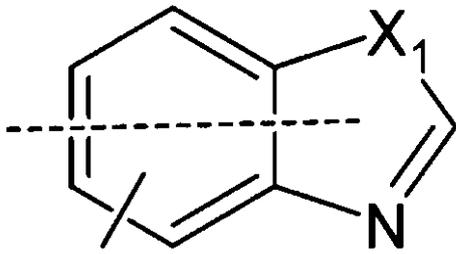
前記 Ar_3 は、 L_1 が化学式5の場合に、シアノ基で置換されたフェニル基；置換もしくは非置換のフルオレニル基；置換もしくは非置換のベンゾフルオレニル基；置換もしくは非置換のスピロビフルオレニル基；置換もしくは非置換のスピロフルオレンインデノフ

50

エナントレン基；置換もしくは非置換のジスピロフルオレンアントラセンフルオレン基；
SまたはOを含むC₄～C₂₀のヘテロ環基；または化学式6～10のうちのいずれか1
つで表され、

[化学式6]

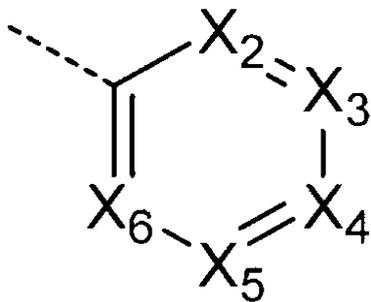
【化7】



(R₁)_m

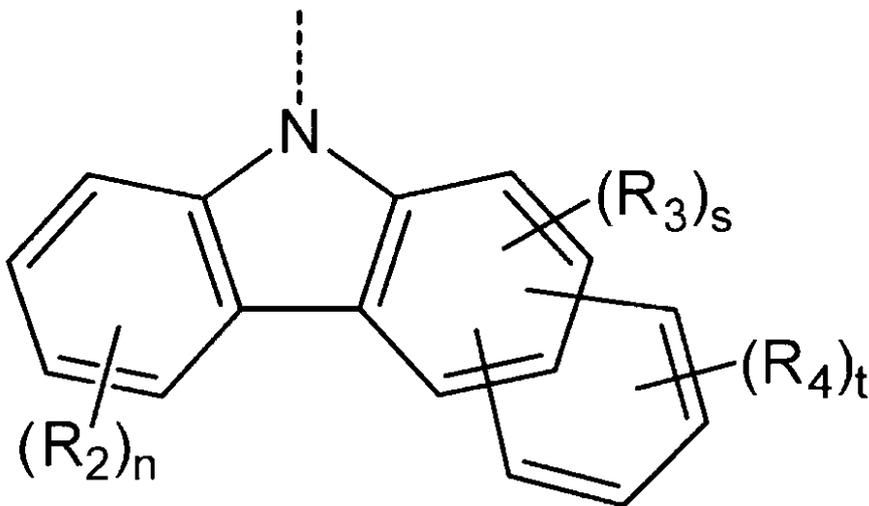
[化学式7]

【化8】



[化学式8]

【化9】



[化学式9]

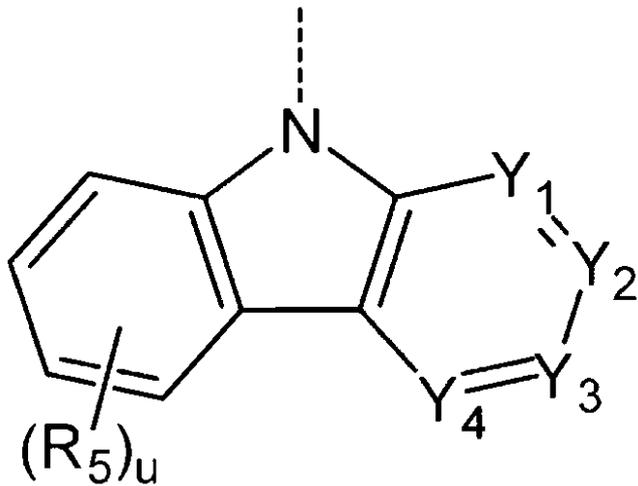
10

20

30

40

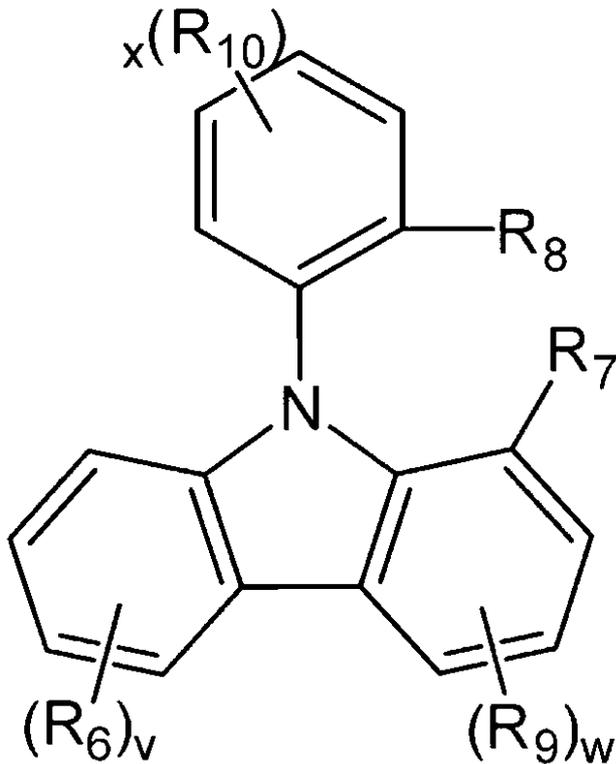
【化10】



10

[化学式10]

【化11】



20

30

前記化学式6～10において、

X₁は、O、SまたはNRであり、X₂～X₆のうちの少なくとも2つは、Nであり、残りは、それぞれ独立に、CR'であり、 40

前記RおよびR'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；置換もしくは非置換のアルキル基；または置換もしくは非置換のアリール基であり、

R₁～R₆、R₉およびR₁₀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；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リール基；または置換もしくは非置換のヘテロ環基であり、Y₁～Y₄のうちの少なくとも1つは、Nであり、残りは、CR''であり、

前記R''は、それぞれ独立に、水素または重水素であり、

R₇およびR₈は、直接結合するか、互いに結合して置換もしくは非置換の環を形成し 50

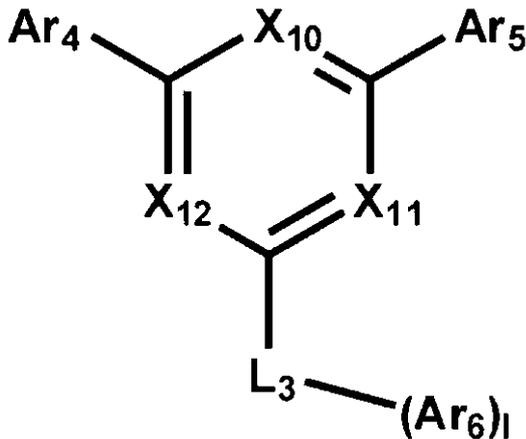
、
 m、n、t、u、v および x はそれぞれ、0 ~ 4 の整数であり、w は、0 ~ 3 の整数であり、m、n、t、u、v、w および x がそれぞれ 2 以上の整数の時、複数の $R_1 \sim R_6$ 、 R_9 および R_{10} はそれぞれ、互いに同一または異なり、
 s は、0 ~ 2 の整数であり、s が 2 の時、2 個の R_3 は、互いに同一または異なり、
 【化 1 2】

"-----"

は、前記化学式 1 の L_2 と結合する部分を意味し、
 前記化学式 10 の結合する部分は、 R_6 、 R_9 、 R_{10} または R_7 および R_8 が結合して形成される環と結合され、

[化学式 1 1]

【化 1 3】



前記化学式 1 1 において、 $X_{10} \sim X_{12}$ のうちの少なくとも 2 つは、N であり、残りは、それぞれ独立に、CR^{'''} であり、

前記 R^{'''} は、水素；重水素；ハロゲン基；置換もしくは非置換のアルキル基；または置換もしくは非置換のアリール基であり、

$Ar_4 \sim Ar_6$ 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環基であり、

L_3 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 2 価のヘテロ環基であり、

l は、1 または 2 であり、l が 2 の場合、 Ar_6 は、互いに同一または異なる。

【請求項 2】

前記 L_2 は、直接結合；または置換もしくは非置換の $C_6 \sim C_{20}$ のアリーレン基である、

請求項 1 に記載の有機発光素子。

【請求項 3】

前記 Ar_3 は、 L_1 が化学式 2 ~ 4 の場合に、シアノ基で置換されたフェニル基；置換もしくは非置換のフルオレニル基；置換もしくは非置換のベンゾフルオレニル基；置換もしくは非置換のスピロフルオレニル基；置換もしくは非置換のスピロフルオレンインデノフェナントレン基；置換もしくは非置換のジスピロフルオレンアントラセンフルオレン基；アリール基で置換されたカルバゾール基；置換もしくは非置換のピリミジル基；置換もしくは非置換のピリダジニル基；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カルバゾリル基；置換もしくは非置換のベンズイミダゾール基；ベンズオキサゾール基；ベンズチアゾール基；ジベンゾフラン基；ジベンゾチオフエン基；ベンゾナフトフラン基；または ベンゾナフトチオフエン基 であり、

Ar_3 は、 L_1 が化学式 5 の場合に、シアノ基で置換されたフェニル基；置換もしくは非置換のフルオレニル基；置換もしくは非置換のベンゾフルオレニル基；置換もしくは非

置換のスピロピフルオレニル基；置換もしくは非置換のスピロフルオレンインデノフェナントレン基；置換もしくは非置換のジスピロフルオレンアントラセンプルオレン基；置換もしくは非置換のピリミジル基；置換もしくは非置換のピリダジニル基；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カルバゾリル基；置換もしくは非置換のベンズイミダゾール基；ベンズオキサゾール基；ベンゾチアゾール基；ジベンゾフラン基；ジベンゾチオフェン基；ベンゾナフトフラン基；またはベンゾナフトチオフェン基である、

請求項 1 または 2 に記載の有機発光素子。

【請求項 4】

前記 $A r_1$ および $A r_2$ 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 $C_6 \sim C_{20}$ のアリール基である、 10

請求項 1 から 3 のいずれか一項に記載の有機発光素子。

【請求項 5】

前記 $S_1 \sim S_4$ は、水素である、

請求項 1 から 4 のいずれか一項に記載の有機発光素子。

【請求項 6】

前記 $R_1 \sim R_6$ および $R_9 \sim R_{10}$ は、水素である、

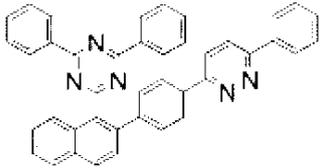
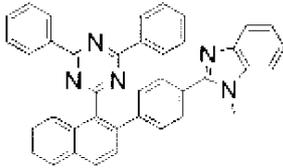
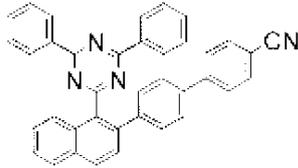
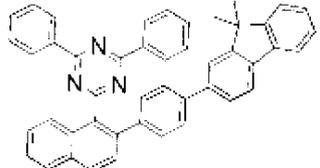
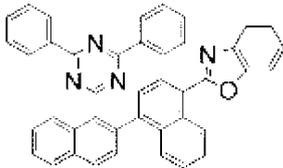
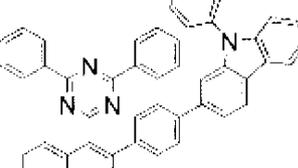
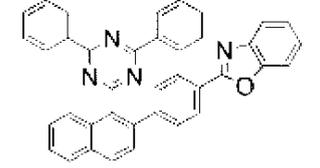
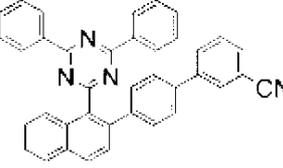
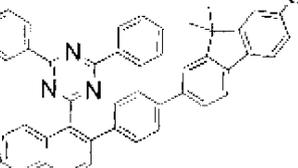
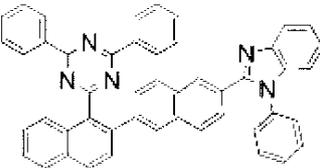
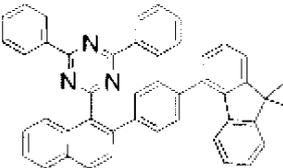
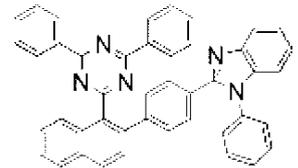
請求項 1 から 5 のいずれか一項に記載の有機発光素子。

【請求項 7】

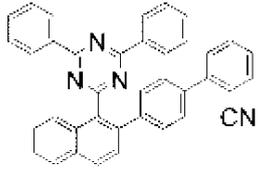
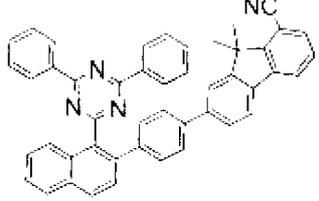
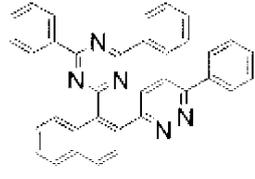
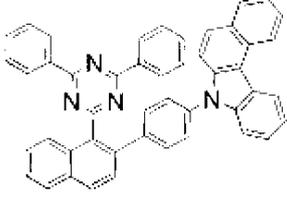
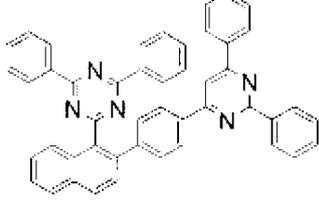
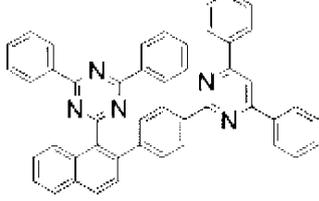
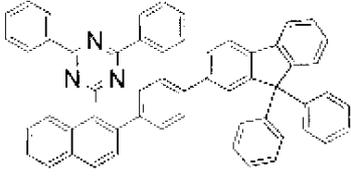
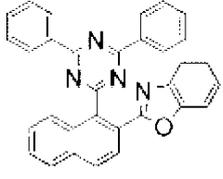
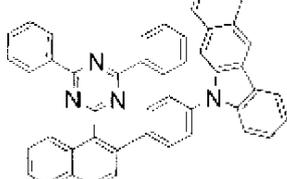
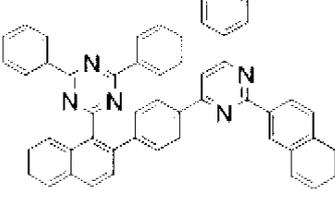
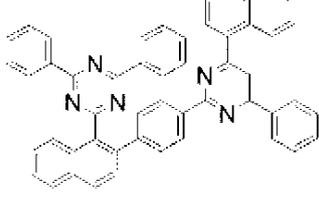
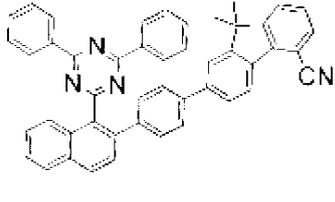
前記化学式 1 で表される化合物は、下記構造式の中から選択されるいずれか 1 つである 20

請求項 1 から 6 のいずれか一項に記載の有機発光素子：

【化 1 4】

			10
<p style="text-align: center;">化合物 1 1</p> 	<p style="text-align: center;">化合物 1 2</p> 	<p style="text-align: center;">化合物 1 3</p> 	
<p style="text-align: center;">化合物 1 4</p> 	<p style="text-align: center;">化合物 1 5</p> 	<p style="text-align: center;">化合物 1 6</p> 	30
<p style="text-align: center;">化合物 1 7</p> 	<p style="text-align: center;">化合物 1 8</p> 	<p style="text-align: center;">化合物 1 9</p> 	
<p style="text-align: center;">化合物 1 10</p>	<p style="text-align: center;">化合物 1 11</p>	<p style="text-align: center;">化合物 1 12</p>	

【化 1 5】

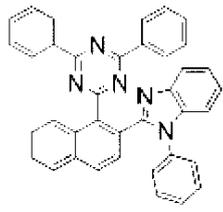
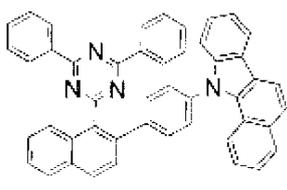
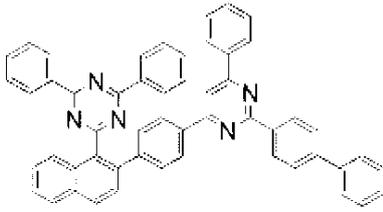
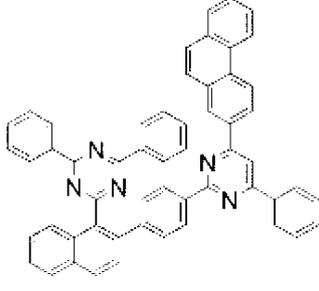
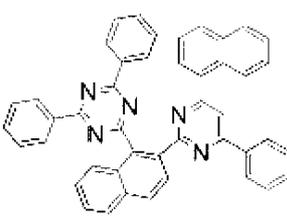
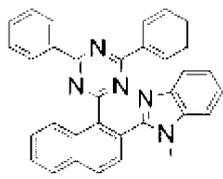
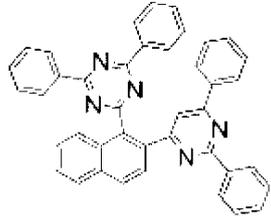
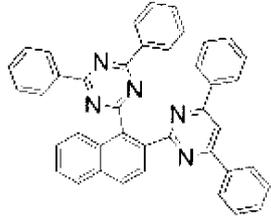
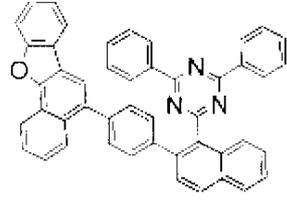
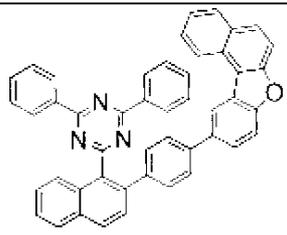
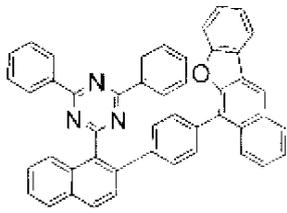
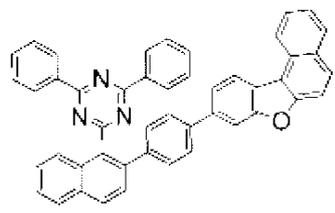
		
<p>化合物 1-13</p>	<p>化合物 1-14</p>	<p>化合物 1-15</p>
		
<p>化合物 1-16</p>	<p>化合物 1-17</p>	<p>化合物 1-18</p>
		
<p>化合物 1-19</p>	<p>化合物 1-20</p>	<p>化合物 1-21</p>
		
<p>化合物 1-22</p>	<p>化合物 1-23</p>	<p>化合物 1-24</p>

10

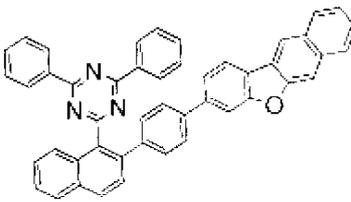
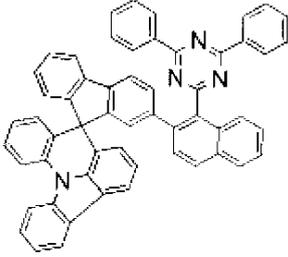
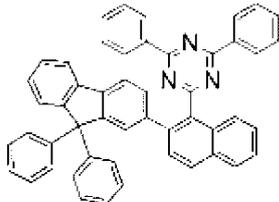
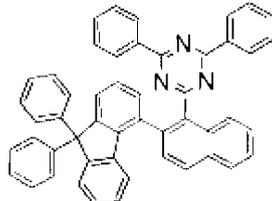
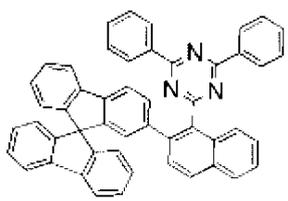
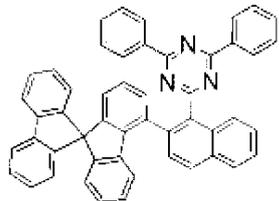
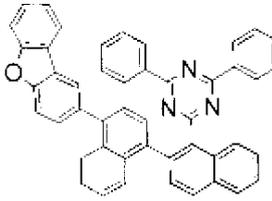
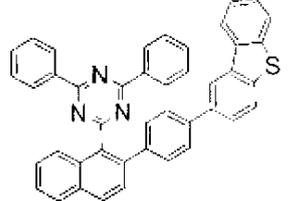
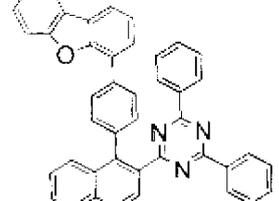
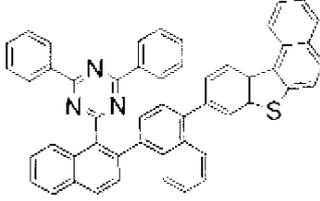
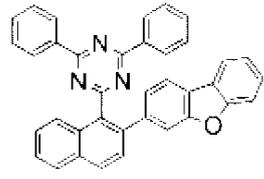
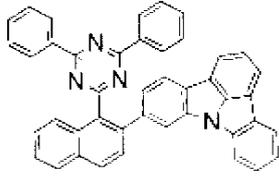
20

30

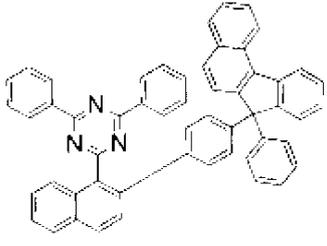
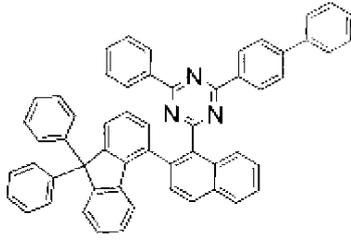
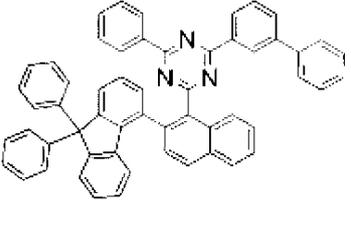
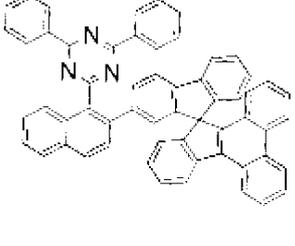
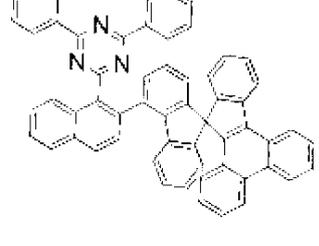
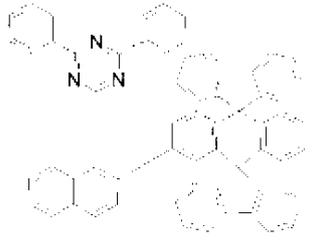
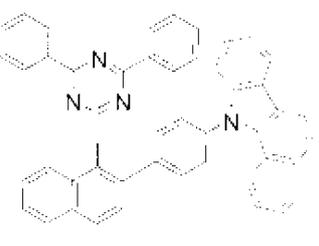
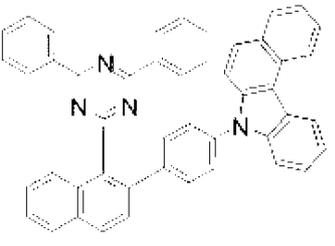
【化 1 6】

			10
<p>化合物 1-25</p>	<p>化合物 1-26</p>	<p>化合物 1-27</p>	
			20
<p>化合物 1-28</p>	<p>化合物 1-29</p>	<p>化合物 1-30</p>	
			30
<p>化合物 1-31</p>	<p>化合物 1-32</p>	<p>化合物 1-33</p>	
			40
<p>化合物 1-34</p>	<p>化合物 1-35</p>	<p>化合物 1-36</p>	

【化 17】

 <p>化合物 1-37</p>	 <p>化合物 1-38</p>	 <p>化合物 1-39</p>	10
 <p>化合物 1-40</p>	 <p>化合物 1-41</p>	 <p>化合物 1-42</p>	20
 <p>化合物 1-43</p>	 <p>化合物 1-44</p>	 <p>化合物 1-45</p>	30
 <p>化合物 1-46</p>	 <p>化合物 1-47</p>	 <p>化合物 1-48</p>	

【化 1 8】

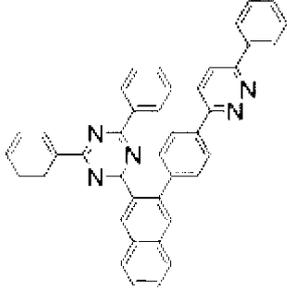
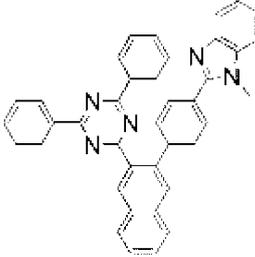
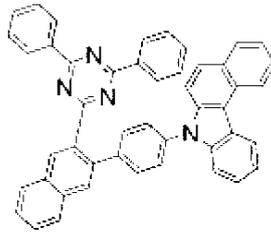
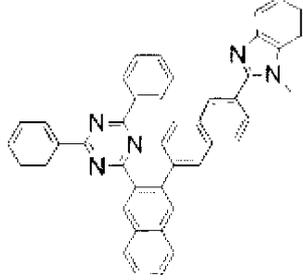
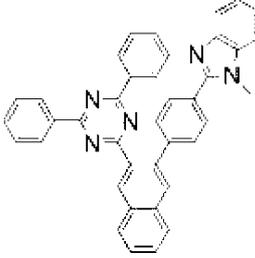
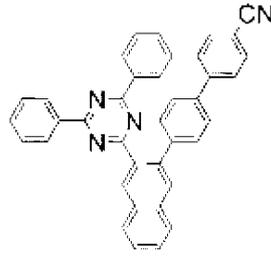
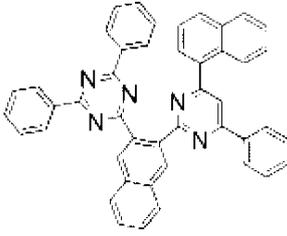
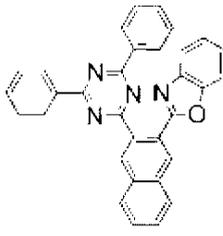
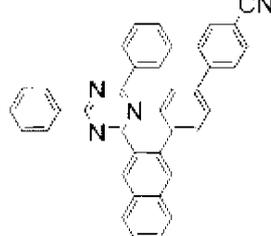
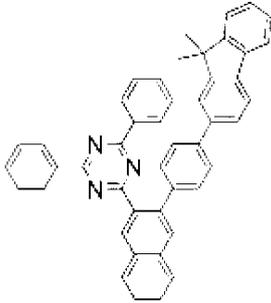
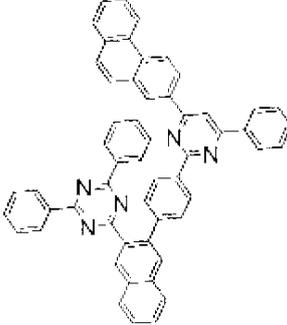
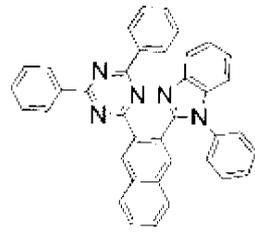
		
化合物 1-49		化合物 1-51
		
化合物 1-52	化合物 1-53	化合物 1-54
		
化合物 1-55	化合物 1-56	化合物 1-57

10

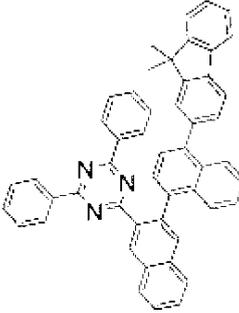
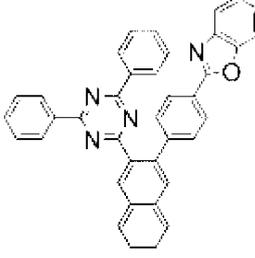
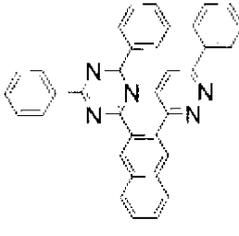
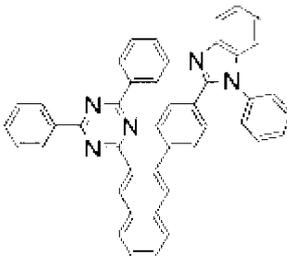
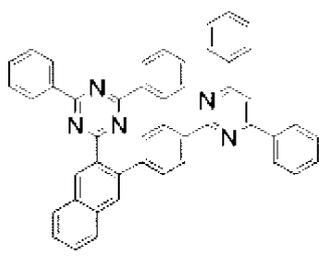
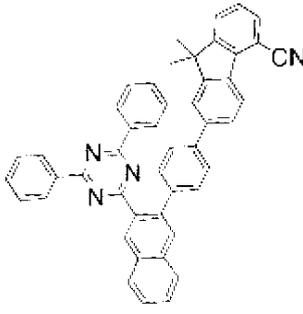
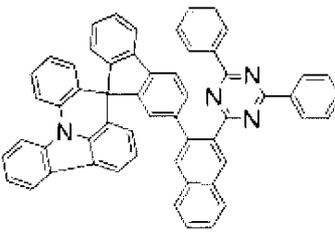
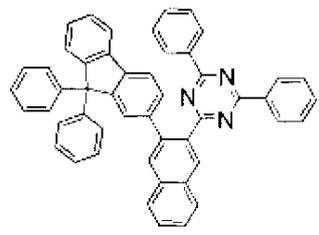
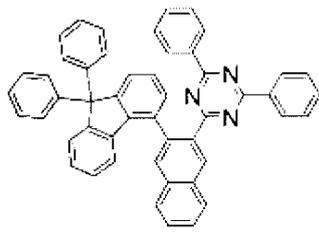
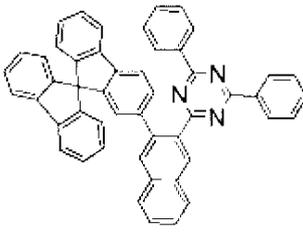
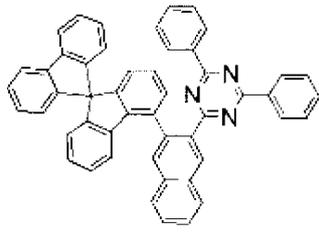
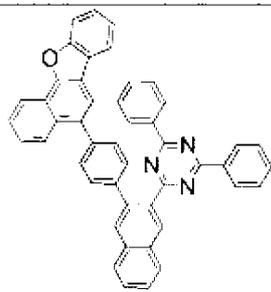
20

30

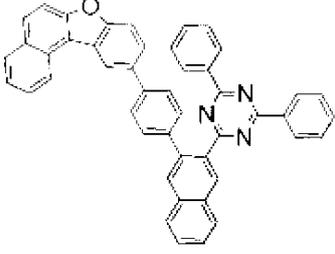
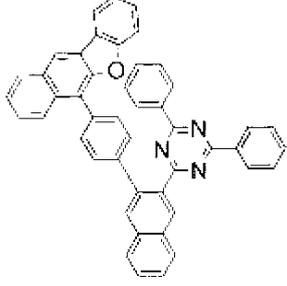
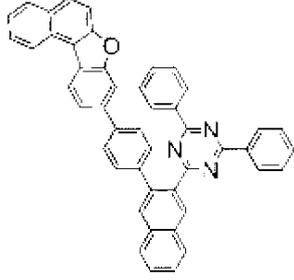
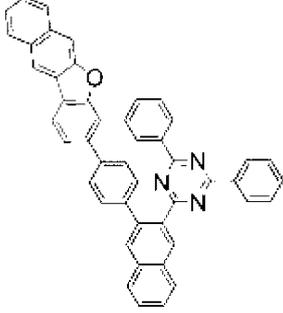
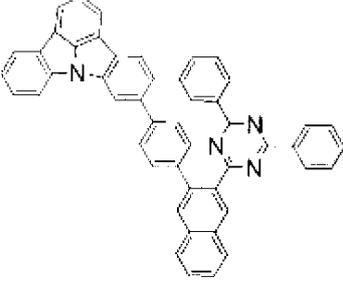
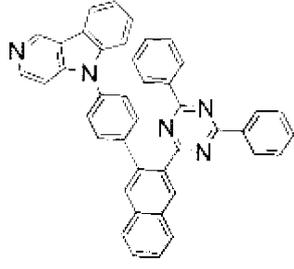
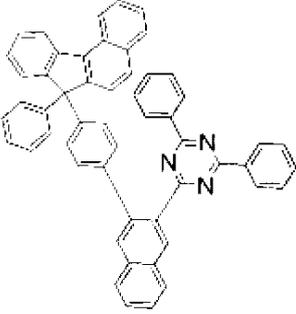
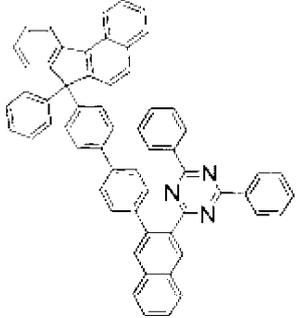
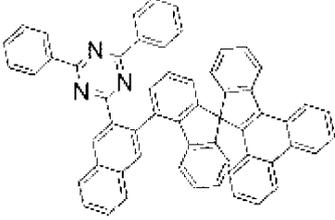
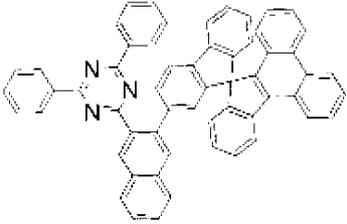
【化 1 9】

 <p>化合物 2-1</p>	 <p>化合物 2-2</p>	 <p>化合物 2-3</p>	10
 <p>化合物 2-4</p>	 <p>化合物 2-5</p>	 <p>化合物 2-6</p>	20
 <p>化合物 2-7</p>	 <p>化合物 2-8</p>	 <p>化合物 2-9</p>	30
 <p>化合物 2-10</p>	 <p>化合物 2-11</p>	 <p>化合物 2-12</p>	40

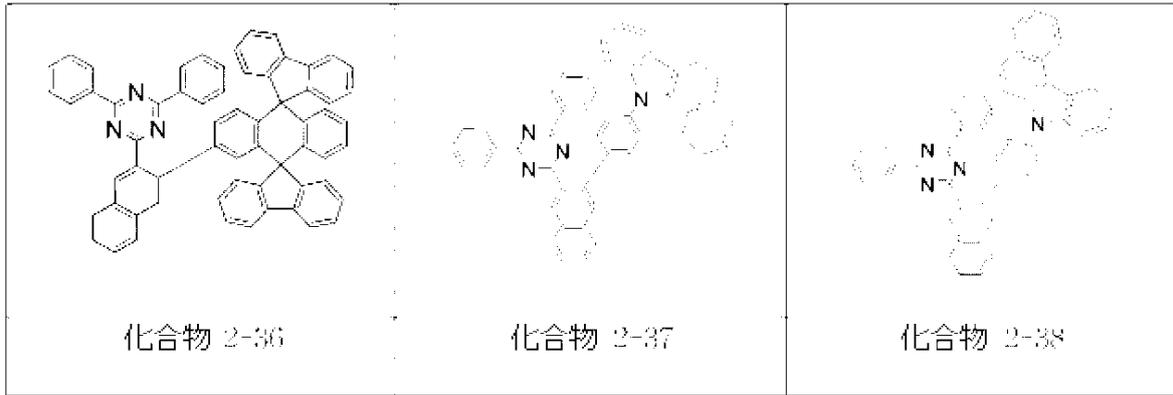
【化 2 0】

			10
<p>化合物 2-13</p>	<p>化合物 2-14</p>	<p>化合物 2-15</p>	
			20
<p>化合物 2-16</p>	<p>化合物 2-17</p>	<p>化合物 2-18</p>	
			30
<p>化合物 2-19</p>	<p>化合物 2-20</p>	<p>化合物 2-21</p>	
			40
<p>化合物 2-22</p>	<p>化合物 2-23</p>	<p>化合物 2-24</p>	

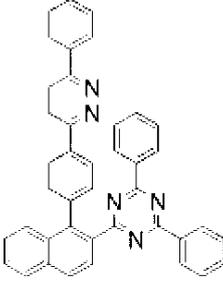
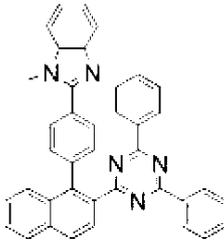
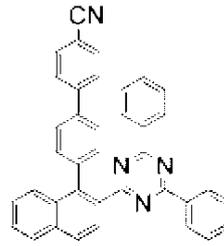
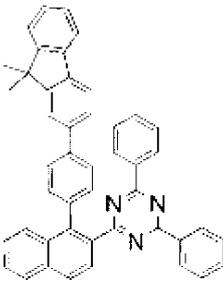
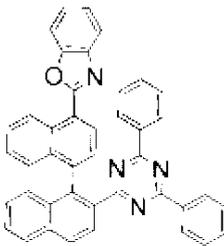
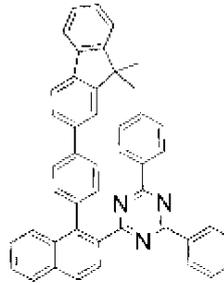
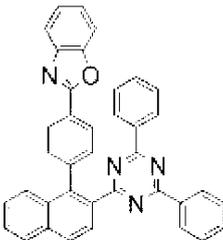
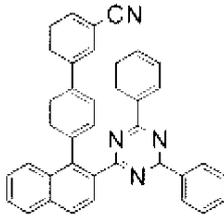
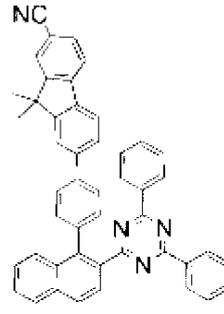
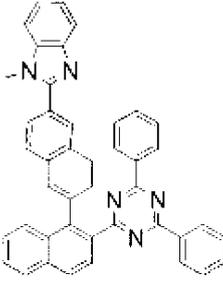
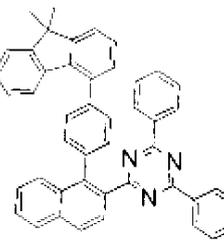
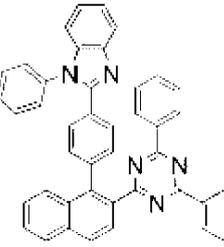
【化 2 1】

			10
<p>化合物 2-24</p>	<p>化合物 2-25</p>	<p>化合物 2-26</p>	
			
<p>化合物 2-27</p>	<p>化合物 2-28</p>	<p>化合物 2-29</p>	
			30
<p>化合物 2-30</p>	<p>化合物 2-31</p>		
			
	<p>化合物 2-34</p>	<p>化合物 2-35</p>	

【化 2 2】



【化 2 3】

		
<p>化合物 3-1</p>	<p>化合物 3-2</p>	<p>化合物 3-3</p>
		
<p>化合物 3-4</p>	<p>化合物 3-5</p>	<p>化合物 3-6</p>
		
<p>化合物 3-7</p>	<p>化合物 3-8</p>	<p>化合物 3-9</p>
		
<p>化合物 3-10</p>	<p>化合物 3-11</p>	<p>化合物 3-12</p>

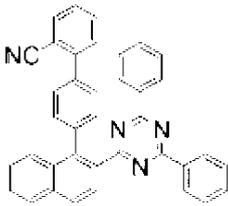
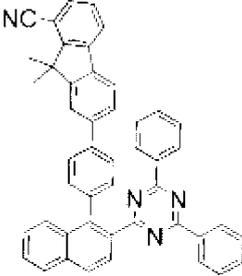
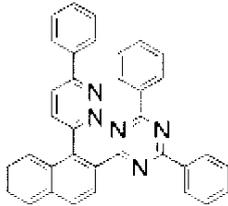
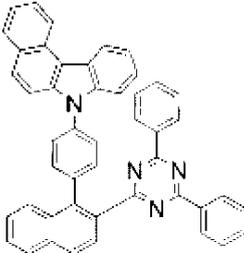
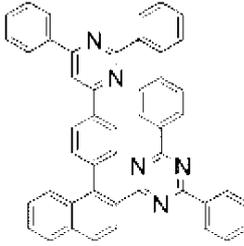
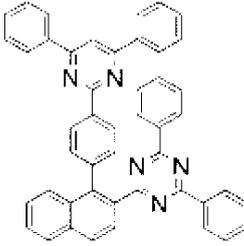
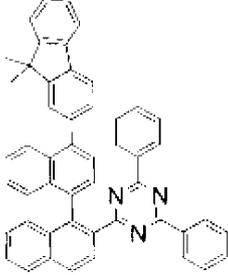
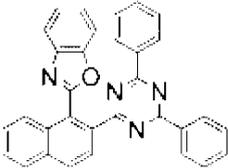
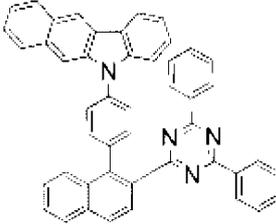
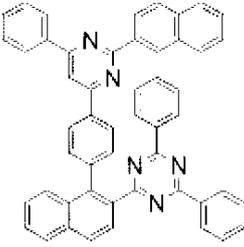
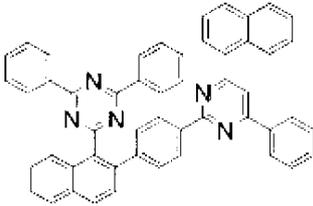
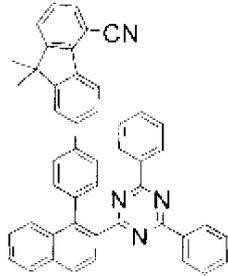
10

20

30

40

【化 2 4】

		
<p>化合物 3-13</p>	<p>化合物 3-14</p>	<p>化合物 3-15</p>
		
<p>化合物 3-16</p>	<p>化合物 3-17</p>	<p>化合物 3-18</p>
		
<p>化合物 3-19</p>	<p>化合物 3-20</p>	<p>化合物 3-21</p>
		
<p>化合物 3-22</p>	<p>化合物 3-23</p>	<p>化合物 3-24</p>

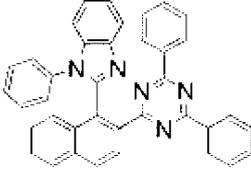
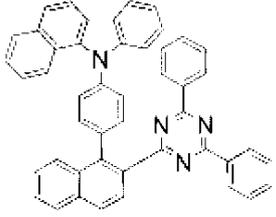
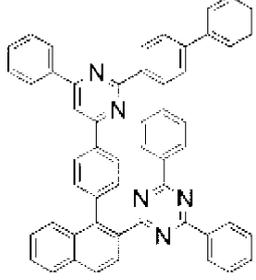
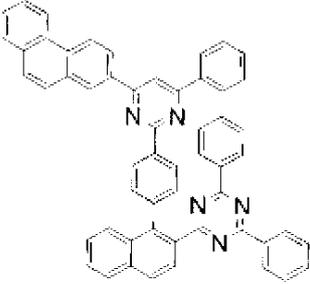
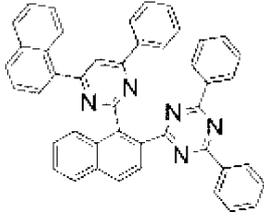
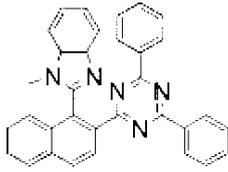
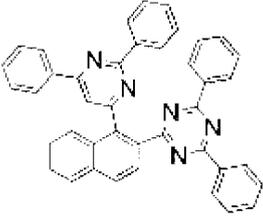
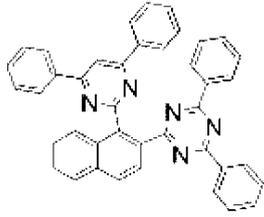
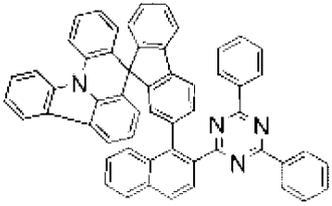
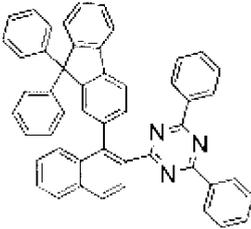
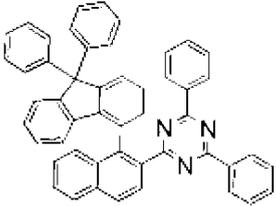
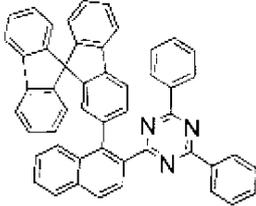
10

20

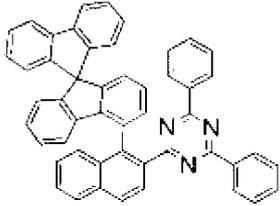
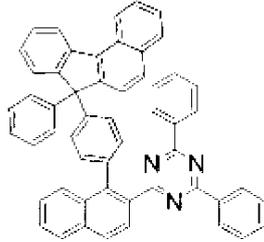
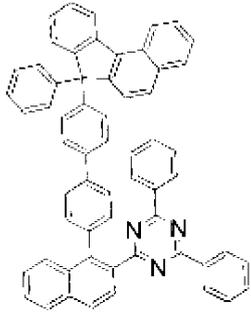
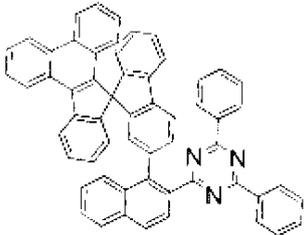
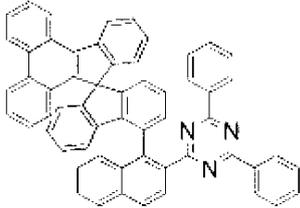
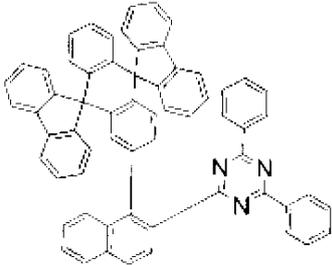
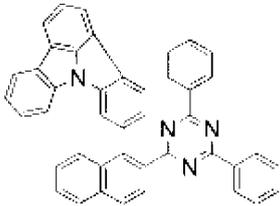
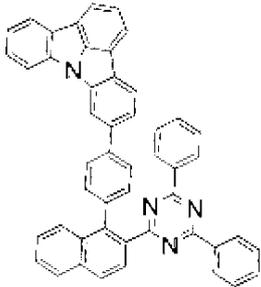
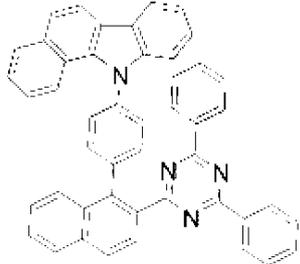
30

40

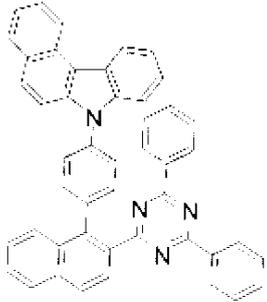
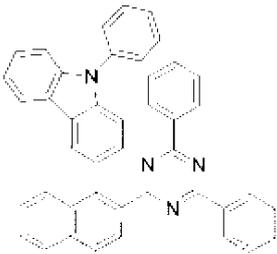
【化 2 5】

 <p>化合物 3-25</p>	 <p>化合物 3-26</p>	 <p>化合物 3-27</p>	10
 <p>化合物 3-28</p>	 <p>化合物 3-29</p>	 <p>化合物 3-30</p>	20
 <p>化合物 3-31</p>	 <p>化合物 3-32</p>	 <p>化合物 3-33</p>	30
 <p>化合物 3-34</p>	 <p>化合物 3-35</p>	 <p>化合物 3-36</p>	40

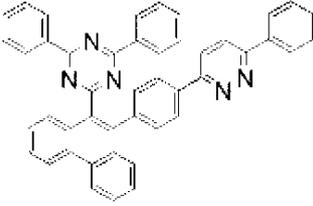
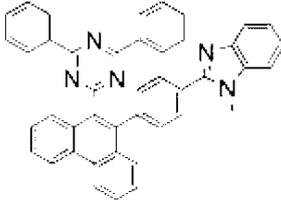
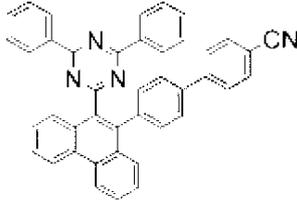
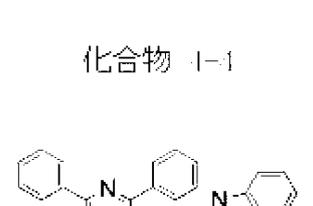
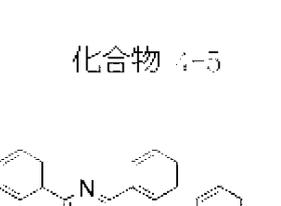
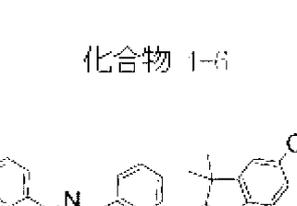
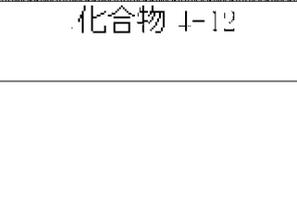
【化 2 6】

			10
<p>化合物 3-37</p>		<p>化合物 3-39</p>	
			20
	<p>化合物 3-41</p>		
			30
<p>化合物 3-43</p>	<p>化合物 3-44</p>	<p>化合物 3-45</p>	
			40
<p>化合物 3-46</p>	<p>化合物 3-47</p>	<p>化合物 3-48</p>	

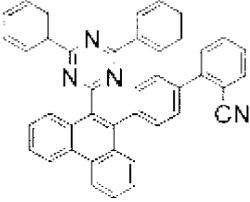
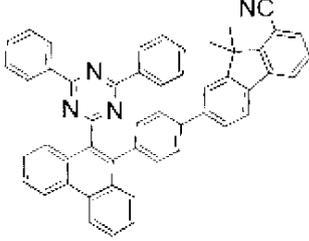
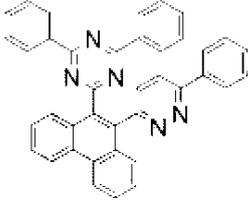
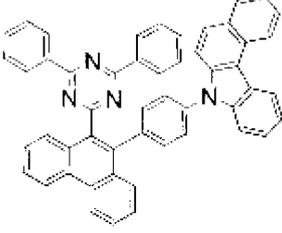
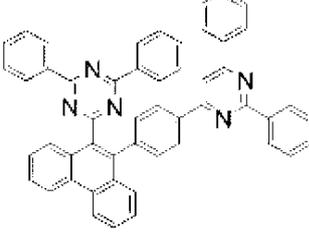
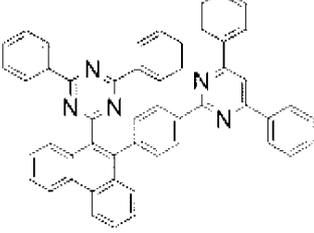
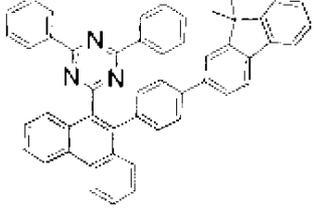
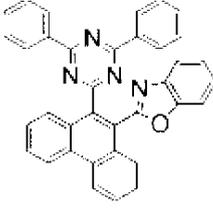
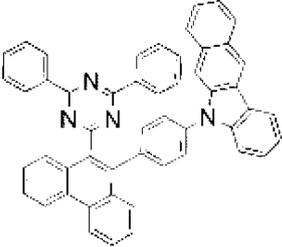
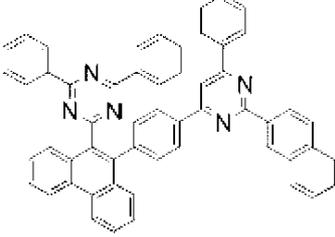
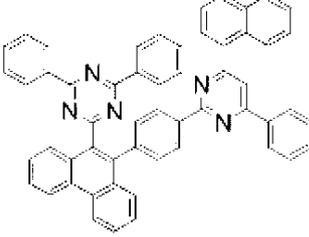
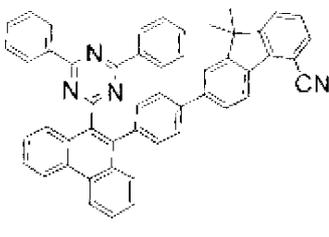
【化 2 7】

 <p>Chemical structure of compound 3-19: A complex polycyclic molecule featuring a central benzimidazole ring system. It is substituted with a phenyl ring, a benzimidazole ring, and a benzimidazole ring. The central benzimidazole ring is also substituted with a phenyl ring and a benzimidazole ring.</p>	 <p>Chemical structure of compound 3-50: A complex polycyclic molecule featuring a central benzimidazole ring system. It is substituted with a phenyl ring, a benzimidazole ring, and a benzimidazole ring. The central benzimidazole ring is also substituted with a phenyl ring and a benzimidazole ring.</p>
化合物 3-19	化合物 3-50

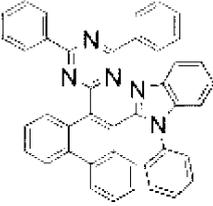
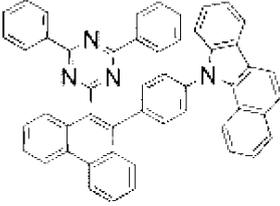
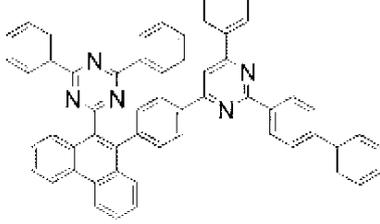
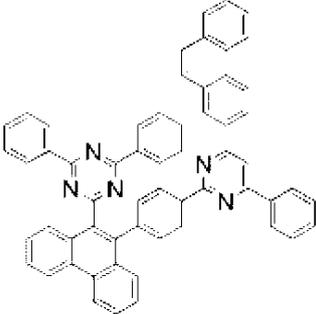
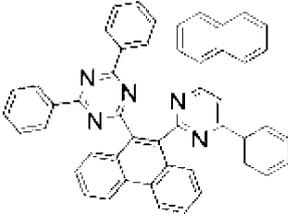
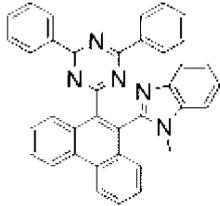
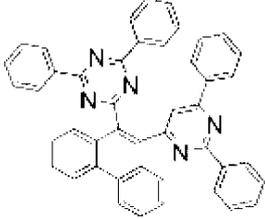
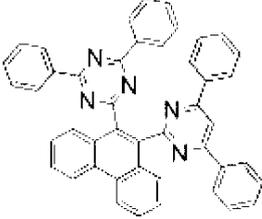
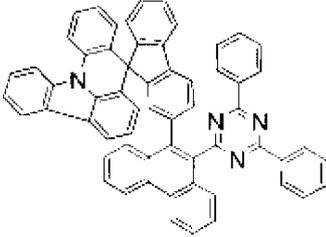
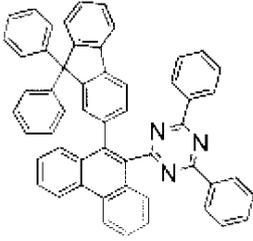
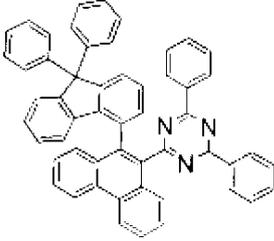
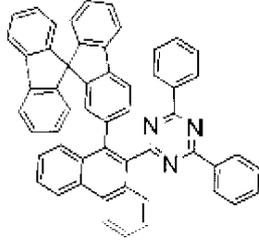
【化 2 8】

			10
<p>化合物 4-1</p>	<p>化合物 4-2</p>	<p>化合物 4-3</p>	
			20
<p>化合物 4-4</p>	<p>化合物 4-5</p>	<p>化合物 4-6</p>	
			30
<p>化合物 4-7</p>	<p>化合物 4-8</p>	<p>化合物 4-9</p>	
			
<p>化合物 4-10</p>	<p>化合物 4-11</p>	<p>化合物 4-12</p>	

【化 2 9】

			
化合物 4-13	化合物 4-14	化合物 4-15	10
			
化合物 4-16	化合物 4-17	化合物 4-18	20
			
化合物 4-19	化合物 4-20	化合物 4-21	30
			
化合物 4-22	化合物 4-23	化合物 1-21	40

【化 3 0】

			10
<p>化合物 1-25</p>	<p>化合物 1-26</p>	<p>化合物 1-27</p>	
			
<p>化合物 1-28</p>	<p>化合物 1-29</p>	<p>化合物 1-30</p>	
			30
<p>化合物 1-31</p>	<p>化合物 1-32</p>	<p>化合物 1-33</p>	
			
<p>化合物 1-34</p>	<p>化合物 1-35</p>	<p>化合物 1-36</p>	

【化 3 1】

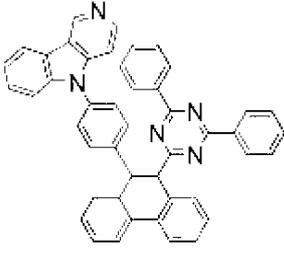
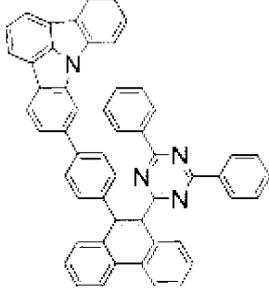
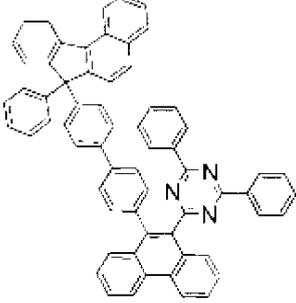
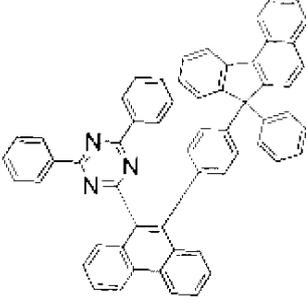
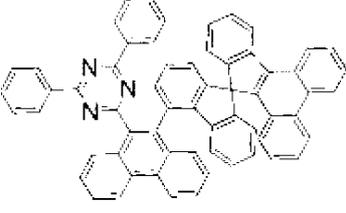
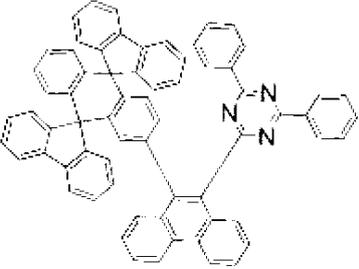
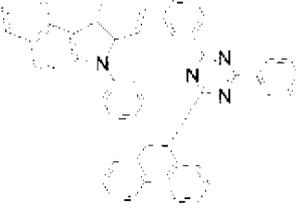
<p>化合物 4-37</p>	<p>化合物 4-38</p>	<p>化合物 4-39</p>
<p>化合物 4-10</p>	<p>化合物 4-11</p>	<p>化合物 4-12</p>
<p>化合物 4-13</p>	<p>化合物 4-14</p>	

10

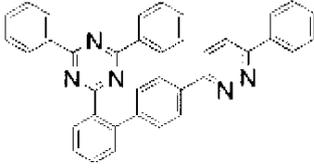
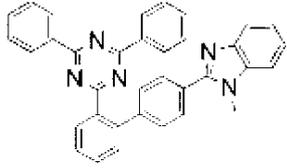
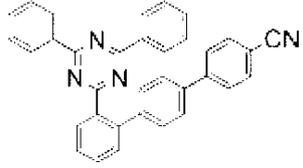
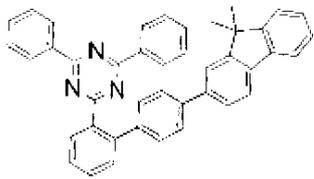
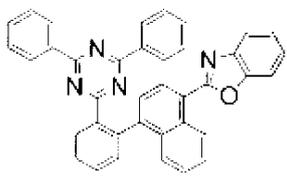
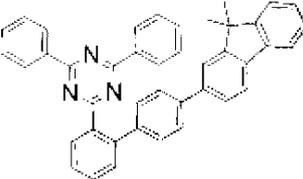
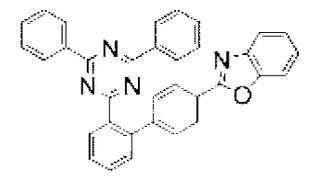
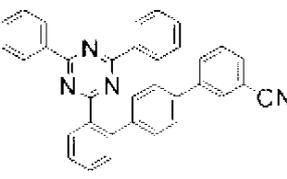
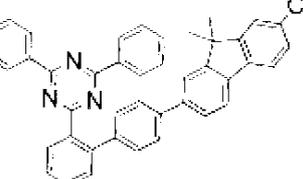
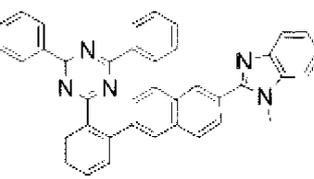
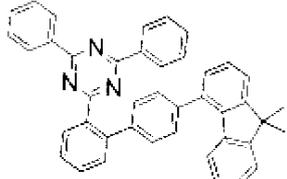
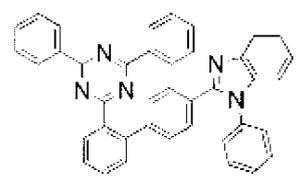
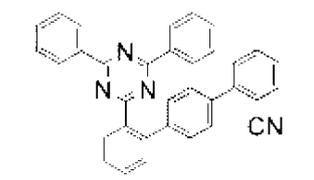
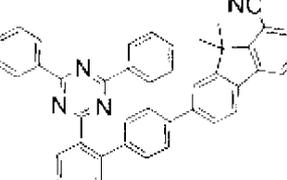
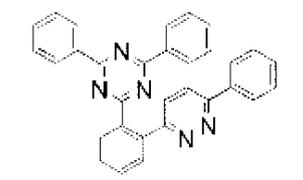
20

30

【化 3 2】

 <p>化合物 4-47</p>	 <p>化合物 4-48</p>	10
 <p>化合物 4-49</p>	 <p>化合物 4-50</p>	20
 <p>化合物 4-52</p>	 <p>化合物 4-53</p>	30
 <p>化合物 4-55</p>		40

【化 3 3】

 <p>化合物 5-1</p>	 <p>化合物 5-2</p>	 <p>化合物 5-3</p>
 <p>化合物 5-4</p>	 <p>化合物 5-5</p>	 <p>化合物 5-6</p>
 <p>化合物 5-7</p>	 <p>化合物 5-8</p>	 <p>化合物 5-9</p>
 <p>化合物 5-10</p>	 <p>化合物 5-11</p>	 <p>化合物 5-12</p>
 <p>化合物 5-13</p>	 <p>化合物 5-14</p>	 <p>化合物 5-15</p>

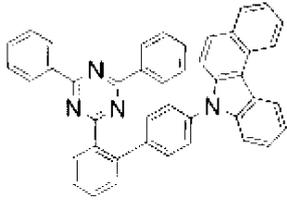
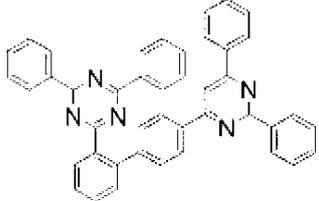
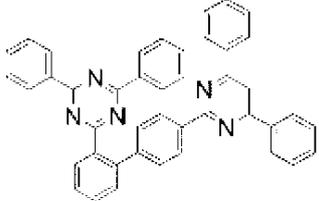
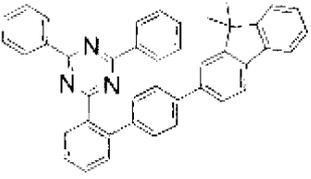
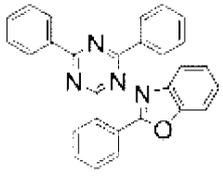
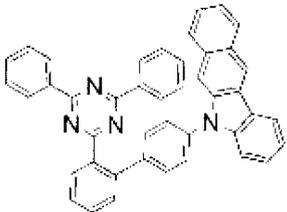
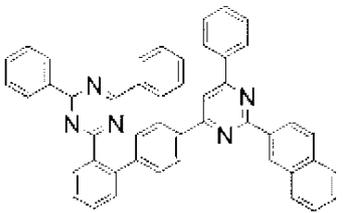
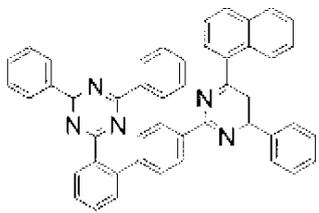
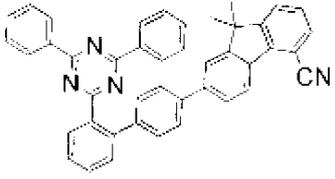
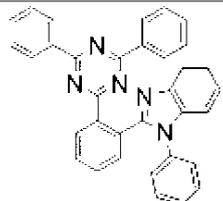
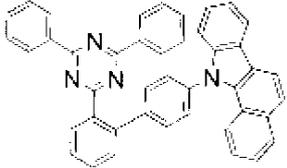
10

20

30

40

【化 3 4】

		
化合物 5-16	化合物 5-17	化合物 5-18
		
化合物 5-19	化合物 5-20	化合物 5-21
		
化合物 5-22	化合物 5-23	化合物 5-24
		
化合物 5-25	化合物 5-27	

10

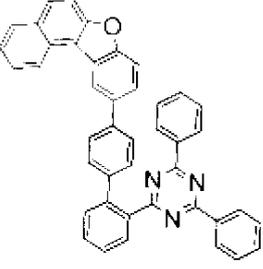
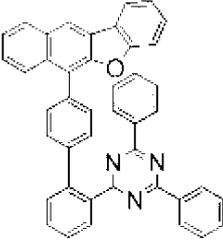
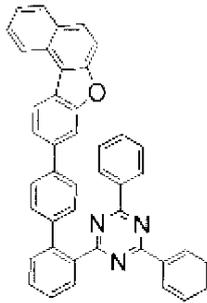
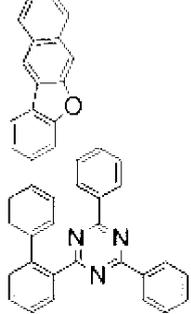
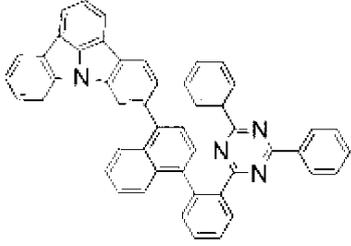
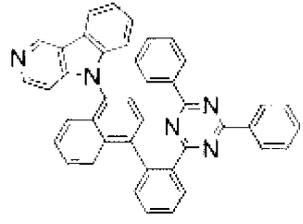
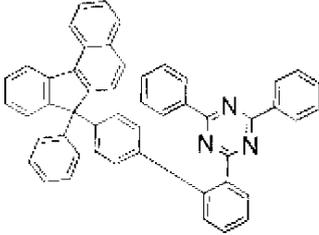
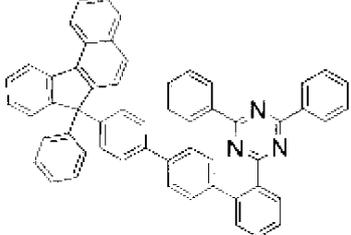
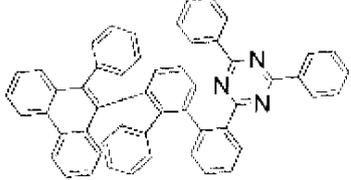
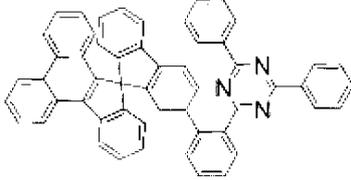
20

30

【化 3 5】

			10
			20
			30
			40
			40

【化 3 6】

		
<p>化合物 5-40</p>	<p>化合物 5-41</p>	<p>化合物 5-42</p>
		
<p>化合物 5-43</p>	<p>化合物 5-44</p>	<p>化合物 5-45</p>
		
<p>化合物 5-46</p>	<p>化合物 5-47</p>	
		
	<p>化合物 5-50</p>	<p>化合物 5-51</p>

10

20

30

40

【化 3 7】



10

【請求項 8】

前記 Ar_4 および Ar_5 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 $C_6 \sim C_{20}$ のアリール基である、

請求項 1 から 7 のいずれか一項に記載の有機発光素子。

【請求項 9】

前記 L_3 は、直接結合；または置換もしくは非置換の $C_6 \sim C_{20}$ のアリーレン基である、

20

請求項 1 から 8 のいずれか一項に記載の有機発光素子。

【請求項 10】

前記 Ar_6 は、置換もしくは非置換のスピロフルオレンインドロアクリジン基；置換もしくは非置換のインドロカルバゾール基；置換もしくは非置換のベンゾカルバゾール基；置換もしくは非置換のカルバゾール基；置換もしくは非置換のスピロピフルオレニル基；または置換もしくは非置換のフルオレニル基である、

請求項 1 から 9 のいずれか一項に記載の有機発光素子。

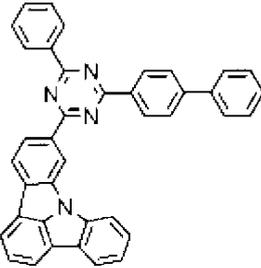
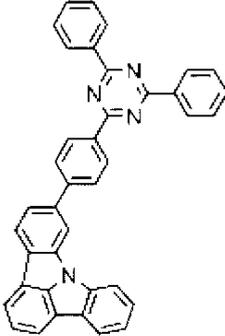
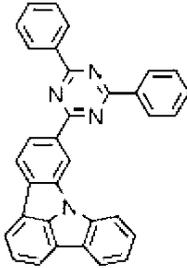
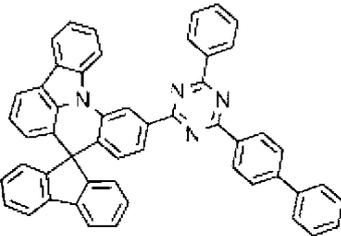
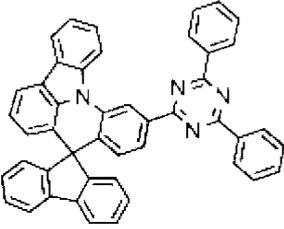
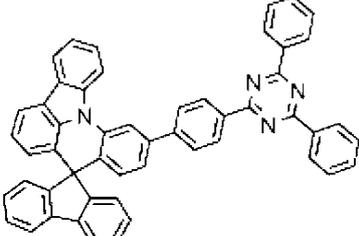
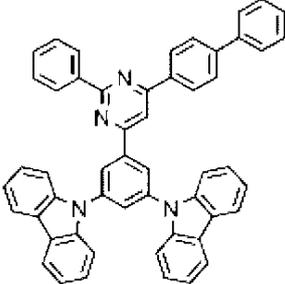
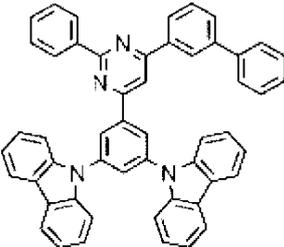
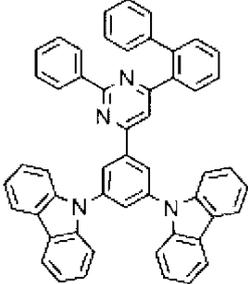
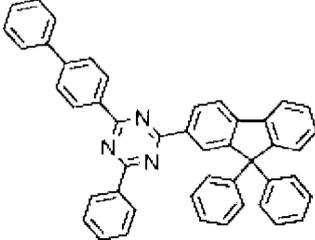
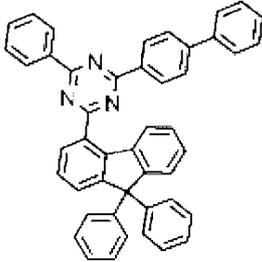
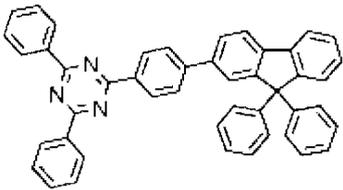
【請求項 11】

前記化学式 11 で表される化合物は、下記構造式の中から選択されるいずれか 1 つである、

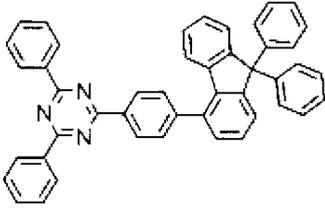
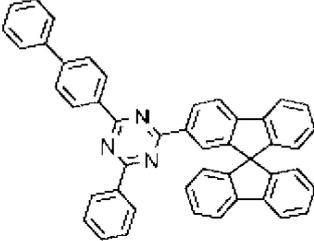
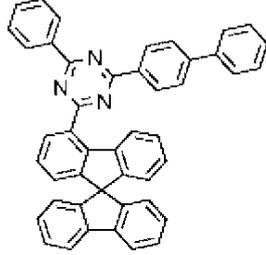
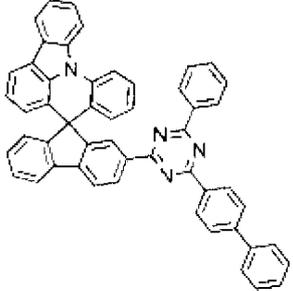
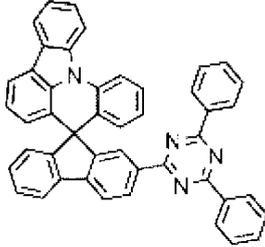
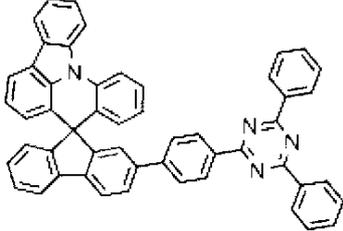
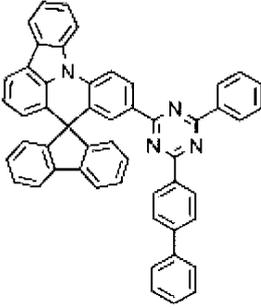
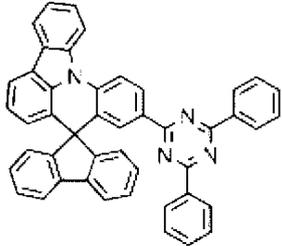
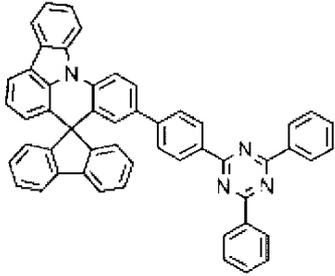
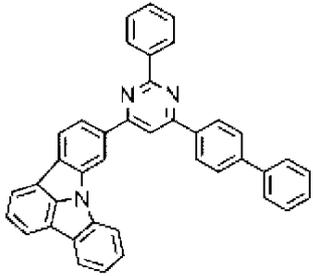
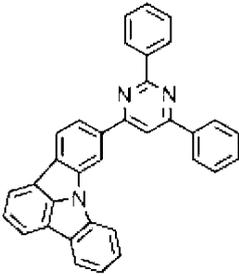
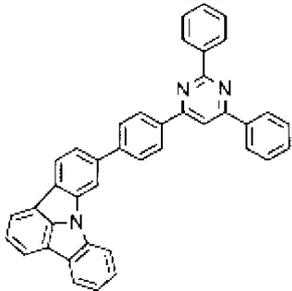
30

請求項 1 から 10 のいずれか一項に記載の有機発光素子：

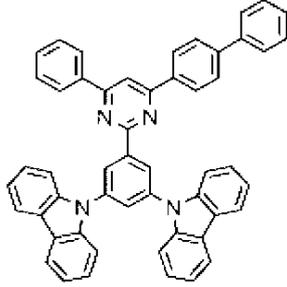
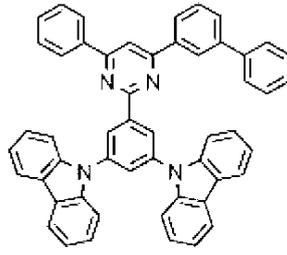
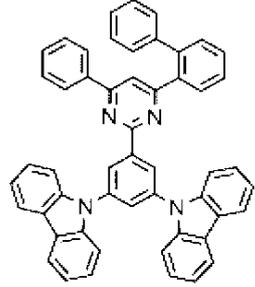
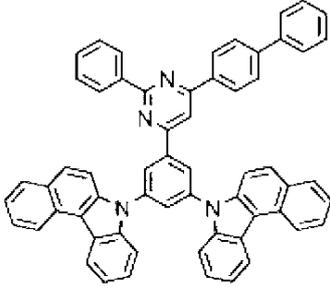
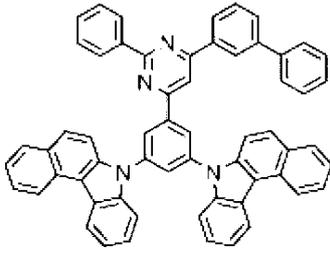
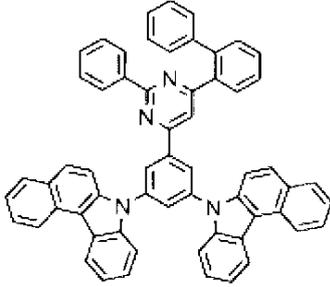
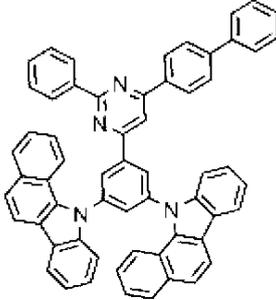
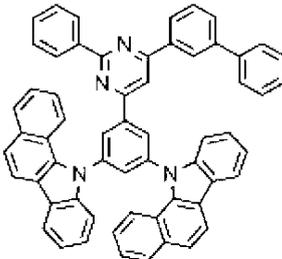
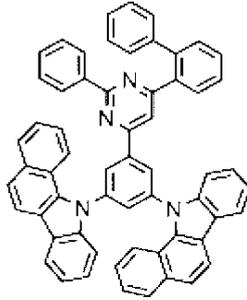
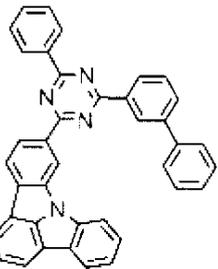
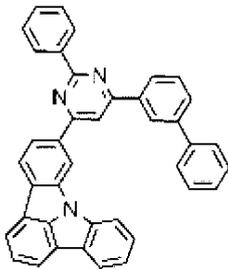
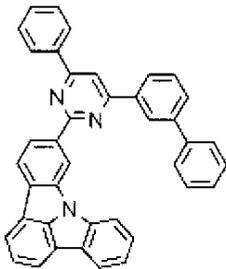
【化 3 8】

			10
			20
			30
			40

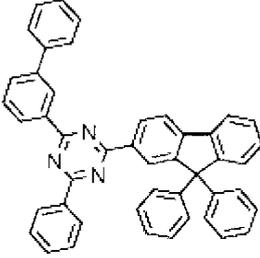
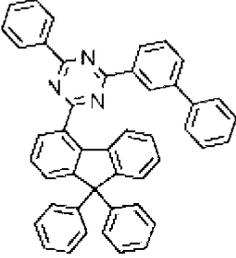
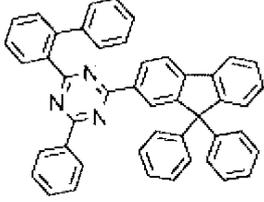
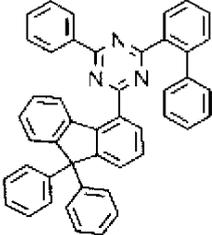
【化 3 9】

			10
<p>化合物 6-13</p> 	<p>化合物 6-14</p> 	<p>化合物 6-15</p> 	20
<p>化合物 6-16</p> 	<p>化合物 6-17</p> 	<p>化合物 6-18</p> 	30
<p>化合物 6-19</p> 	<p>化合物 6-20</p> 	<p>化合物 6-21</p> 	40
<p>化合物 6-22</p>	<p>化合物 6-23</p>	<p>化合物 6-24</p>	

【化 4 0】

			10
<p style="text-align: center;">化合物 6-25</p>	<p style="text-align: center;">化合物 6-26</p>	<p style="text-align: center;">化合物 6-27</p>	
			20
<p style="text-align: center;">化合物 6-28</p>	<p style="text-align: center;">化合物 6-29</p>	<p style="text-align: center;">化合物 6-30</p>	
			30
<p style="text-align: center;">化合物 6-30</p>	<p style="text-align: center;">化合物 6-31</p>	<p style="text-align: center;">化合物 6-32</p>	
			40
<p style="text-align: center;">化合物 6-33</p>	<p style="text-align: center;">化合物 6-34</p>	<p style="text-align: center;">化合物 6-35</p>	

【化 4 1】

			10
化合物 6-36	化合物 6-37	化合物 6-38	
			20
化合物 6-39			

【請求項 1 2】

前記電子調節層は、発光層と電子輸送層との間に備えられた、
請求項 1 から 1 1 のいずれか一項に記載の有機発光素子。

【請求項 1 3】

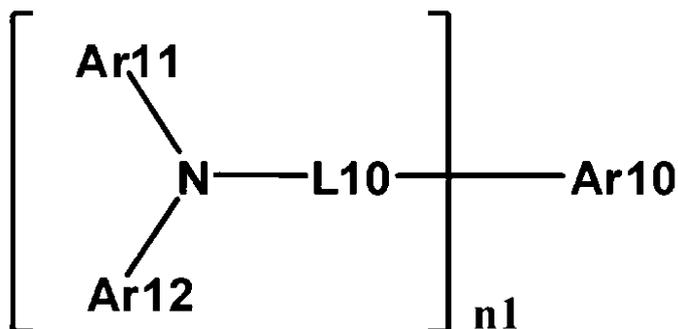
前記有機発光素子は、正孔注入層、正孔輸送層、発光層、電子注入層、電子阻止層、および正孔阻止層からなる群より選択される 1 層または 2 層以上をさらに含む、
請求項 1 から 1 2 のいずれか一項に記載の有機発光素子。

30

【請求項 1 4】

前記有機物層は、発光層を含み、
前記発光層は、下記の化学式 A - 1 の化合物を含む、
請求項 1 から 1 3 のいずれか一項に記載の有機発光素子：
[化学式 A - 1]

【化 4 2】



40

前記化学式 A - 1 において、

n 1 は、1 以上の整数であり、

Ar 1 0 は、置換もしくは非置換の 1 価以上のベンゾフルオレン基；置換もしくは非置

50

換の1価以上のフルオランテン基；置換もしくは非置換の1価以上のピレン基；または置換もしくは非置換の1価以上のクリセン基であり、

L10は、直接結合；置換もしくは非置換のアリーレン基；置換もしくは非置換のヘテロアリーレン基であり、

Ar11およびAr12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；置換もしくは非置換のシリル基；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リールアルキル基；または置換もしくは非置換のヘテロ環基であるが、互いに結合して置換もしくは非置換の環を形成してもよいし、

n1が2以上の場合、2以上の括弧内の構造は、互いに同一または異なる。

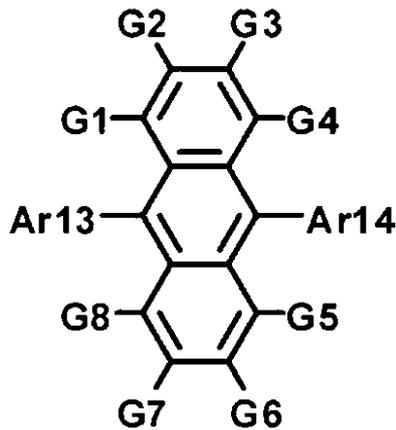
【請求項15】

前記有機物層は、発光層を含み、前記発光層は、下記の化学式A-2で表される化合物を含む、

請求項1から14のいずれか一項に記載の有機発光素子：

[化学式A-2]

【化43】



前記化学式A-2において、

Ar13およびAr14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単環のアリール基；または置換もしくは非置換の多環のアリール基であり、

G1～G8は、互いに同一または異なり、それぞれ独立に、水素；置換もしくは非置換の単環のアリール基；または置換もしくは非置換の多環のアリール基である。

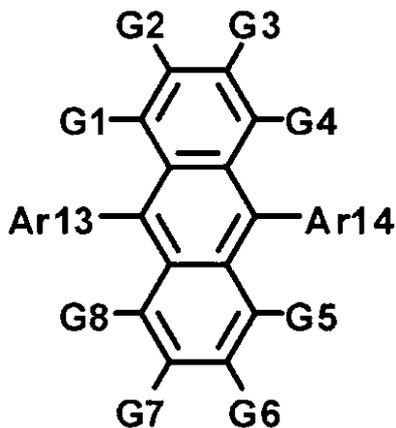
【請求項16】

前記発光層は、下記の化学式A-2で表される化合物を含む、

請求項14に記載の有機発光素子：

[化学式A-2]

【化44】



前記化学式A-2において、

A r 1 3 および A r 1 4 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単環のアリール基；または置換もしくは非置換の多環のアリール基であり、

G 1 ~ G 8 は、互いに同一または異なり、それぞれ独立に、水素；置換もしくは非置換の単環のアリール基；または置換もしくは非置換の多環のアリール基である。

【発明の詳細な説明】

【技術分野】

【0001】

本出願は、有機発光素子に関する。本出願は、2015年10月27日付で韓国特許庁に出願された韓国特許出願第10-2015-0149714号の出願日の利益を主張し、その内容はすべて明細書に組み込まれる。

10

【背景技術】

【0002】

一般的に、有機発光現象とは、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。有機発光現象を利用する有機発光素子は、通常、陽極および陰極と、それらの間に有機物層とを含む構造を有する。ここで、有機物層は、有機発光素子の効率と安定性を高めるために、それぞれ異なる物質で構成された多層の構造からなる場合が多く、例えば、正孔注入層、正孔輸送層、発光層、電子輸送層、電子注入層などからなる。このような有機発光素子の構造において、2つの電極の間に電圧をかけると、陽極からは正孔が、陰極からは電子が有機物層に注入され、注入された正孔と電子が接した時、エキシトン (e x c i t o n) が形成され、このエキシトンが再び基底状態に落ちる時に光を

20

【0003】

前記のような有機発光素子のための新たな材料の開発が要求され続けている。

【発明の概要】

【発明が解決しようとする課題】

【0004】

本出願は、有機発光素子を提供する。

【課題を解決するための手段】

【0005】

本出願は、陽極と、前記陽極に対向して備えられた陰極と、前記陽極と前記陰極との間に有機物層とを含む有機発光素子であって、

30

前記有機物層は、発光層を含み、

前記有機物層は、前記発光層および陰極の間に備えられた電子調節層および電子輸送層をさらに含み、

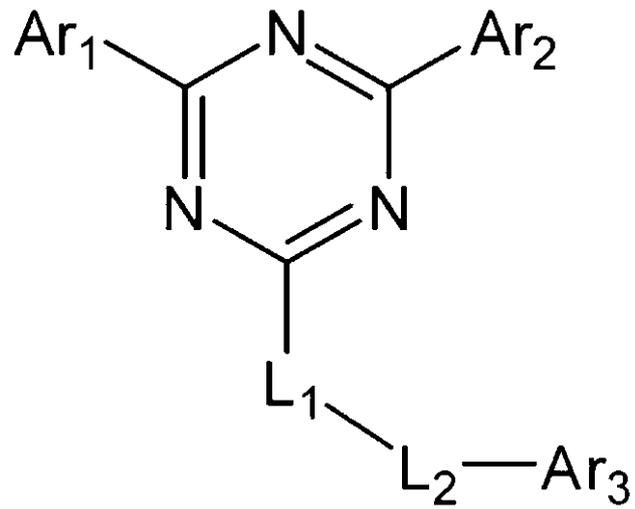
前記電子調節層は、下記化学式1で表される化合物を含み、

前記電子輸送層は、下記化学式11で表される化合物を含むものである有機発光素子を提供する。

【0006】

[化学式1]

【化 1】



10

化学式 1 において、

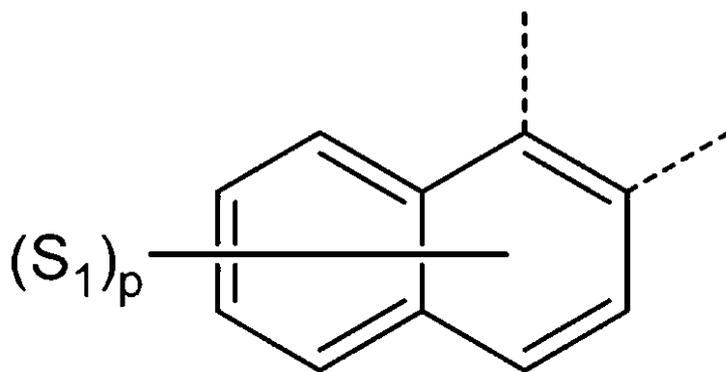
Ar_1 および Ar_2 は、互いに同一または異なり、それぞれ独立に、置換もしくは非置換のアリール基；または置換もしくは非置換のヘテロ環基であり、

L_1 は、下記化学式 2 ~ 5 のうちのいずれか 1 つで表され、

【化学式 2】

20

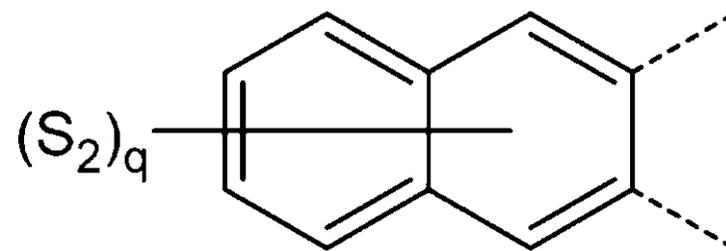
【化 2】



30

【化学式 3】

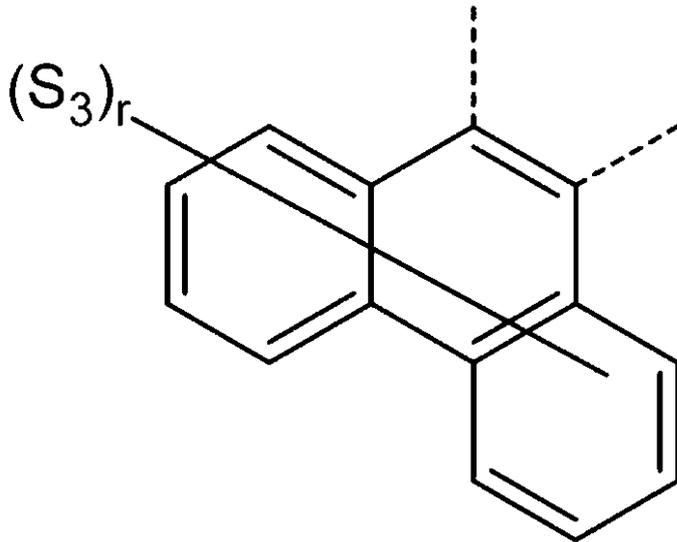
【化 3】



40

【化学式 4】

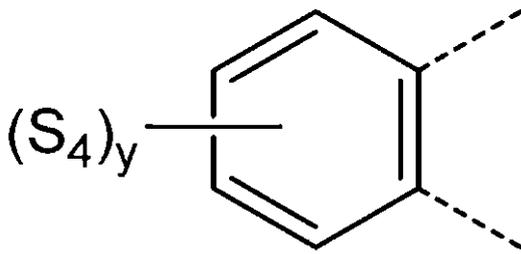
【化4】



10

[化学式5]

【化5】



20

前記化学式2～5において、
点線

【化6】

"-----"

30

はそれぞれ、化学式1のトリアジン基、または L_2 に結合される部位であり、

$S_1 \sim S_4$ 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；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リール基；または置換もしくは非置換のヘテロ環基であり、

p および q は、互いに同一または異なり、それぞれ独立に、0～6の整数であり、

r は、0～8の整数であり、

y は、0～4の整数であり、

p 、 q 、 r および y がそれぞれ2以上の整数の時、複数の $S_1 \sim S_4$ それぞれは、互いに同一または異なり、

40

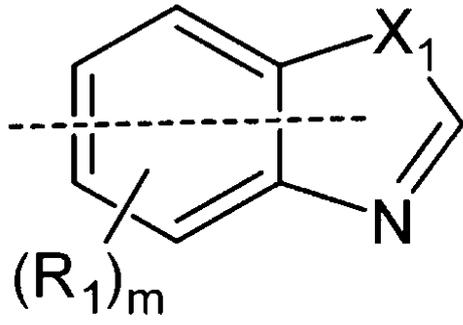
L_2 は、直接結合；または置換もしくは非置換のアリーレン基であり、

Ar_3 は、 L_1 が化学式2～4の場合に、置換もしくは非置換のアリール基； S または O を含む置換もしくは非置換のヘテロ環基；置換もしくは非置換のカルバゾール基；または下記化学式6～10のうちのいずれか1つで表され、

Ar_3 は、 L_1 が化学式5の場合に、置換もしくは非置換のアリール基； S または O を含む置換もしくは非置換のヘテロ環基；または下記化学式6～10のうちのいずれか1つで表され、

[化学式6]

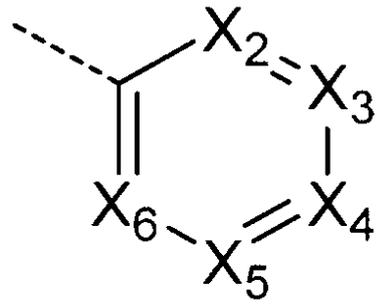
【化7】



10

[化学式7]

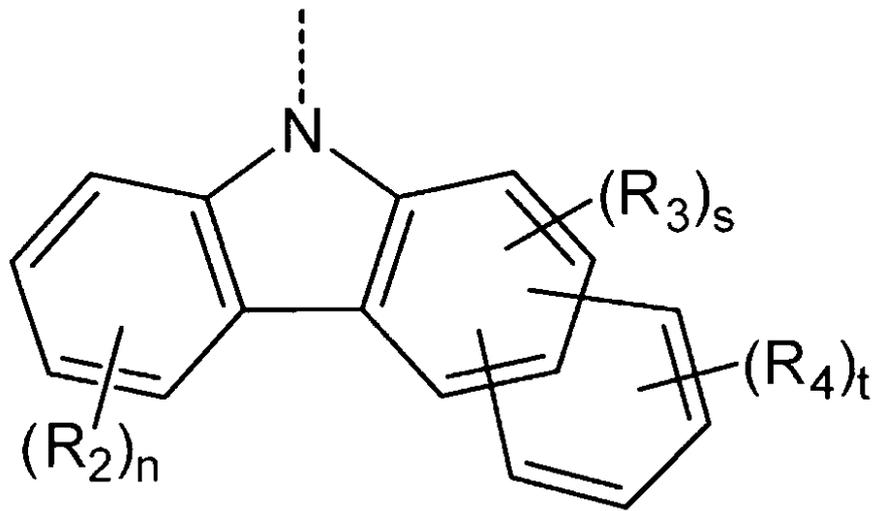
【化8】



20

[化学式8]

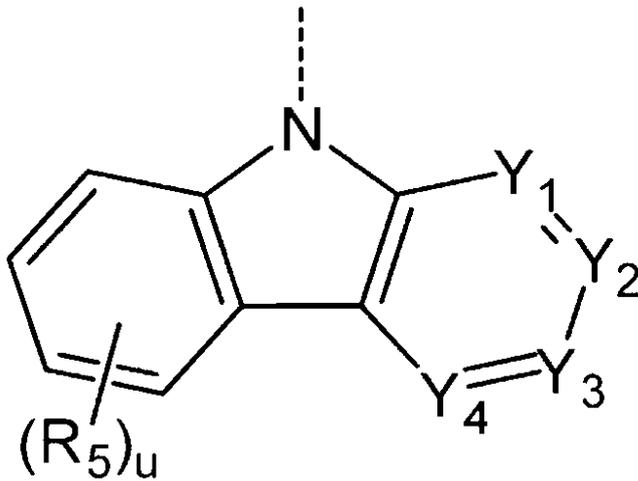
【化9】



30

[化学式9]

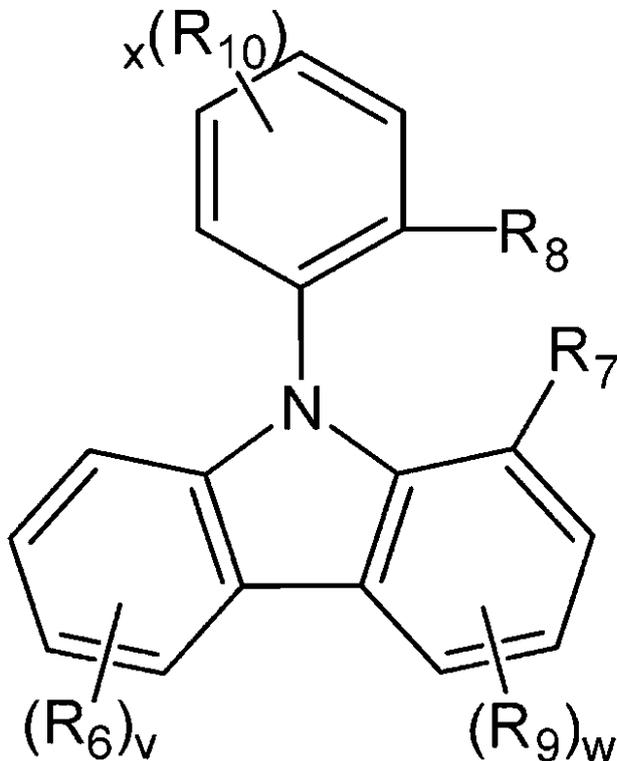
【化10】



10

[化学式10]

【化11】



20

30

40

前記化学式6～10において、

X₁は、O、S、またはNRであり、X₂～X₆のうちの少なくとも2つは、Nであり、残りは、それぞれ独立に、CR'であり、

前記RおよびR'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；置換もしくは非置換のアルキル基；または置換もしくは非置換のアリール基であり、

R₁～R₆、R₉およびR₁₀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；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リール基；または置換もしくは非置換のヘテロ環基であり、

50

$Y_1 \sim Y_4$ のうちの少なくとも1つは、Nであり、残りは、CR"であり、
前記R"は、それぞれ独立に、水素または重水素であり、

R_7 および R_8 は、直接結合するか、互いに結合して置換もしくは非置換の環を形成し

、
 m, n, t, u, v および x はそれぞれ、0 ~ 4の整数であり、 w は、0 ~ 3の整数であり、 m, n, t, u, v, w および x がそれぞれ2以上の整数の時、複数の $R_1 \sim R_6$ 、 R_9 および R_{10} はそれぞれ、互いに同一または異なり、

s は、0 ~ 2の整数であり、 s が2の時、2個の R_3 は、互いに同一または異なり、
【化12】

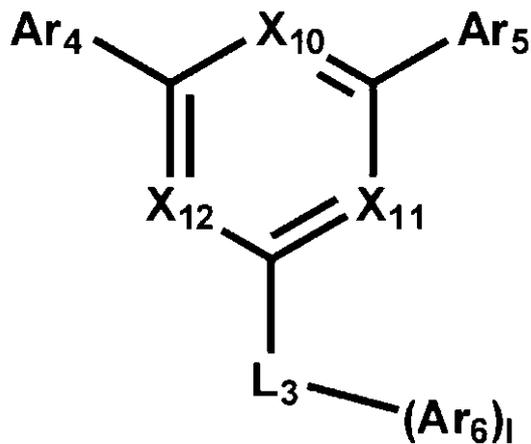
"-----"

10

は、前記化学式1の L_2 と結合する部分を意味し、前記化学式10の結合する部分は、
 R_6, R_9, R_{10} または R_7 および R_8 が結合して形成される環と結合され、

[化学式11]

【化13】



20

前記化学式11において、 $X_{10} \sim X_{12}$ のうちの少なくとも2つは、Nであり、残りは、それぞれ独立に、CR"であり、

30

前記R"は、水素；重水素；ハロゲン基；置換もしくは非置換のアルキル基；または置換もしくは非置換のアリール基であり、

$Ar_4 \sim Ar_6$ 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環基であり、

L_3 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2価のヘテロ環基であり、

l は、1または2であり、 l が2の場合、 Ar_6 は、互いに同一または異なる。

【発明の効果】

【0007】

40

本出願の一実施態様に係る有機発光素子は、駆動電圧が低く、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。

【0008】

化学式1で表されるトリアジンタイプの化合物は、トリアジンと他の官能基が L_1 に互いに隣接して(ortho-)位置することにより、ホール(hole)量の調節(hole blocking)が容易な特性を示し、電子調節層物質として優れた特性を示すことができる。化学式11で表されるピリミジンおよびトリアジンタイプの化合物は、通常高いLUMO値を有し、したがって、電子調節層として電子伝達が容易な特性を有し、低電圧、高効率特性を有する。

【0009】

50

したがって、化学式 1 の化合物を電子調節層に使用すると同時に、電子輸送層に化学式 1 1 の化合物を共に使用することで電子輸送層から電子調節層への電子伝達が容易になり、広いバンドギャップの特性により陽極からのホール (h o l e) 量を効率的に調節することにより、電荷のバランス (C h a r g e b a l a n c e) を合わせると、低い駆動電圧、長寿命の特性を有するだけでなく、効率特性を向上させることができる。

【図面の簡単な説明】

【 0 0 1 0 】

【図 1】本明細書の一実施態様に係る有機発光素子の例を示すものである。

【発明を実施するための形態】

【 0 0 1 1 】

以下、本明細書についてより詳細に説明する。

【 0 0 1 2 】

本明細書において、ある部分がある構成要素を「含む」とする時、これは、特に反対の記載がない限り、他の構成要素を除くのではなく、他の構成要素をさらに包含できることを意味する。

【 0 0 1 3 】

本明細書は、陽極と、前記陽極に対向して備えられた陰極と、前記陽極と前記陰極との間に有機物層とを含む有機発光素子であって、

前記有機物層は、発光層を含み、

前記有機物層は、前記発光層および陰極の間に備えられた電子調節層および電子輸送層をさらに含み、

前記電子調節層は、上記化学式 1 で表される化合物を含み、

前記電子輸送層は、上記化学式 1 1 で表される化合物を含むものである有機発光素子を提供する。

【 0 0 1 4 】

前記電子調節層は、有機発光素子において電子の移動度を調節する役割を果たす層を意味する。

【 0 0 1 5 】

本明細書の一実施態様において、前記有機発光素子は、発光層を含み、前記電子調節層は、前記発光層に接して備えられる。この場合、電子調節層は、電子移動度を調節する役割および陽極から供給される正孔が、陰極、特に電子輸送層に移らないようにする正孔障壁の役割を同時に果たすことができる。

【 0 0 1 6 】

本明細書の一実施態様において、前記電子輸送層の厚さは、前記電子調節層の厚さより厚い。電子の移動を調節する電子調節層の厚さが電子輸送層の厚さより厚い場合には、単位時間あたり発光層に移動可能な電子の量が減少して、相対的に陽極から正孔が陰極に過度に供給され、素子の効率が低くなり得る。したがって、電子輸送層の厚さが電子調節層の厚さより厚い場合には、単位時間あたり発光層に移動可能な電子の量を適切に調節して、陽極から供給される正孔の量とバランスを合わせることができ、発光層のエキシトン形成の極大化および高い素子効率を期待することができる。

【 0 0 1 7 】

本明細書において、置換基の例示は以下に説明するが、これに限定されるものではない。

【 0 0 1 8 】

前記「置換」という用語は、化合物の炭素原子に結合され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。

【 0 0 1 9 】

本明細書において、「置換もしくは非置換の」という用語は、重水素；ハロゲン基；シ

10

20

30

40

50

アノ基；ニトロ基；ヒドロキシ基；アルキル基；シクロアルキル基；アルケニル基；アルコキシ基；アリール基；およびヘテロ環基からなる群より選択された1または2以上の置換基で置換されているか、前記例示された置換基のうちの2以上の置換基が連結された置換基で置換されるか、またはいずれの置換基も有しないことを意味する。例えば、「2以上の置換基が連結された置換基」は、ビフェニル基であってもよい。すなわち、ビフェニル基は、アリール基であってもよく、2個のフェニル基が連結された置換基と解釈されてもよい。

【0020】

本明細書において、ハロゲン基の例としては、フッ素、塩素、臭素、またはヨウ素がある。

10

【0021】

本明細書において、前記アルキル基は、直鎖もしくは分枝鎖であってもよく、炭素数は特に限定されないが、1～50のものが好ましい。具体例としては、メチル、エチル、プロピル、*n*-プロピル、イソプロピル、ブチル、*n*-ブチル、イソブチル、*tert*-ブチル、*sec*-ブチル、1-メチル-ブチル、1-エチル-ブチル、ペンチル、*n*-ペンチル、イソペンチル、ネオペンチル、*tert*-ペンチル、ヘキシル、*n*-ヘキシル、1-メチルペンチル、2-メチルペンチル、4-メチル-2-ペンチル、3,3-ジメチルブチル、2-エチルブチル、ヘプチル、*n*-ヘプチル、1-メチルヘキシル、シクロペンチルメチル、シクロヘキシルメチル、オクチル、*n*-オクチル、*tert*-オクチル、1-メチルヘプチル、2-エチルヘキシル、2-プロピルペンチル、*n*-ノニル、2,2-ジメチルヘプチル、1-エチル-プロピル、1,1-ジメチル-プロピル、イソヘキシル、2-メチルペンチル、4-メチルヘキシル、5-メチルヘキシルなどがあるが、これらに限定されない。

20

【0022】

本明細書において、シクロアルキル基は特に限定されないが、炭素数3～60のものが好ましく、具体的には、シクロプロピル、シクロブチル、シクロペンチル、3-メチルシクロペンチル、2,3-ジメチルシクロペンチル、シクロヘキシル、3-メチルシクロヘキシル、4-メチルシクロヘキシル、2,3-ジメチルシクロヘキシル、3,4,5-トリメチルシクロヘキシル、4-*tert*-ブチルシクロヘキシル、シクロヘプチル、シクロオクチルなどがあるが、これらに限定されない。

30

【0023】

本明細書において、前記アルコキシ基は、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。

【0024】

本明細書において、前記アルケニル基は、直鎖もしくは分枝鎖であってもよく、炭素数は特に限定されないが、2～40のものが好ましい。具体例としては、ビニル、1-プロペニル、イソプロペニル、1-ブテニル、2-ブテニル、3-ブテニル、1-ペンテニル、2-ペンテニル、3-ペンテニル、3-メチル-1-ブテニル、1,3-ブタジエニル、アリル、1-フェニルビニル-1-イル、2-フェニルビニル-1-イル、2,2-ジフェニルビニル-1-イル、2-フェニル-2-(ナフチル-1-イル)ビニル-1-イル、2,2-ビス(ジフェニル-1-イル)ビニル-1-イル、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。

40

【0025】

本明細書において、前記アリール基が単環式アリール基の場合、炭素数は特に限定され

50

ないが、炭素数6～25のものが好ましい。具体的には、単環式アリール基としては、フェニル基、ビフェニル基、ターフェニル基などになってよいが、これらに限定されるものではない。

【0026】

前記アリール基が多環式アリール基の場合、炭素数は特に限定されないが、炭素数10～24のものが好ましい。具体的には、多環式アリール基としては、ナフチル基、アントラセニル基、フェナントリル基、ピレニル基、ペリレニル基、クリセニル基、フルオレニル基などになってよいが、これらに限定されるものではない。

【0027】

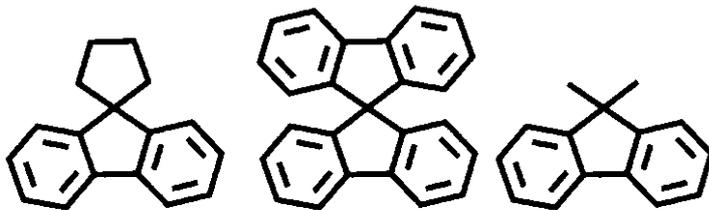
本明細書において、前記フルオレニル基は置換されていてもよいし、隣接した置換基が互いに結合して環を形成してもよい。

10

【0028】

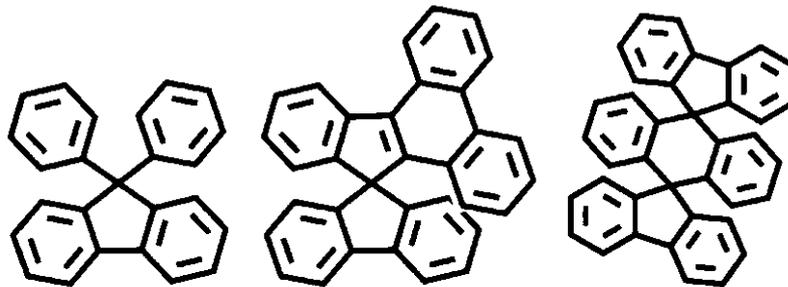
前記フルオレニル基が置換される場合、

【化14】



20

【化15】



30

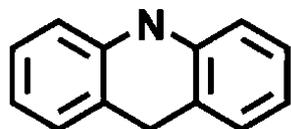
などになってよいが、これらに限定されるものではない。

【0029】

本明細書において、ヘテロ環基は、炭素でない原子、異種原子を1以上含むものであって、具体的には、前記異種原子は、O、N、S e、およびSなどからなる群より選択される原子を1以上含むことができる。ヘテロ環基の炭素数は特に限定されないが、炭素数2～60のものが好ましい。ヘテロ環基の例としては、チオフェニル基、フラニル基、ピロール基、イミダゾリル基、チアゾリル基、オキサゾリル基、オキサジアゾリル基、トリアゾリル基、ピリジル基、ピピリジル基、ピリミジル基、トリアジニル基、アクリジル基、ヒドロアクリジル基（例えば、

40

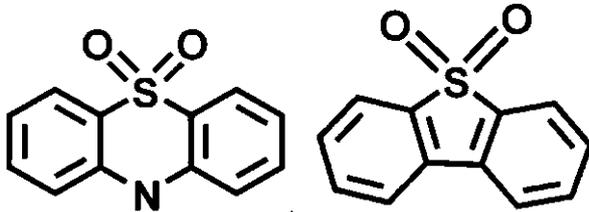
【化16】



)、ピリダジニル基、ピラジニル基、キノリニル基、キナゾリニル基、キノキサリニル基、フタラジニル基、ピリドピリミジニル基、ピリドピラジニル基、ピラジノピラジニル基、イソキノリニル基、インドール基、カルバゾリル基、ベンズオキサゾリル基、ベンズイミダゾリル基、ベンゾチアゾリル基、ベンゾカルバゾリル基、ジベンゾカルバゾリル基

50

、ベンゾチオフェニル基、ジベンゾチオフェニル基、ベンゾフラニル基、ジベンゾフラニル基；ベンゾシロール基；ジベンゾシロール基；フェナントロリニル基（phenanthrolianyl group）、チアゾリル基、イソオキサゾリル基、オキサジアゾリル基、チアジアゾリル基、ベンゾチアゾリル基、フェノチアジニル基、フェノオキサジニル基、およびこれらの縮合構造などがあるが、これらにのみ限定されるものではない。その他にも、ヘテロ環基の例として、スルホニル基を含むヘテロ環構造、例えば、

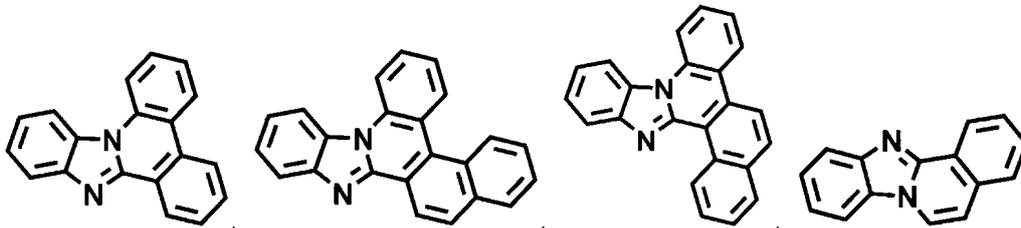


などがある。

【0030】

本明細書において、前記縮合構造は、当該置換基に芳香族炭化水素環が縮合された構造であってもよい。例えば、ベンズイミダゾールの縮合環として、

【化18】



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。

【0031】

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原子に置換された置換基、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」基と解釈されてもよい。

【0032】

本明細書において、隣接した基が互いに結合して環を形成するとの意味は、前述のように隣接した基が互いに結合して、5員～8員の炭化水素環または5員～8員のヘテロ環を形成することを意味し、単環もしくは多環であってもよいし、脂肪族、芳香族、またはこれらの縮合された形態であってもよいし、これを限定しない。

【0033】

本出願の一実施態様によれば、前記L₂は、直接結合；または置換もしくは非置換のC₆～C₂₀のアリーレン基である。

【0034】

本出願の一実施態様によれば、前記L₂は、直接結合である。

【0035】

本出願の一実施態様によれば、前記L₂は、置換もしくは非置換のフェニレン基である。

【0036】

本出願の一実施態様によれば、前記L₂は、置換もしくは非置換のビフェニレン基である。

【0037】

本出願の一実施態様によれば、前記L₂は、置換もしくは非置換のナフチレン基である

10

20

30

40

50

【0038】

本出願の一実施態様によれば、前記 Ar_3 は、 L_1 が化学式 2 ~ 4 の場合に、置換されたフェニル基；置換もしくは非置換のフルオレニル基；置換もしくは非置換のベンゾフルオレニル基；置換もしくは非置換のビスピロフルオレニル基；置換もしくは非置換のスピロフルオレンインデノフェナントレン基；置換もしくは非置換のジスピロフルオレンアントラセンフルオレン基；置換もしくは非置換のトリフェニレン基；S または O を含む $C_4 \sim C_{20}$ のヘテロ環基；置換もしくは非置換のカルバゾール基；または前記化学式 6 ~ 10 のうちのいずれか 1 つで表され、

前記 Ar_3 は、 L_1 が化学式 5 の場合に、置換されたフェニル基；置換もしくは非置換のフルオレニル基；置換もしくは非置換のベンゾフルオレニル基；置換もしくは非置換のビスピロフルオレニル基；置換もしくは非置換のスピロフルオレンインデノフェナントレン基；置換もしくは非置換のジスピロフルオレンアントラセンフルオレン基；置換もしくは非置換のトリフェニレン基；S または O を含む $C_4 \sim C_{20}$ のヘテロ環基；または前記化学式 6 ~ 10 のうちのいずれか 1 つで表される。

【0039】

本出願の一実施態様によれば、前記 Ar_3 は、S または O を含む置換もしくは非置換の $C_4 \sim C_{20}$ のヘテロアリアル基である。

【0040】

本出願の一実施態様によれば、前記 Ar_3 は、S または O を含む置換もしくは非置換のヘテロアリアル基は置換もしくは非置換のフラン基；または置換もしくは非置換のチオフェン基である。

【0041】

本出願の一実施態様によれば、前記 Ar_3 は、S または O を含む置換もしくは非置換のヘテロアリアル基は置換もしくは非置換のジベンゾフラン基；または置換もしくは非置換のジベンゾチオフェン基である。

【0042】

本出願の一実施態様によれば、前記 Ar_3 は、 L_1 が化学式 2 ~ 4 の場合に、置換されたフェニル基；置換もしくは非置換のフルオレニル基；置換もしくは非置換のベンゾフルオレニル基；置換もしくは非置換のスピロフルオレニル基；置換もしくは非置換のスピロフルオレンインデノフェナントレン基；置換もしくは非置換のジスピロフルオレンアントラセンフルオレン基；置換もしくは非置換のトリフェニレン基；置換もしくは非置換のカルバゾール基；置換もしくは非置換のピリミジル基；置換もしくは非置換のピリダジニル基；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カルバゾリル基；置換もしくは非置換のベンズイミダゾール基；置換もしくは非置換のベンズオキサゾール基；置換もしくは非置換のベンゾチアゾール基；置換もしくは非置換のジベンゾフラン基；置換もしくは非置換のジベンゾチオフェン基；置換もしくは非置換のベンゾナフトフラン基；または置換もしくは非置換のベンゾナフトチオフェン基であり、

前記 Ar_3 は、 L_1 が化学式 5 の場合に、置換されたフェニル基；置換もしくは非置換のフルオレニル基；置換もしくは非置換のベンゾフルオレニル基；置換もしくは非置換のスピロフルオレニル基；置換もしくは非置換のスピロフルオレンインデノフェナントレン基；置換もしくは非置換のジスピロフルオレンアントラセンフルオレン基；置換もしくは非置換のトリフェニレン基；置換もしくは非置換のピリミジル基；置換もしくは非置換のピリダジニル基；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カルバゾリル基；置換もしくは非置換のベンズイミダゾール基；置換もしくは非置換のベンズオキサゾール基；置換もしくは非置換のベンゾチアゾール基；置換もしくは非置換のジベンゾフラン基；置換もしくは非置換のジベンゾチオフェン基；置換もしくは非置換のベンゾナフトフラン基；または置換もしくは非置換のベンゾナフトチオフェン基であり、

前記「置換もしくは非置換の」とは、重水素；ハロゲン基；シアノ基； $C_1 \sim C_{10}$ のアルキル基；および $C_6 \sim C_{10}$ のアリアル基の中から選択される少なくとも 1 つで置換

10

20

30

40

50

もしくは非置換であることを意味する。

【0043】

本出願の一実施態様によれば、前記 Ar_3 は、 L_1 が化学式 2 ~ 4 の場合に、置換されたフェニル基；置換もしくは非置換のフルオレニル基；置換もしくは非置換のベンゾフルオレニル基；置換もしくは非置換のスピロビフルオレニル基；置換もしくは非置換のスピロフルオレンインデノフェナントレン基；置換もしくは非置換のジスピロフルオレンアントラセンフルオレン基；置換もしくは非置換のトリフェニレン基；置換もしくは非置換のカルバゾール基；置換もしくは非置換のピリミジル基；置換もしくは非置換のピリダジニル基；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カルバゾリル基；置換もしくは非置換のベンズイミダゾール基；置換もしくは非置換のベンズオキサゾール基；置換もしくは非置換のベンゾチアゾール基；置換もしくは非置換のジベンゾフラン基；置換もしくは非置換のジベンゾチオフェン基；置換もしくは非置換のベンゾナフトフラン基；または置換もしくは非置換のベンゾナフトチオフェン基であり、

10

前記 Ar_3 は、 L_1 が化学式 5 の場合に、置換されたフェニル基；置換もしくは非置換のフルオレニル基；置換もしくは非置換のベンゾフルオレニル基；置換もしくは非置換のスピロビフルオレニル基；置換もしくは非置換のスピロフルオレンインデノフェナントレン基；置換もしくは非置換のジスピロフルオレンアントラセンフルオレン基；置換もしくは非置換のトリフェニレン基；置換もしくは非置換のピリミジル基；置換もしくは非置換のピリダジニル基；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カルバゾリル基；置換もしくは非置換のベンズイミダゾール基；置換もしくは非置換のベンズオキサゾール基；置換もしくは非置換のベンゾチアゾール基；置換もしくは非置換のジベンゾフラン基；置換もしくは非置換のジベンゾチオフェン基；置換もしくは非置換のベンゾナフトフラン基；または置換もしくは非置換のベンゾナフトチオフェン基であり、

20

前記「置換もしくは非置換の」とは、シアノ基；メチル基；エチル基；フェニル基；またはピフェニル基で置換もしくは非置換であることを意味する。

【0044】

本出願の一実施態様によれば、前記 Ar_3 は、 L_1 が化学式 2 ~ 4 の場合に、シアノ基で置換されたフェニル基；シアノ基、アルキル基、またはアリール基で置換もしくは非置換のフルオレニル基；アルキル基またはアリール基で置換もしくは非置換のベンゾフルオレニル基；スピロビフルオレニル基；スピロフルオレンインデノフェナントレン基；ジスピロフルオレンアントラセンフルオレン基；トリフェニレン基；カルバゾール基；ピリミジル基；ピリダジニル基；フェニル基で置換もしくは非置換のトリアジニル基；ベンゾカルバゾリル基；ベンズイミダゾール基；ベンズオキサゾール基；ベンゾチアゾール基；ジベンゾフラン基；ジベンゾチオフェン基；ベンゾナフトフラン基；またはベンゾナフトチオフェン基であり、

30

前記 Ar_3 は、 L_1 が化学式 5 の場合に、シアノ基で置換されたフェニル基；シアノ基、アルキル基、またはアリール基で置換もしくは非置換のフルオレニル基；アルキル基またはアリール基で置換もしくは非置換のベンゾフルオレニル基；スピロビフルオレニル基；スピロフルオレンインデノフェナントレン基；ジスピロフルオレンアントラセンフルオレン基；トリフェニレン基；ピリミジル基；ピリダジニル基；フェニル基で置換もしくは非置換のトリアジニル基；ベンゾカルバゾリル基；ベンズイミダゾール基；ベンズオキサゾール基；ベンゾチアゾール基；ジベンゾフラン基；ジベンゾチオフェン基；ベンゾナフトフラン基；またはベンゾナフトチオフェン基である。

40

【0045】

本出願の一実施態様によれば、前記 Ar_3 は、シアノ基で置換されたフェニル基である。

【0046】

本出願の一実施態様によれば、前記 Ar_3 は、フルオレニル基である。

【0047】

本出願の一実施態様によれば、前記 Ar_3 は、シアノ基で置換されたフルオレニル基で

50

ある。

【0048】

本出願の一実施態様によれば、前記Ar₃は、アリール基で置換されたベンゾフルオレニル基である。

【0049】

本出願の一実施態様によれば、前記Ar₃は、フェニル基で置換されたベンゾフルオレニル基である。

【0050】

本出願の一実施態様によれば、前記Ar₃は、ジメチルフルオレニル基である。

【0051】

本出願の一実施態様によれば、前記Ar₃は、スピロピフルオレニル基である。

10

【0052】

本出願の一実施態様によれば、前記Ar₃は、スピロフルオレンインデノフェナントレン基である。

【0053】

本出願の一実施態様によれば、前記Ar₃は、ジスピロフルオレンアントラセンフルオレン基である。

【0054】

本出願の一実施態様によれば、前記Ar₃は、シアノ基で置換されたジメチルフルオレニル基である。

20

【0055】

本出願の一実施態様によれば、前記Ar₃は、トリフェニレン基である。

【0056】

本出願の一実施態様によれば、前記Ar₃は、ピリミジル基である。

【0057】

本出願の一実施態様によれば、前記Ar₃は、アリール基で置換されたピリミジル基である。

【0058】

本出願の一実施態様によれば、前記Ar₃は、フェニル基、ビフェニル基、フェナントレン基、またはフルオレニル基で置換されたピリミジル基である。

30

【0059】

本出願の一実施態様によれば、前記Ar₃は、ピリダジニル基である。

【0060】

本出願の一実施態様によれば、前記Ar₃は、アリール基で置換されたピリダジニル基である。

【0061】

本出願の一実施態様によれば、前記Ar₃は、フェニル基で置換されたピリダジニル基である。

【0062】

本出願の一実施態様によれば、前記Ar₃は、トリアジニル基である。

40

【0063】

本出願の一実施態様によれば、前記Ar₃は、ベンズイミダゾール基である。

【0064】

本出願の一実施態様によれば、前記Ar₃は、アルキル基またはアリール基で置換されたベンズイミダゾール基である。

【0065】

本出願の一実施態様によれば、前記Ar₃は、メチル基で置換されたベンズイミダゾール基である。

【0066】

本出願の一実施態様によれば、前記Ar₃は、フェニル基で置換されたベンズイミダゾ

50

ール基である。

【0067】

本出願の一実施態様によれば、前記 Ar_3 は、ベンズオキサゾール基である。

【0068】

本出願の一実施態様によれば、前記 Ar_3 は、ベンゾチアゾール基である。

【0069】

本出願の一実施態様によれば、前記 Ar_3 は、ベンゾカルバゾール基である。

【0070】

本出願の一実施態様によれば、前記 Ar_3 は、ジベンゾチオフェン基である。

【0071】

本出願の一実施態様によれば、前記 Ar_3 は、ジベンゾフラン基である。

【0072】

本出願の一実施態様によれば、前記 Ar_3 は、ベンゾナフトチオフェン基である。

【0073】

本出願の一実施態様によれば、前記 Ar_3 は、ベンゾナフトフラン基である。

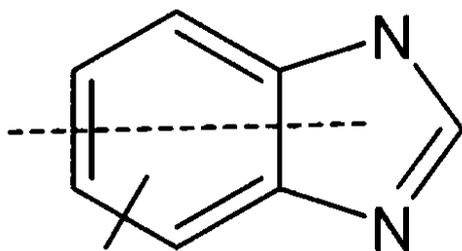
【0074】

本出願の一実施態様によれば、前記化学式 6 は、下記化学式 6 - 1 - 1 ~ 6 - 1 - 3 のうちのいずれか 1 つで表される。

【0075】

[化学式 6 - 1 - 1]

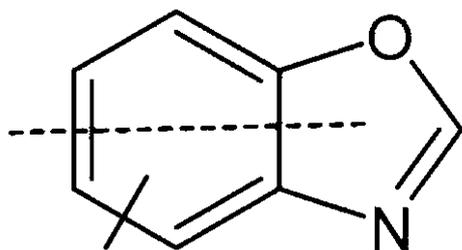
【化19】



$(R_1)_m$

[化学式 6 - 1 - 2]

【化20】



$(R_1)_m$

[化学式 6 - 1 - 3]

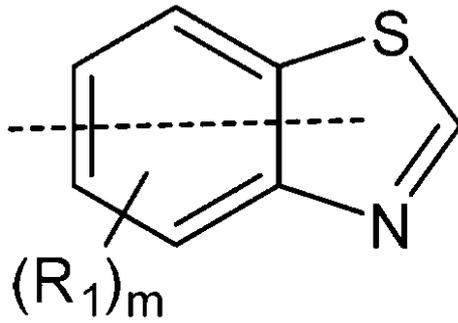
10

20

30

40

【化 2 1】



10

前記化学式 6 - 1 - 1 ~ 6 - 1 - 3 において、 R_1 および m は、前述したものと同じである。

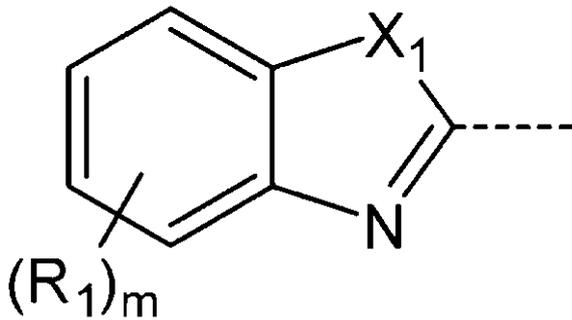
【 0 0 7 6】

本出願の一実施態様によれば、前記化学式 6 は、下記化学式 6 - 2 - 1 ~ 6 - 2 - 3 のうちのいずれか 1 つで表される。

【 0 0 7 7】

[化学式 6 - 2 - 1]

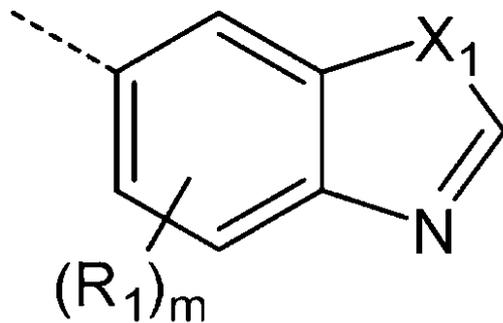
【化 2 2】



20

[化学式 6 - 2 - 2]

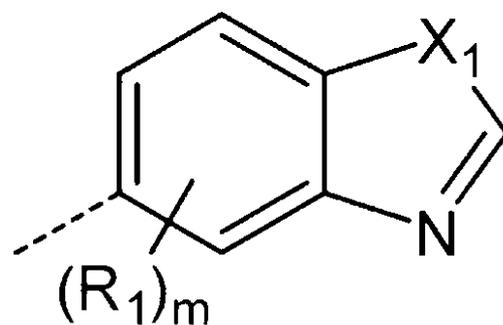
【化 2 3】



30

[化学式 6 - 2 - 3]

【化 2 4】



50

前記化学式 6 - 2 - 1 ~ 6 - 2 - 3 において、 X_1 、 R_1 および m は、前述したものと
同じである。

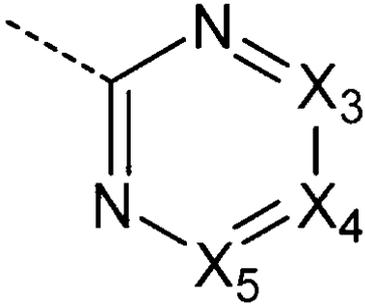
【 0 0 7 8 】

本出願の一実施態様によれば、前記化学式 7 は、下記化学式 7 - 1 ~ 7 - 6 のうちのい
ずれか 1 つで表される。

【 0 0 7 9 】

[化学式 7 - 1]

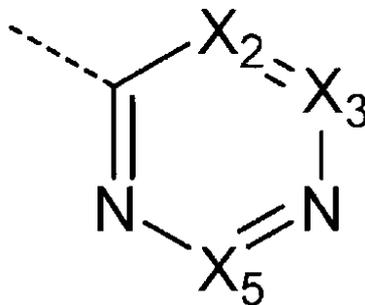
【 化 2 5 】



10

[化学式 7 - 2]

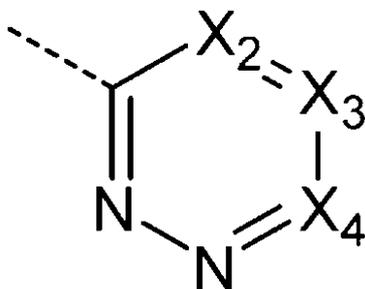
【 化 2 6 】



20

[化学式 7 - 3]

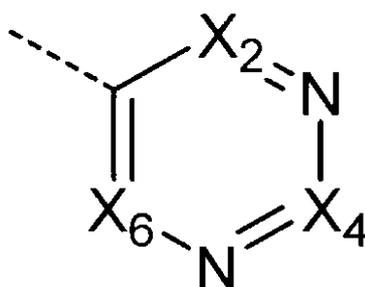
【 化 2 7 】



30

[化学式 7 - 4]

【 化 2 8 】

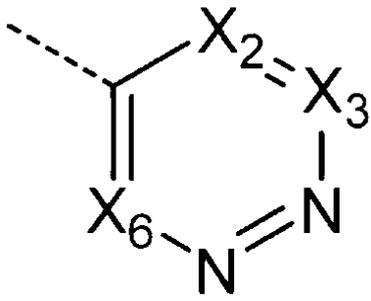


40

[化学式 7 - 5]

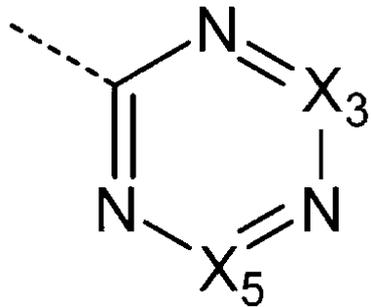
50

【化 2 9】



[化学式 7 - 6]

【化 3 0】



10

20

前記化学式 7 - 1 ~ 7 - 6 において、 $X_2 \sim X_6$ は、前記前述の C R' と同じである。

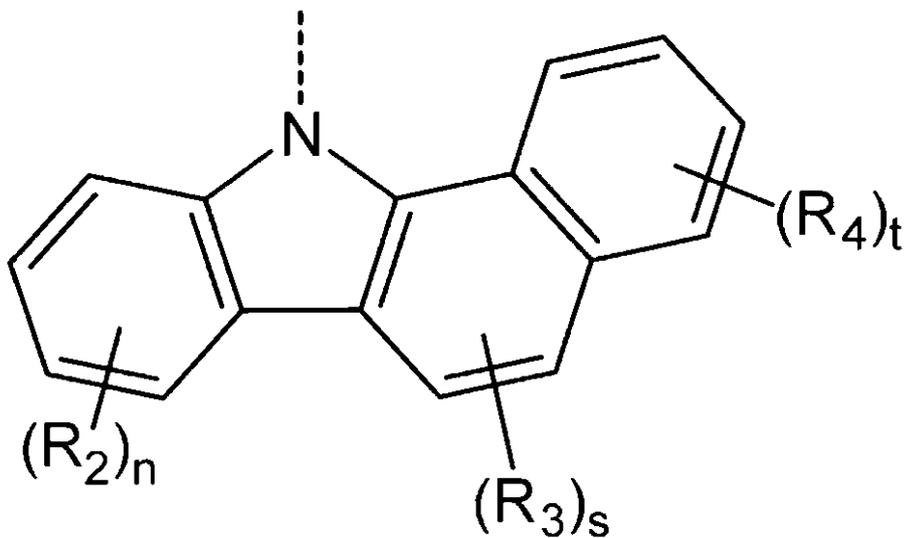
【 0 0 8 0】

本出願の一実施態様によれば、前記化学式 8 は、下記化学式 8 - 1 ~ 8 - 3 のうちのいずれか 1 つで表される。

【 0 0 8 1】

[化学式 8 - 1]

【化 3 1】

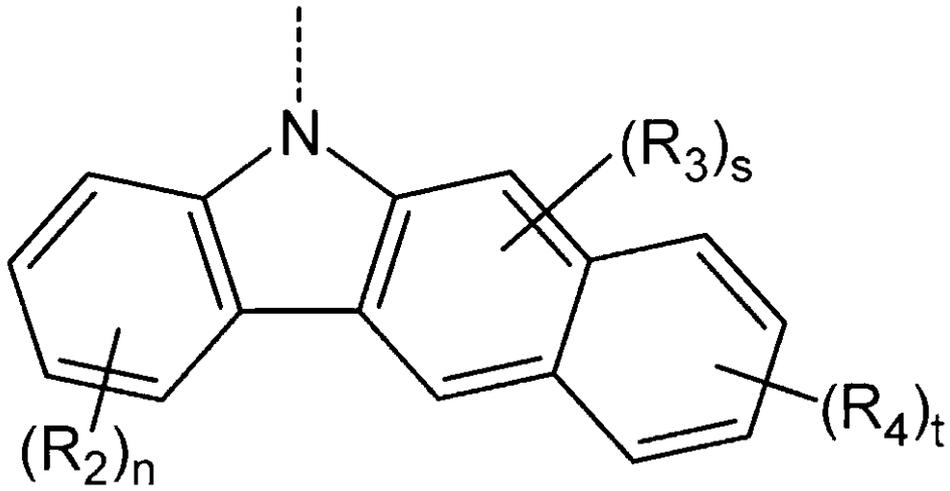


30

40

[化学式 8 - 2]

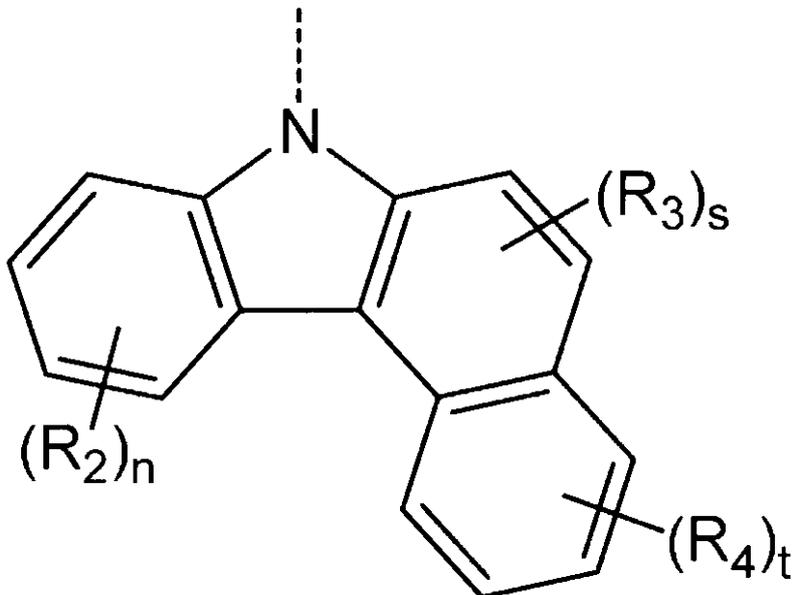
【化32】



10

[化学式 8 - 3]

【化33】



20

30

前記化学式 8 - 1 ~ 8 - 3 において、 $R_2 \sim R_4$ 、 n 、 s および t は、前述したものと
同じである。

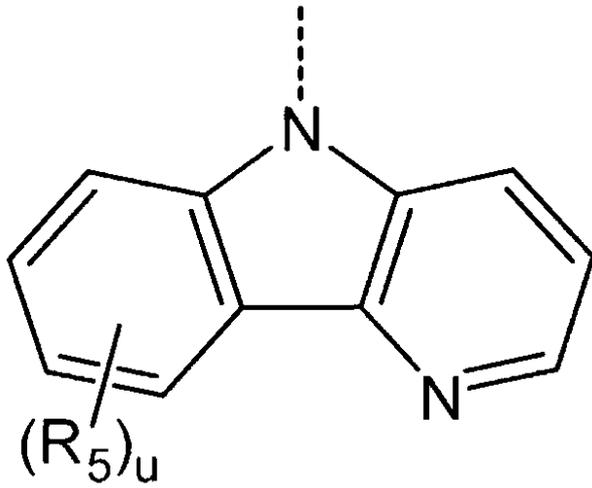
【0082】

本出願の一実施態様によれば、前記化学式 9 は、下記化学式 9 - 1 ~ 9 - 4 のうちのい
ずれか 1 つで表される。

【0083】

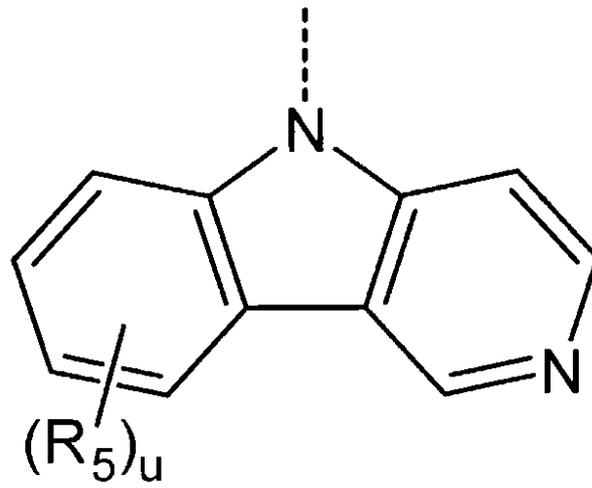
[化学式 9 - 1]

【化 3 4】



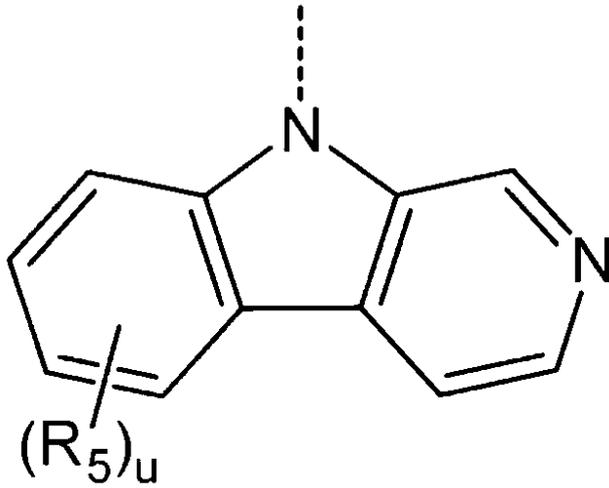
10

[化学式 9 - 2]
【化 3 5】



20

[化学式 9 - 3]
【化 3 6】

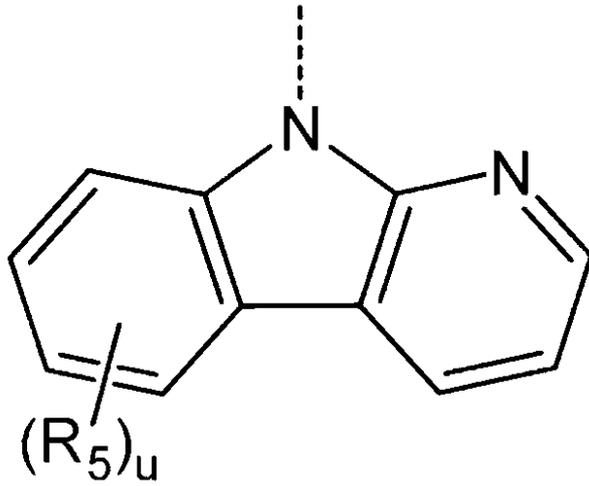


30

40

[化学式 9 - 4]

【化 3 7】



10

前記化学式 9 - 1 ~ 9 - 4 において、 R_5 および u は、前述したものと同一である。

【 0 0 8 4】

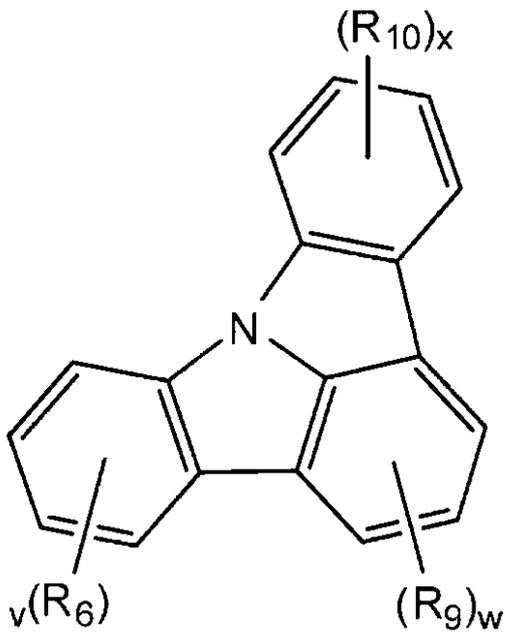
本出願の一実施態様によれば、前記化学式 10 は、下記化学式 10 - 1 または 10 - 2 で表される。

【 0 0 8 5】

20

[化学式 10 - 1]

【化 3 8】

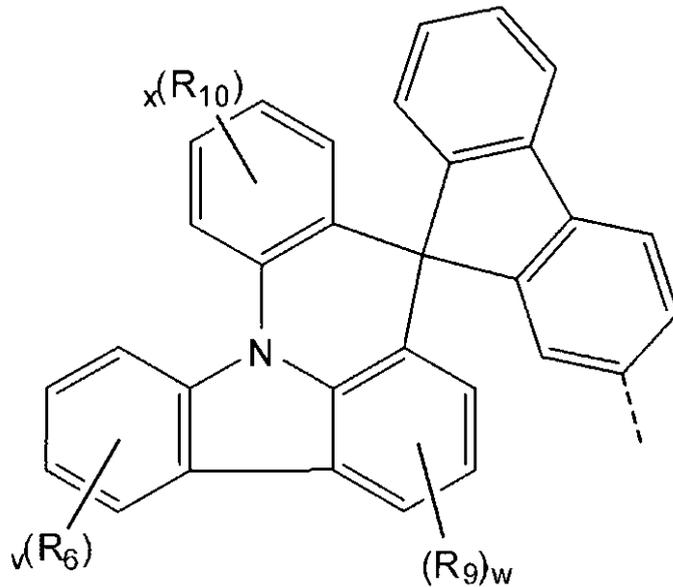


30

[化学式 10 - 2]

40

【化39】



10

前記化学式 10 - 1 および 10 - 2 において、 R_6 、 R_9 、 R_{10} 、 v 、 w および x は、前述したものと同一であり、

【化40】

20

"-----"

は、前記化学式 1 の L_2 と結合する部分を意味し、前記化学式 10 - 1 の結合する部分は、 R_6 、 R_9 または R_{10} である。

【0086】

本出願の一実施態様によれば、前記 Ar_1 および Ar_2 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 $C_6 \sim C_{20}$ のアリール基である。

【0087】

本出願の一実施態様によれば、前記 Ar_1 および Ar_2 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フェニル基；置換もしくは非置換のビフェニル基；または置換もしくは非置換のナフチル基である。

30

【0088】

本出願の一実施態様によれば、前記 Ar_1 および Ar_2 は、フェニル基である。

【0089】

本出願の一実施態様によれば、前記 $S_1 \sim S_4$ 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； $C_1 \sim C_{10}$ のアルキル基； $C_6 \sim C_{10}$ のアリール基；または $C_2 \sim C_{10}$ のヘテロ環基である。

【0090】

本出願の一実施態様によれば、前記 $S_1 \sim S_4$ は、水素である。

【0091】

本出願の一実施態様によれば、前記 $R_1 \sim R_4$ は、水素である。

40

【0092】

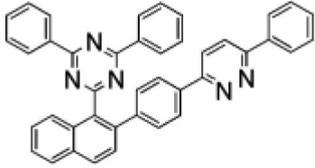
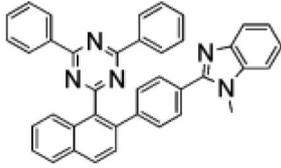
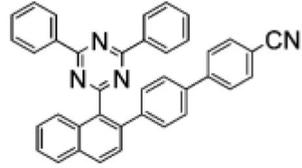
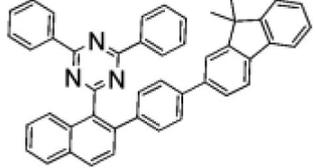
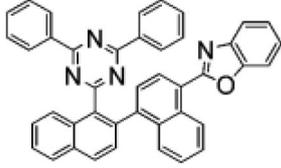
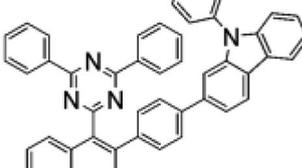
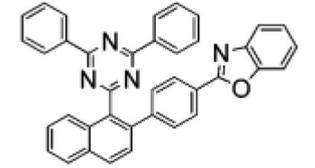
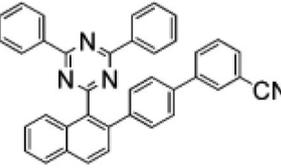
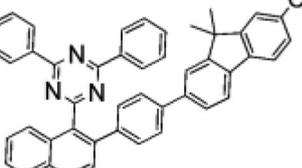
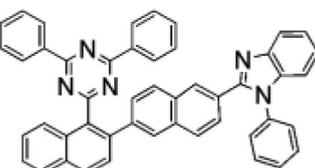
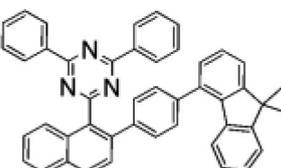
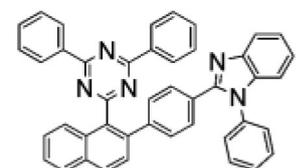
本出願の一実施態様によれば、前記 $R_1 \sim R_6$ および $R_9 \sim R_{10}$ は、水素である。

【0093】

本出願の一実施態様によれば、前記化学式 1 で表される化合物は、下記構造式の中から選択されるいずれか 1 つである。

【0094】

【化 4 1】

		
化合物 1-1	化合物 1-2	化合物 1-3
		
化合物 1-4	化合物 1-5	化合物 1-6
		
化合物 1-7	化合物 1-8	化合物 1-9
		
化合物 1-10	化合物 1-11	化合物 1-12

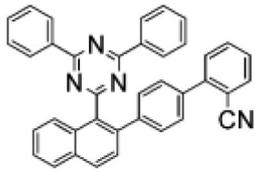
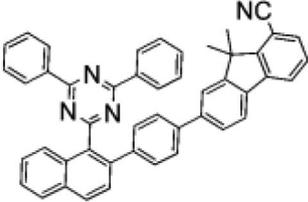
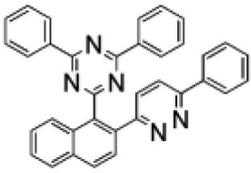
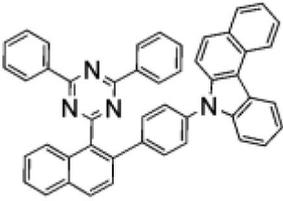
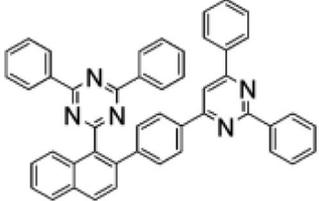
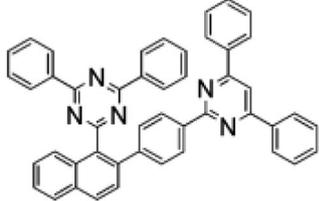
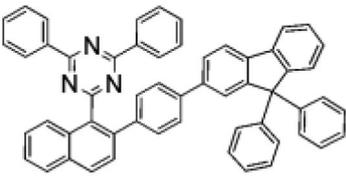
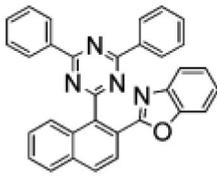
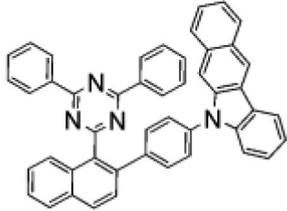
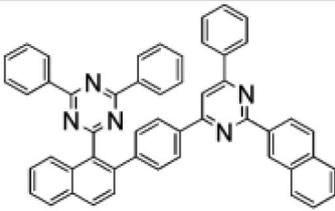
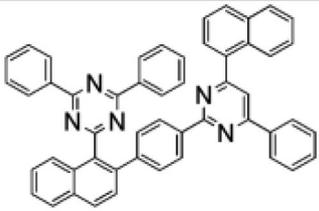
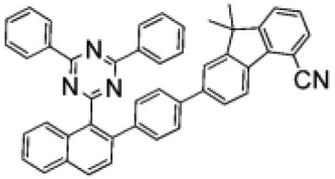
10

20

30

40

【化 4 2】

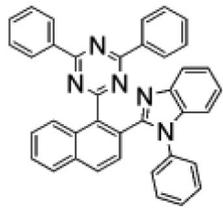
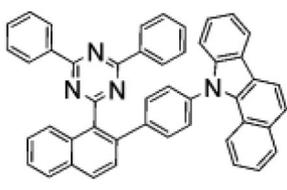
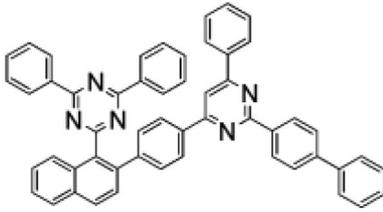
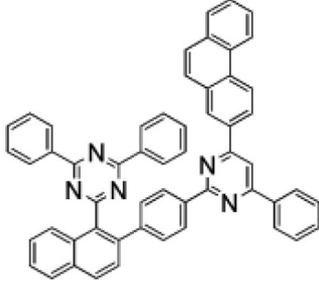
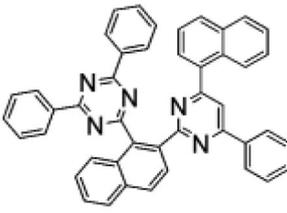
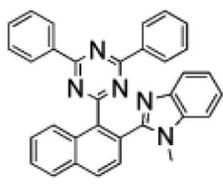
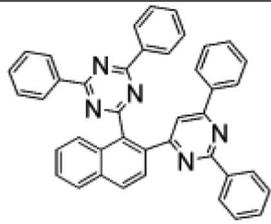
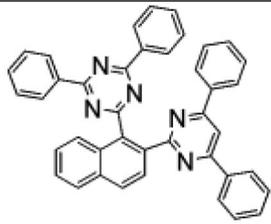
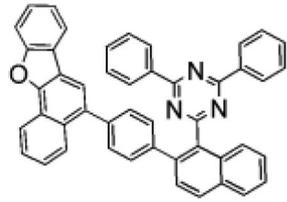
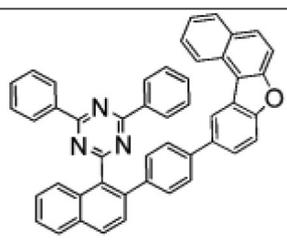
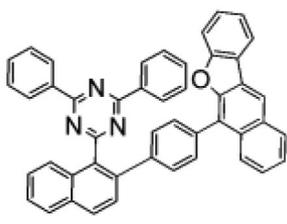
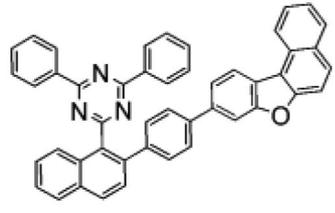
		
化合物 1-13	化合物 1-14	化合物 1-15
		
化合物 1-16	化合物 1-17	化合物 1-18
		
化合物 1-19	化合物 1-20	化合物 1-21
		
化合物 1-22	化合物 1-23	化合物 1-24

10

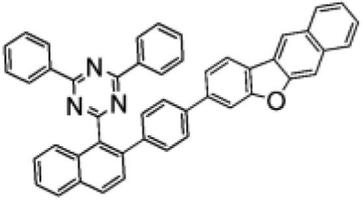
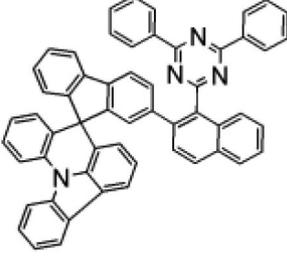
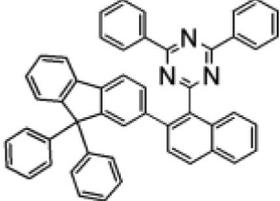
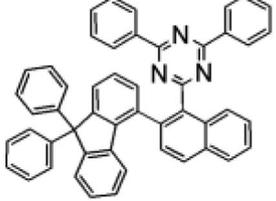
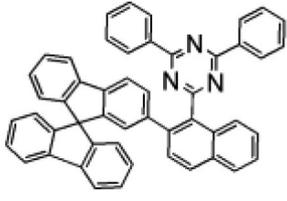
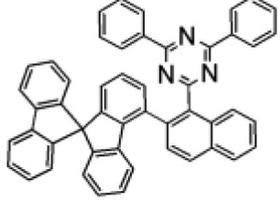
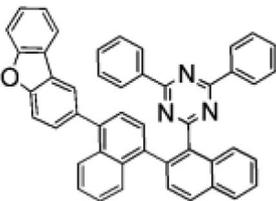
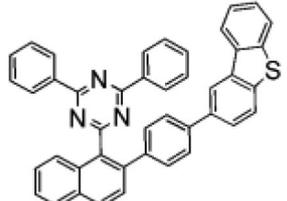
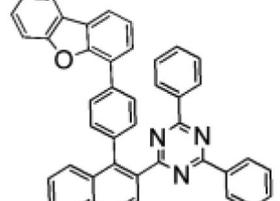
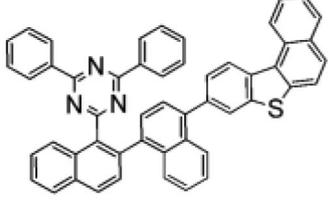
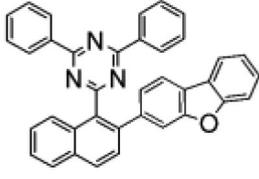
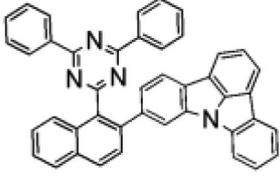
20

30

【化 4 3】

			10
化合物 1-25	化合物 1-26	化合物 1-27	
			20
化合物 1-28	化合物 1-29	化合物 1-30	
			30
化合物 1-31	化合物 1-32	化合物 1-33	
			40
化合物 1-34	化合物 1-35	化合物 1-36	

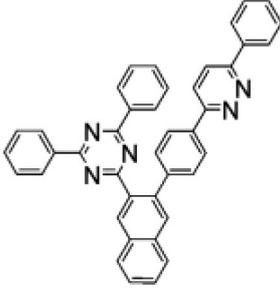
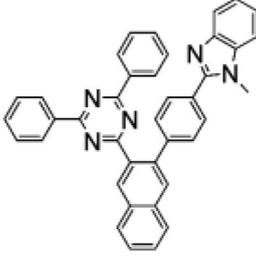
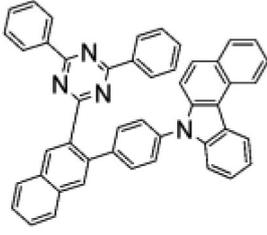
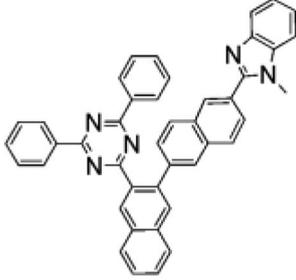
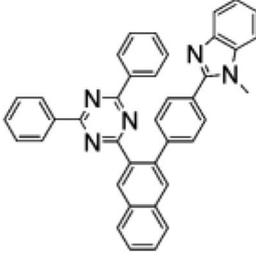
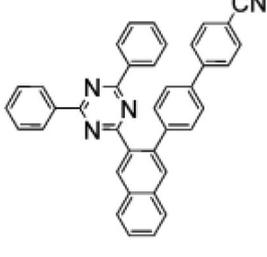
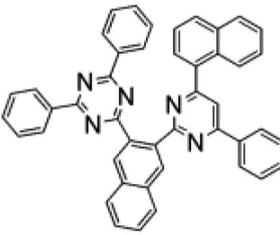
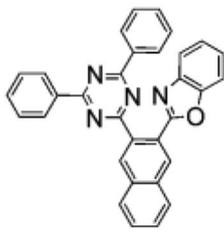
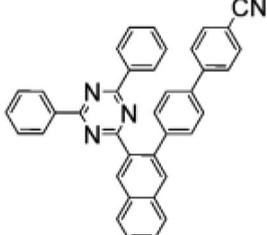
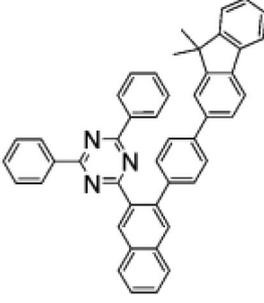
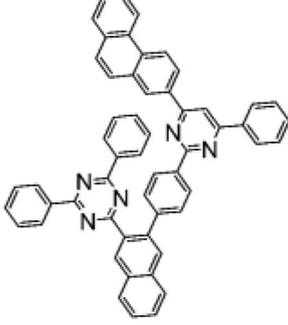
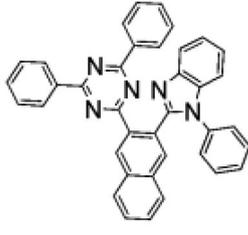
【化 4 4】

			10
<p>化合物 1-37</p>	<p>化合物 1-38</p>	<p>化合物 1-39</p>	
			
<p>化合物 1-40</p>	<p>化合物 1-41</p>	<p>化合物 1-42</p>	20
			
<p>化合物 1-43</p>	<p>化合物 1-44</p>	<p>化合物 1-45</p>	
			30
<p>化合物 1-46</p>	<p>化合物 1-47</p>	<p>化合物 1-48</p>	

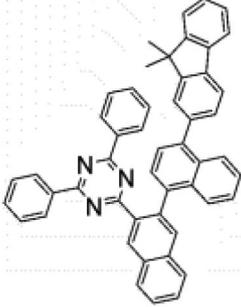
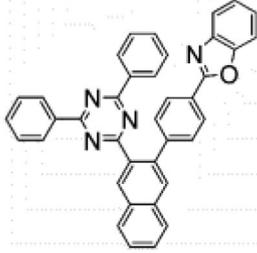
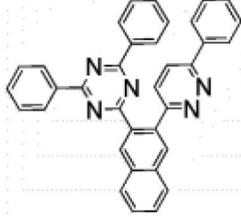
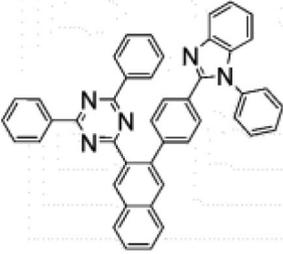
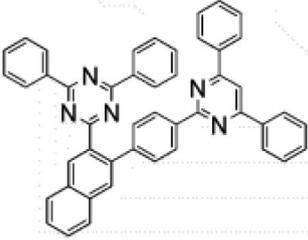
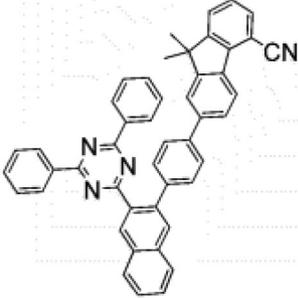
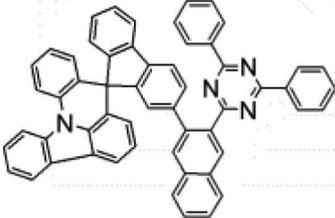
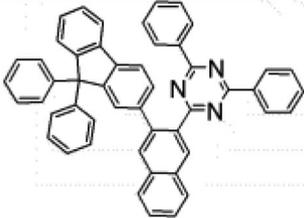
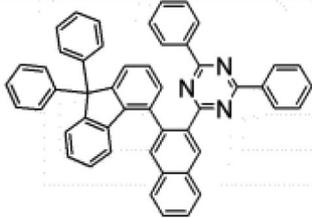
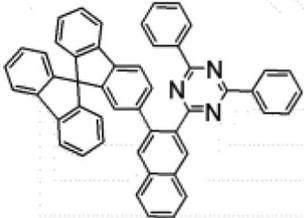
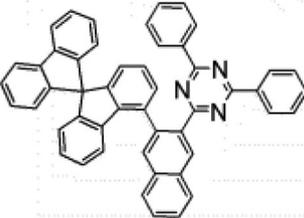
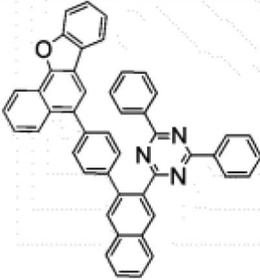
【化 4 5】

			10
<p>化合物 1-49</p>	<p>化合物 1-50</p>	<p>化合物 1-51</p>	
<p>化合物 1-52</p>	<p>化合物 1-53</p>	<p>化合物 1-54</p>	
			30
<p>化合物 1-55</p>	<p>化合物 1-56</p>	<p>化合物 1-57</p>	

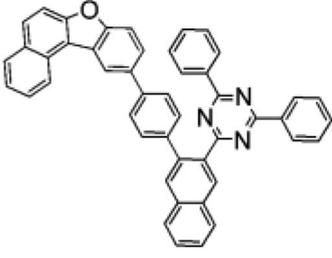
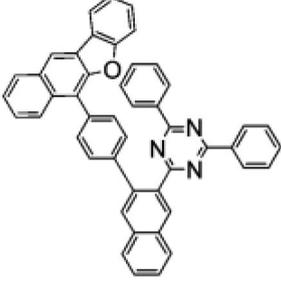
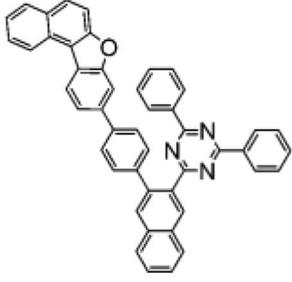
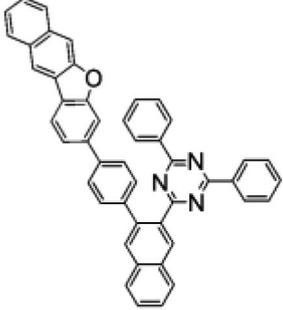
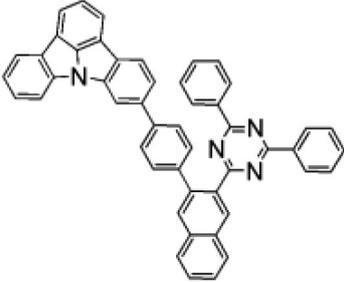
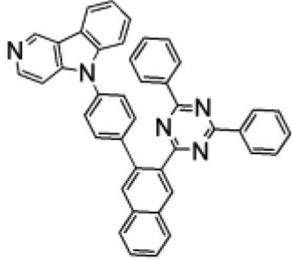
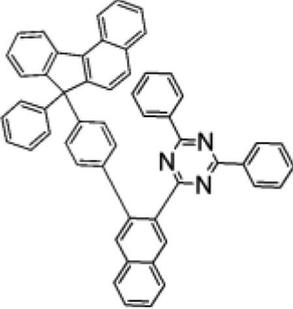
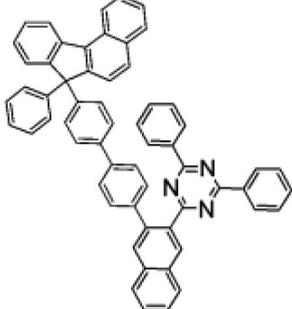
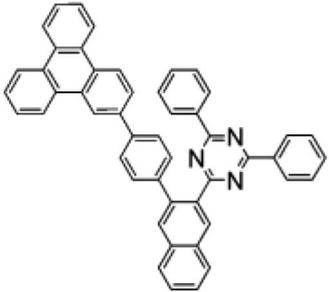
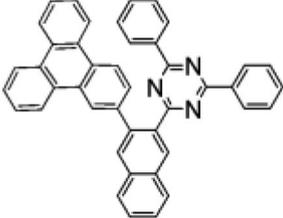
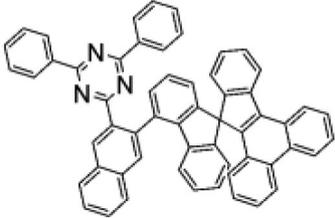
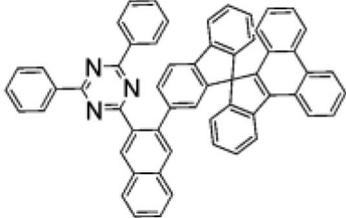
【化 4 6】

			10
<p>化合物 2-1</p>	<p>化合物 2-2</p>	<p>化合物 2-3</p>	
			20
<p>化合物 2-4</p>	<p>化合物 2-5</p>	<p>化合物 2-6</p>	
			30
<p>化合物 2-7</p>	<p>化合物 2-8</p>	<p>化合物 2-9</p>	
			40
<p>化合物 2-10</p>	<p>化合物 2-11</p>	<p>化合物 2-12</p>	

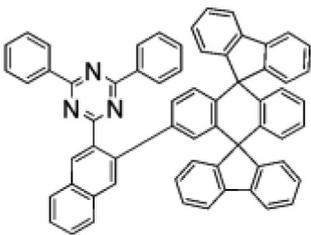
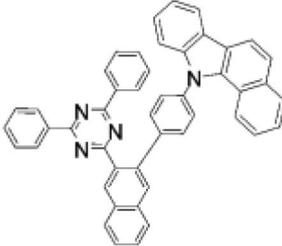
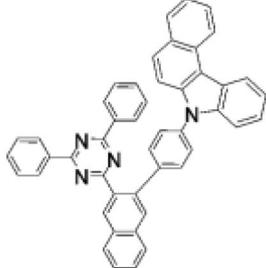
【化 4 7】

			10
<p>化合物 2-13</p>	<p>化合物 2-14</p>	<p>化合物 2-15</p>	
			20
<p>化合物 2-16</p>	<p>化合物 2-17</p>	<p>化合物 2-18</p>	
			30
<p>化合物 2-39</p>	<p>化合物 2-19</p>	<p>化合物 2-20</p>	
			40
<p>化合物 2-21</p>	<p>化合物 2-22</p>	<p>化合物 2-23</p>	

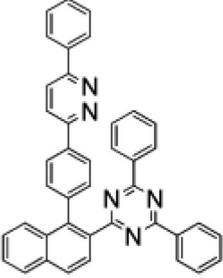
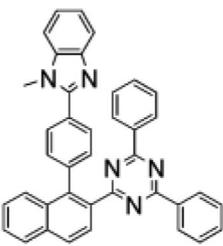
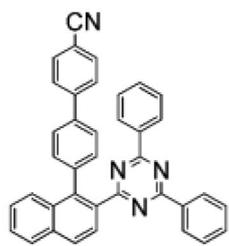
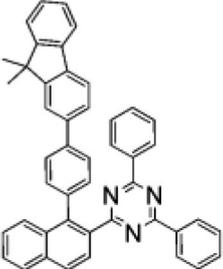
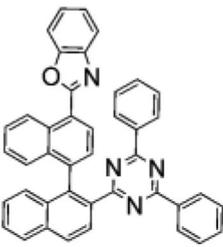
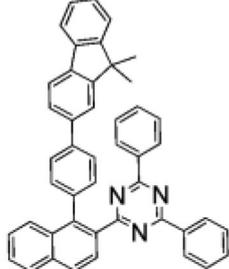
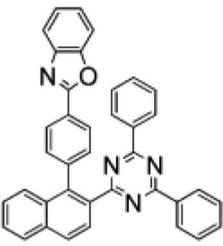
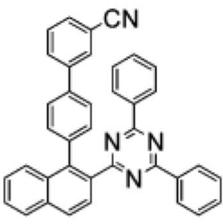
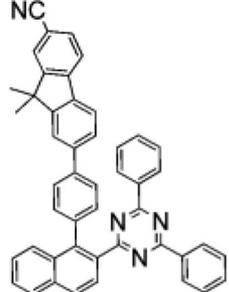
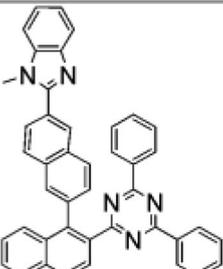
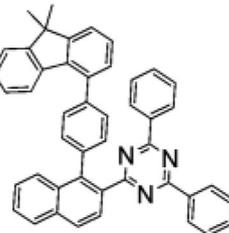
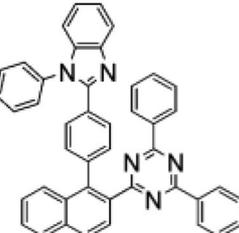
【化 4 8】

			10
<p>化合物 2-24</p>	<p>化合物 2-25</p>	<p>化合物 2-26</p>	
			20
<p>化合物 2-27</p>	<p>化合物 2-28</p>	<p>化合物 2-29</p>	
			30
<p>化合物 2-30</p>	<p>化合物 2-31</p>	<p>化合物 2-32</p>	
			40
<p>化合物 2-33</p>	<p>化合物 2-34</p>	<p>化合物 2-35</p>	

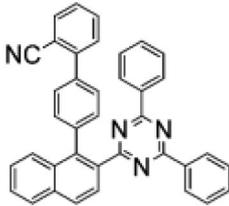
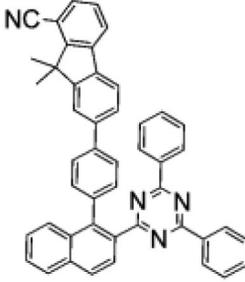
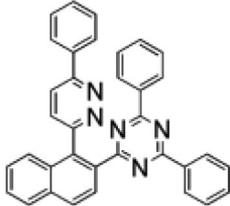
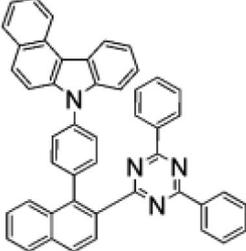
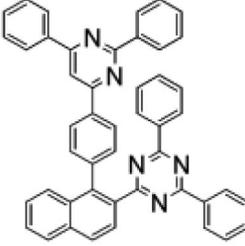
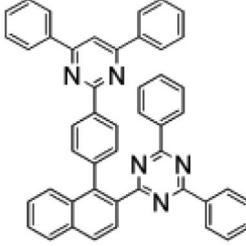
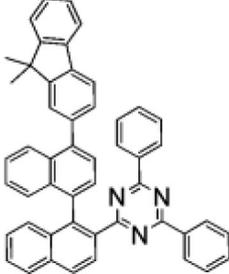
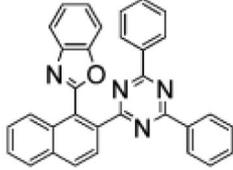
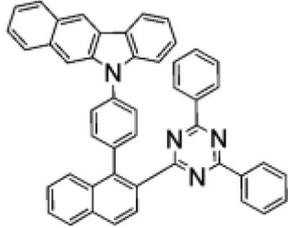
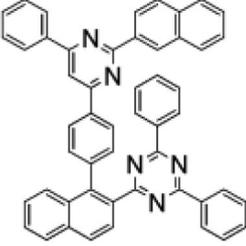
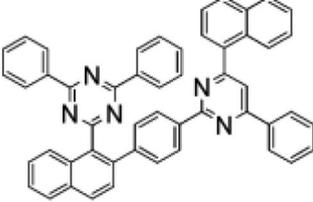
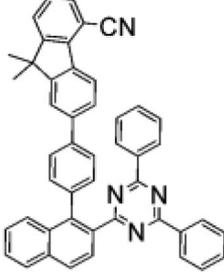
【化 4 9】

		
化合物 2-36	化合物 2-37	化合物 2-38

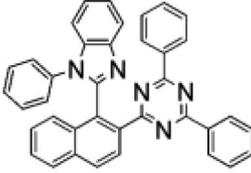
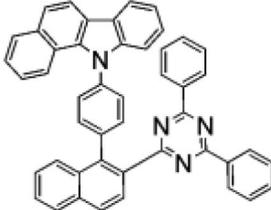
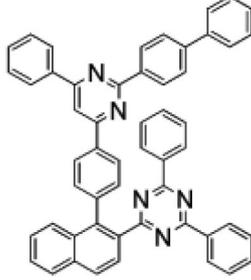
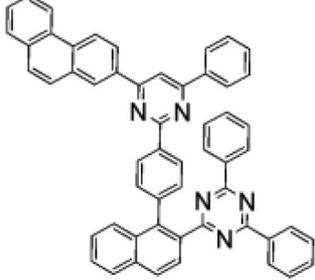
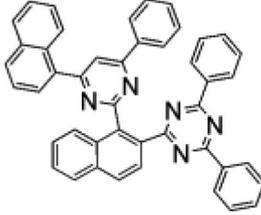
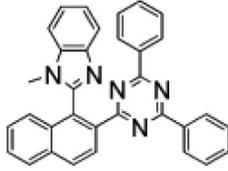
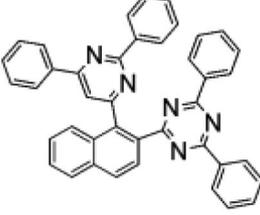
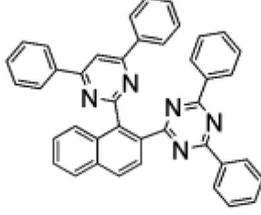
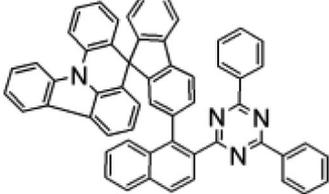
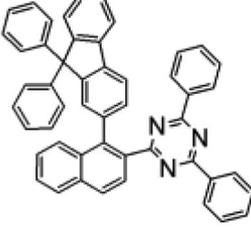
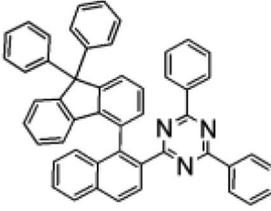
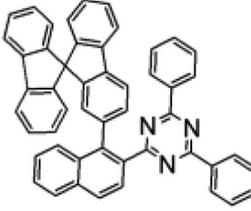
【化 5 0】

			10
<p>化合物 3-1</p>	<p>化合物 3-2</p>	<p>化合物 3-3</p>	
			
<p>化合物 3-4</p>	<p>化合物 3-5</p>	<p>化合物 3-6</p>	
			30
<p>化合物 3-7</p>	<p>化合物 3-8</p>	<p>化合物 3-9</p>	
			
<p>化合物 3-10</p>	<p>化合物 3-11</p>	<p>化合物 3-12</p>	

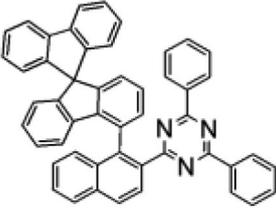
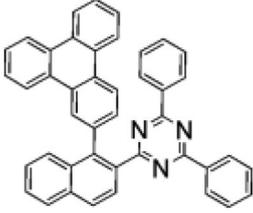
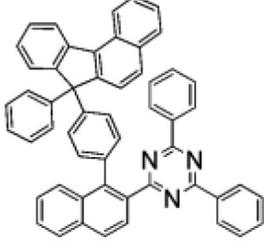
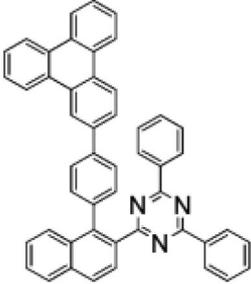
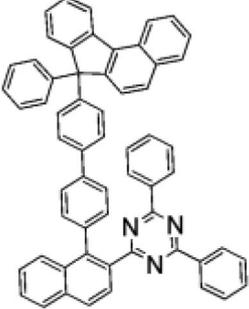
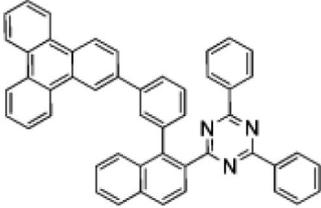
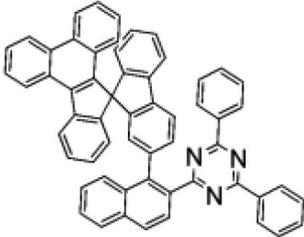
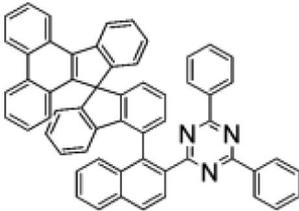
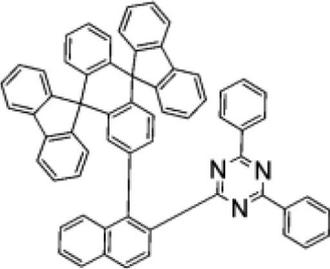
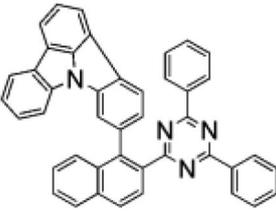
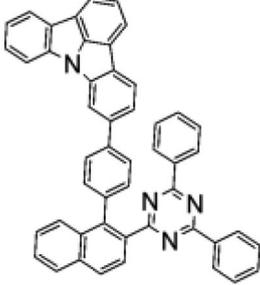
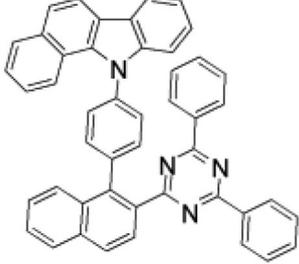
【化 5 1】

			10
<p>化合物 3-13</p>	<p>化合物 3-14</p>	<p>化合物 3-15</p>	
			20
<p>化合物 3-16</p>	<p>化合物 3-17</p>	<p>化合物 3-18</p>	
			30
<p>化合物 3-19</p>	<p>化合物 3-20</p>	<p>化合物 3-21</p>	
			40
<p>化合物 3-22</p>	<p>化合物 3-23</p>	<p>化合物 3-24</p>	

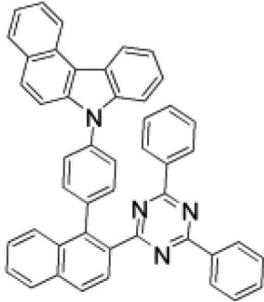
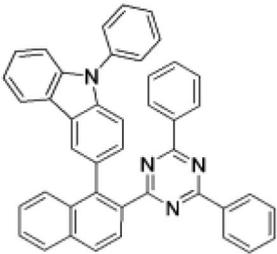
【化 5 2】

			10
<p>化合物 3-25</p>	<p>化合物 3-26</p>	<p>化合物 3-27</p>	
			20
<p>化合物 3-28</p>	<p>化合物 3-29</p>	<p>化合物 3-30</p>	
			30
<p>化合物 3-31</p>	<p>化合物 3-32</p>	<p>化合物 3-33</p>	
			40
<p>化合物 3-34</p>	<p>化合物 3-35</p>	<p>化合物 3-36</p>	

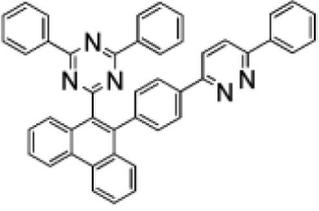
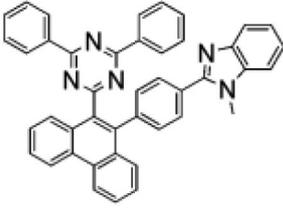
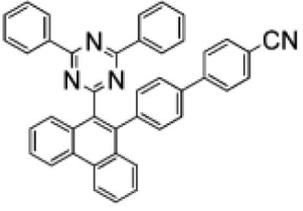
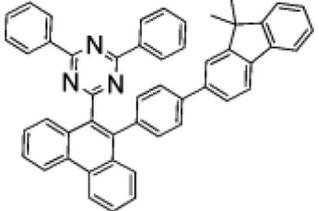
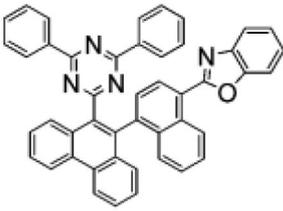
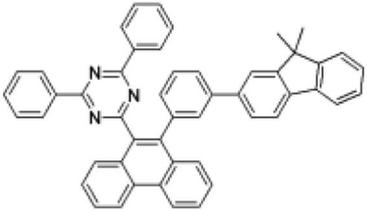
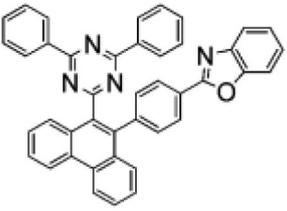
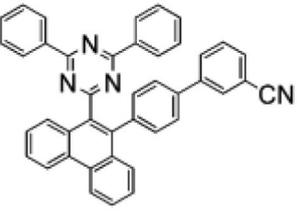
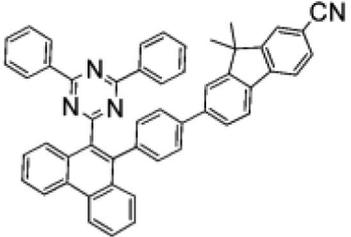
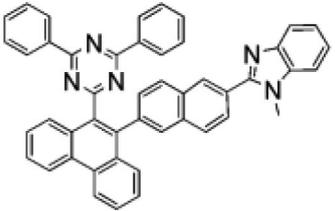
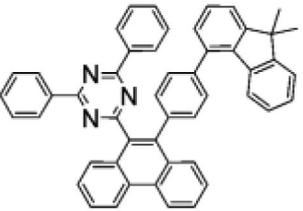
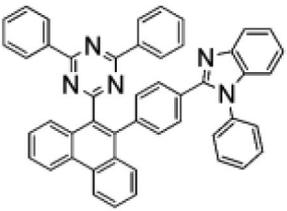
【化 5 3】

			10
<p>化合物 3-37</p>	<p>化合物 3-38</p>	<p>化合物 3-39</p>	
			20
<p>化合物 3-40</p>	<p>化合物 3-41</p>	<p>化合物 3-42</p>	
			30
<p>化合物 3-43</p>	<p>化合物 3-44</p>	<p>化合物 3-45</p>	
			40
<p>化合物 3-46</p>	<p>化合物 3-47</p>	<p>化合物 3-48</p>	

【化 5 4】

		
化合物 3-49	化合物 3-50	

【化 5 5】

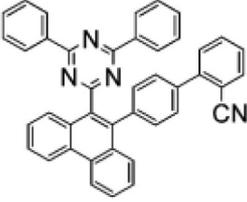
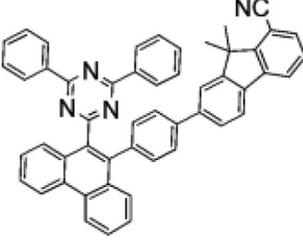
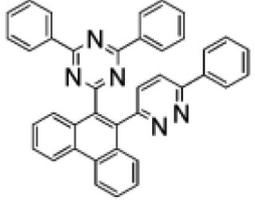
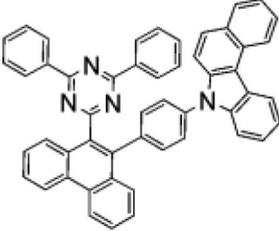
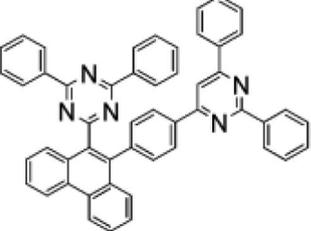
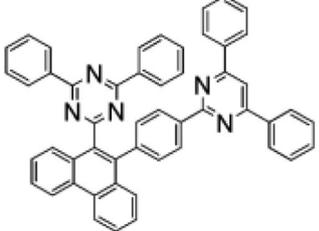
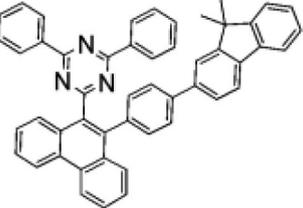
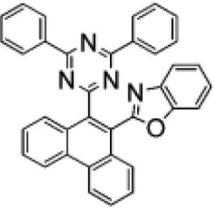
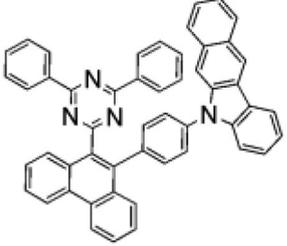
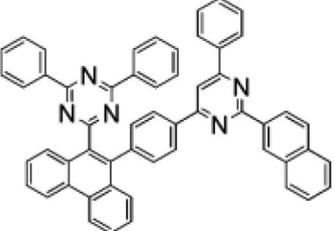
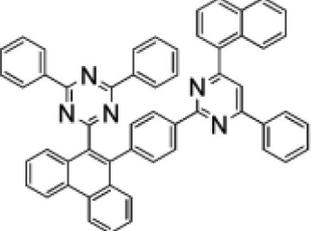
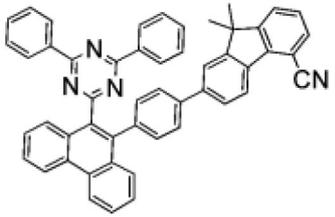
		
化合物 4-1	化合物 4-2	化合物 4-3
		
化合物 4-4	化合物 4-5	化合物 4-6
		
化合物 4-7	化合物 4-8	化合物 4-9
		
化合物 4-10	化合物 4-11	化合物 4-12

10

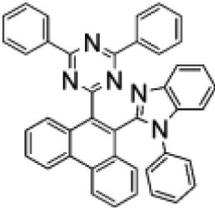
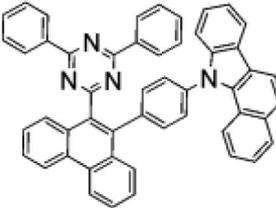
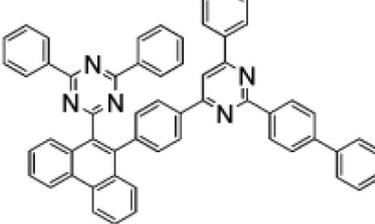
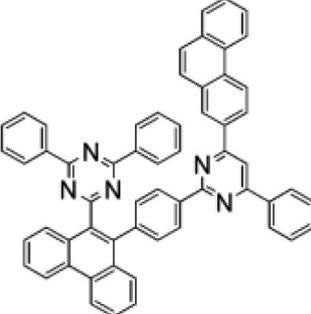
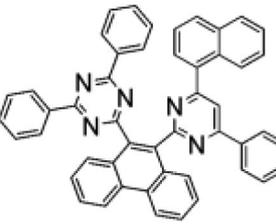
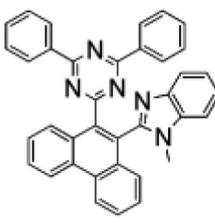
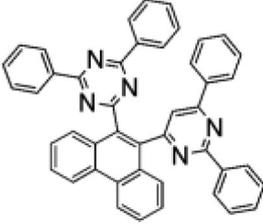
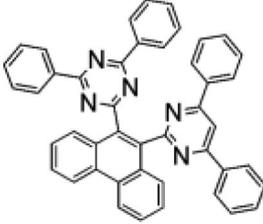
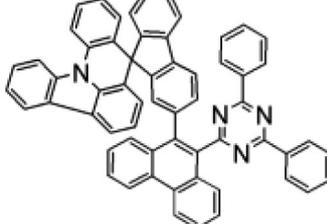
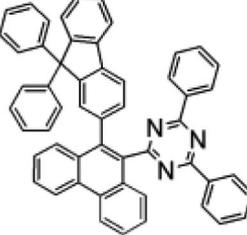
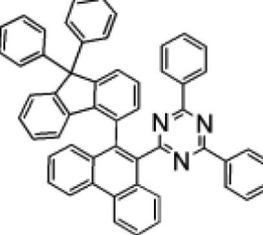
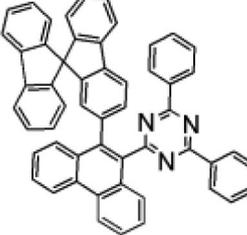
20

30

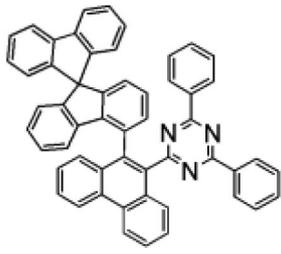
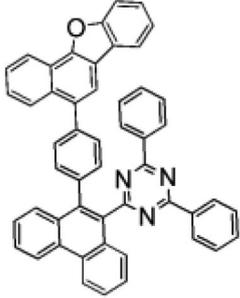
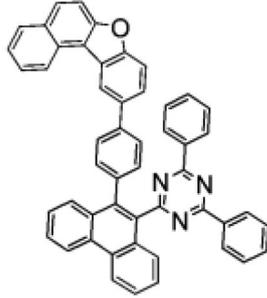
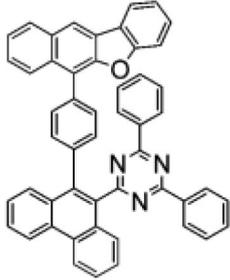
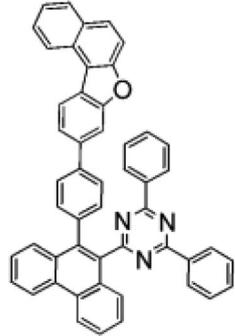
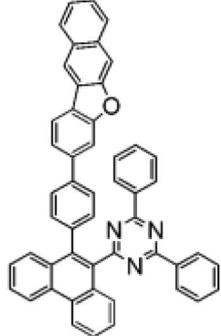
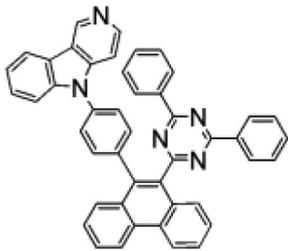
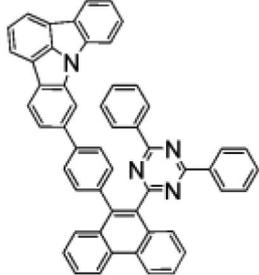
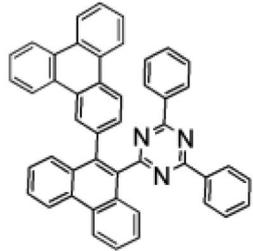
【化 5 6】

			10
化合物 4-13	化合物 4-14	化合物 4-15	
			
化合物 4-16	化合物 4-17	化合物 4-18	
			30
化合物 4-19	化合物 4-20	化合物 4-21	
			
化合物 4-22	化合物 4-23	化合物 4-24	

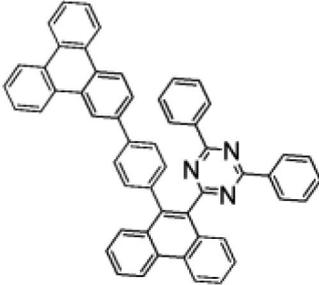
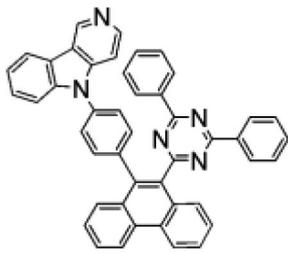
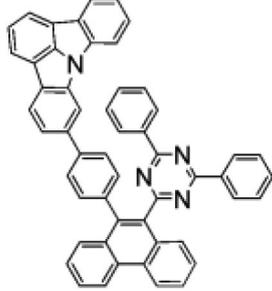
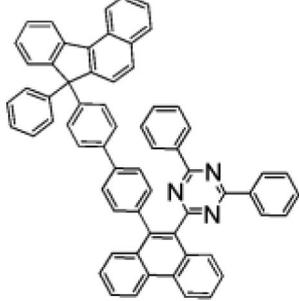
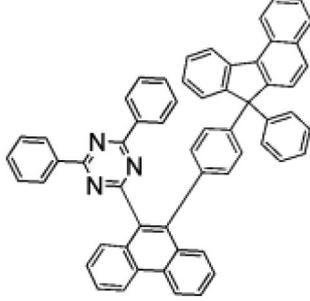
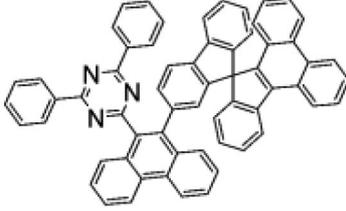
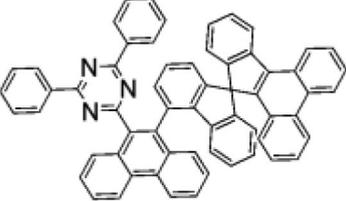
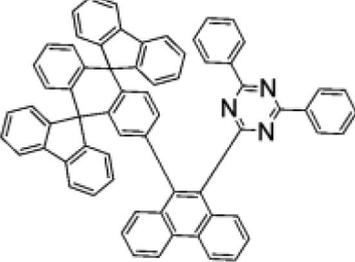
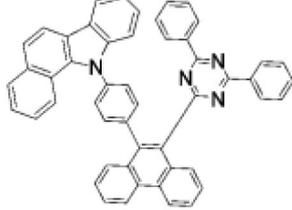
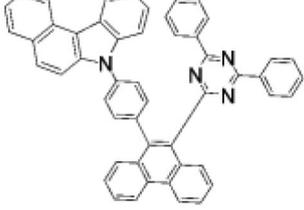
【化 5 7】

			10
<p>化合物 4-25</p>	<p>化合物 4-26</p>	<p>化合物 4-27</p>	
			20
<p>化合物 4-28</p>	<p>化合物 4-29</p>	<p>化合物 4-30</p>	
			30
<p>化合物 4-31</p>	<p>化合物 4-32</p>	<p>化合物 4-33</p>	
			40
<p>化合物 4-34</p>	<p>化合物 4-35</p>	<p>化合物 4-36</p>	

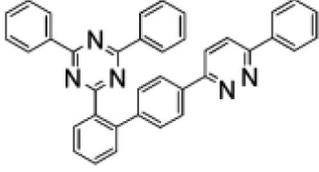
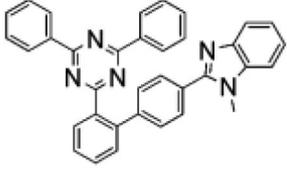
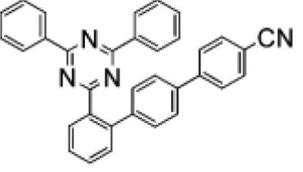
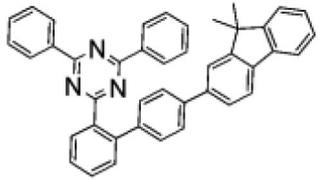
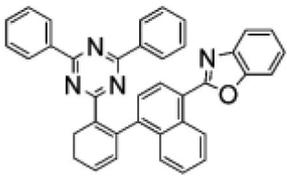
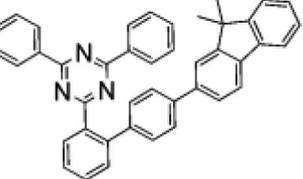
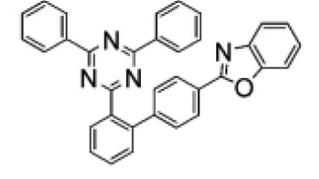
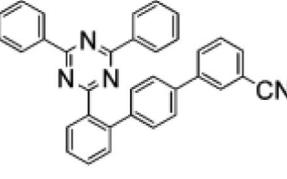
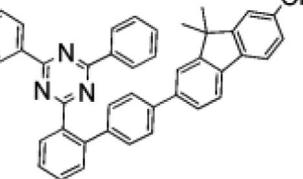
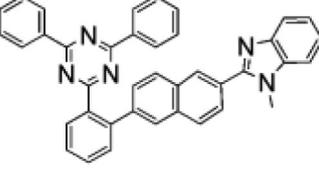
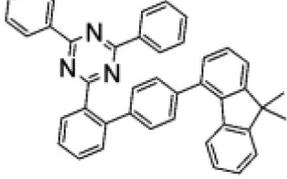
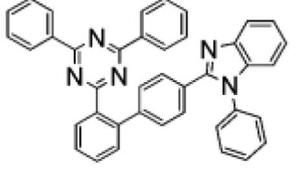
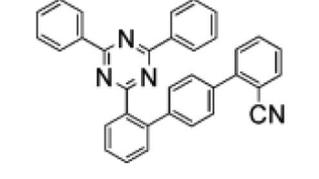
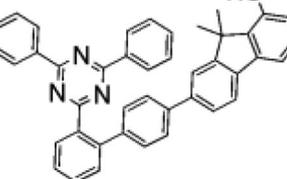
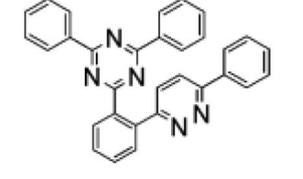
【化 5 8】

			10
化合物 4-37	化合物 4-38	化合物 4-39	
			20
化合物 4-40	化合物 4-41	化合物 4-42	
			30
化合物 4-43	化合物 4-44	化合物 4-45	

【化 5 9】

			10
化合物 4-46	化合物 4-47	化合物 4-48	
			20
化合物 4-49	化合物 4-50	化合物 4-51	
			30
化合物 4-52	化合物 4-53	化合物 4-54	
			40
化合物 4-55			

【化 6 0】

		
化合物 5-1	化合物 5-2	化合物 5-3
		
化合物 5-4	化合物 5-5	化合物 5-6
		
化合物 5-7	化合物 5-8	化合物 5-9
		
化合物 5-10	化合物 5-11	化合物 5-12
		
化合物 5-13	化合物 5-14	化合物 5-15

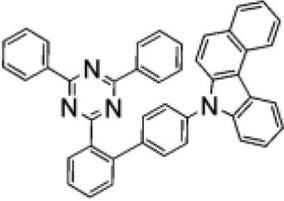
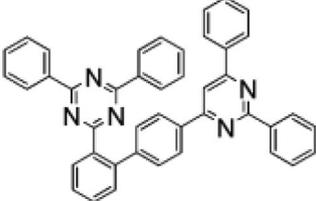
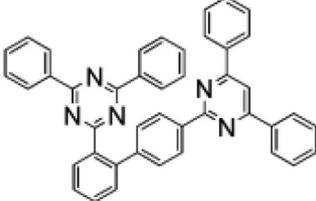
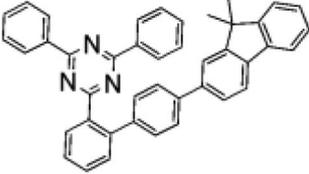
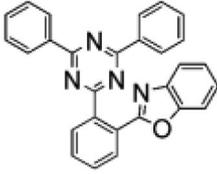
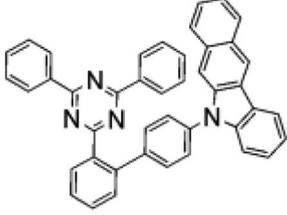
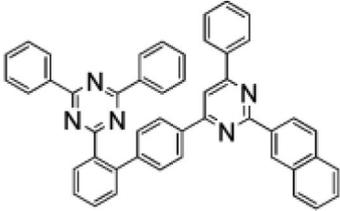
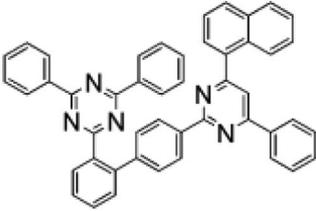
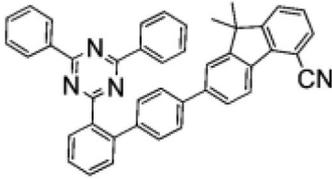
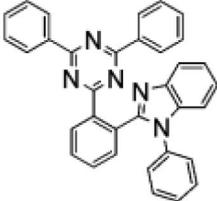
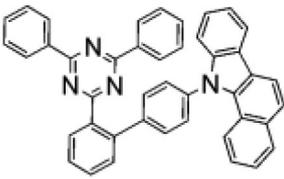
10

20

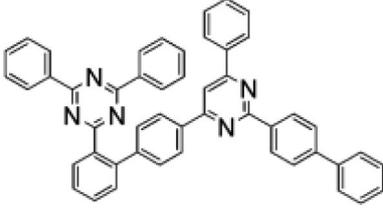
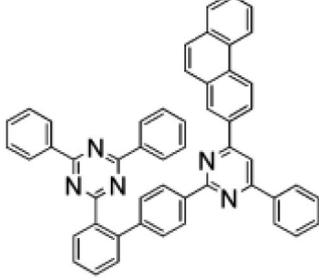
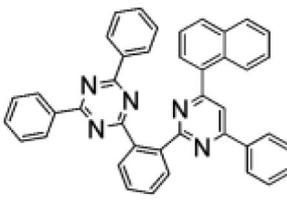
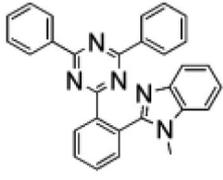
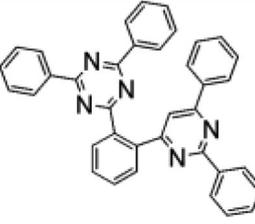
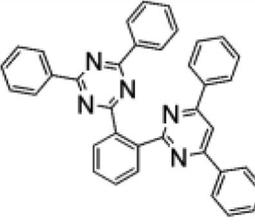
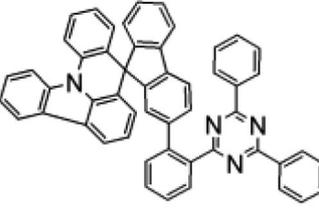
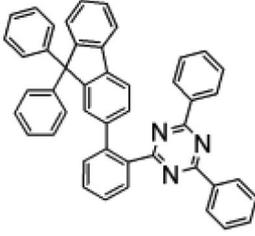
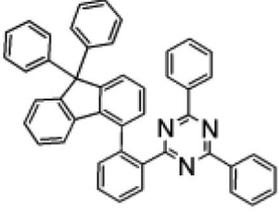
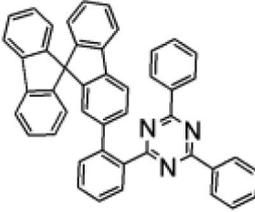
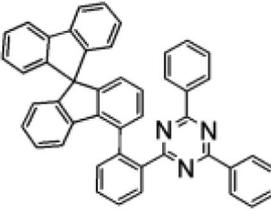
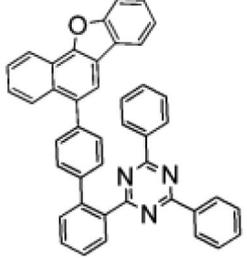
30

40

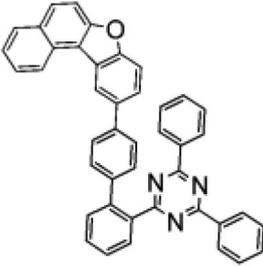
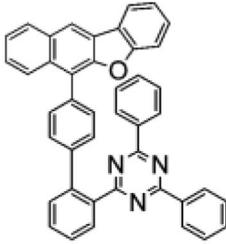
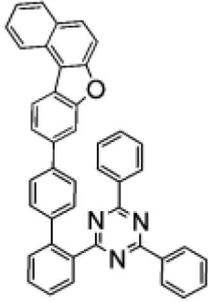
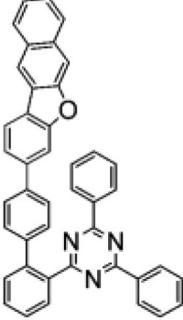
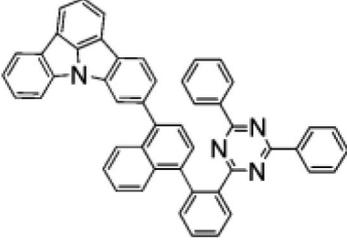
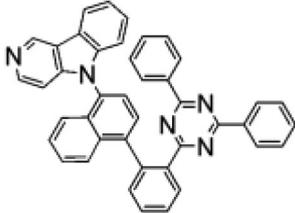
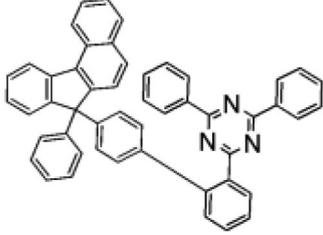
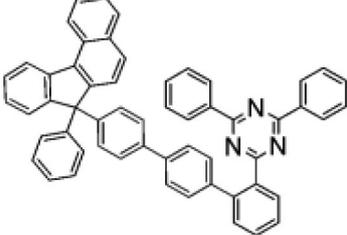
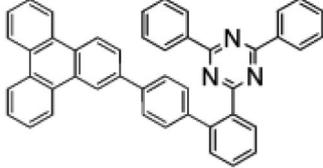
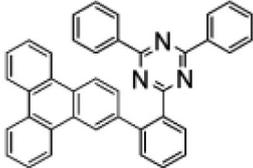
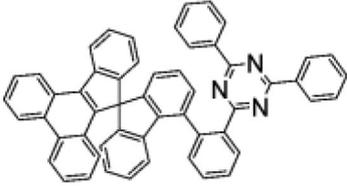
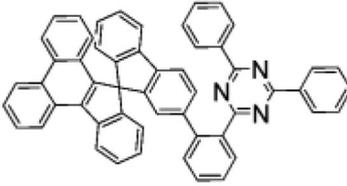
【化 6 1】

			10
<p>化合物 5-16</p>	<p>化合物 5-17</p>	<p>化合物 5-18</p>	
			20
<p>化合物 5-19</p>	<p>化合物 5-20</p>	<p>化合物 5-21</p>	
			30
<p>化合物 5-22</p>	<p>化合物 5-23</p>	<p>化合物 5-24</p>	
			
<p>化合物 5-25</p>	<p>化合物 5-27</p>		

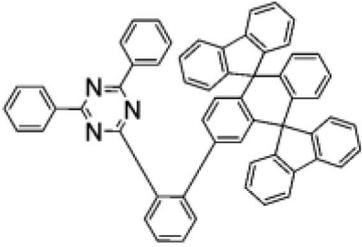
【化 6 2】

			10
<p>化合物 5-28</p>	<p>化合物 5-29</p>	<p>化合物 5-30</p>	
			20
<p>化合物 5-31</p>	<p>化合物 5-32</p>	<p>化合物 5-33</p>	
			30
<p>化合物 5-34</p>	<p>化合物 5-35</p>	<p>化合物 5-36</p>	
			40
<p>化合物 5-37</p>	<p>化合物 5-38</p>	<p>化合物 5-39</p>	

【化 6 3】

			10
<p>化合物 5-40</p>	<p>化合物 5-41</p>	<p>化合物 5-42</p>	
			20
<p>化合物 5-43</p>	<p>化合物 5-44</p>	<p>化合物 5-45</p>	
			30
<p>化合物 5-46</p>	<p>化合物 5-47</p>	<p>化合物 5-48</p>	
			40
<p>化合物 5-49</p>	<p>化合物 5-50</p>	<p>化合物 5-51</p>	

【化 6 4】

		
化合物 5-52		

10

【0095】

本出願の一実施態様によれば、前記 Ar_4 および Ar_5 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 $C_6 \sim C_{20}$ のアリール基である。

【0096】

本出願の一実施態様によれば、 Ar_4 および Ar_5 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フェニル基；置換もしくは非置換のビフェニル基；または置換もしくは非置換のナフチル基である。

20

【0097】

本出願の一実施態様によれば、前記 Ar_4 および Ar_5 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単環のアリール基である。

【0098】

本出願の一実施態様によれば、 Ar_4 および Ar_5 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フェニル基；または置換もしくは非置換のビフェニル基である。

【0099】

本出願の一実施態様によれば、 Ar_4 および Ar_5 は、互いに同一または異なり、それぞれ独立に、フェニル基；またはビフェニル基である。

30

【0100】

本出願の一実施態様によれば、前記 L_3 は、直接結合、または置換もしくは非置換の $C_6 \sim C_{20}$ のアリーレン基である。

【0101】

本出願の一実施態様によれば、前記 L_3 は、直接結合；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リレン基；または置換もしくは非置換のナフタレン基である。

【0102】

本出願の一実施態様によれば、前記 L_3 は、直接結合；または置換もしくは非置換のフェニレン基である。

40

【0103】

本出願の一実施態様によれば、前記 L_3 は、直接結合；またはフェニレン基である。

【0104】

本出願の一実施態様によれば、前記 Ar_6 は、置換もしくは非置換の $C_6 \sim C_{20}$ のアリール基；または置換もしくは非置換の $C_2 \sim C_{20}$ のヘテロ環基である。

【0105】

本出願の一実施態様によれば、前記 Ar_6 は、置換もしくは非置換のスピロフルオレンインドロアクリジン基；置換もしくは非置換のインドロカルバゾール基；置換もしくは非置換のベンゾカルバゾール基；置換もしくは非置換のカルバゾール基；置換もしくは非置

50

換のスピロビフルオレニル基；または置換もしくは非置換のフルオレニル基である。

【0106】

本出願の一実施態様によれば、前記 Ar_6 は、スピロフルオレンインドロアクリジン基；インドロカルバゾール基；ベンゾカルバゾール基；カルバゾール基；スピロビフルオレニル基；またはアリール基で置換もしくは非置換のフルオレニル基である。

【0107】

本出願の一実施態様によれば、前記 Ar_6 は、スピロフルオレンインドロアクリジン基；インドロカルバゾール基；ベンゾカルバゾール基；カルバゾール基；スピロビフルオレニル基；またはフェニル基で置換もしくは非置換のフルオレニル基である。

【0108】

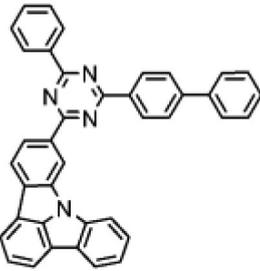
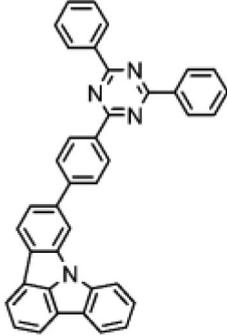
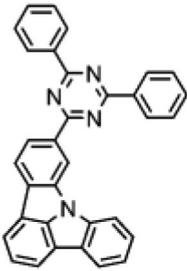
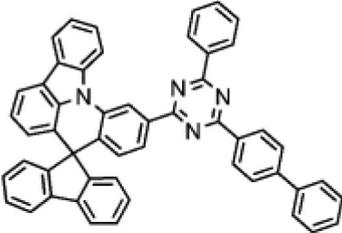
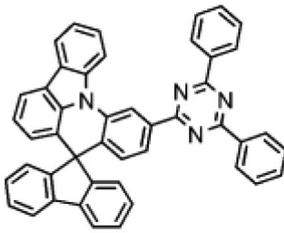
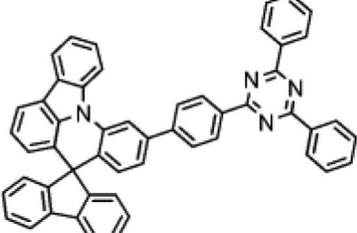
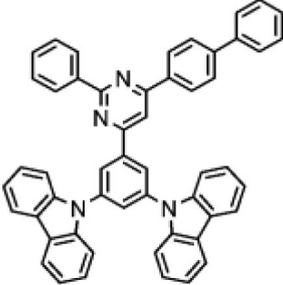
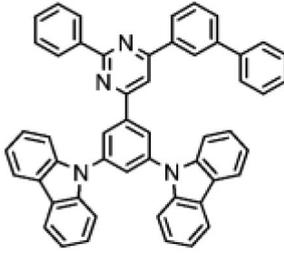
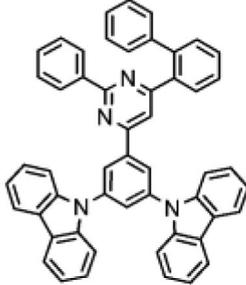
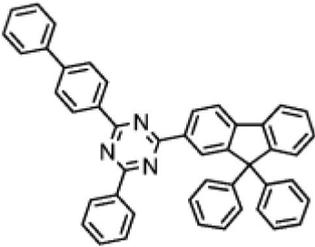
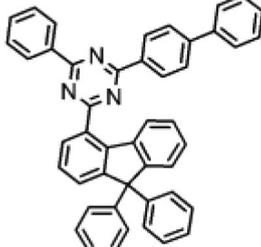
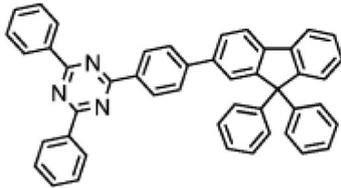
本出願の一実施態様によれば、前記 Ar_6 は、スピロフルオレンインドロアクリジン基；インドロカルバゾール基；ベンゾカルバゾール基；カルバゾール基；スピロビフルオレニル基；またはジメチルフルオレニル基である。

【0109】

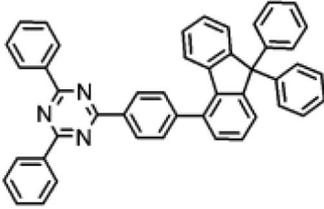
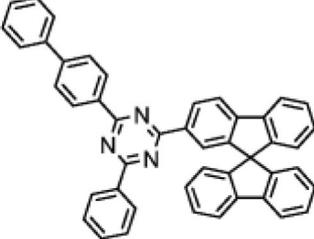
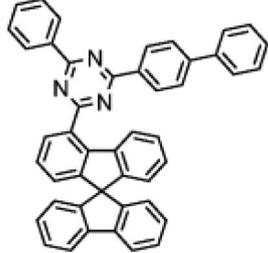
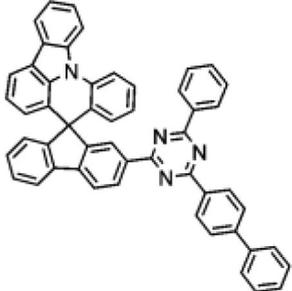
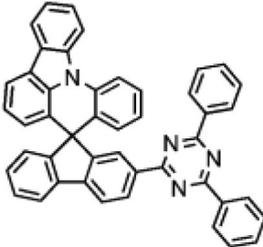
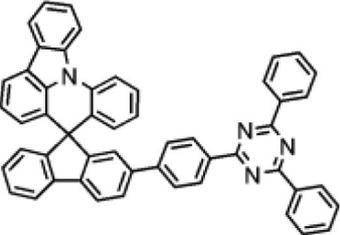
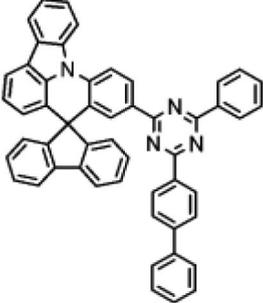
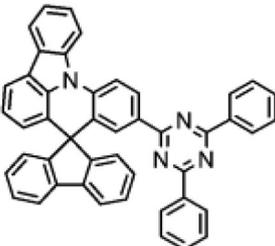
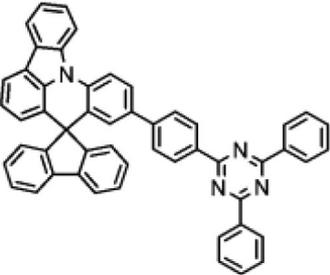
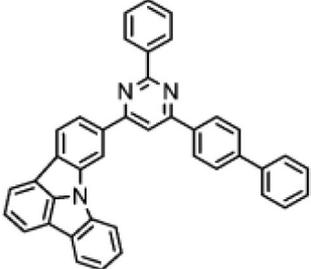
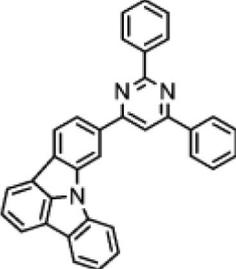
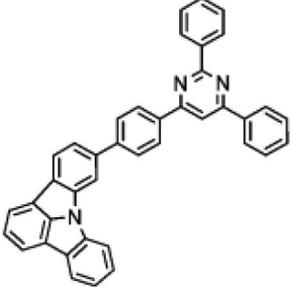
本出願の一実施態様によれば、前記化学式 11 で表される化合物は、下記構造式の中から選択される。

【0110】

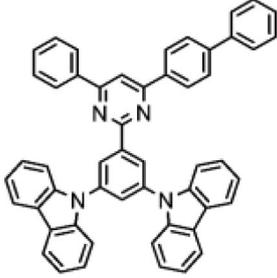
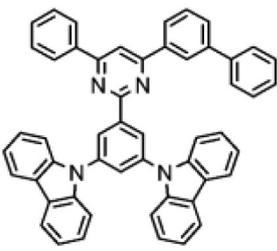
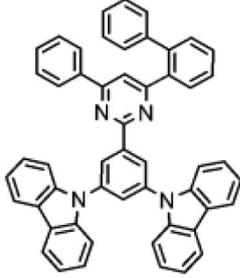
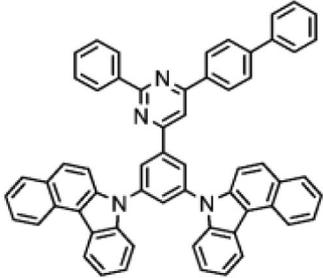
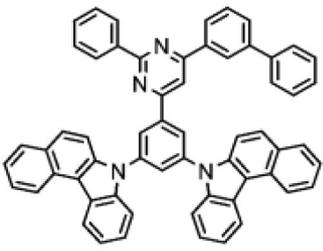
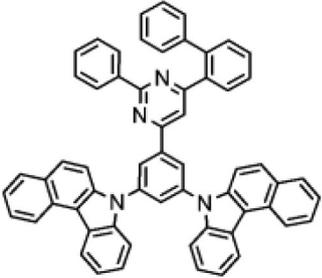
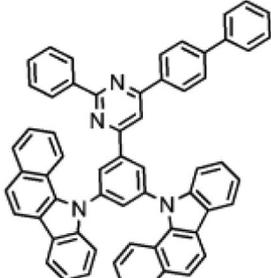
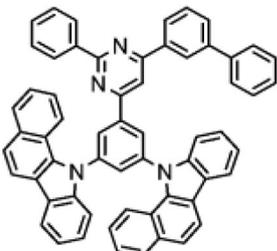
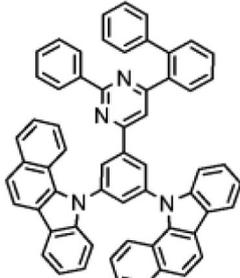
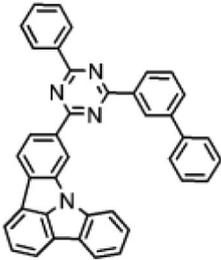
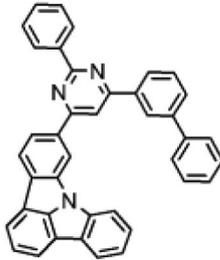
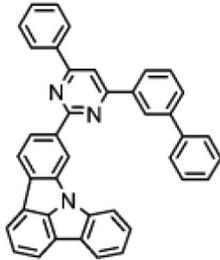
【化 6 5】

			10
<p style="text-align: center;">化合物 6-1</p>	<p style="text-align: center;">化合物 6-2</p>	<p style="text-align: center;">化合物 6-3</p>	
			20
<p style="text-align: center;">化合物 6-4</p>	<p style="text-align: center;">化合物 6-5</p>	<p style="text-align: center;">化合物 6-6</p>	
			30
<p style="text-align: center;">化合物 6-7</p>	<p style="text-align: center;">化合物 6-8</p>	<p style="text-align: center;">化合物 6-9</p>	
			40
<p style="text-align: center;">化合物 6-10</p>	<p style="text-align: center;">化合物 6-11</p>	<p style="text-align: center;">化合物 6-12</p>	

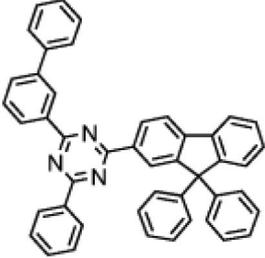
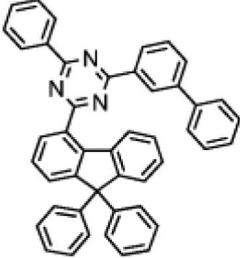
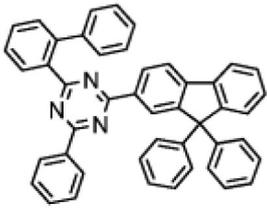
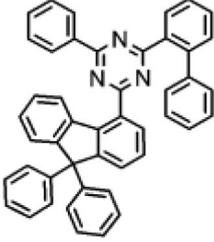
【化 6 6】

			10
<p>化合物 6-13</p>	<p>化合物 6-14</p>	<p>化合物 6-15</p>	
			20
<p>化合物 6-16</p>	<p>化合物 6-17</p>	<p>化合物 6-18</p>	
			30
<p>化合物 6-19</p>	<p>化合物 6-20</p>	<p>化合物 6-21</p>	
			40
<p>化合物 6-22</p>	<p>化合物 6-23</p>	<p>化合物 6-24</p>	

【化 6 7】

			10
<p>化合物 6-25</p>	<p>化合物 6-26</p>	<p>化合物 6-27</p>	
			
<p>化合物 6-28</p>	<p>化合物 6-29</p>	<p>化合物 6-30</p>	
			30
<p>化合物 6-30</p>	<p>化合物 6-31</p>	<p>化合物 6-32</p>	
			
<p>化合物 6-33</p>	<p>化合物 6-34</p>	<p>化合物 6-35</p>	

【化 6 8】

			10
化合物 6-36	化合物 6-37	化合物 6-38	
			20
化合物 6-39			

【 0 1 1 1】

本明細書の有機発光素子は、電子輸送層および電子調節層を含むことを除けば、当技術分野で知られている材料および方法で製造できる。

【 0 1 1 2】

例えば、本明細書の有機発光素子は、基板上に、アノード、有機物層、およびカソードを順次に積層させることにより製造することができる。この時、スパッタリング法 (sputtering) や電子ビーム蒸発法 (e-beam evaporation) のような PVD (Physical Vapor Deposition) 方法を利用して、基板上に金属または導電性を有する金属酸化物またはこれらの合金を蒸着させてアノードを形成し、その上に正孔注入層、正孔輸送層、発光層、電子調節層、および電子輸送層を含む有機物層を形成した後、その上にカソードとして使用可能な物質を蒸着させることにより製造できる。このような方法以外にも、基板上に、カソード物質から有機物層、アノード物質を順に蒸着させて有機発光素子を作ることができる。

【 0 1 1 3】

本明細書の有機発光素子の電子調節層は、発光層と電子輸送層との間に備えられた。

【 0 1 1 4】

本明細書の有機発光素子の有機物層は、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。

【 0 1 1 5】

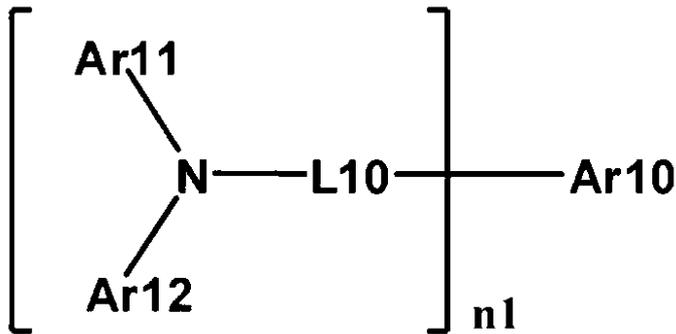
本明細書の一実施態様において、前記有機発光素子は、正孔注入層、正孔輸送層、電子輸送層、電子注入層、電子阻止層、および正孔阻止層からなる群より選択される1層または2層以上をさらに含んでもよい。

【 0 1 1 6】

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、下記化学式 A - 1 の化合物を含む。

【 0 1 1 7】

[化学式 A - 1]
【化 6 9】



10

【 0 1 1 8 】

前記化学式 A - 1 において、
n 1 は、1 以上の整数であり、

Ar 1 0 は、置換もしくは非置換の 1 価以上のベンゾフルオレン基；置換もしくは非置換の 1 価以上のフルオランテン基；置換もしくは非置換の 1 価以上のピレン基；または置換もしくは非置換の 1 価以上のクリセン基であり、

L 1 0 は、直接結合；置換もしくは非置換のアリーレン基；置換もしくは非置換のヘテロアリーレン基であり、

20

Ar 1 1 および Ar 1 2 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；置換もしくは非置換のシリル基；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リールアルキル基；または置換もしくは非置換のヘテロ環基であるか、互いに結合して置換もしくは非置換の環を形成してもよいし、

n 1 が 2 以上の場合、2 以上の括弧内の構造は、互いに同一または異なる。

【 0 1 1 9 】

本明細書の一実施態様によれば、前記有機物層は、発光層を含み、前記発光層は、前記化学式 A - 1 で表される化合物を発光層のドーパントとして含む。

【 0 1 2 0 】

本明細書の一実施態様によれば、前記 L 1 0 は、直接結合である。

30

【 0 1 2 1 】

本明細書の一実施態様によれば、前記 n 1 は、2 である。

【 0 1 2 2 】

本明細書の一実施態様において、前記 Ar 1 0 は、重水素、メチル基、エチル基、イソプロピル基、または tert - ブチル基で置換もしくは非置換の 2 価のピレン基；または重水素、メチル基、エチル基、または tert - ブチル基で置換もしくは非置換の 2 価のクリセン基である。

【 0 1 2 3 】

本明細書の一実施態様において、前記 Ar 1 0 は、アルキル基で置換もしくは非置換の 2 価のピレン基；またはアルキル基で置換もしくは非置換の 2 価のクリセン基である。

40

【 0 1 2 4 】

本明細書の一実施態様において、前記 Ar 1 0 は、アルキル基で置換もしくは非置換の 2 価のピレン基である。

【 0 1 2 5 】

本明細書の一実施態様において、前記 Ar 1 0 は、2 価のピレン基である。

【 0 1 2 6 】

本明細書の一実施態様によれば、前記 Ar 1 1 および Ar 1 2 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炭素数 6 ~ 3 0 のアリール基である。

【 0 1 2 7 】

50

本明細書の一実施態様によれば、前記Ar 1 1およびAr 1 2は、互いに同一または異なり、それぞれ独立に、アルキル基、シアノ基、またはアルキル基で置換されたシリル基で置換もしくは非置換のアリール基である。

【0128】

本明細書の一実施態様によれば、前記Ar 1 1およびAr 1 2は、互いに同一または異なり、それぞれ独立に、メチル基、エチル基、イソプロピル基、tert-ブチル基、シアノ基、アルキル基で置換されたシリル基で置換もしくは非置換のアリール基である。

【0129】

本明細書の一実施態様によれば、前記Ar 1 1およびAr 1 2は、互いに同一または異なり、それぞれ独立に、アルキル基で置換されたシリル基で置換もしくは非置換のアリール基である。

10

【0130】

本明細書の一実施態様によれば、前記Ar 1 1およびAr 1 2は、互いに同一または異なり、それぞれ独立に、トリメチルシリル基で置換もしくは非置換のアリール基である。

【0131】

本明細書の一実施態様によれば、前記Ar 1 1およびAr 1 2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フェニル基；置換もしくは非置換のピフェニル基；または置換もしくは非置換のターフェニル基である。

【0132】

本明細書の一実施態様によれば、前記Ar 1 1およびAr 1 2は、互いに同一または異なり、それぞれ独立に、メチル基、エチル基、イソプロピル基、tert-ブチル基、シアノ基、またはトリメチルシリル基で置換もしくは非置換のフェニル基である。

20

【0133】

本明細書の一実施態様によれば、前記Ar 1 1およびAr 1 2は、互いに同一または異なり、それぞれ独立に、トリメチルシリル基で置換もしくは非置換のフェニル基である。

【0134】

本明細書の一実施態様によれば、前記Ar 1 1およびAr 1 2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炭素数6～30のヘテロアリール基である。

【0135】

本明細書の一実施態様によれば、前記Ar 1 1およびAr 1 2は、互いに同一または異なり、それぞれ独立に、メチル基、エチル基、tert-ブチル基、ニトリル基、アルキル基で置換されたシリル基、またはフェニル基で置換もしくは非置換のヘテロアリール基である。

30

【0136】

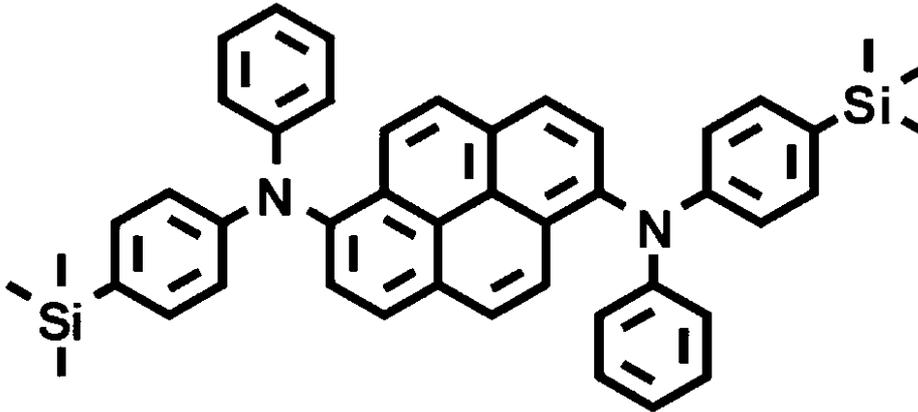
本明細書の一実施態様によれば、前記Ar 1 1およびAr 1 2は、互いに同一または異なり、それぞれ独立に、メチル基、エチル基、tert-ブチル基、ニトリル基、トリメチルシリル基、またはフェニル基で置換もしくは非置換のジベンゾフラン基である。

【0137】

本明細書の一実施態様によれば、前記化学式A-1は、下記化合物で表すことができる。

40

【化70】



10

【0138】

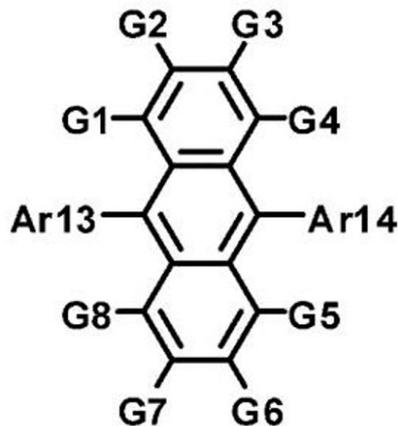
本明細書の一実施態様によれば、前記有機物層は、発光層を含み、前記発光層は、下記化学式 A - 2 で表される化合物を含む。

【0139】

[化学式 A - 2]

【化71】

20



30

【0140】

前記化学式 A - 2 において、

Ar 1 3 および Ar 1 4 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単環のアリール基；または置換もしくは非置換の多環のアリール基であり、

G 1 ~ G 8 は、互いに同一または異なり、それぞれ独立に、水素；置換もしくは非置換の単環のアリール基；または置換もしくは非置換の多環のアリール基である。

【0141】

40

本明細書の一実施態様によれば、前記有機物層は、発光層を含み、前記発光層は、前記化学式 A - 2 で表される化合物を発光層のホストとして含む。

【0142】

本明細書の一実施態様によれば、前記 Ar 1 3 および Ar 1 4 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多環のアリール基である。

【0143】

本明細書の一実施態様によれば、前記 Ar 1 3 および Ar 1 4 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炭素数 1 0 ~ 3 0 の多環のアリール基である。

【0144】

50

本明細書の一実施態様によれば、前記Ar 13およびAr 14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ナフチル基である。

【0145】

本明細書の一実施態様によれば、前記Ar 13およびAr 14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1-ナフチル基である。

【0146】

本明細書の一実施態様によれば、前記Ar 13およびAr 14は、1-ナフチル基である。

【0147】

本明細書の一実施態様によれば、前記G 1～G 8は、水素である。

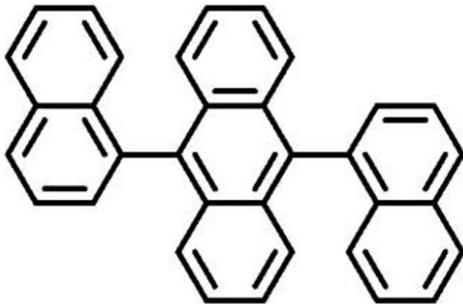
10

【0148】

本明細書の一実施態様によれば、前記化学式A-2は、下記化合物で表すことができる。

【0149】

【化72】



20

【0150】

本明細書の一実施態様によれば、前記有機物層は、発光層を含み、前記発光層は、前記化学式A-1で表される化合物を発光層のドーパントとして含み、前記化学式A-2で表される化合物を発光層のホストとして含む。

【0151】

30

例えば、本明細書の有機発光素子の構造は、図1に示しているような構造を有することができるが、これにのみ限定されるものではない。

【0152】

図1には、基板101上に、陽極201、発光層301、電子調節層401、電子輸送層501、および陰極601が順次に積層された有機発光素子の構造が例示されている。前記図1は、本明細書の実施態様に係る例示的な構造であり、他の有機物層をさらに含んでもよい。

【0153】

前記有機発光素子が複数の有機物層を含む場合、前記有機物層は、同一の物質または異なる物質で形成される。

40

【0154】

前記陽極物質としては、通常、有機物層に正孔注入が円滑となるように仕事関数の大きい物質が好ましい。本発明で使用可能な陽極物質の具体例としては、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。

【0155】

50

前記陰極物質としては、通常、有機物層に電子注入が容易となるように仕事関数の小さい物質であることが好ましい。陰極物質の具体例としては、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。

【0156】

前記正孔注入物質としては、電極から正孔を注入する層で、正孔注入物質としては、正孔を輸送する能力を有し、陽極からの正孔注入効果、発光層または発光材料に対して優れた正孔注入効果を有し、発光層で生成された励起子の電子注入層または電子注入材料への移動を防止し、また、薄膜形成能力の優れた化合物が好ましい。正孔注入物質のHOMO (highest occupied molecular orbital) が陽極物質の仕事関数と周辺有機物層のHOMOとの間であることが好ましい。正孔注入物質の具体例としては、金属ポルフィリン (porphyrin)、オリゴチオフェン、アリアルアミン系の有機物、ヘキサニトリルヘキサアザトリフェニレン系の有機物、キナクリドン (quinacridone) 系の有機物、ペリレン (perylene) 系の有機物、アントラキノンおよびポリアニリンとポリチオフェン系の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。

10

【0157】

前記正孔輸送層は、正孔注入層から正孔を受け取って発光層まで正孔を輸送する層で、正孔輸送物質としては、陽極や正孔注入層から正孔を受けて発光層に移し得る物質で、正孔に対する移動性の大きい物質が好適である。具体例としては、アリアルアミン系の有機物、導電性高分子、および共役部分と非共役部分が共にあるブロック共重合体などがあるが、これらにのみ限定されるものではない。

20

【0158】

前記発光物質としては、正孔輸送層と電子輸送層から正孔と電子をそれぞれ受けて結合させることにより、可視光線領域の光を発生し得る物質であって、蛍光や燐光に対する量子効率の良い物質が好ましい。具体例としては、8-ヒドロキシ-キノリンアルミニウム錯体 (Alq₃)；カルバゾール系化合物；二量体化スチリル (dimerized styryl) 化合物；BALq；10-ヒドロキシベンゾキノリン-金属化合物；ベンゾキサゾール、ベンズチアゾール、およびベンズイミダゾール系の化合物；ポリ(p-フェニレンビニレン) (PPV) 系の高分子；スピロ (spiro) 化合物；ポリフルオレン、ルブレンなどがあるが、これらにのみ限定されるものではない。

30

【0159】

前記発光層は、ホスト材料およびドーパント材料を含むことができる。ホスト材料は、縮合芳香族環誘導体またはヘテロ環含有化合物などがある。具体的には、縮合芳香族環誘導体としては、アントラセン誘導体、ピレン誘導体、ナフタレン誘導体、ペントセン誘導体、フェナントレン化合物、フルオランテン化合物などがあり、ヘテロ環含有化合物としては、カルバゾール誘導体、ジベンゾフラン誘導体、ラダー型フラン化合物、ピリミジン誘導体などがあるが、これらに限定されない。

40

【0160】

ドーパント材料としては、有機化合物、金属または金属化合物がある。

【0161】

ドーパント材料としての有機化合物としては、芳香族アミン誘導体、スチリルアミン化合物、ホウ素錯体、フルオランテン化合物などがある。具体的には、芳香族アミン誘導体としては、置換もしくは非置換のアリアルアミノ基を有する縮合芳香族環誘導体であって、アリアルアミノ基を有するピレン、アントラセン、クリセン、ペリフランテンなどがあり、スチリルアミン化合物としては、置換もしくは非置換のアリアルアミンに少なくとも1個のアリアルビニル基が置換されている化合物で、アリアル基、シリル基、アルキル基、シクロアルキル基、およびアリアルアミノ基からなる群より1または2以上選択される

50

置換基が置換もしくは非置換である。具体的には、スチリルアミン、スチリルジアミン、スチリルトリアミン、スチリルテトラアミンなどがあるが、これらに限定されない。また、金属または金属化合物としては、一般的な金属または金属化合物を使用することができ、具体的には、金属錯体を使用することができる。前記金属錯体としては、イリジウム錯体、白金錯体などがあるが、これらに限定されない。

【0162】

前記電子注入層は、電極から電子を注入する層で、電子を輸送する能力を有し、陰極からの電子注入効果、発光層または発光材料に対して優れた電子注入効果を有し、発光層で生成された励起子の正孔注入層への移動を防止し、また、薄膜形成能力の優れた化合物が好ましい。具体的には、フルオレノン、アントラキノジメタン、ジフェノキノン、チオピランジオキシド、オキサゾール、オキサジアゾール、トリアゾール、イミダゾール、ペリレンテトラカルボン酸、フルオレニリデンメタン、アントロンなどとそれらの誘導体、金属錯体化合物、および含窒素5員環誘導体などがあるが、これらに限定されない。

10

【0163】

前記金属錯体化合物としては、8-ヒドロキシキノリナートリチウム、ビス(8-ヒドロキシキノリナート)亜鉛、ビス(8-ヒドロキシキノリナート)銅、ビス(8-ヒドロキシキノリナート)マンガン、トリス(8-ヒドロキシキノリナート)アルミニウム、トリス(2-メチル-8-ヒドロキシキノリナート)アルミニウム、トリス(8-ヒドロキシキノリナート)ガリウム、ビス(10-ヒドロキシベンゾ[h]キノリナート)ベリリウム、ビス(10-ヒドロキシベンゾ[h]キノリナート)亜鉛、ビス(2-メチル-8-キノリナート)クロロガリウム、ビス(2-メチル-8-キノリナート)(o-クレゾラート)ガリウム、ビス(2-メチル-8-キノリナート)(1-ナフトラート)アルミニウム、ビス(2-メチル-8-キノリナート)(2-ナフトラート)ガリウムなどがあるが、これらに限定されない。

20

【0164】

前記正孔阻止層は、正孔の陰極到達を阻止する層で、一般的に、正孔注入層と同一の条件で形成される。具体的には、オキサジアゾール誘導体やトリアゾール誘導体、フェナントロリン誘導体、BCP、アルミニウム錯体(aluminum complex)などがあるが、これらに限定されない。

【0165】

本明細書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。

30

【0166】

また、本明細書に係る有機発光素子は、下部電極がアノード、上部電極がカソードの正構造(normal type)であってもよく、下部電極がカソード、上部電極がアノードの逆構造(inverted type)であってもよい。

【0167】

本明細書の一実施態様に係る構造は、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。

40

【0168】

【実施例】

【0169】

以下、本明細書を具体的に説明するために実施例を挙げて詳細に説明する。しかし、本明細書に係る実施例は種々の異なる形態に変形可能であり、本明細書の範囲が以下に詳述する実施例に限定されると解釈されない。本明細書の実施例は、当業界における平均的な知識を有する者に本明細書をより完全に説明するために提供されるものである。

【0170】

< 製造例 >

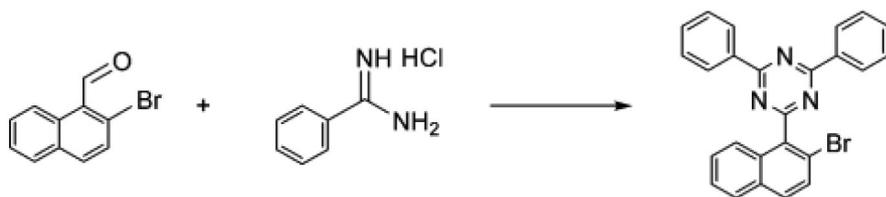
【0171】

50

< 製造例 1 > 化合物 1 - 1 の合成

【 0 1 7 2 】

【 化 7 3 】



[化合物 1-1-A]

10

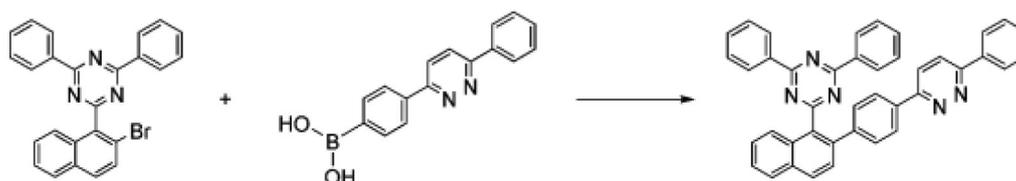
【 0 1 7 3 】

窒素気流下、2 - ブロモ - 1 - ナフトアルデヒド (n a p h t h a l d e h y d e) (1 0 g、4 2 . 5 4 m m o l)、ベンズイミダミドヒドロクロライド (b e n z i m i d a m i d e h y d r o c h l o r i d e) (2 0 g、1 2 7 . 6 m m o l)、ポタシウムホスフェート (p o t a s s i u m p h o s p h a t e) (3 6 g、1 7 0 . 2 m m o l) を、ジメチルアセタミド (D i m e t h y l a c e t a m i d e (D M A c)) 溶媒 1 5 0 m L に入れて、1 8 時間加熱撈拌した。反応溶液を冷やしてから濾過後、E t O H スラリー精製により、化合物 1 - 1 - A (1 6 g、収率 8 6 %) を得た。

20

【 0 1 7 4 】

【 化 7 4 】



[化合物 1-1-A]

[化合物 1-1]

30

【 0 1 7 5 】

窒素気流下、化合物 1 - 1 - A (1 6 g、3 6 . 5 m m o l) と、(4 - (6 - フェニルピリダジン - 3 - イル) フェニル) ボロン酸 (1 0 . 6 g、3 8 . 3 m m o l)、テトラキス (トリフェニルホスフィン) パラジウム (0) (1 . 3 g、1 . 1 m m o l)、およびポタシウムカーボネート (1 0 . 1 g、7 3 m m o l) を入れて、6 時間加熱撈拌した。反応終了後、常温に温度を下げた後、1 次濾過して不純物を除去した。濾過物を水に入れてクロロホルムで抽出して有機層を得た後、無水硫酸マグネシウムで乾燥した。減圧蒸留後、エタノールで洗浄して、化合物 1 - 1 (2 0 g、収率 9 3 %) を製造した。

【 0 1 7 6 】

MS : [M + H] ⁺ = 5 9 0

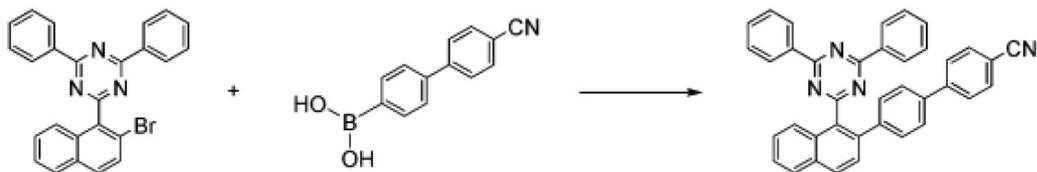
【 0 1 7 7 】

< 製造例 2 > 化合物 1 - 3 の合成

【 0 1 7 8 】

40

【化75】



[化合物 1-1-A]

[化合物 1-3]

。

【0179】

窒素気流下、化合物 1-1-A (15 g、34.2 mmol) と、(4'-シアノ-[1,1'-ビフェニル]-4-イル) ボロン酸 (8 g、35.9 mmol)、およびポタシウムカーボネート (9.5 g、68.4 mmol) を入れて、加熱撹拌した。還流後、テトラキス(トリフェニルホスフィン)パラジウム(0) (1.2 g、1.0 mmol) を入れて、追加的に 5 時間加熱撹拌した。反応終了後、常温に温度を下げた後、1 次濾過して不純物を除去した。濾過物を水に入れてクロロホルムで抽出して有機層を得た後、無水硫酸マグネシウムで乾燥した。減圧蒸留後、エタノールで洗浄して、化合物 1-3 (16 g、収率 87%) を製造した。

【0180】

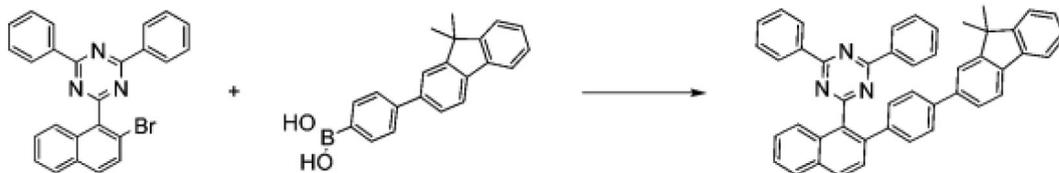
MS: $[M + H]^+ = 537$

【0181】

< 製造例 3 > 化合物 1-4 の合成

【0182】

【化76】



[化合物 1-1-A]

[化合物 1-4]

。

【0183】

(4-(6-フェニルピリダジン-3-イル)フェニル) ボロン酸の代わりに(4-(9,9-ジメチル-9H-フルオレン-2-イル)フェニル) ボロン酸を用いたことを除き、化合物 1-1 の製造方法と同様の方法で化合物 1-4 を得た。

【0184】

MS: $[M + H]^+ = 628$

【0185】

< 製造例 4 > 化合物 1-6 の合成

【0186】

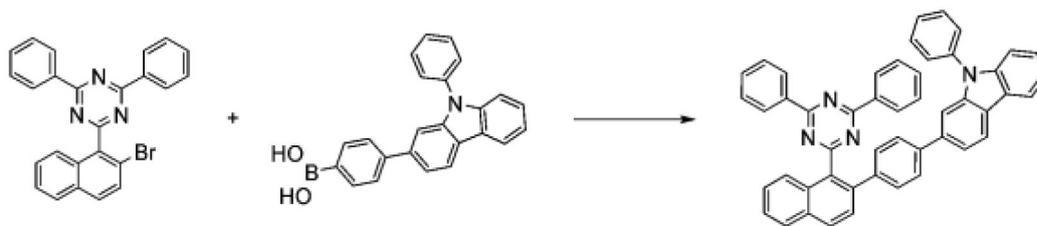
10

20

30

40

【化 7 7】



【化合物 1-1-A】

【化合物 1-6】

10

【 0 1 8 7】

(4-(6-フェニルピリダジン-3-イル)フェニル)ボロン酸の代わりに(4-(9-フェニル-9H-カルバゾール-2-イル)フェニル)ボロン酸を用いたことを除き、化合物1-1の製造方法と同様の方法で化合物1-6を得た。

【 0 1 8 8】

MS: [M + H]⁺ = 676

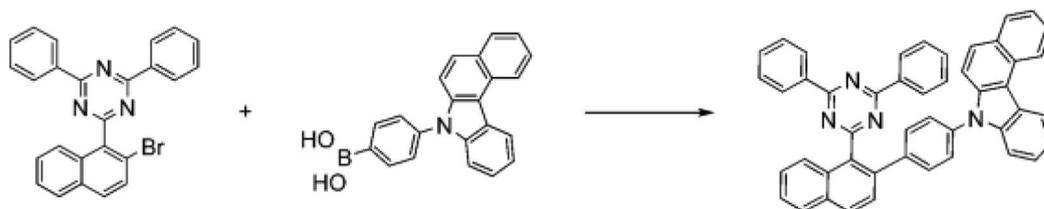
【 0 1 8 9】

< 製造例 5 > 化合物 1 - 1 6 の合成

【 0 1 9 0】

20

【化 7 8】



【化合物 1-1-A】

【化合物 1-16】

30

【 0 1 9 1】

(4-(6-フェニルピリダジン-3-イル)フェニル)ボロン酸の代わりに(4-(7H-ベンゾ[c]カルバゾール-7-イル)フェニル)ボロン酸を用いたことを除き、化合物1-1の製造方法と同様の方法で化合物1-16を得た。

【 0 1 9 2】

MS: [M + H]⁺ = 650

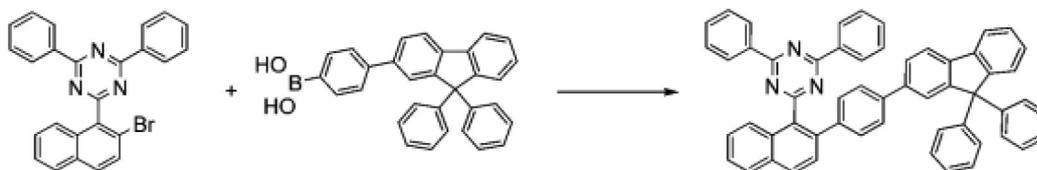
【 0 1 9 3】

< 製造例 6 > 化合物 1 - 1 9 の合成

【 0 1 9 4】

【化 7 9】

40



【化合物 1-1-A】

【化合物 1-19】

【 0 1 9 5】

(4-(6-フェニルピリダジン-3-イル)フェニル)ボロン酸の代わりに(4-(

50

9,9-ジフェニル-9H-フルオレン-2-イル)フェニル)ボロン酸を用いたことを除き、化合物1-1の製造方法と同様の方法で化合物1-19を得た。

【0196】

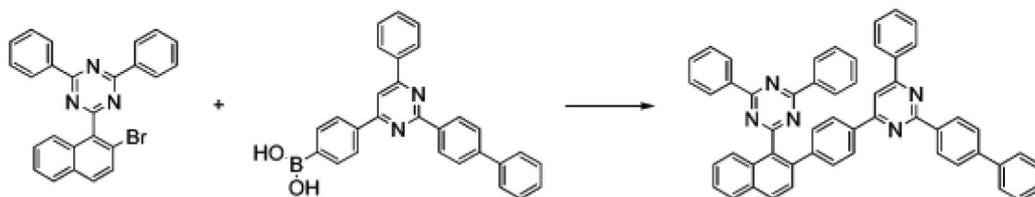
MS: [M+H]⁺ = 751

【0197】

<製造例7>化合物1-27の合成

【0198】

【化80】



10

[化合物 1-1-A]

[化合物 1-27]

。【0199】

(4-(6-フェニルピリダジン-3-イル)フェニル)ボロン酸の代わりに(4-(2-([1,1'-ビフェニル]-4-イル)-6-フェニルピリミジン-4-イル)フェニル)ボロン酸を用いたことを除き、化合物1-1の製造方法と同様の方法で化合物1-27を得た。

20

【0200】

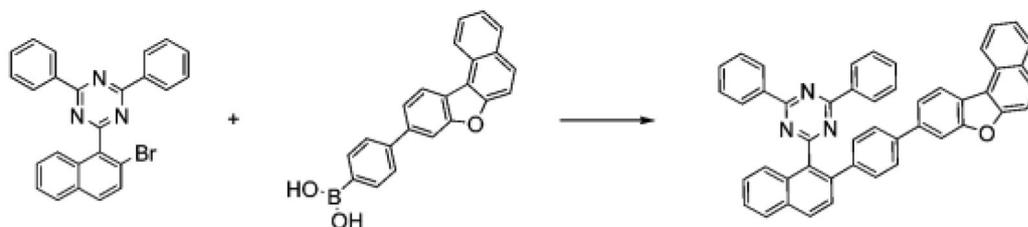
MS: [M+H]⁺ = 741

【0201】

<製造例8>化合物1-36の合成

【0202】

【化81】



30

[化合物 1-1-A]

[化合物 1-36]

。【0203】

(4-(6-フェニルピリダジン-3-イル)フェニル)ボロン酸の代わりに(4-(ナフト[2,1-b]ベンゾフラン-9-イル)フェニル)ボロン酸を用いたことを除き、化合物1-1の製造方法と同様の方法で化合物1-36を得た。

40

【0204】

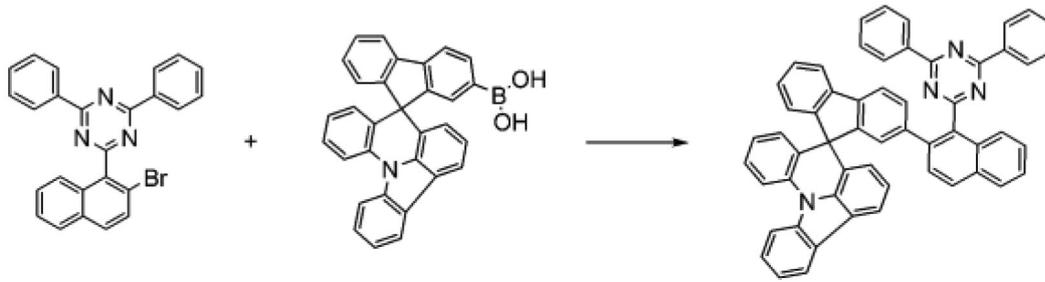
MS: [M+H]⁺ = 651

【0205】

<製造例9>化合物1-38の合成

【0206】

【化 8 2】



[化合物 1-1-A]

[化合物 1-38]

10

【 0 2 0 7】

(4-(6-フェニルピリダジン-3-イル)フェニル)ボロン酸の代わりにスピロ[フルオレン-9,8'-インドロ[3,2,1-ジ]アクリジン]-2-イルボロン酸を用いたことを除き、化合物 1-1 の製造方法と同様の方法で化合物 1-38 を得た。

【 0 2 0 8】

MS: $[M + H]^+ = 762$

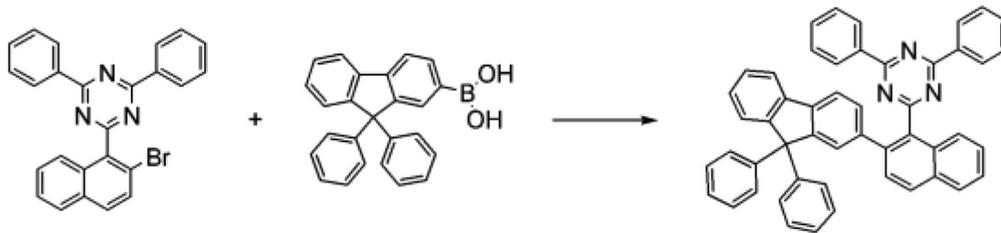
【 0 2 0 9】

< 製造例 10 > 化合物 1-39 の合成

20

【 0 2 1 0】

【化 8 3】



[化合物 1-1-A]

[化合物 1-39]

30

【 0 2 1 1】

(4-(6-フェニルピリダジン-3-イル)フェニル)ボロン酸の代わりに(9,9-ジフェニル-9H-フルオレン-2-イル)ボロン酸を用いたことを除き、化合物 1-1 の製造方法と同様の方法で化合物 1-39 を得た。

【 0 2 1 2】

MS: $[M + H]^+ = 675$

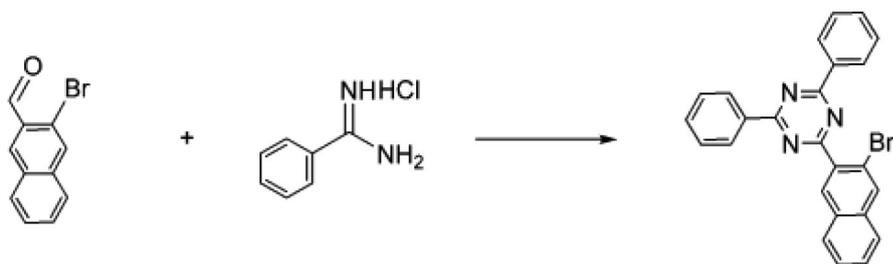
【 0 2 1 3】

< 製造例 11 > 化合物 2-31 の合成

40

【 0 2 1 4】

【化 8 4】



[化合物 2-1-A]

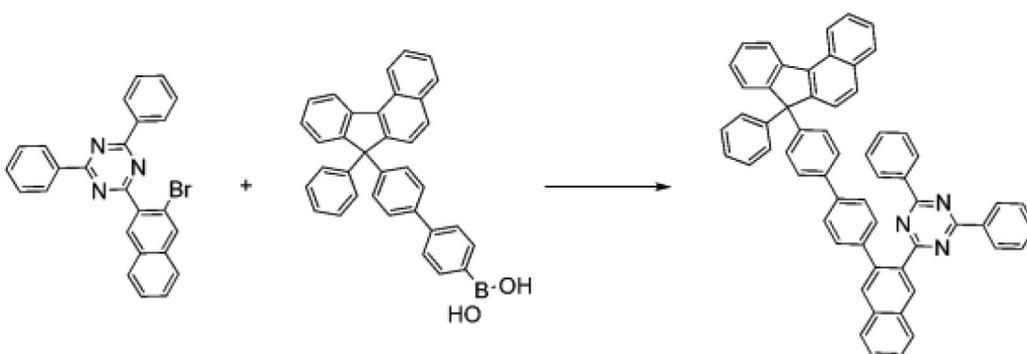
10

【 0 2 1 5】

2 - プロモ - 1 - ナフトアルデヒドの代わりに 3 - プロモ - 2 - ナフトアルデヒドを用いたことを除き、化合物 1 - 1 - A の製造方法と同様の方法で化合物 2 - 1 - A を得た。

【 0 2 1 6】

【化 8 5】



[化合物 2-1-A]

[化合物 2-31]

20

【 0 2 1 7】

[化合物 1 - 1 - A] の代わりに [化合物 2 - 1 - A] を使い、(4 - (6 - フェニルピリダジン - 3 - イル)フェニル)ボロン酸の代わりに(4' - (7 - フェニル - 7H - ベンゾ[c]フルオレン - 7 - イル) - [1, 1' - ビフェニル] - 4 - イル)ボロン酸を用いたことを除き、化合物 1 - 1 の製造方法と同様の方法で化合物 2 - 3 1 を得た。

【 0 2 1 8】

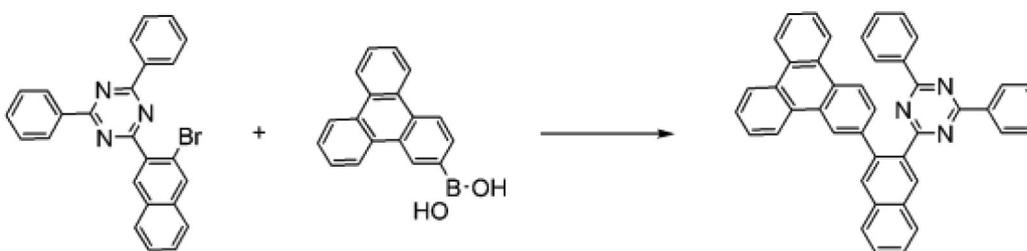
MS : [M + H] ⁺ = 8 0 1

【 0 2 1 9】

< 製造例 1 2 > 化合物 2 - 3 3 の合成

【 0 2 2 0】

【化 8 6】



[化合物 2-1-A]

[化合物 2-33]

30

40

50

。【0221】

[化合物1-1-A]の代わりに[化合物2-1-A]を用い、(4-(6-フェニルピリダジン-3-イル)フェニル)ボロン酸の代わりにトリフェニレン-2-イルボロン酸を用いたことを除き、化合物1-1の製造方法と同様の方法で化合物2-33を得た。

【0222】

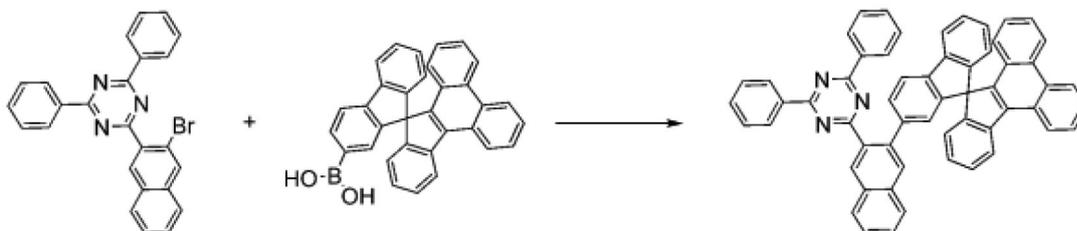
MS: [M+H]⁺ = 585

【0223】

<製造例13> 化合物2-35の合成

【0224】

【化87】



[化合物2-1-A]

[化合物2-35]

10

20

。【0225】

[化合物1-1-A]の代わりに[化合物2-1-A]を用い、(4-(6-フェニルピリダジン-3-イル)フェニル)ボロン酸の代わりにスピロ[フルオレン-9,13'-インデノ[1,2-イル]フェナントレン]-2-イルボロン酸を用いたことを除き、化合物1-1の製造方法と同様の方法で化合物2-35を得た。

【0226】

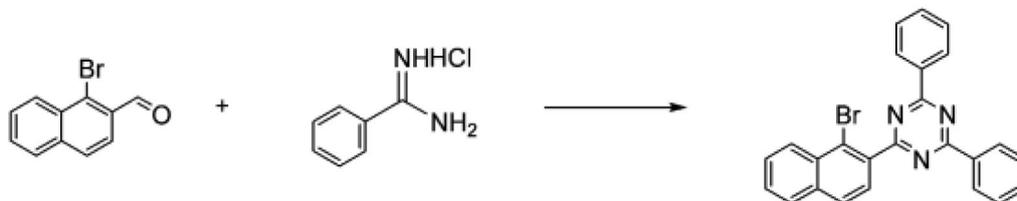
MS: [M+H]⁺ = 773

【0227】

<製造例14> 化合物3-16の合成

【0228】

【化88】



[化合物3-1-A]

30

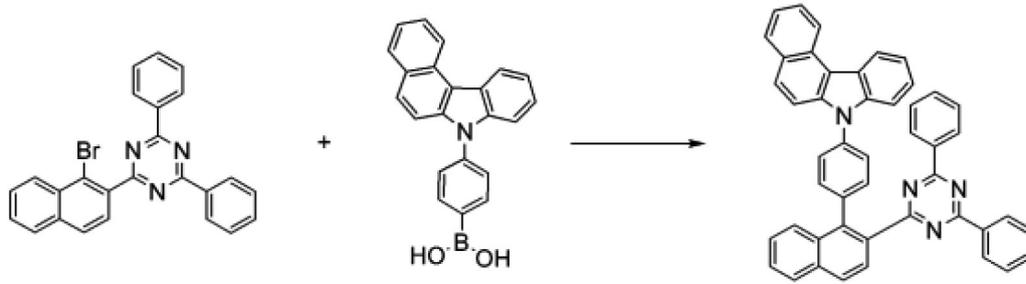
40

。【0229】

2-プロモ-1-ナフトアルデヒドの代わりに1-プロモ-2-ナフトアルデヒドを用いたことを除き、化合物1-1-Aの製造方法と同様の方法で化合物3-1-Aを得た。

【0230】

【化 8 9】



[化合物 3-1-A]

[化合物 3-16]

10

【 0 2 3 1】

[化合物 1 - 1 - A] の代わりに [化合物 3 - 1 - A] を用い、(4 - (6 - フェニルピリダジン - 3 - イル)フェニル)ボロン酸の代わりに(4 - (7H - ベンゾ[c]カルバゾール - 7 - イル)フェニル)ボロン酸を用いたことを除き、化合物 1 - 1 の製造方法と同様の方法で化合物 3 - 1 6 を得た。

【 0 2 3 2】

MS : [M + H] ⁺ = 6 5 0

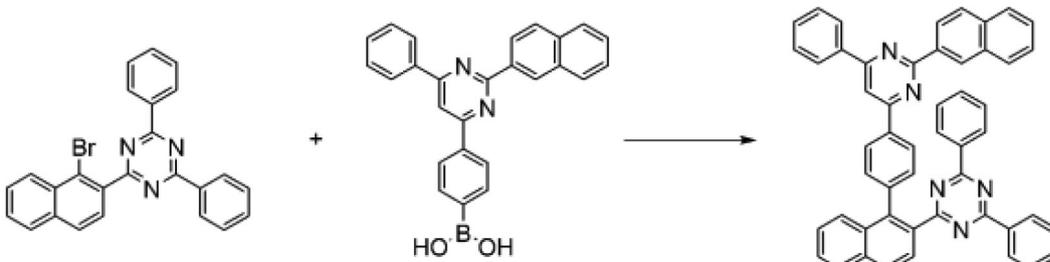
【 0 2 3 3】

< 製造例 1 5 > 化合物 3 - 2 2 の合成

20

【 0 2 3 4】

【化 9 0】



[化合物 3-1-A]

[化合物 3-22]

30

【 0 2 3 5】

[化合物 1 - 1 - A] の代わりに [化合物 3 - 1 - A] を用い、(4 - (6 - フェニルピリダジン - 3 - イル)フェニル)ボロン酸の代わりに(4 - (2 - (ナフタレン - 2 - イル) - 6 - フェニルピリミジン - 4 - イル)フェニル)ボロン酸を用いたことを除き、化合物 1 - 1 の製造方法と同様の方法で化合物 3 - 2 2 を得た。

【 0 2 3 6】

MS : [M + H] ⁺ = 7 1 5

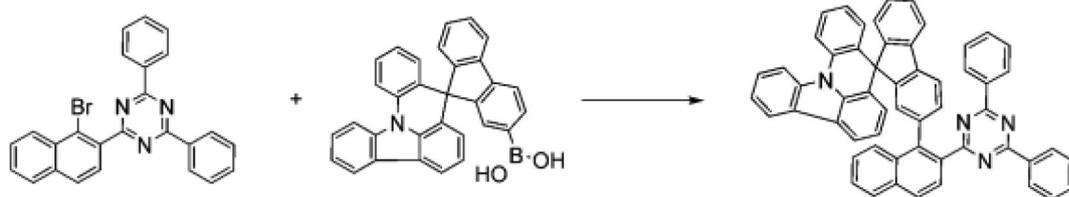
40

【 0 2 3 7】

< 製造例 1 6 > 化合物 3 - 3 3 の合成

【 0 2 3 8】

【化 9 1】



[化合物 3-1-A]

[化合物 3-33]

10

【 0 2 3 9】

[化合物 1 - 1 - A]の代わりに[化合物 3 - 1 - A]を用い、(4 - (6 - フェニルピリダジン - 3 - イル)フェニル)ボロン酸の代わりにスピロ[フルオレン - 9 , 8' - インドロ[3 , 2 , 1 - d e]アクリジン] - 2 - イルボロン酸を用いたことを除き、化合物 1 - 1 の製造方法と同様の方法で化合物 3 - 3 3 を得た。

【 0 2 4 0】

MS : [M + H] ⁺ = 7 6 2

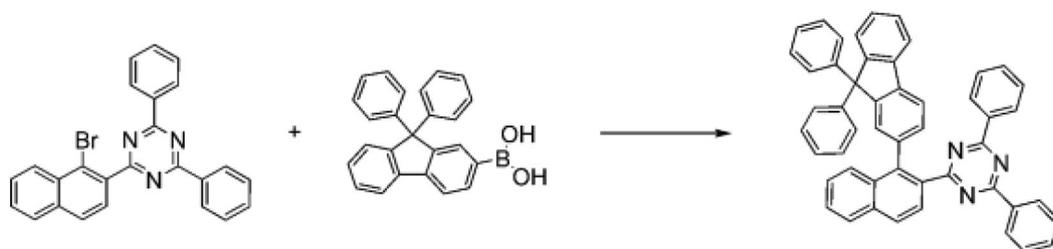
【 0 2 4 1】

< 製造例 1 7 > 化合物 3 - 3 4 の合成

【 0 2 4 2】

20

【化 9 2】



[化合物 3-1-A]

[化合物 3-34]

30

【 0 2 4 3】

[化合物 1 - 1 - A]の代わりに[化合物 3 - 1 - A]を用い、(4 - (6 - フェニルピリダジン - 3 - イル)フェニル)ボロン酸の代わりに(9 , 9 - ジフェニル - 9 H - フルオレン - 2 - イル)ボロン酸を用いたことを除き、化合物 1 - 1 の製造方法と同様の方法で化合物 3 - 3 4 を得た。

【 0 2 4 4】

MS : [M + H] ⁺ = 6 7 5

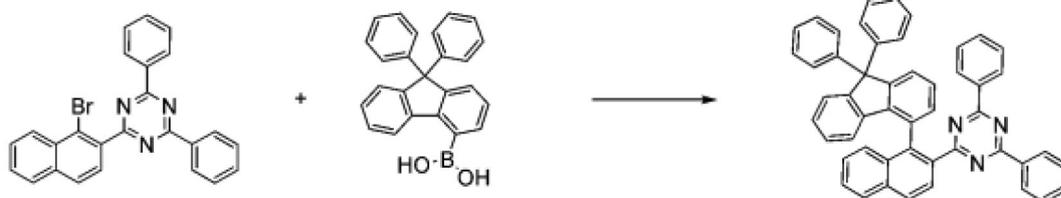
【 0 2 4 5】

< 製造例 1 8 > 化合物 3 - 3 5 の合成

40

【 0 2 4 6】

【化 9 3】



[化合物 3-1-A]

[化合物 3-35]

50

。【0247】

【化合物 1 - 1 - A】の代わりに【化合物 3 - 1 - A】を用い、(4 - (6 - フェニルピリダジン - 3 - イル)フェニル)ボロン酸の代わりに(9, 9 - ジフェニル - 9H - フルオレン - 4 - イル)ボロン酸を用いたことを除き、化合物 1 - 1 の製造方法と同様の方法で化合物 3 - 35 を得た。

【0248】

MS : [M + H] ⁺ = 675

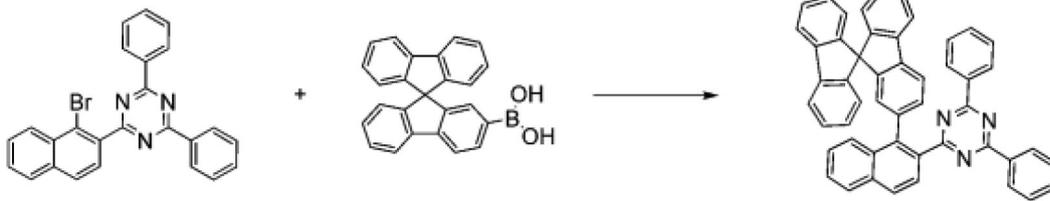
【0249】

< 製造例 19 > 化合物 3 - 36 の合成

10

【0250】

【化94】



【化合物 3-1-A】

【化合物 3-36】

20

。【0251】

【化合物 1 - 1 - A】の代わりに【化合物 3 - 1 - A】を用い、(4 - (6 - フェニルピリダジン - 3 - イル)フェニル)ボロン酸の代わりに9, 9' - スピロビ[フルオレン] - 2 - イルボロン酸を用いたことを除き、化合物 1 - 1 の製造方法と同様の方法で化合物 3 - 36 を得た。

【0252】

MS : [M + H] ⁺ = 673

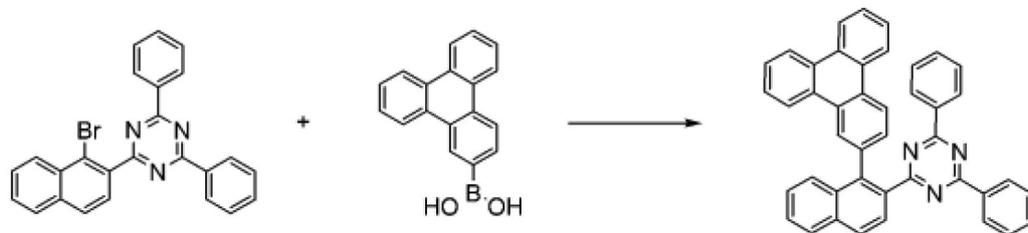
【0253】

< 製造例 20 > 化合物 3 - 38 の合成

30

【0254】

【化95】



【化合物 3-1-A】

【化合物 3-38】

40

。【0255】

【化合物 1 - 1 - A】の代わりに【化合物 3 - 1 - A】を用い、(4 - (6 - フェニルピリダジン - 3 - イル)フェニル)ボロン酸の代わりにトレフェニレン - 2 - イルボロン酸を用いたことを除き、化合物 1 - 1 の製造方法と同様の方法で化合物 3 - 38 を得た。

【0256】

MS : [M + H] ⁺ = 585

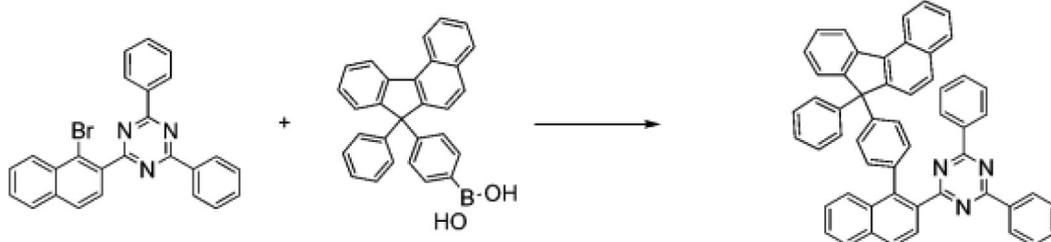
【0257】

50

< 製造例 2 1 > 化合物 3 - 3 9 の合成

【 0 2 5 8 】

【 化 9 6 】



[化合物 3-1-A]

[化合物 3-39]

10

【 0 2 5 9 】

[化合物 1 - 1 - A] の代わりに [化合物 3 - 1 - A] を用い、(4 - (6 - フェニルピリダジン - 3 - イル) フェニル) ボロン酸の代わりに (4 - (7 - フェニル - 7 H - ベンゾ [c] フルオレン - 7 - イル) フェニル) ボロン酸を用いたことを除き、化合物 1 - 1 の製造方法と同様の方法で化合物 3 - 3 9 を得た。

【 0 2 6 0 】

MS : [M + H] ⁺ = 7 2 5

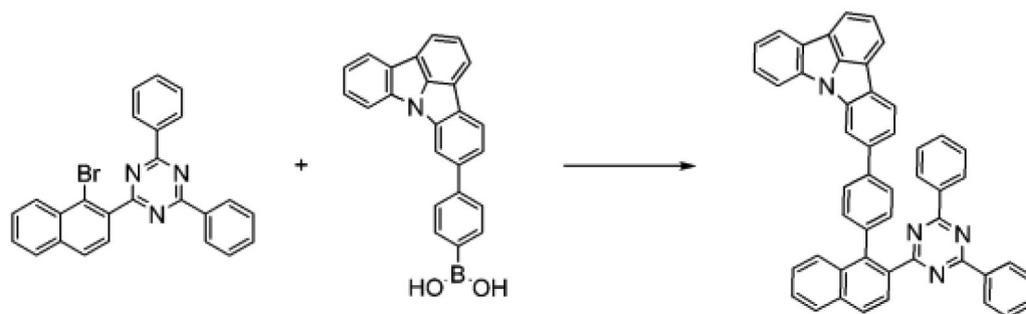
20

【 0 2 6 1 】

< 製造例 2 2 > 化合物 3 - 4 7 の合成

【 0 2 6 2 】

【 化 9 7 】



[化合物 3-1-A]

[化合物 3-47]

30

【 0 2 6 3 】

[化合物 1 - 1 - A] の代わりに [化合物 3 - 1 - A] を用い、(4 - (6 - フェニルピリダジン - 3 - イル) フェニル) ボロン酸の代わりに (4 - (インドロ [3 , 2 , 1 - j k] カルバゾール - 1 0 - イル) フェニル) ボロン酸を用いたことを除き、化合物 1 - 1 の製造方法と同様の方法で化合物 3 - 4 7 を得た。

40

【 0 2 6 4 】

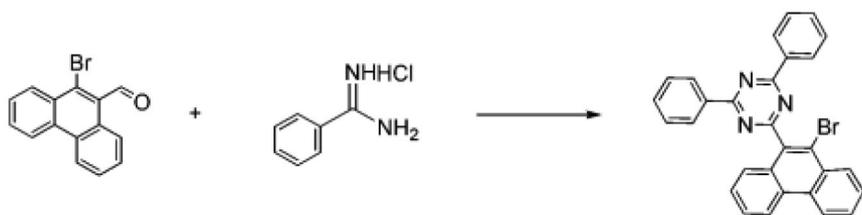
MS : [M + H] ⁺ = 6 7 4

【 0 2 6 5 】

< 製造例 2 3 > 化合物 4 - 4 の合成

【 0 2 6 6 】

【化 9 8】



[化合物 4-1-A]

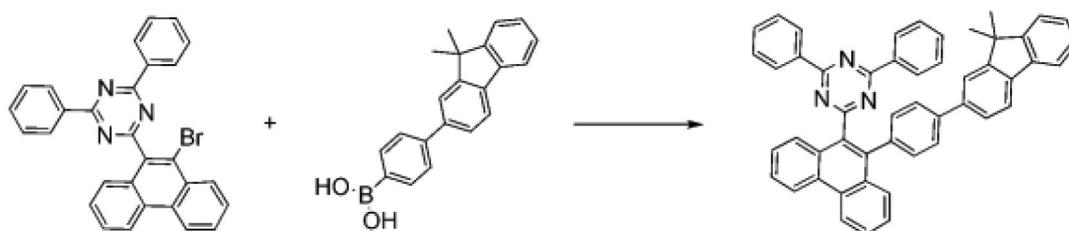
10

【 0 2 6 7】

2 - プロモ - 1 - ナフトアルデヒドの代わりに 10 - プロモフェナントレン - 9 - カルバルデヒドを用いたことを除き、化合物 1 - 1 - A の製造方法と同様の方法で化合物 4 - 1 - A を得た。

【 0 2 6 8】

【化 9 9】



[化合物 4-1-A]

[化合物 4-4]

20

【 0 2 6 9】

[化合物 1 - 1 - A] の代わりに [化合物 4 - 1 - A] を使い、(4 - (6 - フェニルピリダジン - 3 - イル)フェニル)ボロン酸の代わりに(4 - (9,9 - ジメチル - 9H - フルオレン - 2 - イル)フェニル)ボロン酸を用いたことを除き、化合物 1 - 1 の製造方法と同様の方法で化合物 4 - 4 を得た。

30

【 0 2 7 0】

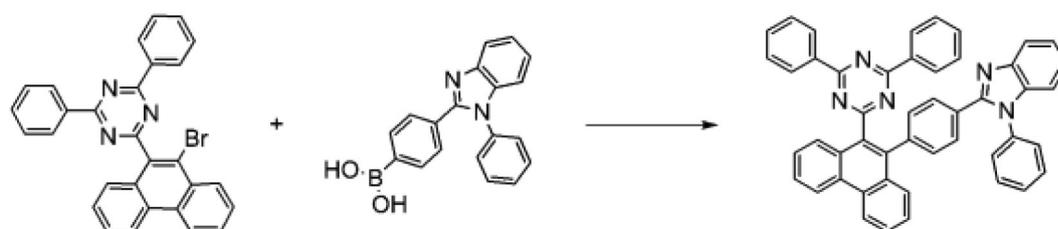
MS : [M + H] ⁺ = 677

【 0 2 7 1】

< 製造例 2 4 > 化合物 4 - 1 2 の合成

【 0 2 7 2】

【化 1 0 0】



[化合物 4-1-A]

[化合物 4-12]

40

【 0 2 7 3】

[化合物 1 - 1 - A] の代わりに [化合物 4 - 1 - A] を使い、(4 - (6 - フェニルピリダジン - 3 - イル)フェニル)ボロン酸の代わりに(4 - (1 - フェニル - 1H - ベ

50

ンゾ〔d〕イミダゾール-2-イル)フェニル)ボロン酸を用いたことを除き、化合物1-1の製造方法と同様の方法で化合物4-12を得た。

【0274】

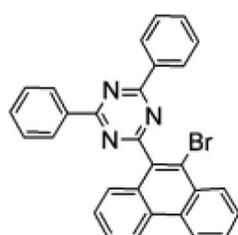
MS: [M+H]⁺ = 677

【0275】

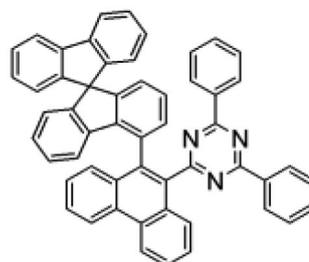
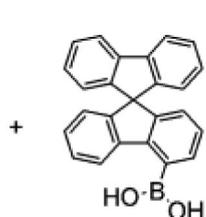
<製造例25>化合物4-37の合成

【0276】

【化101】



【化合物 4-1-A】



【化合物 4-37】

10

【0277】

【化合物1-1-A】の代わりに【化合物4-1-A】を用い、(4-(6-フェニルピリダジン-3-イル)フェニル)ボロン酸の代わりに9,9'-スピロビ[フルオレン]-4-イルボロン酸を用いたことを除き、化合物1-1の製造方法と同様の方法で化合物4-37を得た。

【0278】

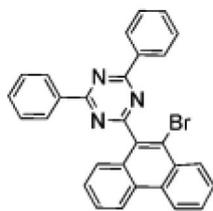
MS: [M+H]⁺ = 723

【0279】

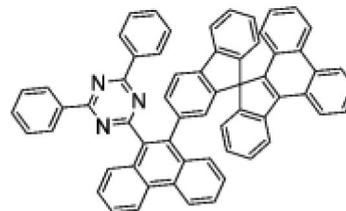
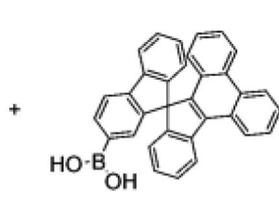
<製造例26>化合物4-51の合成

【0280】

【化102】



【化合物 4-1-A】



【化合物 4-51】

30

【0281】

【化合物1-1-A】の代わりに【化合物4-1-A】を用い、(4-(6-フェニルピリダジン-3-イル)フェニル)ボロン酸の代わりにスピロ[フルオレン-9,9'-インデノ[2,1-b]フェナントレン]-2-イルボロン酸を用いたことを除き、化合物1-1の製造方法と同様の方法で化合物4-51を得た。

【0282】

MS: [M+H]⁺ = 823

【0283】

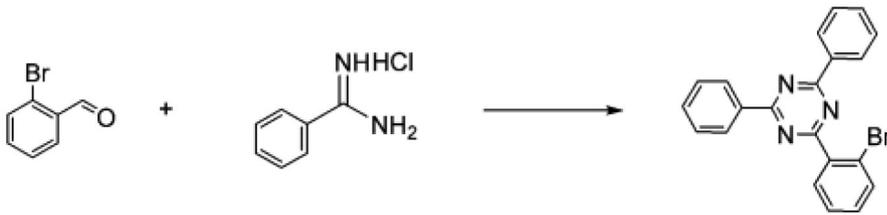
<製造例27>化合物5-10の合成

【0284】

40

50

【化103】



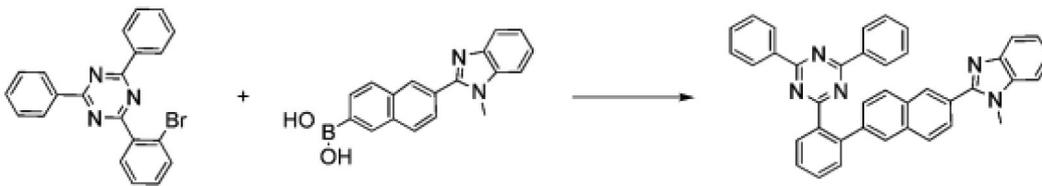
[化合物 5-1-A]

【0285】

2 - プロモ - 1 - ナフトアルデヒドの代わりに2 - プロモベンズアルデヒドを用いたことを除き、化合物 1 - 1 - A の製造方法と同様の方法で化合物 5 - 1 - A を得た。

【0286】

【化104】



[化合物 5-1-A]

[化合物 5-10]

【0287】

[化合物 1 - 1 - A] の代わりに [化合物 5 - 1 - A] を使い、(4 - (6 - フェニルピリダジン - 3 - イル)フェニル)ボロン酸の代わりに(6 - (1 - メチル - 1H - ベンゾ[d]イミダゾール - 2 - イル)ナフタレン - 2 - イル)ボロン酸を用いたことを除き、化合物 1 - 1 の製造方法と同様の方法で化合物 5 - 10 を得た。

【0288】

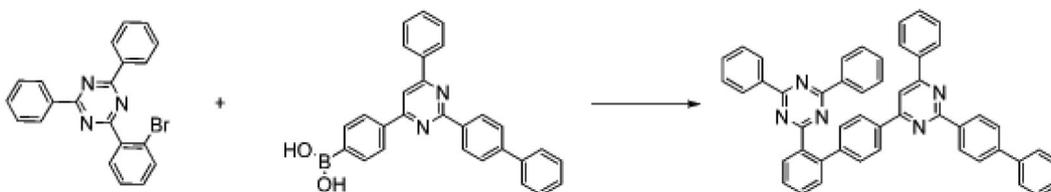
MS : [M + H] ⁺ = 565

【0289】

< 製造例 28 > 化合物 5 - 28 の合成

【0290】

【化105】



[化合物 5-1-A]

[化合物 5-28]

【0291】

[化合物 1 - 1 - A] の代わりに [化合物 5 - 1 - A] を使い、(4 - (6 - フェニルピリダジン - 3 - イル)フェニル)ボロン酸の代わりに(4 - (2 - ([1, 1' - ビフェニル] - 4 - イル) - 6 - フェニルピリミジン - 4 - イル)フェニル)ボロン酸を用いたことを除き、化合物 1 - 1 の製造方法と同様の方法で化合物 5 - 28 を得た。

【0292】

10

20

30

40

50

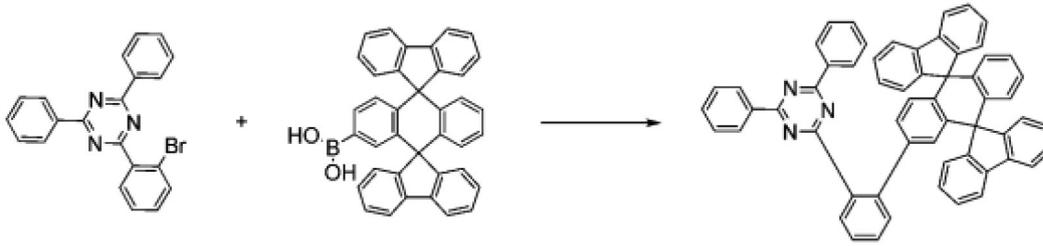
MS : [M + H] ⁺ = 691

【0293】

< 製造例 29 > 化合物 5 - 52 の合成

【0294】

【化106】



[化合物 5-1-A]

[化合物 5-52]

10

【0295】

[化合物 1 - 1 - A] の代わりに [化合物 5 - 1 - A] を用い、(4 - (6 - フェニルピリダジン - 3 - イル)フェニル)ボロン酸の代わりにジスピロ[フルオレン - 9, 9' - アントラセン - 10', 9'' - フルオレン] - 2' - イルボロン酸を用いたことを除き、化合物 1 - 1 の製造方法と同様の方法で化合物 5 - 52 を得た。

20

【0296】

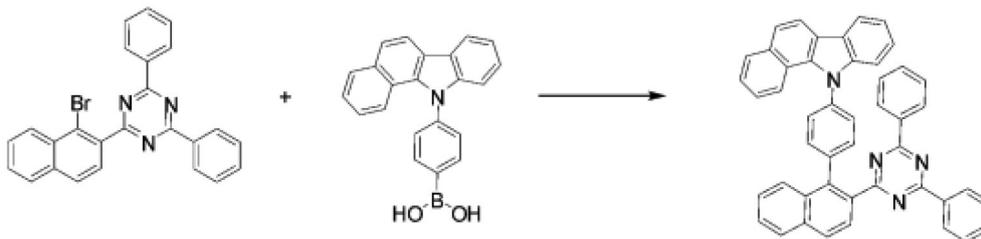
MS : [M + H] ⁺ = 787

【0297】

< 製造例 30 > 化合物 3 - 48 の合成

【0298】

【化107】



[化合物 3-1-A]

[化合物 3-48]

30

【0299】

[化合物 1 - 1 - A] の代わりに [化合物 3 - 1 - A] を用い、(4 - (6 - フェニルピリダジン - 3 - イル)フェニル)ボロン酸の代わりに(4 - (11H - ベンゾ[a]カルバゾール - 11 - イル)フェニル)ボロン酸を用いたことを除き、化合物 1 - 1 の製造方法と同様の方法で化合物 3 - 48 を得た。

40

【0300】

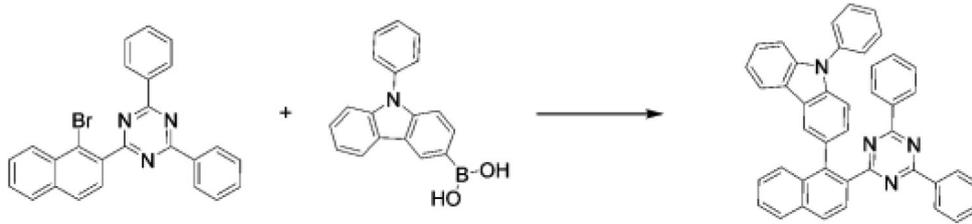
MS : [M + H] ⁺ = 650

【0301】

< 製造例 31 > 化合物 3 - 50 の合成

【0302】

【化108】



[化合物 3-1-A]

[化合物 3-50]

10

【0303】

[化合物 1-1-A]の代わりに[化合物 3-1-A]を用い、(4-(6-フェニルピリダジン-3-イル)フェニル)ボロン酸の代わりに(9-フェニル-9H-カルバゾール-3-イル)ボロン酸を用いたことを除き、化合物 1-1 の製造方法と同様の方法で化合物 3-50 を得た。

【0304】

MS: $[M + H]^+ = 600$

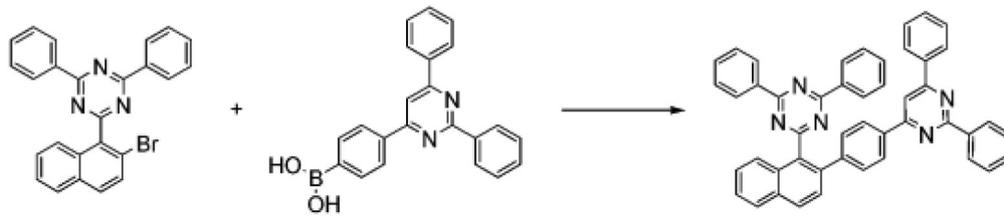
【0305】

< 製造例 32 > 化合物 1-17 の合成

20

【0306】

【化109】



[化合物 1-1-A]

[化合物 1-17]

30

【0307】

(4-(6-フェニルピリダジン-3-イル)フェニル)ボロン酸の代わりに(4-(2,6-ジフェニルピリミジン-4-イル)フェニル)ボロン酸を用いたことを除き、化合物 1-1 の製造方法と同様の方法で化合物 1-17 を得た。

【0308】

MS: $[M + H]^+ = 665$

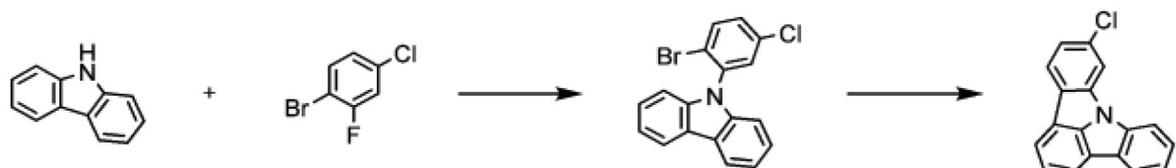
【0309】

< 製造例 33 > 化合物 6-1 の合成

40

【0310】

【化110】



[化合物 6-1-A]

[化合物 6-1-B]

【0311】

50

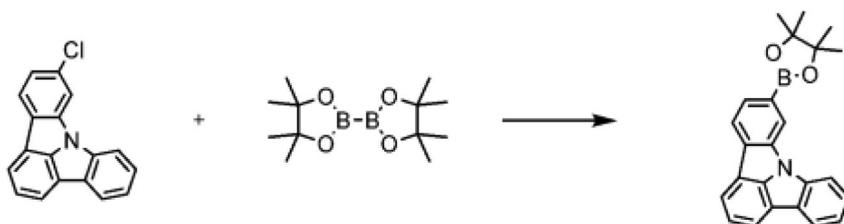
窒素気流下、9H-カルバゾール(10.0g、59.8mmol)、1-ブromo-4-クロロ-2-フルオロベンゼン(1-bromo-4-chloro-2-fluorobenzene)(12.5g、59.8mmol)、ソジウムtert-ブトキシド(Sodium tert-butoxide)(8.6g、89.7mmol)を、ジメチルアセタミド(Dimethylacetamide(DMAc))溶媒240mLに入れて、16時間加熱撹拌した。反応溶液を冷やしてから濾過後、EtOHスラリー精製により、[化合物6-1-A](18.0g、収率86%)を得た。

【0312】

窒素気流下、[化合物6-1-A](18.0g、50.5mmol)、塩化カルシウム(10.5g、75.7mmol)、およびテトラキス(トリフェニルホスフィン)パラジウム(0)(1.7g、1.5mmol)を、テトラヒドロフラン(tetrahydrofuran)溶媒200mLに入れて、1時間加熱撹拌した。反応溶液を冷やしてから濾過後、EtOHスラリー精製により、[化合物6-1-B](12.5g、収率90%)を得た。

【0313】

【化111】



[化合物 6-1-B]

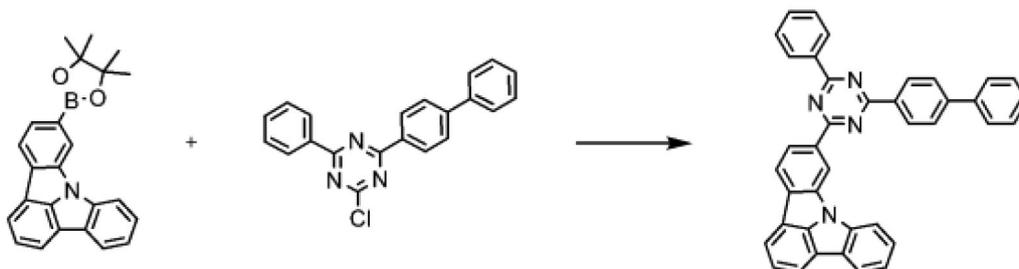
[化合物 6-1-C]

【0314】

窒素気流下、[化合物6-1-B](12.5g、45.3mmol)、4,4',4'',4'',5,5,5',5'-オクタメチル-2,2'-ビ(1,3,2-ジオキサボロラン)(12.7g、49.9mmol)、および酢酸カリウム(9.4g、68.0mmol)を、ジオキササン(dioxane)溶媒200mLに入れて、加熱撹拌する。30分後、ビス(ジベンジリデンアセトン)パラジウム(0)(0.8g、1.4mmol)、トリシクロヘキシルホスフィン(0.8g、2.7mmol)を入れて、3時間加熱撹拌した。反応溶液を冷やし濾過して固体を生成した後、EtOHスラリー精製により、[化合物6-1-C](15.0g、収率90%)を得た。

【0315】

【化112】



[化合物 6-1-C]

[化合物 6-1]

【0316】

窒素気流下、[化合物6-1-C](15.0g、40.8mmol)、2-([1,

10

20

30

40

50

1'-ビフェニル]-4-イル)-4-クロロ-6-フェニル-1,3,5-トリアジン(14.0g、40.8mmol)を、テトラヒドロフラン(tetrahydrofuran)溶媒200mLに入れて、塩化カルシウム(9.4g、68.0mmol)水溶液を入れた後、加熱撹拌する。30分後、テトラキス(トリフェニルホスフィン)パラジウム(0)(1.4g、1.2mmol)を入れて、4時間加熱撹拌した。反応溶液を冷やしてから濾過後、EtOHスラリー精製により、[化合物6-1](20.0g、収率89%)を得た。

【0317】

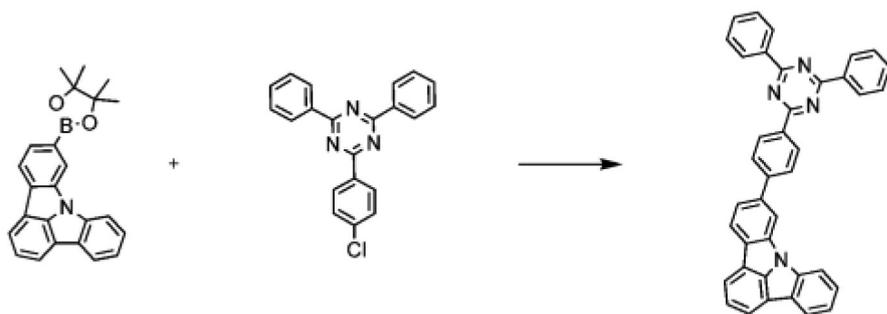
MS: [M+H]⁺ = 549

【0318】

<製造例34>化合物6-2の合成

【0319】

【化113】



[化合物 6-1-C]

[化合物 6-2]

【0320】

2-([1,1'-ビフェニル]-4-イル)-4-クロロ-6-フェニル-1,3,5-トリアジンの代わりに2-(4-クロロフェニル)-4,6-ジフェニル-1,3,5-トリアジンを用いたことを除き、[化合物6-1]の製造方法と同様の方法で化合物6-2を得た。

【0321】

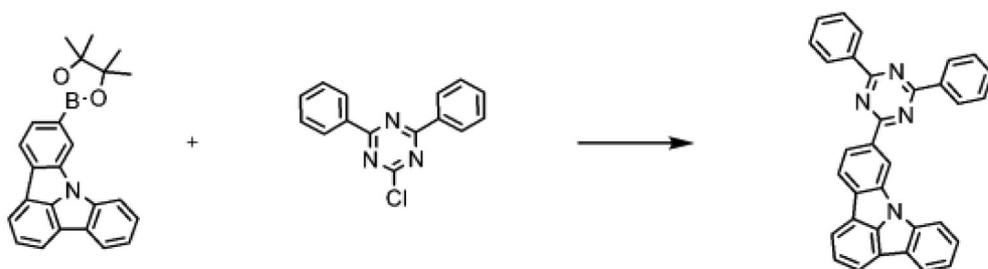
MS: [M+H]⁺ = 549

【0322】

<製造例35>化合物6-3の合成

【0323】

【化114】



[化合物 6-1-C]

[化合物 6-3]

【0324】

2-([1,1'-ビフェニル]-4-イル)-4-クロロ-6-フェニル-1,3,5-トリアジンの代わりに2-クロロ-4,6-ジフェニル-1,3,5-トリアジンを

10

20

30

40

50

用いたことを除き、[化合物 6 - 1] の製造方法と同様の方法で [化合物 6 - 3] を得た。

【 0 3 2 5 】

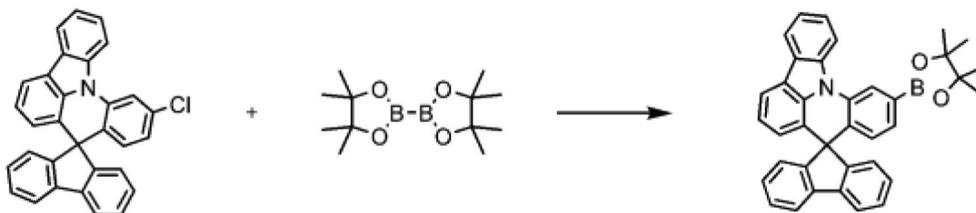
MS : [M + H] ⁺ = 4 7 3

【 0 3 2 6 】

< 製造例 3 6 > 化合物 6 - 4 の合成

【 0 3 2 7 】

【 化 1 1 5 】



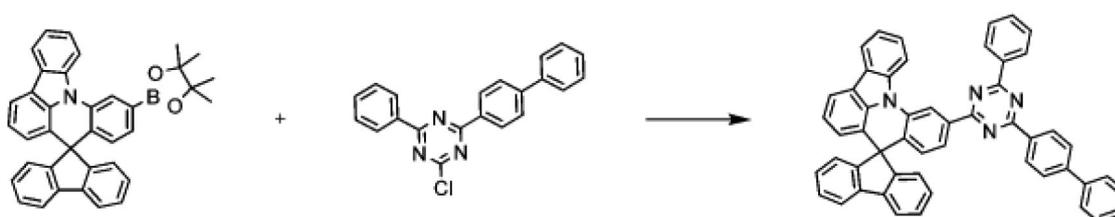
[化合物 6-4-A]

【 0 3 2 8 】

窒素気流下、1,1'-クロロスピロ[フルオレン-9,8'-インドロ[3,2,1-ジ]アクリジン] (15.0 g、34.1 mmol)、4,4,4',4',5,5,5',5'-オクタメチル-2,2'-ビ(1,3,2-ジオキサボロラン) (9.5 g、37.5 mmol)、および酢酸カリウム (6.6 g、68.2 mmol) を、ジオキサソラン (dioxane) 溶媒 200 mL に入れて、加熱撹拌する。30分後、ビス(ジベンジリデンアセトン)パラジウム(0) (0.59 g、1.02 mmol)、トリシクロヘキシルホスフィン (0.55 g、2.04 mmol) を入れて、3時間加熱撹拌した。反応溶液を冷やし濾過して固体を生成した後、EtOHスラリー精製により、[化合物 6 - 4 - A] (17.0 g、収率 94%) を得た。

【 0 3 2 9 】

【 化 1 1 6 】



[化合物 6-4-A]

[化合物 6-4]

【 0 3 3 0 】

窒素気流下、化合物 6 - 4 - A (17.0 g、32.0 mmol)、2 - ([1,1'-ビフェニル] - 4 - イル) - 4 - クロロ - 6 - フェニル - 1,3,5 - トリアジン (11.0 g、32.0 mmol) を、テトラヒドロフラン (tetrahydrofuran) 溶媒 200 mL に入れて、塩化カルシウム (6.6 g、48.0 mmol) 水溶液を入れた後、加熱撹拌する。30分後、テトラキス(トリフェニルホスフィン)パラジウム(0) (1.1 g、0.96 mmol) を入れて、2時間加熱撹拌した。反応溶液を冷やしてから濾過後、EtOHスラリー精製により、[化合物 6 - 4] (19.0 g、収率 84%) を得た。

【 0 3 3 1 】

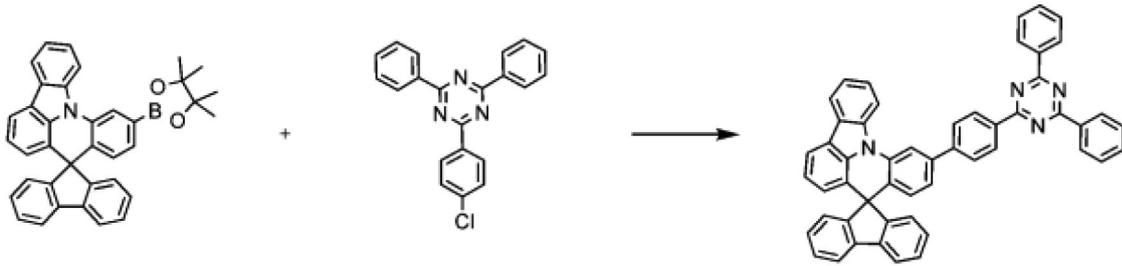
MS : [M + H] ⁺ = 7 1 3

【 0 3 3 2 】

< 製造例 37 > 化合物 6 - 6 の合成

【 0 3 3 3 】

【 化 1 1 7 】



10

[化合物 6-4-A]

[化合物 6-6]

。【 0 3 3 4 】

2 - ([1 , 1' - ビフェニル] - 4 - イル) - 4 - クロロ - 6 - フェニル - 1 , 3 , 5 - トリアジンの代わりに 2 - (4 - クロロフェニル) - 4 , 6 - ジフェニル - 1 , 3 , 5 - トリアジンを用いたことを除き、化合物 6 - 4 の製造方法と同様の方法で [化合物 6 - 6] を得た。

【 0 3 3 5 】

MS : [M + H] ⁺ = 7 1 3

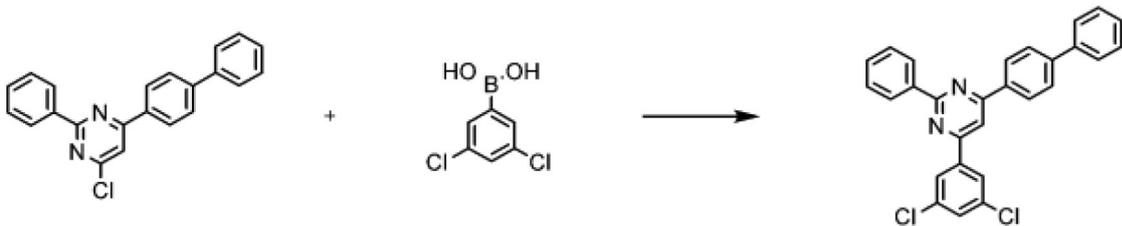
20

【 0 3 3 6 】

< 製造例 38 > 化合物 6 - 7 の合成

【 0 3 3 7 】

【 化 1 1 8 】



30

[化合物 6-7-A]

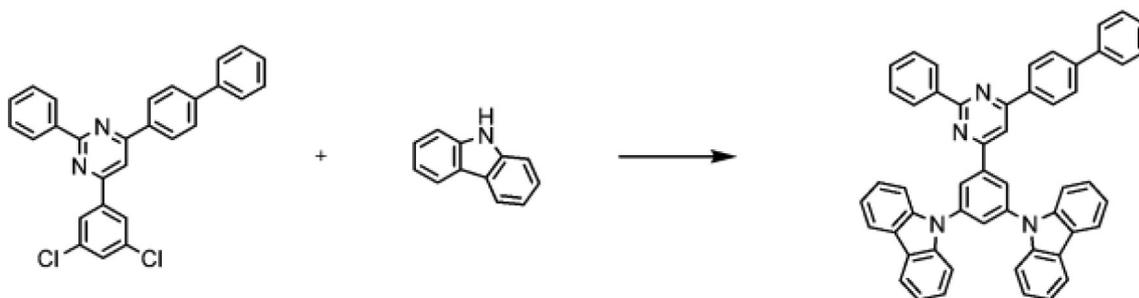
。【 0 3 3 8 】

窒素気流下、4 - ([1 , 1' - ビフェニル] - 4 - イル) - 6 - クロロ - 2 - フェニルピリミジン (2 0 g 、 5 8 . 3 m m o l) 、 (3 , 5 - ジクロロフェニル) ボロン酸 (1 1 . 7 g 、 6 1 . 3 m m o l) 、 および塩化カルシウム (1 2 . 1 g 、 8 7 . 5 m m o l) 水溶液を、テトラヒドロフラン (t e t r a h y d r o f u r a n) 溶媒 2 5 0 m L に入れて、加熱攪拌する。30分後、テトラキス(トリフェニルホスフィン)パラジウム(0) (2 . 0 g 、 1 . 8 m m o l) を入れて、5時間加熱攪拌する。反応溶液を冷やしてから濾過後、E t O H スラリー精製により、[化合物 6 - 7 - A] (2 4 . 0 g 、 収率 9 1 %) を得た。

40

【 0 3 3 9 】

【化 1 1 9】



[化合物 6-7-A]

[化合物 6-7]

10

【 0 3 4 0】

窒素気流下、4 - ([1 , 1' - ビフェニル] - 4 - イル) - 6 - (3 , 5 - ジクロロフェニル) - 2 - フェニルピリミジン (24 . 0 g、52 . 9 mmol)、9H - カルバゾール (18 . 6 g、111 . 2 mmol)、ソジウム tert - ブトキシド (sodium tert - butoxide) (15 . 3 g、158 . 8 mmol) を、キシレン (xylene) 溶媒 240 mL に入れて、加熱撹拌する。ビス (トリ - tert - ブチルホスフィン) パラジウム (0) (Bis (tri - tert - butyl phosphine) palladium (0)) (0 . 54 g、1 . 06 mmol) を入れた後、12 時間加熱撹拌する。反応溶液を冷やしてから濾過後、EtOH スラリー精製により、[化合物 6 - 7] (35 g、収率 92 . 6 %) を得た。

20

【 0 3 4 1】

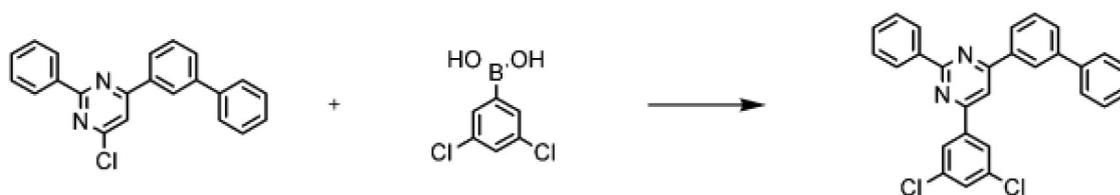
MS : [M + H] ⁺ = 715

【 0 3 4 2】

< 製造例 39 > 化合物 6 - 8 の合成

【 0 3 4 3】

【化 1 2 0】



[化合物 6-8-A]

30

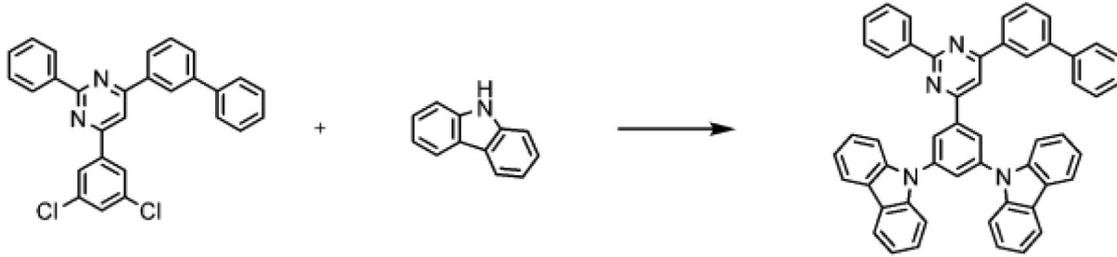
【 0 3 4 4】

4 - ([1 , 1' - ビフェニル] - 4 - イル) - 6 - クロロ - 2 - フェニルピリミジンの代わりに 4 - ([1 , 1' - ビフェニル] - 3 - イル) - 6 - クロロ - 2 - フェニルピリミジンを用いたことを除き、化合物 6 - 7 - A の製造方法と同様の方法で [化合物 6 - 8 - A] を得た。

40

【 0 3 4 5】

【化 1 2 1】



[化合物 6-8-A]

[化合物 6-8]

10

【 0 3 4 6】

[化合物 6 - 7 - A] の代わりに [化合物 6 - 8 - A] を用いたことを除き、化合物 6 - 7 の製造方法と同様の方法で [化合物 6 - 8] (35 g、収率 89.9%) を得た。

【 0 3 4 7】

MS : [M + H] ⁺ = 715

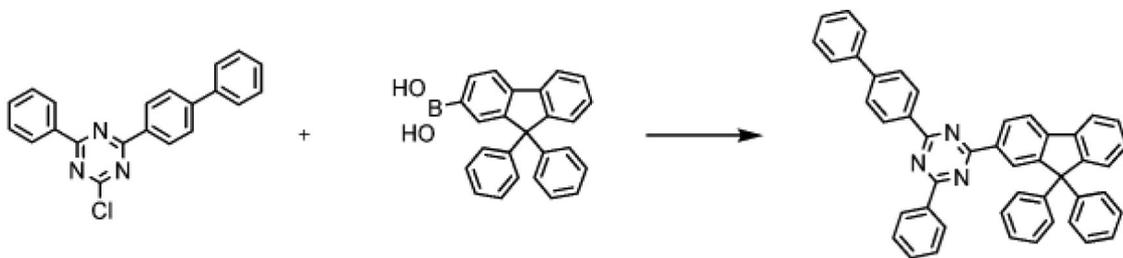
【 0 3 4 8】

< 製造例 4 0 > 化合物 6 - 1 0 の合成

【 0 3 4 9】

20

【化 1 2 2】



[化合物 6-10]

30

【 0 3 5 0】

2 - ([1 , 1' - ビフェニル] - 4 - イル) - 4 - クロロ - 6 - フェニル - 1 , 3 , 5 - トリアジン (10 g、29.1 mmol)、(9,9 - ジフェニル - 9H - フルオレン - 2 - イル) ボロン酸 (11.1 g、30.5 mmol)、塩化カルシウム (8.0 g、58.2 mmol) を、テトラヒドロフラン (tetrahydrofuran) 溶媒 120 mL に入れて、加熱撹拌する。テトラキス(トリフェニルホスフィン)パラジウム(0) (1.0 g、0.87 mmol) を入れた後、6時間加熱撹拌する。反応溶液を冷やしてから濾過後、EtOHスラリー精製により、[化合物 6 - 1 0] (16.5 g、収率 90.7%) を得た。

40

【 0 3 5 1】

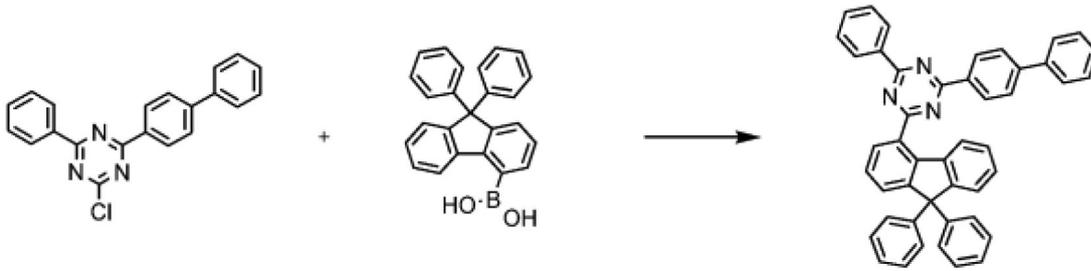
MS : [M + H] ⁺ = 626

【 0 3 5 2】

< 製造例 4 1 > 化合物 6 - 1 1 の合成

【 0 3 5 3】

【化 1 2 3】



【化合物 6-11】

10

【 0 3 5 4】

(9,9-ジフェニル-9H-フルオレン-2-イル)ボロン酸の代わりに(9,9-ジフェニル-9H-フルオレン-4-イル)ボロン酸を用いたことを除き、[化合物6-10]の製造方法と同様の方法で[化合物6-11](16.0g、収率88%)を得た。

【 0 3 5 5】

MS: [M+H]⁺ = 626

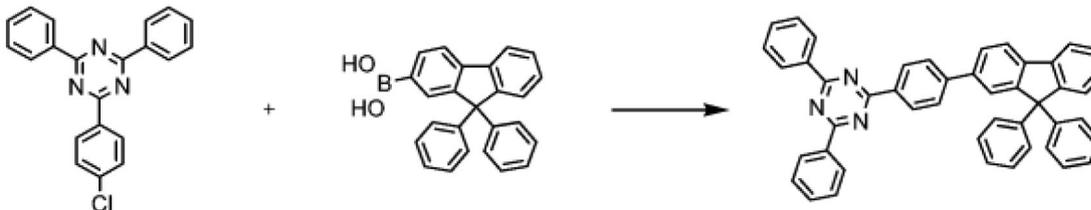
【 0 3 5 6】

< 製造例 4 2 > 化合物 6 - 1 2 の合成

20

【 0 3 5 7】

【化 1 2 4】



【化合物 6-12】

30

【 0 3 5 8】

(2-([1,1'-ビフェニル]-4-イル)-4-クロロ-6-フェニル-1,3,5-トリアジン)の代わりに2-(4-クロロフェニル)-4,6-ジフェニル-1,3,5-トリアジンを除き、[化合物6-10]の製造方法と同様の方法で[化合物6-12](17.0g、収率93%)を得た。

【 0 3 5 9】

MS: [M+H]⁺ = 626

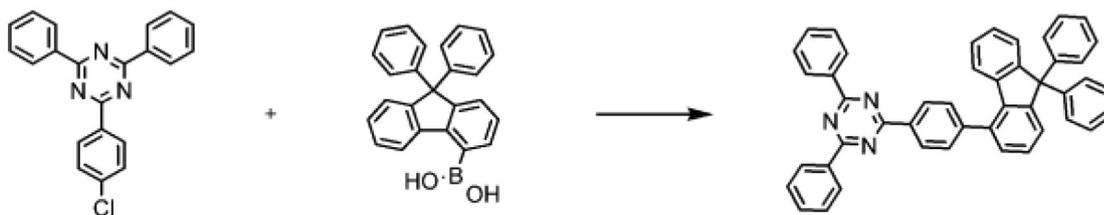
【 0 3 6 0】

< 製造例 4 3 > 化合物 6 - 1 3 の合成

40

【 0 3 6 1】

【化 1 2 5】



[化合物 6-13]

10

【 0 3 6 2】

(2 - ([1, 1'-ビフェニル] - 4 - イル) - 4 - クロロ - 6 - フェニル - 1, 3, 5 - トリアジンの代わりに 2 - (4 - クロロフェニル) - 4, 6 - ジフェニル - 1, 3, 5 - トリアジンを用いたことを除き、[化合物 6 - 1 1] の製造方法と同様の方法で [化合物 6 - 1 3] (16.5 g、収率 90.7%) を得た。

【 0 3 6 3】

MS : [M + H]⁺ = 626

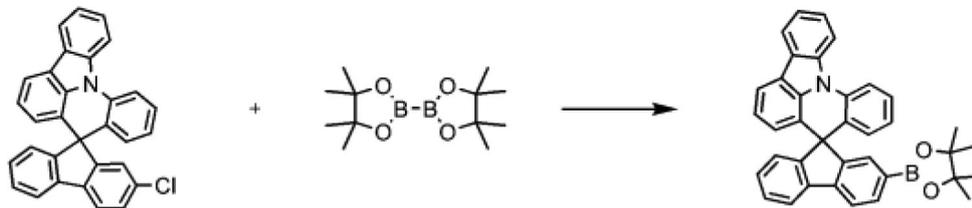
【 0 3 6 4】

< 製造例 4 4 > 化合物 6 - 1 7 の合成

【 0 3 6 5】

20

【化 1 2 6】



[化合物 6-17-A]

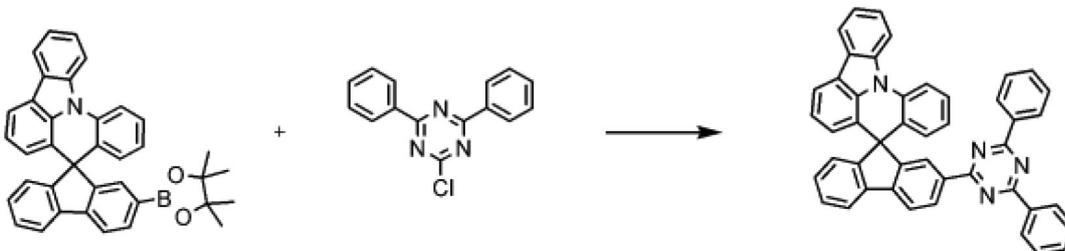
30

【 0 3 6 6】

1 1' - クロロスピロ [フルオレン - 9, 8' - インドロ [3, 2, 1 - ジ] アクリジン] の代わりに 2 - クロロスピロ [フルオレン - 9, 8' - インドロ [3, 2, 1 - ジ] アクリジン] を用いたことを除き、[化合物 6 - 4 - A] の製造方法と同様の方法で [化合物 6 - 1 7 - A] (16.5 g、収率 91%) を得た。

【 0 3 6 7】

【化 1 2 7】



40

[化合物 6-17-A]

[化合物 6-17]

【 0 3 6 8】

[化合物 6 - 4 - A] の代わりに [化合物 6 - 1 7 - A] を用いたことと、2 - ([1, 1'-ビフェニル] - 4 - イル) - 4 - クロロ - 6 - フェニル - 1, 3, 5 - トリアジ

50

ンの代わりに 2 - クロロ - 4 , 6 - ジフェニル - 1 , 3 , 5 - トリアジンを用いたことを除き、[化合物 6 - 4] の製造方法と同様の方法で [化合物 6 - 17] (18 . 0 g、収率 88 %) を得た。

【 0369 】

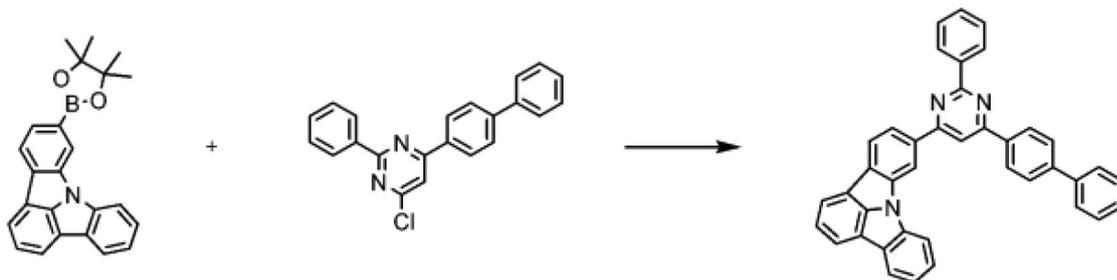
MS : [M + H] ⁺ = 637

【 0370 】

< 製造例 45 > 化合物 6 - 22 の合成

【 0371 】

【化 128 】



[化合物 6-1-C]

[化合物 6-22]

。

【 0372 】

2 - ([1 , 1' - ビフェニル] - 4 - イル) - 4 - クロロ - 6 - フェニル - 1 , 3 , 5 - トリアジンの代わりに 4 - ([1 , 1' - ビフェニル] - 4 - イル) - 6 - クロロ - 2 - フェニルピリミジンを用いたことを除き、[化合物 6 - 1] の製造方法と同様の方法で [化合物 6 - 22] (21 g、収率 94 %) を得た。

【 0373 】

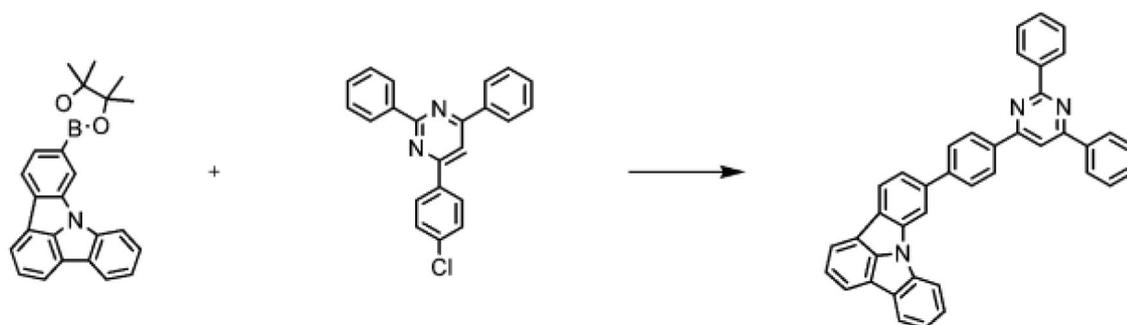
MS : [M + H] ⁺ = 548

【 0374 】

< 製造例 46 > 化合物 6 - 24 の合成

【 0375 】

【化 129 】



[化合物 6-1-C]

[化合物 6-24]

。

【 0376 】

4 - ([1 , 1' - ビフェニル] - 4 - イル) - 6 - クロロ - 2 - フェニルピリミジンの代わりに 4 - (4 - クロロフェニル) - 2 , 6 - ジフェニルピリミジンを用いたことを除き、[化合物 6 - 22] の製造方法と同様の方法で [化合物 6 - 24] (20 . 5 g、収率 91 . 7 %) を得た。

【 0377 】

MS : [M + H] ⁺ = 548

10

20

30

40

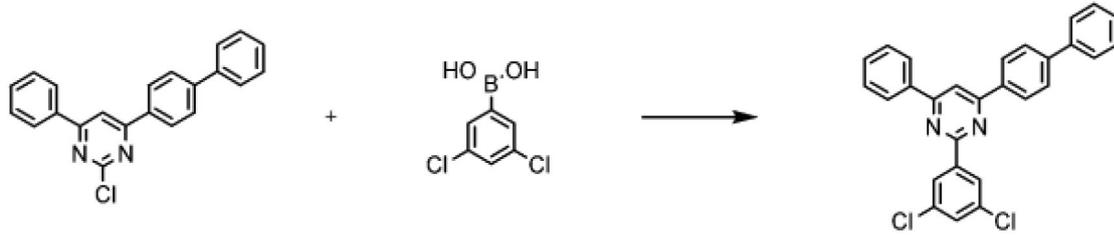
50

【 0 3 7 8 】

< 製造例 4 7 > 化合物 6 - 2 5 の合成

【 0 3 7 9 】

【 化 1 3 0 】



10

[化合物 6-25-A]

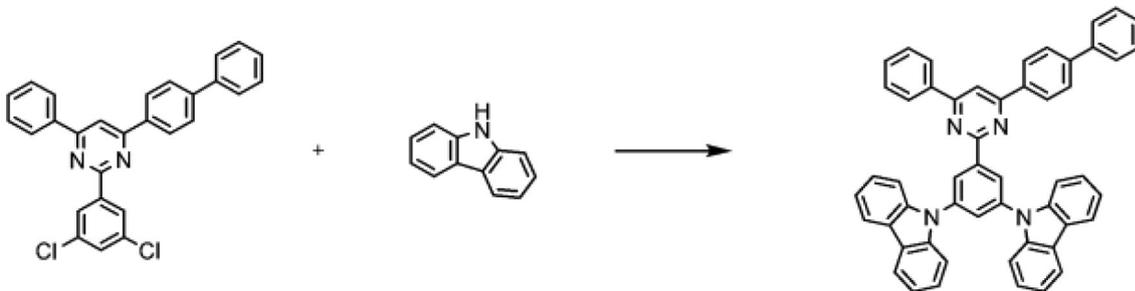
【 0 3 8 0 】

4 - ([1 , 1 ' - ビフェニル] - 4 - イル) - 6 - クロロ - 2 - フェニルピリミジンの代わりに 4 - ([1 , 1 ' - ビフェニル] - 4 - イル) - 2 - クロロ - 6 - フェニルピリミジンを用いたことを除き、化合物 6 - 7 - A の製造方法と同様の方法で [化合物 6 - 2 5 - A] を得た。

【 0 3 8 1 】

20

【 化 1 3 1 】



30

[化合物 6-25-A]

[化合物 6-25]

【 0 3 8 2 】

[化合物 6 - 7 - A] の代わりに [化合物 6 - 2 5 - A] を用いたことを除き、化合物 6 - 7 の製造方法と同様の方法で [化合物 6 - 2 5] (3 5 g 、 収率 8 9 . 9 %) を得た。

【 0 3 8 3 】

MS : [M + H] ⁺ = 7 1 5

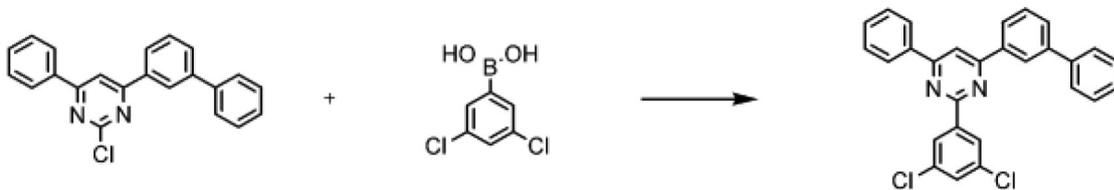
【 0 3 8 4 】

< 製造例 4 8 > 化合物 6 - 2 6 の合成

40

【 0 3 8 5 】

【 化 1 3 2 】



[化合物 6-26-A]

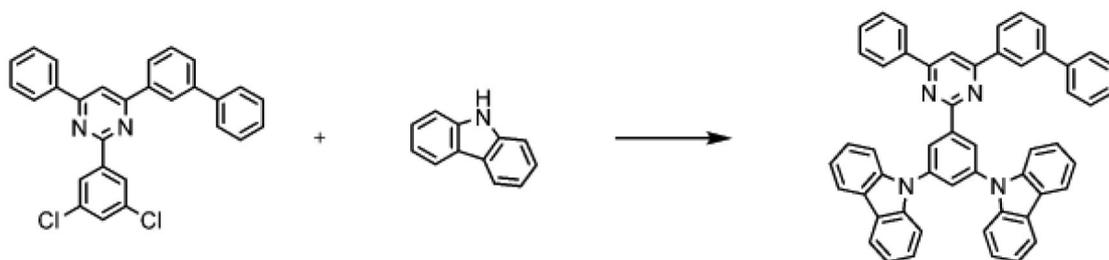
50

。【0386】

4 - ([1 , 1' - ビフェニル] - 4 - イル) - 6 - クロロ - 2 - フェニルピリミジンの代わりに4 - ([1 , 1' - ビフェニル] - 3 - イル) - 2 - クロロ - 6 - フェニルピリミジンを用いたことを除き、化合物6 - 7 - Aの製造方法と同様の方法で [化合物6 - 26 - A] を得た。

【0387】

【化133】



[化合物 6-26-A]

[化合物 6-26]

。【0388】

[化合物6 - 7 - A] の代わりに [化合物6 - 26 - A] を用いたことを除き、化合物6 - 7の製造方法と同様の方法で [化合物6 - 26] (36 . 0 g、収率95%) を得た。

【0389】

MS : [M + H] ⁺ = 715

【0390】

< 実施例 >

【0391】

実施例 1

【0392】

I T O (インジウムスズ酸化物) が 1000 の厚さに薄膜コーティングされたガラス基板 (corning 7059 glass) を、分散剤を溶かした蒸留水に入れて超音波洗浄した。洗剤は Fischer Co . の製品を使用し、蒸留水は Millipore Co . 製品のフィルタ (Filter) で2次濾過した蒸留水を使用した。I T O を30分間洗浄した後、蒸留水で2回繰り返し超音波洗浄を10分間進行させた。蒸留水洗浄が終わった後、イソプロピルアルコール、アセトン、メタノール溶剤の順に超音波洗浄し乾燥させた。

【0393】

こうして用意された I T O 透明電極上に、ヘキサニトリルヘキサアザトリフェニレン (hexanitri le hexaazatri phenylene) を 500 の厚さに熱真空蒸着して、正孔注入層を形成した。その上に、正孔を輸送する物質である H T 1 (400) を真空蒸着した後、発光層としてホスト H 1 とドーパント D 1 の化合物を 300 の厚さに真空蒸着した。前記発光層上に、電子調節層として製造例 2 で製造した化合物 1 - 3 を蒸着した後、電子輸送層として製造例 33 で製造した化合物 6 - 1 と L i Q (L i t h i u m Q u i n o l a t e) を 2 : 1 の重量比で真空蒸着して、250 の厚さに電子注入および輸送層を形成した。

【0394】

前記電子注入および輸送層上に、順次に、12 の厚さにリチウムフルオライド (L i F) と、2,000 の厚さにアルミニウムを蒸着して、陰極を形成した。有機発光素子を製造した。

10

20

30

40

50

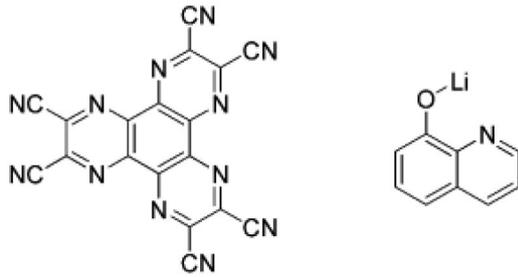
【 0 3 9 5 】

前記過程で、有機物の蒸着速度は0.4～0.7 / secを維持し、陰極のリチウムフルオライドは0.3 / sec、アルミニウムは2 / secの蒸着速度を維持し、蒸着時の真空度は $2 \times 10^{-7} \sim 5 \times 10^{-6}$ torrを維持して、有機発光素子を作製した。

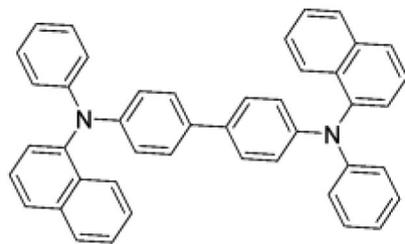
【 0 3 9 6 】

【 化 1 3 4 】

[ヘキサニトリルヘキサアザトリフェニレン][LiQ]

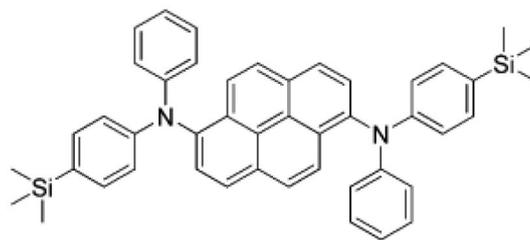
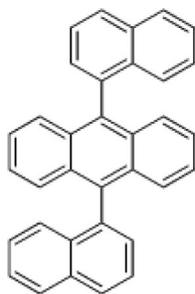


[HT1]



[H1]

[D1]



【 0 3 9 7 】

実施例 2

【 0 3 9 8 】

前記実施例 1 において、電子調節層として化合物 1 - 3 の代わりに化合物 2 - 1 5 を用いたことを除けば、同様に実験した。

【 0 3 9 9 】

実施例 3

【 0 4 0 0 】

前記実施例 1 において、電子調節層として化合物 1 - 3 の代わりに化合物 3 - 3 3 を、電子輸送層として化合物 6 - 1 の代わりに化合物 6 - 2 を用いたことを除けば、同様に実験した。

10

20

30

40

50

【 0 4 0 1 】

実施例 4

【 0 4 0 2 】

前記実施例 1 において、電子調節層として化合物 1 - 3 の代わりに化合物 3 - 3 3 を、電子輸送層として化合物 6 - 1 の代わりに化合物 6 - 4 を用いたことを除けば、同様に実験した。

【 0 4 0 3 】

実施例 5

【 0 4 0 4 】

前記実施例 1 において、電子調節層として化合物 1 - 3 の代わりに化合物 3 - 3 3 を、電子輸送層として化合物 6 - 1 の代わりに化合物 6 - 7 を用いたことを除けば、同様に実験した。

10

【 0 4 0 5 】

実施例 6

【 0 4 0 6 】

前記実施例 1 において、電子調節層として化合物 1 - 3 の代わりに化合物 3 - 3 3 を、電子輸送層として化合物 6 - 1 の代わりに化合物 6 - 1 1 を用いたことを除けば、同様に実験した。

【 0 4 0 7 】

実施例 7

【 0 4 0 8 】

前記実施例 1 において、電子調節層として化合物 1 - 3 の代わりに化合物 3 - 3 4 を、電子輸送層として化合物 6 - 1 の代わりに化合物 6 - 4 を用いたことを除けば、同様に実験した。

20

【 0 4 0 9 】

実施例 8

【 0 4 1 0 】

前記実施例 1 において、電子調節層として化合物 1 - 3 の代わりに化合物 3 - 3 4 を、電子輸送層として化合物 6 - 1 の代わりに化合物 6 - 7 を用いたことを除けば、同様に実験した。

30

【 0 4 1 1 】

実施例 9

【 0 4 1 2 】

前記実施例 1 において、電子調節層として化合物 1 - 3 の代わりに化合物 3 - 3 6 を、電子輸送層として化合物 6 - 1 の代わりに化合物 6 - 7 を用いたことを除けば、同様に実験した。

【 0 4 1 3 】

実施例 1 0

【 0 4 1 4 】

前記実施例 1 において、電子調節層として化合物 1 - 3 の代わりに化合物 3 - 3 6 を、電子輸送層として化合物 6 - 1 の代わりに化合物 6 - 8 を用いたことを除けば、同様に実験した。

40

【 0 4 1 5 】

実施例 1 1

【 0 4 1 6 】

前記実施例 1 において、電子調節層として化合物 1 - 3 の代わりに化合物 3 - 3 6 を、電子輸送層として化合物 6 - 1 の代わりに化合物 6 - 1 1 を用いたことを除けば、同様に実験した。

【 0 4 1 7 】

実施例 1 2

50

【 0 4 1 8 】

前記実施例 1 において、電子調節層として化合物 1 - 3 の代わりに化合物 3 - 3 8 を、電子輸送層として化合物 6 - 1 の代わりに化合物 6 - 7 を用いたことを除けば、同様に実験した。

【 0 4 1 9 】

実施例 1 3

【 0 4 2 0 】

前記実施例 1 において、電子調節層として化合物 1 - 3 の代わりに化合物 3 - 3 9 を、電子輸送層として化合物 6 - 1 の代わりに化合物 6 - 7 を用いたことを除けば、同様に実験した。

10

【 0 4 2 1 】

実施例 1 4

【 0 4 2 2 】

前記実施例 1 において、電子調節層として化合物 1 - 3 の代わりに化合物 4 - 1 9 を、電子輸送層として化合物 6 - 1 の代わりに化合物 6 - 1 0 を用いたことを除けば、同様に実験した。

【 0 4 2 3 】

実施例 1 5

【 0 4 2 4 】

前記実施例 1 において、電子調節層として化合物 1 - 3 の代わりに化合物 5 - 2 7 を、電子輸送層として化合物 6 - 1 の代わりに化合物 6 - 2 4 を用いたことを除けば、同様に実験した。

20

【 0 4 2 5 】

比較例 1

【 0 4 2 6 】

前記実施例 1 において、電子調節層の化合物を用いず、電子輸送層として化合物 6 - 2 を用いたことを除けば、同様に実験した。

【 0 4 2 7 】

比較例 2

【 0 4 2 8 】

前記実施例 1 において、電子調節層の化合物を用いず、電子輸送層として化合物 6 - 4 を用いたことを除けば、同様に実験した。

30

【 0 4 2 9 】

比較例 3

【 0 4 3 0 】

前記実施例 1 において、電子調節層の化合物を用いず、電子輸送層として化合物 6 - 7 を用いたことを除けば、同様に実験した。

【 0 4 3 1 】

比較例 4

【 0 4 3 2 】

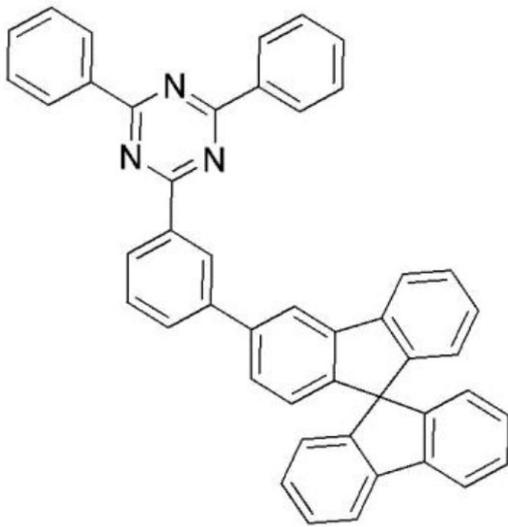
前記実施例 1 において、電子調節層として化合物 1 - 3 の代わりに化合物 [E T 1] を、電子輸送層として化合物 6 - 1 の代わりに化合物 6 - 4 を用いたことを除けば、同様に実験した。

40

【 0 4 3 3 】

【化 1 3 5】

[ET 1]



10

。

20

【0 4 3 4】

比較例 5

【0 4 3 5】

前記実施例 1 において、電子調節層として化合物 1 - 3 の代わりに化合物 [ET 1] を、電子輸送層として化合物 6 - 1 の代わりに化合物 6 - 7 を用いたことを除けば、同様に実験した。

【0 4 3 6】

比較例 6

【0 4 3 7】

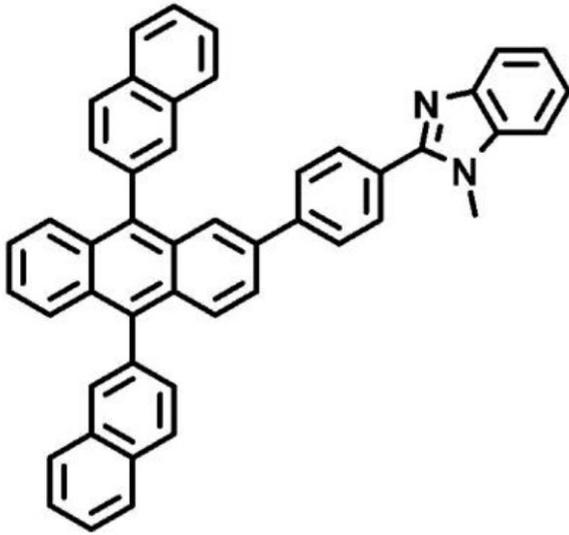
前記実施例 1 において、電子調節層として化合物 1 - 3 の代わりに化合物 3 - 3 3 を、電子輸送層として化合物 6 - 1 の代わりに化合物 [ET 2] を用いたことを除けば、同様に実験した。

30

【0 4 3 8】

【化 1 3 6】

[ET 2]



10

。

20

【0 4 3 9】

比較例 7

【0 4 4 0】

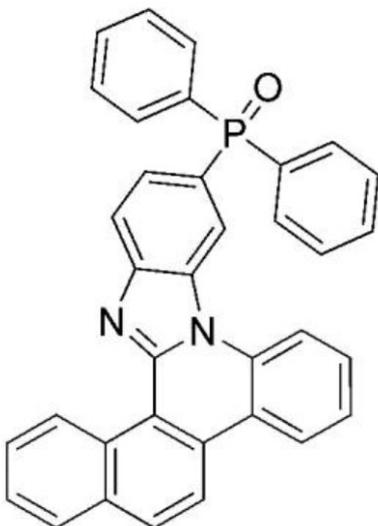
前記実施例 1 において、電子調節層として化合物 1 - 3 の代わりに化合物 3 - 3 6 を、電子輸送層として化合物 6 - 1 の代わりに化合物 [E T 3] を用いたことを除けば、同様に実験した。

【0 4 4 1】

【化 1 3 7】

[ET 3]

30



40

。

【0 4 4 2】

前記実施例 1 ~ 1 5 および比較例 1 ~ 比較例 7 の有機発光素子を、 $10 \text{ mA} / \text{cm}^2$ の電流密度で駆動電圧と発光効率を測定し、 $20 \text{ mA} / \text{cm}^2$ の電流密度で初期輝度対比 9

50

8 % になる時間 (L T 9 8) を測定した。その結果を下記表 1 に示した。

【 0 4 4 3 】

【表 1】

実施例 10mA/cm ²	化合物 (調節層/輸送層)	電圧 (V)	電流効率 (cd/A)	色座標 (x, y)	Life Time (98 at 20mA/cm ²)
実施例 1	1-3 / 6-1	3.94	5.19	(0.137, 0.127)	40
実施例 2	2-15/ 6-1	4.05	5.07	(0.137, 0.128)	38
実施例 3	3-33/ 6-2	3.89	5.28	(0.138, 0.127)	44
実施例 4	3-33/ 6-4	3.91	5.30	(0.137, 0.126)	42
実施例 5	3-33/ 6-7	3.89	5.39	(0.136, 0.127)	44
実施例 6	3-33/ 6-11	3.93	5.26	(0.136, 0.126)	41
実施例 7	3-34/ 6-4	3.91	5.31	(0.136, 0.126)	40
実施例 8	3-34/ 6-7	3.90	5.40	(0.136, 0.127)	43
実施例 9	3-36/ 6-7	3.92	5.38	(0.136, 0.126)	40
実施例 10	3-36/ 6-8	3.91	5.35	(0.137, 0.127)	39
実施例 11	3-36/ 6-11	3.90	5.37	(0.137, 0.127)	37
実施例 12	3-38/ 6-7	4.00	5.20	(0.136, 0.127)	36
実施例 13	3-39/ 6-7	3.95	5.19	(0.137, 0.126)	38
実施例 14	4-19/ 6-10	4.06	5.09	(0.137, 0.127)	37
実施例 15	5-27/ 6-24	4.03	5.07	(0.136, 0.127)	36
比較例 1	- / 6-2	4.13	4.86	(0.140, 0.129)	26
比較例 2	- / 6-4	4.14	4.92	(0.139, 0.130)	23
比較例 3	- / 6-7	4.16	4.90	(0.139, 0.130)	28
比較例 4	ET 1 / 6-4	4.08	4.94	(0.140, 0.130)	22
比較例 5	ET 1 / 6-7	4.12	4.92	(0.139, 0.130)	26
比較例 6	3-33 / ET 2	4.17	4.89	(0.139, 0.130)	25
比較例 7	3-36 / ET 3	4.19	4.88	(0.139, 0.130)	27

【符号の説明】

【 0 4 4 4 】

- 1 0 1 : 基板
- 2 0 1 : 陽極
- 3 0 1 : 発光層
- 4 0 1 : 電子調節層
- 5 0 1 : 電子輸送層
- 6 0 1 : 陰極

10

20

30

【 図 1 】

[도1]

601
501
401
301
201
101

フロントページの続き

(51)Int.Cl.		F I	
C 0 7 D 487/06	(2006.01)	C 0 7 D	403/10
C 0 7 D 471/10	(2006.01)	C 0 7 D	487/06
C 0 9 K 11/06	(2006.01)	C 0 7 D	471/10 1 0 1
		C 0 9 K	11/06 6 9 0
		C 0 9 K	11/06 6 6 0

- (72)発明者 ホ、ジュンオ
大韓民国・ソウル・ヨンドゥンポ - グ・ヨイ - デロ・1 2 8 エルジー・ケム・リミテッド内
- (72)発明者 ジャン、ブンジェ
大韓民国・ソウル・ヨンドゥンポ - グ・ヨイ - デロ・1 2 8 エルジー・ケム・リミテッド内
- (72)発明者 ホ、ドン ウク
大韓民国・ソウル・ヨンドゥンポ - グ・ヨイ - デロ・1 2 8 エルジー・ケム・リミテッド内
- (72)発明者 ジュン、ミン ウ
大韓民国・ソウル・ヨンドゥンポ - グ・ヨイ - デロ・1 2 8 エルジー・ケム・リミテッド内

審査官 大竹 秀紀

- (56)参考文献 韓国公開特許第10 - 2015 - 0090836 (KR, A)
韓国登録特許第10 - 1560102 (KR, B1)
特表2014 - 503502 (JP, A)
特開2015 - 083566 (JP, A)
国際公開第2014 / 094963 (WO, A1)
国際公開第2015 / 014434 (WO, A1)
韓国公開特許第10 - 2015 - 0115622 (KR, A)
特開2016 - 092412 (JP, A)

- (58)調査した分野(Int.Cl. , DB名)
H 0 1 L 5 1 / 5 0
C A p l u s / R E G I S T R Y (S T N)