

(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2017-530555

(P2017-530555A)

(43) 公表日 平成29年10月12日(2017.10.12)

(51) Int.Cl.	F I	テーマコード (参考)
H O 1 L 51/50 (2006.01)	H O 5 B 33/14 B	3 K 1 0 7
C O 7 D 487/16 (2006.01)	C O 7 D 487/16	4 C O 5 O

審査請求 未請求 予備審査請求 未請求 (全 43 頁)

(21) 出願番号	特願2017-515102 (P2017-515102)	(71) 出願人	509266480
(86) (22) 出願日	平成27年9月25日 (2015. 9. 25)		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29年3月17日 (2017. 3. 17)		ク・マテリアルズ・コリア・リミテッド
(86) 国際出願番号	PCT/KR2015/010245		大韓民国 3 3 1 - 9 8 0 チュンチョン
(87) 国際公開番号	W02016/052962		ナムード チョナンシー ソブクーク 3
(87) 国際公開日	平成28年4月7日 (2016. 4. 7)		コンダン 1 - ロ 5 6
(31) 優先権主張番号	10-2014-0130061	(74) 代理人	110000589
(32) 優先日	平成26年9月29日 (2014. 9. 29)		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	ビトナリ・キム
(31) 優先権主張番号	10-2015-0135881		大韓民国 キョンギード ファソンーシ
(32) 優先日	平成27年9月24日 (2015. 9. 24)		サムサン 1 - ロ 5 - ギル 2 0
(33) 優先権主張国	韓国 (KR)	(72) 発明者	ヒーリョン・カン
			大韓民国 キョンギード ファソンーシ
			サムサン 1 - ロ 5 - ギル 2 0

最終頁に続く

(54) 【発明の名称】 有機電界発光化合物及びこ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こ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は、良好な色純度、溶解性、及び熱安定性を有する。本開示の有機電界発光化合物を含むことによって、低駆動電圧、優れた電流及び電力効率、ならびに著しく改善された寿命を示す有機電界発光デバイスが提供され得る。

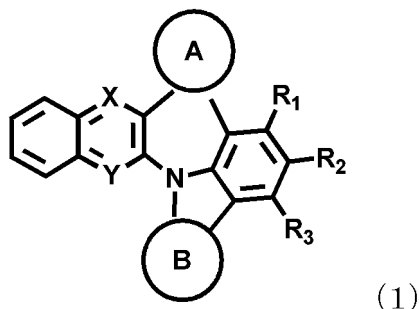
【選択図】なし

【特許請求の範囲】

【請求項 1】

以下の式 1 によって表される有機電界発光化合物であって、

【化 1】

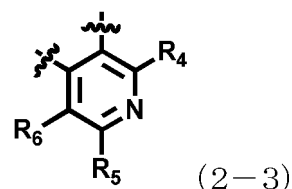
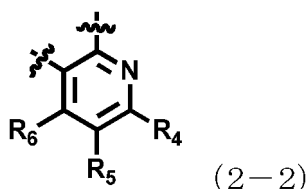
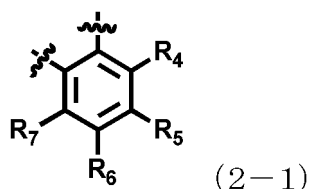


10

式中、

環 A 及び環 B は、それぞれ独立して、以下の式 2 - 1 ~ 2 - 3 のうちのいずれか 1 つを表し、

【化 2】



20

X 及び Y は、それぞれ独立して、-CR₈- または -N- を表すが、ただし、X 及び Y の両方が同時に -CR₈- にはならないことを条件とし、

R₁ ~ R₈ は、それぞれ独立して、水素、重水素、ハロゲン、シアノ、置換もしくは非置換の (C1 - C30) アルキル、置換もしくは非置換の (C6 - C30) アリール、置換もしくは非置換の 3 ~ 30 員ヘテロアリール、置換もしくは非置換の (C3 - C30) シクロアルキル、置換もしくは非置換の (C1 - C30) アルコキシ、置換もしくは非置換のトリ (C1 - C30) アルキルシリル、置換もしくは非置換のジ (C1 - C30) アルキル (C6 - C30) アリールシリル、置換もしくは非置換の (C1 - C30) アルキルジ (C6 - C30) アリールシリル、置換もしくは非置換のトリ (C6 - C30) アリールシリル、置換もしくは非置換のモノもしくはジ (C1 - C30) アルキルアミノ、置換もしくは非置換のモノもしくはジ (C6 - C30) アリールアミノ、または置換もしくは非置換の (C1 - C30) アルキル (C6 - C30) アリールアミノを表すが、あるいは、隣接する置換基 (複数可) と連結して、窒素、酸素、及び硫黄から選択される少なくとも 1 個のヘテロ原子で炭素原子 (複数可) が置換され得る、置換もしくは非置換の (C3 - C30) 単環式もしくは多環式の脂環式環または芳香族環を形成してもよく、

30

前記ヘテロアリールは、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。

40

【請求項 2】

R₁ ~ R₈ における前記置換アルキル、前記置換アリール、前記置換ヘテロアリール、前記置換シクロアルキル、前記置換アルコキシ、前記置換トリアルキルシリル、前記置換ジアルキルアリールシリル、前記置換アルキルジアリールシリル、前記置換トリアリールシリル、前記置換されたモノもしくはジアルキルアミノ、前記置換されたモノもしくはジアリールアミノ、及び前記置換アルキルアリールアミノの置換基は、それぞれ独立して、重水素、ハロゲン、シアノ、カルボキシ、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

50

ル、(C 6 - C 3 0) アリールオキシ、(C 6 - C 3 0) アリールチオ、非置換もしくは(C 6 - C 3 0) アリールで置換されている 5 ~ 3 0 員ヘテロアリール、非置換もしくは 5 ~ 3 0 員ヘテロアリールで置換されている(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。

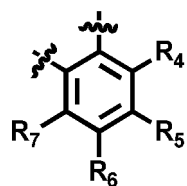
10

【請求項 3】

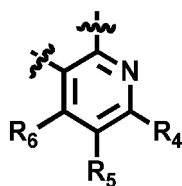
X 及び Y は、それぞれ独立して、- C R₈ - または - N - を表すが、ただし、X 及び Y の両方が同時に - C R₈ - にはならないことを条件とし、

環 A 及び環 B は、それぞれ独立して、以下の式 2 - 1 ~ 2 - 3 のうちのいずれか 1 つを表し、

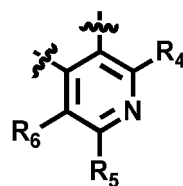
【化 3】



(2-1)



(2-2)



(2-3)

20

R₁ ~ R₈ は、それぞれ独立して、水素、置換もしくは非置換の(C 6 - C 2 0) アリール、置換もしくは非置換の 5 ~ 2 5 員ヘテロアリール、または置換もしくは非置換のジ(C 6 - C 2 0) アリールアミノを表すか、あるいは、隣接する置換基(複数可)と連結して、置換もしくは非置換の(C 3 - C 2 0) 単環式もしくは多環式の脂環式環または芳香族環を形成してもよい、請求項 1 に記載の有機電界発光化合物。

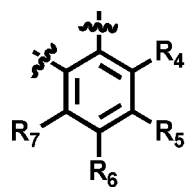
30

【請求項 4】

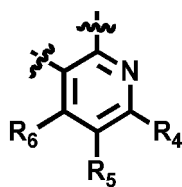
X 及び Y は、それぞれ独立して、- C R₈ - または - N - を表すが、ただし、X 及び Y の両方が同時に - C R₈ - にはならないことを条件とし、

環 A 及び環 B は、それぞれ独立して、以下の式 2 - 1 ~ 2 - 3 のうちのいずれか 1 つを表し、

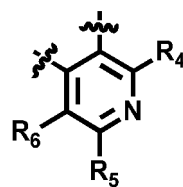
【化 4】



(2-1)



(2-2)



(2-3)

40

R₁ ~ R₇ は、それぞれ独立して、水素；非置換または(C 1 - C 6) アルキル、5 ~ 2 0 員ヘテロアリール、もしくはジ(C 6 - C 1 2) アリールアミノで置換されている(C 6 - C 2 0) アリール；あるいは非置換または(C 1 - C 6) アルキル、(C 6 - C 1 2) アリール、もしくはジ(C 6 - C 1 2) アリールアミノで置換されている 5 ~ 2 0 員ヘテロアリールを表すか、あるいは、隣接する置換基(複数可)と連結して、非置換もしくは(C 1 - C 6) アルキルで置換されている(C 3 - C 2 0) 単環式もしくは多環式の芳香族環を形成してもよいが、ただし、R₁ ~ R₇ が同時に水素にはならないことを条件とし、

50

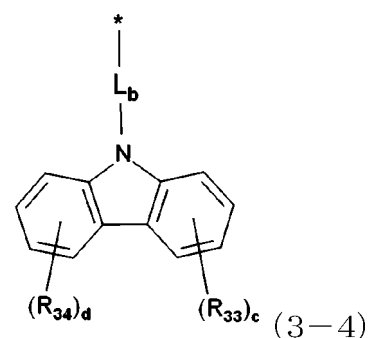
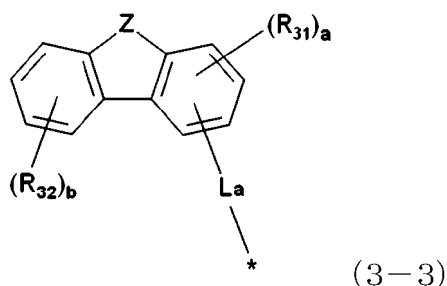
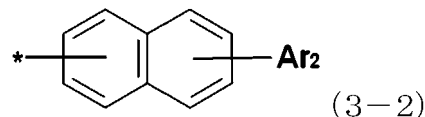
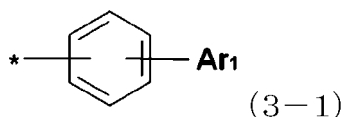
R_8 は、水素または (C 1 - C 6) アルキルを表す、請求項 1 に記載の有機電界発光化合物。

【請求項 5】

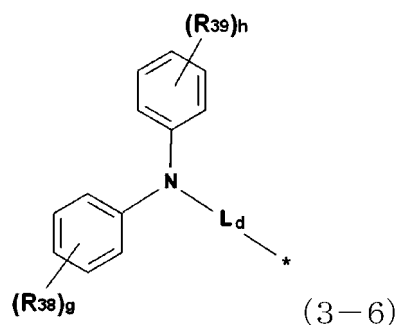
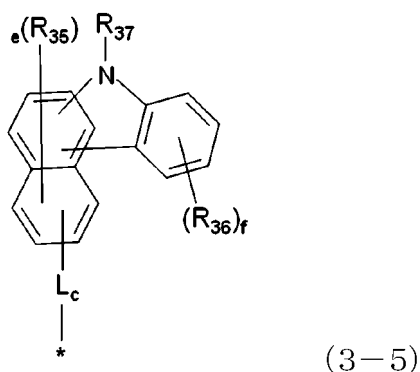
$R_1 \sim R_7$ は、それぞれ独立して、水素、(C 1 - C 20) アルキル、または以下の式 3 - 1 ~ 3 - 6 のうちのいずれか 1 つを表すか、あるいは、隣接する置換基 (複数可) と連結して、非置換もしくは (C 1 - C 6) アルキルで置換されているベンゼン環、または非置換もしくは (C 1 - C 6) アルキルで置換されているナフタレン環を形成してもよいが、ただし、 $R_1 \sim R_7$ が同時に水素にはならないことを条件とし、 R_8 は、水素または (C 1 - C 6) アルキルを表す。

【化 5】

10



20



30

式中、

Ar_1 及び Ar_2 は、それぞれ独立して、水素、置換もしくは非置換の (C 1 - C 30) アルキル、または置換もしくは非置換の (C 6 - C 30) アリールを表すが、ただし、 Ar_1 及び Ar_2 がフルオレニルではないことを条件とし、

L_a 、 L_b 、 L_c 、及び L_d は、それぞれ独立して、単結合、置換もしくは非置換の (C 6 - C 30) アリーレン、または置換もしくは非置換の 3 ~ 30 員ヘテロアリーレンを表し、

40

Z は、 $-S-$ 、 $-O-$ 、 $-NR_{11}-$ 、または $-CR_{12}R_{13}-$ を表し、

$R_{11} \sim R_{13}$ は、それぞれ独立して、水素、置換もしくは非置換の (C 1 - C 30) アルキル、置換もしくは非置換の (C 6 - C 30) アリール、置換もしくは非置換の 3 ~ 30 員ヘテロアリール、置換もしくは非置換の (C 3 - C 30) シクロアルキル、または置換もしくは非置換の 3 ~ 7 員ヘテロシクロアルキルを表すか、あるいは、隣接する置換基 (複数可) と連結して、置換もしくは非置換の 3 ~ 30 員単環式もしくは多環式の脂環式環または芳香族環を形成してもよく、

$R_{31} \sim R_{39}$ は、それぞれ独立して、水素、重水素、ハロゲン、シアノ、置換もしくは非置換の (C 1 - C 30) アルキル、置換もしくは非置換の (C 3 - C 30) シクロア

50

ルキル、置換もしくは非置換の(C₃ - C₃₀)シクロアルケニル、置換もしくは非置換の3～7員ヘテロシクロアルキル、置換もしくは非置換の(C₆ - C₃₀)アリール、置換もしくは非置換の3～30員ヘテロアリール、置換もしくは非置換のトリ(C₁ - C₃₀)アルキルシリル、置換もしくは非置換のトリ(C₆ - C₃₀)アリールシリル、置換もしくは非置換のジ(C₁ - C₃₀)アルキル(C₆ - C₃₀)アリールシリル、置換もしくは非置換の(C₁ - C₃₀)アルキルジ(C₆ - C₃₀)アリールシリル、置換もしくは非置換のモノもしくはジ(C₁ - C₃₀)アルキルアミノ、置換もしくは非置換のモノもしくはジ(C₆ - C₃₀)アリールアミノ、または置換もしくは非置換の(C₁ - C₃₀)アルキル(C₆ - C₃₀)アリールアミノを表すか、あるいは、隣接する置換基(複数可)と連結して、窒素、酸素、及び硫黄から選択される少なくとも1個のヘテロ原子で炭素原子(複数可)が置換され得る、置換もしくは非置換の3～30員単環式もしくは多環式の脂環式環または芳香族環を形成してもよく、

10

前記ヘテロアリール(ヘテロアリーレン)及びヘテロシクロアルキルは、それぞれ独立して、窒素、酸素、及び硫黄から選択される少なくとも1個のヘテロ原子を含有し、

a は、1～3の整数を表し、

b～d、及びf は、それぞれ独立して、1～4の整数を表し、

e、g、及びh は、それぞれ独立して、1～5の整数を表し、

a、b、c、d、e、f、g、またはhが2以上の整数である場合、R₃₁、R₃₂、R₃₃、R₃₄、R₃₅、R₃₆、R₃₇、R₃₈、またはR₃₉のそれぞれは同じかまたは異なってもよい、請求項1に記載の有機電界発光化合物。

20

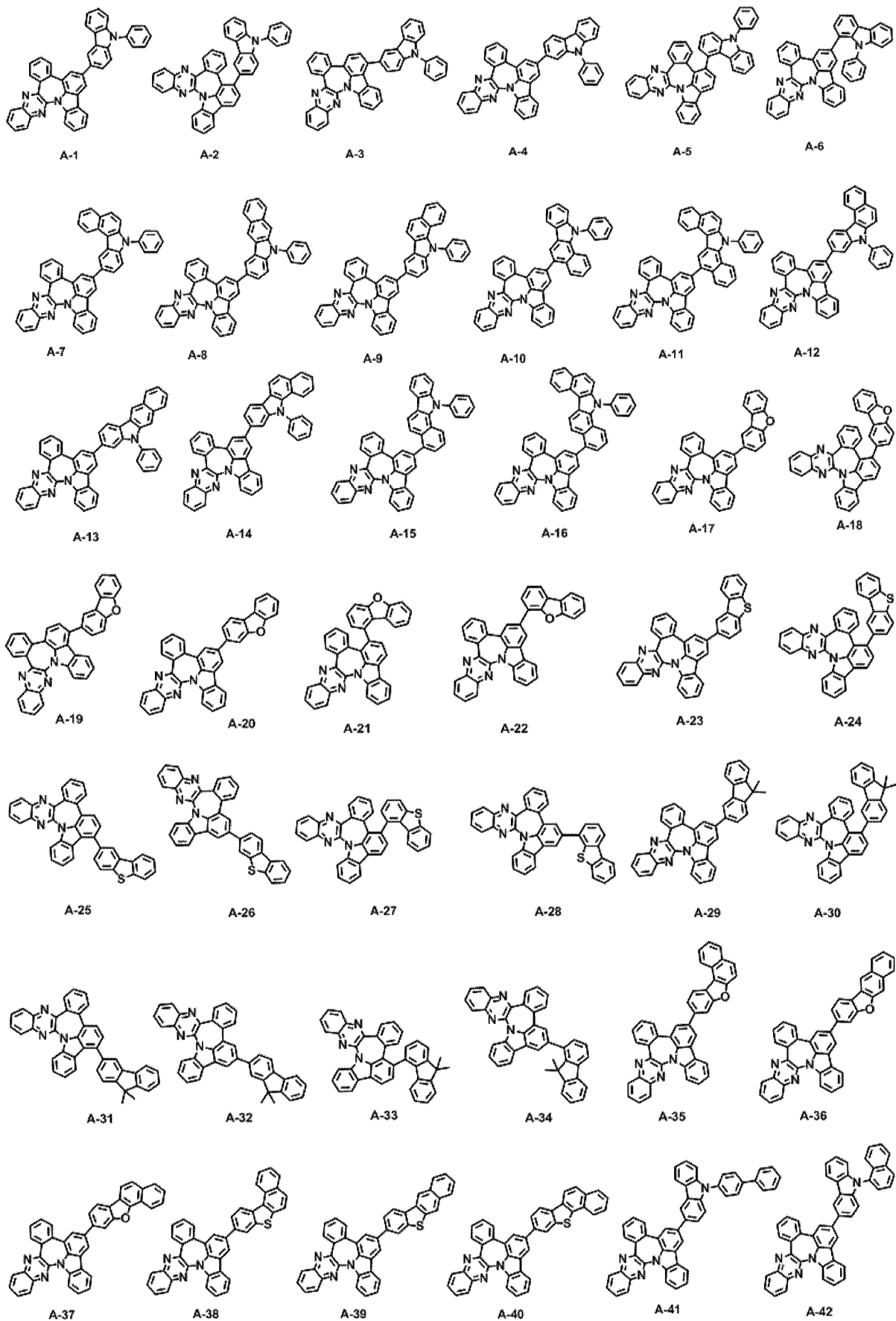
【請求項6】

R₁～R₇のうちの少なくとも1つは、式3-3～3-5から選択され、式3-3のZは、-NR₁₁-を表す、請求項5に記載の有機電界発光化合物。

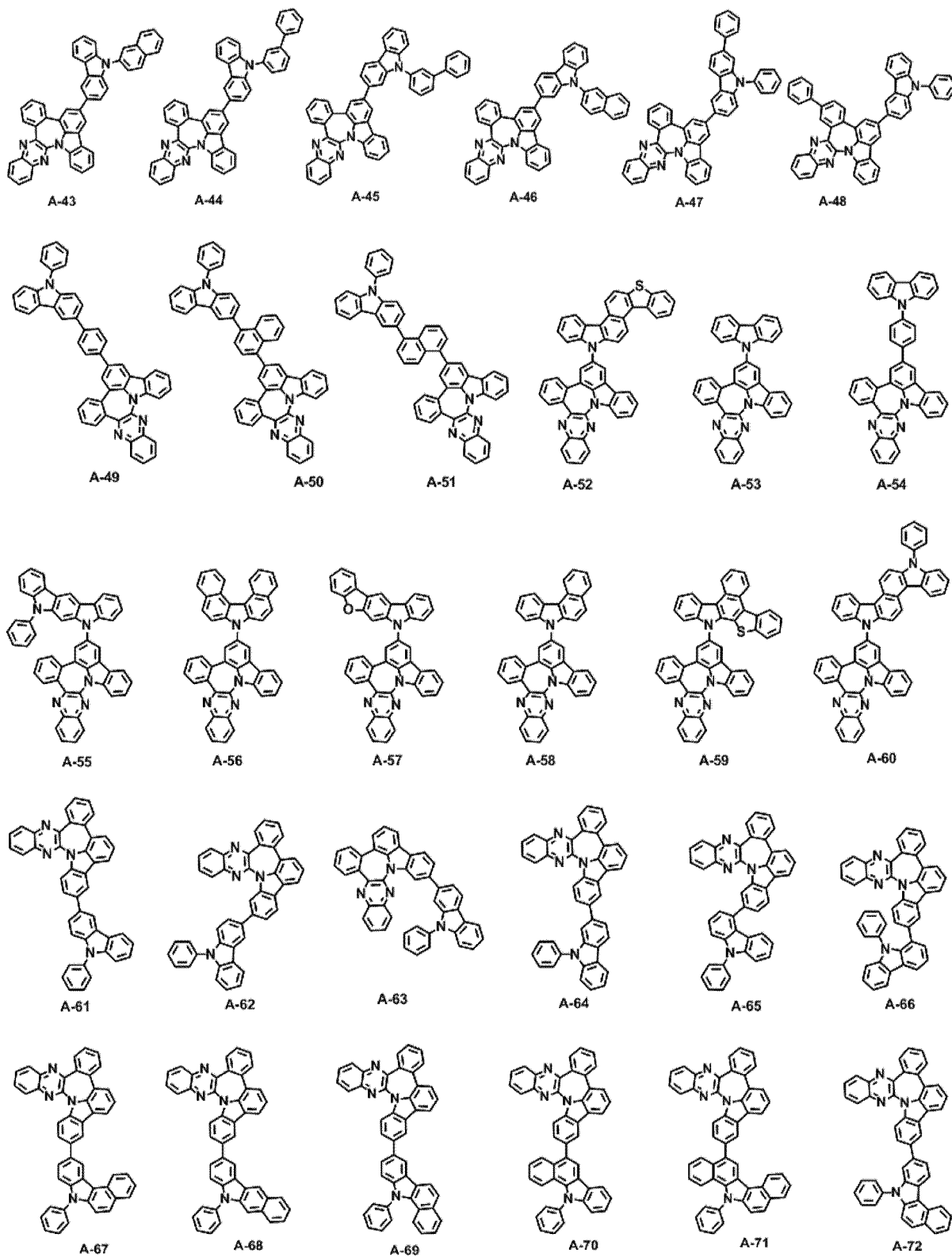
【請求項7】

式1により表される前記化合物は、以下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。

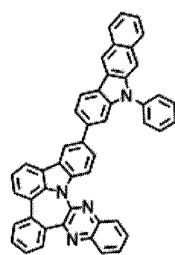
【化 6 - 1】



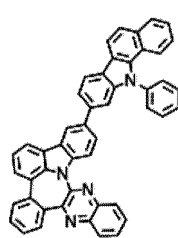
【化 6 - 2】



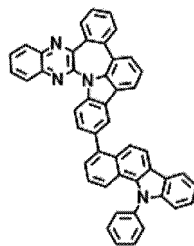
【化 6 - 3】



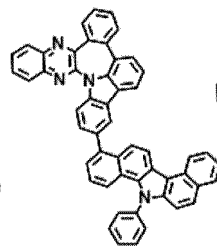
A-73



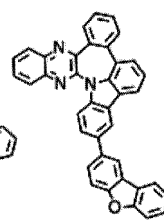
A-74



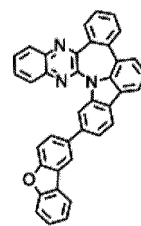
A-75



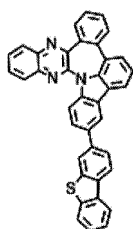
A-76



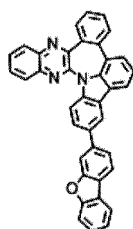
A-77



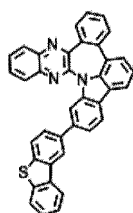
A-78



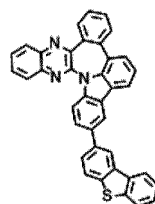
A-79



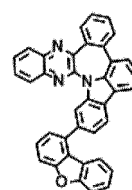
A-80



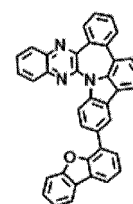
A-81



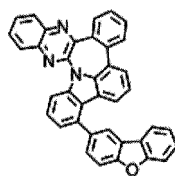
A-82



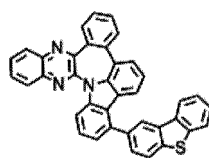
A-83



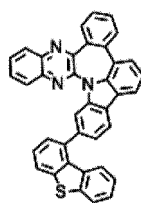
A-84



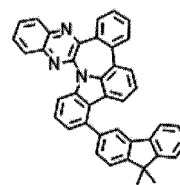
A-85



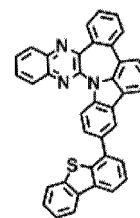
A-86



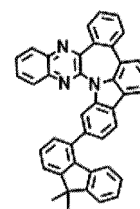
A-87



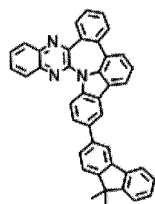
A-88



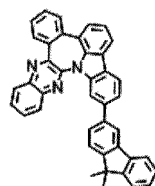
A-89



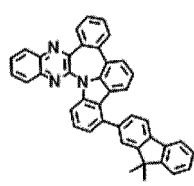
A-90



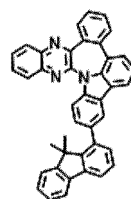
A-91



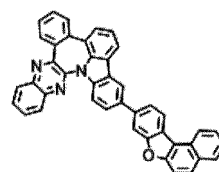
A-92



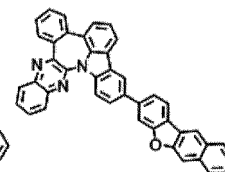
A-93



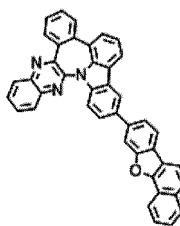
A-94



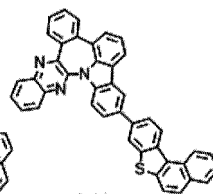
A-95



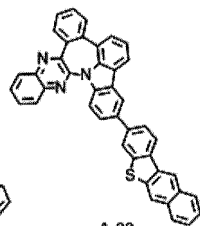
A-96



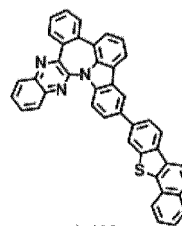
A-97



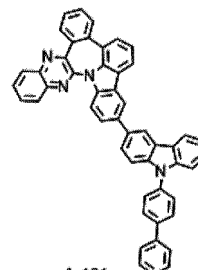
A-98



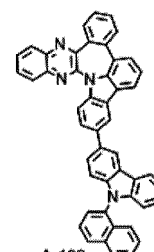
A-99



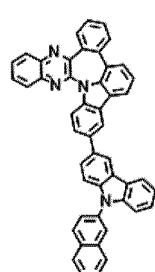
A-100



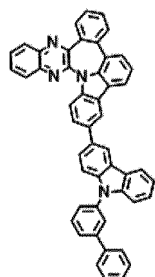
A-101



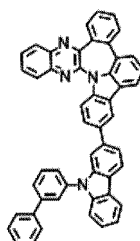
A-102



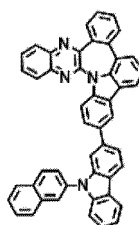
A-103



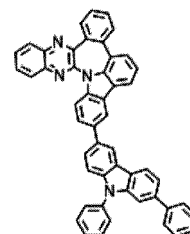
A-104



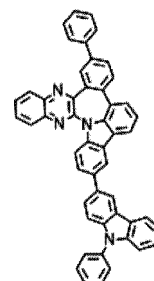
A-105



A-106



A-107



A-108

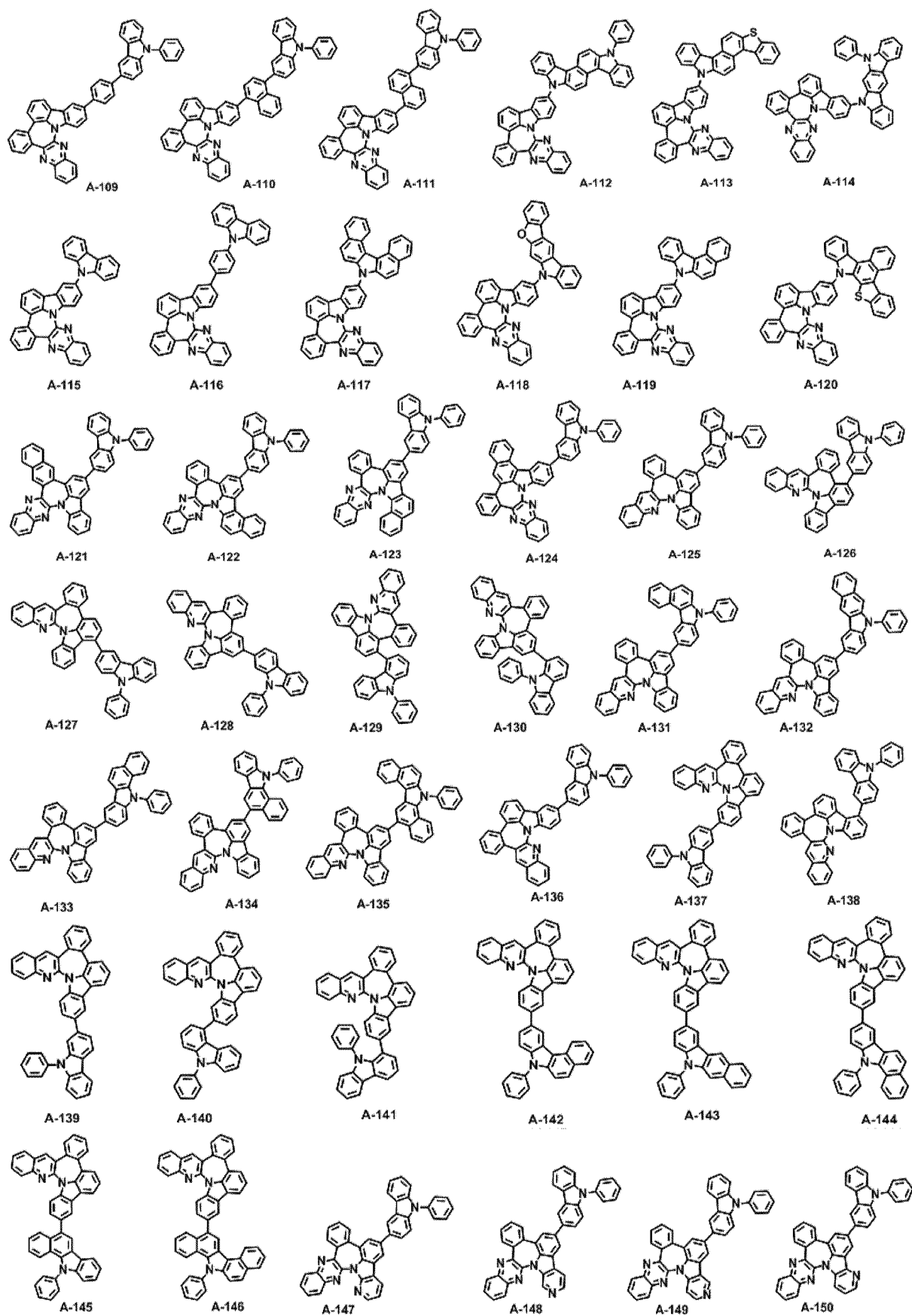
10

20

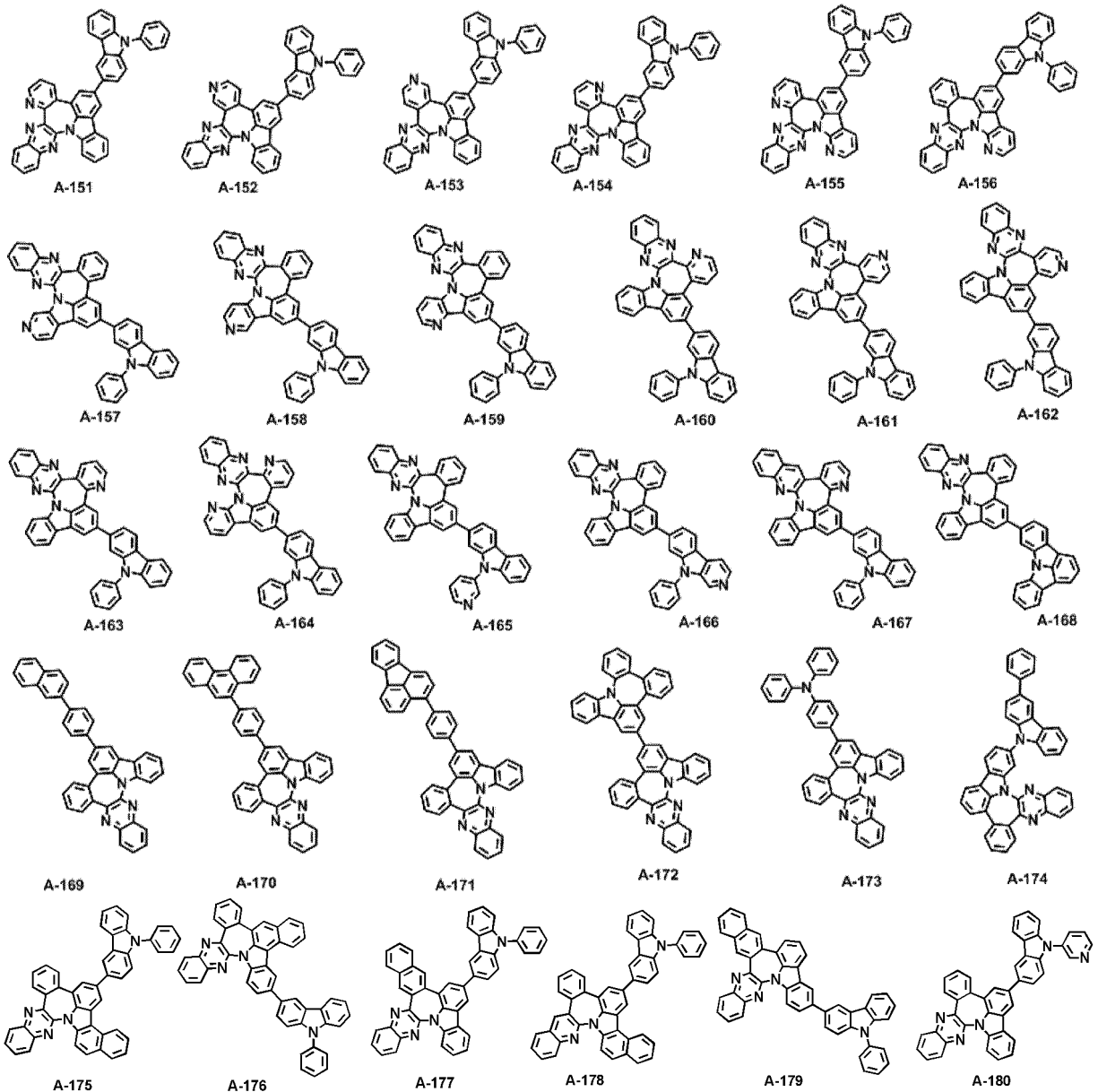
30

40

【化 6 - 4】



【化 6 - 5】



【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。

【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これを含む有機電界発光デバイスに関する。

【背景技術】

【0002】

有機電界発光 (EL) デバイスは、より広い視覚野、より高いコントラスト比、及びより速い反応時間を提供するという点における利点を有する自発光デバイスである。有機 EL デバイスは、発光層を形成するために、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 によって初めて開発された (Appl. Phys. Lett. 51, 913, 1987 参照)。

10

20

30

40

50

【 0 0 0 3 】

有機 E L デバイス内の発光効率を決定する最も重要な要素は、発光材料である。現在まで、蛍光材料が発光材料として広く使用されてきた。しかしながら、有機電界発光機構を考慮すると、リン光材料が、蛍光材料と比較して発光効率を理論的に四 (4) 倍に増強するため、リン光発光材料が広く研究されてきた。イリジウム (I I I) 錯体は、それぞれに赤色、緑色、及び青色発光材料として、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) ピコリナートイリジウム (F i r p i c) を含むリン光材料として周知されている。

10

【 0 0 0 4 】

現時点で、4 , 4 ' - N , N ' - ジカルバゾール - ビフェニル (C B P) が、リン光材料のための最も周知されるホスト材料である。近年、Pioneer (Japan) 他は、正孔阻止材料として既知であったバソクプロイン (B C P) 及びアルミニウム (I I I) ビス (2 - メチル - 8 - キノリナート) (4 - フェニルフェノレート) (B A l q) などを、ホスト材料として使用して高性能有機 E L デバイスを開発した。

【 0 0 0 5 】

これらの材料は、良好な発光特性を提供するが、それらは、以下の不利益を有する。(1) それらの低ガラス遷移温度及び不十分な熱安定性が原因で、それらの分解が、真空内の高温堆積プロセス中に生じ得、寿命は短い。(2) 有機 E L デバイスの電力効率が、[(π / 電圧) × 電流効率] によって示され、電力効率が電圧に反比例する。リン光ホスト材料を含む有機 E L 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、著しく高い駆動電圧が必要である。したがって、電力効率 (l m / W) の点から利点はない。(3) さらに、有機 E L デバイスの動作寿命は短く、発光効率はやはり改善される必要がある。

20

【 0 0 0 6 】

ドイツ特許出願公開第 1 9 8 0 8 0 8 8 号及び米国特許第 8 , 1 7 4 , 0 0 2 号は、カルバゾールとフェニル基との間の架橋によって形成される、以下の式 A に示される構造を有する化合物を開示している。国際公開第 W O 2 0 1 1 / 0 4 2 , 1 0 7 号は、カルバゾールとアルキル置換フェニル基との間の架橋によって形成される、以下の式 B に示される構造を有する化合物を開示している。しかしながら、それらは、カルバゾールとフェニル置換キノリンまたはキノキサリン基との間の架橋によって形成される化合物を開示することはできていない。

30

【 0 0 0 7 】

【 化 1 】



40

【 発明の開示 】

【 発明が解決しようとする課題 】

【 0 0 0 8 】

本開示の目的は、長寿命、低駆動電圧、ならびに電流効率及び電力効率などの発光効率における優秀さを示す有機電界発光デバイス、色純度、溶解性、ならびに熱安定性を提供し得る有機電界発光化合物を提供すること、及びその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。

50

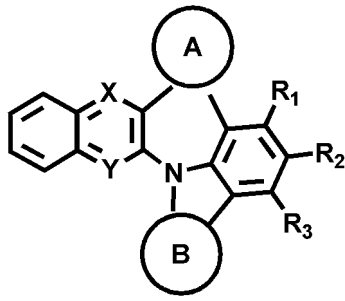
【課題を解決するための手段】

【0009】

本発明者らは、上記の目的を、以下の式1により表される有機電界発光化合物によって達成することができることを見出し、

【0010】

【化2】



(1)

10

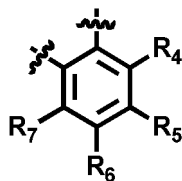
【0011】

式中、

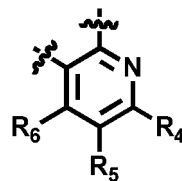
環A及び環Bは、それぞれ独立して、以下の式2-1～2-3のうちのいずれか1つを表し、

【0012】

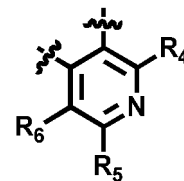
【化3】



(2-1)



(2-2)



(2-3)

20

【0013】

X及びYは、それぞれ独立して、-CR₈-または-N-を表すが、ただし、X及びYの両方が同時に-CR₈-にはならないことを条件とし、

30

R₁～R₈は、それぞれ独立して、水素、重水素、ハロゲン、シアノ、置換もしくは非置換の(C1-C30)アルキル、置換もしくは非置換の(C6-C30)アリール、置換もしくは非置換の3～30員ヘテロアリール、置換もしくは非置換の(C3-C30)シクロアルキル、置換もしくは非置換の(C1-C30)アルコキシ、置換もしくは非置換のトリ(C1-C30)アルキルシリル、置換もしくは非置換のジ(C1-C30)アルキル(C6-C30)アリールシリル、置換もしくは非置換の(C1-C30)アルキルジ(C6-C30)アリールシリル、置換もしくは非置換のトリ(C6-C30)アリールシリル、置換もしくは非置換のモノもしくはジ(C1-C30)アルキルアミノ、置換もしくは非置換のモノもしくはジ(C6-C30)アリールアミノ、または置換もしくは非置換の(C1-C30)アルキル(C6-C30)アリールアミノを表すが、あるいは、隣接する置換基(複数可)と連結して、窒素、酸素、及び硫黄から選択される少なくとも1個のヘテロ原子で炭素原子(複数可)が置換され得る、置換もしくは非置換の(C3-C30)単環式もしくは多環式の脂環式環または芳香族環を形成してもよく、

40

ヘテロアリールは、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む。

【発明の効果】

【0014】

本開示の有機電界発光化合物は、良好な色純度、溶解性、及び熱安定性を有する。本開示の有機電界発光化合物を含むことによって、低駆動電圧、優れた電流及び電力効率、な

50

らびに著しく改善された寿命を示す有機電界発光デバイスが提供され得る。

【発明を実施するための形態】

【0015】

以降、本開示が詳細に記載される。しかしながら、以下の記載は本発明の説明を目的とするものであり、決して本発明の範囲の制限を目的とするものではない。

【0016】

本開示は、上記の式1によって表される有機電界発光化合物、有機電界発光化合物を含む有機電界発光材料、及びその化合物を含む有機電界発光デバイスを提供する。

【0017】

式1の有機電界発光化合物の詳細は以下の通りである。

10

【0018】

本明細書において、「アルキル」には、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-ブチルなどが含まれる。「シクロアルキル」には、シクロプロピル、シクロブチル、シクロペンチル、シクロヘキシルなどが含まれる。「(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員の環骨格原子を有するシクロアルキルを示し、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などが含まれる。さらに、「アリール(アリーレン)」には、芳香族炭化水素から誘導される単環式環または縮合環ラジカルを示し、2つの環が1個の原子を通して結合されるスピロ化合物が含まれる。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、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、スピロビフルオレニルなどが含まれる。「3~30員ヘテロアリール(ヘテロアリーレン)」は、B、N、O、S、Si、及びP、好ましくはO、S、及びN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環骨格原子を有するアリール基を示し、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り得、部分的に飽和していてもよく、単結合(複数可)を介して少なくとも1つのヘテロアリールまたはアリール基をヘテロアリール基に連結させることによって形成されるものであり得、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、ビリジル、ピラジニル、ピリミジル、ピリダジニルなど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、シンノリニル、キナゾリニル、キノキサリニル、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、ジヒドロアクリジニルなどの縮合環型ヘテロアリールが含まれる。さらに、「ハロゲン」には、F、C

20

30

40

【0019】

本明細書において、「置換もしくは非置換の」という表現における「置換」とは、ある特定の官能基内の水素原子が、別の原子または基、すなわち置換基で置換されることを意味する。本開示において、 $R_1 \sim R_8$ における置換アルキル、置換アリール、置換ヘテロアリール、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、置換されたモノもしくはジアルキルアミノ、置換されたモノもしくはジアリールアミノ、及び置換アルキルアリールアミノの置換基は、それぞれ独立して、重水素、ハロゲン、シアノ、カルボキシ、ニトロ、ヒドロキシ、(C1-C30)アルキル、ハロ(C1-C30)ア

50

ルキル、(C 2 - C 3 0) アルケニル、(C 2 - C 3 0) アルキニル、(C 1 - C 3 0) 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、非置換もしくは(C 6 - C 3 0) アリール置換されている5 ~ 3 0 員ヘテロアリール、非置換もしくは5 ~ 3 0 員ヘテロアリールで置換されている(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、好ましくは(C 1 - C 1 0) アルキル、5 ~ 1 8 員ヘテロアリール、(C 6 - C 1 8) アリールで置換されている5 ~ 1 8 員ヘテロアリール、(C 6 - C 1 8) アリール、5 ~ 1 8 員ヘテロアリールで置換されている(C 6 - C 1 8) アリール、ジ(C 6 - C 1 2) アリールアミノ、及び(C 1 - C 1 0) アルキル(C 5 - C 1 8) アリールからなる群から選択される少なくとも1つであり得る。

10

【0020】

20

好ましくは、 $R_1 \sim R_8$ は、それぞれ独立して、水素、置換もしくは非置換の(C 6 - C 2 0) アリール、置換もしくは非置換の5 ~ 2 5 員ヘテロアリール、または置換もしくは非置換のジ(C 6 - C 2 0) アリールアミノを表すか、あるいは、隣接する置換基(複数可)と連結して、置換もしくは非置換の(C 3 - C 2 0) 単環式もしくは多環式の脂環式環または芳香族環を形成してもよい。より好ましくは、 $R_1 \sim R_7$ は、それぞれ独立して、水素；非置換または(C 1 - C 6) アルキル、5 ~ 2 0 員ヘテロアリール、もしくはジ(C 6 - C 1 2) アリールアミノで置換されている(C 6 - C 2 0) アリール；あるいは非置換または(C 1 - C 6) アルキル、(C 6 - C 1 2) アリール、もしくはジ(C 6 - C 1 2) アリールアミノで置換されている5 ~ 2 0 員ヘテロアリールを表すか、あるいは、隣接する置換基(複数可)と連結して、非置換もしくは(C 1 - C 6) アルキルで置換されている(C 3 - C 2 0) 単環式もしくは多環式の芳香族環を形成してもよいが、ただし、 $R_1 \sim R_7$ が同時に水素にはならないことを条件とし、 R_8 は、水素または(C 1 - C 6) アルキルを表し得る。

30

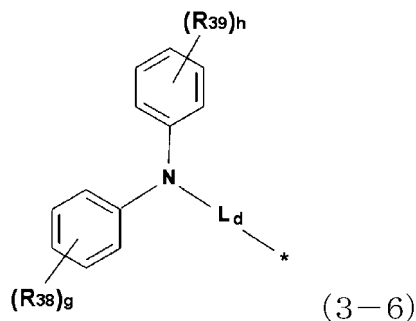
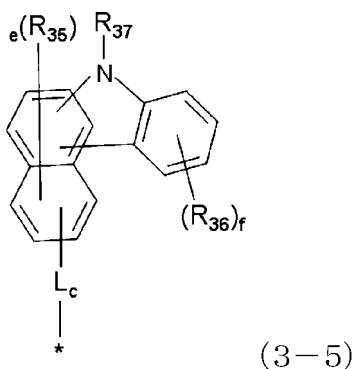
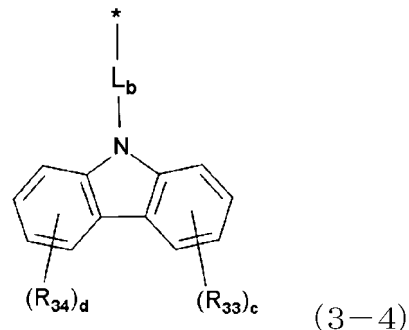
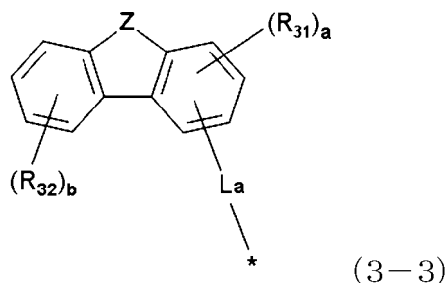
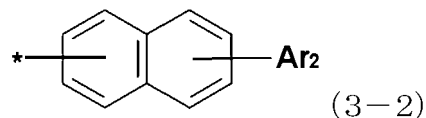
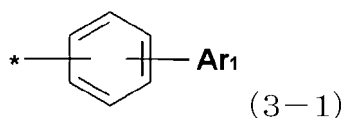
【0021】

具体的には、 $R_1 \sim R_7$ は、それぞれ独立して、水素、(C 1 - C 2 0) アルキル、または以下の式3 - 1 ~ 3 - 6のうちのいずれか1つを表し得るか、あるいは、隣接する置換基(複数可)と連結して、非置換もしくは(C 1 - C 6) アルキルで置換されているベンゼン環、または非置換もしくは(C 1 - C 6) アルキルで置換されているナフタレン環を形成してもよいが、ただし、 $R_1 \sim R_7$ が同時に水素にはならないことを条件とし、

【0022】

40

【化 4】



【 0 0 2 3 】

式中、

Ar₁ 及び Ar₂ は、それぞれ独立して、水素、置換もしくは非置換の (C₁ - C₃₀) アルキル、または置換もしくは非置換の (C₆ - C₃₀) アリールを表すが、ただし、Ar₁ 及び Ar₂ がフルオレニルではないことを条件とし、

L_a、L_b、L_c、及び L_d は、それぞれ独立して、単結合、置換もしくは非置換の (C₆ - C₃₀) アリーレン、または置換もしくは非置換の 3 ~ 30 員ヘテロアリーレンを表し、

Z は、- S -、- O -、- NR₁₁ -、または - CR₁₂R₁₃ - を表し、

R₁₁ ~ R₁₃ は、それぞれ独立して、水素、置換もしくは非置換の (C₁ - C₃₀) アルキル、置換もしくは非置換の (C₆ - C₃₀) アリール、置換もしくは非置換の 3 ~ 30 員ヘテロアリール、置換もしくは非置換の (C₃ - C₃₀) シクロアルキル、または置換もしくは非置換の 3 ~ 7 員ヘテロシクロアルキルを表すか、あるいは、隣接する置換基 (複数可) と連結して、置換もしくは非置換の 3 ~ 30 員単環式もしくは多環式の脂環式環または芳香族環を形成してもよく、

R₃₁ ~ R₃₉ は、それぞれ独立して、水素、重水素、ハロゲン、シアノ、置換もしくは非置換の (C₁ - C₃₀) アルキル、置換もしくは非置換の (C₃ - C₃₀) シクロアルキル、置換もしくは非置換の (C₃ - C₃₀) シクロアルケニル、置換もしくは非置換の 3 ~ 7 員ヘテロシクロアルキル、置換もしくは非置換の (C₆ - C₃₀) アリール、置換もしくは非置換の 3 ~ 30 員ヘテロアリール、置換もしくは非置換のトリ (C₁ - C₃₀) アルキルシリル、置換もしくは非置換のトリ (C₆ - C₃₀) アリールシリル、置換もしくは非置換のジ (C₁ - C₃₀) アルキル (C₆ - C₃₀) アリールシリル、置換もしくは非置換の (C₁ - C₃₀) アルキルジ (C₆ - C₃₀) アリールシリル、置換もしくは非置換のモノもしくはジ (C₁ - C₃₀) アルキルアミノ、置換もしくは非置換のモノもしくはジ (C₆ - C₃₀) アリールアミノ、または置換もしくは非置換の (C₁ - C

10

20

30

40

50

30) アルキル (C₆ - C₃₀) アリールアミノを表すか、あるいは、隣接する置換基 (複数可) と連結して、窒素、酸素、及び硫黄から選択される少なくとも 1 個のヘテロ原子で炭素原子 (複数可) が置換され得る、置換もしくは非置換の 3 ~ 30 員単環式もしくは多環式の脂環式環または芳香族環を形成してもよく、

ヘテロアリール (ヘテロアリーレン) 及びヘテロシクロアルキルは、それぞれ独立して、窒素、酸素、及び硫黄から選択される少なくとも 1 個のヘテロ原子を含有し、

a は、1 ~ 3 の整数を表し、

b ~ d、及び f は、それぞれ独立して、1 ~ 4 の整数を表し、

e、g、及び h は、それぞれ独立して、1 ~ 5 の整数を表し、

a、b、c、d、e、f、g、または h が 2 以上の整数である場合、R₃₁、R₃₂、R₃₃、R₃₄、R₃₅、R₃₆、R₃₇、R₃₈、または R₃₉ のそれぞれは同じかまたは異なってもよい。

【0024】

具体的には、Ar₁ 及び Ar₂ は、それぞれ独立して、水素、置換もしくは非置換の (C₁ - C₂₀) アルキル、置換もしくは非置換のフェニル、置換もしくは非置換のビフェニル、置換もしくは非置換のナフチル、置換もしくは非置換のアントラセニル、置換もしくは非置換のフェナントレニル、置換もしくは非置換のクリセニル、置換もしくは非置換のテトラセニル、置換もしくは非置換のピレニル、置換もしくは非置換のトリフェニレニル、または置換もしくは非置換のフルオランテニルを表し得る。

【0025】

具体的には、L_a ~ L_d は、それぞれ独立して、単結合、または置換もしくは非置換の (C₆ - C₁₈) アリーレンを表し得る。より具体的には、L_a ~ L_d は、それぞれ独立して、単結合、置換もしくは非置換のフェニレン、置換もしくは非置換のビフェニレン、または置換もしくは非置換のナフチレンを表し得る。

【0026】

具体的には、Z は、-NR₁₁- を表し得る。

【0027】

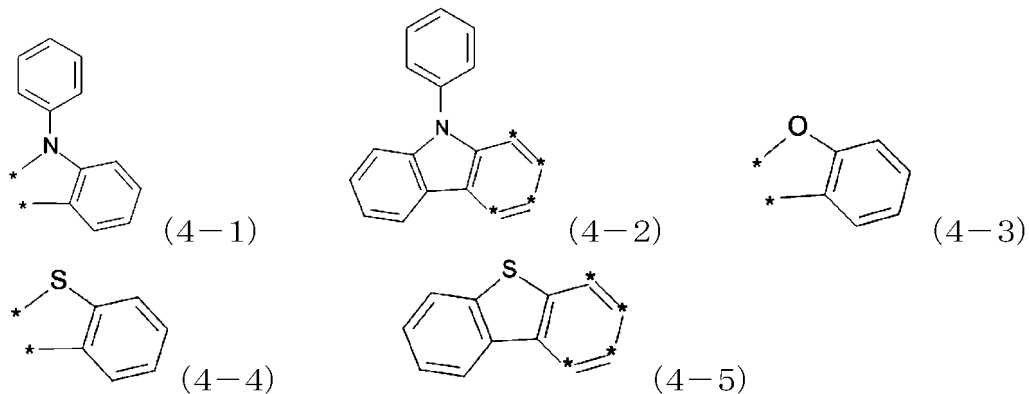
具体的には、R₁₁ ~ R₁₃ は、それぞれ独立して、水素、置換もしくは非置換の (C₁ - C₁₀) アルキル、または置換もしくは非置換の (C₅ - C₁₈) アリールを表し得るか、あるいは、隣接する置換基 (複数可) と連結して、置換もしくは非置換の 3 ~ 30 員単環式もしくは多環式の芳香族環を形成してもよい。より具体的には、R₁₁ ~ R₁₃ は、それぞれ独立して、水素、非置換 (C₁ - C₆) アルキル、置換もしくは非置換のフェニル、置換もしくは非置換のビフェニル、または置換もしくは非置換のナフチルを表し得る。

【0028】

具体的には、R₃₁ ~ R₃₉ は、それぞれ独立して、水素、置換もしくは非置換の (C₁ - C₁₀) アルキル、置換もしくは非置換の (C₆ - C₁₈) アリール、または置換もしくは非置換の 5 ~ 18 員ヘテロアリールを表し得るか、あるいは、隣接する置換基 (複数可) と連結して、窒素、酸素、及び硫黄から選択される 3 個のヘテロ原子 (複数可) で炭素原子 (複数可) が置換され得る、置換もしくは非置換の 5 ~ 18 員単環式もしくは多環式の脂環式環または芳香族環を形成してもよい。より具体的には、R₃₁ ~ R₃₉ は、それぞれ独立して、水素、置換もしくは非置換のフェニル、置換もしくは非置換のビフェニル、置換もしくは非置換のナフチル、置換もしくは非置換のカルバゾリル、置換もしくは非置換のジベンゾフラニル、または置換もしくは非置換のジベンゾチオフェニルを表すか、あるいは、隣接する置換基 (複数可) と連結して、ベンゼン環または以下の式 4 - 1 ~ 4 - 5 のうちのいずれか 1 つを形成してもよく、

【0029】

【化 5】



10

【0030】

式中、*は、結合部位を表す。

【0031】

本開示の一実施形態に従って、X及びYは、それぞれ独立して、 $-CR_8-$ または $-N-$ を表し得るが、ただし、X及びYの両方が同時に $-CR_8-$ にはならないことを条件とし、環A及び環Bは、それぞれ独立して、式2-1~2-3のうちのいずれか1つを表し得、 $R_1 \sim R_8$ は、それぞれ独立して、水素、置換もしくは非置換の(C6-C20)アリール、置換もしくは非置換の5~25員ヘテロアリール、または置換もしくは非置換のジ(C6-C20)アリールアミノを表し得るか、あるいは、隣接する置換基(複数可)と連結して、置換もしくは非置換の(C3-C20)単環式もしくは多環式の脂環式環または芳香族環を形成してもよい。

20

【0032】

本開示の別の実施形態に従って、X及びYは、それぞれ独立して、 $-CR_8-$ または $-N-$ を表し得るが、ただし、X及びYの両方が同時に $-CR_8-$ にはならないことを条件とし、環A及び環Bは、それぞれ独立して、式2-1~2-3のいずれか1つを表し得、 $R_1 \sim R_7$ は、それぞれ独立して、水素；非置換または(C1-C6)アルキル、5~20員ヘテロアリール、もしくはジ(C6-C12)アリールアミノで置換されている(C6-C20)アリール；あるいは非置換または(C1-C6)アルキル、(C6-C12)アリール、もしくはジ(C6-C12)アリールアミノで置換されている5~20員ヘテロアリールを表すか、あるいは、隣接する置換基(複数可)と連結して、非置換もしくは(C1-C6)アルキルで置換されている(C3-C20)単環式もしくは多環式の芳香族環を形成してもよいが、ただし、 $R_1 \sim R_7$ が同時に水素にはならないことを条件とし、 R_8 は、水素または(C1-C6)アルキルを表し得る。

30

【0033】

本開示の別の実施形態に従って、 $R_1 \sim R_7$ は、それぞれ独立して、水素、(C1-C20)アルキル、または以下の式3-1~3-6のうちのいずれか1つを表し得るか、あるいは、隣接する置換基(複数可)と連結して、非置換もしくは(C1-C6)アルキルで置換されているベンゼン環、または非置換もしくは(C1-C6)アルキルで置換されているナフタレン環を形成してもよいが、ただし、 $R_1 \sim R_7$ が同時に水素にはならないことを条件とし、 R_8 は、水素または(C1-C6)アルキルを表し得る。

40

【0034】

本開示の別の実施形態に従って、 $R_1 \sim R_7$ のうちの少なくとも1つは、式3-3~3-5から選択され得、式3-3のZは、 $-NR_{11}-$ を表し得る。

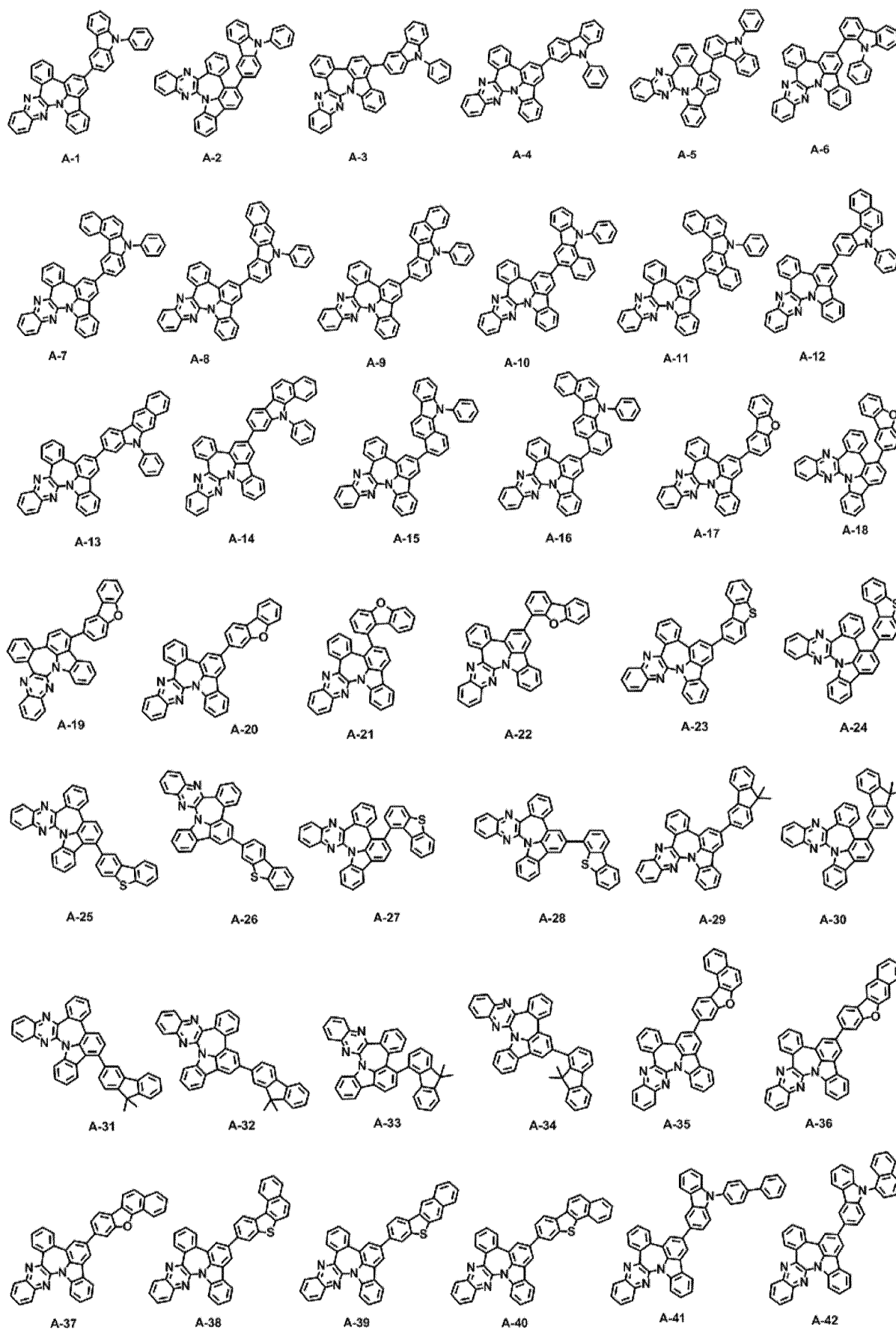
【0035】

より具体的には、式1の有機電界発光化合物には、以下が含まれるが、これらに限定されない。

【0036】

50

【化 6 - 1】



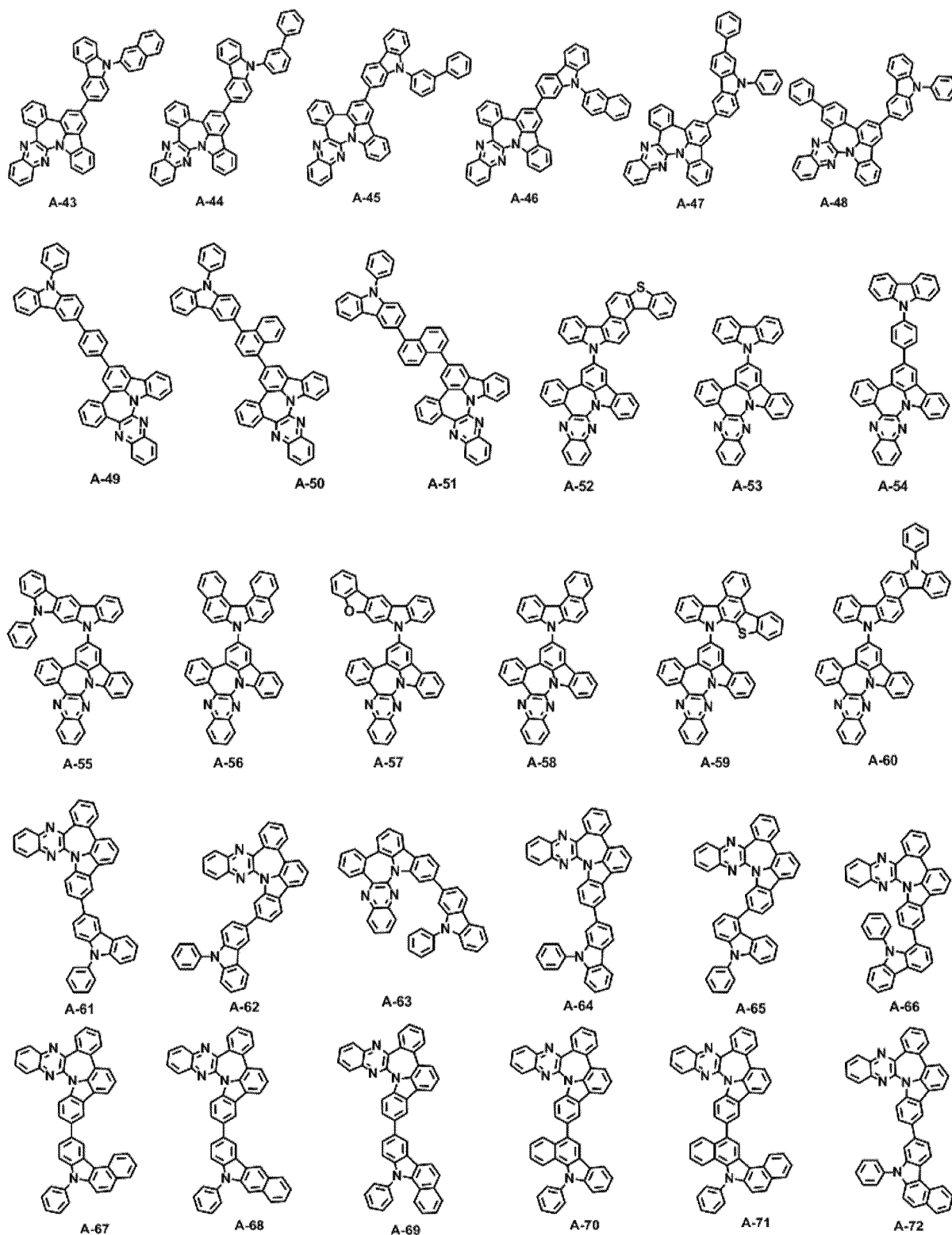
10

20

30

40

【化 6 - 2】



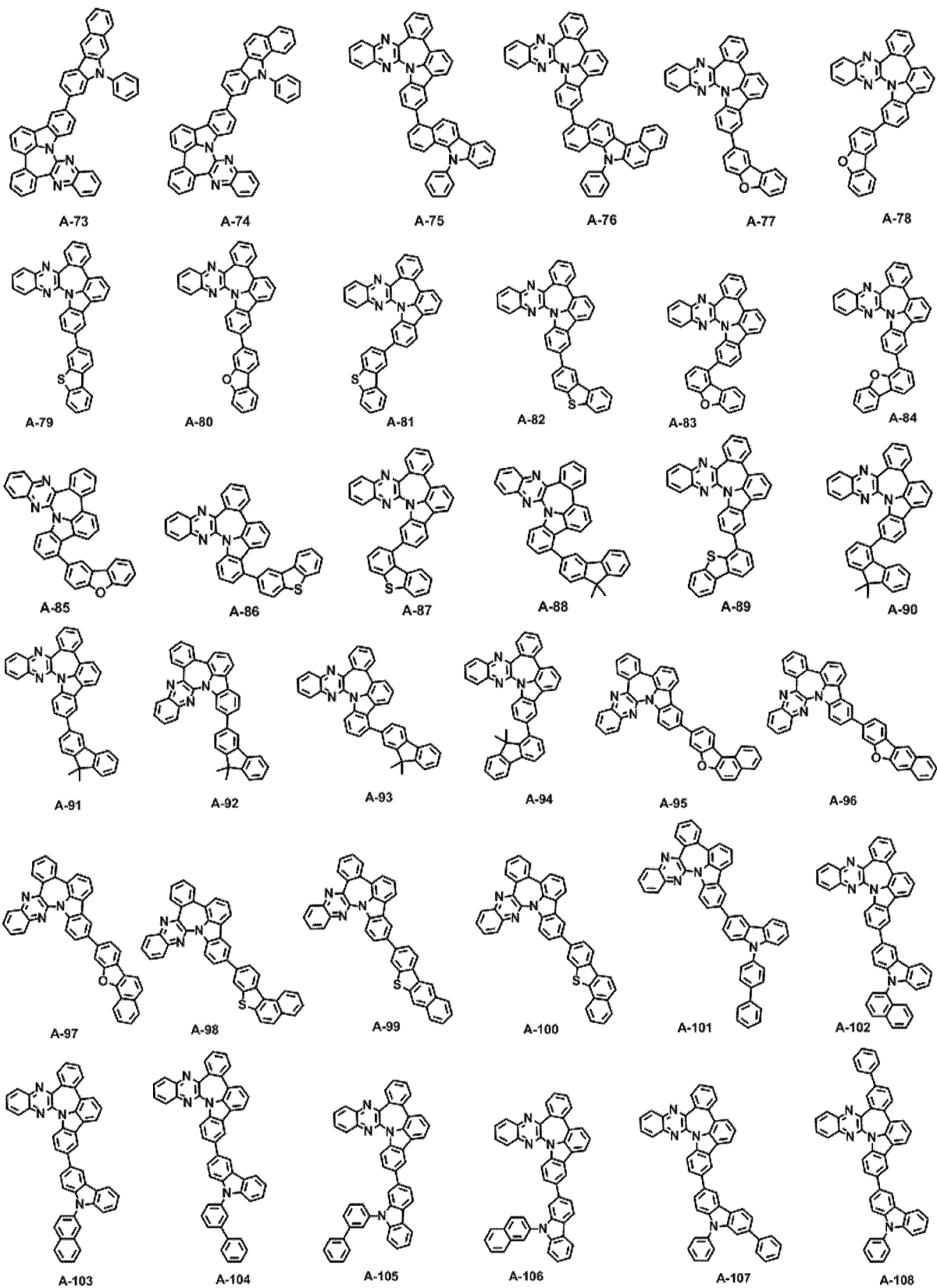
10

20

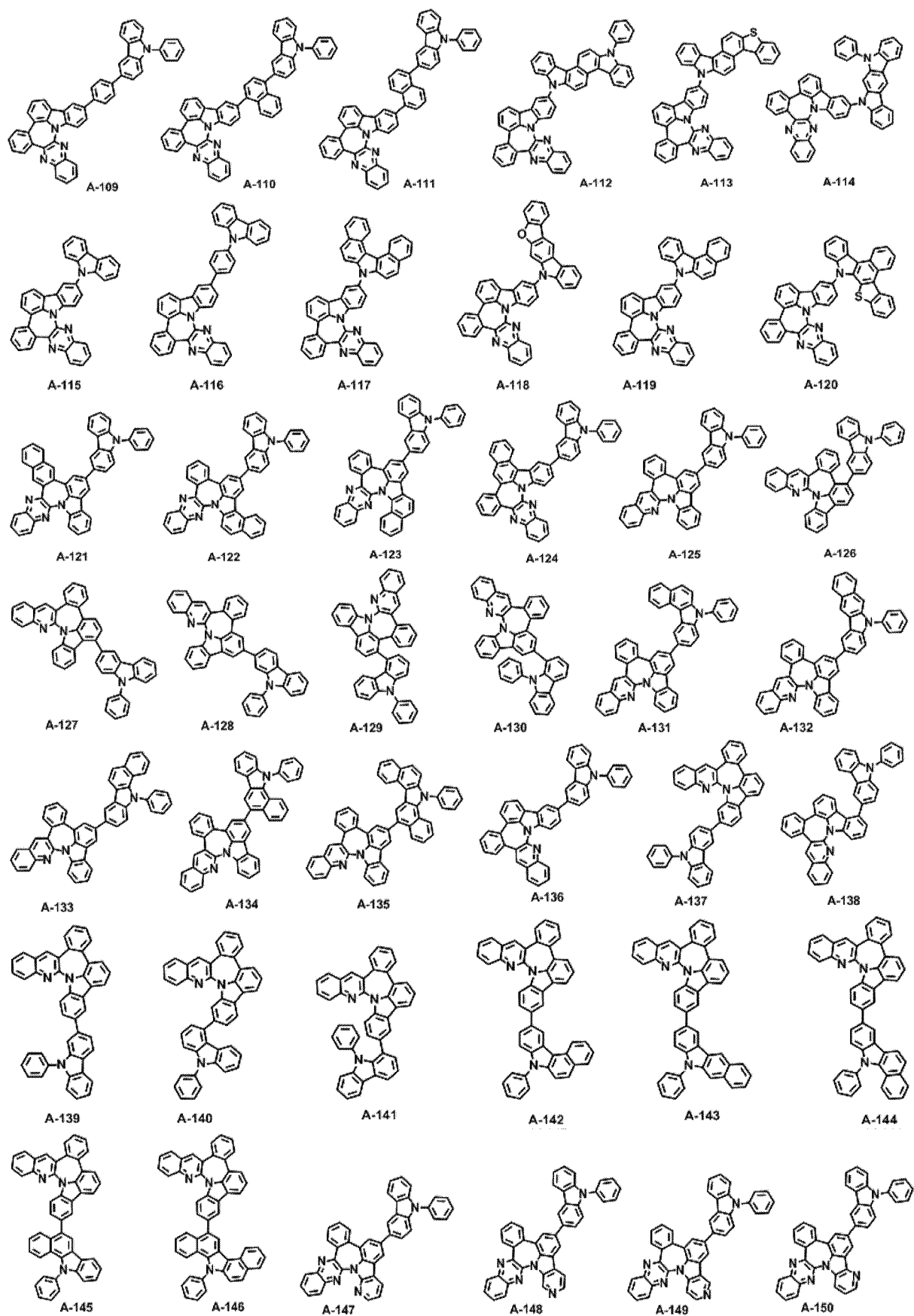
30

40

【化 6 - 3】



【化 6 - 4】



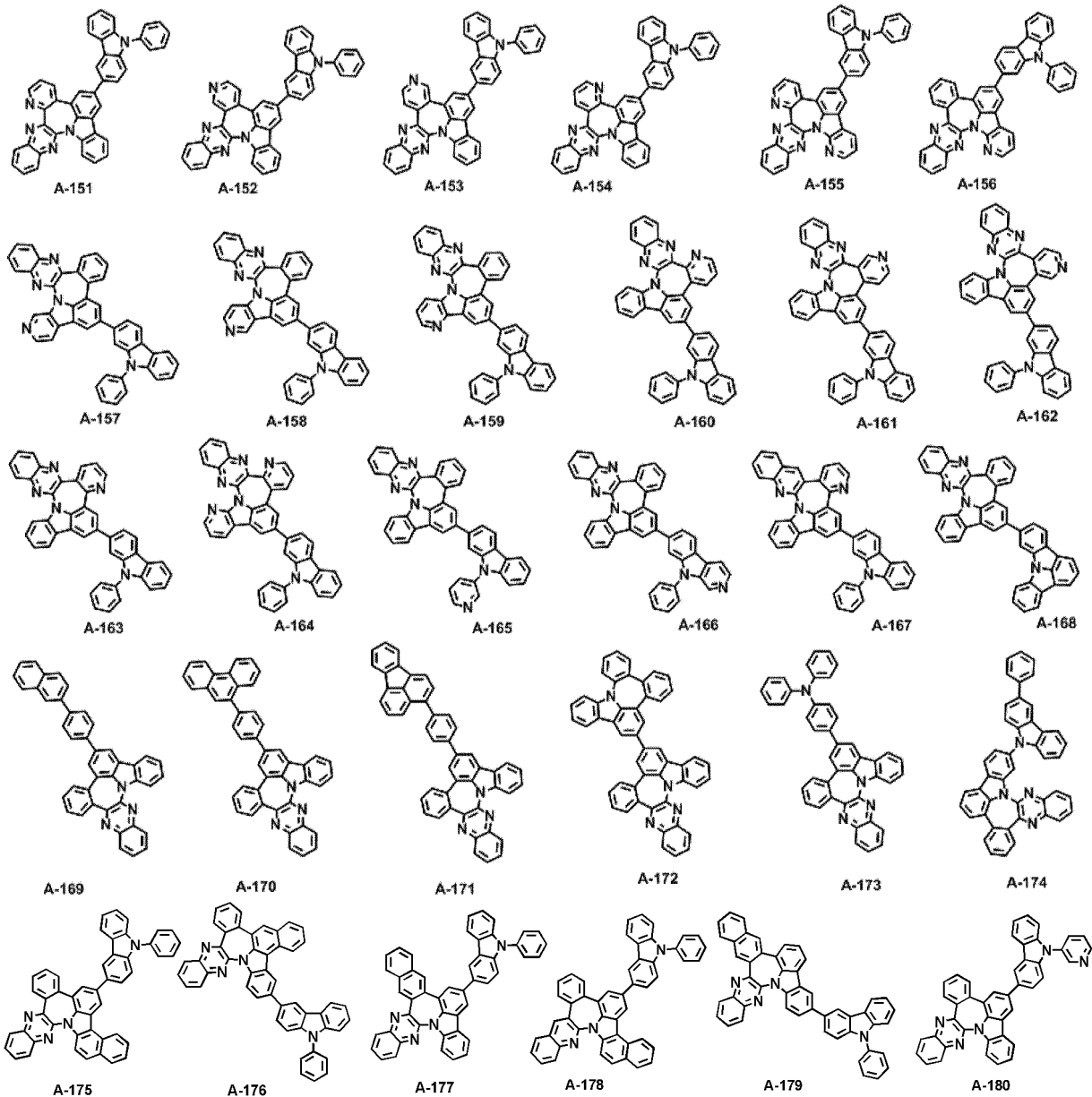
10

20

30

40

【化 6 - 5】



10

20

30

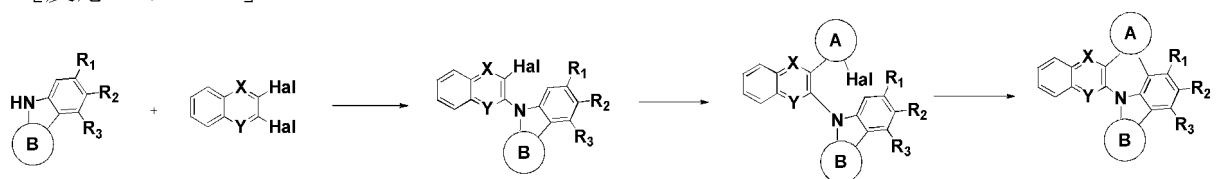
【 0 0 4 1】

本開示の有機電界発光化合物は、当業者に既知の合成方法によって調製され得る。例えば、以下の反応スキーム 1 に従って調製され得る。

【 0 0 4 2】

【化 7】

[反応スキーム1]



40

【 0 0 4 3】

式中、 $R_1 \sim R_3$ 、環 A、環 B、X、及び Y は、上記の式 1 において記載される通りであり、Hal はハロゲンを表す。

【 0 0 4 4】

50

本開示は、式 1 の有機電界発光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を提供する。

【0045】

材料は、本開示の有機電界発光化合物からなり得る。別途、材料は、有機電界発光材料のために含まれてきた従来の化合物（複数可）をさらに含んでもよい。有機電界発光材料は、好ましくはホスト材料、より好ましくはリン光ホスト材料、さらにより好ましくはリン光性赤色発光ホスト材料であり得る。有機電界発光材料がホスト材料として使用されるとき、式 1 の化合物に加えて、以下の第 2 のホスト材料をさらに含むことができる。

【0046】

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 の電極との間に配置される少なくとも 1 つの有機層を備え得る。有機層は、式 1 の少なくとも 1 つの有機電界発光化合物を含み得る。

10

【0047】

第 1 の電極及び第 2 の電極のうちの 1 つは陽極であり得、その他は陰極であり得る。有機層は、発光層を備え得、正孔注入層、正孔輸送層、電子輸送層、電子注入層、中間層、正孔阻止層、電子緩衝層、及び電子阻止層から選択される少なくとも 1 つの層をさらに備え得る。

【0048】

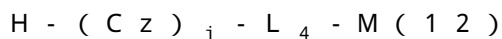
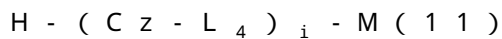
本開示の式 1 の有機電界発光化合物は発光層内に含まれ得る。発光層内で使用されるとき、本開示の有機電界発光化合物は、ホスト材料、好ましくはリン光ホスト材料、より好ましくはリン光性赤色発光ホスト材料として含まれ得る。好ましくは、発光層は、少なくとも 1 つ以上のドーパントと、必要であれば、本開示の式 1 の化合物以外の第 2 のホスト材料とをさらに含み得る。第 1 のホスト材料と第 2 のホスト材料との間の重量比は、1 : 99 ~ 99 : 1 の範囲内である。

20

【0049】

第 2 のホスト材料は、既知のリン光ホストのいずれかからである。発光効率を考慮して、式 11 ~ 15 の化合物からなる群から選択される材料は、好ましくは第 2 のホスト材料である。

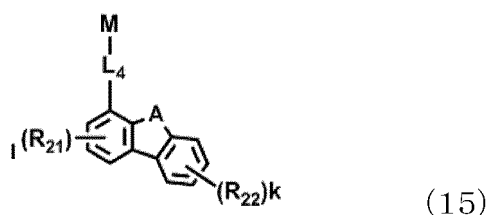
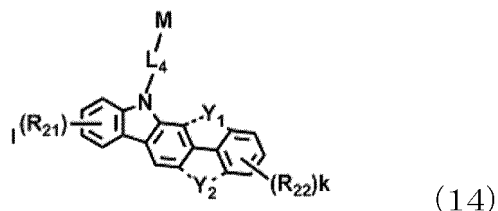
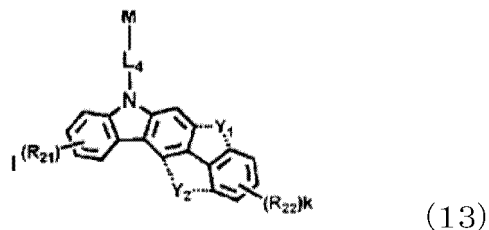
【0050】



30

【0051】

【化 8】



10

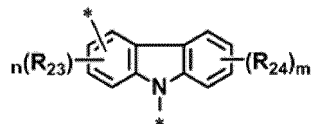
20

【 0 0 5 2 】

式中、C_zは、以下の構造を表す。

【 0 0 5 3 】

【化 9】



30

【 0 0 5 4 】

Aは、-O-または-S-を表し、

R₂₁ ~ R₂₄は、それぞれ独立して、水素、重水素、ハロゲン、置換もしくは非置換の(C₁ - C₃₀)アルキル、置換もしくは非置換の(C₆ - C₃₀)アリール、置換もしくは非置換の5 ~ 30員ヘテロアリール、または-SiR₂₅R₂₆R₂₇を表し、R₂₅ ~ R₂₇は、それぞれ独立して、置換もしくは非置換の(C₁ - C₃₀)アルキル、または置換もしくは非置換の(C₆ - C₃₀)アリールを表し、L₄は、単結合、置換もしくは非置換の(C₆ - C₃₀)アリーレン、または置換もしくは非置換の5 ~ 30員ヘテロアリーレンを表し、Mは、置換もしくは非置換の(C₆ - C₃₀)アリール、または置換もしくは非置換の5 ~ 30員ヘテロアリールを表し、Y₁及びY₂は、それぞれ独立して、-O-、-S-、-N(R₄₁)-、または-C(R₄₂)(R₄₃)-を表し、Y₁及びY₂は、同時に存在することはない、R₄₁ ~ R₄₃は、それぞれ独立して、置換もしくは非置換の(C₁ - C₃₀)アルキル、置換もしくは非置換の(C₆ - C₃₀)アリール、または置換もしくは非置換の5 ~ 30員ヘテロアリールを表し、R₄₂及びR₄₃は同じかまたは異なってもよく、i及びjは、それぞれ独立して、1 ~ 3の整数を表し、k、l、m、及びnは、それぞれ独立して、0 ~ 4の整数を表し、i、j、k、l、m、またはnが2以上の整数である場合、(C_z - L₄)、(C_z)、R₂₁、R₂₂、R₂₃、またはR₂₄のそれぞれは同じか異なってもよい。

40

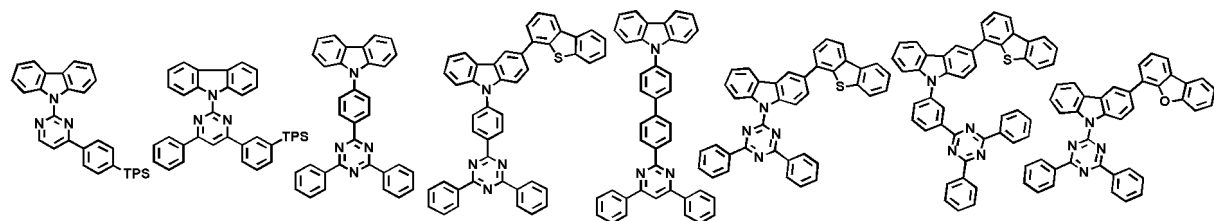
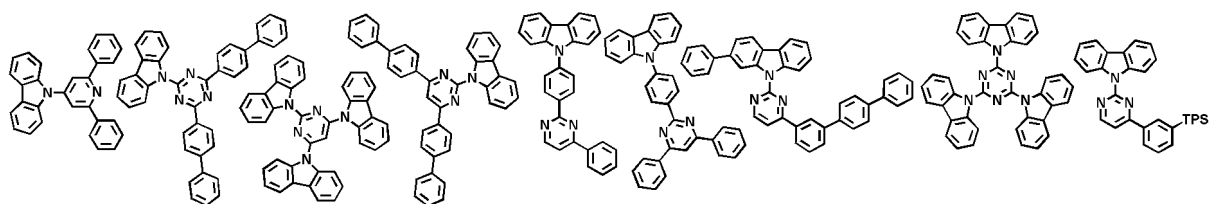
【 0 0 5 5 】

具体的には、好ましい第2のホスト材料には、以下が含まれるが、これらに限定されない。

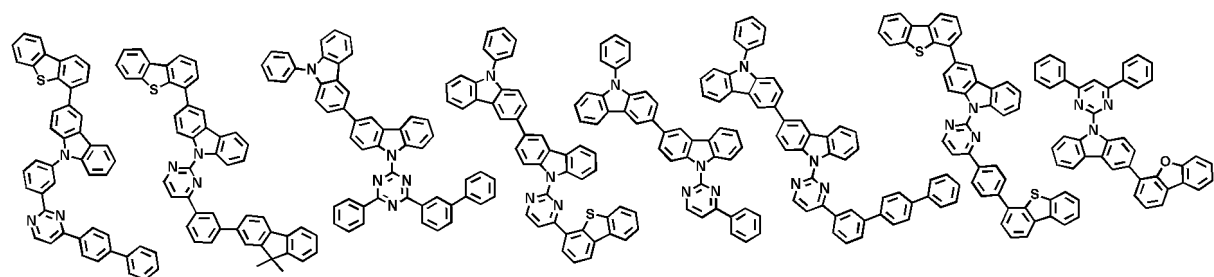
50

【 0 0 5 6 】

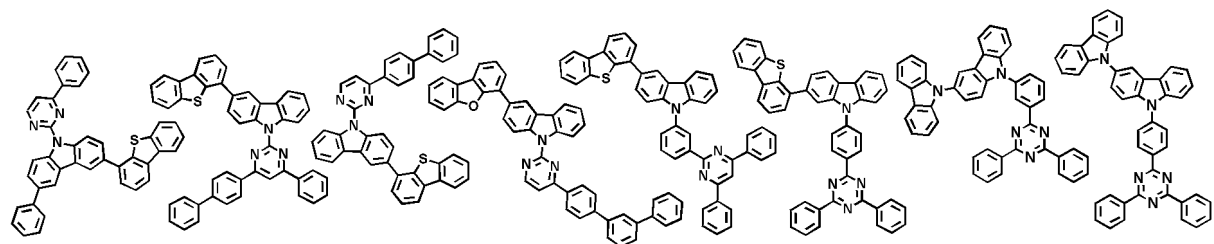
【 化 1 0 - 1 】



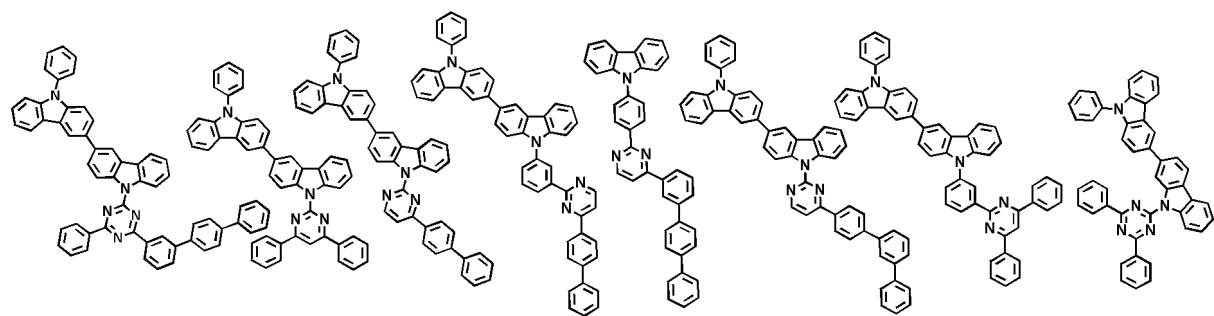
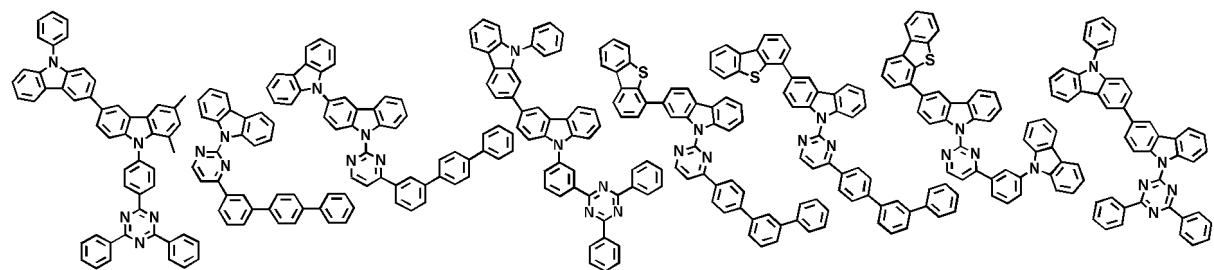
10



20



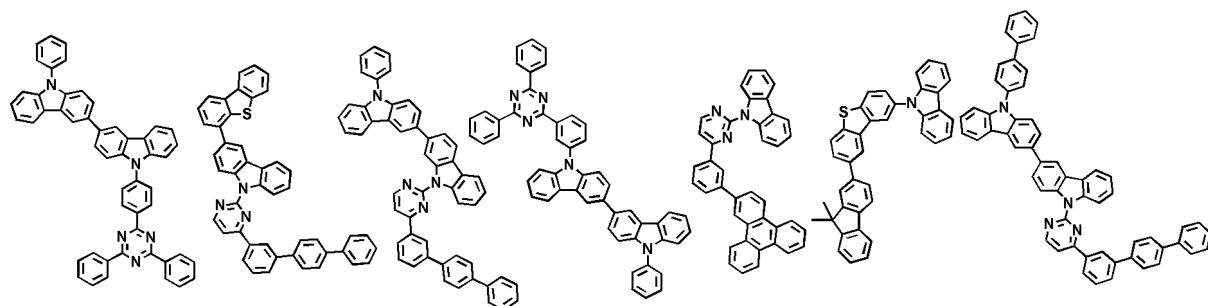
30



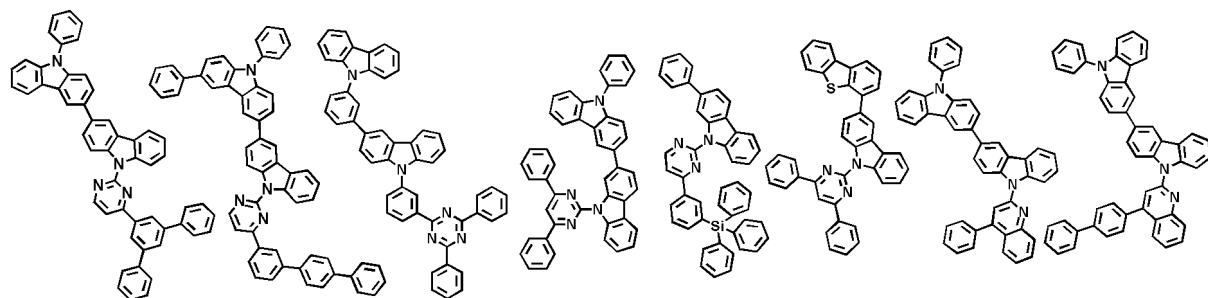
40

【 0 0 5 7 】

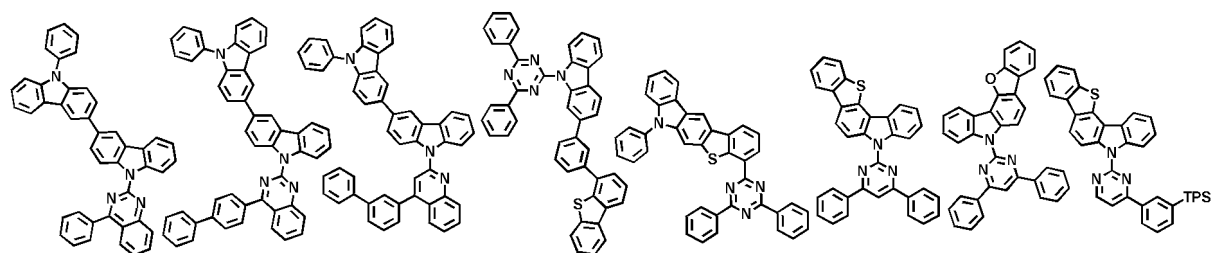
【化 1 0 - 2】



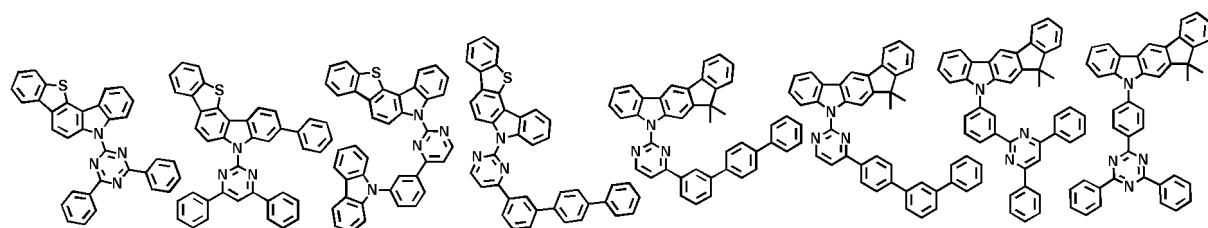
10



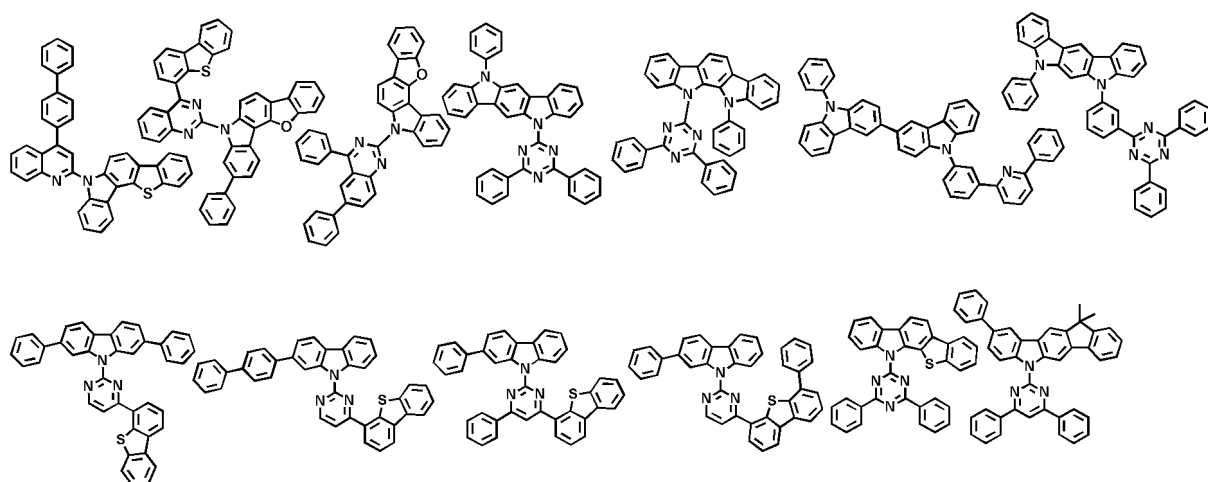
20



30

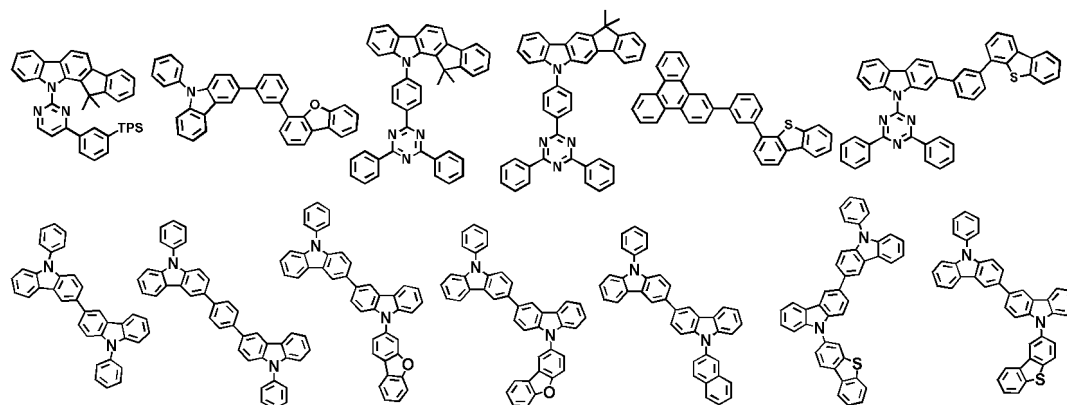


40



【 0 0 5 8 】

【化 1 0 - 3】



10

【 0 0 5 9】

(式中、TPS は、トリフェニルシリル基を表す。)

【 0 0 6 0】

本開示の有機電界発光デバイス内に含まれるべきドーパントは、好ましくは、少なくとも1つのリン光性ドーパントである。本開示の有機電界発光デバイスのためのリン光性ドーパント材料は限定されないが、好ましくは、イリジウム (Ir)、オスミウム (Os)、銅 (Cu)、または白金 (Pt) のメタル化錯体化合物から選択され、より好ましくは、イリジウム (Ir)、オスミウム (Os)、銅 (Cu)、または白金 (Pt) のオルトメタル化錯体化合物、さらにより好ましくは、オルトメタル化イリジウム錯体化合物から選択され得る。

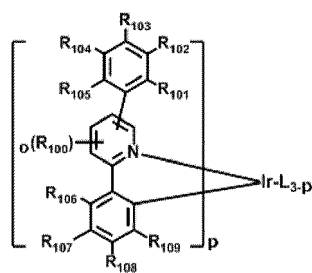
20

【 0 0 6 1】

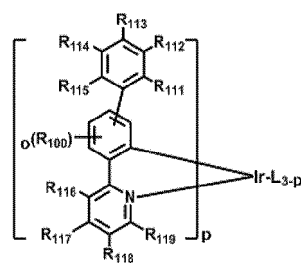
好ましくは、本開示の有機電界発光デバイス内に含まれるべきドーパントは、以下の式101～103によって表される化合物からなる群から選択され得、

【 0 0 6 2】

【化 1 1】

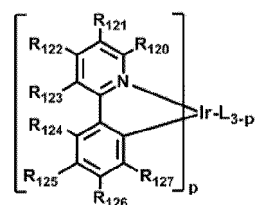


(101)



(102)

30



(103)

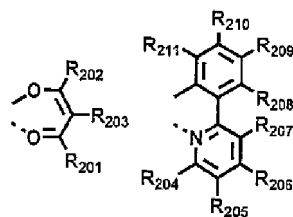
40

【 0 0 6 3】

式中、L は、以下の構造から選択される。

【 0 0 6 4】

【化 1 2】



【0065】

R_{100} は、水素、置換もしくは非置換の (C1 - C30) アルキル、または置換もしくは非置換の (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、それぞれ独立して、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ている (C1 - C30) アルキル、置換もしくは非置換の (C3 - C30) シクロアルキル、置換もしくは非置換の (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、隣接する置換基 (複数可) と連結して、例えば、非置換もしくはアルキルで置換されているフルオレン、非置換もしくはアルキルで置換されているジベンゾチオフェン、または非置換もしくはアルキルで置換されているジベンゾフランである置換もしくは非置換の縮合環を形成してもよく、 $R_{120} \sim R_{123}$ は、隣接する置換基 (複数可) と連結して、例えば、非置換もしくはアルキルまたはアリールで置換されているキノリンである置換もしくは非置換の縮合環を形成してもよく、 $R_{124} \sim R_{127}$ は、それぞれ独立して、水素、重水素、ハロゲン、置換もしくは非置換の (C1 - C30) アルキル、または置換もしくは非置換の (C6 - C30) アリールを表し、 $R_{124} \sim R_{127}$ は、隣接する置換基 (複数可) と連結して、例えば、非置換もしくはアルキルで置換されているフルオレン、非置換もしくはアルキルで置換されているジベンゾチオフェン、または非置換もしくはアルキルで置換されているジベンゾフランである置換もしくは非置換の縮合環を形成してもよく、 $R_{201} \sim R_{211}$ は、それぞれ独立して、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ている (C1 - C30) アルキル、置換もしくは非置換の (C3 - C30) シクロアルキル、または置換もしくは非置換の (C6 - C30) アリールを表し、 $R_{208} \sim R_{211}$ は、隣接する置換基 (複数可) と連結して、例えば、非置換もしくはアルキルで置換されているフルオレン、非置換もしくはアルキルで置換されているジベンゾチオフェン、または非置換もしくはアルキルで置換されているジベンゾフランである置換もしくは非置換の縮合環を形成してもよく、 o は、1 ~ 3 の整数を表し、 o が 2 以上の整数である場合、 R_{100} のそれぞれは同じかまたは異なってもよく、 p は、1 ~ 3 の整数を表す。

10

20

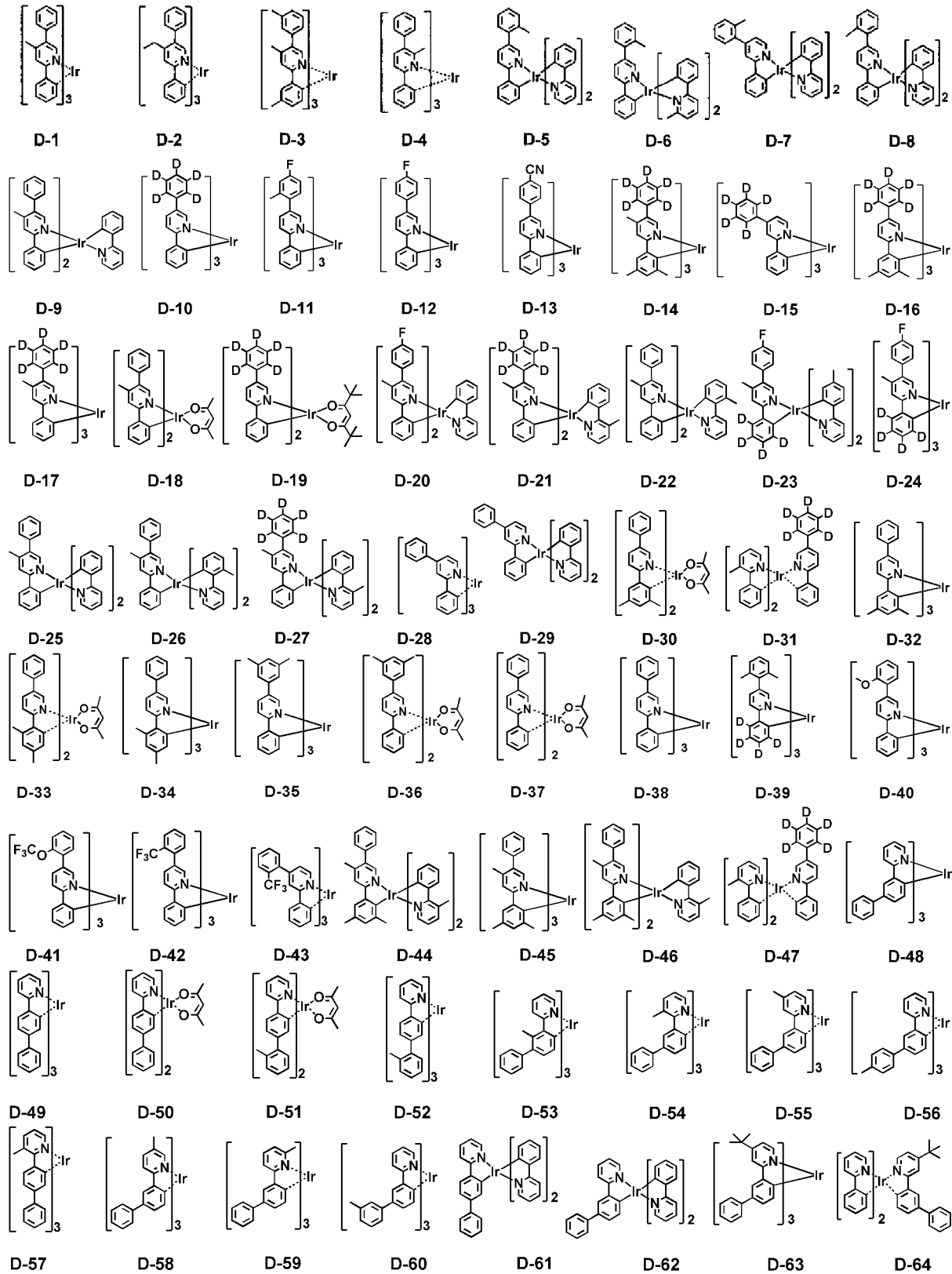
30

【0066】

具体的には、ドーパント材料には、以下が含まれるが、これらに限定されない。

【0067】

【化 1 3 - 1】



10

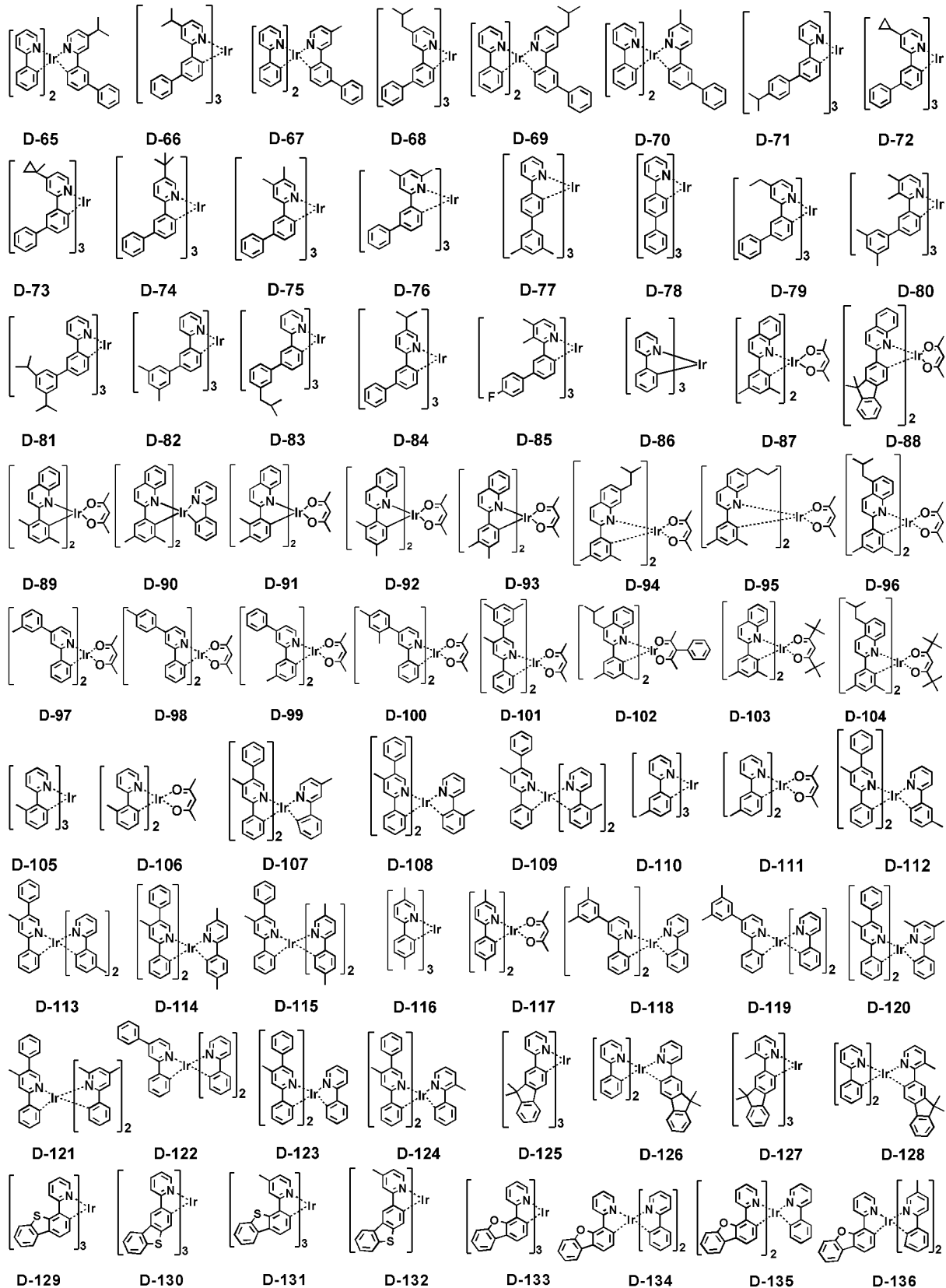
20

30

40

【 0 0 6 8 】

【化 1 3 - 2】



10

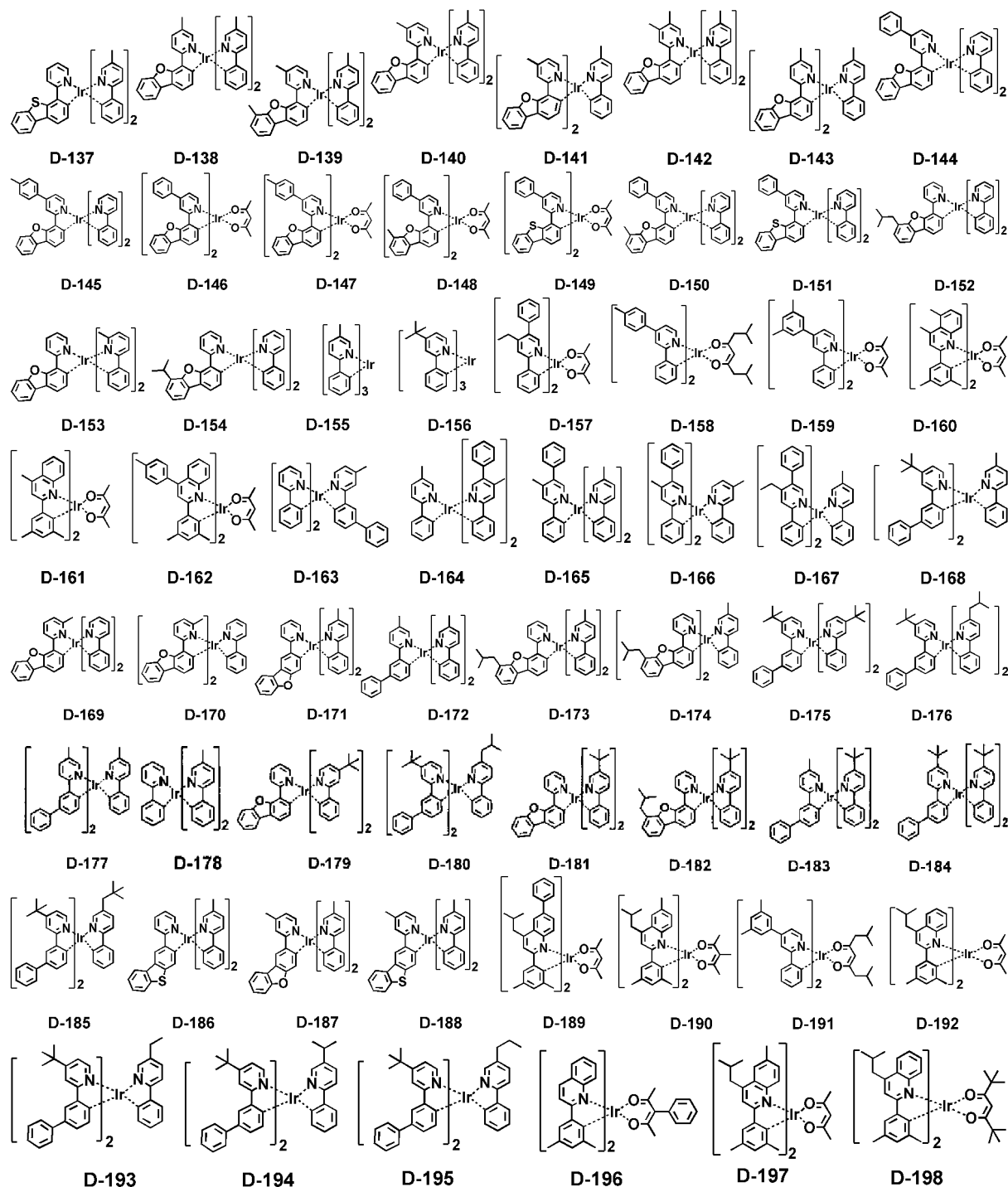
20

30

40

【 0 0 6 9 】

【化 1 3 - 3】



10

20

30

40

【0070】

本開示の追加の態様に従って、有機電界発光デバイスの調製のための混合物または組成物が提供される。混合物または組成物は、本開示の化合物を含む。混合物または組成物は、有機電界発光デバイスの発光層または正孔輸送層を調製するために使用され得る。有機電界発光デバイスの発光層を調製するための混合物または組成物は、リン光または蛍光発光層、具体的には、有機電界発光デバイスのリン光性赤色発光層を調製するための混合物または組成物であり得る。本開示の化合物が、有機電界発光デバイスの正孔輸送層を調製するための混合物または組成物内に含まれる場合、その化合物は、正孔輸送材料として含まれ得る。本開示の化合物が、有機電界発光デバイスの発光層を調製するための混合物または組成物内に含まれる場合、その化合物は、ホスト材料として含まれ得る。本開示の化

50

合物が、ホスト材料として含まれる場合、混合物または組成物は、第2のホスト材料をさらに含み得る。第1のホスト材料と第2のホスト材料との間の重量比は、1:99~99:1の範囲内である。

【0071】

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の電極との間に配置される少なくとも1つの有機層を備え得、有機層は、発光層を備え得、発光層は、本開示の有機電界発光デバイスのための混合物または組成物を含み得る。

【0072】

本開示の有機電界発光デバイスは、式1の有機電界発光化合物に加えて、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み得る。

10

【0073】

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族の金属、第2族の金属、第4周期の遷移金属、第5周期の遷移金属、ランタニド、及びd遷移元素の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、発光層及び電荷生成層をさらに備え得る。

【0074】

加えて、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、当該技術分野で既知の青色有機電界発光化合物、赤色有機電界発光化合物、または緑色有機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備えることによって、白色光を発し得る。必要であれば、本開示の有機電界発光デバイスは、黄色または橙色発光層をさらに備え得る。

20

【0075】

本開示の有機電界発光デバイスにおいて、好ましくは、少なくとも1つの層（以降、「表面層」）が、一方または両方の電極（複数可）の内面（複数可）上に配置され得、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。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、有機電界発光媒体層の陽極表面上に配置され、金属ハロゲン化物層または金属酸化物層が、好ましくは、電界発光媒体層の陰極表面上に配置される。そのような表面層は、有機電界発光デバイスの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 などを含み、金属ハロゲン化物は、 LiF 、 MgF_2 、 CaF_2 、希土類金属フッ化物などを含み、金属酸化物は、 Cs_2O 、 Li_2O 、 MgO 、 SrO 、 BaO 、 CaO などを含む。

30

【0076】

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的ドーパントとの混合領域、または正孔輸送化合物と酸化的ドーパントとの混合領域が、電極一対の少なくとも1つの表面上に配置され得る。この場合、電子輸送化合物はアニオンに還元され、したがって、電子を注入して混合領域から電界発光媒体へと輸送することがより容易になる。さらに、正孔輸送化合物はカチオンに酸化され、したがって、正孔を注入して混合領域から電界発光媒体へと輸送することがより容易になる。好ましくは、酸化的ドーパントは、様々なルイス酸及び受容体化合物を含み、還元的ドーパントは、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。2つ以上の発光層を有し、かつ白色光を発する有機電界発光デバイスを調製するために、還元的ドーパント層を電荷生成層として用いることができる。

40

【0077】

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、真空蒸発法、スパッタリング法、プラズマ法、及びイオンめっき法などの乾式フィルム形成法、またはインクジェット印刷法、ノズル印刷法、スロットコーティング法、スピンコーティング法、ディップコーティング法、及びフローコーティング法などの湿式フィルム形成法が使用され得る。

【0078】

50

湿式フィルム形成法を使用するとき、例えば、エタノール、クロロホルム、テトラヒドロフラン、ジオキサンなどのあらゆる好適な溶媒中に、各層を形成する材料を溶解または拡散することによって、薄いフィルムが形成され得る。各層を形成する材料が溶解または拡散され得る場合、及びフィルム形成能力において問題がない場合、溶媒はあらゆる溶媒になり得る。

【0079】

以降、本開示の有機電界発光化合物、化合物の調製法、及びデバイスの発光特性が、以下の実施例を参照にして詳細に説明される。

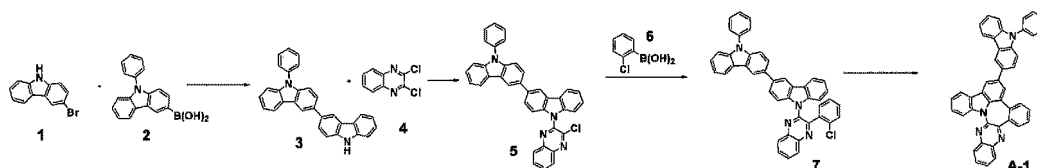
【0080】

実施例1：化合物A-1の調製

10

【0081】

【化14】



【0082】

1) 化合物3の調製

フラスコのトルエン、エタノール、及びH₂O中に、化合物1 (3-プロモ-9H-カルバゾール) (20 g、69.70 mmol)、化合物2 [(9-フェニル-9H-カルバゾール-3-イル)ボロン酸] (17.2 g、69.70 mmol)、Pd(PPh₃)₄ (2.4 g、2.10 mmol)、及びNa₂CO₃ (18.5 g、174.30 mmol)を溶解した後、混合物は、1日120 の還流下にあった。反応の完了後、混合物を、酢酸エチルを用いて抽出した。得られた有機層を乾燥させ、カラムクロマトグラフィーに供して化合物3 (12.8 g、収率：45%)を得た。

20

【0083】

2) 化合物5の調製

ジメチルホルムアミド (DMF) (200 mL) 中に、化合物3 (9'-フェニル-9H, 9'H-3, 3'-ピカルバゾール) (11.8 g、28.9 mmol) 及び化合物4 (7.5 g、37.60 mmol)を溶解した後、NaH (1.8 g、43.4 mmol、鉱物油中に60%)をそこに添加した。混合物を2.5時間室温で攪拌し、メタノールをそこに添加した。得られた固体を減圧下で濾過し、カラムクロマトグラフィーに供して化合物5 (9.7 g、収率：59%)を得た。

30

【0084】

3) 化合物7の調製

フラスコのトルエン、エタノール、及びH₂O中に、化合物5 [9-(3-クロロキノキサリン-2-イル)-9'-フェニル-9H, 9'H-3, 3'-ピカルバゾール] (18 g、31.5 mmol)、化合物6 (2-クロロフェニル)ボロン酸 (6 g、32.0 mmol)、Pd(PPh₃)₄ (1.83 g、1.6 mmol)、及びNa₂CO₃ (10 g、94 mmol)を溶解した後、混合物は1日120 の還流下にあった。反応の完了後、混合物を、酢酸エチルを用いて抽出した。得られた有機層を乾燥させ、カラムクロマトグラフィーに供して化合物7 (16 g、収率：78%)を得た。

40

【0085】

4) 化合物A-1の調製

化合物7 (15 g、23.2 mmol)、Pd(OAc)₂ (520 mg、1.2 mmol)、リガンド (トリシクロヘキシルホスホニウムテトラフルオロボラート) (853 mg、2.3 mmol)、Cs₂CO₃ (23 g、70 mmol)、及びキシレン (77 mL)の混合物を1.5時間還流下で攪拌した。室温へ冷却した後、蒸留水をそこに添加した。反応の完了後、混合物を、酢酸エチルを用いて抽出した。得られた有機層を乾燥さ

50

せ、カラムクロマトグラフィーに供して化合物 A - 1 (8 . 5 g、収率 : 5 8 %) を得た。

【 0 0 8 6 】

【 表 1 】

	分子量(MW)	UV	PL	融点(M. P.)
A-1	610.70	324nm	496nm	220°C

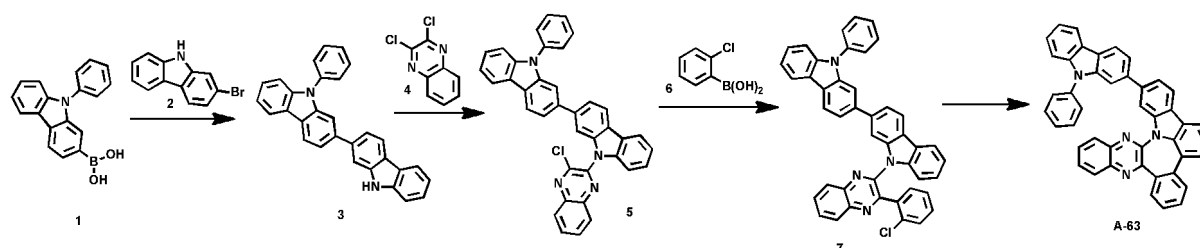
【 0 0 8 7 】

実施例 2 : 化合物 A - 6 3 の調製

10

【 0 0 8 8 】

【 化 1 5 】



20

【 0 0 8 9 】

1) 化合物 3 の調製

フラスコのトルエン、エタノール、及び H_2O 中に、化合物 1 (9 - フェニル - 9 H - カルバゾール - 2 - イル) ボロン酸 (5 0 g、1 7 4 . 2 m m o l)、化合物 2 (2 - ブロモ - 9 H - カルバゾール) (4 3 g、1 7 4 . 2 m m o l)、 $Pd(PPh_3)_4$ (1 0 g、8 . 7 m m o l)、及び Na_2CO_3 (5 4 g、5 2 2 m m o l) を溶解した後、混合物は、1 日 1 2 0 の還流下にあった。反応の完了後、混合物を、酢酸エチルを用いて抽出した。得られた有機層を乾燥させ、カラムクロマトグラフィーに供して化合物 3 (4 0 g、収率 : 5 6 %) を得た。

30

【 0 0 9 0 】

2) 化合物 5 の調製

D M F (2 0 0 m L) 中に、化合物 3 (9 - フェニル - 9 H , 9 ' H - 2 , 2 ' - ビカルバゾール) (4 0 g、9 8 m m o l) 及び化合物 4 (2 3 g、1 1 7 m m o l) を溶解した後、 NaH (7 . 8 g、1 9 6 m m o l、鉱物油中に 6 0 %) をそこに添加した。混合物を 2 . 5 時間室温で攪拌し、メタノールをそこに添加した。得られた固体を減圧下で濾過し、カラムクロマトグラフィーに供して化合物 5 (3 0 g、収率 : 5 4 %) を得た。

【 0 0 9 1 】

3) 化合物 7 の調製

フラスコのトルエン、エタノール、及び H_2O 中に、化合物 5 [9 - (3 クロロキノキサリン - 2 - イル) - 9 ' - フェニル - 9 H , 9 ' H - 2 , 2 ' - ビカルバゾール] (3 0 g、5 3 m m o l)、化合物 6 (2 - クロロフェニル) ボロン酸 (9 . 8 g、5 5 m m o l)、 $Pd(PPh_3)_4$ (3 g、2 . 6 m m o l)、及び Na_2CO_3 (1 7 g、1 5 9 m m o l) を溶解した後、混合物は、1 日 1 2 0 の還流下にあった。反応の完了後、混合物を、酢酸エチルを用いて抽出した。得られた有機層を乾燥させ、カラムクロマトグラフィーに供して化合物 7 (2 0 g、収率 : 5 8 %) を得た。

40

【 0 0 9 2 】

4) 化合物 A - 6 3 の調製

化合物 7 [9 - (3 - (2 - クロロフェニル) キノキサリン - 2 - イル) - 9 ' - フェニル - 9 H , 9 ' H - 2 , 2 ' - ビカルバゾール] (2 0 g、3 1 m m o l)、 $Pd(OAc)_2$ (3 5 0 m g、1 . 5 m m o l)、リガンド (トリシクロヘキシルホスホニウム

50

テトラフルオロボラート) (1.3 mg、3.1 mmol)、 Cs_2CO_3 (30 g、90 mmol)、及びキシレン (70 mL) の混合物を1.5時間還流下で撹拌した。室温へ冷却した後、蒸留水をそこに添加した。反応の完了後、混合物を、酢酸エチルを用いて抽出した。得られた有機層を乾燥させ、カラムクロマトグラフィーに供して化合物 A - 63 (6.5 g、収率：41%) を得た。

【0093】

【表2】

	MW	UV	PL	M. P.
A-63	610.70	344nm	475nm	289°C

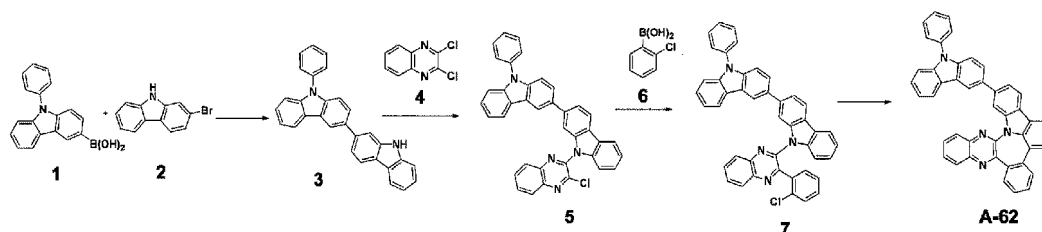
10

【0094】

実施例3：化合物 A - 62 の調製

【0095】

【化16】



20

【0096】

1) 化合物3の調製

フラスコのトルエン (870 mL)、エタノール (200 mL)、及び H_2O (200 mL) 中に、(9-フェニル-9H-カルバゾール-3-イル) ボロン酸 (50 g、174.10 mmol)、2-ブロモ-9H-カルバゾール (43 g、174.10 mmol)、及び $\text{Pd}(\text{PPh}_3)_4$ (6.0 g、5.22 mmol) を溶解した後、混合物は、7時間120 で還流下にあった。反応の完了後、混合物を、酢酸エチルを用いて抽出した。得られた有機層を、硫酸マグネシウムを用いて乾燥させて残存する水分を除去し、カラムクロマトグラフィーに供して化合物3 (53.5 g、収率：75%) を得た。

30

【0097】

2) 化合物5の調製

フラスコのDMF (430 mL) 中に、化合物3 (35.0 g、85.70 mmol)、2,3-ジクロロキノキサリン (25.6 g、128.50 mmol)、 K_2CO_3 (17.8 g、128.5 mmol)、及び4-ジメチルアミノピリジン (DMA P) (5.2 g、42.9 mmol) を溶解した後、混合物を6時間90 で撹拌した。反応の完了後、メタノール及び H_2O をそこに添加した。混合物を撹拌し、濾過した。得られた固体をカラムクロマトグラフィーに供して化合物5 (33.3 g、収率：68.1%) を得た。

40

【0098】

3) 化合物7の調製

化合物7 (15 g、26.3 mmol)、(2-クロロフェニル) ボロン酸 (5.0 g、31.5 mmol)、 $\text{Pd}(\text{PPh}_3)_4$ (1.5 g、1.32 mmol)、 Na_2CO_3 (8.4 g、78.9 mmol)、トルエン (131 mL)、エタノール (33 mL)、及び H_2O (33 mL) の混合物を2時間還流下で撹拌した。室温へ冷却した後、蒸留水をそこに添加した。反応の完了後、混合物を、酢酸エチルを用いて抽出した。得られた有機層を、硫酸マグネシウムを用いて乾燥させて残存する水分を除去し、カラムクロマトグラフィーに供して化合物7 (17.0 g、収率：99%) を得た。

【0099】

50

4) 化合物 A - 62 の調製

化合物 7 (14.4 g、22.3 mmol)、Pd(OAc)₂ (250 mg、1.11 mmol)、リガンド (トリシクロヘキシルホスホニウムテトラフルオロボラート) (820 mg、2.22 mmol)、Cs₂CO₃ (21.7 g、66.7 mmol)、及びキシレン (120 mL) の混合物を 5 時間還流下で撹拌した。室温へ冷却した後、メタノールをそこに添加した。混合物を濾過し、得られた固体をカラムクロマトグラフィーに供して化合物 A - 62 (9.5 g、収率：70%) を得た。

【0100】

【表 3】

	MW	UV	PL	M. P.
A-62	610.70	440nm	475nm	250.0°C

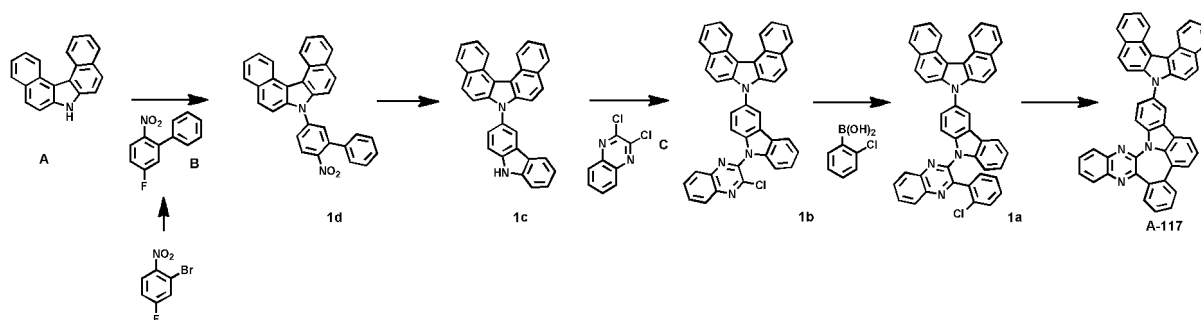
10

【0101】

実施例 4：化合物 A - 117 の調製

【0102】

【化 17】



20

【0103】

1) 化合物 B の調製

2-ブロモ-4-フルオロ-1-ニトロベンゼン (50 g、227.3 mmol)、フェニルボロン酸 (30.5 g、250 mmol)、Pd(PPh₃)₄ (13.1 g、11.37 mmol)、K₂CO₃ (62.8 g、454.6 mmol)、トルエン (600 mL)、エタノール (200 mL)、及び H₂O (200 mL) をフラスコ内に導入した後、混合物を 6 時間還流下で撹拌し、室温に冷却し、酢酸エチル (EA) 及び蒸留水を用いて抽出した。有機層を、減圧下で蒸留した。残渣をカラムクロマトグラフィーに供して化合物 B (5-フルオロ-2-ニトロ-1,1'-ビフェニル) (49 g、収率：99%) を得た。

30

【0104】

2) 化合物 1d の調製

化合物 A (34.5 g、128.9 mmol)、化合物 B (5-フルオロ-2-ニトロ-1,1'-ビフェニル) (28 g、128.9 mmol)、NaH (6.7 g、167.6 mmol)、及び DMF (600 mL) をフラスコ内に導入した後、混合物を 2 時間 75℃ で撹拌した。室温に冷却した後、メタノール (1 L) 及び精製水をそこへ添加した。混合物を濾過し、得られた固体を減圧下で乾燥させて化合物 1d [7-(6-ニトロ-[1,1'-ビフェニル]-3-イル)-7H-ジベンゾ[c,g]カルバゾール] (52 g、収率：86.8%) を得た。

40

【0105】

3) 化合物 1c の調製

化合物 1d (52 g、111.9 mmol)、PPh₃ (88 g、335.8 mmol)、及び 1,2-ジクロロベンゼン (500 mL) をフラスコ内に導入した後、混合物を撹拌した。次いで、混合物を 6 時間還流下で撹拌し、1,2-ジクロロベンゼンを蒸留し

50

た。残渣をカラムクロマトグラフィーに供して化合物 1 c [7 - (9 H - カルバゾール - 3 - イル) - 7 H - ジベンゾ [c , g] カルバゾール] (39 g、収率：75.9%) を得た。

【 0 1 0 6 】

4) 化合物 1 b の調製

化合物 1 c [7 - (9 H - カルバゾール - 3 - イル) - 7 H - ジベンゾ [c , g] カルバゾール] (15 g、34.68 mmol)、化合物 C [2 , 3 - ジクロロキノキサリン] (7.6 g、38.15 mmol)、4 - ジメチルアミノピリジン (2.1 g、17.34 mmol)、 K_2CO_3 (4.8 g、34.88 mmol)、及び DMF (200 mL) をフラスコ内に導入した後、混合物を撹拌した。次いで、混合物を 3 時間還流下で撹拌し、室温に冷却した。メタノール (400 mL) 及び精製水を添加した後、混合物を濾過した。固体を乾燥させ、カラムクロマトグラフィーに供して化合物 1 b [7 - (9 - (3 - クロロキノキサリン - 2 - イル) - 9 H - カルバゾール - 3 - イル) - 7 H - ジベンゾ [c , g] カルバゾール] (17.7 g、収率：85.8%) を得た。

【 0 1 0 7 】

5) 化合物 1 a の調製

化合物 1 b (17.7 g)、2 - クロロ - フェニルボロン酸 (4.7 g、29.74 mmol)、 $Pd(PPh_3)_4$ (1.7 g、1.487 mmol)、 K_2CO_3 (8.2 g、59.48 mmol)、精製水 (30 mL)、トルエン (100 mL)、及びエタノール (30 mL) をフラスコ内に導入した後、混合物を撹拌した。次いで、混合物を 4 時間還流下で撹拌した。室温へ冷却した後、混合物を、EA 及び精製水を用いて抽出した。得られた有機層を減圧下で濃縮した。残渣をカラムクロマトグラフィーに供して化合物 1 a [7 - (9 - (3 - (2 - クロロフェニル) キノキサリン - 2 - イル) - 9 H - カルバゾール - 3 - イル) - 7 H - ジベンゾ [c , g] カルバゾール] (15.3 g、収率 76.6%) を得た。

【 0 1 0 8 】

6) 化合物 A - 117 の調製

化合物 1 a (14.3 g)、 $Pd(OAc)_2$ (0.48 g、2.13 mmol)、トリシクロヘキシルホスホニウムテトラフルオロボラート (1.57 g、4.26 mmol)、 Cs_2CO_3 (20.8 g、63.9 mmol)、及び o - キシレン (100 mL) をフラスコ内に導入した後、混合物を撹拌した。次いで、混合物を 2 時間還流下で撹拌した。室温へ冷却した後、混合物を、EA 及び精製水を用いて抽出した。有機層を減圧下で濃縮した。残渣をカラムクロマトグラフィーに供して化合物 A - 117 (6.5 g、収率：48%) を得た。

【 0 1 0 9 】

【表 4】

	MW	UV	PL	M. P.
A-117	634.73	442	477	300.1°C

【 0 1 1 0 】

[デバイス実施例 1] 本開示の化合物を使用する OLED

以下のように、本開示の有機電界発光化合物を使用して OLED を製作した。OLED (Geomatec) 用のガラス基材上の透明電極酸化インジウムスズ (ITO) の薄いフィルム ($10 \Omega / sq$) を、順次アセトン、エタノール、及び蒸留水を用いて超音波洗浄に供し、次いで、イソプロパノール中に保管した。次いで、ITO 基材を真空蒸着装置の基材ホルダ上に載置した。HI - 1 を前記真空蒸着装置のセル内に導入し、次いで、前記装置のチャンバ内の圧力を 10^{-6} トルに制御した。その後、セルに電流を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 基材上に形成した。次いで、HI - 2 を前記真空蒸着装置の別のセル内に導入し

10

20

30

40

50

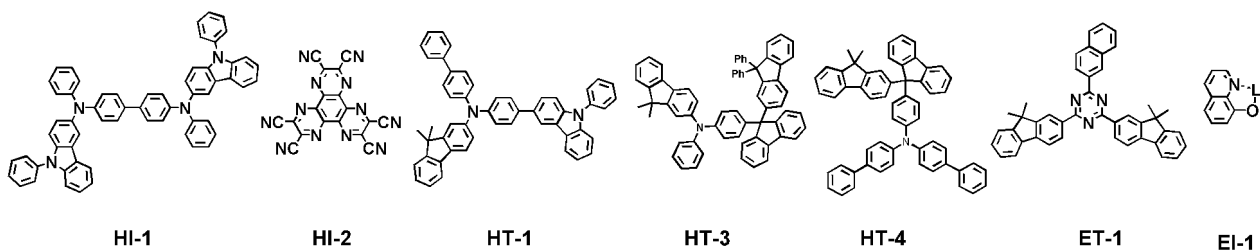
、そのセルに電流を印加することによって蒸発させ、それにより、5 nmの厚さを有する第2の正孔注入層を第1の正孔注入層上に形成した。HT-1を真空蒸着装置の1つのセル内に導入し、そのセルに電流を印加することによって蒸発させ、それにより、10 nmの厚さを有する第1の正孔輸送層を第2の正孔注入層上に形成した。HT-3を真空蒸着装置の別のセル内に導入し、そのセルに電流を印加することによって蒸発させ、それにより、60 nmの厚さを有する第2の正孔輸送層を第1の正孔輸送層上に形成した。その後、化合物A-1をホストとして真空蒸着装置の1つのセル内に導入し、化合物D-96をドーパントとして別のセル内に導入した。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3重量%のドーパ量で堆積させて、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。ET-1及びEI-1を真空蒸着装置のそれぞれ2つのセル内に導入し、1:1の速度で蒸発させて、30 nmの厚さを有する電子輸送層を発光層上に形成した。2 nmの厚さを有する電子注入層としてEI-1を堆積させた後、別の真空蒸着装置によって、電子注入層上に80 nmの厚さを有するA1陰極を堆積させてOLEDを製作した。製作されたOLEDは、1,000 cd/m²の輝度及び3.6 Vの駆動電圧で30.4 cd/Aの電流効率を有する赤色発光を示した。5,000ニトでの輝度の95%に低減するために費やされた最短時間は63時間であった。

10

【0111】

【化18】

20



【0112】

[デバイス実施例2] 本開示の化合物を使用するOLED

化合物A-117を発光材料のホストとして使用し、HT-4を第2の正孔輸送層のためにHT-3の代わりに使用したことを除いて、OLEDをデバイス実施例1と同じ様式で製作した。製作されたOLEDは、1,000 cd/m²の輝度及び4.0 Vの駆動電圧で28.7 cd/Aの電流効率を有する赤色発光を示した。5,000ニトで輝度の95%に低減するために費やされた最短時間は9時間であった。

30

【0113】

[デバイス実施例3] 本開示の化合物を使用するOLED

化合物A-63を発光材料のホストとして使用したことを除いて、OLEDをデバイス実施例1と同じ様式で製作した。製作されたOLEDは、1,000 cd/m²の輝度及び3.7 Vの駆動電圧で25.8 cd/Aの電流効率を有する赤色発光を示した。5,000ニトで輝度の95%に低減するために費やされた最短時間は11時間であった。

40

【0114】

[デバイス実施例4] 本開示の化合物を使用するOLED

化合物A-62を発光材料のホストとして使用したことを除いて、OLEDをデバイス実施例1と同じ様式で製作した。製作されたOLEDは、1,000 cd/m²の輝度及び3.5 Vの駆動電圧で29.0 cd/Aの電流効率を有する赤色発光を示した。5,000ニトで輝度の95%に低減するために費やされた最短時間は33時間であった。

【0115】

[比較実施例1] 従来の化合物を使用するOLED

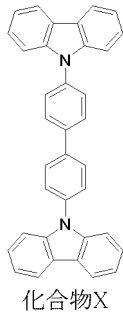
以下に示される化合物Xを、発光材料の第1のホストとして使用したことを除いて、OLEDをデバイス実施例1と同じ様式で製作した。製作されたOLEDは、1,000 c

50

cd/m^2 の輝度及び 10 V の駆動電圧で 14.3 cd/A の電流効率を有する赤色発光を示した。 $5,000$ ニトで輝度の 95% に低減するために費やされた最短時間は 0 時間であった。

【0116】

【化19】



10

【0117】

上記に示される式 A 及び B のものなどの先行技術の化合物は、有機電界発光デバイスのリン光性赤色発光ホスト材料のための適切な HOMO レベル、LUMO レベル、及び三重項エネルギーを有しない。したがって、そのような化合物がリン光性赤色発光ホスト材料のために使用されるとき、有機電界発光デバイスは、不十分な発光効率、短い寿命、及び高い駆動電圧などの不十分な特性を示す。上記の式 A などの融着構造を有する化合物は、不十分な溶解性を有し、したがって、大量生産のための調製プロセスにおいて使用することができない。式 B を有する化合物は、良好な溶解性を有するが、それらは、結果として不十分な効率及び低熱安定性をもたらす低三重項エネルギーを有する。しかしながら、本開示の実施例において示されるように、本開示の有機電界発光化合物は、従来の有機電界発光化合物よりも、より低い駆動電圧、より良好な発光効率、及びより長い寿命を有する。本開示の有機電界発光化合物を含むデバイスは、優れた発光効率、特に、優れた電流 / 電力効率、ならびに良好な色純度、熱安定性、及び溶解性を示す。

20

30

【 国際調査報告 】

INTERNATIONAL SEARCH REPORT		International application No. PCT/KR2015/010245
A. CLASSIFICATION OF SUBJECT MATTER C07D 487/16 (2006.01) C07D 471/16 (2006.01) C07D 487/22 (2006.01) C09K 11/06 (2006.01) H01L 27/32 (2006.01) H01L 51/54 (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 Abstract Registry and CAplus: Substructure search based on compounds of formula (1) and Keywords: electroluminescent and OLED		
Applicant/inventors names searched in internal databases provided by IP Australia		
PatentScope and Espacenet: Inventor and/or Applicant Search with IPC marks C07D and C09K		
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		
* "A"	Special categories of cited documents: document defining the general state of the art which is not considered to be of particular relevance	"I" 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 25 November 2015		Date of mailing of the international search report 25 November 2015
Name and mailing address of the ISA/AU AUSTRALIAN PATENT OFFICE PO BOX 200, WODEN ACT 2606, AUSTRALIA Email address: pct@ipaustalia.gov.au		Authorised officer Alanna Hurne AUSTRALIAN PATENT OFFICE (ISO 9001 Quality Certified Service) Telephone No. 0262223657

INTERNATIONAL SEARCH REPORT		International application No.
C (Continuation). DOCUMENTS CONSIDERED TO BE RELEVANT		PCT/KR2015/010245
Category*	Citation of document, with indication, where appropriate, of the relevant passages	Relevant to claim No.
X	JP 2014/160813 A (IDEMITSU KOSAN CO., LTD.) 04 September 2014 abstract, claims especially 1, 2, 5 & 18 on pages 2-6, first compound in the first row of example 41 in paragraph 96 on page 46	1-8
A	WO 2014/088290 A1 (ROHM AND HAAS ELECTRONIC MATERIALS KOREA LTD.) 12 June 2014 abstract, pages 2-3, claims, compounds C-1 to C-5 on page 7; C-20 on page 8 and C-59 & C-64 on page 9	1-8
P,A	KR 10-2015-021861 A (DON-SU CHOI & YUN-HWAN CHO) 03 March 2015 abstract, page 2, claims, compounds 4-24 on page 39; 5-24 on page 56; A-4 on page 62; 4-47 & 4-48 & 4-50 on page 42; 4-52 to 4-57 on page 43; 4-58 on page 44; 5-47, 5-48 & 5-50 on page 58; 5-52 to 5-58 on page 59; A-24 & A-25 on page 66; A-28 to A-31 on page 67; A-32 on page 68; E-4-2 & E-5-2 on page 75 and E-6-2 on page 76	1-8
Form PCT/ISA/210 (fifth sheet) (July 2009)		

INTERNATIONAL SEARCH REPORT		International application No.	
Information on patent family members		PCT/KR2015/010245	
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
JP 2014/160813 A	04 September 2014	JP 2014160813 A	04 Sep 2014
WO 2014/088290 A1	12 June 2014	WO 2014088290 A1	12 Jun 2014
		CN 104797571 A	22 Jul 2015
		KR 20140071944 A	12 Jun 2014
		TW 201439078 A	16 Oct 2014
KR 10-2015-021861 A	03 March 2015	None	
End of Annex			

Due to data integration issues this family listing may not include 10 digit Australian applications filed since May 2001.

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, 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, 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, US, UZ

(72)発明者 ヒュン - ジュ・カン

大韓民国 キョンギ - ド ファソン - シ サムサン 1 - ロ 5 - ギル 2 0

(72)発明者 ジン - リ・ホン

大韓民国 キョンギ - ド ファソン - シ サムサン 1 - ロ 5 - ギル 2 0

(72)発明者 ヨン - ムク・リム

大韓民国 キョンギ - ド ファソン - シ サムサン 1 - ロ 5 - ギル 2 0

(72)発明者 ドウ - ヒョン・ムン

大韓民国 キョンギ - ド ファソン - シ サムサン 1 - ロ 5 - ギル 2 0

Fターム(参考) 3K107 AA01 CC03 CC04 CC07 CC12 CC21 CC24 DD53 DD59 DD68

4C050 AA02 AA07 AA08 BB04 CC08 DD03 EE03 FF10 GG01 HH04

专利名称(译)	有机电致发光化合物和含有它的有机电致发光器件		
公开(公告)号	JP2017530555A	公开(公告)日	2017-10-12
申请号	JP2017515102	申请日	2015-09-25
[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	ビトナリキム ヒーリョンカン ヒュンジュカン ジンリホン ヨンムクリム ドゥヒョンムン		
发明人	ビトナリ・キム ヒー・リョン・カン ヒュン・ジュ・カン ジン・リ・ホン ヨン・ム・クリム ドゥ・ヒョン・ムン		
IPC分类号	H01L51/50 C07D487/16		
CPC分类号	C07D471/16 C07D471/22 C07D487/16 C07D487/22 C07D519/00 C09K11/06 C09K2211/1007 C09K2211/1011 C09K2211/1014 C09K2211/1018 C09K2211/1022 C09K2211/1029 C09K2211/1044 H01L51/0072 H01L51/0073 H01L51/0074 H01L51/5016 H01L51/001 H01L51/0061 H01L51/5056 H01L51/5088 H01L2251/558		
FI分类号	H05B33/14.B C07D487/16		
F-TERM分类号	3K107/AA01 3K107/CC03 3K107/CC04 3K107/CC07 3K107/CC12 3K107/CC21 3K107/CC24 3K107/ /DD53 3K107/DD59 3K107/DD68 4C050/AA02 4C050/AA07 4C050/AA08 4C050/BB04 4C050/CC08 4C050/DD03 4C050/EE03 4C050/FF10 4C050/GG01 4C050/HH04		
优先权	1020140130061 2014-09-29 KR 1020150135881 2015-09-24 KR		
其他公开文献	JP6637493B2		
外部链接	Espacenet		

摘要(译)

本公开涉及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。本公开的有机电致发光化合物具有良好的色纯度，溶解度和热稳定性。通过包含本公开的有机电致发光化合物，可以提供显示出低驱动电压，优异的电流和功率效率以及显著改善的寿命的有机电致发光器件。[选择图]无

(51) Int. Cl.

H O 1 L 51/50 (2006. 01)
C O 7 D 487/16 (2006. 01)

F I
H O 5 B 33/14
C O 7 D 487/16

B

テーマコード (参考)
3 K 1 O 7
4 C O 5 O

審査請求 未請求 予備審査請求 未請求 (全 43 頁)			
(21) 出願番号	特願2017-515102 (P2017-515102)	(71) 出願人	509266480
(86) (22) 出願日	平成27年9月25日 (2015. 9. 25)		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29年3月17日 (2017. 3. 17)		ク・マテリアルズ・コリア・リミテッド
(86) 国際出願番号	PCT/KR2015/010245		大韓民国 3 3 1 - 9 8 0 チュンチョン
(87) 国際公開番号	W02016/052962		ナムード チョナソーシ ソブクーク 3
(87) 国際公開日	平成28年4月7日 (2016. 4. 7)		コンダン 1 - ロ 5 6
(31) 優先権主張番号	10-2014-0130061	(74) 代理人	110000589
(32) 優先日	平成26年9月29日 (2014. 9. 29)		特許業務法人センタ国際特許事務所
(33) 優先権主張国	韓国 (KR)	(72) 発明者	ビトナリ・キム
(31) 優先権主張番号	10-2015-0135881		大韓民国 キョンギード ファソーンシ
(32) 優先日	平成27年9月24日 (2015. 9. 24)		サムサン 1 - ロ 5 - ギル 2 O
(33) 優先権主張国	韓国 (KR)	(72) 発明者	ヒーリョン・カン
			大韓民国 キョンギード ファソーンシ
			サムサン 1 - ロ 5 - ギル 2 O
最終頁に続く			

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