

(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2014-523877  
(P2014-523877A)

(43) 公表日 平成26年9月18日(2014.9.18)

(51) Int.Cl.	F I	テーマコード (参考)
<b>C07F</b> 9/6561 (2006.01)	C07F 9/6561 C S P	3 K 1 0 7
<b>H01L</b> 51/50 (2006.01)	H05B 33/14 B	4 H 0 3 9
<b>C09K</b> 11/06 (2006.01)	H05B 33/22 B	4 H 0 5 0
<b>C07B</b> 61/00 (2006.01)	H05B 33/22 D	
	C09K 11/06 6 9 0	
審査請求 有 予備審査請求 未請求 (全 39 頁) 最終頁に続く		

(21) 出願番号 特願2014-515722 (P2014-515722)  
 (86) (22) 出願日 平成24年6月12日 (2012.6.12)  
 (85) 翻訳文提出日 平成26年1月9日 (2014.1.9)  
 (86) 国際出願番号 PCT/KR2012/004629  
 (87) 国際公開番号 W02012/173371  
 (87) 国際公開日 平成24年12月20日 (2012.12.20)  
 (31) 優先権主張番号 10-2011-0056777  
 (32) 優先日 平成23年6月13日 (2011.6.13)  
 (33) 優先権主張国 韓国 (KR)

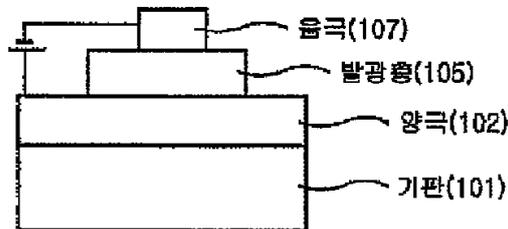
(71) 出願人 500239823  
 エルジー・ケム・リミテッド  
 大韓民国・ソウル・ヨンドゥンポグ・ヨ  
 イーデロ・128  
 (74) 代理人 100110364  
 弁理士 実広 信哉  
 (74) 代理人 100122161  
 弁理士 渡部 崇  
 (72) 発明者 チャンホワン・シン  
 大韓民国・テジョン・302-210・ソ  
 ーグ・ボックスドン・(番地なし)・ジュ  
 ンファン・エス・クラス・チョロクマウル・  
 アパート・511-205

最終頁に続く

(54) 【発明の名称】 新規な化合物及びこれを用いた有機電子素子

(57) 【要約】

本発明は新規な化合物及びこれを用いた有機電子素子を提供する。本発明に係る化合物は、有機発光素子をはじめとする有機電子素子において正孔注入、正孔輸送、電子注入及び輸送、発光物質の役割を果たすことができ、本発明に係る有機電子素子は効率、駆動電圧及び寿命面において優れた特性を示す。



101 ... substrate  
 102 ... anode  
 105 ... light-emitting layer  
 107 ... cathode

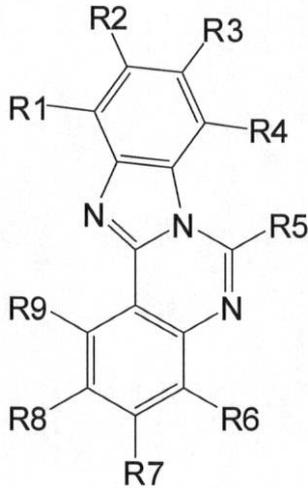
## 【特許請求の範囲】

## 【請求項 1】

下記化学式 1 で表される化合物：

## 【化 1】

[化 1]



10

20

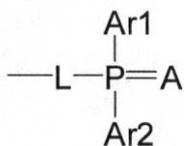
式中、

R 1 ないし R 9 のうち少なくとも一つは下記化学式 2 で表され、残りは、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；置換もしくは非置換のシクロアルキル基；置換もしくは非置換のアルコキシ基；置換もしくは非置換のアリールオキシ基；置換もしくは非置換のアルキルチオキシ基；置換もしくは非置換のアリールチオキシ基；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アリールアミン基；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基；置換もしくは非置換のフルオレニル基；置換もしくは非置換のカルバゾール基；または N、O、S 原子のうち一つ以上を含む置換もしくは非置換の複素環基であり；

30

## 【化 2】

[化 2]



40

式中、

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 N、O、S 原子のうち一つ以上を含む置換もしくは非置換のヘテロアリーレン基であり、

Ar 1 及び Ar 2 は、それぞれ独立して置換もしくは非置換のアリール基；または N、O、S 原子のうち一つ以上を含む置換もしくは非置換の複素環基であり；

A は O、S または Se である。

## 【請求項 2】

前記化学式 1 の R 5 が前記化学式 2 で表されることを特徴とする請求項 1 に記載の化合物。

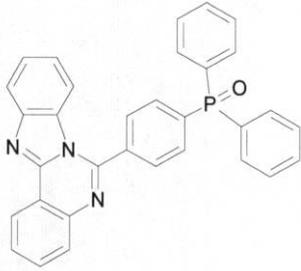
50

## 【請求項 3】

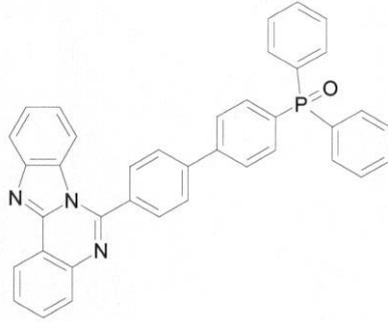
前記化学式 1 で表される化合物は、下記化学式のうちいずれか一つで表されることを特徴とする請求項 1 に記載の化合物：

## 【化 3】

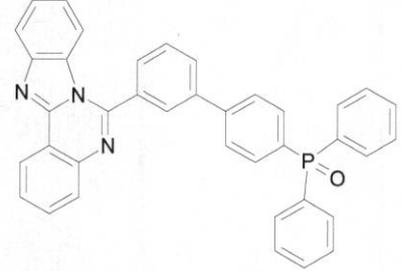
[化 1-1]



[化 1-2]

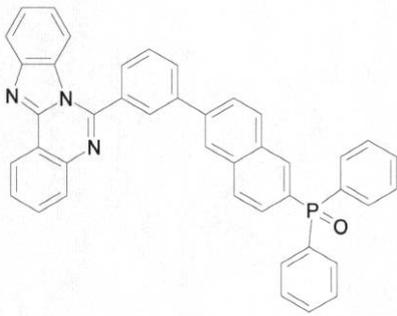


[化 1-3]

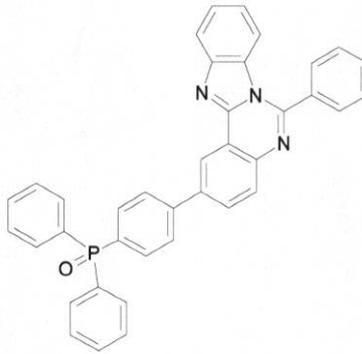


10

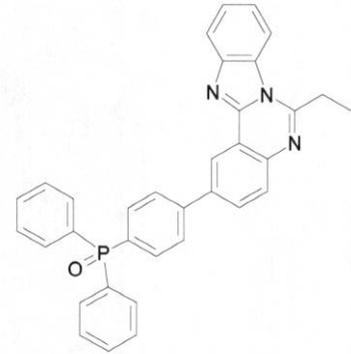
[化 1-4]



[化 1-5]

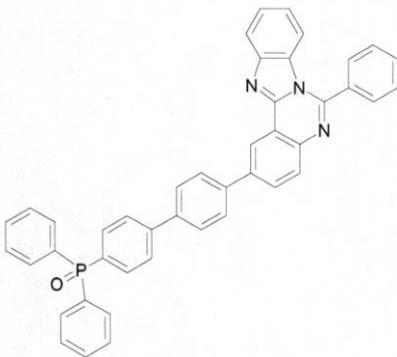


[化 1-6]

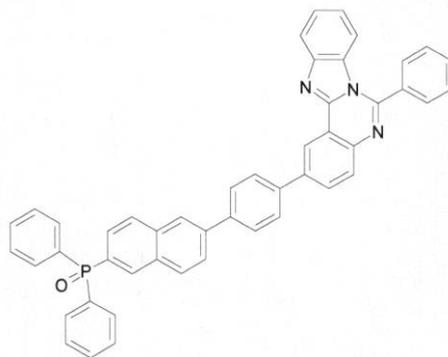


20

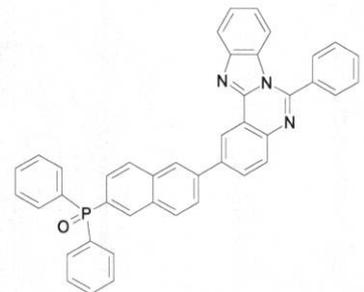
[化 1-7]



[化 1-8]



[化 1-9]

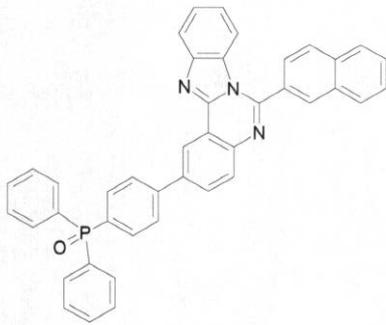


30

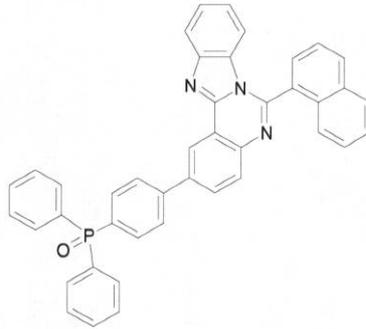
40

【化 4】

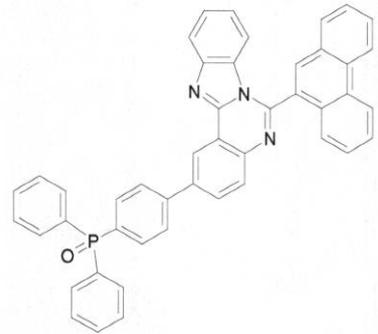
[化1-10]



[化1-11]

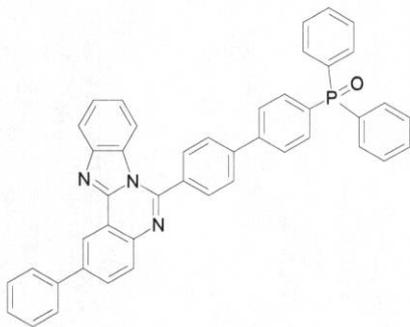


[化1-12]

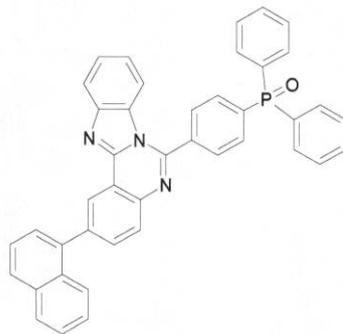


10

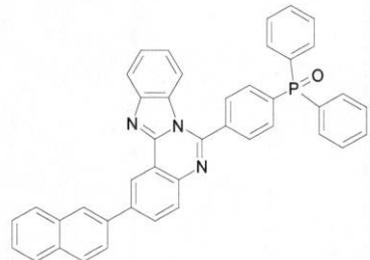
[化1-13]



[化1-14]

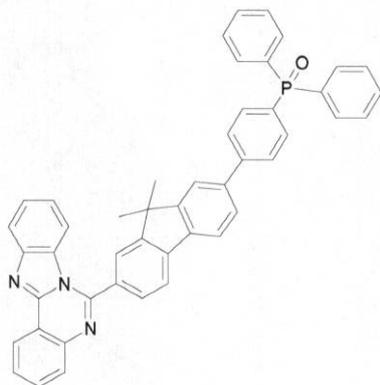


[化1-15]

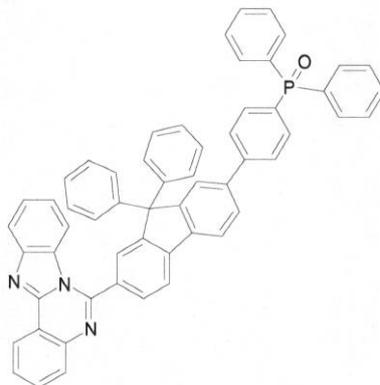


20

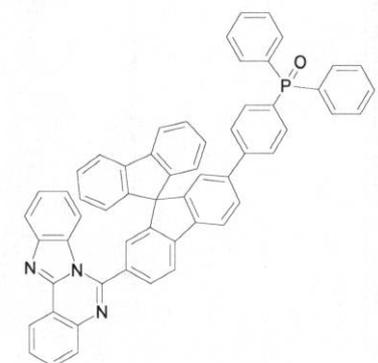
[化1-16]



[化1-17]



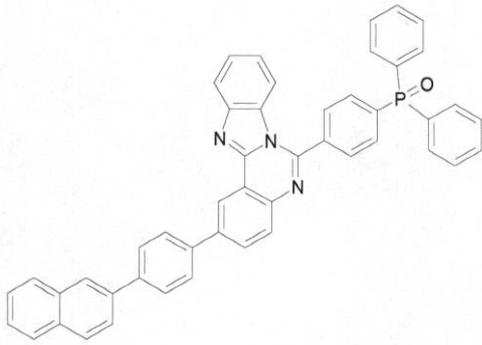
[化1-18]



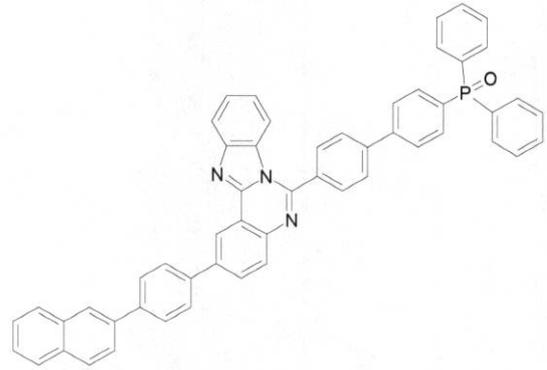
30

【化5】

[化1-19]

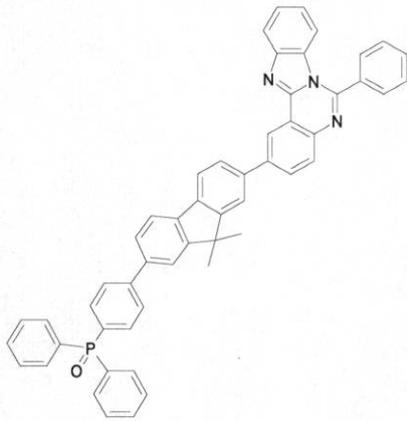


[化1-20]

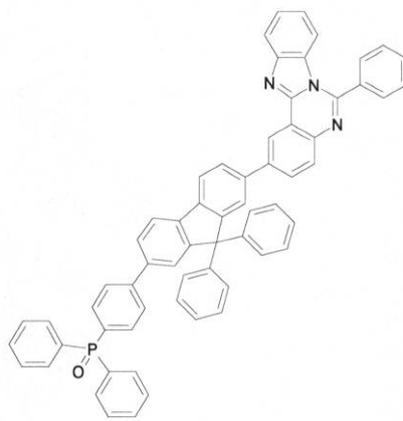


10

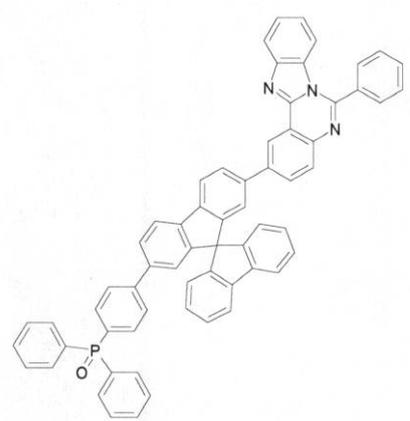
[化1-21]



[化1-22]

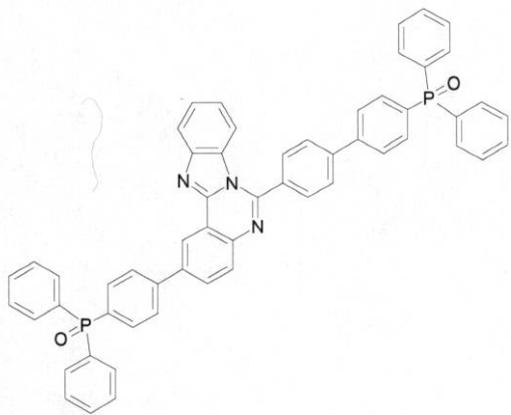


[化1-23]

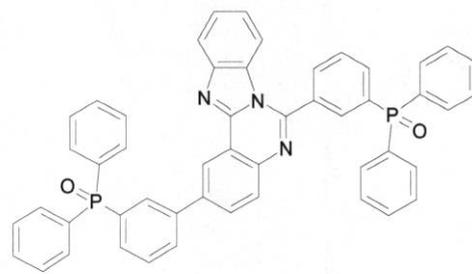


20

[化1-24]



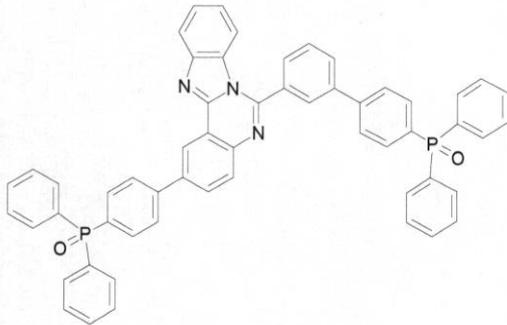
[化1-25]



40

## 【化 6】

## [化 1 - 2 6]



10

## 【請求項 4】

第 1 電極、第 2 電極、及び前記第 1 電極と第 2 電極との間に配置された 1 層以上の有機物層を含む有機電子素子であって、前記有機物層のうち 1 層以上は請求項 1 ないし請求項 3 のいずれか一項に記載の化学式 1 で表される化合物を含むことを特徴とする有機電子素子。

20

## 【請求項 5】

前記有機物層は、正孔注入層、正孔輸送層、及び正孔注入及び正孔輸送を同時にする層のうち 1 層以上を含み、前記層のうち 1 層以上が化学式 1 で表される化合物を含むことを特徴とする請求項 4 に記載の有機電子素子。

## 【請求項 6】

前記有機物層は発光層を含み、前記発光層が化学式 1 で表される化合物を含むことを特徴とする請求項 4 に記載の有機電子素子。

## 【請求項 7】

前記有機物層は、電子輸送層、電子注入層、及び電子輸送及び電子注入を同時にする層のうち 1 層以上を含み、前記層のうち 1 層以上が化学式 1 で表示される化合物を含むことを特徴とする請求項 4 に記載の有機電子素子。

30

## 【請求項 8】

前記有機電子素子は、有機発光素子、有機リン光素子、有機太陽電池、有機感光体 (OPC) 及び有機トランジスタからなる群より選択されることを特徴とする請求項 4 に記載の有機電子素子。

## 【発明の詳細な説明】

## 【技術分野】

## 【0001】

本出願は、2011年6月13日付にて韓国特許庁に提出された韓国特許出願第10-2011-0056777号の出願日の利益を主張し、その内容はいずれも本明細書に含まれる。

40

## 【0002】

本発明は、新規な化合物及びこれを用いた有機電子素子に関するものである。

## 【背景技術】

## 【0003】

本明細書において、有機電子素子とは、有機半導体物質を用いた電子素子であって、電極と有機半導体物質との間における正孔及び/または電子の交流を必要とする。有機電子素子は、動作原理によって次のように大きく二つに分けることができる。第一は、外部の光源から素子に流入された光子によって有機物層で励起子 (exciton) が形成され、この励起子が電子と正孔とに分離され、この電子と正孔がそれぞれ他の電極に伝達されて電流源 (電圧源) として使用される形態の電子素子である。第二は、2つ以上の電極に電圧

50

または電流を加えて電極と界面をなす有機半導体物質層に正孔及び/または電子を注入し、注入された電子と正孔によって作動する形態の電子素子である。

【0004】

有機電子素子の例としては、有機発光素子、有機太陽電池、有機感光体(OPC)ドラム、有機トランジスタなどがあり、これらはいずれも素子の駆動のために電子/正孔注入物質、電子/正孔抽出物質、電子/正孔輸送物質または発光物質を必要とする。以下では、主に有機発光素子について具体的に説明するが、上記有機電子素子では、電子/正孔注入物質、電子/正孔抽出物質、電子/正孔輸送物質または発光物質がいずれも類似する原理で作用する。

【0005】

通常、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転換させる現象を言う。有機発光現象を用いる有機発光素子は、通常、陽極と陰極及びこれらの間に有機物層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、電子注入層などを含むことができる。このような有機発光素子の構造において二つの電極の間に電圧をかけると、陽極では正孔が、陰極では電子が有機物層に注入され、注入された正孔と電子が結合したとき、励起子(exciton)が形成され、この励起子が基底状態になる際に光を発生する。このような有機発光素子は自発光、高輝度、高効率、低駆動電圧、広視野角、高コントラスト、高速応答性などの特性を持つものと知られている。

【0006】

有機発光素子において有機物層として使用される材料は、機能によって発光材料と電荷輸送材料、例えば、正孔注入材料、正孔輸送材料、電子輸送材料、電子注入材料などに分類されることができる。発光材料は、発光色によって青色、緑色、赤色の発光材料と、より良い天然色を具現するために必要な黄色及びオレンジ色の発光材料がある。また、色純度の増加とエネルギー移動を通じた発光効率を増加させるために、発光材料としてホスト/ドープアント系を使用することができる。その原理は、発光層を主に構成するホストよりエネルギー帯域間隙が小さくて発光効率が優れたドープアントを発光層に少量混合すれば、ホストで発生した励起子がドープアントに輸送されて効率の高い光を出すのである。このとき、ホストの波長がドープアントの波長帯に移動するので、利用するドープアントの種類によって所望の波長の光を得ることができる。

【0007】

上述した有機発光素子が有する優れた特徴を十分発揮するためには、素子内の有機物層をなす物質、例えば、正孔注入物質、正孔輸送物質、発光物質、電子輸送物質、電子注入物質などが安定かつ効率的な材料によってサポートされることが先行されなければならないが、未だ安定かつ効率的な有機発光素子用の有機物層材料の開発が十分なされていない状態であり、よって、新しい材料の開発が引き続き要求されている。

【先行技術文献】

【特許文献】

【0008】

【特許文献1】韓国特許出願第10-2011-0056777号

【発明の概要】

【発明が解決しようとする課題】

【0009】

本発明者らは新規な構造を持つ化合物を見出した。また、上記新規な化合物を用いて有機電子素子の有機物層を形成する場合、素子効率の上昇、駆動電圧の下降及び安定性の上昇などの効果を奏することができるという事実を突き止めた。

【0010】

したがって、本発明は、新規な化合物及びこれを用いた有機電子素子を提供することを目的とする。

10

20

30

40

50

【課題を解決するための手段】

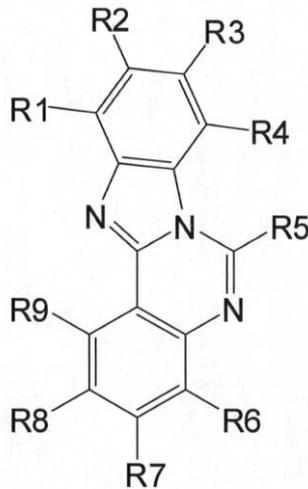
【0011】

本発明は、下記化学式1で表される化合物を提供する。

【0012】

【化1】

[化1]



10

20

【0013】

式中、

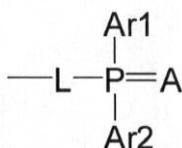
R1ないしR9のうち少なくとも一つは下記化学式2で表され、残りは、水素；重水素；ハロゲン基；ニトリル基；ニトロ基；ヒドロキシ基；置換もしくは非置換のシクロアルキル基；置換もしくは非置換のアルコキシ基；置換もしくは非置換のアリールオキシ基；置換もしくは非置換のアルキルチオキシ基；置換もしくは非置換のアリールチオキシ基；置換もしくは非置換のアルキルスルホキシ基；置換もしくは非置換のアリールスルホキシ基；置換もしくは非置換のアルケニル基；置換もしくは非置換のシリル基；置換もしくは非置換のホウ素基；置換もしくは非置換のアルキルアミン基；置換もしくは非置換のアラルキルアミン基；置換もしくは非置換のアリールアミン基；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基；置換もしくは非置換のフルオレニル基；置換もしくは非置換のカルバゾール基；またはN、O、S原子のうち一つ以上を含む置換もしくは非置換の複素環基であり；

30

【0014】

【化2】

[化2]



40

【0015】

式中、

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N、O、S原子のうち一つ以上を含む置換もしくは非置換のヘテロアリーレン基であり、

Ar1及びAr2は、それぞれ独立して置換もしくは非置換のアリール基；またはN、O、S原子のうち一つ以上を含む置換もしくは非置換の複素環基であり；

50

AはO、SまたはSeである。

【0016】

また、本発明は、第1電極、第2電極、及び上記第1電極と第2電極との間に配置された1層以上の有機物層を含む有機電子素子であって、上記有機物層のうち1層以上は上記化学式1で表される化合物を含むことを特徴とする有機電子素子を提供する。

【発明の効果】

【0017】

本発明に係る新規な化合物は、多様な置換基などを導入して、有機発光素子をはじめとする有機電子素子の有機物層の材料として使用されることができる。上記本発明に係る化学式1で表される化合物を有機物層の材料として用いた有機発光素子をはじめとする有機電子素子は、効率、駆動電圧、寿命などにおいて優れた特性を示す。

10

【図面の簡単な説明】

【0018】

【図1】基板101上に陽極102、発光層105及び陰極107が順次積層された有機発光素子の構造の例示である。

【図2】基板101上に陽極102、正孔注入/正孔輸送及び発光層105、電子輸送層106及び陰極107が順次積層された有機発光素子の構造の例示である。

【図3】基板101、陽極102、正孔注入層103、正孔輸送及び発光層105、電子輸送層106及び陰極107が順次積層された有機発光素子の構造の例示である。

【図4】基板101、陽極102、正孔注入層103、正孔輸送層104、電子輸送及び発光層105及び陰極107が順次積層された有機発光素子の構造の例示である。

20

【発明を実施するための形態】

【0019】

以下、本発明をより具体的に説明する。

【0020】

本発明に係る新規な化合物は、上記化学式1で表されることを特徴とする。

【0021】

式中、R5が上記化学式2で表されることができ、これに限定されるものではない。

【0022】

本発明に係る化合物において、上記化学式1の置換基をより具体的に説明すれば、次の通りである。

30

【0023】

上記アルキル基は、直鎖または分岐鎖であってもよく、炭素数は特に限定されないが、1~12であるのが好ましい。具体的な例としては、メチル基、エチル基、プロピル基、イソプロピル基、ブチル基、t-ブチル基、ペンチル基、ヘキシル基、ヘプチル基などがあるが、これに限定されるものではない。

【0024】

上記アルケニル基は、直鎖または分岐鎖であってもよく、炭素数は特に限定されないが、2~12であるのが好ましい。具体的な例としては、スチルベニル基(stylybenyl)、スチレニル基(styrenyl)などのアリール基が連結されたアルケニル基があるが、これに限定されるものではない。

40

【0025】

上記アルキニル基は、直鎖または分岐鎖であってもよく、炭素数は特に限定されないが、2~12であるのが好ましい。具体的な例としては、エチニル基、プロピニル基などがあるが、これに限定されるものではない。

【0026】

上記シクロアルキル基は、炭素数3~12の立体障害のないものが好ましい。具体的な例としては、シクロペンチル基、シクロヘキシル基などがあるが、これに限定されるものではない。

50

## 【 0 0 2 7 】

上記シクロアルケニル基は、炭素数 3 ~ 12 であるのが好ましく、より具体的には、五角形または六角形の環内にエテニレンを持つ環状化合物などが挙げられるが、これに限定されるものではない。

## 【 0 0 2 8 】

上記アルコキシ基は、炭素数 1 ~ 12 であるのが好ましく、より具体的に、メトキシ、エトキシ、イソプロピルオキシなどが挙げられるが、これに限定されるものではない。

## 【 0 0 2 9 】

上記アリールオキシ基は、炭素数 6 ~ 20 であるのが好ましく、より具体的に、フェニルオキシ、シクロヘキシルオキシ、ナフチルオキシ、ビフェニルオキシなどが挙げられるが、これに限定されるものではない。

10

## 【 0 0 3 0 】

上記アルキルアミン基は、炭素数 1 ~ 30 であるのが好ましく、より具体的に、メチルアミン基、ジメチルアミン基、エチルアミン基、ジエチルアミン基などが挙げられるが、これに限定されるものではない。

## 【 0 0 3 1 】

上記アリールアミン基は炭素数 5 ~ 30 であるのが好ましく、より具体的に、フェニルアミン基、ナフチルアミン基、ビフェニルアミン基、アントラセニルアミン基、3 - メチル - フェニルアミン基、4 - メチル - ナフチルアミン基、2 - メチル - ビフェニルアミン基、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、これらに限定されるものではない。

20

## 【 0 0 3 2 】

上記アリール基は、単環式または多環式であってもよく、炭素数は特に限定されないが、6 ~ 40 であるのが好ましい。単環式アリール基の例としては、フェニル基、ビフェニル基、ターフェニル基、スチルベンなどが挙げられ、多環式アリール基の例としては、ナフチル基、アントラセニル基、フェナントレン基、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が挙げられるが、これに限定されるものではない。

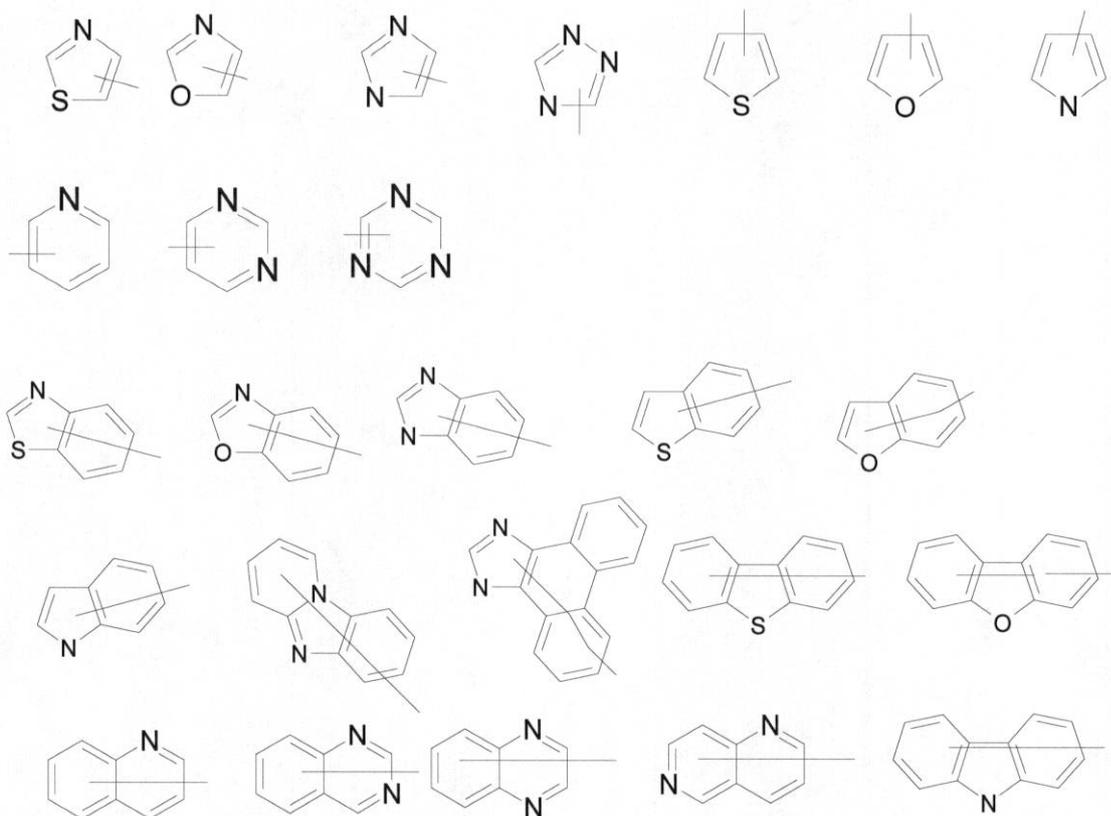
## 【 0 0 3 3 】

上記ヘテロアリール基は、異種原子として O、N、S または P を含む環状基であって、炭素数は特に限定されないが、炭素数 3 ~ 30 であるのが好ましい。複素環基の例としては、カルバゾール基、チオフェン基、フラン基、ピロール基、イミダゾール基、チアゾール基、オキサゾール基、オキサジアゾール基、トリアゾール基、ピリジル基、ピラダジン基、キノリニル基、イソキノリン基、アクリジル基などがあり、下記構造式のような化合物が好ましいが、これに限定されるものではない。

30

## 【 0 0 3 4 】

## 【化3】



10

20

## 【0035】

上記ハロゲン基としては、フッ素、塩素、臭素、ヨウ素などが挙げられるが、これに限定されるものではない。

## 【0036】

上記アリーレン基の具体的な例としては、フェニレン基、ピフェニレン基、ナフタレン基、ピナフタレン基、アントラセニレン基、フルオレニレン基、クリセニレン基、フェナントレニレン基などが挙げられるが、これに限定されるものではない。

30

## 【0037】

上記ヘテロシクロアルキル基としては、N、SまたはOのような異種元素を含む環状基が挙げられる。

## 【0038】

また、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、アルキル基、アルケニル基、アルコキシ基、シリル基、アリールアルケニル基、アリール基、ヘテロアリール基、カルバゾール基、アリールアミン基、アリール基で置換もしくは非置換のフルオレニル基及びニトリル基からなる群より選択された一つ以上の置換基で置換されたか、またはいずれの置換基も持たないことを意味する。

40

## 【0039】

上記化学式1のR1ないしR9、L、Ar1、Ar2およびAは、追加の置換基でさらに置換されてもよく、これらの例としては、ハロゲン基、アルキル基、アルケニル基、アルコキシ基、シリル基、アリールアルケニル基、アリール基、ヘテロアリール基、カルバゾール基、アリールアミン基、アリール基で置換もしくは非置換のフルオレニル基、ニトリル基などが挙げられるが、これに限定されるものではない。

## 【0040】

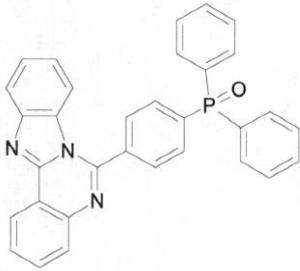
上記化学式1で表される化合物の好ましい具体的な例としては、下記化合物があるが、これらに限定されるものではない。

## 【0041】

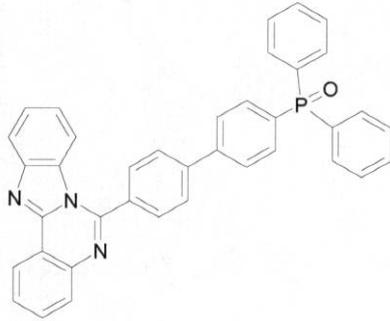
50

【化 4】

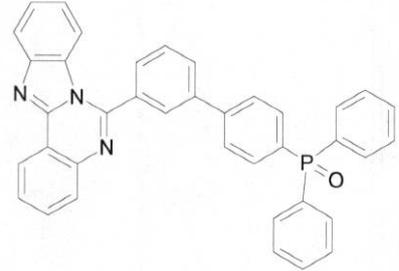
[化 1 - 1]



[化 1 - 2]

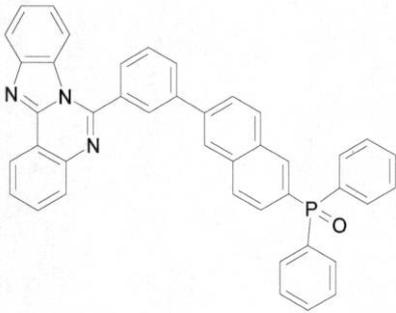


[化 1 - 3]

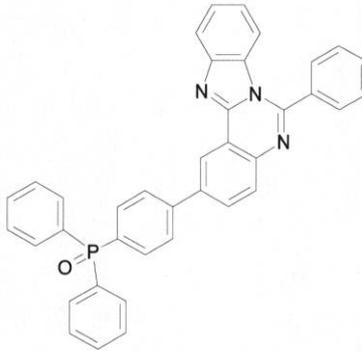


10

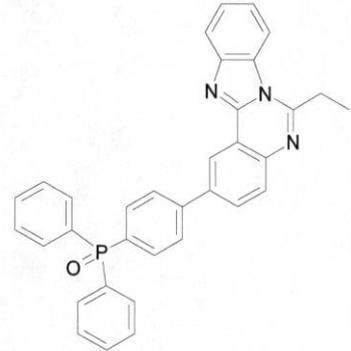
[化 1 - 4]



[化 1 - 5]

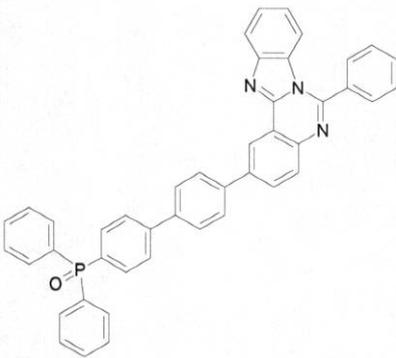


[化 1 - 6]

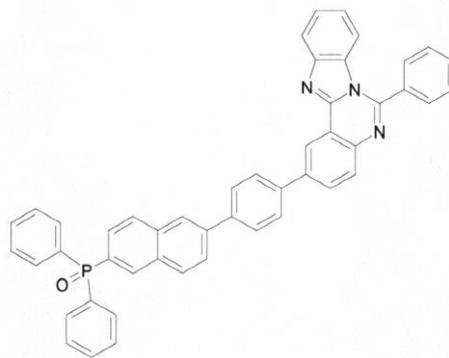


20

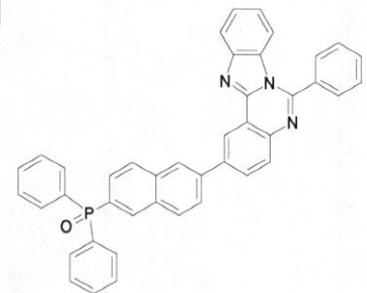
[化 1 - 7]



[化 1 - 8]



[化 1 - 9]



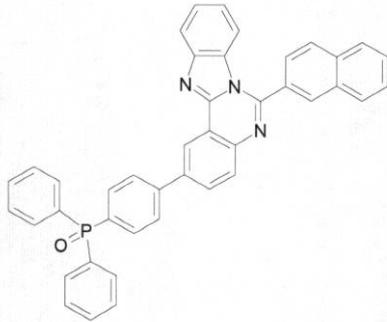
30

【 0 0 4 2 】

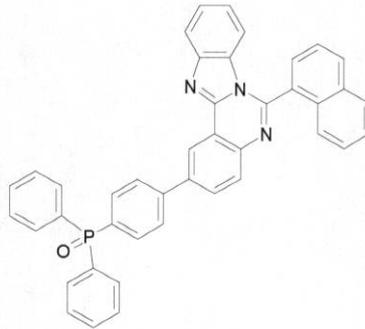
40

【化5】

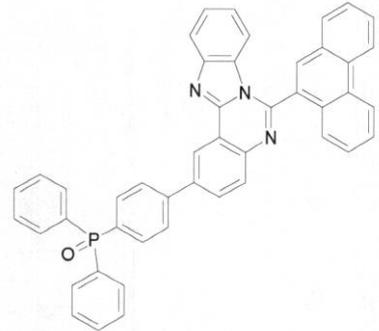
[化1-10]



[化1-11]

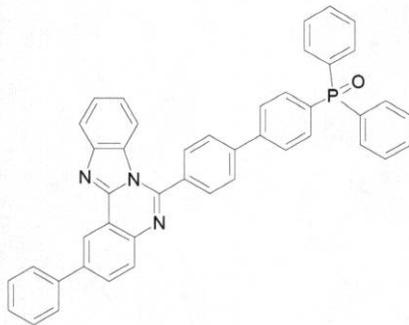


[化1-12]

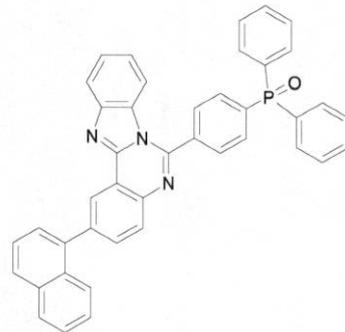


10

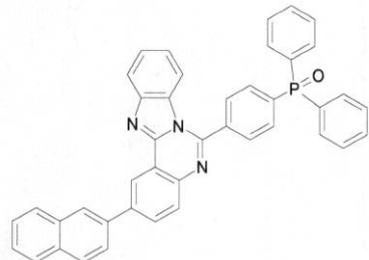
[化1-13]



[化1-14]

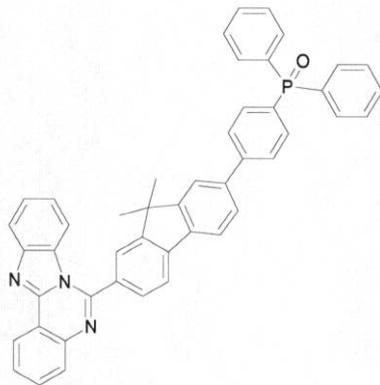


[化1-15]

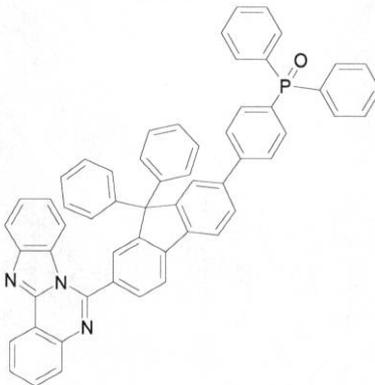


20

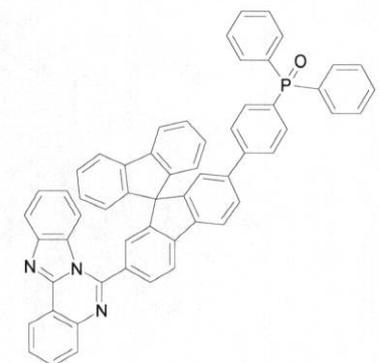
[化1-16]



[化1-17]



[化1-18]



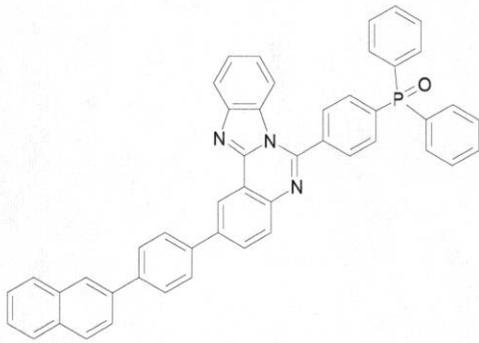
30

【0043】

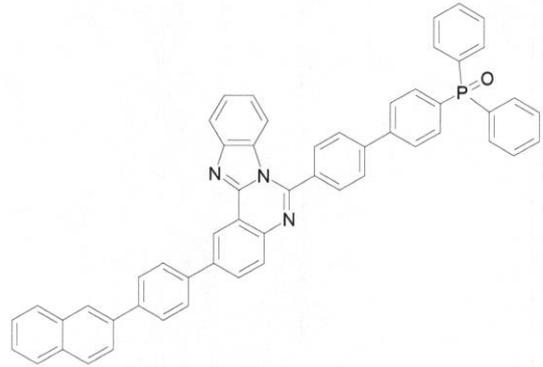
40

【化6】

[化1-19]

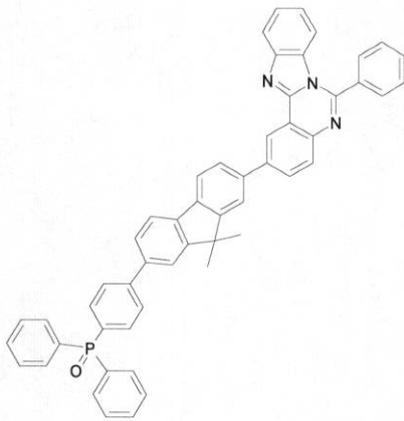


[化1-20]

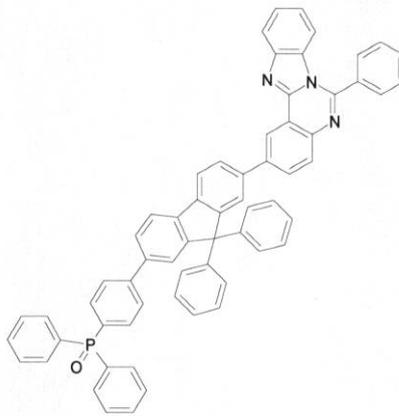


10

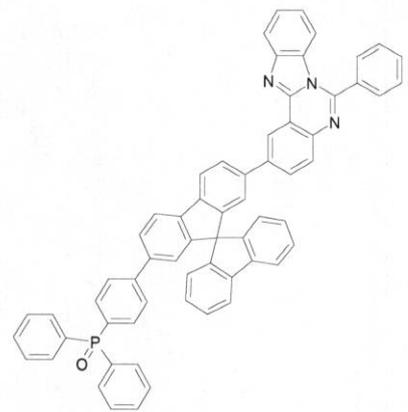
[化1-21]



[化1-22]

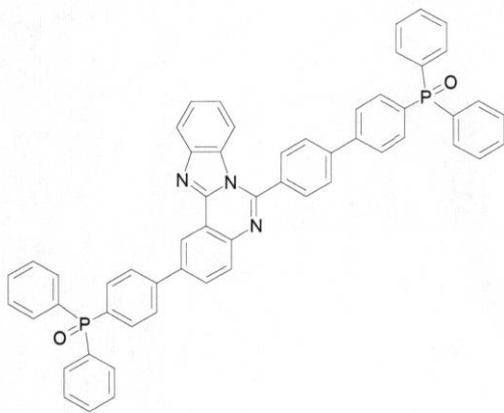


[化1-23]

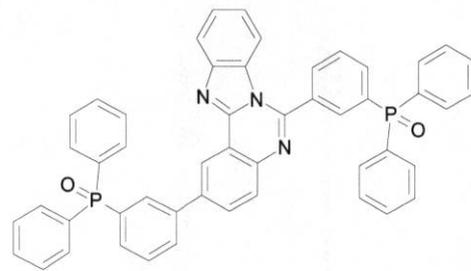


20

[化1-24]



[化1-25]



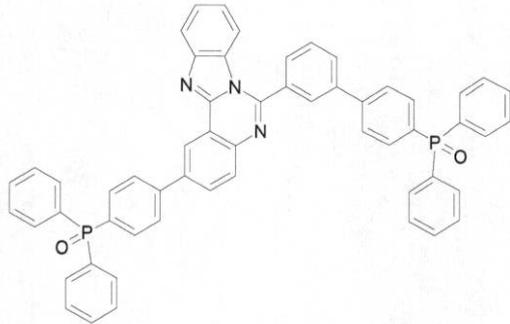
30

40

【0044】

## 【化 7】

## [化 1 - 2 6]



10

## 【 0 0 4 5 】

以下、上記化学式 1 で表される化合物の製造方法について説明する。

## 【 0 0 4 6 】

上記化学式 1 で表される化合物は、縮合反応、鈴木カップリング反応などの当該技術分野に知られている一般的な方法を用いて製造されることができる。

## 【 0 0 4 7 】

上記化学式 1 で表される化合物は、上記化学式に表示されたコア構造に多様な置換体を導入することで、有機発光素子で使用される有機物層として使用されるのに好適な特性を持つことができる。上記化学式 1 で表される化合物は、有機発光素子のいずれの層に使用しても特性を示すことができるが、特に次のような特性を示すことができる。

20

## 【 0 0 4 8 】

置換もしくは非置換のアリールアミン基が導入された化合物は、発光層、正孔注入及び正孔輸送層の物質として好適であり、N を含む複素環基が導入された化合物は、電子注入、電子伝達層及び正孔阻止層の物質として好適である。

## 【 0 0 4 9 】

化合物の共役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、化合物の共役長が長いほどエネルギーバンドギャップが小くなる。上述したように、上記化学式 1 で表される化合物のコアは制限された共役を含んでいるので、これはエネルギーバンドギャップが小さい性質から大きい性質を持つ。

30

## 【 0 0 5 0 】

また、上記のような構造のコア構造に多様な置換基を導入することで、導入された置換基の固有特性を持つ化合物を合成することができる。例えば、有機発光素子の製造時に使用される正孔注入層の物質、正孔輸送層の物質は HOMO を通って正孔を伝達できるだけのエネルギー準位を持つようにし、発光層から LUMO を通って越えて来る電子を阻止する程度のエネルギー準位を持つことができる化合物になることができる。特に、本化合物のコア構造は、電子に安定的な特性を見せて、素子の寿命向上に寄与することができる。発光層及び電子輸送層の物質に使用されるように置換体を導入してなる誘導体は、多様なアリールアミン系ドーパント、アリール系ドーパント、金属を含有したドーパントなどに適当なエネルギーバンドギャップを持つように製造可能である。

40

## 【 0 0 5 1 】

また、上記コア構造に多様な置換基を導入することでエネルギーバンドギャップを微細に調節可能とし、一方で、有機物間における界面での特性を向上して物質の用途を多様にすることができる。

## 【 0 0 5 2 】

一方、上記化学式 1 で表される化合物は、ガラス転移温度 ( $T_g$ ) が高く熱的安定性に優れる。このような熱的安定性の増加は、素子に駆動安全性を提供する重要な要因となる

50

。

## 【0053】

また、本発明に係る有機電子素子は、第1電極、第2電極、及び上記第1電極と第2電極との間に配置された1層以上の有機物層を含む有機電子素子であって、上記有機物層のうち1層以上は上記化学式1で表される化合物を含むことを特徴とする。

## 【0054】

本発明の有機電子素子は、上述した化合物を用いて1層以上の有機物層を形成することを除いては、通常有機電子素子の製造方法及び材料によって製造されることができる。

## 【0055】

上記化学式1の化合物は、有機電子素子の製造時に真空蒸着法だけでなく溶液塗布法によって有機物層として形成されることができる。ここで、溶液塗布法とは、スピコート、ディップコート、インクジェット印刷、スクリーン印刷、スプレー法、ロールコートなどを意味するが、これらに限定されるものではない。

10

## 【0056】

本発明の有機電子素子の有機物層は、単層構造からなることもできるが、2層以上の有機物層が積層された多層構造からなることができる。例えば、本発明の有機電子素子は、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持つことができる。しかし、有機電子素子の構造はこれに限定されず、より少ない数の有機物層を含むことができる。

## 【0057】

したがって、本発明の有機電子素子において、上記有機物層は、正孔注入層、正孔輸送層、及び正孔注入及び正孔輸送を同時にする層のうち1層以上を含むことができ、上記層のうち1層以上が上記化学式1で表される化合物を含むことができる。

20

## 【0058】

また、上記有機物層は発光層を含むことができ、上記発光層が上記化学式1で表される化合物を含むことができる。

## 【0059】

また、上記有機物層は、電子輸送層、電子注入層、及び電子輸送及び電子注入を同時にする層のうち1層以上を含むことができ、上記層のうち1層以上が上記化学式1で表される化合物を含むことができる。

30

## 【0060】

このような多層構造の有機物層において、上記化学式1の化合物は、発光層、正孔注入/正孔輸送と発光を同時にする層、正孔輸送と発光を同時にする層、または電子輸送と発光を同時にする層などに含まれることができる。

## 【0061】

例えば、本発明の有機発光素子の構造は図1ないし図4に示すような構造を持つことができるが、これらに限定されるものではない。

## 【0062】

図1には、基板101上に陽極102、発光層105及び陰極107が順次積層された有機発光素子の構造が例示されている。このような構造において、上記化学式1の化合物は上記発光層105に含まれることができる。

40

## 【0063】

図2には、基板101上に陽極102、正孔注入/正孔輸送及び発光層105、電子輸送層106及び陰極107が順次積層された有機発光素子の構造が例示されている。このような構造において、上記化学式1の化合物は正孔注入/正孔輸送及び発光層105に含まれることができる。

## 【0064】

図3には、基板101、陽極102、正孔注入層103、正孔輸送及び発光層105、電子輸送層106及び陰極107が順次積層された有機発光素子の構造が例示されている。このような構造において、上記化学式1の化合物は正孔注入/正孔輸送及び発光層10

50

5に含まれることができる。

【0065】

図4には、基板101、陽極102、正孔注入層103、正孔輸送層104、電子輸送及び発光層105及び陰極107が順次積層された有機発光素子の構造が例示されている。このような構造において、上記化学式1の化合物は電子輸送及び発光層105に含まれることができる。

【0066】

本発明の有機電子素子において、上記化学式1で表される化合物は電子輸送層、電子輸送及び電子注入を同時にする層、または発光層内に含まれることがより好ましい。

【0067】

例えば、本発明に係る有機発光素子は、スパッタリング(sputtering)や電子ビーム蒸着(e-beam evaporation)のようなPVD(physical vapor deposition)法を用いて、基板上に金属または導電性を持つ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、発光層及び電子輸送層を含む有機物層を形成した後、その上に陰極として使用できる物質を蒸着させることで製造されることができる。このような方法以外にも、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製することもできる。

【0068】

上記有機物層は、正孔注入層、正孔輸送層、発光層及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、上記有機物層は多様な高分子素材を使用して蒸着法ではない溶媒工程(solvent process)、例えば、スピコート、ディップコート、ドクターブレード、スクリーン印刷、インクジェット印刷または熱転写法などの方法によって、より少ない数の層に製造することができる。

【0069】

上記陽極物質としては、通常、有機物層に正孔注入が円滑になされるように仕事関数の大きい物質が好ましい。本発明で使用されることができる陽極物質の具体的な例としては、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SnO<sub>2</sub>:Sbのような金属と酸化物の組み合わせ；ポリ(3-メチル化合物の)、ポリ[3,4-(エチレン-1,2-ジオキシ)化合物の](PEDT)、ポリピロール及びポリアニリンのような導電性高分子などがあるが、これらに限定されるものではない。

【0070】

上記陰極物質としては、通常、有機物層に電子注入が容易になされるように仕事関数の小さい物質であることが好ましい。陰極物質の具体的な例としては、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、錫及び鉛のような金属またはこれらの合金；LiF/AlまたはLiO<sub>2</sub>/Alのような多層構造物質などがあるが、これらに限定されるものではない。

【0071】

上記正孔注入物質としては、低い電圧で陽極から正孔をよく注入されることが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的な例としては、金属ポルフィリン(porphyrine)、オリゴチオフェン、アリア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、アントラキノン及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、これらに限定されるものではない。

【0072】

10

20

30

40

50

上記正孔輸送物質としては、陽極や正孔注入層から正孔を輸送されて発光層に移すことができる物質であって、正孔に対する移動性が大きい物質が好適である。具体的な例としては、アリアルアミン系の有機物、導電性高分子、及び共役部分と非共役部分とが共にあるブロック共重合体などがあるが、これらに限定されるものではない。

【0073】

上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輸送されて結合させることで可視光線領域の光を出すことができる物質であって、蛍光やリン光に対する量子効率の良い物質が好ましい。具体的な例としては、8-ヒドロキシ-キノリンアルミニウム錯体(A1q<sub>3</sub>)；カルパゾール系化合物；二量体化スチリル(dimerized styryl)化合物；BA1q；10-ヒドロキシベンゾキノリン-金属化合物；ベンゾオキサゾール、ベンゾチアゾール及びベンゾ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、これらに限定されるものではない。

10

【0074】

上記電子輸送物質としては、陰極から電子をよく注入されて発光層に移すことができる物質であって、電子に対する移動性が大きい物質が好適である。具体的な例としては、8-ヒドロキシキノリンのAl錯体；Alq<sub>3</sub>を含む錯体；有機ラジカル化合物；ヒドロキシフラボン-金属錯体などがあるが、これらに限定されるものではない。

【0075】

本発明に係る有機発光素子は、使用される材料によってトップエミッション型、ボトムエミッション型または両面発光型であってもよい。

20

【0076】

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はじめとする有機電子素子においても、有機発光素子に適用されることと類似する原理で作用することができる。

【0077】

したがって、上記有機電子素子は、有機発光素子、有機リン光素子、有機太陽電池、有機感光体(OPC)及び有機トランジスタからなる群より選択されることができる。

【0078】

以下、本発明の理解を助けるために好ましい実施例を提示する。ところが、下記の実施例は本発明を例示するためのものであり、これによって本発明の範囲が限定されるものではない。

30

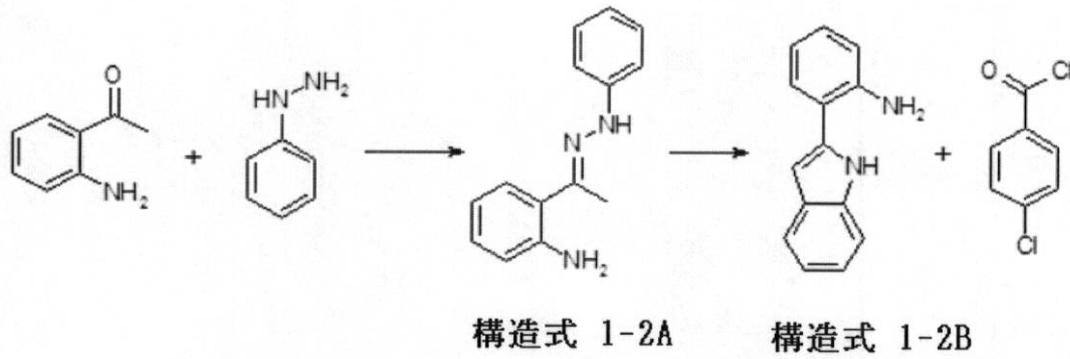
【0079】

<実施例>

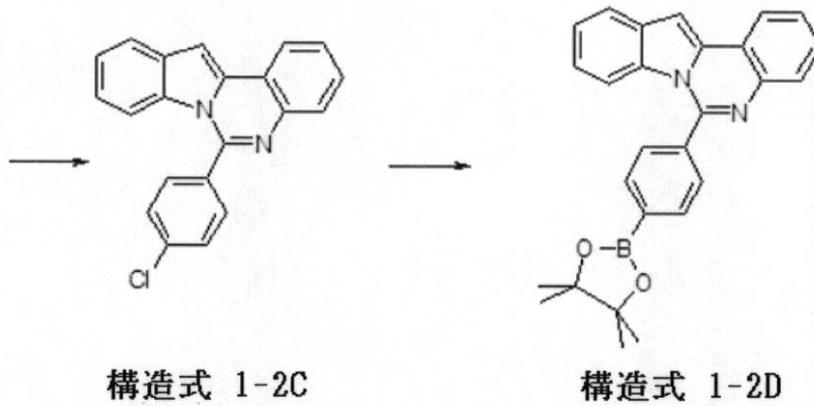
<製造例1> 構造式1-2で表される化合物の製造

【0080】

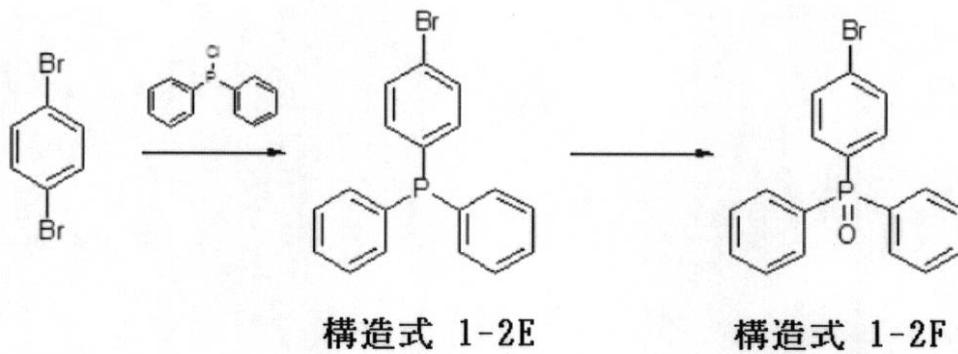
## 【化 8】



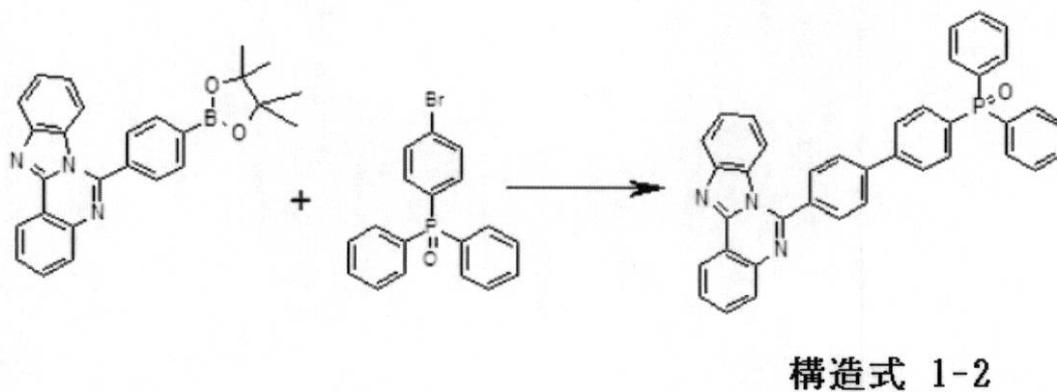
10



20



30



40

## 【0081】

## 構造式 1 - 2 A の製造

2'-アミノアセトフェノン(9.6 mL、80 mmol)とフェニルヒドラジン(15 g、103.7 mmol)をエタノール(100 mL)と氷酢酸(30 mL)に入れて5時間、加熱攪拌した。常温に温度を下げた後、生成された固体を濾過してエタノール(30 mL)で洗浄した後、真空乾燥させて構造式 1 - 2 A (14 g、収率 83%)を得た。

50

MS : [ M + H ] <sup>+</sup> = 226

【0082】

構造式 1 - 2 B の製造

メタンスルホン酸(100 mL)に五酸化リン(8.4 g、58.7 mmol)を入れて80 で五酸化リンが完全に溶けるまで攪拌した。構造式 1 - 2 A(6.3 g、28 mmol)をゆっくり添加した後、90 で3時間攪拌し、常温に温度を下げた。反応液を0の水酸化ナトリウム水溶液に入れて10分間攪拌した後、生成された固体を濾過した。蒸留水で洗浄した後、真空乾燥して構造式 1 - 2 B(4 g、収率69%)を得た。

MS : [ M + H ] <sup>+</sup> = 209

【0083】

構造式 1 - 2 C の製造

構造式 1 - 2 B(4 g、19.2 mmol)と4-クロロベンゾイルクロリド(2.4 mL、19.2 mmol)をp-トルエンスルホン酸(50 mL)に入れて5時間加熱攪拌した。50 に温度を下げた後、2,3-ジクロロ-5,6-ジシアノ-1,4-ベンゾキノ(D D Q)(4.8 g、21.1 mmol)をゆっくり添加した。2時間加熱攪拌した後、常温に温度を下げて炭酸カリウム水溶液をゆっくり添加した。30分間攪拌した後、水層を除去して生成された固体を濾過した。濾過された固体をクロロホルムで再結晶して構造式 1 - 2 C(5 g、79%)を得た。

MS : [ M + ] <sup>+</sup> = 328

【0084】

構造式 1 - 2 D の製造

構造式 1 - 2 C(13 g、40 mmol)とビス(ピナコラト)ジボロン(12 g、47 mmol)、酢酸カリウム(12 g、118 mmol)をジオキサン(150 mL)に溶かした後、50 に温度を上げ、Pd(DBA)<sub>2</sub>(0.23 g、0.4 mmol)とP(Cy)<sub>3</sub>(0.22 g、0.8 mmol)を添加した後、12時間加熱攪拌した。反応溶液を室温に冷却させた後、蒸留水(100 mL)を加えてメチレンクロライド(100 mL × 3)で抽出した。有機層を濃縮させてエタノールで再結晶して構造式 1 - 2 D(14 g、収率90%)を得た。

MS : [ M + H ] <sup>+</sup> = 420

【0085】

構造式 1 - 2 E の製造

ジプロモベンゼン(20 g、85 mmol)をテトラヒドロフラン(100 mL)に溶かした後、-78 に冷却させた。n-BuLi(2.5 M、37 mL、93 mmol)をゆっくり滴下した後、30分間攪拌した。クロロジフェニルホスフィン(17 g、76 mmol)をゆっくり滴下した後、3時間攪拌してから、常温に上げた後、水(100 mL)を加えて、テトラヒドロフランで抽出した。有機層を濃縮させてヘキサンで再結晶して構造式 1 - 2 E(20 g、収率70%)を得た。

MS : [ M + H ] <sup>+</sup> = 342

【0086】

構造式 1 - 2 F の製造

構造式 1 - 2 E(20 g、58 mmol)をトリクロロメタン(200 mL)に溶かした後、過酸化水素水(20 mL)を添加した後、12時間攪拌した。MgSO<sub>4</sub>を入れて攪拌して水を除去した後、濾過して濃縮させてヘキサンで再結晶して構造式 1 - 2 F(18 g、収率85%)を得た。

MS : [ M + H ] <sup>+</sup> = 358

【0087】

化学式 1 - 2 の製造

構造式 1 - 2 D(9.4 g、22.4 mmol)と構造式 1 - 2 F(8 g、22.4 mmol)をテトラヒドロフラン(200 mL)に加熱して完全に溶かした後、2 M炭酸カリウム水溶液100 mLを添加し、Pd(PPh<sub>3</sub>)<sub>4</sub>(0.26 g、0.22 mmol)を入れ

10

20

30

40

50

て12時間攪拌した。常温に下げた後、水層を除去して生成された固体を濾過した。濾過された固体をテトラヒドロフランとアセトンで再結晶して化学式1-2(8g、収率62%)を得た。

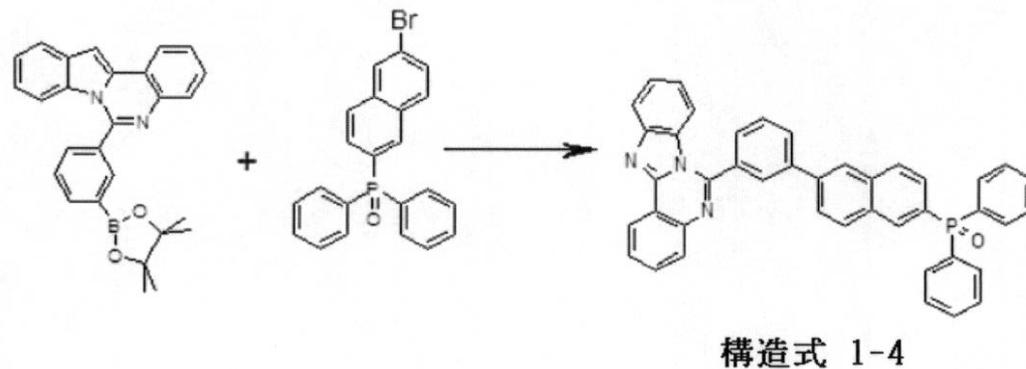
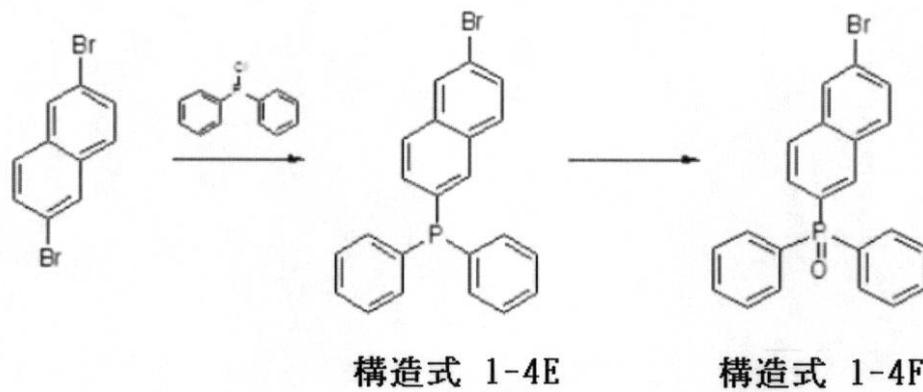
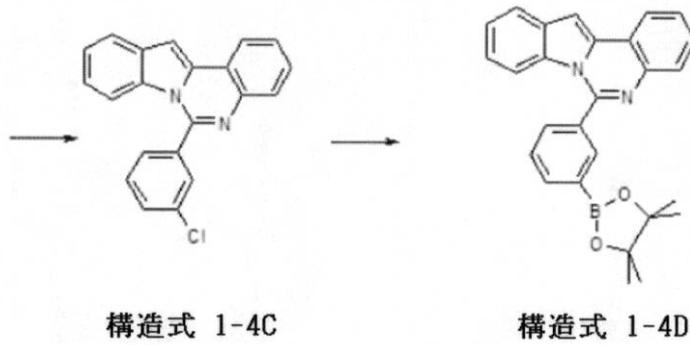
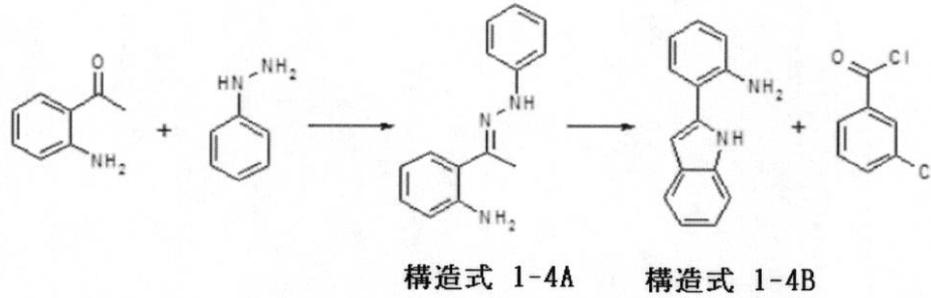
MS:  $[M+H]^+ = 572$

【0088】

<製造例2> 構造式1-4で表される化合物の製造

【0089】

【化9】



【0090】

10

20

30

40

50

構造式 1 - 4 C の製造

4 - クロロベンゾイルクロリドの代わりに 3 - クロロベンゾイルクロリドを使用したことを除いては、構造式 1 - 2 C の製造方法と同一の方法で構造式 1 - 4 C を得た。

MS : [ M + H ] <sup>+</sup> = 3 2 8

【 0 0 9 1 】

構造式 1 - 4 D の製造

構造式 1 - 2 C の代わりに構造式 1 - 4 C を使用したことを除いては、構造式 1 - 2 D の製造方法と同一の方法で構造式 1 - 4 D を得た。

MS : [ M + H ] <sup>+</sup> = 4 2 0

【 0 0 9 2 】

10

構造式 1 - 4 E の製造

1 , 4 - ジブロモベンゼンの代わりに 2 , 6 - ジブロモナフタレンを使用したことを除いては、構造式 1 - 2 E の製造方法と同一の方法で構造式 1 - 4 E を得た。

MS : [ M + H ] <sup>+</sup> = 3 9 2

【 0 0 9 3 】

構造式 1 - 4 F の製造

構造式 1 - 2 E の代わりに構造式 1 - 4 E を使用したことを除いては、構造式 1 - 2 F の製造方法と同一の方法で構造式 1 - 4 F を得た。

MS : [ M + H ] <sup>+</sup> = 4 0 8

【 0 0 9 4 】

20

化学式 1 - 4 の製造

構造式 1 - 2 D の代わりに構造式 1 - 4 D、構造式 1 - 2 F の代わりに構造式 1 - 4 F を使用したことを除いては、化学式 1 - 2 の製造方法と同一の方法で化学式 1 - 4 を得た。

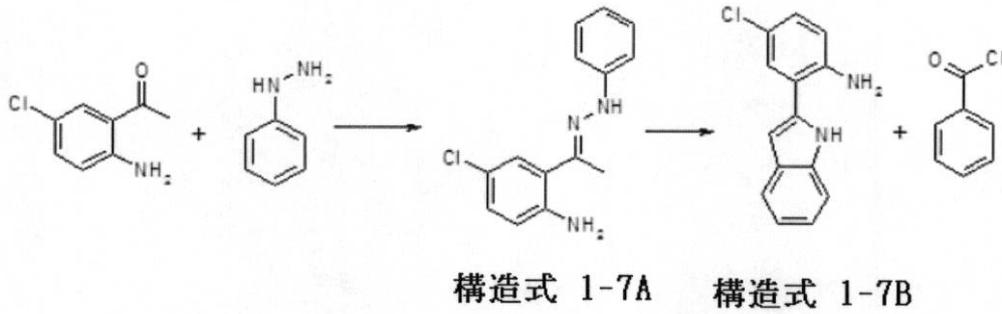
MS : [ M + H ] <sup>+</sup> = 6 2 2

【 0 0 9 5 】

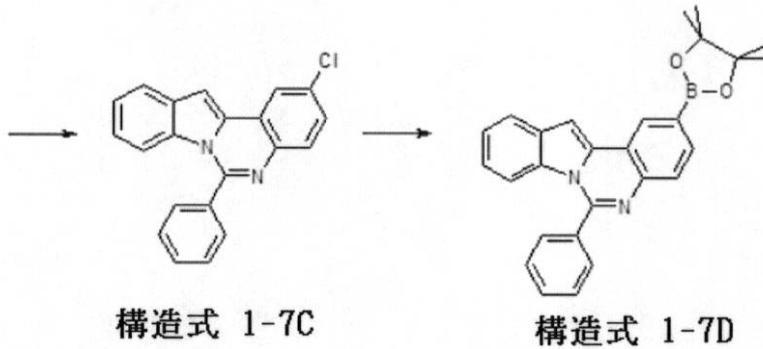
<製造例 3> 構造式 1 - 7 で表される化合物の製造

【 0 0 9 6 】

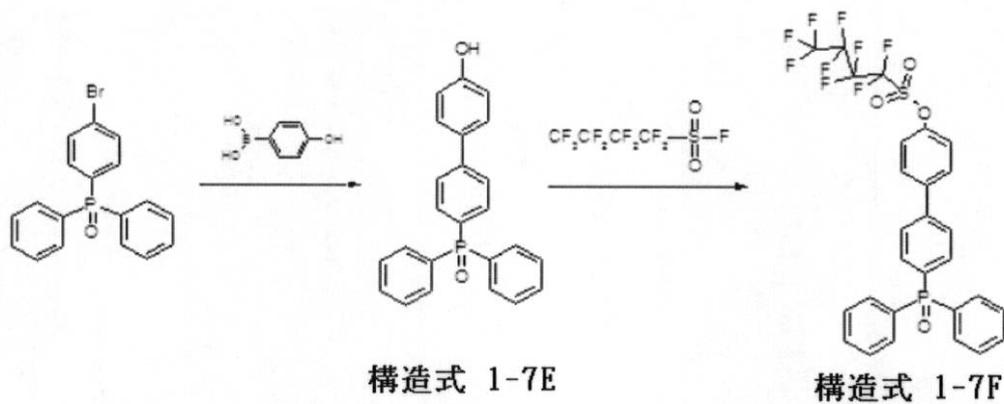
【化 1 0】



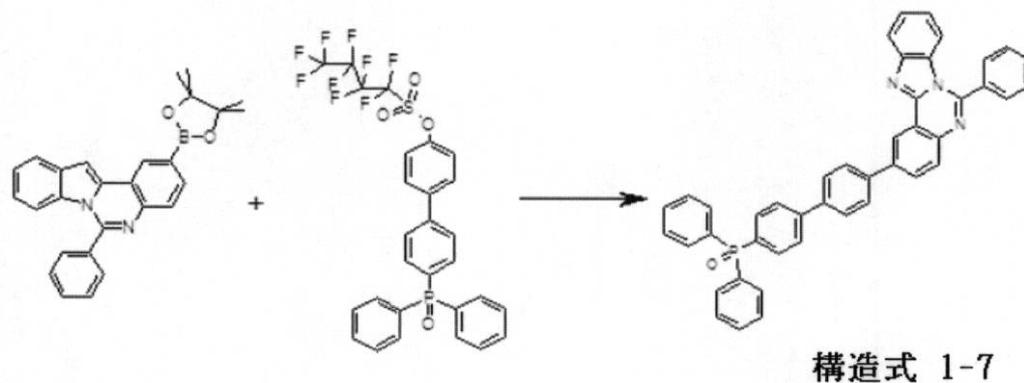
10



20



30



40

【 0 0 9 7 】

構造式 1 - 7 A の製造

2'-アミノアセトフェノンの代わりに2'-アミノ-5-クロロアセトフェノンを使用したことを除いては、構造式1-2Aの製造方法と同一の方法で構造式1-7Aを得た。

MS : [ M + H ] <sup>+</sup> = 2 6 0

【 0 0 9 8 】

50

構造式 1 - 7 B の製造

構造式 1 - 2 A の代わりに構造式 1 - 7 A を使用したことを除いては、構造式 1 - 2 B の製造方法と同一の方法で構造式 1 - 7 B を得た。

MS : [ M + H ] <sup>+</sup> = 243

【 0099 】

構造式 1 - 7 C の製造

4 - クロロベンゾイルクロリドの代わりにベンゾイルクロリドを使用したことを除いては、構造式 1 - 2 C の製造方法と同一の方法で構造式 1 - 7 C を得た。

MS : [ M + H ] <sup>+</sup> = 329

【 0100 】

構造式 1 - 7 D の製造

構造式 1 - 2 C の代わりに構造式 1 - 7 C を使用したことを除いては、構造式 1 - 2 D の製造方法と同一の方法で構造式 1 - 7 D を得た。

MS : [ M + H ] <sup>+</sup> = 421

【 0101 】

構造式 1 - 7 E の製造

構造式 1 - 2 F ( 8 g、22.4 mmol ) と 4 - ヒドロキシフェニルボロン酸 ( 3.1 g、22.4 mmol ) をテトラヒドロフラン ( 200 ml ) に加熱して完全に溶かした後、2 M 炭酸カリウム水溶液 100 ml を添加し、Pd ( PPh<sub>3</sub> )<sub>4</sub> ( 0.26 g、0.22 mmol ) を入れて 12 時間攪拌した。常温に下げてから有機層を抽出した後、溶媒を飛ばして生成された固体を濾過した。濾過された固体をテトラヒドロフランとヘキサンで再結晶して構造式 1 - 7 E ( 7 g、収率 84% ) を得た。

MS : [ M + H ] <sup>+</sup> = 371

【 0102 】

構造式 1 - 7 F の製造

構造式 1 - 7 E ( 7 g、18.9 mmol ) をアセトニトリル ( 200 ml ) に溶かした後、パークロロブタンスルホニルクロリド ( 2.9 g、20.8 mmol ) と 2 M 炭酸カリウム水溶液 100 ml を添加して加熱した後、12 時間攪拌した。常温に下げてから有機層を抽出した後、溶媒を飛ばして生成された固体を濾過した。濾過された固体はクロロホルムとヘキサンで再結晶して構造式 1 - 7 F ( 9.5 g、収率 75% ) を得た。

MS : [ M + H ] <sup>+</sup> = 653

【 0103 】

化学式 1 - 7 の製造

構造式 1 - 2 D の代わりに構造式 1 - 7 D、構造式 1 - 2 F の代わりに構造式 1 - 7 F を使用したことを除いては、化学式 1 - 2 の製造方法と同一の方法で化学式 1 - 7 を得た。

MS : [ M + H ] <sup>+</sup> = 648

【 0104 】

<製造例 4> 構造式 1 - 24 で表される化合物の製造

【 0105 】

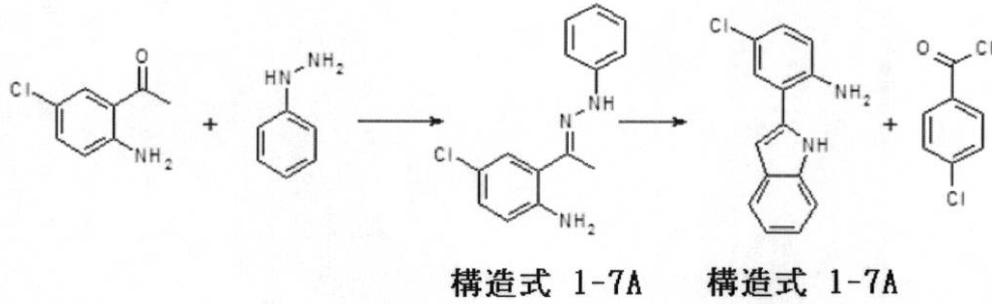
10

20

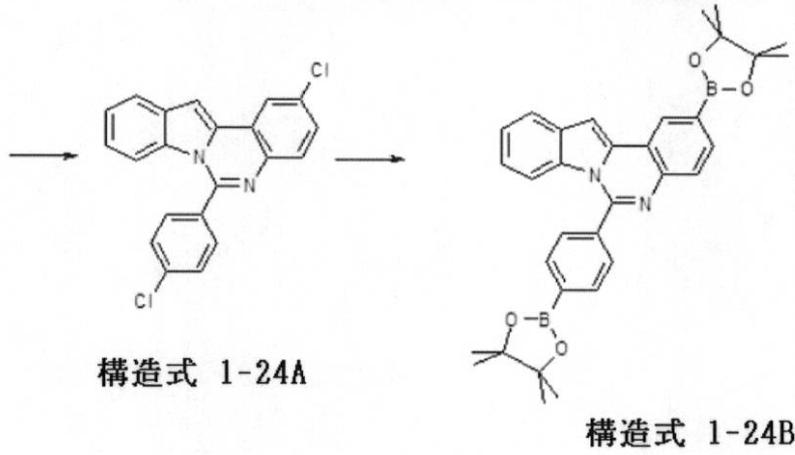
30

40

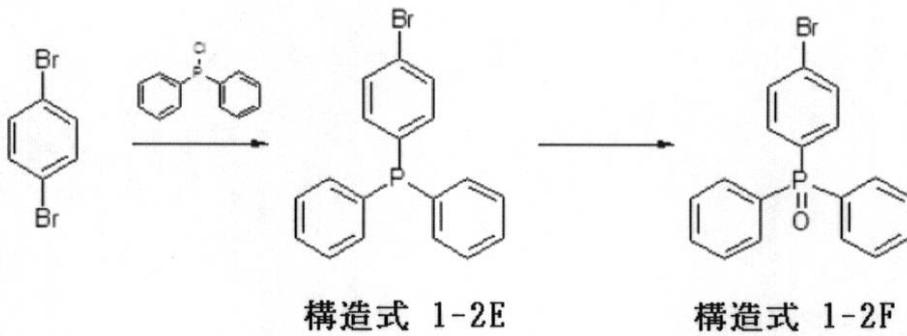
【化 1 1】



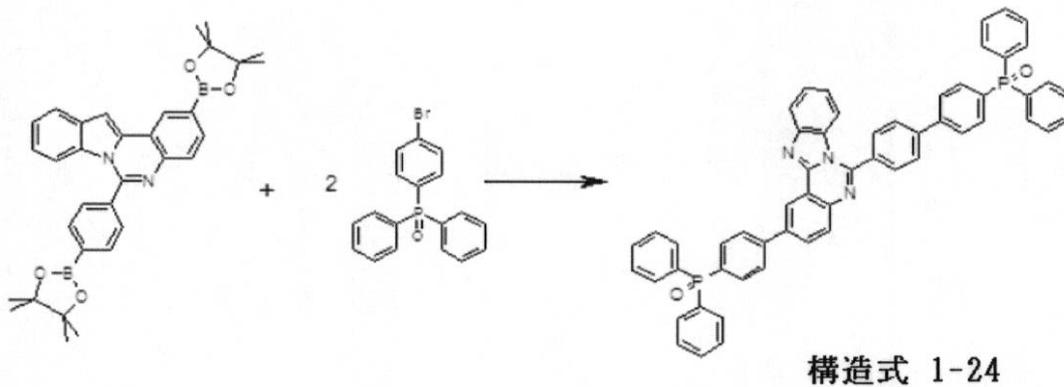
10



20



30



40

【 0 1 0 6 】

構造式 1 - 2 4 A の製造

ベンゾイルクロリドの代わりに 4 - クロロベンゾイルクロリドを使用したことを除いては、構造式 1 - 7 C の製造方法と同一の方法で構造式 1 - 2 4 A を得た。

MS : [ M + H ] <sup>+</sup> = 3 6 3

【 0 1 0 7 】

50

構造式 1 - 2 4 B の製造

構造式 1 - 7 C の代わりに構造式 1 - 2 4 A を使用したことを除いては、構造式 1 - 7 D の製造方法と同一の方法で構造式 1 - 2 4 B を得た。

MS : [ M + H ] <sup>+</sup> = 5 4 7

【 0 1 0 8 】

化学式 1 - 2 4 の製造

構造式 1 - 2 D の代わりに構造式 1 - 2 4 B を使用したことを除いては、化学式 1 - 2 の製造方法と同一の方法で化学式 1 - 2 4 を得た。

MS : [ M + H ] <sup>+</sup> = 8 4 8

【 0 1 0 9 】

## &lt;実施例 1&gt;

I T O (インジウムスズ酸化物) が 1 , 0 0 0 の厚さで薄膜コーティングされたガラス基板 ( c o r n i n g 7 0 5 9 g l a s s ) を、分散剤を溶かした蒸留水に入れて超音波で洗浄した。洗剤はフィッシャー社 ( F i s c h e r C o . ) 製を使用し、蒸留水はミリポア社 ( M i l l i p o r e C o . ) 製のフィルター ( F i l t e r ) で 2 次濾過された蒸留水を使用した。I T O を 3 0 分間洗浄した後、蒸留水で 2 回繰り返して超音波洗浄を 1 0 分間進行した。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、メタノールの溶剤の順に超音波洗浄をして乾燥させた。

【 0 1 1 0 】

このように用意された I T O 透明電極の上にヘキサニトリルヘキサアザトリフェニレン ( h e x a n i t r i l e h e x a a z a t r i p h e n y l e n e ) を 5 0 0 の厚さで熱真空蒸着して正孔注入層を形成した。その上に正孔を輸送する物質である N P B ( 4 0 0 ) を真空蒸着した後、発光層としてホスト H 1 とドーパント D 1 化合物を 3 0 0 の厚さで真空蒸着した。次に、上記製造例 1 で合成した化学式 1 - 2 の化合物と L i Q を共に ( 2 0 0 ) 電子注入及び輸送層として熱真空蒸着した。上記電子輸送層上に順次に 1 2 厚さのリチウムキノレート ( L i Q ) と 2 , 0 0 0 厚さのアルミニウムを蒸着して陰極を形成して、有機発光素子を製造した。

【 0 1 1 1 】

上記電子輸送層の比較例として E 1 を使用した。

【 0 1 1 2 】

上記の過程で有機物の蒸着速度は 1 / s e c を維持し、リチウムキノレートは 0 . 2 / s e c 、アルミニウムは 3 ~ 7 / s e c の蒸着速度を維持した。

【 0 1 1 3 】

10

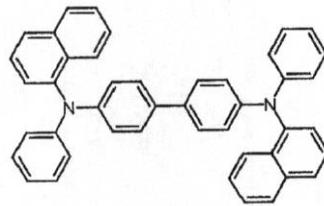
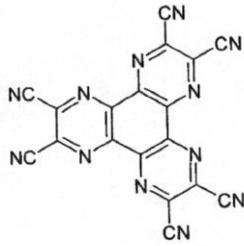
20

30

【化 1 2】

[ヘキサニトリルヘキサアザトリフェニレン]

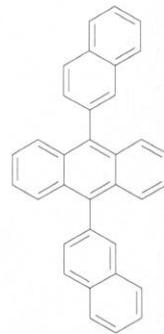
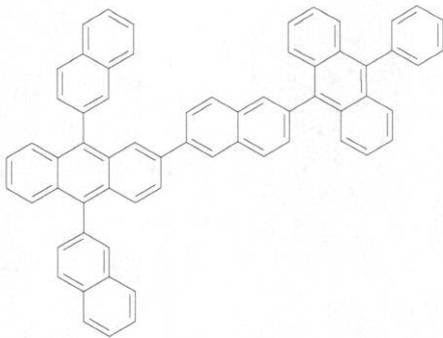
[NPB]



10

[H 1]

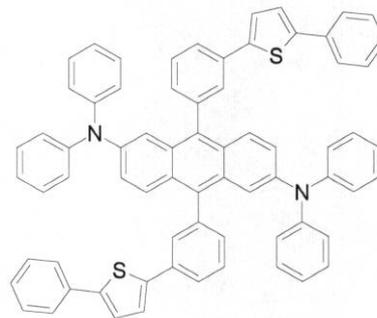
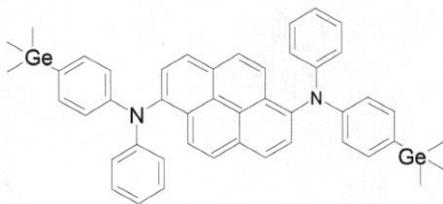
[H 2]



20

[D 1]

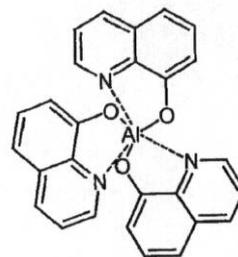
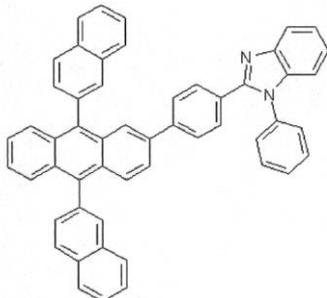
[D 2]



30

[E 1]

[A 1 q<sub>3</sub>]



40

【 0 1 1 4】

<実施例 2>

上記実施例 1 において電子輸送層として化学式 1 - 2 の代わりに化学式 1 - 4 を使用したことを除いては、同一に実験を行った。

50

## 【 0 1 1 5 】

## &lt;実施例 3&gt;

上記実施例 1 において電子輸送層として化学式 1 - 2 の代わりに化学式 1 - 7 を使用したことを除いては、同一に実験を行った。

## 【 0 1 1 6 】

## &lt;実施例 4&gt;

上記実施例 1 において電子輸送層として化学式 1 - 2 の代わりに化学式 1 - 2 4 を使用したことを除いては、同一に実験を行った。

## 【 0 1 1 7 】

## &lt;比較例 1&gt;

上記実施例 1 において電子輸送層として化学式 1 - 2 の代わりに E 1 を使用したことを除いては、同一に実験を行った。

上記実施例のようにそれぞれの化合物を正孔輸送層の物質として使用して製造した有機発光素子を実験した結果を、表 1 に示す。

## 【 0 1 1 8 】

## 【表 1】

実験例 (5mA/cm <sup>2</sup> )	ETL物質	電圧 (V)	効率 (cd/A)	色座標 (x, y)	寿命(Td5) (時間)
比較例 1	E1	4.11	19.05	(0.314, 0.650)	94
実施例 1	化学式 1 - 2	6.28	17.09	(0.315, 0.650)	590
実施例 2	化学式 1 - 4	5.01	19.24	(0.314, 0.655)	256
実施例 3	化学式 1 - 7	4.90	17.88	(0.311, 0.654)	183
実施例 4	化学式 1 - 2 4	5.07	15.63	(0.315, 0.655)	309

10

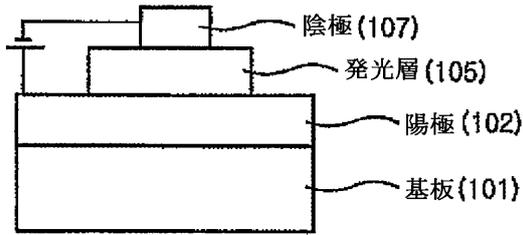
20

30

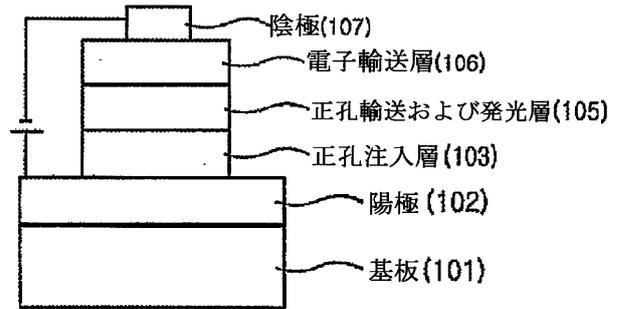
## 【 0 1 1 9 】

上記結果のように、本発明に係る新規な化合物は、多様な置換基などを導入して、有機発光素子をはじめとする有機電子素子の有機物層の材料として使用されることができる。上記本発明に係る化学式 1 で表される化合物を有機物層の材料として用いた有機発光素子をはじめとする有機電子素子は、効率、駆動電圧、寿命などにおいて優れた特性を示す。

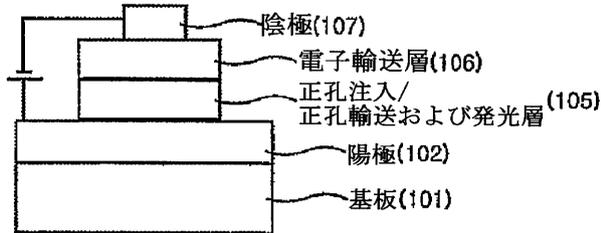
【図 1】



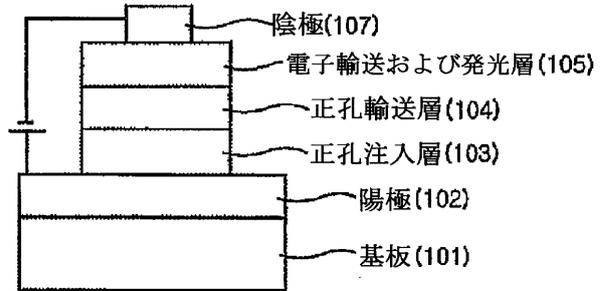
【図 3】



【図 2】



【図 4】



【手続補正書】

【提出日】平成26年1月9日(2014.1.9)

【手続補正 1】

【補正対象書類名】特許請求の範囲

【補正対象項目名】全文

【補正方法】変更

【補正の内容】

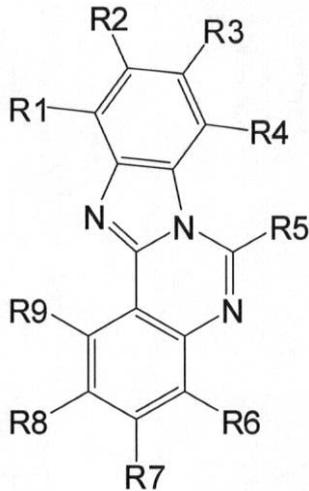
【特許請求の範囲】

【請求項 1】

下記化学式 1 で表される化合物：

【化 1】

[化 1]

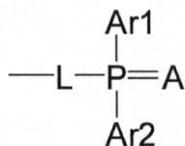


式中、

R 1 ないし R 9 のうち少なくとも一つは下記化学式 2 で表され、残りは、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；置換もしくは非置換のシクロアルキル基；置換もしくは非置換のアルコキシ基；置換もしくは非置換のアリールオキシ基；置換もしくは非置換のアルキルチオキシ基；置換もしくは非置換のアリールチオキシ基；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アリールアミン基；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基；置換もしくは非置換のフルオレニル基；置換もしくは非置換のカルバゾール基；または N、O、S 原子のうち一つ以上を含む置換もしくは非置換の複素環基であり；

【化 2】

[化 2]



式中、

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 N、O、S 原子のうち一つ以上を含む置換もしくは非置換のヘテロアリーレン基であり、

Ar 1 及び Ar 2 は、それぞれ独立して置換もしくは非置換のアリール基；または N、O、S 原子のうち一つ以上を含む置換もしくは非置換の複素環基であり；

A は O、S または Se である。

【請求項 2】

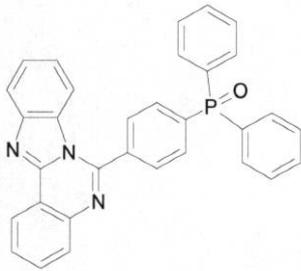
前記化学式 1 の R 5 が前記化学式 2 で表されることを特徴とする請求項 1 に記載の化合物。

【請求項 3】

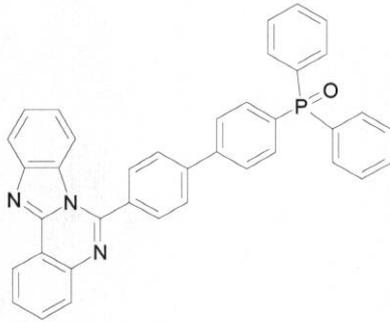
前記化学式 1 で表される化合物は、下記化学式のうちいずれか一つで表されることを特徴とする請求項 1 または 2 に記載の化合物；

## 【化 3】

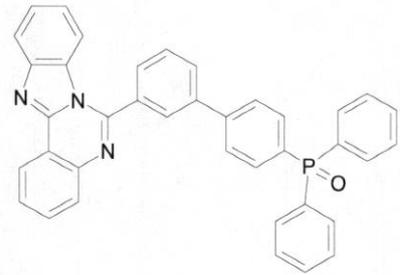
[化 1 - 1]



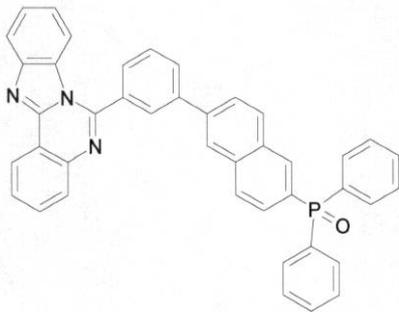
[化 1 - 2]



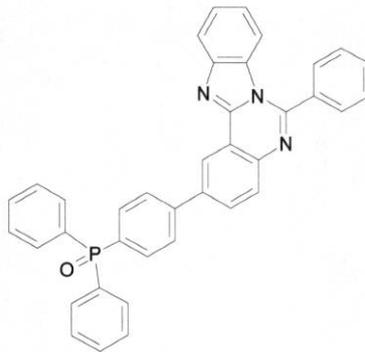
[化 1 - 3]



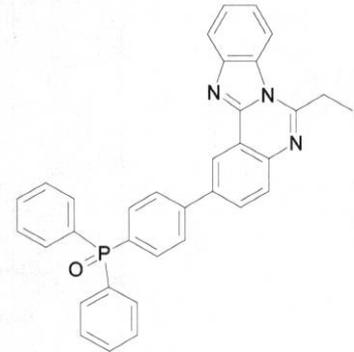
[化 1 - 4]



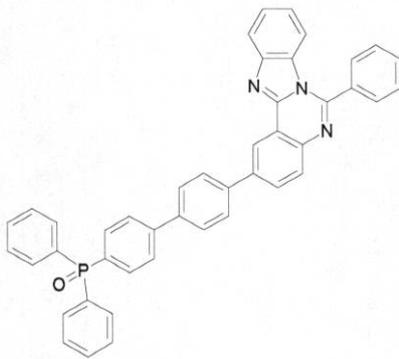
[化 1 - 5]



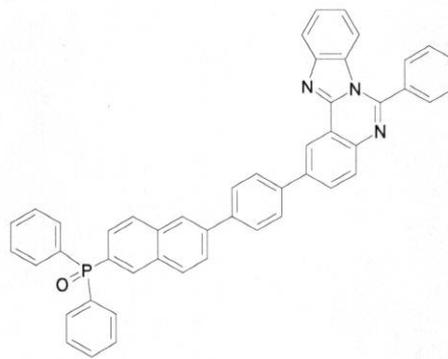
[化 1 - 6]



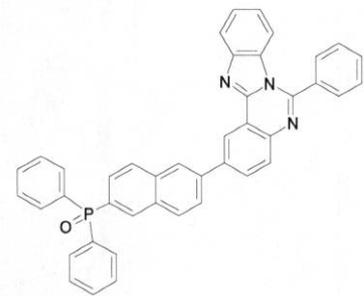
[化 1 - 7]



[化 1 - 8]

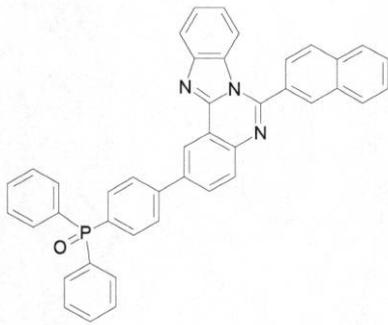


[化 1 - 9]

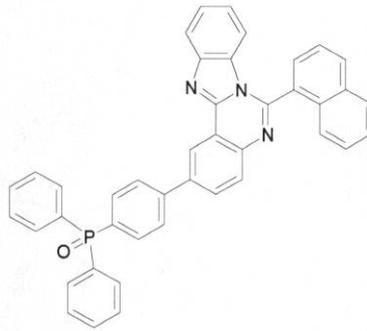


【化 4】

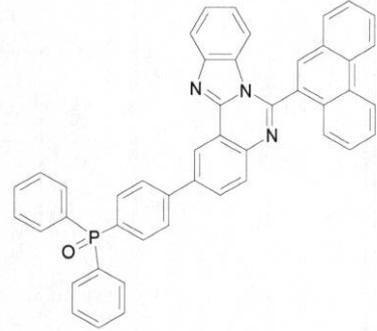
[化1-10]



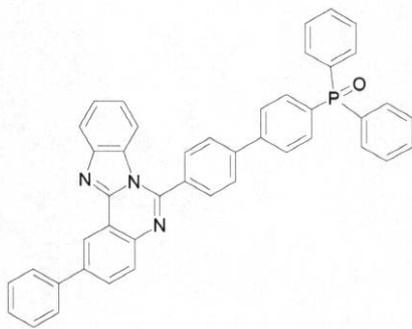
[化1-11]



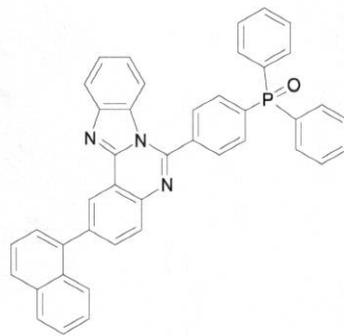
[化1-12]



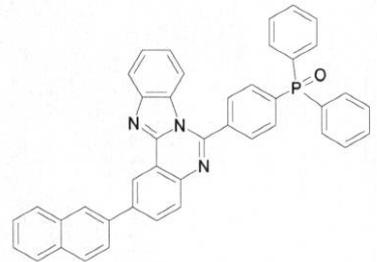
[化1-13]



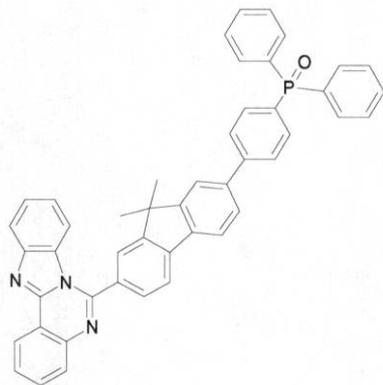
[化1-14]



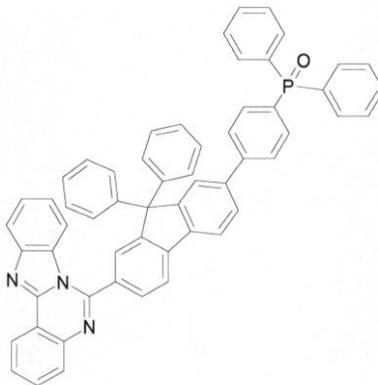
[化1-15]



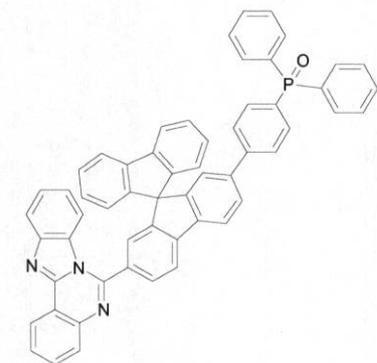
[化1-16]



[化1-17]

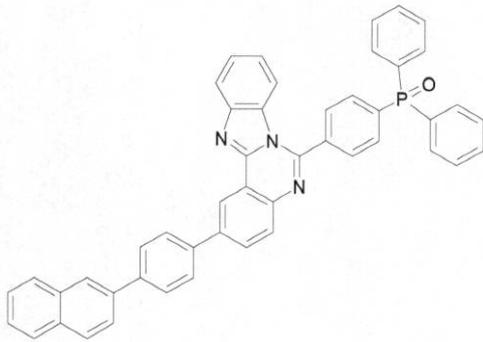


[化1-18]

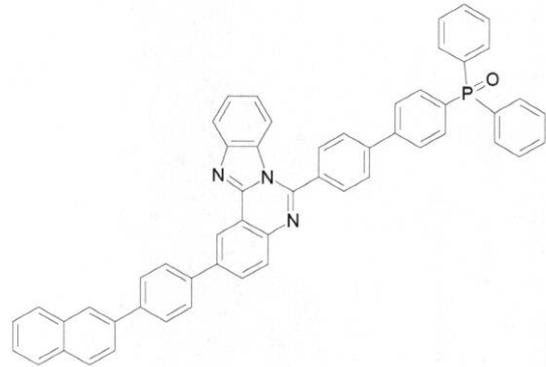


## 【化5】

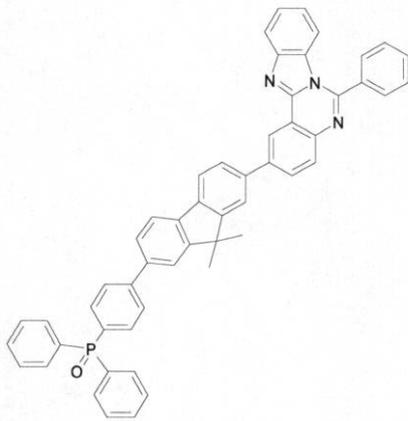
[化1-19]



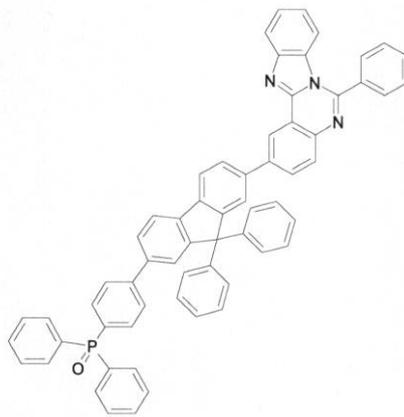
[化1-20]



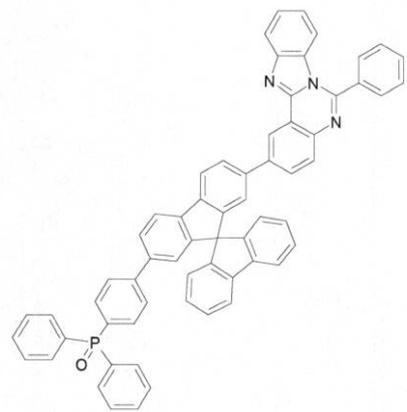
[化1-21]



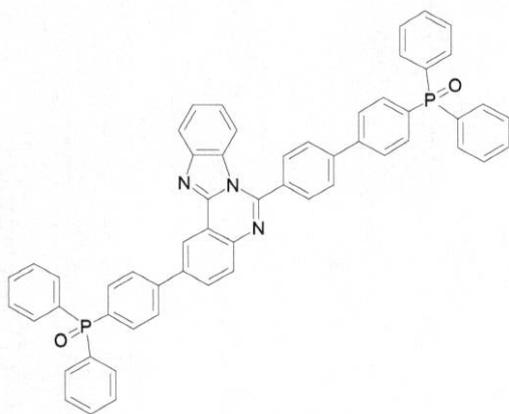
[化1-22]



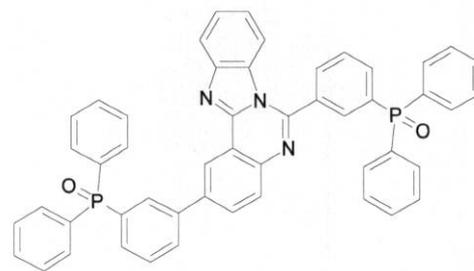
[化1-23]



[化1-24]

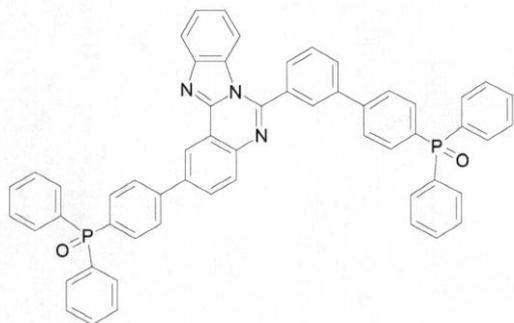


[化1-25]



【化 6】

[化 1 - 2 6]



【請求項 4】

第 1 電極、第 2 電極、及び前記第 1 電極と第 2 電極との間に配置された 1 層以上の有機物層を含む有機電子素子であって、前記有機物層のうち 1 層以上は請求項 1 ないし請求項 3 のいずれか一項に記載の化学式 1 で表される化合物を含むことを特徴とする有機電子素子。

【請求項 5】

前記有機物層は、正孔注入層、正孔輸送層、及び正孔注入及び正孔輸送を同時にする層のうち 1 層以上を含み、前記層のうち 1 層以上が化学式 1 で表される化合物を含むことを特徴とする請求項 4 に記載の有機電子素子。

【請求項 6】

前記有機物層は発光層を含み、前記発光層が化学式 1 で表される化合物を含むことを特徴とする請求項 4 または 5 に記載の有機電子素子。

【請求項 7】

前記有機物層は、電子輸送層、電子注入層、及び電子輸送及び電子注入を同時にする層のうち 1 層以上を含み、前記層のうち 1 層以上が化学式 1 で表示される化合物を含むことを特徴とする請求項 4 から 6 のいずれか一項に記載の有機電子素子。

【請求項 8】

前記有機電子素子は、有機発光素子、有機リン光素子、有機太陽電池、有機感光体 (OPC) 及び有機トランジスタからなる群より選択されることを特徴とする請求項 4 から 7 のいずれか一項に記載の有機電子素子。

## 【 国際調査報告 】

## INTERNATIONAL SEARCH REPORT

International application No.

PCT/KR2012/004629

A. CLASSIFICATION OF SUBJECT MATTER <b>C09K 11/06(2006.01)i, C07D 471/04(2006.01)i, C07F 9/28(2006.01)i, H01L 51/50(2006.01)i</b> 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; C07D 487/04; H05B 33/14; C07F 15/00; C07D 487/00  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) & Keywords: phosphine oxide, electron transporting materials, benzimidazoquinazoline.		
C. DOCUMENTS CONSIDERED TO BE RELEVANT		
Category*	Citation of document, with indication, where appropriate, of the relevant passages	Relevant to claim No.
Y	WO 2007-069847 A1 (LG CHEM. LTD.) 21 June 2007 See abstract and the claims, especially, compound of pages 7, 8.	1-8
Y	KR 10-2005-0037337 A (JINWOONG INDUSTRIAL CO., LTD.) 21 April 2005 See compound of chemical formula 1 and claims 1-14.	1-8
A	WO 2009-100991 A1 (BASF SE) 20 August 2009 See abstract and the claims.	1-8
A	WO 2007-064479 A1 (EASTMAN KODAK COMPANY) 07 June 2007 See abstract and the claims.	1-8
A	US 2005-0123795 A1 (BARBARA LUSSIER et al.) 09 June 2005 See abstract and the claims.	1-8
<input type="checkbox"/> Further documents are listed in the continuation of Box C. <input checked="" type="checkbox"/> See patent family annex.		
* Special categories of cited documents: "A" document defining the general state of the art which is not considered to be of particular relevance "E" earlier application or patent but published on or after the international filing date "L" document which may throw doubts on priority claim(s) or which is cited to establish the publication date of another citation or other special reason (as specified) "O" document referring to an oral disclosure, use, exhibition or other means "P" document published prior to the international filing date but later than the priority date claimed "T" later document published after the international filing date or priority date and not in conflict with the application but cited to understand the principle or theory underlying the invention "X" document of particular relevance; the claimed invention cannot be considered novel or cannot be considered to involve an inventive step when the document is taken alone "Y" document of particular relevance; the claimed invention cannot be considered to involve an inventive step when the document is combined with one or more other such documents, such combination being obvious to a person skilled in the art "&" document member of the same patent family		
Date of the actual completion of the international search <b>30 JANUARY 2013 (30.01.2013)</b>		Date of mailing of the international search report <b>31 JANUARY 2013 (31.01.2013)</b>
Name and mailing address of the ISA/KR  Korean Intellectual Property Office Government Complex-Daejeon, 139 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/KR2012/004629**

Patent document cited in search report	Publication date	Patent family member	Publication date
WO 2007-069847 A1	21.06.2007	CN 101291935 A0 EP 1960402 A1 EP 1960402 A4 JP 05-064407 B2 JP 2009-516652 A KR 10-0864364 B1 KR 10-2007-0062920 A TW 1343410 B US 2007-0131929 A1 US 8053762 B2 WO 2007-069847 A9	22.10.2008 27.08.2008 27.07.2011 17.08.2012 23.04.2009 17.10.2008 18.06.2007 11.06.2011 14.06.2007 08.11.2011 16.12.2010
KR 10-2005-0037337 A	21.04.2005	NONE	
WO 2009-100991 A1	20.08.2009	CN 101970448 A EP 2252624 A1 JP 2011-511821 A KR 10-2010-0123716 A TW 200940554 A US 2011-0089407 A1	09.02.2011 24.11.2010 14.04.2011 24.11.2010 01.10.2009 21.04.2011
WO 2007-064479 A1	07.06.2007	EP 1954782 A1 US 2007-0122655 A1	13.08.2008 31.05.2007
US 2005-0123795 A1	09.06.2005	JP 2007-517382 A KR 10-1128005 B1 KR 10-2006-0122886 A US 7147937 B2 WO 2005-056719 A1	28.06.2007 29.03.2012 30.11.2006 12.12.2006 23.06.2005

국제 조사 보고서

국제출원번호  
**PCT/KR2012/004629**

<b>A. 발명이 속하는 기술분류(국제특허분류(IPC))</b>		
<i>C09K 11/06(2006.01)i, C07D 471/04(2006.01)i, C07F 9/28(2006.01)i, H01L 51/50(2006.01)i</i>		
<b>B. 조사된 분야</b>		
조사된 최소문헌(국제특허분류를 기재) C09K 11/06; C07D 487/04; H05B 33/14; C07F 15/00; C07D 487/00		
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) & 키워드:phosphine oxide, electron transporting materials, benzimidazoquinazoline.		
<b>C. 관련 문헌</b>		
카테고리*	인용문헌명 및 관련 구결(해당하는 경우)의 기재 관련 청구항	
Y	WO 2007-069847 A1 (LG CHEM. LTD.) 2007.06.21 요약 및 청구항, 특히, 페이지 7, 8의 화합물 참조.	1-8
Y	KR 10-2005-0037337 A (주식회사 진용산업) 2005.04.21 화학식 1의 화합물 및 청구항 1-14 참조.	1-8
A	WO 2009-100991 A1 (BASF SE) 2009.08.20 요약 및 청구항 참조.	1-8
A	WO 2007-064479 A1 (EASTMAN KODAK COMPANY) 2007.06.07 요약 및 청구항 참조.	1-8
A	US 2005-0123795 A1 (BARBARA LUSSIER 외 2명) 2005.06.09 요약 및 청구항 참조.	1-8
<input type="checkbox"/> 추가 문헌이 C(계속)에 기재되어 있습니다. <input checked="" type="checkbox"/> 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 2013년 01월 30일 (30.01.2013)	국제조사보고서 발송일 <b>2013년 01월 31일 (31.01.2013)</b>	
ISA/KR의 명칭 및 우편주소 대한민국 특허청 (302-701) 대전광역시 서구 청사로 189, 4동 (문산동, 정부대전청사) 팩스 번호 82-42-472-7140	심사관 오세주 전화번호 82-42-481-5596	



국제조사보고서  
대응특허에 관한 정보

국제출원번호  
**PCT/KR2012/004629**

국제조사보고서에서 인용된 특허문헌	공개일	대응특허문헌	공개일
WO 2007-069847 A1	2007.06.21	CN 101291935 A0 EP 1960402 A1 EP 1960402 A4 JP 05-064407 B2 JP 2009-516652 A KR 10-0864364 B1 KR 10-2007-0062920 A TW 1343410 B US 2007-0131929 A1 US 8053762 B2 WO 2007-069847 A9	2008.10.22 2008.08.27 2011.07.27 2012.08.17 2009.04.23 2008.10.17 2007.06.18 2011.06.11 2007.06.14 2011.11.08 2010.12.16
KR 10-2005-0037337 A	2005.04.21	없음	
WO 2009-100991 A1	2009.08.20	CN 101970448 A EP 2252624 A1 JP 2011-511821 A KR 10-2010-0123716 A TW 200940554 A US 2011-0089407 A1	2011.02.09 2010.11.24 2011.04.14 2010.11.24 2009.10.01 2011.04.21
WO 2007-064479 A1	2007.06.07	EP 1954782 A1 US 2007-0122655 A1	2008.08.13 2007.05.31
US 2005-0123795 A1	2005.06.09	JP 2007-517382 A KR 10-1128005 B1 KR 10-2006-0122886 A US 7147937 B2 WO 2005-056719 A1	2007.06.28 2012.03.29 2006.11.30 2006.12.12 2005.06.23

## 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 B 61/00 3 0 0

(81)指定国 AP(BW, GH, GM, KE, LR, LS, MW, MZ, NA, RW, SD, SL, 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, ML, MR, NE, SN, TD, TG), AE, AG, AL, AM, AO, AT, AU, AZ, BA, BB, BG, BH, BR, BW, BY, BZ, CA, CH, CL, CN, CO, CR, CU, CZ, DE, DK, DM, DO, DZ, EC, EE, EG, ES, FI, GB, GD, GE, GH, GM, GT, HN, HR, HU, ID, IL, IN, IS, JP, KE, KG, KM, KN, KP, KZ, LA, LC, LK, LR, LS, LT, LU, LY, MA, MD, ME, MG, MK, MN, MW, MX, MY, MZ, NA, NG, NI, NO, NZ, OM, PE, PG, PH, PL, PT, QA, RO, RS, RU, RW, SC, SD, SE, SG, SK, SL, SM, ST, SV, SY, TH, TJ, TM, TN, TR, TT, TZ, UA, UG, US, UZ, VC, VN, ZA, ZM

(72)発明者 コンキョム・キム  
大韓民国・テジョン・305-500・ユソン-グ・ヨンサン-ドン・(番地なし)・デドク・テクノ・ヴァレー・12-ダンジ・1210-101

(72)発明者 ドン・フン・イ  
大韓民国・テジョン・301-793・ジュン-グ・ムンホワ・1-ドン・(番地なし)・セントラル・パーク・3-ダンジ・アパート・302-2202

(72)発明者 ジュンギ・ジャン  
大韓民国・テジョン・305-340・ユソン-グ・ドリヨン-ドン・(番地なし)・ヒュンダイ・アパート・102-301

(72)発明者 ミンスン・チュン  
大韓民国・テジョン・305-390・ユソン-グ・ジョンミン-ドン・6ボン-ギル・105・ジェマ・ハウス・#402

Fターム(参考) 3K107 AA01 CC03 CC11 CC21 DD53 DD59 DD67 DD68 DD71 DD74  
DD78  
4H039 CA41 CA42 CD20 CD40 CD90  
4H050 AA01 AA03 AB92 AB99 AC20 BA17 BA48 BE12