

(19) 日本国特許庁 (JP)

(12) 公表特許公報 (A)

(11) 特許出願公表番号

特表2020-511775

(P2020-511775A)

(43) 公表日 令和2年4月16日 (2020.4.16)

(51) Int.Cl.	F I	テーマコード (参考)
H01L 51/50 (2006.01)	H05B 33/22 B	3K107
C09K 11/06 (2006.01)	H05B 33/14 A	4C056
C07D 263/52 (2006.01)	C09K 11/06 690	4C063
C07D 277/60 (2006.01)	C07D 263/52	
C07D 417/04 (2006.01)	C07D 277/60	
審査請求 未請求 予備審査請求 未請求 (全 40 頁) 最終頁に続く		

(21) 出願番号	特願2019-541700 (P2019-541700)	(71) 出願人	509266480
(86) (22) 出願日	平成30年2月9日 (2018.2.9)		ローム・アンド・ハース・エレクトロニク・マテリアルズ・コリア・リミテッド
(85) 翻訳文提出日	令和1年8月1日 (2019.8.1)		大韓民国 331-980 チュンチョンナムード チョナンシー ソブクーク 3コンダン 1ーロ 56
(86) 国際出願番号	PCT/KR2018/001756	(74) 代理人	110000589
(87) 国際公開番号	W02018/151470		特許業務法人センダ国際特許事務所
(87) 国際公開日	平成30年8月23日 (2018.8.23)	(72) 発明者	ドゥーヒョン・ムン
(31) 優先権主張番号	10-2017-0020862		大韓民国 18449 ギョンギード ファソンシーサムスン 1ーロ 5ーギル 20
(32) 優先日	平成29年2月16日 (2017.2.16)		
(33) 優先権主張国・地域又は機関	韓国 (KR)		
		最終頁に続く	

(54) 【発明の名称】 有機エレクトロルミネセント化合物及びこれを含む有機エレクトロルミネセントデバイス

(57) 【要約】

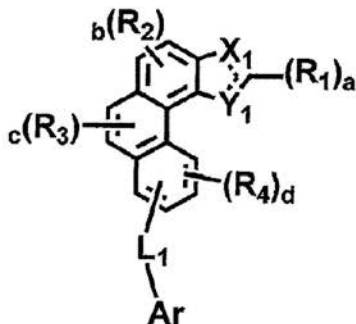
本開示は、有機エレクトロルミネセント化合物及びこれを含む有機エレクトロルミネセントデバイスに関する。改良された発光効率を有する有機エレクトロルミネセントデバイスを作製するために本開示による有機エレクトロルミネセント化合物が電子輸送層及び/又は電子緩衝層に含有される。

【特許請求の範囲】

【請求項 1】

以下の式 1 :

【化 1】



----- (1)

(式中、

X_1 及び Y_1 は、それぞれ独立して、 $-N=$ 、 $-NR_5-$ 、 $-O-$ 又は $-S-$ を表し、 X_1 が $-N=$ を表すとき、 Y_1 は $-NR_5-$ 、 $-O-$ 又は $-S-$ を表し、及び X_1 が $-NR_5-$ を表すとき、 Y_1 が $-N=$ 、 $-O-$ 又は $-S-$ を表し、但し、 X_1 及び Y_1 の両方が $-O-$ 又は $-S-$ を表すことはなく、 X_1 及び Y_1 のどちらか一方が $-O-$ であるとき、他方は $-S-$ を表さず、

Ar は置換又は非置換 ($C10 - C60$) アリールを表し、

L_1 は、単結合、置換又は非置換 ($C6 - C30$) アリーレン、或いは置換又は非置換 ($3 \sim 30$ 員) ヘテロアリーレンを表し、

R_1 は、置換又は非置換 ($C6 - C30$) アリール、或いは置換又は非置換 ($3 \sim 30$ 員) ヘテロアリールを表し、

$R_2 \sim R_5$ は、それぞれ独立して、水素、ジュウテリウム、ハロゲン、シアノ、置換又は非置換 ($C1 - C30$) アルキル、置換又は非置換 ($C6 - C30$) アリール、置換又は非置換 ($3 \sim 30$ 員) ヘテロアリール、置換又は非置換 ($C3 - C30$) シクロアルキル、置換又は非置換 ($C1 - C30$) アルコキシ、置換又は非置換トリ ($C1 - C30$) アルキルシリル、置換又は非置換ジ ($C1 - C30$) アルキル ($C6 - C30$) アリールシリル、置換又は非置換 ($C1 - C30$) アルキルジ ($C6 - C30$) アリールシリル、置換又は非置換トリ ($C6 - C30$) アリールシリル、置換又は非置換モノ - 又はジ - ($C1 - C30$) アルキルアミノ、置換又は非置換モノ - 又はジ - ($C6 - C30$) アリールアミノ、或いは置換又は非置換 ($C1 - C30$) アルキル ($C6 - C30$) アリールアミノを表すか、或いは、隣接する置換基と結合して、置換又は非置換の、($C3 - C30$) 単環式又は多環式、脂環式又は芳香族環、又は脂環式環と芳香族環との組合せを形成してもよく、これらの炭素原子は、窒素、酸素、及び硫黄から選択される少なくとも 1 つのヘテロ原子で置き換えられてもよく、

$a \sim c$ は、それぞれ独立して、1 又は 2 の整数を表し、 d は 1 $\sim$ 3 の整数を表し、前記ヘテロアリール (エン) は、B、N、O、S、Si、及び P から選択される少なくとも 1 つのヘテロ原子を含む)

によって表される有機エレクトロルミネセント化合物。

【請求項 2】

Ar 、 L_1 、及び $R_1 \sim R_5$ における置換アルキル、置換アリール (エン)、置換ヘテロアリール (エン)、置換シクロアルキル、置換アルコキシ、置換トリアルキルシリル、置換ジアルキルアリールシリル、置換アルキルジアリールシリル、置換トリアリールシリル、置換モノ - 又はジアルキルアミノ、置換モノ - 又はジアリールアミノ、置換アルキルアリールアミノ、及び置換単環式又は多環式、脂環式、芳香族環の置換基、又はそれらの組合せは、それぞれ独立して、ジュウテリウム、ハロゲン、シアノ、カルボキシル、ニトロ、ヒドロキシル、($C1 - C30$) アルキル、ハロ ($C1 - C30$) アルキル、($C2 - C30$) アルケニル、($C2 - C30$) アルキニル、($C1 - C30$) アルコキシ、(

C 1 - C 3 0) アルキルチオ、(C 3 - C 3 0) シクロアルキル、(C 3 - C 3 0) シクロアルケニル、(3 ~ 7 員) ヘテロシクロアルキル、(C 6 - C 3 0) アリールオキシ、(C 6 - C 3 0) アリールチオ、(3 ~ 3 0 員) ヘテロアリール、(C 6 - C 3 0) アリール、トリ (C 1 - C 3 0) アルキルシリル、トリ (C 6 - C 3 0) アリールシリル、ジ (C 1 - C 3 0) アルキル (C 6 - C 3 0) アリールシリル、(C 1 - C 3 0) アルキルジ (C 6 - C 3 0) アリールシリル、アミノ、モノ - 又はジ (C 1 - C 3 0) アルキルアミノ、モノ - 又はジ (C 6 - C 3 0) アリールアミノ、(C 1 - C 3 0) アルキル (C 6 - C 3 0) アリールアミノ、(C 1 - C 3 0) アルキルカルボニル、(C 1 - C 3 0) アルコキシカルボニル、(C 6 - C 3 0) アリールカルボニル、ジ (C 6 - C 3 0) アリールボロニル、ジ (C 1 - C 3 0) アルキルボロニル、(C 1 - C 3 0) アルキル (C 6 - C 3 0) アリールボロニル、(C 6 - C 3 0) アリール (C 1 - C 3 0) アルキル、及び (C 1 - C 3 0) アルキル (C 6 - C 3 0) アリールからなる群から選択される少なくとも 1 つである、請求項 1 に記載の有機エレクトロルミネセント化合物。

10

【請求項 3】

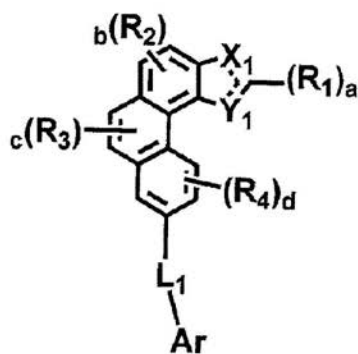
X_1 及び Y_1 のうち的一方が - N = を表し、他方が - N R₅ - 、- O - 又は - S - を表し、a が 1 を表す、請求項 1 に記載の有機エレクトロルミネセント化合物。

【請求項 4】

式 1 が、下記の式 2 又は 3 :

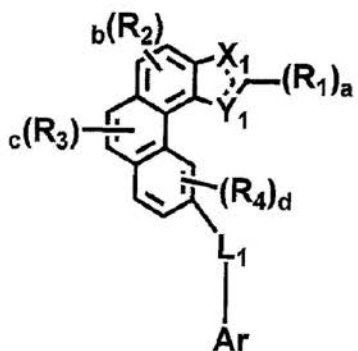
【化 2】

20



---- (2)

30



---- (3)

(式中、 X_1 、 Y_1 、Ar、 L_1 、 $R_1 \sim R_4$ 、及び a ~ d が請求項 1 に記載された通りである)

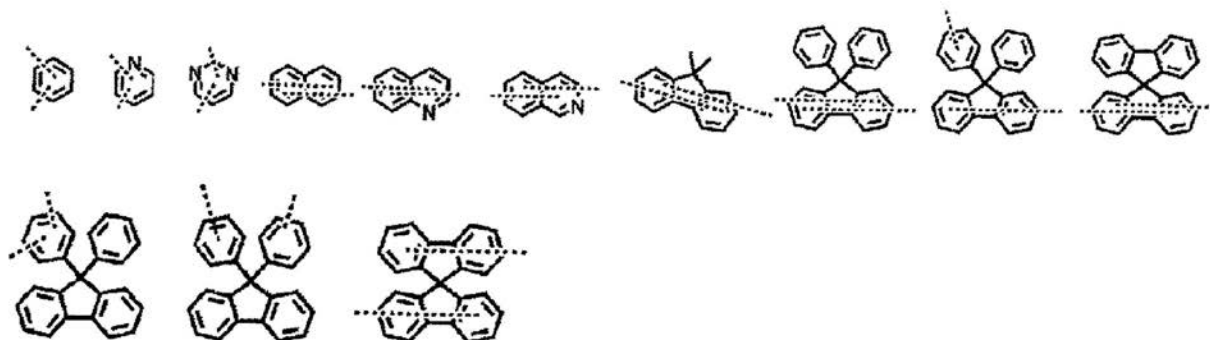
40

によって表される、請求項 1 に記載の有機エレクトロルミネセント化合物。

【請求項 5】

L_1 が単結合であるか、又は

【化 3】



10

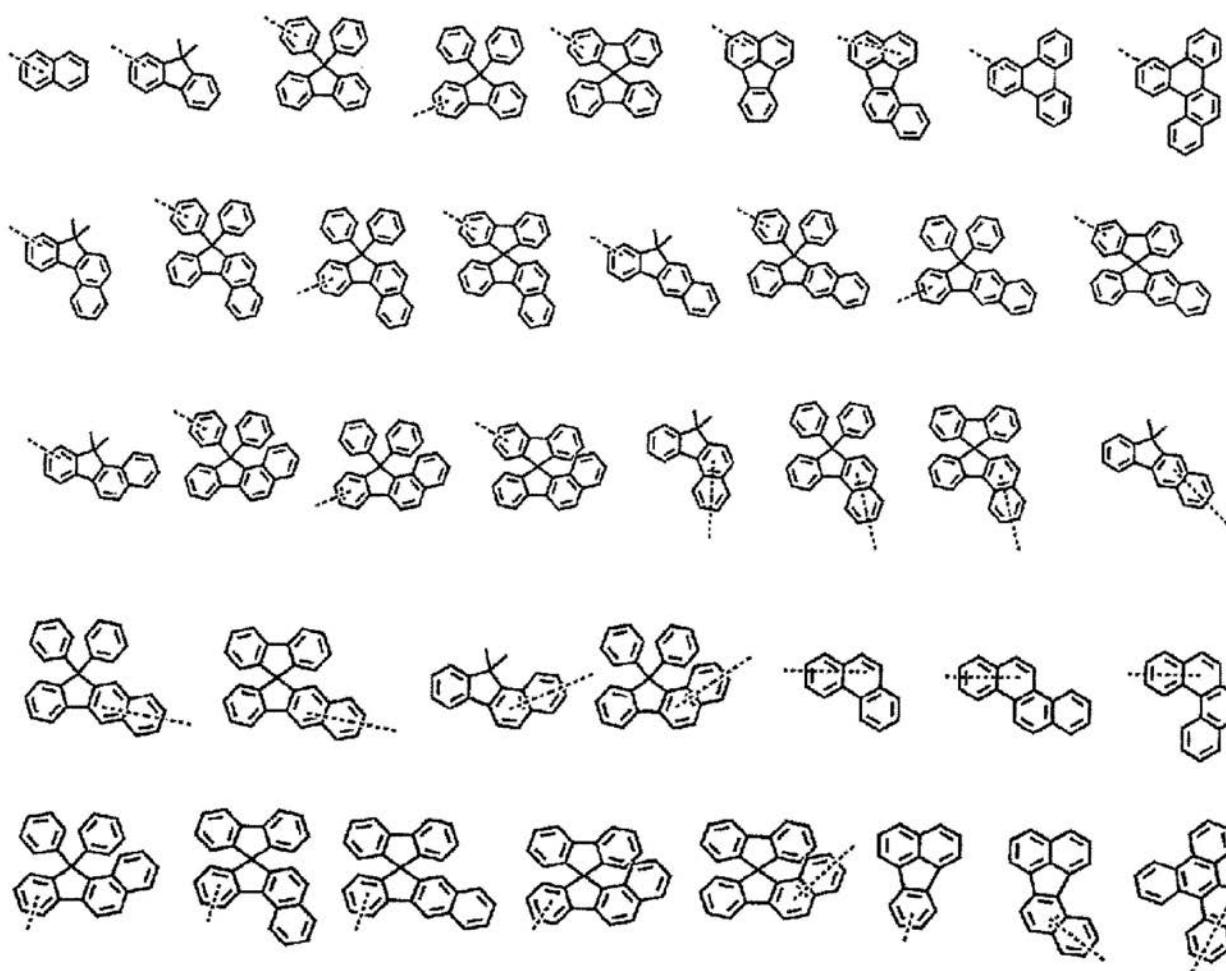
(式中、破線(- - -)が主骨格とArとの間の結合位置を表す)

からなる群から選択される任意の1つを含む、請求項1に記載の有機エレクトロルミネセント化合物。

【請求項6】

Arが

【化 4】



20

30

40

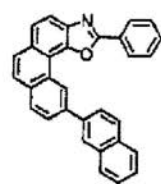
(式中、破線(- - -)が、 L_1 との結合位置を表す)

からなる群から選択される任意の1つを含む、請求項1に記載の有機エレクトロルミネセント化合物。

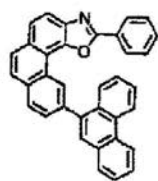
【請求項7】

式1によって表される前記化合物が、

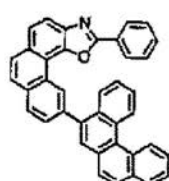
【化 5】



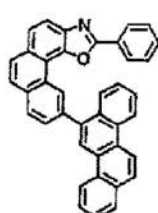
C-1



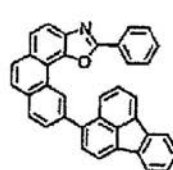
C-2



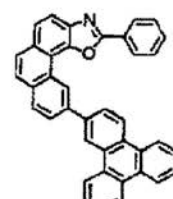
C-3



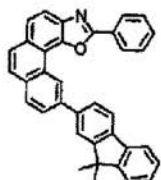
C-4



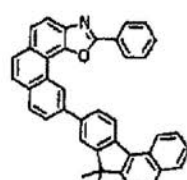
C-5



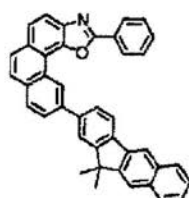
C-6



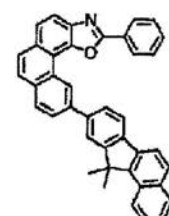
C-7



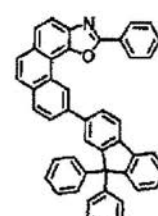
C-8



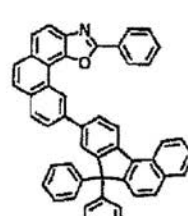
C-9



C-10

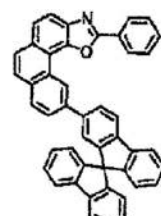


C-11

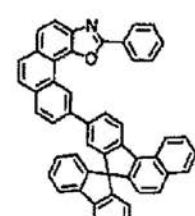


C-12

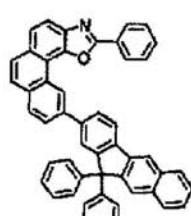
10



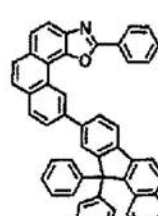
C-13



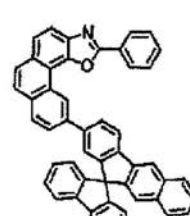
C-14



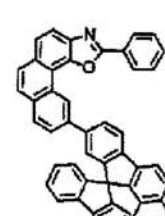
C-15



C-16

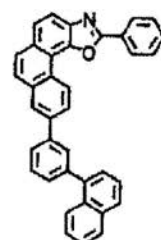


C-17

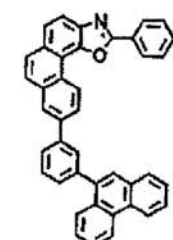


C-18

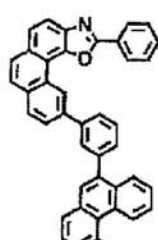
20



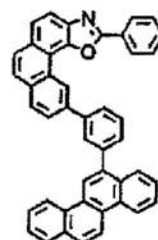
C-19



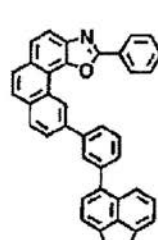
C-20



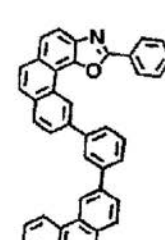
C-21



C-22

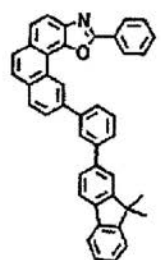


C-23

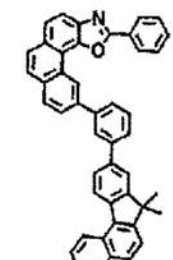


C-24

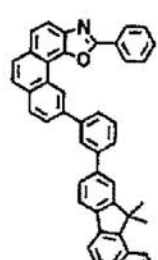
30



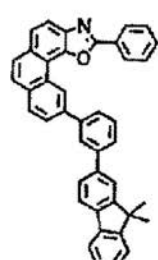
C-25



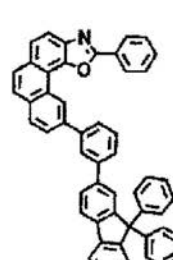
C-26



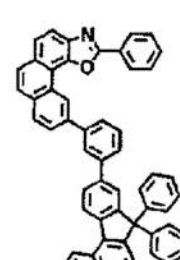
C-27



C-28



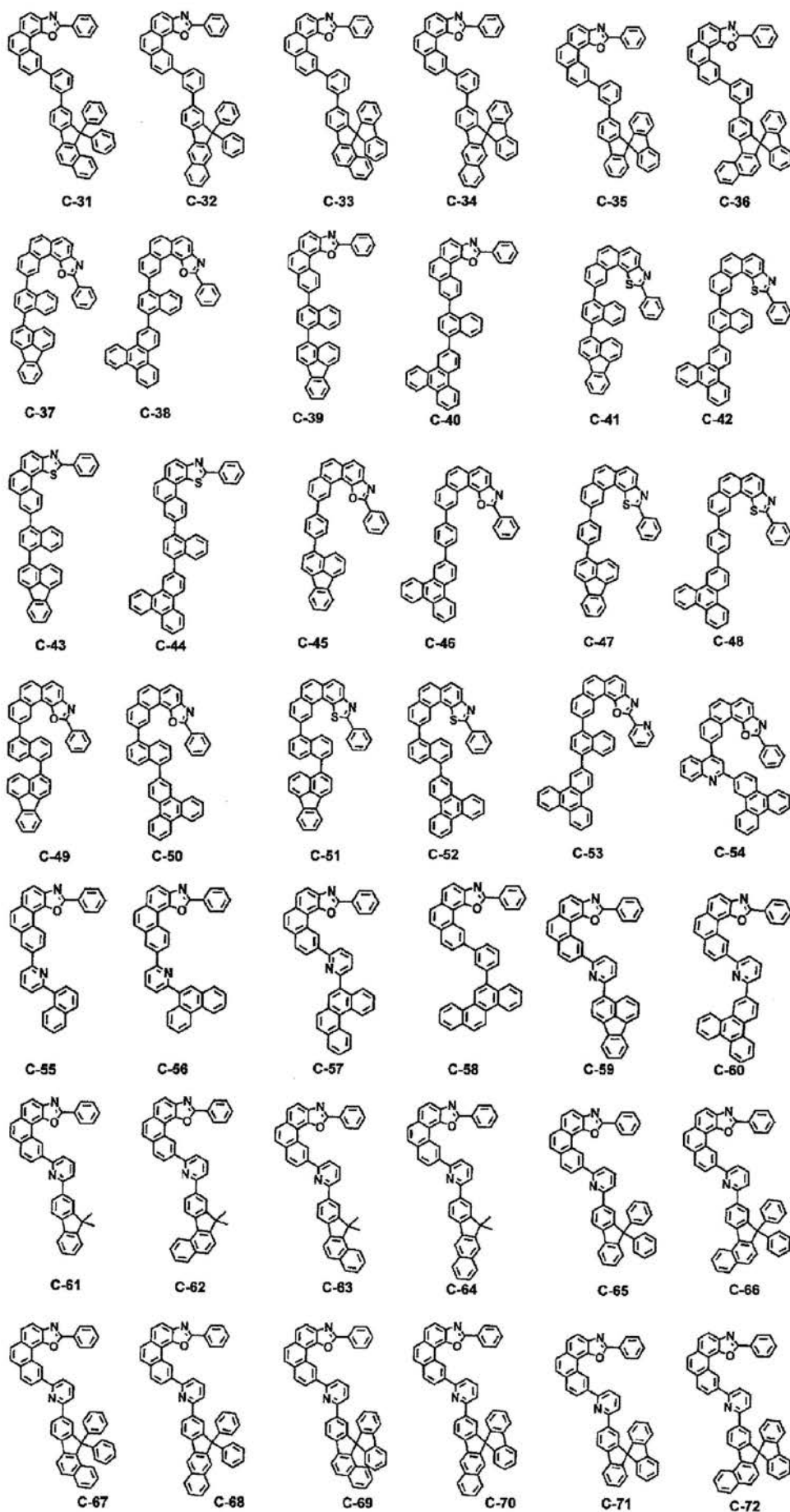
C-29



C-30

40

【化 6】



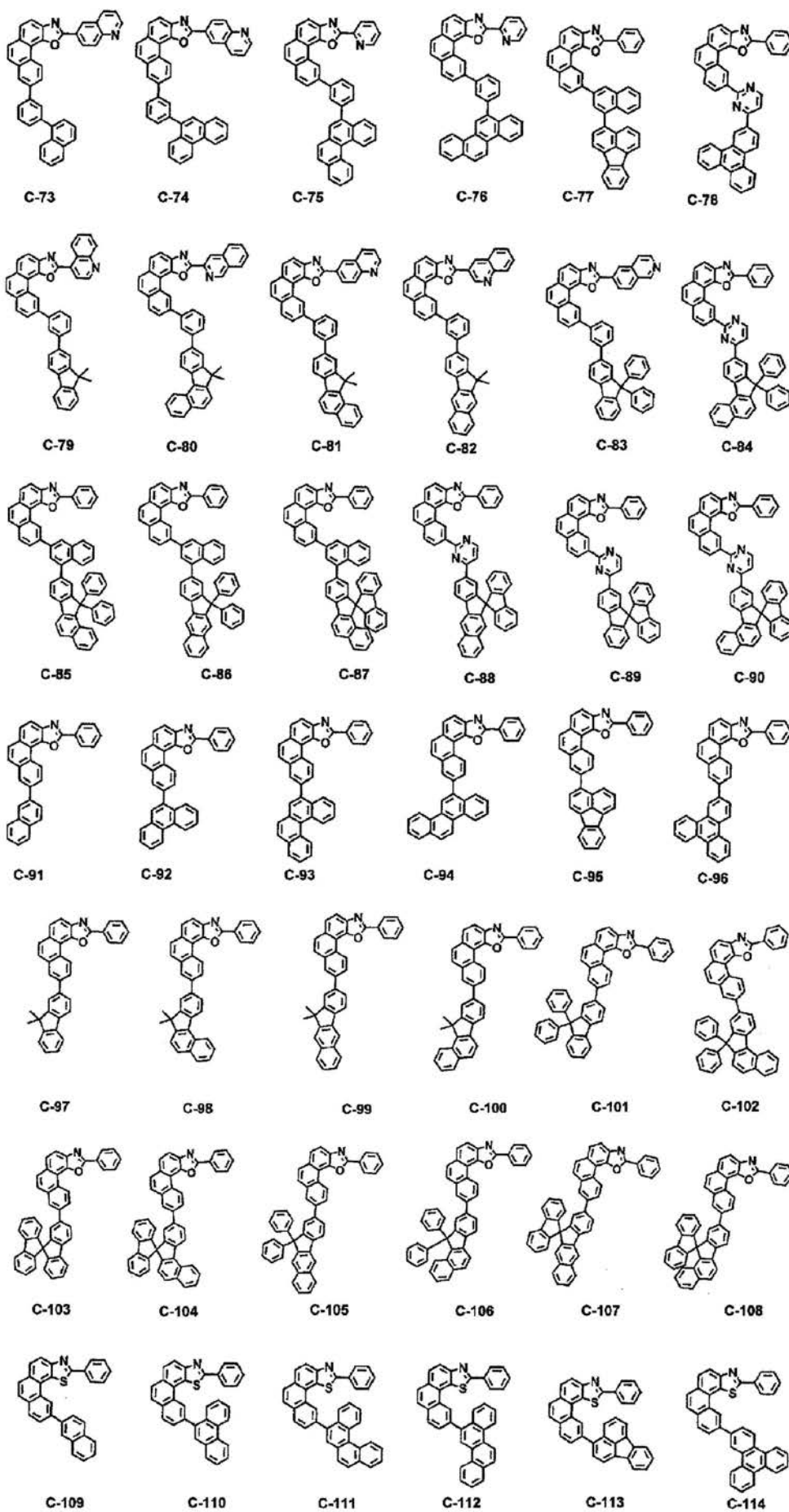
10

20

30

40

【化 7】



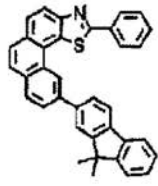
10

20

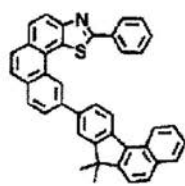
30

40

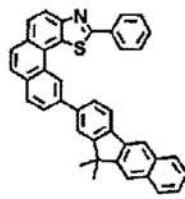
【化 8】



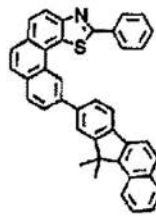
C-115



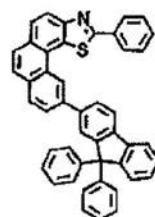
C-116



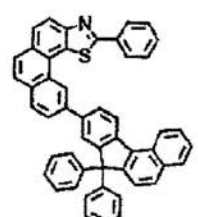
C-117



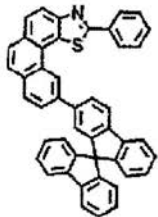
C-118



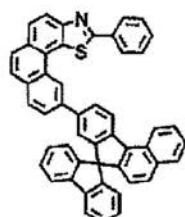
C-119



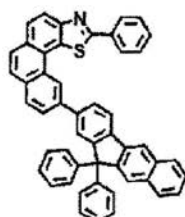
C-120



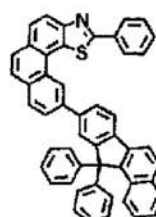
C-121



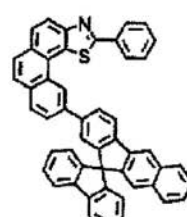
C-122



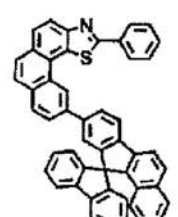
C-123



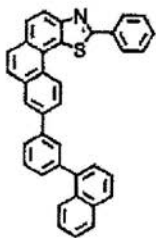
C-124



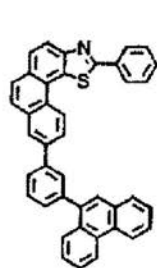
C-125



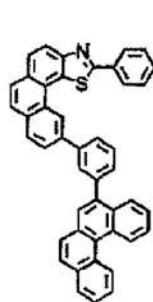
C-126



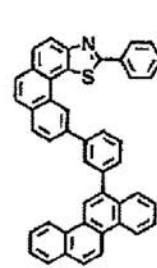
C-127



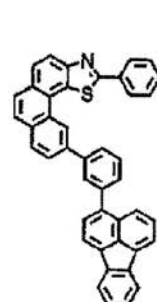
C-128



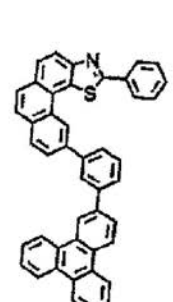
C-129



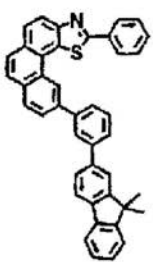
C-130



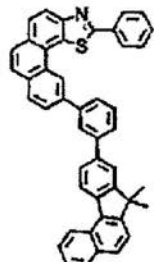
C-131



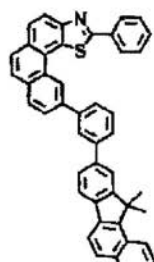
C-132



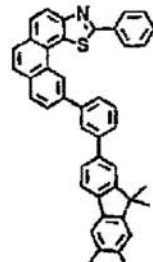
C-133



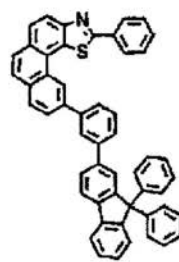
C-134



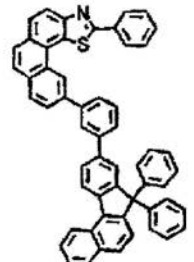
C-135



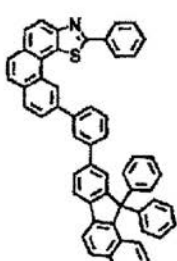
C-136



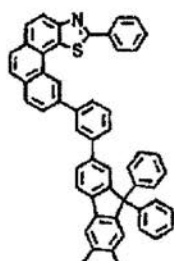
C-137



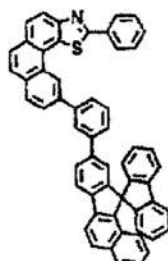
C-138



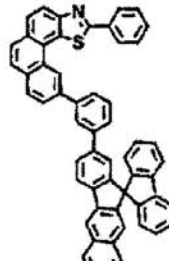
C-139



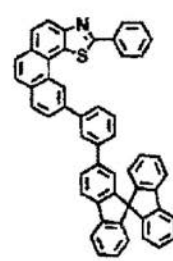
C-140



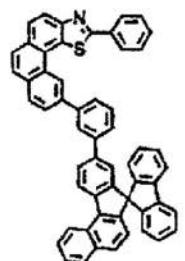
C-141



C-142



C-143



C-144

からなる群から選択される、請求項 1 に記載の有機エレクトロルミネセント化合物。

【請求項 8】

請求項 1 に記載の有機エレクトロルミネセント化合物を含む有機エレクトロルミネセント材料。

10

20

30

40

50

【請求項 9】

請求項 1 に記載の有機エレクトロルミネセント化合物を含む有機エレクトロルミネセントデバイス。

【請求項 10】

前記有機エレクトロルミネセント化合物が、電子輸送層及び電子緩衝層のうちの少なくとも 1 つに含有される、請求項 9 に記載の有機エレクトロルミネセントデバイス。

【発明の詳細な説明】

【技術分野】

【0001】

本開示は、有機エレクトロルミネセント化合物及びこれを含む有機エレクトロルミネセントデバイスに関する。

10

【背景技術】

【0002】

エレクトロルミネセントデバイス（EL デバイス）は、より広い視野角、より大きいコントラスト比及びより速い応答時間を提供するという利点を有する自発光ディスプレイデバイスである。発光層を形成するための材料として小さい芳香族ジアミン分子及びアルミニウム錯体を用いて 1987 年に Eastman Kodak によって最初の有機 EL デバイスが開発された（Appl. Phys. Lett. 51, 913, 1987 を参照）。

20

【0003】

有機 EL デバイス（OLED）は、有機エレクトロルミネセント材料に電気を印加することによって電気エネルギーを光に変換し、通常、アノード、カソード及び 2 つの電極間に形成された有機層を含む。有機 EL デバイスの有機層は、正孔注入層、正孔輸送層、正孔補助層、発光補助層、電子阻止層、発光層（ホスト材料及びドーパント材料を含有する）、電子緩衝層、正孔阻止層、電子輸送層、電子注入層等を含んでもよい。有機層において使用される材料は、それらの機能に応じて、正孔注入材料、正孔輸送材料、正孔補助材料、発光補助材料、電子阻止材料、発光材料、電子緩衝材料、正孔阻止材料、電子輸送材料、電子注入材料等に分類され得る。有機 EL デバイスでは、電圧の印加により、アノードからの正孔とカソードからの電子とが発光層に注入され、正孔と電子との再結合により、高エネルギーを有する励起子が生成される。有機発光化合物は、有機発光化合物が励起状態から基底状態に戻るとき、エネルギーによって励起状態に移行し、エネルギーから光を発する。

30

【0004】

エレクトロルミネセントデバイスでは、電子輸送材料が電子をカソードから発光層へ能動的に輸送し、発光層で再結合しない正孔の輸送を抑制して発光層での正孔と電子との再結合の機会を増大させる。こうして、電子輸送材料として電子親和性材料が用いられる。Alq₃ などの発光機能を有する有機金属錯体が電子輸送材料として慣例的に使用されている。しかしながら、Alq₃ は、他の層に移動し、青色発光デバイスにおいて使用されるときに色の純度の低下を示すという点で問題がある。従って、上記の問題を有さず、電子親和力が高く、有機 EL デバイスで電子を速やかに輸送して発光効率の高い有機 EL デバイスを提供する新しい電子輸送材料が求められていた。

40

【0005】

さらに、電子緩衝層は、パネルを作製するプロセスの間に高温に暴露されるときにデバイスの電流特性の変化によって引き起こされる輝度の減少の問題を解決するための層である。従って、電子緩衝層に含まれる化合物の特性が重要である。さらに、電子緩衝層において使用される化合物は好ましくは、LUMO（最低空分子軌道）のエネルギー値によって電子吸引特性及び電子注入を制御し、それによって有機エレクトロルミネセントデバイスの効率を改良することができる。特開第 2001-23777 A 号公報には、窒素を含有する 5 員ヘテロアリアルがフェナントレン骨格の中間ベンゼン環において縮合している化合物をホスト材料として使用する有機エレクトロルミネセントデバイスが開示されてい

50

る。

【発明の概要】

【発明が解決しようとする課題】

【0006】

特開第2001-23777A号公報に開示された化合物を含む有機エレクトロルミネセントデバイスは、青色のすぐれた色純度特性を示す。しかしながら、それはさらに、発光効率に関して改良される必要がある。

【0007】

したがって、有機エレクトロルミネセントデバイスの発光効率は、5員ヘテロアリアルがフェナントレン骨格の側ベンゼン環上で縮合される化合物が電子輸送層及び/又は電子緩衝層のために使用されるときに改良され得ることを本発明者は発見した。

10

【0008】

本開示の目的は、すぐれた発光効率を有する有機エレクトロルミネセントデバイスを作製するために有効である有機エレクトロルミネセント化合物を提供することである。

【課題を解決するための手段】

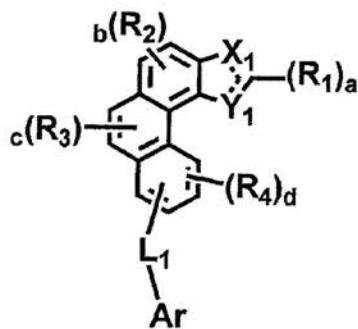
【0009】

上記の技術的問題を解決するための集中的な研究の結果として、本発明者は、前述の目的を以下の式1

【0010】

【化1】

20



----- (1)

【0011】

30

(式中、

X_1 及び Y_1 は、それぞれ独立して、 $-N=$ 、 $-NR_5-$ 、 $-O-$ 又は $-S-$ を表し、 X_1 が $-N=$ を表すとき、 Y_1 は $-NR_5-$ 、 $-O-$ 又は $-S-$ を表し、及び X_1 が $-NR_5-$ を表すとき、 Y_1 は $-N=$ 、 $-O-$ 又は $-S-$ を表し、

但し、 X_1 及び Y_1 の両方が $-O-$ 又は $-S-$ を表すことはなく、 X_1 及び Y_1 のどちらか一方が $-O-$ を表すとき、他方は $-S-$ を表さず、

Ar は置換又は非置換 ($C10-C60$) アリールを表し、

L_1 は、単結合、置換又は非置換 ($C6-C30$) アリーレン、或いは置換又は非置換 ($3\sim30$ 員) ヘテロアリーレンを表し、

R_1 は、置換又は非置換 ($C6-C30$) アリール、或いは置換又は非置換 ($3\sim30$ 員) ヘテロアリーールを表し、

40

$R_2\sim R_5$ は、それぞれ独立して、水素、ジュウテリウム、ハロゲン、シアノ、置換又は非置換 ($C1-C30$) アルキル、置換又は非置換 ($C6-C30$) アリール、置換又は非置換 ($3\sim30$ 員) ヘテロアリーール、置換又は非置換 ($C3-C30$) シクロアルキル、置換又は非置換 ($C1-C30$) アルコキシ、置換又は非置換トリ ($C1-C30$) アルキルシリル、置換又は非置換ジ ($C1-C30$) アルキル ($C6-C30$) アリールシリル、置換又は非置換 ($C1-C30$) アルキルジ ($C6-C30$) アリールシリル、置換又は非置換トリ ($C6-C30$) アリールシリル、置換又は非置換モノ - 又はジ - ($C1-C30$) アルキルアミノ、置換又は非置換モノ - 又はジ - ($C6-C30$) アリールアミノ、或いは置換又は非置換 ($C1-C30$) アルキル ($C6-C30$) アリールア

50

ミノを表すか、或いは、隣接する置換基と結合して、置換又は非置換の、(C₃ - C₃₀) 単環式又は多環式、脂環式又は芳香族環、又は脂環式環と芳香族環との組合せを形成してもよく、これらの炭素原子は、窒素、酸素、及び硫黄から選択される少なくとも1つのヘテロ原子で置き換えられてもよく、

a ~ c は、それぞれ独立して、1又は2の整数を表し、d は1 ~ 3の整数を表し、ヘテロアリアル(エン)は、B、N、O、S、Si、及びPから選択される少なくとも1つのヘテロ原子を含む)

によって表される有機エレクトロルミネセント化合物によって達成することができることを見出し、本発明を完成した。

【発明を実施するための形態】

【0012】

本発明の有利な効果

電子輸送層及び/又は電子緩衝層において本開示による有機エレクトロルミネセント化合物を使用するOLEDデバイスは、従来の有機エレクトロルミネセント化合物を使用するOLEDデバイスと比較して発光効率に関して著しく改良される。さらに、或いは代わりに、本開示による有機エレクトロルミネセント化合物は、高い明るさにおいても高い効率を維持することによって著しく改良された長い寿命を有することができ、それによって、高い解像度のためにますます要求がきびきびになっている、現在の傾向により適した特性を示す。

【0013】

本発明の様式

以下、本開示を詳細に説明する。しかしながら、以下の説明は本発明を説明することを意図しており、決して本発明の範囲を限定することを意味していない。

【0014】

本開示は、式1によって表される有機エレクトロルミネセント化合物、有機エレクトロルミネセント化合物を含む有機エレクトロルミネセンス材料、及び有機エレクトロルミネセント化合物を含む有機エレクトロルミネセントデバイスに関する。

【0015】

本開示における「有機エレクトロルミネセント化合物」という用語は、有機エレクトロルミネセントデバイスに使用されてもよく、必要に応じて、有機エレクトロルミネセントデバイスを構成する任意の層に含まれてもよい化合物を意味する。

【0016】

本開示における「有機エレクトロルミネセント材料」という用語は、有機エレクトロルミネセントデバイスに使用されてもよく、且つ少なくとも1つの化合物を含んでもよい材料を意味する。必要に応じて、有機エレクトロルミネセント材料は、有機エレクトロルミネセントデバイスを構成する任意の層に含まれてもよい。例えば、有機エレクトロルミネセント材料は、正孔注入材料、正孔輸送材料、正孔補助材料、発光補助材料、電子阻止材料、発光材料、電子緩衝材料、正孔阻止材料、電子輸送材料、又は電子注入材料であってもよい。

【0017】

上記の式1によって表される化合物は、以下の通りより詳細に説明される。

【0018】

式1の有機エレクトロルミネセント化合物は、以下の式2又は3

【0019】

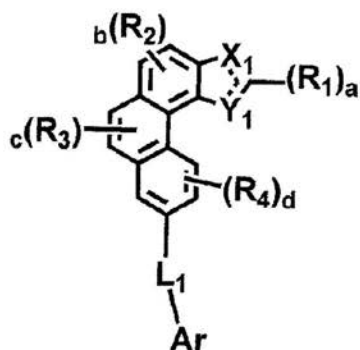
10

20

30

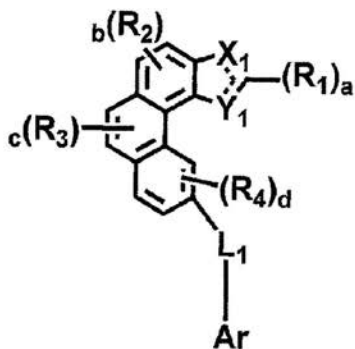
40

【化 2】



---(2)

10



---(3)

20

【0020】

(式中、 X_1 、 Y_1 、 Ar 、 L_1 、 $R_1 \sim R_4$ 、及び $a \sim d$ は式 1 に定義されたように表される) によって表されてもよい。

【0021】

式 1 ~ 3 では、 X_1 及び Y_1 は、それぞれ独立して、 $-N=$ 、 $-NR_5-$ 、 $-O-$ 又は $-S-$ を表し、 X_1 が $-N=$ を表すとき、 Y_1 は $-NR_5-$ 、 $-O-$ 又は $-S-$ を表し、及び X_1 が $-NR_5-$ を表すとき、 Y_1 は $-N=$ 、 $-O-$ 又は $-S-$ を表し、但し、 X_1 及び Y_1 の両方が $-O-$ 又は $-S-$ を表すことはなく、 X_1 及び Y_1 のどちらか一方が $-O-$ であるとき、他方は $-S-$ を表さない。本開示の一実施形態によれば、 X_1 及び Y_1 のうちの一方が $-N=$ であってもよく、他方が $-NR_5-$ 、 $-O-$ 又は $-S-$ であってもよい。 X_1 が $-N=$ であってもよく、及び Y_1 が $-NR_5-$ 、 $-O-$ 又は $-S-$ であってもよい。さらに、本開示の別の実施形態によれば、 X_1 及び Y_1 のうちの一方が $-N=$ であってもよく、他方が $-O-$ 又は $-S-$ であってもよい。 X_1 が $-N=$ であってもよく、及び Y_1 が $-O-$ 又は $-S-$ であってもよい。

30

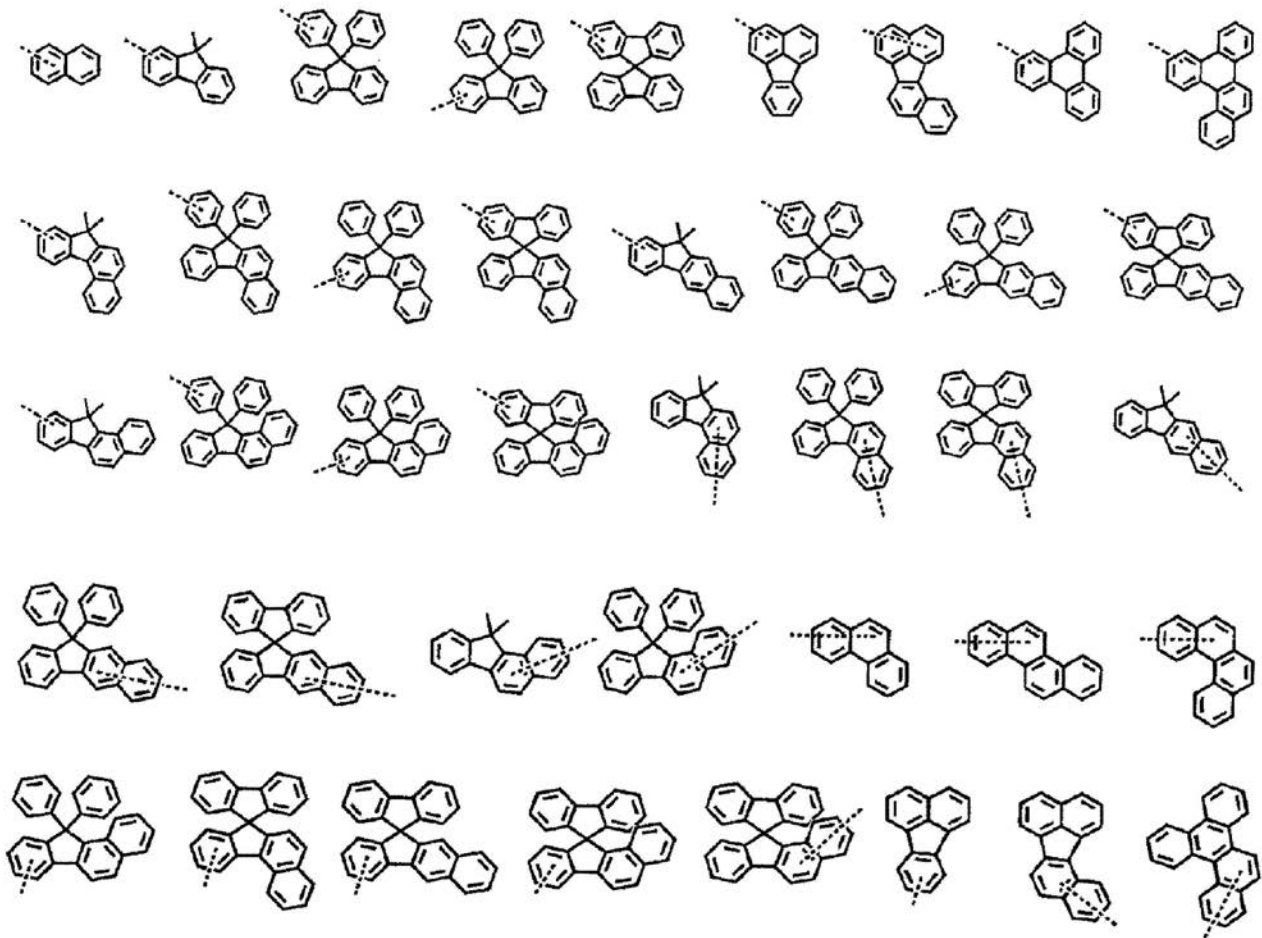
【0022】

式 1 ~ 3 では、 Ar は置換又は非置換 ($C_{10} - C_{60}$) アリール、好ましくは、置換又は非置換 ($C_{10} - C_{30}$) アリール、より好ましくは、($C_1 - C_6$) アルキル - 置換又は非置換 ($C_{10} - C_{30}$) アリールを表し、そこでアリールは縮合環であってもよく、スピロ構造物を含んでもよい。本開示の一実施形態によれば、 Ar は以下の群から選択される任意の 1 つを含んでもよく、そこで、破線 (---) はそれぞれ、 L_1 との結合位置を表し、例えば、以下の群における破線は、 L_1 が単結合を表すときに主骨格に結合していてもよい。

40

【0023】

【化 3】



10

20

【0024】

さらに、本開示の別の実施形態によれば、Arはナフチル、フェナントレニル、ベンゾフェナントレニル、クリセニル、フルオランテニル、トリフェニル、ジメチルフルオレニル、ジフェニルフルオレニル、ジメチルベンゾフルオレニル、ジフェニルベンゾフルオレニル、スピロ[フルオレン-フルオレン]イル、又はスピロ[フルオレン-ベンゾフルオレン]イルであってもよい。

30

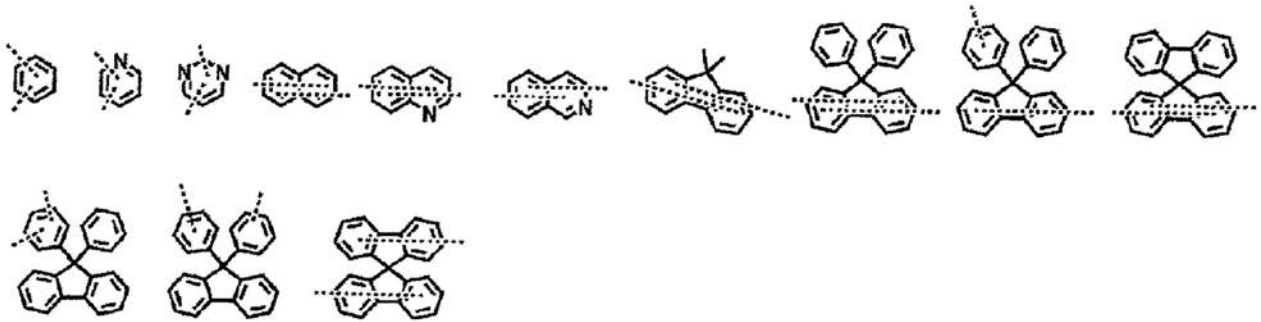
【0025】

式1～3では、L₁は、単結合、置換又は非置換(C₆-C₃₀)アリーレン、或いは置換又は非置換(3～30員)ヘテロアリーレン、好ましくは、単結合、置換又は非置換(C₆-C₂₅)アリーレン、或いは置換又は非置換(5～25員)ヘテロアリーレン、より好ましくは、単結合、置換又は非置換(C₆-C₁₈)アリーレン、或いは置換又は非置換(5～18員)ヘテロアリーレン、さらにより好ましくは、単結合、置換又は非置換(C₆-C₁₂)アリーレン、或いは置換又は非置換(5～15員)ヘテロアリーレンを表す。本開示の一実施形態によれば、L₁は単結合であるか、又は

40

【0026】

【化 4】



10

【0027】

からなる以下の群から選択される任意の1つを含んでもよい。

【0028】

上記の群において、破線(---)は主骨格とArとの間の結合位置を表す。主骨格は、式1~3においてフェナントレンが窒素、酸素及び硫黄のうちの少なくとも1つを含有する5員環と縮合している構造を有する17員ヘテロ環を意味する。また、本開示の一実施形態によれば、L₁は、式1の骨格の側ベンゼン環に結合している。

【0029】

さらに、本開示の別の実施形態によればL₁は単結合、フェニレン、ナフチレン、ピリジニレン、ピリミジニレン、又はキノリニレンであってもよい。

20

【0030】

式1~3では、R₁は、置換又は非置換(C₆-C₃₀)アリール、或いは置換又は非置換(3~30員)ヘテロアリール、好ましくは、置換又は非置換(C₆-C₂₅)アリール、或いは置換又は非置換(5~25員)ヘテロアリール、より好ましくは、置換又は非置換(C₆-C₁₈)アリール、或いは置換又は非置換(5~18員)ヘテロアリール、さらにより好ましくは、非置換(C₆-C₁₈)アリール又は窒素を含有する非置換(5~18員)ヘテロアリールを表す。本開示の一実施形態によれば、R₁は非置換フェニル、非置換ピリジニル、非置換キノリニル、又は非置換イソキノリニルであってもよい。

【0031】

式1~3では、R₂~R₅は、それぞれ独立して、水素、ジュウテリウム、ハロゲン、シアノ、置換又は非置換(C₁-C₃₀)アルキル、置換又は非置換(C₆-C₃₀)アリール、置換又は非置換(3~30員)ヘテロアリール、置換又は非置換(C₃-C₃₀)シクロアルキル、置換又は非置換(C₁-C₃₀)アルコキシ、置換又は非置換トリ(C₁-C₃₀)アルキルシリル、置換又は非置換ジ(C₁-C₃₀)アルキル(C₆-C₃₀)アリールシリル、置換又は非置換(C₁-C₃₀)アルキルジ(C₆-C₃₀)アリールシリル、置換又は非置換トリ(C₆-C₃₀)アリールシリル、置換又は非置換モノ-又はジ(C₁-C₃₀)アルキルアミノ、置換又は非置換モノ-又はジ(C₆-C₃₀)アリールアミノ、或いは置換又は非置換(C₁-C₃₀)アルキル(C₆-C₃₀)アリールアミノを表すか、或いは隣接する置換基と結合して、置換又は非置換の、(C₃-C₃₀)単環式又は多環式、脂環式、芳香族環、又は脂環式環と芳香族環との組合せを形成してもよく、これらの炭素原子は、窒素、酸素、及び硫黄から選択される少なくとも1つのヘテロ原子で置き換えられてもよく、好ましくは、それぞれ独立して、水素、ジュウテリウム、ハロゲン、シアノ、置換又は非置換(C₁-C₂₀)アルキル、置換又は非置換(C₆-C₂₅)アリール、置換又は非置換(3~25員)ヘテロアリール、置換又は非置換(C₃-C₂₅)シクロアルキル、置換又は非置換(C₁-C₂₅)アルコキシ、置換又は非置換トリ(C₁-C₂₀)アルキルシリル、置換又は非置換ジ(C₁-C₂₀)アルキル(C₆-C₂₅)アリールシリル、置換又は非置換(C₁-C₂₀)アルキルジ(C₆-C₂₅)アリールシリル、置換又は非置換トリ(C₆-C₂₅)アリールシリル、置換又は非置換モノ-又はジ(C₁-C₂₀)アルキルアミノ、置換又は非置換モノ-又はジ(C₆-C₂₅)アリールアミノ、或いは置換又は非置換(C₁-C₂₀)ア

30

40

50

ルキル (C₆ - C₂₅) アリールアミノを表す。本開示の一実施形態によれば、R₂ ~ R₄ は水素であってもよい。

【0032】

式 1 ~ 3 では、a ~ c は、それぞれ独立して、1 又は 2 の整数を表し、d は 1 ~ 3 の整数を表す。本開示の一実施形態によれば、a は 1 であってもよい。さらに、本開示の別の実施形態によれば、b ~ d は 1 であってもよい。

【0033】

ヘテロアリール (エン) は、B、N、O、S、Si、及び P から選択される少なくとも 1 つのヘテロ原子を含有する。本開示の一実施形態によれば、ヘテロアリール (エン) は少なくとも 1 つの窒素を含有してもよい。

10

【0034】

本明細書において、「(C₁ - C₃₀) アルキル」は、鎖を構成する 1 ~ 30 の炭素原子を有する直鎖又は分岐アルキル (炭素原子数は好ましくは 1 ~ 20、より好ましくは 1 ~ 10 である) であることを意図し、メチル、エチル、n - プロピル、イソプロピル、n - ブチル、イソブチル、及び tert - ブチル等を含む。「(C₃ - C₃₀) シクロアルキル」は、3 ~ 30 の環骨格炭素原子を有する単環又は多環式炭化水素であり (炭素原子数は好ましくは 3 ~ 20、より好ましくは 3 ~ 7 である)、シクロプロピル、シクロブチル、シクロペンチル、シクロヘキシル等を含む。「(C₆ - C₃₀) アリール (エン)」は、6 ~ 30 の環骨格炭素原子を有する芳香族炭化水素に由来する単環式又は縮合環基であり、部分的に飽和していてもよく、スピロ構造を含み、そこで環骨格炭素原子の数は好ましくは 6 ~ 20、より好ましくは 6 ~ 15 である。アリールには、フェニル、ビフェニル、テルフェニル、ナフチル、ピナフチル、フェニルナフチル、ナフチルフェニル、フルオレニル、フェニルフルオレニル、ジフェニルフルオレニル、ベンゾフルオレニル、ジフェニルベンゾフルオレニル、ジベンゾフルオレニル、フェナントレニル、ベンゾフェナントレニル、フェニルフェナントレニル、アントラニル、インデニル、トリフェニル、ピレニル、テトラセニル、ペリレニル、クリセニル、ナフタセニル、フルオランテニル、スピロ [フルオレン - フルオレン] イル、スピロ [フルオレン - ベンゾフルオレン] イル等が含まれる。「(3 ~ 30 員) ヘテロアリール (エン)」は、B、N、O、S、Si、及び P からなる群から選択される少なくとも 1 つのヘテロ原子、及び 3 ~ 30 の環骨格原子 (環骨格原子の数は好ましくは 5 ~ 25 である) を有する、好ましくは 1 ~ 4 のヘテロ原子を有するアリール基であり、単環式環、又は少なくとも 1 つのベンゼン環と縮合した縮合環であってもよく；部分的に飽和していてもよく；少なくとも 1 つのヘテロアリール又はアリール基をヘテロアリール基に単結合によって結合することによって形成されるヘテロアリールであってもよく；フリル、チオフェニル、ピロリル、イミダゾリル、ピラゾリル、チアゾリル、チアジアゾリル、イソチアゾリル、イソキサゾリル、オキサゾリル、オキサジアゾリル、トリアジニル、テトラジニル、トリアゾリル、テトラゾリル、フラザニル、ピリジニル、ピラジニル、ピリミジニル、ピリダジニル等の単環式環型ヘテロアリール、及びベンゾフラニル、ベンゾチオフェニル、イソベンゾフラニル、ジベンゾフラニル、ジベンゾチオフェニル、ベンゾイミダゾリル、ベンゾチアゾリル、ベンゾイソチアゾリル、ベンゾイソキサゾリル、ベンゾキサゾリル、イソインドリル、インドリル、ベンゾインドリル、インダゾリル、ベンゾチアジアゾリル、キノリル、イソキノリル、シンノリニル、キナゾリニル、キノキサリニル、カルバゾリル、ベンゾカルバゾリル、ジベンゾカルバゾリル、フェノキサジニル、フェナントリジニル、ベンゾジオキサリル等の縮合環型ヘテロアリールを含む。「ハロゲン」は F、Cl、Br、及び I を含む。

20

30

40

【0035】

さらに、「置換又は非置換」という表現における「置換」は、特定の官能基中の水素原子が別の原子又は別の官能基、即ち置換基で置き換えられていることを意味する。式 1 ~ 3 の Ar、L₁、及び R₁ ~ R₅ における置換アルキル、置換アリール (エン)、置換ヘテロアリール (エン)、置換シクロアルキル、置換アルコキシ、置換トリアルキルシリル、置換ジアルキルアリールシリル、置換アルキルジアリールシリル、置換トリアリールシ

50

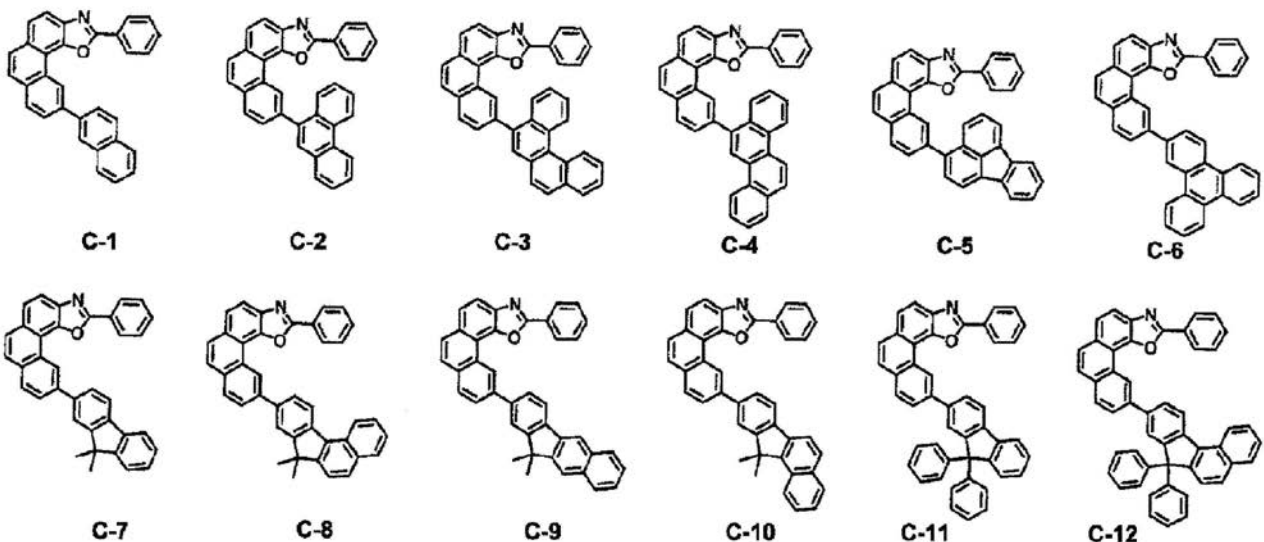
リル、置換モノ - 又はジアルキルアミノ、置換モノ - 又はジアリールアミノ、置換アルキルアリールアミノ、及び置換単環式環又は多環式環、脂環式環又は芳香族環の置換基、又はそれらの組合せは、それぞれ独立して、ジウテリウム；ハロゲン；シアノ；カルボキシル；ニトロ；ヒドロキシ；(C1 - C30)アルキル；ハロ(C1 - C30)アルキル；(C2 - C30)アルケニル；(C2 - C30)アルキニル；(C1 - C30)アルコキシ；(C1 - C30)アルキルチオ；(C3 - C30)シクロアルキル；(C3 - C30)シクロアルケニル；(3 ~ 7員)ヘテロシクロアルキル；(C6 - C30)アリールオキシ；(C6 - C30)アリールチオ；(3 ~ 30員)ヘテロアリール、例えば、(C1 - C6)アルキル - 及び / 又は(C6 - C30)アリール - 置換又は非置換(3 ~ 30員)ヘテロアリール；(C6 - C30)アリール、例えば、シアノ - 、(3 ~ 30員)ヘテロアリール - 及び / 又はモノ - 又はジ(C6 - C30)アリールアミノ - 置換又は非置換(C6 - C30)アリール；トリ(C1 - C30)アルキルシリル；トリ(C6 - C30)アリールシリル；ジ(C1 - C30)アルキル(C6 - C30)アリールシリル；(C1 - C30)アルキルジ(C6 - C30)アリールシリル；アミノ；モノ - 又はジ(C1 - C30)アルキルアミノ；モノ - 又はジ(C6 - C30)アリールアミノ；(C1 - C30)アルキル(C6 - C30)アリールアミノ；(C1 - C30)アルキルカルボニル；(C1 - C30)アルコキシカルボニル；(C6 - C30)アリールカルボニル；ジ(C6 - C30)アリールボロニル；ジ(C1 - C30)アルキルボロニル；(C1 - C30)アルキル(C6 - C30)アリールボロニル；(C6 - C30)アリール(C1 - C30)アルキル；及び(C1 - C30)アルキル(C6 - C30)アリールからなる群から選択される少なくとも1つであり、好ましくは、(C1 - C6)アルキル；又は(C6 - C30)アリール；(3 ~ 30員)ヘテロアリール；及びモノ - 又はジ(C6 - C30)アリールアミノ、例えば、非置換メチル、又は非置換フェニルからなる群から選択される少なくとも1つである。

【0036】

式1によって表される化合物は以下の化合物によってより具体的に示されてもよいが、それらに限定されない：

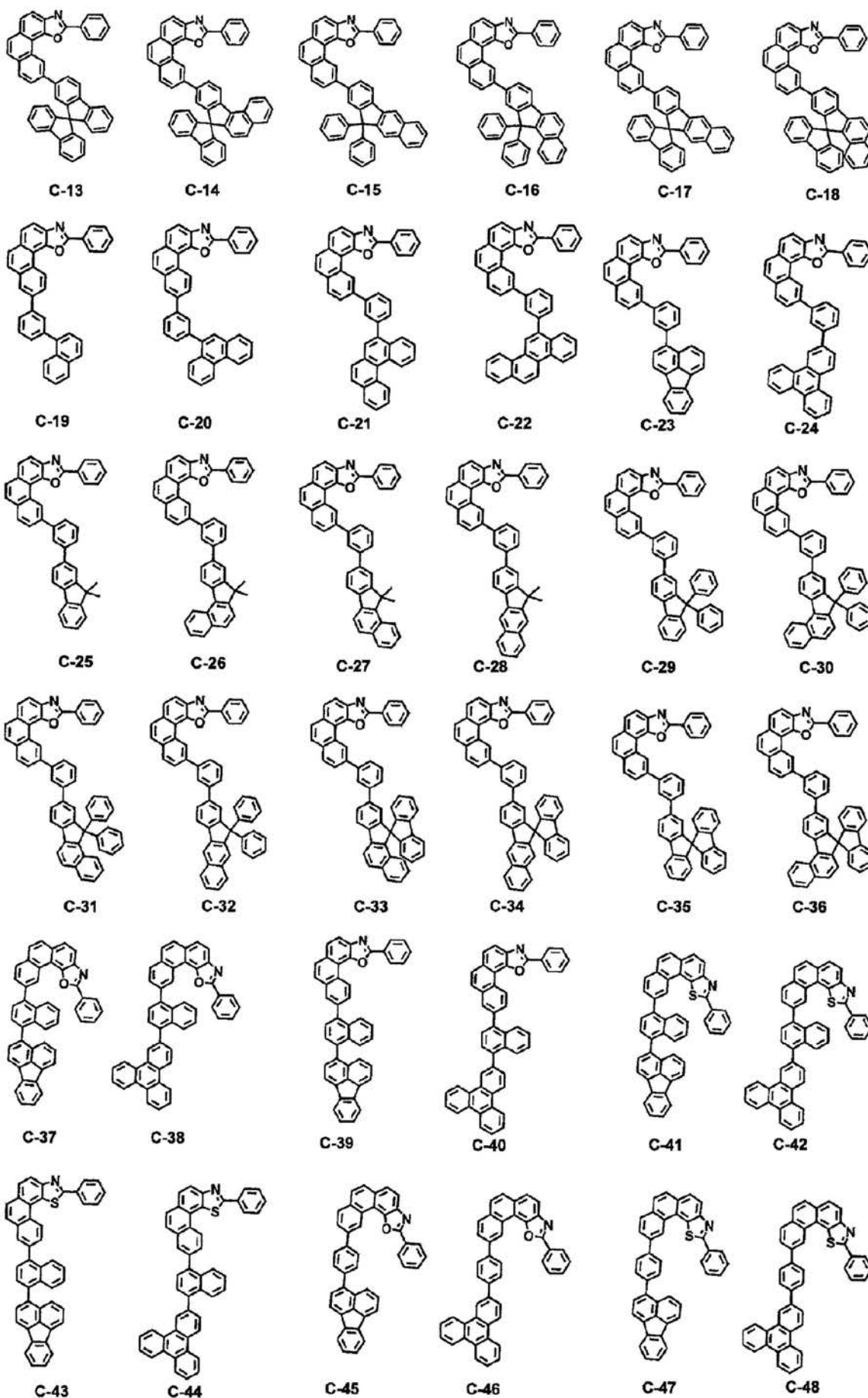
【0037】

【化5】



【0038】

【化 6】



10

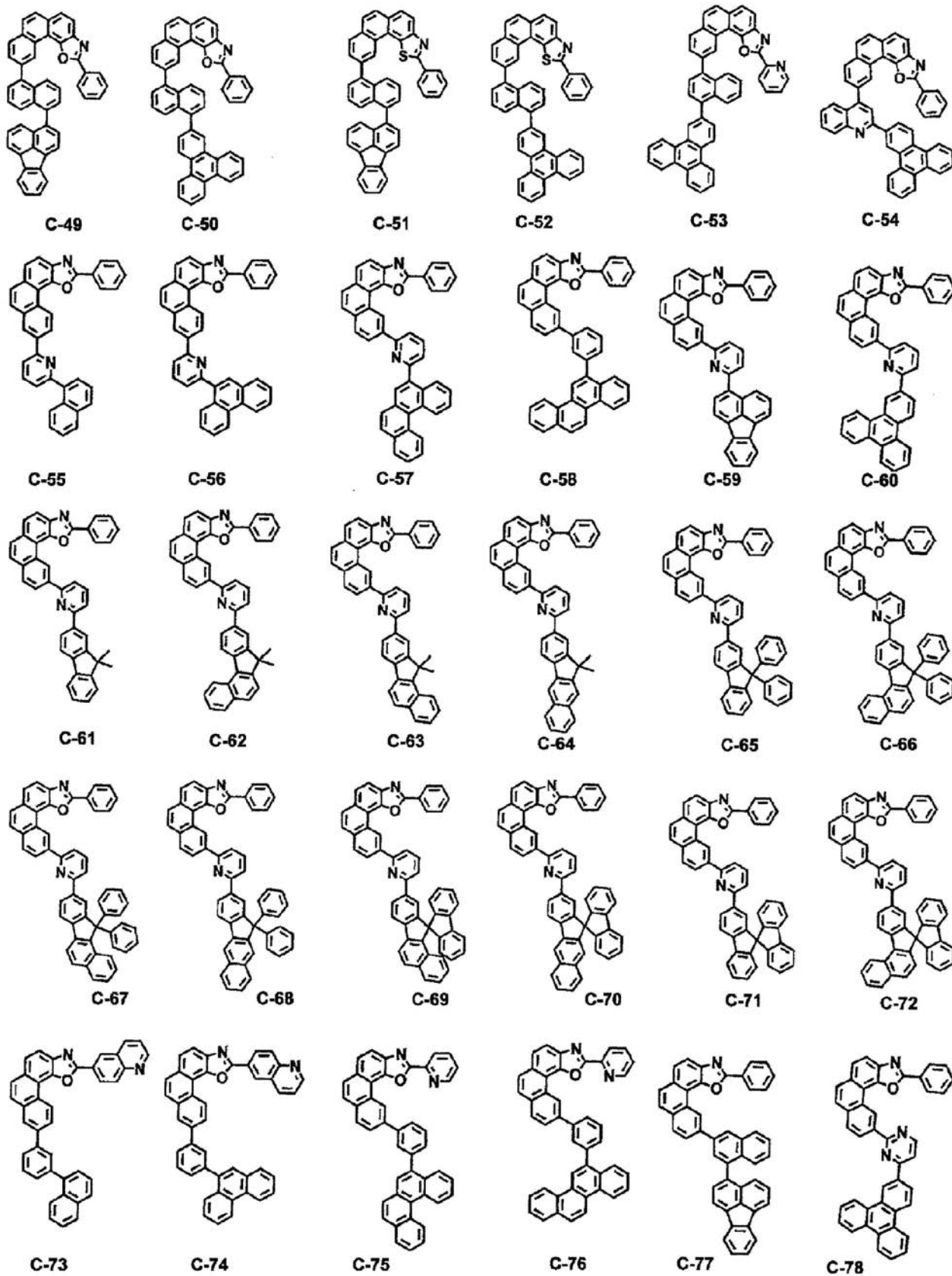
20

30

40

50

【化 7】



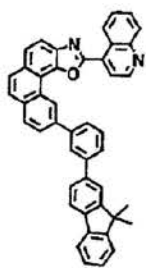
10

20

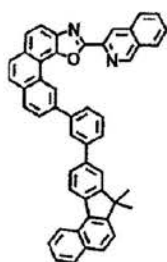
30

40

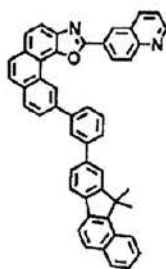
【化 8】



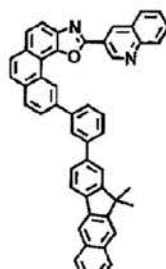
C-79



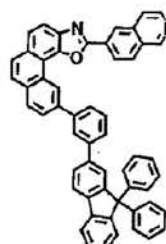
C-80



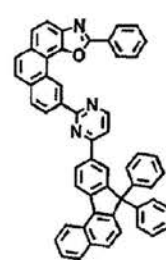
C-81



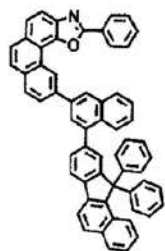
C-82



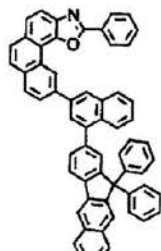
C-83



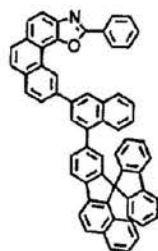
C-84



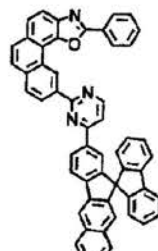
C-85



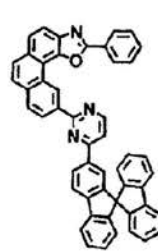
C-86



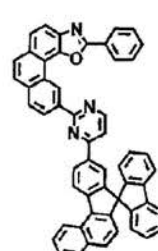
C-87



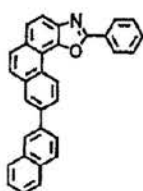
C-88



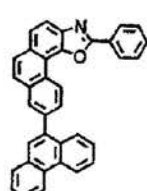
C-89



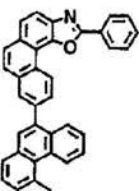
C-90



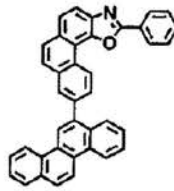
C-91



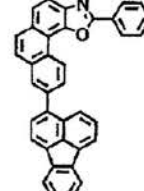
C-92



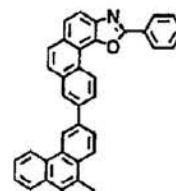
C-93



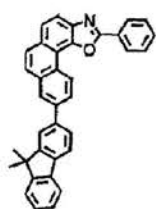
C-94



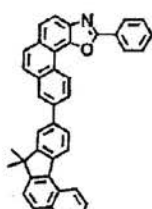
C-95



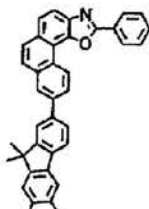
C-96



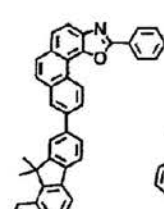
C-97



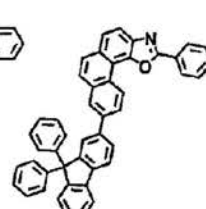
C-98



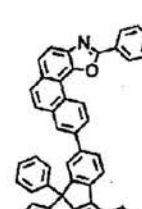
C-99



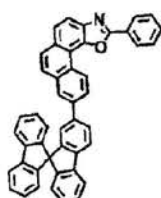
C-100



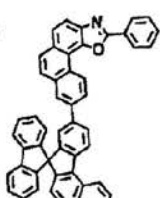
C-101



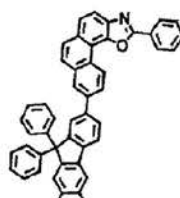
C-102



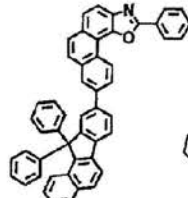
C-103



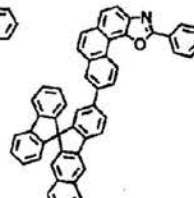
C-104



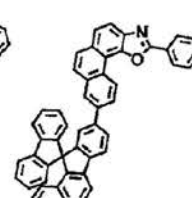
C-105



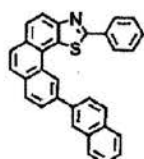
C-106



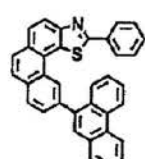
C-107



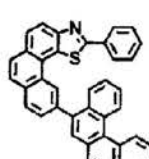
C-108



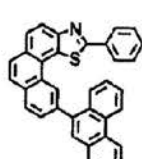
C-109



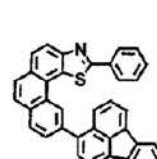
C-110



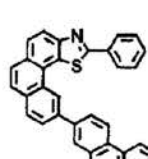
C-111



C-112

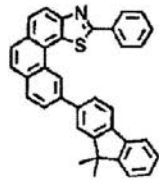


C-113

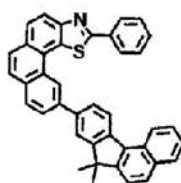


C-114

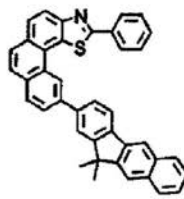
【化 9】



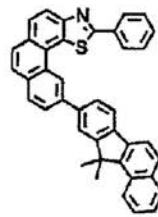
C-115



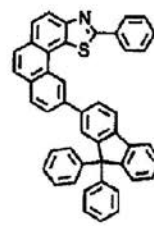
C-116



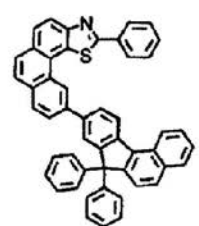
C-117



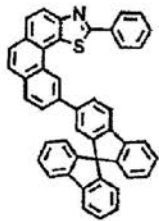
C-118



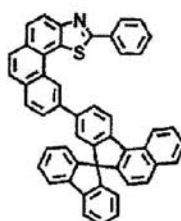
C-119



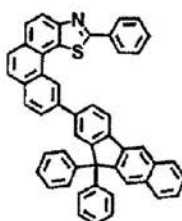
C-120



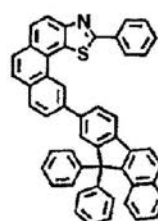
C-121



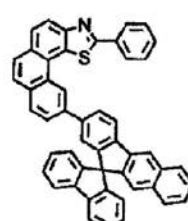
C-122



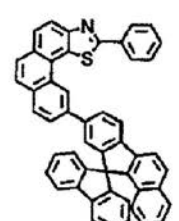
C-123



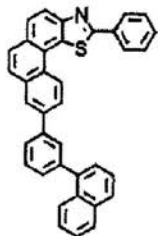
C-124



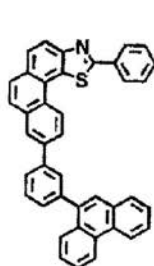
C-125



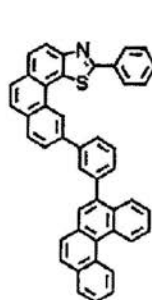
C-126



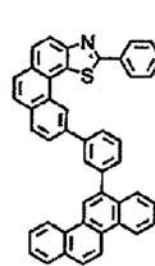
C-127



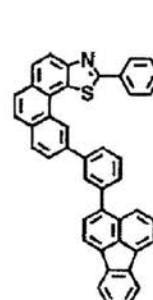
C-128



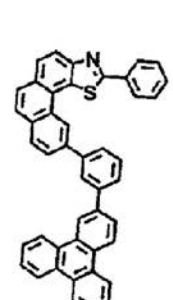
C-129



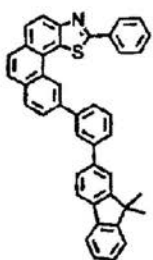
C-130



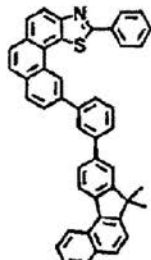
C-131



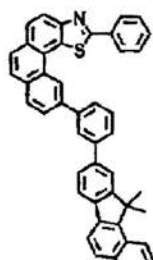
C-132



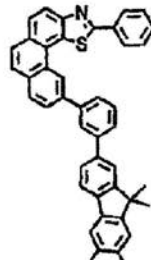
C-133



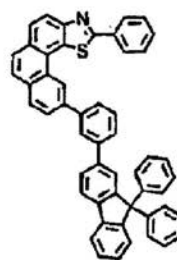
C-134



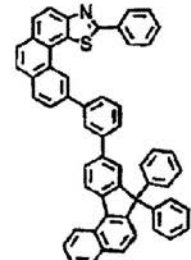
C-135



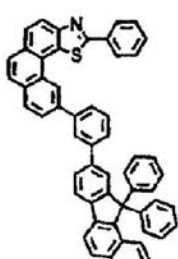
C-136



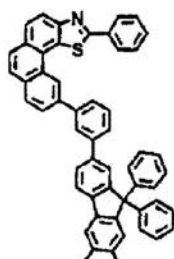
C-137



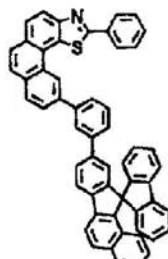
C-138



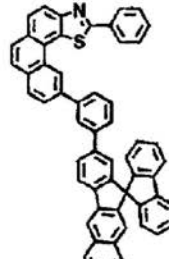
C-139



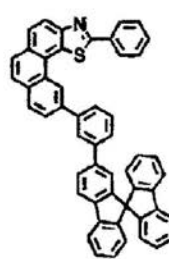
C-140



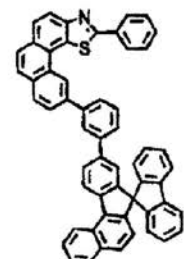
C-141



C-142



C-143



C-144

【 0 0 4 2 】

本開示による式 1 の化合物は、以下の反応スキーム 1 又は 2 によって調製することができるが、それらに限定されず、また、当業者に公知の合成方法によって調製することができる。

10

20

30

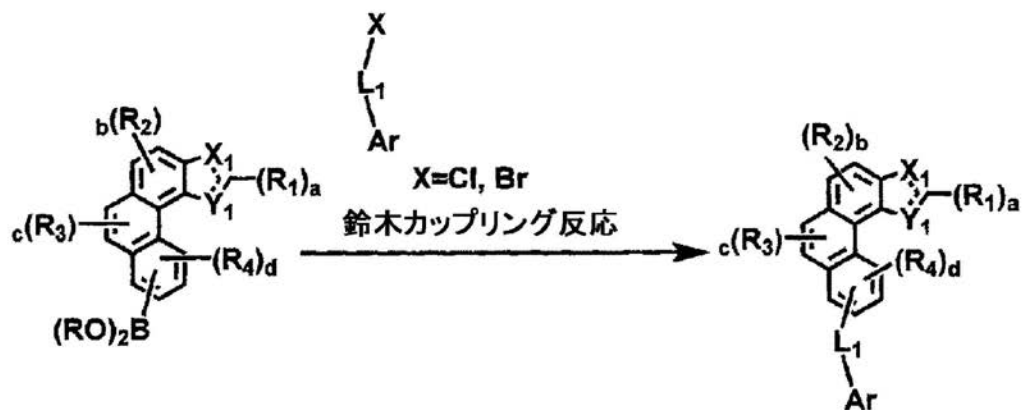
40

50

【 0 0 4 3 】

【 化 1 0 】

[反応スキーム 1]

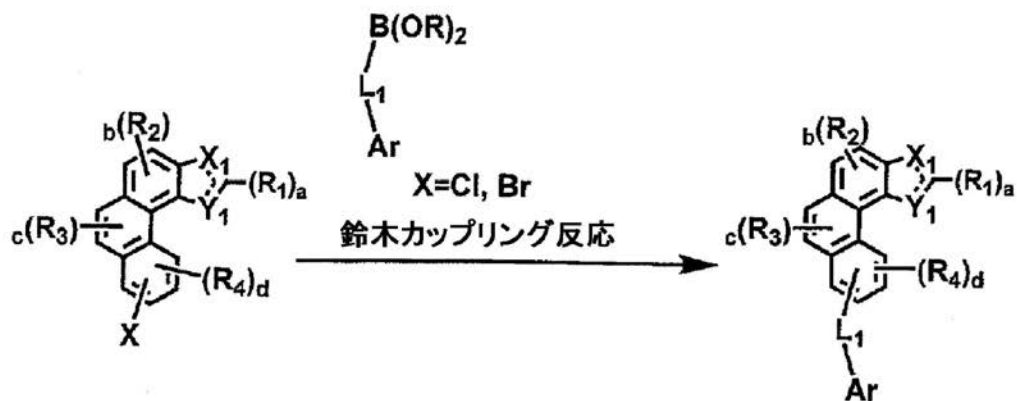


10

【 0 0 4 4 】

【 化 1 1 】

[反応スキーム 2]



20

30

【 0 0 4 5 】

反応スキーム 1 及び 2 において、 X_1 、 Y_1 、 Ar 、 L_1 、 $R_1 \sim R_4$ 、及び $a \sim d$ は式 1 において定義された通りである。

【 0 0 4 6 】

本開示は、式 1 の有機エレクトロルミネセント化合物を含む有機エレクトロルミネセント材料、及び有機エレクトロルミネセント材料を含む有機エレクトロルミネセントデバイスを提供する。

【 0 0 4 7 】

有機エレクトロルミネセント材料は、唯一の化合物として本開示の有機エレクトロルミネセント化合物からなってもよく、又は有機エレクトロルミネセンス材料において一般的に使用される従来の材料をさらに含んでもよい。

40

【 0 0 4 8 】

本開示の有機エレクトロルミネセントデバイスは、第 1 電極、第 2 電極、及び第 1 電極と第 2 電極との間の少なくとも 1 つの有機層を含んでもよい。有機層は、少なくとも 1 つの式 1 の有機エレクトロルミネセント化合物を含んでもよい。さらに、有機層は、アリールアミン系化合物及びスチリルアリールアミン系化合物からなる群から選択される少なくとも 1 つの化合物を更にも含む。また、有機層は、1 族の金属、2 族の金属、4 族の遷移金属、5 族の遷移金属、周期律表の d - 遷移元素のランタニド及び有機金属からなる群から選択される少なくとも 1 つの金属、又は前述の金属を含む少なくとも 1 つの錯体

50

化合物を更に含んでもよい。

【0049】

第1及び第2の電極のうちの一方はアノードであってもよく、他方はカソードであってもよい。有機層は、発光層を含んでもよく、正孔注入層、正孔輸送層、正孔補助層、発光補助層、電子輸送層、電子緩衝層、電子注入層、中間層、正孔阻止層、及び電子阻止層から選択される少なくとも1つの層を更に含んでもよい。本開示の一実施形態によれば、本開示の有機エレクトロルミネセントデバイスは、上に記載された有機層のうちの少なくとも1つに式1の有機エレクトロルミネセント化合物を含んでもよい。本開示の別の実施形態によれば、本開示の有機エレクトロルミネセントデバイスは、電子輸送層及び電子緩衝層のうちの少なくとも1つに式1の有機エレクトロルミネセント化合物を含んでもよい。

10

【0050】

アノードと発光層との間に、正孔注入層、正孔輸送層、電子阻止層、又はこれらの組合せを使用することができる。正孔注入層は、正孔注入障壁（又は正孔注入電圧）をアノードから正孔輸送層又は電子阻止層まで下げるために複数層であってもよく、複数層のそれぞれは、2つの化合物を同時に使用してもよい。電子阻止層は、正孔輸送層（又は正孔注入層）と発光層との間に配置されてもよく、発光層からの電子のオーバーフローを阻止することによって励起子を発光層内に閉じ込めて発光漏れを防止することができる。また、正孔輸送層又は電子阻止層は複数層であってもよく、そこでそれぞれの層は複数の化合物を使用してもよい。

【0051】

20

電子緩衝層、正孔阻止層、電子輸送層、電子注入層、又はこれらの組合せは、発光層とカソードとの間に用いることができる。電子緩衝層は、電子の注入を制御し、発光層と電子注入層との間の界面特性を改善するために複数層であってもよく、複数層のそれぞれは、2つの化合物を同時に使用してもよい。正孔阻止層又は電子輸送層は複数層であってもよく、そこでそれぞれの層は複数の化合物を使用してもよい。

【0052】

発光補助層は、アノードと発光層との間、又はカソードと発光層との間に配置されてもよい。発光補助層をアノードと発光層との間に配置する場合、それは、正孔注入及び/若しくは正孔輸送を促進するために、又は電子のオーバーフローを防止するために用いられ得る。発光補助層をカソードと発光層との間に配置する場合、それは、電子注入及び/若しくは電子輸送を促進するために、又は正孔のオーバーフローを防止するために用いられ得る。また、正孔補助層は、正孔輸送層（又は正孔注入層）と発光層との間に配置され得、正孔輸送速度（又は正孔注入速度）を促進又は阻止するのに有効であり得、それにより電荷のバランスを制御する。有機エレクトロルミネセントデバイスが2つ以上の正孔輸送層を含む場合、更に含まれる正孔輸送層は正孔補助層又は電子阻止層として使用することができる。発光補助層、正孔補助層又は電子阻止層は、有機エレクトロルミネセントデバイスの効率及び/又は寿命を向上させる効果を有し得る。

30

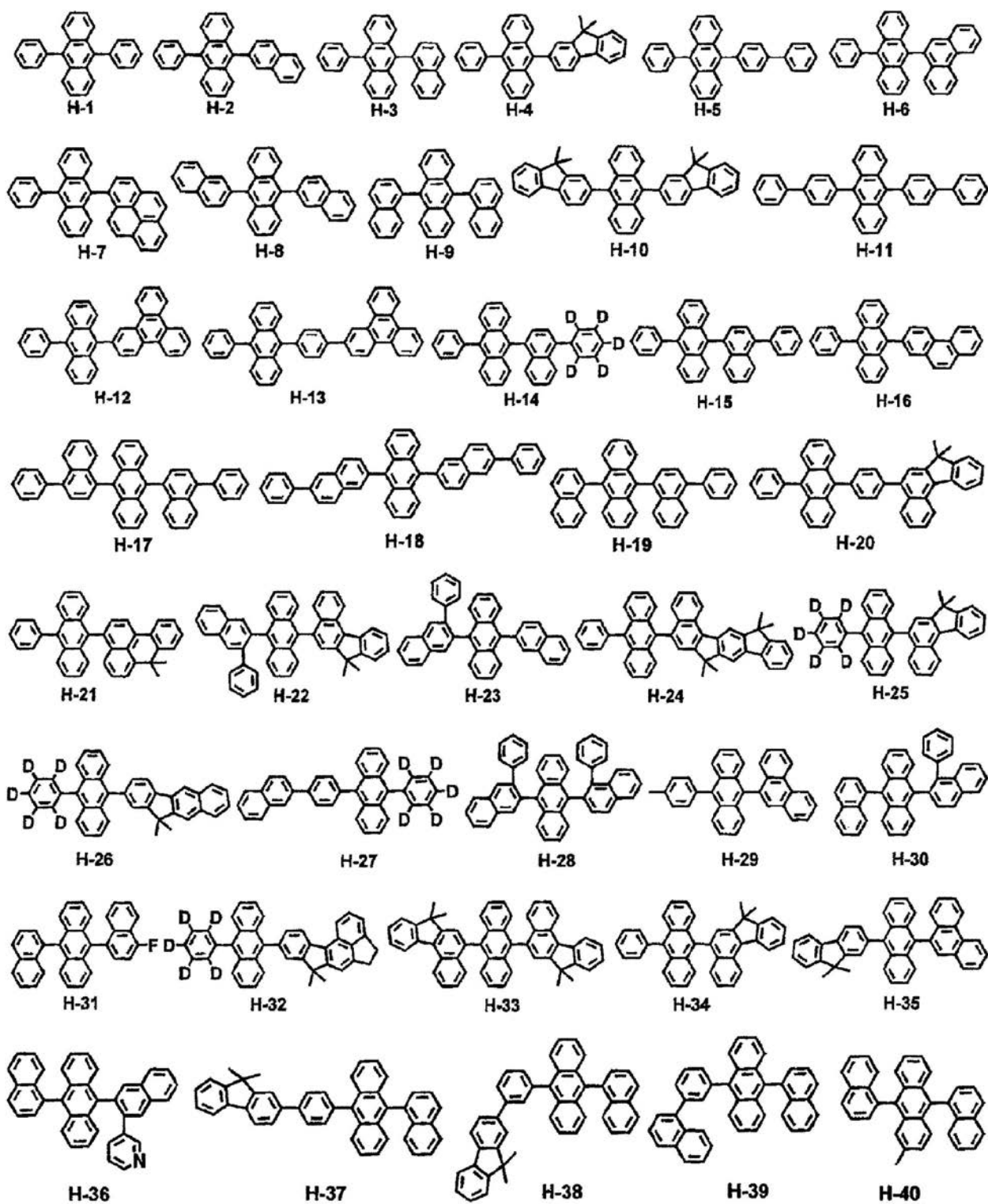
【0053】

本開示の発光層は、ホスト化合物及びドーパント化合物を用いて形成することができる。本開示の一実施形態によれば、ホスト化合物は以下の化合物によって示されてもよいが、それらに限定されない：

40

【0054】

【化 1 2】



10

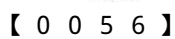
20

30

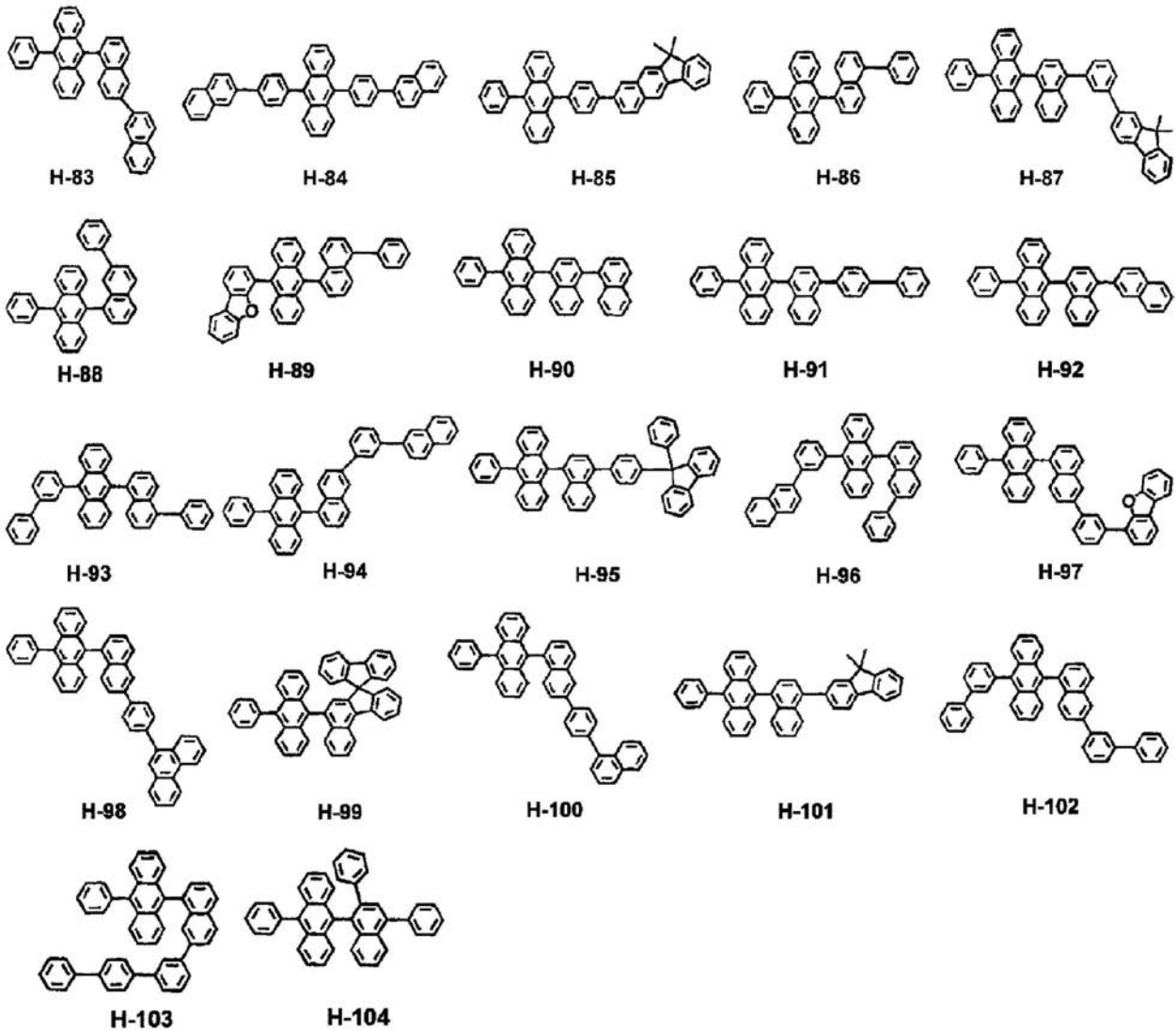
40

【 0 0 5 5 】

50



【化 1 4】



10

20

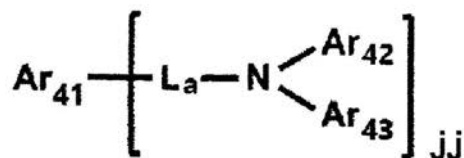
30

【0057】

本開示において使用されるドーパント化合物は燐光ドーパント化合物であっても蛍光ドーパント化合物であってもよい。具体的に、ドーパント化合物は蛍光ドーパント化合物であってもよい。例えば、蛍光ドーパント化合物は、以下の式40：

【0058】

【化 1 5】



---- (40)

40

【0059】

(式中、

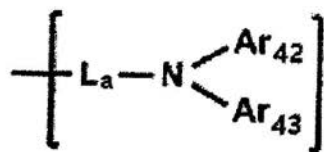
Ar_{41} は置換又は非置換 (C6 - C50) アリール又はスチリルを表し； L_a が単結合、置換又は非置換 (C6 - C30) アリーレン、或いは置換又は非置換 (3 ~ 30員) ヘテロアリーレンを表し； Ar_{42} 及び Ar_{43} は、それぞれ独立して、水素、ジウテリウム、ハロゲン、置換又は非置換 (C1 - C30) アルキル、置換又は非置換 (C6 - C30) アリール、或いは置換又は非置換 (3 ~ 30員) ヘテロアリールを表すが、或いは隣接する置換基と結合して、置換又は非置換の、(C3 - C30) 単環式又は多環式、

50

脂環式、芳香族環、又は脂環式環と芳香族環との組合せを形成してもよく、これらの炭素原子は、窒素、酸素、及び硫黄から選択される少なくとも1つのヘテロ原子で置き換えられてもよく； j は1又は2を表し；及び j が2である場合、

【0060】

【化16】



10

【0061】

のそれぞれは同一であっても異なってもよい)

によって表される縮合多環式アミン誘導体であってもよい。

【0062】

Ar_{41} のための好ましいアリールには、置換又は非置換フェニル、置換又は非置換フルオレニル、置換又は非置換アントリル、置換又は非置換ピレニル、置換又は非置換クリセニル、置換又は非置換ベンゾフルオレニル、スピロ[フルオレン-ベンゾフルオレン]イル等が含まれる。

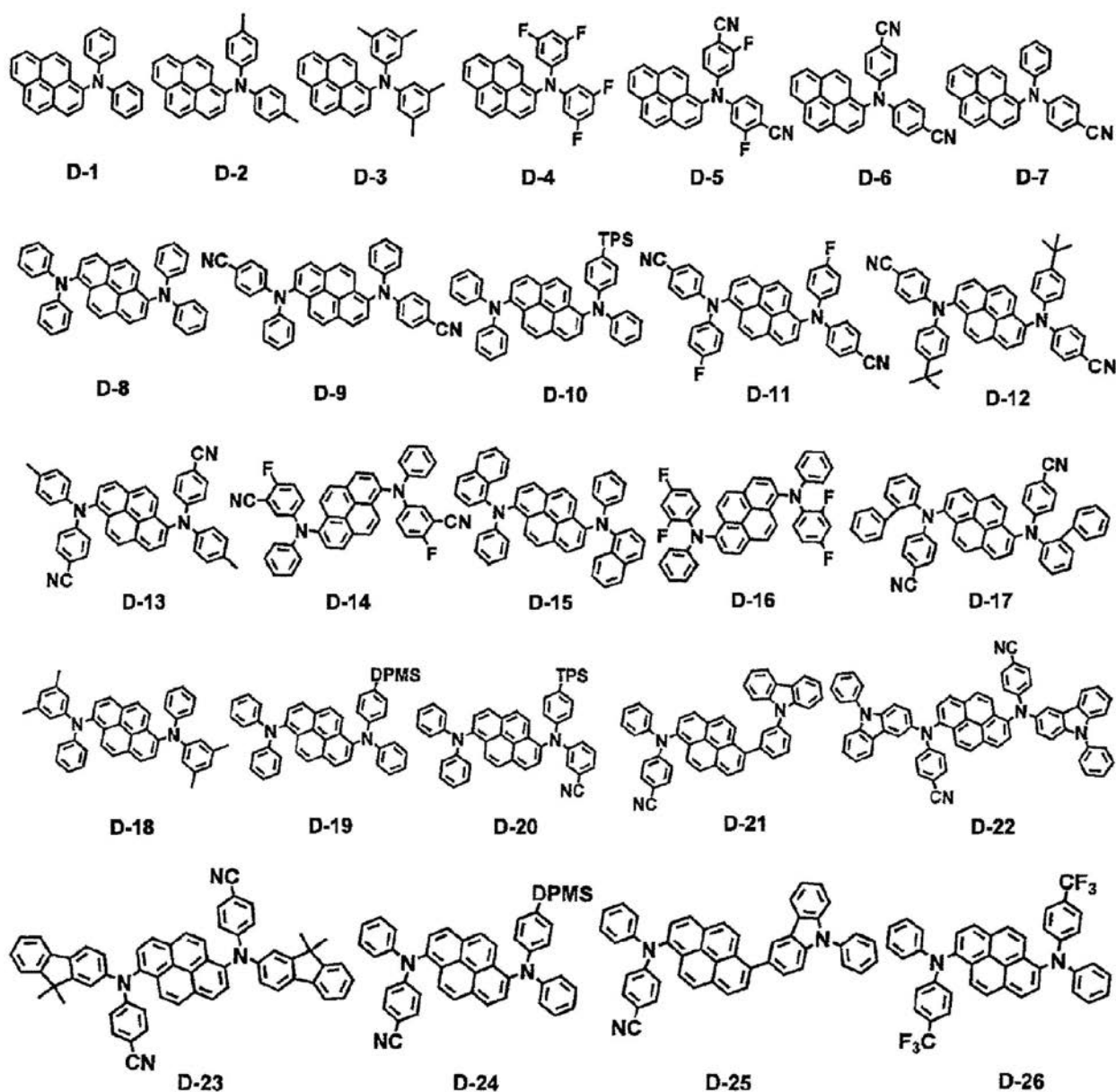
【0063】

式40の化合物は以下の化合物によって示されてもよいが、それらに限定されない：

20

【0064】

【化 17】



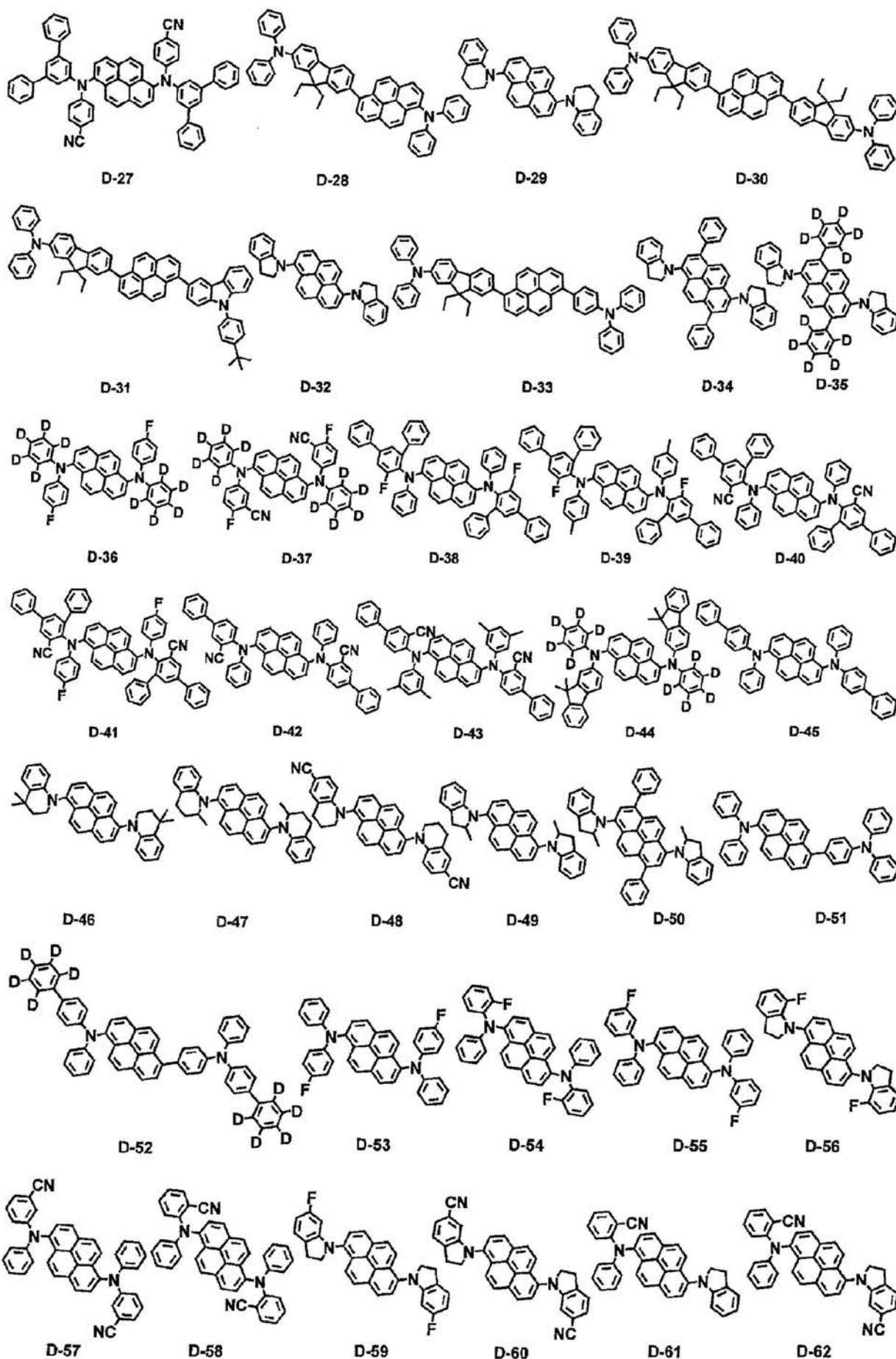
10

20

30

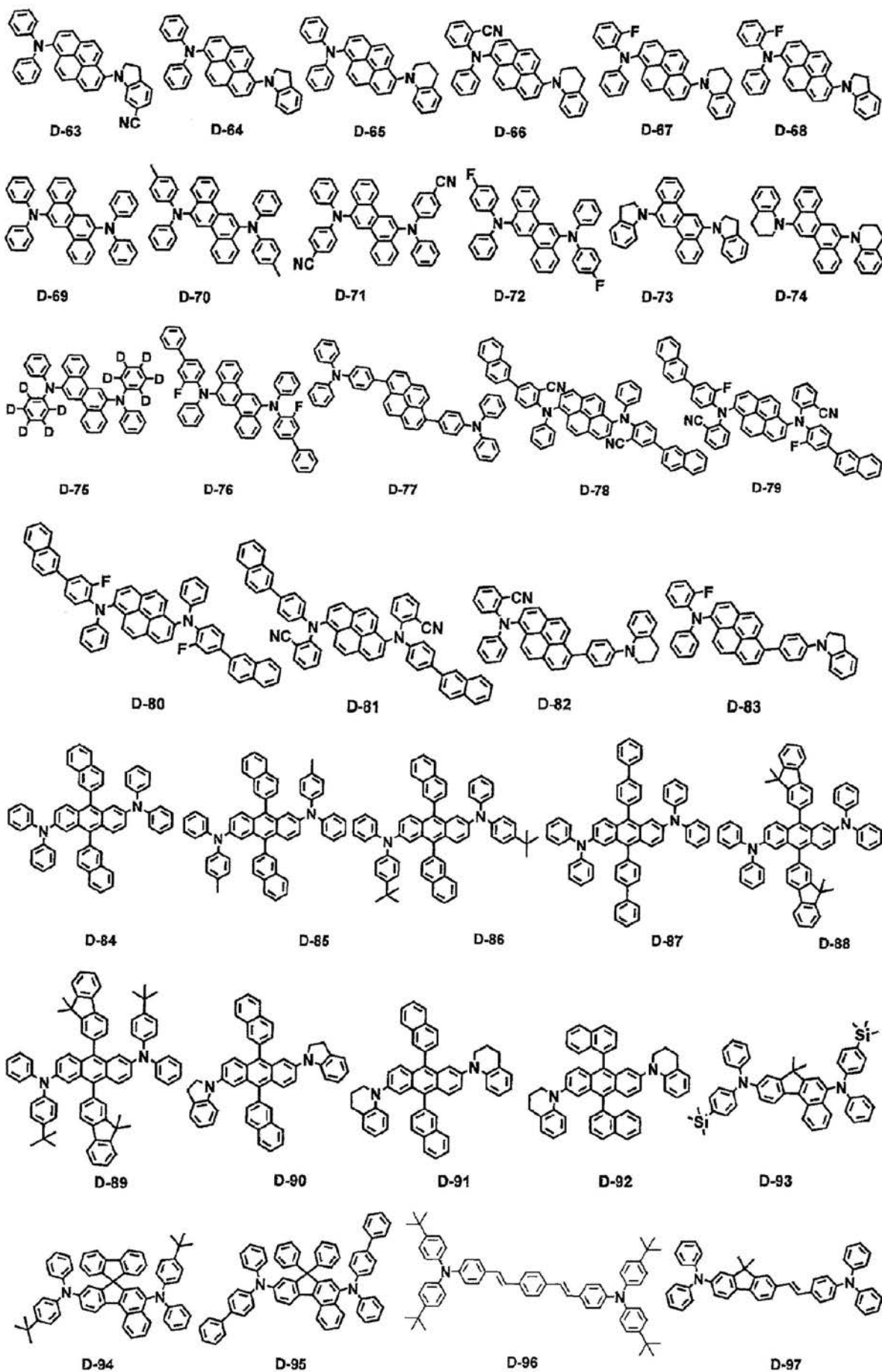
【 0 0 6 5 】

【化 1 8】



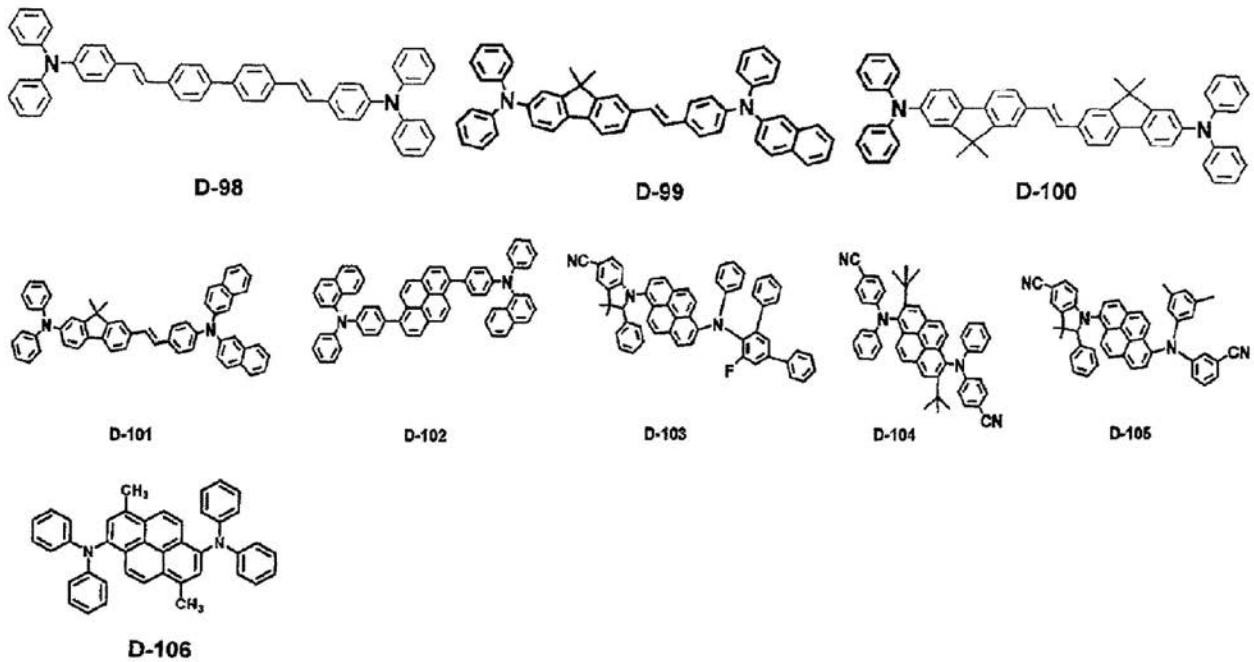
【 0 0 6 6 】

【化 19】



【 0 0 6 7 】

【化 2 0】



10

【0068】

20

本開示の有機エレクトロルミネセントデバイスにおいて、好ましくは、カルコゲナイド層、金属ハロゲン化物層、及び金属酸化物層から選択される少なくとも1つの層（以下、「表面層」）を一对の電極の内部表面の少なくとも1つに置いてよい。具体的には、発光媒体層のアノード表面にシリコン及びアルミニウムのカルコゲナイド（酸化物を含む）層を配置することが好ましく、発光媒体層のカソード表面に金属ハロゲン化物層又は金属酸化物層を配置することが好ましい。有機エレクトロルミネセントデバイスの動作安定性を表面層によって得てもよい。好ましくは、カルコゲナイドとしては、 SiO_x （ $1 < x < 2$ ）、 AlO_x （ $1 < x < 1.5$ ）、 SiON 、 SiAlON 等が挙げられ、ハロゲン化金属としては、 LiF 、 MgF_2 、 CaF_2 、フッ化希土類金属等が挙げられ、金属酸化物としては、 Cs_2O 、 Li_2O 、 MgO 、 SrO 、 BaO 、 CaO 等が挙げられる。

30

【0069】

さらに、本開示の有機エレクトロルミネセントデバイスにおいて、電子輸送化合物と還元性ドーパントとの混合領域、又は正孔輸送化合物と酸化性ドーパントとの混合領域は、一对の電極の少なくとも1つの表面に配置されてよい。この場合、電子輸送化合物は、アニオンに還元されるため、混合領域からエレクトロルミネセント媒体への電子の注入及び輸送がより容易になる。更に、正孔輸送化合物はカチオンに酸化されるので、混合領域から発光媒体への正孔の注入及び輸送がより容易になる。好ましくは、酸化性ドーパントは、種々のルイス酸及びアクセプター化合物を含み、還元性ドーパントは、アルカリ金属、アルカリ金属化合物、アルカリ土類金属、希土類金属、及びこれらの混合物を含む。還元性ドーパント層を電荷発生層として使用して、2つ以上の発光層を有し且つ白色光を放出する有機エレクトロルミネセントデバイスを調製してもよい。

40

【0070】

本開示の有機エレクトロルミネセントデバイスのそれぞれの層の形成は、真空蒸発、スパッタリング、プラズマ、イオンめっき方法等の乾燥製膜法、及びインクジェット印刷、ノズル印刷、スロットコーティング、スピンコーティング、浸漬コーティング、フローコーティング方法等の湿式製膜法のうちの1つを使用することができる。

【0071】

湿式製膜法を用いる場合、それぞれの層を形成する材料をエタノール、クロロホルム、テトラヒドロフラン、ジオキサン等などの任意の適切な溶媒に溶解又は拡散させることによって薄膜を形成することができる。それぞれの層を形成する材料を溶解又は拡散させる

50

ことができ、製膜能力に問題がない場合、溶媒は、任意の溶媒であり得る。

【 0 0 7 2 】

以下に、本開示による有機エレクトロルミネセント化合物の調製方法は、本開示を詳細に理解するために本開示の代表的な化合物又は中間化合物の合成方法に関して詳細に説明される。

【 実施例 】

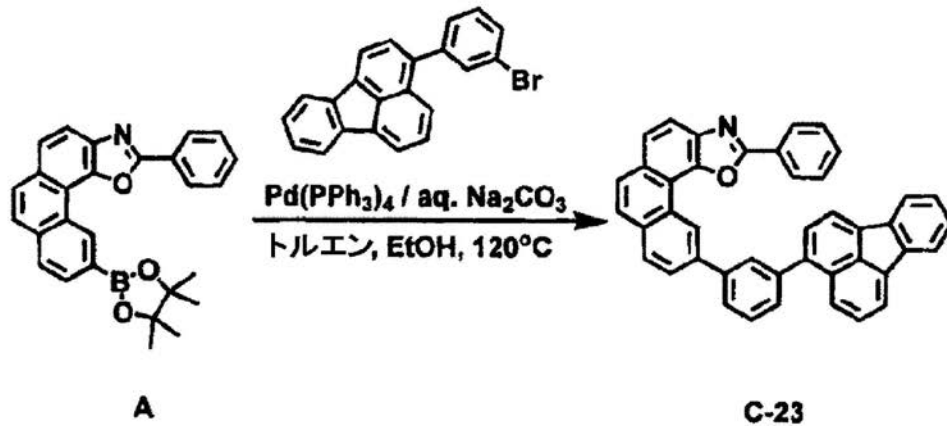
【 0 0 7 3 】

実施例 1 : 化合物 C - 2 3 の調製

【 0 0 7 4 】

【 化 2 1 】

10



20

【 0 0 7 5 】

化合物 A (3 . 5 g 、 8 m m o l) 、 3 - (3 - ブロモフェニル) フルオランテン (2 . 5 g 、 7 m m o l) 、 テトラキス (トリフェニルホスフィン) パラジウム (0 . 4 g 、 0 . 4 m m o l) 、 炭酸ナトリウム (2 . 5 g 、 1 8 m m o l) 、 3 6 m L のトルエン、 9 m L のエタノール、及び 9 m L の蒸留水を反応器に添加し、 1 2 0 で 3 時間撹拌した。反応の終了後に、有機層混合物を蒸留水で洗浄し、酢酸エチルで抽出した。抽出された有機層を硫酸マグネシウムで乾燥させ、溶媒を回転蒸発器によって取り除いた。その後、残留物をカラムクロマトグラフィーによって精製して、化合物 C - 2 3 (3 . 4 g 、 収率 : 8 5 %) を得た。

30

【 0 0 7 6 】

[表]

	MW	UV	PL	M.P.
C-23	571.68	390nm	457nm	209°C

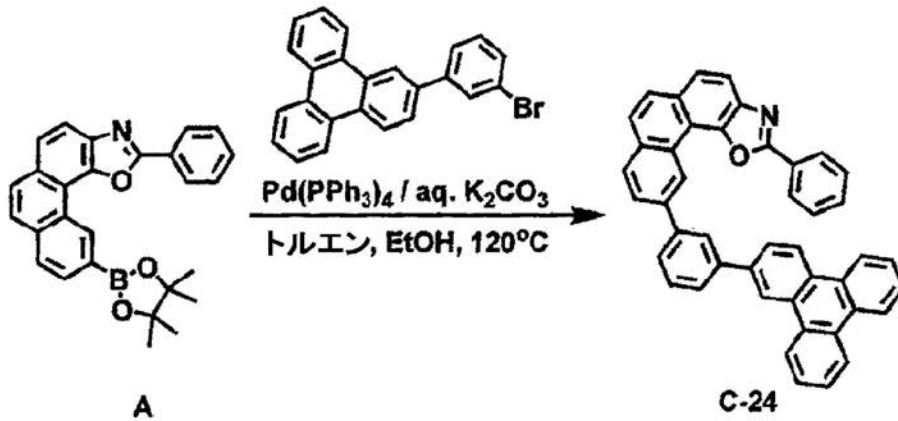
【 0 0 7 7 】

実施例 2 : 化合物 C - 2 4 の調製

【 0 0 7 8 】

40

【化 2 2】



10

【0079】

化合物 A (3.3 g、8 mmol)、2-(3-ブロモフェニル)トリフェニレン (3 g、8 mmol)、テトラキス(トリフェニルホスフィン)パラジウム (0.3 g、0.3 mmol)、炭酸カリウム (2.7 g、20 mmol)、40 mL のトルエン、10 mL のエタノール、及び 10 mL の蒸留水を反応器に添加し、120 で 3 時間撹拌した。反応の終了後に、有機層混合物を蒸留水で洗浄し、酢酸エチルで抽出した。抽出された有機層を硫酸マグネシウムで乾燥させ、溶媒を回転蒸発器によって取り除いた。その後、残留物をカラムクロマトグラフィーによって精製して、化合物 C-24 (2.5 g、収率：53%) を得た。

20

【0080】

[表]

	MW	UV	PL	M.P.
C-24	597.72	395nm	481nm	287°C

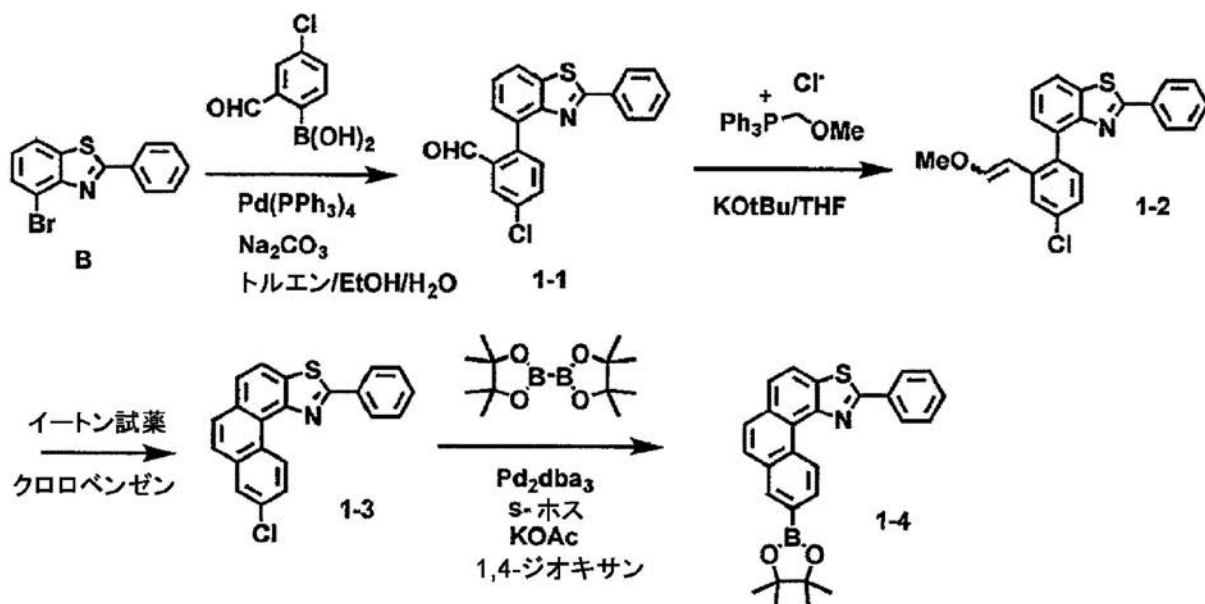
30

【0081】

実施例 3：化合物 1-4 の調製

【0082】

【化 2 3】



40

50

【0083】

1) 化合物 1 - 1 の調製

化合物 B (CAS: 1044146 - 16 - 8、36 g、124 mmol)、4 - クロロ - 2 - ホルミルベンゼンボロン酸 (25.2 g、136 mmol)、テトラキス(トリフェニルホスフィン)パラジウム (5.7 g、5.0 mmol)、炭酸ナトリウム (33 g、150 mmol)、600 mL のトルエン、150 mL のエタノール、及び 150 mL の蒸留水を反応器に添加し、140 で 3 時間撹拌した。反応の終了後に、沈殿した固体を蒸留水及びメタノールで洗浄した。得られた化合物 1 - 1 は、追加的な精製をせずに次の反応において使用された。

【0084】

2) 化合物 1 - 2 の調製

化合物 1 - 1 (45.6 g、130 mmol)、(メトキシメチル)トリフェニルホスホニウムクロリド (74.3 g、217 mmol)、及び 1,500 mL のテトラヒドロフランを反応器に添加し、反応混合物を 5 分間撹拌した。次に、カリウム t - ブトキシド (THF 中に 1 M、220 mL) を 0 でゆっくりと滴下した。温度をゆっくりと上昇させ、反応混合物を室温で 3 時間撹拌した。蒸留水を反応溶液に添加して反応を終結させ、次いで有機層混合物を酢酸エチルで抽出した。抽出された有機層を硫酸マグネシウムで乾燥させ、溶媒を回転蒸発器によって取り除いた。その後、残留物をカラムクロマトグラフィーによって精製して、化合物 1 - 2 (48 g、収率: 97%) を得た。

【0085】

3) 化合物 1 - 3 の調製

化合物 1 - 2 (44.8 g、119 mmol)、4.5 mL のイートン試薬、及び 600 mL のクロロベンゼンを反応器に添加し、2 時間還流した。反応の終了後に、反応混合物を室温に冷却し、塩化メチレン (MC) で抽出した。抽出された有機層を硫酸マグネシウムで乾燥させ、溶媒を回転蒸発器によって取り除いた。その後、残留物をカラムクロマトグラフィーによって精製して、化合物 1 - 3 (36.3 g、収率: 89%) を得た。

【0086】

4) 化合物 1 - 4 の調製

化合物 1 - 3 (10 g、29 mmol)、ビス(ピナコラト)ジボラン (8.8 g、34.8 mmol)、トリス(ジベンジリデンアセトン)ジパラジウム (1.3 g、1.45 mmol) 2 - ジシクロヘキシルホスフィノ - 2', 6' - ジメトキシビフェニル (s - ホス) (1.2 g、2.9 mmol)、酢酸カリウム (8.5 g、87 mmol)、及び 150 mL の 1,4 - ジオキサンを反応器に添加し、140 で 3 時間撹拌した。反応の終了後に、反応混合物を室温に冷却し、酢酸エチルで抽出した。抽出された有機層を硫酸マグネシウムで乾燥させ、溶媒を回転蒸発器によって取り除いた。その後、残留物をカラムクロマトグラフィーによって精製して、化合物 1 - 4 (10.4 g、収率: 82%) を得た。

【0087】

実施例 1 又は 2 において、本開示による化合物は、化合物 A の代わりに化合物 1 - 4 を使用して合成されてもよい。

【0088】

以下に、本開示の有機エレクトロルミネセント化合物を含む有機エレクトロルミネセントデバイスの発光特性が本開示を詳細に理解するために説明される。

【0089】

[比較例 1] 本開示によらない青色発光有機エレクトロルミネセントデバイスの作製

本開示によらない OLED デバイスを作製した。OLED 用ガラス基板 (ジオマテック株式会社、日本) 上の透明電極酸化インジウム錫 (ITO) 薄膜 (10 Ω / sq) を、アセトン、及びイソプロピルアルコールで順次超音波洗浄し、次いでイソプロパノール中に保存した。次に、ITO 基板を真空蒸着装置の基板ホルダーに装着した。化合物 HI - 1 を真空蒸着装置のセルに導入し、次いで、装置のチャンバー内の圧力を 10⁻⁷ トーラに

10

20

30

40

50

制御した。その後、セルに電流を流して、導入された物質を蒸発させて、これによりITO基板に厚さ60nmの第1の正孔注入層を形成した。次いで、化合物HI-2を真空蒸着装置の別のセルに導入し、セルに電流を流して、導入された物質を蒸発させて、これにより第1の正孔注入層上に厚さ5nmの第2の正孔注入層を形成した。次に、化合物HT-1を真空蒸着装置の別のセルに導入した。その後、セルに電流を流して、導入された物質を蒸発させて、これにより第2の正孔注入層上に厚さ20nmの第1の正孔輸送層を形成した。次いで、化合物HT-2を真空蒸着装置の別のセルに導入し、セルに電流を流して、導入された物質を蒸発させて、これにより第1の正孔輸送層上に厚さ5nmの第2の正孔輸送層を形成した。正孔注入層及び正孔輸送層を形成した後、発光層を以下の通り蒸着した。ホストとして化合物H-34を真空蒸着装置の1つのセルに導入し、ドーパントとして化合物D-38を装置の別のセルに導入した。2つの材料を異なる速度で蒸発させ、ドーパントをホスト及びドーパントの総量に基づいて2重量%のドーパ量で蒸着させて、第2の正孔輸送層上に厚さ20nmの発光層を形成した。次に、電子輸送材料として、化合物ETL-1を1つのセルに導入し、化合物EIL-1を別のセルに導入し、50:50の重量比で蒸発させ、蒸着して厚さ35nmの電子輸送層を形成した。次に、電子輸送層に、厚さ2nmの電子注入層として化合物ETL-1を蒸着し、他の真空蒸着装置により電子注入層に厚さ80nmのAlカソードを蒸着した。このようにして、OLEDデバイスを作製した。OLEDデバイスを作製するために使用された全ての材料を、 10^{-6} トールで真空昇華によって精製した。

10

20

【0090】

[デバイス実施例1] 本開示による青色発光有機エレクトロルミネセントデバイスの作製

厚さ5nmの電子緩衝材料として化合物C-23を発光層上に蒸着させて電子緩衝層を形成し、化合物ETL-1及び化合物EIL-1を50:50の重量比で蒸着させて電子緩衝層上に30nmの電子輸送層を形成したこと以外は、OLEDデバイスを比較例1の場合と同じ方法で作製した。

【0091】

1,000ニットの輝度で上に記載されたように作製された比較例1及びデバイス実施例1の有機エレクトロルミネセントデバイスの駆動電圧、発光効率、及び色座標の結果を以下の表1に示す。

30

【0092】

【表1】

[表1]

	電子緩衝材料	駆動電圧 (V)	発光効率 (cd/A)	色座標 (x)	色座標 (y)
比較例 1	-	3.8	5.9	0.139	0.092
デバイス実施例 1	C-23	3.6	6.6	0.139	0.091

40

【0093】

[比較例2] 本開示によらない青色発光有機エレクトロルミネセントデバイスの作製

ホストとして化合物H-15をH-34の代わりに蒸着させて発光層を形成し、電子輸送材料として化合物ETL-2だけをセルの1つに添加し、蒸発させて発光層上に35nmの厚さの電子輸送層を蒸着させたこと以外は、OLEDデバイスを比較例1の場合と同じ方法で作製した。

【0094】

[比較例3] 本開示によらない青色発光有機エレクトロルミネセントデバイスの作製

50

ホストとして化合物 H - 1 5 を H - 3 4 の代わりに使用し、電子輸送材料として化合物 E T L - 3 を E T L - 1 の代わりに使用したこと以外は、O L E D デバイスを比較例 1 の場合と同じ方法で作製した。

【 0 0 9 5 】

[デバイス実施例 2 及び 3] 本開示による青色発光有機エレクトロルミネセントデバイスの作製

デバイス実施例 2 及び 3 において、化合物 C - 2 3 及び化合物 C - 2 4 をそれぞれ、E I L - 1 と 5 0 : 5 0 の重量比で蒸着させて、厚さ 3 0 n m の電子輸送層を形成したこと以外は、O L E D デバイスを比較例 3 の場合と同じ方法で作製した。

【 0 0 9 6 】

1 , 0 0 0 ニットの輝度で上に記載されたように作製された比較例 2 及び 3、ならびにデバイス実施例 2 及び 3 の有機エレクトロルミネセントデバイスの駆動電圧、発光効率、及び色座標の結果を以下の表 2 に示す。

【 0 0 9 7 】

【表 2】

[表 2]

	電子輸送材料	駆動電圧 (V)	発光効率 (cd/A)	色座標 (x)	色座標 (y)
比較例 2	ETL-2	5.2	4.0	0.146	0.105
比較例 3	ETL-3:EIL-1	4.3	5.5	0.141	0.092
デバイス実施例 2	C-23:EIL-1	4.3	6.1	0.140	0.088
デバイス実施例 3	C-24:EIL-1	5.4	6.4	0.140	0.090

【 0 0 9 8 】

上記の表 1 及び 2 から、電子緩衝層又は電子輸送層において本開示の化合物を使用するデバイス実施例 1 ~ 3 は比較例 1 ~ 3 のルミネセンス効率よりも高いルミネセンス効率を示すことが確認された。特に、本開示の化合物を含む有機エレクトロルミネセントデバイスは、高い効率を必要とする、フレキシブルディスプレイ、照明、及び自動車等のためのディスプレイに適し得る。

【 0 0 9 9 】

デバイス実施例及び比較例に用いた化合物を下記表 3 に示す。

【 0 1 0 0 】

10

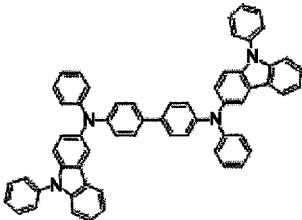
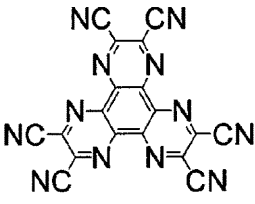
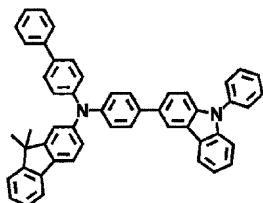
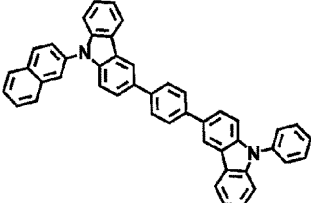
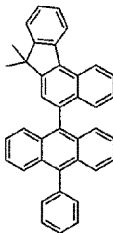
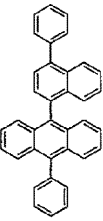
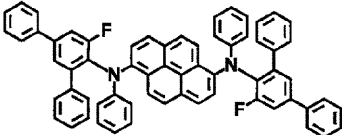
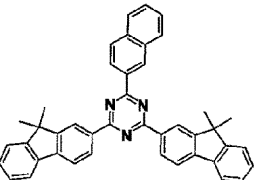
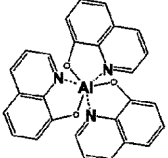
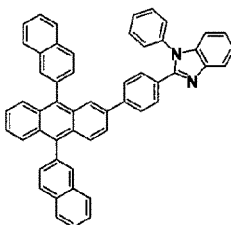
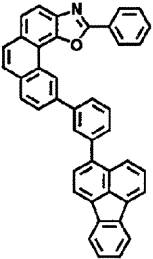
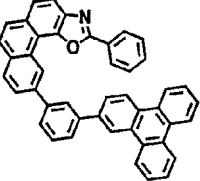
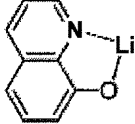
20

30

40

【表 3】

【表3】

正孔注入層/ 正孔輸送層	 HI-1  HI-2  HT-1  HT-2	10
発光層	 H-34  H-15  D-38	20
電子緩衝層/ 電子輸送層/ 電子注入層	 ETL-1  ETL-2  ETL-3  C-23  C-24  EIL-1	30
		40

【 国際調査報告 】

INTERNATIONAL SEARCH REPORT		International application No. PCT/KR2018/001756
A. CLASSIFICATION OF SUBJECT MATTER C07D 235/02 (2006.01) C07D 263/52 (2006.01) C07D 277/60 (2006.01) H01L 33/00 (2010.01) C09K 11/06 (2006.01)		
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)		
Documentation searched other than minimum documentation to the extent that such documents are included in the fields searched		
Electronic data base consulted during the international search (name of data base and, where practicable, search terms used) STN: Registry and CAplus: Substructure Search based on formula (1) and Applicant and Inventors search in external databases: Patentscope and Espacenet and Internal databases provided by IP Australia: ROHM AND HAAS ELECTRONIC MATERIALS KOREA LTD and MOON, Doo-Hyeon; CHO, Sang-Hee.		
C. DOCUMENTS CONSIDERED TO BE RELEVANT		
Category*	Citation of document, with indication, where appropriate, of the relevant passages	Relevant to claim No.
	Documents are listed in the continuation of Box C	
☒ Further documents are listed in the continuation of Box C ☒ See patent family annex		
* Special categories of cited documents:		
"A" document defining the general state of the art which is not considered to be of particular relevance	"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	
"E" earlier application or patent but published on or after the international filing date	"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	
"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)	"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	
"O" document referring to an oral disclosure, use, exhibition or other means	"&" document member of the same patent family	
"P" document published prior to the international filing date but later than the priority date claimed		
Date of the actual completion of the international search 26 April 2018	Date of mailing of the international search report 26 April 2018	
Name and mailing address of the ISA/AU AUSTRALIAN PATENT OFFICE PO BOX 200, WODEN ACT 2606, AUSTRALIA Email address: pct@ipaustralia.gov.au	Authorised officer Ricky Fung AUSTRALIAN PATENT OFFICE (ISO 9001 Quality Certified Service) Telephone No. +61262223648	

INTERNATIONAL SEARCH REPORT		International application No.
C (Continuation). DOCUMENTS CONSIDERED TO BE RELEVANT		PCT/KR2018/001756
Category*	Citation of document, with indication, where appropriate, of the relevant passages	Relevant to claim No.
A	Awad, W. I., et al., "Chrysenoxazoles." Journal of the American Chemical Society, Vol. 77, No. 4 (1955), pp 1013-1014. See whole document especially formula IIa and IIb	1-10
P,X	WO 2017/073942 A1 (ROHM AND HAAS ELECTRONIC MATERIALS KOREA LTD.) 04 May 2017 See abstract, claims, formula (2) and the following compounds: C-1 to C-5, C-7 to C-12, C-17, C-19 to C-23, C-26, C-32 to C-34, C-41 to C-50, C-52, C-55 to C-77, C-81, C-82, C-86 to C-88, C-90, C-92 to C-94, C-96 to C-102, C-105 to C-108, C-111-C-114, C-118, C-119, C-132, C-133, C-138 to C-140 and C-142 in both claims 3 and 6	1-10
P,X	WO 2017/030283 A1 (ROHM AND HAAS ELECTRONIC MATERIALS KOREA LTD.) 23 February 2017 See abstract, claims, formula (2) and compounds C-1 to C-5, C-7 to C-12, C-17, C-19 to C-23, C-32 to C-34, C-41 to C-50, C-52, C-55 to C-77, C-81, C-82, C-86 to C-88, C-90, C-92 to C-94, C-96 to C-101 in claim 5	1-10

Form PCT/ISA/210 (fifth sheet) (July 2009)

INTERNATIONAL SEARCH REPORT Information on patent family members		International application No. PCT/KR2018/001756	
This Annex lists known patent family members relating to the patent documents cited in the above-mentioned international search report. The Australian Patent Office is in no way liable for these particulars which are merely given for the purpose of information.			
Patent Document/s Cited in Search Report		Patent Family Member/s	
Publication Number	Publication Date	Publication Number	Publication Date
WO 2017/073942 A1	04 May 2017	None	
WO 2017/030283 A1	23 February 2017	None	
End of Annex			
Due to data integration issues this family listing may not include 10 digit Australian applications filed since May 2001. Form PCT/ISA/210 (Family Annex)(July 2009)			

フロントページの続き

(51)Int.Cl.

F I

テーマコード(参考)

C 0 7 D 417/04

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

(72)発明者 サン - ヒー・チョ

大韓民国 1 8 4 4 9 ギョンギ - ド ファソン - シ サムスン 1 - ロ 5 - ギル 2 0

Fターム(参考) 3K107 AA01 BB01 BB02 BB08 CC04 CC22 DD74 DD78

4C056 AA01 AB01 AC02 AD02 AE03 CA03 CC01 CD02

4C063 AA01 BB01 CC62 DD12 DD14 DD29 EE10

專利名称(译)	有机电致发光化合物和包含该化合物的有机电致发光器件		
公开(公告)号	JP2020511775A	公开(公告)日	2020-04-16
申请号	JP2019541700	申请日	2018-02-09
[标]申请(专利权)人(译)	罗门哈斯电子材料有限公司		
申请(专利权)人(译)	罗门哈斯电子材料有限公司韩国		
[标]发明人	ドウヒョンムン サンヒーチョ		
发明人	ドウ-ヒョン・ムン サン-ヒー・チョ		
IPC分类号	H01L51/50 C09K11/06 C07D263/52 C07D277/60 C07D417/04		
CPC分类号	C07D263/52 C07D277/60 C09K11/06 C09K2211/1007 C09K2211/1011 C09K2211/1033 C09K2211/1037 H01L51/0052 H01L51/0054 H01L51/0071 H01L51/0055 H01L51/0067 H01L51/0069 H01L51/0072 H01L51/0073 H01L51/0074 H01L51/5072		
FI分类号	H05B33/22.B H05B33/14.A C09K11/06.690 C07D263/52 C07D277/60 C07D417/04		
F-TERM分类号	3K107/AA01 3K107/BB01 3K107/BB02 3K107/BB08 3K107/CC04 3K107/CC22 3K107/DD74 3K107/DD78 4C056/AA01 4C056/AB01 4C056/AC02 4C056/AD02 4C056/AE03 4C056/CA03 4C056/CC01 4C056/CD02 4C063/AA01 4C063/BB01 4C063/CC62 4C063/DD12 4C063/DD14 4C063/DD29 4C063/EE10		
优先权	1020170020862 2017-02-16 KR		
外部链接	Espacenet		

摘要(译)

本公开涉及一种有机电致发光化合物和包括该有机电致发光化合物的有机电致发光器件。根据本公开的有机电致发光化合物包含在电子传输层和/或电子缓冲层中，从而可以制造具有提高的发光效率的有机电致发光器件。

(11) 特許出願公表番号	(12) 公表特許公報(A)	(13) 日本国特許庁(JP)
特表2020-511775 (P2020-511775A)		
令和2年4月16日(2020.4.16)	(43) 公表日	
テーマコード(参考)	FI	
3K107	H05B 33/22 B	
4C056	H05B 33/14 A	
4C063	C09K 11/06 690	
	C07D 263/52	
	C07D 277/60	
審査請求 未請求 予備審査請求 未請求 (全 40 頁) 最終頁に続く		
(21) 出願番号 特願2019-541700 (P2019-541700)	(71) 出願人 509266480	
(86) (22) 出願日 平成30年2月9日(2018.2.9)	ローム・アンド・ハース・エレクトロニク・マテリアルズ・コリア・リミテッド	
(86) 翻訳文提出日 令和1年8月1日(2019.8.1)	大韓民国 331-980 チュンチョンナムード チョナシ ソブクク 3	
(86) 国際出願番号 PCT/KR2018/001756	コンダン 1-ロ 56	
(87) 国際公開番号 WO2018/151470	(74) 代理人 110000589	
(87) 国際公開日 平成30年8月23日(2018.8.23)	特許業務法人センタ国際特許事務所	
(31) 優先権主張番号 10-2017-0020862	ドゥーヒョン・ムン	
(32) 優先日 平成29年2月16日(2017.2.16)	大韓民国 18449 キョンギード	
(33) 優先権主張国・地域又は機関 韓国(KR)	アソンシ サムスン 1-ロ 5-ギル 20	
	最終頁に続く	
(54) 【発明の名称】 有機エレクトロルミネセント化合物及びこれを含む有機エレクトロルミネセントデバイス		