

(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2018-537843

(P2018-537843A)

(43) 公表日 平成30年12月20日 (2018. 12. 20)

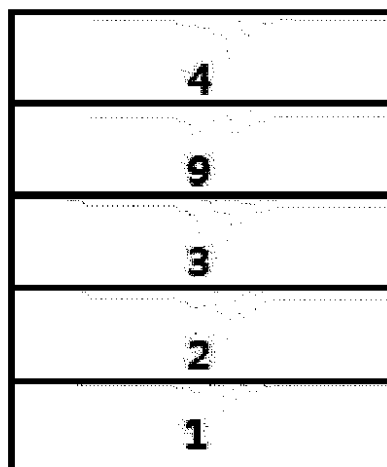
(51) Int. Cl.	F I	テーマコード (参考)
H O 1 L 51/50 (2006. 01)	H O 5 B 33/22 B	3 K 1 0 7
C O 7 D 405/04 (2006. 01)	H O 5 B 33/14 B	4 C O 5 O
C O 7 D 405/10 (2006. 01)	C O 7 D 405/04	4 C O 6 3
C O 7 D 487/04 (2006. 01)	C O 7 D 405/10	
C O 7 D 409/10 (2006. 01)	C O 7 D 487/04 1 4 4	
審査請求 有 予備審査請求 未請求 (全 142 頁) 最終頁に続く		

(21) 出願番号	特願2018-515209 (P2018-515209)	(71) 出願人	500239823
(86) (22) 出願日	平成28年10月7日 (2016. 10. 7)		エルジー・ケム・リミテッド
(85) 翻訳文提出日	平成30年4月26日 (2018. 4. 26)		大韓民国 07336 ソウル, ヨンドゥン
(86) 国際出願番号	PCT/KR2016/011233		ンボーク, ヨイードロ 128
(87) 国際公開番号	W02017/061810	(74) 代理人	110000877
(87) 国際公開日	平成29年4月13日 (2017. 4. 13)		龍華国際特許業務法人
(31) 優先権主張番号	10-2015-0141233	(72) 発明者	ハ、ジェ セウン
(32) 優先日	平成27年10月7日 (2015. 10. 7)		大韓民国・ソウル・ヨンドゥンボーク・ヨ
(33) 優先権主張国	韓国 (KR)		イードロ・128 エルジー・ケム・リミ
		(72) 発明者	テッド内
			ホン、スン キル
			大韓民国・ソウル・ヨンドゥンボーク・ヨ
			イードロ・128 エルジー・ケム・リミ
			テッド内
		最終頁に続く	

(54) 【発明の名称】 二重スピロ型化合物およびこれを含有有機発光素子

(57) 【要約】

本明細書は、二重スピロ型化合物およびこれを含有有機発光素子を提供する。



【特許請求の範囲】

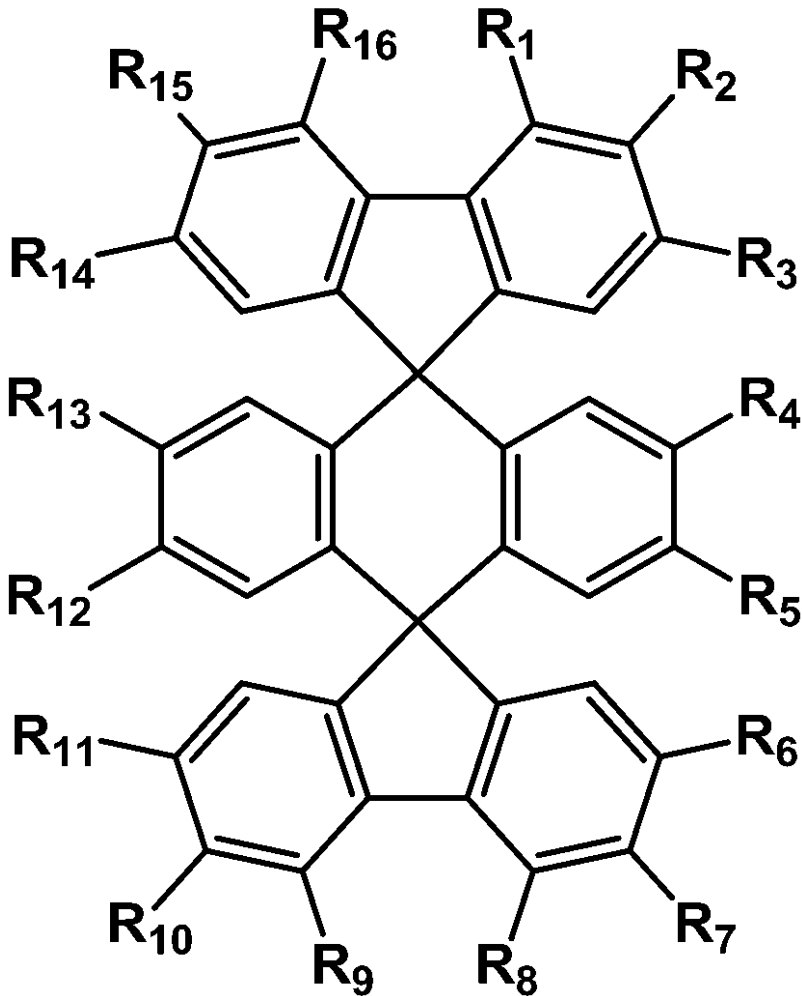
【請求項 1】

アノードと、
 前記アノードに対向して備えられたカソードと、
 前記アノードおよび前記カソードの間に備えられた発光層を含む有機物層と
 を含む有機発光素子であって、
 前記有機物層は、前記発光層と前記カソードとの間に備えられ、
 下記化学式 1 の化合物を含む有機物層をさらに含む
 有機発光素子：

[化学式 1]

10

【化 1】



20

30

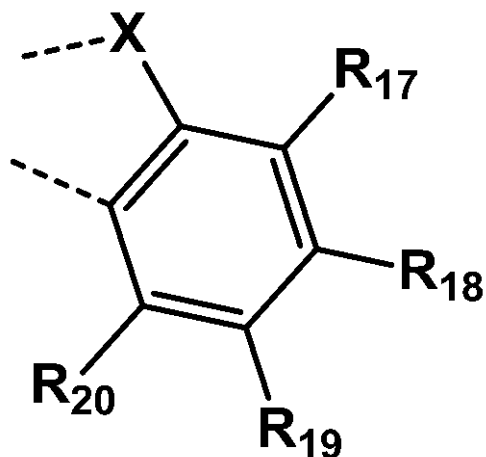
前記化学式 1 において、

$R_1 \sim R_{16}$ のうちの少なくとも 1 つは、隣接した基と互いに結合して化学式 1 - 1 の環を形成し、

40

[化学式 1 - 1]

【化 2】



10

X は、O または S であり、

R₁ ~ R₁₆ のうちの環を形成しない基および R₁₇ ~ R₂₀ は、互いに同一または異なり、それぞれ独立に、水素；重水素；ハロゲン基；ニトリル基；ニトロ基；ヒドロキシ基；カルボニル基；置換もしくは非置換のシリル基；置換もしくは非置換のホウ素基；置換もしくは非置換のアルキル基；置換もしくは非置換のアルキルスルホキシ基；置換もしくは非置換のアリールスルホキシ基；置換もしくは非置換のアルケニル基；置換もしくは非置換のアルアルキル基；置換もしくは非置換のアルアルケニル基；置換もしくは非置換のアルキルアリール基；置換もしくは非置換のアルキルアミン基；置換もしくは非置換のアラルキルアミン基；置換もしくは非置換のヘテロアリールアミン基；置換もしくは非置換のアリールアミン基；置換もしくは非置換のアリールホスフィン基；置換もしくは非置換のホスフィンオキシド基；置換もしくは非置換のアリール基；または置換もしくは非置換のヘテロ環基である。

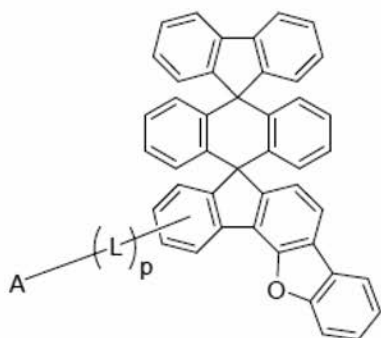
20

【請求項 2】

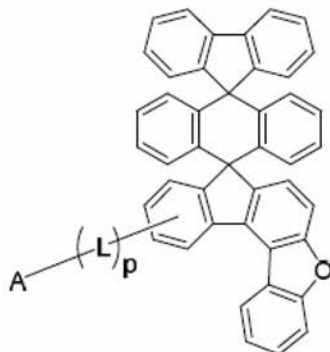
前記化学式 1 は、化学式 2 ~ 化学式 7 のうちのいずれか 1 つで表されるものである、
請求項 1 に記載の有機発光素子：

30

【化 3】

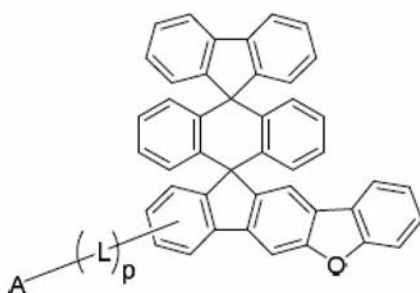


化学式 2

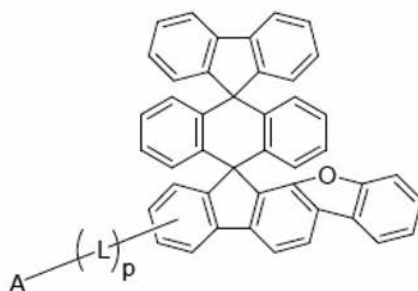


化学式 5

10

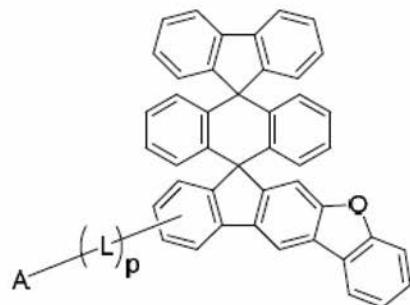


化学式 3

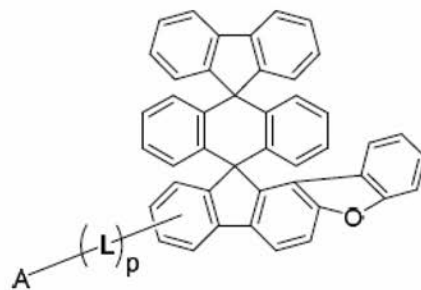


化学式 6

20



化学式 4



化学式 7

30

前記化学式 2 ~ 7 において、

p は、0 ~ 5 の整数であり、

L は、直接結合；置換もしくは非置換のアリーレン基；または置換もしくは非置換のヘテロアリーレン基であり；

40

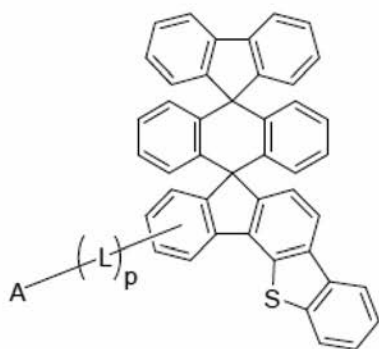
A は、水素；重水素；ハロゲン基；ニトリル基；ニトロ基；ヒドロキシ基；カルボニル基；エステル基；イミド基；アミノ基；置換もしくは非置換のシリル基；置換もしくは非置換のホウ素基；置換もしくは非置換のアルキル基；置換もしくは非置換のアルキルスルホキシ基；置換もしくは非置換のアリールスルホキシ基；置換もしくは非置換のアルケニル基；置換もしくは非置換のアルアルキル基；置換もしくは非置換のアルアルケニル基；置換もしくは非置換のアルキルアリール基；置換もしくは非置換のアルキルアミン基；置換もしくは非置換のアラルキルアミン基；置換もしくは非置換のヘテロアリールアミン基；置換もしくは非置換のアリールアミン基；置換もしくは非置換のアリールホスフィン基；置換もしくは非置換のホスフィンオキシド基；置換もしくは非置換のアリール基；または置換もしくは非置換のヘテロ環基である。

50

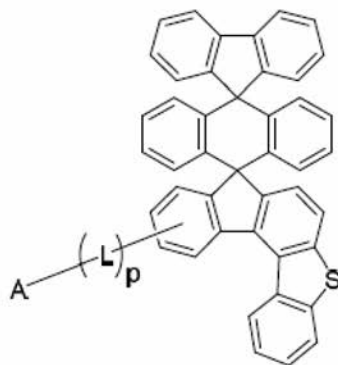
【請求項 3】

前記化学式 1 は、化学式 8 ～ 化学式 13 のうちのいずれか 1 つで表されるものである、
請求項 1 に記載の有機発光素子：

【化 4】

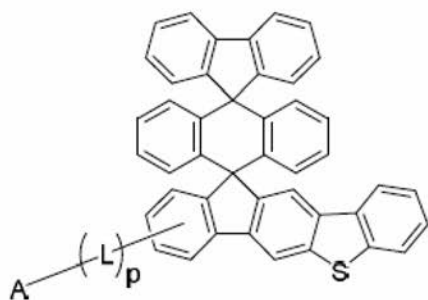


化学式 8

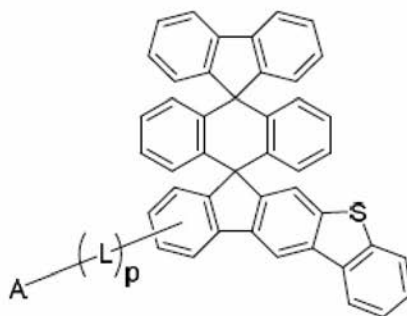


化学式 11

10

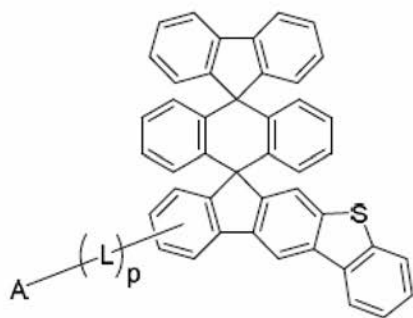


化学式 9

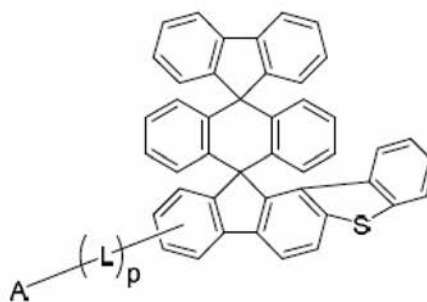


化学式 12

20



化学式 10



化学式 13

30

前記化学式 8 ～ 13 において、

p は、0 ～ 5 の整数であり、

L は、直接結合；置換もしくは非置換のアリーレン基；または置換もしくは非置換のヘテロアリーレン基であり；

A は、水素；重水素；ハロゲン基；ニトリル基；ニトロ基；ヒドロキシ基；カルボニル基；エステル基；イミド基；アミノ基；置換もしくは非置換のシリル基；置換もしくは非置換のホウ素基；置換もしくは非置換のアルキル基；置換もしくは非置換のアルキルスルホキシ基；置換もしくは非置換のアリールスルホキシ基；置換もしくは非置換のアルケニル基；置換もしくは非置換のアルアルキル基；置換もしくは非置換のアルアルケニル基；置換もしくは非置換のアルキルアリール基；置換もしくは非置換のアルキルアミン基；置

40

50

換もしくは非置換のアラルキルアミン基；置換もしくは非置換のヘテロアリールアミン基；置換もしくは非置換のアリールアミン基；置換もしくは非置換のアリールホスフィン基；置換もしくは非置換のホスフィンオキシド基；置換もしくは非置換のアリール基；または置換もしくは非置換のヘテロ環基である。

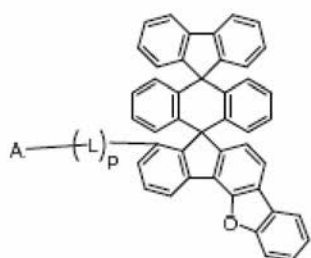
【請求項 4】

前記化学式 1 は、化学式 2 - 1 ~ 2 - 4、化学式 3 - 1 ~ 3 - 4、および化学式 4 - 1 ~ 4 - 4 のうちのいずれか 1 つで表されるものである、

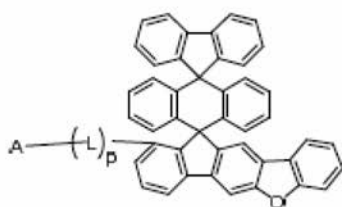
請求項 2 に記載の有機発光素子：

【化 5】

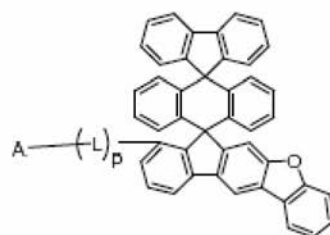
10



化学式 2-1

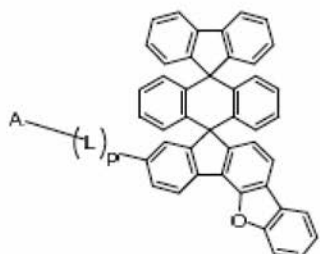


化学式 3-1

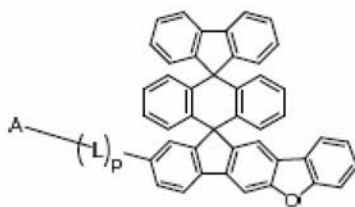


化学式 4-1

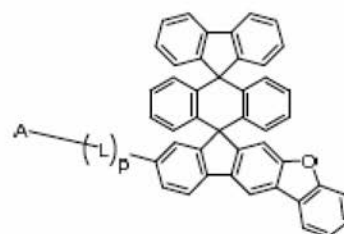
20



化学式 2-2

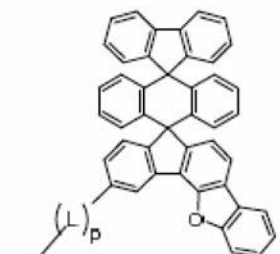


化学式 3-2

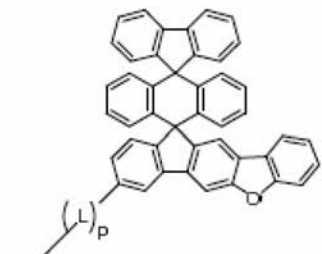


化学式 4-2

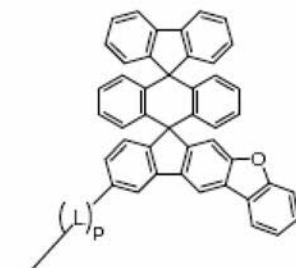
30



化学式 2-3

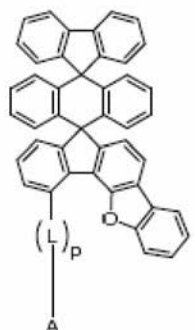


化学式 3-3

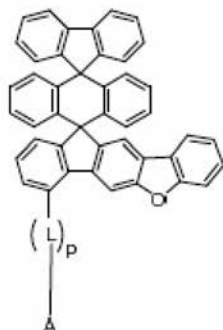


化学式 4-3

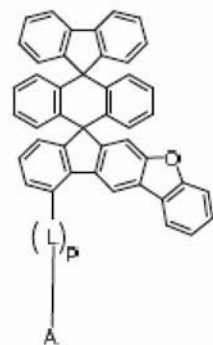
40



化学式 2-4



化学式 3-4



化学式 4-4

前記化学式 2 - 1 ~ 2 - 4、化学式 3 - 1 ~ 3 - 4、および化学式 4 - 1 ~ 4 - 4 において、

p、L および A はそれぞれ、化学式 2 ~ 7 で定義された通りである。

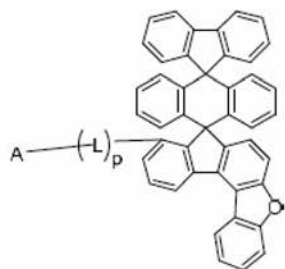
【請求項 5】

前記化学式 1 は、化学式 5 - 1 ~ 5 - 4、化学式 6 - 1 ~ 6 - 4、および化学式 7 - 1

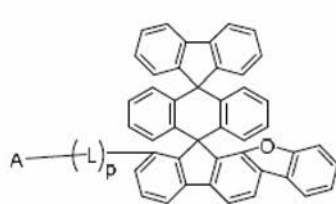
50

～ 7 - 4 のうちのいずれか 1 つで表されるものである、
請求項 2 に記載の有機発光素子：

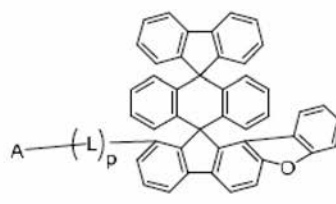
【化 6】



化学式 5-1

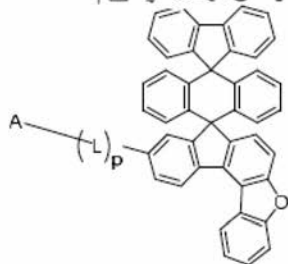


化学式 6-1

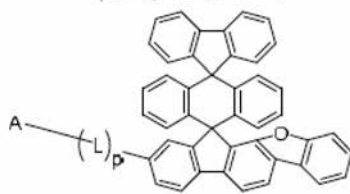


化学式 7-1

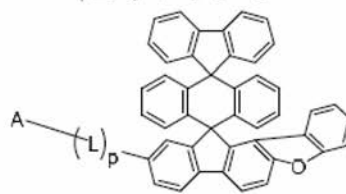
10



化学式 5-2

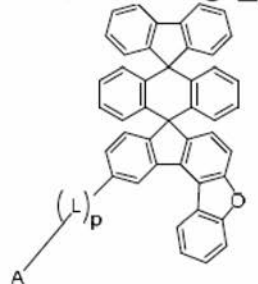


化学式 6-2

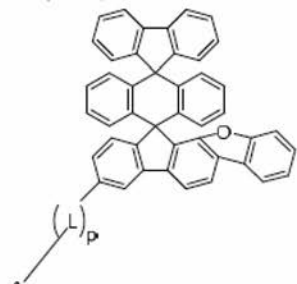


化学式 7-2

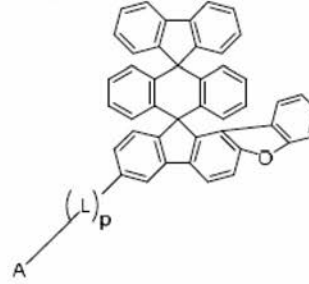
20



化学式 5-3

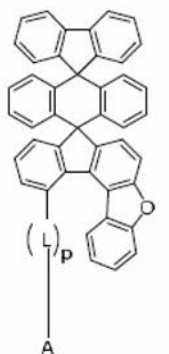


化学式 6-3

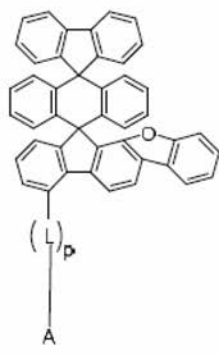


化学式 7-3

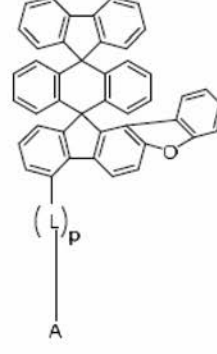
30



化学式 5-4



化学式 6-4



化学式 7-4

前記化学式 5 - 1 ～ 5 - 4、化学式 6 - 1 ～ 6 - 4、および化学式 7 - 1 ～ 7 - 4 において、

40

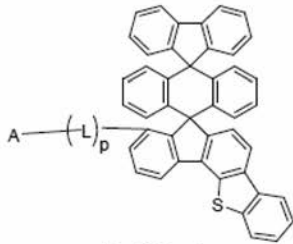
p、L および A はそれぞれ、化学式 2 ～ 7 で定義された通りである。

【請求項 6】

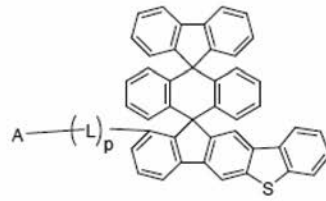
前記化学式 1 は、化学式 8 - 1 ～ 8 - 4、化学式 9 - 1 ～ 9 - 4、および化学式 10 - 1 ～ 10 - 4 のうちのいずれか 1 つで表されるものである、

請求項 3 に記載の有機発光素子：

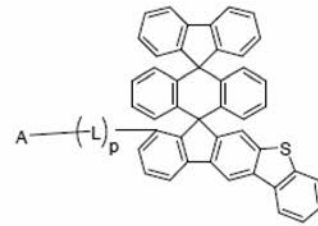
【化 7】



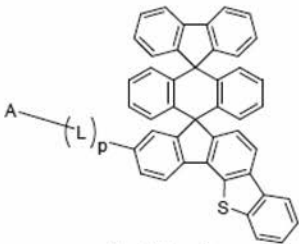
化学式 8-1



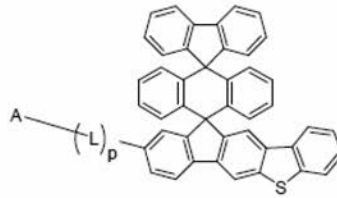
化学式 9-1



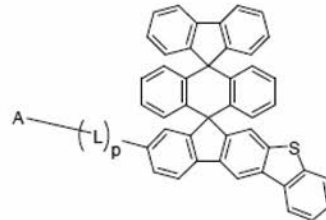
化学式 10-1



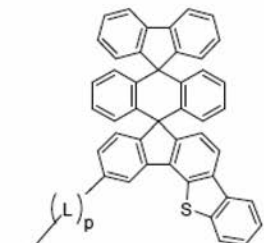
化学式 8-2



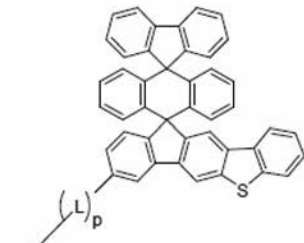
化学式 9-2



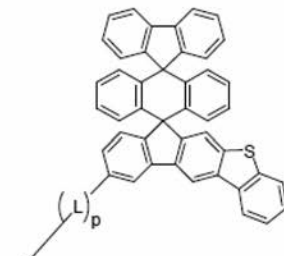
化学式 10-2



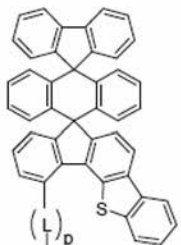
化学式 8-3



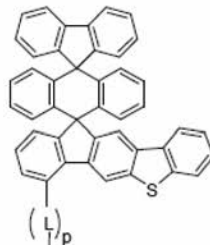
化学式 9-3



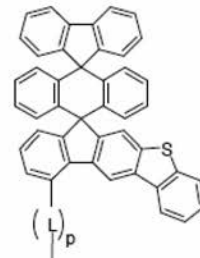
化学式 10-3



化学式 8-4



化学式 9-4



化学式 10-4

前記化学式 8 - 1 ~ 8 - 4、化学式 9 - 1 ~ 9 - 4、および化学式 10 - 1 ~ 10 - 4 において、

p、L および A はそれぞれ、化学式 8 ~ 13 で定義された通りである。

【請求項 7】

前記化学式 1 は、化学式 11 - 1 ~ 11 - 4、化学式 12 - 1 ~ 12 - 4、および化学式 13 - 1 ~ 13 - 4 のうちのいずれか 1 つで表されるものである、

請求項 3 に記載の有機発光素子：

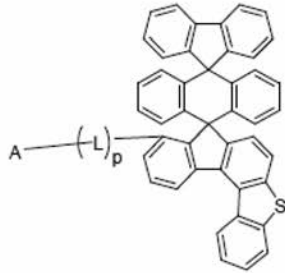
10

20

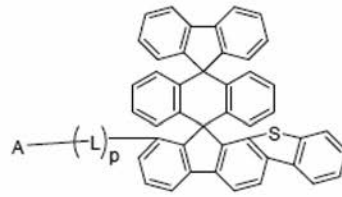
30

40

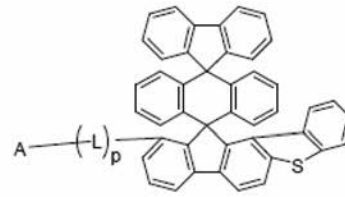
【化 8】



化学式 11-1

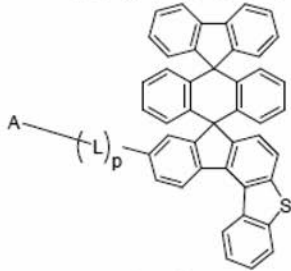


化学式 12-1

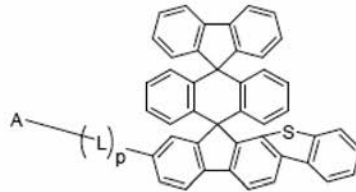


化学式 13-1

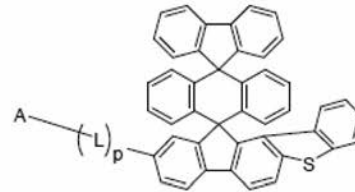
10



化学式 11-2

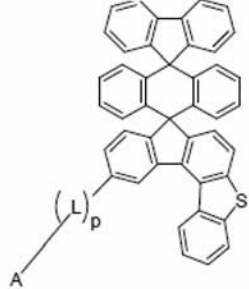


化学式 12-2

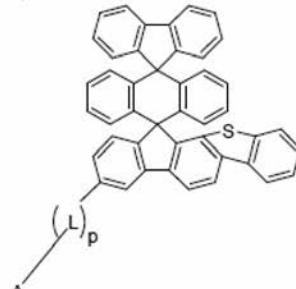


化学式 13-2

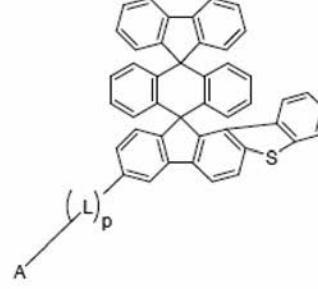
20



化学式 11-3

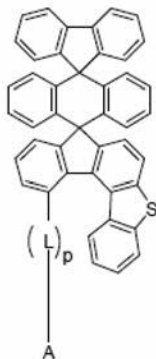


化学式 12-3

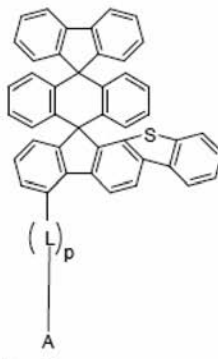


化学式 13-3

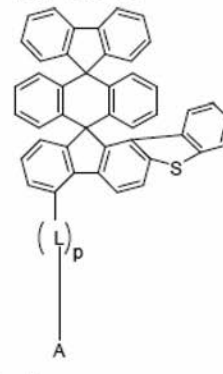
30



化学式 11-4



化学式 12-4



化学式 13-4

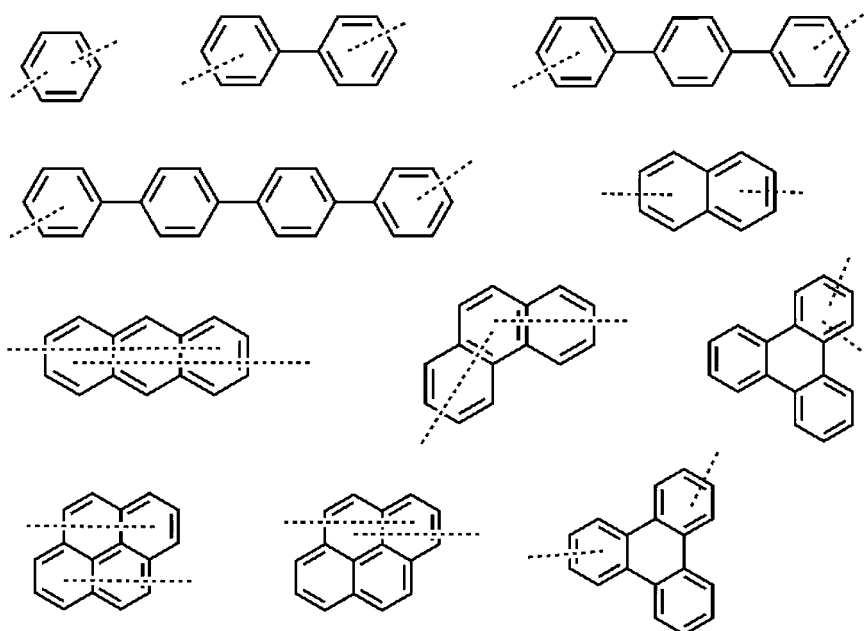
前記化学式 11-1 ~ 11-4、化学式 12-1 ~ 12-4、および化学式 13-1 ~ 13-4 において、
p、L および A はそれぞれ、化学式 8 ~ 13 で定義された通りである。

40

【請求項 8】

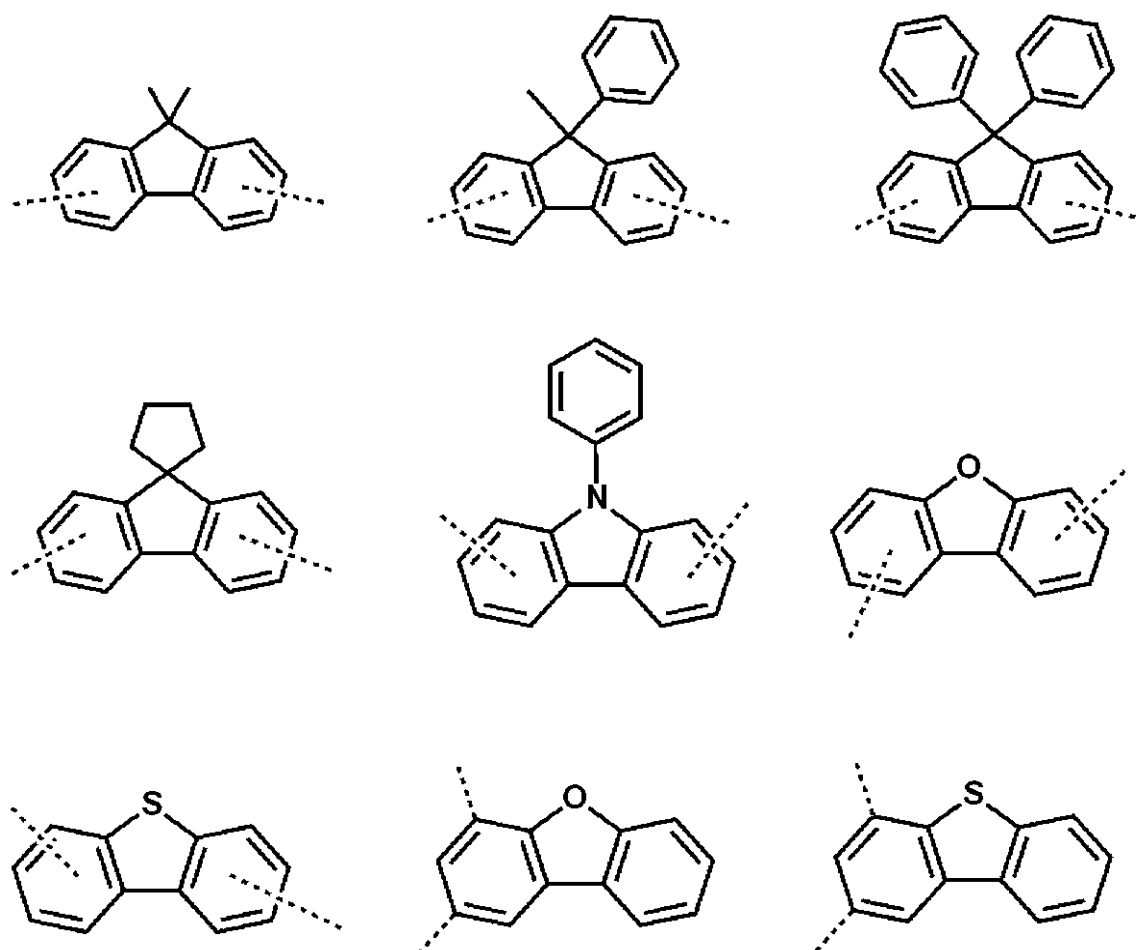
前記 L は、直接結合、または下記構造の中から選択されたいずれか 1 つである、
請求項 2 から 7 のいずれか 1 項に記載の有機発光素子：

【化 9】



10

【化 1 0】



20

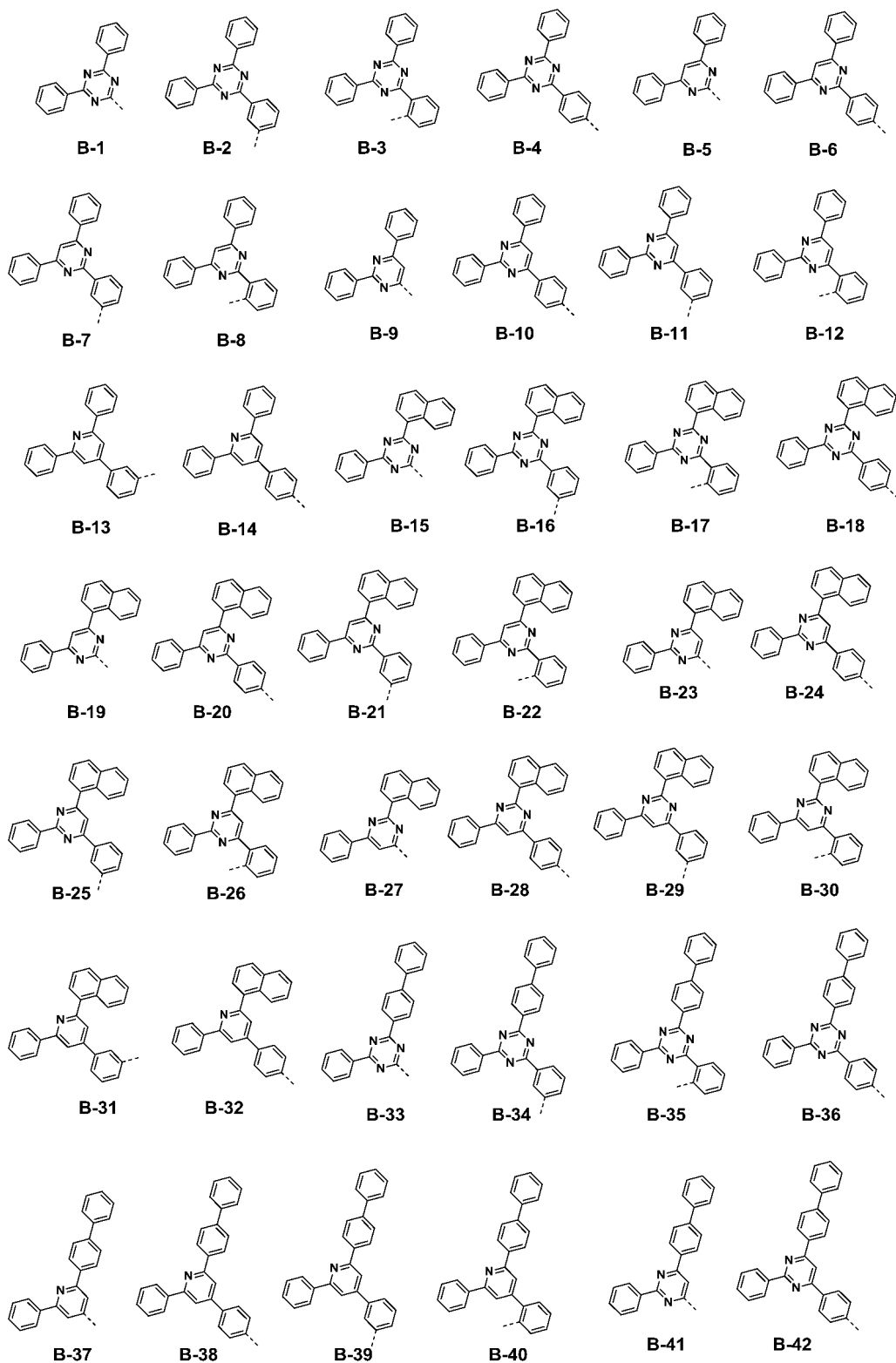
30

40

【請求項 9】

前記 A は、水素；重水素；または下記構造の中から選択されたいずれか 1 つである、請求項 2 から 8 のいずれか 1 項に記載の有機発光素子：

【化 1 1】



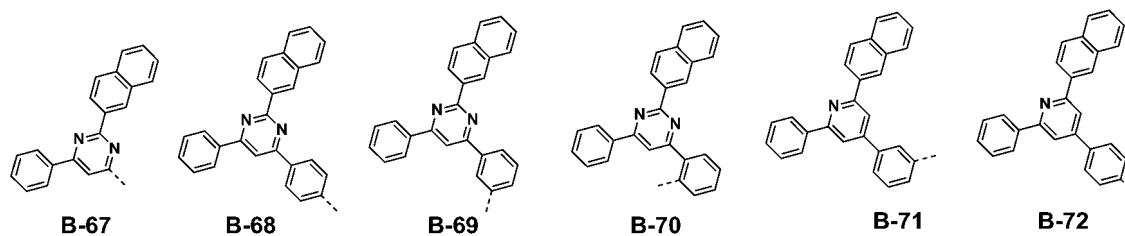
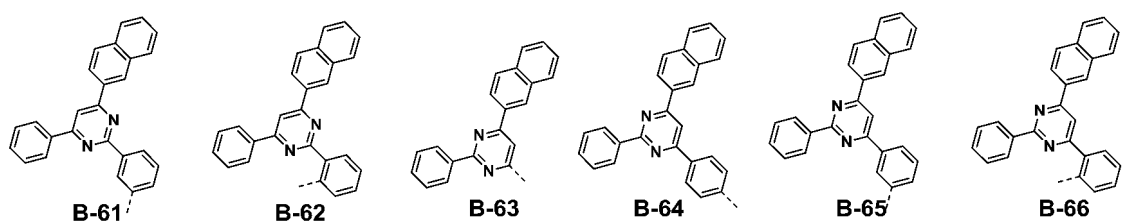
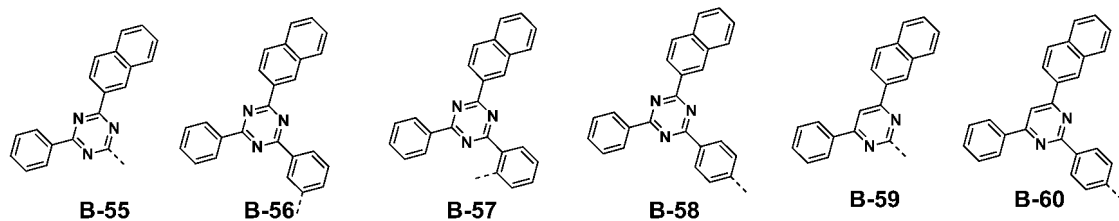
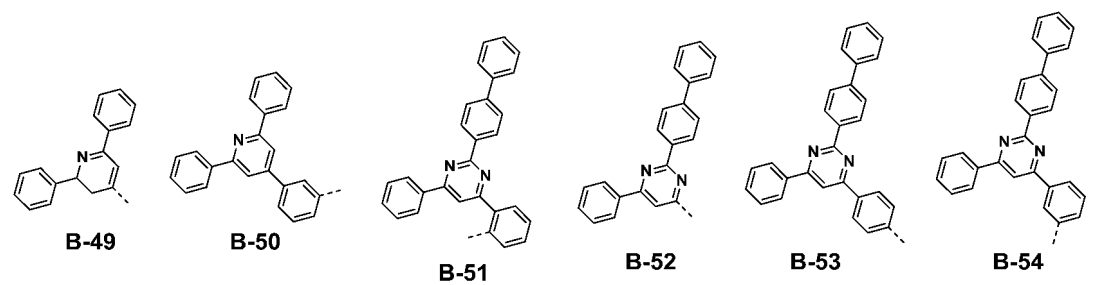
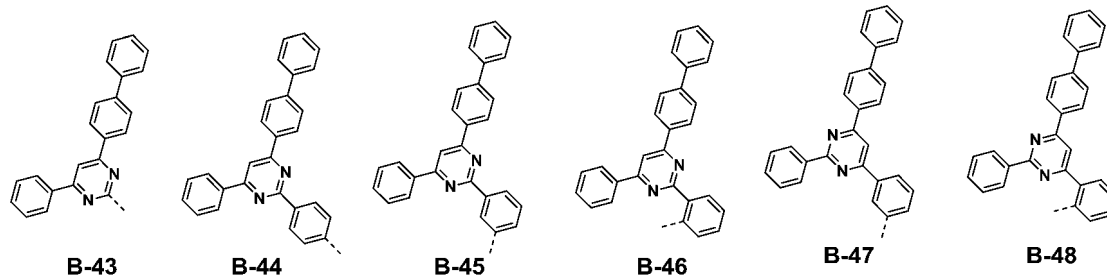
10

20

30

40

【化 1 2】

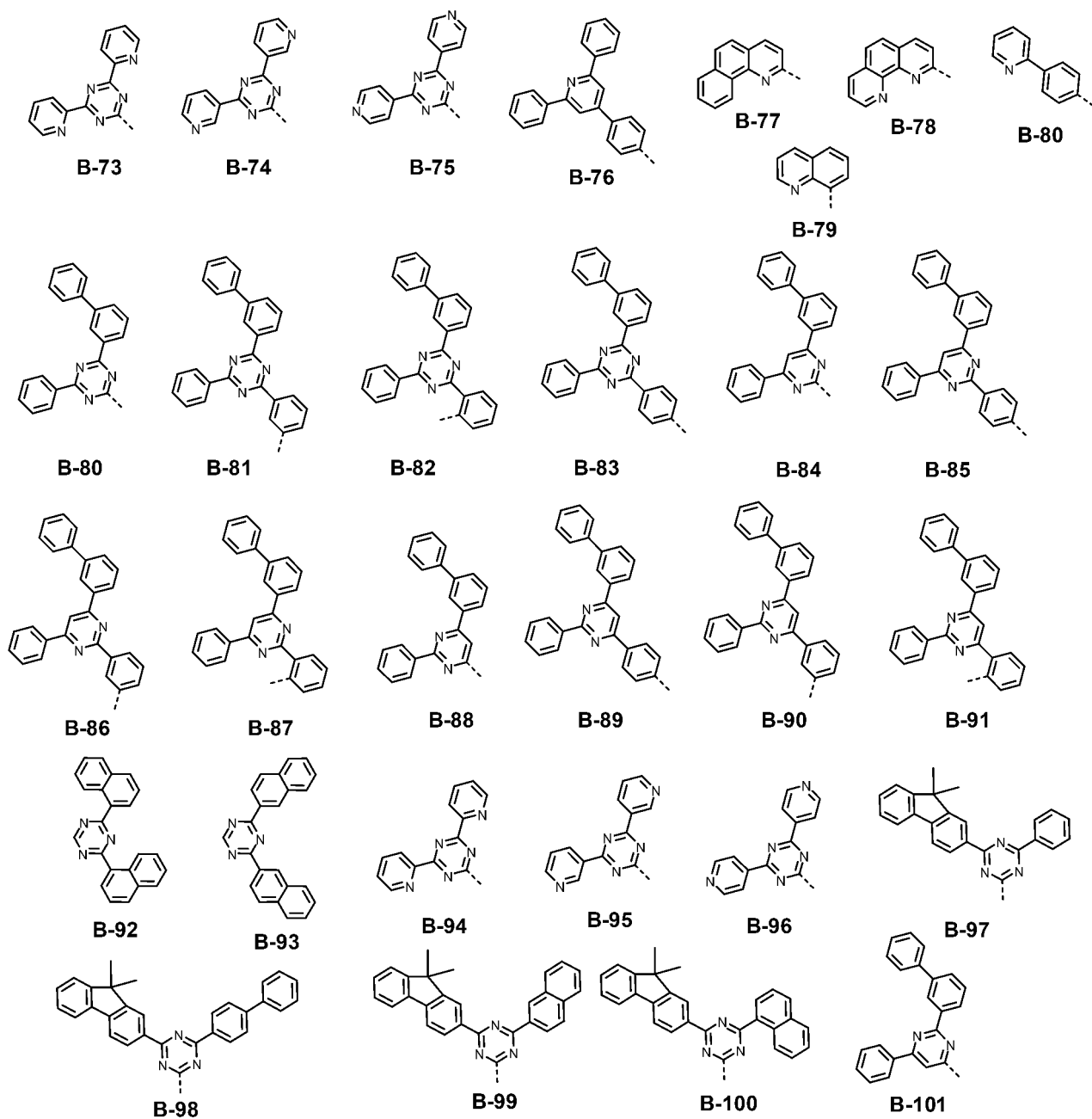


10

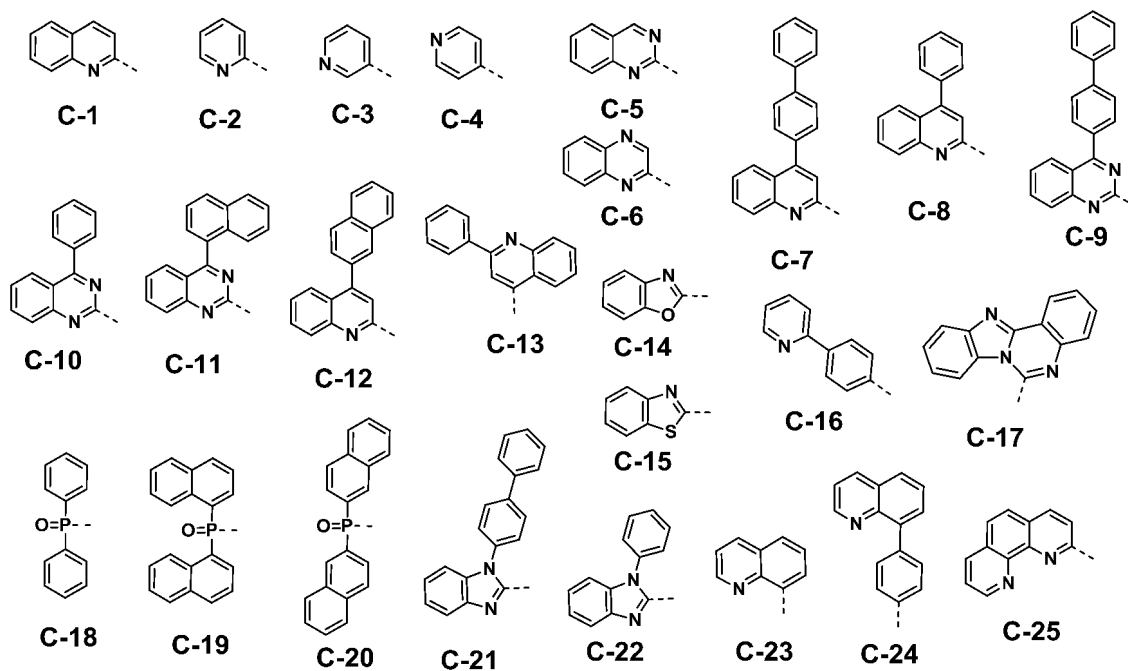
20

30

【化 1 3】



【化 1 4】



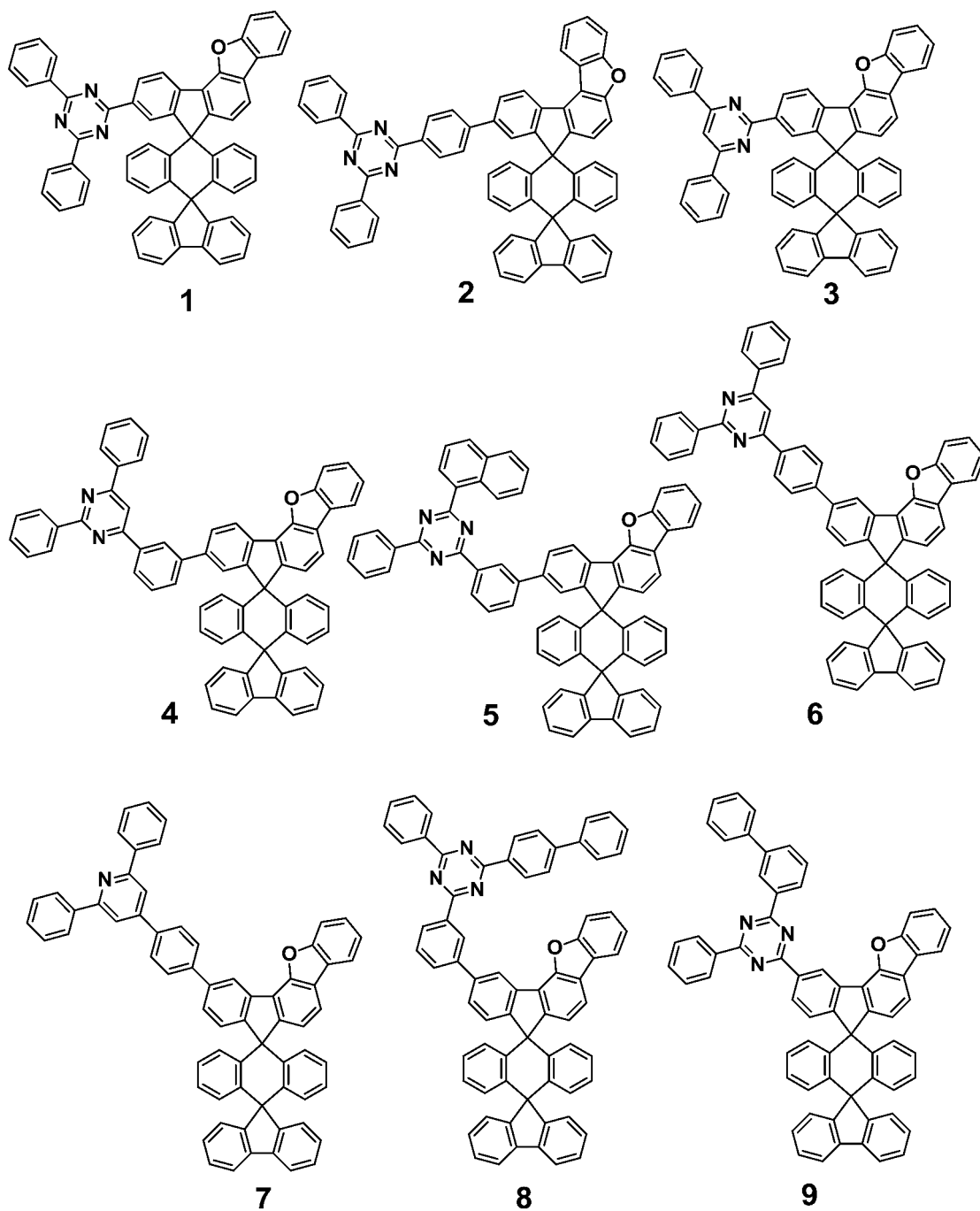
10

【請求項 10】

20

前記化学式 1 の化合物は、下記化合物の中から選択されたいずれか 1 つである、
請求項 1 に記載の有機発光素子：

【化 1 5】

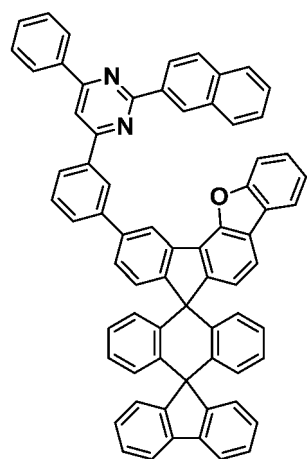
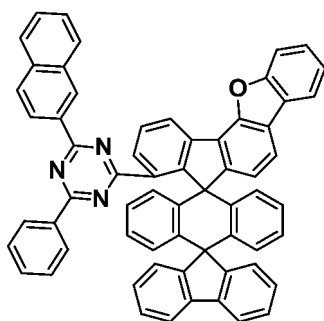
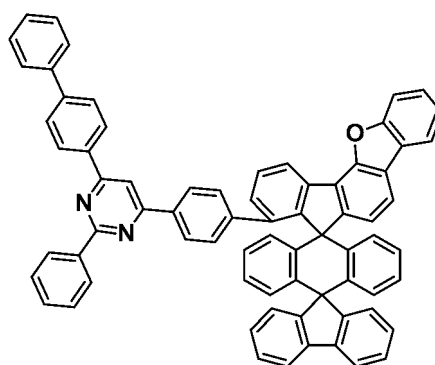
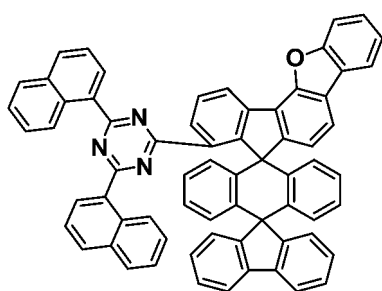
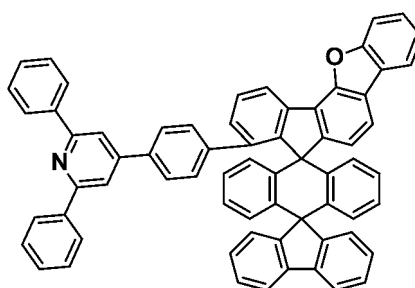
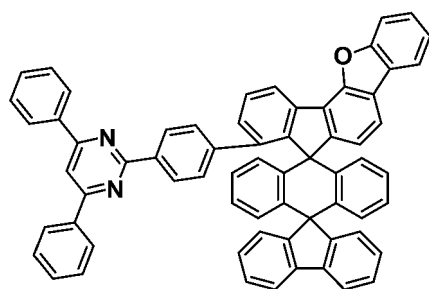
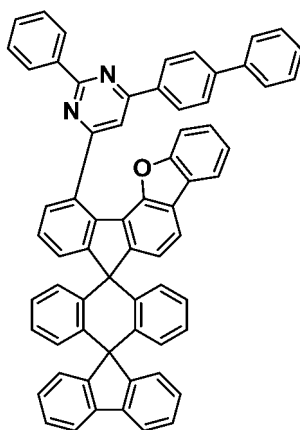
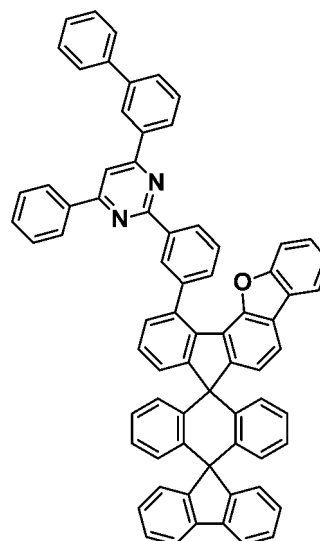


10

20

30

【化 1 6】

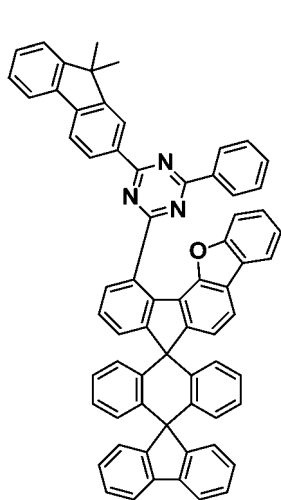
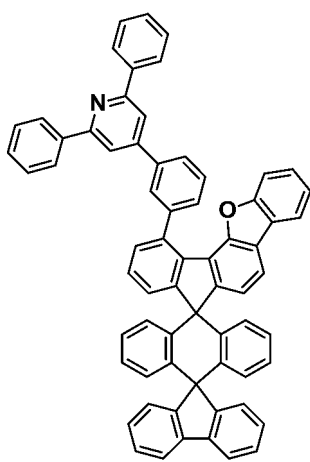
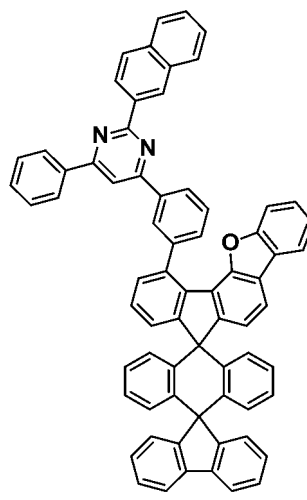
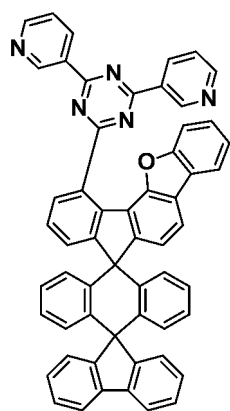
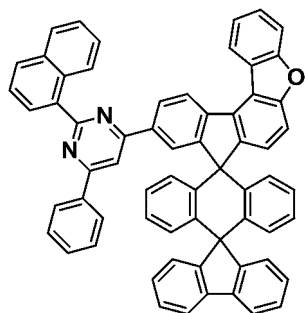
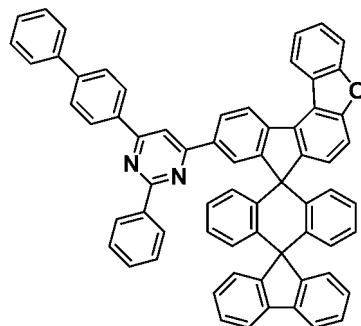
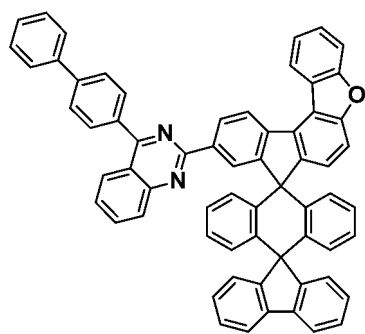
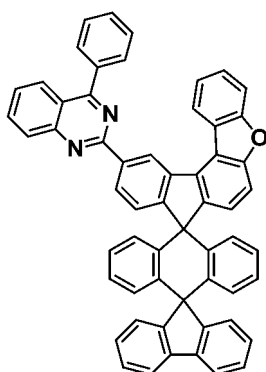
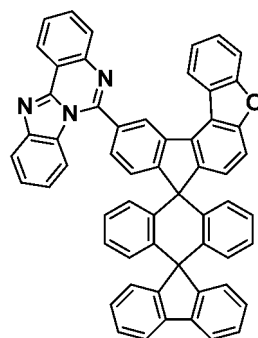
**10****11****12****13****14****15****16****17**

10

20

30

【化 17】

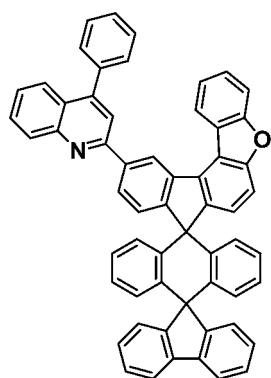
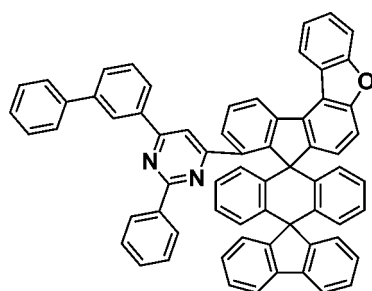
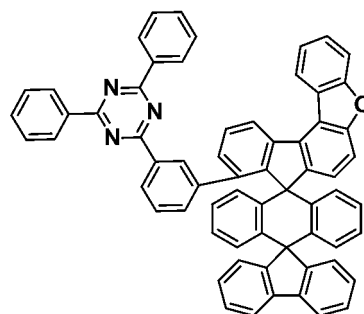
**18****19****20****21****22****23****24****25****26**

10

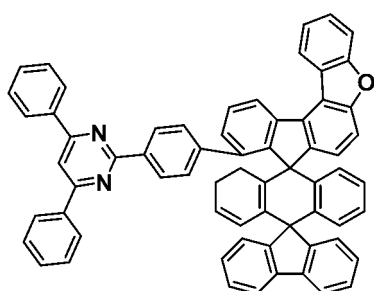
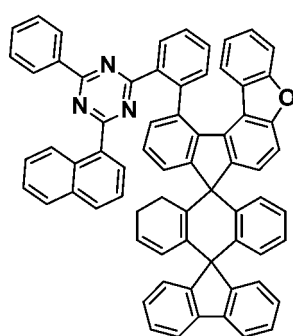
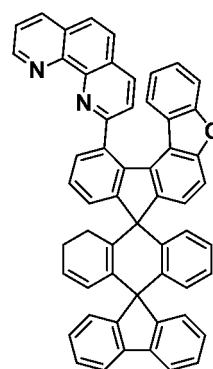
20

30

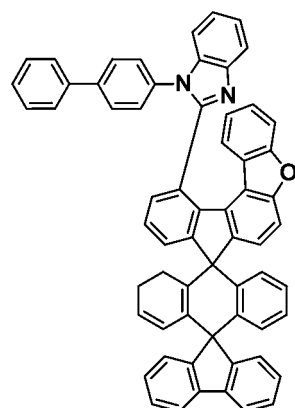
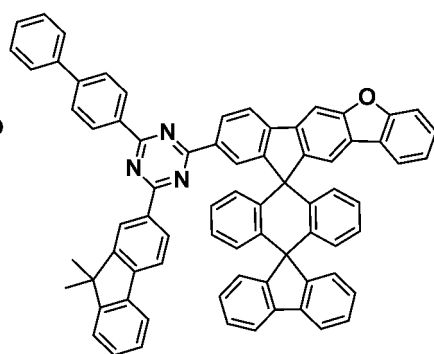
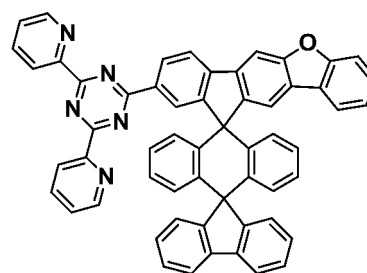
【化 1 8】

**27****28****29**

10

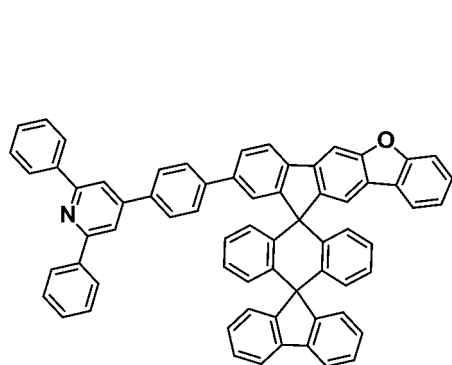
**30****31****32**

20

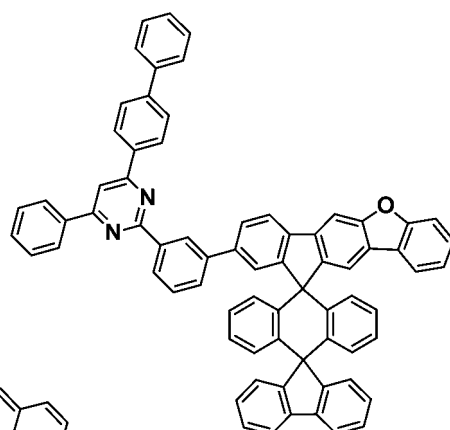
**33****34****35**

30

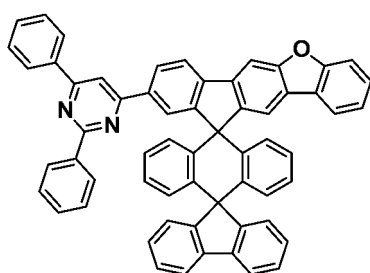
【化 1 9】



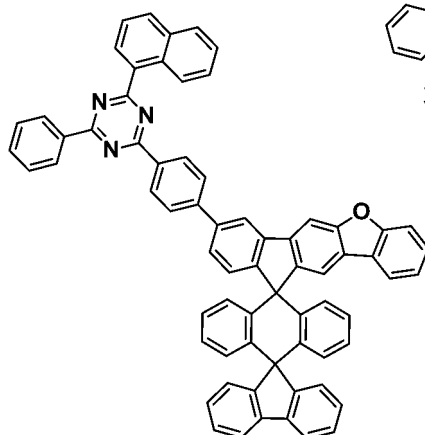
36



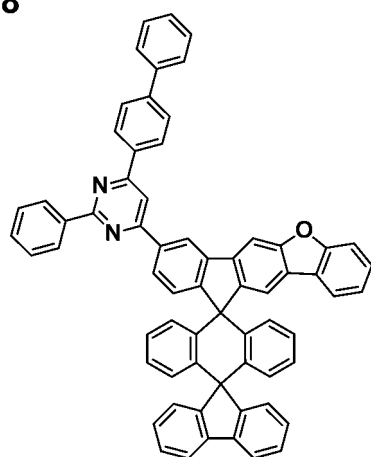
37



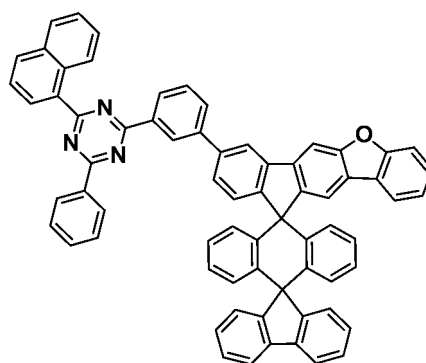
38



39



40



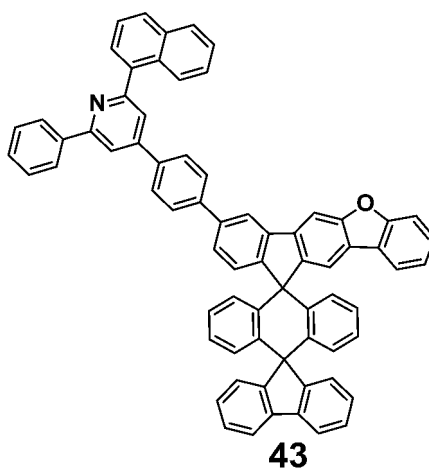
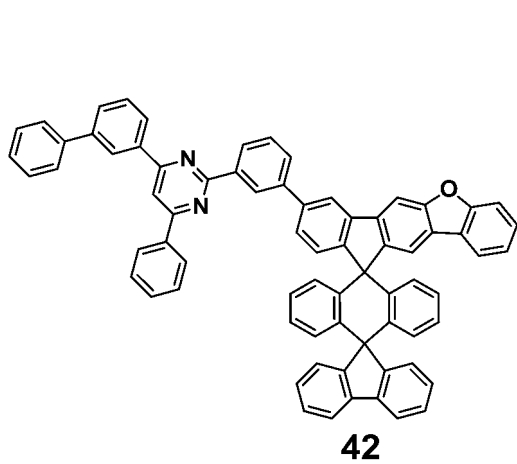
41

10

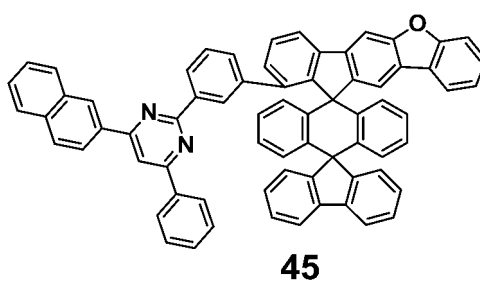
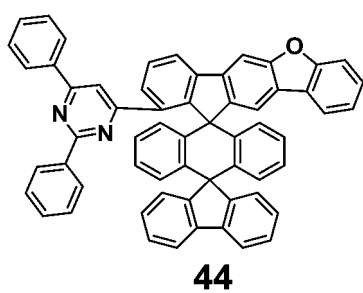
20

30

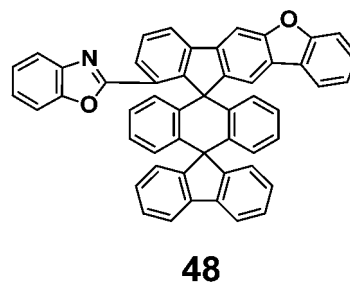
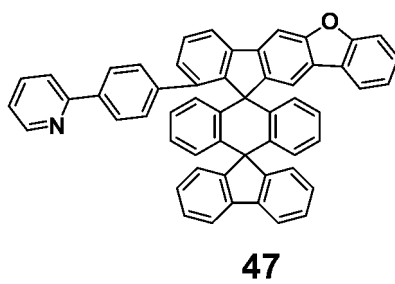
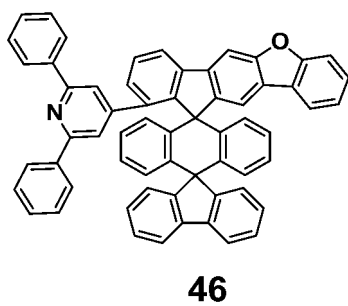
【化 20】



10

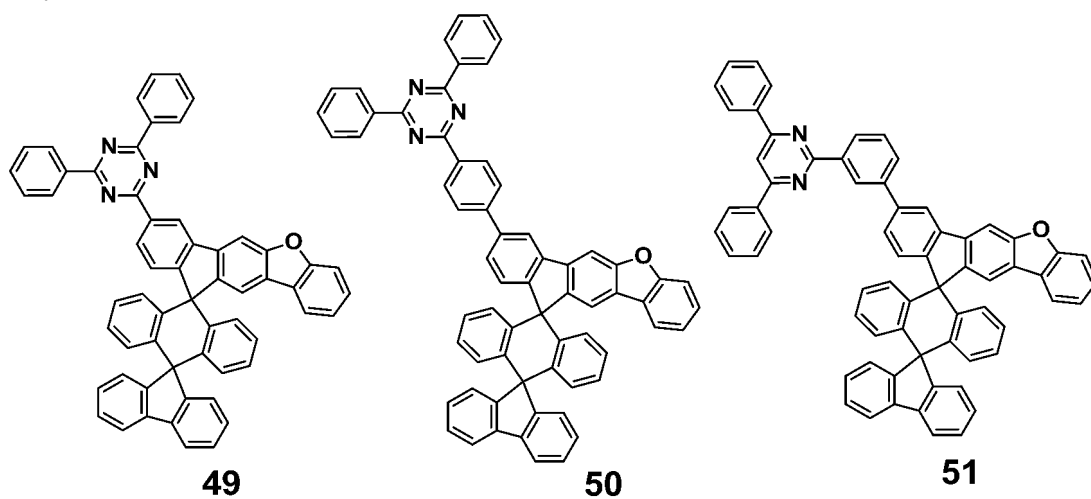


20

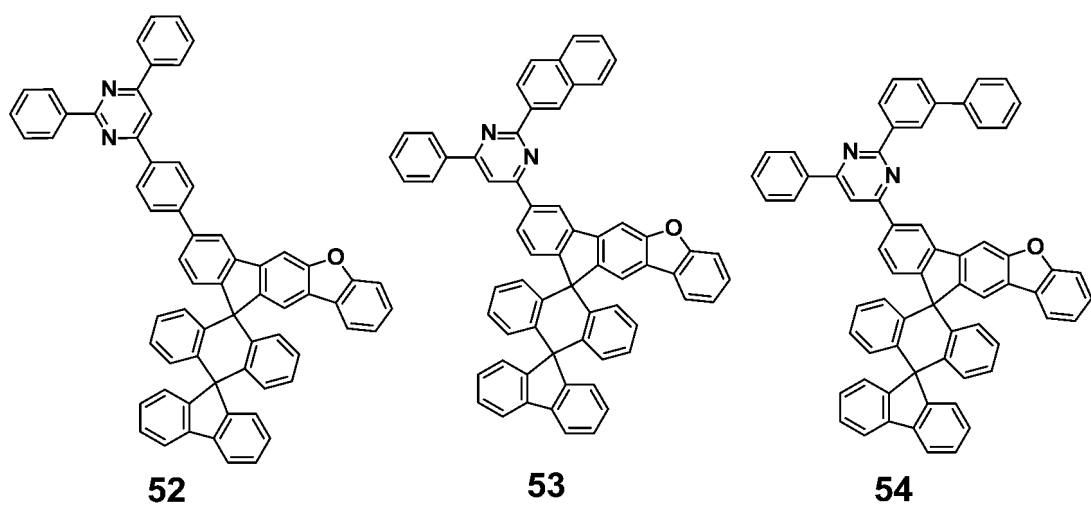


30

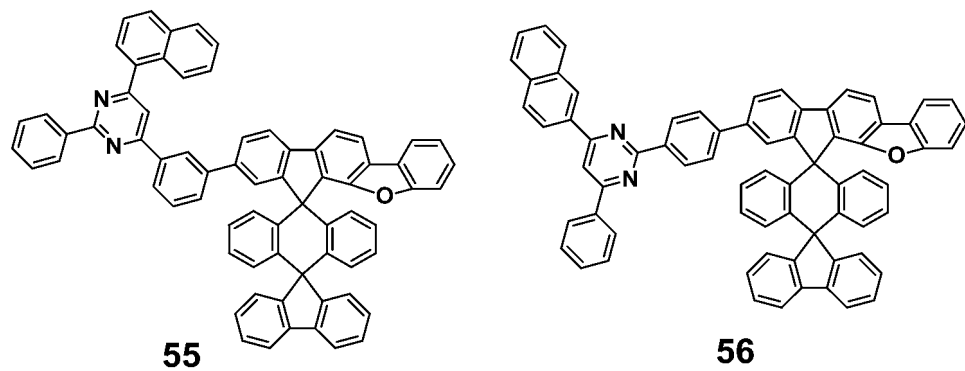
【化 2 1】



10

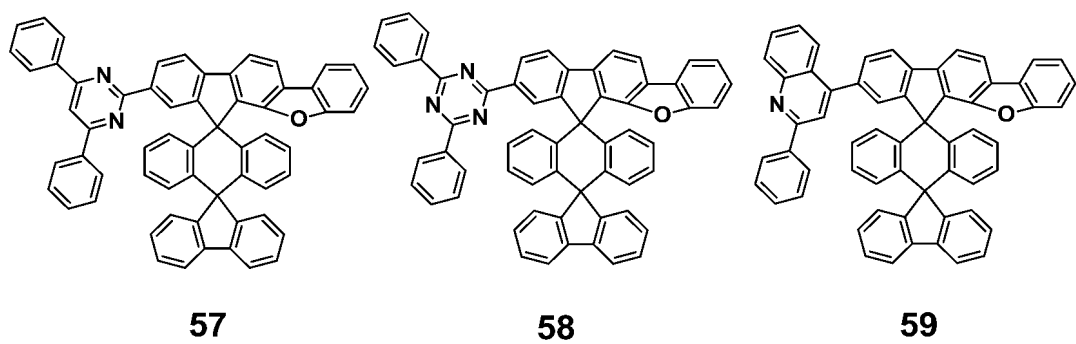


20



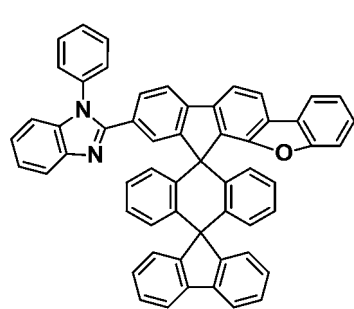
30

【化 2 2】

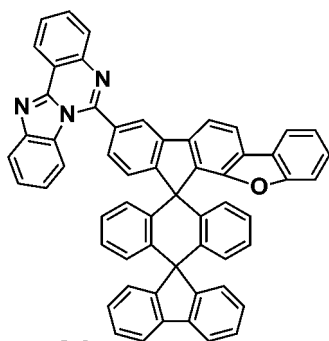


40

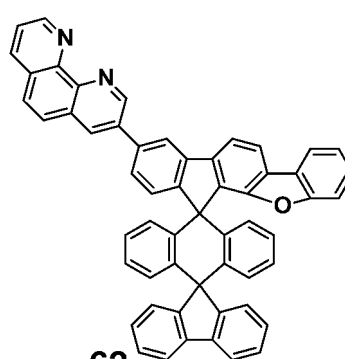
【化 2 3】



60

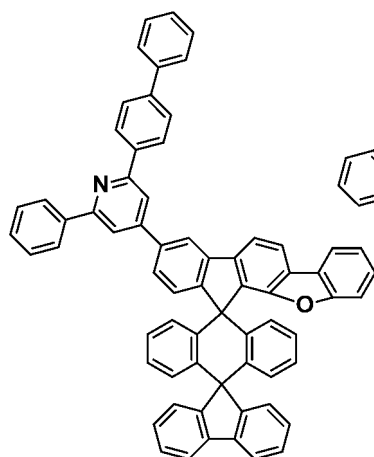


61

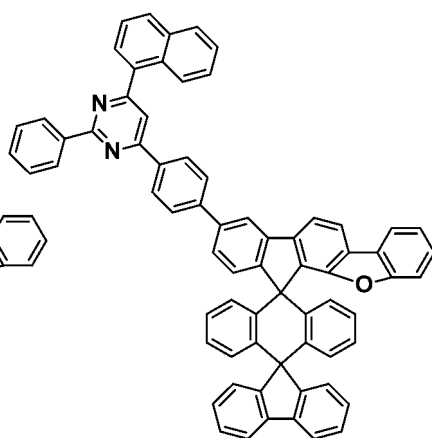


62

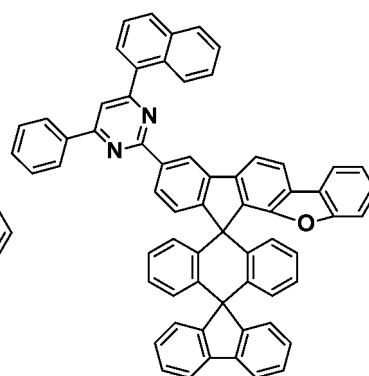
10



63

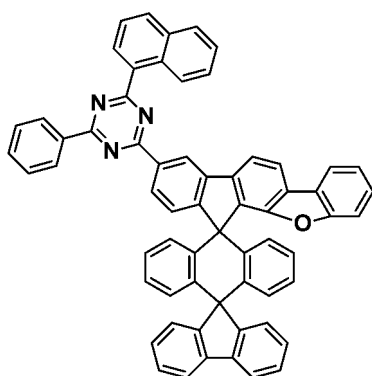


64

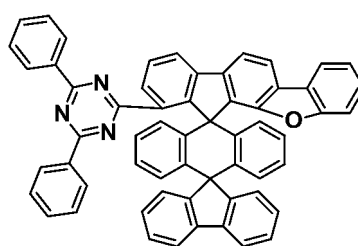


65

20



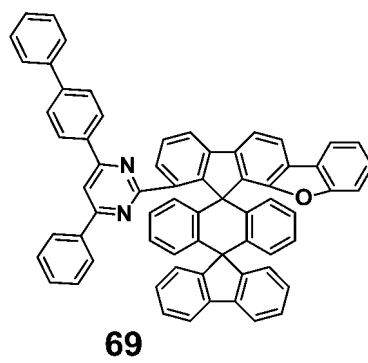
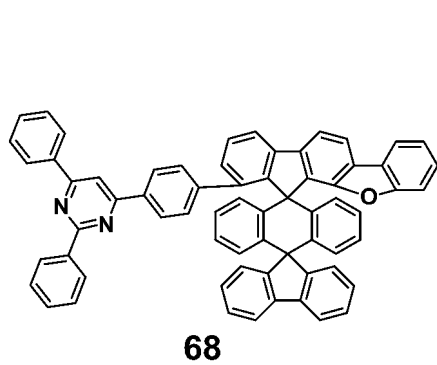
66



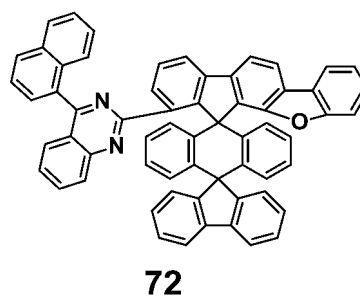
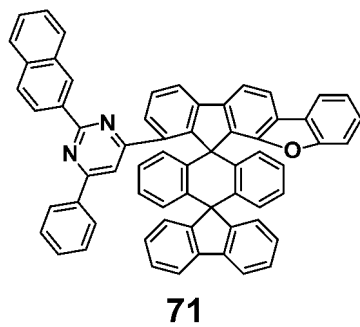
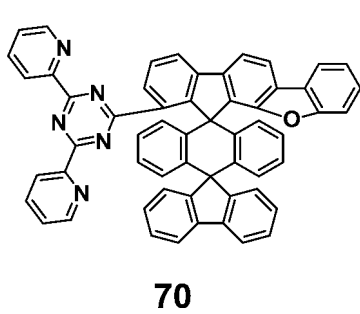
67

30

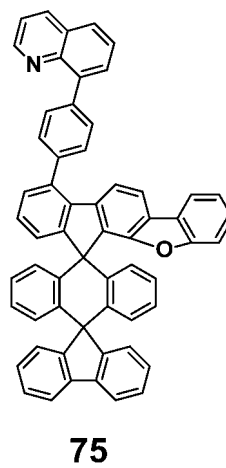
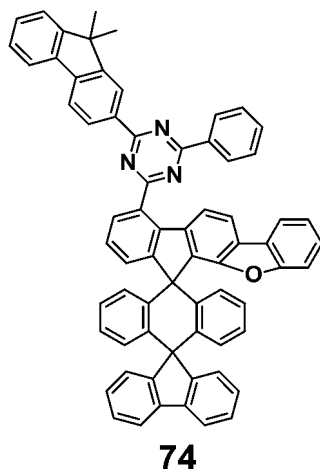
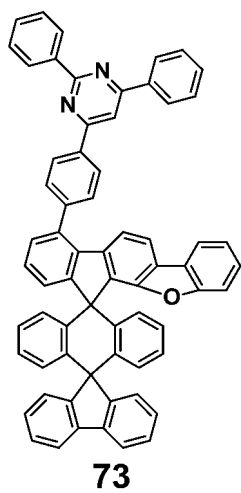
【化 2 4】



10

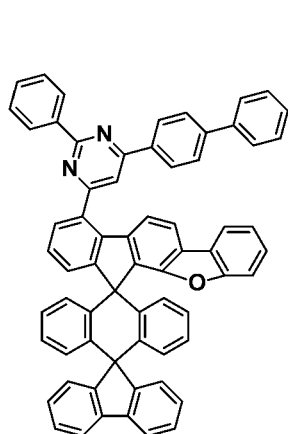
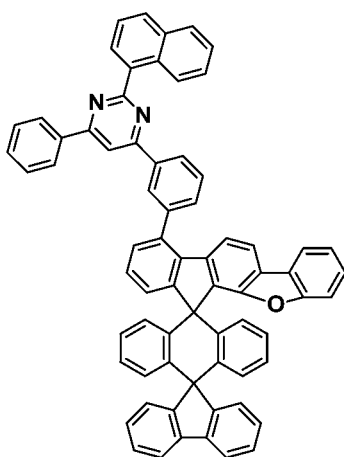
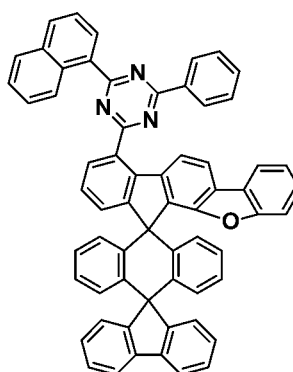


20

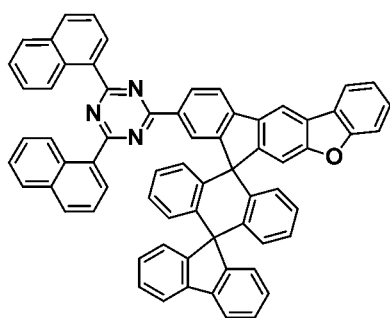
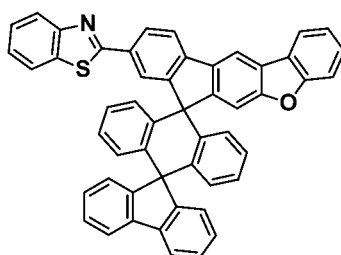


30

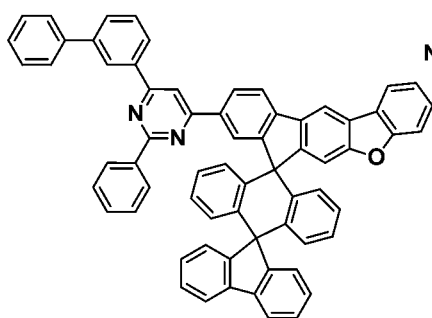
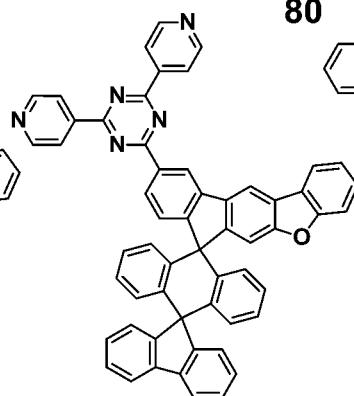
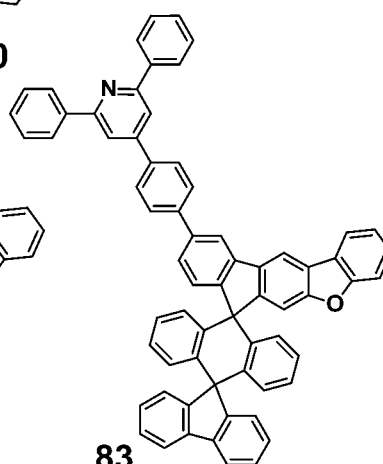
【化 2 5】

**76****77****78**

10

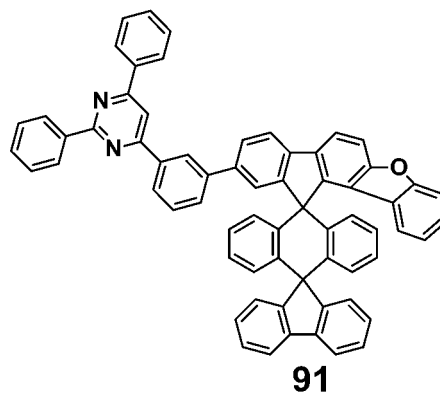
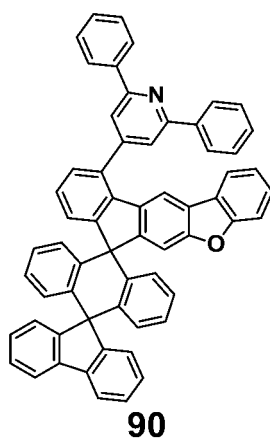
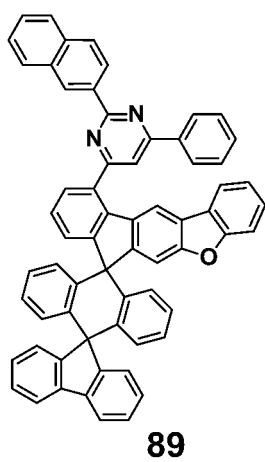
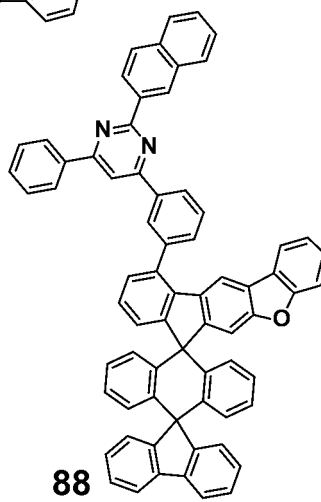
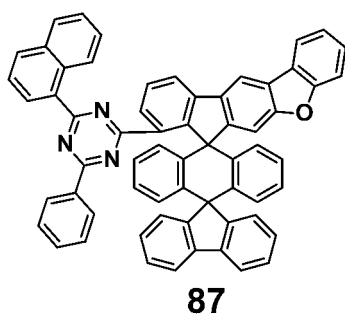
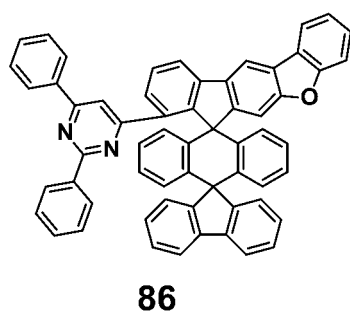
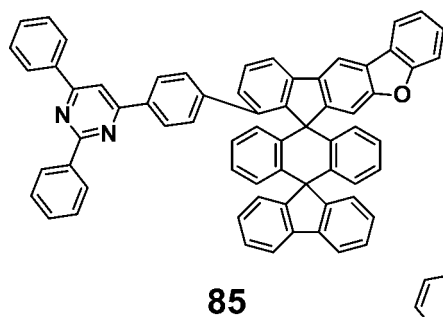
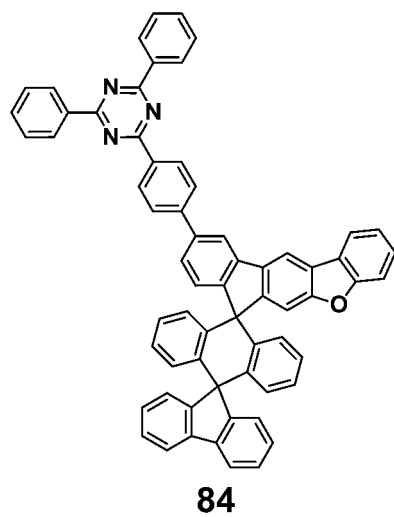
**79****80**

20

**81****82****83**

30

【化 2 6】

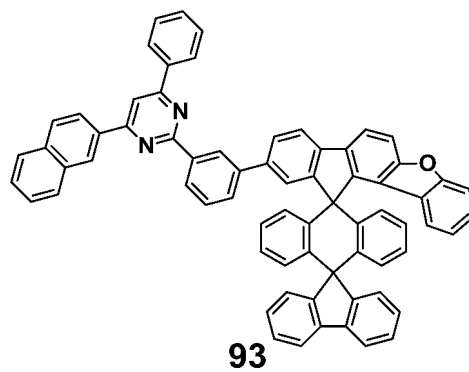
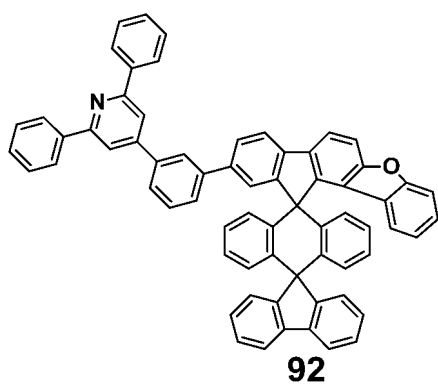


10

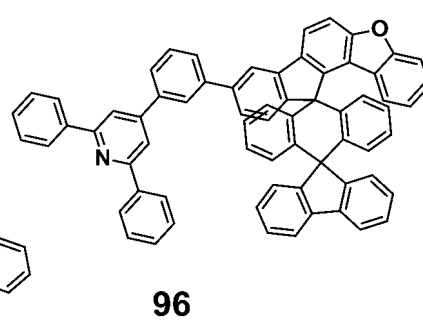
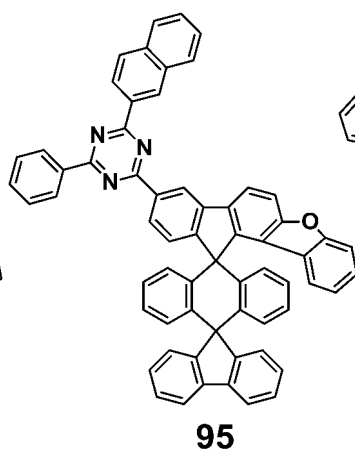
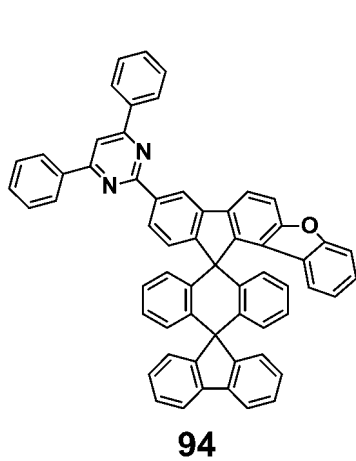
20

30

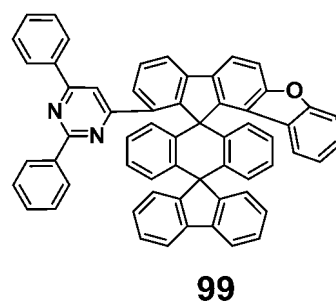
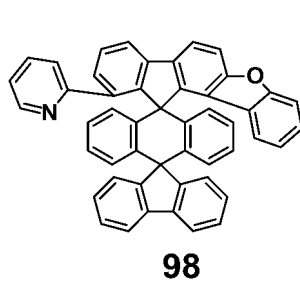
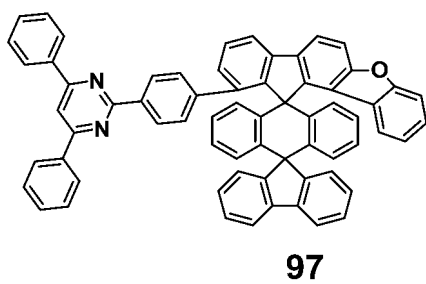
【化 27】



10

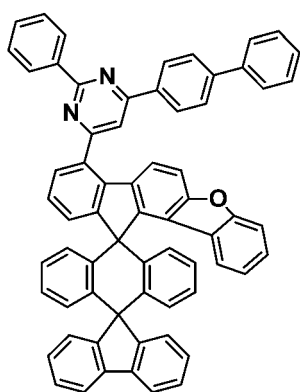
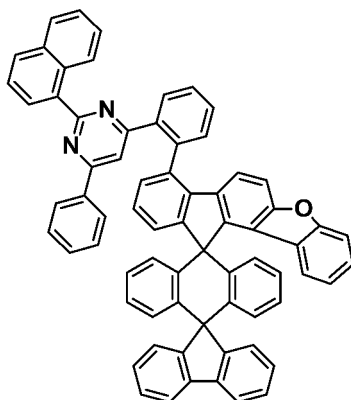
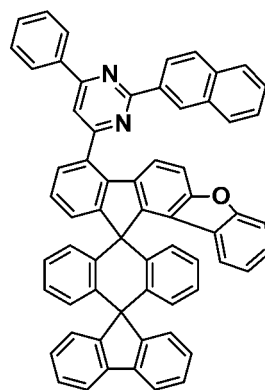


20

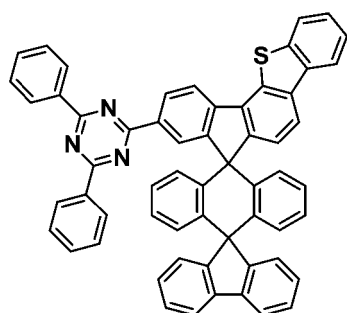
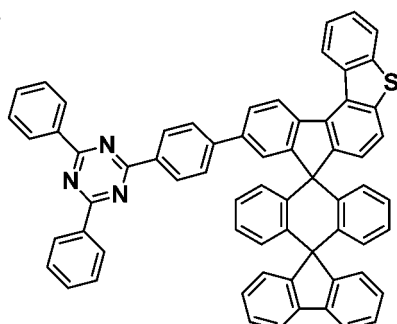
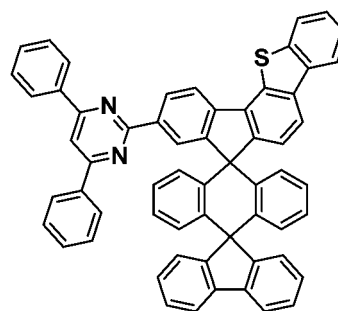


30

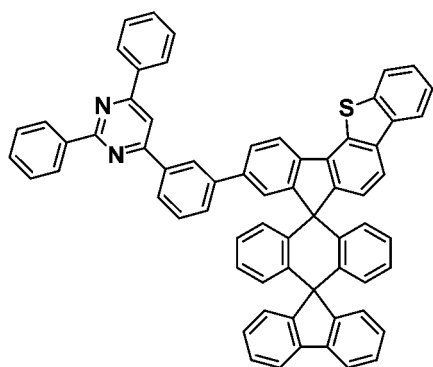
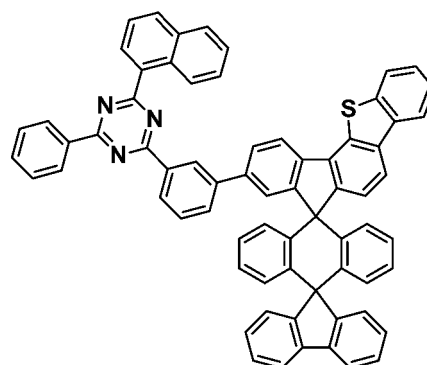
【化 2 8】

**100****101****102**

10

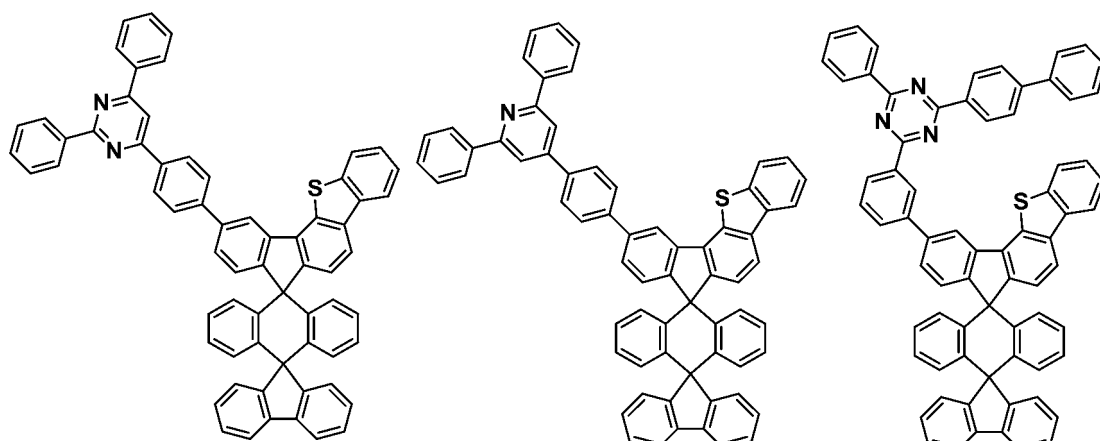
**103****104****105**

20

**106****107**

30

【化 2 9】

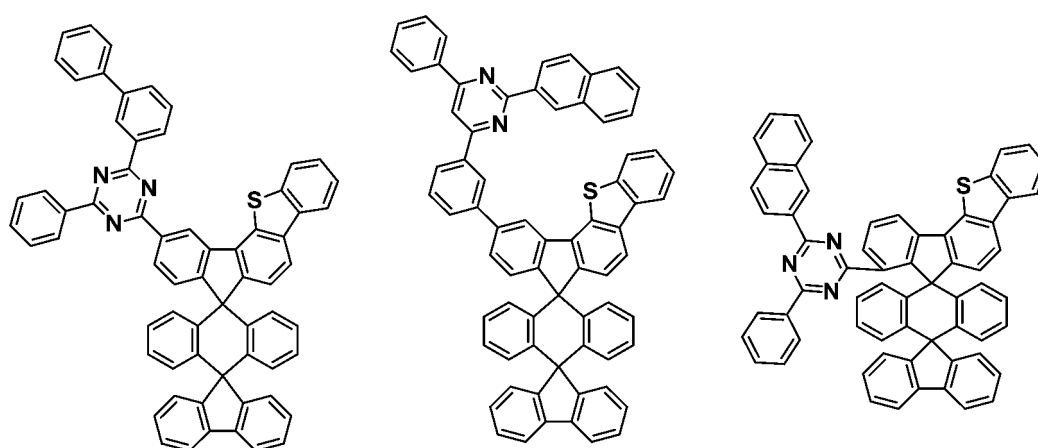


108

109

110

10

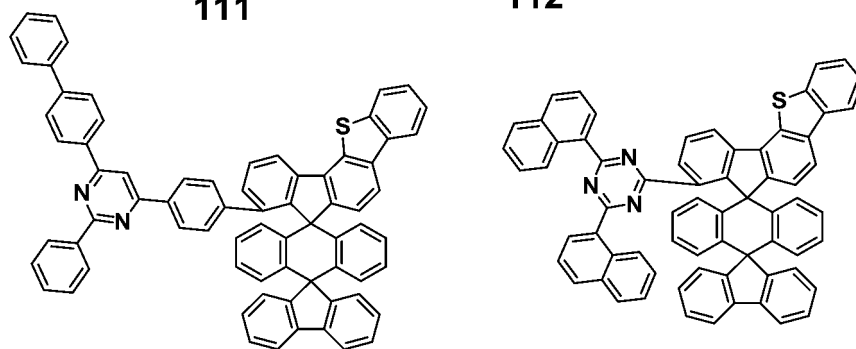


111

112

113

20

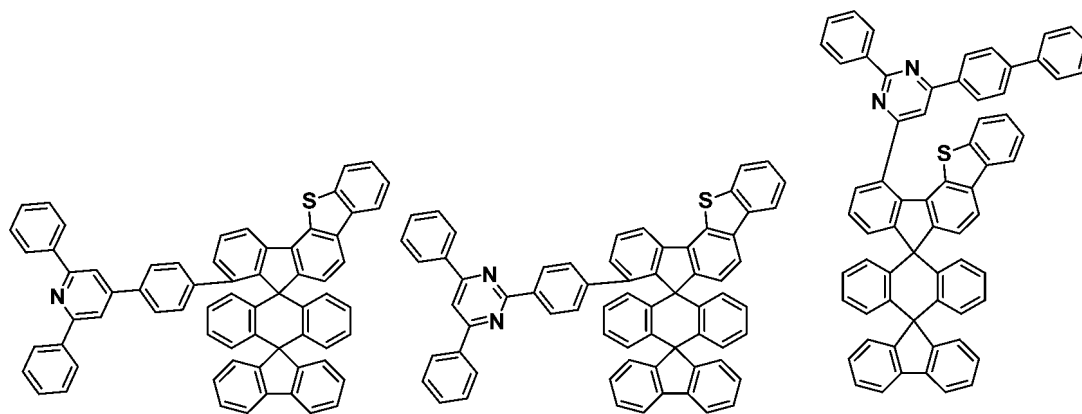


114

115

30

【化 3 0】



116

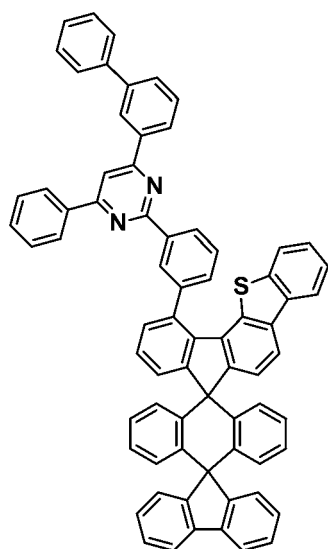
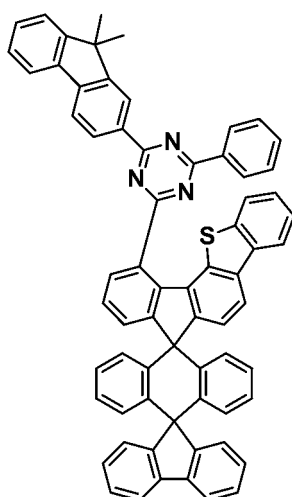
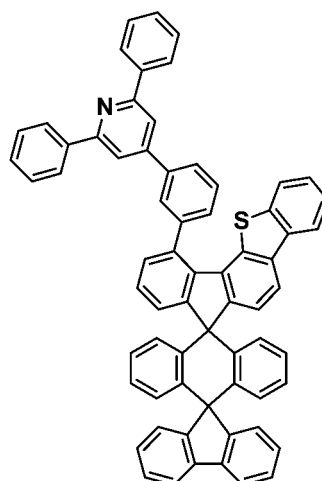
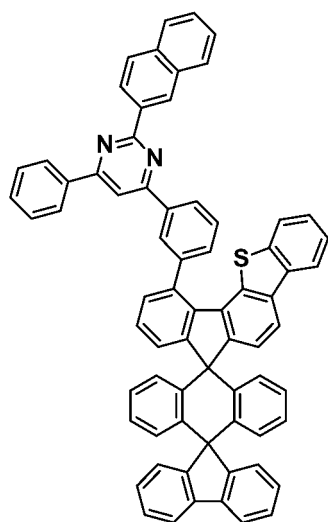
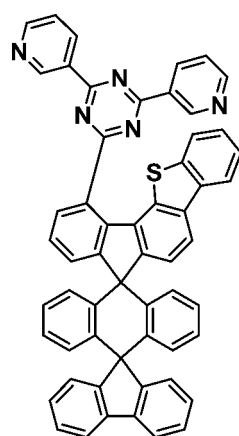
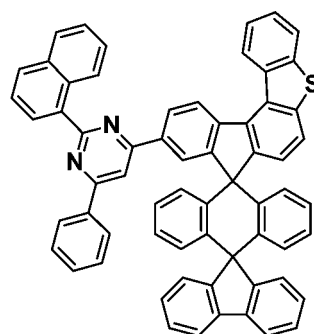
117

118

40

50

【化 3 1】

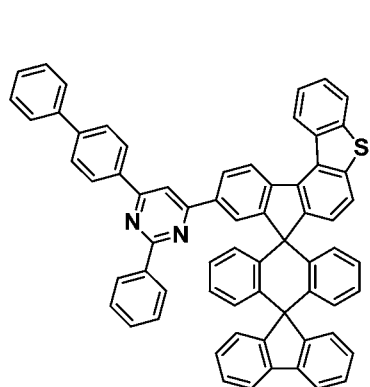
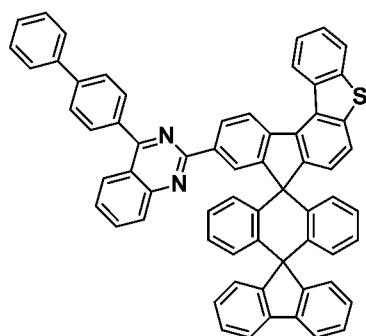
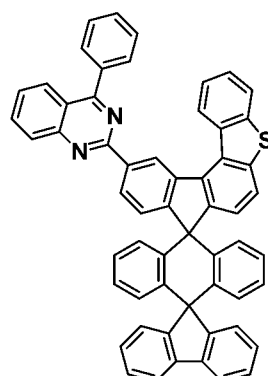
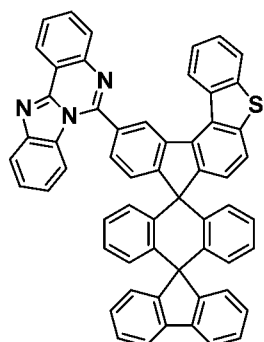
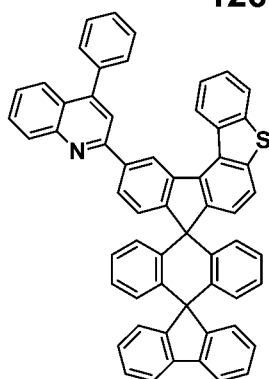
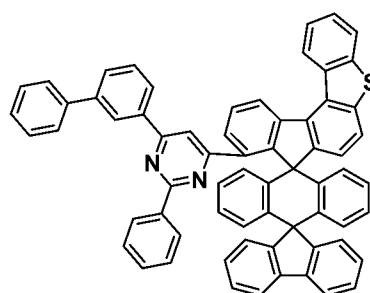
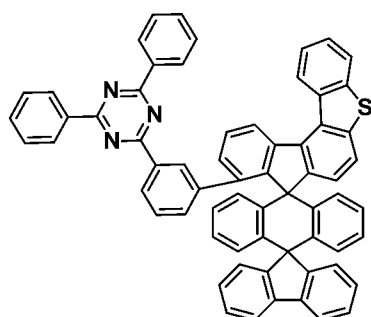
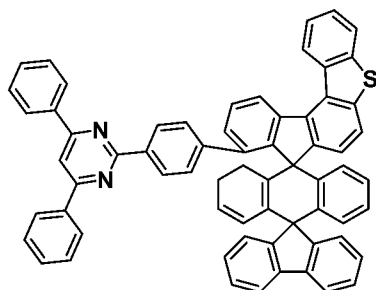
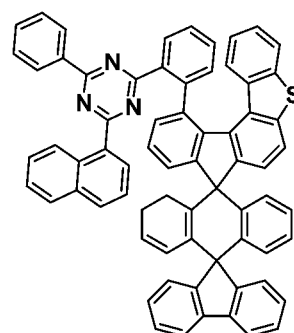
**119****120****121****122****123****124**

10

20

30

【化 3 2】

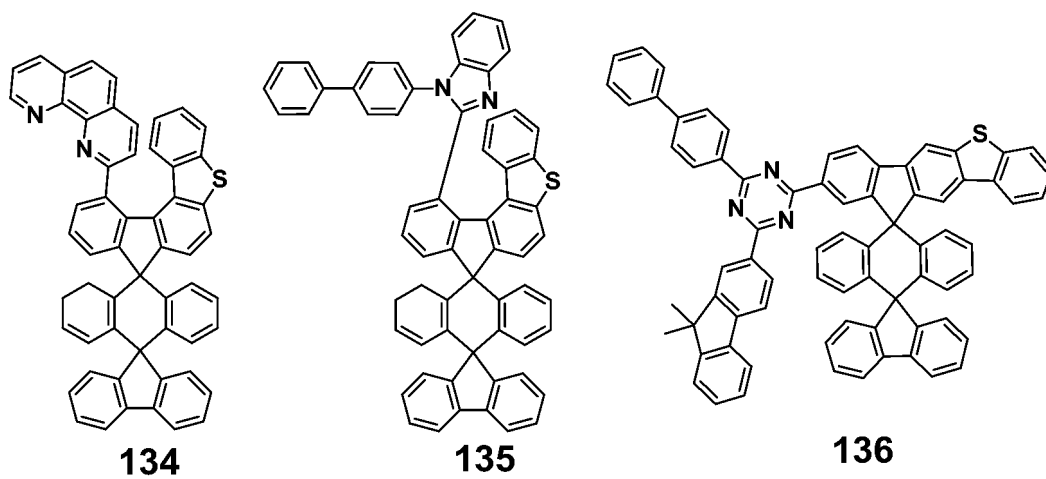
**125****126****127****128****129****130****131****132****133**

10

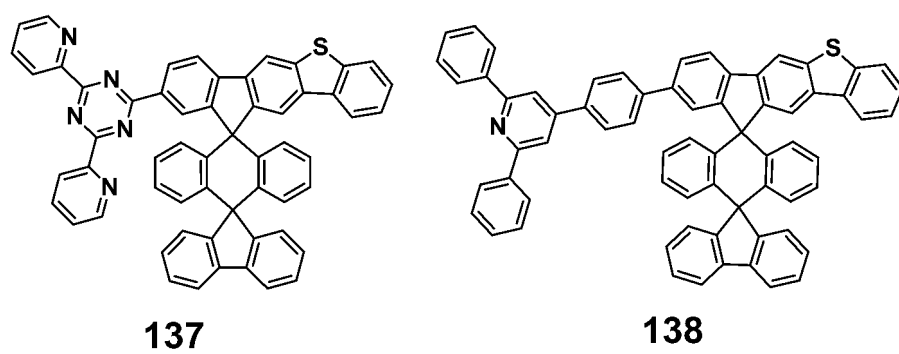
20

30

【化 3 3】

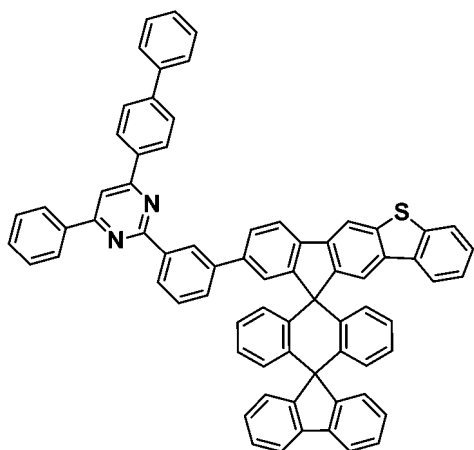
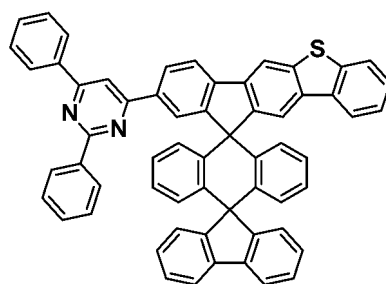


10

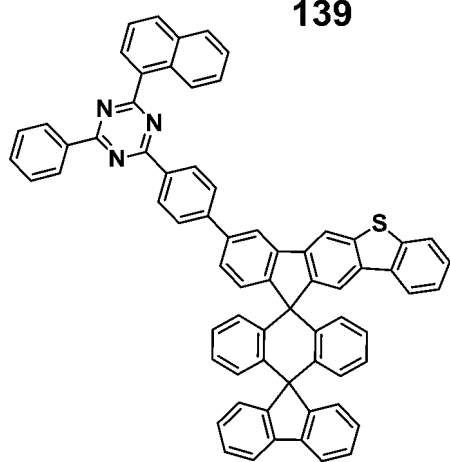
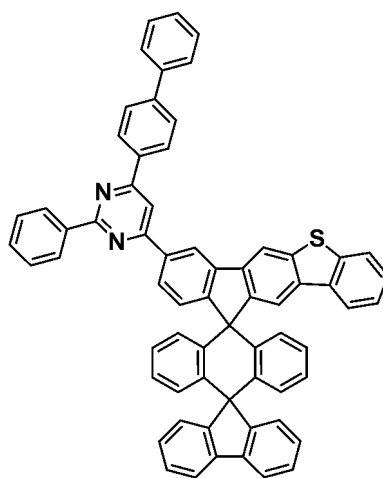


20

【化 3 4】

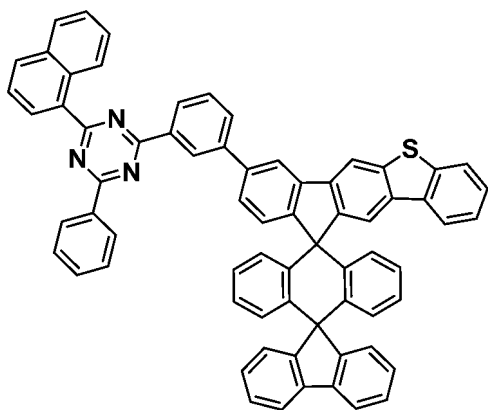
**139****140**

10

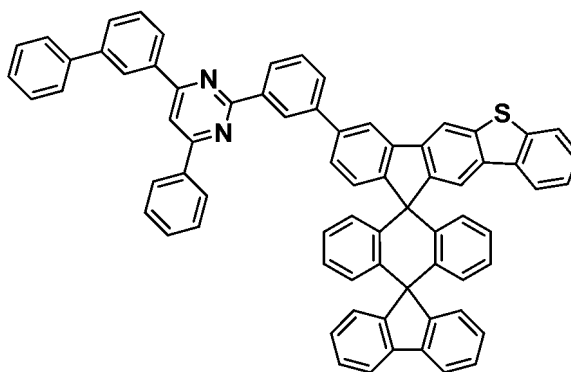
**141****142**

20

【化 3 5】

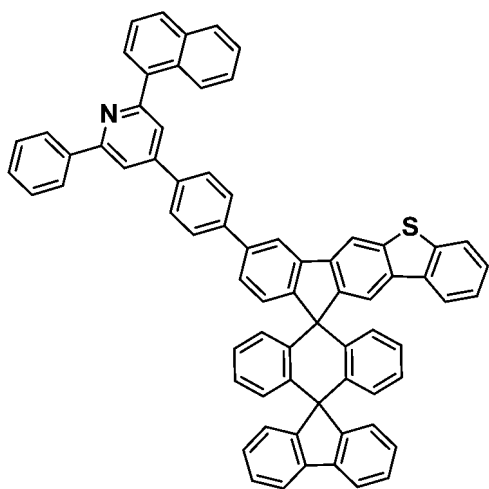


143

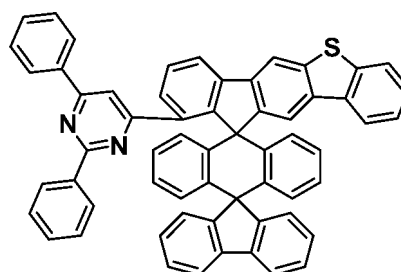


144

10



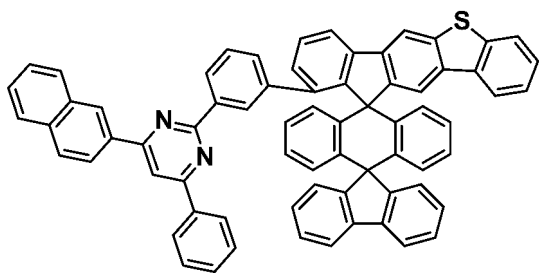
145



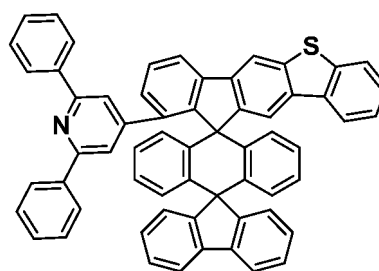
146

20

【化 3 6】

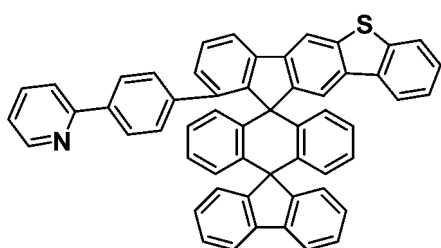


147

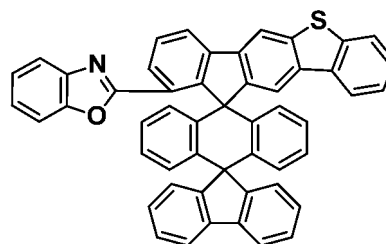


148

30



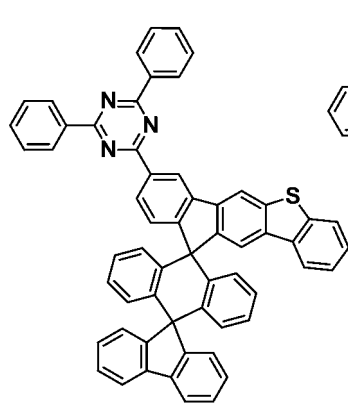
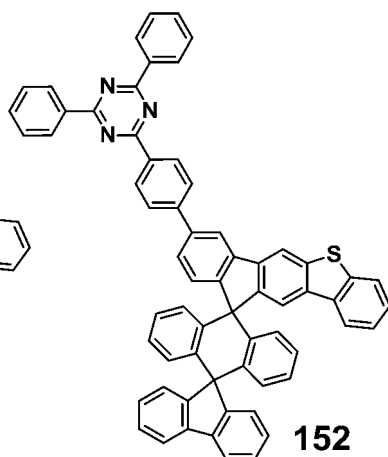
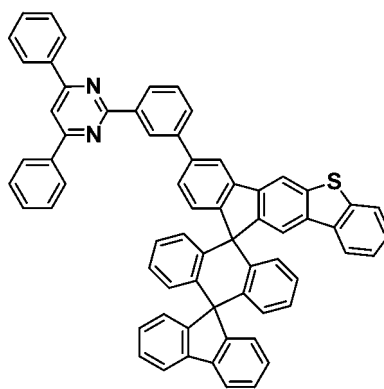
149



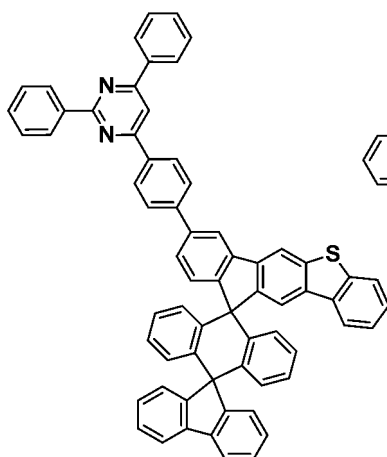
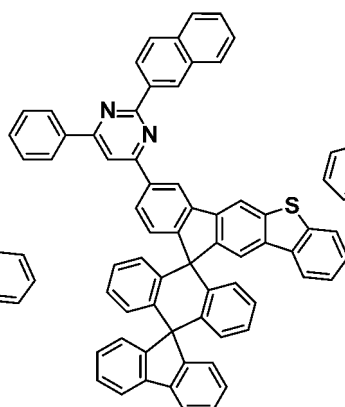
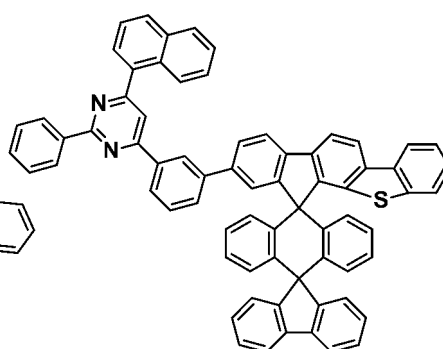
150

40

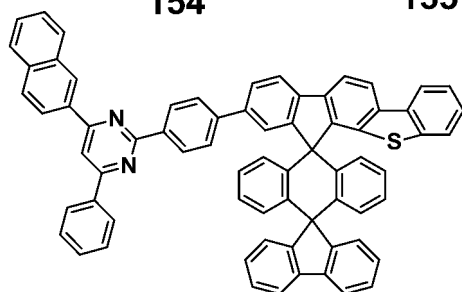
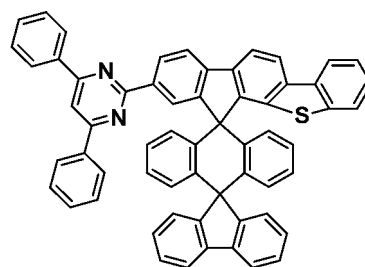
【化 3 7】

**151****152****153**

10

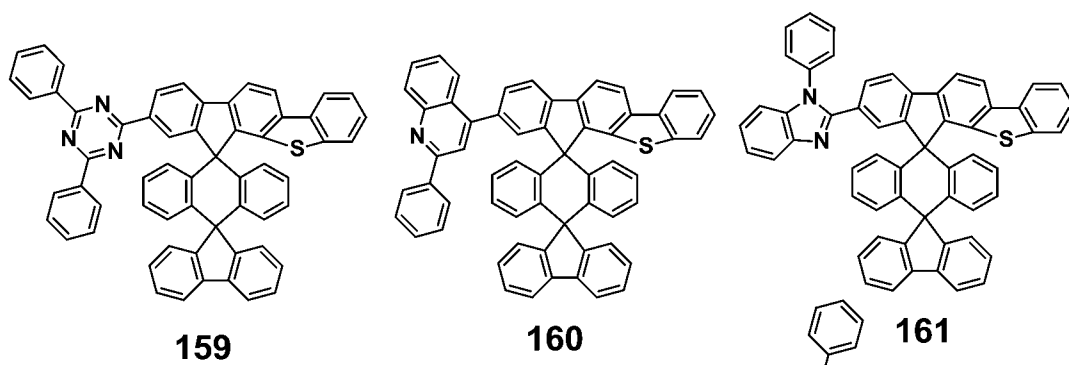
**154****155****156**

20

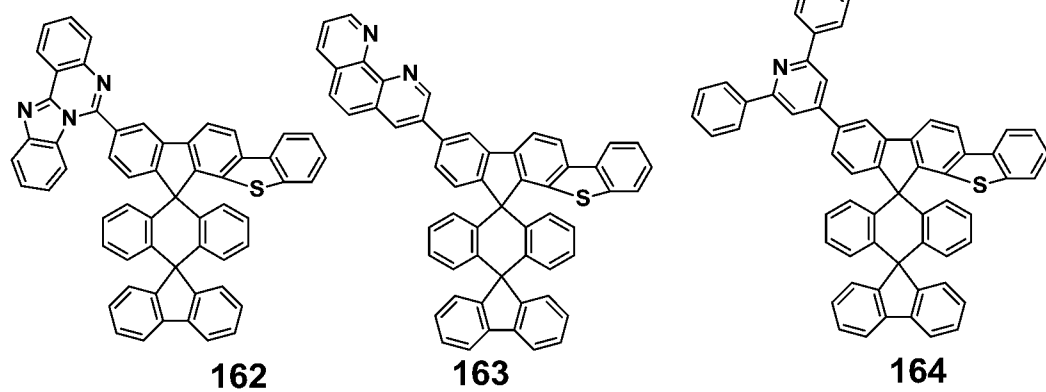
**157****158**

30

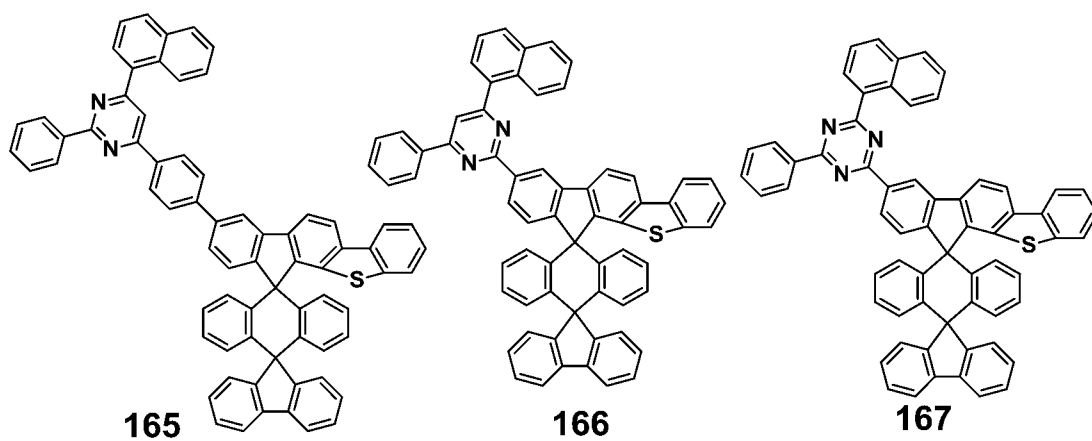
【化 3 8】



10

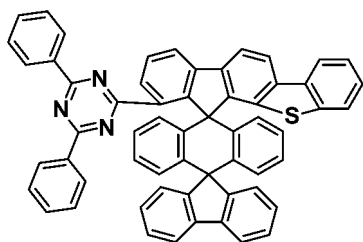


20

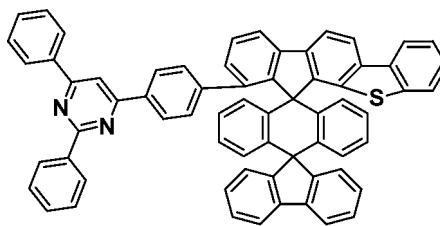


30

【化 3 9】

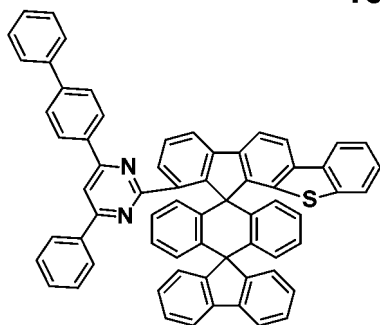


168

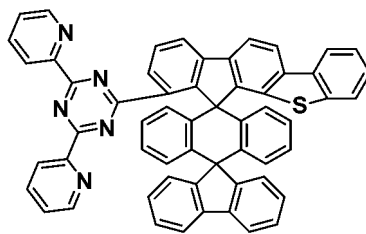


169

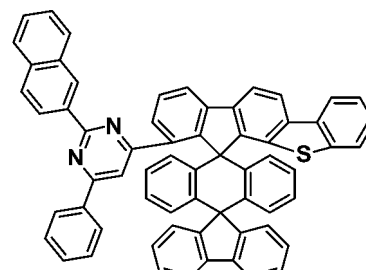
10



170

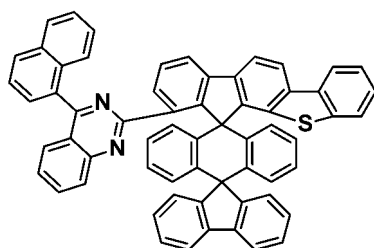


171

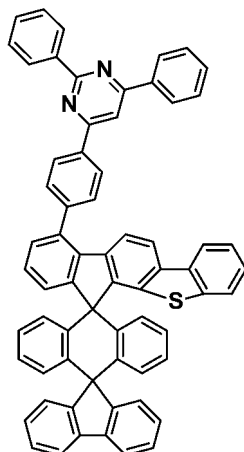


172

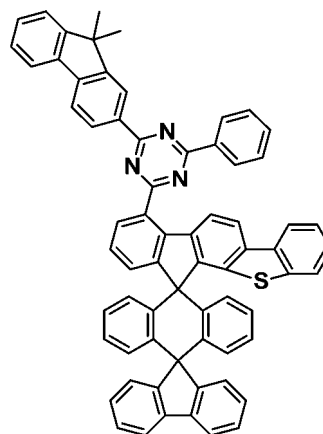
20



173



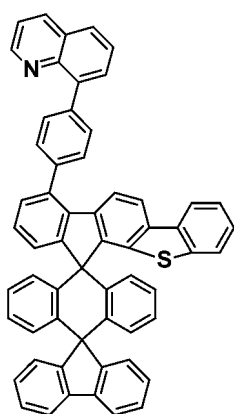
174



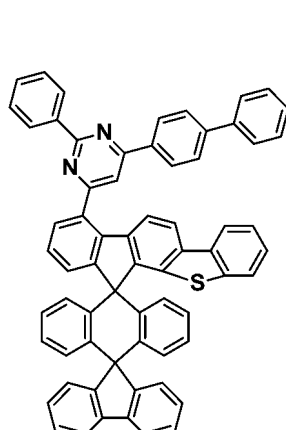
175

30

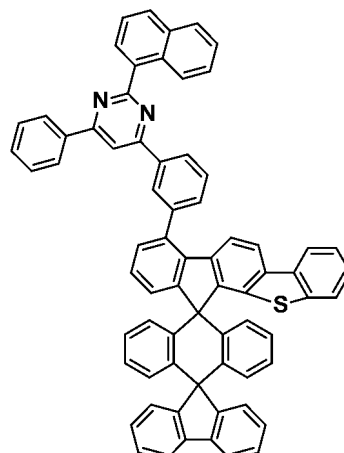
【化 4 0】



176



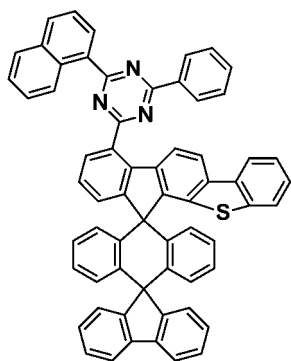
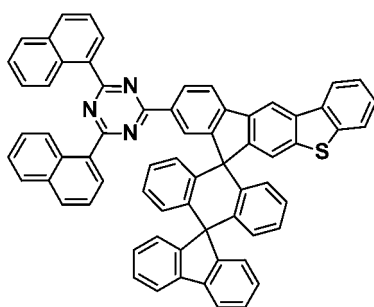
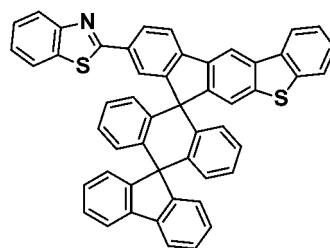
177



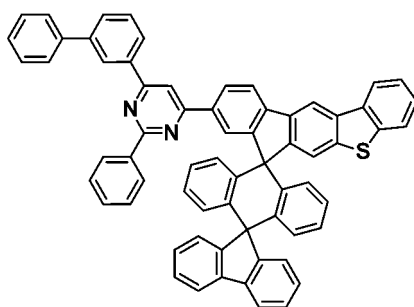
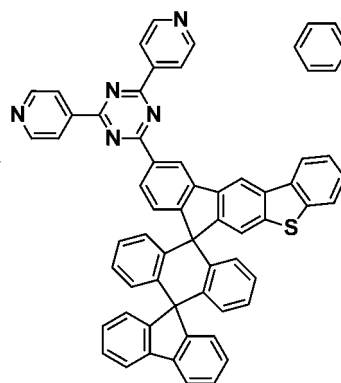
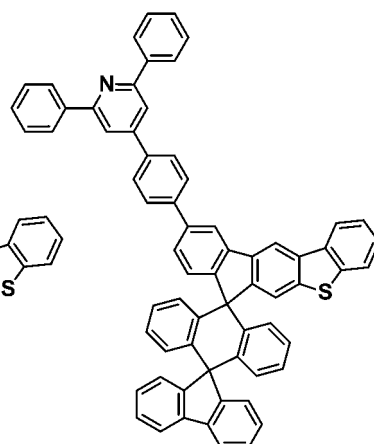
178

40

【化 4 1】

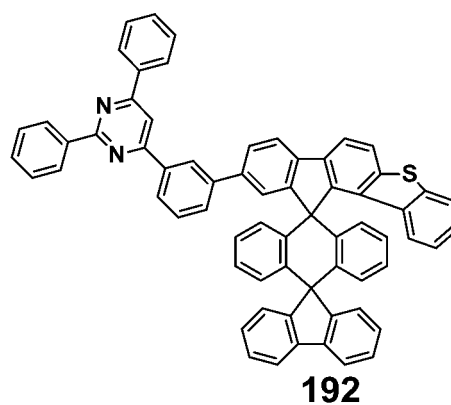
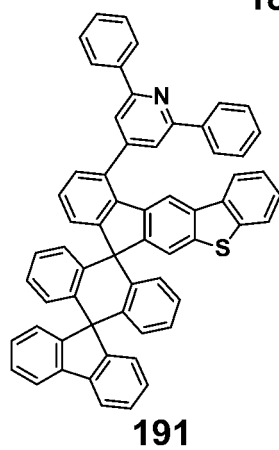
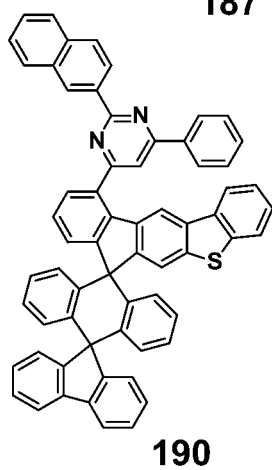
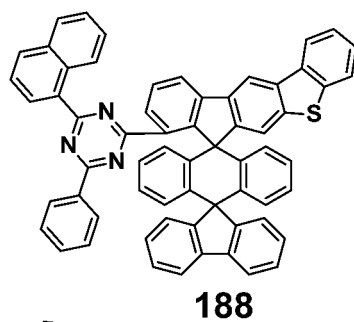
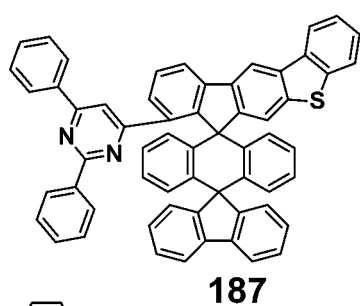
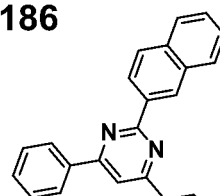
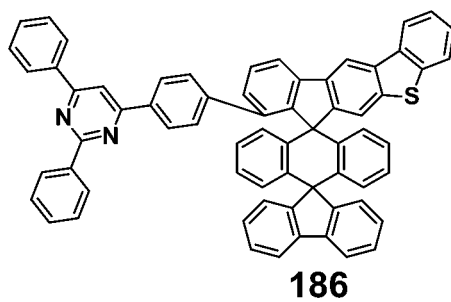
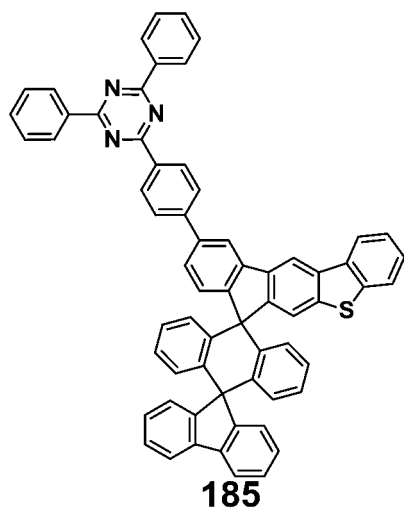
**179****180****181**

10

**182****183****184**

20

【化 4 2】

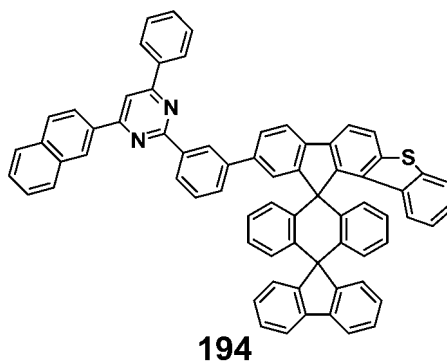
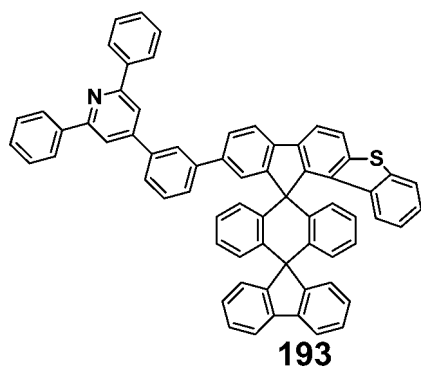


10

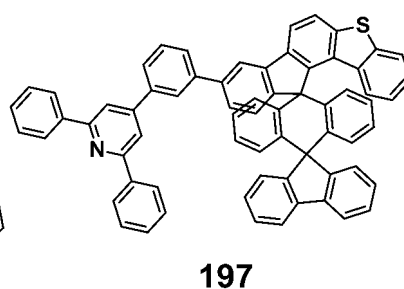
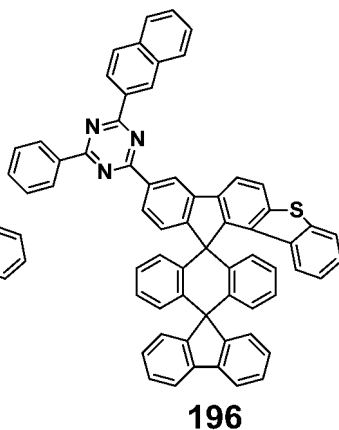
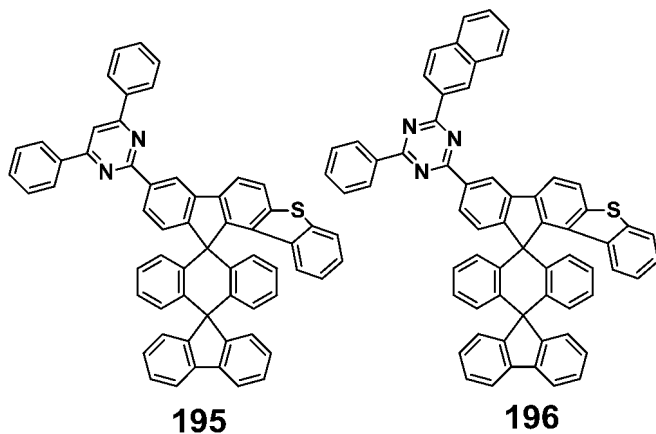
20

30

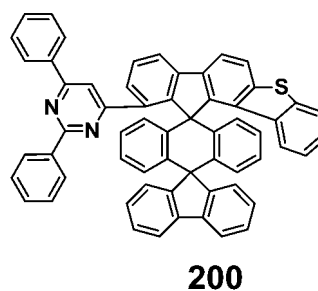
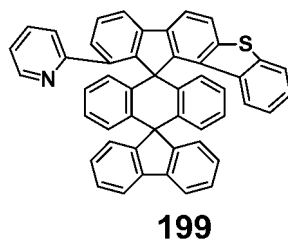
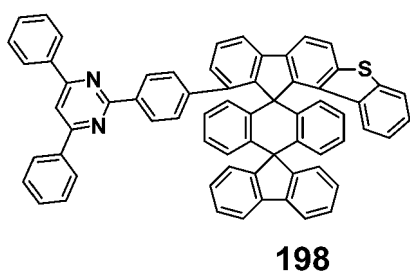
【化 4 3】



10

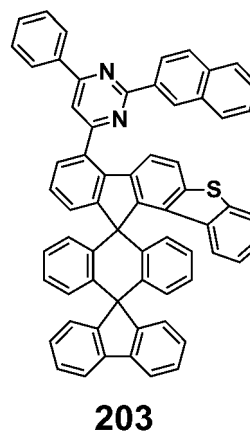
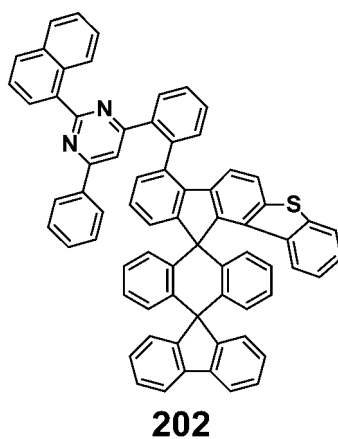
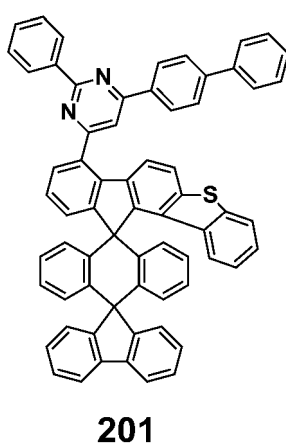


20



30

【化 4 4】



40

【請求項 1 1】

前記化学式 1 の化合物を含む有機物層は、n 型ドーパントをさらに含む、請求項 1 から 10 のいずれか 1 項に記載の有機発光素子。

【請求項 1 2】

前記 n 型ドーパントは、LiQ である、請求項 1 1 に記載の有機発光素子。

【請求項 1 3】

50

前記化学式 1 の化合物を含む有機物層は、電子注入層、電子輸送層、電子注入および電子輸送を同時に行う層のうちの少なくとも 1 層を含み、

前記層のうちの少なくとも 1 層が前記化合物を含む、

請求項 1 から 12 のいずれか 1 項に記載の有機発光素子。

【請求項 14】

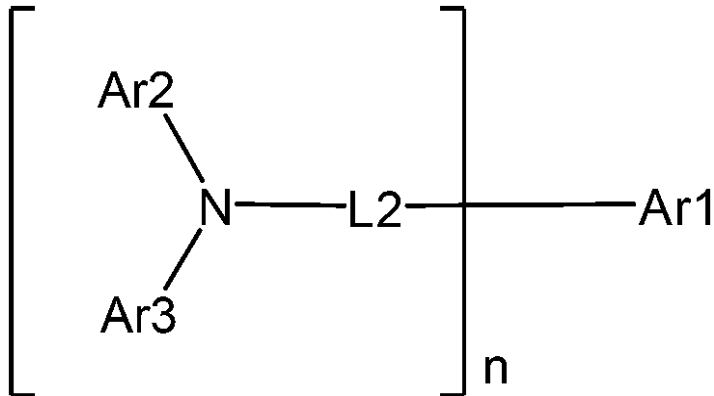
前記有機物層は、発光層を含み、

前記発光層は、下記化学式 1 - A で表される化合物を含むものである、

請求項 13 に記載の有機発光素子：

[化学式 1 - A]

【化 45】



前記化学式 1 - A において、

n は、1 以上の整数であり、

Ar1 は、置換もしくは非置換の 1 価以上のベンゾフルオレン基；置換もしくは非置換の 1 価以上のフルオランテン基；置換もしくは非置換の 1 価以上のピレン基；または置換もしくは非置換の 1 価以上のクリセン基であり、

L2 は、直接結合；置換もしくは非置換のアリーレン基；または置換もしくは非置換のヘテロアリーレン基であり、

Ar2 および Ar3 は、互いに同一または異なり、それぞれ独立に、置換もしくは非置換のアリール基；置換もしくは非置換のシリル基；置換もしくは非置換のゲルマニウム基；置換もしくは非置換のアルキル基；置換もしくは非置換のアリールアルキル基；または置換もしくは非置換のヘテロアリール基であるか、互いに結合して置換もしくは非置換の環を形成してもよいし、

n が 2 以上の場合、2 以上の括弧内の構造は、互いに同一または異なる。

【請求項 15】

前記 L2 は、直接結合であり、

Ar1 は、2 価のピレン基であり、

Ar2 および Ar3 は、互いに同一または異なり、それぞれ独立に、アルキル基で置換されたゲルマニウム基で置換もしくは非置換のアリール基であり、

n は、2 である、

請求項 14 に記載の有機発光素子。

【請求項 16】

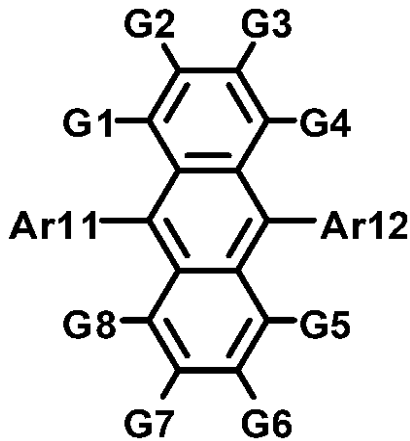
前記有機物層は、発光層を含み、

前記発光層は、下記化学式 2 - A で表される化合物を含むものである、

請求項 13 から 15 のいずれか 1 項に記載の有機発光素子：

[化学式 2 - A]

【化 4 6】



10

前記化学式 2 - A において、

Ar 1 1 および Ar 1 2 は、互いに同一または異なり、それぞれ独立に、置換もしくは非置換の単環のアリール基；または置換もしくは非置換の多環のアリール基であり、

G 1 ~ G 8 は、互いに同一または異なり、それぞれ独立に、水素；置換もしくは非置換の単環のアリール基；または置換もしくは非置換の多環のアリール基である。

【請求項 1 7】

前記 Ar 1 1 および Ar 1 2 は、2 - ナフチル基であり、

20

G 6 は、フェニル基で置換されたアントラセン基で置換された 2 - ナフチル基であり、

G 1 ~ G 5、G 7、および G 8 は、水素である、

請求項 1 6 に記載の有機発光素子。

【発明の詳細な説明】

【技術分野】

【0 0 0 1】

本発明は、2 0 1 5 年 1 0 月 7 日付で韓国特許庁に出願された韓国特許出願第 1 0 - 2 0 1 5 - 0 1 4 1 2 3 3 号の出願日の利益を主張し、その内容のすべては本明細書に組み込まれる。

【0 0 0 2】

30

本明細書は、二重スピロ化合物およびこれを含む有機発光素子に関する。

【背景技術】

【0 0 0 3】

一般的に、有機発光現象とは、有機物質を用いて電気エネルギーを光エネルギーに変換させる現象をいう。有機発光現象を利用する有機発光素子は、通常、陽極および陰極と、それらの間に有機物層とを含む構造を有する。ここで、有機物層は、有機発光素子の効率と安定性を高めるために、それぞれ異なる物質で構成された多層の構造からなる場合が多く、例えば、正孔注入層、正孔輸送層、発光層、電子輸送層、電子注入層などからなる。このような有機発光素子の構造において、2 つの電極の間に電圧をかけると、陽極からは正孔が、陰極からは電子が有機物層に注入され、注入された正孔と電子が接した時、エキシトン (e x c i t o n) が形成され、このエキシトンが再び基底状態に落ちる時に光を発する。

40

【0 0 0 4】

前記のような有機発光素子のための新たな材料の開発が要求され続けている。

【発明の概要】

【発明が解決しようとする課題】

【0 0 0 5】

本明細書には、二重スピロ型化合物およびこれを含む有機発光素子が記載される。

【課題を解決するための手段】

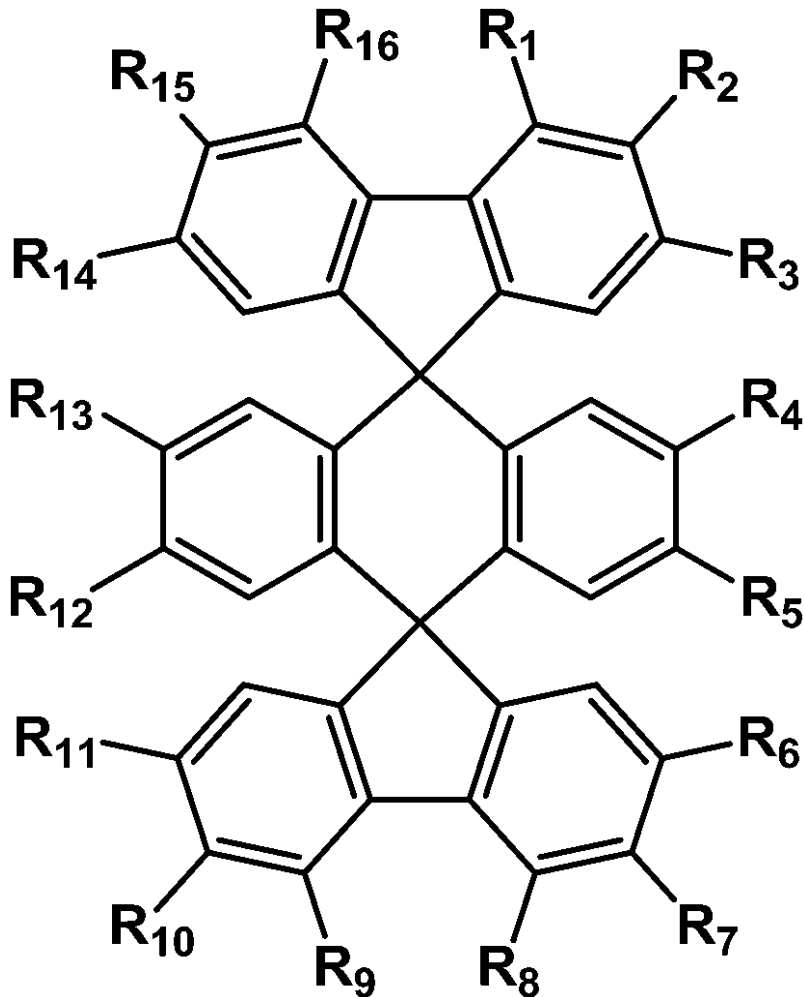
【0 0 0 6】

50

本明細書の一実施態様は、アノードと、前記アノードに対向して備えられたカソードと、前記アノードおよび前記カソードの間に備えられた発光層を含む有機物層とを含む有機発光素子であって、前記有機物層は、前記発光層と前記カソードとの間に備えられ、下記化学式 1 の化合物を含む有機物層をさらに含むことを特徴とする有機発光素子を提供する：

[化学式 1]

【 化 1 】

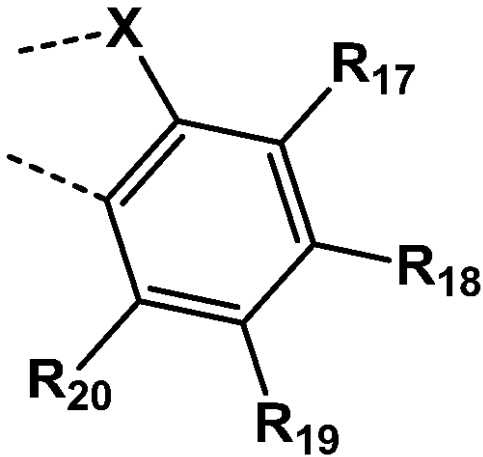


前記化学式 1 において、

$R_1 \sim R_{16}$ のうちの少なくとも 1 つは、隣接した基と互いに結合して化学式 1 - 1 の環を形成し、

[化学式 1 - 1]

【化 2】



10

X は、O または S であり、

R₁ ~ R₁₆ のうちの前記化学式 1 - 1 の環を形成しない基および R₁₇ ~ R₂₀ は、互いに同一または異なり、それぞれ独立に、水素；重水素；ハロゲン基；ニトリル基；ニトロ基；ヒドロキシ基；カルボニル基；置換もしくは非置換のシリル基；置換もしくは非置換のホウ素基；置換もしくは非置換のアルキル基；置換もしくは非置換のアルキルスルホキシ基；置換もしくは非置換のアリールスルホキシ基；置換もしくは非置換のアルケニル基；置換もしくは非置換のアルアルキル基；置換もしくは非置換のアルアルケニル基；置換もしくは非置換のアルキルアリール基；置換もしくは非置換のアルキルアミン基；置換もしくは非置換のアラルキルアミン基；置換もしくは非置換のヘテロアリールアミン基；置換もしくは非置換のアリールアミン基；置換もしくは非置換のアリールホスフィン基；置換もしくは非置換のホスフィンオキシド基；置換もしくは非置換のアリール基；または置換もしくは非置換のヘテロ環基である。

20

【発明の効果】

【0007】

本明細書に記載の化合物は、有機発光素子の有機物層の材料として使用できる。少なくとも一つの実施態様に係る化合物は、有機発光素子において効率の向上、低い駆動電圧および/または寿命特性を向上させることができる。特に、本明細書に記載の化合物は、電子輸送、または電子注入材料として使用できる。

30

【図面の簡単な説明】

【0008】

【図 1】基板 1、陽極 2、発光層 3、前記化学式 1 の化合物を含む有機物層 9、および陰極 4 からなる有機発光素子の例を示すものである。

【図 2】基板 1、陽極 2、正孔注入層 5、正孔輸送層 6、発光層 7、電子輸送層 8、および陰極 4 からなる有機発光素子の例を示すものである。

【発明を実施するための形態】

【0009】

40

以下、本明細書についてより詳細に説明する。

【0010】

本明細書の一実施態様は、アノードと、前記アノードに対向して備えられたカソードと、前記アノードおよび前記カソードの間に備えられた発光層を含む有機物層とを含む有機発光素子であって、前記有機物層は、前記発光層と前記カソードとの間に備えられ、前記化学式 1 の化合物を含む有機物層をさらに含むことを特徴とする有機発光素子を提供する。

【0011】

前記置換基の例示は以下に説明するが、これに限定されるものではない。

【0012】

50

本明細書において、「置換もしくは非置換の」という用語は、重水素；ハロゲン基；ニトリル基；ニトロ基；ヒドロキシ基；カルボニル基；エステル基；イミド基；アミノ基；ホスフィンオキシド基；アルコキシ基；アリールオキシ基；アルキルチオキシ基；アリールチオキシ基；アルキルスルホキシ基；アリールスルホキシ基；シリル基；ハウ素基；アルキル基；シクロアルキル基；アルケニル基；アリール基；アルアルキル基；アルアルケニル基；アルキルアリール基；アルキルアミン基；アラルキルアミン基；ヘテロアリールアミン基；アリールアミン基；アリールホスフィン基；およびヘテロ環基からなる群より選択された１個以上の置換基で置換もしくは非置換であるか、前記例示された置換基のうちの２以上の置換基が連結された置換もしくは非置換であることを意味する。例えば、「２以上の置換基が連結された置換基」は、ビフェニル基であってもよい。すなわち、ビフェニル基は、アリール基であってもよく、２個のフェニル基が連結された置換基と解釈されてもよい。

10

【００１３】

本明細書において、「隣接した」基は、当該置換基が置換された原子と直接連結された原子に置換された置換基、当該置換基と立体構造的に最も近く位置した置換基、または当該置換基が置換された原子に置換された他の置換基を意味することができる。例えば、ベンゼン環におけるオルト（ortho）位に置換された２個の置換基、および脂肪族環における同一炭素に置換された２個の置換基は、互いに「隣接した」基と解釈されてもよい。

20

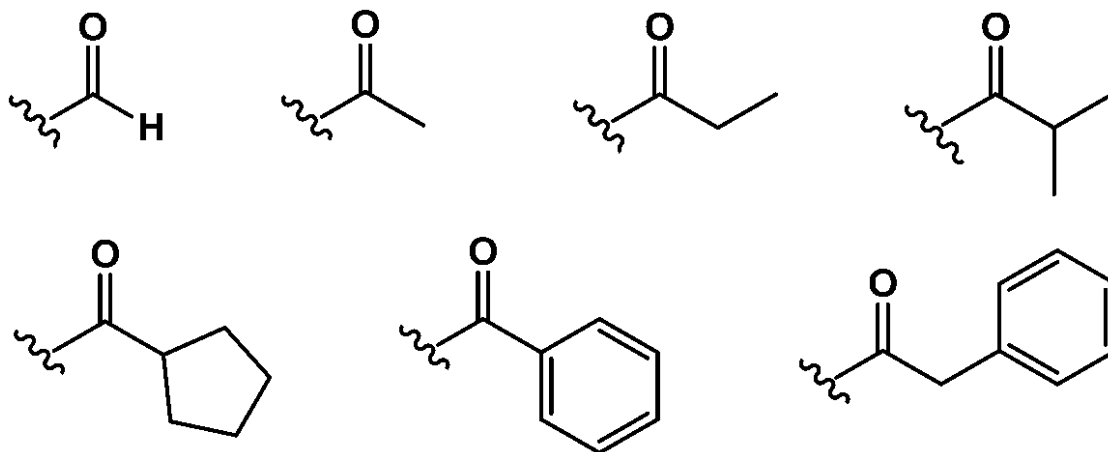
【００１４】

本明細書において、ハロゲン基の例としては、フッ素、塩素、臭素、またはヨウ素がある。

【００１５】

本明細書において、カルボニル基の炭素数は特に限定されないが、炭素数１～４０のものが好ましい。具体的には、下記のような構造の化合物になってもよいが、これに限定されるものではない。

【化３】



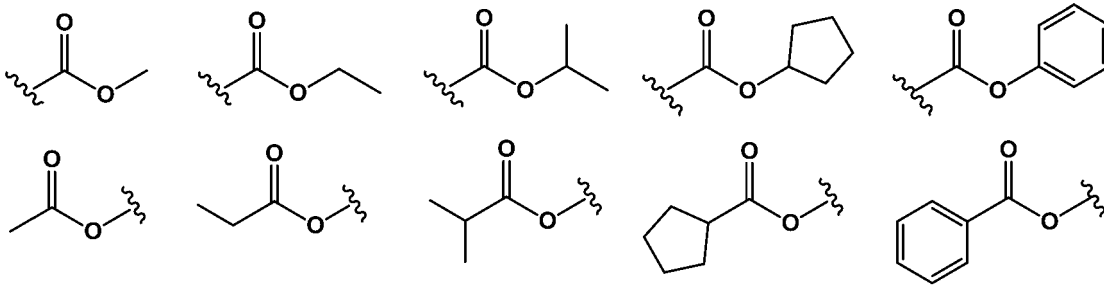
30

【００１６】

40

本明細書において、エステル基は、エステル基の酸素が炭素数１～４０の直鎖、分枝鎖もしくは環鎖アルキル基、または炭素数６～３０のアリール基で置換されていてもよい。具体的には、下記構造式の化合物になってもよいが、これに限定されるものではない。

【化 4】

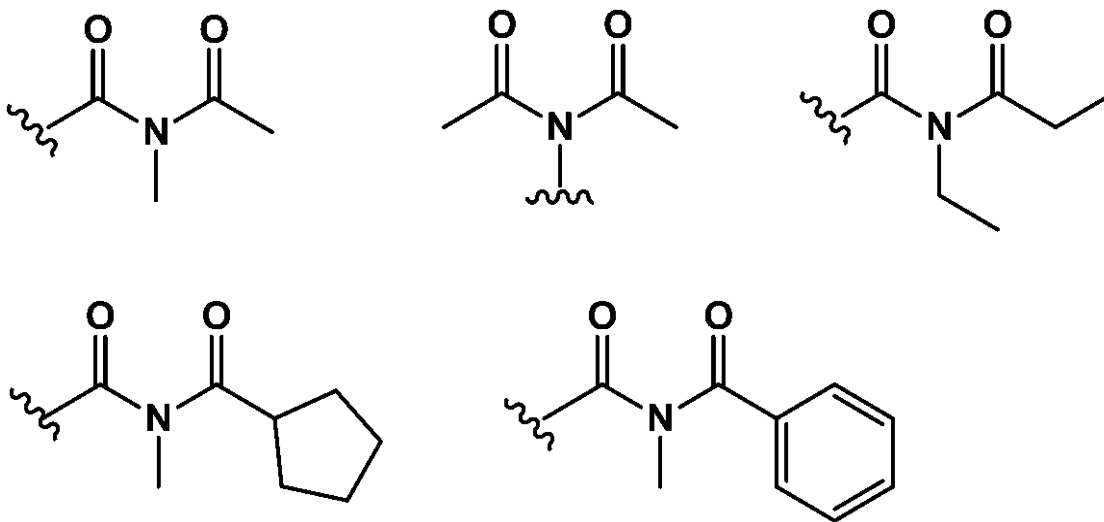


【 0 0 1 7 】

10

本明細書において、イミド基の炭素数は特に限定されないが、炭素数 1 ~ 25 のものが好ましい。具体的には、下記のような構造の化合物になってもよいが、これに限定されるものではない。

【化 5】



20

【 0 0 1 8 】

30

本明細書において、シリル基は、 $-SiR_aR_bR_c$ の化学式で表されてもよく、前記 R_a 、 R_b および R_c はそれぞれ、水素；置換もしくは非置換のアルキル基；または置換もしくは非置換のアリール基であってもよい。前記シリル基は、具体的には、トリメチルシリル基、トリエチルシリル基、*t*-ブチルジメチルシリル基、ビニルジメチルシリル基、プロピルジメチルシリル基、トリフェニルシリル基、ジフェニルシリル基、フェニルシリル基などがあるが、これらに限定されない。

【 0 0 1 9 】

40

本明細書において、ホウ素基は、 $-BR_aR_bR_c$ の化学式で表されてもよく、前記 R_a 、 R_b および R_c はそれぞれ、水素；置換もしくは非置換のアルキル基；または置換もしくは非置換のアリール基であってもよい。前記ホウ素基は、具体的には、トリメチルホウ素基、トリエチルホウ素基、*t*-ブチルジメチルホウ素基、トリフェニルホウ素基、フェニルホウ素基などがあるが、これらに限定されない。

【 0 0 2 0 】

本明細書において、前記アルキル基は、直鎖もしくは分枝鎖であってもよく、炭素数は特に限定されないが、1 ~ 40 のものが好ましい。一実施態様によれば、前記アルキル基の炭素数は 1 ~ 20 である。もう一つの実施態様によれば、前記アルキル基の炭素数は 1 ~ 10 である。もう一つの実施態様によれば、前記アルキル基の炭素数は 1 ~ 6 である。アルキル基の具体例としては、メチル、エチル、プロピル、*n*-プロピル、イソプロピル、ブチル、*n*-ブチル、イソブチル、*tert*-ブチル、*sec*-ブチル、1-メチル-ブチル、1-エチル-ブチル、ペンチル、*n*-ペンチル、イソペンチル、ネオペンチル、*tert*-ペンチル、ヘキシル、*n*-ヘキシル、1-メチルペンチル、2-メチルペンチ

50

ル、4 - メチル - 2 - ペンチル、3, 3 - ジメチルブチル、2 - エチルブチル、ヘブチル、n - ヘブチル、1 - メチルヘキシル、シクロペンチルメチル、シクロヘキシルメチル、オクチル、n - オクチル、tert - オクチル、1 - メチルヘブチル、2 - エチルヘキシル、2 - プロピルペンチル、n - ノニル、2, 2 - ジメチルヘブチル、1 - エチル - プロピル、1, 1 - ジメチル - プロピル、イソヘキシル、4 - メチルヘキシル、5 - メチルヘキシルなどがあるが、これらに限定されない。

【0021】

本明細書において、前記アルコキシ基は、直鎖、分枝鎖もしくは環鎖であってもよい。アルコキシ基の炭素数は特に限定されないが、炭素数1～40のものが好ましい。具体的には、メトキシ、エトキシ、n - プロポキシ、イソプロポキシ、i - プロピルオキシ、n - ブトキシ、イソブトキシ、tert - ブトキシ、sec - ブトキシ、n - ペンチルオキシ、ネオペンチルオキシ、イソペンチルオキシ、n - ヘキシルオキシ、3, 3 - ジメチルブチルオキシ、2 - エチルブチルオキシ、n - オクチルオキシ、n - ノニルオキシ、n - デシルオキシ、ベンジルオキシ、p - メチルベンジルオキシなどになってもよいが、これらに限定されるものではない。

10

【0022】

本明細書に記載のアルキル基、アルコキシ基、およびその他アルキル基部分を含む置換体は、直鎖もしくは分鎖形態をすべて含む。

【0023】

本明細書において、前記アルケニル基は、直鎖もしくは分枝鎖であってもよく、炭素数は特に限定されないが、2～40のものが好ましい。一実施態様によれば、前記アルケニル基の炭素数は2～20である。もう一つの実施態様によれば、前記アルケニル基の炭素数は2～10である。もう一つの実施態様によれば、前記アルケニル基の炭素数は2～6である。具体例としては、ビニル、1 - プロペニル、イソプロペニル、1 - ブテニル、2 - ブテニル、3 - ブテニル、1 - ペンテニル、2 - ペンテニル、3 - ペンテニル、3 - メチル - 1 - ブテニル、1, 3 - ブタジエニル、アリル、1 - フェニルビニル - 1 - イル、2 - フェニルビニル - 1 - イル、2, 2 - ジフェニルビニル - 1 - イル、2 - フェニル - 2 - (ナフチル - 1 - イル) ビニル - 1 - イル、2, 2 - ビス(ジフェニル - 1 - イル) ビニル - 1 - イル、スチルベニル基、スチレニル基などがあるが、これらに限定されない。

20

30

【0024】

本明細書において、シクロアルキル基は特に限定されないが、炭素数3～60のものが好ましく、一実施態様によれば、前記シクロアルキル基の炭素数は3～40である。もう一つの実施態様によれば、前記シクロアルキル基の炭素数は3～20である。もう一つの実施態様によれば、前記シクロアルキル基の炭素数は3～6である。具体的には、シクロプロピル、シクロブチル、シクロペンチル、3 - メチルシクロペンチル、2, 3 - ジメチルシクロペンチル、シクロヘキシル、3 - メチルシクロヘキシル、4 - メチルシクロヘキシル、2, 3 - ジメチルシクロヘキシル、3, 4, 5 - トリメチルシクロヘキシル、4 - tert - ブチルシクロヘキシル、シクロヘブチル、シクロオクチルなどがあるが、これらに限定されない。

40

【0025】

本明細書において、アルキルアミン基は、炭素数は特に限定されないが、1～40のものが好ましい。アルキルアミン基の具体例としては、メチルアミン基、ジメチルアミン基、エチルアミン基、ジエチルアミン基、フェニルアミン基、ナフチルアミン基、ピフェニルアミン基、アントラセニルアミン基、9 - メチル - アントラセニルアミン基、ジフェニルアミン基、フェニルナフチルアミン基、ジトリルアミン基、フェニルトリルアミン基、トリフェニルアミン基などがあるが、これらにのみ限定されるものではない。

【0026】

本明細書において、アリールアミン基の例としては、置換もしくは非置換のモノアリールアミン基、置換もしくは非置換のジアアリールアミン基、または置換もしくは非置換のト

50

リアリールアミン基がある。前記アリールアミン基中のアリール基は、単環式アリール基であってもよく、多環式アリール基であってもよい。前記 2 以上のアリール基を含むアリールアミン基は、単環式アリール基、多環式アリール基、または単環式アリール基と多環式アリール基を同時に含んでもよい。

【0027】

アリールアミン基の具体例としては、フェニルアミン、ナフチルアミン、ビフェニルアミン、アントラセニルアミン、3 - メチル - フェニルアミン、4 - メチル - ナフチルアミン、2 - メチル - ビフェニルアミン、9 - メチル - アントラセニルアミン、ジフェニルアミン基、フェニルナフチルアミン基、ジトリルアミン基、フェニルトリルアミン基、カルバゾールおよびトリフェニルアミン基などがあるが、これらに限定されるものではない。

10

【0028】

本明細書において、ヘテロアリールアミン基の例としては、置換もしくは非置換のモノヘテロアリールアミン基、置換もしくは非置換のジヘテロアリールアミン基、または置換もしくは非置換のトリヘテロアリールアミン基がある。前記ヘテロアリールアミン基中のヘテロアリール基は、単環式ヘテロ環基であってもよく、多環式ヘテロ環基であってもよい。前記 2 以上のヘテロ環基を含むヘテロアリールアミン基は、単環式ヘテロ環基、多環式ヘテロ環基、または単環式ヘテロ環基と多環式ヘテロ環基を同時に含んでもよい。

【0029】

本明細書において、アリールヘテロアリールアミン基は、アリール基およびヘテロ環基で置換されたアミン基を意味する。

20

【0030】

本明細書において、アリールホスフィン基の例としては、置換もしくは非置換のモノアリールホスフィン基、置換もしくは非置換のジアリールホスフィン基、または置換もしくは非置換のトリアリールホスフィン基がある。前記アリールホスフィン基中のアリール基は、単環式アリール基であってもよく、多環式アリール基であってもよい。前記アリール基が 2 以上を含むアリールホスフィン基は、単環式アリール基、多環式アリール基、または単環式アリール基と多環式アリール基を同時に含んでもよい。

【0031】

本明細書において、アリール基は特に限定されないが、炭素数 6 ~ 60 のものが好ましく、単環式アリール基もしくは多環式アリール基であってもよい。一実施態様によれば、前記アリール基の炭素数は 6 ~ 30 である。一実施態様によれば、前記アリール基の炭素数は 6 ~ 20 である。前記アリール基が単環式アリール基としては、フェニル基、ビフェニル基、ターフェニル基などになってもよいが、これらに限定されるものではない。前記多環式アリール基としては、ナフチル基、アントラセニル基、フェナントリル基、ピレニル基、ペリレニル基、クリセニル基、フルオレニル基などになってもよいが、これらに限定されるものではない。

30

【0032】

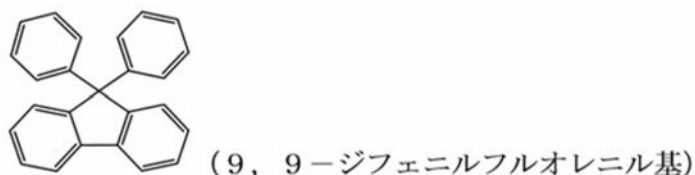
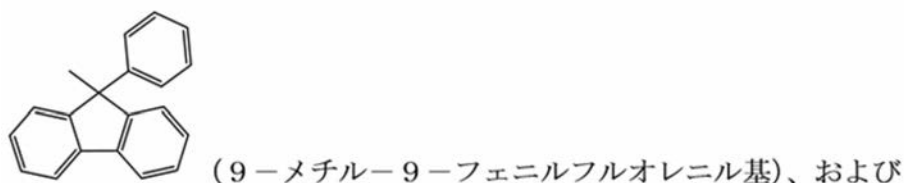
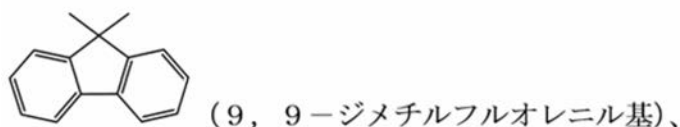
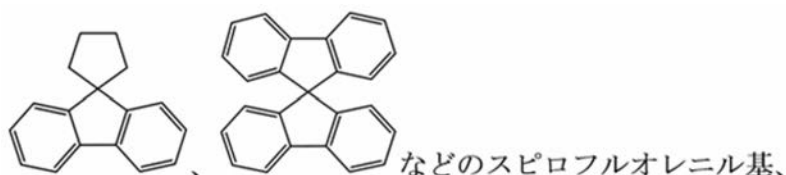
本明細書において、フルオレニル基は置換されていてもよく、置換基 2 個が互いに結合してスピロ構造を形成してもよい。

【0033】

40

前記フルオレニル基が置換される場合、

【化 6】



などの置換されたフルオレニル基になってもよい。ただし、これに限定されるものではない。

【0034】

本明細書において、ヘテロ環基は、異種原子としてN、O、P、S、Si、およびSeのうち1個以上を含むヘテロ環基であって、炭素数は特に限定されないが、炭素数1～60のものが好ましい。一実施態様によれば、前記ヘテロ環基の炭素数は1～30である。ヘテロ環基の例としては、ピリジル基、ピロール基、ピリミジル基、ピリダジニル基、フラニル基、チオフェニル基、イミダゾール基、ピラゾール基、オキサゾール基、イソオキサゾール基、チアゾール基、イソチアゾール基、トリアゾール基、オキサジアゾール基、チアジアゾール基、ジチアゾール基、テトラゾール基、ピラニル基、チオピラニル基、ピラジニル基、オキサジニル基、チアジニル基、ジオキシニル基、トリアジニル基、テトラジニル基、キノリニル基、イソキノリニル基、キノリル基、キナゾリニル基、キノキサリニル基、ナフチリジニル基、アクリジル基、キサンテニル基、フェナントリジニル基、ジアザナフタレニル基、トリアザインデニル基、インドール基、インドリニル基、インドリジニル基、フタラジニル基、ピリドピリミジニル基、ピリドピラジニル基、ピラジノピラジニル基、ベンゾチアゾール基、ベンズオキサゾール基、ベンズイミダゾール基、ベンゾチオフェン基、ベンゾフラニル基、ジベンゾチオフェニル基、ジベンゾフラニル基、カルバゾール基、ベンゾカルバゾール基、ジベンゾカルバゾール基、インドロカルバゾール基、インデノカルバゾール基、フェナジニル基、イミダゾピリジン基、フェノキサジニル基、フェナントリジン基、フェナントロリン(phenanthroline)基、フェノチアジン(phenothiazine)基、イミダゾピリジン基、イミダゾフェナントリジン基、ベンゾイミダゾキナゾリン基、またはベンゾイミダゾフェナントリジン基などがあるが、これらにのみ限定されるものではない。

【0035】

本明細書において、含窒素ヘテロ環基は、環員として窒素原子を少なくとも1個以上含むヘテロ環基であって、単環式の含窒素ヘテロ環基の例としては、ピリジン基、ピリミジン基、トリアジン基がある。また、多環式の含窒素ヘテロ環基の例としては、ベンズイミダゾール基、ベンズオキサゾール基、ベンゾチアゾール基、フェナジニル基、フェノキサジン基、フェナントリジン基、フェナントロリン基、フェノチアジン基、イミダゾピリジン基、イミダゾフェナントリジン基、ベンゾイミダゾキナゾリン基、ベンゾイミダゾフェ

10

20

30

40

50

ナントリジン基などがある。

【 0 0 3 6 】

本明細書において、アリアルオキシ基、アリアルチオキシ基、アリアルスルホキシ基、アリアルホスフィン基、アルアルキル基、アラルキルアミン基、アルアルケニル基、アルキルアリアル基、アリアルアミン基、アリアルヘテロアリアルアミン基中のアリアル基は、前述のアリアル基に関する説明が適用可能である。

【 0 0 3 7 】

本明細書において、アルキルチオキシ基、アルキルスルホキシ基、アルアルキル基、アラルキルアミン基、アルキルアリアル基、アルキルアミン基中のアルキル基は、前述のアルキル基に関する説明が適用可能である。

10

【 0 0 3 8 】

本明細書において、ヘテロアリアル基、ヘテロアリアルアミン基、アリアルヘテロアリアルアミン基中のヘテロアリアル基は、芳香族であることを除けば、前述のヘテロ環基に関する説明が適用可能である。

【 0 0 3 9 】

本明細書において、アルアルケニル基中のアルケニル基は、前述のアルケニル基に関する説明が適用可能である。

【 0 0 4 0 】

本明細書において、アリーレン基は、2価の基であることを除けば、前述のアリアル基に関する説明が適用可能である。

20

【 0 0 4 1 】

本明細書において、ヘテロアリーレン基は、2価の基であることを除けば、前述のヘテロ環基に関する説明が適用可能である。

【 0 0 4 2 】

本明細書において、隣接する基と互いに結合して環を形成するとの意味は、隣接する基と互いに結合して置換もしくは非置換の脂肪族炭化水素環；置換もしくは非置換の芳香族炭化水素環；置換もしくは非置換の脂肪族ヘテロ環；置換もしくは非置換の芳香族ヘテロ環；またはこれらの縮合環を形成することを意味する。

【 0 0 4 3 】

本明細書において、脂肪族炭化水素環とは、芳香族でない環であって、炭素と水素原子のみからなる環を意味する。具体的には、脂肪族炭化水素環の例としては、シクロプロパン、シクロブタン、シクロブテン、シクロペンタン、シクロペンテン、シクロヘキサン、シクロヘキセン、1, 4 - シクロヘキサジエン、シクロヘブタン、シクロヘブテン、シクロオクタン、シクロオクテンなどがあるが、これらにのみ限定されるものではない。

30

【 0 0 4 4 】

本明細書において、芳香族炭化水素環とは、炭素と水素原子のみからなる芳香族の環を意味する。具体的には、芳香族炭化水素環の例としては、ベンゼン、ナフタレン、アントラセン、フェナントレン、ペリレン、フルオランテン、トリフェニレン、フェナレン、ピレン、テトラセン、クリセン、ペンタセン、フルオレン、インデン、アセナフチレン、ベンゾフルオレン、スピロフルオレンなどがあるが、これらにのみ限定されるものではない。

40

【 0 0 4 5 】

本明細書において、脂肪族ヘテロ環とは、ヘテロ原子のうちの1個以上を含む脂肪族環を意味する。具体的には、脂肪族ヘテロ環の例としては、オキシラン (oxirane)、テトラヒドロフラン、1, 4 - ジオキサン (1, 4 - dioxane)、ピロリジン、ピペリジン、モルホリン (morpholine)、オキセパン、アゾカン、チオカンなどがあるが、これらにのみ限定されるものではない。本明細書において、芳香族ヘテロ環とは、ヘテロ原子のうちの1個以上を含む芳香族環を意味する。具体的には、芳香族ヘテロ環の例としては、ピリジン、ピロール、ピリミジン、ピリダジン、フラン、チオフェン、イミダゾール、ピラゾール、オキサゾール、イソオキサゾール、チアゾール、イソチア

50

ゾール、トリアゾール、オキサジアゾール、チアジアゾール、ジチアゾール、テトラゾール、ピラン、チオピラン、ジアジン、オキサジン、チアジン、ジオキシン、トリアジン、テトラジン、イソキノリン、キノリン、キノール、キナゾリン、キノキサリン、ナフチリジン、アクリジン、フェナントリジン、ジアザナフタレン、トリアザインデン、インドール、インドリジン、ベンゾチアゾール、ベンゾオキサゾール、ベンゾイミダゾール、ベンゾチオフエン、ベンゾフラン、ジベンゾチオフエン、ジベンゾフラン、カルバゾール、ベンゾカルバゾール、ジベンゾカルバゾール、フェナジン、イミダゾピリジン、フェノキサジン、フェナントリジン、インドロカルバゾール、インデノカルバゾールなどがあるが、これらにのみ限定されるものではない。

【 0 0 4 6 】

本明細書において、前記脂肪族炭化水素環、芳香族炭化水素環、脂肪族ヘテロ環、および芳香族ヘテロ環は、単環もしくは多環であってもよい。

【 0 0 4 7 】

本明細書の一実施態様によれば、 $R_1 \sim R_{16}$ のうちの少なくとも1つが隣接した基と結合して化学式 1 - 1 の環を形成する。

【 0 0 4 8 】

本明細書の一実施態様によれば、 $R_6 \sim R_{11}$ のうちの少なくとも1つが隣接した基と結合して化学式 1 - 1 の環を形成する。

【 0 0 4 9 】

本明細書の一実施態様によれば、 $R_1 \sim R_{16}$ のうちの前記化学式 1 - 1 の環を形成しない基および $R_{17} \sim R_{20}$ は、互いに同一または異なり、それぞれ独立に、水素；重水素；ハロゲン基；ニトリル基；ニトロ基；ヒドロキシ基；カルボニル基；置換もしくは非置換のシリル基；置換もしくは非置換のホウ素基；置換もしくは非置換のアルキル基；置換もしくは非置換のアルキルスルホキシ基；置換もしくは非置換のアリールスルホキシ基；置換もしくは非置換のアルケニル基；置換もしくは非置換のアルアルキル基；置換もしくは非置換のアルアルケニル基；置換もしくは非置換のアルキルアリール基；置換もしくは非置換のアルキルアミン基；置換もしくは非置換のアラルキルアミン基；置換もしくは非置換のヘテロアリールアミン基；置換もしくは非置換のアリールアミン基；置換もしくは非置換のアリールホスフィン基；置換もしくは非置換のホスフィンオキシド基；置換もしくは非置換のアリール基；または置換もしくは非置換のヘテロ環基である。

【 0 0 5 0 】

本明細書の一実施態様によれば、 $R_1 \sim R_{16}$ のうちの前記化学式 1 - 1 の環を形成しない基および $R_{17} \sim R_{20}$ のうちの少なくとも1つが $-(L)_p-A$ で表され、 p 、 L および A は、下記化学式 2 ~ 7 で定義された通りである。

【 0 0 5 1 】

本明細書の一実施態様によれば、 $R_6 \sim R_{11}$ のうちの前記化学式 1 - 1 の環を形成しない基のうちの少なくとも1つが $-(L)_p-A$ で表され、 p 、 L および A は、下記化学式 2 ~ 7 で定義された通りである。

【 0 0 5 2 】

本明細書の一実施態様によれば、 $R_6 \sim R_{11}$ のうちの少なくとも1つが隣接した基と結合して化学式 1 - 1 の環を形成し、 $R_6 \sim R_{11}$ のうちの前記化学式 1 - 1 の環を形成しない基のうちの少なくとも1つが $-(L)_p-A$ で表され、 p 、 L および A は、下記化学式 2 ~ 7 で定義された通りである。

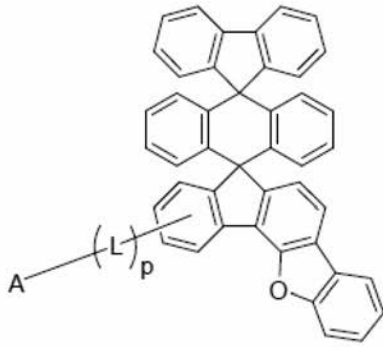
【 0 0 5 3 】

本明細書の一実施態様によれば、 $R_6 \sim R_8$ のうちの少なくとも1つが隣接した基と結合して化学式 1 - 1 の環を形成し、 $R_9 \sim R_{11}$ のうちの少なくとも1つが $-(L)_p-A$ で表され、 p 、 L および A は、下記化学式 2 ~ 7 で定義された通りである。

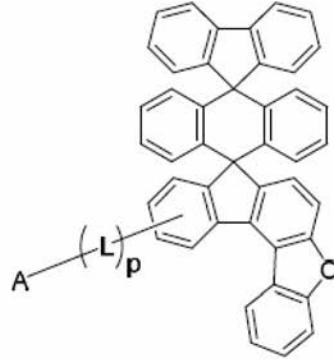
【 0 0 5 4 】

本明細書の一実施態様によれば、前記化学式 1 で表される化合物は、下記化学式 2 ~ 化学式 7 のうちのいずれか1つで表されてもよい。

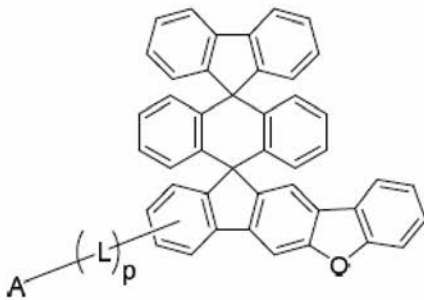
【化 7】



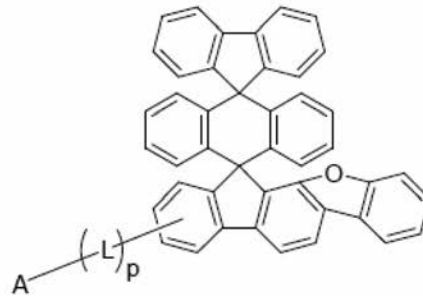
化学式 2



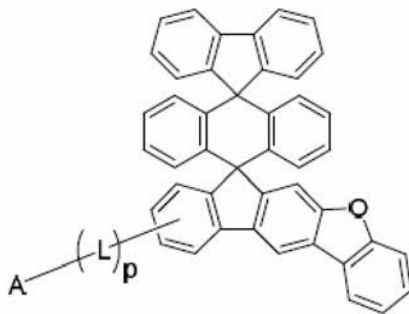
化学式 5



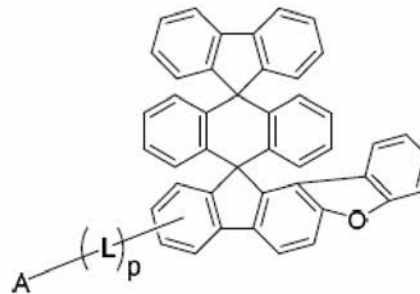
化学式 3



化学式 6



化学式 4



化学式 7

前記化学式 2 ~ 7 において、

p は、0 ~ 5 の整数であり、

L は、直接結合；置換もしくは非置換のアリーレン基；または置換もしくは非置換のヘテロアリーレン基であり；

A は、水素；重水素；ハロゲン基；ニトリル基；ニトロ基；ヒドロキシ基；カルボニル基；エステル基；イミド基；アミノ基；置換もしくは非置換のシリル基；置換もしくは非置換のホウ素基；置換もしくは非置換のアルキル基；置換もしくは非置換のアルキルスルホキシ基；置換もしくは非置換のアリールスルホキシ基；置換もしくは非置換のアルケニル基；置換もしくは非置換のアルアルキル基；置換もしくは非置換のアルアルケニル基；置換もしくは非置換のアルキルアリール基；置換もしくは非置換のアルキルアミン基；置換もしくは非置換のアラルキルアミン基；置換もしくは非置換のヘテロアリールアミン基；置換もしくは非置換のアリールアミン基；置換もしくは非置換のアリールホスフィン基；置換もしくは非置換のホスフィンオキシド基；置換もしくは非置換のアリール基；また

10

20

30

40

50

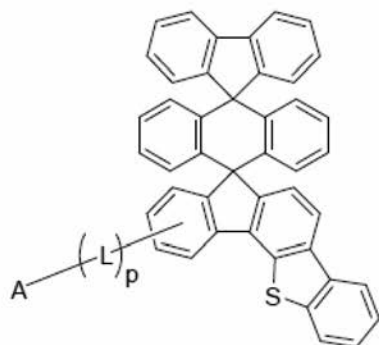
は置換もしくは非置換のヘテロ環基であり、

p が 2 以上の場合、L は、互いに同一または異なる。

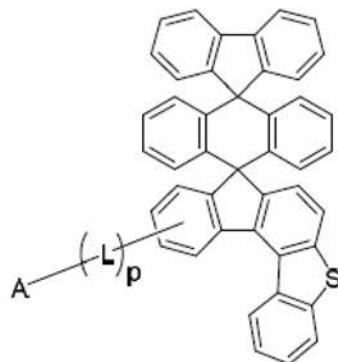
【 0 0 5 5 】

本明細書の一実施態様によれば、前記化学式 1 で表される化合物は、下記化学式 8 ~ 化学式 13 のうちのいずれか 1 つで表されてもよい。

【 化 8 】



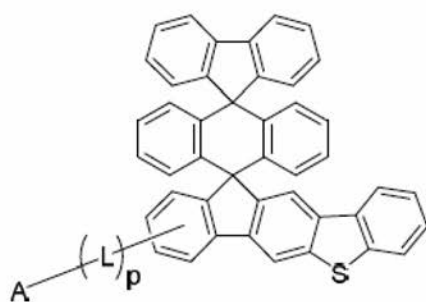
化学式 8



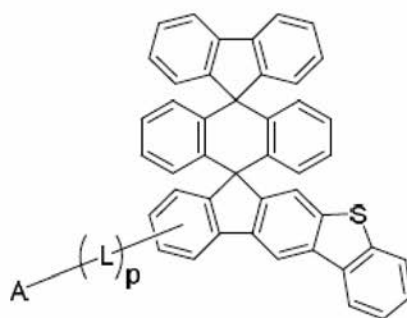
化学式 11

10

20

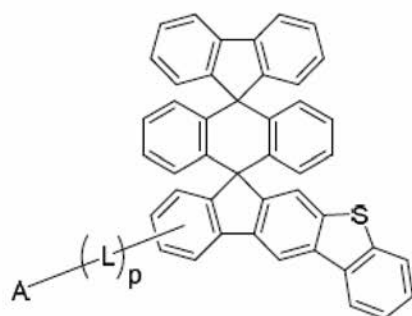


化学式 9

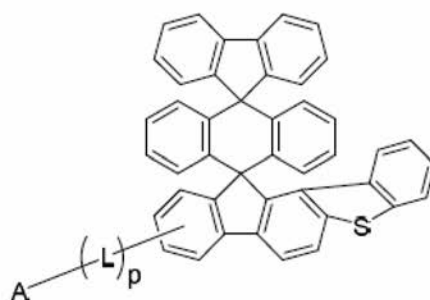


化学式 12

30



化学式 10



化学式 13

40

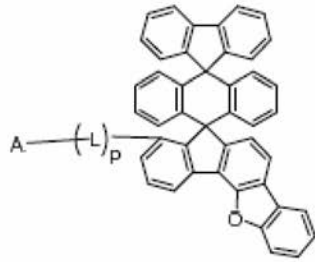
前記化学式 8 ~ 13 において、

p、L および A はそれぞれ、化学式 2 ~ 7 で定義された通りである。

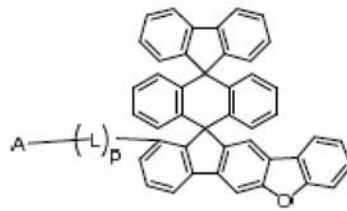
【 0 0 5 6 】

本明細書の一実施態様によれば、前記化学式 1 で表される化合物は、下記化学式 2 - 1 ~ 2 - 4、化学式 3 - 1 ~ 3 - 4、および化学式 4 - 1 ~ 4 - 4 のうちのいずれか 1 つで表されてもよい。

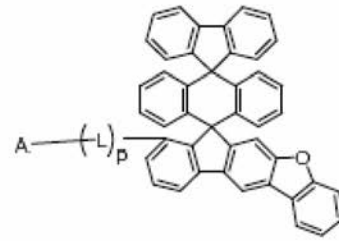
【化 9】



化学式 2-1

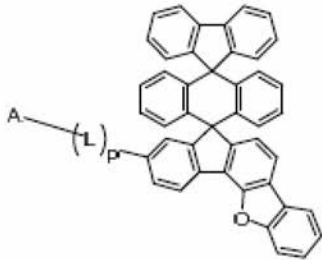


化学式 3-1

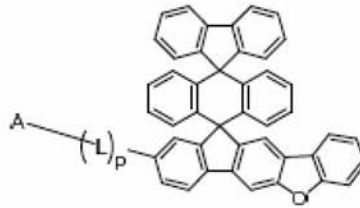


化学式 4-1

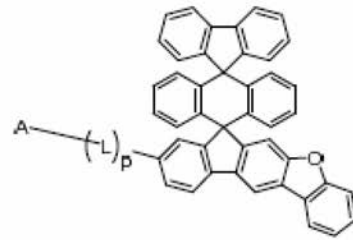
10



化学式 2-2

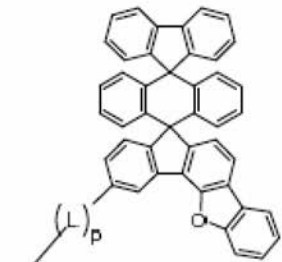


化学式 3-2

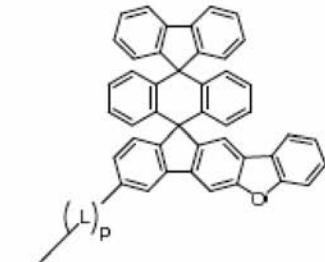


化学式 4-2

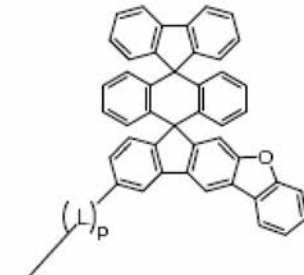
20



化学式 2-3

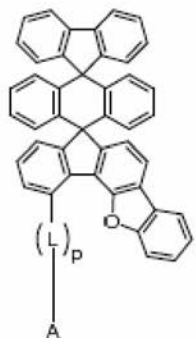


化学式 3-3

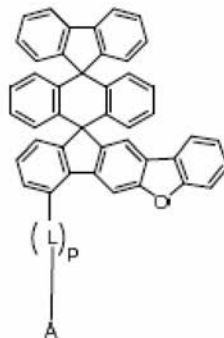


化学式 4-3

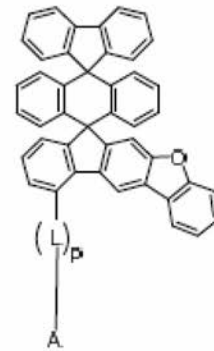
30



化学式 2-4



化学式 3-4



化学式 4-4

前記化学式 2 - 1 ~ 2 - 4、化学式 3 - 1 ~ 3 - 4、および化学式 4 - 1 ~ 4 - 4 において、

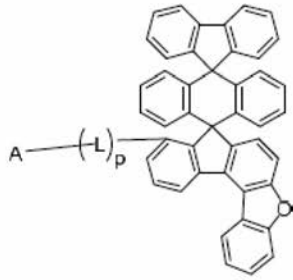
40

p、L および A はそれぞれ、化学式 2 ~ 7 で定義された通りである。

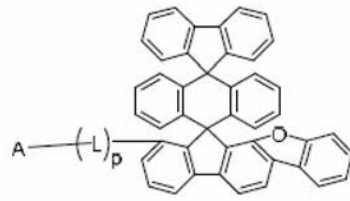
【0057】

本明細書の一実施態様によれば、前記化学式 1 で表される化合物は、下記化学式 5 - 1 ~ 5 - 4、化学式 6 - 1 ~ 6 - 4、および化学式 7 - 1 ~ 7 - 4 のうちのいずれか 1 つで表されてもよい。

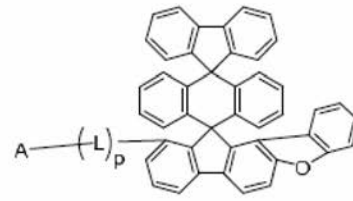
【化 1 0】



化学式 5-1

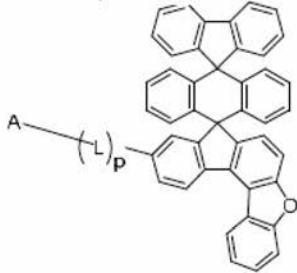


化学式 6-1

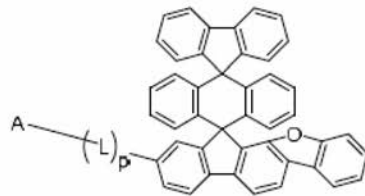


化学式 7-1

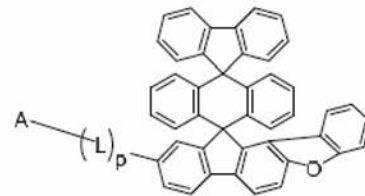
10



化学式 5-2

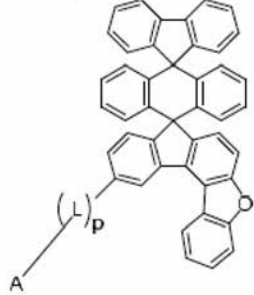


化学式 6-2

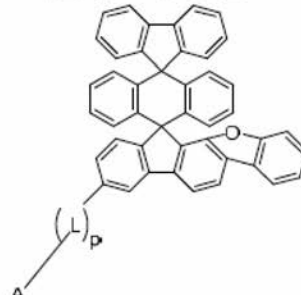


化学式 7-2

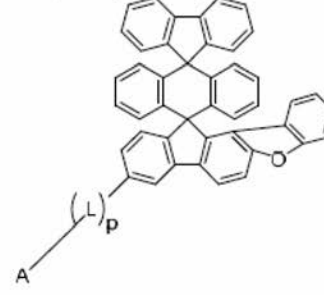
20



化学式 5-3

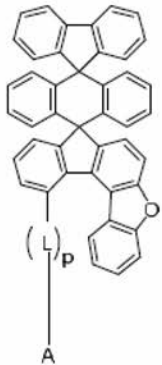


化学式 6-3

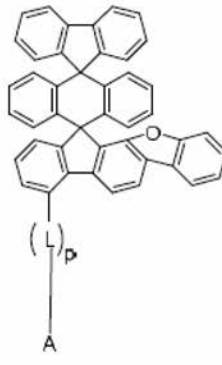


化学式 7-3

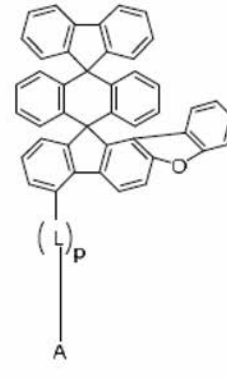
30



化学式 5-4



化学式 6-4



化学式 7-4

前記化学式 5 - 1 ~ 5 - 4、化学式 6 - 1 ~ 6 - 4、および化学式 7 - 1 ~ 7 - 4 において、

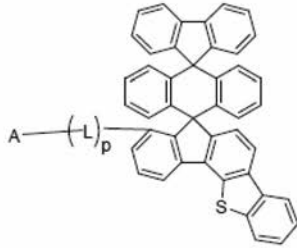
40

p、L および A はそれぞれ、化学式 2 ~ 7 で定義された通りである。

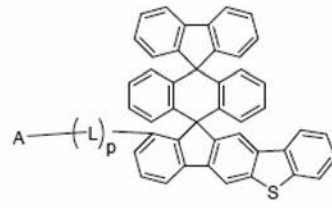
【 0 0 5 8】

本明細書の一実施態様によれば、前記化学式 1 で表される化合物は、下記化学式 8 - 1 ~ 8 - 4、化学式 9 - 1 ~ 9 - 4、および化学式 10 - 1 ~ 10 - 4 のうちのいずれか 1 つで表されてもよい。

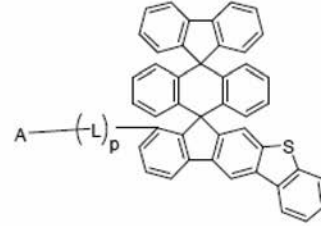
【化 1 1】



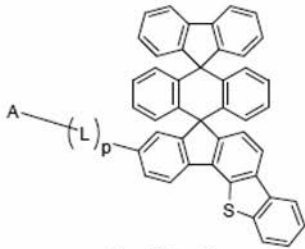
化学式 8-1



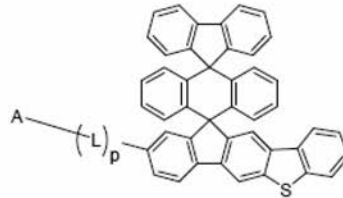
化学式 9-1



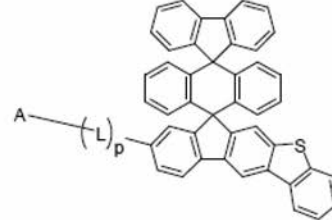
化学式 10-1



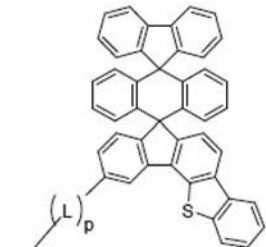
化学式 8-2



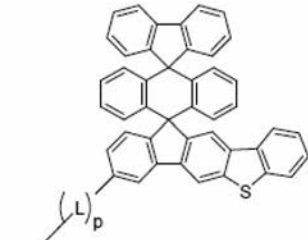
化学式 9-2



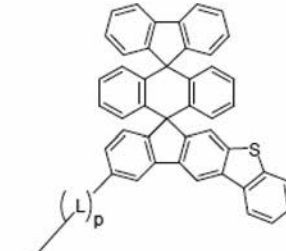
化学式 10-2



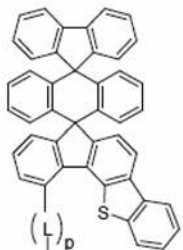
化学式 8-3



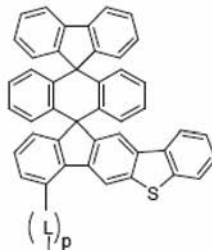
化学式 9-3



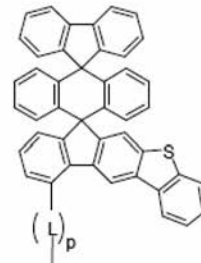
化学式 10-3



化学式 8-4



化学式 9-4



化学式 10-4

前記化学式 8 - 1 ~ 8 - 4、化学式 9 - 1 ~ 9 - 4、および化学式 10 - 1 ~ 10 - 4 において、

p、L および A はそれぞれ、化学式 2 ~ 7 で定義された通りである。

【0059】

本明細書の一実施態様によれば、前記化学式 1 で表される化合物は、下記化学式 11 - 1 ~ 11 - 4、化学式 12 - 1 ~ 12 - 4、および化学式 13 - 1 ~ 13 - 4 のうちのいずれか 1 つで表されてもよい。

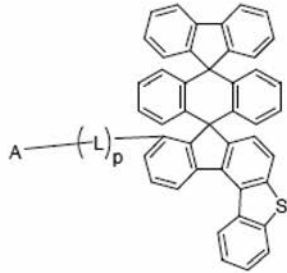
10

20

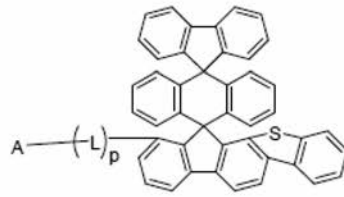
30

40

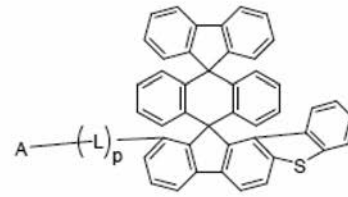
【化 1 2】



化学式 11-1

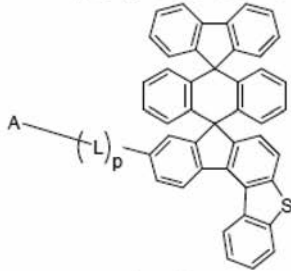


化学式 12-1

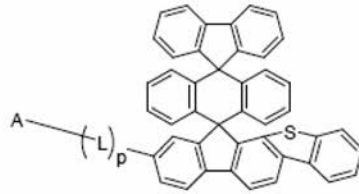


化学式 13-1

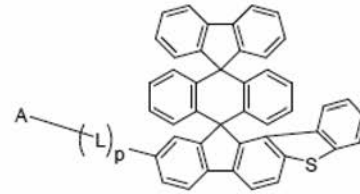
10



化学式 11-2

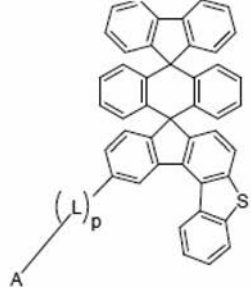


化学式 12-2

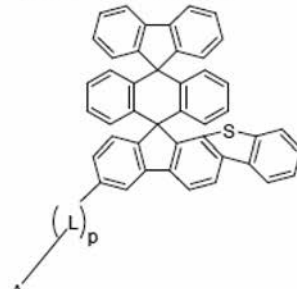


化学式 13-2

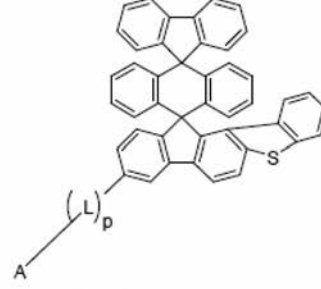
20



化学式 11-3

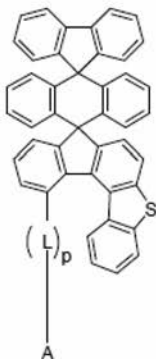


化学式 12-3

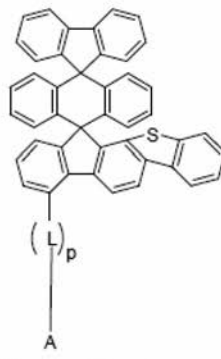


化学式 13-3

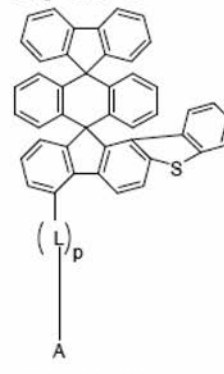
30



化学式 11-4



化学式 12-4



化学式 13-4

前記化学式 11-1 ~ 11-4、化学式 12-1 ~ 12-4、および化学式 13-1 ~ 13-4 において、
p、L および A はそれぞれ、化学式 2 ~ 7 で定義された通りである。

40

【0060】

本発明の一実施態様において、L は、直接結合；置換もしくは非置換のアリーレン基；または置換もしくは非置換のヘテロアリーレン基である。

【0061】

本発明の一実施態様において、L は、直接結合；炭素数 6 ~ 60 の置換もしくは非置換のアリーレン基；または炭素数 1 ~ 60 の置換もしくは非置換のヘテロアリーレン基である。

【0062】

本発明の一実施態様において、L は、直接結合；炭素数 6 ~ 30 の単環式もしくは多環

50

式の置換もしくは非置換のアリーレン基；または炭素数 1 ~ 30 の単環式もしくは多環式の置換もしくは非置換のヘテロアリーレン基である。

【0063】

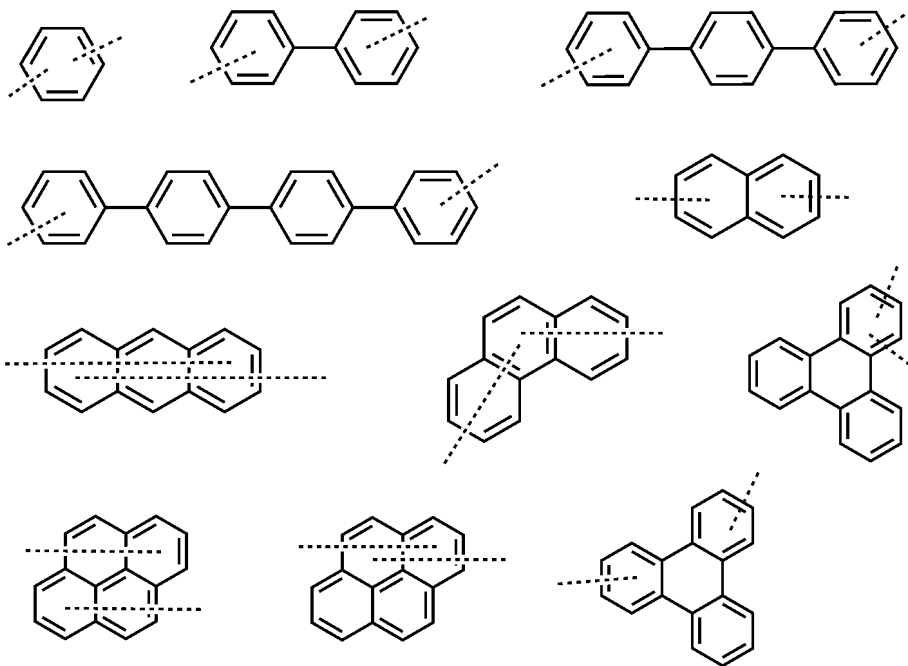
本発明の一実施態様において、L は、直接結合；置換もしくは非置換のフェニレン基；置換もしくは非置換のビフェニリレン基；置換もしくは非置換のターフェニレン基；置換もしくは非置換のクォーターフェニレン基；置換もしくは非置換のナフチレン基；置換もしくは非置換のアントラセニレン基；置換もしくは非置換のフェナントレニレン基；置換もしくは非置換のトリフェニレニレン基；置換もしくは非置換のピレニレン基；置換もしくは非置換のフルオレニレニル基；置換もしくは非置換のジベンゾフラニレン基；置換もしくは非置換のジベンゾチオフェニレン基；または置換もしくは非置換のカルバゾリレン基である。

10

【0064】

本発明の一実施態様において、L は、直接結合、または下記構造の中から選択されたいずれか 1 つであってもよく、下記構造はさらに置換されていてもよい。

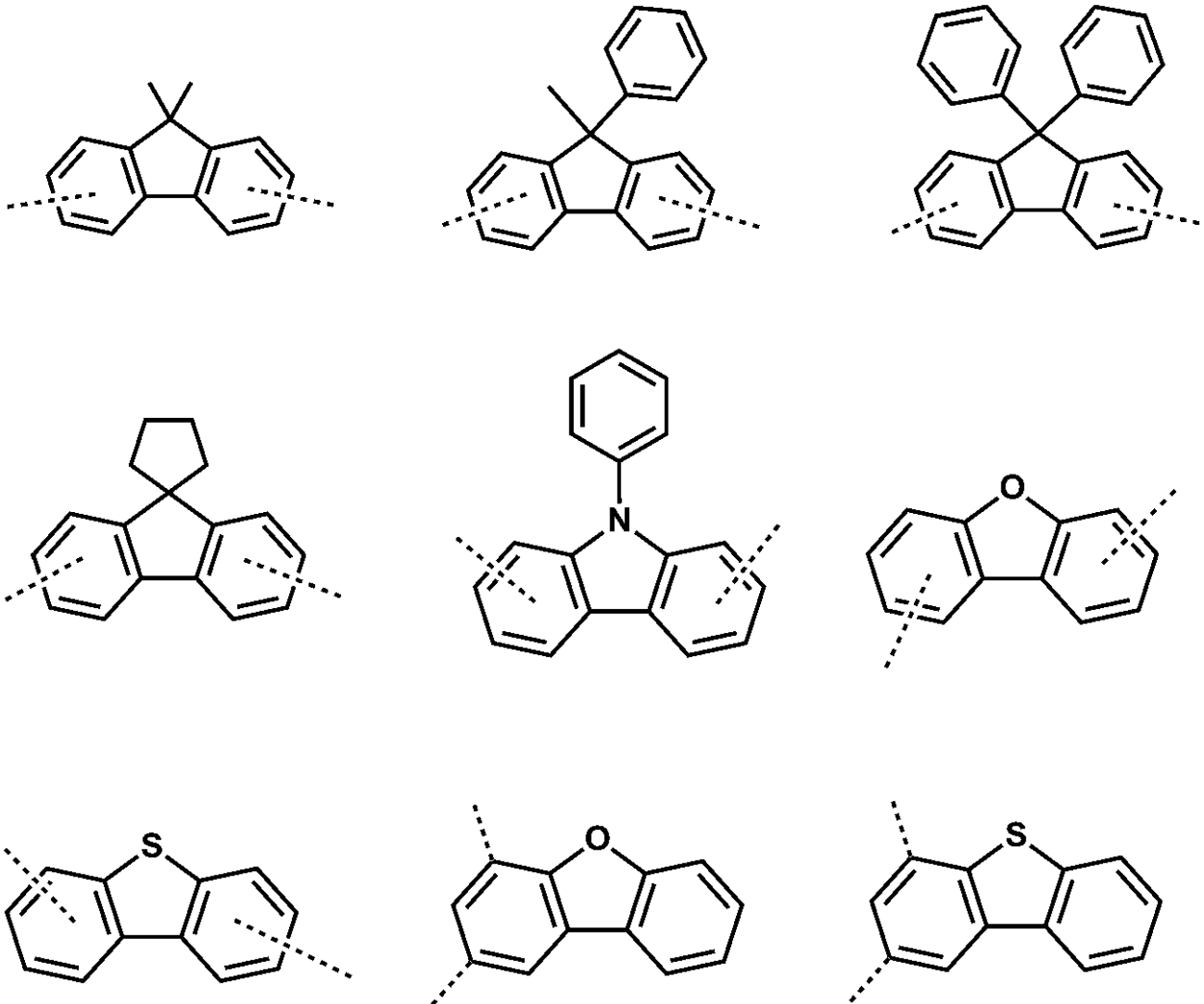
【化 13】



20

30

【化 1 4】



10

20

30

前記構造式中、点線は隣接した基、例えば、化学式 1 のコア構造；p が 2 以上の場合に、もう 1 つの L；または A と結合する部位である。

【0065】

具体的には、前記構造は、重水素；ハロゲン基；ニトリル基；ニトロ基；ヒドロキシ基；カルボニル基；エステル基；イミド基；アミン基；ホスフィンオキシド基；アルコキシ基；アリールオキシ基；アルキルチオキシ基；アリールチオキシ基；アルキルスルホキシ基；アリールスルホキシ基；シリル基；ホウ素基；アルキル基；シクロアルキル基；アルケニル基；アリール基；アルアルキル基；アルアルケニル基；アルキルアリール基；アルキルアミン基；アラルキルアミン基；ヘテロアリールアミン基；アリールアミン基；アリールヘテロアリールアミン基；アリールホスフィン基；およびヘテロ環基からなる群より選択された 1 個以上の置換基で置換もしくは非置換であってもよい。

40

【0066】

本発明の一実施態様において、L は、直接結合；または置換もしくは非置換のフェニレン基である。

【0067】

本発明の一実施態様において、A は、水素；重水素；ハロゲン基；ニトリル基；ニトロ基；ヒドロキシ基；カルボニル基；エステル基；イミド基；アミノ基；置換もしくは非置換のシリル基；置換もしくは非置換のホウ素基；置換もしくは非置換のアルキル基；置換もしくは非置換のアルキルスルホキシ基；置換もしくは非置換のアリールスルホキシ基；置換もしくは非置換のアルケニル基；置換もしくは非置換のアルアルキル基；置換もしくは非置換のアルアルケニル基；置換もしくは非置換のアルキルアリール基；置換もしくは非置換の

50

非置換のアルキルアミン基；置換もしくは非置換のアラルキルアミン基；置換もしくは非置換のヘテロアリールアミン基；置換もしくは非置換のアリールアミン基；置換もしくは非置換のアリールホスフィン基；置換もしくは非置換のホスフィンオキシド基；置換もしくは非置換のアリール基；または置換もしくは非置換のヘテロ環基である。

【0068】

本発明の一実施態様において、Aは、水素；重水素；炭素数6～60の置換もしくは非置換のアリール基；または炭素数1～60の置換もしくは非置換のヘテロ環基である。

【0069】

本発明の一実施態様において、Aは、水素；重水素；炭素数6～30の単環式もしくは多環式の置換もしくは非置換のアリール基；または炭素数1～60の単環式もしくは多環式の置換もしくは非置換のヘテロ環基である。

10

【0070】

本発明の一実施態様において、Aは、水素；重水素；アリール基およびヘテロ環基からなる群より選択された1個以上の置換基で置換もしくは非置換の単環式の含窒素ヘテロ環基；またはアリール基およびヘテロ環基からなる群より選択された1個以上の置換基で置換もしくは非置換の多環式の置換もしくは非置換のヘテロ環基である。

【0071】

本発明の一実施態様において、Aは、水素；重水素；フェニル基、ビフェニル基、ナフチル基、9,9-ジメチルフルオレニル基、およびピリジン基からなる群より選択された1個以上の置換基で置換もしくは非置換のピリジン基；フェニル基、ビフェニル基、ナフチル基、9,9-ジメチルフルオレニル基、およびピリジン基からなる群より選択された1個以上の置換基で置換もしくは非置換のピリミジン基；フェニル基、ビフェニル基、ナフチル基、9,9-ジメチルフルオレニル基、およびピリジン基からなる群より選択された1個以上の置換基で置換もしくは非置換のトリアジニル基；フェニル基、ビフェニル基、ナフチル基、9,9-ジメチルフルオレニル基、およびピリジン基からなる群より選択された1個以上の置換基で置換もしくは非置換のキノリン基；フェニル基、ビフェニル基、ナフチル基、9,9-ジメチルフルオレニル基、およびピリジン基からなる群より選択された1個以上の置換基で置換もしくは非置換のキナゾリン基；フェニル基、ビフェニル基、ナフチル基、9,9-ジメチルフルオレニル基、およびピリジン基からなる群より選択された1個以上の置換基で置換もしくは非置換のベンズイミダゾール基；フェニル基、ビフェニル基、ナフチル基、9,9-ジメチルフルオレニル基、およびピリジン基からなる群より選択された1個以上の置換基で置換もしくは非置換のベンズオキサゾール基；フェニル基、ビフェニル基、ナフチル基、9,9-ジメチルフルオレニル基、およびピリジン基からなる群より選択された1個以上の置換基で置換もしくは非置換のベンゾチアゾール基；フェニル基、ビフェニル基、ナフチル基、9,9-ジメチルフルオレニル基、およびピリジン基からなる群より選択された1個以上の置換基で置換もしくは非置換のフェナントリジン基；フェニル基、ビフェニル基、ナフチル基、9,9-ジメチルフルオレニル基、およびピリジン基からなる群より選択された1個以上の置換基で置換もしくは非置換のフェナントロリン基；またはフェニル基、ビフェニル基、ナフチル基、9,9-ジメチルフルオレニル基、およびピリジン基からなる群より選択された1以上の置換基で置換もしくは非置換のベンゾイミダゾキナゾリン基である。

20

30

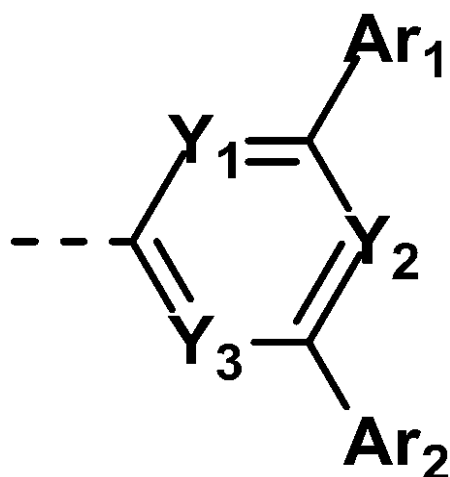
40

【0072】

一実施態様において、Aが置換もしくは非置換のヘテロアリール基の場合に、下記構造式1または構造式2で表されてもよく、ただし、これに限定されるものではない。

[構造式 1]

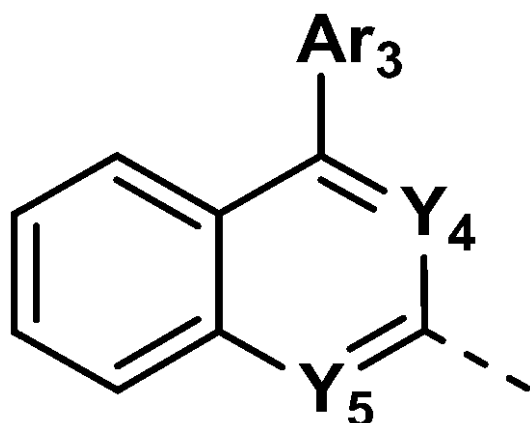
【化 1 5】



10

[構造式 2]

【化 1 6】



20

前記構造式 1 および構造式 2 において、Y 1 ~ Y 5 は、互いに同一または異なり、それぞれ独立に、N または CH であり、Y 1 ~ Y 3 のうちの少なくとも 1 つは、N であり、Y 4 および Y 5 のうちの少なくとも 1 つは、N であり、

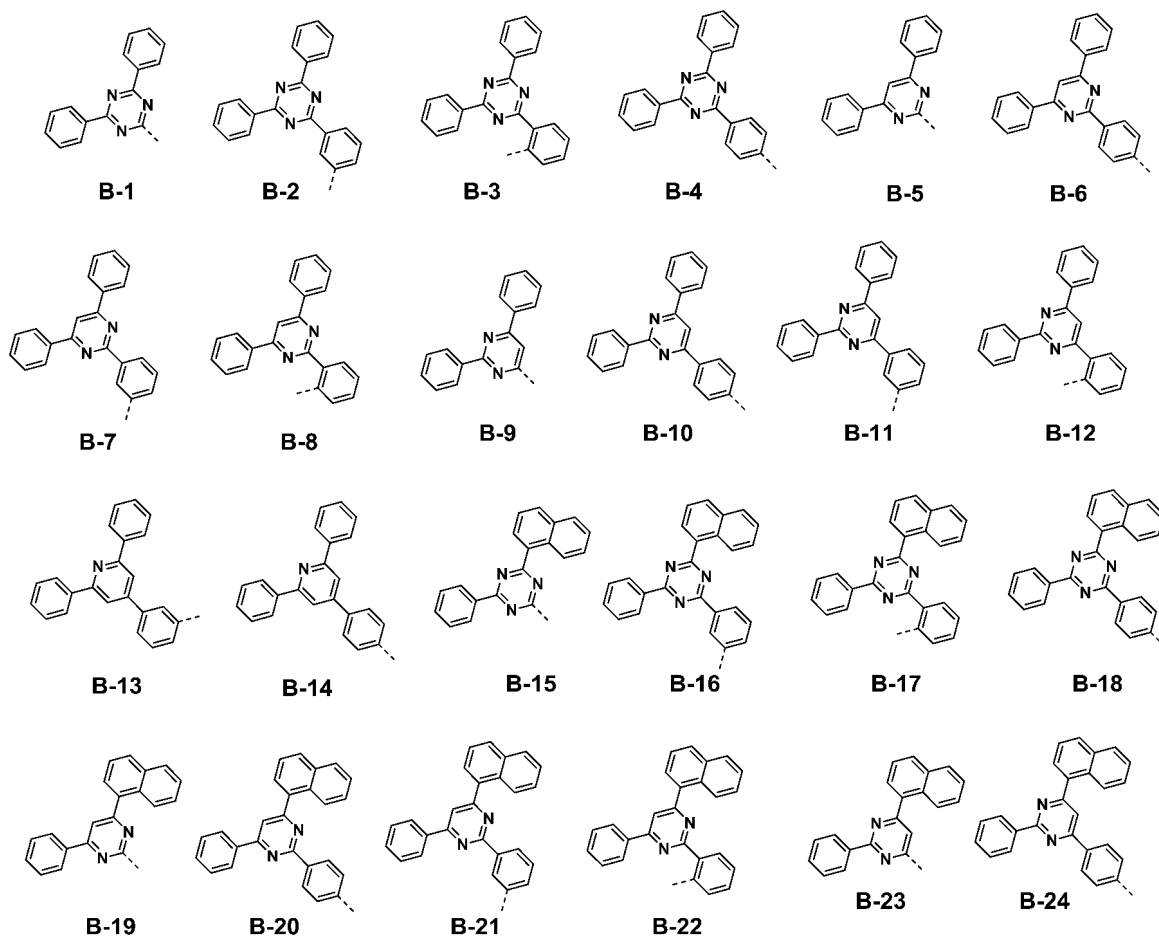
30

Ar 1 ~ Ar 3 は、互いに同一または異なり、それぞれ独立に、水素；置換もしくは非置換のアリール基；または置換もしくは非置換のヘテロ環基であり、具体的には、アリール基またはヘテロ環基でさらに置換されていてもよい。

【 0 0 7 3 】

本発明の一実施態様において、A は、水素、重水素、または下記構造から選択されたいずれか 1 つであってもよく、下記構造はさらに置換されていてもよい。

【化 1 7】



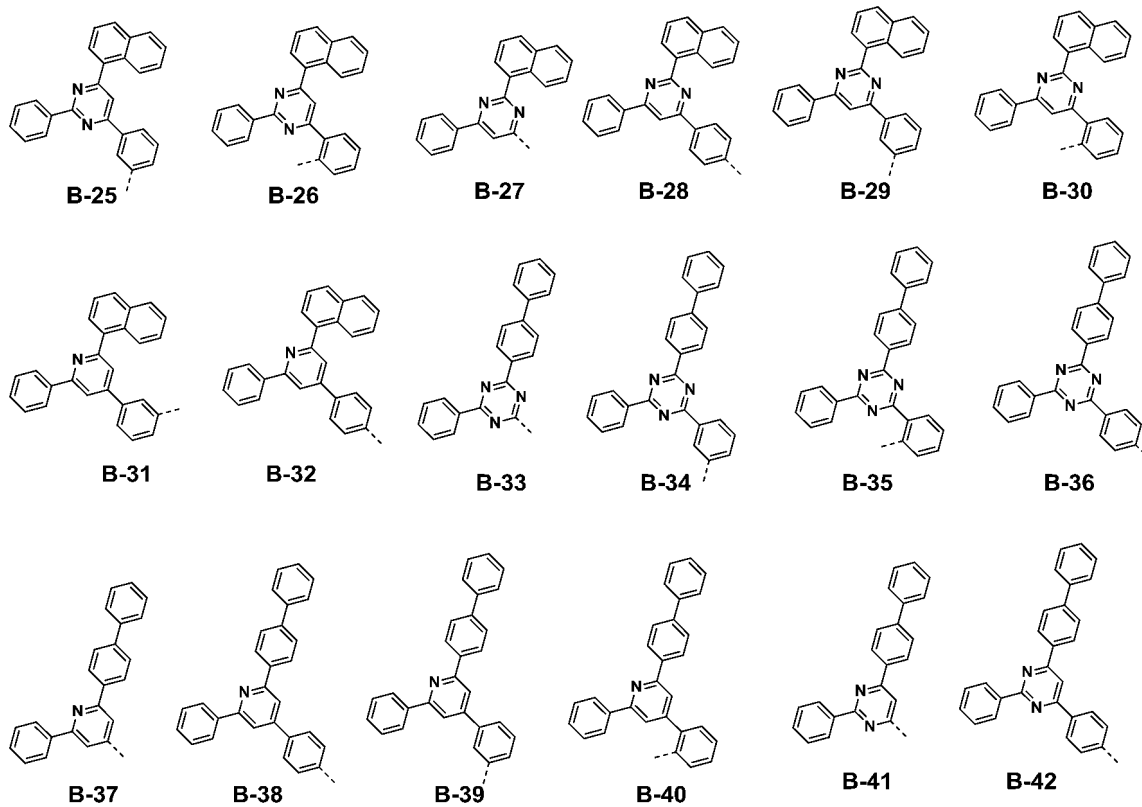
10

20

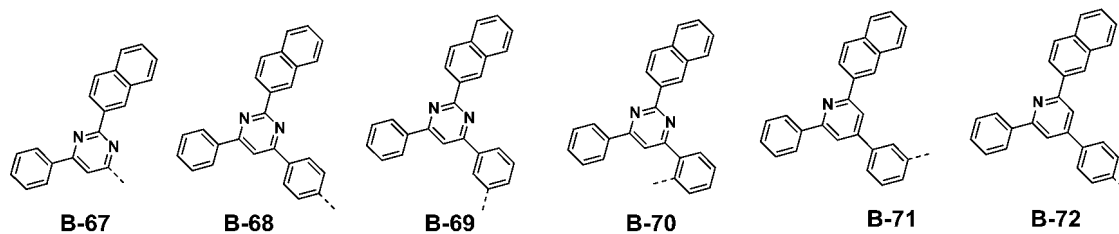
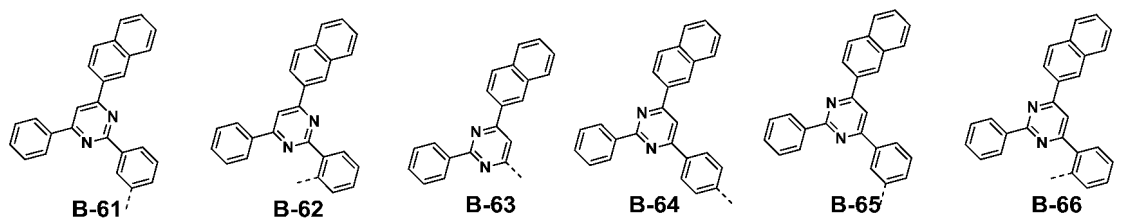
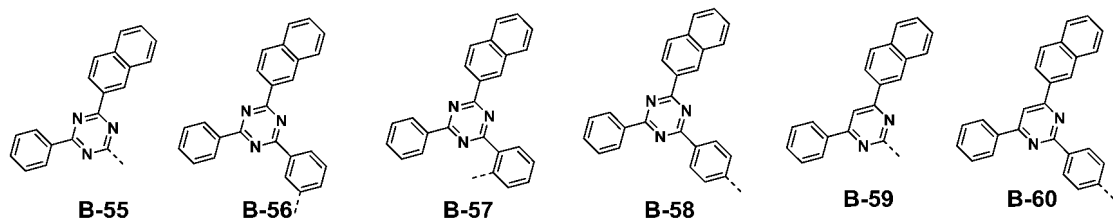
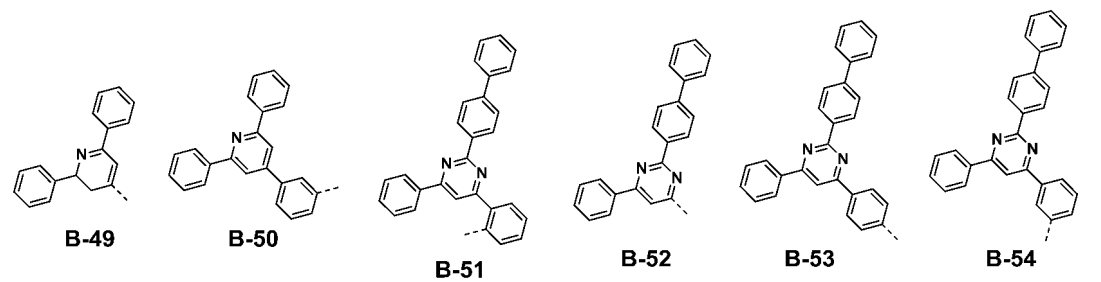
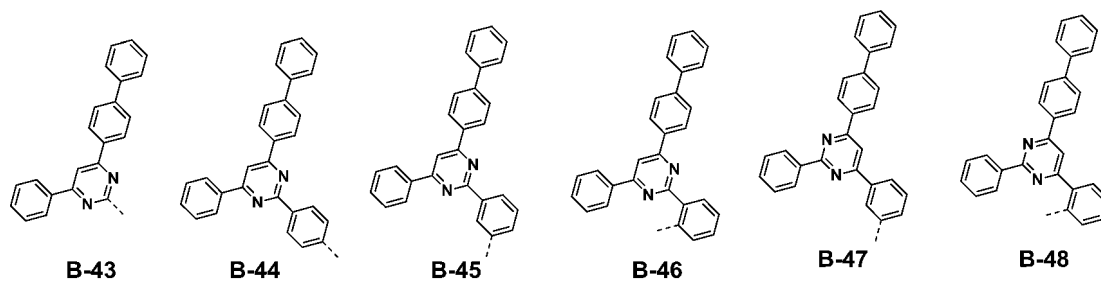
30

40

【化 1 8】



【化 19】

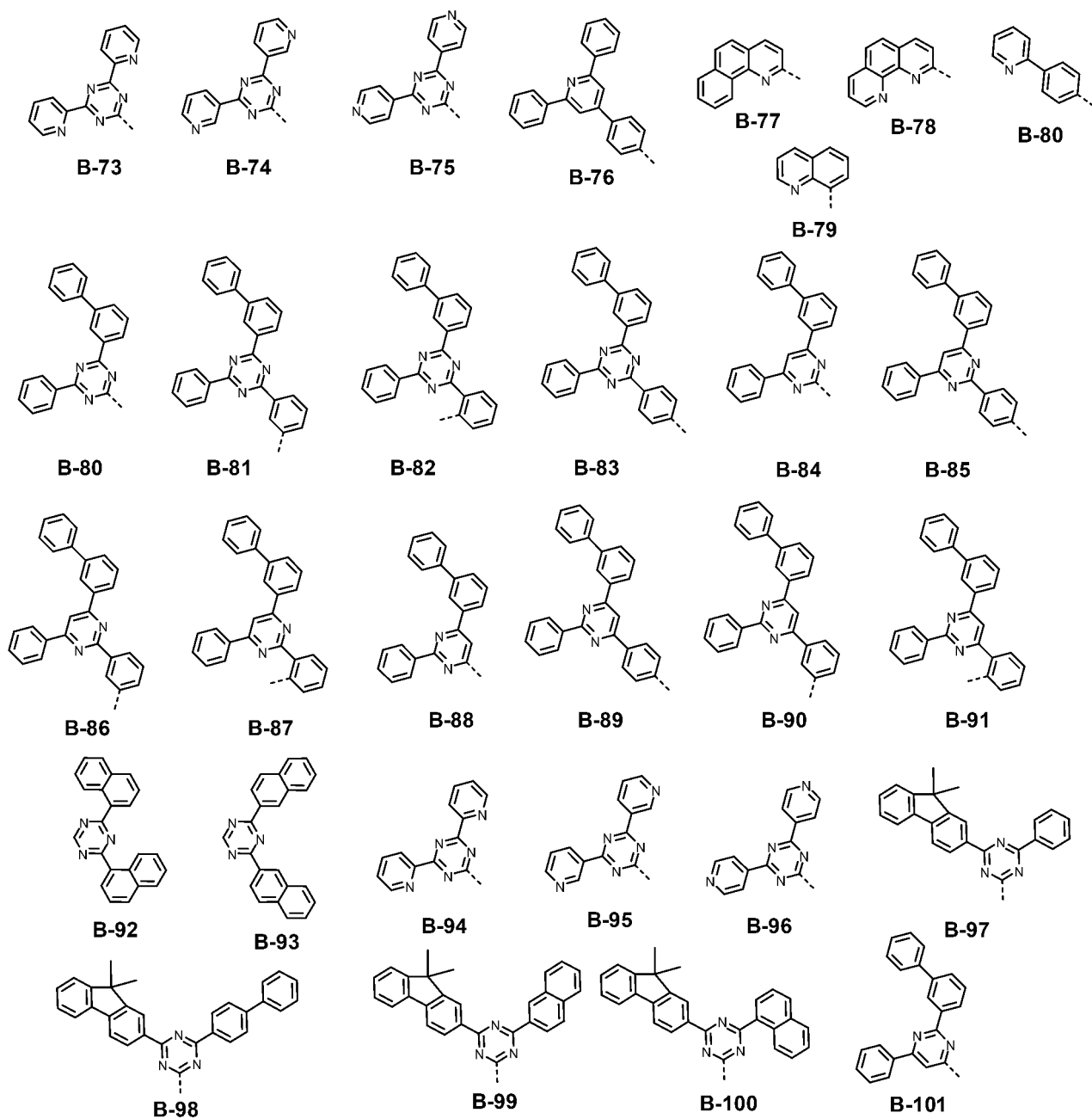


10

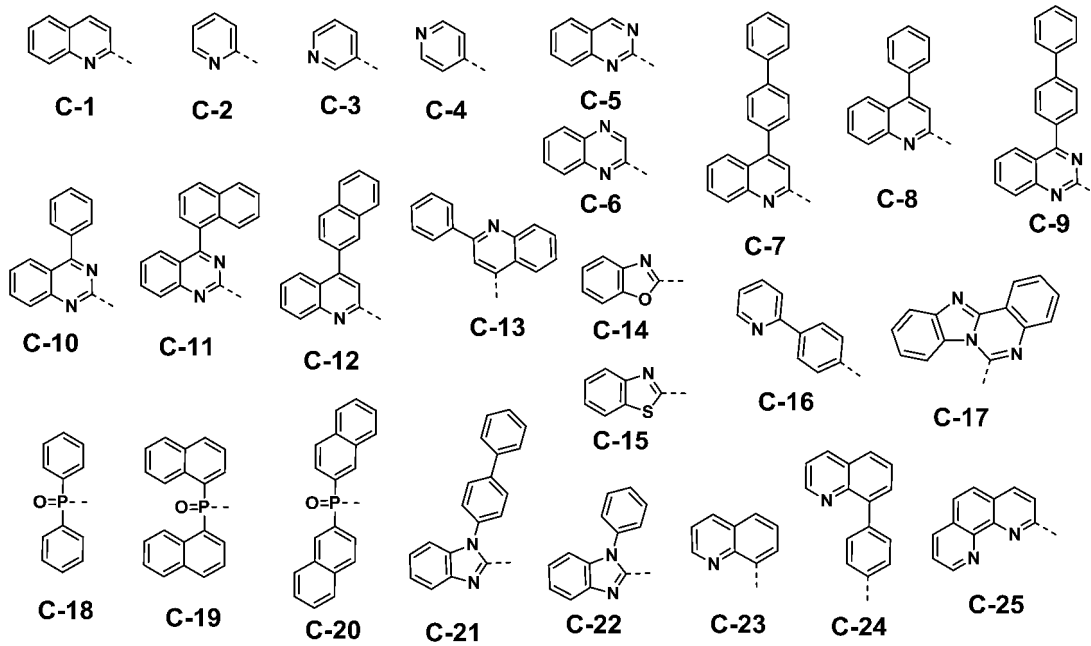
20

30

【化 20】



【化 2 1】



10

【0074】

前記構造式中、点線は隣接した基、例えば、化学式 1 のコア構造、または L と結合する部位である。

20

【0075】

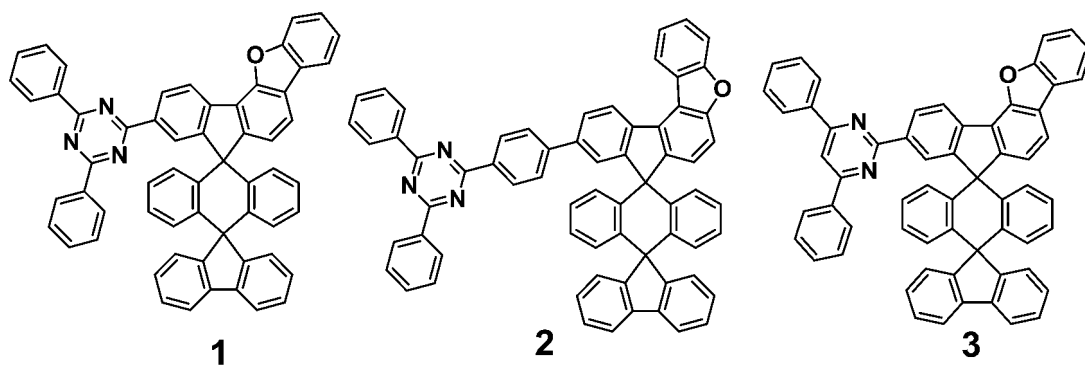
具体的には、前記構造は、重水素；ハロゲン基；ニトリル基；ニトロ基；ヒドロキシ基；カルボニル基；エステル基；イミド基；アミン基；ホスフィンオキシド基；アルコキシ基；アリールオキシ基；アルキルチオキシ基；アリールチオキシ基；アルキルスルホキシ基；アリールスルホキシ基；シリル基；ハウ素基；アルキル基；シクロアルキル基；アルケニル基；アリール基；アルアルキル基；アルアルケニル基；アルキルアリール基；アルキルアミン基；アラルキルアミン基；ヘテロアリールアミン基；アリールアミン基；アリールヘテロアリールアミン基；アリールホスフィン基；およびヘテロ環基からなる群より選択された 1 個以上の置換基で置換もしくは非置換であってもよい。

30

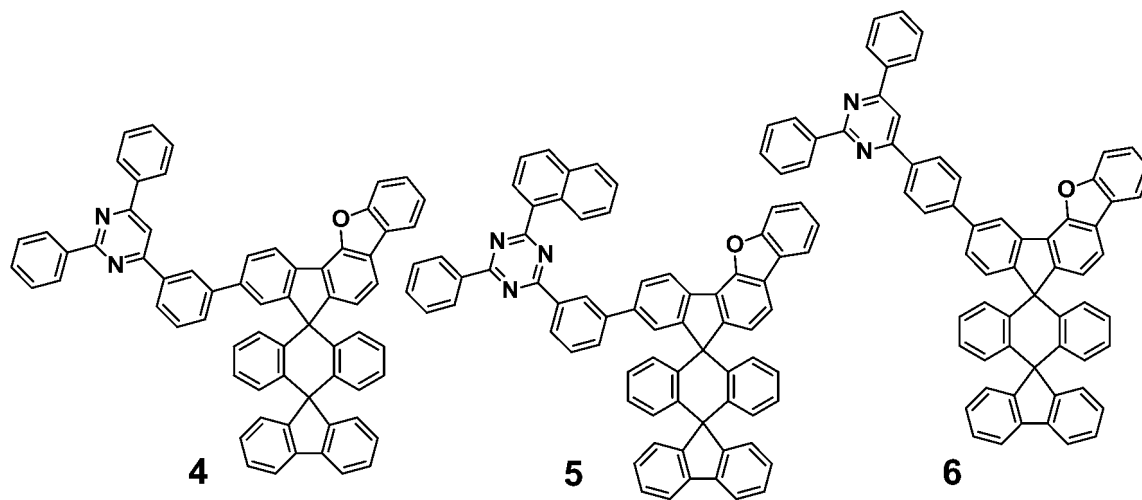
【0076】

本発明の一実施態様において、前記化学式 1 の化合物は、下記化合物の中から選択されたいずれか 1 つであってもよい。

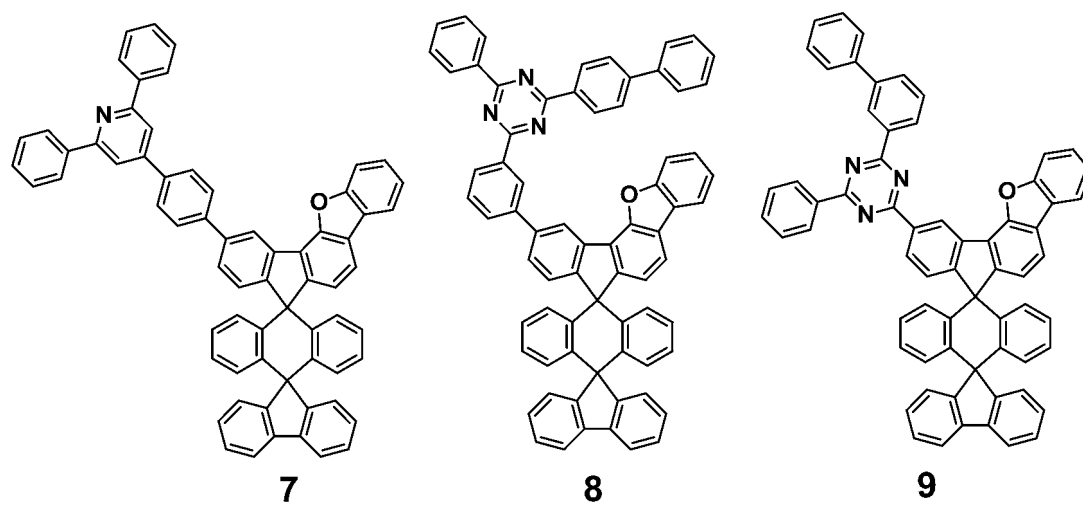
【化 2 2】



10

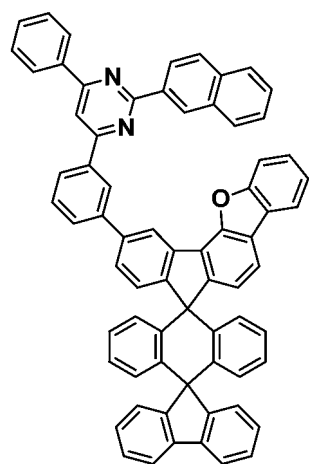
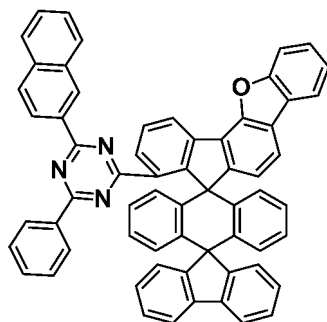
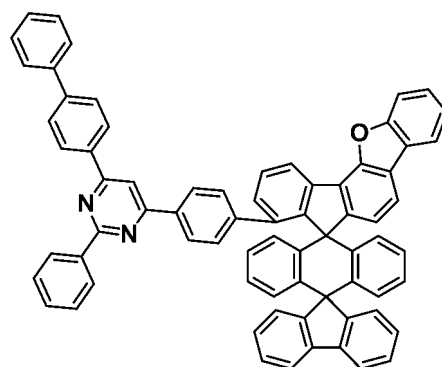
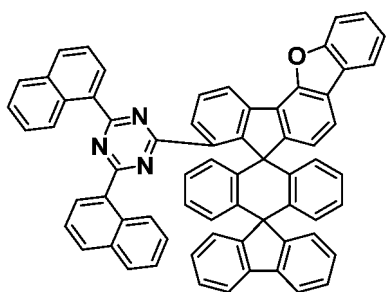
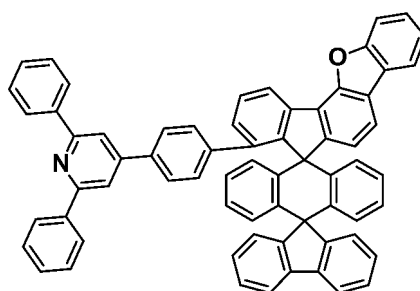
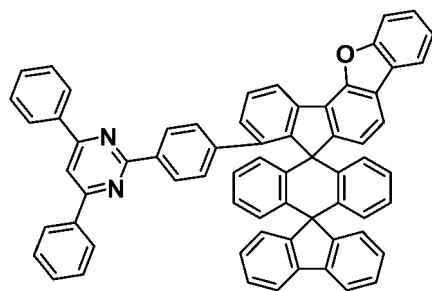
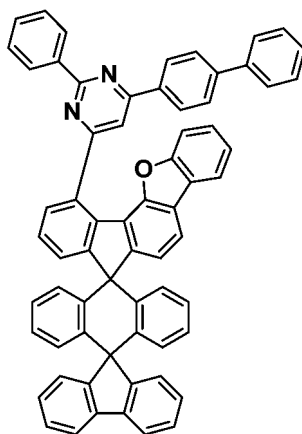
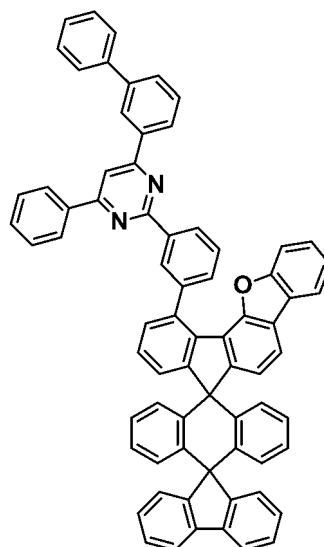


20



30

【化 2 3】

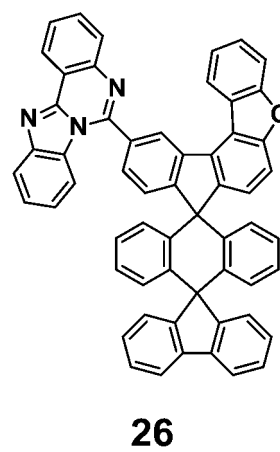
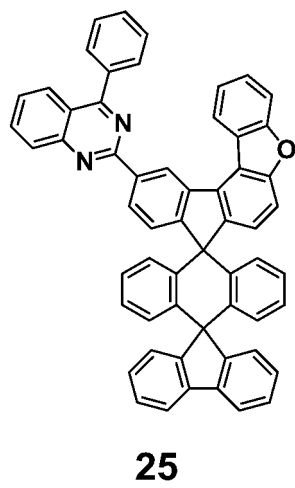
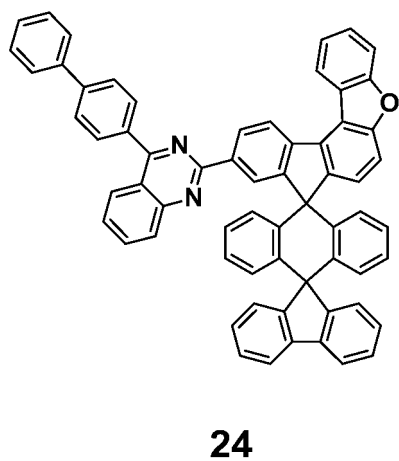
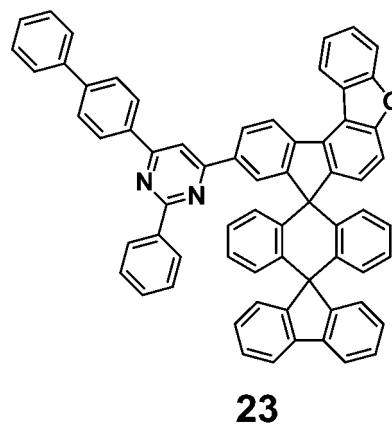
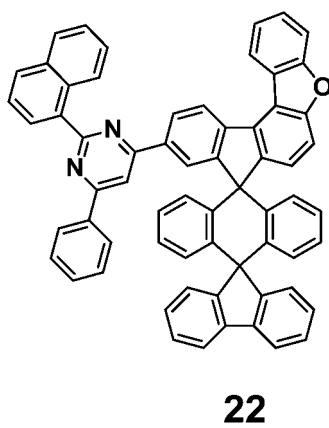
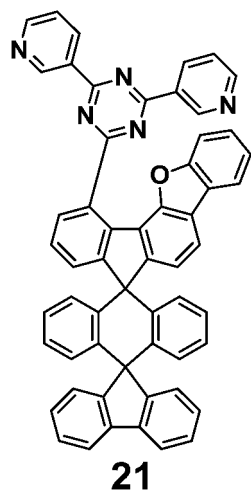
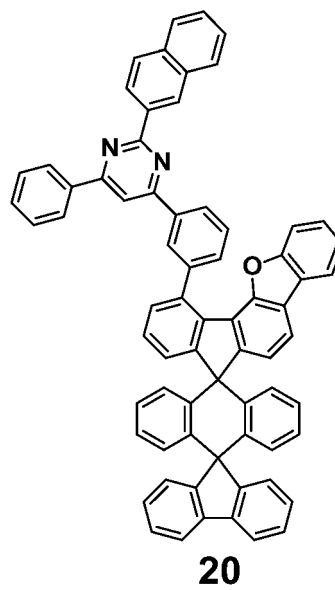
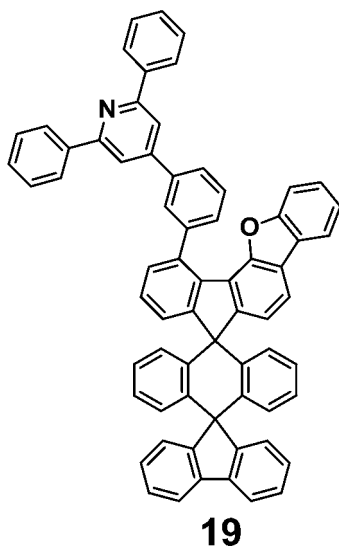
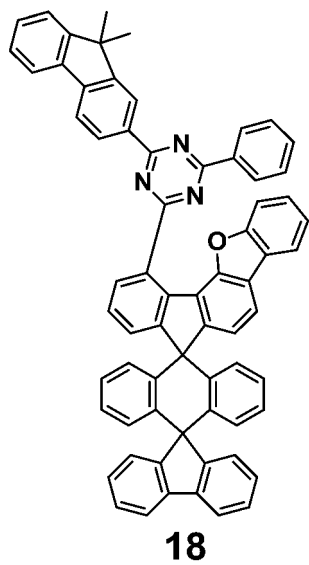
**10****11****12****13****14****15****16****17**

10

20

30

【化 2 4】



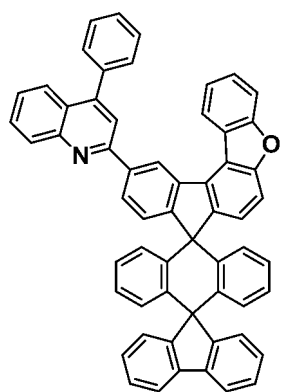
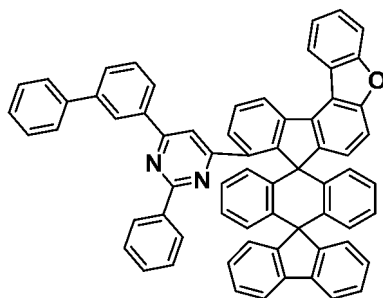
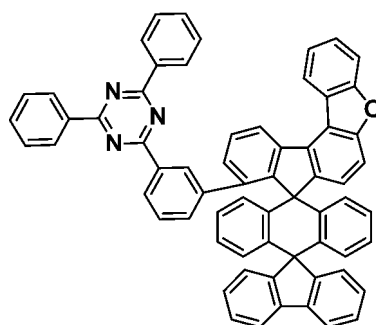
10

20

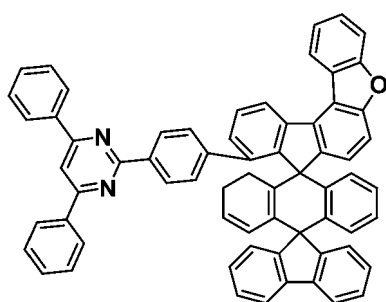
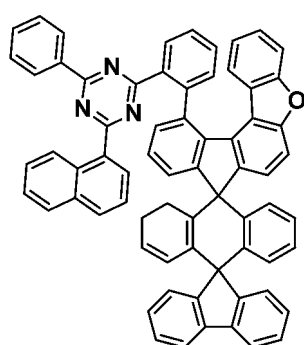
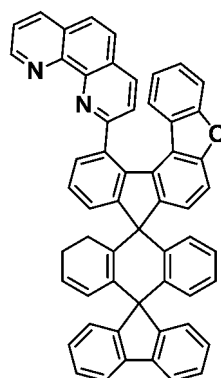
30

40

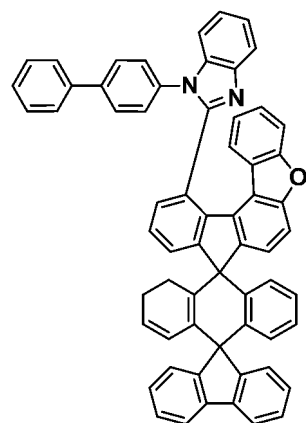
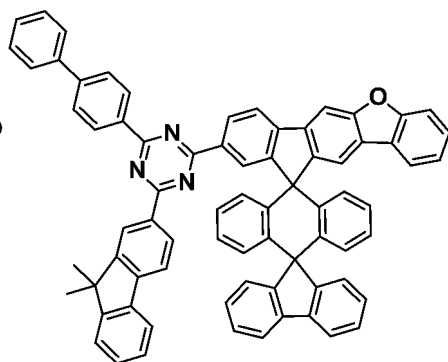
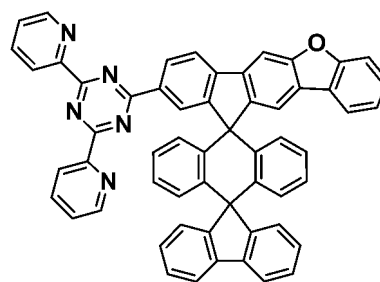
【化 2 5】

**27****28****29**

10

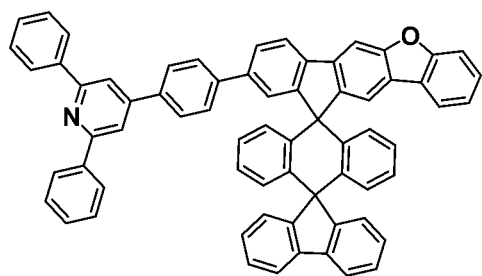
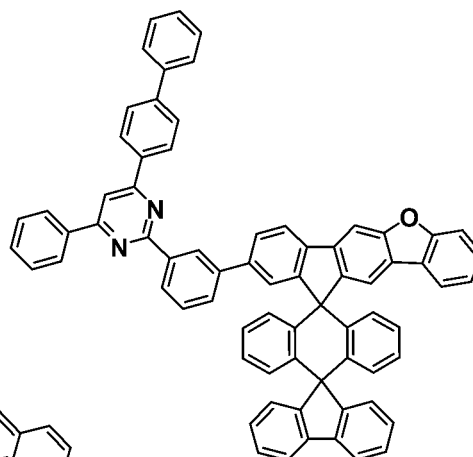
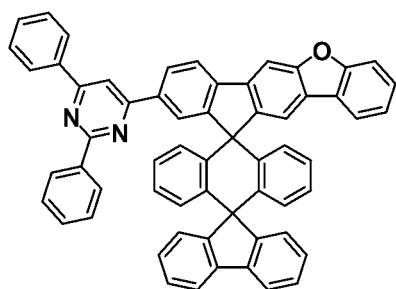
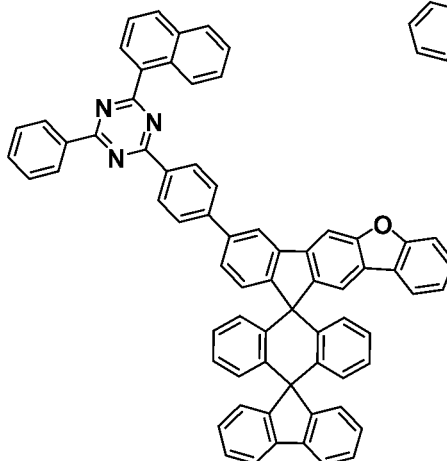
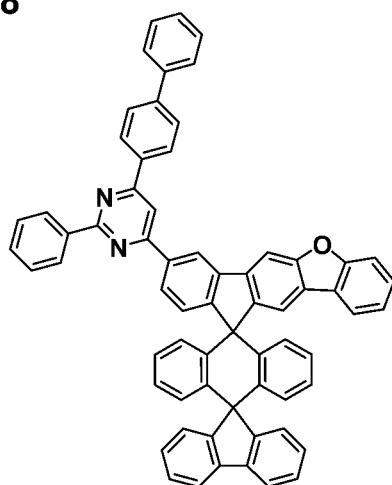
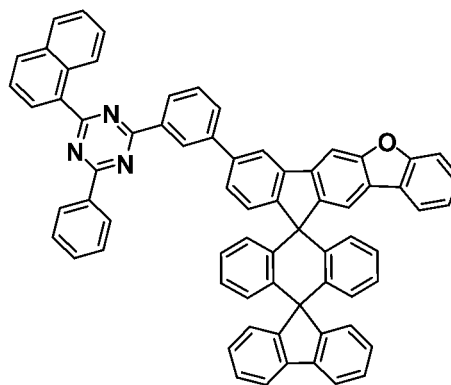
**30****31****32**

20

**33****34****35**

30

【化 2 6】

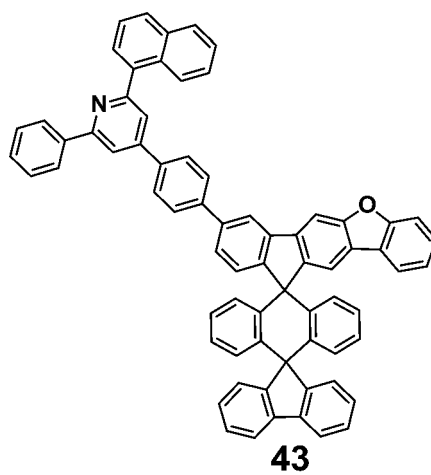
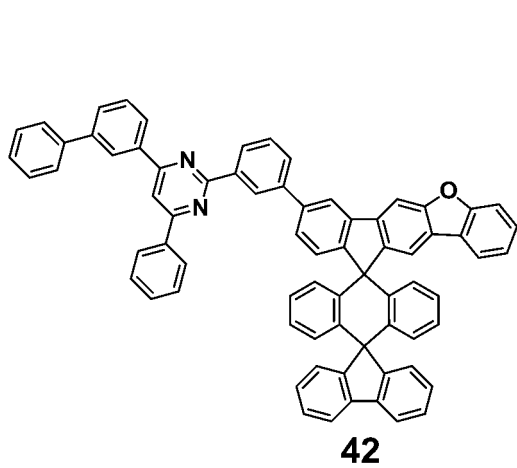
**36****37****38****39****40****41**

10

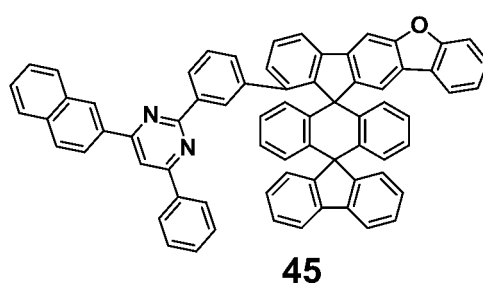
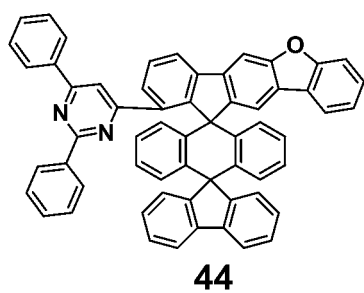
20

30

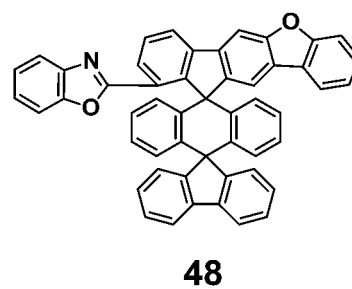
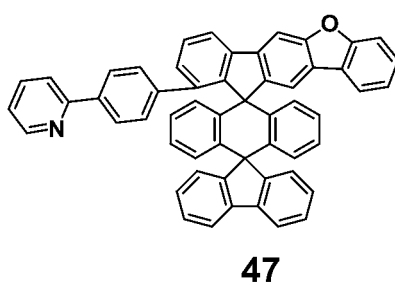
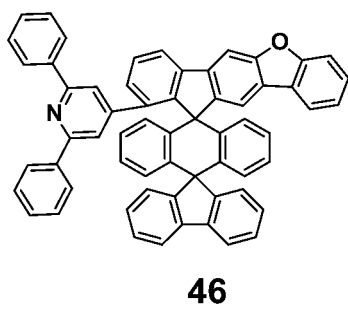
【化 27】



10

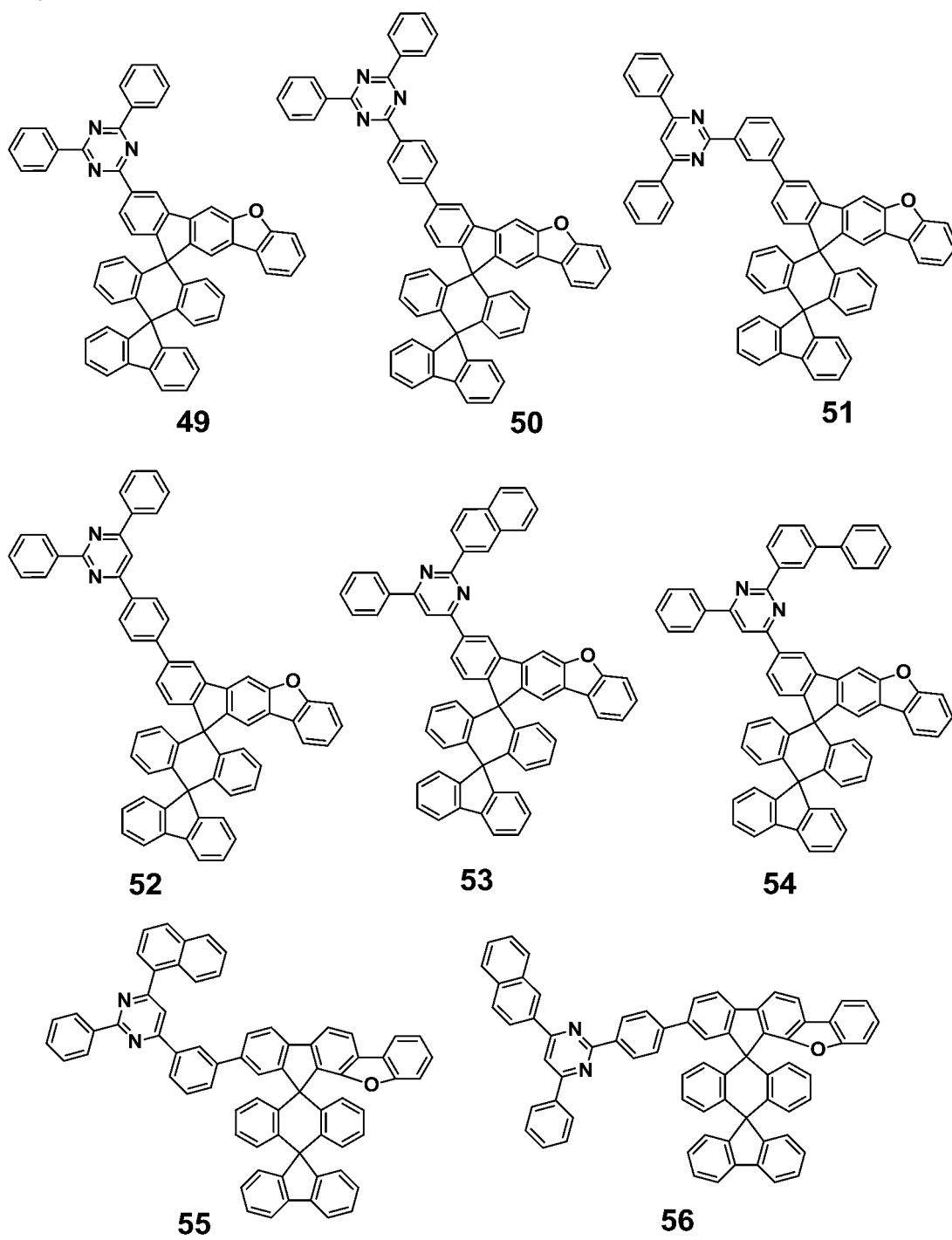


20



30

【化 2 8】

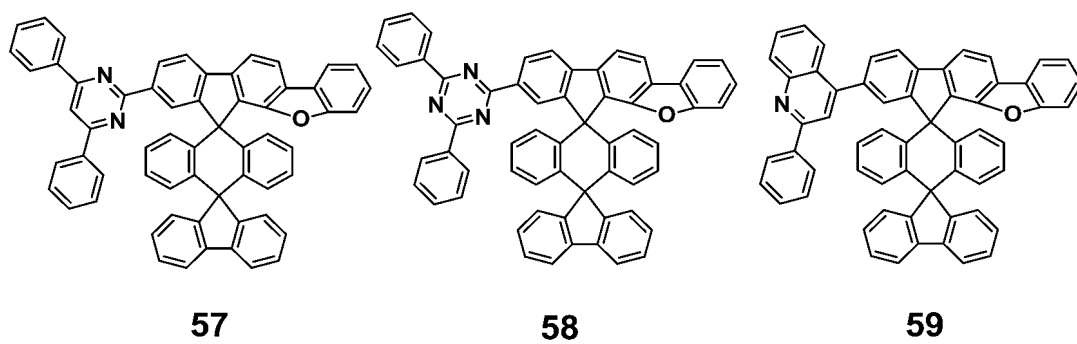


10

20

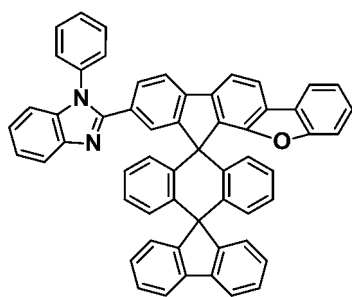
30

【化 2 9】

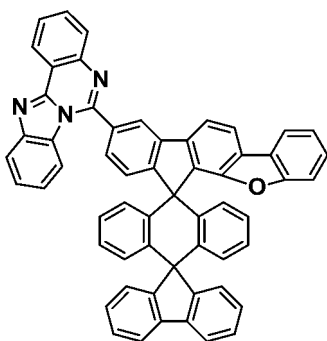


40

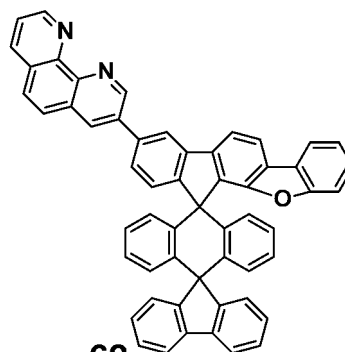
【化 3 0】



60

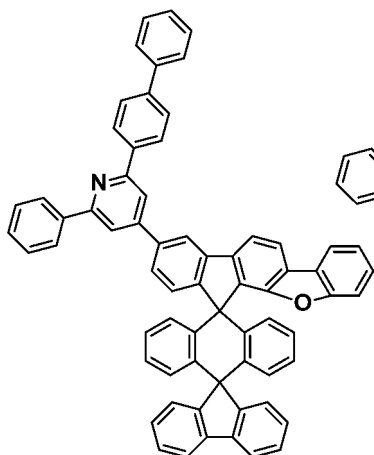


61

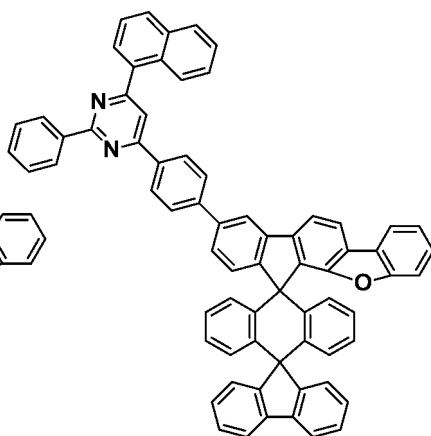


62

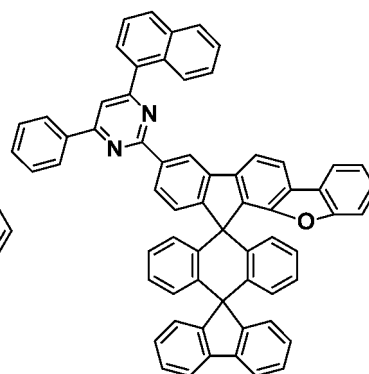
10



63

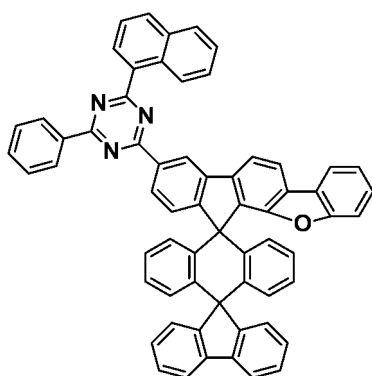


64

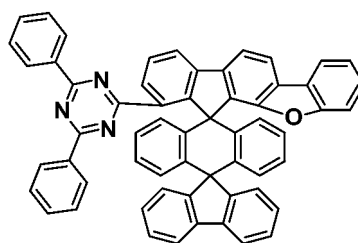


65

20



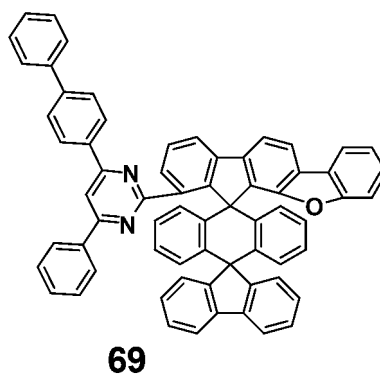
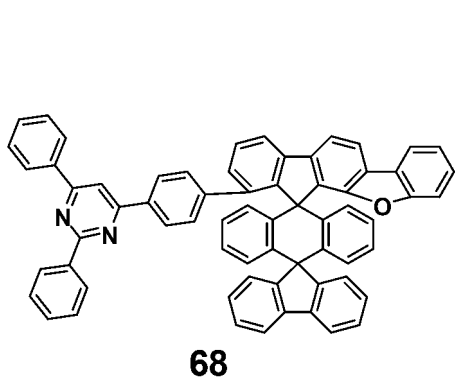
66



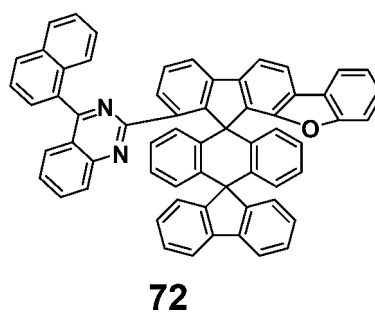
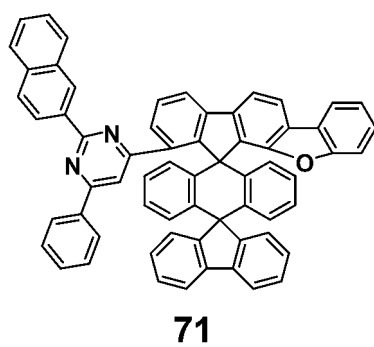
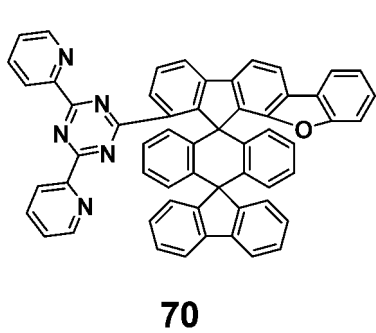
67

30

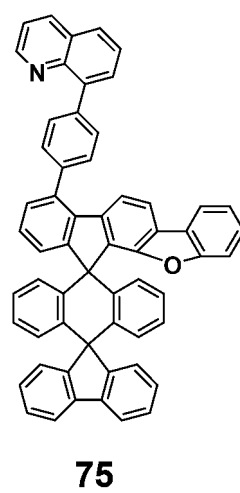
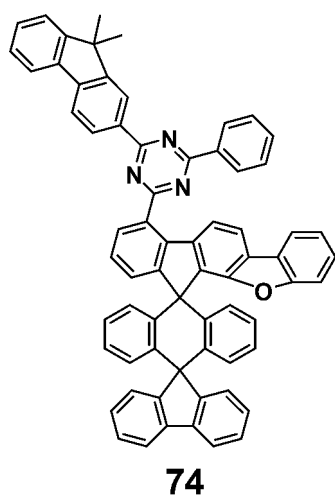
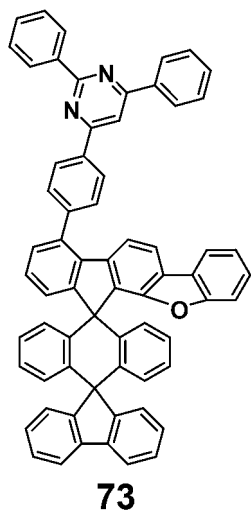
【化 3 1】



10

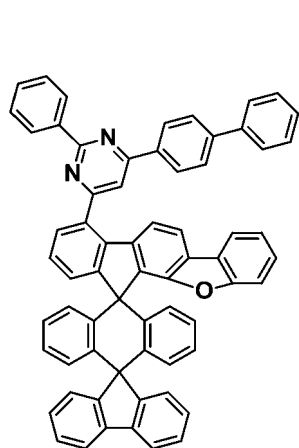
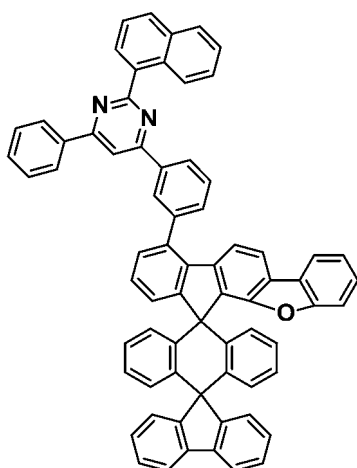
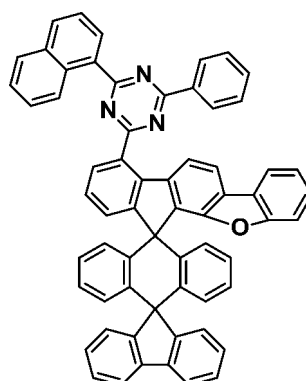
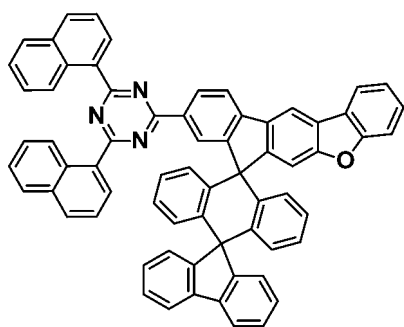
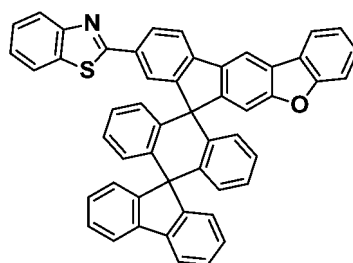
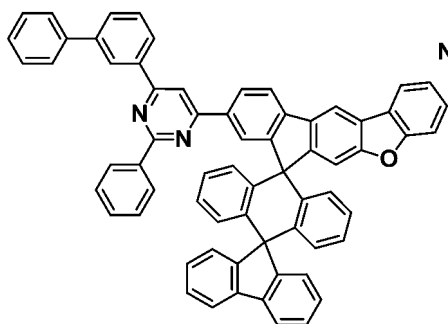
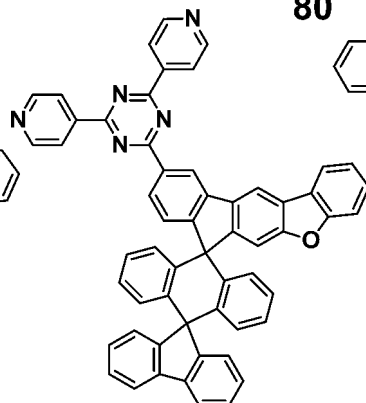
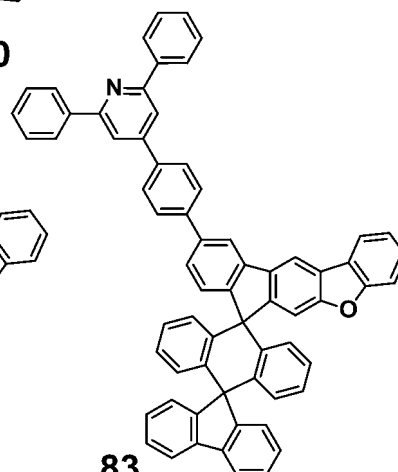


20



30

【化 3 2】

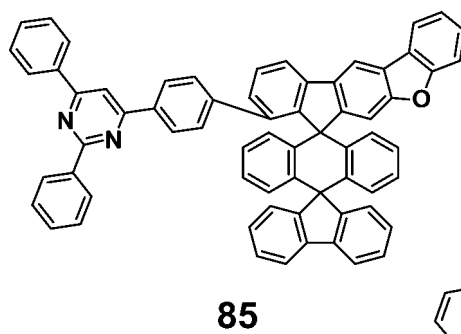
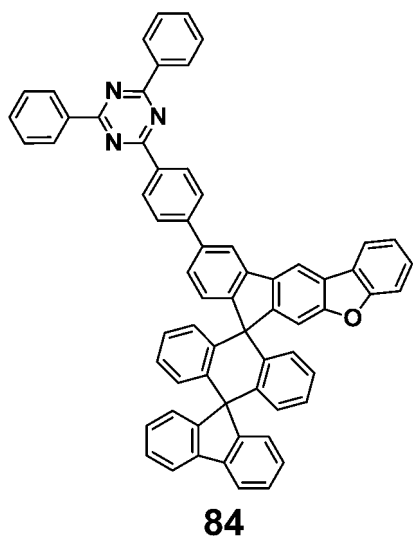
**76****77****78****79****80****81****82****83**

10

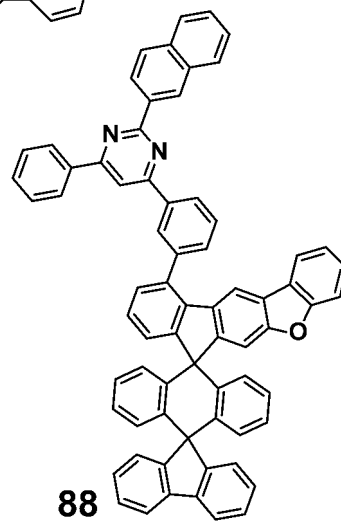
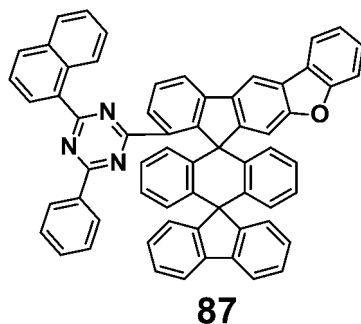
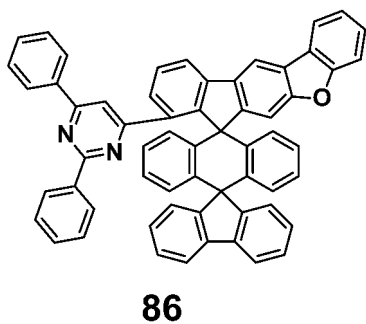
20

30

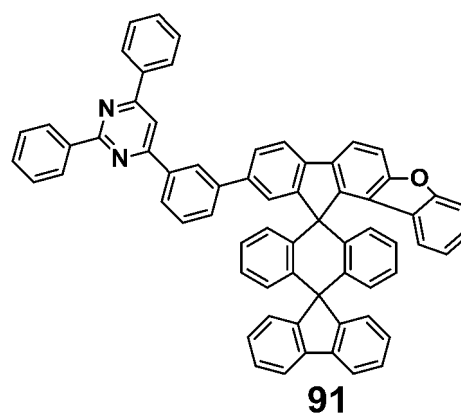
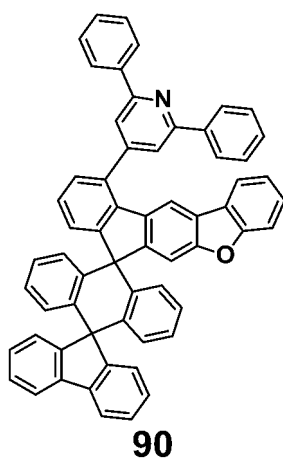
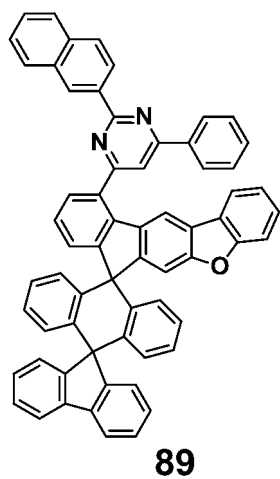
【化 3 3】



10

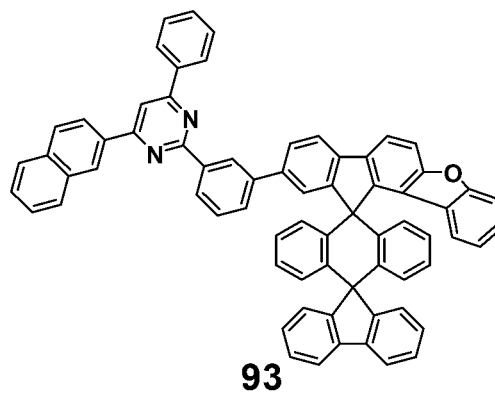
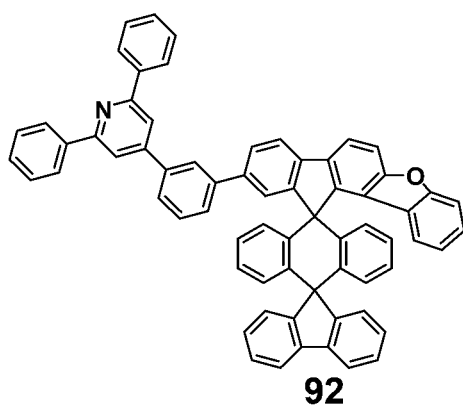


20

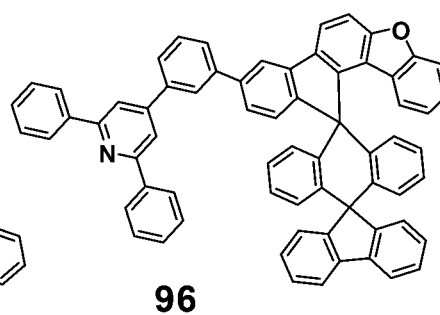
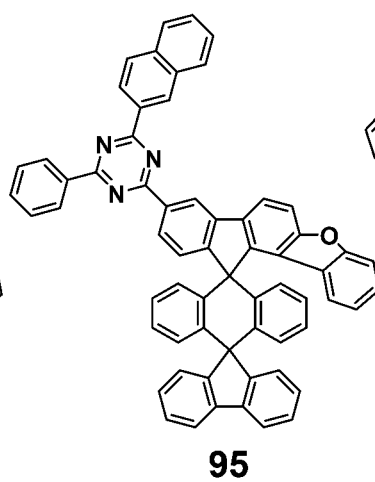
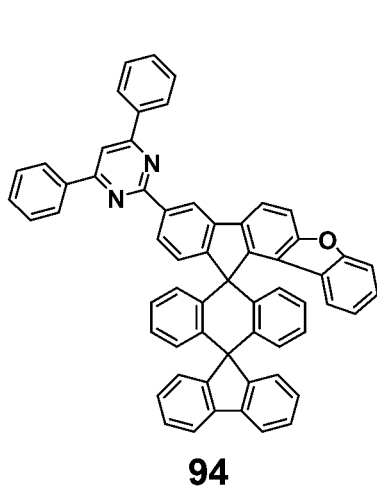


30

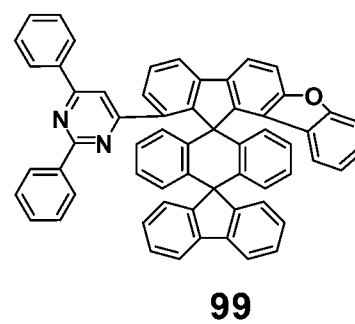
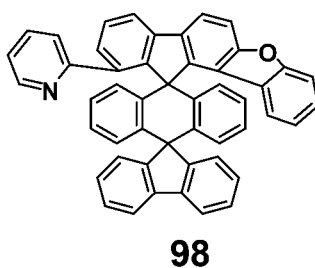
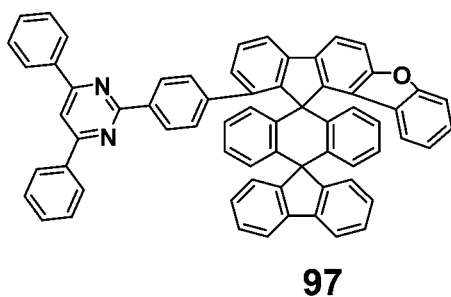
【化 3 4】



10

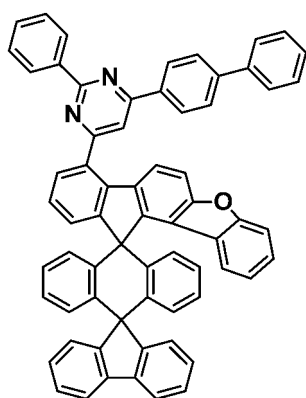
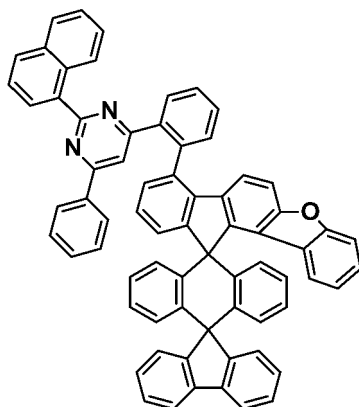
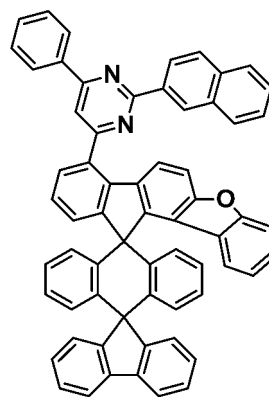


20

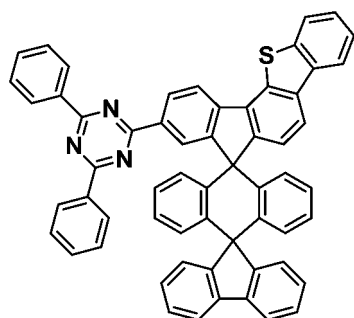
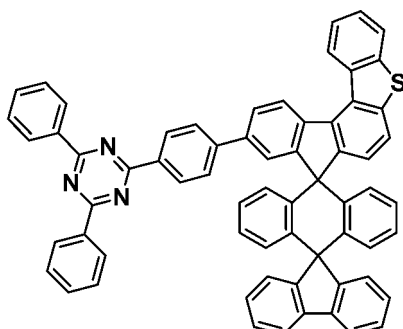
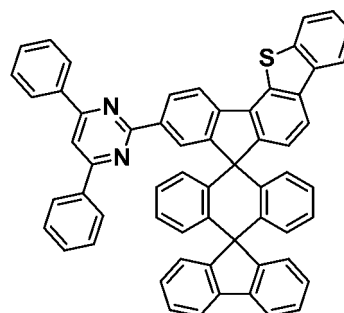


30

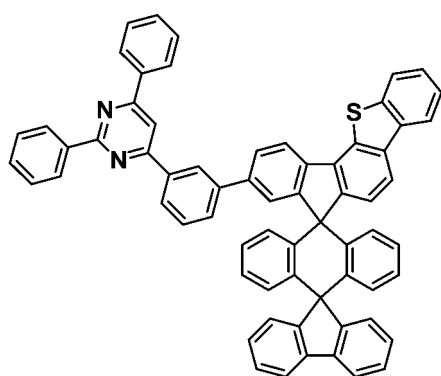
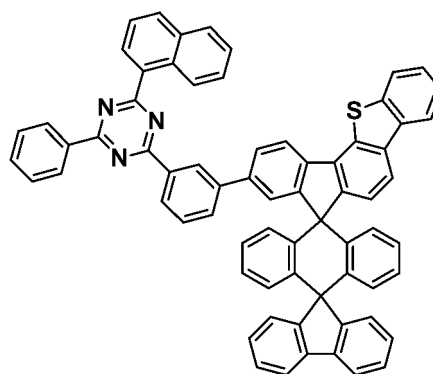
【化 3 5】

**100****101****102**

10

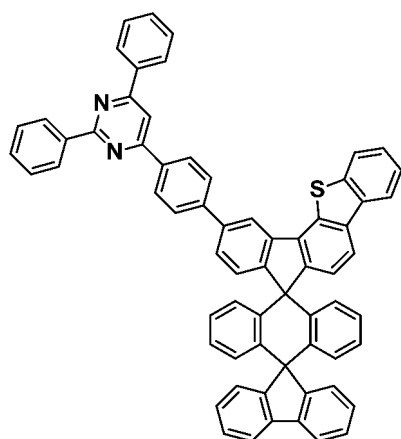
**103****104****105**

20

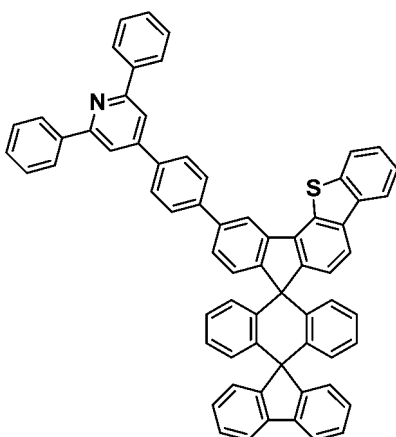
**106****107**

30

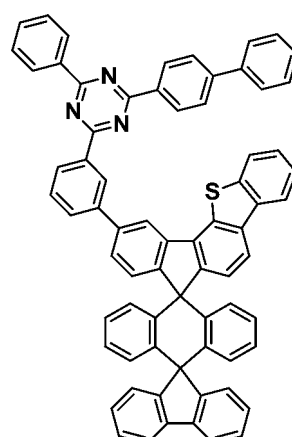
【化 3 6】



108

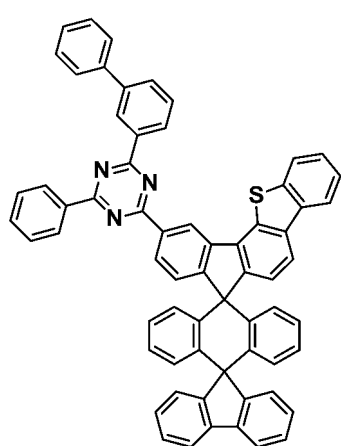


109

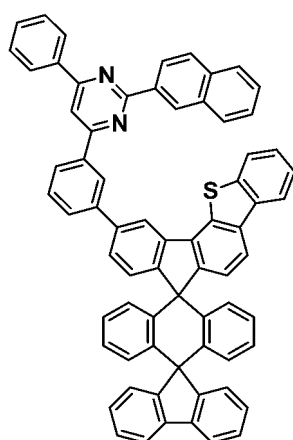


110

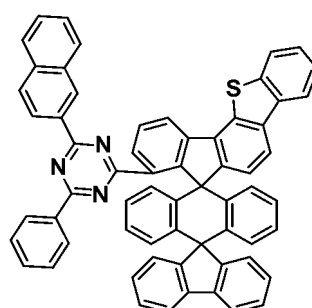
10



111

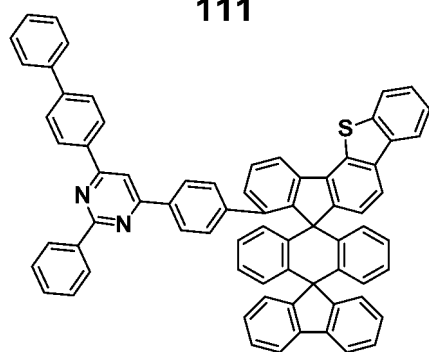


112

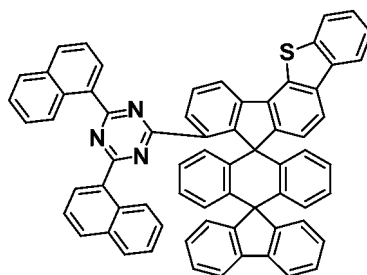


113

20



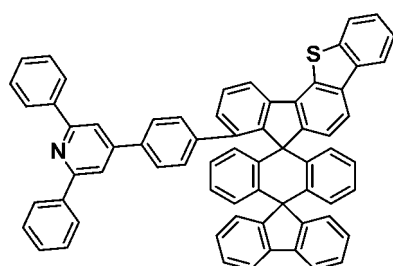
114



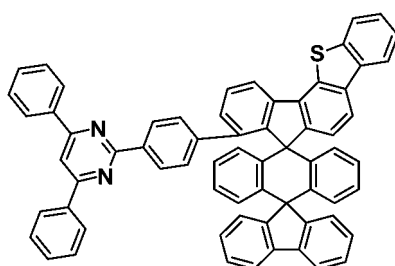
115

30

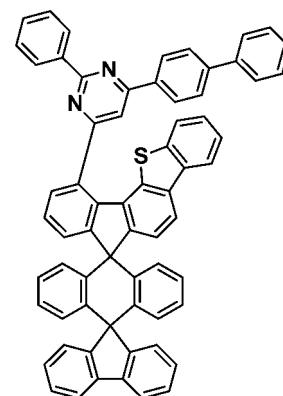
【化 3 7】



116



117



118

40

50

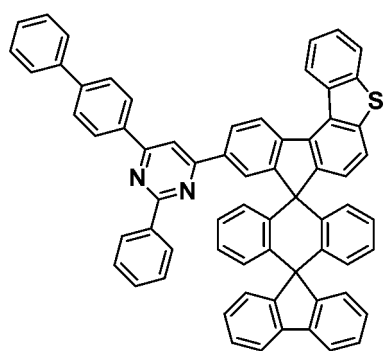
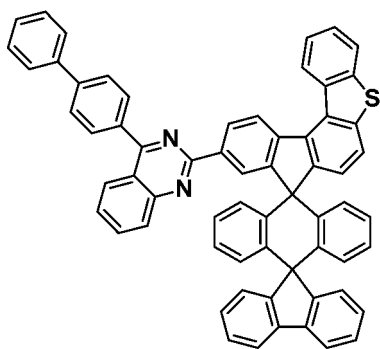
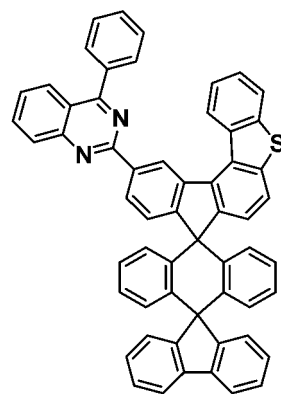
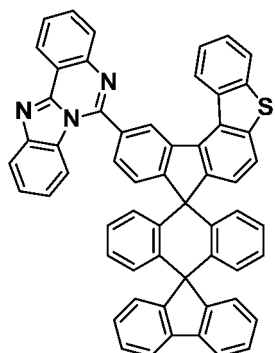
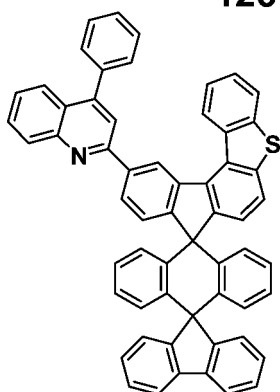
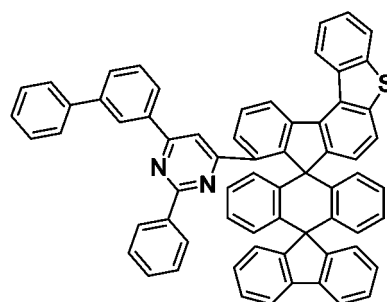
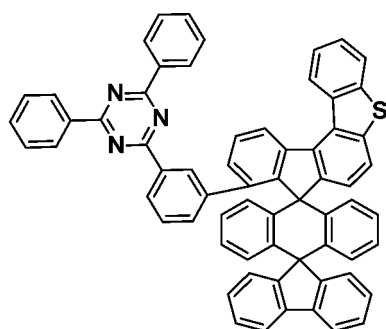
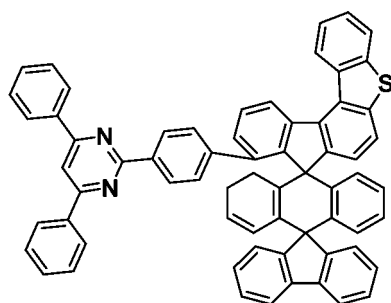
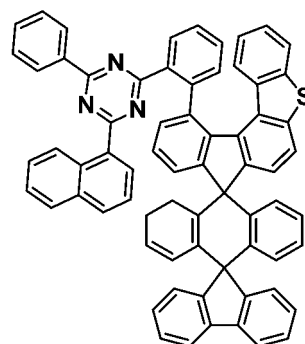
10



20

30

【化 3 9】

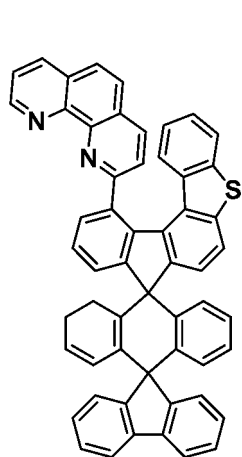
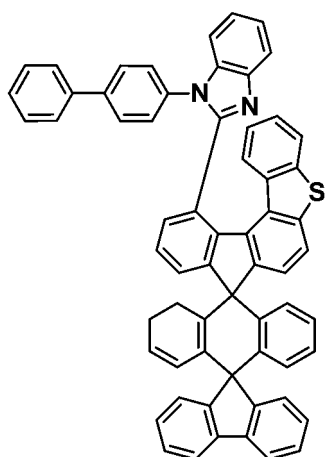
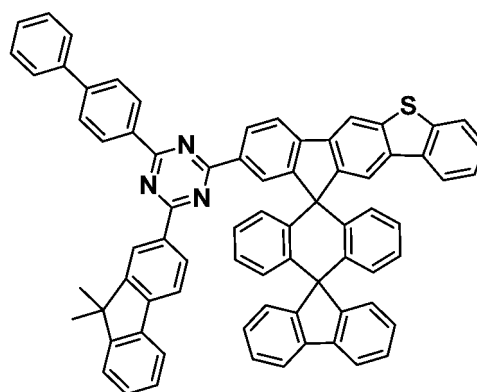
**125****126****127****128****129****130****131****132****133**

10

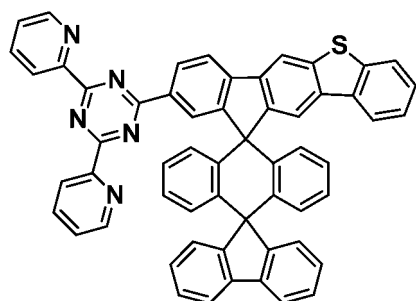
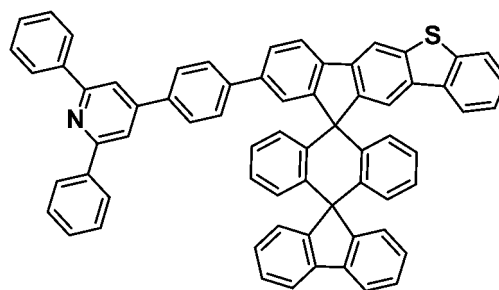
20

30

【化 4 0】

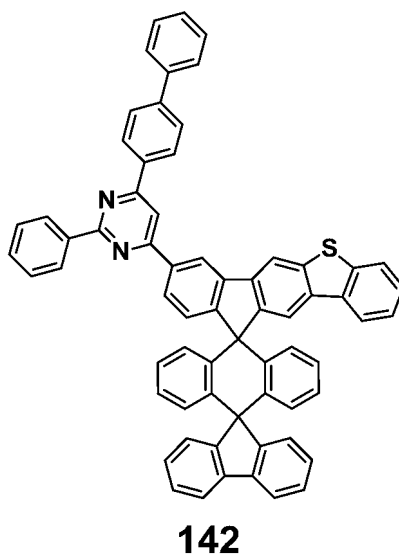
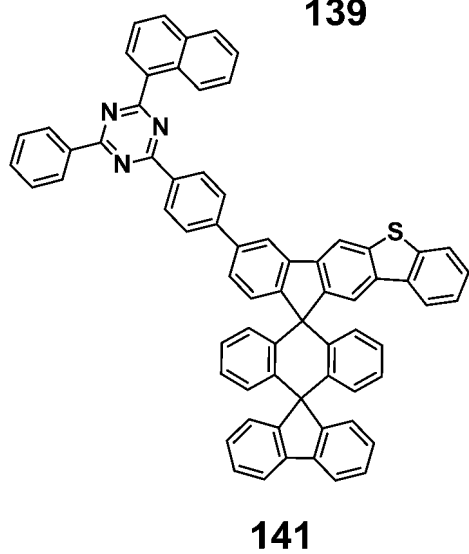
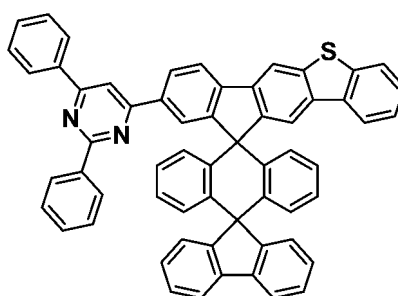
**134****135****136**

10

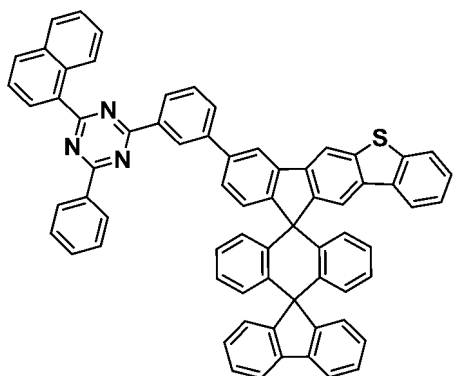
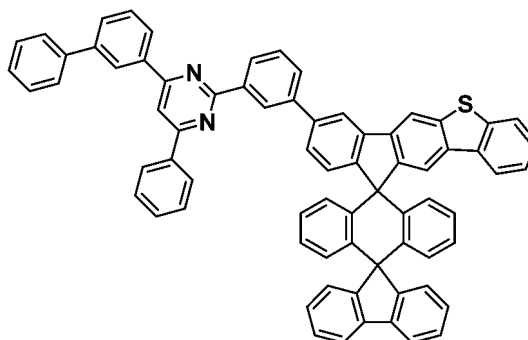
**137****138**

20

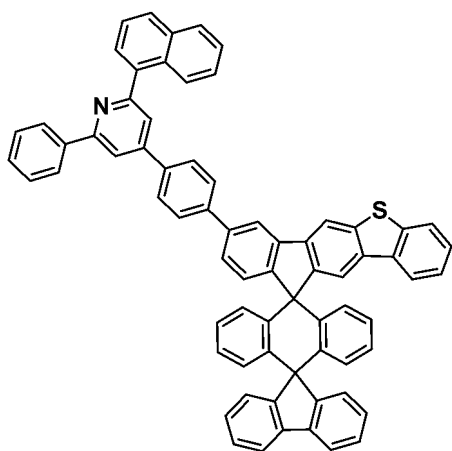
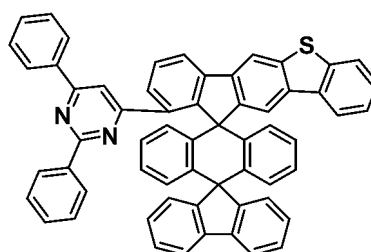
10



【化 4 2】

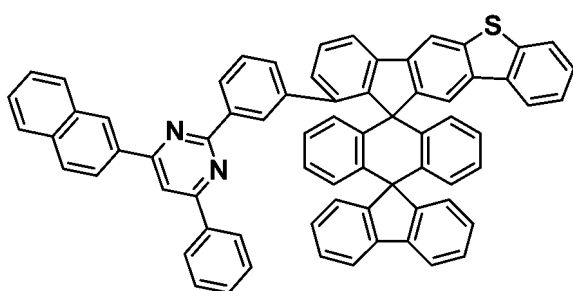
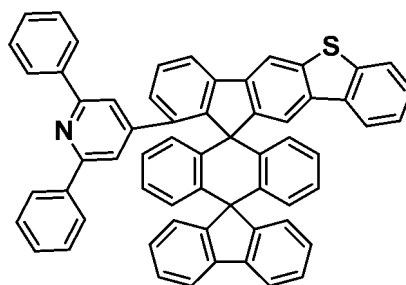
**143****144**

10

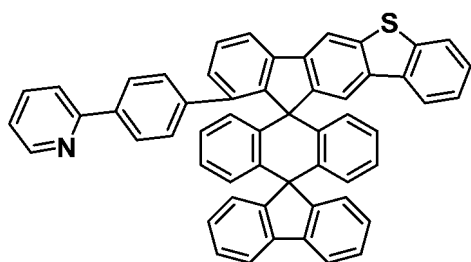
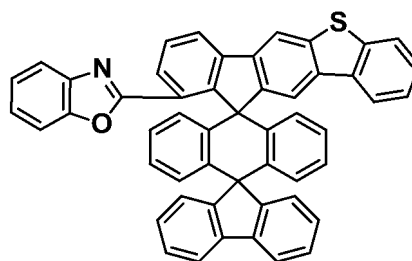
**145****146**

20

【化 4 3】

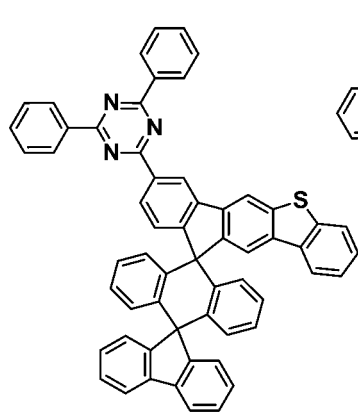
**147****148**

30

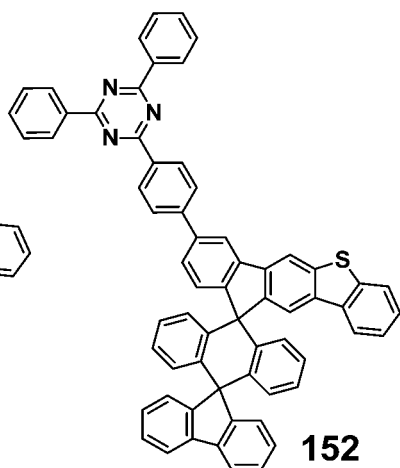
**149****150**

40

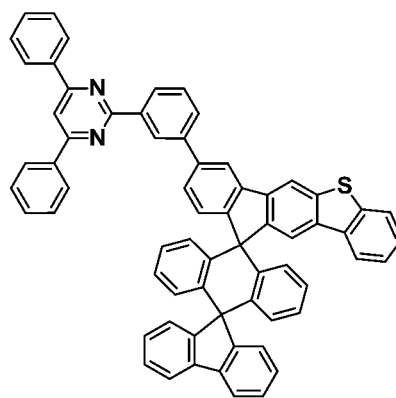
【化 4 4】



151

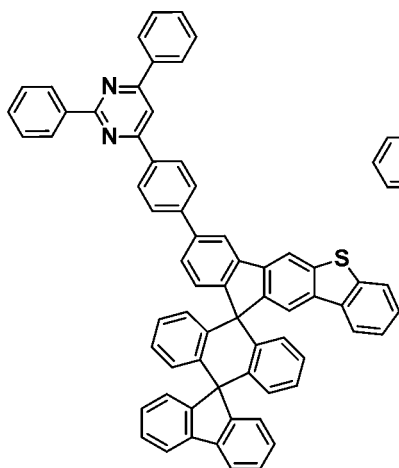


152

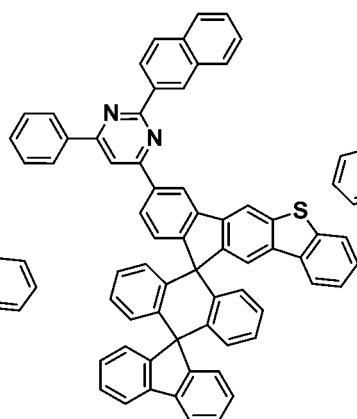


153

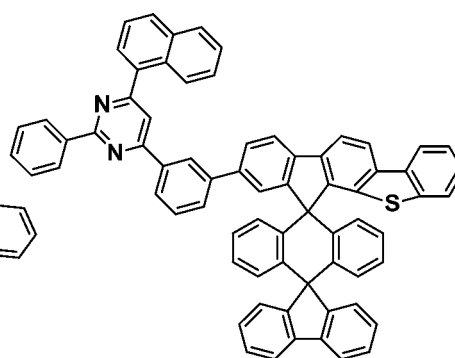
10



154

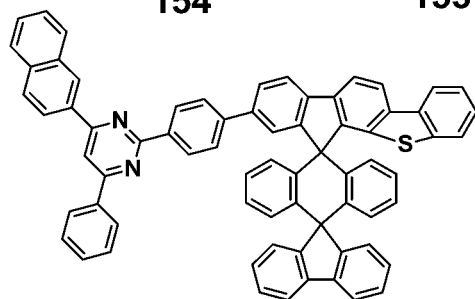


155

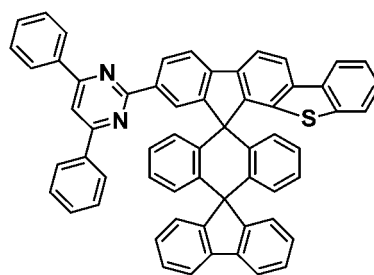


156

20



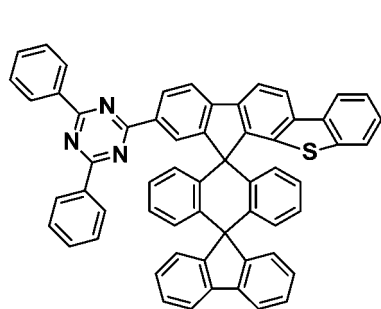
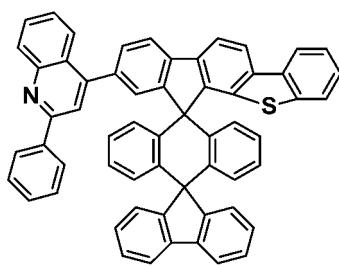
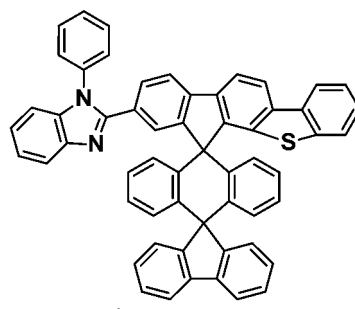
157



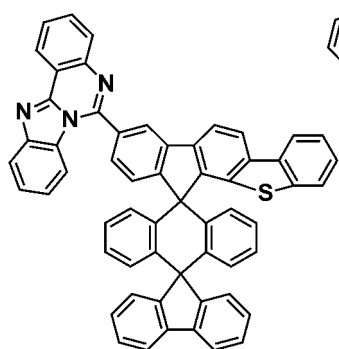
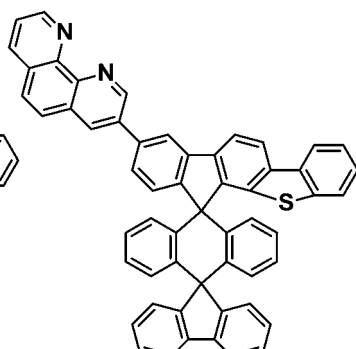
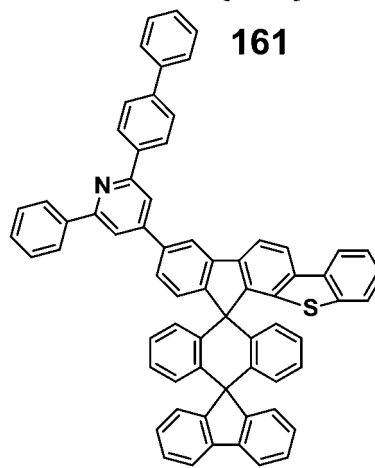
158

30

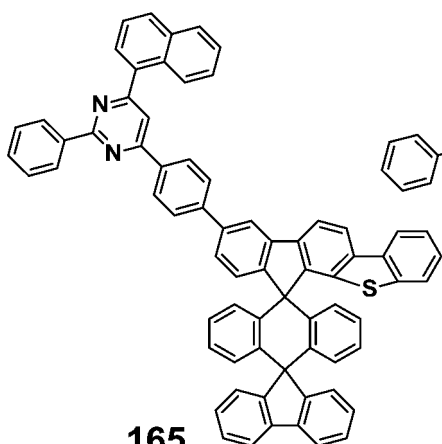
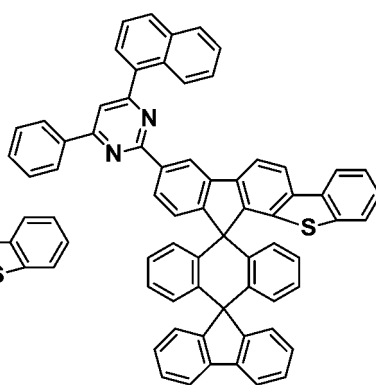
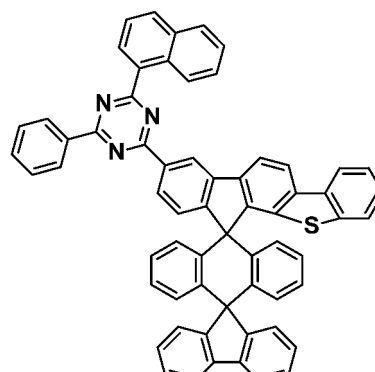
【化 4 5】

**159****160****161**

10

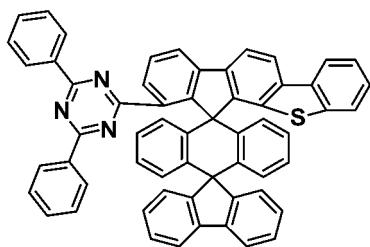
**162****163****164**

20

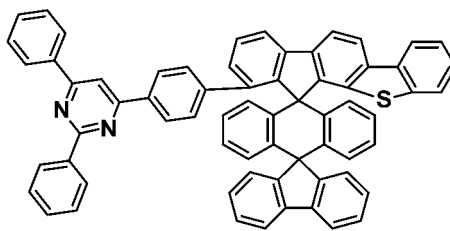
**165****166****167**

30

【化 4 6】

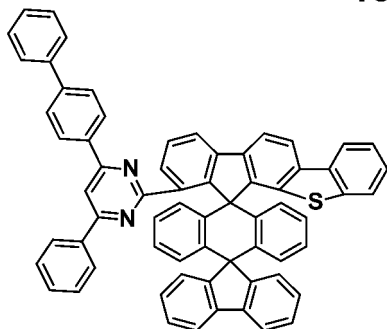


168

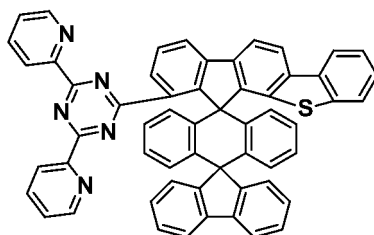


169

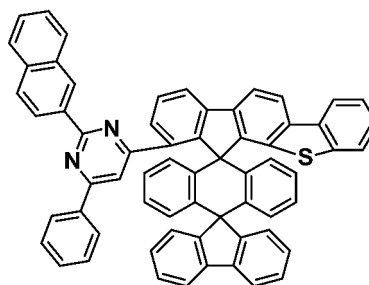
10



170

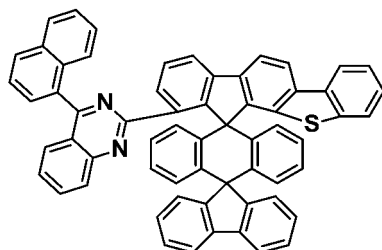


171

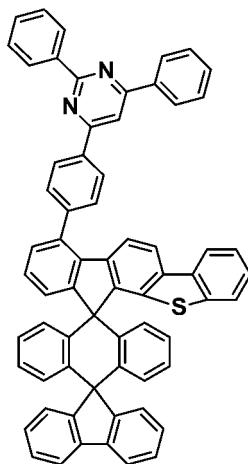


172

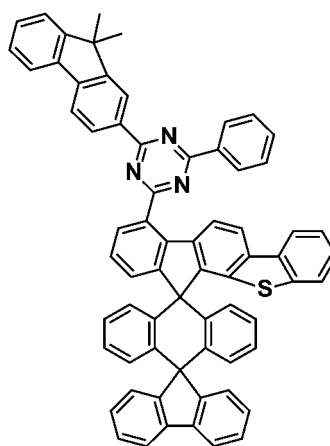
20



173



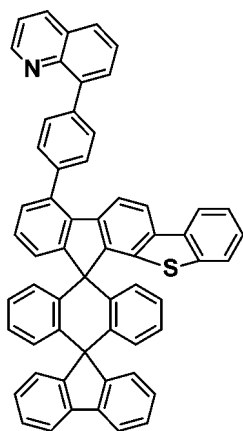
174



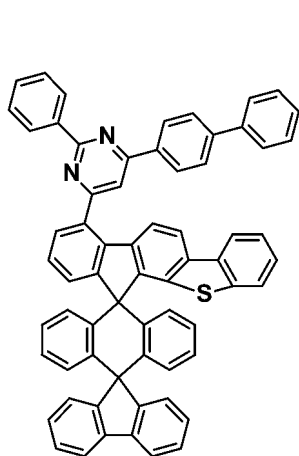
175

30

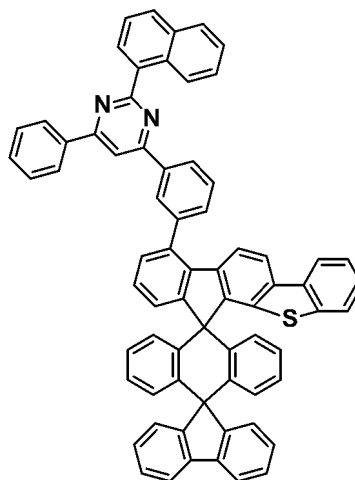
【化 4 7】



176



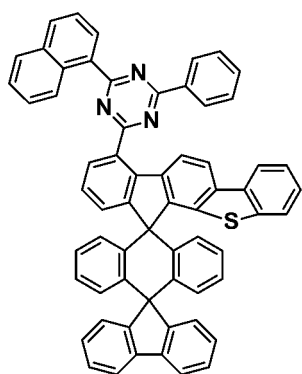
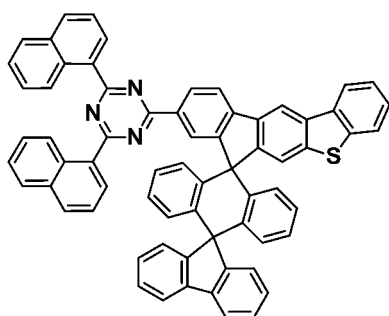
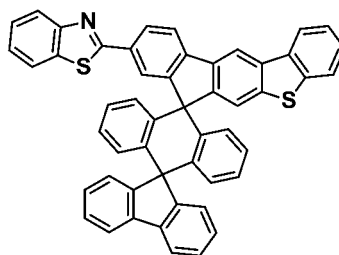
177



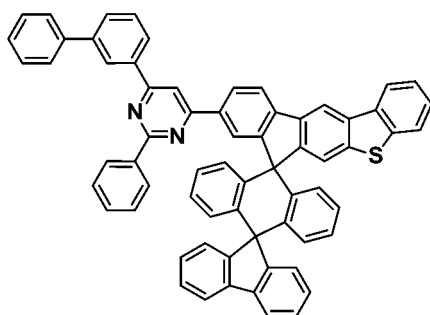
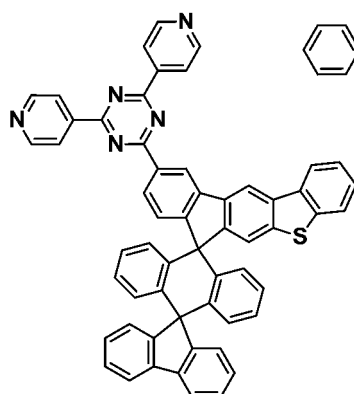
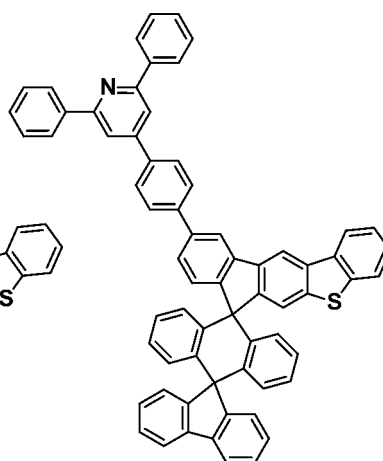
178

40

【化 4 8】

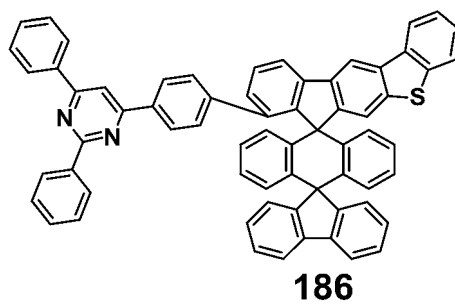
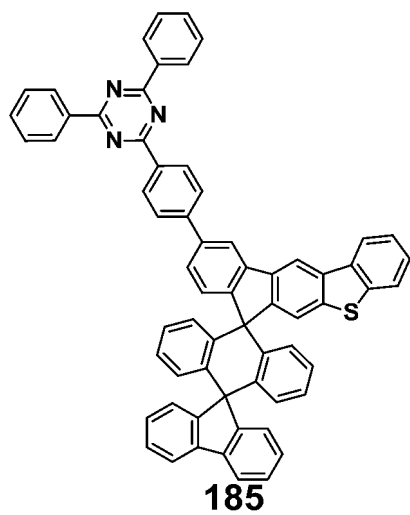
**179****180****181**

10

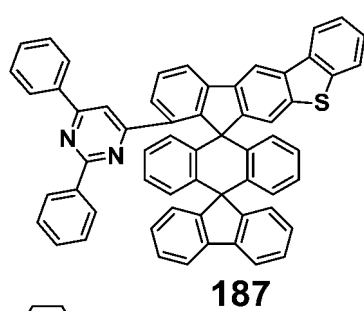
**182****183****184**

20

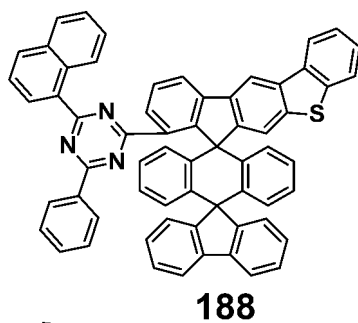
【化 4 9】



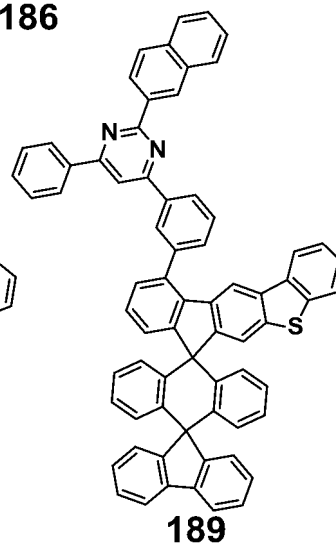
186



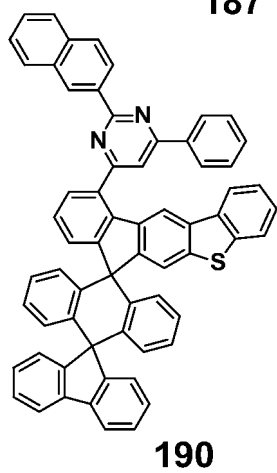
187



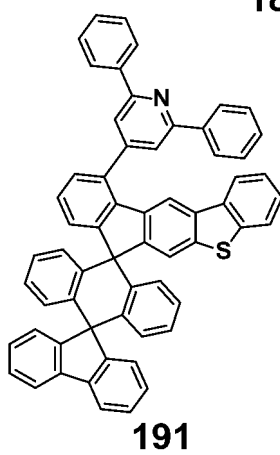
188



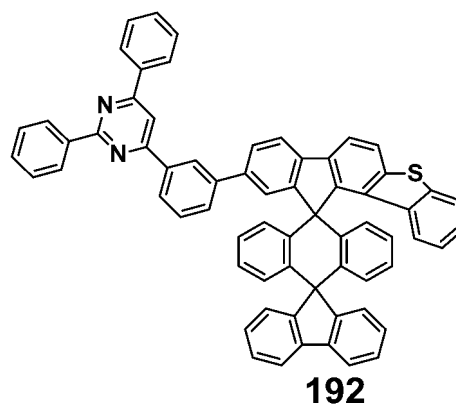
189



190



191



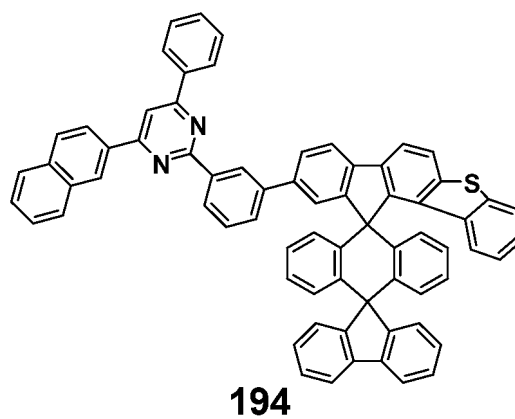
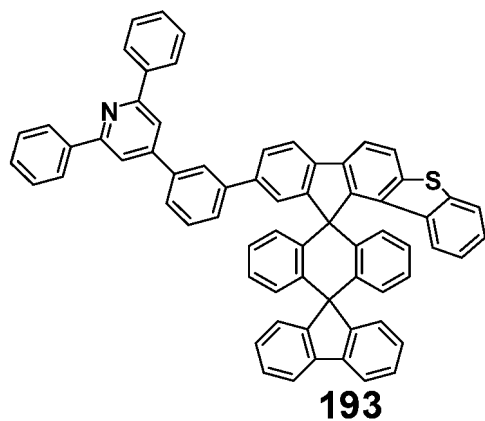
192

10

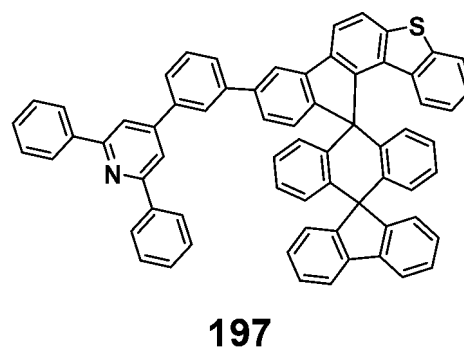
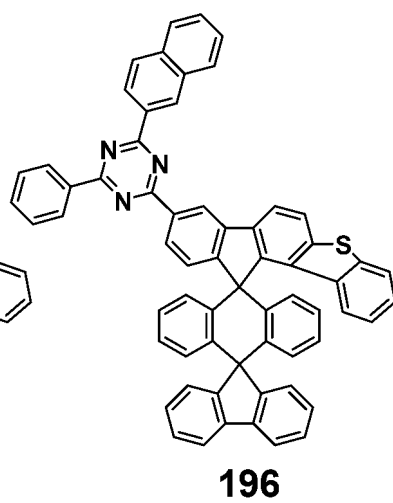
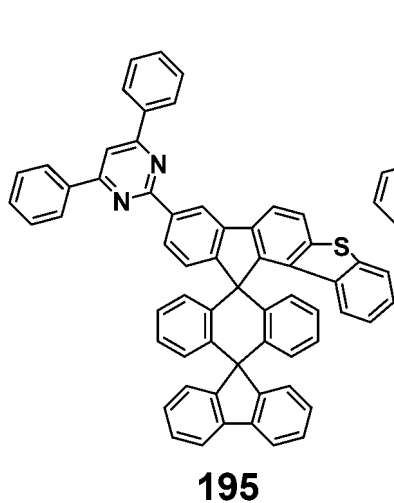
20

30

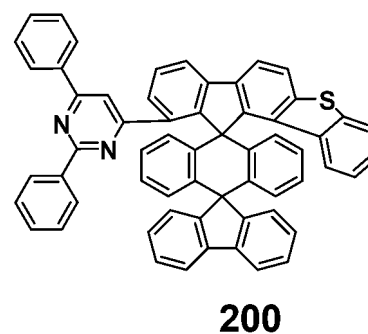
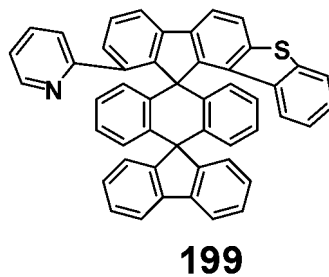
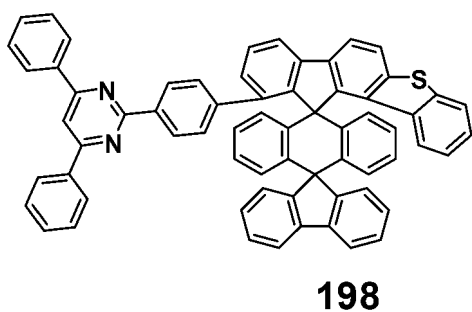
【化 5 0】



10

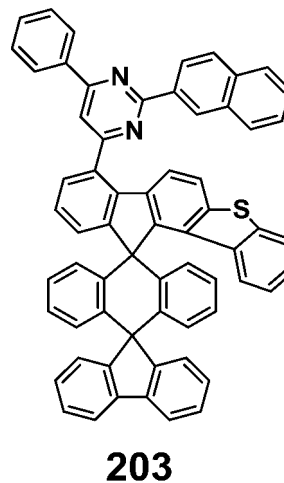
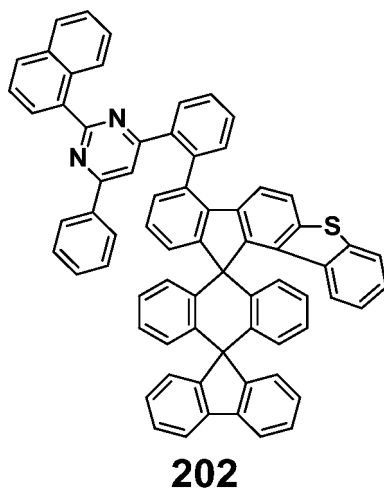
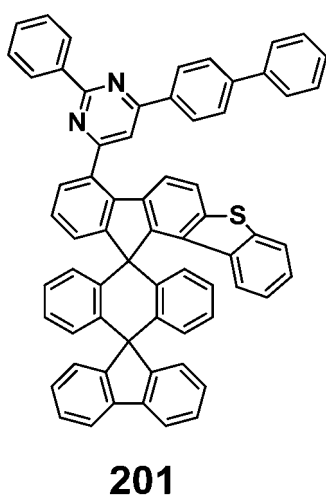


20



30

【化 5 1】



40

【 0 0 7 7 】

50

化合物のコンジュゲーション長とエネルギーバンドギャップとは密接な関係がある。具体的には、化合物のコンジュゲーション長が長いほど、エネルギーバンドギャップが小くなる。前述のように、前記化学式 1 の化合物のコアは、制限されたコンジュゲーションを含んでいるため、これは、エネルギーバンドギャップが大きい性質を有する。

【 0 0 7 8 】

本明細書では、前記のようにエネルギーバンドギャップが大きいコア構造に多様な置換基を導入することにより、多様なエネルギーバンドギャップを有する化合物を合成することができる。通常、エネルギーバンドギャップが大きいコア構造に置換基を導入してエネルギーバンドギャップを調節することは容易であるが、コア構造がエネルギーバンドギャップが小さい場合には、置換基を導入してエネルギーバンドギャップを大きく調節しにくい。また、本発明では、前記のような構造のコア構造において置換基の位置に応じて化合物の HOMO および LUMO エネルギー準位も調節可能であり、電子輸送層物質に主に使用される置換基を前記コア構造に導入することにより、各有機物層で要求する条件を満たす物質を合成することができ、有機発光素子に使用することにより、駆動電圧が低く、光効率が高い素子を実現することができる。

10

【 0 0 7 9 】

前記コア構造に多様な置換基、特に水素または重水素を導入することにより、エネルギーバンドギャップを微細に調節可能にし、一方で、有機物間の界面における特性を向上させ、物質の用途を多様にすることができる。

20

【 0 0 8 0 】

一方、前記化学式 1 の化合物は、スピロ構造の特性上、ガラス転移温度 (T g) が高く、熱的安定性に優れている。このような熱的安定性の増加は、素子に駆動安定性を提供する重要な要因となる。

【 0 0 8 1 】

また、本発明に係る有機発光素子は、アノードと、前記アノードに対向して備えられたカソードと、前記アノードおよび前記カソードの間に備えられた発光層を含む有機物層とを含む有機発光素子であって、前記有機物層は、前記発光層と前記カソードとの間に備えられ、前記化学式 1 で表される化合物を含む有機物層をさらに含むことを特徴とする。

【 0 0 8 2 】

本発明の有機発光素子は、前述の化合物を用いて 1 層以上の有機物層を形成することを除けば、通常の有機発光素子の製造方法および材料によって製造できる。

30

【 0 0 8 3 】

本発明の有機発光素子の有機物層は、単層構造からなってもよいが、2 層以上の有機物層が積層された多層構造からなってもよい。例えば、本発明の有機発光素子は、有機物層として、正孔注入層、正孔輸送層、発光層、電子輸送層、電子注入層などを含む構造を有することができる。しかし、有機発光素子の構造はこれに限定されず、より少数の有機物層を含んでもよい。また、前記有機物層は、電子輸送層、電子注入層、および電子輸送および電子注入を同時に行う層のうちの 1 層以上を含むことができ、前記層のうちの 1 層以上が前記化合物を含むことができる。

40

【 0 0 8 4 】

前記化学式 1 の化合物を含む有機物層は、正孔注入層、正孔輸送層、発光層、および電子輸送層などを含む多層構造であってもよいが、これに限定されず、単層構造であってもよい。また、前記有機物層は、多様な高分子素材を用いて、蒸着法でない溶媒工程 (solvent process)、例えば、スピンコーティング、ディップコーティング、ドクターブレードイング、スクリーンプリンティング、インクジェットプリンティング、または熱転写法などの方法によってより少数の層に製造することができる。

【 0 0 8 5 】

例えば、本発明の有機発光素子の構造は、図 1 および図 2 に示しているような構造を有することができるが、これにのみ限定されるものではない。

【 0 0 8 6 】

50

図 1 には、基板 1 上に、陽極 2、発光層 3、前記化学式 1 の化合物を含む有機物層 9、および陰極 4 が順次に積層された有機発光素子の構造が例示されている。

【 0 0 8 7 】

図 2 には、基板 1 上に、陽極 2、正孔注入層 5、正孔輸送層 6、発光層 7、電子輸送層 8、および陰極 4 が順次に積層された有機発光素子の構造が例示されている。この構造において、前記化合物は、前記化学式 1 の化合物を含む有機物層 9 または電子輸送層 8 に含まれてもよい。

【 0 0 8 8 】

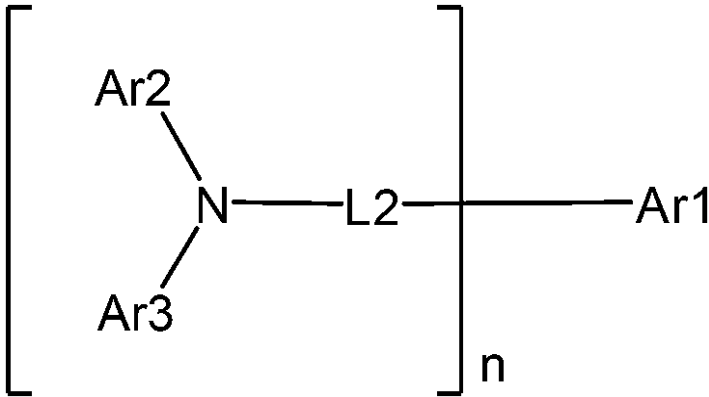
本発明の一実施態様において、前記化学式 1 の化合物を含む有機物層は、電子注入層、電子輸送層、電子注入および電子輸送を同時に行う層のうちの少なくとも 1 層を含み、前記層のうちの少なくとも 1 層が前記化学式 1 の化合物を含むことができる。

【 0 0 8 9 】

本明細書の一実施態様によれば、前記有機物層は、発光層を含み、前記発光層は、下記化学式 1 - A で表される化合物を含む。

[化学式 1 - A]

【 化 5 2 】



前記化学式 1 - A において、

n は、1 以上の整数であり、

Ar 1 は、置換もしくは非置換の 1 価以上のベンゾフルオレン基；置換もしくは非置換の 1 価以上のフルオランテン基；置換もしくは非置換の 1 価以上のピレン基；または置換もしくは非置換の 1 価以上のクリセン基であり、

L 2 は、直接結合；置換もしくは非置換のアリーレン基；または置換もしくは非置換のヘテロアリーレン基であり、

Ar 2 および Ar 3 は、互いに同一または異なり、それぞれ独立に、置換もしくは非置換のアリール基；置換もしくは非置換のシリル基；置換もしくは非置換のゲルマニウム基；置換もしくは非置換のアルキル基；置換もしくは非置換のアリールアルキル基；または置換もしくは非置換のヘテロアリール基であるか、互いに結合して置換もしくは非置換の環を形成してもよいし、

n が 2 以上の場合、2 以上の括弧内の構造は、互いに同一または異なる。

【 0 0 9 0 】

本明細書の一実施態様によれば、前記有機物層は、発光層を含み、前記発光層は、前記化学式 1 - A で表される化合物を発光層のドーパントとして含む。

【 0 0 9 1 】

本明細書の一実施態様によれば、前記 L 2 は、直接結合である。

【 0 0 9 2 】

本明細書の一実施態様によれば、前記 n は、2 である。

【 0 0 9 3 】

本明細書の一実施態様において、前記 Ar 1 は、重水素、メチル基、エチル基、または t e r t - ブチル基で置換もしくは非置換の 2 価のピレン基である。

【 0 0 9 4 】

本明細書の一実施態様によれば、前記 A r 2 および A r 3 は、互いに同一または異なり、それぞれ独立に、置換もしくは非置換の炭素数 6 ~ 3 0 のアリール基である。

【 0 0 9 5 】

本明細書の一実施態様によれば、前記 A r 2 および A r 3 は、互いに同一または異なり、それぞれ独立に、アルキル基で置換されたゲルマニウム基で置換もしくは非置換のアリール基である。

【 0 0 9 6 】

本明細書の一実施態様によれば、A r 2 および A r 3 は、互いに同一または異なり、それぞれ独立に、トリメチルゲルマニウム基で置換もしくは非置換のアリール基である。

10

【 0 0 9 7 】

本明細書の一実施態様によれば、前記 A r 2 および A r 3 は、互いに同一または異なり、それぞれ独立に、置換もしくは非置換のフェニル基である。

【 0 0 9 8 】

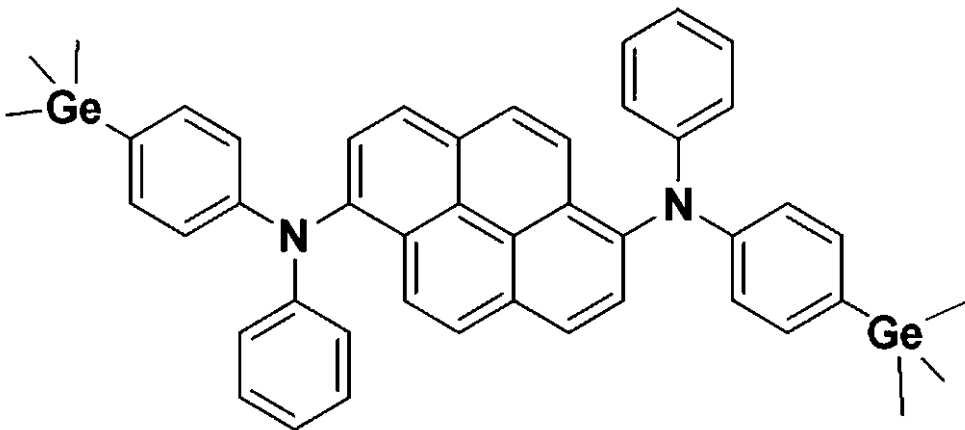
本明細書の一実施態様によれば、前記 A r 2 および A r 3 は、トリメチルゲルマニウム基で置換もしくは非置換のフェニル基である。

【 0 0 9 9 】

本明細書の一実施態様によれば、前記化学式 1 - A は、下記化合物で表される。

【 化 5 3 】

20



30

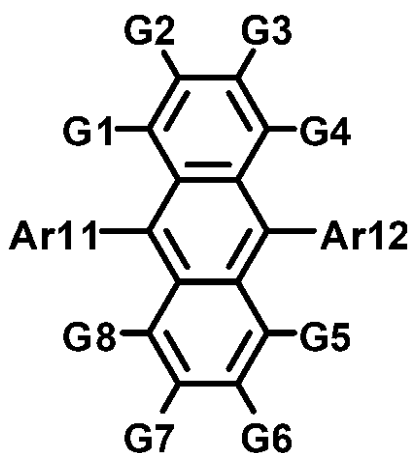
【 0 1 0 0 】

本明細書の一実施態様によれば、前記有機物層は、発光層を含み、前記発光層は、下記化学式 2 - A で表される化合物を含む。

[化学式 2 - A]

【 化 5 4 】

40



前記化学式 2 - A において、

A r 1 1 および A r 1 2 は、互いに同一または異なり、それぞれ独立に、置換もしくは

50

非置換の単環のアリール基；または置換もしくは非置換の多環のアリール基であり、

G 1 ~ G 8 は、互いに同一または異なり、それぞれ独立に、水素；置換もしくは非置換の単環のアリール基；または置換もしくは非置換の多環のアリール基である。

【 0 1 0 1 】

本明細書の一実施態様によれば、前記有機物層は、発光層を含み、前記発光層は、前記化学式 2 - A で表される化合物を発光層のホストとして含む。

【 0 1 0 2 】

本明細書の一実施態様によれば、前記 A r 1 1 および A r 1 2 は、互いに同一または異なり、それぞれ独立に、置換もしくは非置換の多環のアリール基である。

【 0 1 0 3 】

本明細書の一実施態様によれば、前記 A r 1 1 および A r 1 2 は、互いに同一または異なり、それぞれ独立に、置換もしくは非置換の炭素数 1 0 ~ 3 0 の多環のアリール基である。

【 0 1 0 4 】

本明細書の一実施態様によれば、前記 A r 1 1 および A r 1 2 は、互いに同一または異なり、それぞれ独立に、置換もしくは非置換のナフチル基である。

【 0 1 0 5 】

本明細書の一実施態様によれば、前記 A r 1 1 および A r 1 2 は、互いに同一または異なり、それぞれ独立に、置換もしくは非置換の 2 - ナフチル基である。

【 0 1 0 6 】

本明細書の一実施態様によれば、前記 A r 1 1 および A r 1 2 は、2 - ナフチル基である。

【 0 1 0 7 】

本明細書の一実施態様によれば、前記 G 6 は、置換もしくは非置換の多環のアリール基である。

【 0 1 0 8 】

本明細書の一実施態様によれば、前記 G 6 は、置換もしくは非置換の炭素数 1 0 ~ 3 0 の多環のアリール基である。

【 0 1 0 9 】

本明細書の一実施態様によれば、前記 G 6 は、置換もしくは非置換のナフチル基である。

【 0 1 1 0 】

本明細書の一実施態様によれば、前記 G 6 は、置換もしくは非置換の 2 - ナフチル基である。

【 0 1 1 1 】

本明細書の一実施態様によれば、前記 G 6 は、フェニル基で置換されたアントラセン基で置換された 2 - ナフチル基である。

【 0 1 1 2 】

本明細書の一実施態様によれば、前記 G 1 ~ G 5、G 7、および G 8 は、水素である。

【 0 1 1 3 】

本明細書の一実施態様によれば、前記化学式 2 - A は、下記化合物の中から選択される。

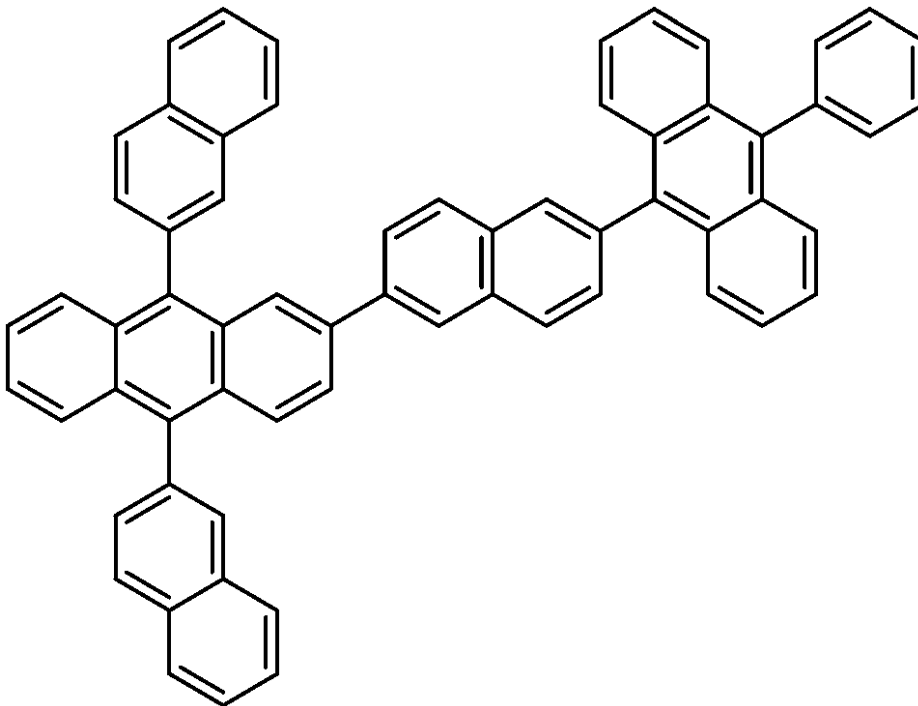
10

20

30

40

【化 5 5】



10

20

【0114】

例えば、本発明に係る有機発光素子は、スパッタリング (sputtering) や電子ビーム蒸発 (e-beam evaporation) のような PVD (physical vapor deposition) 方法を利用して、基板上に金属または導電性を有する金属酸化物またはこれらの合金を蒸着させて陽極を形成し、その上に正孔注入層、正孔輸送層、発光層、電子輸送層を含む有機物層、および前記化学式 1 の化合物を含む有機物層を形成した後、その上に陰極として使用可能な物質を蒸着させることにより製造できる。この方法以外にも、基板上に、陰極物質から有機物層、陽極物質を順に蒸着させて有機発光素子を作ることでもある。

30

【0115】

前記陽極物質としては、通常、有機物層に正孔注入が円滑となるように仕事関数の大きい物質が好ましい。本発明で使用可能な陽極物質の具体例としては、バナジウム、クロム、銅、亜鉛、金のような金属またはこれらの合金；亜鉛酸化物、インジウム酸化物、インジウムスズ酸化物 (ITO)、インジウム亜鉛酸化物 (IZO) のような金属酸化物；ZnO:Al または SnO₂:Sb のような金属と酸化物との組み合わせ；ポリ (3-メチルチオフェン)、ポリ [3,4-(エチレン-1,2-ジオキシ)チオフェン] (PEDT)、ポリピロールおよびポリアニリンのような導電性高分子などがあるが、これらにのみ限定されるものではない。

40

【0116】

前記陰極物質としては、通常、有機物層に電子注入が容易となるように仕事関数の小さい物質であることが好ましい。陰極物質の具体例としては、マグネシウム、カルシウム、ナトリウム、カリウム、チタン、インジウム、イットリウム、リチウム、ガドリニウム、アルミニウム、銀、スズ、および鉛のような金属またはこれらの合金；LiF/Al または LiO₂/Al のような多層構造の物質などがあるが、これらにのみ限定されるものではない。

【0117】

前記正孔注入物質としては、低い電圧で陽極から正孔がよく注入できる物質であって、正孔注入物質の HOMO (highest occupied molecular orbital) が陽極物質の仕事関数と周辺有機物層の HOMO との間であることが好ましい。正孔注入物質の具体例としては、金属ポルフィリン (porphyrine)、オ

50

リゴチオフェン、アリールアミン系の有機物、ヘキサニトリルヘキサアザトリフェニレン系の有機物、キナクリドン (quinacridone) 系の有機物、ペリレン (perylene) 系の有機物、アントラキノンおよびポリアニリンとポリ化合物系の導電性高分子などがあるが、これらにのみ限定されるものではない。

【0118】

前記正孔輸送物質としては、陽極や正孔注入層から正孔を受けて発光層に移し得る物質で、正孔に対する移動性の大きい物質が好適である。具体例としては、アリールアミン系の有機物、導電性高分子、および共役部分と非共役部分がともにあるブロック共重合体などがあるが、これらにのみ限定されるものではない。

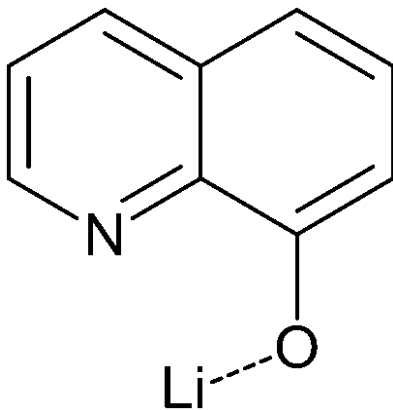
【0119】

前記発光物質としては、正孔輸送層と電子輸送層から正孔と電子をそれぞれ受けて結合させることにより可視光線領域の光を発し得る物質であって、蛍光や燐光に対する量子効率の良い物質が好ましい。具体例としては、8-ヒドロキシ-キノリンアルミニウム錯体 (Alq₃)；カルバゾール系化合物；二量体化スチリル (dimerized styryl) 化合物；BALq；10-ヒドロキシベンゾキノリン-金属化合物；ベンゾキサゾール、ベンズチアゾール、およびベンズイミダゾール系の化合物；ポリ(p-フェニレンビニレン) (PPV) 系の高分子；スピロ (spiro) 化合物；ポリフルオレン、ルブレンなどがあるが、これらにのみ限定されるものではない。

【0120】

前記化学式1の化合物を含む有機物層は、n型ドーパントを追加的に含んでもよい。具体的には、n型ドーパントとして、アルカリ金属；アルカリ土類金属；アルカリ金属のハロゲン化物；アルカリ土類金属のハロゲン化物、アルカリ金属酸化物；アルカリ土類金属酸化物；金属の炭酸塩；およびHOMOエネルギー準位が3 eV以下の有機物からなる群より選択される1種以上であってもよい。一実施態様において、前記n型ドーパントは、LiQである。

【化56】



LiQ

【0121】

本発明に係る有機発光素子は、使用される材料によって、前面発光型、後面発光型、または両面発光型であってもよい。

【0122】

本発明に係る化合物は、有機太陽電池、有機感光体、有機トランジスタなどを含めた有機電子素子においても、有機発光素子に適用されるのと類似の原理で作用できる。

【0123】

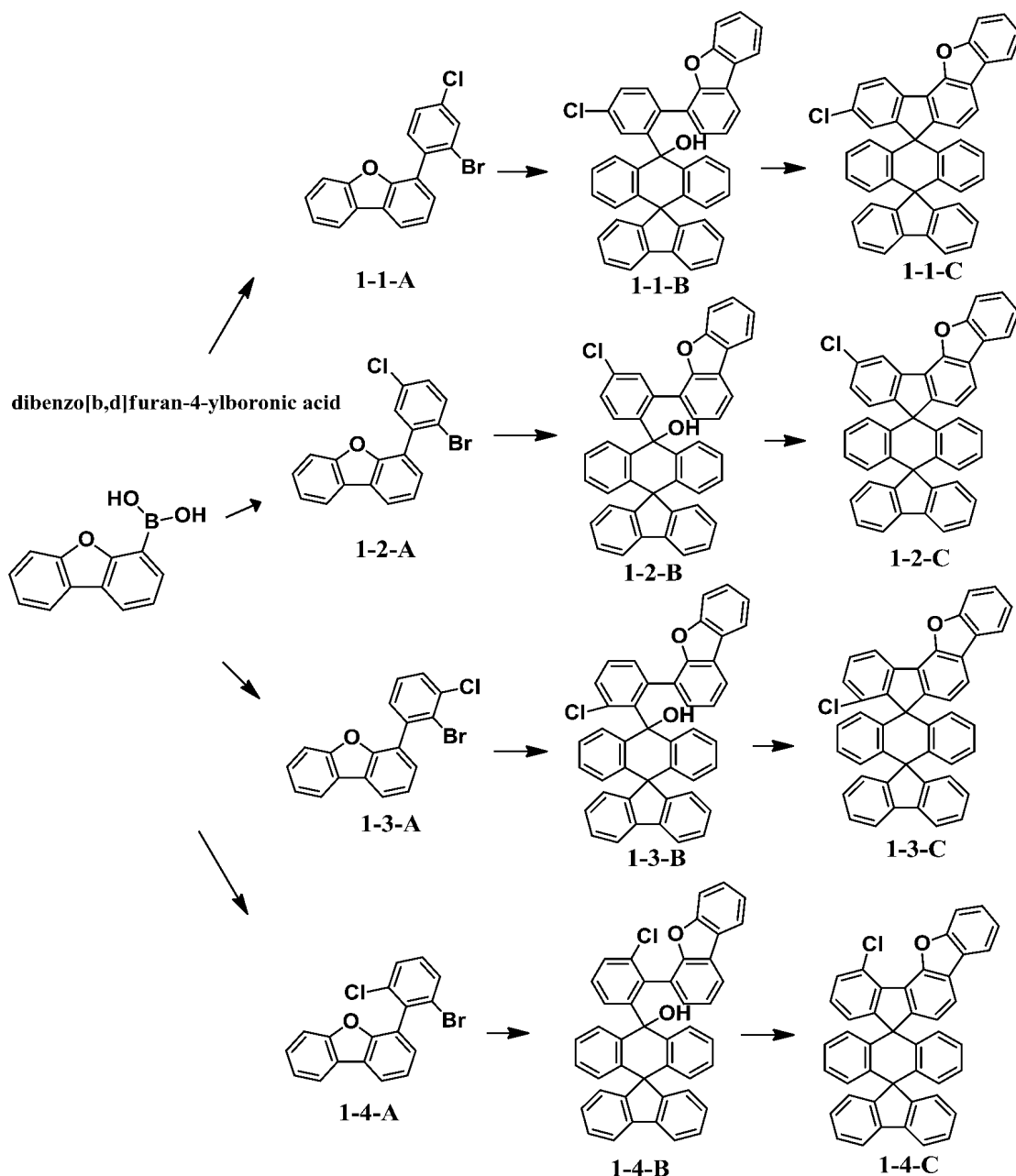
前記化学式1の化合物の製造方法およびこれらを用いた有機発光素子の製造は、以下の実施例で具体的に説明する。しかし、下記の実施例は本発明を例示するためのものであり、本発明の範囲がこれらによって限定されるものではない。

【実施例】

【0124】

<製造例1> 下記1-1-C～1-4-Cの製造

【化 5 7】



10

20

30

【 0 1 2 5 】

化合物 1 - 1 - A の合成

ジベンゾフラン - 4 - イルボロン酸 (10 g、47.1 mmol) と 2 - プロモ - 4 - クロロ - 1 - ヨードベンゼン (15.7 g、49.5 mmol) を THF (300 ml) に添加した後、2 M ポタシウムカーボネート水溶液 (100 ml) を添加し、テトラキストリフェニル - ホスフィノパラジウム (1.63 g、1.41 mmol) を入れた後、10 時間加熱撹拌した。常温に温度を下げて反応を終結した後、リン酸カリウム溶液を除去して層分離した。溶媒除去後、白色固体をエチルアセレートとエタノールで再結晶して、前記化合物 1 - 1 - A (14.31 g、収率 85 %) を製造した。

40

MS [M + H] ⁺ = 356.96

【 0 1 2 6 】

化合物 1 - 2 - A の合成

前記合成例 1 - 1 - A において、化合物 2 - プロモ - 4 - クロロ - 1 - ヨードベンゼンの代わりに 2 - プロモ - 5 - クロロ - 1 - ヨードベンゼンを用いたことを除けば、同様の方法で合成して、化合物 1 - 2 - A を製造した。

MS [M + H] ⁺ = 356.96

50

【 0 1 2 7 】

化合物 1 - 3 - A の合成

前記合成例 1 - 1 - A において、化合物 2 - ブロモ - 4 - クロロ - 1 - ヨードベンゼンの代わりに 2 - ブロモ - 3 - クロロ - 1 - ヨードベンゼンを用いたことを除けば、同様の方法で合成して、化合物 1 - 3 - A を製造した。

$MS [M + H]^+ = 356.96$

【 0 1 2 8 】

化合物 1 - 4 - A の合成

前記合成例 1 - 1 - A において、化合物 2 - ブロモ - 4 - クロロ - 1 - ヨードベンゼンの代わりに 2 - ブロモ - 6 - クロロ - 1 - ヨードベンゼンを用いたことを除けば、同様の方法で合成して、化合物 1 - 4 - A を製造した。

$MS [M + H]^+ = 356.96$

10

【 0 1 2 9 】

化合物 1 - 1 - B の合成

化合物 1 - 1 - A (14 g、39.3 mmol) を THF (250 ml) に溶解した後、温度を - 78 に下げた後、2.5 M n - BuLi (20.4 ml) を滴加し、30 分後に 10H - スピロ - [アントラセン - 9 , 9' - フルオレン] - 10 - オン (13.6 g、40 mmol) を入れて、常温に上げた後、1 時間攪拌した。1 M HCl (300 ml) を入れて 30 分間攪拌した後、層分離して溶媒除去後、エチルアセテートで精製して、化合物 1 - 1 - B (19.5 g、85%) を製造した。

$MS [M + H]^+ = 623.17$

20

【 0 1 3 0 】

化合物 1 - 2 - B の合成

前記合成例 1 - 1 - B において、化合物 1 - 1 - A の代わりに化合物 1 - 2 - A を用いたことを除けば、同様の方法で合成して、化合物 1 - 2 - B を製造した。

$MS [M + H]^+ = 623.17$

【 0 1 3 1 】

化合物 1 - 3 - B の合成

前記合成例 1 - 1 - B において、化合物 1 - 1 - A の代わりに化合物 1 - 3 - A を用いたことを除けば、同様の方法で合成して、化合物 1 - 3 - B を製造した。

$MS [M + H]^+ = 623.17$

30

【 0 1 3 2 】

化合物 1 - 4 - B の合成

前記合成例 1 - 1 - B において、化合物 1 - 1 - A の代わりに化合物 1 - 4 - A を用いたことを除けば、同様の方法で合成して、化合物 1 - 4 - B を製造した。

$MS [M + H]^+ = 623.17$

【 0 1 3 3 】

化合物 1 - 1 - C の合成

化合物 1 - 1 - B (10 g、16.1 mmol) を酢酸 (250 ml) に入れた後、硫酸 1 ml を滴加し、攪拌還流した。常温に温度を下げて水で中和した後、濾過した固体をテトラヒドロフランとエチルアセテートで再結晶して、化合物 1 - 1 - C (9.24 g、95%) を製造した。

$MS [M + H]^+ = 605.16$

40

【 0 1 3 4 】

化合物 1 - 2 - C の合成

前記合成例 1 - 1 - C において、化合物 1 - 1 - B の代わりに化合物 1 - 2 - B を用いたことを除けば、同様の方法で合成して、化合物 1 - 2 - C を製造した。

$MS [M + H]^+ = 605.16$

【 0 1 3 5 】

化合物 1 - 3 - C の合成

50

前記合成例 1 - 1 - C において、化合物 1 - 1 - B の代わりに化合物 1 - 3 - B を用いたことを除けば、同様の方法で合成して、化合物 1 - 3 - C を製造した。

$MS [M + H]^+ = 605.16$

【0136】

化合物 1 - 4 - C の合成

前記合成例 1 - 1 - C において、化合物 1 - 1 - B の代わりに化合物 1 - 4 - B を用いたことを除けば、同様の方法で合成して、化合物 1 - 4 - C を製造した。

$MS [M + H]^+ = 605.16$

【0137】

< 製造例 2 > 下記 2 - 1 - C ~ 2 - 4 - C の製造

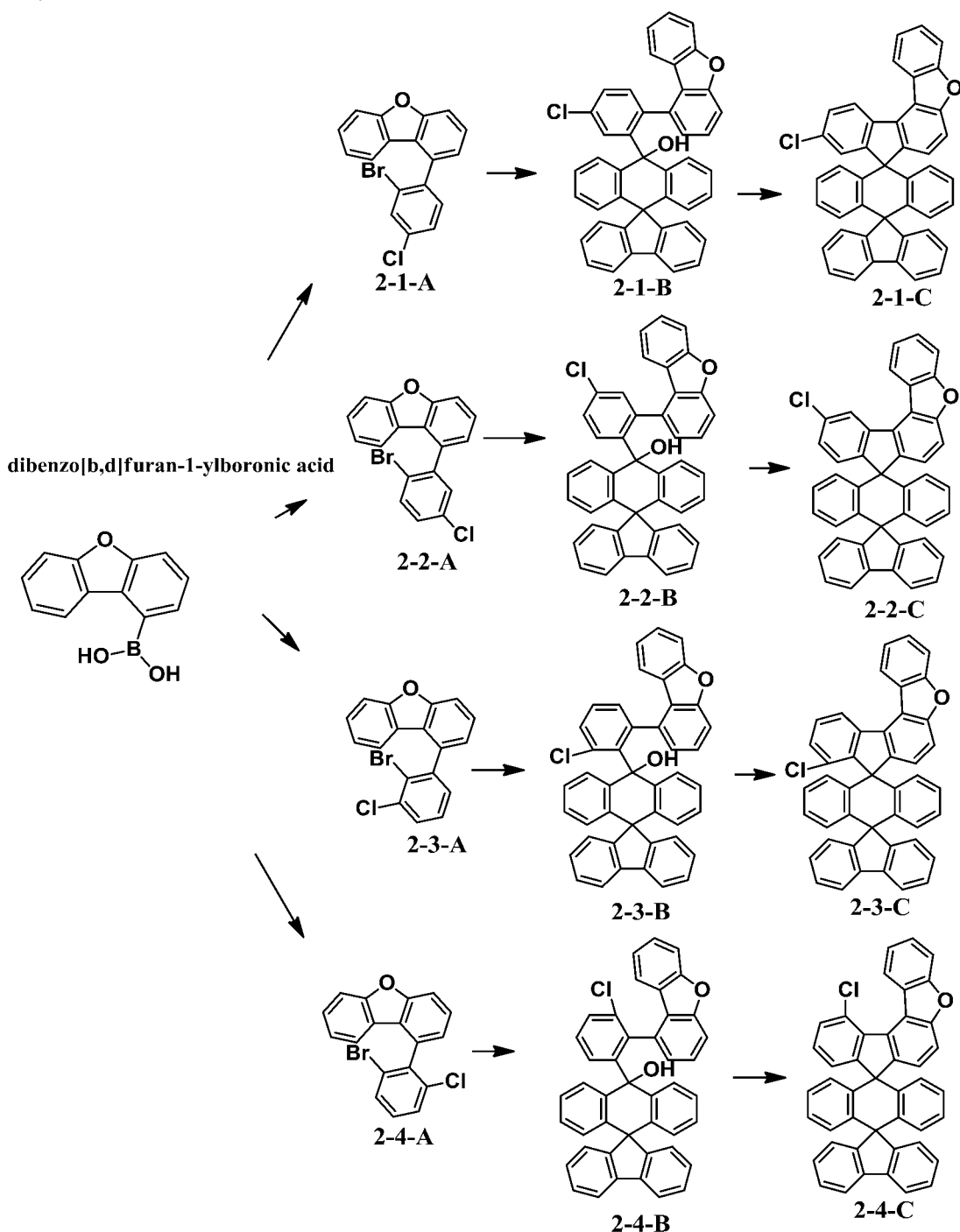
10

【化 58】

20

30

40



【0138】

化合物 2 - 1 - A の合成

前記合成例 1 - 1 - A において、ジベンゾフラン - 4 - イルボロン酸の代わりにジベン

50

ゾフラン - 1 - イルボロン酸を用いたことを除けば、同様の方法で合成して、化合物 2 - 1 - A を製造した。

$$MS [M + H]^+ = 356.96$$

【0139】

化合物 2 - 2 - A の合成

前記合成例 2 - 1 - A において、化合物 2 - ブロモ - 4 - クロロ - 1 - ヨードベンゼンの代わりに 2 - ブロモ - 5 - クロロ - 1 - ヨードベンゼンを用いたことを除けば、同様の方法で合成して、化合物 2 - 2 - A を製造した。

$$MS [M + H]^+ = 356.96$$

【0140】

化合物 2 - 3 - A の合成

前記合成例 2 - 1 - A において、化合物 2 - ブロモ - 4 - クロロ - 1 - ヨードベンゼンの代わりに 2 - ブロモ - 3 - クロロ - 1 - ヨードベンゼンを用いたことを除けば、同様の方法で合成して、化合物 2 - 3 - A を製造した。

$$MS [M + H]^+ = 356.96$$

【0141】

化合物 2 - 4 - A の合成

前記合成例 2 - 1 - A において、化合物 2 - ブロモ - 4 - クロロ - 1 - ヨードベンゼンの代わりに 2 - ブロモ - 6 - クロロ - 1 - ヨードベンゼンを用いたことを除けば、同様の方法で合成して、化合物 2 - 4 - A を製造した。

$$MS [M + H]^+ = 356.96$$

【0142】

化合物 2 - 1 - B の合成

前記合成例 1 - 1 - B において、化合物 1 - 1 - A の代わりに化合物 2 - 1 - A を用いたことを除けば、同様の方法で合成して、化合物 2 - 1 - B を製造した。

$$MS [M + H]^+ = 623.17$$

【0143】

化合物 2 - 2 - B の合成

前記合成例 2 - 1 - B において、化合物 2 - 1 - A の代わりに化合物 2 - 2 - A を用いたことを除けば、同様の方法で合成して、化合物 2 - 2 - B を製造した。

$$MS [M + H]^+ = 623.17$$

【0144】

化合物 2 - 3 - B の合成

前記合成例 2 - 1 - B において、化合物 2 - 1 - A の代わりに化合物 2 - 3 - A を用いたことを除けば、同様の方法で合成して、化合物 2 - 3 - B を製造した。

$$MS [M + H]^+ = 623.17$$

【0145】

化合物 2 - 4 - B の合成

前記合成例 2 - 1 - B において、化合物 2 - 1 - A の代わりに化合物 2 - 4 - A を用いたことを除けば、同様の方法で合成して、化合物 2 - 4 - B を製造した。

$$MS [M + H]^+ = 623.17$$

【0146】

化合物 2 - 1 - C の合成

前記合成例 1 - 1 - C において、化合物 1 - 1 - B の代わりに化合物 2 - 1 - B を用いたことを除けば、同様の方法で合成して、化合物 2 - 1 - C を製造した。

$$MS [M + H]^+ = 605.16$$

【0147】

化合物 2 - 2 - C の合成

前記合成例 2 - 1 - C において、化合物 2 - 1 - B の代わりに化合物 2 - 2 - B を用いたことを除けば、同様の方法で合成して、化合物 2 - 2 - C を製造した。

$MS [M + H]^+ = 605.16$

【0148】

化合物 2 - 3 - C の合成

前記合成例 2 - 1 - C において、化合物 2 - 1 - B の代わりに化合物 2 - 3 - B を用いたことを除けば、同様の方法で合成して、化合物 2 - 3 - C を製造した。

$MS [M + H]^+ = 605.16$

【0149】

化合物 2 - 4 - C の合成

前記合成例 2 - 1 - C において、化合物 2 - 1 - B の代わりに化合物 2 - 4 - B を用いたことを除けば、同様の方法で合成して、化合物 2 - 4 - C を製造した。

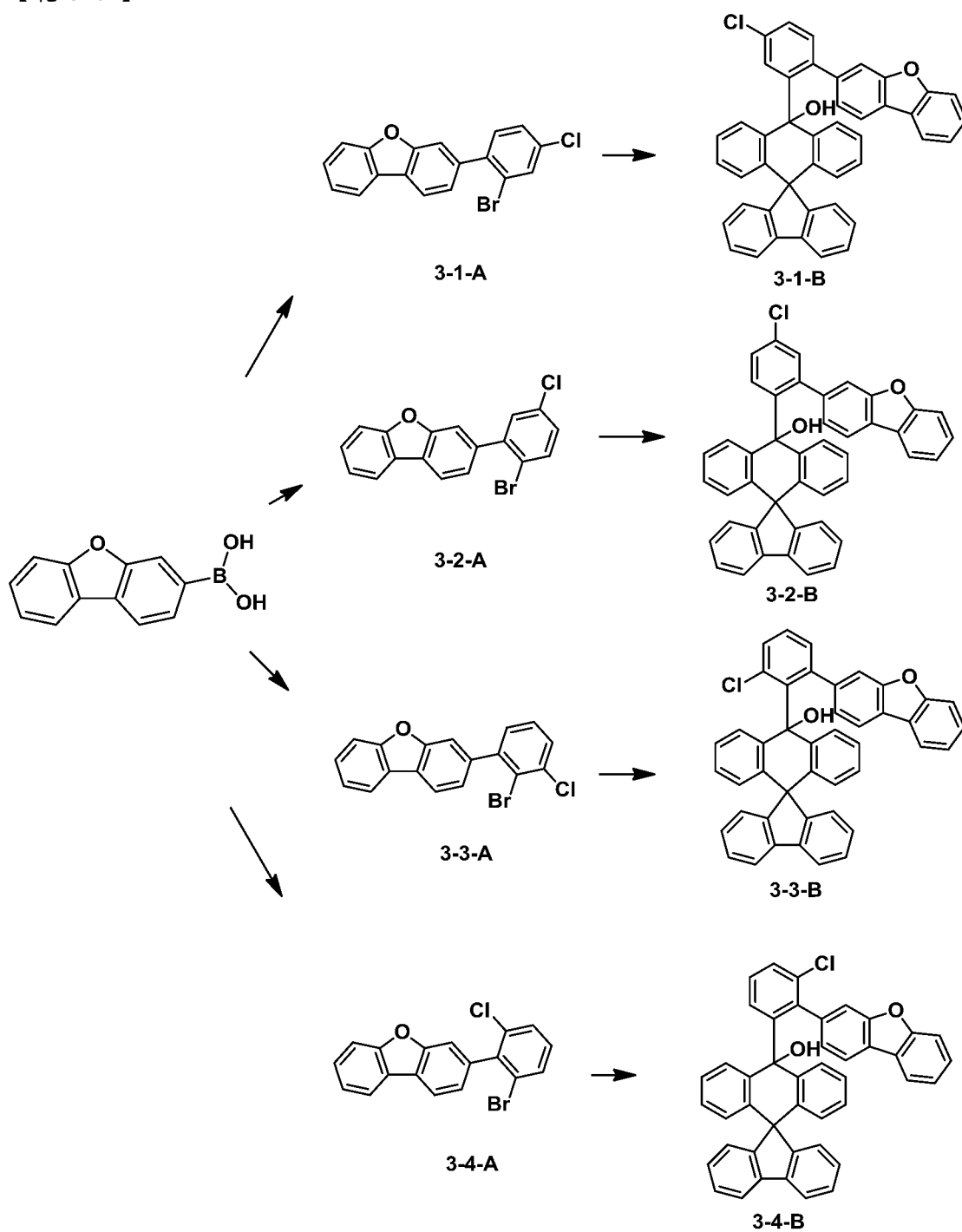
10

$MS [M + H]^+ = 605.16$

【0150】

< 製造例 3 > 下記 3 - 1 - C ~ 3 - 4 - C、3 - 1 - D ~ 3 - 4 - D の製造

【化 5 9】

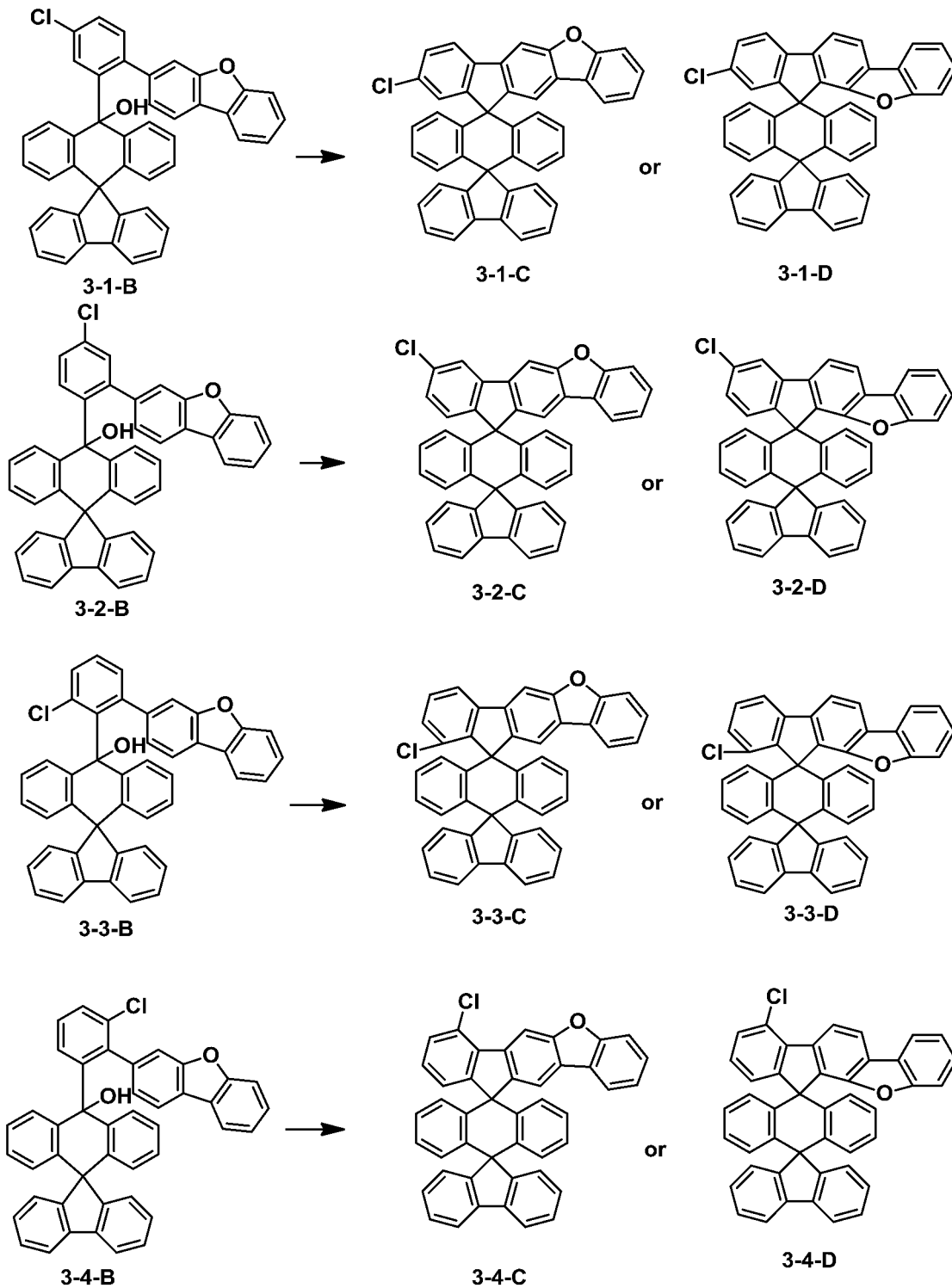


10

20

30

【化 6 0】



10

20

30

40

【 0 1 5 1】

化合物 3 - 1 - A の合成

前記合成例 1 - 1 - A において、ジベンゾフラン - 4 - イルボロン酸の代わりにジベンゾフラン - 3 - イルボロン酸を用いたことを除けば、同様の方法で合成して、化合物 3 - 1 - A を製造した。

$$MS [M + H]^+ = 356.96$$

【 0 1 5 2】

化合物 3 - 2 - A の合成

前記合成例 3 - 1 - A において、化合物 2 - プロモ - 4 - クロロ - 1 - ヨードベンゼンの代わりに 2 - プロモ - 5 - クロロ - 1 - ヨードベンゼンを用いたことを除けば、同様の

50

方法で合成して、化合物 3 - 2 - A を製造した。

$MS [M + H]^+ = 356.96$

【0153】

化合物 3 - 3 - A の合成

前記合成例 3 - 1 - A において、化合物 2 - ブロモ - 4 - クロロ - 1 - ヨードベンゼンの代わりに 2 - ブロモ - 3 - クロロ - 1 - ヨードベンゼンを用いたことを除けば、同様の方法で合成して、化合物 3 - 3 - A を製造した。

$MS [M + H]^+ = 356.96$

【0154】

化合物 3 - 4 - A の合成

前記合成例 3 - 1 - A において、化合物 2 - ブロモ - 4 - クロロ - 1 - ヨードベンゼンの代わりに 2 - ブロモ - 6 - クロロ - 1 - ヨードベンゼンを用いたことを除けば、同様の方法で合成して、化合物 3 - 4 - A を製造した。

$MS [M + H]^+ = 356.96$

【0155】

化合物 3 - 1 - B の合成

前記合成例 1 - 1 - B において、化合物 1 - 1 - A の代わりに化合物 3 - 1 - A を用いたことを除けば、同様の方法で合成して、化合物 3 - 1 - B を製造した。

$MS [M + H]^+ = 623.17$

【0156】

化合物 3 - 2 - B の合成

前記合成例 3 - 1 - B において、化合物 3 - 1 - A の代わりに化合物 3 - 2 - A を用いたことを除けば、同様の方法で合成して、化合物 3 - 2 - B を製造した。

$MS [M + H]^+ = 623.17$

【0157】

化合物 3 - 3 - B の合成

前記合成例 3 - 1 - B において、化合物 3 - 1 - A の代わりに化合物 3 - 3 - A を用いたことを除けば、同様の方法で合成して、化合物 3 - 3 - B を製造した。

$MS [M + H]^+ = 623.17$

【0158】

化合物 3 - 4 - B の合成

前記合成例 3 - 1 - B において、化合物 3 - 1 - A の代わりに化合物 3 - 4 - A を用いたことを除けば、同様の方法で合成して、化合物 3 - 4 - B を製造した。

$MS [M + H]^+ = 623.17$

【0159】

化合物 3 - 1 - C の合成

化合物 3 - 1 - B (10 g、16.1 mmol) を酢酸 (250 ml) に入れた後、硫酸 1 ml を滴加し、攪拌還流した。常温に温度を下げて水で中和した後、濾過した固体をカラムクロマトグラフィーで精製し、テトラヒドロフランとエチルアセレートで再結晶して、化合物 3 - 1 - C (2.7 g、30%) を製造した。

$MS [M + H]^+ = 605.16$

【0160】

化合物 3 - 2 - C の合成

前記合成例 3 - 1 - C において、化合物 3 - 1 - B の代わりに化合物 3 - 2 - B を用いたことを除けば、同様の方法で合成して、化合物 3 - 2 - C を製造した。

$MS [M + H]^+ = 605.16$

【0161】

化合物 3 - 3 - C の合成

前記合成例 3 - 1 - C において、化合物 3 - 1 - B の代わりに化合物 3 - 3 - B を用いたことを除けば、同様の方法で合成して、化合物 3 - 3 - C を製造した。

$MS [M + H]^+ = 605.16$

【0162】

化合物 3 - 4 - C の合成

前記合成例 3 - 1 - C において、化合物 3 - 1 - B の代わりに化合物 3 - 4 - B を用いたことを除けば、同様の方法で合成して、化合物 3 - 4 - C を製造した。

$MS [M + H]^+ = 605.16$

【0163】

化合物 3 - 1 - D の合成

前記合成例 3 - 1 - C において、カラム精製した後、再結晶して、化合物 3 - 1 - D を製造した。

10

$MS [M + H]^+ = 605.16$

【0164】

化合物 3 - 2 - D の合成

前記合成例 3 - 1 - C において、カラム精製した後、再結晶して、化合物 3 - 2 - D を製造した。

$MS [M + H]^+ = 605.16$

【0165】

化合物 3 - 3 - D の合成

前記合成例 3 - 1 - C において、カラム精製した後、再結晶して、化合物 3 - 3 - D を製造した。

20

$MS [M + H]^+ = 605.16$

【0166】

化合物 3 - 4 - D の合成

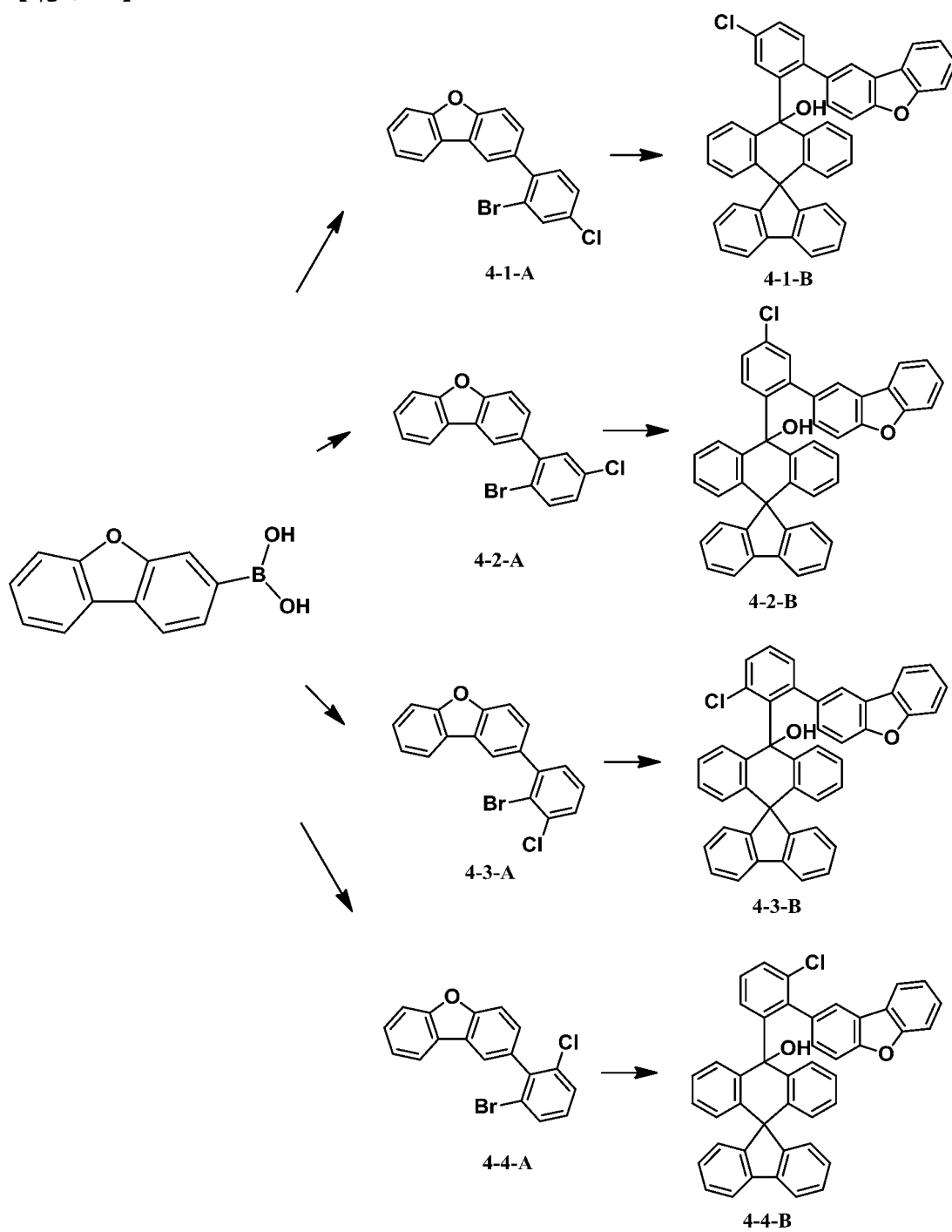
前記合成例 3 - 1 - C において、カラム精製した後、再結晶して、化合物 3 - 4 - D を製造した。

$MS [M + H]^+ = 605.16$

【0167】

< 製造例 4 > 下記 4 - 1 - C ~ 4 - 4 - C、4 - 1 - D ~ 4 - 4 - D の製造

【化 6 1】

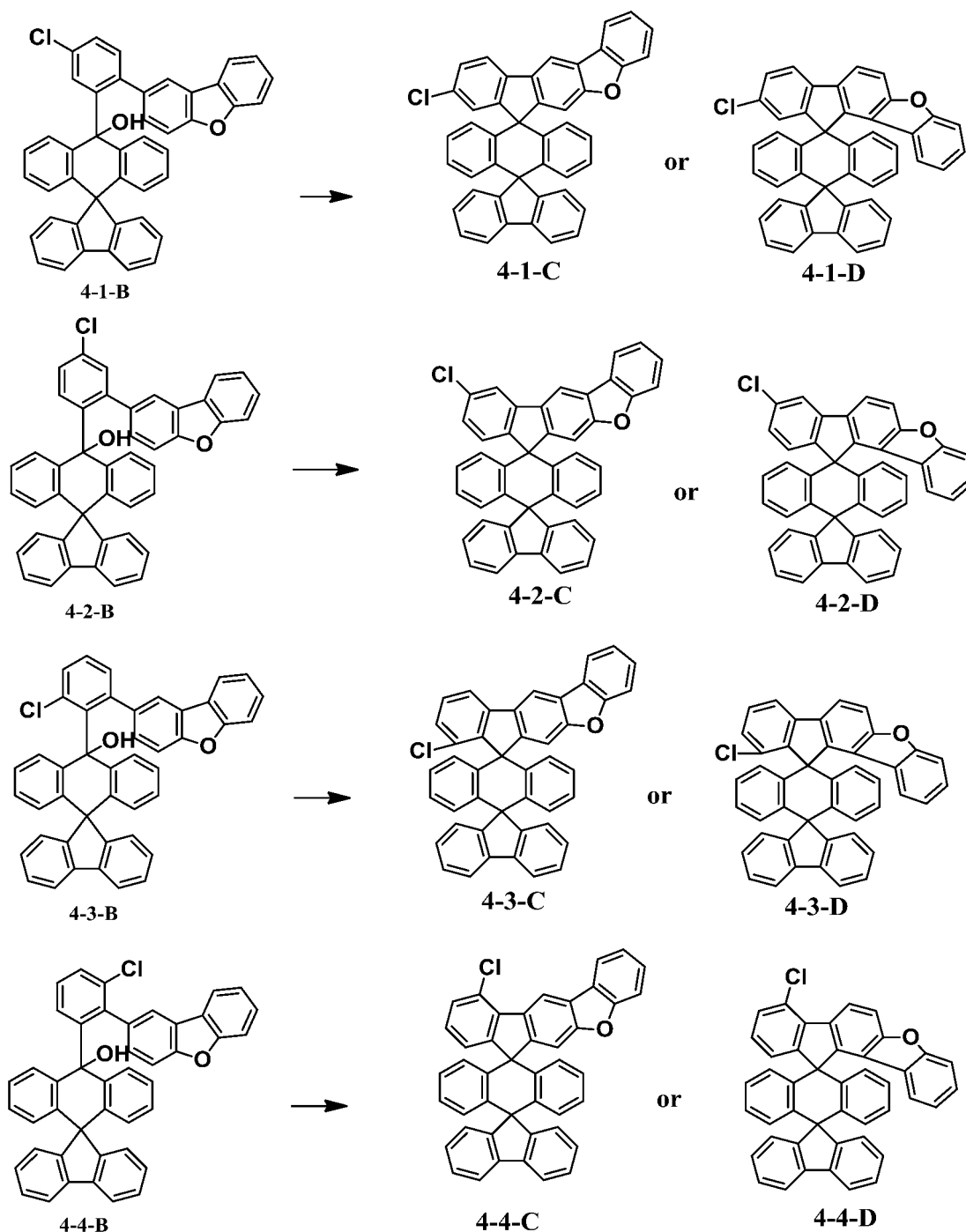


10

20

30

【化 6 2】



10

20

30

【 0 1 6 8 】

化合物 4 - 1 - A の合成

前記合成例 1 - 1 - A において、ジベンゾフラン - 4 - イルボロン酸の代わりにジベンゾフラン - 2 - イルボロン酸を用いたことを除けば、同様の方法で合成して、化合物 4 - 1 - A を製造した。

$$MS [M + H]^+ = 356.96$$

40

【 0 1 6 9 】

化合物 4 - 2 - A の合成

前記合成例 4 - 1 - A において、化合物 2 - ブロモ - 4 - クロロ - 1 - ヨードベンゼンの代わりに 2 - ブロモ - 5 - クロロ - 1 - ヨードベンゼンを用いたことを除けば、同様の方法で合成して、化合物 4 - 2 - A を製造した。

$$MS [M + H]^+ = 356.96$$

50

【 0 1 7 0 】

化合物 4 - 3 - A の合成

前記合成例 4 - 1 - A において、化合物 2 - ブロモ - 4 - クロロ - 1 - ヨードベンゼンの代わりに 2 - ブロモ - 3 - クロロ - 1 - ヨードベンゼンを用いたことを除けば、同様の方法で合成して、化合物 4 - 3 - A を製造した。

$MS [M + H]^+ = 356.96$

【0171】

化合物 4 - 4 - A の合成

前記合成例 3 - 1 - A において、化合物 2 - ブロモ - 4 - クロロ - 1 - ヨードベンゼンの代わりに 2 - ブロモ - 6 - クロロ - 1 - ヨードベンゼンを用いたことを除けば、同様の方法で合成して、化合物 4 - 4 - A を製造した。

$MS [M + H]^+ = 356.96$

【0172】

化合物 4 - 1 - B の合成

前記合成例 1 - 1 - B において、化合物 1 - 1 - A の代わりに化合物 4 - 1 - A を用いたことを除けば、同様の方法で合成して、化合物 4 - 1 - B を製造した。

$MS [M + H]^+ = 623.17$

【0173】

化合物 4 - 2 - B の合成

前記合成例 4 - 1 - B において、化合物 4 - 1 - A の代わりに化合物 4 - 2 - A を用いたことを除けば、同様の方法で合成して、化合物 4 - 2 - B を製造した。

$MS [M + H]^+ = 623.17$

【0174】

化合物 4 - 3 - B の合成

前記合成例 4 - 1 - B において、化合物 4 - 1 の代わりに化合物 4 - 3 を用いたことを除けば、同様の方法で合成して、化合物 4 - 3 - B を製造した。

$MS [M + H]^+ = 623.17$

【0175】

化合物 4 - 4 - B の合成

前記合成例 4 - 1 - B において、化合物 4 - 1 - A の代わりに化合物 4 - 4 - A を用いたことを除けば、同様の方法で合成して、化合物 4 - 4 - B を製造した。

$MS [M + H]^+ = 623.17$

【0176】

化合物 4 - 1 - C の合成

前記合成例 3 - 1 - C において、化合物 3 - 1 - B の代わりに化合物 4 - 1 - B を用いたことを除けば、同様の方法で合成して、化合物 4 - 1 - C を製造した。

$MS [M + H]^+ = 605.16$

【0177】

化合物 4 - 2 - C の合成

前記合成例 4 - 1 - C において、化合物 4 - 1 - B の代わりに化合物 4 - 2 - B を用いたことを除けば、同様の方法で合成して、化合物 4 - 2 - C を製造した。

$MS [M + H]^+ = 605.16$

【0178】

化合物 4 - 3 - C の合成

前記合成例 4 - 1 - C において、化合物 4 - 1 - B の代わりに化合物 4 - 3 - B を用いたことを除けば、同様の方法で合成して、化合物 4 - 3 - C を製造した。

$MS [M + H]^+ = 605.16$

【0179】

化合物 4 - 4 - C の合成

前記合成例 4 - 1 - C において、化合物 4 - 1 - B の代わりに化合物 4 - 4 - B を用いたことを除けば、同様の方法で合成して、化合物 4 - 4 - C を製造した。

10

20

30

40

50

$MS [M + H]^+ = 605.16$

【0180】

化合物 4 - 1 - D の合成

前記合成例 4 - 1 - C において、カラム精製した後、再結晶して、化合物 4 - 1 - D を製造した。

$MS [M + H]^+ = 605.16$

【0181】

化合物 4 - 2 - D の合成

前記合成例 4 - 1 - C において、カラム精製した後、再結晶して、化合物 4 - 2 - D を製造した。

10

$MS [M + H]^+ = 605.16$

【0182】

化合物 4 - 3 - D の合成

前記合成例 4 - 1 - C において、カラム精製した後、再結晶して、化合物 4 - 3 - D を製造した。

$MS [M + H]^+ = 605.16$

【0183】

化合物 4 - 4 - D の合成

前記合成例 4 - 1 - C において、カラム精製した後、再結晶して、化合物 4 - 4 - D を製造した。

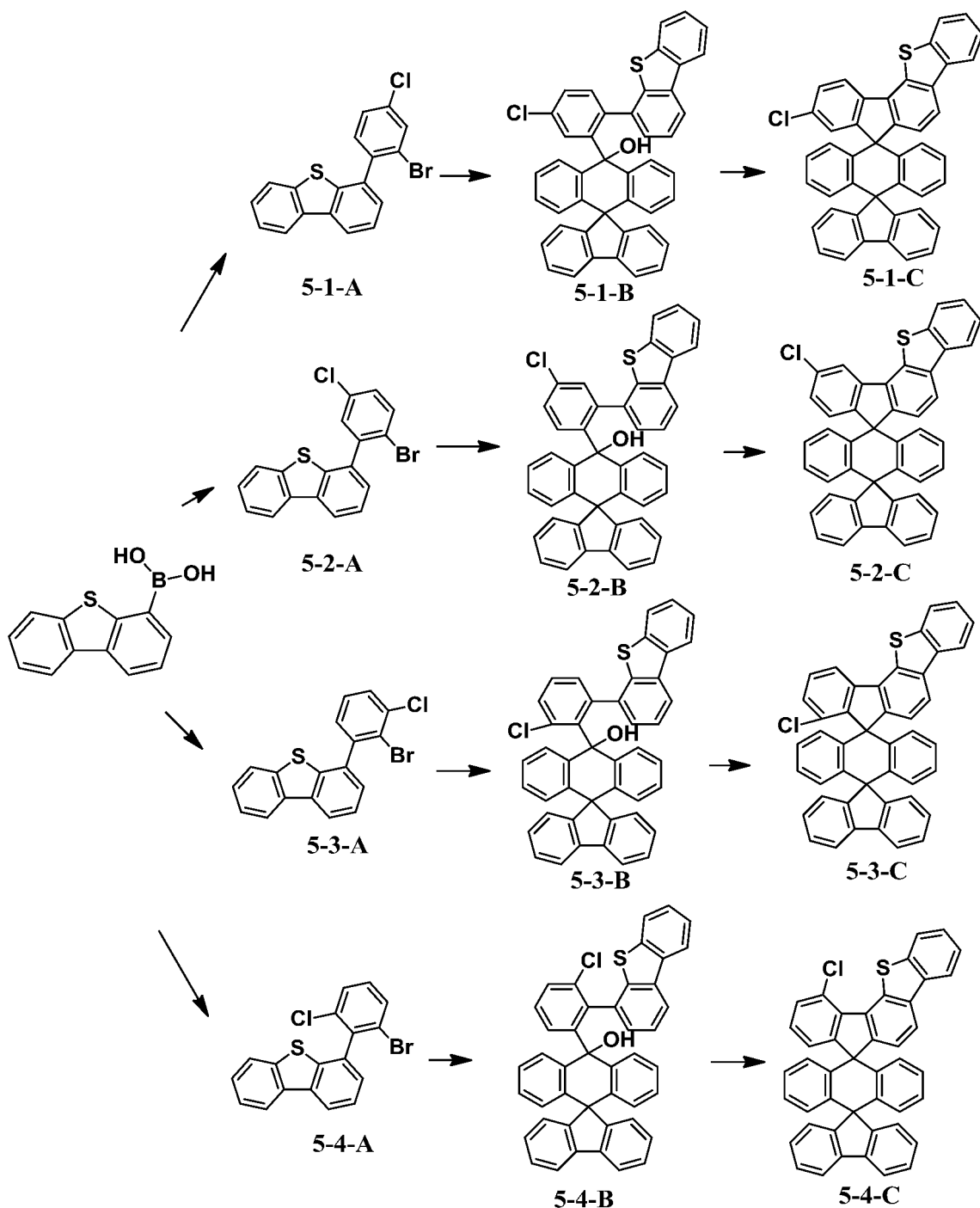
20

$MS [M + H]^+ = 605.16$

【0184】

< 製造例 5 > 下記 5 - 1 - C ~ 5 - 4 - C の製造

【化 6 3】



10

20

30

40

50

【0185】

化合物 5 - 1 - A の合成

前記合成例 1 - 1 - A において、ジベンゾフラン - 4 - イルボロン酸の代わりにジベンゾチオフェン - 4 - イルボロン酸を用いたことを除けば、同様の方法で合成して、化合物 5 - 1 - A を製造した。

$$MS [M + H]^+ = 372.94$$

【0186】

化合物 5 - 2 - A の合成

前記合成例 5 - 1 - A において、化合物 2 - ブロモ - 4 - クロロ - 1 - ヨードベンゼンの代わりに 2 - ブロモ - 5 - クロロ - 1 - ヨードベンゼンを用いたことを除けば、同様の方法で合成して、化合物 5 - 2 - A を製造した。

$$MS [M + H]^+ = 372.94$$

【0187】

化合物 5 - 3 - A の合成

前記合成例 5 - 1 - A において、化合物 2 - ブロモ - 4 - クロロ - 1 - ヨードベンゼンの代わりに 2 - ブロモ - 3 - クロロ - 1 - ヨードベンゼンを用いたことを除けば、同様の方法で合成して、化合物 5 - 3 - A を製造した。

$MS [M + H]^+ = 372.94$

【0188】

化合物 5 - 4 - A の合成

前記合成例 5 - 1 - A において、化合物 2 - ブロモ - 4 - クロロ - 1 - ヨードベンゼンの代わりに 2 - ブロモ - 6 - クロロ - 1 - ヨードベンゼンを用いたことを除けば、同様の方法で合成して、化合物 5 - 4 - A を製造した。

$MS [M + H]^+ = 372.94$

【0189】

化合物 5 - 1 - B の合成

前記合成例 1 - 1 - B において、化合物 1 - 1 - A の代わりに化合物 5 - 1 - A を用いたことを除けば、同様の方法で合成して、化合物 5 - 1 - B を製造した。

$MS [M + H]^+ = 640.15$

【0190】

化合物 5 - 2 - B の合成

前記合成例 5 - 1 - B において、化合物 1 - 1 - A の代わりに化合物 5 - 2 - A を用いたことを除けば、同様の方法で合成して、化合物 5 - 2 - B を製造した。

$MS [M + H]^+ = 640.15$

【0191】

化合物 5 - 3 - B の合成

前記合成例 5 - 1 - B において、化合物 1 - 1 - A の代わりに化合物 5 - 3 - A を用いたことを除けば、同様の方法で合成して、化合物 5 - 3 - B を製造した。

$MS [M + H]^+ = 640.15$

【0192】

化合物 5 - 4 - B の合成

前記合成例 5 - 1 - B において、化合物 1 - 1 - A の代わりに化合物 5 - 4 - A を用いたことを除けば、同様の方法で合成して、化合物 5 - 4 - B を製造した。

$MS [M + H]^+ = 640.15$

【0193】

化合物 5 - 1 - C の合成

前記合成例 1 - 1 - C において、化合物 1 - 1 - B の代わりに化合物 5 - 1 - B を用いたことを除けば、同様の方法で合成して、化合物 5 - 1 - C を製造した。

$MS [M + H]^+ = 621.14$

【0194】

化合物 5 - 2 - C の合成

前記合成例 5 - 1 - C において、化合物 5 - 1 - B の代わりに化合物 5 - 2 - B を用いたことを除けば、同様の方法で合成して、化合物 5 - 2 - C を製造した。

$MS [M + H]^+ = 621.14$

【0195】

化合物 5 - 3 - C の合成

前記合成例 5 - 1 - C において、化合物 5 - 1 - B の代わりに化合物 5 - 3 - B を用いたことを除けば、同様の方法で合成して、化合物 5 - 3 - C を製造した。

$MS [M + H]^+ = 621.14$

【0196】

化合物 5 - 4 - C の合成

前記合成例 5 - 1 - C において、化合物 5 - 1 - B の代わりに化合物 5 - 4 - B を用いたことを除けば、同様の方法で合成して、化合物 5 - 4 - C を製造した。

10

20

30

40

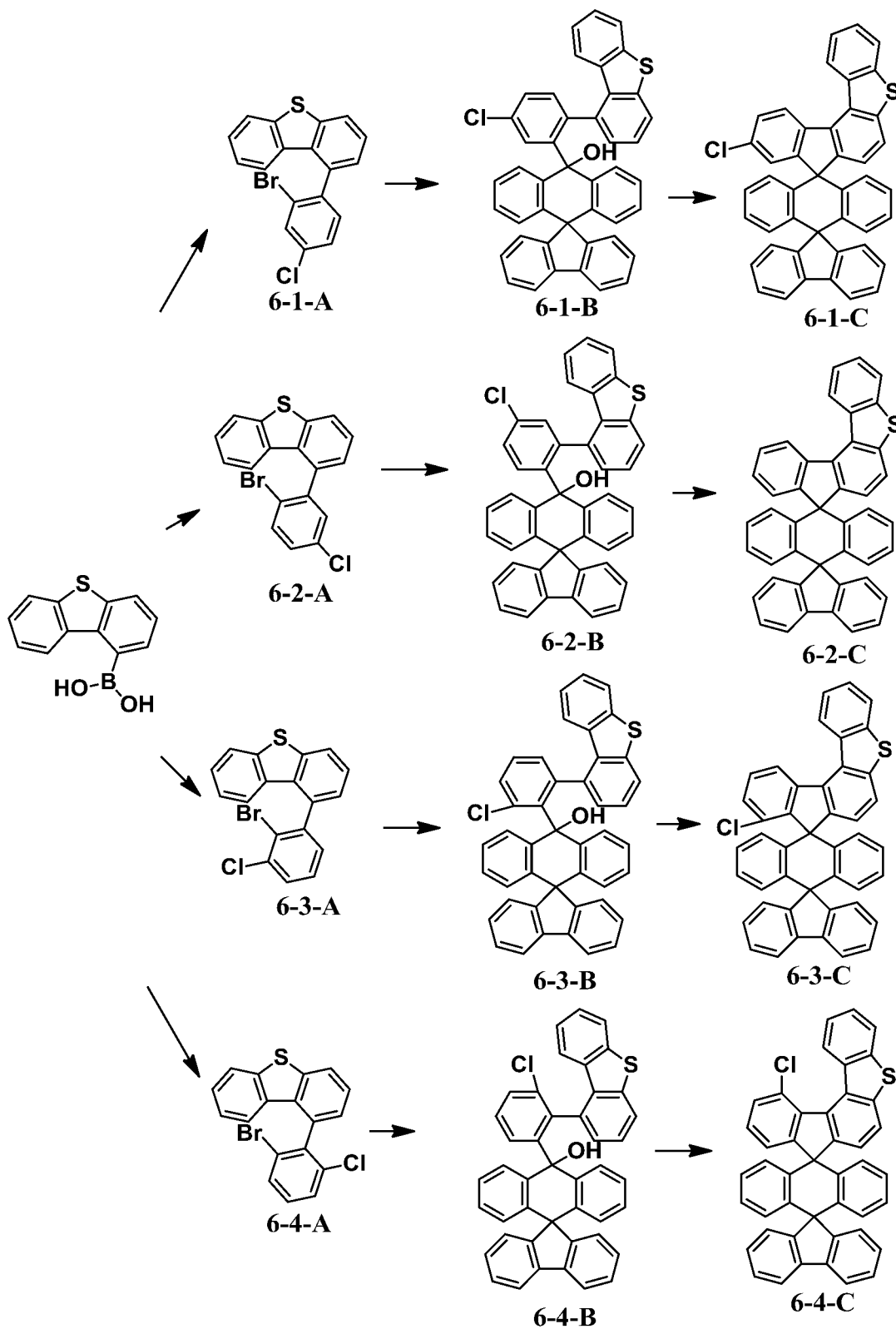
50

MS [M + H]⁺ = 621.14

【0197】

< 製造例 6 > 下記 6 - 1 - C ~ 6 - 4 - C の製造

【化 6 4】



10

20

30

40

【0198】

化合物 6 - 1 - A の合成

前記合成例 5 - 1 - A において、ジベンゾチオフェン - 4 - イルボロン酸の代わりにジベンゾチオフェン - 1 - イルボロン酸を用いたことを除けば、同様の方法で合成して、化合物 6 - 1 - A を製造した。

50

$MS [M + H]^+ = 372.94$

【0199】

化合物 6 - 2 - A の合成

前記合成例 6 - 1 - A において、化合物 2 - ブロモ - 4 - クロロ - 1 - ヨードベンゼンの代わりに 2 - ブロモ - 5 - クロロ - 1 - ヨードベンゼンを用いたことを除けば、同様の方法で合成して、化合物 6 - 2 - A を製造した。

$MS [M + H]^+ = 372.94$

【0200】

化合物 6 - 3 - A の合成

前記合成例 6 - 1 - A において、化合物 2 - ブロモ - 4 - クロロ - 1 - ヨードベンゼンの代わりに 2 - ブロモ - 3 - クロロ - 1 - ヨードベンゼンを用いたことを除けば、同様の方法で合成して、化合物 6 - 3 - A を製造した。

$MS [M + H]^+ = 372.94$

【0201】

化合物 6 - 4 - A の合成

前記合成例 6 - 1 - A において、化合物 2 - ブロモ - 4 - クロロ - 1 - ヨードベンゼンの代わりに 2 - ブロモ - 6 - クロロ - 1 - ヨードベンゼンを用いたことを除けば、同様の方法で合成して、化合物 6 - 4 - A を製造した。

$MS [M + H]^+ = 372.94$

【0202】

化合物 6 - 1 - B の合成

前記合成例 1 - 1 - B において、化合物 1 - 1 - A の代わりに化合物 6 - 1 - A を用いたことを除けば、同様の方法で合成して、化合物 6 - 1 - B を製造した。

$MS [M + H]^+ = 639.15$

【0203】

化合物 6 - 2 - B の合成

前記合成例 6 - 1 - B において、化合物 6 - 1 - A の代わりに化合物 6 - 2 - A を用いたことを除けば、同様の方法で合成して、化合物 6 - 2 - B を製造した。

$MS [M + H]^+ = 639.15$

【0204】

化合物 6 - 3 - B の合成

前記合成例 6 - 1 - B において、化合物 6 - 1 - A の代わりに化合物 6 - 3 - A を用いたことを除けば、同様の方法で合成して、化合物 6 - 3 - B を製造した。

$MS [M + H]^+ = 639.15$

【0205】

化合物 6 - 4 - B の合成

前記合成例 6 - 1 - B において、化合物 6 - 1 - A の代わりに化合物 6 - 4 - A を用いたことを除けば、同様の方法で合成して、化合物 6 - 4 - B を製造した。

$MS [M + H]^+ = 621.14$

【0206】

化合物 6 - 1 - C の合成

前記合成例 1 - 1 - C において、化合物 1 - 1 - B の代わりに化合物 6 - 1 - B を用いたことを除けば、同様の方法で合成して、化合物 6 - 1 - C を製造した。

$MS [M + H]^+ = 621.14$

【0207】

化合物 6 - 2 - C の合成

前記合成例 6 - 1 - C において、化合物 6 - 1 - B の代わりに化合物 6 - 2 - B を用いたことを除けば、同様の方法で合成して、化合物 6 - 2 - C を製造した。

$MS [M + H]^+ = 621.14$

【0208】

10

20

30

40

50

化合物 6 - 3 - C の合成

前記合成例 6 - 1 - C において、化合物 6 - 1 - B の代わりに化合物 6 - 3 - B を用いたことを除けば、同様の方法で合成して、化合物 6 - 3 - C を製造した。

$MS [M + H]^+ = 621.14$

【0209】

化合物 6 - 4 - C の合成

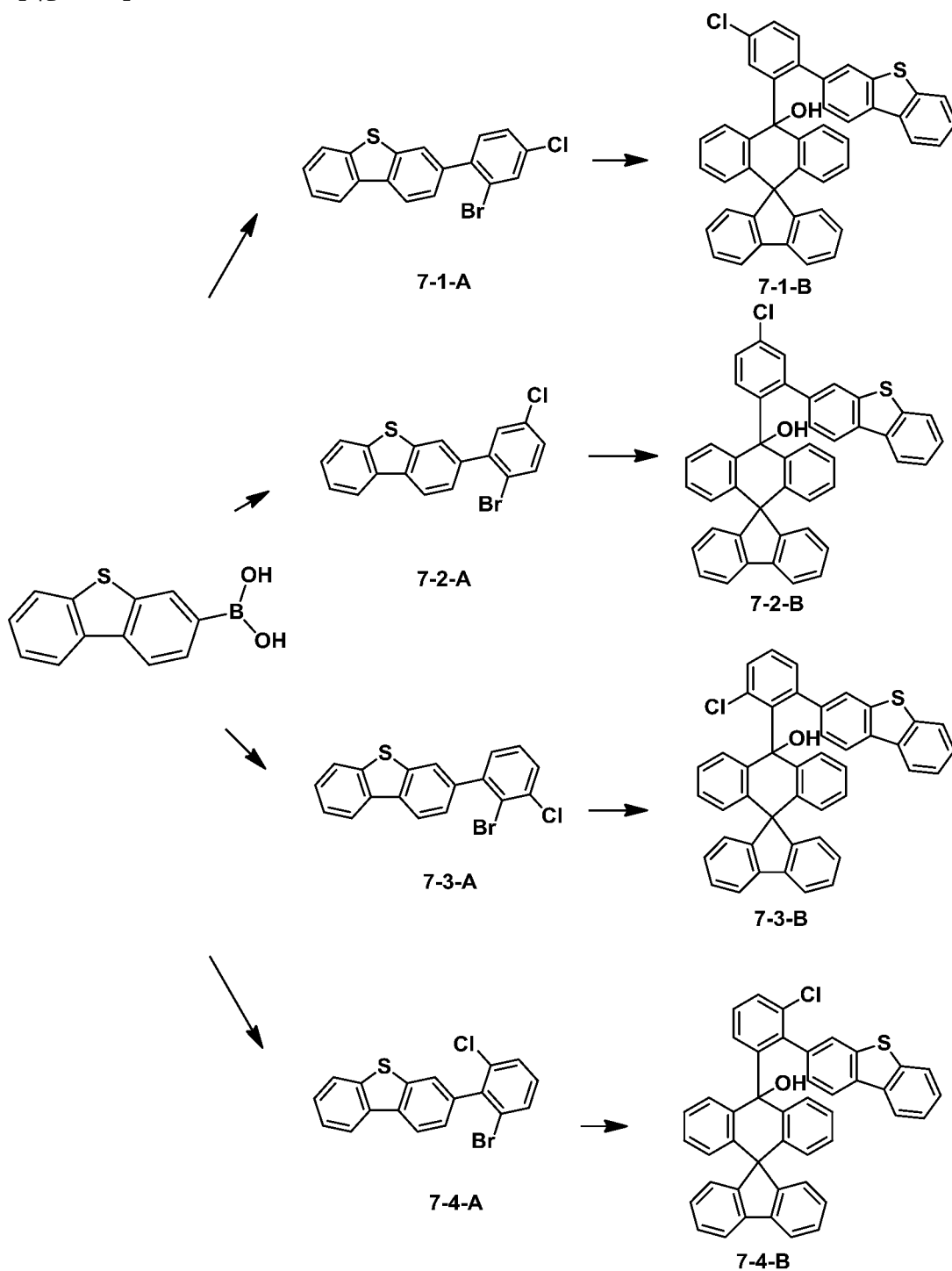
前記合成例 6 - 1 - C において、化合物 6 - 1 - B の代わりに化合物 6 - 4 - B を用いたことを除けば、同様の方法で合成して、化合物 6 - 4 - C を製造した。

$MS [M + H]^+ = 621.14$

【0210】

< 製造例 7 > 下記 7 - 1 - C ~ 7 - 4 - C、7 - 1 - D ~ 7 - 4 - D の製造

【化 65】



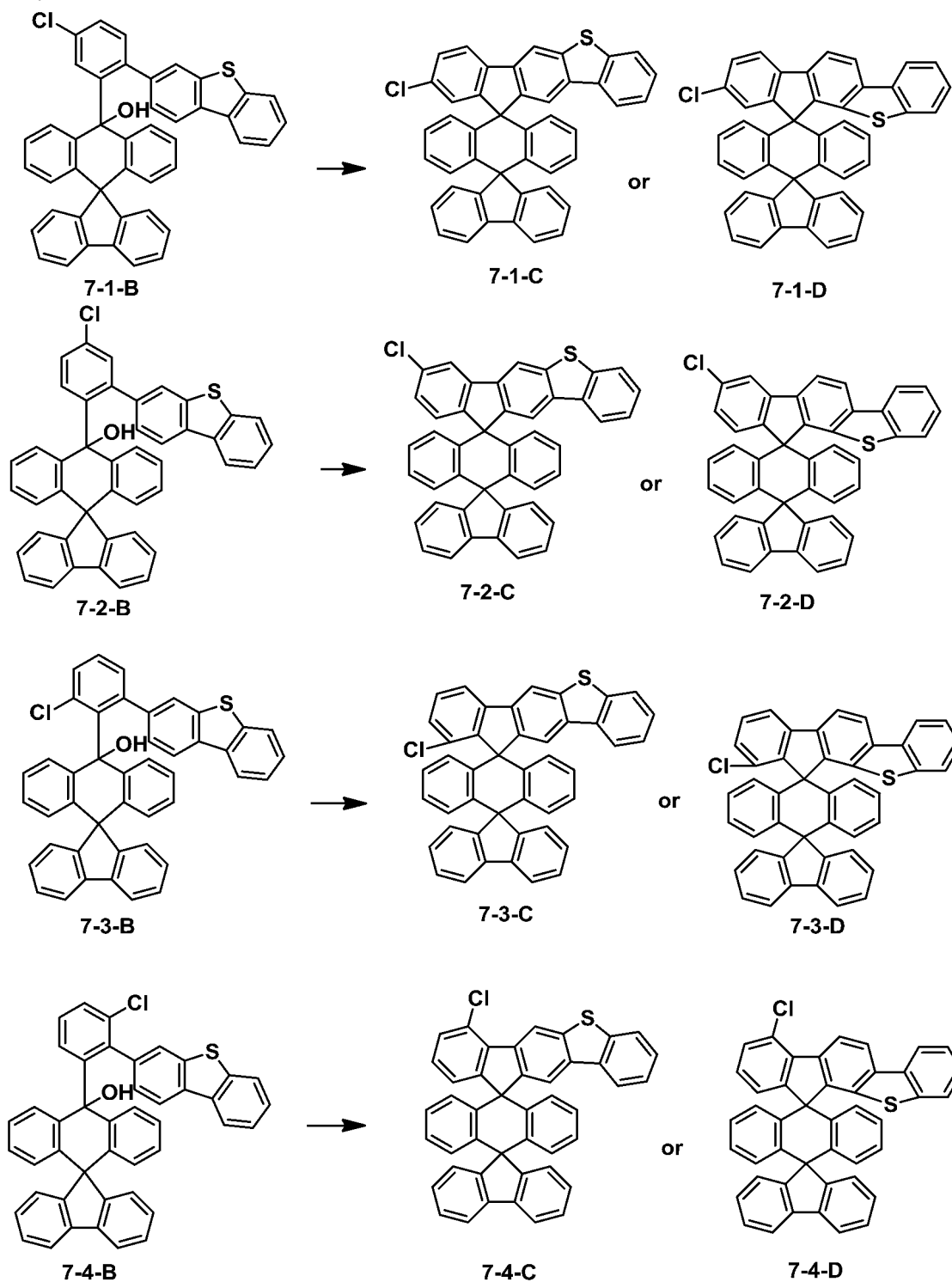
10

20

30

40

【化 6 6】



10

20

30

40

【0 2 1 1】

化合物 7 - 1 - A の合成

前記合成例 5 - 1 - A において、ジベンゾチオフェン - 4 - イルボロン酸の代わりにジベンゾチオフェン - 3 - イルボロン酸を用いたことを除けば、同様の方法で合成して、化合物 7 - 1 - A を製造した。

$$MS [M + H]^+ = 372.94$$

【0 2 1 2】

化合物 7 - 2 - A の合成

前記合成例 7 - 1 - A において、化合物 2 - プロモ - 4 - クロロ - 1 - ヨードベンゼンの代わりに 2 - プロモ - 5 - クロロ - 1 - ヨードベンゼンを用いたことを除けば、同様の

50

方法で合成して、化合物 7 - 2 - A を製造した。

$MS [M + H]^+ = 372.94$

【0213】

化合物 7 - 3 - A の合成

前記合成例 7 - 1 - A において、化合物 2 - ブロモ - 4 - クロロ - 1 - ヨードベンゼンの代わりに 2 - ブロモ - 3 - クロロ - 1 - ヨードベンゼンを用いたことを除けば、同様の方法で合成して、化合物 7 - 3 - A を製造した。

$MS [M + H]^+ = 372.94$

【0214】

化合物 7 - 4 - A の合成

前記合成例 7 - 1 において、化合物 2 - ブロモ - 4 - クロロ - 1 - ヨードベンゼンの代わりに 2 - ブロモ - 6 - クロロ - 1 - ヨードベンゼンを用いたことを除けば、同様の方法で合成して、化合物 7 - 4 - A を製造した。

$MS [M + H]^+ = 372.94$

【0215】

化合物 7 - 1 - B の合成

前記合成例 1 - 1 - B において、化合物 1 - 1 - A の代わりに化合物 7 - 1 - A を用いたことを除けば、同様の方法で合成して、化合物 7 - 1 - B を製造した。

$MS [M + H]^+ = 639.15$

【0216】

化合物 7 - 2 - B の合成

前記合成例 7 - 1 - B において、化合物 7 - 1 - A の代わりに化合物 7 - 2 - A を用いたことを除けば、同様の方法で合成して、化合物 7 - 2 - B を製造した。

$MS [M + H]^+ = 639.15$

【0217】

化合物 7 - 3 - B の合成

前記合成例 7 - 1 - B において、化合物 7 - 1 - A の代わりに化合物 7 - 3 - A を用いたことを除けば、同様の方法で合成して、化合物 7 - 3 - B を製造した。

$MS [M + H]^+ = 639.15$

【0218】

化合物 7 - 4 - B の合成

前記合成例 7 - 1 - B において、化合物 7 - 1 - A の代わりに化合物 7 - 4 - A を用いたことを除けば、同様の方法で合成して、化合物 7 - 4 - B を製造した。

$MS [M + H]^+ = 639.15$

【0219】

化合物 7 - 1 - C の合成

化合物 7 - 1 - B (10 g、16.1 mmol) を酢酸 (250 ml) に入れた後、硫酸 1 ml を滴加し、攪拌還流した。常温に温度を下げて水で中和した後、濾過した固体をカラムクロマトグラフィーで精製し、テトラヒドロフランとエチルアセレートで再結晶して、化合物 7 - 1 - C (2.7 g、30%) を製造した。

$MS [M + H]^+ = 621.14$

【0220】

化合物 7 - 2 - C の合成

前記合成例 7 - 1 - C において、化合物 7 - 1 - B の代わりに化合物 7 - 2 - B を用いたことを除けば、同様の方法で合成して、化合物 7 - 2 - C を製造した。

$MS [M + H]^+ = 621.14$

【0221】

化合物 7 - 3 - C の合成

前記合成例 7 - 1 - C において、化合物 7 - 1 - B の代わりに化合物 7 - 3 - B を用いたことを除けば、同様の方法で合成して、化合物 7 - 3 - C を製造した。

$MS [M + H]^+ = 621.14$

【0222】

化合物 7 - 4 - C の合成

前記合成例 7 - 1 - C において、化合物 7 - 1 - B の代わりに化合物 7 - 4 - B を用いたことを除けば、同様の方法で合成して、化合物 7 - 4 - C を製造した。

$MS [M + H]^+ = 621.14$

【0223】

化合物 7 - 1 - D の合成

前記合成例 7 - 1 - C において、カラム精製した後、再結晶して、化合物 7 - 1 - D を製造した。

10

$MS [M + H]^+ = 621.14$

【0224】

化合物 7 - 2 - D の合成

前記合成例 7 - 1 - C において、カラム精製した後、再結晶して、化合物 7 - 2 - D を製造した。

$MS [M + H]^+ = 621.14$

【0225】

化合物 7 - 3 - D の合成

前記合成例 7 - 1 - C において、カラム精製した後、再結晶して、化合物 7 - 3 - D を製造した。

20

$MS [M + H]^+ = 621.14$

【0226】

化合物 7 - 4 - D の合成

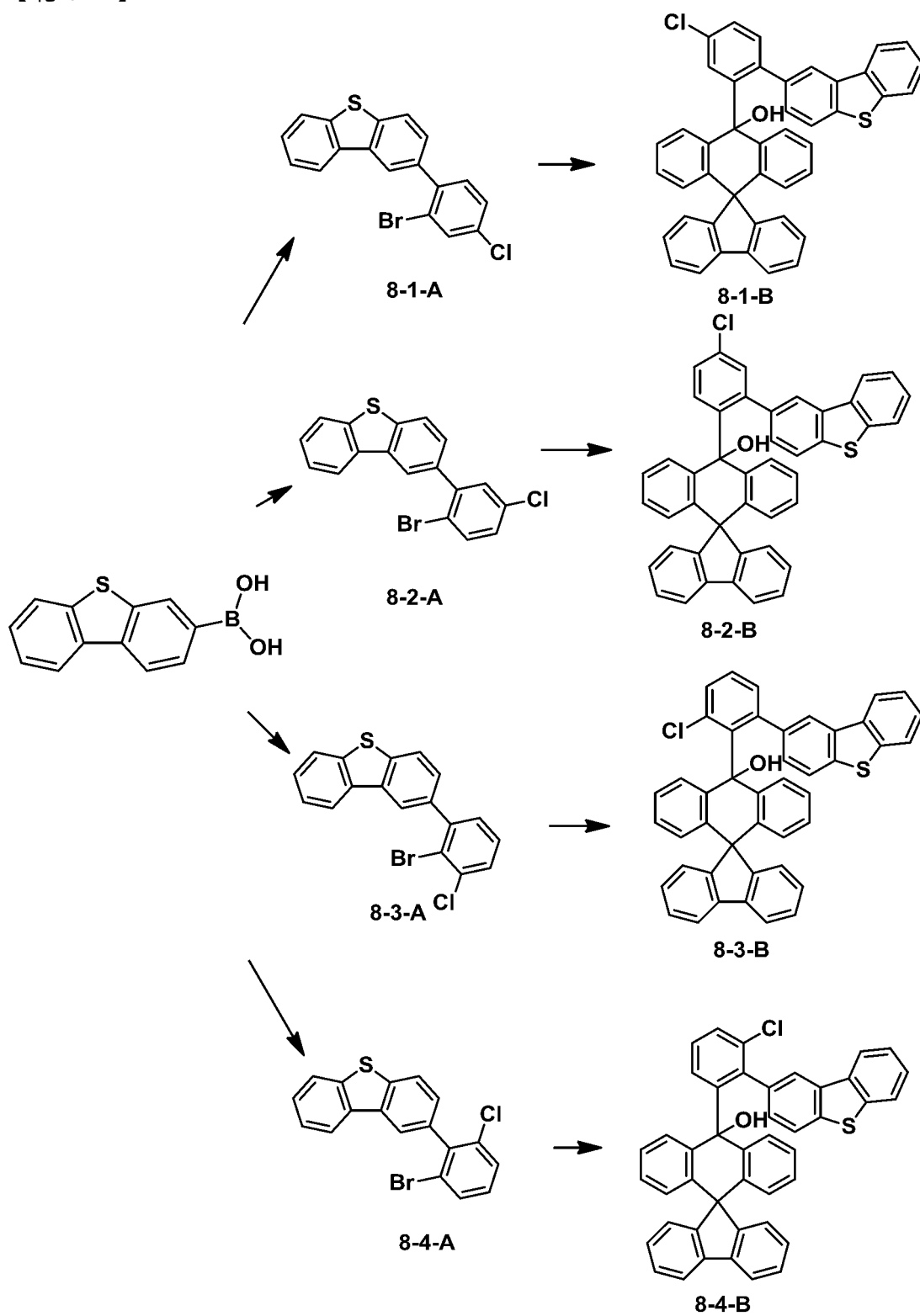
前記合成例 7 - 1 - C において、カラム精製した後、再結晶して、化合物 7 - 4 - D を製造した。

$MS [M + H]^+ = 621.14$

【0227】

< 製造例 8 > 下記 8 - 1 - C ~ 8 - 4 - C、8 - 1 - D ~ 8 - 4 - D の製造

【化 6 7】



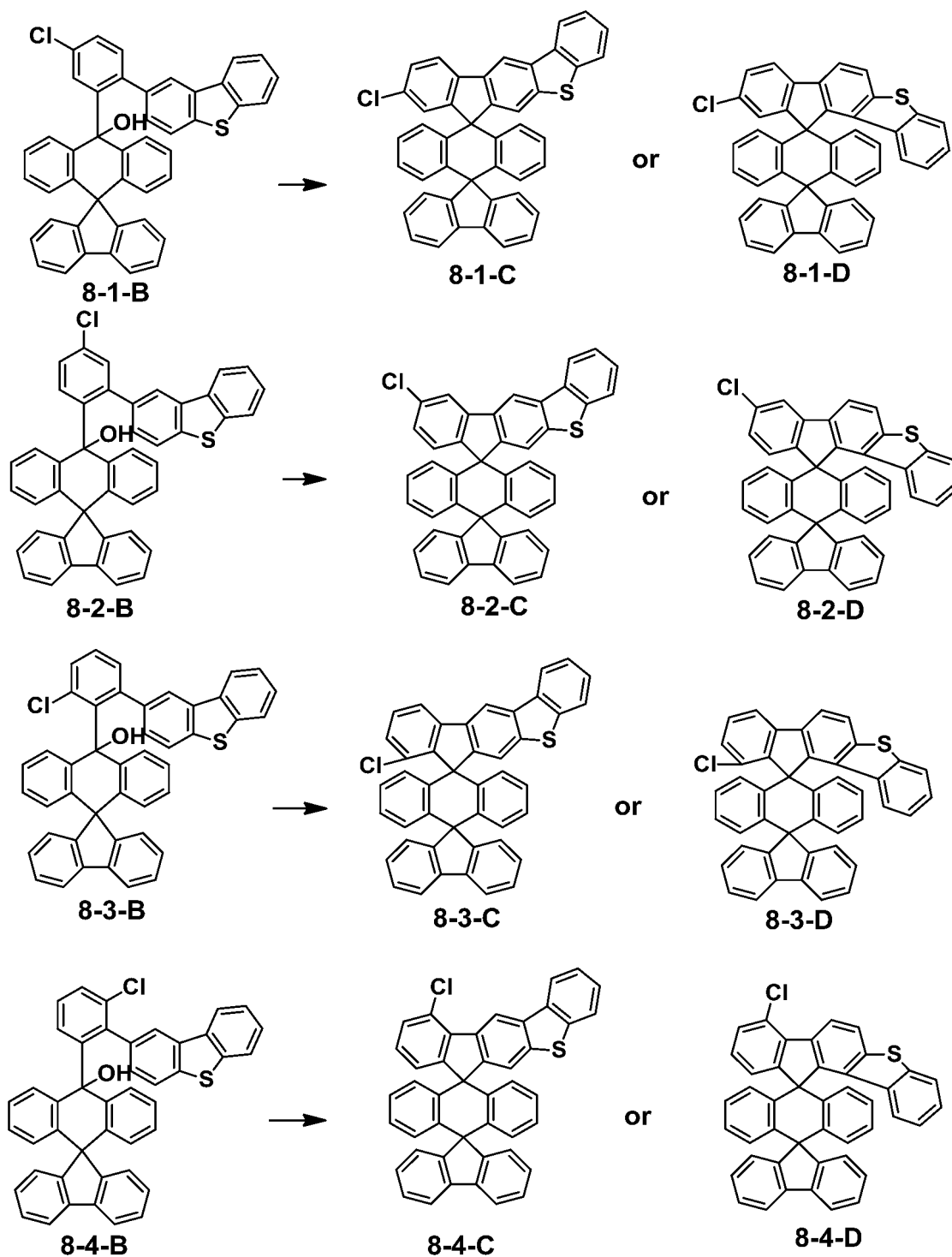
10

20

30

40

【化 6 8】



10

20

30

40

【 0 2 2 8 】

化合物 8 - 1 - A の合成

前記合成例 5 - 1 - A において、ジベンゾチオフェン - 4 - イルボロン酸の代わりにジベンゾチオフェン - 2 - イルボロン酸を用いたことを除けば、同様の方法で合成して、化合物 8 - 1 - A を製造した。

$$MS [M + H]^+ = 372.94$$

【 0 2 2 9 】

化合物 8 - 2 - A の合成

前記合成例 8 - 1 - A において、化合物 2 - ブロモ - 4 - クロロ - 1 - ヨードベンゼンの代わりに 2 - ブロモ - 5 - クロロ - 1 - ヨードベンゼンを用いたことを除けば、同様の方法で合成して、化合物 8 - 2 - A を製造した。

50

$MS [M + H]^+ = 372.94$

【0230】

化合物 8 - 3 - A の合成

前記合成例 8 - 1 - A において、化合物 2 - ブロモ - 4 - クロロ - 1 - ヨードベンゼンの代わりに 2 - ブロモ - 3 - クロロ - 1 - ヨードベンゼンを用いたことを除けば、同様の方法で合成して、化合物 8 - 3 - A を製造した。

$MS [M + H]^+ = 372.94$

【0231】

化合物 8 - 4 - A の合成

前記合成例 8 - 1 - A において、化合物 2 - ブロモ - 4 - クロロ - 1 - ヨードベンゼンの代わりに 2 - ブロモ - 6 - クロロ - 1 - ヨードベンゼンを用いたことを除けば、同様の方法で合成して、化合物 8 - 4 - A を製造した。

$MS [M + H]^+ = 372.94$

【0232】

化合物 8 - 1 - B の合成

前記合成例 1 - 1 - B において、化合物 1 - 1 - A の代わりに化合物 8 - 1 - A を用いたことを除けば、同様の方法で合成して、化合物 8 - 1 - B を製造した。

$MS [M + H]^+ = 639.15$

【0233】

化合物 8 - 2 - B の合成

前記合成例 8 - 1 - B において、化合物 8 - 1 - A の代わりに化合物 8 - 2 - A を用いたことを除けば、同様の方法で合成して、化合物 8 - 2 - B を製造した。

$MS [M + H]^+ = 639.15$

【0234】

化合物 8 - 3 - B の合成

前記合成例 8 - 1 - B において、化合物 8 - 1 - A の代わりに化合物 8 - 3 - A を用いたことを除けば、同様の方法で合成して、化合物 8 - 3 - B を製造した。

$MS [M + H]^+ = 639.15$

【0235】

化合物 8 - 4 - B の合成

前記合成例 8 - 1 - B において、化合物 8 - 1 - A の代わりに化合物 8 - 4 - A を用いたことを除けば、同様の方法で合成して、化合物 8 - 4 - B を製造した。

$MS [M + H]^+ = 639.15$

【0236】

化合物 8 - 1 - C の合成

前記合成例 5 - 1 - C において、化合物 5 - 1 - B の代わりに化合物 8 - 1 - B を用いたことを除けば、同様の方法で合成して、化合物 8 - 1 - C を製造した。

$MS [M + H]^+ = 621.14$

【0237】

化合物 8 - 2 - C の合成

前記合成例 8 - 1 - C において、化合物 8 - 1 - B の代わりに化合物 8 - 2 - B を用いたことを除けば、同様の方法で合成して、化合物 8 - 2 - C を製造した。

$MS [M + H]^+ = 621.14$

【0238】

化合物 8 - 3 - C の合成

前記合成例 8 - 1 - C において、化合物 8 - 1 - B の代わりに化合物 8 - 3 - B を用いたことを除けば、同様の方法で合成して、化合物 8 - 3 - C を製造した。

$MS [M + H]^+ = 621.14$

【0239】

化合物 8 - 4 - C の合成

10

20

30

40

50

前記合成例 8 - 1 - C において、化合物 8 - 1 - B の代わりに化合物 8 - 4 - B を用いたことを除けば、同様の方法で合成して、化合物 8 - 4 - C を製造した。

MS [M + H]⁺ = 621.14

【0240】

化合物 8 - 1 - D の合成

前記合成例 8 - 1 - C において、カラム精製した後、再結晶して、化合物 8 - 1 - D を製造した。

MS [M + H]⁺ = 621.14

【0241】

化合物 8 - 2 - D の合成

前記合成例 8 - 1 - C において、カラム精製した後、再結晶して、化合物 8 - 2 - D を製造した。

MS [M + H]⁺ = 621.14

【0242】

化合物 8 - 3 - D の合成

前記合成例 8 - 1 - C において、カラム精製した後、再結晶して、化合物 8 - 3 - D を製造した。

MS [M + H]⁺ = 621.14

【0243】

化合物 8 - 4 - D の合成

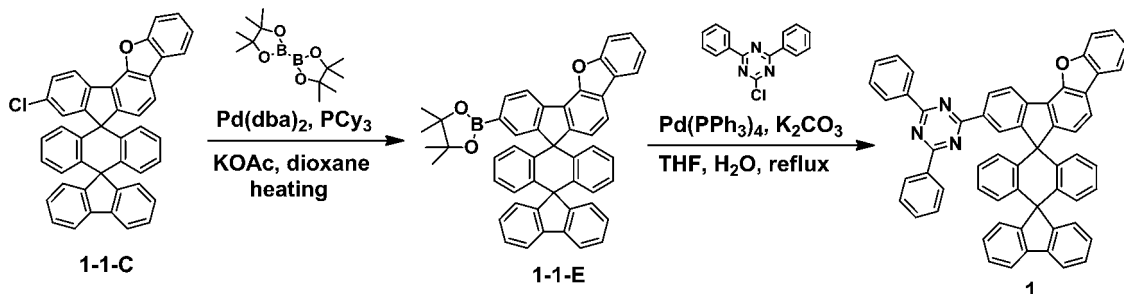
前記合成例 8 - 1 - C において、カラム精製した後、再結晶して、化合物 8 - 4 - D を製造した。

MS [M + H]⁺ = 621.14

【0244】

化合物 1 の合成

【化69】



化合物 1 - 1 - C (10 g、16.6 mmol) とビス(ピナコラト)ジボロン(4.64 g、18.2 mmol) と酢酸カリウム(29.1 g、296 mmol) を混合し、ジオキサン 100 ml に添加し、加熱撹拌する。還流状態で、ビス(ジベンジリデンアセトン)パラジウム(0.3 g、0.55 mmol) とトリシクロヘキシルホスフィン(1.6 g、5.9 mmol) を入れて、10 時間加熱、撹拌した。反応終了後、常温に温度を下けた後、濾過した。溶媒除去後、水に注いでクロロホルムで抽出し、有機層を無水硫酸マグネシウムで乾燥した。減圧蒸留後、エタノールで再結晶して、前記化合物 1 - 1 - E (9.24 g、収率：80%) を製造した。

【0245】

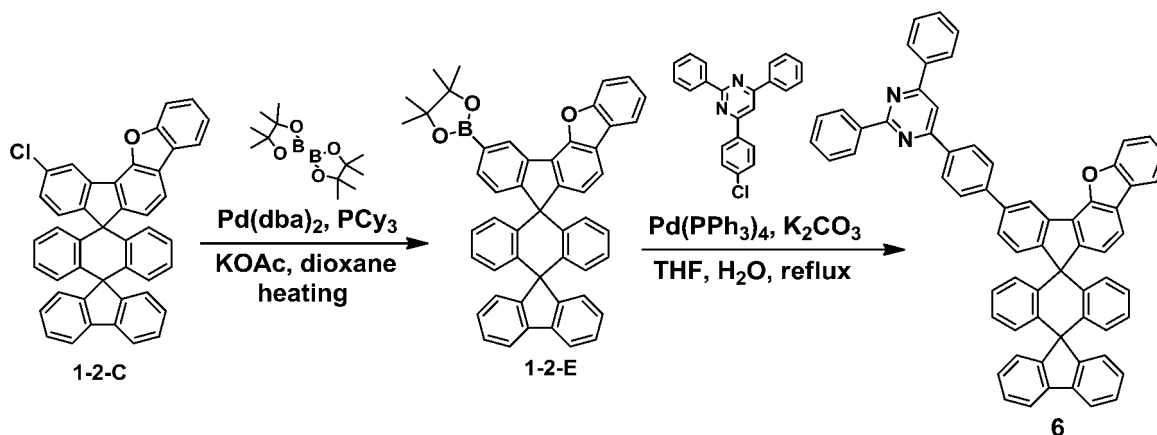
化合物 1 - 1 - E (9 g、12.9 mmol) と 2 - クロロ - 4,6 - ジフェニル - 1,3,5 - トリアジン(3.62 g、13.5 mmol) をテトラヒドロフラン(250 ml) に添加した後、2 M ポタシウムカーボネート水溶液(100 ml) を添加し、テトラキストリフェニル - ホスフィノパラジウム(0.3 g、0.27 mmol) を入れた後、5 時間加熱撹拌した。常温に温度を下げて反応を終結した後、溶媒を除去した後、エチルアセテートに溶かして水で洗った後、層分離した。溶媒除去後、テトラヒドロフランとエチルアセテートで再結晶して、前記化合物 1 (9.3 g、収率：90%) を製造した。

MS [M + H]⁺ = 802.28

【0246】

化合物6の合成

【化70】



10

前記化合物1の合成において、化合物1-1-Cの代わりに化合物1-2-Cを用いて1-2-Eを製造し、その後、2-クロロ-4,6-ジフェニル-1,3,5-トリアジンの代わりに4-(4-クロロフェニル)-2,6-ジフェニルピリミジンを用いたことを除けば、同様の方法で合成して、化合物6を製造した。

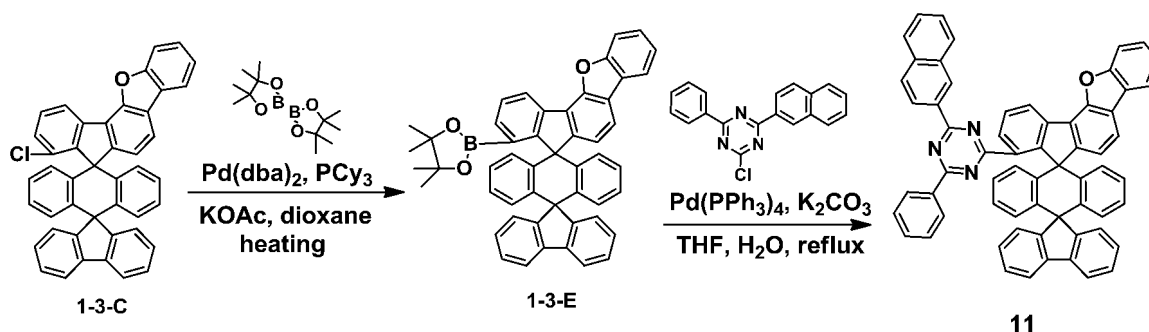
20

MS [M + H]⁺ = 877.31

【0247】

化合物11の合成

【化71】



30

前記化合物1の合成において、化合物1-1-Cの代わりに化合物1-3-Cを用いて1-3-Eを製造し、その後、2-クロロ-4,6-ジフェニル-1,3,5-トリアジンの代わりに2-クロロ-4-(ナフタレン-2-イル)-6-フェニル-1,3,5-トリアジンを用いたことを除けば、同様の方法で合成して、化合物11を製造した。

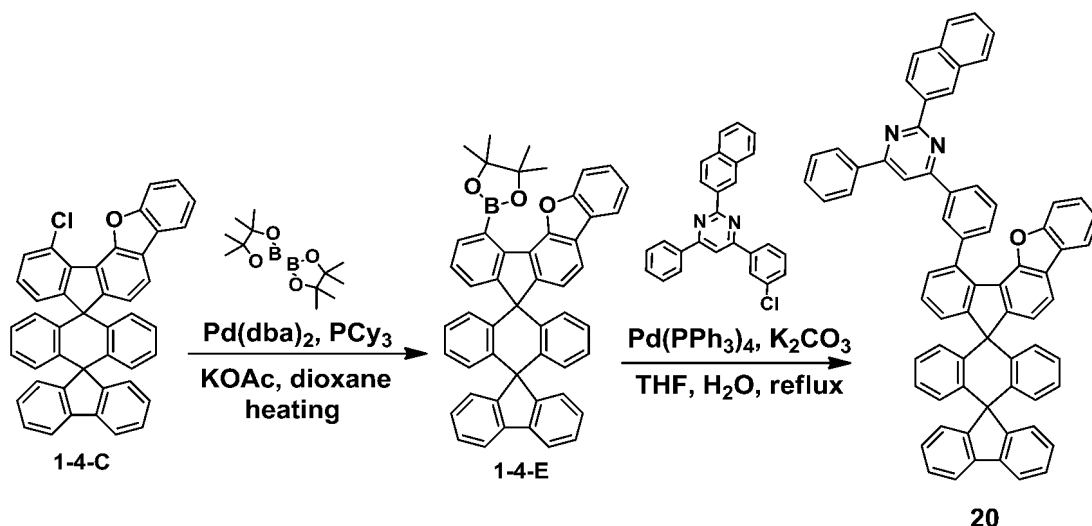
MS [M + H]⁺ = 852.29

【0248】

化合物20の合成

40

【化 7 2】



10

前記化合物 1 の合成において、化合物 1 - 1 - C の代わりに化合物 1 - 4 - C を用いて 1 - 4 - E を製 し、その後、2 - クロロ - 4 , 6 - ジフェニル - 1 , 3 , 5 - トリアジンの代わりに 4 - (3 - クロロフェニル) - 2 - (ナフタレン - 2 - イル) - 6 - フェニルピリミジンを用いたことを除けば、同様の方法で合成して、化合物 20 を製造した。

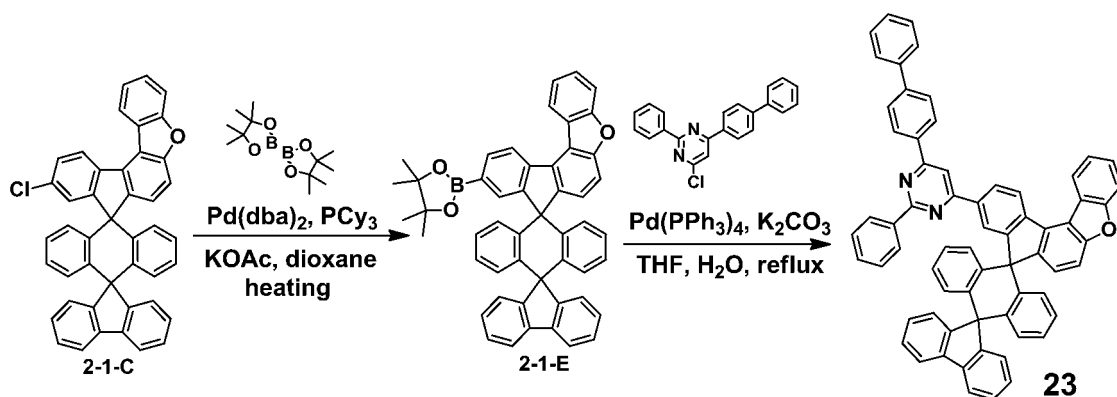
MS [M + H] ⁺ = 927 . 33

20

【 0 2 4 9 】

化合物 23 の合成

【化 7 3】



30

前記化合物 1 の合成において、化合物 1 - 1 - C の代わりに化合物 2 - 1 - C を用いて 2 - 1 - E を製造し、その後、2 - クロロ - 4 , 6 - ジフェニル - 1 , 3 , 5 - トリアジンの代わりに 4 - ([1 , 1' - ビフェニル] - 4 - イル - 6 - クロロ - 2 - フェニルピリミジンを用いたことを除けば、同様の方法で合成して、化合物 23 を製造した。

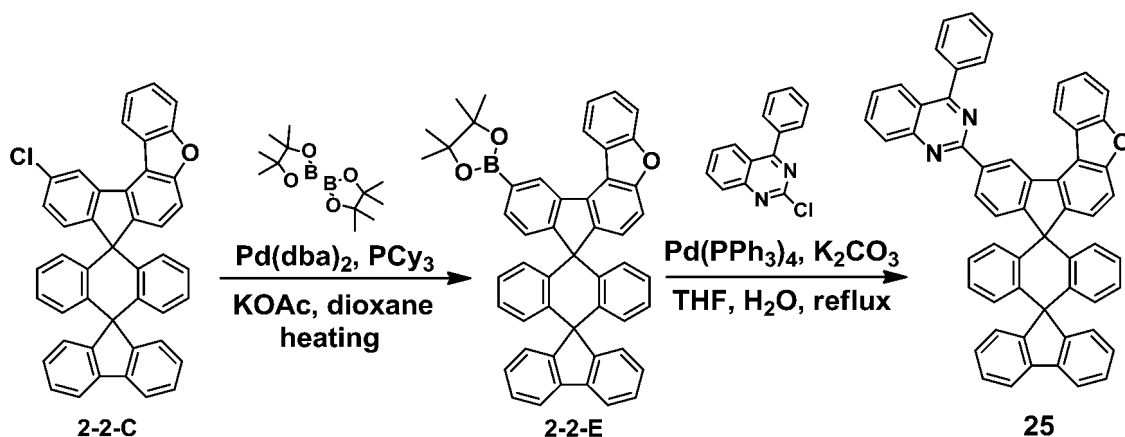
MS [M + H] ⁺ = 877 . 31

40

【 0 2 5 0 】

化合物 25 の合成

【化 7 4】



10

前記化合物 1 の合成において、化合物 1 - 1 - C の代わりに化合物 2 - 2 - C を用いて 2 - 2 - E を製造し、その後、2 - クロロ - 4 , 6 - ジフェニル - 1 , 3 , 5 - トリアジンの代わりに 2 - クロロ - 4 - フェニルキナゾリンを用いたことを除けば、同様の方法で合成して、化合物 25 を製造した。

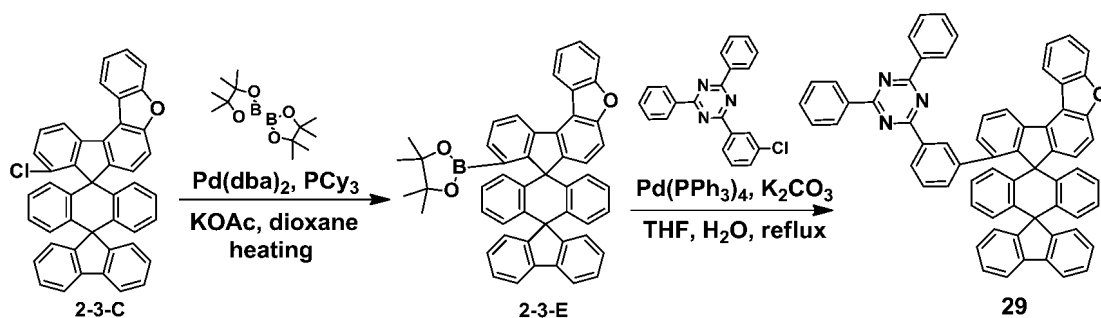
MS [M + H] ⁺ = 775 . 27

【 0 2 5 1】

化合物 29 の合成

20

【化 7 5】



30

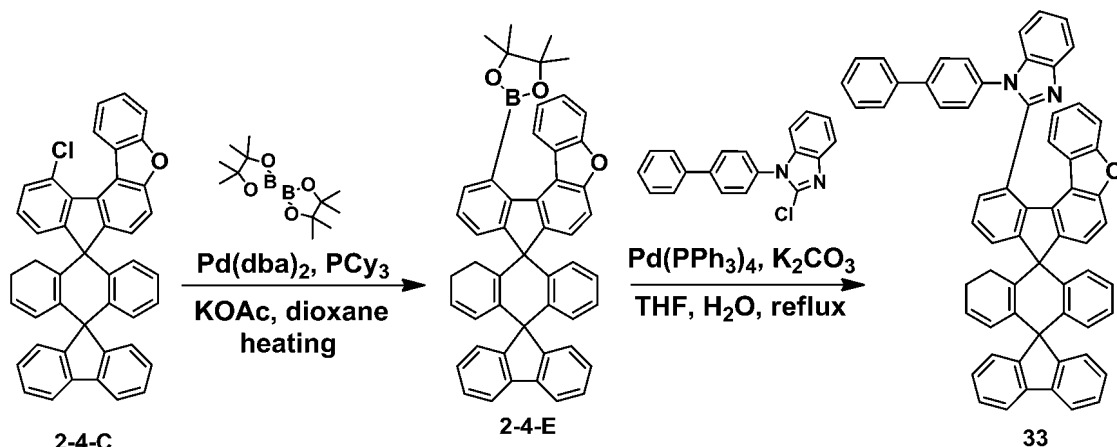
前記化合物 1 の合成において、化合物 1 - 1 - C の代わりに化合物 2 - 3 - C を用いて 2 - 3 - E を製造し、その後、2 - クロロ - 4 , 6 - ジフェニル - 1 , 3 , 5 - トリアジンの代わりに 2 - (3 - クロロフェニル) - 4 , 6 - ジフェニル - 1 , 3 , 5 - トリアジンを用いたことを除けば、同様の方法で合成して、化合物 29 を製造した。

MS [M + H] ⁺ = 775 . 27

【 0 2 5 2】

化合物 33 の合成

【化 7 6】



40

前記化合物 1 の合成において、化合物 1 - 1 - C の代わりに化合物 2 - 4 - C を用いて

50

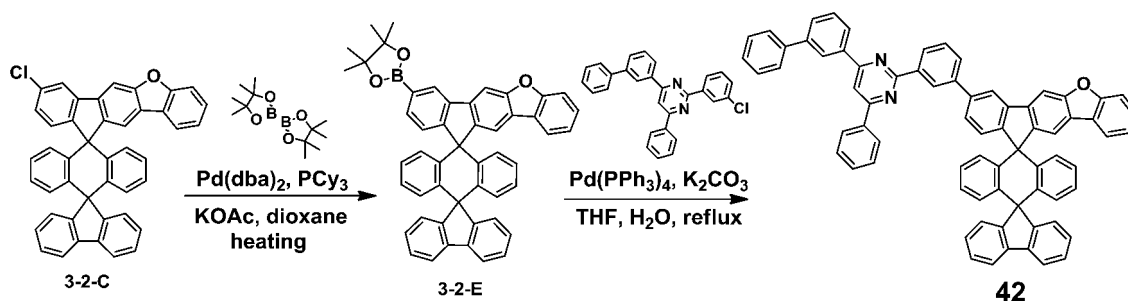
2 - 4 - E を製造し、その後、2 - クロロ - 4 , 6 - ジフェニル - 1 , 3 , 5 - トリアジンの代わりに 1 - ([1 , 1' - ビフェニル] - 4 - イル) - 2 - クロロ - 1 H - ベンゾイミダゾールを用いたことを除けば、同様の方法で合成して、化合物 3 3 を製造した。

MS [M + H] ⁺ = 8 4 1 . 3 1

【 0 2 5 3 】

化合物 4 2 の合成

【 化 7 7 】



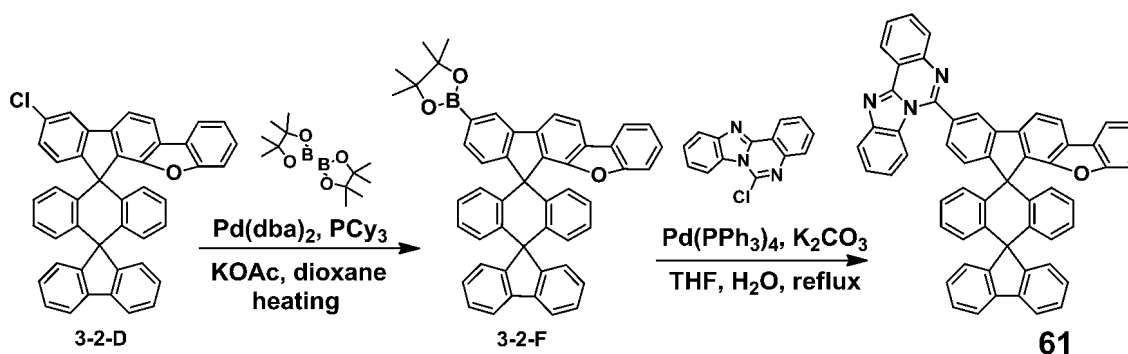
前記化合物 1 の合成において、化合物 1 - 1 - C の代わりに化合物 3 - 2 - C を用いて 3 - 2 - E を製造し、その後、2 - クロロ - 4 , 6 - ジフェニル - 1 , 3 , 5 - トリアジンの代わりに 4 - ([1 , 1' - ビフェニル] - 3 - イル) - 2 - (3 - クロロフェニル) - 6 - フェニルピリミジンを用いたことを除けば、同様の方法で合成して、化合物 4 2 を製造した。

MS [M + H] ⁺ = 9 5 3 . 3 5

【 0 2 5 4 】

化合物 6 1 の合成

【 化 7 8 】



前記化合物 1 の合成において、化合物 1 - 1 - C の代わりに化合物 3 - 2 - D を用いて 3 - 2 - F を製造し、その後、2 - クロロ - 4 , 6 - ジフェニル - 1 , 3 , 5 - トリアジンの代わりに 6 - クロロベンゾ [4 , 5] イミダゾ [1 , 2 - c] キナゾリンを用いたことを除けば、同様の方法で合成して、化合物 6 1 を製造した。

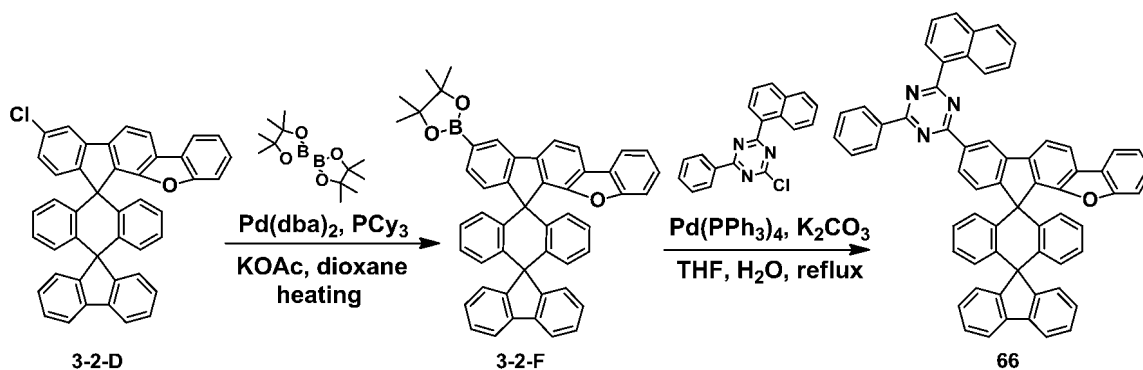
MS [M + H] ⁺ = 7 8 8 . 2 6

【 0 2 5 5 】

化合物 6 6 の合成

40

【化 7 9】



10

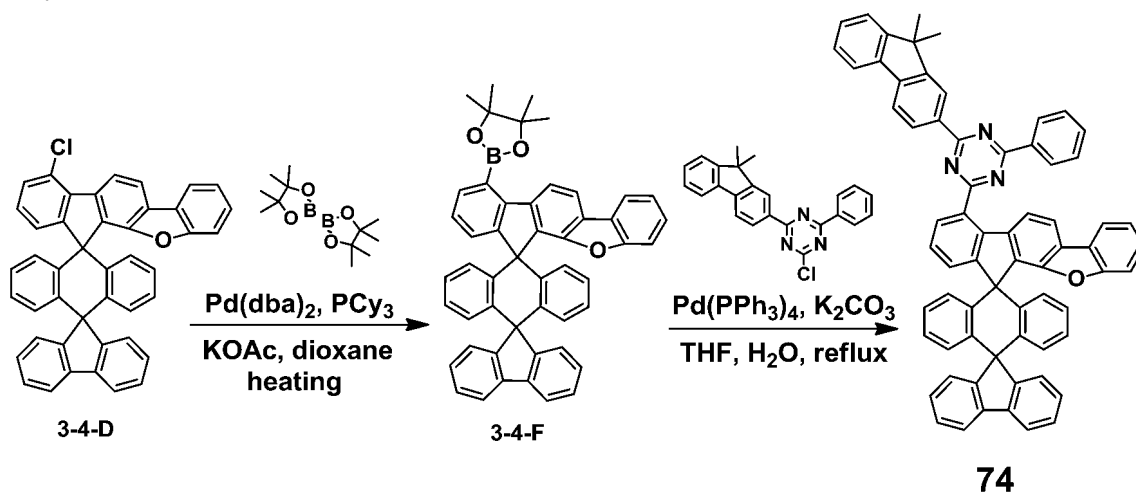
前記化合物 1 の合成において、化合物 1 - 1 - C の代わりに化合物 3 - 2 - D を用いて 3 - 2 - F を製造し、その後、2 - クロロ - 4 , 6 - ジフェニル - 1 , 3 , 5 - トリアジンの代わりに 2 - クロロ - 4 - (ナフタレン - 1 - イル) - 6 - フェニル - 1 , 3 , 5 - トリアジンを用いたことを除けば、同様の方法で合成して、化合物 6 6 を製造した。

MS [M + H] ⁺ = 8 5 2 . 2 9

【 0 2 5 6】

化合物 7 4 の合成

【化 8 0】



20

30

前記化合物 1 の合成において、化合物 1 - 1 - C の代わりに化合物 3 - 4 - D を用いて 3 - 4 - F を製造し、その後、2 - クロロ - 4 , 6 - ジフェニル - 1 , 3 , 5 - トリアジンの代わりに 2 - クロロ - 4 - (9 , 9 - ジメチル - 9 H - フルオレン - 2 - イル) - 6 - フェニル - 1 , 3 , 5 - トリアジンを用いたことを除けば、同様の方法で合成して、化合物 7 4 を製造した。

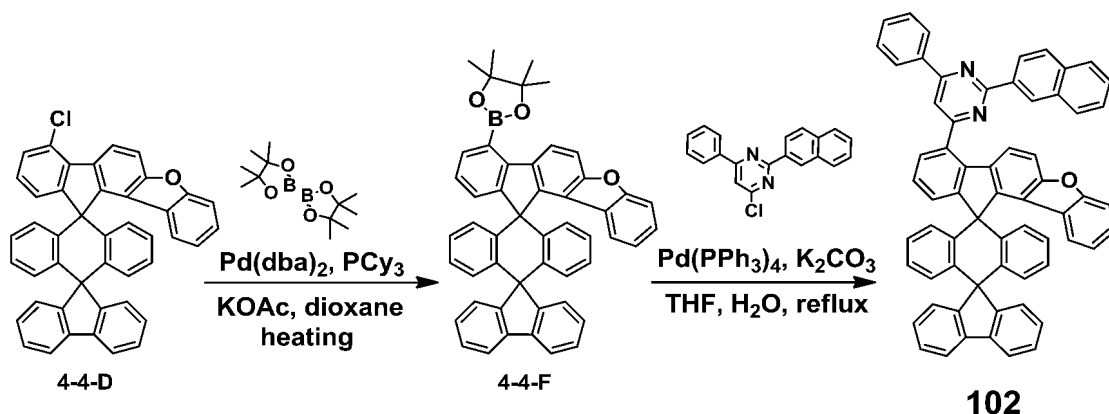
MS [M + H] ⁺ = 9 1 8 . 3 4

【 0 2 5 7】

化合物 1 0 2 の合成

40

【化 8 1】



10

前記化合物 1 の合成において、化合物 1 - 1 - C の代わりに化合物 4 - 4 - D を用いて 4 - 4 - F を製造し、その後、2 - クロロ - 4 , 6 - ジフェニル - 1 , 3 , 5 - トリアジンの代わりに 4 - クロロ - 2 - (ナフタレン - 2 - イル) - 6 - フェニルピリミジンを用いたことを除けば、同様の方法で合成して、化合物 102 を製造した。

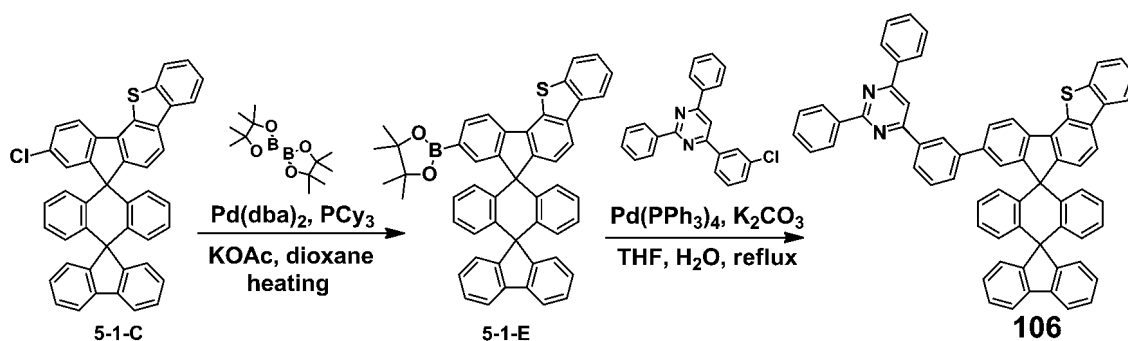
MS [M + H] ⁺ = 851 . 30

【 0 2 5 8 】

化合物 106 の合成

【化 8 2】

20



30

前記化合物 1 の合成において、化合物 1 - 1 - C の代わりに化合物 5 - 1 - C を用いて 5 - 1 - E を製造し、その後、2 - クロロ - 4 , 6 - ジフェニル - 1 , 3 , 5 - トリアジンの代わりに 4 - (3 - クロロフェニル) - 2 , 6 - ジフェニルピリミジンを用いたことを除けば、同様の方法で合成して、化合物 106 を製造した。

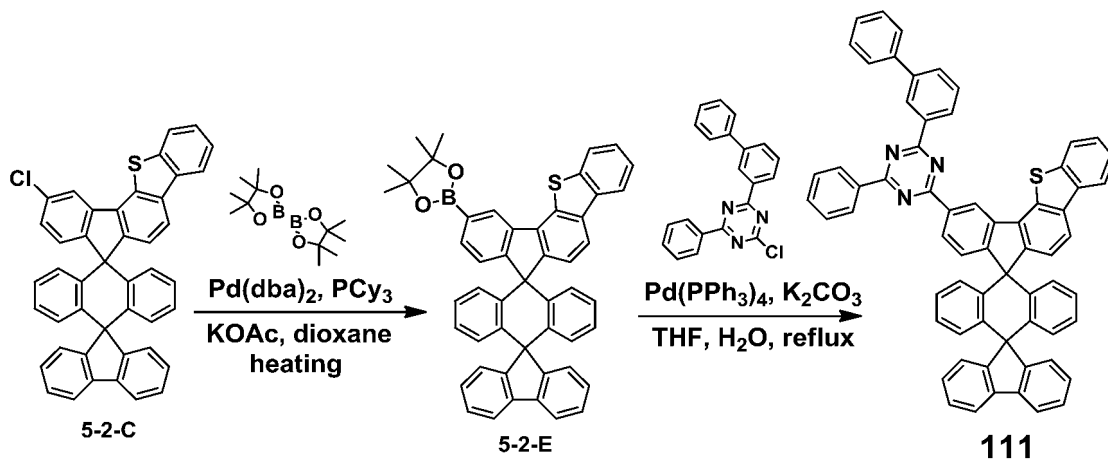
MS [M + H] ⁺ = 894 . 29

【 0 2 5 9 】

化合物 111 の合成

【化 8 3】

40



前記化合物 1 の合成において、化合物 1 - 1 - C の代わりに化合物 5 - 2 - C を用いて

50

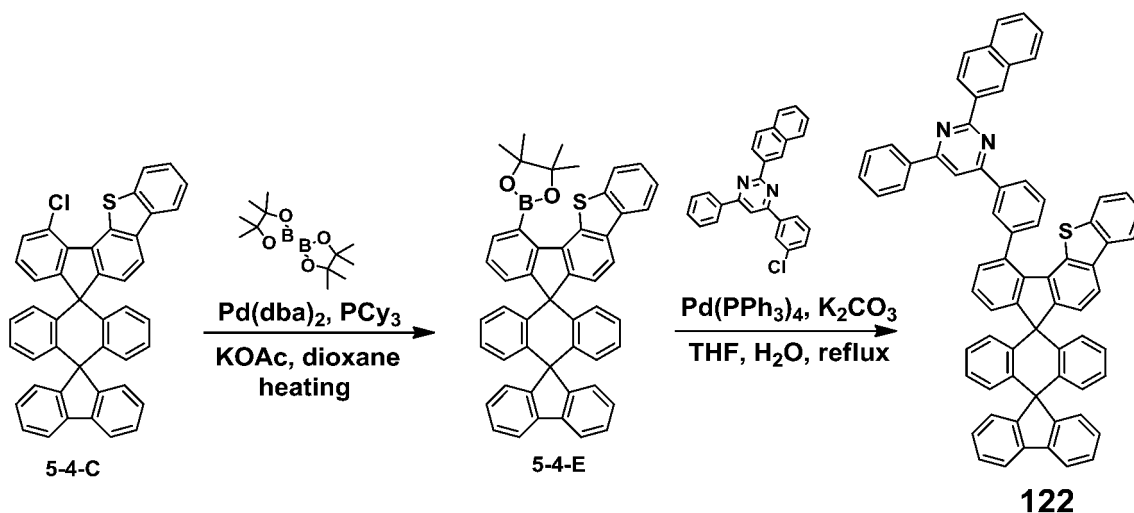
5 - 2 - Eを製造し、その後、2 - クロロ - 4 , 6 - ジフェニル - 1 , 3 , 5 - トリアジンの代わりに2 - ([1 , 1' - ビフェニル]) - 3 - イル) - 4 - クロロ - 6 - フェニル - 1 , 3 , 5 - トリアジンをを用いたことを除けば、同様の方法で合成して、化合物 1 1 を製造した。

MS [M + H] ⁺ = 894 . 29

【 0 2 6 0 】

化合物 1 2 2 の合成

【 化 8 4 】



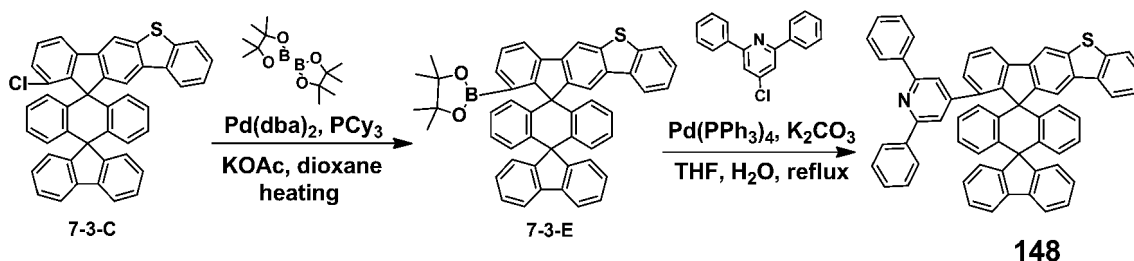
前記化合物 1 の合成において、化合物 1 - 1 - Cの代わりに化合物 5 - 4 - Cを用いて 5 - 4 - Eを製造し、その後、2 - クロロ - 4 , 6 - ジフェニル - 1 , 3 , 5 - トリアジンの代わりに4 - (3 - クロロフェニル) - 2 - (ナフタレン - 2 - イル) - 6 - フェニルピリミジンを用いたことを除けば、同様の方法で合成して、化合物 1 2 2 を製造した。

MS [M + H] ⁺ = 943 . 31

【 0 2 6 1 】

化合物 1 4 8 の合成

【 化 8 5 】



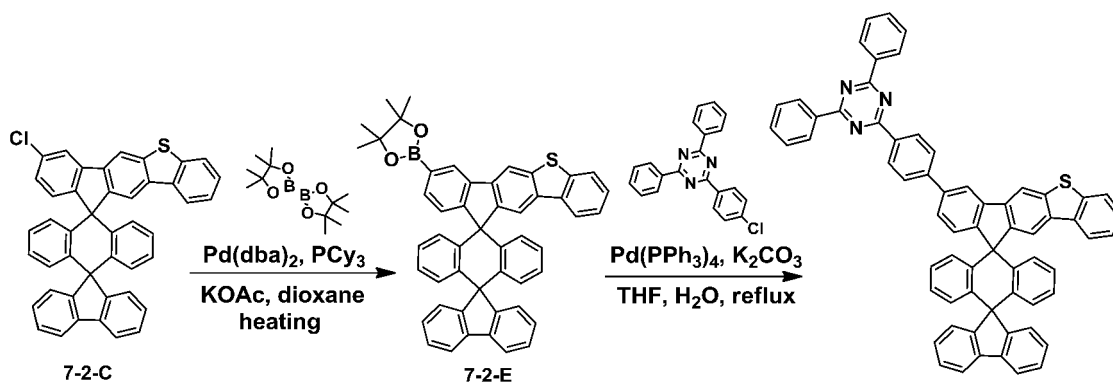
前記化合物 1 の合成において、化合物 1 - 1 - Cの代わりに化合物 7 - 3 - Cを用いて 7 - 3 - Eを製造し、その後、2 - クロロ - 4 , 6 - ジフェニル - 1 , 3 , 5 - トリアジンの代わりに4 - クロロ - 2 , 6 - ジフェニルピリジンを用いたことを除けば、同様の方法で合成して、化合物 1 4 8 を製造した。

MS [M + H] ⁺ = 816 . 26

【 0 2 6 2 】

化合物 1 5 2 の合成

【化 8 6】



10

前記化合物 1 の合成において、化合物 1 - 1 - C の代わりに化合物 7 - 2 - C を用いて 7 - 3 - E を製造し、その後、2 - クロロ - 4 , 6 - ジフェニル - 1 , 3 , 5 - トリアジンの代わりに 2 - (4 - クロロフェニル) - 4 , 6 - ジフェニル - 1 , 3 , 5 - トリアジンを用いたことを除けば、同様の方法で合成して、化合物 1 5 2 を製造した。

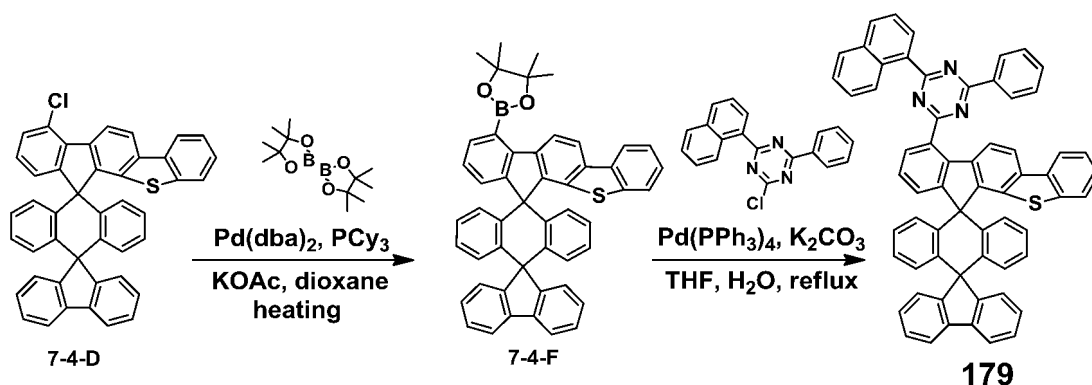
MS [M + H] ⁺ = 8 9 4 . 2 9

【 0 2 6 3 】

化合物 1 7 9 の合成

【化 8 7】

20



30

前記化合物 1 の合成において、化合物 1 - 1 - C の代わりに化合物 7 - 4 - D を用いて 7 - 4 - F を製造し、その後、2 - クロロ - 4 , 6 - ジフェニル - 1 , 3 , 5 - トリアジンの代わりに 2 - クロロ - 4 - (ナフタレン - 1 - イル) - 6 - フェニル - 1 , 3 , 5 - トリアジンを用いたことを除けば、同様の方法で合成して、化合物 1 7 9 を製造した。

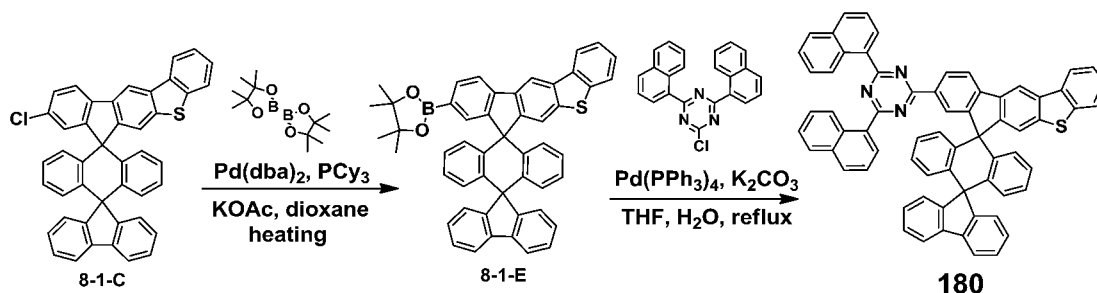
MS [M + H] ⁺ = 8 6 8 . 2 7

【 0 2 6 4 】

化合物 1 8 0 の合成

【化 8 8】

40



前記化合物 1 の合成において、化合物 1 - 1 - C の代わりに化合物 8 - 1 - C を用いて 8 - 1 - E を製造し、その後、2 - クロロ - 4 , 6 - ジフェニル - 1 , 3 , 5 - トリアジンの代わりに 2 - クロロ - 4 , 6 - ジ (ナフタレン - 1 - イル) - 1 , 3 , 5 - トリアジンを用いたことを除けば、同様の方法で合成して、化合物 1 8 0 を製造した。

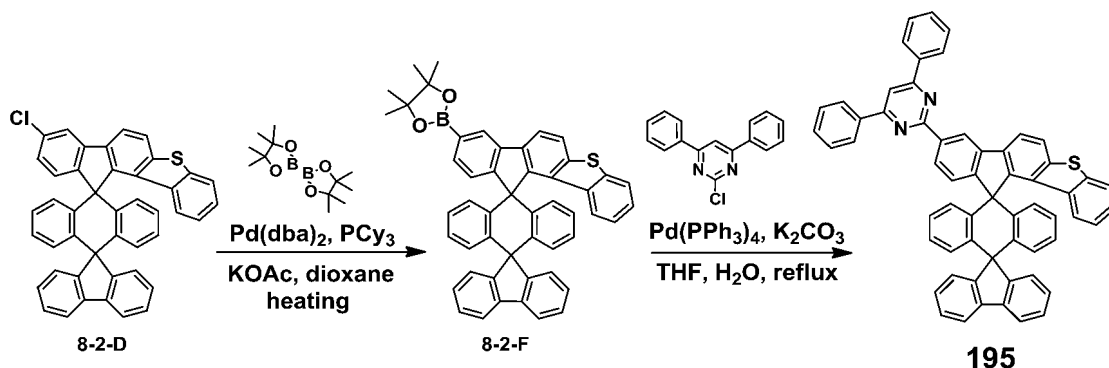
50

MS [M + H]⁺ = 918.29

【0265】

化合物195の合成

【化89】



10

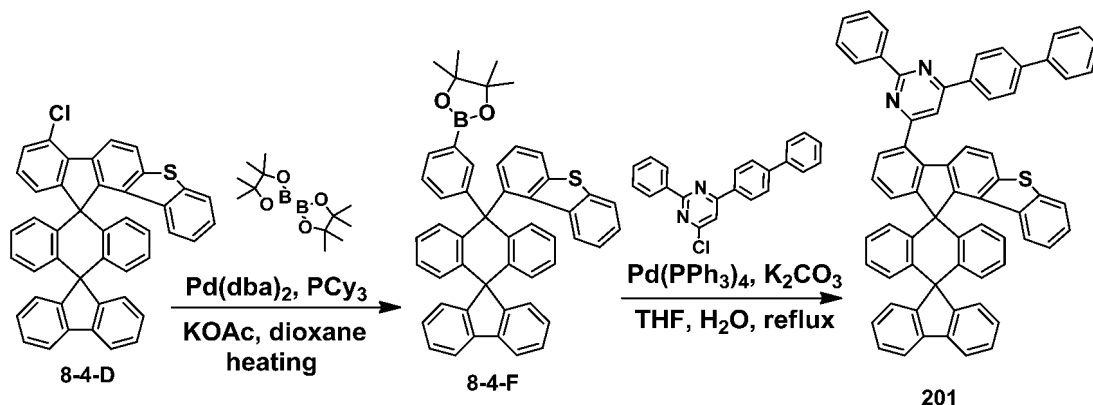
前記化合物1の合成において、化合物1-1-Cの代わりに化合物8-2-Dを用いて8-2-Fを製造し、その後、2-クロロ-4,6-ジフェニル-1,3,5-トリアジンの代わりに2-クロロ-4,6-ジフェニルピリミジンを用いたことを除けば、同様の方法で合成して、化合物195を製造した。

MS [M + H]⁺ = 817.26

【0266】

化合物201の合成

【化90】



30

前記化合物1の合成において、化合物1-1-Cの代わりに化合物8-4-Dを用いて8-4-Fを製造し、その後、2-クロロ-4,6-ジフェニル-1,3,5-トリアジンの代わりに4-([1,1'-ビフェニル]-4-イル)-6-クロロ-2-フェニルピリミジンを用いたことを除けば、同様の方法で合成して、化合物201を製造した。

MS [M + H]⁺ = 893.29

【0267】

<実施例1>

ITO(indium tin oxide)が1,000の厚さに薄膜コーティングされたガラス基板を、洗剤を溶かした蒸留水に入れて超音波洗浄した。この時、洗剤としてはフィッシャー社(Fischer Co.)製品を使用し、蒸留水としてはミリポア社(Millipore Co.)製品のフィルタ(Filter)で2次濾過した蒸留水を使用した。ITOを30分間洗浄した後、蒸留水で2回繰り返し超音波洗浄を10分間進行させた。蒸留水洗浄が終わった後、イソプロピルアルコール、アセトン、メタノールの溶剤で超音波洗浄をし乾燥させた後、プラズマ洗浄機に輸送させた。また、酸素プラズマを用いて前記基板を5分間洗浄した後、真空蒸着機に基板を輸送させた。

40

【0268】

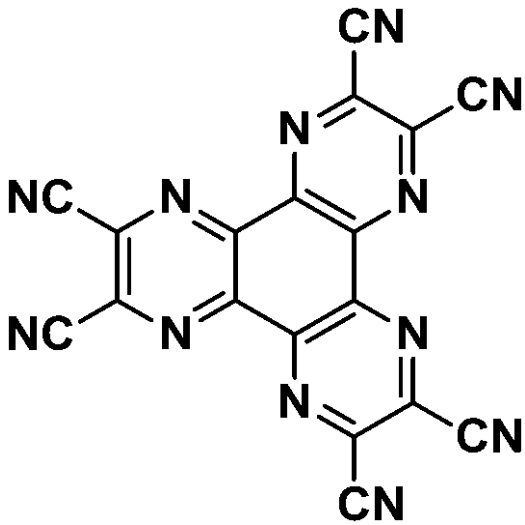
こうして用意されたITO透明電極上に、下記化学式のヘキサニトリルヘキサアザトリ

50

フェニレン (hexaazatriphenylene; HAT) を 500 の厚さに熱真空蒸着して、正孔注入層を形成した。

[HAT]

【化 9 1】



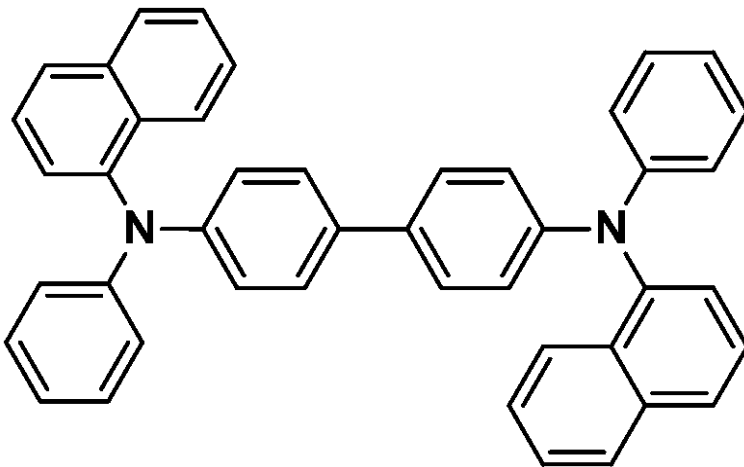
10

【0269】

前記正孔注入層上に、正孔を輸送する物質である下記化合物 4 - 4' - ビス [N - (1 - ナフチル) - N - フェニルアミノ] ビフェニル (NPB) (400) を真空蒸着して、正孔輸送層を形成した。

[NPB]

【化 9 2】



30

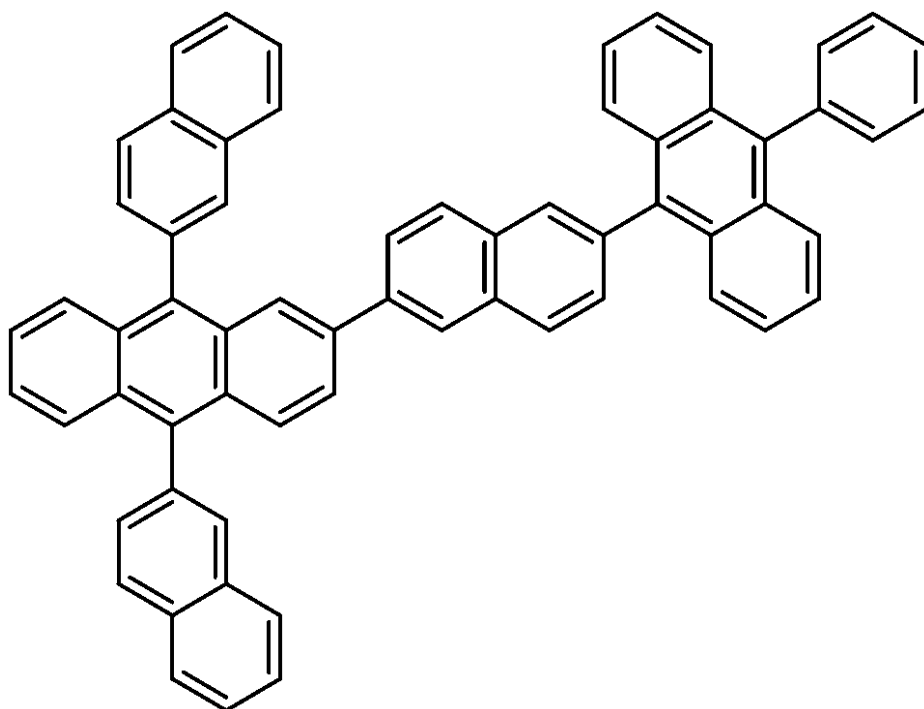
【0270】

次に、前記正孔輸送層上に、膜厚さ 300 として以下のような BH と BD を 25 : 1 の重量比で真空蒸着して、発光層を形成した。

[BH]

40

【化 9 3】

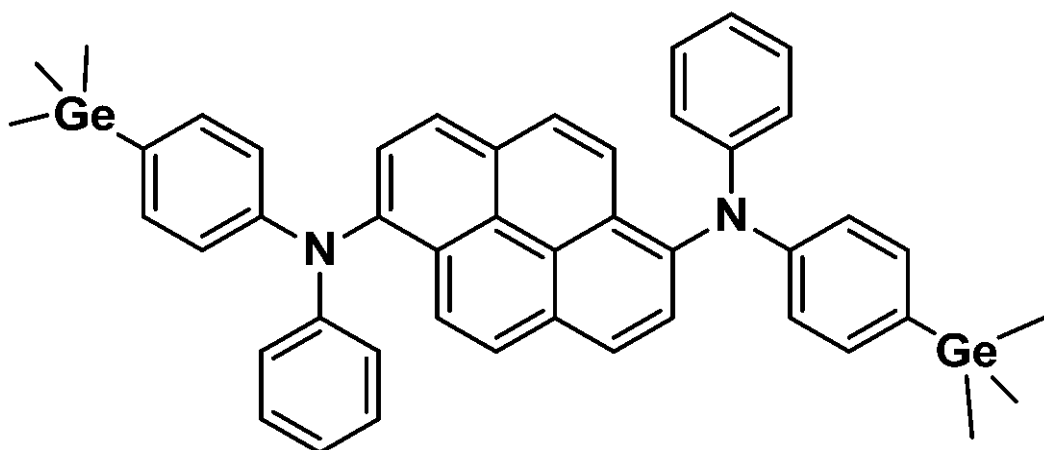


10

20

[B D]

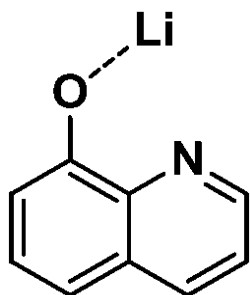
【化 9 4】



30

[L i Q]

【化 9 5】



40

【 0 2 7 1 】

前記発光層上に、前記製造例で製造した化合物 1 と前記化合物 L i Q (L i t h i u m Quinol a t e) を 1 : 1 の重量比で真空蒸着して、 3 0 0 の厚さに電子注入および輸送層を形成した。前記電子注入および輸送層上に、順次に、 1 2 の厚さにリチウムフルオライド (L i F) と 2 , 0 0 0 の厚さにアルミニウムを蒸着して、陰極を形成

50

した。

【0272】

前記過程で、有機物の蒸着速度は $0.4 \sim 0.7$ / sec を維持し、陰極のリチウムフルオライドは 0.3 / sec、アルミニウムは 2 / sec の蒸着速度を維持し、蒸着時の真空度は $2 \times 10^{-7} \sim 5 \times 10^{-6}$ torr を維持して、有機発光素子を作製した。

【0273】

< 実施例 2 >

前記実施例 1 における化合物 1 の代わりに前記化合物 6 を用いたことを除けば、実施例 1 と同様の方法で有機発光素子を作製した。

10

【0274】

< 実施例 3 >

前記実施例 1 における化合物 1 の代わりに前記化合物 11 を用いたことを除けば、実施例 1 と同様の方法で有機発光素子を作製した。

【0275】

< 実施例 4 >

前記実施例 1 における化合物 1 の代わりに前記化合物 20 を用いたことを除けば、実施例 1 と同様の方法で有機発光素子を作製した。

【0276】

< 実施例 5 >

前記実施例 1 における化合物 1 の代わりに前記化合物 23 を用いたことを除けば、実施例 1 と同様の方法で有機発光素子を作製した。

20

【0277】

< 実施例 6 >

前記実施例 1 における化合物 1 の代わりに前記化合物 25 を用いたことを除けば、実施例 1 と同様の方法で有機発光素子を作製した。

【0278】

< 実施例 7 >

前記実施例 1 における化合物 1 の代わりに前記化合物 29 を用いたことを除けば、実施例 1 と同様の方法で有機発光素子を作製した。

30

【0279】

< 実施例 8 >

前記実施例 1 における化合物 1 の代わりに前記化合物 33 を用いたことを除けば、実施例 1 と同様の方法で有機発光素子を作製した。

【0280】

< 実施例 9 >

前記実施例 1 における化合物 1 の代わりに前記化合物 42 を用いたことを除けば、実施例 1 と同様の方法で有機発光素子を作製した。

【0281】

< 実施例 10 >

前記実施例 1 における化合物 1 の代わりに前記化合物 61 を用いたことを除けば、実施例 1 と同様の方法で有機発光素子を作製した。

40

【0282】

< 実施例 11 >

前記実施例 1 における化合物 1 の代わりに前記化合物 66 を用いたことを除けば、実施例 1 と同様の方法で有機発光素子を作製した。

【0283】

< 実施例 12 >

前記実施例 1 における化合物 1 の代わりに前記化合物 74 を用いたことを除けば、実施例 1 と同様の方法で有機発光素子を作製した。

50

【 0 2 8 4 】

< 実施例 1 3 >

前記実施例 1 における化合物 1 の代わりに前記化合物 1 0 2 を用いたことを除けば、実施例 1 と同様の方法で有機発光素子を作製した。

【 0 2 8 5 】

< 実施例 1 4 >

前記実施例 1 における化合物 1 の代わりに前記化合物 1 0 6 を用いたことを除けば、実施例 1 と同様の方法で有機発光素子を作製した。

【 0 2 8 6 】

< 実施例 1 5 >

前記実施例 1 における化合物 1 の代わりに前記化合物 1 1 1 を用いたことを除けば、実施例 1 と同様の方法で有機発光素子を作製した。

10

【 0 2 8 7 】

< 実施例 1 6 >

前記実施例 1 における化合物 1 の代わりに前記化合物 1 2 2 を用いたことを除けば、実施例 1 と同様の方法で有機発光素子を作製した。

【 0 2 8 8 】

< 実施例 1 7 >

前記実施例 1 における化合物 1 の代わりに前記化合物 1 4 8 を用いたことを除けば、実施例 1 と同様の方法で有機発光素子を作製した。

20

【 0 2 8 9 】

< 実施例 1 8 >

前記実施例 1 における化合物 1 の代わりに前記化合物 1 5 2 を用いたことを除けば、実施例 1 と同様の方法で有機発光素子を作製した。

【 0 2 9 0 】

< 実施例 1 9 >

前記実施例 1 における化合物 1 の代わりに前記化合物 1 7 9 を用いたことを除けば、実施例 1 と同様の方法で有機発光素子を作製した。

【 0 2 9 1 】

< 実施例 2 0 >

前記実施例 1 における化合物 1 の代わりに前記化合物 1 8 0 を用いたことを除けば、実施例 1 と同様の方法で有機発光素子を作製した。

30

【 0 2 9 2 】

< 実施例 2 1 >

前記実施例 1 における化合物 1 の代わりに前記化合物 1 9 5 を用いたことを除けば、実施例 1 と同様の方法で有機発光素子を作製した。

【 0 2 9 3 】

< 実施例 2 2 >

前記実施例 1 における化合物 1 の代わりに前記化合物 2 0 1 を用いたことを除けば、実施例 1 と同様の方法で有機発光素子を作製した。

40

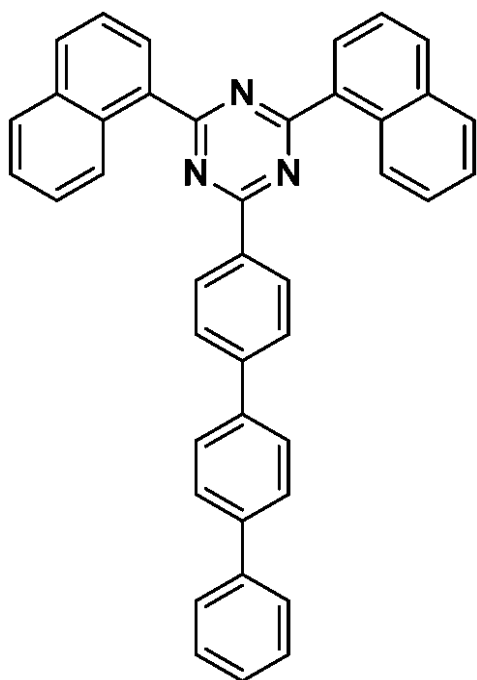
【 0 2 9 4 】

< 比較例 1 >

前記実施例 1 における化合物 1 の代わりに下記 E T 1 の化合物を用いたことを除けば、前記実施例 1 と同様の方法で有機発光素子を作製した。

[E T 1]

【化 9 6】



10

【 0 2 9 5】

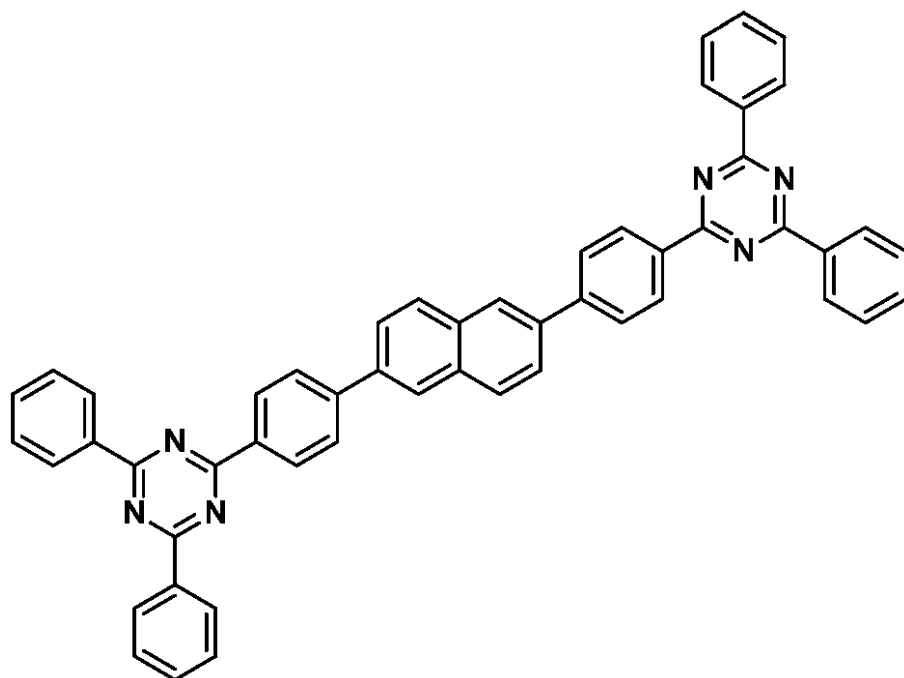
20

< 比較例 2 >

前記実施例 1 における化合物 1 の代わりに下記 E T 2 の化合物を用いたことを除けば、前記実施例 1 と同様の方法で有機発光素子を作製した。

[E T 2]

【化 9 7】



30

40

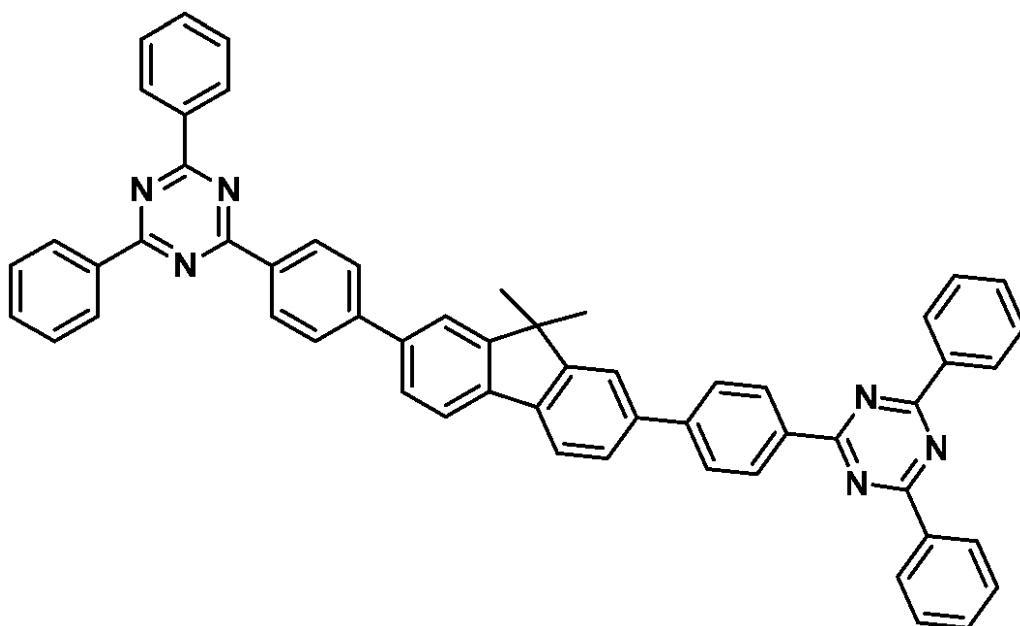
【 0 2 9 6】

< 比較例 3 >

前記実施例 1 における化合物 1 の代わりに下記 E T 3 の化合物を用いたことを除けば、前記実施例 1 と同様の方法で有機発光素子を作製した。

[E T 3]

【化 9 8】



10

【 0 2 9 7】

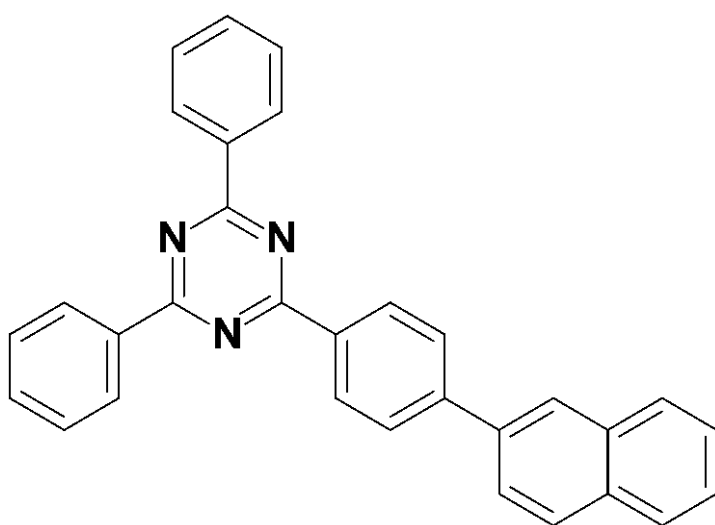
< 比較例 4 >

20

前記実施例 1 における化合物 1 の代わりに下記 E T 4 の化合物を用いたことを除けば、前記実施例 1 と同様の方法で有機発光素子を作製した。

[E T 4]

【化 9 9】



30

【 0 2 9 8】

実施例 1 ~ 2 2 および比較例 1 ~ 4 により作製された有機発光素子に電流を印加した時、表 1 の結果を得た。

40

【表 1】

	電子輸送層 物質	電圧 (V@10mA/cm ²)	効率 (cd/A@10mA/cm ²)	色座標 (x, y)
実施例 1	化合物 1	3.98	4.23	(0.138, 0.127)
実施例 2	化合物 6	3.75	5.15	(0.139, 0.122)
実施例 3	化合物 11	3.86	5.04	(0.138, 0.126)
実施例 4	化合物 20	3.85	5.51	(0.138, 0.127)
実施例 5	化合物 23	3.77	5.22	(0.137, 0.125)
実施例 6	化合物 25	3.83	5.18	(0.136, 0.127)
実施例 7	化合物 29	3.82	5.14	(0.136, 0.127)
実施例 8	化合物 33	3.84	5.27	(0.136, 0.125)
実施例 9	化合物 42	3.83	5.52	(0.138, 0.127)
実施例 10	化合物 61	3.74	5.33	(0.139, 0.122)
実施例 11	化合物 66	3.85	5.12	(0.138, 0.126)
実施例 12	化合物 74	3.83	5.35	(0.138, 0.127)
実施例 13	化合物 102	3.85	5.30	(0.137, 0.125)
実施例 14	化合物 106	3.83	5.52	(0.136, 0.127)
実施例 15	化合物 111	3.71	5.33	(0.136, 0.127)
実施例 16	化合物 122	3.73	5.11	(0.136, 0.125)
実施例 17	化合物 148	3.84	5.22	(0.138, 0.127)
実施例 18	化合物 152	3.85	5.31	(0.139, 0.122)
実施例 19	化合物 179	3.73	5.34	(0.138, 0.126)
実施例 20	化合物 180	3.74	5.12	(0.138, 0.127)
実施例 21	化合物 195	3.82	5.23	(0.137, 0.125)
実施例 22	化合物 201	3.81	5.31	(0.136, 0.127)
比較例 1	ET1	4.02	3.95	(0.136, 0.127)
比較例 2	ET2	4.13	3.87	(0.136, 0.125)
比較例 3	ET3	4.05	4.01	(0.135, 0.125)
比較例 4	ET4	4.07	3.89	(0.135, 0.130)

10

20

【0299】

前記合成された化合物は、前記化学式 1 で表されているように、スピロ構造をコア構造とし、多様な置換体を導入することにより、有機発光素子で使用される有機物層としての使用に適した特性を有することができる。

30

【符号の説明】

【0300】

- 1 : 基板
- 2 : 陽極
- 3 : 発光層
- 4 : 陰極
- 5 : 正孔注入層
- 6 : 正孔輸送層
- 7 : 発光層
- 8 : 電子輸送層
- 9 : 前記化学式 1 の化合物を含む有機物層

40

【 図 1 】

[図1]

4
9
3
2
1

【 図 2 】

[図2]

4
8
7
6
5
2
1

【 国際調査報告 】

INTERNATIONAL SEARCH REPORT

International application No.

PCT/KR2016/011233

A. CLASSIFICATION OF SUBJECT MATTER <i>C09K 11/06(2006.01)i, H01L 51/50(2006.01)i, C07C 13/72(2006.01)i, H01L 51/00(2006.01)i</i> 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) C09K 11/06; H01L 51/54; C07C 13/72; H01L 51/50; C07D 307/94; H01L 51/00 Documentation searched other than minimum documentation to the extent that such documents are included in the fields searched Korean Utility models and applications for Utility models: IPC as above Japanese Utility models and applications for Utility models: IPC as above Electronic data base consulted during the international search (name of data base and, where practicable, search terms used) eKOMPASS (KIPO internal), STN (Registry, Caplus), Google & Keywords: light-emitting efficiency, driving voltage, Dispiro [9H-fluorene-9,7'(12'H)-anthra[2,3-b]benzofuran-12',9'-(9H)fluorene]		
C. DOCUMENTS CONSIDERED TO BE RELEVANT		
Category*	Citation of document, with indication, where appropriate, of the relevant passages	Relevant to claim No.
X	WO 2012-141229 A1 (CANON KABUSHIKI KAISHA) 18 October 2012 See claim 1; and paragraphs [0034]-[0036], [0057], [0095]-[0096].	1,11-13
Y		14-18
A		2-10
Y	KR 10-2015-0010016 A (ROHM AND HAAS ELECTRONIC MATERIALS KOREA LTD.) 28 January 2015 See claims 1, 7-8; and paragraph [0233].	14-18
A	WO 02-088274 A1 (LG CHEM, LTD.) 07 November 2002 See claim 10.	1-18
A	KR 10-2014-0118849 A (SEMICONDUCTOR ENERGY LABORATORY CO., LTD.) 08 October 2014 See claims 9-11.	1-18
A	JP 2012-240951 A (CANON INC.) 10 December 2012 See claim 1.	1-18
☐ 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 20 JANUARY 2017 (20.01.2017)		Date of mailing of the international search report 20 JANUARY 2017 (20.01.2017)
Name and mailing address of the ISA/KR  Korean Intellectual Property Office Government Complex-Daejeon, 189 Seonsa-ro, Daejeon 302-701, Republic of Korea Facsimile No. 82-42-472-7140		Authorized officer Telephone No.

INTERNATIONAL SEARCH REPORT
Information on patent family members

International application No.

PCT/KR2016/011233

Patent document cited in search report	Publication date	Patent family member	Publication date
WO 2012-141229 A1	18/10/2012	JP 2012-229195 A	22/11/2012
		JP 5868195 B2	24/02/2016
		US 2014-0027757 A1	30/01/2014
KR 10-2015-0010016 A	28/01/2015	CN 105359292 A	24/02/2016
		WO 2015-009076 A1	22/01/2015
WO 02-088274 A1	07/11/2002	AT 348136 T	15/01/2007
		AT 466828 T	15/05/2010
		CN 100488923 C	20/05/2009
		CN 1462303 A	17/12/2003
		DE 60216681 T2	11/10/2007
		EP 1294823 A1	26/03/2003
		EP 1294823 B1	13/12/2006
		EP 1645552 A1	12/04/2006
		EP 1645552 B1	05/05/2010
		ES 2274003 T3	16/05/2007
		JP 2004-529937 A	30/09/2004
		JP 3971310 B2	05/09/2007
		KR 10-0422914 B1	12/03/2004
		KR 10-0428642 B1	27/04/2004
		KR 10-2002-0083614 A	04/11/2002
		KR 10-2002-0083615 A	04/11/2002
		TW 591096 B	11/06/2004
		US 2004-0023060 A1	05/02/2004
		US 2004-0170863 A1	02/09/2004
		US 6984462 B2	10/01/2006
		US 6998487 B2	14/02/2006
KR 10-2014-0118849 A	08/10/2014	JP 2014-209603 A	06/11/2014
		US 2016-0163991 A1	09/06/2016
		US 9478749 B2	25/10/2016
JP 2012-240951 A	10/12/2012	JP 5721533 B2	20/05/2015
		US 2014-0103322 A1	17/04/2014
		WO 2012-157440 A1	22/11/2012

국제조사보고서		국제출원번호 PCT/KR2016/011233
A. 발명이 속하는 기술분류(국제특허분류(IPC)) C09K 11/06(2006.01)i, H01L 51/50(2006.01)i, C07C 13/72(2006.01)i, H01L 51/00(2006.01)i		
B. 조사된 분야 조사된 최소문헌(국제특허분류를 기재) C09K 11/06; H01L 51/54; C07C 13/72; H01L 51/50; C07D 307/94; H01L 51/00 조사된 기술분야에 속하는 최소문헌 이외의 문헌 한국등록실용신안공보 및 한국공개실용신안공보: 조사된 최소문헌란에 기재된 IPC 일본등록실용신안공보 및 일본공개실용신안공보: 조사된 최소문헌란에 기재된 IPC		
국제조사에 이용된 전산 데이터베이스(데이터베이스의 명칭 및 검색어(해당하는 경우)) eKOMPASS(특허청 내부 검색시스템), SIN (Registry, Caplus), Google & 키워드: 발광효율, 구동전압, Dispiro[9H-fluorene-9,7'(12'H)-anthra[2,3-b]benzofuran-12',9' '-[9H]fluorene]		
C. 관련 문헌		
카테고리*	인용문헌명 및 관련 구절(해당하는 경우)의 기재	관련 청구항
X	WO 2012-141229 A1 (CANON KABUSHIKI KAISHA) 2012.10.18 청구항 1; 및 단락 [0034]-[0036], [0057], [0095]-[0096] 참조.	1,11-13
Y		14-18
A		2-10
Y	KR 10-2015-0010016 A (콤엔드하스전자재료코리아유한회사) 2015.01.28 청구항 1, 7-8; 및 단락 [0233] 참조.	14-18
A	WO 02-088274 A1 (LG CHEM, LTD.) 2002.11.07 청구항 10 참조.	1-18
A	KR 10-2014-0118849 A (가부시키가이샤 한도오따이 에네루기 켄큐쇼) 2014.10.08 청구항 9-11 참조.	1-18
A	JP 2012-240951 A (CANON INC.) 2012.12.10 청구항 1 참조.	1-18
☐ 추가 문헌이 C(계속)에 기재되어 있습니다. ☒ 대응특허에 관한 별지를 참조하십시오.		
* 인용된 문헌의 특별 카테고리: "A" 특별히 관련이 없는 것으로 보이는 일반적인 기술수준을 정의한 문헌 "E" 국제출원일보다 빠른 출원일 또는 우선일을 가지나 국제출원일 이후에 공개된 선출원 또는 특허 문헌 "L" 우선권 주장에 의문을 제기하는 문헌 또는 다른 인용문헌의 공개일 또는 다른 특별한 이유(이유를 명시)를 밝히기 위하여 인용된 문헌 "O" 구두 개시, 사용, 전시 또는 기타 수단을 언급하고 있는 문헌 "P" 우선일 이후에 공개되었으나 국제출원일 이전에 공개된 문헌 "T" 국제출원일 또는 우선일 후에 공개된 문헌으로, 출원과 상충하지 않으며 발명의 기초가 되는 원리나 이론을 이해하기 위해 인용된 문헌 "X" 특별한 관련이 있는 문헌. 해당 문헌 하나만으로 청구된 발명의 신규성 또는 진보성이 없는 것으로 본다. "Y" 특별한 관련이 있는 문헌. 해당 문헌이 하나 이상의 다른 문헌과 조합하는 경우로 그 조합이 당업자에게 자명한 경우 청구된 발명은 진보성이 없는 것으로 본다. "&" 동일한 대응특허문헌에 속하는 문헌		
국제조사의 실제 완료일 2017년 01월 20일 (20.01.2017)		국제조사보고서 발송일 2017년 01월 20일 (20.01.2017)
ISA/KR의 명칭 및 우편주소 대한민국 특허청 (35208) 대전광역시 서구 청사로 189, 4동 (둔산동, 정부대전청사) 팩스 번호 +82-42-481-8578		심사관 박정민 전화번호 +82-42-481-3516

서식 PCT/ISA/210 (두 번째 용지) (2015년 1월)

국제조사보고서
대응특허에 관한 정보

국제출원번호
PCT/KR2016/011233

국제조사보고서에서 인용된 특허문헌	공개일	대응특허문헌	공개일
WO 2012-141229 A1	2012/10/18	JP 2012-229195 A JP 5868195 B2 US 2014-0027757 A1	2012/11/22 2016/02/24 2014/01/30
KR 10-2015-0010016 A	2015/01/28	CN 105359292 A WO 2015-009076 A1	2016/02/24 2015/01/22
WO 02-088274 A1	2002/11/07	AT 348136 T AT 466828 T CN 100488923 C CN 1462303 A DE 60216681 T2 EP 1294823 A1 EP 1294823 B1 EP 1645552 A1 EP 1645552 B1 ES 2274003 T3 JP 2004-529937 A JP 3971310 B2 KR 10-0422914 B1 KR 10-0428642 B1 KR 10-2002-0083614 A KR 10-2002-0083615 A TW 591096 B US 2004-0023060 A1 US 2004-0170863 A1 US 6984462 B2 US 6998487 B2	2007/01/15 2010/05/15 2009/05/20 2003/12/17 2007/10/11 2003/03/26 2006/12/13 2006/04/12 2010/05/05 2007/05/16 2004/09/30 2007/09/05 2004/03/12 2004/04/27 2002/11/04 2002/11/04 2004/06/11 2004/02/05 2004/09/02 2006/01/10 2006/02/14
KR 10-2014-0118849 A	2014/10/08	JP 2014-209603 A US 2016-0163991 A1 US 9478749 B2	2014/11/06 2016/06/09 2016/10/25
JP 2012-240951 A	2012/12/10	JP 5721533 B2 US 2014-0103322 A1 WO 2012-157440 A1	2015/05/20 2014/04/17 2012/11/22

서식 PCT/ISA/210 (대응특허 추가용지) (2015년 1월)

フロントページの続き

(51) Int.Cl.		F I		テーマコード (参考)
C 0 7 D 409/04	(2006.01)	C 0 7 D	409/10	
C 0 9 K 11/06	(2006.01)	C 0 7 D	409/04	
		C 0 9 K	11/06	6 9 0
		C 0 9 K	11/06	6 6 0

(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 スー、サン ドウク

大韓民国・ソウル・ヨンドウンポ - グ・ヨイ - デロ・1 2 8 エルジー・ケム・リミテッド内

F ターム(参考) 3K107 AA01 CC04 CC12 CC21 DD53 DD59 DD68 DD69 DD74 DD76
DD78 DD80
4C050 AA01 AA07 BB05 CC08 EE03 FF10 GG01 HH02
4C063 AA01 BB01 BB06 CC76 CC94 DD12 DD26 DD29 DD31 DD43
EE10

专利名称(译)	双螺旋型化合物和含有它的有机发光器件		
公开(公告)号	JP2018537843A	公开(公告)日	2018-12-20
申请号	JP2018515209	申请日	2016-10-07
[标]申请(专利权)人(译)	乐金化学股份有限公司		
申请(专利权)人(译)	Eruji化学有限公司		
[标]发明人	ハジエセウン ホンスンキル スーサンドウク		
发明人	ハ、ジエ セウン ホン、スン キル スー、サン ドウク		
IPC分类号	H01L51/50 C07D405/04 C07D405/10 C07D487/04 C07D409/10 C07D409/04 C09K11/06		
CPC分类号	C07D405/04 C07D405/10 C07D409/04 C07D409/10 C07D487/04 C07C13/72 C09K11/06 H01L51/0067 H01L51/0072 H01L51/0073 H01L51/0074 H01L51/0077 H01L51/5076 H01L51/00 H01L51/50 C09K2211/1003 C09K2211/1011 H01L51/0052 H01L51/5012 H01L51/5072 H01L51/5092 C09K2211/1018 H01L51/0058 H01L51/5016		
FI分类号	H05B33/22.B H05B33/14.B C07D405/04 C07D405/10 C07D487/04.144 C07D409/10 C07D409/04 C09K11/06.690 C09K11/06.660		
F-TERM分类号	3K107/AA01 3K107/CC04 3K107/CC12 3K107/CC21 3K107/DD53 3K107/DD59 3K107/DD68 3K107/DD69 3K107/DD74 3K107/DD76 3K107/DD78 3K107/DD80 4C050/AA01 4C050/AA07 4C050/BB05 4C050/CC08 4C050/EE03 4C050/FF10 4C050/GG01 4C050/HH02 4C063/AA01 4C063/BB01 4C063/BB06 4C063/CC76 4C063/CC94 4C063/DD12 4C063/DD26 4C063/DD29 4C063/DD31 4C063/DD43 4C063/EE10		
优先权	1020150141233 2015-10-07 KR		
其他公开文献	JP6601645B2		
外部链接	Espacenet		

摘要(译)

本说明书提供了双螺旋型化合物和包括该双螺旋型化合物的有机发光装置。

