

(19) 日本国特許庁(JP)

(12) 特 許 公 報(B2)

(11) 特許番号

特許第6228979号
(P6228979)

(45) 発行日 平成29年11月8日(2017.11.8)

(24) 登録日 平成29年10月20日(2017.10.20)

(51) Int.Cl.	F I
C O 7 D 471/04 (2006.01)	C O 7 D 471/04 1 O 2
C O 7 D 471/14 (2006.01)	C O 7 D 471/14 1 O 1
C O 7 D 471/22 (2006.01)	C O 7 D 471/22 C S P
C O 7 D 495/14 (2006.01)	C O 7 D 495/14 D
H O 1 L 51/50 (2006.01)	H O 5 B 33/14 B

請求項の数 7 (全 65 頁) 最終頁に続く

(21) 出願番号 特願2015-526456 (P2015-526456)	(73) 特許権者 504408236 ドゥーサン コーポレイション 大韓民国 ソウル 04563、チュン グ、チャンチュン ダン-ロ、275
(86) (22) 出願日 平成25年3月27日(2013.3.27)	(74) 代理人 110000729 特許業務法人 ユニアス国際特許事務所
(65) 公表番号 特表2015-531758 (P2015-531758A)	(72) 発明者 キム、フェ ムン 大韓民国 キョンギド 442-150 、スウォン-シ、パルダルーグ、ファソ ードン、ブルーミング プルソブ アパー トメント、119-1402
(43) 公表日 平成27年11月5日(2015.11.5)	(72) 発明者 ベク、ヨン ミ 大韓民国 キョンギド 448-737 、ヨンイン-シ、スジ-グ、ソンボクド ン、ダエウ プルジオ、105-1104 最終頁に続く
(86) 国際出願番号 PCT/KR2013/002526	
(87) 国際公開番号 W02014/025114	
(87) 国際公開日 平成26年2月13日(2014.2.13)	
審査請求日 平成27年4月3日(2015.4.3)	
(31) 優先権主張番号 10-2012-0087997	
(32) 優先日 平成24年8月10日(2012.8.10)	
(33) 優先権主張国 韓国 (KR)	
(31) 優先権主張番号 10-2012-0103937	
(32) 優先日 平成24年9月19日(2012.9.19)	
(33) 優先権主張国 韓国 (KR)	

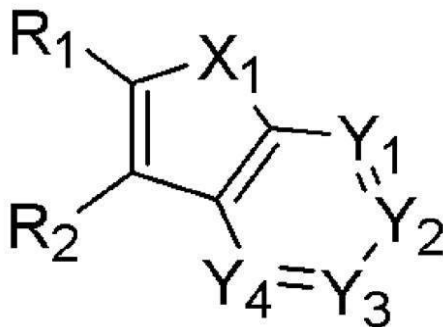
(54) 【発明の名称】 有機発光化合物及びこれを用いた有機電界発光素子

(57) 【特許請求の範囲】

【請求項1】

下記の化1で示される化合物：

【化1】



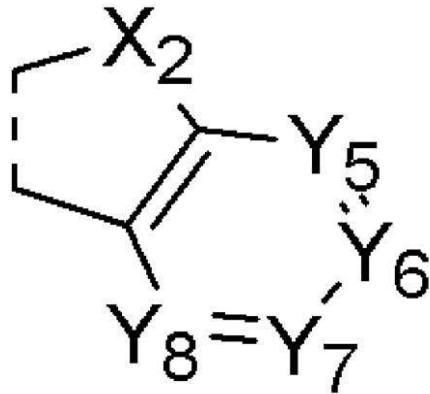
(化1)

式中、

Y₁ 乃至 Y₄ は、互いに、同一又は異なっており、それぞれ独立に、N、CR₃ から選
択され、

Y₁ と Y₂、Y₂ と Y₃、又は Y₃ と Y₄ のうちの少なくとも1つは、CR₃ として、
下記化2で示される縮合環を形成し；

【化 2】



10

(化 2)

破線は、化 1 で示される化合物との縮合部位を指し；

Y_5 乃至 Y_8 は、互いに、同一又は異なっており、それぞれ独立に、 N 、 CR_4 から選択され、少なくとも Y_1 乃至 Y_8 のうち 1 つは N であって、

X_1 は、 S 、または、 $N(Ar_1)$ であり、

X_2 は、 $N(Ar_1)$ 、または、 $C(Ar_2)(Ar_3)$ から選択され、ここで、 X_1 及び X_2 のうちの少なくとも 1 つは、 $N(Ar_1)$ であり、

R_1 乃至 R_4 は、互いに、同一又は異なっており、それぞれ独立に、水素、および、置換もしくは非置換の $C_6 \sim C_{60}$ のアリール基からなる群から選択され、隣接する R_4 同士がそれぞれが結合する炭素原子と一緒になって縮合環を形成し、又は、形成しておらず；

20

Ar_1 乃至 Ar_3 は、互いに、同一又は異なっており、それぞれ独立に、 $C_1 \sim C_{40}$ のアルキル基、置換もしくは非置換の $C_6 \sim C_{60}$ のアリール基、および、核原子数 5 乃至 60 のヘテロアリール基からなる群から選択され、

ただし、 X_1 または X_2 の両方が $N(Ar_1)$ である場合、複数の Ar_1 基の少なくとも 1 つは核原子数 5 乃至 60 のヘテロアリール基であり；

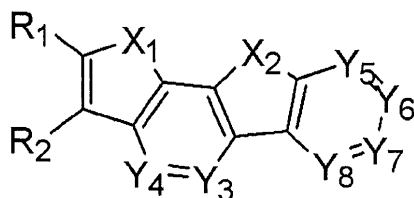
前記 $C_1 \sim C_{40}$ のアルキル基、 $C_6 \sim C_{60}$ のアリール基、および、核原子数 5 乃至 60 のヘテロアリール基は、それぞれ独立に、 $C_6 \sim C_{60}$ のアリール基、および、核原子数 5 乃至 60 のヘテロアリール基からなる群から選択された 1 つ以上の置換基に置換されることができる。

30

【請求項 2】

前記化 1 で示される化合物は、下記の化 3 乃至化 8 のうちのいずれか 1 つで示されることを特徴とする請求項 1 に記載の化合物；

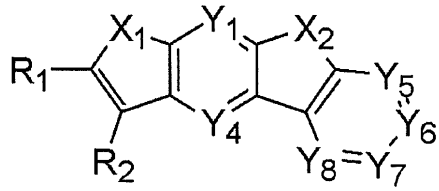
【化 3】



40

(化 3)

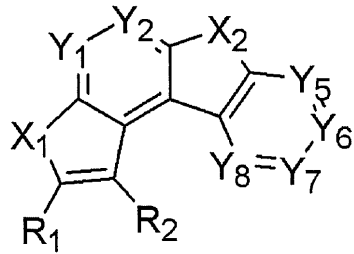
【化4】



(化4)

【化5】

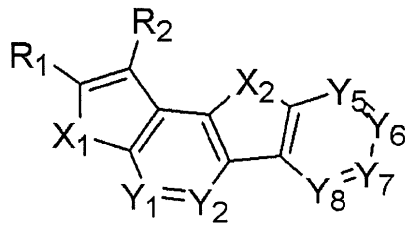
10



(化5)

【化6】

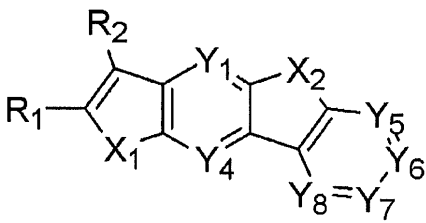
20



(化6)

【化7】

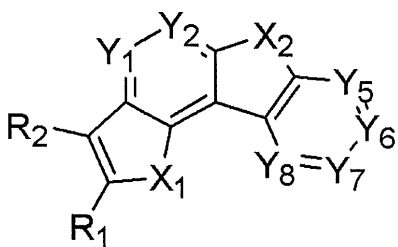
30



(化7)

【化8】

40



50

(化8)

式中、 X_1 及び X_2 、 Y_1 乃至 Y_8 、 R_1 及び R_2 は、請求項1における定義と同じである。

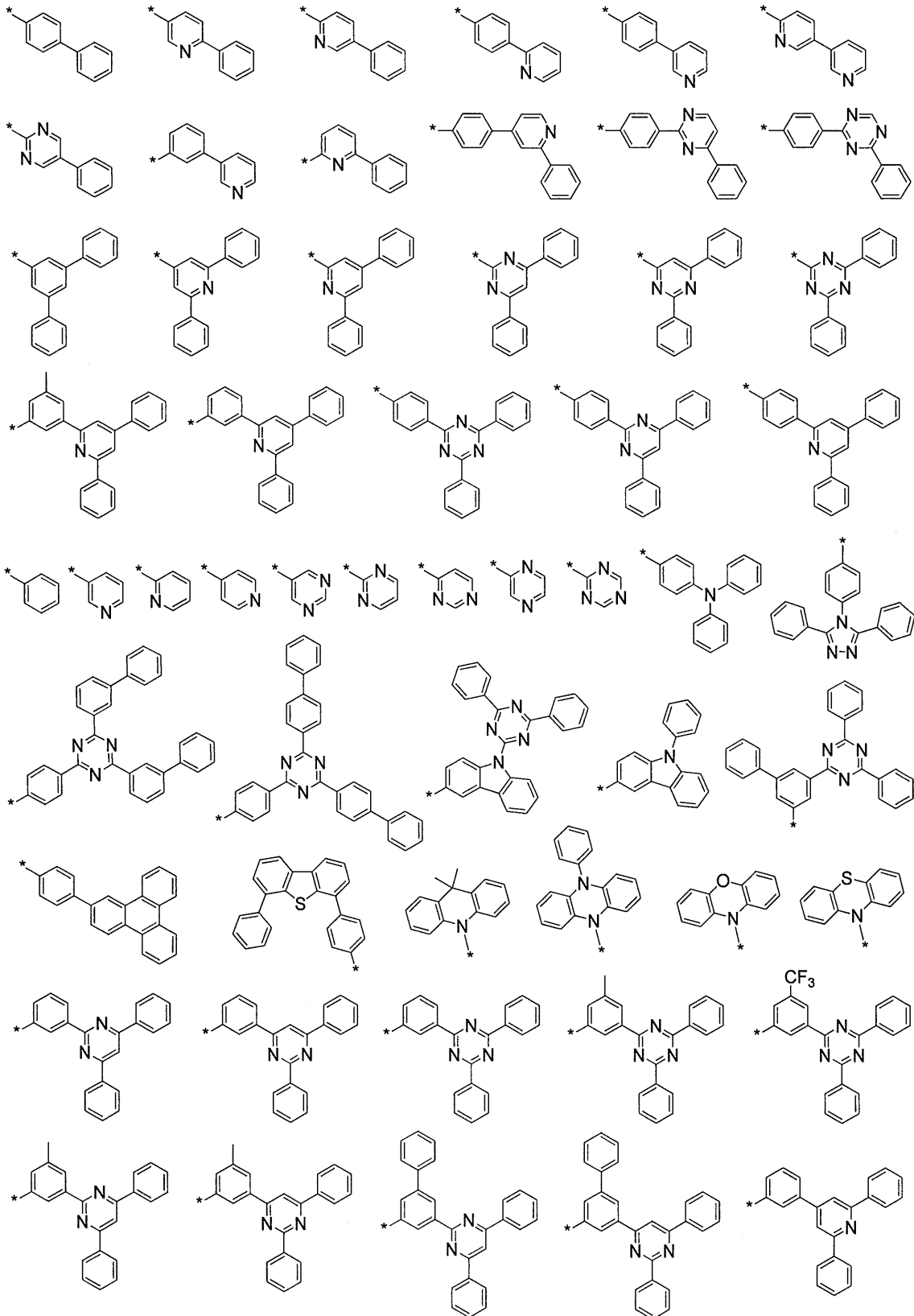
【請求項3】

前記 X_1 及び X_2 は、いずれも $N(Ar_1)$ であることを特徴とする請求項2に記載の化合物。

【請求項4】

前記 Ar_1 乃至 Ar_3 は、下記の置換体群から選択されるものであることを特徴とする請求項1に記載の化合物：

【化 9】



【請求項 5】

(i) 陽極、(ii) 陰極、及び (iii) 前記陽極と陰極との間に介在した 1 層以上の有機物層を含む有機電界発光素子であって、

前記有機物層のうちの少なくとも 1 層は、請求項 1 乃至 4 のいずれか 1 項に記載の化合物を含むことを特徴とする有機電界発光素子。

【請求項 6】

前記化合物を含む有機物層は、正孔注入層、正孔輸送層、及び発光層からなる群から選択されるものであることを特徴とする請求項 5 に記載の有機電界発光素子。

【請求項 7】

前記化合物は、発光層の燐光ホストとして使用されることを特徴とする請求項 5 に記載の有機電界発光素子。

【発明の詳細な説明】

【技術分野】

【0001】

本発明は、新規な有機発光化合物及びこれを用いた有機電界発光素子に関し、より詳しくは、正孔注入及び輸送能、発光能などに優れた新規なインドール(indole)系化合物、並びに、これを 1 層以上の有機物層に含むことで、発光効率、駆動電圧、寿命などの特性が向上した、有機電界発光素子に関する。

10

【背景技術】

【0002】

1950年代における Bernanose による有機薄膜発光の観測を始点として、1965年にアントラセン単結晶を用いた青色の電気発光に繋がる有機電界発光(Electroluminescent、EL)素子(以下、「有機EL素子」と略する)に関する研究は、1987年にタング(Tang)らにより、正孔層と発光層との機能層に分けた積層構造の有機EL素子が提示されている。現在、有機EL素子の高効率及び長寿命を

20

【0003】

有機EL素子において両電極の間に電圧をかけると、陽極からは正孔が有機物層に注入され、陰極からは電子が有機物層に注入される。注入された正孔と電子とが結合する時に励起子(exciton)が形成され、この励起子が底状態に遷移する時に発光するようになる。有機物層に使用される材料は、その機能によって、発光物質、正孔注入物質、正孔輸送物質、電子輸送物質、電子注入物質などに分類することができる。

有機EL素子の発光層形成材料は、発光色によって、青色、緑色、赤色の発光物質に区分される。その他、より良好な天然色を具現するための発光材料として、黄色及び橙色の発光材料が使用されている。なお、色純度の増加とエネルギー転移を通じて発光効率を向上させるため、発光材料として、ホスト/ドーパント(dopant)系を使用することが可能である。ドーパント材料としては、有機物質を使用する蛍光ドーパントと、Ir、Ptなどの重原子が含まれた金属錯体化合物を使用する燐光ドーパントとに分類することができる。燐光材料の開発は、理論的に、蛍光に比べて、発光効率を4倍も向上させることができるため、燐光ドーパントだけでなく、燐光ホスト材料についても関心が集まっている。

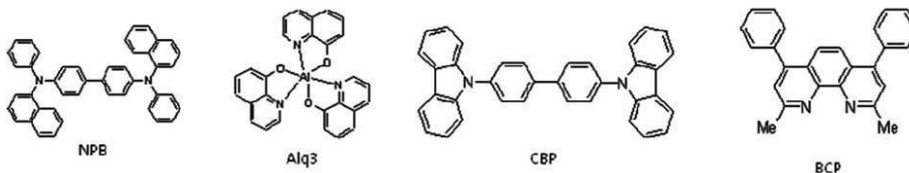
30

【0004】

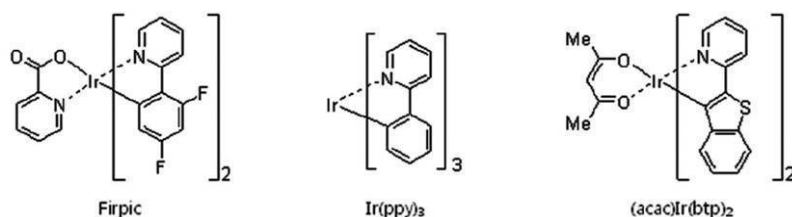
現在、正孔輸送層、正孔遮断層、電子輸送層としては、下記の式で示されるNPB、BCP、Alq₃などが広く知られており、発光材料としては、アントラセン誘導体などが、蛍光ドーパント/ホスト材料として報告されている。特に、効率向上の面から見て大きな長所を持っている燐光材料としては、Firpic、Ir(ppy)₃、(acac)Ir(btpp)₂などのIrを含む金属錯体化合物が、青色、緑色、赤色のドーパント材料として使用されている。現在は、BCPが、燐光ホスト材料として優れた特性を示している。

40

【化 1】



50



しかし、従来の材料は、発光特性の面では、有利な点があるが、ガラス転移温度が低く、熱的安定性に劣るため、有機EL素子における寿命の面では、満足するものではない。

10

【発明の概要】

【発明が解決しようとする課題】

【0005】

本発明は、上記のような課題を解決するために案出されたものであって、発光層として使用されることで素子の駆動電圧、発光効率などを向上させることができる、新規なインドール系物質及びこれを用いた有機電界発光素子を提供することを目的としている。

【0006】

なお、本発明の他の技術的課題は、上記で言及した技術的課題に制限されるのではなく、言及していない他の技術的課題については、以下の記載内容から、本発明の属する技術分野で通常の知識を有する者であれば、明確に理解できるだろう。

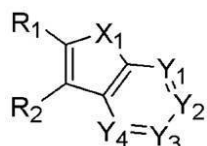
20

【課題を解決するための手段】

【0007】

上記の目的を達成するため、本発明は、下記の化1で示される化合物を提供する。

【化2】



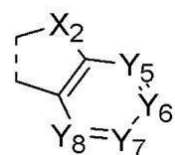
30

式中、

Y₁乃至Y₄は、互いに、同一又は異なっており、それぞれ独立に、N、CR₃から選択され、

Y₁とY₂、Y₂とY₃、又はY₃とY₄のうちの少なくとも1つは、CR₃として、下記化2で示される縮合環を形成し、

【化3】



40

式中、破線は、化1で示される化合物との縮合部位を指し；

Y₅乃至Y₈は、互いに、同一又は異なっており、それぞれ独立に、N、CR₄から選択され、

X₁及びX₂は、互いに、同一又は異なっており、それぞれ独立に、O、S、Se、N(Ar₁)、C(Ar₂)(Ar₃)、及びSi(Ar₄)(Ar₅)から選択され、ここで、X₁及びX₂のうちの少なくとも1つは、N(Ar₁)であり、

R₁乃至R₄は、互いに、同一又は異なっており、それぞれ独立に、水素、重水素、ハロゲン、シアノ、置換もしくは非置換のC₁~C₄₀のアルキル基、置換もしくは非置換の

50

C₃ ~ C₄₀ のシクロアルキル基、置換もしくは非置換の核原子数 3 乃至 40 のヘテロシクロアルキル基、置換もしくは非置換の C₆ ~ C₆₀ のアリアル基、置換もしくは非置換の核原子数 5 乃至 60 のヘテロアリアル基、置換もしくは非置換の C₁ ~ C₄₀ のアルキルオキシ基、置換もしくは非置換の C₆ ~ C₆₀ のアリアルオキシ基、置換もしくは非置換の C₁ ~ C₄₀ のアルキルシリル基、置換もしくは非置換の C₆ ~ C₆₀ のアリアルシリル基、置換もしくは非置換の C₁ ~ C₄₀ のアルキルボロン基、置換もしくは非置換の C₆ ~ C₆₀ のアリアルボロン基、置換もしくは非置換の C₆ ~ C₆₀ のアリアルホスフィン基、置換もしくは非置換の C₆ ~ C₆₀ のアリアルホスフィンオキサイド基、及び置換もしくは非置換の C₆ ~ C₆₀ のアリアルアミン基からなる群から選択され、これらは、隣接した基と縮合環を形成し、又は、形成しておらず；

10

A_{r1} 乃至 A_{r5} は、互いに、同一又は異なっており、それぞれ独立に、置換もしくは非置換の C₁ ~ C₄₀ のアルキル基、置換もしくは非置換の C₃ ~ C₄₀ のシクロアルキル基、置換もしくは非置換の核原子数 3 乃至 40 のヘテロシクロアルキル基、置換もしくは非置換の C₆ ~ C₆₀ のアリアル基、置換もしくは非置換の核原子数 5 乃至 60 のヘテロアリアル基、置換もしくは非置換の C₁ ~ C₄₀ のアルキルオキシ基、置換もしくは非置換のアリアルオキシ基、置換もしくは非置換の C₁ ~ C₄₀ のアルキルシリル基、置換もしくは非置換の C₆ ~ C₆₀ のアリアルシリル基、置換もしくは非置換の C₁ ~ C₄₀ のアルキルボロン基、置換もしくは非置換の C₆ ~ C₆₀ のアリアルボロン基、置換もしくは非置換の C₆ ~ C₆₀ のアリアルホスフィン基、置換もしくは非置換の C₆ ~ C₆₀ のアリアルホスフィンオキサイド基、及び置換もしくは非置換の C₆ ~ C₆₀ のアリアルアミン基からなる群から選択され、

20

但し、Y₁ 乃至 Y₈ は、少なくとも 1 つ以上の N を含む。

【0008】

また、本発明は、(i) 陽極、(ii) 陰極、及び (iii) 前記陽極と陰極との間に介在した 1 層以上の有機物層を含む有機 EL 素子であって、前記有機物層の中の少なくとも 1 つは、前記化 1 で示される化合物を 1 種以上含むことを特徴とする有機 EL 素子を提供する。

【0009】

ここで、前記化 1 で示される化合物は、発光層の燐光ホストとして使用されることが好ましい。

30

【発明の効果】

【0010】

本発明の化 1 で示される新規なインドール系化合物は、優れた耐熱性、正孔注入及び輸送能、発光能などを示すことができる。

【0011】

従って、前記化 1 で示される化合物を正孔注入 / 輸送層、又は発光層の燐光 / 蛍光ホスト、ドープメントなどとして含む有機 EL 素子は、発光性能、駆動電圧、寿命、効率などを大きく向上させることができるため、フルカラーディスプレイパネルなどに効果的に適用することが可能である。

【発明を実施するための形態】

40

【0012】

本発明は、従来の有機 EL 素子用材料 [例えば、4,4-dicarbazolybiphenyl (以下、「CBP」と略する)] より高い分子量を有し、かつ、優れた駆動電圧特性及び効率を有する新規なインドール系化合物 (indole-based compound) を提供する。

【0013】

本発明に係る前記化 1 で示される新規なインドール系化合物は、インドール系基本骨格に、縮合炭素環又は縮合ヘテロ環モイエティ、好ましくは、縮合ヘテロ環モイエティが連結され、種々の置換体によりエネルギーレベルが調節されることで、広いバンドギャップ (sky blue ~ red) を有する。これにより、素子の燐光特性が改善されると共

50

に、電子及び/又は正孔輸送能力、発光効率、駆動電圧、寿命特性などが改善されるため、発光層だけでなく、種々の置換体の導入で正孔輸送層、電子輸送層、発光ホストなどに応用することができる。特に、インドール系基本骨格により、従来のCBPに比べて、発光ホスト材料としての優れた特性を示すことができる。

【0014】

また、インドール系基本骨格に導入される種々の芳香族環(aromatic ring)置換体により、化合物の分子量が有意に増大することで、ガラス転移温度が向上し、これにより、従来のCBPより高い熱的安定性を有することが可能となる。従って、本発明の化1で示される新規な化合物を含む素子は、耐久性及び寿命特性を大きく向上させることができる。

10

【0015】

これに加えて、本発明の化1で示される化合物を、有機EL素子の正孔注入/輸送層、青色、緑色及び/又は赤色の燐光ホスト材料又は蛍光ホスト材料として採用する場合、効率及び寿命の面で、CBPより遥かに優れた効果を発揮することができる。従って、本発明に係る化合物は、有機EL素子の性能改善及び寿命の向上に大きく寄与することが可能である。

【0016】

なお、前記化1中の $R_1 \sim R_4$ 、 $Ar_1 \sim Ar_5$ において「置換もしくは非置換の」という語句が記載された置換基、一例として、 $C_1 \sim C_{40}$ のアルキル基、 $C_3 \sim C_{40}$ のシクロアルキル基、核原子数3乃至40のヘテロシクロアルキル基、 $C_6 \sim C_{60}$ のアリール基、核原子数5乃至60のヘテロアリール基、 $C_1 \sim C_{40}$ のアルキルオキシ基、 $C_6 \sim C_{60}$ のアリールオキシ基、 $C_1 \sim C_{40}$ のアルキルシリル基、 $C_6 \sim C_{60}$ のアリールシリル基、 $C_1 \sim C_{40}$ のアルキルボロン基、 $C_6 \sim C_{60}$ のアリールボロン基、 $C_6 \sim C_{60}$ のアリールホスフィン基、 $C_6 \sim C_{60}$ のアリールホスフィンオキサイド基、 $C_6 \sim C_{60}$ のアリールアミン基は、それぞれ独立に、水素、重水素、ハロゲン、シアノ、 $C_1 \sim C_{40}$ のアルキル基、 $C_3 \sim C_{40}$ のシクロアルキル基、核原子数3乃至40のヘテロシクロアルキル基、 $C_6 \sim C_{60}$ のアリール基、核原子数5乃至60のヘテロアリール基、 $C_1 \sim C_{40}$ のアルキルオキシ基、 $C_6 \sim C_{60}$ のアリールオキシ基、 $C_1 \sim C_{40}$ のアルキルシリル基、 $C_6 \sim C_{60}$ のアリールシリル基、 $C_1 \sim C_{40}$ のアルキルボロン基、 $C_6 \sim C_{60}$ のアリールボロン基、 $C_6 \sim C_{60}$ のアリールホスフィン基、 $C_6 \sim C_{60}$ のアリールホスフィンオキサイド基、及び $C_6 \sim C_{60}$ のアリールアミン基からなる群から選択される1つ以上の置換基に置換されることができる。

20

30

【0017】

本発明に係る化1で示される化合物において、 R_1 乃至 R_4 は、互いに、同一又は異なっており、それぞれ独立に、水素、重水素、ハロゲン、シアノ基、 $C_1 \sim C_{40}$ のアルキル基、 $C_3 \sim C_{40}$ のシクロアルキル基、核原子数3乃至40のヘテロシクロアルキル基、 $C_6 \sim C_{60}$ のアリール基、核原子数5乃至60のヘテロアリール基、 $C_1 \sim C_{40}$ のアルキルオキシ基、 $C_6 \sim C_{60}$ のアリールオキシ基、 $C_1 \sim C_{40}$ のアルキルシリル基、 $C_6 \sim C_{60}$ のアリールシリル基、 $C_1 \sim C_{40}$ のアルキルボロン基、 $C_6 \sim C_{60}$ のアリールボロン基、 $C_6 \sim C_{60}$ のアリールホスフィン基、 $C_6 \sim C_{60}$ のアリールホスフィンオキサイド基、及び $C_6 \sim C_{60}$ のアリールアミン基からなる群から選択されることが好ましい。この時、広いバンドギャップと熱安定性を考慮して、前記 R_1 乃至 R_4 は、それぞれ独立に、水素、 $C_6 \sim C_{60}$ のアリール基(例えば、フェニル、ナフチル、ピスフェニル)、核原子数5乃至60のヘテロアリール基(例えば、ピリジン)であることがより好ましい。

40

【0018】

また、本発明に係る化1で示される化合物において、 X_1 及び X_2 は、それぞれ独立に、O、S、Se、N(Ar_1)、C(Ar_2)(Ar_3)、及びSi(Ar_4)(Ar_5)から選択され、ここで、 X_1 及び X_2 のうちの少なくとも1つは、N(Ar_1)であることができ、好ましくは、 X_1 及び X_2 のいずれもがN(Ar_1)である。

50

【0019】

また、 Y_1 乃至 Y_8 は、それぞれ独立に、 N 、 CR_4 から選択されるが、少なくとも1つ以上の N を含む。好ましくは、 N は1個である。

【0020】

これに加えて、本発明に係る化1で示される化合物において、 Ar_1 乃至 Ar_5 は、それぞれ独立に、 $C_1 \sim C_{40}$ のアルキル基、 $C_3 \sim C_{40}$ のシクロアルキル基、核原子数3乃至40のヘテロシクロアルキル基、 $C_6 \sim C_{60}$ のアリール基、核原子数5乃至60のヘテロアリール基、 $C_1 \sim C_{40}$ のアルキルオキシ基、 $C_6 \sim C_{60}$ のアリールオキシ基、 $C_1 \sim C_{40}$ のアルキルシリル基、 $C_6 \sim C_{60}$ のアリールシリル基、 $C_1 \sim C_{40}$ のアルキルボロン基、 $C_6 \sim C_{60}$ のアリールボロン基、 $C_6 \sim C_{60}$ のアリールホスフィン基、 $C_6 \sim C_{60}$ のアリールホスフィンオキサイド基、及び $C_6 \sim C_{60}$ のアリールアミン基からなる群から選択されることができる。好ましくは、 Ar_1 乃至 Ar_5 は、それぞれ独立に、 $C_1 \sim C_{40}$ のアルキル基、 $C_6 \sim C_{60}$ のアリール基、核原子数5乃至60のヘテロアリール基、又は $C_6 \sim C_{60}$ のアリールアミン基であることができ、この時、前記 $C_6 \sim C_{60}$ のアリール基、核原子数5乃至60のヘテロアリール基、及び $C_6 \sim C_{60}$ のアリールアミン基は、それぞれ、 $C_1 \sim C_{40}$ のアルキル基、 $C_6 \sim C_{60}$ のアリール基、核原子数5乃至60のヘテロアリール基に置換されることができる。

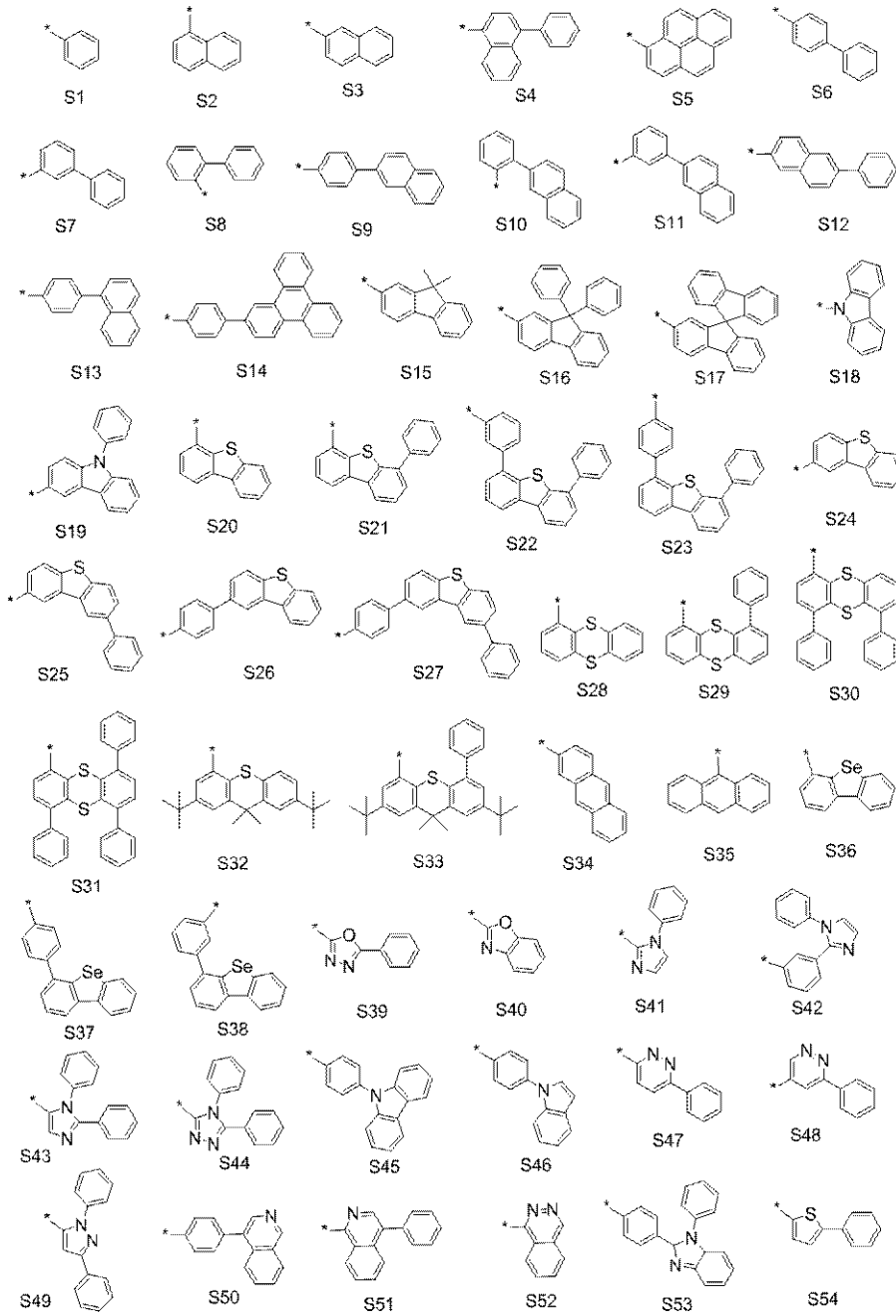
10

【0021】

本発明に係る化1において化合物の置換体である、 Ar_1 乃至 Ar_5 は、それぞれ独立に、下記の置換体(官能基)群、一例として、 $S_1 \sim S_{177}$ から選択されることが好ましいが、これらに限定されない。

20

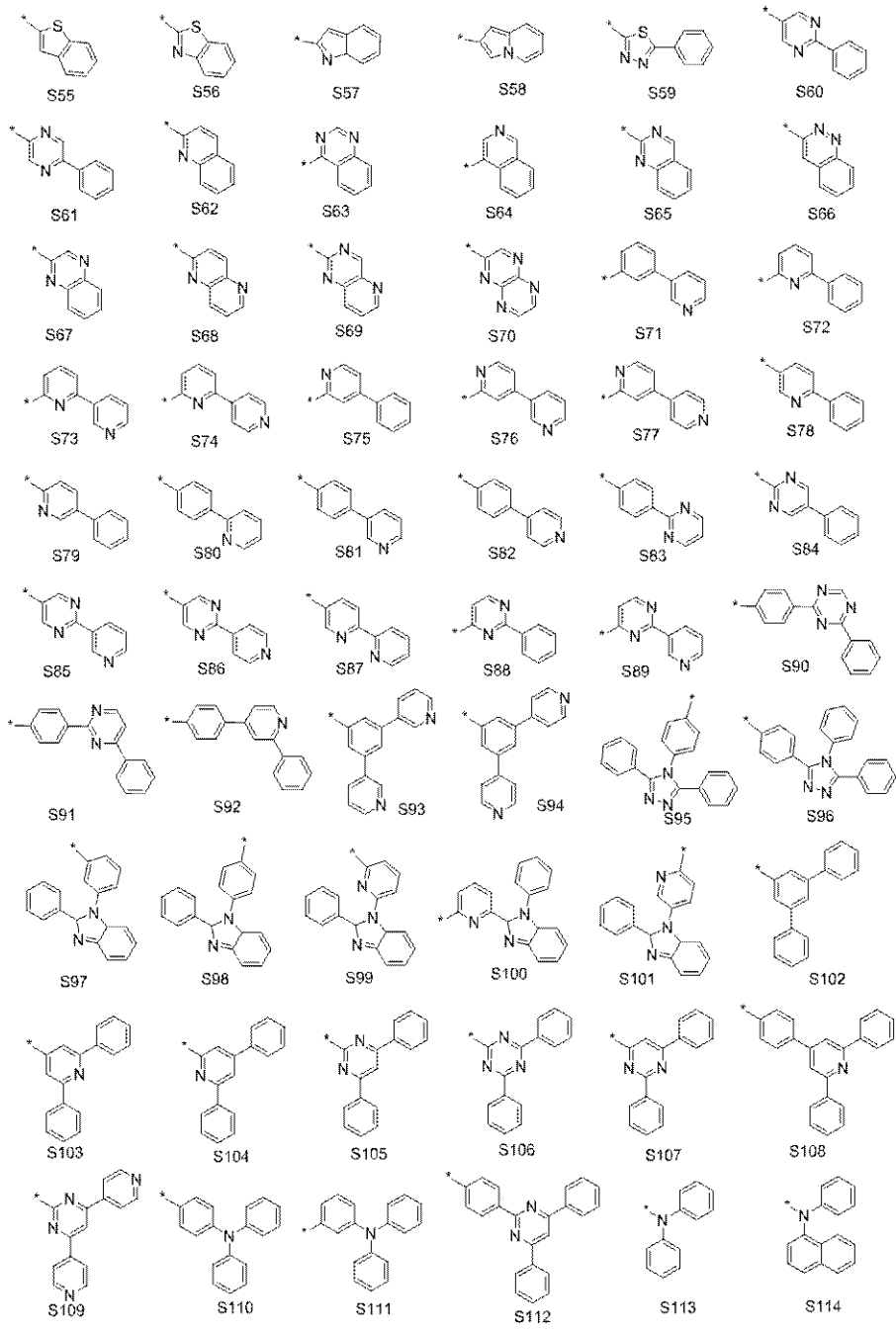
【化 4】



10

20

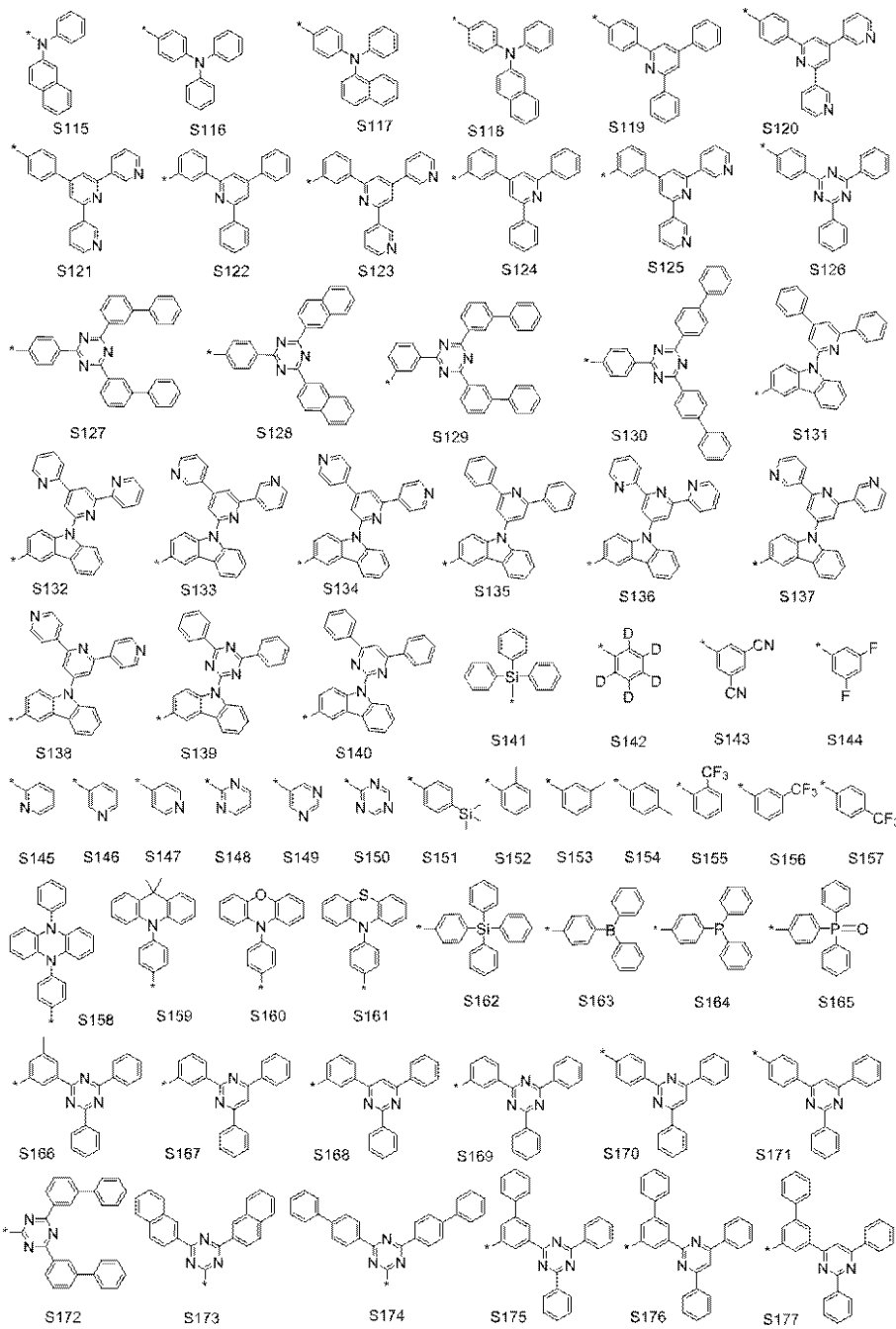
30



10

20

30



10

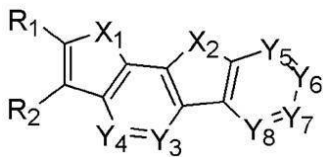
20

30

【 0 0 2 2 】

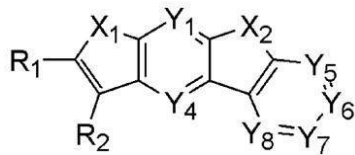
本発明に係る化 1 で示される化合物は、下記の化 3 乃至化 8 のうちのいずれか 1 つの化合物として、より具体化することができる。

【 化 5 】



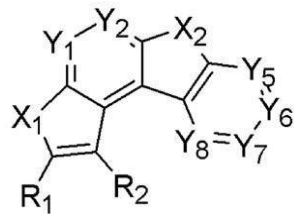
40

【化 6】



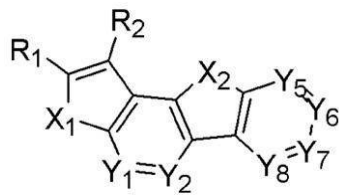
(化 4)

【化 7】



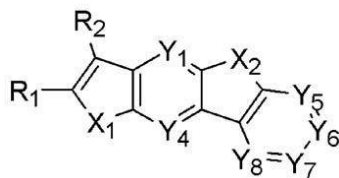
(化 5)

【化 8】



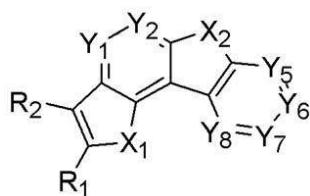
(化 6)

【化 9】



(化 7)

【化 10】



(化 8)

式中、 X_1 及び X_2 、 Y_1 乃至 Y_8 、 R_1 及び R_2 は、前記化 1 における定義と同じである。

【0023】

より詳しくは、 X_1 及び X_2 は、それぞれ独立に、O、S、Se、N(Ar_1)、C(Ar_2) (Ar_3)、及び Si(Ar_4) (Ar_5) から選択され、ここで、 X_1 及び X_2 のうちの少なくとも1つは、N(Ar_1) であることができ、好ましくは、 X_1 及び X_2 のいずれもが N(Ar_1) である。

【0024】

また、 Y_1 乃至 Y_8 は、それぞれ独立に、N、 CR_4 から選択され、少なくとも1つの N を含む。好ましくは、N は 1 個である。

【0025】

本発明において使用された「非置換のアルキル」とは、炭素数 1 乃至 40 の直鎖又は側

10

20

30

40

50

鎖の飽和炭化水素であり、例えば、メチル、エチル、プロピル、イソブチル、*sec*-ブチル、ペンチル、*iso*-アミル、ヘキシルなどを含む。

【0026】

「非置換のアリール」とは、単環又は2以上の環の組み合わせからなる、炭素数6乃至60の芳香族部位を意味する。2以上の環が、互いに単にペンダント(pendant)又は縮合により結合されることができる。

【0027】

「非置換のヘテロアリール」とは、核原子数5乃至60のモノヘテロサイクリック又はポリヘテロサイクリックの芳香族部位を意味し、環中の1以上の炭素、好ましくは、1乃至3個の炭素が、N、O、S又はSeのようなヘテロ原子に置換される。2以上の環が互いに単にペンダント又は縮合により結合されることができ、さらには、アリール基との縮合を含むものと解釈される。

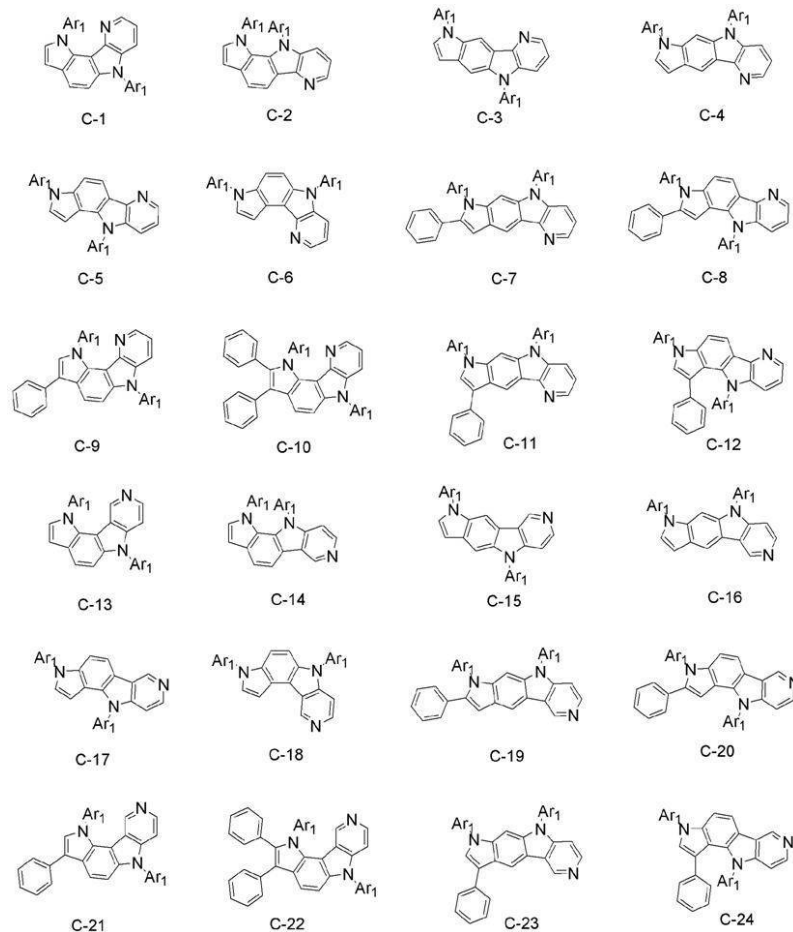
【0028】

「縮合環」とは、縮合脂肪族環、縮合芳香族環、縮合ヘテロ脂肪族環、縮合ヘテロ芳香族環、又はこれらの組み合わせを含む意味である。

【0029】

上述の本発明の化1で示される化合物は、以下に例示する化学式、例えば、式C-1～式C-291によってより具体化される。しかし、本発明の化1で示される化合物は、以下に例示したものに限定されない。

【化11】

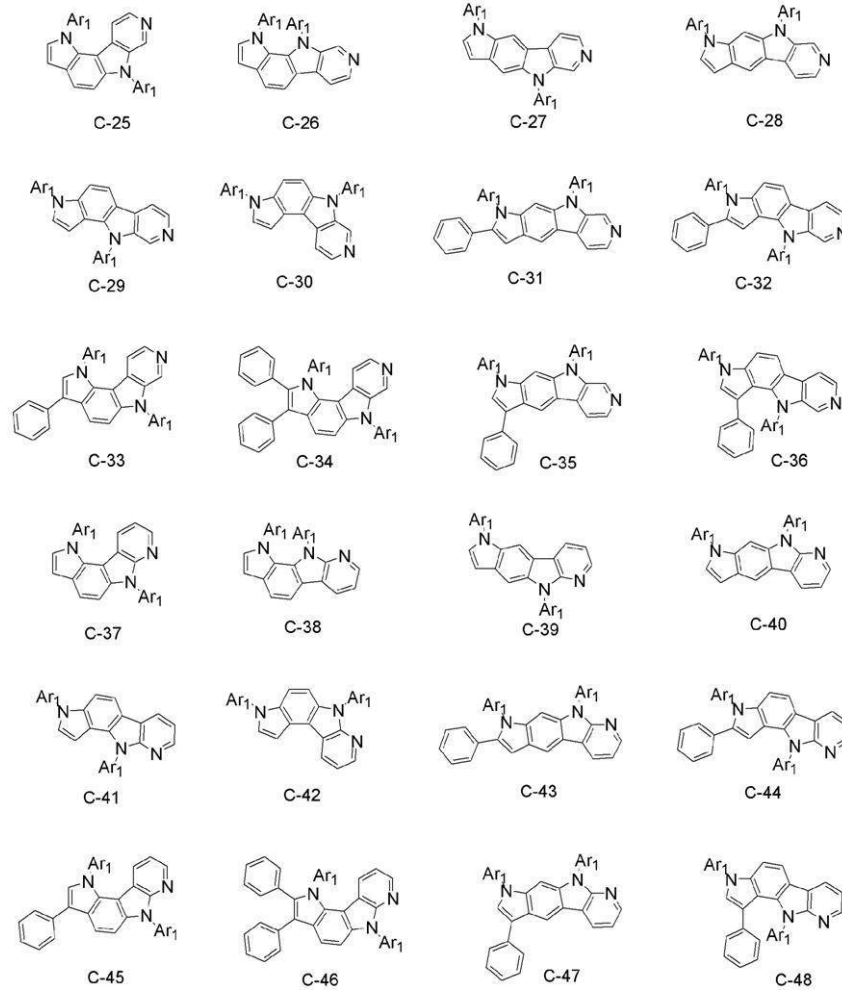


10

20

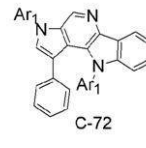
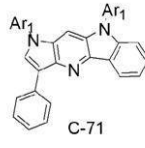
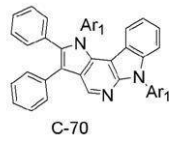
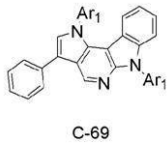
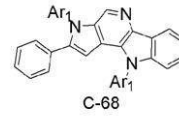
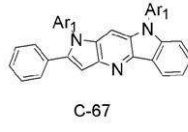
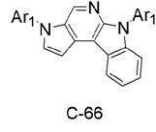
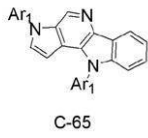
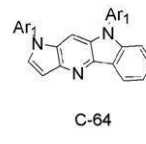
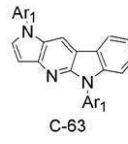
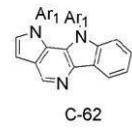
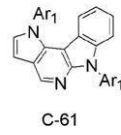
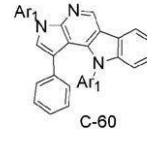
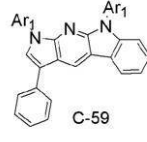
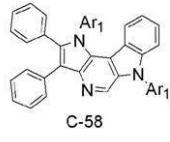
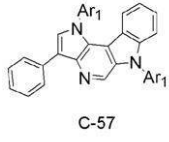
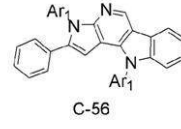
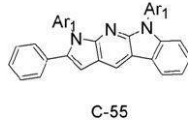
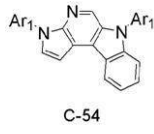
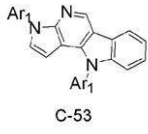
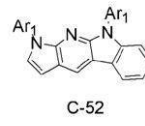
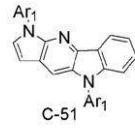
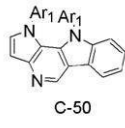
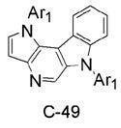
30

40



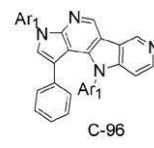
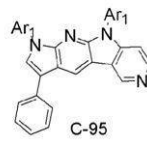
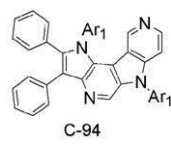
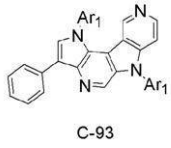
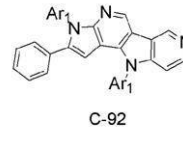
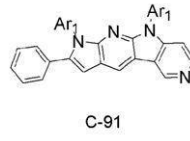
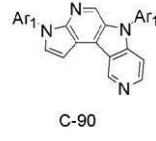
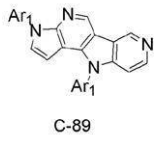
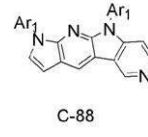
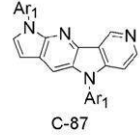
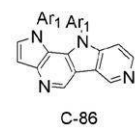
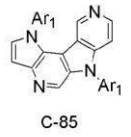
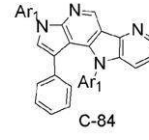
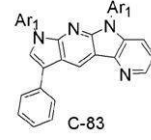
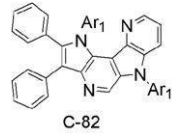
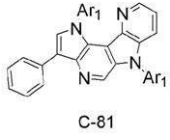
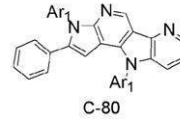
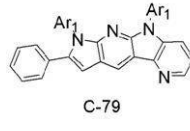
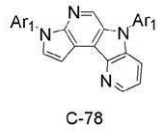
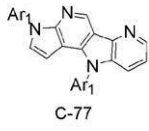
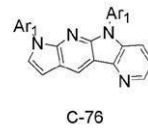
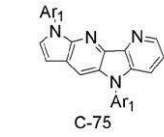
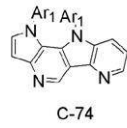
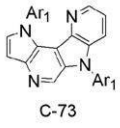
10

20



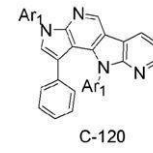
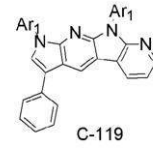
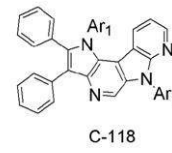
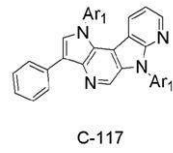
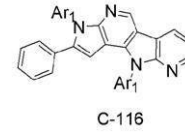
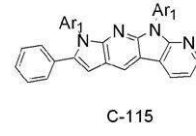
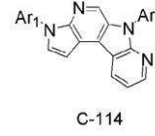
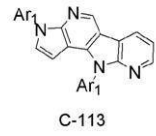
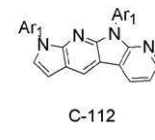
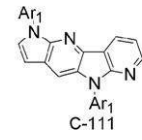
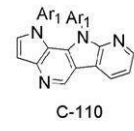
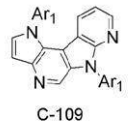
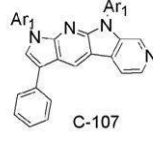
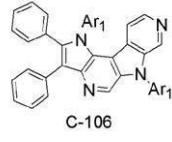
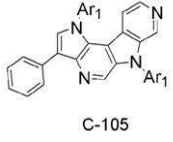
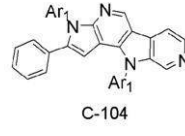
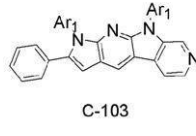
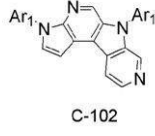
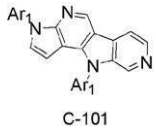
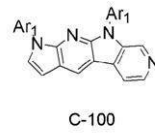
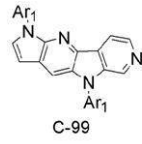
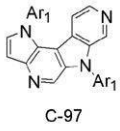
10

20



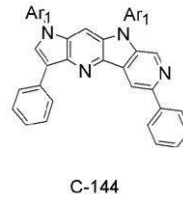
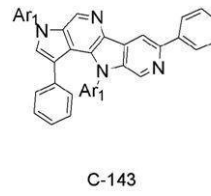
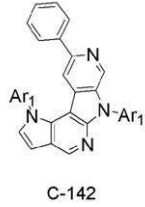
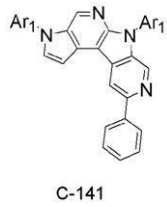
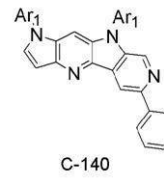
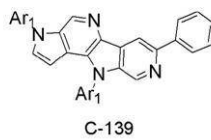
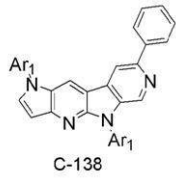
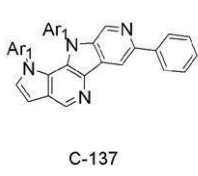
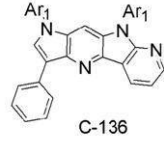
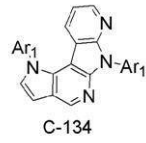
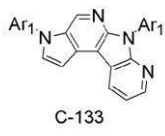
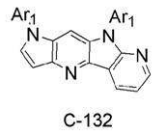
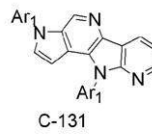
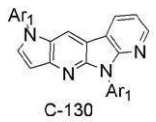
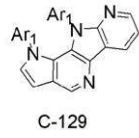
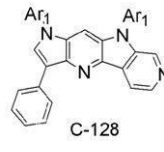
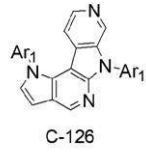
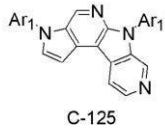
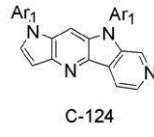
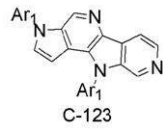
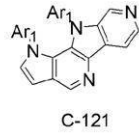
10

20



10

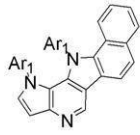
20



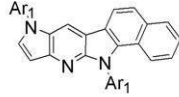
10

20

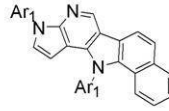
30



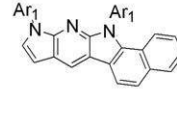
C-145



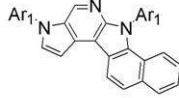
C-146



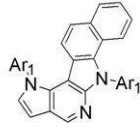
C-147



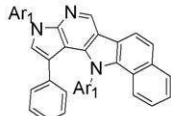
C-148



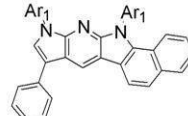
C-149



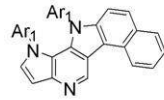
C-150



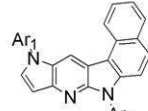
C-151



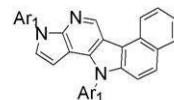
C-152



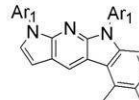
C-153



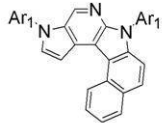
C-154



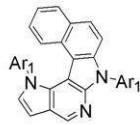
C-155



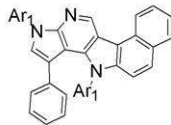
C-156



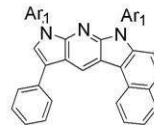
C-157



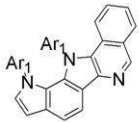
C-158



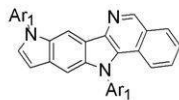
C-159



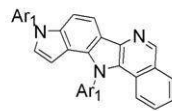
C-160



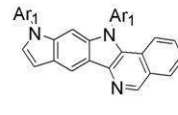
C-161



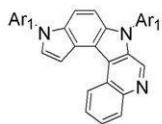
C-162



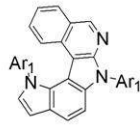
C-163



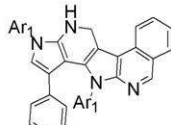
C-164



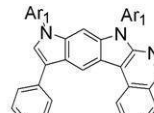
C-165



C-166



C-167

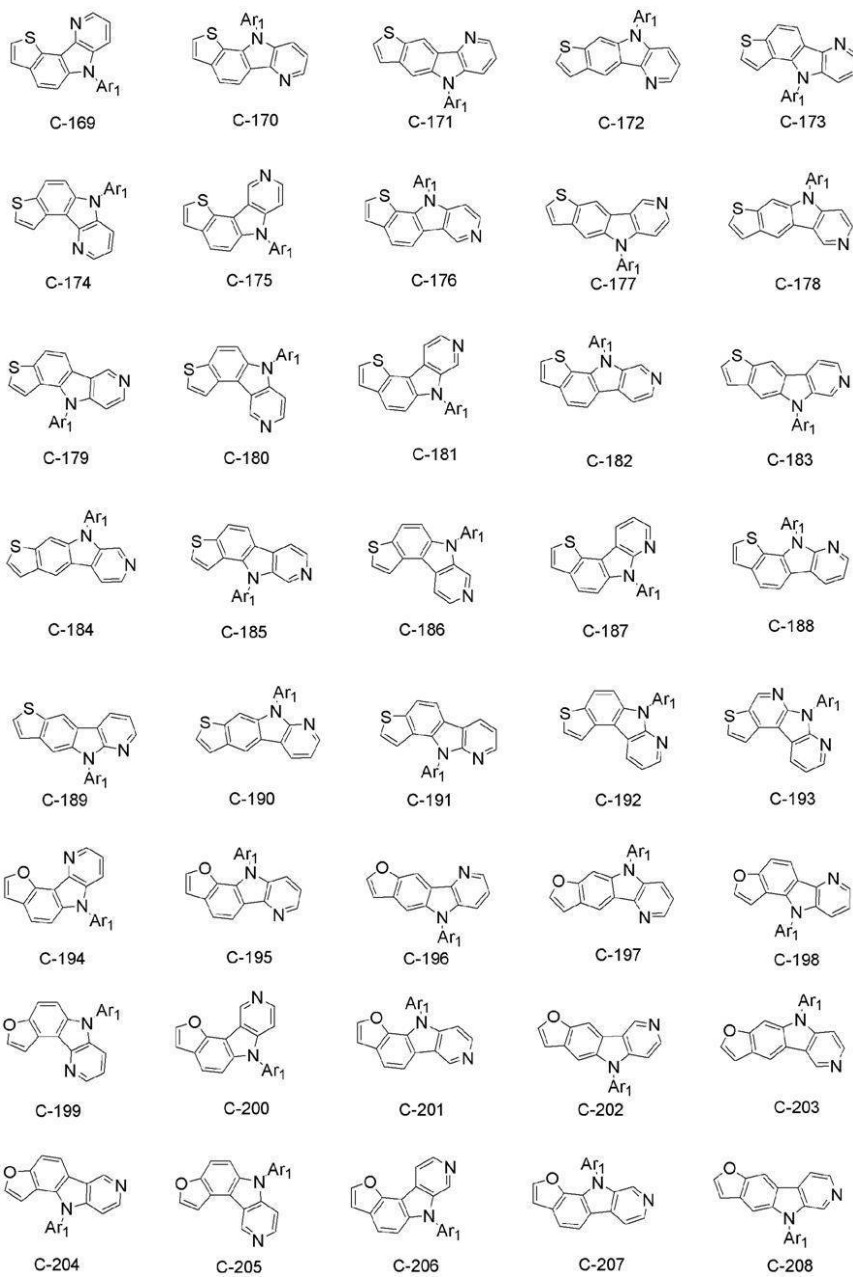


C-168

10

20

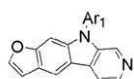
30



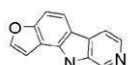
10

20

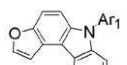
30



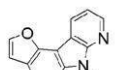
C-209



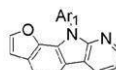
C-210



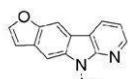
C-211



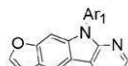
C-212



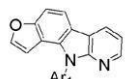
C-213



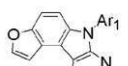
C-214



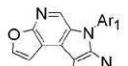
C-215



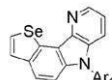
C-216



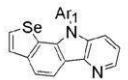
C-217



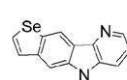
C-218



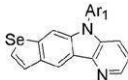
C-219



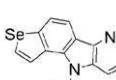
C-220



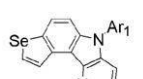
C-221



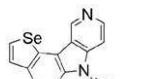
C-222



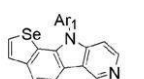
C-223



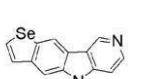
C-224



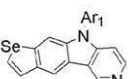
C-225



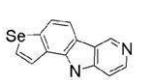
C-226



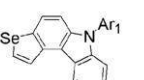
C-227



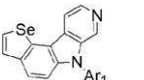
C-228



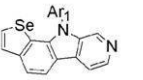
C-229



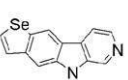
C-230



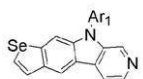
C-231



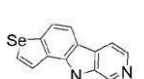
C-232



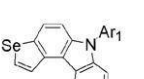
C-233



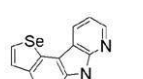
C-234



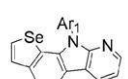
C-235



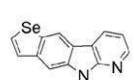
C-236



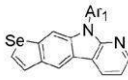
C-237



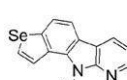
C-238



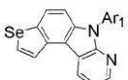
C-239



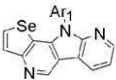
C-240



C-241



C-242

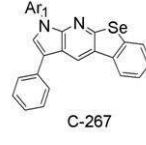
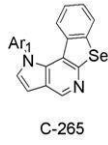
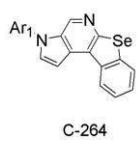
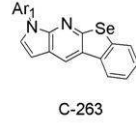
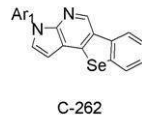
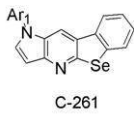
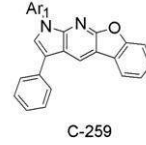
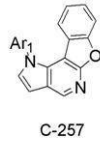
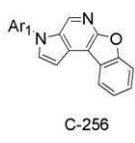
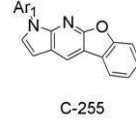
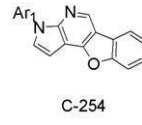
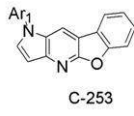
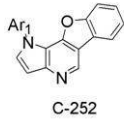
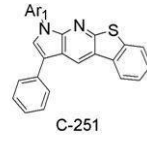
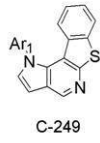
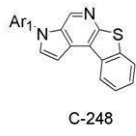
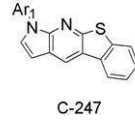
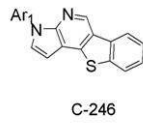
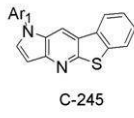
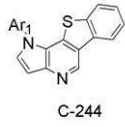


C-243

10

20

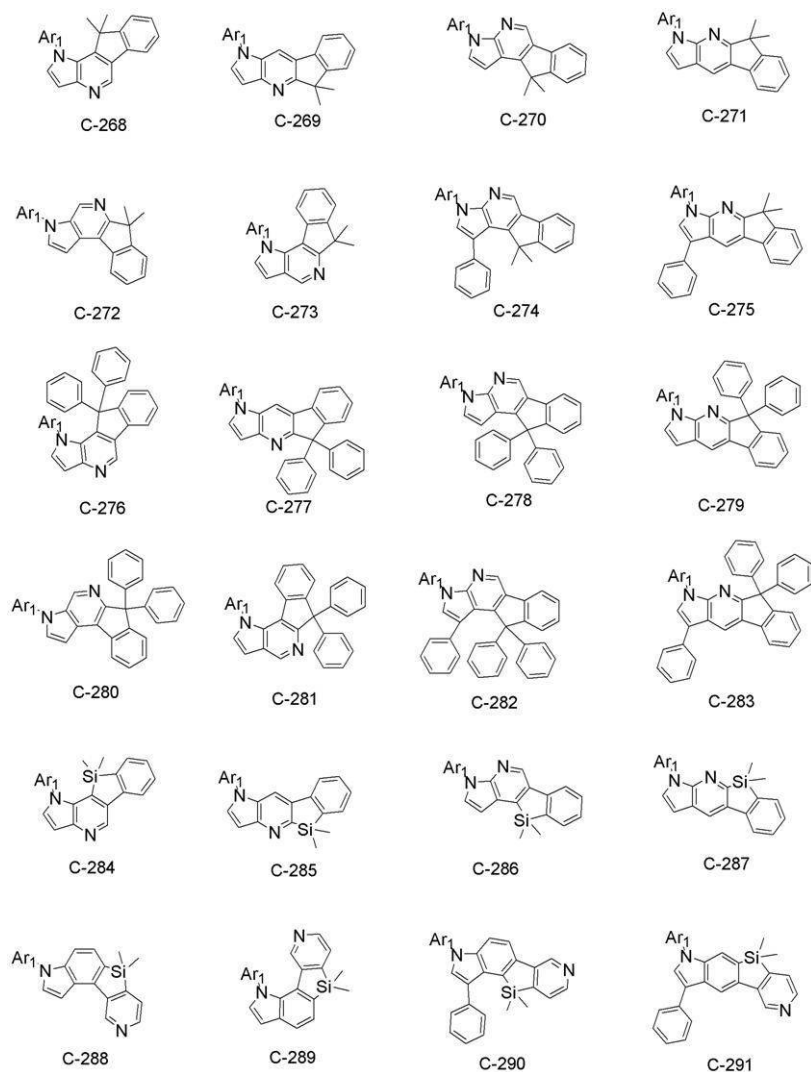
30



10

20

30



10

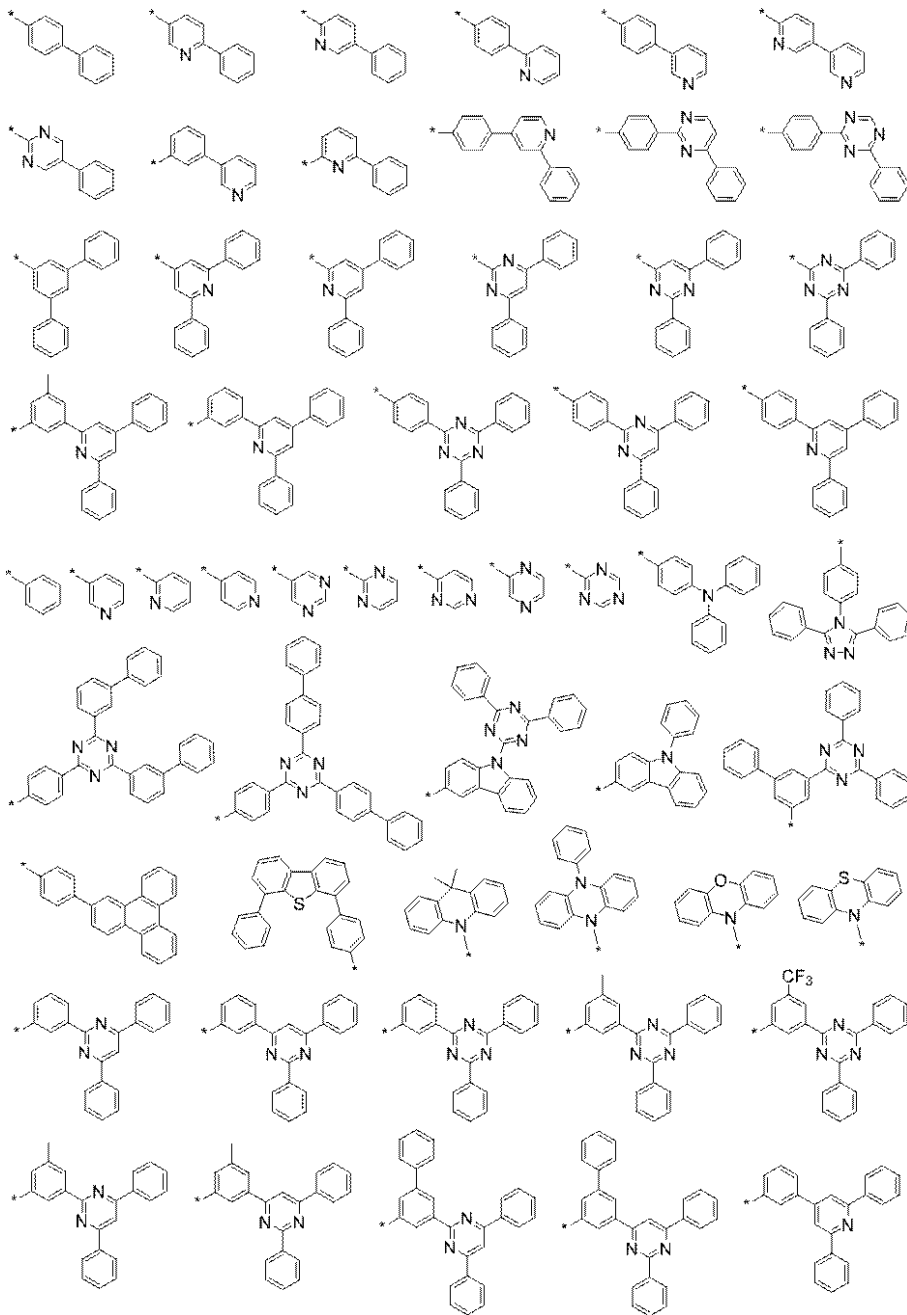
20

【 0 0 3 0 】

上記の式 C - 1 ~ C - 2 9 1 において、A r ₁ は、同様に表記されている場合でも、互いに同じであるか又は異なっていることができ、上記の化 1 における定義と同じである。なお、前記 A r ₁ としては、下記の置換体群から選択されることが好ましい。

30

【化 1 2】



10

20

30

【0031】

本発明に係る化 1 で示される化合物は、通常の方法で合成することができる。本発明の化合物に関する詳細な合成過程については、下記の合成例で詳述する。

【0032】

<有機電界発光素子>

また、本発明の他の側面は、上述の本発明に係る化 1 で示される化合物を含む有機電界発光素子に関する。

40

【0033】

具体的に、本発明に係る有機電界発光素子は、(i) 陽極(anode)、(ii) 陰極(cathode)、及び(iii) 前記陽極と陰極との間に介在した 1 層以上の有機物層を含み、前記有機物層の中の少なくとも 1 つは、前記化 1 で示される化合物を 1 種以上含むことを特徴とする。

【0034】

ここで、本発明の化 1 で示される化合物を含む有機物層は、正孔注入層、正孔輸送層、発光層、電子輸送層、及び電子注入層のうちいずれか 1 つ以上であることができる。具体

50

的に、前記有機物層は、正孔輸送層、発光層、又は電子輸送層であることが好ましく、発光層であることがより好ましい。

【0035】

本発明に係る有機電界発光素子の発光層は、ホスト材料を含むことができるが、この時、ホスト材料としては、前記化1で示される化合物のうちのいずれか1つを使用することができる。このように発光層が前記化1で示される化合物のうちのいずれか1つを含む場合は、発光層において正孔と電子との結合力が高くなるため、効率（発光効率及び電力効率）、寿命、輝度、駆動電圧などに優れた有機電界発光素子を提供することができる。前記化1で示される化合物は、青色、緑色及び/又は赤色の燐光ホスト、蛍光ホスト、又はドーパント材料として有機発光素子に含むことができる。また、ドーパント材料として使用

10

【0036】

本発明に係る有機電界発光素子の構造としては、特に限定されないが、例えば、基板、陽極、正孔注入層、正孔輸送層、発光層、電子輸送層及び陰極が順に積層されるものであることができるが、これに制限されない。この時、正孔注入層、正孔輸送層及び発光層のうちの1つ以上は、前記化1で示される化合物を1種以上含むことができる。また、本発明の化合物は、発光層の燐光ホスト又は蛍光ホストとして使用されることができる。前記電子輸送層の上には、電子注入層が位置することがあり得る。

【0037】

また、本発明に係る有機EL素子は、前述のように、陽極、1層以上の有機物層、及び陰極が順に積層される構造だけでなく、電極と有機物層との界面に絶縁層又は接着層が挿入されることができる。

20

【0038】

本発明に係る有機EL素子において、前記化1で示される化合物を含む有機物層は、真空蒸着法や溶液塗布法により形成されることができる。前記溶液塗布法としては、例えば、スピンコート法、ディップコート法、ドクターブレード法、インクジェット印刷法又は熱転写法などが挙げられるが、これらに限定されない。

【0039】

本発明に係る有機EL素子は、有機物層のうちの1層以上を本発明の化1で示される化合物を含むように形成する以外は、当業界で周知の材料及び方法を用いて有機物層及び電極を形成することで、製造することができる。

30

【0040】

例えば、基板としては、シリコン、ウェハ、石英、又はガラス板、金属板、プラスチックフィルム又はシートなどを使用することができる。

【0041】

陽極材料としては、例えば、バナジウム、クロム、銅、亜鉛、金のような金属もしくはこれらの合金；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又はSnO₂：Sbのような金属と酸化物との組み合わせ；ポリチオフェン、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〕（PEDT）、ポリピロール及びポリアニリンのような導電性高分子；又は、カーボンブラックなどが挙げられるが、これらに限定されない。

40

【0042】

陰極材料としては、マグネシウム、カルシウム、ナトリウム、カリウム、チタン、インジウム、イットリウム、リチウム、ガドリニウム、アルミニウム、銀、錫、又は鉛のような金属もしくはこれらの合金；LiF/Al又はLiO₂/Alのような多層構造物質などが挙げられるが、これらに限定されない。

【0043】

なお、正孔注入層、正孔輸送層、電子注入層、及び電子輸送層としては、特に限定されず、当業界で周知の物質を使用することができる。

50

【実施例】

【0044】

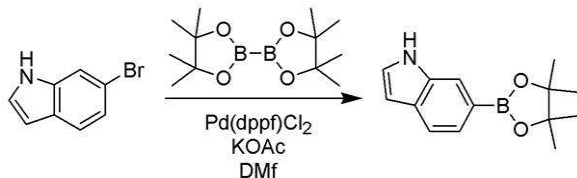
以下、本発明を実施例を挙げて詳述する。但し、下記の実施例は、本発明の例示に過ぎないものであり、本発明は、下記の実施例により限定されるものではない。

【0045】

[準備例1] IC-1の合成

<ステップ1> 6-(4,4,5,5-テトラメチル-1,3,2-ジオキサボロラン-2-イル)-1H-インドールの合成

【化13】



10

窒素気流下、6-ブromo-1H-インドール(25g、0.128mol)、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)(48.58g、0.191mol)、Pd(dppf)Cl₂(5.2g、5mol%)、KOAc(37.55g、0.383mol)及びDMF(500ml)を混合し、130℃で12時間攪拌した。

20

【0046】

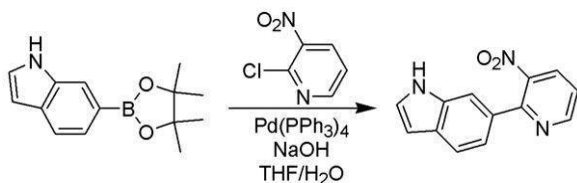
反応終了後、エチルアセテートで抽出した後、MgSO₄で水分を除去し、カラムクロマトグラフィ(ヘキサン:EA=10:1(v/v))で精製して6-(4,4,5,5-テトラメチル-1,3,2-ジオキサボロラン-2-イル)-1H-インドール(20.15g、収率65%)を得た。

¹H-NMR: 1.25(s, 12H), 6.47(d, 1H), 7.28(d, 1H), 7.43(d, 1H), 7.54(d, 1H), 7.99(s, 1H), 8.25(s, 1H)

【0047】

<ステップ2> 6-(3-ニトロピリジン-2-イル)-1H-インドールの合成

【化14】



30

窒素気流下、2-クロロ-3-ニトロピリジン(10.95g、69.07mmol)、前記<ステップ1>で得られた6-(4,4,5,5-テトラメチル-1,3,2-ジオキサボロラン-2-イル)-1H-インドール(20.15g、82.88mmol)、NaOH(8.29g、207.21mmol)、及びTHF/H₂(300ml/150ml)を混合した後、40℃でPd(PPh₃)₄(3.99g、5mol%)を入れ、80℃で12時間攪拌した。

40

【0048】

反応終了後、メチレンクロライドで抽出し、MgSO₄を入れ、ろ過した。得られた有機層から溶媒を除去した後、カラムクロマトグラフィ(ヘキサン:EA=1:1(v/v))で精製して6-(3-ニトロピリジン-2-イル)-1H-インドール(11.90g、収率72%)を得た。

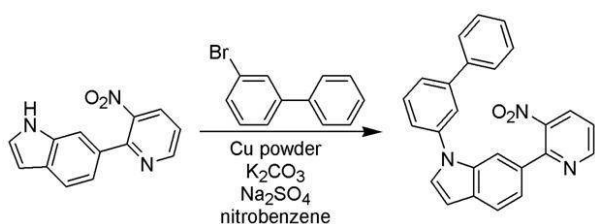
¹H-NMR: 6.45(d, 1H), 7.26(m, 2H), 7.44(d, 1H), 7.56(d, 1H), 7.98(s, 1H), 8.24(s, 1H), 8.32(d, 1H), 8.89(d, 1H)

【0049】

50

<ステップ3> 1-(ピフェニル-3-イル)-6-(3-ニトロピリジン-2-イル)-1H-インドールの合成

【化15】



10

窒素気流下、前記<ステップ2>で得られた6-(3-ニトロピリジン-2-イル)-1H-インドール(11.90g、49.74mmol)、3-プロモビフェニル(17.39g、74.61mmol)、Cuパウダー(0.32g、4.97mmol)、K₂CO₃(6.87g、49.74mmol)、Na₂SO₄(7.07g、49.74mmol)、ニトロベンゼン(200ml)を混合し、190℃で12時間攪拌した。

【0050】

反応終了後、ニトロベンゼンを除去し、メチレンクロライドで有機層を分離し、MgSO₄を用いて水を除去した。水が除去された有機層から溶媒を除去した後、カラムクロマトグラフィ(ヘキサン:MC:1:1(v/v))で精製して1-(ピフェニル-3-イル)-6-(3-ニトロピリジン-2-イル)-1H-インドール(10.51g、収率54%)を得た。

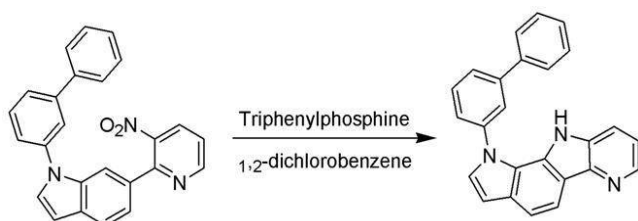
20

¹H-NMR: 6.45(d, 1H), 7.26(m, 2H), 7.44(m, 5H), 7.52(m, 4H), 7.57(d, 1H), 7.98(s, 1H), 8.05(s, 1H), 8.32(d, 1H), 8.89(d, 1H)

【0051】

<ステップ4> IC-1の合成

【化16】



30

窒素気流下、前記<ステップ3>で得られた1-(ピフェニル-3-イル)-6-(3-ニトロピリジン-2-イル)-1H-インドール(10.51g、26.85mmol)、トリフェニルホスフィン(17.61g、67.13mmol)、及び1,2-ジクロロベンゼン(200ml)を混合し、12時間攪拌した。

【0052】

反応終了後、1,2-ジクロロベンゼンを除去し、ジクロロメタンで抽出した。得られた有機層について、MgSO₄で水を除去し、カラムクロマトグラフィ(ヘキサン:EA=3:1(v/v))で精製してIC-1(3.67g、収率38%)を得た。

40

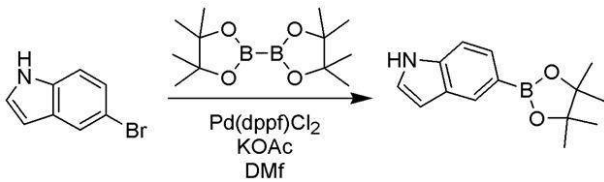
¹H-NMR: 6.46(d, 1H), 7.25(m, 2H), 7.45(m, 5H), 7.53(m, 4H), 7.59(d, 1H), 7.88(s, 1H), 8.27(s, 1H), 8.33(d, 1H), 8.87(d, 1H)

【0053】

[準備例2] IC-2の合成

<ステップ1> 5-(4,4,5,5-テトラメチル-1,3,2-ジオキサボロラン-2-イル)-1H-インドールの合成

【化17】



6 - ブロモ - 1 H - インドールの代わりに、5 - ブロモ - 1 H - インドールを使用する以外は、上述の準備例 1 の <ステップ 1 > と同様にして 5 - (4 , 4 , 5 , 5 - テトラメチル - 1 , 3 , 2 - ジオキサボロラン - 2 - イル) - 1 H - インドールを得た。

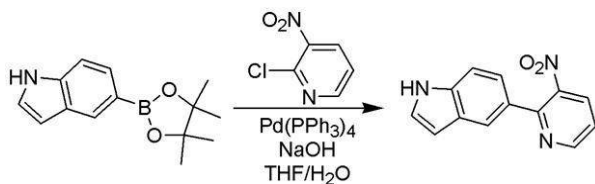
10

$^1\text{H-NMR}$: 1.25(s, 12H), 6.46(d, 1H), 7.25(d, 1H), 7.43(d, 1H), 7.54(d, 1H), 7.97(s, 1H), 8.23(s, 1H)

【0054】

<ステップ 2 > 5 - (3 - ニトロピリジン - 2 - イル) - 1 H - インドールの合成

【化18】



20

6 - (4 , 4 , 5 , 5 - テトラメチル - 1 , 3 , 2 - ジオキサボロラン - 2 - イル) - 1 H - インドールの代わりに、上記の <ステップ 1 > で得られた 5 - (4 , 4 , 5 , 5 - テトラメチル - 1 , 3 , 2 - ジオキサボロラン - 2 - イル) - 1 H - インドールを使用する以外は、上述の準備例 1 の <ステップ 2 > と同様にして 5 - (3 - ニトロピリジン - 2 - イル) - 1 H - インドールを得た。

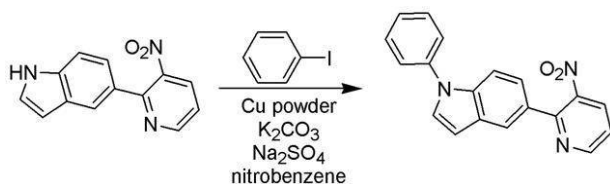
$^1\text{H-NMR}$: 6.45(d, 1H), 7.24(m, 2H), 7.42(d, 1H), 7.53(d, 1H), 7.96(s, 1H), 8.22(s, 1H), 8.31(d, 1H), 8.88(d, 1H)

【0055】

<ステップ 3 > 5 - (3 - ニトロピリジン - 2 - イル) - 1 - フェニル - 1 H - インドールの合成

30

【化19】



6 - (3 - ニトロピリジン - 2 - イル) - 1 H - インドールと、3 - ブロモビフェニルの代わりに、上記の <ステップ 2 > で得られた 5 - (3 - ニトロピリジン - 2 - イル) - 1 H - インドールと、ヨードベンゼンを使用する以外は、上述の準備例 1 の <ステップ 3 > と同様にして 5 - (3 - ニトロピリジン - 2 - イル) - 1 - フェニル - 1 H - インドールを得た。

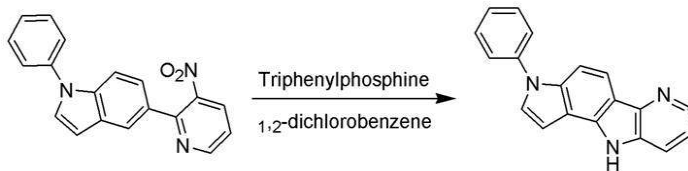
40

$^1\text{H-NMR}$: 6.44(d, 1H), 7.23(m, 2H), 7.41(m, 3H), 7.51(m, 4H), 7.95(s, 1H), 8.33(d, 1H), 8.86(d, 1H)

【0056】

<ステップ 4 > IC - 2 の合成

【化20】



1-(ピフェニル-3-イル)-6-(3-ニトロピリジン-2-イル)-1H-インドールの代わりに、上記の<ステップ3>で得られた5-(3-ニトロピリジン-2-イル)-1-フェニル-1H-インドールを使用する以外は、上述の準備例1の<ステップ4>と同様にしてIC-2を得た。

10

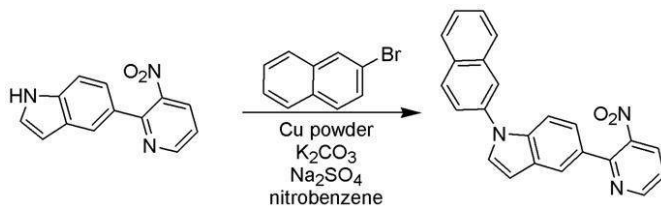
$^1\text{H-NMR}$: 6.44(d, 1H), 7.23(m, 2H), 7.45(m, 3H), 7.53(m, 4H), 8.25(s, 1H), 8.33(d, 1H), 8.86(d, 1H)

【0057】

[準備例3] IC-3の合成

<ステップ1> 1-(ナフタレン-2-イル)-5-(3-ニトロピリジン-2-イル)-1H-インドールの合成

【化21】



20

6-(3-ニトロピリジン-2-イル)-1H-インドールと、3-プロモピフェニルの代わりに、上述の準備例2の<ステップ3>で得られた5-(3-ニトロピリジン-2-イル)-1H-インドールと、2-プロモナフタレンを使用する以外は、上述の準備例1の<ステップ3>と同様にして1-(ナフタレン-2-イル)-5-(3-ニトロピリジン-2-イル)-1H-インドールを得た。

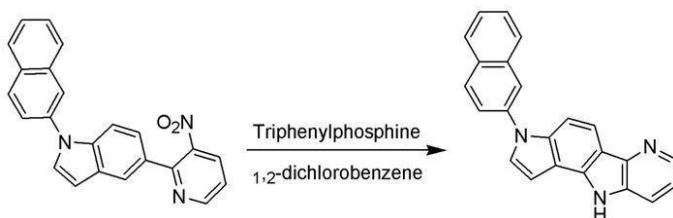
30

$^1\text{H-NMR}$: 6.44(d, 1H), 7.23(m, 2H), 7.36(d, 1H), 7.41(d, 1H), 7.55(m, 3H), 7.82(s, 1H), 7.98(m, 4H), 8.33(d, 1H), 8.86(d, 1H)

【0058】

<ステップ2> IC-3の合成

【化22】



40

1-(ピフェニル-3-イル)-6-(3-ニトロピリジン-2-イル)-1H-インドールの代わりに、上記の<ステップ1>で得られた1-(ナフタレン-2-イル)-5-(3-ニトロピリジン-2-イル)-1H-インドールを使用する以外は、上述の準備例1の<ステップ4>と同様にしてIC-3を得た。

$^1\text{H-NMR}$: 6.44(d, 1H), 7.23(m, 2H), 7.36(d, 1H), 7.41(d, 1H), 7.55(m, 3H), 7.82(s, 1H), 7.98(m, 3H), 8.23(s, 1H), 8.33(d, 1H), 8.86(d, 1H)

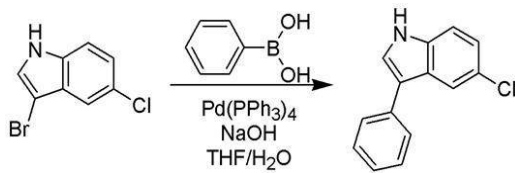
【0059】

[ステップ4] IC-4の合成

50

<ステップ1> 5 - クロロ - 3 - フェニル - 1 H - インドールの合成

【化23】



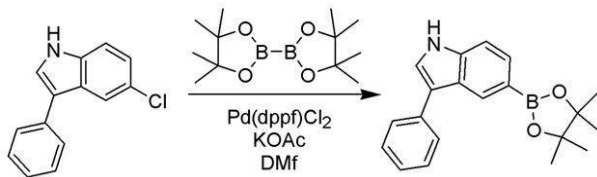
2 - クロロ - 3 - ニトロピリジンと、6 - (4 , 4 , 5 , 5 - テトラメチル - 1 , 3 , 2 - ジオキサボロラン - 2 - イル) - 1 H - インドールの代わりに、3 - プロモ - 5 - クロロ - 1 H - インドールと、フェニルボロン酸を使用する以外は、上述の準備例1の<ステップ2>と同様にして5 - クロロ - 3 - フェニル - 1 H - インドールを得た。

¹H-NMR: 7.18(d, 1H), 7.25(d, 1H), 7.45(m, 3H), 7.55(m, 2H), 7.68(s, 1H), 8.24(s, 1H), 8.31(s, 1H)

【0060】

<ステップ2> 3 - フェニル - 5 - (4 , 4 , 5 , 5 - テトラメチル - 1 , 3 , 2 - ジオキサボロラン - 2 - イル) - 1 H - インドールの合成

【化24】



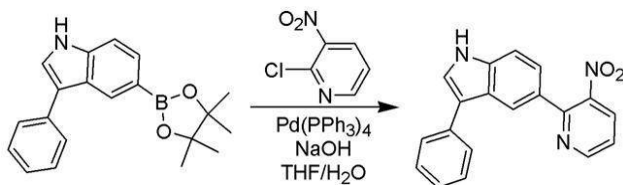
6 - プロモ - 1 H - インドールの代わりに、上記の<ステップ1>で得られた5 - クロロ - 3 - フェニル - 1 H - インドールを使用する以外は、上述の準備例1の<ステップ1>と同様にして3 - フェニル - 5 - (4 , 4 , 5 , 5 - テトラメチル - 1 , 3 , 2 - ジオキサボロラン - 2 - イル) - 1 H - インドールを得た。

¹H-NMR: 1.24(s, 12H), 7.15(d, 1H), 7.24(d, 1H), 7.43(m, 3H), 7.54(m, 2H), 7.67(s, 1H), 8.23(s, 1H), 8.30(s, 1H)

【0061】

<ステップ3> 5 - (3 - ニトロピリジン - 2 - イル) - 3 - フェニル - 1 H - インドールの合成

【化25】



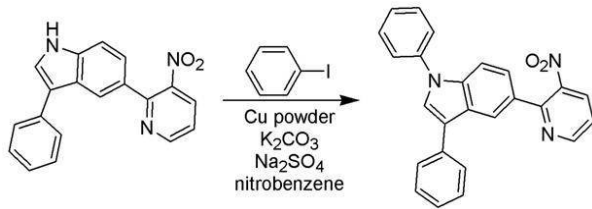
6 - (4 , 4 , 5 , 5 - テトラメチル - 1 , 3 , 2 - ジオキサボロラン - 2 - イル) - 1 H - インドールの代わりに、上記の<ステップ2>で得られた3 - フェニル - 5 - (4 , 4 , 5 , 5 - テトラメチル - 1 , 3 , 2 - ジオキサボロラン - 2 - イル) - 1 H - インドールを使用する以外は、上述の準備例1の<ステップ2>と同様にして5 - (3 - ニトロピリジン - 2 - イル) - 3 - フェニル - 1 H - インドールを得た。

¹H-NMR: 7.17(d, 1H), 7.24(m, 2H), 7.44(m, 3H), 7.55(m, 2H), 7.66(s, 1H), 8.24(s, 1H), 8.32(m, 2H), 8.86(d, 1H)

【0062】

<ステップ4> 5 - (3 - ニトロピリジン - 2 - イル) - 1 , 3 - ジフェニル - 1 H - インドールの合成

【化 2 6】



6 - (3 - ニトロピリジン - 2 - イル) - 1 H - インドールと、3 - プロモピフェニルの代わりに、上記の<ステップ 3>で得られた 5 - (3 - ニトロピリジン - 2 - イル) - 3 - フェニル - 1 H - インドールと、ヨードベンゼンを使用する以外は、上述の準備例 1 の<ステップ 3>と同様にして 5 - (3 - ニトロピリジン - 2 - イル) - 1 , 3 - ジフェニル - 1 H - インドールを得た。

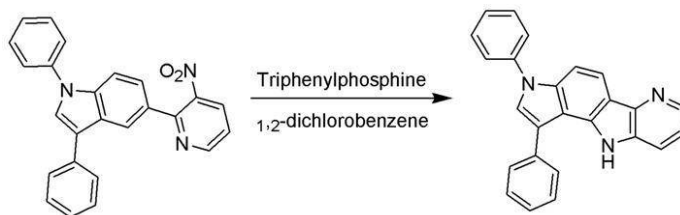
10

$^1\text{H-NMR}$: 7.18(d, 1H), 7.25(m, 2H), 7.44(m, 4H), 7.51(d, 2H), 7.56(m, 4H), 7.67(s, 1H), 8.31(m, 2H), 8.85(d, 1H)

【 0 0 6 3】

<ステップ 5> I C - 4 の合成

【化 2 7】



20

1 - (ビフェニル - 3 - イル) - 6 - (3 - ニトロピリジン - 2 - イル) - 1 H - インドールの代わりに、上記の<ステップ 4>で得られた 5 - (3 - ニトロピリジン - 2 - イル) - 1 , 3 - ジフェニル - 1 H - インドールを使用する以外は、上述の準備例 1 の<ステップ 4>と同様にして I C - 4 を得た。

$^1\text{H-NMR}$: 7.18(d, 1H), 7.25(d, 1H), 7.44(m, 4H), 7.51(d, 2H), 7.56(m, 4H), 7.67(s, 1H), 8.25(s, 1H), 8.31(m, 2H), 8.85(d, 1H)

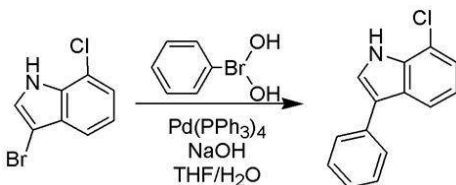
30

【 0 0 6 4】

[準備例 5] I C - 5 の合成

<ステップ 1> 7 - クロロ - 3 - フェニル - 1 H - インドールの合成

【化 2 8】



40

2 - クロロ - 3 - ニトロピリジンと、6 - (4 , 4 , 5 , 5 - テトラメチル - 1 , 3 , 2 - ジオキサボロラン - 2 - イル) - 1 H - インドールの代わりに、3 - プロモ - 7 - クロロ - 1 H - インドールと、フェニルボロン酸を使用する以外は、上述の準備例 1 の<ステップ 2>と同様にして 7 - クロロ - 3 - フェニル - 1 H - インドールを得た。

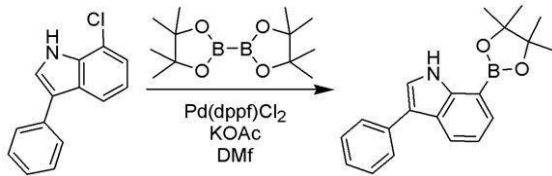
$^1\text{H-NMR}$: 7.04(t, 1H), 7.17(d, 1H), 7.41(m, 1H), 7.52(m, 4H), 7.64(d, 1H), 8.24(s, 1H), 8.31(s, 1H)

【 0 0 6 5】

<ステップ 2> 3 - フェニル - 7 - (4 , 4 , 5 , 5 - テトラメチル - 1 , 3 , 2 - ジオキサボロラン - 2 - イル) - 1 H - インドールの合成

50

【化 29】



6 - プロモ - 1 H - インドールの代わりに、上記の <ステップ 1> で得られた 7 - クロロ - 3 - フェニル - 1 H - インドールを使用する以外は、上記の <準備例 1> と同様にして 3 - フェニル - 7 - (4 , 4 , 5 , 5 - テトラメチル - 1 , 3 , 2 - ジオキサボロラン - 2 - イル) - 1 H - インドールを得た。

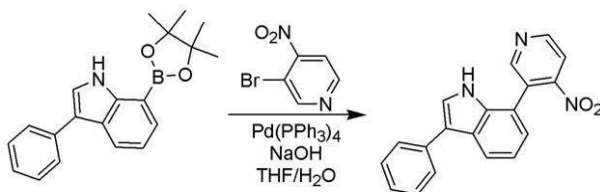
10

¹H-NMR: 1.25(s, 12H), 7.05(t, 1H), 7.13(d, 1H), 7.43(m, 1H), 7.53(m, 4H), 7.65(d, 1H), 8.25(s, 1H), 8.30(s, 1H)

【 0 0 6 6 】

<ステップ 3> 7 - (4 - ニトロピリジン - 3 - イル) - 3 - フェニル - 1 H - インドールの合成

【化 30】



20

6 - (4 , 4 , 5 , 5 - テトラメチル - 1 , 3 , 2 - ジオキサボロラン - 2 - イル) - 1 H - インドールと、2 - クロロ - 3 - ニトロピリジンの代わりに、上記の <ステップ 2> で得られた 3 - フェニル - 7 - (4 , 4 , 5 , 5 - テトラメチル - 1 , 3 , 2 - ジオキサボロラン - 2 - イル) - 1 H - インドールと、3 - プロモ - 4 - ニトロピリジンを使用する以外は、上述の準備例 1 の <ステップ 2> と同様にして 7 - (4 - ニトロピリジン - 3 - イル) - 3 - フェニル - 1 H - インドールを得た。

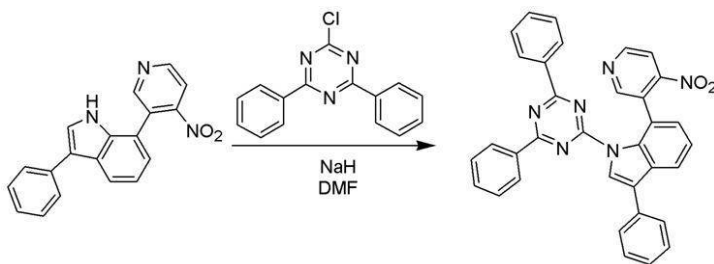
30

¹H-NMR: 7.05(t, 1H), 7.13(d, 1H), 7.43(m, 1H), 7.53(m, 4H), 7.65(d, 1H), 7.92(d, 1H), 8.25(s, 1H), 8.30(m, 2H), 8.52(s, 1H)

【 0 0 6 7 】

<ステップ 4> 1 - (4 , 6 - ジフェニル - 1 , 3 , 5 - トリアジン - 2 - イル) - 7 - (4 - ニトロピリジン - 3 - イル) - 3 - フェニル - 1 H - インドールの合成

【化 31】



40

窒素気流下、上記の <ステップ 3> で得られた 7 - (4 - ニトロピリジン - 3 - イル) - 3 - フェニル - 1 H - インドール (5 g、15.85 mmol) を、DMF 50 ml に溶かし、ここに NaH (0.57 g、23.77 mmol) を入れ、1 時間攪拌した。ここに、DMF 100 ml に溶かした 2 - クロロ - 4 , 6 - ジフェニル - 1 , 3 , 5 - トリアジン (6.36 g、23.77 mmol) を徐々に加えた。2 時間攪拌後、反応を終了させ、混合物のシリカフィルタリングを行い、水とメタノールで洗浄した後、溶媒を除去

50

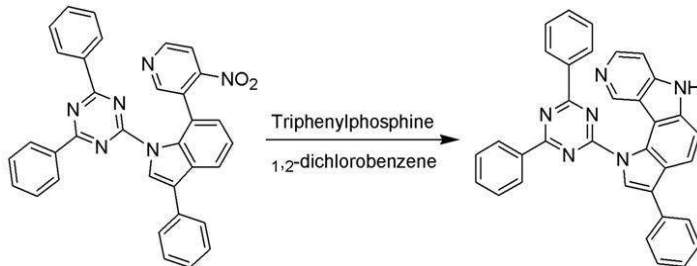
して、1-(4,6-ジフェニル-1,3,5-トリアジン-2-イル)-7-(4-ニトロピリジン-3-イル)-3-フェニル-1H-インドール(6.58g、収率76%)を得た。

GC-Mass (理論値: 546.18 g/mol、測定値: 546 g/mol)

【0068】

<ステップ5> IC-5の合成

【化32】



10

1-(ピフェニル-3-イル)-6-(3-ニトロピリジン-2-イル)-1H-インドールの代わりに、上記の<ステップ4>で得られた1-(4,6-ジフェニル-1,3,5-トリアジン-2-イル)-7-(4-ニトロピリジン-3-イル)-3-フェニル-1H-インドールを使用する以外は、上述の準備例1の<ステップ4>と同様にしてIC-5を得た。

20

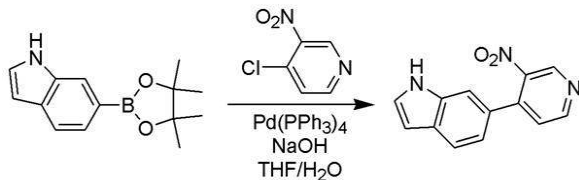
GC-Mass (理論値: 514.19 g/mol、測定値: 514 g/mol)

【0069】

[準備例6] IC-6の合成

<ステップ1> 6-(3-ニトロピリジン-4-イル)-1H-インドールの合成

【化33】



30

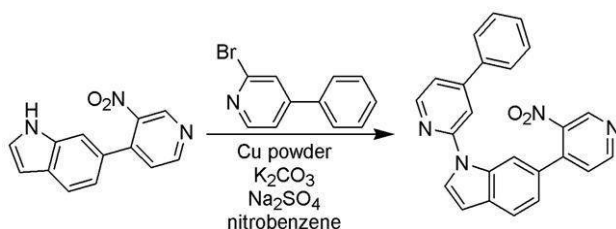
2-クロロ-3-ニトロピリジンの代わりに、上述の準備例1の<ステップ1>で得られた3-フェニル-7-(4,4,5,5-テトラメチル-1,3,2-ジオキサボロラン-2-イル)-1H-インドールと、4-クロロ-3-ニトロピリジンを使用する以外は、上述の準備例1の<ステップ2>と同様にして6-(3-ニトロピリジン-4-イル)-1H-インドールを得た。

¹H-NMR: 6.47(d, 1H), 7.28(d, 1H), 7.43(d, 1H), 7.54(d, 1H), 7.99(s, 1H), 8.25(s, 1H), 8.32(d, 1H), 8.45(d, 1H), 8.52(s, 1H)

【0070】

<ステップ2> 6-(3-ニトロピリジン-4-イル)-1-(4-フェニルピリジン-2-イル)-1H-インドールの合成

【化34】



50

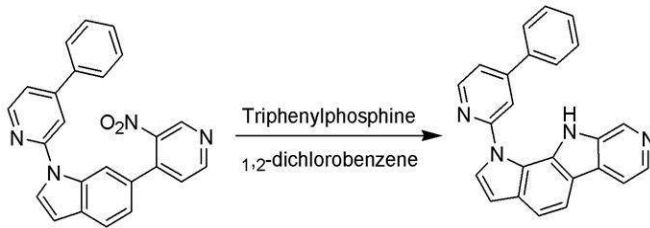
6 - (3 - ニトロピリジン - 2 - イル) - 1 H - インドールと、3 - ブロモビフェニルの代わりに、上記の<ステップ 1>で得られた 6 - (3 - ニトロピリジン - 4 - イル) - 1 H - インドールと、2 - ブロモ - 4 - フェニルピリジンを使用する以外は、上述の準備例 1 の<ステップ 3>と同様にして 6 - (3 - ニトロピリジン - 4 - イル) - 1 - (4 - フェニルピリジン - 2 - イル) - 1 H - インドールを得た。

¹H-NMR: 6.47(d, 1H), 7.28(d, 1H), 7.43(m, 4H), 7.53(m, 3H), 7.62(s, 1H), 7.99(s, 1H), 8.25(s, 1H), 8.32(d, 1H), 8.45(m, 2H), 8.52(m, 2H)

【0071】

<ステップ 3> IC - 6 の合成

【化 3 5】



10

1 - (ビフェニル - 3 - イル) - 6 - (3 - ニトロピリジン - 2 - イル) - 1 H - インドールの代わりに、上記の<ステップ 2>で得られた 6 - (3 - ニトロピリジン - 4 - イル) - 1 - (4 - フェニルピリジン - 2 - イル) - 1 H - インドールを使用する以外は、上述の準備例 1 の<ステップ 4>と同様にして IC - 6 を得た。

20

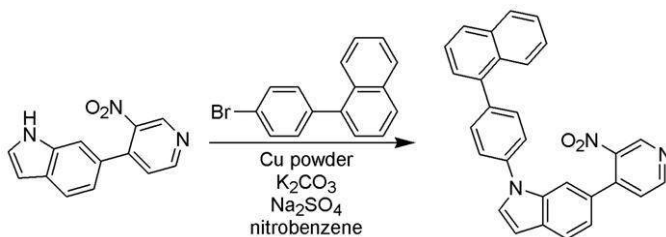
¹H-NMR: 6.47(d, 1H), 7.28(d, 1H), 7.43(m, 4H), 7.53(m, 3H), 7.62(s, 1H), 8.03(s, 1H), 8.25(s, 1H), 8.32(d, 1H), 8.45(m, 2H), 8.52(m, 2H)

【0072】

[準備例 7] IC - 7 の合成

<ステップ 1> 1 - (4 - (ナフタレン - 1 - イル)フェニル) - 6 - (3 - ニトロピリジン - 4 - イル) - 1 H - インドールの合成

【化 3 6】



30

6 - (3 - ニトロピリジン - 2 - イル) - 1 H - インドールと、3 - ブロモビフェニルの代わりに、上述の準備例 6 の<ステップ 1>で得られた 6 - (3 - ニトロピリジン - 4 - イル) - 1 H - インドールと、1 - (4 - ブロモフェニル)ナフタレンを使用する以外は、上述の準備例 1 の<ステップ 3>と同様にして 1 - (4 - (ナフタレン - 1 - イル)フェニル) - 6 - (3 - ニトロピリジン - 4 - イル) - 1 H - インドールを得た。

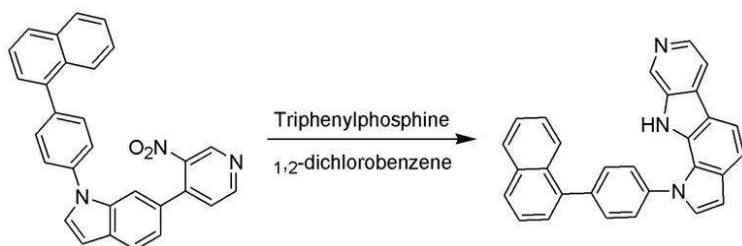
40

¹H-NMR: 6.47(d, 1H), 7.28(d, 1H), 7.43(d, 1H), 7.54(m, 3H), 7.61(m, 3H), 7.79(d, 2H), 7.99(m, 2H), 8.25(d, 1H), 8.32(m, 2H), 8.45(m, 2H), 8.52(s, 1H)

【0073】

<ステップ 2> IC - 7 の合成

【化37】



1 - (ピフェニル - 3 - イル) - 6 - (3 - ニトロピリジン - 2 - イル) - 1 H - インドールの代わりに、上記の<ステップ1>で得られた1 - (4 - (ナフタレン - 1 - イル)フェニル) - 6 - (3 - ニトロピリジン - 4 - イル) - 1 H - インドールを使用する以外は、上述の準備例1の<ステップ4>と同様にしてIC - 7を得た。

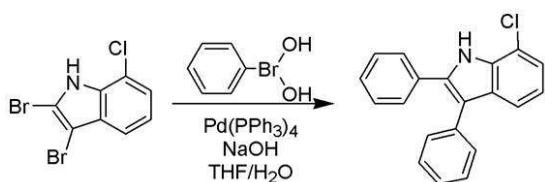
GC - Mass (理論値: 409.16 g/mol、測定値: 409 g/mol)

【0074】

[準備例8] IC - 8の合成

<ステップ1> 7 - クロロ - 2, 3 - ジフェニル - 1 H - インドールの合成

【化38】



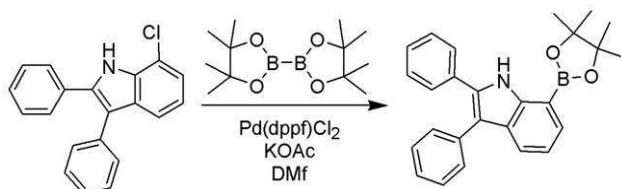
2 - クロロ - 3 - ニトロピリジンと、6 - (4, 4, 5, 5 - テトラメチル - 1, 3, 2 - ジオキサボロラン - 2 - イル) - 1 H - インドールの代わりに、2, 3 - ジブromo - 7 - クロロ - 1 H - インドールと、フェニルボロン酸を使用する以外は、上述の準備例1の<ステップ2>と同様にして7 - クロロ - 2, 3 - ジフェニル - 1 H - インドールを得た。

GC - Mass (理論値: 303.08 g/mol、測定値: 303 g/mol)

【0075】

<ステップ2> 2, 3 - ジフェニル - 7 - (4, 4, 5, 5 - テトラメチル - 1, 3, 2 - ジオキサボロラン - 2 - イル) - 1 H - インドールの合成

【化39】



6 - ブロモ - 1 H - インドールの代わりに、上記の<ステップ1>で得られた7 - クロロ - 2, 3 - ジフェニル - 1 H - インドールを使用する以外は、上述の準備例2の<ステップ1>と同様にして2, 3 - ジフェニル - 7 - (4, 4, 5, 5 - テトラメチル - 1, 3, 2 - ジオキサボロラン - 2 - イル) - 1 H - インドールを得た。

GC - Mass (理論値: 395.21 g/mol、測定値: 395 g/mol)

【0076】

<ステップ3> 7 - (3 - ニトロピリジン - 4 - イル) - 2, 3 - ジフェニル - 1 H - インドールの合成

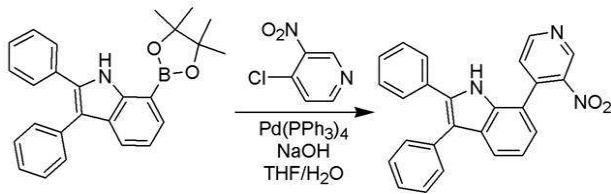
10

20

30

40

【化 4 0】



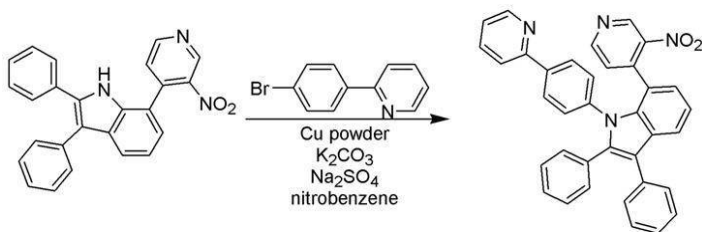
6 - (4 , 4 , 5 , 5 - テトラメチル - 1 , 3 , 2 - ジオキサボロラン - 2 - イル) - 1 H - インドールと、2 - クロロ - 3 - ニトロピリジンの代わりに、上記の<ステップ 2 >で得られた3 - フェニル - 7 - (4 , 4 , 5 , 5 - テトラメチル - 1 , 3 , 2 - ジオキサボロラン - 2 - イル) - 1 H - インドールと、4 - クロロ - 3 - ニトロピリジンを使用する以外は、上述の準備例 1 の<ステップ 2 >と同様にして7 - (3 - ニトロピリジン - 4 - イル) - 2 , 3 - ジフェニル - 1 H - インドールを得た。

G C - M a s s (理論値 : 3 9 1 . 1 3 g / m o l 、 測定値 : 3 9 1 . 1 3 g / m o l)

【 0 0 7 7】

<ステップ 4 > 7 - (3 - ニトロピリジン - 4 - イル) - 2 , 3 - ジフェニル - 1 - (4 - (ピリジン - 2 - イル) フェニル) - 1 H - インドールの合成

【化 4 1】



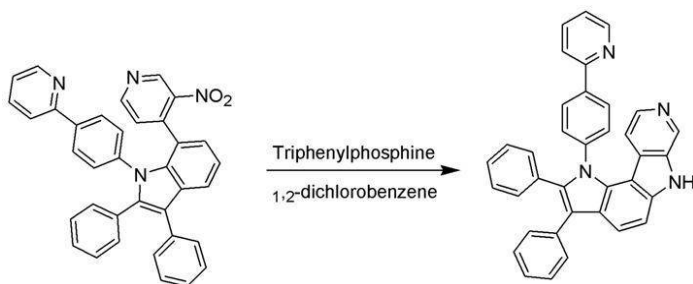
6 - (3 - ニトロピリジン - 2 - イル) - 1 H - インドールと、3 - プロモピフェニルの代わりに、上記の<ステップ 3 >で得られた7 - (3 - ニトロピリジン - 4 - イル) - 2 , 3 - ジフェニル - 1 H - インドールと、2 - (4 - プロモフェニル) ピリジンを使用する以外は、上述の準備例 1 の<ステップ 3 >と同様にして7 - (3 - ニトロピリジン - 4 - イル) - 2 , 3 - ジフェニル - 1 - (4 - (ピリジン - 2 - イル) フェニル) - 1 H - インドールを得た。

G C - M a s s (理論値 : 5 4 4 . 1 9 g / m o l 、 測定値 : 5 4 4 g / m o l)

【 0 0 7 8】

<ステップ 5 > I C - 8 の合成

【化 4 2】



1 - (ピフェニル - 3 - イル) - 6 - (3 - ニトロピリジン - 2 - イル) - 1 H - インドールの代わりに、上記の<ステップ 1 >で得られた7 - (3 - ニトロピリジン - 4 - イル) - 2 , 3 - ジフェニル - 1 - (4 - (ピリジン - 2 - イル) フェニル) - 1 H - イ

10

20

30

40

50

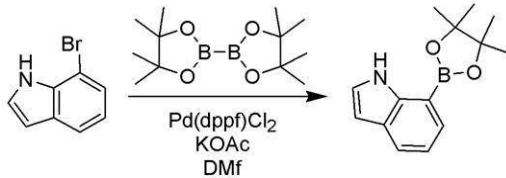
ドールを使用する以外は、上述の準備例 1 の<ステップ 4>と同様にして I C - 8 を得た。

G C - M a s s (理 論 値 : 5 1 2 . 2 0 g / m o l 、 測 定 値 : 5 1 2 g / m o l)
【 0 0 7 9 】

[準備例 9] I C - 9 の合成

<ステップ 1> 7 - (4 , 4 , 5 , 5 - テトラメチル - 1 , 3 , 2 - ジオキサボロラン - 2 - イル) - 1 H - インドールの合成

【化 4 3】



10

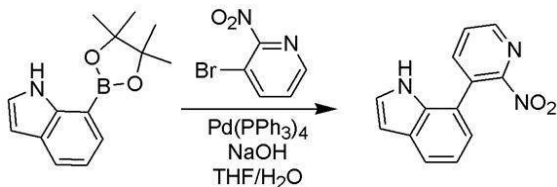
6 - ブロモ - 1 H - インドールの代わりに、7 - ブロモ - 1 H - インドールを使用する
以外は、上述の準備例 1 の<ステップ 1>と同様にして 7 - (4 , 4 , 5 , 5 - テトラメ
チル - 1 , 3 , 2 - ジオキサボロラン - 2 - イル) - 1 H - インドールを得た。

¹H-NMR: 1.25(s, 12H), 6.43(d, 1H), 7.25(d, 1H), 7.45(t, 1H), 7.56(d, 1H), 7.71
(d, 1H), 8.22(s, 1H)

【 0 0 8 0 】

<ステップ 2> 7 - (2 - ニトロピリジン - 3 - イル) - 1 H - インドールの合成

【化 4 4】



20

6 - (4 , 4 , 5 , 5 - テトラメチル - 1 , 3 , 2 - ジオキサボロラン - 2 - イル) -
1 H - インドールと、2 - クロロ - 3 - ニトロピリジンの代わりに、上記の<ステップ 1
>で得られた 7 - (4 , 4 , 5 , 5 - テトラメチル - 1 , 3 , 2 - ジオキサボロラン - 2
- イル) - 1 H - インドールと、3 - ブロモ - 2 - ニトロピリジンを使用する以外は、上
述の準備例 1 の<ステップ 2>と同様にして 7 - (2 - ニトロピリジン - 3 - イル) - 1
H - インドールを得た。

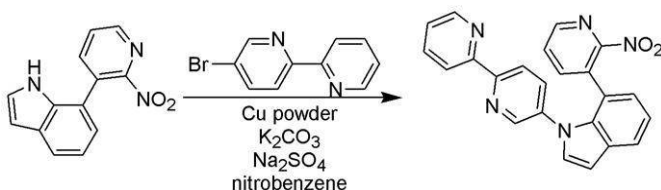
30

¹H-NMR: 6.45(d, 1H), 7.26(d, 1H), 7.44(t, 1H), 7.55(d, 1H), 7.72(d, 1H), 8.
22(m, 2H), 8.41(d, 1H), 8.52(d, 1H)

【 0 0 8 1 】

<ステップ 3> 1 - (2 , 2 ' - ビピリジン - 5 - イル) - 7 - (2 - ニトロピリジン
- 3 - イル) - 1 H - インドールの合成

【化 4 5】



40

6 - (3 - ニトロピリジン - 2 - イル) - 1 H - インドールと、3 - ブロモビフェニル
の代わりに、上記の<ステップ 2>で得られた 7 - (2 - ニトロピリジン - 3 - イル) -
1 H - インドールと、5 - ブロモ - 2 , 2 ' - ビピリジンを使用する以外は、上述の準備
例 1 の<ステップ 1>と同様にして 1 - (2 , 2 ' - ビピリジン - 5 - イル) - 7 - (2
50

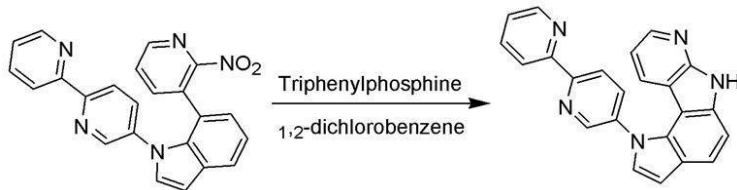
- ニトロピリジン - 3 - イル) - 1 H - インドールを得た。

G C - M a s s (理 論 値 : 3 9 3 . 1 2 g / m o l 、 測 定 値 : 3 9 3 g / m o l)

【 0 0 8 2 】

< ステップ 4 > I C - 9 の 合 成

【 化 4 6 】



10

1 - (ビフェニル - 3 - イル) - 6 - (3 - ニトロピリジン - 2 - イル) - 1 H - インドールの代わりに、上記の<ステップ3>で得られた1 - (2 , 2 ' - ビピリジン - 5 - イル) - 7 - (2 - ニトロピリジン - 3 - イル) - 1 H - インドールを使用する以外は、上述の準備例1の<ステップ4>と同様にしてIC-9を得た。

G C - M a s s (理 論 値 : 3 6 1 . 1 3 g / m o l 、 測 定 値 : 3 6 1 g / m o l)

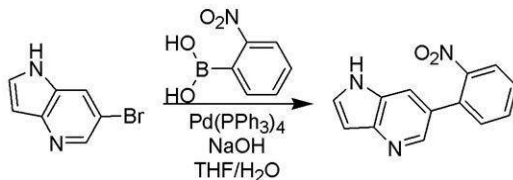
【 0 0 8 3 】

[準備例 1 0] I C - 1 0 の 合 成

< ステップ 1 > 6 - (2 - ニトロフェニル) - 1 H - ピロロ [3 , 2 - b] ピリジンの合成

20

【 化 4 7 】



6 - (4 , 4 , 5 , 5 - テトラメチル - 1 , 3 , 2 - ジオキサボロラン - 2 - イル) - 1 H - インドールと、2 - クロロ - 3 - ニトロピリジンの代わりに、6 - プロモ - 1 H - ピロロ [3 , 2 - b] ピリジンと、2 - ニトロフェニルボロン酸を使用する以外は、上述の準備例1の<ステップ2>と同様にして6 - (2 - ニトロフェニル) - 1 H - ピロロ [3 , 2 - b] ピリジンを得た。

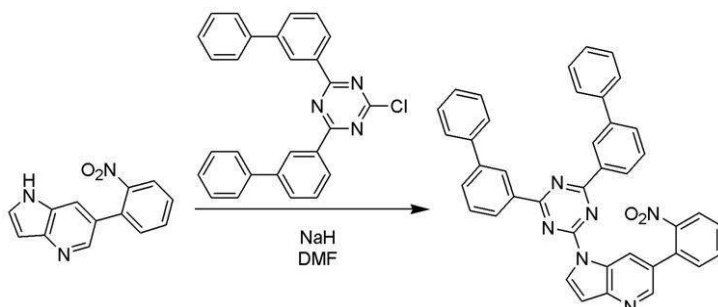
30

¹H-NMR: 6.45(d, 1H), 7.53(d, 1H), 7.67(t, 1H), 7.97(t, 1H), 7.97(s, 1H), 8.03(m, 2H), 8.23(s, 1H), 8.52(s, 1H)

【 0 0 8 4 】

< ステップ 2 > 1 - (4 , 6 - ジ (ビフェニル - 3 - イル) - 1 , 3 , 5 - トリアジン - 2 - イル) - 6 - (2 - ニトロフェニル) - 1 H - ピロロ [3 , 2 - b] ピリジンの合成

【 化 4 8 】



40

7 - (4 - ニトロピリジン - 3 - イル) - 3 - フェニル - 1 H - インドールと、2 - ク

50

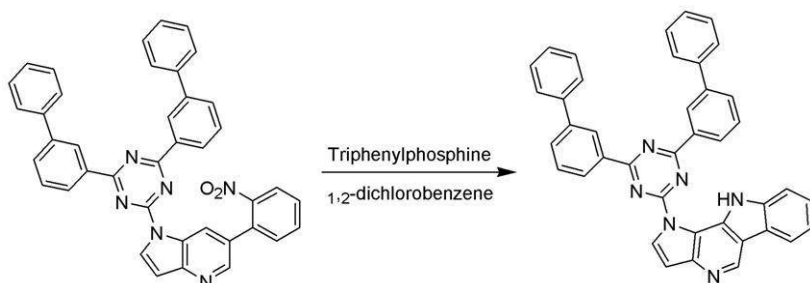
ロロ - 4 , 6 - ジフェニル - 1 , 3 , 5 - トリアジン の代わりに、上記の <ステップ 1 > で得られた 6 - (2 - ニトロフェニル) - 1 H - ピロロ [3 , 2 - b] ピリジン と、2 , 4 - ジ (ビフェニル - 3 - イル) - 6 - クロロ - 1 , 3 , 5 - トリアジン を使用する以外は、上述の準備例 5 の <ステップ 5 > と同様にして 1 - (4 , 6 - ジ (ビフェニル - 3 - イル) - 1 , 3 , 5 - トリアジン - 2 - イル) - 6 - (2 - ニトロフェニル) - 1 H - ピロロ [3 , 2 - b] ピリジン を得た。

G C - M a s s (理論値 : 6 2 2 . 2 1 g / m o l 、測定値 : 6 2 2 g / m o l)

【 0 0 8 5 】

<ステップ 3 > I C - 1 0 の合成

【化 4 9】



10

1 - (ビフェニル - 3 - イル) - 6 - (3 - ニトロピリジン - 2 - イル) - 1 H - インドールの代わりに、上記の <ステップ 2 > で得られた 1 - (4 , 6 - ジ (ビフェニル - 3 - イル) - 1 , 3 , 5 - トリアジン - 2 - イル) - 6 - (2 - ニトロフェニル) - 1 H - ピロロ [3 , 2 - b] ピリジン を使用する以外は、上述の準備例 1 の <ステップ 4 > と同様にして I C - 1 0 を得た。

20

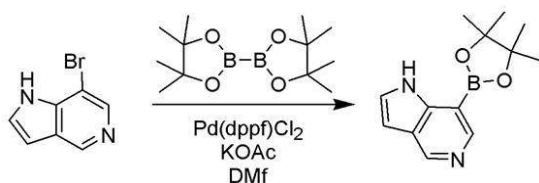
G C - M a s s (理論値 : 5 9 0 . 2 2 g / m o l 、測定値 : 5 9 0 g / m o l)

【 0 0 8 6 】

[準備例 1 1] I C - 1 1 の合成

<ステップ 2 > 7 - (4 , 4 , 5 , 5 - テトラメチル - 1 , 3 , 2 - ジオキサボロラン - 2 - イル) - 1 H - ピロロ [3 , 2 - c] ピリジンの合成

【化 5 0】



30

6 - ブロモ - 1 H - インドールの代わりに、7 - ブロモ - 1 H - ピロロ [3 , 2 - c] ピリジン を使用する以外は、上述の準備例 1 の <ステップ 1 > と同様にして 7 - (4 , 4 , 5 , 5 - テトラメチル - 1 , 3 , 2 - ジオキサボロラン - 2 - イル) - 1 H - ピロロ [3 , 2 - c] ピリジン を得た。

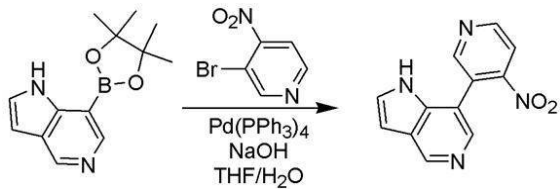
40

$^1\text{H-NMR}$: 1.25(s, 12H), 6.43(d, 1H), 7.25(d, 1H), 8.22(s, 1H), 8.32(s, 1H), 8.41(s, 1H)

【 0 0 8 7 】

<ステップ 2 > 7 - (4 - ニトロピリジン - 3 - イル) - 1 H - ピロロ [3 , 2 - c] ピリジンの合成

【化51】



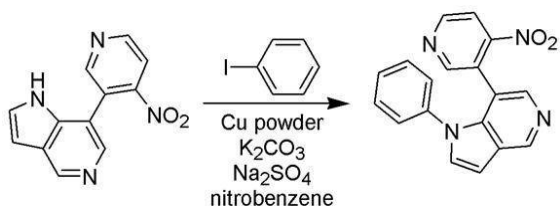
6-(4,4,5,5-テトラメチル-1,3,2-ジオキサボロラン-2-イル)-1H-インドールと、2-クロロ-3-ニトロピリジンの代わりに、上記の<ステップ1>で得られた7-(4,4,5,5-テトラメチル-1,3,2-ジオキサボロラン-2-イル)-1H-ピロロ[3,2-c]ピリジンと、3-ブロモ-4-ニトロピリジンを使用する以外は、上述の準備例1の<ステップ2>と同様にして7-(4-ニトロピリジン-3-イル)-1H-ピロロ[3,2-c]ピリジンを得た。

$^1\text{H-NMR}$: 6.43(d, 1H), 7.25(d, 1H), 7.95(d, 1H), 8.14(d, 1H), 8.22(s, 1H), 8.32(s, 1H), 8.41(m, 2H)

【0088】

<ステップ3> 7-(4-ニトロピリジン-3-イル)-1-フェニル-1H-ピロロ[3,2-c]ピリジンの合成

【化52】



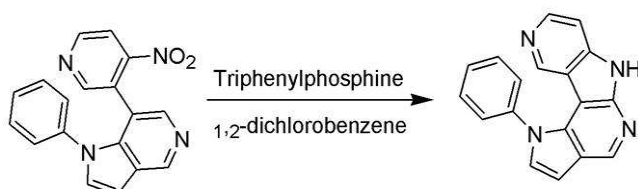
6-(3-ニトロピリジン-2-イル)-1H-インドールと、3-ブロモビフェニルの代わりに、上記の<ステップ2>で得られた7-(4-ニトロピリジン-3-イル)-1H-ピロロ[3,2-c]ピリジンと、ヨードベンゼンを使用する以外は、上述の準備例1の<ステップ3>と同様にして7-(4-ニトロピリジン-3-イル)-1-フェニル-1H-ピロロ[3,2-c]ピリジンを得た。

$^1\text{H-NMR}$: 6.43(d, 1H), 7.25(d, 1H), 7.47(m, 3H), 7.56(d, 2H), 7.95(d, 1H), 8.14(d, 1H), 8.22(s, 1H), 8.32(s, 1H), 8.41(m, 2H)

【0089】

<ステップ4> IC-11の合成

【化53】



1-(ビフェニル-3-イル)-6-(3-ニトロピリジン-2-イル)-1H-インドールの代わりに、上記の<ステップ3>で得られた7-(4-ニトロピリジン-3-イル)-1-フェニル-1H-ピロロ[3,2-c]ピリジンを使用する以外は、上述の準備例1の<ステップ4>と同様にしてIC-11を得た。

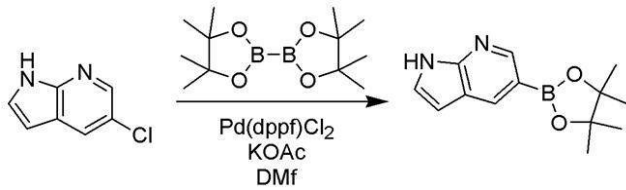
$^1\text{H-NMR}$: 6.44(d, 1H), 7.26(d, 1H), 7.46(m, 3H), 7.55(d, 2H), 7.96(d, 1H), 8.15(d, 1H), 8.23(m, 2H), 8.32(s, 1H)

【0090】

[準備例 1 2] I C - 1 2 の合成

<ステップ 1> 5 - (4 , 4 , 5 , 5 - テトラメチル - 1 , 3 , 2 - ジオキサボロラン - 2 - イル) - 1 H - ピロロ [2 , 3 - b] ピリジンの合成

【化 5 4】



10

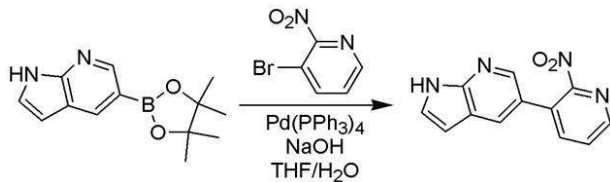
6 - プロモ - 1 H - インドールの代わりに、5 - クロロ - 1 H - ピロロ [2 , 3 - b] ピリジンを使用する以外は、上述の準備例 1 の <ステップ 1> と同様にして 5 - (4 , 4 , 5 , 5 - テトラメチル - 1 , 3 , 2 - ジオキサボロラン - 2 - イル) - 1 H - ピロロ [2 , 3 - b] ピリジンを得た。

¹H-NMR: 1.25(s, 12H), 6.43(d, 1H), 7.25(d, 1H), 8.22(s, 1H), 8.32(s, 1H), 8.41(s, 1H)

【 0 0 9 1 】

<ステップ 2> 5 - (2 - ニトロピリジン - 3 - イル) - 1 H - ピロロ [2 , 3 - b] ピリジンの合成

【化 5 5】



20

6 - (4 , 4 , 5 , 5 - テトラメチル - 1 , 3 , 2 - ジオキサボロラン - 2 - イル) - 1 H - インドールと、2 - クロロ - 3 - ニトロピリジンの代わりに、上記の <ステップ 1> で得られた 5 - (4 , 4 , 5 , 5 - テトラメチル - 1 , 3 , 2 - ジオキサボロラン - 2 - イル) - 1 H - ピロロ [2 , 3 - b] ピリジンと、3 - プロモ - 2 - ニトロピリジンを使用する以外は、上述の準備例 1 の <ステップ 2> と同様にして 5 - (2 - ニトロピリジン - 3 - イル) - 1 H - ピロロ [2 , 3 - b] ピリジンを得た。

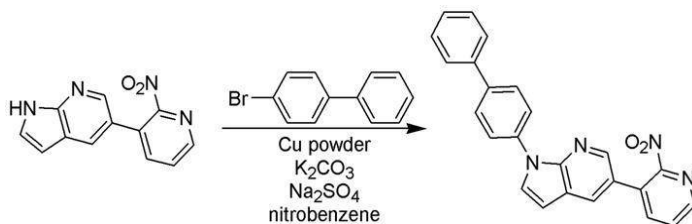
30

¹H-NMR: 6.44(d, 1H), 7.26(d, 1H), 8.21(m, 2H), 8.32(s, 1H), 8.41(m, 2H), 8.53(d, 1H)

【 0 0 9 2 】

<ステップ 3> 1 - (ビフェニル - 4 - イル) - 5 - (2 - ニトロピリジン - 3 - イル) - 1 H - ピロロ [2 , 3 - b] ピリジンの合成

【化 5 6】



40

6 - (3 - ニトロピリジン - 2 - イル) - 1 H - インドールと、3 - プロモビフェニルの代わりに、上記の <ステップ 2> で得られた 5 - (2 - ニトロピリジン - 3 - イル) - 1 H - ピロロ [2 , 3 - b] ピリジンと、4 - プロモビフェニルを使用する以外は、上述の準備例 1 の <ステップ 3> と同様にして 1 - (ビフェニル - 4 - イル) - 5 - (2 - ニトロピリジン - 3 - イル) - 1 H - ピロロ [2 , 3 - b] ピリジンを得た。

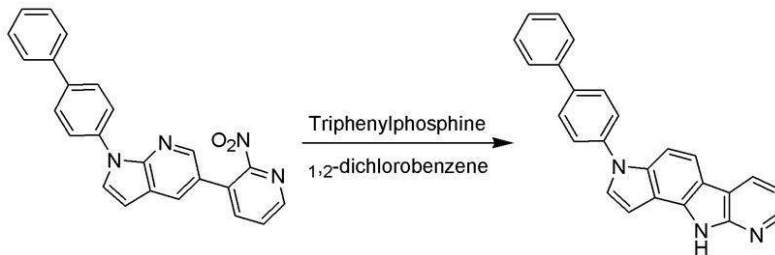
50

¹H-NMR: 6.45(d, 1H), 7.25(d, 1H), 7.41(m, 1H), 7.52(m, 4H), 7.68(d, 2H), 7.79(d, 2H), 8.22(m, 2H), 8.42(m, 2H), 8.52(d, 1H)

【0093】

<ステップ4> IC-12の合成

【化57】



10

1-(ピフェニル-3-イル)-6-(3-ニトロピリジン-2-イル)-1H-インドールの代わりに、上記の<ステップ3>で得られた1-(ピフェニル-4-イル)-5-(2-ニトロピリジン-3-イル)-1H-ピロロ[2,3-b]ピリジンを使用する以外は、上述の準備例1の<ステップ4>と同様にしてIC-12を得た。

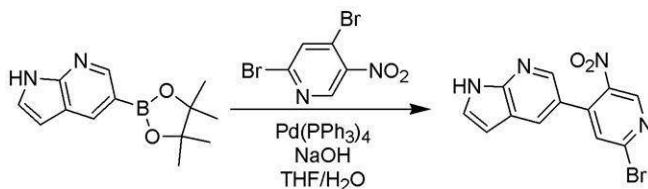
¹H-NMR: 6.45(d, 1H), 7.25(d, 1H), 7.41(m, 1H), 7.52(m, 4H), 7.68(d, 2H), 7.79(d, 2H), 8.22(m, 2H), 8.32(s, 1H), 8.42(m, 2H)

【0094】

[準備例13] IC-13の合成

<ステップ1> 5-(2-ブロモ-5-ニトロピリジン-4-イル)-1H-ピロロ[2,3-b]ピリジンの合成

【化58】



30

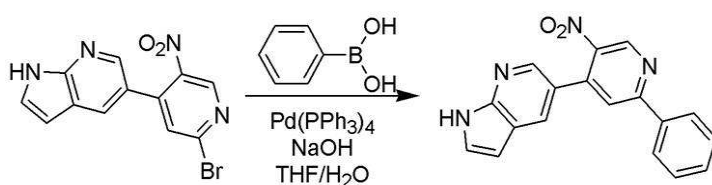
6-(4,4,5,5-テトラメチル-1,3,2-ジオキサボロラン-2-イル)-1H-インドールと、2-クロロ-3-ニトロピリジンの代わりに、上述の準備例12の<ステップ1>で得られた5-(4,4,5,5-テトラメチル-1,3,2-ジオキサボロラン-2-イル)-1H-ピロロ[2,3-b]ピリジンと、2,4-ジブロモ-5-ニトロピリジンを使用する以外は、上述の準備例1の<ステップ2>と同様にして5-(2-ブロモ-5-ニトロピリジン-4-イル)-1H-ピロロ[2,3-b]ピリジンを得た。

¹H-NMR: 6.43(d, 1H), 7.25(d, 1H), 8.25(m, 2H), 8.32(s, 1H), 8.41(s, 1H), 8.54(s, 1H)

【0095】

<ステップ2> 5-(5-ニトロ-2-フェニルピリジン-4-イル)-1H-ピロロ[2,3-b]ピリジンの合成

【化59】



40

6-(4,4,5,5-テトラメチル-1,3,2-ジオキサボロラン-2-イル)-

50

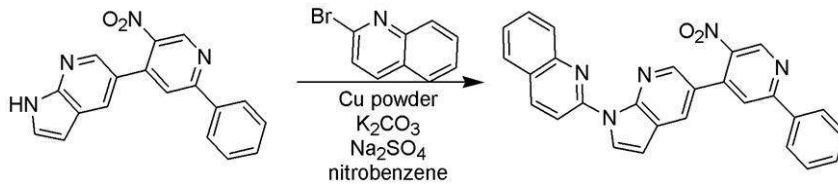
1 H - インドールと、2 - クロロ - 3 - ニトロピリジンの代わりに、上記の <ステップ 1> で得られた 5 - (2 - プロモ - 5 - ニトロピリジン - 4 - イル) - 1 H - ピロロ[2, 3 - b]ピリジンと、フェニルボロン酸を使用する以外は、上述の準備例 1 の <ステップ 2> と同様にして 5 - (5 - ニトロ - 2 - フェニルピリジン - 4 - イル) - 1 H - ピロロ[2, 3 - b]ピリジンを得た。

¹H-NMR: 6.43(d, 1H), 7.25(d, 1H), 7.47(m, 1H), 7.54(d, 2H), 7.86(d, 2H), 8.25(m, 2H), 8.32(s, 1H), 8.41(s, 1H), 8.50(s, 1H)

【0096】

<ステップ 3> 2 - (5 - (5 - ニトロ - 2 - フェニルピリジン - 4 - イル) - 1 H - ピロロ[2, 3 - b]ピリジン - 1 - イル)キノリンの合成

【化 60】



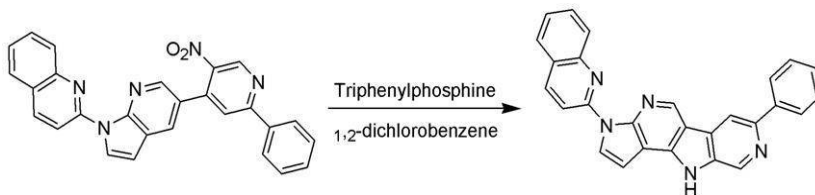
6 - (3 - ニトロピリジン - 2 - イル) - 1 H - インドールの代わりに、上記の <ステップ 2> で得られた 5 - (5 - ニトロ - 2 - フェニルピリジン - 4 - イル) - 1 H - ピロロ[2, 3 - b]ピリジンと、2 - プロモキノリンを使用する以外は、上述の準備例 1 の <ステップ 3> と同様にして 2 - (5 - (5 - ニトロ - 2 - フェニルピリジン - 4 - イル) - 1 H - ピロロ[2, 3 - b]ピリジン - 1 - イル)キノリンを得た。

GC - Mass (理論値: 443.14 g/mol、測定値: 443 g/mol)

【0097】

<ステップ 4> IC - 13 の合成

【化 61】



1 - (ビフェニル - 3 - イル) - 6 - (3 - ニトロピリジン - 2 - イル) - 1 H - インドールの代わりに、上記の <ステップ 3> で得られた 2 - (5 - (5 - ニトロ - 2 - フェニルピリジン - 4 - イル) - 1 H - ピロロ[2, 3 - b]ピリジン - 1 - イル)キノリンを使用する以外は、上述の準備例 1 の <ステップ 4> と同様にして IC - 13 を得た。

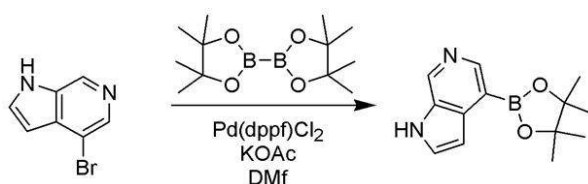
GC - Mass (理論値: 411.15 g/mol、測定値: 411 g/mol)

【0098】

[準備例 14] IC - 14 の合成

<ステップ 1> 4 - (4, 4, 5, 5 - テトラメチル - 1, 3, 2 - ジオキサボロラン - 2 - イル) - 1 H - ピロロ[2, 3 - c]ピリジンの合成

【化 62】



10

20

30

40

50

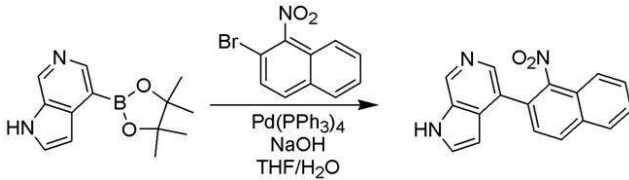
6 - ブロモ - 1 H - インドールの代わりに、4 - ブロモ - 1 H - ピロロ [2 , 3 - c]
ピリジンを使用する以外は、上述の準備例 1 の <ステップ 1 > と同様に 4 - (4 , 4
, 5 , 5 - テトラメチル - 1 , 3 , 2 - ジオキサボロラン - 2 - イル) - 1 H - ピロロ [2 , 3 - c]
ピリジンを得た。

¹H-NMR: 1.24(s, 12H), 6.44(d, 1H), 7.24(d, 1H), 8.41(s, 2H)

【 0 0 9 9 】

<ステップ 2 > 4 - (1 - ニトロナフタレン - 2 - イル) - 1 H - ピロロ [2 , 3 - c]
ピリジンの合成

【化 6 3】



10

6 - (4 , 4 , 5 , 5 - テトラメチル - 1 , 3 , 2 - ジオキサボロラン - 2 - イル) -
1 H - インドールと、2 - クロロ - 3 - ニトロピリジンの代わりに、上記の <ステップ 1
> で得られた 4 - (4 , 4 , 5 , 5 - テトラメチル - 1 , 3 , 2 - ジオキサボロラン - 2
- イル) - 1 H - ピロロ [2 , 3 - c] ピリジンと、2 - ブロモ - 1 - ニトロナフタレン
を使用する以外は、上述の準備例 1 <ステップ 2 > と同様に 4 - (1 - ニトロナフタ
レン - 2 - イル) - 1 H - ピロロ [2 , 3 - c] ピリジンを得た。

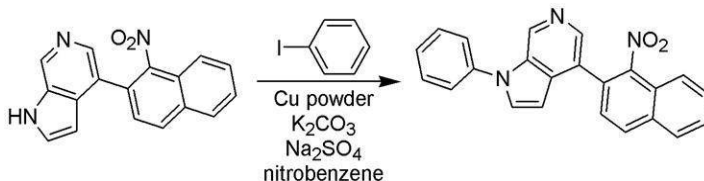
20

¹H-NMR: 6.45(d, 1H), 7.25(d, 1H), 7.76(m, 2H), 7.85(m, 2H), 7.98(m, 2H), 8.
42(s, 2H)

【 0 1 0 0 】

<ステップ 3 > 4 - (1 - ニトロナフタレン - 2 - イル) - 1 - フェニル - 1 H - ピロ
ロ [2 , 3 - c] ピリジンの合成

【化 6 4】



30

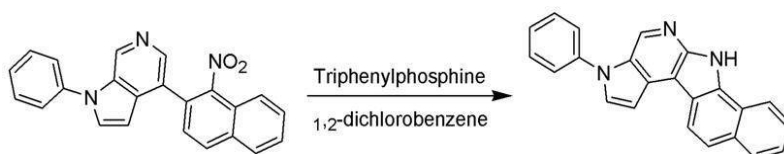
6 - (3 - ニトロピリジン - 2 - イル) - 1 H - インドールと、3 - ブロモビフェニル
の代わりに、上記の <ステップ 2 > で得られた 4 - (1 - ニトロナフタレン - 2 - イル)
- 1 H - ピロロ [2 , 3 - c] ピリジンと、ヨードベンゼンを使用する以外は、上述の準
備例 1 の <ステップ 3 > と同様に 4 - (1 - ニトロナフタレン - 2 - イル) - 1 - フェ
ニル - 1 H - ピロロ [2 , 3 - c] ピリジンを得た。

G C - M a s s (理論値 : 3 6 5 . 1 2 g / m o l 、 測定値 : 3 6 5 g / m o l)

【 0 1 0 1 】

<ステップ 4 > I C - 1 4 の合成

【化 6 5】



40

1 - (ビフェニル - 3 - イル) - 6 - (3 - ニトロピリジン - 2 - イル) - 1 H - イン
ドールの代わりに、上記の <ステップ 3 > で得られた 4 - (1 - ニトロナフタレン - 2 -

50

イル) - 1 - フェニル - 1 H - ピロロ [2 , 3 - c] ピリジンを使用する以外は、上述の準備例 1 の <ステップ 4 > と同様にして IC - 1 4 を得た。

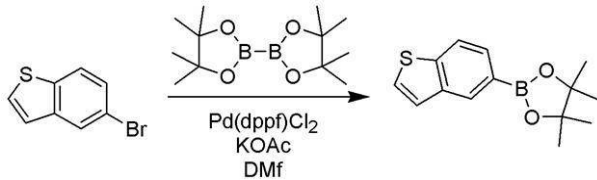
GC - Mass (理論値 : 333.13 g/mol、測定値 : 333 g/mol)

【0102】

[準備例 15] IC - 1 5 の合成

<ステップ 1 > 2 - (ベンゾ [b] チオフェン - 5 - イル) - 4 , 4 , 5 , 5 - テトラメチル - 1 , 3 , 2 - ジオキサボロランの合成

【化 6 6】



10

6 - プロモ - 1 H - インドールの代わりに、5 - プロモベンゾ [b] チオフェンを使用する以外は、上述の準備例 1 の <ステップ 1 > と同様にして 2 - (ベンゾ [b] チオフェン - 5 - イル) - 4 , 4 , 5 , 5 - テトラメチル - 1 , 3 , 2 - ジオキサボロランを得た。

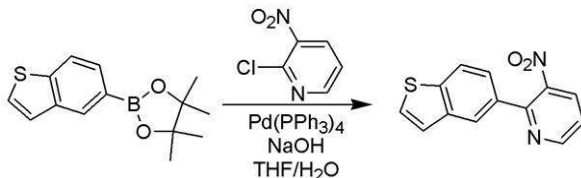
¹H-NMR: 1.24(s, 12H), 7.65(d, 1H), 7.85(d, 1H), 7.98(d, 1H), 8.07(d, 1H), 8.12(s, 1H)

20

【0103】

<ステップ 2 > 2 - (ベンゾ [b] チオフェン - 5 - イル) - 3 - ニトロピリジンの合成

【化 6 7】



30

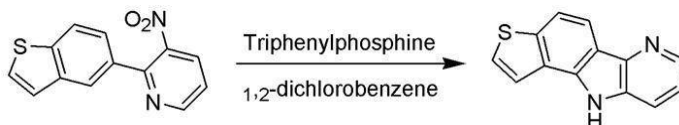
6 - (4,4,5,5-テトラメチル-1,3,2-ジオキサボロラン-2-イル) - 1 H - インドールの代わりに、上記の <ステップ 1 > で得られた 2 - (ベンゾ [b] チオフェン - 5 - イル) - 4 , 4 , 5 , 5 - テトラメチル - 1 , 3 , 2 - ジオキサボロランを使用する以外は、上述の準備例 1 の <ステップ 2 > と同様にして 2 - (ベンゾ [b] チオフェン - 5 - イル) - 3 - ニトロピリジンを得た。

¹H-NMR: 7.66(d, 1H), 7.89(d, 1H), 7.97(d, 1H), 8.01(d, 1H), 8.09(m, 2H), 8.14(s, 1H), 8.42(d, 1H)

【0104】

<ステップ 3 > IC - 1 5 の合成

【化 6 8】



40

1 - (ピフェニル - 3 - イル) - 6 - (3 - ニトロピリジン - 2 - イル) - 1 H - インドールの代わりに、上記の <ステップ 2 > で得られた 2 - (ベンゾ [b] チオフェン - 5 - イル) - 3 - ニトロピリジンを使用する以外は、上述の準備例 1 の <ステップ 4 > と同様にして IC - 1 5 を得た。

¹H-NMR: 7.65(d, 1H), 7.86(d, 1H), 7.98(d, 1H), 8.03(d, 1H), 8.10(m, 2H), 8

50

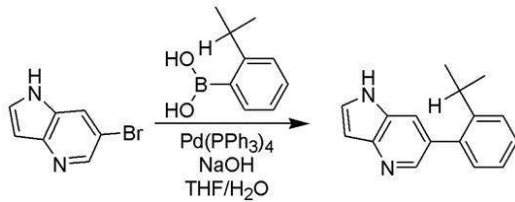
.32(s, 1H), 8.41(d, 1H)

【 0 1 0 5 】

[準備例 1 6] I C - 1 6 の合成

<ステップ 1> 6 - (2 - イソプロピルフェニル) - 1 H - ピロロ [3 , 2 - b] ピリジンの合成

【化 6 9】



10

6 - (4 , 4 , 5 , 5 - テトラメチル - 1 , 3 , 2 - ジオキサボロラン - 2 - イル) - 1 H - インドールと、2 - クロロ - 3 - ニトロピリジンの代わりに、6 - ブロモ - 1 H - ピロロ [3 , 2 - b] ピリジンと、2 - イソプロピルフェニルボロン酸を使用する以外は、上述の準備例 1 の<ステップ 2>と同様にして 6 - (2 - イソプロピルフェニル) - 1 H - ピロロ [3 , 2 - b] ピリジンを得た。

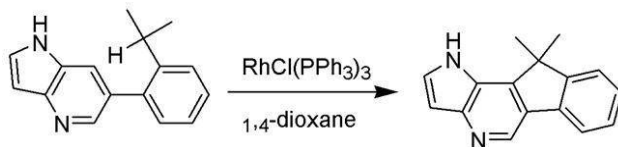
¹H-NMR: 1.20(s, 6H), 2.87(s, 1H), 6.45(d, 1H), 7.25(d, 1H), 7.34(m, 3H), 7.71(d, 1H), 7.97(s, 1H), 8.40(s, 1H)

20

【 0 1 0 6 】

<ステップ 2> I C - 1 6 の合成

【化 7 0】



窒素気流下、上記の<ステップ 1>で得られた 6 - (2 - イソプロピルフェニル) - 1 H - ピロロ [3 , 2 - b] ピリジン (5 g、21.16 mmol) と、RhCl (PPh₃)₃ (97.88 mg、0.5 mol %) を、1,4 - ジオキサン 50 ml に溶かした後、135 で 1 時間攪拌した。反応終了後、溶媒を除去し、カラムクロマトグラフィ (ヘキサン : MC = 3 : 1 (v / v)) で精製して I C - 1 6 (3.92 g、収率 79 %) を得た。

30

¹H NMR: 1.21(s, 6H), 6.44(d, 1H), 7.26(d, 1H), 7.35(m, 3H), 7.72(d, 1H), 8.43(s, 1H)

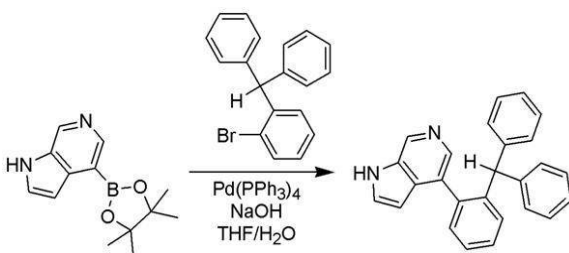
【 0 1 0 7 】

[準備例 1 7] I C - 1 7 の合成

<ステップ 1> 4 - (2 - ベンズヒドリルフェニル) - 1 H - ピロロ [2 , 3 - c] ピリジンの合成

40

【化 7 1】



6 - (4 , 4 , 5 , 5 - テトラメチル - 1 , 3 , 2 - ジオキサボロラン - 2 - イル) -

50

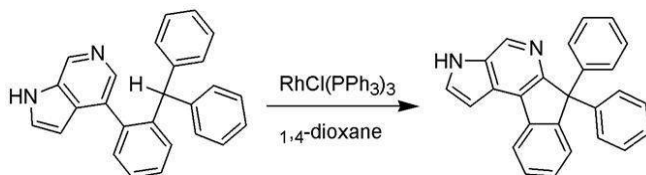
1H-インドールと、2-クロロ-ニトロピリジンの代わりに、上述の準備例14の<ステップ1>で得られた4-(4,4,5,5-テトラメチル-1,3,2-ジオキサボロラン-2-イル)-1H-ピロロ[2,3-c]ピリジンと、((2-ブロモフェニル)メチレン)ジベンゼンを使用する以外は、上述の準備例1の<ステップ2>と同様にして4-(2-ベンズヒドリルフェニル)-1H-ピロロ[2,3-c]ピリジンを得た。

GC-Mass (理論値: 360.16 g/mol、測定値: 360 g/mol)

【0108】

<ステップ2> IC-17の合成

【化72】



10

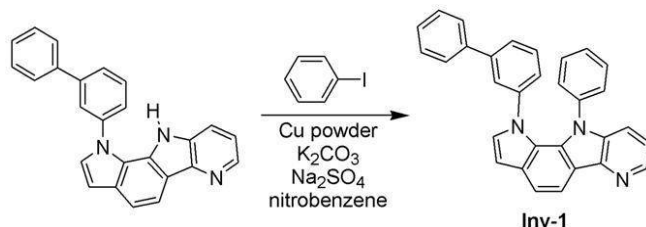
6-(2-イソプロピルフェニル)-1H-ピロロ[3,2-b]ピリジンの代わりに、上記の<ステップ1>で得られた4-(2-ベンズヒドリルフェニル)-1H-ピロロ[2,3-c]ピリジンを使用し、準備例16の<ステップ2>と同様にしてIC-17を得た。

GC-Mass (理論値: 358.15 g/mol、測定値: 358 g/mol)

【0109】

[合成例1] Inv-1の合成

【化73】



30

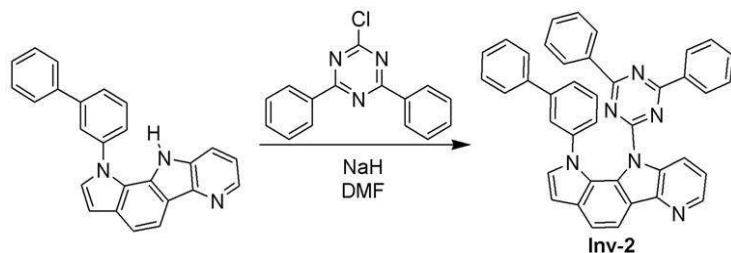
窒素気流下、準備例1で製造された化合物であるIC-1(5g、13.91mmol)、ヨードベンゼン(4.26g、20.87mmol)、Cuパウダー(0.09g、1.39mmol)、K₂CO₃(1.92g、13.91mmol)、Na₂SO₄(1.98g、13.91mmol)、及びニトロベンゼン(100ml)を混合し、190で12時間攪拌した。反応終了後、ニトロベンゼンを除去し、メチレンクロライドで有機層を分離した後、MgSO₄を用いて水を除去した。有機層の溶媒を除去した後、カラムクロマトグラフィ(ヘキサン:EA=3:1(v/v))で精製して、目的化合物であるInv-1(4.60g、収率76%)を得た。

GC-Mass (理論値: 435.17 g/mol、測定値: 435 g/mol)

【0110】

[合成例2] Inv-2の合成

【化74】



50

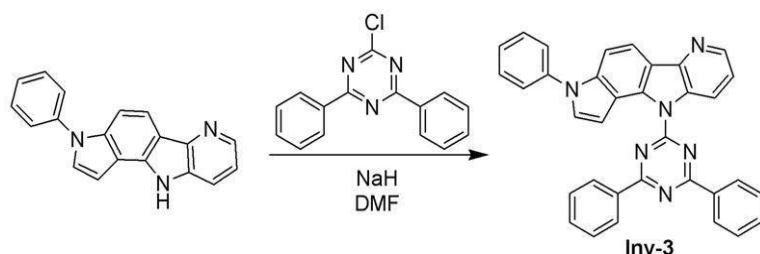
窒素気流下、準備例 1 で製造された化合物である IC - 1 (5 g、13.91 mmol) を、DMF 100 ml に溶かし、ここに NaH (0.50 g、20.87 mmol) を入れ、1 時間攪拌した。ここに DMF 100 ml に溶かした 2 - クロロ - 4, 6 - ジフェニル - 1, 3, 5 - トリアジン (5.59 g、20.87 mmol) を徐々に加えた。3 時間攪拌後、反応を終了させ、混合物のシリカフィルタリングを行い、水とメタノールで洗浄した後、溶媒を除去した。溶媒が除去された固体をカラムクロマトグラフィ (ヘキサン : EA = 1 : 1 (v / v)) で精製して、目的化合物である Inv - 2 (6.00 g、収率 73%) を得た。

GC - Mass (理論値 : 590.22 g / mol、測定値 : 590 g / mol)

【 0111 】

[合成例 3] Inv - 3 の合成

【 化 75 】



10

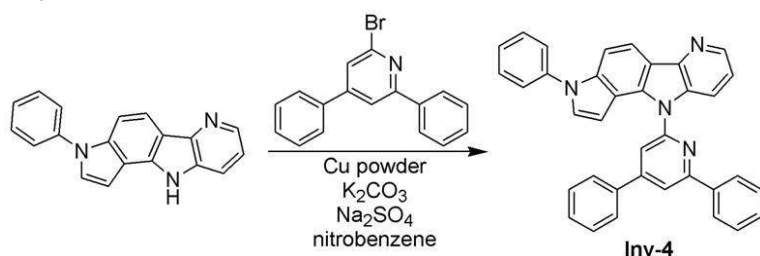
IC - 1 の代わりに、準備例 2 で製造された化合物である IC - 2 を使用する以外は、上記の合成例 2 と同様にして、目的化合物である Inv - 3 (7.63 g、収率 84%) を得た。

GC - Mass (理論値 : 514.19 g / mol、測定値 : 514 g / mol)

【 0112 】

[合成例 4] Inv - 4 の合成

【 化 76 】



20

30

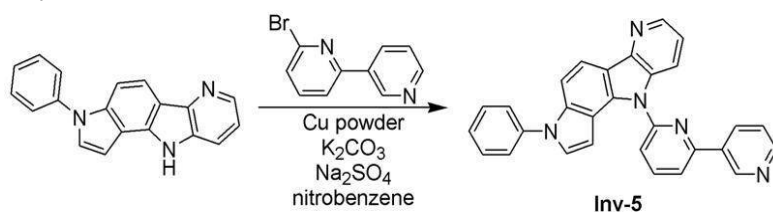
IC - 1 と、ヨードベンゼンの代わりに、準備例 2 で製造された化合物である IC - 2 と、2 - プロモ - 4, 6 - ジフェニルピリジンを使用する以外は、上記の合成例 1 と同様にして、目的化合物である Inv - 4 (6.06 g、収率 67%) を得た。

GC - Mass (理論値 : 512.20 g / mol、測定値 : 512 g / mol)

【 0113 】

[合成例 5] Inv - 5 の合成

【 化 77 】



40

IC - 1 と、ヨードベンゼンの代わりに、準備例 2 で製造された化合物である IC - 2

50

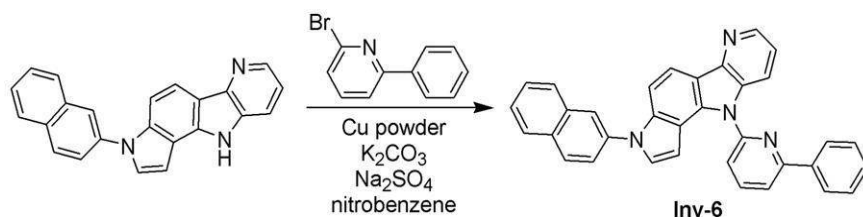
と、6-プロモ-2,3'-ピピリジンを使用する以外は、上記の合成例1と同様にして、目的化合物であるInv-5(4.63g、収率60%)を得た。

GC-Mass(理論値:437.16g/mol、測定値:437g/mol)

【0114】

[合成例6]Inv-6の合成

【化78】



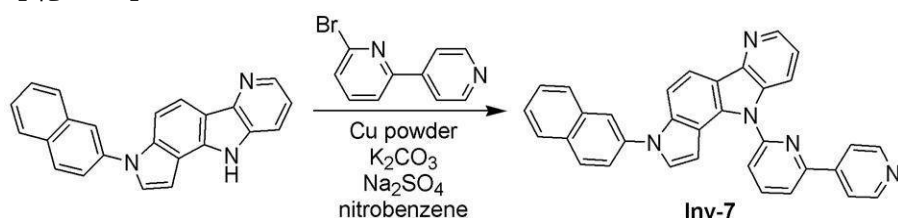
IC-1と、ヨードベンゼンの代わりに、準備例3で製造された化合物であるIC-3と、2-プロモ-6-フェニルピリジンを使用する以外は、上記の合成例1と同様にして、目的化合物であるInv-6(4.09g、収率56%)を得た。

GC-Mass(理論値:486.18g/mol、測定値:486g/mol)

【0115】

[合成例7]Inv-7の合成

【化79】



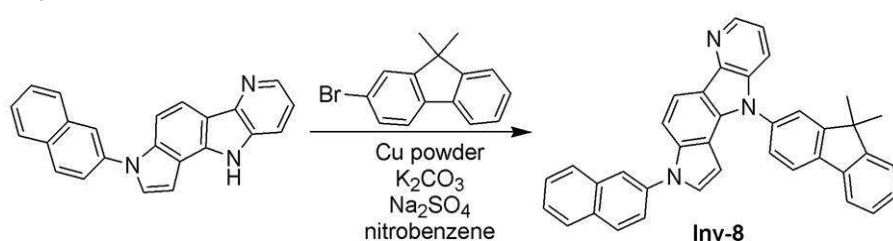
IC-1と、ヨードベンゼンの代わりに、準備例3で製造された化合物であるIC-3と、6-プロモ-2,4'-ピピリジンを使用する以外は、上記の合成例1と同様にして、目的化合物であるInv-7(3.95g、収率54%)を得た。

GC-Mass(理論値:487.18g/mol、測定値:487g/mol)

【0116】

[合成例8]Inv-8の合成

【化80】



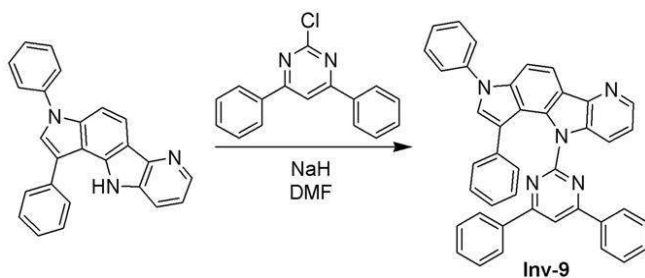
IC-1と、ヨードベンゼンの代わりに、準備例3で製造された化合物であるIC-3と、2-プロモ-9,9-ジメチル-9H-フルオレンを使用する以外は、上記の合成例1と同様にして、目的化合物であるInv-8(5.20g、収率66%)を得た。

GC-Mass(理論値:525.22g/mol、測定値:525g/mol)

【0117】

[合成例9]Inv-9の合成

【化 8 1】



10

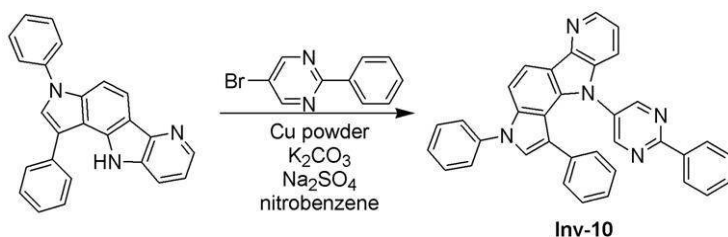
IC - 1と、2 - クロロ - 4 , 6 - ジフェニル - 1 , 3 , 5 - トリアジンの代わりに、準備例 4 で製造された化合物である IC - 4 と、2 - クロロ - 4 , 6 - ジフェニルピリミジンを使用する以外は、上記の合成例 2 と同様にして、目的化合物である Inv - 9 (6 . 1 5 g 、収率 7 5 %) を得た。

GC - Mass (理論値 : 5 8 9 . 2 3 g / mol 、測定値 : 5 8 9 g / mol)

【 0 1 1 8 】

[合成例 1 0] Inv - 1 0 の合成

【化 8 2】



20

IC - 1と、ヨードベンゼンの代わりに、準備例 4 で製造された化合物である IC - 4 と、5 - プロモ - 2 - フェニルピリミジンを使用する以外は、上記の合成例 1 と同様にして、目的化合物である Inv - 1 0 (3 . 6 4 g 、収率 5 1 %) を得た。

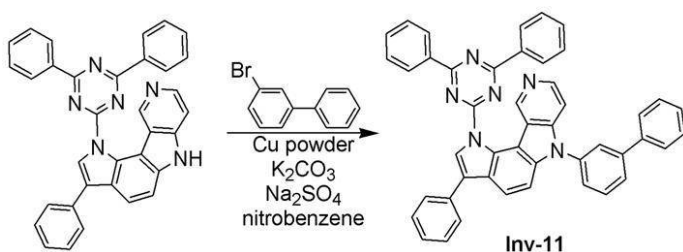
GC - Mass (理論値 : 5 1 3 . 2 0 g / mol 、測定値 : 5 1 3 g / mol)

30

【 0 1 1 9 】

[合成例 1 1] Inv - 1 1 の合成

【化 8 3】



40

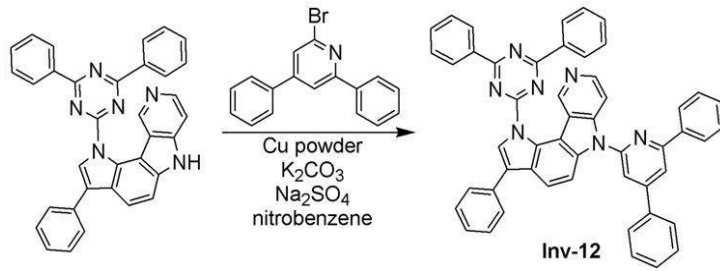
IC - 1と、ヨードベンゼンの代わりに、準備例 5 で製造された化合物である IC - 5 と、3 - プロモビフェニルを使用する以外は、上記の合成例 1 と同様にして、目的化合物である Inv - 1 1 (4 . 6 6 g 、収率 7 2 %) を得た。

GC - Mass (理論値 : 6 6 6 . 2 5 g / mol 、測定値 : 6 6 6 g / mol)

【 0 1 2 0 】

[合成例 1 2] Inv - 1 2 の合成

【化 8 4】



10

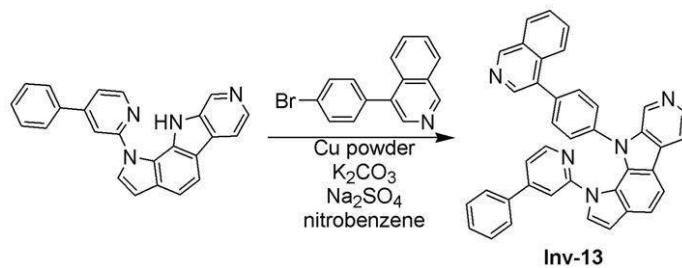
IC - 1と、ヨードベンゼンの代わりに、準備例 5 で製造された化合物である IC - 5 と、2 - プロモ - 4 , 6 - ジフェニルピリジンを使用する以外は、上記の合成例 1 と同様にして、目的化合物である Inv - 12 (4 . 48 g、収率 62 %) を得た。

GC - Mass (理論値 : 743 . 28 g / mol、測定値 : 743 g / mol)

【 0 1 2 1】

[合成例 13] Inv - 13 の合成

【化 8 5】



20

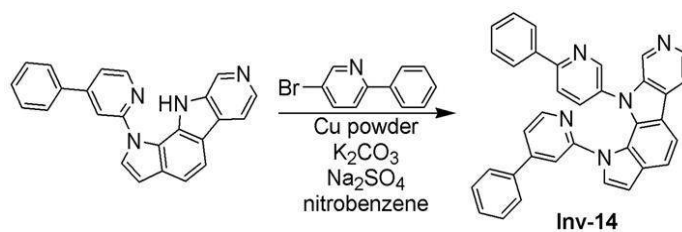
IC - 1と、ヨードベンゼンの代わりに、準備例 6 で製造された化合物である IC - 6 と、4 - (4 - プロモフェニル) イソキノリンを使用する以外は、上記の合成例 1 と同様にして、目的化合物である Inv - 13 (4 . 54 g、収率 58 %) を得た。

GC - Mass (理論値 : 563 . 21 g / mol、測定値 : 563 g / mol)

【 0 1 2 2】

[合成例 14] Inv - 14 の合成

【化 8 6】



30

IC - 1と、ヨードベンゼンの代わりに、準備例 6 で製造された化合物である IC - 6 と、5 - プロモ - 2 - フェニルピリジンを使用する以外は、上記の合成例 1 と同様にして、目的化合物である Inv - 14 (3 . 35 g、収率 47 %) を得た。

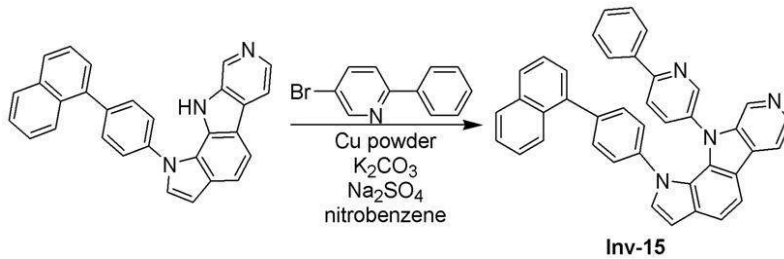
GC - Mass (理論値 : 513 . 20 g / mol、測定値 : 513 g / mol)

【 0 1 2 3】

[合成例 15] Inv - 15 の合成

40

【化 8 7】



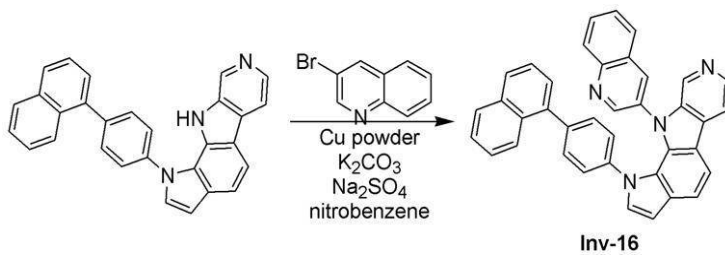
IC - 1 と、ヨードベンゼンの代わりに、準備例 7 で製造された化合物である IC - 7 と、5 - プロモ - 2 - フェニルピリジンを使用する以外は、上記の合成例 1 と同様にして、目的化合物である Inv - 15 (3 . 1 6 g、収率 4 6 %) を得た。

GC - Mass (理論値 : 5 6 2 . 2 2 g / mol、測定値 : 5 6 2 g / mol)

【 0 1 2 4】

[合成例 1 6] Inv - 1 6 の合成

【化 8 8】



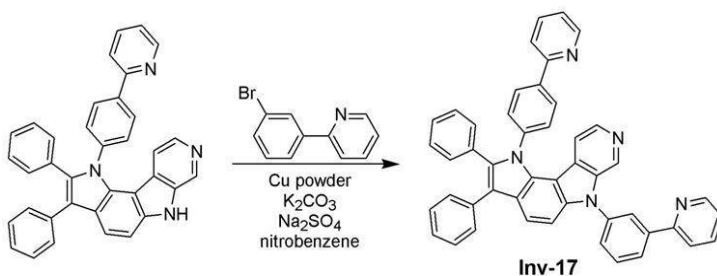
IC - 1 と、ヨードベンゼンの代わりに、準備例 7 で製造された化合物である IC - 7 と、3 - プロモキノリンを使用する以外は、上記の合成例 1 と同様にして、目的化合物である Inv - 1 6 (4 . 0 0 g、収率 6 1 %) を得た。

GC - Mass (理論値 : 5 3 6 . 2 0 g / mol、測定値 : 5 3 6 g / mol)

【 0 1 2 5】

[合成例 1 7] Inv - 1 7 の合成

【化 8 9】



IC - 1 と、ヨードベンゼンの代わりに、準備例 8 で製造された化合物である IC - 8 と、2 - (3 - プロモフェニル) ピリジンを使用する以外は、上記の合成例 1 と同様にして、目的化合物である Inv - 1 7 (4 . 4 2 g、収率 6 8 %) を得た。

GC - Mass (理論値 : 6 6 5 . 2 6 g / mol、測定値 : 6 6 5 g / mol)

【 0 1 2 6】

[合成例 1 8] Inv - 1 8 の合成

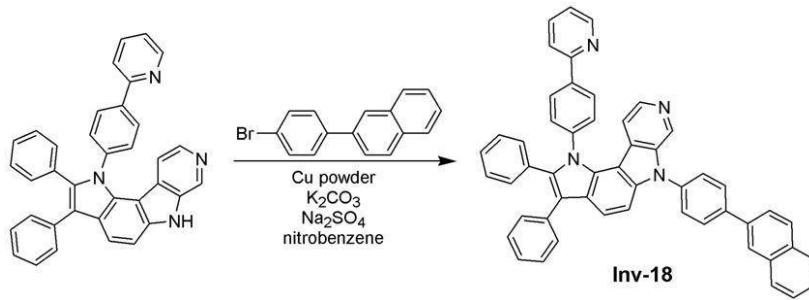
10

20

30

40

【化90】



10

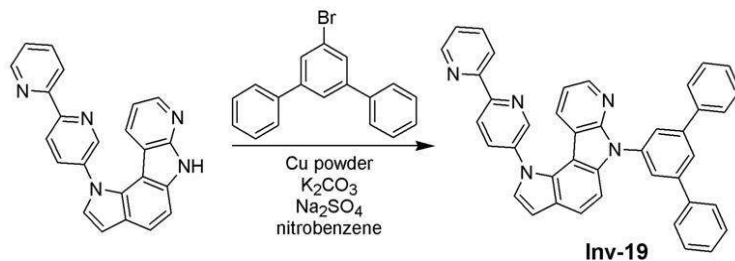
IC-1と、ヨードベンゼンの代わりに、準備例8で製造された化合物であるIC-8と、2-(4-ブロモフェニル)ナフタレンを使用する以外は、上記の合成例1と同様にして、目的化合物であるInv-18(3.97g、収率57%)を得た。

GC-Mass(理論値:714.28g/mol、測定値:714g/mol)

【0127】

[合成例19] Inv-19の合成

【化91】



20

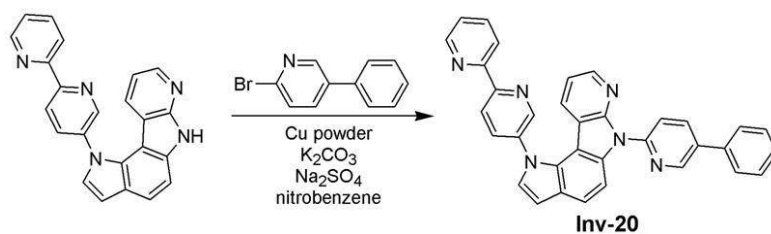
IC-1と、ヨードベンゼンの代わりに、準備例9で製造された化合物であるIC-9と、1-ブロモ-3,5-ジフェニルベンゼンを使用する以外は、上記の合成例1と同様にして、目的化合物であるInv-19(5.14g、収率63%)を得た。

GC-Mass(理論値:589.23g/mol、測定値:589g/mol)

【0128】

[合成例20] Inv-20の合成

【化92】



30

IC-1と、ヨードベンゼンの代わりに、準備例9で製造された化合物であるIC-9と、2-ブロモ-5-フェニルピリジンを使用する以外は、上記の合成例1と同様にして、目的化合物であるInv-20(4.20g、収率59%)を得た。

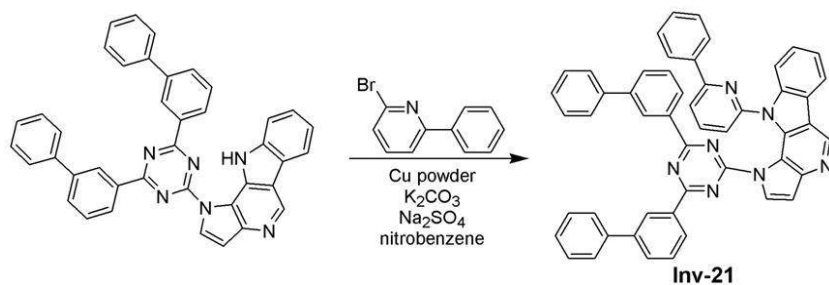
GC-Mass(理論値:514.19g/mol、測定値:514g/mol)

【0129】

[合成例21] Inv-21の合成

40

【化 9 3】



10

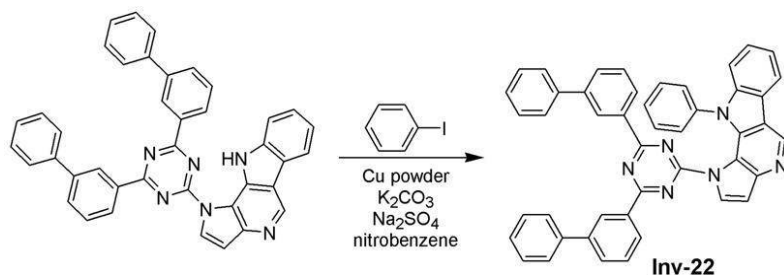
IC - 1と、ヨードベンゼンの代わりに、準備例 10 で製造された化合物である IC - 10 と、2 - ブロモ - 6 - フェニルピリジンを使用する以外は、上記の合成例 1 と同様にして、目的化合物である Inv - 21 (4 . 41 g、収率 70%) を得た。

GC - Mass (理論値 : 743 . 28 g / mol、測定値 : 743 g / mol)

【 0 1 3 0】

[合成例 2 2] Inv - 2 2 の合成

【化 9 4】



20

IC - 1の代わりに、準備例 10 で製造された化合物である IC - 10 を使用する以外は、上記の合成例 1 と同様にして、目的化合物である Inv - 22 (4 . 29 g、収率 76%) を得た。

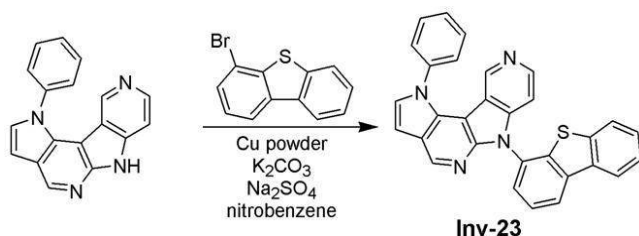
GC - Mass (理論値 : 666 . 25 g / mol、測定値 : 666 g / mol)

30

【 0 1 3 1】

[合成例 2 3] Inv - 2 3 の合成

【化 9 5】



40

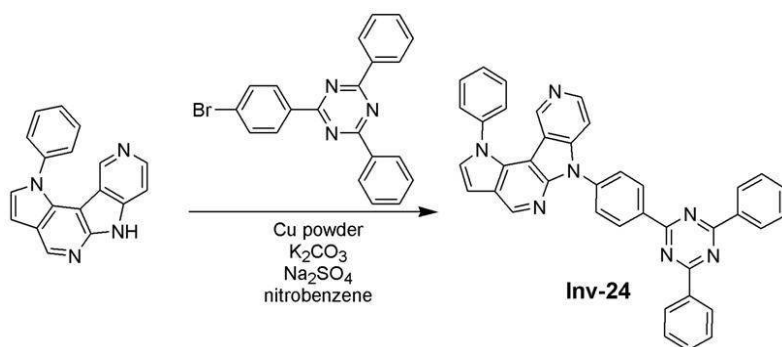
IC - 1と、ヨードベンゼンの代わりに、準備例 11 で製造された化合物である IC - 11 と、4 - ブロモジベンゾ [b , d] チオフェンを使用する以外は、上記の合成例 1 と同様にして、目的化合物である Inv - 23 (5 . 42 g、収率 66%) を得た。

GC - Mass (理論値 : 466 . 13 g / mol、測定値 : 466 g / mol)

【 0 1 3 2】

[合成例 2 4] Inv - 2 4 の合成

【化96】



10

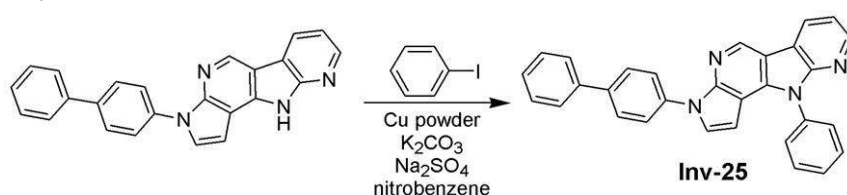
IC-1と、ヨードベンゼンの代わりに、準備例11で製造された化合物であるIC-11と、2-(4-ブロモフェニル)-4,6-ジフェニル-1,3,5-トリアジンを使用する以外は、上記の合成例1と同様にして、目的化合物であるInv-24(7.18g、収率69%)を得た。

GC-Mass(理論値:591.22g/mol、測定値:591g/mol)

【0133】

[合成例25] Inv-25の合成

【化97】



20

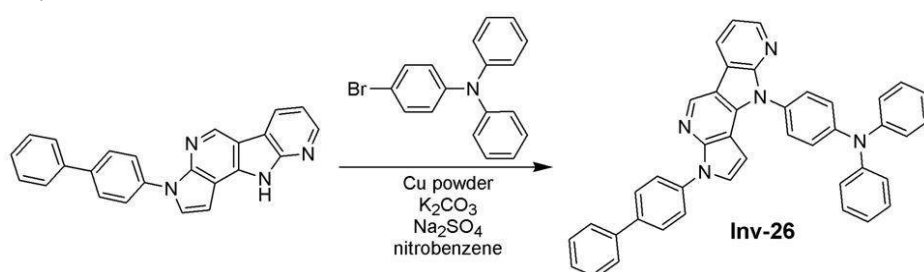
IC-1の代わりに、準備例12で製造された化合物であるIC-12を使用する以外は、上記の合成例1と同様にして、目的化合物であるInv-25(4.54g、収率75%)を得た。

GC-Mass(理論値:436.17g/mol、測定値:436g/mol)

【0134】

[合成例26] Inv-26の合成

【化98】



40

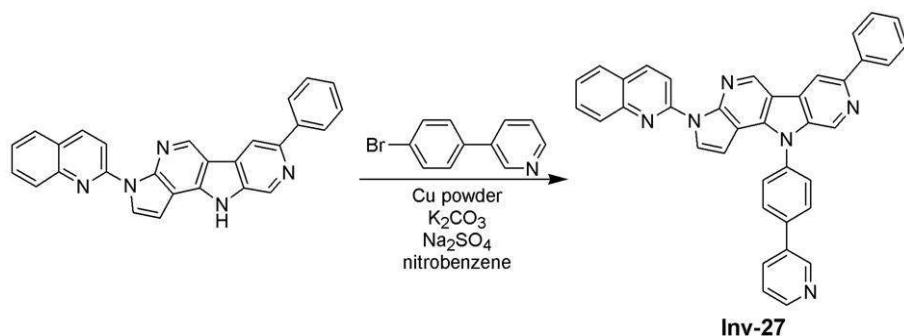
IC-1と、ヨードベンゼンの代わりに、準備例12で製造された化合物であるIC-12と、4-ブロモ-N,N-ジフェニルアニリンを使用する以外は、上記の合成例1と同様にして、目的化合物であるInv-26(4.61g、収率55%)を得た。

GC-Mass(理論値:603.24g/mol、測定値:603g/mol)

【0135】

[合成例27] Inv-27の合成

【化 9 9】



10

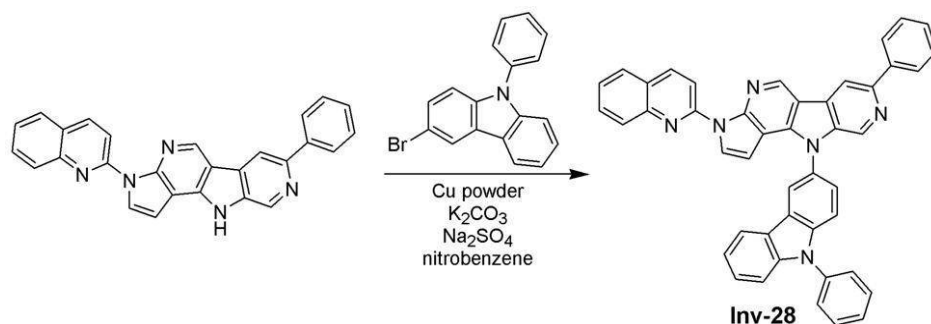
IC - 1と、ヨードベンゼンの代わりに、準備例 13 で製造された化合物である IC - 13 と、3 - (4 - ブロモフェニル) ピリジンを使用する以外は、上記の合成例 1 と同様にして、目的化合物である Inv - 27 (4.32 g、収率 63%) を得た。

GC - Mass (理論値: 564.21 g/mol、測定値: 564 g/mol)

【0136】

[合成例 28] Inv - 28 の合成

【化 100】



20

IC - 1と、ヨードベンゼンの代わりに、準備例 13 で製造された化合物である IC - 13 と、3 - ブロモ - 9 - フェニル - 9H - カルバゾールを使用する以外は、上記の合成例 1 と同様にして、目的化合物である Inv - 28 (5.16 g、収率 65%) を得た。

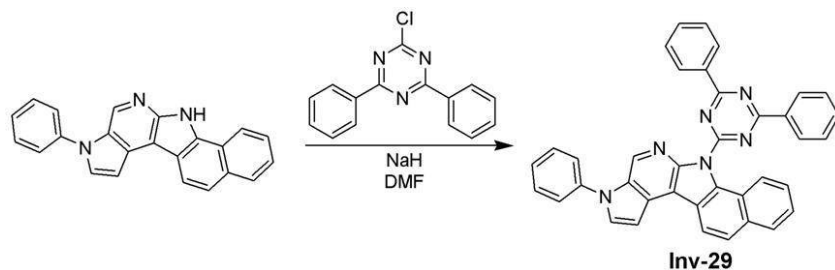
30

GC - Mass (理論値: 652.24 g/mol、測定値: 652 g/mol)

【0137】

[合成例 29] Inv - 29 の合成

【化 101】



40

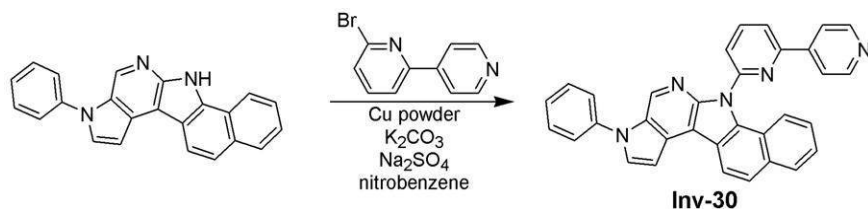
IC - 1の代わりに、準備例 14 で製造された化合物である IC - 14 を使用する以外は、上記の合成例 2 と同様にして、目的化合物である Inv - 29 (6.86 g、収率 81%) を得た。

GC - Mass (理論値: 564.21 g/mol、測定値: 564 g/mol)

【0138】

[合成例 30] Inv - 30 の合成

【化102】



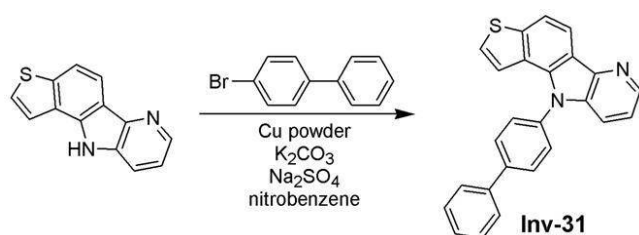
IC-1と、ヨードベンゼンの代わりに、準備例14で製造された化合物であるIC-14と、6-ブロモ-2,4'-ピピリジンを使用する以外は、上記の合成例1と同様にして、目的化合物であるInv-30(4.24g、収率58%)を得た。

GC-Mass(理論値:487.18g/mol、測定値:487g/mol)

【0139】

[合成例31] Inv-31の合成

【化103】



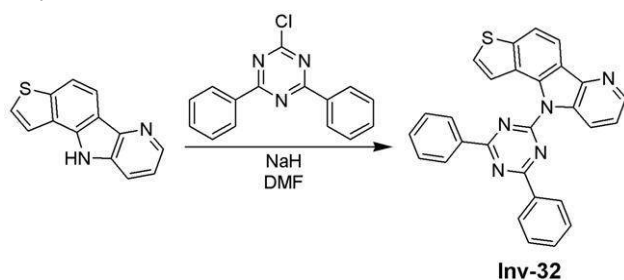
IC-1と、ヨードベンゼンの代わりに、準備例15で製造された化合物であるIC-15と、4-ブロモビフェニルを使用する以外は、上記の合成例1と同様にして、目的化合物であるInv-31(4.03g、収率48%)を得た。

GC-Mass(理論値:376.10g/mol、測定値:376g/mol)

【0140】

[合成例32] Inv-32の合成

【化104】



IC-1の代わりに、準備例15で製造された化合物であるIC-15を使用する以外は、上記の合成例2と同様にして、目的化合物であるInv-32(7.92g、収率78%)を得た。

GC-Mass(理論値:455.12g/mol、測定値:455g/mol)

【0141】

[合成例33] Inv-33の合成

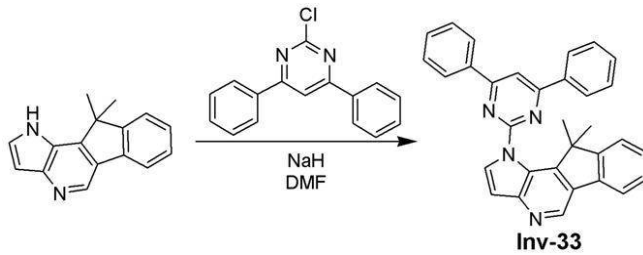
10

20

30

40

【化105】



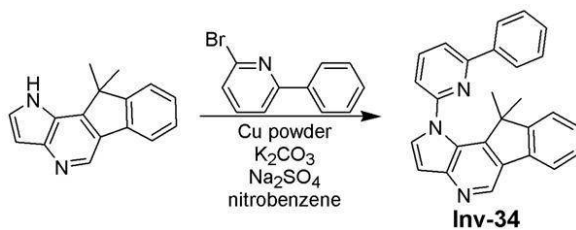
IC-1と、2-クロロ-4,6-ジフェニル-1,3,5-トリアジンの代わりに、
準備例16で製造された化合物であるIC-16と、2-クロロ-4,6-ジフェニルピ
リミジンを使用する以外は、上記の合成例2と同様にして、目的化合物であるInv-3
3(6.34g、収率64%)を得た。

GC-Mass(理論値:464.20g/mol、測定値:464g/mol)

【0142】

[合成例34] Inv-34の合成

【化106】



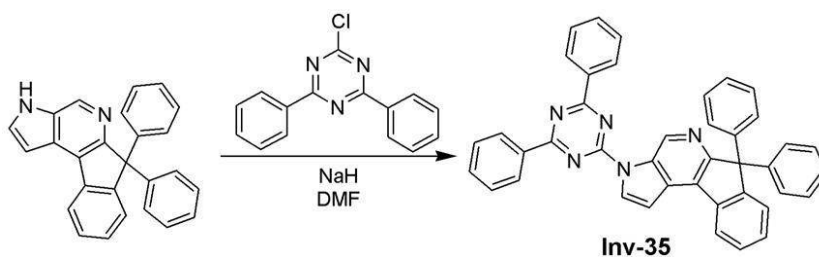
IC-1と、ヨードベンゼンの代わりに、準備例16で製造された化合物であるIC-
16と、2-ブromo-6-フェニルピリジンを使用する以外は、上記の合成例1と同様に
して、目的化合物であるInv-34(4.88g、収率59%)を得た。

GC-Mass(理論値:387.17g/mol、測定値:387g/mol)

【0143】

[合成例35] Inv-35の合成

【化107】



IC-1の代わりに、準備例17で製造された化合物であるIC-16を使用する以外
は、上記の合成例2と同様にして、目的化合物であるInv-35(6.00g、収率7
3%)を得た。

GC-Mass(理論値:589.23g/mol、測定値:589g/mol)

【0144】

[合成例36] Inv-36の合成

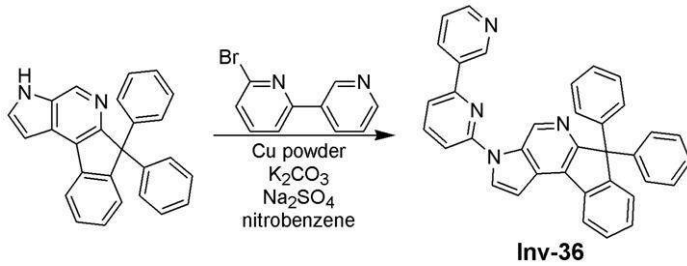
10

20

30

40

【化108】



IC-1と、ヨードベンゼンの代わりに、準備例17で製造された化合物であるIC-17と、6-プロモ-2,3'-ピピリジンを使用する以外は、上記の合成例1と同様にして、目的化合物であるInv-36(4.43g、収率62%)を得た。

GC-Mass(理論値:512.20g/mol、測定値:512g/mol)

【0145】

[実施例1~36]有機EL素子の製作

合成例1~36で合成した化合物Inv-1~Inv-36を、常法で高純度の昇華精製を行った後、下記の過程に従って緑色の有機EL素子を製作した。

【0146】

まず、ITO(Indium Tin Oxide)が150の厚さで薄膜コーティングが施されたガラス基板を、蒸留水超音波で洗浄した。蒸留水洗浄が終わると、イソプロピルアルコール、アセトン、メタノールなどの溶剤で超音波洗浄を行い、乾燥させた後、UV OZONE洗浄機(Power sonic 405、ファシントック製)へ移送した後、UVを用いて前記基板を5分間洗浄し、真空蒸着機に基板を移送した。

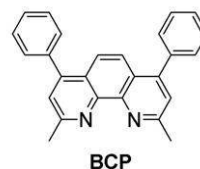
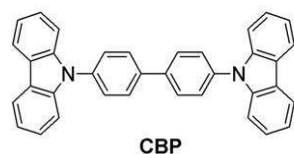
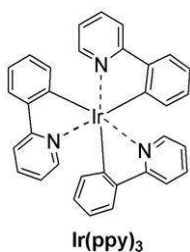
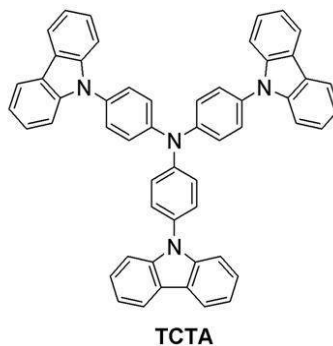
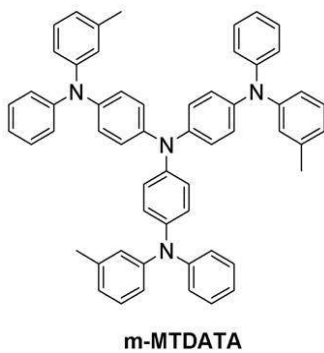
【0147】

このように用意されたITO透明電極の上に、m-MTDATA(60nm)/TCTA(80nm)/Inv-1~Inv-36のそれぞれの化合物+10%Ir(ppy)₃(300nm)/BCP(10nm)/Alq₃(30nm)LiF(1nm)/Al(200nm)の順に積層することで、有機EL素子を製作した。

【0148】

m-MTDATA、TCTA、Ir(ppy)₃、CBP及びBCPの構造は、以下の通りである。

【化109】



10

20

30

40

50

【 0 1 4 9 】

[比較例 1] 有機 E L 素子の製作

発光層の形成時、発光ホスト材料として、化合物 I n v - 1 の代わりに、C B P を使用する以外は、実施例 1 と同様にして有機 E L 素子を製作した。

【 0 1 5 0 】

[評価例]

実施例 1 ~ 3 6 及び比較例 1 で製作されたそれぞれの有機 E L 素子について、電流密度 $10 \text{ mA} / \text{cm}^2$ での駆動電圧、電流効率及び発光ピークを測定し、その結果を下記表 1 に示した。

【 0 1 5 1 】

【表 1】
[Table 1]

サンプル	ホスト	駆動電圧 (V)	ELピーク (nm)	電流効率 (cd/A)
実施例 1	I n v - 1	6. 7 8	5 1 7	4 1. 4
実施例 2	I n v - 2	6. 6 1	5 1 6	4 1. 3
実施例 3	I n v - 3	6. 6 3	5 1 6	4 0. 5
実施例 4	I n v - 4	6. 6 1	5 1 5	4 1. 2
実施例 5	I n v - 5	6. 6 1	5 1 7	4 0. 6
実施例 6	I n v - 6	6. 7 7	5 1 6	4 2. 0
実施例 7	I n v - 7	6. 7 8	5 1	4 0. 5
実施例 8	I n v - 8	6. 6 0	5 1 6	4 1. 2
実施例 9	I n v - 9	6. 7 9	5 1 7	4 1. 3
実施例 1 0	I n v - 1 0	6. 6 5	5 1 6	4 0. 2
実施例 1 1	I n v - 1 1	6. 7 7	5 1 5	4 1. 1
実施例 1 2	I n v - 1 2	6. 7 9	5 1 8	4 1. 3
実施例 1 3	I n v - 1 3	6. 6 2	5 1 7	4 0. 2
実施例 1 4	I n v - 1 4	6. 6 3	5 1 8	4 0. 5
実施例 1 5	I n v - 1 5	6. 6 1	5 1 6	4 1. 2
実施例 1 6	I n v - 1 6	6. 7 9	5 1 6	4 1. 3
実施例 1 7	I n v - 1 7	6. 6 7	5 1 7	3 9. 5
実施例 1 8	I n v - 1 8	6. 6 6	5 1 5	3 9. 6
実施例 1 9	I n v - 1 9	6. 6 9	5 1 8	3 9. 3
実施例 2 0	I n v - 2 0	6. 6 5	5 1 7	3 9. 8
実施例 2 1	I n v - 2 1	6. 6 6	5 1 8	4 0. 2
実施例 2 2	I n v - 2 2	6. 7 2	5 1 8	3 9. 5
実施例 2 3	I n v - 2 3	6. 6 0	5 1 9	3 9. 2
実施例 2 4	I n v - 2 4	6. 6 3	5 1 6	3 9. 1
実施例 2 5	I n v - 2 5	6. 6 9	5 1 7	3 9. 9
実施例 2 6	I n v - 2 6	6. 5 1	5 1 5	4 0. 1
実施例 2 7	I n v - 2 7	6. 5 9	5 1 7	3 9. 5
実施例 2 8	I n v - 2 8	6. 5 1	5 1 8	3 9. 9
実施例 2 9	I n v - 2 9	6. 7 2	5 1 7	3 9. 1
実施例 3 0	I n v - 3 0	6. 6 6	5 1 6	4 0. 2
実施例 3 1	I n v - 3 1	6. 7 7	5 1 5	4 0. 0
実施例 3 2	I n v - 3 2	6. 7 8	5 1 6	4 0. 3
実施例 3 3	I n v - 3 3	6. 6 2	5 1 7	4 1. 2
実施例 3 4	I n v - 3 4	6. 6 3	5 1 6	4 2. 3
実施例 3 5	I n v - 3 5	6. 6 1	5 1 8	4 0. 7
実施例 3 6	I n v - 3 6	6. 7 0	5 1 7	4 1. 3
比較例 1	C B P	6. 9 3	5 1 6	3 8. 2

【 0 1 5 2 】

表 1 に示されるように、本発明に係る化合物 (I n v - 1 ~ I n v - 3 6) を緑色の有機 E L 素子の発光層として使用する実施例 1 乃至 3 6 の有機 E L 素子は、従来の C B P を使用する比較例 1 の緑色の有機 E L 素子に比べて、効率及び駆動電圧の面において、より

10

20

30

40

50

優れた性能を発揮できることがわかる。

フロントページの続き

(51)Int.Cl. F I
 C 0 9 K 11/06 (2006.01) H 0 5 B 33/22 D
 C 0 9 K 11/06 6 9 0

- (72)発明者 キム、テ ヒョン
 大韓民国 キョンギ - ド 4 4 8 - 1 3 0、ヨンイン - シ、スジ - グ、サンヒョン - ドン、マンヒ
 ヨンマウル ヒュンダイ アイ - パーク、5 0 1 - 7 0 3
- (72)発明者 パク、ホ チョル
 大韓民国 キョンギ - ド 4 4 2 - 1 5 0、スウォン - シ、パルダル - グ、ファソ - ドン、ブルー
 ミング プルンソブ アpartment、1 0 8 - 1 1 0 4
- (72)発明者 イ、チャン ジュン
 大韓民国 キョンギ - ド 4 2 5 - 0 2 2、アンサン - シ、タヌオン - グ、コジャン 2 - ドン、
 ジュゴン アpartment 5 ダンジ、5 3 5 - 4 0 4
- (72)発明者 シン、ジン ヨン
 大韓民国 キョンギ - ド 4 4 8 - 1 3 0、ヨンイン - シ、スジ - グ、サンヒョン - ドン、ソウォ
 ンマウル ヒュンダイ ホームタウン アpartment、2 0 6 - 5 0 3

審査官 谷尾 忍

- (56)参考文献 特開2 0 1 2 - 0 0 1 5 1 3 (J P , A)
 国際公開第2 0 1 0 / 1 1 3 7 2 6 (W O , A 1)
 国際公開第2 0 1 0 / 1 0 7 2 4 4 (W O , A 2)
 特許第5 9 2 2 7 9 2 (J P , B 2)
 特開2 0 1 6 - 0 4 0 2 9 2 (J P , A)
 特許第6 0 2 2 6 9 0 (J P , B 2)
 PENG,H. et al , Solvent-free synthesis of -carbolines/carbazoles from 3-nitro-2-pheny
 lpyridines/2-nitrobiphenyl derivatives using DPPE as a reducing agent , Tetrahedron , 2
 0 1 1年 6月1 6日 , Vol.67, No.32 , p.5725-5731
 ZHANG,Y. et al , Synthesis of pyrimido[4,5-b]indoles and benzo[4,5]furo[2,3-d]pyrimidin
 es via palladium-catalyzed intramolecular arylation , Tetrahedron Letters , 2 0 0 2年 ,
 Vol.43, No.46 , p.8235-8239

(58)調査した分野(Int.Cl. , D B名)

C 0 7 D 4 7 1 / 0 4
 C 0 7 D 4 7 1 / 1 4
 C 0 7 D 4 7 1 / 2 2
 C 0 7 D 4 9 5 / 1 4
 C 0 9 K 1 1 / 0 6
 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)