

(19) 日本国特許庁(JP)

(12) 公表特許公報(A)

(11) 特許出願公表番号

特表2005-531552  
(P2005-531552A)

(43) 公表日 平成17年10月20日(2005.10.20)

(51) Int. Cl. <sup>7</sup>	F I	テーマコード (参考)	
C07D 333/08	C07D 333/08	CSP	3K007
C07D 333/18	C07D 333/18		4C023
C07D 333/20	C07D 333/20		4C063
C07D 333/24	C07D 333/24		
C07D 333/36	C07D 333/36		

審査請求 有 予備審査請求 未請求 (全 146 頁) 最終頁に続く

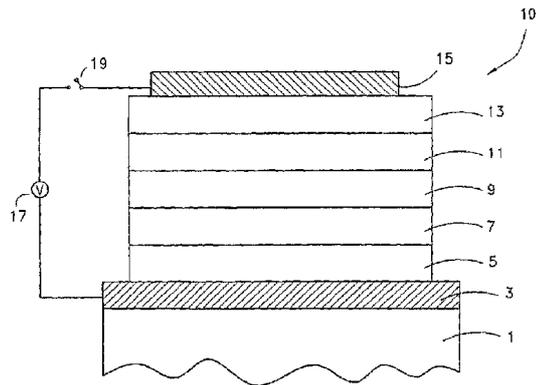
(21) 出願番号	特願2004-503461 (P2004-503461)	(71) 出願人	500239823 エルジー・ケム・リミテッド 大韓民国・ソウル・150-721・ヤングデウングポグ・ヨイドードング・20
(86) (22) 出願日	平成15年5月6日(2003.5.6)	(74) 代理人	100064908 弁理士 志賀 正武
(85) 翻訳文提出日	平成16年10月4日(2004.10.4)	(74) 代理人	100089037 弁理士 渡邊 隆
(86) 国際出願番号	PCT/KR2003/000899	(74) 代理人	100101465 弁理士 青山 正和
(87) 国際公開番号	W02003/095445	(74) 代理人	100108453 弁理士 村山 靖彦
(87) 国際公開日	平成15年11月20日(2003.11.20)	(74) 代理人	100110364 弁理士 実広 信哉
(31) 優先権主張番号	10-2002-0025084		
(32) 優先日	平成14年5月7日(2002.5.7)		
(33) 優先権主張国	韓国 (KR)		
(31) 優先権主張番号	10-2003-0010439		
(32) 優先日	平成15年2月19日(2003.2.19)		
(33) 優先権主張国	韓国 (KR)		

最終頁に続く

(54) 【発明の名称】 新たな有機発光化合物及びこれを利用した有機発光素子

(57) 【要約】

様々な置換基で置換できる少なくとも一つのチオフェニル基で置換されたアントラセン骨格の一般構造を有する新規群の化合物が開示される。前記新規化合物は一般に有機電界発光に適している。有機電界発光素子及びその製造方法も開示する。有機電界発光素子は様々な層内で少なくとも一つの前記化合物を含む。発光層内前記新規化合物を使用する有機電界発光素子は顕著な安定性を示す。

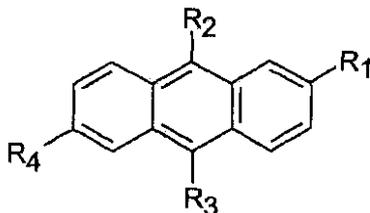


## 【特許請求の範囲】

## 【請求項 1】

一般式 I:

## 【化 1】



10

[ここで、R<sub>1</sub> 乃至 R<sub>4</sub> のうちの少なくとも一つは一般式 II:

## 【化 2】



(ここで、

nは1乃至10の整数であり、式中R<sub>5</sub> と一般式IIでないR<sub>1</sub> -R<sub>4</sub> の各々は同一であるか異なる置換基であって、下記:

20

水素;ハロ;ヒドロキシル;メルカプト;シアノ;ニトロ;カルボニル;カルボキシ;ホルミル;置換または非置換C<sub>1</sub> -C<sub>20</sub> アルキル;置換または非置換C<sub>2</sub> -C<sub>10</sub> アルケニル;置換または非置換C<sub>2</sub> -C<sub>7</sub> アルキニル;置換または非置換アリール;置換または非置換ヘテロアリール;環内炭素原子が酸素、窒素または硫黄原子によって任意に代替できる置換または非置換C<sub>3</sub> -C<sub>7</sub> シクロアルキル;環内炭素原子が酸素、窒素または硫黄原子によって任意に代替できる置換または非置換C<sub>4</sub> -C<sub>7</sub> シクロアルケニル;置換または非置換C<sub>1</sub> -C<sub>20</sub> アルコキシ;置換または非置換C<sub>2</sub> -C<sub>10</sub> アルケニルオキシ;置換または非置換C<sub>2</sub> -C<sub>7</sub> アルキニルオキシ;置換または非置換アリールオキシ;置換または非置換C<sub>1</sub> -C<sub>20</sub> アルキルアミン;置換または非置換C<sub>2</sub> -C<sub>10</sub> アルケニルアミン;置換または非置換C<sub>2</sub> -C<sub>7</sub> アルキニルアミン;置換または非置換アリールアミン;置換または非置換アルキルアリールアミン;置換または非置換C<sub>1</sub> -C<sub>20</sub> アルキルシリル;置換または非置換C<sub>2</sub> -C<sub>10</sub> アルケニルシリル;置換または非置換C<sub>2</sub> -C<sub>7</sub> アルキニルシリル;置換または非置換アリールシリル;置換または非置換アルキルアリールシリル;置換または非置換C<sub>1</sub> -C<sub>20</sub> アルキルボラニル;置換または非置換C<sub>2</sub> -C<sub>10</sub> アルケニルボラニル;置換または非置換C<sub>2</sub> -C<sub>7</sub> アルキニルボラニル;置換または非置換アリールボラニル;置換または非置換アルキルアリールボラニル;置換または非置換C<sub>1</sub> -C<sub>20</sub> アルキルチオ;置換または非置換C<sub>2</sub> -C<sub>10</sub> アルケニルチオ;置換または非置換C<sub>2</sub> -C<sub>7</sub> アルキニルチオ;及び置換または非置換アリールチオの各基

30

から成る群より選択される)で示される]

の化合物。

## 【請求項 2】

40

R<sub>5</sub> 及び一般式IIではないR<sub>1</sub> -R<sub>4</sub> の各々が下記:

水素、シアノ、ニトロ、置換または非置換C<sub>1</sub> -C<sub>20</sub> アルキル、置換または非置換C<sub>2</sub> -C<sub>10</sub> アルケニル、置換または非置換C<sub>3</sub> -C<sub>7</sub> シクロアルキル、置換または非置換C<sub>4</sub> -C<sub>7</sub> シクロアルケニル、置換または非置換アリール、置換または非置換ヘテロアリール、置換または非置換C<sub>1</sub> -C<sub>20</sub> アルコキシ、置換または非置換アリールオキシ、置換または非置換C<sub>1</sub> -C<sub>20</sub> アルキルアミン、置換または非置換アリールアミン、置換または非置換アルキルアリールアミン、置換または非置換C<sub>1</sub> -C<sub>20</sub> アルキルシリル、置換または非置換アリールシリル;置換または非置換アルキルアリールシリル、置換または非置換C<sub>1</sub> -C<sub>20</sub> アルキルボラニル、置換または非置換アリールボラニル、置換または非置換アルキルアリールボラニル、置換または非置換C<sub>1</sub> -C<sub>20</sub> アルキルチオ、及び置換または非置換アリールチオ

50

の各基

で構成される群より選択される請求項 1 に記載の化合物。

【請求項 3】

$R_5$  及び一般式 II ではない  $R_1$  - $R_4$  各々が下記:

ハロ、ヒドロキシル、メルカプト、シアノ、ニトロ、アミノ、カルボニル、カルボキシル、ホルミル、 $C_1$  - $C_{20}$  アルキル、 $C_2$  - $C_{10}$  アルケニル、 $C_2$  - $C_7$  アルキニル、アリール、ヘテロアリール、 $C_3$  - $C_7$  シクロアルキル、3 - 7 員複素環式飽和または不飽和環、アクリル、 $C_1$  - $C_{20}$  アルコキシ、 $C_2$  - $C_{10}$  アルケニルオキシ、 $C_2$  - $C_7$  アルキニルオキシ、 $C_1$  - $C_{20}$  アルキルアミン、 $C_2$  - $C_{10}$  アルケニルアミン、 $C_2$  - $C_7$  アルキニルアミン、アリールアミン、アルキルアリールアミン、 $C_1$  - $C_{20}$  アルキルシリル、 $C_2$  - $C_{10}$  アルケニルシリル、 $C_2$  - $C_7$  アルキニルシリル、アルコキシシリル、アリールシリル、アルキルアリールシリル、 $C_1$  - $C_{20}$  アルキルボラニル、 $C_2$  - $C_{10}$  アルケニルボラニル、 $C_2$  - $C_7$  アルキニルボラニル、アリールボラニル、アルキルアリールボラニル、 $C_1$  - $C_{20}$  アルキルチオ、 $C_2$  - $C_{10}$  アルケニルチオ、 $C_2$  - $C_7$  アルキニルチオ及びアリールチオの各基で構成される群より選択される同一または異なる置換基でモノ-またはポリ-置換された請求項 1 に記載の化合物。

10

【請求項 4】

$R_5$  及び一般式 II ではない  $R_1$  - $R_4$  各々が下記:

シアノ、ニトロ、ホルミル、メチル、エチル、プロピル、フェニル、ナフチル、ビフェニル、アントラセニル、イミダゾリル、チアゾリル、オキサゾリル、チオフエニル、ピリジル、ピリミジン、ピロリル、シクロブテニル、シクロペンテニル、メトキシ、エトキシ、プロポキシ、フェノキシ、ナフトキシ、メチルアミン、エチルアミン、プロピルアミン、フェニルアミン、ナフチルアミン、メチルフェニルアミン、エチルフェニルアミン、エチルナフチルアミン、ジメチルボラニル、ジエチルボラニル、ジプロピルボラニル、ジフェニルボラニル、ジナフチルボラニル、フェニルナフチルボラニル、フェニルメチルボラニル、ナフチルメチルボラニル、ナフチルエチルボラニル、トリメチルシリル、トリエチルシリル、トリプロピルシリル、トリフェニルシリル、トリナフチルシリル、ジメチルフェニルシリル、ジエチルフェニルシリル、ジフェニルメチルシリル、メチルチオ、エチルチオ、プロピルチオ、ブチルチオ、フェニルチオ及びナフチルチオの各基で構成される群より選択される同一または異なる置換基でモノ-またはポリ-置換された請求項 1 に記載の化合物。

20

30

【請求項 5】

前記  $C_3$  - $C_7$  シクロアルキル及び  $C_4$  - $C_7$  シクロアルケニル基が 5、6 員環化合物の置換または非置換、飽和または不飽和複素環であることを特徴とする、請求項 1 に記載の化合物。

【請求項 6】

$R_5$  及び一般式 II ではない  $R_1$  - $R_4$  各々が下記:

メチル、エチル、プロピル、ブチル、イソプロピル、*n*-ブチル、*t*-ブチル、イソブチル、*n*-ペンチル、ネオ-ペンチル、*n*-ヘキシル、エテニル、プロペニル、ブテニル、ペンテニル、ヘキセニル、2-メチル-エテニル、2-メチル-プロペニル、2-メチル-ブテニル、2-メチル-ペンテニル、2-メチル-ヘキセニル、イミダゾリル、チアゾリル、オキサゾリル、チオフエニル、ピリジル、ピリミジン、ピロリル、2-メチルイミダゾリル、2-メチルチアゾリル、2-メチルオキサゾリル、2-メチルチオフエニル、2-メチルピリジル、2-メチルピリミジン、2-メチルピロリル、フェニル、ナフチル、アントラセニル、ビフェニル、テルフェニル、二重スピロ、テトラセニル、3-メチル-フェニル、4-メチル-ナフチル、9-メチル-アントラセニル、4-メチル-テトラセニル、2-メチル-イミダゾリル、2-メチル-オキサゾリル、2-メチル-チアゾリル、2-メチル-フラニル、2-メチル-チオフエニル、2-メチル-ピラゾリル、2-メチル-ピリジル、2-メチル-ピリミジン、メトキシ、エトキシ、プロポキシ、ブトキシ、ペントキシ、ヘソキシ、イソプロポキシ、イソブトキシ、*t*-ブトキシ、ネオ-ペントキシ、フェノキシ、ナフトキシ、ビフェノキシ、3-メ

40

50

チル-フェノキシ、4-メチル-ナフトキシ、2-メチル-ピフェノキシ、メチルアミン、エチルアミン、プロピルアミン、ブチルアミン、ペンチルアミン、ヘキシルアミン、ヘプチルアミン、イソプロピルアミン、イソブチルアミン、t-ブチルアミン、2-ペンチルアミン、ネオ-ペンチルアミン、フェニルアミン、ナフチルアミン、ピフェニルアミン、アントラセニルアミン、3-メチル-フェニルアミン、4-メチル-ナフチルアミン、2-メチル-ピフェニルアミン、9-メチル-アントラセニルアミン、フェニルメチルアミン、フェニルエチルアミン、ナフチルメチルアミン、ナフチルエチルアミン、ピフェニルメチルアミン、3-メチル-フェニルメチルアミン、フェニルイソプロピルアミン、ナフチルイソプロピルアミン、ナフチルイソブチルアミン、ピフェニルイソプロピルアミン、トリメチルシリル、トリエチルシリル、トリブチルシリル、トリ(イソプロピル)シリル、トリ(イソブチル)シリル、トリ(t-ブチル)シリル、トリ(2-ブチル)シリル、トリフェニルシリル、トリナフチルシリル、トリピフェニルシリル、トリ(3-メチルフェニル)シリル、トリ(4-メチルナフチル)シリル、トリ(2-メチルピフェニル)シリル、フェニルメチルシリル、フェニルエチルシリル、ナフチルメチルシリル、ナフチルエチルシリル、ピフェニルメチルシリル、3-メチル-フェニルメチルシリル、フェニルイソプロピルシリル、ナフチルイソプロピルシリル、ナフチルイソブチルシリル、ピフェニルイソプロピルシリル、ジメチルボラニル、ジエチルボラニル、ジプロピルアミン、ジブチルアミン、ジペンチルアミン、ジイソプロピルボラニル、ジイソブチルボラニル、ジ(t-ブチル)ボラニル、イソプロピルイソブチルアミン、ジフェニルボラニル、ジナフチルボラニル、ジピフェニルボラニル、ジ(3-メチルフェニル)ボラニル、ジ(4-メチルナフチル)ボラニル、ジ(2-メチルピフェニル)ボラニル、フェニルメチルボラニル、フェニルエチルボラニル、ナフチルメチルボラニル、ナフチルエチルボラニル、ピフェニルメチルボラニル、3-メチル-フェニルメチルボラニル、フェニルイソプロピルボラニル、ナフチルイソプロピルボラニル、ナフチルイソブチルボラニル、ピフェニルイソプロピルボラニル、メチルチオ、エチルチオ、プロピルチオ、ブチルチオ、ペンチルチオ、ヘキシルチオ、トリ(イソプロピル)チオ、トリ(イソブチル)チオ、トリ(t-ブチル)チオ、トリ(2-ブチル)チオ、フェニルチオ、ナフチルチオ、ピフェニルチオ、(3-メチルフェニル)チオ、(4-メチルナフチル)チオ及び(2-メチルピフェニル)チオの各基の構成の群より選択される請求項1に記載の化合物。

10

20

30

【請求項7】

R<sub>5</sub> 及び一般式IIではないR<sub>1</sub> -R<sub>4</sub> の各々が下記:

メチル、エチル、イソプロピル、t-ブチル、エテニル、プロペニル、2-メチル-エテニル、2-メチル-プロペニル、イミダゾリル、チアゾリル、オキサゾリル、2-メチルイミダゾリル、2-メチルチアゾリル、2-メチルオキサゾリル、フェニル、ナフチル、ピフェニル、テルフェニル、アントラセニル、二重スピロ、3-メチル-フェニル、4-メチル-ナフチル、メトキシ、エトキシ、イソプロポキシ、イソプトキシ、フェノキシ、ナフトキシ、3-メチル-フェノキシ、4-メチル-ナフトキシ、メチルアミン、エチルアミン、イソプロピルアミン、イソブチルアミン、t-ブチルアミン、フェニルアミン、ナフチルアミン、3-メチル-フェニルアミン、4-メチル-ナフチルアミン、フェニルメチルアミン、フェニルエチルアミン、ナフチルメチルアミン、3-メチル-フェニルメチルアミン、フェニルイソプロピルアミン、トリメチルシリル、トリエチルシリル、トリ(イソプロピル)シリル、トリ(イソブチル)シリル、トリフェニルシリル、トリナフチルシリル、トリ(3-メチルフェニル)シリル、トリ(4-メチルナフチル)シリル、フェニルメチルシリル、フェニルエチルシリル、3-メチル-フェニルメチルシリル、フェニルイソプロピルシリル、ジメチルボラニル、ジエチルボラニル、ジイソプロピルボラニル、ジイソブチルボラニル、ジフェニルボラニル、ジナフチルボラニル、ジ(3-メチルフェニル)ボラニル、ジ(4-メチルナフチル)ボラニル、フェニルメチルボラニル、フェニルエチルボラニル、3-メチル-フェニルメチルボラニル、フェニルイソプロピルボラニル、メチルチオ、エチルチオ、トリ(イソプロピル)チオ、トリ(イソブチル)チオ、フェニルチオ、ナフチルチオ、(3-メチルフェニル)チオ、及び(4-メチルナフチル)チオ基

40

50

で構成される群より選択される請求項 1 に記載の化合物。

【請求項 8】

$R_5$  及び一般式 II ではない  $R_1$  -  $R_4$  各々が、選択肢を構成する置換または非置換フェニル、置換または非置換ナフチル、置換または非置換ピフェニル、置換または非置換テルフェニル、置換または非置換アントラセニル及び置換または非置換二重スピロの各基から選択されることを特徴とする、請求項 1 に記載の化合物。

【請求項 9】

前記置換されたフェニル、ナフチル、ピフェニル、テルフェニル、アントラセニル及び二重スピロの各基が、選択肢を構成するシアノ、ニトロ、ホルミル、置換または非置換  $C_{1}$  -  $C_{20}$  アルキル、アリールヘテロアリール、 $C_4$  -  $C_7$  シクロアルケニル、置換または非置換  $C_{1}$  -  $C_{20}$  アルコキシ、アリールオキシ、 $C_{1}$  -  $C_{20}$  アルキルアミン、アリールアミン、アルキルアリールアミン、 $C_{1}$  -  $C_{20}$  シリル、アリールシリル、及びアルキルアリールシリル、 $C_{1}$  -  $C_{20}$  アルキルボラニル、アリールボラニル、アルキルアリールボラニル、 $C_{1}$  -  $C_{20}$  アルキルチオ及びアリールチオから選択される一つ以上で置換されることを特徴とする、請求項 8 に記載の化合物。

10

【請求項 10】

$R_1$  乃至  $R_4$  のうちの一つのみが一般式 II で示されることを特徴とする、請求項 1 に記載の化合物。

【請求項 11】

$R_1$  乃至  $R_4$  のうちの二つが一般式 II で示されることを特徴とする、請求項 1 に記載の化合物。

20

【請求項 12】

$R_1$  及び  $R_4$  が一般式 II で示されることを特徴とする、請求項 1 に記載の化合物。

【請求項 13】

$R_2$  及び  $R_3$  が一般式 II で示されることを特徴とする、請求項 1 に記載の化合物。

【請求項 14】

$R_1$  乃至  $R_4$  のうちの三つが一般式 II で示されることを特徴とする、請求項 1 に記載の化合物。

【請求項 15】

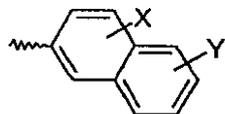
$R_1$  乃至  $R_4$  の全てが一般式 II で示されることを特徴とする、請求項 1 に記載の化合物。

30

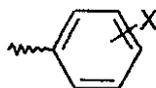
【請求項 16】

$R_1$  -  $R_4$  のうちの少なくとも一つが一般式 II で表され、残りの  $R_1$  -  $R_4$  は、選択肢を構成する下記一般式 1 - 1 乃至 1 - 14 :

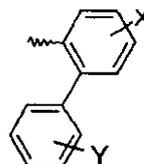
【化 3 A】



一般式 1 - 1



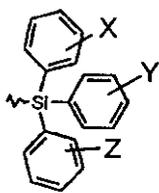
一般式 1 - 2



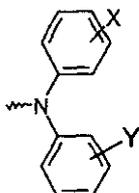
一般式 1 - 3

40

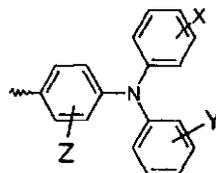
## 【化 3 B】



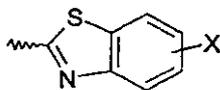
一般式 1-4



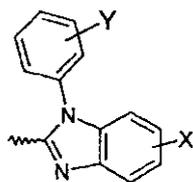
一般式 1-5



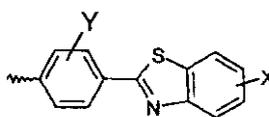
一般式 1-6



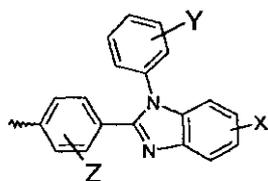
一般式 1-7



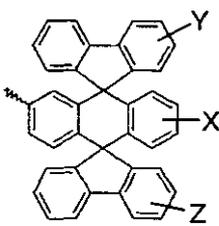
一般式 1-8



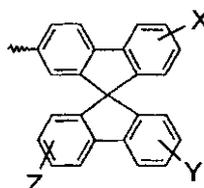
一般式 1-9



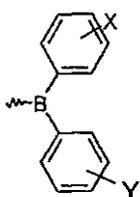
一般式 1-10



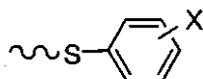
一般式 1-11



一般式 1-12



一般式 1-13



一般式 1-14

[ここで、X、Y及びZは同一または異なる置換基であり、

X、YまたはZが付着した各環形態はX、YまたはZのような二つ以上の同一または異なる置換基で置換できる]

から選択されることを特徴とする、請求項1に記載の化合物。

## 【請求項17】

前記X、Y及びZが、選択肢を構成するシアノ、ニトロ、ホルミル、置換または非置換C<sub>1</sub>-C<sub>20</sub>アルキル、アリールヘテロアリール、C<sub>4</sub>-C<sub>7</sub>シクロアルケニル、置換または非置換C<sub>1</sub>-C<sub>20</sub>アルコキシ、アリールオキシ、C<sub>1</sub>-C<sub>20</sub>アルキルアミン、アリールアミン、アルキルアリールアミン、C<sub>1</sub>-C<sub>20</sub>シリル、アリールシリル、及びアルキルアリールシリル、C<sub>1</sub>-C<sub>20</sub>アルキルボラニル、アリールボラニル、アルキルアリールボラニル、C<sub>1</sub>-C<sub>20</sub>アルキルチオ及びアリールチオから選択されることを特徴とする、請求項16に記載の化合物。

## 【請求項18】

10

20

30

40

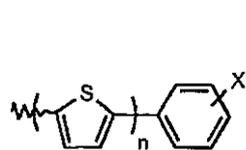
50

X、Y及びZがシアノ、ニトロ、メチル、エチル、イソプロピル、t-ブチル、メトキシ、エトキシ、プロポキシ、メチルチオ、イミダゾリル、ピリジル、チアゾリル、オキサゾリル、フラニル、チオフェニル、ピロリル、ピリジル及びピリミジルで構成される群より選択されることを特徴とする、請求項16に記載の化合物。

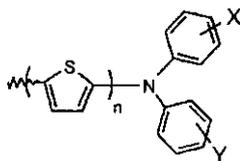
【請求項19】

前記一般式IIが、選択肢を構成する下記一般式2-1乃至2-5：

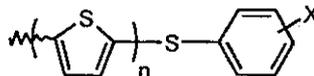
【化4】



一般式 2-1

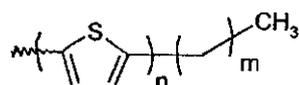


一般式 2-2

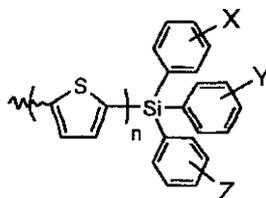


一般式 2-3

10



一般式 2-4



一般式 2-5

20

[ここで、nは1乃至4の整数であり；

mは0乃至20の整数であり；

X、Y及びZは同一または異なる置換基であり；更に

X、YまたはZが付着した各々の環形態はX、YまたはZのような一つ以上の同一または異なる置換基で置換できる]

から選択されることを特徴とする、請求項1に記載の化合物。

30

【請求項20】

X、Y及びZがシアノ、ニトロ、ホルミル、置換または非置換C<sub>1</sub>-C<sub>20</sub>アルキル、アリール、ヘテロアリール、C<sub>4</sub>-C<sub>7</sub>シクロアルケニル、置換または非置換C<sub>1</sub>-C<sub>20</sub>アルコキシ、アリールオキシ、C<sub>1</sub>-C<sub>20</sub>アルキルアミン、アリールアミン、アルキルアリールアミン、C<sub>1</sub>-C<sub>20</sub>シリル、アリールシリル、及びアルキルアリールシリル、C<sub>1</sub>-C<sub>20</sub>アルキルボラニル、アリールボラニル、アルキルアリールボラニル、C<sub>1</sub>-C<sub>20</sub>アルキルチオ及びアリールチオで構成される群より選択されることを特徴とする、請求項19に記載の化合物。

【請求項21】

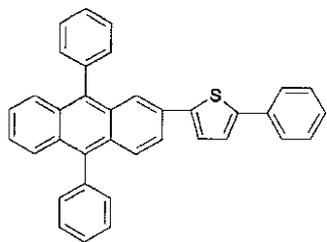
X、Y及びZがシアノ、ニトロ、メチル、エチル、イソプロピル、t-ブチル、メトキシ、エトキシ、プロポキシ、メチルチオ、イミダゾリル、ピリジル、チアゾリル、オキサゾリル、フラニル、チオフェニル、ピロリル、ピリジル及びピリミジルで構成される群より選択されることを特徴とする、請求項19に記載の化合物。

40

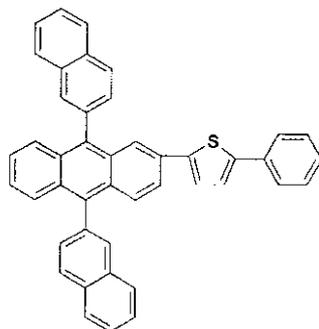
【請求項22】

前記化合物が、選択肢を構成する下記一般式1乃至96：

【化 5 A】

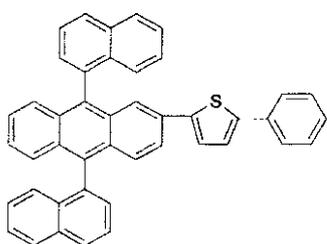


化合物 1

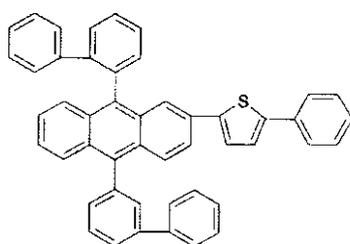


化合物 2

10

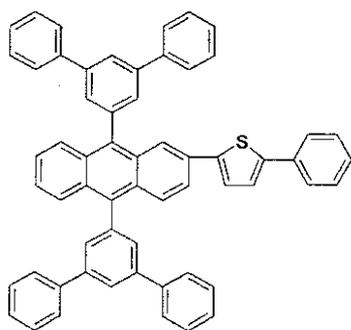


化合物 3

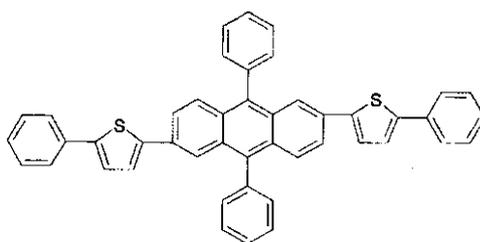


化合物 4

20

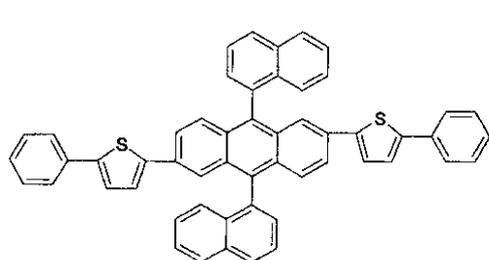


化合物 5

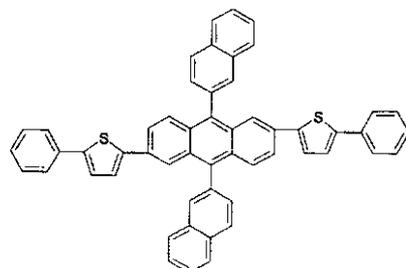


化合物 6

30



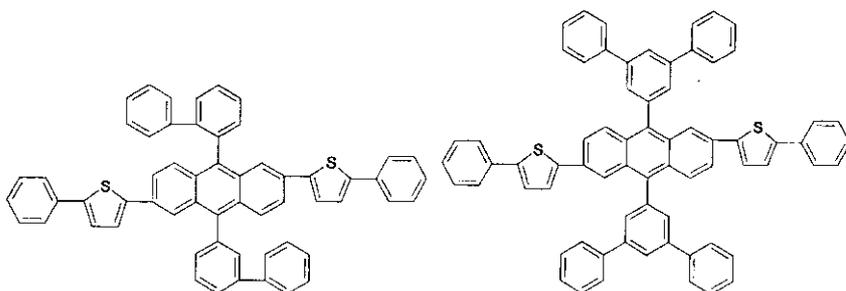
化合物 7



化合物 8

40

【化 5 B】

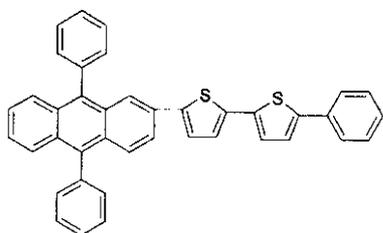


化合物 9

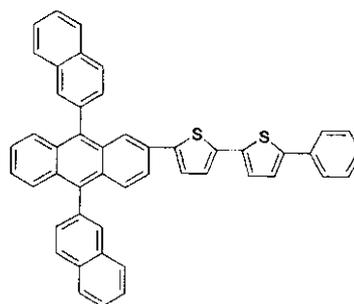
化合物 10

10

【化 5 C】

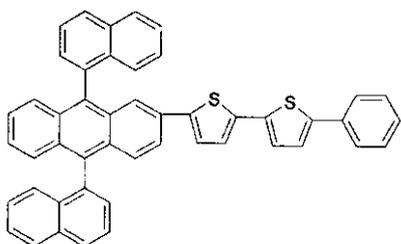


化合物 11

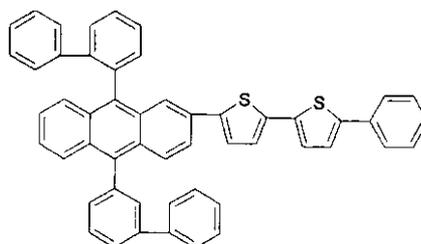


化合物 12

20

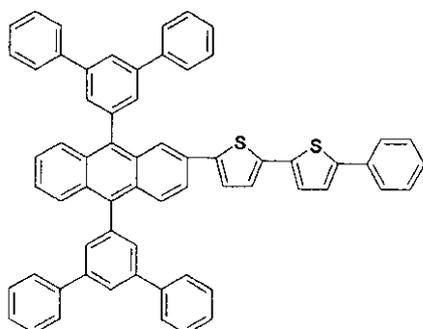


化合物 13



化合物 14

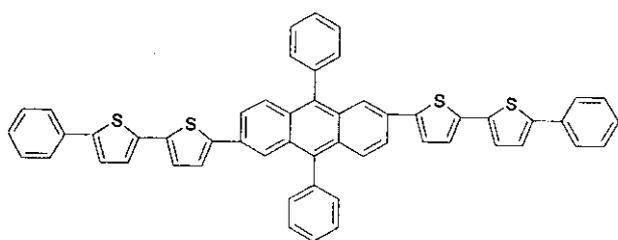
30



化合物 15

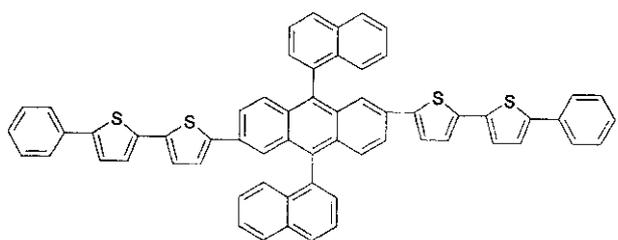
40

【化 5 D】



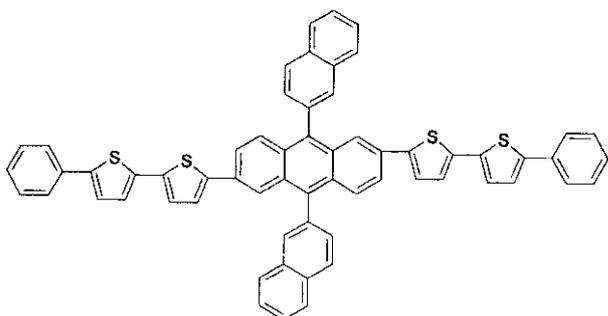
化合物 1 6

10



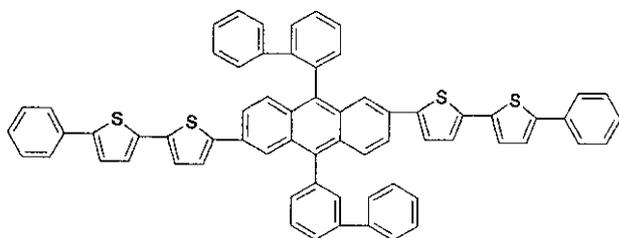
化合物 1 7

20



化合物 1 8

30

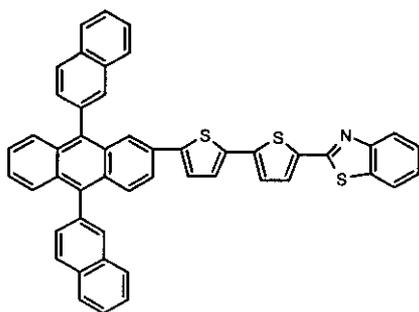


化合物 1 9

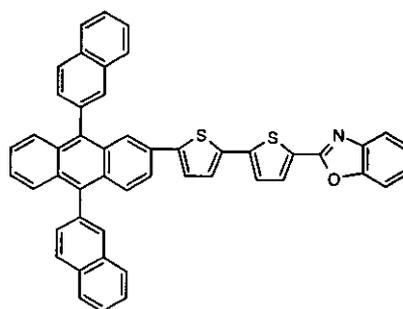
40



【化 5 F】

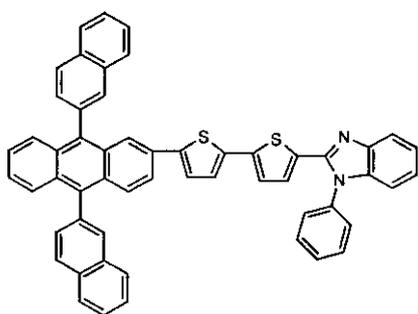


化合物 2 7

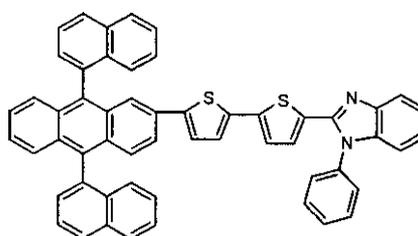


化合物 2 8

10

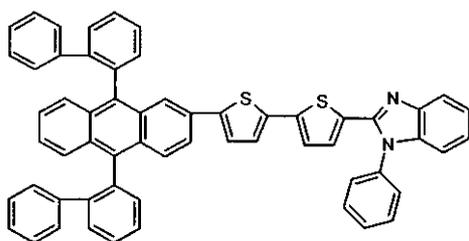


化合物 2 9

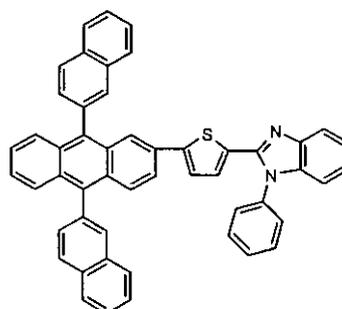


化合物 3 0

20

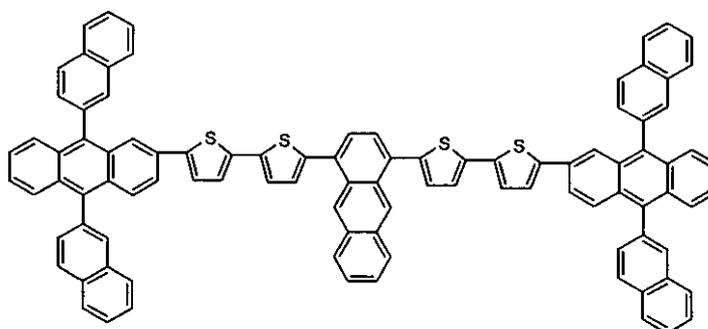


化合物 3 1



化合物 3 2

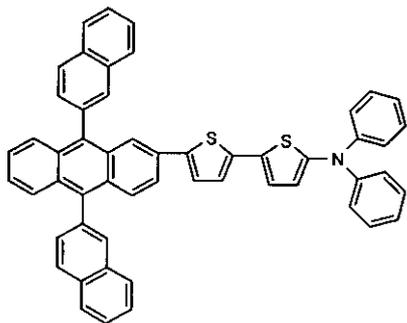
30



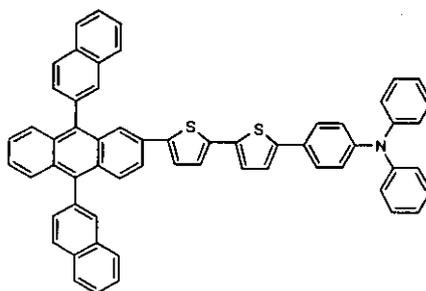
化合物 3 3

40

【化 5 G】

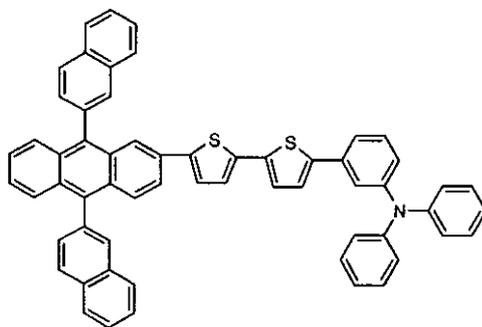


化合物 3 4



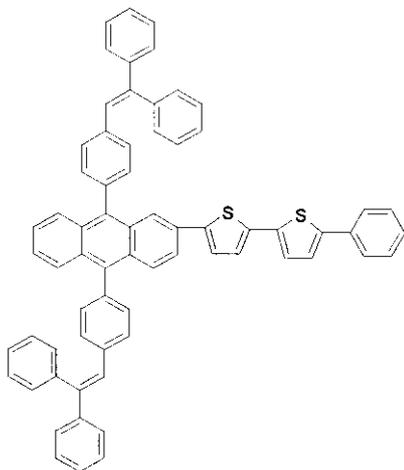
化合物 3 5

10

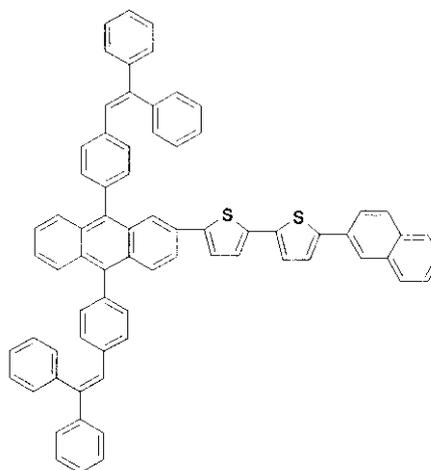


化合物 3 6

20



化合物 3 7

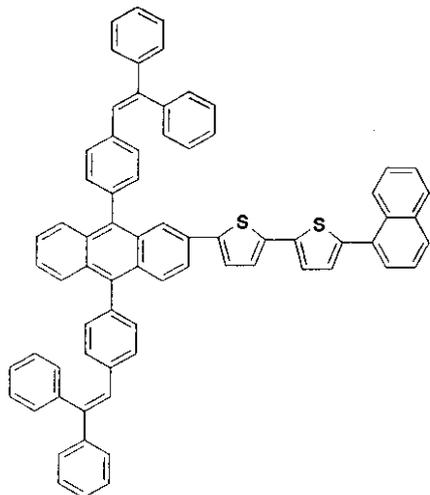


化合物 3 8

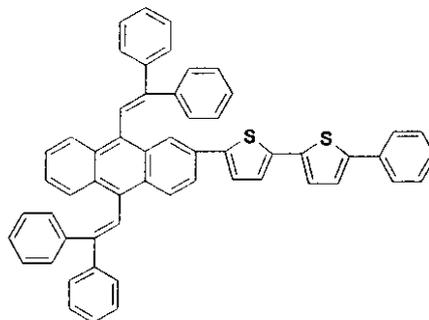
30

40

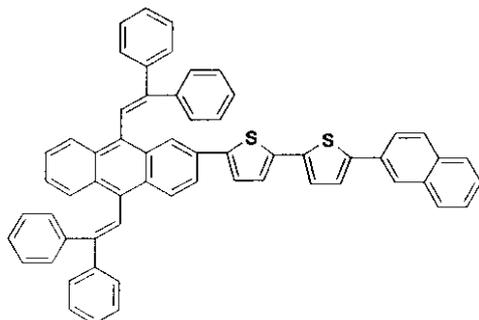
【化 5 H】



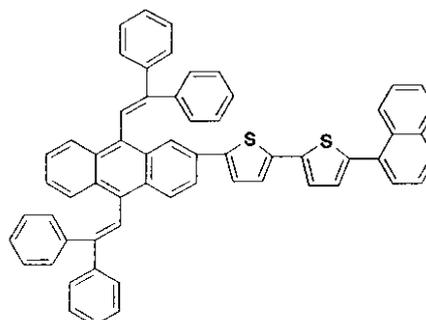
化合物 3 9



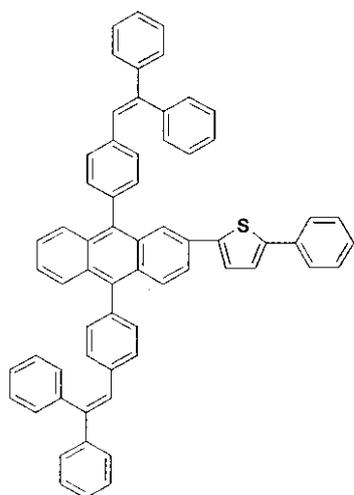
化合物 4 0



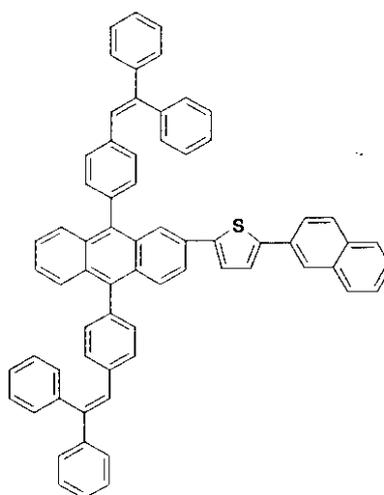
化合物 4 1



化合物 4 2



化合物 4 3



化合物 4 4

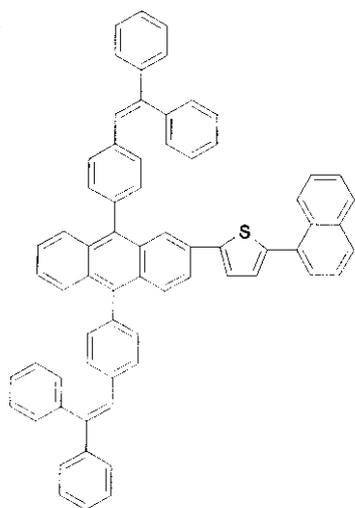
10

20

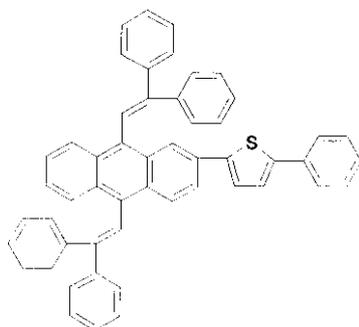
30

40

【化 5 I】

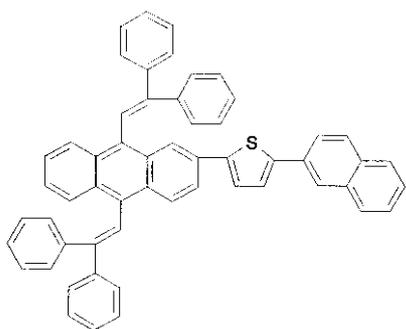


化合物 4 5

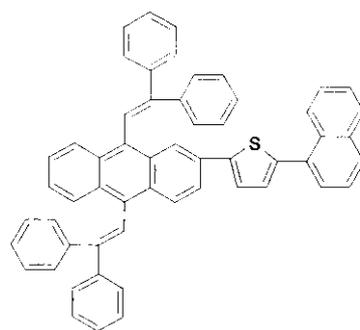


化合物 4 6

10



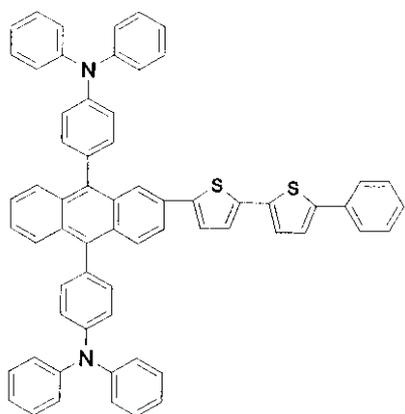
化合物 4 7



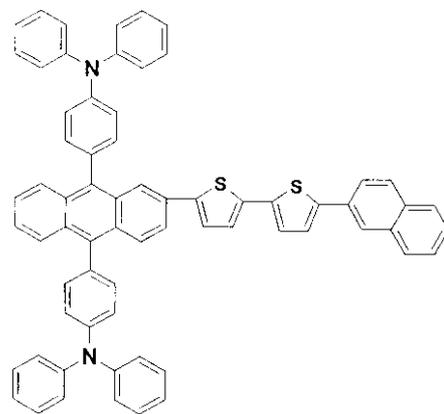
化合物 4 8

20

30



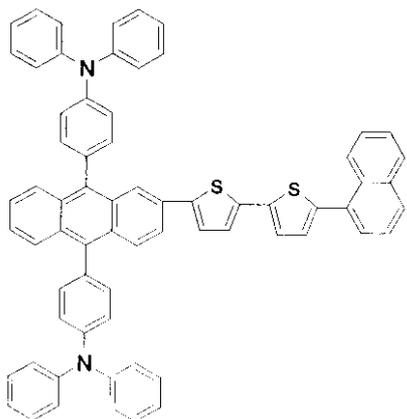
化合物 4 9



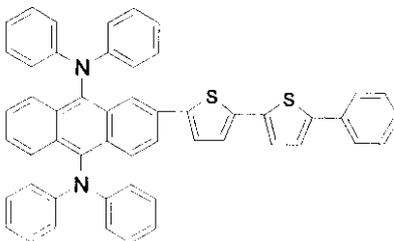
化合物 5 0

40

【化 5 J】

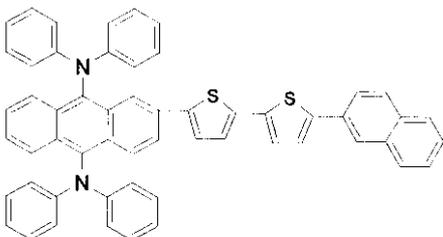


化合物 5 1

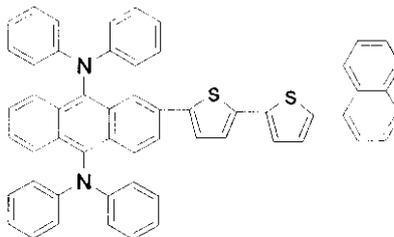


化合物 5 2

10

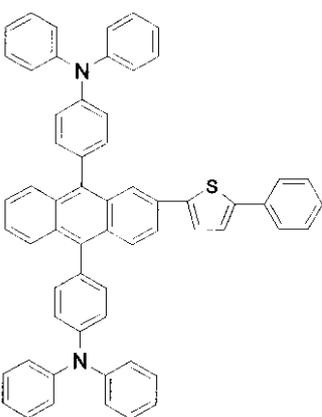


化合物 5 3

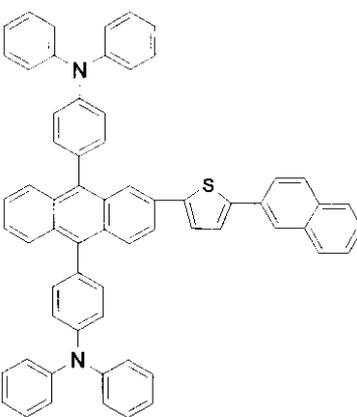


化合物 5 4

20



化合物 5 5

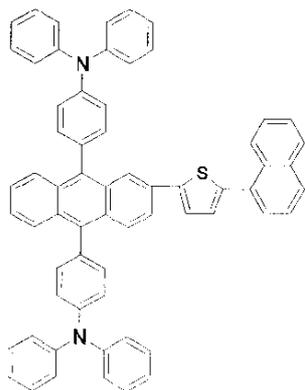


化合物 5 6

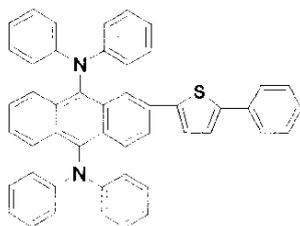
30

40

【化 5 K】

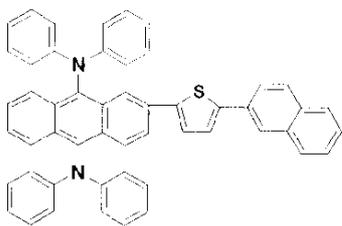


化合物 5 7

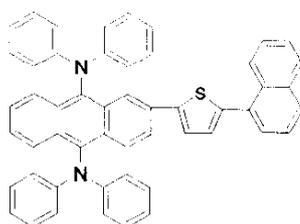


化合物 5 8

10

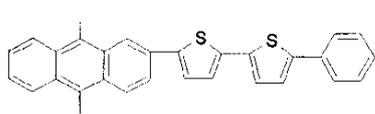


化合物 5 9

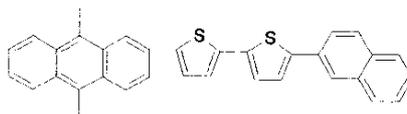


化合物 6 0

20

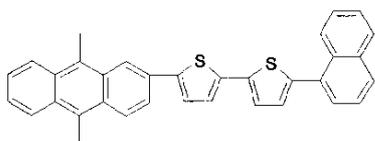


化合物 6 1

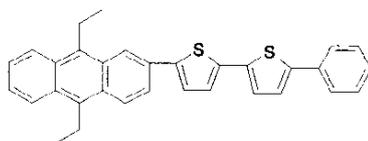


化合物 6 2

30

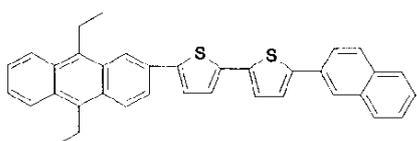


化合物 6 3

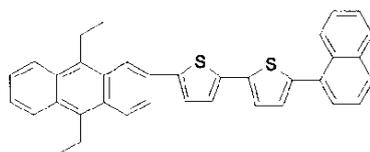


化合物 6 4

40

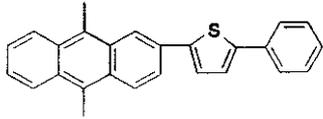


化合物 6 5

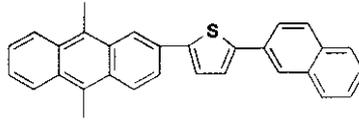


化合物 6 6

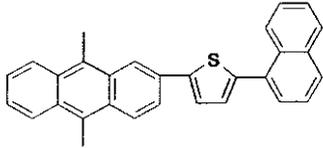
【化 5 L】



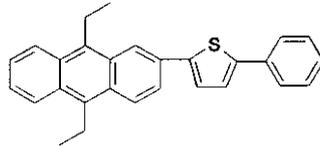
化合物 6 7



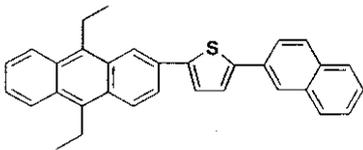
化合物 6 8



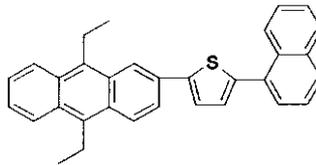
化合物 6 9



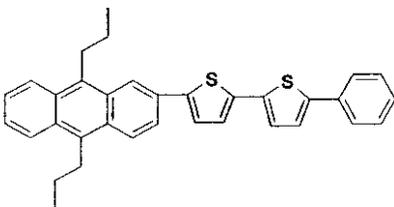
化合物 7 0



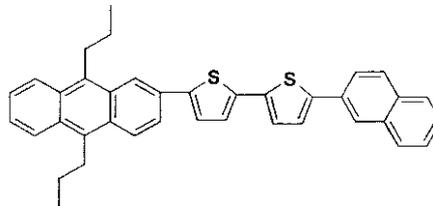
化合物 7 1



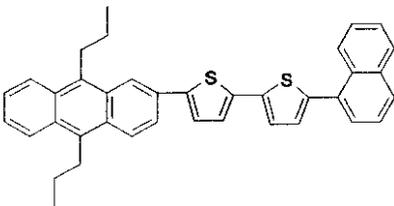
化合物 7 2



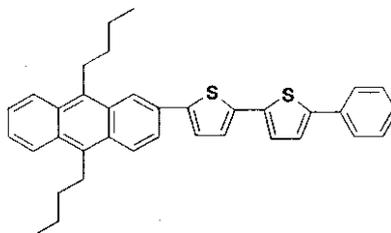
化合物 7 3



化合物 7 4



化合物 7 5



化合物 7 6

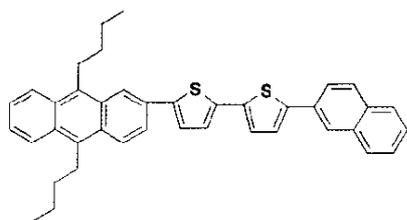
10

20

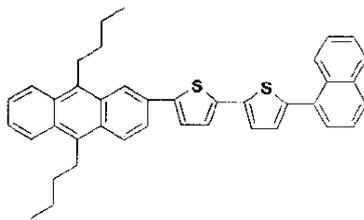
30

40

【化 5 M】

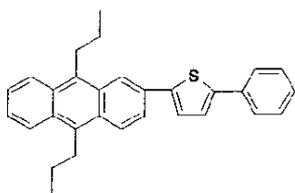


化合物 7 7

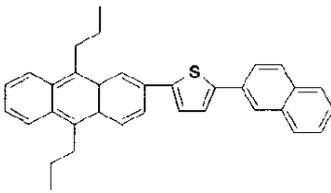


化合物 7 8

10

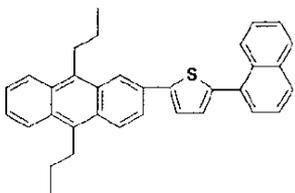


化合物 7 9

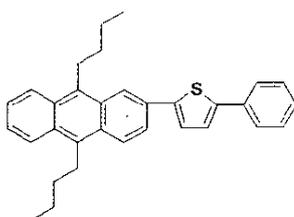


化合物 8 0

20

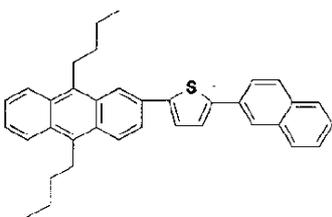


化合物 8 1

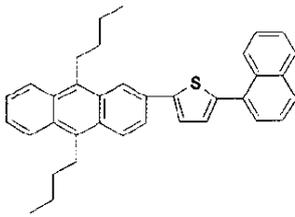


化合物 8 2

30

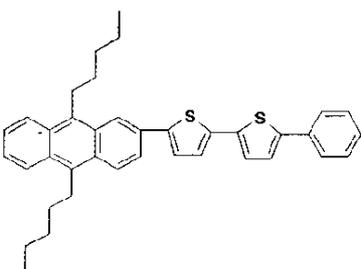


化合物 8 3

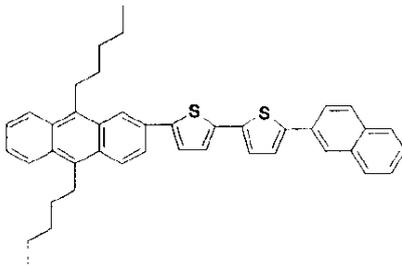


化合物 8 4

40

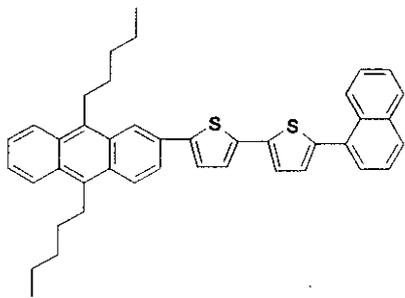


化合物 8 5

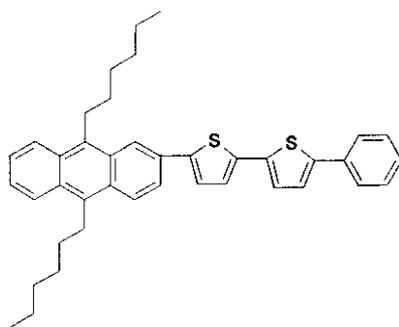


化合物 8 6

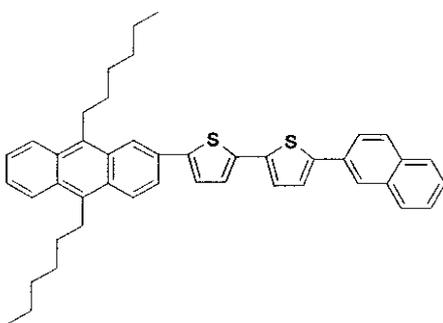
【化 5 N】



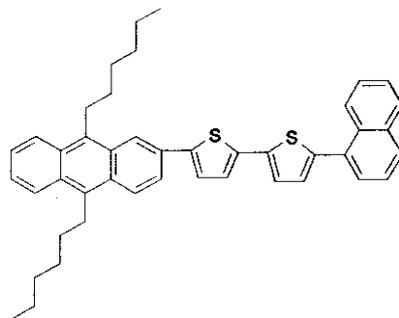
化合物 8 7



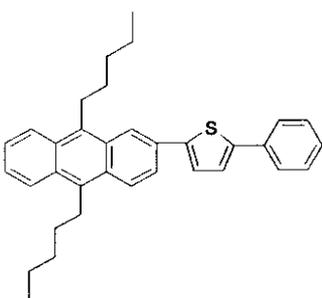
化合物 8 8



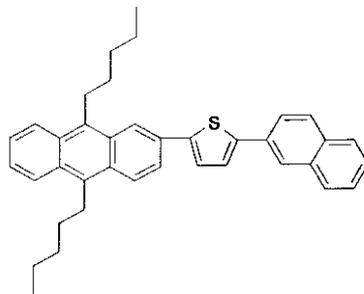
化合物 8 9



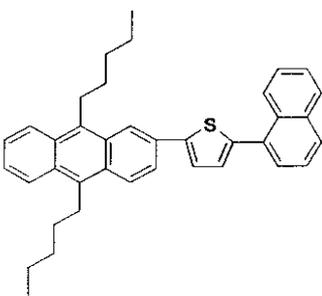
化合物 9 0



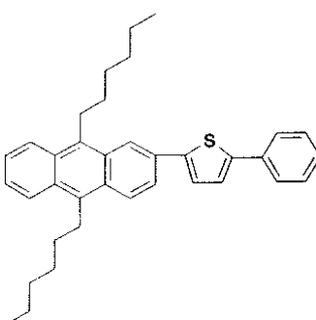
化合物 9 1



化合物 9 2



化合物 9 3



化合物 9 4

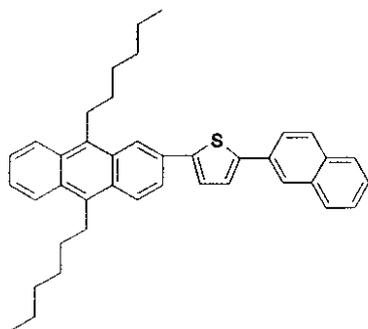
10

20

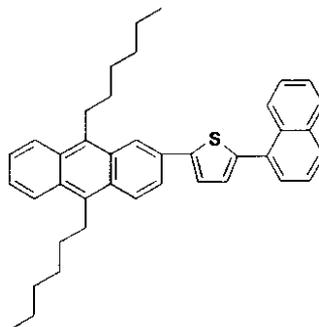
30

40

## 【化 50】



化合物 95



化合物 96

10

から選択されることを特徴とする、請求項 1 に記載の化合物。

## 【請求項 23】

前記化合物が化合物 1 乃至 60 で構成される群より選択されることを特徴とする、請求項 22 に記載の化合物。

## 【請求項 24】

前記化合物が化合物 1 乃至 36 で構成される群より選択されることを特徴とする、請求項 22 に記載の化合物。

## 【請求項 25】

前記化合物が化合物 1 乃至 24 で構成される群より選択されることを特徴とする、請求項 22 に記載の化合物。

20

## 【請求項 26】

前記化合物が、選択肢を構成する化合物 4、12、14、19、21、23、25、27 及び 29 から選択されることを特徴とする、請求項 22 に記載の化合物。

## 【請求項 27】

前記化合物が約 300 以上の融点を有することを特徴とする、請求項 1 に記載の化合物。

## 【請求項 28】

前記化合物が可視発光に対応する帯域間隙を有することを特徴とする、請求項 1 に記載の化合物。

30

## 【請求項 29】

前記可視発光のための帯域間隙が約 1.8 eV 乃至約 3.5 eV であることを特徴とする、請求項 28 に記載の化合物。

## 【請求項 30】

請求項 1 において定義したような化合物を一つ以上含む発光物質であって、前記各々の化合物が帯域間隙を有することを特徴とする物質。

## 【請求項 31】

一般式 I で表されない付加的な発光化合物を一つ以上含む発光物質であって、前記各々の付加的な化合物は帯域間隙を有することを特徴とする、請求項 30 に記載の発光物質。

40

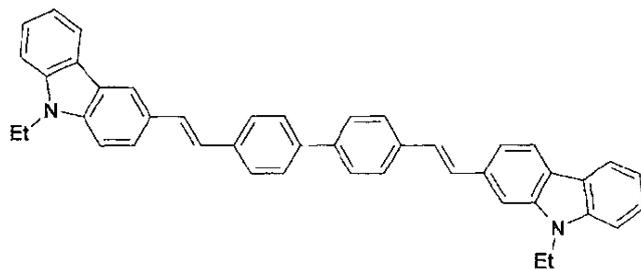
## 【請求項 32】

前記付加的な化合物のうちの少なくとも一つの帯域間隙が一般式 I で表される化合物の帯域間隙値の約 80% 乃至 100% であることを特徴とする、請求項 31 に記載の発光物質。

## 【請求項 33】

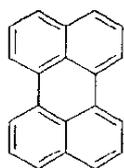
BCzVBi、ペリレン、ルブレン、DCJTb、キナクリドン、クマリン、ナイルレッド、DCM1、DCM2、テトラジフェニルアミノピリミド-ピリミジン、ピリジノチアジアゾール及び化合物 201 乃至 220:

【化 6 A】

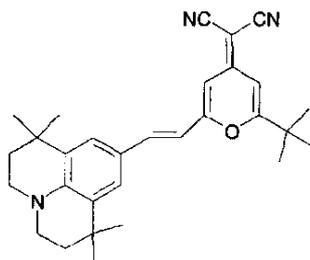


化合物 2 0 1

10

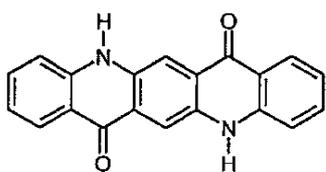


化合物 2 0 2

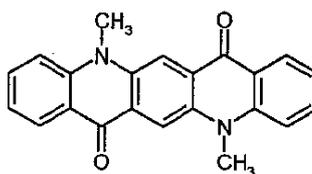


化合物 2 0 3

20

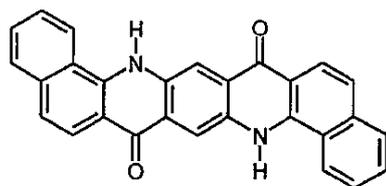


化合物 2 0 4

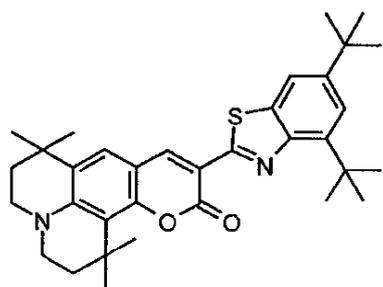


化合物 2 0 5

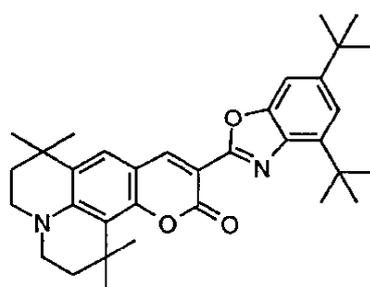
30



化合物 2 0 6



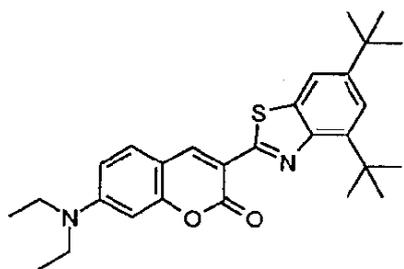
化合物 2 0 7



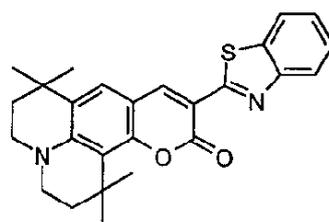
化合物 2 0 8

40

【化 6 B】

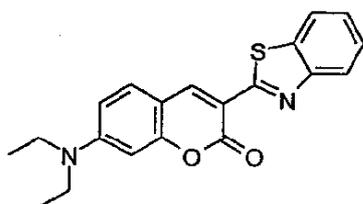


化合物 209

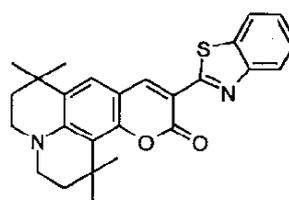


化合物 210

10

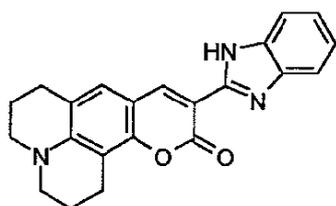


化合物 211

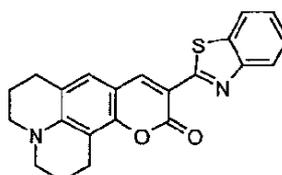


化合物 212

20

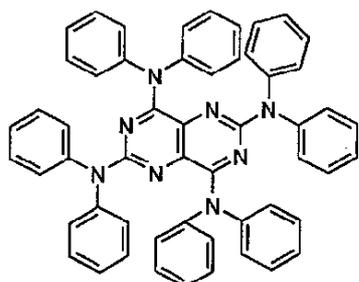


化合物 213

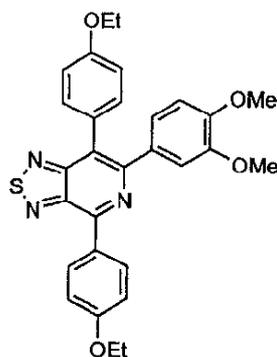


化合物 214

30

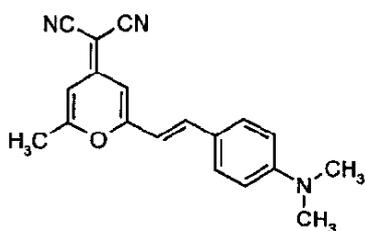


化合物 215

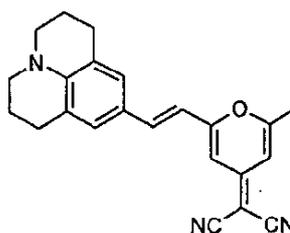


化合物 216

40

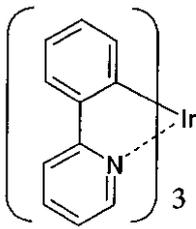


化合物 217

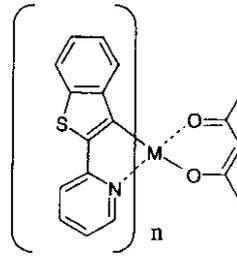


化合物 218

## 【化 6 C】



化合物 2 1 9



化合物 2 2 0

10

で構成される群より選択される発光化合物を一つ以上追加的に含むことを特徴とする、請求項 3 0 に記載の発光物質。

## 【請求項 3 4】

請求項 6 に定義されたような化合物を一つ以上含む発光物質。

## 【請求項 3 5】

請求項 2 2 に定義されたような化合物を一つ以上含む発光物質。

## 【請求項 3 6】

請求項 1 に定義されたような化合物を一つ以上含む正孔移送物質。

## 【請求項 3 7】

請求項 1 に定義されたような化合物を一つ以上含む電子移送物質。

20

## 【請求項 3 8】

請求項 1 に記載の一般式 I で示される化合物を一つ以上含む固体フィルム。

## 【請求項 3 9】

前記固体フィルム内一つ以上の化合物が無定形であることを特徴とする、請求項 3 8 に記載の固体フィルム。

## 【請求項 4 0】

一般式 I で示されない付加的な化合物を一つ以上追加的に含むことを特徴とする、請求項 3 8 に記載の固体フィルム。

## 【請求項 4 1】

前記一般式 I で示されない少なくとも一つの付加的な化合物が一般式 I で示される化合物より小さい帯域間隙を有することを特徴とする、請求項 4 0 に記載の固体フィルム。

30

## 【請求項 4 2】

前記付加的な化合物の帯域間隙が一般式 I で示される化合物の帯域間隙の約 7 0 % 乃至 1 0 0 % であることを特徴とする、請求項 4 1 に記載の固体フィルム。

## 【請求項 4 3】

前記付加的な化合物の帯域間隙が一般式 I で示される化合物の帯域間隙の約 9 0 % 乃至 1 0 0 % であることを特徴とする、請求項 4 1 に記載の固体フィルム。

## 【請求項 4 4】

一般式 I で示される一つの化合物が前記固体フィルム内ホスト物質であることを特徴とする、請求項 4 0 に記載の固体フィルム。

40

## 【請求項 4 5】

一般式 I で示される少なくとも一つの化合物が前記固体フィルム内ドープントであることを特徴とする、請求項 4 0 に記載の固体フィルム。

## 【請求項 4 6】

一般式 I で示されない一つの付加的な化合物が前記固体フィルム内ホスト物質であることを特徴とする、請求項 4 0 に記載の固体フィルム。

## 【請求項 4 7】

一般式 I で示されない少なくとも一つの付加的な化合物が前記固体フィルム内ドープントであることを特徴とする、請求項 4 0 に記載の固体フィルム。

## 【請求項 4 8】

50

少なくとも一つの付加的な化合物が発光化合物であることを特徴とする、請求項40に記載の固体フィルム。

【請求項49】

一般式Iで示されない付加的な化合物の各々が可視発光、電子移送、電子注入、正孔移送、及び正孔注入で構成される群より選択される一つ以上の特性を有することを特徴とする、請求項40に記載の固体フィルム。

【請求項50】

少なくとも一つの付加的な化合物が蛍光性または燐光性発光化合物であることを特徴とする、請求項40に記載の固体フィルム。

【請求項51】

前記フィルムが約5nm乃至100nmの厚さを有することを特徴とする、請求項38に記載の固体フィルム。

【請求項52】

一般式Iで示される化合物の各々が可視発光、電子移送、電子注入、正孔移送、及び正孔注入で構成される群より選択される一つ以上の特性を有することを特徴とする、請求項38に記載の固体フィルム。

【請求項53】

一般式Iで示される少なくとも一つの化合物が可視発光に相応する帯域間隙を有することを特徴とする、請求項38に記載の固体フィルム。

【請求項54】

前記固体フィルムが、一般式Iで示される一つ以上の化合物を一般式Iで示されない物質と共にまたは単独で蒸着、インクジェットプリンティングまたはスピニングして形成されることを特徴とする、請求項38に記載の固体フィルム。

【請求項55】

請求項6に定義されたような化合物を一つ以上含むことを特徴とする固体フィルム。

【請求項56】

請求項22に定義されたような発光物質を含むことを特徴とする固体フィルム。

【請求項57】

支持体を提供する段階;及び

前記支持体上に前記一つ以上の化合物を含み、固体フィルムを構成する少なくとも一つの層を形成する段階を含むことを特徴とする、請求項38に記載の固体フィルムの製造方法。

【請求項58】

前記層が支持体上に前記化合物を物理的蒸着、インクジェットプリンティングまたはスピニングして形成されることを特徴とする、請求項57に記載の固体フィルムの製造方法。

【請求項59】

陽極;

陰極;及び

前記陽極と陰極の間に配置された請求項38の固体フィルムを含むことを特徴とする有機電界発光(EL)素子。

【請求項60】

前記固体フィルムが発光、正孔注入、正孔移送、電子注入及び電子移送で構成される群より選択される一つ以上の機能を行う層を含むことを特徴とする、請求項59に記載の有機EL素子。

【請求項61】

前記陽極と陰極の間に一つ以上の付加的な固体フィルムを追加的に含むことを特徴とする、請求項59に記載の有機EL素子。

【請求項62】

前記有機EL素子が基板によって支持され、前記基板は陽極または陰極のうちの一つと接

10

20

30

40

50

触することを特徴とする、請求項 59 に記載の有機EL素子。

【請求項 63】

前記固体フィルムが発光層を構成することを特徴とする、請求項 59 に記載の有機EL素子。

【請求項 64】

前記発光層が一つ以上の蛍光性または燐光性発光物質を含むことを特徴とする、請求項 63 に記載の有機EL素子。

【請求項 65】

前記陰極と陽極の間に一つ以上の付加的な固体フィルムを追加的に含むことを特徴とする、請求項 63 に記載の有機EL素子。

【請求項 66】

前記陽極と発光層の間に正孔注入層、正孔移送層またはこれら両層を追加的に含むことを特徴とする、請求項 63 に記載の有機EL素子。

【請求項 67】

前記陰極と発光層の間に電子注入層、電子移送層またはこれら両層を追加的に含むことを特徴とする、請求項 63 に記載の有機EL素子。

【請求項 68】

前記発光層が、その中に発光可能な少なくとも二つの化合物を含むことを特徴とする、請求項 63 に記載の有機EL素子。

【請求項 69】

一般式 I で表示される少なくとも一つの化合物が可視発光に対応する帯域間隙を有することを特徴とする、請求項 63 に記載の有機EL素子。

【請求項 70】

前記発光層が少なくとも一つの付加的な発光化合物を追加的に含むことを特徴とする、請求項 69 に記載の有機EL素子。

【請求項 71】

前記付加的な発光化合物が一般式 I で示されないことを特徴とする、請求項 70 に記載の有機EL素子。

【請求項 72】

前記付加的な発光化合物もまた一般式 I で示されることを特徴とする、請求項 70 に記載の有機EL素子。

【請求項 73】

前記付加的な発光化合物が一般式 I で示される少なくとも一つの化合物より高い量子効率を有することを特徴とする、請求項 70 に記載の有機EL素子。

【請求項 74】

前記付加的な発光化合物が一般式 I で示される少なくとも一つの化合物より小さい帯域間隙を有することを特徴とする、請求項 70 に記載の有機EL素子。

【請求項 75】

前記付加的な化合物の帯域間隙が一般式 I で示される化合物の帯域間隙の約 70% 乃至 100% であることを特徴とする、請求項 74 に記載の有機EL素子。

【請求項 76】

前記付加的な化合物の帯域間隙が一般式 I で示される化合物の帯域間隙の約 80% 乃至 100% であることを特徴とする、請求項 74 に記載の有機EL素子。

【請求項 77】

前記付加的な化合物の帯域間隙が一般式 I で示される化合物の帯域間隙の約 90% 乃至 100% であることを特徴とする、請求項 74 に記載の有機EL素子。

【請求項 78】

前記付加的な発光化合物が燐光性発光化合物であることを特徴とする、請求項 70 に記載の有機EL素子。

【請求項 79】

10

20

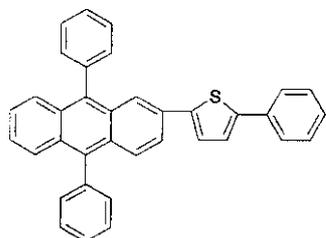
30

40

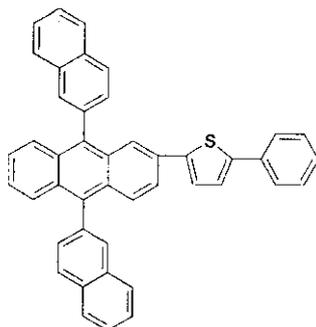
50

一般式Iで示される少なくとも一つの化合物が、選択肢を構成する下記一般式1乃至9  
6:

【化7A】

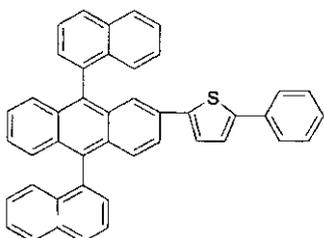


化合物 1

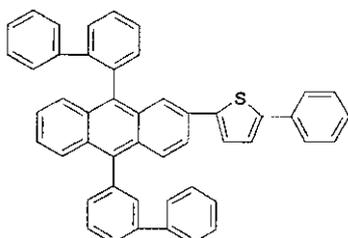


化合物 2

10

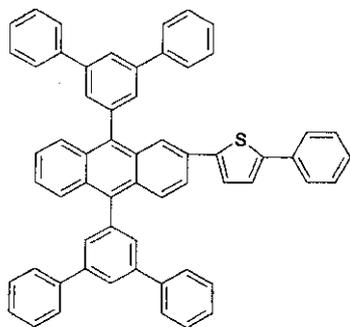


化合物 3

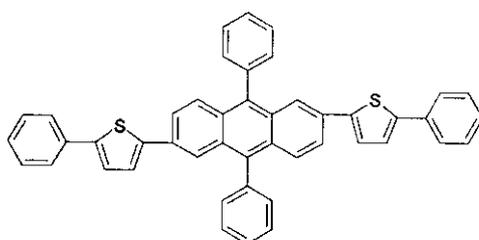


化合物 4

20

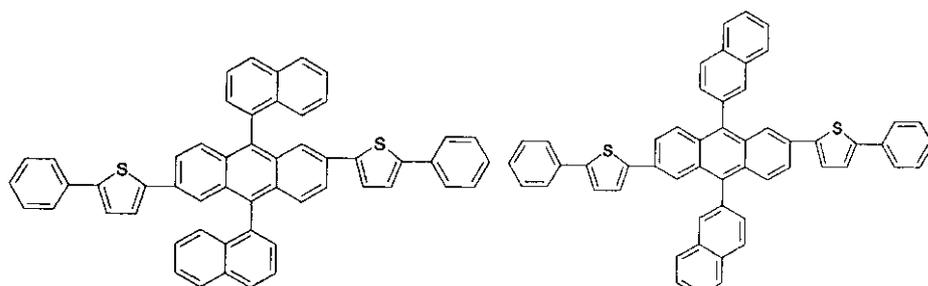


化合物 5



化合物 6

30

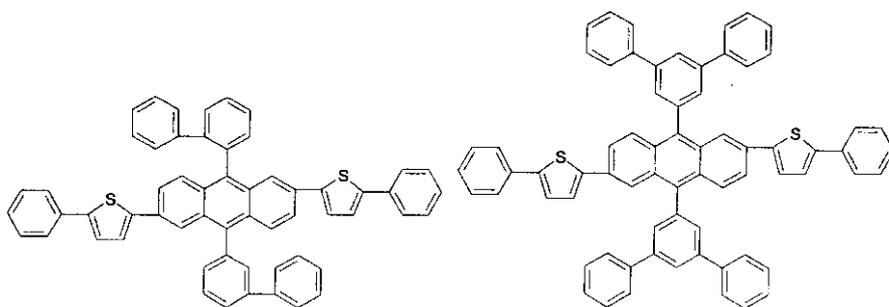


化合物 7

化合物 8

40

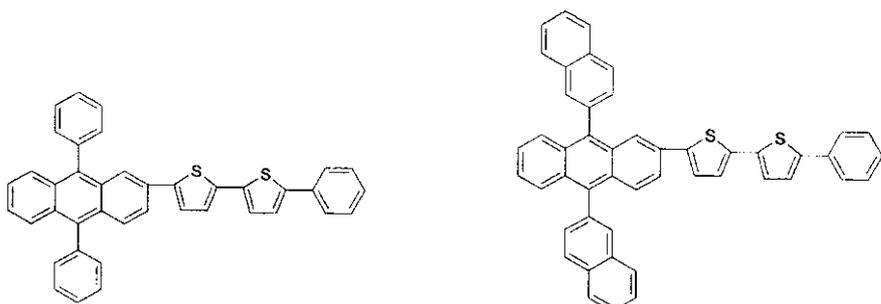
【化 7 B】



化合物 9

化合物 10

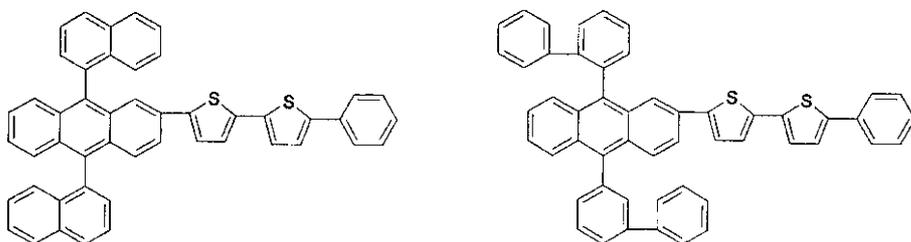
10



化合物 11

化合物 12

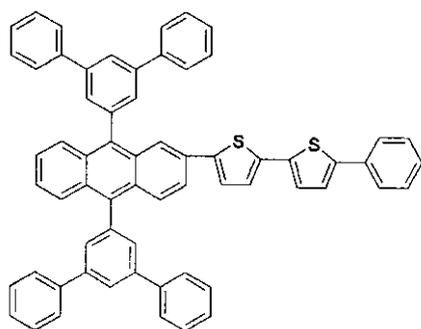
20



化合物 13

化合物 14

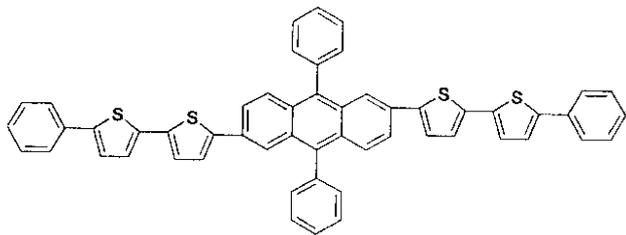
30



化合物 15

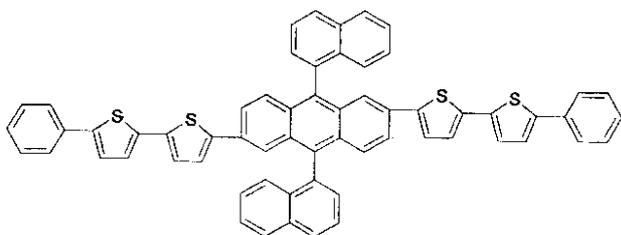
40

【化 7 C】



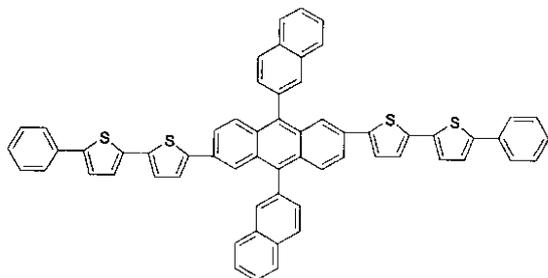
化合物 1 6

10



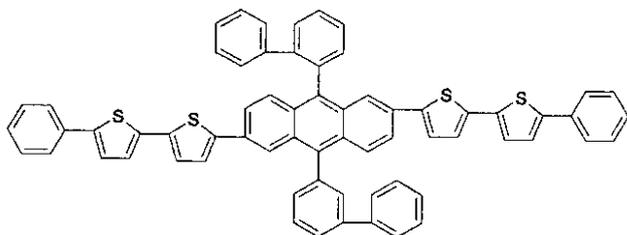
化合物 1 7

20



化合物 1 8

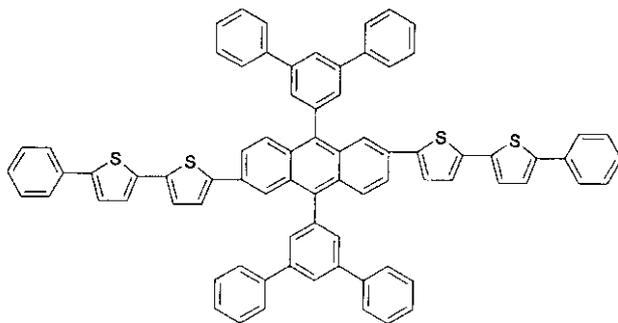
30



化合物 1 9

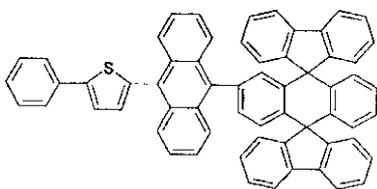
40

【化 7 D】

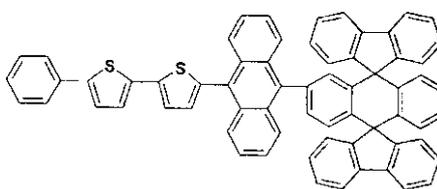


10

化合物 2 0

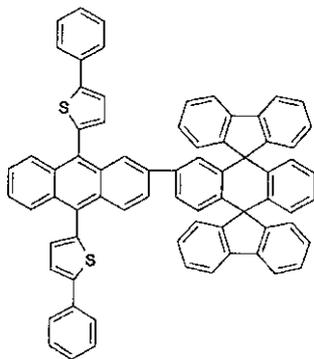


化合物 2 1

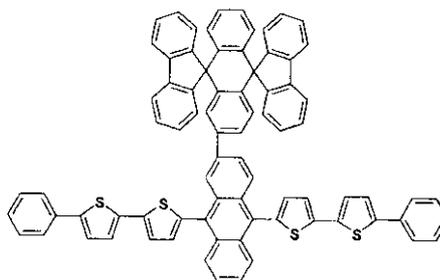


化合物 2 2

20

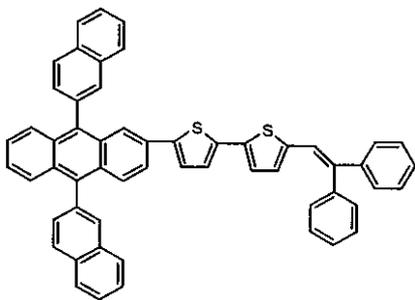


化合物 2 3

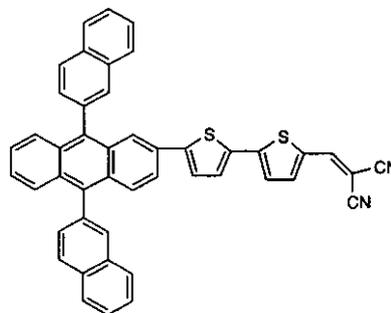


化合物 2 4

30



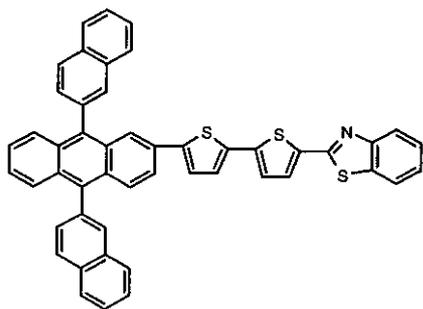
化合物 2 5



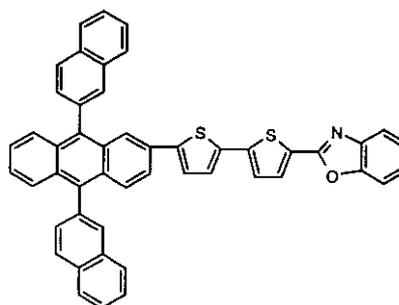
化合物 2 6

40

【化 7 E】

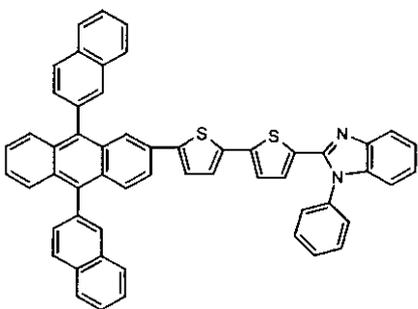


化合物 2 7

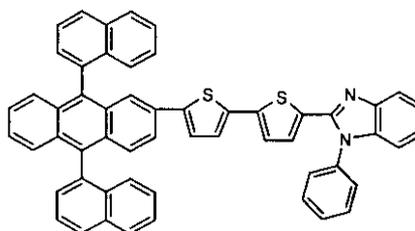


化合物 2 8

10

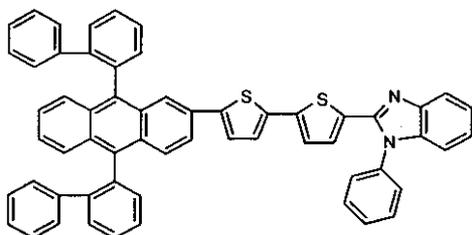


化合物 2 9

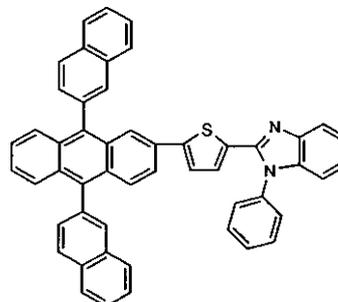


化合物 3 0

20

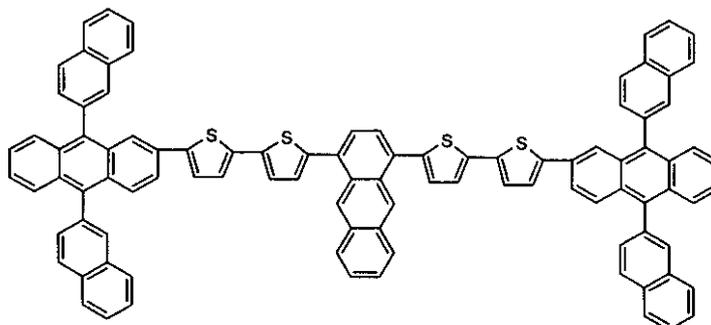


化合物 3 1



化合物 3 2

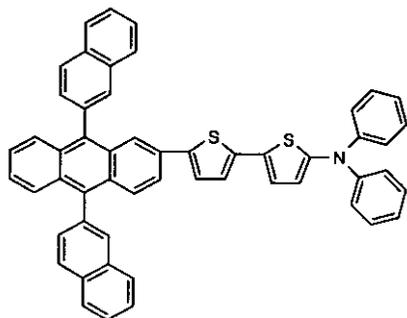
30



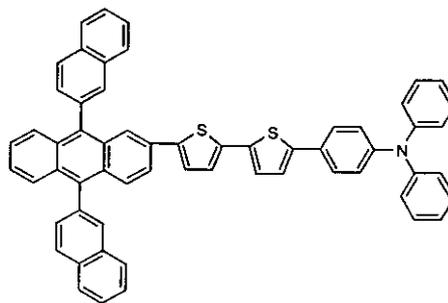
化合物 3 3

40

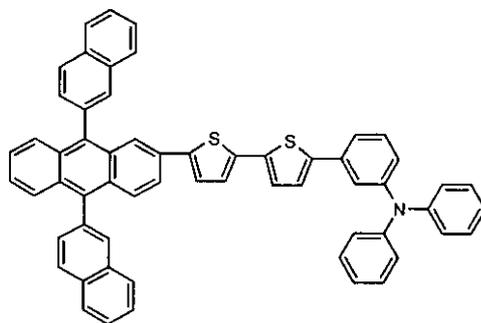
【化 7 F】



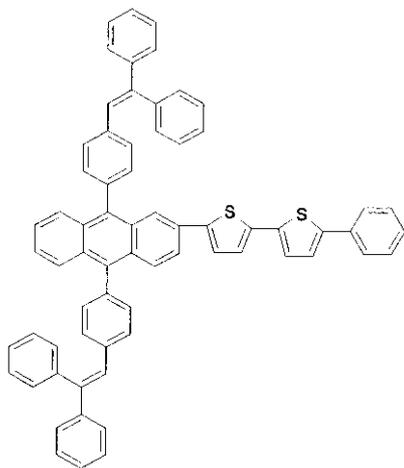
化合物 3 4



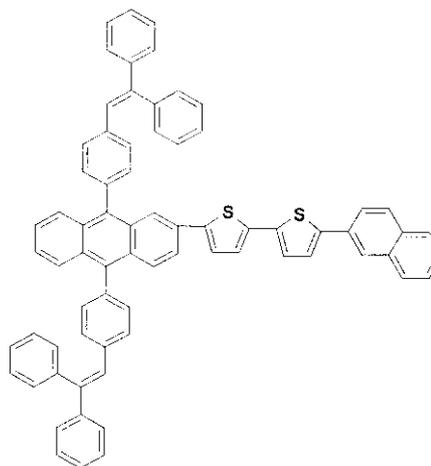
化合物 3 5



化合物 3 6



化合物 3 7



化合物 3 8

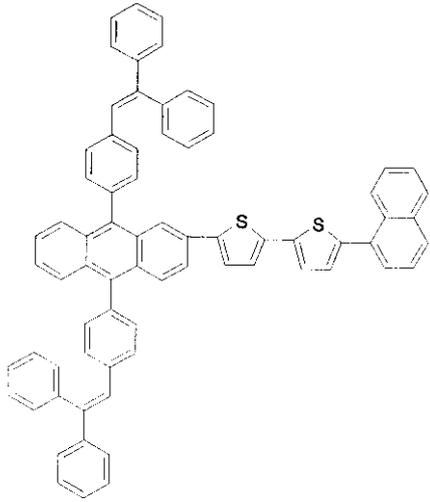
10

20

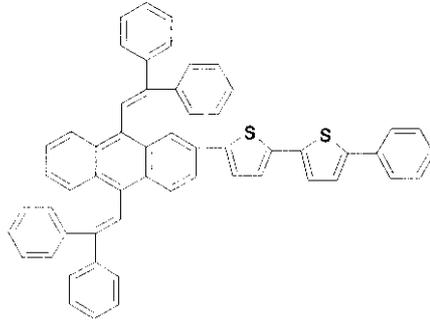
30

40

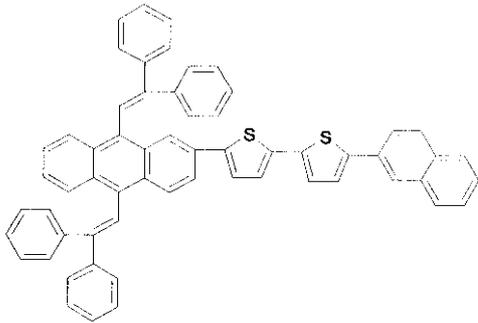
【化 7 G】



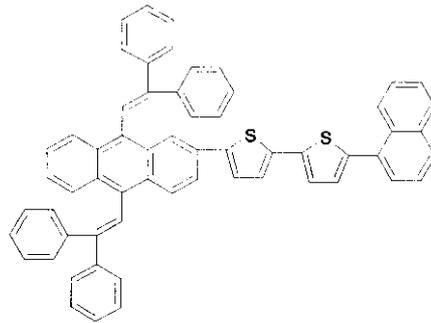
化合物 3 9



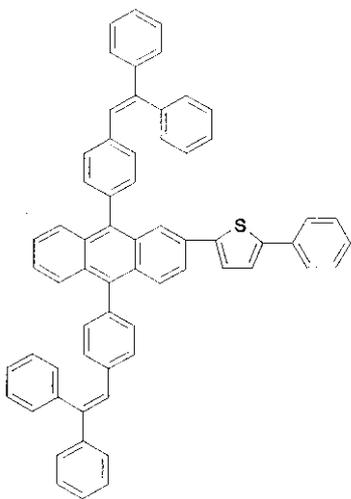
化合物 4 0



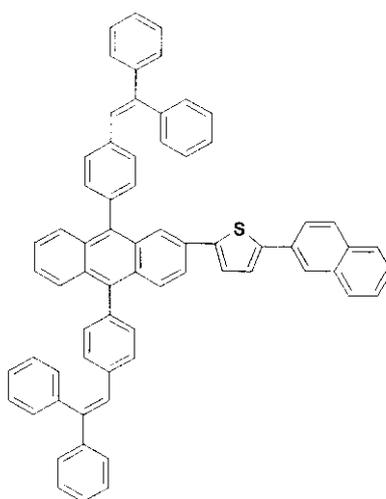
化合物 4 1



化合物 4 2



化合物 4 3



化合物 4 4

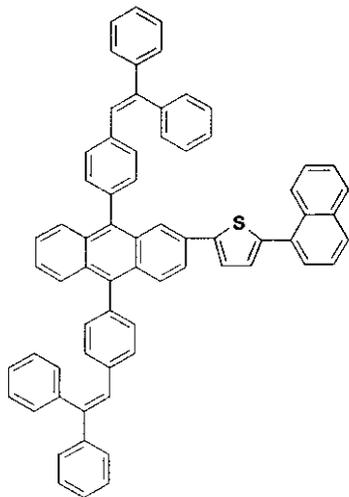
10

20

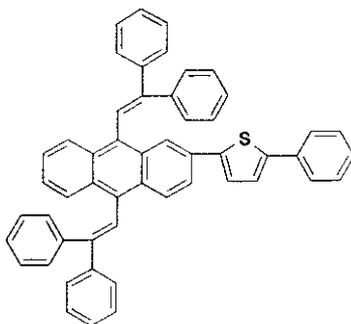
30

40

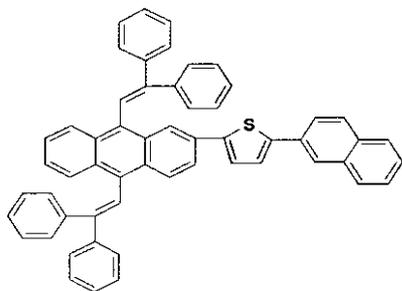
【化 7 H】



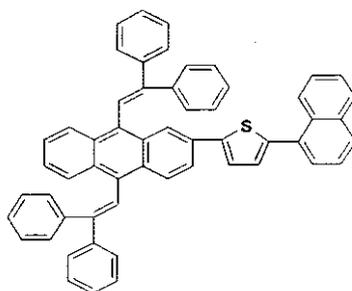
化合物 4 5



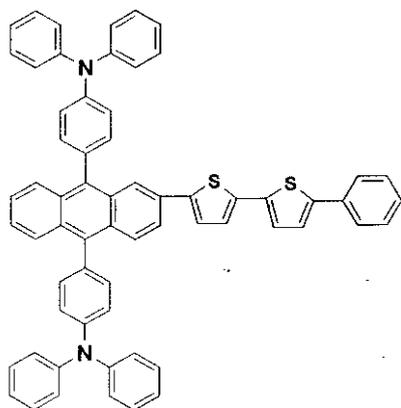
化合物 4 6



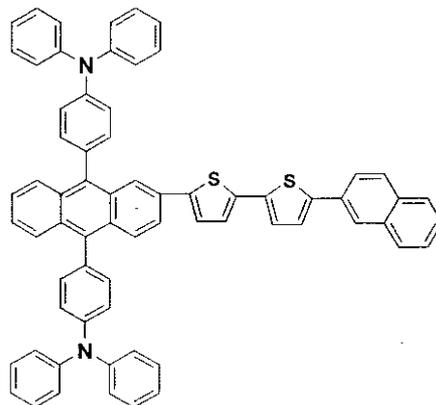
化合物 4 7



化合物 4 8



化合物 4 9



化合物 5 0

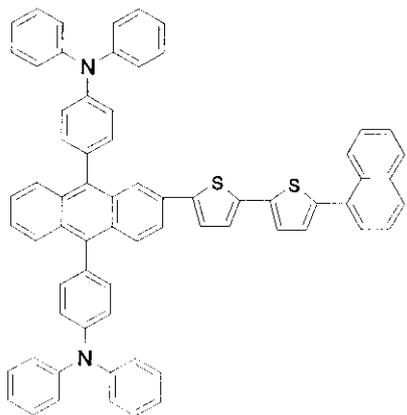
10

20

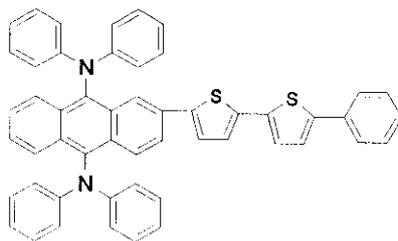
30

40

【化 7 I】

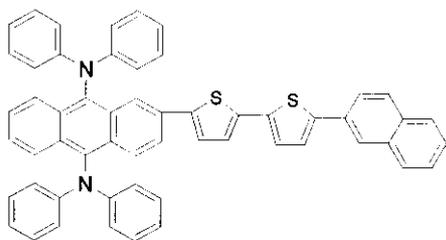


化合物 5 1

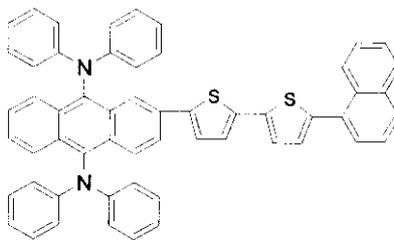


化合物 5 2

10

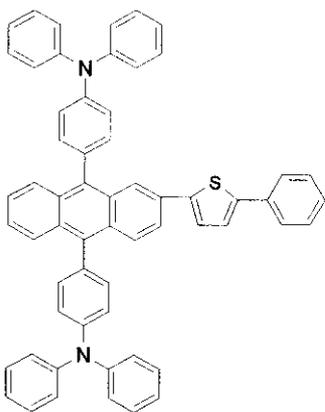


化合物 5 3

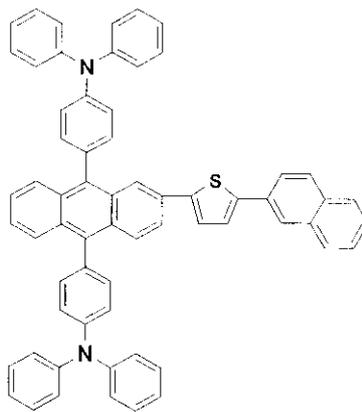


化合物 5 4

20



化合物 5 5

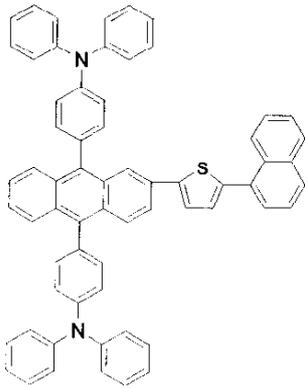


化合物 5 6

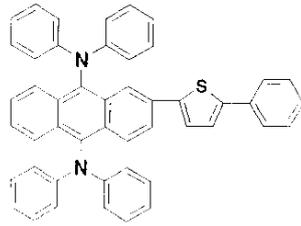
30

40

【化 7 J】

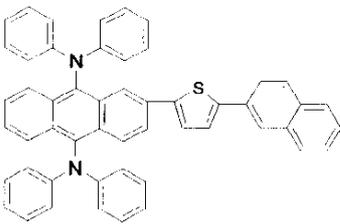


化合物 5 7

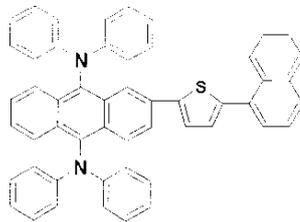


化合物 5 8

10

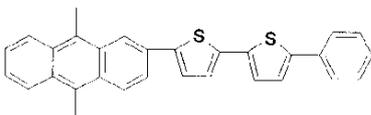


化合物 5 9

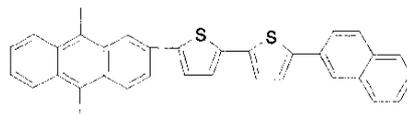


化合物 6 0

20

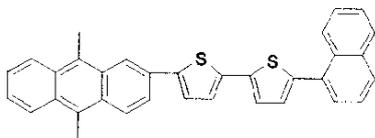


化合物 6 1

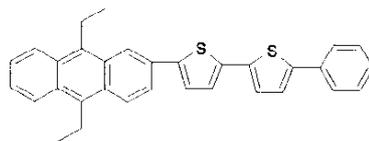


化合物 6 2

30

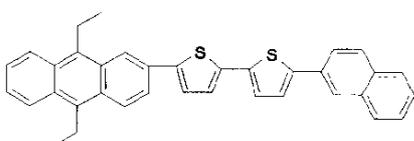


化合物 6 3

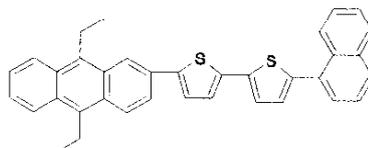


化合物 6 4

40

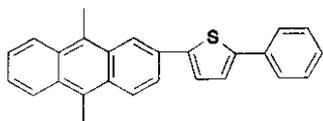


化合物 6 5

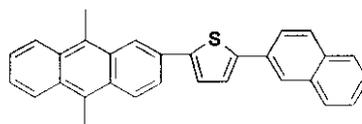


化合物 6 6

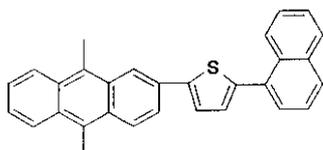
【化 7 K】



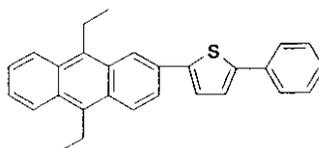
化合物 6 7



化合物 6 8

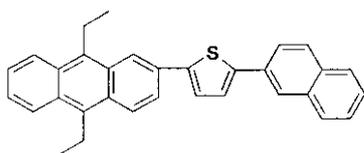


化合物 6 9

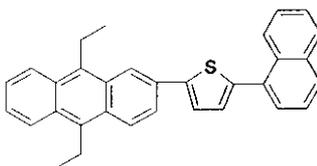


化合物 7 0

10

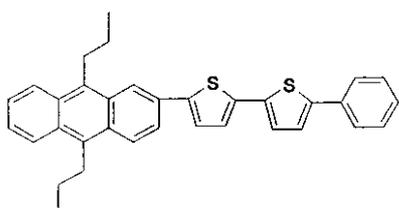


化合物 7 1

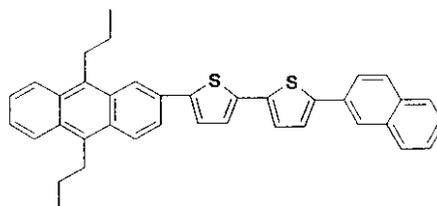


化合物 7 2

20

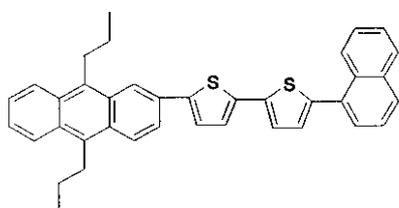


化合物 7 3

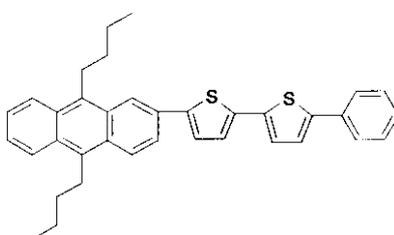


化合物 7 4

30



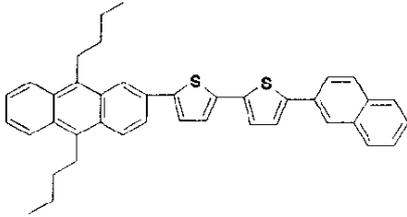
化合物 7 5



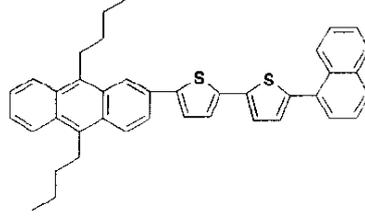
化合物 7 6

40

【化 7 L】

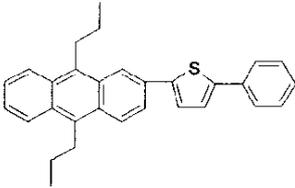


化合物 7 7

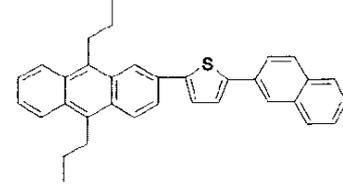


化合物 7 8

10

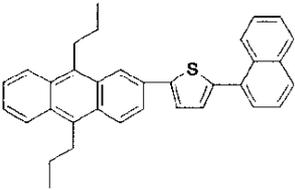


化合物 7 9

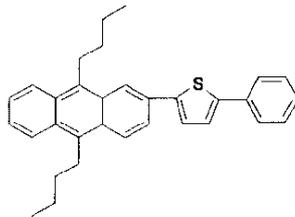


化合物 8 0

20

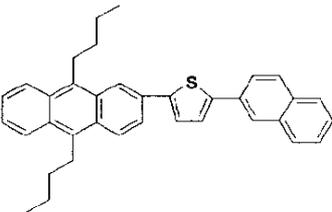


化合物 8 1

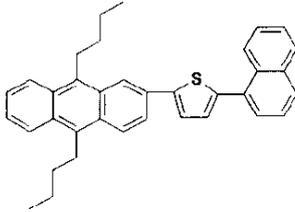


化合物 8 2

30

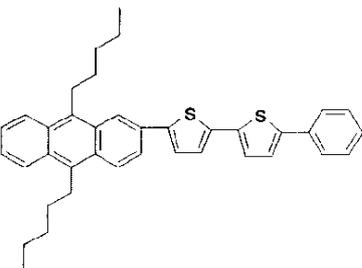


化合物 8 3

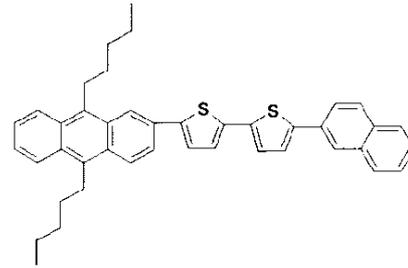


化合物 8 4

40

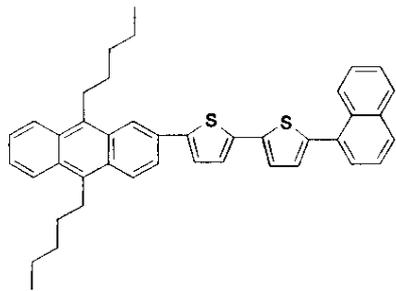


化合物 8 5

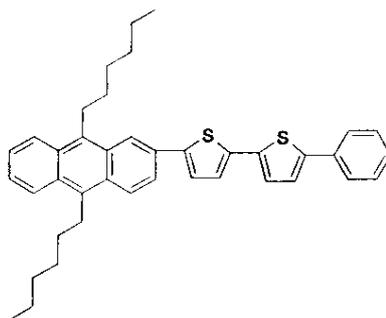


化合物 8 6

【化 7 M】

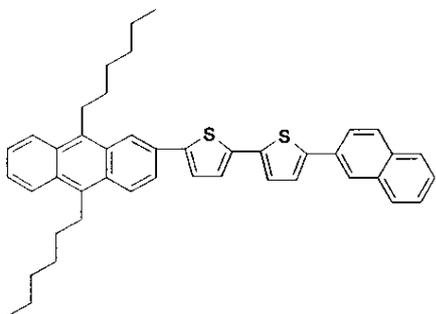


化合物 8 7

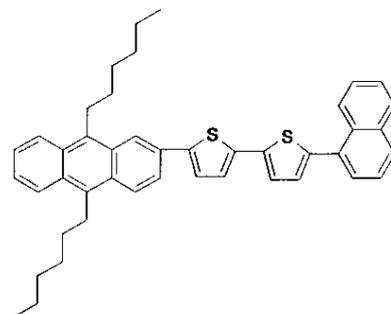


化合物 8 8

10

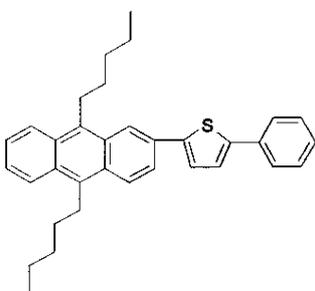


化合物 8 9

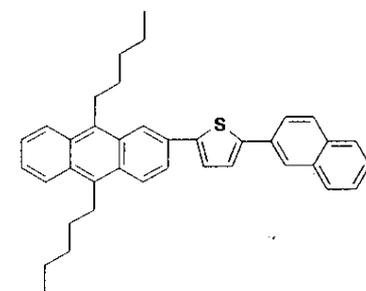


化合物 9 0

20

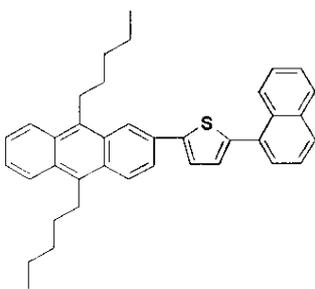


化合物 9 1

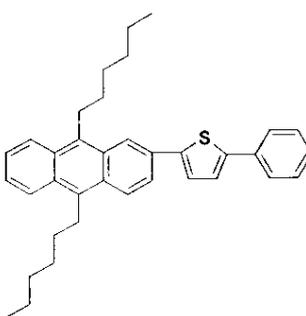


化合物 9 2

30



化合物 9 3

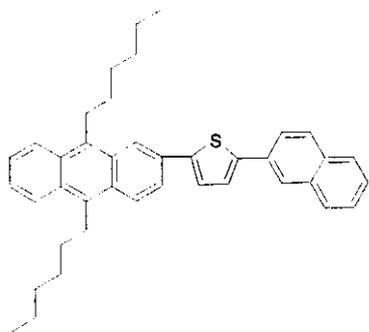


化合物 9 4

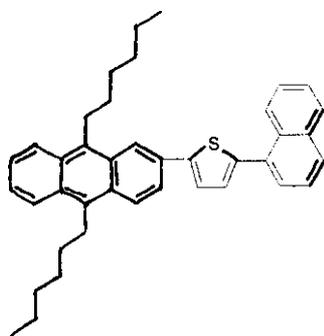
40

## 【化 7 N】

化合物 9 3



化合物 9 4



化合物 9 5

化合物 9 6

から選択されることを特徴とする、請求項 6 3 に記載の有機EL素子。

## 【請求項 8 0】

前記化合物が化合物 1 乃至 6 0 で構成される群より選択されることを特徴とする、請求項 7 9 に記載の有機EL素子。

10

20

## 【請求項 8 1】

前記化合物が化合物 1 乃至 3 6 で構成される群より選択されることを特徴とする、請求項 7 9 に記載の有機EL素子。

## 【請求項 8 2】

前記化合物が化合物 1 乃至 2 4 で構成される群より選択されることを特徴とする、請求項 7 9 に記載の有機EL素子。

## 【請求項 8 3】

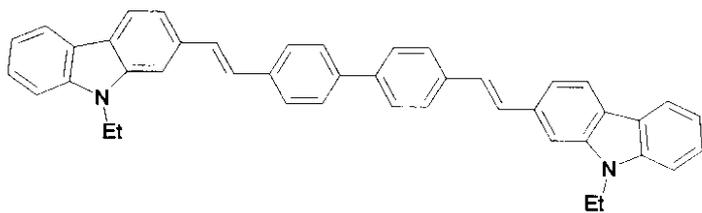
前記化合物が選択肢を構成する化合物 4、1 2、1 4、1 9、2 1、2 3、2 5、2 7 及び 2 9 から選択されることを特徴とする、請求項 7 9 に記載の有機EL素子。

## 【請求項 8 4】

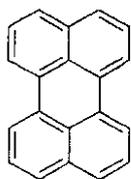
前記発光層が追加的に内部に含む一つ以上の発光化合物は、選択肢を構成する BCzVBi、ペリレン、ルブレン、DCJTB、キナクリドン、クマリン、ナイルレッド、DCM 1、DCM 2、テトラジフェニルアミノピリミド-ピリニジン、ピリジノチアジアゾール及び化合物 2 0 1-2 2 0 :

30

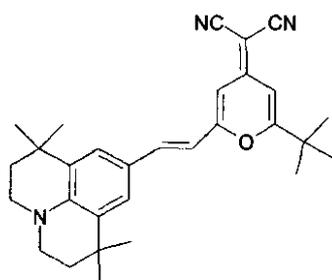
【化 8 A】



化合物 2 0 1



化合物 2 0 2

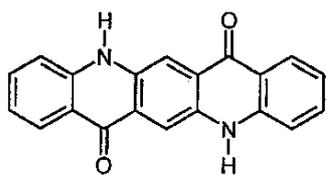


化合物 2 0 3

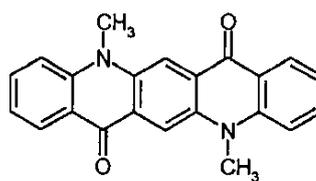
10

20

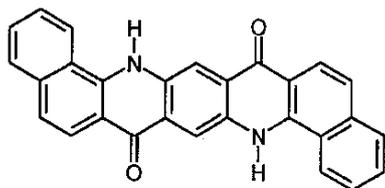
【化 8 B】



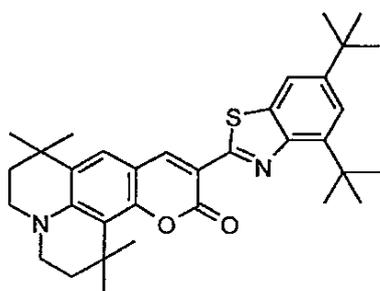
化合物 204



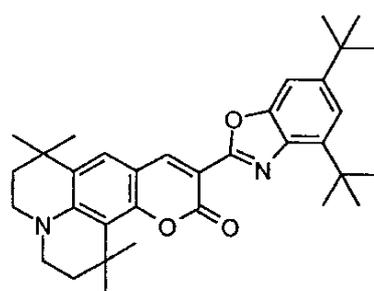
化合物 205



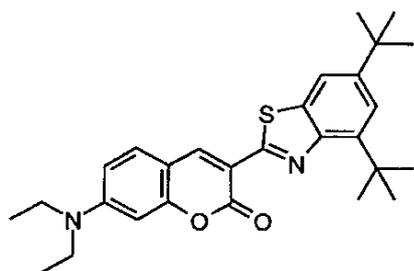
化合物 206



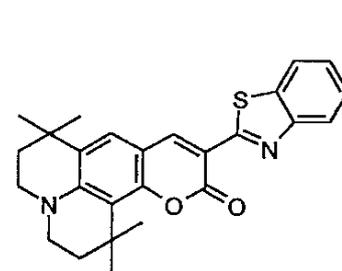
化合物 207



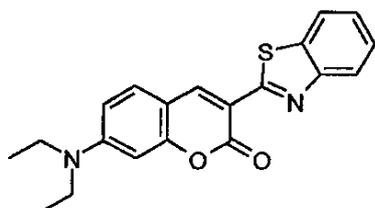
化合物 208



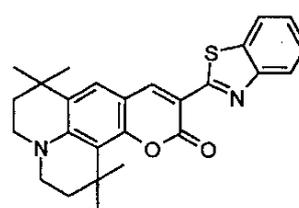
化合物 209



化合物 210



化合物 211



化合物 212

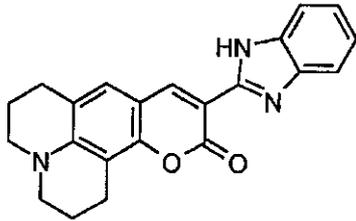
10

20

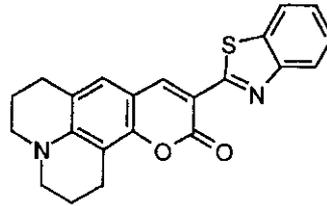
30

40

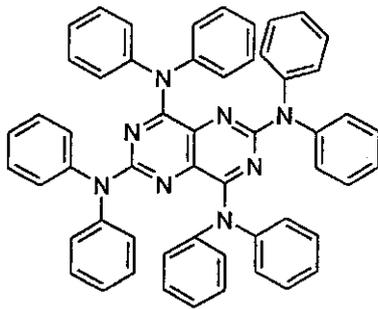
## 【化 8 C】



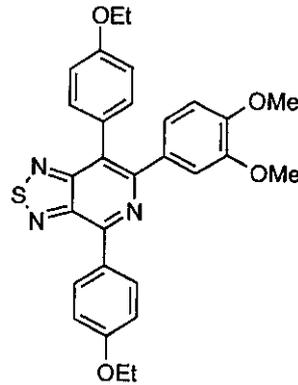
化合物 2 1 3



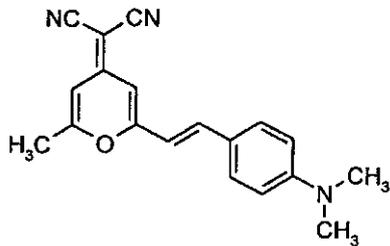
化合物 2 1 4



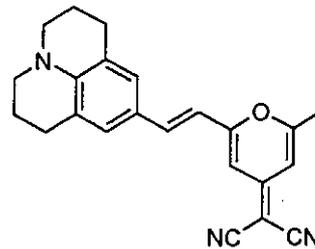
化合物 2 1 5



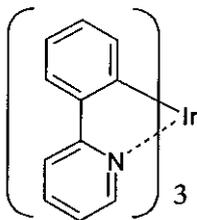
化合物 2 1 6



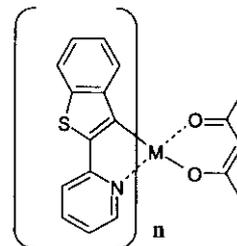
化合物 2 1 7



化合物 2 1 8



化合物 2 1 9



化合物 2 2 0

から選択されることを特徴とする、請求項 6 3 に記載の有機EL素子。

## 【請求項 8 5】

請求項 5 9 に記載の有機EL素子を備えたディスプレイを含む電子器具。

## 【請求項 8 6】

請求項 7 9 に記載の有機EL素子を備えたディスプレイを含む電子器具。

## 【請求項 8 7】

請求項 8 4 に記載の有機EL素子を備えたディスプレイを含む電子器具。

## 【請求項 8 8】

請求項 5 9 に記載の有機EL素子から可視光を生成する方法であって、

10

20

30

40

50

前記素子の陽極と陰極の間に電力を加え；  
 前記陰極から前記固体フィルムに向かって電子を注入し；  
 前記陽極から前記固体フィルムに向かって正孔を注入し；及び  
 前記陰極と陽極の間の領域で前記注入された電子と正孔の少なくとも一部を再結合させることによって前記領域から可視光を生成する段階を含む方法。

【請求項 89】

一つ以上の発光物質が前記領域内位置することを特徴とする、請求項 88 に記載の方法。

【請求項 90】

前記固体フィルムが発光層を構成することを特徴とする、請求項 88 に記載の方法。

【請求項 91】

前記一般式 I で示される少なくとも一つの化合物が発光化合物であることを特徴とする、請求項 90 に記載の方法。

【請求項 92】

前記固体フィルムがその中に付加的な発光化合物を追加的に含むことを特徴とする、請求項 91 に記載の方法。

【請求項 93】

前記付加的な発光化合物が一般式 I で示されないことを特徴とする、請求項 92 に記載の方法。

【請求項 94】

前記付加的な発光化合物が一般式 I で示される化合物より高い量子効率を有することを特徴とする、請求項 92 に記載の方法。

【請求項 95】

前記固体フィルムが発光、正孔注入、正孔移送、電子移送及び電子注入で構成される群より選択される一つ以上の機能を行う、請求項 88 に記載の方法。

【請求項 96】

請求項 59 に記載の有機 EL 素子の製造方法であって、

基板を提供し；

第 1 伝導層を形成し；

前記固体フィルムを形成し；及び

第 2 伝導層を形成する段階

を含み、前記第 1 及び第 2 伝導層のうちの一つが陽極または陰極に相当する方法。

【請求項 97】

前記固体フィルムの形成が一般式 I で示される少なくとも一つの化合物を蒸着、インクジェットプリンティングまたはスピンコーティングすることを含むことを特徴とする、請求項 96 に記載の方法。

【請求項 98】

前記形成された固体フィルム内に、一般式 I で示されない少なくとも一つの付加的な化合物が混入されることを特徴とする、請求項 97 に記載の方法。

【請求項 99】

前記第 1 及び第 2 伝導層の間に有機化合物を含む一つ以上の付加的な固体フィルムを形成する段階を追加的に含むことを特徴とする、請求項 96 に記載の方法。

【発明の詳細な説明】

【技術分野】

【0001】

本発明は一般に有機電界発光に関する。特に、本発明は電界発光（以下、“EL”と言う）特性を有する新規有機化合物及びその有機 EL 化合物を用いる有機 EL 素子に関する。

【背景技術】

【0002】

10

20

30

40

50

有機電界発光は、何らかの有機分子の内部過程を通じて、電流が可視光に転換される現象のひとつである。有機電界発光はディスプレイ技術、特に平面パネルディスプレイ技術に適用されてきた。有機電界発光を用いるディスプレイ素子は有機EL素子または有機ELディスプレイとして言及される。別個の光源を必要とする液晶ディスプレイ(LCD)とは異なって、有機EL素子はその固有の光を発生させる。一般に、この技術は、僅かな電力消費、速い応答速度、高い輝度レベル及び制限されない視野角などにおいて、LCD技術に勝って有利である。

【0003】

【特許文献1】米国特許出願第10/099,781号

【非特許文献1】Conjugated Polymers as Solid-State Laser Materials, Synthetic Metals 91, 35 (1997)年 10

【発明の開示】

【発明が解決しようとする課題】

【0004】

有機EL技術は、様々な有機化合物を利用する。或る化合物群は可視光生成を目的として用いられる。他の化合物群は、自己発光よりも、別の化合物群による発光を手助けするために使われる。有機EL素子、または、その製造過程の特性を向上させるために、見込みのある様々な新規有機化合物が研究されている。

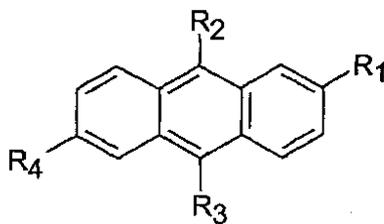
【課題を解決するための手段】

【0005】

20

本発明の一つの側面は一般式Iの化合物を提供する。

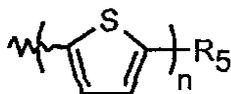
【化1】



R<sub>1</sub> 乃至 R<sub>4</sub> のうちの少なくとも一つは一般式IIで示される。

30

【化2】



【0006】

前記の諸式において、

nは1乃至10の整数である。

R<sub>5</sub> は、各々が一般式IIではないR<sub>1</sub> -R<sub>4</sub> と同一であるか異なる置換基であって、下記のように構成される群より選択される：

40

水素；ハロ；ヒドロキシル；メルカプト；シアノ；ニトロ；カルボニル；カルボキシ；ホルミル；置換または非置換C<sub>1</sub> -C<sub>20</sub> アルキル；置換または非置換C<sub>2</sub> -C<sub>10</sub> アルケニル；置換または非置換C<sub>2</sub> -C<sub>7</sub> アルキニル；置換または非置換アリール(aryl)；置換または非置換ヘテロアリール(heteroaryl)；置換または非置換C<sub>3</sub> -C<sub>7</sub> シクロアルキル、ただし、環内炭素原子が任意に置換されて酸素、窒素または硫黄原子になり得る；C<sub>4</sub> -C<sub>7</sub> シクロアルケニル、ただし、環内炭素原子が任意に置換されて酸素、窒素または硫黄原子になり得る。；置換または非置換C<sub>1</sub> -C<sub>20</sub> アルコキシ；置換または非置換C<sub>2</sub> -C<sub>10</sub> アルケニルオキシ；置換または非置換C<sub>2</sub> -C<sub>7</sub> アルキニルオキシ；置換または非置換アリールオキシ(aryloxy)；置換または非置換C<sub>1</sub> -C<sub>20</sub> アルキルアミン；置換または非置換C<sub>2</sub> -C<sub>10</sub> アルケニルアミン；置換または非置換C<sub>2</sub> -C<sub>7</sub> アルキニルアミン；置換または非置換アリールアミン(arylam 50

ine);置換または非置換アルキルアリーールアミン(alkylarylamine);置換または非置換 $C_1 - C_2 - 0$  アルキルシリル;置換または非置換 $C_2 - C_1 - 0$  アルケニルシリル;置換または非置換 $C_2 - C_7$  アルキニルシリル;置換または非置換アリーールシリル;置換または非置換アルキルアリーールシリル(alkylarylsilyl);置換または非置換 $C_1 - C_2 - 0$  アルキルボラニル;置換または非置換 $C_2 - C_1 - 0$  アルケニルボラニル;置換または非置換 $C_2 - C_7$  アルキニルボラニル;置換または非置換アリーールボラニル(arylboranyl);置換または非置換アルキルアリーールボラニル(alkylarylboranyl);置換または非置換 $C_1 - C_2 - 0$  アルキルチオ;置換または非置換 $C_2 - C_1 - 0$  アルケニルチオ;置換または非置換 $C_2 - C_7$  アルキニルチオ;及び置換または非置換アリーールチオ(arylthio)基。

## 【0007】

前記の諸式において、 $R_5$  と、各々が一般式IIで表現されない $R_1 - R_4$  は、下記のように構成される群より選択される:水素、シアノ、ニトロ、置換または非置換 $C_1 - C_2 - 0$  アルキル、置換または非置換 $C_2 - C_1 - 0$  アルケニル、置換または非置換 $C_3 - C_7$  シクロアルキル、置換または非置換 $C_4 - C_7$  シクロアルケニル、置換または非置換アリーール、置換または非置換ヘテロアリーール、置換または非置換 $C_1 - C_2 - 0$  アルコキシ、置換または非置換アリーールオキシ、置換または非置換 $C_1 - C_2 - 0$  アルキルアミン、置換または非置換アリーールアミン、置換または非置換アルキルアリーールアミン、置換または非置換 $C_1 - C_2 - 0$  アルキルシリル;置換または非置換アリーールシリル、置換または非置換アルキルアリーールシリル;置換または非置換 $C_1 - C_2 - 0$  アルキルボラニル、置換または非置換アリーールボラニル、置換または非置換アルキルアリーールボラニル、置換または非置換 $C_1 - C_2 - 0$  アルキルチオ、及び置換または非置換アリーールチオ基。前記置換基は下記のように構成される群より選択される、同一または異なる置換基でさらにモノ-またはポリ-置換される:ハロ、ヒドロキシル、メルカプト、シアノ、ニトロ、アミノ、カルボニル、カルボキシル、ホルミル、 $C_1 - C_2 - 0$  アルキル、 $C_2 - C_1 - 0$  アルケニル、 $C_2 - C_7$  アルキニル、アリーール、ヘテロアリーール、 $C_3 - C_7$  シクロアルキル、3-7員複素環式飽和または不飽和環、アクリル、 $C_1 - C_2 - 0$  アルコキシ、 $C_2 - C_1 - 0$  アルケニルオキシ、 $C_2 - C_7$  アルキニルオキシ、 $C_1 - C_2 - 0$  アルキルアミン、 $C_2 - C_1 - 0$  アルケニルアミン、 $C_2 - C_7$  アルキニルアミン、アリーールアミン、アルキルアリーールアミン、 $C_1 - C_2 - 0$  アルキルシリル、 $C_2 - C_1 - 0$  アルケニルシリル、 $C_2 - C_7$  アルキニルシリル、アルコキシシリル、アリーールシリル、アルキルアリーールシリル、 $C_1 - C_2 - 0$  アルキルボラニル、 $C_2 - C_1 - 0$  アルケニルボラニル、 $C_2 - C_7$  アルキニルボラニル、アリーールボラニル、アルキルアリーールボラニル、 $C_1 - C_2 - 0$  アルキルチオ、 $C_2 - C_1 - 0$  アルケニルチオ、 $C_2 - C_7$  アルキニルチオ及びアリーールチオ基。

## 【0008】

前記置換基は、下記のように構成される群より選択される同一または異なる置換基でモノ-またはポリ-置換される:シアノ、ニトロ、ホルミル、メチル、エチル、プロピル、フェニル、ナフチル、ピフェニル、アントラセニル、イミダゾルリル、チアゾリル、オキサゾリル、チオフェニル、ピリジル、ピリミジル、ピロリル、シクロブテニル、シクロペテニル、メトキシ、エトキシ、プロポキシ、フェノキシ、ナフトキシ、メチルアミン、エチルアミン、プロピルアミン、フェニルアミン、ナフチルアミン、メチルフェニルアミン、エチルフェニルアミン、エチルナフチルアミン、ジメチルボラニル、ジエチルボラニル、ジプロピルボラニル、ジフェニルボラニル、ジナフチルボラニル、フェニルナフチルボラニル、フェニルメチルボラニル、ナフチルメチルボラニル、ナフチルエチルボラニル、トリメチルシリル、トリエチルシリル、トリプロピルシリル、トリフェニルシリル、トリナフチルシリル、ジメチルフェニルシリル、ジエチルフェニルシリル、ジフェニルメチルシリル、メチルチオ、エチルチオ、プロピルチオ、ブチルチオ、フェニルチオ及びナフチルチオ基。

## 【0009】

$C_3 - C_7$  シクロアルキルと $C_4 - C_7$  シクロアルケニル基は5-6員、置換または非置換、飽和または不飽和複素環である。 $R_5$  と、各々が一般式IIではない $R_1 - R_4$  は下記のように構成される群より選択される:メチル、エチル、プロピル、ブチル、イソプロピル、n-ブ

10

20

30

40

50

チル、t-ブチル、イソブチル、n-ペンチル、ネオ-ペンチル、n-ヘキシル、エテニル、プロペニル、ブテニル、ペンテニル、ヘキセニル、2-メチル-エテニル、2-メチル-プロペニル、2-メチル-ブテニル、2-メチル-ペンテニル、2-メチル-ヘキセニル、イミダゾリル、チアゾリル、オキサゾリ、チオフェニル、ピリジル、ピリミジル、ピロリル、2-メチルイミダゾリル、2-メチルチアゾリル、2-メチルオキサゾリ、2-メチルチオフェニル、2-メチルピリジル、2-メチルピリミジル、2-メチルピロリル、フェニル、ナフチル、アントラセニル、ピフェニル、テルフェニル、二重スピロ、テトラセニル、3-メチル-フェニル、4-メチル-ナフチル、9-メチル-アントラセニル、4-メチル-テトラセニル、2-メチル-イミダゾリル、2-メチル-オキサゾリル、2-メチル-チアゾリル、2-メチル-フラニル、2-メチル-チオフェニル、2-メチル-ピラゾリル、2-メチル-ピリジル、2-メチル-ピリミジニル、メトキシ、エトキシ、プロポキシ、ブトキシ、ペントキシ、ヘソキシ、イソプロポキシ、イソブトキシ、t-ブトキシ、ネオ-ペントキシ、フェノキシ、ナフトキシ、ピフェノキシ、3-メチル-フェノキシ、4-メチル-ナフトキシ、2-メチル-ピフェノキシ、メチルアミン、エチルアミン、プロピルアミン、ブチルアミン、ペンチルアミン、ヘキシルアミン、ヘプチルアミン、イソプロピルアミン、イソブチルアミン、t-ブチルアミン、2-ペンチルアミン、ネオ-ペンチルアミン、フェニルアミン、ナフチルアミン、ピフェニルアミン、アントラセニルアミン、3-メチル-フェニルアミン、4-メチル-ナフチルアミン、2-メチル-ピフェニルアミン、9-メチル-アントラセニルアミン、フェニルメチルアミン、フェニルエチルアミン、ナフチルメチルアミン、ナフチルエチルアミン、ピフェニルメチルアミン、3-メチル-フェニルメチルアミン、フェニルイソプロピルアミン、ナフチルイソプロピルアミン、ナフチルイソブチルアミン、ピフェニルイソプロピルアミン、トリメチルシリル、トリエチルシリル、トリブチルシリル、トリ(イソプロピル)シリル、トリ(イソブチル)シリル、トリ(t-ブチル)シリル、トリ(2-ブチル)シリル、トリフェニルシリル、トリナフチルシリル、トリピフェニルシリル、トリ(3-メチルフェニル)シリル、トリ(4-メチルナフチル)シリル、トリ(2-メチルピフェニル)シリル、フェニルメチルシリル、フェニルエチルシリル、ナフチルメチルシリル、ナフチルエチルシリル、ピフェニルメチルシリル、3-メチル-フェニルメチルシリル、フェニルイソプロピルシリル、ナフチルイソプロピルシリル、ナフチルイソブチルシリル、ピフェニルイソプロピルシリル、ジメチルボラニル、ジエチルボラニル、ジプロピルアミン、ジブチルアミン、ジペンチルアミン、ジイソプロピルボラニル、ジイソブチルボラニル、ジ(t-ブチル)ボラニル、イソプロピルイソブチルアミン、ジフェニルボラニル、ジナフチルボラニル、ジピフェニルボラニル、ジ(3-メチルフェニル)ボラニル、ジ(4-メチルナフチル)ボラニル、ジ(2-メチルピフェニル)ボラニル、フェニルメチルボラニル、フェニルエチルボラニル、ナフチルメチルボラニル、ナフチルエチルボラニル、ピフェニルメチルボラニル、3-メチル-フェニルメチルボラニル、フェニルイソプロピルボラニル、ナフチルイソプロピルボラニル、ナフチルイソブチルボラニル、ピフェニルイソプロピルボラニル、メチルチオ、エチルチオ、プロピルチオ、ブチルチオ、ペンチルチオ、ヘキシルチオ、トリ(イソプロピル)チオ、トリ(イソブチル)チオ、トリ(t-ブチル)チオ、トリ(2-ブチル)チオ、フェニルチオ、ナフチルチオ、ピフェニルチオ、(3-メチルフェニル)チオ、(4-メチルナフチル)チオ及び(2-メチルピフェニル)チオ基。

【0010】

前記の諸式において、R<sub>5</sub> と、各々が一般式IIではないR<sub>1</sub> -R<sub>4</sub> は、下記のように構成される群より選択される：メチル、エチル、イソプロピル、t-ブチル、エテニル、プロペニル、2-メチル-エテニル、2-メチル-プロペニル、イミダゾリル、チアゾリル、オキサゾリル、2-メチルイミダゾリル、2-メチルチアゾリル、2-メチルオキサゾリ、フェニル、ナフチル、ピフェニル、テルフェニル、アントラセニル、二重スピロ、3-メチル-フェニル、4-メチル-ナフチル、メトキシ、エトキシ、イソプロポキシ、イソブトキシ、フェノキシ、ナフトキシ、3-メチル-フェノキシ、4-メチル-ナフトキシ、メチルアミン、エチルアミン、イソプロピルアミン、イソブチルアミン、t-ブチルアミン、フェニルアミン

、ナフチルアミン、3-メチル-フェニルアミン、4-メチル-ナフチルアミン、フェニルメチルアミン、フェニルエチルアミン、ナフチルメチルアミン、3-メチル-フェニルメチルアミン、フェニルイソプロピルアミン、トリメチルシリル、トリエチルシリル、トリ(イソプロピル)シリル、トリ(イソブチル)シリル、トリフェニルシリル、トリナフチルシリル、トリ(3-メチルフェニル)シリル、トリ(4-メチルナフチル)シリル、フェニルメチルシリル、フェニルエチルシリル、3-メチル-フェニルメチルシリル、フェニルイソプロピルシリル、ジメチルボラニル、ジエチルボラニル、ジイソプロピルボラニル、ジイソブチルボラニル、ジフェニルボラニル、ジナフチルボラニル、ジ(3-メチルフェニル)ボラニル、ジ(4-メチルナフチル)ボラニル、フェニルメチルボラニル、フェニルエチルボラニル、3-メチル-フェニルメチルボラニル、フェニルイソプロピルボラニル、メチルチオ、エチルチオ、トリ(イソプロピル)チオ、トリ(イソブチル)チオ、フェニルチオ、ナフチルチオ、(3-メチルフェニル)チオ及び(4-メチルナフチル)チオ基。

10

## 【0011】

また前記の諸式において、 $R_5$  と、各々が一般式IIではない $R_1$  - $R_4$  は、置換または非置換フェニル、置換または非置換ナフチル、置換または非置換ビフェニル、置換または非置換テルフェニル、置換または非置換アントラセニル及び置換または非置換二重スピロ基で構成される群より選択される。前記置換されたフェニル、ナフチル、ビフェニル、テルフェニル、アントラセニル及び二重スピロ基は、シアノ、ニトロ、ホルミル、置換または非置換 $C_1$  - $C_{20}$  アルキル、アリール、ヘテロアリール、 $C_4$  - $C_7$  シクロアルケニル、置換または非置換 $C_1$  - $C_{20}$  アルコキシ、アリールオキシ、 $C_1$  - $C_{20}$  アルキルアミン、アリールアミン、アルキルアリールアミン、 $C_1$  - $C_{20}$  シリル、アリールシリル、及びアルキルアリールシリル、 $C_1$  - $C_{20}$  アルキルボラニル、アリールボラニル、アルキルアリールボラニル、 $C_1$  - $C_{20}$  アルキルチオ及びアリールチオで構成される群より選択される一つ以上で置換される。

20

## 【0012】

更に前記式において、 $R_1$  乃至 $R_4$  のうちの一つのみが一般式IIで示される。 $R_1$  乃至 $R_4$  のうちの二つが一般式IIで示される。 $R_1$  と $R_4$  が一般式IIで示される。 $R_2$  と $R_3$  が一般式IIで示される。 $R_1$  乃至 $R_4$  のうちの3つが一般式IIで示される。 $R_1$  乃至 $R_4$  の全てが一般式IIで示される。 $R_1$  - $R_4$  のうちの少なくとも一つが一般式IIで示され、ここで、残っている $R_1$  - $R_4$  は一般式1-1乃至一般式1-14で構成される群より選択される。これら諸式において、X、YとZは同一または異なる置換基であって、X、YまたはZが付着する各々の環部分はX、YまたはZのような一つ以上の同一または異なる置換基で置換できる。X、YとZは、シアノ、ニトロ、ホルミル、置換または非置換 $C_1$  - $C_{20}$  アルキル、アリール、ヘテロアリール、 $C_4$  - $C_7$  シクロアルケニル、置換または非置換 $C_1$  - $C_{20}$  アルコキシ、アリールオキシ、 $C_1$  - $C_{20}$  アルキルアミン、アリールアミン、アルキルアリールアミン、 $C_1$  - $C_{20}$  シリル、アリールシリル、及びアルキルアリールシリル、 $C_1$  - $C_{20}$  アルキルボラニル、アリールボラニル、アルキルアリールボラニル、 $C_1$  - $C_{20}$  アルキルチオ及びアリールチオで構成される群より選択される。X、Y及びZはシアノ、ニトロ、メチル、エチル、イソプロピル、t-ブチル、メトキシ、エトキシ、プロポキシ、メチルチオ、イミダゾリル、ピリジル、チアゾリル、オキサゾリル、フラニル、チオフェニル、ピロリル、ピリジル及びピリミジルで構成される群より選択される。

30

40

## 【0013】

一般式Iにおいて、一般式IIは一般式2-1乃至2-5で構成される群より選択される。これら諸式において、nは1乃至4の整数であり；mは0乃至20の整数である。X、YとZは同一または異なる置換基である。X、YまたはZが付着した各々の環部分はX、YまたはZのような一つ以上の同一または異なる置換基で置換できる。X、YとZはシアノ、ニトロ、ホルミル、置換または非置換 $C_1$  - $C_{20}$  アルキル、アリール、ヘテロアリール、 $C_4$  - $C_7$  シクロアルケニル、置換または非置換 $C_1$  - $C_{20}$  アルコキシ、アリールオキシ、 $C_1$  - $C_{20}$  アルキルアミン、アリールアミン、アルキルアリールアミン、 $C_1$  - $C_{20}$  シリル、アリールシリル、及びアルキルアリールシリル、 $C_1$  - $C_{20}$  アルキルボラニル、アリールボラニル、ア

50

ルキルアリアルボラニル、 $C_1-C_{20}$  アルキルチオ及びアリアルチオで構成される群より選択される。X、YとZはシアノ、ニトロ、メチル、エチル、イソプロピル、t-ブチル、メトキシ、エトキシ、プロポキシ、メチルチオ、イミダゾリル、ピリジル、チアゾリル、オキサゾリル、フラニル、チオフェニル、ピロリル、ピリジル及びピリミジルで構成される群より選択される。

【0014】

一般式Iの化合物は、化合物1乃至96で構成される群より選択される。一般式Iの化合物は化合物1乃至60で構成される群より選択される。一般式Iの化合物は化合物1乃至24で構成される群より選択される。一般式Iの化合物は化合物1、4、12、14、19、21、23、25、27及び29で構成される群より選択される。前記化合物は約300より高い融点を持つ。前記化合物は可視発光に相応する帯域間隙(バンドギャップ)を有する。前記可視発光のための帯域間隙は約1.8 eV乃至約3.5 eVである。

10

【0015】

本発明の他の一側面が提供する発光物質は、一つ以上の前記化合物を含み、各化合物は一つの帯域間隙を有する。前記発光物質は、更に一つ以上の付加的な発光化合物を含み、一般式Iでは示されないが、前記付加的な化合物は各々帯域間隙を有する。前記付加的な化合物のうち少なくとも一つが有する帯域間隙は、一般式Iで示される化合物の帯域間隙値の約80%乃至100%である。前記発光物質は、BCzVBi、ペリレン、ルブレン(rubrene)、DCJTb、キナクリドン、クマリン、ナイルレッド、DCM1、DCM2、テトラジフェニルアミノピリミド-ピリミジン、ピリジノチアジアゾール、及び化合物201-220で構成される群より選択される一つ以上の発光化合物を追加的に含む。

20

【0016】

本発明の他の諸側面が提供するものは、一般式Iの前記化合物を一つ以上含む発光物質；一般式Iの前記化合物を一つ以上含む正孔移送物質；一般式Iの前記化合物を一つ以上含む電子移送物質である。

【0017】

本発明のもう一つの側面が提供する固体フィルムは、一般式Iの前記化合物を一つ以上含む。前記固体フィルム内の一つ以上の化合物は無定形状である。前記固体フィルムは、一般式Iでは示されない一つ以上の付加的な化合物を更に含む。一般式Iでは示されない、少なくとも一つの付加的な化合物は、一般式Iで示される化合物の間隙より小さい帯域間隙を有する。前記付加的な化合物の帯域間隙は一般式Iで示される化合物の帯域間隙の約70%乃至100%である。前記付加的な化合物の帯域間隙は一般式Iで示される化合物の帯域間隙の約90%乃至100%である。一般式Iで示される一つの化合物が前記固体フィルム内宿主物質である。一般式Iで示される少なくとも一つの化合物が前記固体物質内ドーパントである。一般式Iでは示されない一つの付加的な化合物が前記固体フィルム内宿主物質である。一般式Iでは示されない少なくとも一つの付加的な化合物が前記固体フィルム内ドーパントである。少なくとも一つの付加的な化合物が発光化合物である。一般式Iでは示されない各々の付加的な化合物が可視発光、電子移送、電子注入、正孔移送、及び正孔注入で構成される群より選択される一つ以上の特性を有する。少なくとも一つの付加的な化合物が蛍光性または燐光性発光化合物である。前記固体フィルムは約5 nm乃至約100 nmの厚さを有する。一般式Iで示される各化合物が発光、電子移送、電子注入、正孔移送、及び正孔注入で構成される群より選択される一つ以上の特性を有する。一般式Iで示される少なくとも一つの化合物が可視発光に相当する帯域間隙を有する。前記固体フィルムは一般式Iで示される一つ以上の化合物を一般式Iでは示されない物質と共にあるいは単独で蒸着、インクジェット印刷またはスピンコーティングにより形成される。前記固体フィルムは前記発光物質を含む。

30

40

【0018】

本発明の他の側面は、前記固体フィルムを製造する方法を提供する。前記方法は下記の段階を含む：支持体を提供する段階；及び前記支持体上に前記一つ以上の化合物を含む少な

50

くとも一つの層を形成する段階、ここで前記少なくとも一つの層は固体フィルムが構成する。前記層は、物理的蒸着、インクジェットプリンティングまたはスピンコーティングによって、前記化合物を用いて支持体上に形成される。

#### 【0019】

本発明の他の側面が提供する有機電界発光(EL)素子は、陽極;陰極;及び前記陽陰両極間に配置される前記固体フィルムを含む。前記有機EL素子において、前記固体フィルムが供与する一つ以上の機能は、選択枝を構成する発光、正孔注入、正孔移送、電子移送及び電子注入から選ばれる。前記有機EL素子が更に含む一つ以上の付加的な固体フィルムは前記陽陰両極間にある。前記有機EL素子を支持する基板があって、前記基板は前記陽極または陰極の何れかと接触する。前記固体フィルムは発光層の要素である。前記発光層は一つ以上の蛍光性または燐光性発光物質を含む。前記有機EL素子は、更に、一つ以上の付加的な固体フィルムを前記陽陰両極間に含む。前記有機EL素子は、更に、正孔注入層、正孔移送層または両者を前記陽極と発光層の間に含む。前記有機EL素子は、更に、電子注入層、電子移送層または両者を前記陰極と発光層の間に含む。

10

#### 【0020】

前記有機EL素子において、前記発光層が含む少なくとも二つの化合物は、そこで発光可能である。少なくとも一つの化合物は、一般式Iで示され、その帯域間隙は可視発光に対応する。前記発光層は、更に、少なくとも一つの付加的な発光化合物を含む。前記付加的な発光化合物は一般式Iで示されない。前記付加的な発光化合物はまた、一般式Iで示される。前記付加的な発光化合物は一般式Iで示される少なくとも一つの化合物より高い量子効率を有する。前記付加的な発光化合物は一般式Iで示される少なくとも一つの化合物より小さい帯域間隙を有する。前記付加的な化合物の帯域間隙は一般式Iで示される化合物の帯域間隙の約70%乃至100%である。前記付加的な化合物の帯域間隙は一般式Iで示される化合物の帯域間隙の約80%乃至100%である。前記付加的な化合物の帯域間隙は一般式Iで示される化合物の約90%乃至100%である。前記付加的な発光化合物は燐光性発光物質である。

20

#### 【0021】

また、前記有機EL素子において、少なくとも一つの化合物が、一般式Iで示され、選択枝を構成する化合物1乃至96から選ばれる。一般式Iの前記化合物は、選択枝を構成する化合物1乃至60から選ばれる。一般式Iの前記化合物は、選択枝を構成する化合物1乃至24から選ばれる。一般式Iの前記化合物は、選択枝を構成する化合物1、4、12、14、19、21、23、25、27及び29から選ばれる。前記発光層が、その中に追加的に含む、一つ以上の発光化合物は、選択枝を構成するBCzVBi、ペリレン、ルブレン、DCJTb、キナクリドン、クマリン、ナイルレッド、DCM1、DCM2、テトラジフェニルアミノ、ピリミド-ピリミジン、ピリジノチアジアゾール及び化合物201-220から選ばれる。

30

#### 【0022】

また、本発明の他の側面が提供する電子器具はディスプレイを含み、そこで、前記ディスプレイが備える前記有機EL素子は、前述の様々な特徴を有する。

#### 【0023】

本発明の他の側面は、前記有機EL素子から可視光を生成する方法を提供する。前記方法は下記の段階を含む:前記素子の正負両極間に電力を加える段階;電子を前記陰極から前記固体フィルムに向かって注入する段階;正孔を前記陽極から前記固体フィルムに向かって注入する段階;及び、前記注入された電子と正孔の少なくとも一部を前記陰極と陽極の間の場所で再結合させることにより、前記場所で可視光を発生する段階。一つ以上の発光物質が前記場所に配置される。前記固体フィルムは発光層の要素である。少なくとも一つの化合物が、一般式Iで示され、発光化合物である。前記固体フィルムは、更に、付加的な発光化合物を、そこに含む。前記付加的な発光化合物は一般式Iで示されない。前記付加的な化合物は一般式Iで示される化合物より高い量子効率を有する。前記固体フィルムは発光、正孔注入、正孔移送、電子移送及び電子注入で構成される群より選択される一つ

40

50

以上の機能を供与する。

【0024】

本発明の他の側面は、前述の有機EL素子を製造する方法を提供する。前記方法は下記の段階を含む：基板を供給する段階；第1伝導層を形成する段階；前記固体フィルムを形成する段階；及び、第2伝導層を形成する段階、ここで、前記第1または第2伝導層のどちらが陽極または陰極になってもよい。前記固体フィルムの形成は一般式Iで示される少なくとも一つの化合物の蒸着、インクジェットプリンティングまたはスピンコーティングを含む。前記のように形成された固体フィルム内に、一般式Iで示されない少なくとも一つの付加的な化合物が混入される。前記方法は前記第1及び第2伝導層の間に有機化合物を含む一つ以上の付加的な固体フィルムを形成する段階を追加的に含む。

10

【発明の効果】

【0025】

有機EL素子の安定性に対する議論

発光に用いられる物質の電気的安定性は、非常に重要な特性の一つであって、有機EL素子の寿命及び駆動電圧を決定する。例えば、有機EL素子の発光物質が電気的に安定でなければ、その物質の分解は、電界発光過程の間に生じることがあり、結果的に輝度が低下し、更に高い駆動電圧が要求される。既に知られていることだが、 $Alq_3$  は、有機EL素子に用いられる有機EL化合物のうちで、非常に安定なものである。

【0026】

有機EL化合物の電気的安定性が、普通に決定され比較される期間は、何かの物質で作られた発光層からの発光輝度が低下して或るレベル、例えば初期輝度の90%になるまでで、この間、一定電流密度を素子に印加する。実施例33-38において、10%初期輝度低下期間が測定された有機EL素子は、様々な発光物質を含んでいる。実施例33-37で使われた化合物が一般式Iを充足させる範囲は複数の発光層においてであるが、実施例38は $Alq_3$  を用いた。10%初期輝度低下期間は、実施例33-37の場合、実施例38に用いた $Alq_3$  の場合より非常に高い。一般式Iを満足する有機化合物を有機EL素子内の特に発光物質として使用することによって有機EL素子を駆動電圧及び素子寿命の側面で実質的に向上させることができる。

20

【発明を実施するための最良の形態】

【0027】

本発明の様々な側面について以下で詳細に説明する。まず理解すべきことは、当業者であれば、本願に記述された発明を変更し、本発明の有利な結果を達成できることである。したがって、下記の説明は広義であり、開示内容を当業者に教示するものであると理解されるべきであり、本発明を制限するものではない。

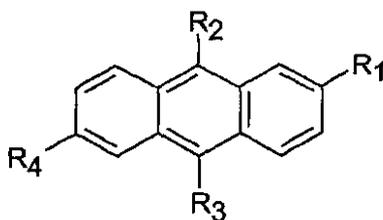
30

【0028】

新規化合物

本発明の一つの側面は、一般式Iで示される新規な化合物群に関する。

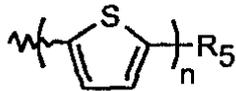
【化3】



40

$R_1$  乃至  $R_4$  は置換基であって以下で定義され、互いに同一または異なっている。 $R_1$  乃至  $R_4$  のうちの一つ以上が一般式IIで示される。

## 【化4】



## 【0029】

一般式IIにおいて、 $n$ は整数の1、2、3、4、5、6、7、8、9または10である。好ましくは、 $n$ は1、2、3または4であり、さらに好ましくは、1または2である。 $R_5$ は置換基であって、一般式Iの $R_1$ - $R_4$ のいずれかと同一または異なることがある。

## 【0030】

一般式Iにおいて、 $R_1$ - $R_4$ のうちの一つ、二つ、三つまたはこれら全てが一般式IIで示される。好ましくは、 $R_1$ - $R_4$ のうちの一つまたは二つが一般式IIで示される。 $R_1$ - $R_4$ のうちの一つのみが一般式IIの場合、好ましくは、 $R_1$ または $R_4$ が一般式IIである。 $R_1$ - $R_4$ のうち二つが一般式IIの場合、好ましくは、 $R_1$ と $R_4$ の対、または、 $R_2$ と $R_3$ の対が一般式IIで示される。

## 【0031】

$R_5$ 、及び、一般式IIで示せない $R_1$ - $R_4$ 、に対する置換基は：水素；ハロ；ヒドロキシル；メルカプト；シアノ；ニトロ；カルボキシル；ホルミル；置換または非置換 $C_1$ - $C_{20}$ アルキル；置換または非置換 $C_2$ - $C_{10}$ アルケニル；置換または非置換 $C_2$ - $C_7$ アルキニル；置換または非置換アリール；置換または非置換ヘテロアリール；置換または非置換 $C_3$ - $C_7$ シクロアルキル、ただし、環内炭素原子が酸素、窒素または硫黄原子で任意に置換できる。； $C_4$ - $C_7$ シクロアルケニル、ただし、環内炭素原子が酸素、窒素または硫黄原子で任意に置換できる。；置換または非置換 $C_1$ - $C_{20}$ アルコキシ；置換または非置換 $C_2$ - $C_{10}$ アルケニルオキシ；置換または非置換 $C_2$ - $C_7$ アルキニルオキシ；置換または非置換アリールオキシ；置換または非置換 $C_1$ - $C_{20}$ アルキルアミン；置換または非置換 $C_2$ - $C_{10}$ アルケニルアミン；置換または非置換 $C_2$ - $C_7$ アルキニルアミン；置換または非置換アリールアミン；置換または非置換アルキルアリールアミン；置換または非置換 $C_1$ - $C_{20}$ アルキルシリル；置換または非置換 $C_2$ - $C_{10}$ アルケニルシリル；置換または非置換 $C_2$ - $C_7$ アルキニルシリル；置換または非置換アリールシリル；置換または非置換アルキルアリールシリル；置換または非置換 $C_1$ - $C_{20}$ アルキルボラニル；置換または非置換 $C_2$ - $C_{10}$ アルケニルボラニル；置換または非置換 $C_2$ - $C_7$ アルキニルボラニル；置換または非置換アリールボラニル；置換または非置換アルキルアリールボラニル；置換または非置換 $C_1$ - $C_{20}$ アルキルチオ；置換または非置換 $C_2$ - $C_{10}$ アルケニルチオ；置換または非置換 $C_2$ - $C_7$ アルキニルチオ；または置換または非置換アリールチオである。

## 【0032】

用語" $C_1$ - $C_{20}$ アルキル"または"非置換 $C_1$ - $C_{20}$ アルキル"は、他の用語の一部である場合も一部でない場合も、直鎖の飽和炭化水素ラジカルのことを言い、例えば、メチル、エチル、 $n$ -プロピル、 $n$ -ブチル、 $n$ -アミル、 $n$ -ヘキシル、 $n$ -デカニル、 $n$ -エイコサニルなどである。用語"置換された $C_1$ - $C_{20}$ アルキル"は、同一または異なる置換基でモノ-またはポリ-置換された $C_1$ - $C_{20}$ アルキルのことを言う。つまり：ハロ、ヒドロキシル、メルカプト、シアノ、ニトロ、アミノ、カルボニル、カルボキシル、ホルミル、 $C_1$ - $C_{20}$ アルキル、 $C_2$ - $C_{10}$ アルケニル、 $C_2$ - $C_7$ アルキニル、アリール、ヘテロアリール、 $C_3$ - $C_7$ シクロアルキル、3-7員複素環式飽和または不飽和環、アクリル、 $C_1$ - $C_{20}$ アルコキシ、 $C_2$ - $C_{10}$ アルケニルオキシ、 $C_2$ - $C_7$ アルキニルオキシ、 $C_1$ - $C_{20}$ アルキルアミン、 $C_2$ - $C_{10}$ アルケニルアミン、 $C_2$ - $C_7$ アルキニルアミン、アリールアミン、アルキルアリールアミン、 $C_1$ - $C_{20}$ アルキルシリル、 $C_2$ - $C_{10}$ アルケニルシリル、 $C_2$ - $C_7$ アルキニルシリル、アリールシリル、アルキルアリールシリル、 $C_1$ - $C_{20}$ アルキルボラニル、 $C_2$ - $C_{10}$ アルケニルボラニル、 $C_2$ - $C_7$ アルキニルボラニル、アリールボラニル、アルキルアリールボラニル、 $C_1$ - $C_{20}$ アルキルチオ、 $C_2$ - $C_{10}$ アルケニルチオ、 $C_2$ - $C_7$ アルキニルチオまたはアリールチオであって、これらは、以後、集約的に"列挙された置換基"

10

20

30

40

50

と言う。用語"複素環式"は一つ以上の骨格炭素が酸素、窒素または硫黄原子に置き換えられた環構造のことを言う。

【0033】

用語" $C_2-C_{10}$  アルケニル"または"非置換 $C_2-C_{10}$  アルケニル"は、他の用語の一部である場合もそうではない場合も、二つの近隣炭素原子間に二重結合を一つ以上有する直鎖炭化水素ラジカルのことを言う。 $C_2-C_{10}$  アルケニル基の例はビニル、アリル (allyl)、ブト-2-エニル、ペント-2-エニル、ヘプト-3-エニル、dec-1,3-ジエン-イルなどである。用語"置換された $C_2-C_{10}$  アルケニル"は、前記列挙された置換基から選択される一つ以上の同一または異なる置換基でモノ-またはポリ-置換された $C_2-C_{10}$  アルケニル基のことを言う。前記置換された $C_2-C_{10}$  アルケニル基の例としてはイソプロポ-2-エニル、イソブテニル、t-ブテニル、2-メチル-2-デセニルなどがある。

10

【0034】

用語" $C_2-C_7$  アルキニル"または"非置換 $C_2-C_7$  アルキニル"は、他の用語の一部である場合もそうではない場合も、二つの近隣炭素間の三重結合を一つ以上有する直鎖炭化水素ラジカルのことを言う。 $C_2-C_7$  アルキニル基の例としては、エチニル、プロポ-1-イニル、ブト-2-イニル、ヘキサ-2-イニル、ヘプト-3-イニルなどである。用語"置換された $C_2-C_7$  アルキニル"は、前記列挙された置換基から選択される一つ以上の同一または異なる置換基でモノ-またはポリ-置換された $C_2-C_7$  アルキニル基のことを言う。前記置換された $C_2-C_7$  アルキニル基の例としては2-メチルエチニル、2-メチルプロピニル、2-メチルブチニル、3-メトキシヘプチニルなどがある。

20

【0035】

用語"アリール"または"非置換アリール"は、他の用語の一部である場合もそうではない場合も、単一または多重芳香族炭化水素環のことを言う。多重環の場合、2つ以上の環が脂肪鎖を介さずに融合または連結されている。例えば、前記アリール基はフェニル、ビフェニル、テルフェニル、ナフチル、アントラセニル、ルブレニル、ペリレニルなどがある。用語"置換されたアリール"は前記列挙された置換基から選択される一つ以上の同一または異なる非-アリール置換基でモノ-またはポリ-置換されたアリール基のことを言う。前記置換されたアリール基の例としては、メチルフェニル、メトキシフェニル、メチルビフェニル、メチルテルフェニル、メチルナフチル、メトキシナフチル、メチルアントラセニルなどがある。

30

【0036】

用語"ヘテロアリール"または"非置換ヘテロアリール"は他の用語の一部である場合もそうではない場合も、少なくとも一つの骨格炭素原子が酸素、窒素または硫黄原子で代替されている単一または多重芳香族炭化水素環のことを言う。多重環の場合、二つ以上の環が脂肪鎖を介さずに融合(必要ならベンゾ-融合を包含する)または連結されている。例えば、ヘテロアリール基はオキサゾリル、イミダゾリル、チアゾリル、チオペニル、フラニル、ピリジル、ピリミジル、ピロリル等である。用語"置換されたヘテロアリール"は、前記列挙された置換基から選択される一つ以上の同一または異なる非-ヘテロアリール置換基でモノ-またはポリ-置換されたヘテロアリール基のことを言う。例えば、前記置換されたアリール基は2-メチル-オキサゾリル、2-メチル-イミダゾリル、2-メチル-チアゾリル、3,4-ジメチル-チオペニル、2-メチル-フラニル、2-メチル-ピリジル、2-メチル-ピリミジル、2-メチル-ピロリルなどがある。

40

【0037】

前記置換用語" $C_3-C_7$  シクロアルキル"または"非置換 $C_3-C_7$  シクロアルキル"は環内に3-7炭素原子を有する飽和閉環構造のことを言う。前記環内の一つ以上の炭素原子が酸素、窒素または硫黄原子によって任意に置換でき、これはまた、"飽和複素環"とも呼ばれる。前記 $C_3-C_7$  シクロアルキルの例としてはシクロプロピル、シクロブチル、シクロペンチル、シクロヘキシル、シクロヘプチルなどがある。前記用語"置換された $C_3-C_7$  シクロアルキル"が指すものは、 $C_3-C_7$  シクロアルキル基であって、一つ以上の置換が炭素または非-炭素環員に在り、一つ以上の同一または異なる置換基が、前記列挙した置換基か

50

ら選ばれたものを言う。前記置換された $C_3$ - $C_7$  シクロアルキルの例としてはメチルシクロプロピル、メチルシクロブチル、メチルシクロペンチル、メチルシクロヘキシル、メチルシクロヘプチルなどがある。

【0038】

前記置換用語" $C_4$ - $C_7$  シクロアルケニル"または"非置換 $C_4$ - $C_7$  シクロアルケニル"は環構造であって4-7炭素原子からなり、二重結合を少なくとも一つ有する。一つ以上の炭素原子が前記環内にあって、酸素、窒素または硫黄原子により必要に応じて置換でき、これもまた"不飽和複素環"と呼ばれる。例えば、前記 $C_4$ - $C_7$  シクロアルケニル群は3-シクロペンテニル、4-シクロヘキセニル、5-シクロヘプテニルなどがある。用語"置換された $C_4$ - $C_7$  シクロアルケニル"が指すものは、 $C_4$ - $C_7$  シクロアルケニル基であって、一つ以上の置換が炭素または非-炭素環員に在り、一つ以上の同一または異なる置換基が、前記列挙した置換基から選ばれたものを言う。例えば、前記置換された $C_4$ - $C_7$  シクロアルケニルは2-メチル-3-シクロペンテニル、2-メチル-4-シクロヘキセニル、2-メチル-シクロヘプテニルなどを言う。

10

【0039】

前記用語" $C_1$ - $C_{20}$  アルコキシ"または"非置換 $C_1$ - $C_{20}$  アルコキシ"は $C_1$ - $C_{20}$  アルキル基で置換された酸素ラジカルのことを言う。 $C_1$ - $C_{20}$  アルコキシの例としてはメトキシ、エトキシ、*n*-プロポキシ、*n*-ブトキシ、*n*-デカノキシ、*n*-ドデカノキシ、*n*-エイコサノキシなどである。前記用語"置換された $C_1$ - $C_{20}$  アルコキシ"が指すものは、 $C_1$ - $C_{20}$  アルコキシ基であって、これはモノ-、または、ポリ-置換が、アルキル部分に在り、一つ以上の同一または異なる置換基が、前記列挙された置換基から選ばれたものを言う。前記置換された $C_1$ - $C_{20}$  アルコキシの例は1-メチルエトキシ、1-メチル-*n*-プロポキシ、1-メチル-*n*-ブトキシ、5-メトキシデカノキシ、3-メチル-ドデカノキシ、3-フェニルイコサノキシなどである。

20

【0040】

用語" $C_2$ - $C_{10}$  アルケニルオキシ"または"非置換 $C_2$ - $C_{10}$  アルケニルオキシ"は、 $C_2$ - $C_{10}$  アルケニル基で置換された酸素ラジカルのことを言う。例えば、 $C_2$ - $C_{10}$  アルケニルオキシ基はエテニルオキシ、プロプ-1-エニルオキシ、ブト-1-エニルオキシ、ヘプト-3-エニルオキシ、dec-2-エニルオキシなどのことを言う。用語"置換された $C_2$ - $C_{10}$  アルケニルオキシ"は、前記列挙した置換基から選択される一つ以上の同一または異なる置換基で、アルケニル部分に、モノ-またはポリ-置換された $C_2$ - $C_{10}$  アルケニルオキシ基のことを言う。例えば、前記置換された $C_2$ - $C_{10}$  アルケニルオキシ基は1-メチルエテニルオキシ、1-メチル-1-プロペニルオキシ、1-メチル-1-ブテニルオキシ、2-メチル-1-ヘプチルオキシ、2-メチル-1-デセニルオキシなどである。

30

【0041】

用語" $C_2$ - $C_7$  アルキニルオキシ"または"非置換 $C_2$ - $C_7$  アルキニルオキシ"は、 $C_2$ - $C_7$  アルキニル基で置換された酸素ラジカルのことを言う。前記 $C_2$ - $C_7$  アルキニルオキシ基の例はエチニルオキシ、1-プロピニルオキシ、1-ブチニルオキシ、1,3-ヘプト-ジエニルオキシなどである。用語"置換 $C_2$ - $C_7$  アルキニルオキシ"は前記列挙した置換基から選択される一つ以上の同一または異なる置換基で、アルキニル部分に、モノ-またはポリ-置換された $C_2$ - $C_7$  アルキニルオキシ基のことを言う。前記置換された $C_2$ - $C_7$  の例は2-メチル-エチニルオキシ、2-メチル-1-プロピニルオキシ、2-メチル-1-ブチニルオキシ、3-メトキシ-1-ヘプチニルオキシなどである。

40

【0042】

用語"アリールオキシ"または"非置換アリールオキシ"は、アリール基で置換された酸素ラジカルを有する基のことを言う。例えば、前記アリールオキシ基はフェニルオキシ、ナフチルオキシ、アントラセニルオキシ、ピフェニルオキシ、ルブレニルオキシ、ペリレニルオキシなどである。用語"置換されたアリールオキシ"は前記列挙した置換基から選択される一つ以上の同一または異なる置換基でアリール部分にモノ-またはポリ-置換されたアリールオキシ基のことを言う。例えば、前記置換されたアリールオキシ基は2-メ

50

チル-フェニルオキシ、4-メチル-ナフチル-2-オキシ、9-メチル-アントラセニル-1-オキシ、2-メチル-ビフェニルオキシ、2-メチル-ルブレニルオキシ、2-メチル-ペリレニルオキシなどがある。

【0043】

用語“ $C_1-C_2_0$ アルキルアミン”または“非置換 $C_1-C_2_0$ アルキルアミン”は、一つ以上の同一または異なる $C_1-C_2_0$ アルキル基で置換された窒素ラジカルのことを言う。例えば、前記 $C_1-C_2_0$ アルキルアミン基はメチルアミン、エチルアミン、プロピルアミン、ブチルアミン、ペンチルアミン、ヘプチルアミン、ヘプタデカニルアミン及びエイコサニルアミンを含む。用語“置換された $C_1-C_2_0$ アルキルアミン”は前記列挙した置換基から選択される一つ以上の同一または異なる置換基でアルキル部分にモノ-またはポリ-置換された $C_1-C_2_0$ アルキルアミン基のことを言う。例えば、前記置換された $C_1-C_2_0$ アルキルアミン基はイソプロピルアミン、N-プロピル-N-(2-メトキシ)ブチルアミン、2-メチルブチルアミン、N-ブチル-N-(2-メチル)ヘプチルアミン及びN-2-ブチル-N-(2-メチル)ヘプタデカニルアミンがある。

【0044】

用語“ $C_2-C_1_0$ アルケニルアミン”または“非置換 $C_2-C_1_0$ アルケニルアミン”は、一つまたは二つの同一または異なる $C_2-C_1_0$ アルケニル基で置換された窒素ラジカルのことを言い、ここで一つの $C_2-C_1_0$ アルケニル基のみが前記窒素原子に付着している場合、 $C_1-C_2_0$ アルキルも前記窒素原子に付着できる。 $C_2-C_1_0$ アルケニルアミンの例はエテニルアミン、1-プロペニルアミン、1-ブテニルアミン、1-ヘプテニルアミン、1-デセニルアミンなどである。用語“置換された $C_2-C_1_0$ アルケニルアミン”は前記列挙した基から選択される一つ以上の同一または異なる置換基でアルケニルまたはアルキル部分にモノ-またはポリ-置換された $C_2-C_1_0$ アルケニルアミン基のことを言う。前記置換された $C_2-C_1_0$ アルケニルアミン基の例は、1-メチル-エテニルアミン、1-メチル-1-プロペニルアミン及び1-メチル-1-ブテニルアミン、1-メチル-1-ヘプテニルアミン、2-メチル-1-デセニルアミンなどである。

【0045】

用語“ $C_2-C_7$ アルキニルアミン”または“非置換 $C_2-C_7$ アルキニルアミン”は、一つまたは二つの同一または異なる $C_2-C_7$ アルキニル基で置換された窒素ラジカルのことを言い、ここで一つの $C_2-C_1_0$ アルケニル基のみが前記窒素原子に付着されている場合、 $C_1-C_2_0$ アルキルまたは $C_2-C_1_0$ アルケニルも前記窒素原子に付着できる。前記 $C_2-C_1_0$ アルキニルアミン基の例は、エチニルアミン、1-プロピニルアミン、1-ブチニルアミン、2-ヘプチニルアミン、1-デシニルアミンなどである。用語“置換された $C_2-C_7$ アルキニルアミン”は前記列挙した置換基から選択される一つ以上の同一または異なる置換基にアルキル、アルケニル及びアルキニル部分のうちの一つ以上にモノ-またはポリ-置換された $C_2-C_7$ アルキニルアミン基である。前記置換された $C_2-C_7$ アルキニルアミン基の例はイソプロピニルアミン、2-メチル-1-ブチニルアミン、3-メチル-2-ヘピニルアミン、2-メチル-1-デシニルアミンなどである。

【0046】

用語“アリアルアミン”または“非置換アリアルアミン”は、一つまたは二つの同一または異なるアリアルまたはヘテロアリアル基で置換された窒素ラジカルのことを言う。前記アリアルアミン基の例は、フェニルアミン、1-ナフチルアミン、9-アントラセニルアミン、ビフェニルアミン、ルブレニルアミン、ペリレニルアミンなどである。用語“置換されたアリアルアミン”は前記列挙した置換基から選択される一つ以上の同一または異なる置換基で環部分にモノ-またはポリ-置換されたアリアルアミン基のことを言う。前記置換されたアリアルアミン基の例は3-メチルフェニルアミン、9-メトキシアントラセニルアミンなどである。

【0047】

用語“アルキルアリアルアミン”、“アリアルアルキルアミン”、“非置換アリアルアルキルアミン”または“非置換アルキルアリアルアミン”は、アリアルまたはヘテロアリ

ール基、及び、 $C_1 - C_{20}$  アルキル、 $C_2 - C_{10}$  アルケニル、 $C_2 - C_7$  アルキニル、 $C_1 - C_{20}$  アルコキシ、 $C_2 - C_{10}$  アルケニルオキシまたは $C_2 - C_7$  アルキニルオキシ基のうちの一つ、の両者で置換された窒素ラジカルのことを言う。前記アルキルアリアルアミン基の例はN-メチル-N-フェニルアミン、N-エチル-N-フェニルアミン、N-エチル-N-(1-ナフチル)アミン、N-メチル-N-(9-アントラセニル)アミン、N-エチニル-N-フェニルアミン、N-エチニル-N-(1-ナフチル)アミン、N-エチニル-N-フェニルアミン、N-エチニル-N-(1-ナフチル)アミンなどである。用語“置換されたアルキルアリアルアミン”または“置換されたアリアルアルキルアミン”は前記列挙した置換基から選択される一つ以上の同一または異なる置換基で環部分、非-環部分またはこの両者でモノ-またはポリ-置換されたアルキルアリアルアミン基のことを言う。前記置換されたアルキルアリアルアミン基の例としてはN-イソプロピル-N-フェニルアミン、N-フェニル-N-(4-プロピル-1-ナフチル)アミンなどがある。

10

## 【0048】

用語“ $C_1 - C_{20}$  アルキルシリル”または“非置換 $C_1 - C_{20}$  アルキルシリル”は一つ以上の同一または異なる $C_1 - C_{20}$  アルキル基で置換されたシリコンラジカルのことを言う。例えば、前記アルキルシリル基はトリメチルシリル、トリエチルシリル、トリプロピルシリル、トリデカニルシリル及びトリエイコサニルシリルを含む。用語“置換された $C_1 - C_{20}$  アルキルシリル”は前記列挙した置換基から選択される一つ以上の同一または異なる置換基で $C_1 - C_{20}$  アルキル部分のうちの一つ以上にモノ-またはポリ-置換された $C_1 - C_{20}$  アルキルシリル基のことを言う。例えば、前記置換されたアルキルシリル基はジイソ

20

## 【0049】

用語“ $C_2 - C_{10}$  アルケニルシリル”または“非置換 $C_2 - C_{10}$  アルケニルシリル”が指すシリコンラジカルは、一つ以上の同一または異なる $C_2 - C_{10}$  アルケニル基で置換されていて、ここで一つ以上の $C_1 - C_{20}$  アルキル基も前記シリコンに付着できる。例えば、前記アルケニルシリル基には、トリエチニルシリル、トリプロペニルシリル、トリブテニルシリル、トリヘプテニルシリル、及びトリデセニルシリルを含む。用語“置換 $C_2 - C_{10}$  アルケニルシリル”が指す $C_2 - C_{10}$  アルケニルシリル基は、モノ-またはポリ-置換されるアルキルまたはアルケニル部分に、一つ以上の同一または異なる置換基が、前記列挙

30

## 【0050】

用語“ $C_2 - C_7$  アルキニルシリル”または“非置換 $C_2 - C_7$  アルキニルシリル”は一つ以上の同一または異なる $C_2 - C_{10}$  アルキニル基で置換されたシリコンラジカルのことを言い、 $C_1 - C_{20}$  アルキル及び $C_2 - C_{10}$  アルケニル基のうちの一つ以上がシリコンに付着できる。例えば、前記アルキニルシリル基はトリエチニルシリル、トリプロピニルシリル、トリブチニルシリル、トリヘプテニルシリル、及びトリデセニルシリルを含む。用語“置換された $C_2 - C_7$  アルキニルシリル”は前記列挙した置換基から選択される一つ以上の同一

40

## 【0051】

用語“アリアルシリル”または“非置換アリアルシリル”は一つ以上の同一または異なるアリアルまたはヘテロアリアル基で置換されたシリコンラジカルのことを言う。例えば、前記アリアルシリル基はトリフェニルシリル、トリナフチルシリル及びトリピフェニルシリルを含む。用語“置換されたアリアルシリル”は前記列挙した置換基から選択される

50

一つ以上の同一または異なる置換基でモノ-またはポリ-置換されたアリールシリル基のことを言う。例えば、前記置換されたアリールシリル基はトリ(2-メチルフェニル)シリル、トリ(4-メチルナフチル)シリル及びトリ(2-メチルピフェニル)シリルを含む。

【0052】

用語“アルキルアリールシリル”、“アリールアルキルシリル”、“非置換アリールアルキルシリル”または“非置換アルキルアリールシリル”が指すシリコンラジカルは、一つ以上の同一または異なるアリールまたはヘテロアリール基、及び同時に、 $C_1-C_{20}$ アルキル、 $C_2-C_{10}$ アルケニル、 $C_2-C_7$ アルキニル、 $C_1-C_{20}$ アルコキシ、 $C_2-C_{10}$ アルケニルオキシまたは $C_2-C_7$ アルキニルオキシ基のうちの一つ、によって置換されている。前記アルキルアリールシリル基の例としては、ジフェニルメチルシリル、ジナフチルメチルシリル、ジフェニルエチルシリル、ジナフチルエチルシリル、ジアントラセニルエチルシリルなどがある。用語“置換されたアルキルアリールシリル”が指すアルキルシリル基は、モノ-またはポリ-置換される環状部、非環状部または両方に、一つ以上の同一または異なる置換基が、前記列挙した置換基から選択されて入る。前記置換されたアルキルアリールシリル基の例としてはジ(2-メチルフェニル)メチルシリル、ジ(4-メチルナフチル)メチルシリルなどがある。

10

【0053】

用語“ $C_1-C_{20}$ アルキルボラニル”または“非置換 $C_1-C_{20}$ アルキルボラニル”は一つ以上の同一または異なる $C_1-C_{20}$ アルキル基で置換されたホウ素ラジカルを意味する。例えば、前記アルキルボラニル基はジメチルボラニル、ジエチルボラニル、ジプロピルボラニル、ジヘプチルボラニル、ジデカニルボラニル、及びジ(エイコサニル)ボラニルを含む。用語“置換された $C_1-C_{20}$ アルキルボラニル”は前記列挙した置換基から選択される一つ以上の同一または異なる置換基で $C_1-C_{20}$ アルキル部分のうちの一つ以上にモノ-またはポリ-置換された $C_1-C_{20}$ アルキルボラニル基である。例えば、前記置換されたアルキルボラニル基はジ(イソプロピル)ボラニル、ジ(イソブチル)ボラニル、ジ(2-メチルヘプチニル)ボラニル、ジ(2-メチルデカニル)ボラニル及びジ(2-メチルエイコサニル)ボラニルを含む。

20

【0054】

用語“ $C_2-C_{10}$ アルケニルボラニル”または“非置換 $C_2-C_{10}$ アルケニルボラニル”が指すホウ素ラジカルは、一つか二つの同一または異なる $C_2-C_{10}$ アルケニル基で置換されていて、ここで一つの $C_1-C_{20}$ アルキル基も前記ホウ素原子に付着できるが、それは $C_2-C_{10}$ アルケニル基のみが前記ホウ素に付着している場合のみである。例えば、前記アルケニルボラニル基には、ジエチルボラニル、ジプロベニルボラニル、ジブテニルボラニル、ジヘプテニルボラニル及びジデカニルボラニルを含む。用語“置換された $C_2-C_{10}$ アルケニルボラニル”が指す $C_2-C_{10}$ アルケニルボラニル基は、モノ-またはポリ-置換されたアルキルまたはアルケニル部分に、一つ以上の同一または異なる置換基を、前記列挙した置換基から選択して入れる。前記置換されたアルケニルボラニル基には、ジ(1-メチルエチニル)ボラニル及びジ(1-メチルプロプ-1-エニル)ボラニル、ジ(2-メチルヘプテニル)ボラニル、ジ(2-メチルデカニル)ボラニルなどがある。

30

【0055】

用語“ $C_2-C_7$ アルキニルボラニル”または“非置換 $C_2-C_7$ アルキニルボラニル”は、一つか二つの同一または異なる $C_2-C_7$ アルキニル基で置換されたホウ素ラジカルのことを意味し、ここで一つの $C_2-C_7$ アルキニル基のみが前記ホウ素に付着された場合、 $C_1-C_{20}$ アルキルまたは $C_2-C_{10}$ アルケニル基も前記ホウ素原子に付着できる。例えば、前記アルキニルボラニル基はジエチニルボラニル、ジプロピニルボラニル、ジブチニルボラニル、ジヘキシニルボラニル及びジヘプチルボラニルを含む。用語“置換された $C_2-C_7$ アルキニルボラニル”は前記列挙した置換基から選択される一つ以上の同一または異なる置換基でアルキル、アルケニルまたはアルキニル部分にモノ-またはポリ-置換された $C_2-C_7$ アルキニルボラニル基のことを意味する。前記置換された $C_2-C_7$ アルキニルボラニル基は、例えば、ジ(2-メチルエチニル)ボラニル、ジ(2-メチルプロピニル)ボラニル

40

50

、ジ(2-メチルブチニル)ボラニル、ジ(2-メチルヘキシニル)ボラニル及びジ(2-メチルヘプチル)ボラニルを含む。

【0056】

用語“アリアルボラニル”または“非置換アリアルボラニル”は一つ以上の同一または異なるアリアルまたはヘテロアリアル基で置換されたホウ素ラジカルのことを意味する。前記アリアルボラニル基の例としてはジフェニルボラニル、ナフチルボラニル、ジナフチルボラニル、ジビフェニルボラニル、ルブレニルボラニル、ペリレニルボラニルなどがある。用語“置換されたアリアルボラニル”は前記列挙した置換基から選択される一つ以上の同一または異なる置換基でアリアル部分にモノ-またはポリ-置換されたアリアルボラニル基のことを意味する。前記置換されたアリアルボラニル基の例としては、ジ(3-メチルフェニル)ボラニル、ジ(4-メチルナフト-1-イル)ボラニル、ジ(2-メチルピフェニル)ボラニルなどがある。

10

【0057】

用語“アルキルアリアルボラニル”、“アリアルアルキルボラニル”、“非置換アリアルアルキルボラニル”または“非置換アルキルアリアルボラニル”は、アリアルまたはヘテロアリアル基、及び同時に、 $C_1-C_{20}$ アルキル、 $C_2-C_{10}$ アルケニル、 $C_2-C_7$ アルキニル、 $C_1-C_{20}$ アルコキシ、 $C_2-C_{10}$ アルケニルオキシまたは $C_2-C_7$ アルキニルオキシ基のうちの一つで置換されたホウ素ラジカルを意味する。前記アルキルアリアルボラニル基の例としてはエチルフェニルボラニル、メチルナフチルボラニル、メチルビフェニルボラニル、エテニルナフチルボラニル、エチニルフェニルボラニルなどがある。用語“置換されたアルキルアリアルボラニル”は前記列挙した置換基から選択される一つ以上の同一または異なる置換基で環部分、非-環部分または両者にモノ-またはポリ-置換されたアルキルアリアルボラニル基のことを意味する。前記置換されたアルキルアリアルボラニル基の例としてはメチル(4-メチルナフチル)ボラニル、エチル(2-メチルフェニル)ボラニル、メチル(2-メチルピフェニル)ボラニルなどがある。

20

【0058】

用語“ $C_1-C_{20}$ アルキルチオ”または“非置換 $C_1-C_{20}$ アルキルチオ”は $C_1-C_{20}$ アルキル基で置換された硫黄ラジカルのことを意味する。例えば、前記アルキルチオ基はメチルチオ、エチルチオ、*n*-プロピルチオ、*n*-ブチルチオ、*n*-ヘプチルチオ、*n*-デカニルチオ及び*n*-エイコサニルチオを含む。用語“置換された $C_1-C_{20}$ アルキルチオ”は前記列挙した置換基から選択される一つ以上の同一または異なる置換基で $C_1-C_{20}$ アルキル部分のうちの一つ以上にモノ-またはポリ-置換された $C_1-C_{20}$ アルキルチオ基のことを意味する。例えば、前記置換されたアルキルチオ基はイソプロピルチオ、イソブチルチオ、ネオ-ペンチルチオ、2-メチルヘプチルチオ、2-メチルデカニルチオ及び2-メチルエイコサニルチオを含む。

30

【0059】

用語“ $C_2-C_{10}$ アルケニルチオ”または“非置換 $C_2-C_{10}$ アルケニルチオ”は $C_2-C_{10}$ アルケニル基で置換された硫黄ラジカルのことを意味する。例えば、前記アルケニルチオ基はエテニルチオ、プロペニルチオ、ブテニルチオ及びデセニルチオを含む。用語“置換された $C_2-C_{10}$ アルケニルチオ”は前記列挙した置換基から選択される一つ以上の同一または異なる置換基でアルケニル部分にモノ-またはポリ-置換された $C_2-C_{10}$ アルケニルチオ基を意味する。例えば、前記置換されたアルキルチオ基は1-メチルエテニルチオ、1-メチル-2-プロペニルチオ及び1-メチル-2-ブテニルチオを含む。

40

【0060】

用語“ $C_2-C_7$ アルキニルチオ”または“非置換 $C_2-C_7$ アルキニルチオ”は $C_2-C_7$ アルキニル基で置換された硫黄ラジカルのことを意味する。例えば、前記アルキニルチオ基はエチニルチオ、プロピニルチオ、ブチニルチオ及びヘプチニルチオを含む。用語“置換された $C_2-C_7$ アルキニルチオ”は前記列挙した置換基から選択される一つ以上の同一または異なる置換基でアルキニル部分にモノ-またはポリ-置換された $C_2-C_7$ アルキニルチオ基を意味する。前記置換された $C_2-C_7$ アルキニルチオ基は、例えば、2-メチル-エチ

50

ニルチオ、2-メチルプロピニル、2-メチルブチニルチオ及び2-メチルヘプチニルチオを含む。

【0061】

用語“アリールチオ”または“非置換アリールチオ”はアリール基で置換された硫黄原子を有する基を意味する。例えば、前記アリールチオ基はフェニルチオ、ナフチルチオ、アントラセニルチオ及びピフェニルチオを含む。用語“置換されたアリールチオ”は前記列挙した置換基から選択される一つ以上の同一または異なる置換基でアリール部分にモノ-またはポリ-置換されたアリールチオ基を意味する。例えば、前記置換されたアリールチオ基は3-メチルフェニルチオ、4-メチルナフチルチオ及び2-メチルピフェニルチオを含む。

10

【0062】

好ましい $R_1$ - $R_5$ 置換基

前記一般式I及びIIにおいて、 $R_5$ 、及び、一般式IIでは表されない $R_1$ - $R_4$ の、各々は好ましくは水素、シアノ、ニトロ、置換または非置換 $C_1$ - $C_{20}$ アルキル、置換または非置換 $C_2$ - $C_{10}$ アルケニル、置換または非置換 $C_3$ - $C_7$ シクロアルキル、置換または非置換 $C_4$ - $C_7$ シクロアルケニル、置換または非置換アリール、置換または非置換ヘテロアリール、置換または非置換 $C_1$ - $C_{20}$ アルコキシ、置換または非置換アリールオキシ、置換または非置換 $C_1$ - $C_{20}$ アルキルアミン、置換または非置換アリールアミン、置換または非置換アルキルアリールアミン、置換または非置換 $C_1$ - $C_{20}$ アルキルシリル;置換または非置換アリールシリル;置換または非置換アルキルアリールシリル、置換または非置換 $C_1$ - $C_{20}$ アルキルボラニル、置換または非置換アリールボラニル、置換または非置換アルキルアリールボラニル、置換または非置換 $C_1$ - $C_{20}$ アルキルチオ、または置換または非置換チオである。前述した基において、置換された $R_1$ - $R_5$ は好ましくはシアノ;ニトロ;ホルミル; $C_1$ - $C_{20}$ アルキル、つまり、メチル、エチルまたはプロピル;アリール、つまり、フェニル、ナフチル、ピフェニルまたはアントラセニル;ヘテロアリール、つまり、イミダゾリル、チアゾリル、オキサゾリル、チオフェニル、ピリジル、ピリミジルまたはピロリル; $C_4$ - $C_7$ シクロアルケニル、つまり、シクロブテニルまたはシクロペテニル; $C_1$ - $C_{20}$ アルコキシ、つまり、メトキシ、エトキシまたはプロポキシ;アリールオキシ、つまり、フェノキシまたはナフトキシ; $C_1$ - $C_{20}$ アルキルアミン、つまり、メチルアミン、エチルアミンまたはプロピルアミン;アリールアミン、つまり、フェニルアミンまたはナフチルアミン;アルキルアリールアミン、つまり、メチルフェニルアミン、エチルフェニルアミンまたはエチルナフチルアミン; $C_1$ - $C_{20}$ アルキルボラニル、つまり、ジメチルボラニル、ジエチルボラニルまたはジプロピルボラニル;アリールボラニル、つまり、ジフェニルボラニル、ジナフチルボラニルまたはフェニルナフチルボラニル;アルキルアリールボラニル、つまり、フェニルメチルボラニル、ナフチルメチルボラニルまたはナフチルエチルボラニル; $C_1$ - $C_{20}$ アルキルシリル、つまり、トリメチルシリル、トリエチルシリルまたはトリプロピルシリル;アリールシリル、つまり、トリフェニルシリルまたはトリナフチルシリル;アルキルアリールシリル、つまり、ジメチルフェニルシリル、ジエチルフェニルシリルまたはジフェニルメチルシリル; $C_1$ - $C_{20}$ アルキルチオ、つまり、メチルチオ、エチルチオ、プロピルチオまたはブチルチオ;及びアリールチオ、つまり、フェニルチオまたはナフチルチオで置換される。

20

30

40

【0063】

$R_1$ - $R_5$ で、前記非置換 $C_1$ - $C_{20}$ アルキル基は好ましくはメチル、エチル、プロピル、ブチル、より好ましくはメチルまたはエチルである。置換された $C_1$ - $C_{20}$ アルキル基は好ましくはイソプロピル、*n*-ブチル、*t*-ブチル、イソブチル、*n*-ペンチル、ネオ-ペンチルまたは*n*-ヘキシル、より好ましくはイソプロピルまたは*t*-ブチルである。

【0064】

前記非置換 $C_2$ - $C_{10}$ アルケニル基は好ましくはエテニル、プロペニル、ブテニル、ペンテニルまたはヘキセニル、より好ましくはエテニルまたはプロペニルである。前記置換された $C_2$ - $C_{10}$ アルケニル基は好ましくは2-メチル-エテニル、2-メチル-プロペニル

50

、2-メチル-ブテニル、2-メチル-ペンテニルまたは2-メチル-ヘキセニル、より好ましくは2-メチル-エテニルまたは2-メチル-プロベニルである。

【0065】

前記非置換または置換 $C_3$ - $C_7$ シクロアルキル及び $C_4$ - $C_7$ シクロアルケニル基は、好ましくは、5または6員構成のベンゾ-融合された置換または非置換、飽和または不飽和複素環である。前記非置換複素環は、好ましくはイミダゾリル、チアゾリル、オキサゾリル、チオフェニル、ピリジル、ピリミジルまたはピロリル、より好ましくはイミダゾリル、チアゾリルまたはオキサゾリルである。前記置換された複素環は、好ましくは、2-メチルイミダゾリル、2-メチルチアゾリル、2-メチルオキサゾリル、2-メチルチオフェニル、2-メチルピリジル、2-メチルピリミジルまたは2-メチルピロリル、より好ましくは2-メチルイミダゾリル、2-メチルチアゾリルまたは2-メチルオキサゾリルである。

10

【0066】

前記非置換アリール基は、好ましくはフェニル、ナフチル、アントラセニル、ピフェニル、テルフェニル、二重スピロ構造であって定義を示す米国特許出願第10/099,781号が参照として本願に統合されたもの、またはテトラセニル、より好ましくはフェニルまたはナフチルである。前記置換されたアリール基は、好ましくは3-メチル-フェニル、4-メチル-ナフチル、9-メチル-アントラセニルまたは4-メチル-テトラセニル、より好ましくは3-メチル-フェニルまたは4-メチル-ナフチルである。

【0067】

前記非置換ヘテロアリール基は好ましくはイミダゾリル、オキサゾリル、チアゾリル、フラニル、チオフェニル、ピラゾリル、ピリジルまたはピリミジニル、より好ましくはイミダゾリル、オキサゾリルまたはチアゾリルである。前記置換されたヘテロアリール基は、好ましくは2-メチル-イミダゾリル、2-メチル-オキサゾリル、2-メチル-チアゾリル、2-メチル-フラニル、2-メチル-チオフェニル、2-メチル-ピラゾリル、2-メチル-ピリジルまたは2-メチル-ピリミジニル、より好ましくは2-メチル-イミダゾリル、2-メチル-オキサゾリルまたは2-メチル-チアゾリルである。

20

【0068】

前記非置換 $C_1$ - $C_2$ アルコキシ基は、好ましくはメトキシ、エトキシ、プロポキシ、ブトキシ、ペントキシまたはヘソキシ、より好ましくはメトキシまたはエトキシである。前記置換された $C_1$ - $C_2$ アルコキシ基は、好ましくはイソプロポキシ、イソブトキシ、t-ブトキシまたはネオ-ペントキシ、より好ましくはイソプロポキシまたはイソブトキシである。

30

【0069】

前記非置換アリールオキシ基は、好ましくはフェノキシ、ナフトキシまたはピフェノキシ、より好ましくはフェノキシまたはナフトキシである。前記置換されたアリールオキシ基は、好ましくは3-メチル-フェノキシ、4-メチル-ナフトキシまたは2-メチル-ピフェノキシ、より好ましくは3-メチル-フェノキシまたは4-メチル-ナフトキシである。

【0070】

前記非置換 $C_1$ - $C_2$ アルキルアミン基は、好ましくはメチルアミン、エチルアミン、プロピルアミン、ブチルアミン、ペンチルアミン、ヘキシルアミンまたはヘプチルアミン、より好ましくはメチルアミンまたはエチルアミンである。前記置換された $C_1$ - $C_2$ アルキルアミン基は、好ましくはイソプロピルアミン、イソブチルアミン、t-ブチルアミン、2-ペンチルアミンまたはネオ-ペンチルアミン、より好ましくはイソプロピルアミン、イソブチルアミンまたはt-ブチルアミンである。

40

【0071】

前記非置換アリールアミン基は、好ましくはフェニルアミン、ナフチルアミン、ピフェニルアミンまたはアントラセニルアミン、より好ましくはフェニルアミンまたはナフチルアミンである。前記置換されたアリールアミン基は、好ましくは3-メチル-フェニルアミン、4-メチル-ナフチルアミン、2-メチル-ピフェニルアミンまたは9-メチル-アントラ

50

セニルアミン、より好ましくは 3-メチル-フェニルアミンまたは 4-メチル-ナフチルアミンである。

【0072】

前記非置換アルキルアリアルアミン基は、好ましくはフェニルメチルアミン、フェニルエチルアミン、ナフチルメチルアミン、ナフチルエチルアミンまたはピフェニルメチルアミン、より好ましくはフェニルメチルアミン、フェニルエチルアミンまたはナフチルメチルアミンである。前記置換されたアルキルアリアルアミン基は好ましくは 3-メチル-フェニルメチルアミン、フェニル(イソプロピル)アミン、ナフチル(イソプロピル)アミン、ナフチル(イソブチル)アミンまたはピフェニル(イソプロピル)アミン、より好ましくは 3-メチル-フェニルメチルアミンまたはフェニルイソプロピルアミンである。

10

【0073】

前記非置換 $C_1-C_2$ 。アルキルシリル基は、好ましくはトリメチルシリル、トリエチルシリル、またはトリブチルシリル、より好ましくはトリメチルシリルまたはトリエチルシリルである。前記置換された $C_1-C_2$ 。アルキルシリル基は、好ましくはトリ(イソプロピル)シリル、トリ(イソブチル)シリル、トリ(t-ブチル)シリルまたはトリ(2-ブチル)シリル、より好ましくはトリ(イソプロピル)シリルまたはトリ(イソブチル)シリルである。

【0074】

前記非置換アリアルシリル基は、好ましくはトリフェニルシリル、トリナフチルシリルまたはトリピフェニルシリル、より好ましくはトリフェニルシリルまたはトリナフチルシリルである。前記置換されたアリアルシリル基は好ましくはトリ(3-メチルフェニル)シリル、トリ(4-メチルナフチル)シリルまたはトリ(2-メチルピフェニル)シリル、より好ましくはトリ(3-メチルフェニル)シリルまたはトリ(4-メチルナフチル)シリルである。

20

【0075】

前記非置換アルキルアリアルシリル基は好ましくはフェニルメチルシリル、フェニルエチルシリル、ナフチルメチルシリル、ナフチルエチルシリルまたはピフェニルメチルシリル、より好ましくはフェニルメチルシリルまたはフェニルエチルシリルである。前記置換されたアルキルアリアルシリル基は好ましくは 3-メチル-フェニルメチルシリル、フェニル(イソプロピル)シリル、ナフチル(イソプロピル)シリル、ナフチル(イソブチル)シリルまたはピフェニル(イソプロピル)シリル、より好ましくは 3-メチル-フェニルメチルシリルまたはフェニルイソプロピルシリルである。

30

【0076】

前記非置換 $C_1-C_2$ 。アルキルボラニル基は、好ましくはジメチルボラニル、ジエチルボラニル、ジプロピルアミン、ジブチルアミンまたはジベンチルアミン、より好ましくはジメチルボラニルまたはジエチルボラニルである。前記置換された $C_1-C_2$ 。アルキルボラニル基は、好ましくはジ(イソプロピル)ボラニル、ジ(イソブチル)ボラニル、ジ(t-ブチル)ボラニルまたは(イソプロピル)(イソブチル)アミン、より好ましくはジ(イソプロピル)ボラニルまたはジ(イソブチル)ボラニルである。

【0077】

前記非置換アリアルボラニル基は好ましくはジフェニルボラニル、ジナフチルボラニルまたはジピフェニルボラニル、より好ましくはジフェニルボラニルまたはジナフチルボラニルである。前記置換アリアルボラニル基は、好ましくはジ(3-メチルフェニル)ボラニル、ジ(4-メチルナフチル)ボラニルまたはジ(2-メチルピフェニル)ボラニル、より好ましくはジ(3-メチルフェニル)ボラニルまたはジ(4-メチルナフチル)ボラニルである。

40

【0078】

前記非置換アルキルアリアルボラニル基は、好ましくはフェニルメチルボラニル、フェニルエチルボラニル、ナフチルメチルボラニル、ナフチルエチルボラニルまたはピフェニルメチルボラニル、より好ましくはフェニルメチルボラニルまたはフェニルエチルボラニル

50

ルである。前記置換されたアルキルアリールボラニル基は、好ましくは3-メチル-フェニルメチルボラニル、フェニル(イソプロピル)ボラニル、ナフチル(イソプロピル)ボラニル、ナフチル(イソブチル)ボラニルまたはビフェニル(イソプロピル)ボラニル、より好ましくは3-メチル-フェニルメチルボラニルまたはフェニル(イソプロピル)ボラニルである。

## 【0079】

前記非置換 $C_1-C_{20}$ アルキルチオ基は、好ましくはメチルチオ、エチルチオ、プロピルチオ、ブチルチオ、ペンチルチオまたはヘキシルチオ、より好ましくはメチルチオまたはエチルチオである。前記置換された $C_1-C_{20}$ アルキルチオ基は、好ましくはトリ(イソプロピル)チオ、トリ(イソブチル)チオ、トリ(t-ブチル)チオまたはトリ(2-ブチル)チオ、より好ましくはトリ(イソプロピル)チオまたはトリ(イソブチル)チオである。

10

## 【0080】

前記非置換アリールチオ基は、好ましくはフェニルチオ、ナフチルチオまたはビフェニルチオ、より好ましくはフェニルチオまたはナフチルチオである。前記置換アリールチオ基は好ましくは(3-メチルフェニル)チオ、(4-メチルナフチル)チオまたは(2-メチルビフェニル)チオ、より好ましくは(3-メチルフェニル)チオまたは(4-メチルナフチル)チオである。

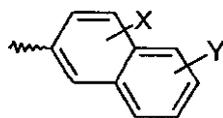
## 【0081】

好ましくは、 $R_5$  及び $R_1-R_4$  に対する前記置換基は、これら置換基が一般式IIでない場合、直鎖 $C_1-C_{20}$ アルキル基及び下記の諸基である：

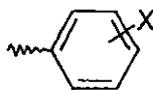
20

## 【0082】

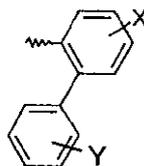
## 【化5A】



一般式 1-1



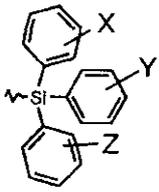
一般式 1-2



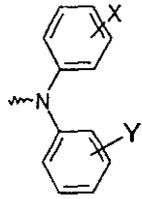
一般式 1-3

30

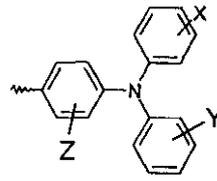
## 【化5B】



一般式 1-4

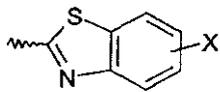


一般式 1-5

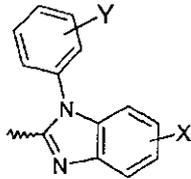


一般式 1-6

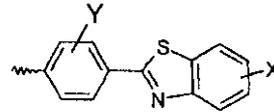
10



一般式 1-7

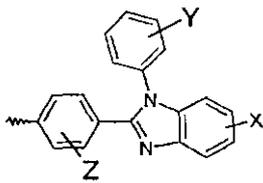


一般式 1-8

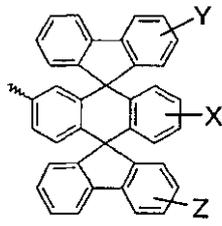


一般式 1-9

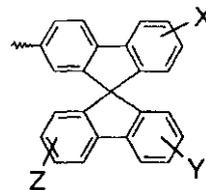
20



一般式 1-10

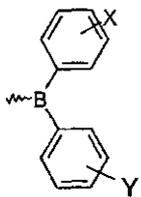


一般式 1-11

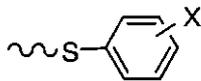


一般式 1-12

30



一般式 1-13



一般式 1-14

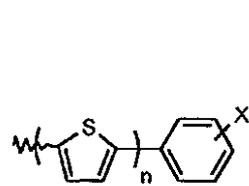
## 【0083】

R<sub>1</sub> -R<sub>4</sub> のうちの一つ以上が一般式IIで表される場合、それらは、好ましくは下記の基である。

## 【0084】

40

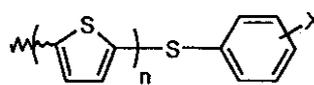
## 【化6】



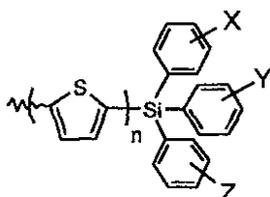
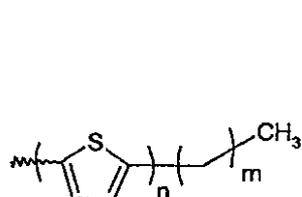
一般式 2-1



一般式 2-2



一般式 2-3



## 【0085】

前記列挙された一般式において、X、YまたはZは互いに同一であるか異なる置換基を意味する。X、YまたはZが付着された各環構造は二つ以上の、同一または異なる、置換基、例えばX、YまたはZで置換できる。X、Y及びZはシアノ、ニトロ、ホルミル、置換または非置換C<sub>1</sub>-C<sub>20</sub>アルキル、アリール、ヘテロアリール、C<sub>4</sub>-C<sub>7</sub>シクロアルケニル、置換または非置換C<sub>1</sub>-C<sub>20</sub>アルコキシ、アリーロキシ、C<sub>1</sub>-C<sub>20</sub>アルキルアミン、アリールアミン、アルキルアリールアミン、C<sub>1</sub>-C<sub>20</sub>シリル、アリールシリル及びアルキルアリールシリル、C<sub>1</sub>-C<sub>20</sub>アルキルボラニル、アリールボラニル、アルキルアリールボラニル、C<sub>1</sub>-C<sub>20</sub>アルキルチオまたはアリールチオである。好ましくは、X、YまたはZは、シアノ、ニトロ、メチル、エチル、イソプロピル、t-ブチル、メトキシ、エトキシ、プロポキシ、メチルチオ、イミダゾリル、ピリジル、チアゾリル、オキサゾリル、フラニル、チオフェニル、ピロリル、ピリジルまたはピリミジルである。

10

20

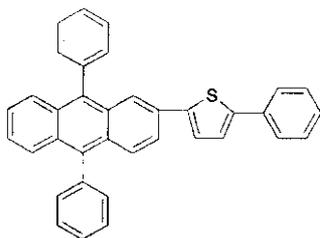
## 【0086】

一般式I範囲内化合物の諸例は下記の化合物を含む。

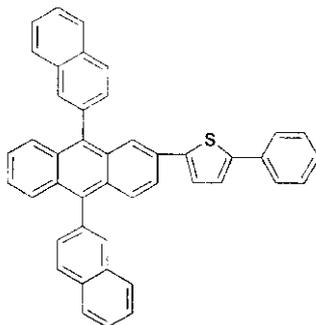
30

## 【0087】

【化 7 A】

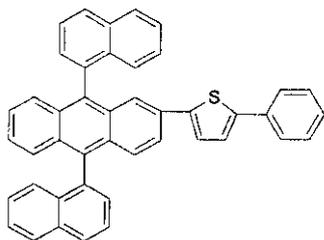


化合物 1

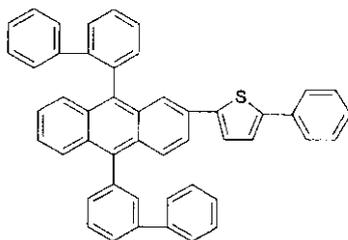


化合物 2

10

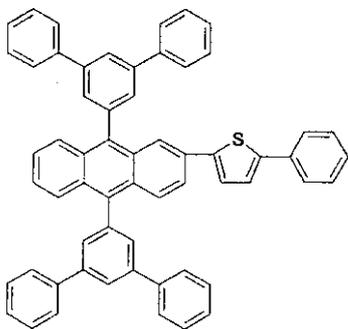


化合物 3

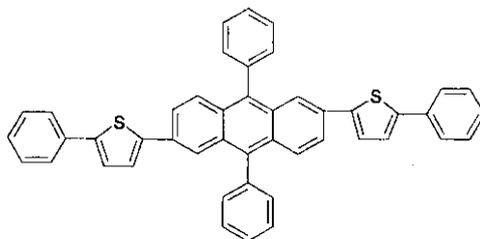


化合物 4

20



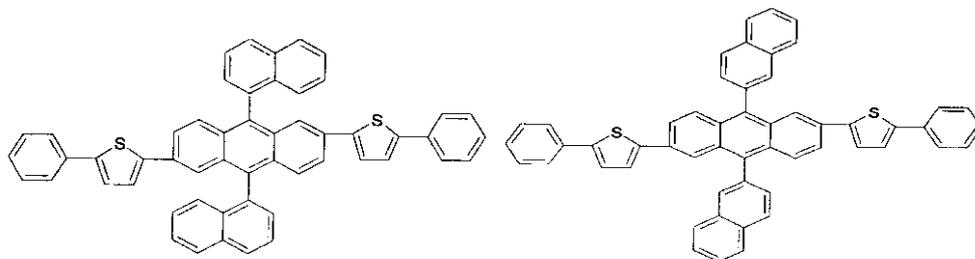
化合物 5



化合物 6

30

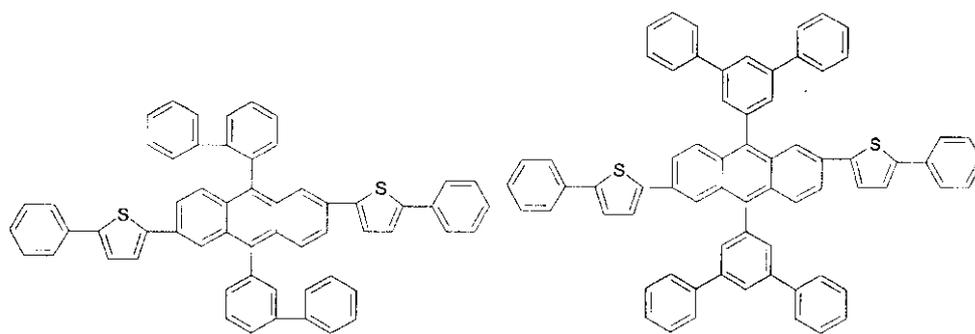
【化 7 B】



化合物 7

化合物 8

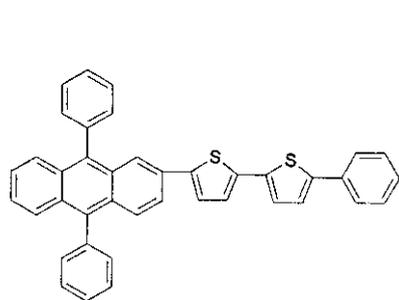
10



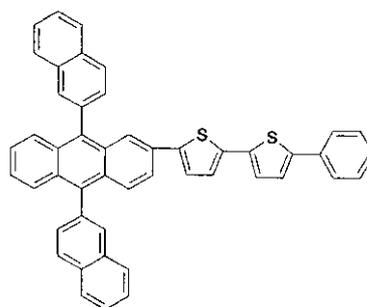
化合物 9

化合物 10

20

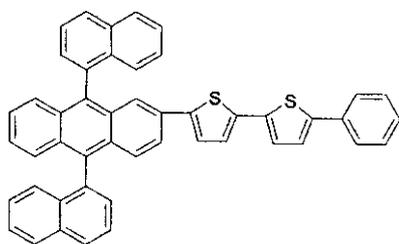


化合物 11

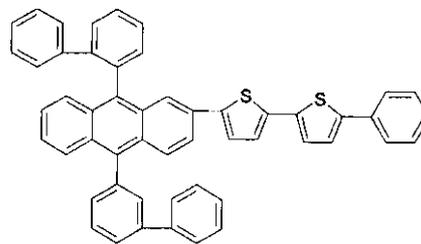


化合物 12

30



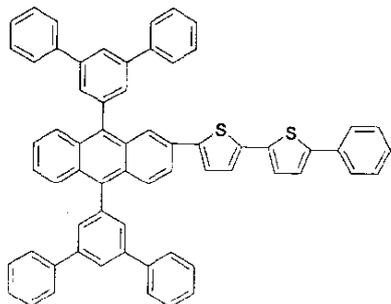
化合物 13



化合物 14

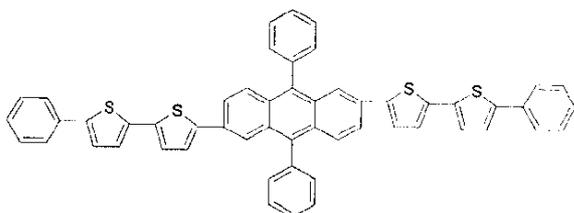
40

【化 7 C】



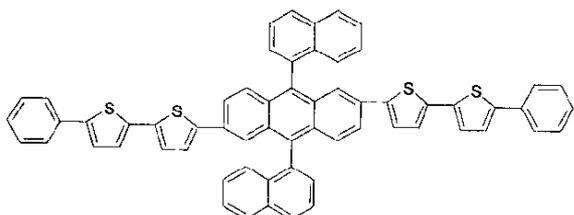
化合物 1 5

10



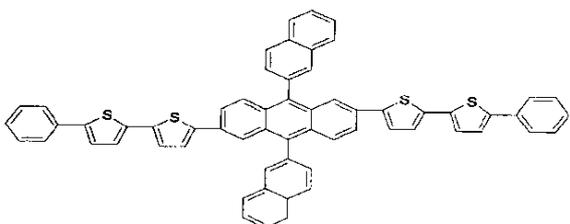
化合物 1 6

20



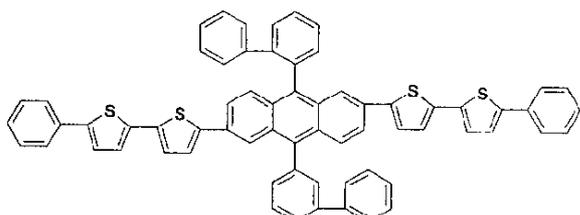
化合物 1 7

30



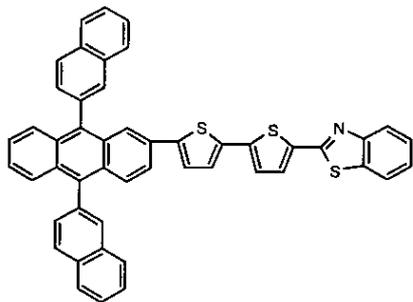
化合物 1 8

40

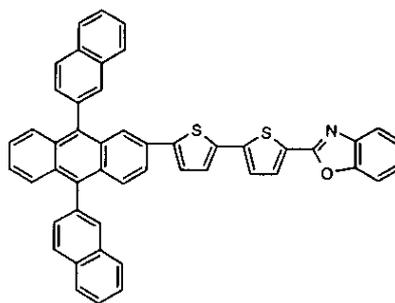




【化 7 E】

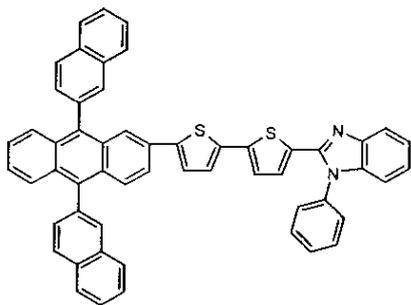


化合物 2 7

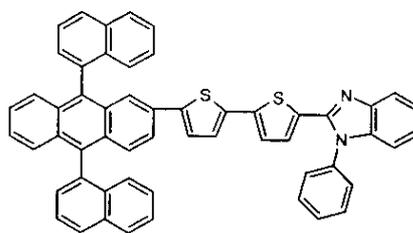


化合物 2 8

10

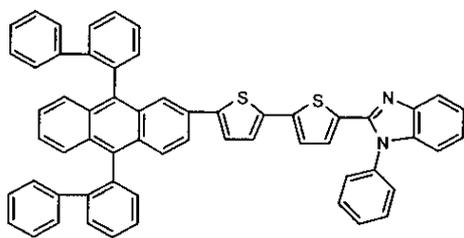


化合物 2 9

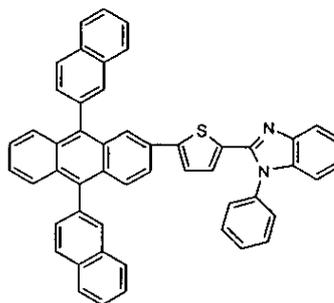


化合物 3 0

20

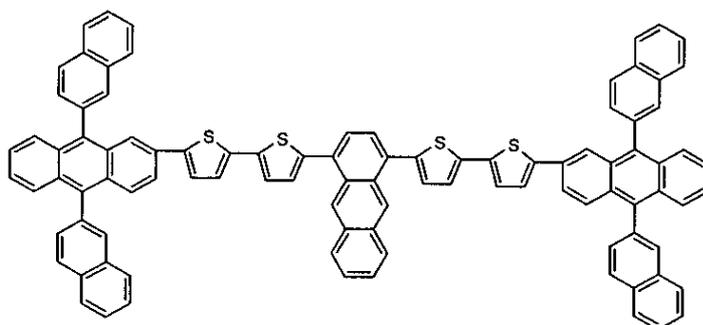


化合物 3 1



化合物 3 2

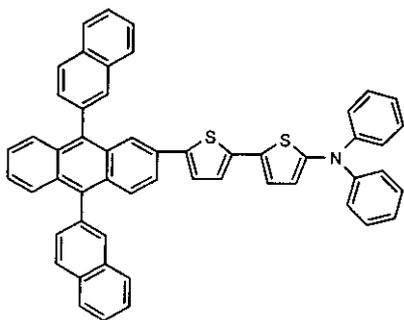
30



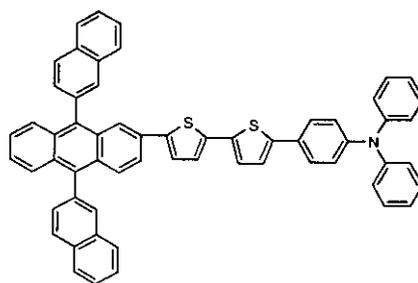
化合物 3 3

40

【化 7 F】

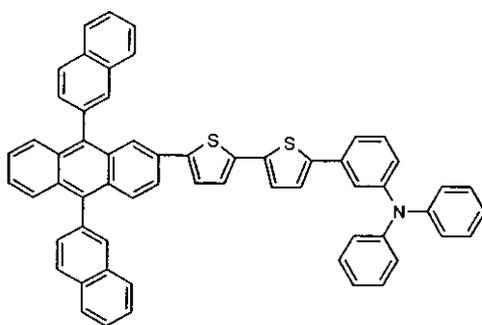


化合物 3 4



化合物 3 5

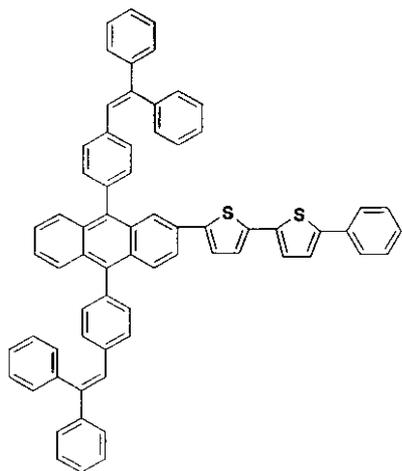
10



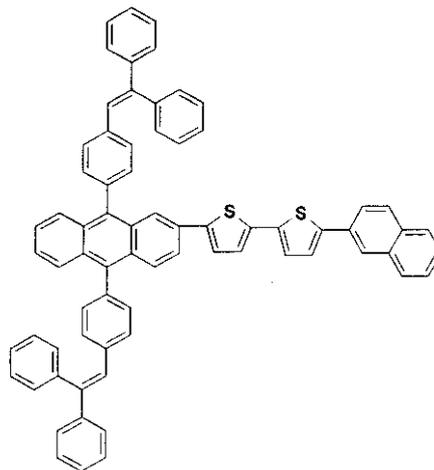
化合物 3 6

20

【化 7 G】

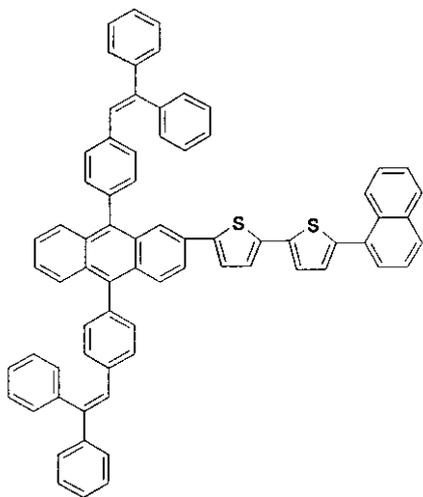


化合物 3 7

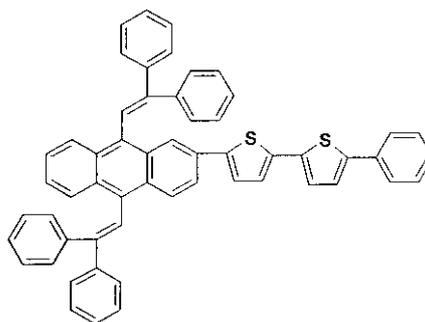


化合物 3 8

10



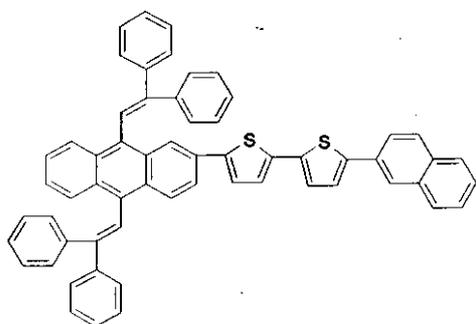
化合物 3 9



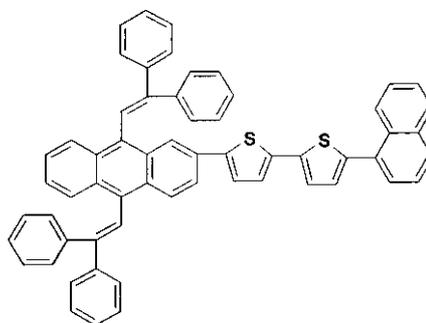
化合物 4 0

20

30



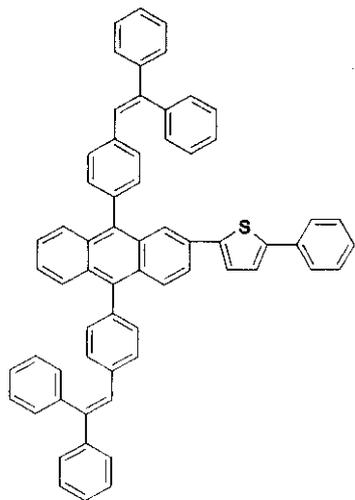
化合物 4 1



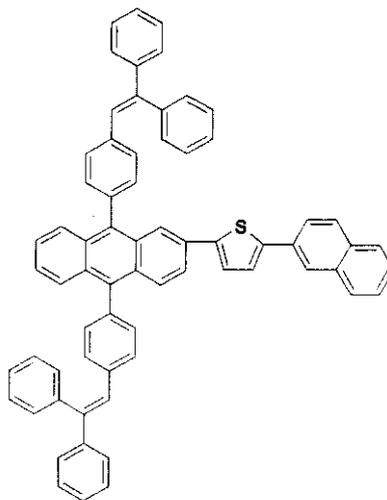
化合物 4 2

40

【化 7 H】

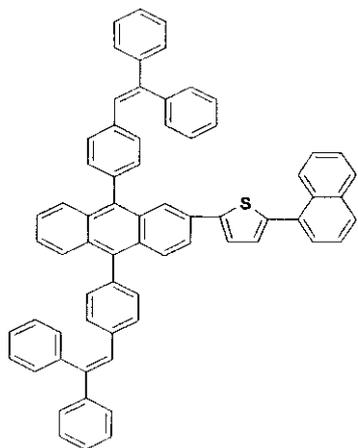


化合物 4 3

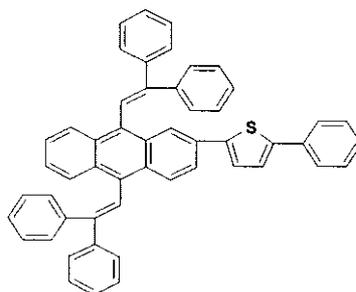


化合物 4 4

10



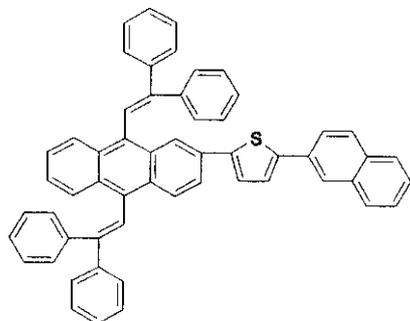
化合物 4 5



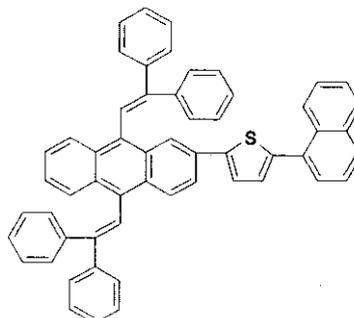
化合物 4 6

20

30



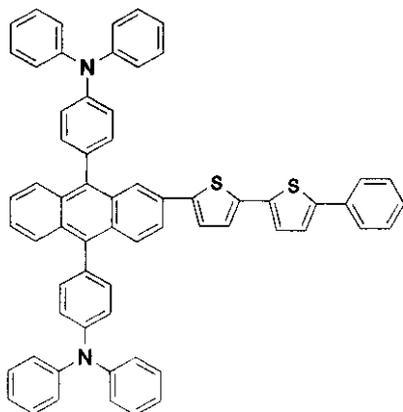
化合物 4 7



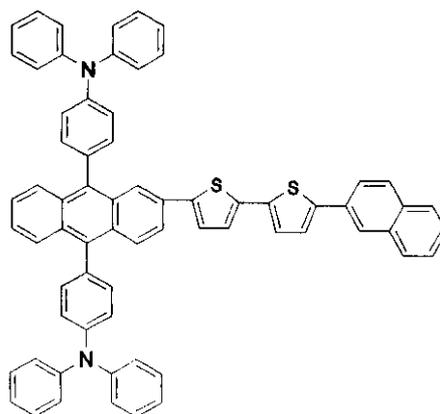
化合物 4 8

40

【化 7 I】

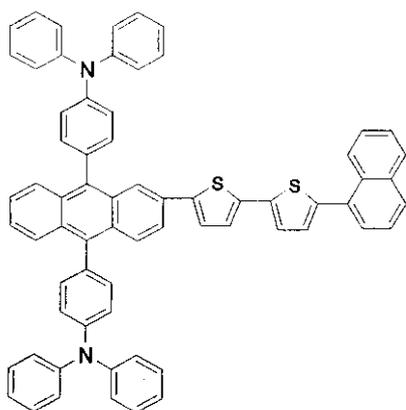


化合物 4 9

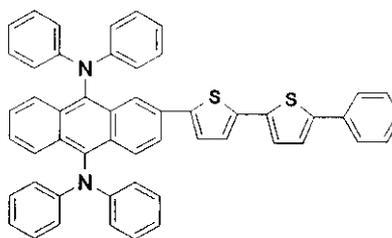


化合物 5 0

10

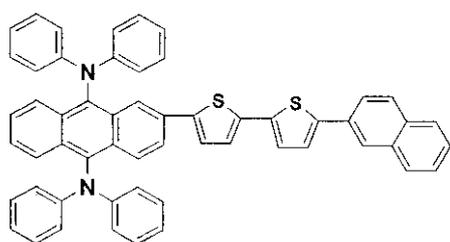


化合物 5 1

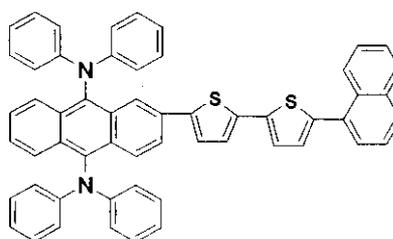


化合物 5 2

20



化合物 5 3

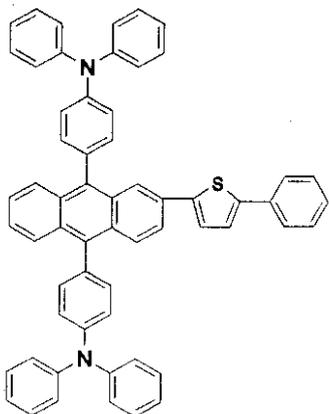


化合物 5 4

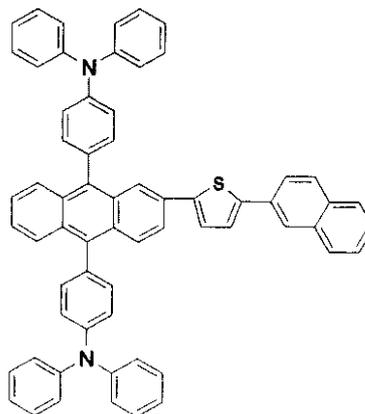
30

40

【化 7 J】

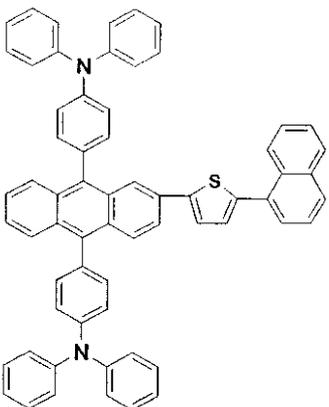


化合物 5 5

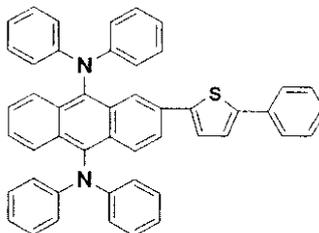


化合物 5 6

10

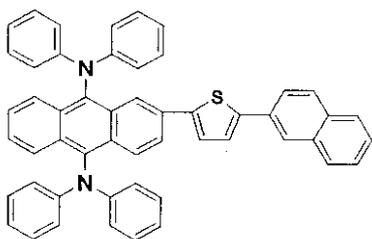


化合物 5 7

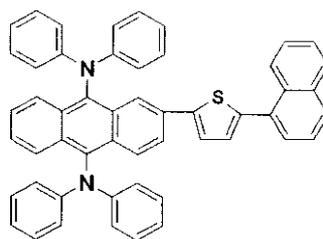


化合物 5 8

20

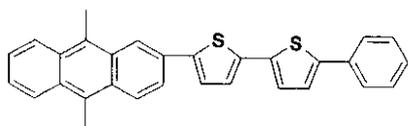


化合物 5 9

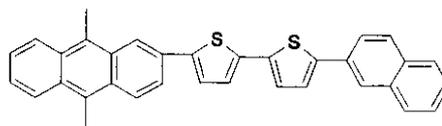


化合物 6 0

30



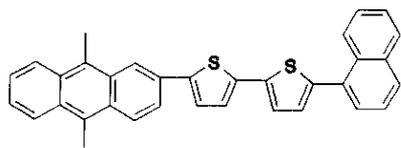
化合物 6 1



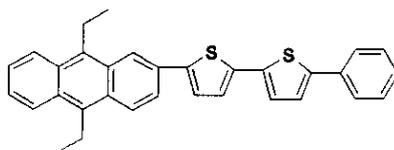
化合物 6 2

40

【化 7 K】

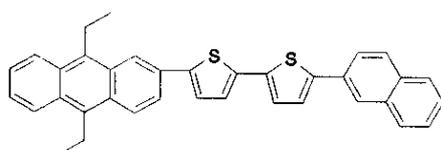


化合物 6 3

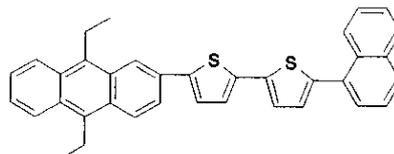


化合物 6 4

10

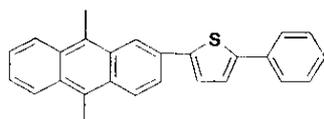


化合物 6 5

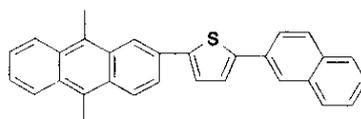


化合物 6 6

20

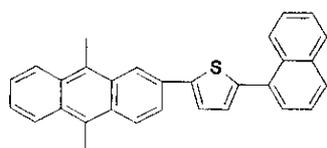


化合物 6 7

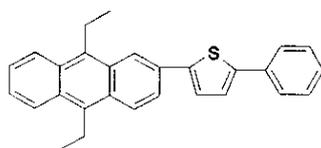


化合物 6 8

30

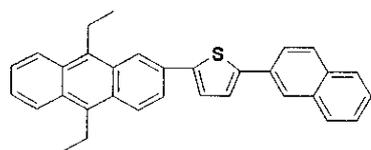


化合物 6 9

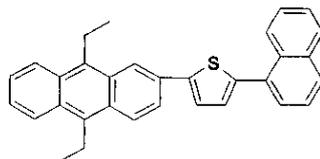


化合物 7 0

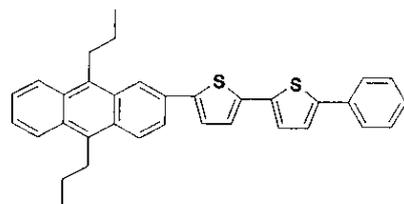
40



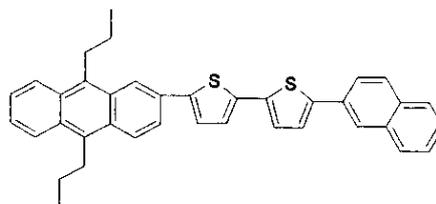
化合物 7 1



化合物 7 2

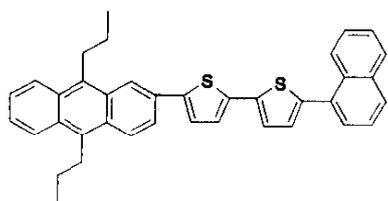


化合物 7 3

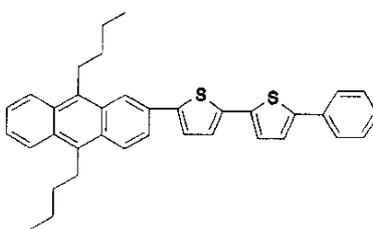


化合物 7 4

【化 7 L】

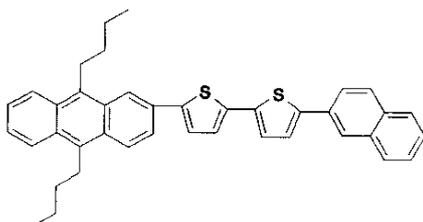


化合物 7 5

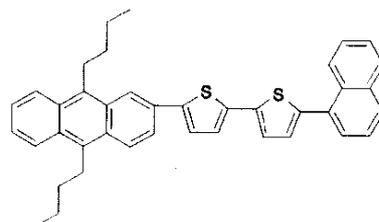


化合物 7 6

10

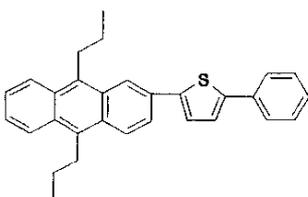


化合物 7 7

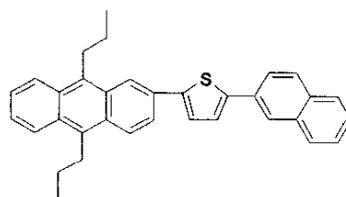


化合物 7 8

20

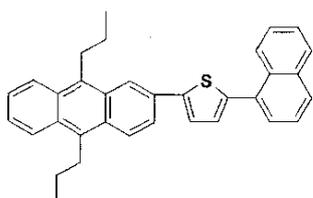


化合物 7 9

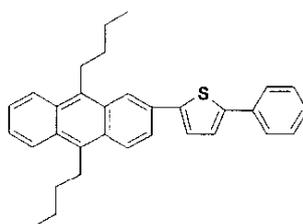


化合物 8 0

30

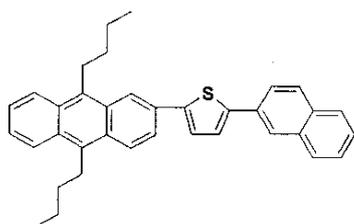


化合物 8 1

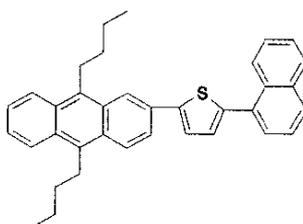


化合物 8 2

40

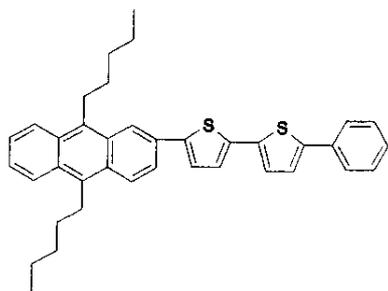


化合物 8 3

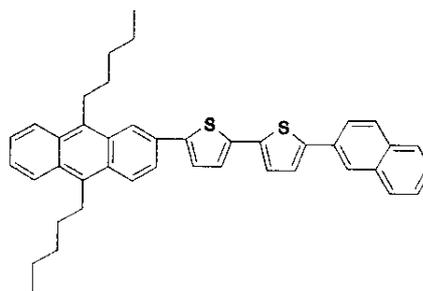


化合物 8 4

【化 7 M】

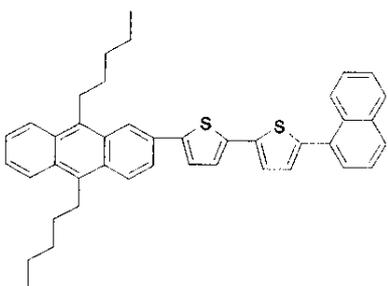


化合物 8 5

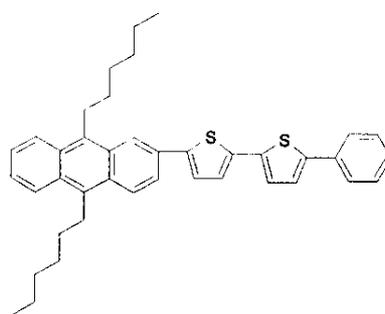


化合物 8 6

10

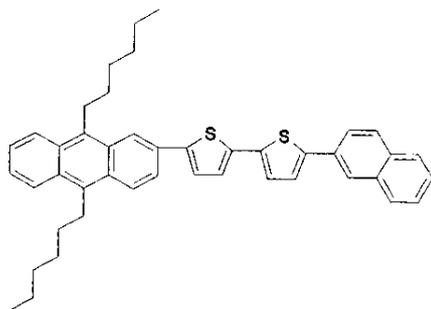


化合物 8 7

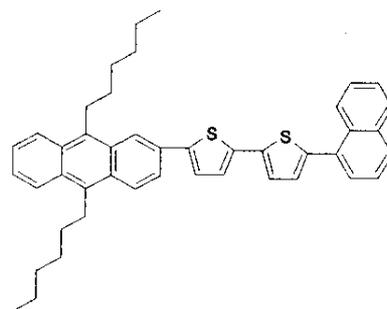


化合物 8 8

20

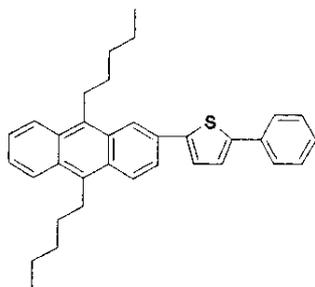


化合物 8 9

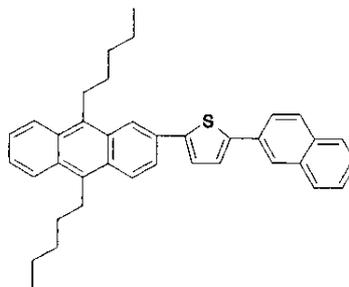


化合物 9 0

30



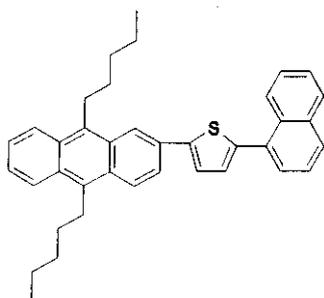
化合物 9 1



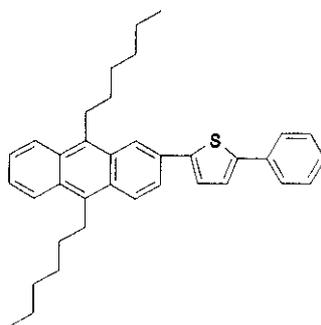
化合物 9 2

40

## 【化7N】

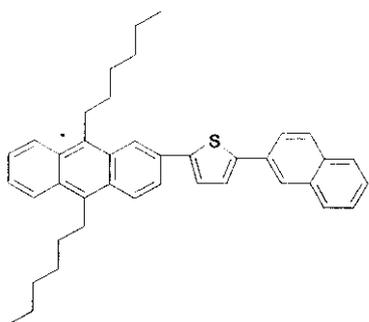


化合物 9 3

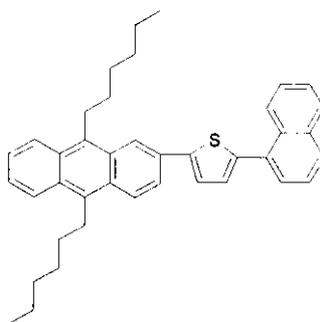


化合物 9 4

10



化合物 9 5



化合物 9 6

20

## 【0088】

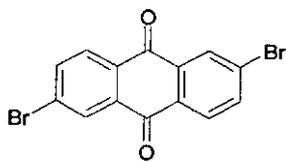
## 新規有機化合物の合成

一般式Iを満足する化合物は多段階化学反応で合成できる。前記化合物の合成は以下の実施例によって記述される。実施例に示すように、一部中間体化合物が先に合成され、その中間体化合物は相互に反応し、または、変形する。例証的な中間体化合物は以下に列挙する化合物101-123である。これら化合物において、“Br”は任意の他の反応性原子または作用基で置換できる。

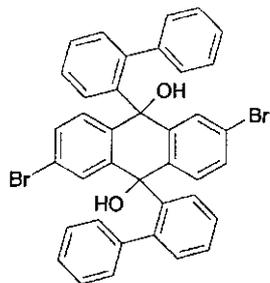
30

## 【0089】

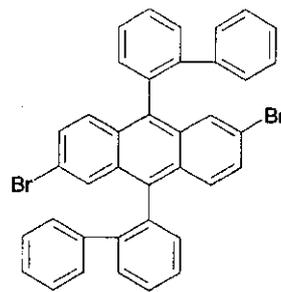
【化 8 A】



化合物 1 0 1

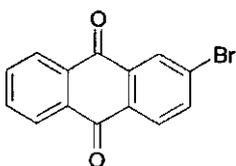


化合物 1 0 2

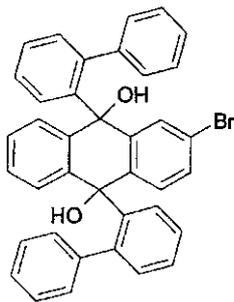


化合物 1 0 3

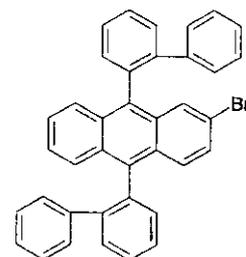
10



化合物 1 0 4



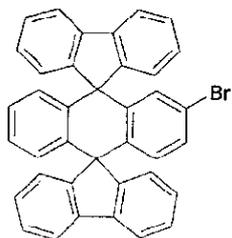
化合物 1 0 5



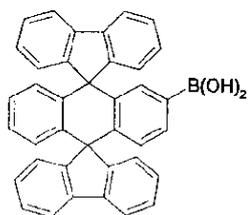
化合物 1 0 6

20

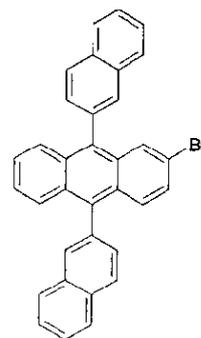
【化 8 B】



化合物 1 0 7

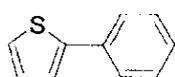


化合物 1 0 8

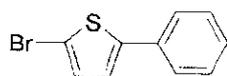


化合物 1 0 9

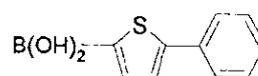
10



化合物 1 1 0

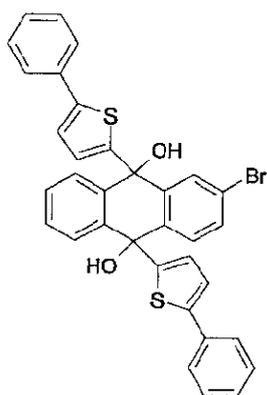


化合物 1 1 1

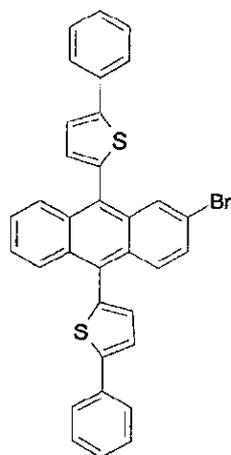


化合物 1 1 2

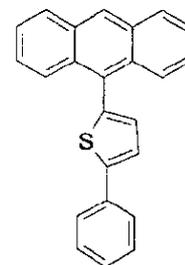
20



化合物 1 1 3

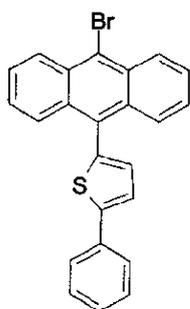


化合物 1 1 4

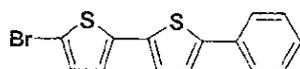


化合物 1 1 5

30



化合物 1 1 6



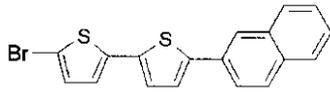
化合物 1 1 7



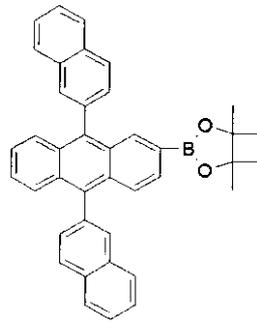
化合物 1 1 8

40

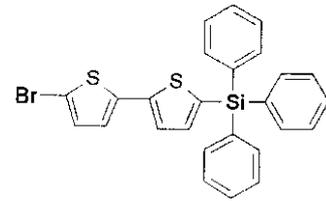
## 【化 8 C】



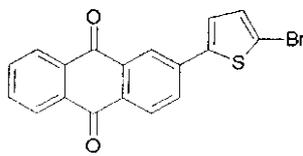
化合物 1 1 9



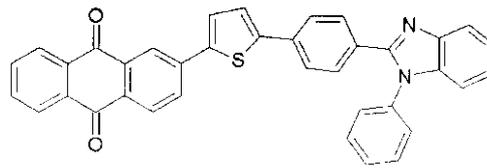
化合物 1 2 0



化合物 1 2 1



化合物 1 2 2



化合物 1 2 3

10

20

## 【 0 0 9 0 】

## 新規有機化合物の特性

有機EL素子は、他の諸物質の中の一つ以上の有機化合物から作られる。以下で詳細に議論されるように、有機EL素子に用いられる有機化合物は様々な機能を有し、その中には、発光、電極からのキャリア注入促進、注入されたキャリアの移送促進、不純物の活性化、発光効率向上などを含む。普通、一般式Iを満足させる有機化合物は本発明の一側面により、有機EL素子内で活用され、一つ以上の機能を行うことができる。

## 【 0 0 9 1 】

これに制限されるわけではないが、一般式Iを満足させる多くの化合物が発光物質として特に有用である。また、そのような多くの化合物がドーパント（活性添加物）と呼ばれる他の発光物質のホスト（賦活剤）として適している。発光ドーパントのホストはそれ自体の発光特性を有しなければならない。有機EL素子内ホスト物質はドーパントとエネルギー的に適合しなければならない。また、前記ホスト物質は有機EL素子内で電氣的に安定でなければならない。

30

## 【 0 0 9 2 】

## 新規化合物の電界発光

都合のよいことには、一般式Iを満足させる多くの化合物が可視発光特性を示すのは、適切なエネルギーが加えられた時である。これら化合物は、一般に可視発光のためのエネルギーに相応する、伝導帯の最低エネルギー準位と価電子帯の最高エネルギー準位の差である帯域間隙を有する。都合のよいことに、前記一般式Iを満足させる化合物の帯域間隙は約1.8乃至約3.0 eVの範囲である。都合のよいことに、一般式Iを満足する化合物は適切な電気エネルギーの印加時、一般に青緑色から赤色に至る様々な色の可視光を生成することができる。これら色に相応する帯域間隙は約2.8乃至約1.8 eVである。前記発光化合物は以下で追加的に議論されるように一つ以上の適合した添加物を活性化できる。また、これら化合物は単独発光物質としてまたは他のホスト物質に対するドーパントとしてそれ自体で着色発光できる。

40

## 【 0 0 9 3 】

## ドーパントとのエネルギーマッチング

ホスト物質及びドーパントは互いにエネルギー的に適合しなければならない。以下でよ

50

り詳細に議論されるように、前記ホスト物質の帯域間隙は前記ドーパントの帯域間隙と同一であるかそれより大きいことが必要で、この時にドーパントが可視発光できる。また好ましいことは、前記ホストの帯域間隙が“少し”だけ大きく、比較対象をドーパントの帯域間隙とすることであって、以下で追加議論する。多くの化合物が、一般式Iを満足しながら、都合よく発生する有色光は、変化範囲が青緑から遠赤外である。したがって、一般式Iを満足する化合物の中でホストまたはドーパントのための相異なる発色物質が選択できる。例えば、特定帯域間隙を有するドーパントが選択される場合、このドーパントとエネルギー的に適合できる一般式Iを満足する化合物を選択する。

#### 【0094】

有機EL素子としての新規化合物の安定性

10

有機EL素子内電界発光過程で、正孔及び電子は以下で議論されるように発光分子の周囲を移動して発光分子で再結合する。一部発光分子は他のものより電氣的にさらに安定である。それほど安定でない発光分子の場合、発光分子で、または、その近くでの正孔と電子の反応は前記化合物を電気化学的に破壊または分解し、これは素子の駆動電圧の増加、発光輝度の急激な低下或いはこれら両者を招く。好ましくは、発光物質が、ホストまたはドーパントのどちらであっても、電氣的に安定な化合物の中から選択される。本発明の一側面による新規有機化合物は以下の実施例を参照して議論されるように、顕著な電氣的安定性を示す。

#### 【0095】

また、有機EL素子が高温に置かれると素子の安定性が低下することがあるので、有機EL素子内使用のための化合物の熱的安定性もやはり重要である。一般に、有機EL素子内で、有機化合物は無定形薄膜形態で存在する。前記無定形の化合物は温度がガラス転移温度以上に上昇すれば結晶化する。化合物の部分的結晶化は電界発光損失を招く。無定形フィルム内の結晶化は高温を伴う製造過程に起こることがある。有機化合物の熱的結晶化を避けるために、化合物のガラス転移温度は薄膜が置かれる温度より高くなければならない。一般に、約120 またはそれ以上のガラス転移温度を有する有機化合物は有機EL素子内使用のために充分である。当業者にもよく分かるように、化合物のガラス転移温度はその融点と相関関係を有するので、融点がガラス転移温度の代わりに基準として用いられることもある。融点とガラス転移温度の関係は本願に参照として統合される *Molecular Design for Nonpolymeric Organic Dye Glasses with Thermal Stability*, *J. Phys. Chem.* 97, 6240-6248 (1993)に記載されている。都合のよいことに、一般式Iの多くの化合物が有機EL素子内使用に十分な融点を有する。好ましくは、一般式Iの化合物は約300 またはそれ以上の融点を有したり、約120 またはそれ以上のガラス転移温度を有し、より好ましくは融点は約350 以上である。

20

30

#### 【0096】

新規化合物を用いる有機EL素子

本発明の他の側面は、既に述べた新規有機化合物を用いる有機EL素子である。上述のように、新規化合物は電界発光、正孔注入、正孔移送、電子移送及び電子注入のうちの一つ以上の特性を有する。有機EL技術に適した任意のその他の化合物と組み合わせて、本発明の一つ以上の新規有機化合物を用いて様々な有機EL素子が製作できる。

40

#### 【0097】

本発明による有機EL素子の様々な構造を、添付した図面を参照して議論する。図1乃至6は本発明によって製作できる有機EL素子の断面構造を描いたものである。これら図面において、同じ引用番号が構造の一部として、同様な層または部品のことを示すのに利用される。用語“層”は単一化合物または二つ以上の化合物を含む混合物の堆積物、被覆またはフィルムのことを意味する。これらの構成は本発明による有機EL素子の跡形が無いほどの変形ではないことを注目すべきである。

#### 【0098】

図示の有機EL素子には、基板1、陽極3、陰極15と一つ以上の層が陽極3と陰極15の間に位置して含まれる。都合のよいことに、前記一つ以上の介在層が含む少なくとも一

50

つの化合物は一般式Iで表される。前記一つ以上の介在層には正孔注入層5、正孔移送層7、発光層9、電子移送層11、電子注入層13と幾つかの層が前述した諸層が有する二つ以上の機能を有して含まれる。

#### 【0099】

基板1(図1乃至6)が支持するのは、積層構造の有機EL素子10である。陽極3(図1-6)と陰極15(図1-6)が電氣的に連結される電源17(図1-6)があるが、途中にスイッチ19(図1-6)があつて制御器(図示せず)によって制御される。前記電源は、好ましくは、電流源である。正孔注入層5(図1-3)は陽極3から正孔移送層7(図1-5)内への正孔注入を促進させる。同様に、電子注入層13(図1及び4)は陰極15から電子移送層13内への電子注入を促進させる。正孔移送層7は陽極3及び/または正孔注入層5から発光層9(図1-6)に向かって正孔の移動を加速する。電子移送層11(図1、2、4及び5)は陰極15及び/または電子注入層13から発光層9(図1-6)に向かって電子の移動を加速する。

10

#### 【0100】

##### 有機EL素子の作動

電圧を電極3と15の間に印加すれば、電子と正孔が陰極15と陽極3から介在層内に注入される。移動中の正孔及び電子が再結合する所は発光分子であり、発光層9内に位置していることが好ましい。再結合対の電子と正孔、つまり、励起子は再結合エネルギーを発光分子に供与するが、そこで再結合したのである。別の見方をすると、励起子が短い時間だけ動きまわり、再結合エネルギーを供与するのは他の有機発光、特に、小さい帯域間隙を有し、再結合位置に近いものである。供与されたエネルギーは発光分子の価電子を励起させるのに用いられ、そこでは電子が基底状態に戻る時に光子を発生する。

20

#### 【0101】

##### 発光層

発光層9は、その中で電子と正孔の再結合過程による可視光放出に特別に寄与している層であるが、他の機能も有する。実施形態には例示していないが、発光層が有機EL素子内の分離した層として含まれないこともあり、この場合、発光物質がドーピングされた所で可視光が発生する。本発明の有機EL素子は、別個の発光層を含むことが好ましい。

#### 【0102】

単一物質で形成された発光層9を含む実施形態において、一般式Iを満足させる化合物が、都合のよいことに、発光層を形成する。他の場合には、一般式Iでない化合物が発光層9を形成し、一般式Iの化合物の一つ以上が有機EL素子の一つ以上の他の層内で用いられる。

30

#### 【0103】

有機EL素子の発光層9は、単一発光化合物または二つ以上の物質の混合物で構成できる。二つ以上の化合物で形成された発光層9を含む実施形態で、大部分の内包化合物はホストと呼ばれ、他の化合物または他の化合物群はドーパントと呼ばれる。ホスト及び少なくとも一つのドーパントが共に発光性を持つことが好ましい。ホスト及び少なくとも一つのドーパントが共に一般式Iの化合物群から選択される。代案として、ホストは一般式Iの化合物から選択され、ドーパントは一般式Iでない化合物から選択される。別の代案として、一般式Iでない化合物がホストとして用いられ、ドーパントを一般式Iの化合物群から選ぶことができる。好ましい実施形態において、ホスト物質が一つ以上のドーパントを伴って、一般式Iの化合物群から選択され、ドーパントが一般式Iを満足させる化合物かどうかは無関係である。

40

#### 【0104】

どの前記実施形態に対しても、一般式Iの化合物が含まれ、一般式IIの $R_5$ と $R_1$ 乃至 $R_4$ の各々は、それらが一般式IIではない場合に、好ましくは、水素、シアノ、ニトロ、置換または非置換 $C_1-C_2$ アルキル、置換または非置換 $C_2-C_1$ アルケニル、置換または非置換 $C_3-C_7$ シクロアルキル、置換または非置換 $C_4-C_7$ シクロアルケニル、置換または非置換アリール、置換または非置換ヘテロアリール、置換または非置換 $C_1-C_2$ アルコ

50

キシ、置換または非置換アリールオキシ、置換または非置換 $C_1-C_{20}$ アルキルアミン、置換または非置換アリールアミン、置換または非置換アルキルアリールアミン、置換または非置換 $C_1-C_{20}$ アルキルシリル;置換または非置換アリールシリル;置換または非置換アルキルアリールシリル、置換または非置換 $C_1-C_{20}$ アルキルボラニル、置換または非置換アリールボラニル、置換または非置換アルキルアリールボラニル、置換または非置換 $C_1-C_{20}$ アルキルチオ、または置換または非置換アリールチオである。前述した基において、置換された $R_1-R_5$ は、好ましくは、下記の各基で置換される:すなわち、シアノ;ニトロ;ホルミル; $C_1-C_{20}$ アルキル、つまり、メチル、エチルまたはプロピル;アリール、つまり、フェニル、ナフチル、ピフェニルまたはアントラセニル;ヘテロアリール、つまり、イミダゾリル、チアゾリル、オキサゾリル、チオフェニル、ピリジル、ピリミジルまたはピロリル; $C_4-C_7$ シクロアルケニル、つまり、シクロブテニルまたはシクロペンテニル、 $C_1-C_{20}$ アルコキシ、つまり、メトキシ、エトキシ、プロポキシ;アリールオキシ、つまり、フェノキシまたはナフトキシ; $C_1-C_{20}$ アルキルアミン、つまり、メチルアミン、エチルアミンまたはプロピルアミン;アリールアミン、つまり、フェニルアミンまたはナフチルアミン;アルキルアリールアミン、つまり、メチルフェニルアミン、エチルフェニルアミンまたはエチルナフチルアミン; $C_1-C_{20}$ アルキルボラニル、つまり、ジメチルボラニル、ジエチルボラニルまたはジプロピルボラニル;アリールボラニル、つまり、ジフェニルボラニル、ジナフチルボラニルまたはフェニルナフチルボラニル;アルキルアリールボラニル、つまり、フェニルメチルボラニル、ナフチルメチルボラニルまたはナフチルエチルボラニル; $C_1-C_{20}$ アルキルシリル、つまり、トリメチルシリル、トリエチルシリルまたはトリプロピルシリル;アリールシリル、つまり、トリフェニルシリルまたはトリナフチルシリル;アルキルアリールシリル、つまり、ジメチルフェニルシリル、ジエチルフェニルシリルまたはジフェニルメチルシリル; $C_1-C_{20}$ アルキルチオ、つまり、メチルチオ、エチルチオ、プロピルチオまたはブチルチオ;及びアリールチオ、フェニルチオまたはナフチルチオである。一般式Iを満足する化合物は、化合物1乃至96、好ましくは化合物1乃至36、より好ましくは化合物4、12、14、19、21、23、25、17及び29から選択される。

#### 【0105】

前述した実施形態の何れかに対して、当業者が理解するであろうことは、一般式Iでない化合物を、単独または一つ以上の他の化合物と共に発光層9の内部で使用できることである。例えば、発光層9の内部で使用するために、一般式Iでない発光化合物は、Alq<sub>3</sub>を含む8-ヒドロキシキノリン金属錯体;カルバゾール化合物及びその誘導体;二量化されたスチリル化合物(米国特許第5,366,811);BAIq(米国特許第5,150,006);10-ヒドロキシベンゾ[h]キノリン-金属錯体(米国特許第5,529,853);2-(2'-ヒドロキシ-5'-メチルフェニル)ベンゾトリアゾール金属錯体(米国特許第5,486,406);ベンゾキサゾール、ベンズチアゾール、ベンズイミダゾール及びその誘導体(米国特許第5,645,948);ポリ(p-フェニレンピレン)及びその誘導体(Conjugated Polymers as Solid-State Laser Materials, Synthetic Metals 91, 35(1997); and Low Voltage Operation of Large Area Polymer LEDs, Synthetic Metals 91, 109(1997));スピロ化合物(米国特許第5,840,217);ポリフルオレン、ルプレンなどを含む。引用された文献及び特許は本願に参照として統合される。

#### 【0106】

##### ドーパント

本発明の有機EL素子は、ドーパントの有無に拘わらず構成できる。ドーパントは導入されて発光効率を向上させ、発色を調節し、及び/または非-蛍光性ホストを含む層から単独に発光する。ドーパントは発光層9及び一つ以上の他の層5、7、11及び13に添加できる。二つ以上の発光物質がこれら層内の様々な目的のためにドーピングできる。また、本発明の有機EL素子の一つの実施形態で、発光層9は存在しなくてもよい。そのような構成で、一つ以上の発光ドーパントが一つ以上の層5、7、11または13内に必然的に

導入されて、そこから可視光を発生する。

【0107】

一般に、発光層9のためのドーパントは、ホスト物質より高い量子効率を有する発光物質群から選択される。好ましいのは、ドーパントの持つ量子収率が、低濃度システムで、“1”に近いことである。これの意味することは、励起子から受けとったエネルギーの大部分が発光に寄与するが、発熱のような他の形態で放出されるのではないことである。また、ドーパントは、ホスト物質とエネルギー的に適合するように選択される。励起子の知識によると、傾向として、持っているエネルギーを供与する相手は、再結合点近くの諸物質のうち、小さい帯域間隙の物質である；したがって、ドーパントは、都合のよいことに、ホスト物質より小さい帯域間隙を有する発光物質から選択される。ドーパントとホスト物質のマッチングによって、再結合がホスト分子内で起こり、生じた励起子のエネルギーがドーパントに与えられる。このような場合、可視光がドーパント分子から放出される。また、励起子のエネルギーが他のドーパントに与えられて、そこで発光する。

10

【0108】

また、ドーパントは、なるべく、ホスト物質より僅かに小さい帯域間隙を持つ発光物質から選択する。ホストとドーパント分子の間の相対的に小さい帯域間隙の差は、ホスト分子からドーパント分子へのエネルギー供与の効率を高める。非効率的なエネルギー供与では、例えば、一部ホストが再結合エネルギーをドーパントに供与せずに自身の光を発すると同時に、ドーパントも他のホストからエネルギーの供与を受けて発光する。得られる光はホスト色とドーパント色の混合物であり、普通は、フルカラーディスプレイの製作に好ましくない。したがって、ドーパントが決定すると、ホストはドーパントより僅かに大きい帯域間隙を有する化合物群から選択され、反対の場合も同様である。ドーパントの帯域間隙は、ホストの帯域間隙値の約60から100%までのどの値でもよく、なるべくなら、約80から100%にする。

20

【0109】

一つの実施形態では、ドーパントは一般式Iを満足する化合物から選択され、ホストが一般式Iの化合物であるかどうかとは関係しない。好ましくは、ドーパントは化合物1乃至96から選ばれ、より好ましくは化合物1乃至36で一般式Iでないドーパントと共にまたは単独である。もう一つの実施形態では、ドーパントは一般式Iでない化合物から選択され、ホストが一般式Iの化合物であるかどうかとは関係しない。ドーパントが一般式Iの化合物でも、一般式Iではない化合物でも、蛍光性または燐光性を有することが好ましい。好ましいのは、ドーパントが燐光性物質で、蛍光性物質内で用いられない三重項エネルギーをいわゆる“三重項から一重項遷移”の内部過程によって光に転換させることである。三重項から一重項遷移の概説はNature (403, 6771, 2000, 750-753)に見出すことができ、これは本願に参照として統合される。

30

【0110】

好ましい実施形態では、ドーパントは一般式Iではない発光化合物であるが、ホストは一般式Iの化合物である。ドーパントが決定されれば、ホストに選ばれるのは、一般式Iの化合物で、先に議論したように適合した帯域間隙を有する。当業者が理解するように、一般式Iではない化合物が、発光層9または他の層3、5、7、11及び13内で、ドーパントとして使用できる。一般式Iでないドーピング物質の例は、BCzVBiまたは2,2'-([1,1'-ビフェニル]-4,4'-ジイルジ-2,1-エテンジイル)ビス[9-エチル-9H-カルバゾール、ペリレン、ルブレネン、DCJTbまたは2-(1,1-ジメチルエチル)-6-[2-(2,3,6,7-テトラヒドロ-1,1,7,7-テトラメチル-1H,5H-ベンゾ[ij]キノリジン-9-イル)エテニル]-4H-ピラン-4-イリデン]-プロパンジニトリル、キナクリドン及びその誘導体、クマリン及びその誘導体、ナイルレッド、DCM1または2-[2-[4-(ジエチルアミノ)フェニル]エテニル]-6-メチル-4H-ピラン-4-イリデン]-プロパンジニトリル、DCM2または2-メチル-6-[2-(2,3,6,7-テトラヒドロ-1H,5H-ベンゾ[ij]キノリジン-9-イル)エテニル]-4H-ピラン-4-イリデン]-プロパンジニトリル、テトラジフェニルアミノピリミド-ピリミジン、ピリジノチアジアゾールなど

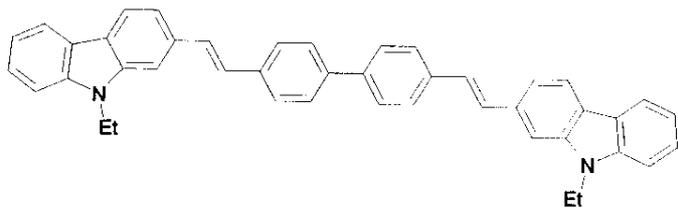
40

50

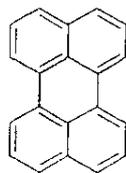
であり、化合物 2 0 1 乃至 2 2 0 を含むが、これに制限されない。

【 0 1 1 1 】

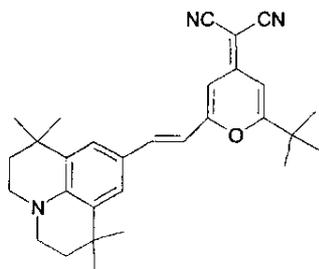
【化 9 A】



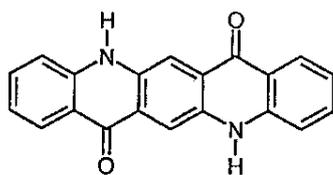
化合物 2 0 1



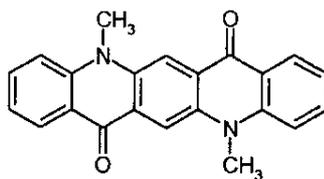
化合物 2 0 2



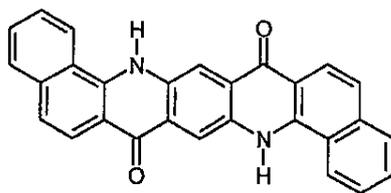
化合物 2 0 3



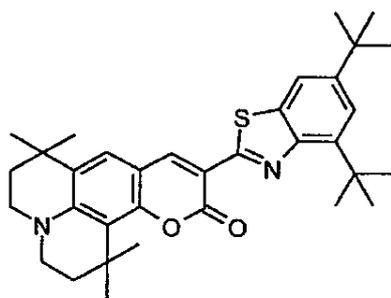
化合物 2 0 4



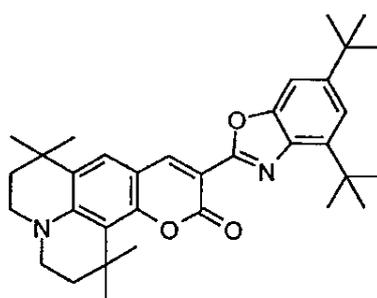
化合物 2 0 5



化合物 2 0 6



化合物 2 0 7



化合物 2 0 8

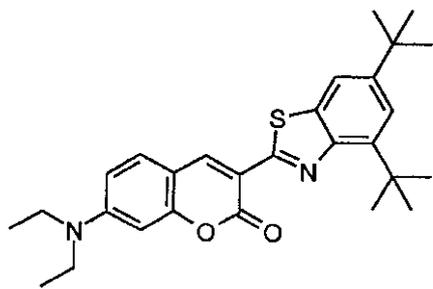
10

20

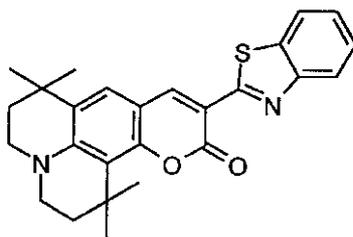
30

40

【化 9 B】

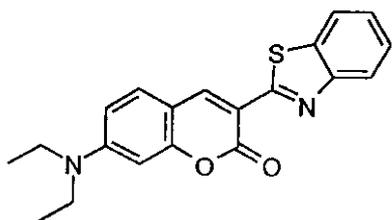


化合物 209

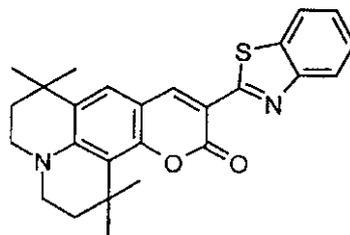


化合物 210

10

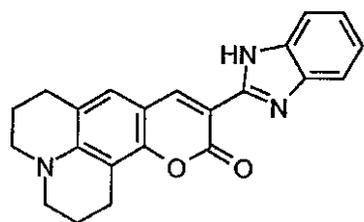


化合物 211

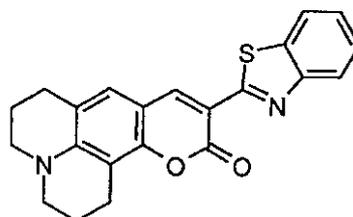


化合物 212

20

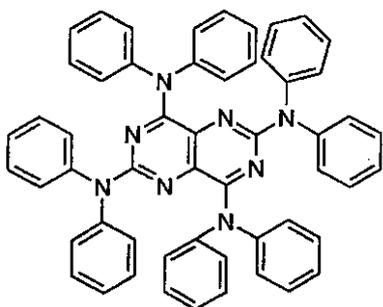


化合物 213

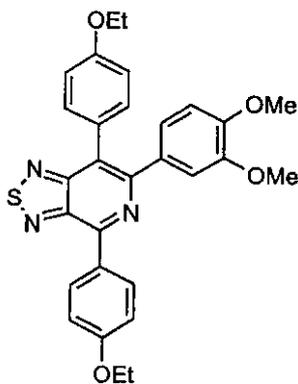


化合物 214

30



化合物 215



化合物 216

40



Emitting Devices with Iridium-Complex as Triplet Emissive Center, Jpn. J. Appl. Phys. 38, L1502 (1999); Optimization of Emitting Efficiency in Organic LED Cells Using Ir Complex, Synthetic Metals 122, 203 (2001); Operating lifetime of phosphorescent organic light emitting devices, Appl. Phys. Lett. 76, 2493 (2000); High-Efficiency Red Electrophosphorescence Devices, Appl. Phys. Lett. 78, 1622 (2001); Very High-Efficiency Green Organic Light-Emitting Devices Based on Electrophosphorescence, Appl. Phys. Lett. 75, 4 (1999); Highly-Efficient Organic Electrophosphorescent Devices With Tris(2-Phenylpyridine)Iridium Doped Into Electron-Transporting Materials, Appl. Phys. Lett. 77, 904 (2000); and Improved Energy Transfer In Electrophosphorescent Devices Appl. Phys. Lett. 74,442(1999)、に開示されており、これら文献全てが本願に参照として統合される。

#### 【0113】

##### 基板

図面が示す基板1は陽極3の前記面に置かれるが、これと異なって、基板1が陰極15の前記面に置かれてもよい。いずれの場合でも、基板1提供する支持体の上に積層構造の有機EL素子が、製造期間中は継続して、組立て可能である。また、基板1は有機EL素子の構成のための保護層として機能する。したがって、基板1のための物質は有機EL素子の製造過程条件及び用途を耐えられる物質から選択される。当業者であれば何の物質が前記条件に基づいた要求条件を充足させられるかが分かる。

#### 【0114】

一部有機EL素子の構成において、例えば、介在層5、7、9、11及び13のうちの一つ以上の層から放出された光が基板1を通過する。そのような構成で、基板1は都合のよいことに透明物質で形成されていて、可視光が発光層9から放出されてこれを通過できる。基板1のために用いられる透明物質は、たとえば、ガラス、石英及びその他の適切な天然または人工物質を含む。好ましくは、ガラスが基板1のために用いられる。有機EL素子の他の構造において、例えば、陰極15を通じてまたは基板1を通らない他の方向に発光することができる。そのような構成で、基板1は都合のよいことにその上に陽極3を形成するための熱力学的及び機械的要求条件を充足させる高-反射性の物質で形成される。例えば、半導体ウエハー、金属酸化物、セラミック物質及び不透明プラスチックが基板1として用いられる。反射性物質を塗布された透明基板も使用できる。

#### 【0115】

##### 陽極

陽極3は導電性電極で有って、電氣的に電源17に連結されている。例示していないが、陽極3は各種物質の多重層で構成できる。陽極3の厚さは用いられる物質及び層状構造によって変化する。しかし、陽極3は都合のよいことに約10乃至約1000nm、好ましくは約10乃至約500nmである。

#### 【0116】

陽極3が要求する比較的大きい仕事関数は、正孔注入を助けるものである。都合のよいことに、陽極3に用いる物質の仕事関数は約4eV以上である。例えば、陽極3に用いられる導電性物質には、炭素;アルミニウム、バナジウム、クロム、銅、亜鉛、銀、金、類似金属及び前述した金属の合金;亜鉛酸化物、インジウム酸化物、インジウム錫酸化物(ITO)、インジウム亜鉛酸化物及び類似の錫酸化物または錫酸化物インジウム基錯化合物;酸化物及び金属の混合物、例えばZnO:Al、SnO<sub>2</sub>:Sb;及び導電性ポリマー群、例えばポリ(3-メチルチオフェン)、ポリ[3,4-(エチレン-1,2-ジオキシ)チオフェン]、ポリピロール及びポリアニリンを含む。透明または不透明物質が陽極3材料として、有機EL素子内の光路構成に応じて選択できるが、先の議論に係る基板1用材料と関連している。出来るならば、陽極3をITOで形成する。当業者に理解できることは、他の物質の陽極3内での使用可能性、及び、適切な陽極物質の選択である。

#### 【0117】

10

20

30

40

50

## 陰極

陰極 15 はまた、電源 17 に電氣的に連結された導電性電極である。例示していないが、陰極 15 は各種物質の多重層で形成できる。陰極 15 の厚さは用いられる物質及びその層状構造によって変化する。しかし、陰極 15 は一般に約 1 乃至約 10,000 nm、約 5 nm 乃至約 5,000 nm で積層される。

## 【0118】

陰極 15 が要求する比較的小さい仕事関数は、電子注入を助けるものである。都合のよいことに、陰極 15 用材料の仕事関数は約 4 eV 以下である。例えば、陰極 15 として用いられる導電性物質には、マグネシウム、カルシウム、ナトリウム、カリウム、チタニウム、インジウム、イットリウム、リチウム、ガドリニウム、アルミニウム、銀、錫、鉛、類似金属及び前述した金属の合金を含む。多重層陰極物質には LiF/Al 及び  $\text{Li}_2\text{O}/\text{Al}$  を含む。出来るならば、陰極 15 はアルミニウム-リチウム合金、LiF/Al または  $\text{Li}_2\text{O}/\text{Al}$  で形成する。透明または不透明物質が先に議論した有機 EL 素子内光路構成に応じて陰極 15 として用いられる。当業者であれば陰極 15 内で使用できる他の物質及び適切な陰極物質が分かる。

10

## 【0119】

## 正孔注入層

正孔注入層 5 は素子に印加される弱い電界において多数の正孔を陽極 3 から注入させる機能を有する。正孔注入層 5 は、都合のよいことに、陽極層 3 と正孔移送層 7 の間の界面電界強度が十分に強くない場合に形成される。また、正孔注入層 5 は、陽極物質の仕事関数が、その近隣層 7、9、11 または 13 に用いた物質の最高被占軌道 (HOMO) 準位に対し、著しく異なる場合に形成されることがある。正孔注入層 5 は正孔注入における電位障壁を効果的に減少させて、結果的に有機 EL 素子の駆動電圧を減少させる。正孔注入物質の HOMO 準位は、都合のよいことに、陽極 3 の仕事関数と他の近隣層 9、11 または 13 の HOMO 準位の間にあるが、そこに制限されない。都合のよいことに、正孔注入層 5 に用いる化合物の HOMO 準位は負電位で約 4.0 eV から約 6.0 eV の範囲である。また、正孔注入物質は有機 EL 素子の構成が基板 1 を通じた光放射を許す場合、透明であるのが好ましい。他の構成で、正孔注入物質は都合のよいことに不透明である。

20

## 【0120】

有機 EL 素子の一つの実施形態によると、正孔注入層 5 は一般式 I を満足させる一つ以上の有機化合物で形成できる。このような実施形態で、一般式 I で示されない一つ以上の化合物 (一般式 I でない化合物) を添加できる。他の有機 EL 素子の実施形態では、一つ以上の一般式 I の化合物が素子の一つ以上の層内で用いられ、一つ以上の一般式 I でない化合物が正孔注入層 5 を形成する。当業者であれば正孔注入層 5 内で使用できる一般式 I でない化合物及び適切な物質の選択が分かる。

30

## 【0121】

一般式 I でないが、正孔注入層 5 内で使用できる化合物には、例えば、金属ポルフィリン (米国特許第 4,720,432 号及び第 4,356,429 号); オリゴチオフェン (米国特許第 5,540,999); アリールアミン及びその誘導体 (米国特許第 5,256,945 号、5,609,970 号及び第 6,074,734 号、更に、日本の未審査特許公報 1999-219788 及び 1996-269445); ヘキサニトリルヘキサアザトリフェニレン; 導電性ポリマー例えばポリアニリン誘導体、酸性ドーパントを伴う又は伴わないポリチオフェン; キナクリドン誘導体; ペリレン誘導体 (米国特許第 5,998,803 号); 及びアントラキノ (日本未審査特許公報第 2000-058267 号) を含む。引用された米国特許及び日本特許公報は本願に参照として統合される。

40

## 【0122】

## 正孔移送層

正孔移送層 7 の機能は、正孔を、出発点の正孔注入層 5 または陽極 3 (正孔注入層 5 が無い時) から到着点の発光層 9 または発光物質添加済み領域に向かって円滑に移動させることである。出来れば、正孔移送層 7 での使用に適した物質はその中に高い正孔移動度を

50

有する物質である。化合物内での高い正孔移動度は、有機EL素子の駆動電圧を減少させるが、その理由は、高い正孔移動度を有する化合物内の正孔が低い電位差で移動する傾向にある。都合のよいことに、正孔移送層7内で使用する化合物の正孔移動度は約  $1 \times 10^{-7} \text{ cm}^2 / \text{Vs}$  以上である。都合のよいことに、正孔移送層7の機能は、電子が陰極15の前記面上にある近隣層9、11または13からその中へ移動することを抑制する。低い電子移動度を有する物質が好ましい。この構成では、別個の正孔注入層が無く(図4)、正孔移送層7の機能は正孔注入と正孔移送の両方である。このような場合、先に議論した正孔注入特性を有する物質が好ましい。

#### 【0123】

本発明の有機EL素子の一つの実施形態によると、正孔移送層7は、一般式Iを満足する一つ以上の化合物で形成される。この実施形態において、一般式Iで表されない一つ以上の化合物(一般式Iでない化合物)を追加できる。有機EL素子の他の実施形態で、一般式Iの一つ以上の化合物が、素子の他の一つ以上の層に用いられ、その一方で、一般式Iでない一つ以上の化合物が正孔移送層7を形成する。正孔移送層7内で用いられる一般式Iでない化合物には、例えば、アリールアミン誘導体、共役ポリマー、共役又は非-共役反復単位を有するブロック共重合体などを含む。都合のよいことに、アリールアミン誘導体、4,4'-ビス[N-(1-ナフチル)-N-フェニルアミノ]ビフェニル(NPB)が正孔移送層7として用いられる。当業者であれば正孔移送層7内で使用可能な一般式Iでない化合物及びその適切な選択を理解できる。

10

#### 【0124】

##### 電子移送層

電子移送層11は電子注入層13または陰極15(電子注入層13が無い時)から発光層9または発光物質添加済み領域に向かって電子を注入させる傾向がある物質を含む。前記物質が電子注入層13のための要求条件を満たせば、電子移送及び注入の両機能が図2に示すように単一層内で結合できる。

20

#### 【0125】

出来れば、高い電子移動度を有する化合物が電子移送物質として用いられるが、その理由は、高い電子移動度が、その化合物を使っている有機EL素子の駆動電圧を減少させるためである。高い電子移動度を有する化合物内に注入された電子は、低い電位差で動く傾向がある。都合のよいことに、約  $1 \times 10^{-7} \text{ cm}^2 / \text{Vs}$  以上の電子移動度を有する化合物は、電子移送のために使用できる。出来れば、電子移送層11には、正孔がその中へ移動することを抑制する機能を持たせる。低い正孔移動度を有する物質が好まれる。約  $1 \times 10^{-3} \text{ cm}^2 / \text{Vs}$  以下の正孔移動度を有する化合物が好まれる。キャリア移動度に対する一般的議論は Electron Mobility in Tris(8-hydroxy-quinoline)aluminum Thin Films Determined via Transient Electroluminescence From Single- and Multiple-Layer Organic Light-Emitting Diodes, J. Appl. Phys., Vol 89, 3712 (2001); Transient Electroluminescence Measurements on Organic Heterolayer Light Emitting Diodes, Synthetic Metals 111-112, 91 (2000); and Organic Electroluminescence of Silole-Incorporated Polysilane, Journal of Luminescence 87-89, 1174(2000), でき、前記文献は本願に参照として統合される。

30

40

#### 【0126】

本発明の有機EL素子の一つの形態によると、電子移送層11は一般式Iを満足する一つ以上の化合物で形成される。一般式Iで示されない化合物(一般式Iでない化合物)が一つ以上追加できる。有機EL素子の他の形態では、一般式Iの一つ以上の化合物が有機EL素子の一つ以上の他の層内で用いられ、その一方で、一般式Iでない一つ以上の化合物が電子移送層11を形成する。当業者であれば電子移送層11内で使用可能な一般式Iでない化合物及び適切な材料選択を理解する。

#### 【0127】

電子移送層11内で使用可能な一般式Iでない化合物には、例えば、8-ヒドロキシキノリンのアルミニウム錯体;  $\text{Alq}_3$  を含む有機金属錯体化合物(米国特許第5,061,56

50

9 及び米国特許出願第 09/540837); 有機ラジカル化合物 (米国特許第 5,811,833); ヒドロキシフラボン-金属錯体 (米国特許第 5,817,431 号及び第 5,516,577 号、日本未審査特許公報 2001-076879, 2001-123157 及び 1998-017860, 並びに Organic Light-emitting Diodes using 3- or 5-hydroxyflavone-metal Complexes, Appl. Phys. Lett. 71 (23), 3338 (1997).) を含み、前記引用文献は本願に参照として統合される。

#### 【0128】

##### 電子注入層

電子注入層 13 は、一般に、素子に印加された低い電界において陰極 15 から多数の電子を注入させる。電子注入層 13 は、陰極 15 の仕事関数が他の近隣層 5、7、9 または 11 の最低空軌道 (LUMO) と著しく異なる場合に備えられることがある。エネルギー準位の大差は電子注入に対する電位障壁として作用する。電子注入層は、この電位障壁を減少させて素子内の電子注入を促進させる。電子注入層 13 はまた、近隣層 5、7、9 または 11 内において発生した励起子が陰極層 15 に向かって移動することを防止するためにも付加されることがある。代案的にまたは付加的に、電子注入層 13 は、陰極層 15 の形成時に近隣層 5、7、9 または 11 の損傷を避けるために備えられる。電子注入物質の LUMO 準位は、都合のよいことに、陰極物質の仕事関数と他の近隣層 5、7、9 または 11 の LUMO 準位との間に位置し、出来れば、これらの中央近くに位置させる。都合のよいことに、電子注入のために用いる化合物の LUMO 準位は負電位で約 2.5 eV から約 4.0 eV の範囲にある。また、電子注入層 13 は、陰極層 15 との強く繋がることが要求される。

#### 【0129】

本発明の有機 EL 素子の一つの実施形態によると、電子注入層 13 は、一般式 I の一つ以上の化合物で形成できる。一般式 I でない一つ以上の化合物が添加できる。有機 EL 素子の他の形態では、一般式 I の一つ以上の化合物が有機 EL 素子の他の一つ以上の層内で用いられ、その一方で、一般式 I でない一つ以上の化合物が電子注入層 13 を形成する。当業者であれば電子注入層 13 内で使用可能な一般式 I でない化合物及びその適切な選択が分かる。

#### 【0130】

電子注入層 13 内で使用可能な一般式 I でない化合物には、例えば、8-ヒドロキシキノリンのアルミニウム錯体、Alq<sub>3</sub> を含む有機金属錯体化合物、有機ラジカル化合物 (米国特許第 5,811,833); 3-または 5-ヒドロキシフラボン-金属錯体 (Organic Light-emitting Diodes using 3- or 5-hydroxyflavone-metal Complexes, Appl. Phys. Lett. 71 (23), 3338 (1997)); 日本未審査特許公報 2001-076879, 2001-123157 及び 1998-017860 に開示された電子注入化合物; ポリ(p-フェニレンエチレン)、ポリ(トリフェニルジアミン)、及びスピロキノキサリン (Polymeric Light-Emitting Diodes Based on Poly(p-phenyleneethylene), Poly(triphenylidiamine), and Spiroquinoxaline, Adv. Funct. Mater. 11, 41, (2001)); the electron-injecting compounds disclosed in High-efficiency oligothiophene-based light-emitting diodes, Appl. Phys. Lett. 75, 439 (1999)) に開示された電子注入化合物; Modifiede Oligothiophenes with High Photo-and Electroluminescence Efficiencies, Adv. Mater. 11, 1375 (1999) に開示された電子注入化合物を含む。前記引用文献は本願に参照として統合される。

#### 【0131】

##### 素子の製作

本発明の有機 EL 素子の様々な層が形成出来るように用いる何らかの公知のフィルム形成技術には、物理蒸着 (PVD)、化学蒸着 (CVD)、スパインコーティング、インクジェットプリンティング、スクリーンプリンティング、ロールコーティングが含まれる。これらの技術は一般的に下記の出版物に記述されており、これは本願に参照として統合される: Applied Physics Letters, 73, 18, 1998, 2561-2563 Applied Physics Letters, 78, 24, 2001, 3905-3907. ]。

10

20

30

40

50

## 【0132】

都合のよいことに、一般式Iを満足する一つ以上の化合物を含む層はPVD、CVD、スピンコーティング、インクジェットプリンティングを利用して支持体上に形成できる。好ましくは、一般式Iの化合物を一つ以上含有する層はPVD、スピンコーティングまたはインクジェットプリンティング、より好ましくは、PVDを利用して製造される。スピンコーティングまたはインクジェットプリンティングは、一般式Iを満足し、一つ以上のC<sub>1</sub>-C<sub>20</sub>直鎖を有する化合物を一つ以上含む層の形成に、好んで用いられる。一般式Iでない化合物の層に関して、当業者であれば各化合物に適した技術を知っている。

## 【実施例】

## 【0133】

本発明の様々な側面と特徴は、一般式Iを満足する化合物群、それらの合成、この化合物群を含む有機EL素子及び素子の製作を含み、実施例を参照して更に議論される。下記の実施例は本発明の様々な側面及び特徴を示すためのものであるが、本発明の範囲を制限するものではない。

10

## 【0134】

## 合成例

## 実施例1:化合物101の合成

2,6-ジアミノアントラキノン(23.8g、100mmol)を48wt%の臭化水素水溶液に分散させた。亜硝酸ナトリウム(NaNO<sub>2</sub>, 14.1g、204mmol)を-20で前記混合物に徐々に加え、窒素ガスを放出させた。ガス放出が完了した後、48wt%の臭化水素水溶液(63mL)に溶解した臭化銅(CuBr, 29.5g、206mmol)溶液を、少量のエタノール(50mL)と共に、前記混合物に徐々に加えた。得られた混合物の温度を徐々に上昇させた後、混合物を徐々に還流させた。得た物を室温に冷却させて水で希釈した。混合物内の沈殿物を吸引ろ過し、水で洗浄して真空乾燥した。乾燥させた沈殿物をクロロホルムに溶解し、シリカゲルの短いカラムを通過した後、減圧下で濃縮させた。カラムクロマトグラフィによる精製とクロロホルムからの再結晶とで、化合物101(10.0g、27%)を収得した。この化合物の分析結果は: <sup>1</sup>H NMR(300MHz, CDCl<sub>3</sub>)、8.44(d, J=2.1Hz, 2H)、8.18(d, J=8.0Hz, 2H)、7.95(dd, J=2.1, 8.0Hz, 2H)。

20

## 【0135】

## 実施例2:化合物102の合成

2-プロモピフェニル(8.83mL、51.2mmol)を窒素雰囲気下の室温で乾燥テトラヒドロフラン(THF, 200mL)に溶解した。この溶液を冷却浴で零下78に冷却した。t-ブチルリチウム(60mL、1.7Mペンタン溶液)を零下78でこの溶液に徐々に加え、得られた混合物を同一温度で約40分間攪拌した。次に、化合物101(7.50g、20.5mmol)を同一温度でこの混合物に加えた。冷却浴を除去して、この混合物を室温で約15時間攪拌した。その後、この混合物にジエチルエーテル(200mL)と2N塩酸(200mL)を加えて反応を止め室温で約40分間攪拌した。沈殿物を吸引ろ過し、水とエチルエーテルで洗浄した。得られた物を乾燥して化合物102(11.8g、85%)を収得した。

30

40

## 【0136】

## 実施例3:化合物103の合成

化合物102(4.00g、5.93mmol)、ヨウ化カリウム(9.85g、59.3mmol)及び次亜リン酸ナトリウム水和物(10.4g、98.0mmol)の混合物を、酢酸(80mL)とオルト-ジクロロベンゼン(600mL)の混合液の中で還流した。得られた混合物を室温に冷却した。その後、この混合物をクロロホルムで抽出し、硫酸マグネシウム上で乾燥し、減圧下で濃縮した。濃縮された固体をクロロホルムに溶解し、短いシリカゲル・カラムを通過させて減圧下で濃縮させた。この固体をn-ヘキサンに分散させ、攪拌ろ過した後、真空乾燥して収得した化合物103(3.30g、87%)は淡黄色であった。この化合物の分析結果は次の通りである: m.p. 478.1; <sup>1</sup>H NMR(300MHz,

50

CDCl<sub>3</sub>) 7.92 (d, J = 7.6 Hz, 4H), 7.46 (t, J = 8.0 Hz, 4H), 7.33 (t, J = 7.4 Hz, 4H), 7.21 (d, J = 7.6 Hz, 4H), 6.88 (dd, J = 2.1, 8.6 Hz, 2H), 6.47 (d, J = 2.1 Hz, 2H), 6.22 (d, J = 8.6 Hz, 2H); MS (M+) 636; Anal. Calc'd. for C<sub>38</sub>H<sub>22</sub>Br<sub>2</sub>: C, 71.50; H, 3.47; Br, 25.03. Found: C, 71.90; H, 3.40; Br, 25.7.

**【0137】**

## 実施例4:化合物104の合成

臭化銅 (CuBr<sub>2</sub>, 17.9g, 80.0 mmol) 及び t-ブチル亜硝酸塩 (12 mL, 101 mmol) をアセトニトリル (250 mL) 内に65 で分散させ、分散混合物を攪拌した。この混合物に、2-アミノアントラキノン (15.0g, 67.2 mmol) を約5分間かけて徐々に滴下し、窒素ガスを放出させた。ガス放出完了後、この混合物を室温まで冷却し、20%塩酸 (1000 mL) を加えて反応を止め、ジクロロメタンで抽出した。有機抽出物を硫酸マグネシウムで乾燥し、減圧下で濃縮させた。カラムクロマトグラフィ (ジクロロメタン/n-ヘキサン=4/1) で精製して化合物104 (14.5g, 75%) を取得した。この化合物の分析結果は次の通りである: m.p. 207.5 ; <sup>1</sup>H NMR (500 MHz, CDCl<sub>3</sub>), 8.43 (d, J = 1.8 Hz, 1H), 8.30 (m, 2H), 8.17 (d, J = 8.3 Hz, 1H), 7.91 (dd, J = 1.8, 8.3 Hz, 1H), 7.82 (m, 2H); MS (M+) 286; Anal. Calc'd. for C<sub>14</sub>H<sub>7</sub>BrO<sub>2</sub>: C, 58.57; H, 2.46; Br, 27.83; O, 11.14. Found: C, 58.88; H, 2.39; Br, 27.80; O, 10.93.

10

**【0138】**

## 実施例5:化合物105の合成

2-ブロモビフェニル (9.0 mL, 5.2 mmol) を室温の窒素雰囲気下で乾燥テトラヒドロフラン (100 mL) に溶解させた。この溶液を冷却浴で零下78 に冷却させ、t-ブチルリチウム (40 mL, 1.7 Mペンタン溶液) を徐々に加えた。同一温度で1時間攪拌した後、この混合物に化合物104 (4.9g, 1.7 mmol) を加えた。冷却浴を除去し、この混合物を室温で約3時間攪拌した。この混合物に塩化アンモニウム水溶液を加えた後、これを塩化メチレンで抽出した。有機抽出物を硫酸マグネシウム上で乾燥して減圧下で濃縮させた。濃縮された固体をエタノールに分散させ、1時間攪拌して吸引ろ過した後、エタノールで洗浄した。乾燥後、化合物105 (9.50g, 94%) を取得した。

20

**【0139】**

## 実施例6:化合物106の合成

化合物105 (6.00g, 10.1 mmol) を窒素雰囲気下で300 mLの酢酸に分散させた。ヨウ化カリウム (16.8g, 101 mmol) 及び次亜リン酸ナトリウム水和物 (17.7g, 167 mmol) を加えた。得られた混合物を3時間沸騰させながら攪拌した。室温まで冷却した後、この混合物をろ過して水とメタノールで洗浄し、真空乾燥して取得した化合物106 (5.0g, 88%) は淡黄色であった。

30

**【0140】**

## 実施例7:化合物107の合成

化合物105 (9.5g, 16 mmol) を酢酸100 mLに分散させた。この分散液に濃硫酸5滴を加えた。この混合物を3時間還流した後、室温まで冷却した。沈殿物をろ過し、酢酸で洗浄してから、水とエタノールで順次洗浄した。乾燥後、この固体を昇華によって精製し、取得した化合物107 (8.0g, 89%) は白色の固状体であった。

40

**【0141】**

## 実施例8:化合物108の合成

化合物107 (10.0g, 17.9 mmol) を室温の窒素雰囲気下で、150 mLの乾燥THFに完全に溶解した。この溶液を冷却浴で零下78 に冷却し、t-ブチルリチウム (31.5 mL, 1.7 Mペンタン溶液) を徐々に加えた。この混合物を同一温度で1時間攪拌し、これにトリメチルボレート (8 mL, 71.5 mmol) を加えた。その後、冷却浴を除去し、得られた混合物を室温で3時間攪拌した。この混合物に2N塩酸溶液 (100 mL) を加えて反応を止め室温で1.5時間攪拌した。沈殿物をろ過し、水とジエチルエーテルで順次洗浄し

50

、真空で乾燥した。乾燥後、粗生成物をジエチルエーテルに分散させ、2時間攪拌して、ろ過、及び乾燥して収得した化合物108(7.6g、81%)は白色であった。

【0142】

実施例9:化合物109の合成

2-ブロモナフタレン(11.0g、53.1mmol)を室温の窒素雰囲気下で乾燥テトラヒドロフラン(100mL)に溶解した。この溶液を冷却浴で零下78に冷却し、t-ブチルリチウム(47.0mL、1.7ペンタン溶液)を徐々に加えた。この混合物を同一温度で約1時間攪拌し、化合物104(6.31g、22.0mmol)を同一温度で加えた。次に、冷却浴を除去し、この混合物を室温で約3時間攪拌した。攪拌された混合物に、塩化アンモニウム水溶液を加えた。得られた混合物を塩化メチレンで抽出した。前記有機抽出物を硫酸マグネシウム上で乾燥して減圧下で濃縮した。粗生成物をジエチルエーテルに溶解した後、石油エーテルを加えた。この混合物を数時間攪拌して固体化合物を収得した。この固体をろ過し真空乾燥して、ジナフチルジアルコール(11.2g、93%)を収得した。前記ジナフチルジアルコール(11.2g、20.5mmol)を窒素雰囲気下で600mLの酢酸に分散させ、これにヨウ化カリウム(34.2g、206mmol)及び次亜リン酸ナトリウム水和物(36.0g、340mmol)を加えた。得られた混合物を約3時間沸騰させながら攪拌した。室温まで冷却した後、この混合物をろ過して水とメタノールで洗浄し、真空乾燥して収得した化合物109(10.1g、96%)は淡黄色であった。

10

【0143】

実施例10:化合物110の合成

トルエン(100mL)と水(50mL)の混合物内の2-ブロモチオフェン(8.42g、51.6mmol)、フェニルホウ酸(9.44g、77.4mmol)及び炭酸ナトリウム(16.4g、155mmol)の懸濁液に、テトラキス(トリフェニルフォスフィン)パラジウム(1.80g、1.55mmol)を加えた。この混合物を還流しながら約24時間攪拌した。次に、混合物を室温まで冷却させ、1N塩酸(100mL)を加えた。この混合物から有機層を分離した。水溶液層をエチルアセテート(3?100mL)で抽出した。結合された有機抽出物を硫酸マグネシウム上で乾燥して真空で濃縮させた。カラムクロマトグラフィによって精製して化合物110(6.27g、76%)を白色固体で収得した。この化合物の分析結果は次の通りである:  $^1\text{H NMR}$  (300 MHz,  $\text{CDCl}_3$ ), 7.60 (m, 2H), 7.44-7.23 (m, 5H), 7.05 (m, 1H); MS (M+H) 161。

20

30

【0144】

実施例11:化合物111の合成

クロロホルム(80mL)と酢酸(80mL)の混合物内化合物110(5.00g、31.2mmol)の溶液に、N-ブロモコハク酸イミド(5.60g、31.2mmol)を0で加えた。次に、この混合物を60に加熱して同一温度で約1時間攪拌した。次いで、この混合物を室温に冷却して約24時間攪拌した。その後、この混合物に水酸化カリウム水溶液を加えてクロロホルムで抽出した。有機層を硫酸マグネシウム上で乾燥して真空内濃縮させた。エタノールから再結晶化して精製し、化合物4-11(3.66g、49%)を得た: $\text{C}_{50}\text{H}_{29}\text{Br}_2\text{N}$ に対するMS(M+)計算値238、実測値238。

【0145】

実施例12:化合物112の合成

乾燥THF(50mL)内化合物111溶液に、窒素雰囲気下の零下78でn-BuLi(2.5Mヘキサン溶液内8.4mL)を滴下した。混合物を約1時間攪拌した後、トリメチルボレート(2.40mL、20.9mmol)を零下78で滴下した。約30分後、冷却浴を除去し、混合物を室温で約3時間攪拌した。この混合物に1N HCl(100ml)を加えてエチルアセテートで抽出した。有機層を硫酸マグネシウム上で乾燥して真空濃縮させた。粗生成物を石油エーテル内スラリー化し、吸引ろ過して乾燥して化合物112(1.04g、48.8%)を収得した。

40

【0146】

実施例13:化合物113の合成

50

化合物 111 (1.00 g, 4.18 mmol) を窒素雰囲気下室温で乾燥テトラヒドロフラン (30 mL) に溶解した。この溶液を冷却浴内で零下 78 に冷却し、この溶液に t-ブチルリチウム (3.3 mL, 1.7 M ペンタン溶液) を同一温度で徐々に加えた。この混合物を同一温度で約 1 時間攪拌し、化合物 104 (0.4 g, 1.4 mmol) を加えた。零下 78 で 30 分間攪拌した後、冷却浴を除去して混合物を室温で約 3 時間追加的に攪拌した。この混合物を 1 N HCl (50 ml) を加えて、ジエチルエーテルで抽出した。有機層を硫酸マグネシウム上で乾燥して真空内濃縮させた。槽生成物を石油エーテル内でスラリー化し、吸引ろ過して乾燥し化合物 113 (0.70 g, 82%) を収得した。

【0147】

実施例 14: 化合物 114 の合成

化合物 113 (0.71 g, 1.15 mmol) を窒素雰囲気下で 15 mL の酢酸に分散させた。この分散液にヨウ化カリウム (1.91 g, 11.5 mmol) 及び次亜リン酸ナトリウム水和物 (2.02 g, 23.0 mmol) を加えた。結果混合物を約 3 時間沸騰させながら攪拌した。沸騰した混合物を室温まで冷却した。混合物をろ過して水とメタノールで洗浄した後、真空乾燥して化合物 114 (0.57 g, 86.9%) を収得した: MS (M+) 572。

【0148】

実施例 15: 化合物 115 の合成

9-プロモアントラセン (1.90 g, 7.35 mmol)、化合物 112 (1.80 g, 8.82 mmol) 及び炭酸ナトリウム (2.34 g, 22.1 mmol) をトルエン (20 mL)、エタノール (3 mL) 及び水 (10 mL) の混合物に懸濁させた。この懸濁液にテトラキス(トリフェニルフォスフィン)パラジウム (0.25 g, 0.22 mmol) を加えた。この混合物を約 24 時間還流させながら攪拌した後、還流させた混合物を室温に冷却した。有機層を分離して水で洗浄し、水溶液層をクロロホルムで抽出した。有機抽出物を硫酸マグネシウム上で乾燥して真空内濃縮させて化合物 115 (2.10 g, 84%) を収得した。

【0149】

実施例 16: 化合物 116 の合成

乾燥  $\text{CCl}_4$  (60 ml) 内化合物 4-15 (2.10 g, 6.24 mmol) 溶液に、臭素 (0.32 mL, 6.24 mmol) を 0 で滴下した。反応混合物を室温で約 3 時間攪拌した後、飽和重炭酸ナトリウム溶液を加えた。有機層を分離して、水性層をクロロホルムで抽出した。結合された有機抽出物を硫酸マグネシウム上で乾燥して真空内濃縮した。カラムクロマトグラフィ (1:4 THF-ヘキサン) によって精製してエタノールから再結晶して化合物 116 (0.92 g, 35%) を収得した。

【0150】

実施例 17: 化合物 117 の合成

5,5'-ジプロモ-2,2'-ボチオフェン (5.00 g, 15.4 mmol)、フェニルホウ酸 (2.07 g, 17.0 mmol) 及び炭酸ナトリウム (4.90 g, 46.3 mmol) をトルエン (30 mL) と水 (15 mL) の混合物内で懸濁させた。この懸濁液にテトラキス(トリフェニルフォスフィン)パラジウム (0.50 g, 0.46 mmol) を加えた。結果混合物を還流させながら約 24 時間攪拌した。還流された混合物を室温に冷却してクロロホルムで抽出した。有機抽出物を硫酸マグネシウム上で乾燥して真空内で濃縮した。カラムクロマトグラフィ (n-ヘキサン) によって精製して化合物 117 (2.80 g, 57%) を収得した。

【0151】

実施例 18: 化合物 118 の合成

乾燥 THF (100 ml) 内化合物 4-17 (6.71 g, 20.9 mmol) の溶液に、t-BuLi (ペンタン内 1.7 M 溶液 18.0 mL) を窒素下の零下 78 で滴下した。混合物を約 1 時間攪拌した後、トリメチルボレート (4.68 g, 41.8 mmol) を零下 78 で滴下した。30 分後、冷却浴を除去して混合物を室温で約 3 時間攪拌した。混合物に 1 N HCl を加えてジエチルエーテルを加えた。唾液節物を吸引ろ過しジエチルエーテルで洗浄して

10

20

30

40

50

、真空内乾燥して化合物 118 (5.33 g, 89%) を取得した。

【0152】

実施例 19: 化合物 119 の合成

5,5'-ジブプロモ-2,2'-ボチオフェン (5.00 g, 15.4 mmol)、ナフタレン-2-ホウ酸 (1.86 g, 10.8 mmol) 及び炭酸カリウム (30 mL, 2 M 水溶液) を THF (50 mL) に懸濁させた。この懸濁液にテトラキス(トリフェニルフォスフィン)パラジウム (0.18 g, 0.16 mmol) を加えた。混合物を約 24 時間還流させながら攪拌した後、室温に冷却した。沈殿物を吸引ろ過した。槽生成物を THF 内で溶解しろ過して、THF で洗浄した。ろ過物を真空内濃縮してエチルアセテートから再結晶化して化合物 119 (2.60 g, 45%) を取得した。

10

【0153】

実施例 20: 化合物 120 の合成

化合物 4-9 (5.00 g, 9.81 mmol)、ビス(ピナコラト)ジボロン (2.75 g, 10.9 mmol) 及び酢酸カリウム (2.89 g, 29.4 mmol) をジオキサン (50 mL) に懸濁させた。この懸濁液にパラジウム(ジフェニルホスフィノフェロセン)クロライド (0.24 g, 3 mol%) を加えた。混合物を約 6 時間 80 で攪拌し、室温に冷却した。この混合物を水 (50 mL) で希釈してジクロロメタン (3?50 mL) で抽出した。有機抽出物を硫酸マグネシウム上で乾燥して真空内濃縮した。槽生成物をエタノールで洗浄して真空内乾燥し、化合物 120 (5.46 g, 92%) を取得した。

20

【0154】

実施例 21: 化合物 121 の合成

冷却槽内の零下 78 で乾燥 THF (50 mL) 内 2,2'-ジブプロモチオフェン (2.70 g, 8.30 mmol) 溶液に、窒素下で t-BuLi (ペンタン内 1.5 M 溶液 6.0 mL) を滴下した。混合物を 1 時間攪拌した後、トリフェニルボラニルクロライド (2.35 g, 8.00 mmol) を零下 78 で滴下した。冷却浴を除去し、混合物を約 3 時間室温で攪拌した。この混合物に飽和 NaCl 水溶液 (50 mL) を加えて反応を止め室温で約 10 分間攪拌した。有機層を分離し、硫酸マグネシウム上で乾燥して真空内濃縮させた。カラムクロマトグラフィ (n-ヘキサン) によって精製して化合物 121 (2.30 g, 55%) を取得した。

【0155】

実施例 22: 化合物 122 の合成

2-クロロアントラキノン (3.00 g, 12.3 mmol) の THF (100 mL) 溶液に、チオフェン-2-ホウ酸 (2.00 g, 15.6 mmol)、2 M 炭酸カリウム溶液 (20 mL) 及びテトラキス(トリフェニルフォスフィン)パラジウム (0.14 g) を加えた。この混合物を還流させながら約 48 時間攪拌した後、室温に冷却した。沈殿物を吸引ろ過し、水とエタノールで洗浄して真空乾燥した。精製のためエチルアセテートから再結晶して、チオフェン-2-アントラキノン (1.70 g, 47%) を取得した。このチオフェン-2-アントラキノン (1.70 g, 5.85 mmol) をクロロホルム (30 mL) 及び酢酸 (5 mL) の混合物に溶解した。N-ブプロモこはく酸イミド (1.04 g, 5.85 mmol) をこのチオフェン-2-アントラキノン溶液に室温に加えた。反応混合物を室温で約 4 時間攪拌した後、沈殿物をろ過して水で洗浄し、真空乾燥して化合物 122 (1.80 g, 87%) を取得した。

30

40

【0156】

実施例 23: 化合物 123 の合成

化合物 122 (1.80 g, 4.87 mmol) の THF (100 mL) 溶液に 4-ホルミルフェニルホウ酸 (1.00 g, 6.91 mmol)、2 M 炭酸カリウム溶液 (30 mL)、及びテトラキス(トリフェニルフォスフィン)パラジウム (0.05 g, 0.04 mmol) を加えた。この混合物を還流させながら約 72 時間攪拌した後、室温に冷却した。沈殿物を吸引ろ過して水とエタノールで洗浄し、真空乾燥して 2-(2-アントラキノン)-5-(4-ホルミルフェニル)チオフェン (1.70 g, 4.31 mmol) を取得した。この 2-2(-アントラキノン)-5-(4-ホルミルフェニル)チオフェン (1.70 g, 4.31 mmol) を N-フ

50

エニル-1, 2-フェニレンジアミン(0.87g, 4.74 mmol)と、トルエン50 mL 及び酢酸5 mLの混合液内で、混合した。得られた混合物を約16時間還流させて室温に冷却した。形成された固体をろ過して酢酸で洗浄し、乾燥して化合物123の固体を取得した(0.75g, 32%)。

**【0157】**

## 実施例24:化合物4の合成

化合物106(1.00g, 1.796 mmol)、化合物112(0.55g, 2.67 mmol)、及び炭酸ナトリウム(0.57g, 5.34 mmol)をトルエン(20 mL)、エタノール(3 mL)及び水(10 mL)の混合物内で懸濁させた。この懸濁液にテトラキス(トリフェニルフォスフィン)パラジウム(0.06g, 0.05 mmol)を加えた。得られた混合物を還流させながら約48時間攪拌した後、室温に冷却した。有機層を分離し、水性層をクロロホルムで抽出した。結合された有機抽出物を硫酸マグネシウム上で乾燥して真空濃縮した。カラムクロマトグラフィ(クロロホルム/n-ヘキサン=1/5)で精製して取得したものが化合物4(0.50g, 44%): mp 113.17 ; <sup>1</sup>H NMR (300 MHz, CDCl<sub>3</sub>) 7.75 (s, 1H), 7.64-7.46 (m, 12H), 7.44-7.28 (m, 4H), 7.26-7.18 (m, 5H), 6.99 (t, 4H), 6.86 (d, 6H); MS [M+H] 641; Anal. Calcd for C<sub>48</sub>H<sub>32</sub>S: C, 89.96; H, 5.03; S, 5.00. Found: C, 90.82; H, 5.17; S, 4.8。

10

**【0158】**

## 実施例27:化合物12の合成

化合物109(1.00g, 1.96 mmol)、化合物118(0.84g, 2.94 mmol)、及び炭酸ナトリウム(0.62g, 5.88 mmol)をトルエン(50 mL)、エタノール(5 mL)及び水(25 mL)の混合物内で懸濁させた。この懸濁液にテトラキス(トリフェニルフォスフィン)パラジウム(0.05g, 0.05 mmol)を加えた。得られた混合物を還流させながら約48時間攪拌した後、室温に冷却した。有機層を分離して水性層をクロロホルムで抽出した。結合された有機抽出物を硫酸マグネシウム上で乾燥して真空濃縮した。カラムクロマトグラフィ(クロロホルム/n-ヘキサン=1/2)によって精製して取得したものが化合物12(0.83g, 63%): mp 304.49 ; MS [M+H] 671。

20

**【0159】**

## 実施例25:化合物14の合成

化合物106(0.85g, 1.51 mmol)、化合物118(0.65g, 2.27 mmol)、及び炭酸ナトリウム(0.48g, 5.53 mmol)をトルエン(40 mL)、エタノール5 mL)及び水(20 mL)の混合物内で懸濁させた。この懸濁液にテトラキス(トリフェニルフォスフィン)パラジウム(0.05g, 0.05 mmol)を加えた。得られた混合物を還流させながら約48時間攪拌した後、室温に冷却した。有機層を分離して水性層をクロロホルムで抽出した。結合された有機抽出物を硫酸マグネシウム上で乾燥して真空濃縮した。カラムクロマトグラフィ(クロロホルム/n-ヘキサン=1/4)で精製して取得したものが化合物14(0.70g, 64%): mp 117.86 ; MS [M+H] 723。

30

**【0160】**

## 実施例26:化合物19の合成

化合物103(1.00g, 1.80 mmol)、化合物118(1.23g, 4.31 mmol)及び炭酸ナトリウム(1.14g, 10.8 mmol)をトルエン(40 mL)、エタノール(5 mL)及び水(10 mL)の混合物内で懸濁させた。この懸濁液にテトラキス(トリフェニルフォスフィン)パラジウム(0.05g, 0.05 mmol)を加えた。得られた混合物を還流させながら約48時間攪拌した後、室温に冷却した。有機層を分離して水性層をクロロホルムで抽出した。結合された有機抽出物を硫酸マグネシウム上で乾燥して真空濃縮した。カラムクロマトグラフィ(クロロホルム/n-ヘキサン=1/2)で精製して取得したものが化合物19(0.18g, 10%): mp 326.07 ; MS [M+H] 963; Anal. Calcd for C<sub>66</sub>H<sub>42</sub>S<sub>4</sub>: C, 82.29; H, 4.39; S, 13.31. Found: C, 8

40

50

0.89; H, 4.39; S, 12.70。

【0161】

実施例29:化合物21の合成

化合物108 (1.34g, 2.56 mmol)、化合物116 (0.80g, 1.93 mmol)、リン酸カリウム (0.82g, 3.86 mmol) 及びテトラキス(トリフェニルフォスフィン)パラジウム (0.07g, 0.06 mmol) をDMF (25 mL) 内で混合した。この混合物を80 で約48時間攪拌した後、室温に冷却した。沈殿物を吸引ろ過して、水とメタノールで洗浄し、真空乾燥して得たものが化合物21 (1.10g, 53%) : mp 438.50 ; MS [M+H] 815。

【0162】

実施例28:化合物23の合成

化合物108 (0.45g, 0.86 mmol)、化合物114 (0.45g, 0.78 mmol)、リン酸カリウム (0.33g, 1.56 mmol) 及びテトラキス(トリフェニルフォスフィン)パラジウム (0.03g, 0.02 mmol) をDMF (10 mL) 内で混合した。この混合物を80 で約48時間攪拌した後、室温に冷却した。沈殿物を吸引ろ過して、水とメタノールで洗浄した後、真空乾燥して得たものが化合物23 (0.30g, 36%) : mp 396.70 ; MS [M+H] 973。

【0163】

実施例30:化合物25の合成

化合物120 (4.50g, 5.39 mmol)、化合物119 (2.00g, 5.39 mmol) 及び2N炭酸カリウム (20 mL) をトルエン (50 mL) 及びエタノール (20 mL) に懸濁させた。この懸濁液にテトラキス(トリフェニルフォスフィン)パラジウム (0.13g) を加えた。得られた混合物を還流させながら約15時間攪拌した後、室温に冷却した。沈殿物を吸引ろ過して水とエタノールで洗浄した後、真空乾燥して化合物25を収得した (3.38g)。

【0164】

実施例31:化合物27の合成

化合物121 (1.00g, 2.00 mmol)、化合物120 (1.10g, 2.00 mmol) 及び2M炭酸ナトリウム (2 mL) をTHF (25 mL) 内で懸濁させた。この懸濁液にテトラキス(トリフェニルフォスフィン)パラジウム (0.02g, 0.02 mmol) を加えた。得られた混合物を還流させながら約10時間攪拌した後、室温に冷却した。この混合物をTHFで抽出した。有機抽出物を硫酸マグネシウム上で乾燥して真空濃縮した。カラムクロマトグラフィ (クロロホルム/n-ヘキサン=1/5) で精製して化合物27を収得した (1.20g, 70%) : mp 156.4 ; MS [M+H] 853。

【0165】

実施例32:化合物29の合成

2-プロモナフタレン (0.83g, 4.03 mmol) を乾燥THF (40 mL) に窒素雰囲気下で溶解した。この溶液を冷却浴で零下78 に冷却し、t-ブチルリチウム (3.15 mL, 1.7Mペンタン溶液) を冷却された溶液に10分間かけて徐々に加えた。この混合物を零下78 で約40分間攪拌した。次に、それに化合物123 (0.75g, 1.75 mmol) を加え、得られた混合物を零下78 で更に約3時間攪拌した。その後、冷却浴を除去し、この混合物を室温で約1時間攪拌した。この混合物に水性塩化アンモニウム溶液 (50 mL) を加えて反応を止めた。有機層を分離し、水性層をジエチルエーテル (40 mL) で抽出した。結合した有機抽出物を硫酸マグネシウム上で乾燥して減圧濃縮した。得られた固体をジエチルエーテル中に懸濁させ、1時間攪拌して吸引ろ過した。乾燥後、ジアルコール化合物 (0.80g, 73%) を収得した。

【0166】

このジアルコール化合物 (0.80g, 0.98 mmol) を酢酸 (100 mL) に窒素雰囲気下で分散させた。ヨウ化カリウム (1.66g, 10 mmol) 及び次亜リン酸ナトリウム水和物 (1.76g, 20 mmol) をこの分散液に加えた。この混合物を継続して攪拌しな

がら約3時間沸騰させた後、室温に冷却した。この混合物をろ過して水で洗浄し、真空乾燥して化合物29を取得した(0.80g)。

【0167】

実施例33:化合物12を用いる発光層を有する有機EL素子

約1500 のITO(インジウム錫酸化物)で覆ったガラス基板を、超音波槽に洗浄液を満たした中で洗浄した。約30分間超音波洗浄の後、基板を蒸留水で約10分間づつ2回洗浄して基板の残留洗浄剤を除去した。基板を、超音波槽内でイソプロピルアルコール、アセトン及びメタノールの順で追加洗浄した。大気中で乾燥の後、基板を熱真空蒸発器と連結されたプラズマ洗浄室内に移動させた。基板は、更に、酸素プラズマ条件内で約5分間洗浄し、洗浄室をターボ-分子ポンプで排気して熱真空蒸発器に移動できるようにした。

10

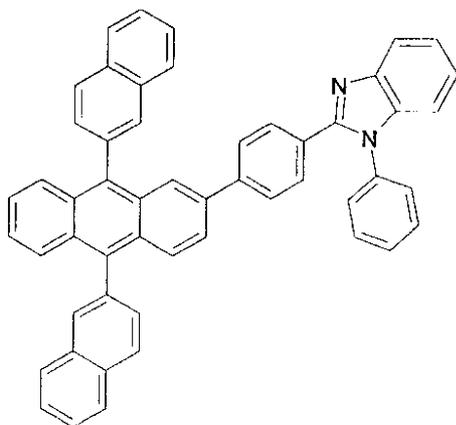
【0168】

前記ITOフィルム上に陽極として、約500 のヘキサニトリルヘキサアザトリフェニレンを約 $5 \times 10^{-7}$  torrで熱真空蒸発によって正孔注入物質として付着させた。約600 のNPBを正孔移送物質として前記正孔注入層上に蒸着した後、約200 厚の化合物12を発光物質として付着させた。発光層の最上部に、約300 の化合物301(2-[4-[(N-フェニルベンズイミダゾール-2-イル)フェニル-9,10-ビス(2-ナフチル)アントラセン]を電子移送、及び/または、電子注入層として形成した。次に、約5 厚さのフッ化リチウム及び約2500 厚さのアルミニウムを前記電子移送/注入層上に付着させてLiF/Al二層陰極を形成した。有機物質の付着速度は約1A/秒、フッ化リチウムに対しては約0.2A/秒、アルミニウムに対しては約3~7A/秒に維持した。

20

【0169】

【化10】



30

【化合物301】

【0170】

3.3Vの順バイアスを素子に印加した時、約 $10 \text{ mA/cm}^2$ の電流密度で、 $358 \text{ nit}$ の緑色発光(1931CIEカラー座標で $x=0.30$ ,  $y=0.56$ に相当)が観察された。 $50 \text{ mA/cm}^2$ のDC定電流密度で、54.6時間後に、輝度が初期輝度の90%レベルに低下した。

40

【0171】

実施例34:化合物21を用いる発光層を有する有機EL素子

有機発光ダイオードを製作したが、その方式は実施例33で述べたのと同様で、相違点は、化合物21と $\text{Alq}_3$ を各々発光物質と電子移送/注入物質として使い、化合物12と化合物301を使用しなかったことである。5.66Vの順バイアスを得られた素子に印加した時、 $10 \text{ mA/cm}^2$ の電流密度で、 $151 \text{ nit}$ の緑色発光(1931CIEカラー座標の $x=0.20$ ,  $y=0.44$ に相当)が観察された。 $50 \text{ mA/cm}^2$ のDC定電流密度で、11.9

50

時間後に、輝度が初期輝度の90%レベルに低下した。

【0172】

実施例35:化合物19を用いる発光層を有する有機EL素子

有機発光ダイオードを製作したが、その方式は実施例34で述べたのと同様で、相違点は、化合物19を発光物質として用い、化合物21は使用しなかったことである。3.74Vの順バイアスを素子に印加した時、10 mA/cm<sup>2</sup>の電流密度で、404 nitの緑色発光(1931 CIEカラー座標のx=0.39, y=0.57に相当)が観察された。50 mA/cm<sup>2</sup>のDC定電流密度で、19.8時間後に、輝度が初期レベルの90%に低下した。

【0173】

実施例36:化合物14を用いる発光層を有する有機EL素子

有機発光ダイオードを製作したが、その方式は実施例34で述べたのと同様で、相違点は、化合物14を発光物質として用い、化合物21は使用しなかったことである。4.06Vの順バイアスを素子に印加した時、10 mA/cm<sup>2</sup>の電流密度で、486 nitの緑色発光、1931 CIEカラー座標のx=0.28, y=0.58に相当、が観察された。50 mA/cm<sup>2</sup>のDC定電流密度で、10.6時間後に、輝度が初期レベルの90%に低下した。

【0174】

実施例37:化合物12及びDCJTBを用いる発光層を有する有機EL素子

有機発光ダイオードを製作したが、その方式は実施例33で述べたのと同様で、相違点は、DCJTB(2 wt%)を化合物12と一緒に付着させ、化合物12がホストとして作用し、DCJTBがドープントを供給することである。3.26Vの順バイアスを素子に印加した時、10 mA/cm<sup>2</sup>の電流密度で、404 nitの赤色発光、1931 CIEカラー座標のx=0.59, y=0.40に相当、が観察された。50 mA/cm<sup>2</sup>のDC定電流密度で、132.5時間後に、輝度が初期レベルの90%に低下した。

【0175】

実施例38:Alq<sub>3</sub>を用いる発光層を有する有機EL素子

有機発光ダイオードを製作したが、その方式は実施例33で述べたのと同様で、相違点は、500 のAlq<sub>3</sub>を付着させて、化合物12の発光層及び化合物301の電子移送/注入層の両層の代わりにしたことである。5.20Vの順バイアスを素子に印加した時、10 mA/cm<sup>2</sup>の電流密度で、326 nitの緑色発光(1931 CIEカラー座標のx=0.33, y=0.53に相当)が観察された。50 mA/cm<sup>2</sup>のDC定電流密度で、1時間後に、輝度が初期レベルの90%に低下した。

【図面の簡単な説明】

【0176】

【図1】本発明による有機EL素子の様々な例証的な構造の概略断面図である。

【図2】本発明による有機EL素子の様々な例証的な構造の概略断面図である。

【図3】本発明による有機EL素子の様々な例証的な構造の概略断面図である。

【図4】本発明による有機EL素子の様々な例証的な構造の概略断面図である。

【図5】本発明による有機EL素子の様々な例証的な構造の概略断面図である。

【図6】本発明による有機EL素子の様々な例証的な構造の概略断面図である。

【図7】実施例33~38の有機EL素子の10%初期輝度低下時間を例示する。

10

20

30

40

【 図 1 】

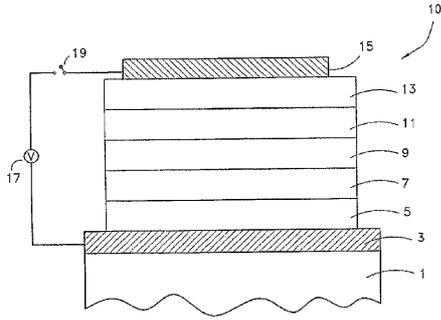


FIG. 1

【 図 2 】

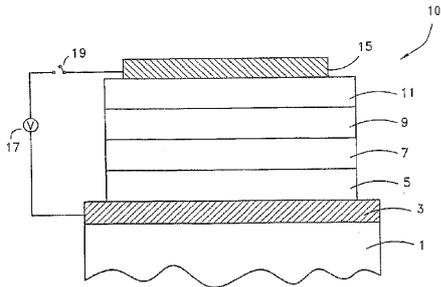


FIG. 2

【 図 5 】

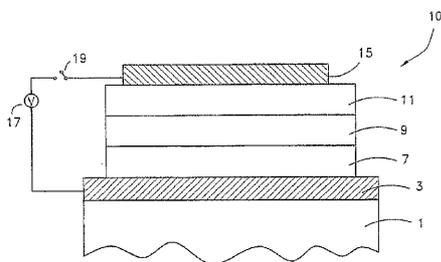


FIG. 5

【 図 6 】

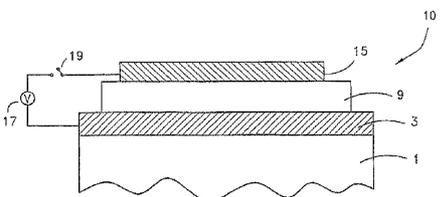


FIG. 6

【 図 3 】

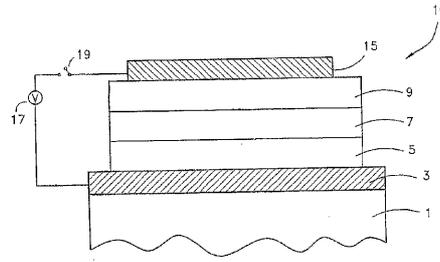


FIG. 3

【 図 4 】

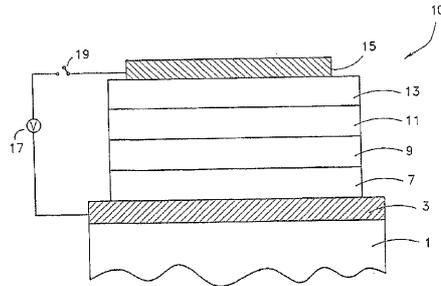


FIG. 4

【 図 7 】

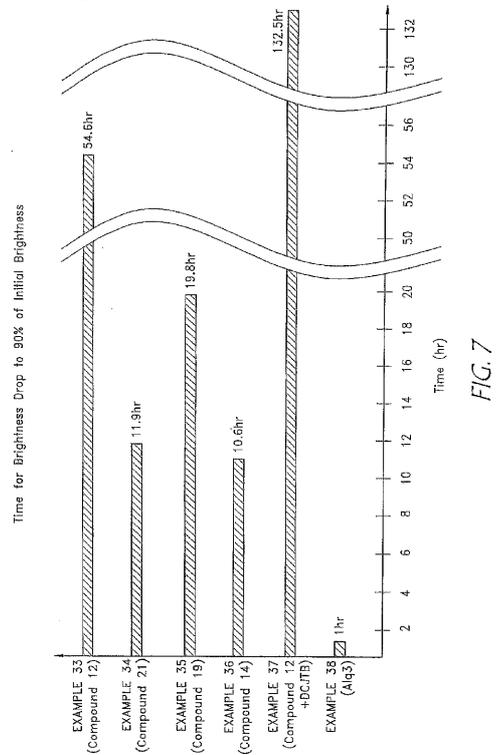


FIG. 7

【手続補正書】

【提出日】平成16年10月4日(2004.10.4)

【手続補正1】

【補正対象書類名】明細書

【補正対象項目名】特許請求の範囲

【補正方法】変更

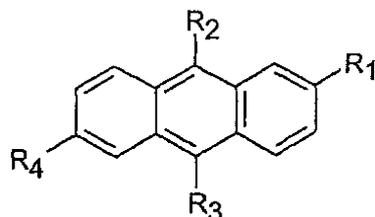
【補正の内容】

【特許請求の範囲】

【請求項1】

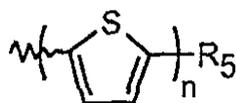
一般式I:

【化1】



[ここで、 $R_1$  乃至  $R_4$  のうちの少なくとも一つは一般式II:

【化2】



(ここで、

$n$ は1乃至10の整数であり、式中 $R_5$  と一般式IIでない $R_1$  - $R_4$  の各々は同一であるか異なる置換基であって、下記:

水素;ハロ;ヒドロキシル;メルカプト;シアノ;ニトロ;カルボニル;カルボキシル;ホルミル;置換または非置換 $C_1$  - $C_{20}$  アルキル;置換または非置換 $C_2$  - $C_{10}$  アルケニル;置換または非置換 $C_2$  - $C_7$  アルキニル;置換または非置換アリール;置換または非置換ヘテロアリール;環内炭素原子が酸素、窒素または硫黄原子によって任意に代替できる置換または非置換 $C_3$  - $C_7$  シクロアルキル;環内炭素原子が酸素、窒素または硫黄原子によって任意に代替できる置換または非置換 $C_4$  - $C_7$  シクロアルケニル;置換または非置換 $C_1$  - $C_{20}$  アルコキシ;置換または非置換 $C_2$  - $C_{10}$  アルケニルオキシ;置換または非置換 $C_2$  - $C_7$  アルキニルオキシ;置換または非置換アリールオキシ;置換または非置換 $C_1$  - $C_{20}$  アルキルアミン;置換または非置換 $C_2$  - $C_{10}$  アルケニルアミン;置換または非置換 $C_2$  - $C_7$  アルキニルアミン;置換または非置換アリールアミン;置換または非置換アルキルアリールアミン;置換または非置換 $C_1$  - $C_{20}$  アルキルシリル;置換または非置換 $C_2$  - $C_{10}$  アルケニルシリル;置換または非置換 $C_2$  - $C_7$  アルキニルシリル;置換または非置換アリールシリル;置換または非置換アルキルアリールシリル;置換または非置換 $C_1$  - $C_{20}$  アルキルボラニル;置換または非置換 $C_2$  - $C_{10}$  アルケニルボラニル;置換または非置換 $C_2$  - $C_7$  アルキニルボラニル;置換または非置換アリールボラニル;置換または非置換アルキルアリールボラニル;置換または非置換 $C_1$  - $C_{20}$  アルキルチオ;置換または非置換 $C_2$  - $C_{10}$  アルケニルチオ;置換または非置換 $C_2$  - $C_7$  アルキニルチオ;及び置換または非置換アリールチオの各基から成る群より選択される)で示される]の化合物。

【請求項2】

$R_5$  及び一般式IIではない $R_1$  - $R_4$  各々が下記:

ハロ、ヒドロキシル、メルカプト、シアノ、ニトロ、アミノ、カルボニル、カルボキシル、ホルミル、 $C_1$  - $C_{20}$  アルキル、 $C_2$  - $C_{10}$  アルケニル、 $C_2$  - $C_7$  アルキニル、アリール、ヘテロアリール、 $C_3$  - $C_7$  シクロアルキル、3-7員複素環式飽和または不飽和環、ア

クリル、 $C_1 - C_{20}$  アルコキシ、 $C_2 - C_{10}$  アルケニルオキシ、 $C_2 - C_7$  アルキニルオキシ、 $C_1 - C_{20}$  アルキルアミン、 $C_2 - C_{10}$  アルケニルアミン、 $C_2 - C_7$  アルキニルアミン、アリールアミン、アルキルアリールアミン、 $C_1 - C_{20}$  アルキルシリル、 $C_2 - C_{10}$  アルケニルシリル、 $C_2 - C_7$  アルキニルシリル、アルコキシシリル、アリールシリル、アルキルアリールシリル、 $C_1 - C_{20}$  アルキルボラニル、 $C_2 - C_{10}$  アルケニルボラニル、 $C_2 - C_7$  アルキニルボラニル、アリールボラニル、アルキルアリールボラニル、 $C_1 - C_{20}$  アルキルチオ、 $C_2 - C_{10}$  アルケニルチオ、 $C_2 - C_7$  アルキニルチオ及びアリールチオの各基で構成される群より選択される同一または異なる置換基でモノ-またはポリ-置換された請求項 1 に記載の化合物。

【請求項 3】

前記  $C_3 - C_7$  シクロアルキル及び  $C_4 - C_7$  シクロアルケニル基が 5、6 員環化合物の置換または非置換、飽和または不飽和複素環であることを特徴とする、請求項 1 に記載の化合物。

【請求項 4】

$R_5$  及び一般式 II ではない  $R_1 - R_4$  各々が下記：

メチル、エチル、プロピル、ブチル、イソプロピル、*n*-ブチル、*t*-ブチル、イソブチル、*n*-ペンチル、ネオ-ペンチル、*n*-ヘキシル、エテニル、プロペニル、ブテニル、ペンテニル、ヘキセニル、2-メチル-エテニル、2-メチル-プロペニル、2-メチル-ブテニル、2-メチル-ペンテニル、2-メチル-ヘキセニル、イミダゾリル、チアゾリル、オキサゾリル、チオフェニル、ピリジル、ピリミジル、ピロリル、2-メチルイミダゾリル、2-メチルチアゾリル、2-メチルオキサゾリル、2-メチルチオフェニル、2-メチルピリジル、2-メチルピリミジル、2-メチルピロリル、フェニル、ナフチル、アントラセニル、ビフェニル、テルフェニル、二重スピロ、テトラセニル、3-メチル-フェニル、4-メチル-ナフチル、9-メチル-アントラセニル、4-メチル-テトラセニル、2-メチル-イミダゾリル、2-メチル-オキサゾリル、2-メチル-チアゾリル、2-メチル-フラニル、2-メチル-チオフェニル、2-メチル-ピラゾリル、2-メチル-ピリジル、2-メチル-ピリミジニル、メトキシ、エトキシ、プロポキシ、ブトキシ、ペントキシ、ヘソキシ、イソプロポキシ、イソブトキシ、*t*-ブトキシ、ネオ-ペントキシ、フェノキシ、ナフトキシ、ピフェノキシ、3-メチル-フェノキシ、4-メチル-ナフトキシ、2-メチル-ピフェノキシ、メチルアミン、エチルアミン、プロピルアミン、ブチルアミン、ペンチルアミン、ヘキシルアミン、ヘプチルアミン、イソプロピルアミン、イソブチルアミン、*t*-ブチルアミン、2-ペンチルアミン、ネオ-ペンチルアミン、フェニルアミン、ナフチルアミン、ビフェニルアミン、アントラセニルアミン、3-メチル-フェニルアミン、4-メチル-ナフチルアミン、2-メチル-ビフェニルアミン、9-メチル-アントラセニルアミン、フェニルメチルアミン、フェニルエチルアミン、ナフチルメチルアミン、ナフチルエチルアミン、ビフェニルメチルアミン、3-メチル-フェニルメチルアミン、フェニルイソプロピルアミン、ナフチルイソプロピルアミン、ナフチルイソブチルアミン、ビフェニルイソプロピルアミン、トリメチルシリル、トリエチルシリル、トリブチルシリル、トリ(イソプロピル)シリル、トリ(イソブチル)シリル、トリ(*t*-ブチル)シリル、トリ(2-ブチル)シリル、トリフェニルシリル、トリナフチルシリル、トリビフェニルシリル、トリ(3-メチルフェニル)シリル、トリ(4-メチルナフチル)シリル、トリ(2-メチルビフェニル)シリル、フェニルメチルシリル、フェニルエチルシリル、ナフチルメチルシリル、ナフチルエチルシリル、ビフェニルメチルシリル、3-メチル-フェニルメチルシリル、フェニルイソプロピルシリル、ナフチルイソプロピルシリル、ナフチルイソブチルシリル、ビフェニルイソプロピルシリル、ジメチルボラニル、ジエチルボラニル、ジプロピルアミン、ジブチルアミン、ジペンチルアミン、ジイソプロピルボラニル、ジイソブチルボラニル、ジ(*t*-ブチル)ボラニル、イソプロピルイソブチルアミン、ジフェニルボラニル、ジナフチルボラニル、ジビフェニルボラニル、ジ(3-メチルフェニル)ボラニル、ジ(4-メチルナフチル)ボラニル、ジ(2-メチルビフェニル)ボラニル、フェニルメチルボラニル、フェニルエチルボラニル、ナフチルメチルボラニル、ナフチルエチルボラニル、ビフェニルメチルボラニル、3

-メチル-フェニルメチルボラニル、フェニルイソプロピルボラニル、ナフチルイソプロピルボラニル、ナフチルイソブチルボラニル、ビフェニルイソプロピルボラニル、メチルチオ、エチルチオ、プロピルチオ、ブチルチオ、ペンチルチオ、ヘキシルチオ、トリ(イソプロピル)チオ、トリ(イソブチル)チオ、トリ(t-ブチル)チオ、トリ(2-ブチル)チオ、フェニルチオ、ナフチルチオ、ビフェニルチオ、(3-メチルフェニル)チオ、(4-メチルナフチル)チオ及び(2-メチルビフェニル)チオの各基から成る群より選択される請求項1に記載の化合物。

【請求項5】

R<sub>5</sub> 及び一般式IIではないR<sub>1</sub>-R<sub>4</sub> 各々が、選択肢を構成する置換または非置換フェニル、置換または非置換ナフチル、置換または非置換ビフェニル、置換または非置換テルフェニル、置換または非置換アントラセニル及び置換または非置換二重スピロの各基から選択されることを特徴とする、請求項1に記載の化合物。

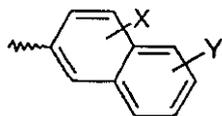
【請求項6】

前記置換されたフェニル、ナフチル、ビフェニル、テルフェニル、アントラセニル及び二重スピロの各基が、選択肢を構成するシアノ、ニトロ、ホルミル、置換または非置換C<sub>1</sub>-C<sub>20</sub> アルキル、アリアルヘテロアリアル、C<sub>4</sub>-C<sub>7</sub> シクロアルケニル、置換または非置換C<sub>1</sub>-C<sub>20</sub> アルコキシ、アリアルオキシ、C<sub>1</sub>-C<sub>20</sub> アルキルアミン、アリアルアミン、アルキルアリアルアミン、C<sub>1</sub>-C<sub>20</sub> シリル、アリアルシリル、及びアルキルアリアルシリル、C<sub>1</sub>-C<sub>20</sub> アルキルボラニル、アリアルボラニル、アルキルアリアルボラニル、C<sub>1</sub>-C<sub>20</sub> アルキルチオ及びアリアルチオから選択される一つ以上で置換されることを特徴とする、請求項5に記載の化合物。

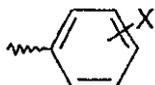
【請求項7】

R<sub>1</sub>-R<sub>4</sub> のうちの少なくとも一つが一般式IIで表され、残りのR<sub>1</sub>-R<sub>4</sub> は、選択肢を構成する下記一般式1-1乃至1-14:

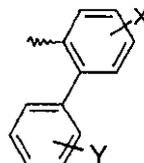
【化3A】



一般式 1-1

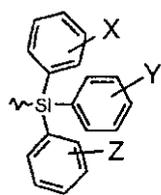


一般式 1-2

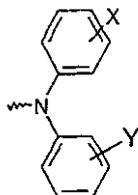


一般式 1-3

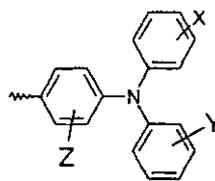
【化3B】



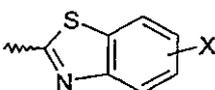
一般式 1-4



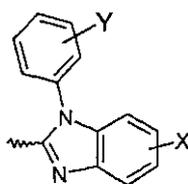
一般式 1-5



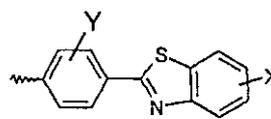
一般式 1-6



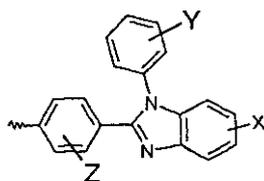
一般式 1-7



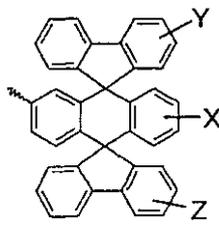
一般式 1-8



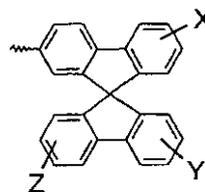
一般式 1-9



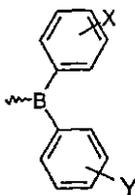
一般式 1-10



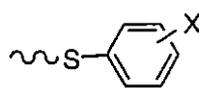
一般式 1-11



一般式 1-12



一般式 1-13



一般式 1-14

[ここで、X、Y及びZは同一または異なる置換基であり、

X、YまたはZが付着した各環形態はX、YまたはZのような二つ以上の同一または異なる置換基で置換できる]

から選択されることを特徴とする、請求項1に記載の化合物。

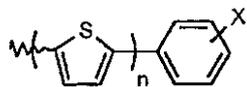
【請求項8】

前記X、Y及びZが、選択肢を構成するシアノ、ニトロ、ホルミル、置換または非置換 $C_1 - C_{20}$ アルキル、アリールヘテロアリール、 $C_4 - C_7$ シクロアルケニル、置換または非置換 $C_1 - C_{20}$ アルコキシ、アリールオキシ、 $C_1 - C_{20}$ アルキルアミン、アリールアミン、アルキルアリールアミン、 $C_1 - C_{20}$ シリル、アリールシリル、及びアルキルアリールシリル、 $C_1 - C_{20}$ アルキルボラニル、アリールボラニル、アルキルアリールボラニル、 $C_1 - C_{20}$ アルキルチオ及びアリールチオから選択されることを特徴とする、請求項7に記載の化合物。

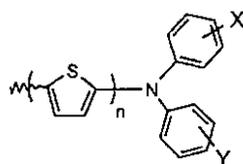
【請求項9】

前記一般式IIが、選択肢を構成する下記一般式2-1乃至2-5:

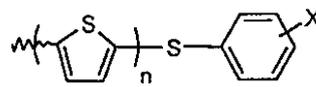
【化4】



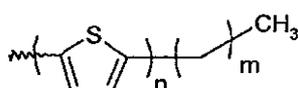
一般式 2-1



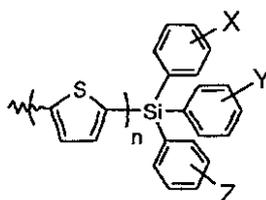
一般式 2-2



一般式 2-3



一般式 2-4



一般式 2-5

[ここで、nは1乃至4の整数であり；

mは0乃至20の整数であり；

X、Y及びZは同一または異なる置換基であり；更に

X、YまたはZが付着した各々の環形態はX、YまたはZのような一つ以上の同一または異なる置換基で置換できる]

から選択されることを特徴とする、請求項1に記載の化合物。

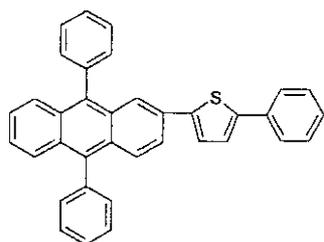
【請求項10】

X、Y及びZがシアノ、ニトロ、ホルミル、置換または非置換C<sub>1</sub>-C<sub>20</sub>アルキル、アリール、ヘテロアリール、C<sub>4</sub>-C<sub>7</sub>シクロアルケニル、置換または非置換C<sub>1</sub>-C<sub>20</sub>アルコキシ、アリールオキシ、C<sub>1</sub>-C<sub>20</sub>アルキルアミン、アリールアミン、アルキルアリールアミン、C<sub>1</sub>-C<sub>20</sub>シリル、アリールシリル、及びアルキルアリールシリル、C<sub>1</sub>-C<sub>20</sub>アルキルボラニル、アリールボラニル、アルキルアリールボラニル、C<sub>1</sub>-C<sub>20</sub>アルキルチオ及びアリールチオで構成される群より選択されることを特徴とする、請求項9に記載の化合物。

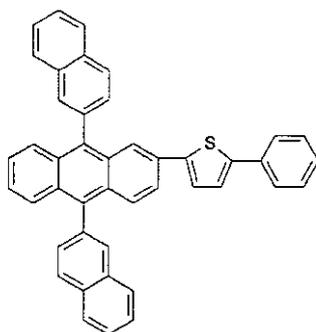
【請求項11】

前記化合物が、選択肢を構成する下記一般式1乃至96：

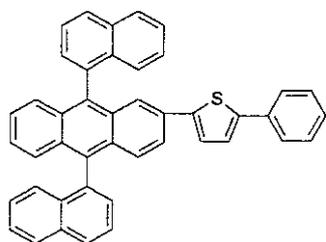
【化5A】



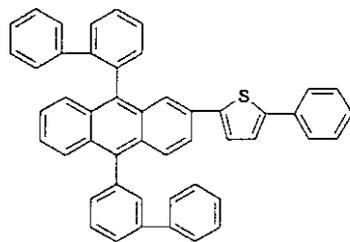
化合物 1



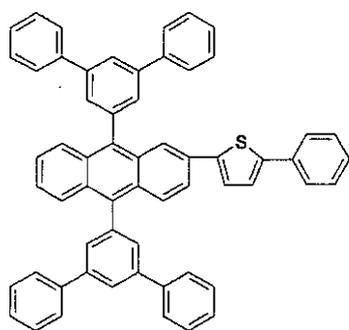
化合物 2



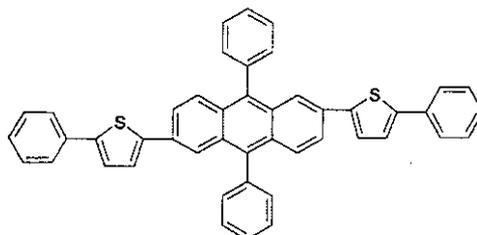
化合物 3



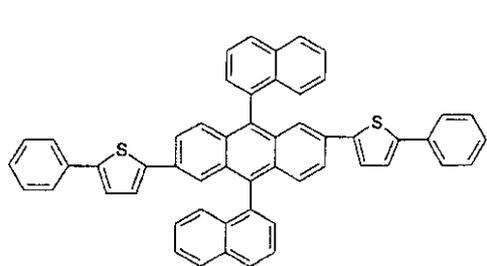
化合物 4



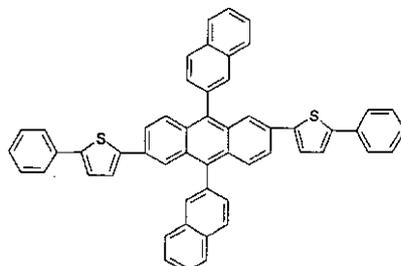
化合物 5



化合物 6

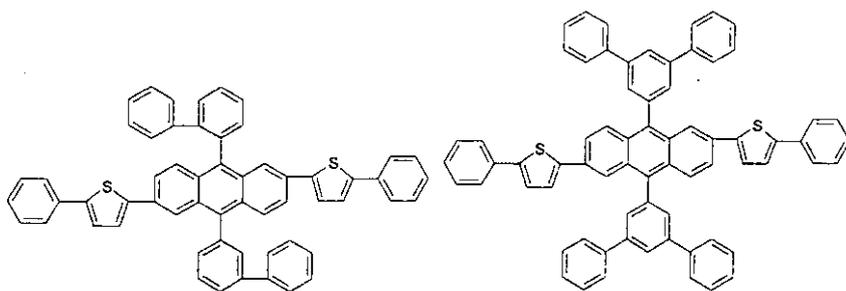


化合物 7



化合物 8

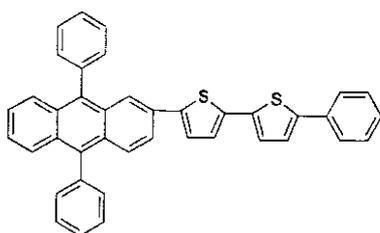
【化 5 B】



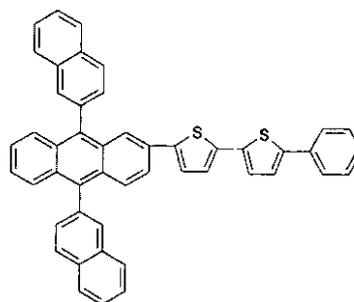
化合物 9

化合物 10

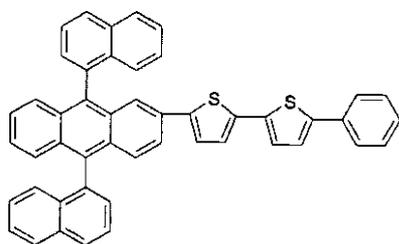
## 【化 5 C】



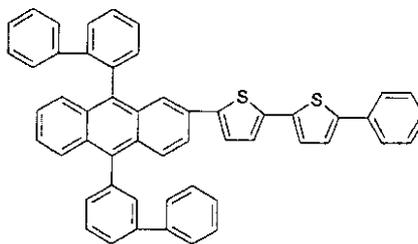
化合物 11



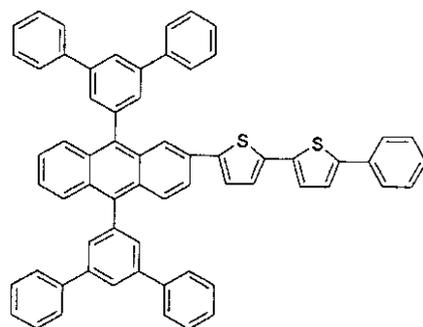
化合物 12



化合物 13

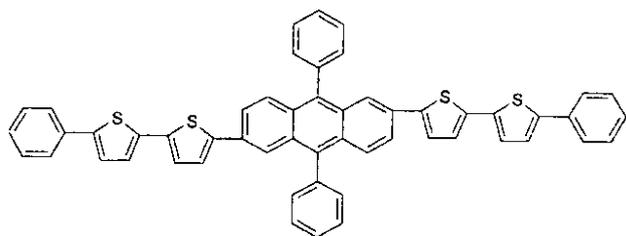


化合物 14

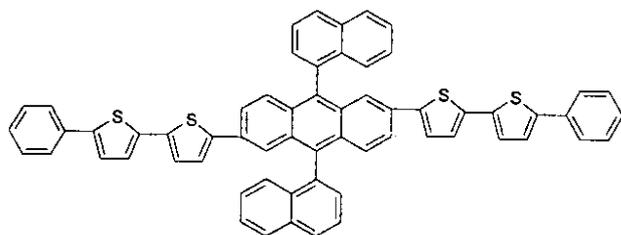


化合物 15

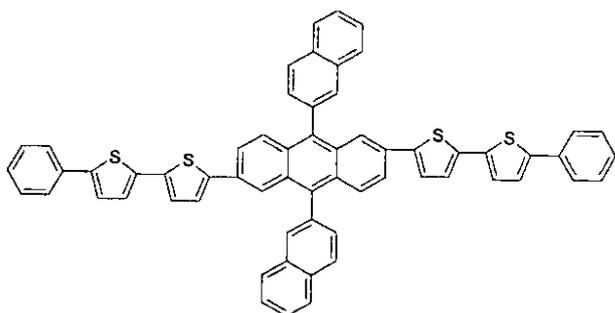
## 【化 5 D】



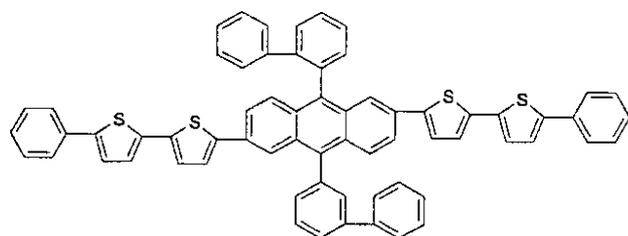
化合物 1 6



化合物 1 7

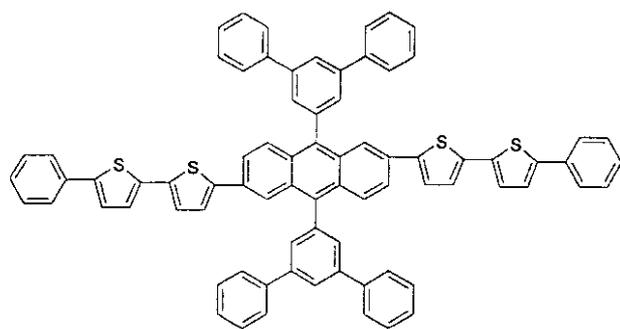


化合物 1 8

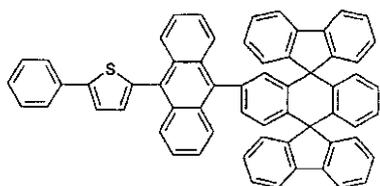


化合物 1 9

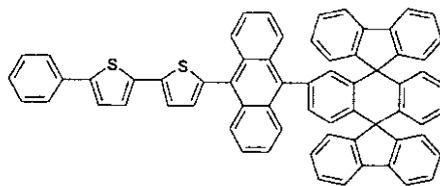
【化 5 E】



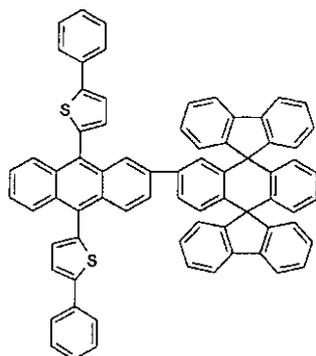
化合物 2 0



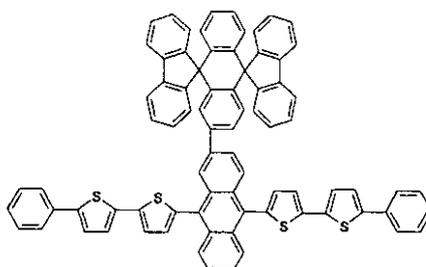
化合物 2 1



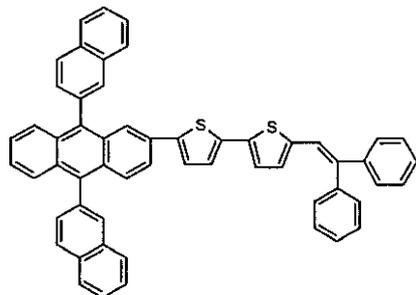
化合物 2 2



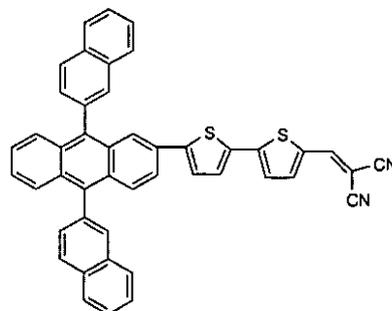
化合物 2 3



化合物 2 4

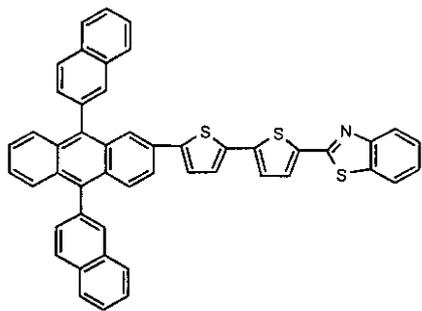


化合物 2 5

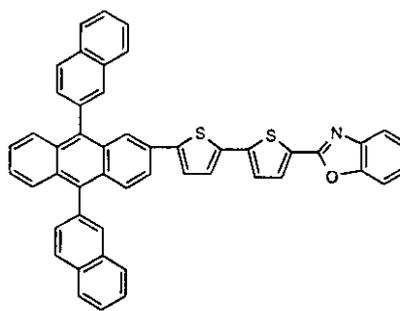


化合物 2 6

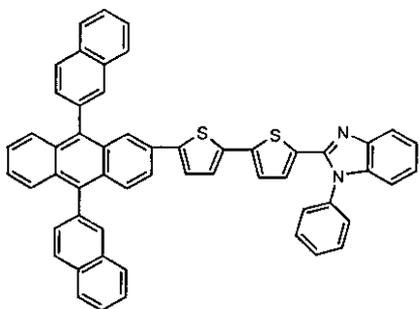
【化 5 F】



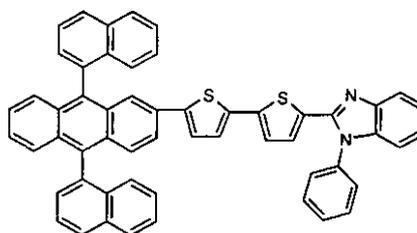
化合物 27



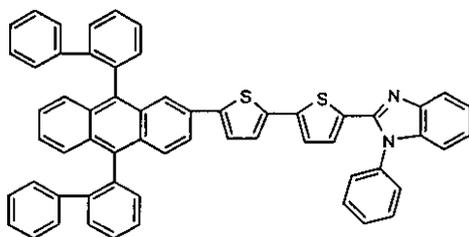
化合物 28



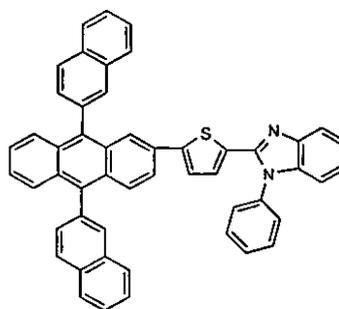
化合物 29



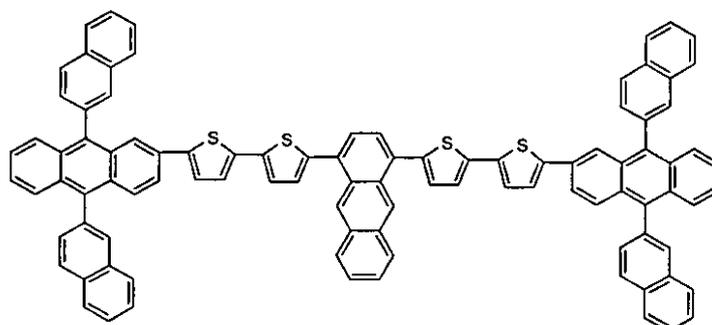
化合物 30



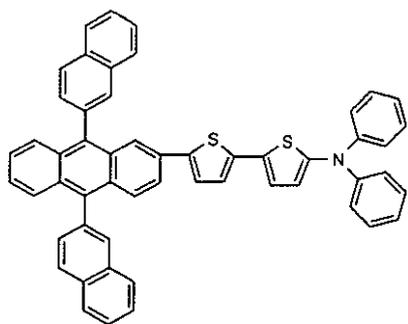
化合物 31



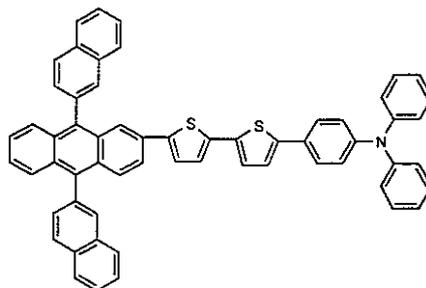
化合物 32



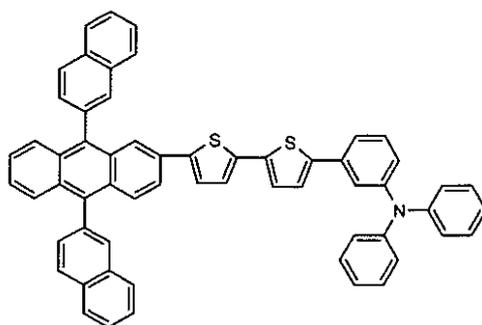
化合物 33



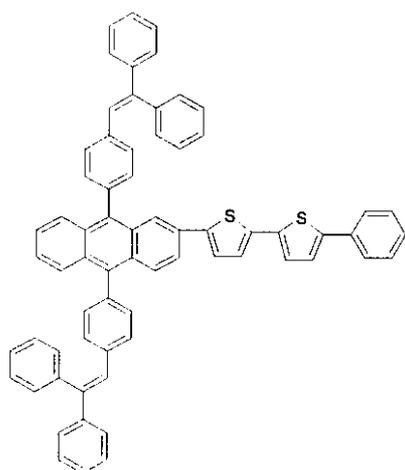
化合物 3 4



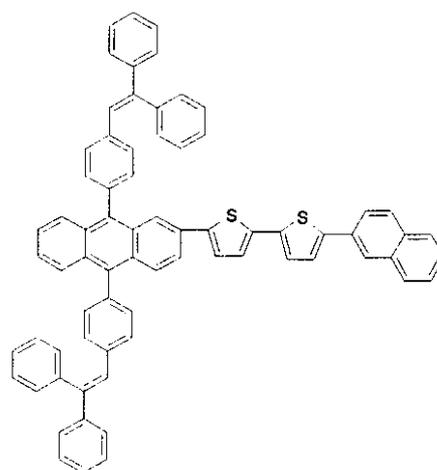
化合物 3 5



化合物 3 6

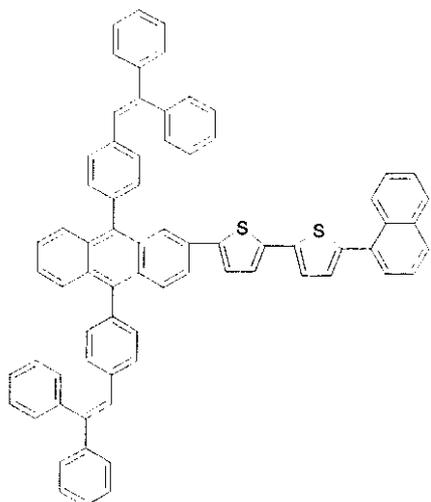


化合物 3 7

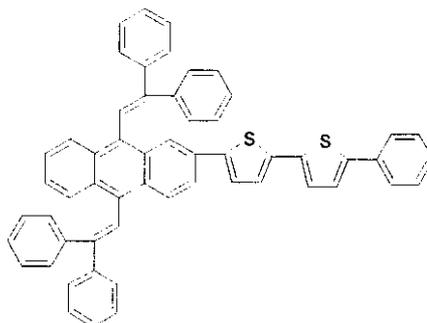


化合物 3 8

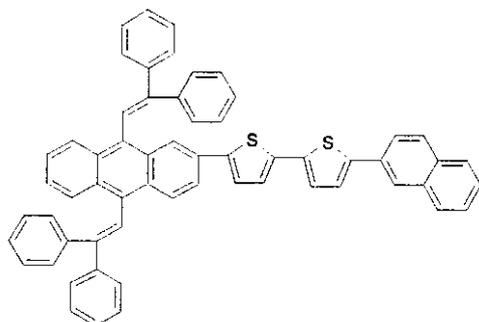
【化 5 H】



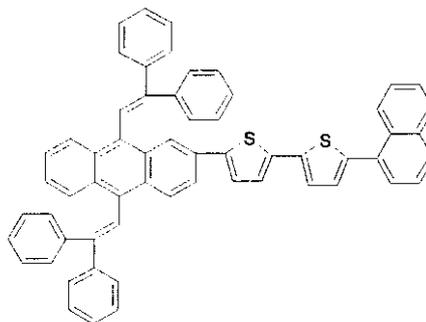
化合物 39



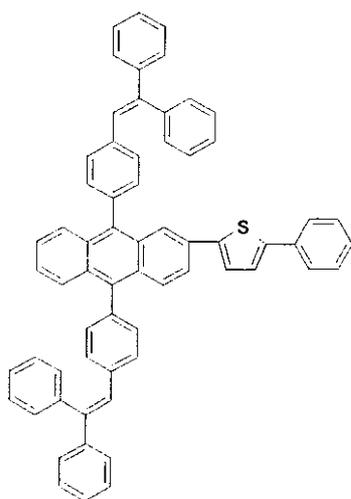
化合物 40



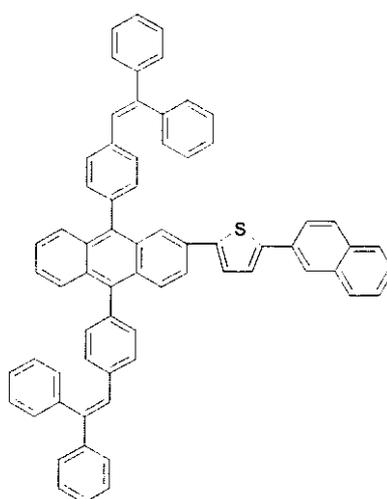
化合物 41



化合物 42

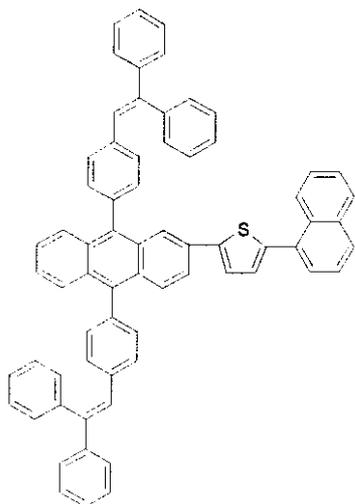


化合物 43

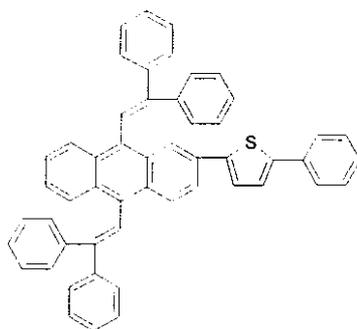


化合物 44

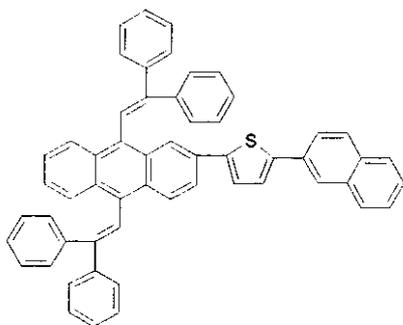
【化 5 I】



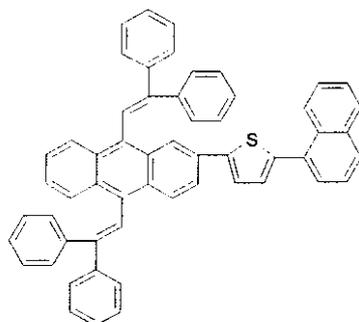
化合物 4 5



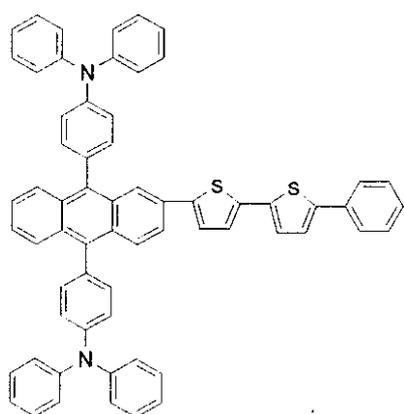
化合物 4 6



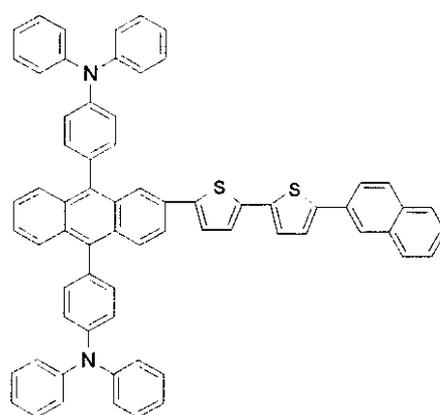
化合物 4 7



化合物 4 8

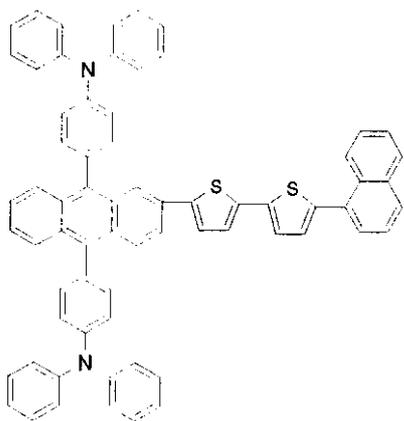


化合物 4 9

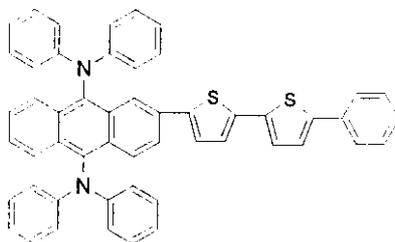


化合物 5 0

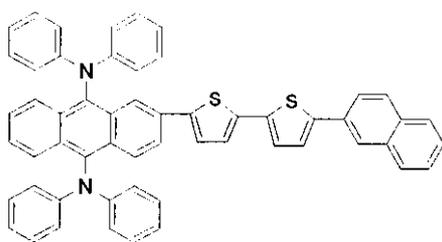
【化 5 J】



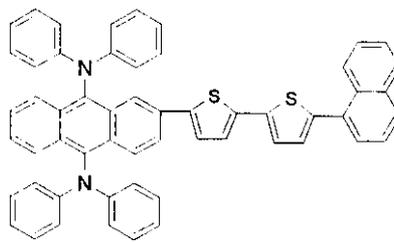
化合物 5 1



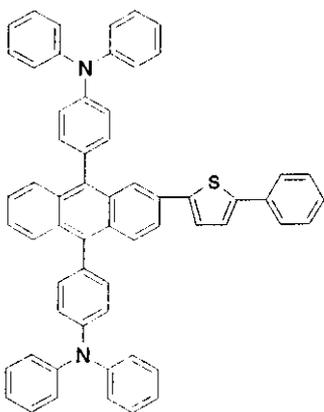
化合物 5 2



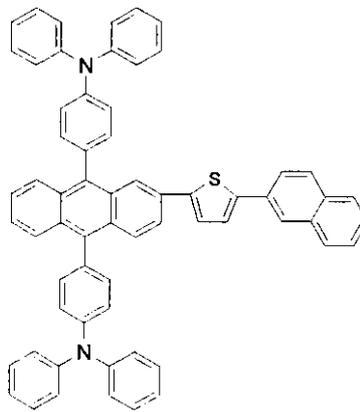
化合物 5 3



化合物 5 4

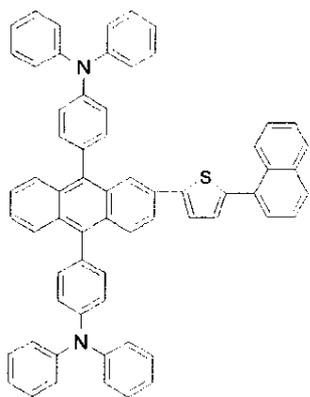


化合物 5 5

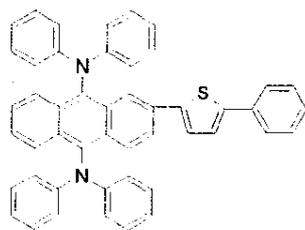


化合物 5 6

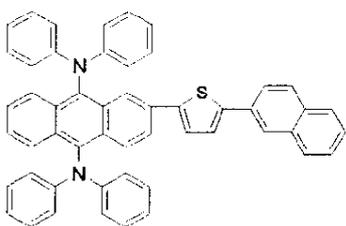
【化 5 K】



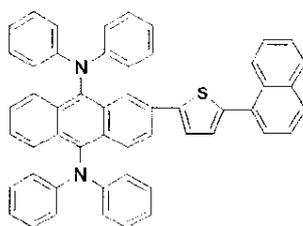
化合物 5 7



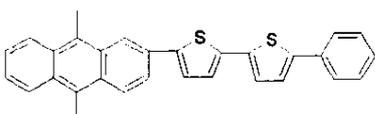
化合物 5 8



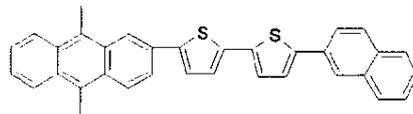
化合物 5 9



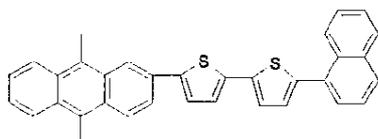
化合物 6 0



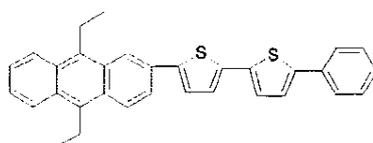
化合物 6 1



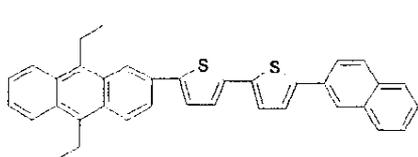
化合物 6 2



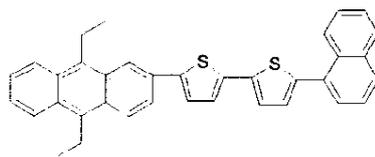
化合物 6 3



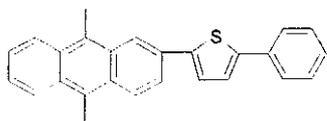
化合物 6 4



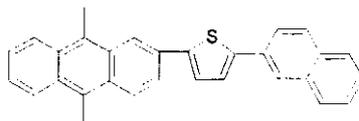
化合物 6 5



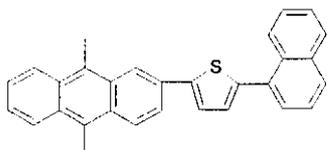
化合物 6 6



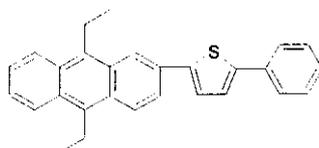
化合物 6 7



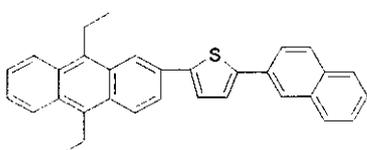
化合物 6 8



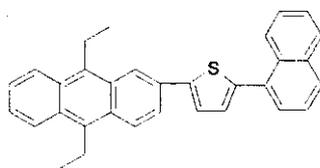
化合物 6 9



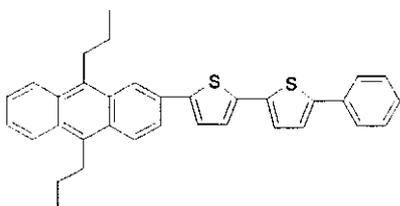
化合物 7 0



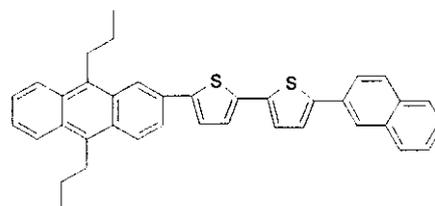
化合物 7 1



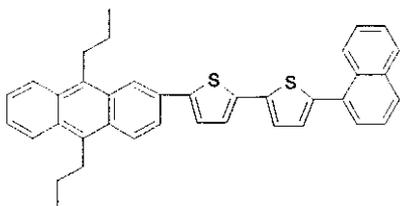
化合物 7 2



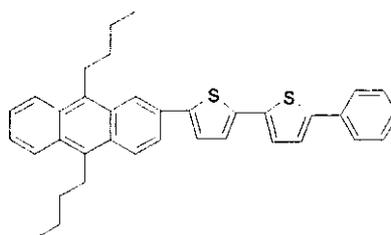
化合物 7 3



化合物 7 4

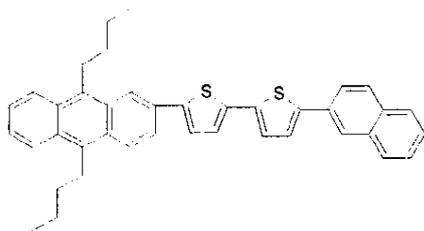


化合物 7 5

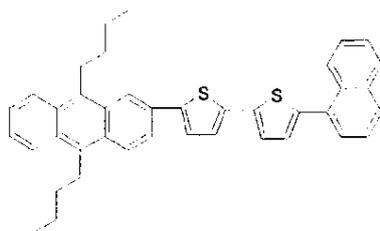


化合物 7 6

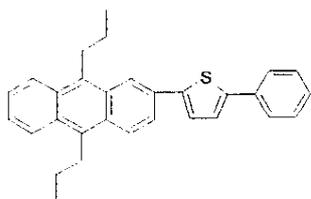
【化 5 M】



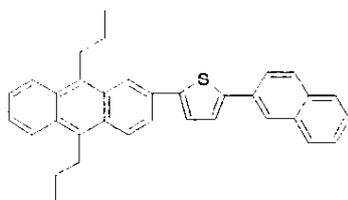
化合物 7 7



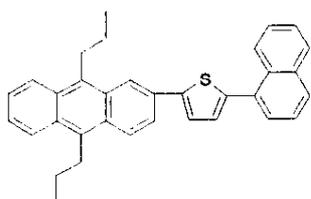
化合物 7 8



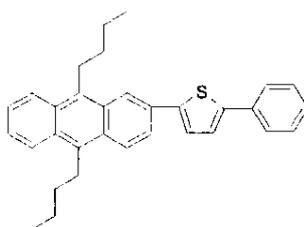
化合物 7 9



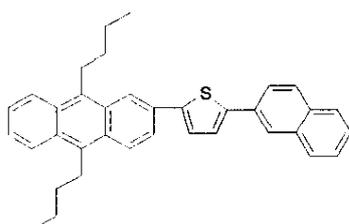
化合物 8 0



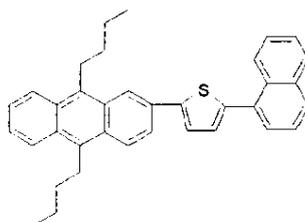
化合物 8 1



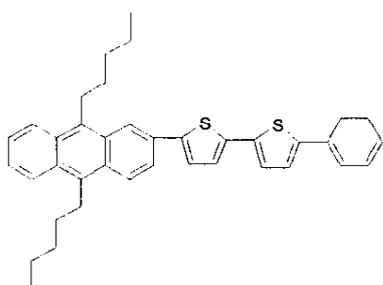
化合物 8 2



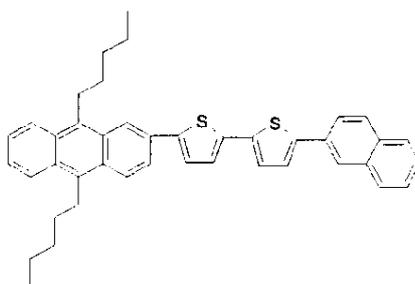
化合物 8 3



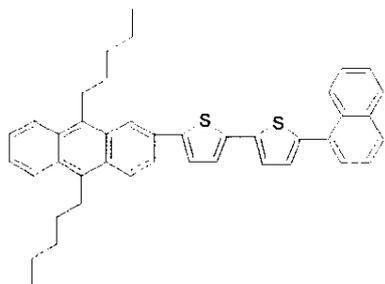
化合物 8 4



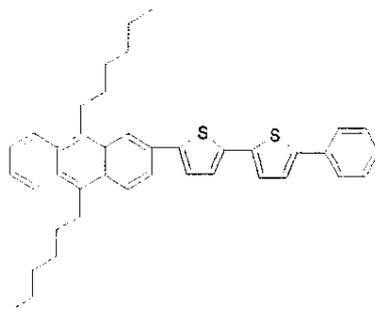
【化 5 N】



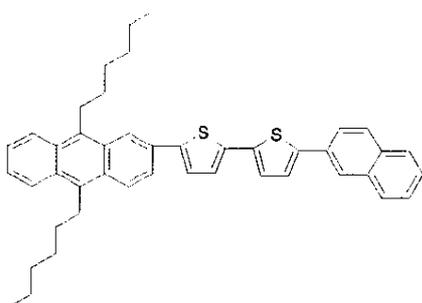
化合物 8 5



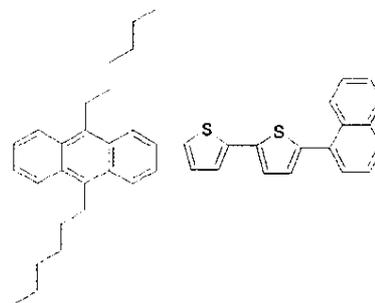
化合物 8 6



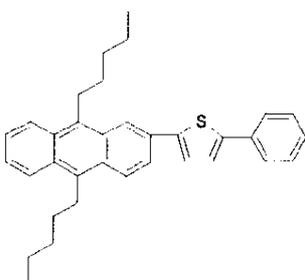
化合物 8 7



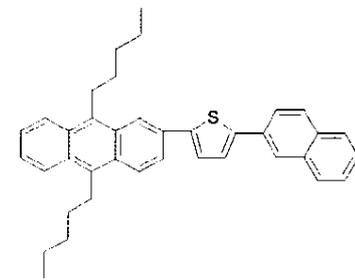
化合物 8 8



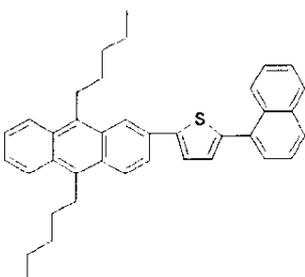
化合物 8 9



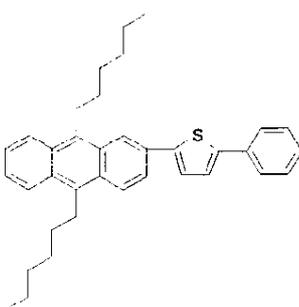
化合物 9 0



化合物 9 1



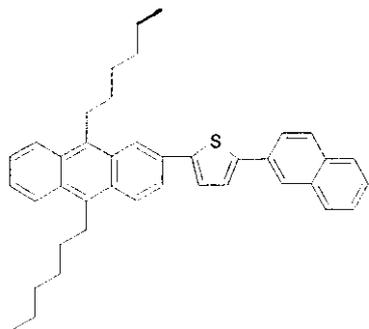
化合物 9 2



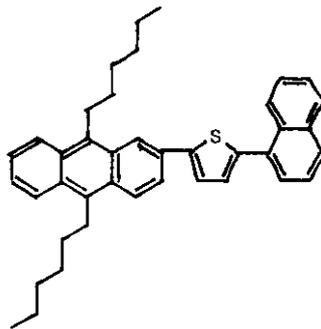
化合物 9 3

【化 5 0】

化合物 9 4



化合物 9 5



化合物 9 6

から選択されることを特徴とする、請求項 1 に記載の化合物。

【請求項 1 2】

前記化合物が、選択肢を構成する化合物 4、12、14、19、21、23、25、27 及び 29 から選択されることを特徴とする、請求項 1.1 に記載の化合物。

【請求項 1 3】

前記化合物が約 300 以上の融点を有することを特徴とする、請求項 1 に記載の化合物。

【請求項 1 4】

前記化合物が可視発光に対応する帯域間隙を有することを特徴とする、請求項 1 に記載の化合物。

【請求項 1 5】

前記可視発光のための帯域間隙が約 1.8 eV 乃至約 3.5 eV であることを特徴とする、請求項 1.4 に記載の化合物。

【請求項 1 6】

請求項 1 において定義したような化合物を一つ以上含む発光物質であって、前記各々の化合物が帯域間隙を有することを特徴とする物質。

【請求項 1 7】

一般式 I で表されない付加的な発光化合物を一つ以上含む発光物質であって、前記各々の付加的な化合物は帯域間隙を有することを特徴とする、請求項 1.6 に記載の発光物質。

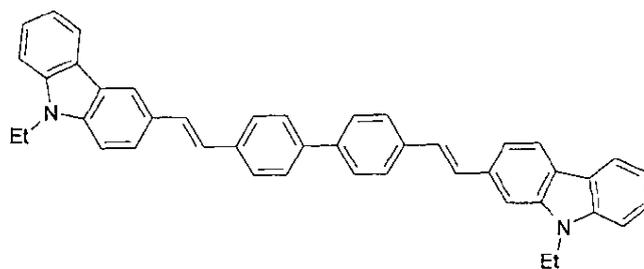
【請求項 1 8】

前記付加的な化合物のうち少なくとも一つの帯域間隙が一般式 I で表される化合物の帯域間隙値の約 80% 乃至 100% であることを特徴とする、請求項 1.7 に記載の発光物質。

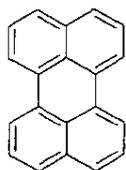
【請求項 1 9】

BCzVBi、ペリレン、ルブレン、DCJTB、キナクリドン、クマリン、ナイルレッド、DCM1、DCM2、テトラジフェニルアミノピリミド-ピリミジン、ピリジノチアジアゾール及び化合物 201 乃至 220 :

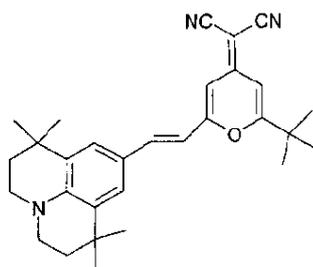
【化 6 A】



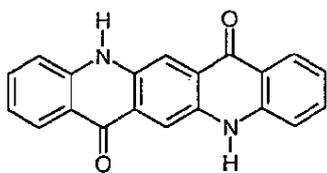
化合物 201



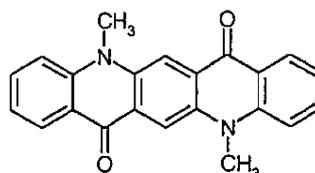
化合物 202



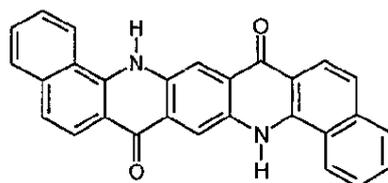
化合物 203



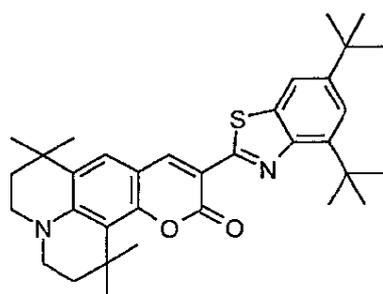
化合物 204



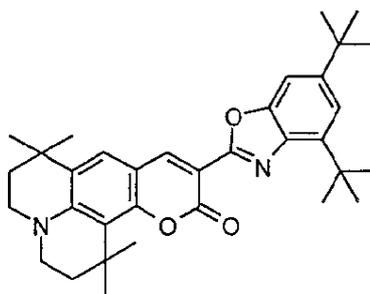
化合物 205



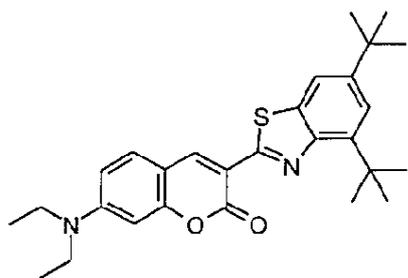
化合物 206



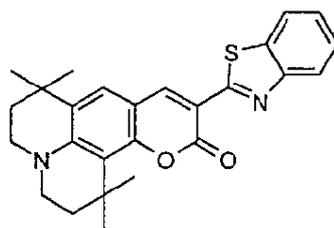
化合物 207



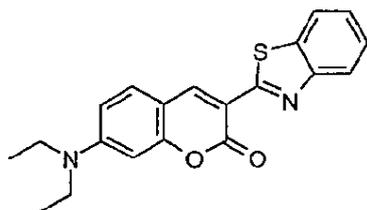
化合物 208



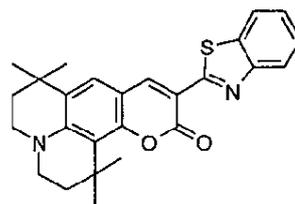
化合物 209



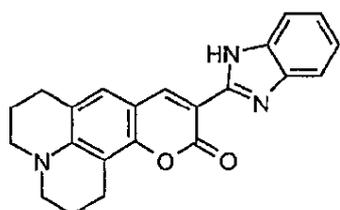
化合物 210



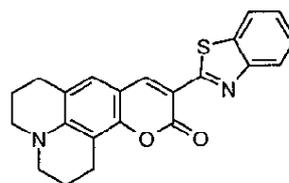
化合物 211



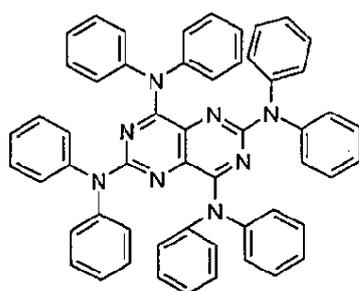
化合物 212



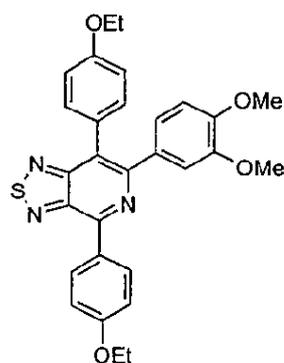
化合物 213



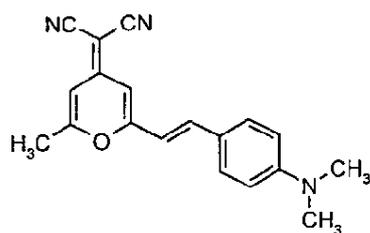
化合物 214



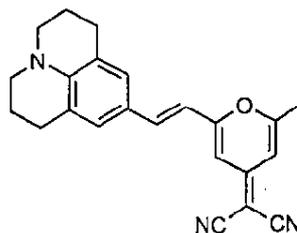
化合物 215



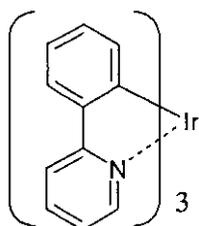
化合物 216



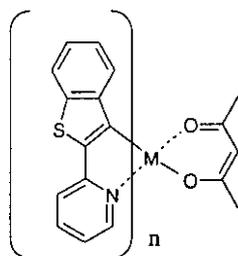
化合物 217



化合物 218



化合物 2 1 9



化合物 2 2 0

で構成される群より選択される発光化合物を一つ以上追加的に含むことを特徴とする、請求項 1 6 に記載の発光物質。

【請求項 2 0】

陽極；

陰極；及び

前記陽極と陰極の間に配置された少なくとも一つの層を含み、前記少なくとも一つの層が請求項 1 において定義された一般式 I で表示される化合物を含むことを特徴とする有機電界発光 (EL) 素子。

【請求項 2 1】

前記少なくとも一つの層が発光、正孔注入、正孔移送、電子注入及び電子移送で構成される群より選択される一つ以上の機能を行う層を含むことを特徴とする、請求項 2 0 に記載の有機 EL 素子。

【請求項 2 2】

前記有機 EL 素子が基板によって支持され、前記基板は陽極または陰極のうちの一つと接触することを特徴とする、請求項 2 0 に記載の有機 EL 素子。

【請求項 2 3】

前記少なくとも一つの層が発光層を含むことを特徴とする、請求項 2 0 に記載の有機 EL 素子。

【請求項 2 4】

前記発光層が一つ以上の蛍光性または燐光性発光物質を含むことを特徴とする、請求項 2 3 に記載の有機 EL 素子。

【請求項 2 5】

前記陽極と発光層の間に正孔注入層、正孔移送層またはこれら両層を追加的に含むことを特徴とする、請求項 2 3 に記載の有機 EL 素子。

【請求項 2 6】

前記陰極と発光層の間に電子注入層、電子移送層またはこれら両層を追加的に含むことを特徴とする、請求項 2 3 に記載の有機 EL 素子。

【請求項 2 7】

前記発光層が、その中に発光可能な少なくとも二つの化合物を含むことを特徴とする、請求項 2 3 に記載の有機 EL 素子。

【請求項 2 8】

一般式 I で表示される少なくとも一つの化合物が可視発光に対応する帯域間隙を有することを特徴とする、請求項 2 3 に記載の有機 EL 素子。

【請求項 2 9】

前記発光層が一般式 I で表示されるか表示されない少なくとも一つの付加的な発光化合物を追加的に含むことを特徴とする、請求項 2 8 に記載の有機 EL 素子。

【請求項 3 0】

前記付加的な発光化合物が一般式 I で示される少なくとも一つの化合物より高い量子効率を有することを特徴とする、請求項 2 9 に記載の有機 EL 素子。

【請求項 3 1】

前記付加的な発光化合物が一般式 I で示される少なくとも一つの化合物より小さい帯域

間隙を有することを特徴とする、請求項 2 9 に記載の有機EL素子。

【請求項 3 2】

前記付加的な化合物の帯域間隙が一般式 I で示される化合物の帯域間隙の約 7 0 % 乃至 1 0 0 % であることを特徴とする、請求項 3 1 に記載の有機EL素子。

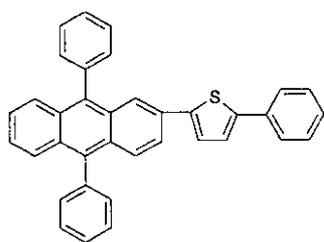
【請求項 3 3】

前記付加的な発光化合物が燐光性発光化合物であることを特徴とする、請求項 2 9 に記載の有機EL素子。

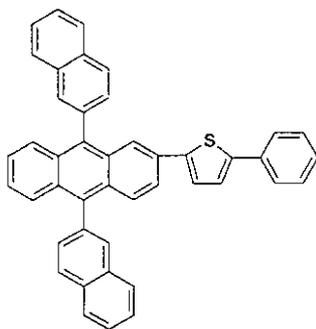
【請求項 3 4】

一般式 I で示される少なくとも一つの化合物が、選択肢を構成する下記一般式 1 乃至 9 6 :

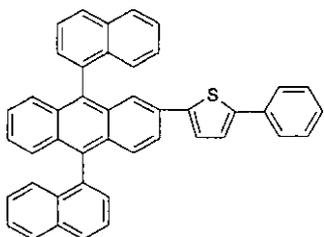
【化 7 A】



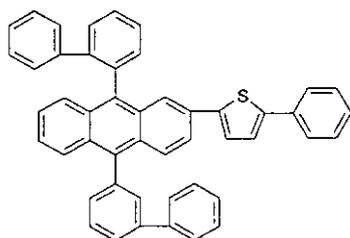
化合物 1



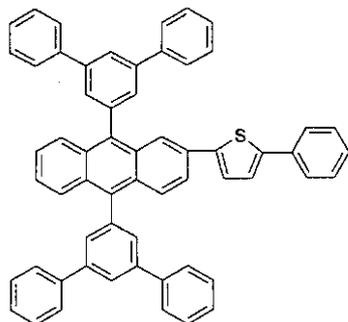
化合物 2



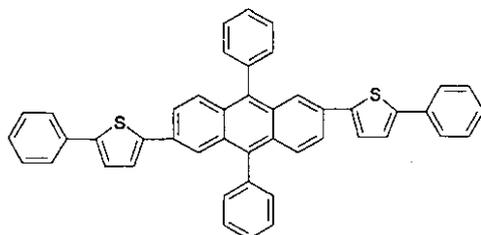
化合物 3



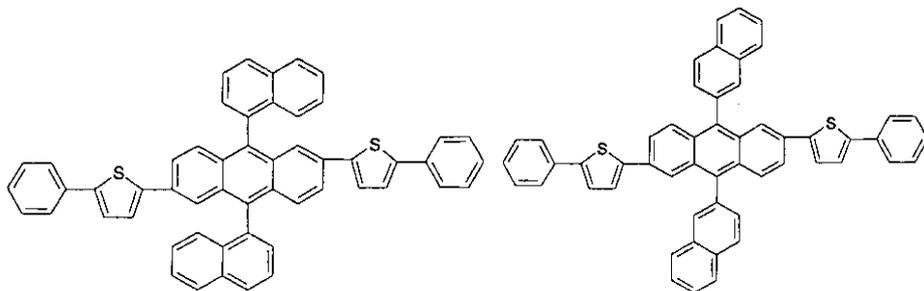
化合物 4



化合物 5

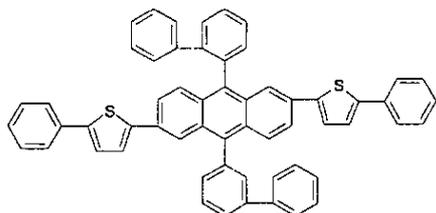


化合物 6

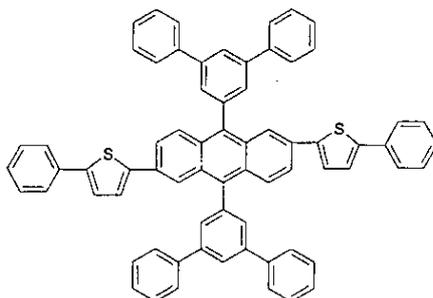


【化 7 B】

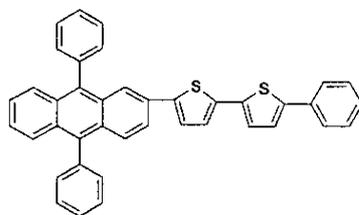
化合物 7



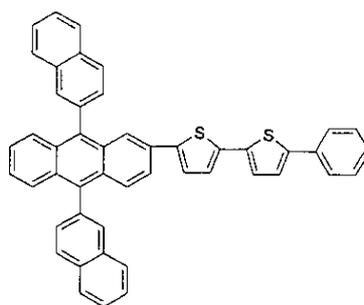
化合物 8



化合物 9

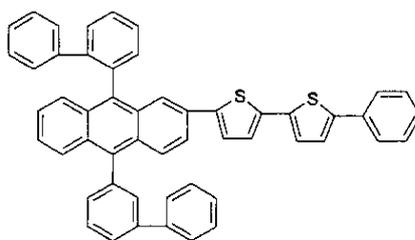
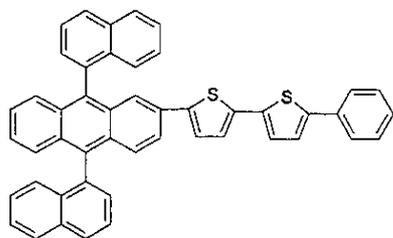


化合物 10



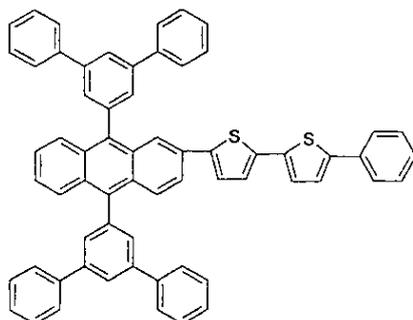
化合物 11

化合物 12

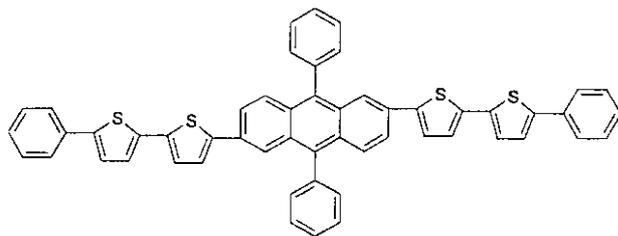


化合物 13

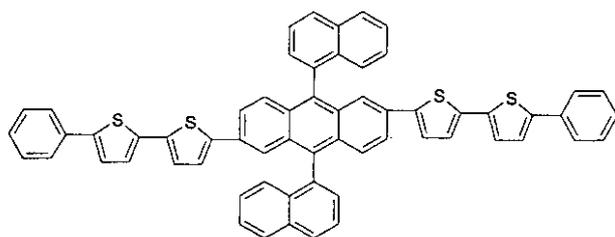
化合物 14



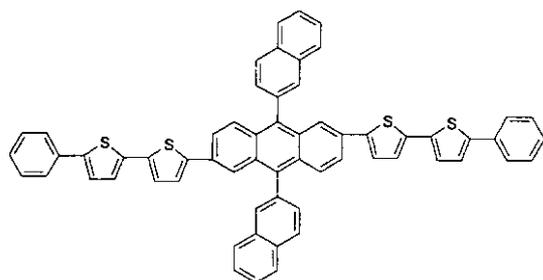
化合物 15



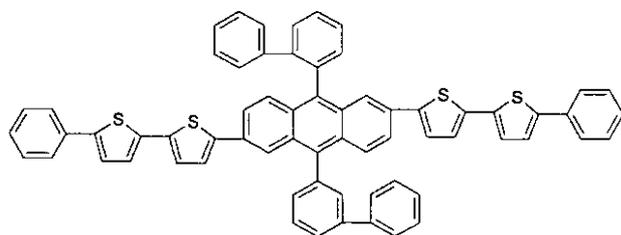
化合物 1 6



化合物 1 7

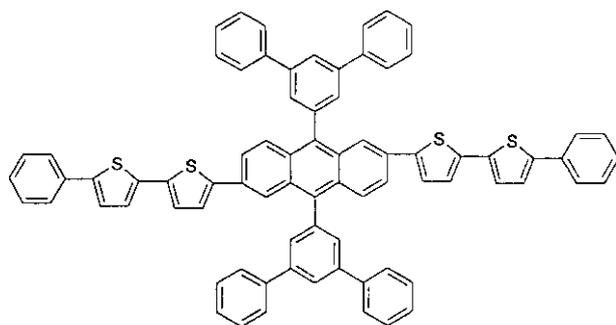


化合物 1 8

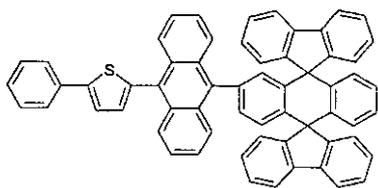


化合物 1 9

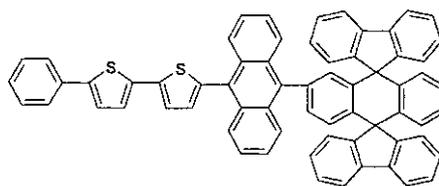
【化 7 D】



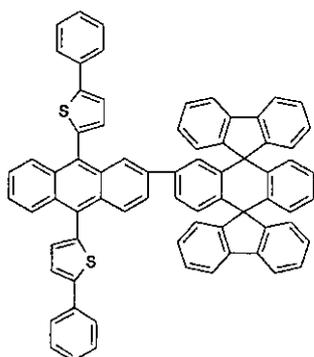
化合物 2 0



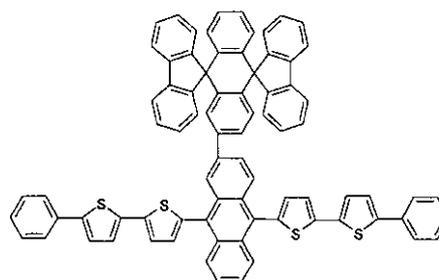
化合物 2 1



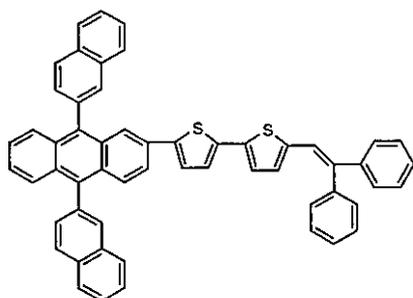
化合物 2 2



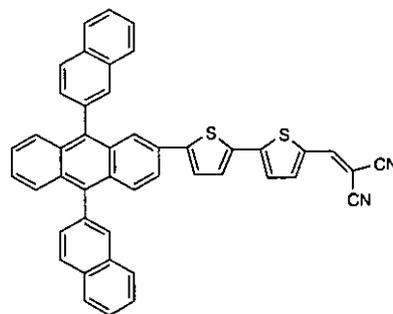
化合物 2 3



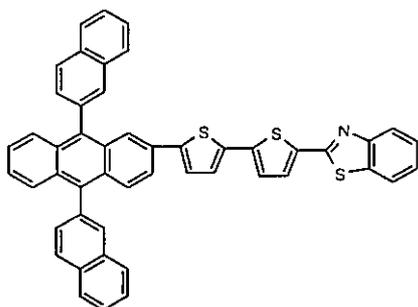
化合物 2 4



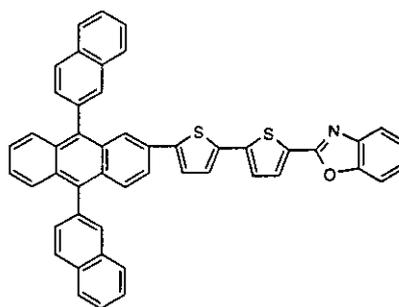
化合物 2 5



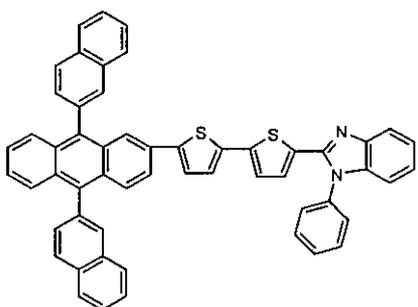
化合物 2 6



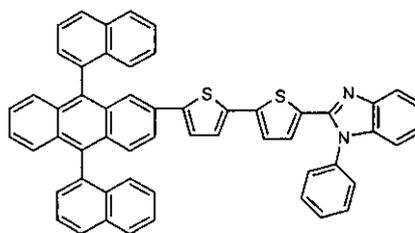
化合物 2 7



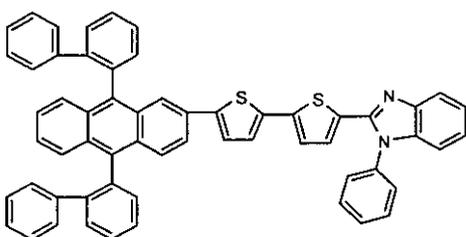
化合物 2 8



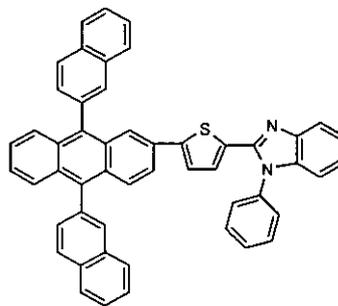
化合物 2 9



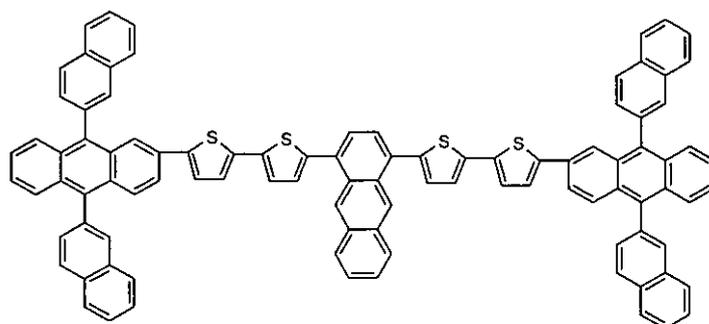
化合物 3 0



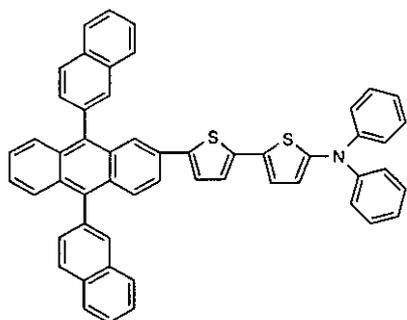
化合物 3 1



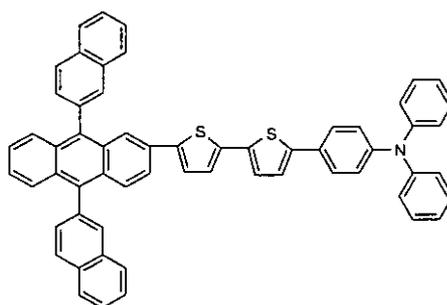
化合物 3 2



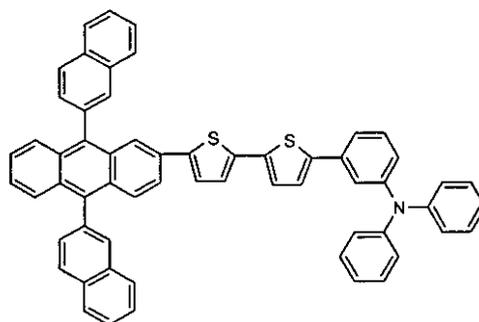
化合物 3 3



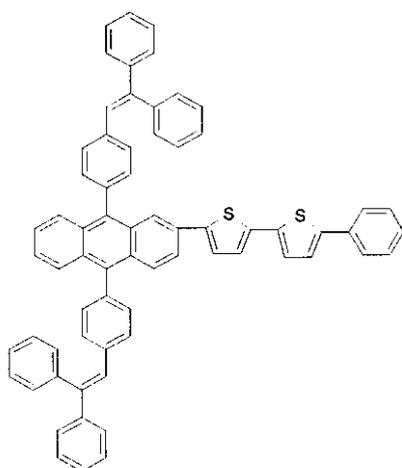
化合物 3 4



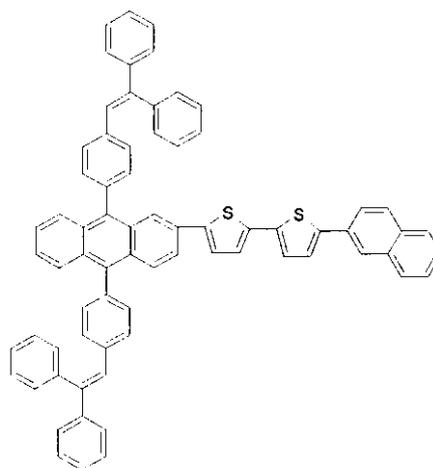
化合物 3 5



化合物 3 6

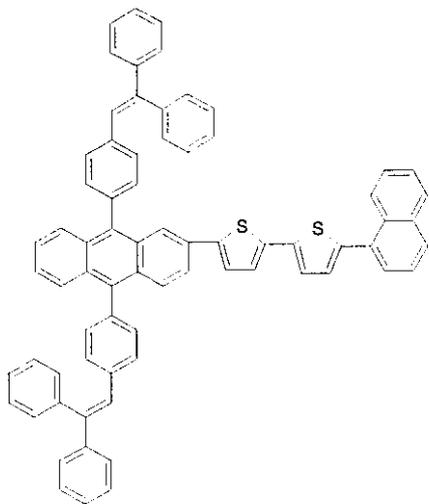


化合物 3 7

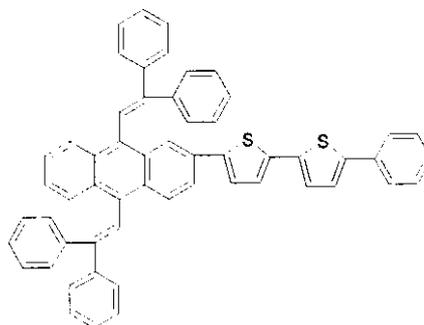


化合物 3 8

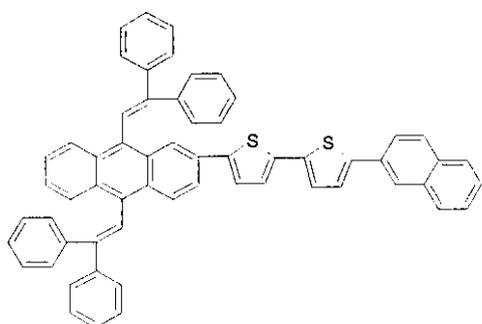
【化 7 G】



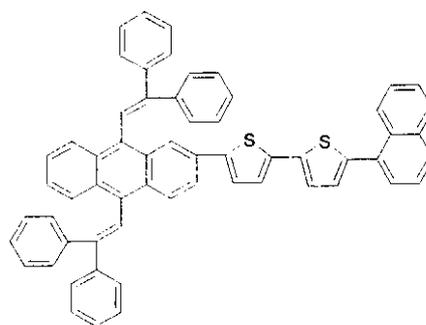
化合物 3 9



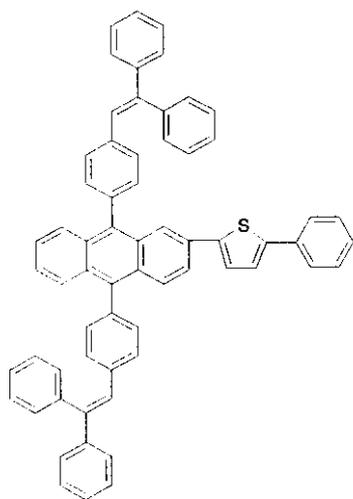
化合物 4 0



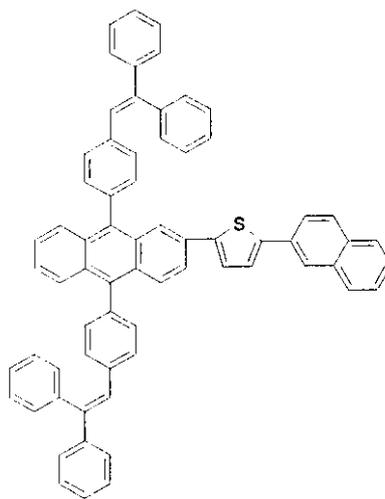
化合物 4 1



化合物 4 2

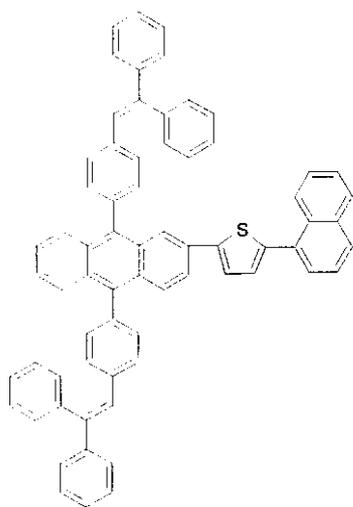


化合物 4 3

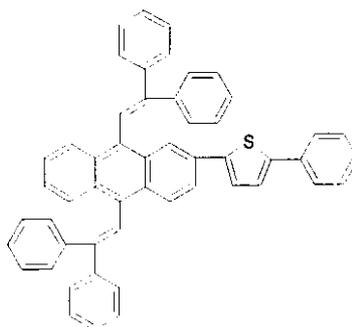


化合物 4 4

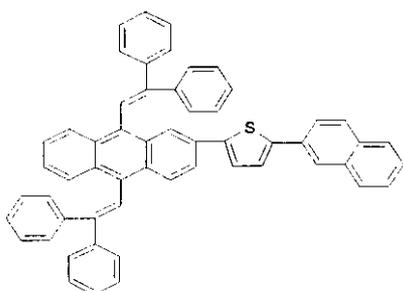
【化 7 H】



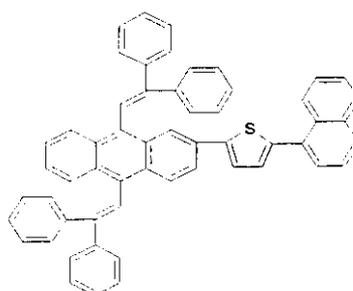
化合物 4 5



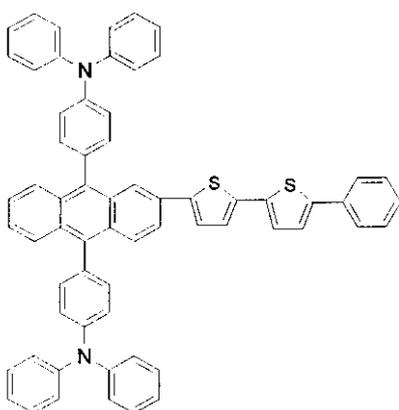
化合物 4 6



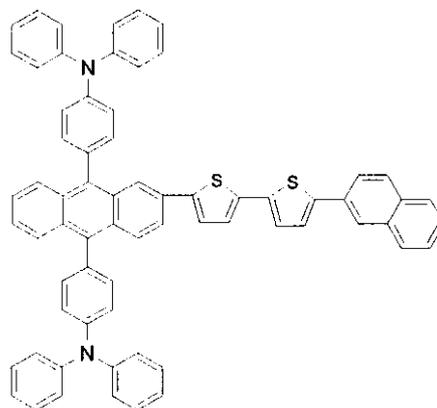
化合物 4 7



化合物 4 8

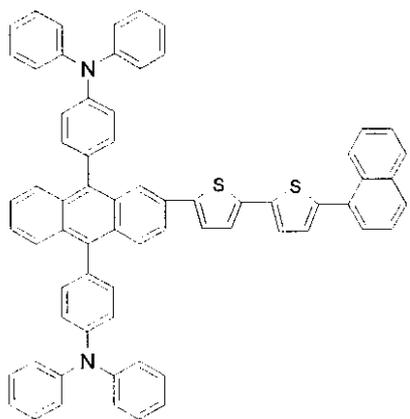


化合物 4 9

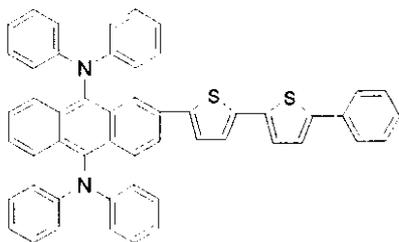


化合物 5 0

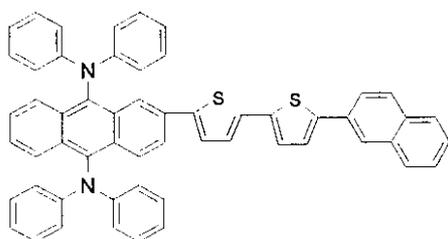
【化 7 I】



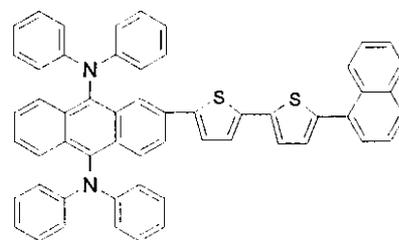
化合物 5 1



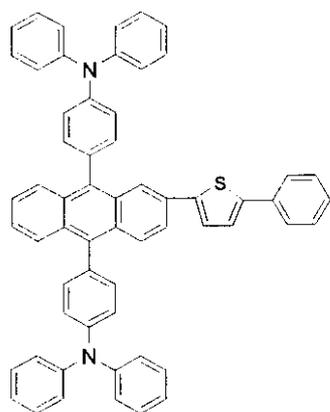
化合物 5 2



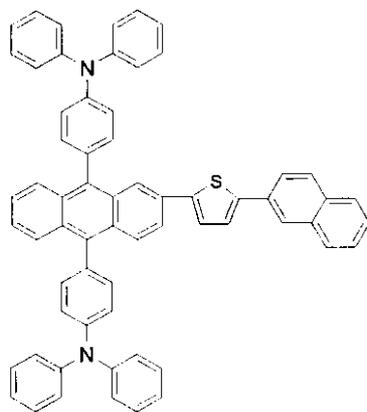
化合物 5 3



化合物 5 4

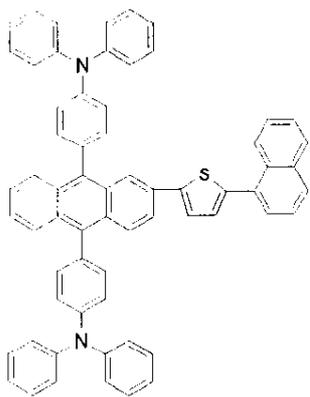


化合物 5 5

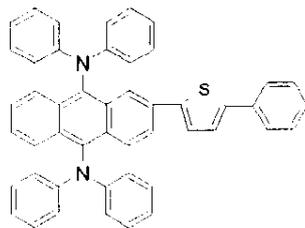


化合物 5 6

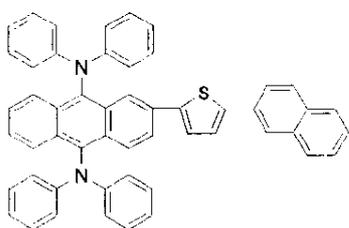
【化 7 J】



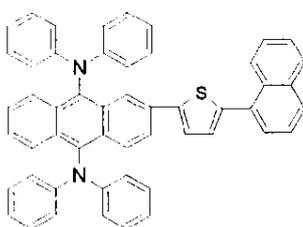
化合物 5 7



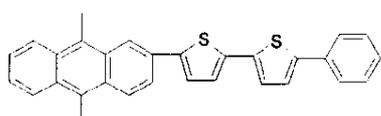
化合物 5 8



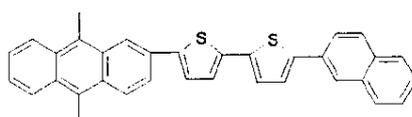
化合物 5 9



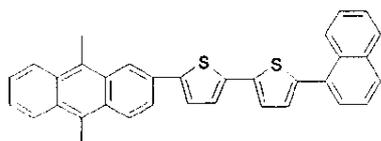
化合物 6 0



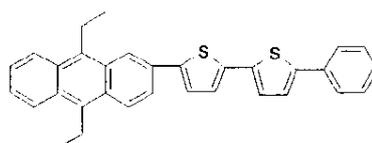
化合物 6 1



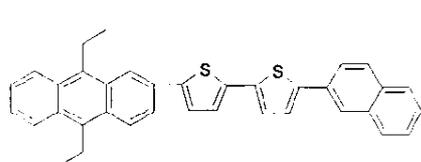
化合物 6 2



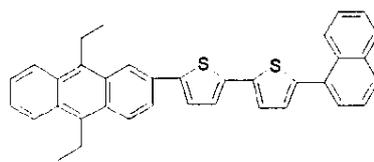
化合物 6 3



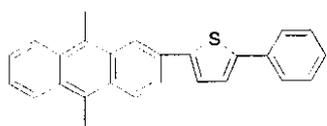
化合物 6 4



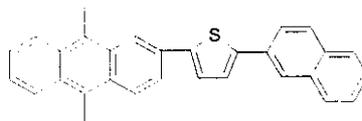
化合物 6 5



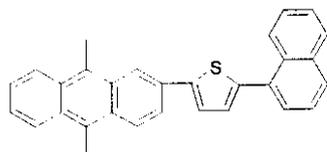
化合物 6 6



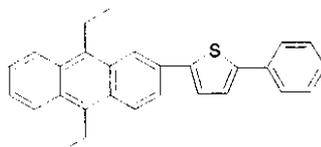
化合物 6 7



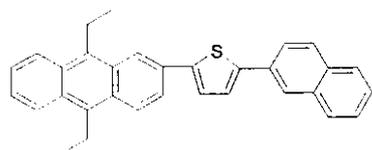
化合物 6 8



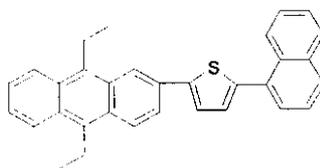
化合物 6 9



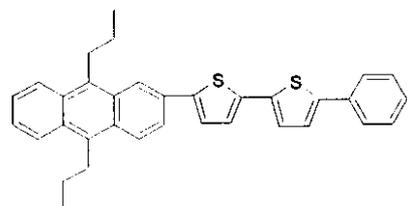
化合物 7 0



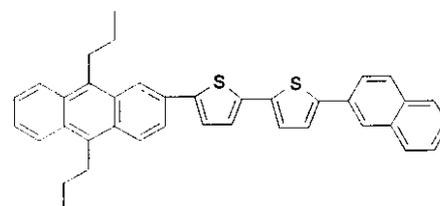
化合物 7 1



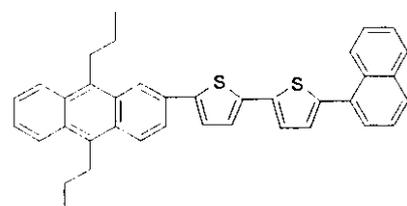
化合物 7 2



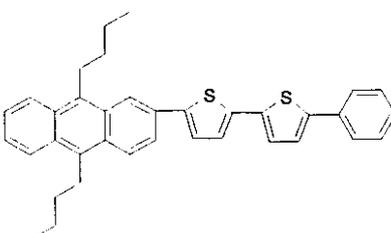
化合物 7 3



化合物 7 4

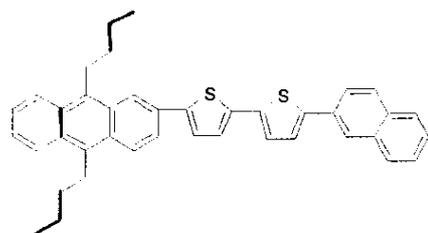


化合物 7 5

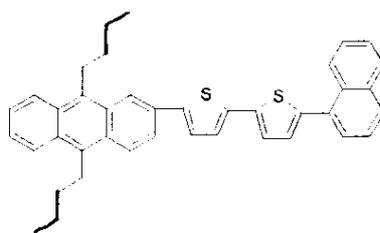


化合物 7 6

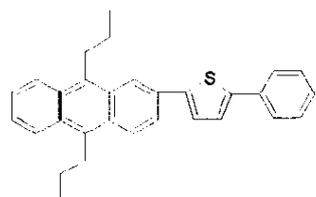
【化 7 L】



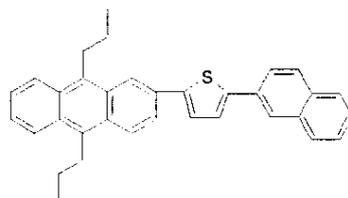
化合物 7 7



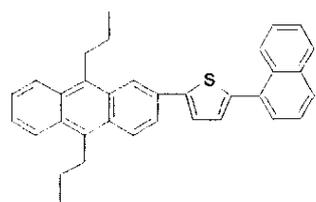
化合物 7 8



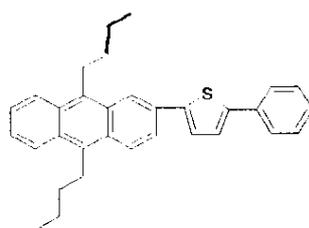
化合物 7 9



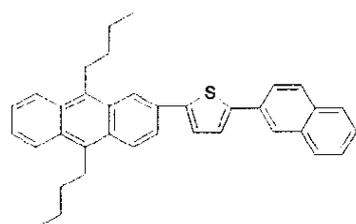
化合物 8 0



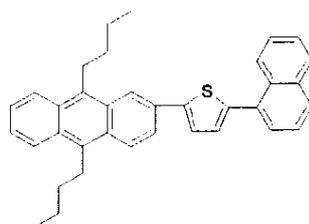
化合物 8 1



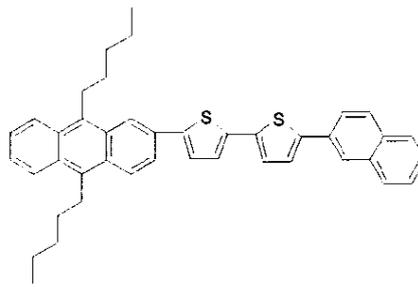
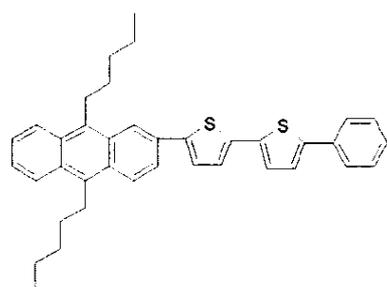
化合物 8 2



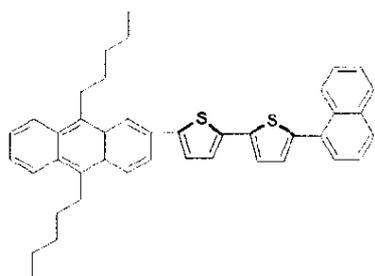
化合物 8 3



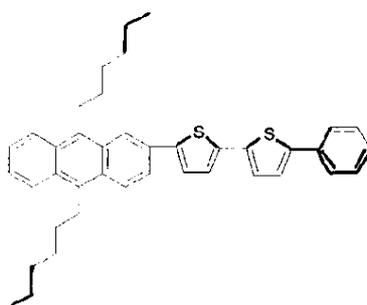
化合物 8 4



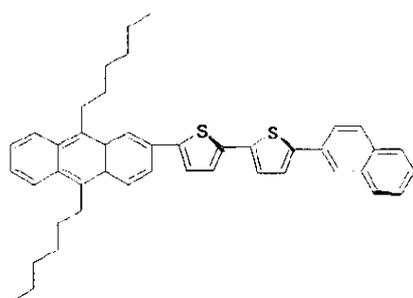
化合物 8 5



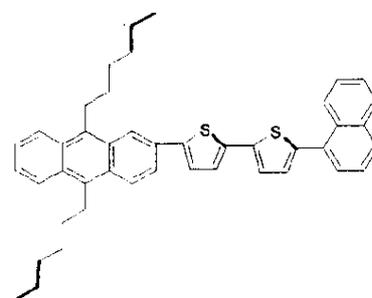
化合物 8 6



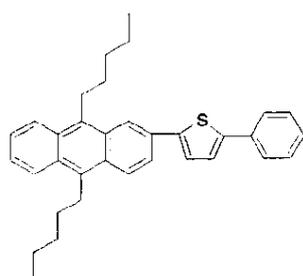
化合物 8 7



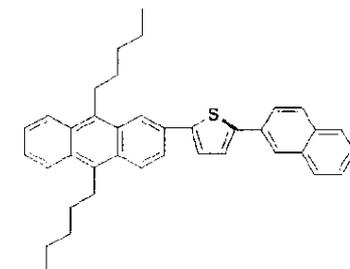
化合物 8 8



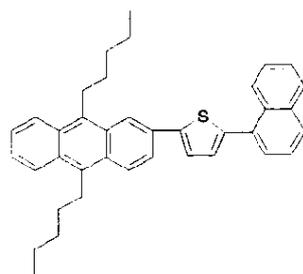
化合物 8 9



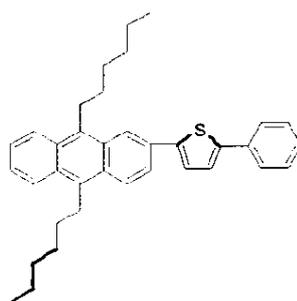
化合物 9 0



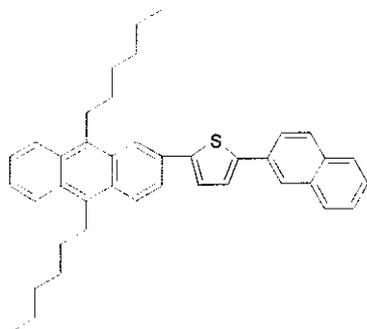
化合物 9 1



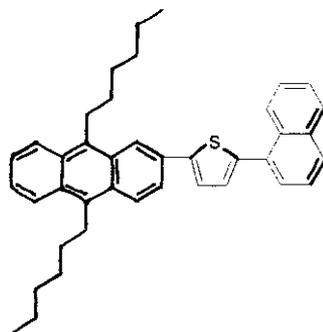
化合物 9 2



化合物 9 3



化合物 9 4



化合物 9 5

化合物 9 6

から選択されることを特徴とする、請求項 2 3 に記載の有機EL素子。

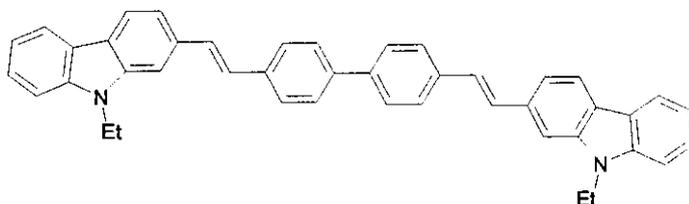
【請求項 3 5】

前記化合物が選択肢を構成する化合物 4、1 2、1 4、1 9、2 1、2 3、2 5、2 7 及び 2 9 から選択されることを特徴とする、請求項 3 4 に記載の有機EL素子。

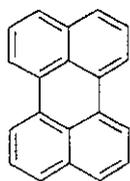
【請求項 3 6】

前記発光層が追加的に内部に含む一つ以上の発光化合物は、選択肢を構成する BCzVBi、ペリレン、ルブレン、DCJTb、キナクリドン、クマリン、ナイルレッド、DCM 1、DCM 2、テトラジフェニルアミノピリミド-ピリニジン、ピリジノチアゾール及び化合物 2 0 1 - 2 2 0 :

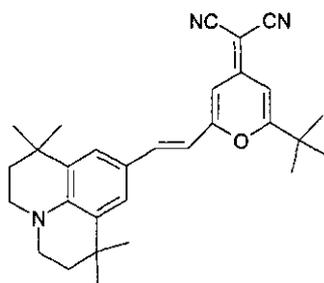
【化 8 A】



化合物 2 0 1

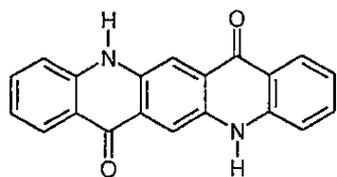


化合物 2 0 2

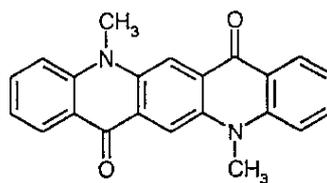


化合物 2 0 3

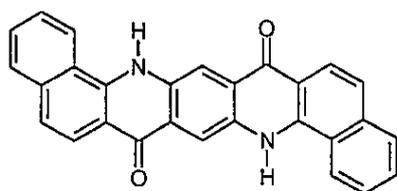
【化 8 B】



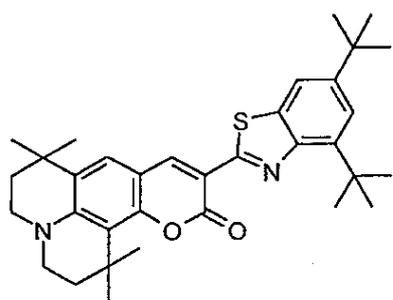
化合物 204



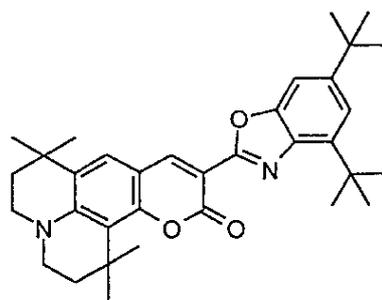
化合物 205



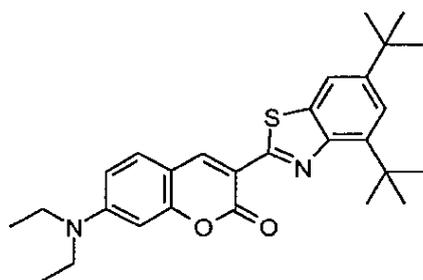
化合物 206



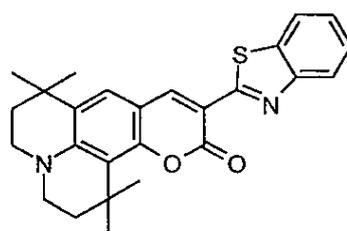
化合物 207



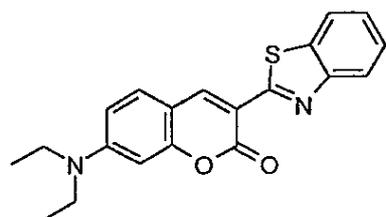
化合物 208



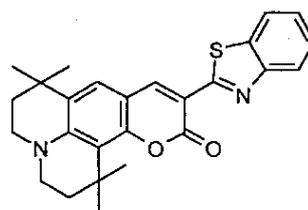
化合物 209



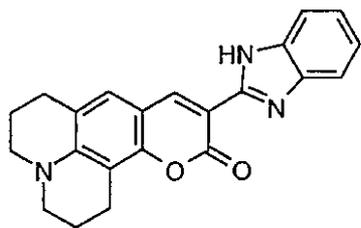
化合物 210



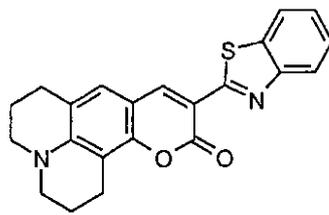
化合物 211



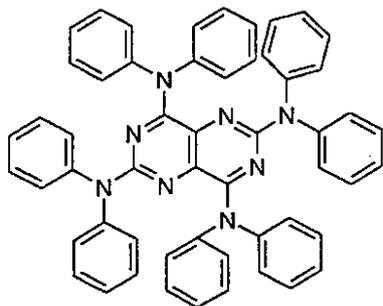
化合物 212



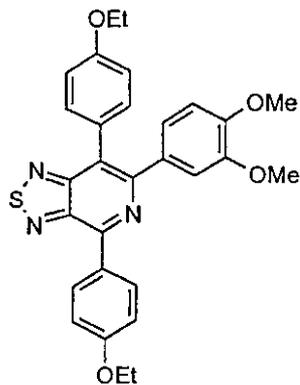
化合物 2 1 3



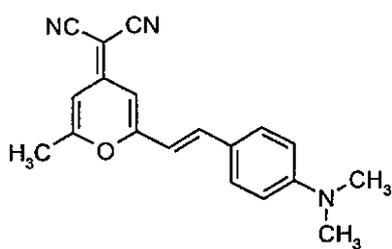
化合物 2 1 4



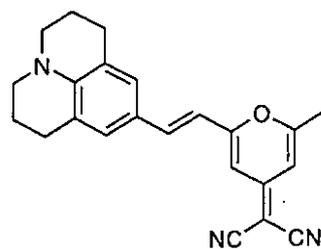
化合物 2 1 5



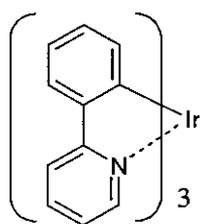
化合物 2 1 6



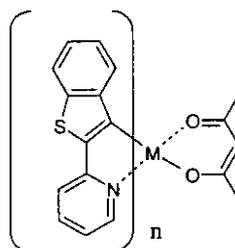
化合物 2 1 7



化合物 2 1 8



化合物 2 1 9



化合物 2 2 0

から選択されることを特徴とする、請求項 2 3 に記載の有機EL素子。

【請求項 3 7】

請求項 2 0 に記載の有機EL素子を備えたディスプレイを含む電子器具。

【請求項 3 8】

請求項 3 4 に記載の有機EL素子を備えたディスプレイを含む電子器具。

【請求項 3 9】

請求項 3 6 に記載の有機EL素子を備えたディスプレイを含む電子器具。

## 【 国際調査報告 】

INTERNATIONAL SEARCH REPORT		International application No. PCT/KR 03/00899-0
CLASSIFICATION OF SUBJECT MATTER		
IPC <sup>7</sup> : C07D 333/44, C07D 409/14		
According to International Patent Classification (IPC) or to both national classification and IPC		
B. FIELDS SEARCHED		
Minimum documentation searched (classification system followed by classification symbols)		
IPC <sup>7</sup> : C07D		
Documentation searched other than minimum documentation to the extent that such documents are included in the fields searched		
AT		
Electronic data base consulted during the international search (name of data base and, where practicable, search terms used)		
WPI, STN: CAPLUS		
C. DOCUMENTS CONSIDERED TO BE RELEVANT		
Category	Citation of document, with indication, where appropriate, of the relevant passages	Relevant to claim No.
A	US 2002/0048687 A1 (Hosokawa et al.) 25 April 2002 (25.04.02) <i>claims 1-14.</i>	1-99
A	JP 11 111460 A (Toyo Ink Co Ltd) 23 April 1999 (23.04.99) . <i>compounds 1-8,17,20,21,28,31,36,41,50.</i>	1-99
	----	
<input type="checkbox"/> Further documents are listed in the continuation of Box C. <input checked="" type="checkbox"/> See patent family annex.		
* Special categories of cited documents: „A“ document defining the general state of the art which is not considered to be of particular relevance „E“ earlier application or patent but published on or after the international filing date „L“ document which may throw doubts on priority claim(s) or which is cited to establish the publication date of another citation or other special reason (as specified) „O“ document referring to an oral disclosure, use, exhibition or other means „P“ document published prior to the international filing date but later than the priority date claimed „T“ later document published after the international filing date or priority date and not in conflict with the application but cited to understand the principle or theory underlying the invention „X“ document of particular relevance, the claimed invention cannot be considered novel or cannot be considered to involve an inventive step when the document is taken alone „Y“ document of particular relevance; the claimed invention cannot be considered to involve an inventive step when the document is combined with one or more other such documents, such combination being obvious to a person skilled in the art „&“ document member of the same patent family		
Date of the actual completion of the international search 26 June 2003 (26.06.2003)		Date of mailing of the international search report 12 August 2003 (12.08.2003)
Name and mailing address of the ISA/AT Austrian Patent Office Dresdner Straße 87, A-1200 Vienna Facsimile No. 1/53424/535		Authorized officer BÖHM K. Telephone No. 1/53424/519

## INTERNATIONAL SEARCH REPORT

International application No.  
PCT/KR 03/00899-0**Box I Observations where certain claims were found unsearchable (Continuation of item 1 of first sheet)**

This international search report has not been established in respect of certain claims under Article 17(2)(a) for the following reasons:

1.  Claims Nos.: A part of almost each claim.  
because they relate to subject matter not required to be searched by this Authority, namely:  
  
Because there are too much claimed compounds and their usages, the international search report has been limited to these compounds which are prepared in the examples and their usages. These compounds are compound 4, 12, 14, 19, 21, 23, 25, 27, and 29.
2.  Claims Nos.:  
because they relate to parts of the international application that do not comply with the prescribed requirements to such an extent that no meaningful international search can be carried out, specifically:
3.  Claims Nos.:  
because they are dependent claims and are not drafted in accordance with the second and third sentences of Rule 6.4(a).

**Box II Observations where unity of invention is lacking (Continuation of item 2 of first sheet)**

This International Searching Authority found multiple inventions in this international application, as follows:

1.  As all required additional search fees were timely paid by the applicant, this international search report covers all searchable claims.
2.  As all searchable claims could be searched without effort justifying an additional fee, this Authority did not invite payment of any additional fee.
3.  As only some of the required additional search fees were timely paid by the applicant, this international search report covers only those claims for which fees were paid, specifically claims Nos.:
4.  No required additional search fees were timely paid by the applicant. Consequently, this international search report is restricted to the invention first mentioned in the claims; it is covered by claims Nos.:

**Remark on Protest**

- The additional search fees were accompanied by the applicant's protest.  
 No protest accompanied the payment of additional search fees.

## INTERNATIONAL SEARCH REPORT

Information on patent family members

International application No.  
PCT/KR 03/00899-0

Patent document cited in search report			Publication date	Patent family member(s)		Publication date
JP	A	11111460		none		
		A2				
US	AA	02004868	10-01-2002	EP	A2 1170670	09-01-2002
				JP	A2 02024195	25-01-2002

## フロントページの続き

(51) Int.Cl. <sup>7</sup>	F I	テーマコード(参考)
C 0 7 D 409/04	C 0 7 D 409/04	
C 0 7 D 409/14	C 0 7 D 409/14	
C 0 7 D 413/14	C 0 7 D 413/14	
C 0 7 D 417/14	C 0 7 D 417/14	
C 0 9 K 11/06	C 0 9 K 11/06	6 1 0
H 0 5 B 33/14	C 0 9 K 11/06	6 3 5
	C 0 9 K 11/06	6 4 0
	C 0 9 K 11/06	6 4 5
	C 0 9 K 11/06	6 5 0
	C 0 9 K 11/06	6 5 5
	C 0 9 K 11/06	6 6 0
	H 0 5 B 33/14	B

(81) 指定国 AP(GH, GM, KE, LS, MW, MZ, SD, SL, SZ, TZ, UG, ZM, ZW), EA(AM, AZ, BY, KG, KZ, MD, RU, TJ, TM), EP(AT, BE, BG, CH, CY, CZ, DE, DK, EE, ES, FI, FR, GB, GR, HU, IE, IT, LU, MC, NL, PT, RO, SE, SI, SK, TR), OA(BF, BJ, CF, CG, CI, CM, GA, GN, GQ, GW, ML, MR, NE, SN, TD, TG), AE, AG, AL, AM, AT, AU, AZ, BA, BB, BG, BR, BY, BZ, CA, CH, CN, CO, CR, CU, CZ, DE, DK, DM, DZ, EC, EE, ES, FI, GB, GD, GE, GH, GM, HR, HU, ID, IL, IN, IS, JP, KE, KG, KP, KR, KZ, LC, LK, LR, LS, LT, LU, LV, MA, MD, MG, MK, MN, MW, MX, MZ, NI, NO, NZ, OM, PH, PL, PT, RO, RU, SC, SD, SE, SG, SK, SL, TJ, TM, TN, TR, TT, TZ, UA, UG, UZ, VC, VN, YU, ZA, ZM, ZW

- (72) 発明者 ジ - エウン・キム  
大韓民国・ゲオンサンナム - ド・6 4 5 - 2 4 0・ジンヘ - シティ・ジェワンサン - ドン・(番地なし)・ピョンワグリーンパーク・1 0 0 6
- (72) 発明者 セ - ファン・ソン  
大韓民国・デジョン - シティ・3 0 5 - 3 4 0・ドリヨン - ドン・ユソン - ク・3 8 1 - 4 2・エルジー・ケミカル・アパート・8 - 4 0 5
- (72) 発明者 ジャエ - ソーン・バエ  
大韓民国・デジョン - シティ・3 0 2 - 7 4 0・セオ - グ・マンヨン - ドン・(番地なし)・チョウォン・アパート・1 0 8 - 1 1 0
- (72) 発明者 ヨウン - グ・リー  
大韓民国・ソウル・1 2 1 - 2 1 0・マポ - グ・セオキョ - ドン・2 4 7 - 1 8 4
- (72) 発明者 コン - キョム・キム  
大韓民国・デジョン - シティ・3 0 5 - 3 9 0・ユソン - グ・ジェオンミン - ドン・3 9 0 - 9・3 0 1
- (72) 発明者 ジェ - チョル・リー  
大韓民国・デジョン - シティ・3 2 0 - 1 8 1・セオ - グ・ナエ - ドン・2 2 0・ロッテ・アパート・1 0 8 - 3 0 1
- (72) 発明者 ジュン - ギ・ジャン  
大韓民国・デジョン - シティ・3 0 5 - 3 4 0・ユソン - グ・ドリヨン - ドン・3 8 6 - 1・7 - 4 0 1
- (72) 発明者 スン - ガブ・イム  
大韓民国・ギョンギ - ド・4 3 5 - 0 5 5・グンポ - シティ・ジェグン - ドン・8 7 2・チュングムジュゴン・アパート・2 0 9 - 4 0 9

F ターム(参考) 3K007 AB01 DB03 FA01  
4C023 CA07 EA11 GA01  
4C063 AA01 AA03 AA05 BB01 CC92 DD26 DD52 DD62 EE10

专利名称(译)	新型有机发光化合物和使用其的有机发光器件		
公开(公告)号	<a href="#">JP2005531552A</a>	公开(公告)日	2005-10-20
申请号	JP2004503461	申请日	2003-05-06
[标]申请(专利权)人(译)	乐金化学股份有限公司		
申请(专利权)人(译)	Eruji化学有限公司		
[标]发明人	ジエウンキム セファンソン ジャエソーンバエ ヨウングリー コンキヨムキム ジェチヨルリー ジュンギジャン スンガプイム		
发明人	ジ-エウン・キム セ-ファン・ソン ジャエ-ソーン・バエ ヨウン-グ・リー コン-キヨム・キム ジェ-チヨル・リー ジュン-ギ・ジャン スン-ガプ・イム		
IPC分类号	H01L51/50 C07D333/08 C07D333/18 C07D333/20 C07D333/24 C07D333/36 C07D409/04 C07D409/14 C07D413/14 C07D417/14 C09K11/06 H01L51/00 H01L51/30 H05B33/14		
CPC分类号	H01L51/0058 C07D333/08 C07D333/20 C07D333/24 C07D333/36 C07D409/14 C07D413/14 C07D417/14 C09B1/00 C09B23/005 C09B23/0058 C09B23/14 C09B57/008 C09B69/008 H01L51/0055 H01L51/006 H01L51/0061 H01L51/0064 H01L51/0068 H01L51/0069 H01L51/0072 H01L51/0073 H01L51/0085 H01L51/50 Y10S428/917		
FI分类号	C07D333/08.CSP C07D333/18 C07D333/20 C07D333/24 C07D333/36 C07D409/04 C07D409/14 C07D413/14 C07D417/14 C09K11/06.610 C09K11/06.635 C09K11/06.640 C09K11/06.645 C09K11/06.650 C09K11/06.655 C09K11/06.660 H05B33/14.B		
F-TERM分类号	3K007/AB01 3K007/DB03 3K007/FA01 4C023/CA07 4C023/EA11 4C023/GA01 4C063/AA01 4C063/AA03 4C063/AA05 4C063/BB01 4C063/CC92 4C063/DD26 4C063/DD52 4C063/DD62 4C063/EE10		
代理人(译)	渡边 隆 正和青山 村山彦		
优先权	1020020025084 2002-05-07 KR 1020030010439 2003-02-19 KR		
外部链接	<a href="#">Espacenet</a>		

#### 摘要(译)

公开了一组新的具有被至少一个可被各种取代基取代的苯硫基取代的蒽骨架结构的化合物。新型化合物通常适用于有机电致发光。还公开了一种有机电致发光器件及其制造方法。有机电致发光器件包含各种层中的至少一种上述化合物。在发光层中使用该新型化合物的有机电致发光器件显示出显著的稳定性。

