



(19) 대한민국특허청(KR)
(12) 공개특허공보(A)

(11) 공개번호 10-2025-0076672
(43) 공개일자 2025년05월29일

(51) 국제특허분류(Int. Cl.)
C07D 307/77 (2006.01) C09K 11/06 (2006.01)
H10K 50/11 (2023.01) H10K 85/60 (2023.01)
(52) CPC특허분류
C07D 307/77 (2013.01)
C09K 11/06 (2022.01)
(21) 출원번호 10-2025-7016189(분할)
(22) 출원일자(국제) 2022년12월26일
심사청구일자 2025년05월16일
(62) 원출원 특허 10-2024-7025276
원출원일자(국제) 2022년12월26일
심사청구일자 2024년11월06일
(85) 번역문제출일자 2025년05월16일
(86) 국제출원번호 PCT/JP2022/048062
(87) 국제공개번호 WO 2023/127844
국제공개일자 2023년07월06일
(30) 우선권주장
JP-P-2021-212989 2021년12월27일 일본(JP)
JP-P-2022-125649 2022년08월05일 일본(JP)

(71) 출원인
이데미쓰 고산 가부시키가이샤
일본 도쿄도 지요다쿠 오테마치 1쵸메 2방 1고
(72) 발명자
구도 유
일본 100-8321 도쿄도 지요다쿠 오테마치 1쵸메
2방 1고 이데미쓰 고산 가부시키가이샤 나이
시라사키 요시나오
일본 100-8321 도쿄도 지요다쿠 오테마치 1쵸메
2방 1고 이데미쓰 고산 가부시키가이샤 나이
(뒷면에 계속)
(74) 대리인
김진희, 김태홍

전체 청구항 수 : 총 24 항

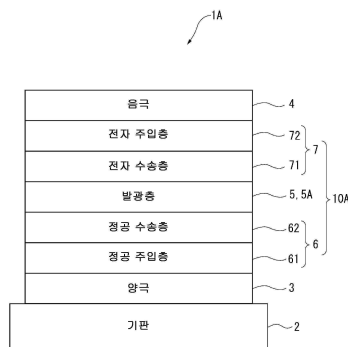
(54) 발명의 명칭 화합물, 유기 일렉트로루미네센스 소자, 및 전자 기기

(57) 요약

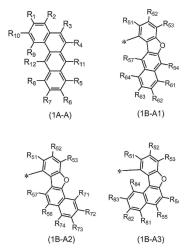
본 발명은 하기 일반식 (1A-A)로 표시되는 화합물에 관한 것이다.

(뒷면에 계속)

대표도



[화학 1A-A]



(상기 일반식 (1A-A)에 있어서, $R_4 \sim R_8$ 및 $R_{10} \sim R_{12}$ 중 하나는, 상기 일반식 (1B-A1)~(1B-A3)으로 표시되는 기 중 어느 하나이고, $R_1 \sim R_3$, R_9 , 및 그 이외의 $R_4 \sim R_8$ 및 $R_{10} \sim R_{12}$ 는 수소 원자, 또는 치환기 등이며, R_{11} 또는 R_{12} 가 상기 일반식 (1B-A1)~(1B-A3)으로 표시되는 기 중 어느 하나인 경우, R_{12} 또는 R_{11} 은 수소 원자 또는 페닐기이고, 상기 일반식 (1B-A1)~(1B-A3)에 있어서, 고리를 형성하지 않는 상기 일반식 (1B-A1)~(1B-A3)에서의 $R_{51} \sim R_{57}$, $R_{61} \sim R_{64}$, $R_{71} \sim R_{74}$, 및 $R_{81} \sim R_{84}$ 는 수소 원자, 또는 치환기 등이며, *는 상기 일반식 (1A-A)에서의 벤즈[a]안트라센화과의 결합 위치를 나타낸다.)

(52) CPC특허분류

H10K 50/11 (2023.02)

H10K 85/622 (2023.02)

H10K 85/6574 (2023.02)

(72) 발명자

미타니 마사토

일본 100-8321 도쿄도 지요다쿠 오테마치 1쵸메 2

방 1고 이데미쓰 고산 가부시키가이샤 나이

하시모토 시그마

일본 100-8321 도쿄도 지요다쿠 오테마치 1쵸메 2

방 1고 이데미쓰 고산 가부시키가이샤 나이

요시다 게이

일본 100-8321 도쿄도 지요다쿠 오테마치 1췌메 2

방 1고 이데미쓰 고산 가부시키가이샤 나이

반 신타로

일본 100-8321 도쿄도 지요다쿠 오테마치 1쵸메 2

방 1고 이데미쓰 고산 가부시키가이샤 나이

이토이 히로아키

일본 100-8321 도쿄도 지요다쿠 오테마치 1쵸메 2

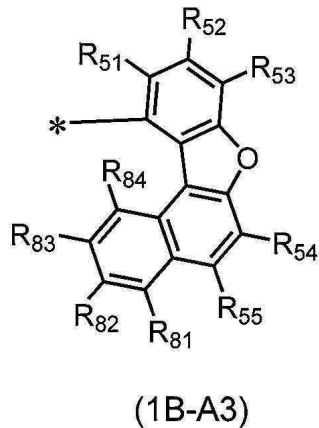
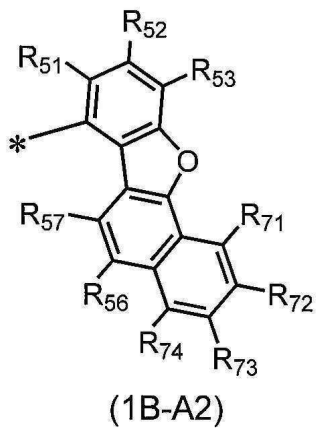
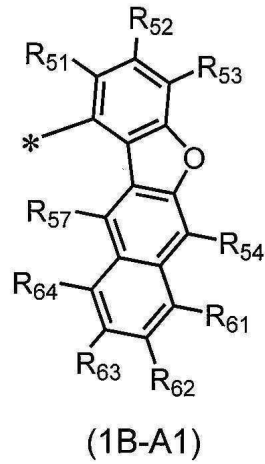
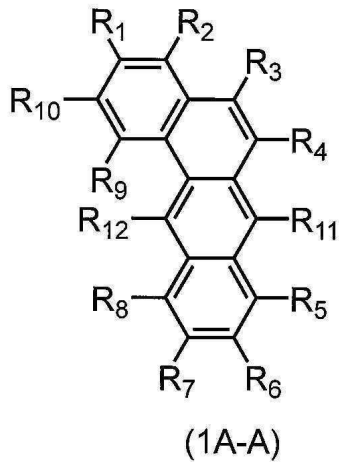
방 1고 이데미쓰 고산 가부시키가이샤 나이

명세서

청구범위

청구항 1

하기 일반식 (1A-A)로 표시되는 화합물.



(상기 일반식 (1A-A)에 있어서,

R₇, R₈, R₁₀, 및 R₁₂ 중 하나는 상기 일반식 (1B-A1), (1B-A2) 또는 (1B-A3)으로 표시되는 기이고,

R₁~R₆, R₉, R₁₁, 그리고 상기 일반식 (1B-A1), (1B-A2) 또는 (1B-A3)으로 표시되는 기 이외의 R₇, R₈, R₁₀ 및 R₁₂는, 각각 독립적으로

수소 원자,

치환 혹은 무치환의 탄소수 1~50의 알킬기,

치환 혹은 무치환의 탄소수 1~50의 할로알킬기,

치환 혹은 무치환의 탄소수 2~50의 알케닐기,

치환 혹은 무치환의 탄소수 2~50의 알키닐기,

치환 혹은 무치환의 고리 형성 탄소수 3~50의 시클로알킬기,

-Si(R₉₀₁)(R₉₀₂)(R₉₀₃)으로 표시되는 기,

-O-(R₉₀₄)로 표시되는 기,
 -S-(R₉₀₅)로 표시되는 기,
 치환 혹은 무치환의 탄소수 7~50의 아랄킬기,
 -C(=O)R₈₀₁로 표시되는 기,
 -COOR₈₀₂로 표시되는 기,
 할로겐 원자,
 시아노기,
 니트로기,
 치환 혹은 무치환의 고리 형성 탄소수 6~50의 아릴기, 또는
 치환 혹은 무치환의 고리 형성 원자수 5~50의 복소환기이며,
 R₁₂가 상기 일반식 (1B-A1), (1B-A2) 또는 (1B-A3)으로 표시되는 기인 경우, R₁₁은 수소 원자 또는 치환 혹은 무치환의 페닐기이고,
 상기 일반식 (1B-A1)에 있어서,
 R₅₁~R₅₄, R₅₇, 및 R₆₁~R₆₄ 중 인접한 2개 이상으로 이루어지는 조의 1조 이상이,
 서로 결합하여 치환 혹은 무치환의 단환을 형성하거나,
 서로 결합하여 치환 혹은 무치환의 축합환을 형성하거나, 또는
 서로 결합하지 않으며,
 상기 치환 혹은 무치환의 단환을 형성하지 않고, 또한 상기 치환 혹은 무치환의 축합환을 형성하지 않는 R₅₁~R₅₄, R₅₇, 및 R₆₁~R₆₄는, 각각 독립적으로
 수소 원자,
 치환 혹은 무치환의 탄소수 1~50의 알킬기,
 치환 혹은 무치환의 탄소수 2~50의 알케닐기,
 치환 혹은 무치환의 탄소수 2~50의 알키닐기,
 치환 혹은 무치환의 고리 형성 탄소수 3~50의 시클로알킬기,
 -Si(R₉₀₁)(R₉₀₂)(R₉₀₃)으로 표시되는 기,
 -O-(R₉₀₄)로 표시되는 기,
 -S-(R₉₀₅)로 표시되는 기,
 -N(R₉₀₆)(R₉₀₇)로 표시되는 기,
 할로겐 원자,
 시아노기,
 니트로기,
 치환 혹은 무치환의 고리 형성 탄소수 6~50의 아릴기, 또는
 치환 혹은 무치환의 고리 형성 원자수 5~50의 복소환기이며,
 *는 상기 일반식 (1A-A) 중의 벤즈[a]안트라센환과의 결합 위치를 나타내고,

상기 일반식 (1B-A2)에 있어서,

$R_{51} \sim R_{53}$, R_{56} , R_{57} , 및 $R_{71} \sim R_{74}$ 중의 인접한 2개 이상으로 이루어지는 조의 1조 이상이,

서로 결합하여 치환 혹은 무치환의 단환을 형성하거나,

서로 결합하여 치환 혹은 무치환의 축합환을 형성하거나, 또는

서로 결합하지 않으며,

상기 치환 혹은 무치환의 단환을 형성하지 않고, 또한 상기 치환 혹은 무치환의 축합환을 형성하지 않는 $R_{51} \sim R_{53}$, R_{56} , R_{57} , 및 $R_{71} \sim R_{74}$ 는, 각각 독립적으로 상기 일반식 (1B-A1)에 있어서의 $R_{51} \sim R_{54}$, R_{57} , 및 $R_{61} \sim R_{64}$ 와 동일한 의미이며,

*는 상기 일반식 (1A-A) 중의 벤즈[a]안트라센환과의 결합 위치를 나타내고,

상기 일반식 (1B-A3)에 있어서,

$R_{51} \sim R_{55}$ 및 $R_{81} \sim R_{84}$ 중 인접한 2개 이상으로 이루어지는 조의 1조 이상이,

서로 결합하여 치환 혹은 무치환의 단환을 형성하거나,

서로 결합하여 치환 혹은 무치환의 축합환을 형성하거나, 또는

서로 결합하지 않으며,

상기 치환 혹은 무치환의 단환을 형성하지 않고, 또한 상기 치환 혹은 무치환의 축합환을 형성하지 않는 $R_{51} \sim R_{55}$, 및 $R_{81} \sim R_{84}$ 는, 각각 독립적으로 상기 일반식 (1B-A1)에 있어서의 $R_{51} \sim R_{54}$, R_{57} , 및 $R_{61} \sim R_{64}$ 와 동일한 의미이며,

*는 상기 일반식 (1A-A) 중의 벤즈[a]안트라센환과의 결합 위치를 나타낸다.)

(상기 일반식 (1A-A)로 표시되는 화합물에 있어서, R_{901} , R_{902} , R_{903} , R_{904} , R_{905} , R_{906} , R_{907} , R_{801} , 및 R_{802} 는, 각각 독립적으로

수소 원자,

치환 혹은 무치환의 탄소수 1~50의 알킬기,

치환 혹은 무치환의 고리 형성 탄소수 3~50의 시클로알킬기,

치환 혹은 무치환의 고리 형성 탄소수 6~50의 아릴기, 또는

치환 혹은 무치환의 고리 형성 원자수 5~50의 복소환기이고,

R_{901} 이 복수 존재하는 경우, 복수의 R_{901} 은 서로 동일하거나 또는 상이하하며,

R_{902} 가 복수 존재하는 경우, 복수의 R_{902} 는 서로 동일하거나 또는 상이하고,

R_{903} 이 복수 존재하는 경우, 복수의 R_{903} 은 서로 동일하거나 또는 상이하하며,

R_{904} 가 복수 존재하는 경우, 복수의 R_{904} 는 서로 동일하거나 또는 상이하고,

R_{905} 가 복수 존재하는 경우, 복수의 R_{905} 는 서로 동일하거나 또는 상이하하며,

R_{906} 이 복수 존재하는 경우, 복수의 R_{906} 은 서로 동일하거나 또는 상이하고,

R_{907} 이 복수 존재하는 경우, 복수의 R_{907} 은 서로 동일하거나 또는 상이하하며,

R_{801} 이 복수 존재하는 경우, 복수의 R_{801} 은 서로 동일하거나 또는 상이하고,

R_{802} 가 복수 존재하는 경우, 복수의 R_{802} 는 서로 동일하거나 또는 상이하다.)

청구항 2

제1항에 있어서,

R_7 , R_8 , R_{10} , 및 R_{12} 중 하나는 상기 일반식 (1B-A2)로 표시되는 기인,

화합물.

청구항 3

제2항에 있어서,

상기 일반식 (1B-A2)로 표시되는 기에 있어서의 상기 치환 혹은 무치환의 단환을 형성하지 않고, 또한 상기 치환 혹은 무치환의 축합환을 형성하지 않는 상기 일반식 (1B-A2) 중의 $R_{51} \sim R_{53}$, R_{56} , R_{57} , 및 $R_{71} \sim R_{74}$ 중 적어도 하나가 수소 원자인,

화합물.

청구항 4

제3항에 있어서,

상기 일반식 (1B-A2)로 표시되는 기에 있어서의 상기 치환 혹은 무치환의 단환을 형성하지 않고, 또한 상기 치환 혹은 무치환의 축합환을 형성하지 않는 상기 일반식 (1B-A2) 중의 $R_{51} \sim R_{53}$, R_{56} , R_{57} , 및 $R_{71} \sim R_{74}$ 전부가 수소 원자인,

화합물.

청구항 5

제2항에 있어서,

$R_1 \sim R_6$, R_9 , R_{11} , 그리고 상기 일반식 (1B-A2)로 표시되는 기 이외의 R_7 , R_8 , R_{10} , 및 R_{12} 는 수소 원자인,

화합물.

청구항 6

제2항에 있어서,

상기 일반식 (1B-A2)에 있어서의 $R_{51} \sim R_{53}$, R_{56} , R_{57} , 및 $R_{71} \sim R_{74}$ 중의 인접한 2개 이상으로 이루어지는 조가 서로 결합하지 않는,

화합물.

청구항 7

제2항에 있어서,

R_{12} 가 상기 일반식 (1B-A2)로 표시되는 기인,

화합물.

청구항 8

제1항 내지 제7항 중 어느 한 항에 있어서,

상기 「치환 혹은 무치환」이라고 기재된 기는 모두 「무치환」의 기이고,

상기 「치환 혹은 무치환」이라고 기재된 고리는 모두 「무치환」의 고리인,

화합물.

청구항 9

제7항에 있어서,
R₁₁은 수소 원자인,
화합물.

청구항 10

제7항에 있어서,
R₁~R₆, R₇, R₈, R₉, R₁₀, 및 R₁₁은 수소 원자인,
화합물.

청구항 11

제7항에 있어서,
R₁~R₆, R₇, R₈, R₉, R₁₀, 및 R₁₁은 경수소 원자이고,

상기 일반식 (1B-A2)로 표시되는 기에 있어서의 상기 치환 혹은 무치환의 단환을 형성하지 않으며, 또한 상기 치환 혹은 무치환의 축합환을 형성하지 않는 상기 일반식 (1B-A2) 중의 R₅₁~R₅₃, R₅₆, R₅₇, 및 R₇₁~R₇₄가 경수소 원자인,
화합물.

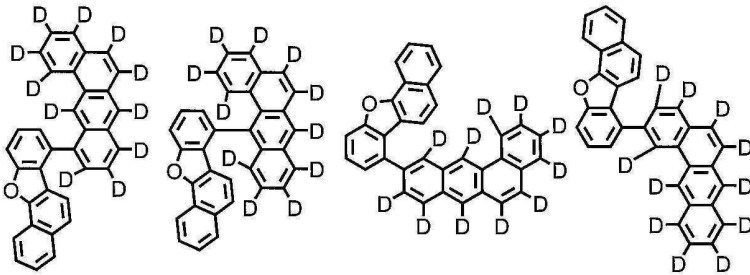
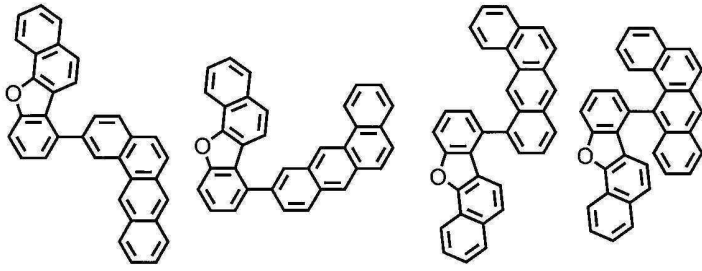
청구항 12

제1항 내지 제7항 중 어느 한 항에 있어서,
분자 내에 하나 이상의 중수소 원자를 갖는,
화합물.

청구항 13

제1항에 있어서,
상기 일반식 (1A-A)로 표시되는 화합물은, 하기 화합물로 이루어진 군으로부터 선택되는 어느 하나인,

화합물.



청구항 14

제1항 내지 제7항 중 어느 한 항에 기재된 화합물을 함유하는,
유기 일렉트로루미네센스 소자.

청구항 15

제14항에 있어서,
양극과,
음극과,
상기 양극과 상기 음극 사이에 배치된 유기층을 가지며,
상기 유기층 중 적어도 1층은 상기 화합물을 함유하는,
유기 일렉트로루미네센스 소자.

청구항 16

제15항에 있어서,
상기 유기층은 발광 영역을 가지며,
상기 발광 영역은 적어도 하나의 발광층을 포함하고,
상기 발광층은 상기 화합물을 함유하는,
유기 일렉트로루미네센스 소자.

청구항 17

제16항에 있어서,
상기 발광 영역은 제1 발광층 및 제2 발광층을 포함하고,
상기 제1 발광층은 제1 화합물로서 상기 화합물을 함유하며, 상기 제2 발광층은 제2 화합물을 함유하는,
유기 일렉트로루미네센스 소자.

청구항 18

제17항에 있어서,

상기 제1 화합물의 삼중항 에너지 $T_1(H1)$ 과 상기 제2 화합물의 삼중항 에너지 $T_1(H2)$ 이 하기 수식(수학식 1)의 관계를 충족시키는,

유기 일렉트로루미네센스 소자.

$$T_1(H1) > T_1(H2) \dots (\text{수학식 1})$$

청구항 19

제17항에 있어서,

상기 제1 발광층과 상기 제2 발광층이 직접 접하고 있는,

유기 일렉트로루미네센스 소자.

청구항 20

제17항에 있어서,

상기 제1 발광층은 상기 양극과 상기 제2 발광층 사이에 배치되어 있는,

유기 일렉트로루미네센스 소자.

청구항 21

제17항에 있어서,

상기 제1 발광층은 제1 발광성 화합물을 함유하고,

상기 제2 발광층은 제2 발광성 화합물을 함유하며,

상기 제1 발광성 화합물 및 상기 제2 발광성 화합물은, 각각 독립적으로 최대 피크 파장이 500 nm 이하인 발광을 나타내는 화합물인,

유기 일렉트로루미네센스 소자.

청구항 22

제16항에 있어서,

상기 양극과 상기 발광 영역의 사이에 정공 수송층을 갖는,

유기 일렉트로루미네센스 소자.

청구항 23

제16항에 있어서,

상기 음극과 상기 발광 영역의 사이에 전자 수송층을 갖는,

유기 일렉트로루미네센스 소자.

청구항 24

제14항에 기재된 유기 일렉트로루미네센스 소자를 탑재한 전자 기기.

발명의 설명

기술 분야

[0001] 본 발명은, 화합물, 유기 일렉트로루미네센스 소자, 및 전자 기기에 관한 것이다.

배경 기술

- [0002] 유기 일렉트로루미네센스 소자(이하, 「유기 EL 소자」라고 하는 경우가 있음)는, 휴대전화 및 텔레비전 등의 풀 컬러 디스플레이에 응용되고 있다. 유기 EL 소자에 전압을 인가하면, 양극으로부터 정공이 발광층에 주입되고, 또한 음극으로부터 전자가 발광층에 주입된다. 그리고, 발광층에 있어서, 주입된 정공과 전자가 재결합하여, 여기자가 형성된다. 이때, 전자 스핀의 통계칙에 의해, 일중항 여기자가 25%의 비율로 생성되며, 그리고 삼중항 여기자가 75%의 비율로 생성된다.
- [0003] 유기 EL 소자의 성능 향상을 도모하기 위해, 유기 EL 소자에 이용하는 화합물에 대해서 다양한 검토가 이루어지고 있다(예컨대, 특허문헌 1 및 특허문헌 2 참조). 유기 EL 소자의 성능으로서, 예컨대 휘도, 발광 파장, 색도, 발광 효율, 구동 전압, 및 수명을 들 수 있다.
- [0004] [선행기술문헌]
- [0005] [특허문헌]
- [0006] (특허문헌 1) [특허문헌 1] 국제 공개 제2021/132535호
- [0007] (특허문헌 2) [특허문헌 2] 일본 특허 공개 제2021-090050호 공보

발명의 내용

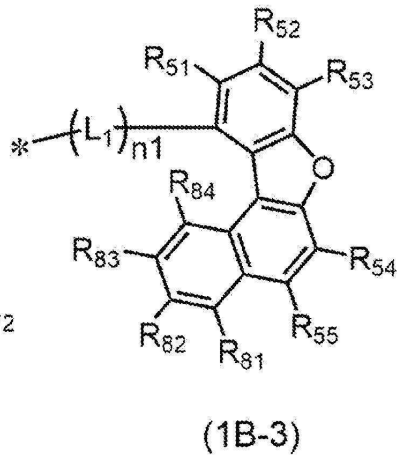
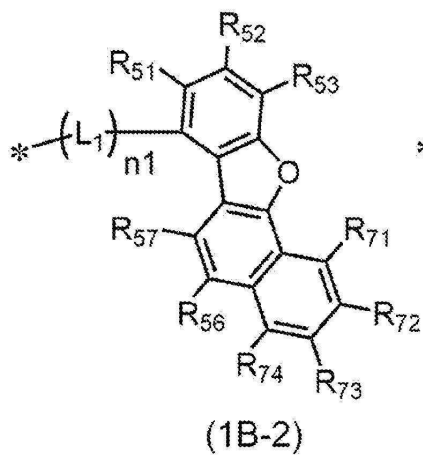
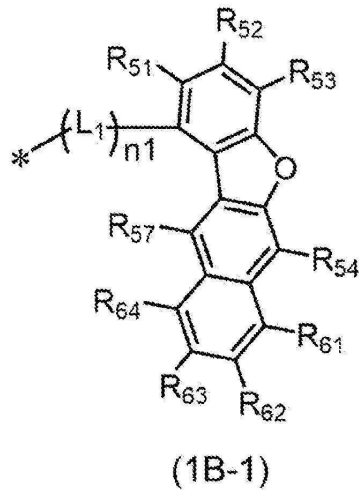
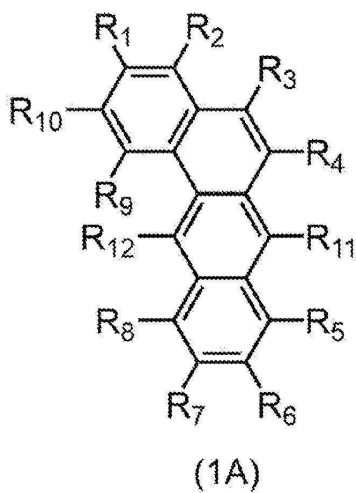
해결하려는 과제

- [0008] 본 발명의 목적의 하나는, 유기 일렉트로루미네센스 소자의 수명을 향상시킬 수 있는 화합물, 해당 화합물을 포함하는 유기 일렉트로루미네센스 소자, 및 해당 유기 일렉트로루미네센스 소자를 탑재한 전자 기기를 제공하는 것이다.
- [0009] 또한, 본 발명의 다른 목적의 하나는, 수명이 향상된 유기 일렉트로루미네센스 소자, 및 해당 유기 일렉트로루미네센스 소자를 탑재한 전자 기기를 제공하는 것이다.

과제의 해결 수단

- [0010] 본 발명의 일 양태에 따르면, 하기 일반식 (1A)로 표시되는 화합물이 제공된다.

[0011] [화학식 1]



[0012]

[0013] (상기 일반식 (1A)에 있어서,

[0014] $R_4 \sim R_8$ 및 $R_{10} \sim R_{12}$ 중 하나는 상기 일반식 (1B-1), (1B-2) 또는 (1B-3)으로 표시되는 기이고,

[0015] $R_1 \sim R_3$, R_9 , 및 상기 일반식 (1B-1), (1B-2) 또는 (1B-3)으로 표시되는 기 이외의 $R_4 \sim R_8$ 및 $R_{10} \sim R_{12}$ 는, 각각 독립적으로

[0016] 수소 원자,

[0017] 치환 혹은 무치환의 탄소수 1~50의 알킬기,

[0018] 치환 혹은 무치환의 탄소수 1~50의 할로알킬기,

[0019] 치환 혹은 무치환의 탄소수 2~50의 알케닐기,

[0020] 치환 혹은 무치환의 탄소수 2~50의 알키닐기,

[0021] 치환 혹은 무치환의 고리 형성 탄소수 3~50의 시클로알킬기,

[0022] $-\text{Si}(\text{R}_{901})(\text{R}_{902})(\text{R}_{903})$ 으로 표시되는 기,

[0023] $-\text{O}(\text{R}_{904})$ 로 표시되는 기,

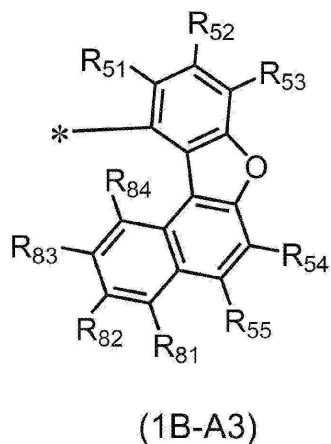
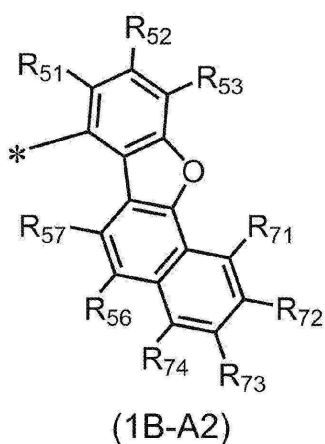
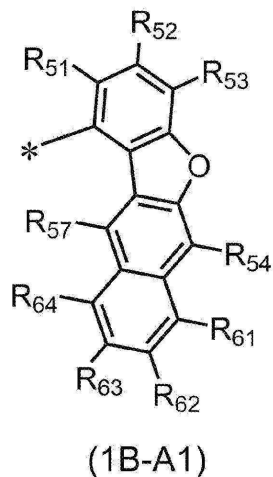
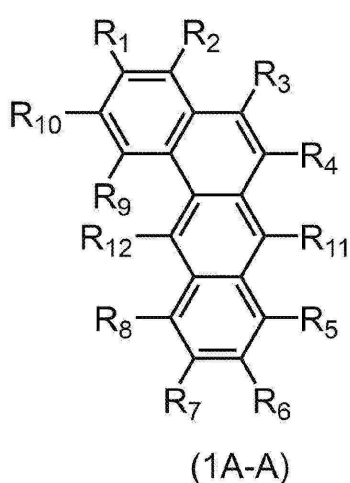
[0024] $-\text{S}(\text{R}_{905})$ 로 표시되는 기,

[0025] 치환 혹은 무치환의 탄소수 7~50의 아랄킬기,

- [0026] $-C(=O)R_{801}$ 로 표시되는 기,
- [0027] $-COOR_{802}$ 로 표시되는 기,
- [0028] 할로겐 원자,
- [0029] 시아노기,
- [0030] 니트로기,
- [0031] 치환 혹은 무치환의 고리 형성 탄소수 6~50의 아릴기, 또는
- [0032] 치환 혹은 무치환의 고리 형성 원자수 5~50의 복소환기이며,
- [0033] R_{11} 이 상기 일반식 (1B-1), (1B-2) 또는 (1B-3)으로 표시되는 기인 경우, R_{12} 는 수소 원자 또는 치환 혹은 무치환의 페닐기이고,
- [0034] R_{12} 가 상기 일반식 (1B-1), (1B-2) 또는 (1B-3)으로 표시되는 기인 경우, R_{11} 은 수소 원자 또는 치환 혹은 무치환의 페닐기이며,
- [0035] 상기 일반식 (1B-1), (1B-2) 및 (1B-3)으로 표시되는 기에 있어서,
- [0036] n_1 은 0, 1, 2, 또는 3이고,
- [0037] n_1 이 1, 2, 또는 3인 경우의 L_1 은,
- [0038] 치환 혹은 무치환의 고리 형성 탄소수 6~50의 아릴렌기, 또는
- [0039] 치환 혹은 무치환의 고리 형성 원자수 5~50의 2가의 복소환기이며,
- [0040] L_1 이 2 이상 존재하는 경우, 2 이상의 L_1 은 서로 동일하거나 또는 상이하고,
- [0041] 상기 일반식 (1B-1)에 있어서,
- [0042] $R_{51} \sim R_{54}$, R_{57} , 및 $R_{61} \sim R_{64}$ 중의 인접한 2개 이상으로 이루어지는 조의 1조 이상이,
- [0043] 서로 결합하여 치환 혹은 무치환의 단환을 형성하거나,
- [0044] 서로 결합하여 치환 혹은 무치환의 축합환을 형성하거나, 또는
- [0045] 서로 결합하지 않으며,
- [0046] 상기 치환 혹은 무치환의 단환을 형성하지 않고, 또한 상기 치환 혹은 무치환의 축합환을 형성하지 않는 $R_{51} \sim R_{54}$, R_{57} , 및 $R_{61} \sim R_{64}$ 는, 각각 독립적으로
- [0047] 수소 원자,
- [0048] 치환 혹은 무치환의 탄소수 1~50의 알킬기,
- [0049] 치환 혹은 무치환의 탄소수 2~50의 알케닐기,
- [0050] 치환 혹은 무치환의 탄소수 2~50의 알킬닐기,
- [0051] 치환 혹은 무치환의 고리 형성 탄소수 3~50의 시클로알킬기,
- [0052] $-Si(R_{901})(R_{902})(R_{903})$ 으로 표시되는 기,
- [0053] $-O(R_{904})$ 로 표시되는 기,
- [0054] $-S(R_{905})$ 로 표시되는 기,
- [0055] $-N(R_{906})(R_{907})$ 로 표시되는 기,
- [0056] 할로겐 원자,

- [0057] 시아노기,
- [0058] 니트로기,
- [0059] 치환 혹은 무치환의 고리 형성 탄소수 6~50의 아릴기, 또는
- [0060] 치환 혹은 무치환의 고리 형성 원자수 5~50의 복소환기이며,
- [0061] *는 상기 일반식 (1A)에서의 벤즈[a]안트라센환과의 결합 위치를 나타내고,
- [0062] 상기 일반식 (1B-2)에 있어서,
- [0063] $R_{51} \sim R_{53}$, R_{56} , R_{57} , 및 $R_{71} \sim R_{74}$ 중의 인접한 2개 이상으로 이루어지는 조의 1조 이상이,
- [0064] 서로 결합하여 치환 혹은 무치환의 단환을 형성하거나,
- [0065] 서로 결합하여 치환 혹은 무치환의 축합환을 형성하거나, 또는
- [0066] 서로 결합하지 않으며,
- [0067] 상기 치환 혹은 무치환의 단환을 형성하지 않고, 또한 상기 치환 혹은 무치환의 축합환을 형성하지 않는 $R_{51} \sim R_{53}$, R_{56} , R_{57} , 및 $R_{71} \sim R_{74}$ 는, 각각 독립적으로 상기 일반식 (1B-1)에 있어서의 $R_{51} \sim R_{54}$, R_{57} , 및 $R_{61} \sim R_{64}$ 와 동일한 의미이며,
- [0068] *는 상기 일반식 (1A)에서의 벤즈[a]안트라센환과의 결합 위치를 나타내고,
- [0069] 상기 일반식 (1B-3)에 있어서,
- [0070] $R_{51} \sim R_{55}$, 및 $R_{81} \sim R_{84}$ 중의 인접한 2개 이상으로 이루어지는 조의 1조 이상이,
- [0071] 서로 결합하여 치환 혹은 무치환의 단환을 형성하거나,
- [0072] 서로 결합하여 치환 혹은 무치환의 축합환을 형성하거나, 또는
- [0073] 서로 결합하지 않으며,
- [0074] 상기 치환 혹은 무치환의 단환을 형성하지 않고, 또한 상기 치환 혹은 무치환의 축합환을 형성하지 않는 $R_{51} \sim R_{55}$, 및 $R_{81} \sim R_{84}$ 는, 각각 독립적으로 상기 일반식 (1B-1)에 있어서의 $R_{51} \sim R_{54}$, R_{57} , 및 $R_{61} \sim R_{64}$ 와 동일한 의미이며,
- [0075] *는 상기 일반식 (1A)에서의 벤즈[a]안트라센환과의 결합 위치를 나타낸다.)
- [0076] (상기 일반식 (1A)로 표시되는 화합물에 있어서, R_{901} , R_{902} , R_{903} , R_{904} , R_{905} , R_{906} , R_{907} , R_{801} , 및 R_{802} 는, 각각 독립적으로
- [0077] 수소 원자,
- [0078] 치환 혹은 무치환의 탄소수 1~50의 알킬기,
- [0079] 치환 혹은 무치환의 고리 형성 탄소수 3~50의 시클로알킬기,
- [0080] 치환 혹은 무치환의 고리 형성 탄소수 6~50의 아릴기, 또는
- [0081] 치환 혹은 무치환의 고리 형성 원자수 5~50의 복소환기이고,
- [0082] R_{901} 이 복수 존재하는 경우, 복수의 R_{901} 은 서로 동일하거나 또는 상이하며,
- [0083] R_{902} 가 복수 존재하는 경우, 복수의 R_{902} 는 서로 동일하거나 또는 상이하고,
- [0084] R_{903} 이 복수 존재하는 경우, 복수의 R_{903} 은 서로 동일하거나 또는 상이하며,
- [0085] R_{904} 가 복수 존재하는 경우, 복수의 R_{904} 는 서로 동일하거나 또는 상이하고,
- [0086] R_{905} 가 복수 존재하는 경우, 복수의 R_{905} 는 서로 동일하거나 또는 상이하며,

- [0087] R_{906} 이 복수 존재하는 경우, 복수의 R_{906} 은 서로 동일하거나 또는 상이하고,
- [0088] R_{907} 이 복수 존재하는 경우, 복수의 R_{907} 은 서로 동일하거나 또는 상이하며,
- [0089] R_{801} 이 복수 존재하는 경우, 복수의 R_{801} 은 서로 동일하거나 또는 상이하고,
- [0090] R_{802} 가 복수 존재하는 경우, 복수의 R_{802} 는 서로 동일하거나 또는 상이하다.)
- [0091] 본 발명의 일 양태에 따르면, 하기 일반식 (1A-A)로 표시되는 화합물이 제공된다.
- [0092] [화학식 2]



- [0093]
- [0094] (상기 일반식 (1A-A)에 있어서,
- [0095] $R_4 \sim R_8$ 및 $R_{10} \sim R_{12}$ 중의 하나는 상기 일반식 (1B-A1), (1B-A2) 또는 (1B-A3)으로 표시되는 기이고,
- [0096] $R_1 \sim R_3$, R_9 , 및 상기 일반식 (1B-A1), (1B-A2) 또는 (1B-A3)으로 표시되는 기 이외의 $R_4 \sim R_8$ 및 $R_{10} \sim R_{12}$ 는, 각각 독립적으로
- [0097] 수소 원자,
- [0098] 치환 혹은 무치환의 탄소수 1~50의 알킬기,
- [0099] 치환 혹은 무치환의 탄소수 1~50의 할로알킬기,
- [0100] 치환 혹은 무치환의 탄소수 2~50의 알케닐기,
- [0101] 치환 혹은 무치환의 탄소수 2~50의 알키닐기,

- [0102] 치환 혹은 무치환의 고리 형성 탄소수 3~50의 시클로알킬기,
- [0103] $-\text{Si}(\text{R}_{901})(\text{R}_{902})(\text{R}_{903})$ 으로 표시되는 기,
- [0104] $-\text{O}-(\text{R}_{904})$ 로 표시되는 기,
- [0105] $-\text{S}-(\text{R}_{905})$ 로 표시되는 기,
- [0106] 치환 혹은 무치환의 탄소수 7~50의 아랄킬기,
- [0107] $-\text{C}(=\text{O})\text{R}_{801}$ 로 표시되는 기,
- [0108] $-\text{COOR}_{802}$ 로 표시되는 기,
- [0109] 할로젠 원자,
- [0110] 시아노기,
- [0111] 니트로기,
- [0112] 치환 혹은 무치환의 고리 형성 탄소수 6~50의 아릴기, 또는
- [0113] 치환 혹은 무치환의 고리 형성 원자수 5~50의 복소환기이며,
- [0114] R_{11} 이 상기 일반식 (1B-A1), (1B-A2) 또는 (1B-A3)으로 표시되는 기인 경우, R_{12} 는 수소 원자 또는 치환 혹은 무치환의 페닐기이고,
- [0115] R_{12} 가 상기 일반식 (1B-A1), (1B-A2) 또는 (1B-A3)으로 표시되는 기인 경우, R_{11} 은 수소 원자 또는 치환 혹은 무치환의 페닐기이며,
- [0116] 상기 일반식 (1B-A1)에 있어서,
- [0117] $\text{R}_{51} \sim \text{R}_{54}$, R_{57} , 및 $\text{R}_{61} \sim \text{R}_{64}$ 중의 인접한 2개 이상으로 이루어지는 조의 1조 이상이,
- [0118] 서로 결합하여 치환 혹은 무치환의 단환을 형성하거나,
- [0119] 서로 결합하여 치환 혹은 무치환의 축합환을 형성하거나, 또는
- [0120] 서로 결합하지 않으며,
- [0121] 상기 치환 혹은 무치환의 단환을 형성하지 않고, 또한 상기 치환 혹은 무치환의 축합환을 형성하지 않는 $\text{R}_{51} \sim \text{R}_{54}$, R_{57} , 및 $\text{R}_{61} \sim \text{R}_{64}$ 는, 각각 독립적으로
- [0122] 수소 원자,
- [0123] 치환 혹은 무치환의 탄소수 1~50의 알킬기,
- [0124] 치환 혹은 무치환의 탄소수 2~50의 알케닐기,
- [0125] 치환 혹은 무치환의 탄소수 2~50의 알키닐기,
- [0126] 치환 혹은 무치환의 고리 형성 탄소수 3~50의 시클로알킬기,
- [0127] $-\text{Si}(\text{R}_{901})(\text{R}_{902})(\text{R}_{903})$ 으로 표시되는 기,
- [0128] $-\text{O}-(\text{R}_{904})$ 로 표시되는 기,
- [0129] $-\text{S}-(\text{R}_{905})$ 로 표시되는 기,
- [0130] $-\text{N}(\text{R}_{906})(\text{R}_{907})$ 로 표시되는 기,
- [0131] 할로젠 원자,
- [0132] 시아노기,

- [0133] 니트로기,
- [0134] 치환 혹은 무치환의 고리 형성 탄소수 6~50의 아릴기, 또는
- [0135] 치환 혹은 무치환의 고리 형성 원자수 5~50의 복소환기이고,
- [0136] *는 상기 일반식 (1A-A)에서의 벤즈[a]안트라센환과의 결합 위치를 나타내며,
- [0137] 상기 일반식 (1B-A2)에 있어서,
- [0138] $R_{51} \sim R_{53}$, R_{56} , R_{57} , 및 $R_{71} \sim R_{74}$ 중의 인접한 2개 이상으로 이루어지는 조의 1조 이상이,
- [0139] 서로 결합하여 치환 혹은 무치환의 단환을 형성하거나,
- [0140] 서로 결합하여 치환 혹은 무치환의 축합환을 형성하거나, 또는
- [0141] 서로 결합하지 않고,
- [0142] 상기 치환 혹은 무치환의 단환을 형성하지 않고, 또한 상기 치환 혹은 무치환의 축합환을 형성하지 않는 $R_{51} \sim R_{53}$, R_{56} , R_{57} , 및 $R_{71} \sim R_{74}$ 는, 각각 독립적으로 상기 일반식 (1B-A1)에 있어서의 $R_{51} \sim R_{54}$, R_{57} , 및 $R_{61} \sim R_{64}$ 와 동일한 의미이고,
- [0143] *는 상기 일반식 (1A-A)에서의 벤즈[a]안트라센환과의 결합 위치를 나타내며,
- [0144] 상기 일반식 (1B-A3)에 있어서,
- [0145] $R_{51} \sim R_{55}$, 및 $R_{81} \sim R_{84}$ 중의 인접한 2개 이상으로 이루어지는 조의 1조 이상이,
- [0146] 서로 결합하여 치환 혹은 무치환의 단환을 형성하거나,
- [0147] 서로 결합하여 치환 혹은 무치환의 축합환을 형성하거나, 또는
- [0148] 서로 결합하지 않고,
- [0149] 상기 치환 혹은 무치환의 단환을 형성하지 않고, 또한 상기 치환 혹은 무치환의 축합환을 형성하지 않는 $R_{51} \sim R_{55}$, 및 $R_{81} \sim R_{84}$ 는, 각각 독립적으로 상기 일반식 (1B-A1)에 있어서의 $R_{51} \sim R_{54}$, R_{57} , 및 $R_{61} \sim R_{64}$ 와 동일한 의미이고,
- [0150] *는 상기 일반식 (1A-A)에서의 벤즈[a]안트라센환과의 결합 위치를 나타낸다.)
- [0151] (상기 일반식 (1A-A)로 표시되는 화합물에 있어서, R_{901} , R_{902} , R_{903} , R_{904} , R_{905} , R_{906} , R_{907} , R_{801} , 및 R_{802} 는, 각각 독립적으로
- [0152] 수소 원자,
- [0153] 치환 혹은 무치환의 탄소수 1~50의 알킬기,
- [0154] 치환 혹은 무치환의 고리 형성 탄소수 3~50의 시클로알킬기,
- [0155] 치환 혹은 무치환의 고리 형성 탄소수 6~50의 아릴기, 또는
- [0156] 치환 혹은 무치환의 고리 형성 원자수 5~50의 복소환기이며,
- [0157] R_{901} 이 복수 존재하는 경우, 복수의 R_{901} 은 서로 동일하거나 또는 상이하고,
- [0158] R_{902} 가 복수 존재하는 경우, 복수의 R_{902} 는 서로 동일하거나 또는 상이하며,
- [0159] R_{903} 이 복수 존재하는 경우, 복수의 R_{903} 은 서로 동일하거나 또는 상이하고,
- [0160] R_{904} 가 복수 존재하는 경우, 복수의 R_{904} 는 서로 동일하거나 또는 상이하며,
- [0161] R_{905} 가 복수 존재하는 경우, 복수의 R_{905} 는 서로 동일하거나 또는 상이하고,
- [0162] R_{906} 이 복수 존재하는 경우, 복수의 R_{906} 은 서로 동일하거나 또는 상이하며,

- [0163] R_{907} 이 복수 존재하는 경우, 복수의 R_{907} 은 서로 동일하거나 또는 상이하고,
- [0164] R_{801} 이 복수 존재하는 경우, 복수의 R_{801} 은 서로 동일하거나 또는 상이하며,
- [0165] R_{802} 가 복수 존재하는 경우, 복수의 R_{802} 는 서로 동일하거나 또는 상이하다.)
- [0166] 본 발명의 일 양태에 따르면, 본 발명의 일 양태에 따른 화합물을 함유하는 유기 일렉트로루미네센스 소자가 제공된다.
- [0167] 본 발명의 일 양태에 따르면, 양극과, 음극과, 상기 양극과 상기 음극의 사이에 배치된 유기층을 가지며, 상기 유기층의 적어도 1층은 본 발명의 일 양태에 따른 화합물을 함유하는 유기 일렉트로루미네센스 소자가 제공된다.
- [0168] 본 발명의 일 양태에 따르면, 본 발명의 일 양태에 따른 유기 일렉트로루미네센스 소자를 탑재한 전자 기기가 제공된다.
- [0169] 본 발명의 일 양태에 따르면, 유기 일렉트로루미네센스 소자의 수명을 향상시킬 수 있는 화합물, 해당 화합물을 포함하는 유기 일렉트로루미네센스 소자, 및 해당 유기 일렉트로루미네센스 소자를 탑재한 전자 기기를 제공할 수 있다.
- [0170] 또한, 본 발명의 일 양태에 따르면, 수명이 향상된 유기 일렉트로루미네센스 소자, 및 해당 유기 일렉트로루미네센스 소자를 탑재한 전자 기기를 제공할 수 있다.

도면의 간단한 설명

- [0171] 도 1은 본 발명의 일 실시형태에 따른 유기 일렉트로루미네센스 소자의 일례의 개략 구성을 나타낸 도면이다.
- 도 2는 본 발명의 일 실시형태에 따른 유기 일렉트로루미네센스 소자의 다른 일례의 개략 구성을 나타낸 도면이다.

발명을 실시하기 위한 구체적인 내용

- [0172] [정의]
- [0173] 본 명세서에 있어서, 수소 원자란, 중성자수가 상이한 동위체, 즉, 경수소(protium), 중수소(deuterium) 및 삼중수소(tritium)를 포함한다.
- [0174] 본 명세서에 있어서, 화학 구조식 중, 「R」 등의 기호나 중수소 원자를 나타내는 「D」가 명시되어 있지 않은 결합 가능 위치에는, 수소 원자, 즉, 경수소 원자, 중수소 원자 또는 삼중수소 원자가 결합하고 있는 것으로 한다.
- [0175] 본 명세서에 있어서, 고리 형성 탄소수란, 원자가 환상으로 결합한 구조의 화합물(예컨대, 단환 화합물, 축합환 화합물, 가교 화합물, 탄소환 화합물 및 복소환 화합물)의 해당 고리 자체를 구성하는 원자 중 탄소 원자의 수를 나타낸다. 해당 고리가 치환기에 의해 치환되는 경우, 치환기에 포함되는 탄소는 고리 형성 탄소수에는 포함하지 않는다. 이하에 기재된 「고리 형성 탄소수」에 대해서는, 별도 기재가 없는 한, 동일한 것으로 한다. 예컨대, 벤젠환은 고리 형성 탄소수가 6이고, 나프탈렌환은 고리 형성 탄소수가 10이며, 피리딘환은 고리 형성 탄소수 5이고, 푸란환은 고리 형성 탄소수 4이다. 또한, 예컨대 9,9-디페닐플루오렌닐기의 고리 형성 탄소수는 13이고, 9,9'-스피로비플루오렌닐기의 고리 형성 탄소수는 25이다.
- [0176] 또한, 벤젠환에 치환기로서, 예컨대 알킬기가 치환되어 있는 경우, 해당 알킬기의 탄소수는 벤젠환의 고리 형성 탄소수에 포함시키지 않는다. 그 때문에, 알킬기가 치환되어 있는 벤젠환의 고리 형성 탄소수는 6이다. 또한, 나프탈렌환에 치환기로서, 예컨대 알킬기가 치환되어 있는 경우, 상기 알킬기의 탄소수는 나프탈렌환의 고리 형성 탄소수에 포함시키지 않는다. 그 때문에, 알킬기가 치환되어 있는 나프탈렌환의 고리 형성 탄소수는 10이다.
- [0177] 본 명세서에 있어서, 고리 형성 원자수란, 원자가 환상으로 결합한 구조(예컨대, 단환, 축합환 및 환집합)의 화합물(예컨대, 단환 화합물, 축합환 화합물, 가교 화합물, 탄소환 화합물 및 복소환 화합물)의 해당 고리 자체를 구성하는 원자의 수를 나타낸다. 고리를 구성하지 않는 원자(예컨대, 고리를 구성하는 원자의 결합을 중단하는 수소 원자)나, 해당 고리가 치환기에 의해 치환되는 경우의 치환기에 포함되는 원자는 고리 형성 원자수에는 포함하지 않는다. 이하에 기재된 「고리 형성 원자수」에 대해서는, 별도 기재가 없는 한, 동일한 것으로 한다.

예컨대, 피리딘환의 고리 형성 원자수는 6이고, 퀴나졸린환의 고리 형성 원자수는 10이며, 푸란환의 고리 형성 원자수는 5이다. 예컨대, 피리딘환에 결합되어 있는 수소 원자 또는 치환기를 구성하는 원자의 수는, 피리딘환 형성 원자수의 수에 포함시키지 않는다. 그 때문에, 수소 원자 또는 치환기가 결합되어 있는 피리딘환의 고리 형성 원자수는 6이다. 또한, 예컨대 퀴나졸린환의 탄소 원자에 결합되어 있는 수소 원자 또는 치환기를 구성하는 원자에 대해서는, 퀴나졸린환의 고리 형성 원자수의 수에 포함시키지 않는다. 그 때문에, 수소 원자 또는 치환기가 결합되어 있는 퀴나졸린환의 고리 형성 원자수는 10이다.

- [0178] 본 명세서에 있어서, 「치환 혹은 무치환의 탄소수 XX~YY의 ZZ기」라는 표현에 있어서의 「탄소수 XX~YY」는, ZZ기가 무치환인 경우의 탄소수를 나타내고, 치환되어 있는 경우의 치환기의 탄소수를 포함시키지 않는다. 여기서, 「YY」는 「XX」보다 크고, 「XX」는 1 이상의 정수를 의미하며, 「YY」는 2 이상의 정수를 의미한다.
- [0179] 본 명세서에 있어서, 「치환 혹은 무치환의 원자수 XX~YY의 ZZ기」라는 표현에 있어서의 「원자수 XX~YY」는, ZZ기가 무치환인 경우의 원자수를 나타내고, 치환되어 있는 경우의 치환기의 원자수를 포함시키지 않는다. 여기서, 「YY」는 「XX」보다 크고, 「XX」는 1 이상의 정수를 의미하며, 「YY」는 2 이상의 정수를 의미한다.
- [0180] 본 명세서에 있어서, 무치환의 ZZ기란 「치환 혹은 무치환의 ZZ기」가 「무치환의 ZZ기」인 경우를 나타내고, 치환의 ZZ기란 「치환 혹은 무치환의 ZZ기」가 「치환의 ZZ기」인 경우를 나타낸다.
- [0181] 본 명세서에 있어서, 「치환 혹은 무치환의 ZZ기」라고 하는 경우에 있어서의 「무치환」이란, ZZ기에 있어서의 수소 원자가 치환기로 치환되어 있지 않다는 것을 의미한다. 「무치환의 ZZ기」에 있어서의 수소 원자는 경수소 원자, 중수소 원자 또는 삼중수소 원자이다.
- [0182] 또한, 본 명세서에 있어서, 「치환 혹은 무치환의 ZZ기」라고 하는 경우에 있어서의 「치환」이란, ZZ기에 있어서의 하나 이상의 수소 원자가 치환기로 치환되어 있다는 것을 의미한다. 「AA기로 치환된 BB기」라고 하는 경우에 있어서의 「치환」도 마찬가지로 BB기에 있어서의 하나 이상의 수소 원자가 AA기로 치환되어 있다는 것을 의미한다.
- [0183] 「본 명세서에 기재된 치환기」
- [0184] 이하, 본 명세서에 기재된 치환기에 대해서 설명한다.
- [0185] 본 명세서에 기재된 「무치환의 아릴기」의 고리 형성 탄소수는, 본 명세서에 별도 기재가 없는 한, 6~50이며, 바람직하게는 6~30, 보다 바람직하게는 6~18이다.
- [0186] 본 명세서에 기재된 「무치환의 복소환기」의 고리 형성 원자수는, 본 명세서에 별도 기재가 없는 한, 5~50이며, 바람직하게는 5~30, 보다 바람직하게는 5~18이다.
- [0187] 본 명세서에 기재된 「무치환의 알킬기」의 탄소수는, 본 명세서에 별도 기재가 없는 한, 1~50이며, 바람직하게는 1~20, 보다 바람직하게는 1~6이다.
- [0188] 본 명세서에 기재된 「무치환의 알케닐기」의 탄소수는, 본 명세서에 별도 기재가 없는 한, 2~50이며, 바람직하게는 2~20, 보다 바람직하게는 2~6이다.
- [0189] 본 명세서에 기재된 「무치환의 알킬닐기」의 탄소수는, 본 명세서에 별도 기재가 없는 한, 2~50이며, 바람직하게는 2~20, 보다 바람직하게는 2~6이다.
- [0190] 본 명세서에 기재된 「무치환의 시클로알킬기」의 고리 형성 탄소수는, 본 명세서에 별도 기재가 없는 한, 3~50이며, 바람직하게는 3~20, 보다 바람직하게는 3~6이다.
- [0191] 본 명세서에 기재된 「무치환의 아릴렌기」의 고리 형성 탄소수는, 본 명세서에 별도 기재가 없는 한, 6~50이며, 바람직하게는 6~30, 보다 바람직하게는 6~18이다.
- [0192] 본 명세서에 기재된 「무치환의 2가의 복소환기」의 고리 형성 원자수는, 본 명세서에 별도 기재가 없는 한, 5~50이며, 바람직하게는 5~30, 보다 바람직하게는 5~18이다.
- [0193] 본 명세서에 기재된 「무치환의 알킬렌기」의 탄소수는, 본 명세서에 별도 기재가 없는 한, 1~50이며, 바람직하게는 1~20, 보다 바람직하게는 1~6이다.
- [0194] · 「치환 혹은 무치환의 아릴기」
- [0195] 본 명세서에 기재된 「치환 혹은 무치환의 아릴기」의 구체예(구체예군 G1)로서는, 이하의 무치환의 아릴기(구

체예군 G1A) 및 치환의 아틸기(구체예군 G1B) 등을 들 수 있다(여기서, 무치환의 아틸기란 「치환 혹은 무치환의 아틸기」가 「무치환의 아틸기」인 경우를 가리키고, 치환의 아틸기란 「치환 혹은 무치환의 아틸기」가 「치환의 아틸기」인 경우를 가리킨다.). 본 명세서에 있어서, 단순히 「아틸기」라고 하는 경우는, 「무치환의 아틸기」와 「치환의 아틸기」 양쪽 모두를 포함한다.

[0196] 「치환의 아틸기」는 「무치환의 아틸기」의 하나 이상의 수소 원자가 치환기로 치환된 기를 의미한다. 「치환의 아틸기」로서는, 예컨대 하기 구체예군 G1A의 「무치환의 아틸기」의 하나 이상의 수소 원자가 치환기로 치환된 기, 및 하기 구체예군 G1B의 치환의 아틸기의 예 등을 들 수 있다. 또한, 여기에 열거한 「무치환의 아틸기」의 예 및 「치환의 아틸기」의 예는 일례에 불과하며, 본 명세서에 기재된 「치환의 아틸기」에는, 하기 구체예군 G1B의 「치환의 아틸기」에 있어서의 아틸기 자체의 탄소 원자에 결합하는 수소 원자가 치환기로 더 치환된 기, 및 하기 구체예군 G1B의 「치환의 아틸기」에 있어서의 치환기의 수소 원자가 치환기로 더 치환된 기도 포함된다.

[0197] · 무치환의 아틸기(구체예군 G1A):

[0198] 페닐기,

[0199] p-비페닐기,

[0200] m-비페닐기,

[0201] o-비페닐기,

[0202] p-터페닐-4-일기,

[0203] p-터페닐-3-일기,

[0204] p-터페닐-2-일기,

[0205] m-터페닐-4-일기,

[0206] m-터페닐-3-일기,

[0207] m-터페닐-2-일기,

[0208] o-터페닐-4-일기,

[0209] o-터페닐-3-일기,

[0210] o-터페닐-2-일기,

[0211] 1-나프틸기,

[0212] 2-나프틸기,

[0213] 안트릴기,

[0214] 벤조안트릴기,

[0215] 페난트릴기,

[0216] 벤조페난트릴기,

[0217] 페날레닐기,

[0218] 피레닐기,

[0219] 크리스세닐기,

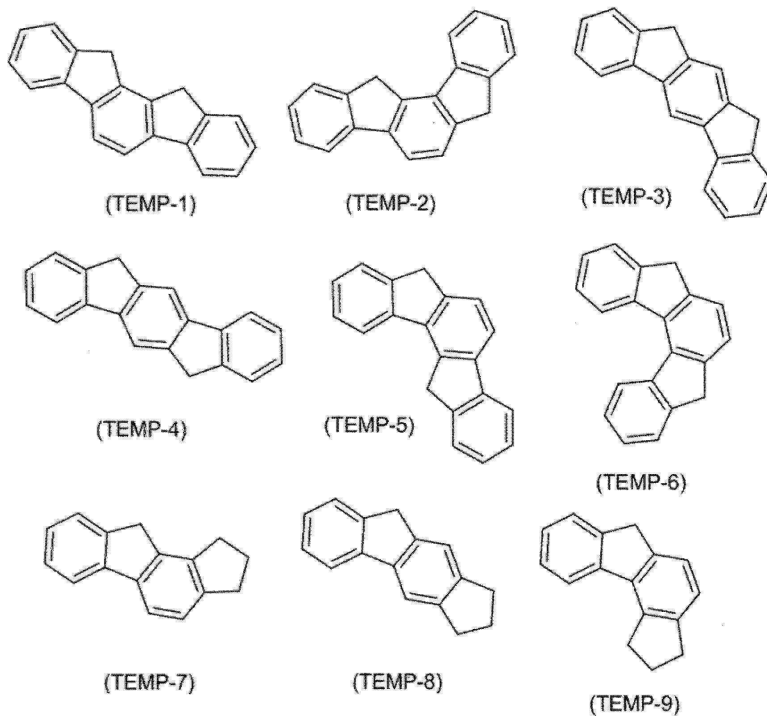
[0220] 벤조크리스세닐기,

[0221] 트리페닐레닐기,

[0222] 벤조트리페닐레닐기,

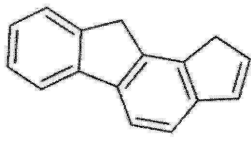
[0223] 테트라세닐기,

- [0224] 펜타세닐기,
 [0225] 플루오레닐기,
 [0226] 9,9'-스피로비플루오레닐기,
 [0227] 벤조플루오레닐기,
 [0228] 디벤조플루오레닐기,
 [0229] 플루오란테닐기,
 [0230] 벤조플루오란테닐기,
 [0231] 페릴레닐기, 및
 [0232] 하기 일반식 (TEMP-1)~(TEMP-15)로 표시되는 고리 구조로부터 하나의 수소 원자를 제거함으로써 유도되는 1가의 아릴기.
 [0233] [화학식 3]

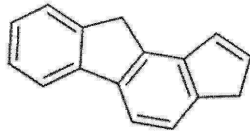


[0234]

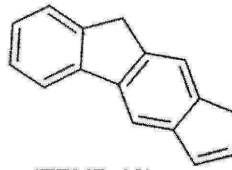
[0235] [화학식 4]



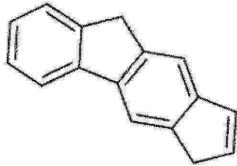
(TEMP-10)



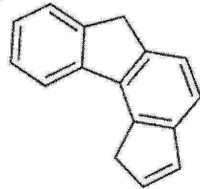
(TEMP-11)



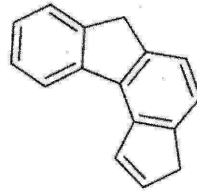
(TEMP-12)



(TEMP-13)



(TEMP-14)



(TEMP-15)

[0236]

[0237] · 치환의 아릴기(구체예군 G1B):

[0238] o-톨릴기,

[0239] m-톨릴기,

[0240] p-톨릴기,

[0241] 파라-크실릴기,

[0242] 메타-크실릴기,

[0243] 오르토-크실릴기,

[0244] 파라-이소프로필페닐기,

[0245] 메타-이소프로필페닐기,

[0246] 오르토-이소프로필페닐기,

[0247] 파라-t-부틸페닐기,

[0248] 메타-t-부틸페닐기,

[0249] 오르토-t-부틸페닐기,

[0250] 3,4,5-트리메틸페닐기,

[0251] 9,9-디메틸플루오레닐기,

[0252] 9,9-디페닐플루오레닐기,

[0253] 9,9-비스(4-메틸페닐)플루오레닐기,

[0254] 9,9-비스(4-이소프로필페닐)플루오레닐기,

[0255] 9,9-비스(4-t-부틸페닐)플루오레닐기,

[0256] 시아노페닐기,

[0257] 트리페닐실릴페닐기,

[0258] 트리메틸실릴페닐기,

[0259] 페닐나프틸기,

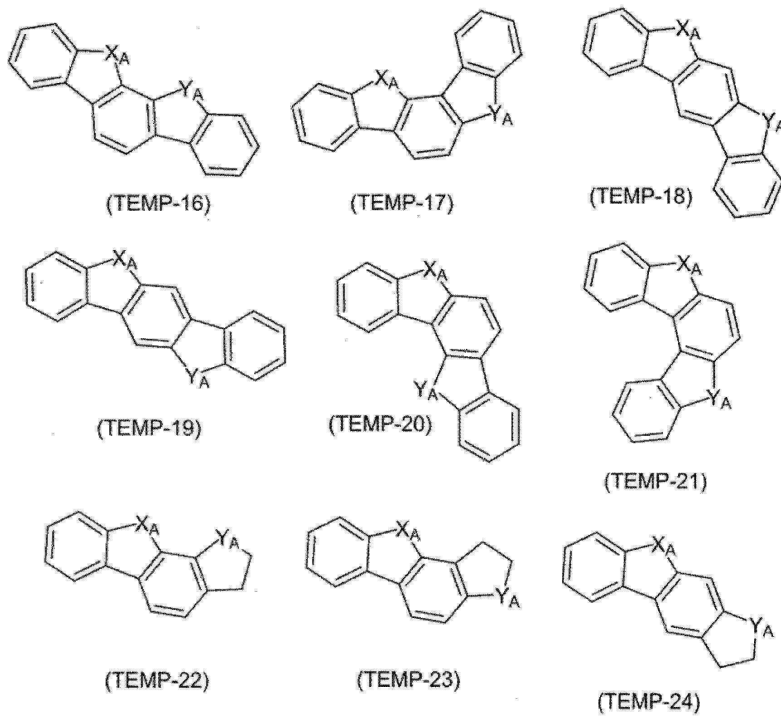
[0260] 나프틸페닐기, 및

- [0261] 상기 일반식 (TEMP-1)~(TEMP-15)로 표시되는 고리 구조로부터 유도되는 1가의 기의 하나 이상의 수소 원자가 치환기로 치환된 기.
- [0262] · 「치환 혹은 무치환의 복소환기」
- [0263] 본 명세서에 기재된 「복소환기」는 고리 형성 원자에 헤테로 원자를 적어도 하나 포함하는 환상의 기이다. 헤테로 원자의 구체예로서는 질소 원자, 산소 원자, 황 원자, 규소 원자, 인 원자 및 붕소 원자를 들 수 있다.
- [0264] 본 명세서에 기재된 「복소환기」는 단환의 기이거나 또는 축합환의 기이다.
- [0265] 본 명세서에 기재된 「복소환기」는 방향족 복소환기이거나 또는 비방향족 복소환기이다.
- [0266] 본 명세서에 기재된 「치환 혹은 무치환의 복소환기」의 구체예(구체예군 G2)로서는, 이하의 무치환의 복소환기(구체예군 G2A), 및 치환의 복소환기(구체예군 G2B) 등을 들 수 있다(여기서, 무치환의 복소환기란 「치환 혹은 무치환의 복소환기」가 「무치환의 복소환기」인 경우를 가리키고, 치환의 복소환기란 「치환 혹은 무치환의 복소환기」가 「치환의 복소환기」인 경우를 가리킨다.). 본 명세서에 있어서, 단순히 「복소환기」라고 하는 경우는, 「무치환의 복소환기」와 「치환의 복소환기」 양쪽 모두를 포함한다.
- [0267] 「치환의 복소환기」는 「무치환의 복소환기」의 하나 이상의 수소 원자가 치환기로 치환된 기를 의미한다. 「치환의 복소환기」의 구체예는 하기 구체예군 G2A의 「무치환의 복소환기」의 수소 원자가 치환된 기, 및 하기 구체예군 G2B의 치환의 복소환기의 예 등을 들 수 있다. 또한, 여기에 열거한 「무치환의 복소환기」의 예나 「치환의 복소환기」의 예는 일례에 불과하며, 본 명세서에 기재된 「치환의 복소환기」에는, 구체예군 G2B의 「치환의 복소환기」에 있어서의 복소환기 자체의 고리 형성 원자에 결합하는 수소 원자가 치환기로 더 치환된 기, 및 구체예군 G2B의 「치환의 복소환기」에 있어서의 치환기의 수소 원자가 치환기로 더 치환된 기도 포함된다.
- [0268] 구체예군 G2A는, 예컨대 이하의 질소 원자를 포함하는 무치환의 복소환기(구체예군 G2A1), 산소 원자를 포함하는 무치환의 복소환기(구체예군 G2A2), 황 원자를 포함하는 무치환의 복소환기(구체예군 G2A3), 및 하기 일반식 (TEMP-16)~(TEMP-33)으로 표시되는 고리 구조로부터 하나의 수소 원자를 제거함으로써 유도되는 1가의 복소환기(구체예군 G2A4)를 포함한다.
- [0269] 구체예군 G2B는, 예컨대 이하의 질소 원자를 포함하는 치환의 복소환기(구체예군 G2B1), 산소 원자를 포함하는 치환의 복소환기(구체예군 G2B2), 황 원자를 포함하는 치환의 복소환기(구체예군 G2B3), 및 하기 일반식 (TEMP-16)~(TEMP-33)으로 표시되는 고리 구조로부터 유도되는 1가의 복소환기의 하나 이상의 수소 원자가 치환기로 치환된 기(구체예군 G2B4)를 포함한다.
- [0270] · 질소 원자를 포함하는 무치환의 복소환기(구체예군 G2A1):
- [0271] 피롤릴기,
- [0272] 이미다졸릴기,
- [0273] 피라졸릴기,
- [0274] 트리아졸릴기,
- [0275] 테트라졸릴기,
- [0276] 옥사졸릴기,
- [0277] 이소옥사졸릴기,
- [0278] 옥사디아졸릴기,
- [0279] 티아졸릴기,
- [0280] 이소티아졸릴기,
- [0281] 티아디아졸릴기,
- [0282] 피리딜기,
- [0283] 피리다지닐기,

- [0284] 피리미디닐기,
- [0285] 피라지닐기,
- [0286] 트리아지닐기,
- [0287] 인돌릴기,
- [0288] 이소인돌릴기,
- [0289] 인돌리지닐기,
- [0290] 퀴놀리디닐기,
- [0291] 퀴놀릴기,
- [0292] 이소퀴놀릴기,
- [0293] 신놀릴기,
- [0294] 프탈라지닐기,
- [0295] 퀴나졸리닐기,
- [0296] 퀴녹살리닐기,
- [0297] 벤조이미다졸릴기,
- [0298] 인다졸릴기,
- [0299] 페난트롤리닐기,
- [0300] 페난트리디닐기,
- [0301] 아크리디닐기,
- [0302] 페나지닐기,
- [0303] 카르바졸릴기,
- [0304] 벤조카르바졸릴기,
- [0305] 모르폴리노기,
- [0306] 페녹사지닐기,
- [0307] 페노티아지닐기,
- [0308] 아자카르바졸릴기, 및
- [0309] 디아자카르바졸릴기.
- [0310] · 산소 원자를 포함하는 무치환의 복소환기(구체예군 G2A2):
- [0311] 푸릴기,
- [0312] 옥사졸릴기,
- [0313] 이소옥사졸릴기,
- [0314] 옥사디아졸릴기,
- [0315] 크산테닐기,
- [0316] 벤조푸라닐기,
- [0317] 이소벤조푸라닐기,
- [0318] 디벤조푸라닐기,
- [0319] 나프토벤조푸라닐기,

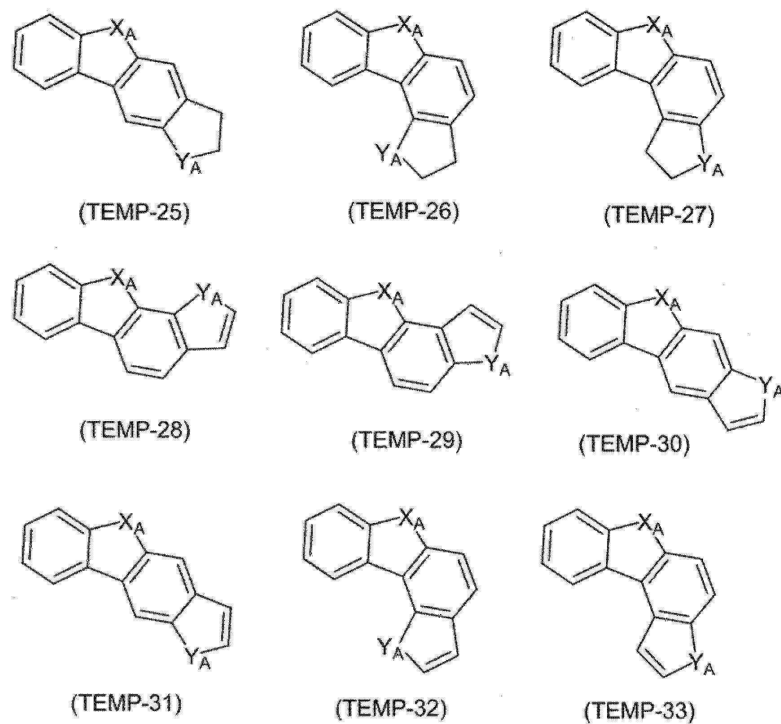
- [0320] 벤조옥사졸릴기,
- [0321] 벤조이속사졸릴기,
- [0322] 페녹사지닐기,
- [0323] 모르폴리노기,
- [0324] 디나프토푸라닐기,
- [0325] 아자디벤조푸라닐기,
- [0326] 디아자디벤조푸라닐기,
- [0327] 아자나프토펴조푸라닐기, 및
- [0328] 디아자나프토펴조푸라닐기.
- [0329] · 황 원자를 포함하는 무치환의 복소환기(구체예군 G2A3):
- [0330] 티에닐기,
- [0331] 티아졸릴기,
- [0332] 이소티아졸릴기,
- [0333] 티아디아졸릴기,
- [0334] 벤조티오펴닐기(벤조티에닐기),
- [0335] 이소벤조티오펴닐기(이소벤조티에닐기),
- [0336] 디벤조티오펴닐기(디벤조티에닐기),
- [0337] 나프토펴조티오펴닐기(나프토펴조티에닐기),
- [0338] 벤조티아졸릴기,
- [0339] 벤조이소티아졸릴기,
- [0340] 페노티아지닐기,
- [0341] 디나프토펴티오펴닐기(디나프토펴티에닐기),
- [0342] 아자디벤조티오펴닐기(아자디벤조티에닐기),
- [0343] 디아자디벤조티오펴닐기(디아자디벤조티에닐기),
- [0344] 아자나프토펴조티오펴닐기(아자나프토펴조티에닐기), 및
- [0345] 디아자나프토펴조티오펴닐기(디아자나프토펴조티에닐기).
- [0346] · 하기 일반식 (TEMP-16)~(TEMP-33)으로 표시되는 고리 구조로부터 하나의 수소 원자를 제거함으로써 유도되는 1가의 복소환기(구체예군 G2A4):

[0347] [화학식 5]



[0348]

[0349] [화학식 6]



[0350]

[0351] 상기 일반식 (TEMP-16)~(TEMP-33)에 있어서, X_A 및 Y_A 는, 각각 독립적으로 산소 원자, 황 원자, NH 또는 CH_2 이다. 단, X_A 및 Y_A 중 적어도 하나는 산소 원자, 황 원자 또는 NH이다.

[0352] 상기 일반식 (TEMP-16)~(TEMP-33)에 있어서, X_A 및 Y_A 중 적어도 어느 하나가 NH 또는 CH_2 인 경우, 상기 일반식 (TEMP-16)~(TEMP-33)으로 표시되는 고리 구조로부터 유도되는 1가의 복소환기에는, 이들 NH 또는 CH_2 로부터 하

나의 수소 원자를 제거하여 얻어지는 1가의 기가 포함된다.

[0353] · 질소 원자를 포함하는 치환의 복소환기(구체예군 G2B1):

[0354] (9-페닐)카르바졸릴기,

[0355] (9-비페닐릴)카르바졸릴기,

[0356] (9-페닐)페닐카르바졸릴기,

[0357] (9-나프틸)카르바졸릴기,

[0358] 디페닐카르바졸-9-일기,

[0359] 페닐카르바졸-9-일기,

[0360] 메틸벤조이미다졸릴기,

[0361] 에틸벤조이미다졸릴기,

[0362] 페닐트리아지닐기,

[0363] 비페닐릴트리아지닐기,

[0364] 디페닐트리아지닐기,

[0365] 페닐퀴나졸리닐기, 및

[0366] 비페닐릴퀴나졸리닐기.

[0367] · 산소 원자를 포함하는 치환의 복소환기(구체예군 G2B2):

[0368] 페닐디벤조푸라닐기,

[0369] 메틸디벤조푸라닐기,

[0370] t-부틸디벤조푸라닐기, 및

[0371] 스피로[9H-크산텐-9,9'-[9H]플루오렌]의 1가의 잔기.

[0372] · 황 원자를 포함하는 치환의 복소환기(구체예군 G2B3):

[0373] 페닐디벤조티오펜기,

[0374] 메틸디벤조티오펜기,

[0375] t-부틸디벤조티오펜기, 및

[0376] 스피로[9H-티오크산텐-9,9'-[9H]플루오렌]의 1가의 잔기.

[0377] · 상기 일반식 (TEMP-16)~(TEMP-33)으로 표시되는 고리 구조로부터 유도되는 1가의 복소환기의 하나 이상의 수소 원자가 치환기로 치환된 기(구체예군 G2B4):

[0378] 상기 「1가의 복소환기의 하나 이상의 수소 원자」란, 해당 1가의 복소환기의 고리 형성 탄소 원자에 결합되어 있는 수소 원자, X_A 및 Y_A 중 적어도 어느 하나가 NH인 경우의 질소 원자에 결합되어 있는 수소 원자, 및 X_A 및 Y_A 중 한쪽이 CH_2 인 경우의 메틸렌기의 수소 원자로부터 선택되는 하나 이상의 수소 원자를 의미한다.

[0379] · 「치환 혹은 무치환의 알킬기」

[0380] 본 명세서에 기재된 「치환 혹은 무치환의 알킬기」의 구체예(구체예군 G3)로서는 이하의 무치환의 알킬기(구체예군 G3A) 및 치환의 알킬기(구체예군 G3B)를 들 수 있다(여기서, 무치환의 알킬기란 「치환 혹은 무치환의 알킬기」가 「무치환의 알킬기」인 경우를 가리키고, 치환의 알킬기란 「치환 혹은 무치환의 알킬기」가 「치환의 알킬기」인 경우를 가리킨다.). 이하, 단순히 「알킬기」라고 하는 경우는, 「무치환의 알킬기」와 「치환의 알킬기」 양쪽 모두를 포함한다.

[0381] 「치환의 알킬기」는 「무치환의 알킬기」에 있어서의 하나 이상의 수소 원자가 치환기로 치환된 기를 의미한다. 「치환의 알킬기」의 구체예로서는, 하기의 「무치환의 알킬기」(구체예군 G3A)에 있어서의 하나 이

상의 수소 원자가 치환기로 치환된 기, 및 치환의 알킬기(구체예군 G3B)의 예 등을 들 수 있다. 본 명세서에 있어서, 「무치환의 알킬기」에 있어서의 알킬기는 쇠상 알킬기를 의미한다. 그 때문에, 「무치환의 알킬기」는 직쇄인 「무치환의 알킬기」 및 분기상인 「무치환의 알킬기」가 포함된다. 또한, 여기에 열거한 「무치환의 알킬기」의 예나 「치환의 알킬기」의 예는 일례에 불과하며, 본 명세서에 기재된 「치환의 알킬기」에는, 구체예군 G3B의 「치환의 알킬기」에 있어서의 알킬기 자체의 수소 원자가 치환기로 더 치환된 기, 및 구체예군 G3B의 「치환의 알킬기」에 있어서의 치환기의 수소 원자가 치환기로 더 치환된 기도 포함된다.

[0382] · 무치환의 알킬기(구체예군 G3A):

[0383] 메틸기,

[0384] 에틸기,

[0385] n-프로필기,

[0386] 이소프로필기,

[0387] n-부틸기,

[0388] 이소부틸기,

[0389] s-부틸기, 및

[0390] t-부틸기.

[0391] · 치환의 알킬기(구체예군 G3B):

[0392] 헵타플루오로프로필기(이성체를 포함함),

[0393] 펜타플루오로에틸기,

[0394] 2,2,2-트리플루오로에틸기, 및

[0395] 트리플루오로메틸기.

[0396] · 「치환 혹은 무치환의 알케닐기」

[0397] 본 명세서에 기재된 「치환 혹은 무치환의 알케닐기」의 구체예(구체예군 G4)로서는, 이하의 무치환의 알케닐기(구체예군 G4A), 및 치환의 알케닐기(구체예군 G4B) 등을 들 수 있다(여기서, 무치환의 알케닐기란 「치환 혹은 무치환의 알케닐기」가 「무치환의 알케닐기」인 경우를 가리키고, 「치환의 알케닐기」란 「치환 혹은 무치환의 알케닐기」가 「치환의 알케닐기」인 경우를 가리킨다.). 본 명세서에 있어서, 단순히 「알케닐기」라고 하는 경우는, 「무치환의 알케닐기」와 「치환의 알케닐기」 양쪽 모두를 포함한다.

[0398] 「치환의 알케닐기」는 「무치환의 알케닐기」에 있어서의 하나 이상의 수소 원자가 치환기로 치환된 기를 의미한다. 「치환의 알케닐기」의 구체예로서는, 하기의 「무치환의 알케닐기」(구체예군 G4A)가 치환기를 갖는 기, 및 치환의 알케닐기(구체예군 G4B)의 예 등을 들 수 있다. 또한, 여기에 열거한 「무치환의 알케닐기」의 예나 「치환의 알케닐기」의 예는 일례에 불과하며, 본 명세서에 기재된 「치환의 알케닐기」에는, 구체예군 G4B의 「치환의 알케닐기」에 있어서의 알케닐기 자체의 수소 원자가 치환기로 더 치환된 기, 및 구체예군 G4B의 「치환의 알케닐기」에 있어서의 치환기의 수소 원자가 치환기로 더 치환된 기도 포함된다.

[0399] · 무치환의 알케닐기(구체예군 G4A):

[0400] 비닐기,

[0401] 알릴기,

[0402] 1-부테닐기,

[0403] 2-부테닐기, 및

[0404] 3-부테닐기.

[0405] · 치환의 알케닐기(구체예군 G4B):

[0406] 1,3-부탄디에닐기,

- [0407] 1-메틸비닐기,
- [0408] 1-메틸알릴기,
- [0409] 1,1-디메틸알릴기,
- [0410] 2-메틸알릴기, 및
- [0411] 1,2-디메틸알릴기.
- [0412] · 「치환 혹은 무치환의 알키닐기」
- [0413] 본 명세서에 기재된 「치환 혹은 무치환의 알키닐기」의 구체예(구체예군 G5)로서는 이하의 무치환의 알키닐기(구체예군 G5A) 등을 들 수 있다(여기서, 무치환의 알키닐기란 「치환 혹은 무치환의 알키닐기」가 「무치환의 알키닐기」인 경우를 가리킨다.). 이하, 단순히 「알키닐기」라고 하는 경우는, 「무치환의 알키닐기」와 「치환의 알키닐기」 양쪽 모두를 포함한다.
- [0414] 「치환의 알키닐기」는 「무치환의 알키닐기」에 있어서의 하나 이상의 수소 원자가 치환기로 치환된 기를 의미한다. 「치환의 알키닐기」의 구체예로서는, 하기의 「무치환의 알키닐기」(구체예군 G5A)에 있어서의 하나 이상의 수소 원자가 치환기로 치환된 기 등을 들 수 있다.
- [0415] · 무치환의 알키닐기(구체예군 G5A):
- [0416] 에틸닐기.
- [0417] · 「치환 혹은 무치환의 시클로알킬기」
- [0418] 본 명세서에 기재된 「치환 혹은 무치환의 시클로알킬기」의 구체예(구체예군 G6)로서는, 이하의 무치환의 시클로알킬기(구체예군 G6A), 및 치환의 시클로알킬기(구체예군 G6B) 등을 들 수 있다(여기서, 무치환의 시클로알킬기란 「치환 혹은 무치환의 시클로알킬기」가 「무치환의 시클로알킬기」인 경우를 가리키고, 치환의 시클로알킬기란 「치환 혹은 무치환의 시클로알킬기」가 「치환의 시클로알킬기」인 경우를 가리킨다.). 본 명세서에 있어서, 단순히 「시클로알킬기」라고 하는 경우는, 「무치환의 시클로알킬기」와 「치환의 시클로알킬기」 양쪽 모두를 포함한다.
- [0419] 「치환의 시클로알킬기」는 「무치환의 시클로알킬기」에 있어서의 하나 이상의 수소 원자가 치환기로 치환된 기를 의미한다. 「치환의 시클로알킬기」의 구체예로서는, 하기의 「무치환의 시클로알킬기」(구체예군 G6A)에 있어서의 하나 이상의 수소 원자가 치환기로 치환된 기, 및 치환의 시클로알킬기(구체예군 G6B)의 예 등을 들 수 있다. 또한, 여기에 열거한 「무치환의 시클로알킬기」의 예나 「치환의 시클로알킬기」의 예는 일례에 불과하며, 본 명세서에 기재된 「치환의 시클로알킬기」에는, 구체예군 G6B의 「치환의 시클로알킬기」에 있어서의 시클로알킬기 자체의 탄소 원자에 결합하는 하나 이상의 수소 원자가 치환기로 치환된 기, 및 구체예군 G6B의 「치환의 시클로알킬기」에 있어서의 치환기의 수소 원자가 치환기로 더 치환된 기도 포함된다.
- [0420] · 무치환의 시클로알킬기(구체예군 G6A):
- [0421] 시클로프로필기,
- [0422] 시클로부틸기,
- [0423] 시클로펜틸기,
- [0424] 시클로헥실기,
- [0425] 1-아다만틸기,
- [0426] 2-아다만틸기,
- [0427] 1-노르보르닐기, 및
- [0428] 2-노르보르닐기.
- [0429] · 치환의 시클로알킬기(구체예군 G6B):
- [0430] 4-메틸시클로헥실기.

- [0431] · 「-Si(R₉₀₁)(R₉₀₂)(R₉₀₃)으로 표시되는 기」
- [0432] 본 명세서에 기재된 -Si(R₉₀₁)(R₉₀₂)(R₉₀₃)으로 표시되는 기의 구체예(구체예군 G7)로서는,
- [0433] -Si(G1)(G1)(G1),
- [0434] -Si(G1)(G2)(G2),
- [0435] -Si(G1)(G1)(G2),
- [0436] -Si(G2)(G2)(G2),
- [0437] -Si(G3)(G3)(G3), 및
- [0438] -Si(G6)(G6)(G6)
- [0439] 을 들 수 있다. 여기서,
- [0440] G1은 구체예군 G1에 기재된 「치환 혹은 무치환의 아틸기」이다.
- [0441] G2는 구체예군 G2에 기재된 「치환 혹은 무치환의 복소환기」이다.
- [0442] G3은 구체예군 G3에 기재된 「치환 혹은 무치환의 알킬기」이다.
- [0443] G6은 구체예군 G6에 기재된 「치환 혹은 무치환의 시클로알킬기」이다.
- [0444] -Si(G1)(G1)(G1)에 있어서의 복수의 G1은 서로 동일하거나 또는 상이하다.
- [0445] -Si(G1)(G2)(G2)에 있어서의 복수의 G2는 서로 동일하거나 또는 상이하다.
- [0446] -Si(G1)(G1)(G2)에 있어서의 복수의 G1은 서로 동일하거나 또는 상이하다.
- [0447] -Si(G2)(G2)(G2)에 있어서의 복수의 G2는 서로 동일하거나 또는 상이하다.
- [0448] -Si(G3)(G3)(G3)에 있어서의 복수의 G3은 서로 동일하거나 또는 상이하다.
- [0449] -Si(G6)(G6)(G6)에 있어서의 복수의 G6은 서로 동일하거나 또는 상이하다.
- [0450] · 「-O-(R₉₀₄)로 표시되는 기」
- [0451] 본 명세서에 기재된 -O-(R₉₀₄)로 표시되는 기의 구체예(구체예군 G8)로서는,
- [0452] -O(G1),
- [0453] -O(G2),
- [0454] -O(G3), 및
- [0455] -O(G6)
- [0456] 을 들 수 있다. 여기서,
- [0457] G1은 구체예군 G1에 기재된 「치환 혹은 무치환의 아틸기」이다.
- [0458] G2는 구체예군 G2에 기재된 「치환 혹은 무치환의 복소환기」이다.
- [0459] G3은 구체예군 G3에 기재된 「치환 혹은 무치환의 알킬기」이다.
- [0460] G6은 구체예군 G6에 기재된 「치환 혹은 무치환의 시클로알킬기」이다.
- [0461] · 「-S-(R₉₀₅)로 표시되는 기」
- [0462] 본 명세서에 기재된 -S-(R₉₀₅)로 표시되는 기의 구체예(구체예군 G9)로서는,
- [0463] -S(G1),
- [0464] -S(G2),

- [0465] -S(G3), 및
- [0466] -S(G6)
- [0467] 을 들 수 있다. 여기서,
- [0468] G1은 구체예군 G1에 기재된 「치환 혹은 무치환의 아릴기」이다.
- [0469] G2는 구체예군 G2에 기재된 「치환 혹은 무치환의 복소환기」이다.
- [0470] G3은 구체예군 G3에 기재된 「치환 혹은 무치환의 알킬기」이다.
- [0471] G6은 구체예군 G6에 기재된 「치환 혹은 무치환의 시클로알킬기」이다.
- [0472] · 「-N(R₉₀₆)(R₉₀₇)로 표시되는 기」
- [0473] 본 명세서에 기재된 -N(R₉₀₆)(R₉₀₇)로 표시되는 기의 구체예(구체예군 G10)로서는,
- [0474] -N(G1)(G1),
- [0475] -N(G2)(G2),
- [0476] -N(G1)(G2),
- [0477] -N(G3)(G3), 및
- [0478] -N(G6)(G6)
- [0479] 을 들 수 있다. 여기서,
- [0480] G1은 구체예군 G1에 기재된 「치환 혹은 무치환의 아릴기」이다.
- [0481] G2는 구체예군 G2에 기재된 「치환 혹은 무치환의 복소환기」이다.
- [0482] G3은 구체예군 G3에 기재된 「치환 혹은 무치환의 알킬기」이다.
- [0483] G6은 구체예군 G6에 기재된 「치환 혹은 무치환의 시클로알킬기」이다.
- [0484] -N(G1)(G1)에 있어서의 복수의 G1은 서로 동일하거나 또는 상이하다.
- [0485] -N(G2)(G2)에 있어서의 복수의 G2는 서로 동일하거나 또는 상이하다.
- [0486] -N(G3)(G3)에 있어서의 복수의 G3은 서로 동일하거나 또는 상이하다.
- [0487] -N(G6)(G6)에 있어서의 복수의 G6은 서로 동일하거나 또는 상이하다.
- [0488] · 「할로겐 원자」
- [0489] 본 명세서에 기재된 「할로겐 원자」의 구체예(구체예군 G11)로서는 불소 원자, 염소 원자, 브롬 원자 및 요오드 원자 등을 들 수 있다.
- [0490] · 「치환 혹은 무치환의 플루오로알킬기」
- [0491] 본 명세서에 기재된 「치환 혹은 무치환의 플루오로알킬기」는, 「치환 혹은 무치환의 알킬기」에 있어서의 알킬기를 구성하는 탄소 원자에 결합되어 있는 적어도 하나의 수소 원자가 불소 원자로 치환된 기를 의미하고, 「치환 혹은 무치환의 알킬기」에 있어서의 알킬기를 구성하는 탄소 원자에 결합되어 있는 모든 수소 원자가 불소 원자로 치환된 기(퍼플루오로기)도 포함한다. 「무치환의 플루오로알킬기」의 탄소수는, 본 명세서에 별도로 기재가 없는 한, 1~50이며, 바람직하게는 1~30이고, 보다 바람직하게는 1~18이다. 「치환의 플루오로알킬기」는 「플루오로알킬기」의 하나 이상의 수소 원자가 치환기로 치환된 기를 의미한다. 또한, 본 명세서에 기재된 「치환의 플루오로알킬기」에는, 「치환의 플루오로알킬기」에 있어서의 알킬쇄의 탄소 원자에 결합하는 하나 이상의 수소 원자가 치환기로 더 치환된 기, 및 「치환의 플루오로알킬기」에 있어서의 치환기의 하나 이상의 수소 원자가 치환기로 더 치환된 기도 포함된다. 「무치환의 플루오로알킬기」의 구체예로서는, 상기 「알킬기」(구체예군 G3)에 있어서의 하나 이상의 수소 원자가 불소 원자로 치환된 기의 예 등을 들 수 있다.
- [0492] · 「치환 혹은 무치환의 할로알킬기」

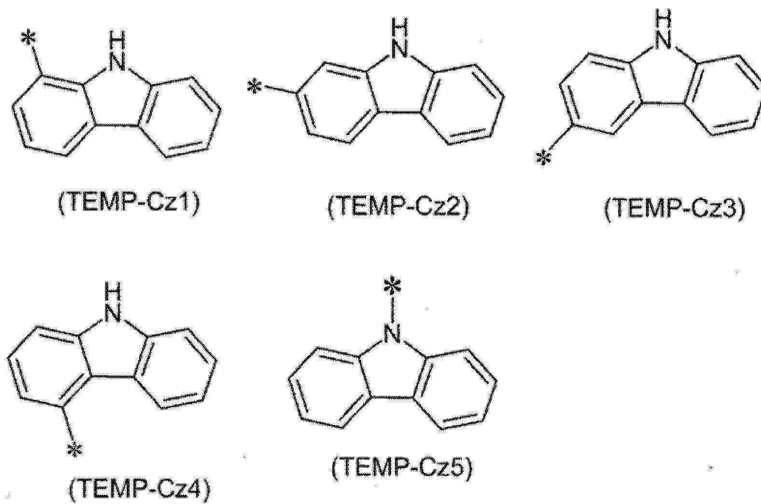
- [0493] 본 명세서에 기재된 「치환 혹은 무치환의 할로알킬기」는, 「치환 혹은 무치환의 알킬기」에 있어서의 알킬기를 구성하는 탄소 원자에 결합되어 있는 적어도 하나의 수소 원자가 할로젠 원자로 치환된 기를 의미하고, 「치환 혹은 무치환의 알킬기」에 있어서의 알킬기를 구성하는 탄소 원자에 결합되어 있는 모든 수소 원자가 할로젠 원자로 치환된 기도 포함한다. 「무치환의 할로알킬기」의 탄소수는, 본 명세서에 별도 기재가 없는 한, 1~50이며, 바람직하게는 1~30이고, 보다 바람직하게는 1~18이다. 「치환의 할로알킬기」는 「할로알킬기」의 하나 이상의 수소 원자가 치환기로 치환된 기를 의미한다. 또한, 본 명세서에 기재된 「치환의 할로알킬기」에는, 「치환의 할로알킬기」에 있어서의 알킬쇄의 탄소 원자에 결합하는 하나 이상의 수소 원자가 치환기로 더 치환된 기, 및 「치환의 할로알킬기」에 있어서의 치환기의 하나 이상의 수소 원자가 치환기로 더 치환된 기도 포함된다. 「무치환의 할로알킬기」의 구체예로서는, 상기 「알킬기」(구체예군 G3)에 있어서의 하나 이상의 수소 원자가 할로젠 원자로 치환된 기의 예 등을 들 수 있다. 할로알킬기를 할로젠화 알킬기라고 부르는 경우가 있다.
- [0494] · 「치환 혹은 무치환의 알콕시기」
- [0495] 본 명세서에 기재된 「치환 혹은 무치환의 알콕시기」의 구체예로서는, -O(G3)으로 표시되는 기이며, 여기서 G3은 구체예군 G3에 기재된 「치환 혹은 무치환의 알킬기」이다. 「무치환의 알콕시기」의 탄소수는, 본 명세서에 별도 기재가 없는 한, 1~50이며, 바람직하게는 1~30이고, 보다 바람직하게는 1~18이다.
- [0496] · 「치환 혹은 무치환의 알킬티오기」
- [0497] 본 명세서에 기재된 「치환 혹은 무치환의 알킬티오기」의 구체예로서는, -S(G3)으로 표시되는 기이며, 여기서 G3은 구체예군 G3에 기재된 「치환 혹은 무치환의 알킬기」이다. 「무치환의 알킬티오기」의 탄소수는, 본 명세서에 별도 기재가 없는 한, 1~50이며, 바람직하게는 1~30이고, 보다 바람직하게는 1~18이다.
- [0498] · 「치환 혹은 무치환의 아릴옥시기」
- [0499] 본 명세서에 기재된 「치환 혹은 무치환의 아릴옥시기」의 구체예로서는, -O(G1)로 표시되는 기이며, 여기서 G1은 구체예군 G1에 기재된 「치환 혹은 무치환의 아릴기」이다. 「무치환의 아릴옥시기」의 고리 형성 탄소수는, 본 명세서에 별도 기재가 없는 한, 6~50이며, 바람직하게는 6~30이고, 보다 바람직하게는 6~18이다.
- [0500] · 「치환 혹은 무치환의 아릴티오기」
- [0501] 본 명세서에 기재된 「치환 혹은 무치환의 아릴티오기」의 구체예로서는, -S(G1)로 표시되는 기이며, 여기서 G1은 구체예군 G1에 기재된 「치환 혹은 무치환의 아릴기」이다. 「무치환의 아릴티오기」의 고리 형성 탄소수는, 본 명세서에 별도 기재가 없는 한, 6~50이며, 바람직하게는 6~30이고, 보다 바람직하게는 6~18이다.
- [0502] · 「치환 혹은 무치환의 트리알킬실릴기」
- [0503] 본 명세서에 기재된 「트리알킬실릴기」의 구체예로서는, -Si(G3)(G3)(G3)으로 표시되는 기이며, 여기서 G3은 구체예군 G3에 기재된 「치환 혹은 무치환의 알킬기」이다. -Si(G3)(G3)(G3)에 있어서의 복수의 G3은 서로 동일하거나 또는 상이하다. 「트리알킬실릴기」의 각 알킬기의 탄소수는, 본 명세서에 별도 기재가 없는 한, 1~50이며, 바람직하게는 1~20이고, 보다 바람직하게는 1~6이다.
- [0504] · 「치환 혹은 무치환의 아랄킬기」
- [0505] 본 명세서에 기재된 「치환 혹은 무치환의 아랄킬기」의 구체예로서는, -(G3)-(G1)로 표시되는 기이며, 여기서 G3은 구체예군 G3에 기재된 「치환 혹은 무치환의 알킬기」이고, G1은 구체예군 G1에 기재된 「치환 혹은 무치환의 아릴기」이다. 따라서, 「아랄킬기」는 「알킬기」의 수소 원자가 치환기로서의 「아릴기」로 치환된 기이며, 「치환의 알킬기」의 일 양태이다. 「무치환의 아랄킬기」는 「무치환의 아릴기」가 치환된 「무치환의 알킬기」이고, 「무치환의 아랄킬기」의 탄소수는, 본 명세서에 별도 기재가 없는 한, 7~50이며, 바람직하게는 7~30이고, 보다 바람직하게는 7~18이다.
- [0506] 「치환 혹은 무치환의 아랄킬기」의 구체예로서는, 벤질기, 1-페닐에틸기, 2-페닐에틸기, 1-페닐이소프로필기, 2-페닐이소프로필기, 페닐-t-부틸기, α-나프틸메틸기, 1-α-나프틸에틸기, 2-α-나프틸에틸기, 1-α-나프틸이소프로필기, 2-α-나프틸이소프로필기, β-나프틸메틸기, 1-β-나프틸에틸기, 2-β-나프틸에틸기, 1-β-나프틸이소프로필기, 및 2-β-나프틸이소프로필기 등을 들 수 있다.
- [0507] 본 명세서에 기재된 치환 혹은 무치환의 아릴기는, 본 명세서에 별도 기재가 없는 한, 바람직하게는 페닐기, p-비페닐기, m-비페닐기, o-비페닐기, p-터페닐-4-일기, p-터페닐-3-일기, p-터페닐-2-일기, m-터페닐-4-일기, m-터페닐-3-일기, m-터페닐-2-일기, o-터페닐-4-일기, o-터페닐-3-일기, o-터페닐-2-일기, 1-나프틸기, 2-나프틸

기, 안트릴기, 페난트릴기, 피레닐기, 크리세닐기, 트리페닐레닐기, 플루오레닐기, 9,9'-스피로비플루오레닐기, 9,9-디메틸플루오레닐기, 및 9,9-디페닐플루오레닐기 등이다.

[0508] 본 명세서에 기재된 치환 혹은 무치환의 복소환기는, 본 명세서에 별도로 기재가 없는 한, 바람직하게는 피리딜기, 피리미디닐기, 트리아지닐기, 퀴놀릴기, 이소퀴놀릴기, 퀴나졸리닐기, 벤조이미다졸릴기, 페난트롤리닐기, 카르바졸릴기(1-카르바졸릴기, 2-카르바졸릴기, 3-카르바졸릴기, 4-카르바졸릴기 또는 9-카르바졸릴기), 벤조카르바졸릴기, 아자카르바졸릴기, 디아자카르바졸릴기, 디벤조푸라닐기, 나프토벤조푸라닐기, 아자디벤조푸라닐기, 디아자디벤조푸라닐기, 디벤조티오펜닐기, 나프토벤조티오펜닐기, 아자디벤조티오펜닐기, 디아자디벤조티오펜닐기, (9-페닐)카르바졸릴기((9-페닐)카르바졸-1-일기, (9-페닐)카르바졸-2-일기, (9-페닐)카르바졸-3-일기 또는 (9-페닐)카르바졸-4-일기), (9-비페닐)카르바졸릴기, (9-페닐)페닐카르바졸릴기, 디페닐카르바졸-9-일기, 페닐카르바졸-9-일기, 페닐트리아지닐기, 비페닐릴트리아지닐기, 디페닐트리아지닐기, 페닐디벤조푸라닐기, 및 페닐디벤조티오펜닐기 등이다.

[0509] 본 명세서에 있어서, 카르바졸릴기는, 본 명세서에 별도로 기재가 없는 한, 구체적으로는 이하의 어느 하나의 기이다.

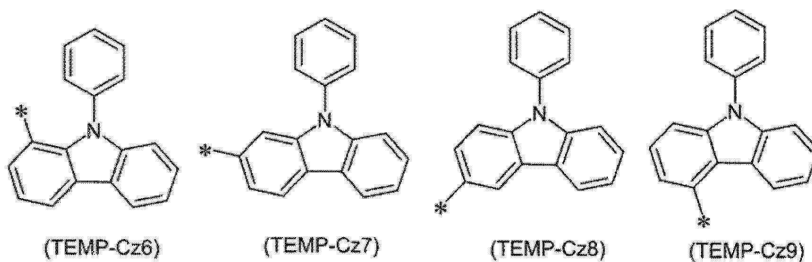
[0510] [화학식 7]



[0511]

[0512] 본 명세서에 있어서, (9-페닐)카르바졸릴기는, 본 명세서에 별도로 기재가 없는 한, 구체적으로는 이하의 어느 하나의 기이다.

[0513] [화학식 8]

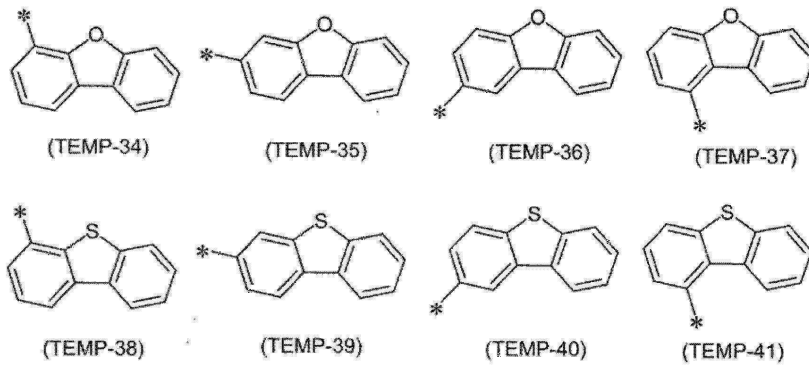


[0514]

[0515] 상기 일반식 (TEMP-Cz1)~(TEMP-Cz9) 중, *는 결합 위치를 나타낸다.

[0516] 본 명세서에 있어서, 디벤조푸라닐기 및 디벤조티오펜닐기는, 본 명세서에 별도로 기재가 없는 한, 구체적으로는 이하의 어느 하나의 기이다.

[0517] [화학식 9]



[0518]

[0519] 상기 일반식 (TEMP-34)~(TEMP-41) 중, *는 결합 위치를 나타낸다.

[0520] 본 명세서에 기재된 치환 혹은 무치환의 알킬기는, 본 명세서에 별도 기재가 없는 한, 바람직하게는 메틸기, 에틸기, 프로필기, 이소프로필기, n-부틸기, 이소부틸기, 및 t-부틸기 등이다.

[0521] · 「치환 혹은 무치환의 아릴렌기」

[0522] 본 명세서에 기재된 「치환 혹은 무치환의 아릴렌기」는, 별도 기재가 없는 한, 상기 「치환 혹은 무치환의 아릴기」로부터 아릴환 상의 하나의 수소 원자를 제거함으로써 유도되는 2가의 기이다. 「치환 혹은 무치환의 아릴렌기」의 구체예(구체예군 G12)로서는, 구체예군 G1에 기재된 「치환 혹은 무치환의 아릴기」로부터 아릴환 상의 하나의 수소 원자를 제거함으로써 유도되는 2가의 기 등을 들 수 있다.

[0523] · 「치환 혹은 무치환의 2가의 복소환기」

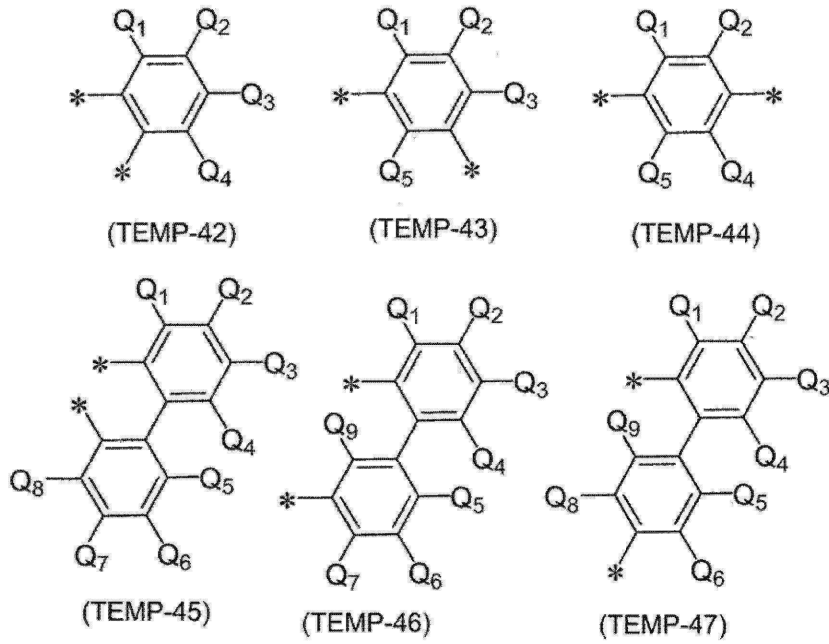
[0524] 본 명세서에 기재된 「치환 혹은 무치환의 2가의 복소환기」는, 별도 기재가 없는 한, 상기 「치환 혹은 무치환의 복소환기」로부터 복소환 상의 하나의 수소 원자를 제거함으로써 유도되는 2가의 기이다. 「치환 혹은 무치환의 2가의 복소환기」의 구체예(구체예군 G13)로서는, 구체예군 G2에 기재된 「치환 혹은 무치환의 복소환기」로부터 복소환 상의 하나의 수소 원자를 제거함으로써 유도되는 2가의 기 등을 들 수 있다.

[0525] · 「치환 혹은 무치환의 알킬렌기」

[0526] 본 명세서에 기재된 「치환 혹은 무치환의 알킬렌기」는, 별도 기재가 없는 한, 상기 「치환 혹은 무치환의 알킬기」로부터 알킬쇄 상의 하나의 수소 원자를 제거함으로써 유도되는 2가의 기이다. 「치환 혹은 무치환의 알킬렌기」의 구체예(구체예군 G14)로서는, 구체예군 G3에 기재된 「치환 혹은 무치환의 알킬기」로부터 알킬쇄 상의 하나의 수소 원자를 제거함으로써 유도되는 2가의 기 등을 들 수 있다.

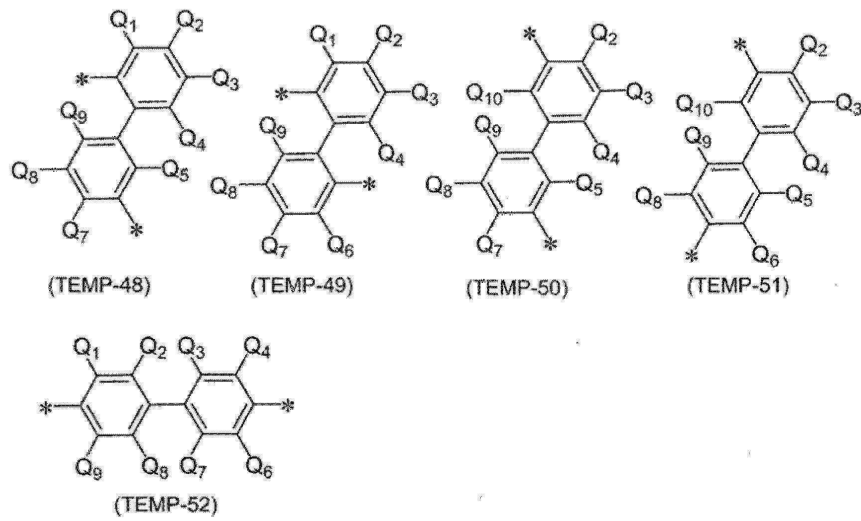
[0527] 본 명세서에 기재된 치환 혹은 무치환의 아릴렌기는, 본 명세서에 별도 기재가 없는 한, 바람직하게는 하기 일반식 (TEMP-42)~(TEMP-68) 중 어느 하나의 기이다.

[0528] [화학식 10]



[0529]

[0530] [화학식 11]

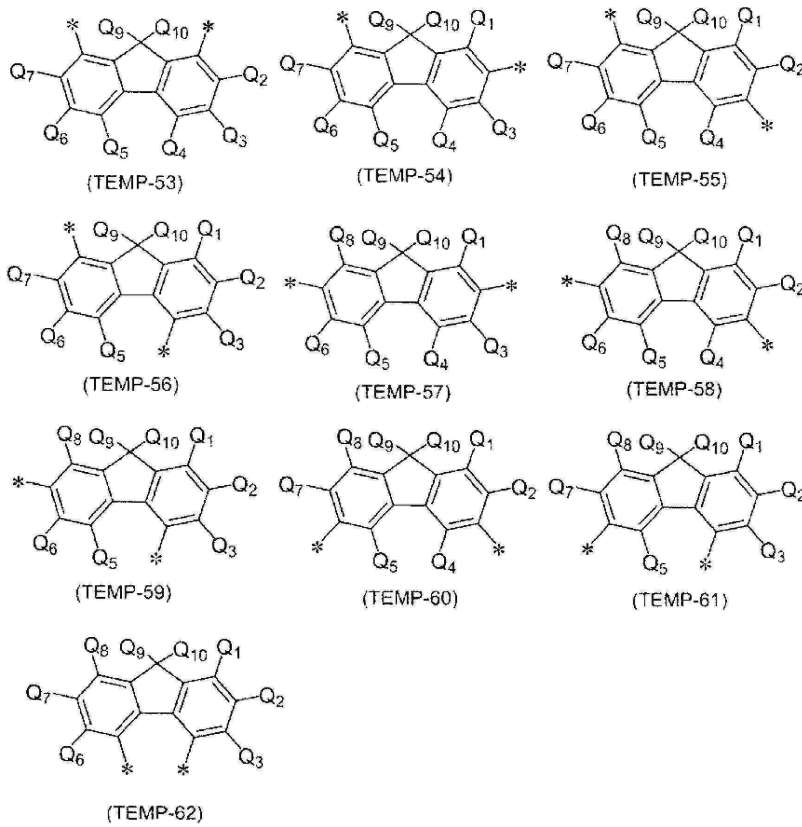


[0531]

[0532] 상기 일반식 (TEMP-42)~(TEMP-52) 중, Q₁~Q₁₀은, 각각 독립적으로 수소 원자 또는 치환기이다.

[0533] 상기 일반식 (TEMP-42)~(TEMP-52) 중, *는 결합 위치를 나타낸다.

[0534] [화학식 12]



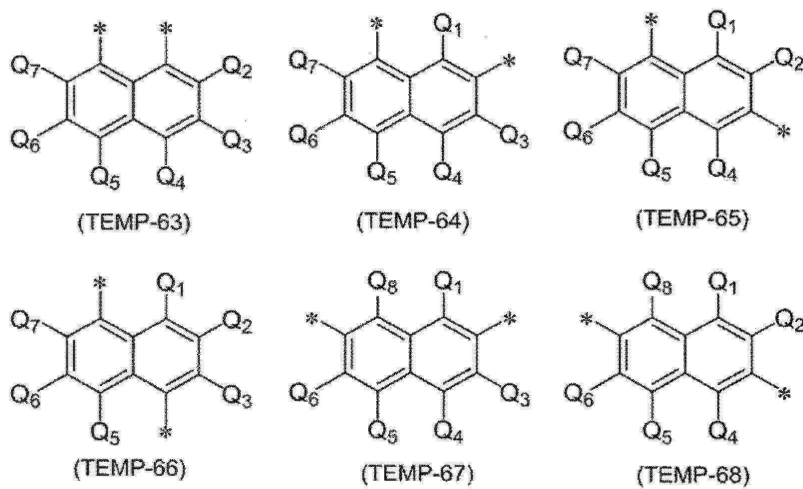
[0535]

[0536] 상기 일반식 (TEMP-53)~(TEMP-62) 중, $Q_1 \sim Q_{10}$ 은, 각각 독립적으로 수소 원자 또는 치환기이다.

[0537] 식 Q_9 및 Q_{10} 은 단일 결합을 통해 서로 결합하여 고리를 형성하여도 좋다.

[0538] 상기 일반식 (TEMP-53)~(TEMP-62) 중, *는 결합 위치를 나타낸다.

[0539] [화학식 13]



[0540]

[0541] 상기 일반식 (TEMP-63)~(TEMP-68) 중, $Q_1 \sim Q_8$ 은, 각각 독립적으로 수소 원자 또는 치환기이다.

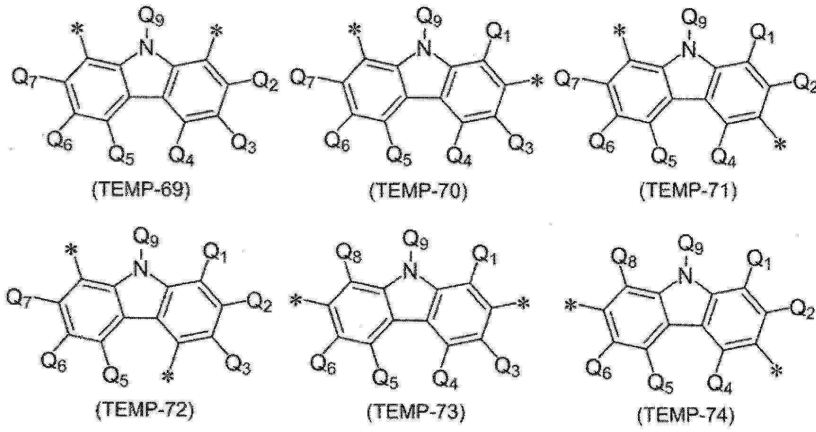
[0542] 상기 일반식 (TEMP-63)~(TEMP-68) 중, *는 결합 위치를 나타낸다.

[0543] 본 명세서에 기재된 치환 혹은 무치환의 2가의 복소환기는, 본 명세서에 별도 기재가 없는 한, 바람직하게는 하

기 일반식 (TEMP-69)~(TEMP-102) 중 어느 하나의 기이다.

[0544]

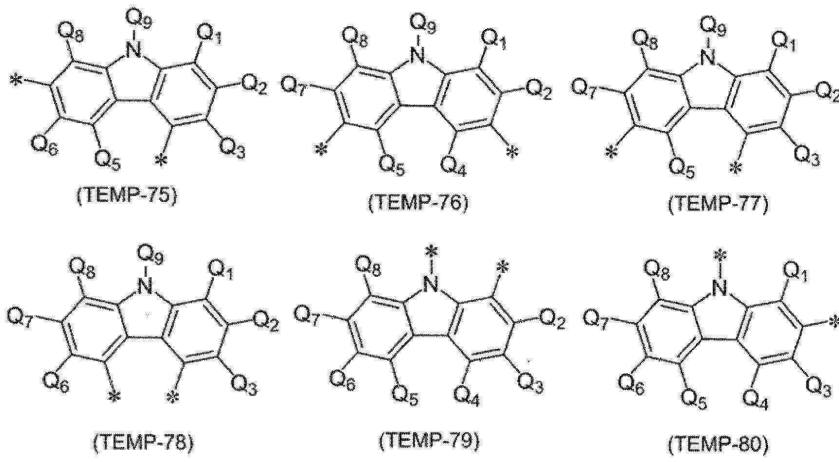
[화학식 14]



[0545]

[0546]

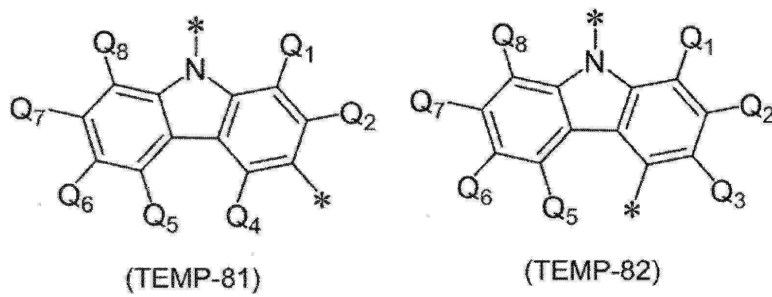
[화학식 15]



[0547]

[0548]

[화학식 16]

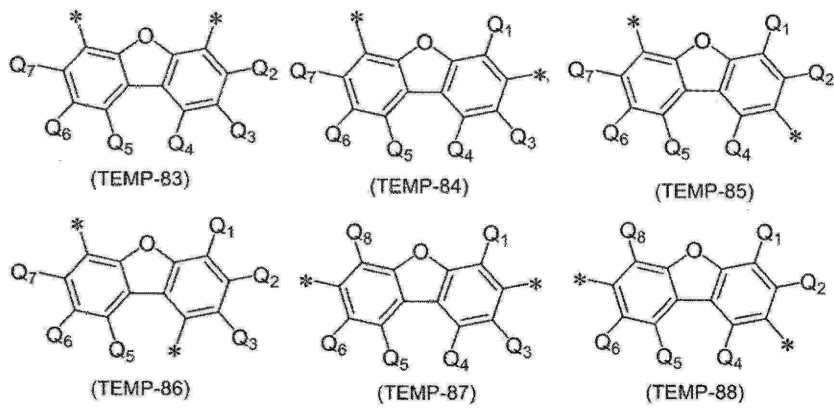


[0549]

[0550]

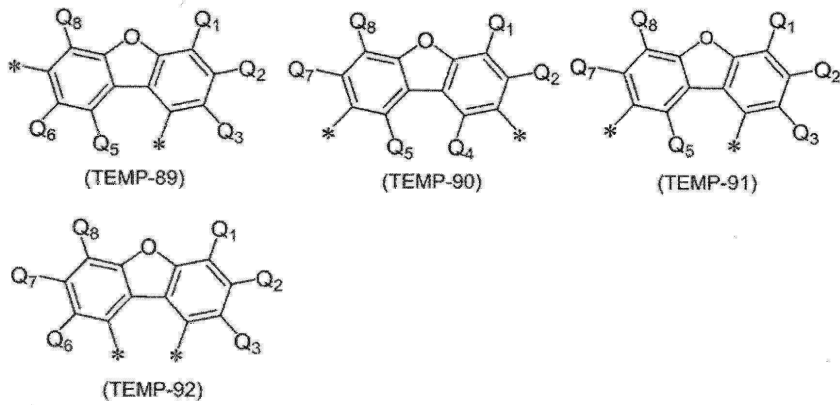
상기 일반식 (TEMP-69)~(TEMP-82) 중, Q₁~Q₉는, 각각 독립적으로 수소 원자 또는 치환기이다.

[0551] [화학식 17]



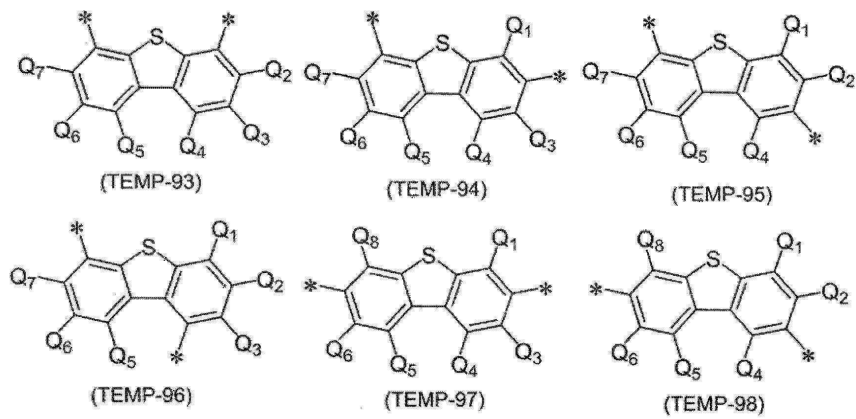
[0552]

[0553] [화학식 18]



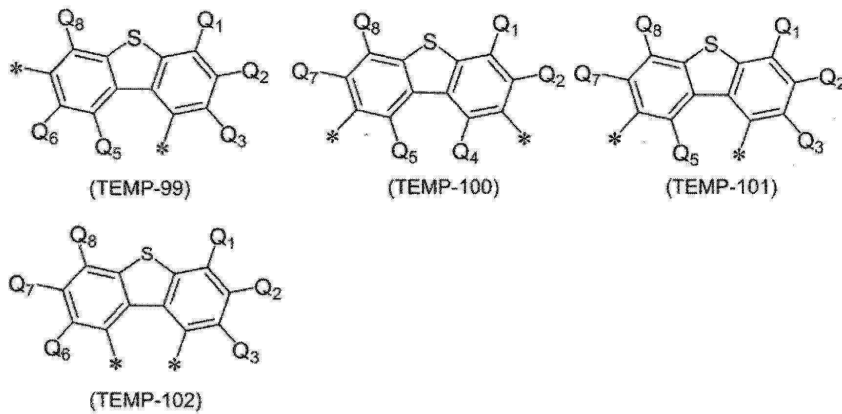
[0554]

[0555] [화학식 19]



[0556]

[0557] [화학식 20]



[0558]

[0559] 상기 일반식 (TEMP-83)~(TEMP-102) 중, Q₁~Q₈은, 각각 독립적으로 수소 원자 또는 치환기이다.

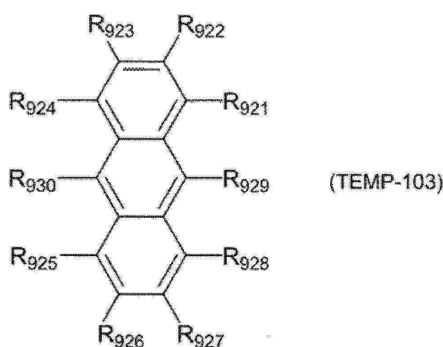
[0560] 이상이 「본 명세서에 기재된 치환기」에 대한 설명이다.

[0561] · 「결합하여 고리를 형성하는 경우」

[0562] 본 명세서에 있어서, 「인접한 2개 이상으로 이루어지는 조의 1조 이상이, 서로 결합하여 치환 혹은 무치환의 단환을 형성하거나, 서로 결합하여 치환 혹은 무치환의 축합환을 형성하거나, 또는 서로 결합하지 않고」라고 하는 경우는, 「인접한 2개 이상으로 이루어지는 조의 1조 이상이 서로 결합하여 치환 혹은 무치환의 단환을 형성하는」 경우와, 「인접한 2개 이상으로 이루어지는 조의 1조 이상이 서로 결합하여 치환 혹은 무치환의 축합환을 형성하는」 경우와 「인접한 2개 이상으로 이루어지는 조의 1조 이상이 서로 결합하지 않는」 경우를 의미한다.

[0563] 본 명세서에 있어서의, 「인접한 2개 이상으로 이루어지는 조의 1조 이상이 서로 결합하여 치환 혹은 무치환의 단환을 형성하는」 경우, 및 「인접한 2개 이상으로 이루어지는 조의 1조 이상이 서로 결합하여 치환 혹은 무치환의 축합환을 형성하는」 경우(이하, 이들 경우를 통합하여 「결합하여 고리를 형성하는 경우」라고 부르는 경우가 있음)에 대해서 이하에 설명한다. 모골격이 안트라센환인 하기 일반식 (TEMP-103)으로 표시되는 안트라센 화합물의 경우를 예로 들어 설명한다.

[0564] [화학식 21]



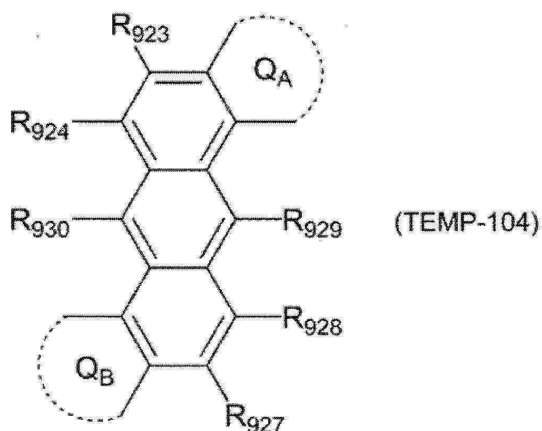
[0565]

[0566] 예컨대, R₉₂₁~R₉₃₀ 중의 「인접한 2개 이상으로 이루어지는 조의 1조 이상이 서로 결합하여 고리를 형성하는」 경우에 있어서, 1조가 되는 인접한 2개로 이루어지는 조는, R₉₂₁과 R₉₂₂의 조, R₉₂₂와 R₉₂₃의 조, R₉₂₃과 R₉₂₄의 조, R₉₂₄와 R₉₃₀의 조, R₉₃₀과 R₉₂₅의 조, R₉₂₅와 R₉₂₆의 조, R₉₂₆과 R₉₂₇의 조, R₉₂₇과 R₉₂₈의 조, R₉₂₈과 R₉₂₉의 조, 및 R₉₂₉와 R₉₂₁의 조이다.

[0567] 상기 「1조 이상」이란, 상기 인접한 2개 이상으로 이루어지는 조의 2조 이상이 동시에 고리를 형성하여도 좋다는 것을 의미한다. 예컨대, R₉₂₁과 R₉₂₂가 서로 결합하여 고리 Q_A를 형성하고, 동시에 R₉₂₅와 R₉₂₆이 서로 결합하여

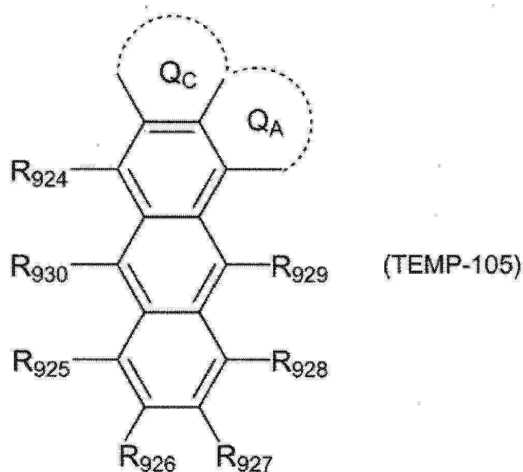
고리 Q_B를 형성한 경우, 상기 일반식 (TEMP-103)으로 표시되는 안트라센 화합물은 하기 일반식 (TEMP-104)로 표시된다.

[화학식 22]



「인접한 2개 이상으로 이루어지는 조」가 고리를 형성하는 경우란, 전술한 예와 같이 인접한 「2개」로 이루어지는 조가 결합하는 경우뿐만 아니라, 인접한 「3개 이상」으로 이루어지는 조가 결합하는 경우도 포함한다. 예컨대, R₉₂₁과 R₉₂₂가 서로 결합하여 고리 Q_A를 형성하고, 또한 R₉₂₂와 R₉₂₃이 서로 결합하여 고리 Q_C를 형성하며, 서로 인접한 3개(R₉₂₁, R₉₂₂ 및 R₉₂₃)로 이루어지는 조가 서로 결합하여 고리를 형성하여 안트라센 모골격에 축합하는 경우를 의미하고, 이 경우, 상기 일반식 (TEMP-103)으로 표시되는 안트라센 화합물은 하기 일반식 (TEMP-105)로 표시된다. 하기 일반식 (TEMP-105)에 있어서, 고리 Q_A 및 고리 Q_C는 R₉₂₂를 공유한다.

[화학식 23]



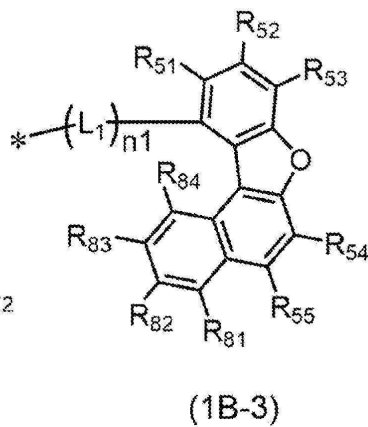
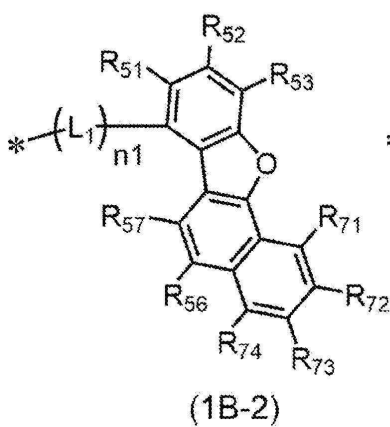
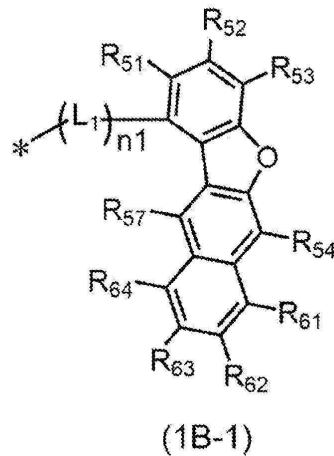
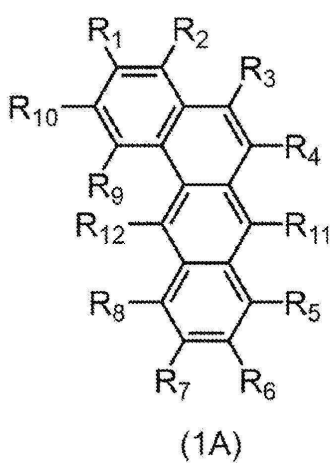
형성되는 「단환」 또는 「축합환」은, 형성된 고리만의 구조로서, 포화 고리여도 좋고 불포화 고리여도 좋다. 「인접한 2개로 이루어지는 조의 1조」가 「단환」 또는 「축합환」을 형성하는 경우여도, 해당 「단환」 또는 「축합환」은 포화 고리 또는 불포화 고리를 형성할 수 있다. 예컨대, 상기 일반식 (TEMP-104)에 있어서 형성된 고리 Q_A 및 고리 Q_B는 각각 「단환」 또는 「축합환」이다. 또한, 상기 일반식 (TEMP-105)에 있어서 형성된 고리 Q_A 및 고리 Q_C는 「축합환」이다. 상기 일반식 (TEMP-105)의 고리 Q_A와 고리 Q_C는, 고리 Q_A와 고리 Q_C가 축합함으로써 축합환으로 되어 있다. 상기 일반식 (TEMP-104)의 고리 Q_A가 벤젠환이면, 고리 Q_A는 단환이다. 상기 일반식 (TEMP-104)의 고리 Q_A가 나프탈렌환이면, 고리 Q_A는 축합환이다.

「불포화 고리」란, 방향족 탄화수소환 또는 방향족 복소환을 의미한다. 「포화 고리」란, 지방족 탄화수소환 또는 비방향족 복소환을 의미한다.

- [0575] 방향족 탄화수소환의 구체예로서는, 구체예군 G1에 있어서 구체예로 든 기가 수소 원자에 의해 중단된 구조를 들 수 있다.
- [0576] 방향족 복소환의 구체예로서는, 구체예군 G2에 있어서 구체예로 든 방향족 복소환기가 수소 원자에 의해 중단된 구조를 들 수 있다.
- [0577] 지방족 탄화수소환의 구체예로서는, 구체예군 G6에 있어서 구체예로 든 기가 수소 원자에 의해 중단된 구조를 들 수 있다.
- [0578] 「고리를 형성한다」란, 모골격의 복수의 원자만, 혹은 모골격의 복수의 원자와 추가로 1 이상의 임의의 원자로 고리를 형성하는 것을 의미한다. 예컨대, 상기 일반식 (TEMP-104)에 나타내는, R_{921} 과 R_{922} 가 서로 결합하여 형성된 고리 Q_A 는, R_{921} 이 결합하는 안트라센 골격의 탄소 원자와, R_{922} 가 결합하는 안트라센 골격의 탄소 원자와, 1 이상의 임의의 원자로 형성하는 고리를 의미한다. 구체예로서는, R_{921} 과 R_{922} 로 고리 Q_A 를 형성하는 경우에 있어서, R_{921} 이 결합하는 안트라센 골격의 탄소 원자와, R_{922} 가 결합하는 안트라센 골격의 탄소 원자와, 4개의 탄소 원자로 단환의 불포화 고리를 형성하는 경우, R_{921} 과 R_{922} 로 형성하는 고리는 벤젠환이다.
- [0579] 여기서, 「임의의 원소」는, 본 명세서에 별도 기재가 없는 한, 바람직하게는 탄소 원소, 질소 원소, 산소 원소 및 황 원소로 이루어진 군으로부터 선택되는 적어도 1종의 원소이다. 임의의 원소에 있어서(예컨대, 탄소 원소 또는 질소 원소의 경우), 고리를 형성하지 않는 결합은, 수소 원자 등으로 중단되어도 좋고, 후술하는 「임의의 치환기」로 치환되어도 좋다. 탄소 원소 이외의 임의의 원소를 포함하는 경우, 형성되는 고리는 복소환이다.
- [0580] 단환 또는 축합환을 구성하는 「1 이상의 임의의 원소」는, 본 명세서에 별도 기재가 없는 한, 바람직하게는 2개 이상 15개 이하이며, 보다 바람직하게는 3개 이상 12개 이하이고, 더욱 바람직하게는 3개 이상 5개 이하이다.
- [0581] 본 명세서에 별도 기재가 없는 한, 「단환」 및 「축합환」 중, 바람직하게는 「단환」이다.
- [0582] 본 명세서에 별도 기재가 없는 한, 「포화 고리」 및 「불포화 고리」 중, 바람직하게는 「불포화 고리」이다.
- [0583] 본 명세서에 별도 기재가 없는 한, 「단환」은 바람직하게는 벤젠환이다.
- [0584] 본 명세서에 별도 기재가 없는 한, 「불포화 고리」는 바람직하게는 벤젠환이다.
- [0585] 「인접한 2개 이상으로 이루어지는 조의 1조 이상」이, 「서로 결합하여 치환 혹은 무치환의 단환을 형성하는」 경우, 또는 「서로 결합하여 치환 혹은 무치환의 축합환을 형성하는」 경우, 본 명세서에 별도 기재가 없는 한, 바람직하게는 인접한 2개 이상으로 이루어지는 조의 1조 이상이, 서로 결합하여, 모골격의 복수의 원자와, 1개 이상 15개 이하의 탄소 원소, 질소 원소, 산소 원소 및 황 원소로 이루어진 군으로부터 선택되는 적어도 1종의 원소로 이루어지는 치환 혹은 무치환의 「불포화 고리」를 형성한다.
- [0586] 상기한 「단환」 또는 「축합환」이 치환기를 갖는 경우의 치환기는, 예컨대 후술하는 「임의의 치환기」이다. 상기한 「단환」 또는 「축합환」이 치환기를 갖는 경우의 치환기의 구체예는, 전술한 「본 명세서에 기재된 치환기」의 항에서 설명한 치환기이다.
- [0587] 상기한 「포화 고리」 또는 「불포화 고리」가 치환기를 갖는 경우의 치환기는, 예컨대 후술하는 「임의의 치환기」이다. 상기한 「단환」 또는 「축합환」이 치환기를 갖는 경우의 치환기의 구체예는, 전술한 「본 명세서에 기재된 치환기」의 항에서 설명한 치환기이다.
- [0588] 이상이 「인접한 2개 이상으로 이루어지는 조의 1조 이상이 서로 결합하여 치환 혹은 무치환의 단환을 형성하는」 경우, 및 「인접한 2개 이상으로 이루어지는 조의 1조 이상이 서로 결합하여 치환 혹은 무치환의 축합환을 형성하는」 경우(「결합하여 고리를 형성하는 경우」)에 대한 설명이다.
- [0589] · 「치환 혹은 무치환의」라고 하는 경우의 치환기
- [0590] 본 명세서에 있어서의 일 실시형태에서는, 상기 「치환 혹은 무치환의」라고 하는 경우의 치환기(본 명세서에 있어서 「임의의 치환기」라고 부르는 경우가 있음)는, 예컨대,
- [0591] 무치환의 탄소수 1~50의 알킬기,
- [0592] 무치환의 탄소수 2~50의 알케닐기,

- [0593] 무치환의 탄소수 2~50의 알킬닐기,
- [0594] 무치환의 고리 형성 탄소수 3~50의 시클로알킬기,
- [0595] $-\text{Si}(\text{R}_{901})(\text{R}_{902})(\text{R}_{903})$,
- [0596] $-\text{O}-(\text{R}_{904})$,
- [0597] $-\text{S}-(\text{R}_{905})$,
- [0598] $-\text{N}(\text{R}_{906})(\text{R}_{907})$,
- [0599] 할로젠 원자,
- [0600] 시아노기,
- [0601] 니트로기,
- [0602] 무치환의 고리 형성 탄소수 6~50의 아릴기, 및
- [0603] 무치환의 고리 형성 원자수 5~50의 복소환기
- [0604] 로 이루어진 군으로부터 선택되는 기 등이고, 여기서
- [0605] $\text{R}_{901} \sim \text{R}_{907}$ 은, 각각 독립적으로
- [0606] 수소 원자,
- [0607] 치환 혹은 무치환의 탄소수 1~50의 알킬기,
- [0608] 치환 혹은 무치환의 고리 형성 탄소수 3~50의 시클로알킬기,
- [0609] 치환 혹은 무치환의 고리 형성 탄소수 6~50의 아릴기, 또는
- [0610] 치환 혹은 무치환의 고리 형성 원자수 5~50의 복소환기이다.
- [0611] R_{901} 이 2개 이상 존재하는 경우, 2개 이상의 R_{901} 은 서로 동일하거나 또는 상이하고,
- [0612] R_{902} 가 2개 이상 존재하는 경우, 2개 이상의 R_{902} 는 서로 동일하거나 또는 상이하며,
- [0613] R_{903} 이 2개 이상 존재하는 경우, 2개 이상의 R_{903} 은 서로 동일하거나 또는 상이하고,
- [0614] R_{904} 가 2개 이상 존재하는 경우, 2개 이상의 R_{904} 는 서로 동일하거나 또는 상이하며,
- [0615] R_{905} 가 2개 이상 존재하는 경우, 2개 이상의 R_{905} 는 서로 동일하거나 또는 상이하고,
- [0616] R_{906} 이 2개 이상 존재하는 경우, 2개 이상의 R_{906} 은 서로 동일하거나 또는 상이하며,
- [0617] R_{907} 이 2개 이상 존재하는 경우, 2개 이상의 R_{907} 은 서로 동일하거나 또는 상이하다.
- [0618] 일 실시형태에서는, 상기 「치환 혹은 무치환의」라고 하는 경우의 치환기는,
- [0619] 탄소수 1~50의 알킬기,
- [0620] 고리 형성 탄소수 6~50의 아릴기, 및
- [0621] 고리 형성 원자수 5~50의 복소환기
- [0622] 로 이루어진 군으로부터 선택되는 기이다.
- [0623] 일 실시형태에서는, 상기 「치환 혹은 무치환의」라고 하는 경우의 치환기는,
- [0624] 탄소수 1~18의 알킬기,
- [0625] 고리 형성 탄소수 6~18의 아릴기, 및

- [0626] 고리 형성 원자수 5~18의 복소환기
- [0627] 로 이루어진 군으로부터 선택되는 기이다.
- [0628] 상기 임의의 치환기의 각 기의 구체예는 전술한 「본 명세서에 기재된 치환기」의 항에서 설명한 치환기의 구체예이다.
- [0629] 본 명세서에 있어서 별도 기재가 없는 한, 인접한 임의의 치환기들이 「포화 고리」 또는 「불포화 고리」를 형성하여도 좋고, 바람직하게는 치환 혹은 무치환의 포화 5원환, 치환 혹은 무치환의 포화 6원환, 치환 혹은 무치환의 불포화 5원환, 또는 치환 혹은 무치환의 불포화 6원환을 형성하고, 보다 바람직하게는 벤젠환을 형성한다.
- [0630] 본 명세서에 있어서 별도 기재가 없는 한, 임의의 치환기는 치환기를 더 가져도 좋다. 임의의 치환기가 더 갖는 치환기로는 상기 임의의 치환기와 동일하다.
- [0631] 본 명세서에 있어서 「AA~BB」를 이용하여 표시되는 수치 범위는, 「AA~BB」 앞에 기재되는 수치 AA를 하한값으로서, 「AA~BB」 뒤에 기재되는 수치 BB를 상한값으로서 포함하는 범위를 의미한다.
- [0632] [제1 실시형태]
- [0633] (화합물)
- [0634] 본 실시형태에 따른 화합물은, 하기 일반식 (1A)로 표시되는 화합물이다.
- [0635] [화학식 24]



- [0636]
- [0637] (상기 일반식 (1A)에 있어서,
- [0638] $R_4 \sim R_8$ 및 $R_{10} \sim R_{12}$ 중 하나는 상기 일반식 (1B-1), (1B-2) 또는 (1B-3)으로 표시되는 기이고,
- [0639] $R_1 \sim R_3$, R_9 , 및 상기 일반식 (1B-1), (1B-2) 또는 (1B-3)으로 표시되는 기 이외의 $R_4 \sim R_8$ 및 $R_{10} \sim R_{12}$ 는, 각각 독

립적으로

- [0640] 수소 원자,
- [0641] 치환 혹은 무치환의 탄소수 1~50의 알킬기,
- [0642] 치환 혹은 무치환의 탄소수 1~50의 할로알킬기,
- [0643] 치환 혹은 무치환의 탄소수 2~50의 알케닐기,
- [0644] 치환 혹은 무치환의 탄소수 2~50의 알키닐기,
- [0645] 치환 혹은 무치환의 고리 형성 탄소수 3~50의 시클로알킬기,
- [0646] $-\text{Si}(\text{R}_{901})(\text{R}_{902})(\text{R}_{903})$ 으로 표시되는 기,
- [0647] $-\text{O}(\text{R}_{904})$ 로 표시되는 기,
- [0648] $-\text{S}(\text{R}_{905})$ 로 표시되는 기,
- [0649] 치환 혹은 무치환의 탄소수 7~50의 아랄킬기,
- [0650] $-\text{C}(=\text{O})\text{R}_{801}$ 로 표시되는 기,
- [0651] $-\text{COOR}_{802}$ 로 표시되는 기,
- [0652] 할로젠 원자,
- [0653] 시아노기,
- [0654] 니트로기,
- [0655] 치환 혹은 무치환의 고리 형성 탄소수 6~50의 아틸기, 또는
- [0656] 치환 혹은 무치환의 고리 형성 원자수 5~50의 복소환기이며,
- [0657] R_{11} 이 상기 일반식 (1B-1), (1B-2) 또는 (1B-3)으로 표시되는 기인 경우, R_{12} 는 수소 원자 또는 치환 혹은 무치환의 페닐기이고,
- [0658] R_{12} 가 상기 일반식 (1B-1), (1B-2) 또는 (1B-3)으로 표시되는 기인 경우, R_{11} 은 수소 원자 또는 치환 혹은 무치환의 페닐기이며,
- [0659] 상기 일반식 (1B-1), (1B-2) 및 (1B-3)으로 표시되는 기에 있어서,
- [0660] n_1 은 0, 1, 2, 또는 3이고,
- [0661] n_1 이 1, 2, 또는 3인 경우의 L_1 은,
- [0662] 치환 혹은 무치환의 고리 형성 탄소수 6~50의 아틸렌기, 또는
- [0663] 치환 혹은 무치환의 고리 형성 원자수 5~50의 2가의 복소환기이며,
- [0664] L_1 이 2 이상 존재하는 경우, 2 이상의 L_1 은 서로 동일하거나 또는 상이하고,
- [0665] 상기 일반식 (1B-1)에 있어서,
- [0666] $\text{R}_{51} \sim \text{R}_{54}$, R_{57} , 및 $\text{R}_{61} \sim \text{R}_{64}$ 중의 인접한 2개 이상으로 이루어지는 조의 1조 이상이,
- [0667] 서로 결합하여 치환 혹은 무치환의 단환을 형성하거나,
- [0668] 서로 결합하여 치환 혹은 무치환의 축합환을 형성하거나, 또는
- [0669] 서로 결합하지 않으며,
- [0670] 상기 치환 혹은 무치환의 단환을 형성하지 않고, 또한 상기 치환 혹은 무치환의 축합환을 형성하지 않는 $\text{R}_{51} \sim$

R_{54} , R_{57} , 및 $R_{61} \sim R_{64}$ 는, 각각 독립적으로

- [0671] 수소 원자,
- [0672] 치환 혹은 무치환의 탄소수 1~50의 알킬기,
- [0673] 치환 혹은 무치환의 탄소수 2~50의 알케닐기,
- [0674] 치환 혹은 무치환의 탄소수 2~50의 알키닐기,
- [0675] 치환 혹은 무치환의 고리 형성 탄소수 3~50의 시클로알킬기,
- [0676] $-\text{Si}(R_{901})(R_{902})(R_{903})$ 으로 표시되는 기,
- [0677] $-\text{O}(R_{904})$ 로 표시되는 기,
- [0678] $-\text{S}(R_{905})$ 로 표시되는 기,
- [0679] $-\text{N}(R_{906})(R_{907})$ 로 표시되는 기,
- [0680] 할로겐 원자,
- [0681] 시아노기,
- [0682] 니트로기,
- [0683] 치환 혹은 무치환의 고리 형성 탄소수 6~50의 아릴기, 또는
- [0684] 치환 혹은 무치환의 고리 형성 원자수 5~50의 복소환기이며,
- [0685] *는 상기 일반식 (1A)에서의 벤즈[a]안트라센환과의 결합 위치를 나타내고,
- [0686] 상기 일반식 (1B-2)에 있어서,
- [0687] $R_{51} \sim R_{53}$, R_{56} , R_{57} , 및 $R_{71} \sim R_{74}$ 중의 인접한 2개 이상으로 이루어지는 조의 1조 이상이,
- [0688] 서로 결합하여 치환 혹은 무치환의 단환을 형성하거나,
- [0689] 서로 결합하여 치환 혹은 무치환의 축합환을 형성하거나, 또는
- [0690] 서로 결합하지 않으며,
- [0691] 상기 치환 혹은 무치환의 단환을 형성하지 않고, 또한 상기 치환 혹은 무치환의 축합환을 형성하지 않는 $R_{51} \sim R_{53}$, R_{56} , R_{57} , 및 $R_{71} \sim R_{74}$ 는, 각각 독립적으로 상기 일반식 (1B-1)에 있어서의 $R_{51} \sim R_{54}$, R_{57} , 및 $R_{61} \sim R_{64}$ 와 동일한 의미이며,
- [0692] *는 상기 일반식 (1A)에서의 벤즈[a]안트라센환과의 결합 위치를 나타내고,
- [0693] 상기 일반식 (1B-3)에 있어서,
- [0694] $R_{51} \sim R_{55}$, 및 $R_{81} \sim R_{84}$ 중의 인접한 2개 이상으로 이루어지는 조의 1조 이상이,
- [0695] 서로 결합하여 치환 혹은 무치환의 단환을 형성하거나,
- [0696] 서로 결합하여 치환 혹은 무치환의 축합환을 형성하거나, 또는
- [0697] 서로 결합하지 않으며,
- [0698] 상기 치환 혹은 무치환의 단환을 형성하지 않고, 또한 상기 치환 혹은 무치환의 축합환을 형성하지 않는 $R_{51} \sim R_{55}$, 및 $R_{81} \sim R_{84}$ 는, 각각 독립적으로 상기 일반식 (1B-1)에 있어서의 $R_{51} \sim R_{54}$, R_{57} , 및 $R_{61} \sim R_{64}$ 와 동일한 의미이며,
- [0699] *는 상기 일반식 (1A)에서의 벤즈[a]안트라센환과의 결합 위치를 나타낸다.)
- [0700] (상기 일반식 (1A)로 표시되는 화합물에 있어서, R_{901} , R_{902} , R_{903} , R_{904} , R_{905} , R_{906} , R_{907} , R_{801} , 및 R_{802} 는, 각각 독

립적으로

- [0701] 수소 원자,
- [0702] 치환 혹은 무치환의 탄소수 1~50의 알킬기,
- [0703] 치환 혹은 무치환의 고리 형성 탄소수 3~50의 시클로알킬기,
- [0704] 치환 혹은 무치환의 고리 형성 탄소수 6~50의 아릴기, 또는
- [0705] 치환 혹은 무치환의 고리 형성 원자수 5~50의 복소환기이고,
- [0706] R_{901} 이 복수 존재하는 경우, 복수의 R_{901} 은 서로 동일하거나 또는 상이하며,
- [0707] R_{902} 가 복수 존재하는 경우, 복수의 R_{902} 는 서로 동일하거나 또는 상이하고,
- [0708] R_{903} 이 복수 존재하는 경우, 복수의 R_{903} 은 서로 동일하거나 또는 상이하며,
- [0709] R_{904} 가 복수 존재하는 경우, 복수의 R_{904} 는 서로 동일하거나 또는 상이하고,
- [0710] R_{905} 가 복수 존재하는 경우, 복수의 R_{905} 는 서로 동일하거나 또는 상이하며,
- [0711] R_{906} 이 복수 존재하는 경우, 복수의 R_{906} 은 서로 동일하거나 또는 상이하고,
- [0712] R_{907} 이 복수 존재하는 경우, 복수의 R_{907} 은 서로 동일하거나 또는 상이하며,
- [0713] R_{801} 이 복수 존재하는 경우, 복수의 R_{801} 은 서로 동일하거나 또는 상이하고,
- [0714] R_{802} 가 복수 존재하는 경우, 복수의 R_{802} 는 서로 동일하거나 또는 상이하다.)
- [0715] 본 실시형태에 따른 화합물에 있어서, L_1 이 갖는 치환기는, 고리 형성 탄소수 6~18의 아릴기, 또는 치환 혹은 무치환의 고리 형성 원자수 5~16의 복소환기인 것도 바람직하다.
- [0716] 본 실시형태에 따른 화합물에 있어서, L_1 은, 치환 혹은 무치환의 고리 형성 탄소수 6~13의 아릴렌기인 것도 바람직하다.
- [0717] 본 실시형태에 따른 화합물에 있어서, $n1$ 은 1, 2, 또는 3인 것도 바람직하다.
- [0718] 본 실시형태에 따른 화합물에 있어서, $n1$ 은 0인 것도 바람직하다.
- [0719] 본 실시형태에 따른 화합물에 있어서, 상기 일반식 (1B-1), (1B-2) 또는 (1B-3)으로 표시되는 기에 있어서의 상기 치환 혹은 무치환의 단환을 형성하지 않고, 또한 상기 치환 혹은 무치환의 축합환을 형성하지 않는 상기 일반식 (1B-1)에서의 $R_{51} \sim R_{54}$, R_{57} , 및 $R_{61} \sim R_{64}$ 중 적어도 하나, 상기 일반식 (1B-2)에서의 $R_{51} \sim R_{53}$, R_{56} , R_{57} , 및 $R_{71} \sim R_{74}$ 중 적어도 하나, 또는 상기 일반식 (1B-3)에서의 $R_{51} \sim R_{55}$, 및 $R_{81} \sim R_{84}$ 중 적어도 하나가 수소 원자 이외인 것도 바람직하다.
- [0720] 본 실시형태에 따른 화합물에 있어서, 상기 일반식 (1B-1), (1B-2) 또는 (1B-3)으로 표시되는 기에 있어서의 상기 치환 혹은 무치환의 단환을 형성하지 않고, 또한 상기 치환 혹은 무치환의 축합환을 형성하지 않는 상기 일반식 (1B-1)에서의 $R_{51} \sim R_{54}$, R_{57} , 및 $R_{61} \sim R_{64}$ 중 적어도 하나, 상기 일반식 (1B-2)에서의 $R_{51} \sim R_{53}$, R_{56} , R_{57} , 및 $R_{71} \sim R_{74}$ 중 적어도 하나, 또는 상기 일반식 (1B-3)에서의 $R_{51} \sim R_{55}$, 및 $R_{81} \sim R_{84}$ 중 적어도 하나가 치환 혹은 무치환의 고리 형성 탄소수 6~50의 아릴기인 것도 바람직하다.
- [0721] 본 실시형태에 따른 화합물에 있어서, 상기 일반식 (1B-1), (1B-2) 또는 (1B-3)으로 표시되는 기에 있어서의 상기 치환 혹은 무치환의 단환을 형성하지 않고, 또한 상기 치환 혹은 무치환의 축합환을 형성하지 않는 상기 일반식 (1B-1)에서의 $R_{51} \sim R_{54}$, R_{57} , 및 $R_{61} \sim R_{64}$ 중 적어도 하나, 상기 일반식 (1B-2)에서의 $R_{51} \sim R_{53}$, R_{56} , R_{57} , 및 $R_{71} \sim R_{74}$ 중 적어도 하나, 또는 상기 일반식 (1B-3)에서의 $R_{51} \sim R_{55}$, 및 $R_{81} \sim R_{84}$ 중 적어도 하나가 치환 혹은 무치환의 페닐기인 것도 바람직하다.
- [0722] 본 실시형태에 따른 화합물에 있어서, 상기 일반식 (1B-1), (1B-2) 또는 (1B-3)으로 표시되는 기에 있어서의 상

기 치환 혹은 무치환의 단환을 형성하지 않고, 또한 상기 치환 혹은 무치환의 축합환을 형성하지 않는 상기 일반식 (1B-1)에서의 $R_{51} \sim R_{54}$, R_{57} , 및 $R_{61} \sim R_{64}$ 중 적어도 하나, 상기 일반식 (1B-2)에서의 $R_{51} \sim R_{53}$, R_{56} , R_{57} , 및 $R_{71} \sim R_{74}$ 중 적어도 하나, 또는 상기 일반식 (1B-3)에서의 $R_{51} \sim R_{55}$, 및 $R_{81} \sim R_{84}$ 중 적어도 하나가 무치환의 페닐 기인 것도 바람직하다.

[0723] 본 실시형태에 따른 화합물에 있어서, R_5 , R_6 , R_7 , R_8 , R_{11} , 및 R_{12} 중의 하나가 상기 일반식 (1B-1), (1B-2) 또는 (1B-3)으로 표시되는 기인 것도 바람직하다.

[0724] 본 실시형태에 따른 화합물에 있어서, R_6 , R_7 , R_{11} , 및 R_{12} 중의 하나가 상기 일반식 (1B-1), (1B-2) 또는 (1B-3)으로 표시되는 기인 것도 바람직하다.

[0725] 본 실시형태에 따른 화합물에 있어서, R_{11} 이 상기 일반식 (1B-1), (1B-2) 또는 (1B-3)으로 표시되는 기인 것도 바람직하다.

[0726] 본 실시형태에 따른 화합물에 있어서, R_{12} 가 상기 일반식 (1B-1), (1B-2) 또는 (1B-3)으로 표시되는 기인 것도 바람직하다.

[0727] 본 실시형태에 따른 화합물에 있어서, R_{11} 이 상기 일반식 (1B-1), (1B-2) 또는 (1B-3)으로 표시되는 기인 경우, R_{12} 는 수소 원자인 것도 바람직하다.

[0728] 본 실시형태에 따른 화합물에 있어서, R_{12} 가 상기 일반식 (1B-1), (1B-2) 또는 (1B-3)으로 표시되는 기인 경우, R_{11} 은 수소 원자인 것도 바람직하다.

[0729] 본 실시형태에 따른 화합물에 있어서, 분자 내에 하나 이상의 중수소 원자를 갖는 것도 바람직하다.

[0730] 본 실시형태에 따른 화합물에 있어서, 수소 원자인 경우의 $R_1 \sim R_3$, R_9 , 및 상기 일반식 (1B-1)로 표시되는 기, 상기 일반식 (1B-2)로 표시되는 기 및 상기 일반식 (1B-3)으로 표시되는 기 이외의 수소 원자인 경우의 $R_4 \sim R_8$ 및 $R_{10} \sim R_{12}$, 및 수소 원자인 경우의 $R_{51} \sim R_{57}$, $R_{61} \sim R_{64}$, $R_{71} \sim R_{74}$ 및 $R_{81} \sim R_{84}$ 중 하나 이상은 중수소 원자인 것도 바람직하다.

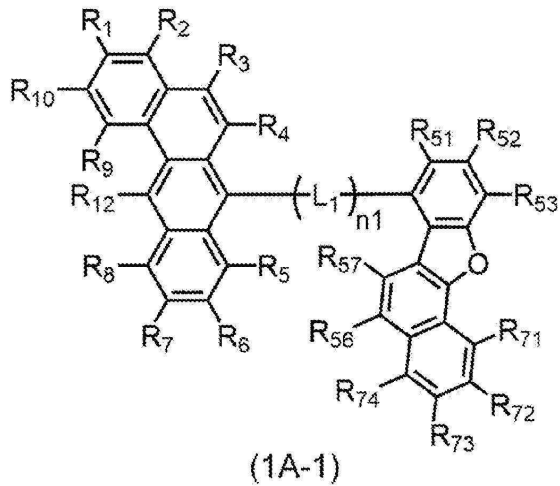
[0731] 본 실시형태에 따른 화합물에 있어서, 수소 원자인 경우의 $R_1 \sim R_3$, R_9 , 및 상기 일반식 (1B-1)로 표시되는 기, 상기 일반식 (1B-2)로 표시되는 기 및 상기 일반식 (1B-3)으로 표시되는 기 이외의 수소 원자인 경우의 $R_4 \sim R_8$ 및 $R_{10} \sim R_{12}$, 및 수소 원자인 경우의 $R_{51} \sim R_{57}$, $R_{61} \sim R_{64}$, $R_{71} \sim R_{74}$ 및 $R_{81} \sim R_{84}$ 전부는 중수소 원자인 것도 바람직하다.

[0732] 본 실시형태에 따른 화합물에 있어서, 수소 원자 이외인 경우의 $R_1 \sim R_3$, R_9 , 및 상기 일반식 (1B-1)로 표시되는 기, 상기 일반식 (1B-2)로 표시되는 기 및 상기 일반식 (1B-3)으로 표시되는 기 이외의 수소 원자 이외인 경우의 $R_4 \sim R_8$ 및 $R_{10} \sim R_{12}$, 및 수소 원자 이외인 경우의 $R_{51} \sim R_{57}$, $R_{61} \sim R_{64}$, $R_{71} \sim R_{74}$ 및 $R_{81} \sim R_{84}$ 가 각각 수소 원자를 갖는 경우, 해당 수소 원자 중 하나 이상은 중수소 원자인 것도 바람직하다.

[0733] 본 실시형태에 따른 화합물에 있어서, 수소 원자 이외인 경우의 $R_1 \sim R_3$, R_9 , 및 상기 일반식 (1B-1)로 표시되는 기, 상기 일반식 (1B-2)로 표시되는 기 및 상기 일반식 (1B-3)으로 표시되는 기 이외의 수소 원자 이외인 경우의 $R_4 \sim R_8$ 및 $R_{10} \sim R_{12}$, 및 수소 원자 이외인 경우의 $R_{51} \sim R_{57}$, $R_{61} \sim R_{64}$, $R_{71} \sim R_{74}$ 및 $R_{81} \sim R_{84}$ 가 각각 수소 원자를 갖는 경우, 해당 수소 원자 전부는 중수소 원자인 것도 바람직하다.

[0734] 본 실시형태에 따른 화합물은, 하기 일반식 (1A-1)로 표시되는 화합물인 것도 바람직하다.

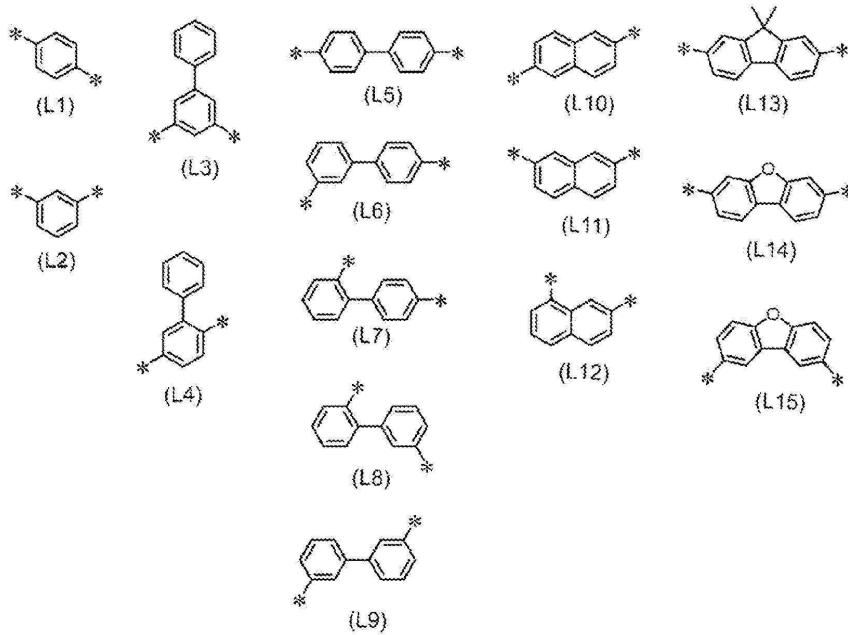
[0735] [화학식 25]



- [0736]
- [0737] (상기 일반식 (1A-1)에 있어서,
- [0738] $R_1 \sim R_{10}$ 및 R_{12} 는, 각각 독립적으로
- [0739] 수소 원자,
- [0740] 치환 혹은 무치환의 탄소수 1~50의 알킬기,
- [0741] 치환 혹은 무치환의 탄소수 1~50의 할로알킬기,
- [0742] 치환 혹은 무치환의 탄소수 2~50의 알케닐기,
- [0743] 치환 혹은 무치환의 탄소수 2~50의 알키닐기,
- [0744] 치환 혹은 무치환의 고리 형성 탄소수 3~50의 시클로알킬기,
- [0745] $-\text{Si}(R_{901})(R_{902})(R_{903})$ 으로 표시되는 기,
- [0746] $-\text{O}(R_{904})$ 로 표시되는 기,
- [0747] $-\text{S}(R_{905})$ 로 표시되는 기,
- [0748] 치환 혹은 무치환의 탄소수 7~50의 아랄킬기,
- [0749] $-\text{C}(=\text{O})R_{801}$ 로 표시되는 기,
- [0750] $-\text{COOR}_{802}$ 로 표시되는 기,
- [0751] 할로젠 원자,
- [0752] 시아노기,
- [0753] 니트로기,
- [0754] 치환 혹은 무치환의 고리 형성 탄소수 6~50의 아릴기, 또는
- [0755] 치환 혹은 무치환의 고리 형성 원자수 5~50의 복소환기이고,
- [0756] $R_{51} \sim R_{53}$, R_{56} , R_{57} , 및 $R_{71} \sim R_{74}$ 는, 각각 독립적으로
- [0757] 수소 원자,
- [0758] 치환 혹은 무치환의 탄소수 1~50의 알킬기,
- [0759] 치환 혹은 무치환의 탄소수 2~50의 알케닐기,

- [0760] 치환 혹은 무치환의 탄소수 2~50의 알킬닐기,
- [0761] 치환 혹은 무치환의 고리 형성 탄소수 3~50의 시클로알킬기,
- [0762] $-\text{Si}(\text{R}_{901})(\text{R}_{902})(\text{R}_{903})$ 으로 표시되는 기,
- [0763] $-\text{O}(\text{R}_{904})$ 로 표시되는 기,
- [0764] $-\text{S}(\text{R}_{905})$ 로 표시되는 기,
- [0765] $-\text{N}(\text{R}_{906})(\text{R}_{907})$ 로 표시되는 기,
- [0766] 할로젠 원자,
- [0767] 시아노기,
- [0768] 니트로기,
- [0769] 치환 혹은 무치환의 고리 형성 탄소수 6~50의 아릴기, 또는
- [0770] 치환 혹은 무치환의 고리 형성 원자수 5~50의 복소환기이며,
- [0771] L_1 및 n1 은, 각각 상기 일반식 (1B-2)에 있어서의 L_1 및 n1 과 동일한 의미한다.)
- [0772] 본 실시형태에 따른 화합물에 있어서, $\text{R}_1 \sim \text{R}_3$, R_9 , 및 상기 일반식 (1B-1), (1B-2) 또는 (1B-3)으로 표시되는 기 이외의 $\text{R}_4 \sim \text{R}_8$ 및 $\text{R}_{10} \sim \text{R}_{12}$ 는, 각각 독립적으로 수소 원자, 또는 치환 혹은 무치환의 고리 형성 탄소수 6~50의 아릴기인 것도 바람직하다.
- [0773] 본 실시형태에 따른 화합물에 있어서, 상기 일반식 (1B-1)에서의, 상기 치환 혹은 무치환의 단환을 형성하지 않고, 또한 상기 치환 혹은 무치환의 축합환을 형성하지 않는 $\text{R}_{51} \sim \text{R}_{54}$, R_{57} , 및 $\text{R}_{61} \sim \text{R}_{64}$ 는, 각각 독립적으로 수소 원자, 또는 치환 혹은 무치환의 고리 형성 탄소수 6~50의 아릴기인 것도 바람직하다.
- [0774] 본 실시형태에 따른 화합물에 있어서, 상기 일반식 (1B-2)에서의, 상기 치환 혹은 무치환의 단환을 형성하지 않고, 또한 상기 치환 혹은 무치환의 축합환을 형성하지 않는 $\text{R}_{51} \sim \text{R}_{53}$, R_{56} , R_{57} , 및 $\text{R}_{71} \sim \text{R}_{74}$ 는, 각각 독립적으로 수소 원자, 또는 치환 혹은 무치환의 고리 형성 탄소수 6~50의 아릴기인 것도 바람직하다.
- [0775] 본 실시형태에 따른 화합물에 있어서, 상기 일반식 (1B-3)에서의, 상기 치환 혹은 무치환의 단환을 형성하지 않고, 또한 상기 치환 혹은 무치환의 축합환을 형성하지 않는 $\text{R}_{51} \sim \text{R}_{55}$, 및 $\text{R}_{81} \sim \text{R}_{84}$ 는, 각각 독립적으로 수소 원자, 또는 치환 혹은 무치환의 고리 형성 탄소수 6~50의 아릴기인 것도 바람직하다.
- [0776] 본 실시형태에 따른 화합물에 있어서, 상기 「치환 혹은 무치환」이라고 기재된 기는 모두 「무치환」의 기이며, 상기 「치환 혹은 무치환」이라고 기재된 고리는 모두 「무치환」의 고리인 것도 바람직하다.
- [0777] 본 실시형태에 따른 화합물에 있어서, L_1 은 무치환인 것도 바람직하다.
- [0778] 본 실시형태에 따른 화합물에 있어서, L_1 은 하기 일반식 (L1)~(L15)로 표시되는 기로 이루어진 군으로부터 선택되는 어느 하나의 기인 것도 바람직하다. 또한, 하기 예시 중의 *는 결합 위치를 나타낸다.

[0779] [화학식 26]



[0780]

[0781] 상기 일반식 (L1)~(L15)로 표시되는 기는, 각각 독립적으로 전술한 「임의의 치환기」를 1 이상 갖고 있어도 좋고, 갖지 않아도 좋다.

[0782] 본 실시형태에 따른 화합물에 있어서, 상기 일반식 (1A)에서의 R_4 , R_5 , R_6 , R_7 , R_8 , R_{10} , R_{11} , 또는 R_{12} 가 상기 일반식 (1B-1), (1B-2) 및 (1B-3)으로 표시되는 기로 이루어진 군으로부터 선택되는 어느 하나의 기이다.

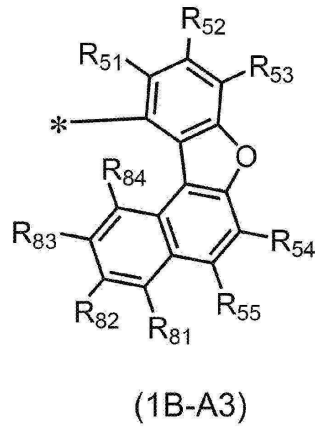
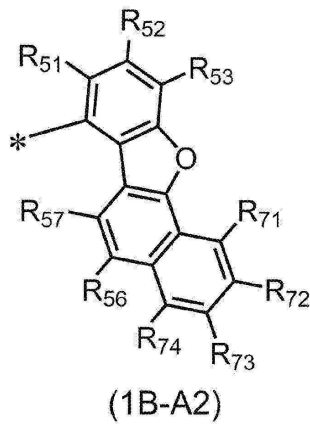
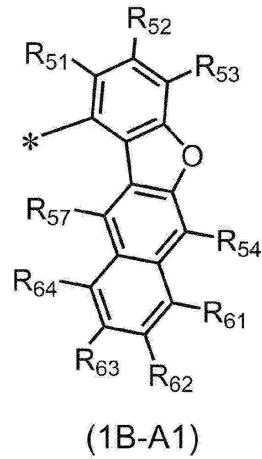
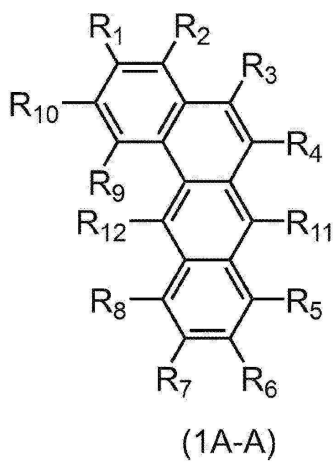
[0783] 또한, 본 실시형태에 따른 화합물에 있어서, 후술하는 일반식 (1A-A)에서의 R_4 , R_5 , R_6 , R_7 , R_8 , R_{10} , R_{11} , 또는 R_{12} 가 후술하는 일반식 (1B-A1), (1B-A2) 및 (1B-A3)으로 표시되는 기로 이루어진 군으로부터 선택되는 어느 하나의 기이다.

[0784] HOMO 및 LUMO의 전자 밀도가 보다 큰 위치 또는 일중항 에너지 S_1 이 보다 작아지는 부위인 R_4 , R_5 , R_6 , R_7 , R_8 , R_{10} , R_{11} , 또는 R_{12} 가, 상기 일반식 (1B-1), (1B-2) 및 (1B-3)으로 표시되는 기로 이루어진 군으로부터 선택되는 어느 하나의 기, 및 후술하는 일반식 (1B-A1), (1B-A2) 및 (1B-A3)으로 표시되는 기로 이루어진 군으로부터 선택되는 어느 하나의 기임으로써, 여기 내성이 향상되기 쉽고, 유기 EL 소자의 장수명화 효과가 얻어지기 쉬워진다.

[0785] 본 실시형태에 따른 화합물에 있어서, 상기 일반식 (1A)에서의 R_4 , R_5 , R_6 , R_7 , R_8 , R_{10} , R_{11} , 또는 R_{12} 가, 상기 일반식 (1B-1), (1B-2) 및 (1B-3)으로 표시되는 기로 이루어진 군으로부터 선택되는 어느 하나의 기를 갖는 것, 및 후술하는 일반식 (1A-A)에서의 R_4 , R_5 , R_6 , R_7 , R_8 , R_{10} , R_{11} , 또는 R_{12} 가, 후술하는 일반식 (1B-A1), (1B-A2) 및 (1B-A3)으로 표시되는 기로 이루어진 군으로부터 선택되는 어느 하나의 기를 가짐으로써, 분자간 상호작용이 보다 작아지기 때문에, 동일한 도펀트를 이용하는 경우에도 보다 깊은 청색 발광을 얻을 수 있다는 것을 발견할 수 있었다. 즉, 본 실시형태에 따른 화합물을 호스트 재료로서 이용하여, 도펀트(발광성 화합물)와 조합하여 발광층에 함유시킴으로써, 다른 호스트 재료와 해당 도펀트(발광성 화합물)를 함유시킨 발광층에 비해, 동일한 도펀트를 이용하고 있음에도 불구하고, 보다 깊은 청색 발광을 얻을 수 있다는 것을 발견할 수 있었다.

[0786] 본 실시형태에 따른 화합물은, 하기 일반식 (1A-A)로 표시되는 화합물인 것도 바람직하다.

[0787] [화학식 27]



[0788]

[0789] (상기 일반식 (1A-A)에 있어서,

[0790] $R_4 \sim R_8$ 및 $R_{10} \sim R_{12}$ 중의 하나는 상기 일반식 (1B-A1), (1B-A2) 또는 (1B-A3)으로 표시되는 기이고,

[0791] $R_1 \sim R_3$, R_9 , 및 상기 일반식 (1B-A1), (1B-A2) 또는 (1B-A3)으로 표시되는 기 이외의 $R_4 \sim R_8$ 및 $R_{10} \sim R_{12}$ 는, 각각 독립적으로

[0792] 수소 원자,

[0793] 치환 혹은 무치환의 탄소수 1~50의 알킬기,

[0794] 치환 혹은 무치환의 탄소수 1~50의 할로알킬기,

[0795] 치환 혹은 무치환의 탄소수 2~50의 알케닐기,

[0796] 치환 혹은 무치환의 탄소수 2~50의 알키닐기,

[0797] 치환 혹은 무치환의 고리 형성 탄소수 3~50의 시클로알킬기,

[0798] $-\text{Si}(\text{R}_{901})(\text{R}_{902})(\text{R}_{903})$ 으로 표시되는 기,

[0799] $-\text{O}(\text{R}_{904})$ 로 표시되는 기,

[0800] $-\text{S}(\text{R}_{905})$ 로 표시되는 기,

[0801] 치환 혹은 무치환의 탄소수 7~50의 아랄킬기,

[0802] $-\text{C}(=\text{O})\text{R}_{801}$ 로 표시되는 기,

- [0803] -COOR_{902} 로 표시되는 기,
- [0804] 할로젠 원자,
- [0805] 시아노기,
- [0806] 니트로기,
- [0807] 치환 혹은 무치환의 고리 형성 탄소수 6~50의 아릴기, 또는
- [0808] 치환 혹은 무치환의 고리 형성 원자수 5~50의 복소환기이며,
- [0809] R_{11} 이 상기 일반식 (1B-A1), (1B-A2) 또는 (1B-A3)으로 표시되는 기인 경우, R_{12} 는 수소 원자 또는 치환 혹은 무치환의 페닐기이고,
- [0810] R_{12} 가 상기 일반식 (1B-A1), (1B-A2) 또는 (1B-A3)으로 표시되는 기인 경우, R_{11} 은 수소 원자 또는 치환 혹은 무치환의 페닐기이며,
- [0811] 상기 일반식 (1B-A1)에 있어서,
- [0812] $R_{51} \sim R_{54}$, R_{57} , 및 $R_{61} \sim R_{64}$ 중의 인접한 2개 이상으로 이루어지는 조의 1조 이상이,
- [0813] 서로 결합하여 치환 혹은 무치환의 단환을 형성하거나,
- [0814] 서로 결합하여 치환 혹은 무치환의 축합환을 형성하거나, 또는
- [0815] 서로 결합하지 않으며,
- [0816] 상기 치환 혹은 무치환의 단환을 형성하지 않고, 또한 상기 치환 혹은 무치환의 축합환을 형성하지 않는 $R_{51} \sim R_{54}$, R_{57} , 및 $R_{61} \sim R_{64}$ 는, 각각 독립적으로
- [0817] 수소 원자,
- [0818] 치환 혹은 무치환의 탄소수 1~50의 알킬기,
- [0819] 치환 혹은 무치환의 탄소수 2~50의 알케닐기,
- [0820] 치환 혹은 무치환의 탄소수 2~50의 알키닐기,
- [0821] 치환 혹은 무치환의 고리 형성 탄소수 3~50의 시클로알킬기,
- [0822] $\text{-Si}(R_{901})(R_{902})(R_{903})$ 으로 표시되는 기,
- [0823] $\text{-O}(R_{904})$ 로 표시되는 기,
- [0824] $\text{-S}(R_{905})$ 로 표시되는 기,
- [0825] $\text{-N}(R_{906})(R_{907})$ 로 표시되는 기,
- [0826] 할로젠 원자,
- [0827] 시아노기,
- [0828] 니트로기,
- [0829] 치환 혹은 무치환의 고리 형성 탄소수 6~50의 아릴기, 또는
- [0830] 치환 혹은 무치환의 고리 형성 원자수 5~50의 복소환기이고,
- [0831] *는 상기 일반식 (1A-A)에서의 벤즈[a]안트라센환과의 결합 위치를 나타내며,
- [0832] 상기 일반식 (1B-A2)에 있어서,
- [0833] $R_{51} \sim R_{53}$, R_{56} , R_{57} , 및 $R_{71} \sim R_{74}$ 중의 인접한 2개 이상으로 이루어지는 조의 1조 이상이,

- [0834] 서로 결합하여 치환 혹은 무치환의 단환을 형성하거나,
- [0835] 서로 결합하여 치환 혹은 무치환의 축합환을 형성하거나, 또는
- [0836] 서로 결합하지 않고,
- [0837] 상기 치환 혹은 무치환의 단환을 형성하지 않고, 또한 상기 치환 혹은 무치환의 축합환을 형성하지 않는 $R_{51} \sim R_{53}$, R_{56} , R_{57} , 및 $R_{71} \sim R_{74}$ 는, 각각 독립적으로 상기 일반식 (1B-A1)에 있어서의 $R_{51} \sim R_{54}$, R_{57} , 및 $R_{61} \sim R_{64}$ 와 동일한 의미이고,
- [0838] *는 상기 일반식 (1A-A)에서의 벤즈[a]안트라센환과의 결합 위치를 나타내며,
- [0839] 상기 일반식 (1B-A3)에 있어서,
- [0840] $R_{51} \sim R_{55}$, 및 $R_{81} \sim R_{84}$ 중의 인접한 2개 이상으로 이루어지는 조의 1조 이상이,
- [0841] 서로 결합하여 치환 혹은 무치환의 단환을 형성하거나,
- [0842] 서로 결합하여 치환 혹은 무치환의 축합환을 형성하거나, 또는
- [0843] 서로 결합하지 않고,
- [0844] 상기 치환 혹은 무치환의 단환을 형성하지 않고, 또한 상기 치환 혹은 무치환의 축합환을 형성하지 않는 $R_{51} \sim R_{55}$, 및 $R_{81} \sim R_{84}$ 는, 각각 독립적으로 상기 일반식 (1B-A1)에 있어서의 $R_{51} \sim R_{54}$, R_{57} , 및 $R_{61} \sim R_{64}$ 와 동일한 의미이고,
- [0845] *는 상기 일반식 (1A-A)에서의 벤즈[a]안트라센환과의 결합 위치를 나타낸다.)
- [0846] (상기 일반식 (1A-A)로 표시되는 화합물에 있어서, R_{901} , R_{902} , R_{903} , R_{904} , R_{905} , R_{906} , R_{907} , R_{801} , 및 R_{802} 는, 각각 독립적으로
- [0847] 수소 원자,
- [0848] 치환 혹은 무치환의 탄소수 1~50의 알킬기,
- [0849] 치환 혹은 무치환의 고리 형성 탄소수 3~50의 시클로알킬기,
- [0850] 치환 혹은 무치환의 고리 형성 탄소수 6~50의 아릴기, 또는
- [0851] 치환 혹은 무치환의 고리 형성 원자수 5~50의 복소환기이며,
- [0852] R_{901} 이 복수 존재하는 경우, 복수의 R_{901} 은 서로 동일하거나 또는 상이하고,
- [0853] R_{902} 가 복수 존재하는 경우, 복수의 R_{902} 는 서로 동일하거나 또는 상이하며,
- [0854] R_{903} 이 복수 존재하는 경우, 복수의 R_{903} 은 서로 동일하거나 또는 상이하고,
- [0855] R_{904} 가 복수 존재하는 경우, 복수의 R_{904} 는 서로 동일하거나 또는 상이하며,
- [0856] R_{905} 가 복수 존재하는 경우, 복수의 R_{905} 는 서로 동일하거나 또는 상이하고,
- [0857] R_{906} 이 복수 존재하는 경우, 복수의 R_{906} 은 서로 동일하거나 또는 상이하며,
- [0858] R_{907} 이 복수 존재하는 경우, 복수의 R_{907} 은 서로 동일하거나 또는 상이하고,
- [0859] R_{801} 이 복수 존재하는 경우, 복수의 R_{801} 은 서로 동일하거나 또는 상이하며,
- [0860] R_{802} 가 복수 존재하는 경우, 복수의 R_{802} 는 서로 동일하거나 또는 상이하다.)
- [0861] 본 실시형태에 따른 상기 일반식 (1A-A)로 표시되는 화합물에 있어서, R_5 , R_6 , R_7 , R_8 , R_{11} , 및 R_{12} 중의 하나가 상기 일반식 (1B-A1), (1B-A2) 또는 (1B-A3)으로 표시되는 기인 것도 바람직하다.

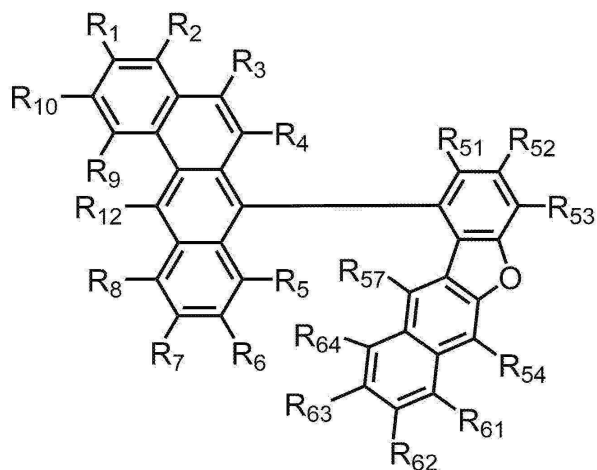
- [0862] 본 실시형태에 따른 상기 일반식 (1A-A)로 표시되는 화합물에 있어서, R_6 , R_7 , R_{11} , 및 R_{12} 중의 하나가 상기 일반식 (1B-A1), (1B-A2) 또는 (1B-A3)으로 표시되는 기인 것도 바람직하다.
- [0863] 본 실시형태에 따른 상기 일반식 (1A-A)로 표시되는 화합물에 있어서, R_{11} 이 상기 일반식 (1B-A1), (1B-A2) 또는 (1B-A3)으로 표시되는 기인 것도 바람직하다.
- [0864] 본 실시형태에 따른 상기 일반식 (1A-A)로 표시되는 화합물에 있어서, 상기 일반식 (1B-A1), (1B-A2) 또는 (1B-A3)으로 표시되는 기에 있어서의 상기 치환 혹은 무치환의 단환을 형성하지 않고, 또한 상기 치환 혹은 무치환의 축합환을 형성하지 않는 상기 일반식 (1B-A1)에서의 $R_{51} \sim R_{54}$, R_{57} , 및 $R_{61} \sim R_{64}$ 중 적어도 하나, 상기 일반식 (1B-A2)에서의 $R_{51} \sim R_{53}$, R_{56} , R_{57} , 및 $R_{71} \sim R_{74}$ 중 적어도 하나, 또는 상기 일반식 (1B-A3)에서의 $R_{51} \sim R_{55}$, 및 $R_{81} \sim R_{84}$ 중 적어도 하나가 수소 원자 이외인 것도 바람직하다.
- [0865] 본 실시형태에 따른 상기 일반식 (1A-A)로 표시되는 화합물에 있어서, 상기 일반식 (1B-A1), (1B-A2) 또는 (1B-A3)으로 표시되는 기에 있어서의 상기 치환 혹은 무치환의 단환을 형성하지 않고, 또한 상기 치환 혹은 무치환의 축합환을 형성하지 않는 상기 일반식 (1B-A1)에서의 $R_{51} \sim R_{54}$, R_{57} , 및 $R_{61} \sim R_{64}$ 중 적어도 하나, 상기 일반식 (1B-A2)에서의 $R_{51} \sim R_{53}$, R_{56} , R_{57} , 및 $R_{71} \sim R_{74}$ 중 적어도 하나, 또는 상기 일반식 (1B-A3)에서의 $R_{51} \sim R_{55}$, 및 $R_{81} \sim R_{84}$ 중 적어도 하나가 치환 혹은 무치환의 고리 형성 탄소수 6~50의 아릴기인 것도 바람직하다.
- [0866] 본 실시형태에 따른 상기 일반식 (1A-A)로 표시되는 화합물에 있어서, 상기 일반식 (1B-A1), (1B-A2) 또는 (1B-A3)으로 표시되는 기에 있어서의 상기 치환 혹은 무치환의 단환을 형성하지 않고, 또한 상기 치환 혹은 무치환의 축합환을 형성하지 않는 상기 일반식 (1B-A1)에서의 $R_{51} \sim R_{54}$, R_{57} , 및 $R_{61} \sim R_{64}$ 중 적어도 하나, 상기 일반식 (1B-A2)에서의 $R_{51} \sim R_{53}$, R_{56} , R_{57} , 및 $R_{71} \sim R_{74}$ 중 적어도 하나, 또는 상기 일반식 (1B-A3)에서의 $R_{51} \sim R_{55}$, 및 $R_{81} \sim R_{84}$ 중 적어도 하나가 치환 혹은 무치환의 페닐기인 것도 바람직하다.
- [0867] 본 실시형태에 따른 상기 일반식 (1A-A)로 표시되는 화합물에 있어서, 상기 일반식 (1B-A1), (1B-A2) 또는 (1B-A3)으로 표시되는 기에 있어서의 상기 치환 혹은 무치환의 단환을 형성하지 않고, 또한 상기 치환 혹은 무치환의 축합환을 형성하지 않는 상기 일반식 (1B-A1)에서의 $R_{51} \sim R_{54}$, R_{57} , 및 $R_{61} \sim R_{64}$ 중 적어도 하나, 상기 일반식 (1B-A2)에서의 $R_{51} \sim R_{53}$, R_{56} , R_{57} , 및 $R_{71} \sim R_{74}$ 중 적어도 하나, 또는 상기 일반식 (1B-A3)에서의 $R_{51} \sim R_{55}$, 및 $R_{81} \sim R_{84}$ 중 적어도 하나가 무치환의 페닐기인 것도 바람직하다.
- [0868] 본 실시형태에 따른 상기 일반식 (1A-A)로 표시되는 화합물에 있어서, R_{12} 가 상기 일반식 (1B-A1), (1B-A2) 또는 (1B-A3)으로 표시되는 기인 경우, R_{11} 은 수소 원자인 것도 바람직하다.
- [0869] 본 실시형태에 따른 상기 일반식 (1A-A)로 표시되는 화합물에 있어서, R_{11} 이 상기 일반식 (1B-A1), (1B-A2) 또는 (1B-A3)으로 표시되는 기인 경우, R_{12} 는 수소 원자인 것도 바람직하다.
- [0870] 본 실시형태에 따른 상기 일반식 (1A-A)로 표시되는 화합물에 있어서, 분자 내에 하나 이상의 중수소 원자를 갖는 것도 바람직하다.
- [0871] 본 실시형태에 따른 상기 일반식 (1A-A)로 표시되는 화합물에 있어서, 수소 원자인 경우의 $R_1 \sim R_3$, R_9 , 및 상기 일반식 (1B-A1)로 표시되는 기, 상기 일반식 (1B-A2)로 표시되는 기 및 상기 일반식 (1B-A3)으로 표시되는 기 이외의 수소 원자인 경우의 $R_4 \sim R_8$ 및 $R_{10} \sim R_{12}$, 및 수소 원자인 경우의 $R_{51} \sim R_{57}$, $R_{61} \sim R_{64}$, $R_{71} \sim R_{74}$ 및 $R_{81} \sim R_{84}$ 중 하나 이상은 중수소 원자인 것도 바람직하다.
- [0872] 본 실시형태에 따른 상기 일반식 (1A-A)로 표시되는 화합물에 있어서, 수소 원자인 경우의 $R_1 \sim R_3$, R_9 , 및 상기 일반식 (1B-A1)로 표시되는 기, 상기 일반식 (1B-A2)로 표시되는 기 및 상기 일반식 (1B-A3)으로 표시되는 기 이외의 수소 원자인 경우의 $R_4 \sim R_8$ 및 $R_{10} \sim R_{12}$, 및 수소 원자인 경우의 $R_{51} \sim R_{57}$, $R_{61} \sim R_{64}$, $R_{71} \sim R_{74}$ 및 $R_{81} \sim R_{84}$ 전부는 중수소 원자인 것도 바람직하다.
- [0873] 본 실시형태에 따른 상기 일반식 (1A-A)로 표시되는 화합물에 있어서, 수소 원자 이외인 경우의 $R_1 \sim R_3$, R_9 , 및 상기 일반식 (1B-A1)로 표시되는 기, 상기 일반식 (1B-A2)로 표시되는 기 및 상기 일반식 (1B-A3)으로 표시되는

기 이외의 수소 원자 이외인 경우의 $R_4 \sim R_8$ 및 $R_{10} \sim R_{12}$, 및 수소 원자 이외인 경우의 $R_{51} \sim R_{57}$, $R_{61} \sim R_{64}$, $R_{71} \sim R_{74}$ 및 $R_{81} \sim R_{84}$ 가 각각 수소 원자를 갖는 경우, 해당 수소 원자 중 하나 이상은 중수소 원자인 것도 바람직하다.

[0874] 본 실시형태에 따른 화합물에 있어서, 수소 원자 이외인 경우의 $R_1 \sim R_3$, R_9 , 및 상기 일반식 (1B-A1)로 표시되는 기, 상기 일반식 (1B-A2)로 표시되는 기 및 상기 일반식 (1B-A3)으로 표시되는 기 이외의 수소 원자 이외인 경우의 $R_4 \sim R_8$ 및 $R_{10} \sim R_{12}$, 및 수소 원자 이외인 경우의 $R_{51} \sim R_{57}$, $R_{61} \sim R_{64}$, $R_{71} \sim R_{74}$ 및 $R_{81} \sim R_{84}$ 가 각각 수소 원자를 갖는 경우, 해당 수소 원자 전부는 중수소 원자인 것도 바람직하다.

[0875] 본 실시형태에 따른 화합물은, 하기 일반식 (1A-A-1) 또는 (1A-A-2)로 표시되는 화합물인 것도 바람직하다.

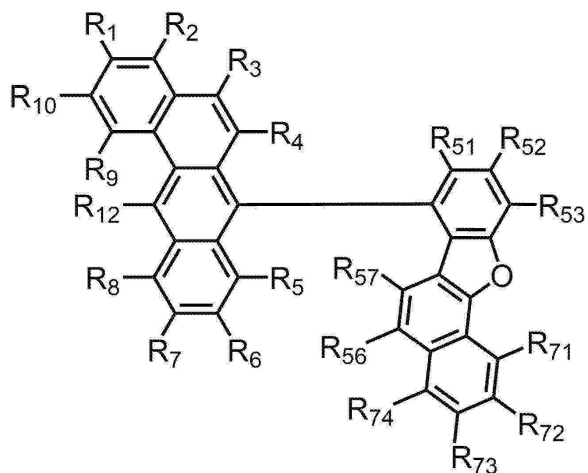
[0876] [화학식 28]



(1A-A-1)

[0877]

[0878] [화학식 29]



(1A-A-2)

[0879]

[0880] (상기 일반식 (1A-A-1) 및 상기 일반식 (1A-A-2)에 있어서,

[0881] $R_1 \sim R_{10}$ 및 R_{12} 는, 각각 독립적으로

[0882] 수소 원자,

[0883] 치환 혹은 무치환의 탄소수 1~50의 알킬기,

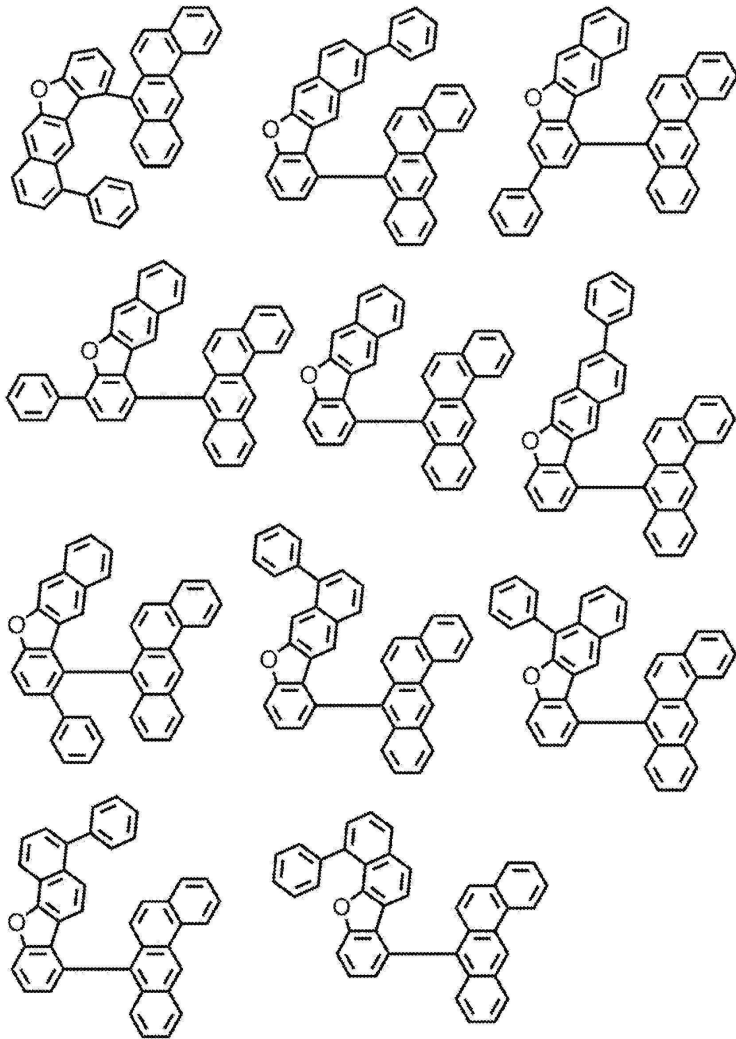
[0884] 치환 혹은 무치환의 탄소수 1~50의 할로알킬기,

[0885] 치환 혹은 무치환의 탄소수 2~50의 알케닐기,

- [0886] 치환 혹은 무치환의 탄소수 2~50의 알킬닐기,
- [0887] 치환 혹은 무치환의 고리 형성 탄소수 3~50의 시클로알킬기,
- [0888] -Si(R₉₀₁)(R₉₀₂)(R₉₀₃)으로 표시되는 기,
- [0889] -O-(R₉₀₄)로 표시되는 기,
- [0890] -S-(R₉₀₅)로 표시되는 기,
- [0891] 치환 혹은 무치환의 탄소수 7~50의 아랄킬기,
- [0892] -C(=O)R₈₀₁로 표시되는 기,
- [0893] -COOR₈₀₂로 표시되는 기,
- [0894] 할로겐 원자,
- [0895] 시아노기,
- [0896] 니트로기,
- [0897] 치환 혹은 무치환의 고리 형성 탄소수 6~50의 아릴기, 또는
- [0898] 치환 혹은 무치환의 고리 형성 원자수 5~50의 복소환기이고,
- [0899] 상기 일반식 (1A-A-1)에 있어서의 R₅₁~R₅₃, R₅₄, R₅₇ 및 R₆₁~R₆₄, 및 상기 일반식 (1A-A-2)에 있어서의 R₅₁~R₅₃, R₅₇, 및 R₇₁~R₇₄는, 각각 독립적으로
- [0900] 수소 원자,
- [0901] 치환 혹은 무치환의 탄소수 1~50의 알킬기,
- [0902] 치환 혹은 무치환의 탄소수 2~50의 알케닐기,
- [0903] 치환 혹은 무치환의 탄소수 2~50의 알킬닐기,
- [0904] 치환 혹은 무치환의 고리 형성 탄소수 3~50의 시클로알킬기,
- [0905] -Si(R₉₀₁)(R₉₀₂)(R₉₀₃)으로 표시되는 기,
- [0906] -O-(R₉₀₄)로 표시되는 기,
- [0907] -S-(R₉₀₅)로 표시되는 기,
- [0908] -N(R₉₀₆)(R₉₀₇)로 표시되는 기,
- [0909] 할로겐 원자,
- [0910] 시아노기,
- [0911] 니트로기,
- [0912] 치환 혹은 무치환의 고리 형성 탄소수 6~50의 아릴기, 또는
- [0913] 치환 혹은 무치환의 고리 형성 원자수 5~50의 복소환기이다.)
- [0914] · 본 실시형태에 따른 화합물의 제조 방법
- [0915] 본 실시형태에 따른 화합물은, 후술하는 실시예에 기재된 합성 방법에 따라 제조할 수 있다. 또한, 본 실시형태에 따른 화합물은, 해당 합성 방법에 따라, 목적물에 맞춘 기지의 대체 반응 및 원료를 이용함으로써, 제조할 수 있다.
- [0916] · 본 실시형태에 따른 화합물의 구체예
- [0917] 본 실시형태에 따른 화합물의 구체예로서는, 예컨대 이하의 화합물을 들 수 있다. 단, 본 발명은, 이들 구체예

에 한정되지 않는다. 본 명세서에 있어서, 중수소 원자는 화학식 중에서 D로 표기하고, 경수소 원자는 H로 표기하거나 또는 기재를 생략한다.

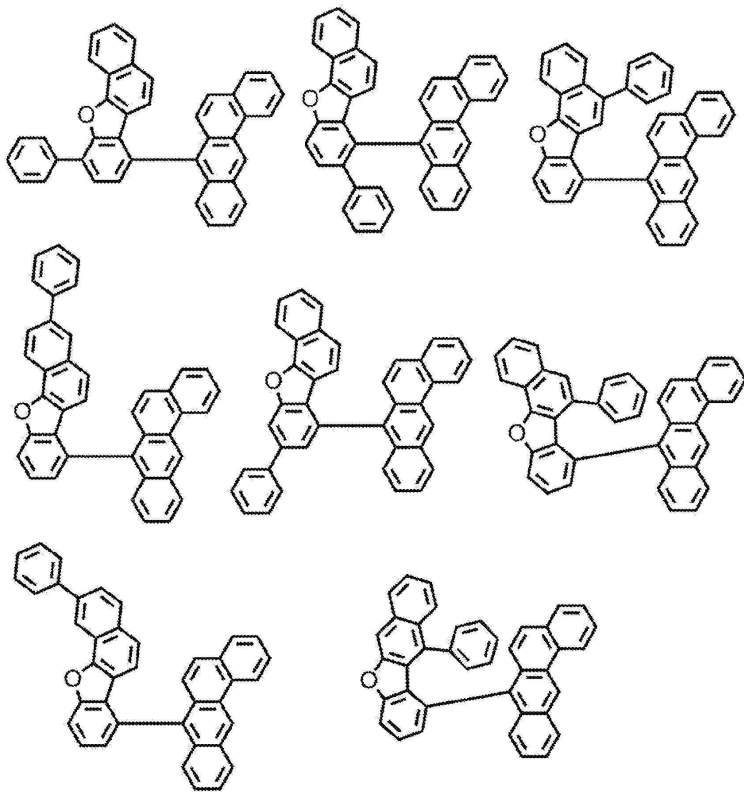
[0918] [화학식 30]



[0919]

[0920]

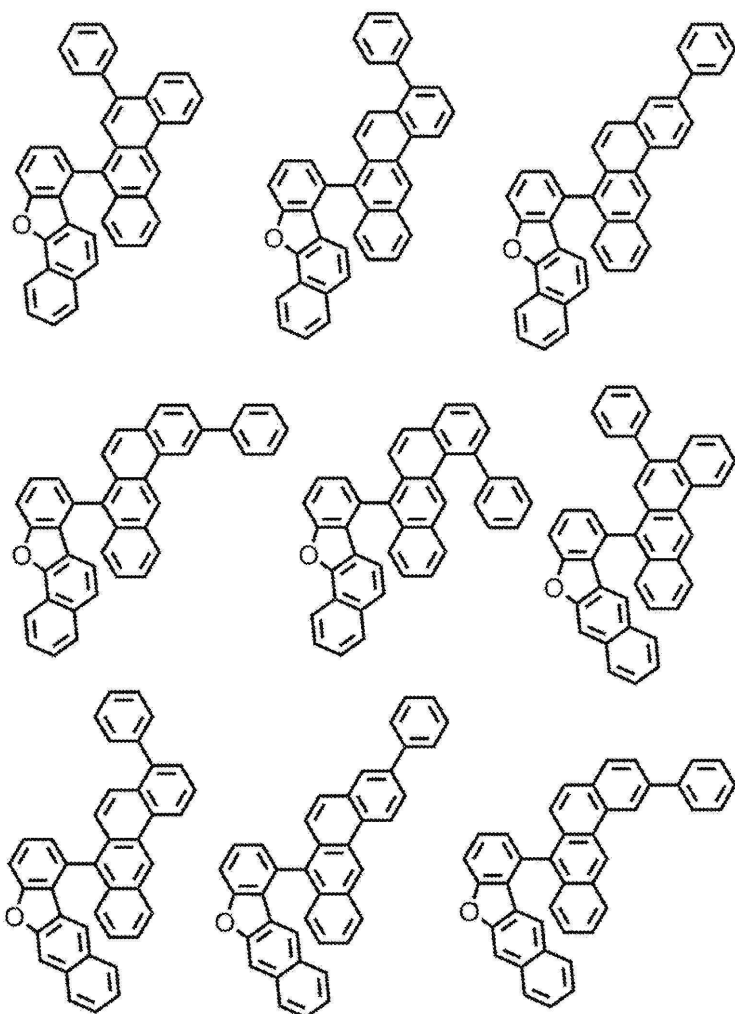
[화학식 31]



[0921]

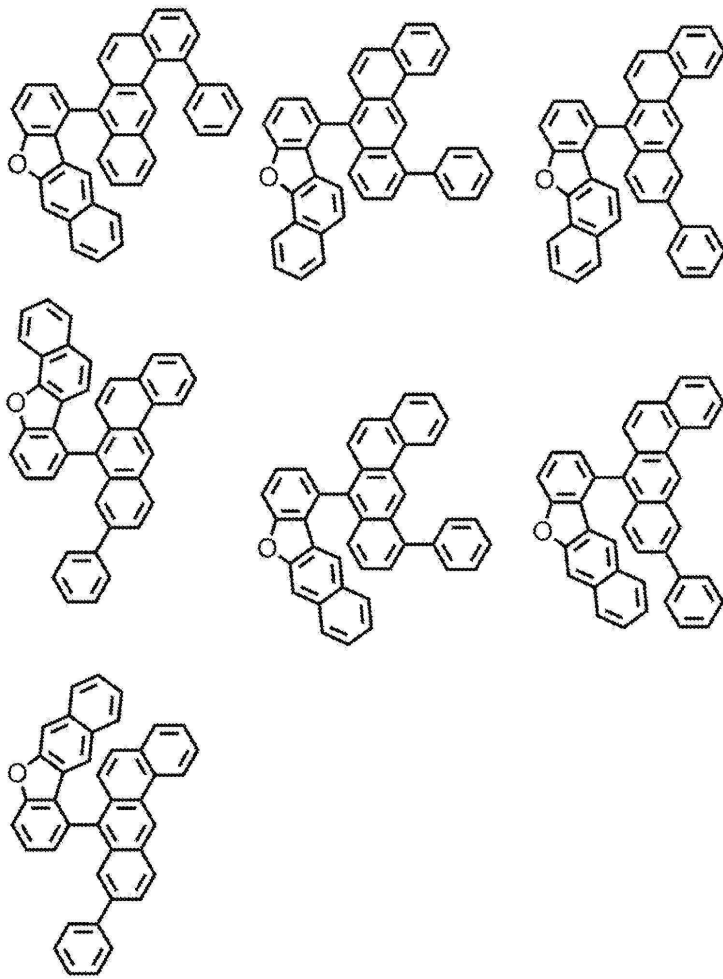
[0922]

[화학식 32]



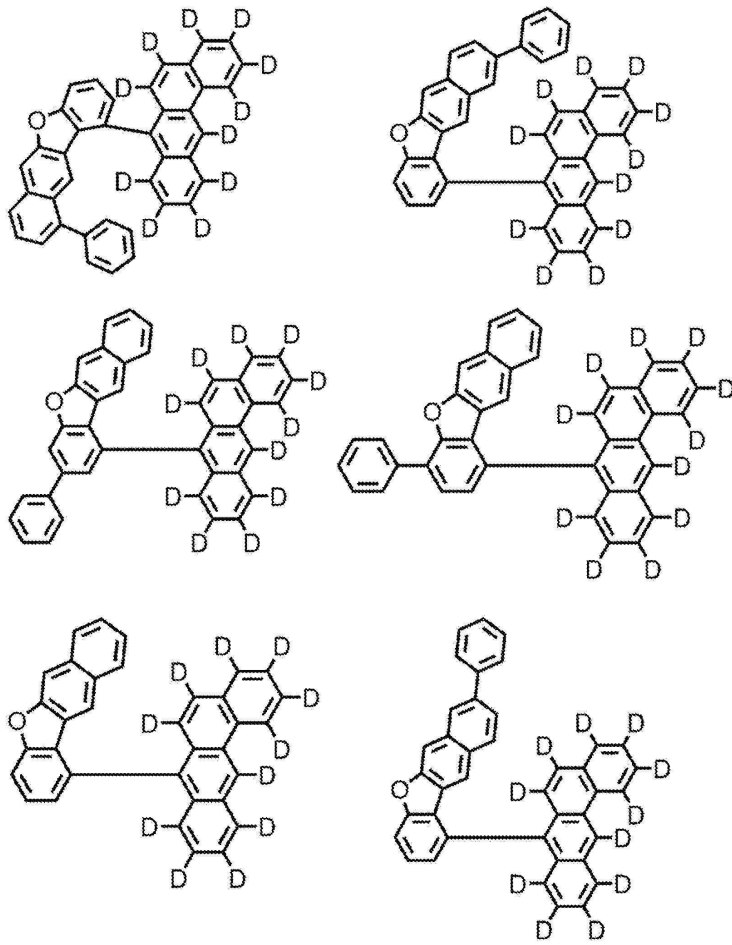
[0923]

[0924] [화학식 33]



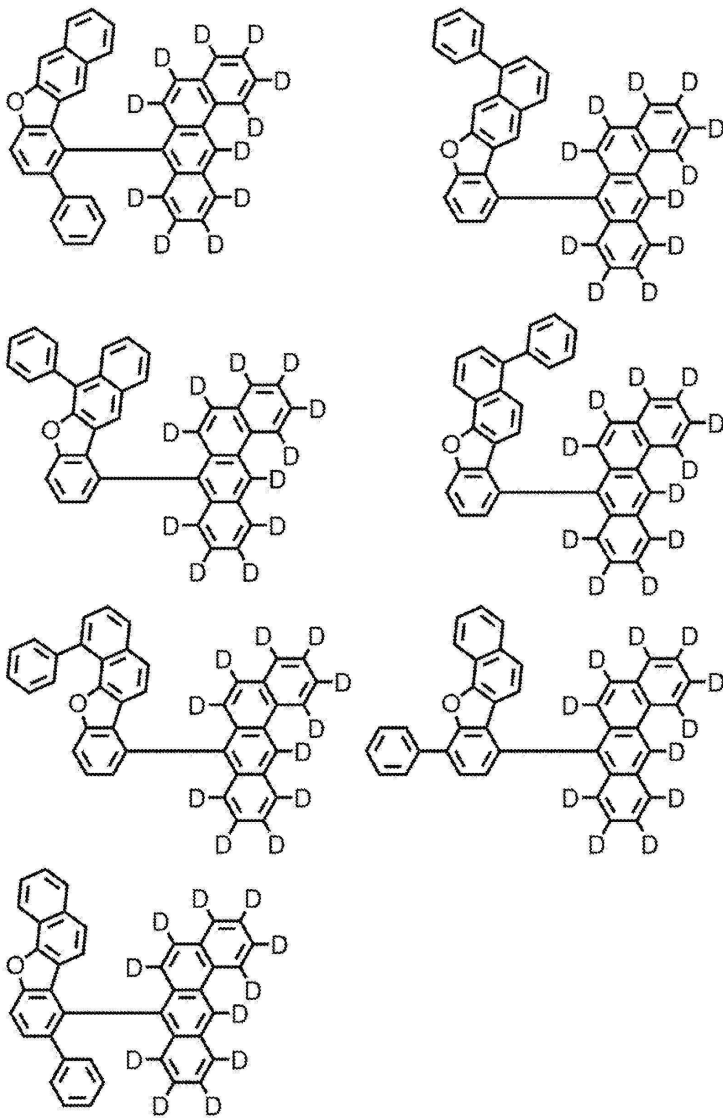
[0925]

[0926] [화학식 34]



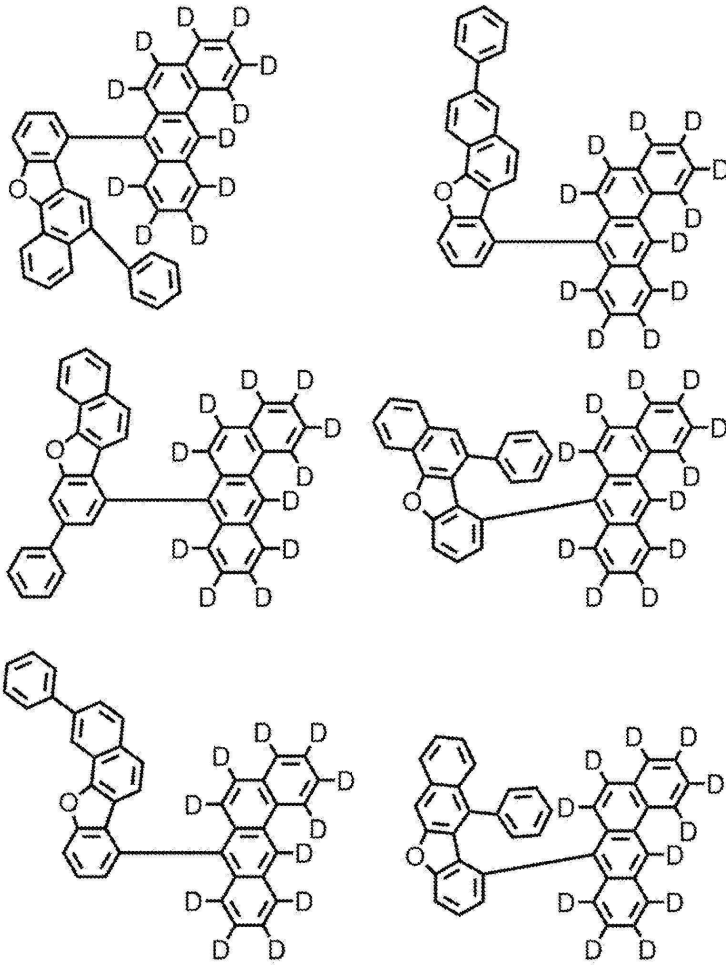
[0927]

[0928] [화학식 35]



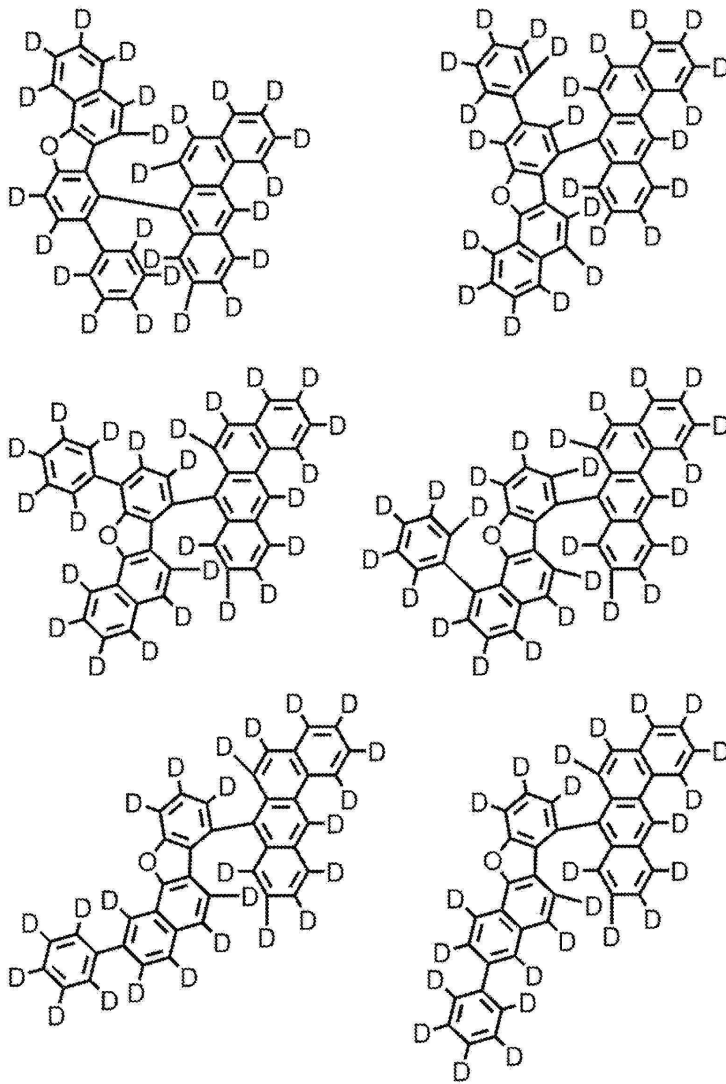
[0929]

[0930] [화학식 36]



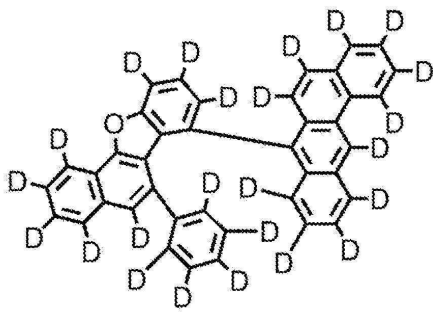
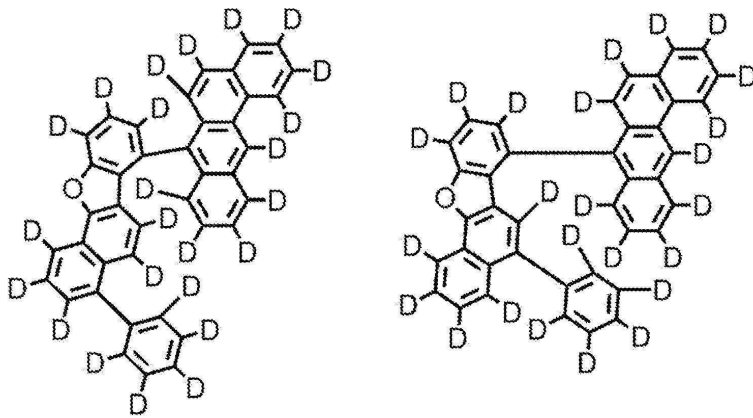
[0931]

[0932] [화학식 37]



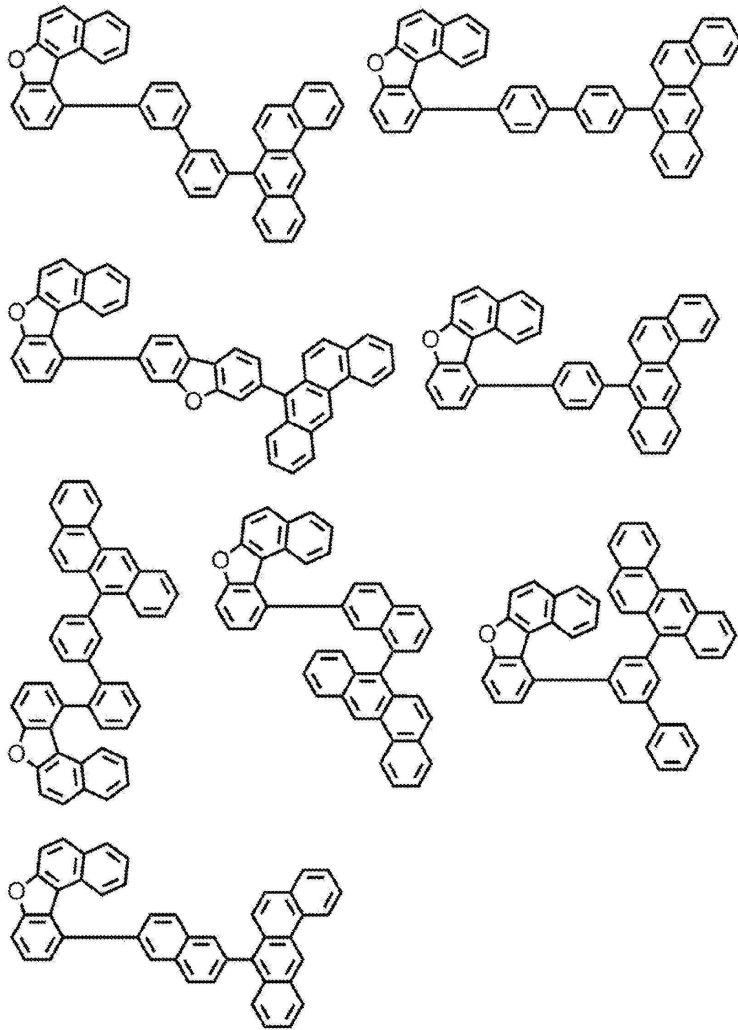
[0933]

[0934] [화학식 38]



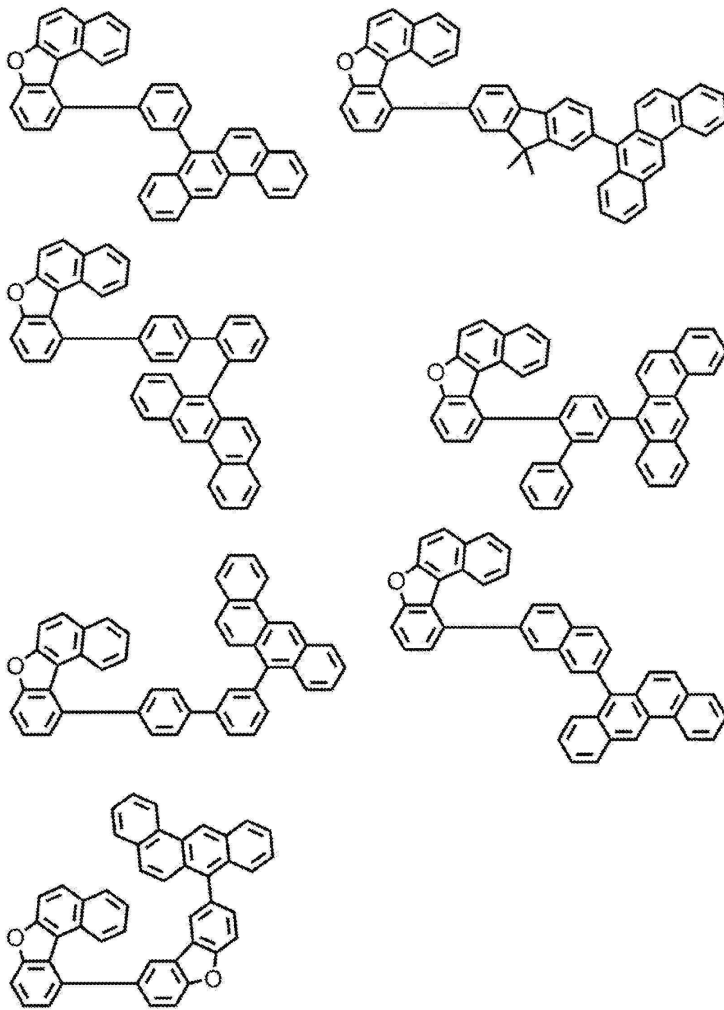
[0935]

[0936] [화학식 39]



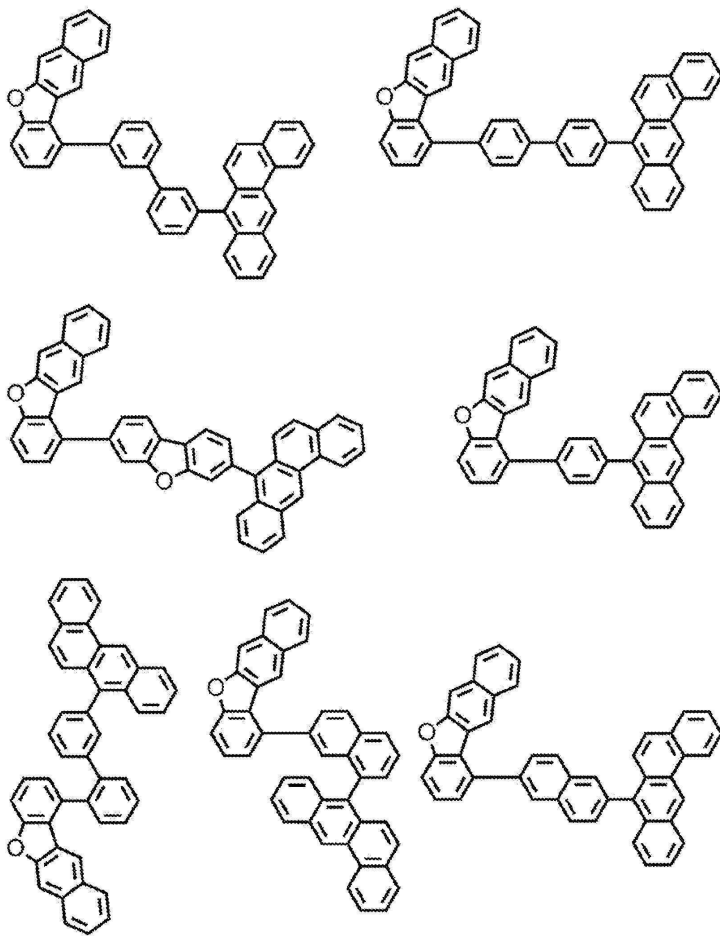
[0937]

[0938] [화학식 40]



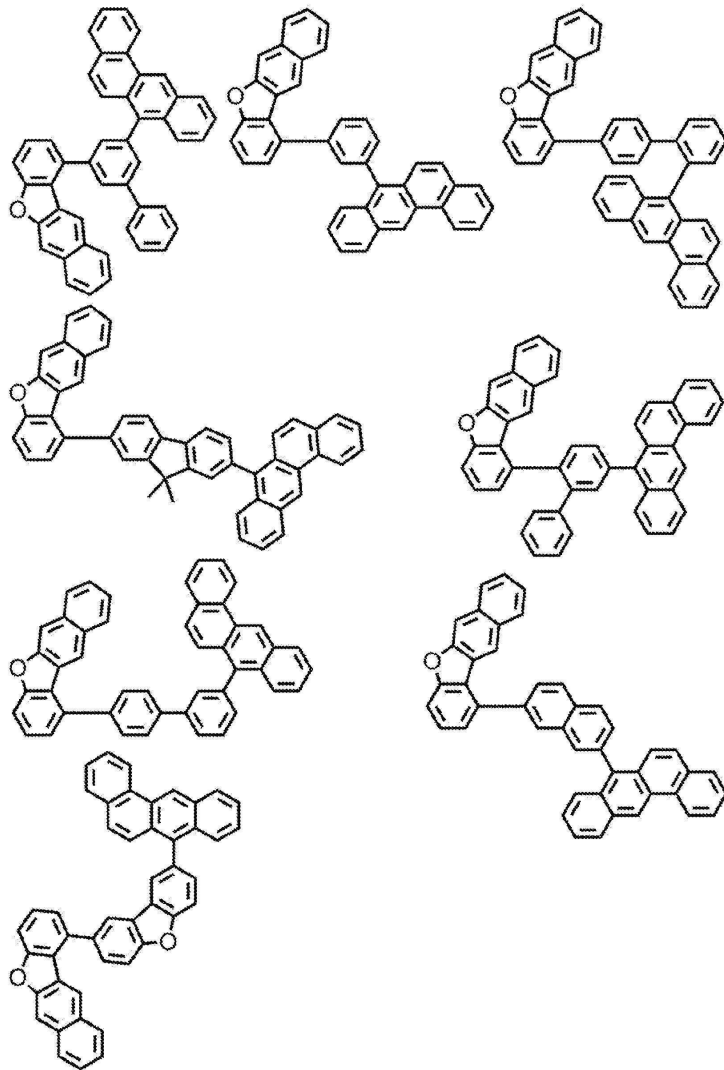
[0939]

[0940] [화학식 41]



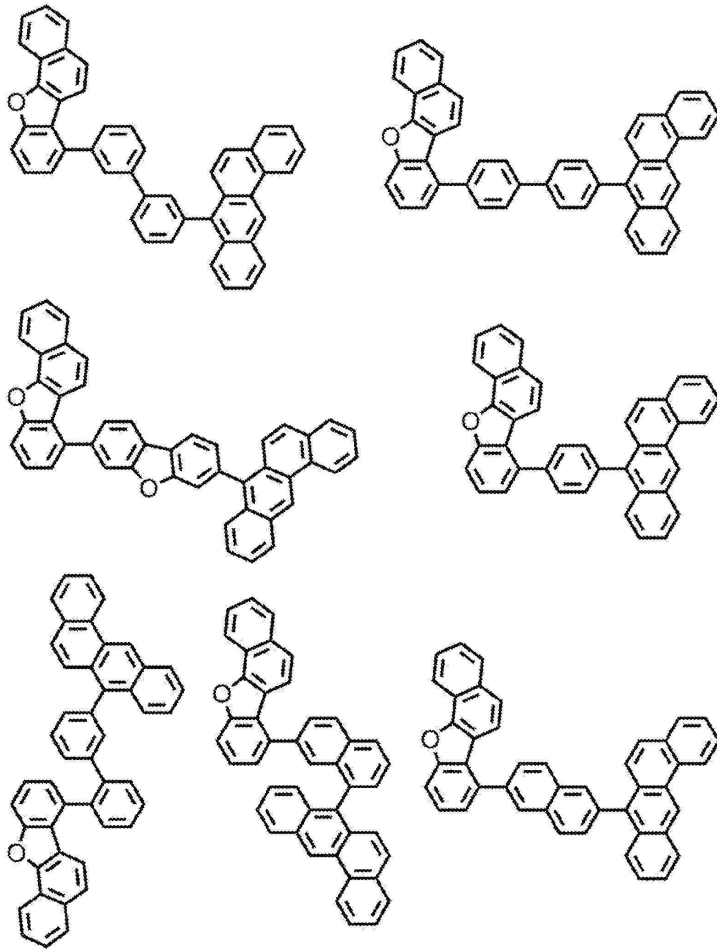
[0941]

[0942] [화학식 42]



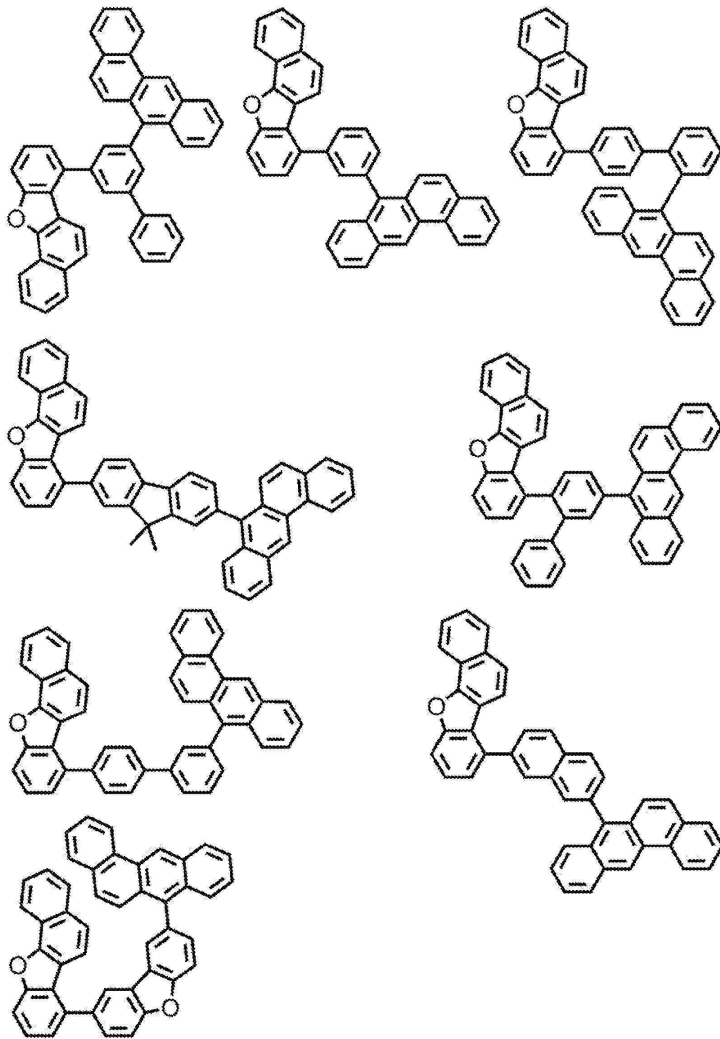
[0943]

[0944] [화학식 43]



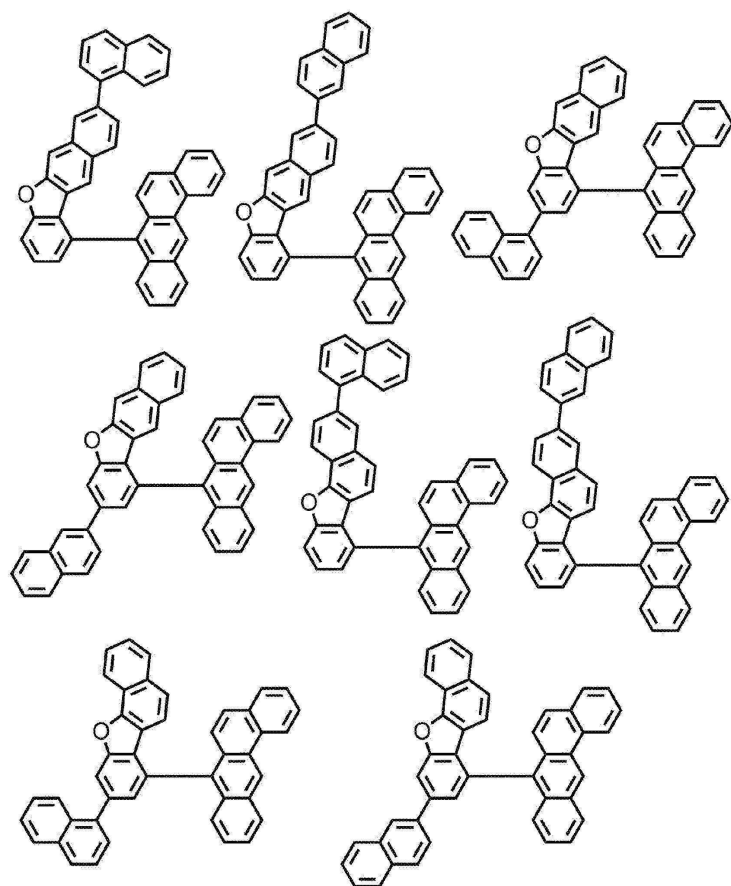
[0945]

[0946] [화학식 44]



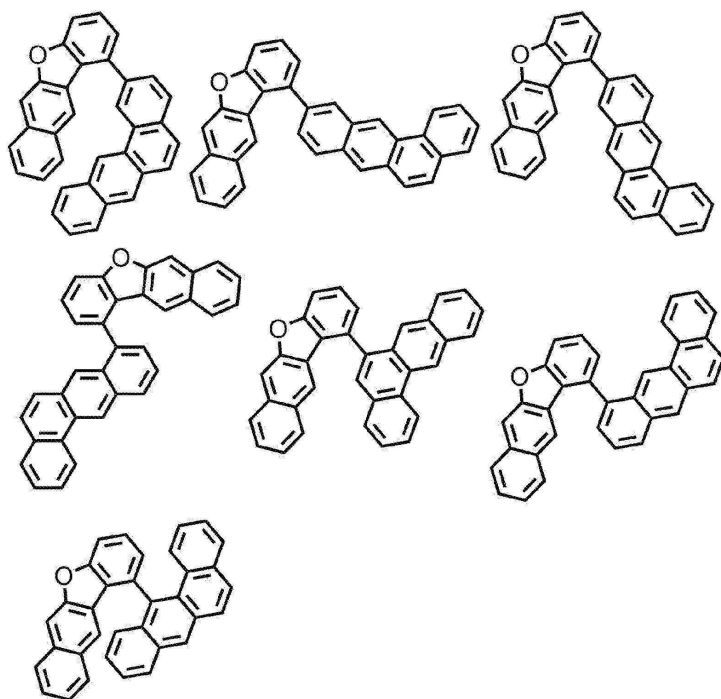
[0947]

[0948] [화학식 45]



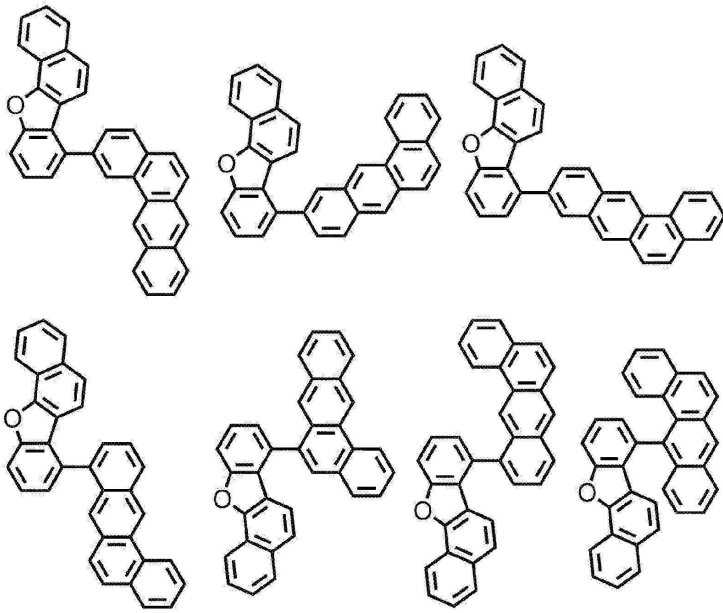
[0949]

[0950] [화학식 46]



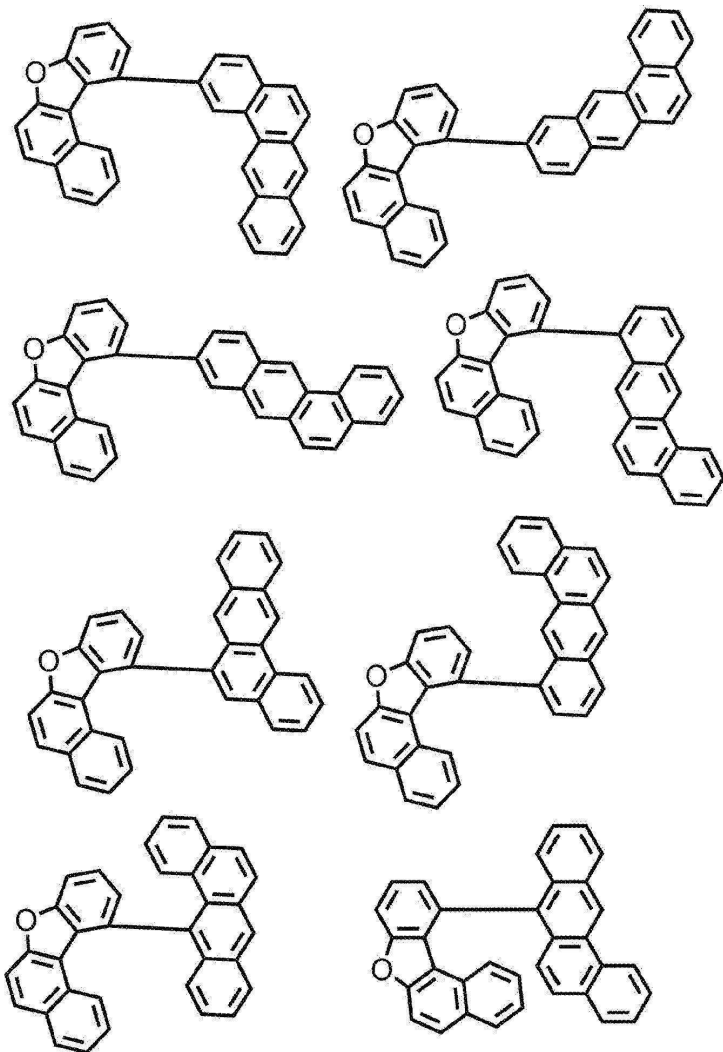
[0951]

[0952] [화학식 47]



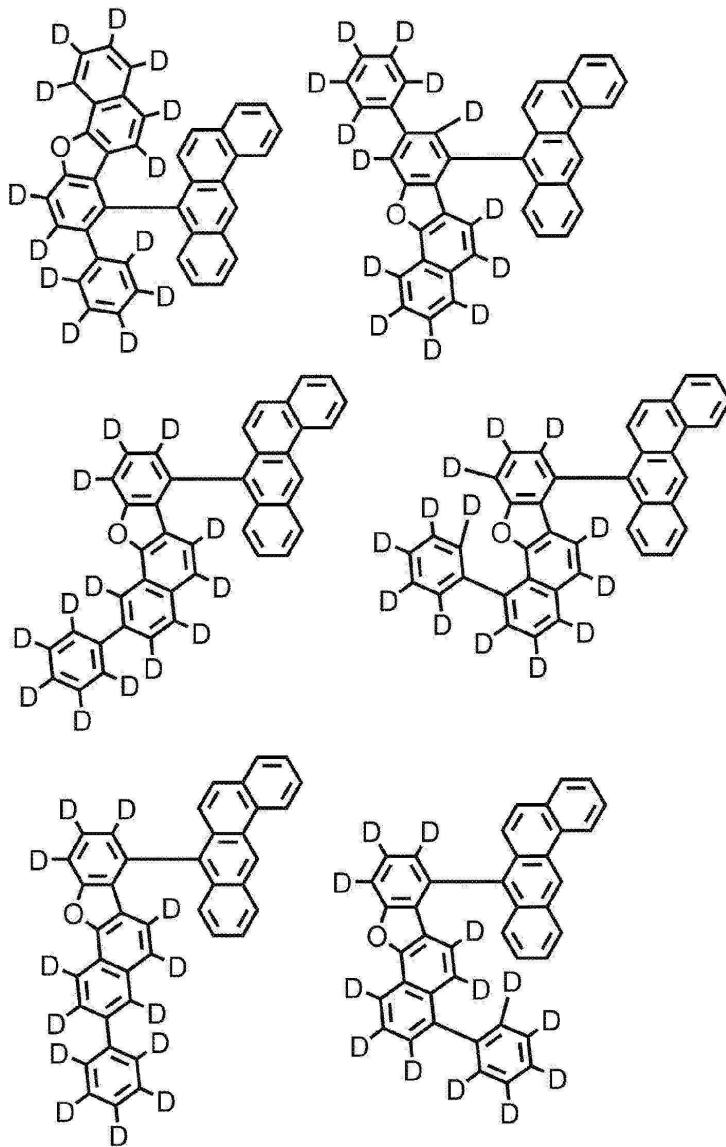
[0953]

[0954] [화학식 48]



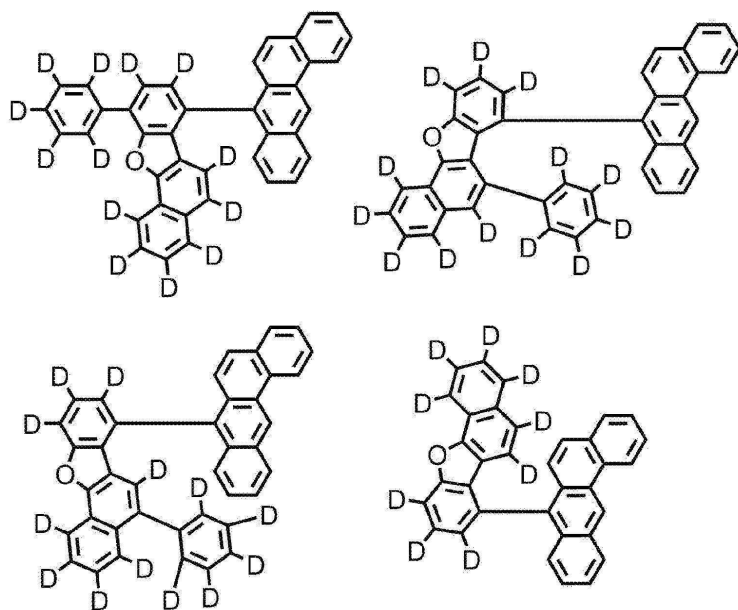
[0955]

[0956] [화학식 49]



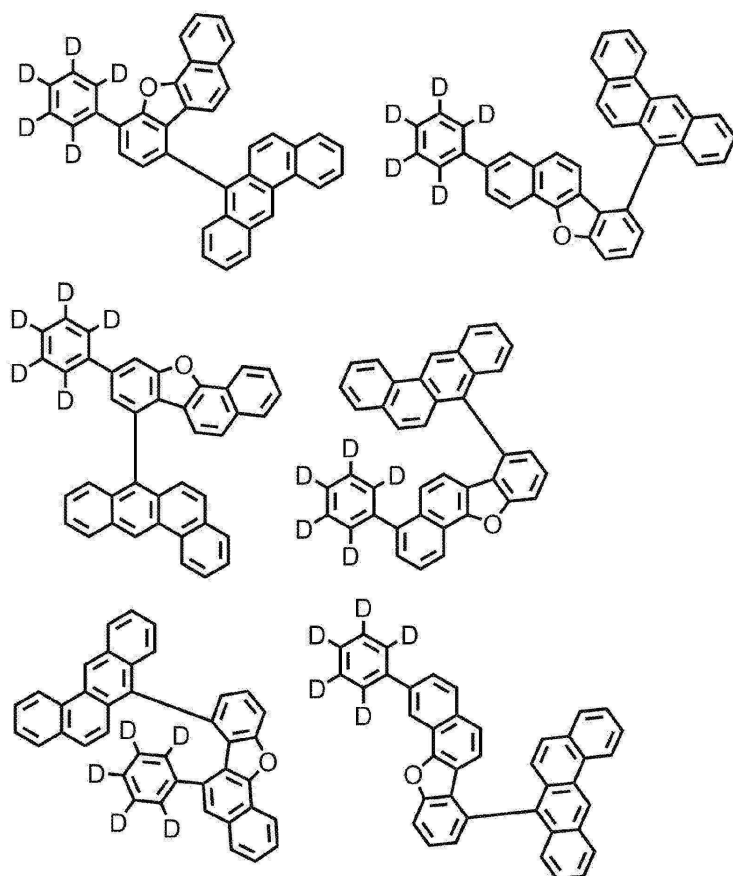
[0957]

[0958] [화학식 50]



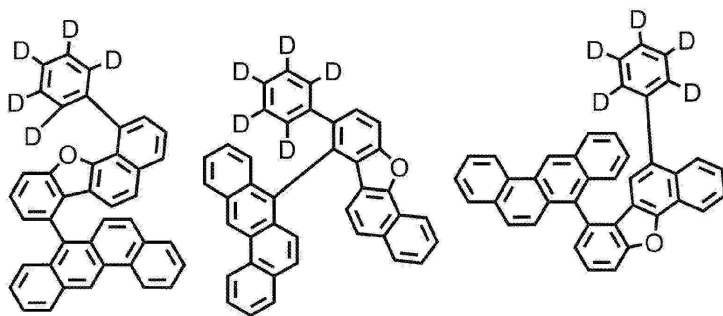
[0959]

[0960] [화학식 51]



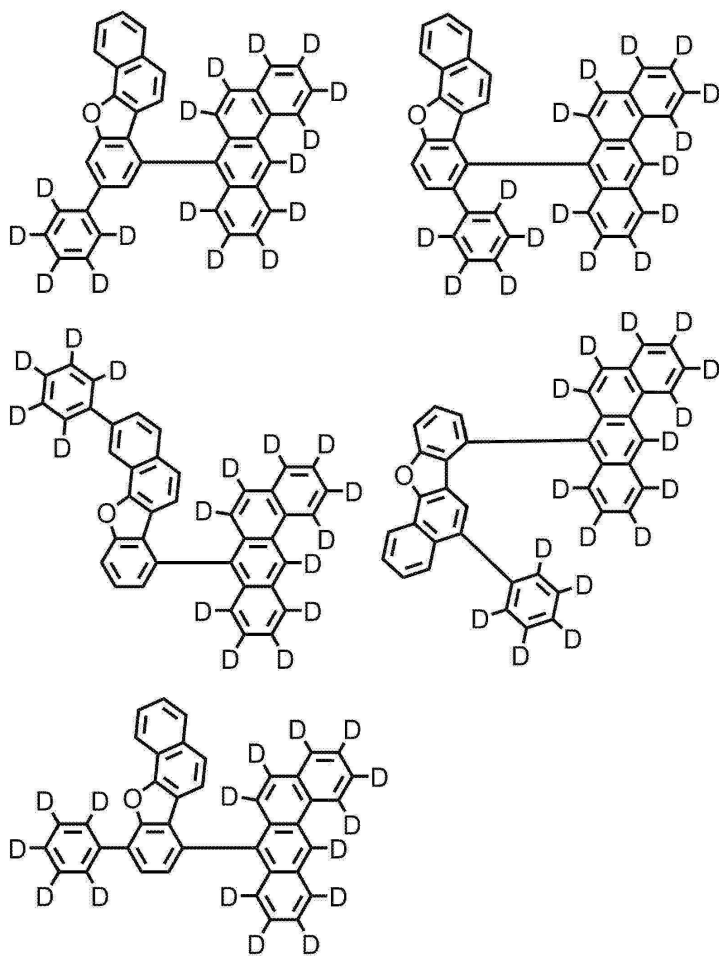
[0961]

[0962] [화학식 52]



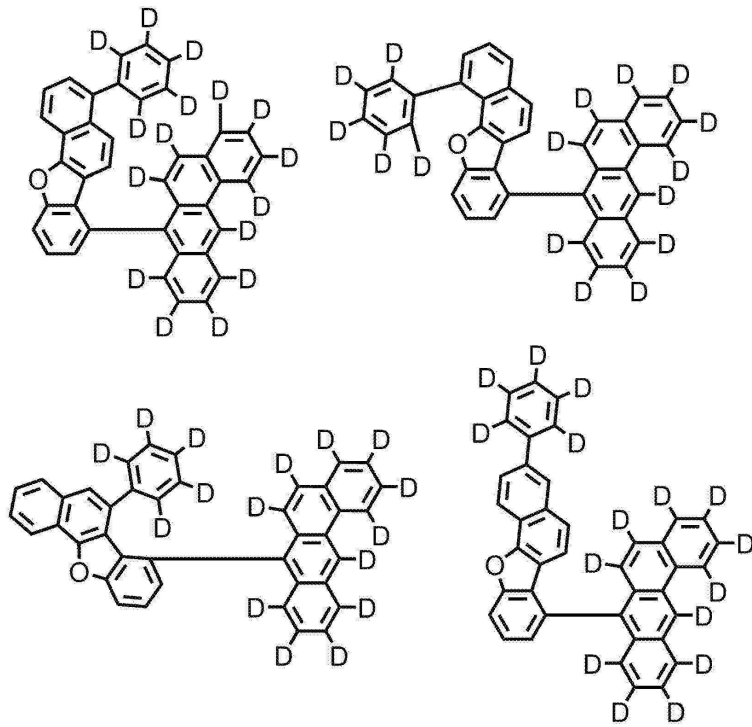
[0963]

[0964] [화학식 53]



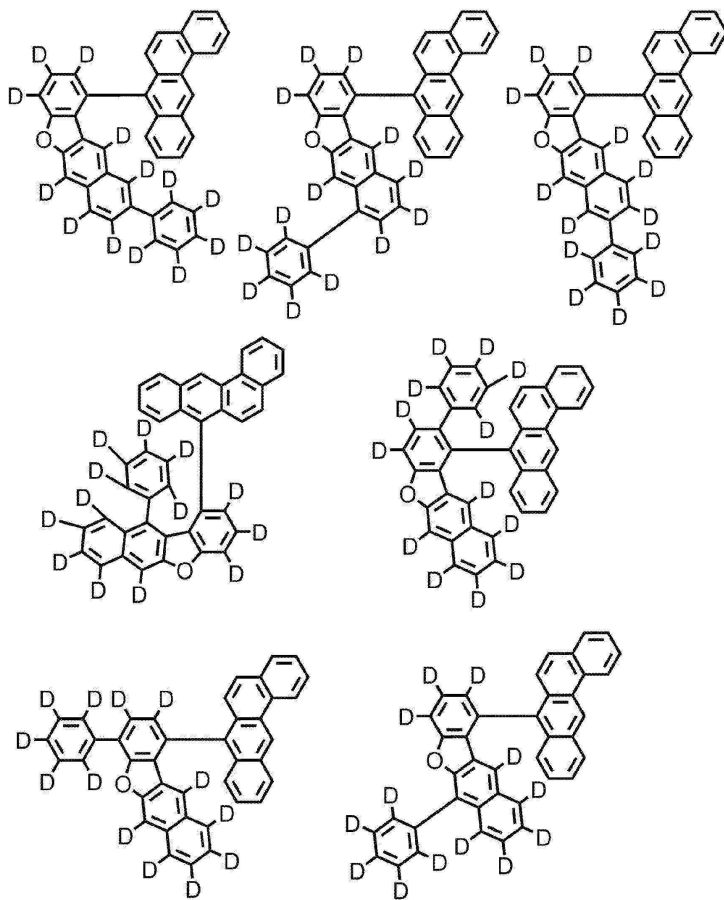
[0965]

[0966] [화학식 54]



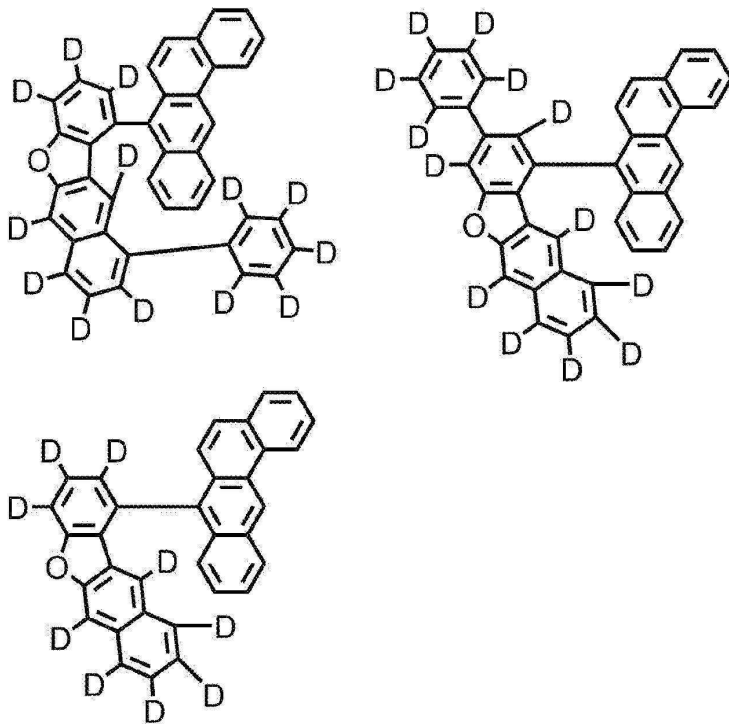
[0967]

[0968] [화학식 55]



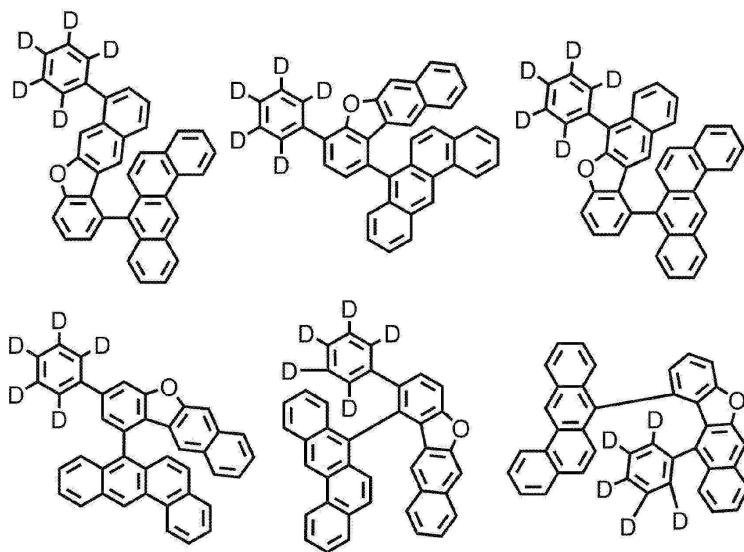
[0969]

[0970] [화학식 56]



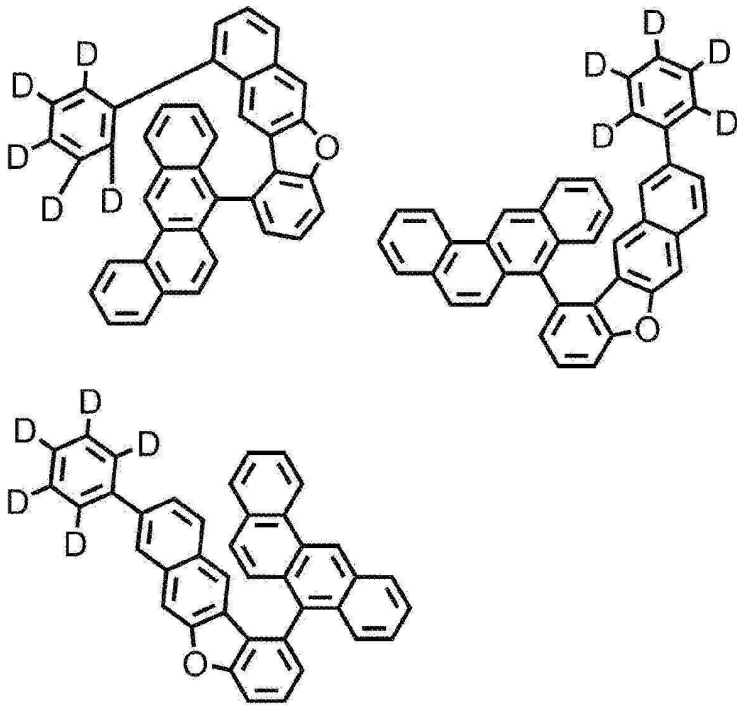
[0971]

[0972] [화학식 57]



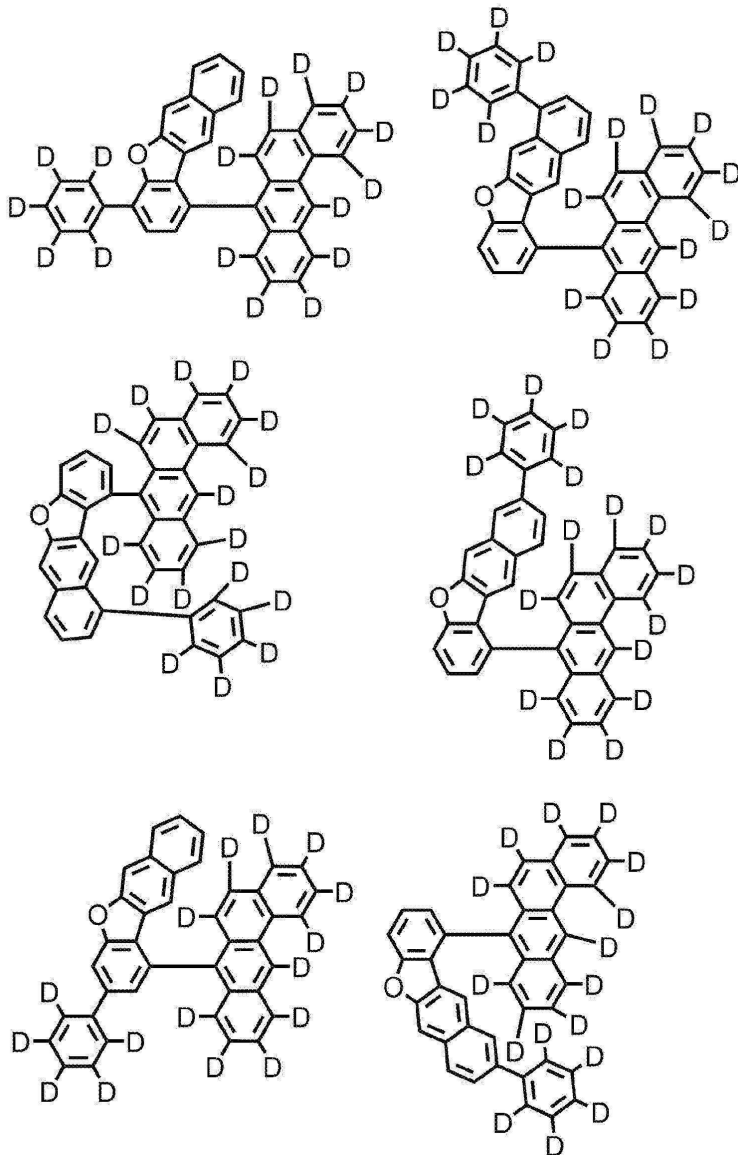
[0973]

[0974] [화학식 58]



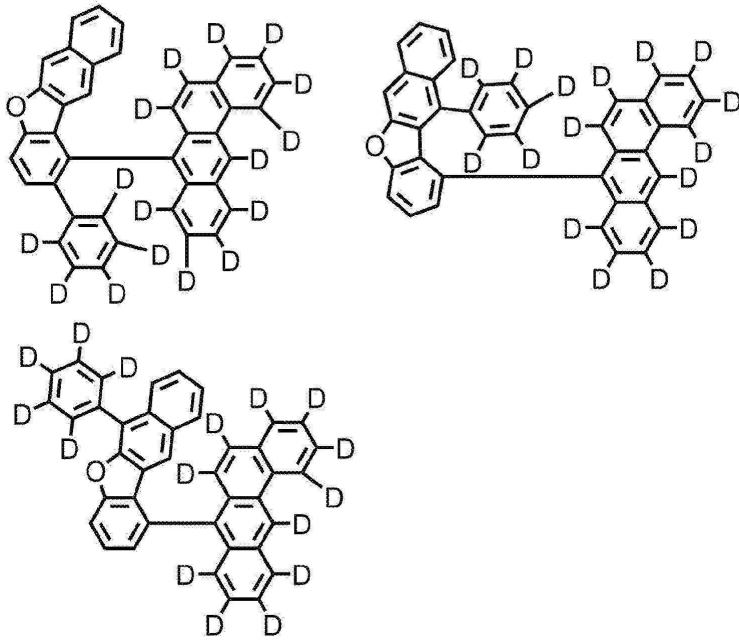
[0975]

[0976] [화학식 59]



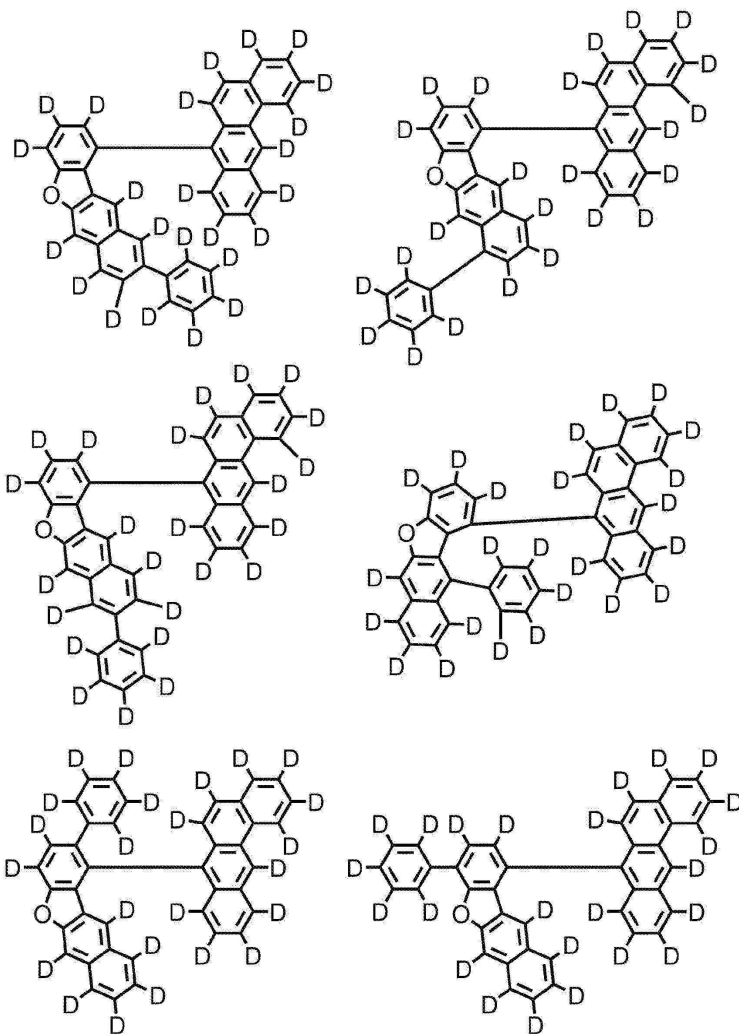
[0977]

[0978] [화학식 60]



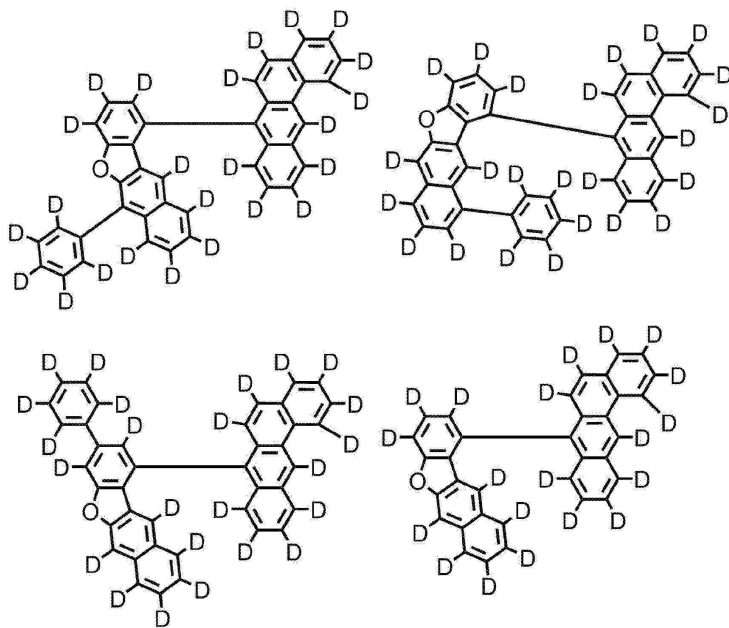
[0980]

[0981] [화학식 61]



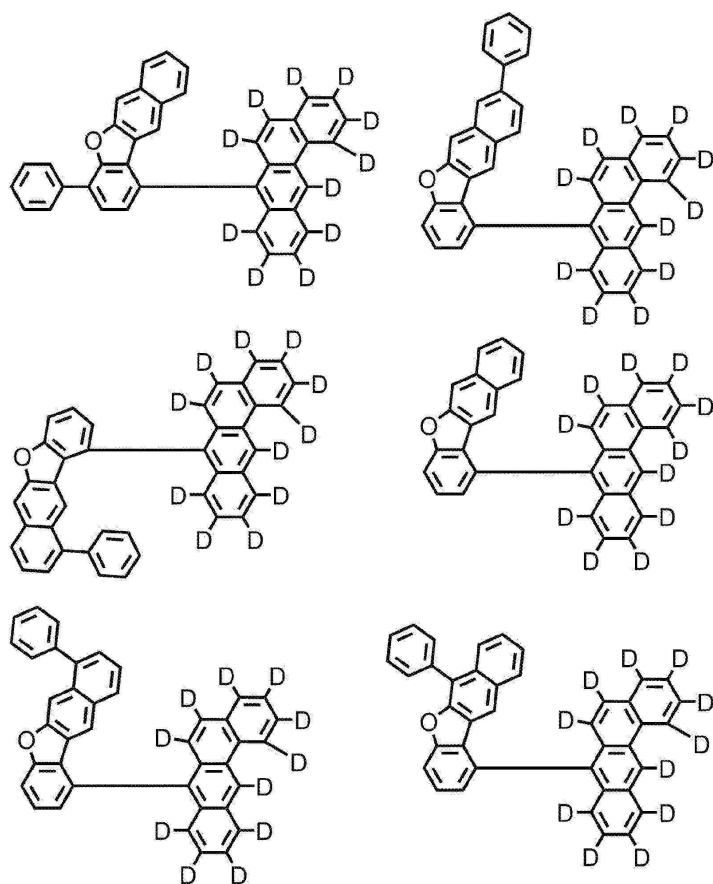
[0982]

[0983] [화학식 62]



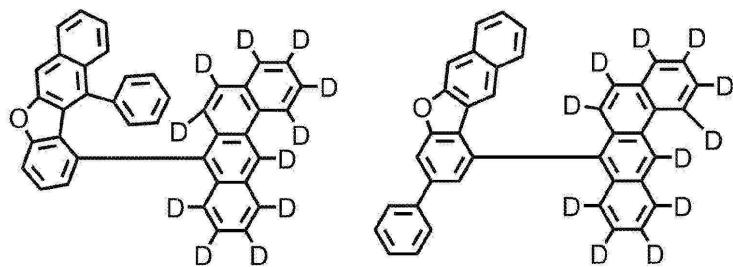
[0984]

[0985] [화학식 63]



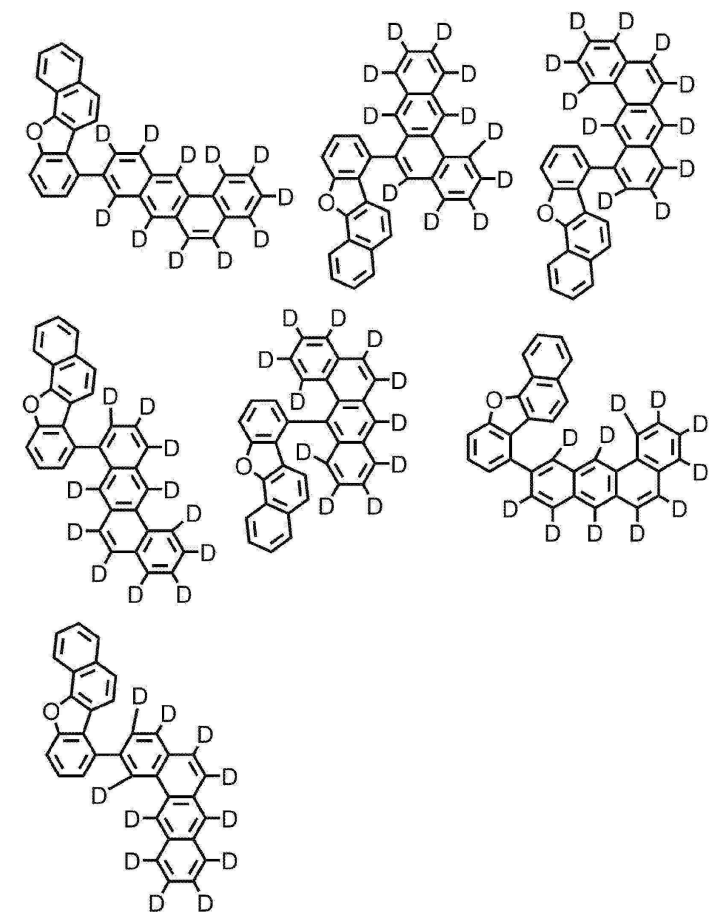
[0986]

[0987] [화학식 64]



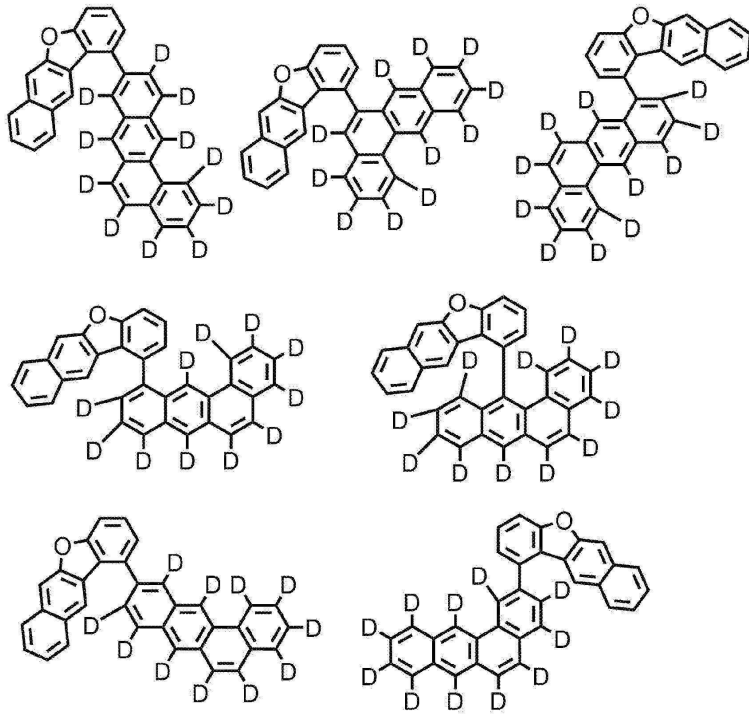
[0988]

[0989] [화학식 65]



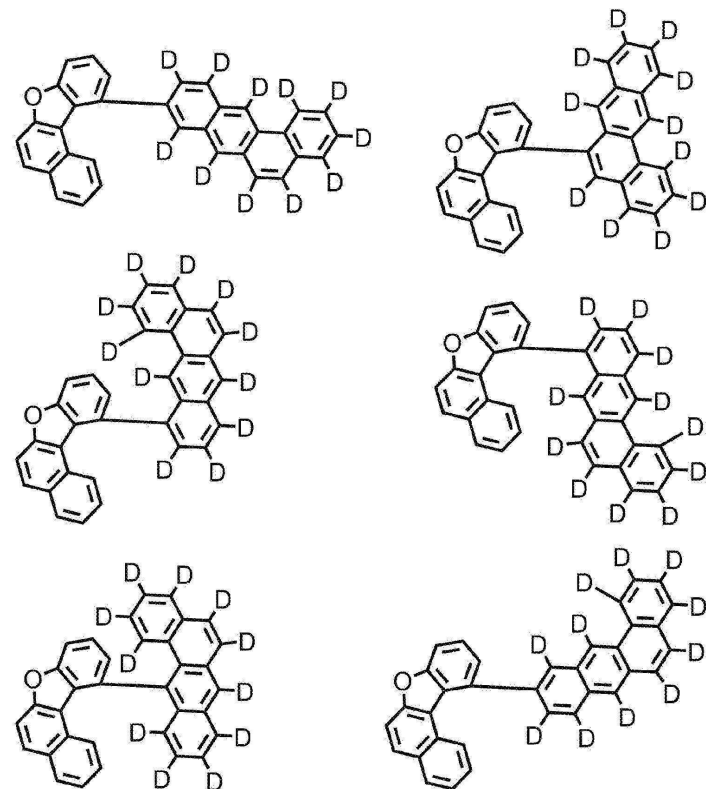
[0990]

[0991] [화학식 66]



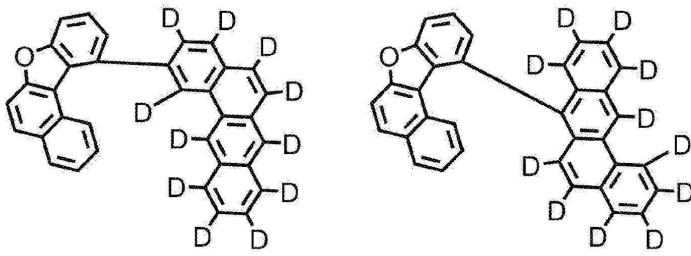
[0992]

[0993] [화학식 67]



[0994]

[0995] [화학식 68]



[0996]

[0997] [제2 실시형태]

[0998] (유기 일렉트로루미네센스 소자)

[0999] 본 실시형태에 따른 유기 EL 소자에 대해서 설명한다.

[1000] 본 실시형태에 따른 유기 EL 소자는 제1 실시형태에 따른 화합물을 함유한다.

[1001] 본 실시형태에 따른 유기 EL 소자는, 양극과, 음극과, 양극과 음극의 사이에 배치된 유기층을 갖는다. 이 유기층은 유기 화합물로 구성되는 층을 적어도 하나 포함한다. 혹은, 이 유기층은 유기 화합물로 구성되는 복수의 층이 적층되어 이루어진다. 유기층은 무기 화합물을 더 포함하고 있어도 좋다.

[1002] 본 실시형태에 따른 유기 EL 소자의 일 양태에 있어서, 유기층의 적어도 1층은 제1 실시형태에 따른 화합물을 함유한다.

[1003] 본 실시형태의 유기 EL 소자에 있어서, 유기층 중 적어도 1층은 발광 영역을 갖는 것이 바람직하다. 본 실시형태의 유기 EL 소자에 있어서, 발광 영역은 적어도 하나의 발광층을 함유하는 것이 바람직하다. 일 실시형태에 있어서, 발광층은 상기 일반식 (1A)로 표시되는 화합물을 함유한다. 일 실시형태에 있어서, 발광층은 상기 일반식 (1A-A)로 표시되는 화합물을 함유한다.

[1004] 본 실시형태에 따른 유기 EL 소자는, 양극과, 음극과, 상기 양극과 상기 음극의 사이에 배치된 발광 영역을 가지며, 상기 발광 영역은 제1 발광층 및 제2 발광층을 포함하고, 상기 제1 발광층은 제1 화합물로서 상기 일반식 (1A)로 표시되는 화합물을 함유하며, 상기 제2 발광층은 제2 화합물을 함유하는 것도 바람직하다.

[1005] 본 실시형태의 유기 EL 소자에 있어서, 상기 일반식 (1A)로 표시되는 화합물과 제2 화합물은 서로 상이한 화합물이다.

[1006] 본 실시형태에 따른 유기 EL 소자는, 양극과, 음극과, 상기 양극과 상기 음극의 사이에 배치된 발광 영역을 가지며, 상기 발광 영역은 제1 발광층 및 제2 발광층을 포함하고, 상기 제1 발광층은 제1 화합물로서 상기 일반식 (1A-A)로 표시되는 화합물을 함유하며, 상기 제2 발광층은 제2 화합물을 함유하는 것도 바람직하다.

[1007] 본 실시형태의 유기 EL 소자에 있어서, 상기 일반식 (1A-A)로 표시되는 화합물과 제2 화합물은 서로 상이한 화합물이다.

[1008] 발광 영역이 제1 발광층 및 제2 발광층을 포함하는 경우, 본 실시형태에 따른 유기 EL 소자는, 예컨대 양극과, 제1 발광층과, 제2 발광층과, 음극을 이 순서로 갖고 있을 수도 있지만, 제1 발광층과 제2 발광층의 순서를 반대로 하여, 양극과, 제2 발광층과, 제1 발광층과, 음극을 이 순서로 가질 수도 있다.

[1009] 발광 영역이 제1 발광층 및 제2 발광층을 포함하는 경우, 본 실시형태에 따른 유기 EL 소자는, 양극과 음극의 사이에 제2 발광층을 포함하고, 양극과 제2 발광층의 사이에 제1 발광층이 배치되어 있는 것도 바람직하다.

[1010] 발광 영역이 제1 발광층 및 제2 발광층을 포함하는 경우, 본 실시형태에 따른 유기 EL 소자는, 양극과 음극의 사이에 제1 발광층을 포함하고, 양극과 제1 발광층의 사이에 제2 발광층이 배치되어 있는 것도 바람직하다.

[1011] (유기 EL 소자의 발광 파장)

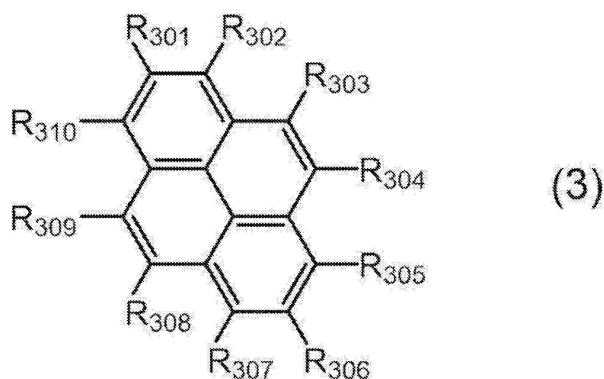
[1012] 본 실시형태에 따른 유기 EL 소자는, 소자 구동시에 최대 피크 파장이 500 nm 이하인 광을 방사하는 것이 바람직하고, 430 nm 이상 480 nm 이하인 광을 방사하는 것이 보다 바람직하다.

[1013] 소자 구동시에 유기 EL 소자가 방사하는 광의 최대 피크 파장의 측정은, 이하와 같이 하여 행한다. 전류 밀도가

10 mA/cm²가 되도록 유기 EL 소자에 전압을 인가했을 때의 분광 방사 휘도 스펙트럼을 분광 방사 휘도계 CS-2000(코니카미놀타사 제조)으로 측정한다. 얻어진 분광 방사 휘도 스펙트럼에 있어서, 발광 강도가 최대가 되는 발광 스펙트럼의 피크 파장을 측정하고, 이것을 최대 피크 파장(단위: nm)으로 한다.

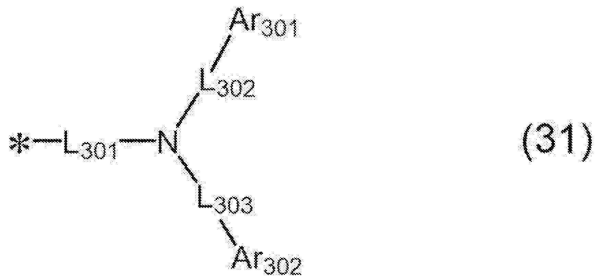
- [1014] 본 명세서에 있어서의 화합물의 최대 피크 파장의 측정 방법은, 다음과 같다. 측정 대상이 되는 화합물의 10⁻⁶ mol/L 이상 10⁻⁵ mol/L 이하의 톨루엔 용액을 조제하여 석영 셀에 넣고, 상온(300 K)에서 이 시료의 발광 스펙트럼(중축: 발광 강도, 횡축: 파장으로 함)을 측정한다. 발광 스펙트럼은, 가부시키가이샤 히타치하이테크사이언스 제조의 분광 형광 광도계(장치명: F-7000)에 의해 측정할 수 있다. 또한, 발광 스펙트럼 측정 장치는, 여기서 이용한 장치에 한정되지 않는다.
- [1015] 발광 스펙트럼에 있어서, 발광 강도가 최대가 되는 발광 스펙트럼의 피크 파장을 발광 최대 피크 파장으로 한다. 또한, 본 명세서에 있어서, 최대 피크 파장을 형광 발광 최대 피크 파장(FL-peak)이라고 부르는 경우가 있다.
- [1016] 본 실시형태에 따른 유기 EL 소자에 있어서, 유기층은, 발광층만으로 구성되어 있어도 좋지만, 유기층으로서, 예컨대 정공 주입층, 정공 수송층, 전자 주입층, 전자 수송층, 정공 장벽층, 및 전자 장벽층 등으로 이루어진 군으로부터 선택되는 적어도 어느 하나의 층을 더 갖고 있어도 좋다.
- [1017] 본 실시형태에 따른 유기 EL 소자에 있어서, 양극과 발광 영역의 사이에, 정공 수송층을 갖는 것이 바람직하다.
- [1018] 본 실시형태에 따른 유기 EL 소자에 있어서, 발광 영역이 제1 발광층 및 제2 발광층을 포함하고, 제1 발광층과 제2 발광층의 적층 순서가, 양극측에서부터, 제1 발광층과 제2 발광층의 순서인 경우, 양극과 제1 발광층의 사이에, 정공 수송층을 갖는 것이 바람직하다. 또한, 제1 발광층과 제2 발광층의 적층 순서가, 양극측에서부터, 제2 발광층과 제1 발광층의 순서인 경우, 양극과 제2 발광층의 사이에, 정공 수송층을 갖는 것이 바람직하다.
- [1019] 본 실시형태에 따른 유기 EL 소자에 있어서, 음극과 발광 영역의 사이에, 전자 수송층을 갖는 것이 바람직하다.
- [1020] 본 실시형태에 따른 유기 EL 소자에 있어서, 발광 영역이 제1 발광층 및 제2 발광층을 포함하고, 제1 발광층과 제2 발광층의 적층 순서가, 양극측에서부터, 제1 발광층과 제2 발광층의 순서인 경우, 상기 음극과 상기 제2 발광층의 사이에, 전자 수송층을 갖는 것이 바람직하다. 또한, 제1 발광층과 제2 발광층의 적층 순서가, 양극측에서부터, 제2 발광층과 제1 발광층의 순서인 경우, 상기 음극과 상기 제1 발광층의 사이에, 전자 수송층을 갖는 것이 바람직하다.
- [1021] 도 1에, 본 실시형태에 따른 유기 EL 소자의 일례의 개략 구성을 나타낸다.
- [1022] 도 1에 도시된 유기 EL 소자(1A)는, 기관(2)과, 양극(3)과, 음극(4)과, 양극(3)과 음극(4)의 사이에 배치된 유기층(10A)을 포함한다. 유기층(10A)은, 양극(3)측에서부터 차례로 정공 수송 대역(6), 발광 영역(5A), 및 전자 수송 대역(7)을 포함한다. 정공 수송 대역(6)은, 양극(3)측에서부터 차례로 정공 주입층(61) 및 정공 수송층(62)을 포함한다. 발광 영역(5A)은, 하나의 발광층(5)을 포함한다. 전자 수송 대역(7)은, 발광 영역(5A)측에서부터 차례로 전자 수송층(71) 및 전자 주입층(72)을 포함한다.
- [1023] (발광층)
- [1024] 발광층(5)은, 제1 실시형태에 따른 화합물을 함유한다.
- [1025] 유기 EL 소자(1A)에 있어서, 발광층(5)이 함유하는 화합물은, 상기 일반식 (1A)로 표시되는 화합물인 것이 바람직하다.
- [1026] 유기 EL 소자(1A)에 있어서, 발광층(5)이 함유하는 화합물은, 상기 일반식 (1A-A)로 표시되는 화합물인 것이 바람직하다.
- [1027] (발광성 화합물)
- [1028] 유기 EL 소자(1A)에 있어서, 발광층(5)은, 발광성 화합물(바람직하게는 형광 발광성 화합물)을 더 함유하는 것도 바람직하다.
- [1029] 발광층(5)이 함유하는 발광성 화합물은,
- [1030] 하기 일반식 (3)으로 표시되는 화합물,

- [1031] 하기 일반식 (4)로 표시되는 화합물,
 [1032] 하기 일반식 (5)로 표시되는 화합물,
 [1033] 하기 일반식 (6)으로 표시되는 화합물,
 [1034] 하기 일반식 (7)로 표시되는 화합물,
 [1035] 하기 일반식 (8)로 표시되는 화합물,
 [1036] 하기 일반식 (9)로 표시되는 화합물, 및
 [1037] 하기 일반식 (10)으로 표시되는 화합물
 [1038] 로 이루어진 군으로부터 선택되는 1 이상의 화합물을 들 수 있다.
 [1039] (일반식 (3)으로 표시되는 화합물)
 [1040] 일반식 (3)으로 표시되는 화합물에 대해서 설명한다.
 [1041] [화학식 69]



- [1042]
 [1043] (상기 일반식 (3)에 있어서,
 [1044] $R_{301} \sim R_{310}$ 중의 인접한 2개 이상으로 이루어지는 조의 1조 이상이,
 [1045] 서로 결합하여 치환 혹은 무치환의 단환을 형성하거나,
 [1046] 서로 결합하여 치환 혹은 무치환의 축합환을 형성하거나, 또는
 [1047] 서로 결합하지 않고,
 [1048] $R_{301} \sim R_{310}$ 중 적어도 하나는 하기 일반식 (31)로 표시되는 1가의 기이며,
 [1049] 상기 단환을 형성하지 않고, 상기 축합환을 형성하지 않으며, 또한 하기 일반식 (31)로 표시되는 1가의 기가 아닌 $R_{301} \sim R_{310}$ 은, 각각 독립적으로
 [1050] 수소 원자,
 [1051] 치환 혹은 무치환의 탄소수 1~50의 알킬기,
 [1052] 치환 혹은 무치환의 탄소수 2~50의 알케닐기,
 [1053] 치환 혹은 무치환의 탄소수 2~50의 알키닐기,
 [1054] 치환 혹은 무치환의 고리 형성 탄소수 3~50의 시클로알킬기,
 [1055] $-\text{Si}(R_{901})(R_{902})(R_{903})$ 으로 표시되는 기,
 [1056] $-\text{O}(R_{904})$ 로 표시되는 기,
 [1057] $-\text{S}(R_{905})$ 로 표시되는 기,

- [1058] $-N(R_{906})(R_{907})$ 로 표시되는 기,
- [1059] 할로겐 원자,
- [1060] 시아노기,
- [1061] 니트로기,
- [1062] 치환 혹은 무치환의 고리 형성 탄소수 6~50의 아릴기, 또는
- [1063] 치환 혹은 무치환의 고리 형성 원자수 5~50의 복소환기이다.)
- [1064] [화학식 70]



- [1065]
- [1066] (상기 일반식 (31)에 있어서,
- [1067] Ar_{301} 및 Ar_{302} 는, 각각 독립적으로
- [1068] 치환 혹은 무치환의 고리 형성 탄소수 6~50의 아릴기, 또는
- [1069] 치환 혹은 무치환의 고리 형성 원자수 5~50의 복소환기이고,
- [1070] $L_{301} \sim L_{303}$ 은, 각각 독립적으로
- [1071] 단일 결합,
- [1072] 치환 혹은 무치환의 고리 형성 탄소수 6~30의 아릴렌기, 또는
- [1073] 치환 혹은 무치환의 고리 형성 원자수 5~30의 2가의 복소환기이며,
- [1074] *는 상기 일반식 (3)에서의 피렌환에 있어서의 결합 위치를 나타낸다.)
- [1075] 발광성 화합물 중, R_{901} , R_{902} , R_{903} , R_{904} , R_{905} , R_{906} 및 R_{907} 은, 각각 독립적으로
- [1076] 수소 원자,
- [1077] 치환 혹은 무치환의 탄소수 1~50의 알킬기,
- [1078] 치환 혹은 무치환의 고리 형성 탄소수 3~50의 시클로알킬기,
- [1079] 치환 혹은 무치환의 고리 형성 탄소수 6~50의 아릴기, 또는
- [1080] 치환 혹은 무치환의 고리 형성 원자수 5~50의 복소환기이고,
- [1081] 바람직하게는, 치환 혹은 무치환의 탄소수 1~50의 알킬기, 또는
- [1082] 치환 혹은 무치환의 고리 형성 탄소수 6~50의 아릴기이며,
- [1083] R_{901} 이 복수 존재하는 경우, 복수의 R_{901} 은 서로 동일하거나 또는 상이하고,
- [1084] R_{902} 가 복수 존재하는 경우, 복수의 R_{902} 는 서로 동일하거나 또는 상이하며,
- [1085] R_{903} 이 복수 존재하는 경우, 복수의 R_{903} 은 서로 동일하거나 또는 상이하고,
- [1086] R_{904} 가 복수 존재하는 경우, 복수의 R_{904} 는 서로 동일하거나 또는 상이하며,

[1087] R_{905} 가 복수 존재하는 경우, 복수의 R_{905} 는 서로 동일하거나 또는 상이하고,

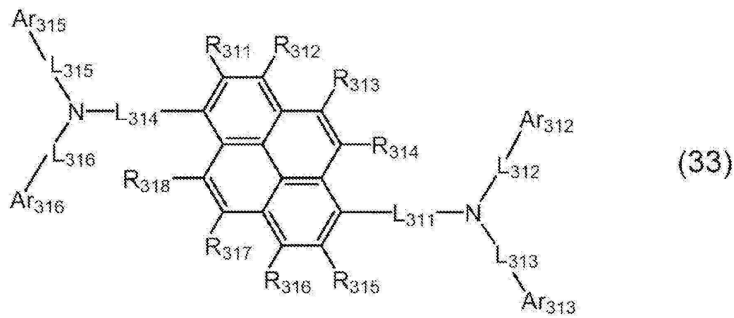
[1088] R_{906} 이 복수 존재하는 경우, 복수의 R_{906} 은 서로 동일하거나 또는 상이하며,

[1089] R_{907} 이 복수 존재하는 경우, 복수의 R_{907} 은 서로 동일하거나 또는 상이하다.

[1090] 상기 일반식 (3)에 있어서, $R_{301} \sim R_{310}$ 중 2개가 상기 일반식 (31)로 표시되는 기인 것이 바람직하다.

[1091] 일 실시형태에 있어서, 상기 일반식 (3)으로 표시되는 화합물은, 하기 일반식 (33)으로 표시되는 화합물이다.

[1092] [화학식 71]



[1093]

[1094] (상기 일반식 (33)에 있어서,

[1095] $R_{311} \sim R_{318}$ 은, 각각 독립적으로 상기 일반식 (3)에 있어서의, 상기 일반식 (31)로 표시되는 1가의 기가 아닌 $R_{301} \sim R_{310}$ 과 동일한 의미이고,

[1096] $L_{311} \sim L_{316}$ 은, 각각 독립적으로

[1097] 단일 결합,

[1098] 치환 혹은 무치환의 고리 형성 탄소수 6~30의 아틸렌기, 또는

[1099] 치환 혹은 무치환의 고리 형성 원자수 5~30의 2가의 복소환기이며,

[1100] Ar_{312} , Ar_{313} , Ar_{315} 및 Ar_{316} 은, 각각 독립적으로

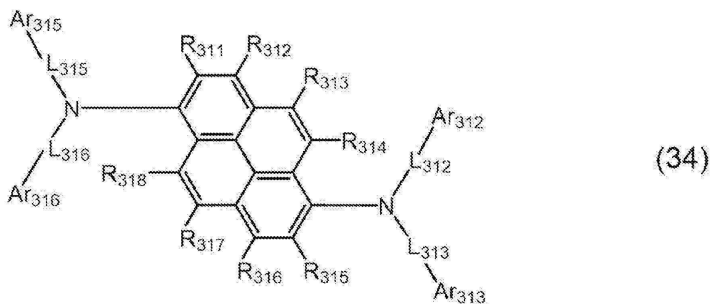
[1101] 치환 혹은 무치환의 고리 형성 탄소수 6~50의 아틸기, 또는

[1102] 치환 혹은 무치환의 고리 형성 원자수 5~50의 복소환기이다.)

[1103] 상기 일반식 (31)에 있어서, L_{301} 은 단일 결합인 것이 바람직하고, L_{302} 및 L_{303} 은 단일 결합인 것이 바람직하다.

[1104] 일 실시형태에 있어서, 상기 일반식 (3)으로 표시되는 화합물은, 하기 일반식 (34) 또는 일반식 (35)로 표시된다.

[1105] [화학식 72]



[1106]

[1107] (상기 일반식 (34)에 있어서,

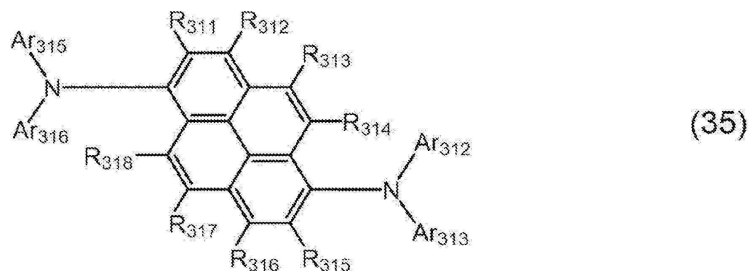
[1108] $R_{311} \sim R_{318}$ 은, 각각 독립적으로 상기 일반식 (3)에 있어서의, 상기 일반식 (31)로 표시되는 1가의 기가 아닌 R_{301}

~R₃₁₀과 동일한 의미이고,

[1109] L₃₁₂, L₃₁₃, L₃₁₅ 및 L₃₁₆은, 각각 독립적으로 상기 일반식 (33)에 있어서의 L₃₁₂, L₃₁₃, L₃₁₅ 및 L₃₁₆과 동일한 의미이며,

[1110] Ar₃₁₂, Ar₃₁₃, Ar₃₁₅ 및 Ar₃₁₆은, 각각 독립적으로 상기 일반식 (33)에 있어서의 Ar₃₁₂, Ar₃₁₃, Ar₃₁₅ 및 Ar₃₁₆과 동일한 의미이다.)

[1111] [화학식 73]



[1112]

[1113] (상기 일반식 (35)에 있어서,

[1114] R₃₁₁~R₃₁₈은, 각각 독립적으로 상기 일반식 (3)에 있어서의, 상기 일반식 (31)로 표시되는 1가의 기가 아닌 R₃₀₁~R₃₁₀과 동일한 의미이고,

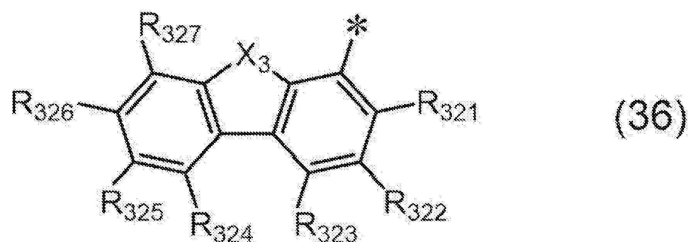
[1115] Ar₃₁₂, Ar₃₁₃, Ar₃₁₅ 및 Ar₃₁₆은, 각각 독립적으로 상기 일반식 (33)에 있어서의 Ar₃₁₂, Ar₃₁₃, Ar₃₁₅ 및 Ar₃₁₆과 동일한 의미이다.)

[1116] 상기 일반식 (31)에 있어서, 바람직하게는, Ar₃₀₁ 및 Ar₃₀₂ 중 적어도 하나가 하기 일반식 (36)으로 표시되는 기이다.

[1117] 상기 일반식 (33)~일반식 (35)에 있어서, 바람직하게는, Ar₃₁₂ 및 Ar₃₁₃ 중 적어도 하나가 하기 일반식 (36)으로 표시되는 기이다.

[1118] 상기 일반식 (33)~일반식 (35)에 있어서, 바람직하게는, Ar₃₁₅ 및 Ar₃₁₆ 중 적어도 하나가 하기 일반식 (36)으로 표시되는 기이다.

[1119] [화학식 74]



[1120]

[1121] (상기 일반식 (36)에 있어서,

[1122] X₃은 산소 원자 또는 황 원자를 나타내고,

[1123] R₃₂₁~R₃₂₇ 중 인접한 2개 이상으로 이루어지는 조의 1조 이상이,

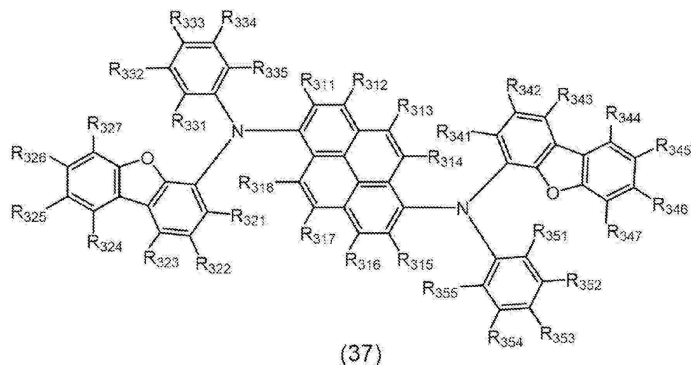
[1124] 서로 결합하여 치환 혹은 무치환의 단환을 형성하거나,

[1125] 서로 결합하여 치환 혹은 무치환의 축합환을 형성하거나, 또는

[1126] 서로 결합하지 않으며,

- [1127] 상기 단환을 형성하지 않고, 또한 상기 축합환을 형성하지 않는 $R_{321} \sim R_{327}$ 은, 각각 독립적으로
- [1128] 수소 원자,
- [1129] 치환 혹은 무치환의 탄소수 1~50의 알킬기,
- [1130] 치환 혹은 무치환의 탄소수 2~50의 알케닐기,
- [1131] 치환 혹은 무치환의 탄소수 2~50의 알키닐기,
- [1132] 치환 혹은 무치환의 고리 형성 탄소수 3~50의 시클로알킬기,
- [1133] $-\text{Si}(R_{901})(R_{902})(R_{903})$ 으로 표시되는 기,
- [1134] $-\text{O}(R_{904})$ 로 표시되는 기,
- [1135] $-\text{S}(R_{905})$ 로 표시되는 기,
- [1136] $-\text{N}(R_{906})(R_{907})$ 로 표시되는 기,
- [1137] 할로젠 원자,
- [1138] 시아노기,
- [1139] 니트로기,
- [1140] 치환 혹은 무치환의 고리 형성 탄소수 6~50의 아릴기, 또는
- [1141] 치환 혹은 무치환의 고리 형성 원자수 5~50의 복소환기이며,
- [1142] *는 L_{302} , L_{303} , L_{312} , L_{313} , L_{315} 또는 L_{316} 과의 결합 위치를 나타낸다.)
- [1143] X_3 은 산소 원자인 것이 바람직하다.
- [1144] $R_{321} \sim R_{327}$ 중 적어도 하나는
- [1145] 치환 혹은 무치환의 탄소수 1~50의 알킬기,
- [1146] 치환 혹은 무치환의 탄소수 2~50의 알케닐기,
- [1147] 치환 혹은 무치환의 탄소수 2~50의 알키닐기,
- [1148] 치환 혹은 무치환의 고리 형성 탄소수 3~50의 시클로알킬기,
- [1149] 치환 혹은 무치환의 고리 형성 탄소수 6~50의 아릴기, 또는
- [1150] 치환 혹은 무치환의 고리 형성 원자수 5~50의 복소환기인 것이 바람직하다.
- [1151] 상기 일반식 (31)에 있어서, Ar_{301} 이 상기 일반식 (36)으로 표시되는 기이며, Ar_{302} 가 치환 혹은 무치환의 고리 형성 탄소수 6~50의 아릴기인 것이 바람직하다.
- [1152] 상기 일반식 (33)~일반식 (35)에 있어서, Ar_{312} 가 상기 일반식 (36)으로 표시되는 기이고, Ar_{313} 이 치환 혹은 무치환의 고리 형성 탄소수 6~50의 아릴기인 것이 바람직하다.
- [1153] 상기 일반식 (33)~일반식 (35)에 있어서, Ar_{315} 가 상기 일반식 (36)으로 표시되는 기이고, Ar_{316} 이 치환 혹은 무치환의 고리 형성 탄소수 6~50의 아릴기인 것이 바람직하다.
- [1154] 일 실시형태에 있어서, 상기 일반식 (3)으로 표시되는 화합물은, 하기 일반식 (37)로 표시된다.

[1155] [화학식 75]



[1156]

[1157] (상기 일반식 (37)에 있어서,

[1158] $R_{311} \sim R_{318}$ 은, 각각 독립적으로 상기 일반식 (3)에 있어서의, 상기 일반식 (31)로 표시되는 1가의 기가 아닌 $R_{301} \sim R_{310}$ 과 동일한 의미이고,

[1159] $R_{321} \sim R_{327}$ 중 인접한 2개 이상으로 이루어지는 조의 1조 이상이,

[1160] 서로 결합하여 치환 혹은 무치환의 단환을 형성하거나,

[1161] 서로 결합하여 치환 혹은 무치환의 축합환을 형성하거나, 또는

[1162] 서로 결합하지 않으며,

[1163] $R_{341} \sim R_{347}$ 중 인접한 2개 이상으로 이루어지는 조의 1조 이상이,

[1164] 서로 결합하여 치환 혹은 무치환의 단환을 형성하거나,

[1165] 서로 결합하여 치환 혹은 무치환의 축합환을 형성하거나, 또는

[1166] 서로 결합하지 않고,

[1167] 상기 단환을 형성하지 않고, 또한 상기 축합환을 형성하지 않는 $R_{321} \sim R_{327}$ 및 $R_{341} \sim R_{347}$ 은, 각각 독립적으로

[1168] 수소 원자,

[1169] 치환 혹은 무치환의 탄소수 1~50의 알킬기,

[1170] 치환 혹은 무치환의 탄소수 2~50의 알케닐기,

[1171] 치환 혹은 무치환의 탄소수 2~50의 알키닐기,

[1172] 치환 혹은 무치환의 고리 형성 탄소수 3~50의 시클로알킬기,

[1173] $-\text{Si}(R_{901})(R_{902})(R_{903})$ 으로 표시되는 기,

[1174] $-\text{O}(R_{904})$ 로 표시되는 기,

[1175] $-\text{S}(R_{905})$ 로 표시되는 기,

[1176] $-\text{N}(R_{906})(R_{907})$ 로 표시되는 기,

[1177] 할로젠 원자,

[1178] 시아노기,

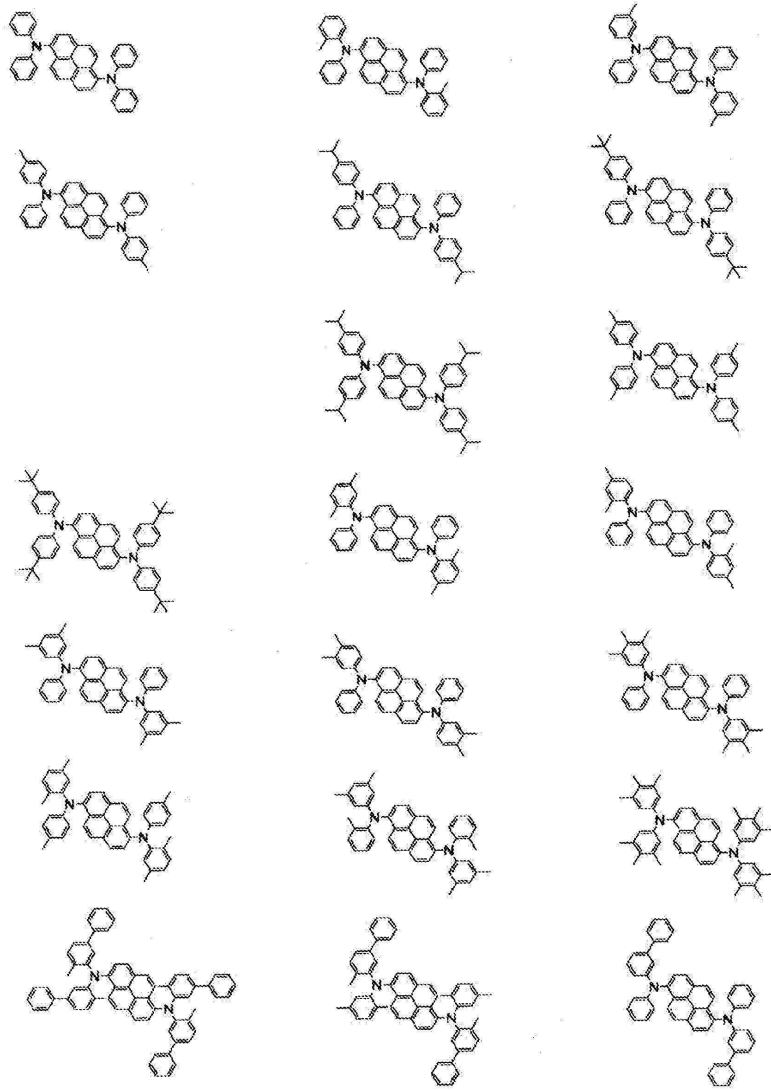
[1179] 니트로기,

[1180] 치환 혹은 무치환의 고리 형성 탄소수 6~50의 아릴기, 또는

[1181] 치환 혹은 무치환의 고리 형성 원자수 5~50의 복소환기이고,

- [1182] $R_{331} \sim R_{335}$ 및 $R_{351} \sim R_{355}$ 는, 각각 독립적으로
- [1183] 수소 원자,
- [1184] 치환 혹은 무치환의 탄소수 1~50의 알킬기,
- [1185] 치환 혹은 무치환의 탄소수 2~50의 알케닐기,
- [1186] 치환 혹은 무치환의 탄소수 2~50의 알키닐기,
- [1187] 치환 혹은 무치환의 고리 형성 탄소수 3~50의 시클로알킬기,
- [1188] $-\text{Si}(R_{901})(R_{902})(R_{903})$ 으로 표시되는 기,
- [1189] $-\text{O}(R_{904})$ 로 표시되는 기,
- [1190] $-\text{S}(R_{905})$ 로 표시되는 기,
- [1191] $-\text{N}(R_{906})(R_{907})$ 로 표시되는 기,
- [1192] 할로젠 원자,
- [1193] 시아노기,
- [1194] 니트로기,
- [1195] 치환 혹은 무치환의 고리 형성 탄소수 6~50의 아릴기, 또는
- [1196] 치환 혹은 무치환의 고리 형성 원자수 5~50의 복소환기이다.)
- [1197] 상기 일반식 (3)으로 표시되는 화합물로서는, 예컨대 이하에 나타내는 화합물을 구체예로서 들 수 있다.

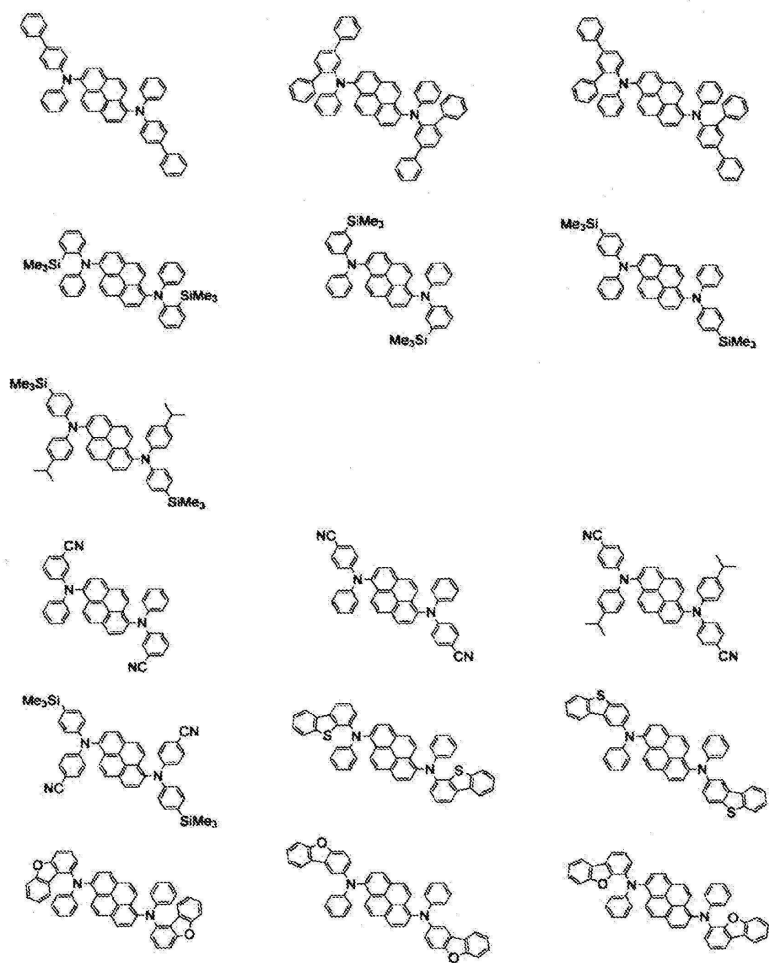
[1198] [화학식 76]



[1199]

[1200]

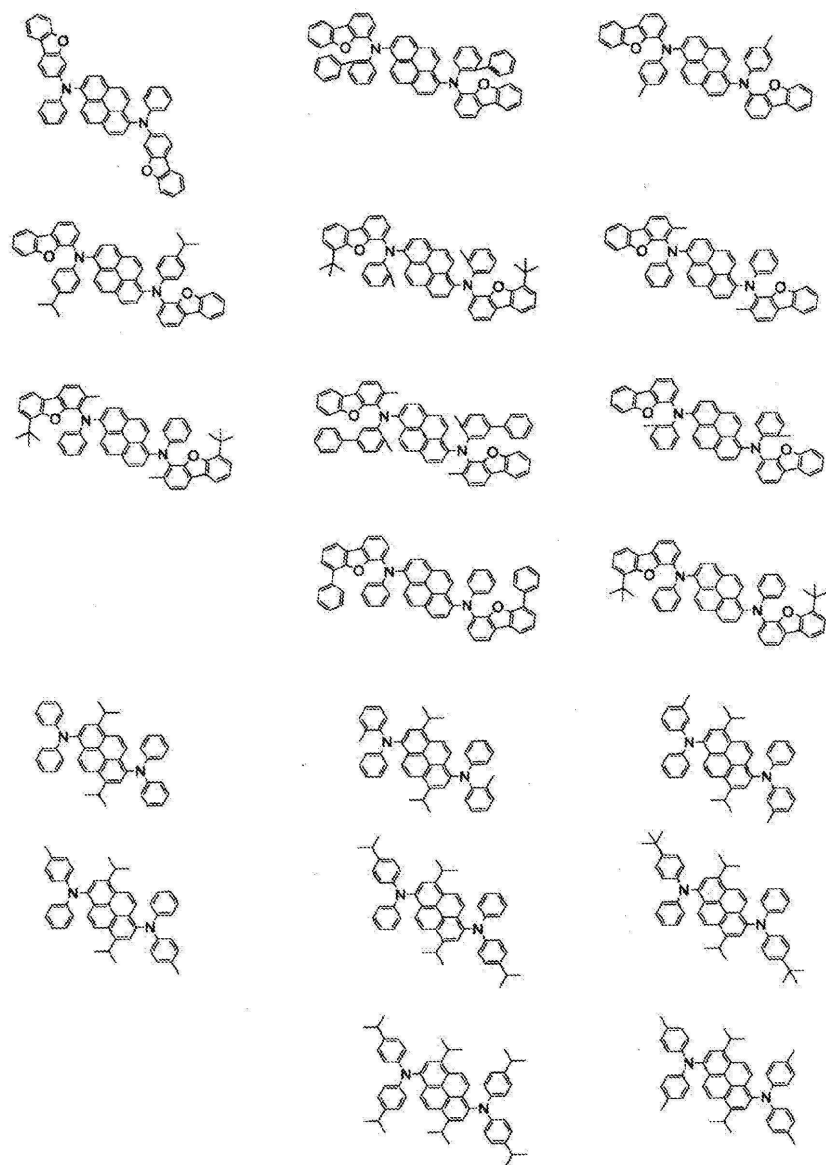
[화학식 77]



[1201]

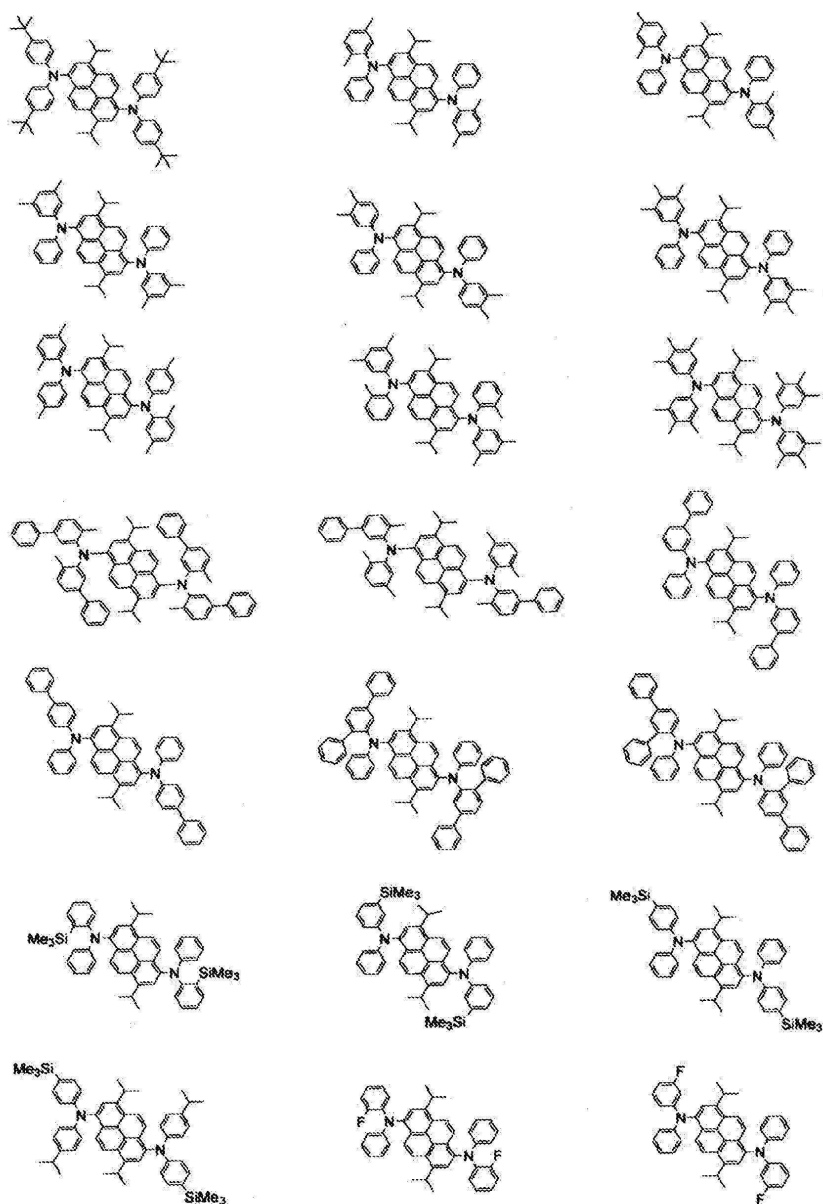
[1202]

[화학식 78]



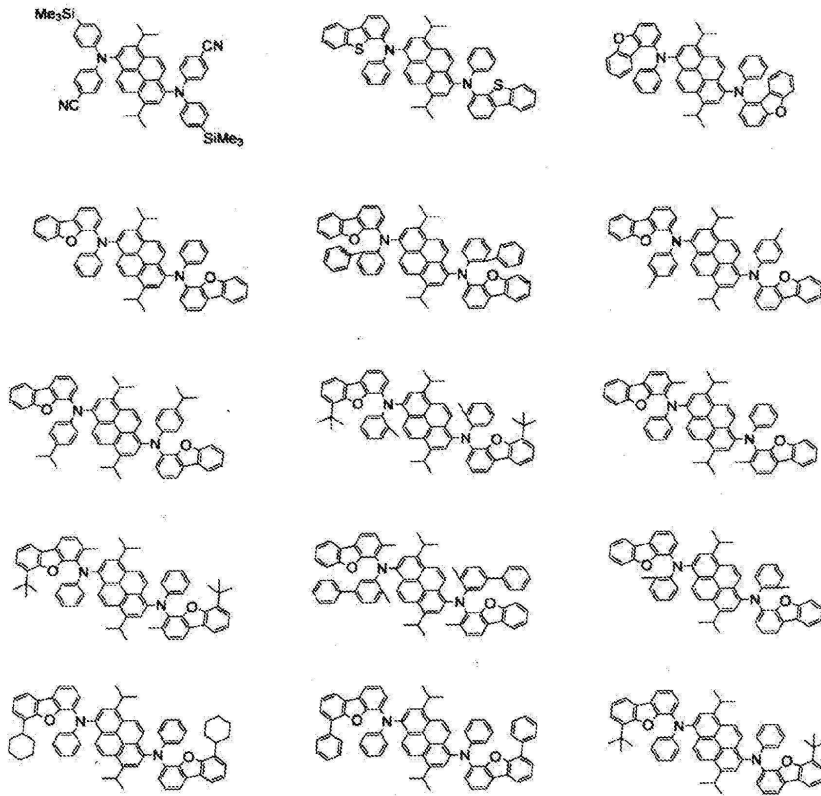
[1203]

[1204] [화학식 79]



[1205]

[1206] [화학식 80]

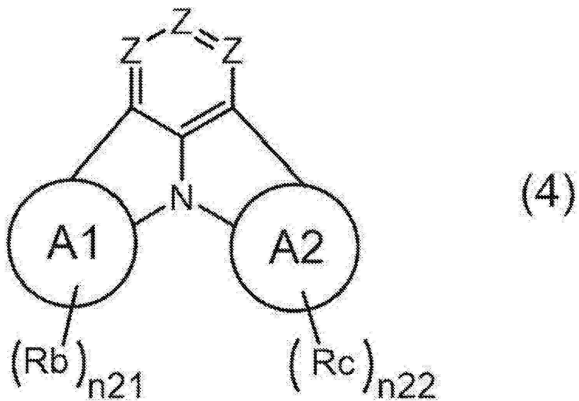


[1207]

[1208] (일반식 (4)로 표시되는 화합물)

[1209] 일반식 (4)로 표시되는 화합물에 대해서 설명한다.

[1210] [화학식 81]



[1211]

[1212] (상기 일반식 (4)에 있어서,

[1213] Z는, 각각 독립적으로 CRa 또는 질소 원자이며,

[1214] A1 고리 및 A2 고리는, 각각 독립적으로

[1215] 치환 혹은 무치환의 고리 형성 탄소수 6~50의 방향족 탄화수소환, 또는

[1216] 치환 혹은 무치환의 고리 형성 원자수 5~50의 복소환이고,

[1217] Ra가 복수 존재하는 경우, 복수의 Ra 중의 인접한 2개 이상으로 이루어지는 조의 1조 이상이,

[1218] 서로 결합하여 치환 혹은 무치환의 단환을 형성하거나,

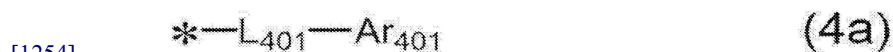
- [1219] 서로 결합하여 치환 혹은 무치환의 축합환을 형성하거나, 또는
- [1220] 서로 결합하지 않으며,
- [1221] n21 및 n22는, 각각 독립적으로 0, 1, 2, 3 또는 4이고,
- [1222] Rb가 복수 존재하는 경우, 복수의 Rb 중의 인접한 2개 이상으로 이루어지는 조의 1조 이상이,
- [1223] 서로 결합하여 치환 혹은 무치환의 단환을 형성하거나,
- [1224] 서로 결합하여 치환 혹은 무치환의 축합환을 형성하거나, 또는
- [1225] 서로 결합하지 않으며,
- [1226] Rc가 복수 존재하는 경우, 복수의 Rc 중의 인접한 2개 이상으로 이루어지는 조의 1조 이상이,
- [1227] 서로 결합하여 치환 혹은 무치환의 단환을 형성하거나,
- [1228] 서로 결합하여 치환 혹은 무치환의 축합환을 형성하거나, 또는
- [1229] 서로 결합하지 않고,
- [1230] 상기 단환을 형성하지 않고, 또한 상기 축합환을 형성하지 않는 Ra, Rb 및 Rc는, 각각 독립적으로
- [1231] 치환 혹은 무치환의 탄소수 1~50의 알킬기,
- [1232] 치환 혹은 무치환의 탄소수 2~50의 알케닐기,
- [1233] 치환 혹은 무치환의 탄소수 2~50의 알키닐기,
- [1234] 치환 혹은 무치환의 고리 형성 탄소수 3~50의 시클로알킬기,
- [1235] -Si(R₉₀₁)(R₉₀₂)(R₉₀₃)으로 표시되는 기,
- [1236] -O-(R₉₀₄)로 표시되는 기,
- [1237] -S-(R₉₀₅)로 표시되는 기,
- [1238] -N(R₉₀₆)(R₉₀₇)로 표시되는 기,
- [1239] 할로젠 원자,
- [1240] 시아노기,
- [1241] 니트로기,
- [1242] 치환 혹은 무치환의 고리 형성 탄소수 6~50의 아릴기, 또는
- [1243] 치환 혹은 무치환의 고리 형성 원자수 5~50의 복소환기이다.)
- [1244] A1 고리 및 A2 고리의 「방향족 탄화수소환」은, 전술한 「아릴기」에 수소 원자를 도입한 화합물과 동일한 구조이다.
- [1245] A1 고리 및 A2 고리의 「방향족 탄화수소환」은, 상기 일반식 (4) 중앙의 축합 2환 구조 상의 탄소 원자 2개를 고리 형성 원자로서 포함한다.
- [1246] 「치환 혹은 무치환의 고리 형성 탄소수 6~50의 방향족 탄화수소환」의 구체예로서는, 구체예군 G1에 기재된 「아릴기」에 수소 원자를 도입한 화합물 등을 들 수 있다.
- [1247] A1 고리 및 A2 고리의 「복소환」은, 전술한 「복소환기」에 수소 원자를 도입한 화합물과 동일한 구조이다.
- [1248] A1 고리 및 A2 고리의 「복소환」은, 상기 일반식 (4) 중앙의 축합 2환 구조 상의 탄소 원자 2개를 고리 형성 원자로서 포함한다.
- [1249] 「치환 혹은 무치환의 고리 형성 원자수 5~50의 복소환」의 구체예로서는, 구체예군 G2에 기재된 「복소환기」에 수소 원자를 도입한 화합물 등을 들 수 있다.

[1250] Rb는 A1 고리로서의 방향족 탄화수소환을 형성하는 탄소 원자의 어느 하나, 또는, A1 고리로서의 복소환을 형성하는 원자의 어느 하나에 결합한다.

[1251] Rc는 A2 고리로서의 방향족 탄화수소환을 형성하는 탄소 원자의 어느 하나, 또는, A2 고리로서의 복소환을 형성하는 원자의 어느 하나에 결합한다.

[1252] Ra, Rb 및 Rc 중, 적어도 하나가, 하기 일반식 (4a)로 표시되는 기인 것이 바람직하고, 적어도 2개가, 하기 일반식 (4a)로 표시되는 기인 것이 보다 바람직하다.

[1253] [화학식 82]



[1255] (상기 일반식 (4a)에 있어서,

[1256] L₄₀₁은

[1257] 단일 결합,

[1258] 치환 혹은 무치환의 고리 형성 탄소수 6~30의 아틸렌기, 또는

[1259] 치환 혹은 무치환의 고리 형성 원자수 5~30의 2가의 복소환기이고,

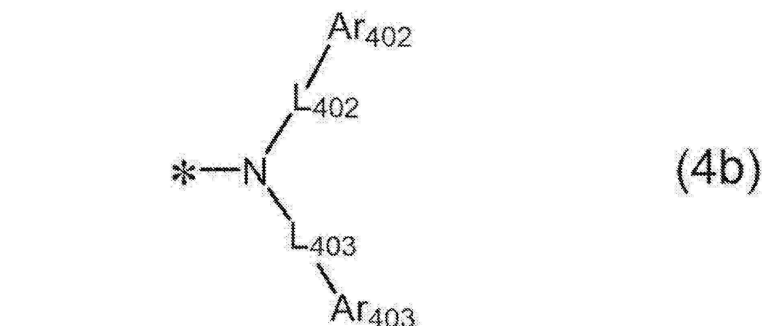
[1260] Ar₄₀₁은

[1261] 치환 혹은 무치환의 고리 형성 탄소수 6~50의 아틸기,

[1262] 치환 혹은 무치환의 고리 형성 원자수 5~50의 복소환기, 또는

[1263] 하기 일반식 (4b)로 표시되는 기이다.)

[1264] [화학식 83]



[1266] (상기 일반식 (4b)에 있어서,

[1267] L₄₀₂ 및 L₄₀₃은, 각각 독립적으로

[1268] 단일 결합,

[1269] 치환 혹은 무치환의 고리 형성 탄소수 6~30의 아틸렌기, 또는

[1270] 치환 혹은 무치환의 고리 형성 원자수 5~30의 2가의 복소환기이고,

[1271] Ar₄₀₂ 및 Ar₄₀₃으로 이루어지는 조는

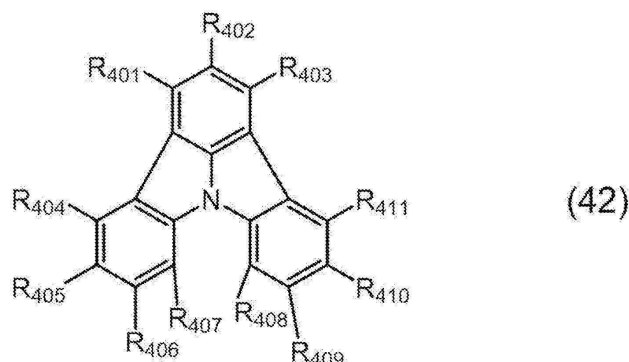
[1272] 서로 결합하여 치환 혹은 무치환의 단환을 형성하거나,

[1273] 서로 결합하여 치환 혹은 무치환의 축합환을 형성하거나, 또는

[1274] 서로 결합하지 않으며,

[1275] 상기 단환을 형성하지 않고, 또한 상기 축합환을 형성하지 않는 Ar₄₀₂ 및 Ar₄₀₃은, 각각 독립적으로

- [1276] 치환 혹은 무치환의 고리 형성 탄소수 6~50의 아릴기, 또는
- [1277] 치환 혹은 무치환의 고리 형성 원자수 5~50의 복소환기이다.)
- [1278] 일 실시형태에 있어서, 상기 일반식 (4)로 표시되는 화합물은 하기 일반식 (42)로 표시된다.
- [1279] [화학식 84]

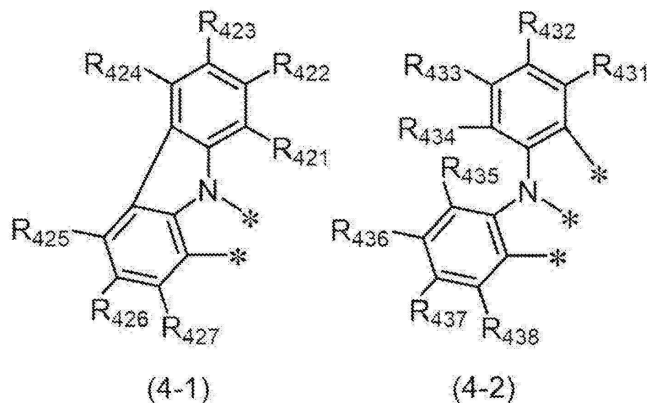


- [1280]
- [1281] (상기 일반식 (42)에 있어서,
- [1282] $R_{401} \sim R_{411}$ 중의 인접한 2개 이상으로 이루어지는 조의 1조 이상이,
- [1283] 서로 결합하여 치환 혹은 무치환의 단환을 형성하거나,
- [1284] 서로 결합하여 치환 혹은 무치환의 축합환을 형성하거나, 또는
- [1285] 서로 결합하지 않으며,
- [1286] 상기 단환을 형성하지 않고, 또한 상기 축합환을 형성하지 않는 $R_{401} \sim R_{411}$ 은, 각각 독립적으로
- [1287] 수소 원자,
- [1288] 치환 혹은 무치환의 탄소수 1~50의 알킬기,
- [1289] 치환 혹은 무치환의 탄소수 2~50의 알케닐기,
- [1290] 치환 혹은 무치환의 탄소수 2~50의 알키닐기,
- [1291] 치환 혹은 무치환의 고리 형성 탄소수 3~50의 시클로알킬기,
- [1292] $-\text{Si}(R_{901})(R_{902})(R_{903})$ 으로 표시되는 기,
- [1293] $-\text{O}(R_{904})$ 로 표시되는 기,
- [1294] $-\text{S}(R_{905})$ 로 표시되는 기,
- [1295] $-\text{N}(R_{906})(R_{907})$ 로 표시되는 기,
- [1296] 할로젠 원자,
- [1297] 시아노기,
- [1298] 니트로기,
- [1299] 치환 혹은 무치환의 고리 형성 탄소수 6~50의 아릴기, 또는
- [1300] 치환 혹은 무치환의 고리 형성 원자수 5~50의 복소환기이다.)
- [1301] $R_{401} \sim R_{411}$ 중, 적어도 하나가, 상기 일반식 (4a)로 표시되는 기인 것이 바람직하고, 적어도 2개가 상기 일반식 (4a)로 표시되는 기인 것이 보다 바람직하다.
- [1302] R_{404} 및 R_{411} 이 상기 일반식 (4a)로 표시되는 기인 것이 바람직하다.

[1303] 일 실시형태에 있어서, 상기 일반식 (4)로 표시되는 화합물은, A1 고리에 하기 일반식 (4-1) 또는 일반식 (4-2)로 표시되는 구조가 결합한 화합물이다.

[1304] 또한, 일 실시형태에 있어서, 상기 일반식 (42)로 표시되는 화합물은, $R_{404} \sim R_{407}$ 이 결합하는 고리에 하기 일반식 (4-1) 또는 일반식 (4-2)로 표시되는 구조가 결합한 화합물이다.

[1305] [화학식 85]



[1306]

[1307] (상기 일반식 (4-1)에 있어서, 2개의 *는, 각각 독립적으로 상기 일반식 (4)의 A1 고리로서의 방향족 탄화수소환의 고리 형성 탄소 원자 혹은 복소환의 고리 형성 원자와 결합하거나, 또는 상기 일반식 (42)의 $R_{404} \sim R_{407}$ 중 어느 하나와 결합하고,

[1308] 상기 일반식 (4-2)의 3개의 *는, 각각 독립적으로 상기 일반식 (4)의 A1 고리로서의 방향족 탄화수소환의 고리 형성 탄소 원자 혹은 복소환의 고리 형성 원자와 결합하거나 또는 상기 일반식 (42)의 $R_{404} \sim R_{407}$ 중 어느 하나와 결합하며,

[1309] $R_{421} \sim R_{427}$ 중의 인접한 2개 이상으로 이루어지는 조의 1조 이상이,

[1310] 서로 결합하여 치환 혹은 무치환의 단환을 형성하거나,

[1311] 서로 결합하여 치환 혹은 무치환의 축합환을 형성하거나, 또는

[1312] 서로 결합하지 않고,

[1313] $R_{431} \sim R_{438}$ 중의 인접한 2개 이상으로 이루어지는 조의 1조 이상이,

[1314] 서로 결합하여 치환 혹은 무치환의 단환을 형성하거나,

[1315] 서로 결합하여 치환 혹은 무치환의 축합환을 형성하거나, 또는

[1316] 서로 결합하지 않으며,

[1317] 상기 단환을 형성하지 않고, 또한 상기 축합환을 형성하지 않는 $R_{421} \sim R_{427}$ 및 $R_{431} \sim R_{438}$ 은, 각각 독립적으로

[1318] 수소 원자,

[1319] 치환 혹은 무치환의 탄소수 1~50의 알킬기,

[1320] 치환 혹은 무치환의 탄소수 2~50의 알케닐기,

[1321] 치환 혹은 무치환의 탄소수 2~50의 알키닐기,

[1322] 치환 혹은 무치환의 고리 형성 탄소수 3~50의 시클로알킬기,

[1323] $-\text{Si}(\text{R}_{901})(\text{R}_{902})(\text{R}_{903})$ 으로 표시되는 기,

[1324] $-\text{O}-(\text{R}_{904})$ 로 표시되는 기,

[1325] -S-(R₉₀₅)로 표시되는 기,

[1326] -N(R₉₀₆)(R₉₀₇)로 표시되는 기,

[1327] 할로겐 원자,

[1328] 시아노기,

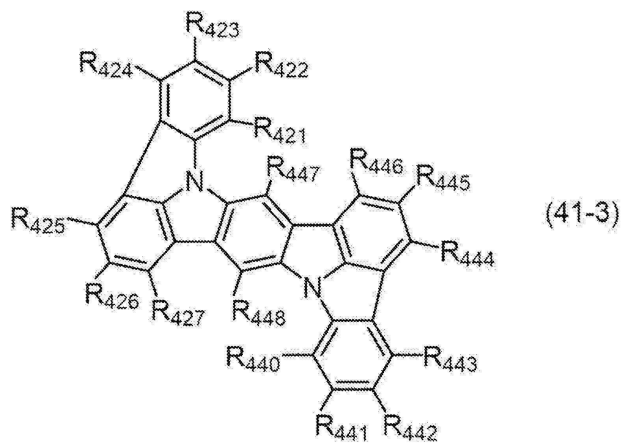
[1329] 니트로기,

[1330] 치환 혹은 무치환의 고리 형성 탄소수 6~50의 아릴기, 또는

[1331] 치환 혹은 무치환의 고리 형성 원자수 5~50의 복소환기이다.)

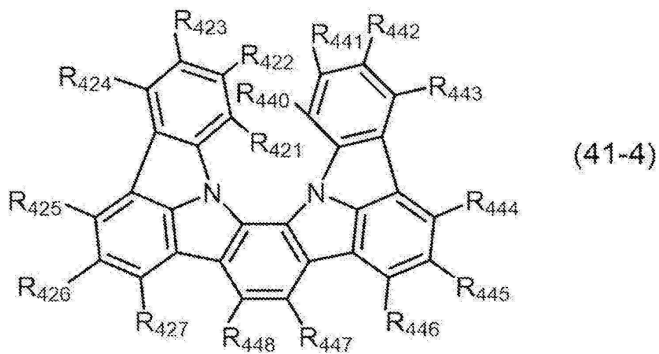
[1332] 일 실시형태에 있어서는, 상기 일반식 (4)로 표시되는 화합물은, 하기 일반식 (41-3), 일반식 (41-4) 또는 일반식 (41-5)로 표시되는 화합물이다.

[1333] [화학식 86]



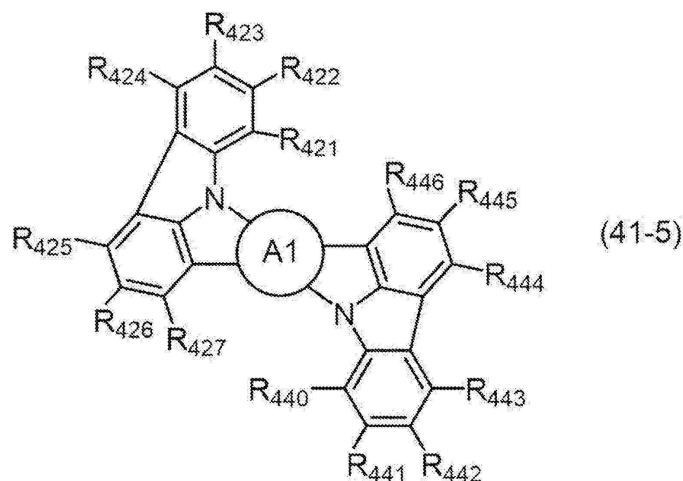
[1334]

[1335] [화학식 87]



[1336]

[1337] [화학식 88]



[1338]

[1339] (상기 일반식 (41-3), 일반식 (41-4) 및 일반식 (41-5) 중,

[1340] A1 고리는 상기 일반식 (4)에서 정의한 바와 같고,

[1341] R₄₂₁~R₄₂₇은, 각각 독립적으로 상기 일반식 (4-1)에 있어서의 R₄₂₁~R₄₂₇과 동일한 의미이며,

[1342] R₄₄₀~R₄₄₈은, 각각 독립적으로 상기 일반식 (42)에 있어서의 R₄₀₁~R₄₁₁과 동일한 의미이다.)

[1343] 일 실시형태에 있어서는, 상기 일반식 (41-5)의 A1 고리로서의 치환 혹은 무치환의 고리 형성 탄소수 6~50의 방향족 탄화수소환은,

[1344] 치환 혹은 무치환의 나프탈렌환, 또는

[1345] 치환 혹은 무치환의 플루오렌환이다.

[1346] 일 실시형태에 있어서는, 상기 일반식 (41-5)의 A1 고리로서의 치환 혹은 무치환의 고리 형성 원자수 5~50의 복소환은,

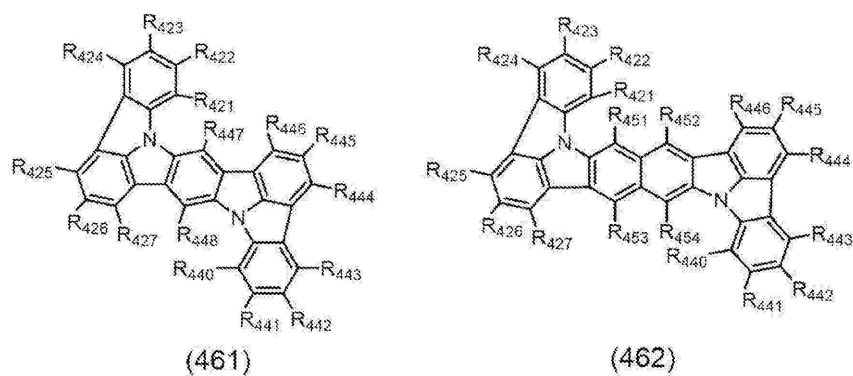
[1347] 치환 혹은 무치환의 디벤조푸란환,

[1348] 치환 혹은 무치환의 카르바졸환, 또는

[1349] 치환 혹은 무치환의 디벤조티오환이다.

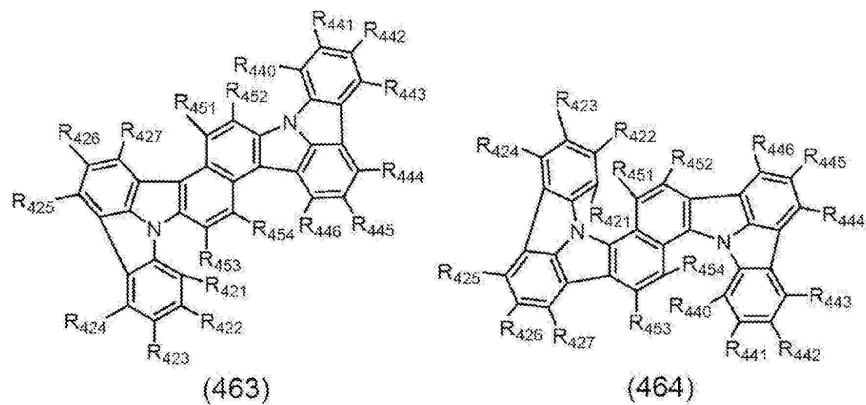
[1350] 일 실시형태에 있어서는, 상기 일반식 (4) 또는 상기 일반식 (42)로 표시되는 화합물은, 하기 일반식 (461)~일반식 (467)로 표시되는 화합물로 이루어진 군으로부터 선택된다.

[1351] [화학식 89]



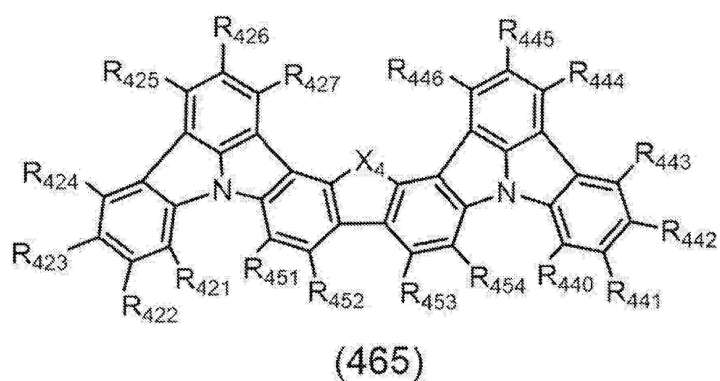
[1352]

[1353] [화학식 90]



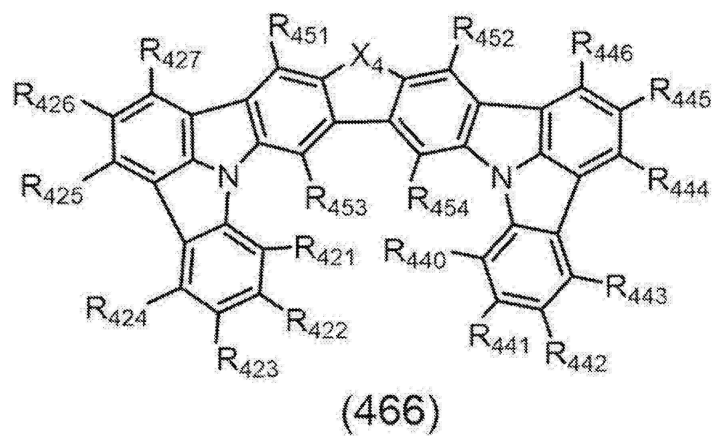
[1354]

[1355] [화학식 91]



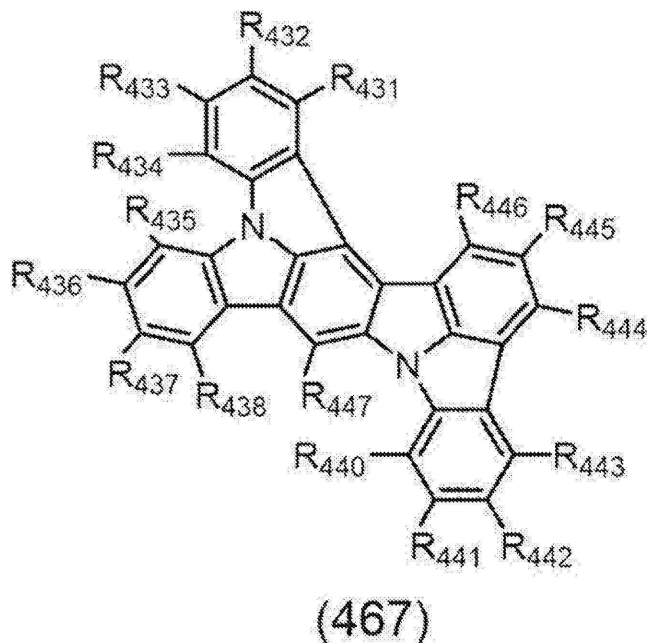
[1356]

[1357] [화학식 92]



[1358]

[1359] [화학식 93]



[1360]

[1361] (상기 일반식 (461), 일반식 (462), 일반식 (463), 일반식 (464), 일반식 (465), 일반식 (466) 및 일반식 (467) 중,

[1362] $R_{421} \sim R_{427}$ 은, 각각 독립적으로 상기 일반식 (4-1)에 있어서의 $R_{421} \sim R_{427}$ 과 동일한 의미이고,

[1363] $R_{431} \sim R_{438}$ 은, 각각 독립적으로 상기 일반식 (4-2)에 있어서의 $R_{431} \sim R_{438}$ 과 동일한 의미이며,

[1364] $R_{440} \sim R_{448}$ 및 $R_{451} \sim R_{454}$ 는, 각각 독립적으로 상기 일반식 (42)에 있어서의 $R_{401} \sim R_{411}$ 과 동일한 의미이고,

[1365] X_4 는 산소 원자, NR_{801} , 또는 $C(R_{802})(R_{803})$ 이며,

[1366] R_{801} , R_{802} 및 R_{803} 은, 각각 독립적으로

[1367] 수소 원자,

[1368] 치환 혹은 무치환의 탄소수 1~50의 알킬기,

[1369] 치환 혹은 무치환의 고리 형성 탄소수 3~50의 시클로알킬기,

[1370] 치환 혹은 무치환의 고리 형성 탄소수 6~50의 아릴기, 또는

[1371] 치환 혹은 무치환의 고리 형성 원자수 5~50의 복소환기이고,

[1372] 바람직하게는, 치환 혹은 무치환의 탄소수 1~50의 알킬기, 또는

[1373] 치환 혹은 무치환의 고리 형성 탄소수 6~50의 아릴기이며,

[1374] R_{801} 이 복수 존재하는 경우, 복수의 R_{801} 은 서로 동일하거나 또는 상이하고,

[1375] R_{802} 가 복수 존재하는 경우, 복수의 R_{802} 는 서로 동일하거나 또는 상이하며,

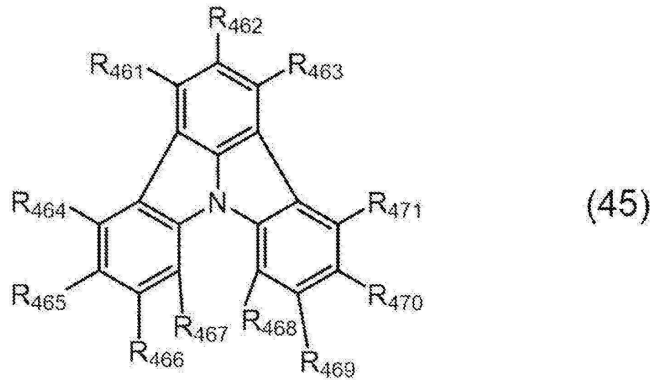
[1376] R_{803} 이 복수 존재하는 경우, 복수의 R_{803} 은 서로 동일하거나 또는 상이하다.)

[1377] 일 실시형태에 있어서, 상기 일반식 (42)로 표시되는 화합물은, $R_{401} \sim R_{411}$ 중의 인접한 2개 이상으로 이루어지는 조의 1조 이상이, 서로 결합하여 치환 혹은 무치환의 단환을 형성하거나, 또는 서로 결합하여 치환 혹은 무치환의 축합환을 형성하고, 해당 실시형태에 대해서, 이하 일반식 (45)로 표시되는 화합물로서 상세히 설명한다.

[1378] (일반식 (45)로 표시되는 화합물)

[1379] 일반식 (45)로 표시되는 화합물에 대해서 설명한다.

[1380] [화학식 94]



[1381]

[1382] (상기 일반식 (45)에 있어서,

[1383] R_{461} 과 R_{462} 로 이루어지는 조, R_{462} 와 R_{463} 으로 이루어지는 조, R_{464} 와 R_{465} 로 이루어지는 조, R_{465} 와 R_{466} 으로 이루어지는 조, R_{466} 과 R_{467} 로 이루어지는 조, R_{468} 과 R_{469} 로 이루어지는 조, R_{469} 와 R_{470} 으로 이루어지는 조, 및, R_{470} 과 R_{471} 로 이루어지는 조로 이루어진 군으로부터 선택되는 조 중 2 이상은 서로 결합하여 치환 혹은 무치환의 단환 또는 치환 혹은 무치환의 축합환을 형성하고,

[1384] 단,

[1385] R_{461} 과 R_{462} 로 이루어지는 조 및 R_{462} 와 R_{463} 으로 이루어지는 조;

[1386] R_{464} 와 R_{465} 로 이루어지는 조 및 R_{465} 와 R_{466} 으로 이루어지는 조;

[1387] R_{465} 와 R_{466} 으로 이루어지는 조 및 R_{466} 과 R_{467} 로 이루어지는 조;

[1388] R_{468} 과 R_{469} 로 이루어지는 조 및 R_{469} 와 R_{470} 으로 이루어지는 조; 및

[1389] R_{469} 와 R_{470} 으로 이루어지는 조 및 R_{470} 과 R_{471} 로 이루어지는 조가, 동시에 고리를 형성하는 일은 없으며,

[1390] $R_{461} \sim R_{471}$ 이 형성하는 2개 이상의 고리는, 서로 동일하거나 또는 상이하고,

[1391] 상기 단환을 형성하지 않고, 또한 상기 축합환을 형성하지 않는 $R_{461} \sim R_{471}$ 은, 각각 독립적으로

[1392] 수소 원자,

[1393] 치환 혹은 무치환의 탄소수 1~50의 알킬기,

[1394] 치환 혹은 무치환의 탄소수 2~50의 알케닐기,

[1395] 치환 혹은 무치환의 탄소수 2~50의 알키닐기,

[1396] 치환 혹은 무치환의 고리 형성 탄소수 3~50의 시클로알킬기,

[1397] $-\text{Si}(\text{R}_{901})(\text{R}_{902})(\text{R}_{903})$ 으로 표시되는 기,

[1398] $-\text{O}(\text{R}_{904})$ 로 표시되는 기,

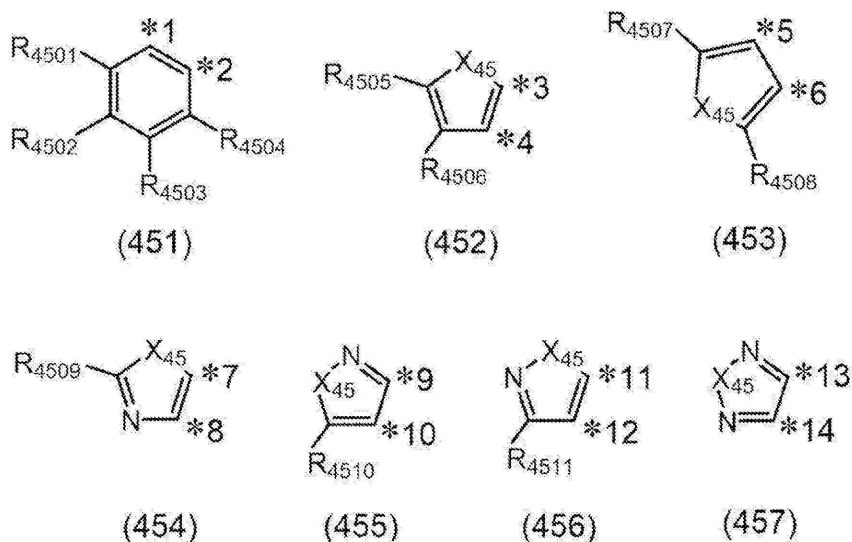
[1399] $-\text{S}(\text{R}_{905})$ 로 표시되는 기,

[1400] $-\text{N}(\text{R}_{906})(\text{R}_{907})$ 로 표시되는 기,

[1401] 할로겐 원자,

[1402] 시아노기,

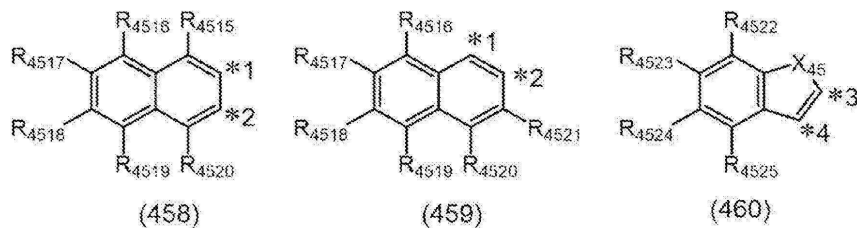
- [1403] 니트로기,
- [1404] 치환 혹은 무치환의 고리 형성 탄소수 6~50의 아릴기, 또는
- [1405] 치환 혹은 무치환의 고리 형성 원자수 5~50의 복소환기이다.)
- [1406] 상기 일반식 (45)에 있어서, R_n 과 R_{n+1} (n 은 461, 462, 464~466, 및 468~470으로부터 선택되는 정수를 나타냄)은 서로 결합하여 R_n 과 R_{n+1} 이 결합하는 2개의 고리 형성 탄소 원자와 함께 치환 혹은 무치환의 단환 또는 치환 혹은 무치환의 축합환을 형성한다. 해당 고리는, 바람직하게는, 탄소 원자, 산소 원자, 황 원자 및 질소 원자로 이루어진 군으로부터 선택되는 원자로 구성되고, 상기 고리의 원자수는, 바람직하게는 3~7이며, 보다 바람직하게는 5 또는 6이다.
- [1407] 상기 일반식 (45)로 표시되는 화합물에 있어서의 상기한 고리 구조의 수는, 예컨대 2개, 3개, 또는 4개이다. 2개 이상의 고리 구조는, 각각 상기 일반식 (45)의 모골격 상의 동일한 벤젠환 상에 존재하여도 좋고, 상이한 벤젠환 상에 존재하여도 좋다. 예컨대, 고리 구조를 3개 갖는 경우, 상기 일반식 (45)의 3개의 벤젠환의 각각에 하나씩 고리 구조가 존재하여도 좋다.
- [1408] 상기 일반식 (45)로 표시되는 화합물에 있어서의 상기한 고리 구조로서는, 예컨대 하기 일반식 (451)~(460)으로 표시되는 구조 등을 들 수 있다.
- [1409] [화학식 95]



- [1410]
- [1411] (상기 일반식 (451)~(457)에 있어서,
- [1412] *1과 *2, *3과 *4, *5와 *6, *7과 *8, *9와 *10, *11과 *12 및 *13과 *14의 각각은, R_n 과 R_{n+1} 이 결합하는 상기 2개의 고리 형성 탄소 원자를 나타내고,
- [1413] R_n 이 결합하는 고리 형성 탄소 원자는, *1과 *2, *3과 *4, *5와 *6, *7과 *8, *9와 *10, *11과 *12 및 *13과 *14가 나타내는 2개의 고리 형성 탄소 원자의 어느 쪽이어도 좋으며,
- [1414] X_{45} 는 $C(R_{4512})(R_{4513})$, NR_{4514} , 산소 원자 또는 황 원자이고,
- [1415] R_{4501} ~ R_{4506} 및 R_{4512} ~ R_{4513} 중의 인접한 2개 이상으로 이루어지는 조의 1조 이상이,
- [1416] 서로 결합하여 치환 혹은 무치환의 단환을 형성하거나,
- [1417] 서로 결합하여 치환 혹은 무치환의 축합환을 형성하거나, 또는
- [1418] 서로 결합하지 않으며,
- [1419] 상기 단환을 형성하지 않고, 또한 상기 축합환을 형성하지 않는 R_{4501} ~ R_{4514} 는, 각각 독립적으로 상기 일반식

(45)에 있어서의 $R_{461} \sim R_{471}$ 과 동일한 의미이다.)

[1420] [화학식 96]



[1421]

[1422] (상기 일반식 (458)~(460)에 있어서,

[1423] *1과 *2, 및 *3과 *4의 각각은, R_n 과 R_{n+1} 이 결합하는 상기 2개의 고리 형성 탄소 원자를 나타내고,

[1424] R_n 이 결합하는 고리 형성 탄소 원자는, *1과 *2, 또는 *3과 *4가 나타내는 2개의 고리 형성 탄소 원자의 어느 쪽이어도 좋으며,

[1425] X_{45} 는 $C(R_{4512})(R_{4513})$, NR_{4514} , 산소 원자 또는 황 원자이고,

[1426] $R_{4512} \sim R_{4513}$ 및 $R_{4515} \sim R_{4525}$ 중의 인접한 2개 이상으로 이루어지는 조의 1조 이상이,

[1427] 서로 결합하여 치환 혹은 무치환의 단환을 형성하거나,

[1428] 서로 결합하여 치환 혹은 무치환의 축합환을 형성하거나, 또는

[1429] 서로 결합하지 않으며,

[1430] 상기 단환을 형성하지 않고, 또한 상기 축합환을 형성하지 않는 $R_{4512} \sim R_{4513}$, $R_{4515} \sim R_{4521}$ 및 $R_{4522} \sim R_{4525}$, 및 R_{4514} 는, 각각 독립적으로 상기 일반식 (45)에 있어서의 $R_{461} \sim R_{471}$ 과 동일한 의미이다.)

[1431] 상기 일반식 (45)에 있어서, R_{462} , R_{464} , R_{465} , R_{470} 및 R_{471} 중 적어도 하나(바람직하게는 R_{462} , R_{465} 및 R_{470} 중 적어도 하나, 더욱 바람직하게는 R_{462})가, 고리 구조를 형성하지 않는 기이면 바람직하다.

[1432] (i) 상기 일반식 (45)에 있어서, R_n 과 R_{n+1} 에 의해 형성되는 고리 구조가 치환기를 갖는 경우의 치환기,

[1433] (ii) 상기 일반식 (45)에 있어서, 고리 구조를 형성하지 않는 $R_{461} \sim R_{471}$, 및

[1434] (iii) 상기 일반식 (451)~(460)에 있어서의 $R_{4501} \sim R_{4514}$, $R_{4515} \sim R_{4525}$ 는, 바람직하게는, 각각 독립적으로

[1435] 수소 원자,

[1436] 치환 혹은 무치환의 탄소수 1~50의 알킬기,

[1437] 치환 혹은 무치환의 탄소수 2~50의 알케닐기,

[1438] 치환 혹은 무치환의 탄소수 2~50의 알키닐기,

[1439] 치환 혹은 무치환의 고리 형성 탄소수 3~50의 시클로알킬기,

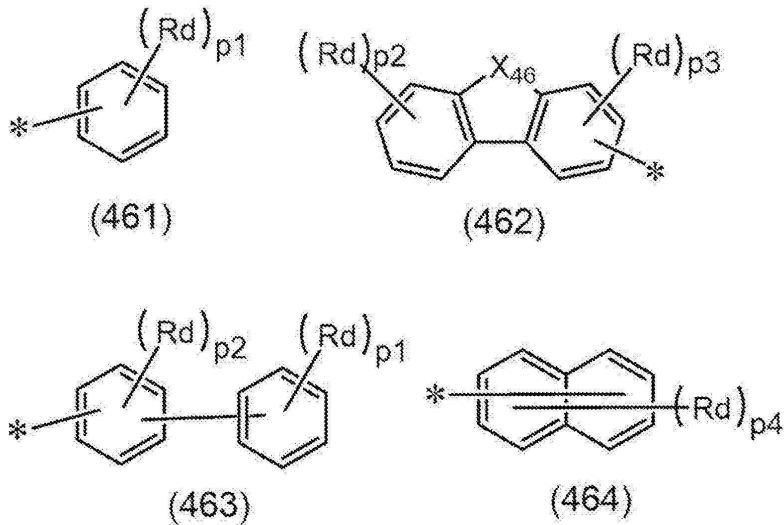
[1440] $-N(R_{906})(R_{907})$ 로 표시되는 기,

[1441] 치환 혹은 무치환의 고리 형성 탄소수 6~50의 아릴기,

[1442] 치환 혹은 무치환의 고리 형성 원자수 5~50의 복소환기, 또는

[1443] 하기 일반식 (461)~일반식 (464)로 표시되는 기로 이루어진 군으로부터 선택되는 기 중 어느 하나이다.

[1444] [화학식 97]



[1445]

[1446] (상기 일반식 (461)~(464) 중,

[1447] R_d 는, 각각 독립적으로

[1448] 수소 원자,

[1449] 치환 혹은 무치환의 탄소수 1~50의 알킬기,

[1450] 치환 혹은 무치환의 탄소수 2~50의 알케닐기,

[1451] 치환 혹은 무치환의 탄소수 2~50의 알키닐기,

[1452] 치환 혹은 무치환의 고리 형성 탄소수 3~50의 시클로알킬기,

[1453] $-\text{Si}(R_{901})(R_{902})(R_{903})$ 으로 표시되는 기,

[1454] $-\text{O}(R_{904})$ 로 표시되는 기,

[1455] $-\text{S}(R_{905})$ 로 표시되는 기,

[1456] $-\text{N}(R_{906})(R_{907})$ 로 표시되는 기,

[1457] 할로겐 원자,

[1458] 시아노기,

[1459] 니트로기,

[1460] 치환 혹은 무치환의 고리 형성 탄소수 6~50의 아릴기, 또는

[1461] 치환 혹은 무치환의 고리 형성 원자수 5~50의 복소환기이고,

[1462] X_{46} 은 $\text{C}(R_{801})(R_{802})$, NR_{803} , 산소 원자 또는 황 원자이며,

[1463] R_{801} , R_{802} 및 R_{803} 은, 각각 독립적으로

[1464] 수소 원자,

[1465] 치환 혹은 무치환의 탄소수 1~50의 알킬기,

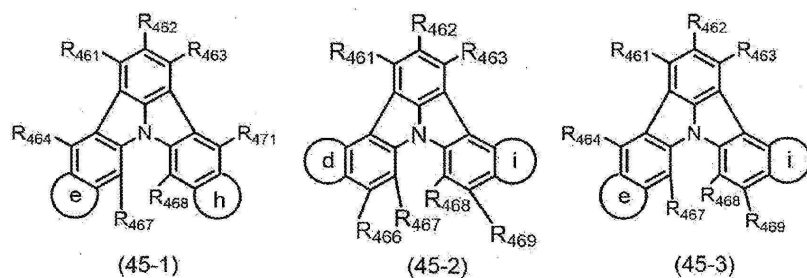
[1466] 치환 혹은 무치환의 고리 형성 탄소수 3~50의 시클로알킬기,

[1467] 치환 혹은 무치환의 고리 형성 탄소수 6~50의 아릴기, 또는

[1468] 치환 혹은 무치환의 고리 형성 원자수 5~50의 복소환기이고,

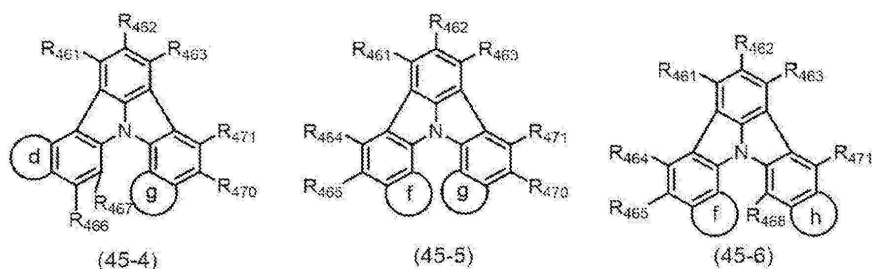
- [1469] 바람직하게는, 치환 혹은 무치환의 탄소수 1~50의 알킬기, 또는
- [1470] 치환 혹은 무치환의 고리 형성 탄소수 6~50의 아릴기이며,
- [1471] R_{801} 이 복수 존재하는 경우, 복수의 R_{801} 은 서로 동일하거나 또는 상이하고,
- [1472] R_{802} 가 복수 존재하는 경우, 복수의 R_{802} 는 서로 동일하거나 또는 상이하며,
- [1473] R_{803} 이 복수 존재하는 경우, 복수의 R_{803} 은 서로 동일하거나 또는 상이하고,
- [1474] p1은 5이며,
- [1475] p2는 4이고,
- [1476] p3은 3이며,
- [1477] p4는 7이고,
- [1478] 상기 일반식 (461)~(464)에서의 *는, 각각 독립적으로 고리 구조와의 결합 위치를 나타낸다.)
- [1479] 발광성 화합물에 있어서, R_{901} ~ R_{907} 은 전술과 같이 정의한 바와 같다.
- [1480] 일 실시형태에 있어서, 상기 일반식 (45)로 표시되는 화합물은, 하기 일반식 (45-1)~(45-6) 중 어느 하나로 표시된다.

[1481] [화학식 98]



[1482]

[1483] [화학식 99]

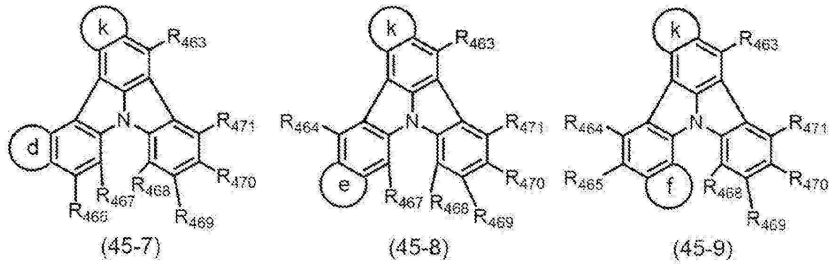


[1484]

- [1485] (상기 일반식 (45-1)~(45-6)에 있어서,
- [1486] 고리 d~i는, 각각 독립적으로 치환 혹은 무치환의 단환 또는 치환 혹은 무치환의 축합환이고,
- [1487] R_{461} ~ R_{471} 은, 각각 독립적으로 상기 일반식 (45)에 있어서의 R_{461} ~ R_{471} 과 동일한 의미이다.)

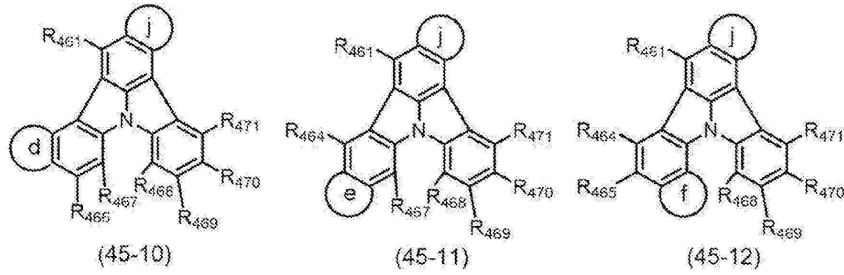
- [1488] 일 실시형태에 있어서, 상기 일반식 (45)로 표시되는 화합물은, 하기 일반식 (45-7)~(45-12) 중 어느 하나로 표시된다.

[1489] [화학식 100]



[1490]

[1491] [화학식 101]



[1492]

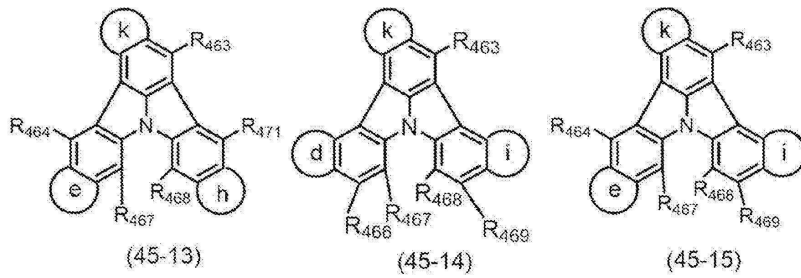
[1493] (상기 일반식 (45-7)~(45-12)에 있어서,

[1494] 고리 d~f, k, j는, 각각 독립적으로 치환 혹은 무치환의 단환 또는 치환 혹은 무치환의 축합환이고,

[1495] R₄₆₁~R₄₇₁은, 각각 독립적으로 상기 일반식 (45)에 있어서의 R₄₆₁~R₄₇₁과 동일한 의미이다.)

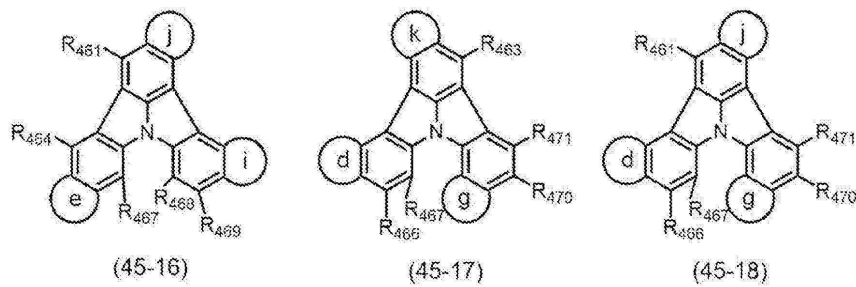
[1496] 일 실시형태에 있어서, 상기 일반식 (45)로 표시되는 화합물은, 하기 일반식 (45-13)~(45-21) 중 어느 하나로 표시된다.

[1497] [화학식 102]



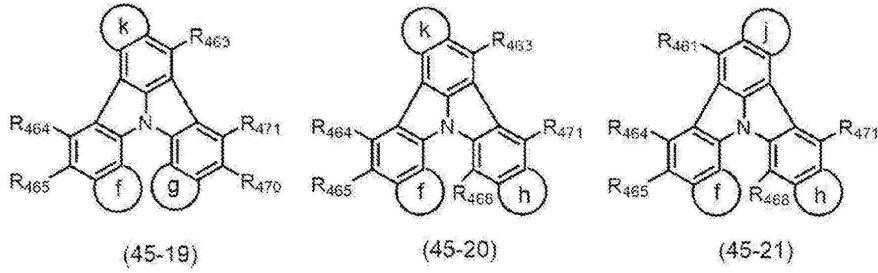
[1498]

[1499] [화학식 103]



[1500]

[1501] [화학식 104]



[1502]

[1503] (상기 일반식 (45-13)~(45-21)에 있어서,

[1504] 고리 d~k는, 각각 독립적으로 치환 혹은 무치환의 단환 또는 치환 혹은 무치환의 축합환이고,

[1505] R461~R471은, 각각 독립적으로 상기 일반식 (45)에 있어서의 R461~R471과 동일한 의미이다.)

[1506] 상기 고리 g 또는 상기 고리 h가 치환기를 더 갖는 경우의 치환기로서는, 예컨대,

[1507] 치환 혹은 무치환의 탄소수 1~50의 알킬기,

[1508] 치환 혹은 무치환의 고리 형성 탄소수 6~50의 아릴기,

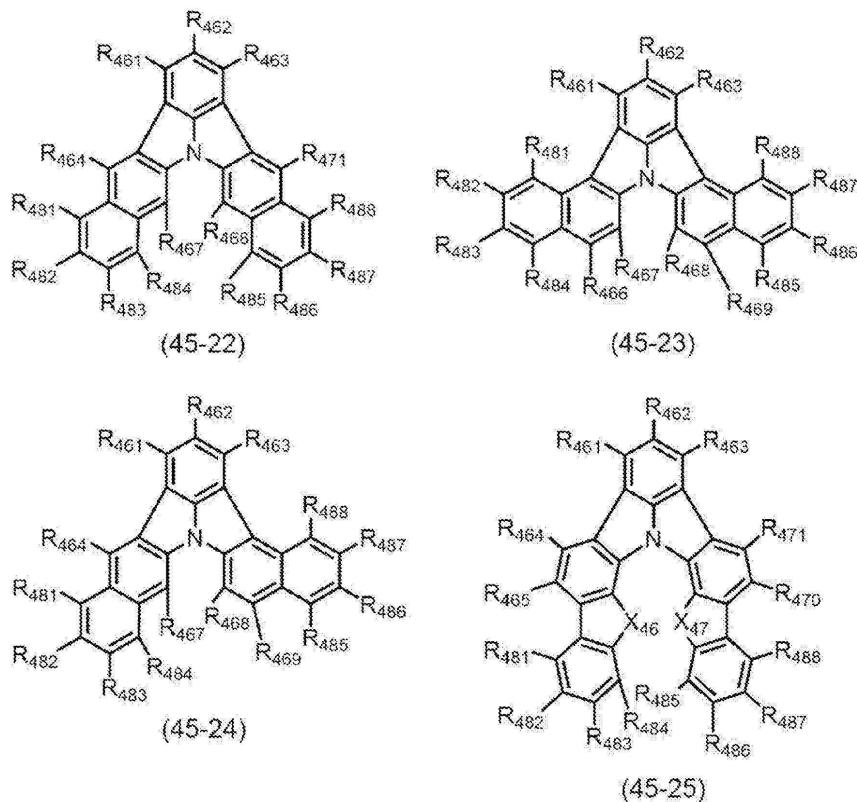
[1509] 상기 일반식 (461)로 표시되는 기,

[1510] 상기 일반식 (463)으로 표시되는 기, 또는

[1511] 상기 일반식 (464)로 표시되는 기를 들 수 있다.

[1512] 일 실시형태에 있어서, 상기 일반식 (45)로 표시되는 화합물은, 하기 일반식 (45-22)~(45-25) 중 어느 하나로 표시된다.

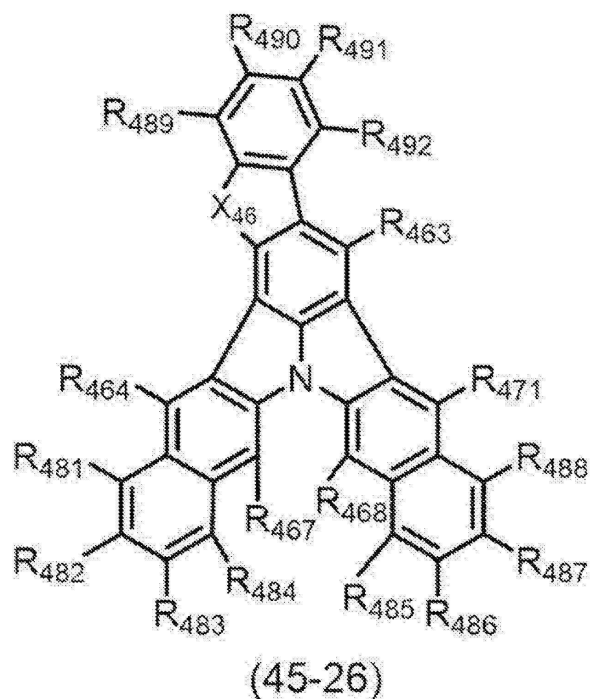
[1513] [화학식 105]



[1514]

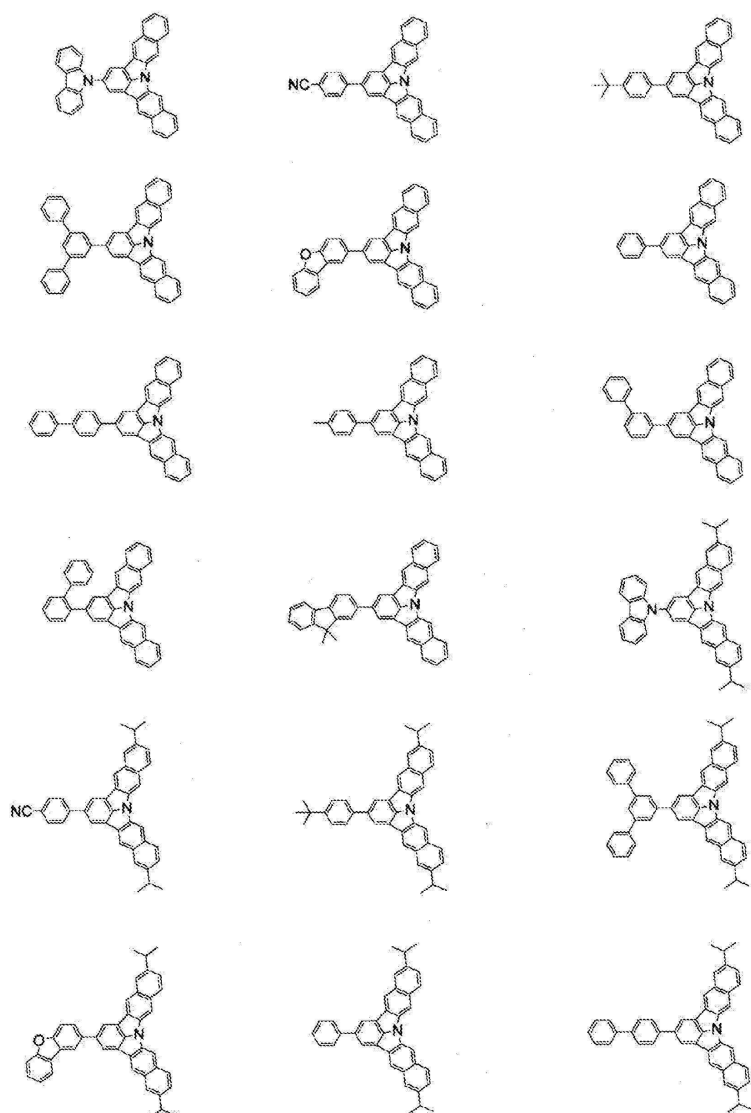
[1515] (상기 일반식 (45-22)~(45-25)에 있어서,

- [1516] X_{46} 및 X_{47} 은, 각각 독립적으로 $C(R_{801})(R_{802})$, NR_{803} , 산소 원자 또는 황 원자이고,
- [1517] $R_{461} \sim R_{471}$ 그리고 $R_{481} \sim R_{488}$ 은, 각각 독립적으로 상기 일반식 (45)에 있어서의 $R_{461} \sim R_{471}$ 과 동일한 의미이다.
- [1518] R_{801} , R_{802} 및 R_{803} 은, 각각 독립적으로
- [1519] 수소 원자,
- [1520] 치환 혹은 무치환의 탄소수 1~50의 알킬기,
- [1521] 치환 혹은 무치환의 고리 형성 탄소수 3~50의 시클로알킬기,
- [1522] 치환 혹은 무치환의 고리 형성 탄소수 6~50의 아릴기, 또는
- [1523] 치환 혹은 무치환의 고리 형성 원자수 5~50의 복소환기이고,
- [1524] 바람직하게는, 치환 혹은 무치환의 탄소수 1~50의 알킬기, 또는
- [1525] 치환 혹은 무치환의 고리 형성 탄소수 6~50의 아릴기이며,
- [1526] R_{801} 이 복수 존재하는 경우, 복수의 R_{801} 은 서로 동일하거나 또는 상이하고,
- [1527] R_{802} 가 복수 존재하는 경우, 복수의 R_{802} 는 서로 동일하거나 또는 상이하며,
- [1528] R_{803} 이 복수 존재하는 경우, 복수의 R_{803} 은 서로 동일하거나 또는 상이하다.)
- [1529] 일 실시형태에 있어서, 상기 일반식 (45)로 표시되는 화합물은, 하기 일반식 (45-26)으로 표시된다.
- [1530] [화학식 106]



- [1531]
- [1532] (상기 일반식 (45-26)에 있어서,
- [1533] X_{46} 은 $C(R_{801})(R_{802})$, NR_{803} , 산소 원자 또는 황 원자이며,
- [1534] R_{463} , R_{464} , R_{467} , R_{468} , R_{471} , 및 $R_{481} \sim R_{492}$ 는, 각각 독립적으로 상기 일반식 (45)에 있어서의 $R_{461} \sim R_{471}$ 과 동일한 의미이다.
- [1535] R_{801} , R_{802} 및 R_{803} 은, 각각 독립적으로
- [1536] 수소 원자,

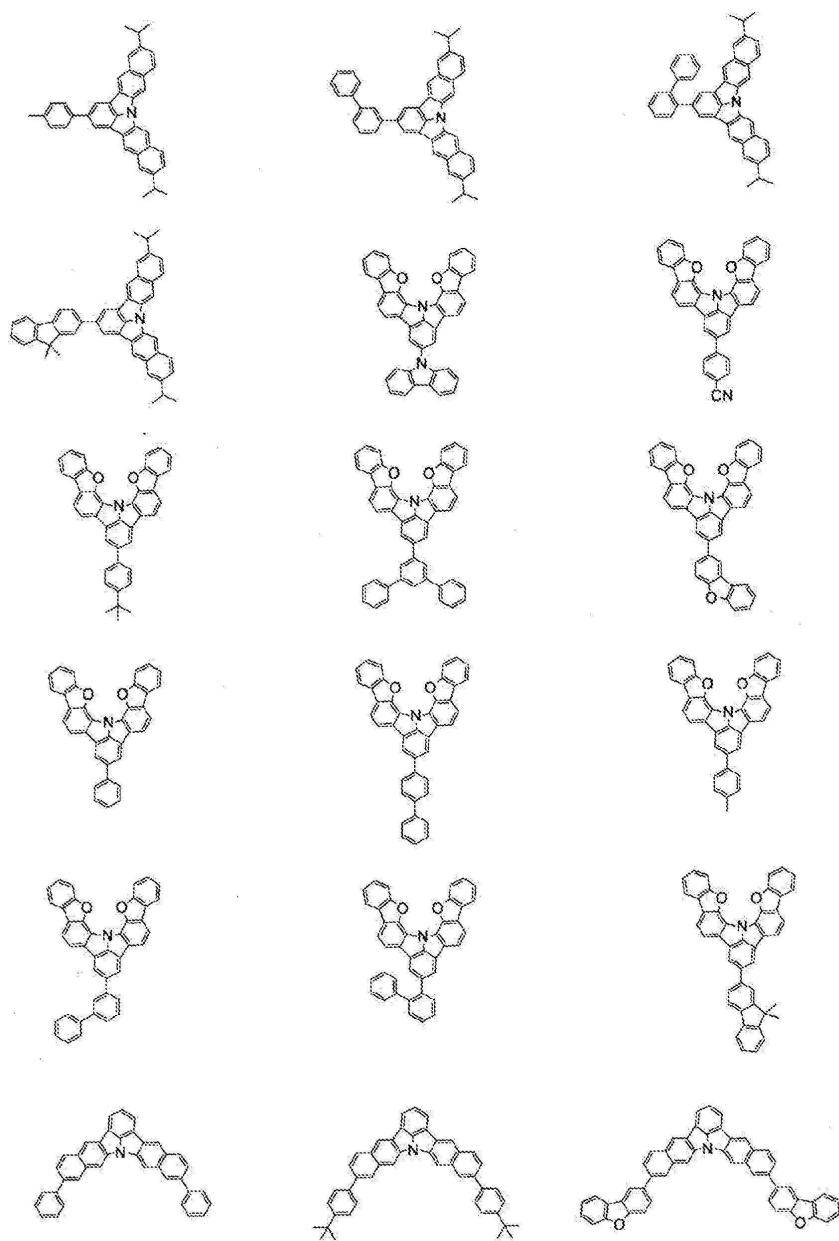
- [1537] 치환 혹은 무치환의 탄소수 1~50의 알킬기,
- [1538] 치환 혹은 무치환의 고리 형성 탄소수 3~50의 시클로알킬기,
- [1539] 치환 혹은 무치환의 고리 형성 탄소수 6~50의 아릴기, 또는
- [1540] 치환 혹은 무치환의 고리 형성 원자수 5~50의 복소환기이고,
- [1541] 바람직하게는, 치환 혹은 무치환의 탄소수 1~50의 알킬기, 또는
- [1542] 치환 혹은 무치환의 고리 형성 탄소수 6~50의 아릴기이며,
- [1543] R₈₀₁이 복수 존재하는 경우, 복수의 R₈₀₁은 서로 동일하거나 또는 상이하고,
- [1544] R₈₀₂가 복수 존재하는 경우, 복수의 R₈₀₂는 서로 동일하거나 또는 상이하며,
- [1545] R₈₀₃이 복수 존재하는 경우, 복수의 R₈₀₃은 서로 동일하거나 또는 상이하다.)
- [1546] 상기 일반식 (4)로 표시되는 화합물로서는, 예컨대 이하에 나타내는 화합물을 구체예로서 들 수 있다. 하기 구체예 중, Ph는 페닐기를 나타내고, D는 중수소 원자를 나타낸다.
- [1547] [화학식 107]



[1548]

[1549]

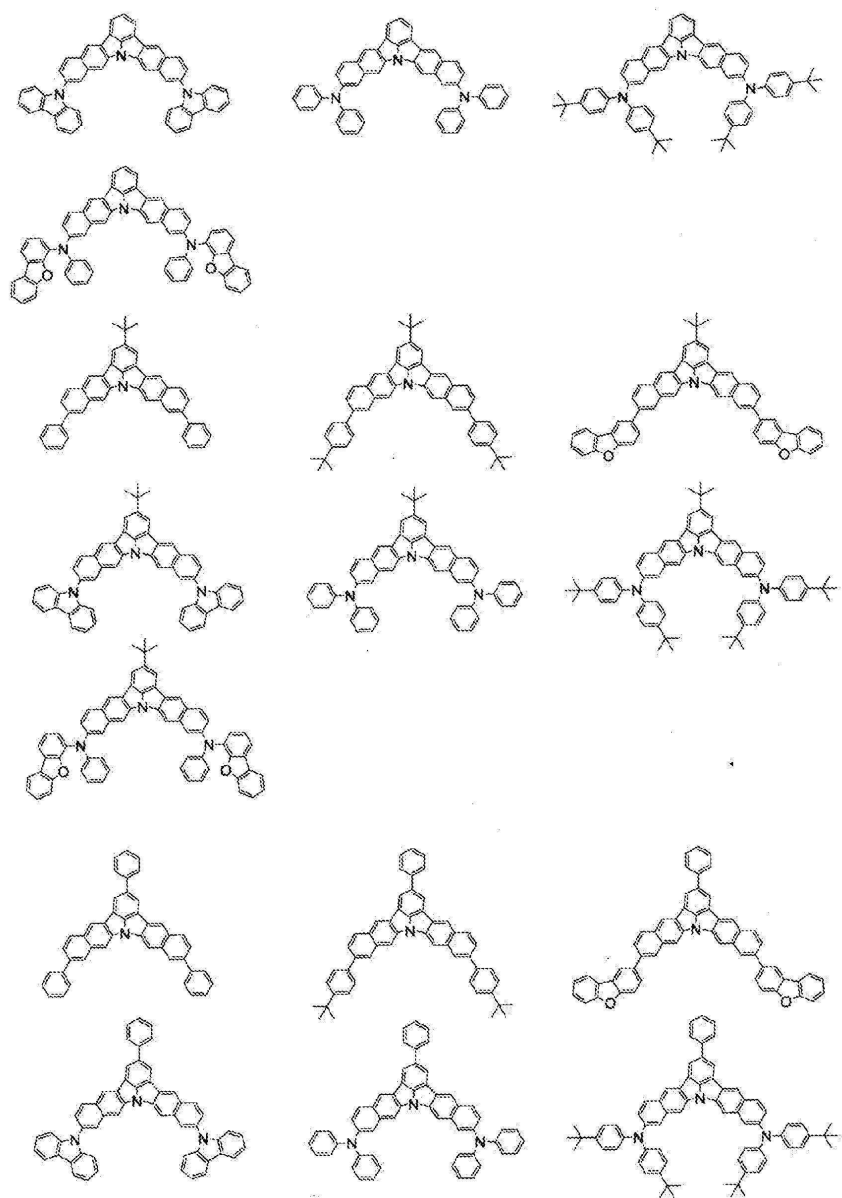
[화학식 108]



[1550]

[1551]

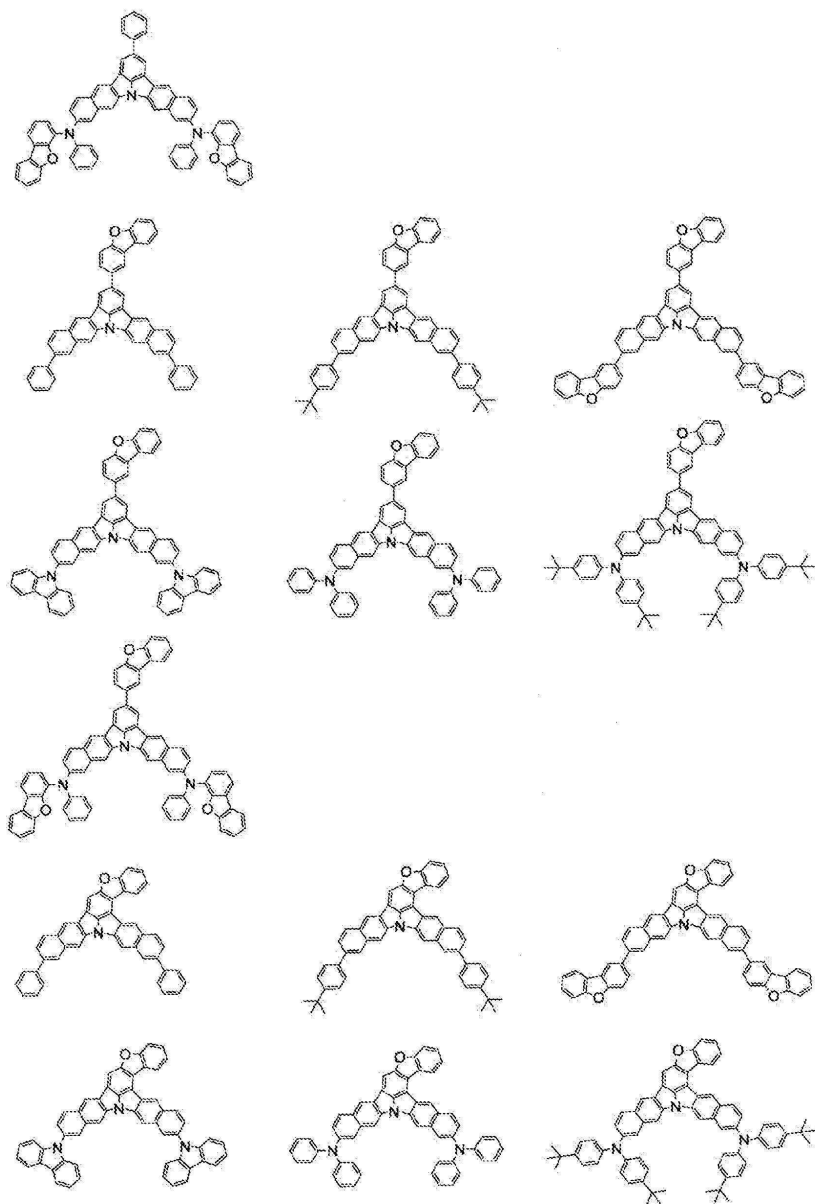
[화학식 109]



[1552]

[1553]

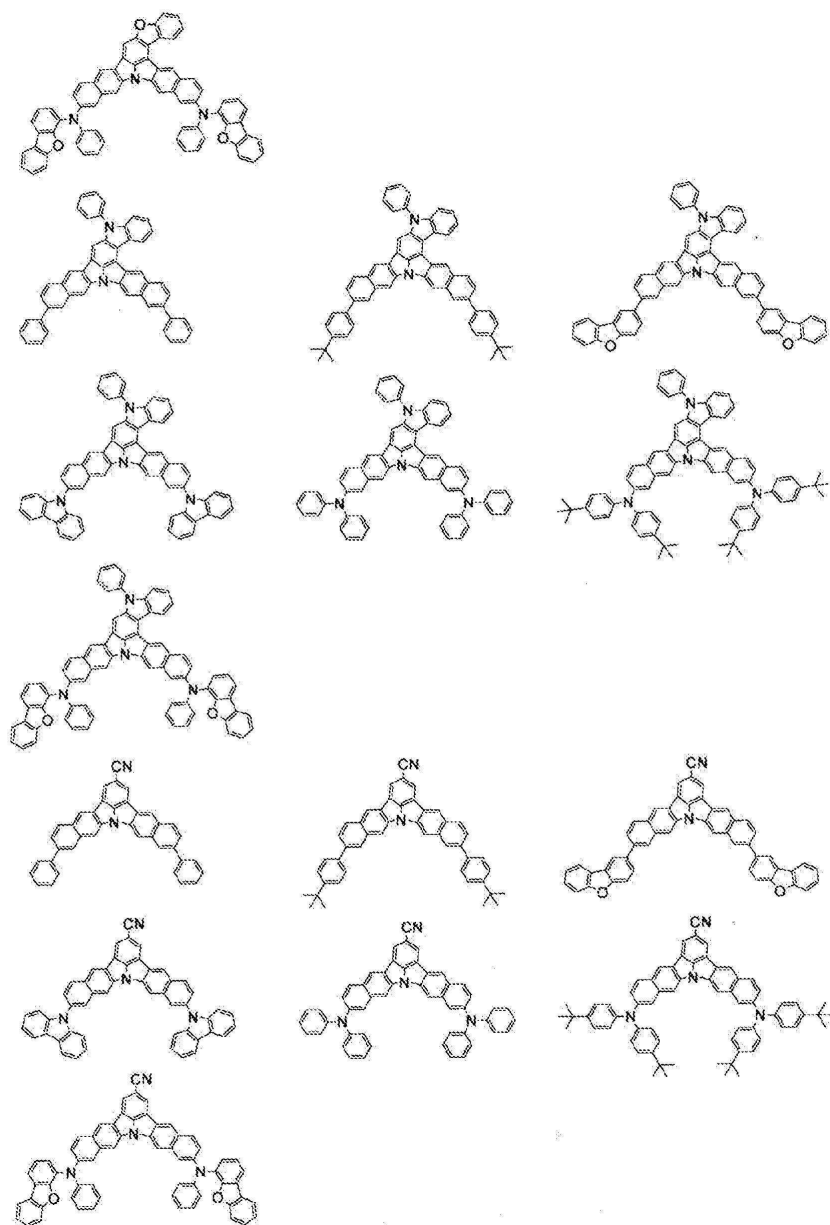
[화학식 110]



[1554]

[1555]

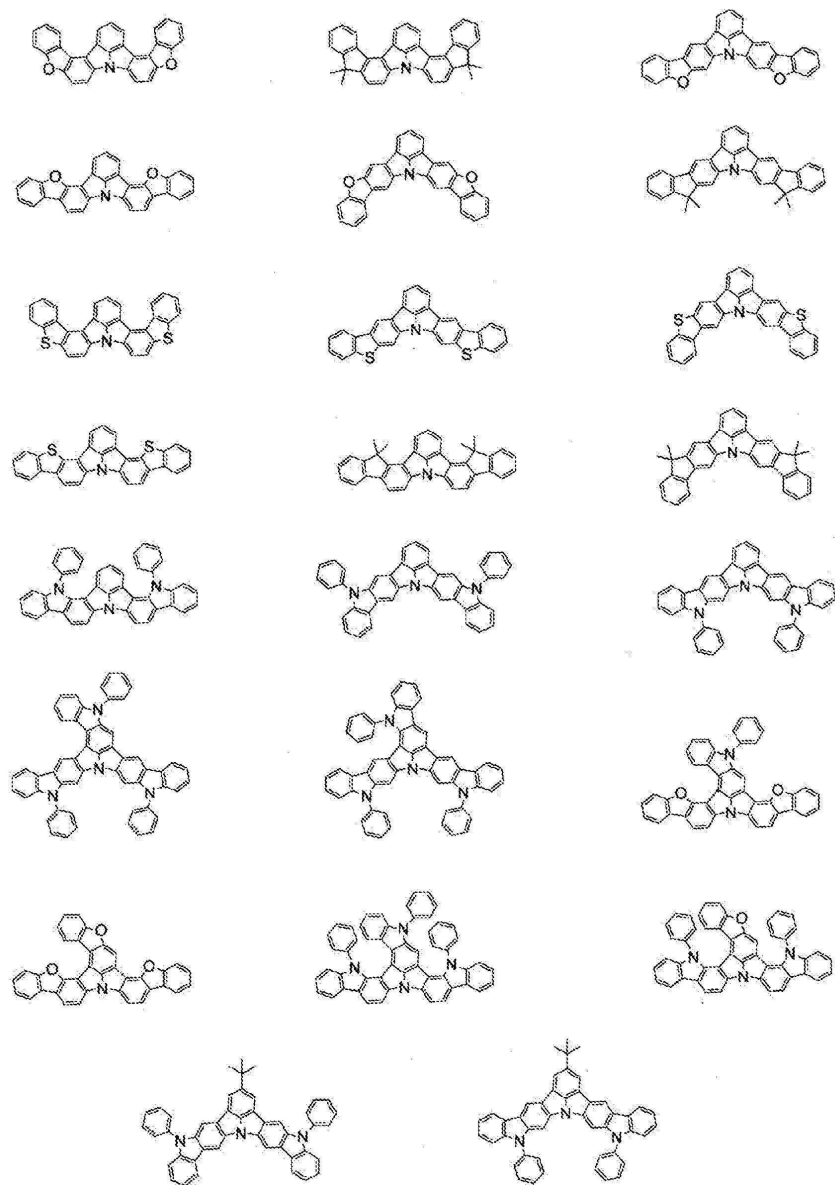
[화학식 111]



[1556]

[1557]

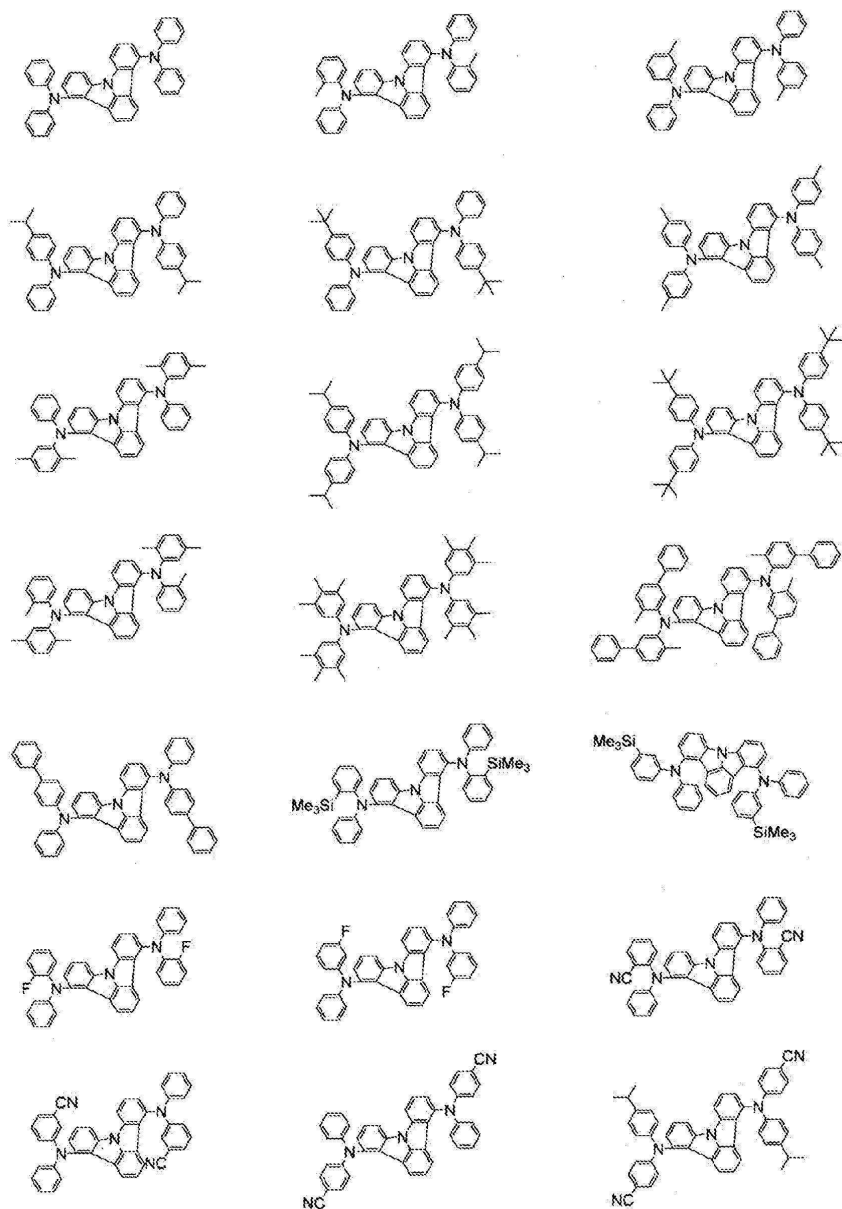
[화학식 112]



[1558]

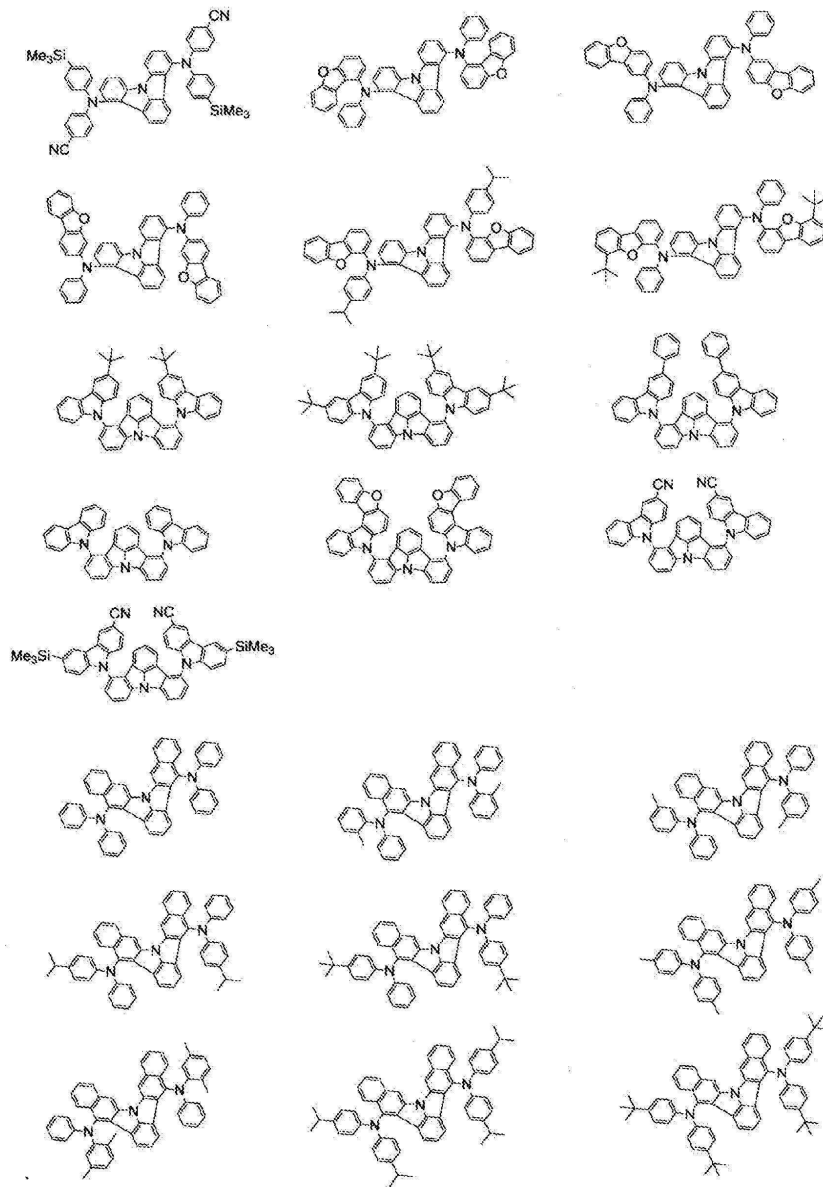
[1559]

[화학식 113]



[1560]

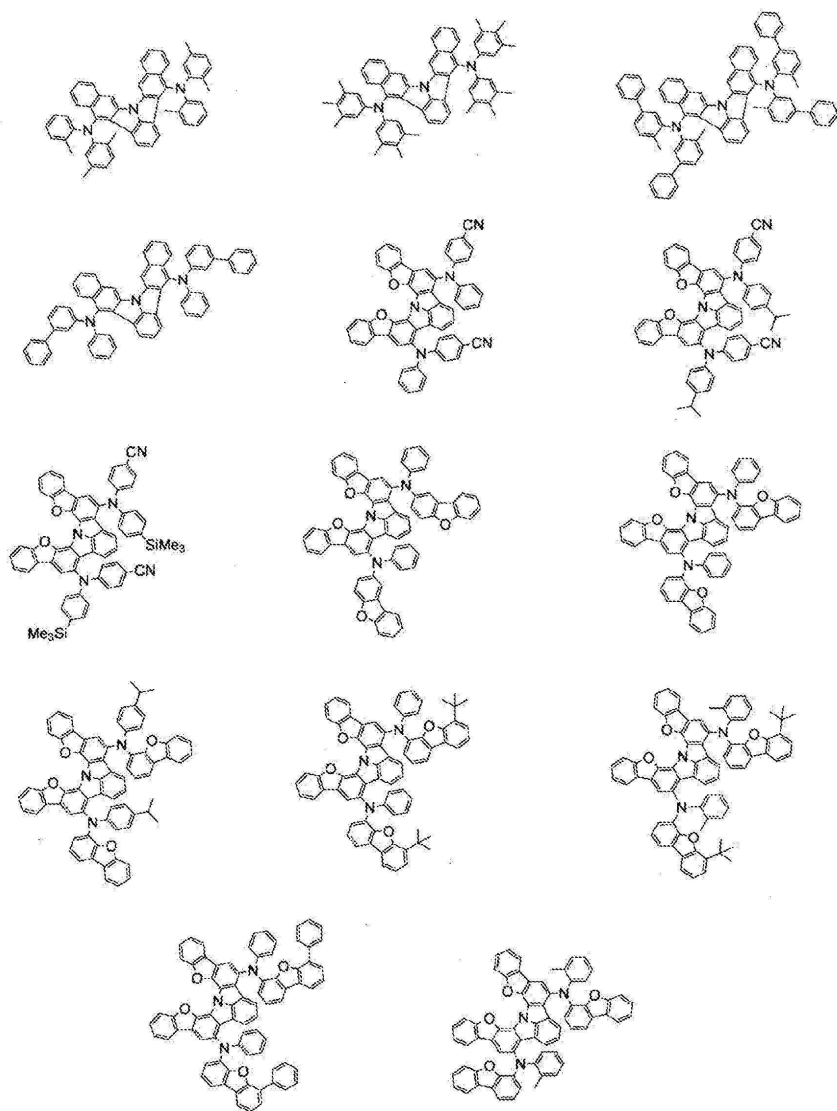
[1561] [화학식 114]



[1562]

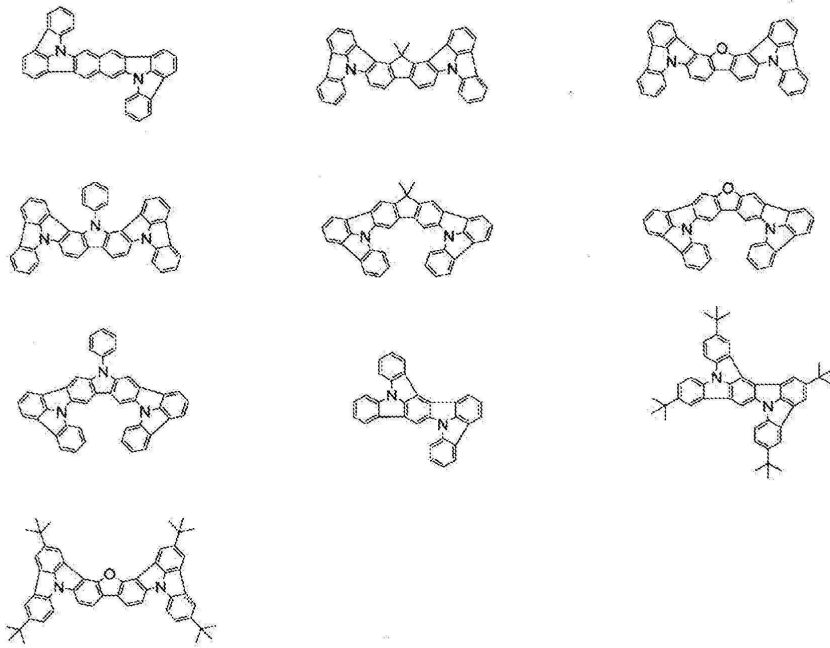
[1563]

[화학식 115]



[1564]

[1565] [화학식 116]

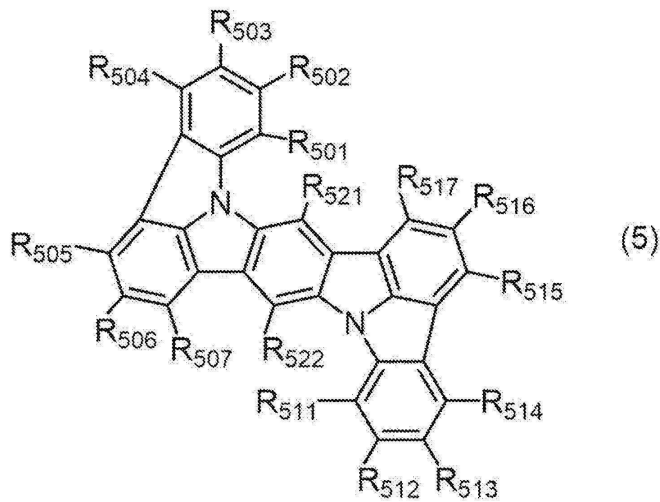


[1566]

[1567] (일반식 (5)로 표시되는 화합물)

[1568] 일반식 (5)로 표시되는 화합물에 대해서 설명한다. 일반식 (5)로 표시되는 화합물은, 전술한 일반식 (41-3)으로 표시되는 화합물에 대응하는 화합물이다.

[1569] [화학식 117]



[1570]

[1571] (상기 일반식 (5)에 있어서,

[1572] $R_{501} \sim R_{507}$ 및 $R_{511} \sim R_{517}$ 중 인접한 2개 이상으로 이루어지는 조의 1조 이상이,

[1573] 서로 결합하여 치환 혹은 무치환의 단환을 형성하거나,

[1574] 서로 결합하여 치환 혹은 무치환의 축합환을 형성하거나, 또는

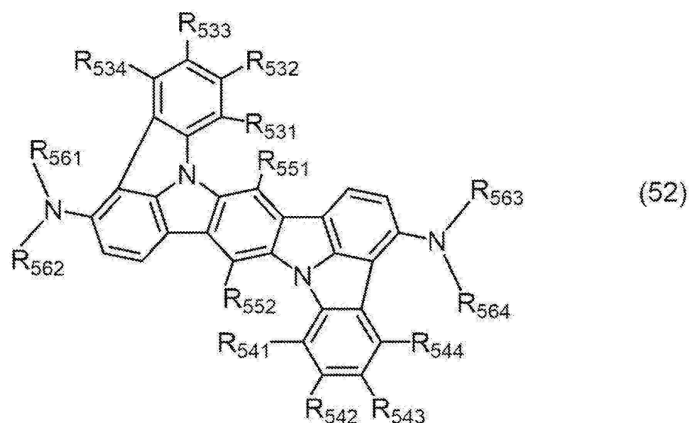
[1575] 서로 결합하지 않고,

[1576] 상기 단환을 형성하지 않고, 또한 상기 축합환을 형성하지 않는 $R_{501} \sim R_{507}$ 및 $R_{511} \sim R_{517}$ 은, 각각 독립적으로

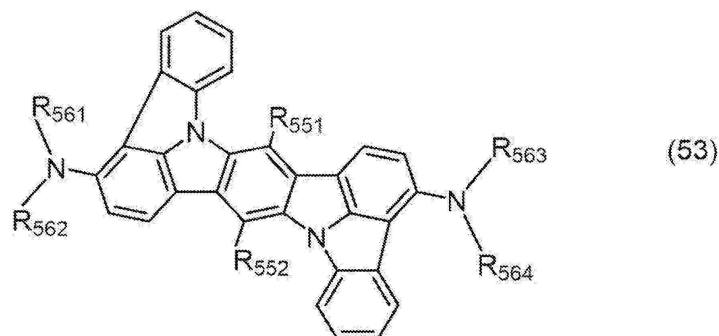
[1577] 수소 원자,

- [1578] 치환 혹은 무치환의 탄소수 1~50의 알킬기,
- [1579] 치환 혹은 무치환의 탄소수 2~50의 알케닐기,
- [1580] 치환 혹은 무치환의 탄소수 2~50의 알키닐기,
- [1581] 치환 혹은 무치환의 고리 형성 탄소수 3~50의 시클로알킬기,
- [1582] $-\text{Si}(\text{R}_{901})(\text{R}_{902})(\text{R}_{903})$ 으로 표시되는 기,
- [1583] $-\text{O}-(\text{R}_{904})$ 로 표시되는 기,
- [1584] $-\text{S}-(\text{R}_{905})$ 로 표시되는 기,
- [1585] $-\text{N}(\text{R}_{906})(\text{R}_{907})$ 로 표시되는 기,
- [1586] 할로겐 원자,
- [1587] 시아노기,
- [1588] 니트로기,
- [1589] 치환 혹은 무치환의 고리 형성 탄소수 6~50의 아릴기, 또는
- [1590] 치환 혹은 무치환의 고리 형성 원자수 5~50의 복소환기이다.
- [1591] R_{521} 및 R_{522} 는, 각각 독립적으로
- [1592] 수소 원자,
- [1593] 치환 혹은 무치환의 탄소수 1~50의 알킬기,
- [1594] 치환 혹은 무치환의 탄소수 2~50의 알케닐기,
- [1595] 치환 혹은 무치환의 탄소수 2~50의 알키닐기,
- [1596] 치환 혹은 무치환의 고리 형성 탄소수 3~50의 시클로알킬기,
- [1597] $-\text{Si}(\text{R}_{901})(\text{R}_{902})(\text{R}_{903})$ 으로 표시되는 기,
- [1598] $-\text{O}-(\text{R}_{904})$ 로 표시되는 기,
- [1599] $-\text{S}-(\text{R}_{905})$ 로 표시되는 기,
- [1600] $-\text{N}(\text{R}_{906})(\text{R}_{907})$ 로 표시되는 기,
- [1601] 할로겐 원자,
- [1602] 시아노기,
- [1603] 니트로기,
- [1604] 치환 혹은 무치환의 고리 형성 탄소수 6~50의 아릴기, 또는
- [1605] 치환 혹은 무치환의 고리 형성 원자수 5~50의 복소환기이다.)
- [1606] 「 $\text{R}_{501} \sim \text{R}_{507}$ 및 $\text{R}_{511} \sim \text{R}_{517}$ 중의 인접한 2개 이상으로 이루어지는 조의 1조」는, 예컨대 R_{501} 과 R_{502} 로 이루어지는 조, R_{502} 와 R_{503} 으로 이루어지는 조, R_{503} 과 R_{504} 로 이루어지는 조, R_{505} 와 R_{506} 으로 이루어지는 조, R_{506} 과 R_{507} 로 이루어지는 조, R_{501} 과 R_{502} 와 R_{503} 으로 이루어지는 조 등의 조합이다.
- [1607] 일 실시형태에 있어서, $\text{R}_{501} \sim \text{R}_{507}$ 및 $\text{R}_{511} \sim \text{R}_{517}$ 중 적어도 하나, 바람직하게는 2개가 $-\text{N}(\text{R}_{906})(\text{R}_{907})$ 로 표시되는 기이다.
- [1608] 일 실시형태에 있어서는, $\text{R}_{501} \sim \text{R}_{507}$ 및 $\text{R}_{511} \sim \text{R}_{517}$ 은, 각각 독립적으로

- [1609] 수소 원자,
 [1610] 치환 혹은 무치환의 고리 형성 탄소수 6~50의 아틸기, 또는
 [1611] 치환 혹은 무치환의 고리 형성 원자수 5~50의 복소환기이다.
 [1612] 일 실시형태에 있어서는, 상기 일반식 (5)로 표시되는 화합물은, 하기 일반식 (52)로 표시되는 화합물이다.
 [1613] [화학식 118]

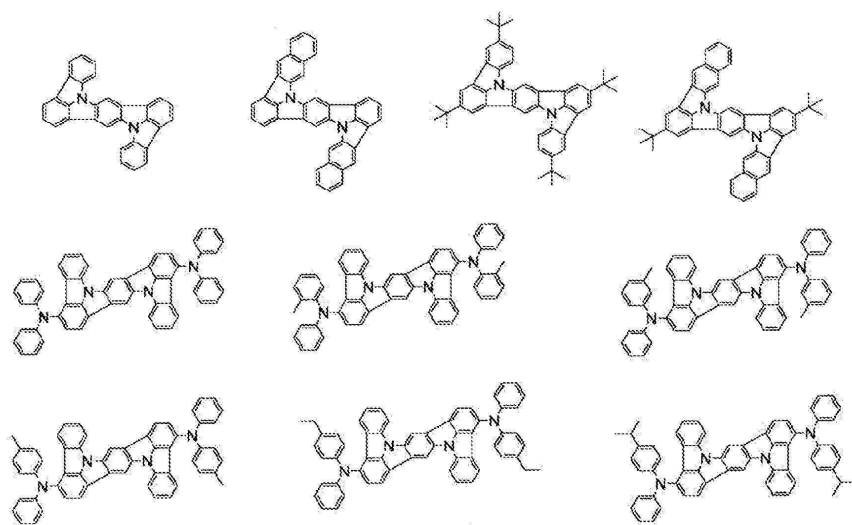


- [1614]
 [1615] (상기 일반식 (52)에 있어서,
 [1616] R₅₃₁~R₅₃₄ 및 R₅₄₁~R₅₄₄ 중의 인접한 2개 이상으로 이루어지는 조의 1조 이상이,
 [1617] 서로 결합하여 치환 혹은 무치환의 단환을 형성하거나,
 [1618] 서로 결합하여 치환 혹은 무치환의 축합환을 형성하거나, 또는
 [1619] 서로 결합하지 않고,
 [1620] 상기 단환을 형성하지 않고, 또한 상기 축합환을 형성하지 않는 R₅₃₁~R₅₃₄, R₅₄₁~R₅₄₄, 및 R₅₅₁ 및 R₅₅₂는, 각각 독립적으로
 [1621] 수소 원자,
 [1622] 치환 혹은 무치환의 고리 형성 탄소수 6~50의 아틸기, 또는
 [1623] 치환 혹은 무치환의 고리 형성 원자수 5~50의 복소환기이며,
 [1624] R₅₆₁~R₅₆₄는, 각각 독립적으로
 [1625] 치환 혹은 무치환의 고리 형성 탄소수 6~50의 아틸기, 또는
 [1626] 치환 혹은 무치환의 고리 형성 원자수 5~50의 복소환기이다.)
 [1627] 일 실시형태에 있어서는, 상기 일반식 (5)로 표시되는 화합물은, 하기 일반식 (53)으로 표시되는 화합물이다.
 [1628] [화학식 119]



[1629]

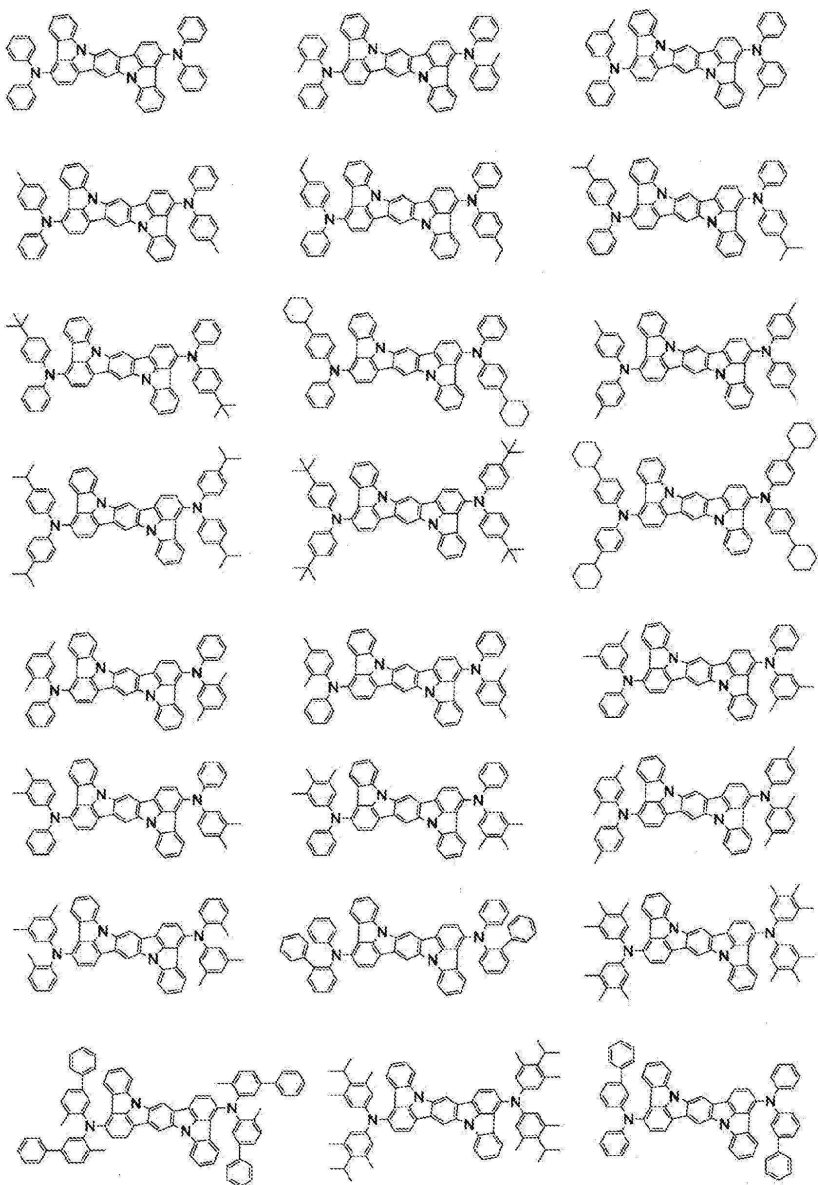
- [1630] (상기 일반식 (53)에 있어서, R_{551} , R_{552} 및 $R_{561} \sim R_{564}$ 는, 각각 독립적으로 상기 일반식 (52)에 있어서의 R_{551} , R_{552} 및 $R_{561} \sim R_{564}$ 와 동일한 의미이다.)
- [1631] 일 실시형태에 있어서는, 상기 일반식 (52) 및 일반식 (53)에 있어서의 $R_{561} \sim R_{564}$ 는, 각각 독립적으로 치환 혹은 무치환의 고리 형성 탄소수 6~50의 아릴기(바람직하게는 페닐기)이다.
- [1632] 일 실시형태에 있어서는, 상기 일반식 (5)에 있어서의 R_{521} 및 R_{522} , 상기 일반식 (52) 및 일반식 (53)에 있어서의 R_{551} 및 R_{552} 는 수소 원자이다.
- [1633] 일 실시형태에 있어서는, 상기 일반식 (5), 일반식 (52) 및 일반식 (53)에 있어서의, 「치환 혹은 무치환의」라고 하는 경우에 있어서의 치환기는,
- [1634] 치환 혹은 무치환의 탄소수 1~50의 알킬기,
- [1635] 치환 혹은 무치환의 탄소수 2~50의 알케닐기,
- [1636] 치환 혹은 무치환의 탄소수 2~50의 알키닐기,
- [1637] 치환 혹은 무치환의 고리 형성 탄소수 3~50의 시클로알킬기,
- [1638] 치환 혹은 무치환의 고리 형성 탄소수 6~50의 아릴기, 또는
- [1639] 치환 혹은 무치환의 고리 형성 원자수 5~50의 복소환기이다.
- [1640] 상기 일반식 (5)로 표시되는 화합물로서는, 예컨대 이하에 나타내는 화합물을 구체예로서 들 수 있다.
- [1641] [화학식 120]



[1642]

[1643]

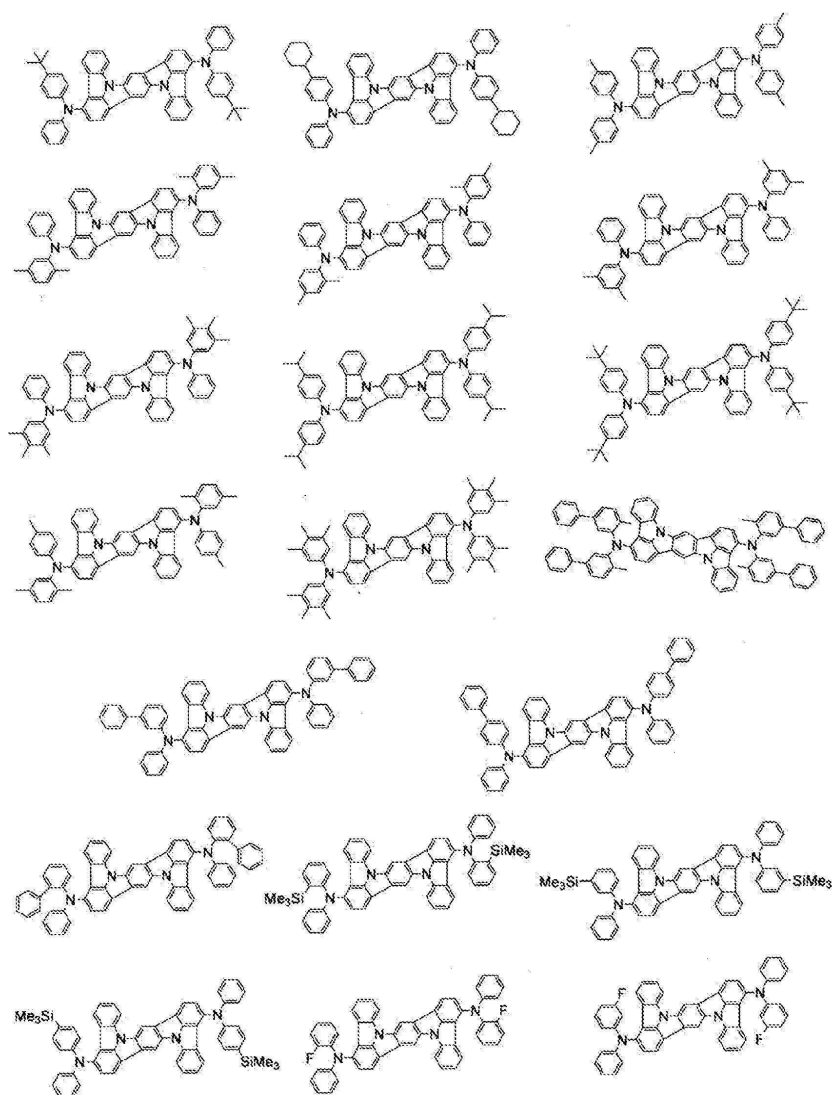
[화학식 121]



[1644]

[1645]

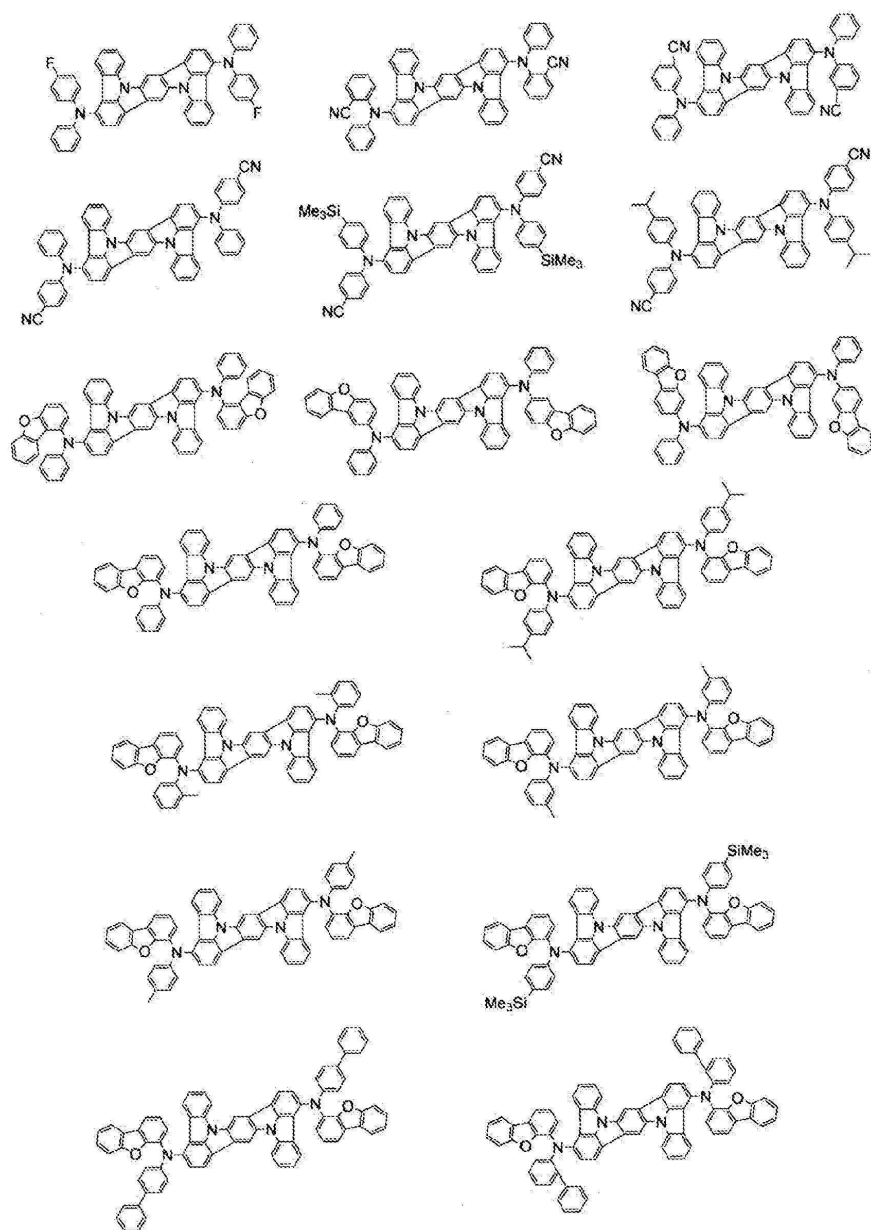
[화학식 122]



[1646]

[1647]

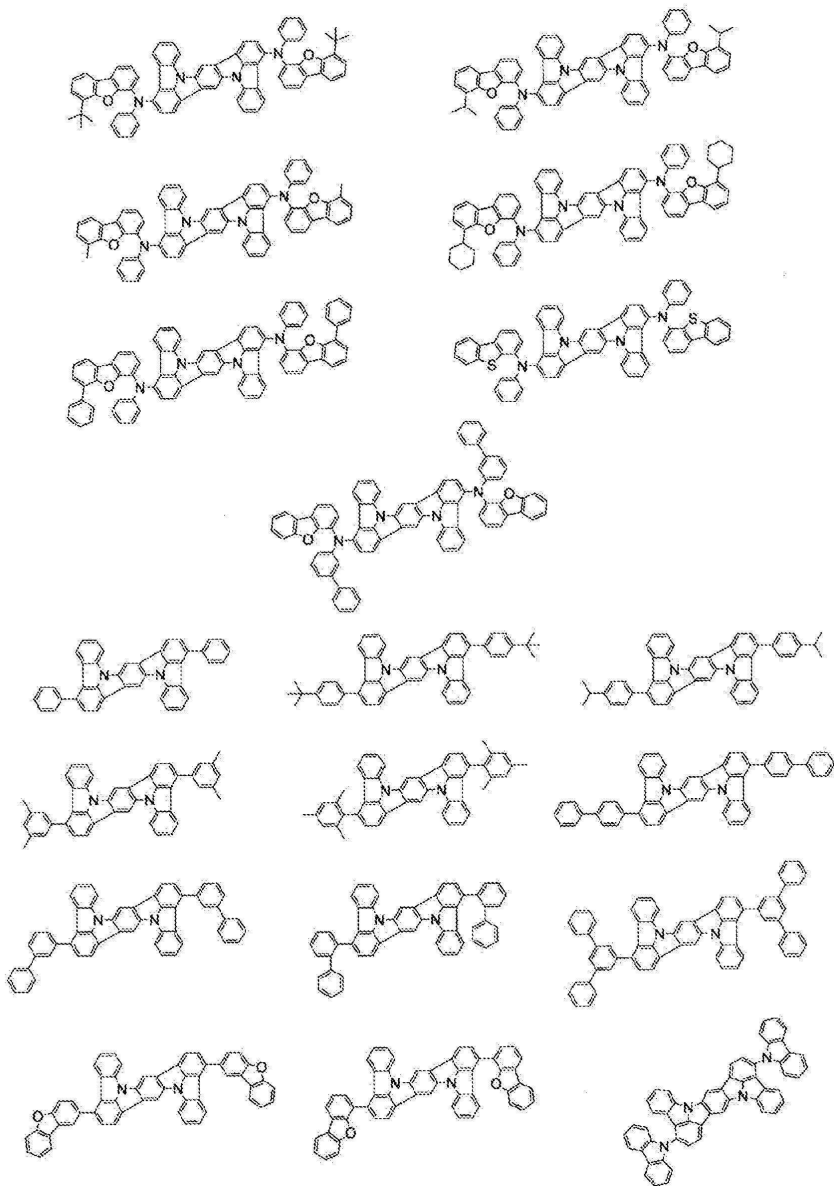
[화학식 123]



[1648]

[1649]

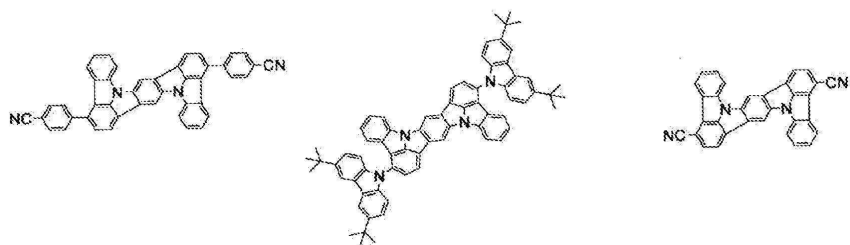
[화학식 124]



[1650]

[1651]

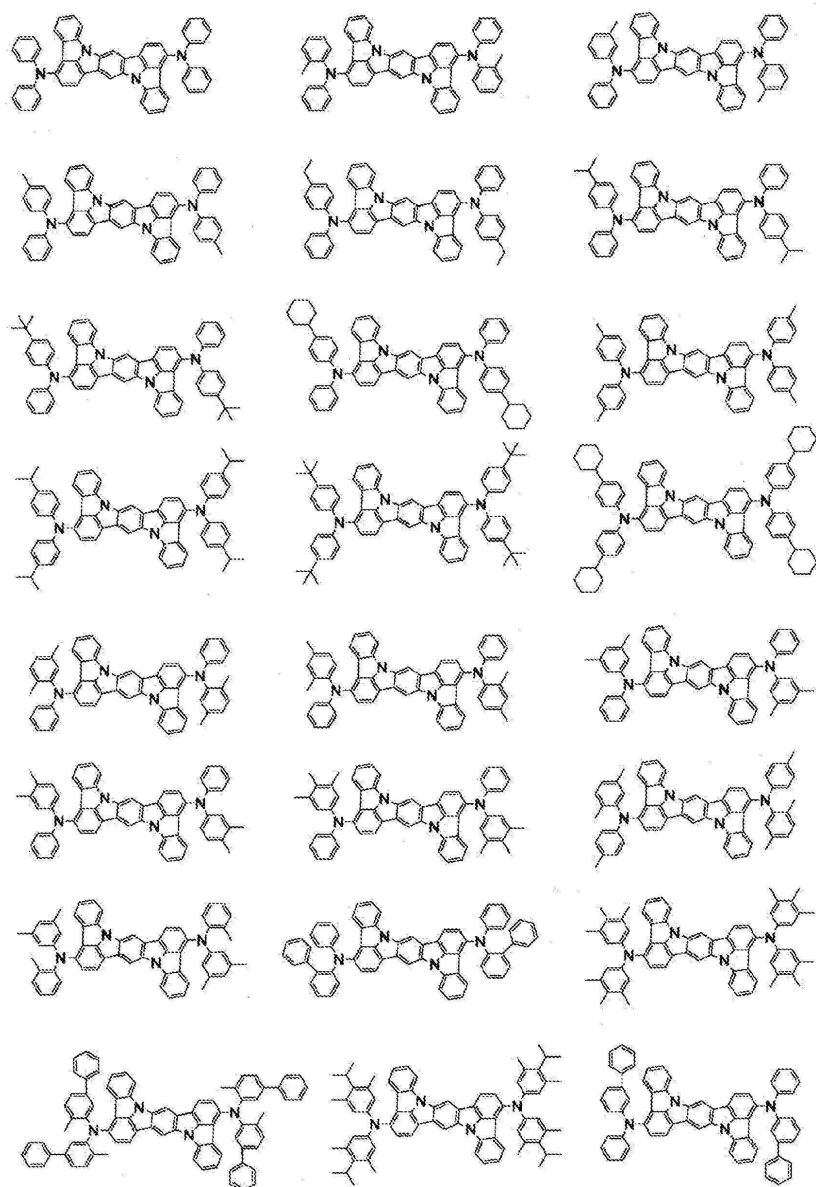
[화학식 125]



[1652]

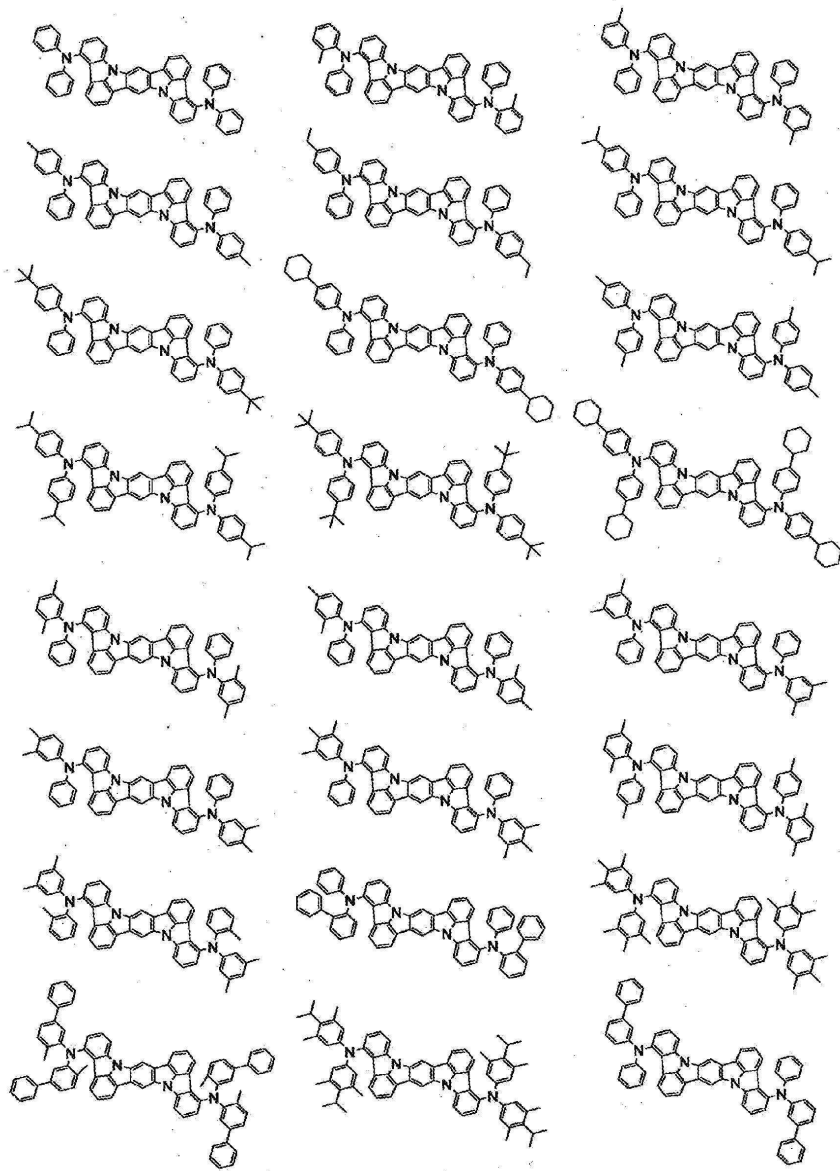
[1653]

[화학식 126]



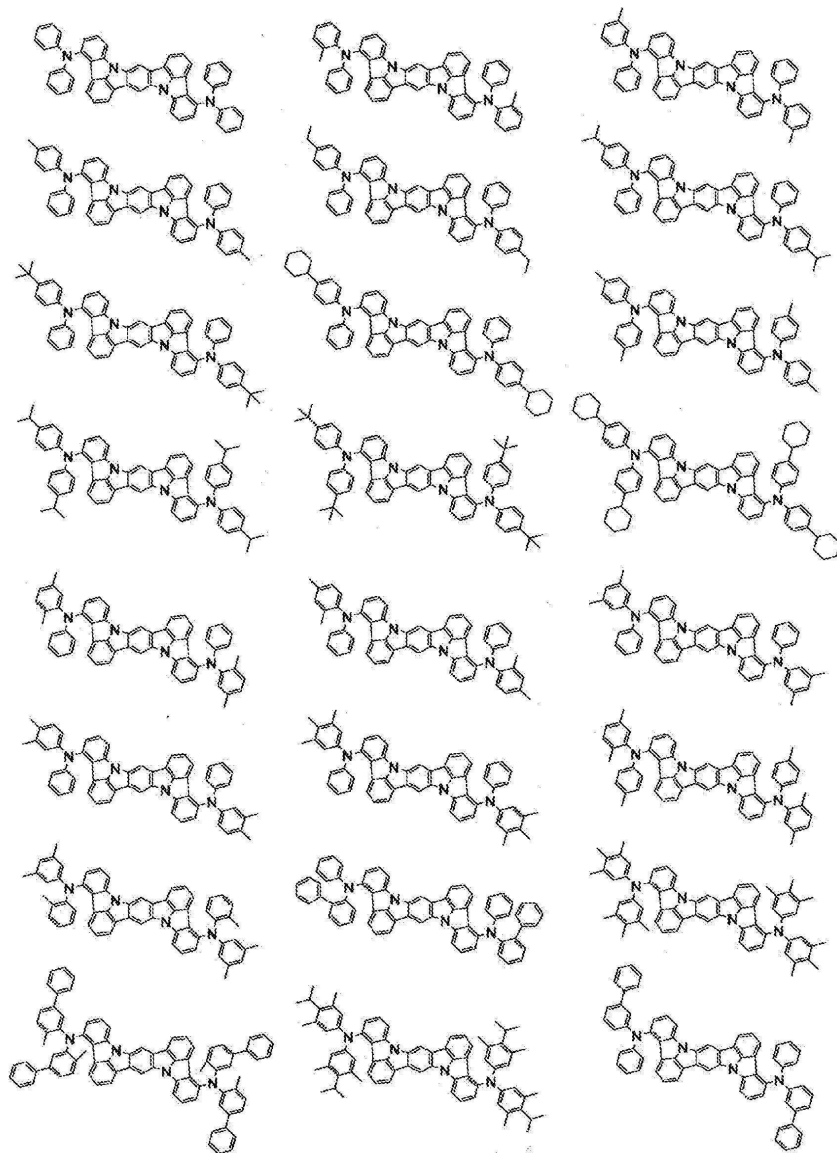
[1654]

[1655] [화학식 127]



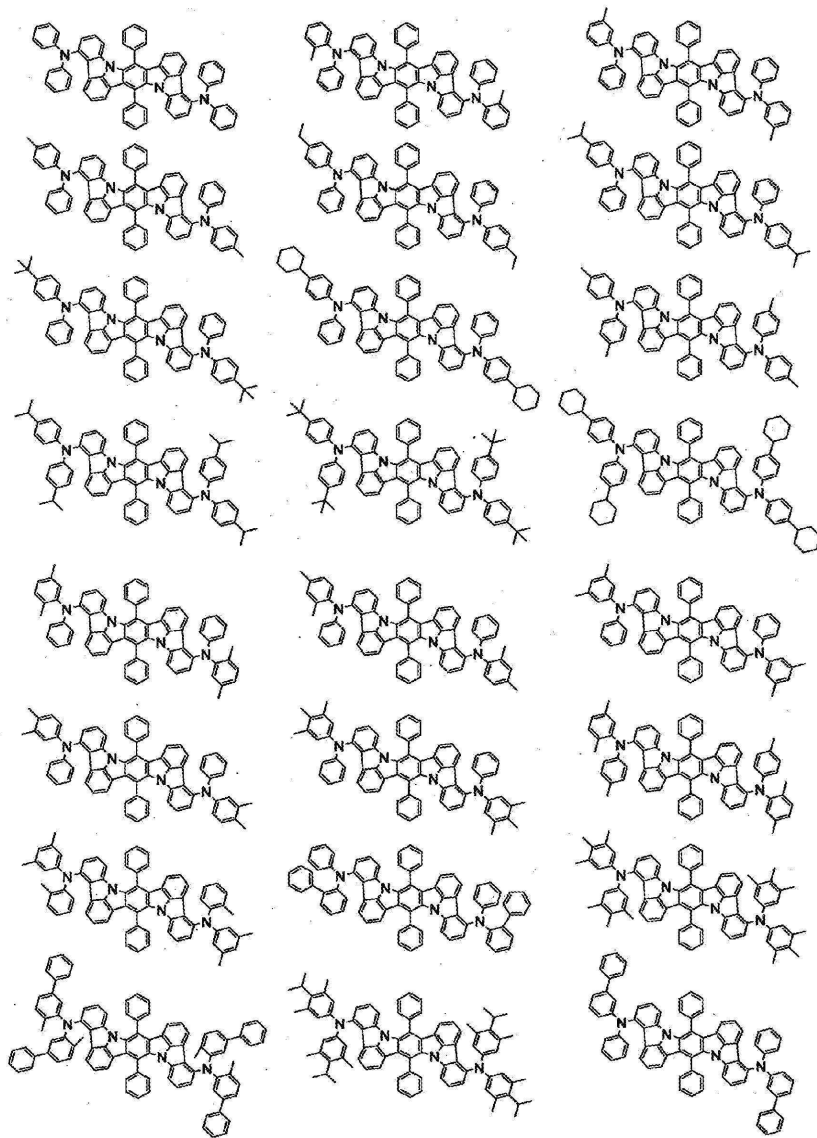
[1656]

[1657] [화학식 128]



[1658]

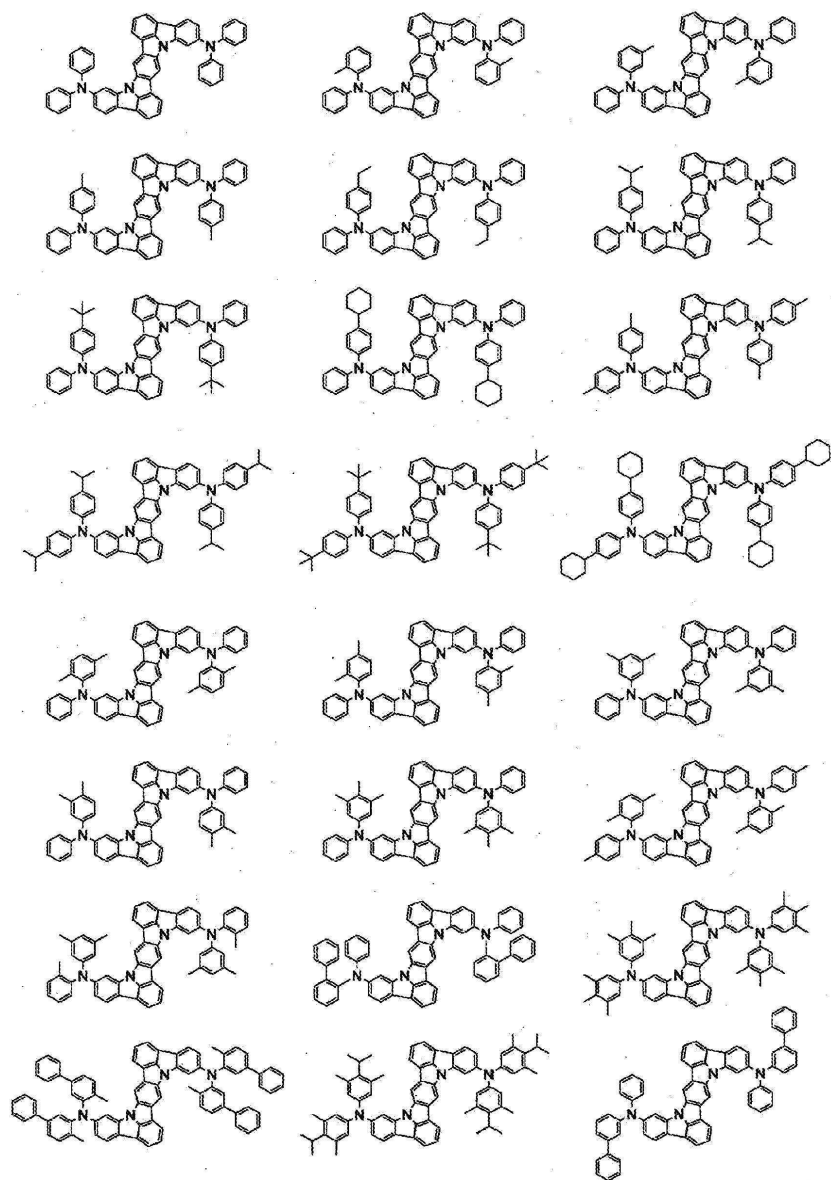
[1659] [화학식 129]



[1660]

[1661]

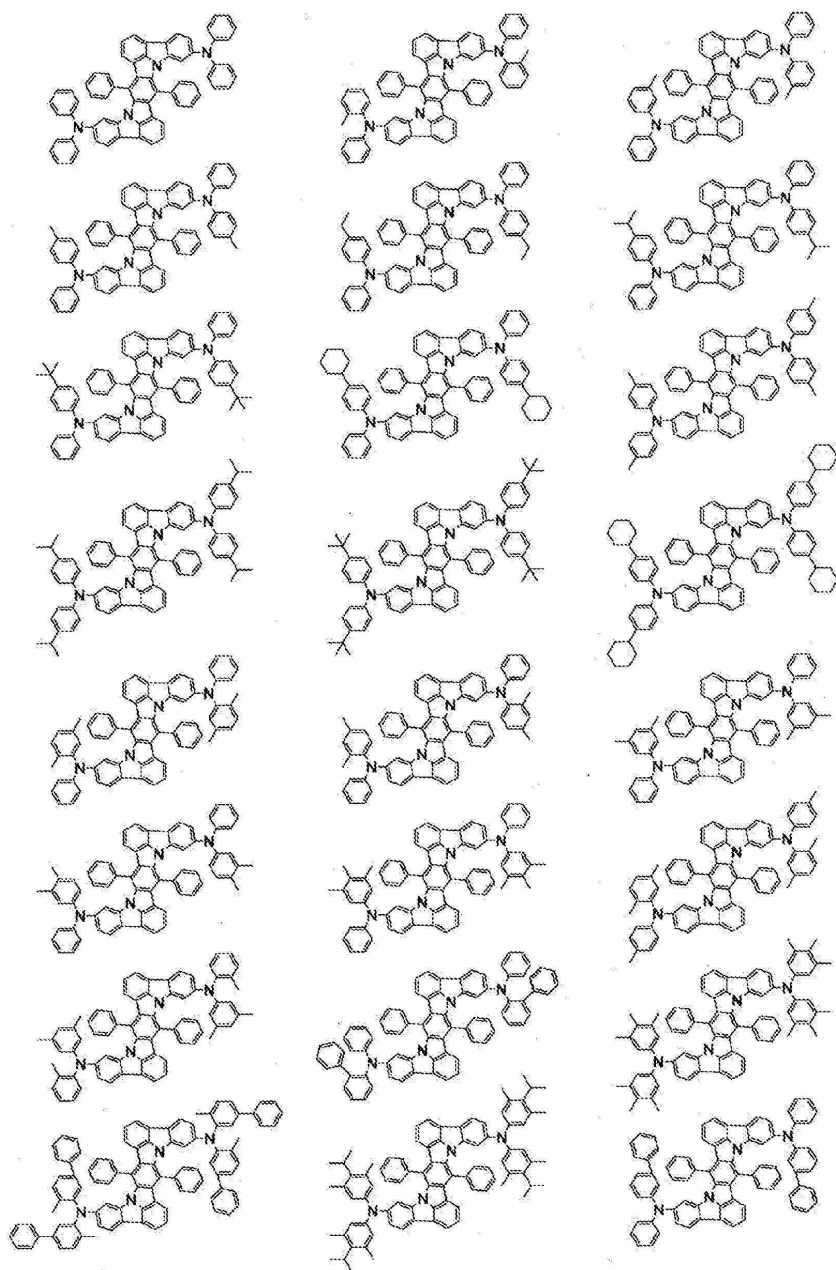
[화학식 130]



[1662]

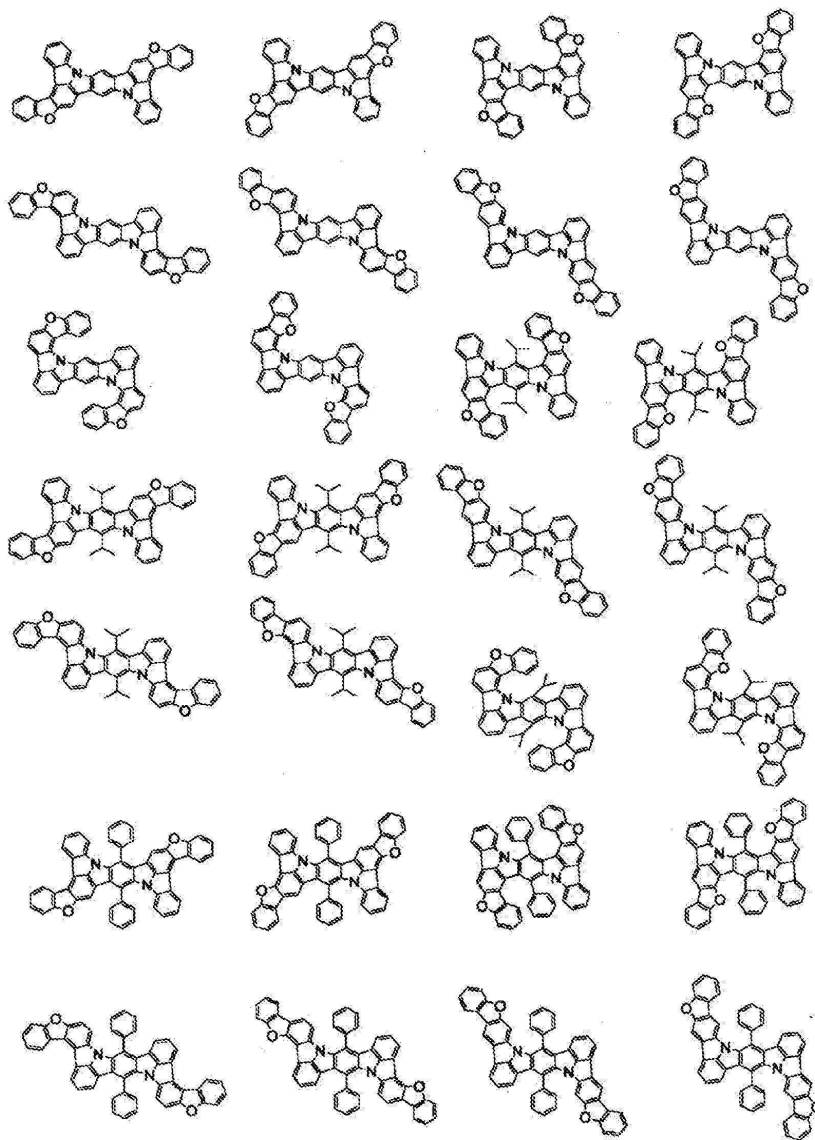
[1663]

[화학식 131]



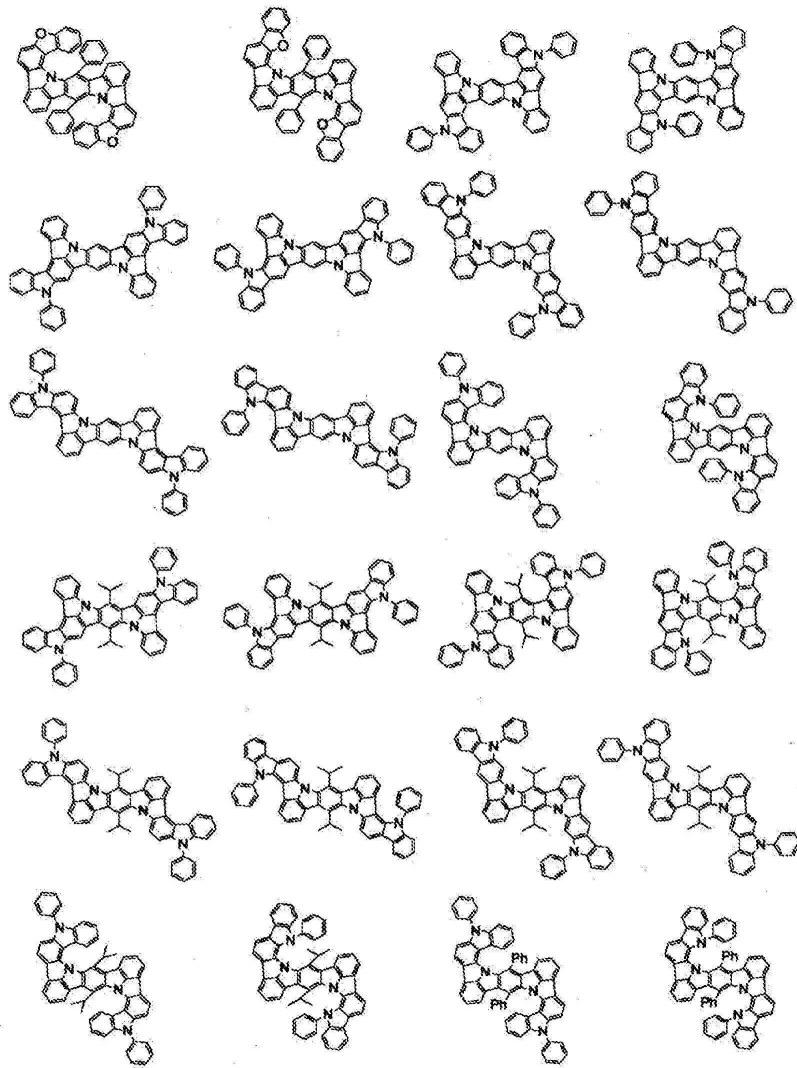
[1664]

[1665] [화학식 132]



[1666]

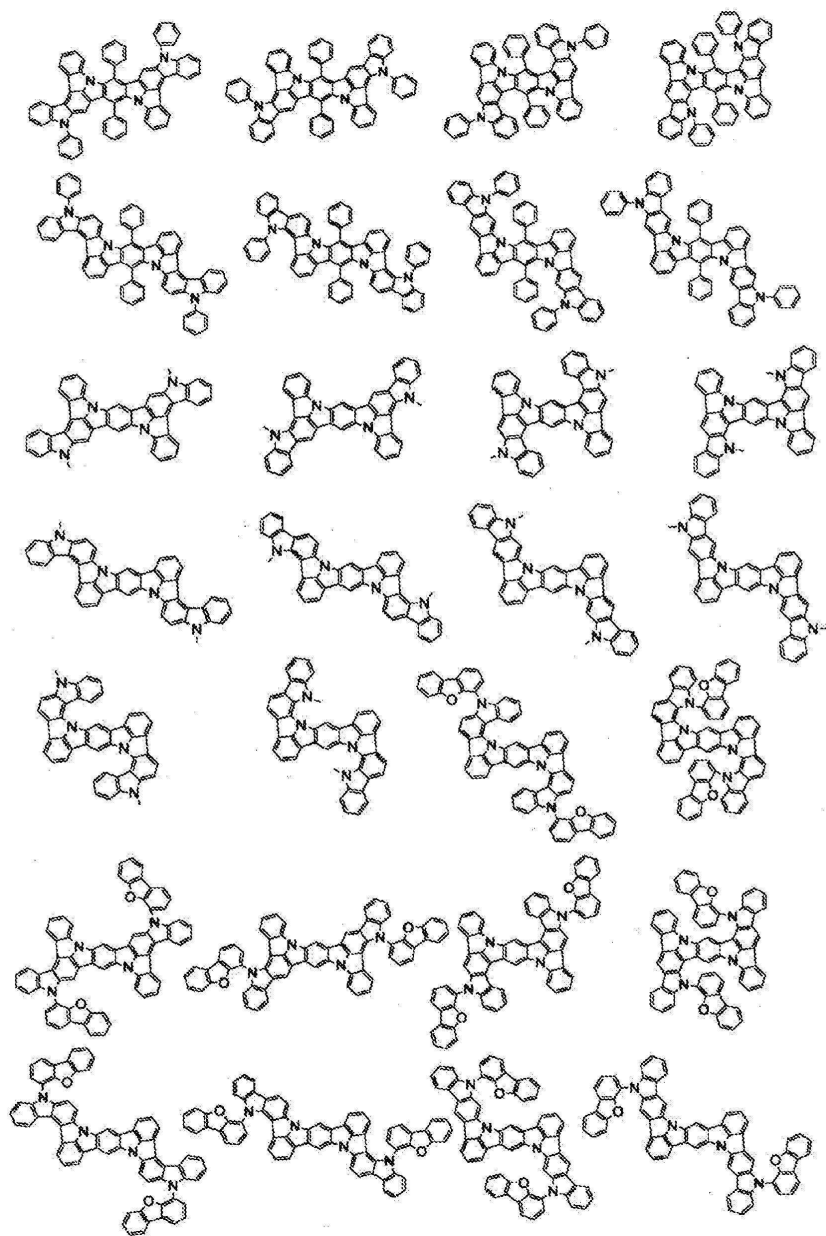
[1667] [화학식 133]



(식 중, Ph는 페닐기임)

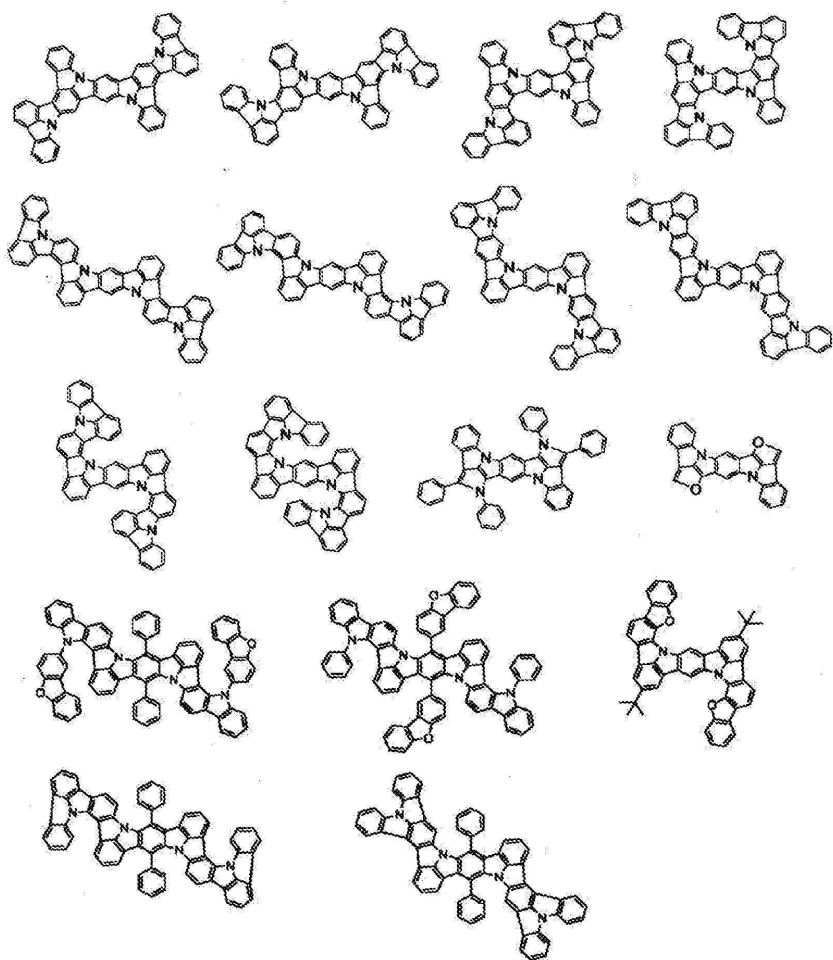
[1668]

[1669] [화학식 134]



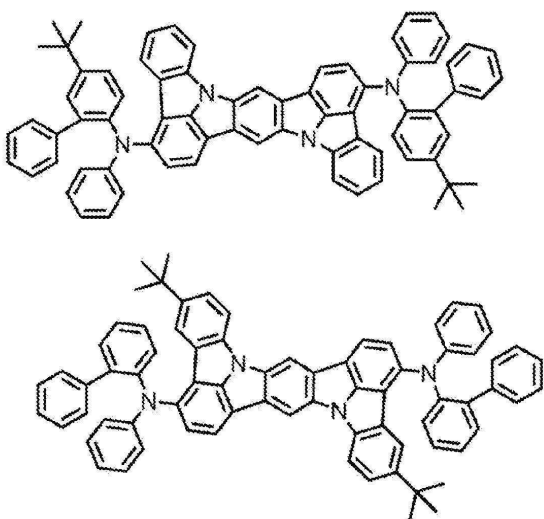
[1670]

[1671] [화학식 135]



[1672]

[1673] [화학식 136]

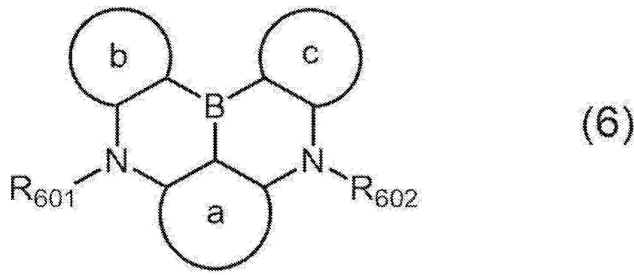


[1674]

[1675] (일반식 (6)으로 표시되는 화합물)

[1676] 일반식 (6)으로 표시되는 화합물에 대해서 설명한다.

[1677] [화학식 137]



[1678]

[1679] (상기 일반식 (6)에 있어서,

[1680] a 고리, b 고리 및 c 고리는, 각각 독립적으로

[1681] 치환 혹은 무치환의 고리 형성 탄소수 6~50의 방향족 탄화수소환, 또는

[1682] 치환 혹은 무치환의 고리 형성 원자수 5~50의 복소환이고,

[1683] R₆₀₁ 및 R₆₀₂는, 각각 독립적으로 상기 a 고리, b 고리 또는 c 고리와 결합하여 치환 혹은 무치환의 복소환을 형성하거나, 또는 치환 혹은 무치환의 복소환을 형성하지 않으며,

[1684] 상기 치환 혹은 무치환의 복소환을 형성하지 않는 R₆₀₁ 및 R₆₀₂는, 각각 독립적으로

[1685] 치환 혹은 무치환의 탄소수 1~50의 알킬기,

[1686] 치환 혹은 무치환의 탄소수 2~50의 알케닐기,

[1687] 치환 혹은 무치환의 탄소수 2~50의 알키닐기,

[1688] 치환 혹은 무치환의 고리 형성 탄소수 3~50의 시클로알킬기,

[1689] 치환 혹은 무치환의 고리 형성 탄소수 6~50의 아릴기, 또는

[1690] 치환 혹은 무치환의 고리 형성 원자수 5~50의 복소환기이다.)

[1691] a 고리, b 고리 및 c 고리는 붕소 원자 및 2개의 질소 원자로 구성되는 상기 일반식 (6) 중앙의 축합 2환 구조에 축합하는 고리(치환 혹은 무치환의 고리 형성 탄소수 6~50의 방향족 탄화수소환, 또는 치환 혹은 무치환의 고리 형성 원자수 5~50의 복소환)이다.

[1692] a 고리, b 고리 및 c 고리의 「방향족 탄화수소환」은, 전술한 「아릴기」에 수소 원자를 도입한 화합물과 동일한 구조이다.

[1693] a 고리의 「방향족 탄화수소환」은, 상기 일반식 (6) 중앙의 축합 2환 구조 상의 탄소 원자 3개를 고리 형성 원자로서 포함한다.

[1694] b 고리 및 c 고리의 「방향족 탄화수소환」은, 상기 일반식 (6) 중앙의 축합 2환 구조 상의 탄소 원자 2개를 고리 형성 원자로서 포함한다.

[1695] 「치환 혹은 무치환의 고리 형성 탄소수 6~50의 방향족 탄화수소환」의 구체예로서는, 구체예군 G1에 기재된 「아릴기」에 수소 원자를 도입한 화합물 등을 들 수 있다.

[1696] a 고리, b 고리 및 c 고리의 「복소환」은, 전술한 「복소환기」에 수소 원자를 도입한 화합물과 동일한 구조이다.

[1697] a 고리의 「복소환」은, 상기 일반식 (6) 중앙의 축합 2환 구조 상의 탄소 원자 3개를 고리 형성 원자로서 포함한다. b 고리 및 c 고리의 「복소환」은, 상기 일반식 (6) 중앙의 축합 2환 구조 상의 탄소 원자 2개를 고리 형성 원자로서 포함한다. 「치환 혹은 무치환의 고리 형성 원자수 5~50의 복소환」의 구체예로서는, 구체예군 G2에 기재된 「복소환기」에 수소 원자를 도입한 화합물 등을 들 수 있다.

[1698] R₆₀₁ 및 R₆₀₂는, 각각 독립적으로 a 고리, b 고리 또는 c 고리와 결합하여 치환 혹은 무치환의 복소환을 형성하여도 좋다. 이 경우에 있어서의 복소환은, 상기 일반식 (6) 중앙의 축합 2환 구조 상의 질소 원자를 포함한다. 이

경우에 있어서의 복소환은, 질소 원자 이외의 헤테로 원자를 포함하고 있어도 좋다. R_{601} 및 R_{602} 가 a 고리, b 고리 또는 c 고리와 결합한다고 하는 것은, 구체적으로는, a 고리, b 고리 또는 c 고리를 구성하는 원자와 R_{601} 및 R_{602} 를 구성하는 원자가 결합한다는 것을 의미한다. 예컨대, R_{601} 이 a 고리와 결합하여 R_{601} 을 포함하는 고리와 a 고리가 축합한 2환 축합(또는 3환 축합 이상)의 합질소 복소환을 형성하여도 좋다. 해당 합질소 복소환의 구체 예로서는, 구체예군 G2 중, 질소를 포함하는 2환 축합 이상의 복소환기에 대응하는 화합물 등을 들 수 있다.

[1699] R_{601} 이 b 고리와 결합하는 경우, R_{602} 가 a 고리와 결합하는 경우, 및 R_{602} 가 c 고리와 결합하는 경우도 상기와 동일하다.

[1700] 일 실시형태에 있어서, 상기 일반식 (6)에 있어서의 a 고리, b 고리 및 c 고리는, 각각 독립적으로 치환 혹은 무치환의 고리 형성 탄소수 6~50의 방향족 탄화수소환이다.

[1701] 일 실시형태에 있어서, 상기 일반식 (6)에 있어서의 a 고리, b 고리 및 c 고리는, 각각 독립적으로 치환 혹은 무치환의 벤젠환 또는 나프탈렌환이다.

[1702] 일 실시형태에 있어서, 상기 일반식 (6)에 있어서의 R_{601} 및 R_{602} 는, 각각 독립적으로

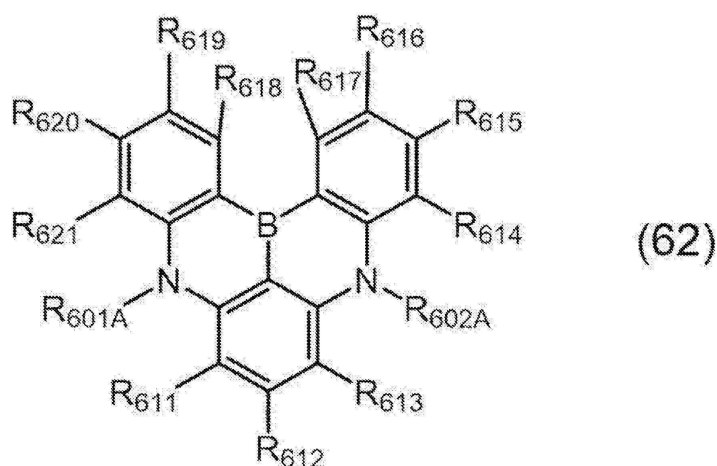
[1703] 치환 혹은 무치환의 고리 형성 탄소수 6~50의 아릴기, 또는

[1704] 치환 혹은 무치환의 고리 형성 원자수 5~50의 복소환기이고,

[1705] 바람직하게는 치환 혹은 무치환의 고리 형성 탄소수 6~50의 아릴기이다.

[1706] 일 실시형태에 있어서, 상기 일반식 (6)으로 표시되는 화합물은 하기 일반식 (62)로 표시되는 화합물이다.

[1707] [화학식 138]



[1708]

[1709] (상기 일반식 (62)에 있어서,

[1710] R_{601A} 는 R_{611} 및 R_{621} 로 이루어진 군으로부터 선택되는 1 이상과 결합하여 치환 혹은 무치환의 복소환을 형성하거나, 또는 치환 혹은 무치환의 복소환을 형성하지 않고,

[1711] R_{602A} 는 R_{613} 및 R_{614} 로 이루어진 군으로부터 선택되는 1 이상과 결합하여 치환 혹은 무치환의 복소환을 형성하거나, 또는 치환 혹은 무치환의 복소환을 형성하지 않으며,

[1712] 상기 치환 혹은 무치환의 복소환을 형성하지 않는 R_{601A} 및 R_{602A} 는, 각각 독립적으로

[1713] 치환 혹은 무치환의 탄소수 1~50의 알킬기,

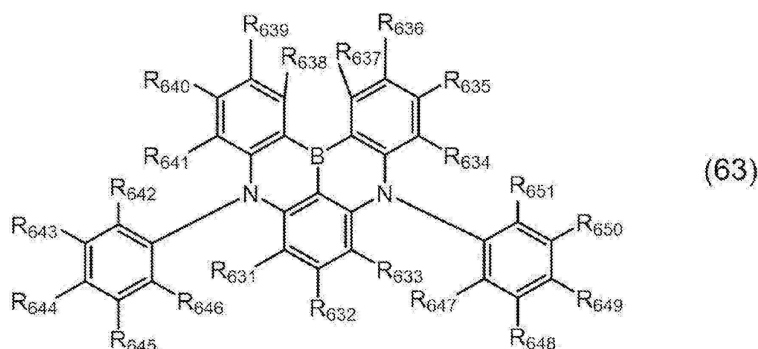
[1714] 치환 혹은 무치환의 탄소수 2~50의 알케닐기,

[1715] 치환 혹은 무치환의 탄소수 2~50의 알키닐기,

[1716] 치환 혹은 무치환의 고리 형성 탄소수 3~50의 시클로알킬기,

- [1717] 치환 혹은 무치환의 고리 형성 탄소수 6~50의 아릴기, 또는
- [1718] 치환 혹은 무치환의 고리 형성 원자수 5~50의 복소환기이고,
- [1719] $R_{611} \sim R_{621}$ 중의 인접한 2개 이상으로 이루어지는 조의 1조 이상이,
- [1720] 서로 결합하여 치환 혹은 무치환의 단환을 형성하거나,
- [1721] 서로 결합하여 치환 혹은 무치환의 축합환을 형성하거나, 또는
- [1722] 서로 결합하지 않으며,
- [1723] 상기 치환 혹은 무치환의 복소환을 형성하지 않고, 상기 단환을 형성하지 않고, 또한 상기 축합환을 형성하지 않는 $R_{611} \sim R_{621}$ 은, 각각 독립적으로
- [1724] 수소 원자,
- [1725] 치환 혹은 무치환의 탄소수 1~50의 알킬기,
- [1726] 치환 혹은 무치환의 탄소수 2~50의 알케닐기,
- [1727] 치환 혹은 무치환의 탄소수 2~50의 알키닐기,
- [1728] 치환 혹은 무치환의 고리 형성 탄소수 3~50의 시클로알킬기,
- [1729] $-\text{Si}(R_{901})(R_{902})(R_{903})$ 으로 표시되는 기,
- [1730] $-\text{O}(R_{904})$ 로 표시되는 기,
- [1731] $-\text{S}(R_{905})$ 로 표시되는 기,
- [1732] $-\text{N}(R_{906})(R_{907})$ 로 표시되는 기,
- [1733] 할로젠 원자,
- [1734] 시아노기,
- [1735] 니트로기,
- [1736] 치환 혹은 무치환의 고리 형성 탄소수 6~50의 아릴기, 또는
- [1737] 치환 혹은 무치환의 고리 형성 원자수 5~50의 복소환기이다.)
- [1738] 상기 일반식 (62)의 R_{601A} 및 R_{602A} 는 각각 상기 일반식 (6)의 R_{601} 및 R_{602} 에 대응하는 기이다.
- [1739] 예컨대, R_{601A} 와 R_{611} 이 결합하여 이들을 포함하는 고리와 a 고리에 대응하는 벤젠환이 축합한 2환 축합(또는 3환 축합 이상)의 합질소 복소환을 형성하여도 좋다. 해당 합질소 복소환의 구체예로서는, 구체예군 G2 중, 질소를 포함하는 2환 축합 이상의 복소환기에 대응하는 화합물 등을 들 수 있다. R_{601A} 와 R_{621} 이 결합하는 경우, R_{602A} 와 R_{613} 이 결합하는 경우, 및 R_{602A} 와 R_{614} 가 결합하는 경우도 상기과 동일하다.
- [1740] $R_{611} \sim R_{621}$ 중의 인접한 2개 이상으로 이루어지는 조의 1조 이상이,
- [1741] 서로 결합하여 치환 혹은 무치환의 단환을 형성하거나, 또는
- [1742] 서로 결합하여 치환 혹은 무치환의 축합환을 형성하여도 좋다.
- [1743] 예컨대, R_{611} 과 R_{612} 가 결합하여 이들이 결합하는 6원환에 대하여, 벤젠환, 인돌환, 피롤환, 벤조푸란환 또는 벤조티오펜환 등이 축합된 구조를 형성하여도 좋고, 형성된 축합환은, 나프탈렌환, 카르바졸환, 인돌환, 디벤조푸란환 또는 디벤조티오펜환이 된다.
- [1744] 일 실시형태에 있어서, 고리 형성에 기여하지 않는 $R_{611} \sim R_{621}$ 은, 각각 독립적으로
- [1745] 수소 원자,

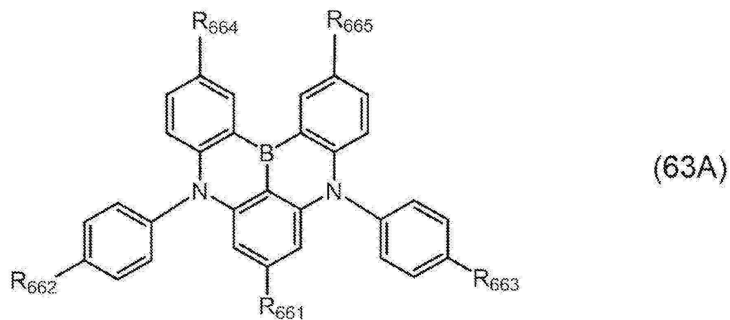
- [1746] 치환 혹은 무치환의 탄소수 1~50의 알킬기,
 [1747] 치환 혹은 무치환의 고리 형성 탄소수 6~50의 아릴기, 또는
 [1748] 치환 혹은 무치환의 고리 형성 원자수 5~50의 복소환기이다.
 [1749] 일 실시형태에 있어서, 고리 형성에 기여하지 않는 $R_{611} \sim R_{621}$ 은, 각각 독립적으로
 [1750] 수소 원자,
 [1751] 치환 혹은 무치환의 고리 형성 탄소수 6~50의 아릴기, 또는
 [1752] 치환 혹은 무치환의 고리 형성 원자수 5~50의 복소환기이다.
 [1753] 일 실시형태에 있어서, 고리 형성에 기여하지 않는 $R_{611} \sim R_{621}$ 은, 각각 독립적으로
 [1754] 수소 원자, 또는
 [1755] 치환 혹은 무치환의 탄소수 1~50의 알킬기이다.
 [1756] 일 실시형태에 있어서, 고리 형성에 기여하지 않는 $R_{611} \sim R_{621}$ 은, 각각 독립적으로
 [1757] 수소 원자, 또는
 [1758] 치환 혹은 무치환의 탄소수 1~50의 알킬기이고,
 [1759] $R_{611} \sim R_{621}$ 중 적어도 하나는 치환 혹은 무치환의 탄소수 1~50의 알킬기이다.
 [1760] 일 실시형태에 있어서, 상기 일반식 (62)로 표시되는 화합물은, 하기 일반식 (63)으로 표시되는 화합물이다.
 [1761] [화학식 139]



- [1762]
 [1763] (상기 일반식 (63)에 있어서,
 [1764] R_{631} 은 R_{646} 과 결합하여 치환 혹은 무치환의 복소환을 형성하거나, 또는 치환 혹은 무치환의 복소환을 형성하지 않고,
 [1765] R_{633} 은 R_{647} 과 결합하여 치환 혹은 무치환의 복소환을 형성하거나, 또는 치환 혹은 무치환의 복소환을 형성하지 않으며,
 [1766] R_{634} 는 R_{651} 과 결합하여 치환 혹은 무치환의 복소환을 형성하거나, 또는 치환 혹은 무치환의 복소환을 형성하지 않고,
 [1767] R_{641} 은 R_{642} 와 결합하여 치환 혹은 무치환의 복소환을 형성하거나, 또는 치환 혹은 무치환의 복소환을 형성하지 않으며,
 [1768] $R_{631} \sim R_{651}$ 중의 인접한 2개 이상으로 이루어지는 조의 1조 이상이,
 [1769] 서로 결합하여 치환 혹은 무치환의 단환을 형성하거나,
 [1770] 서로 결합하여 치환 혹은 무치환의 축합환을 형성하거나, 또는

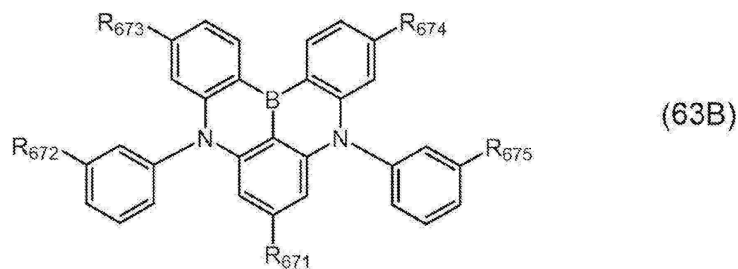
- [1771] 서로 결합하지 않고,
- [1772] 상기 치환 혹은 무치환의 복소환을 형성하지 않고, 상기 단환을 형성하지 않으며, 또한 상기 축합환을 형성하지 않는 $R_{631} \sim R_{651}$ 은, 각각 독립적으로
- [1773] 수소 원자,
- [1774] 치환 혹은 무치환의 탄소수 1~50의 알킬기,
- [1775] 치환 혹은 무치환의 탄소수 2~50의 알케닐기,
- [1776] 치환 혹은 무치환의 탄소수 2~50의 알키닐기,
- [1777] 치환 혹은 무치환의 고리 형성 탄소수 3~50의 시클로알킬기,
- [1778] $-\text{Si}(R_{901})(R_{902})(R_{903})$ 으로 표시되는 기,
- [1779] $-\text{O}(R_{904})$ 로 표시되는 기,
- [1780] $-\text{S}(R_{905})$ 로 표시되는 기,
- [1781] $-\text{N}(R_{906})(R_{907})$ 로 표시되는 기,
- [1782] 할로젠 원자,
- [1783] 시아노기,
- [1784] 니트로기,
- [1785] 치환 혹은 무치환의 고리 형성 탄소수 6~50의 아릴기, 또는
- [1786] 치환 혹은 무치환의 고리 형성 원자수 5~50의 복소환기이다.)
- [1787] R_{631} 은 R_{646} 과 결합하여 치환 혹은 무치환의 복소환을 형성하여도 좋다. 예컨대, R_{631} 과 R_{646} 이 결합하여 R_{646} 이 결합하는 벤젠환과, N을 포함하는 고리와, a 고리에 대응하는 벤젠환이 축합된 3환 축합 이상의 합질소 복소환을 형성하여도 좋다. 해당 합질소 복소환의 구체예로서는, 구체예군 G2 중, 질소를 포함하는 3환 축합 이상의 복소환기에 대응하는 화합물 등을 들 수 있다. R_{633} 과 R_{647} 이 결합하는 경우, R_{634} 와 R_{651} 이 결합하는 경우, 및 R_{641} 과 R_{642} 가 결합하는 경우도 상기와 동일하다.
- [1788] 일 실시형태에 있어서, 고리 형성에 기여하지 않는 $R_{631} \sim R_{651}$ 은, 각각 독립적으로
- [1789] 수소 원자,
- [1790] 치환 혹은 무치환의 탄소수 1~50의 알킬기,
- [1791] 치환 혹은 무치환의 고리 형성 탄소수 6~50의 아릴기, 또는
- [1792] 치환 혹은 무치환의 고리 형성 원자수 5~50의 복소환기이다.
- [1793] 일 실시형태에 있어서, 고리 형성에 기여하지 않는 $R_{631} \sim R_{651}$ 은, 각각 독립적으로
- [1794] 수소 원자,
- [1795] 치환 혹은 무치환의 고리 형성 탄소수 6~50의 아릴기, 또는
- [1796] 치환 혹은 무치환의 고리 형성 원자수 5~50의 복소환기이다.
- [1797] 일 실시형태에 있어서, 고리 형성에 기여하지 않는 $R_{631} \sim R_{651}$ 은, 각각 독립적으로
- [1798] 수소 원자, 또는
- [1799] 치환 혹은 무치환의 탄소수 1~50의 알킬기이다.
- [1800] 일 실시형태에 있어서, 고리 형성에 기여하지 않는 $R_{631} \sim R_{651}$ 은, 각각 독립적으로

- [1801] 수소 원자, 또는
- [1802] 치환 혹은 무치환의 탄소수 1~50의 알킬기이며,
- [1803] $R_{631} \sim R_{651}$ 중 적어도 하나는 치환 혹은 무치환의 탄소수 1~50의 알킬기이다.
- [1804] 일 실시형태에 있어서, 상기 일반식 (63)으로 표시되는 화합물은, 하기 일반식 (63A)로 표시되는 화합물이다.
- [1805] [화학식 140]



- [1806]
- [1807] (상기 일반식 (63A)에 있어서,
- [1808] R_{661} 은,
- [1809] 수소 원자,
- [1810] 치환 혹은 무치환의 탄소수 1~50의 알킬기,
- [1811] 치환 혹은 무치환의 탄소수 2~50의 알케닐기,
- [1812] 치환 혹은 무치환의 탄소수 2~50의 알키닐기,
- [1813] 치환 혹은 무치환의 고리 형성 탄소수 3~50의 시클로알킬기, 또는
- [1814] 치환 혹은 무치환의 고리 형성 탄소수 6~50의 아릴기이며,
- [1815] $R_{662} \sim R_{665}$ 는, 각각 독립적으로
- [1816] 치환 혹은 무치환의 탄소수 1~50의 알킬기,
- [1817] 치환 혹은 무치환의 탄소수 2~50의 알케닐기,
- [1818] 치환 혹은 무치환의 탄소수 2~50의 알키닐기,
- [1819] 치환 혹은 무치환의 고리 형성 탄소수 3~50의 시클로알킬기, 또는
- [1820] 치환 혹은 무치환의 고리 형성 탄소수 6~50의 아릴기이다.)
- [1821] 일 실시형태에 있어서, $R_{661} \sim R_{665}$ 는, 각각 독립적으로
- [1822] 치환 혹은 무치환의 탄소수 1~50의 알킬기, 또는
- [1823] 치환 혹은 무치환의 고리 형성 탄소수 6~50의 아릴기이다.
- [1824] 일 실시형태에 있어서, $R_{661} \sim R_{665}$ 는, 각각 독립적으로 치환 혹은 무치환의 탄소수 1~50의 알킬기이다.
- [1825] 일 실시형태에 있어서, 상기 일반식 (63)으로 표시되는 화합물은, 하기 일반식 (63B)로 표시되는 화합물이다.

[1826] [화학식 141]



[1827]

[1828] (상기 일반식 (63B)에 있어서,

[1829] R_{671} 및 R_{672} 는, 각각 독립적으로

[1830] 수소 원자,

[1831] 치환 혹은 무치환의 탄소수 1~50의 알킬기,

[1832] 치환 혹은 무치환의 탄소수 2~50의 알케닐기,

[1833] 치환 혹은 무치환의 탄소수 2~50의 알키닐기,

[1834] 치환 혹은 무치환의 고리 형성 탄소수 3~50의 시클로알킬기,

[1835] $-N(R_{906})(R_{907})$ 로 표시되는 기, 또는

[1836] 치환 혹은 무치환의 고리 형성 탄소수 6~50의 아릴기이고,

[1837] $R_{673} \sim R_{675}$ 는, 각각 독립적으로

[1838] 치환 혹은 무치환의 탄소수 1~50의 알킬기,

[1839] 치환 혹은 무치환의 탄소수 2~50의 알케닐기,

[1840] 치환 혹은 무치환의 탄소수 2~50의 알키닐기,

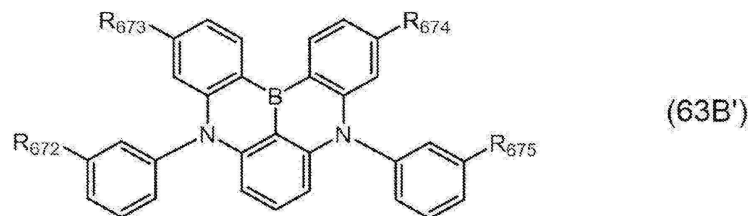
[1841] 치환 혹은 무치환의 고리 형성 탄소수 3~50의 시클로알킬기,

[1842] $-N(R_{906})(R_{907})$ 로 표시되는 기, 또는

[1843] 치환 혹은 무치환의 고리 형성 탄소수 6~50의 아릴기이다.)

[1844] 일 실시형태에 있어서, 상기 일반식 (63)으로 표시되는 화합물은, 하기 일반식 (63B')로 표시되는 화합물이다.

[1845] [화학식 142]



[1846]

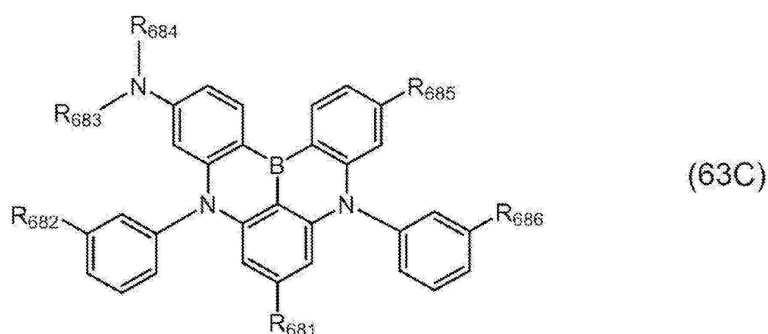
[1847] (상기 일반식 (63B')에 있어서, $R_{672} \sim R_{675}$ 는, 각각 독립적으로 상기 일반식 (63B)에 있어서의 $R_{672} \sim R_{675}$ 와 동일한 의미이다.)

[1848] 일 실시형태에 있어서, $R_{671} \sim R_{675}$ 중 적어도 하나는,

[1849] 치환 혹은 무치환의 탄소수 1~50의 알킬기,

[1850] 치환 혹은 무치환의 탄소수 2~50의 알케닐기,

- [1851] 치환 혹은 무치환의 탄소수 2~50의 알킬닐기,
 [1852] 치환 혹은 무치환의 고리 형성 탄소수 3~50의 시클로알킬기,
 [1853] -N(R₉₀₆)(R₉₀₇)로 표시되는 기, 또는
 [1854] 치환 혹은 무치환의 고리 형성 탄소수 6~50의 아릴기이다.
 [1855] 일 실시형태에 있어서,
 [1856] R₆₇₂는,
 [1857] 수소 원자,
 [1858] 치환 혹은 무치환의 탄소수 1~50의 알킬기,
 [1859] -N(R₉₀₆)(R₉₀₇)로 표시되는 기, 또는
 [1860] 치환 혹은 무치환의 고리 형성 탄소수 6~50의 아릴기이고,
 [1861] R₆₇₁ 및 R₆₇₃~R₆₇₅는, 각각 독립적으로
 [1862] 치환 혹은 무치환의 탄소수 1~50의 알킬기,
 [1863] -N(R₉₀₆)(R₉₀₇)로 표시되는 기, 또는
 [1864] 치환 혹은 무치환의 고리 형성 탄소수 6~50의 아릴기이다.
 [1865] 일 실시형태에 있어서, 상기 일반식 (63)으로 표시되는 화합물은, 하기 일반식 (63C)로 표시되는 화합물이다.
 [1866] [화학식 143]



- [1867]
 [1868] (상기 일반식 (63C)에 있어서,
 [1869] R₆₈₁ 및 R₆₈₂는, 각각 독립적으로
 [1870] 수소 원자,
 [1871] 치환 혹은 무치환의 탄소수 1~50의 알킬기,
 [1872] 치환 혹은 무치환의 탄소수 2~50의 알케닐기,
 [1873] 치환 혹은 무치환의 탄소수 2~50의 알킬닐기,
 [1874] 치환 혹은 무치환의 고리 형성 탄소수 3~50의 시클로알킬기, 또는
 [1875] 치환 혹은 무치환의 고리 형성 탄소수 6~50의 아릴기이다.
 [1876] R₆₈₃~R₆₈₆은, 각각 독립적으로
 [1877] 치환 혹은 무치환의 탄소수 1~50의 알킬기,
 [1878] 치환 혹은 무치환의 탄소수 2~50의 알케닐기,

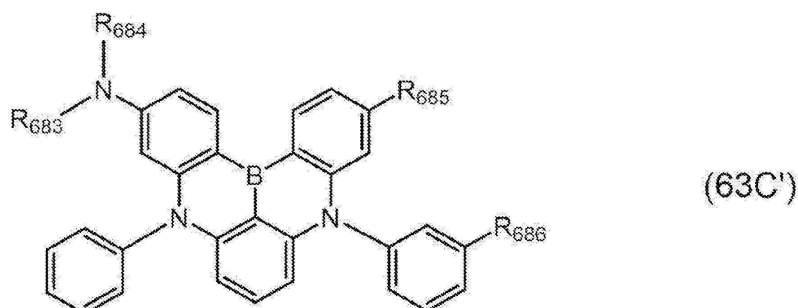
[1879] 치환 혹은 무치환의 탄소수 2~50의 알킬닐기,

[1880] 치환 혹은 무치환의 고리 형성 탄소수 3~50의 시클로알킬기, 또는

[1881] 치환 혹은 무치환의 고리 형성 탄소수 6~50의 아릴기이다.)

[1882] 일 실시형태에 있어서, 상기 일반식 (63)으로 표시되는 화합물은, 하기 일반식 (63C')로 표시되는 화합물이다.

[1883] [화학식 144]



[1884]

[1885] (상기 일반식 (63C')에 있어서, $R_{683} \sim R_{686}$ 은, 각각 독립적으로 상기 일반식 (63C)에 있어서의 $R_{683} \sim R_{686}$ 과 동일한 의미이다.)

[1886] 일 실시형태에 있어서, $R_{681} \sim R_{686}$ 은, 각각 독립적으로

[1887] 치환 혹은 무치환의 탄소수 1~50의 알킬기, 또는

[1888] 치환 혹은 무치환의 고리 형성 탄소수 6~50의 아릴기이다.

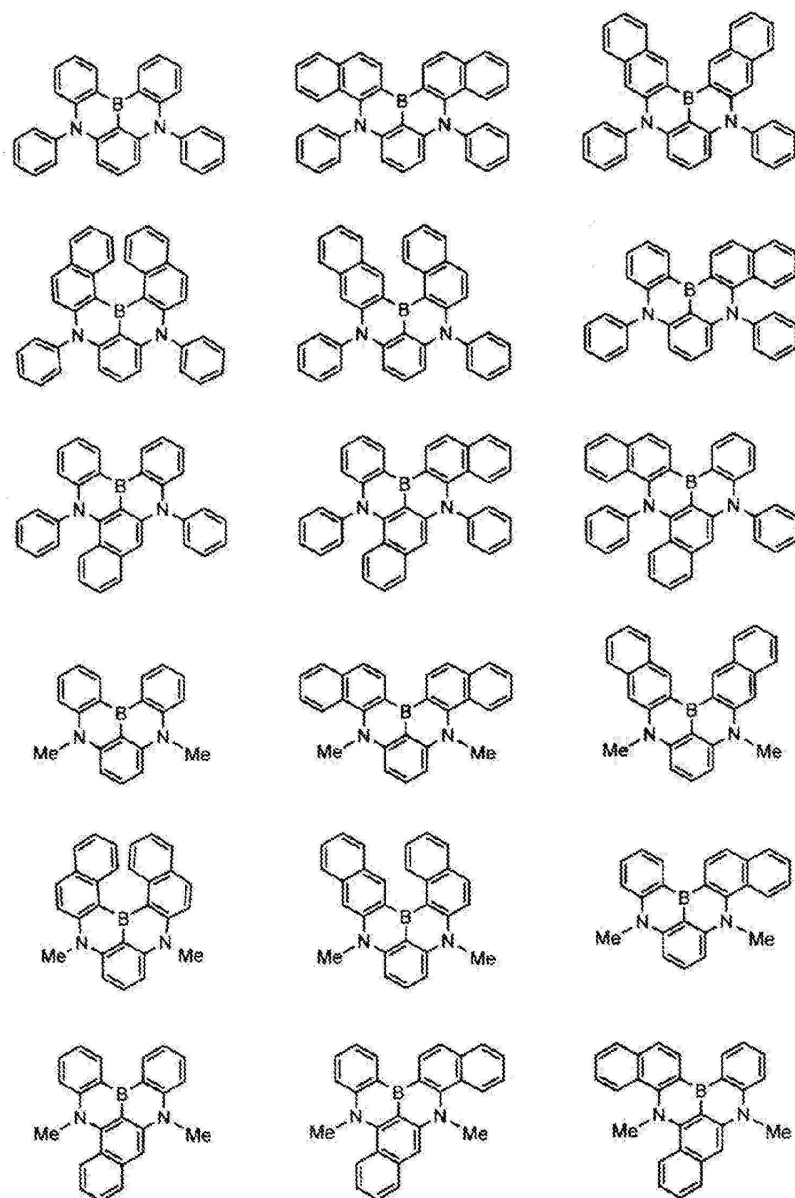
[1889] 일 실시형태에 있어서, $R_{681} \sim R_{686}$ 은, 각각 독립적으로 치환 혹은 무치환의 고리 형성 탄소수 6~50의 아릴기이다.

[1890] 상기 일반식 (6)으로 표시되는 화합물은, 우선 a 고리, b 고리 및 c 고리를 연결기($N-R_{601}$ 을 포함하는 기 및 $N-R_{602}$ 를 포함하는 기)로 결합시킴으로써 중간체를 제조하고(제1 반응), a 고리, b 고리 및 c 고리를 연결기(붕소 원자를 포함하는 기)로 결합시킴으로써 최종 생성물을 제조할 수 있다(제2 반응). 제1 반응에서는 부흐발트-하르트비히 반응 등의 아미노화 반응을 적용할 수 있다. 제2 반응에서는, 탠덤 헤테로-프리델 크래프츠 반응 등을 적용할 수 있다.

[1891] 이하에, 상기 일반식 (6)으로 표시되는 화합물의 구체예를 기재하였으나, 이들은 예시에 불과하며, 상기 일반식 (6)으로 표시되는 화합물은 하기 구체예에 한정되지 않는다.

[1892]

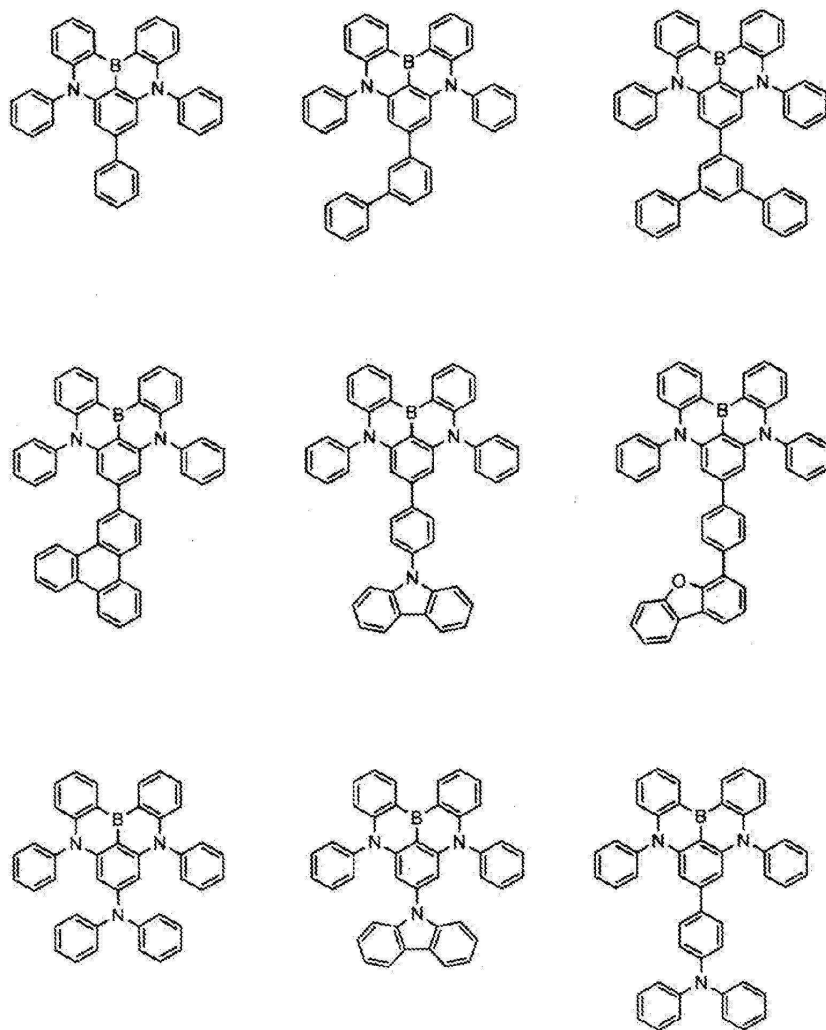
[화학식 145]



[1893]

[1894]

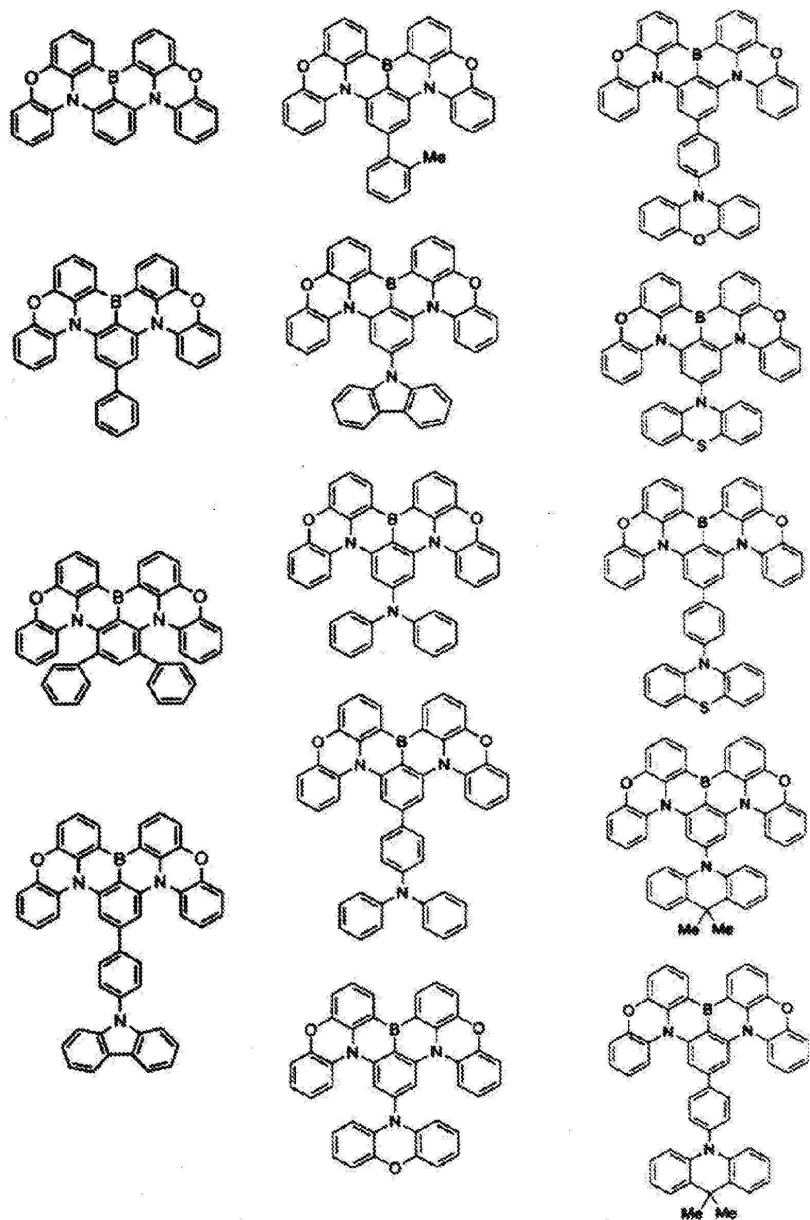
[화학식 146]



[1895]

[1896]

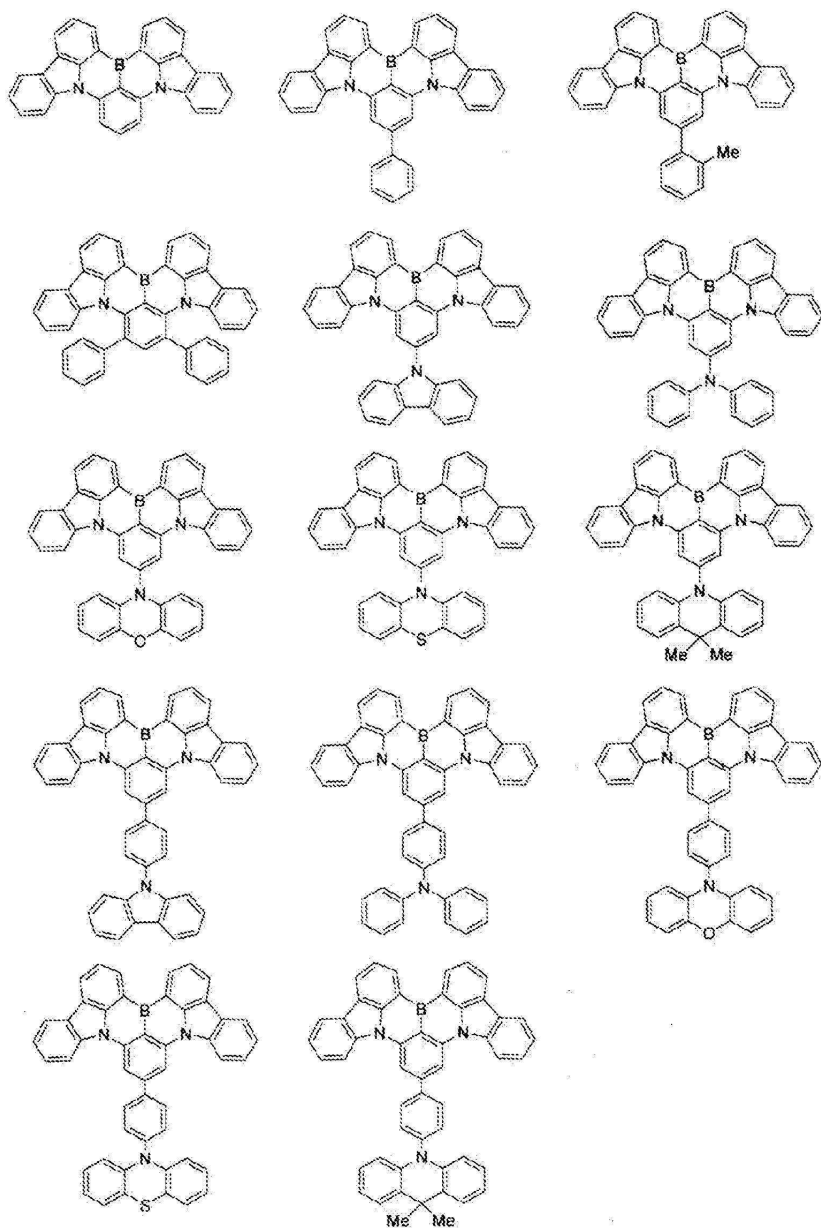
[화학식 147]



[1897]

[1898]

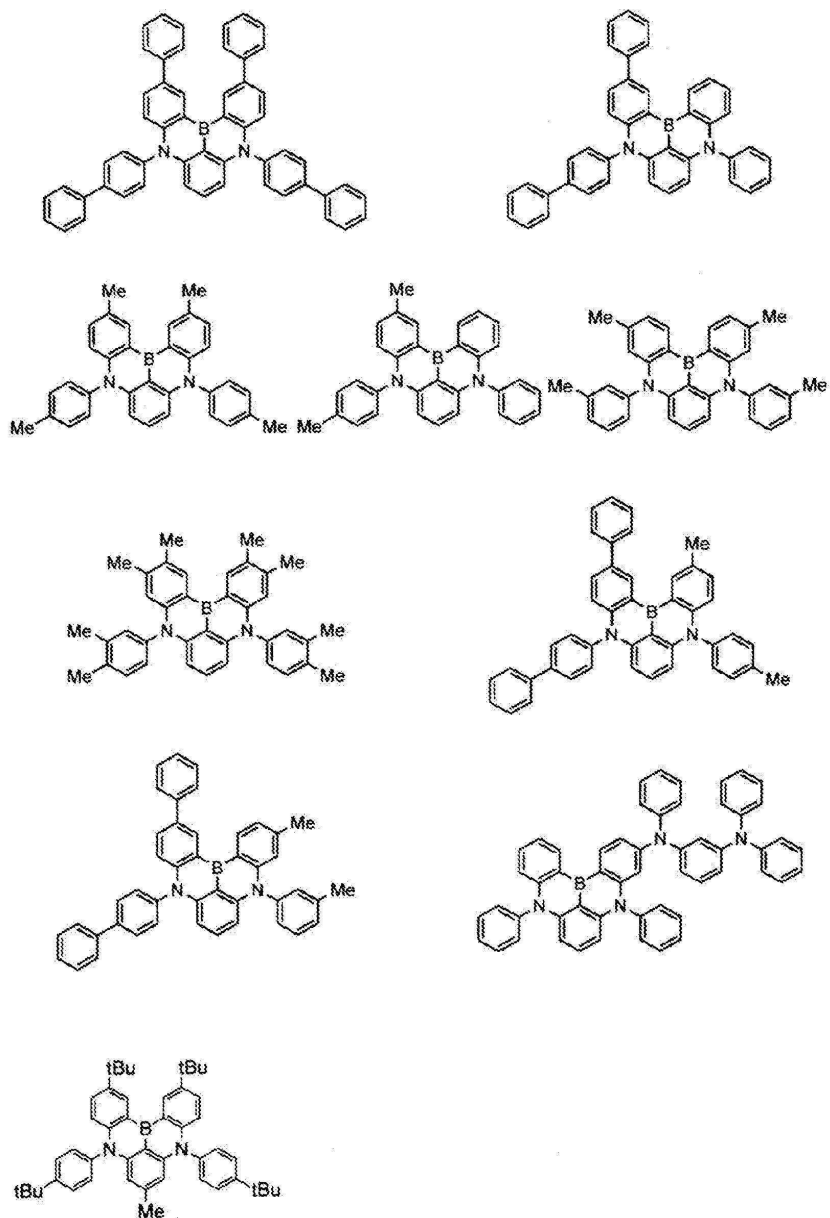
[화학식 148]



[1899]

[1900]

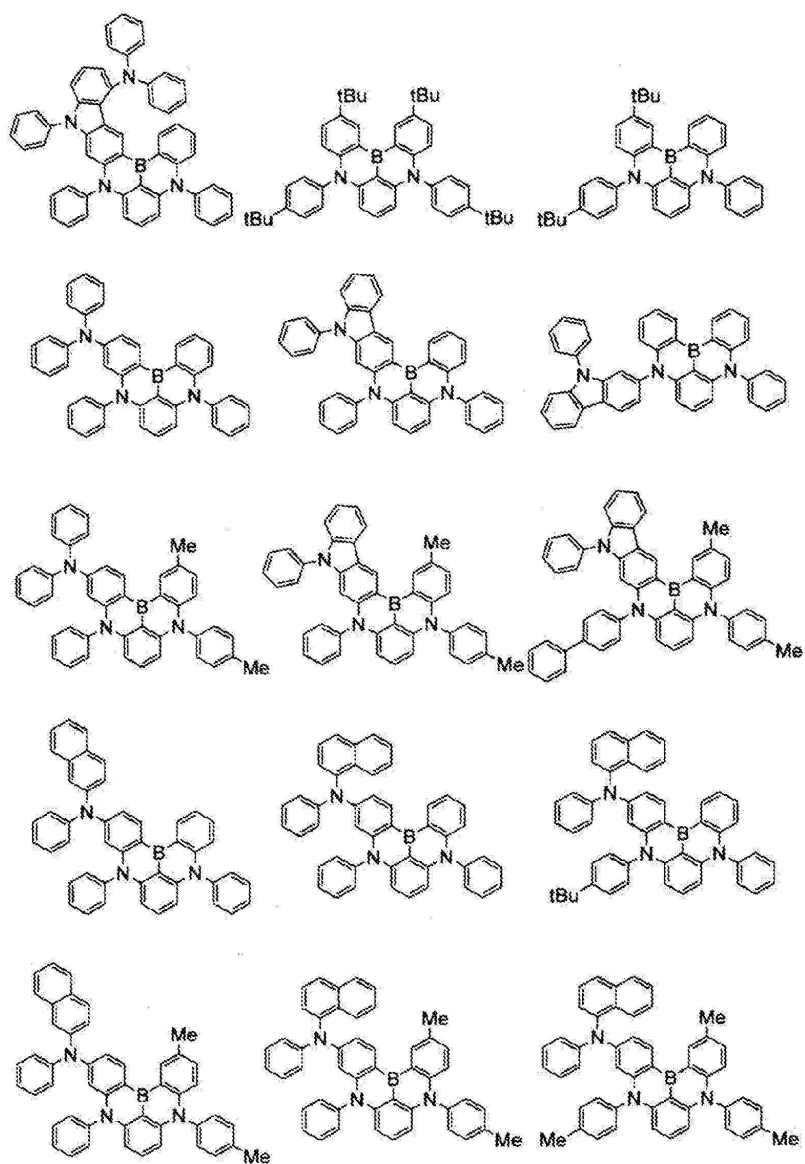
[화학식 149]



[1901]

[1902]

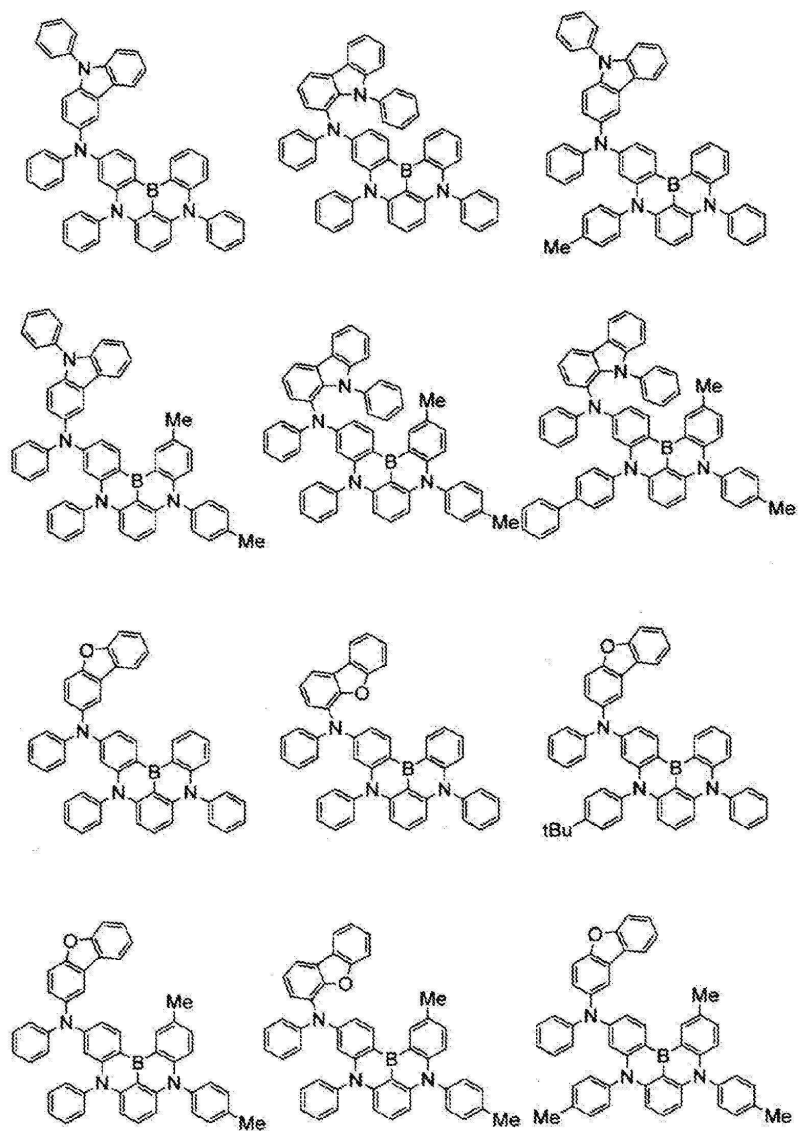
[화학식 150]



[1903]

[1904]

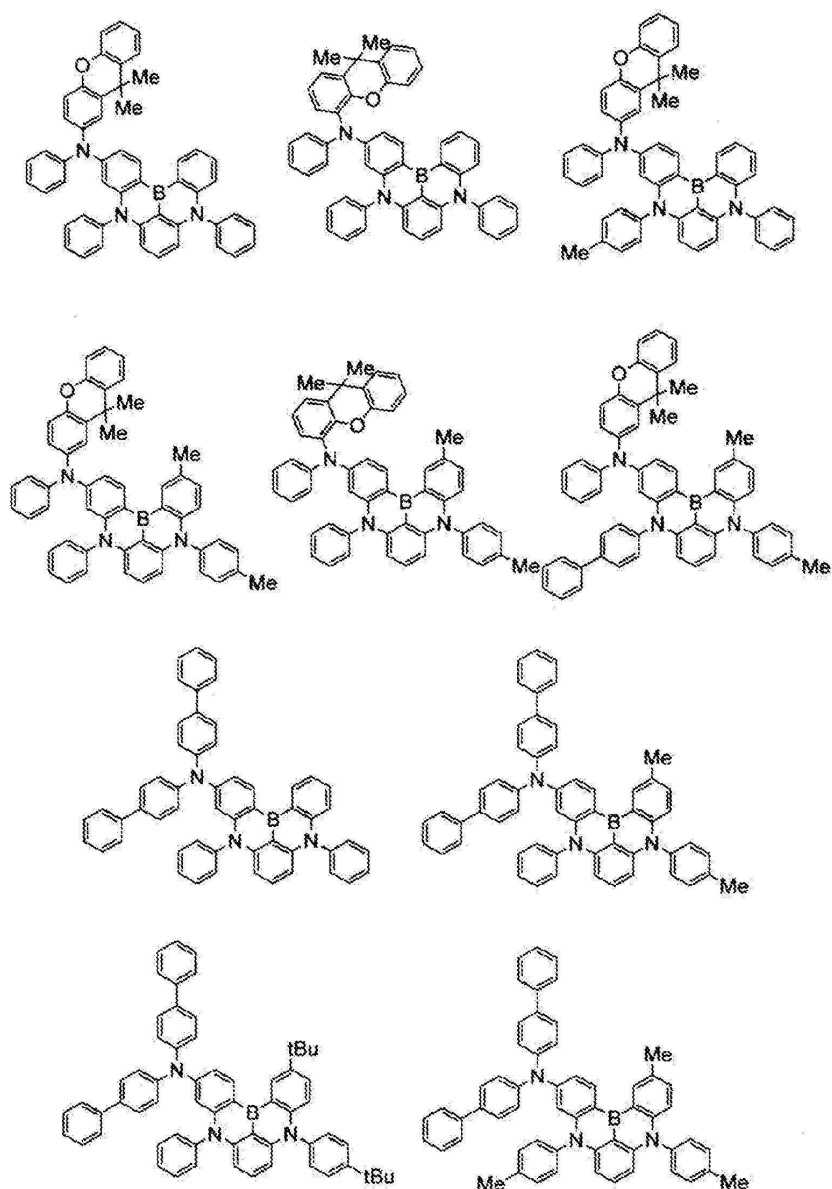
[화학식 151]



[1905]

[1906]

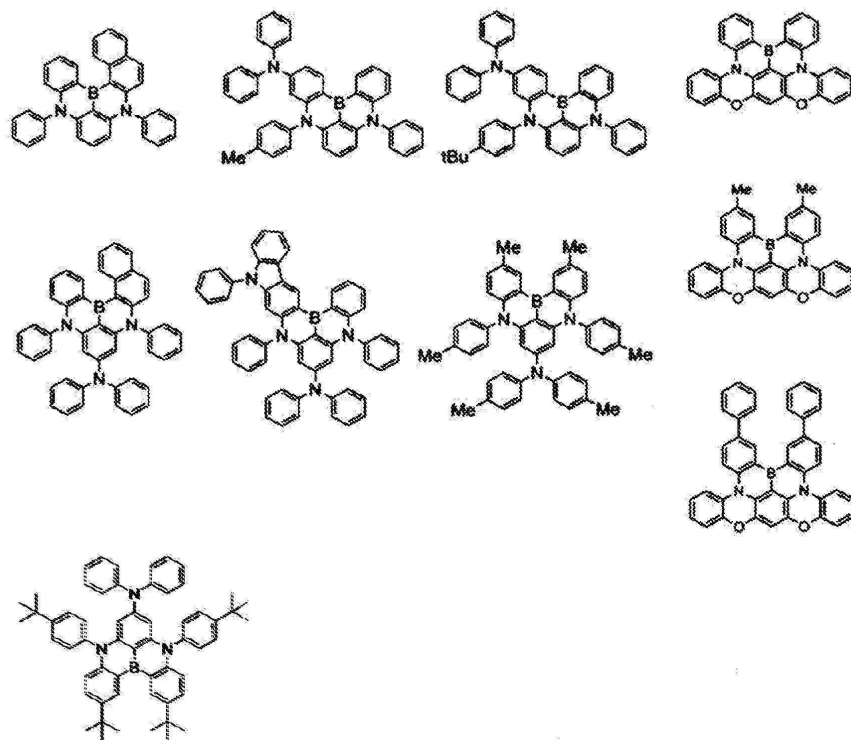
[화학식 152]



[1907]

[1908]

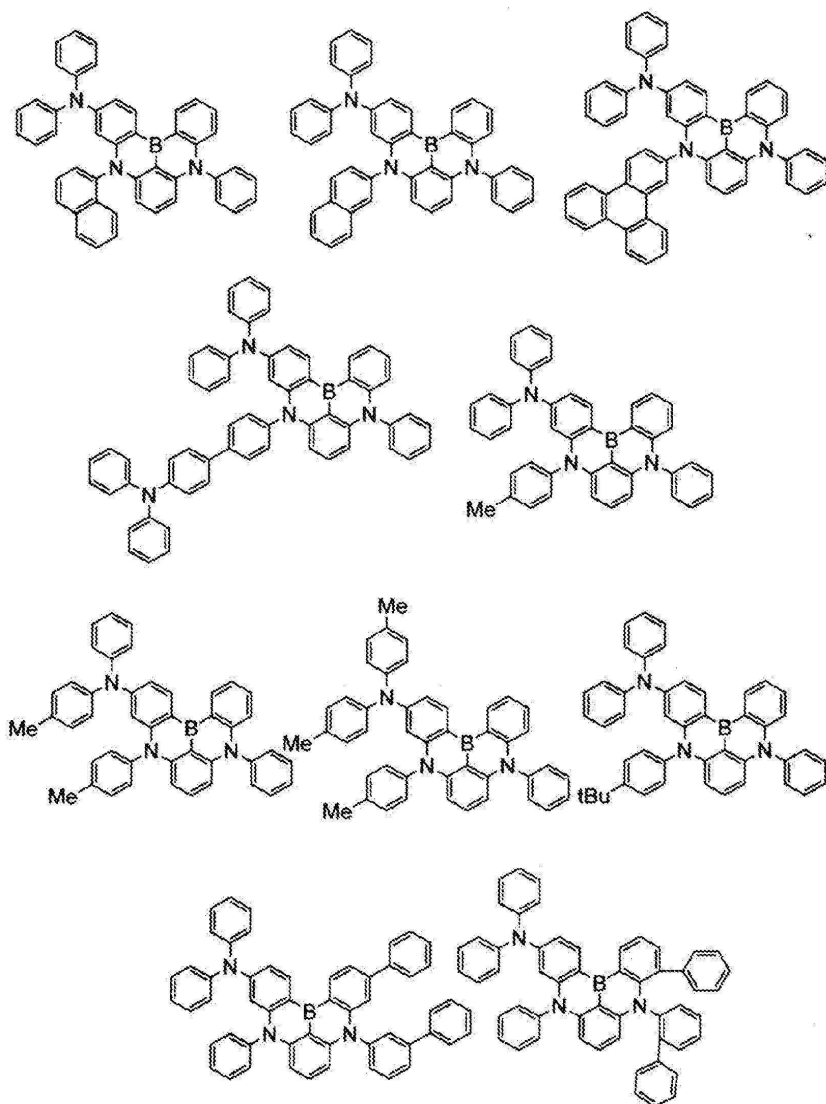
[화학식 153]



[1909]

[1910]

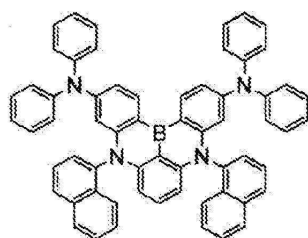
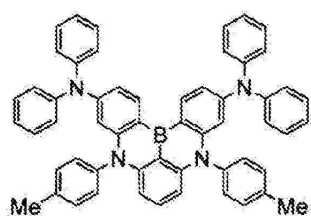
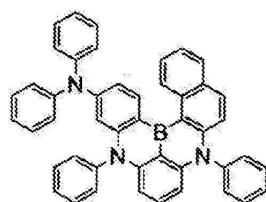
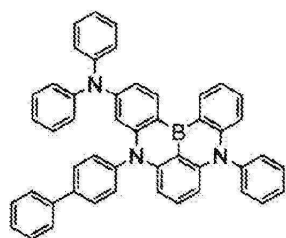
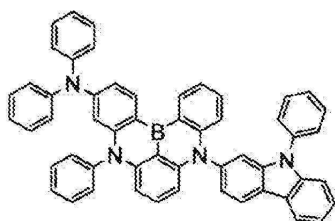
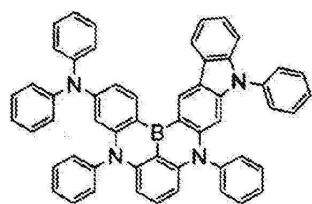
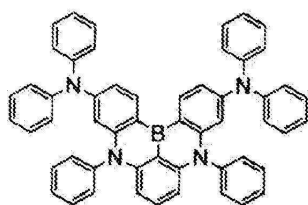
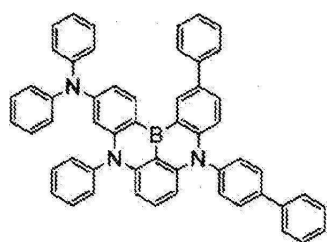
[화학식 154]



[1911]

[1912]

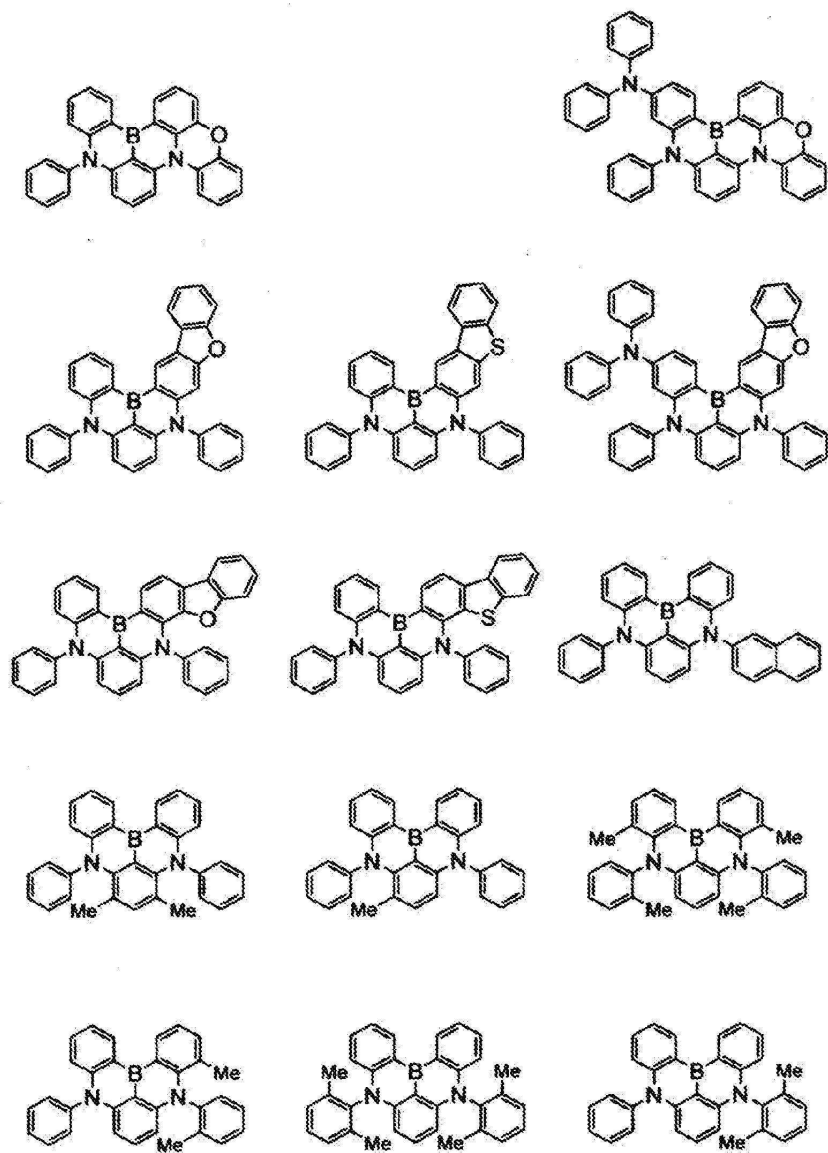
[화학식 155]



[1913]

[1914]

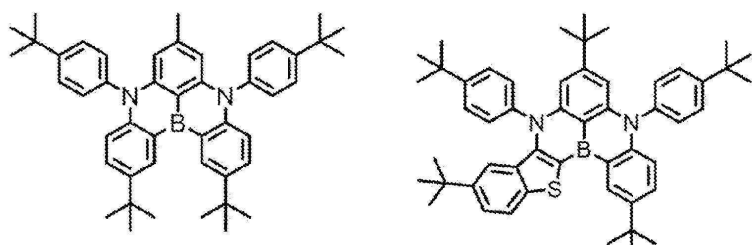
[화학식 156]



[1915]

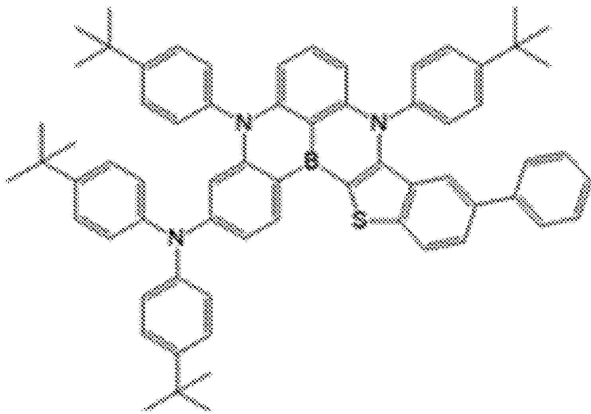
[1916]

[화학식 157]



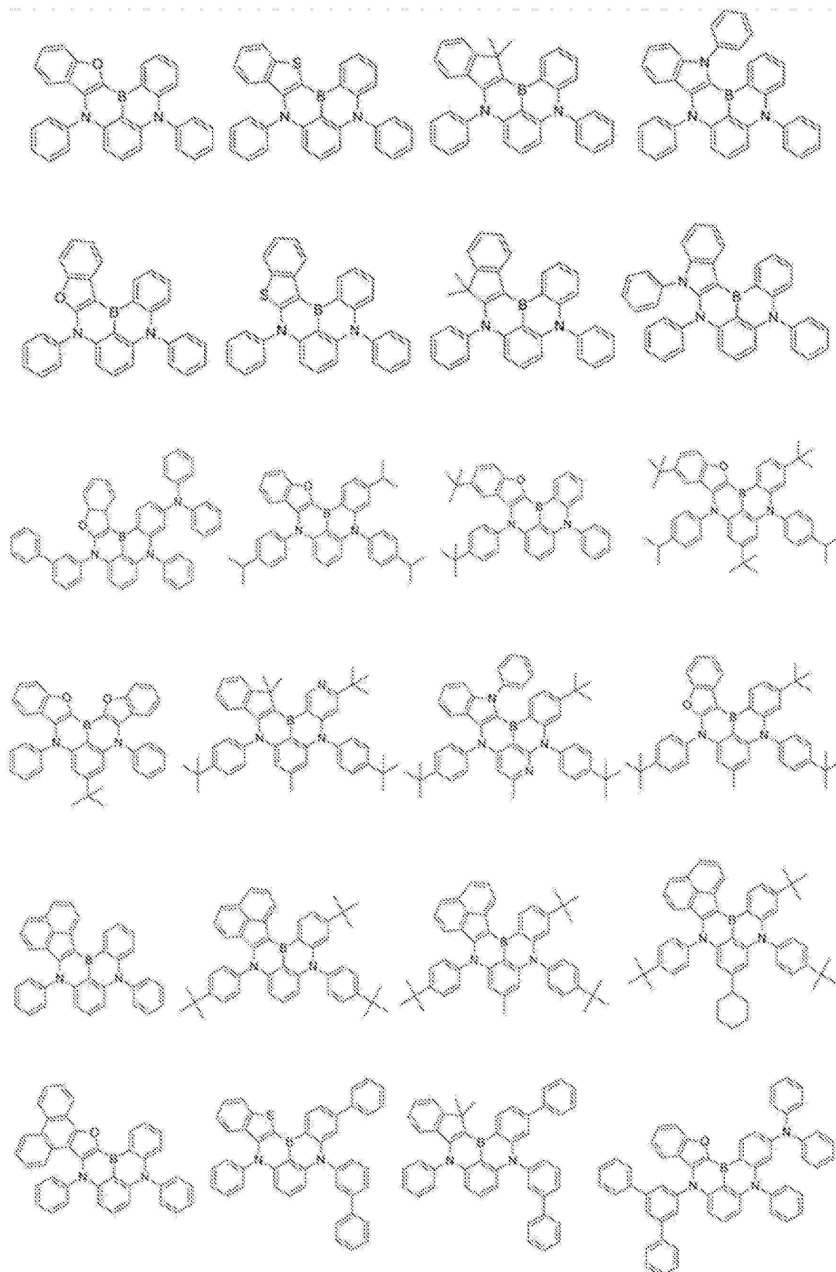
[1917]

[1918] [화학식 158]



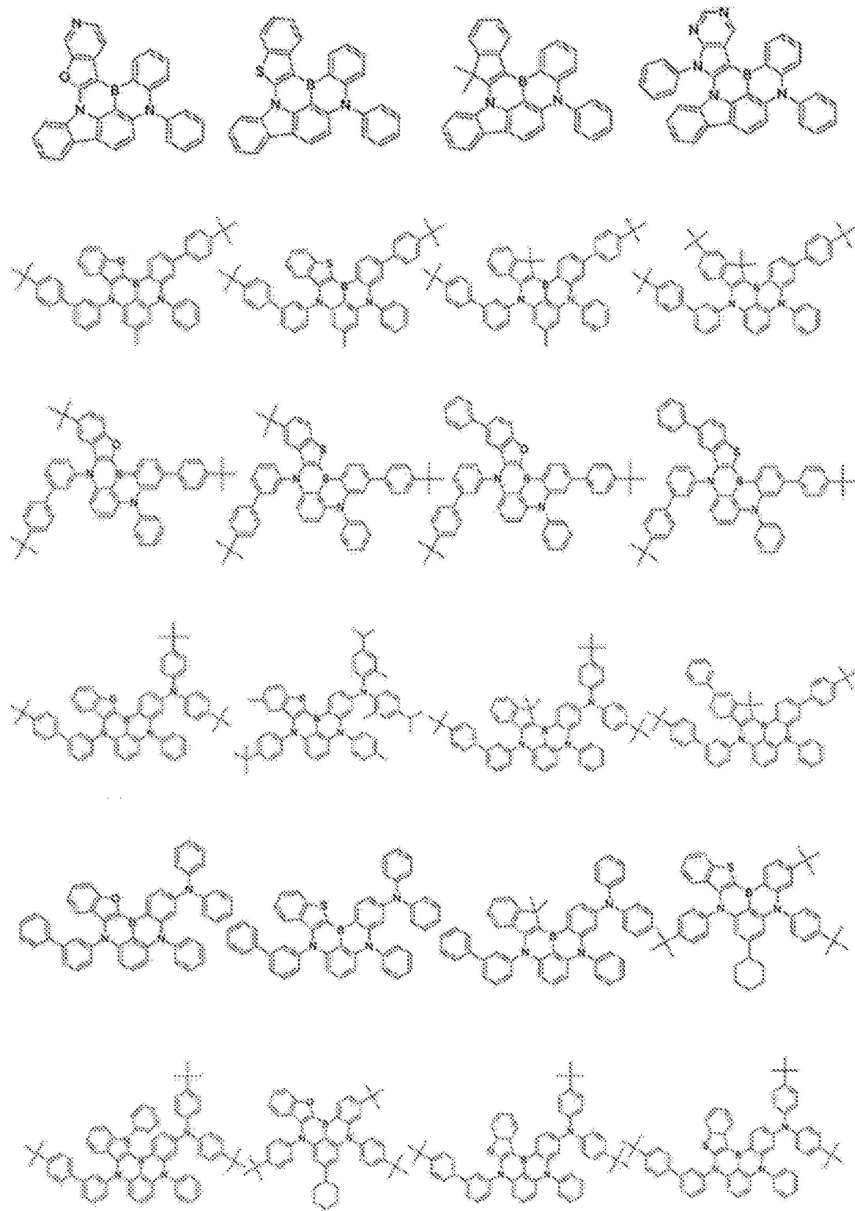
[1919]

[1920] [화학식 159]



[1921]

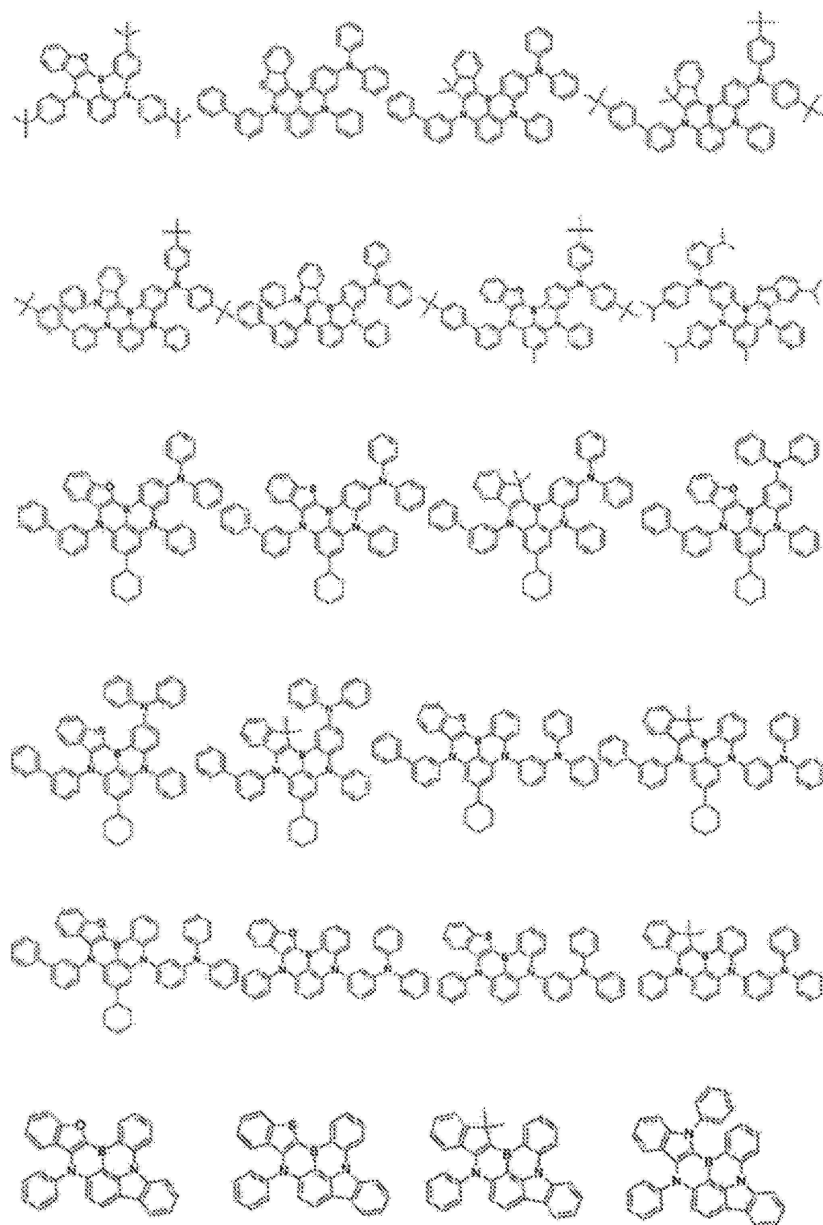
[1922] [화학식 160]



[1923]

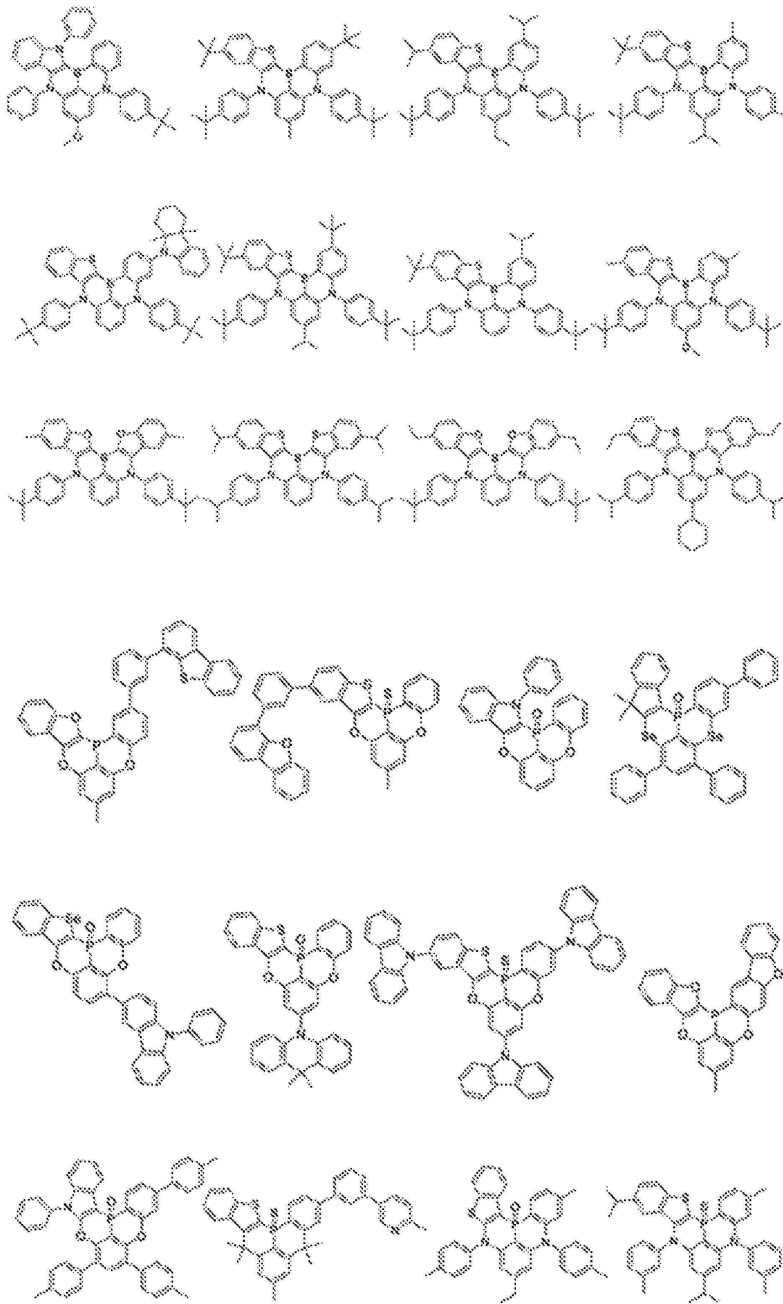
[1924]

[화학식 161]



[1925]

[1926] [화학식 162]

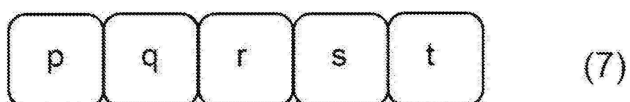


[1927]

[1928] (일반식 (7)로 표시되는 화합물)

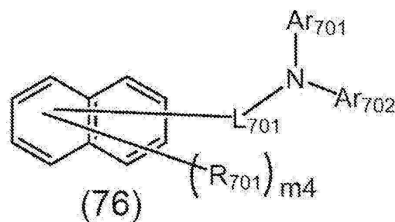
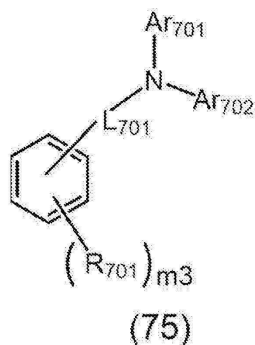
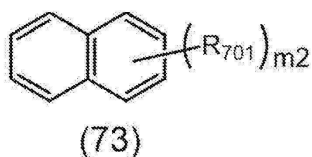
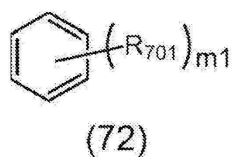
[1929] 일반식 (7)로 표시되는 화합물에 대해서 설명한다.

[1930] [화학식 163]



[1931]

[1932] [화학식 164]



[1933]

[1934] (상기 일반식 (7)에 있어서,

[1935] r 고리는 인접 고리의 임의의 위치에서 축합하는 상기 일반식 (72) 또는 일반식 (73)으로 표시되는 고리이고,

[1936] q 고리 및 s 고리는, 각각 독립적으로 인접 고리의 임의의 위치에서 축합하는 상기 일반식 (74)로 표시되는 고리이며,

[1937] p 고리 및 t 고리는, 각각 독립적으로 인접 고리의 임의의 위치에서 축합하는 상기 일반식 (75) 또는 일반식 (76)으로 표시되는 구조이고,

[1938] X7은 산소 원자, 황 원자, 또는 NR702이다.

[1939] R701이 복수 존재하는 경우, 인접하는 복수의 R701은,

[1940] 서로 결합하여 치환 혹은 무치환의 단환을 형성하거나,

[1941] 서로 결합하여 치환 혹은 무치환의 축합환을 형성하거나, 또는

[1942] 서로 결합하지 않고,

[1943] 상기 단환을 형성하지 않고, 또한 상기 축합환을 형성하지 않는 R701 및 R702는, 각각 독립적으로

[1944] 치환 혹은 무치환의 탄소수 1~50의 알킬기,

[1945] 치환 혹은 무치환의 탄소수 2~50의 알케닐기,

[1946] 치환 혹은 무치환의 탄소수 2~50의 알키닐기,

[1947] 치환 혹은 무치환의 고리 형성 탄소수 3~50의 시클로알킬기,

[1948] -Si(R901)(R902)(R903)으로 표시되는 기,

[1949] -O-(R904)로 표시되는 기,

[1950] -S-(R905)로 표시되는 기,

[1951] -N(R906)(R907)로 표시되는 기,

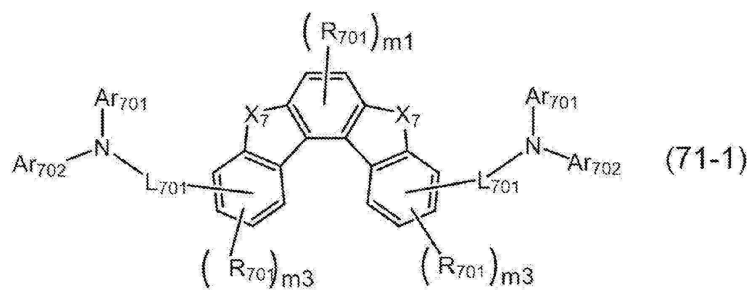
[1952] 할로젠 원자,

[1953] 시아노기,

[1954] 니트로기,

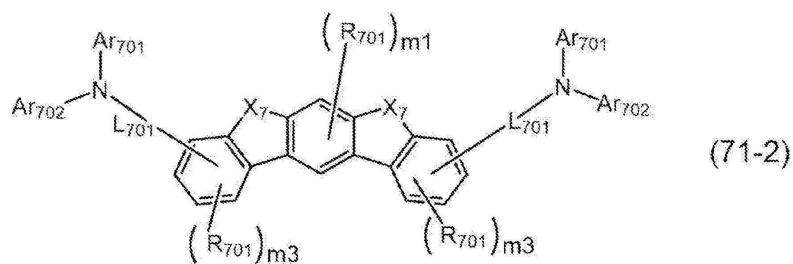
- [1955] 치환 혹은 무치환의 고리 형성 탄소수 6~50의 아릴기, 또는
- [1956] 치환 혹은 무치환의 고리 형성 원자수 5~50의 복소환기이고,
- [1957] Ar_{701} 및 Ar_{702} 는, 각각 독립적으로
- [1958] 치환 혹은 무치환의 탄소수 1~50의 알킬기,
- [1959] 치환 혹은 무치환의 탄소수 2~50의 알케닐기,
- [1960] 치환 혹은 무치환의 탄소수 2~50의 알키닐기,
- [1961] 치환 혹은 무치환의 고리 형성 탄소수 3~50의 시클로알킬기,
- [1962] 치환 혹은 무치환의 고리 형성 탄소수 6~50의 아릴기, 또는
- [1963] 치환 혹은 무치환의 고리 형성 원자수 5~50의 복소환기이며,
- [1964] L_{701} 은,
- [1965] 치환 혹은 무치환의 탄소수 1~50의 알킬렌기,
- [1966] 치환 혹은 무치환의 탄소수 2~50의 알케닐렌기,
- [1967] 치환 혹은 무치환의 탄소수 2~50의 알키닐렌기,
- [1968] 치환 혹은 무치환의 고리 형성 탄소수 3~50의 시클로알킬렌기,
- [1969] 치환 혹은 무치환의 고리 형성 탄소수 6~50의 아릴렌기, 또는
- [1970] 치환 혹은 무치환의 고리 형성 원자수 5~50의 2가의 복소환기이고,
- [1971] m_1 은 0, 1 또는 2이며,
- [1972] m_2 는 0, 1, 2, 3 또는 4이고,
- [1973] m_3 은, 각각 독립적으로 0, 1, 2 또는 3이며,
- [1974] m_4 는, 독립적으로 0, 1, 2, 3, 4 또는 5이고,
- [1975] R_{701} 이 복수 존재하는 경우, 복수의 R_{701} 은 서로 동일하거나 또는 상이하며,
- [1976] X_7 이 복수 존재하는 경우, 복수의 X_7 은 서로 동일하거나 또는 상이하고,
- [1977] R_{702} 가 복수 존재하는 경우, 복수의 R_{702} 는 서로 동일하거나 또는 상이하며,
- [1978] Ar_{701} 이 복수 존재하는 경우, 복수의 Ar_{701} 은 서로 동일하거나 또는 상이하고,
- [1979] Ar_{702} 가 복수 존재하는 경우, 복수의 Ar_{702} 는 서로 동일하거나 또는 상이하며,
- [1980] L_{701} 이 복수 존재하는 경우, 복수의 L_{701} 은 서로 동일하거나 또는 상이하다.)
- [1981] 상기 일반식 (7)에 있어서, p 고리, q 고리, r 고리, s 고리 및 t 고리의 각 고리는 인접 고리와 탄소 원자 2개를 공유하여 축합한다. 축합하는 위치 및 방향은 한정되지 않고, 임의의 위치 및 방향에서 축합 가능하다.
- [1982] 일 실시형태에 있어서, r 고리로서의 상기 일반식 (72) 또는 일반식 (73)에 있어서, $m_1=0$ 또는 $m_2=0$ 이다.
- [1983] 일 실시형태에 있어서, 상기 일반식 (7)로 표시되는 화합물은, 하기 일반식 (71-1)~(71-6) 중 어느 하나로 표시된다.

[1984] [화학식 165]



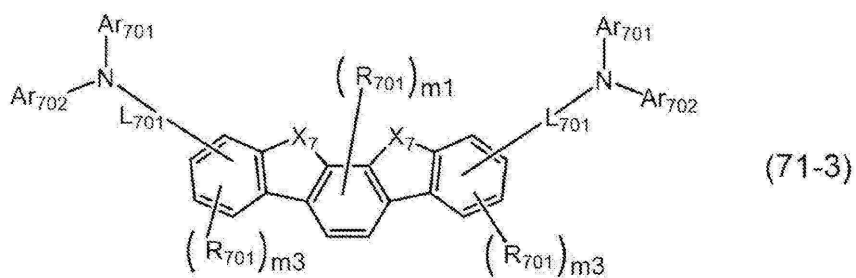
[1985]

[1986] [화학식 166]



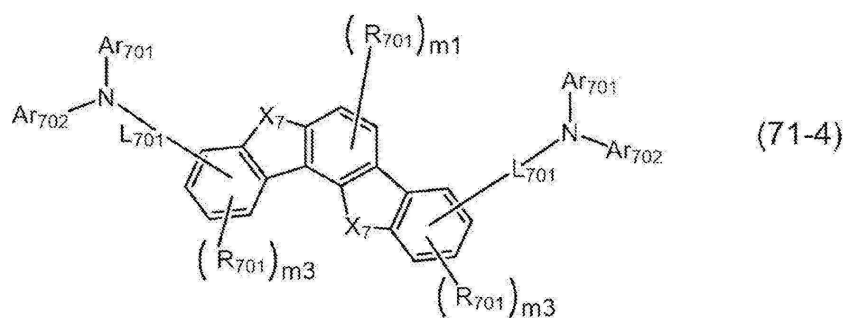
[1987]

[1988] [화학식 167]



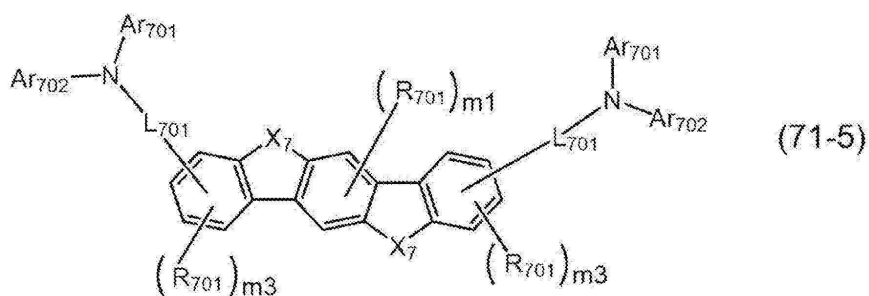
[1989]

[1990] [화학식 168]



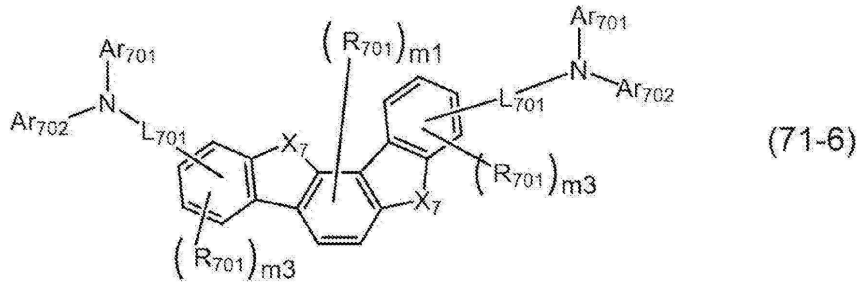
[1991]

[1992] [화학식 169]



[1993]

[1994] [화학식 170]

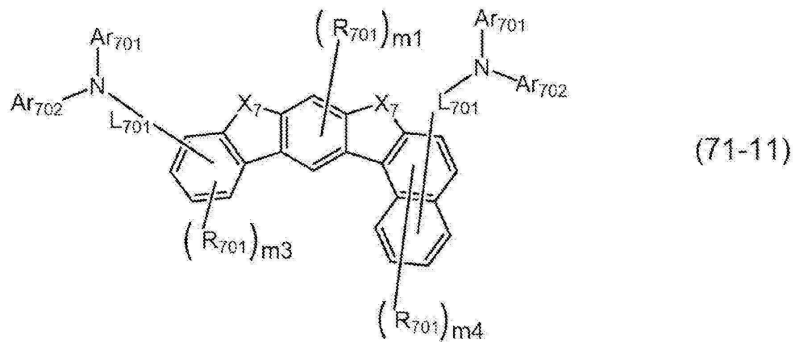


[1995]

[1996] (상기 일반식 (71-1)~일반식 (71-6)에 있어서, R_{701} , X_7 , Ar_{701} , Ar_{702} , L_{701} , m_1 및 m_3 은 각각 상기 일반식 (7)에 있어서의 R_{701} , X_7 , Ar_{701} , Ar_{702} , L_{701} , m_1 및 m_3 과 동일한 의미이다.)

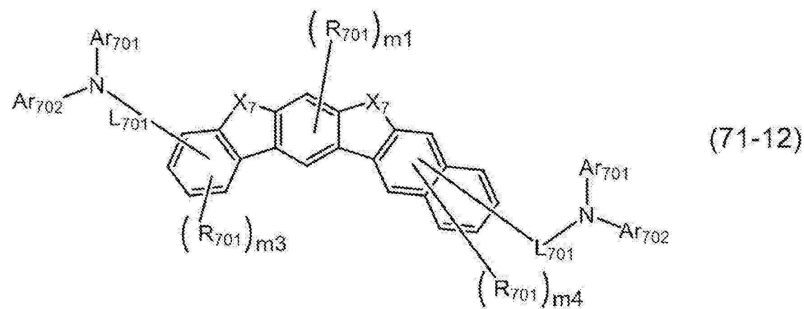
[1997] 일 실시형태에 있어서, 상기 일반식 (7)로 표시되는 화합물은 하기 일반식 (71-11)~일반식 (71-13) 중 어느 하나로 표시된다.

[1998] [화학식 171]



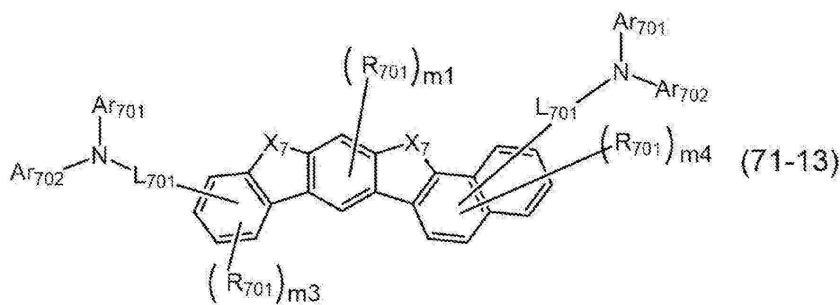
[1999]

[2000] [화학식 172]



[2001]

[2002] [화학식 173]

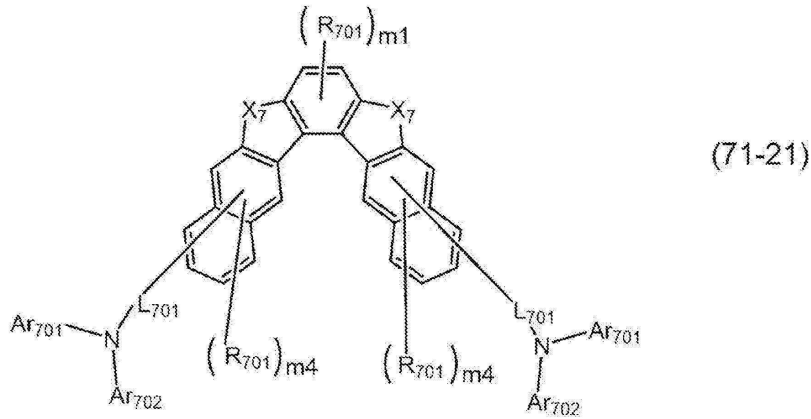


[2003]

[2004] (상기 일반식 (71-11)~일반식 (71-13)에 있어서, R_{701} , X_7 , Ar_{701} , Ar_{702} , L_{701} , m_1 , m_3 및 m_4 는 각각 상기 일반식 (7)에 있어서의 R_{701} , X_7 , Ar_{701} , Ar_{702} , L_{701} , m_1 , m_3 및 m_4 와 동일한 의미이다.)

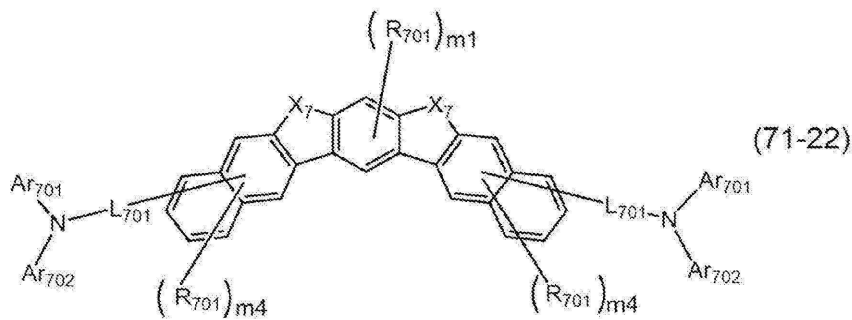
[2005] 일 실시형태에 있어서, 상기 일반식 (7)로 표시되는 화합물은 하기 일반식 (71-21)~(71-25) 중 어느 하나로 표시된다.

[2006] [화학식 174]



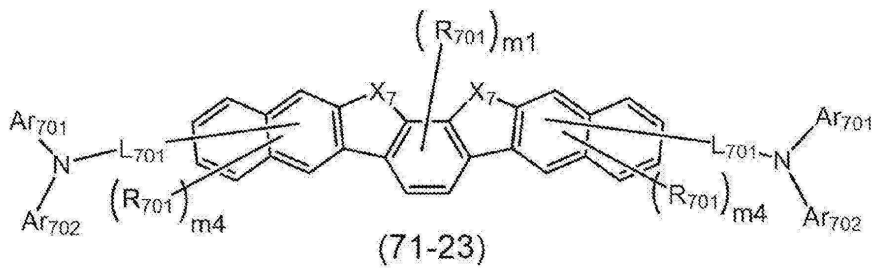
[2007]

[2008] [화학식 175]



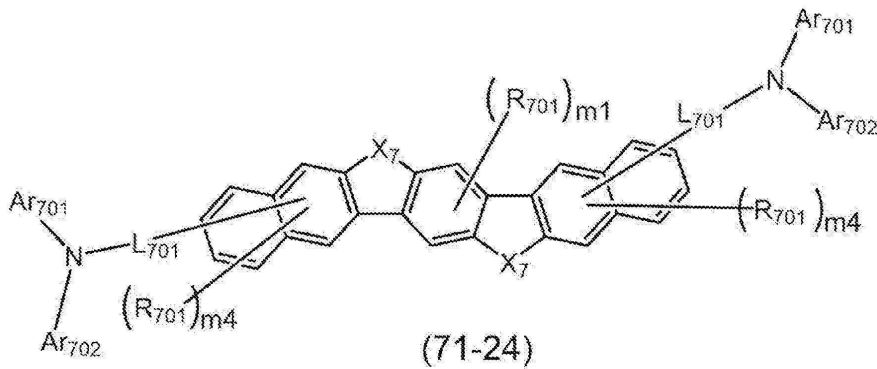
[2009]

[2010] [화학식 176]



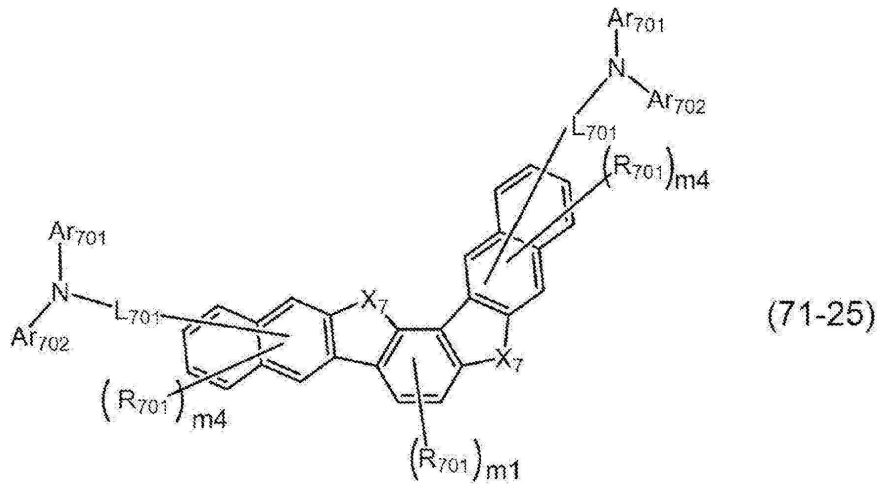
[2011]

[2012] [화학식 177]



[2013]

[2014] [화학식 178]

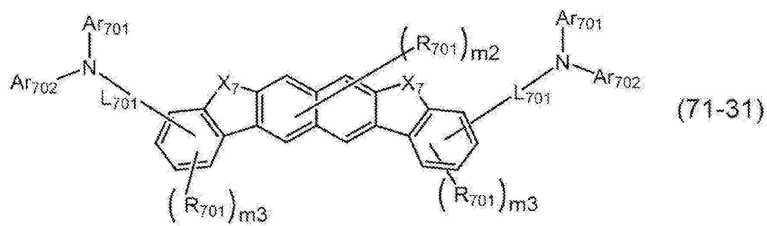


[2015]

[2016] (상기 일반식 (71-21)~일반식 (71-25)에 있어서, R_{701} , X_7 , Ar_{701} , Ar_{702} , L_{701} , $m1$ 및 $m4$ 는 각각 상기 일반식 (7)에 있어서의 R_{701} , X_7 , Ar_{701} , Ar_{702} , L_{701} , $m1$ 및 $m4$ 와 동일한 의미이다.)

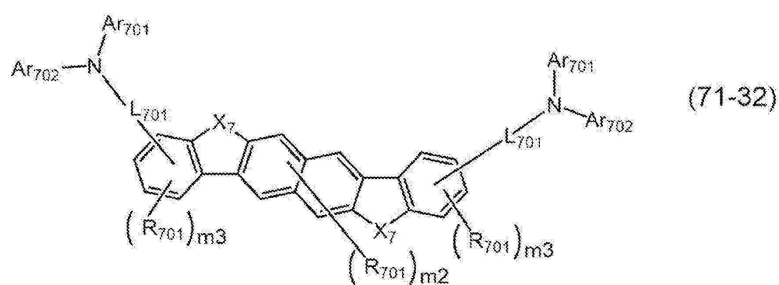
[2017] 일 실시형태에 있어서, 상기 일반식 (7)로 표시되는 화합물은 하기 일반식 (71-31)~일반식 (71-33) 중 어느 하나로 표시된다.

[2018] [화학식 179]



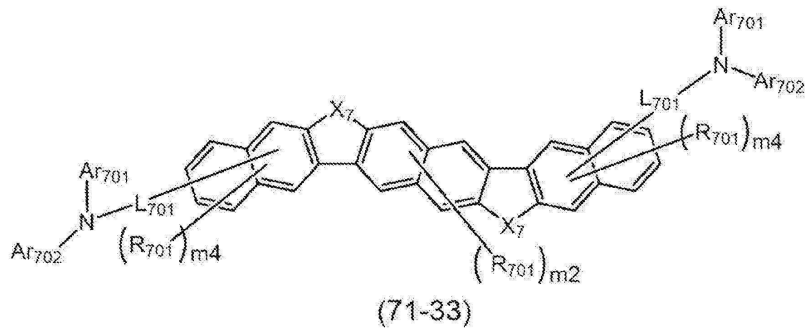
[2019]

[2020] [화학식 180]



[2022]

[2023] [화학식 181]



[2024]

[2025] (상기 일반식 (71-31)~일반식 (71-33)에 있어서, R_{701} , X_7 , Ar_{701} , Ar_{702} , L_{701} , $m_2 \sim m_4$ 는 각각 상기 일반식 (7)에 있어서의 R_{701} , X_7 , Ar_{701} , Ar_{702} , L_{701} , $m_2 \sim m_4$ 와 동일한 의미이다.)

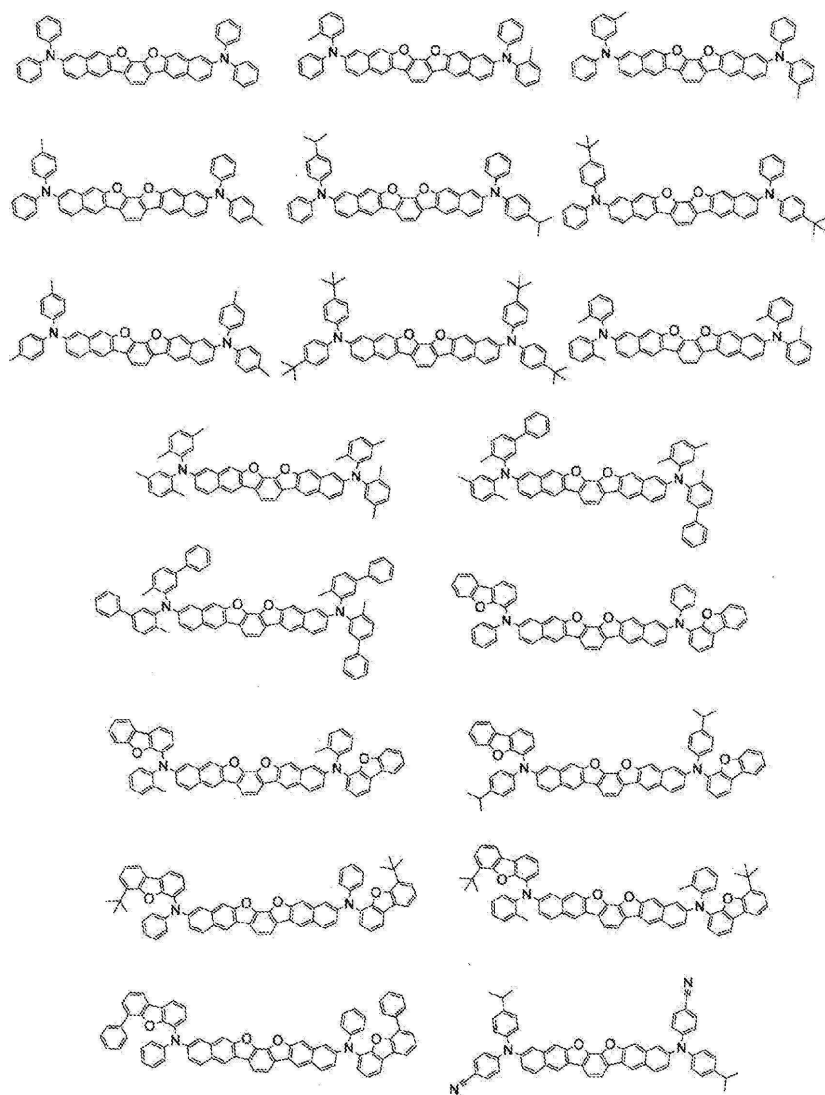
[2026] 일 실시형태에 있어서는, Ar_{701} 및 Ar_{702} 가 각각 독립적으로 치환 혹은 무치환의 고리 형성 탄소수 6~50의 아릴기이다.

[2027] 일 실시형태에 있어서는, Ar_{701} 및 Ar_{702} 중 한쪽이 치환 혹은 무치환의 고리 형성 탄소수 6~50의 아릴기이고, Ar_{701} 및 Ar_{702} 중 다른 쪽이 치환 혹은 무치환의 고리 형성 원자수 5~50의 복소환기이다.

[2028] 상기 일반식 (7)로 표시되는 화합물로서는, 예컨대 이하에 나타내는 화합물을 구체예로서 들 수 있다.

[2029]

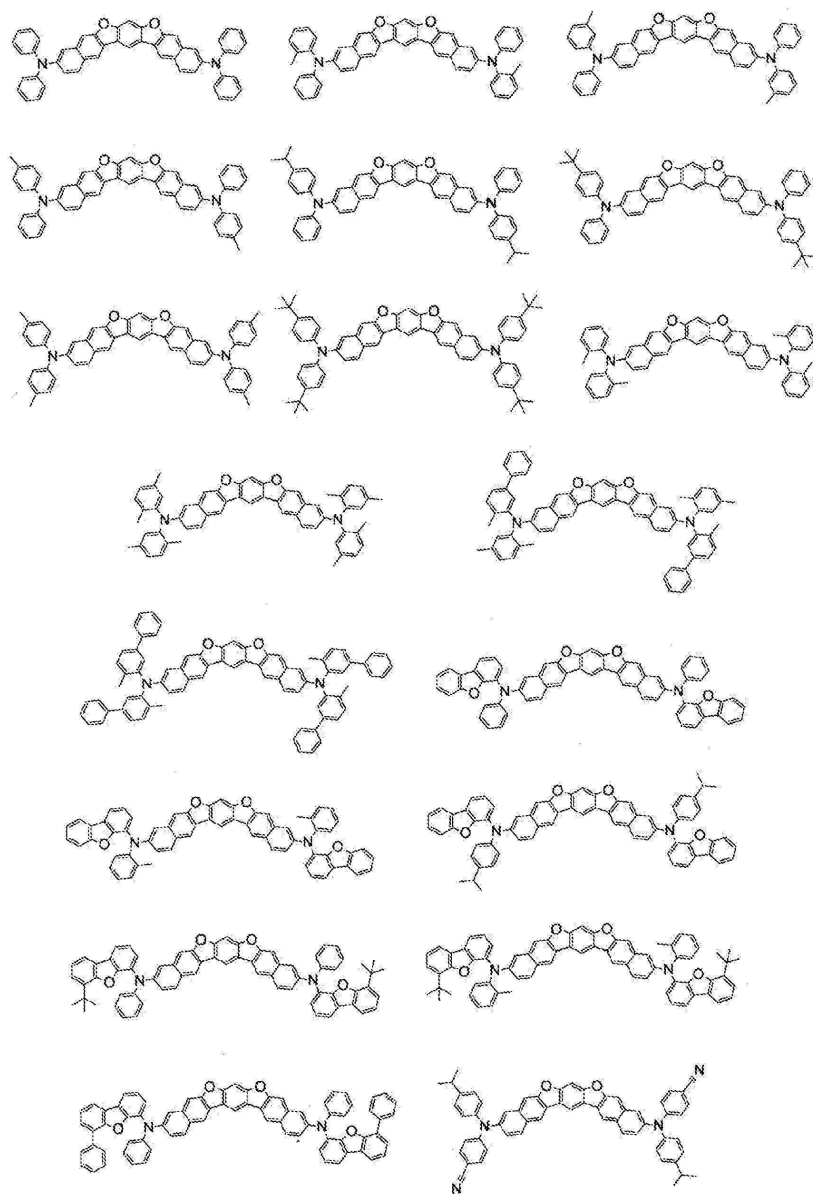
[화학식 182]



[2030]

[2031]

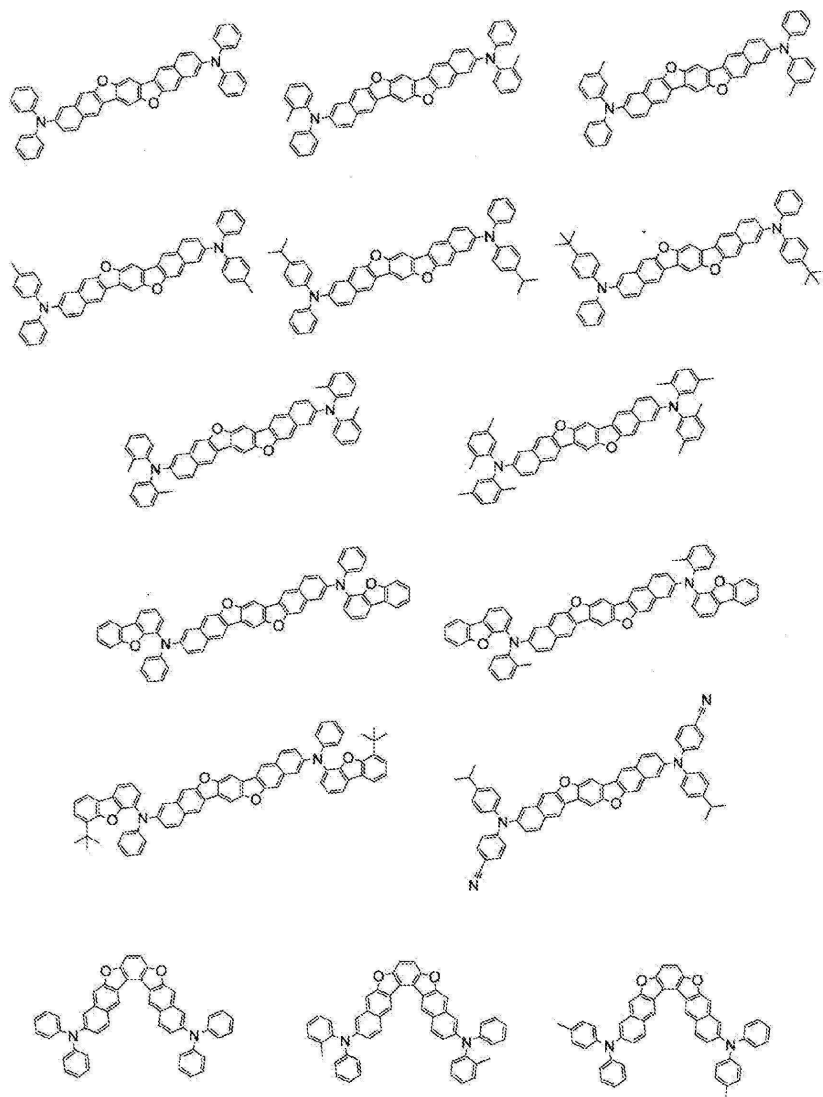
[화학식 183]



[2032]

[2033]

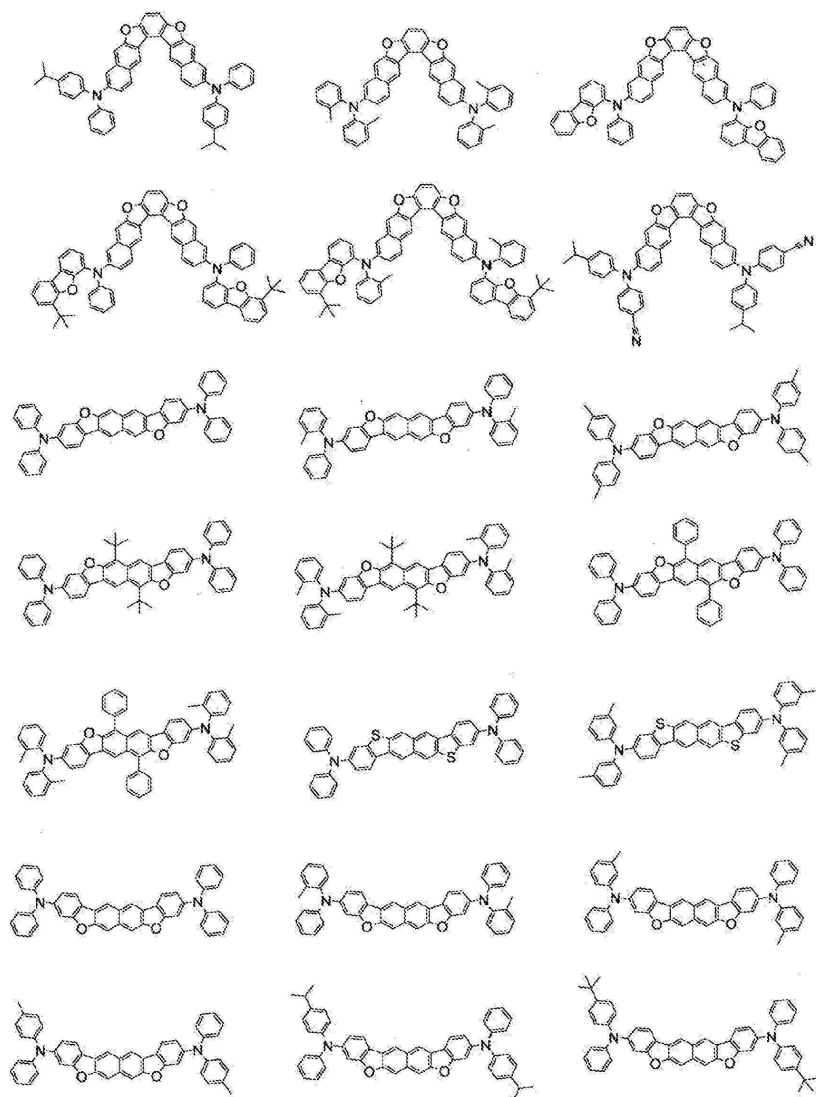
[화학식 184]



[2034]

[2035]

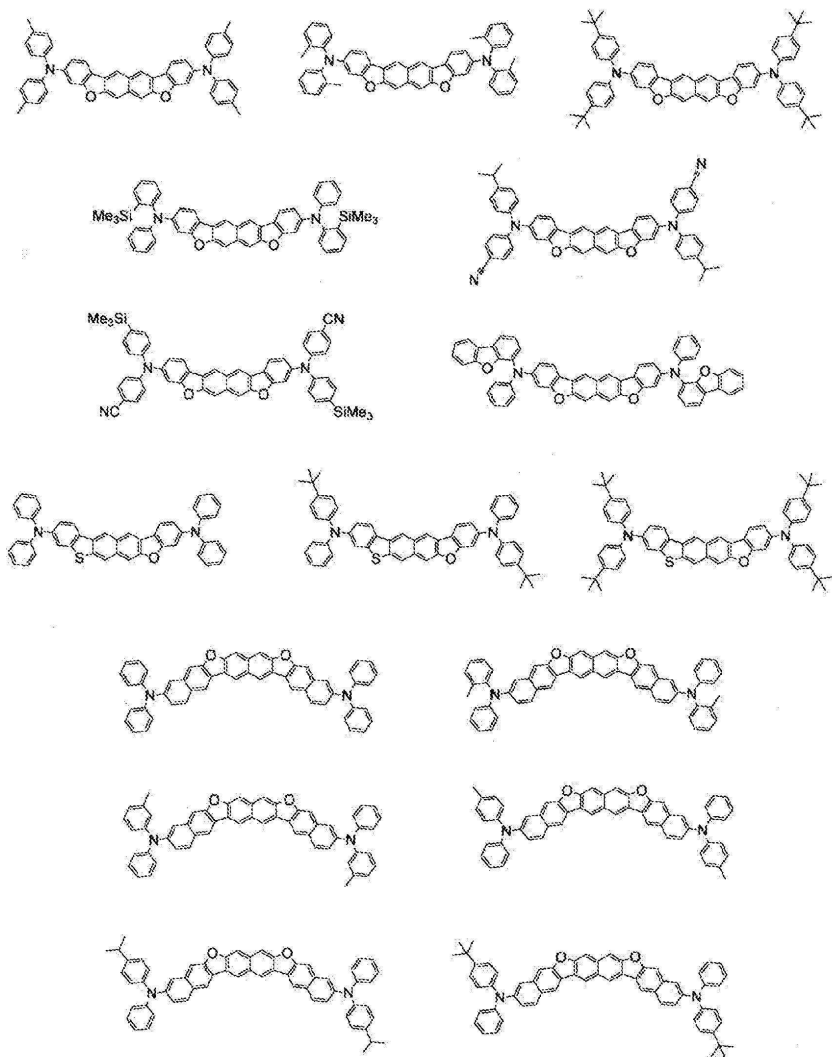
[화학식 185]



[2036]

[2037]

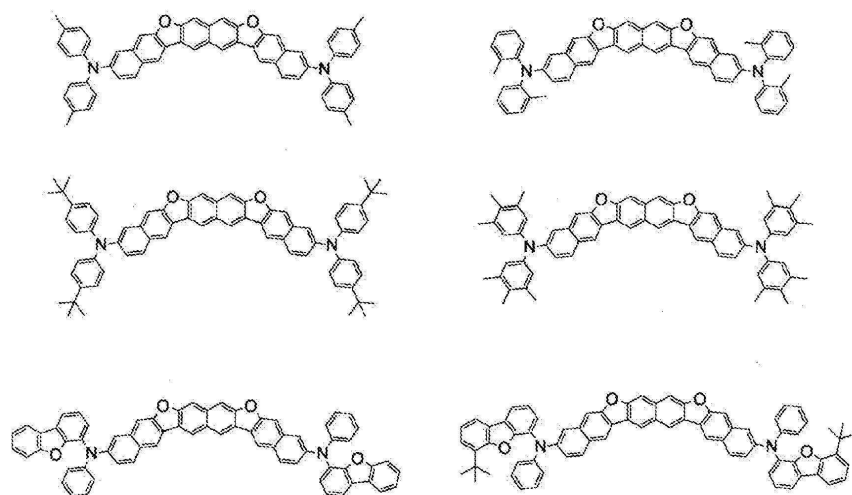
[화학식 186]



[2038]

[2039]

[화학식 187]



[2040]

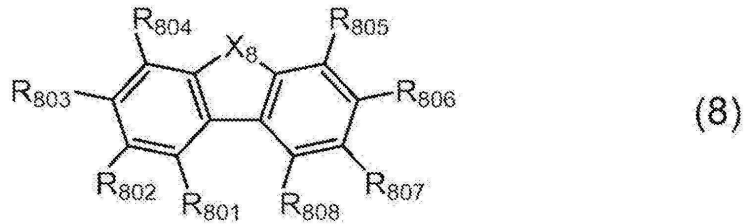
[2041]

(일반식 (8)로 표시되는 화합물)

[2042]

일반식 (8)로 표시되는 화합물에 대해서 설명한다.

[2043] [화학식 188]



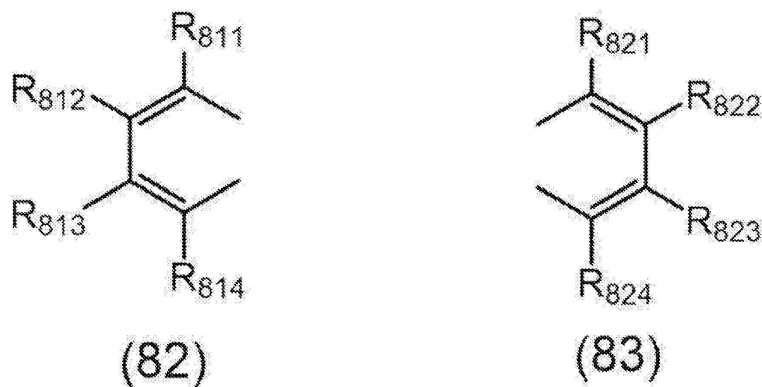
[2044]

[2045] (상기 일반식 (8)에 있어서,

[2046] R₈₀₁과 R₈₀₂, R₈₀₂와 R₈₀₃, 및 R₈₀₃과 R₈₀₄ 중 적어도 1조는, 서로 결합하여 하기 일반식 (82)로 표시되는 2가의 기를 형성하고,

[2047] R₈₀₅와 R₈₀₆, R₈₀₆과 R₈₀₇, 및 R₈₀₇과 R₈₀₈ 중 적어도 1조는, 서로 결합하여 하기 일반식 (83)으로 표시되는 2가의 기를 형성한다.)

[2048] [화학식 189]



[2049]

[2050] (상기 일반식 (82)로 표시되는 2가의 기를 형성하지 않는 R₈₀₁~R₈₀₄, 및 R₈₁₁~R₈₁₄ 중 적어도 하나는 하기 일반식 (84)로 표시되는 1가의 기이고,

[2051] 상기 일반식 (83)으로 표시되는 2가의 기를 형성하지 않는 R₈₀₅~R₈₀₈, 및 R₈₂₁~R₈₂₄ 중 적어도 하나는 하기 일반식 (84)로 표시되는 1가의 기이며,

[2052] X₈은 산소 원자, 황 원자, 또는 NR₈₀₉이고,

[2053] 상기 일반식 (82) 및 일반식 (83)으로 표시되는 2가의 기를 형성하지 않고, 또한, 상기 일반식 (84)로 표시되는 1가의 기가 아닌 R₈₀₁~R₈₀₈, 상기 일반식 (84)로 표시되는 1가의 기가 아닌 R₈₁₁~R₈₁₄ 및 R₈₂₁~R₈₂₄, 및 R₈₀₉는, 각각 독립적으로

[2054] 수소 원자,

[2055] 치환 혹은 무치환의 탄소수 1~50의 알킬기,

[2056] 치환 혹은 무치환의 탄소수 2~50의 알케닐기,

[2057] 치환 혹은 무치환의 탄소수 2~50의 알키닐기,

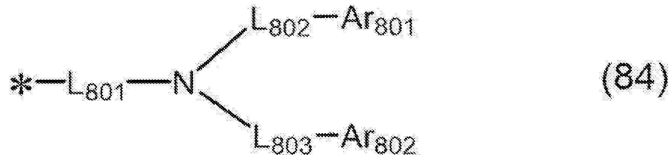
[2058] 치환 혹은 무치환의 고리 형성 탄소수 3~50의 시클로알킬기,

[2059] -Si(R₉₀₁)(R₉₀₂)(R₉₀₃)으로 표시되는 기,

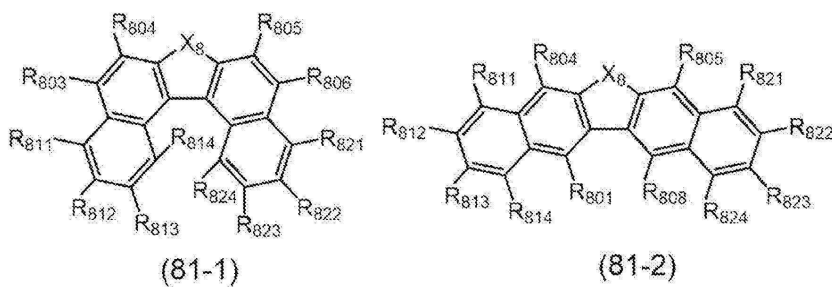
[2060] -O-(R₉₀₄)로 표시되는 기,

[2061] -S-(R₉₀₅)로 표시되는 기,

- [2062] $-N(R_{906})(R_{907})$ 로 표시되는 기,
 [2063] 할로겐 원자,
 [2064] 시아노기,
 [2065] 니트로기,
 [2066] 치환 혹은 무치환의 고리 형성 탄소수 6~50의 아릴기, 또는
 [2067] 치환 혹은 무치환의 고리 형성 원자수 5~50의 복소환기이다.)
 [2068] [화학식 190]

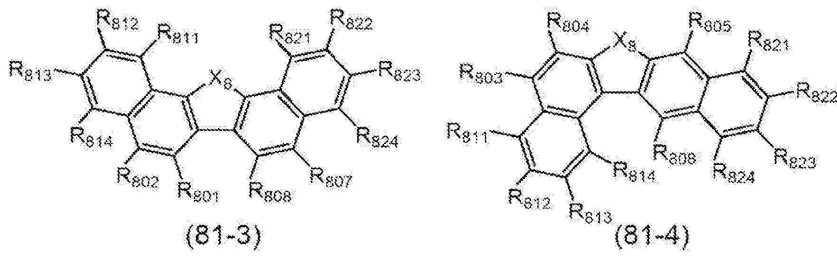


- [2069]
 [2070] (상기 일반식 (84)에 있어서,
 [2071] Ar_{801} 및 Ar_{802} 는, 각각 독립적으로
 [2072] 치환 혹은 무치환의 고리 형성 탄소수 6~50의 아릴기, 또는
 [2073] 치환 혹은 무치환의 고리 형성 원자수 5~50의 복소환기이고,
 [2074] $\text{L}_{801} \sim \text{L}_{803}$ 은, 각각 독립적으로
 [2075] 단일 결합,
 [2076] 치환 혹은 무치환의 고리 형성 탄소수 6~30의 아릴렌기,
 [2077] 치환 혹은 무치환의 고리 형성 원자수 5~30의 2가의 복소환기, 또는
 [2078] 치환 혹은 무치환의 고리 형성 탄소수 6~30의 아릴렌기 및 치환 혹은 무치환의 고리 형성 원자수 5~30의 2가의 복소환기로 이루어진 군으로부터 선택되는 2~4개의 기가 결합하여 형성되는 2가의 연결기이며,
 [2079] 상기 일반식 (84)에서의 *는 상기 일반식 (8)로 표시되는 고리 구조, 일반식 (82) 또는 일반식 (83)으로 표시되는 기와의 결합 위치를 나타낸다.)
 [2080] 상기 일반식 (8)에 있어서, 상기 일반식 (82)로 표시되는 2가의 기 및 일반식 (83)으로 표시되는 2가의 기가 형성되는 위치는 특별히 한정되지 않고, $R_{801} \sim R_{808}$ 의 가능한 위치에 있어서 해당 기를 형성할 수 있다.
 [2081] 일 실시형태에 있어서, 상기 일반식 (8)로 표시되는 화합물은, 하기 일반식 (81-1)~(81-6) 중 어느 하나로 표시된다.
 [2082] [화학식 191]



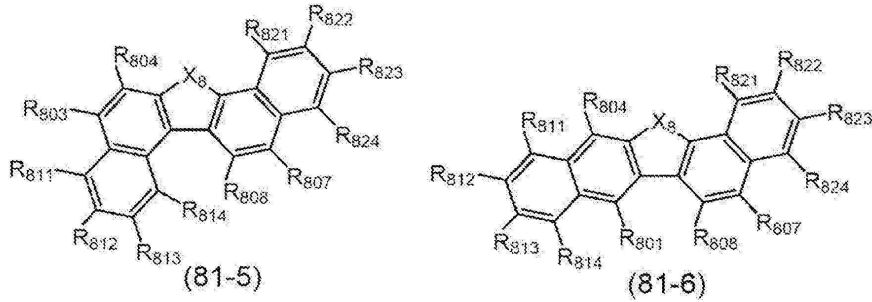
[2083]

[2084] [화학식 192]



[2085]

[2086] [화학식 193]



[2087]

[2088] (상기 일반식 (81-1)~일반식 (81-6)에 있어서,

[2089] X_8 은 상기 일반식 (8)에 있어서의 X_8 과 동일한 의미이고,

[2090] $R_{801} \sim R_{824}$ 중 적어도 2개는 상기 일반식 (84)로 표시되는 1가의 기이며,

[2091] 상기 일반식 (84)로 표시되는 1가의 기가 아닌 $R_{801} \sim R_{824}$ 는, 각각 독립적으로

[2092] 수소 원자,

[2093] 치환 혹은 무치환의 탄소수 1~50의 알킬기,

[2094] 치환 혹은 무치환의 탄소수 2~50의 알케닐기,

[2095] 치환 혹은 무치환의 탄소수 2~50의 알키닐기,

[2096] 치환 혹은 무치환의 고리 형성 탄소수 3~50의 시클로알킬기,

[2097] $-\text{Si}(\text{R}_{901})(\text{R}_{902})(\text{R}_{903})$ 으로 표시되는 기,

[2098] $-\text{O}(\text{R}_{904})$ 로 표시되는 기,

[2099] $-\text{S}(\text{R}_{905})$ 로 표시되는 기,

[2100] $-\text{N}(\text{R}_{906})(\text{R}_{907})$ 로 표시되는 기,

[2101] 할로젠 원자,

[2102] 시아노기,

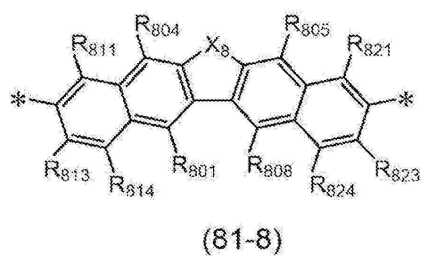
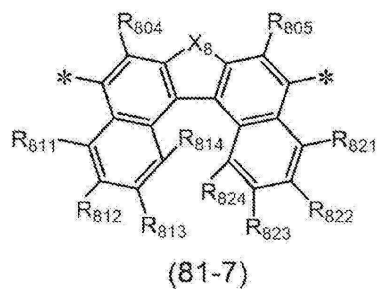
[2103] 니트로기,

[2104] 치환 혹은 무치환의 고리 형성 탄소수 6~50의 아릴기, 또는

[2105] 치환 혹은 무치환의 고리 형성 원자수 5~50의 복소환기이다.)

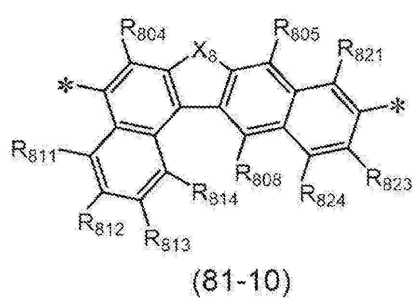
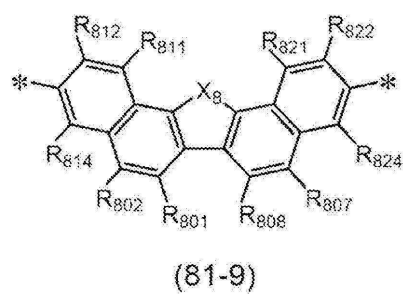
[2106] 일 실시형태에 있어서, 상기 일반식 (8)로 표시되는 화합물은, 하기 일반식 (81-7)~(81-18) 중 어느 하나로 표시된다.

[2107] [화학식 194]



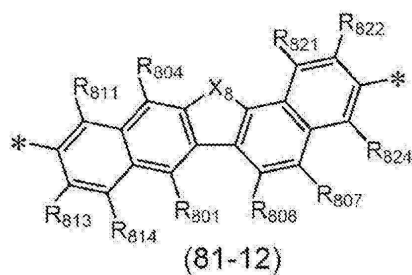
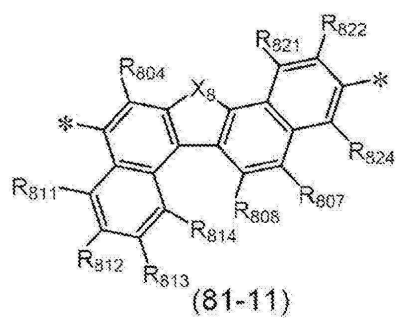
[2108]

[2109] [화학식 195]



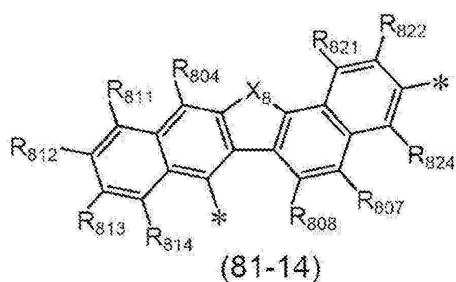
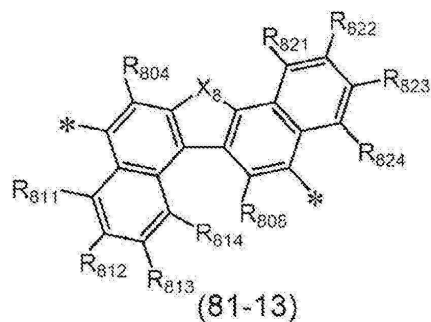
[2110]

[2111] [화학식 196]



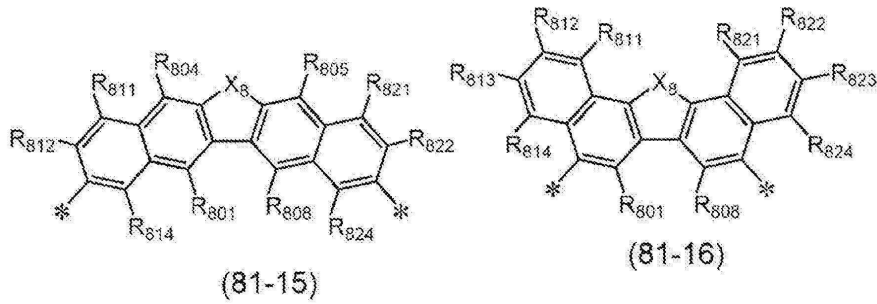
[2112]

[2113] [화학식 197]



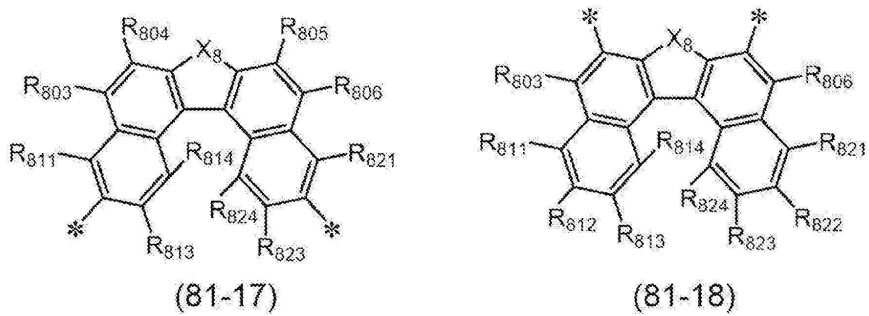
[2114]

[2115] [화학식 198]



[2116]

[2117] [화학식 199]



[2118]

[2119] (상기 일반식 (81-7)~일반식 (81-18)에 있어서,

[2120] X_8 은 상기 일반식 (8)에 있어서의 X_8 과 동일한 의미이고,

[2121] *는 상기 일반식 (84)로 표시되는 1가의 기와 결합하는 단일 결합이며,

[2122] $R_{801} \sim R_{824}$ 는, 각각 독립적으로 상기 일반식 (81-1)~일반식 (81-6)에 있어서의 상기 일반식 (84)로 표시되는 1가의 기가 아닌 $R_{801} \sim R_{824}$ 와 동일한 의미이다.)

[2123] 상기 일반식 (82) 및 일반식 (83)으로 표시되는 2가의 기를 형성하지 않고, 또한 상기 일반식 (84)로 표시되는 1가의 기가 아닌 $R_{801} \sim R_{808}$, 및 상기 일반식 (84)로 표시되는 1가의 기가 아닌 $R_{811} \sim R_{814}$ 및 $R_{821} \sim R_{824}$ 는, 바람직하게는, 각각 독립적으로

[2124] 수소 원자,

[2125] 치환 혹은 무치환의 탄소수 1~50의 알킬기,

[2126] 치환 혹은 무치환의 탄소수 2~50의 알케닐기,

[2127] 치환 혹은 무치환의 탄소수 2~50의 알키닐기,

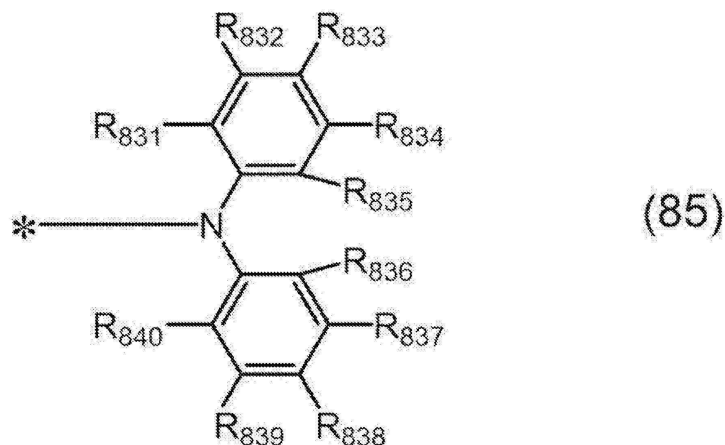
[2128] 치환 혹은 무치환의 고리 형성 탄소수 3~50의 시클로알킬기,

[2129] 치환 혹은 무치환의 고리 형성 탄소수 6~50의 아릴기, 또는

[2130] 치환 혹은 무치환의 고리 형성 원자수 5~50의 복소환기이다.

[2131] 상기 일반식 (84)로 표시되는 1가의 기는, 바람직하게는, 하기 일반식 (85) 또는 일반식 (86)으로 표시된다.

[2132] [화학식 200]



[2133]

[2134] (상기 일반식 (85)에 있어서,

[2135] $R_{831} \sim R_{840}$ 은, 각각 독립적으로

[2136] 수소 원자,

[2137] 치환 혹은 무치환의 탄소수 1~50의 알킬기,

[2138] 치환 혹은 무치환의 탄소수 2~50의 알케닐기,

[2139] 치환 혹은 무치환의 탄소수 2~50의 알키닐기,

[2140] 치환 혹은 무치환의 고리 형성 탄소수 3~50의 시클로알킬기,

[2141] $-\text{Si}(R_{901})(R_{902})(R_{903})$ 으로 표시되는 기,

[2142] $-\text{O}(R_{904})$ 로 표시되는 기,

[2143] $-\text{S}(R_{905})$ 로 표시되는 기,

[2144] $-\text{N}(R_{906})(R_{907})$ 로 표시되는 기,

[2145] 할로젠 원자,

[2146] 시아노기,

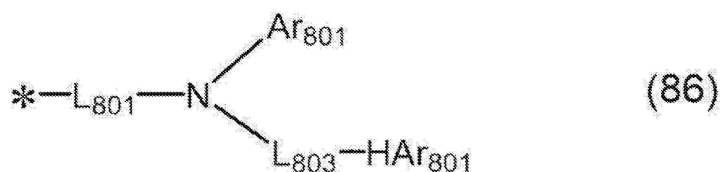
[2147] 니트로기,

[2148] 치환 혹은 무치환의 고리 형성 탄소수 6~50의 아릴기, 또는

[2149] 치환 혹은 무치환의 고리 형성 원자수 5~50의 복소환기이며,

[2150] 상기 일반식 (85)에서의 *는 상기 일반식 (84)에서의 *와 동일한 의미이다.)

[2151] [화학식 201]



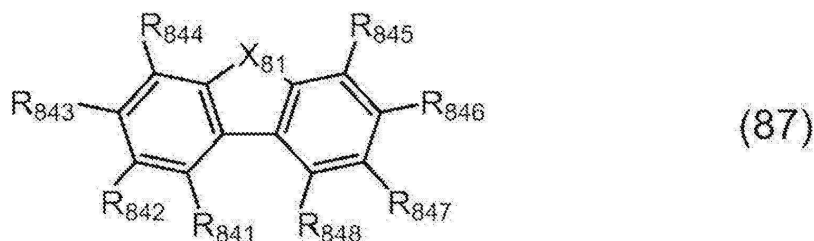
[2152]

[2153] (상기 일반식 (86)에 있어서,

[2154] Ar_{801} , L_{801} 및 L_{803} 은 상기 일반식 (84)에 있어서의 Ar_{801} , L_{801} 및 L_{803} 과 동일한 의미이고,

[2155] HAr₈₀₁은 하기 일반식 (87)로 표시되는 구조이다.)

[2156] [화학식 202]



[2157]

[2158] (상기 일반식 (87)에 있어서,

[2159] X₈₁은 산소 원자 또는 황 원자이고,

[2160] R₈₄₁~R₈₄₈ 중 어느 하나는 L₈₀₃에 결합하는 단일 결합이며,

[2161] 단일 결합이 아닌 R₈₄₁~R₈₄₈은, 각각 독립적으로

[2162] 수소 원자,

[2163] 치환 혹은 무치환의 탄소수 1~50의 알킬기,

[2164] 치환 혹은 무치환의 탄소수 2~50의 알케닐기,

[2165] 치환 혹은 무치환의 탄소수 2~50의 알키닐기,

[2166] 치환 혹은 무치환의 고리 형성 탄소수 3~50의 시클로알킬기,

[2167] -Si(R₉₀₁)(R₉₀₂)(R₉₀₃)으로 표시되는 기,

[2168] -O-(R₉₀₄)로 표시되는 기,

[2169] -S-(R₉₀₅)로 표시되는 기,

[2170] -N(R₉₀₆)(R₉₀₇)로 표시되는 기,

[2171] 할로젠 원자,

[2172] 시아노기,

[2173] 니트로기,

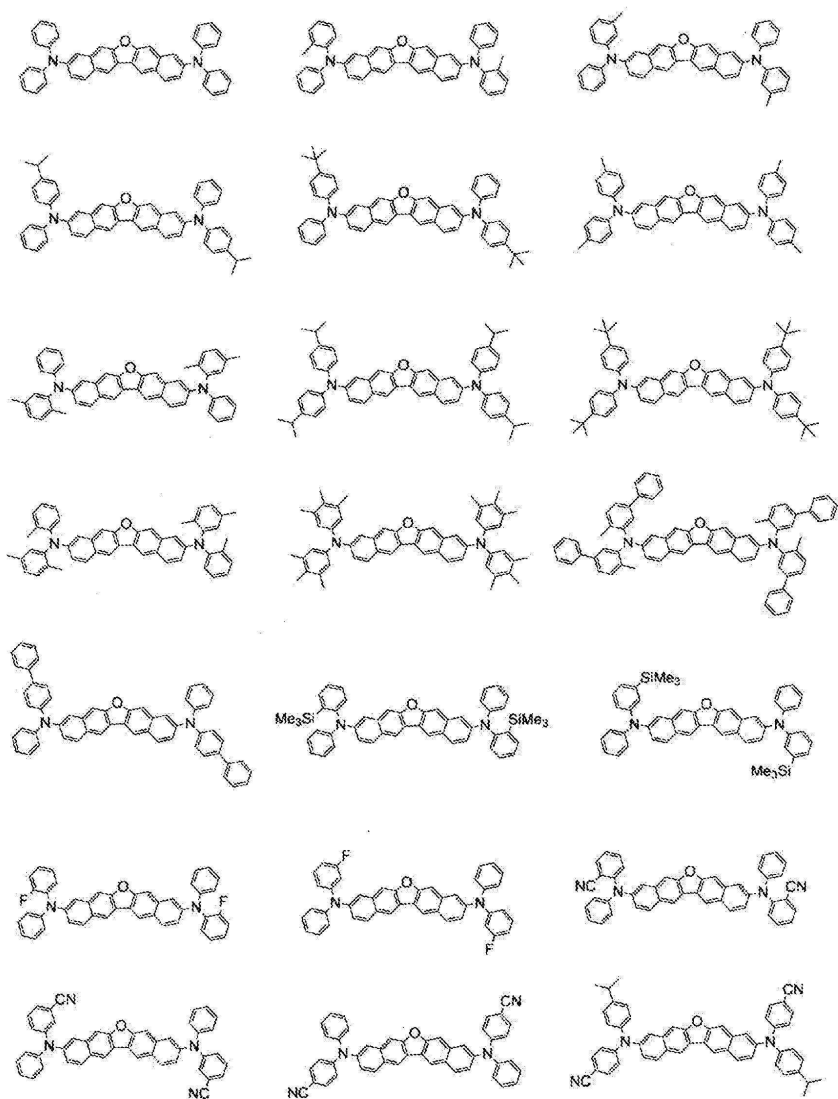
[2174] 치환 혹은 무치환의 고리 형성 탄소수 6~50의 아릴기, 또는

[2175] 치환 혹은 무치환의 고리 형성 원자수 5~50의 복소환기이다.)

[2176] 상기 일반식 (8)로 표시되는 화합물로서는, 국제 공개 제2014/104144호에 기재된 화합물 외에, 예컨대 이하에 나타내는 화합물을 구체예로서 들 수 있다.

[2177]

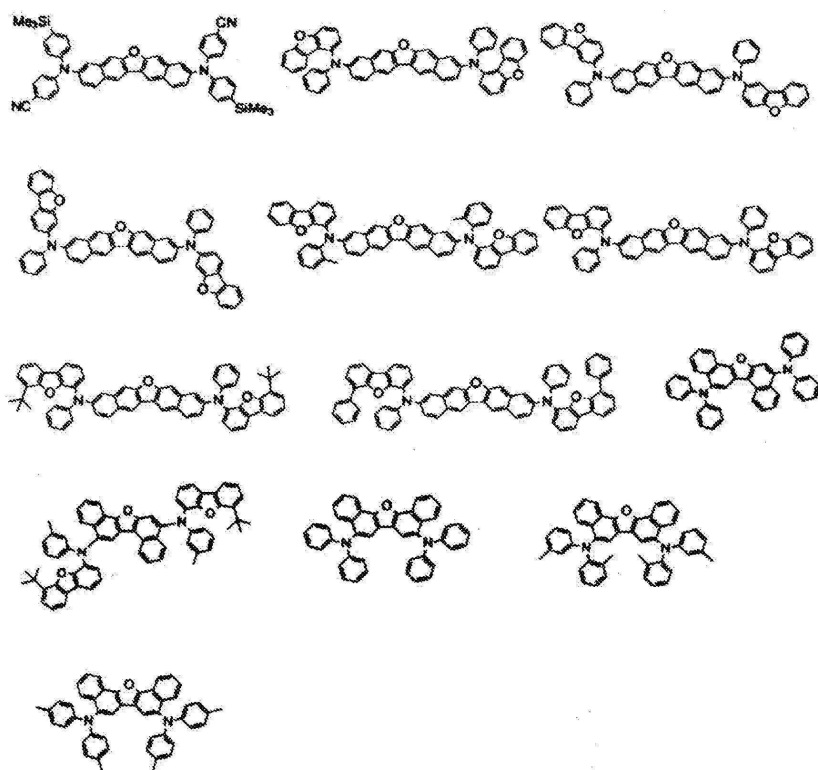
[화학식 203]



[2178]

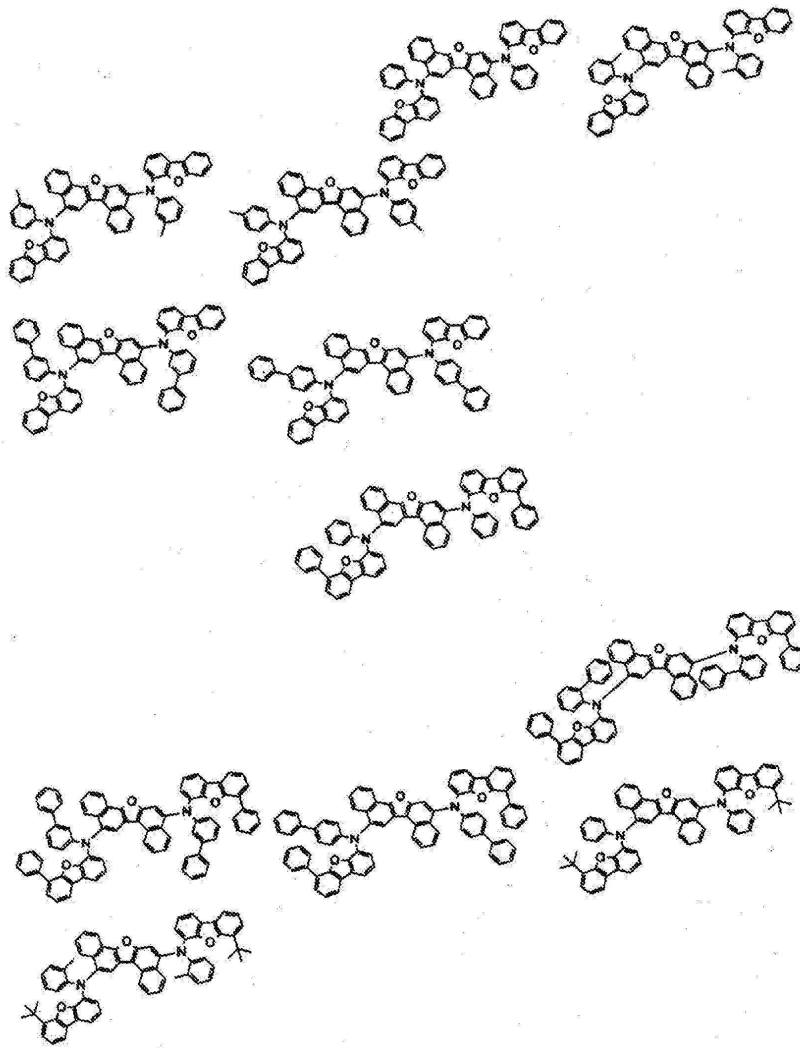
[2179]

[화학식 204]



[2180]

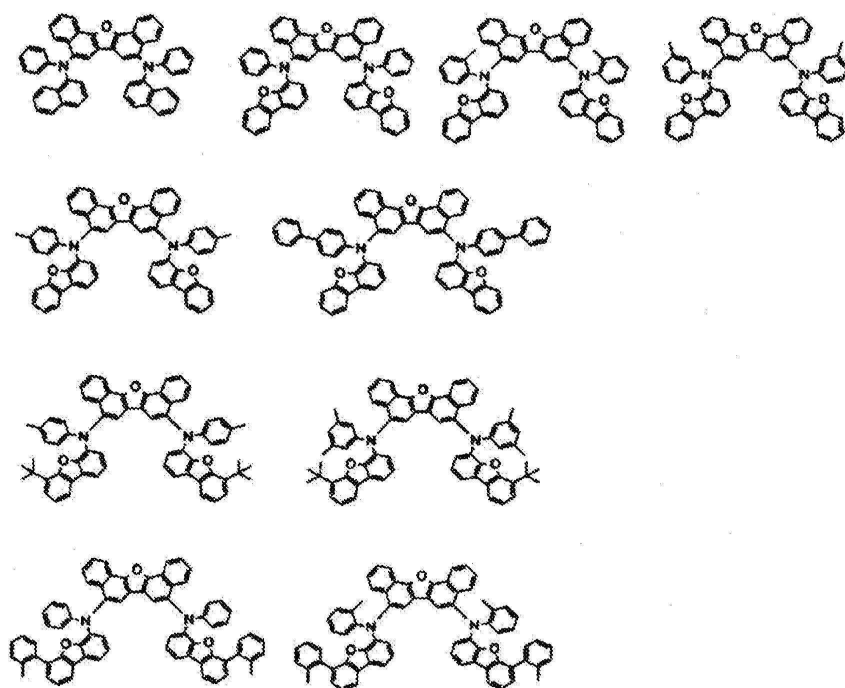
[2181] [화학식 205]



[2182]

[2183]

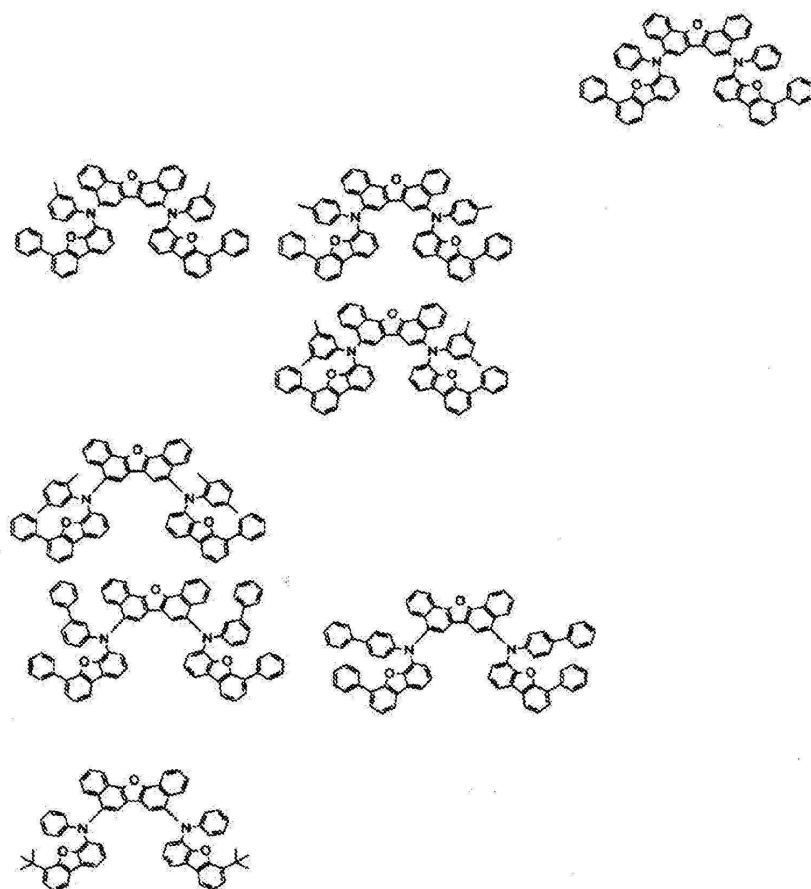
[화학식 206]



[2184]

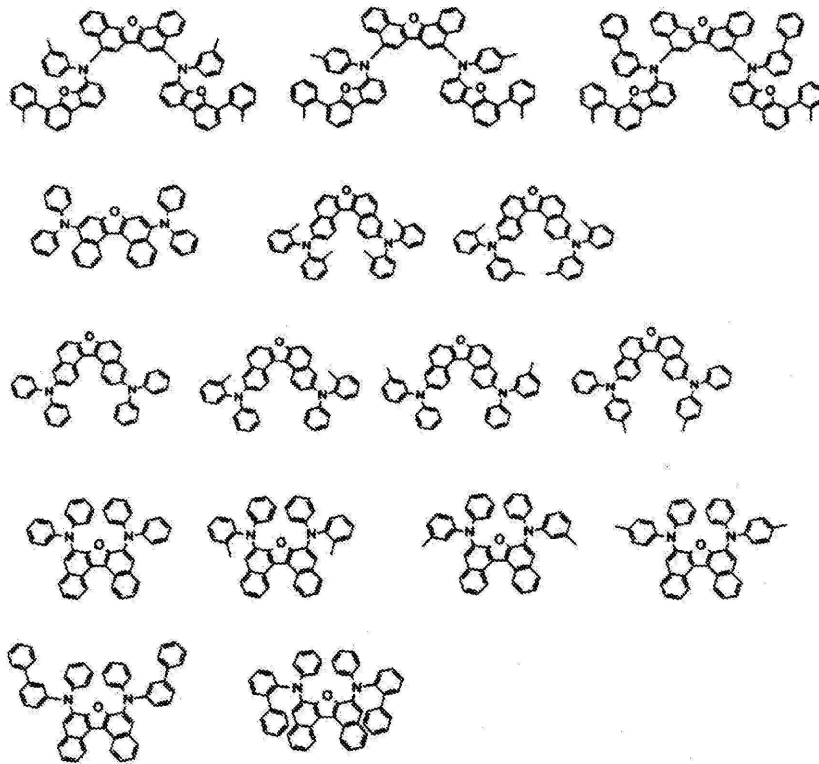
[2185]

[화학식 207]



[2186]

[2187] [화학식 208]

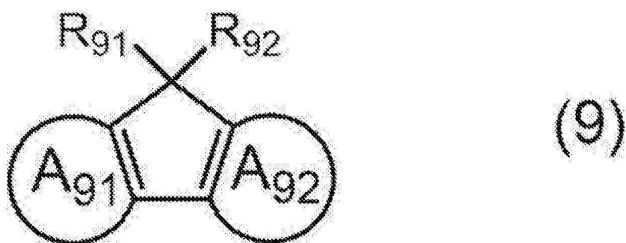


[2188]

[2189] (일반식 (9)로 표시되는 화합물)

[2190] 일반식 (9)로 표시되는 화합물에 대해서 설명한다.

[2191] [화학식 209]



[2192]

[2193] (상기 일반식 (9)에 있어서,

[2194] A₉₁ 고리 및 A₉₂ 고리는, 각각 독립적으로

[2195] 치환 혹은 무치환의 고리 형성 탄소수 6~50의 방향족 탄화수소환, 또는

[2196] 치환 혹은 무치환의 고리 형성 원자수 5~50의 복소환이고,

[2197] A₉₁ 고리 및 A₉₂ 고리로 이루어진 군으로부터 선택되는 1 이상의 고리는,

[2198] 하기 일반식 (92)로 표시되는 구조의 *와 결합한다.)

[2199] [화학식 210]



[2200]

[2201] (상기 일반식 (92)에 있어서,

[2202] A_{93} 고리는,

[2203] 치환 혹은 무치환의 고리 형성 탄소수 6~50의 방향족 탄화수소환, 또는,

[2204] 치환 혹은 무치환의 고리 형성 원자수 5~50의 복소환이고,

[2205] X_9 는 NR_{93} , $C(R_{94})(R_{95})$, $Si(R_{96})(R_{97})$, $Ge(R_{98})(R_{99})$, 산소 원자, 황 원자 또는 셀레늄 원자이며,

[2206] R_{91} 과 R_{92} 는,

[2207] 서로 결합하여 치환 혹은 무치환의 단환을 형성하거나,

[2208] 서로 결합하여 치환 혹은 무치환의 축합환을 형성하거나, 또는

[2209] 서로 결합하지 않고,

[2210] 상기 단환을 형성하지 않고, 또한 상기 축합환을 형성하지 않는 R_{91} 및 R_{92} , 및 $R_{93} \sim R_{99}$ 는, 각각 독립적으로

[2211] 수소 원자,

[2212] 치환 혹은 무치환의 탄소수 1~50의 알킬기,

[2213] 치환 혹은 무치환의 탄소수 2~50의 알케닐기,

[2214] 치환 혹은 무치환의 탄소수 2~50의 알킬닐기,

[2215] 치환 혹은 무치환의 고리 형성 탄소수 3~50의 시클로알킬기,

[2216] $-Si(R_{901})(R_{902})(R_{903})$ 으로 표시되는 기,

[2217] $-O-(R_{904})$ 로 표시되는 기,

[2218] $-S-(R_{905})$ 로 표시되는 기,

[2219] $-N(R_{906})(R_{907})$ 로 표시되는 기,

[2220] 할로겐 원자,

[2221] 시아노기,

[2222] 니트로기,

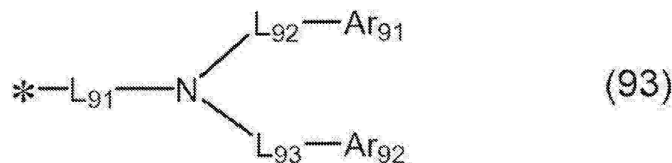
[2223] 치환 혹은 무치환의 고리 형성 탄소수 6~50의 아릴기, 또는

[2224] 치환 혹은 무치환의 고리 형성 원자수 5~50의 복소환기이다.)

[2225] A_{91} 고리 및 A_{92} 고리로 이루어진 군으로부터 선택되는 1 이상의 고리는, 상기 일반식 (92)로 표시되는 구조의 *와 결합한다. 즉, 일 실시형태에 있어서, A_{91} 고리의 상기 방향족 탄화수소환의 고리 형성 탄소 원자, 또는 상기 복소환의 고리 형성 원자는, 상기 일반식 (92)로 표시되는 구조의 *와 결합한다. 또한, 일 실시형태에 있어서, A_{92} 고리의 상기 방향족 탄화수소환의 고리 형성 탄소 원자, 또는 상기 복소환의 고리 형성 원자는, 상기 일반식 (92)로 표시되는 구조의 *와 결합한다.

[2226] 일 실시형태에 있어서, A_{91} 고리 및 A_{92} 고리 중 어느 하나 또는 양쪽 모두에 하기 일반식 (93)으로 표시되는 기가 결합한다.

[2227] [화학식 211]



[2228]

[2229] (상기 일반식 (93)에 있어서,

[2230] Ar_{91} 과 Ar_{92} 는, 각각 독립적으로

[2231] 치환 혹은 무치환의 고리 형성 탄소수 6~50의 아릴기, 또는

[2232] 치환 혹은 무치환의 고리 형성 원자수 5~50의 복소환기이고,

[2233] $\text{L}_{91} \sim \text{L}_{93}$ 은, 각각 독립적으로

[2234] 단일 결합,

[2235] 치환 혹은 무치환의 고리 형성 탄소수 6~30의 아틸렌기,

[2236] 치환 혹은 무치환의 고리 형성 원자수 5~30의 2가의 복소환기, 또는

[2237] 치환 혹은 무치환의 고리 형성 탄소수 6~30의 아틸렌기 및 치환 혹은 무치환의 고리 형성 원자수 5~30의 2가의 복소환기로 이루어진 군으로부터 선택되는 2~4개 결합하여 형성되는 2가의 연결기이며,

[2238] 상기 일반식 (93)에서의 *는 A_{91} 고리 및 A_{92} 고리 중 어느 하나와의 결합 위치를 나타낸다.)

[2239] 일 실시형태에 있어서, A_{91} 고리에 더하여, A_{92} 고리의 상기 방향족 탄화수소환의 고리 형성 탄소 원자, 또는 상기 복소환의 고리 형성 원자는, 상기 일반식 (92)로 표시되는 구조의 *와 결합한다. 이 경우, 상기 일반식 (92)로 표시되는 구조는, 서로 동일하여도 좋고 상이하여도 좋다.

[2240] 일 실시형태에 있어서, R_{91} 및 R_{92} 는, 각각 독립적으로 치환 혹은 무치환의 고리 형성 탄소수 6~50의 아릴기이다.

[2241] 일 실시형태에 있어서, R_{91} 및 R_{92} 는 서로 결합하여 플루오렌 구조를 형성한다.

[2242] 일 실시형태에 있어서, 고리 A_{91} 및 고리 A_{92} 는, 각각 독립적으로 치환 혹은 무치환의 고리 형성 탄소수 6~50의 방향족 탄화수소환이며, 예컨대 치환 혹은 무치환의 벤젠환이다.

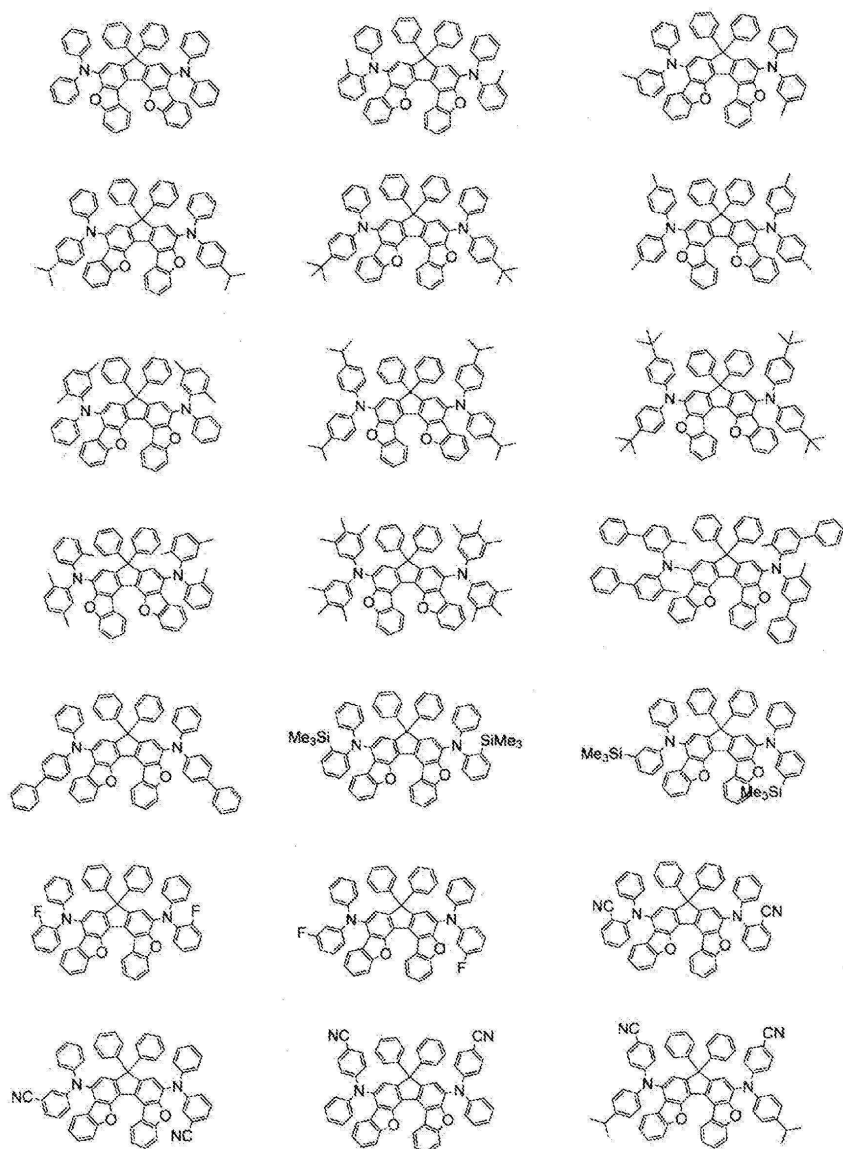
[2243] 일 실시형태에 있어서, 고리 A_{93} 은 치환 혹은 무치환의 고리 형성 탄소수 6~50의 방향족 탄화수소환이며, 예컨대 치환 혹은 무치환의 벤젠환이다.

[2244] 일 실시형태에 있어서, X_9 는 산소 원자 또는 황 원자이다.

[2245] 상기 일반식 (9)로 표시되는 화합물로서는, 예컨대 이하에 나타내는 화합물을 구체예로서 들 수 있다.

[2246]

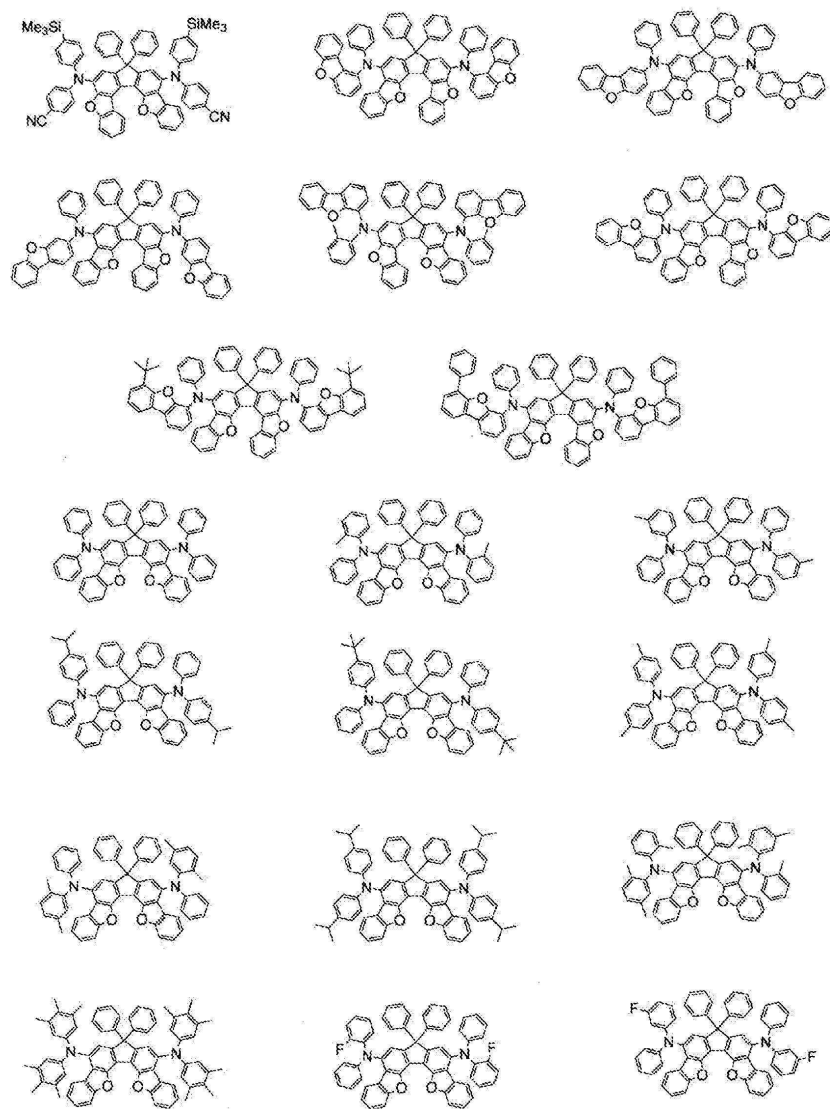
[화학식 212]



[2247]

[2248]

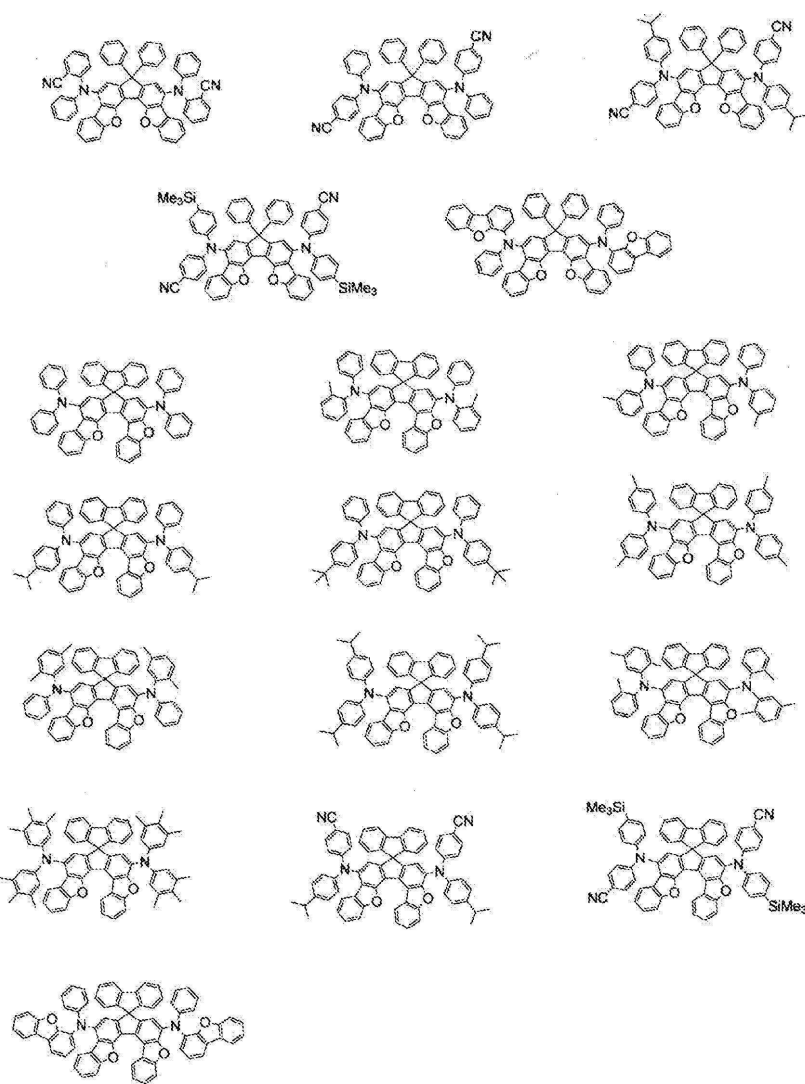
[화학식 213]



[2249]

[2250]

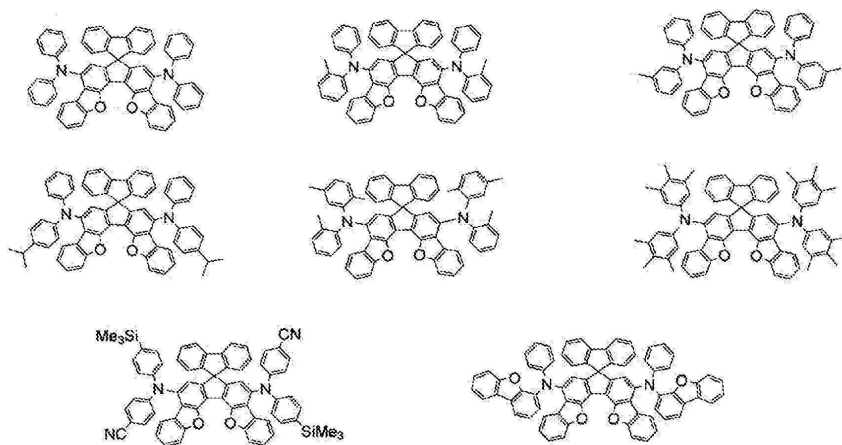
[화학식 214]



[2251]

[2252]

[화학식 215]



[2253]

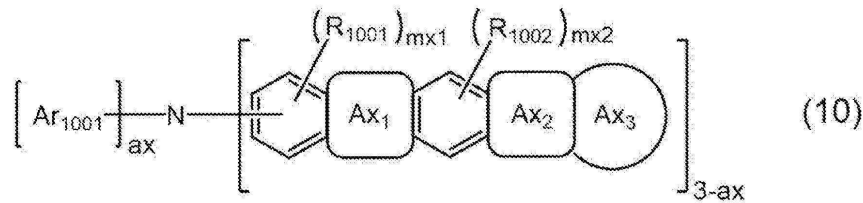
[2254]

(일반식 (10)으로 표시되는 화합물)

[2255]

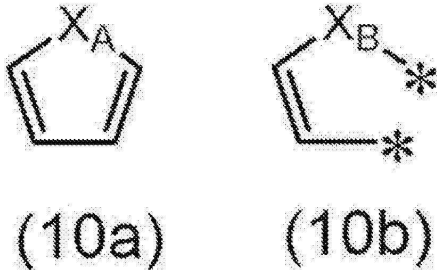
일반식 (10)으로 표시되는 화합물에 대해서 설명한다.

[2256] [화학식 216]



[2257]

[2258] [화학식 217]



[2259]

[2260] (상기 일반식 (10)에 있어서,

[2261] Ax₁ 고리는 인접 고리의 임의의 위치에서 축합하는 상기 일반식 (10a)로 표시되는 고리이고,

[2262] Ax₂ 고리는 인접 고리의 임의의 위치에서 축합하는 상기 일반식 (10b)로 표시되는 고리이며,

[2263] 상기 일반식 (10b)에서의 2개의 *는 Ax₃ 고리의 임의의 위치와 결합하고,

[2264] X_A 및 X_B는, 각각 독립적으로 C(R₁₀₀₃)(R₁₀₀₄), Si(R₁₀₀₅)(R₁₀₀₆), 산소 원자 또는 황 원자이며,

[2265] Ax₃ 고리는,

[2266] 치환 혹은 무치환의 고리 형성 탄소수 6~50의 방향족 탄화수소환, 또는

[2267] 치환 혹은 무치환의 고리 형성 원자수 5~50의 복소환이고,

[2268] Ar₁₀₀₁은

[2269] 치환 혹은 무치환의 고리 형성 탄소수 6~50의 아릴기, 또는

[2270] 치환 혹은 무치환의 고리 형성 원자수 5~50의 복소환기이며,

[2271] R₁₀₀₁~R₁₀₀₆은, 각각 독립적으로

[2272] 수소 원자,

[2273] 치환 혹은 무치환의 탄소수 1~50의 알킬기,

[2274] 치환 혹은 무치환의 탄소수 2~50의 알케닐기,

[2275] 치환 혹은 무치환의 탄소수 2~50의 알키닐기,

[2276] 치환 혹은 무치환의 고리 형성 탄소수 3~50의 시클로알킬기,

[2277] -Si(R₉₀₁)(R₉₀₂)(R₉₀₃)으로 표시되는 기,

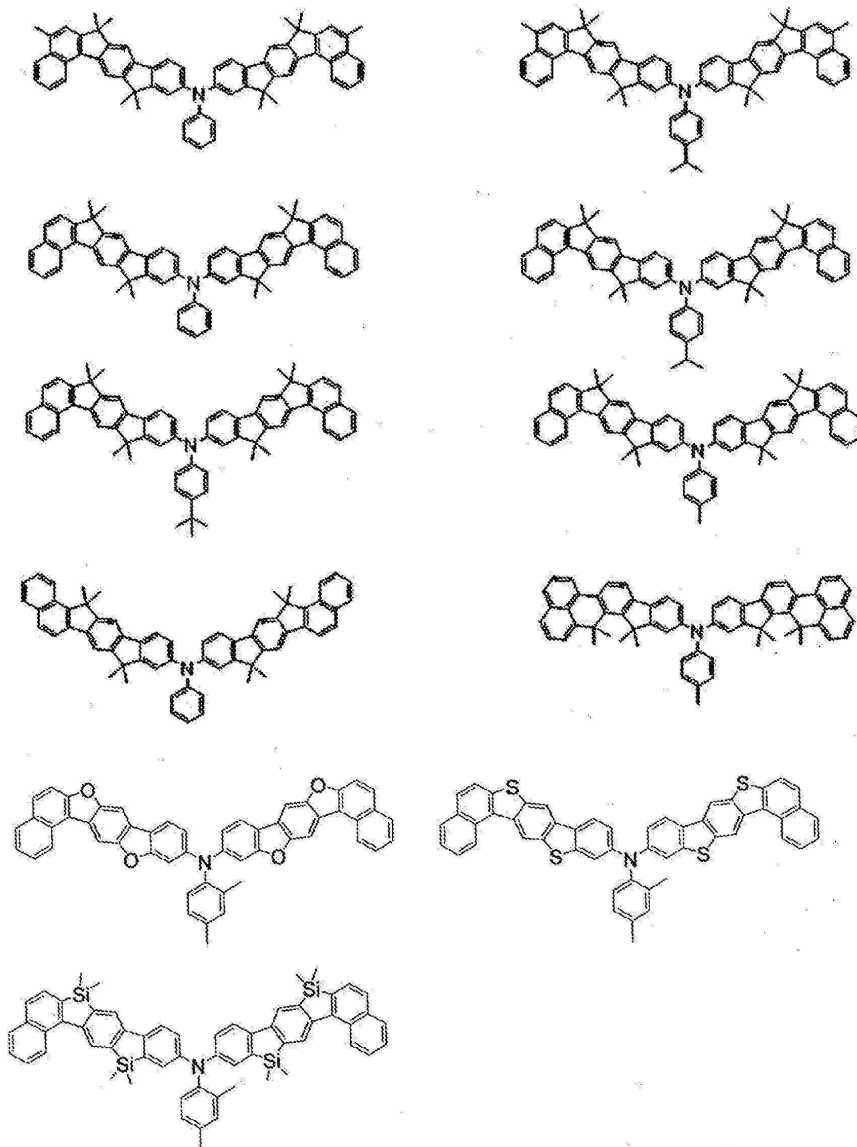
[2278] -O-(R₉₀₄)로 표시되는 기,

[2279] -S-(R₉₀₅)로 표시되는 기,

[2280] -N(R₉₀₆)(R₉₀₇)로 표시되는 기,

- [2281] 할로겐 원자,
- [2282] 시아노기,
- [2283] 니트로기,
- [2284] 치환 혹은 무치환의 고리 형성 탄소수 6~50의 아릴기, 또는
- [2285] 치환 혹은 무치환의 고리 형성 원자수 5~50의 복소환기이고,
- [2286] m_{x1} 은 3이며, m_{x2} 는 2이고,
- [2287] 복수의 R_{1001} 은 서로 동일하거나 또는 상이하며,
- [2288] 복수의 R_{1002} 는 서로 동일하거나 또는 상이하고,
- [2289] a_x 는 0, 1 또는 2이며,
- [2290] a_x 가 0 또는 1인 경우, 「3- a_x 」로 나타내는 괄호 안의 구조는 서로 동일하거나 또는 상이하고,
- [2291] a_x 가 2인 경우, 복수의 Ar_{1001} 은 서로 동일하거나 또는 상이하다.)
- [2292] 일 실시형태에 있어서, Ar_{1001} 은 치환 혹은 무치환의 고리 형성 탄소수 6~50의 아릴기이다.
- [2293] 일 실시형태에 있어서, A_{x3} 고리는 치환 혹은 무치환의 고리 형성 탄소수 6~50의 방향족 탄화수소환이며, 예컨대 치환 혹은 무치환의 벤젠환, 치환 혹은 무치환의 나프탈렌환, 또는 치환 혹은 무치환의 안트라센환이다.
- [2294] 일 실시형태에 있어서, R_{1003} 및 R_{1004} 는, 각각 독립적으로 치환 혹은 무치환의 탄소수 1~50의 알킬기이다.
- [2295] 일 실시형태에 있어서, a_x 는 1이다.
- [2296] 상기 일반식 (10)으로 표시되는 화합물로서는, 예컨대 이하에 나타내는 화합물을 구체예로서 들 수 있다.

[2297] [화학식 218]



[2298]

[2299] 일 실시형태에 있어서는, 발광층(5)이, 발광성 화합물로서,

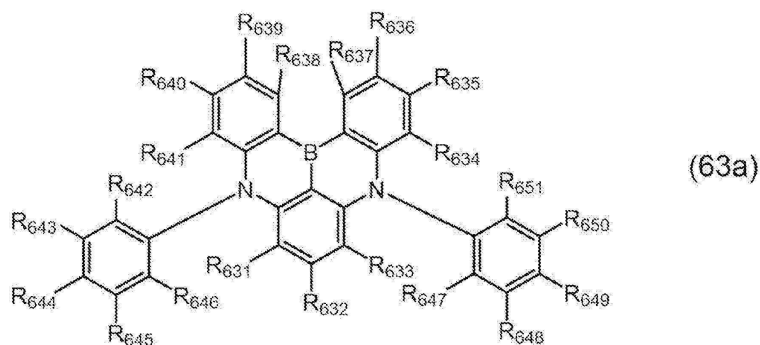
[2300] 상기 일반식 (4)로 표시되는 화합물,

[2301] 상기 일반식 (5)로 표시되는 화합물,

[2302] 상기 일반식 (6)으로 표시되는 화합물, 및

[2303] 하기 일반식 (63a)로 표시되는 화합물로 이루어진 군으로부터 선택되는 1 이상의 화합물을 함유한다.

[2304] [화학식 219]



[2305]

[2306] (상기 일반식 (63a)에 있어서,

[2307] R₆₃₁은 R₆₄₆과 결합하여 치환 혹은 무치환의 복소환을 형성하거나, 또는 치환 혹은 무치환의 복소환을 형성하지 않는다.

[2308] R₆₃₃은 R₆₄₇과 결합하여 치환 혹은 무치환의 복소환을 형성하거나, 또는 치환 혹은 무치환의 복소환을 형성하지 않는다.

[2309] R₆₃₄는 R₆₅₁과 결합하여 치환 혹은 무치환의 복소환을 형성하거나, 또는 치환 혹은 무치환의 복소환을 형성하지 않는다.

[2310] R₆₄₁은 R₆₄₂와 결합하여 치환 혹은 무치환의 복소환을 형성하거나, 또는 치환 혹은 무치환의 복소환을 형성하지 않는다.

[2311] R₆₃₁~R₆₅₁ 중의 인접하는 2개 이상의 1조 이상은,

[2312] 서로 결합하여 치환 혹은 무치환의 단환을 형성하거나,

[2313] 서로 결합하여 치환 혹은 무치환의 축합환을 형성하거나, 또는

[2314] 서로 결합하지 않고,

[2315] 상기 치환 혹은 무치환의 복소환을 형성하지 않고, 상기 단환을 형성하지 않으며, 또한 상기 축합환을 형성하지 않는 R₆₃₁~R₆₅₁은, 각각 독립적으로

[2316] 수소 원자,

[2317] 할로젠 원자,

[2318] 시아노기,

[2319] 니트로기,

[2320] 치환 혹은 무치환의 탄소수 1~50의 알킬기,

[2321] 치환 혹은 무치환의 탄소수 2~50의 알케닐기,

[2322] 치환 혹은 무치환의 탄소수 2~50의 알키닐기,

[2323] 치환 혹은 무치환의 고리 형성 탄소수 3~50의 시클로알킬기,

[2324] -Si(R₉₀₁)(R₉₀₂)(R₉₀₃)으로 표시되는 기,

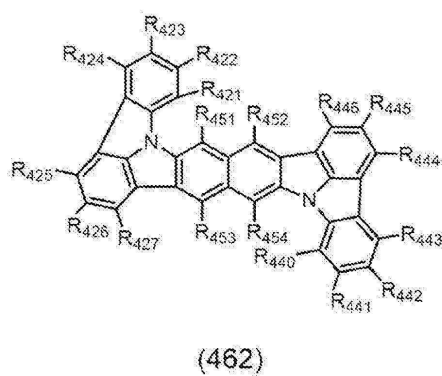
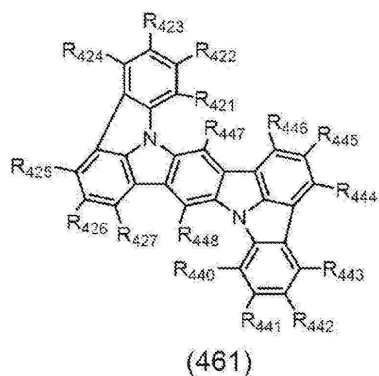
[2325] -O-(R₉₀₄)로 표시되는 기,

[2326] -S-(R₉₀₅)로 표시되는 기,

[2327] -N(R₉₀₆)(R₉₀₇)로 표시되는 기,

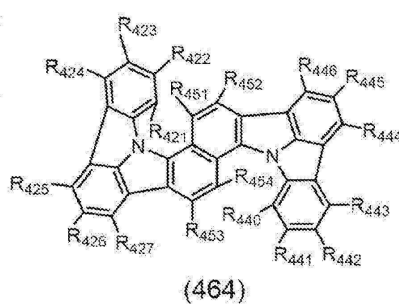
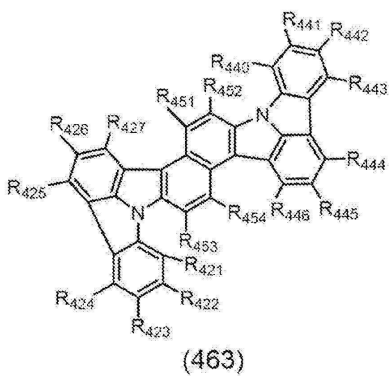
- [2328] 치환 혹은 무치환의 고리 형성 탄소수 6~50의 아릴기, 또는
- [2329] 치환 혹은 무치환의 고리 형성 원자수 5~50의 복소환기이며,
- [2330] 단, 상기 치환 혹은 무치환의 복소환을 형성하지 않고, 상기 단환을 형성하지 않으며, 또한 상기 축합환을 형성하지 않는 $R_{631} \sim R_{651}$ 중의 적어도 하나는,
- [2331] 할로겐 원자,
- [2332] 시아노기,
- [2333] 니트로기,
- [2334] 치환 혹은 무치환의 탄소수 1~50의 알킬기,
- [2335] 치환 혹은 무치환의 탄소수 2~50의 알케닐기,
- [2336] 치환 혹은 무치환의 탄소수 2~50의 알키닐기,
- [2337] 치환 혹은 무치환의 고리 형성 탄소수 3~50의 시클로알킬기,
- [2338] $-\text{Si}(R_{901})(R_{902})(R_{903})$ 으로 표시되는 기,
- [2339] $-\text{O}(R_{904})$ 로 표시되는 기,
- [2340] $-\text{S}(R_{905})$ 로 표시되는 기,
- [2341] $-\text{N}(R_{906})(R_{907})$ 로 표시되는 기,
- [2342] 할로겐 원자,
- [2343] 시아노기,
- [2344] 니트로기,
- [2345] 치환 혹은 무치환의 고리 형성 탄소수 6~50의 아릴기, 또는
- [2346] 치환 혹은 무치환의 고리 형성 원자수 5~50의 복소환기이다.)
- [2347] 일 실시형태에 있어서는, 상기 일반식 (4)로 표시되는 화합물이, 상기 일반식 (41-3), 일반식 (41-4) 또는 일반식 (41-5)로 표시되는 화합물이며, 상기 일반식 (41-5)에서의 A1 고리가, 치환 혹은 무치환의 고리 형성 탄소수 10~50의 축합 방향족 탄화수소환, 또는 치환 혹은 무치환의 고리 형성 원자수 8~50의 축합 복소환이다.
- [2348] 일 실시형태에 있어서는, 상기 일반식 (41-3), 일반식 (41-4), 및 일반식 (41-5)에 있어서의, 상기 치환 혹은 무치환의 고리 형성 탄소수 10~50의 축합 방향족 탄화수소환이,
- [2349] 치환 혹은 무치환의 나프탈렌환,
- [2350] 치환 혹은 무치환의 안트라센환, 또는
- [2351] 치환 혹은 무치환의 플루오렌환이며,
- [2352] 상기 치환 혹은 무치환의 고리 형성 원자수 8~50의 축합 복소환이,
- [2353] 치환 혹은 무치환의 디벤조푸란환,
- [2354] 치환 혹은 무치환의 카르바졸환, 또는
- [2355] 치환 혹은 무치환의 디벤조티오펜환이다.
- [2356] 일 실시형태에 있어서는, 상기 일반식 (41-3), 일반식 (41-4) 또는 일반식 (41-5)에 있어서의, 상기 치환 혹은 무치환의 고리 형성 탄소수 10~50의 축합 방향족 탄화수소환이,
- [2357] 치환 혹은 무치환의 나프탈렌환, 또는
- [2358] 치환 혹은 무치환의 플루오렌환이고,

- [2359] 상기 치환 혹은 무치환의 고리 형성 원자수 8~50의 축합 복소환이,
 [2360] 치환 혹은 무치환의 디벤조푸란환,
 [2361] 치환 혹은 무치환의 카르바졸환, 또는
 [2362] 치환 혹은 무치환의 디벤조티오펜환이다.
 [2363] 일 실시형태에 있어서는, 상기 일반식 (4)로 표시되는 화합물이,
 [2364] 하기 일반식 (461)로 표시되는 화합물,
 [2365] 하기 일반식 (462)로 표시되는 화합물,
 [2366] 하기 일반식 (463)으로 표시되는 화합물,
 [2367] 하기 일반식 (464)로 표시되는 화합물,
 [2368] 하기 일반식 (465)로 표시되는 화합물,
 [2369] 하기 일반식 (466)으로 표시되는 화합물, 및
 [2370] 하기 일반식 (467)로 표시되는 화합물로 이루어진 군으로부터 선택된다.
 [2371] [화학식 220]



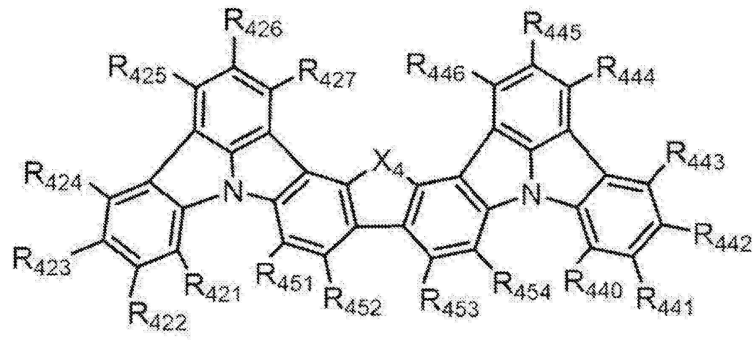
[2372]

- [2373] [화학식 221]



[2374]

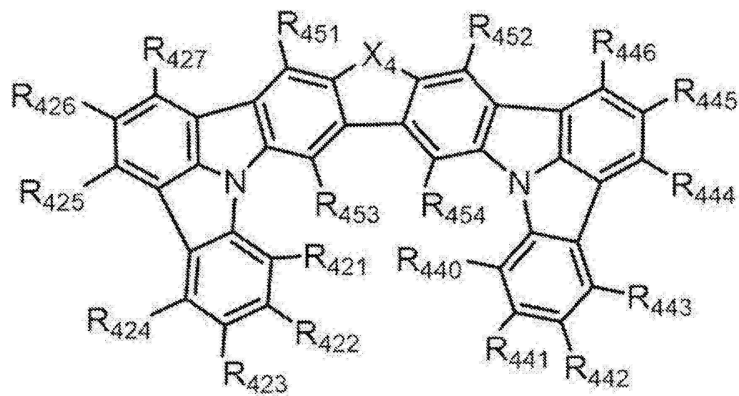
[2375] [화학식 222]



(465)

[2376]

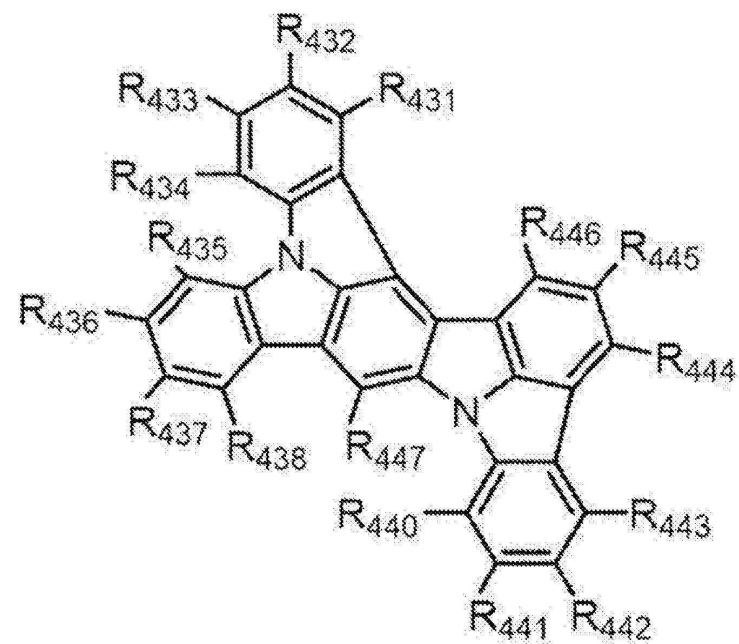
[2377] [화학식 223]



(466)

[2378]

[2379] [화학식 224]



(467)

[2380]

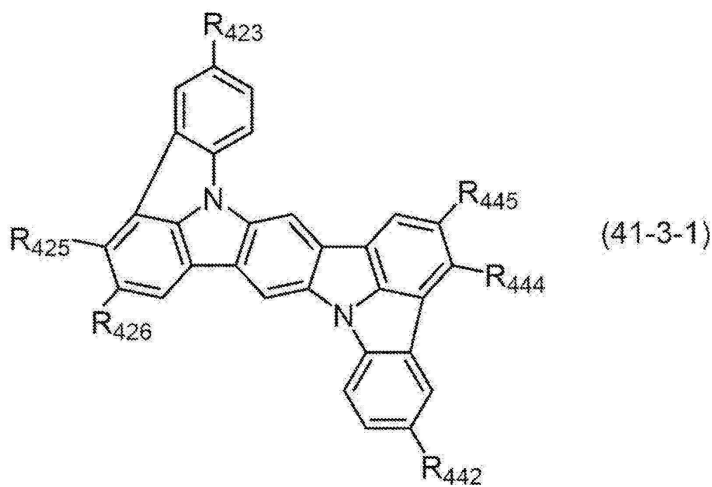
[2381] (상기 일반식 (461)~(467)에서,

- [2382] $R_{421} \sim R_{427}$, $R_{431} \sim R_{436}$, $R_{440} \sim R_{448}$ 및 $R_{451} \sim R_{454}$ 중의 인접한 2개 이상으로 이루어지는 조의 1조 이상이,
- [2383] 서로 결합하여 치환 혹은 무치환의 단환을 형성하거나,
- [2384] 서로 결합하여 치환 혹은 무치환의 축합환을 형성하거나, 또는
- [2385] 서로 결합하지 않으며,
- [2386] R_{437} , R_{438} , 및 상기 단환을 형성하지 않고, 또한 상기 축합환을 형성하지않는 $R_{421} \sim R_{427}$, $R_{431} \sim R_{436}$, $R_{440} \sim R_{448}$ 및 $R_{451} \sim R_{454}$ 는, 각각 독립적으로
- [2387] 수소 원자,
- [2388] 치환 혹은 무치환의 탄소수 1~50의 알킬기,
- [2389] 치환 혹은 무치환의 탄소수 2~50의 알케닐기,
- [2390] 치환 혹은 무치환의 탄소수 2~50의 알키닐기,
- [2391] 치환 혹은 무치환의 고리 형성 탄소수 3~50의 시클로알킬기,
- [2392] $-\text{Si}(R_{901})(R_{902})(R_{903})$ 으로 표시되는 기,
- [2393] $-\text{O}(R_{904})$ 로 표시되는 기,
- [2394] $-\text{S}(R_{905})$ 로 표시되는 기,
- [2395] $-\text{N}(R_{906})(R_{907})$ 로 표시되는 기,
- [2396] 할로젠 원자,
- [2397] 시아노기,
- [2398] 니트로기,
- [2399] 치환 혹은 무치환의 고리 형성 탄소수 6~50의 아릴기, 또는
- [2400] 치환 혹은 무치환의 고리 형성 원자수 5~50의 복소환기이며,
- [2401] X_4 는 산소 원자, NR_{801} , 또는 $\text{C}(R_{802})(R_{803})$ 이고,
- [2402] R_{801} , R_{802} 및 R_{803} 은, 각각 독립적으로
- [2403] 수소 원자,
- [2404] 치환 혹은 무치환의 탄소수 1~50의 알킬기,
- [2405] 치환 혹은 무치환의 고리 형성 탄소수 3~50의 시클로알킬기,
- [2406] 치환 혹은 무치환의 고리 형성 탄소수 6~50의 아릴기, 또는
- [2407] 치환 혹은 무치환의 고리 형성 원자수 5~50의 복소환기이며,
- [2408] 바람직하게는, 치환 혹은 무치환의 탄소수 1~50의 알킬기, 또는
- [2409] 치환 혹은 무치환의 고리 형성 탄소수 6~50의 아릴기이며,
- [2410] R_{801} 이 복수 존재하는 경우, 복수의 R_{801} 은 서로 동일하거나 또는 상이하고,
- [2411] R_{802} 가 복수 존재하는 경우, 복수의 R_{802} 는 서로 동일하거나 또는 상이하며,
- [2412] R_{803} 이 복수 존재하는 경우, 복수의 R_{803} 은 서로 동일하거나 또는 상이하다.)
- [2413] 일 실시형태에 있어서는, $R_{421} \sim R_{427}$ 및 $R_{440} \sim R_{448}$ 이, 각각 독립적으로

- [2414] 수소 원자,
 [2415] 치환 혹은 무치환의 고리 형성 탄소수 6~50의 아틸기, 또는
 [2416] 치환 혹은 무치환의 고리 형성 원자수 5~50의 복소환기이다.
 [2417] 일 실시형태에 있어서는, $R_{421} \sim R_{427}$ 및 $R_{440} \sim R_{447}$ 이, 각각 독립적으로

- [2418] 수소 원자,
 [2419] 치환 혹은 무치환의 고리 형성 탄소수 6~18의 아틸기, 및
 [2420] 치환 혹은 무치환의 고리 형성 원자수 5~18의 복소환으로 이루어진 군으로부터 선택된다.
 [2421] 일 실시형태에 있어서는, 상기 일반식 (41-3)으로 표시되는 화합물이, 하기 일반식 (41-3-1)로 표시되는 화합물이다.

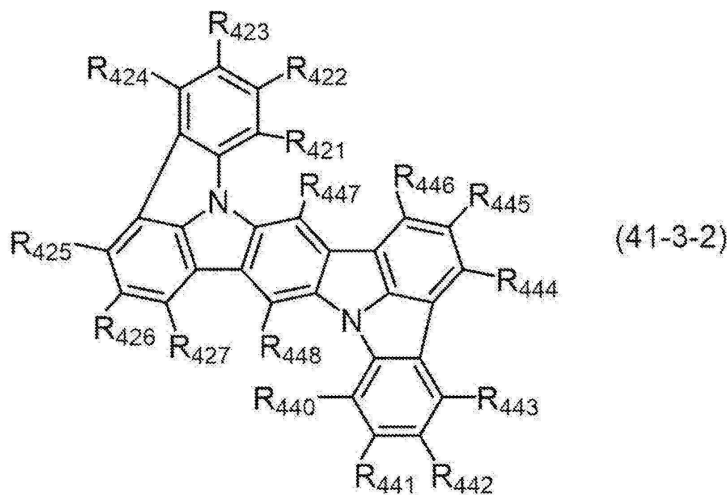
[2422] [화학식 225]



- [2423]
 [2424] (상기 일반식 (41-3-1)에서, R_{423} , R_{425} , R_{426} , R_{442} , R_{444} 및 R_{445} 는, 각각 독립적으로 상기 일반식 (41-3)에 있어서의 R_{423} , R_{425} , R_{426} , R_{442} , R_{444} 및 R_{445} 와 동일한 의미이다.)

- [2425] 일 실시형태에 있어서는, 상기 일반식 (41-3)으로 표시되는 화합물이, 하기 일반식 (41-3-2)로 표시되는 화합물이다.

[2426] [화학식 226]



- [2427]
 [2428] (상기 일반식 (41-3-2)에서, $R_{421} \sim R_{427}$ 및 $R_{440} \sim R_{448}$ 은, 각각 독립적으로 상기 일반식 (41-3)에 있어서의 $R_{421} \sim$

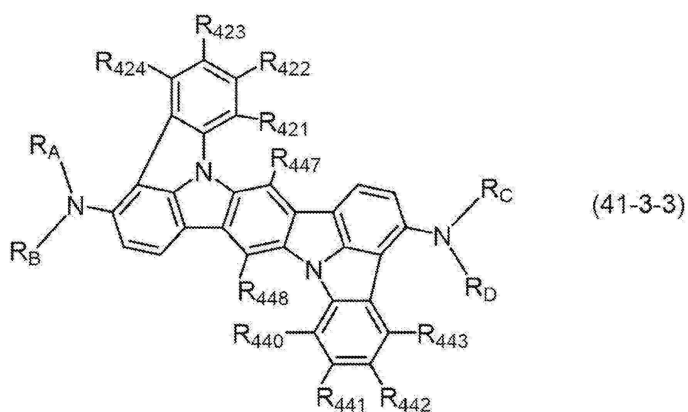
R_{427} 및 $R_{440} \sim R_{448}$ 과 동일한 의미이고,

[2429] 단, $R_{421} \sim R_{427}$ 및 $R_{440} \sim R_{446}$ 중 적어도 하나는 $-N(R_{906})(R_{907})$ 로 표시되는 기이다.)

[2430] 일 실시형태에 있어서는, 상기 일반식 (41-3-2)에 있어서의, $R_{421} \sim R_{427}$ 및 $R_{440} \sim R_{446}$ 중 어느 2개가 $-N(R_{906})(R_{907})$ 로 표시되는 기이다.

[2431] 일 실시형태에 있어서는, 상기 일반식 (41-3-2)로 표시되는 화합물이, 하기 식 (41-3-3)으로 표시되는 화합물이다.

[2432] [화학식 227]



[2433]

[2434] (상기 일반식 (41-3-3)에서, $R_{421} \sim R_{424}$, $R_{440} \sim R_{443}$, R_{447} 및 R_{448} 은, 각각 독립적으로 상기 일반식 (41-3)에 있어서의 $R_{421} \sim R_{424}$, $R_{440} \sim R_{443}$, R_{447} 및 R_{448} 과 동일한 의미이고,

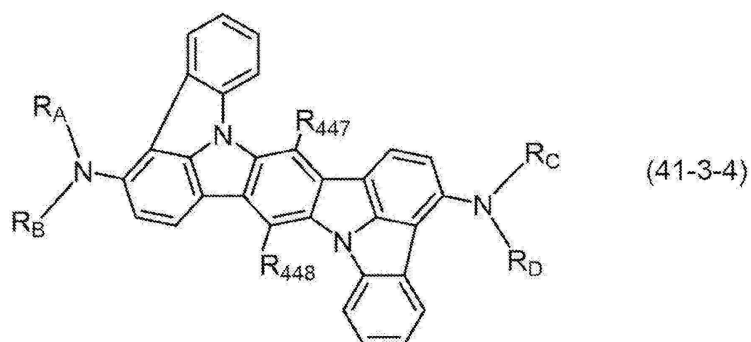
[2435] R_A , R_B , R_C 및 R_D 는, 각각 독립적으로

[2436] 치환 혹은 무치환의 고리 형성 탄소수 6~18의 아릴기, 또는

[2437] 치환 혹은 무치환의 고리 형성 원자수 5~18의 복소환기이다.)

[2438] 일 실시형태에 있어서는, 상기 일반식 (41-3-3)으로 표시되는 화합물이, 하기 식 (41-3-4)로 표시되는 화합물이다.

[2439] [화학식 228]



[2440]

[2441] (상기 일반식 (41-3-4)에서, R_{447} , R_{448} , R_A , R_B , R_C 및 R_D 는, 각각 독립적으로 상기 일반식 (41-3-3)에 있어서의 R_{447} , R_{448} , R_A , R_B , R_C 및 R_D 와 동일한 의미이다.)

[2442] 일 실시형태에 있어서는, R_A , R_B , R_C 및 R_D 가, 각각 독립적으로 치환 혹은 무치환의 고리 형성 탄소수 6~18의 아릴기이다.

[2443] 일 실시형태에 있어서는, R_A , R_B , R_C 및 R_D 가, 각각 독립적으로 치환 혹은 무치환의 페닐기이다.

- [2444] 일 실시형태에 있어서는, R₄₄₇ 및 R₄₄₈이 수소 원자이다.
- [2445] 유기 EL 소자(1A)에 있어서, 발광층(5)이 함유하는 발광성 화합물은, 최대 피크 파장이 500 nm 이하인 발광을 나타내는 화합물인 것이 바람직하고, 430 nm 이상 480 nm 이하인 발광을 나타내는 화합물인 것이 보다 바람직하다.
- [2446] 유기 EL 소자(1A)에 있어서, 발광층(5)이 함유하는 발광성 화합물은, 최대 피크 파장이 500 nm 이하인 형광 발광을 나타내는 화합물인 것이 바람직하고, 430 nm 이상 480 nm 이하인 형광 발광을 나타내는 화합물인 것이 보다 바람직하다.
- [2447] 유기 EL 소자(1A)에 있어서, 발광층(5)이 제1 실시형태에 따른 화합물 및 발광성 화합물을 포함하는 경우, 제1 실시형태에 따른 화합물은, 호스트 재료(매트릭스 재료라고 부르는 경우도 있음)인 것이 바람직하고, 발광성 화합물은, 도펀트 재료(게스트 재료, 이미터, 또는 발광 재료라고 부르는 경우도 있음)인 것이 바람직하다.
- [2448] 본 명세서에 있어서, 「호스트 재료」란, 예컨대 「층의 50 질량% 이상」 포함되는 재료이다.
- [2449] 따라서, 예컨대 유기 EL 소자(1A)의 경우, 발광층(5)은, 상기 일반식 (1A)로 표시되는 화합물을, 발광층의 전체 질량의 50 질량% 이상 함유한다.
- [2450] 따라서, 예컨대 유기 EL 소자(1A)의 경우, 발광층(5)은, 상기 일반식 (1A-A)로 표시되는 화합물을, 발광층의 전체 질량의 50 질량% 이상 함유한다.
- [2451] (발광층의 막 두께)
- [2452] 발광층(5)의 막 두께는, 5 nm 이상 50 nm 이하인 것이 바람직하고, 7 nm 이상 50 nm 이하인 것이 보다 바람직하며, 10 nm 이상 50 nm 이하인 것이 더욱 바람직하다. 발광층의 막 두께가 5 nm 이상이면, 발광층을 형성하기 쉽고, 색도를 조정하기 쉽다. 발광층의 막 두께가 50 nm 이하이면, 구동 전압의 상승을 억제하기 쉽다.
- [2453] (발광층에 있어서의 화합물의 함유율)
- [2454] 발광층(5)이 제1 실시형태에 따른 화합물 및 발광성 화합물을 함유하는 경우, 발광층(5)에 있어서의 제1 실시형태에 따른 화합물 및 발광성 화합물의 함유율은, 예컨대, 각각 이하의 범위인 것이 바람직하다.
- [2455] 제1 실시형태에 따른 화합물의 함유율은, 80 질량% 이상 99 질량% 이하인 것이 바람직하고, 90 질량% 이상 99 질량% 이하인 것이 보다 바람직하며, 95 질량% 이상 99 질량% 이하인 것이 더욱 바람직하다.
- [2456] 발광성 화합물의 함유율은, 1 질량% 이상 10 질량% 이하인 것이 바람직하고, 1 질량% 이상 7 질량% 이하인 것이 보다 바람직하며, 1 질량% 이상 5 질량% 이하인 것이 더욱 바람직하다.
- [2457] 단, 발광층(5)에 있어서의 제1 실시형태에 따른 화합물 및 발광성 화합물의 합계 함유율의 상한은 100 질량%이다.
- [2458] 또한, 본 실시형태는, 발광층(5)에, 제1 실시형태에 따른 화합물 및 발광성 화합물 이외의 재료가 포함되는 것을 제외하지 않는다.
- [2459] 발광층(5)은, 제1 실시형태에 따른 화합물을 1종만 포함하여도 좋고, 2종 이상 포함하여도 좋다. 발광층(5)은, 발광성 화합물을 1종만 포함하여도 좋고, 2종 이상 포함하여도 좋다.
- [2460] 도 2에, 본 실시형태에 따른 유기 EL 소자의 다른 일례의 개략 구성을 나타낸다.
- [2461] 도 2에 도시된 유기 EL 소자(1B)는, 유기층(10B)이, 제1 발광 영역(5B)을 포함한다는 점에서, 유기 EL 소자(1A)와 상이하고, 그 밖의 점은, 유기 EL 소자(1A)와 동일하다. 제1 발광 영역(5B)은, 양극(3)측에서부터 차례로 제1 발광층(51) 및 제2 발광층(52)을 포함한다.
- [2462] 제1 발광층(51)은, 제1 화합물을 함유하고, 제2 발광층(52)은, 제2 화합물을 함유한다. 제1 화합물과 제2 화합물은, 서로 상이한 화합물이다.
- [2463] (제1 화합물)
- [2464] 유기 EL 소자(1B)의 일 양태에 있어서, 제1 화합물은, 제1 실시형태에 따른 화합물이다.
- [2465] 본 실시형태에 따른 유기 EL 소자의 일 양태에 있어서, 제1 화합물은, 상기 일반식 (1A)로 표시되는 화합물이어

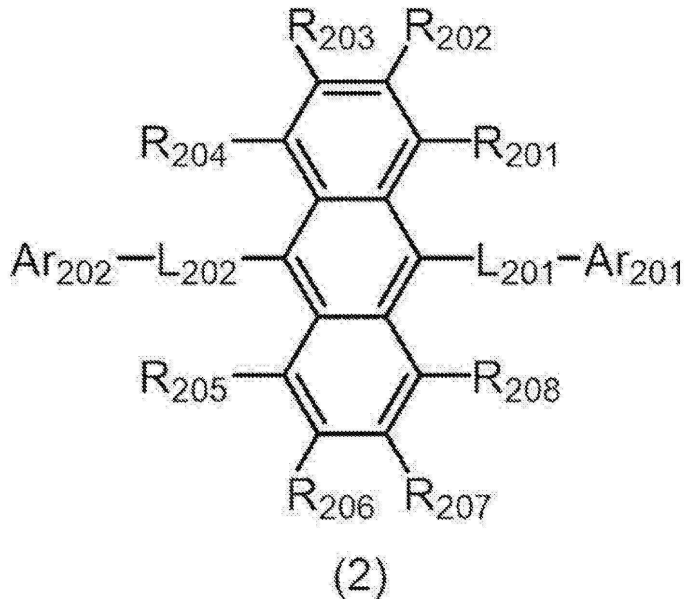
도 좋다.

[2466] 본 실시형태에 따른 유기 EL 소자의 일 양태에 있어서, 제1 화합물은, 상기 일반식 (1A-A)로 표시되는 화합물이어도 좋다.

[2467] (제2 화합물)

[2468] 유기 EL 소자(1B)에 있어서, 제2 화합물은, 하기 일반식 (2)로 표시되는 화합물인 것이 바람직하다.

[2469] [화학식 229]



[2470]

[2471] (상기 일반식 (2)에 있어서,

[2472] $R_{201} \sim R_{208}$ 은, 각각 독립적으로

[2473] 수소 원자,

[2474] 치환 혹은 무치환의 탄소수 1~50의 알킬기,

[2475] 치환 혹은 무치환의 탄소수 1~50의 할로알킬기,

[2476] 치환 혹은 무치환의 탄소수 2~50의 알케닐기,

[2477] 치환 혹은 무치환의 탄소수 2~50의 알키닐기,

[2478] 치환 혹은 무치환의 고리 형성 탄소수 3~50의 시클로알킬기,

[2479] $-\text{Si}(R_{901})(R_{902})(R_{903})$ 으로 표시되는 기,

[2480] $-\text{O}-$ (R_{904})로 표시되는 기,

[2481] $-\text{S}-$ (R_{905})로 표시되는 기,

[2482] $-\text{N}(R_{906})(R_{907})$ 로 표시되는 기,

[2483] 치환 혹은 무치환의 탄소수 7~50의 아랄킬기,

[2484] $-\text{C}(=\text{O})R_{801}$ 로 표시되는 기,

[2485] $-\text{COOR}_{802}$ 로 표시되는 기,

[2486] 할로젠 원자,

[2487] 시아노기,

- [2488] 니트로기,
- [2489] 치환 혹은 무치환의 고리 형성 탄소수 6~50의 아릴기, 또는
- [2490] 치환 혹은 무치환의 고리 형성 원자수 5~50의 복소환기이고,
- [2491] L_{201} 및 L_{202} 는, 각각 독립적으로
- [2492] 단일 결합,
- [2493] 치환 혹은 무치환의 고리 형성 탄소수 6~50의 아릴렌기, 또는
- [2494] 치환 혹은 무치환의 고리 형성 원자수 5~50의 2가의 복소환기이며,
- [2495] Ar_{201} 및 Ar_{202} 는, 각각 독립적으로
- [2496] 치환 혹은 무치환의 고리 형성 탄소수 6~50의 아릴기, 또는
- [2497] 치환 혹은 무치환의 고리 형성 원자수 5~50의 복소환기이다.)
- [2498] (본 실시형태에 따른 제2 화합물 중, R_{901} , R_{902} , R_{903} , R_{904} , R_{905} , R_{906} , R_{907} , R_{801} 및 R_{802} 는, 각각 독립적으로
- [2499] 수소 원자,
- [2500] 치환 혹은 무치환의 탄소수 1~50의 알킬기,
- [2501] 치환 혹은 무치환의 고리 형성 탄소수 3~50의 시클로알킬기,
- [2502] 치환 혹은 무치환의 고리 형성 탄소수 6~50의 아릴기, 또는
- [2503] 치환 혹은 무치환의 고리 형성 원자수 5~50의 복소환기이며,
- [2504] R_{901} 이 복수 존재하는 경우, 복수의 R_{901} 은 서로 동일하거나 또는 상이하고,
- [2505] R_{902} 가 복수 존재하는 경우, 복수의 R_{902} 는 서로 동일하거나 또는 상이하며,
- [2506] R_{903} 이 복수 존재하는 경우, 복수의 R_{903} 은 서로 동일하거나 또는 상이하고,
- [2507] R_{904} 가 복수 존재하는 경우, 복수의 R_{904} 는 서로 동일하거나 또는 상이하며,
- [2508] R_{905} 가 복수 존재하는 경우, 복수의 R_{905} 는 서로 동일하거나 또는 상이하고,
- [2509] R_{906} 이 복수 존재하는 경우, 복수의 R_{906} 은 서로 동일하거나 또는 상이하며,
- [2510] R_{907} 이 복수 존재하는 경우, 복수의 R_{907} 은 서로 동일하거나 또는 상이하고,
- [2511] R_{801} 이 복수 존재하는 경우, 복수의 R_{801} 은 서로 동일하거나 또는 상이하며,
- [2512] R_{802} 가 복수 존재하는 경우, 복수의 R_{802} 는 서로 동일하거나 또는 상이하다.)
- [2513] 본 실시형태에 따른 유기 EL 소자에 있어서,
- [2514] $R_{201} \sim R_{208}$ 은, 각각 독립적으로
- [2515] 수소 원자,
- [2516] 치환 혹은 무치환의 탄소수 1~50의 알킬기,
- [2517] 치환 혹은 무치환의 탄소수 1~50의 할로알킬기,
- [2518] 치환 혹은 무치환의 탄소수 2~50의 알케닐기,
- [2519] 치환 혹은 무치환의 탄소수 2~50의 알키닐기,
- [2520] 치환 혹은 무치환의 고리 형성 탄소수 3~50의 시클로알킬기,

- [2521] $-\text{Si}(\text{R}_{901})(\text{R}_{902})(\text{R}_{903})$ 으로 표시되는 기,
- [2522] $-\text{O}-(\text{R}_{904})$ 로 표시되는 기,
- [2523] $-\text{S}-(\text{R}_{905})$ 로 표시되는 기,
- [2524] $-\text{N}(\text{R}_{906})(\text{R}_{907})$ 로 표시되는 기,
- [2525] 치환 혹은 무치환의 탄소수 7~50의 아랄킬기,
- [2526] $-\text{C}(=\text{O})\text{R}_{801}$ 로 표시되는 기,
- [2527] $-\text{COOR}_{802}$ 로 표시되는 기,
- [2528] 할로겐 원자,
- [2529] 시아노기, 또는
- [2530] 니트로기이고,
- [2531] L_{201} 및 L_{202} 는, 각각 독립적으로
- [2532] 단일 결합,
- [2533] 치환 혹은 무치환의 고리 형성 탄소수 6~50의 아릴렌기, 또는
- [2534] 치환 혹은 무치환의 고리 형성 원자수 5~50의 2가의 복소환기이며,
- [2535] Ar_{201} 및 Ar_{202} 는, 각각 독립적으로
- [2536] 치환 혹은 무치환의 고리 형성 탄소수 6~50의 아릴기, 또는
- [2537] 치환 혹은 무치환의 고리 형성 원자수 5~50의 복소환기인 것이 바람직하다.
- [2538] 본 실시형태에 따른 유기 EL 소자에 있어서,
- [2539] L_{201} 및 L_{202} 는, 각각 독립적으로
- [2540] 단일 결합, 또는
- [2541] 치환 혹은 무치환의 고리 형성 탄소수 6~50의 아릴렌기이고,
- [2542] Ar_{201} 및 Ar_{202} 은, 각각 독립적으로 치환 혹은 무치환의 고리 형성 탄소수 6~50의 아릴기인 것이 바람직하다.
- [2543] 본 실시형태에 따른 유기 EL 소자에 있어서,
- [2544] Ar_{201} 및 Ar_{202} 는, 각각 독립적으로
- [2545] 페닐기,
- [2546] 나프틸기,
- [2547] 페난트릴기,
- [2548] 비페닐기,
- [2549] 터페닐기,
- [2550] 디페닐플루오레닐기,
- [2551] 디메틸플루오레닐기,
- [2552] 벤조디페닐플루오레닐기,
- [2553] 벤조디메틸플루오레닐기,

[2554] 디벤조푸라닐기,

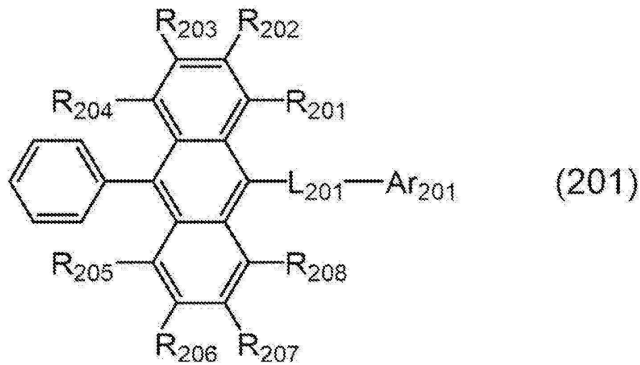
[2555] 디벤조티에닐기,

[2556] 나프토벤조푸라닐기, 또는

[2557] 나프토벤조티에닐기인 것이 바람직하다.

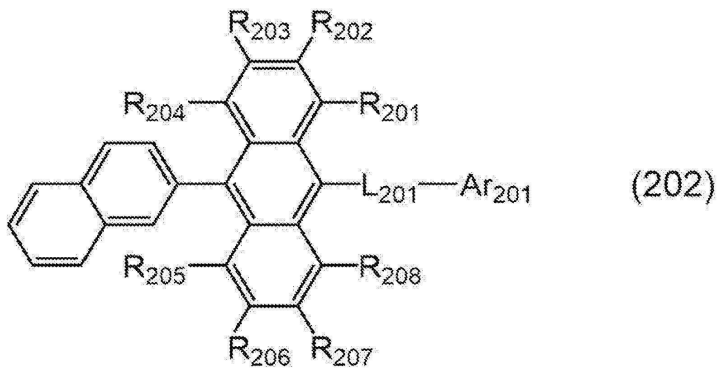
[2558] 본 실시형태에 따른 유기 EL 소자에 있어서, 상기 일반식 (2)로 표시되는 제2 화합물은, 하기 일반식 (201), 일반식 (202), 일반식 (203), 일반식 (204), 일반식 (205), 일반식 (206), 일반식 (207), 일반식 (208) 또는 일반식 (209)로 표시되는 화합물인 것이 바람직하다.

[2559] [화학식 230]



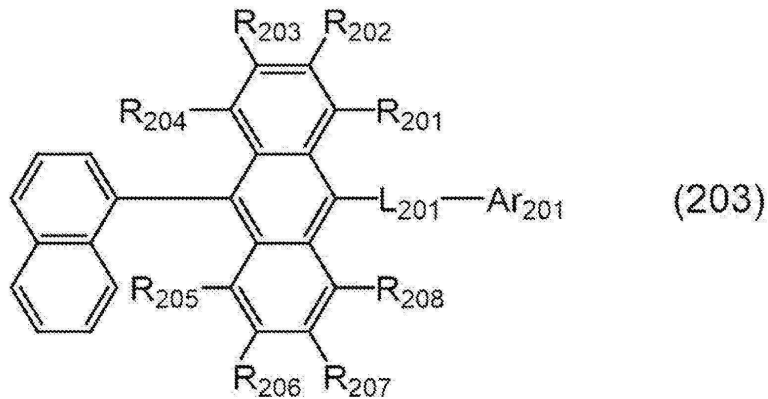
[2560]

[2561] [화학식 231]



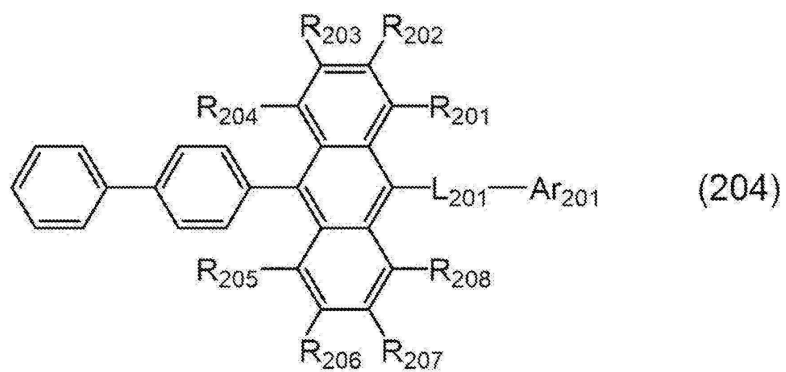
[2562]

[2563] [화학식 232]



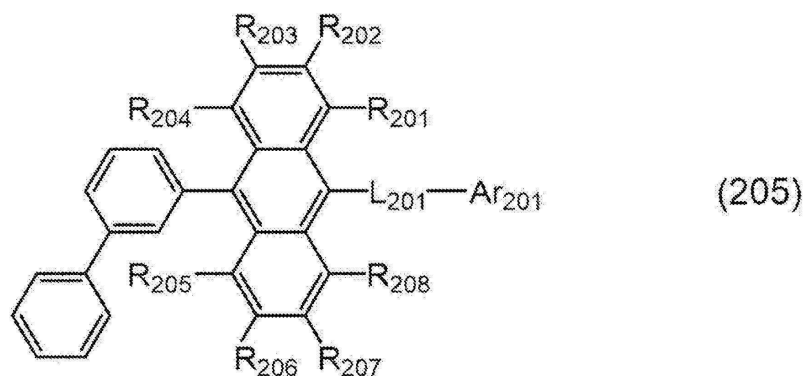
[2564]

[2565] [화학식 233]



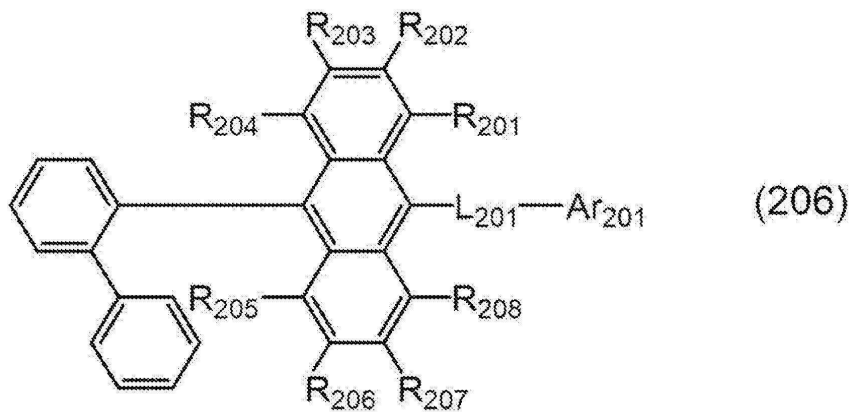
[2566]

[2567] [화학식 234]



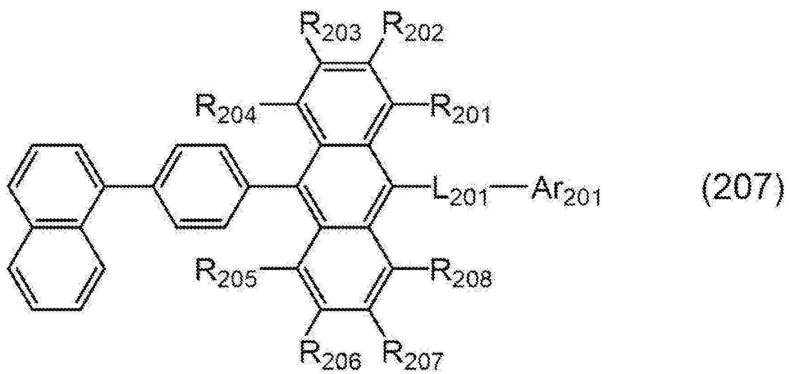
[2568]

[2569] [화학식 235]



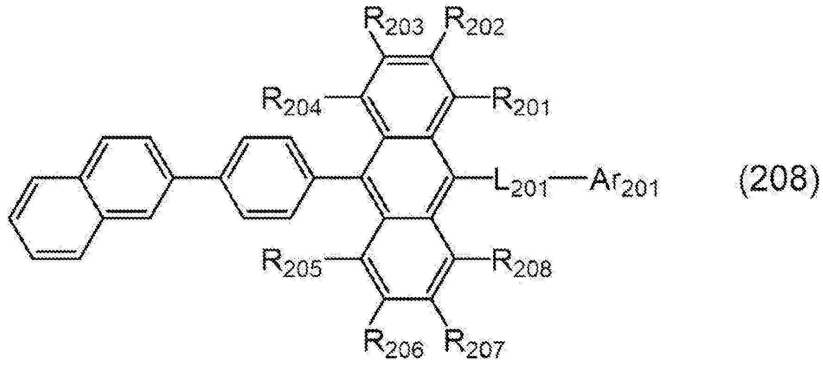
[2570]

[2571] [화학식 236]



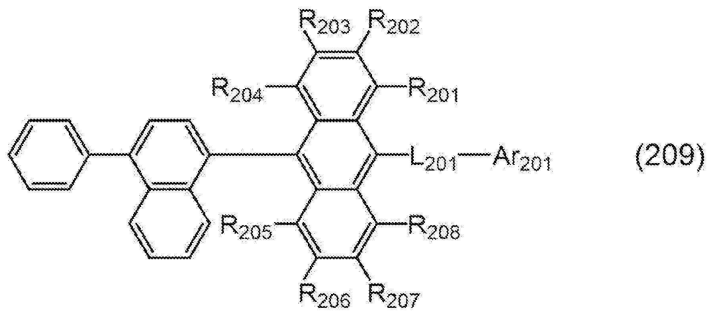
[2572]

[2573] [화학식 237]



[2574]

[2575] [화학식 238]



[2576]

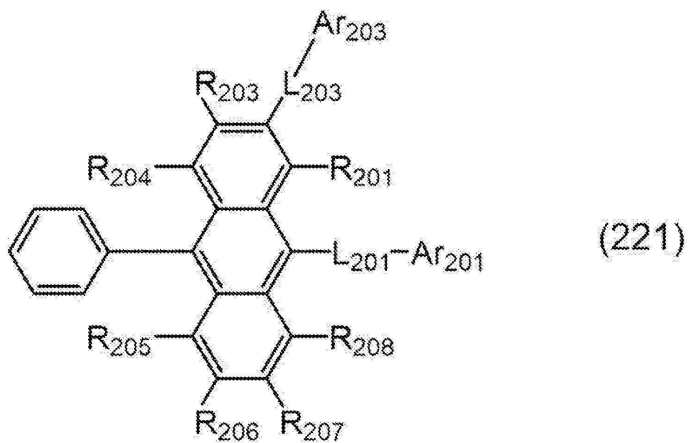
[2577] (상기 일반식 (201)~(209)에서,

[2578] L₂₀₁ 및 Ar₂₀₁은 상기 일반식 (2)에 있어서의 L₂₀₁ 및 Ar₂₀₁과 동일한 의미이고,

[2579] R₂₀₁~R₂₀₈은, 각각 독립적으로 상기 일반식 (2)에 있어서의 R₂₀₁~R₂₀₈과 동일한 의미이다.)

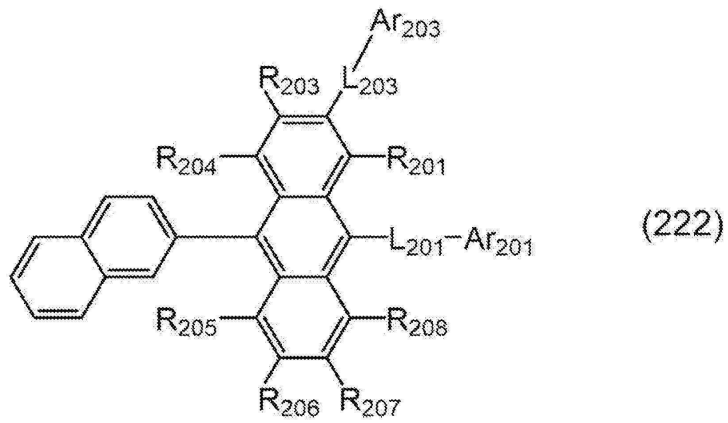
[2580] 상기 일반식 (2)로 표시되는 제2 화합물은, 하기 일반식 (221), 일반식 (222), 일반식 (223), 일반식 (224), 일반식 (225), 일반식 (226), 일반식 (227), 일반식 (228) 또는 일반식 (229)로 표시되는 화합물인 것도 바람직하다.

[2581] [화학식 239]



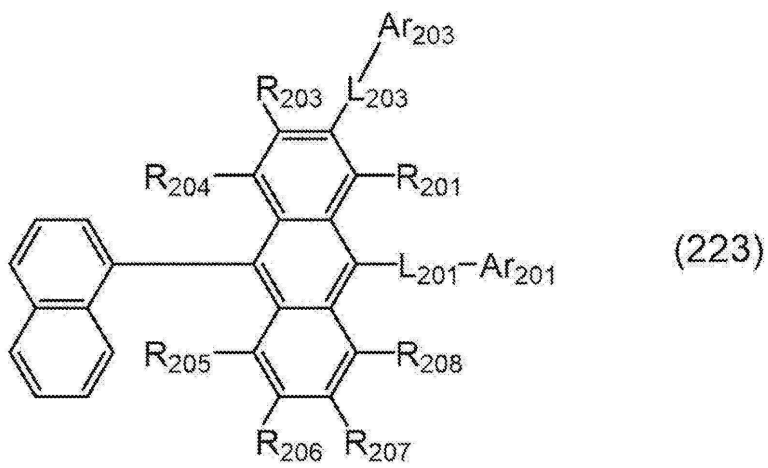
[2582]

[2583] [화학식 240]



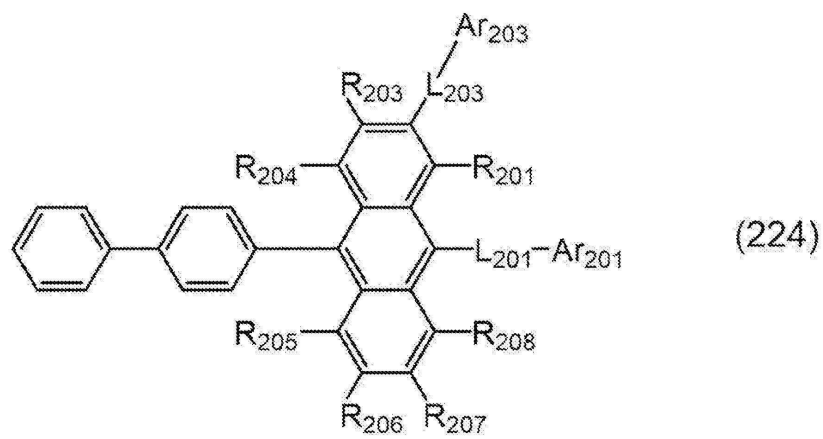
[2584]

[2585] [화학식 241]



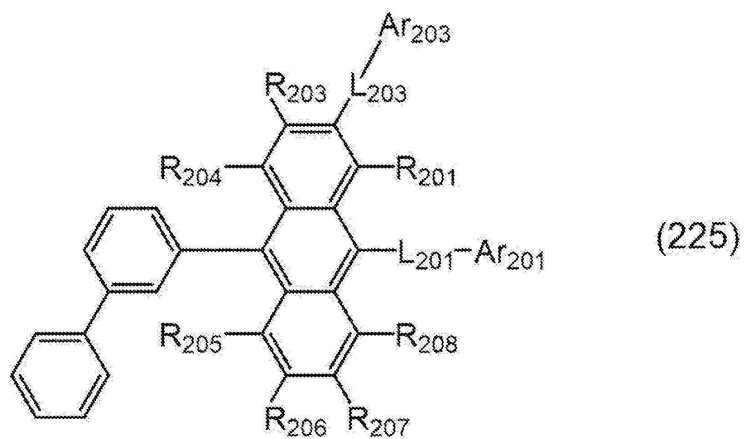
[2586]

[2587] [화학식 242]



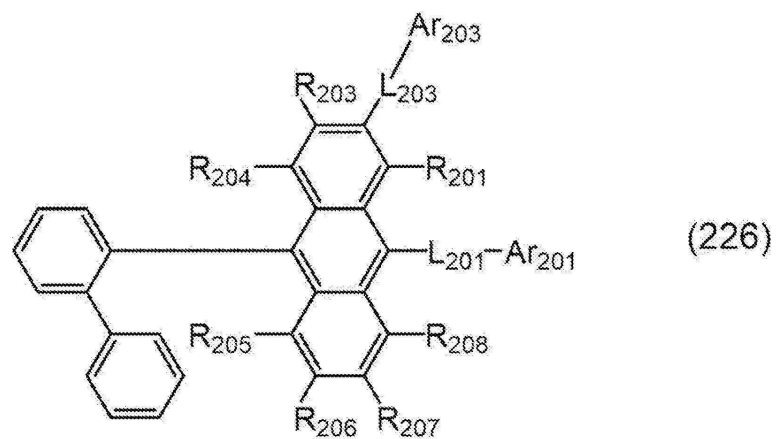
[2588]

[2589] [화학식 243]



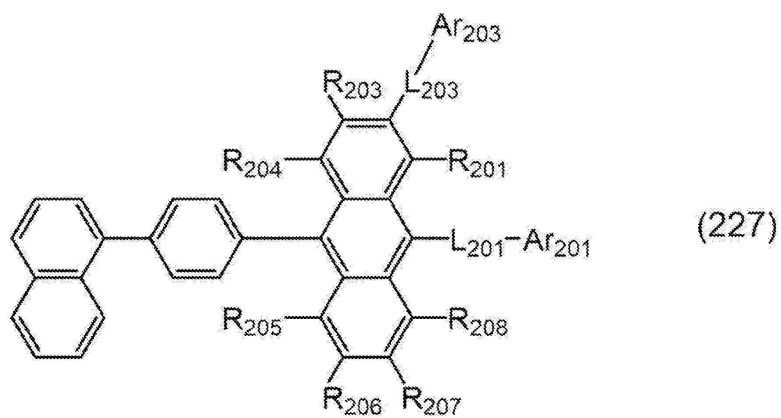
[2590]

[2591] [화학식 244]



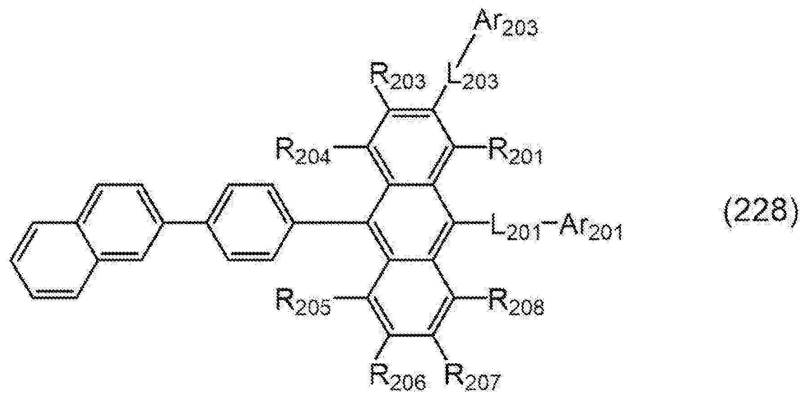
[2592]

[2593] [화학식 245]



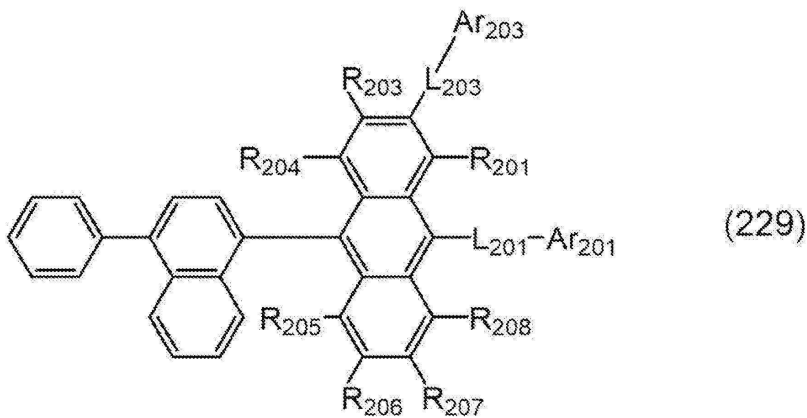
[2594]

[2595] [화학식 246]



[2596]

[2597] [화학식 247]



[2598]

[2599] (상기 일반식 (221), 일반식 (222), 일반식 (223), 일반식 (224), 일반식 (225), 일반식 (226), 일반식 (227), 일반식 (228) 및 일반식 (229)에 있어서,

[2600] R_{201} 및 $R_{203} \sim R_{208}$ 은, 각각 독립적으로 상기 일반식 (2)에 있어서의 R_{201} 및 $R_{203} \sim R_{208}$ 과 동일한 의미이고,

[2601] L_{201} 및 Ar_{201} 은, 각각 상기 일반식 (2)에 있어서의 L_{201} 및 Ar_{201} 과 동일한 의미이며,

[2602] L_{203} 은 상기 일반식 (2)에 있어서의 L_{201} 과 동일한 의미이고,

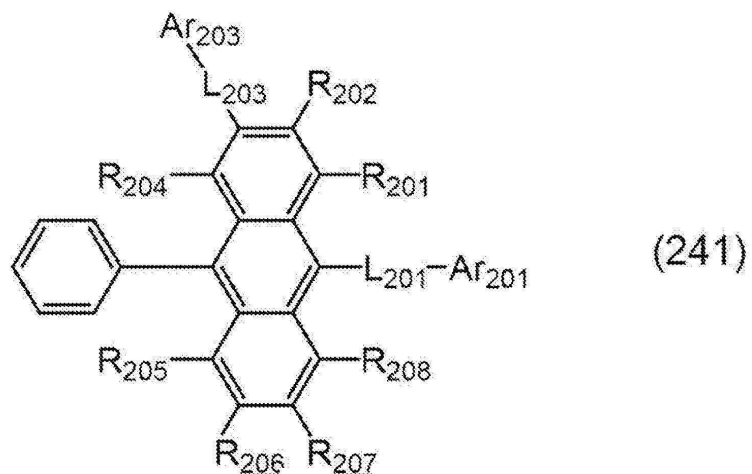
[2603] L_{203} 과 L_{201} 은 서로 동일하거나 또는 상이하며,

[2604] Ar_{203} 은 상기 일반식 (2)에 있어서의 Ar_{201} 과 동일한 의미이고,

[2605] Ar_{203} 과 Ar_{201} 은 서로 동일하거나 또는 상이하다.)

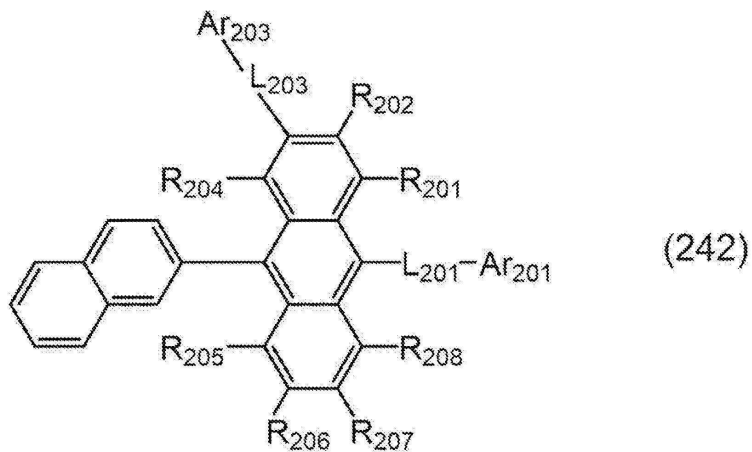
[2606] 상기 일반식 (2)로 표시되는 제2 화합물은, 하기 일반식 (241), 일반식 (242), 일반식 (243), 일반식 (244), 일반식 (245), 일반식 (246), 일반식 (247), 일반식 (248) 또는 일반식 (249)로 표시되는 화합물인 것도 바람직하다.

[2607] [화학식 248]



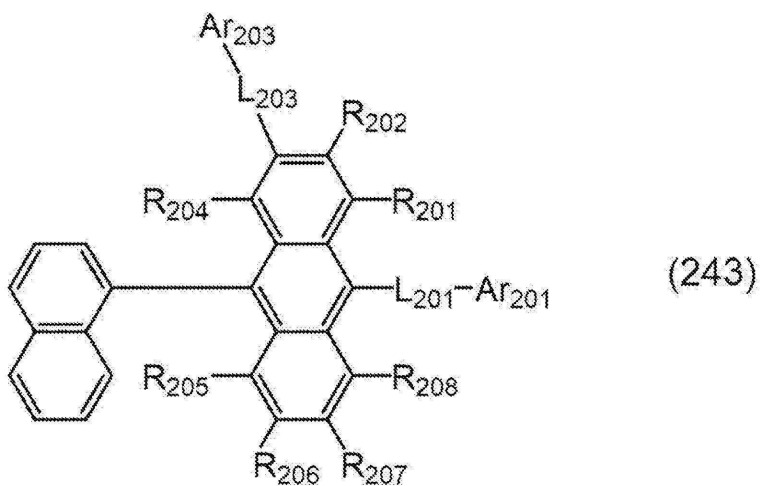
[2608]

[2609] [화학식 249]



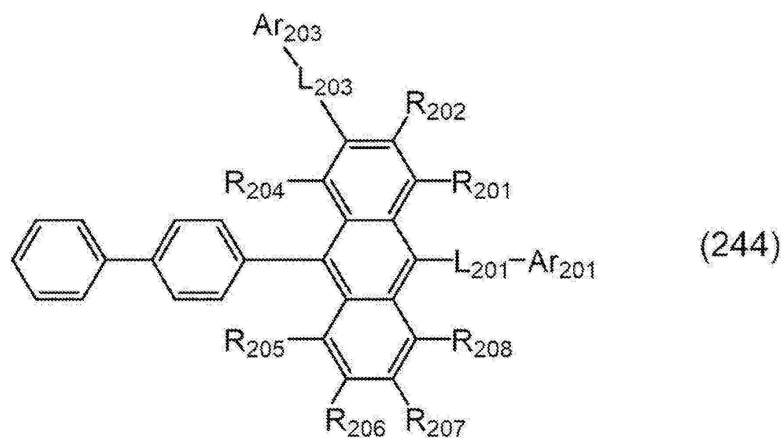
[2610]

[2611] [화학식 250]



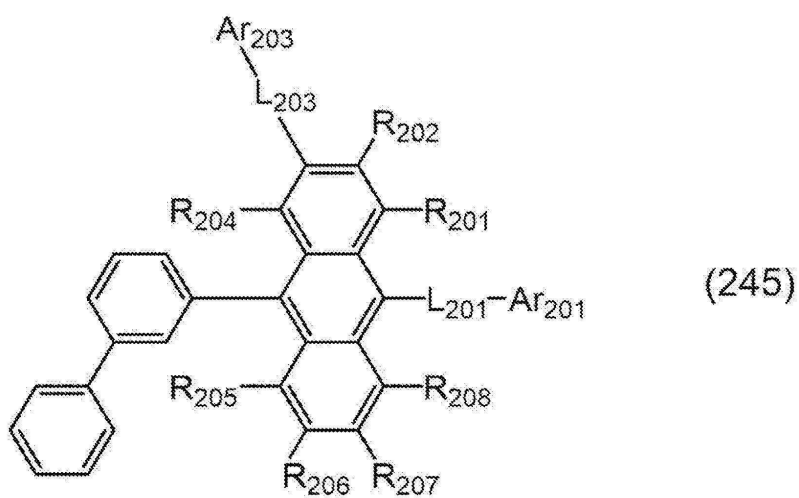
[2612]

[2613] [화학식 251]



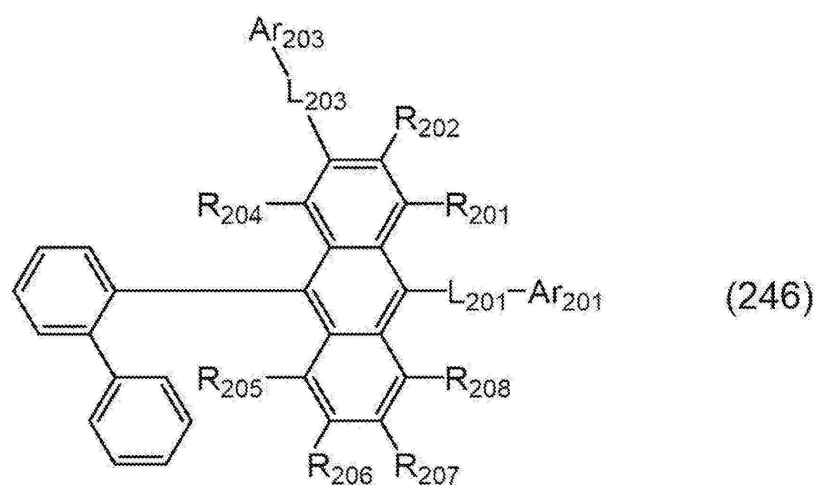
[2614]

[2615] [화학식 252]



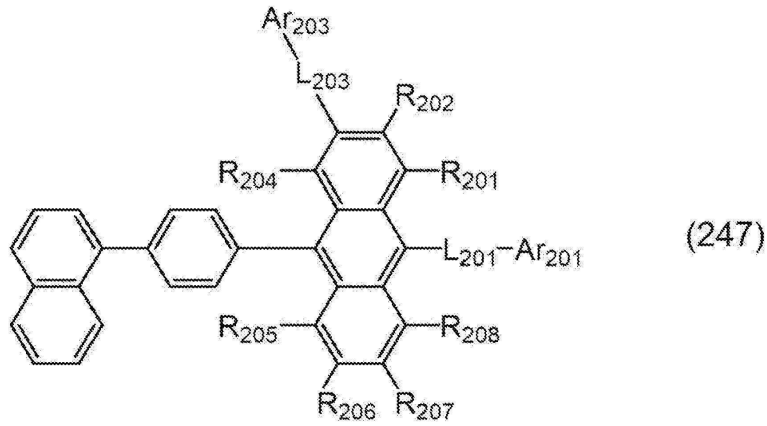
[2616]

[2617] [화학식 253]



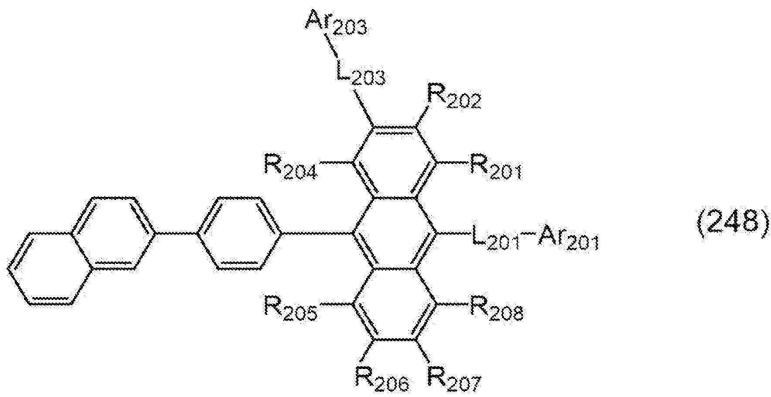
[2618]

[2619] [화학식 254]



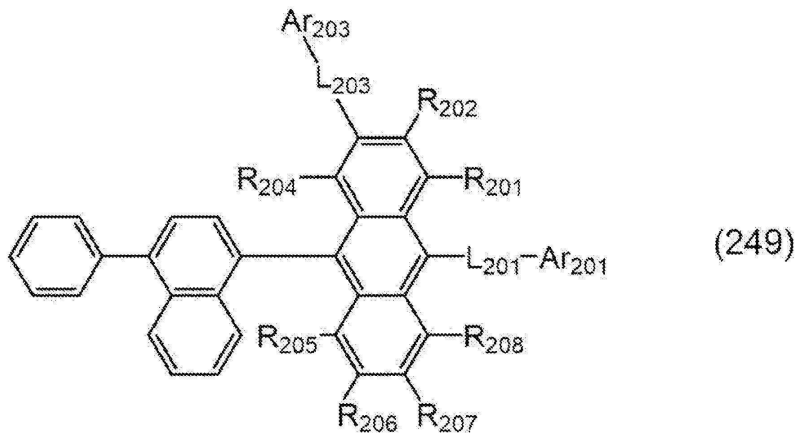
[2620]

[2621] [화학식 255]



[2622]

[2623] [화학식 256]



[2624]

[2625] (상기 일반식 (241), 일반식 (242), 일반식 (243), 일반식 (244), 일반식 (245), 일반식 (246), 일반식 (247), 일반식 (248) 및 일반식 (249)에 있어서,

[2626] R_{201} , R_{202} 및 $R_{204} \sim R_{208}$ 은, 각각 독립적으로 상기 일반식 (2)에 있어서의 R_{201} , R_{202} 및 $R_{204} \sim R_{208}$ 과 동일한 의미이고,

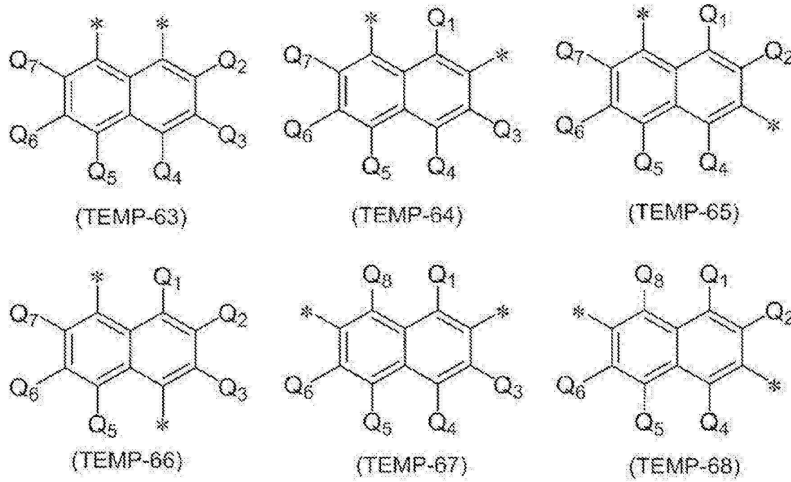
[2627] L_{201} 및 Ar_{201} 은, 각각 상기 일반식 (2)에 있어서의 L_{201} 및 Ar_{201} 과 동일한 의미이며,

[2628] L_{203} 은 상기 일반식 (2)에 있어서의 L_{201} 과 동일한 의미이고,

[2629] L_{203} 과 L_{201} 은 서로 동일하거나 또는 상이하며,

- [2630] Ar_{203} 은 상기 일반식 (2)에 있어서의 Ar_{201} 과 동일한 의미이고,
- [2631] Ar_{203} 과 Ar_{201} 은 서로 동일하거나 또는 상이하다.)
- [2632] 상기 일반식 (2)로 표시되는 제2 화합물 중, $R_{201} \sim R_{208}$ 은, 각각 독립적으로
- [2633] 수소 원자,
- [2634] 치환 혹은 무치환의 탄소수 1~50의 알킬기,
- [2635] 치환 혹은 무치환의 고리 형성 탄소수 3~50의 시클로알킬기, 또는
- [2636] $-Si(R_{901})(R_{902})(R_{903})$ 으로 표시되는 기인 것이 바람직하다.
- [2637] L_{201} 은,
- [2638] 단일 결합, 또는
- [2639] 무치환의 고리 형성 탄소수 6~22의 아릴렌기이고,
- [2640] Ar_{201} 은 치환 혹은 무치환의 고리 형성 탄소수 6~22의 아릴기인 것이 바람직하다.
- [2641] 본 실시형태에 따른 유기 EL 소자에 있어서,
- [2642] 상기 일반식 (2)로 표시되는 제2 화합물 중, $R_{201} \sim R_{208}$ 은, 각각 독립적으로
- [2643] 수소 원자,
- [2644] 치환 혹은 무치환의 탄소수 1~50의 알킬기,
- [2645] 치환 혹은 무치환의 고리 형성 탄소수 3~50의 시클로알킬기, 또는
- [2646] $-Si(R_{901})(R_{902})(R_{903})$ 으로 표시되는 기인 것이 바람직하다.
- [2647] 본 실시형태에 따른 유기 EL 소자에 있어서,
- [2648] 상기 일반식 (2)로 표시되는 제2 화합물 중, $R_{201} \sim R_{208}$ 은 수소 원자인 것이 바람직하다.
- [2649] 상기 제2 화합물에 있어서, 「치환 혹은 무치환」이라고 기재된 기는 모두 「무치환」의 기인 것이 바람직하다.
- [2650] 본 실시형태에 따른 유기 EL 소자에 있어서, 예컨대 상기 일반식 (2)로 표시되는 제2 화합물 중의 Ar_{201} 은 치환 혹은 무치환의 디벤조푸라닐기이다.
- [2651] 본 실시형태에 따른 유기 EL 소자에 있어서, 예컨대 상기 일반식 (2)로 표시되는 제2 화합물 중의 Ar_{201} 은 무치환의 디벤조푸라닐기이다.
- [2652] 본 실시형태에 따른 유기 EL 소자에 있어서, 예컨대 상기 일반식 (2)로 표시되는 제2 화합물은 적어도 하나의 수소를 포함하고, 상기 수소 중 적어도 하나가 중수소이다.
- [2653] 본 실시형태에 따른 유기 EL 소자에 있어서, 예컨대 상기 일반식 (2)로 표시되는 제2 화합물 중의 L_{201} 은 TEMP-63 내지 TEMP-68이다.

[2654] [화학식 257]



[2655]

[2656] 본 실시형태에 따른 유기 EL 소자에 있어서, 예컨대 상기 일반식 (2)로 표시되는 제2 화합물 중의 Ar₂₀₁은 치환 혹은 무치환의 안트라닐기,

[2657] 벤조안트라닐기,

[2658] 페난트라닐기,

[2659] 벤조페난트라닐기,

[2660] 페날레닐기,

[2661] 피레닐기,

[2662] 크리세닐기,

[2663] 벤조크리세닐기,

[2664] 트리페닐레닐기,

[2665] 벤조트리페닐레닐기,

[2666] 테트라세닐기,

[2667] 펜타세닐기,

[2668] 플루오란테닐기,

[2669] 벤조플루오란테닐기, 및

[2670] 피릴레닐기로 이루어진 군으로부터 선택되는 적어도 어느 하나의 기이다.

[2671] 본 실시형태에 따른 유기 EL 소자에 있어서, 예컨대 상기 일반식 (2)로 표시되는 제2 화합물 중의 Ar₂₀₁은 치환 혹은 무치환의 플루오레닐기이다.

[2672] 본 실시형태에 따른 유기 EL 소자에 있어서, 예컨대 상기 일반식 (2)로 표시되는 제2 화합물 중의 Ar₂₀₁은 치환 혹은 무치환의 크산텐일기이다.

[2673] 본 실시형태에 따른 유기 EL 소자에 있어서, 예컨대 상기 일반식 (2)로 표시되는 제2 화합물 중의 Ar₂₀₁은 벤조 크산텐일기이다.

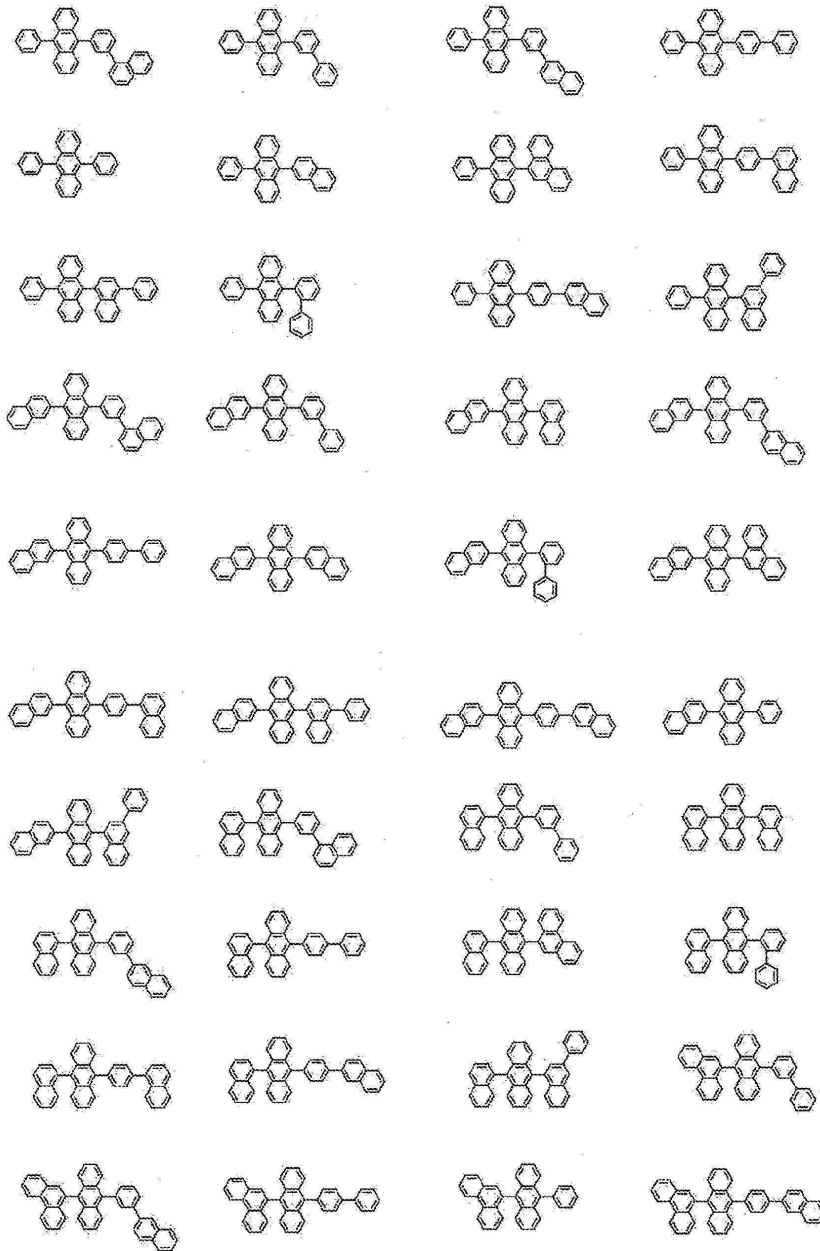
[2674] (제2 화합물의 제조 방법)

[2675] 제2 화합물은, 공지된 방법에 의해 제조할 수 있다. 또한, 제2 화합물은, 공지된 방법에 따라, 목적물에 맞춘 기지의 대체 반응 및 원료를 이용함으로써, 제조할 수 있다.

[2676] (제2 화합물의 구체예)

[2677] 제2 화합물의 구체예로서는, 예컨대 이하의 화합물을 들 수 있다. 단, 본 발명은, 이들 제2 화합물의 구체예에 한정되지 않는다.

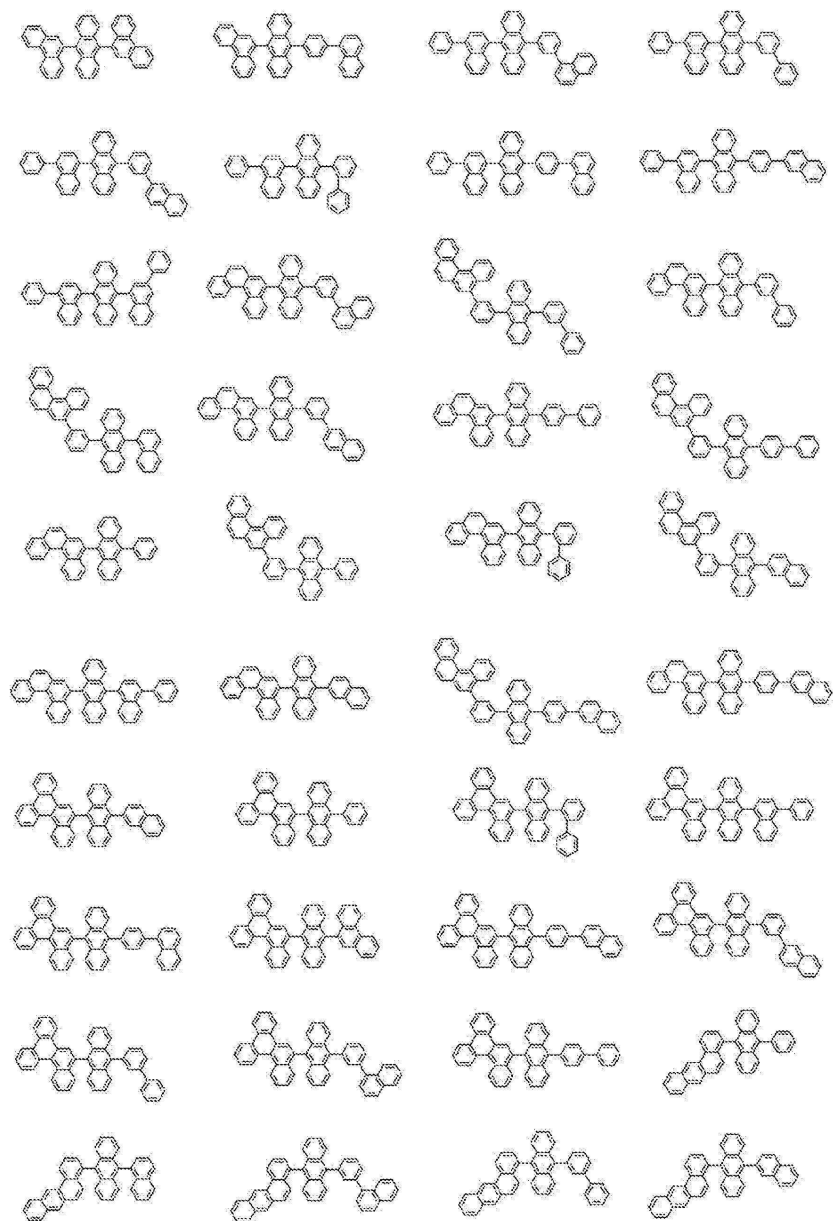
[2678] [화학식 258]



[2679]

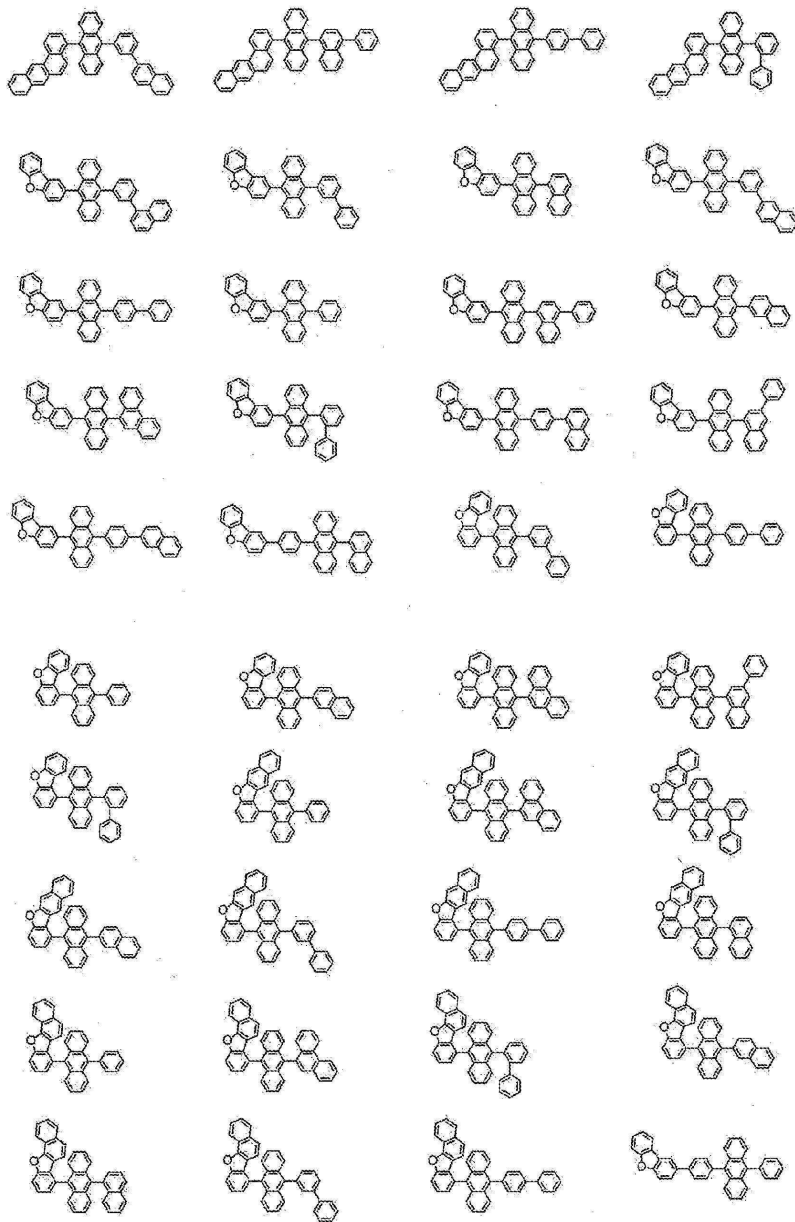
[2680]

[화학식 259]



[2681]

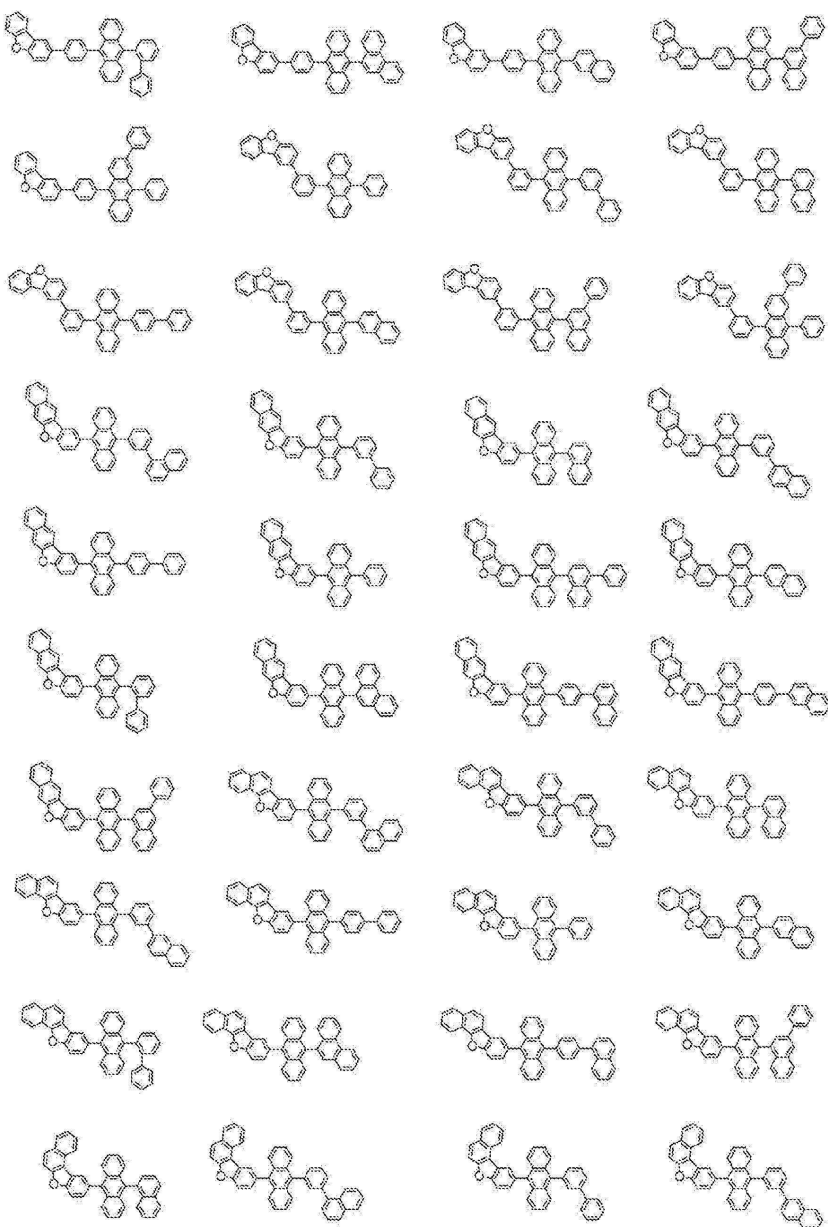
[2682] [화학식 260]



[2683]

[2684]

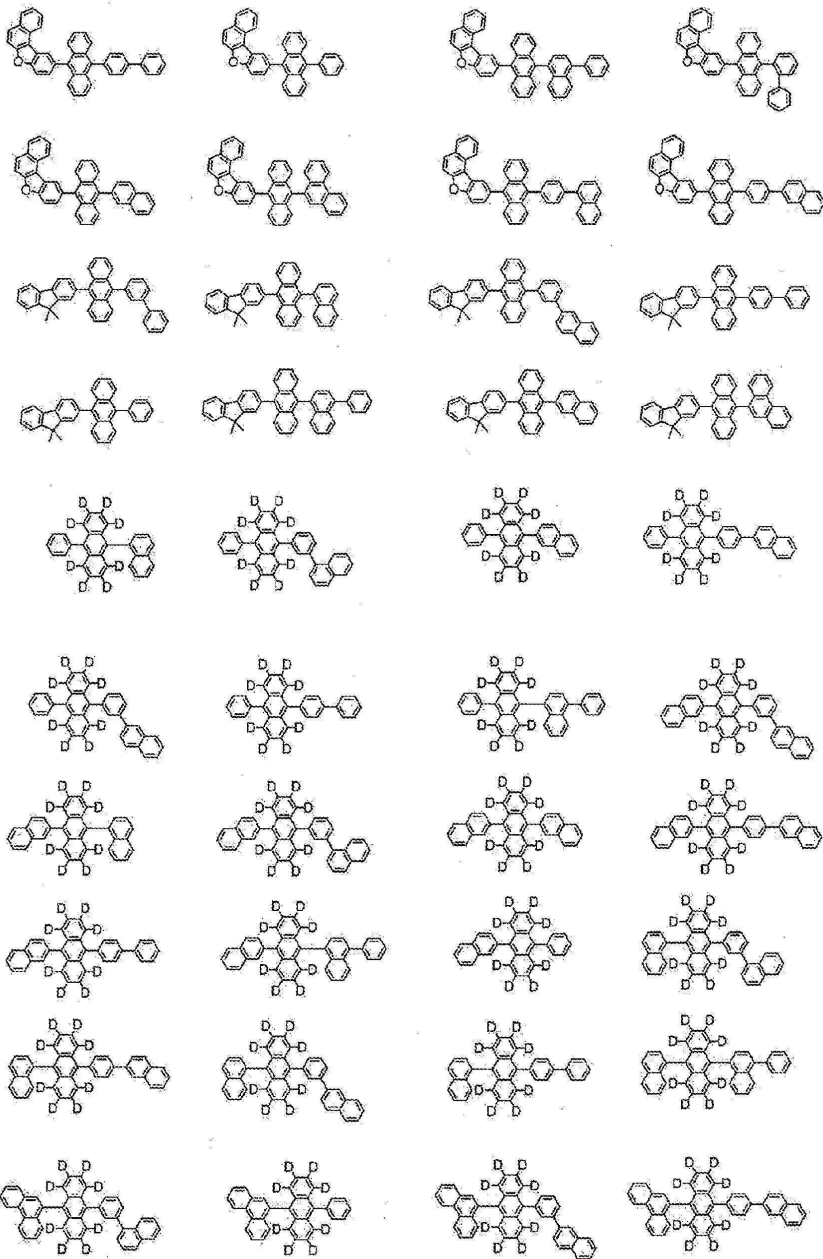
[화학식 261]



[2685]

[2686]

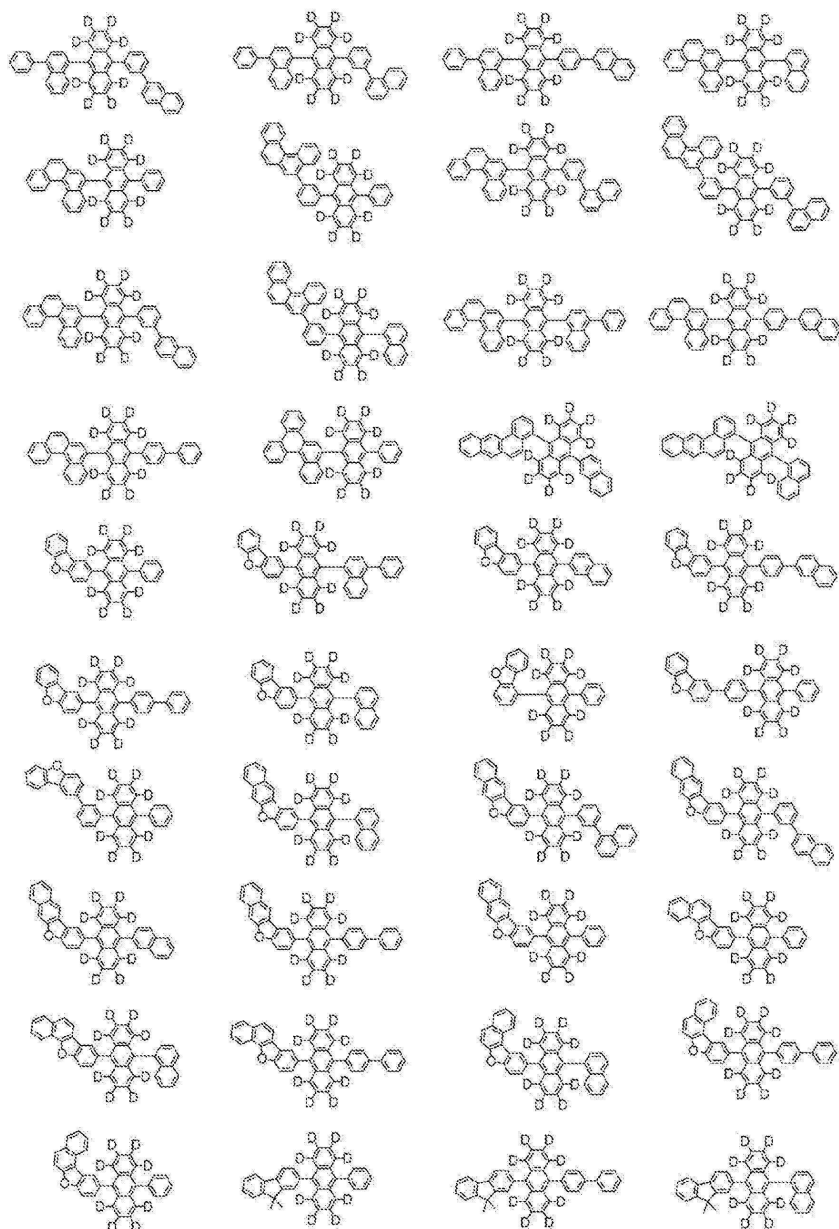
[화학식 262]



[2687]

[2688]

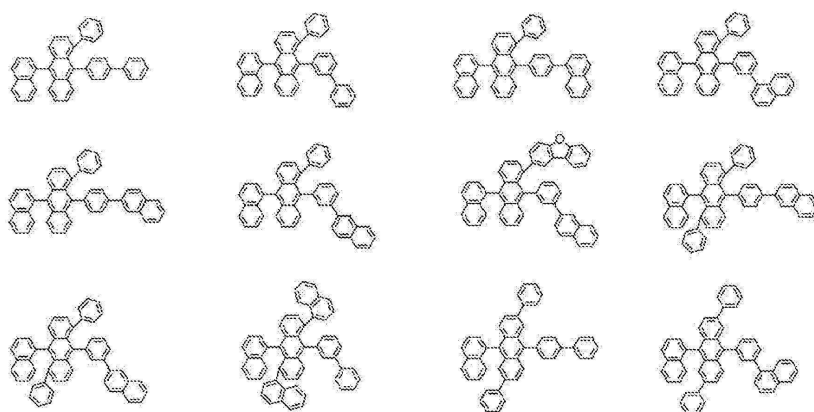
[화학식 263]



[2689]

[2690]

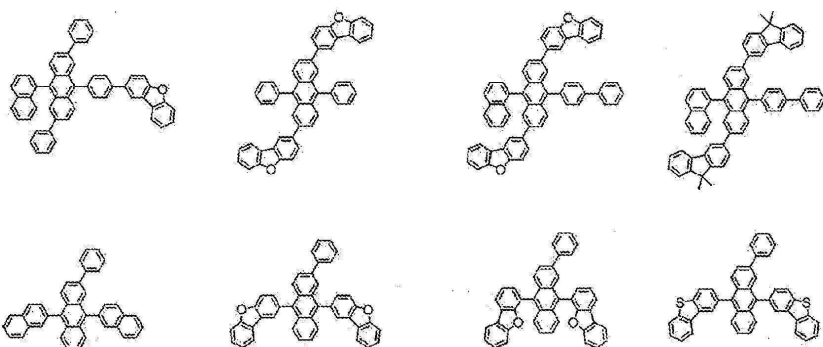
[화학식 264]



[2691]

[2692]

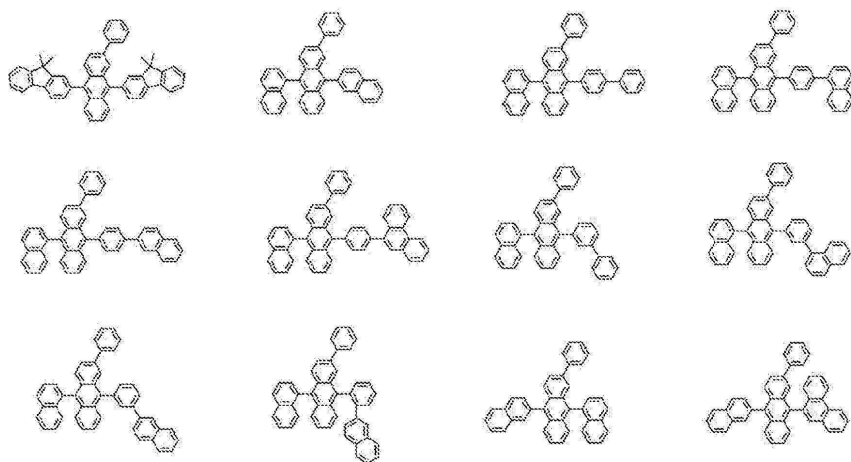
[화학식 265]



[2693]

[2694]

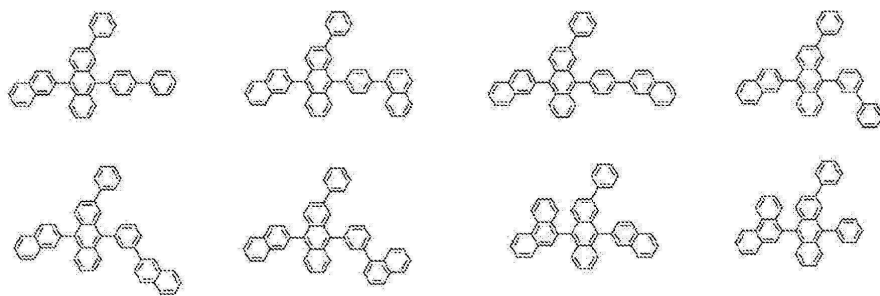
[화학식 266]



[2695]

[2696]

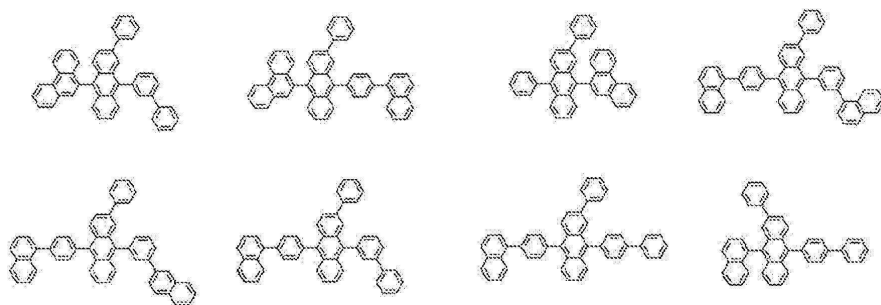
[화학식 267]



[2697]

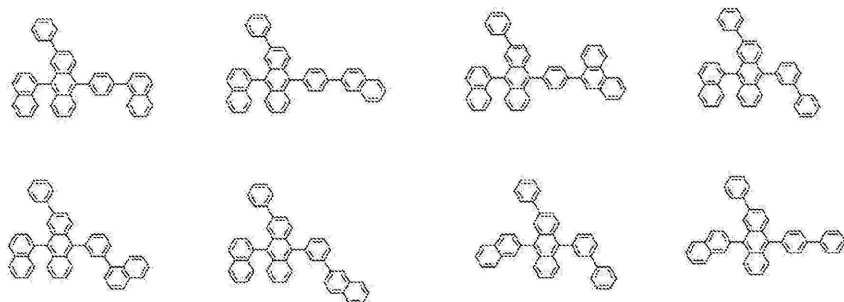
[2698]

[화학식 268]



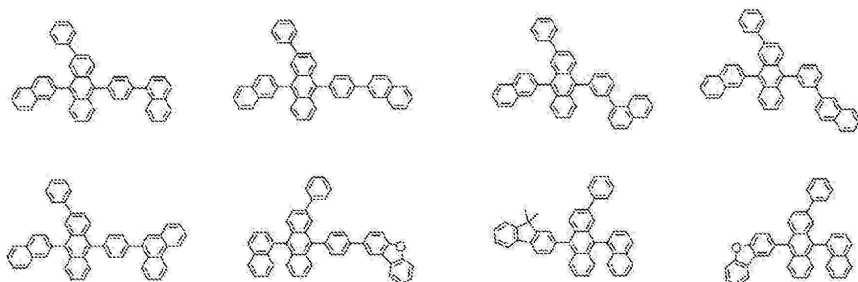
[2699]

[2700] [화학식 269]



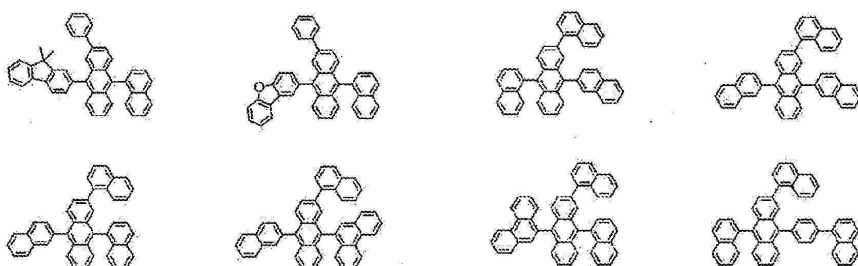
[2701]

[2702] [화학식 270]



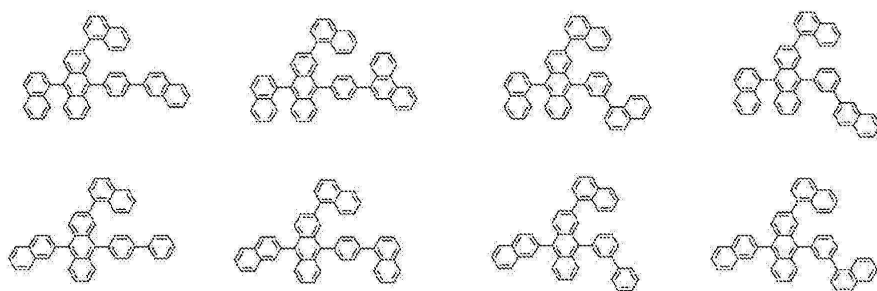
[2703]

[2704] [화학식 271]



[2705]

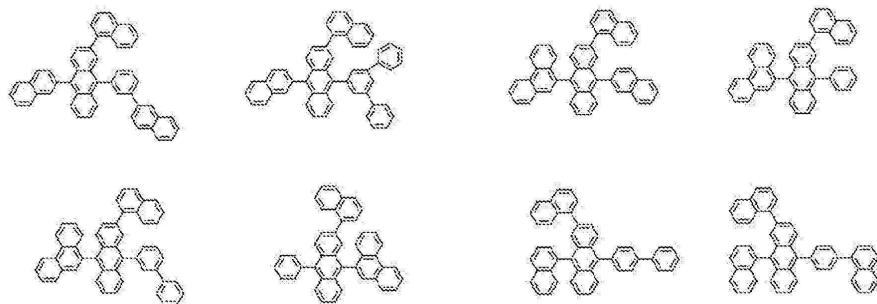
[2706] [화학식 272]



[2707]

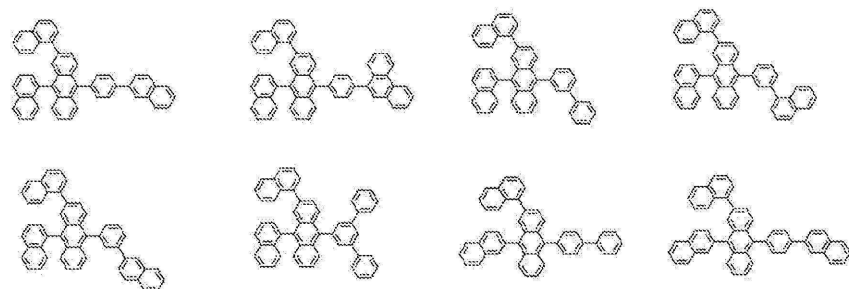
[2708]

[화학식 273]



[2709]

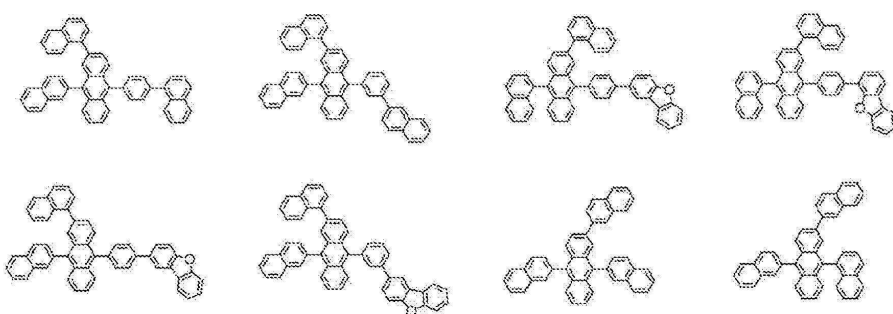
[화학식 274]



[2711]

[2712]

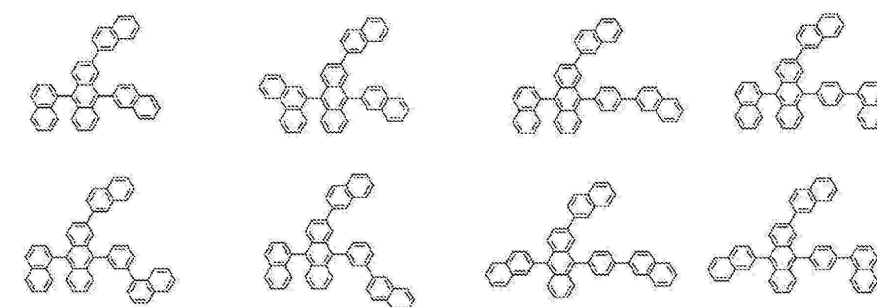
[화학식 275]



[2713]

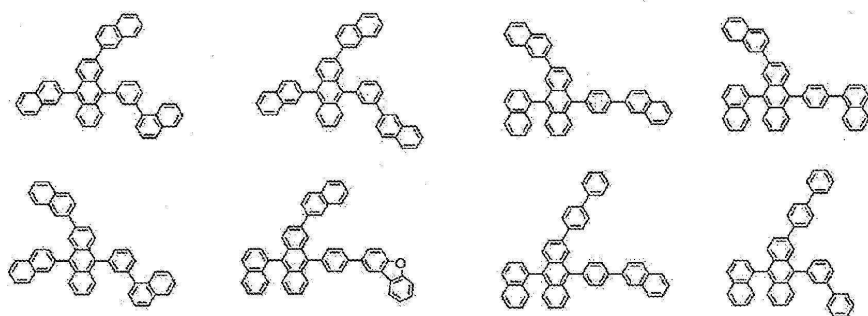
[2714]

[화학식 276]



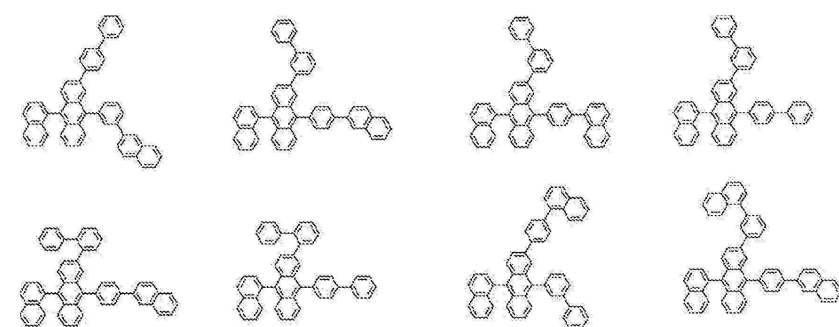
[2715]

[2716] [화학식 277]



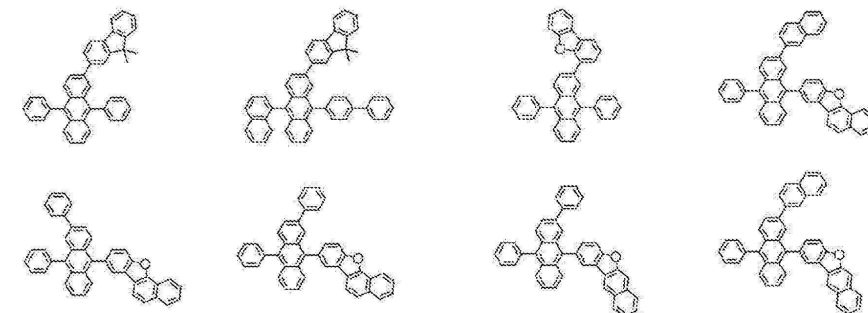
[2717]

[2718] [화학식 278]



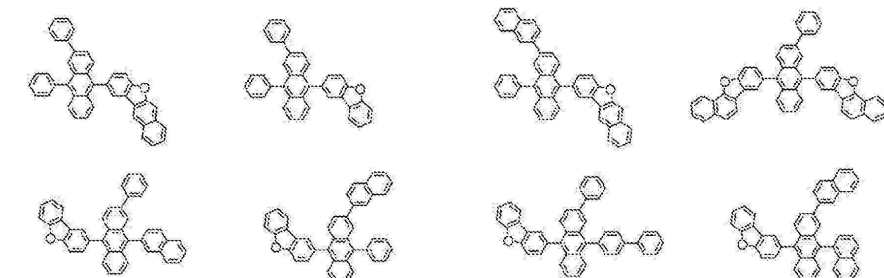
[2720]

[2721] [화학식 279]



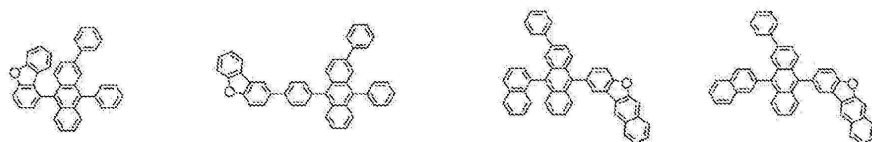
[2722]

[2723] [화학식 280]



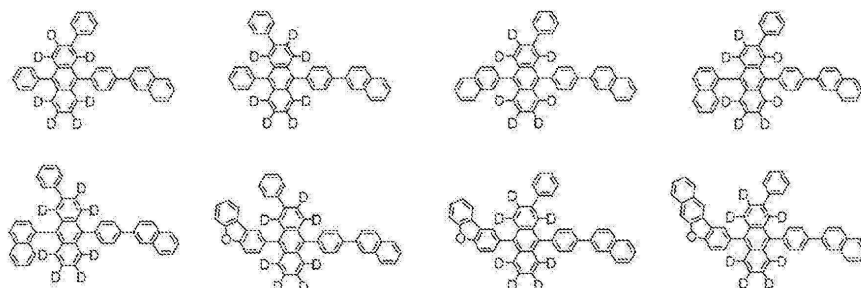
[2724]

[2725] [화학식 281]



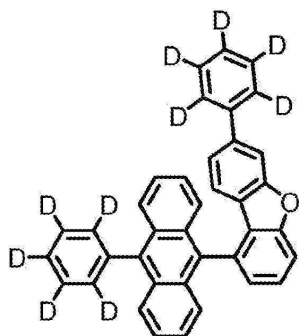
[2726]

[2727] [화학식 282]



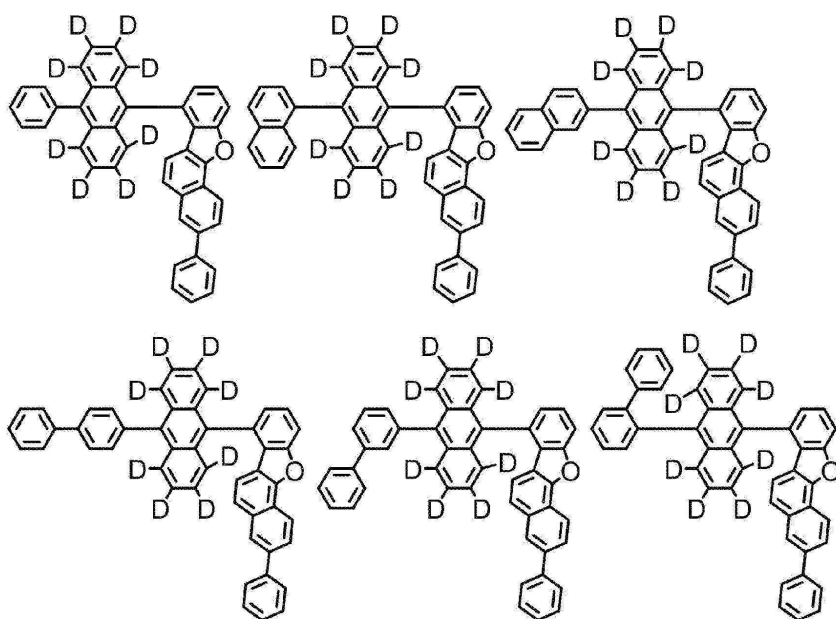
[2728]

[2729] [화학식 283]



[2730]

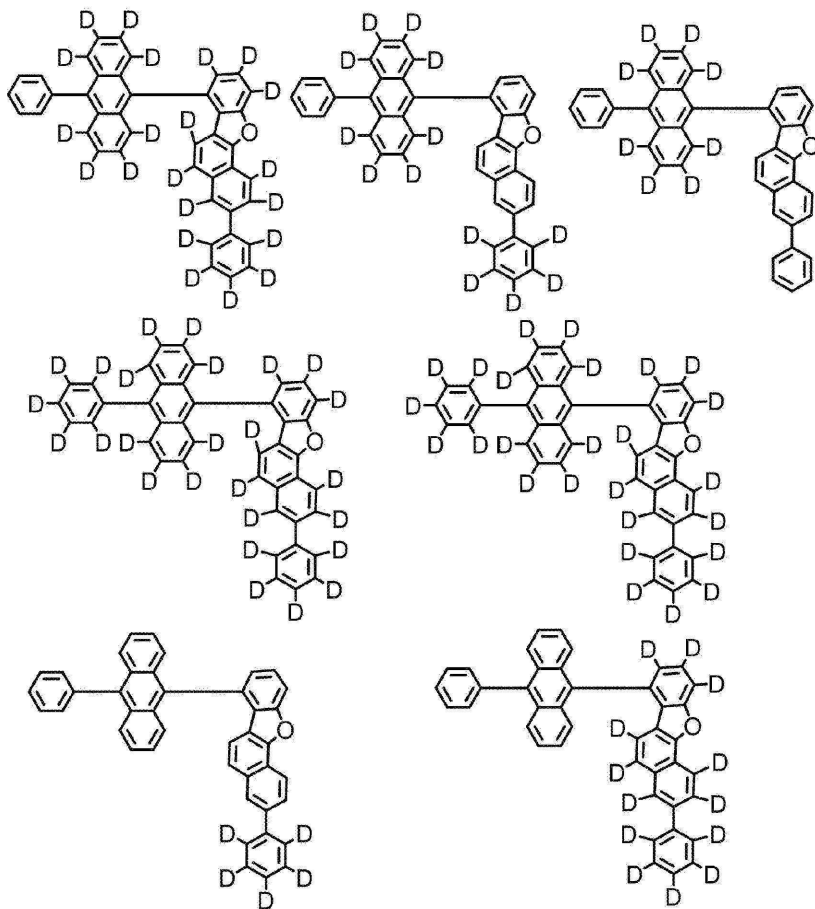
[2731] [화학식 284]



[2732]

[2733]

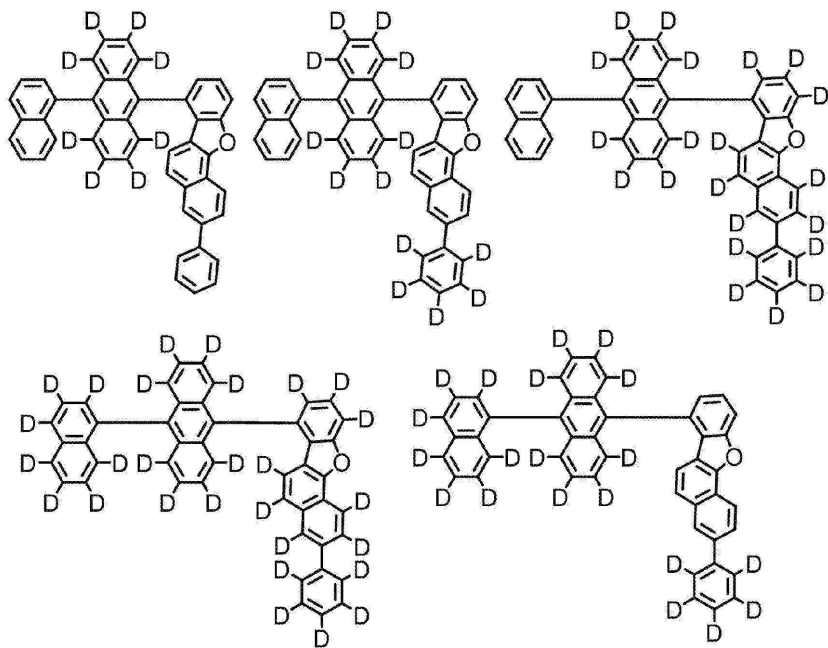
[화학식 285]



[2734]

[2735]

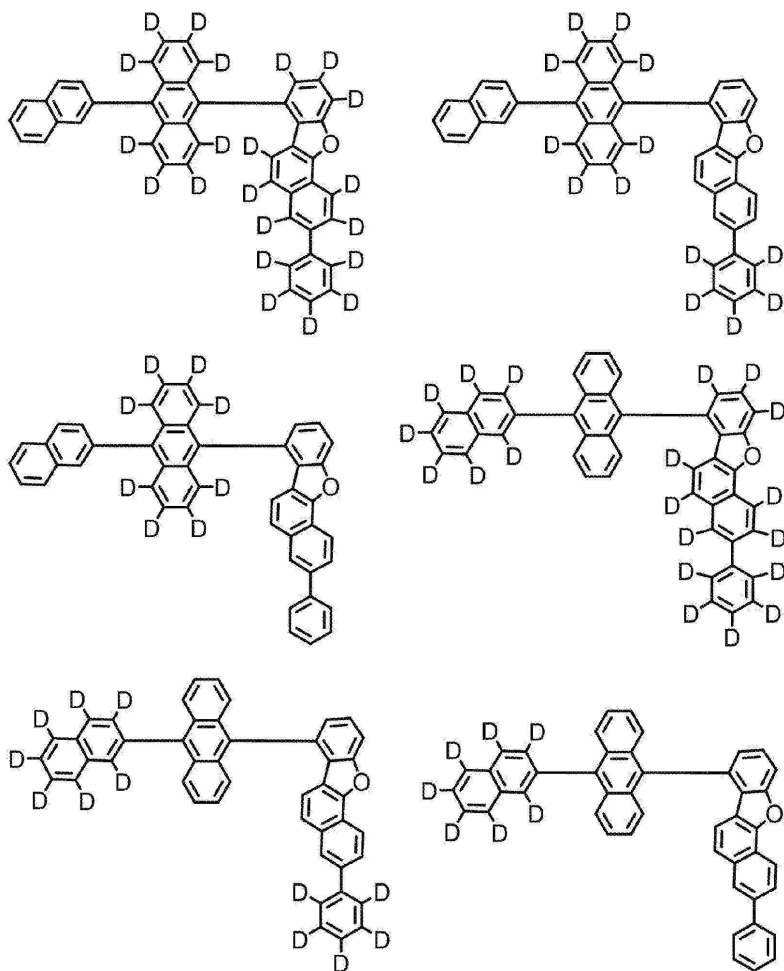
[화학식 286]



[2736]

[2737]

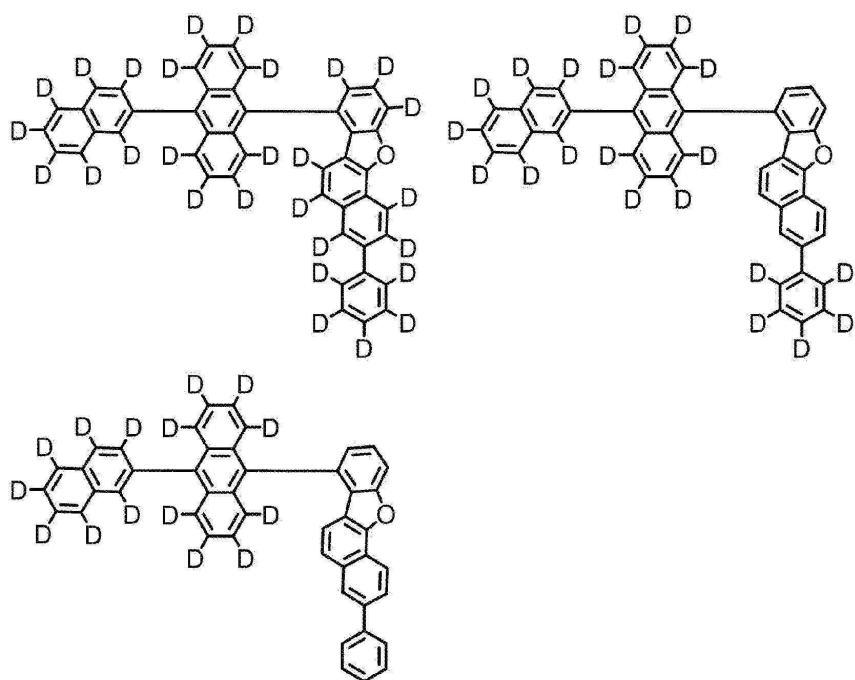
[화학식 287]



[2738]

[2739]

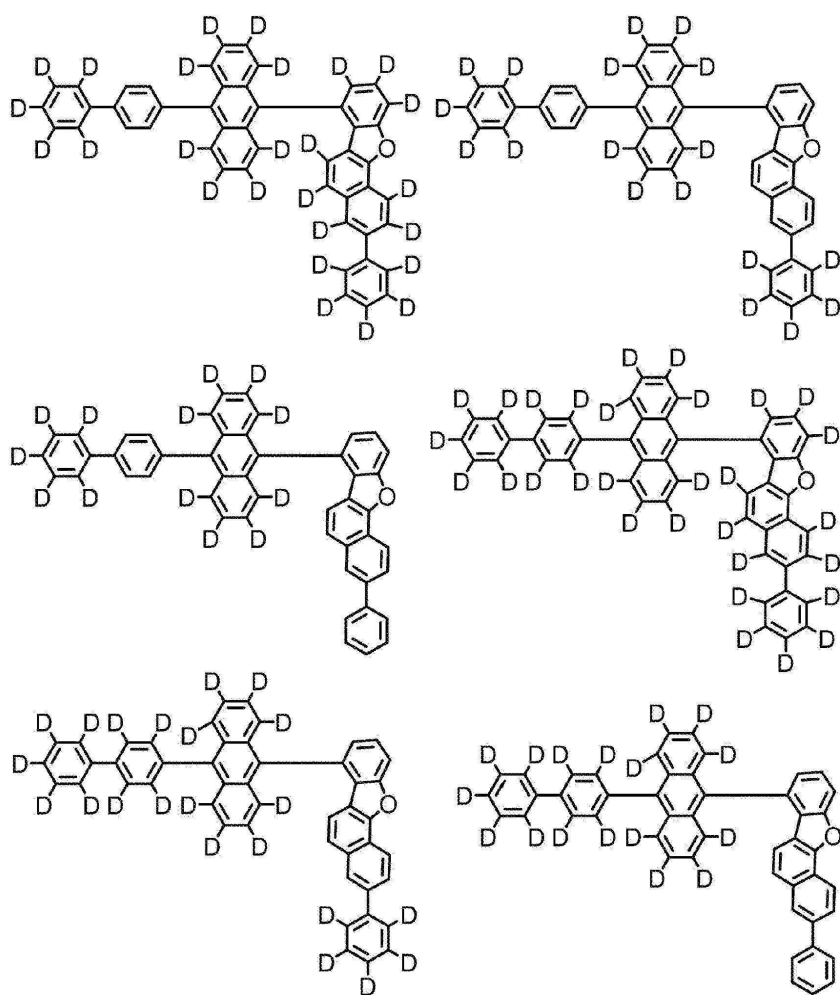
[화학식 288]



[2740]

[2743]

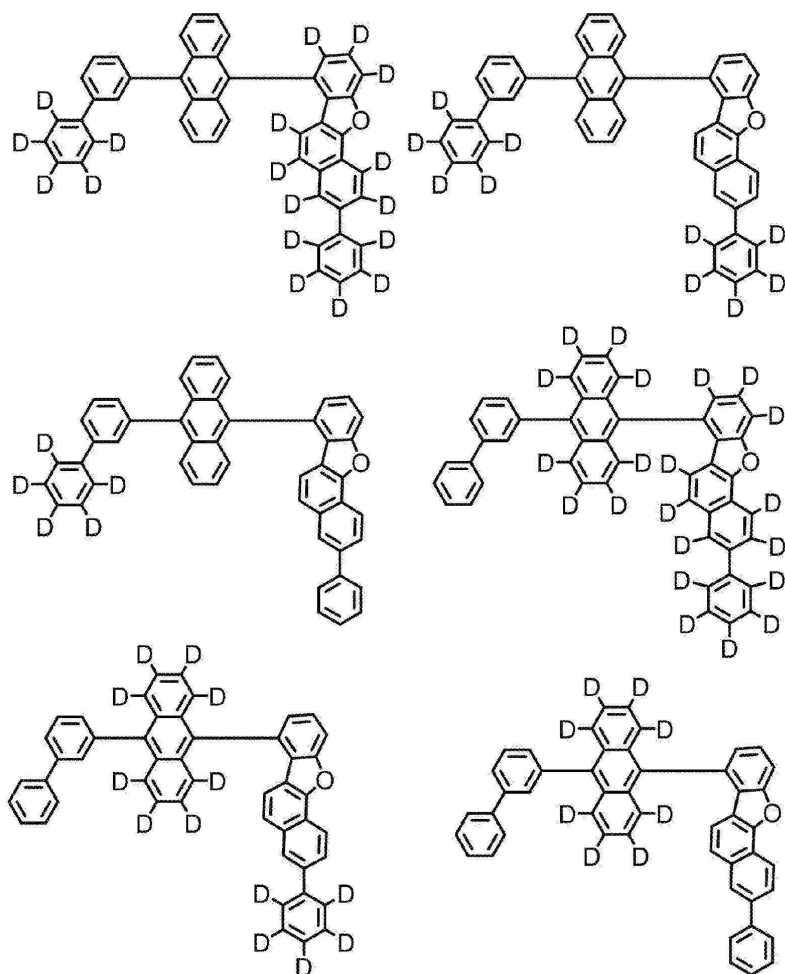
[화학식 290]



[2744]

[2745]

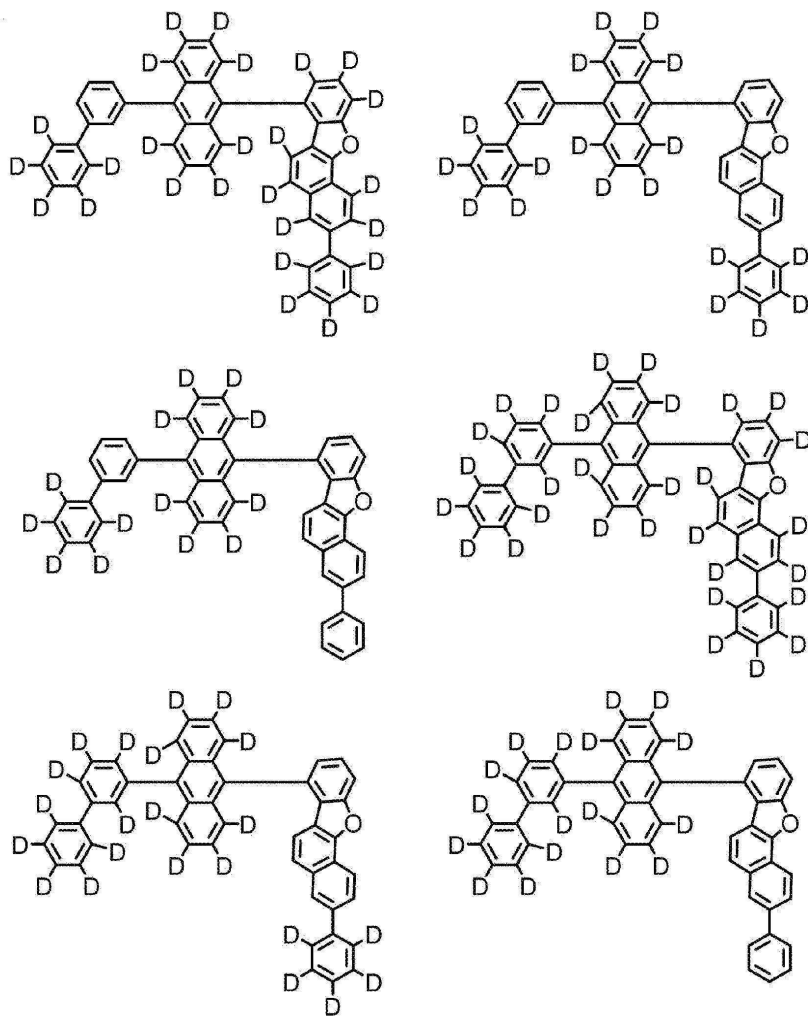
[화학식 291]



[2746]

[2747]

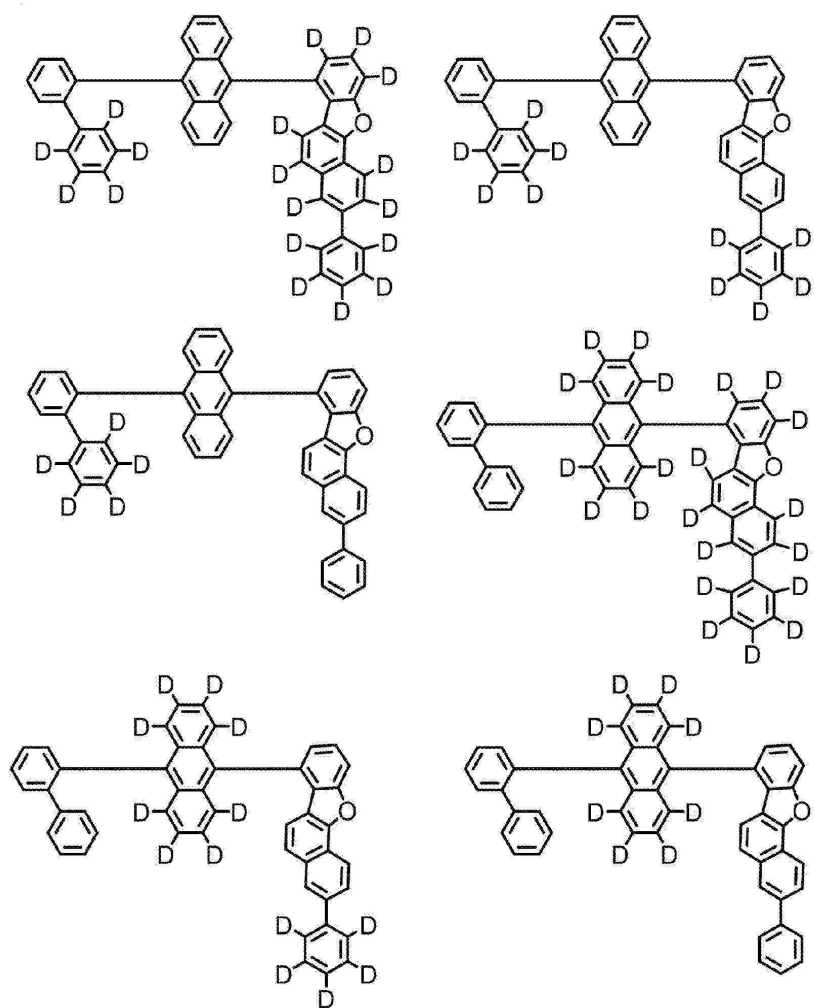
[화학식 292]



[2748]

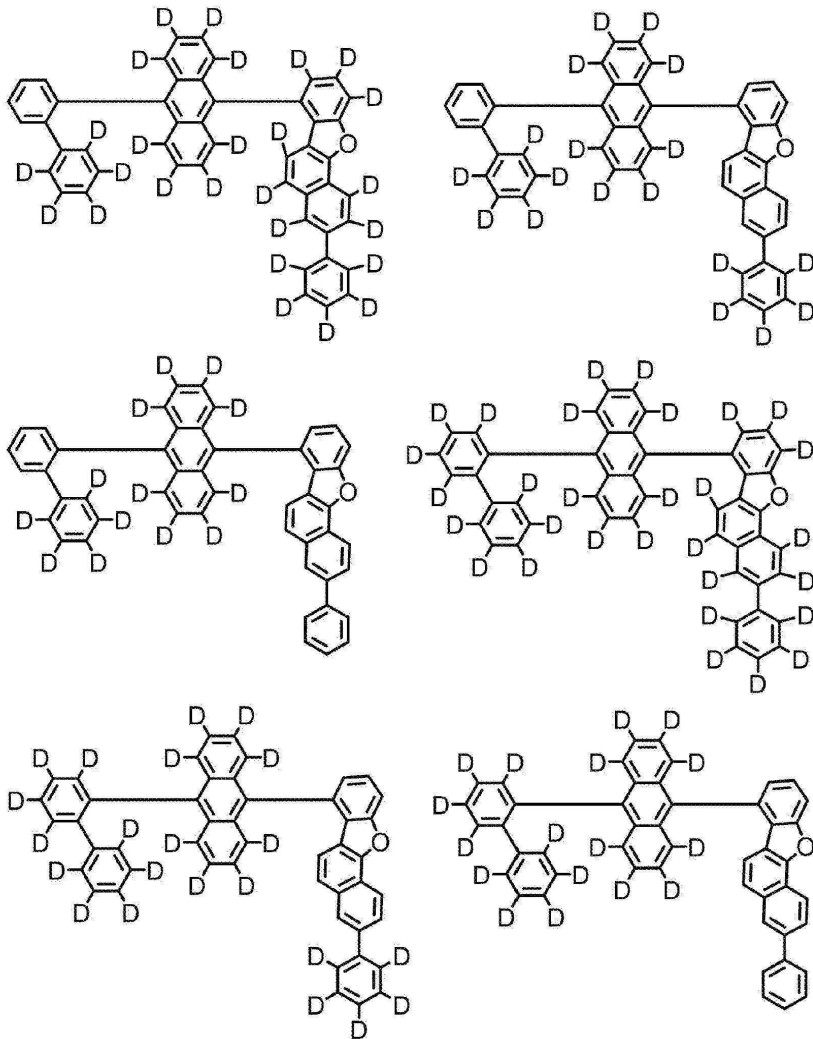
[2749]

[화학식 293]



[2750]

[2751] [화학식 294]



[2752]

[2753] (제1 발광성 화합물 및 제2 발광성 화합물)

[2754] 유기 EL 소자(1B)에 있어서, 제1 발광층(51)은, 제1 발광성 화합물(바람직하게는 형광 발광성 화합물)을 더 함유하는 것도 바람직하다.

[2755] 유기 EL 소자(1B)에 있어서, 제2 발광층(52)은, 제2 발광성 화합물(바람직하게는 형광 발광성 화합물)을 더 함유하는 것도 바람직하다.

[2756] 제1 발광층(51)이 제1 발광성 화합물을 함유하고, 또한 제2 발광층(52)이 제2 발광성 화합물을 함유하는 경우, 제1 발광성 화합물과 제2 발광성 화합물은 서로 동일하거나 또는 상이하다.

[2757] 제1 발광성 화합물 및 제2 발광성 화합물로서는, 유기 EL 소자(1A)로 예시한 발광성 화합물과 동일한 예를 들 수 있다.

[2758] 일 실시형태에 있어서는, 유기 EL 소자(1B)는, 제1 발광층(51)에 있어서의 제1 발광성 화합물 및 제2 발광층(52)에 있어서의 제2 발광성 화합물 중 적어도 어느 하나의 화합물로서,

[2759] 상기 일반식 (4)로 표시되는 화합물,

[2760] 상기 일반식 (5)로 표시되는 화합물,

[2761] 상기 일반식 (6)으로 표시되는 화합물, 및

[2762] 상기 일반식 (63a)로 표시되는 화합물

[2763] 로 이루어진 군으로부터 선택되는 1 이상의 화합물을 함유한다.

- [2764] 일 실시형태에 있어서는, 상기 각 식에서의 「치환 혹은 무치환의」라고 하는 경우에 있어서의 치환기가,
- [2765] 무치환의 탄소수 1~50의 알킬기,
- [2766] 무치환의 탄소수 2~50의 알케닐기,
- [2767] 무치환의 탄소수 2~50의 알키닐기,
- [2768] 무치환의 고리 형성 탄소수 3~50의 시클로알킬기,
- [2769] $-Si(R_{901a})(R_{902a})(R_{903a})$ 로 표시되는 기,
- [2770] $-O-(R_{904a})$ 로 표시되는 기,
- [2771] $-S-(R_{905a})$ 로 표시되는 기,
- [2772] $-N(R_{906a})(R_{907a})$ 로 표시되는 기,
- [2773] 할로젠 원자,
- [2774] 시아노기,
- [2775] 니트로기,
- [2776] 무치환의 고리 형성 탄소수 6~50의 아릴기, 또는
- [2777] 무치환의 고리 형성 원자수 5~50의 복소환기이고,
- [2778] $R_{901a} \sim R_{907a}$ 는, 각각 독립적으로
- [2779] 수소 원자,
- [2780] 무치환의 탄소수 1~50의 알킬기,
- [2781] 무치환의 고리 형성 탄소수 6~50의 아릴기, 또는
- [2782] 무치환의 고리 형성 원자수 5~50의 복소환기이며,
- [2783] R_{901a} 가 2 이상 존재하는 경우, 2 이상의 R_{901a} 는 서로 동일하거나 또는 상이하고,
- [2784] R_{902a} 가 2 이상 존재하는 경우, 2 이상의 R_{902a} 는 서로 동일하거나 또는 상이하며,
- [2785] R_{903a} 가 2 이상 존재하는 경우, 2 이상의 R_{903a} 는 서로 동일하거나 또는 상이하고,
- [2786] R_{904a} 가 2 이상 존재하는 경우, 2 이상의 R_{904a} 는 서로 동일하거나 또는 상이하며,
- [2787] R_{905a} 가 2 이상 존재하는 경우, 2 이상의 R_{905a} 는 서로 동일하거나 또는 상이하고,
- [2788] R_{906a} 가 2 이상 존재하는 경우, 2 이상의 R_{906a} 는 서로 동일하거나 또는 상이하며,
- [2789] R_{907a} 가 2 이상 존재하는 경우, 2 이상의 R_{907a} 는 서로 동일하거나 또는 상이하다.
- [2790] 일 실시형태에 있어서는, 상기 각 식에서의 「치환 혹은 무치환의」라고 하는 경우에 있어서의 치환기가,
- [2791] 무치환의 탄소수 1~50의 알킬기,
- [2792] 무치환의 고리 형성 탄소수 6~50의 아릴기, 또는
- [2793] 무치환의 고리 형성 원자수 5~50의 복소환기이다.
- [2794] 일 실시형태에 있어서는, 상기 각 식에서의 「치환 혹은 무치환의」라고 하는 경우에 있어서의 치환기가,
- [2795] 무치환의 탄소수 1~18의 알킬기,
- [2796] 무치환의 고리 형성 탄소수 6~18의 아릴기, 또는

- [2797] 무치환의 고리 형성 원자수 5~18의 복소환기이다.
- [2798] 유기 EL 소자(1B)에 있어서, 제1 발광층(51)이 함유하는 제1 발광성 화합물은, 최대 피크 파장이 500 nm 이하인 발광을 나타내는 화합물인 것이 바람직하고, 430 nm 이상 480 nm 이하인 발광을 나타내는 화합물인 것이 보다 바람직하다.
- [2799] 유기 EL 소자(1B)에 있어서, 제1 발광층(51)이 함유하는 제1 발광성 화합물은, 최대 피크 파장이 500 nm 이하인 형광 발광을 나타내는 화합물인 것이 바람직하고, 430 nm 이상 480 nm 이하인 형광 발광을 나타내는 화합물인 것이 보다 바람직하다.
- [2800] 유기 EL 소자(1B)에 있어서, 제2 발광층(52)이 함유하는 제2 발광성 화합물은, 최대 피크 파장이 500 nm 이하인 발광을 나타내는 화합물인 것이 바람직하고, 430 nm 이상 480 nm 이하인 발광을 나타내는 화합물인 것이 보다 바람직하다.
- [2801] 유기 EL 소자(1B)에 있어서, 제2 발광층(52)이 함유하는 제2 발광성 화합물은, 최대 피크 파장이 500 nm 이하인 형광 발광을 나타내는 화합물인 것이 바람직하고, 430 nm 이상 480 nm 이하인 형광 발광을 나타내는 화합물인 것이 보다 바람직하다.
- [2802] 유기 EL 소자(1B)에 있어서, 제1 발광층(51)이 제1 화합물 및 제1 발광성 화합물을 포함하는 경우, 제1 화합물은 호스트 재료인 것이 바람직하고, 제1 발광성 화합물은 도펀트 재료인 것이 바람직하다.
- [2803] 유기 EL 소자(1B)에 있어서, 제1 화합물의 삼중항 에너지 $T_1(H1)$ 과 제2 화합물의 삼중항 에너지 $T_1(H2)$ 이, 하기 수식(수학식 1)의 관계를 충족시키는 것이 바람직하다.
- [2804] $T_1(H1) > T_1(H2) \dots$ (수학식 1)
- [2805] 종래, 유기 EL 소자의 발광 효율을 향상시키기 위한 기술로서, 삼중항-삼중항 소멸(Triplet-Triplet-Annihilation)(TTA라고 부르는 경우가 있음)이 알려져 있다. TTA는 삼중항 여기자와 삼중항 여기자가 충돌하여, 일중항 여기자를 생성한다고 하는 기구(메커니즘)이다. 또한, TTA 메커니즘은, 국제 공개 제2010/134350호에 기재된 바와 같이 TTF 메커니즘이라고 부르는 경우도 있다.
- [2806] TTF 현상을 설명한다. 양극으로부터 주입된 정공과, 음극으로부터 주입된 전자는, 발광층 내에서 재결합하여 여기자를 생성한다. 그 스핀 상태는, 종래부터 알려져 있는 바와 같이, 일중항 여기자가 25%, 삼중항 여기자가 75%의 비율이다. 종래 알려져 있는 형광 소자에 있어서는, 25%의 일중항 여기자가 기저 상태로 완화될 때에 광을 발생시키지만, 나머지 75%의 삼중항 여기자에 대해서는 광을 발생시키지 않고 열적 실패 과정을 거쳐 기저 상태로 되돌아간다. 따라서, 종래의 형광 소자의 내부 양자 효율의 이론 한계값은 25%라고 되어 있었다.
- [2807] 한편, 유기물 내부에서 생성된 삼중항 여기자의 거동이 이론적으로 조사되고 있다. S. M. Bachilo 연구진에 따르면(J. Phys. Chem. A, 104, 7711(2000)), 오중항 등의 고차의 여기자가 즉시 삼중항으로 되돌아간다고 가정하면, 삼중항 여기자(이하, $^3A^*$ 라고 기재함)의 밀도가 높아졌을 때, 삼중항 여기자끼리가 충돌하여 하기 식과 같은 반응이 일어난다. 여기서, 1A 는 기저 상태를 나타내고, $^1A^*$ 는 최저 여기 일중항 여기자를 나타낸다.
- [2808] $^3A^* + ^3A^* \rightarrow (4/9)^1A + (1/9)^1A^* + (13/9)^3A^*$
- [2809] 즉, $5^3A^* \rightarrow 4^1A + 1^1A^*$ 가 되고, 당초 생성된 75%의 삼중항 여기자 중, 1/5 즉 20%가 일중항 여기자로 변화되는 것이 예측되고 있다. 따라서, 광으로서 기여하는 일중항 여기자는, 당초 생성되는 25%분에 $75\% \times (1/5) = 15\%$ 를 더한 40%라고 하게 된다. 이때, 전체 발광 강도 중에 차지하는 TTF 유래의 발광 비율(TTF 비율)은, $15/40$, 즉 37.5%가 된다. 또한, 당초 생성된 75%의 삼중항 여기자가 서로 충돌하여 일중항 여기자가 생성되었다(2개의 삼중항 여기자로부터 하나의 일중항 여기자가 생성되었다)고 하면, 당초 생성되는 일중항 여기자 25%분에 $75\% \times (1/2) = 37.5\%$ 를 더한 62.5%라는 매우 높은 내부 양자 효율이 얻어진다. 이때, TTF 비율은, $37.5/62.5 = 60\%$ 이다.
- [2810] 본 실시형태에 따른 유기 EL 소자에 의하면, 제1 발광층에서 정공과 전자의 재결합에 의해 생성된 삼중항 여기자는, 해당 제1 발광층과 직접 접하는 유기층의 계면에 캐리어가 과잉으로 존재하고 있어도, 제1 발광층과 해당 유기층의 계면에 존재하는 삼중항 여기자가 퀸치되기 어려워진다고 생각된다. 예컨대, 재결합 영역이, 제1 발광층과 정공 수송층 또는 전자 장벽층과의 계면에 국소적으로 존재하는 경우에는, 과잉 전자에 의한 퀸치를 생각할 수 있다. 한편, 재결합 영역이, 제1 발광층과 전자 수송층 또는 정공 장벽층과의 계면에 국소적으로 존재하

는 경우에는, 과잉 정공에 의한 퀀치를 생각할 수 있다.

[2811] 유기 EL 소자(1B)는, 소정의 관계를 충족시키는, 적어도 2개의 발광층(즉, 제1 발광층(51) 및 제2 발광층(52))을 구비하고, 제1 발광층(51) 중의 제1 화합물의 삼중항 에너지 $T_1(H1)$ 과, 제2 발광층(52) 중의 제2 화합물의 삼중항 에너지 $T_1(H2)$ 이, 상기 수식(수학식 1)의 관계를 충족시키도록 제1 발광층(51) 및 제2 발광층(52)을 구비함으로써, 제1 발광층(51)에서 생성된 삼중항 여기자는, 과잉 캐리어에 의해 퀀치되지 않고 제2 발광층(52)으로 이동하고, 또한 제2 발광층(52)으로부터 제1 발광층(51)으로 역이동하는 것을 억제할 수 있다. 그 결과, 제2 발광층(52)에 있어서, TTF 메커니즘이 발현되어 일중항 여기자가 효율적으로 생성되고, 발광 효율이 향상된다.

[2812] 이와 같이, 유기 EL 소자(1B)가, 삼중항 여기자를 주로 생성시키는 제1 발광층(51)과, 제1 발광층(51)으로부터 이동해 온 삼중항 여기자를 활용하여 TTF 메커니즘을 주로 발현시키는 제2 발광층(52)을 상이한 영역으로서 구비하고, 제2 발광층(52) 중의 제2 화합물로서, 제1 발광층 중의 제1 화합물보다 작은 삼중항 에너지를 갖는 화합물을 이용하여, 삼중항 에너지의 차를 돕으로써, 발광 효율이 향상된다.

[2813] (삼중항 에너지 T_1)

[2814] 삼중항 에너지 T_1 의 측정 방법으로는, 하기의 방법을 들 수 있다.

[2815] 측정 대상이 되는 화합물을 EPA(디에틸에테르:이소펜탄:에탄올=5:5:2(용적비)) 중에, 10^{-5} mol/L 이상 10^{-4} mol/L 이하가 되도록 용해하여 용액을 제작하고, 이 용액을 석영 셀 안에 넣어 측정 시료로 한다. 이 측정 시료에 대해서, 저온(77[K])에서 인광 스펙트럼(종축: 인광 발광 강도, 횡축: 파장으로 함)을 측정하고, 이 인광 스펙트럼의 단파장측의 상승에 대하여 접선을 긋고, 그 접선과 횡축과의 교점의 파장값 $\lambda_{edge}[nm]$ 에 기초하여, 다음 환산식 (F1)로부터 산출되는 에너지량을 삼중항 에너지 T_1 로 한다.

[2816] 환산식 (F1): $T_1[eV] = 1239.85 / \lambda_{edge}$

[2817] 인광 스펙트럼의 단파장측의 상승에 대한 접선은 이하와 같이 긋는다. 인광 스펙트럼의 단파장측으로부터, 스펙트럼의 극대값 중, 가장 단파장측의 극대값까지 스펙트럼 곡선 상을 이동할 때에, 장파장측을 향해 곡선 상의 각 점에 있어서의 접선을 고려한다. 이 접선은, 곡선이 상승함에 따라(즉 종축이 증가함에 따라), 기울기가 증가한다. 이 기울기의 값이 극대값을 취하는 점에 있어서 그은 접선(즉 변곡점에서의 접선)은, 해당 인광 스펙트럼의 단파장측의 상승에 대한 접선으로 한다.

[2818] 또한, 스펙트럼의 최대 피크 강도의 15% 이하의 피크 강도를 갖는 극대점은, 전술한 가장 단파장측의 극대값에는 포함시키지 않고, 가장 단파장측의 극대값에 가장 가까운, 기울기의 값이 극대값을 취하는 점에 있어서 그은 접선을 상기 인광 스펙트럼의 단파장측의 상승에 대한 접선으로 한다.

[2819] 인광의 측정에는, (주)히타치하이테크놀로지 제조의 F-4500형 분광 형광 광도계 본체를 이용할 수 있다. 또한, 측정 장치는 이에 한정되지 않고, 냉각 장치, 및 저온용 용기와, 여기 광원과, 수광 장치를 조합함으로써, 측정하여도 좋다.

[2820] 유기 EL 소자(1B)에 있어서, 제1 발광층(51)이 제1 화합물 및 제1 발광성 화합물을 포함하는 경우, 제1 화합물의 일중항 에너지 $S_1(H1)$ 과, 제1 발광성 화합물의 일중항 에너지 $S_1(D3)$ 이, 하기 수식(수학식 2)의 관계를 충족시키는 것이 바람직하다.

[2821] $S_1(H1) > S_1(D3) \dots$ (수학식 2)

[2822] (일중항 에너지 S_1)

[2823] 용액을 이용한 일중항 에너지 S_1 의 측정 방법(용액법이라고 부르는 경우가 있음)으로는, 하기의 방법을 들 수 있다.

[2824] 측정 대상이 되는 화합물의 10^{-5} mol/L 이상 10^{-4} mol/L 이하의 톨루엔 용액을 조제하여 석영 셀에 넣고, 상온(300 K)에서 이 시료의 흡수 스펙트럼(종축: 흡수 강도, 횡축: 파장으로 함)을 측정한다. 이 흡수 스펙트럼의 장파장측의 하강에 대하여 접선을 긋고, 그 접선과 횡축과의 교점의 파장값 $\lambda_{edge}[nm]$ 를 다음에 나타내는 환산식

(F2)에 대입하여 일중항 에너지 S_1 을 산출한다.

- [2825] 환산식 (F2): $S_1[\text{eV}] = 1239.85 / \lambda_{\text{edge}}$
- [2826] 흡수 스펙트럼 측정 장치로서는, 예컨대 히타치사 제조의 분광 광도계(장치명: U3310)를 들 수 있지만, 이것에 한정되지 않는다.
- [2827] 흡수 스펙트럼의 장파장측의 하강에 대한 접선은 이하와 같이 긋는다. 흡수 스펙트럼의 극대값 중, 가장 장파장측의 극대값으로부터 장파장 방향으로 스펙트럼 곡선 상을 이동할 때에, 곡선 상의 각 점에 있어서의 접선을 고려한다. 이 접선은, 곡선이 하강함에 따라(즉 종측의 값이 감소함에 따라), 기울기가 감소하고 그 후 증가하는 것을 반복한다. 기울기의 값이 가장 장파장측(단, 흡광도가 0.1 이하가 되는 경우는 제외함)에서 극소값을 취하는 점에 있어서 그 접선을 상기 흡수 스펙트럼의 장파장측의 하강에 대한 접선으로 한다.
- [2828] 또한, 흡광도의 값이 0.2 이하인 극대점은, 상기 가장 장파장측의 극대값에는 포함시키지 않는다.
- [2829] 유기 EL 소자(1B)에 있어서, 제2 발광층(52)이 제2 화합물 및 제2 발광성 화합물을 포함하는 경우, 제2 화합물은 호스트 재료인 것이 바람직하고, 제2 발광성 화합물은 도펀트 재료인 것이 바람직하다.
- [2830] 유기 EL 소자(1B)에 있어서, 제2 발광층(52)이 제2 화합물 및 제2 발광성 화합물을 포함하는 경우, 제2 화합물의 일중항 에너지 $S_1(\text{H2})$ 과, 제2 발광성 화합물의 일중항 에너지 $S_1(\text{D4})$ 이, 하기 수식(수학식 3)의 관계를 충족시키는 것이 바람직하다.
- [2831] $S_1(\text{H2}) > S_1(\text{D4}) \dots$ (수학식 3)
- [2832] 제1 발광층(51) 및 제2 발광층(52)은, 인광 발광성 재료(도펀트 재료)를 포함하지 않는 것이 바람직하다.
- [2833] 또한, 제1 발광층(51) 및 제2 발광층(52)은, 중금속 착체 및 인광 발광성의 희토류 금속 착체를 포함하지 않는 것이 바람직하다. 여기서, 중금속 착체로서는, 예컨대 이리듐 착체, 오스뮴 착체, 및 백금 착체 등을 들 수 있다.
- [2834] 또한, 제1 발광층(51) 및 제2 발광층(52)은, 금속 착체를 포함하지 않는 것도 바람직하다.
- [2835] (발광층의 막 두께)
- [2836] 유기 EL 소자(1B)에 있어서의 제1 발광층(51) 및 제2 발광층(52)의 막 두께는, 각각 5 nm 이상 50 nm 이하인 것이 바람직하고, 7 nm 이상 50 nm 이하인 것이 보다 바람직하며, 10 nm 이상 50 nm 이하인 것이 더욱 바람직하다. 발광층의 막 두께가 5 nm 이상이면, 발광층을 형성하기 쉽고, 색도를 조정하기 쉽다. 발광층의 막 두께가 50 nm 이하이면, 구동 전압의 상승을 억제하기 쉽다.
- [2837] (발광층에 있어서의 화합물의 함유율)
- [2838] 제1 발광층(51)이 제1 화합물 및 제1 발광성 화합물을 함유하는 경우, 제1 발광층(51)에 있어서의 제1 화합물 및 제1 발광성 화합물의 함유율은, 예컨대 각각, 이하의 범위인 것이 바람직하다.
- [2839] 제1 화합물의 함유율은, 80 질량% 이상 99 질량% 이하인 것이 바람직하고, 90 질량% 이상 99 질량% 이하인 것이 보다 바람직하며, 95 질량% 이상 99 질량% 이하인 것이 더욱 바람직하다.
- [2840] 제1 발광성 화합물의 함유율은, 1 질량% 이상 10 질량% 이하인 것이 바람직하고, 1 질량% 이상 7 질량% 이하인 것이 보다 바람직하며, 1 질량% 이상 5 질량% 이하인 것이 더욱 바람직하다.
- [2841] 단, 제1 발광층(51)에 있어서의 제1 화합물 및 제1 발광성 화합물의 합계 함유율의 상한은 100 질량%이다.
- [2842] 또한, 본 실시형태는, 제1 발광층(51)에, 제1 화합물 및 제1 발광성 화합물 이외의 재료가 포함되는 것을 제외하지 않는다.
- [2843] 제1 발광층(51)은, 제1 화합물을 1종만 포함하여도 좋고, 2종 이상 포함하여도 좋다. 제1 발광층(51)은, 제1 발광성 화합물을 1종만 포함하여도 좋고, 2종 이상 포함하여도 좋다.
- [2844] 제2 발광층(52)이 제2 화합물 및 제2 발광성 화합물을 함유하는 경우, 제2 발광층(52)에 있어서의 제2 화합물 및 제2 발광성 화합물의 함유율은, 예컨대 각각, 이하의 범위인 것이 바람직하다.
- [2845] 제2 화합물의 함유율은, 80 질량% 이상 99 질량% 이하인 것이 바람직하고, 90 질량% 이상 99 질량% 이하인 것이

보다 바람직하며, 95 질량% 이상 99 질량% 이하인 것이 더욱 바람직하다.

- [2846] 제2 발광성 화합물의 함유율은, 1 질량% 이상 10 질량% 이하인 것이 바람직하고, 1 질량% 이상 7 질량% 이하인 것이 보다 바람직하며, 1 질량% 이상 5 질량% 이하인 것이 더욱 바람직하다.
- [2847] 단, 제2 발광층(52)에 있어서의 제2 화합물 및 제2 발광성 화합물의 합계 함유율의 상한은 100 질량%이다.
- [2848] 또한, 본 실시형태는, 제2 발광층(52)에, 제2 화합물 및 제2 발광성 화합물 이외의 재료가 포함되는 것을 제외하지 않는다.
- [2849] 제2 발광층(52)은, 제2 화합물을 1종만 포함하여도 좋고, 2종 이상 포함하여도 좋다. 제2 발광층(52)은, 제2 발광성 화합물을 1종만 포함하여도 좋고, 2종 이상 포함하여도 좋다.
- [2850] 유기 EL 소자(1B)에 있어서, 제1 발광층(51)과 제2 발광층(52)이 직접 접하고 있는 것도 바람직하다.
- [2851] 유기 EL 소자(1B)에 있어서, 「제1 발광층(51)과 제2 발광층(52)이 직접 접하고 있는」 경우, 해당 「제1 발광층(51)과 제2 발광층(52)이 직접 접하고 있는」 층 구조는, 예컨대 이하의 양태 (LS1), (LS2) 및 (LS3) 중 어느 하나의 양태도 포함할 수 있다.
- [2852] (LS1) 제1 발광층(51)에 따른 화합물의 증착 공정과 제2 발광층(52)에 따른 화합물의 증착 공정을 거치는 과정에서 호스트 재료로서의 제1 화합물(이하, 「제1 호스트 재료」라고 하는 경우가 있음) 및 호스트 재료로서의 제2 화합물(이하, 「제2 호스트 재료」라고 하는 경우가 있음) 양쪽 모두가 혼재되는 영역이 생겨, 해당 영역이 제1 발광층(51)과 제2 발광층(52)의 계면에 존재하는 양태.
- [2853] (LS2) 제1 발광층(51) 및 제2 발광층(52)이 발광성의 화합물을 포함하는 경우에, 제1 발광층(51)에 따른 화합물의 증착 공정과 제2 발광층(52)에 따른 화합물의 증착 공정을 거치는 과정에서 제1 호스트 재료, 제2 호스트 재료 및 발광성의 화합물이 혼재되는 영역이 생겨, 해당 영역이 제1 발광층(51)과 제2 발광층(52)의 계면에 존재하는 양태.
- [2854] (LS3) 제1 발광층(51) 및 제2 발광층(52)이 발광성의 화합물을 포함하는 경우에, 제1 발광층(51)에 따른 화합물의 증착 공정과 제2 발광층(52)에 따른 화합물의 증착 공정을 거치는 과정에서 해당 발광성의 화합물로 이루어지는 영역, 제1 호스트 재료로 이루어지는 영역, 또는 제2 호스트 재료로 이루어지는 영역이 생겨, 해당 영역이 제1 발광층(51)과 제2 발광층(52)의 계면에 존재하는 양태.
- [2855] 유기 EL 소자(1B)가 제3 발광층을 포함하고 있는 경우, 제1 발광층(51)과 제2 발광층(52)이 직접 접하고 있고, 제2 발광층(52)과 상기 제3 발광층이 직접 접하고 있는 것이 바람직하다.
- [2856] 유기 EL 소자(1B)에 있어서, 「제2 발광층(52)과 제3 발광층이 직접 접하고 있는」 경우, 해당 「제2 발광층(52)과 제3 발광층이 직접 접하고 있는」 층 구조는, 예컨대 이하의 양태 (LS4), (LS5) 및 (LS6) 중 어느 하나의 양태도 포함할 수 있다.
- [2857] (LS4) 제2 발광층(52)에 따른 화합물의 증착 공정과 제3 발광층에 따른 화합물의 증착 공정을 거치는 과정에서 제2 호스트 재료 및 제3 호스트 재료(제3 발광층이 함유하는 호스트 재료) 양쪽 모두가 혼재되는 영역이 생겨, 해당 영역이 제2 발광층(52)과 제3 발광층의 계면에 존재하는 양태.
- [2858] (LS5) 제2 발광층(52) 및 제3 발광층이 발광성의 화합물을 포함하는 경우에, 제2 발광층(52)에 따른 화합물의 증착 공정과 제3 발광층에 따른 화합물의 증착 공정을 거치는 과정에서 제2 호스트 재료, 제3 호스트 재료 및 발광성의 화합물이 혼재되는 영역이 생겨, 해당 영역이 제2 발광층(52)과 제3 발광층의 계면에 존재하는 양태.
- [2859] (LS6) 제2 발광층(52) 및 제3 발광층이 발광성의 화합물을 포함하는 경우에, 제2 발광층(52)에 따른 화합물의 증착 공정과 제3 발광층에 따른 화합물의 증착 공정을 거치는 과정에서 해당 발광성의 화합물로 이루어지는 영역, 제2 호스트 재료로 이루어지는 영역, 또는 제3 호스트 재료로 이루어지는 영역이 생겨, 해당 영역이 제2 발광층(52)과 제3 발광층의 계면에 존재하는 양태.
- [2860] 유기 EL 소자(1B)는, 개재층을 더 갖는 것도 바람직하다.
- [2861] 유기 EL 소자(1B)가 개재층을 갖는 경우, 상기 개재층은, 제1 발광층(51)과 제2 발광층(52)의 사이에 배치되어 있는 것이 바람직하다.
- [2862] (개재층)

- [2863] 개재층은 논-도프층인 것이 바람직하다. 개재층은 금속 원자를 포함하지 않는 것이 바람직하다.
- [2864] 개재층은 개재층 재료를 포함한다. 개재층 재료는 발광성 화합물이 아닌 것이 바람직하다.
- [2865] 개재층 재료로서는, 특별히 한정되지 않지만, 발광성 화합물 이외의 재료인 것이 바람직하다.
- [2866] 개재층 재료로서는, 예컨대 1) 옥사디아졸 유도체, 벤조이미다졸 유도체, 혹은 페난트롤린 유도체 등의 복소환 화합물, 2) 카르바졸 유도체, 안트라센 유도체, 페난트렌 유도체, 피렌 유도체, 혹은 크리센 유도체 등의 축합 방향족 화합물, 3) 트리아릴아민 유도체, 혹은 축합 다환 방향족 아민 유도체 등의 방향족 아민 화합물을 들 수 있다.
- [2867] 개재층 재료는, 제1 발광층(51)이 함유하는 제1 화합물 및 제2 발광층(52)이 함유하는 제2 화합물 중 한쪽, 또는 양쪽 모두의 화합물이어도 좋다.
- [2868] 개재층이 복수의 개재층 재료를 함유하는 경우, 각각의 개재층 재료의 함유율은, 모두 개재층의 전체 질량의 10 질량% 이상인 것이 바람직하다.
- [2869] 개재층은, 상기 개재층 재료를, 개재층의 전체 질량의 60 질량% 이상 함유하는 것이 바람직하고, 개재층의 전체 질량의 70 질량% 이상 함유하는 것이 보다 바람직하며, 개재층의 전체 질량의 80 질량% 이상 함유하는 것이 더욱 바람직하고, 개재층의 전체 질량의 90 질량% 이상 함유하는 것이 보다 더 바람직하며, 개재층의 전체 질량의 95 질량% 이상 함유하는 것이 더욱 더 바람직하다.
- [2870] 개재층은, 개재층 재료를 1종만 포함하여도 좋고, 2종 이상 포함하여도 좋다.
- [2871] 개재층이 개재층 재료를 2종 이상 함유하는 경우, 2종 이상의 개재층 재료의 합계 함유율의 상한은 100 질량%이다.
- [2872] 또한, 본 실시형태는, 개재층에, 개재층 재료 이외의 재료가 포함되는 것을 제외하지 않는다.
- [2873] 개재층은 단층으로 구성되어 있어도 좋고, 2층 이상 적층되어 구성되어 있어도 좋다.
- [2874] 개재층의 막 두께는, 특별히 제한은 없지만, 1층당, 3 nm 이상 15 nm 이하인 것이 바람직하고, 5 nm 이상 10 nm 이하인 것이 보다 바람직하다.
- [2875] 유기 EL 소자(1A) 및 유기 EL 소자(1B)에 공통되는 각 층의 구성에 대해서 더 설명한다. 이하, 부호의 기재는 생략하는 경우가 있다.
- [2876] (기판)
- [2877] 기판(2)은 유기 EL 소자의 지지체로서 이용된다. 기판(2)으로서, 예컨대 유리, 석영, 및 플라스틱 등을 이용할 수 있다. 또한, 가요성 기판을 이용하여도 좋다. 가요성 기판이란, 구부릴 수 있는(플렉시블) 기판을 말하며, 예컨대 플라스틱 기판 등을 들 수 있다. 플라스틱 기판을 형성하는 재료로서는, 예컨대 폴리카보네이트, 폴리아릴레이트, 폴리에테르술폰, 폴리프로필렌, 폴리에스테르, 폴리불화비닐, 폴리염화비닐, 폴리이미드, 및 폴리에틸렌나프탈레이트 등을 들 수 있다. 또한, 무기 증착 필름을 이용할 수도 있다.
- [2878] (양극)
- [2879] 기판 상에 형성되는 양극(3)에는, 일함수가 큰(구체적으로는 4.0 eV 이상인) 금속, 합금, 전기 전도성 화합물, 및 이들의 혼합물 등을 이용하는 것이 바람직하다. 구체적으로는, 예컨대 산화인듐-산화주석(ITO: Indium Tin Oxide), 규소 혹은 산화규소를 함유한 산화인듐-산화주석, 산화인듐-산화아연, 산화텅스텐, 및 산화아연을 함유한 산화인듐, 그래핀 등을 들 수 있다. 이밖에, 금(Au), 백금(Pt), 니켈(Ni), 텅스텐(W), 크롬(Cr), 몰리브덴(Mo), 철(Fe), 코발트(Co), 구리(Cu), 팔라듐(Pd), 티탄(Ti), 또는 금속 재료의 질화물(예컨대, 질화티탄) 등을 들 수 있다.
- [2880] 이들 재료는, 통상, 스퍼터링법에 의해 성막된다. 예컨대, 산화인듐-산화아연은, 산화인듐에 대하여 1 질량% 이상 10 질량% 이하의 산화아연을 첨가한 타겟을 이용함으로써, 스퍼터링법으로 형성할 수 있다. 또한, 예컨대 산화텅스텐, 및 산화아연을 함유한 산화인듐은, 산화인듐에 대하여 산화텅스텐을 0.5 질량% 이상 5 질량% 이하, 산화아연을 0.1 질량% 이상 1 질량% 이하 함유한 타겟을 이용함으로써, 스퍼터링법으로 형성할 수 있다. 그 밖에, 진공 증착법, 도포법, 잉크젯법, 스핀 코팅법 등에 의해 제작하여도 좋다.
- [2881] 양극 상에 형성되는 EL층 중, 양극에 접하여 형성되는 정공 주입층은, 양극의 일함수에 관계없이 정공(홀) 주입

이 용이한 복합 재료를 이용하여 형성되기 때문에, 전극 재료로서 가능한 재료(예컨대, 금속, 합금, 전기 전도성 화합물, 및 이들의 혼합물, 그 밖에, 원소 주기율표의 제1족 또는 제2족에 속하는 원소도 포함함)를 이용할 수 있다.

[2882] 일함수가 작은 재료인, 원소 주기율표의 제1족 또는 제2족에 속하는 원소, 즉 리튬(Li)이나 세슘(Cs) 등의 알칼리 금속, 및 마그네슘(Mg), 칼슘(Ca), 스트론튬(Sr) 등의 알칼리 토류 금속, 및 이들을 포함하는 합금(예컨대, MgAg, AlLi), 유로퓸(Eu), 이테르븀(Yb) 등의 희토류 금속 및 이들을 포함하는 합금 등을 이용할 수도 있다. 또한, 알칼리 금속, 알칼리 토류 금속, 및 이들을 포함하는 합금을 이용하여 양극을 형성하는 경우에는, 진공 증착법이나 스퍼터링법을 이용할 수 있다. 또한, 은 페이스트 등을 이용하는 경우에는, 도포법이나 잉크젯법 등을 이용할 수 있다.

[2883] (음극)

[2884] 음극(4)에는, 일함수가 작은(구체적으로는 3.8 eV 이하인) 금속, 합금, 전기 전도성 화합물, 및 이들의 혼합물 등을 이용하는 것이 바람직하다. 이러한 음극 재료의 구체예로서는, 원소 주기율표의 제1족 또는 제2족에 속하는 원소, 즉 리튬(Li)이나 세슘(Cs) 등의 알칼리 금속, 및 마그네슘(Mg), 칼슘(Ca), 스트론튬(Sr) 등의 알칼리 토류 금속, 및 이들을 포함하는 합금(예컨대, MgAg, AlLi), 유로퓸(Eu), 이테르븀(Yb) 등의 희토류 금속 및 이들을 포함하는 합금 등을 들 수 있다.

[2885] 또한, 알칼리 금속, 알칼리 토류 금속, 이들을 포함하는 합금을 이용하여 음극을 형성하는 경우에는, 진공 증착법이나 스퍼터링법을 이용할 수 있다. 또한, 은 페이스트 등을 이용하는 경우에는, 도포법이나 잉크젯법 등을 이용할 수 있다.

[2886] 또한, 전자 주입층을 설치함으로써, 일함수의 대소에 관계없이, Al, Ag, ITO, 그래핀, 규소 혹은 산화규소를 함유한 산화인듐-산화주석 등 다양한 도전성 재료를 이용하여 음극을 형성할 수 있다. 이들 도전성 재료는 스퍼터링법이나 잉크젯법, 스핀 코팅법 등을 이용하여 성막할 수 있다.

[2887] (정공 주입층)

[2888] 정공 주입층(61)은, 정공 주입성이 높은 물질을 포함하는 층이다. 정공 주입성이 높은 물질로서는, 폴리브덴 산화물, 티탄 산화물, 바나듐 산화물, 레늄 산화물, 루테튬 산화물, 크롬 산화물, 지르코늄 산화물, 하프늄 산화물, 탄탈 산화물, 은 산화물, 텅스텐 산화물, 망간 산화물 등을 이용할 수 있다.

[2889] 또한, 정공 주입성이 높은 물질로서는, 저분자의 유기 화합물인 4,4',4''-트리스(N,N-디페닐아미노)트리페닐아민(약칭: TDATA), 4,4',4''-트리스[N-(3-메틸페닐)-N-페닐아미노]트리페닐아민(약칭: MTDATA), 4,4'-비스[N-(4-디페닐아미노페닐)-N-페닐아미노]비페닐(약칭: DPAB), 4,4'-비스(N-{4-[N'-(3-메틸페닐)-N'-페닐아미노]페닐}-N-페닐아미노)비페닐(약칭: DNTPD), 1,3,5-트리스[N-(4-디페닐아미노페닐)-N-페닐아미노]벤젠(약칭: DPA3B), 3-[N-(9-페닐카르바졸-3-일)-N-페닐아미노]-9-페닐카르바졸(약칭: PCzPCA1), 3,6-비스[N-(9-페닐카르바졸-3-일)-N-페닐아미노]-9-페닐카르바졸(약칭: PCzPCA2), 3-[N-(1-나프틸)-N-(9-페닐카르바졸-3-일)아미노]-9-페닐카르바졸(약칭: PCzPCN1) 등의 방향족 아민 화합물 등이나 디피라지노[2,3-f:20,30-h]퀴녹살린-2,3,6,7,10,11-헥사카르보니트릴(HAT-CN)도 들 수 있다.

[2890] 또한, 정공 주입성이 높은 물질로서는, 고분자 화합물(올리고머, 덴드리머, 폴리머 등)을 이용할 수도 있다. 예컨대, 폴리(N-비닐카르바졸)(약칭: PVK), 폴리(4-비닐트리페닐아민)(약칭: PVTPA), 폴리[N-(4-{N'-(4-(4-디페닐아미노)페닐)페닐-N'-페닐아미노}페닐)메타크릴아미드](약칭: PTPDMA), 폴리[N,N'-비스(4-부틸페닐)-N,N'-비스(페닐)벤지딘](약칭: Poly-TPD) 등의 고분자 화합물을 들 수 있다. 또한, 폴리(3,4-에틸렌디옥시티오펜)/폴리(스티렌술폰산)(PEDOT/PSS), 폴리아닐린/폴리(스티렌술폰산)(PAni/PSS) 등의 산을 첨가한 고분자 화합물을 이용할 수도 있다.

[2891] (정공 수송층)

[2892] 정공 수송층(62)은, 정공 수송성이 높은 물질을 포함하는 층이다. 정공 수송층(62)에는, 방향족 아민 화합물, 카르바졸 유도체, 안트라센 유도체 등을 사용할 수 있다. 구체적으로는, 4,4'-비스[N-(1-나프틸)-N-페닐아미노]비페닐(약칭: NPB)이나 N,N'-비스(3-메틸페닐)-N,N'-디페닐-[1,1'-비페닐]-4,4'-디아민(약칭: TPD), 4-페닐-4'-(9-페닐플루오렌-9-일)트리페닐아민(약칭: BAFLP), 4,4'-비스[N-(9,9-디메틸플루오렌-2-일)-N-페닐아미노]비페닐(약칭: DFLLDPBi), 4,4',4''-트리스(N,N-디페닐아미노)트리페닐아민(약칭: TDATA), 4,4',4''-트리스[N-(3-메틸페닐)-N-페닐아미노]트리페닐아민(약칭: MTDATA), 4,4'-비

스[N-(스피로-9,9'-비플루오렌-2-일)-N-페닐아미노]비페닐(약칭: BSPB) 등의 방향족 아민 화합물 등을 이용할 수 있다. 여기에 설명한 물질은, 주로 $10^{-6} \text{ cm}^2/(\text{V} \cdot \text{s})$ 이상의 정공 이동도를 갖는 물질이다.

[2893] 정공 수송층(62)에는, CBP, 9-[4-(N-카르바졸릴)]페닐-10-페닐안트라센(CzPA), 9-페닐-3-[4-(10-페닐-9-안트릴)페닐]-9H-카르바졸(PCzPA)과 같은 카르바졸 유도체나, t-BuDNA, DNA, DPAnth와 같은 안트라센 유도체를 이용하여도 좋다. 폴리(N-비닐카르바졸)(약칭: PVK)이나 폴리(4-비닐트리페닐아민)(약칭: PVTPA) 등의 고분자 화합물을 이용할 수도 있다.

[2894] 단, 전자보다 정공의 수송성이 높은 물질이면, 이들 이외의 것을 이용하여도 좋다. 또한, 정공 수송성이 높은 물질을 포함하는 층은, 단층의 것뿐만 아니라, 상기 물질로 이루어지는 층이 2층 이상 적층된 것으로 하여도 좋다.

[2895] (전자 수송층)

[2896] 전자 수송층(71)은, 전자 수송성이 높은 물질을 포함하는 층이다. 전자 수송층(71)에는, 1) 알루미늄 착체, 베릴륨 착체, 아연 착체 등의 금속 착체, 2) 이미다졸 유도체, 벤조이미다졸 유도체, 아진 유도체, 카르바졸 유도체, 페난트롤린 유도체 등의 복소 방향족 화합물, 3) 고분자 화합물을 사용할 수 있다. 구체적으로는 저분자 유기 화합물로서, Alq, 트리스(4-메틸-8-퀴놀리놀라토)알루미늄(약칭: Almq₃), 비스(10-히드록시벤조[h]퀴놀리나토)베릴륨(약칭: BeBq₂), BAlq, Znq, ZnPBO, ZnPBTZ 등의 금속 착체 등을 이용할 수 있다. 또한, 금속 착체 이외에도, 2-(4-비페닐릴)-5-(4-tert-부틸페닐)-1,3,4-옥사디아졸(약칭: PBD), 1,3-비스[5-(p-tert-부틸페닐)-1,3,4-옥사디아졸-2-일]벤젠(약칭: OXD-7), 3-(4-tert-부틸페닐)-4-페닐-5-(4-비페닐릴)-1,2,4-트리아졸(약칭: TAZ), 3-(4-tert-부틸페닐)-4-(4-에틸페닐)-5-(4-비페닐릴)-1,2,4-트리아졸(약칭: p-EtTAZ), 바소페난트롤린(약칭: BPhen), 바소큐프로인(약칭: BCP), 4,4'-비스(5-메틸벤조옥사졸-2-일)스틸벤(약칭: BzOs) 등의 복소 방향족 화합물도 이용할 수 있다. 본 실시형태에 있어서는, 벤조이미다졸 화합물을 적합하게 이용할 수 있다. 여기에 설명한 물질은, 주로 $10^{-6} \text{ cm}^2/(\text{V} \cdot \text{s})$ 이상의 전자 이동도를 갖는 물질이다. 또한, 정공 수송성보다 전자 수송성이 높은 물질이라면, 상기 이외의 물질을 전자 수송층으로서 이용하여도 좋다. 또한, 전자 수송층은, 단층으로 구성되어 있어도 좋고, 상기 물질로 이루어지는 층이 2층 이상 적층되어 구성되어 있어도 좋다.

[2897] 또한, 전자 수송층(71)에는, 고분자 화합물을 이용할 수도 있다. 예컨대, 폴리[(9,9-디헥실플루오렌-2,7-디일)-co-(피리딘-3,5-디일)](약칭: PF-Py), 폴리[(9,9-디옥틸플루오렌-2,7-디일)-co-(2,2'-비피리딘-6,6'-디일)](약칭: PF-BPy) 등을 이용할 수 있다.

[2898] (전자 주입층)

[2899] 전자 주입층(72)은, 전자 주입성이 높은 물질을 포함하는 층이다. 전자 주입층(72)에는, 리튬(Li), 세슘(Cs), 칼슘(Ca), 불화리튬(LiF), 불화세슘(CsF), 불화칼슘(CaF₂), 리튬산화물(LiOx) 등과 같은 알칼리 금속, 알칼리 토류 금속, 또는 이들의 화합물을 이용할 수 있다. 그 밖에, 전자 수송성을 갖는 물질에 알칼리 금속, 알칼리 토류 금속, 또는 이들의 화합물을 함유시킨 것, 구체적으로는 Alq 중에 마그네슘(Mg)을 함유시킨 것 등을 이용하여도 좋다. 또한, 이 경우에는, 음극으로부터의 전자 주입을 보다 효율적으로 행할 수 있다.

[2900] 혹은, 전자 주입층(72)에, 유기 화합물과 전자 공여체(도너)를 혼합하여 이루어지는 복합 재료를 이용하여도 좋다. 이러한 복합 재료는, 전자 공여체에 의해 유기 화합물에 전자가 발생하기 때문에, 전자 주입성 및 전자 수송성이 우수하다. 이 경우, 유기 화합물로서는, 발생한 전자의 수송이 우수한 재료인 것이 바람직하고, 구체적으로는, 예컨대 전술한 전자 수송층을 구성하는 물질(금속 착체나 복소 방향족 화합물 등)을 이용할 수 있다. 전자 공여체로서는, 유기 화합물에 대하여 전자 공여성을 나타내는 물질이면 좋다. 구체적으로는, 알칼리 금속이나 알칼리 토류 금속이나 희토류 금속이 바람직하고, 리튬, 세슘, 마그네슘, 칼슘, 에르븀, 이테르븀 등을 들 수 있다. 또한, 알칼리 금속 산화물이나 알칼리 토류 금속 산화물이 바람직하고, 리튬 산화물, 칼슘 산화물, 바륨 산화물 등을 들 수 있다. 또한, 산화마그네슘과 같은 루이스 염기를 이용할 수도 있다. 또한, 테트라티아폴발렌(약칭: TTF) 등의 유기 화합물을 이용할 수도 있다.

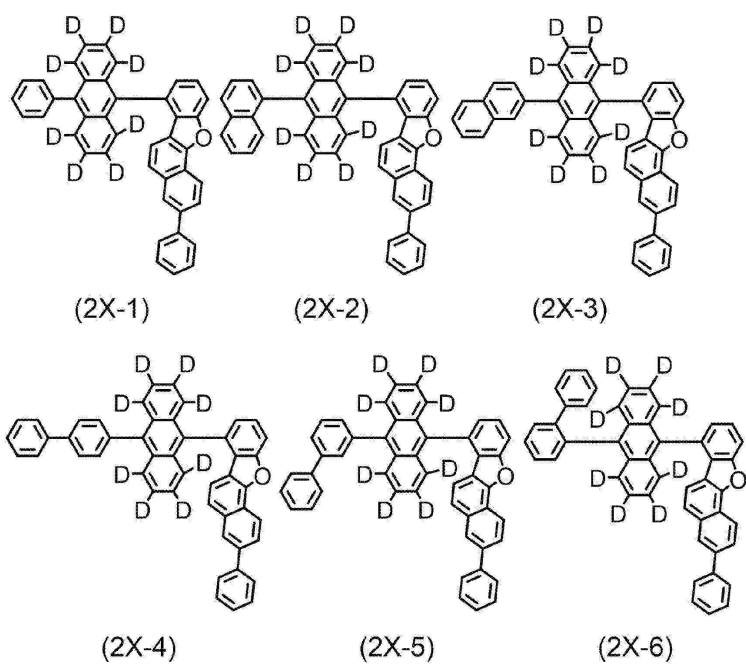
[2901] (층 형성 방법)

[2902] 본 실시형태의 유기 EL 소자의 각 층의 형성 방법으로서, 상기에서 특별히 언급한 것 이외에는 제한되지 않지만, 진공 증착법, 스퍼터링법, 플라즈마법, 이온 플레이팅법 등의 건식 성막법이나, 스핀 코팅법, 디핑법, 플로우 코팅법, 잉크젯법 등의 습식 성막법 등의 공지된 방법을 채용할 수 있다.

- [2903] (막 두께)
- [2904] 본 실시형태의 유기 EL 소자의 각 유기층의 막 두께는, 상기에서 특별히 언급한 경우를 제외하고 한정되지 않는다. 일반적으로, 막 두께가 지나치게 얇으면, 편향 등의 결함이 생기기 쉽고, 막 두께가 지나치게 두꺼우면, 높은 인가 전압이 필요하게 되어 효율이 나빠지기 때문에, 통상, 유기 EL 소자의 각 유기층의 막 두께는, 수 nm 내지 1 μ m의 범위가 바람직하다.
- [2905] 본 실시형태에 따르면, 수명이 향상된 유기 일렉트로루미네센스 소자를 제공할 수 있다.
- [2906] [제3 실시형태]
- [2907] (전자 기기)
- [2908] 본 실시형태에 따른 전자 기기는, 전술한 실시형태 중 어느 하나의 유기 EL 소자를 탑재하고 있다. 전자 기기로서는, 예컨대 표시 장치 및 발광 장치 등을 들 수 있다. 표시 장치로서는, 예컨대 표시 부품(예컨대, 유기 EL 패널 모듈 등), 텔레비전, 휴대전화, 태블릿, 및 퍼스널 컴퓨터 등을 들 수 있다. 발광 장치로서는, 예컨대 조명 및 차량용 등기구 등을 들 수 있다.
- [2909] [실시형태의 변형]
- [2910] 또한, 본 발명은, 전술한 실시형태에 한정되지 않고, 본 발명의 목적을 달성할 수 있는 범위에서의 변경, 개량 등은 본 발명에 포함된다.
- [2911] 예컨대, 발광층은, 1층 또는 2층에 한정되지 않고, 2를 초과하는 복수의 발광층이 적층되어 있어도 좋다. 유기 EL 소자가 2를 초과하는 복수의 발광층을 갖는 경우, 예컨대 전술한 실시형태에서 설명한 발광층 이외의 그 밖의 발광층은, 형광 발광형의 발광층이어도 좋고, 삼중항 여기 상태에서부터 직접 기저 상태로의 전자 천이에 의한 발광을 이용한 인광 발광형의 발광층이어도 좋다.
- [2912] 또한, 유기 EL 소자가 복수의 발광층을 갖는 경우, 이들 발광층이 서로 인접하여 설치되어 있어도 좋고, 개재층을 통해 복수의 발광 유닛이 적층된, 이른바 탠덤형 유기 EL 소자여도 좋다.
- [2913] 또한, 예컨대 발광층의 양극측, 및 음극측 중 적어도 한쪽에 장벽층을 인접시켜 설치하여도 좋다. 장벽층은, 발광층에 접하여 배치되고, 정공, 전자, 및 여기자 중 적어도 어느 하나를 저지하는 것이 바람직하다.
- [2914] 예컨대, 발광층의 음극측에서 접하여 장벽층이 배치된 경우, 해당 장벽층은, 전자를 수송하고, 또한 정공이 해당 장벽층보다 음극측의 층(예컨대, 전자 수송층)에 도달하는 것을 저지한다. 유기 EL 소자가, 전자 수송층을 포함하는 경우는, 발광층과 전자 수송층의 사이에 해당 장벽층을 포함하는 것이 바람직하다.
- [2915] 또한, 발광층의 양극측에서 접하여 장벽층이 배치된 경우, 해당 장벽층은, 정공을 수송하고, 또한 전자가 해당 장벽층보다 양극측의 층(예컨대, 정공 수송층)에 도달하는 것을 저지한다. 유기 EL 소자가, 정공 수송층을 포함하는 경우는, 발광층과 정공 수송층의 사이에 해당 장벽층을 포함하는 것이 바람직하다.
- [2916] 또한, 여기 에너지가 발광층으로부터 그 주변층으로 누출되지 않도록, 장벽층을 발광층에 인접시켜 설치하여도 좋다. 발광층에서 생성된 여기자가, 상기 장벽층보다 전극측의 층(예컨대, 전자 수송층 및 정공 수송층 등)으로 이동하는 것을 저지한다.
- [2917] 발광층과 장벽층은 접합되어 있는 것이 바람직하다.
- [2918] 그 밖에, 본 발명의 실시예에 있어서의 구체적인 구조, 및 형상 등은, 본 발명의 목적을 달성할 수 있는 범위에서 다른 구조 등으로 하여도 좋다.
- [2919] [제4 실시형태]
- [2920] (화합물 및 유기 일렉트로루미네센스 소자)
- [2921] 본 실시형태에 따른 화합물은 하기 구조식 (2X-1)~(2X-63)이다.

[2922]

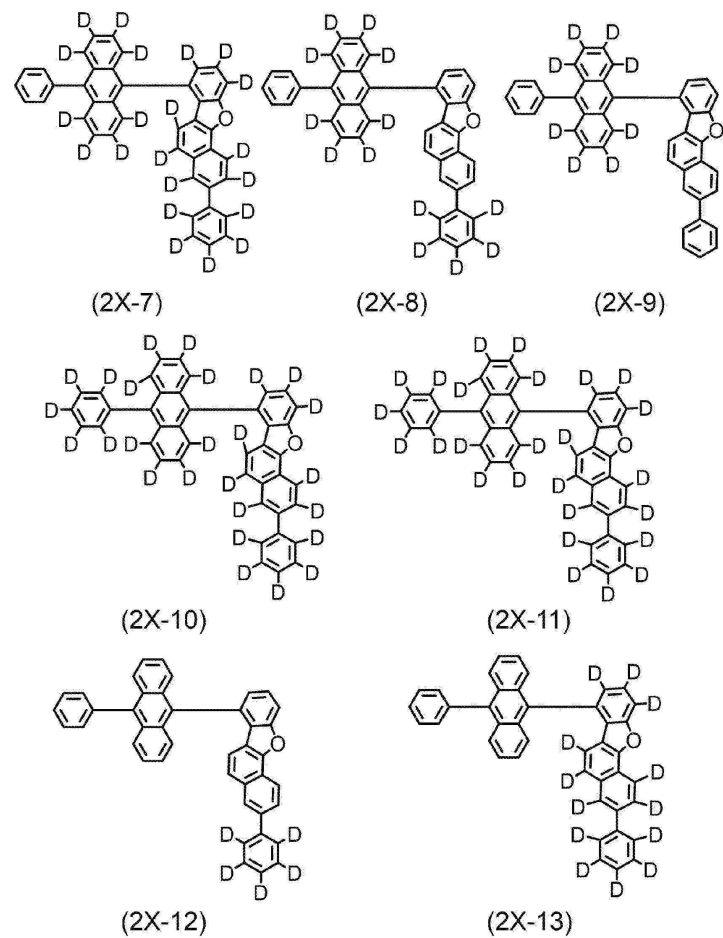
[화학식 295]



[2923]

[2924]

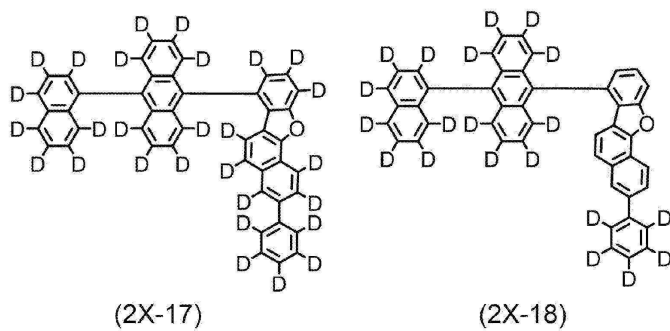
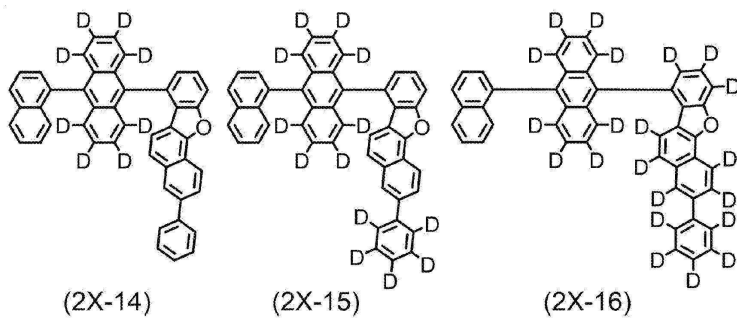
[화학식 296]



[2925]

[2926]

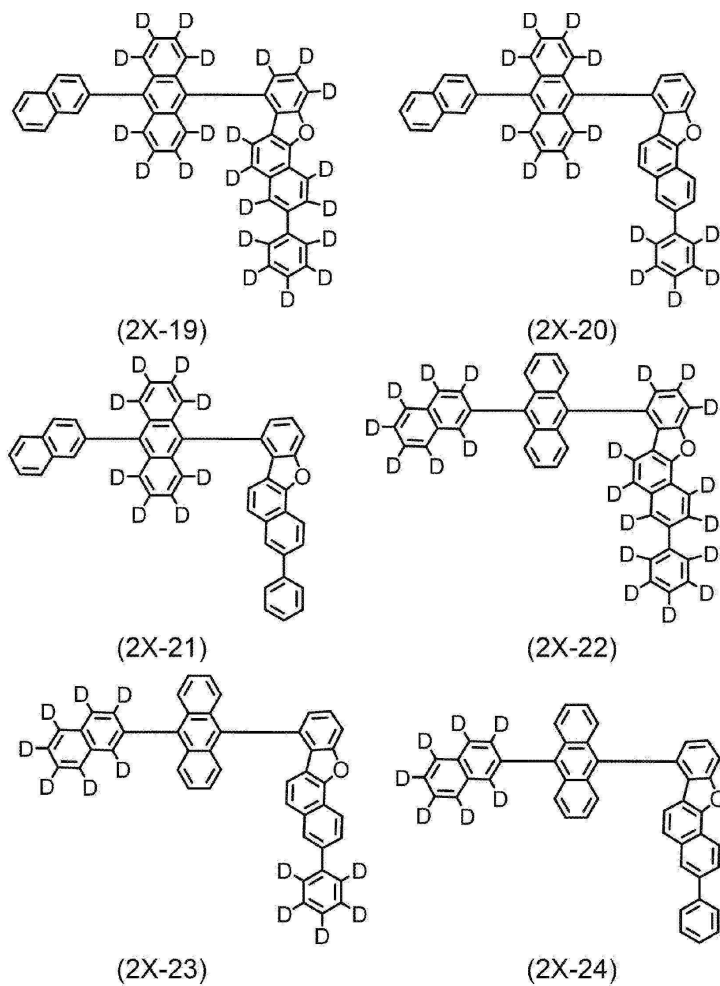
[화학식 297]



[2927]

[2928]

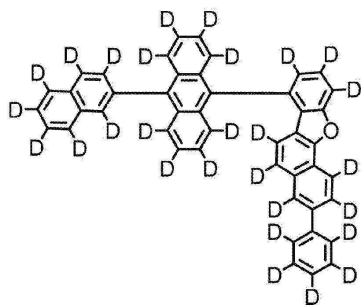
[화학식 298]



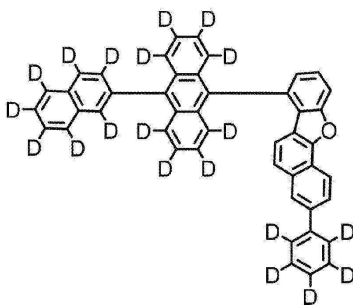
[2929]

[2930]

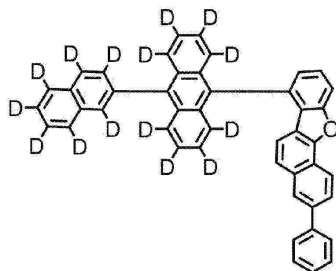
[화학식 299]



(2X-25)



(2X-26)

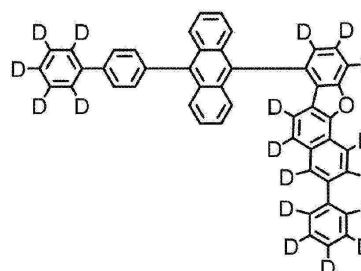


(2X-27)

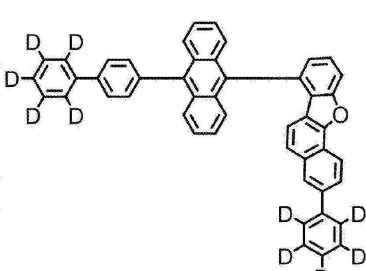
[2931]

[2932]

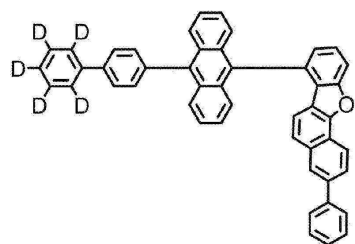
[화학식 300]



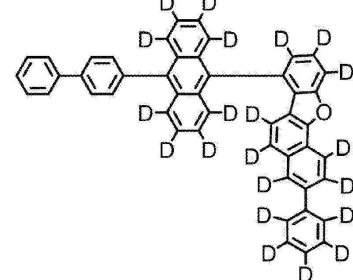
(2X-28)



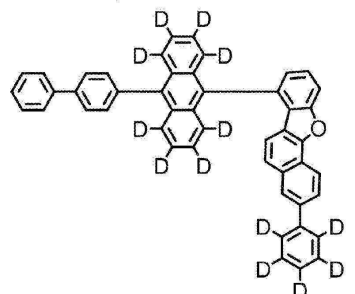
(2X-29)



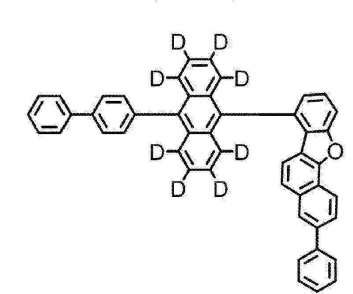
(2X-30)



(2X-31)



(2X-32)

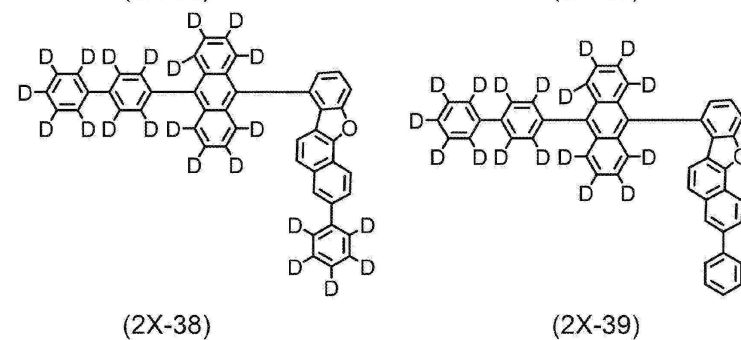
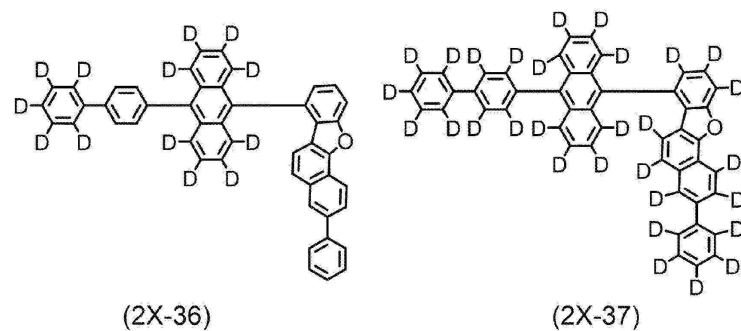
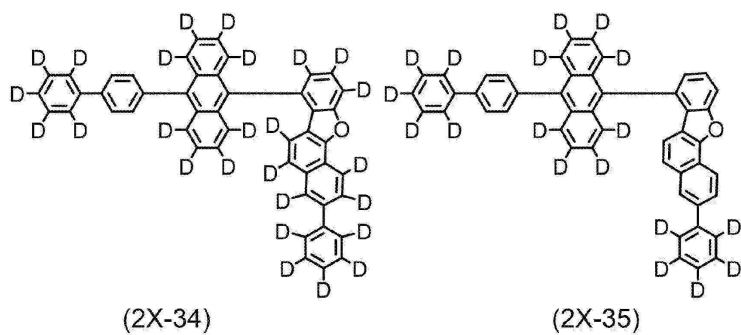


(2X-33)

[2933]

[2934]

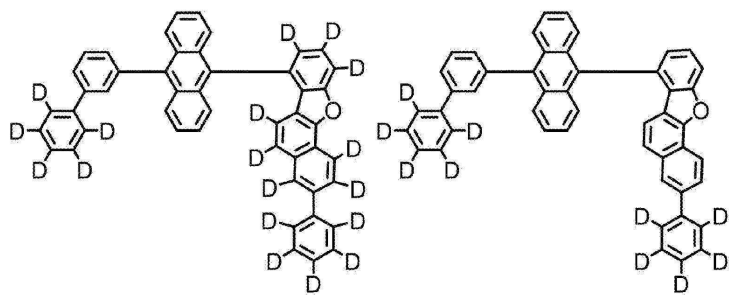
[화학식 301]



[2935]

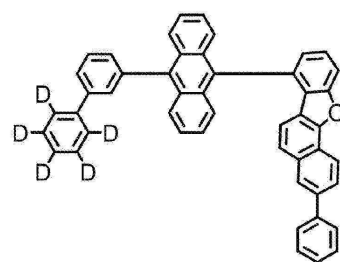
[2936]

[화학식 302]

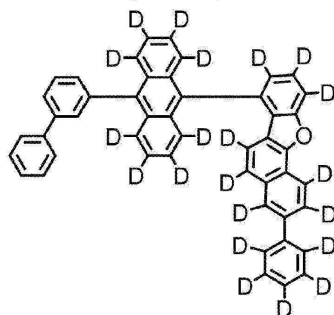


(2X-40)

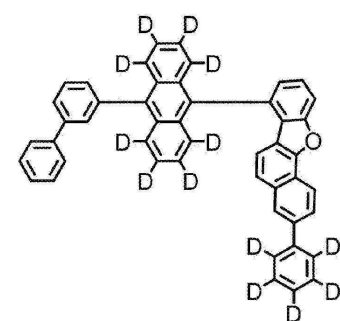
(2X-41)



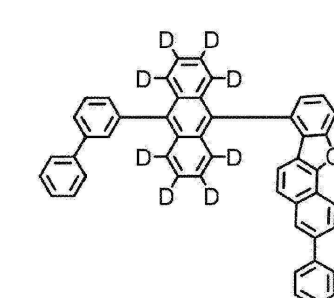
(2X-42)



(2X-43)



(2X-44)

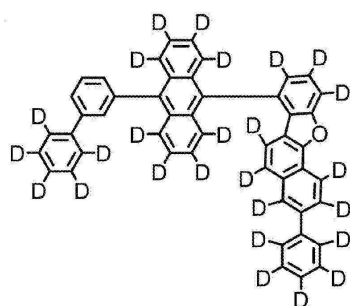


(2X-45)

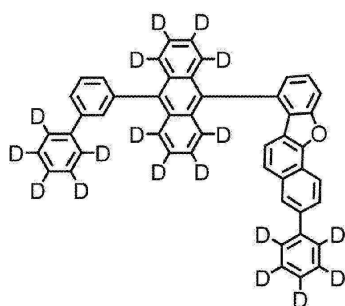
[2937]

[2938]

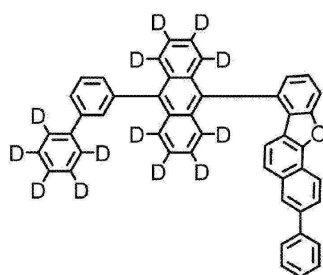
[화학식 303]



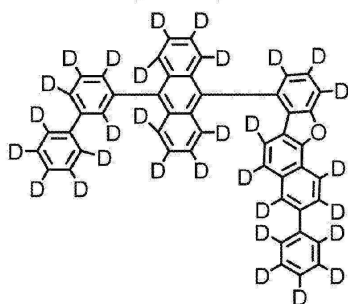
(2X-46)



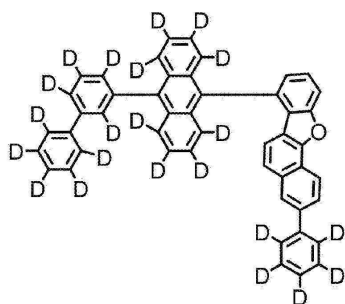
(2X-47)



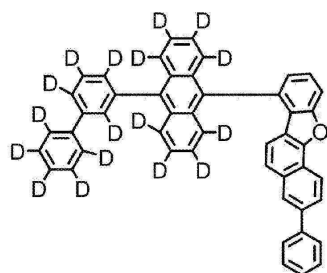
(2X-48)



(2X-49)



(2X-50)

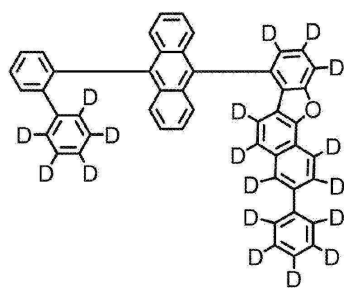


(2X-51)

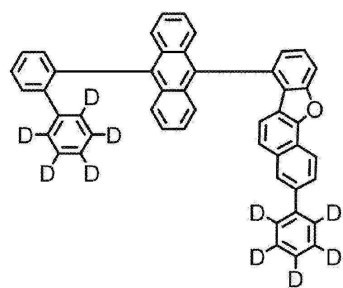
[2939]

[2940]

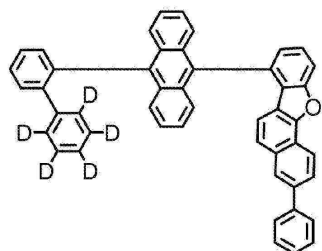
[화학식 304]



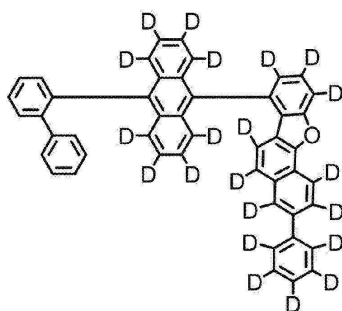
(2X-52)



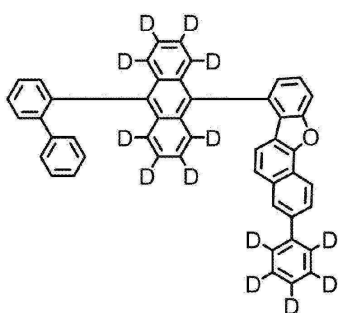
(2X-53)



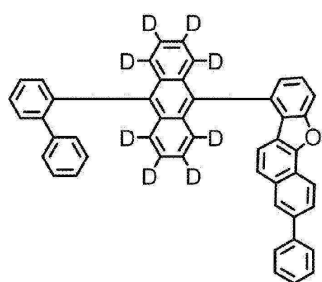
(2X-54)



(2X-55)



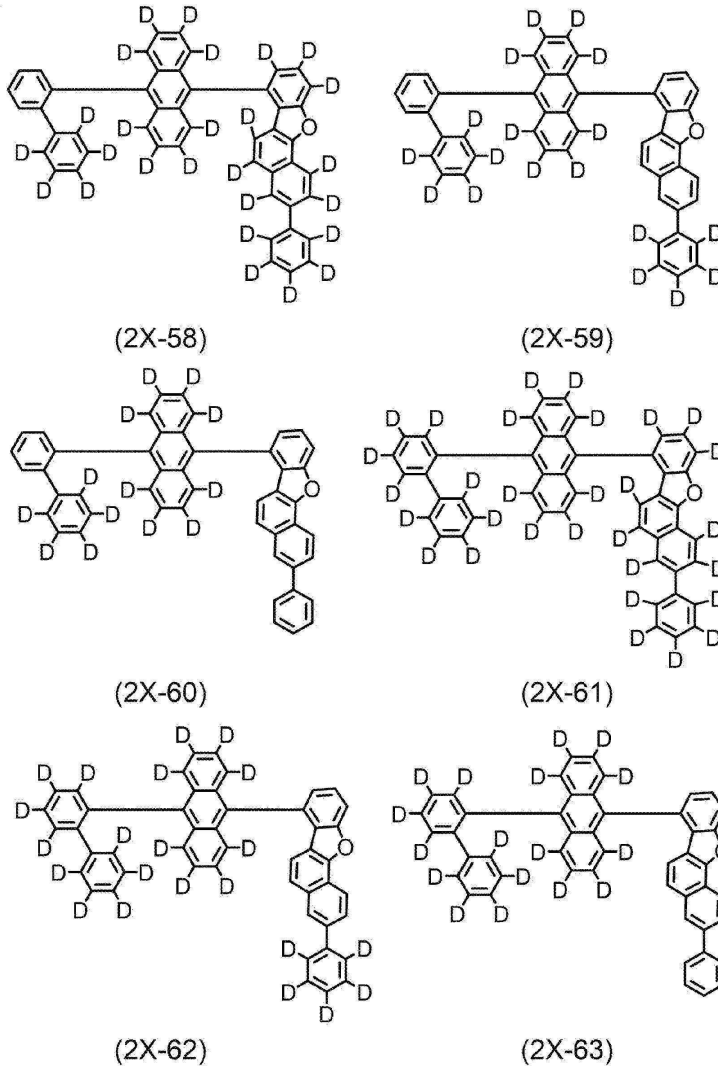
(2X-56)



(2X-57)

[2941]

[2942] [화학식 305]



[2943]

[2944] 본 실시형태에 따른 유기 EL 소자에 대해서 설명한다.

[2945] 본 실시형태에 따른 유기 EL 소자는, 제4 실시형태에 따른 화합물 중, 적어도 어느 하나에 따른 화합물을 함유한다.

[2946] 본 실시형태에 따른 유기 EL 소자는, 양극과, 음극과, 양극과 음극의 사이에 배치된 유기층을 갖는다. 이 유기층은, 유기 화합물로 구성되는 층을 적어도 하나 포함한다. 혹은, 이 유기층은, 유기 화합물로 구성되는 복수의 층이 적층되어 이루어진다. 유기층은 무기 화합물을 더 포함하고 있어도 좋다.

[2947] 본 실시형태에 따른 유기 EL 소자의 일 형태에 있어서, 유기층 중 적어도 한층이, 제1 실시형태에 따른 화합물을 함유한다.

[2948] 본 실시형태의 유기 EL 소자에 있어서, 유기층 중 적어도 한 층은, 발광 영역을 갖는 것이 바람직하다. 본 실시형태의 유기 EL 소자에 있어서, 발광 영역은, 적어도 1개의 발광층을 함유하는 것이 바람직하다. 일 실시형태에 있어서, 발광층은, 상기 구조식 (2X-1)~(2X-63)으로 표시되는 화합물 중, 적어도 어느 하나를 함유한다.

[2949] · 본 실시형태에 따른 화합물의 제조 방법

[2950] 본 실시형태에 따른 화합물은, 후술하는 실시예에 기재된 합성 방법에 따라 제조할 수 있다. 또한, 본 실시형태에 따른 화합물은, 해당 합성 방법에 따라, 목적물에 맞춘 기지의 대체 반응 및 원료를 이용함으로써, 제조할 수 있다.

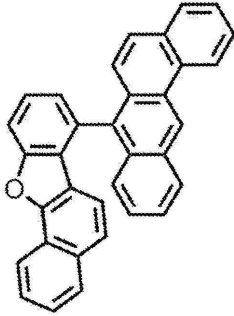
[2951] 실시예

[2952] 이하, 실시예를 들어 본 발명을 더욱 상세히 설명한다. 본 발명은 이들 실시예에 전혀 한정되지 않는다.

[2953] <화합물>

[2954] 실시예에 따른 유기 EL 소자의 제조에 이용한, 일반식 (1A)로 표시되는 화합물, 및 일반식 (1A-A)로 표시되는 화합물의 구조를 이하에 나타낸다.

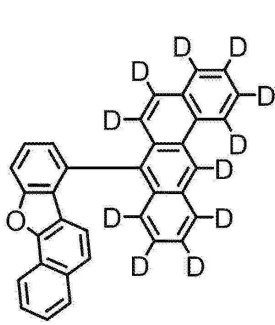
[2955] [화학식 306]



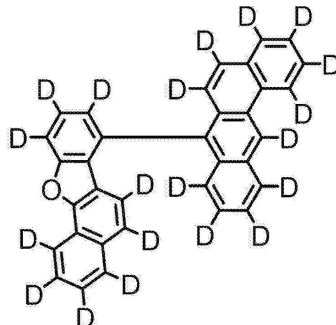
BH1-2

[2956]

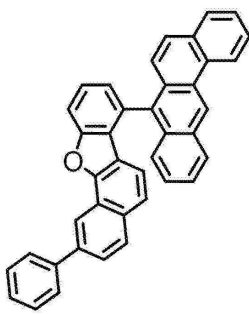
[2957] [화학식 307]



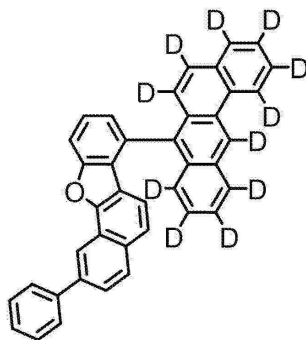
BH1-4



BH1-5



BH1-6

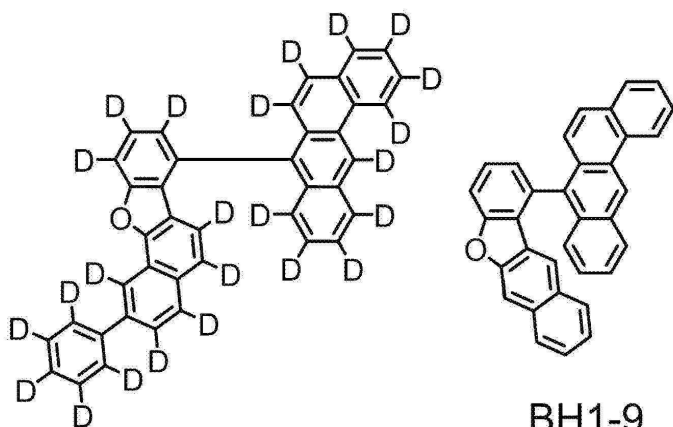


BH1-7

[2958]

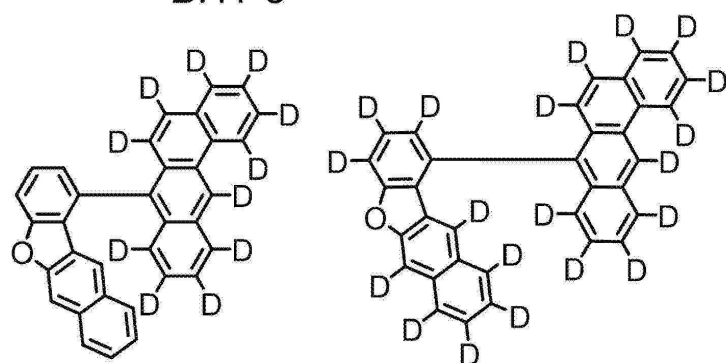
[2959]

[화학식 308]



BH1-8

BH1-9



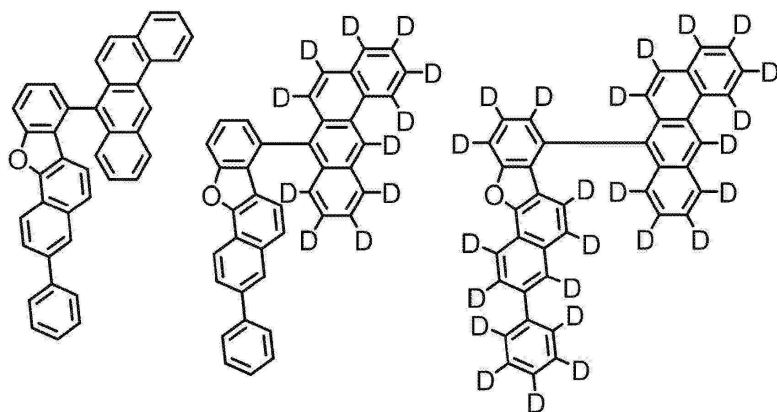
BH1-10

BH1-11

[2960]

[2961]

[화학식 309]



BH1-12

BH1-13

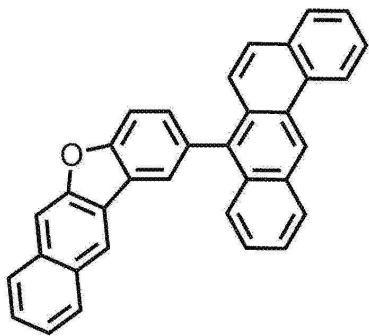
BH1-14

[2962]

[2963]

비교예에 따른 유기 EL 소자의 제조에 이용한 비교 화합물의 구조를 이하에 나타낸다.

[2964] [화학식 310]

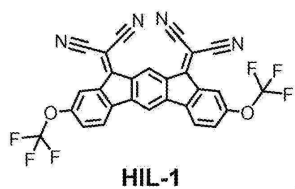


BH1-Ref2

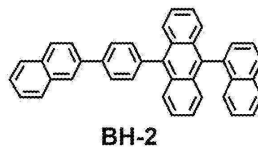
[2965]

[2966] 실시예 및 비교예에 따른 유기 EL 소자에 이용한, 다른 화합물의 구조를 이하에 나타낸다.

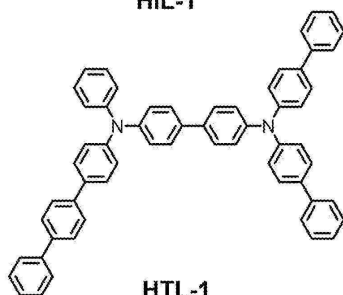
[2968] [화학식 311]



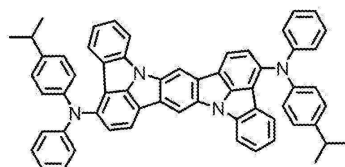
HIL-1



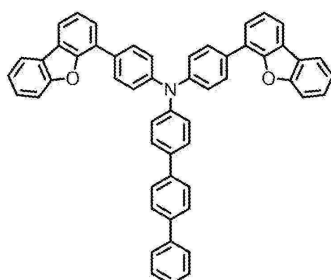
BH-2



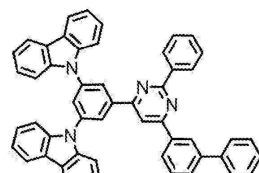
HTL-1



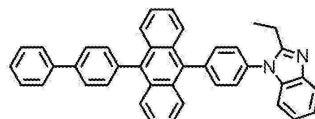
BD-1



EBL-1



aET-1

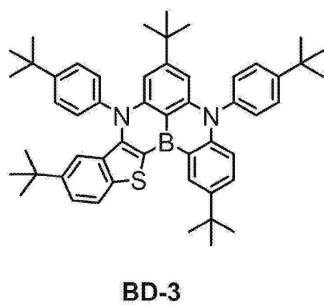
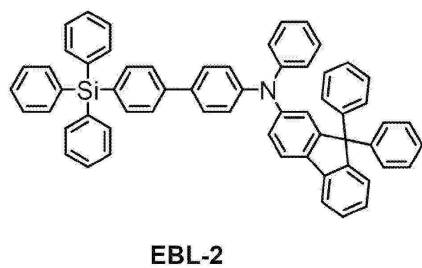
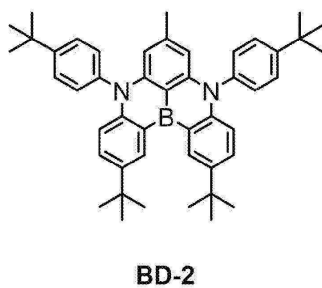
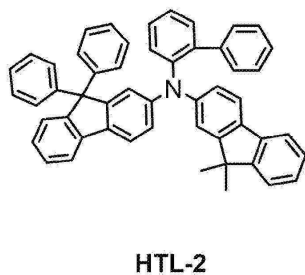
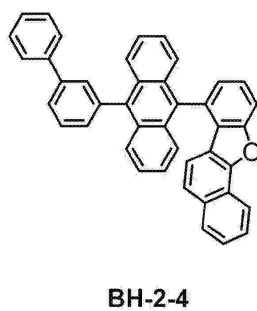
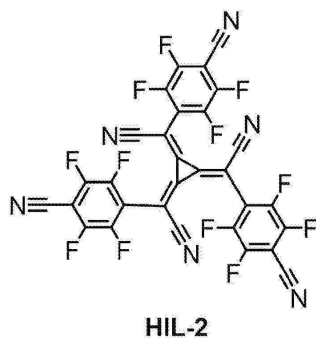


bET-1

[2969]

[2970]

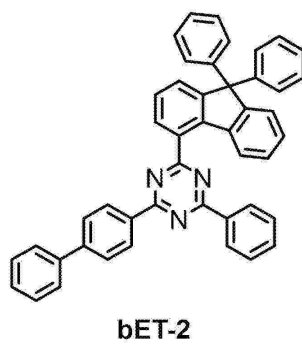
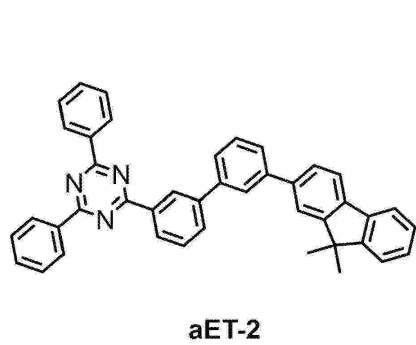
[화학식 312]



[2971]

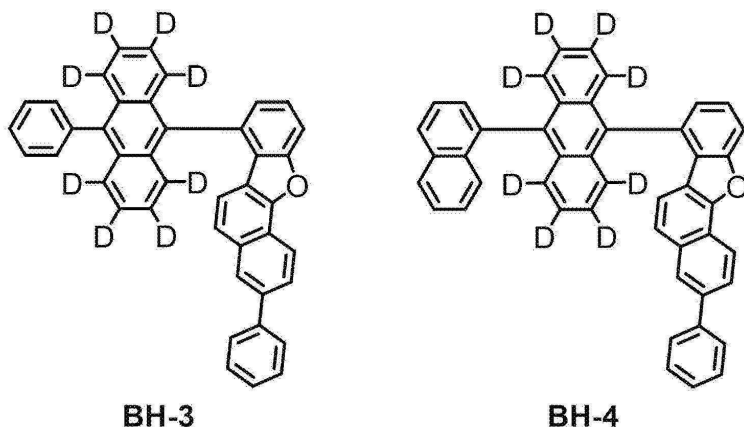
[2972]

[화학식 313]



[2973]

[2974] [화학식 314]



[2975]

[2976] <유기 EL 소자의 제작>

[2977] 유기 EL 소자를 이하와 같이 제작하여, 평가하였다.

[2978] [실시예 1-1]

[2979] 25 mm×75 mm×1.1 mm 두께의 ITO(Indium Tin Oxide) 투명 전극(양극)이 구비된 유리 기판(지오마텍 가부시키가이샤 제조)을 이소프로필알코올 중에서 초음파 세정을 5분간 행한 후, UV 오존 세정을 30분간 행하였다. ITO 투명 전극의 막 두께는, 130 nm로 하였다.

[2980] 세정 후의 투명 전극 라인이 구비된 유리 기판을 진공 증착 장치의 기판 홀더에 장착하고, 우선 투명 전극 라인이 형성되어 있는 쪽의 면 상에 투명 전극을 덮도록 하여 화합물 HIL-1을 증착함으로써, 막 두께 5 nm의 정공 주입층(HI)을 형성하였다.

[2981] 정공 주입층의 성막에 이어서 화합물 HTL-1을 증착하여, 막 두께 80 nm의 제1 정공 수송층을 성막하였다.

[2982] 제1 정공 수송층의 성막에 이어서 화합물 EBL-1을 증착하여, 막 두께 10 nm의 제2 정공 수송층(전자 장벽층이라고도 함)을 성막하였다.

[2983] 제2 정공 수송층 상에 제1 화합물로서의 화합물 BH1-2 및 제1 발광성 화합물로서의 화합물 BD-1을, 화합물 BH1-2의 비율이 98 질량% 및 화합물 BD-1의 비율이 2 질량%가 되도록 공증착하여, 막 두께 12.5 nm의 제1 발광층을 성막하였다.

[2984] 제1 발광층 상에 제2 화합물로서의 화합물 BH-2 및 제2 발광성 화합물로서의 화합물 BD-1을, 화합물 BH-2의 비율이 98 질량% 및 화합물 BD-1의 비율이 2 질량%가 되도록 공증착하여, 막 두께 12.5 nm의 제2 발광층을 성막하였다.

[2985] 제2 발광층 상에 화합물 aET-1을 증착하여, 막 두께 10 nm의 제1 전자 수송층(정공 장벽층이라고도 함)을 형성하였다.

[2986] 제1 전자 수송층 상에 화합물 bET-1을 증착하여, 막 두께 15 nm의 제2 전자 수송층을 형성하였다.

[2987] 제2 전자 수송층 상에 LiF를 증착하여, 막 두께 1 nm의 전자 주입층을 형성하였다.

[2988] 전자 주입층 상에 금속 Al을 증착하여, 막 두께 80 nm의 음극을 형성하였다.

[2989] 실시예 1-1의 소자 구성을 약식으로 나타내면, 다음과 같다.

[2990] ITO(130)/HIL-1(5)/HTL-1(80)/EBL-1(10)/BH1-2:BD-1(12.5, 98%:2%)/BH-2:BD-1(12.5, 98%:2%)/aET-1(10)/bET-1(15)/LiF(1)/Al(80)

[2991] 또한, 괄호 안의 숫자는 막 두께(단위: nm)를 나타낸다.

[2992] 동 괄호 안에 있어서, 퍼센트 표시된 숫자(98%:2%)는, 제1 발광층 또는 제2 발광층에 있어서의 화합물 BH1-2 또는 화합물 BH-2 및 화합물 BD-1의 비율(질량%)을 나타낸다.

- [2993] [실시예 1-2~실시예 1-12]
- [2994] 실시예 1-2~실시예 1-12의 유기 EL 소자는, 각각, 제1 발광층의 제1 화합물을 표 1에 기재된 화합물로 변경한 것 이외에는, 실시예 1-1과 동일하게 하여 제작하였다.
- [2995] [비교예 1-1]
- [2996] 비교예 1-1의 유기 EL 소자는, 제1 발광층의 제1 화합물을 표 1에 기재된 화합물로 변경한 것 이외에는, 실시예 1-1과 동일하게 하여 제작하였다.
- [2997] [실시예 2-1]
- [2998] 25 mm×75 mm×1.1 mm 두께의 ITO(Indium Tin Oxide) 투명 전극(양극)이 구비된 유리 기판(지오마텍 가부시키가이샤 제조)을 이소프로필알코올 중에서 초음파 세정을 5분간 행한 후, UV 오존 세정을 30분간 행하였다. ITO 투명 전극의 막 두께는, 130 nm로 하였다.
- [2999] 세정 후의 투명 전극 라인이 구비된 유리 기판을 진공 증착 장치의 기판 홀더에 장착하고, 우선 투명 전극 라인이 형성되어 있는 쪽의 면 상에 투명 전극을 덮도록 하여, 화합물 HTL-2 및 화합물 HIL-2를, 화합물 HTL-2의 비율이 90 질량% 및 화합물 HIL-2의 비율이 10 질량%가 되도록 공증착하여, 막 두께 10 nm의 정공 주입층(HI)을 형성하였다.
- [3000] 정공 주입층의 성막에 이어서 화합물 HTL-2를 증착하여, 막 두께 85 nm의 제1 정공 수송층을 성막하였다.
- [3001] 제1 정공 수송층의 성막에 이어서 화합물 EBL-2를 증착하여, 막 두께 5 nm의 제2 정공 수송층(전자 장벽층이라고도 함)을 성막하였다.
- [3002] 제2 정공 수송층 상에 제1 화합물로서의 화합물 BH1-2 및 제1 발광성 화합물로서의 화합물 BD-2를, 화합물 BH1-2의 비율이 98 질량% 및 화합물 BD-2의 비율이 2 질량%가 되도록 공증착하여, 막 두께 10 nm의 제1 발광층을 성막하였다.
- [3003] 제1 발광층 상에 제2 화합물로서의 화합물 BH-2-4 및 제2 발광성 화합물로서의 화합물 BD-2를, 화합물 BH-2-4의 비율이 98 질량% 및 화합물 BD-2의 비율이 2 질량%가 되도록 공증착함으로써, 막 두께 10 nm의 제2 발광층을 성막하였다.
- [3004] 제2 발광층 상에 화합물 aET-2를 증착하여, 막 두께 5 nm의 제1 전자 수송층(정공 장벽층이라고도 함)을 형성하였다.
- [3005] 제1 전자 수송층 상에 화합물 bET-2 및 화합물 Liq를, 화합물 bET-2의 비율이 50 질량% 및 화합물 Liq의 비율이 50 질량%가 되도록 공증착하여, 막 두께 25 nm의 전자 수송층을 형성하였다. Liq는 (8-퀴놀리놀라토)리튬((8-Quinololato) lithium)의 약칭이다.
- [3006] 제2 전자 수송층 상에 Liq를 증착하여, 막 두께 1 nm의 전자 주입층을 형성하였다.
- [3007] 전자 주입층 상에 금속 Al을 증착하여, 막 두께 80 nm의 음극을 형성하였다.
- [3008] 실시예 2-1의 소자 구성을 약식으로 나타내면, 다음과 같다.
- [3009] ITO(130)/HTL-2:HIL-2(10,90%:10%)/HTL-2(85)/EBL-2(5)/BH1-2:BD-2(10,98%:
- [3010] 2%)/BH-2-4:BD-2(10,98%:2%)/aET-2(5)/bET-2:Liq(25,50%:50%)/Liq(1)/Al(80)
- [3011] 또한, 괄호 안의 숫자는 막 두께(단위: nm)를 나타낸다.
- [3012] 동 괄호 안에 있어서, 퍼센트 표시된 숫자(90%:10%)는, 화합물 HTL-2 및 화합물 HIL-2의 비율(질량%)을 나타낸다.
- [3013] 동 괄호 안에 있어서, 퍼센트 표시된 숫자(98%:2%)는, 제1 발광층 또는 제2 발광층에 있어서의 화합물 BH1-2 또는 화합물 BH-2-4 및 화합물 BD-2의 비율(질량%)을 나타낸다.
- [3014] [실시예 2-2~실시예 2-4]
- [3015] 실시예 2-2~실시예 2-4의 유기 EL 소자는, 각각, 제1 발광층의 제1 화합물을 표 2에 기재된 화합물로 변경한 것 이외에는, 실시예 2-1과 동일하게 하여 제작하였다.

- [3016] [비교예 2-1]
- [3017] 비교예 2-1의 유기 EL 소자는, 제1 발광층의 제1 화합물을 표 2에 기재된 화합물로 변경한 것 이외에는, 실시예 2-1과 동일하게 하여 제작하였다.
- [3018] [실시예 3-1]
- [3019] 25 mm×75 mm×1.1 mm 두께의 ITO(Indium Tin Oxide) 투명 전극(양극)이 구비된 유리 기판(지오마텍 가부시키가이샤 제조)을 이소프로필알코올 중에서 초음파 세정을 5분간 행한 후, UV 오존 세정을 30분간 행하였다. ITO 투명 전극의 막 두께는, 130 nm로 하였다.
- [3020] 세정 후의 투명 전극 라인이 구비된 유리 기판을 진공 증착 장치의 기판 홀더에 장착하고, 우선 투명 전극 라인이 형성되어 있는 쪽의 면 상에 투명 전극을 덮도록 하여, 화합물 HTL-2 및 화합물 HIL-2를, 화합물 HTL-2의 비율이 90 질량% 및 화합물 HIL-2의 비율이 10 질량%가 되도록 공증착함으로써, 막 두께 10 nm의 정공 주입층(HI)을 형성하였다.
- [3021] 정공 주입층의 성막에 이어서 화합물 HTL-2를 증착하여, 막 두께 85 nm의 제1 정공 수송층을 성막하였다.
- [3022] 제1 정공 수송층의 성막에 이어서 화합물 EBL-2를 증착하여, 막 두께 5 nm의 제2 정공 수송층(전자 장벽층이라고도 함)을 성막하였다.
- [3023] 제2 정공 수송층 상에 제1 화합물로서의 화합물 BH1-2 및 제1 발광성 화합물로서의 화합물 BD-3을, 화합물 BH1-2의 비율이 98 질량% 및 화합물 BD-3의 비율이 2 질량%가 되도록 공증착하여, 막 두께 10 nm의 제1 발광층을 성막하였다.
- [3024] 제1 발광층 상에 제2 화합물로서의 화합물 BH-2-4 및 제2 발광성 화합물로서의 화합물 BD-3을, 화합물 BH-2-4의 비율이 98 질량% 및 화합물 BD-3의 비율이 2 질량%가 되도록 공증착하여, 막 두께 10 nm의 제2 발광층을 성막하였다.
- [3025] 제2 발광층 상에 화합물 aET-2를 증착하여, 막 두께 5 nm의 제1 전자 수송층(정공 장벽층이라고도 함)을 형성하였다.
- [3026] 제1 전자 수송층 상에 화합물 bET-2 및 화합물 Liq를, 화합물 bET-2의 비율이 50 질량% 및 화합물 Liq의 비율이 50 질량%가 되도록 공증착하여, 막 두께 25 nm의 전자 수송층을 형성하였다. Liq는 (8-퀴놀리놀라토)리튬((8-Quinololinolato)lithium)의 약칭이다.
- [3027] 제2 전자 수송층 상에 Liq를 증착하여, 막 두께 1 nm의 전자 주입층을 형성하였다.
- [3028] 전자 주입층 상에 금속 Al을 증착하여, 막 두께 80 nm의 음극을 형성하였다.
- [3029] 실시예 3-1의 소자 구성을 약식으로 나타내면, 다음과 같다.
- [3030] ITO(130)/HTL-2:HIL-2(10,90%:10%)/HTL-2(85)/EBL-2(5)/BH1-2:BD-3(10,98%:
- [3031] 2%)/BH-2-4:BD-3(10,98%:2%)/aET-2(5)/bET-2:Liq(25,50%:50%)/Liq(1)/Al(80)
- [3032] 또한, 괄호 안의 숫자는 막 두께(단위: nm)를 나타낸다.
- [3033] 동 괄호 안에 있어서, 퍼센트 표시된 숫자(90%:10%)는, 화합물 HTL-2 및 화합물 HIL-2의 비율(질량%)을 나타낸다.
- [3034] 동 괄호 안에 있어서, 퍼센트 표시된 숫자(98%:2%)는, 제1 발광층 또는 제2 발광층에 있어서의 화합물 BH1-2 또는 화합물 BH-2-4 및 화합물 BD-3의 비율(질량%)을 나타낸다.
- [3035] [실시예 3-2~실시예 3-6]
- [3036] 실시예 3-2~실시예 3-6의 유기 EL 소자는, 각각, 제1 발광층의 제1 화합물을 표 3에 기재된 화합물로 변경한 것 이외에는, 실시예 3-1과 동일하게 하여 제작하였다.
- [3037] [비교예 3-1]
- [3038] 비교예 3-1의 유기 EL 소자는, 제1 발광층의 제1 화합물을 표 3에 기재된 화합물로 변경한 것 이외에는, 실시예 3-1과 동일하게 하여 제작하였다.

- [3039] [실시예 4-1]
- [3040] 25 mm×75 mm×1.1 mm 두께의 ITO(Indium Tin Oxide) 투명 전극(양극)이 구비된 유리 기판(지오마텍 가부시키가이샤 제조)을 이소프로필알코올 중에서 초음파 세정을 5분간 행한 후, UV 오존 세정을 30분간 행하였다. ITO 투명 전극의 막 두께는, 130 nm로 하였다.
- [3041] 세정 후의 투명 전극 라인이 구비된 유리 기판을 진공 증착 장치의 기판 홀더에 장착하고, 우선 투명 전극 라인이 형성되어 있는 쪽의 면 상에 투명 전극을 덮도록 하여, 화합물 HTL-2 및 화합물 HIL-2를, 화합물 HTL-2의 비율이 90 질량% 및 화합물 HIL-2의 비율이 10 질량%가 되도록 공증착함으로써, 막 두께 10 nm의 정공 주입층(HI)을 형성하였다.
- [3042] 정공 주입층의 성막에 이어서 화합물 HTL-2를 증착하여, 막 두께 85 nm의 제1 정공 수송층을 성막하였다.
- [3043] 제1 정공 수송층의 성막에 이어서 화합물 EBL-2를 증착하여, 막 두께 5 nm의 제2 정공 수송층(전자 장벽층이라고도 함)을 성막하였다.
- [3044] 제2 정공 수송층 상에 제1 화합물로서의 화합물 BH1-2 및 제1 발광성 화합물로서의 화합물 BD-2를, 화합물 BH1-2의 비율이 98 질량% 및 화합물 BD-2의 비율이 2 질량%가 되도록 공증착하여, 막 두께 10 nm의 제1 발광층을 성막하였다.
- [3045] 제1 발광층 상에 제2 화합물로서의 화합물 BH-3 및 제2 발광성 화합물로서의 화합물 BD-2를, 화합물 BH-3의 비율이 98 질량% 및 화합물 BD-2의 비율이 2 질량%가 되도록 공증착하여, 막 두께 10 nm의 제2 발광층을 성막하였다.
- [3046] 제2 발광층 상에 화합물 aET-2를 증착하여, 막 두께 5 nm의 제1 전자 수송층(정공 장벽층이라고도 함)을 형성하였다.
- [3047] 제1 전자 수송층 상에 화합물 bET-2 및 화합물 Liq를, 화합물 bET-2의 비율이 50 질량% 및 화합물 Liq의 비율이 50 질량%가 되도록 공증착하여, 막 두께 25 nm의 전자 수송층을 형성하였다.
- [3048] 제2 전자 수송층 상에 Liq를 증착하여, 막 두께 1 nm의 전자 주입층을 형성하였다.
- [3049] 전자 주입층 상에 금속 Al을 증착하여, 막 두께 80 nm의 음극을 형성하였다.
- [3050] 실시예 4-1의 소자 구성을 약식으로 나타내면, 다음과 같다.
- [3051] ITO(130)/HTL-2:HIL-2(10,90%:10%)/HTL-2(85)/EBL-2(5)/BH1-2:BD-2(10,98%:
- [3052] 2%)/BH-3:BD-2(10,98%:2%)/aET-2(5)/bET-2:Liq(25,50%:50%)/Liq(1)/Al(80)
- [3053] 또한, 괄호 안의 숫자는 막 두께(단위: nm)를 나타낸다.
- [3054] 동 괄호 안에 있어서, 퍼센트 표시된 숫자(90%:10%)는, 화합물 HIL-2 및 화합물 HIL-2의 비율(질량%)을 나타낸다.
- [3055] 동 괄호 안에 있어서, 퍼센트 표시된 숫자(98%:2%)는, 제1 발광층 또는 제2 발광층에 있어서의 화합물 BH1-2 또는 화합물 BH-3 및 화합물 BD-2의 비율(질량%)을 나타낸다.
- [3056] [실시예 4-2]
- [3057] 실시예 4-2의 유기 EL 소자는, 제2 발광층의 제2 화합물을 표 4에 기재된 화합물로 변경한 것 이외에는, 실시예 4-1과 동일하게 하여 제작하였다.
- [3058] 참고를 위해, 표 4에 실시예 2-1에 대해서 재게(再掲)하였다.
- [3059] 참고를 위해, 표 4에 비교예 2-1에 대해서 재게하였다.
- [3060] <유기 EL 소자의 평가>
- [3061] 실시예 1-1~실시예 1-12, 실시예 2-1~실시예 2-4, 실시예 3-1~실시예 3-6 및 실시예 4-1~실시예 4-2, 및 비교예 1-1, 비교예 2-1 및 비교예 3-1에서 제작한 유기 EL 소자에 대해서, 이하의 평가를 행하였다. 평가 결과를 표 1~표 4에 나타낸다.
- [3062] · 수명(LT95)

[3063] 얻어진 유기 EL 소자에, 전류 밀도가 50 mA/cm^2 가 되도록 전압을 인가하고, 초기 휘도에 대하여 휘도가 95%가 될 때까지의 시간(LT95(단위: 시간))을 측정하였다. 휘도는 분광 방사 휘도계 CS-2000(코니카미놀타 가부시키키가이샤 제조)을 이용하여 측정하였다.

[3064] 표 1에는, 각 예(실시에 1-1~실시에 1-12, 및 비교예 1-1)의 LT95의 측정값, 및 하기 수식(수학식 1X)에 기초하여 산출한 「LT95(상대값)」(단위:%)를 나타낸다.

[3065] $\text{LT95(상대값)} = (\text{각 예의 LT95/비교예 1-1의 LT95}) \times 100 \dots (\text{수학식 1X})$

[3066] 표 2에는, 각 예(실시에 2-1~실시에 2-4, 및 비교예 2-1)의 LT95의 측정값, 및 하기 수식(수학식 2X)에 기초하여 산출한 「LT95(상대값)」(단위:%)을 나타낸다.

[3067] $\text{LT95(상대값)} = (\text{각 예의 LT95/비교예 2-1의 LT95}) \times 100 \dots (\text{수학식 2X})$

[3068] 표 3에는, 각 예(실시에 3-1~실시에 3-6, 및 비교예 3-1)의 LT95의 측정값, 및 하기 수식(수학식 3X)에 기초하여 산출한 「LT95(상대값)」(단위:%)을 나타낸다.

[3069] $\text{LT95(상대값)} = (\text{각 예의 LT95/비교예 3-1의 LT95}) \times 100 \dots (\text{수학식 3X})$

[3070] 표 4에는, 각 예(실시에 4-1~실시에 4-2, 및 비교예 2-1)의 LT95의 측정값, 및 하기 수식(수학식 4X)에 기초하여 산출한 「LT95(상대값)」(단위:%)을 나타낸다.

[3071] $\text{LT95(상대값)} = (\text{각 예의 LT95/비교예 2-1의 LT95}) \times 100 \dots (\text{수학식 4X})$

[3072] · CIE1931 색도

[3073] 유기 EL 소자의 전류 밀도가 10.00 mA/cm^2 가 되도록 소자에 전압을 인가했을 때의 CIE1931 색도 좌표(x, y)를 분광 방사 휘도계 CS-2000(코니카미놀타 가부시키키가이샤 제조)으로 측정하였다.

[3074] [표 1]

	제1 발광층							제2 발광층					소자 평가			
	제1 화합물			제1 발광성 화합물			막 두께 [nm]	제2 화합물			제2 발광성 화합물		막 두께 [nm]	CIE x	CIE y	LT95 (상대값) [%]
	명칭	S ₁ [eV]	T ₁ [eV]	명칭	S ₁ [eV]	T ₁ [eV]		명칭	S ₁ [eV]	T ₁ [eV]	명칭					
실시예 1-1	BH1-2	3.08	2.08	BD-1	2.73	2.29	12.5	BH-2	3.01	1.87	BD-1	12.5	0.133	0.110	140	
실시예 1-2	BH1-4	3.08	2.08	BD-1	2.73	2.29	12.5	BH-2	3.01	1.87	BD-1	12.5	0.133	0.110	155	
실시예 1-3	BH1-5	3.08	2.08	BD-1	2.73	2.29	12.5	BH-2	3.01	1.87	BD-1	12.5	0.133	0.110	165	
실시예 1-4	BH1-6	3.11	2.07	BD-1	2.73	2.29	12.5	BH-2	3.01	1.87	BD-1	12.5	0.134	0.110	120	
실시예 1-5	BH1-7	3.11	2.07	BD-1	2.73	2.29	12.5	BH-2	3.01	1.87	BD-1	12.5	0.134	0.110	125	
실시예 1-6	BH1-8	3.11	2.07	BD-1	2.73	2.29	12.5	BH-2	3.01	1.87	BD-1	12.5	0.134	0.110	135	
실시예 1-7	BH1-9	3.10	2.07	BD-1	2.73	2.29	12.5	BH-2	3.01	1.87	BD-1	12.5	0.134	0.110	145	
실시예 1-8	BH1-10	3.10	2.07	BD-1	2.73	2.29	12.5	BH-2	3.01	1.87	BD-1	12.5	0.134	0.110	170	
실시예 1-9	BH1-11	3.10	2.07	BD-1	2.73	2.29	12.5	BH-2	3.01	1.87	BD-1	12.5	0.134	0.110	180	
실시예 1-10	BH1-12	3.10	2.06	BD-1	2.73	2.29	12.5	BH-2	3.01	1.87	BD-1	12.5	0.133	0.110	140	
실시예 1-11	BH1-13	3.10	2.06	BD-1	2.73	2.29	12.5	BH-2	3.01	1.87	BD-1	12.5	0.133	0.110	150	
실시예 1-12	BH1-14	3.10	2.06	BD-1	2.73	2.29	12.5	BH-2	3.01	1.87	BD-1	12.5	0.133	0.110	170	
비교예 1-1	BH1-Ref2	3.08	2.09	BD-1	2.73	2.29	12.5	BH-2	3.01	1.87	BD-1	12.5	0.133	0.114	100	

[3075]

[3076] [표 2]

	제1 발광층							제2 발광층					소자 평가			
	제1 화합물			제1 발광성 화합물			막 두께 [nm]	제2 화합물			제2 발광성 화합물		막 두께 [nm]	CIE x	CIE y	LT95 (상대값) [%]
	명칭	S ₁ [eV]	T ₁ [eV]	명칭	S ₁ [eV]	T ₁ [eV]		명칭	S ₁ [eV]	T ₁ [eV]	명칭					
실시예 2-1	BH1-2	3.08	2.08	BD-2	2.71	2.64	10	BH-2-4	3.01	1.87	BD-2	10	0.133	0.081	154	
실시예 2-2	BH1-6	3.11	2.07	BD-2	2.71	2.64	10	BH-2-4	3.01	1.87	BD-2	10	0.132	0.082	123	
실시예 2-3	BH1-9	3.10	2.07	BD-2	2.71	2.64	10	BH-2-4	3.01	1.87	BD-2	10	0.132	0.082	149	
실시예 2-4	BH1-12	3.10	2.06	BD-2	2.71	2.64	10	BH-2-4	3.01	1.87	BD-2	10	0.133	0.081	163	
비교예 2-1	BH1-Ref2	3.08	2.09	BD-2	2.71	2.64	10	BH-2-4	3.01	1.87	BD-2	10	0.133	0.085	100	

[3077]

[3078] [표 3]

	제1 발광층							제2 발광층					소자 평가		
	제1 화합물			제1 발광성 화합물			막 두께 [nm]	제2 화합물			제2 발광성 화합물	막 두께 [nm]	CIE x	CIE y	LT95 (상대값) [%]
	명칭	S ₁ [eV]	T ₁ [eV]	명칭	S ₁ [eV]	T ₁ [eV]		명칭	S ₁ [eV]	T ₁ [eV]	명칭				
실시예 3-1	BH1-2	3.08	2.08	BD-3	2.80	2.45	10	BH-2-4	3.01	1.87	BD-3	10	0.131	0.097	155
실시예 3-2	BH1-4	3.08	2.08	BD-3	2.80	2.45	10	BH-2-4	3.01	1.87	BD-3	10	0.131	0.097	172
실시예 3-3	BH1-5	3.08	2.08	BD-3	2.80	2.45	10	BH-2-4	3.01	1.87	BD-3	10	0.131	0.097	186
실시예 3-4	BH1-6	3.11	2.07	BD-3	2.80	2.45	10	BH-2-4	3.01	1.87	BD-3	10	0.131	0.101	114
실시예 3-5	BH1-9	3.10	2.07	BD-3	2.80	2.45	10	BH-2-4	3.01	1.87	BD-3	10	0.132	0.098	145
실시예 3-6	BH1-12	3.10	2.06	BD-3	2.80	2.45	10	BH-2-4	3.01	1.87	BD-3	10	0.131	0.100	166
비교예 3-1	BH1-Ref2	3.08	2.09	BD-3	2.80	2.45	10	BH-2-4	3.01	1.87	BD-3	10	0.131	0.102	100

[3079]

[3080] [표 4]

	제1 발광층							제2 발광층					소자 평가		
	제1 화합물			제1 발광성 화합물			막 두께 [nm]	제2 화합물			제2 발광성 화합물	막 두께 [nm]	CIE x	CIE y	LT95 (상대값) [%]
	명칭	S ₁ [eV]	T ₁ [eV]	명칭	S ₁ [eV]	T ₁ [eV]		명칭	S ₁ [eV]	T ₁ [eV]	명칭				
실시예 2-1 (재개)	BH1-2	3.08	2.08	BD-2	2.71	2.64	10	BH-2-4	3.01	1.87	BD-2	10	0.133	0.081	154
실시예 4-1	BH1-2	3.08	2.08	BD-2	2.71	2.64	10	BH-3	3.02	1.88	BD-2	10	0.133	0.083	133
실시예 4-2	BH1-2	3.08	2.08	BD-2	2.71	2.64	10	BH-4	3.01	1.87	BD-2	10	0.133	0.084	114
실시예 2-1 (재개)	BH1-Ref2	3.08	2.09	BD-2	2.71	2.64	10	BH-2-4	3.01	1.87	BD-2	10	0.133	0.085	100

[3081]

[3082] 일반식 (1A)로 표시되는 화합물, 및 일반식 (1A-A)로 표시되는 화합물을 이용한 실시예 1-1~실시예 1-12, 실시예 2-1~실시예 2-4, 및 실시예 3-1~실시예 3-6의 유기 EL 소자에 따르면, 비교예 1-1, 비교예 2-1, 및 비교예 3-1의 유기 EL 소자에 비해 장수명화하였다.

[3083] 또한, 일반식 (1A)로 표시되는 화합물, 및 일반식 (1A-A)로 표시되는 화합물을 이용한 실시예 4-1 및 실시예 4-2의 유기 EL 소자에 따르면, 실시예 2-1의 유기 EL 소자와 동등하게 장수명화하였다.

[3084] 일반식 (1A)로 표시되는 화합물, 및 일반식 (1A-A)로 표시되는 화합물을 이용한 실시예 1-1~실시예 1-12, 실시예 2-1~실시예 2-4, 및 실시예 3-1~실시예 3-6의 유기 EL 소자에 따르면, 일반식 (1A)로 표시되는 화합물의 경우는, 일반식 (1B-1)~일반식 (1B-3)으로 표시되는 기 중 어느 하나가 결합되어 있으므로, 일반식 (1A-A)로

표시되는 화합물의 경우는, 일반식 (1B-A1)~일반식 (1B-A3)으로 표되는 기 중 어느 하나가 결합되어 있음으로써, 동일한 도펀트를 이용하고 있는 경우에도 보다 깊은 청색 발광을 얻을 수 있다는 것을 확인할 수 있다. 즉, 제1 실시형태에 따른 화합물을 호스트 재료로서 이용하여, 도펀트(발광성 화합물)와 조합하여 발광층에 함유시킴으로써, 다른 호스트 재료와 해당 도펀트(발광성 화합물)를 함유시킨 발광층에 비해, 동일한 도펀트를 이용하고 있음에도 불구하고, 보다 깊은 청색 발광을 얻을 수 있다는 것을 확인할 수 있다. 이것은, 분자간 상호작용이 보다 작아지기 때문에, CIEy가 작아지고 있다고 생각된다.

[3085] <화합물의 평가>

[3086] (삼중항 에너지 T_1)

[3087] 측정 대상이 되는 화합물을 EPA(디에틸에테르:이소펜탄:에탄올=5:5:2(용적비)) 중에, 농도가 10 $\mu\text{mol/L}$ 가 되도록 용해하여 용액을 제작하고, 이 용액을 석영 셀 안에 넣어 측정 시료로 하였다. 이 측정 시료에 대해서, 저온(77[K])에서 인광 스펙트럼(종축: 인광 발광 강도, 횡축: 파장으로 함)을 측정하고, 이 인광 스펙트럼의 단파장측의 상승에 대하여 접선을 긋고, 그 접선과 횡축과의 교점의 파장값 $\lambda_{\text{edge}}[\text{nm}]$ 에 기초하여, 다음 환산식 (F1)로부터 산출되는 에너지량을 삼중항 에너지 T_1 로 하였다. 결과는 표 1 및 표 2에 나타내는 바와 같다.

[3088] 또한, 삼중항 에너지 T_1 은, 측정 조건에 따라서는 상하 0.02 eV 정도의 오차가 생길 수 있다.

[3089] 환산식 (F1): $T_1[\text{eV}]=1239.85/\lambda_{\text{edge}}$

[3090] 인광 스펙트럼의 단파장측의 상승에 대한 접선은 이하와 같이 긋는다. 인광 스펙트럼의 단파장측으로부터, 스펙트럼의 극대값 중, 가장 단파장측의 극대값까지 스펙트럼 곡선 상을 이동할 때에, 장파장측을 향해 곡선 상의 각 점에 있어서의 접선을 생각한다. 이 접선은, 곡선이 상승함에 따라(즉 종축이 증가함에 따라), 기울기가 증가한다. 이 기울기의 값이 극대값을 취하는 점에 있어서 그 접선(즉 변곡점에서의 접선)은, 상기 인광 스펙트럼의 단파장측의 상승에 대한 접선으로 한다.

[3091] 또한, 스펙트럼의 최대 피크 강도의 15% 이하의 피크 강도를 갖는 극대점은, 진술한 가장 단파장측의 극대값에는 포함시키지 않고, 가장 단파장측의 극대값에 가장 가까운, 기울기의 값이 극대값을 취하는 점에 있어서 그 접선을 상기 인광 스펙트럼의 단파장측의 상승에 대한 접선으로 한다.

[3092] 인광의 측정에는, (주)히타치하이테크놀로지 제조의 F-4500형 분광 형광 광도계 본체를 이용하였다.

[3093] (일중항 에너지 S_1)

[3094] 측정 대상이 되는 화합물의 10 $\mu\text{mol/L}$ 톨루엔 용액을 조제하여 석영 셀에 넣고, 상온(300 K)에서 이 시료의 흡수 스펙트럼(종축: 흡수 강도, 횡축: 파장으로 함)을 측정하였다. 이 흡수 스펙트럼의 장파장측의 하강에 대하여 접선을 긋고, 그 접선과 횡축과의 교점의 파장값 $\lambda_{\text{edge}}[\text{nm}]$ 를 다음에 나타내는 환산식 (F2)에 대입하여 일중항 에너지 S_1 을 산출하였다. 결과는 표 1 및 표 2에 나타내는 바와 같다.

[3095] 환산식 (F2): $S_1[\text{eV}]=1239.85/\lambda_{\text{edge}}$

[3096] 흡수 스펙트럼 측정 장치로서는, 히타치사 제조의 분광 광도계(장치명: U3310)를 이용하였다.

[3097] 흡수 스펙트럼의 장파장측의 하강에 대한 접선은 이하와 같이 긋는다. 흡수 스펙트럼의 극대값 중, 가장 장파장측의 극대값으로부터 장파장 방향으로 스펙트럼 곡선 상을 이동할 때에, 곡선 상의 각 점에 있어서의 접선을 생각한다. 이 접선은, 곡선이 하강함에 따라(즉 종축의 값이 감소함에 따라), 기울기가 감소하고 그 후 증가하는 것을 반복한다. 기울기의 값이 가장 장파장측(단, 흡광도가 0.1 이하가 되는 경우는 제외함)에서 극소값을 취하는 점에 있어서 그 접선을 상기 흡수 스펙트럼의 장파장측의 하강에 대한 접선으로 한다.

[3098] 또한, 흡광도의 값이 0.2 이하인 극대점은, 상기 가장 장파장측의 극대값에는 포함시키지 않는다.

[3099] (화합물의 최대 피크 파장)

[3100] 화합물의 최대 피크 파장 λ 는, 이하의 방법에 의해 측정하였다.

[3101] 측정 대상이 되는 화합물의 5 $\mu\text{mol/L}$ 톨루엔 용액을 조제하여 석영 셀에 넣고, 상온(300 K)에서 이 시료의 발광 스펙트럼(종축: 발광 강도, 횡축: 파장으로 함)을 측정하였다. 본 실시예에서는, 발광 스펙트럼을 가부시키

가이샤 히타치하이테크사이언스 제조의 분광 형광 광도계(장치명: F-7000)로 측정하였다. 또한, 발광 스펙트럼 측정 장치는, 여기서 이용한 장치에 한정되지 않는다. 발광 스펙트럼에 있어서, 발광 강도가 최대가 되는 발광 스펙트럼의 피크 파장을 최대 피크 파장 λ 로 하였다.

[3102] 화합물 BD-1의 최대 피크 파장 λ 는 452 nm였다.

[3103] 화합물 BD-2의 최대 피크 파장 λ 는 455 nm였다.

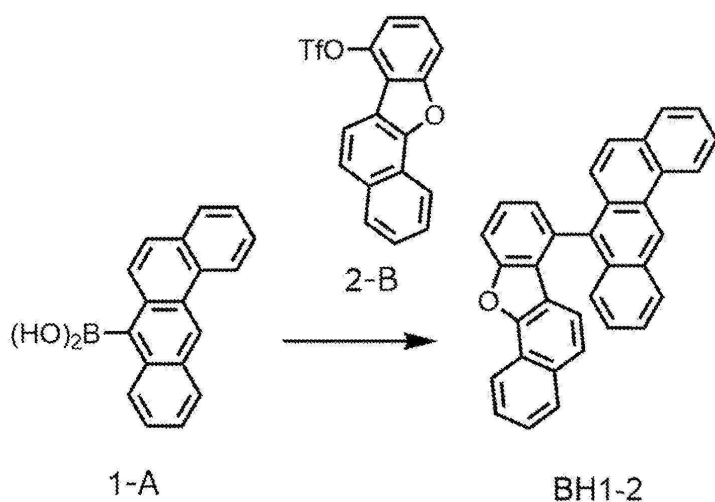
[3104] 화합물 BD-3의 최대 피크 파장 λ 는 457 nm였다.

[3105] <화합물의 합성>

[3106] [합성예 1: 화합물 BH1-2의 합성]

[3107] 하기 합성 경로로 화합물 BH1-2를 합성하였다.

[3108] [화학식 315]



[3109]

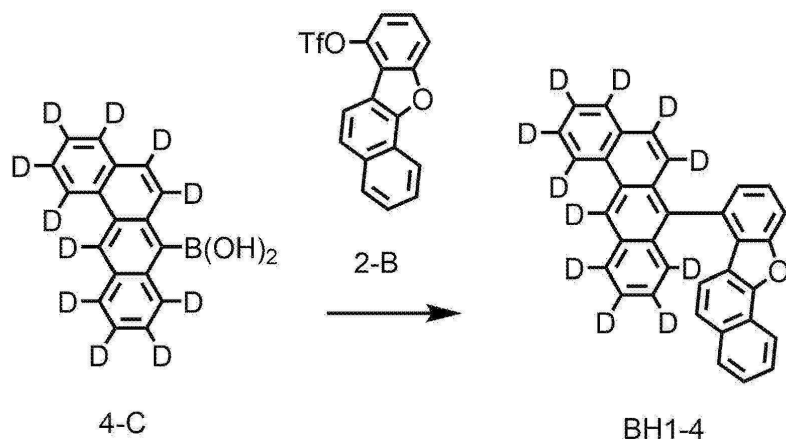
[3110] 아르곤 분위기 하에, 중간체 1-A: 17.6 g(64.5 mmol), 중간체 2-B: 23.6 g(64.5 mmol), 디클로로비스암포스팔라딘(2): 0.91 g(1.29 mmol), 2M 탄산나트륨 수용액: 90.0 ml(180.0 mmol), 및 1,2-디메톡시에탄: 450 ml를 플라스크에 주입하여, 100℃에서 8시간 가열 환류 교반하였다. 교반 후에 실온(25℃)까지 냉각시킨 후, 용매를 증류 제거하고, 얻어진 고체를 실리카 겔 칼럼 크로마토그래피로 정제하여, 담황색 고체 24.1 g(수율 84%)을 얻었다.

[3111] LC-MS 분석(액체 크로마토그래피 질량 분석)에 의해, 해당 담황색 고체를 화합물 BH1-2로 동정하였다.

[3112] [합성예 2: 화합물 BH1-4의 합성]

[3113] 하기 합성 경로로 화합물 BH1-4를 합성하였다.

[3114] [화학식 316]



[3115]

[3116] (화합물 BH1-4의 합성)

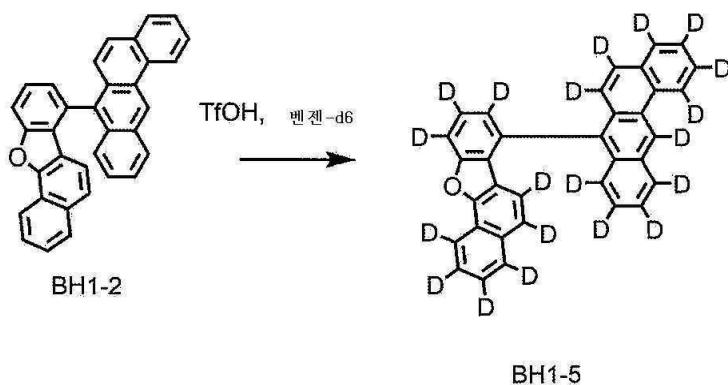
[3117] 아르곤 분위기 하에, 중간체 4-C: 1.41 g(5.0 mmol), 중간체 2-B: 1.83 g(20.0 mmol), 디클로로비스암포스팔라듬(2): 0.07 g(0.1 mmol), 2M 탄산나트륨 수용액: 7.5 ml(15.0 mmol), 및 1,2-디메톡시에탄: 20 ml를 플라스크에 주입하여, 100℃에서 8시간 가열 교반하였다. 교반 후에 실온(25℃)까지 냉각시킨 후, 용매를 증류 제거하고, 얻어진 고체를 실리카 겔 칼럼 크로마토그래피로 정제하여, 담황색 고체 1.8 g(수율 77%)을 얻었다.

[3118] LC-MS 분석(액체 크로마토그래피 질량 분석)에 의해, 해당 담황색 고체를 화합물 BH1-4로 동정하였다.

[3119] [합성예 3: 화합물 BH1-5의 합성]

[3120] 하기 합성 경로로 화합물 BH1-5를 합성하였다.

[3121] [화학식 317]



[3122]

[3123] (화합물 BH1-5의 합성)

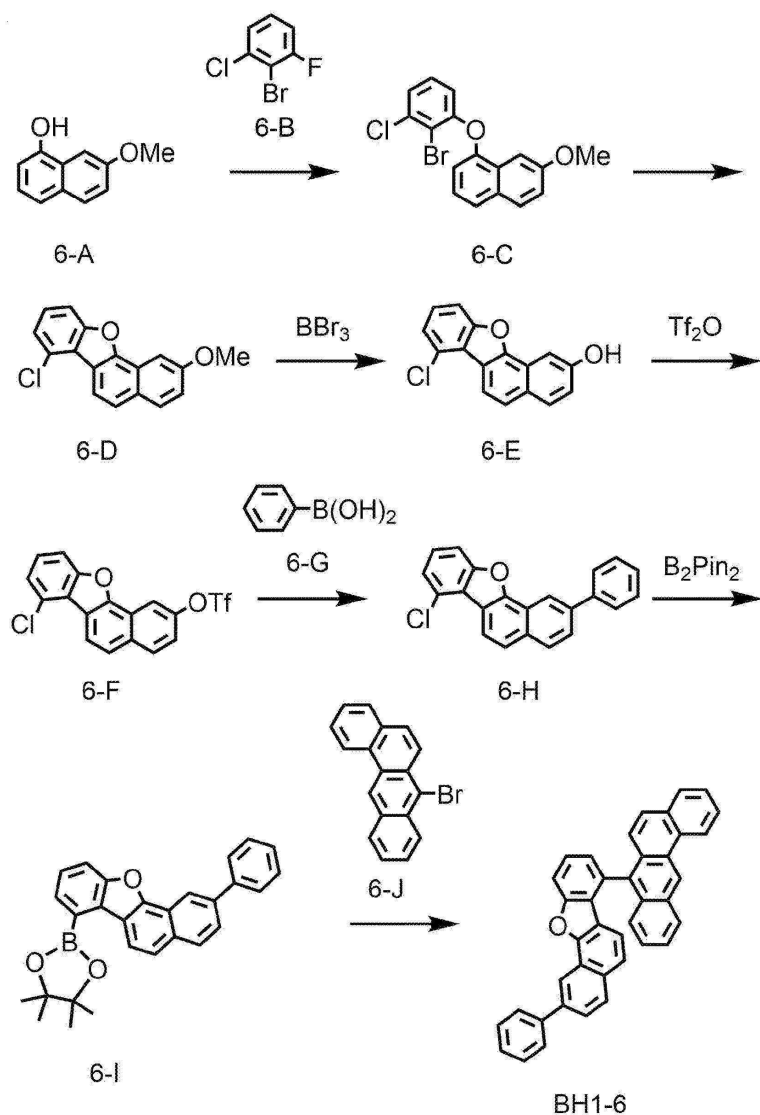
[3124] 아르곤 분위기 하에, 화합물 BH1-2: 5.0 g(11.3 mmol) 및 오르토-디클로로벤젠: 100 ml를 플라스크에 주입하여, 실온에서 교반하면서 완전 용해시킨 후, 벤젠-d6: 50 ml를 첨가하여, 10℃에서 5분 교반하였다. 그 후, 트리플루오로메탄술포산: 1.99 ml(22.5 mmol)를 첨가하여, 10℃에서 2시간 교반하였다. 그 후, 중수 200 ml를 첨가하여, 15분 더 교반하였다. 교반 후, 수층을 제거하고 남은 유기층을 농축하고, 얻어진 고체를 실리카 겔 칼럼 크로마토그래피로 정제하여, 담황색 고체 3.0 g(수율 58%)을 얻었다.

[3125] LC-MS 분석(액체 크로마토그래피 질량 분석)에 의해, 해당 담황색 고체를 화합물 BH1-5로 동정하였다.

[3126] [합성예 4: 화합물 BH1-6의 합성]

[3127] 하기 합성 경로로 화합물 BH1-6을 합성하였다.

[3128] [화학식 318]



[3129]

[3130] (중간체 6-C의 합성)

[3131] 아르곤 분위기 하에, 중간체 6-A: 25.0 g(144.0 mmol), 중간체 6-B: 31.5 g(158.0 mmol), 탄산세슘: 70.1 g(215.0 mmol), N,N-디메틸포름아미드: 300 ml를 플라스크에 주입하여, 130℃에서 10시간 가열 교반하였다. 실온(25℃)까지 냉각시킨 후, 반응 용액을 농축하고, 얻어진 잔사를 실리카 겔 칼럼 크로마토그래피로 정제하여, 백색 고체 34.0 g(수율 65%)을 얻었다.

[3132] LC-MS 분석(액체 크로마토그래피 질량 분석)에 의해, 상기 백색 고체를 중간체 6-C로 동정하였다.

[3134] (중간체 6-D의 합성)

[3135] 아르곤 분위기 하에, 중간체 6-C: 34.0 g(94.0 mmol), [1,1'-비스(디페닐포스피노)페로센]디클로로팔라듐(II): 2.1 g(2.8 mmol), 탄산칼륨: 25.8 g(187.0 mmol), N,N-디메틸포름아미드: 940 ml를 플라스크에 주입하여, 130℃에서 10시간 가열 교반하였다. 실온(25℃)까지 냉각시킨 후, 반응 용액을 농축하고, 얻어진 잔사를 실리카 겔 칼럼 크로마토그래피로 정제하여, 백색 고체 15.6 g(수율 59%)을 얻었다.

[3136] LC-MS 분석(액체 크로마토그래피 질량 분석)에 의해, 상기 백색 고체를 중간체 6-D로 동정하였다.

[3137] (중간체 6-E의 합성)

[3138] 아르곤 분위기 하에, 중간체 6-D: 15.6 g(55.2 mmol), 디클로로메탄: 150 ml를 플라스크에 주입하여, 용액을 0

℃까지 냉각시킨 후에, 삼브롬화붕소 1M 디클로로메탄 용액: 71.7 ml(71.7 mmol)를 계 내에 적하하고, 그대로 1시간 교반하였다. 실온(25℃)으로 되돌리면서, 6시간 더 교반한 후, 반응 용액에 빙수를 첨가하였다. 잘 교반한 후, 수층을 제거하고, 남은 유기층을 농축하며, 얻어진 잔사를 실리카 겔 칼럼 크로마토그래피로 정제하여, 백색 고체 11.6 g(수율 78%)을 얻었다.

[3139] LC-MS 분석(액체 크로마토그래피 질량 분석)에 의해, 상기 백색 고체를 중간체 6-E로 동정하였다.

[3140] (중간체 6-F의 합성)

[3141] 아르곤 분위기 하에, 중간체 6-E: 11.6 g(43.2 mmol), 디클로로메탄: 215 ml를 플라스크에 주입하여, 용액을 0℃까지 냉각시킨 후에, 피리딘: 4.4 ml(56.1 mmol)를 계 내에 적하하고, 그 후 트리플루오로메탄술폰산 무수물: 9.2 ml(56.1 mmol)를 계 내에 적하하여, 그대로 1시간 교반하였다. 실온(25℃)으로 되돌리면서 6시간 더 교반한 후, 반응 용액에 빙수를 첨가하였다. 잘 교반한 후, 수층을 제거하고, 남은 유기층을 농축하며, 얻어진 잔사를 실리카 겔 칼럼 크로마토그래피로 정제하여, 백색 고체 12.5 g(수율 72%)을 얻었다.

[3142] LC-MS 분석(액체 크로마토그래피 질량 분석)에 의해, 상기 백색 고체를 중간체 6-F로 동정하였다.

[3143] (중간체 6-H의 합성)

[3144] 화합물 BH1-2의 합성에 있어서, 중간체 1-A 및 중간체 2-B 대신에 중간체 6-F 및 중간체 6-G를 이용한 것 이외에는, 화합물 BH1-2의 합성 방법과 동일한 방법으로 합성하여, 백색 고체 6.5 g(수율 63%)을 얻었다.

[3145] LC-MS 분석(액체 크로마토그래피 질량 분석)에 의해, 상기 백색 고체를 중간체 6-H로 동정하였다.

[3146] (화합물 6-I의 합성)

[3147] 아르곤 분위기 하에, 중간체 6-H: 6.5 g(19.8 mmol), 비스(피나콜라토)디보론 10.0 g(39.5 mmol), 아세트산팔라듐(II): 0.09 g(0.4 mmol), XPhos: 0.75 g(1.6 mmol), 아세트산칼륨 5.82 g(59.3 mmol), 및 1,4-디옥산 100 mL를 플라스크에 넣어, 7시간 100℃에서 교반하였다. 교반 후, 실온까지 냉각시켰다. 냉각 후, 유기층을 포화 식염수로 세정한 다음, 황산나트륨을 첨가하여 건조시켰다. 건조 후, 여과하고, 감압 하에 농축하였다. 조체(粗體)를 실리카 겔 크로마토그래피로 정제하여, 백색 고체 2.8 g(수율 49%)을 얻었다.

[3148] LC-MS 분석(액체 크로마토그래피 질량 분석)에 의해, 상기 백색 고체를 중간체 6-I로 동정하였다.

[3149] (화합물 BH1-6의 합성)

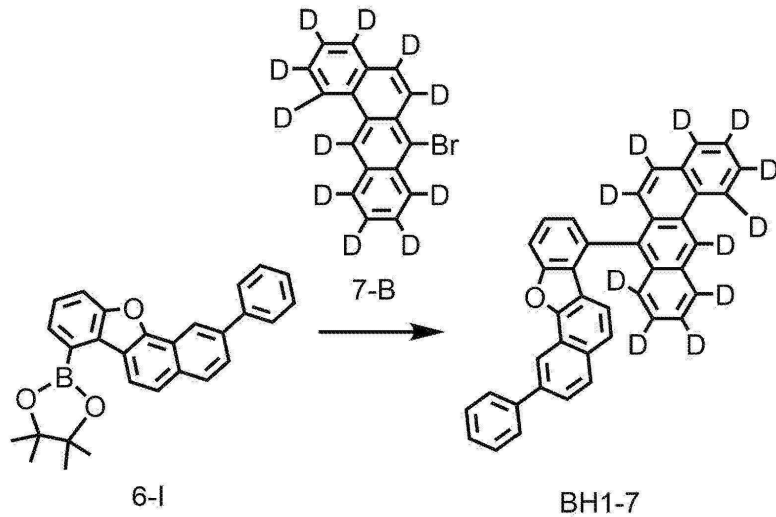
[3150] 화합물 BH1-2의 합성에 있어서, 중간체 1-A 및 중간체 2-B 대신에 중간체 6-I 및 중간체 6-J를 이용한 것 이외에는, 화합물 BH1-2의 합성 방법과 동일한 방법으로 합성하여, 담황색 고체 1.3 g(수율 53%)을 얻었다.

[3151] LC-MS 분석(액체 크로마토그래피 질량 분석)에 의해, 해당 담황색 고체를 화합물 BH1-6으로 동정하였다.

[3152] [합성에 5: 화합물 BH1-7의 합성]

[3153] 하기 합성 경로로 화합물 BH1-7을 합성하였다.

[3154] [화학식 319]



[3155]

[3156] (화합물 BH1-7의 합성)

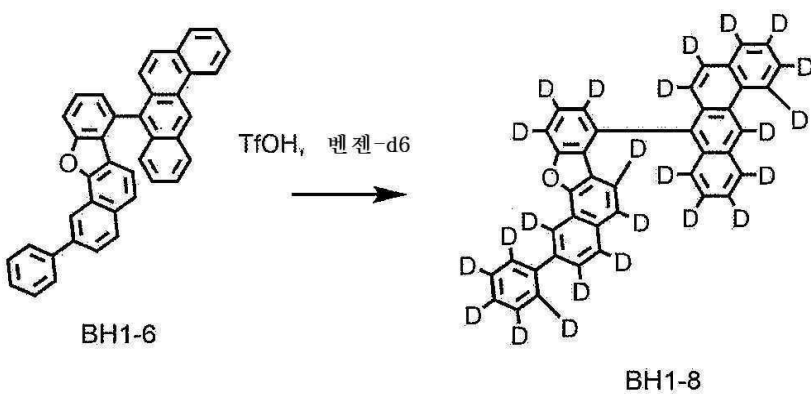
[3157] 화합물 BH1-2의 합성에 있어서, 중간체 1-A 및 중간체 2-B 대신에 중간체 6-I 및 중간체 7-B를 이용한 것 이외에는, 화합물 BH1-2의 합성 방법과 동일한 방법으로 합성하여, 담황색 고체 0.8 g(수율 63%)을 얻었다.

[3158] LC-MS 분석(액체 크로마토그래피 질량 분석)에 의해, 해당 담황색 고체를 화합물 BH1-7로 동정하였다.

[3159] [합성예 6: 화합물 BH1-8의 합성]

[3160] 하기 합성 경로로 화합물 BH1-8을 합성하였다.

[3161] [화학식 320]



[3162]

[3163] (화합물 BH1-8의 합성)

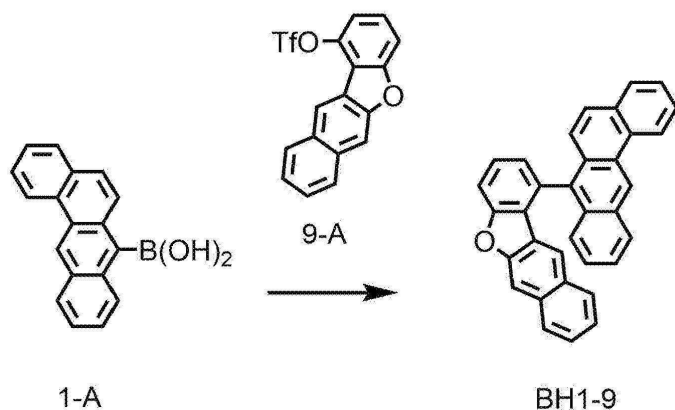
[3164] 화합물 BH1-5의 합성에 있어서, 화합물 BH1-2 대신에 화합물 BH1-6을 이용한 것 이외에는, 화합물 BH1-5의 합성 방법과 동일한 방법으로 합성하여, 담황색 고체 0.4 g(수율 36%)을 얻었다.

[3165] LC-MS 분석(액체 크로마토그래피 질량 분석)에 의해, 해당 담황색 고체를 화합물 BH1-8로 동정하였다.

[3166] [합성예 7: 화합물 BH1-9의 합성]

[3167] 하기 합성 경로로 화합물 BH1-9를 합성하였다.

[3168] [화학식 321]



[3169]

[3170] (화합물 BH1-9의 합성)

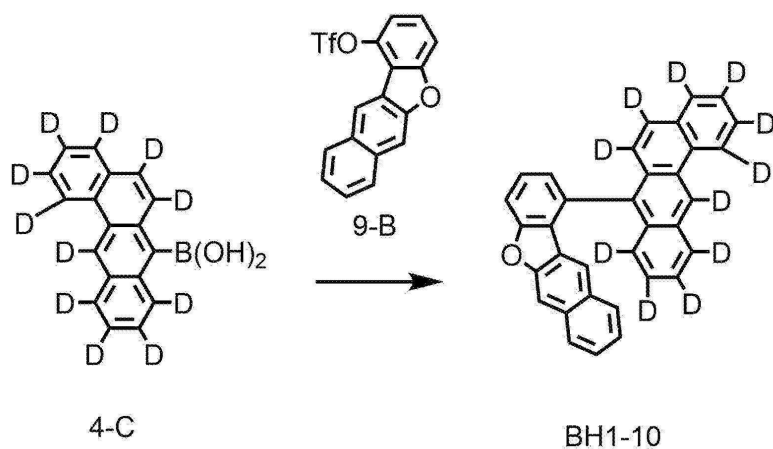
[3171] 화합물 BH1-2의 합성에 있어서, 중간체 2-B 대신에 중간체 9-A를 이용한 것 이외에는, 화합물 BH1-2의 합성 방법과 동일한 방법으로 합성하여, 담황색 고체 3.6 g(수율 71%)을 얻었다.

[3172] LC-MS 분석(액체 크로마토그래피 질량 분석)에 의해, 해당 담황색 고체를 화합물 BH1-9로 동정하였다.

[3173] [합성예 8: 화합물 BH1-10의 합성]

[3174] 하기 합성 경로로 화합물 BH1-10을 합성하였다.

[3175] [화학식 322]



[3176]

[3177] (화합물 BH1-10의 합성)

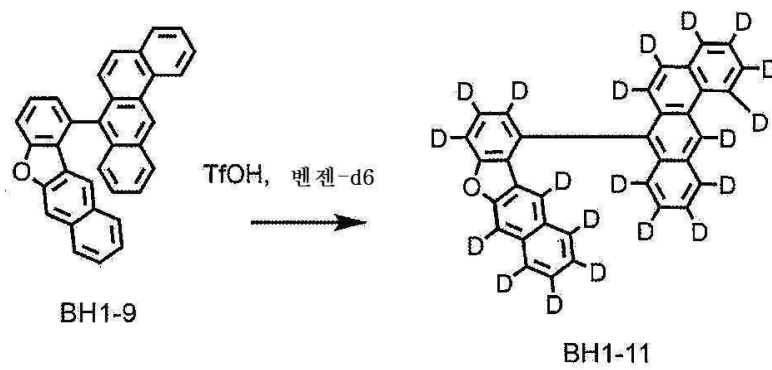
[3178] 화합물 BH1-2의 합성에 있어서, 중간체 1-A 및 중간체 2-B 대신에 중간체 4-C 및 중간체 9-B를 이용한 것 이외에는, 화합물 BH1-2의 합성 방법과 동일한 방법으로 합성하여, 담황색 고체 1.1 g(수율 69%)을 얻었다.

[3179] LC-MS 분석에 의해, 해당 담황색 고체를 화합물 BH1-10으로 동정하였다.

[3180] [합성예 9: 화합물 BH1-11의 합성]

[3181] 하기 합성 경로로 화합물 BH1-11을 합성하였다.

[3182] [화학식 323]



[3183]

[3184] (화합물 BH1-11의 합성)

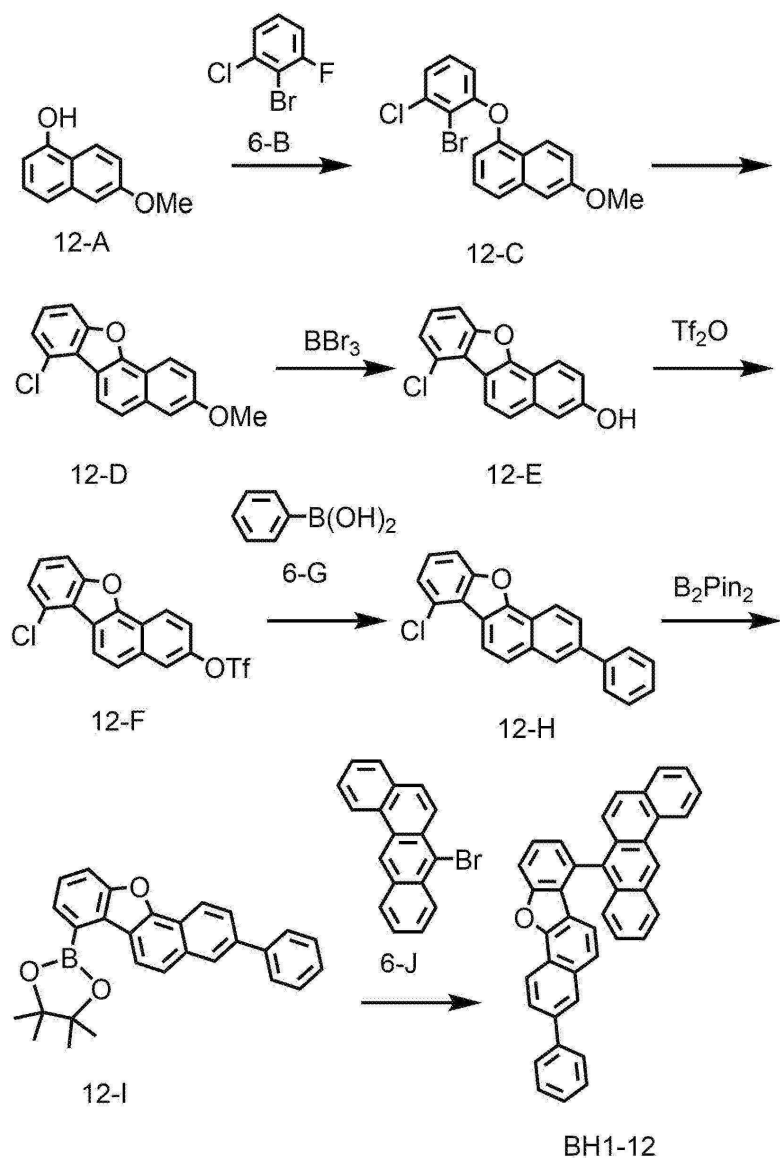
[3185] 화합물 BH1-5의 합성에 있어서, 화합물 BH1-2 대신에 화합물 BH1-9를 이용한 것 이외에는, 화합물 BH1-5의 합성 방법과 동일한 방법으로 합성하여, 담황색 고체 0.7 g (수율 41%)을 얻었다.

[3186] LC-MS 분석(액체 크로마토그래피 질량 분석)에 의해, 해당 담황색 고체를 화합물 BH1-11로 동정하였다.

[3187] [합성예 10: 화합물 BH1-12의 합성]

[3188] 하기 합성 경로로 화합물 BH1-12를 합성하였다.

[3189] [화학식 324]



[3190]

[3191] (화합물 BH1-12의 합성)

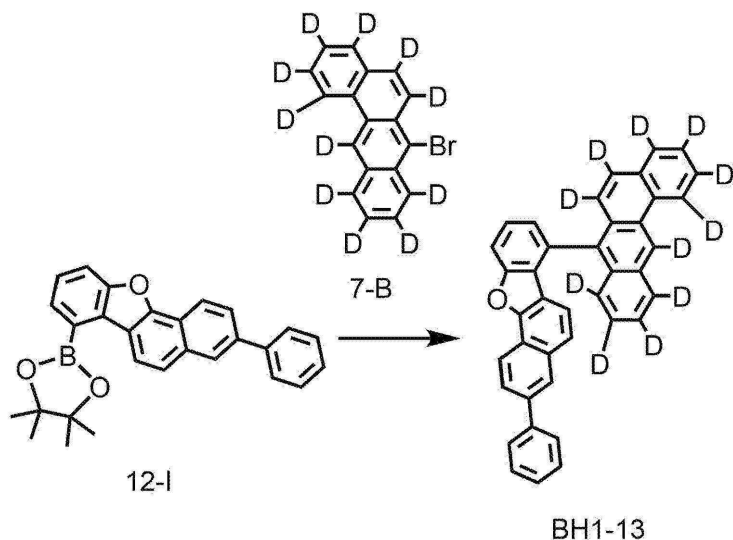
[3192] 중간체 6-A를 출발 원료로 한 일련의 화합물 BH1-6의 합성에 있어서, 중간체 6-A 대신에 중간체 12-A를 이용한 것 이외에는, 화합물 BH1-6의 합성 방법과 동일한 방법으로 합성하여, 담황색 고체 2.4 g(충수율(7 step) 9%)을 얻었다.

[3193] LC-MS 분석(액체 크로마토그래피 질량 분석)에 의해, 해당 담황색 고체를 화합물 BH1-12로 동정하였다.

[3194] [합성예 11: 화합물 BH1-13의 합성]

[3195] 하기 합성 경로로 화합물 BH1-13을 합성하였다.

[3196] [화학식 325]



[3197]

[3198] (화합물 BH1-13의 합성)

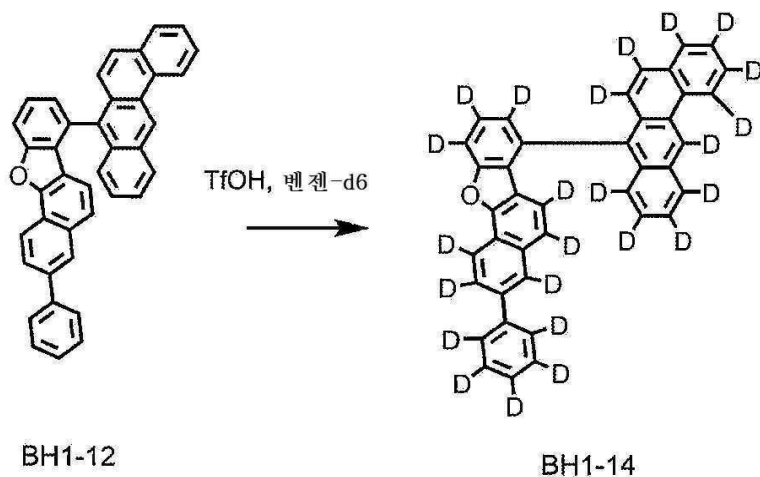
[3199] 화합물 BH1-2의 합성에 있어서, 중간체 1-A 및 중간체 2-B 대신에 중간체 12-I 및 중간체 7-B를 이용한 것 이외에는, 화합물 BH1-2의 합성 방법과 동일한 방법으로 합성하여, 담황색 고체 1.7 g(수율 58%)을 얻었다.

[3200] LC-MS 분석(액체 크로마토그래피 질량 분석)에 의해, 해당 담황색 고체를 화합물 BH1-13으로 동정하였다.

[3201] [합성에 12: 화합물 BH1-14의 합성]

[3202] 하기 합성 경로로 화합물 BH1-14를 합성하였다.

[3203] [화학식 326]



[3204]

[3205] (화합물 BH1-14의 합성)

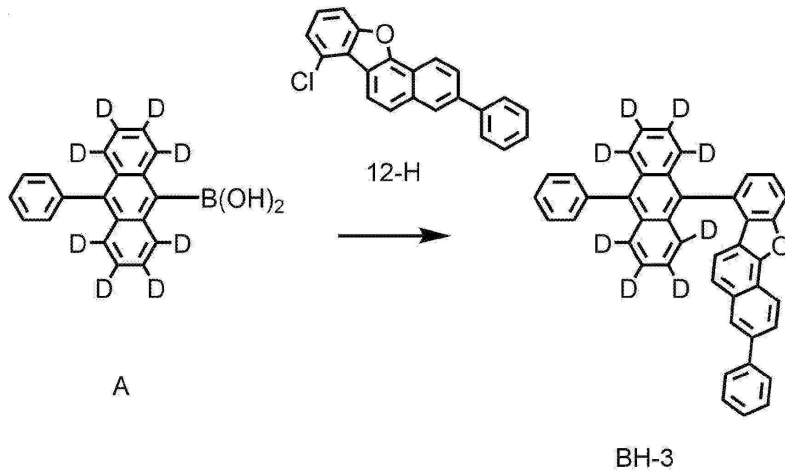
[3206] 화합물 BH1-5의 합성에 있어서, 화합물 BH1-2 대신에 화합물 BH1-12를 이용한 것 이외에는, 화합물 BH1-5의 합성 방법과 동일한 방법으로 합성하여, 담황색 고체 0.7 g(수율 44%)을 얻었다.

[3207] LC-MS 분석(액체 크로마토그래피 질량 분석)에 의해, 해당 담황색 고체를 화합물 BH1-14로 동정하였다.

[3208] [합성에 13: 화합물 BH-3의 합성]

[3209] 하기 합성 경로로 화합물 BH-3을 합성하였다.

[3210] [화학식 327]



[3211]

[3212] (화합물 BH-3의 합성)

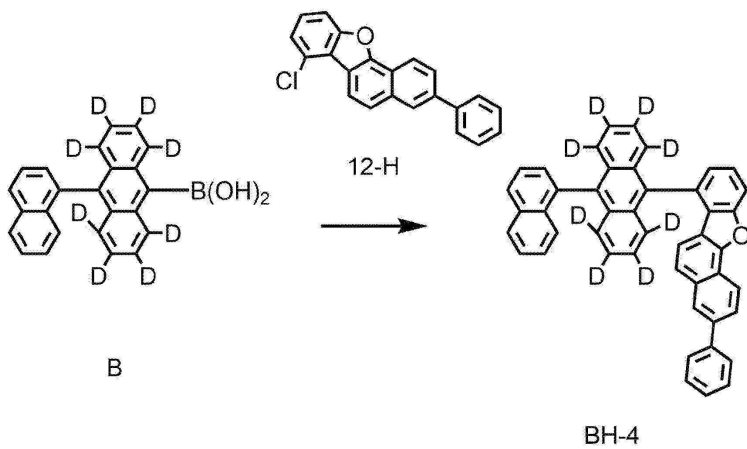
[3213] 화합물 BH1-2의 합성에 있어서, 중간체 1-A 및 중간체 2-B 대신에 중간체 A 및 중간체 12-H를 이용한 것 이외에는, 화합물 BH1-2의 합성 방법과 동일한 방법으로 합성하여, 담황색 고체 2.8 g(수율 41%)을 얻었다.

[3214] LC-MS 분석(액체 크로마토그래피 질량 분석)에 의해, 해당 담황색 고체를 화합물 BH-3으로 동정하였다.

[3215] [합성에 14: 화합물 BH-4의 합성]

[3216] 하기 합성 경로로 화합물 BH-4를 합성하였다.

[3217] [화학식 328]



[3218]

[3219] (화합물 BH-4의 합성)

[3220] 화합물 BH1-2의 합성에 있어서, 중간체 1-A 및 중간체 2-B 대신에 중간체 B 및 중간체 12-H를 이용한 것 이외에는, 화합물 BH1-2의 합성 방법과 동일한 방법으로 합성하여, 담황색 고체 1.3 g(수율 43%)을 얻었다.

[3221] LC-MS 분석(액체 크로마토그래피 질량 분석)에 의해, 해당 담황색 고체를 화합물 BH-4로 동정하였다.

부호의 설명

[3222] 1A, 1B : 유기 EL 소자

2 : 기판

3 : 양극

4 : 음극

5A, 5B : 발광 영역

5 : 발광층

51 : 제1 발광층

52 : 제2 발광층

6 : 정공 수송 대역

61 : 정공 주입층

62 : 정공 수송층

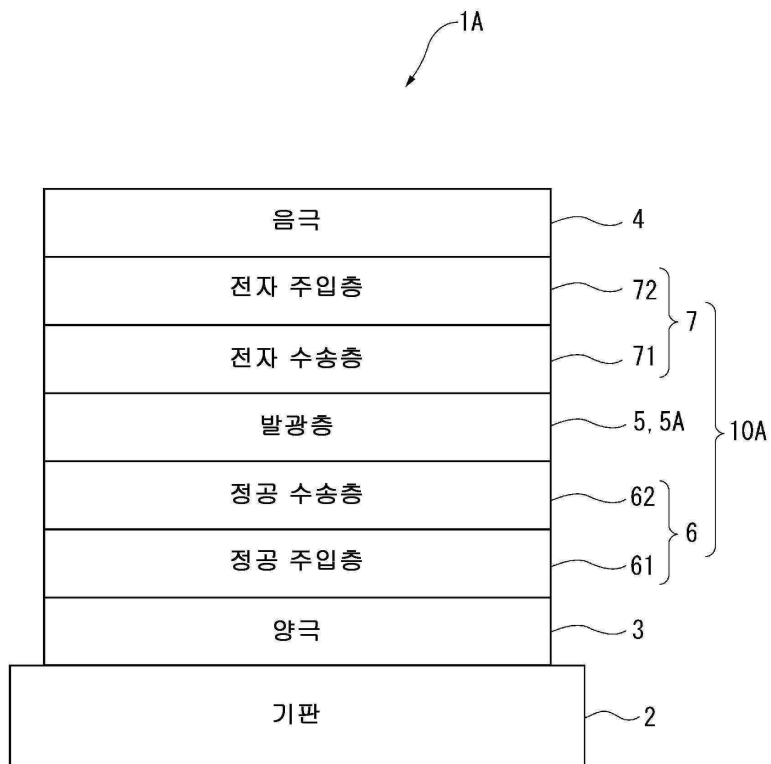
7 : 전자 수송 대역

71 : 전자 수송층

72 : 전자 주입층

도면

도면1



도면2

