

(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2019-501522

(P2019-501522A)

(43) 公表日 平成31年1月17日 (2019.1.17)

(51) Int. Cl.	F I	テーマコード (参考)
H01L 51/50 (2006.01)	H05B 33/14 B	3K107
H01L 27/32 (2006.01)	H01L 27/32	5C094
C09K 11/06 (2006.01)	H05B 33/22 B	
G09F 9/30 (2006.01)	C09K 11/06 690	
	G09F 9/30 365	
審査請求 未請求 予備審査請求 未請求 (全 50 頁)		
(21) 出願番号 特願2018-526255 (P2018-526255)	(71) 出願人 509266480	
(86) (22) 出願日 平成28年11月1日 (2016.11.1)	ローム・アンド・ハース・エレクトロニッ	
(85) 翻訳文提出日 平成30年5月18日 (2018.5.18)	ク・マテリアルズ・コリア・リミテッド	
(86) 国際出願番号 PCT/KR2016/012459	大韓民国 331-980 チュンチョン	
(87) 国際公開番号 W02017/099360	ナムード チョナンシー ソブクーク 3	
(87) 国際公開日 平成29年6月15日 (2017.6.15)	コンダン 1-ロ 56	
(31) 優先権主張番号 10-2015-0174137	(74) 代理人 110000589	
(32) 優先日 平成27年12月8日 (2015.12.8)	特許業務法人センダ国際特許事務所	
(33) 優先権主張国 韓国 (KR)	(72) 発明者 ドゥーヒョン・ムン	
(31) 優先権主張番号 10-2016-0132040	大韓民国 18405 キョンギード フ	
(32) 優先日 平成28年10月12日 (2016.10.12)	ァソンシー ピョンジョム 3-ロ 11	
(33) 優先権主張国 韓国 (KR)	7 906-1304	
最終頁に続く		

(54) 【発明の名称】 有機電界発光化合物及びそれを含む有機電界発光デバイス

(57) 【要約】

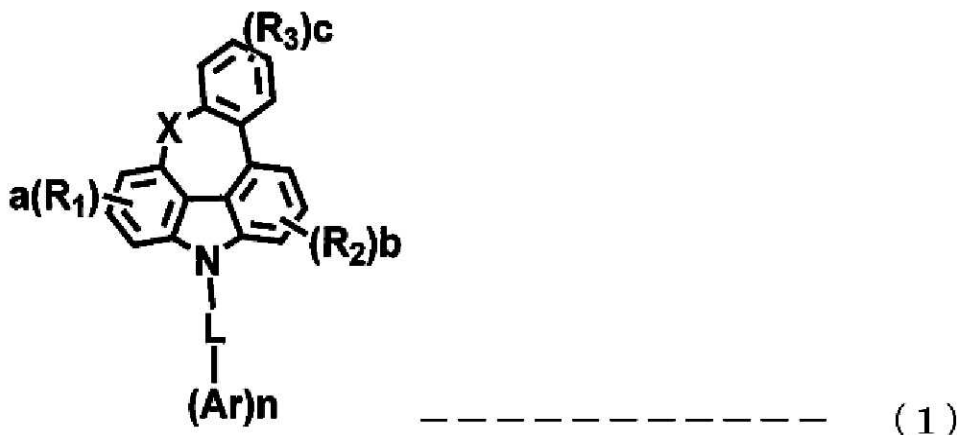
本開示は、有機電界発光化合物及びそれを含む有機電界発光デバイスに関する。本開示の有機電界発光化合物を使用することによって、低い駆動電圧及び／または優れた電力効率及び／または改善された駆動寿命を有する有機電界発光デバイスを提供することができる。

【特許請求の範囲】

【請求項 1】

以下の式 1 で表される有機電界発光化合物であって、

【化 1】



式中、

X は、O または S を表し、

L は、単結合、置換もしくは非置換 (C6 - C30) アリーレン、または置換もしくは非置換 (3 ~ 30 員) ヘテロアリーレンを表し、

Ar は、置換もしくは非置換 (C6 - C30) アリール、置換もしくは非置換 (3 ~ 30 員) ヘテロアリール、または -NR₁₁R₁₂ を表し、

R₁ ~ R₃ は各々独立して、水素、重水素、置換もしくは非置換 (C1 - C10) アルキル、置換もしくは非置換 (C6 - C30) アリール、置換もしくは非置換 (3 ~ 30 員) ヘテロアリール、または -NR₁₃R₁₄ を表すか、またはそれぞれ、隣接する R₁、R₂、及び R₃ に連結されて、置換もしくは非置換の単環もしくは多環の (C3 - C30) 脂環式環もしくは芳香環、またはそれらの組み合わせを形成し、その炭素原子 (複数可) は、窒素、酸素、及び硫黄から選択される少なくとも 1 個のヘテロ原子で置き換えられていてもよく、

R₁₁ ~ R₁₄ は各々独立して、置換もしくは非置換 (C1 - C10) アルキル、置換もしくは非置換 (C6 - C30) アリール、または置換もしくは非置換 (3 ~ 30 員) ヘテロアリールを表し、

n は、1 または 2 を表し、n が 2 である場合、各 Ar は同じであっても異なってもよく、

a 及び b は各々独立して、1 ~ 3 の整数を表し、c は、1 ~ 4 の整数を表し、a ~ c が各々独立して、2 以上の整数を表す場合、R₁ ~ R₃ は各々同じであっても異なってもよく、

前記ヘテロアリール (アリーレン) は、B、N、O、S、Si、及び P から選択される少なくとも 1 個のヘテロ原子を含有する、有機電界発光化合物。

【請求項 2】

L、Ar、R₁ ~ R₃、及び R₁₁ ~ R₁₄ における前記置換アリール (アリーレン)、前記置換ヘテロアリール (アリーレン)、前記置換アルキル、及び前記置換の単環もしくは多環の脂環式環もしくは芳香環の前記置換基、またはそれらの組み合わせが各々独立して、重水素、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、(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、置換もしくは (C1 - C30) アルキルまたは (C6 - C30) アリールで置換された (3 ~ 30 員) ヘテロアリール、非置換もしくは 3 ~ 30 員ヘテロアリールで置換された

(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、モノもしくはジ (C 1 - C 3 0) アルキルアミノ、モノもしくはジ (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 に記載の有機電界発光化合物。

10

【請求項 3】

L は、単結合、置換もしくは非置換 (C 6 - C 2 5) アリーレン、または置換もしくは非置換 (5 ~ 2 5 員) ヘテロアリーレンを表し、

Ar は、置換もしくは非置換 (C 6 - C 2 5) アリール、置換もしくは非置換 (5 ~ 2 5 員) ヘテロアリール、または -NR₁₁R₁₂ を表し、

R₁ ~ R₃ は各々独立して、水素、置換もしくは非置換 (C 6 - C 2 5) アリール、置換もしくは非置換 (5 ~ 2 5 員) ヘテロアリール、または -NR₁₃R₁₄ を表すか、またはそれぞれ、隣接する R₁、R₂、及び R₃ に連結されて、置換もしくは非置換の単環もしくは多環の (C 5 - C 2 5) 脂環式環もしくは芳香環、またはそれらの組み合わせを形成し、その炭素原子 (複数可) は、窒素、酸素、及び硫黄から選択される少なくとも 1 個のヘテロ原子で置き換えられていてもよく、

20

R₁₁ ~ R₁₄ は各々独立して、置換もしくは非置換 (C 6 - C 2 5) アリール、または置換もしくは非置換 (5 ~ 2 5 員) ヘテロアリールを表し、

a ~ c は各々独立して、1 または 2 を表す、請求項 1 に記載の有機電界発光化合物。

【請求項 4】

L は、単結合、置換もしくは非置換 (C 6 - C 1 8) アリーレン、または置換もしくは非置換 (5 ~ 1 8 員) ヘテロアリーレンを表し、

Ar は、置換もしくは非置換 (C 6 - C 1 8) アリール、置換もしくは非置換 (5 ~ 1 8 員) ヘテロアリール、または -NR₁₁R₁₂ を表し、

R₁ ~ R₃ は各々独立して、水素、置換もしくは非置換 (C 6 - C 1 8) アリール、置換もしくは非置換 (5 ~ 1 8 員) ヘテロアリール、または -NR₁₃R₁₄ を表すか、またはそれぞれ、隣接する R₁、R₂、及び R₃ に連結されて、非置換の単環もしくは多環の (C 5 - C 1 8) 芳香環を形成し、

30

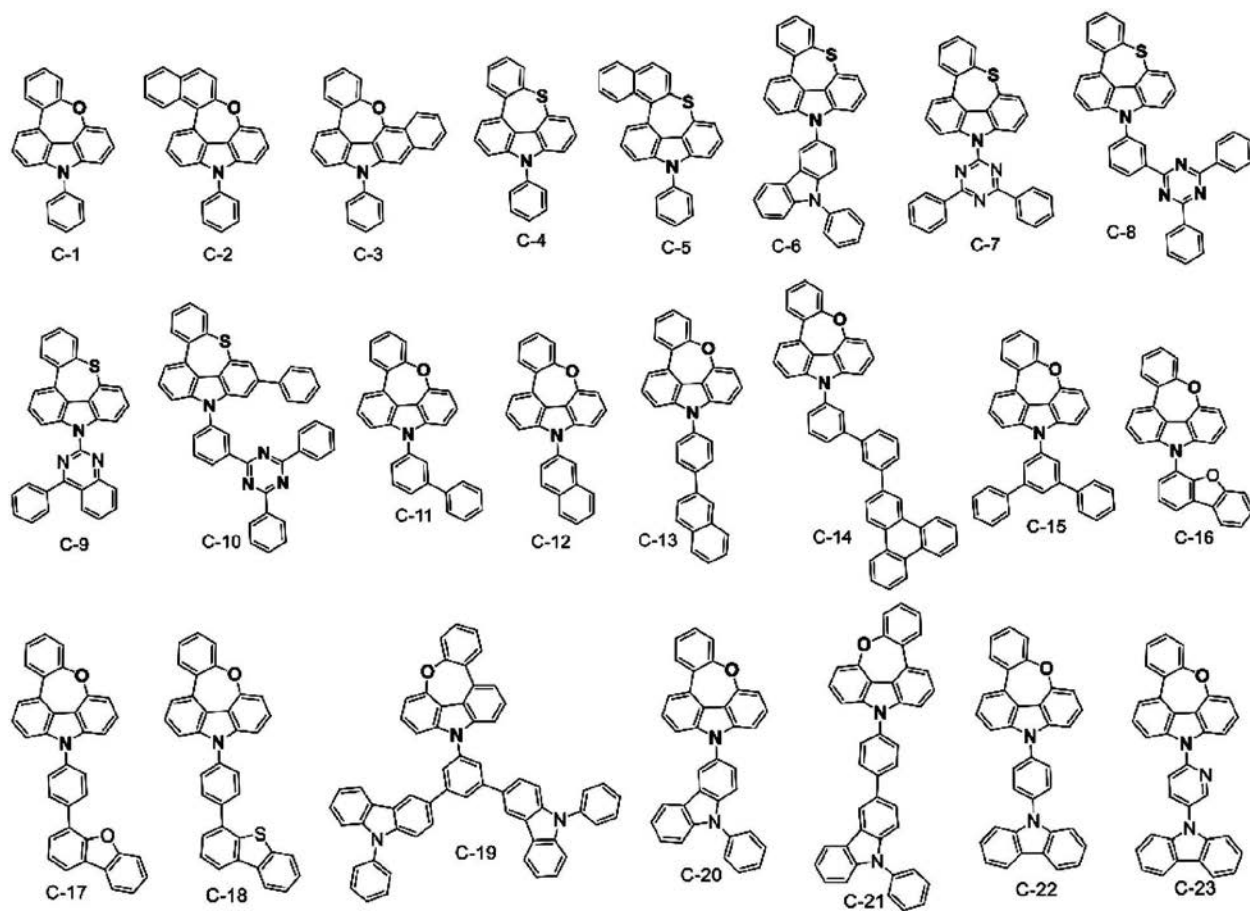
R₁₁ ~ R₁₄ は各々独立して、置換もしくは非置換 (C 6 - C 1 8) アリールを表し、

a ~ c は各々独立して、1 または 2 を表す、請求項 1 に記載の有機電界発光化合物。

【請求項 5】

式 1 で表される前記化合物が、

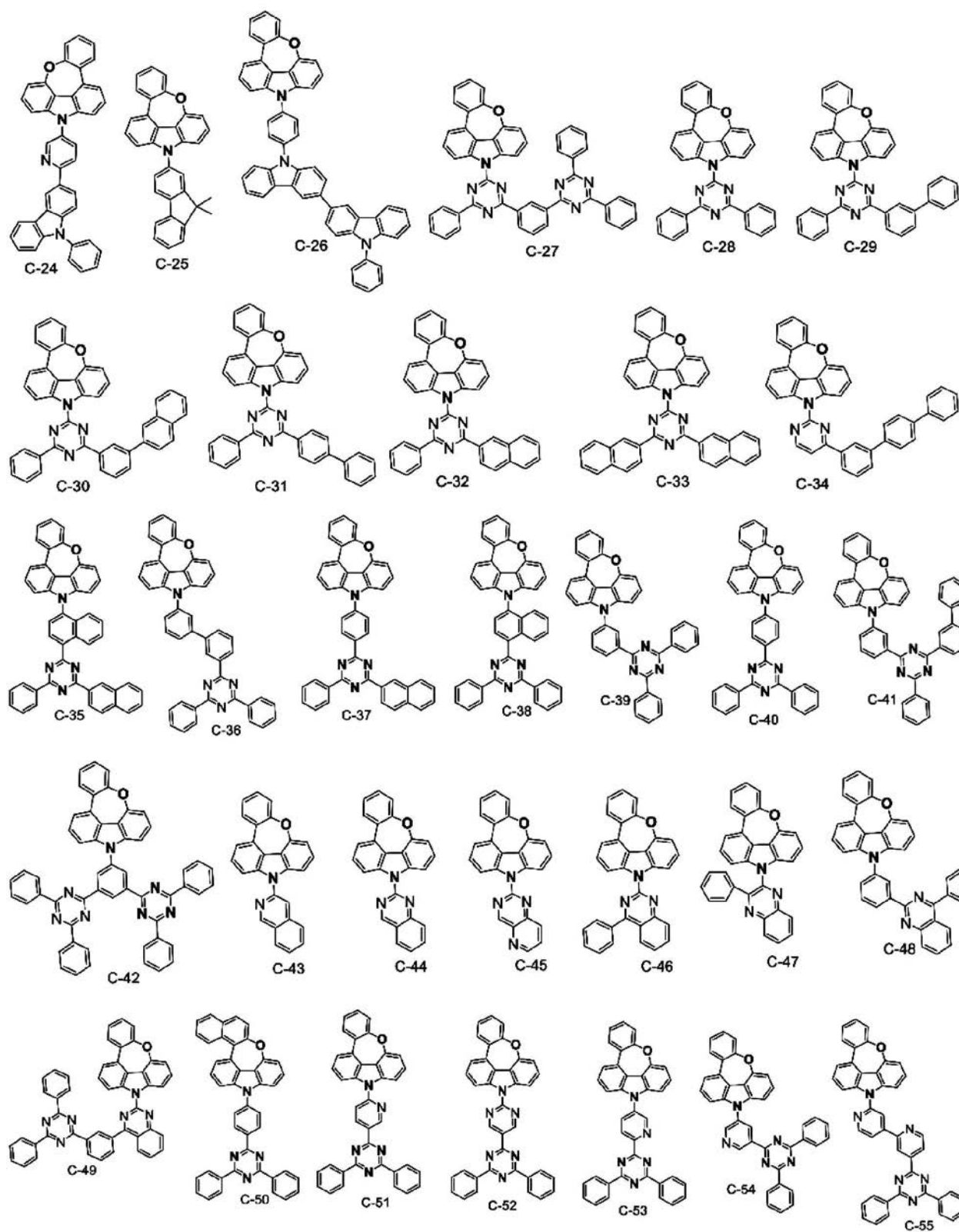
【化 2 - 1】



10

20

【化 2 - 2】



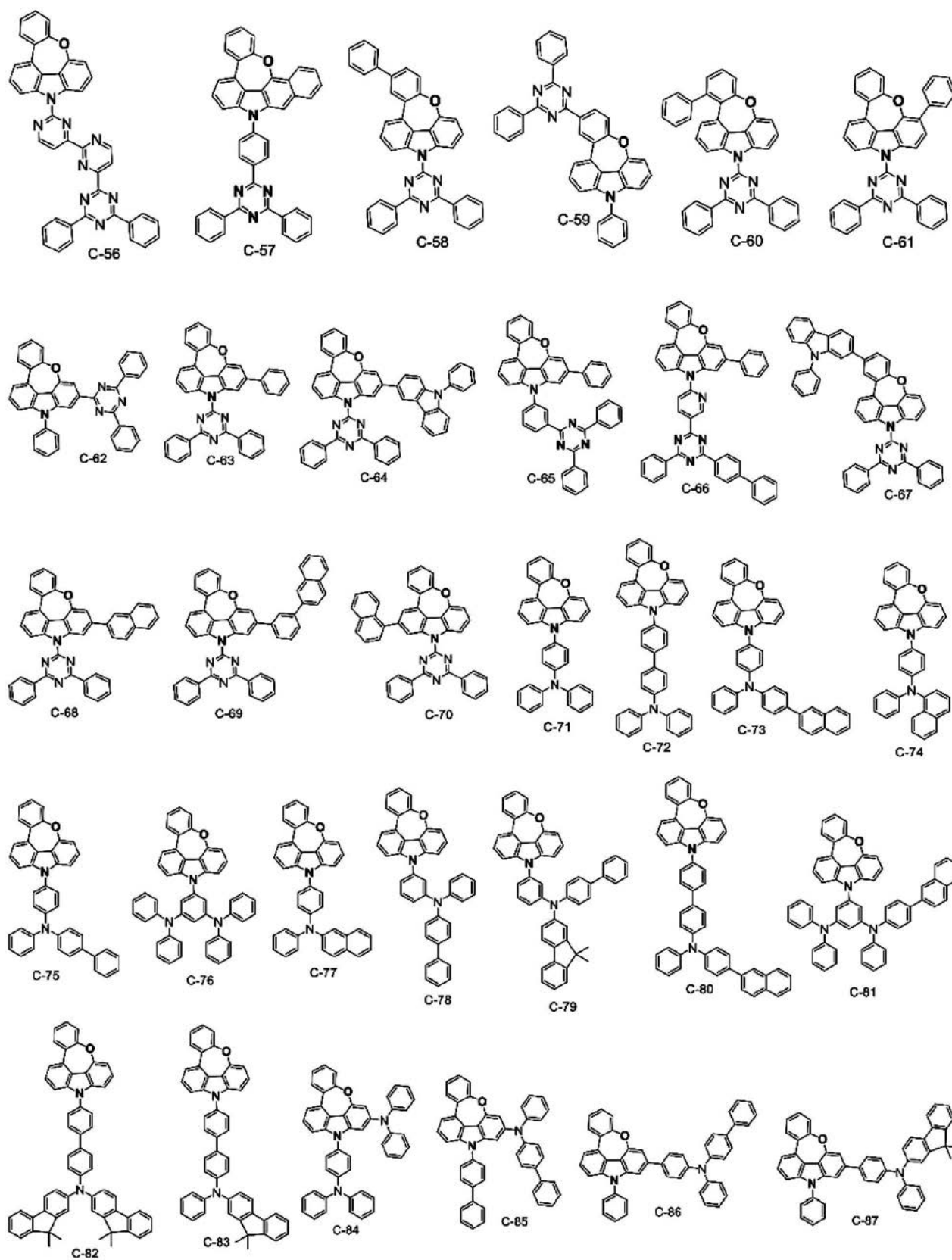
10

20

30

40

【化 2 - 3】



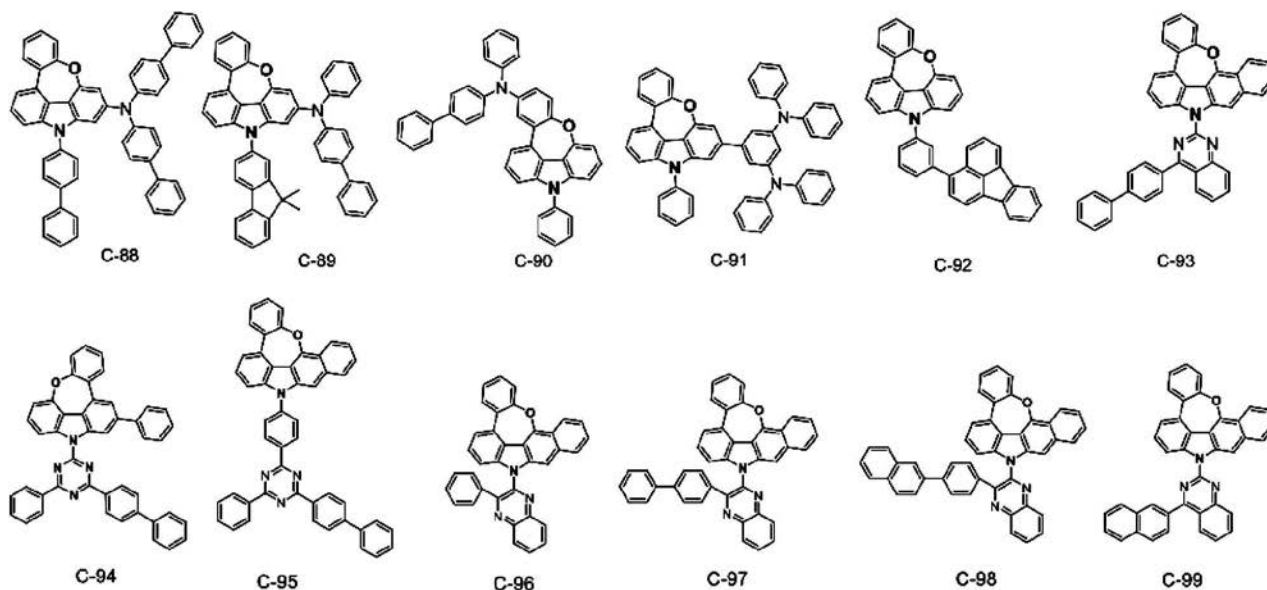
10

20

30

40

【化 2 - 4】



10

からなる群から選択される、請求項 1 に記載の有機電界発光化合物。

【請求項 6】

請求項 1 に記載の有機電界発光化合物を含むホスト材料。

20

【請求項 7】

請求項 1 に記載の有機電界発光化合物を含む電子緩衝材料。

【請求項 8】

請求項 1 に記載の有機電界発光化合物を含む有機電界発光デバイス。

【請求項 9】

前記有機電界発光デバイスが、第 1 の電極と第 2 の電極との間に配設された少なくとも 1 つの発光層を備え、前記発光層がホスト及びドーパントを含み、前記ホストが複数のホスト化合物を含み、前記複数のホスト化合物のうちの少なくとも 1 つのホスト化合物が前記有機電界発光化合物である、請求項 8 に記載の有機電界発光デバイス。

30

【請求項 10】

前記有機電界発光デバイスが、第 1 の電極と、前記第 1 の電極に対向している第 2 の電極と、前記第 1 の電極と前記第 2 の電極との間の発光層と、前記発光層と前記第 2 の電極との間の電子輸送層及び電子緩衝層と、を備え、前記電子緩衝層が、前記有機電界発光化合物を含む、請求項 8 に記載の有機電界発光デバイス。

【発明の詳細な説明】

【技術分野】

【0001】

本開示は、有機電界発光化合物及びそれを含む有機電界発光デバイスに関する。

【背景技術】

【0002】

ディスプレイデバイスの中でも、電界発光デバイス（ELデバイス）は、より広い視角、より高いコントラスト比、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己発光ディスプレイデバイスである。最初の有機 EL デバイスは、発光層を形成するための材料として芳香族ジアミン小分子及びアルミニウム錯体を使用することにより、Eastman Kodak によって開発された [Appl. Phys. Lett. 51, 913, 1987]。

40

【0003】

有機電界発光デバイスにおける発光効率を決定する最も重要な因子は発光材料である。現在に至るまで、蛍光材料が発光材料として広く使用されている。しかしながら、電界発光機構を考慮して、リン光発光材料は蛍光発光材料と比較して理論的に発光効率を 4 倍高

50

めることから、リン光発光材料は広く研究されている。イリジウム (I I I) 錯体はリン光発光材料として広く知られており、例えば、ビス (2 - (2 ' - ベンゾチエニル) - ピリジナト - N , C - 3 ') イリジウム (アセチルアセトネート) ((a c a c) I r (b t p) ₂) 、トリス (2 - フェニルピリジン) イリジウム (I r (p p y) ₃) 、及びビス (4 , 6 - ジフルオロフェニルピリジナト - N , C 2) ピコリネートイリジウム (F i r p i c) が、それぞれ、赤色、緑色、及び青色発光材料として挙げられる。

【 0 0 0 4 】

従来技術では、4 , 4 ' - N , N ' - ジカルバゾール - ビフェニル (C B P) が最も広く知られているリン光材料のためのホスト材料である。近年、P i o n e e r (J a p a n) らは、正孔阻止材料として既知のバソクプロイン (B C P) 及びアルミニウム (I I I)

10

【 0 0 0 5 】

これらの材料は、良好な発光特性を提供するが、以下の欠点を有する：(1) それらの低いガラス転移温度及び不良な熱安定性に起因して、真空中での高温蒸着プロセス中にそれらの劣化が生じる場合があり、デバイスの寿命が短くなることがある。(2) 有機電界発光デバイスの電力効率は [(π / 電圧) × 電流効率] によって得られ、その電力効率は電圧に反比例する。リン光ホスト材料を含む有機電界発光デバイスは蛍光材料を含むものよりも高い電流効率 (c d / A) を提供するが、顕著に高い駆動電圧が必要である。したがって、電力効率 (l m / W) の点では利点がない。(3) また、有機電界発光デバイスの動作寿命は短く、発光効率は依然として改善する必要がある。したがって、デバイスにおける有機層を構成する材料、特に、発光材料を構成するホストまたはドーパントは、有機 E L デバイスの優れた特性を実現するためには適宜選択しなければならない。

20

【 0 0 0 6 】

また、電子緩衝層は、パネルを製造するプロセス中にデバイスが高温に曝露される場合、デバイスの電流特性の変化に起因して発生することがある発光輝度の低下問題を改善するために備えられている。したがって、電子緩衝層内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用いられる化合物は、電子求引性及び電子親和力 L U M O (最低空分子軌道) エネルギー準位によって電子注入を制御する役割を果たすことができる。

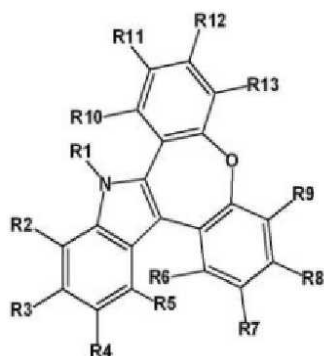
30

【 0 0 0 7 】

韓国特許出願公開第 2 0 1 4 - 0 1 1 9 6 4 2 号は、以下の構造を有する化合物を開示している。

【 0 0 0 8 】

【 化 1 】



40

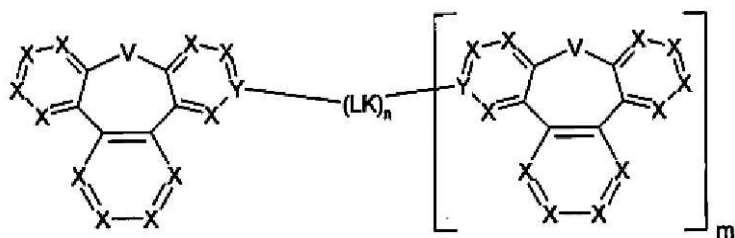
【 0 0 0 9 】

国際公開第 2 0 1 5 - 0 8 2 0 4 6 号は、以下の構造を含む化合物を開示しているが、V を含む 7 員環が 5 員環と縮合される構造を有する化合物は具体的には開示されていない。

50

【 0 0 1 0 】

【 化 2 】



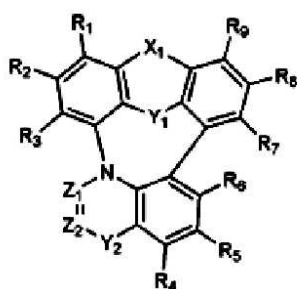
【 0 0 1 1 】

10

韓国特許出願公開第 2 0 1 5 - 0 0 7 7 2 2 0 号は、以下の構造、すなわち縮合アゼピン核構造を含む化合物を開示している。

【 0 0 1 2 】

【 化 3 】



20

【 0 0 1 3 】

しかしながら、上記の文献のいずれも、縮合オキセピン - カルバゾール核構造または縮合チエピン - カルバゾール核構造を有する化合物を具体的には開示していない。

【 発明の概要 】

【 0 0 1 4 】

技術的課題

本開示の目的は、(1) 低い駆動電圧及び / または優れた電力効率及び / または著しく改善された動作寿命を有する有機電界発光デバイスを製造するのに有効な有機電界発光化合物、ならびに (2) 有機電界発光化合物を含む有機電界発光デバイスを提供することである。

30

【 0 0 1 5 】

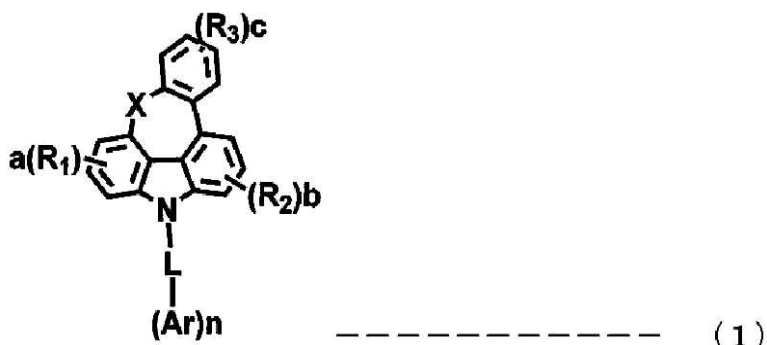
課題を解決するための手段

上記技術的課題を解決するために徹底的に研究した結果、本発明者らは、本開示の有機電界発光化合物が、高い三重項エネルギー及び改善された効率を有する有機電界発光デバイスを製造できることを見出した。具体的には、本発明者らは、以下の式 1 で表される有機電界発光化合物によって上記目的が達成されることを見出した。

【 0 0 1 6 】

【 化 4 】

40



【 0 0 1 7 】

50

式中、

X は、O または S を表し、

L は、単結合、置換もしくは非置換 (C 6 - C 3 0) アリーレン、または置換もしくは非置換 (3 ~ 3 0 員) ヘテロアリーレンを表し、

A r は、置換もしくは非置換 (C 6 - C 3 0) アリール、置換もしくは非置換 (3 ~ 3 0 員) ヘテロアリール、または - N R_{1 1} R_{1 2} を表し、

R₁ ~ R₃ は各々独立して、水素、重水素、置換もしくは非置換 (C 1 - C 3 0) アルキル、置換もしくは非置換 (C 6 - C 3 0) アリール、置換もしくは非置換 (3 ~ 3 0 員) ヘテロアリール、または - N R_{1 3} R_{1 4} を表すか、またはそれぞれ、隣接する R₁、R₂、及び R₃ に連結されて、置換もしくは非置換の単環もしくは多環の (C 3 - C 3 0) 脂環式環もしくは芳香環、またはそれらの組み合わせを形成し、その炭素原子 (複数可) は、窒素、酸素、及び硫黄から選択される少なくとも 1 個のヘテロ原子で置き換えられていてもよく、

R_{1 1} ~ R_{1 4} は各々独立して、置換もしくは非置換 (C 1 - C 1 0) アルキル、置換もしくは非置換 (C 6 - C 3 0) アリール、または置換もしくは非置換 (3 ~ 3 0 員) ヘテロアリールを表し、

n は、1 または 2 を表し、n が 2 を表す場合、各 A r は同じであっても異なってもよく、

a 及び b は各々独立して、1 ~ 3 の整数を表し、c は 1 ~ 4 の整数を表し、ここで、a ~ c は各々独立して、2 以上の整数を表し、R₁ ~ R₃ は各々同じであっても異なってもよく、

ヘテロアリール (アリーレン) は、B、N、O、S、Si、及び P から選択される少なくとも 1 個のヘテロ原子を含有する。

【0018】

発明の有利な効果

本開示の有機電界発光化合物は、低い駆動電圧及び / または優れた電力効率及び / または改善された駆動寿命を有する電界発光デバイスを提供することができる。

【発明を実施するための形態】

【0019】

以下、本開示が詳細に記載される。しかしながら、以下の説明は、本開示を説明することを意図したものであり、決して本開示の範囲を限定するものではない。

【0020】

本開示における用語「有機電界発光化合物」は、有機電界発光デバイスで使用され得る化合物を意味し、必要に応じて有機電界発光デバイスを構成する任意の層内に含まれ得る。

【0021】

本開示における用語「有機電界発光材料」とは、有機電界発光デバイスで使用され得、かつ少なくとも 1 つの化合物を含み得る材料を意味する。必要であれば、有機電界発光材料は、有機電界発光デバイスを構成する任意の層内に含まれ得る。例えば、有機電界発光材料は、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、電子注入材料等であり得る。

【0022】

式 1 で表される化合物が、以下で詳細に記載される。

【0023】

式 1 中、X は、O または S を表す。

【0024】

式 1 中、L は、単結合、置換もしくは非置換 (C 6 - C 3 0) アリーレン、または置換もしくは非置換 (3 ~ 3 0 員) ヘテロアリーレンを表し、好ましくは、単結合、置換もしくは非置換 (C 6 - C 2 5) アリーレン、または置換もしくは非置換 (5 ~ 2 5 員) ヘテロアリーレンを表し、より好ましくは、単結合、置換もしくは非置換 (C 6 - C 1 8) ア

10

20

30

40

50

リーレン、または置換もしくは非置換（５～１８員）ヘテロアリーレンを表す。例えば、 L は、単結合、置換もしくは非置換フェニレン、非置換ビフェニレン、非置換ナフチレン、非置換カルバゾリレン、非置換キナゾリニレン、非置換ピリジニレン、置換もしくは非置換トリアジニレン、非置換ピリミジニレン、または非置換キノキサリニレンを表し、置換フェニレンの置換基は、フェニルで置換されたカルバゾリル、ジフェニルで置換されたトリアジニル、及びジフェニルアミノからなる群から選択される少なくとも１つであり得、置換トリアジニレンの置換基は、フェニルであり得る。

【００２５】

式１中、 A_r は、置換もしくは非置換（ $C_6 - C_{30}$ ）アリール、置換もしくは非置換（３～３０員）ヘテロアリール、または $-NR_{11}R_{12}$ を表し、好ましくは、置換もしくは非置換（ $C_6 - C_{25}$ ）アリール、置換もしくは非置換（５～２５員）ヘテロアリール、または $-NR_{11}R_{12}$ を表し、より好ましくは、置換もしくは非置換（ $C_6 - C_{18}$ ）アリール、置換もしくは非置換（５～１８員）ヘテロアリール、または $-NR_{11}R_{12}$ を表す。例えば、 A_r は、置換もしくは非置換フェニル、非置換ナフチル、非置換ビフェニル、非置換ターフェニル、非置換ナフチルフェニル、非置換フルオランテニル、非置換トリフェニレニル、置換トリアジニル、非置換ジベンゾフラニル、非置換ジベンゾチオフェニル、置換もしくは非置換カルバゾリル、ジメチルで置換されたフルオレニル、非置換イソキノリル、非置換もしくはフェニルで置換されているキナゾリニル、非置換ピリドピリミジニル、置換ピリジル、置換ピリミジニル、または $-NR_{11}R_{12}$ を表し得、ここで、置換フェニル、置換ピリジル、及び置換ピリミジニルの置換基は、ジフェニルで置換されたトリアジニルであり得、置換カルバゾリルの置換基は、フェニル、及びフェニルで置換されたカルバゾリルからなる群から選択される少なくとも１つであり得、置換トリアジニルの置換基は、フェニル、ビフェニル、ナフチル、及びナフチルフェニルからなる群から選択される少なくとも１つであり得る。

【００２６】

式１中、 $R_1 \sim R_3$ は各々独立して、水素、重水素、置換もしくは非置換（ $C_1 - C_{10}$ ）アルキル、置換もしくは非置換（ $C_6 - C_{30}$ ）アリール、置換もしくは非置換（３～３０員）ヘテロアリール、または $-NR_{13}R_{14}$ を表すか、またはそれぞれ、隣接する R_1 、 R_2 、及び R_3 に連結されて、置換もしくは非置換の単環もしくは多環の（ $C_3 - C_{30}$ ）脂環式環もしくは芳香環、またはそれらの組み合わせを形成し、その炭素原子（複数可）は、窒素、酸素、及び硫黄から選択される少なくとも１個のヘテロ原子で置き換えられていてもよい。好ましくは、 $R_1 \sim R_3$ は各々独立して、水素、置換もしくは非置換（ $C_6 - C_{25}$ ）アリール、置換もしくは非置換（５～２５員）ヘテロアリール、または $-NR_{13}R_{14}$ を表すか、またはそれぞれ、隣接する R_1 、 R_2 、及び R_3 に連結されて、置換もしくは非置換の単環もしくは多環の（ $C_5 - C_{25}$ ）脂環式環もしくは芳香環、またはそれらの組み合わせを形成し、その炭素原子（複数可）は、窒素、酸素、及び硫黄から選択される少なくとも１個のヘテロ原子で置き換えられていてもよい。より好ましくは、 $R_1 \sim R_3$ は各々独立して、水素、置換もしくは非置換（ $C_6 - C_{18}$ ）アリール、置換もしくは非置換（５～１８員）ヘテロアリール、または $-NR_{13}R_{14}$ を表すか、またはそれぞれ、隣接する R_1 、 R_2 、及び R_3 に連結されて、非置換の単環もしくは多環の（ $C_5 - C_{18}$ ）の芳香環を形成する。例えば、 $R_1 \sim R_3$ は各々独立して、水素、置換もしくは非置換フェニル、非置換ナフチルフェニル、非置換ナフチル、ジフェニルで置換されたトリアジニル、フェニルで置換されたカルバゾリル、または $-NR_{13}R_{14}$ を表すか、またはそれぞれ、隣接する R_1 、 R_2 、及び R_3 に連結されて非置換ベンゼン環を形成することができ、ここで、置換フェニルの置換基は、モノ-またはジ-（ $C_6 - C_{30}$ ）アリールアミノであり得、好ましくはフェニルビフェニルアミノ、ジフェニルアミノ、及びジメチルフルオレニルフェニルアミノからなる群から選択される少なくとも１つであり得る。

【００２７】

式１中、 $R_{11} \sim R_{14}$ は各々独立して、置換もしくは非置換（ $C_1 - C_{10}$ ）アルキ

ル、置換もしくは非置換 (C 6 - C 3 0) アリール、または置換もしくは非置換 (3 ~ 3 0 員) ヘテロアリールを表し、好ましくは、置換もしくは非置換 (C 6 - C 2 5) アリール、または置換もしくは非置換 (5 ~ 2 5 員) ヘテロアリールを表し、より好ましくは、置換または非置換 (C 6 - C 1 8) アリールを表す。例えば、R_{1 1} 及び R_{1 2} は各々独立して、非置換フェニル、非置換ナフチル、非置換ビフェニル、非置換ナフチルフェニル、またはジメチルで置換されたフルオレニルを表し得、また R_{1 3} 及び R_{1 4} は各々独立して、非置換フェニル、または非置換ビフェニルを表し得る。

【0028】

式 1 において、n は、1 または 2 を表し、n が 2 である場合、各 A_r は同じであっても異なってもよい。

【0029】

式 1 中、a 及び b は各々独立して、1 ~ 3 の整数を表し、c は、1 ~ 4 の整数を表し、a ~ c が各々独立して、2 以上の整数を表す場合、R₁ ~ R₃ は各々同じであっても異なってもよい。好ましくは、a ~ c は各々独立して、1 または 2 を表す。

【0030】

本開示の一実施形態によれば、L は、単結合、置換もしくは非置換 (C 6 - C 2 5) アリーレン、または置換もしくは非置換 (5 ~ 2 5 員) ヘテロアリーレンを表し、A_r は、置換もしくは非置換 (C 6 - C 2 5) アリール、置換もしくは非置換 (5 ~ 2 5 員) ヘテロアリール、または -NR_{1 1}R_{1 2} を表し、R₁ ~ R₃ は各々独立して、水素、置換もしくは非置換 (C 6 - C 2 5) アリール、置換もしくは非置換 (5 ~ 2 5 員) ヘテロアリール、または -NR_{1 3}R_{1 4} を表すか、またはそれぞれ、隣接する R₁、R₂、及び R₃ に連結されて置換もしくは非置換の単環もしくは多環の (C 5 - C 2 5) の脂環式環もしくは芳香環、またはそれらの組み合わせを形成し、その炭素原子 (複数可) は、窒素、酸素、及び硫黄から選択される少なくとも 1 個のヘテロ原子で置き換えられていてもよく、R_{1 1} ~ R_{1 4} は各々独立して、置換もしくは非置換 (C 6 - C 2 5) アリール、または置換もしくは非置換 (5 ~ 2 5 員) ヘテロアリールを表し、a ~ c は各々独立して、1 または 2 を表す。

【0031】

本開示の別の実施形態によれば、式 1 中、L は、単結合、置換もしくは非置換 (C 6 - C 1 8) アリーレン、または置換もしくは非置換 (5 ~ 1 8 員) ヘテロアリーレンを表し、A_r は、置換もしくは非置換 (C 6 - C 1 8) アリール、置換もしくは非置換 (5 ~ 1 8 員) ヘテロアリール、または -NR_{1 1}R_{1 2} を表し、R₁ ~ R₃ は各々独立して、水素、置換もしくは非置換 (C 6 - C 1 8) アリール、置換もしくは非置換 (5 ~ 1 8 員) ヘテロアリール、または -NR_{1 3}R_{1 4} を表すか、またはそれぞれ、隣接する R₁、R₂、及び R₃ に連結されて非置換の単環もしくは多環の (C 5 - C 1 8) の芳香環を形成し、R_{1 1} ~ R_{1 4} は各々独立して、置換もしくは非置換 (C 6 - C 1 8) アリールを表し、a ~ c は各々独立して、1 または 2 を表す。

【0032】

本明細書において、用語「(C 1 - C 3 0) アルキル」は、鎖を構成する 1 ~ 3 0 個の炭素原子を有する直鎖または分枝鎖アルキルを意味し、炭素原子の数は、好ましくは 1 ~ 2 0 個、より好ましくは 1 ~ 1 0 個であり、例えばメチル、エチル、n - プロピル、イソプロピル、n - ブチル、イソブチル、tert - ブチル等が挙げられる。用語「(C 2 - C 3 0) アルケニル」は、鎖を構成する 2 ~ 3 0 個の炭素原子を有する直鎖または分枝鎖アルケニルを意味し、炭素原子の数は、好ましくは 2 ~ 2 0 個、より好ましくは 2 ~ 1 0 個であり、例えばビニル、1 - プロペニル、2 - プロペニル、1 - ブテニル、2 - ブテニル、3 - ブテニル、2 - メチルブタ - 2 - エニル等が挙げられる。用語「(C 2 - C 3 0) アルキニル」は、鎖を構成する 2 ~ 3 0 個の炭素原子を有する直鎖または分枝鎖アルキニルを意味し、炭素原子の数は、好ましくは 2 ~ 2 0 個、より好ましくは 2 ~ 1 0 個であり、例えばエチニル、1 - プロピニル、2 - プロピニル、1 - ブチニル、2 - ブチニル、3 - ブチニル、1 - メチルペンタ - 2 - イニル等が挙げられる。用語「(C 3 - C 3 0)

10

20

30

40

50

シクロアルキル」は、3～30個の環骨格炭素原子を有する単環または多環炭化水素であり、炭素原子数は、好ましくは3～20個、より好ましくは3～7個であり、例えばシクロプロピル、シクロブチル、シクロペンチル、シクロヘキシル等が挙げられる。用語「(3～7員)ヘテロシクロアルキル」は、B、N、O、S、Si、及びP、好ましくはO、S、及びNから選択される少なくとも1個のヘテロ原子を含む3～7個、好ましくは5～7個の環骨格原子を有するシクロアルキルであり、テトラヒドロフラン、ピロリジン、チオラン、テトラヒドロピラン等が挙げられる。用語「(C6～C30)アリール(アリーレン)」は、6～30個の環骨格炭素原子を有する芳香族炭化水素から誘導された単環または縮合環ラジカルであり、その環骨格炭素原子の数は、好ましくは6～20個、より好ましくは6～15個であり、部分的に飽和していてもよく、またスピロ構造を含んでいてもよい。上記アリール(アリーレン)としては、フェニル、ピフェニル、ターフェニル、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、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、フェニルフェナントレニル、アントラセニル、インデニル、トリフェニレニル、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、スピロピフルオレニル等が挙げられる。用語「(3～30員)ヘテロアリール(アリーレン)」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個、好ましくは1～4個のヘテロ原子を含む3～30個の環骨格原子を有するアリールである。上記ヘテロアリール(アリーレン)は、単環式環、または少なくとも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基またはアリール基を単結合(複数可)によってヘテロアリール基に連結することにより形成されたものであってもよく、単環式環型ヘテロアリール、例えばフリル、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、イソオキサゾリル、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、及びピリダジニル等、及び縮合環型ヘテロアリール、例えばベンゾフラニル、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、ベンゾイソオキサゾリル、ベンゾオキサゾリル、イソインドリル、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、フェノキサジニル、フェノチアジニル、フェナントリジニル、ベンゾジオキサリル、及びジヒドロアクリジニル等が挙げられる。さらに、「ハロゲン」としては、F、Cl、Br、及びIが挙げられる。

【0033】

本明細書において、「置換もしくは非置換」という表現における「置換」とは、ある特定の官能基中の水素原子が別の原子または別の官能基、すなわち置換基で置き換えられることを意味する。L、Ar、R₁～R₃、及びR₁₁～R₁₄における置換アリール(アリーレン)、置換ヘテロアリール(アリーレン)、置換アルキル、及び置換された単環もしくは多環の脂環式環もしくは芳香環の置換基、またはそれらの組み合わせは各々独立して、重水素、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、(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、非置換もしくは(C1～C30)アルキルまたは(C6～C30)アリールで置換された(3～30員)ヘテロアリール、非置換もしくは3～30員ヘテロアリールで置換された(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、モノもしくはジ(C1～C30)アルキルアミノ、モノもしくはジ(C6～C30)アリールアミノ、(C1～

10

20

30

40

50

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 つであり、好ましくは、(C 1 - C 2 0) アルキル、(C 6 - C 2 5) アリール、非置換もしくは (C 6 - C 2 5) で置換された (5 ~ 2 5 員) ヘテロアリール、及びジ (C 6 - C 2 5) アリールアミノからなる群から選択される少なくとも 1 つであり、より好ましくは、(C 1 - C 1 0) アルキル、(C 6 - C 1 8) アリール、非置換もしくは (C 6 - C 1 8) アリールで置換された (5 ~ 1 8 員) ヘテロアリール、及びジ (C 6 - C 1 8) アリールアミノからなる群から選択される少なくとも 1 つであり、例えば、メチル、フェニル、ビフェニル、ナフチル、ナフチルフェニル、ジフェニルで置換されたトリアジニル、フェニルで置換されたカルバゾリル、ジフェニルアミノ、フェニルビフェニルアミノ、及びジメチルフルオレニルフェニルアミノからなる群から選択される少なくとも 1 つであり得る。

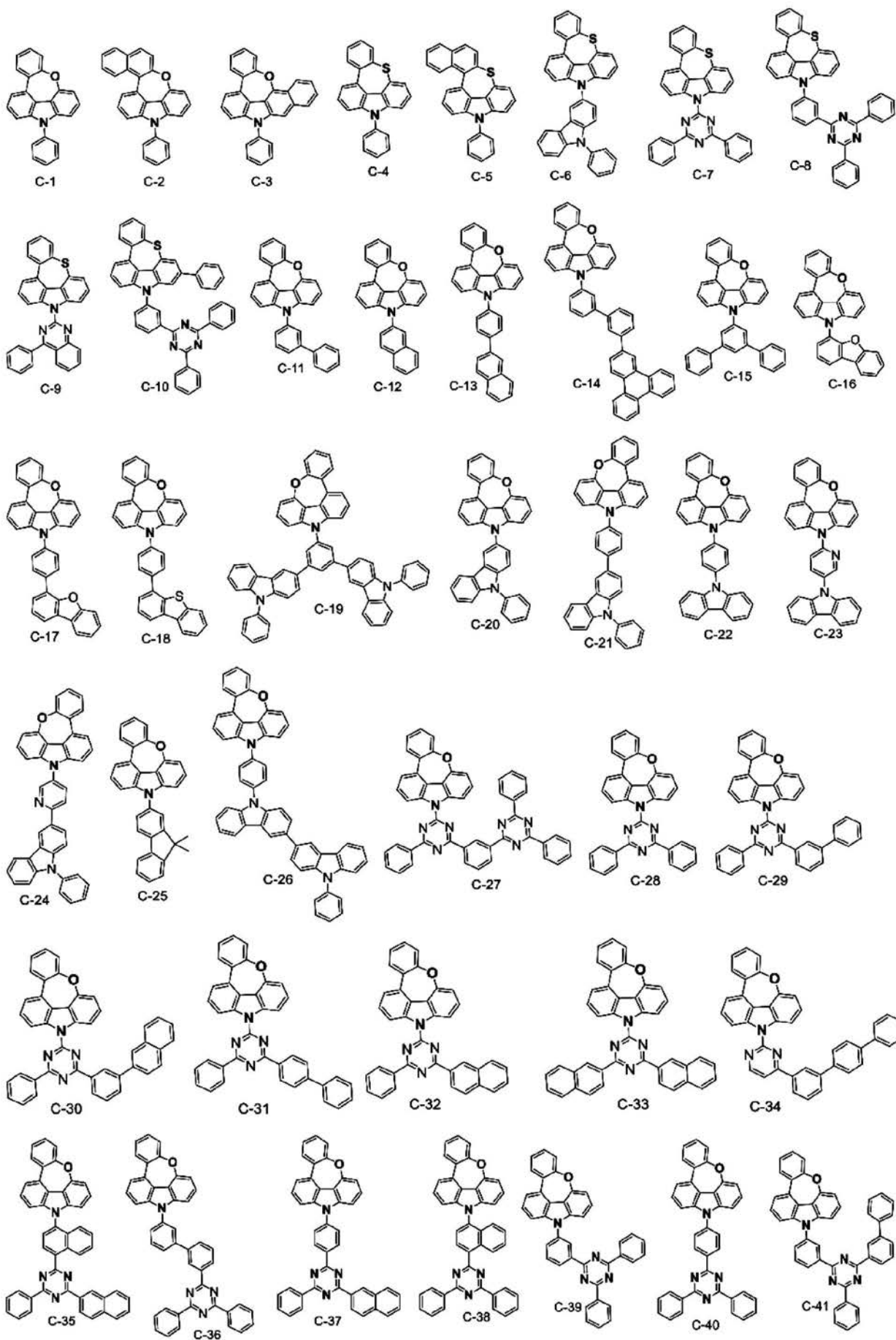
10

【 0 0 3 4 】

式 1 で表わされる有機電界発光化合物としては、以下の化合物が挙げられるが、これらに限定されない：

【 0 0 3 5 】

【化 5 - 1】



10

20

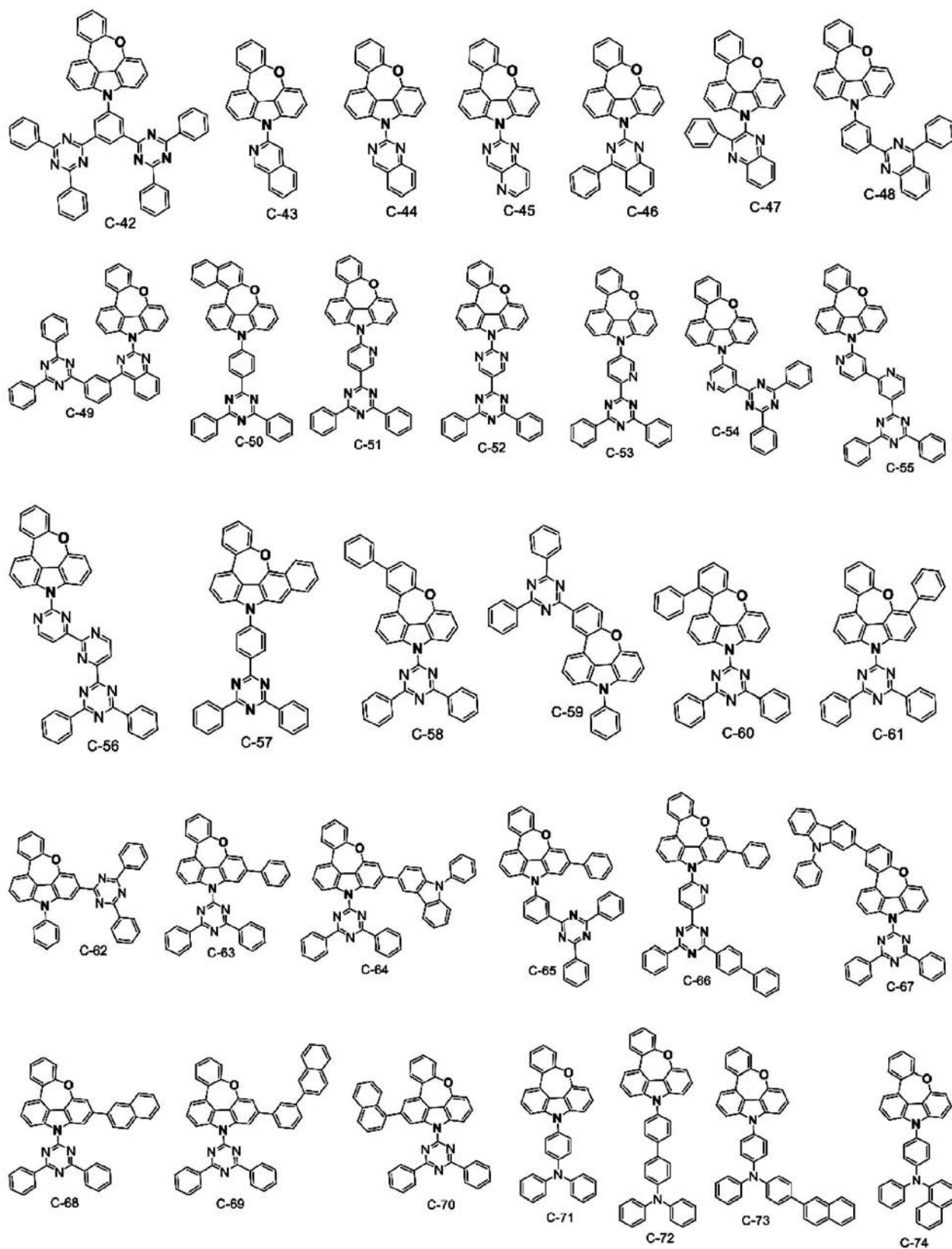
30

40

50

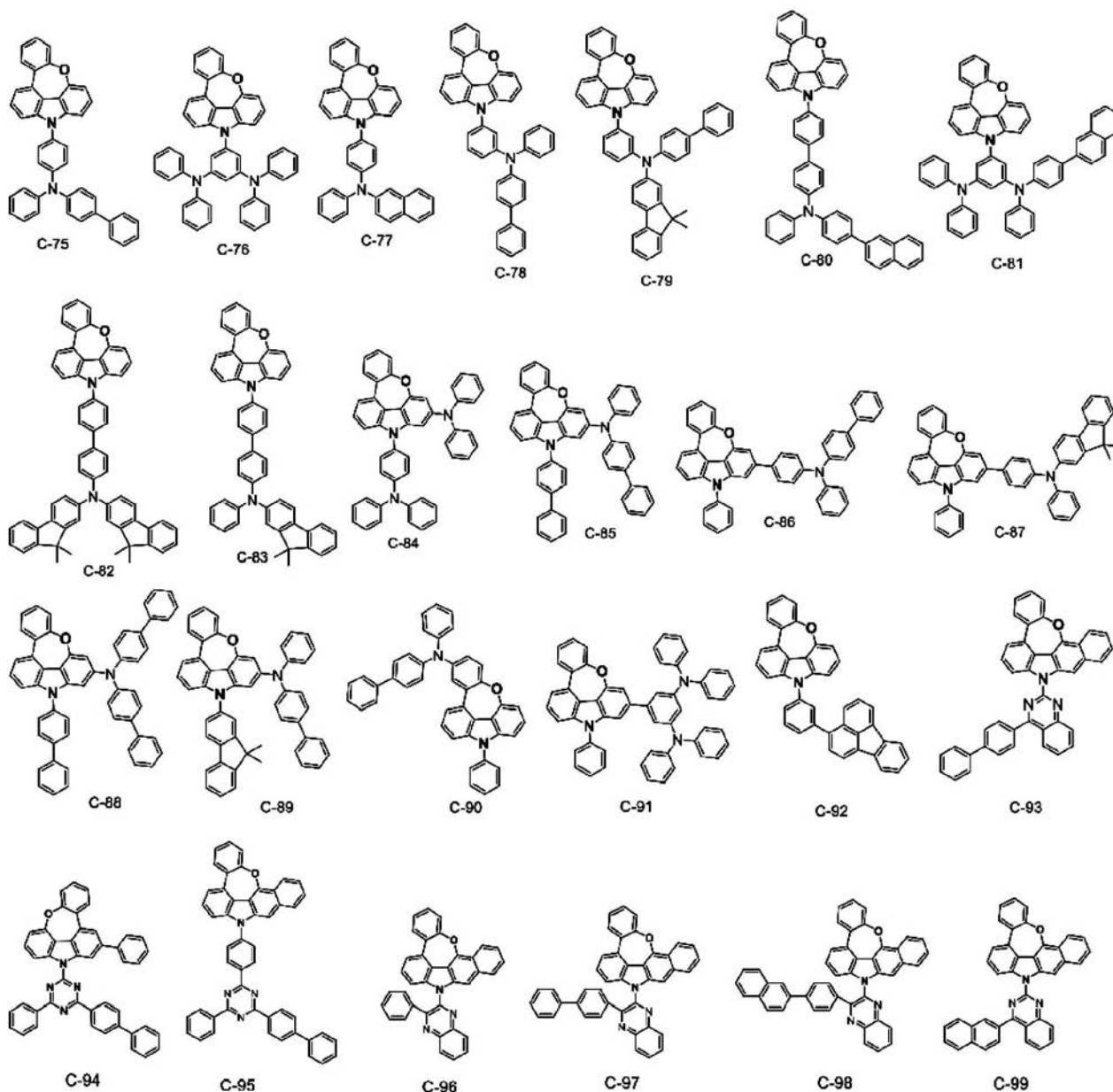
【 0 0 3 6 】

【化 5 - 2】



【 0 0 3 7 】

【化 5 - 3】



10

20

30

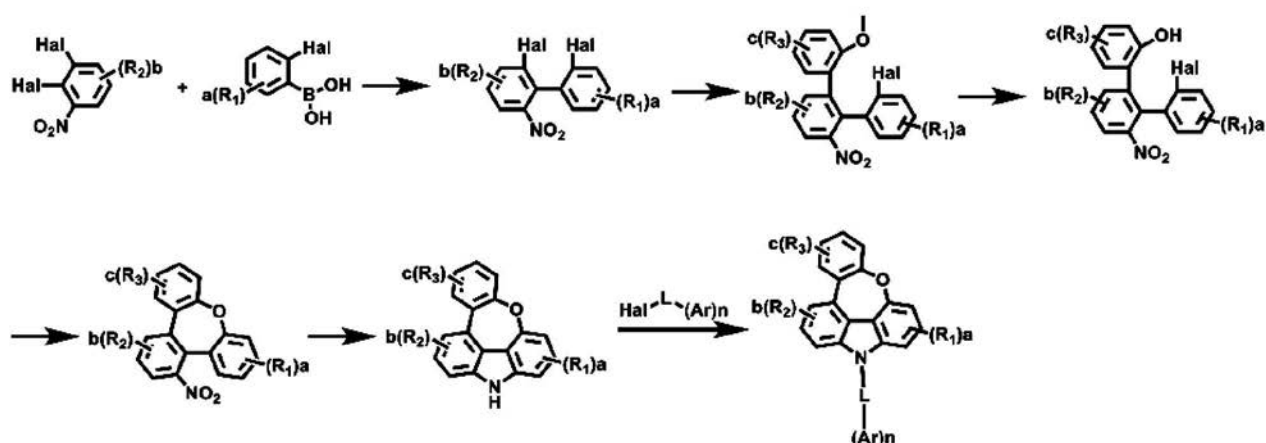
【 0 0 3 8 】

本開示の有機電界発光化合物は、当業者に既知の合成法、例えば以下の反応スキームによって製造することができる：

【 0 0 3 9 】

【化 6】

[反応スキーム 1]

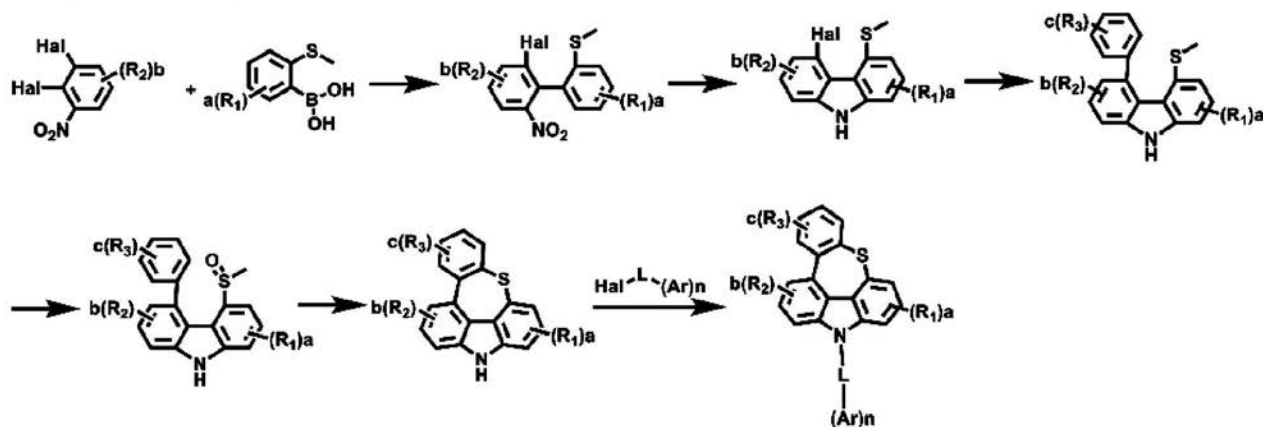


10

【 0 0 4 0】

【化 7】

[反応スキーム 2]



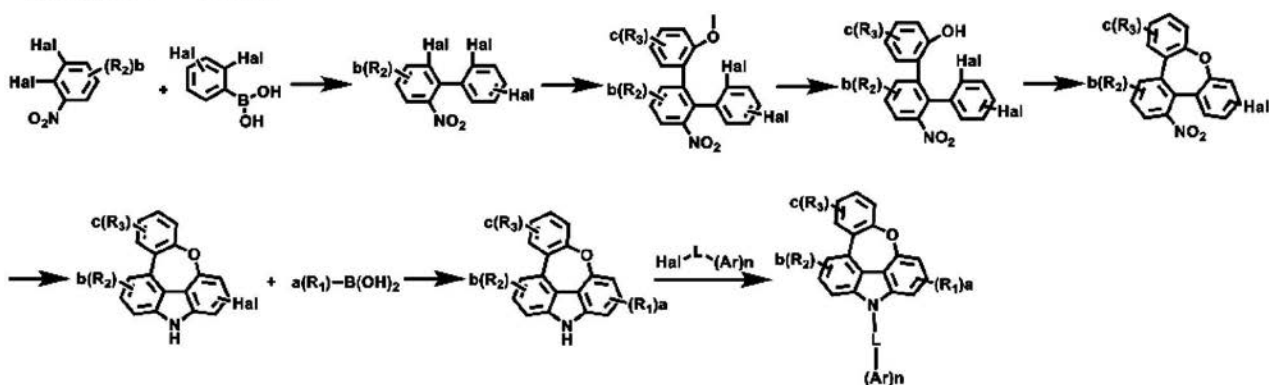
20

30

【 0 0 4 1】

【化 8】

[反応スキーム 3]

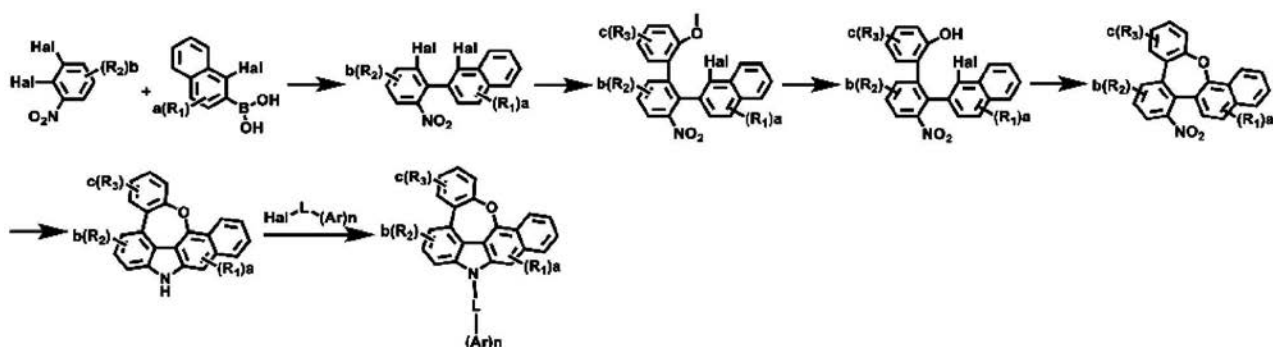


40

【 0 0 4 2】

【化 9】

[反応スキーム 4]

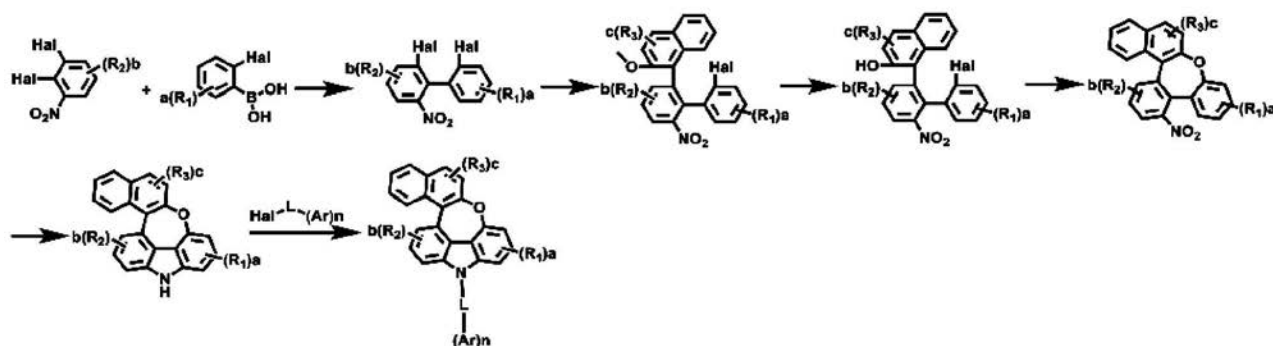


10

【 0 0 4 3 】

【化 1 0】

[反応スキーム 5]



20

【 0 0 4 4 】

式中、 L 、 Ar 、 $R_1 \sim R_3$ 、 n 、 a 、 b 、及び c は、式 1 に定義されている。

【 0 0 4 5 】

本開示は、式 1 の化合物を含む有機電界発光材料、及びその材料を含む有機電界発光デバイスも開示する。

30

【 0 0 4 6 】

有機電界発光材料は、唯一の化合物としての本開示の有機電界発光化合物からなり得るか、または有機電界発光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むことができる。

【 0 0 4 7 】

本開示の有機電界発光デバイスは、第 1 の電極、第 2 の電極、及び第 1 の電極と第 2 の電極との間の少なくとも 1 つの有機層を備えることができる。この有機層は、少なくとも 1 つの式 1 の有機電界発光化合物を含み得る。

【 0 0 4 8 】

第 1 の電極及び第 2 の電極のうち的一方がアノードであり得、他方がカソードであり得る。有機層は、発光層を備えることができ、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、電子注入層、中間層、正孔阻止層、電子阻止層、及び電子緩衝層から選択される少なくとも 1 つの層をさらに備えることができる。ここで、正孔補助層または発光補助層は、正孔輸送層と発光層との間に配設され、それにより正孔の輸送速度を制御することができる。正孔補助層または発光補助層は、優れた効率及び / または改善された寿命を有する有機電界発光デバイスを製造するのに有効であり得る。

40

【 0 0 4 9 】

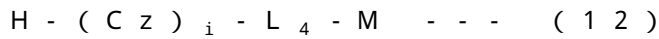
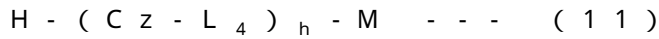
式 1 で表される有機電界発光化合物は、発光層内に含まれ得る。発光層で使用される場合、式 1 の有機電界発光化合物は、ホスト材料として含まれ得る。好ましくは、発光層は、少なくとも 1 つのドーパントをさらに含むことができる。必要であれば、式 1 の有機電

50

界発光化合物以外の別の化合物が第2のホスト材料としてさらに含まれ得る。本明細書では、第1のホスト材料の第2のホスト材料に対する重量比は、1：99～99：1の範囲である。発光層中のホスト化合物に対するドーパント化合物のドーピング濃度は、20重量%未満であることが好ましい。

【0050】

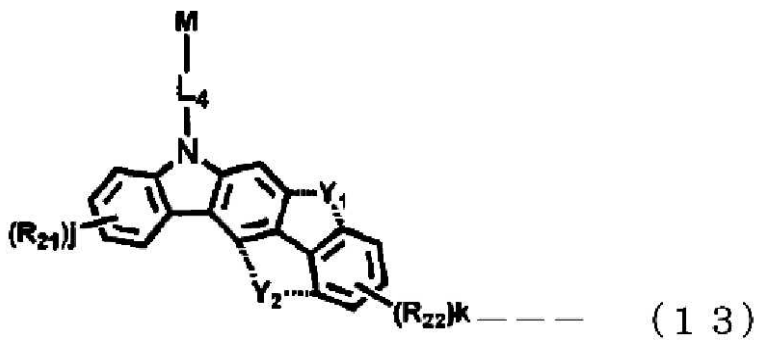
第2のホスト材料は、既知のリン光ホストのうちのいずれかを使用することができる。好ましくは、第2のホスト材料は、以下の式11～16で表される化合物からなる群から選択される化合物を含むことができる。



10

【0051】

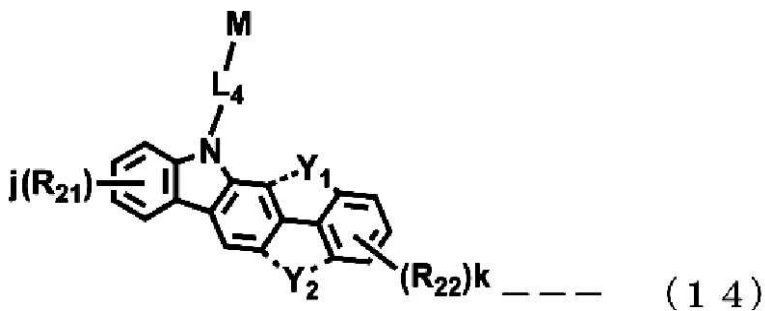
【化11】



20

【0052】

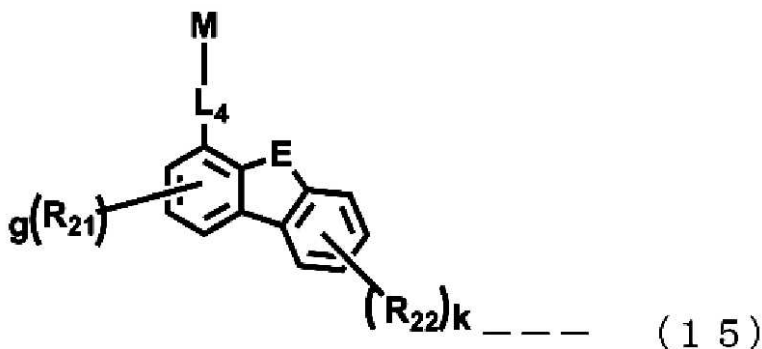
【化12】



30

【0053】

【化13】



40

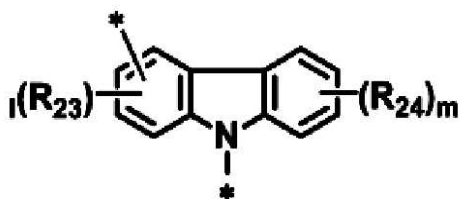
【0054】

式中、

Czは、以下の構造を表し、

【0055】

【化 1 4】



【 0 0 5 6】

E は、O または S を表し、

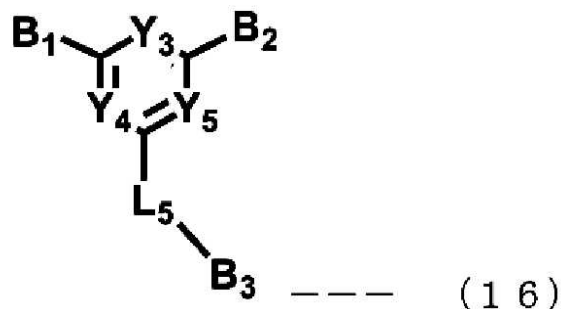
$R_{21} \sim R_{24}$ は各々独立して、水素、重水素、ハロゲン、置換もしくは非置換 (C 1 - C 3 0) アルキル、置換もしくは非置換 (C 6 - C 3 0) アリール、置換もしくは非置換 (5 ~ 3 0 員) ヘテロアリール、または $-SiR_{25}R_{26}R_{27}$ を表し、式中、 $R_{25} \sim R_{27}$ は各々独立して、置換もしくは非置換 (C 1 - C 3 0) アルキル、または置換もしくは非置換 (C 6 - C 3 0) アリールを表し、 L_4 は、単結合、置換もしくは非置換 (C 6 - C 3 0) アリーレン、または置換もしくは非置換 (5 ~ 3 0 員) ヘテロアリーレンを表し、M は、置換もしくは非置換 (C 6 - C 3 0) アリール、または置換もしくは非置換 (5 ~ 3 0 員) ヘテロアリールを表し、 Y_1 及び Y_2 は各々独立して、O、S、 $-NR_{31}$ 、または $-CR_{32}R_{33}$ を表し、但し Y_1 及び Y_2 は同時に存在しない、 $R_{31} \sim R_{33}$ は各々独立して、置換もしくは非置換 (C 1 - C 3 0) アルキル、置換もしくは非置換 (C 6 - C 3 0) アリール、または置換もしくは非置換 (5 ~ 3 0 員) ヘテロアリールを表し、 R_{32} 及び R_{33} は、同じであっても異なってもよく、h 及び i は各々独立して、1 ~ 3 の整数を表し、g は、0 ~ 3 の整数を表し、j、k、l、及び m は各々独立して、0 ~ 4 の整数を表し、g、h、i、j、k、l、及び m が各々独立して、2 以上の整数を表す場合、各 (C z - L_4)、各 (C z)、各 R_{21} 、各 R_{22} 、各 R_{23} 及び各 R_{24} は同じであっても異なってもよい。

10

20

【 0 0 5 7】

【化 1 5】



30

【 0 0 5 8】

式中、

$Y_3 \sim Y_5$ は各々独立して、 CR_{34} または N を表し、式中、 R_{34} は、水素、置換もしくは非置換 (C 1 - C 3 0) アルキル、置換もしくは非置換 (C 6 - C 3 0) アリール、または置換もしくは非置換 (5 ~ 3 0 員) ヘテロアリールを表し、

40

B_1 及び B_2 は各々独立して、水素、置換もしくは非置換 (C 6 - C 3 0) アリール、または置換もしくは非置換 (5 ~ 3 0 員) ヘテロアリールを表し、

B_3 は、置換もしくは非置換 (C 6 - C 3 0) アリール、または置換もしくは非置換 (5 ~ 3 0 員) ヘテロアリールを表し、

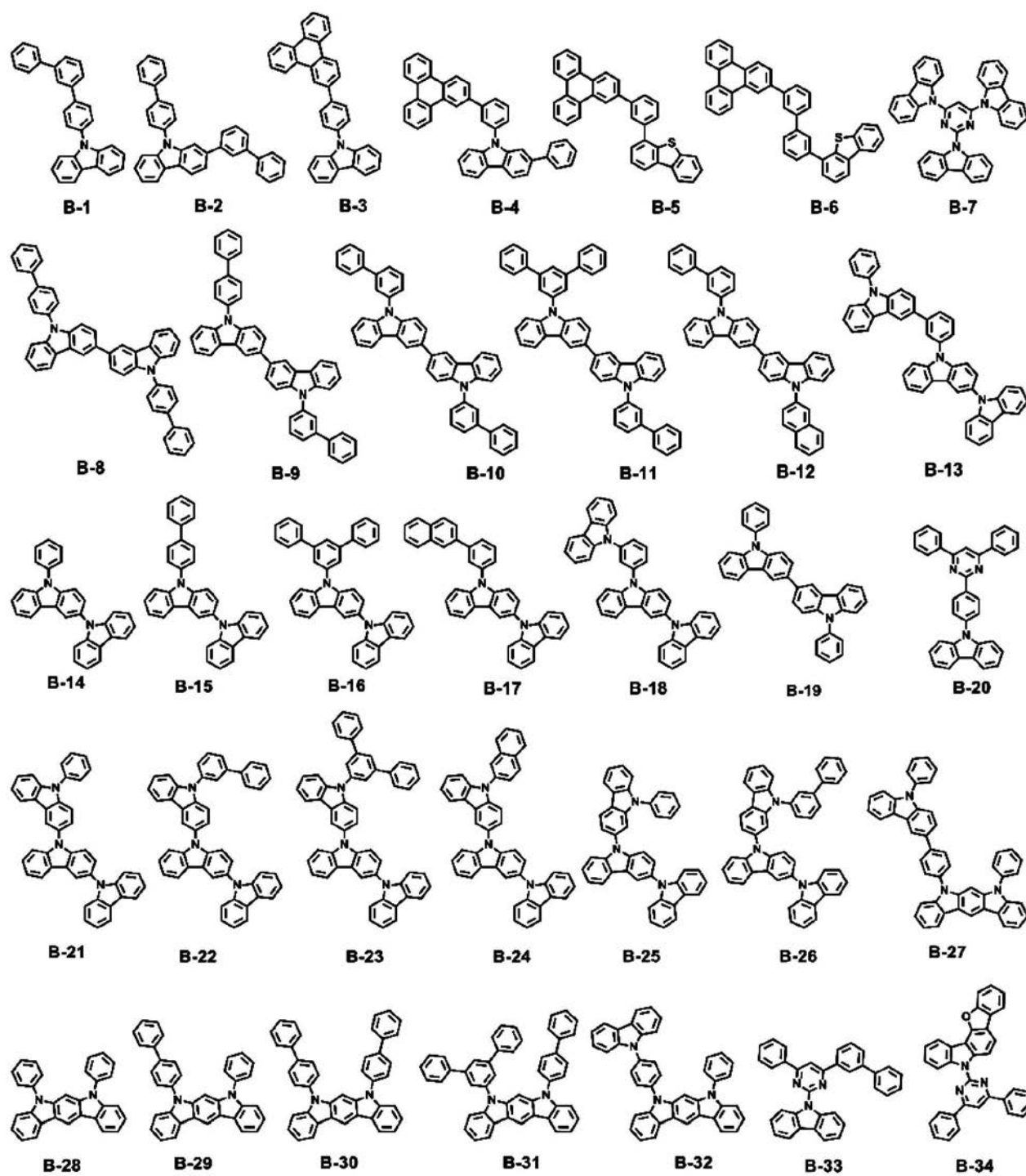
L_5 は、単結合、置換もしくは非置換 (C 6 - C 3 0) アリーレン、または置換もしくは非置換 (5 ~ 3 0 員) ヘテロアリーレンを表す。

【 0 0 5 9】

具体的には、第 2 のホスト材料の好ましい例は、以下の通りである。

【 0 0 6 0】

【化 1 6 - 1】



【 0 0 6 1】

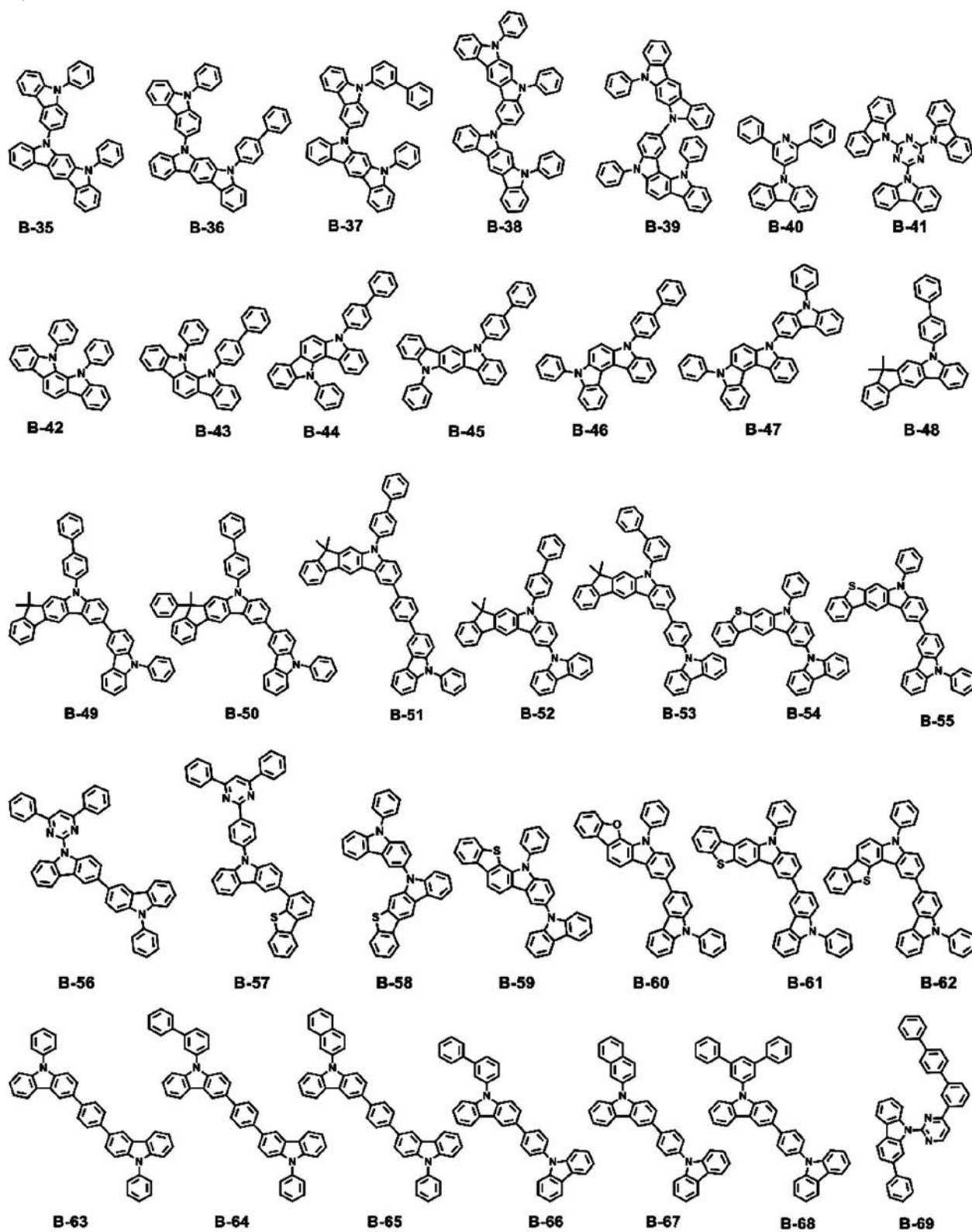
10

20

30

40

【化 1 6 - 2】



10

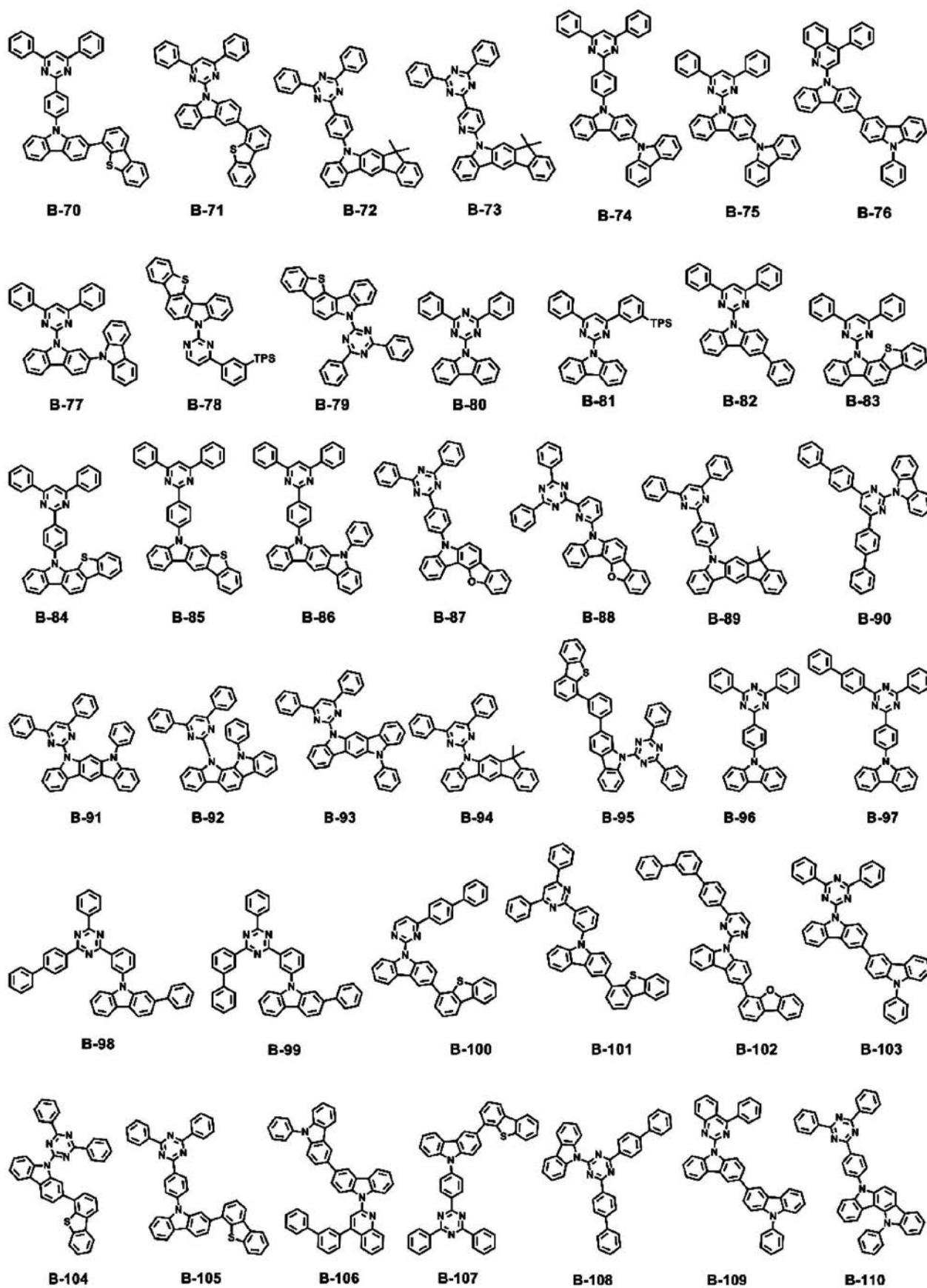
20

30

40

【 0 0 6 2 】

【化 1 6 - 3】



10

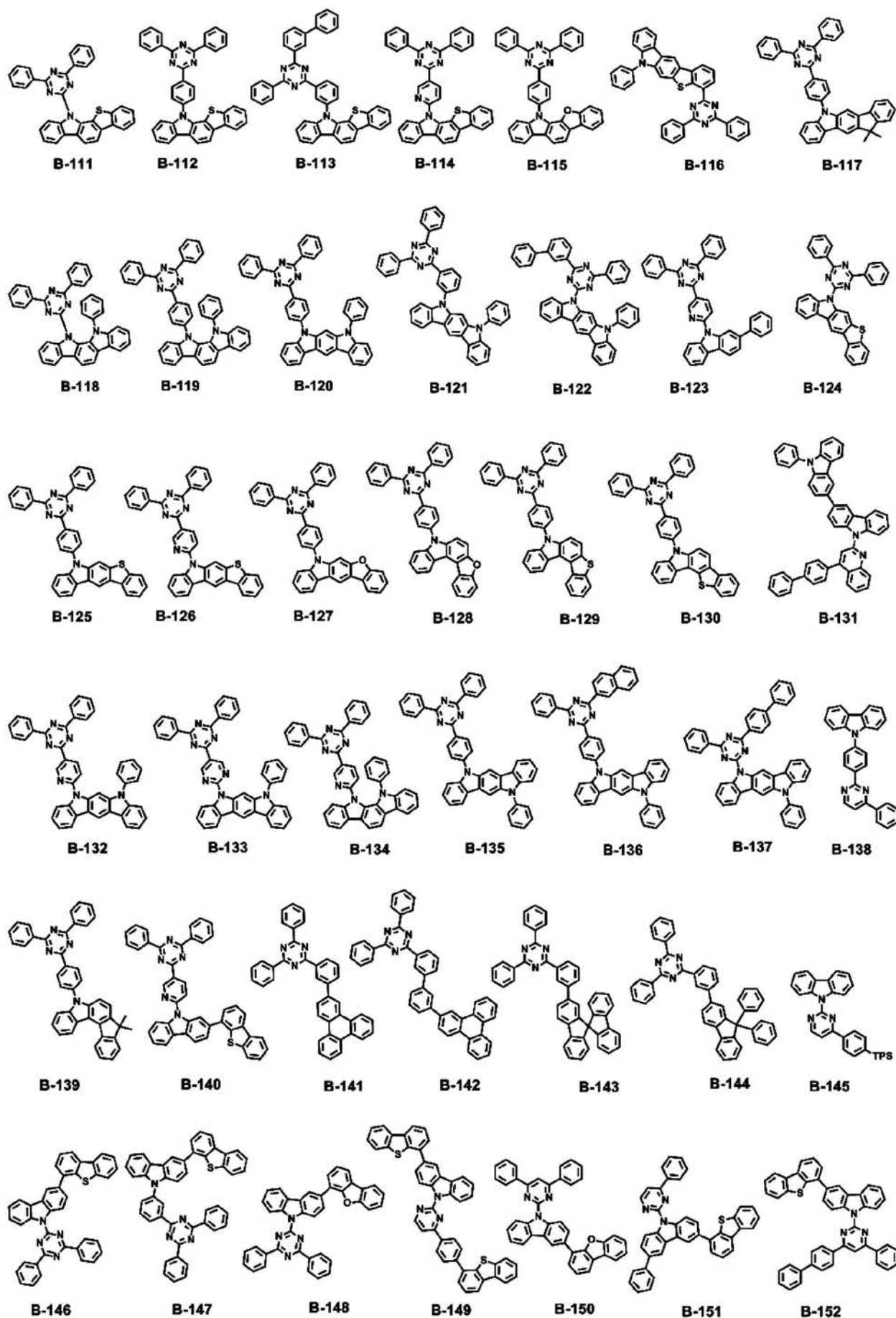
20

30

40

【 0 0 6 3】

【化 1 6 - 4】



10

20

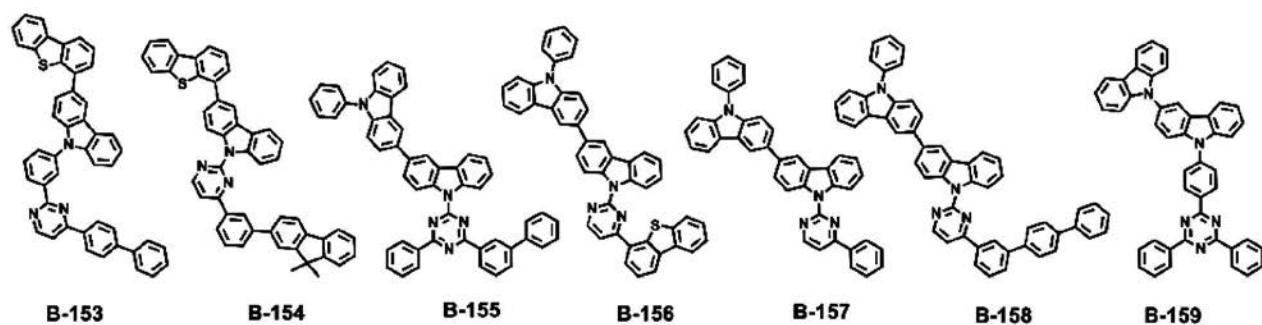
30

40

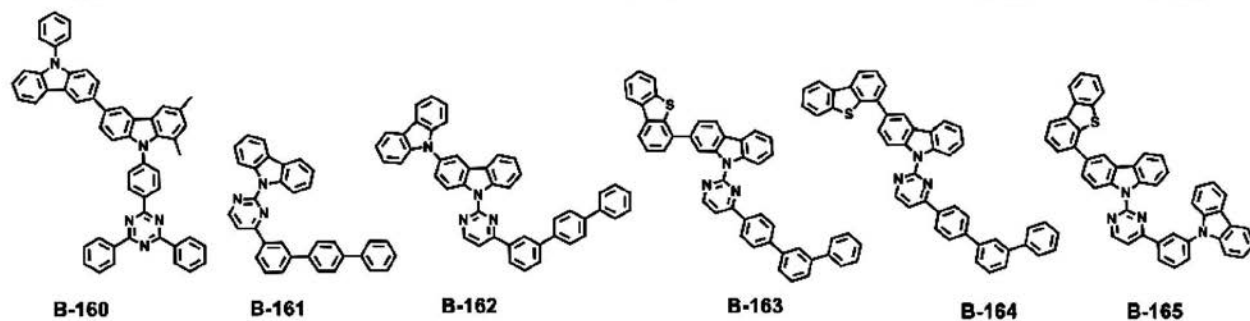
50

【 0 0 6 4】

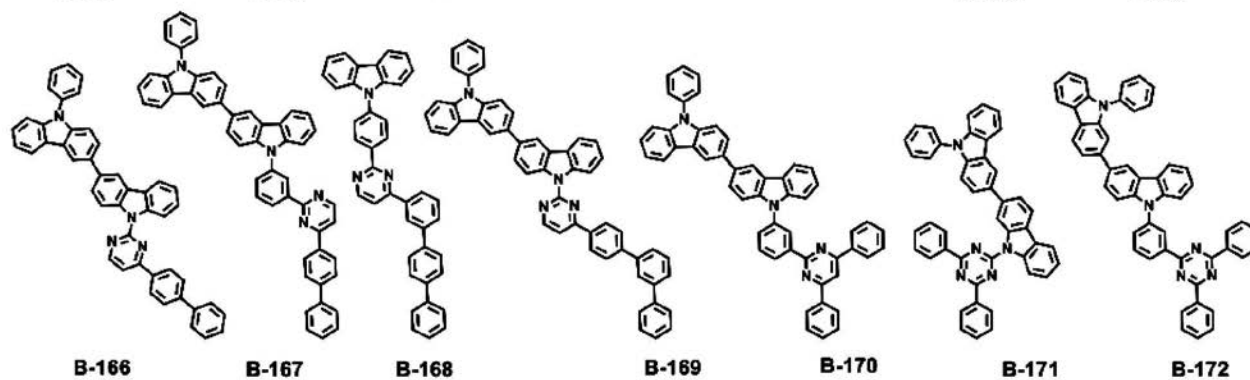
【化 1 6 - 5】



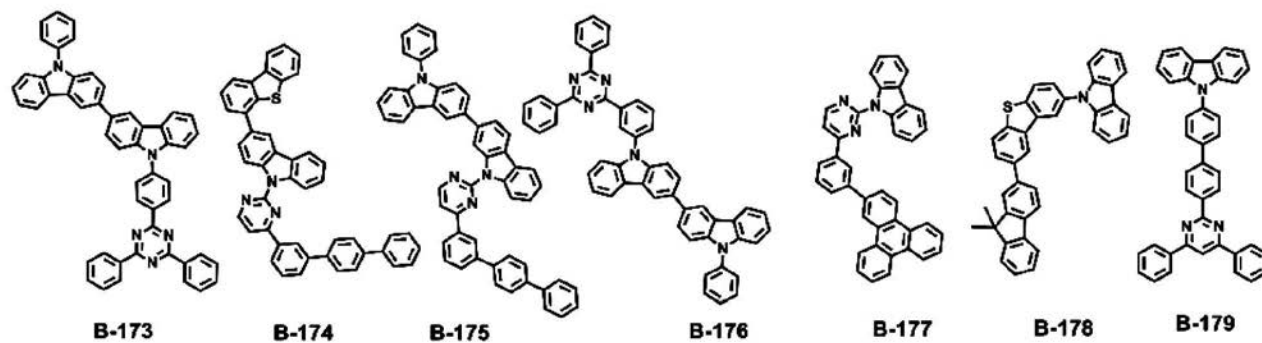
10



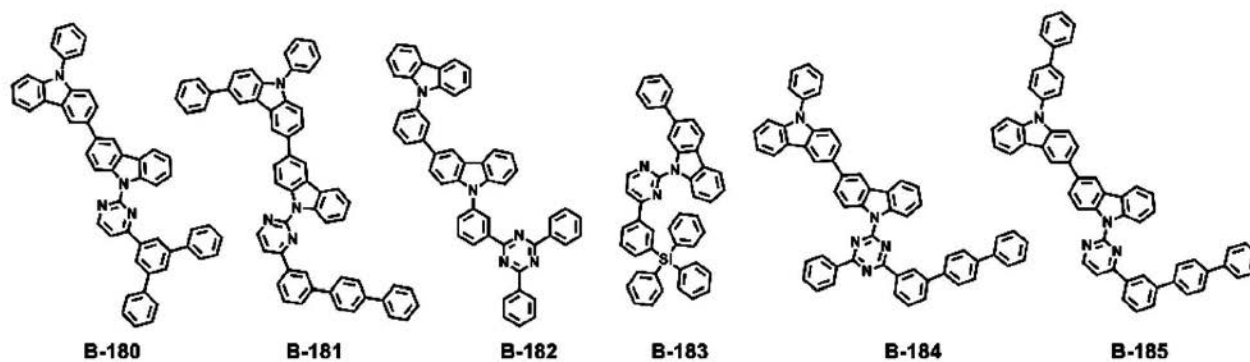
20



30

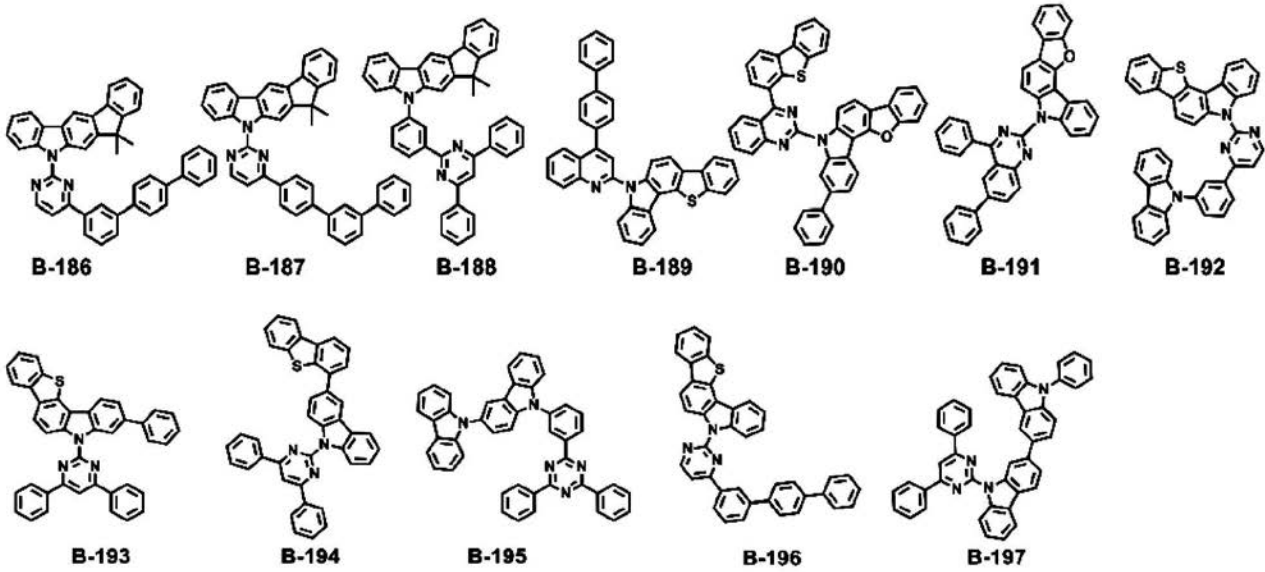


40



【 0 0 6 5 】

【化 1 6 - 6】



10

【 0 0 6 6】

[式中、TPS はトリフェニルシリル基を表す。]

【 0 0 6 7】

20

本開示の有機電界発光デバイスに含まれるドーパントは、好ましくは少なくとも1つのリン光ドーパントである。本開示の有機電界発光デバイスに適用されるリン光ドーパント材料は、特に限定されるものではないが、好ましくは、イリジウム (Ir)、オスミウム (Os)、銅 (Cu)、及び白金 (Pt) の金属化錯体化合物から選択され得、より好ましくは、イリジウム (Ir)、オスミウム (Os)、銅 (Cu)、及び白金 (Pt) のオルト金属化錯体化合物から選択され得、さらにより好ましくは、オルト金属化イリジウム錯体化合物から選択され得る。

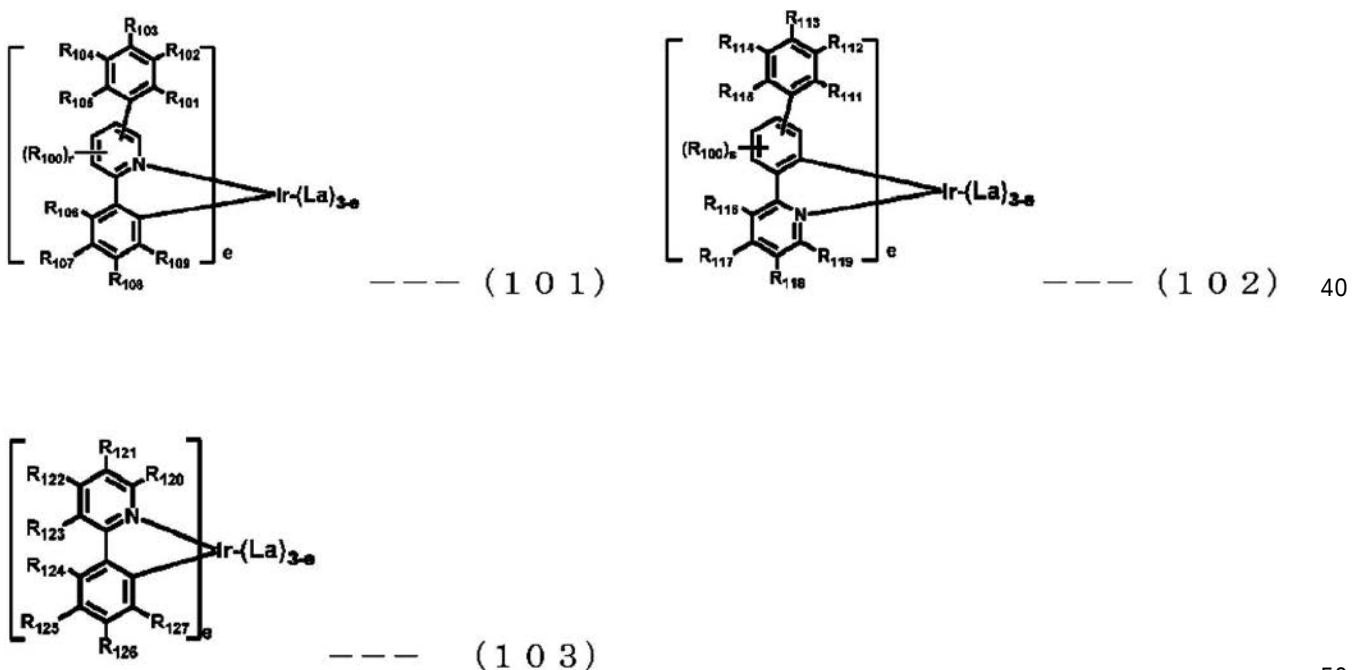
【 0 0 6 8】

本開示の有機電界発光デバイスに含まれるドーパントは、以下の式 1 0 1 ~ 1 0 3 で表される化合物からなる群から選択される化合物を含むことができる。

30

【 0 0 6 9】

【化 1 7】



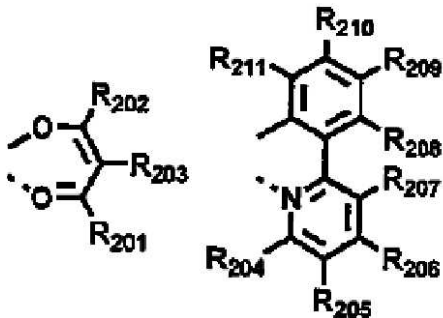
50

【 0 0 7 0 】

式中、 $L a$ は、以下の構造から選択される：

【 0 0 7 1 】

【 化 1 8 】



10

【 0 0 7 2 】

式中、 R_{100} は、水素、重水素、置換もしくは非置換（ $C1 - C30$ ）アルキル、または置換もしくは非置換（ $C3 - C30$ ）シクロアルキルを表し、

$R_{101} \sim R_{109}$ 及び $R_{111} \sim R_{123}$ は各々独立して、水素、重水素、ハロゲン、非置換もしくはハロゲンで置換された（ $C1 - C30$ ）シクロアルキル、置換もしくは非置換（ $C3 - C30$ ）シクロアルキル、置換もしくは非置換（ $C6 - C30$ ）アリール、シアノ、または置換もしくは非置換の（ $C1 - C30$ ）アルコキシを表し、 $R_{106} \sim R_{109}$ は、隣接する $R_{106} \sim R_{109}$ それぞれに連結されて、置換もしくは非置換縮合環、例えば、非置換もしくはアルキル置換されたフルオレン、非置換もしくはアルキルで置換されたジベンゾチオフエン、または非置換もしくはアルキルで置換されたジベンゾフランを形成することができ、 $R_{120} \sim R_{123}$ は、隣接する $R_{120} \sim R_{123}$ それぞれに連結されて、置換または非置換縮合環、例えば、非置換またはアルキルまたはアリールで置換されたキノリンを形成することができ、

20

$R_{124} \sim R_{127}$ は各々独立して、水素、重水素、ハロゲン、置換もしくは非置換（ $C1 - C30$ ）アルキル、または置換もしくは非置換（ $C6 - C30$ ）アリールを表し、 $R_{124} \sim R_{127}$ は、隣接する $R_{124} \sim R_{127}$ それぞれに連結されて、置換もしくは非置換縮合環、例えば、非置換もしくはアルキル置換されたフルオレン、非置換もしくはアルキルで置換されたジベンゾチオフエン、または非置換もしくはアルキルで置換されたジベンゾフランを形成することができ、

30

$R_{201} \sim R_{211}$ は各々独立して、水素、重水素、ハロゲン、非置換もしくはハロゲンで置換された（ $C1 - C30$ ）アルキル、置換もしくは非置換（ $C3 - C30$ ）シクロアルキル、または置換もしくは非置換（ $C6 - C30$ ）アリールを表し、 $R_{208} \sim R_{211}$ は、隣接する $R_{208} \sim R_{211}$ それぞれに連結されて、置換もしくは非置換縮合環、例えば、非置換もしくはアルキル置換されたフルオレン、非置換もしくはアルキルで置換されたジベンゾチオフエン、または非置換もしくはアルキルで置換されたジベンゾフランを形成することができ、

r 及び s は各々独立して、 $1 \sim 3$ の整数を表し、 r または s が 2 以上の整数である場合、各 R_{100} は同じであっても異なってもよく、

40

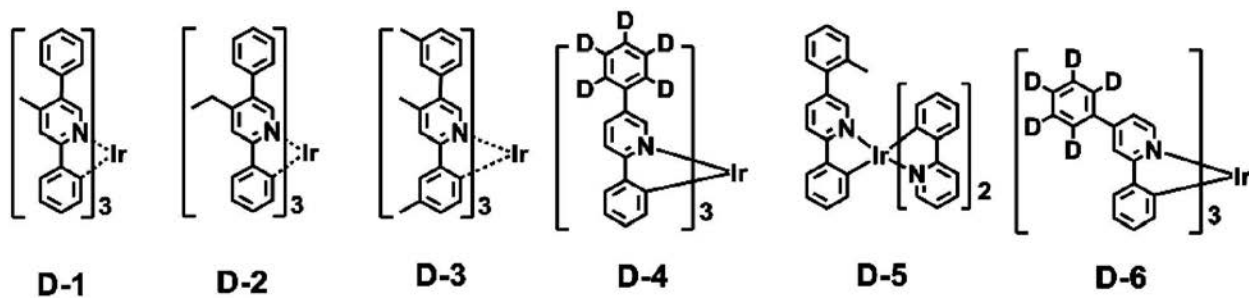
e は、 $1 \sim 3$ の整数を表す。

【 0 0 7 3 】

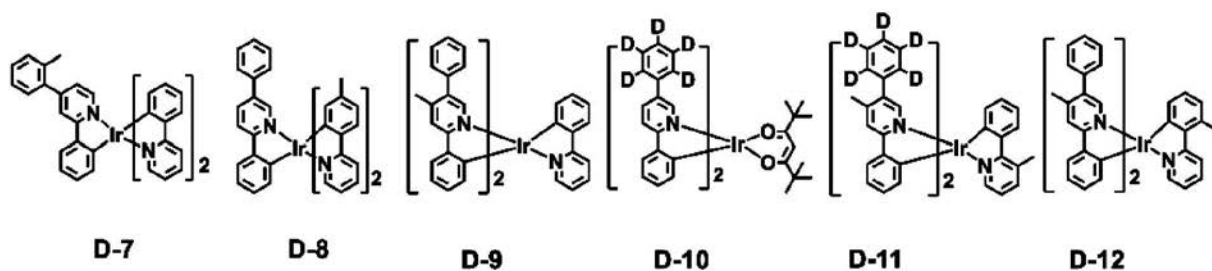
ドーパントとして用いられる化合物の具体例は、以下の通りである。

【 0 0 7 4 】

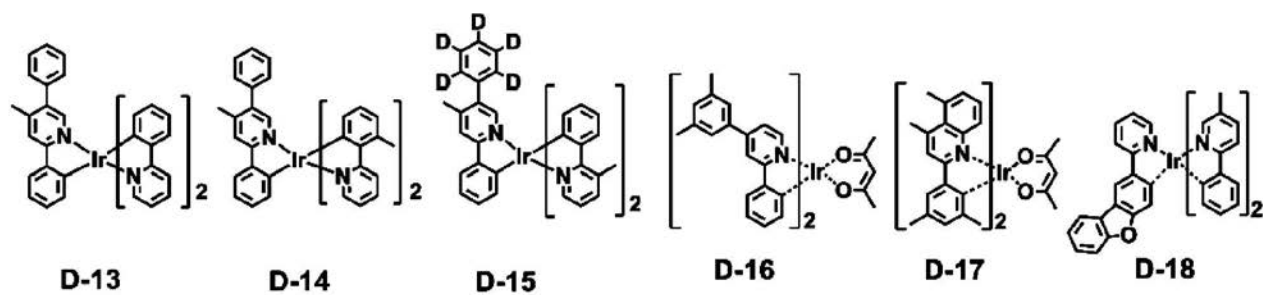
【化 19 - 1】



10

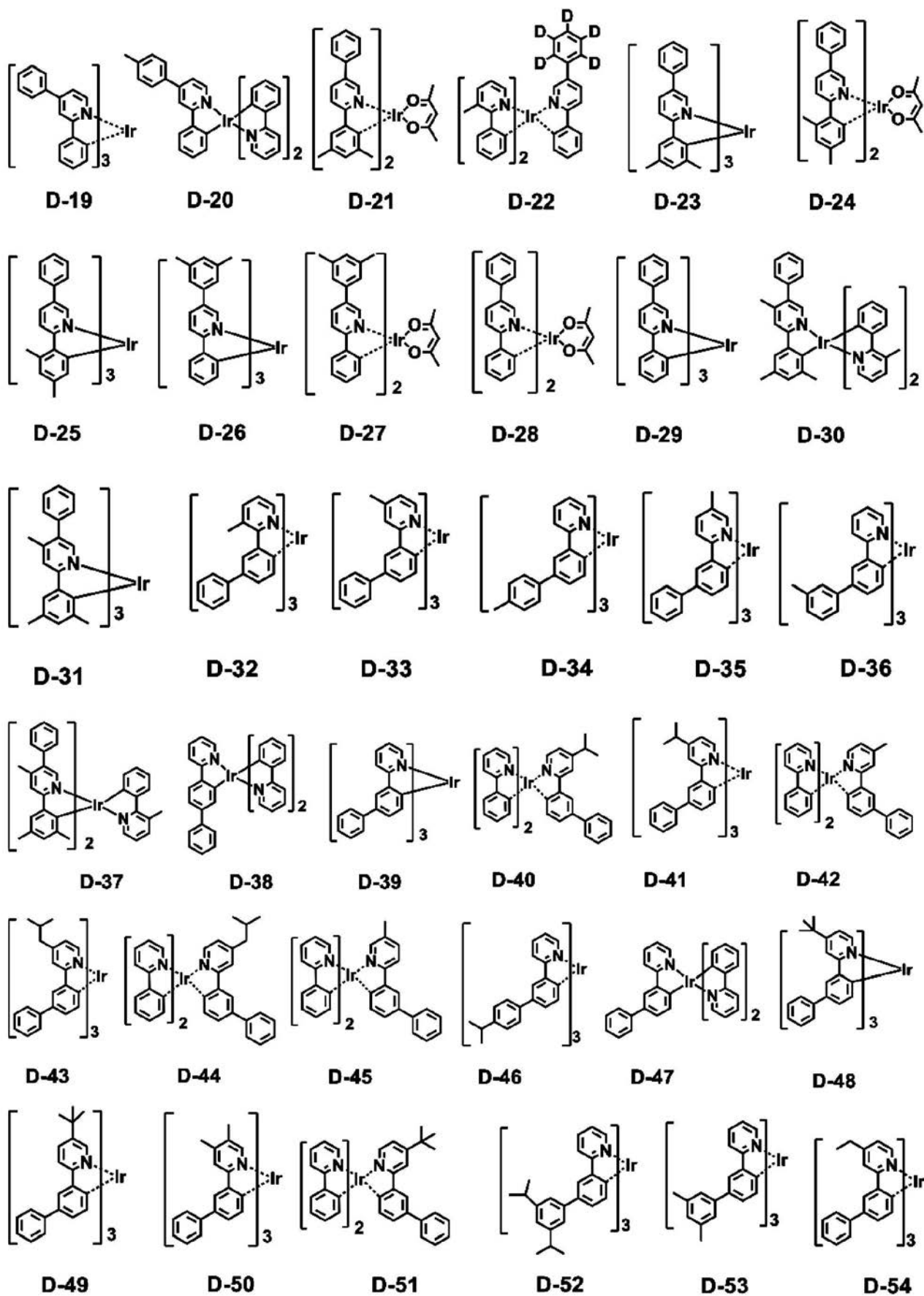


20



【 0 0 7 5 】

【化 19 - 2】



10

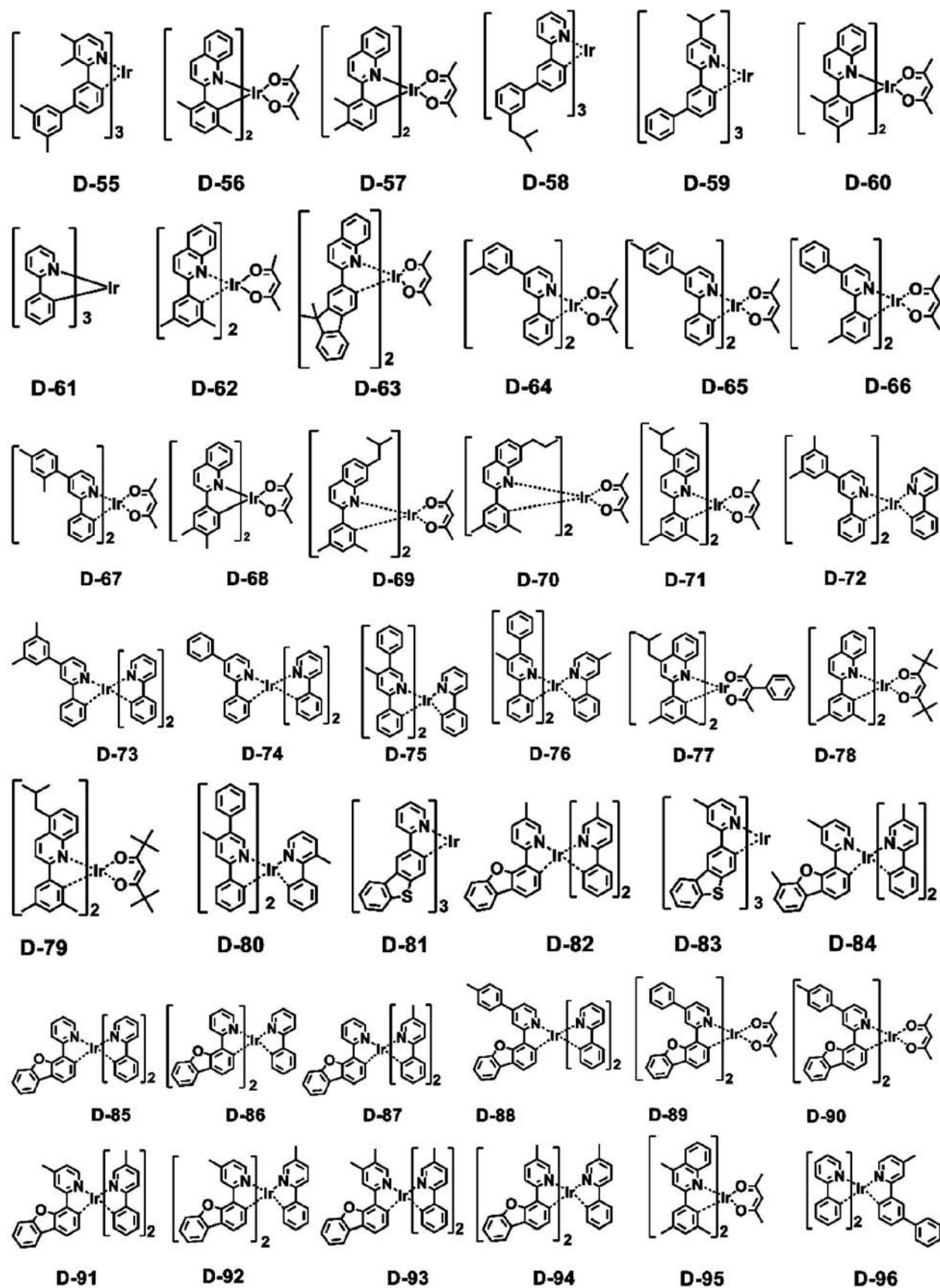
20

30

40

【 0 0 7 6 】

【化 19 - 3】



10

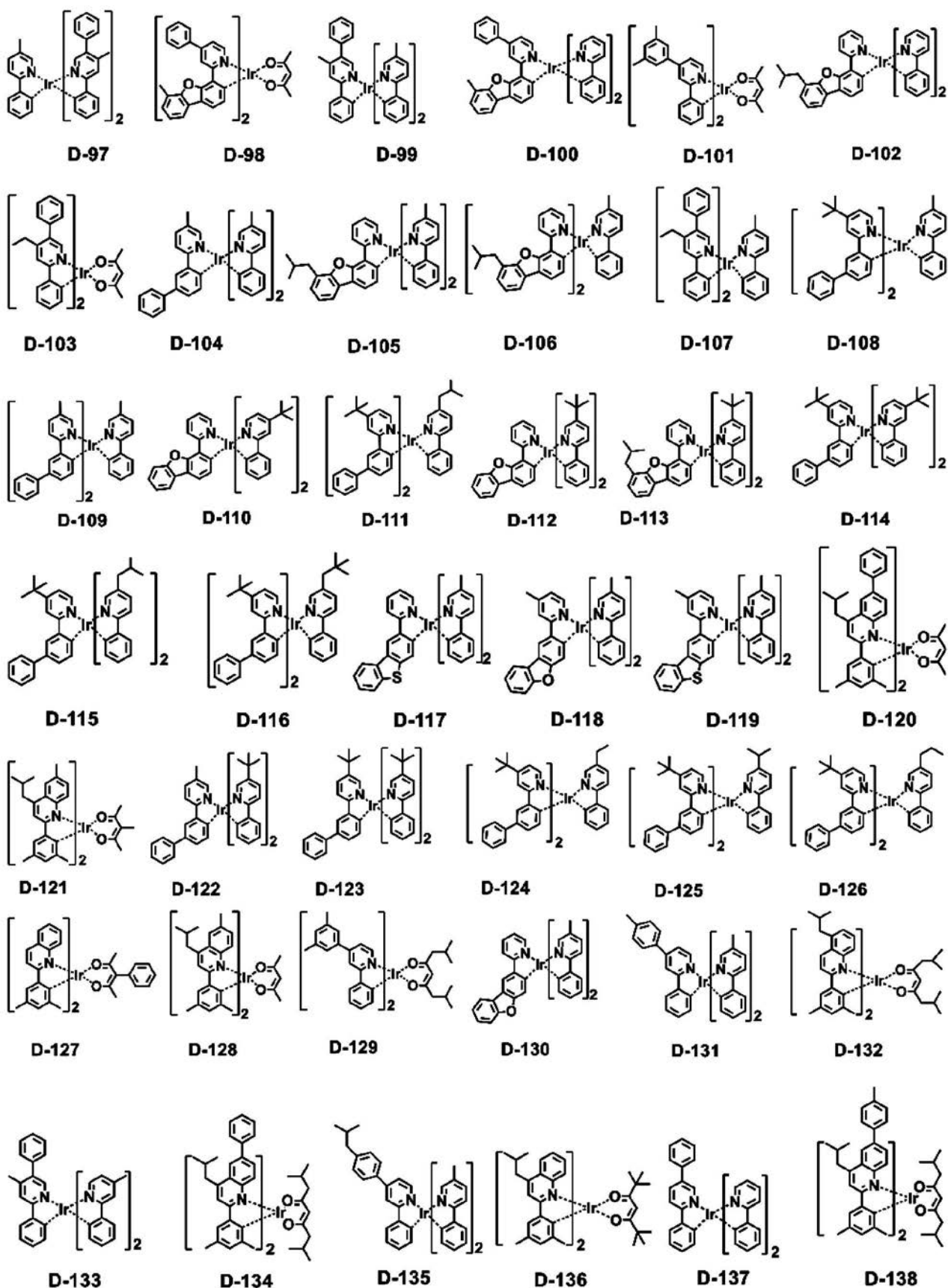
20

30

40

【 0 0 7 7 】

【化 19 - 4】



10

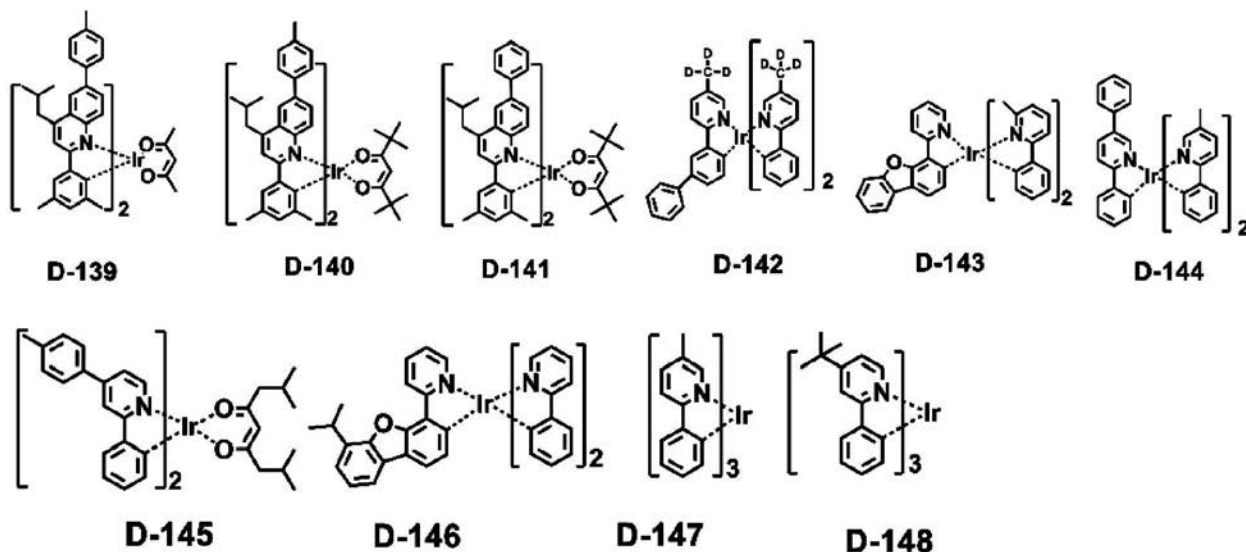
20

30

40

【 0 0 7 8 】

【化 19 - 5】



10

【0079】

本開示の一実施形態によれば、本開示は、式1で表される化合物を含む電子緩衝材料を提供する。電子緩衝材料とは、電子の流動特性を制御する材料を指す。例えば、電子緩衝材料は、電子をトラップするか、電子を阻止するか、または電子輸送領域と発光層との間のエネルギー障壁を低下させることができる。具体的には、電子緩衝材料は、有機電界発光デバイスの電子緩衝材料であってもよい。有機電界発光デバイスにおける電子緩衝材料は、電子緩衝層で使用されてもよく、または電子輸送領域もしくは発光層等の他の領域で同時に使用されてもよい。電子緩衝材料は、有機電界発光デバイスを製造する際に一般的に用いられる従来の材料をさらに含む混合物または組成物であり得る。

20

【0080】

本開示の有機電界発光デバイスは、式1の化合物を含むことができ、同時に、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つの化合物をさらに含むことができる。

【0081】

本開示の有機電界発光デバイスにおいて、有機層は、式1の化合物に加えて、周期表の第1族金属、第2族金属、第4周期遷移金属、第5周期遷移金属、ランタニド、及びd軌道遷移元素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、またはその金属を含む少なくとも1つの錯体化合物をさらに含むことができる。有機層は、1つ以上の追加の発光層と、電荷発生層をさらに含むことができる。

30

【0082】

さらに、本開示の有機電界発光デバイスは、本開示の化合物に加えて、当技術分野で既知の青色電界発光化合物、赤色電界発光化合物、または緑色電界発光化合物を含む少なくとも1つの発光層をさらに含むことにより、白色光を放射することができる。必要に応じて、黄色またはオレンジ色発光層をさらに含むことができる。

40

【0083】

本開示の有機電界発光デバイスにおいて、カルコゲニド層、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」）が、好ましくは、一方の電極の内面（複数可）または両方の電極の内面（複数可）に配設され得る。具体的には、シリコンまたはアルミニウムのカルコゲニド（酸化物を含む）層が、好ましくは、電界発光媒体層のアノード表面に配設され、金属ハロゲン化物層または金属酸化物層が、好ましくは、電界発光媒体層のカソード表面に配設される。そのような表面層は、有機電界発光デバイスに動作安定性を提供する。好ましくは、カルコゲニドは、 SiO_x （ $1 < x < 2$ ）、 AlO_x （ $1 < x < 1.5$ ）、 SiON 、 SiAlON 等を含み、金属ハロゲン化物は、 LiF 、 MgF_2 、 CaF_2 、希土類金属フッ化物等を含み、金属酸化物は、

50

Cs₂O、Li₂O、MgO、SrO、BaO、CaO等を含む。

【0084】

本開示の有機電界発光デバイスにおいて、電子輸送化合物と還元性ドーパントとの混合領域、または正孔輸送化合物と酸化性ドーパントとの混合領域が、好ましくは、一対の電極の少なくとも1つの表面に配設され得る。この場合、電子輸送化合物が還元されてアニオンになり、それ故に混合領域から電界発光媒体までの電子の注入及び輸送が容易になる。さらに、正孔輸送化合物が酸化されてカチオンになり、それ故に混合領域から電界発光媒体までの正孔の注入及び輸送が容易になる。好ましくは、酸化性ドーパントとしては、様々なルイス酸及び受容体化合物が挙げられ、還元性ドーパントとしては、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、及びそれらの混合物が挙げられる。還元性ドーパント層を電荷発生層として用いて、2つ以上の発光層を有し、かつ白色光を放出する有機電界発光デバイスを調製することができる。

10

【0085】

本開示の有機電界発光デバイスの各層を形成するために、真空蒸発、スパッタリング、プラズマめっき、及びイオンめっき法等の乾式膜形成法、または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法等の湿式膜形成法を使用することができる。

【0086】

湿式膜形成法を使用する場合、各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、ジオキサン等の任意の適切な溶媒中に溶解または拡散させて薄膜を形成することができる。この溶媒は、各層を形成する材料を溶解または拡散させることができ、かつ膜形成能力に問題のない、任意の溶媒であり得る。

20

【0087】

以下、本開示の化合物の調製方法、及びその化合物を含むデバイスの特性が、本開示の代表的な化合物を参照して詳細に記載される。しかしながら、本開示は、以下の実施例によって限定されない。

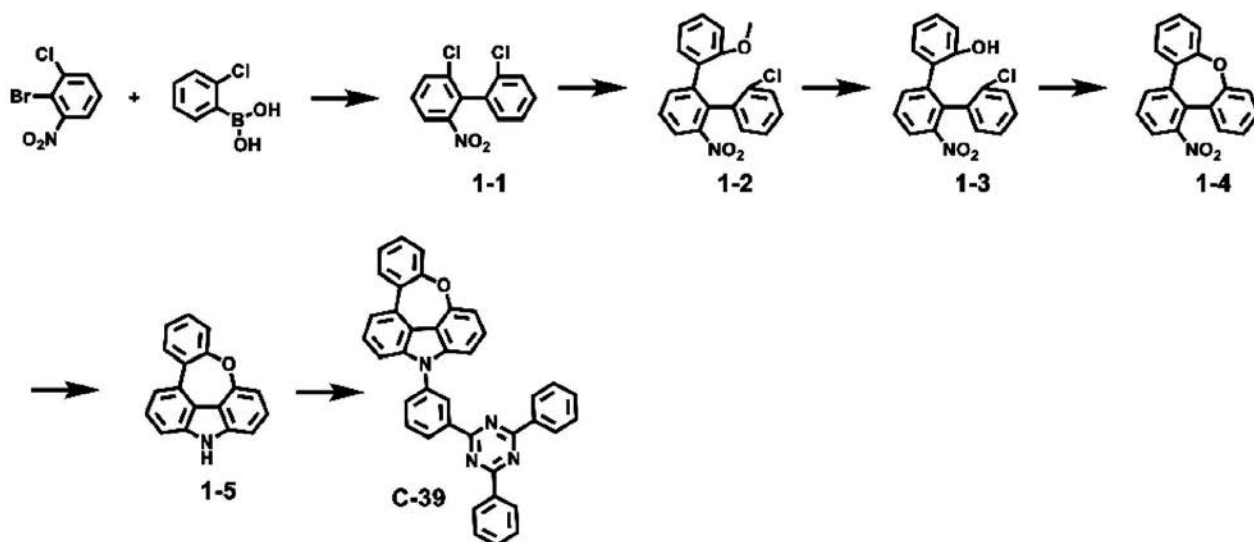
【0088】

実施例1：化合物C-39の調製

【0089】

【化20】

30



40

【0090】

化合物1-1の調製

2-ブromo-1-クロロ-3-ニトロベンゼン(56g、234mmol)、2-クロロフェニルボロン酸(74g、476mmol)、テトラキス(トリフェニルホスフィン)パラジウム(O)(Pd(PPh₃)₄)(13g、11.9mmol)、2M炭酸セ

50

シウム (1 9 4 g、5 9 6 m m o l)、トルエン (1 2 0 0 m L)、及びエタノール (3 0 0 m L) をフラスコに注ぎ、溶解させ、次いで 1 2 時間還流した。反応が完了した後、有機層を酢酸エチルで抽出した。有機抽出液を硫酸マグネシウムで乾燥させ、カラムクロマトグラフィーによって精製して、化合物 1 - 1 (5 1 g、収率 8 0 %) を得た。

【 0 0 9 1 】

化合物 1 - 2 の調製

化合物 1 - 1 (1 0 g、3 7 . 3 m m o l)、2 - メトキシフェニルボロン酸 (6 . 8 g、4 4 . 7 m m o l)、トリス (ジベンジリデンアセトン) ジパラジウム (1 . 7 g、1 . 8 6 m m o l)、炭酸セシウム (3 0 g、9 3 . 2 m m o l)、トリシクロヘキシルホスフィン (1 g、3 . 7 3 m m o l)、トルエン (2 0 0 m L)、及びジオキサン (5 0 m L) をフラスコに注ぎ、溶解させ、次いで 4 時間還流した。反応完了後、有機層を酢酸エチルで抽出した。有機抽出液を硫酸マグネシウムで乾燥させ、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 (7 . 7 g、収率 6 2 %) を得た。

10

【 0 0 9 2 】

化合物 1 - 3 の調製

化合物 1 - 2 (7 . 7 g、2 2 . 7 m m o l)、三臭化ホウ素 (3 . 2 m L、3 4 . 1 m m o l)、及び塩化メチレン (2 3 0 m L) をフラスコに注ぎ、溶解させ、次いで室温で 1 2 時間反応させた。炭酸水素ナトリウム溶液で反応を完了させた後、有機層を塩化メチレンで抽出した。有機抽出液を硫酸マグネシウムで乾燥させ、次いで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 (6 . 4 g、収率 8 8 %) を得た。

20

【 0 0 9 3 】

化合物 1 - 4 の調製

化合物 1 - 3 (3 . 9 g、1 2 m m o l)、炭酸カリウム (0 . 8 g、6 m m o l)、及びジメチルホルムアミド (6 0 m L) をフラスコに注ぎ、溶解させ、次いで 1 2 時間還流した。反応完了後、有機層を酢酸エチルで抽出した。有機抽出液を硫酸マグネシウムで乾燥させ、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 (2 g、収率 6 0 %) を得た。

【 0 0 9 4 】

化合物 1 - 5 の調製

化合物 1 - 4 (2 g、6 . 9 m m o l)、トリフェニルホスフィン (7 . 2 g、2 7 m m o l)、及びジクロロベンゼン (2 5 m L) フラスコに注ぎ、溶解させ、次いで 1 2 時間還流した。反応完了後、有機層を酢酸エチルで抽出した。有機抽出液を硫酸マグネシウムで乾燥させ、カラムクロマトグラフィーによって精製して、化合物 1 - 5 (1 . 6 g、収率 9 5 %) を得た。

30

【 0 0 9 5 】

化合物 C - 3 9 の調製

化合物 1 - 5 (1 . 6 g、6 . 5 m m o l)、2 - (3 - プロモフェニル) - 4 , 6 - ジフェニル - 1 , 3 , 5 - トリアジン (2 . 6 g、6 . 8 m m o l)、酢酸パラジウム (0 . 0 7 g、0 . 3 2 m m o l)、ナトリウム *tert* - ブトキシド (1 . 5 g、1 6 m m o l)、2 - ジクロロヘキシルホスフィン - 2 ' , 6 ' - ジメトキシビフェニル (0 . 2 6 g、0 . 6 5 m m o l)、及び *o* - キシレン (3 0 m L) をフラスコに注ぎ、次いで 4 時間還流した。反応完了後、有機層を酢酸エチルで抽出した。有機抽出液を硫酸マグネシウムで乾燥させ、カラムクロマトグラフィーによって精製して、化合物 C - 3 9 (3 . 1 g、収率 8 5 %) を得た。

40

【 0 0 9 6 】

[表]

化合物	MW	UV	PL	M. P.
C - 3 9	5 6 4 . 6 3	3 7 4 n m	4 4 3 n m	2 3 7 °C

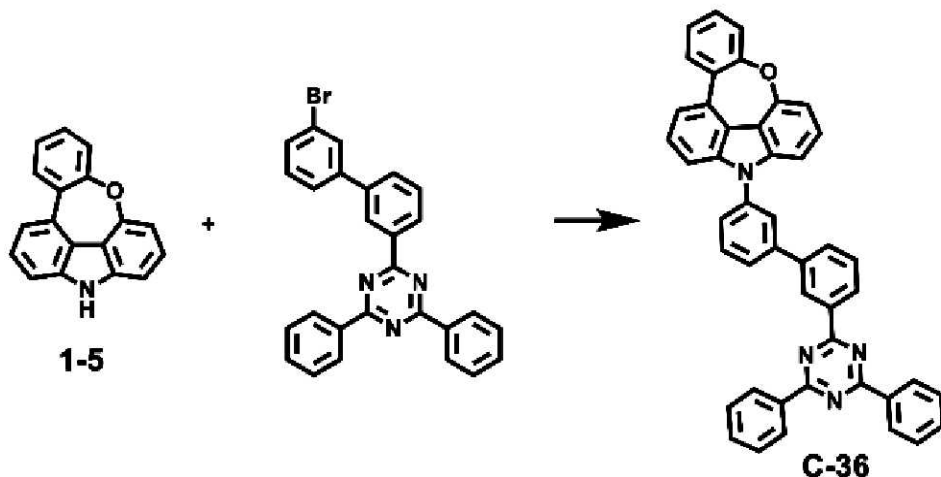
50

【 0 0 9 7 】

実施例 2：化合物 C - 3 6 の調製

【 0 0 9 8 】

【 化 2 1 】



10

【 0 0 9 9 】

化合物 1 - 5 (5 g、1 9 m m o l)、2 - (3 - ブロモビフェニル) - 3 - イル - 4 , 6 - ジフェニル - 1 , 3 , 5 - トリアジン (9 g、1 9 m m o l)、酢酸パラジウム (0 . 2 g、0 . 9 7 m m o l)、ナトリウム *tert* - ブトキシド (4 . 6 g、4 8 m m o l)、2 - ジクロロヘキシルホスフィン - 2 ' , 6 ' - ジメトキシビフェニル (0 . 7 g、1 . 9 m m o l)、及び *o* - キシレン (1 0 0 m L) をフラスコに注ぎ、次いで 7 時間還流した。反応完了後、有機層を酢酸エチルで抽出した。有機抽出液を硫酸マグネシウムで乾燥させ、カラムクロマトグラフィーによって精製して、化合物 C - 3 6 (8 . 2 g、収率 6 5 %) を得た。

20

【 0 1 0 0 】

[表]

化合物	MW	UV	PL	M. P.
C - 3 6	6 4 0 . 7 5	3 4 4 n m	4 4 5 n m	2 4 1 °C

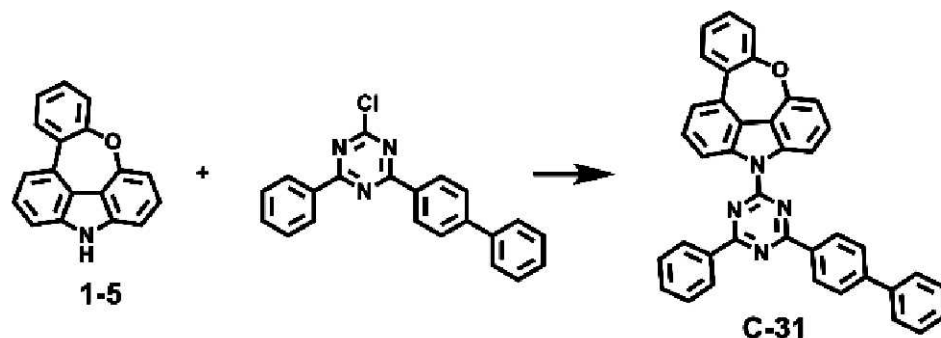
30

【 0 1 0 1 】

実施例 3：化合物 C - 3 1 の調製

【 0 1 0 2 】

【 化 2 2 】



40

【 0 1 0 3 】

化合物 1 - 5 (3 g、1 1 m m o l)、2 - [1 , 1 ' - ビフェニル] - 4 - イル - 4 - クロロ - 6 - フェニル - 1 , 3 , 5 - トリアジン (4 . 8 g、1 4 m m o l)、4 - (ジメチルアミノ) ピリジン (0 . 7 g、5 . 8 m m o l)、炭酸カリウム (4 g、2 9 m m o l)、及びジメチルホルムアミド (1 2 0 m L) をフラスコに入れ、溶解させ、1 2

50

0 に加熱し、次いで4時間反応させた。反応終了後、その混合物を蒸留水に滴加し、得られた固体を濾過した。その濾液を乾燥させ、カラムクロマトグラフィーによって精製して、化合物C-31(6.4g、収率97%)を得た。

【0104】

[表]

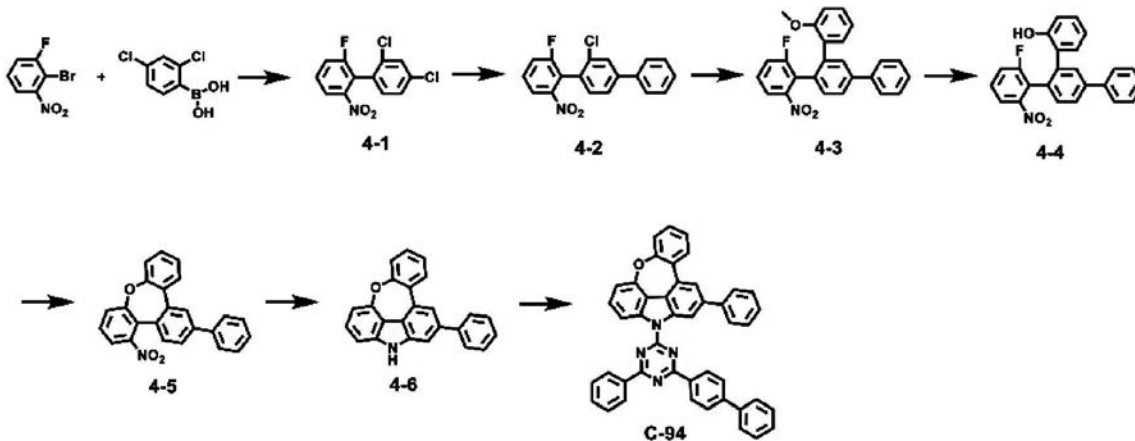
化合物	MW	UV	PL	M. P.
C-31	564.63	360nm	482nm	229℃

【0105】

実施例4：化合物C-94の調製

【0106】

【化23】



【0107】

化合物4-1の調製

2-ブロモ-1-フルオロ-3-ニトロベンゼン(30g、136mmol)、(2,4-ジクロロフェニル)ボロン酸(27g、143mmol)、テトラキス(トリフェニルホスフィン)パラジウム(0)(Pd(PPh₃)₄)(7.8g、6.8mmol)、2M炭酸セシウム(111g、341mmol)、トルエン(680mL)、及びエタノール(170mL)をフラスコに注ぎ、溶解させ、次いで12時間還流した。反応完了後、有機層を酢酸エチルで抽出した。有機抽出液を硫酸マグネシウムで乾燥させ、カラムクロマトグラフィーによって精製して、化合物4-1(32g、収率84%)を得た。

【0108】

化合物4-2の調製

化合物4-1(15g、52mmol)、フェニルボロン酸(7g、57mmol)、酢酸パラジウム(0.3g、1.5mmol)、2-ジクロロヘキシルホスフィン-2',6'-ジメトキシビフェニル(2.5g、6.3mmol)、2Mリン酸カリウム(27g、131mmol)、トルエン(260mL)、及びジオキサン(65mL)をフラスコに入れ、溶解させ、次いで3時間還流した。反応完了後、有機層を酢酸エチルで抽出した。有機抽出液を硫酸マグネシウムで乾燥させ、カラムクロマトグラフィーによって精製して、化合物4-2(13g、収率80%)を得た。

【0109】

化合物4-3の調製

化合物4-2(10g、32mmol)、2-メトキシフェニルボロン酸(7.3g、48mmol)、トリス(ジベンジリデンアセトン)ジパラジウム(2.9g、3.2mmol)、炭酸セシウム(31g、96mmol)、トリシクロヘキシルホスフィン(トルエン中20重量%)(9g、6.4mmol)、トルエン(160mL)、及びジオキサン(50mL)をフラスコに注ぎ、溶解させ、次いで12時間還流した。反応完了後、

有機層を酢酸エチルで抽出した。有機抽出液を硫酸マグネシウムで乾燥させ、カラムクロマトグラフィーによって精製して、化合物 4 - 3 (3 . 3 g、収率 2 6 %) を得た。

【 0 1 1 0 】

化合物 4 - 4 の調製

化合物 4 - 3 (3 . 3 g、8 . 2 m m o l)、三臭化ホウ素 (1 2 m L、1 2 m m o l)、及び塩化メチレン (8 0 m L) をフラスコに注ぎ、溶解させ、次いで室温で 1 2 時間反応させた。炭酸水素ナトリウム溶液を加えて反応を完了させた後、有機層を塩化メチレンで抽出した。有機抽出液を硫酸マグネシウムで乾燥させ、カラムクロマトグラフィーによって精製して、化合物 4 - 4 (3 . 1 g、収率 9 9 %) を得た。

【 0 1 1 1 】

化合物 4 - 5 の調製

化合物 4 - 4 (3 . 1 g、8 . 2 m m o l)、炭酸カリウム (0 . 5 g、4 . 1 m m o l)、及びジメチルホルムアミド (4 0 m L) をフラスコに注ぎ、溶解させ、次いで 4 時間還流した。反応完了後、有機層を酢酸エチルで抽出した。有機抽出液を硫酸マグネシウムで乾燥させ、カラムクロマトグラフィーによって精製して、化合物 4 - 5 (2 . 5 g、収率 8 3 %) を得た。

【 0 1 1 2 】

化合物 4 - 6 の調製

化合物 4 - 5 (1 . 6 g、6 . 9 m m o l)、トリフェニルホスフィン (4 . 6 g、1 7 m m o l)、及びジクロロベンゼン (1 5 m L) フラスコに注ぎ、溶解させ、次いで 1 2 時間還流した。反応完了後、有機層を酢酸エチルで抽出した。有機抽出液を硫酸マグネシウムで乾燥させ、カラムクロマトグラフィーによって精製して、化合物 4 - 6 (1 . 2 g、収率 8 6 %) を得た。

【 0 1 1 3 】

化合物 C - 9 4 の調製

化合物 4 - 6 (1 . 2 g、3 . 7 m m o l)、2 - [1 , 1 ' - ビフェニル] - 4 - イル - 4 - クロロ - 6 - フェニル - 1 , 3 , 5 - トリアジン (1 . 5 g、4 . 4 m m o l)、4 - (ジメチルアミノ) ピリジン (0 . 2 g、1 . 8 m m o l)、炭酸カリウム (1 . 2 g、9 . 3 m m o l)、及びジメチルホルムアミド (4 0 m L) をフラスコに入れ、溶解させ、1 2 0 まで加熱し、次いで 4 時間還流した。反応終了後、その混合物を蒸留水に滴加し、得られた固体を濾過した。その濾液を乾燥させ、カラムクロマトグラフィーによって精製して、化合物 C - 9 4 (6 . 4 g、収率 9 7 %) を得た。

【 0 1 1 4 】

[表]

化合物	MW	UV	PL	M. P.
C - 9 4	6 4 0 . 7 3	N. D	N. D	3 1 5 ° C

[N. D は、「検出不能」を意味する

【 0 1 1 5 】

実施例 5 : 化合物 C - 9 9 の調製

【 0 1 1 6 】

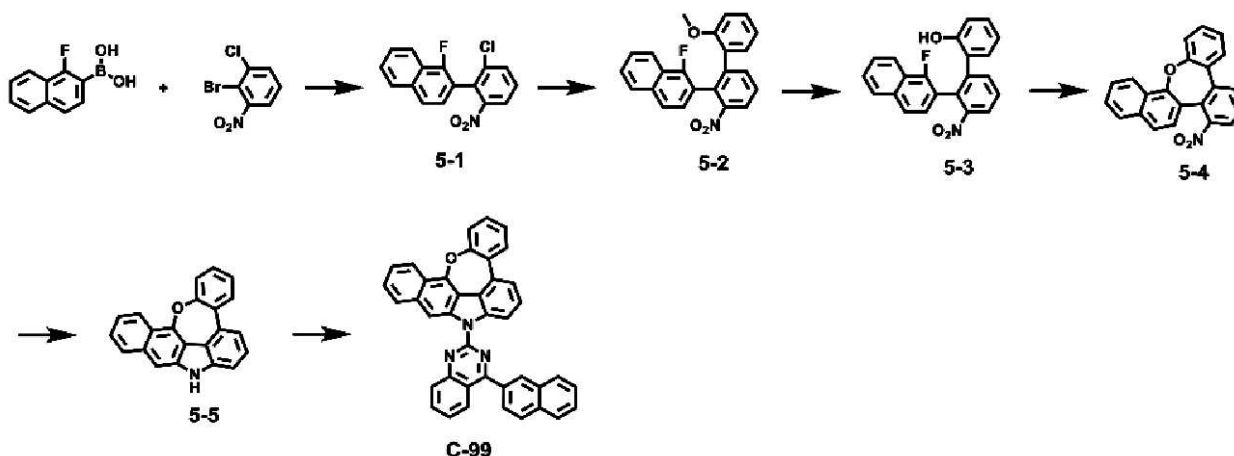
10

20

30

40

【化 2 4】



10

【0117】

化合物 5 - 1 の調製

2 - ブロモ - 1 - クロロ - 3 - ニトロベンゼン (74 g、315 mmol)、(1 - フルオロ - 2 - ナフタレニル) ボロン酸 (50 g、263 mmol)、テトラキス(トリフェニルホスフィン)パラジウム(O) ($\text{Pd}(\text{PPh}_3)_4$) (15 g、13 mmol)、2 M 炭酸セシウム (257 g、789 mmol)、o - キシレン (1600 mL)、及びエタノール (400 mL) をフラスコに注ぎ、溶解させ、次いで 12 時間還流した。反応完了後、有機層を酢酸エチルで抽出した。有機抽出液を硫酸マグネシウムで乾燥させ、カラムクロマトグラフィーによって精製して、化合物 5 - 1 (36 g、収率 47%) を得た。

20

【0118】

化合物 5 - 2 の調製

化合物 5 - 1 (34 g、114 mmol)、2 - メトキシフェニルボロン酸 (26 g、172 mmol)、トリス(ジベンジリデンアセトン)ジパラジウム (10 g、11 mmol)、炭酸セシウム (112 g、343 mmol)、トリシクロヘキシルホスフィン(トルエン中 20 重量%) (32 g、22 mmol)、o - キシレン (600 mL)、及びジオキサン (170 mL) をフラスコに注ぎ、溶解させ、次いで 12 時間還流した。反応完了後、有機層を酢酸エチルで抽出した。有機抽出液を硫酸マグネシウムで乾燥させ、カラムクロマトグラフィーによって精製して、化合物 5 - 2 (38 g、収率 90%) を得た。

30

【0119】

化合物 5 - 3 の調製

化合物 5 - 2 (38 g、102 mmol)、三臭化ホウ素 (MC 中 1 M) (153 mL、153 mmol)、及び塩化メチレン (1000 mL) をフラスコに注ぎ、溶解させ、次いで室温で 12 時間反応させた。炭酸水素ナトリウム溶液を加えて反応を完了させた後、有機層を塩化メチレンで抽出した。有機抽出液を硫酸マグネシウムで乾燥させ、カラムクロマトグラフィーによって精製して、化合物 5 - 3 (53 g) を得た。

40

【0120】

化合物 5 - 4 の調製

化合物 5 - 3 (53 g、102 mmol)、炭酸カリウム (7 g、51 mmol)、及びジメチルホルムアミド (500 mL) をフラスコに注ぎ、溶解させ、次いで 4 時間還流した。反応完了後、有機層を酢酸エチルで抽出した。有機抽出液を硫酸マグネシウムで乾燥させ、カラムクロマトグラフィーによって精製して、化合物 5 - 4 (18 g、収率 52%) を得た。

【0121】

化合物 5 - 5 の調製

化合物 5 - 4 (18 g、53 mmol)、トリフェニルホスフィン (56 g、214 mmol)

50

mol)、及びジクロロベンゼン(180 mL)フラスコに注ぎ、溶解させ、次いで12時間還流した。反応完了後、有機層を酢酸エチルで抽出した。有機抽出液を硫酸マグネシウムで乾燥させ、カラムクロマトグラフィーによって精製して、化合物5-5(9.5 g、収率59%)を得た。

【0122】

化合物C-99の調製

化合物5-5(5 g、16 mmol)、2-クロロ-4-(2-ナフタレニル)キナゾリン(4.7 g、16 mmol)、炭酸セシウム(5.3 g、16 mmol)、4-(ジメチルアミノ)ピリジン(0.99 g、8.1 mmol)、及びジメチルスルホキシド(80 mL)をフラスコに注ぎ、溶解させ、90℃まで加熱し、次いで2時間反応させた。反応終了後、その混合物をメタノールに滴加し、得られた固体を濾過した。その濾液を乾燥させ、カラムクロマトグラフィーによって精製して、化合物C-99(8.6 g、収率94%)を得た。

【0123】

[表]

化合物	MW	UV	PL	M. P.
C-99	561.63	344 nm	566 nm	230℃

【0124】

以下、本開示の化合物を含む有機発光ダイオード(OLED)デバイスの発光特性が詳細に記載される。

【0125】

デバイス例1：本開示の化合物をホストとして含むOLEDデバイスの製造

本開示による有機電界発光化合物を用いてOLEDデバイスを製造した。OLEDデバイス(Geomatec)用のガラス基板上の透明電極インジウムスズ酸化物(ITO)薄膜(10 Ω/sq)を、アセトン、イソプロパノールでの連続超音波洗浄に供し、次いでイソプロパノール中で保管した。次いで、ITO基板を真空蒸着装置の基板ホルダ上に載置した。化合物HIL-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内の圧力を 10^{-6} トルに制御した。その後、電流をセルに印加して上記導入された材料を蒸発させ、それにより80 nmの厚さを有する第1の正孔注入層をITO基板上に形成した。次に、化合物HIL-2を真空蒸着装置の別のセルに導入し、電流をそのセルに印加することにより蒸発させ、それにより5 nmの厚さを有する第2の正孔注入層を第1の正孔注入層上に形成した。次いで、化合物HTL-1を真空蒸着装置の1つのセルに導入し、電流をそのセルに印加することによって蒸発させ、それにより10 nmの厚さを有する第1の正孔輸送層を第2の正孔注入層上に形成した。次いで、化合物HTL-2を真空蒸着装置の別のセルに導入し、電流をそのセルに印加することによって蒸発させ、それにより60 nmの厚さを有する第2の正孔輸送層を第1の正孔輸送層上に形成した。正孔注入層及び正孔輸送層の形成後、その上に発光層を以下のように形成した。化合物C-39をホスト材料として真空蒸着装置の1つのセルに導入し、化合物D-71をドーパントとして別のセルに導入した。これらの2つの材料を異なる比率で蒸発させ、ホスト及びドーパントの総量に基づいて3重量%のドーピング量でドーパントを蒸着させて、40 nmの厚さを有する発光層を第2の正孔輸送層上に形成した。次いで、化合物ETL-1及び化合物Li qを別の2つのセルに導入し、1:1の比率で蒸発させて、発光層の上に厚さ30 nmを有する電子輸送層を形成した。化合物Li qを、2 nmの厚さを有する電子注入層として蒸着させた後、80 nmの厚さを有するAlカソードを別の真空蒸着装置によって蒸着させた。このようにしてOLEDデバイスを製造した。

【0126】

結果として、製造されたOLEDデバイスは、3.5 Vの駆動電圧で26.9 lm/Wの出力効率、及び1,000 nitの輝度を有する赤色発光を示した。初期輝度は定電流

で 100% の 5,000 nit であり、16.7 時間後の輝度は 95.7% であった（寿命特性）。

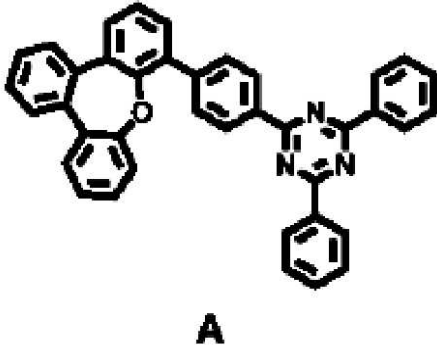
【0127】

比較例 1：ホストとして従来の化合物を含む OLED デバイスの製造

以下の化合物 A をホストに用いた以外は、デバイス例 1 と同じ様式で OLED デバイスを製造した。

【0128】

【化 25】



10

【0129】

結果として、製造された OLED デバイスは、4.5 V の駆動電圧で 17.9 lm/W の出力効率、及び 1,000 nit の輝度を有する赤色発光を示した。初期輝度は定電流で 100% の 5,000 nit であり、16.7 時間後の輝度は 19.9% であった（寿命特性）。

20

【0130】

デバイス例 2 - 1：ホストとして本開示の化合物を含む OLED デバイスの製造

本開示による有機電界発光化合物を用いて OLED デバイスを製造した。OLED デバイス（Geomatic）用のガラス基板上の透明電極インジウムスズ酸化物（ITO）薄膜（10 Ω/sq）を、アセトン、エタノール、及び蒸留水での連続超音波洗浄に供し、次いでイソプロパノール中で保管した。次いで、ITO 基板を真空蒸着装置の基板ホルダ上に載置した。化合物 HIL-1 を真空蒸着装置のセルに導入し、次いで装置のチャンパ内の圧力を 10^{-6} トルに制御した。その後、電流をセルに印加して上記の導入された材料を蒸発させ、それにより 80 nm の厚さを有する第 1 の正孔注入層を ITO 基板上に形成した。次に、化合物 HIL-2 を真空蒸着装置の別のセルに導入し、電流をそのセルに印加することにより蒸発させ、それにより 5 nm の厚さを有する第 2 の正孔注入層を第 1 の正孔注入層上に形成した。次いで、化合物 HTL-1 を真空蒸着装置の 1 つのセルに導入し、電流をそのセルに印加することによって蒸発させ、それにより 10 nm の厚さを有する第 1 の正孔輸送層を第 2 の正孔注入層上に形成した。次いで、化合物 HTL-3 を真空蒸着装置の別のセルに導入し、電流をそのセルに印加することによって蒸発させ、それにより 30 nm の厚さを有する第 2 の正孔輸送層を第 1 の正孔輸送層上に形成した。正孔注入層及び正孔輸送層の形成後、その上に発光層を以下のように形成した。化合物 C-39 をホスト材料として真空蒸着装置の 1 つのセルに導入し、化合物 D-13 をドーパントとして別のセルに導入した。これらの 2 つの材料を異なる比率で蒸発させ、ホスト及びドーパントの総量に基づいて 15 重量% のドーピング量でドーパントを蒸着させて、40 nm の厚さを有する発光層を第 2 の正孔輸送層上に形成した。次いで、化合物 ETL-1 及び化合物 Liq を別の 2 つのセルに導入し、4:6 の比率で蒸発させて、発光層の上に厚さ 35 nm を有する電子輸送層を形成した。化合物 Liq を、2 nm の厚さを有する電子注入層として蒸着させた後、80 nm の厚さを有する Al カソードを別の真空蒸着装置によって蒸着させた。このようにして OLED デバイスを製造した。OLED デバイスを製造するために使用された材料を各々、 10^{-6} torr の真空昇華によって精製した。

30

40

50

【 0 1 3 1 】

デバイス例 2 - 2 及び 2 - 3 : 本開示の化合物をホストとして含む O L E D デバイスの製造

デバイス例 2 - 2、2 - 3 では、それぞれ、化合物 C - 3 6 及び化合物 C - 3 1 をホストとして用いた以外は、デバイス例 2 - 1 と同じ様式で O L E D デバイスを製造した。

【 0 1 3 2 】

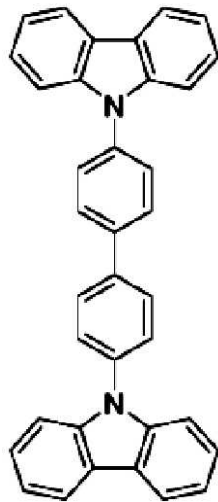
比較例 2 : ホストとして従来の化合物を含む O L E D デバイスの製造

以下のこと以外は、デバイス例 2 - 1 と同じ様式で O L E D デバイスを製造した : 化合物 C B P をホストとして、かつ化合物 D - 1 3 をドーパントとして用いることによって、第 2 の正孔輸送層の上に厚さ 4 0 n m を有する発光層を蒸着させ、化合物 B a l q を、厚さ 1 0 n m を有する正孔阻止層として蒸着させ、その後、化合物 E T L - 1 及び化合物 L i q を別の 2 つのセルに導入し、4 : 6 の比率で蒸発させて、厚さ 2 5 n m を有する電子輸送層を形成した。

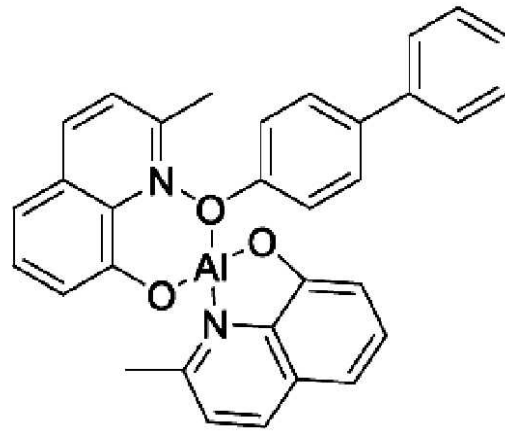
10

【 0 1 3 3 】

【 化 2 6 】



C B P



B a l q

20

30

【 0 1 3 4 】

デバイス例 2 - 1 ~ 2 - 3 及び比較例 2 で製造された O L E D デバイスの 1 , 0 0 0 n i t の輝度における駆動電圧、電力効率、及び C I E 色座標を以下の表 1 に示す。

【 0 1 3 5 】

【 表 1 】

[表 1]

	ホスト	電圧 [V]	電力効率 [l m / W]	色座標 (x , y)
デバイス例 2 - 1 :	C-39	3.3	27.0	0.311、0.656
デバイス例 2 - 2	C-36	4.0	29.1	0.303、0.662
デバイス例 2 - 3	C-31	3.4	31.2	0.306、0.659
比較例 2	CBP	5.8	23.1	0.295、0.665

40

【 0 1 3 6 】

上記のデバイス例 1 及び 2 - 1 ~ 2 - 3 ならびに比較例 1 及び 2 から、本開示の化合物

50

をホストとして用いたOLEDデバイスが、優れた輝度特性を有するだけでなく、従来の発光材料を用いたOLEDデバイスと比較して、駆動電圧を低下させて電力消費を改善することにより電力効率も高めることが認められる。

【0137】

デバイス例3-1：本開示の化合物を第1のホスト化合物として含むOLEDデバイスの製造

第2の正孔輸送層の厚さを30nmまで低下させ、かつ発光層及び電子輸送層を以下のようにして蒸着させた以外は、デバイス例1と同じ様式でOLEDデバイスを製造した。ホストとして、化合物C-39（第1のホスト）及び化合物B-8（第2のホスト）をそれぞれ真空蒸着装置の2つのセルに導入した。化合物D-87をドーパントとして別のセルに導入した。2つのホスト化合物を1：2の異なる比率で蒸発させ、一方ドーパントをホスト化合物とは異なる比率で蒸発させ、それにより、ホスト及びドーパントの総量に基づいて10重量%のドーピング量でドーパントを蒸着させて40nmの厚さを有する発光層を第2の正孔輸送層上に形成した。その後、化合物ETL-1及び化合物Liqを別の2つのセルに導入し、4：6の比率で蒸発させて、発光層の上に厚さ35nmを有する電子輸送層を形成した。

【0138】

デバイス例3-2及び3-3：本開示の化合物を第1のホスト化合物として含むOLEDデバイスの製造

デバイス例3-2及び3-3では、化合物C-36及び化合物C-31をそれぞれ第1のホスト化合物として用いた以外は、デバイス例3-1と同じ様式でOLEDデバイスを製造した。

【0139】

デバイス例3-4～3-6：本開示の化合物をホスト化合物として含むOLEDデバイスの製造

デバイス例3-4～3-6では、第1及び第2のホスト化合物の代わりに発光層におけるホストとして、化合物C-39、化合物C-36、及び化合物C-31のみをそれぞれを用いた以外は、デバイス例3-1と同じ様式でOLEDデバイスを製造した。

【0140】

デバイス例3-1～3-6で製造されたOLEDデバイスの1,000cd/m²の輝度における駆動電圧、電流、及び発光色を以下の表2に示す。

【0141】

【表2】

[表2]

	ホスト		電圧 (V)	電流 (mA/ cm ²)	色
	第1のホスト	第2のホスト			
デバイス例3-1	C-39	B-8	3.4	1.62	緑色
デバイス例3-2	C-36	B-8	3.5	1.66	緑色
デバイス例3-3	C-31	B-8	3.3	1.60	緑色
デバイス例3-4	C-39		3.1	2.25	緑色
デバイス例3-5	C-36		3.6	1.80	緑色
デバイス例3-6	C-31		3.2	2.00	緑色

【0142】

上記のデバイス例3-1～3-6から、複数のホスト化合物のうちのいずれか1つとし

て本開示の化合物を含み、かつ唯一のホストとして本開示の化合物を含む O L E D デバイスが優れた輝度特性を有することが認められる。

【 0 1 4 3 】

デバイス例 4 - 1 : 電子緩衝材料として本開示の化合物を含む青色発光 O L E D デバイスの製造

O L E D デバイスを以下のようにして製造した : O L E D デバイス (G e o m a t e c) 用のガラス基板上の透明電極インジウムスズ酸化物 (I T O) 薄膜 ($10 \Omega / sq$) を、アセトン、エタノール、及び蒸留水での連続超音波洗浄に供し、次いでイソプロパノール中で保管した。次いで、I T O 基板を真空蒸着装置の基板ホルダ上に載置した。化合物 H I L - 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内の圧力を 10^{-7} トルに制御した。その後、電流をセルに印加して上記の導入された材料を蒸発させ、それにより 60 nm の厚さを有する第 1 の正孔注入層を I T O 基板上に形成した。次に、化合物 H I L - 2 を真空蒸着装置の別のセルに導入し、電流をそのセルに印加することにより蒸発させ、それにより 5 nm の厚さを有する第 2 の正孔注入層を第 1 の正孔注入層上に形成した。次いで、化合物 H T L - 1 を真空蒸着装置の別のセルに導入し、電流をそのセルに印加することによって蒸発させ、それにより 20 nm の厚さを有する第 1 の正孔輸送層を第 2 の正孔注入層上に形成した。次いで、化合物 H T L - 4 を真空蒸着装置の別のセルに導入し、電流をそのセルに印加することによって蒸発させ、それにより 5 nm の厚さを有する第 2 の正孔輸送層を第 1 の正孔輸送層上に形成した。正孔注入層及び正孔輸送層の形成後、その上に発光層を以下のようにして形成した。化合物 B H - 1 をホスト材料として真空蒸着装置の 1 つのセルに導入し、化合物 B D - 1 をドーパントとして別のセルに導入した。これらの 2 つの材料を異なる比率で蒸発させ、ホスト及びドーパントの総量に基づいて 2 重量 % のドーピング量でドーパントを蒸着させて、 20 nm の厚さを有する発光層を第 2 の正孔輸送層上に形成した。電子緩衝材料としての化合物 C - 36 を、発光層上に厚さ 5 nm を有する電子緩衝層として蒸着させた。化合物 E T L - 2 を 1 つのセルに導入し、化合物 L i q を別のセルに導入し、同じ比率で蒸発させ、ドーピング量 $50 \text{ wt} \%$ で蒸着させて、電子緩衝層上に厚さ 25 nm を有する電子輸送層を形成した。化合物 L i q を、 2 nm の厚さを有する電子注入層として蒸着させた後、 80 nm の厚さを有する A l カソードを別の真空蒸着装置によって蒸着させた。このようにして O L E D デバイスを製造した。O L E D デバイスを製造するために使用された材料を各々、 10^{-6} torr での真空昇華によって精製した。

【 0 1 4 4 】

デバイス例 4 - 2 ~ 4 - 4 : 電子緩衝材料として本開示の化合物を含む青色発光 O L E D デバイスの製造

デバイス例 4 - 2 ~ 4 - 4 では、化合物 C - 39、化合物 C - 31、及び化合物 C - 94 をそれぞれ電子緩衝材料として用いた以外は、デバイス例 4 - 1 と同じ様式で O L E D デバイスを製造した。

【 0 1 4 5 】

デバイス例 4 - 1 ~ 4 - 4 で製造された O L E D デバイスの $1,000 \text{ nit}$ の輝度における駆動電圧、発光効率、及び発光色を以下の表 3 に示す。

【 0 1 4 6 】

10

20

30

40

【表 3】

[表 3]

	電子緩衝材料	電圧 (V)	発光効率 (cd/A)	色
デバイス例 4-1 :	C-36	3.6	6.7	青色
デバイス例 4-2 :	C-39	3.8	5.9	青色
デバイス例 4-3 :	C-31	3.7	6.4	青色
デバイス例 4-4 :	C-94	3.6	6.8	青色

10

【0147】

上記のデバイス例 4-1 ~ 4-4 から、電子緩衝材料として本開示の化合物を含む OLED デバイスが低い駆動電圧及び優れた発光効率を有することが認められる。

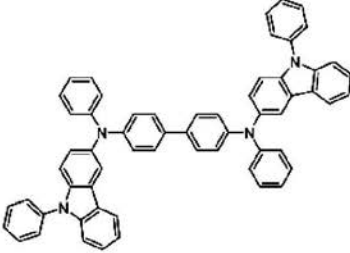
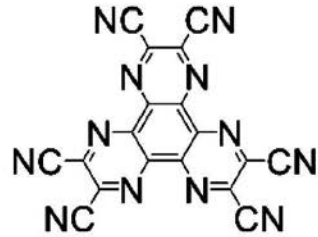
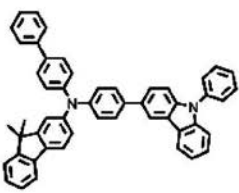
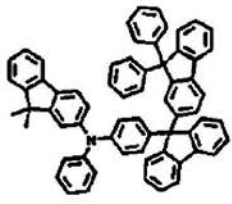
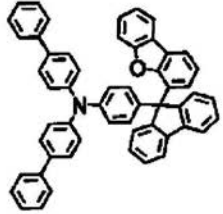
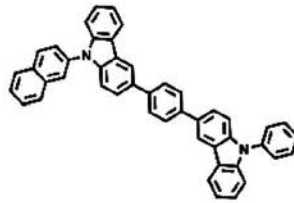
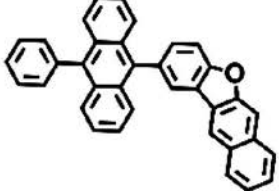
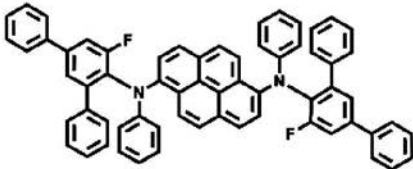
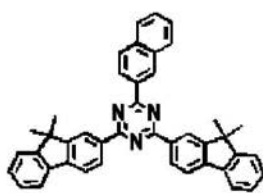
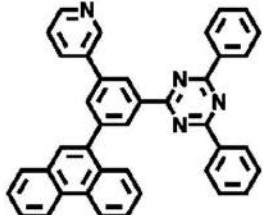
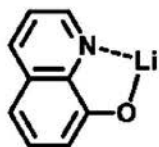
【0148】

デバイス例及び比較例で使用される化合物を以下の表 4 に示す。

【0149】

【表 4】

[表 4]

正孔注入層／正孔輸送層	 H I L - 1  H I L - 2  H T L - 1  H T L - 2  H T L - 3  H T L - 4
発光層	 B H - 1  B D - 1
電子輸送層／電子注入層	 E T L - 1  E T L - 2  L i q

10

20

30

40

【 国 際 調 査 報 告 】

INTERNATIONAL SEARCH REPORT		International application No. PCT/KR2016/012459
A. CLASSIFICATION OF SUBJECT MATTER C07D 491/044 (2006.01) C07D 495/04 (2006.01) C09K 11/06 (2006.01) H01L 27/32 (2006.01) H01L 51/54 (2006.01) H05B 33/14 (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: Chemical Abstracts Registry and CAplus - structure search based on compounds of formula (1). Patentscope: Applicant search with IPC marks C07D 491 or C07D 495. Inventor search with IPC marks C07D 491 or C07D 495. Espacenet: Applicant search with IPC marks C07D 491/00/low or C07D 495/04. Inventor search with IPC marks C07D or C07D 491/00/low or C07D 495/00/low. Applicant/ Inventors names were also searched in internal databases provided by IP Australia.		
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 "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 7 February 2017		Date of mailing of the international search report 07 February 2017
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 Tina Bryant AUSTRALIAN PATENT OFFICE (ISO 9001 Quality Certified Service) Telephone No. +61 2 6283 7992

INTERNATIONAL SEARCH REPORT		International application No.
C (Continuation). DOCUMENTS CONSIDERED TO BE RELEVANT		PCT/KR2016/012459
Category*	Citation of document, with indication, where appropriate, of the relevant passages	Relevant to claim No.
A	KR 10-2014-0119642 A (LG CHEM, LTD.) 10 October 2014 Pages 3 and 4, Claims 1, 2, 12 and 13.	1-10
A	KR 10-2016-0075246 A (DOOSAN CORPORATION) 29 June 2016 Paragraphs [0088]-[0091], [0257]-[0304], paragraph [0483] Table 1 and paragraph [0496] Table 2, Claims 1 and 7-9.	1-10
A	WO 2016/105054 A2 (DOOSAN CORPORATION) 30 June 2016 Paragraphs [83]-[86], [123]-[125], [126]-[128], [141]-[146], Claims 1, 5, 14 and 15.	1-10
A	US 2016/0308146 A1 (MERCK PATENT GMBH) 20 October 2016 Paragraphs [0001], [0036]-[0041], [0044]-[0049], [0112]-[0117], Example 23.	1-10

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

INTERNATIONAL SEARCH REPORT		International application No. PCT/KR2016/012459	
Information on patent family members			
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
KR 10-2014-0119642 A	10 October 2014	None	
KR 10-2016-0075246 A	29 June 2016	None	
WO 2016/105054 A2	30 June 2016	WO 2016105054 A2	30 Jun 2016
		KR 20160077941 A	04 Jul 2016
US 2016/0308146 A1	20 October 2016	US 2016308146 A1	20 Oct 2016
		CN 105793246 A	20 Jul 2016
		EP 3077382 A2	12 Oct 2016
		JP 2017501142 A	12 Jan 2017
		KR 20160095081 A	10 Aug 2016
		WO 2015082046 A2	11 Jun 2015
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

(81)指定国 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, JP, KE, KG, 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, UA, UG

(72)発明者 ジ - ソン・ジュン

大韓民国 1 6 6 8 1 キョンギ - ド スウォン - シ ヨントン - ク 1 4 8 3 ボン - ギル デ
ヨン - デロ 9 7

Fターム(参考) 3K107 AA01 BB01 CC12 CC14 CC21 DD53 DD59 DD68 DD74 DD78

5C094 AA22 AA24 AA37 BA27 FB01

