

(19)日本国特許庁(JP)

(12)特許公報(B2)

(11)特許番号
特許第7170425号
(P7170425)

(45)発行日 令和4年11月14日(2022.11.14)

(24)登録日 令和4年11月4日(2022.11.4)

(51)国際特許分類

F I

H 0 1 L 51/50 (2006.01)

H 0 5 B 33/22

B

H 0 5 B 33/12 (2006.01)

H 0 5 B 33/12

C

C 0 7 D 221/18 (2006.01)

H 0 5 B 33/14

A

C 0 7 D 401/04 (2006.01)

C 0 7 D 221/18

C S P

C 0 7 D 401/10 (2006.01)

C 0 7 D 401/04

請求項の数 18 (全113頁) 最終頁に続く

(21)出願番号 特願2018-97981(P2018-97981)
 (22)出願日 平成30年5月22日(2018.5.22)
 (65)公開番号 特開2018-197230(P2018-197230
 A)
 (43)公開日 平成30年12月13日(2018.12.13)
 審査請求日 令和3年5月13日(2021.5.13)
 (31)優先権主張番号 10-2017-0063520
 (32)優先日 平成29年5月23日(2017.5.23)
 (33)優先権主張国・地域又は機関
 韓国(KR)

(73)特許権者 512187343
 三星ディスプレイ株式会社
 Samsung Display Co.
 , Ltd.
 大韓民国京畿道龍仁市器興区三星路1
 1, Samsung-ro, Gihe
 ung-gu, Yongin-si,
 Gyeonggi-do, Repub
 lic of Korea
 (74)代理人 110002619弁理士法人PORT
 (72)発明者 朴 俊河
 大韓民国 京畿道 龍仁市 器興区 三星路
 1 三星ディスプレイ株式会社内
 (72)発明者 沈 文基
 大韓民国 京畿道 龍仁市 器興区 三星路
 最終頁に続く

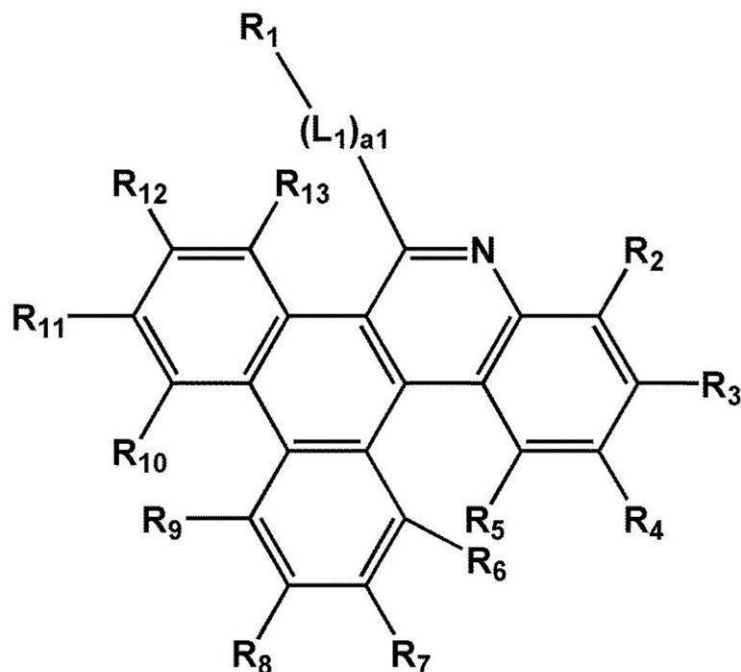
(54)【発明の名称】 有機発光素子

(57)【特許請求の範囲】

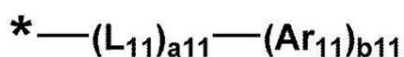
【請求項1】

第1電極と、前記第1電極に対向した第2電極と、前記第1電極と前記第2電極との間に介在されて発光層を含む有機層と、を含み、前記有機層は、前記第1電極と前記発光層との間に介在された正孔輸送領域、及び前記発光層と第2電極との間に介在された電子輸送領域を含み、前記電子輸送領域は、下記化学式1、2で表示された縮合環化合物を1種以上含む、有機
発光素子。

【化 1】



【化 2】



〔前記化学式 1 及び 2 で、

L_1 及び L_{11} は、互いに独立して、置換もしくは非置換の C_3-C_{60} 炭素環式基、または置換もしくは非置換の C_1-C_{60} ヘテロ環式基であり、

a_1 及び a_{11} は、互いに独立して、0 ないし 3 のうちから選択された整数であり、

Ar_{11} は、置換もしくは非置換の C_3-C_{10} シクロアルキル基、置換もしくは非置換の C_1-C_{10} ヘテロシクロアルキル基、置換もしくは非置換の C_3-C_{10} シクロアルケニル基、置換もしくは非置換の C_1-C_{10} ヘテロシクロアルケニル基、置換もしくは非置換の C_6-C_{60} アリール基、置換もしくは非置換の C_6-C_{60} アリールオキシ基、置換もしくは非置換の C_6-C_{60} アリールチオ基、置換もしくは非置換の C_1-C_{60} ヘテロアリール基、置換もしくは非置換の一価非芳香族縮合多環基、置換もしくは非置換の一価非芳香族ヘテロ縮合多環基、 $-Si(Q_1)(Q_2)(Q_3)$ 、 $-N(Q_1)(Q_2)$ 、 $-B(Q_1)(Q_2)$ 、 $-C(=O)(Q_1)$ 、 $-S(=O)_2(Q_1)$ 、及び $-P(=O)(Q_1)(Q_2)$ のうちから選択され、

b_{11} は、1 ないし 4 のうちから選択された整数であり、

R_1 は、少なくとも一つの $-F$ によって置換された、 C_6-C_{60} アリール基、 C_1-C_{60} ヘテロアリール基、一価非芳香族縮合多環基及び一価非芳香族ヘテロ縮合多環基のうちから選択され、

R_2 ないし R_{13} は、互いに独立して、前記化学式 2 で表示される基、水素、重水素、 $-F$ 、 $-Cl$ 、 $-Br$ 、 $-I$ 、ヒドロキシル基、シアノ基、ニトロ基、アミノ基、アミジノ基、ヒドラジン基、ヒドラゾン基、カルボン酸基またはその塩、スルホン酸基またはその塩、リン酸基またはその塩、置換もしくは非置換の C_1-C_{60} アルキル基、置換もしくは非置換の C_2-C_{60} アルケニル基、置換もしくは非置換の C_2-C_{60} アルキニル基、置換もしくは非置換の C_1-C_{60} アルコキシ基、置換もしくは非置換の C_3-C_{10} シクロアルキル基、置換もしくは非置換の C_2-C_{10} ヘテロシクロアルキル基、置換もしくは非置換の C_3-C_{10} シクロアルケニル基、置換もしくは非置換の C_2-C_{10} ヘテロシクロアルケニル基、置換もしくは非置換の C_6-C_{60} アリール基、置換もしくは非置換の C_6-C_{60} アリール

オキシ基、置換もしくは非置換の C_6-C_{60} アリールチオ基、置換もしくは非置換の C_2-C_{60} ヘテロアリール基、置換もしくは非置換の一価非芳香族縮合多環基、置換もしくは非置換の一価非芳香族ヘテロ縮合多環基、 $-Si(Q_1)(Q_2)(Q_3)$ 、 $-N(Q_1)(Q_2)$ 、 $-B(Q_1)(Q_2)$ 、 $-S(=O)_2(Q_1)$ 、及び $-P(=O)(Q_1)(Q_2)$ のうちから選択され、

ただし、前記 R_2 ないし R_{13} において少なくとも一つは、前記化学式2で表示される基であり、

前記置換された C_3-C_{60} 炭素環式基、置換された C_1-C_{60} ヘテロ環式基、置換された C_1-C_{60} アルキル基、置換された C_2-C_{60} アルケニル基、置換された C_2-C_{60} アルキニル基、置換された C_1-C_{60} アルコキシ基、置換された C_3-C_{10} シクロアルキル基、置換された C_2-C_{10} ヘテロシクロアルキル基、置換された C_3-C_{10} シクロアルケニル基、置換された C_2-C_{10} ヘテロシクロアルケニル基、置換された C_6-C_{60} アリール基、置換された C_6-C_{60} アリールオキシ基、置換された C_6-C_{60} アリールチオ基、置換された C_2-C_{60} ヘテロアリール基、置換された一価非芳香族縮合多環基、及び置換された一価非芳香族ヘテロ縮合多環基の置換基のうち少なくとも一つは、

重水素、 $-F$ 、 $-Cl$ 、 $-Br$ 、 $-I$ 、ヒドロキシル基、シアノ基、ニトロ基、アミノ基、ヒドラジノ基、ヒドラゾノ基、 C_1-C_{60} アルキル基、 C_2-C_{60} アルケニル基、 C_2-C_{60} アルキニル基及び C_1-C_{60} アルコキシ基；

重水素、 $-F$ 、 $-Cl$ 、 $-Br$ 、 $-I$ 、ヒドロキシル基、シアノ基、ニトロ基、アミノ基、ヒドラジノ基、ヒドラゾノ基、 C_3-C_{10} シクロアルキル基、 C_1-C_{10} ヘテロシクロアルキル基、 C_3-C_{10} シクロアルケニル基、 C_1-C_{10} ヘテロシクロアルケニル基、 C_6-C_{60} アリール基、 C_6-C_{60} アリールオキシ基、 C_6-C_{60} アリールチオ基、 C_1-C_{60} ヘテロアリール基、一価非芳香族縮合多環基、一価非芳香族ヘテロ縮合多環基、 $-Si(Q_{11})(Q_{12})(Q_{13})$ 、 $-N(Q_{11})(Q_{12})$ 、 $-B(Q_{11})(Q_{12})$ 、 $-C(=O)(Q_{11})$ 、 $-S(=O)_2(Q_{11})$ 及び $-P(=O)(Q_{11})(Q_{12})$ のうちから選択された少なくとも一つで置換された、 C_1-C_{60} アルキル基、 C_2-C_{60} アルケニル基、 C_2-C_{60} アルキニル基及び C_1-C_{60} アルコキシ基；

C_3-C_{10} シクロアルキル基、 C_1-C_{10} ヘテロシクロアルキル基、 C_3-C_{10} シクロアルケニル基、 C_1-C_{10} ヘテロシクロアルケニル基、 C_6-C_{60} アリール基、 C_6-C_{60} アリールオキシ基、 C_6-C_{60} アリールチオ基、 C_1-C_{60} ヘテロアリール基、一価非芳香族縮合多環基、一価非芳香族ヘテロ縮合多環基、ビフェニル基及びターフェニル基；

重水素、 $-F$ 、 $-Cl$ 、 $-Br$ 、 $-I$ 、ヒドロキシル基、シアノ基、ニトロ基、アミノ基、ヒドラジノ基、ヒドラゾノ基、 C_1-C_{60} アルキル基、 C_2-C_{60} アルケニル基、 C_2-C_{60} アルキニル基、 C_1-C_{60} アルコキシ基、 C_3-C_{10} シクロアルキル基、 C_1-C_{10} ヘテロシクロアルキル基、 C_3-C_{10} シクロアルケニル基、 C_1-C_{10} ヘテロシクロアルケニル基、 C_6-C_{60} アリール基、 C_6-C_{60} アリールオキシ基、 C_6-C_{60} アリールチオ基、 C_1-C_{60} ヘテロアリール基、一価非芳香族縮合多環基、一価非芳香族ヘテロ縮合多環基、ビフェニル基、ターフェニル基、 $-Si(Q_{21})(Q_{22})(Q_{23})$ 、 $-N(Q_{21})(Q_{22})$ 、 $-B(Q_{21})(Q_{22})$ 、 $-C(=O)(Q_{21})$ 、 $-S(=O)_2(Q_{21})$ 及び $-P(=O)(Q_{21})(Q_{22})$ のうちから選択された少なくとも一つで置換された、 C_3-C_{10} シクロアルキル基、 C_1-C_{10} ヘテロシクロアルキル基、 C_3-C_{10} シクロアルケニル基、 C_1-C_{10} ヘテロシクロアルケニル基、 C_6-C_{60} アリール基、 C_6-C_{60} アリールオキシ基、 C_6-C_{60} アリールチオ基、 C_1-C_{60} ヘテロアリール基、一価非芳香族縮合多環基、一価非芳香族ヘテロ縮合多環基、ビフェニル基及びターフェニル基；並びに

$-Si(Q_{31})(Q_{32})(Q_{33})$ 、 $-N(Q_{31})(Q_{32})$ 、 $-B(Q_{31})(Q_{32})$ 、 $-C(=O)(Q_{31})$ 、 $-S(=O)_2(Q_{31})$ 及び $-P(=O)(Q_{31})(Q_{32})$ ；のうちから選択され、

前記 Q_1 ないし Q_3 、 Q_{11} ないし Q_{13} 、 Q_{21} ないし Q_{23} 、及び Q_{31} ないし Q_{33} は、互いに独立して、水素、重水素、 $-F$ 、 $-Cl$ 、 $-Br$ 、 $-I$ 、ヒドロキシル基、シアノ基、ニトロ基、アミノ基、ヒドラジノ基、ヒドラゾノ基、 C_1-C_{60} アルキル基、 C_2-C_{60}

10

20

30

40

50

アルケニル基、 C_2-C_{60} アルキニル基、 C_1-C_{60} アルコキシ基、 C_3-C_{10} シクロアルキル基、 C_1-C_{10} ヘテロシクロアルキル基、 C_3-C_{10} シクロアルケニル基、 C_1-C_{10} ヘテロシクロアルケニル基、 C_6-C_{60} アリール基、 C_1-C_{60} アルキル基で置換された C_6-C_{60} アリール基、 C_1-C_{60} ヘテロアリール基、一価非芳香族縮合多環基、一価非芳香族ヘテロ縮合多環基、ビフェニル基、及びターフェニル基；並びに

－F、－Cl、－Br、－I及びシアノ基のうちから選択された少なくとも一つで置換された C_6-C_{60} アリール基のうちから選択され、

＊は、隣接原子との結合サイトである。）

【請求項2】

前記 L_1 及び L_{11} は、互いに独立して、

フェニレン基、ペンタレニレン基、インデニレン基、ナフタレニレン基、アズレニレン基、ヘプタレニレン基、インダセニレン基、アセナフタレニレン基、フルオレニレン基、スピロ－ビフルオレニレン基、スピロ－ベンゾフルオレン－フルオレニレン基、ベンゾフルオレニレン基、ジベンゾフルオレニレン基、フェナレニレン基、フェナントレニレン基、アントラセニレン基、フルオランテニレン基、トリフェニレニレン基、ピレニレン基、クリセニレン基、ナフタセニレン基、ピセニレン基、ペリレニレン基、ピローリレン基、チオフェニレン基、フラニレン基、シローリレン基、イミダゾリレン基、ピラゾリレン基、チアゾリレン基、イソチアゾリレン基、オキサゾリレン基、イソキサゾリレン基、ピリジニレン基、ピラジニレン基、ピリミジニレン基、ピリダジニレン基、トリアジニレン基、ベンゾフラニレン基、ベンゾチオペニレン基、ベンゾシロリレン基、ジベンゾフラニレン基、ジベンゾチオフェニレン基、ジベンゾシロリレン基、カルバゾリレン基、キノリニレン基、イソキノリニレン基、ベンゾカルバゾリレン基、ジベンゾカルバゾリレン基、ベンゾイミダゾリレン基、イミダゾピリジニレン基及びイミダゾピリミジニレン基；

重水素、－F、－Cl、－Br、－I、ヒドロキシル基、シアノ基、 C_1-C_{20} アルキル基、 C_1-C_{20} アルコキシ基、シクロペンチル基、シクロヘキシル基、シクロヘプチル基、シクロペンテニル基、シクロヘキセニル基、フェニル基、ビフェニル基、ターフェニル基、ペンタレニル基、インデニル基、ナフチル基、アズレニル基、ヘプタレニル基、インダセニル基、アセナフチル基、フルオレニル基、スピロ－ビフルオレニル基、ベンゾフルオレニル基、ジベンゾフルオレニル基、フェナレニル基、フェナントレニル基、アントラセニル基、フルオランテニル基、トリフェニレニル基、ピレニル基、クリセニル基、ナフタセニル基、ピセニル基、ペリレニル基、ペンタフェニル基、ヘキサセニル基、ペンタセニル基、ルビセニル基、コロネニル基、オバレニル基、ピロリル基、チオフェニル基、フラニル基、カルバゾリル基、ピリジニル基、ピラジニル基、ピリミジニル基、ピリダジニル基、キノリニル基、イソキノリニル基、ベンゾフラニル基、ベンゾチオフェニル基、ジベンゾフラニル基、ジベンゾチオフェニル基、ベンゾカルバゾリル基、ジベンゾカルバゾリル基、－Si (Q_{31}) (Q_{32}) (Q_{33})、－N (Q_{31}) (Q_{32}) 及び－B (Q_{31})

(Q_{32})のうちから選択された少なくとも一つで置換された、フェニレン基、ペンタレニレン基、インデニレン基、ナフタレニレン基、アズレニレン基、ヘプタレニレン基、インダセニレン基、アセナフタレニレン基、フルオレニレン基、スピロ－ビフルオレニレン基、スピロ－ベンゾフルオレン－フルオレニレン基、ベンゾフルオレニレン基、ジベンゾフルオレニレン基、フェナレニレン基、フェナントレニレン基、アントラセニレン基、フルオランテニレン基、トリフェニレニレン基、ピレニレン基、クリセニレン基、ナフタセニレン基、ピセニレン基、ペリレニレン基、ピローリレン基、チオフェニレン基、フラニレン基、シローリレン基、イミダゾリレン基、ピラゾリレン基、チアゾリレン基、イソチアゾリレン基、オキサゾリレン基、イソキサゾリレン基、ピリジニレン基、ピラジニレン基、ピリミジニレン基、ピリダジニレン基、トリアジニレン基、ベンゾフラニレン基、ベンゾチオペニレン基、ベンゾシロリレン基、ジベンゾフラニレン基、ジベンゾチオフェニレン基、ジベンゾシロリレン基、カルバゾリレン基、キノリニレン基、イソキノリニレン基、ベンゾカルバゾリレン基、ジベンゾカルバゾリレン基、ベンゾイミダゾリレン基、イミダゾピリジニレン基及びイミダゾピリミジニレン基；のうちから選択され、

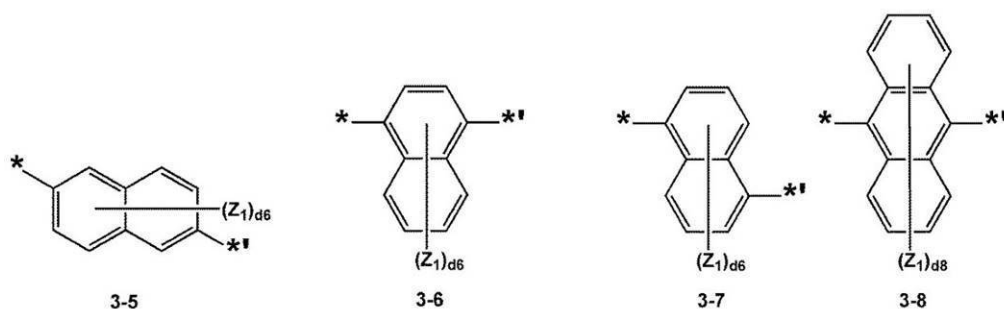
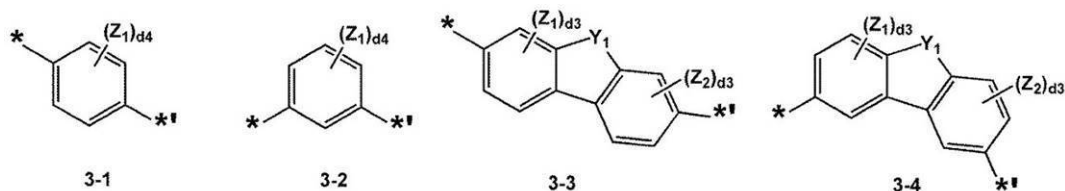
Q₁、及びQ₃₁ないしQ₃₃は、互いに独立して、C₁－C₂₀アルキル基、C₁－C₂₀アルコキシ基、フェニル基、ビフェニル基、ターフェニル基、ナフチル基及びピリジニル基のうちから選択されたことを特徴とする請求項1に記載の有機発光素子。

【請求項3】

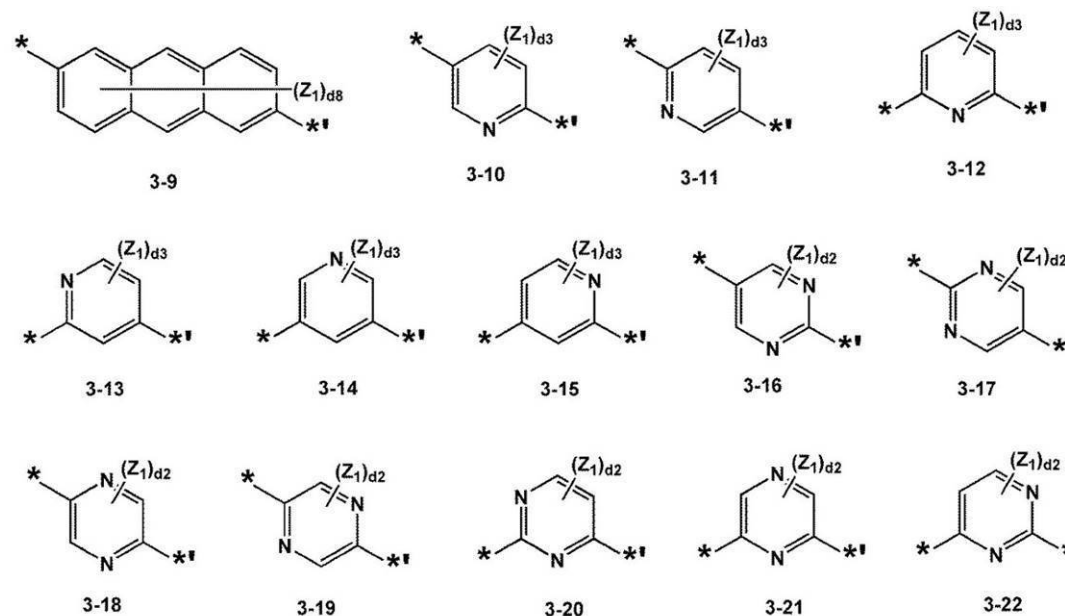
前記L₁及びL₁₁は、互いに独立して、

下記化学式3－1ないし化学式3－33で表示される基のうちから選択されたことを特徴とする請求項1に記載の有機発光素子。

【化3】



【化4】



10

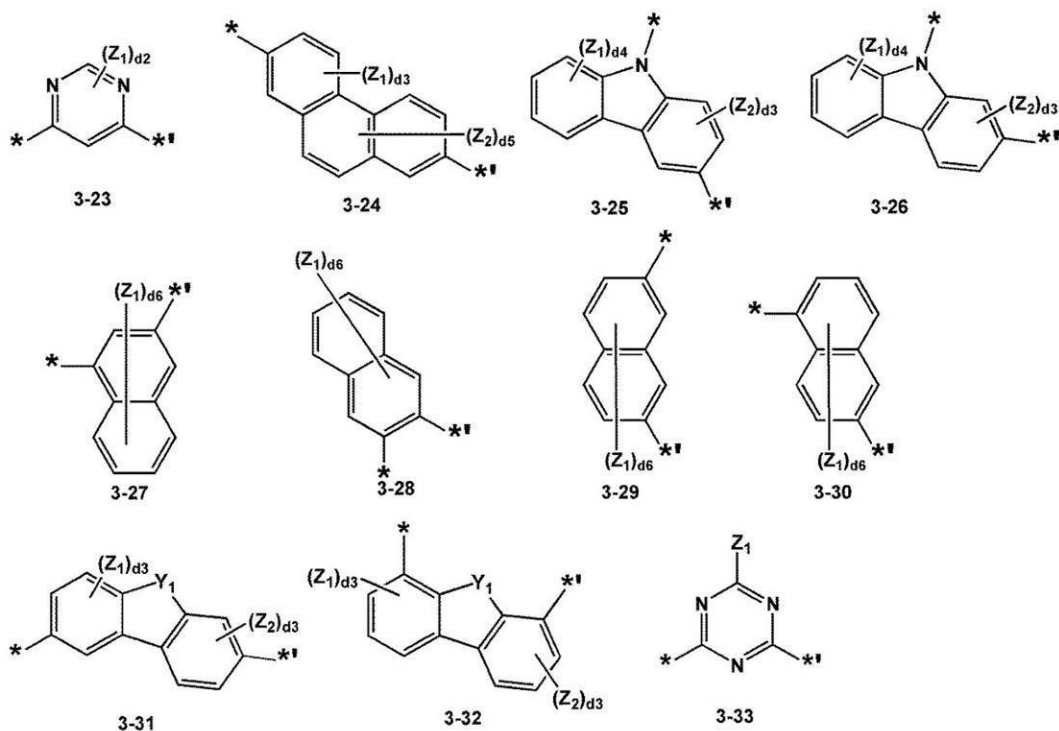
20

30

40

50

【化 5】



（前記化学式 3-1 ないし 3-33 で、

Y_1 は、O、S、C (Z_3) (Z_4)、N (Z_5) または Si (Z_6) (Z_7) であり、

Z_1 ないし Z_7 は、互いに独立して、水素、重水素、-F、-Cl、-Br、-I、ヒドロキシ基、シアノ基、 C_1-C_{20} アルキル基、 C_1-C_{20} アルコキシ基、シクロペンチル基、シクロヘキシル基、シクロヘプチル基、シクロペンテニル基、シクロヘキセニル基、フェニル基、ビフェニル基、ターフェニル基、ナフチル基、フルオレニル基、スピロービフルオレニル基、ベンゾフルオレニル基、ジベンゾフルオレニル基、フェナントレニル基、アントラセニル基、フルオランテニル基、トリフェニレニル基、ピレニル基、クリセニル基、ピロリル基、チオフェニル基、フラニル基、シロリル基、イミダゾリル基、ピラゾリル基、チアゾリル基、イソチアゾリル基、オキサゾリル基、イソキサゾリル基、ピリジニル基、ピラジニル基、ピリミジニル基、ピリダジニル基、ベンゾフラニル基、ベンゾチオフェニル基、ベンゾシロリル基、ジベンゾフラニル基、ジベンゾチオフェニル基、ジベンゾシロリル基、カルバゾリル基、ベンゾカルバゾリル基、ジベンゾカルバゾリル基及び -Si (Q_{31}) (Q_{32}) (Q_{33}) ; 並びに

-F、-Cl、-Br、-I 及びシアノ基のうちから選択された少なくとも一つで置換されたフェニル基のうちから選択され、

前記 Q_{31} ないし Q_{33} は、互いに独立して、 C_1-C_{20} アルキル基、 C_1-C_{20} アルコキシ基、フェニル基、ビフェニル基、ターフェニル基、ナフチル基及びピリジニル基のうちから選択され、

d_2 は、0 ないし 2 の整数であり、

d_3 は、0 ないし 3 の整数であり、

d_4 は、0 ないし 4 の整数であり、

d_6 は、0 ないし 6 の整数であり、

d_8 は、0 ないし 8 の整数であり、

* 及び * ' は、隣接原子との結合サイトである。）

【請求項 4】

前記 Ar_{11} は、

フェニル基、ビフェニル基、ターフェニル基、ペンタレニル基、インデニル基、ナフチル基、アズレニル基、ヘプタレニル基、インダセニル基、アセナフチル基、フルオレニル

基、スピロ-ビフルオレニル基、ベンゾフルオレニル基、ジベンゾフルオレニル基、フェナレニル基、フェナントレニル基、アントラセニル基、フルオランテニル基、トリフェニレニル基、ピレニル基、クリセニル基、ナフタセニル基、ピセニル基、ペリレニル基、ペンタフェニル基、ヘキサセニル基、ペンタセニル基、ルビセニル基、コロネニル基、オバレニル基、ピリジニル基、ピラジニル基、ピリミジニル基、ピリダジニル基、トリアジニル基、チオフェニル基、フラニル基、キノリニル基、イソキノリニル基、カルバゾリル基、ベンゾフラニル基、ベンゾチオフェニル基、ジベンゾフラニル基、ジベンゾチオフェニル基、ベンゾナフトフラニル基、ジナフトフラニル基、ベンゾカルバゾリル基、ジベンゾカルバゾリル基、ジベンゾシロリル基、ベンゾナフトシロリル基、ジナフトシロリル基、ベンゾイミダゾリル基、フェナントロリニル基及びイミダゾピリジニル基；

10

重水素、 $-F$ 、 $-Cl$ 、 $-Br$ 、 $-I$ 、ヒドロキシ基、シアノ基、ニトロ基、アミジノ基、ヒドラジノ基、ヒドラゾノ基、 C_1-C_{20} アルキル基、 C_1-C_{20} アルコキシ基、シクロペンチル基、シクロヘキシル基、シクロヘプチル基、シクロペンテニル基、シクロヘキセニル基、フェニル基、ビフェニル基、ターフェニル基、ペントレニル基、インデニル基、ナフチル基、アズレニル基、ヘプタレニル基、インダセニル基、アセナフチル基、フルオレニル基、スピロ-ビフルオレニル基、ベンゾフルオレニル基、ジベンゾフルオレニル基、フェナレニル基、フェナントレニル基、アントラセニル基、フルオランテニル基、トリフェニレニル基、ピレニル基、クリセニル基、ナフタセニル基、ピセニル基、ペリレニル基、ペンタフェニル基、ヘキサセニル基、ペンタセニル基、ルビセニル基、コロネニル基、オバレニル基、ピリジニル基、ピラジニル基、ピリミジニル基、ピリダジニル基、トリアジニル基、チオフェニル基、フラニル基、キノリニル基、イソキノリニル基、カルバゾリル基、ベンゾフラニル基、ベンゾチオフェニル基、ジベンゾフラニル基、ジベンゾチオフェニル基、ベンゾカルバゾリル基、ジベンゾカルバゾリル基、ジベンゾシロリル基、 $-N(Q_{31})(Q_{32})$ 及び $-Si(Q_{31})(Q_{32})(Q_{33})$ のうちから選択された少なくとも一つで置換された、フェニル基、ビフェニル基、ターフェニル基、ペントレニル基、インデニル基、ナフチル基、アズレニル基、ヘプタレニル基、インダセニル基、アセナフチル基、フルオレニル基、スピロ-ビフルオレニル基、ベンゾフルオレニル基、ジベンゾフルオレニル基、フェナレニル基、フェナントレニル基、アントラセニル基、フルオランテニル基、トリフェニレニル基、ピレニル基、クリセニル基、ナフタセニル基、ピセニル基、ペリレニル基、ペンタフェニル基、ヘキサセニル基、ペンタセニル基、ルビセニル基、コロネニル基、オバレニル基、ピリジニル基、ピラジニル基、ピリミジニル基、ピリダジニル基、トリアジニル基、チオフェニル基、フラニル基、キノリニル基、イソキノリニル基、カルバゾリル基、ベンゾフラニル基、ベンゾチオフェニル基、ジベンゾフラニル基、ジベンゾチオフェニル基、ベンゾナフトフラニル基、ジナフトフラニル基、ベンゾカルバゾリル基、ジベンゾカルバゾリル基、ジベンゾシロリル基、ベンゾナフトシロリル基、ジナフトシロリル基、ベンゾイミダゾリル基、フェナントロリニル基及びイミダゾピリジニル基；並びに

20

30

$-N(Q_1)(Q_2)$ 、 $-B(Q_1)(Q_2)$ 、 $-S(=O)_2(Q_1)$ 及び $-P(=O)(Q_1)(Q_2)$ ；のうちから選択され、

前記 Q_1 、 Q_2 、及び Q_{31} ないし Q_{33} は、互いに独立して、 C_1-C_{20} アルキル基、 C_1-C_{20} アルコキシ基、フェニル基、ビフェニル基、ターフェニル基、ナフチル基及びピリジニル基；並びに

40

$-F$ 、 $-Cl$ 、 $-Br$ 、 $-I$ 、シアノ基及び C_1-C_{20} アルキル基のうちから選択された少なくとも一つで置換されたフェニル基のうちから選択されたことを特徴とする請求項 1 に記載の有機発光素子。

【請求項 5】

前記 Ar_{11} は、

フェニル基、ビフェニル基、ナフチル基、フルオレニル基、ピリジニル基、ピリミジニル基、トリアジニル基、キノリニル基、カルバゾリル基及びフェナントロリニル基；

重水素、 $-F$ 、 $-Cl$ 、 $-Br$ 、 $-I$ 、ヒドロキシ基、シアノ基、ニトロ基、アミジ

50

ノ基、ヒドラジノ基、ヒドラゾノ基、 C_1-C_{20} アルキル基、 C_1-C_{20} アルコキシ基、フェニル基、ビフェニル基、ナフチル基、フルオレニル基、ピリジニル基、ピリミジニル基、トリアジニル基、キノリニル基、カルバゾリル基、フェナントロリニル基、 $-N(Q_{31})(Q_{32})$ 及び $-Si(Q_{31})(Q_{32})(Q_{33})$ のうちから選択された少なくとも一つで置換された、フェニル基、ビフェニル基、ナフチル基、フルオレニル基、ピリジニル基、ピリミジニル基、トリアジニル基、キノリニル基、カルバゾリル基及びフェナントロリニル基；並びに

$-N(Q_1)(Q_2)$ 、 $-B(Q_1)(Q_2)$ 、 $-S(=O)_2(Q_1)$ 及び $-P(=O)(Q_1)(Q_2)$ ；のうちから選択され、

前記 Q_1 、 Q_2 、及び Q_{31} ないし Q_{33} は、互いに独立して、 C_1-C_{20} アルキル基、 C_1-C_{20} アルコキシ基、フェニル基、ビフェニル基、ターフェニル基、ナフチル基及びピリジニル基及び

$-F$ 、 $-Cl$ 、 $-Br$ 、 $-I$ 、シアノ基及び C_1-C_{20} アルキル基のうちから選択された少なくとも一つで置換されたフェニル基のうちから選択されたことを特徴とする請求項4に記載の有機発光素子。

【請求項6】

前記 Ar_{11} は、下記化学式5-1ないし化学式5-47で表示される基、 $-N(Q_1)(Q_2)$ 、 $-B(Q_1)(Q_2)$ 、 $-S(=O)_2(Q_1)$ 、及び $-P(=O)(Q_1)(Q_2)$ ；のうちから選択されたことを特徴とする請求項1に記載の有機発光素子。

10

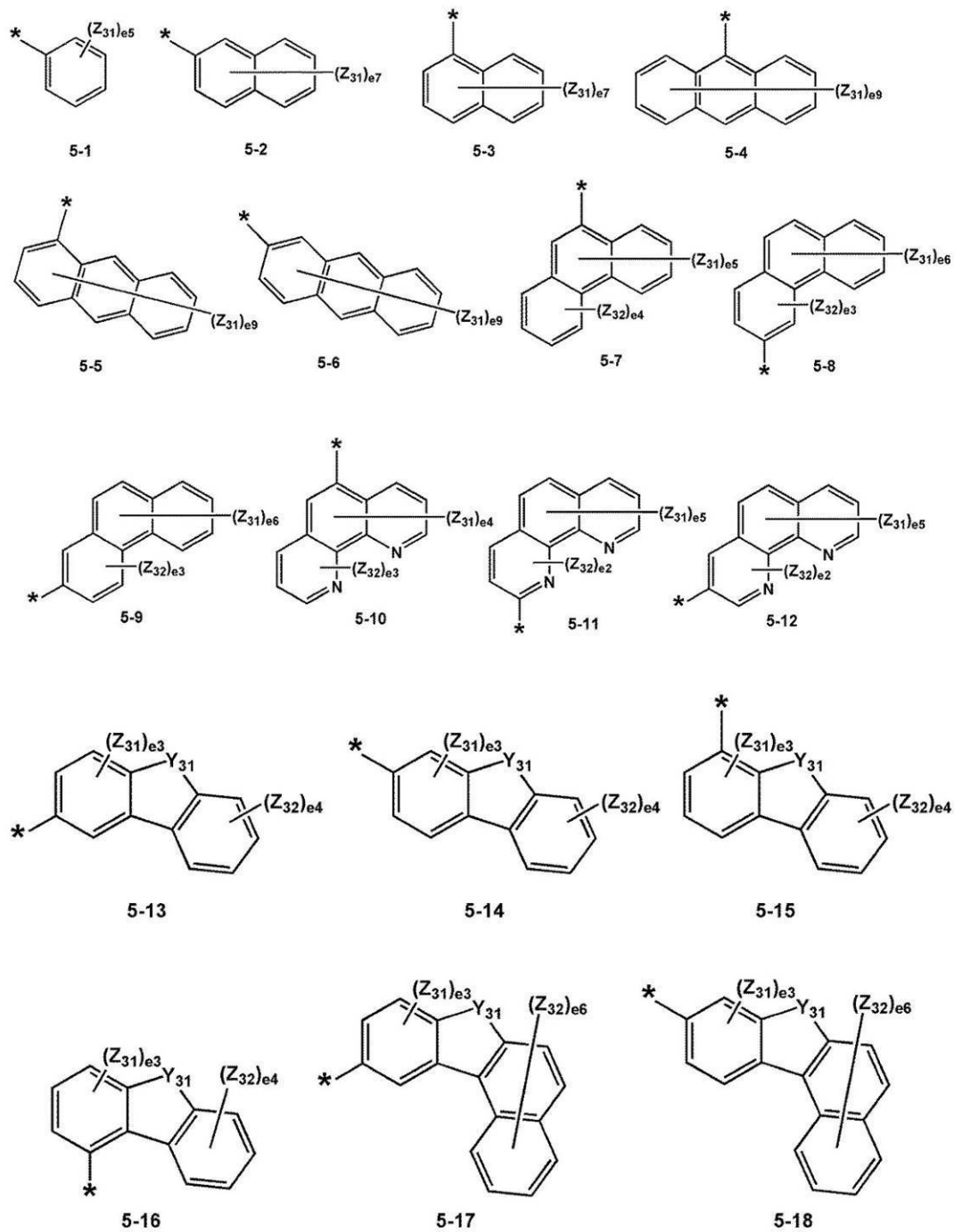
20

30

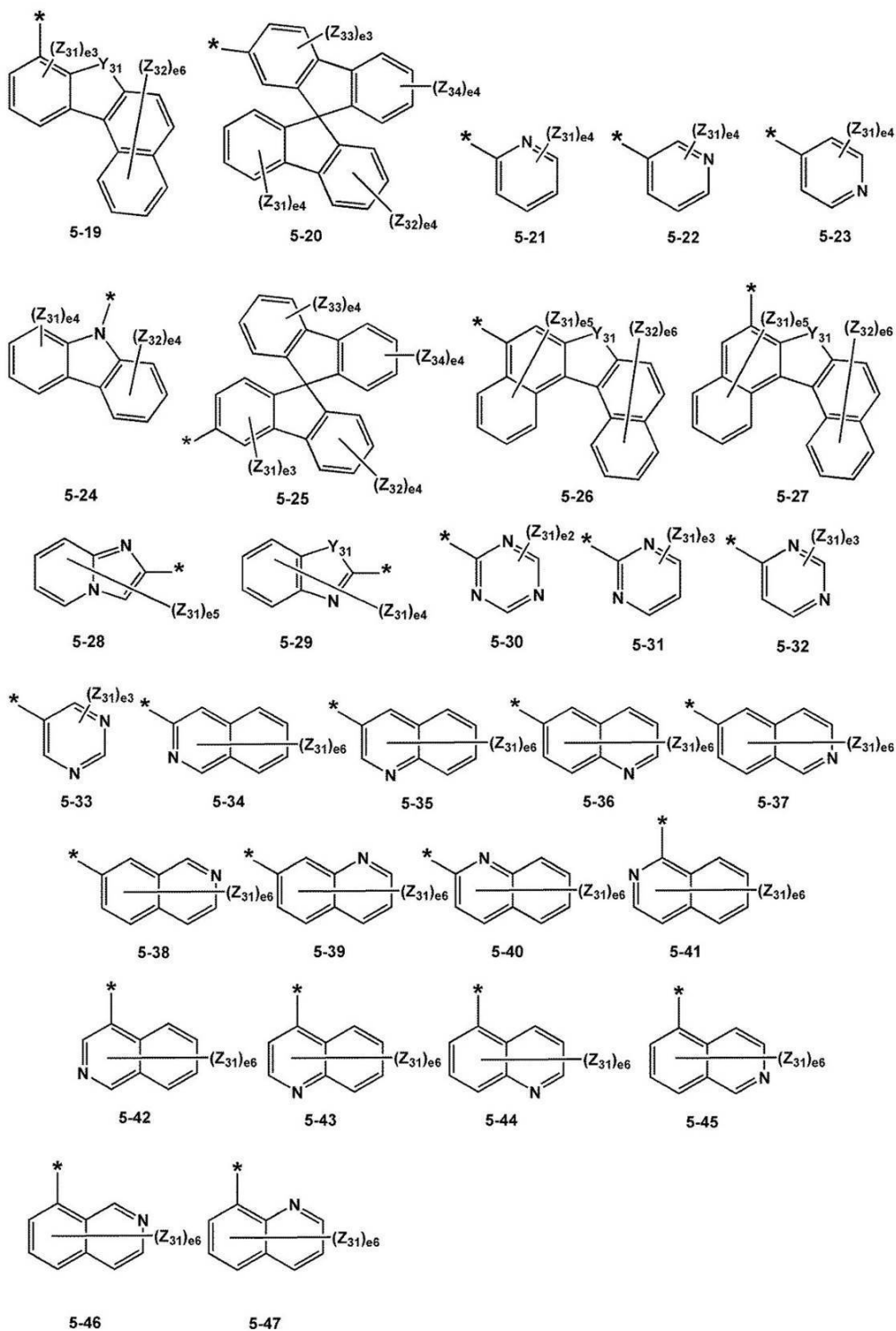
40

50

【化 6】



【化 7】



（前記化学式 5-1 ないし 5-47 で、

Y_{31} は、O、S、C (Z_{33}) (Z_{34})、N (Z_{35}) または Si (Z_{36}) (Z_{37}) であり、

Z_{31} ないし Z_{37} は、互いに独立して、水素、重水素、-F、-Cl、-Br、-I、ヒドロキシ基、シアノ基、 C_1-C_{20} アルキル基、 C_1-C_{20} アルコキシ基、シクロペンチル基、シクロヘキシル基、シクロヘプチル基、シクロペンテニル基、シクロヘキセニル基、フェニル基、ビフェニル基、ターフェニル基、ペンタレニル基、インデニル基、ナフチル基、アズレニル基、ヘプタレニル基、インダセニル基、アセナフチル基、フルオレニル基、スピロ-ビフルオレニル基、ベンゾフルオレニル基、ジベンゾフルオレニル基、フェ

ナレニル基、フェナントレニル基、アントラセニル基、フルオランテニル基、トリフェニレニル基、ピレニル基、クリセニル基、ナфтаセニル基、ピセニル基、ペリレニル基、ペンタフェニル基、ヘキサセニル基、ペンタセニル基、ルビセニル基、コロネニル基、オバレニル基、ピロリル基、チオフェニル基、フラニル基、シロリル基、ピリジニル基、インドリル基、イソインドリル基、ベンゾフラニル基、ベンゾチオフェニル基、ベンゾシロリル基、ジベンゾフラニル基、ジベンゾチオフェニル基、ジベンゾシロリル基、カルバゾリル基、ベンゾカルバゾリル基、ジベンゾカルバゾリル基及び $-Si(Q_{31})(Q_{32})(Q_{33})$; 並びに

$-F$ 、 $-Cl$ 、 $-Br$ 、 $-I$ 及びシアノ基のうちから選択された少なくとも一つで置換されたフェニル基のうちから選択され、

前記 Q_1 、 Q_2 、及び Q_{31} ないし Q_{33} は、互いに独立して、 C_1-C_{20} アルキル基、 C_1-C_{20} アルコキシ基、フェニル基、ビフェニル基、ターフェニル基ナフチル基及びピリジニル基、並びに

$-F$ 、 $-Cl$ 、 $-Br$ 、 $-I$ 、シアノ基及び C_1-C_{20} アルキル基のうちから選択された少なくとも一つで置換されたフェニル基のうちから選択され、

e_2 は、0 ないし 2 のうちから選択された整数であり、

e_3 は、0 ないし 3 のうちから選択された整数であり、

e_4 は、0 ないし 4 のうちから選択された整数であり、

e_5 は、0 ないし 5 のうちから選択された整数であり、

e_6 は、0 ないし 6 のうちから選択された整数であり、

e_7 は、0 ないし 7 のうちから選択された整数であり、

e_9 は、0 ないし 9 のうちから選択された整数であり、

* は、隣接原子との結合サイトである。)

【請求項 7】

前記 Ar_{11} は、下記化学式 6-1 ないし 6-62 で表示される基、及び下記化学式 10-1 ないし 10-20 で表示される基のうちから選択されたことを特徴とする請求項 1 に記載の有機発光素子。

10

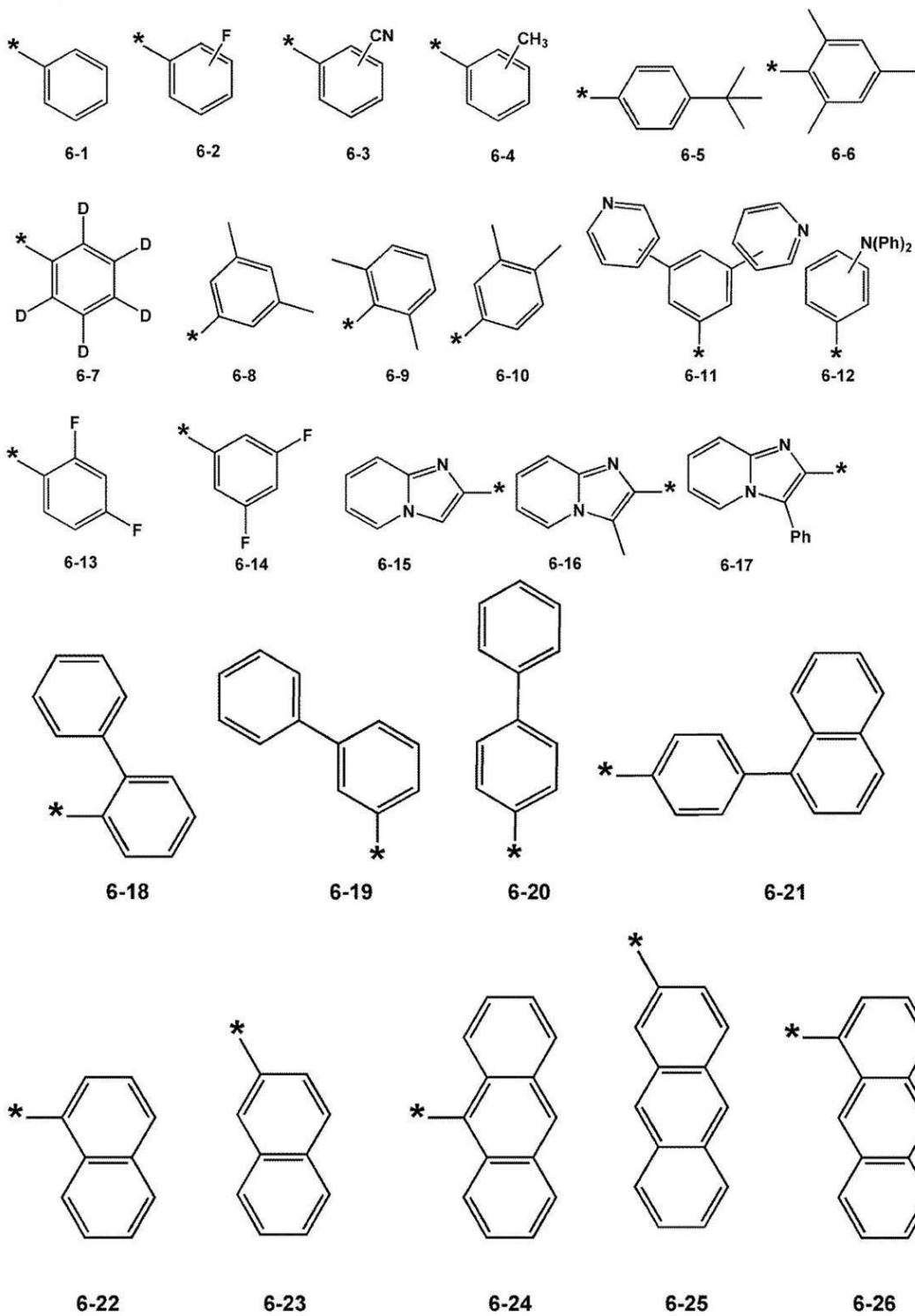
20

30

40

50

【化 8】



10

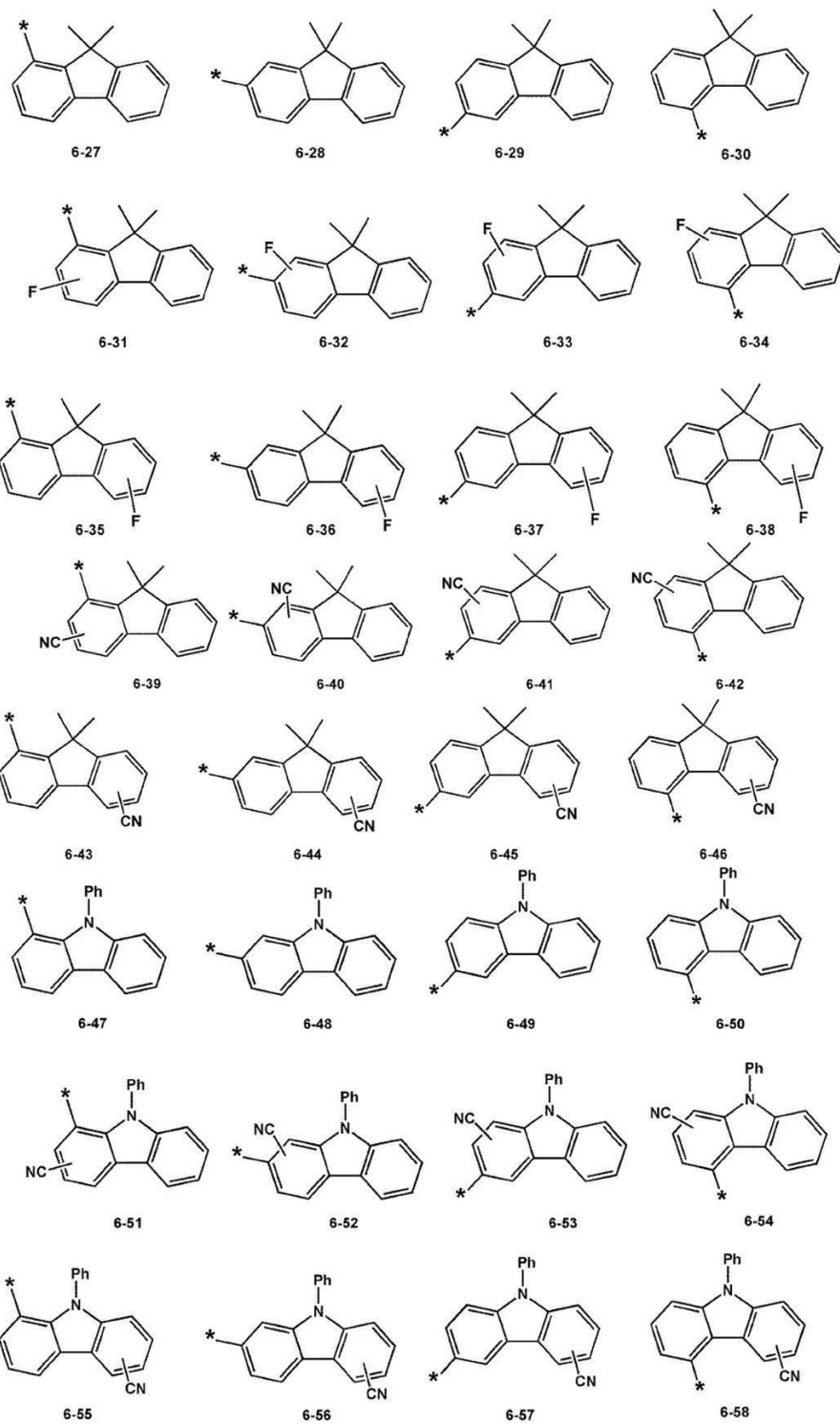
20

30

40

50

【化 9】



10

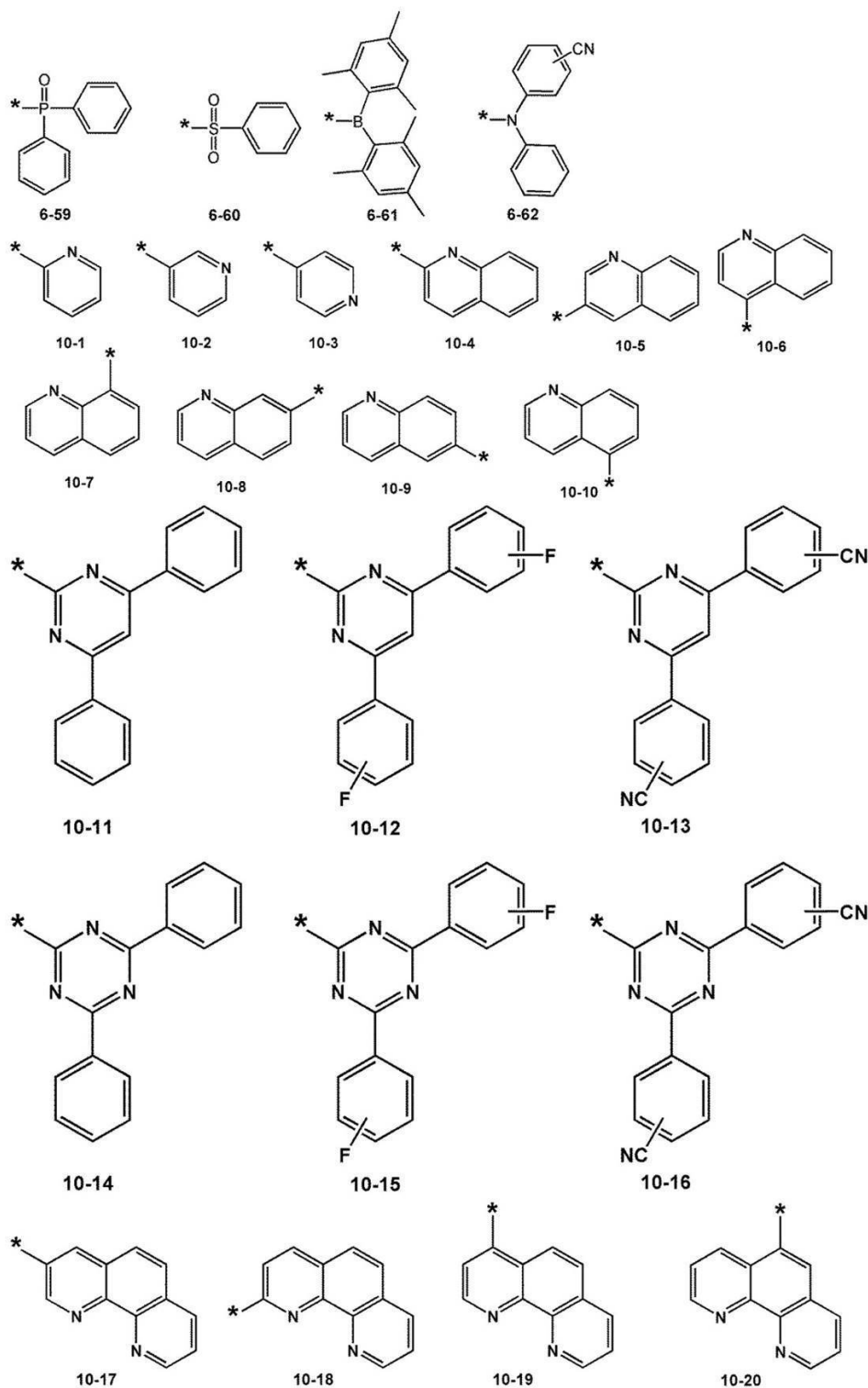
20

30

40

50

【化 10】



〔前記化学式 6-1 ないし 6-62、及び化学式 10-1 ないし 10-20 で Ph は、フェニル基であり、* は、隣接原子との結合サイトである。〕

【請求項 8】

前記 R₁ は、下記化学式 4-1 ないし 4-6 及び 4-10 ないし 4-23 で表示される基のうちから選択されたことを特徴とする請求項 1 に記載の有機発光素子。

10

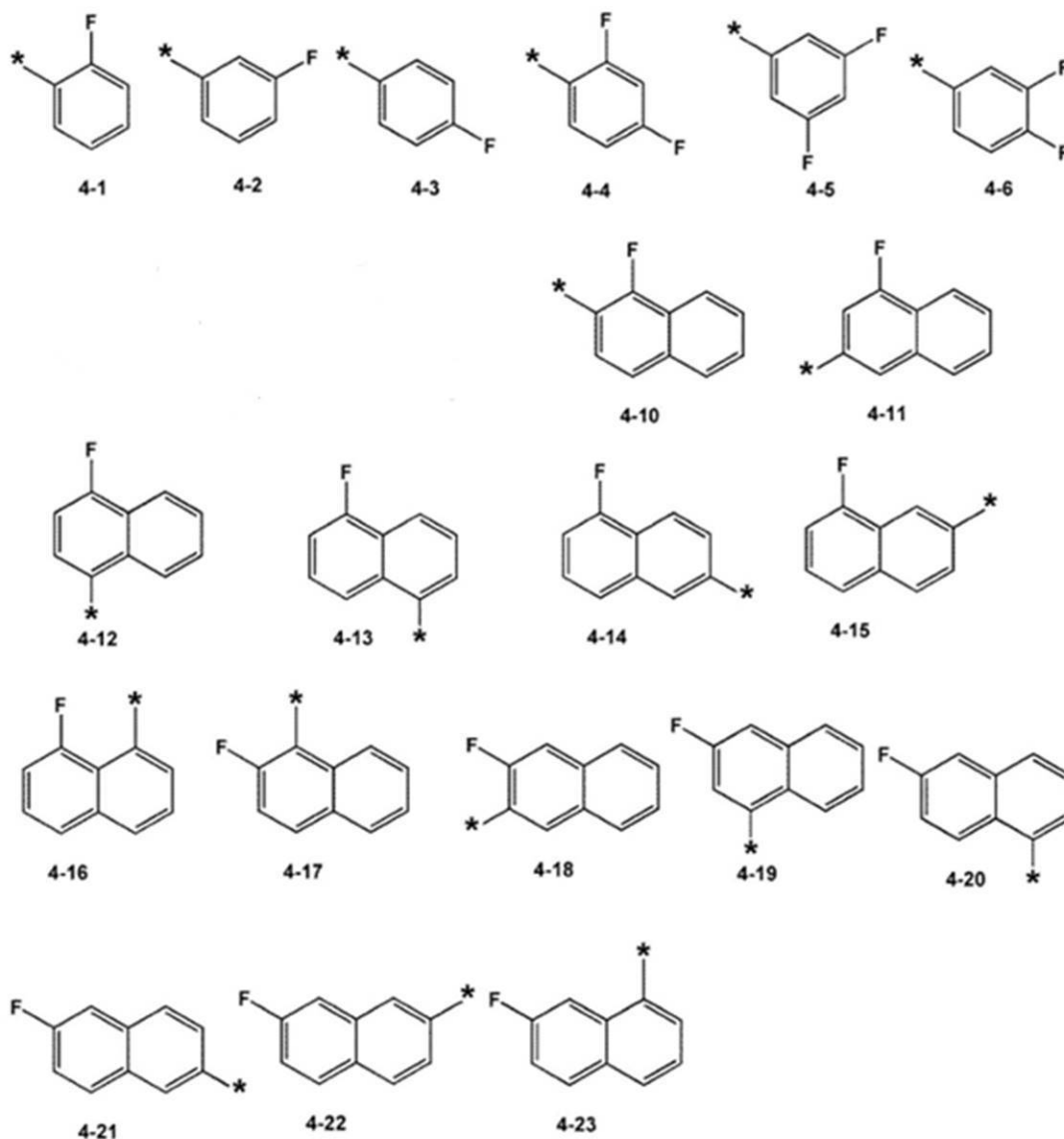
20

30

40

50

【化 1 1】



(前記化学式 4-1 ないし 4-6 及び 4-10 ないし 4-23 で*は、隣接原子との結合サイトである。)

【請求項 9】

前記 R₂ ないし R₅ において少なくとも一つは、前記化学式 2 で表示される基であることを特徴とする請求項 1 に記載の有機発光素子。

【請求項 10】

前記 R₆ ないし R₁₃ は、水素であることを特徴とする請求項 1 に記載の有機発光素子。

【請求項 11】

i) R₂ は、前記化学式 2 で表示される基であり、前記 R₃ ないし R₁₃ は、水素であるか、

ii) R₃ は、前記化学式 2 で表示される基であり、前記 R₂、R₄ ないし R₁₃ は、水素であるか、

iii) R₄ は、前記化学式 2 で表示される基であり、前記 R₂、R₃、R₅ ないし R₁₃ は、水素であることを特徴とする請求項 1 に記載の有機発光素子。

【請求項 12】

前記縮合環化合物は、下記化合物 1 ないし 48 及び 57 ないし 77 のうちから選択されたことを特徴とする請求項 1 に記載の有機発光素子。

10

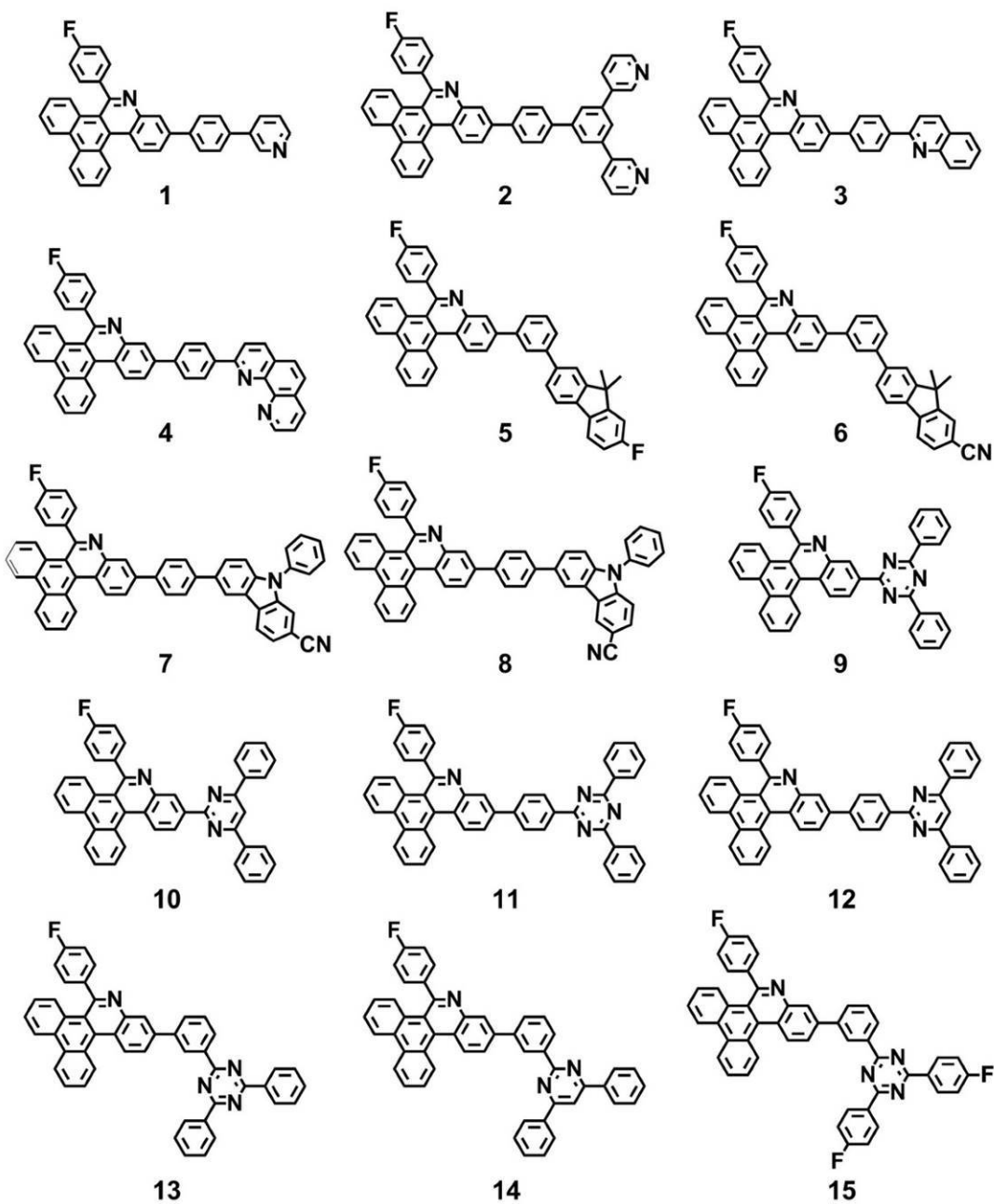
20

30

40

50

【化 1 2】



10

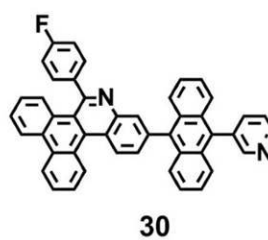
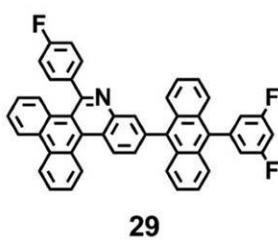
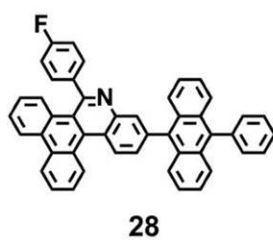
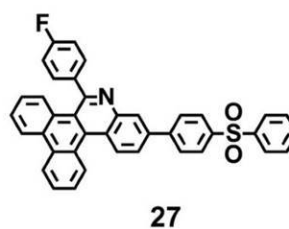
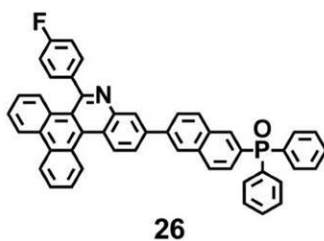
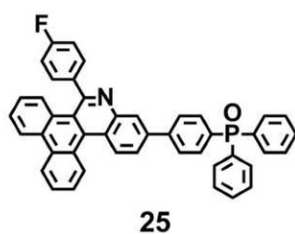
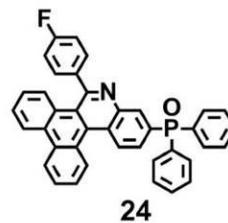
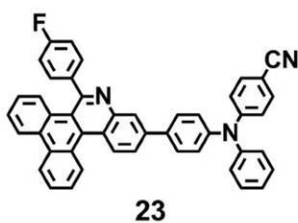
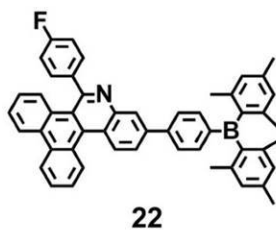
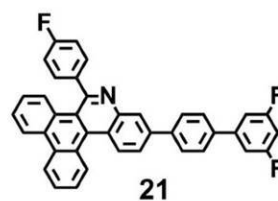
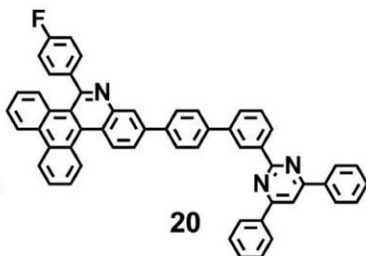
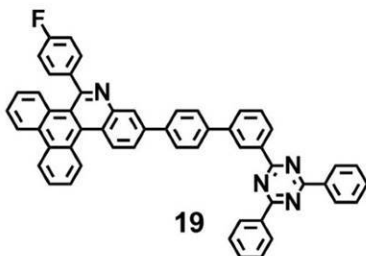
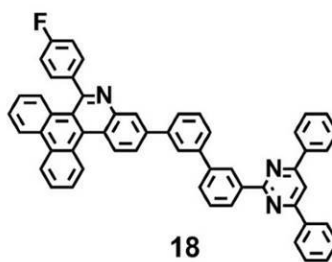
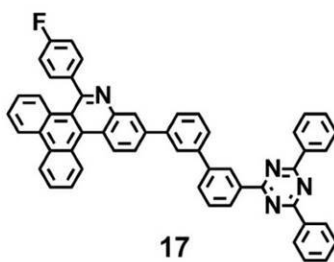
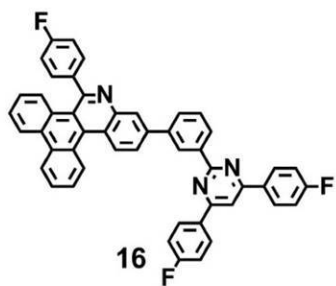
20

30

40

50

【化 1 3】



10

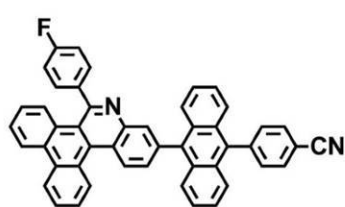
20

30

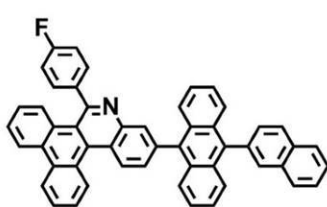
40

50

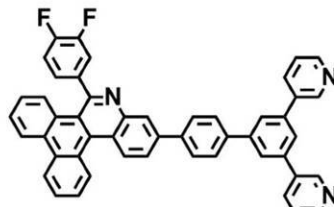
【化 1 4】



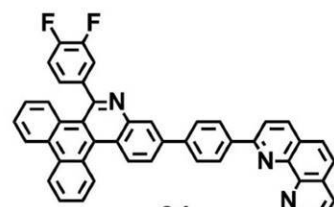
31



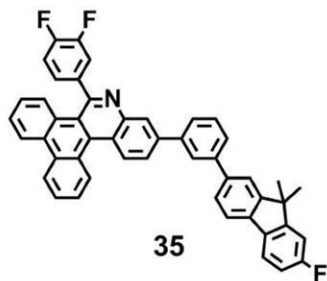
32



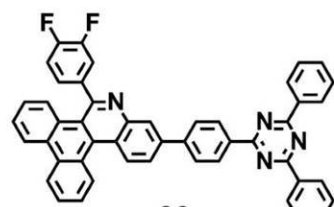
33



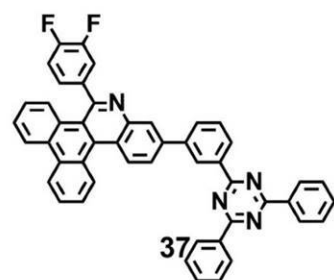
34



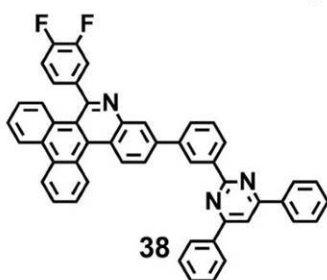
35



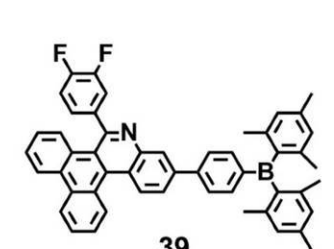
36



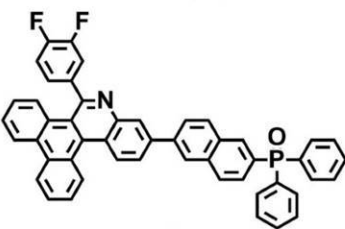
37



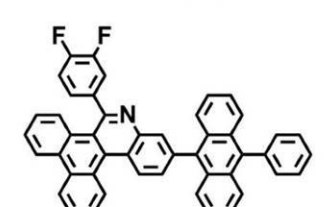
38



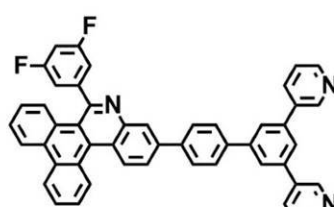
39



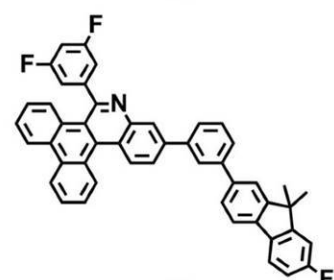
40



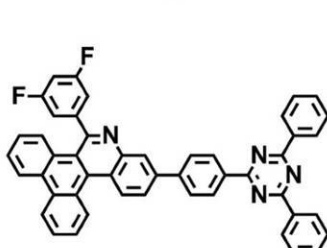
41



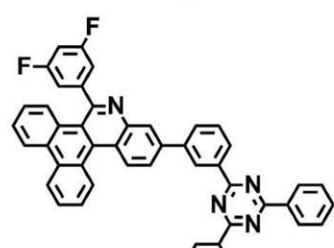
42



43



44



45

10

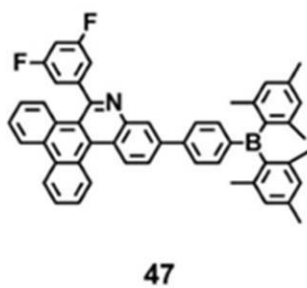
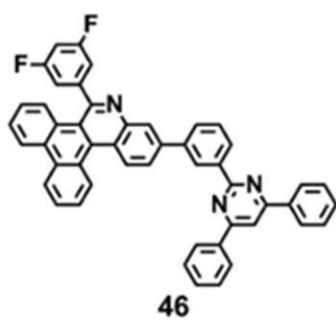
20

30

40

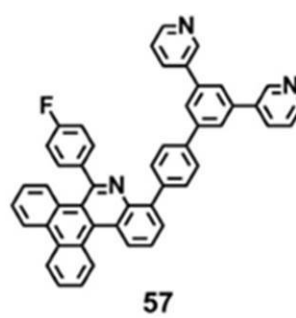
50

【化 1 5】



10

20

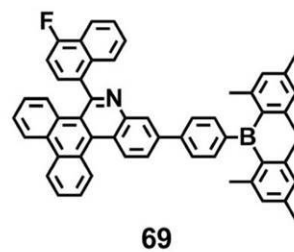
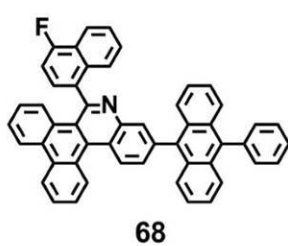
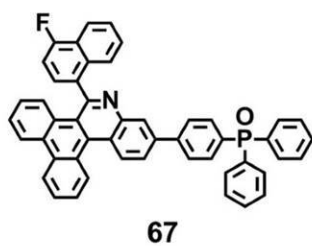
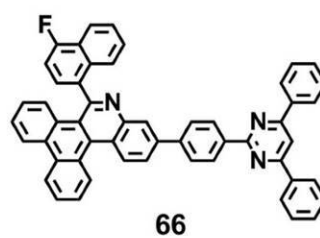
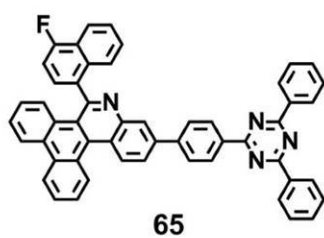
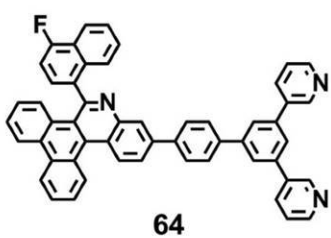
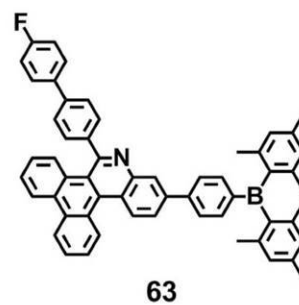
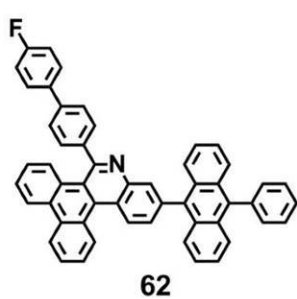
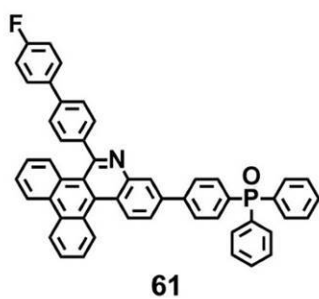
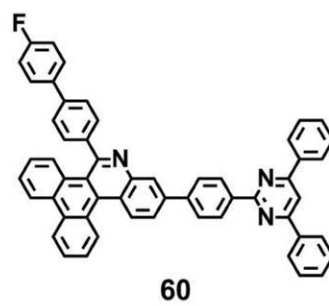
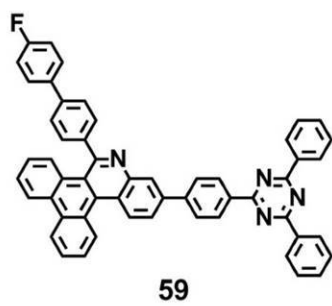
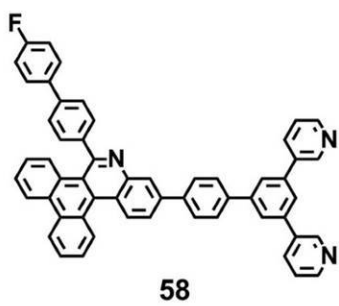


30

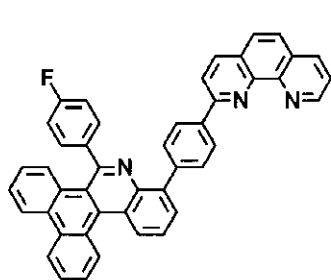
40

50

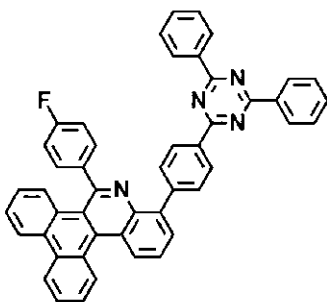
【化 16】



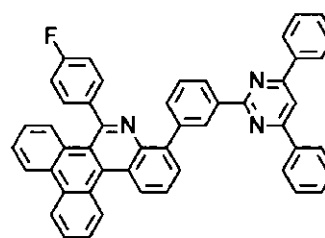
【化 17】



70

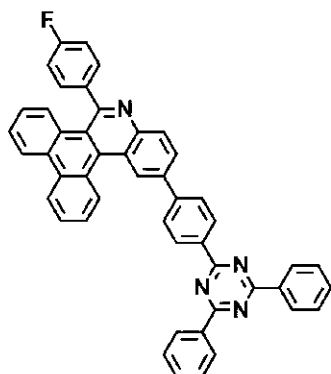


71

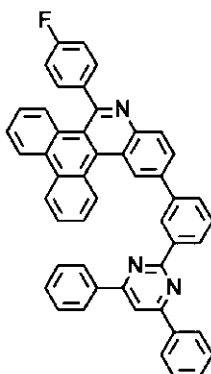


72

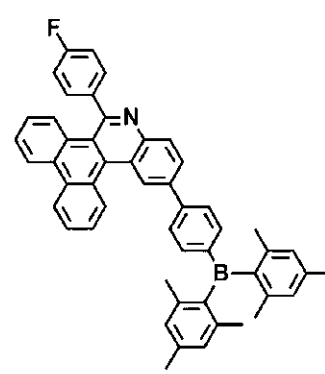
10



73

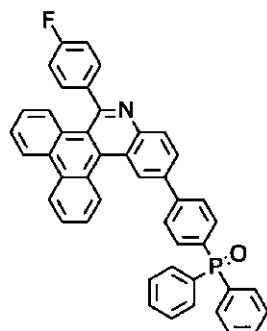


74

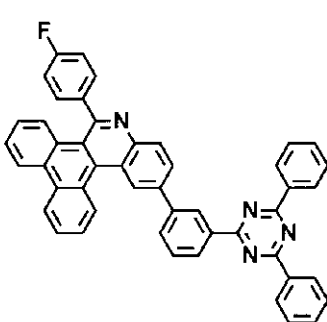


75

20



76



77

30

【請求項 13】

前記第 1 電極がアノードであり、

前記第 2 電極がカソードであり、

前記正孔輸送領域は、正孔注入層、正孔輸送層、発光補助層、電子阻止層、またはそれらの任意の組み合わせを含み、

前記電子輸送領域は、バッファ層、正孔阻止層、電子調節層、電子輸送層、電子注入層、またはそれらの任意の組み合わせを含むことを特徴とする請求項 1 に記載の有機発光素子。

40

【請求項 14】

前記電子輸送領域が電子輸送層を含み、前記電子輸送層に、前記縮合環化合物が含まれていることを特徴とする請求項 13 に記載の有機発光素子。

【請求項 15】

前記電子輸送領域が発光補助層を含み、前記発光補助層に、前記縮合環化合物が含まれていることを特徴とする請求項 14 に記載の有機発光素子。

【請求項 16】

前記正孔輸送領域は、p-ドーパントを含み、

50

前記 p-ドーパントの LUMO (lowest unoccupied molecular orbital) は、 -3.5 eV 以下であることを特徴とする請求項 13 に記載の有機発光素子。

【請求項 17】

前記 p-ドーパントは、シアノ基含有化合物を含むことを特徴とする請求項 16 に記載の有機発光素子。

【請求項 18】

前記発光層は、第 1 色光を放出する第 1 発光層であり、

前記第 1 電極と前記第 2 電極との間に、i) 少なくとも 1 層の第 2 色光を放出する第 2 発光層が追加して含まれているか、または ii) 少なくとも 1 層の前記第 2 色光を放出する前記第 2 発光層、及び少なくとも 1 層の第 3 色光を放出する第 3 発光層が追加して含まれており、

10

前記第 1 色光の最大発光波長、前記第 2 色光の最大発光波長、及び前記第 3 色光の最大発光波長は、互いに同一又は異なっており、

前記第 1 色光と前記第 2 色光とが互いに混合された混色光、または前記第 1 色光、前記第 2 色光及び前記第 3 色光が互いに混合された混色光が放出されることを特徴とする請求項 1 に記載の有機発光素子。

【発明の詳細な説明】

【技術分野】

【0001】

本発明は、有機発光素子用縮合環化合物及び有機発光素子に関する。

20

【背景技術】

【0002】

有機発光素子 (organic light emitting device) は、自発光型素子であって、従来の素子に比べ、視野角が広く、コントラストに優れるだけでなく、応答時間が短く、輝度、駆動電圧及び応答速度の特性に優れる。

【0003】

前記有機発光素子は、基板上に第 1 電極が配置されており、前記第 1 電極上に、正孔輸送領域 (hole transport region)、発光層、電子輸送領域 (electron transport region) 及び第 2 電極が順次形成されている構造を有することができる。前記第 1 電極から注入された正孔は、正孔輸送領域を經由して発光層に移動し、第 2 電極から注入された電子は、電子輸送領域を經由して発光層に移動する。前記正孔及び電子のようなキャリアは、発光層領域で再結合し、励起子 (exciton) を生成する。該励起子が、励起状態から基底状態に緩和しながら光が生成される (例えば特許文献 1 参照)。

30

【先行技術文献】

【特許文献】

【0004】

【文献】韓国登録特許第 525408 号公報

【発明の概要】

【発明が解決しようとする課題】

40

【0005】

本発明が解決しようとする課題は、新規構造を有する縮合環化合物、及びそれを含む有機発光素子を提供することである。

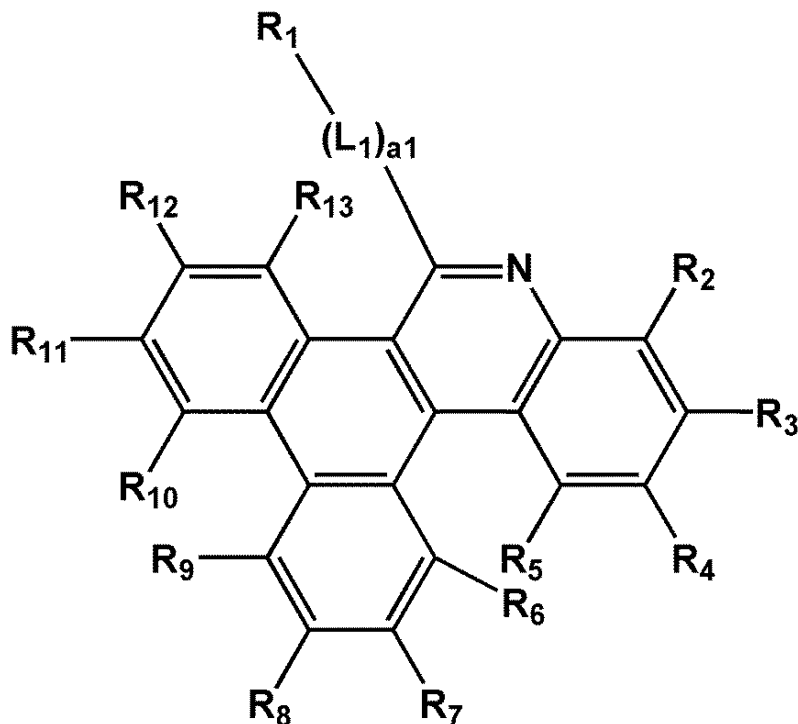
【課題を解決するための手段】

【0006】

一側面によれば、下記化学式 1、2 で表示される縮合環化合物が提供される：

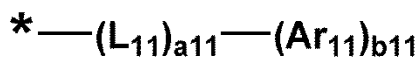
【0007】

【化 1】



【0008】

【化 2】



【0009】

前記化学式 1 及び 2 で、

L_1 及び L_{11} は、互いに独立して、置換もしくは非置換の C_3-C_{60} 炭素環式基、または置換もしくは非置換の C_1-C_{60} ヘテロ環式基であり、

a_1 及び a_{11} は、互いに独立して、0 ないし 3 のうちから選択された整数であり、

Ar_{11} は、置換もしくは非置換の C_3-C_{10} シクロアルキル基、置換もしくは非置換の C_1-C_{10} ヘテロシクロアルキル基、置換もしくは非置換の C_3-C_{10} シクロアルケニル基、置換もしくは非置換の C_1-C_{10} ヘテロシクロアルケニル基、置換もしくは非置換の C_6-C_{60} アリール基、置換もしくは非置換の C_6-C_{60} アリールオキシ基、置換もしくは非置換の C_6-C_{60} アリールチオ基、置換もしくは非置換の C_1-C_{60} ヘテロアリール基、置換もしくは非置換の一価非芳香族縮合多環基 (substituted or unsubstituted monovalent non-aromatic condensed polycyclic group)、置換もしくは非置換の一価非芳香族ヘテロ縮合多環基 (substituted or unsubstituted monovalent non-aromatic condensed heteropolycyclic group)、 $-Si(Q_1)(Q_2)(Q_3)$ 、 $-N(Q_1)(Q_2)$ 、 $-B(Q_1)(Q_2)$ 、 $-C(=O)(Q_1)$ 、 $-S(=O)_2(Q_1)$ 、及び $-P(=O)(Q_1)(Q_2)$ のうちから選択され、

b_{11} は、1 ないし 4 のうちから選択された整数であり、

R_1 は、 $-F$ 、 $-Cl$ 、 $-Br$ 、 $-I$ 、シアノ基及びニトロ基のうちから選択された少なくとも一つで置換された、 C_6-C_{60} アリール基、 C_1-C_{60} ヘテロアリール基、一価非芳香族縮合多環基及び一価非芳香族ヘテロ縮合多環基のうちから選択され、

R_2 ないし R_{13} は、互いに独立して、前記化学式 2 で表示される基、水素、重水素、 $-F$ 、 $-Cl$ 、 $-Br$ 、 $-I$ 、ヒドロキシル基、シアノ基、ニトロ基、アミノ基、アミジノ基、ヒドラジン基、ヒドラゾン基、カルボン酸基またはその塩、スルホン酸基またはその

塩、リン酸基またはその塩、置換もしくは非置換の C_1-C_{60} アルキル基、置換もしくは非置換の C_2-C_{60} アルケニル基、置換もしくは非置換の C_2-C_{60} アルキニル基、置換もしくは非置換の C_1-C_{60} アルコキシ基、置換もしくは非置換の C_3-C_{10} シクロアルキル基、置換もしくは非置換の C_2-C_{10} ヘテロシクロアルキル基、置換もしくは非置換の C_3-C_{10} シクロアルケニル基、置換もしくは非置換の C_2-C_{10} ヘテロシクロアルケニル基、置換もしくは非置換の C_6-C_{60} アリール基、置換もしくは非置換の C_6-C_{60} アリールオキシ基、置換もしくは非置換の C_6-C_{60} アリールチオ基、置換もしくは非置換の C_2-C_{60} ヘテロアリール基、置換もしくは非置換の一価非芳香族縮合多環基、置換もしくは非置換の一価非芳香族ヘテロ縮合多環基、 $-Si(Q_1)(Q_2)(Q_3)$ 、 $-N(Q_1)(Q_2)$ 、 $-B(Q_1)(Q_2)$ 、 $-S(=O)_2(Q_1)$ 、及び $-P(=O)(Q_1)(Q_2)$ のうちから選択され、

10

ただし、前記 R_2 ないし R_{13} において少なくとも一つは、前記化学式2で表示される基であり、

前記置換された C_3-C_{60} 炭素環式基、置換された C_1-C_{60} ヘテロ環式基、置換された C_1-C_{60} アルキル基、置換された C_2-C_{60} アルケニル基、置換された C_2-C_{60} アルキニル基、置換された C_1-C_{60} アルコキシ基、置換された C_3-C_{10} シクロアルキル基、置換された C_2-C_{10} ヘテロシクロアルキル基、置換された C_3-C_{10} シクロアルケニル基、置換された C_2-C_{10} ヘテロシクロアルケニル基、置換された C_6-C_{60} アリール基、置換された C_6-C_{60} アリールオキシ基、置換された C_6-C_{60} アリールチオ基、置換された C_2-C_{60} ヘテロアリール基、置換された一価非芳香族縮合多環基、及び置換された一価非芳香族ヘテロ縮合多環基の置換基のうち少なくとも一つは、

20

重水素、 $-F$ 、 $-Cl$ 、 $-Br$ 、 $-I$ 、ヒドロキシル基、シアノ基、ニトロ基、アミノ基、ヒドラジノ基、ヒドラゾノ基、 C_1-C_{60} アルキル基、 C_2-C_{60} アルケニル基、 C_2-C_{60} アルキニル基及び C_1-C_{60} アルコキシ基；

重水素、 $-F$ 、 $-Cl$ 、 $-Br$ 、 $-I$ 、ヒドロキシル基、シアノ基、ニトロ基、アミノ基、ヒドラジノ基、ヒドラゾノ基、 C_3-C_{10} シクロアルキル基、 C_1-C_{10} ヘテロシクロアルキル基、 C_3-C_{10} シクロアルケニル基、 C_1-C_{10} ヘテロシクロアルケニル基、 C_6-C_{60} アリール基、 C_6-C_{60} アリールオキシ基、 C_6-C_{60} アリールチオ基、 C_1-C_{60} ヘテロアリール基、一価非芳香族縮合多環基、一価非芳香族ヘテロ縮合多環基、 $-Si(Q_{11})(Q_{12})(Q_{13})$ 、 $-N(Q_{11})(Q_{12})$ 、 $-B(Q_{11})(Q_{12})$ 、 $-C(=O)(Q_{11})$ 、 $-S(=O)_2(Q_{11})$ 及び $-P(=O)(Q_{11})(Q_{12})$ のうちから選択された少なくとも一つで置換された、 C_1-C_{60} アルキル基、 C_2-C_{60} アルケニル基、 C_2-C_{60} アルキニル基及び C_1-C_{60} アルコキシ基；

30

C_3-C_{10} シクロアルキル基、 C_1-C_{10} ヘテロシクロアルキル基、 C_3-C_{10} シクロアルケニル基、 C_1-C_{10} ヘテロシクロアルケニル基、 C_6-C_{60} アリール基、 C_6-C_{60} アリールオキシ基、 C_6-C_{60} アリールチオ基、 C_1-C_{60} ヘテロアリール基、一価非芳香族縮合多環基、一価非芳香族ヘテロ縮合多環基、ビフェニル基及びターフェニル基；

重水素、 $-F$ 、 $-Cl$ 、 $-Br$ 、 $-I$ 、ヒドロキシル基、シアノ基、ニトロ基、アミノ基、ヒドラジノ基、ヒドラゾノ基、 C_1-C_{60} アルキル基、 C_2-C_{60} アルケニル基、 C_2-C_{60} アルキニル基、 C_1-C_{60} アルコキシ基、 C_3-C_{10} シクロアルキル基、 C_1-C_{10} ヘテロシクロアルキル基、 C_3-C_{10} シクロアルケニル基、 C_1-C_{10} ヘテロシクロアルケニル基、 C_6-C_{60} アリール基、 C_6-C_{60} アリールオキシ基、 C_6-C_{60} アリールチオ基、 C_1-C_{60} ヘテロアリール基、一価非芳香族縮合多環基、一価非芳香族ヘテロ縮合多環基、ビフェニル基、ターフェニル基、 $-Si(Q_{21})(Q_{22})(Q_{23})$ 、 $-N(Q_{21})(Q_{22})$ 、 $-B(Q_{21})(Q_{22})$ 、 $-C(=O)(Q_{21})$ 、 $-S(=O)_2(Q_{21})$ 及び $-P(=O)(Q_{21})(Q_{22})$ のうちから選択された少なくとも一つで置換された、 C_3-C_{10} シクロアルキル基、 C_1-C_{10} ヘテロシクロアルキル基、 C_3-C_{10} シクロアルケニル基、 C_1-C_{10} ヘテロシクロアルケニル基、 C_6-C_{60} アリール基、 C_6-C_{60} アリールオキシ基、 C_6-C_{60} アリールチオ基、 C_1-C_{60} ヘテロアリール基、一価非芳香族縮合多環基、一価非芳香族ヘテロ縮合多環基、ビフェニル基及びターフェニル基；並びに

40

50

—Si(Q₃₁)(Q₃₂)(Q₃₃)、—N(Q₃₁)(Q₃₂)、—B(Q₃₁)(Q₃₂)、
—C(=O)(Q₃₁)、—S(=O)₂(Q₃₁)及び—P(=O)(Q₃₁)(Q₃₂)；の
うちから選択され、

前記Q₁ないしQ₃、Q₁₁ないしQ₁₃、Q₂₁ないしQ₂₃、及びQ₃₁ないしQ₃₃は、互い
に独立して、水素、重水素、—F、—Cl、—Br、—I、ヒドロキシ基、シアノ基、
ニトロ基、アミノ基、ヒドラジノ基、ヒドラゾノ基、C₁—C₆₀アルキル基、C₂—C₆₀
アルケニル基、C₂—C₆₀アルキニル基、C₁—C₆₀アルコキシ基、C₃—C₁₀シクロアル
キル基、C₁—C₁₀ヘテロシクロアルキル基、C₃—C₁₀シクロアルケニル基、C₁—C₁₀
ヘテロシクロアルケニル基、C₆—C₆₀アリール基、C₁—C₆₀アルキル基で置換されたC
6—C₆₀アリール基、C₁—C₆₀ヘテロアリール基、一価非芳香族縮合多環基、一価非芳香
族ヘテロ縮合多環基、ビフェニル基、及びターフェニル基；並びに

10

—F、—Cl、—Br、—I及びシアノ基のうちから選択された少なくとも一つで置換
されたC₆—C₆₀アリール基のうちから選択され、

*は、隣接原子との結合サイトである。

【0010】

他の側面によれば、第1電極と、前記第1電極に対向した第2電極と、前記第1電極と
前記第2電極との間に介在されて発光層を含む有機層と、を含み、前記有機層は、前記縮
合環化合物を1種以上含む有機発光素子が提供される。

【発明の効果】

【0011】

20

本発明の有機発光素子は、低駆動電圧、高効率及び長寿命を有する。

【図面の簡単な説明】

【0012】

【図1】一実施形態による有機発光素子の構造を概略的に示した図面である。

【図2】一実施形態による有機発光素子の構造を概略的に示した図面である。

【図3】一実施形態による有機発光素子の構造を概略的に示した図面である。

【図4】一実施形態による有機発光素子の構造を概略的に示した図面である。

【発明を実施するための形態】

【0013】

本発明の縮合環化合物は、下記化学式3、4で表示される。

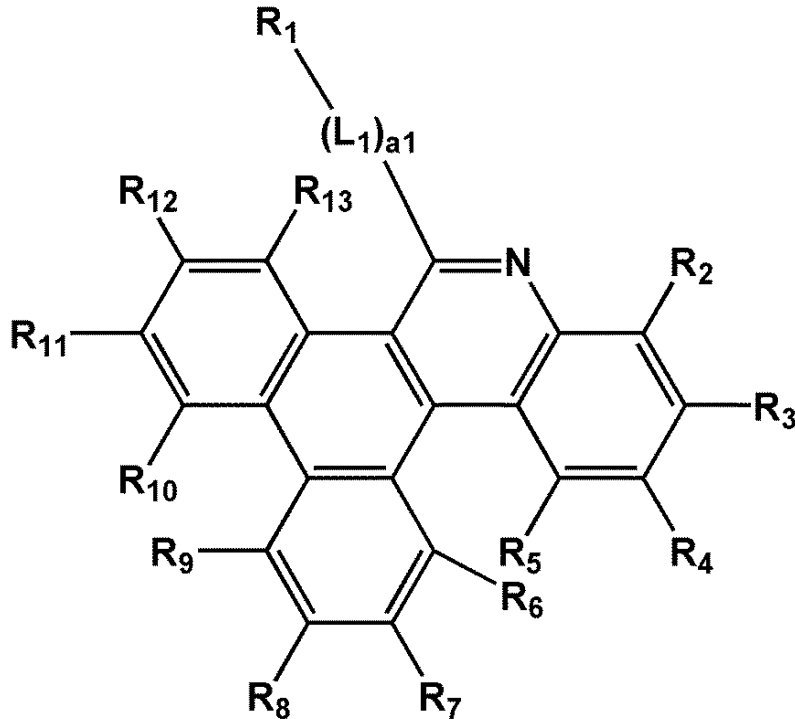
30

【0014】

40

50

【化 3】



【 0 0 1 5 】

【化 4】

*—(L₁₁)_{a11}—(Ar₁₁)_{b11}

【 0 0 1 6 】

前記化学式 3 及び 4 で、

L₁ 及び L₁₁ は、互いに独立して、置換もしくは非置換の C₃—C₆₀ 炭素環式基、または置換もしくは非置換の C₁—C₆₀ ヘテロ環式基である。

【 0 0 1 7 】

一実施形態によれば、前記 L₁ 及び L₁₁ は、互いに独立して、

フェニレン基、ペンタレニレン基、インデニレン基、ナフタレニレン基、アズレニレン基、ヘプタレニレン基、インダセニレン基、アセナフタレニレン基、フルオレニレン基、スピロ—ビフルオレニレン基、スピロ—ベンゾフルオレン—フルオレニレン基、ベンゾフルオレニレン基、ジベンゾフルオレニレン基、フェナレニレン基、フェナントレニレン基、アントラセニレン基、フルオランテニレン基、トリフェニレニレン基、ピレニレン基、クリセニレン基、ナフタセニレン基、ピセニレン基、ペリレニレン基、ピローリレン基、チオフェニレン基、フラニレン基、シローリレン基、イミダゾリレン基、ピラゾリレン基、チアゾリレン基、イソチアゾリレン基、オキサゾリレン基、イソキサゾリレン基、ピリジニレン基、ピラジニレン基、ピリミジニレン基、ピリダジニレン基、トリアジニレン基、ベンゾフラニレン基、ベンゾチオペニレン基、ベンゾシロリレン基、ジベンゾフラニレン基、ジベンゾチオフェニレン基、ジベンゾシロリレン基、カルバゾリレン基、キノリニレン基、イソキノリニレン基、ベンゾカルバゾリレン基、ジベンゾカルバゾリレン基、ベンゾイミダゾリレン基、イミダゾピリジニレン基及びイミダゾピリミジニレン基；

重水素、—F、—Cl、—Br、—I、ヒドロキシ基、シアノ基、C₁—C₂₀ アルキル基、C₁—C₂₀ アルコキシ基、シクロペンチル基、シクロヘキシル基、シクロヘプチル基、シクロペンテニル基、シクロヘキセニル基、フェニル基、ビフェニル基、ターフェニ

ル基、ペンタレニル基、インデニル基、ナフチル基、アズレニル基、ヘプタレニル基、インダセニル基、アセナフチル基、フルオレニル基、スピロービフルオレニル基、ベンゾフルオレニル基、ジベンゾフルオレニル基、フェナレニル基、フェナントレニル基、アントラセニル基、フルオランテニル基、トリフェニレニル基、ピレニル基、クリセニル基、ナフタセニル基、ピセニル基、ペリレニル基、ペンタフェニル基、ヘキサセニル基、ペンタセニル基、ルビセニル基、コロネニル基、オバレニル基、ピロリル基、チオフェニル基、フラニル基、カルバゾリル基、ピリジニル基、ピラジニル基、ピリミジニル基、ピリダジニル基、キノリニル基、イソキノリニル基、ベンゾフラニル基、ベンゾチオフェニル基、ジベンゾフラニル基、ジベンゾチオフェニル基、ベンゾカルバゾリル基、ジベンゾカルバゾリル基、 $-Si(Q_{31})(Q_{32})(Q_{33})$ 、 $-N(Q_{31})(Q_{32})$ 及び $-B(Q_{31})(Q_{32})$ のうちから選択された少なくとも一つで置換された、フェニレン基、ペンタレニレン基、インデニレン基、ナフタレニレン基、アズレニレン基、ヘプタレニレン基、インダセニレン基、アセナフタレニレン基、フルオレニレン基、スピロービフルオレニレン基、スピローベンゾフルオレニレン基、ベンゾフルオレニレン基、ジベンゾフルオレニレン基、フェナレニレン基、フェナントレニレン基、アントラセニレン基、フルオランテニレン基、トリフェニレニレン基、ピレニレン基、クリセニレン基、ナフタセニレン基、ピセニレン基、ペリレニレン基、ピローリレン基、チオフェニレン基、フラニレン基、シローリレン基、イミダゾリレン基、ピラゾリレン基、チアゾリレン基、イソチアゾリレン基、オキサゾリレン基、イソキサゾリレン基、ピリジニレン基、ピラジニレン基、ピリミジニレン基、ピリダジニレン基、トリアジニレン基、ベンゾフラニレン基、ベンゾチオペニレン基、ベンゾシロリレン基、ジベンゾフラニレン基、ジベンゾチオフェニレン基、ジベンゾシロリレン基、カルバゾリレン基、キノリニレン基、イソキノリニレン基、ベンゾカルバゾリレン基、ジベンゾカルバゾリレン基、ベンゾイミダゾリレン基、イミダゾピリジニレン基及びイミダゾピリミジニレン基のうちから選択される。

【0018】

例えば、 L_1 及び L_{11} は、互いに独立して、

フェニレン基、ナフタレニレン基、アントラセニレン基、フルオレニレン基、スピロービフルオレニレン基、ピリジニレン基、ピリミジニレン基、トリアジニレン基、カルバゾリレン基、キノリニレン基及びイソキノリニレン基；並びに

$-F$ 、 $-Cl$ 、 $-Br$ 、 $-I$ 、シアノ基、 C_1-C_{20} アルキル基、フェニル基、ビフェニル基、ピリジニル基及びフルオレニル基のうちから選択された少なくとも一つで置換された、フェニレン基、ナフタレニレン基、アントラセニレン基、フルオレニレン基、スピロービフルオレニレン基、ピリジニレン基、ピリミジニレン基、トリアジニレン基、カルバゾリレン基、キノリニレン基及びイソキノリニレン基；のうちからも選択されるが、それらに限定されるものではない。

【0019】

例えば、前記 L_1 及び L_{11} は、互いに独立して、

下記化学式 3-1 ないし化学式 3-33 で表示される基のうちからも選択されるが、それらに限定されるものではない。

【0020】

10

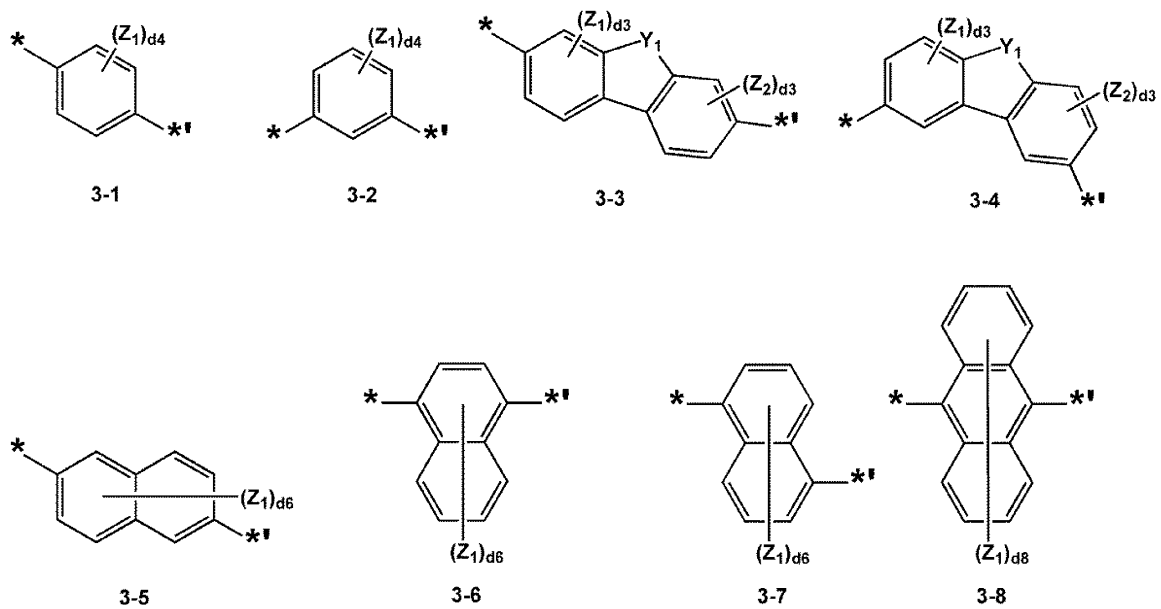
20

30

40

50

【化 5】



【 0 0 2 1 】

10

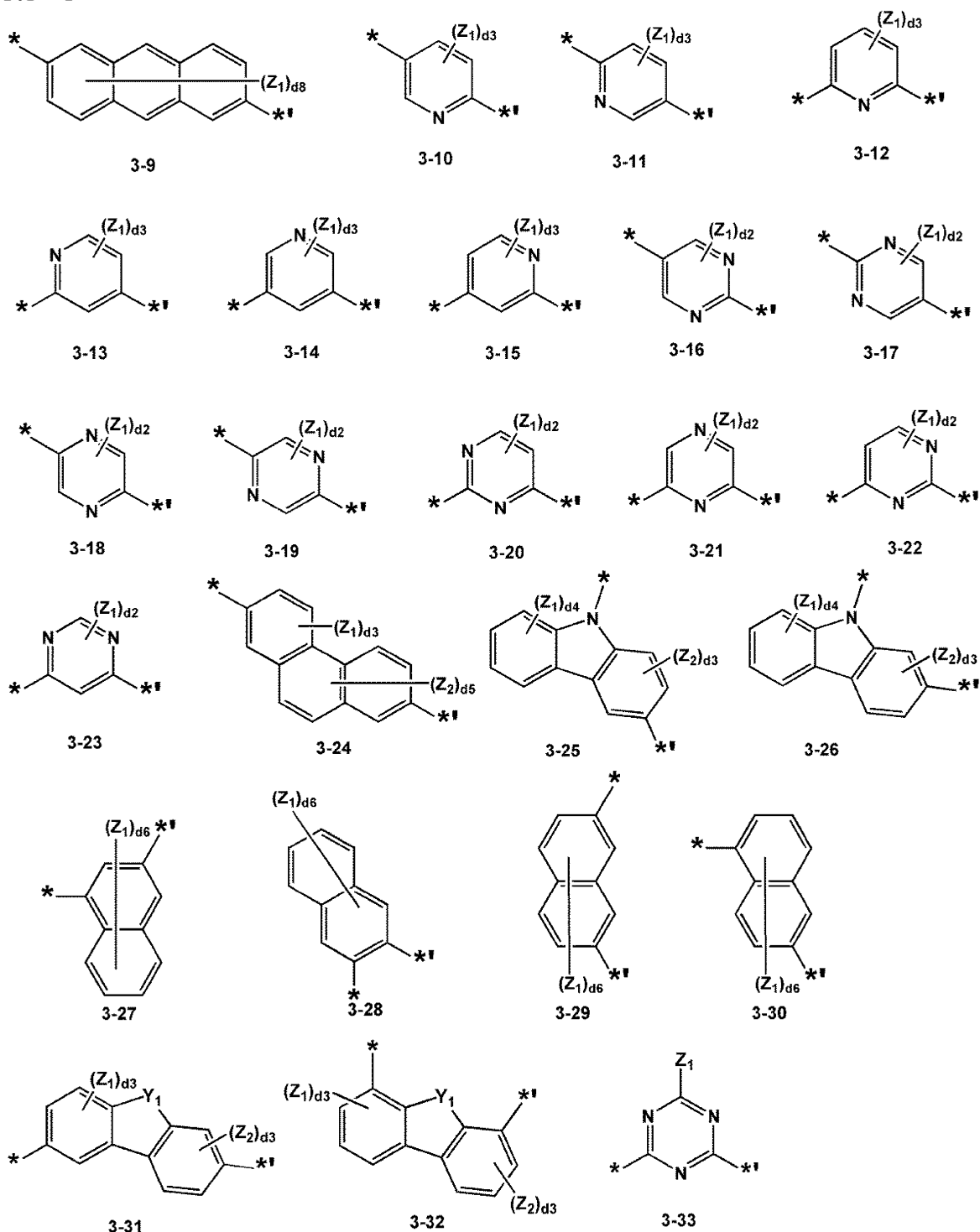
20

30

40

50

【化 6】



【 0 0 2 2 】

前記化学式 3-1 ないし 3-33 で、

Y_1 は、O、S、C (Z_3) (Z_4)、N (Z_5) または Si (Z_6) (Z_7) であり、

Z_1 ないし Z_7 は、互いに独立して、水素、重水素、-F、-Cl、-Br、-I、ヒドロキシル基、シアノ基、 C_1-C_{20} アルキル基、 C_1-C_{20} アルコキシ基、シクロペンチル基、シクロヘキシル基、シクロヘプチル基、シクロペンテニル基、シクロヘキセニル基、フェニル基、ピフェニル基、ターフェニル基、ナフチル基、フルオレニル基、スピロービフルオレニル基、ベンゾフルオレニル基、ジベンゾフルオレニル基、フェナントレニル基、アントラセニル基、フルオランテニル基、トリフェニレニル基、ピレニル基、クリセニル基、ピロリル基、チオフェニル基、フラニル基、シロリル基、イミダゾリル基、ピラゾ

リル基、チアゾリル基、イソチアゾリル基、オキサゾリル基、イソキサゾリル基、ピリジニル基、ピラジニル基、ピリミジニル基、ピリダジニル基、ベンゾフラニル基、ベンゾチオフェニル基、ベンゾシロリル基、ジベンゾフラニル基、ジベンゾチオフェニル基、ジベンゾシロリル基、カルバゾリル基、ベンゾカルバゾリル基、ジベンゾカルバゾリル基及び $-Si(Q_{31})(Q_{32})(Q_{33})$; 並びに

$-F$ 、 $-Cl$ 、 $-Br$ 、 $-I$ 及びシアノ基のうちから選択された少なくとも一つで置換されたフェニル基のうちから選択され、

前記 Q_{31} ないし Q_{33} は、互いに独立して、 C_1-C_{20} アルキル基、 C_1-C_{20} アルコキシ基、フェニル基、ビフェニル基、ターフェニル基、ナフチル基及びピリジニル基のうちから選択され、

d_2 は、0 ないし 2 の整数であり、

d_3 は、0 ないし 3 の整数であり、

d_4 は、0 ないし 4 の整数であり、

d_6 は、0 ないし 6 の整数であり、

d_8 は、0 ないし 8 の整数であり、

* 及び * ' は、隣接原子との結合サイトである。

【0023】

前記化学式 3 及び 4 で、 a_1 及び a_{11} は、互いに独立して、0 ないし 3 のうちから選択された整数であり、 a_1 が 0 である場合、 $-(L_1)_{a_1}-*$ ' は、単結合であり、 a_1 が 2 以上である場合、2 以上の L_1 は、互いに同一であってもよく、異なってもよく、 a_{11} が 0 である場合、 $-(L_{11})_{a_{11}}-*$ ' は、単結合であり、 a_{11} が 2 以上である場合、2 以上の L_{11} は、互いに同一であっても異なってもよい。

【0024】

一実施形態によれば、前記化学式 3 及び 4 で、 a_1 は、0 または 1 であり、 a_{11} は、0 ないし 2 のうちから選択された整数である。

【0025】

前記化学式 4 で、 Ar_{11} は、置換もしくは非置換の C_3-C_{10} シクロアルキル基、置換もしくは非置換の C_1-C_{10} ヘテロシクロアルキル基、置換もしくは非置換の C_3-C_{10} シクロアルケニル基、置換もしくは非置換の C_1-C_{10} ヘテロシクロアルケニル基、置換もしくは非置換の C_6-C_{60} アリール基、置換もしくは非置換の C_6-C_{60} アリールオキシ基、置換もしくは非置換の C_6-C_{60} アリールチオ基、置換もしくは非置換の C_1-C_{60} ヘテロアリール基、置換もしくは非置換の一価非芳香族縮合多環基 (substituted or unsubstituted monovalent non-aromatic condensed polycyclic group)、置換もしくは非置換の一価非芳香族ヘテロ縮合多環基 (substituted or unsubstituted monovalent non-aromatic condensed heteropolycyclic group)、 $-Si(Q_1)(Q_2)(Q_3)$ 、 $-N(Q_1)(Q_2)$ 、 $-B(Q_1)(Q_2)$ 、 $-C(=O)(Q_1)$ 、 $-S(=O)_2(Q_1)$ 、及び $-P(=O)(Q_1)(Q_2)$ のうちから選択され、

前記 Q_1 ないし Q_3 は、互いに独立して、水素、重水素、 $-F$ 、 $-Cl$ 、 $-Br$ 、 $-I$ 、ヒドロキシル基、シアノ基、ニトロ基、アミジノ基、ヒドラジノ基、ヒドラゾノ基、 C_1-C_{60} アルキル基、 C_2-C_{60} アルケニル基、 C_2-C_{60} アルキニル基、 C_1-C_{60} アルコキシ基、 C_3-C_{10} シクロアルキル基、 C_1-C_{10} ヘテロシクロアルキル基、 C_3-C_{10} シクロアルケニル基、 C_1-C_{10} ヘテロシクロアルケニル基、 C_6-C_{60} アリール基、 C_1-C_{60} アルキル基で置換された C_6-C_{60} アリール基、 C_1-C_{60} ヘテロアリール基、一価非芳香族縮合多環基、一価非芳香族ヘテロ縮合多環基、ビフェニル基、及びターフェニル基 ; 並びに

$-F$ 、 $-Cl$ 、 $-Br$ 、 $-I$ 及びシアノ基のうちから選択された少なくとも一つで置換された C_6-C_{60} アリール基のうちから選択される。

【0026】

一実施形態によれば、前記 Ar_{11} は、フェニル基、ビフェニル基、ターフェニル基、ペントレニル基、インデニル基、ナフチル基、アズレニル基、ヘプタレニル基、インダセニ

10

20

30

40

50

ル基、アセナフチル基、フルオレニル基、スピロービフルオレニル基、ベンゾフルオレニル基、ジベンゾフルオレニル基、フェナレニル基、フェナントレニル基、アントラセニル基、フルオランテニル基、トリフェニレニル基、ピレニル基、クリセニル基、ナフタセニル基、ピセニル基、ペリレニル基、ペンタフェニル基、ヘキサセニル基、ペンタセニル基、ルビセニル基、コロネニル基、オバレニル基、ピリジニル基、ピラジニル基、ピリミジニル基、ピリダジニル基、トリアジニル基、チオフェニル基、フラニル基、キノリニル基、イソキノリニル基、カルバゾリル基、ベンゾフラニル基、ベンゾチオフェニル基、ジベンゾフラニル基、ジベンゾチオフェニル基、ベンゾナフトフラニル基、ジナフトフラニル基、ベンゾカルバゾリル基、ジベンゾカルバゾリル基、ジベンゾシロリル基、ベンゾナフトシロリル基、ジナフトシロリル基、ベンゾイミダゾリル基、フェナントロリニル基及びイミダゾピリジニル基；

10

重水素、 $-F$ 、 $-Cl$ 、 $-Br$ 、 $-I$ 、ヒドロキシル基、シアノ基、ニトロ基、アミジノ基、ヒドラジノ基、ヒドラゾノ基、 C_1-C_{20} アルキル基、 C_1-C_{20} アルコキシ基、シクロペンチル基、シクロヘキシル基、シクロヘプチル基、シクロペンテニル基、シクロヘキセニル基、フェニル基、ビフェニル基、ターフェニル基、ペンタレニル基、インデニル基、ナフチル基、アズレニル基、ヘプタレニル基、インダセニル基、アセナフチル基、フルオレニル基、スピロービフルオレニル基、ベンゾフルオレニル基、ジベンゾフルオレニル基、フェナレニル基、フェナントレニル基、アントラセニル基、フルオランテニル基、トリフェニレニル基、ピレニル基、クリセニル基、ナフタセニル基、ピセニル基、ペリレニル基、ペンタフェニル基、ヘキサセニル基、ペンタセニル基、ルビセニル基、コロネニル基、オバレニル基、ピリジニル基、ピラジニル基、ピリミジニル基、ピリダジニル基、トリアジニル基、チオフェニル基、フラニル基、キノリニル基、イソキノリニル基、カルバゾリル基、ベンゾフラニル基、ベンゾチオフェニル基、ジベンゾフラニル基、ジベンゾチオフェニル基、ベンゾカルバゾリル基、ジベンゾカルバゾリル基、ジベンゾシロリル基、 $-N(Q_{31})(Q_{32})$ 及び $-Si(Q_{31})(Q_{32})(Q_{33})$ のうちから選択された少なくとも一つで置換された、フェニル基、ビフェニル基、ターフェニル基、ペンタレニル基、インデニル基、ナフチル基、アズレニル基、ヘプタレニル基、インダセニル基、アセナフチル基、フルオレニル基、スピロービフルオレニル基、ベンゾフルオレニル基、ジベンゾフルオレニル基、フェナレニル基、フェナントレニル基、アントラセニル基、フルオランテニル基、トリフェニレニル基、ピレニル基、クリセニル基、ナフタセニル基、ピセニル基、ペリレニル基、ペンタフェニル基、ヘキサセニル基、ペンタセニル基、ルビセニル基、コロネニル基、オバレニル基、ピリジニル基、ピラジニル基、ピリミジニル基、ピリダジニル基、トリアジニル基、チオフェニル基、フラニル基、キノリニル基、イソキノリニル基、カルバゾリル基、ベンゾフラニル基、ベンゾチオフェニル基、ジベンゾフラニル基、ジベンゾチオフェニル基、ベンゾナフトフラニル基、ジナフトフラニル基、ベンゾカルバゾリル基、ジベンゾカルバゾリル基、ジベンゾシロリル基、ベンゾナフトシロリル基、ジナフトシロリル基、ベンゾイミダゾリル基、フェナントロリニル基及びイミダゾピリジニル基；並びに

20

30

$-N(Q_1)(Q_2)$ 、 $-B(Q_1)(Q_2)$ 、 $-S(=O)_2(Q_1)$ 及び $-P(=O)(Q_1)(Q_2)$ ；のうちから選択され、

40

前記 Q_1 、 Q_2 、及び Q_{31} ないし Q_{33} は、互いに独立して、 C_1-C_{20} アルキル基、 C_1-C_{20} アルコキシ基、フェニル基、ビフェニル基、ターフェニル基、ナフチル基及びピリジニル基；並びに

$-F$ 、 $-Cl$ 、 $-Br$ 、 $-I$ 、シアノ基及び C_1-C_{20} アルキル基のうちから選択された少なくとも一つで置換されたフェニル基のうちからも選択される。

【0027】

例えば、前記 Ar_{11} は、フェニル基、ビフェニル基、ナフチル基、フルオレニル基、ピリジニル基、ピリミジニル基、トリアジニル基、キノリニル基、カルバゾリル基及びフェナントロリニル基；

重水素、 $-F$ 、 $-Cl$ 、 $-Br$ 、 $-I$ 、ヒドロキシル基、シアノ基、ニトロ基、アミジ

50

ノ基、ヒドラジノ基、ヒドラゾノ基、 C_1-C_{20} アルキル基、 C_1-C_{20} アルコキシ基、フェニル基、ビフェニル基、ナフチル基、フルオレニル基、ピリジニル基、ピリミジニル基、トリアジニル基、キノリニル基、カルバゾリル基、フェナントロリニル基、 $-N(Q_{31})(Q_{32})$ 及び $-Si(Q_{31})(Q_{32})(Q_{33})$ のうちから選択された少なくとも一つで置換された、フェニル基、ビフェニル基、ナフチル基、フルオレニル基、ピリジニル基、ピリミジニル基、トリアジニル基、キノリニル基、カルバゾリル基及びフェナントロリニル基；並びに

$-N(Q_1)(Q_2)$ 、 $-B(Q_1)(Q_2)$ 、 $-S(=O)_2(Q_1)$ 及び $-P(=O)(Q_1)(Q_2)$ ；のうちから選択され、

前記 Q_1 、 Q_2 、及び Q_{31} ないし Q_{33} は、互いに独立して、 C_1-C_{20} アルキル基、 C_1-C_{20} アルコキシ基、フェニル基、ビフェニル基、ターフェニル基、ナフチル基及びピリジニル基、並びに

$-F$ 、 $-Cl$ 、 $-Br$ 、 $-I$ 、シアノ基及び C_1-C_{20} アルキル基のうちから選択された少なくとも一つで置換されたフェニル基；のうちからも選択される。

【0028】

例えば、前記 Ar_{11} は、下記化学式5-1ないし化学式5-47で表示される基、 $-N(Q_1)(Q_2)$ 、 $-B(Q_1)(Q_2)$ 、 $-S(=O)_2(Q_1)$ 、及び $-P(=O)(Q_1)(Q_2)$ ；のうちからも選択される：

【0029】

10

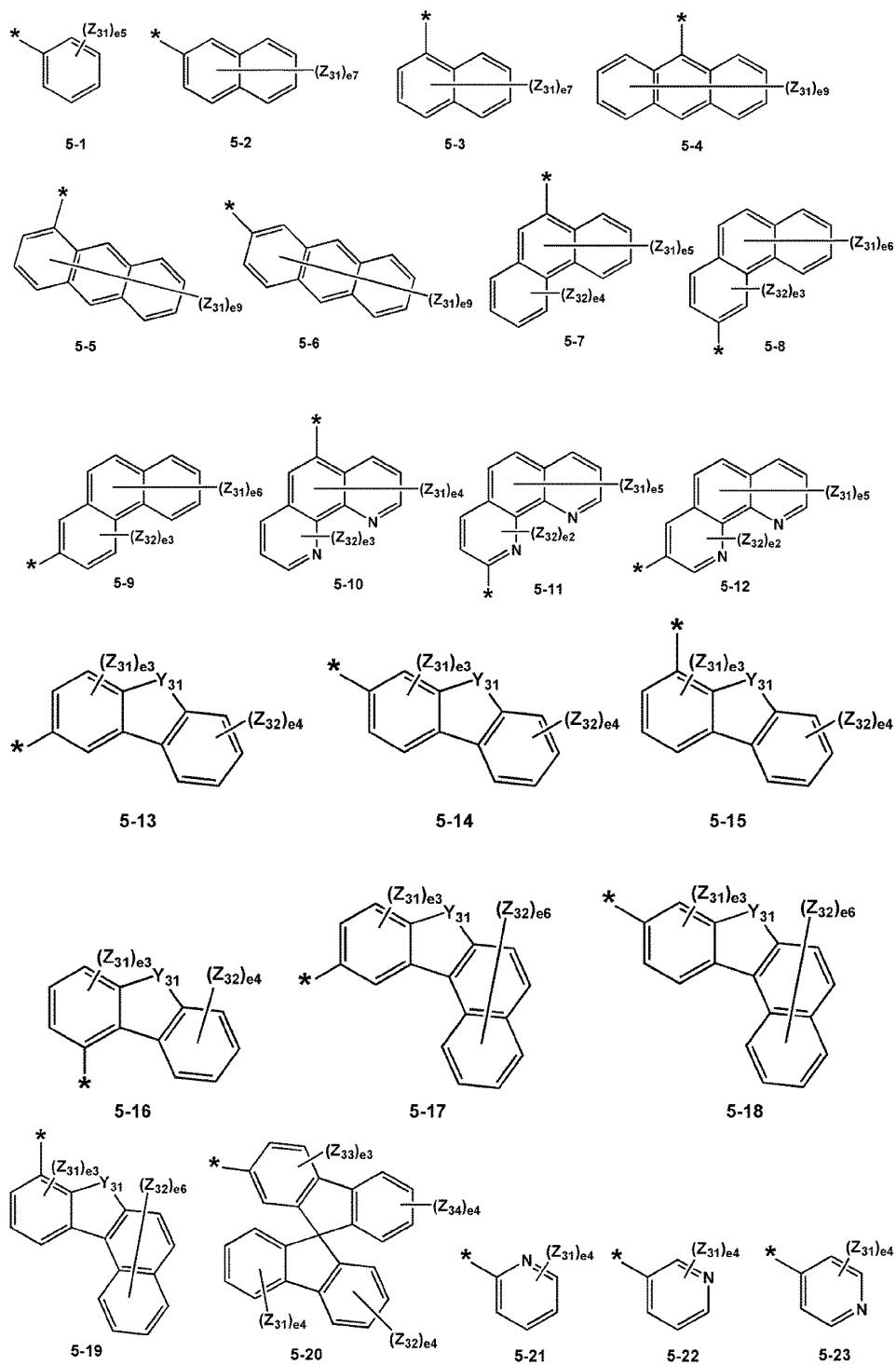
20

30

40

50

【化 7】



【 0 0 3 0 】

10

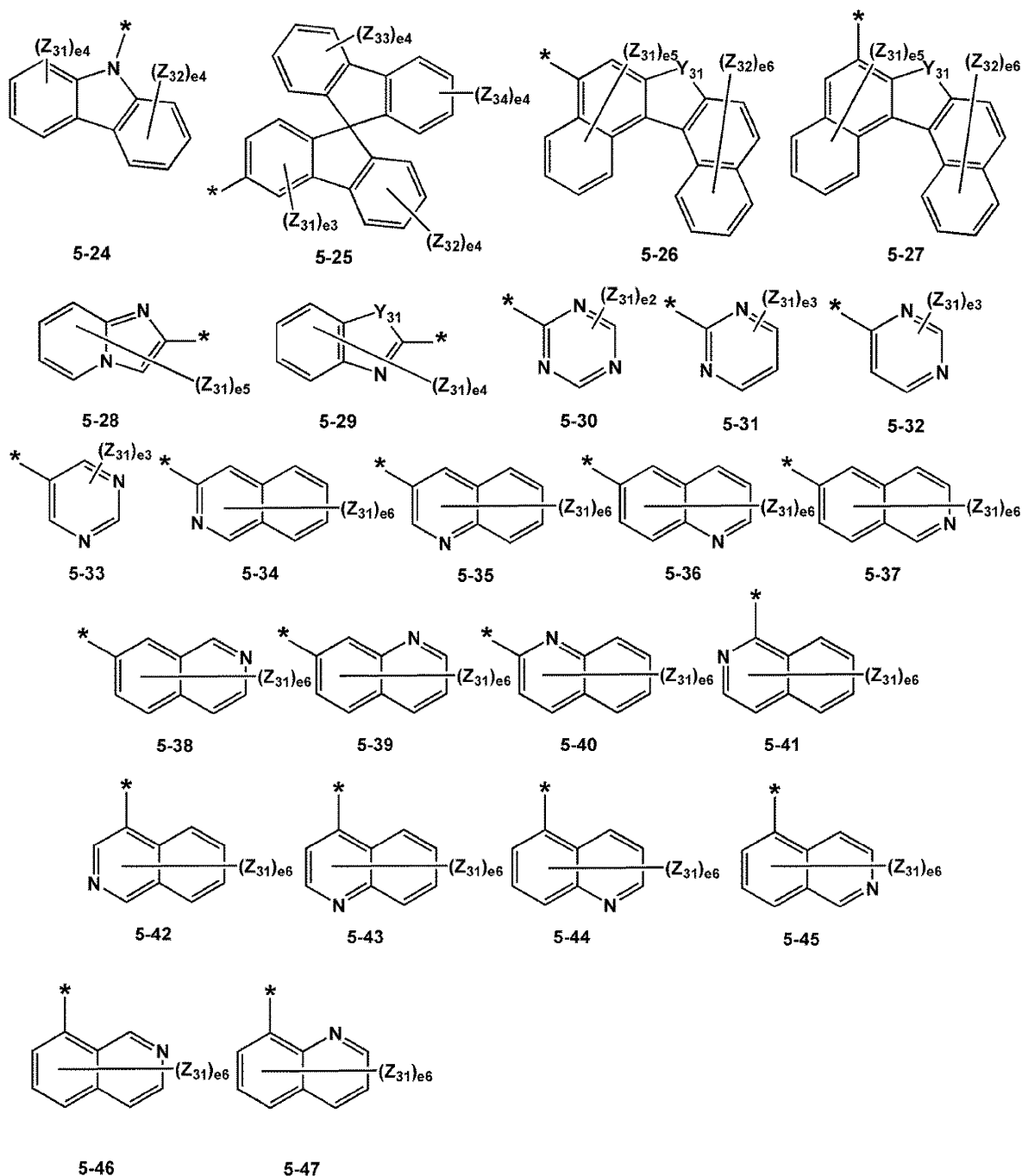
20

30

40

50

【化 8】



【0031】

前記化学式 5-1 ないし 5-47 で、

Y_{31} は、O、S、C (Z_{33}) (Z_{34})、N (Z_{35}) または Si (Z_{36}) (Z_{37}) であり、

Z_{31} ないし Z_{37} は、互いに独立して、水素、重水素、-F、-Cl、-Br、-I、ヒドロキシル基、シアノ基、 C_1-C_{20} アルキル基、 C_1-C_{20} アルコキシ基、シクロペンチル基、シクロヘキシル基、シクロヘプチル基、シクロペンテニル基、シクロヘキセニル基、フェニル基、ビフェニル基、ターフェニル基、ペンタレニル基、インデニル基、ナフチル基、アズレニル基、ヘプタレニル基、インダセニル基、アセナフチル基、フルオレニル基、スピロ-ビフルオレニル基、ベンゾフルオレニル基、ジベンゾフルオレニル基、フェナレニル基、フェナントレニル基、アントラセニル基、フルオランテニル基、トリフェニル基、ピレニル基、クリセニル基、ナフタセニル基、ピセニル基、ペリレニル基、ペ

ンタフェニル基、ヘキサセニル基、ペンタセニル基、ルビセニル基、コロネニル基、オバレニル基、ピロリル基、チオフェニル基、フラニル基、シロリル基、ピリジニル基、インドリル基、イソインドリル基、ベンゾフラニル基、ベンゾチオフェニル基、ベンゾシロリル基、ジベンゾフラニル基、ジベンゾチオフェニル基、ジベンゾシロリル基、カルバゾリル基、ベンゾカルバゾリル基、ジベンゾカルバゾリル基及び-Si(Q₃₁)(Q₃₂)(Q₃₃)；並びに

-F、-Cl、-Br、-I及びシアノ基のうちから選択された少なくとも一つで置換されたフェニル基のうちから選択され、

前記Q₁、Q₂、及びQ₃₁ないしQ₃₃は、互いに独立して、C₁-C₂₀アルキル基、C₁-C₂₀アルコキシ基、フェニル基、ビフェニル基、ターフェニル基ナフチル基及びピリジニル基、並びに

-F、-Cl、-Br、-I、シアノ基及びC₁-C₂₀アルキル基のうちから選択された少なくとも一つで置換されたフェニル基；のうちから選択され、

e₂は、0ないし2のうちから選択された整数であり、

e₃は、0ないし3のうちから選択された整数であり、

e₄は、0ないし4のうちから選択された整数であり、

e₅は0ないし5のうちから選択された整数であり、

e₆は、0ないし6のうちから選択された整数であり、

e₇は、0ないし7のうちから選択された整数であり、

e₉は、0ないし9のうちから選択された整数であり、

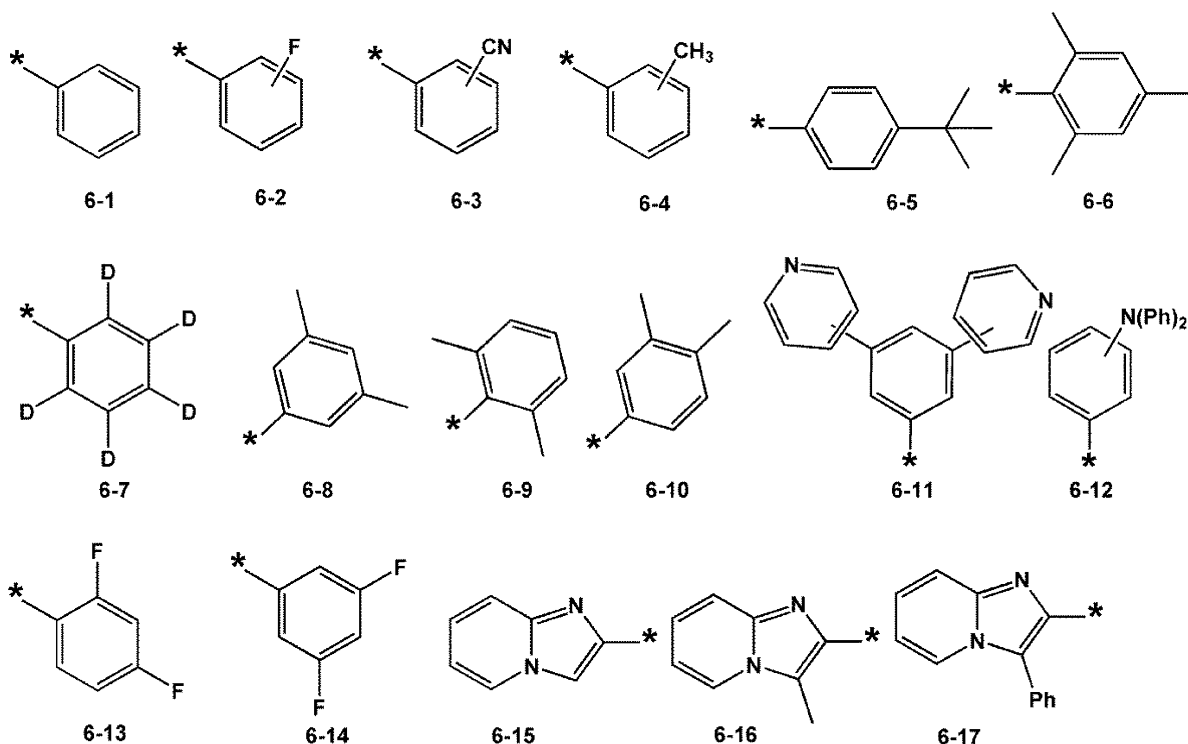
*は、隣接原子との結合サイトである。

【0032】

他の実施形態によれば、前記Ar₁₁は、下記化学式6-1ないし6-62で表示される基、及び下記化学式10-1ないし10-20で表示される基のうちからも選択されるが、それらに限定されるものではない：

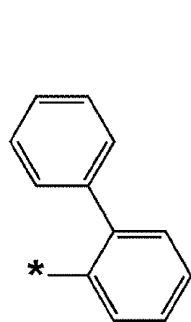
【0033】

【化9】

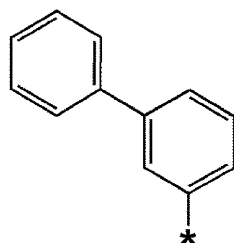


【0034】

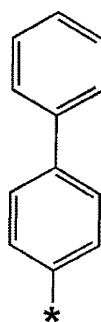
【化 1 0】



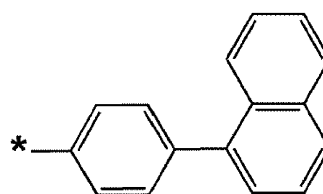
6-18



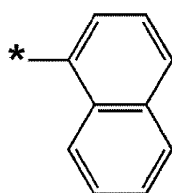
6-19



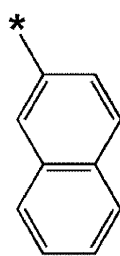
6-20



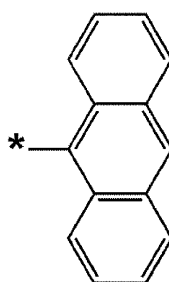
6-21



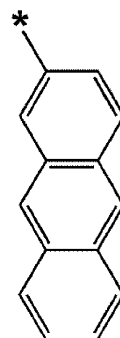
6-22



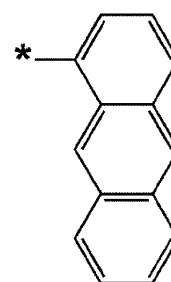
6-23



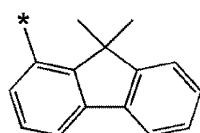
6-24



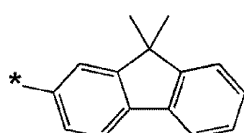
6-25



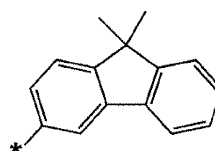
6-26



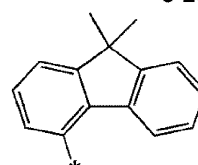
6-27



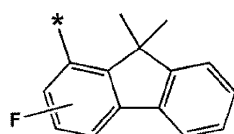
6-28



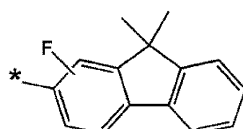
6-29



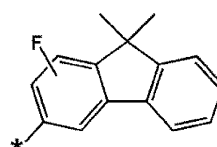
6-30



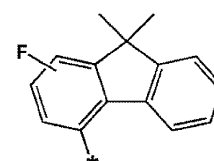
6-31



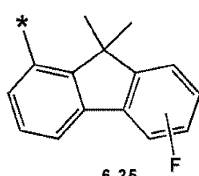
6-32



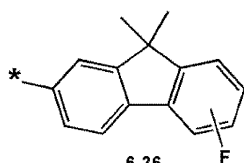
6-33



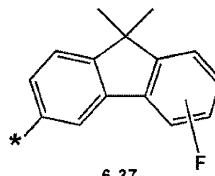
6-34



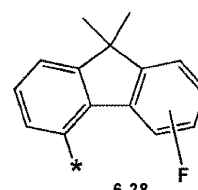
6-35



6-36



6-37



6-38

【 0 0 3 5】

10

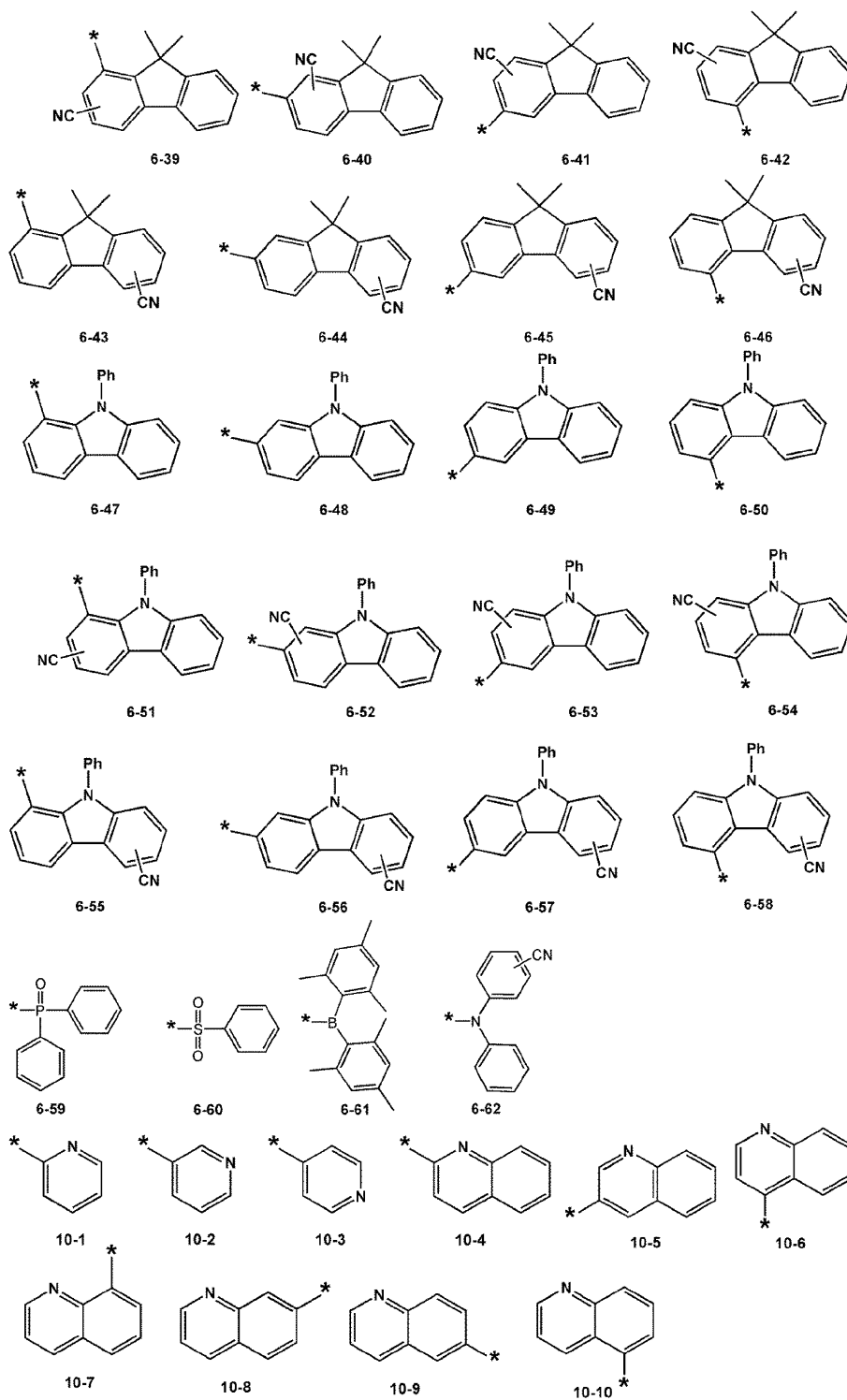
20

30

40

50

【化 1 1】



【0 0 3 6】

10

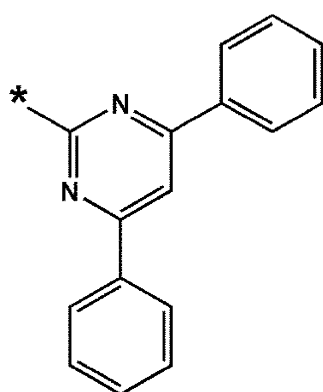
20

30

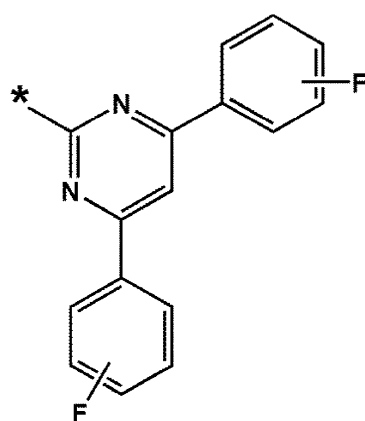
40

50

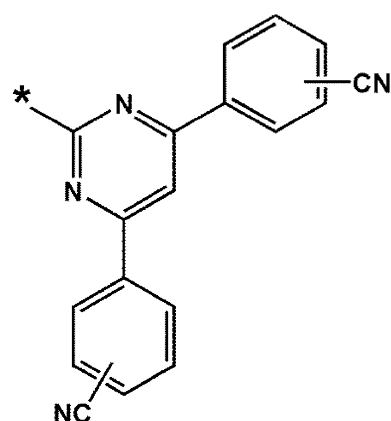
【化 1 2】



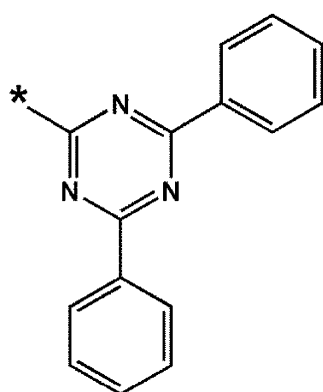
10-11



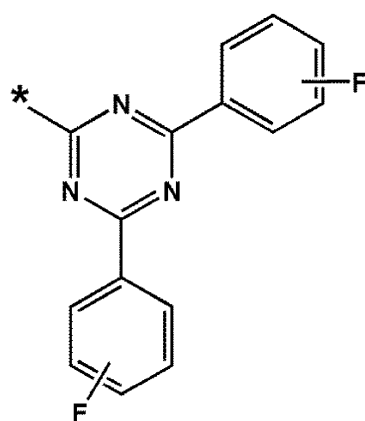
10-12



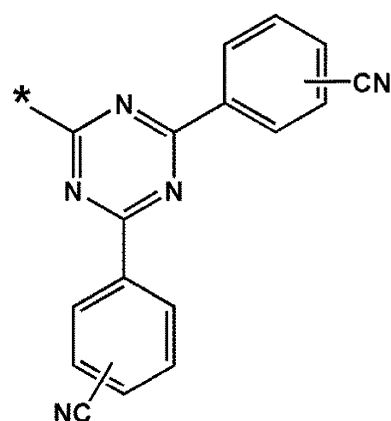
10-13



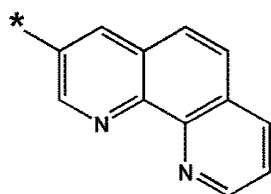
10-14



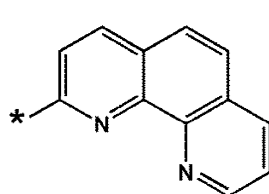
10-15



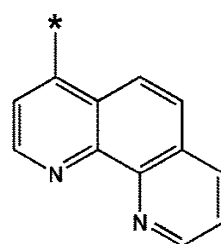
10-16



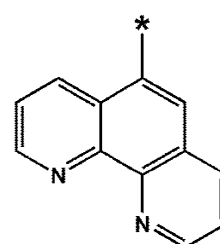
10-17



10-18



10-19



10-20

【0037】

前記化学式 6-1 ないし 6-62、及び化学式 10-1 ないし 10-20 で Ph は、フェニル基であり、* は、隣接原子との結合サイトである。

【0038】

例えば、前記 Ar₁ は、化学式 6-1 ないし 6-3、6-11、6-14、6-23、6-35 ないし 6-38、6-43 ないし 6-46、6-55 ないし 6-62 で表示される基、及び下記化学式 10-1 ないし 10-12、10-14、10-15、及び 10-17 ないし 10-20 で表示される基のうちからも選択されるが、それらに限定されるものではない。

【0039】

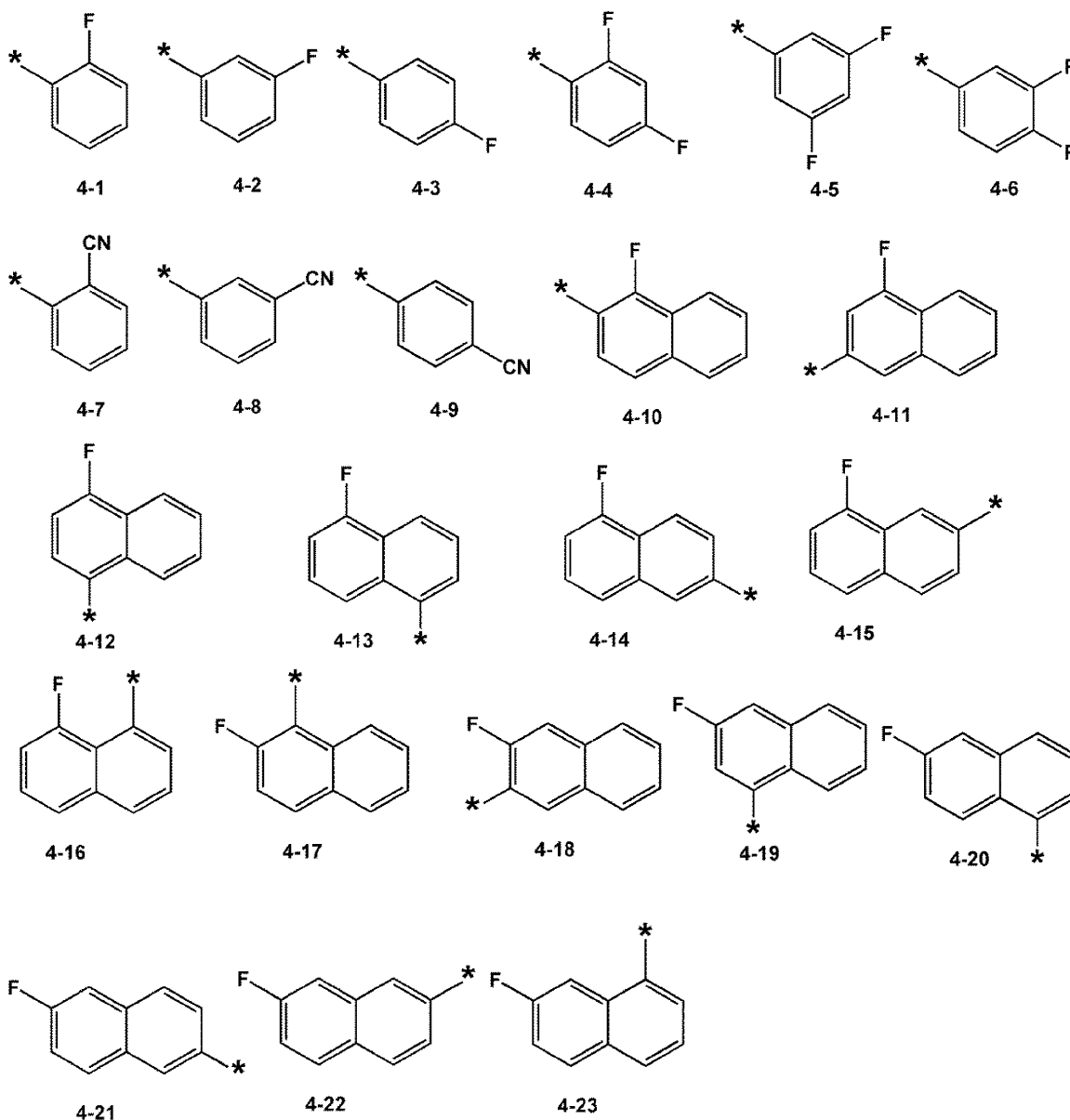
一実施形態によれば、前記化学式 3 で、前記 R₁ は、-F、-Cl、-Br、-I 及びニトロ基のうちから選択された少なくとも一つで置換された、C₆-C₆₀アリール基、C₁-C₆₀ヘテロアリール基、一価非芳香族縮合多環基及び一価非芳香族ヘテロ縮合多環基のうちからも選択される。

【0040】

他の実施形態によれば、前記 R_1 は、下記化学式 4-1 ないし 4-23 で表示される基のうちからも選択されるが、それらに限定されるものではない：

【0041】

【化13】



【0042】

前記化学式 4-1 ないし 4-23 で*は、隣接原子との結合サイトである。

【0043】

例えば、前記 R_1 は、化学式 4-1 ないし 4-6、及び 4-10 ないし 4-23 で表示される基のうちからも選択される。

【0044】

前記化学式 3 で、前記 R_2 ないし R_{13} において少なくとも一つは、前記化学式 4 で表示される基である。

【0045】

他の実施形態によれば、前記 R_2 ないし R_5 において少なくとも一つは、前記化学式 4 で表示される基でもある。

【0046】

他の実施形態によれば、前記 R_6 ないし R_{13} は、水素でもある。

【0047】

10

20

30

40

50

例えば、前記化学式 3 で、i) R_2 は、前記化学式 4 で表示される基であり、前記 R_3 ないし R_{13} は、水素であるか、

ii) R_3 は、前記化学式 4 で表示される基であり、前記 R_2 、 R_4 ないし R_{13} は、水素であるか、

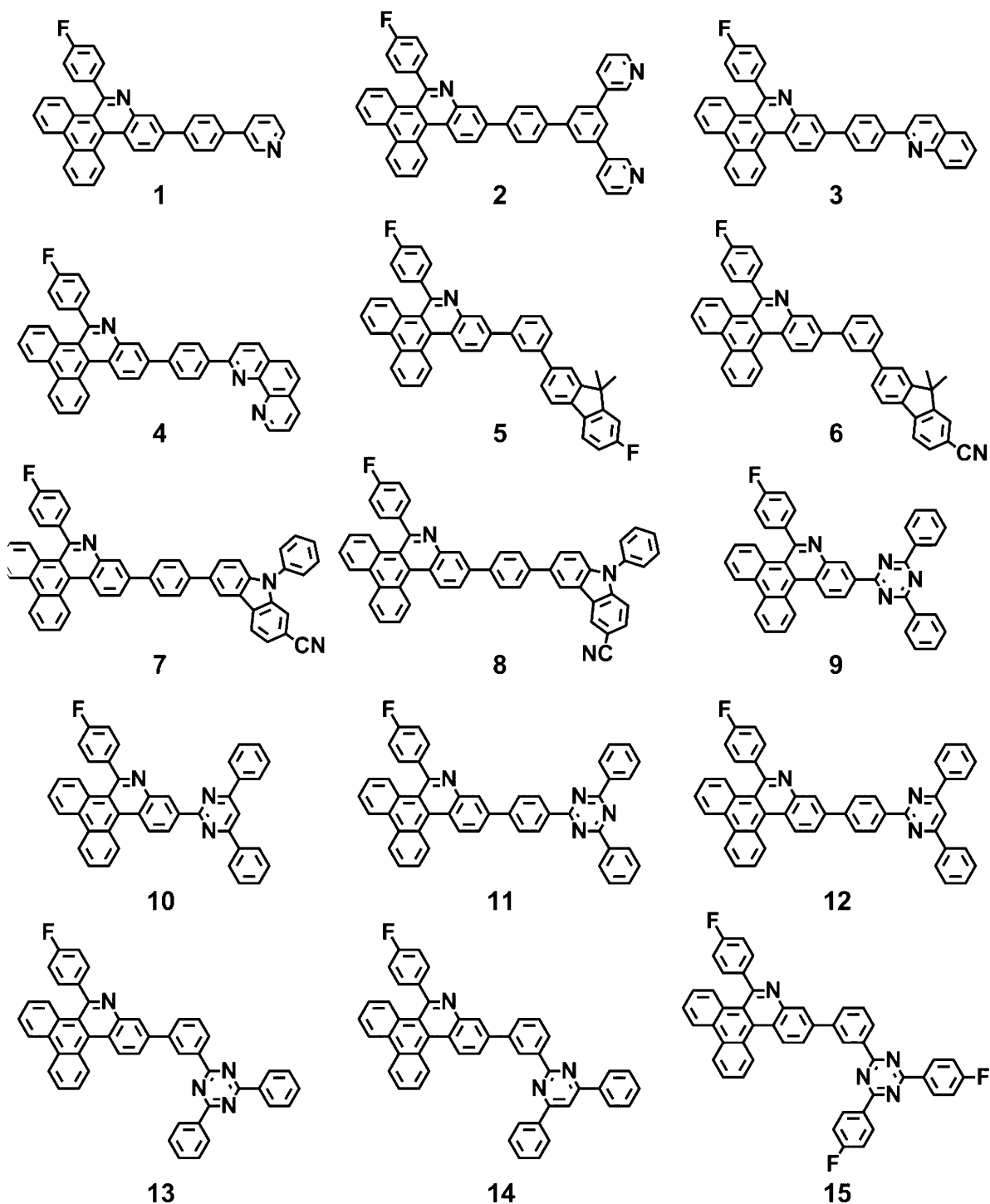
iii) R_4 は、前記化学式 4 で表示される基であり、前記 R_2 、 R_3 、 R_5 ないし R_{13} は、水素でもあるが、それらに限定されるものではない。

【0048】

一実施形態によれば、前記縮合環化合物は、下記化合物 1 ないし 77 のうちからも選択される：

【0049】

【化 14】



10

20

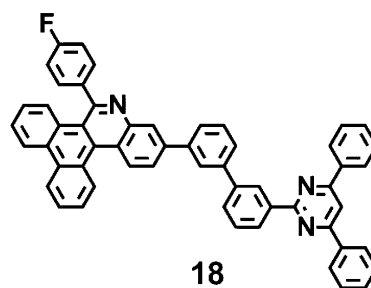
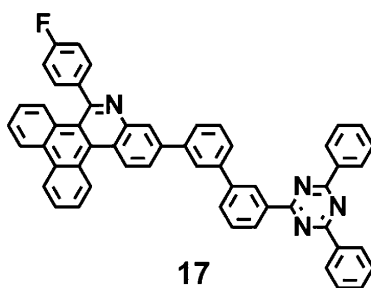
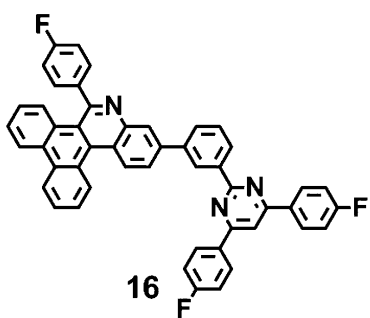
30

40

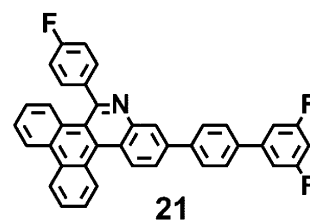
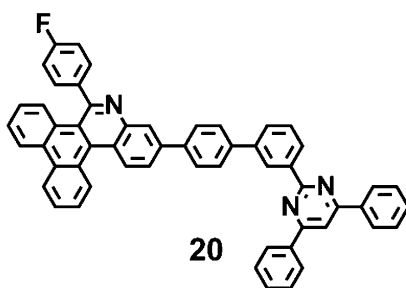
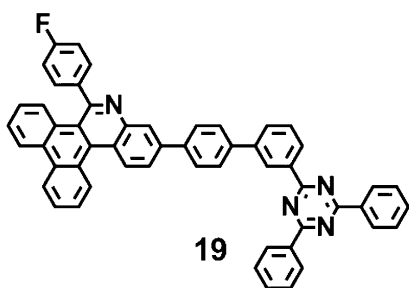
50

【 0 0 5 0 】

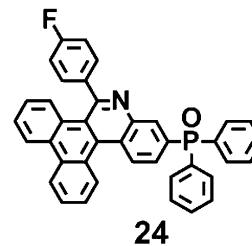
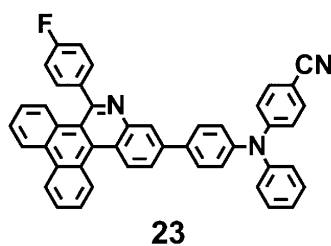
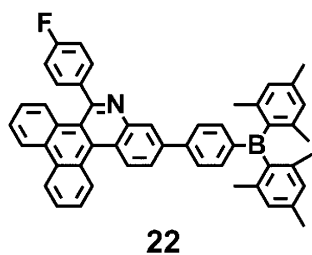
【 化 1 5 】



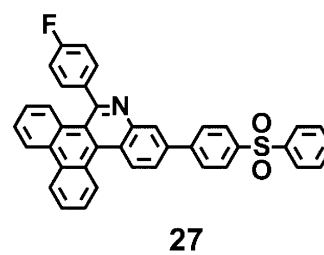
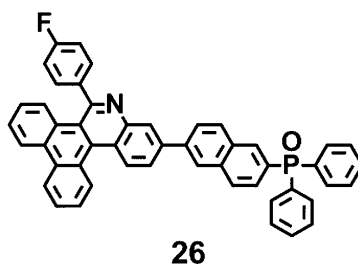
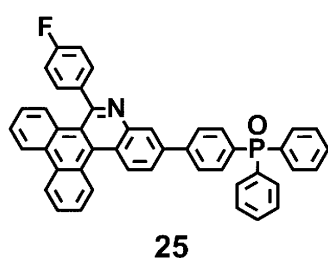
10



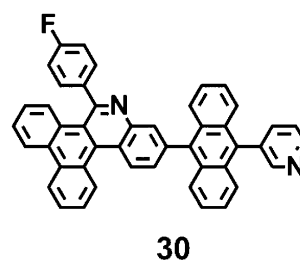
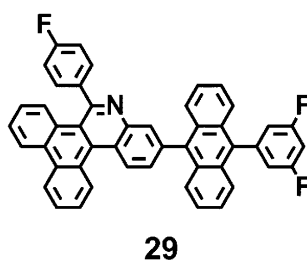
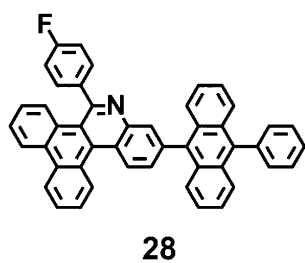
20



30

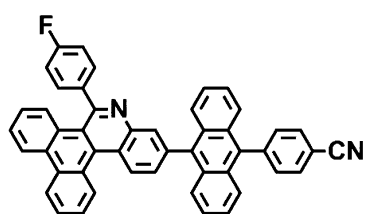


40

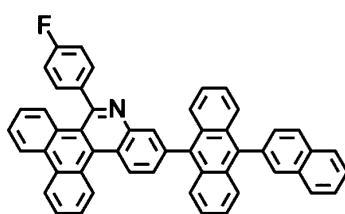


【 0 0 5 1 】

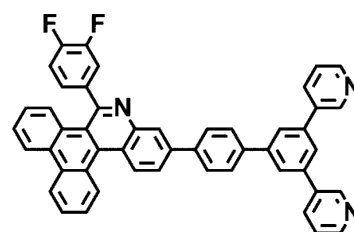
【化 1 6】



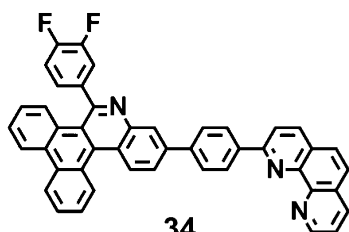
31



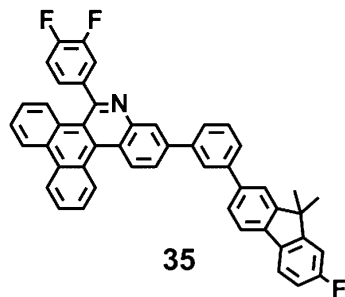
32



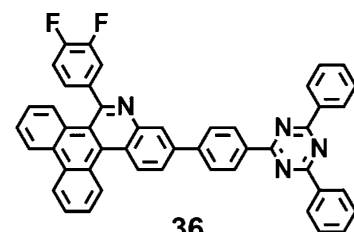
33



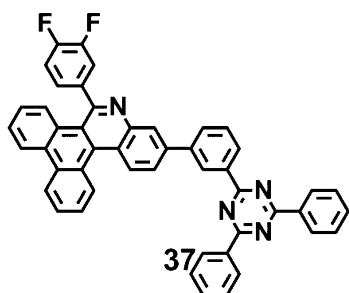
34



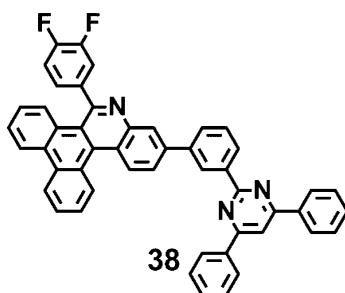
35



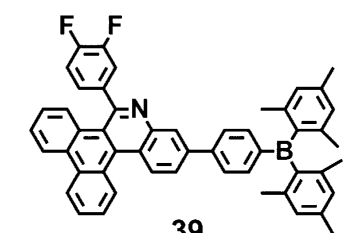
36



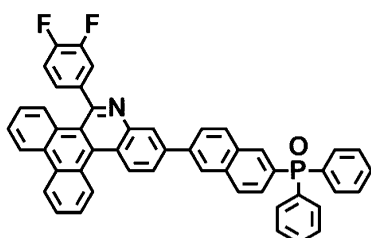
37



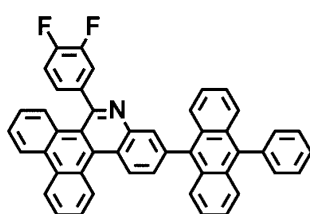
38



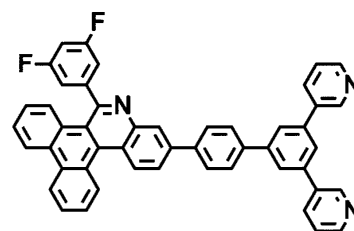
39



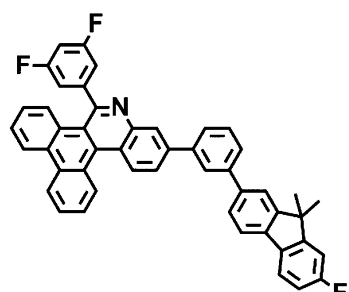
40



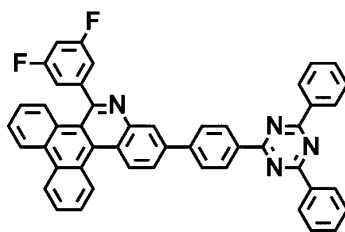
41



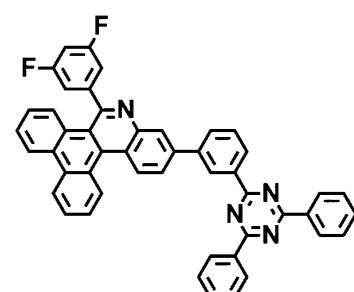
42



43



44



45

【 0 0 5 2】

10

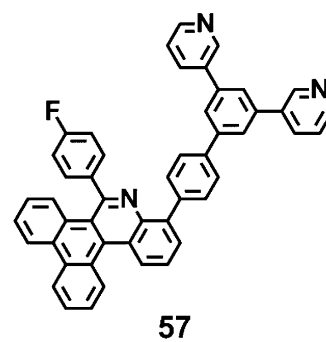
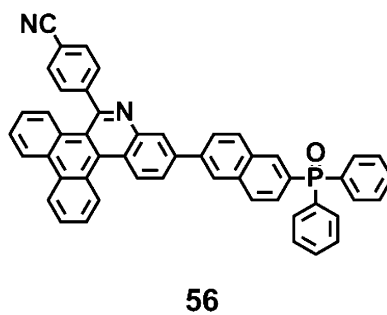
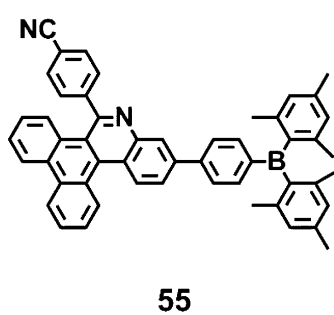
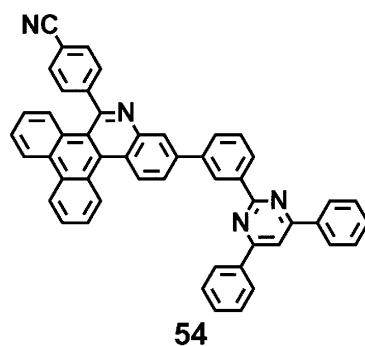
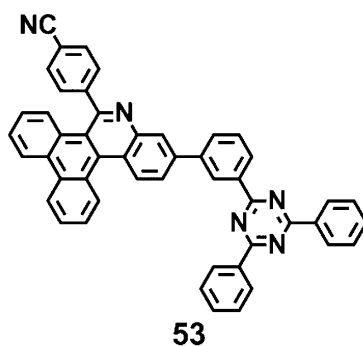
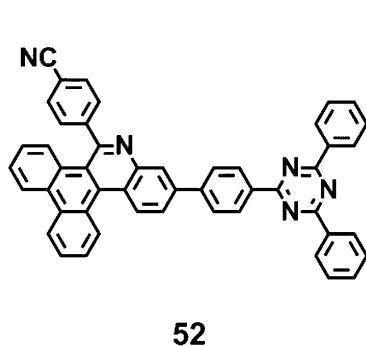
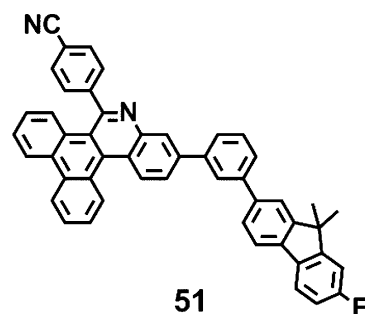
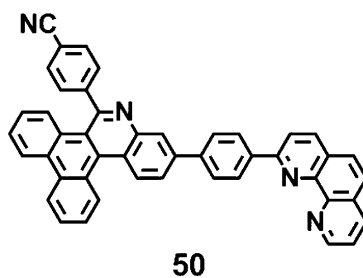
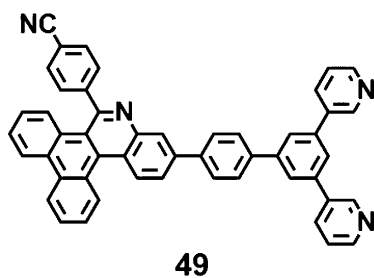
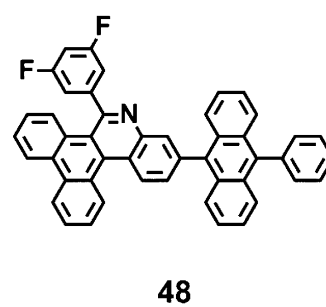
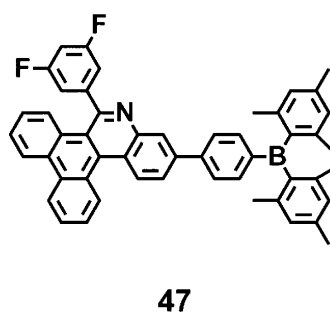
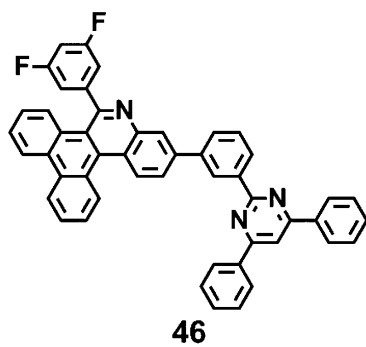
20

30

40

50

【化 1 7】



【 0 0 5 3 】

10

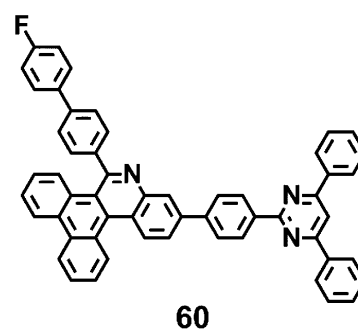
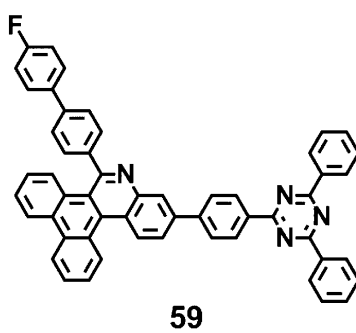
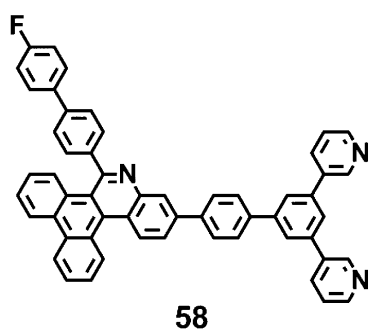
20

30

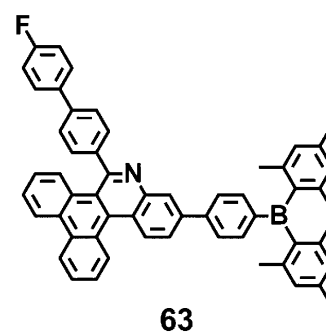
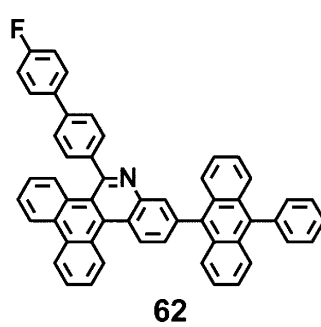
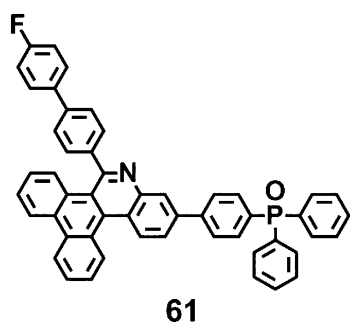
40

50

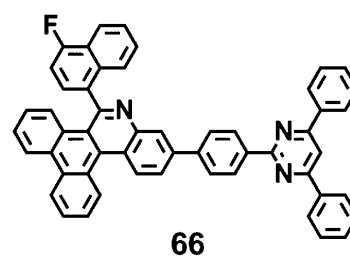
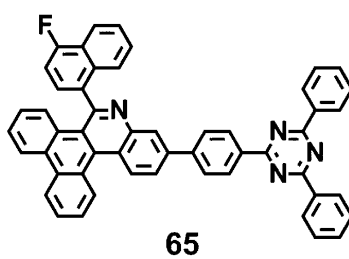
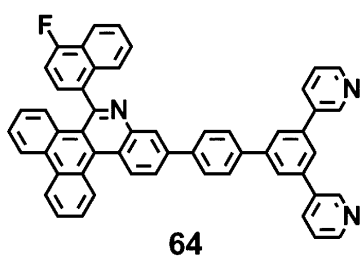
【化 1 8】



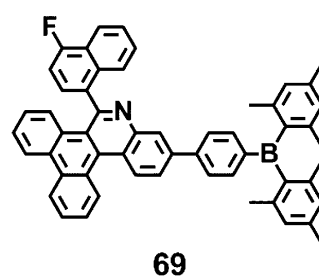
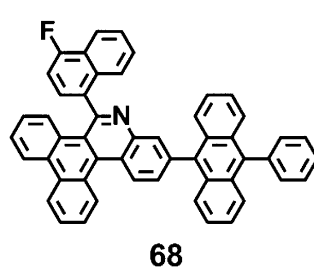
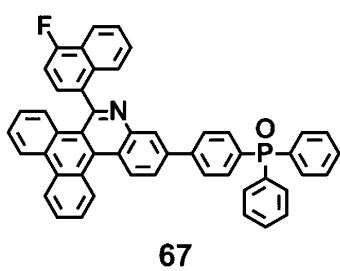
10



20



30

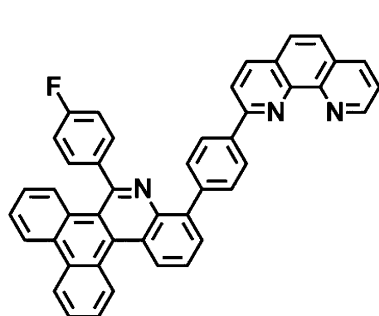


【 0 0 5 4】

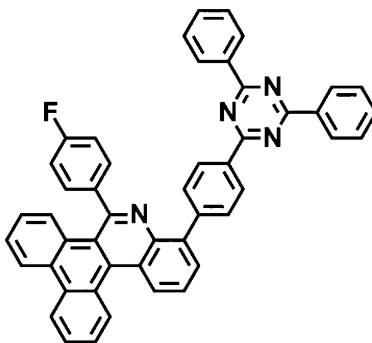
40

50

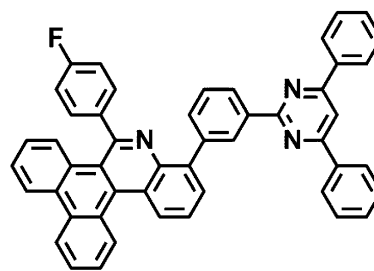
【化 19】



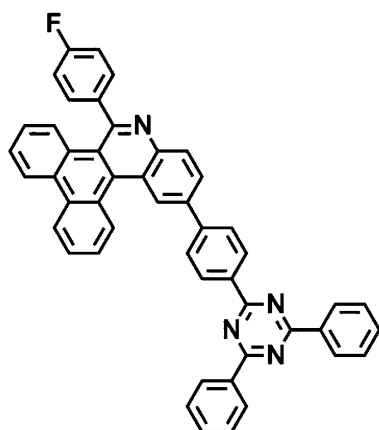
70



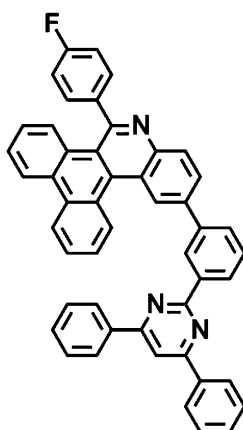
71



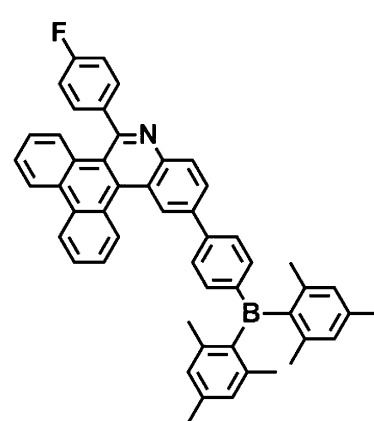
72



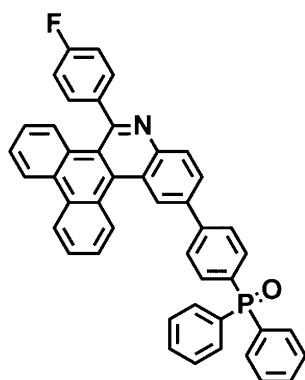
73



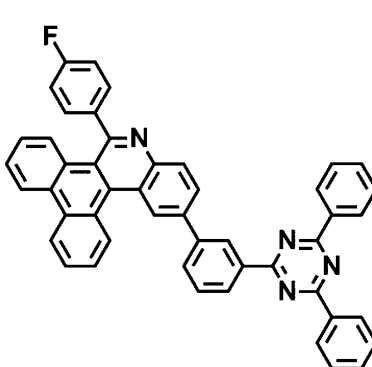
74



75



76



77

【0055】

前記縮合環化合物は、前記化学式 3 及び化学式 4 の構造を含む。特に、化合物のコア内の窒素と隣接した炭素に、電子求引性基（EWG：electron withdrawing group）置換基を 1 以上含むことにより、二重極子-二重極子相互作用（dipole-dipole interaction）原理によって、電子注入及び電子輸送の効果を示すことができる。

【0056】

前記化学式 3 で表示される縮合環化合物の合成方法は、後述する実施例を参照して当業者が認識することができるであろう。

【0057】

前記化学式 3 で表示される縮合環化合物のうち少なくとも一つは、有機発光素子の 1 対の電極間に使用されてもよい。例えば、前記縮合環化合物は、正孔輸送領域、電子輸送領

10

20

30

40

50

域及び発光層のうち少なくとも1層に含まれてもよい。または、前記化学式3で表示される縮合環化合物は、有機発光素子の1対の電極の外側に位置したキャッピング層材料として使用されてもよい。

【0058】

従って、第1電極と、前記第1電極に対向した第2電極と、前記第1電極と前記第2電極との間に介在されて発光層を含む有機層と、を含み、前記有機層が、前記縮合環化合物を1種以上含む有機発光素子が提供される。

【0059】

本明細書において、「(有機層)が縮合環化合物を1種以上含む」ということは、「(有機層)が前記化学式3の範疇に属する1種の縮合環化合物、または互いに異なる2種以上の縮合環化合物を含んでもよい」とも解釈される。

10

【0060】

例えば、前記第1電極がアノードであり、前記第2電極がカソードであり、前記有機層が、前記第1電極と前記発光層との間に介在された正孔輸送領域、及び前記発光層と第2電極との間に介在された電子輸送領域を含み、前記正孔輸送領域は、正孔注入層、正孔輸送層、発光補助層、電子阻止層、またはそれらの任意の組み合わせを含み、前記電子輸送領域は、バッファ層、正孔阻止層、電子調節層、電子輸送層、電子注入層、またはそれらの任意の組み合わせを含んでもよい。

【0061】

一実施形態において、前記電子輸送領域に、前記縮合環化合物が1種以上含まれてもよい。

20

【0062】

他の実施形態において、前記電子輸送領域が電子輸送層を含み、前記電子輸送層に、前記縮合環化合物が含まれていてもよい。

【0063】

例えば、前記電子輸送領域が発光補助層を含み、前記発光補助層に、前記縮合環化合物が含まれていてもよい。

【0064】

さらに他の実施形態において、前記正孔輸送領域は、p-ドーパントを含み、前記p-ドーパントのLUMO (lowest unoccupied molecular orbital) は、 -3.5 eV 以下でもある。

30

【0065】

例えば、前記p-ドーパントは、シアノ基含有化合物を含んでもよい。

【0066】

前記発光層においてホストは、アントラセン系化合物、ピレン系化合物及びスピロビフルオレン系化合物のうち少なくとも一つを含んでもよいが、それらに限定されるものではない。

【0067】

前記発光層においてドーパントは、スチリル系化合物及びアミン系化合物のうち少なくとも一つを含んでもよいが、それらに限定されるものではない。

40

【0068】

前記有機発光素子において前記発光層は、第1色光放出第1発光層であり、

前記第1電極と第2電極との間に、i) 少なくとも1層の第2色光放出第2発光層が追加して含まれているか、あるいはii) 少なくとも1層の第2色光放出第2発光層、及び少なくとも1層の第3色光放出第3発光層が追加して含まれており、

前記第1色光の最大発光波長、前記第2色光の最大発光波長、及び前記第3色光の最大発光波長は、互いに同一であってもよく、異なってもよく、

前記第1色光と前記第2色光とが互いに混合された混色光、または前記第1色光、前記第2色光及び前記第3色光が互いに混合された混色光が放出される。

【0069】

50

前記有機発光素子は、発光層で生成された光が、前記第1電極を経て外部に取り出される経路に配置された第1キャッピング層、及び前記発光層で生成された光が、前記第2電極を経て外部に取り出される経路に配置された第2キャッピング層のうち少なくとも1層をさらに含み、前記第1キャッピング層及び第2キャッピング層のうち少なくとも1層が、前記化学式3で表示される縮合環化合物を1種以上含んでもよい。

【0070】

例えば、前記有機発光素子は、i) 第1電極、有機層、第2電極及び第2キャッピング層が順次に積層された構造、ii) 第1キャッピング層、第1電極、有機層及び第2電極が順次に積層された構造、またはiii) 第1キャッピング層、第1電極、有機層、第2電極及び第2キャッピング層が順次に積層された構造を有し、前記第1キャッピング層及び第2キャッピング層のうち少なくとも1層に、前記縮合環化合物が含まれてもよい。

10

【0071】

本明細書において、「有機層」は、前記有機発光素子において、第1電極と第2電極との間に介在された単一、及び／または複数の全ての層を示す用語である。前記「有機層」の層に含まれた物質は、有機物に限定されるものではない。

【0072】

[図1に係わる説明]

図1は、本発明の一実施形態による有機発光素子10の断面図を概略的に図示したものである。前記有機発光素子10は、第1電極110、有機層150及び第2電極190を含む。

20

【0073】

以下、図1を参照し、本発明の一実施形態による有機発光素子10の構造及び製造方法について説明すれば、次の通りである。

【0074】

[第1電極110]

図1の第1電極110の下部、または第2電極190の上には、基板が追加して配置される。前記基板としては、機械的強度、熱安定性、透明性、表面平滑性、取り扱い容易性及び防水性に優れるガラス基板またはプラスチック基板を使用することができる。

【0075】

前記第1電極110は、例えば、基板上に、第1電極用物質を、蒸着法またはスパッタリング法などを利用して提供することによって形成される。前記第1電極110がアノードである場合、正孔注入が容易になるように、第1電極用物質は、高い仕事関数を有する物質のうちからも選択される。

30

【0076】

前記第1電極110は、反射型電極、半透過型電極または透過型電極でもある。透過型電極である第1電極110を形成するために、第1電極用物質は、酸化インジウムスズ(ITO)、酸化インジウム亜鉛(IZO)、酸化スズ(SnO₂)、酸化亜鉛(ZnO)、及びそれらの任意の組み合わせのうちからも選択されるが、それらに限定されるものではない。または、半透過型電極または反射型電極である第1電極110を形成するために、第1電極用物質は、マグネシウム(Mg)、銀(Ag)、アルミニウム(Al)、アルミニウム-リチウム(Al-Li)、カルシウム(Ca)、マグネシウム-インジウム(Mg-In)、マグネシウム-銀(Mg-Ag)、及びそれらの任意の組み合わせのうちからも選択されるが、それらに限定されるものではない。

40

【0077】

前記第1電極110は、単一層である単層構造、または複数の層を有する多層構造を有することができる。例えば、前記第1電極110は、ITO/Ag/ITOの3層構造を有することができるが、それに限定されるものではない。

【0078】

[有機層150]

前記第1電極110上には、有機層150が配置されている。前記有機層150は、発

50

光層を含む。

【0079】

前記有機層150は、前記第1電極110と前記発光層との間に介在された正孔輸送領域(hole transport region)、及び前記発光層と前記第2電極190と間に介在された電子輸送領域(electron transport region)をさらに含んでもよい。

【0080】

〔有機層150における正孔輸送領域〕

前記正孔輸送領域は、i) 単一物質からなる単一層からなる単層構造、ii) 複数の互いに異なる物質からなる単一層からなる単層構造、またはiii) 複数の互いに異なる物質からなる複数の層を有する多層構造を有することができる。

10

【0081】

前記正孔輸送領域は、正孔注入層(HIL)、正孔輸送層(HTL)、発光補助層及び電子阻止層(EBL)のうちから選択された少なくとも1層を含んでもよい。

【0082】

例えば、前記正孔輸送領域は、複数の互いに異なる物質からなる単一層からなる単層構造を有するか、第1電極110から順に積層された正孔注入層／正孔輸送層、正孔注入層／正孔輸送層／発光補助層、正孔注入層／発光補助層、正孔輸送層／発光補助層、または正孔注入層／正孔輸送層／電子阻止層の多層構造を有することができるが、それらに限定されるものではない。

【0083】

前記正孔輸送領域は、m-MTDATA、TDATA、2-TNATA、NPB(NPD)、 β -NPB、TPD、Spiro-TPD、Spiro-NPB、メチル化(methylated) NPB、TAPC、HMTPD、4,4',4"-トリス(N-カルバゾリル)トリフェニルアミン(TCTA)、ポリアニリン／ドデシルベンゼンスルホン酸(Pani/DBSA)、ポリ(3,4-エチレンジオキシチオフェン)／ポリ(4-スチレンスルホネート)(PEDOT/PSS)、ポリアニリン／カンファースルホン酸(Pani/CSA)、ポリアニリン／ポリ(4-スチレンスルホネート)(PANI/PSS)、下記化学式21で表示される化合物、及び下記化学式22で表示される化合物のうちから選択された少なくとも一つを含んでもよい：

20

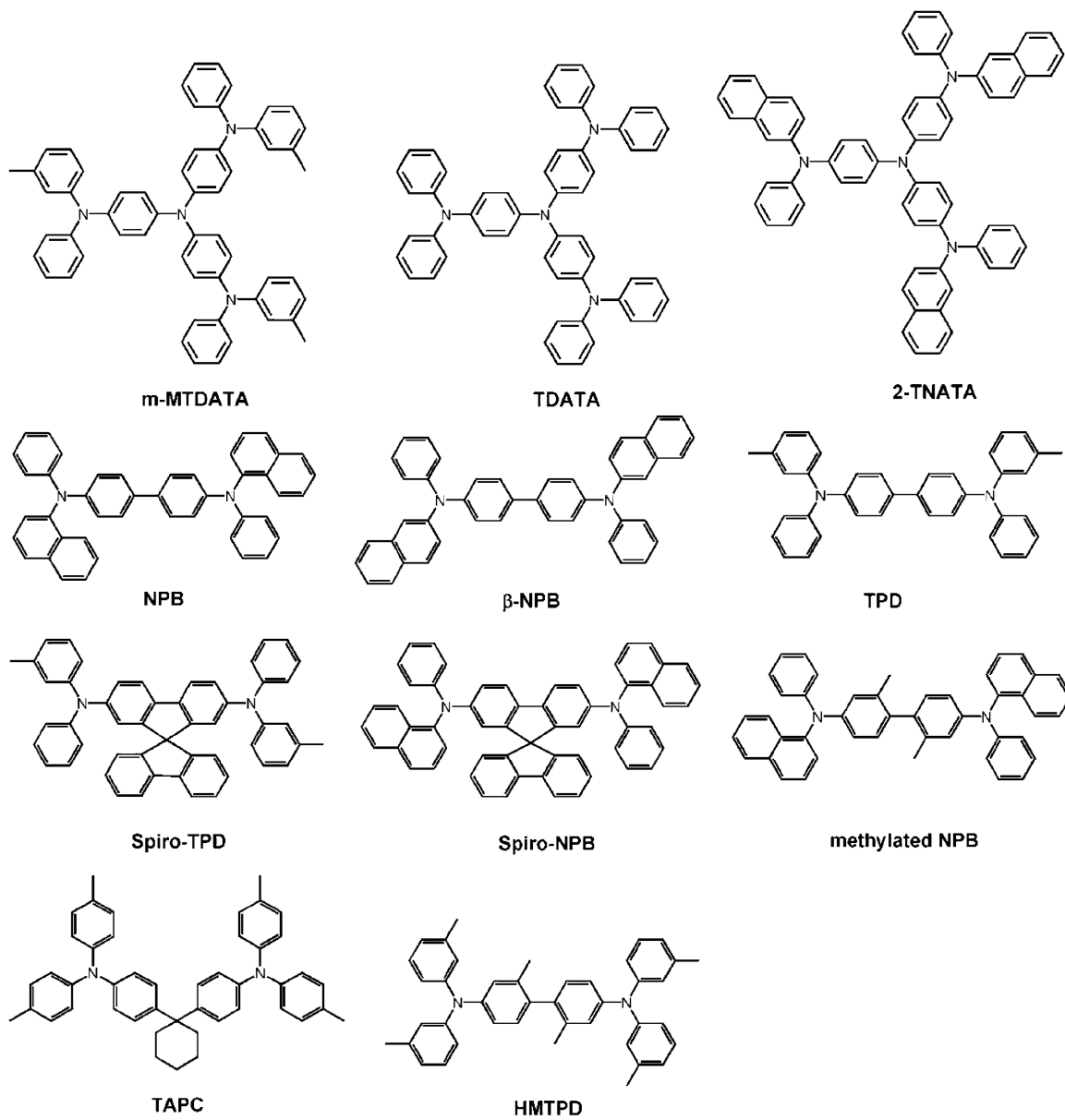
【0084】

30

40

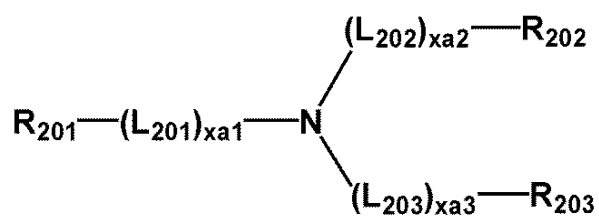
50

【化 2 0】



【 0 0 8 5】

【化 2 1】



【 0 0 8 6】

10

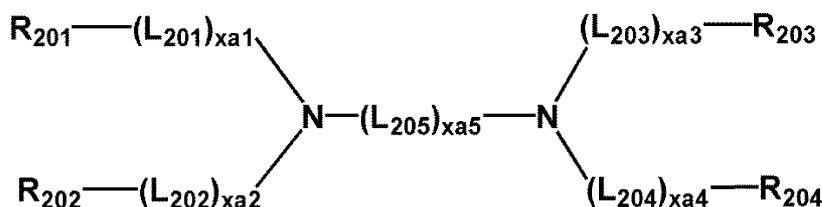
20

30

40

50

【化 2 2】



【0087】

前記化学式 2 1 及び 2 2 で、

L_{201} ないし L_{204} は、互いに独立して、置換もしくは非置換の C_3-C_{10} シクロアルキレン基、置換もしくは非置換の C_1-C_{10} ヘテロシクロアルキレン基、置換もしくは非置換の C_3-C_{10} シクロアルケニレン基、置換もしくは非置換の C_1-C_{10} ヘテロシクロアルケニレン基、置換もしくは非置換の C_6-C_{60} アリーレン基、置換もしくは非置換の C_1-C_{60} ヘテロアリーレン基、置換もしくは非置換の二価非芳香族縮合多環基、及び置換もしくは非置換の二価非芳香族ヘテロ縮合多環基のうちから選択され、

L_{205} は、 $*-O-*'$ 、 $*-S-*'$ 、 $*-N(Q_1)-*'$ 、置換もしくは非置換の C_1-C_{20} アルキレン基、置換もしくは非置換の C_2-C_{20} アルケニレン基、置換もしくは非置換の C_3-C_{10} シクロアルキレン基、置換もしくは非置換の C_1-C_{10} ヘテロシクロアルキレン基、置換もしくは非置換の C_3-C_{10} シクロアルケニレン基、置換もしくは非置換の C_1-C_{10} ヘテロシクロアルケニレン基、置換もしくは非置換の C_6-C_{60} アリーレン基、置換もしくは非置換の C_1-C_{60} ヘテロアリーレン基、置換もしくは非置換の二価非芳香族縮合多環基、及び置換もしくは非置換の二価非芳香族ヘテロ縮合多環基のうちから選択され、

x_{a1} ないし x_{a4} は、互いに独立して、0 ないし 3 の整数のうちから選択され、
 x_{a5} は、1 ないし 10 の整数のうちから選択され、

R_{201} ないし R_{204} 、及び Q_{201} は、互いに独立して、置換もしくは非置換の C_3-C_{10} シクロアルキル基、置換もしくは非置換の C_1-C_{10} ヘテロシクロアルキル基、置換もしくは非置換の C_3-C_{10} シクロアルケニル基、置換もしくは非置換の C_1-C_{10} ヘテロシクロアルケニル基、置換もしくは非置換の C_6-C_{60} アリール基、置換もしくは非置換の C_6-C_{60} アリールオキシ基、置換もしくは非置換の C_6-C_{60} アリールチオ基、置換もしくは非置換の C_1-C_{60} ヘテロアリール基、置換もしくは非置換の一価非芳香族縮合多環基、及び置換もしくは非置換の一価非芳香族ヘテロ縮合多環基のうちからも選択される。

【0088】

例えば、前記化学式 2 2 で R_{201} と R_{202} は、択一的に (alternatively)、単結合、ジメチル-メチレン基またはジフェニル-メチレン基を介して互いに連結され、 R_{203} と R_{204} は、択一的に、単結合、ジメチル-メチレン基またはジフェニル-メチレン基を介して互いに連結される。

【0089】

一実施形態によれば、前記化学式 2 1 及び 2 2 で、

L_{201} ないし L_{205} は、互いに独立して、

フェニレン基、ペンタレニレン基、インデニレン基、ナフチレン基、アズレニレン基、ヘプタレニレン基、インダセニレン基、アセナフチレン基、フルオレニレン基、スピロ-ビフルオレニレン基、ベンゾフルオレニレン基、ジベンゾフルオレニレン基、フェナレニレン基、フェナントレニレン基、アントラセニレン基、フルオランテニレン基、トリフェニレニレン基、ピレニレン基、クリセニレン基、ナフタセニレン基、ピセニレン基、ペリレニレン基、ペンタフェニレン基、ヘキサセニレン基、ペンタセニレン基、ルビセニレン基、コロネニレン基、オバレニレン基、チオフエニレン基、フラニレン基、カルバゾリレン基、インドリレン基、イソインドリレン基、ベンゾフラニレン基、ベンゾチオフエニレン基、ジベンゾフラニレン基、ジベンゾチオフエニレン基、ベンゾカルバゾリレン基、ジ

10

20

30

40

50

ベンゾカルバゾリレン基、ジベンゾシロリレン基及びピリジニレン基；並びに

重水素、 $-F$ 、 $-Cl$ 、 $-Br$ 、 $-I$ 、ヒドロキシ基、シアノ基、ニトロ基、アミノ基、ヒドラジノ基、ヒドラゾノ基、 C_1-C_{20} アルキル基、 C_1-C_{20} アルコキシ基、シクロペンチル基、シクロヘキシル基、シクロヘプチル基、シクロペンテニル基、シクロヘキセニル基、フェニル基、ビフェニル基、ターフェニル基、 C_1-C_{10} アルキル基で置換されたフェニル基、 $-F$ で置換されたフェニル基、ペンタレニル基、インデニル基、ナフチル基、アズレニル基、ヘプタレニル基、インダセニル基、アセナフチル基、フルオレニル基、スピロ-ビフルオレニル基、ベンゾフルオレニル基、ジベンゾフルオレニル基、フェナレニル基、フェナントレニル基、アントラセニル基、フルオランテニル基、トリフェニレニル基、ピレニル基、クリセニル基、ナфтаセニル基、ピセニル基、ペリレニル基、ペンタフェニル基、ヘキサセニル基、ペンタセニル基、ルビセニル基、コロネニル基、オバレニル基、チオフェニル基、フラニル基、カルバゾリル基、インドリル基、イソインドリル基、ベンゾフラニル基、ベンゾチオフェニル基、ジベンゾフラニル基、ジベンゾチオフェニル基、ベンゾカルバゾリル基、ジベンゾカルバゾリル基、ジベンゾシロリル基、ピリジニル基、 $-Si(Q_{31})(Q_{32})(Q_{33})$ 、及び $-N(Q_{31})(Q_{32})$ のうちから選択された少なくとも一つで置換された、フェニレン基、ペンタレニレン基、インデニレン基、ナフチレン基、アズレニレン基、ヘプタレニレン基、インダセニレン基、アセナフチレン基、フルオレニレン基、スピロ-ビフルオレニレン基、ベンゾフルオレニレン基、ジベンゾフルオレニレン基、フェナレニレン基、フェナントレニレン基、アントラセニレン基、フルオランテニレン基、トリフェニレニレン基、ピレニレン基、クリセニレン基、ナфтаセニレン基、ピセニレン基、ペリレニレン基、ペンタフェニレン基、ヘキサセニレン基、ペンタセニレン基、ルビセニレン基、コロネニレン基、オバレニレン基、チオフェニレン基、フラニレン基、カルバゾリレン基、インドリレン基、イソインドリレン基、ベンゾフラニレン基、ベンゾチオフェニレン基、ジベンゾフラニレン基、ジベンゾチオフェニレン基、ベンゾカルバゾリレン基、ジベンゾカルバゾリレン基、ジベンゾシロリレン基及びピリジニレン基；のうちから選択され、

前記 Q_{31} ないし Q_{33} は、互いに独立して、 C_1-C_{10} アルキル基、 C_1-C_{10} アルコキシ基、フェニル基、ビフェニル基、ターフェニル基及びナフチル基のうちからも選択される。

【0090】

他の実施形態によれば、 x_{a1} ないし x_{a4} は、互いに独立して、0、1または2でもある。

【0091】

さらに他の実施形態によれば、 x_{a5} は、1、2、3または4でもある。

【0092】

さらに他の実施形態によれば、 R_{201} ないし R_{204} 、及び Q_{201} は、互いに独立して、フェニル基、ビフェニル基、ターフェニル基、ペンタレニル基、インデニル基、ナフチル基、アズレニル基、ヘプタレニル基、インダセニル基、アセナフチル基、フルオレニル基、スピロ-ビフルオレニル基、ベンゾフルオレニル基、ジベンゾフルオレニル基、フェナレニル基、フェナントレニル基、アントラセニル基、フルオランテニル基、トリフェニレニル基、ピレニル基、クリセニル基、ナфтаセニル基、ピセニル基、ペリレニル基、ペンタフェニル基、ヘキサセニル基、ペンタセニル基、ルビセニル基、コロネニル基、オバレニル基、チオフェニル基、フラニル基、カルバゾリル基、インドリル基、イソインドリル基、ベンゾフラニル基、ベンゾチオフェニル基、ジベンゾフラニル基、ジベンゾチオフェニル基、ベンゾカルバゾリル基、ジベンゾカルバゾリル基、ジベンゾシロリル基及びピリジニル基；並びに

重水素、 $-F$ 、 $-Cl$ 、 $-Br$ 、 $-I$ 、ヒドロキシ基、シアノ基、ニトロ基、アミノ基、ヒドラジノ基、ヒドラゾノ基、 C_1-C_{20} アルキル基、 C_1-C_{20} アルコキシ基、シクロペンチル基、シクロヘキシル基、シクロヘプチル基、シクロペンテニル基、シクロヘキセニル基、フェニル基、ビフェニル基、ターフェニル基、 C_1-C_{10} アルキル基で置換

されたフェニル基、－Fで置換されたフェニル基、ペンタレニル基、インデニル基、ナフチル基、アズレニル基、ヘプタレニル基、インダセニル基、アセナフチル基、フルオレニル基、スピロ－ビフルオレニル基、ベンゾフルオレニル基、ジベンゾフルオレニル基、フェナレニル基、フェナントレニル基、アントラセニル基、フルオランテニル基、トリフェニレニル基、ピレニル基、クリセニル基、ナフタセニル基、ピセニル基、ペリレニル基、ペンタフェニル基、ヘキサセニル基、ペンタセニル基、ルビセニル基、コロネニル基、オバレニル基、チオフェニル基、フラニル基、カルバゾリル基、インドリル基、イソインドリル基、ベンゾフラニル基、ベンゾチオフェニル基、ジベンゾフラニル基、ジベンゾチオフェニル基、ベンゾカルバゾリル基、ジベンゾカルバゾリル基、ジベンゾシロリル基、ピリジニル基、－Si (Q₃₁) (Q₃₂) (Q₃₃)、及び－N (Q₃₁) (Q₃₂) のうちから選択された少なくとも一つで置換された、フェニル基、ビフェニル基、ターフェニル基、ペンタレニル基、インデニル基、ナフチル基、アズレニル基、ヘプタレニル基、インダセニル基、アセナフチル基、フルオレニル基、スピロ－ビフルオレニル基、ベンゾフルオレニル基、ジベンゾフルオレニル基、フェナレニル基、フェナントレニル基、アントラセニル基、フルオランテニル基、トリフェニレニル基、ピレニル基、クリセニル基、ナフタセニル基、ピセニル基、ペリレニル基、ペンタフェニル基、ヘキサセニル基、ペンタセニル基、ルビセニル基、コロネニル基、オバレニル基、チオフェニル基、フラニル基、カルバゾリル基、インドリル基、イソインドリル基、ベンゾフラニル基、ベンゾチオフェニル基、ジベンゾフラニル基、ジベンゾチオフェニル基、ベンゾカルバゾリル基、ジベンゾカルバゾリル基、ジベンゾシロリル基及びピリジニル基；のうちからも選択され、

前記Q₃₁ないしQ₃₃に係わる説明は、本明細書記載のところを参照する。

【0093】

さらに他の実施形態によれば、前記化学式21で、R₂₀₁ないしR₂₀₃において少なくとも一つは、互いに独立して、

フルオレニル基、スピロ－ビフルオレニル基、カルバゾリル基、ジベンゾフラニル基及びジベンゾチオフェニル基；並びに

重水素、－F、－Cl、－Br、－I、ヒドロキシル基、シアノ基、ニトロ基、アミノ基、ヒドラジノ基、ヒドラゾノ基、C₁－C₂₀アルキル基、C₁－C₂₀アルコキシ基、シクロペンチル基、シクロヘキシル基、シクロヘプチル基、シクロペンテニル基、シクロヘキセニル基、フェニル基、ビフェニル基、ターフェニル基、C₁－C₁₀アルキル基で置換されたフェニル基、－Fで置換されたフェニル基、ナフチル基、フルオレニル基、スピロ－ビフルオレニル基、カルバゾリル基、ジベンゾフラニル基、及びジベンゾチオフェニル基のうちから選択された少なくとも一つで置換された、フルオレニル基、スピロ－ビフルオレニル基、カルバゾリル基、ジベンゾフラニル基及びジベンゾチオフェニル基；のうちからも選択されるが、それらに限定されるものではない。

【0094】

さらに他の実施形態によれば、前記化学式22で、i) R₂₀₁とR₂₀₂は、単結合を介して互いに連結され、かつ／またはii) R₂₀₃とR₂₀₄は、単結合を介して互いに連結される。

【0095】

さらに他の実施形態によれば、前記化学式22で、R₂₀₁ないしR₂₀₄において少なくとも一つは、

カルバゾリル基；並びに

重水素、－F、－Cl、－Br、－I、ヒドロキシル基、シアノ基、ニトロ基、アミノ基、ヒドラジノ基、ヒドラゾノ基、C₁－C₂₀アルキル基、C₁－C₂₀アルコキシ基、シクロペンチル基、シクロヘキシル基、シクロヘプチル基、シクロペンテニル基、シクロヘキセニル基、フェニル基、ビフェニル基、ターフェニル基、C₁－C₁₀アルキル基で置換されたフェニル基、－Fで置換されたフェニル基、ナフチル基、フルオレニル基、スピロ－ビフルオレニル基、カルバゾリル基、ジベンゾフラニル基、及びジベンゾチオフェニル基のうちから選択された少なくとも一つで置換されたカルバゾリル基；のうちからも選択

10

20

30

40

50

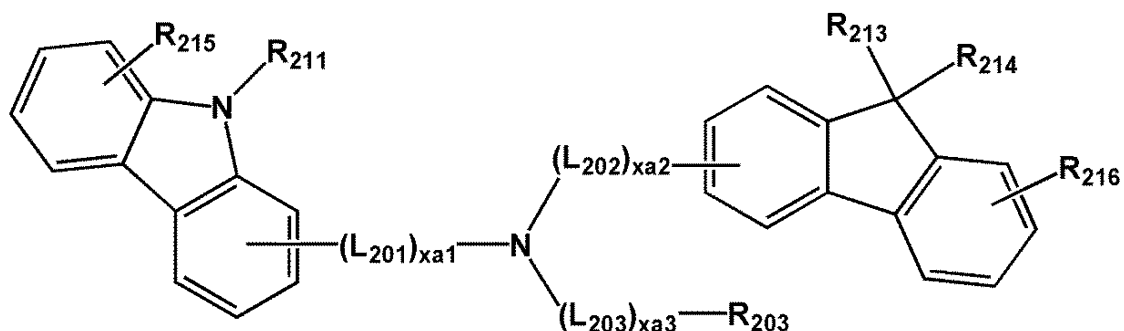
されるが、それらに限定されるものではない。

【 0 0 9 6 】

前記化学式 2 1 で表示される化合物は、下記化学式 2 3 で表示される。

【 0 0 9 7 】

【化 2 3】



10

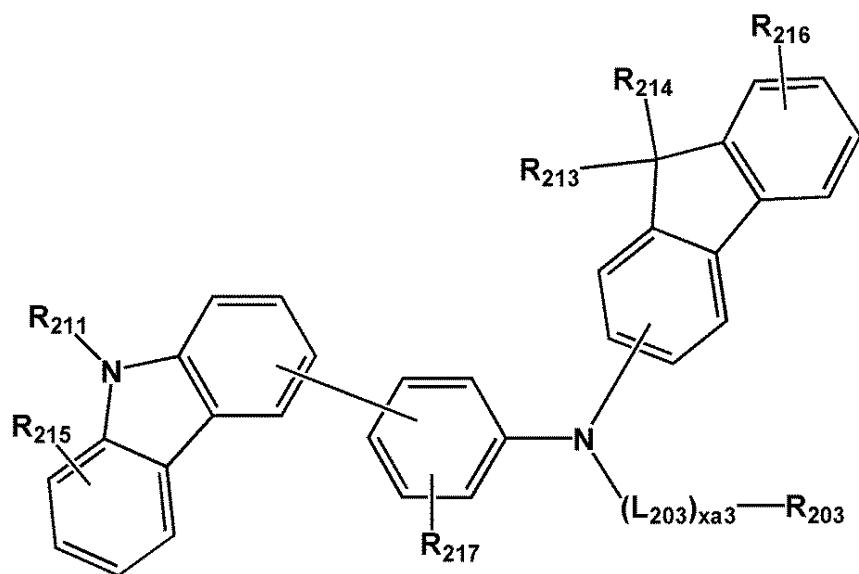
【 0 0 9 8 】

例えば、前記化学式 2 1 で表示される化合物は、下記化学式 2 4 で表示されるが、それ

に限定されるものではない。

【 0 0 9 9 】

【化 2 4】



30

【 0 1 0 0 】

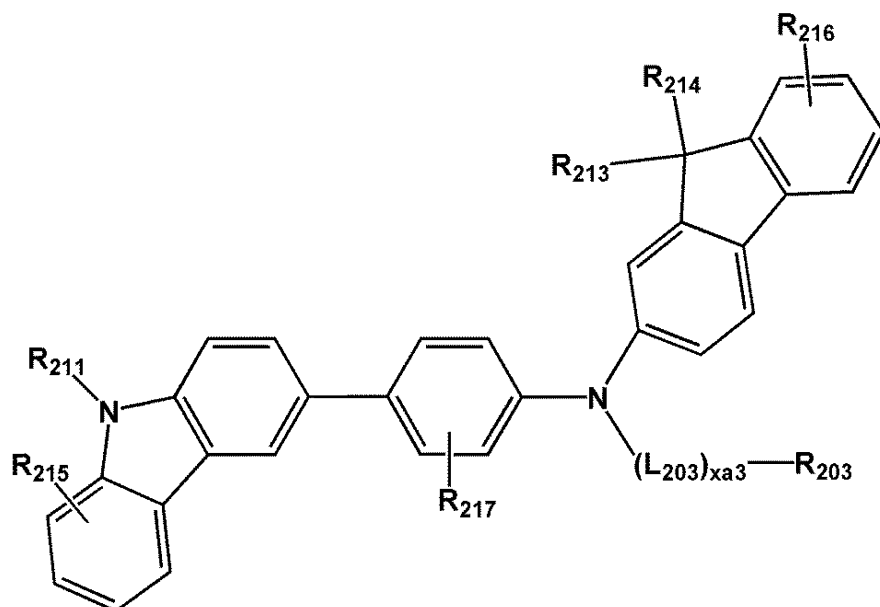
さらに他の例として、前記化学式 2 1 で表示される化合物は、下記化学式 2 5 で表示されるが、それに限定されるものではない。

【 0 1 0 1 】

40

50

【化 2 5】



10

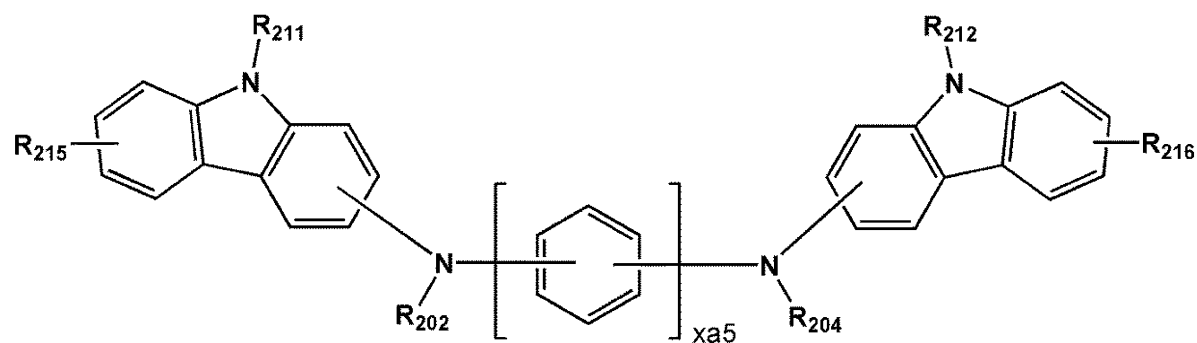
【 0 1 0 2】

一方、前記化学式 2 2 で表示される化合物は、下記化学式 2 6 で表示される。

20

【 0 1 0 3】

【化 2 6】

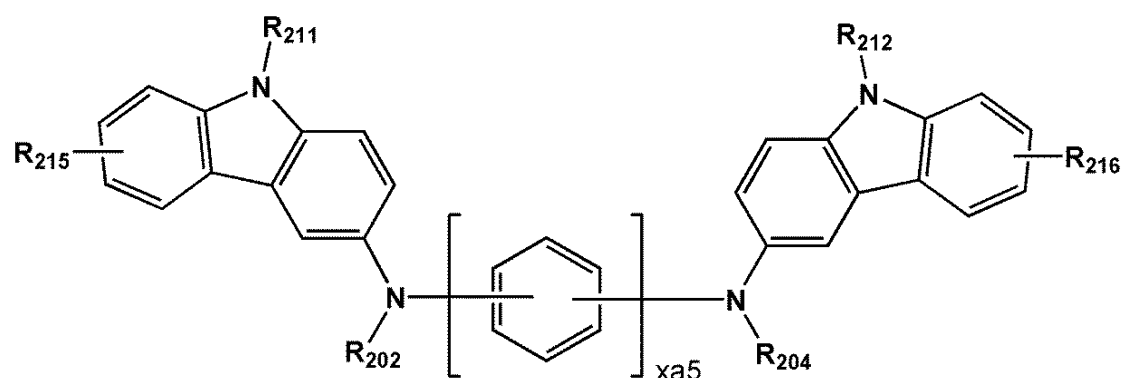


30

さらに他の実施形態によれば、前記化学式 2 2 で表示される化合物は、下記化学式 2 7 で表示される：

【 0 1 0 4】

【化 2 7】



40

【 0 1 0 5】

50

前記化学式 23, 24, 25, 26 及び 27 で、

L₂₀₁ないしL₂₀₃、x_{a1}ないしx_{a3}、x_{a5}、及びR₂₀₂ないしR₂₀₄に係わる説明は、本明細書記載のところを参照し、

R₂₁₁及びR₂₁₂に係わる説明は、本明細書においてR₂₀₃に係わる説明を参照し、

R₂₁₃ないしR₂₁₇は、互いに独立して、水素、重水素、-F、-Cl、-Br、-I、ヒドロキシ基、シアノ基、ニトロ基、アミジノ基、ヒドラジノ基、ヒドラゾノ基、C₁-C₂₀アルキル基、C₁-C₂₀アルコキシ基、シクロペンチル基、シクロヘキシル基、シクロヘプチル基、シクロペンテニル基、シクロヘキセニル基、フェニル基、ビフェニル基、ターフェニル基、C₁-C₁₀アルキル基で置換されたフェニル基、-Fで置換されたフェニル基、ペンタレニル基、インデニル基、ナフチル基、アズレニル基、ヘプタレニル基、インダセニル基、アセナフチル基、フルオレニル基、スピロ-ビフルオレニル基、ベンゾフルオレニル基、ジベンゾフルオレニル基、フェナレニル基、フェナントレニル基、アントラセニル基、フルオランテニル基、トリフェニレニル基、ピレニル基、クリセニル基、ナフタセニル基、ピセニル基、ペリレニル基、ペンタフェニル基、ヘキサセニル基、ペンタセニル基、ルビセニル基、コロネニル基、オバレニル基、チオフェニル基、フラニル基、カルバゾリル基、インドリル基、イソインドリル基、ベンゾフラニル基、ベンゾチオフェニル基、ジベンゾフラニル基、ジベンゾチオフェニル基、ベンゾカルバゾリル基、ジベンゾカルバゾリル基、及びピリジニル基のうちからも選択される。

【0106】

前記正孔輸送領域は、下記化合物HT1ないしHT39のうちから選択された少なくとも一つの化合物を含んでもよいが、それらに限定されるものではない：

【0107】

10

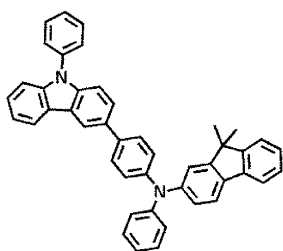
20

30

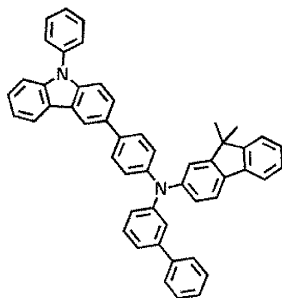
40

50

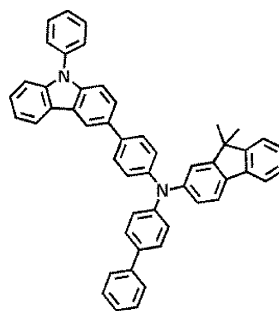
【化 2 8】



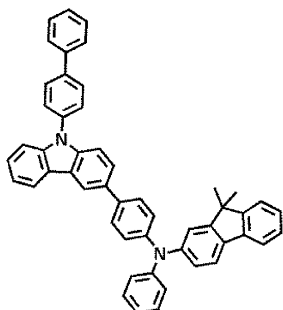
HT1



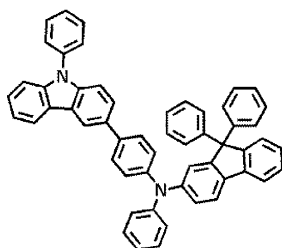
HT2



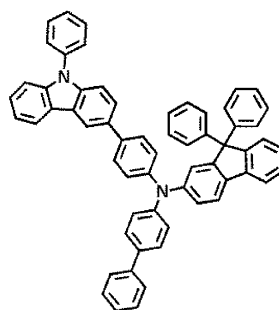
HT3



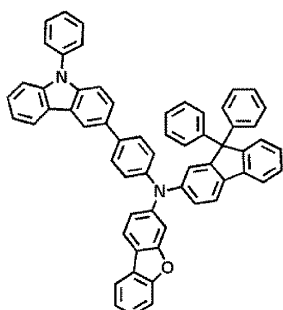
HT4



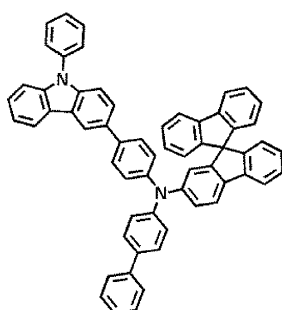
HT5



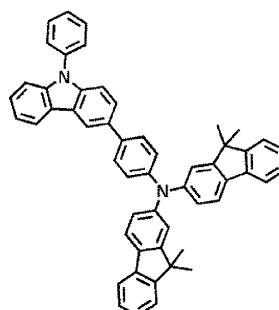
HT6



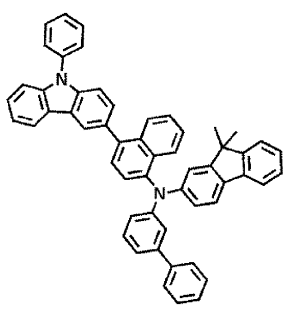
HT7



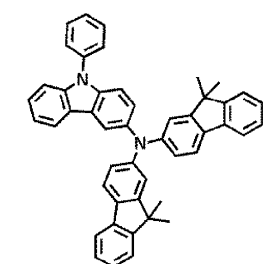
HT8



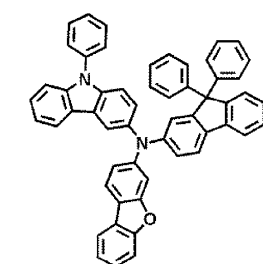
HT9



HT10



HT11



HT12

【 0 1 0 8】

10

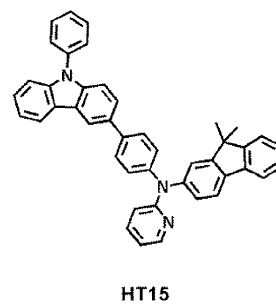
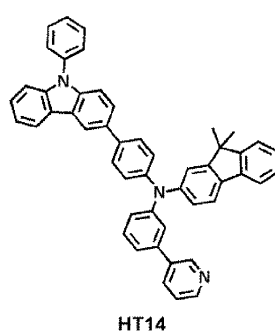
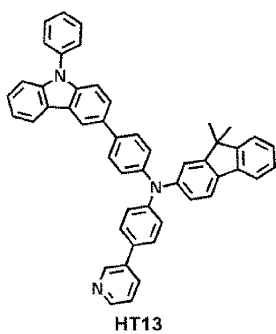
20

30

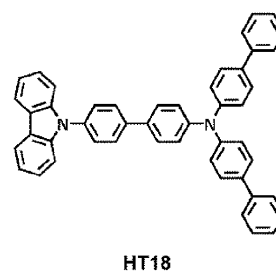
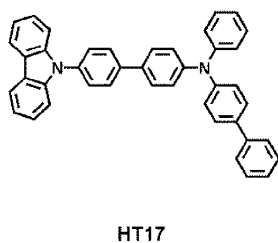
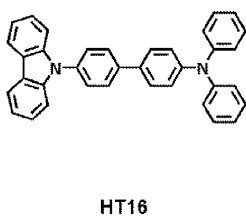
40

50

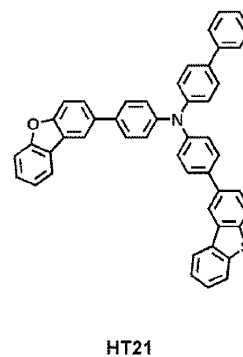
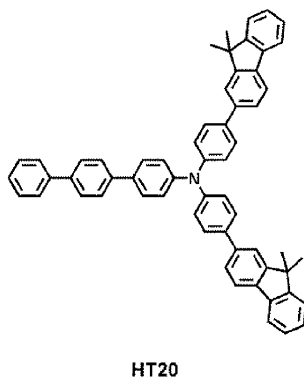
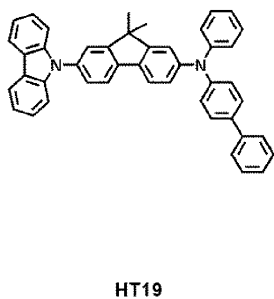
【化 2 9】



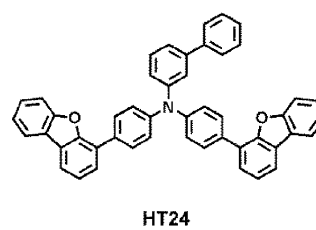
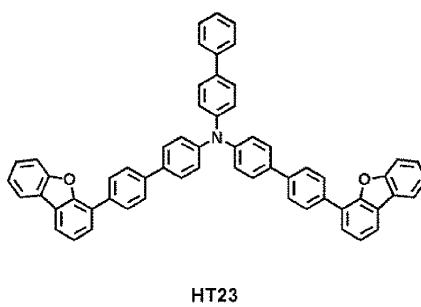
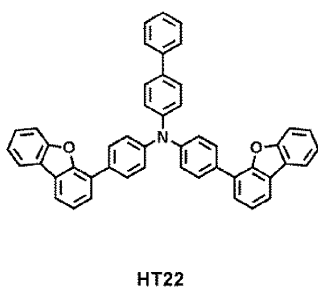
10



20



30

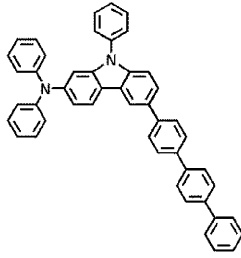


【 0 1 0 9】

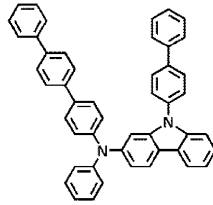
40

50

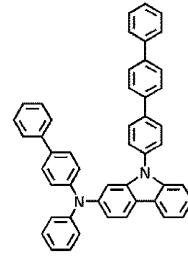
【化 3 0】



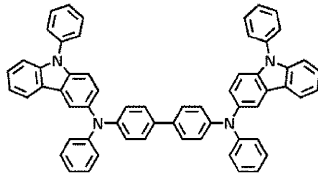
HT25



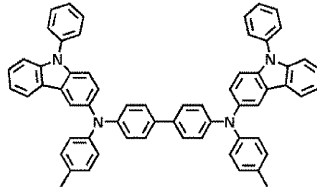
HT26



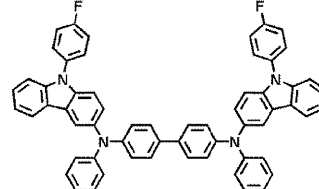
HT27



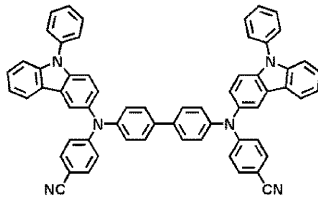
HT28



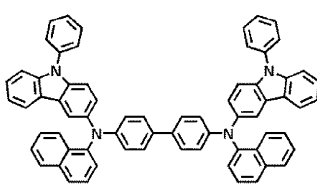
HT29



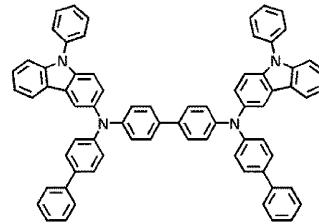
HT30



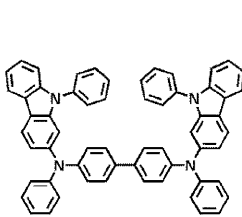
HT31



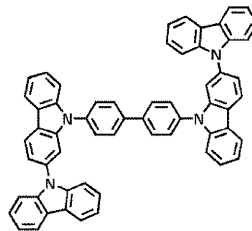
HT32



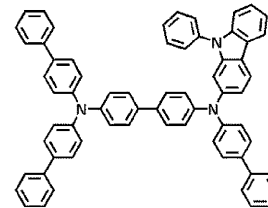
HT33



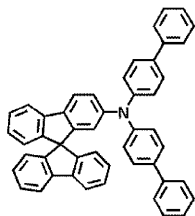
HT34



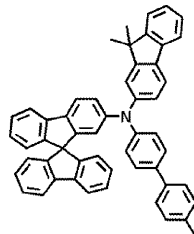
HT35



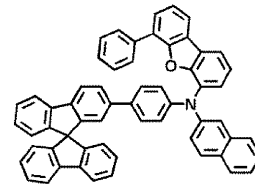
HT36



HT37



HT38



HT39

【 0 1 1 0】

前記正孔輸送領域の厚みは、約 10 nm ないし約 1000 nm、例えば、約 10 nm ないし約 100 nm でもある。前記正孔輸送領域が、正孔注入層及び正孔輸送層のうち少なくとも 1 層を含むのであるならば、前記正孔注入層の厚みは、約 10 nm ないし約 900 nm、例えば、約 10 nm ないし約 100 nm であり、前記正孔輸送層の厚みは、約 5 nm ないし約 200 nm、例えば、約 10 nm ないし約 150 nm でもある。前記正孔輸送領域、正孔注入層及び正孔輸送層の厚みが前述の範囲を満足する場合、実質的な駆動電圧の上昇なしに、満足すべき正孔輸送特性を得ることができる。

【 0 1 1 1】

10

20

30

40

50

前記発光補助層は、発光層から放出される光の波長による光学的共振距離を補償し、光放出効率を上昇させる役割を行う層であり、前記電子阻止層は、電子輸送領域からの電子注入を防止する役割を行う層である。前記発光補助層及び電子阻止層には、前述の物質が含まれてもよい。

【0112】

[p-ドーパント]

前記正孔輸送領域は、前述の物質以外に、導電性向上のために、電荷生成物質をさらに含んでもよい。前記電荷生成物質は、前記正孔輸送領域内に、均一にまたは不均一に分散している。

【0113】

前記電荷生成物質は、例えば、p-ドーパントでもある。

【0114】

一実施形態によれば、前記p-ドーパントのLUMO (lowest unoccupied molecular orbital) は、 -3.5 eV 以下でもある。

【0115】

前記p-ドーパントは、キノン誘導体、金属酸化物及びシアノ基含有化合物のうちから選択された少なくとも一つを含んでもよいが、それらに限定されるものではない。

【0116】

例えば、前記p-ドーパントは、

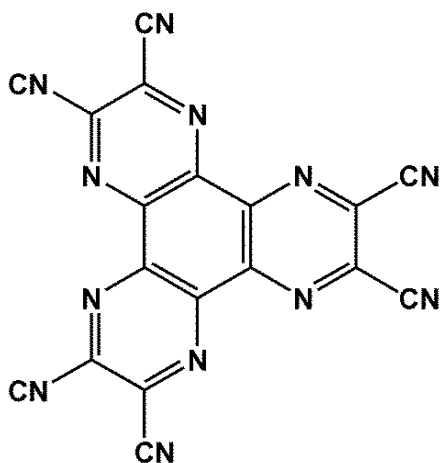
テトラシアノキノジメタン (TCNQ) 及び2, 3, 5, 6-テトラフルオロ-7, 7, 8, 8-テトラシアノキノジメタン (F4-TCNQ) のようなキノン誘導体；
タングステン酸化物及びモリブデン酸化物のような金属酸化物；

1, 4, 5, 8, 9, 12-ヘキサアザトリフェニレン-ヘキサカルボニトリル (HAT-CN)；並びに

下記化学式33で表示される化合物；のうちから選択された少なくとも一つを含んでもよいが、それらに限定されるものではない：

【0117】

【化31】



<HAT-CN>

【0118】

10

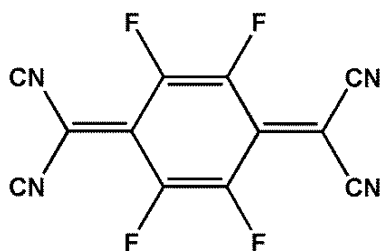
20

30

40

50

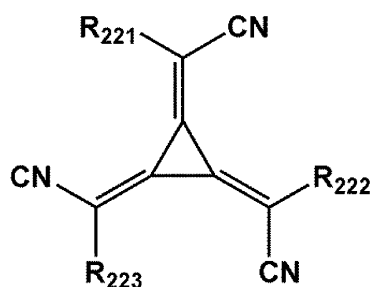
【化 3 2】



< F 4 - T C N Q >

【 0 1 1 9 】

【化 3 3】



【 0 1 2 0 】

前記化学式 3 3 で、

R₂₂₁ないしR₂₂₃は、互いに独立して、置換もしくは非置換のC₃－C₁₀シクロアルキル基、置換もしくは非置換のC₁－C₁₀ヘテロシクロアルキル基、置換もしくは非置換のC₃－C₁₀シクロアルケニル基、置換もしくは非置換のC₁－C₁₀ヘテロシクロアルケニル基、置換もしくは非置換のC₆－C₆₀アリール基、置換もしくは非置換のC₁－C₆₀ヘテロアリール基、置換もしくは非置換の一価非芳香族縮合多環基、及び置換もしくは非置換の一価非芳香族ヘテロ縮合多環基のうちから選択されるが、前記R₂₂₁ないしR₂₂₃において少なくとも一つは、シアノ基、－F、－Cl、－Br、－I、－Fで置換されたC₁－C₂₀アルキル基、－Clで置換されたC₁－C₂₀アルキル基、－Brで置換されたC₁－C₂₀アルキル基、及び－Iで置換されたC₁－C₂₀アルキル基のうちから選択された少なくとも一つの置換基を有する。

【 0 1 2 1 】

〔有機層 1 5 0 における発光層〕

前記有機発光素子 1 0 がフルカラー有機発光素子である場合、発光層は、個別副画素別に、赤色発光層、緑色発光層及び青色発光層にパターンニングされる。または、前記発光層は、赤色発光層、緑色発光層及び青色発光層のうちから選択された 2 以上の層が接触または離隔されて積層された構造を有するか、あるいは赤色光放出物質、緑色光放出物質及び青色光放出物質のうちから選択された 2 以上の物質が層の区分なしに混合された構造を有し、白色光を放出することができる。

【 0 1 2 2 】

前記発光層は、ホスト及びドーパントを含んでもよい。前記ドーパントは、リン光ドーパント及び蛍光ドーパントのうち少なくとも一つを含んでもよい。

【 0 1 2 3 】

前記発光層において、ドーパントの含量は、一般的にホスト約 1 0 0 重量部に対して、約 0 . 0 1 ないし約 1 5 重量部の範囲で選択されるが、それらに限定されるものではない。

【 0 1 2 4 】

前記発光層の厚みは、約 1 0 nm ないし約 1 0 0 nm、例えば、約 2 0 nm ないし約 6

10

20

30

40

50

0 nmでもある。前記発光層の厚みが前述の範囲を満足する場合、実質的な駆動電圧の上昇なしに、優れた発光特性を示すことができる。

【0125】

[発光層におけるホスト]

前記ホストは、下記化学式34で表示される化合物をさらに含んでもよい。

【0126】

【化34】



10

【0127】

前記化学式34で、

Ar_{301} は、置換もしくは非置換の C_5-C_{60} 炭素環式基、または置換もしくは非置換の C_1-C_{60} ヘテロ環式基であり、

$xb11$ は、1、2または3であり、

L_{301} は、置換もしくは非置換の C_3-C_{10} シクロアルキレン基、置換もしくは非置換の C_1-C_{10} ヘテロシクロアルキレン基、置換もしくは非置換の C_3-C_{10} シクロアルケニレン基、置換もしくは非置換の C_1-C_{10} ヘテロシクロアルケニレン基、置換もしくは非置換の C_6-C_{60} アリーレン基、置換もしくは非置換の C_1-C_{60} ヘテロアリーレン基、置換もしくは非置換の二価非芳香族縮合多環基、及び置換もしくは非置換の二価非芳香族ヘテロ縮合多環基のうちから選択され、

20

$xb1$ は、0ないし5の整数のうちから選択され、

R_{301} は、重水素、 $-F$ 、 $-Cl$ 、 $-Br$ 、 $-I$ 、ヒドロキシ基、シアノ基、ニトロ基、アミノ基、ヒドラジノ基、ヒドラゾノ基、置換もしくは非置換の C_1-C_{60} アルキル基、置換もしくは非置換の C_2-C_{60} アルケニル基、置換もしくは非置換の C_2-C_{60} アルキニル基、置換もしくは非置換の C_1-C_{60} アルコキシ基、置換もしくは非置換の C_3-C_{10} シクロアルキル基、置換もしくは非置換の C_1-C_{10} ヘテロシクロアルキル基、置換もしくは非置換の C_3-C_{10} シクロアルケニル基、置換もしくは非置換の C_1-C_{10} ヘテロシクロアルケニル基、置換もしくは非置換の C_6-C_{60} アリール基、置換もしくは非置換の C_6-C_{60} アリールオキシ基、置換もしくは非置換の C_6-C_{60} アリールチオ基、置換もしくは非置換の C_1-C_{60} ヘテロアリール基、置換もしくは非置換の一価非芳香族縮合多環基、置換もしくは非置換の一価非芳香族ヘテロ縮合多環基、 $-Si(Q_{301})(Q_{302})(Q_{303})$ 、 $-N(Q_{301})(Q_{302})$ 、 $-B(Q_{301})(Q_{302})$ 、 $-C(=O)(Q_{301})$ 、 $-S(=O)_2(Q_{301})$ 、及び $-P(=O)(Q_{301})(Q_{302})$ のうちから選択され、

30

$xb21$ は、1ないし5の整数のうちから選択され、

Q_{301} ないし Q_{303} は、互いに独立して、 C_1-C_{10} アルキル基、 C_1-C_{10} アルコキシ基、フェニル基、ビフェニル基、ターフェニル基及びナフチル基のうちからも選択されるが、それらに限定されるものではない。

【0128】

40

一実施形態によれば、前記化学式34で Ar_{301} は、

ナフタレン基、フルオレン基、スピロ-ビフルオレン基、ベンゾフルオレン基、ジベンゾフルオレン基、フェナレン基、フェナントレン基、アントラセン基、フルオランテン基、トリフェニレン基、ピレン基、クリセン基、ナフタセン基、ピセン基、ペリレン基、ペンタフェン基、インデノアントラセン基、ジベンゾフラン基及びジベンゾチオフエン基；並びに

重水素、 $-F$ 、 $-Cl$ 、 $-Br$ 、 $-I$ 、ヒドロキシ基、シアノ基、ニトロ基、アミノ基、ヒドラジノ基、ヒドラゾノ基、 C_1-C_{20} アルキル基、 C_1-C_{20} アルコキシ基、フェニル基、ビフェニル基、ターフェニル基、ナフチル基、 $-Si(Q_{31})(Q_{32})(Q_{33})$ 、 $-N(Q_{31})(Q_{32})$ 、 $-B(Q_{31})(Q_{32})$ 、 $-C(=O)(Q_{31})$ 、 $-S(=$

50

O) ₂ (Q₃₁) 及び -P (=O) (Q₃₁) (Q₃₂) のうちから選択された少なくとも一つで置換された、ナフタレン基、フルオレン基、スピロ-ビフルオレン基、ベンゾフルオレン基、ジベンゾフルオレン基、フェナレン基、フェナントレン基、アントラセン基、フルオランテン基、トリフェニレン基、ピレン基、クリセン基、ナфтаセン基、ピセン基、ペリレン基、ペンタフェン基、インデノアントラセン基、ジベンゾフラン基及びジベンゾチオフェン基；のうちから選択され、

Q₃₁ないしQ₃₃は、互いに独立して、C₁-C₁₀アルキル基、C₁-C₁₀アルコキシ基、フェニル基、ビフェニル基、ターフェニル基及びナフチル基のうちからも選択されるが、それらに限定されるものではない。

【0129】

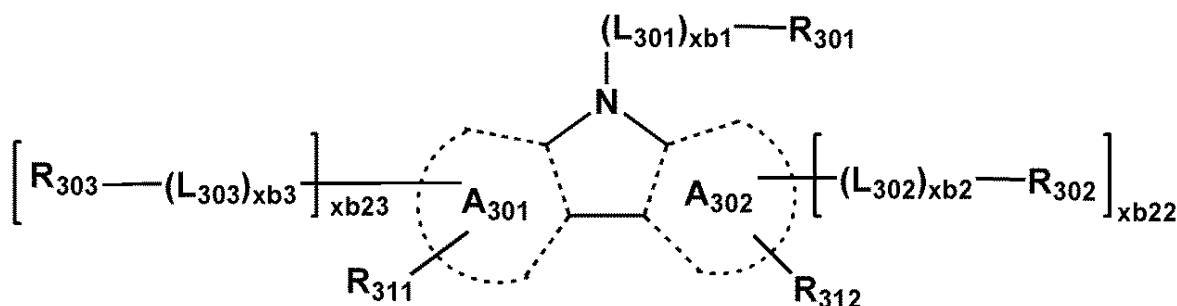
前記化学式34で、x_{b11}が2以上である場合、2以上のA_{r301}は、単結合を介して互いに連結される。

【0130】

他の実施形態によれば、前記化学式34で表示される化合物は、下記化学式35または36で表示される。

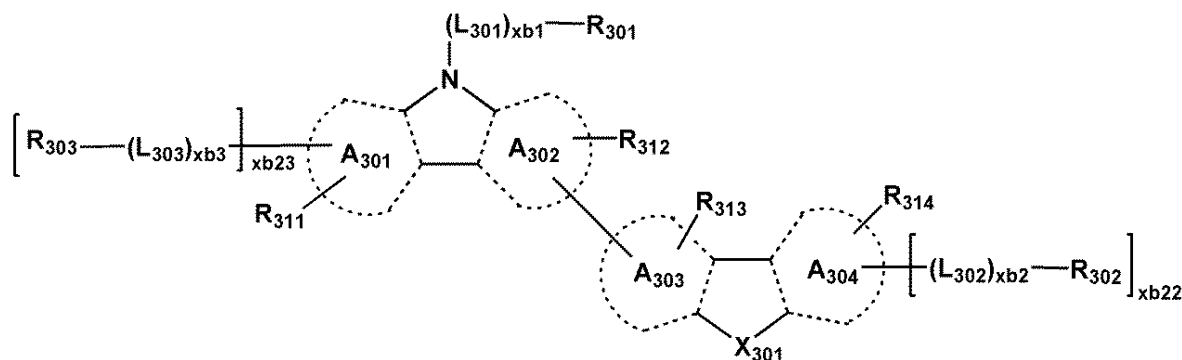
【0131】

【化35】



【0132】

【化36】



【0133】

前記化学式35ないし36で、

A₃₀₁ないしA₃₀₄は、互いに独立して、ベンゼン基、ナフタレン基、フェナントレン基、フルオランテン基、トリフェニレン基、ピレン基、クリセン基、ピリジン基、ピリミジン基、インデン基、フルオレン基、スピロ-ビフルオレン基、ベンゾフルオレン基、ジベンゾフルオレン基、インドール基、カルバゾール基、ベンゾカルバゾール基、ジベンゾカルバゾール基、フラン基、ベンゾフラン基、ジベンゾフラン基、ナフトフラン基、ベンゾナフトフラン基、ジナフトフラン基、チオフェン基、ベンゾチオフェン基、ジベンゾチオフェン基、ナフトチオフェン基、ベンゾナフトチオフェン基及びジナフトチオフェン基のうちから選択され、

X_{301} は、O、SまたはN- $[(L_{304})_{xb4}-R_{304}]$ であり、

R_{311} ないし R_{314} は、互いに独立して、水素、重水素、-F、-Cl、-Br、-I、ヒドロキシル基、シアノ基、ニトロ基、アミジノ基、ヒドラジノ基、ヒドラゾノ基、 C_1-C_{20} アルキル基、 C_1-C_{20} アルコキシ基、フェニル基、ビフェニル基、ターフェニル基、ナフチル基、-Si(Q_{31})(Q_{32})(Q_{33})、-N(Q_{31})(Q_{32})、-B(Q_{31})(Q_{32})、-C(=O)(Q_{31})、-S(=O)₂(Q_{31})及び-P(=O)(Q_{31})(Q_{32})のうちから選択され、

xb_{22} 及び xb_{23} は、互いに独立して、0、1または2であり、

L_{301} 、 xb_1 、 R_{301} 、及び Q_{31} ないし Q_{33} に係わる説明は、本明細書記載のところを参照し、

L_{302} ないし L_{304} に係わる説明は、互いに独立して、前記 L_{301} に係わる説明を参照し、

xb_2 ないし xb_4 に係わる説明は、互いに独立して、前記 xb_1 に係わる説明を参照し、

R_{302} ないし R_{304} に係わる説明は、互いに独立して、前記 R_{301} に係わる説明を参照する。

【0134】

例えば、前記化学式34、35及び36で L_{301} ないし L_{304} は、互いに独立して、

フェニレン基、ナフチレン基、フルオレニレン基、スピロ-ビフルオレニレン基、ベンゾフルオレニレン基、ジベンゾフルオレニレン基、フェナントレニレン基、アントラセニレン基、フルオランテニレン基、トリフェニレニレン基、ピレニレン基、クリセニレン基、ペリレニレン基、ペンタフェニレン基、ヘキサセニレン基、ペンタセニレン基、チオフェニレン基、フラニレン基、カルバゾリレン基、インドリレン基、イソインドリレン基、ベンゾフラニレン基、ベンゾチオフェニレン基、ジベンゾフラニレン基、ジベンゾチオフェニレン基、ベンゾカルバゾリレン基、ジベンゾカルバゾリレン基、ジベンゾシロリレン基、ピリジニレン基、イミダゾリレン基、ピラゾリレン基、チアゾリレン基、イソチアゾリレン基、オキサゾリレン基、イソキサゾリレン基、チアジアゾリレン基、オキサジアゾリレン基、ピラジニレン基、ピリミジニレン基、ピリダジニレン基、トリアジニレン基、キノリニレン基、イソキノリニレン基、ベンゾキノリニレン基、フタラジニレン基、ナフチリジニレン基、キノキサリニレン基、キナゾリニレン基、シンノリニレン基、フェナントリジニレン基、アクリジニレン基、フェナントロリニレン基、フェナジニレン基、ベンゾイミダゾリレン基、イソベンゾチアゾリレン基、ベンゾオキサゾリレン基、イソベンゾオキサゾリレン基、トリアゾリレン基、テトラゾリレン基、イミダゾピリジニレン基、イミダゾピリミジニレン基及びアザカルバゾリレン基；並びに

重水素、-F、-Cl、-Br、-I、ヒドロキシル基、シアノ基、ニトロ基、アミジノ基、ヒドラジノ基、ヒドラゾノ基、 C_1-C_{20} アルキル基、 C_1-C_{20} アルコキシ基、フェニル基、ビフェニル基、ターフェニル基、ナフチル基、フルオレニル基、スピロ-ビフルオレニル基、ベンゾフルオレニル基、ジベンゾフルオレニル基、フェナントレニル基、アントラセニル基、フルオランテニル基、トリフェニレニル基、ピレニル基、クリセニル基、ペリレニル基、ペンタフェニル基、ヘキサセニル基、ペンタセニル基、チオフェニル基、フラニル基、カルバゾリル基、インドリル基、イソインドリル基、ベンゾフラニル基、ベンゾチオフェニル基、ジベンゾフラニル基、ジベンゾチオフェニル基、ベンゾカルバゾリル基、ジベンゾカルバゾリル基、ジベンゾシロリル基、ピリジニル基、イミダゾリル基、ピラゾリル基、チアゾリル基、イソチアゾリル基、オキサゾリル基、イソキサゾリル基、チアジアゾリル基、オキサジアゾリル基、ピラジニル基、ピリミジニル基、ピリダジニル基、トリアジニル基、キノリニル基、イソキノリニル基、ベンゾキノリニル基、フタラジニル基、ナフチリジニル基、キノキサリニル基、キナゾリニル基、シンノリニル基、フェナントリジニル基、アクリジニル基、フェナントロリニル基、フェナジニル基、ベンゾイミダゾリル基、イソベンゾチアゾリル基、ベンゾオキサゾリル基、イソベンゾオキサゾリル基、トリアゾリル基、テトラゾリル基、イミダゾピリジニル基、イミダゾピリミジ

10

20

30

40

50

ニル基、アザカルバゾリル基、 $-Si(Q_{31})(Q_{32})(Q_{33})$ 、 $-N(Q_{31})(Q_{32})$ 、 $-B(Q_{31})(Q_{32})$ 、 $-C(=O)(Q_{31})$ 、 $-S(=O)_2(Q_{31})$ 及び $-P(=O)(Q_{31})(Q_{32})$ のうちから選択された少なくとも一つで置換された、フェニレン基、ナフチレン基、フルオレニレン基、スピロ-ビフルオレニレン基、ベンゾフルオレニレン基、ジベンゾフルオレニレン基、フェナントレニレン基、アントラセニレン基、フルオランテニレン基、トリフェニレニレン基、ピレニレン基、クリセニレン基、ペリレニレン基、ペンタフェニレン基、ヘキサセニレン基、ペンタセニレン基、チオフェニレン基、フラニレン基、カルバゾリレン基、インドリレン基、イソインドリレン基、ベンゾフラニレン基、ベンゾチオフェニレン基、ジベンゾフラニレン基、ジベンゾチオフェニレン基、ベンゾカルバゾリレン基、ジベンゾカルバゾリレン基、ジベンゾシロリレン基、ピリジニレン基、イミダゾリレン基、ピラゾリレン基、チアゾリレン基、イソチアゾリレン基、オキサゾリレン基、イソキサゾリレン基、チアジアゾリレン基、オキサジアゾリレン基、ピラジニレン基、ピリミジニレン基、ピリダジニレン基、トリアジニレン基、キノリニレン基、イソキノリニレン基、ベンゾキノリニレン基、フタラジニレン基、ナフチリジニレン基、キノキサリニレン基、キナゾリニレン基、シンノリニレン基、フェナントリジニレン基、アクリジニレン基、フェナントロリニレン基、フェナジニレン基、ベンゾイミダゾリレン基、イソベンゾチアゾリレン基、ベンゾオキサゾリレン基、イソベンゾオキサゾリレン基、トリアゾリレン基、テトラゾリレン基、イミダゾピリジニレン基、イミダゾピリミジニレン基及びアザカルバゾリレン基；のうちから選択され、

前記 Q_{31} ないし Q_{33} に係わる説明は、本明細書記載のところを参照することができる。

【0135】

他の例として、前記化学式 34、35 及び 36 で R_{301} ないし R_{304} は、互いに独立して

フェニル基、ビフェニル基、ターフェニル基、ナフチル基、フルオレニル基、スピロ-ビフルオレニル基、ベンゾフルオレニル基、ジベンゾフルオレニル基、フェナントレニル基、アントラセニル基、フルオランテニル基、トリフェニレニル基、ピレニル基、クリセニル基、ペリレニル基、ペンタフェニル基、ヘキサセニル基、ペンタセニル基、チオフェニル基、フラニル基、カルバゾリル基、インドリル基、イソインドリル基、ベンゾフラニル基、ベンゾチオフェニル基、ジベンゾフラニル基、ジベンゾチオフェニル基、ベンゾカルバゾリル基、ジベンゾカルバゾリル基、ジベンゾシロリル基、ピリジニル基、イミダゾリル基、ピラゾリル基、チアゾリル基、イソチアゾリル基、オキサゾリル基、イソキサゾリル基、チアジアゾリル基、オキサジアゾリル基、ピラジニル基、ピリミジニル基、ピリダジニル基、トリアジニル基、キノリニル基、イソキノリニル基、ベンゾキノリニル基、フタラジニル基、ナフチリジニル基、キノキサリニル基、キナゾリニル基、シンノリニル基、フェナントリジニル基、アクリジニル基、フェナントロリニル基、フェナジニル基、ベンゾイミダゾリル基、イソベンゾチアゾリル基、ベンゾオキサゾリル基、イソベンゾオキサゾリル基、トリアゾリル基、テトラゾリル基、イミダゾピリジニル基、イミダゾピリミジニル基及びアザカルバゾリル基；並びに

重水素、 $-F$ 、 $-Cl$ 、 $-Br$ 、 $-I$ 、ヒドロキシル基、シアノ基、ニトロ基、アミジノ基、ヒドラジノ基、ヒドラゾノ基、 C_1-C_{20} アルキル基、 C_1-C_{20} アルコキシ基、フェニル基、ビフェニル基、ターフェニル基、ナフチル基、フルオレニル基、スピロ-ビフルオレニル基、ベンゾフルオレニル基、ジベンゾフルオレニル基、フェナントレニル基、アントラセニル基、フルオランテニル基、トリフェニレニル基、ピレニル基、クリセニル基、ペリレニル基、ペンタフェニル基、ヘキサセニル基、ペンタセニル基、チオフェニル基、フラニル基、カルバゾリル基、インドリル基、イソインドリル基、ベンゾフラニル基、ベンゾチオフェニル基、ジベンゾフラニル基、ジベンゾチオフェニル基、ベンゾカルバゾリル基、ジベンゾカルバゾリル基、ジベンゾシロリル基、ピリジニル基、イミダゾリル基、ピラゾリル基、チアゾリル基、イソチアゾリル基、オキサゾリル基、イソキサゾリル基、チアジアゾリル基、オキサジアゾリル基、ピラジニル基、ピリミジニル基、ピリダジニル基、トリアジニル基、キノリニル基、イソキノリニル基、ベンゾキノリニル基、フタ

ラジニル基、ナフチリジニル基、キノキサリニル基、キナゾリニル基、シンノリニル基、フェナントリジニル基、アクリジニル基、フェナントロリニル基、フェナジニル基、ベンゾイミダゾリル基、イソベンゾチアゾリル基、ベンゾオキサゾリル基、イソベンゾオキサゾリル基、トリアゾリル基、テトラゾリル基、イミダゾピリジニル基、イミダゾピリミジニル基、アザカルバゾリル基、 $-Si(Q_{31})(Q_{32})(Q_{33})$ 、 $-N(Q_{31})(Q_{32})$ 、 $-B(Q_{31})(Q_{32})$ 、 $-C(=O)(Q_{31})$ 、 $-S(=O)_2(Q_{31})$ 及び $-P(=O)(Q_{31})(Q_{32})$ のうちから選択された少なくとも一つで置換された、フェニル基、ビフェニル基、ターフェニル基、ナフチル基、フルオレニル基、スピロビフルオレニル基、ベンゾフルオレニル基、ジベンゾフルオレニル基、フェナントレニル基、アントラセニル基、フルオランテニル基、トリフェニレニル基、ピレニル基、クリセニル基、ペリレニル基、ペンタフェニル基、ヘキサセニル基、ペンタセニル基、チオフェニル基、フラニル基、カルバゾリル基、インドリル基、イソインドリル基、ベンゾフラニル基、ベンゾチオフェニル基、ジベンゾフラニル基、ジベンゾチオフェニル基、ベンゾカルバゾリル基、ジベンゾカルバゾリル基、ジベンゾシロリル基、ピリジニル基、イミダゾリル基、ピラゾリル基、チアゾリル基、イソチアゾリル基、オキサゾリル基、イソキサゾリル基、チアジアゾリル基、オキサジアゾリル基、ピラジニル基、ピリミジニル基、ピリダジニル基、トリアジニル基、キノリニル基、イソキノリニル基、ベンゾキノリニル基、フタラジニル基、ナフチリジニル基、キノキサリニル基、キナゾリニル基、シンノリニル基、フェナントリジニル基、アクリジニル基、フェナントロリニル基、フェナジニル基、ベンゾイミダゾリル基、イソベンゾチアゾリル基、ベンゾオキサゾリル基、イソベンゾオキサゾリル基、トリアゾリル基、テトラゾリル基、イミダゾピリジニル基、イミダゾピリミジニル基及びアザカルバゾリル基；のうちから選択され、

前記 Q_{31} ないし Q_{33} に係わる説明は、本明細書記載のところを参照することができる。

【0136】

さらに他の例として、前記ホストは、アルカリ土類金属錯体を含んでもよい。例えば、前記ホストは、Be 錯体（例えば、下記化合物 H55）、Mg 錯体及び Zn 錯体のうちからも選択される。

【0137】

前記ホストは、9, 10-ジ(2-ナフチル)アントラセン(ADN)、2-メチル-9, 10-ビス(ナフタレン-2-イル)アントラセン(MADN)、9, 10-ジ(2-ナフチル)-2-tert-ブチル-アントラセン(TBADN)、4, 4'-ビス(N-カルバゾリル)-1, 1'-ビフェニル(CBP)、1, 3-ジ-9-カルバゾリルベンゼン(mCP)、1, 3, 5-トリス(カルバゾ-9-イル)ベンゼン(TCP)、及び下記化合物 H1 ないし H55 のうちから選択された少なくとも一つを含んでもよいが、それらに限定されるものではない：

【0138】

10

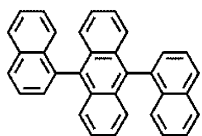
20

30

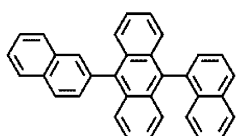
40

50

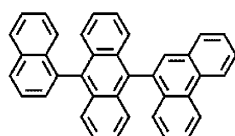
【化 3 7】



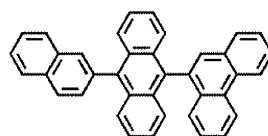
H1



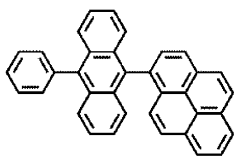
H2



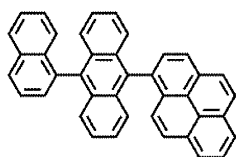
H3



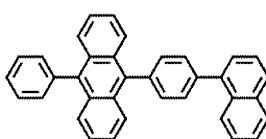
H4



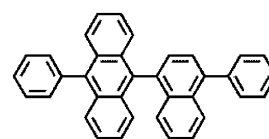
H5



H6

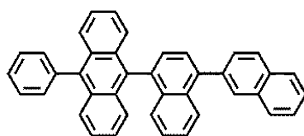


H7

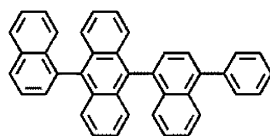


H8

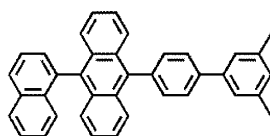
10



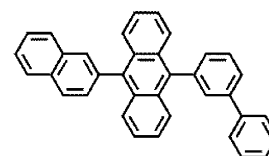
H9



H10



H11



H12

20

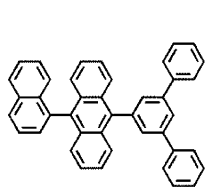
【 0 1 3 9】

30

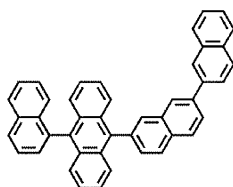
40

50

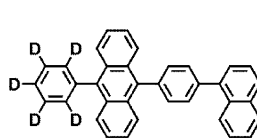
【化 3 8】



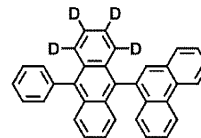
H13



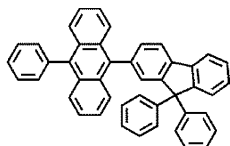
H14



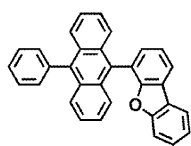
H15



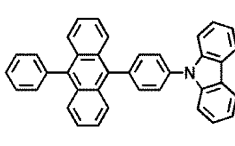
H16



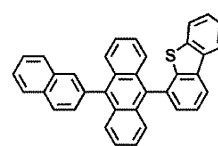
H17



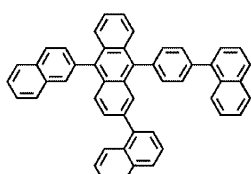
H18



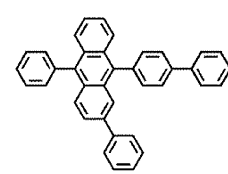
H19



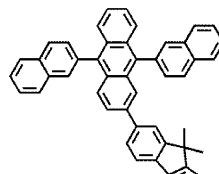
H20



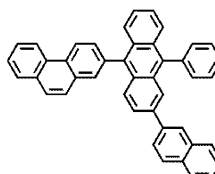
H21



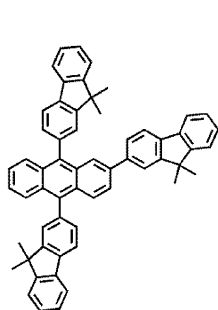
H22



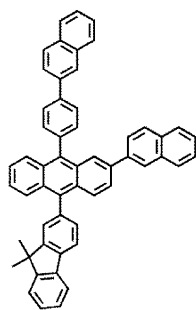
H23



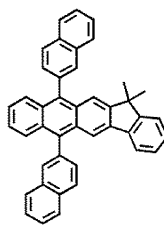
H24



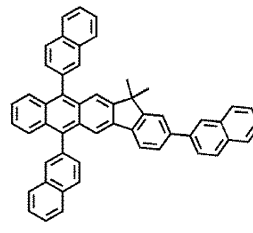
H25



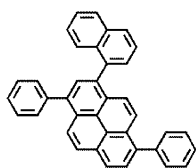
H26



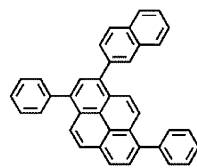
H27



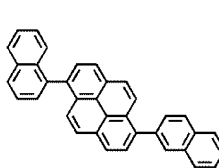
H28



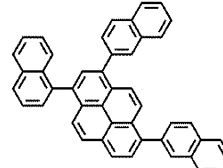
H29



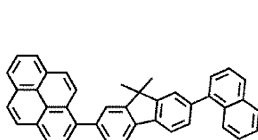
H30



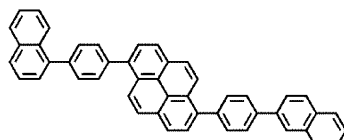
H31



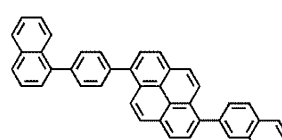
H32



H33



H34



H35

【 0 1 4 0 】

10

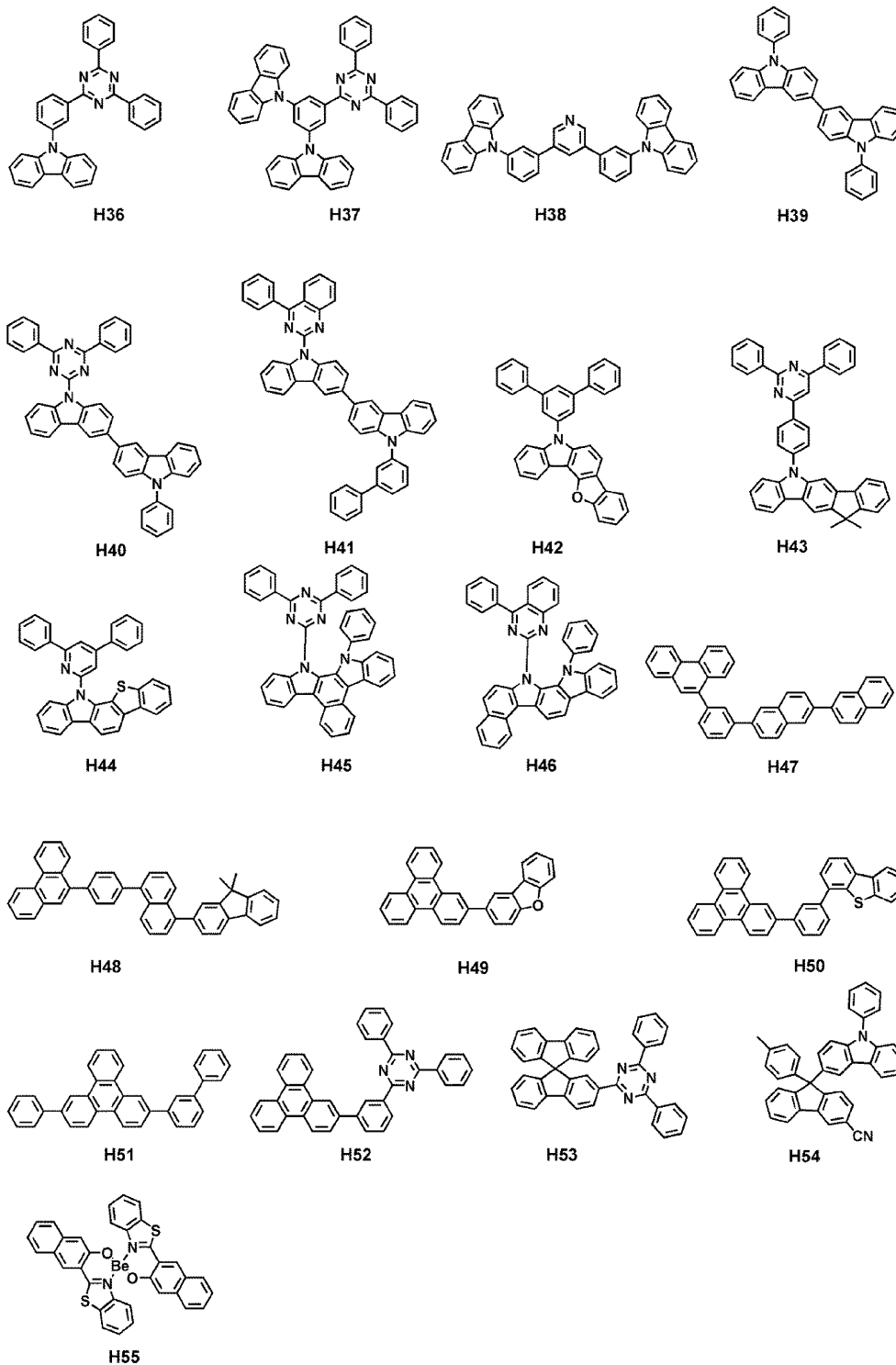
20

30

40

50

【化 3 9】



【0141】

〔有機層 150 における発光層に含まれたリン光ドーパント〕

前記リン光ドーパントは、下記化学式 40、41 で表示される有機金属錯体を含んでもよい。

【0142】

【化 40】



10

20

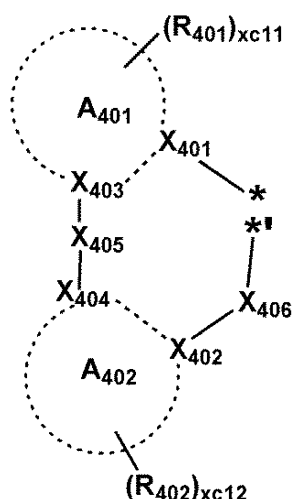
30

40

50

【 0 1 4 3 】

【 化 4 1 】



10

【 0 1 4 4 】

前記化学式 4 0 及び 4 1 で、

M は、イリジウム (I r)、白金 (P t)、パラジウム (P d)、オスミウム (O s)、チタン (T i)、ジルコニウム (Z r)、ハフニウム (H f)、ユウロピウム (E u)、テルビウム (T b)、ロジウム (R h) 及びツリウム (T m) のうちから選択され、

20

L 401 は、前記化学式 4 1 で表示されるリガンドのうちから選択され、x c 1 は、1、2 または 3 であり、x c 1 が 2 以上である場合、2 以上の L 401 は、互いに同一であってもよく、異なってもよく、

L 402 は、有機リガンドであり、x c 2 は、0 ないし 4 の整数のうちから選択され、x c 2 が 2 以上である場合、2 以上の L 402 は、互いに同一であってもよく、異なってもよく、

X 401 ないし X 404 は、互いに独立して、窒素または炭素であり、

X 401 と X 403 は、単結合または二重結合を介して連結され、X 402 と X 404 は、単結合または二重結合を介して連結され、

30

A 401 及び A 402 は、互いに独立して、C 5 - C 60 炭素環式基または C 1 - C 60 ヘテロ環式基であり、

X 405 は、単結合、* - O - * '、* - S - * '、* - C (= O) - * '、* - N 4 (Q) - * '、* - C (Q 11) (Q 412) - * '、* - C (Q 11) = C (Q 412) - * '、* - C (Q 411) = * ' または * = C = * ' であり、前記 Q 1 及び Q 412 は、水素、重水素、C 1 - C 20 アルキル基、C 1 - C 20 アルコキシ基、フェニル基、ビフェニル基、ターフェニル基またはナフチル基であり、

X 406 は、単結合、O または S であり、

R 401 及び R 402 は、互いに独立して、水素、重水素、- F、- C l、- B r、- I、ヒドロキシル基、シアノ基、ニトロ基、アミジノ基、ヒドラジノ基、ヒドラゾノ基、置換もしくは非置換の C 1 - C 20 アルキル基、置換もしくは非置換の C 1 - C 20 アルコキシ基、置換もしくは非置換の C 3 - C 10 シクロアルキル基、置換もしくは非置換の C 1 - C 10 ヘテロシクロアルキル基、置換もしくは非置換の C 3 - C 10 シクロアルケニル基、置換もしくは非置換の C 1 - C 10 ヘテロシクロアルケニル基、置換もしくは非置換の C 6 - C 60 アリール基、置換もしくは非置換の C 6 - C 60 アリールオキシ基、置換もしくは非置換の C 6 - C 60 アリールチオ基、置換もしくは非置換の C 1 - C 60 ヘテロアリール基、置換もしくは非置換の一価非芳香族縮合多環基、置換もしくは非置換の一価非芳香族ヘテロ縮合多環基、- S i (Q 401) (Q 402) (Q 403)、- N (Q 401) (Q 402)、- B (Q 401) (Q 402)、- C (= O) (Q 401)、- S (= O) 2 (Q 401)、及び - P (= O) (Q 401) (

40

50

Q₄₀₂)のうちから選択され、前記Q₄₀₁ないしQ₄₀₃は、互いに独立して、C₁–C₁₀アルキル基、C₁–C₁₀アルコキシ基、C₆–C₂₀アリール基及びC₁–C₂₀ヘテロアリール基のうちから選択され、

x c 1 1 及び x c 1 2 は、互いに独立して、0 ないし 1 0 の整数のうちから選択され、
前記化学式 4 1 で * 及び * ' は、前記化学式 4 0 において M との結合サイトである。

【0145】

一実施形態によれば、前記化学式 4 1 で A₄₀₁ 及び A₄₀₂ は、互いに独立して、ベンゼン基、ナフタレン基、フルオレン基、スピロビフルオレン基、インデン基、ピロール基、チオフェン基、フラン基、イミダゾール基、ピラゾール基、チアゾール基、イソチアゾール基、オキサゾール基、イソキサゾール基、ピリジン基、ピラジン基、ピリミジン基、ピリダジン基、キノリン基、イソキノリン基、ベンゾキノリン基、キノキサリン基、キナゾリン基、カルバゾール基、ベンゾイミダゾール基、ベンゾフラン基、ベンゾチオフェン基、イソベンゾチオフェン基、ベンゾオキサゾール基、イソベンゾオキサゾール基、トリアゾール基、テトラゾール基、オキサジアゾール基、トリアジン基、ジベンゾフラン基及びジベンゾチオフェン基のうちからも選択される。

【0146】

他の実施形態によれば、前記化学式 4 1 で、i) X₄₀₁ は、窒素であり、X₄₀₂ は、炭素であるか、あるいは ii) X₄₀₁ と X₄₀₂ とがいずれも窒素でもある。

【0147】

さらに他の実施形態によれば、前記化学式 4 1 で R₄₀₁ 及び R₄₀₂ は、互いに独立して、水素、重水素、-F、-Cl、-Br、-I、ヒドロキシル基、シアノ基、ニトロ基、アミノ基、ヒドラジノ基、ヒドラゾノ基、C₁–C₂₀アルキル基及びC₁–C₂₀アルコキシ基；

重水素、-F、-Cl、-Br、-I、ヒドロキシル基、シアノ基、ニトロ基、アミノ基、ヒドラジノ基、ヒドラゾノ基、フェニル基、ナフチル基、シクロペンチル基、シクロヘキシル基、アダマンタニル基、ノルボナニル基及びノルボネニル基のうちから選択された少なくとも一つで置換された、C₁–C₂₀アルキル基及びC₁–C₂₀アルコキシ基；

シクロペンチル基、シクロヘキシル基、アダマンタニル基、ノルボナニル基、ノルボネニル基、フェニル基、ピフェニル基、ターフェニル基、ナフチル基、フルオレニル基、ピリジニル基、ピラジニル基、ピリミジニル基、ピリダジニル基、トリアジニル基、キノリニル基、イソキノリニル基、キノキサリニル基、キナゾリニル基、カルバゾリル基、ジベンゾフラニル基及びジベンゾチオフェニル基；

重水素、-F、-Cl、-Br、-I、ヒドロキシル基、シアノ基、ニトロ基、アミノ基、ヒドラジノ基、ヒドラゾノ基、C₁–C₂₀アルキル基、C₁–C₂₀アルコキシ基、シクロペンチル基、シクロヘキシル基、アダマンタニル基、ノルボナニル基、ノルボネニル基、フェニル基、ピフェニル基、ターフェニル基、ナフチル基、フルオレニル基、ピリジニル基、ピラジニル基、ピリミジニル基、ピリダジニル基、トリアジニル基、キノリニル基、イソキノリニル基、キノキサリニル基、キナゾリニル基、カルバゾリル基、ジベンゾフラニル基及びジベンゾチオフェニル基のうちから選択された少なくとも一つで置換された、シクロペンチル基、シクロヘキシル基、アダマンタニル基、ノルボナニル基、ノルボネニル基、フェニル基、ピフェニル基、ターフェニル基、ナフチル基、フルオレニル基、ピリジニル基、ピラジニル基、ピリミジニル基、ピリダジニル基、トリアジニル基、キノリニル基、イソキノリニル基、キノキサリニル基、キナゾリニル基、カルバゾリル基、ジベンゾフラニル基及びジベンゾチオフェニル基；並びに

-S i (Q₄₀₁) (Q₄₀₂) (Q₄₀₃)、-N (Q₄₀₁) (Q₄₀₂)、-B (Q₄₀₁) (Q₄₀₂)、-C (=O) (Q₄₀₁)、-S (=O)₂ (Q₄₀₁) 及び -P (=O) (Q₄₀₁) (Q₄₀₂)；のうちから選択され、

前記Q₄₀₁ないしQ₄₀₃は、互いに独立して、C₁–C₁₀アルキル基、C₁–C₁₀アルコキシ基、フェニル基、ピフェニル基及びナフチル基のうちからも選択されるが、それらに限定されるものではない。

【0148】

さらに他の実施形態によれば、前記化学式40で x_{c1} が2以上である場合、2以上の L_{401} において2個の A_{401} は、選択的に、連結基である X_{407} を介して互いに連結されるか、あるいは2個の A_{402} は、選択的に、連結基である X_{408} を介して互いに連結される（下記化合物PD1ないしPD4、及びPD7参照）。前記 X_{407} 及び X_{408} は、互いに独立して、単結合、 $*-O-*$ 、 $*-S-*$ 、 $*-C(=O)-*$ 、 $*-N(Q)-*$ 、 $*-C(Q_{13})(Q_{414})-*$ または $*-C(Q_{13})=C(Q_{414})-*$ （ここで、 Q_{413} 及び Q_{414} は、互いに独立して、水素、重水素、 C_1-C_{20} アルキル基、 C_1-C_{20} アルコキシ基、フェニル基、ビフェニル基、ターフェニル基またはナフチル基）でもあるが、それらに限定されるものではない。

10

【0149】

前記化学式40で L_{402} は、任意の一価、二価または三価の有機リガンドでもある。例えば、前記 L_{402} は、ハロゲン、ジケトン（例えば、アセチルアセトネート）、カルボン酸（例えば、ピコリネート）、 $-C(=O)$ 、イソニトリル、 $-CN$ 、及びリン含有物質（例えば、ホスフィン（phosphine）、ホスファイト（phosphite））のうちからも選択されるが、それらに限定されるものではない。

【0150】

または、前記リン光ドーパントは、例えば、下記化合物PD1ないしPD25のうちからも選択されるが、それらに限定されるものではない。

20

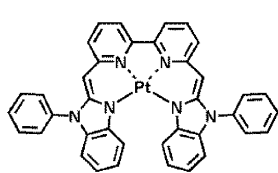
【0151】

30

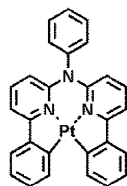
40

50

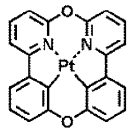
【化 4 2】



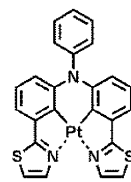
PD1



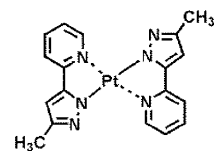
PD2



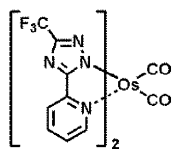
PD3



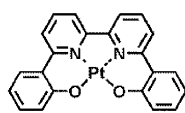
PD4



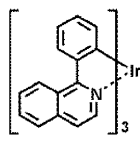
PD5



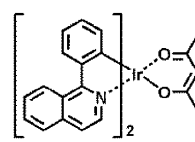
PD6



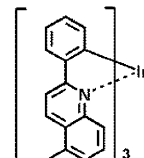
PD7



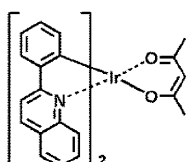
PD8



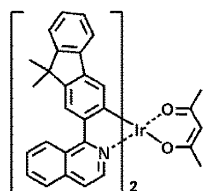
PD9



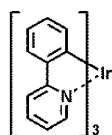
PD10



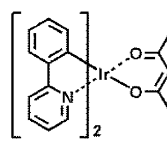
PD11



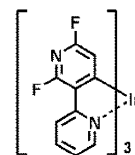
PD12



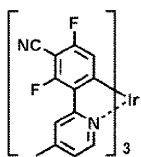
PD13



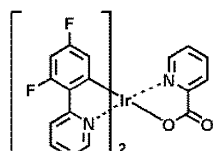
PD14



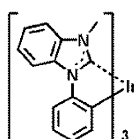
PD15



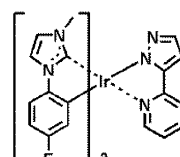
PD16



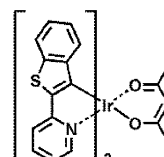
PD17



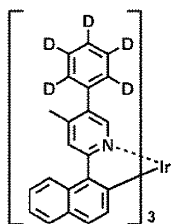
PD18



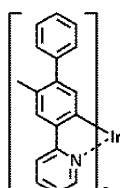
PD19



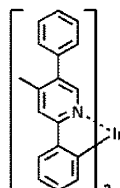
PD20



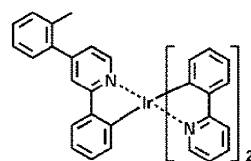
PD21



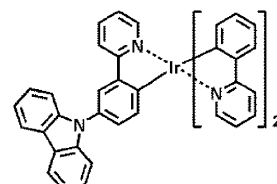
PD22



PD23



PD24



PD25

【 0 1 5 2 】

[発光層における蛍光ドーパント]

前記蛍光ドーパントは、アリールアミン化合物またはスチリルアミン化合物を含んでもよい。

【 0 1 5 3 】

前記蛍光ドーパントは、下記化学式 4 3 で表示される化合物を含んでもよい：

【 0 1 5 4 】

10

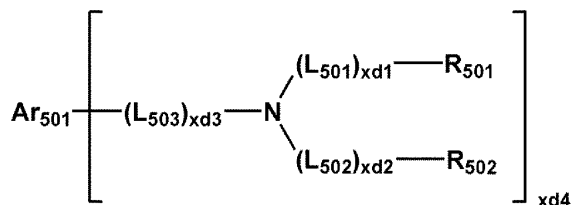
20

30

40

50

【化 4 3】



【0155】

前記化学式 4 3 で、

Ar_{501} は、置換もしくは非置換の $\text{C}_5 - \text{C}_{60}$ 炭素環式基、または置換もしくは非置換の $\text{C}_1 - \text{C}_{60}$ ヘテロ環式基であり、

L_{501} ないし L_{503} は、互いに独立して、置換もしくは非置換の $\text{C}_3 - \text{C}_{10}$ シクロアルキレン基、置換もしくは非置換の $\text{C}_1 - \text{C}_{10}$ ヘテロシクロアルキレン基、置換もしくは非置換の $\text{C}_3 - \text{C}_{10}$ シクロアルケニレン基、置換もしくは非置換の $\text{C}_1 - \text{C}_{10}$ ヘテロシクロアルケニレン基、置換もしくは非置換の $\text{C}_6 - \text{C}_{60}$ アリーレン基、置換もしくは非置換の $\text{C}_1 - \text{C}_{60}$ ヘテロアリーレン基、置換もしくは非置換の二価非芳香族縮合多環基、及び置換もしくは非置換の二価非芳香族ヘテロ縮合多環基のうちから選択され、

$\text{xd}1$ ないし $\text{xd}3$ は、互いに独立して、0ないし3の整数のうちから選択され、

R_{501} 及び R_{502} は、互いに独立して、置換もしくは非置換の $\text{C}_3 - \text{C}_{10}$ シクロアルキル基、置換もしくは非置換の $\text{C}_1 - \text{C}_{10}$ ヘテロシクロアルキル基、置換もしくは非置換の $\text{C}_3 - \text{C}_{10}$ シクロアルケニル基、置換もしくは非置換の $\text{C}_1 - \text{C}_{10}$ ヘテロシクロアルケニル基、置換もしくは非置換の $\text{C}_6 - \text{C}_{60}$ アリール基、置換もしくは非置換の $\text{C}_6 - \text{C}_{60}$ アリールオキシ基、置換もしくは非置換の $\text{C}_6 - \text{C}_{60}$ アリールチオ基、置換もしくは非置換の $\text{C}_1 - \text{C}_{60}$ ヘテロアリール基、置換もしくは非置換の一価非芳香族縮合多環基、及び置換もしくは非置換の一価非芳香族ヘテロ縮合多環基のうちから選択され、

$\text{xd}4$ は、1ないし6の整数のうちからも選択される。

【0156】

一実施形態によれば、前記化学式 4 3 で Ar_{501} は、

ナフタレン基、ヘプタレン基、フルオレン基、スピロ-ビフルオレン基、ベンゾフルオレン基、ジベンゾフルオレン基、フェナレン基、フェナントレン基、アントラセン基、フルオランテン基、トリフェニレン基、ピレン基、クリセン基、ナフタセン基、ピセン基、ペリレン基、ペンタフェン基、インデノアントラセン基及びインデノフェナントレン基；並びに

重水素、 $-\text{F}$ 、 $-\text{Cl}$ 、 $-\text{Br}$ 、 $-\text{I}$ 、ヒドロキシル基、シアノ基、ニトロ基、アミジノ基、ヒドラジノ基、ヒドラゾノ基、 $\text{C}_1 - \text{C}_{20}$ アルキル基、 $\text{C}_1 - \text{C}_{20}$ アルコキシ基、フェニル基、ビフェニル基、ターフェニル基及びナフチル基のうちから選択された少なくとも一つで置換された、ナフタレン基、ヘプタレン基、フルオレン基、スピロ-ビフルオレン基、ベンゾフルオレン基、ジベンゾフルオレン基、フェナレン基、フェナントレン基、アントラセン基、フルオランテン基、トリフェニレン基、ピレン基、クリセン基、ナフタセン基、ピセン基、ペリレン基、ペンタフェン基、インデノアントラセン基及びインデノフェナントレン基；のうちからも選択される。

【0157】

他の実施形態によれば、前記化学式 4 3 で L_{501} ないし L_{503} は、互いに独立して、

フェニレン基、ナフチレン基、フルオレニレン基、スピロ-ビフルオレニレン基、ベンゾフルオレニレン基、ジベンゾフルオレニレン基、フェナントレニレン基、アントラセニレン基、フルオランテニレン基、トリフェニレニレン基、ピレニレン基、クリセニレン基、ペリレニレン基、ペンタフェニレン基、ヘキサセニレン基、ペンタセニレン基、チオフエニレン基、フラニレン基、カルバゾリレン基、インドリレン基、イソインドリレン基、ベンゾフラニレン基、ベンゾチオフエニレン基、ジベンゾフラニレン基、ジベンゾチオフ

10

20

30

40

50

フェニレン基、ベンゾカルバゾリレン基、ジベンゾカルバゾリレン基、ジベンゾシロリレン基、ピリジニレン基；及び

重水素、 $-F$ 、 $-Cl$ 、 $-Br$ 、 $-I$ 、ヒドロキシ基、シアノ基、ニトロ基、アミノ基、ヒドラジノ基、ヒドラゾノ基、 C_1-C_{20} アルキル基、 C_1-C_{20} アルコキシ基、フェニル基、ビフェニル基、ターフェニル基、ナフチル基、フルオレニル基、スピロービフルオレニル基、ベンゾフルオレニル基、ジベンゾフルオレニル基、フェナントレニル基、アントラセニル基、フルオランテニル基、トリフェニレニル基、ピレニル基、クリセニル基、ペリレニル基、ペンタフェニル基、ヘキサセニル基、ペンタセニル基、チオフェニル基、フラニル基、カルバゾリル基、インドリル基、イソインドリル基、ベンゾフラニル基、ベンゾチオフェニル基、ジベンゾフラニル基、ジベンゾチオフェニル基、ベンゾカルバゾリル基、ジベンゾカルバゾリル基、ジベンゾシロリル基及びピリジニル基のうちから選択された少なくとも一つで置換された、フェニレン基、ナフチレン基、フルオレニレン基、スピロービフルオレニレン基、ベンゾフルオレニレン基、ジベンゾフルオレニレン基、フェナントレニレン基、アントラセニレン基、フルオランテニレン基、トリフェニレニレン基、ピレニレン基、クリセニレン基、ペリレニレン基、ペンタフェニレン基、ヘキサセニレン基、ペンタセニレン基、チオフェニレン基、フラニレン基、カルバゾリレン基、インドリレン基、イソインドリレン基、ベンゾフラニレン基、ベンゾチオフェニレン基、ジベンゾフラニレン基、ジベンゾチオフェニレン基、ベンゾカルバゾリレン基、ジベンゾカルバゾリレン基、ジベンゾシロリレン基、ピリジニレン基；のうちからも選択される。

【0158】

さらに他の実施形態によれば、前記化学式43で R_{501} 及び R_{502} は、互いに独立して、フェニル基、ビフェニル基、ターフェニル基、ナフチル基、フルオレニル基、スピロービフルオレニル基、ベンゾフルオレニル基、ジベンゾフルオレニル基、フェナントレニル基、アントラセニル基、フルオランテニル基、トリフェニレニル基、ピレニル基、クリセニル基、ペリレニル基、ペンタフェニル基、ヘキサセニル基、ペンタセニル基、チオフェニル基、フラニル基、カルバゾリル基、インドリル基、イソインドリル基、ベンゾフラニル基、ベンゾチオフェニル基、ジベンゾフラニル基、ジベンゾチオフェニル基、ベンゾカルバゾリル基、ジベンゾカルバゾリル基、ジベンゾシロリル基及びピリジニル基；並びに

重水素、 $-F$ 、 $-Cl$ 、 $-Br$ 、 $-I$ 、ヒドロキシ基、シアノ基、ニトロ基、アミノ基、ヒドラジノ基、ヒドラゾノ基、 C_1-C_{20} アルキル基、 C_1-C_{20} アルコキシ基、フェニル基、ビフェニル基、ターフェニル基、ナフチル基、フルオレニル基、スピロービフルオレニル基、ベンゾフルオレニル基、ジベンゾフルオレニル基、フェナントレニル基、アントラセニル基、フルオランテニル基、トリフェニレニル基、ピレニル基、クリセニル基、ペリレニル基、ペンタフェニル基、ヘキサセニル基、ペンタセニル基、チオフェニル基、フラニル基、カルバゾリル基、インドリル基、イソインドリル基、ベンゾフラニル基、ベンゾチオフェニル基、ジベンゾフラニル基、ジベンゾチオフェニル基、ベンゾカルバゾリル基、ジベンゾカルバゾリル基、ジベンゾシロリル基、ピリジニル基及び $-Si(Q_{31})(Q_{32})(Q_{33})$ のうちから選択された少なくとも一つで置換された、フェニル基、ビフェニル基、ターフェニル基、ナフチル基、フルオレニル基、スピロービフルオレニル基、ベンゾフルオレニル基、ジベンゾフルオレニル基、フェナントレニル基、アントラセニル基、フルオランテニル基、トリフェニレニル基、ピレニル基、クリセニル基、ペリレニル基、ペンタフェニル基、ヘキサセニル基、ペンタセニル基、チオフェニル基、フラニル基、カルバゾリル基、インドリル基、イソインドリル基、ベンゾフラニル基、ベンゾチオフェニル基、ジベンゾフラニル基、ジベンゾチオフェニル基、ベンゾカルバゾリル基、ジベンゾカルバゾリル基、ジベンゾシロリル基及びピリジニル基；のうちから選択され、

前記 Q_{31} ないし Q_{33} は、 C_1-C_{10} アルキル基、 C_1-C_{10} アルコキシ基、フェニル基、ビフェニル基、ターフェニル基及びナフチル基のうちからも選択される。

【0159】

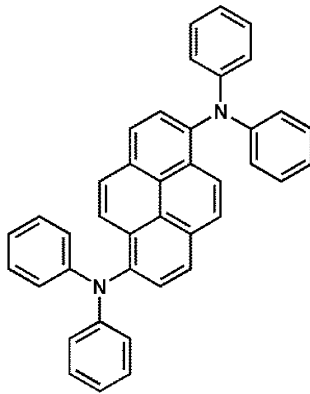
さらに他の実施形態によれば、前記化学式43で x_d4 は、2でもあるが、それに限定されるものではない。

【 0 1 6 0 】

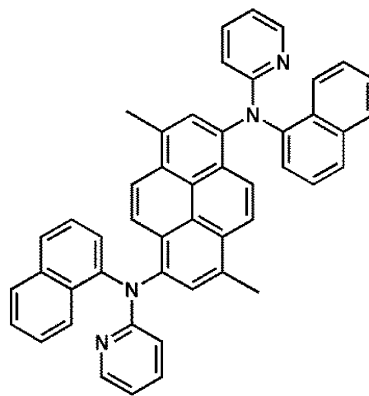
例えば、前記蛍光ドーパントは、下記化合物 F D 1 ないし F D 2 2 のうちから選択される：

【 0 1 6 1 】

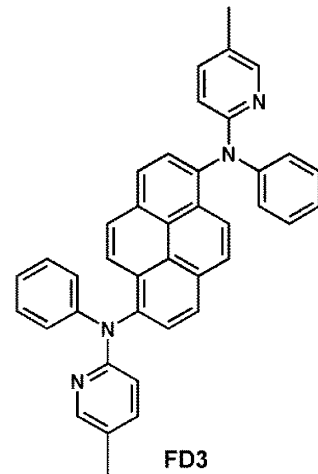
【 化 4 4 】



FD1



FD2



FD3

【 0 1 6 2 】

10

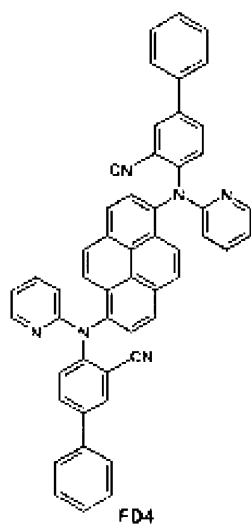
20

30

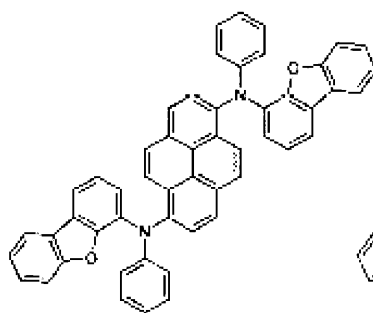
40

50

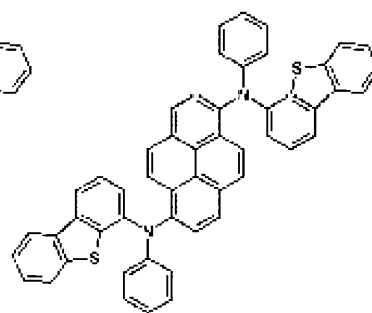
【化 4 5】



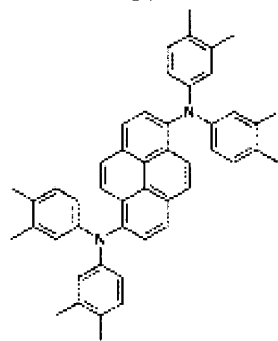
FD4



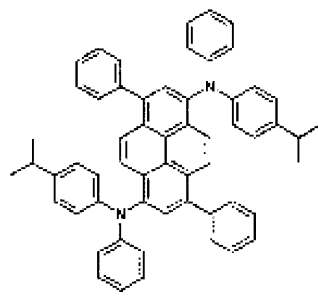
FD5



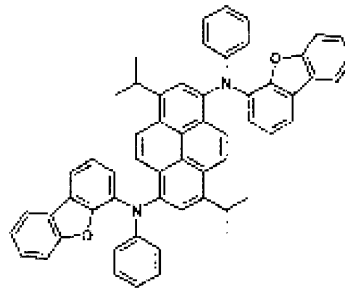
FD6



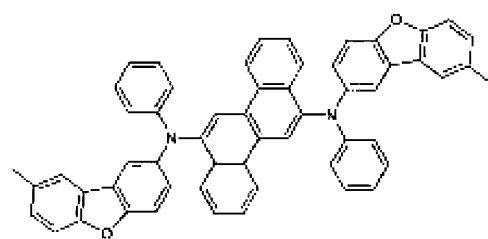
FD7



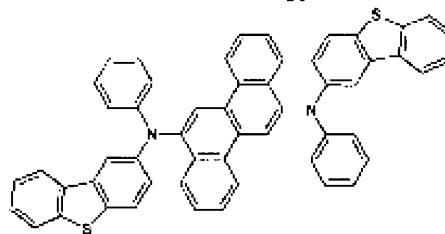
FD8



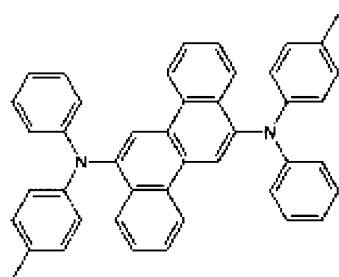
FD9



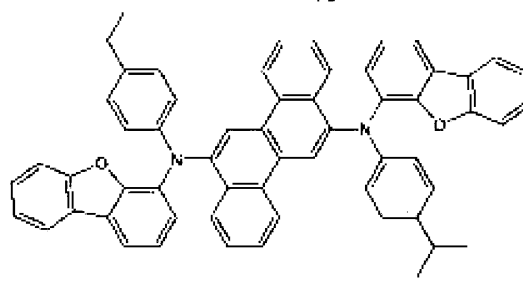
FD10



FD11



FD12



FD13

【 0 1 6 3 】

10

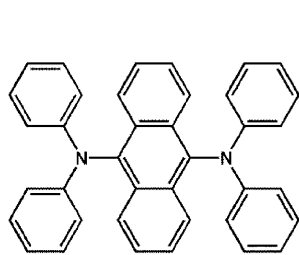
20

30

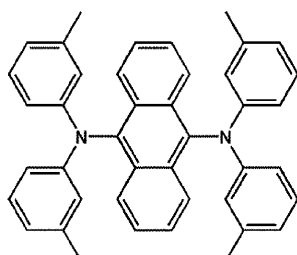
40

50

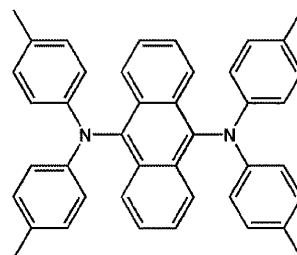
【化 4 6】



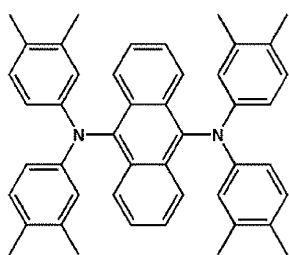
FD14



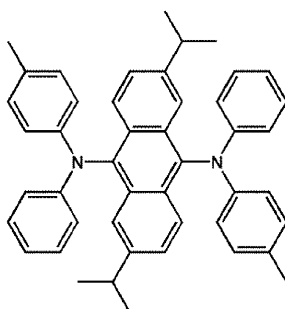
FD15



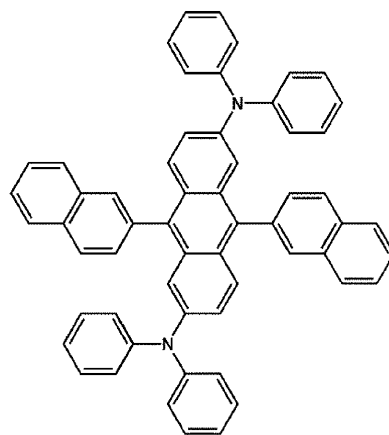
FD16



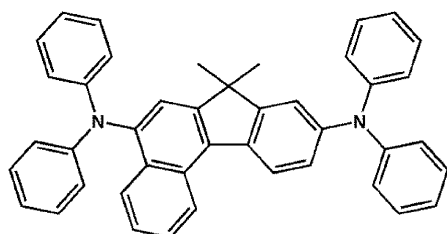
FD17



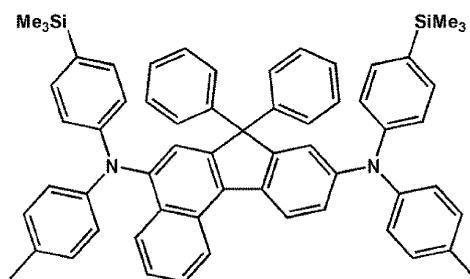
FD18



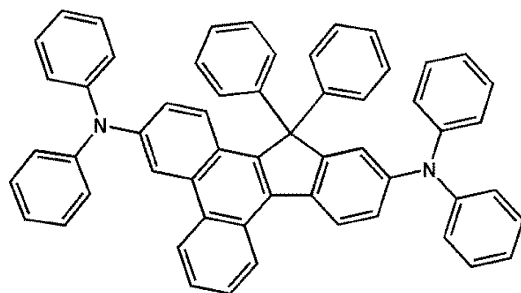
FD19



FD20



FD21



FD22

【 0 1 6 4】

または、前記蛍光ドーパントは、下記化合物のうちからも選択されるが、それらに限定されるものではない。

【 0 1 6 5】

10

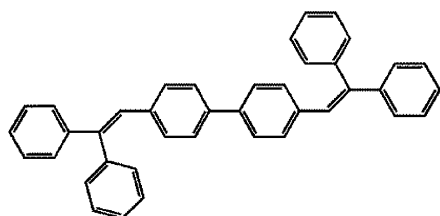
20

30

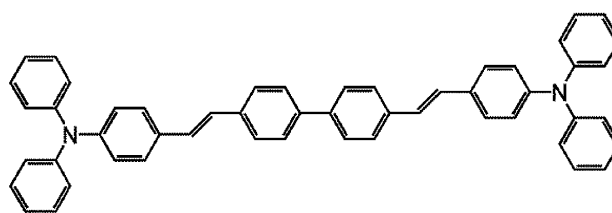
40

50

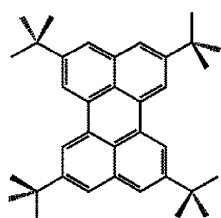
【化 4 7】



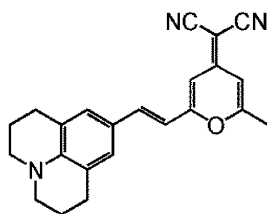
DPVBi



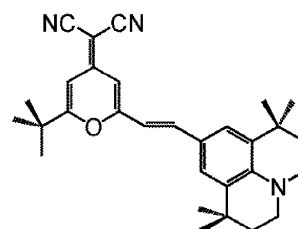
DPAVB



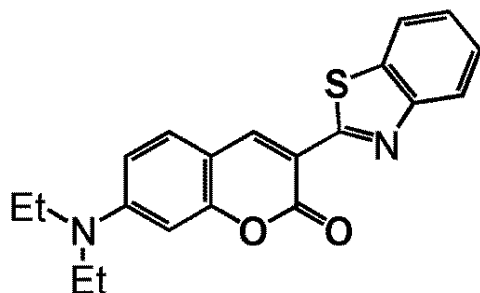
TBPe



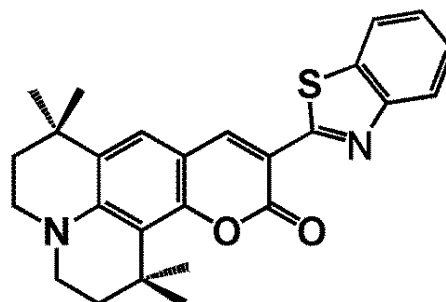
DCM



DCJT



Coumarin 6



C545T

【0166】

【有機層150における電子輸送領域】

前記電子輸送領域は、i) 単一物質からなる単一層からなる単層構造、ii) 複数の互いに異なる物質からなる単一層からなる単層構造、またはiii) 複数の互いに異なる物質からなる複数の層を有する多層構造を有することができる。

【0167】

前記電子輸送領域は、バッファ層、正孔阻止層、電子調節層、電子輸送層（ETL）及び電子注入層のうちから選択された少なくとも1層を含んでもよいが、それらに限定されるものではない。

【0168】

例えば、前記電子輸送領域は、発光層から順に積層された電子輸送層／電子注入層、正孔阻止層／電子輸送層／電子注入層、電子調節層／電子輸送層／電子注入層、またはバッファ層／電子輸送層／電子注入層などの構造を有することができるが、それらに限定されるものではない。

【0169】

前記電子輸送領域は、前記化学式3で表示される化合物を含んでもよい。

【0170】

または、前記電子輸送領域（例えば、前記電子輸送領域において、バッファ層、正孔阻止層、電子調節層または電子輸送層）は、 π 電子欠乏性含窒素環を少なくとも一つ含む金属非含有化合物を含んでもよい。

【0171】

前記「 π 電子欠乏性含窒素環」は、環形成団であり、少なくとも1つの $*-N=*$ ユニットを有する C_1-C_{60} ヘテロ環式基を意味する。

10

20

30

40

50

【0172】

例えば、前記「 π 電子欠乏性含窒素環」は、i) 少なくとも1つの $*-N=*'$ ユニットを有する5員ないし7員のヘテロ単環式基であるか、ii) 少なくとも1つの $*-N=*'$ ユニットを有する5員ないし7員のヘテロ単環式基のうち2以上が互いに縮合されているヘテロ多環式基であるか、あるいはiii) 少なくとも1つの $*-N=*'$ ユニットを有する5員ないし7員のヘテロ単環式基のうち少なくとも一つと、少なくとも1つの C_5-C_{60} 炭素環式基とが互いに縮合されているヘテロ多環式基でもある。

【0173】

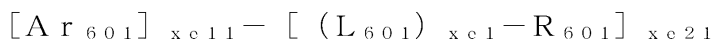
前記 π 電子欠乏性含窒素環の具体例としては、イミダゾール、ピラゾール、チアゾール、イソチアゾール、オキサゾール、イソキサゾール、ピリジン、ピラジン、ピリミジン、ピリダジン、インダゾール、プリン、キノリン、イソキノリン、ベンゾキノリン、フタラジン、ナフチリジン、キノキサリン、キナゾリン、シンノリン、フェナントリジン、アクリジン、フェナントロリン、フェナジン、ベンゾイミダゾール、イソベンゾチアゾール、ベンゾオキサゾール、イソベンゾオキサゾール、トリアゾール、テトラゾール、オキサジアゾール、トリアジン、チアジアゾール、イミダゾピリジン、イミダゾピリミジン、アザカルバゾールなどを挙げることができるが、それらに限定されるものではない。

【0174】

例えば、前記電子輸送領域は、下記化学式48で表示される化合物を含んでもよい。

【0175】

【化48】



【0176】

前記化学式48で、

Ar_{601} は、置換もしくは非置換の C_5-C_{60} 炭素環式基、または置換もしくは非置換の C_1-C_{60} ヘテロ環式基であり、

$xe11$ は、1、2または3であり、

L_{601} は、置換もしくは非置換の C_3-C_{10} シクロアルキレン基、置換もしくは非置換の C_1-C_{10} ヘテロシクロアルキレン基、置換もしくは非置換の C_3-C_{10} シクロアルケニレン基、置換もしくは非置換の C_1-C_{10} ヘテロシクロアルケニレン基、置換もしくは非置換の C_6-C_{60} アリーレン基、置換もしくは非置換の C_1-C_{60} ヘテロアリーレン基、置換もしくは非置換の二価非芳香族縮合多環基、及び置換もしくは非置換の二価非芳香族ヘテロ縮合多環基のうちから選択され、

$xe1$ は、0ないし5の整数のうちから選択され、

R_{601} は、置換もしくは非置換の C_3-C_{10} シクロアルキル基、置換もしくは非置換の C_1-C_{10} ヘテロシクロアルキル基、置換もしくは非置換の C_3-C_{10} シクロアルケニル基、置換もしくは非置換の C_1-C_{10} ヘテロシクロアルケニル基、置換もしくは非置換の C_6-C_{60} アリール基、置換もしくは非置換の C_6-C_{60} アリールオキシ基、置換もしくは非置換の C_6-C_{60} アリールチオ基、置換もしくは非置換の C_1-C_{60} ヘテロアリール基、置換もしくは非置換の一価非芳香族縮合多環基、置換もしくは非置換の一価非芳香族ヘテロ縮合多環基、 $-Si(Q_{601})(Q_{602})(Q_{603})$ 、 $-C(=O)(Q_{601})$ 、 $-S(=O)_2(Q_{601})$ 、及び $-P(=O)(Q_{601})(Q_{602})$ のうちから選択され、

前記 Q_{601} ないし Q_{603} は、互いに独立して、 C_1-C_{10} アルキル基、 C_1-C_{10} アルコキシ基、フェニル基、ピフェニル基、ターフェニル基またはナフチル基であり、

$xe21$ は、1ないし5の整数のうちから選択される。

【0177】

一実施形態によれば、前記 $xe11$ 個の Ar_{601} 、及び $xe21$ 個の R_{601} において少なくとも一つは、前述の π 電子欠乏性含窒素環を含んでもよい。

【0178】

10

20

30

40

50

一実施形態によれば、前記化学式 48 で環 $A r_{601}$ は、

ベンゼン基、ナフタレン基、フルオレン基、スピロービフルオレン基、ベンゾフルオレン基、ジベンゾフルオレン基、フェナレン基、フェナントレン基、アントラセン基、フルオランテン基、トリフェニレン基、ピレン基、クリセン基、ナフタセン基、ピセン基、ペリレン基、ペンタフェン基、インデノアントラセン基、ジベンゾフラン基、ジベンゾチオフエン基、カルバゾール基、イミダゾール基、ピラゾール基、チアゾール基、イソチアゾール基、オキサゾール基、イソキサゾール基、ピリジン基、ピラジン基、ピリミジン基、ピリダジン基、インダゾール基、プリン基、キノリン基、イソキノリン基、ベンゾキノリン基、フタラジン基、ナフチリジン基、キノキサリン基、キナゾリン基、シンノリン基、フェナントリジン基、アクリジン基、フェナントロリン基、フェナジン基、ベンゾイミダゾール基、イソベンゾチアゾール基、ベンゾオキサゾール基、イソベンゾオキサゾール基、トリアゾール基、テトラゾール基、オキサジアゾール基、トリアジン基、チアジアゾール基、イミダゾピリジン基、イミダゾピリミジン基及びアザカルバゾール基；並びに

重水素、 $-F$ 、 $-Cl$ 、 $-Br$ 、 $-I$ 、ヒドロキシル基、シアノ基、ニトロ基、アミノ基、ヒドラジノ基、ヒドラゾノ基、 C_1-C_{20} アルキル基、 C_1-C_{20} アルコキシ基、フェニル基、ビフェニル基、ターフェニル基、ナフチル基、 $-Si(Q_{31})(Q_{32})(Q_{33})$ 、 $-S(=O)_2(Q_{31})$ 及び $-P(=O)(Q_{31})(Q_{32})$ のうちから選択された少なくとも一つで置換された、ベンゼン基、ナフタレン基、フルオレン基、スピロービフルオレン基、ベンゾフルオレン基、ジベンゾフルオレン基、フェナレン基、フェナントレン基、アントラセン基、フルオランテン基、トリフェニレン基、ピレン基、クリセン基、ナフタセン基、ピセン基、ペリレン基、ペンタフェン基、インデノアントラセン基、ジベンゾフラン基、ジベンゾチオフエン基、カルバゾール基、イミダゾール基、ピラゾール基、チアゾール基、イソチアゾール基、オキサゾール基、イソキサゾール基、ピリジン基、ピラジン基、ピリミジン基、ピリダジン基、インダゾール基、プリン基、キノリン基、イソキノリン基、ベンゾキノリン基、フタラジン基、ナフチリジン基、キノキサリン基、キナゾリン基、シンノリン基、フェナントリジン基、アクリジン基、フェナントロリン基、フェナジン基、ベンゾイミダゾール基、イソベンゾチアゾール基、ベンゾオキサゾール基、イソベンゾオキサゾール基、トリアゾール基、テトラゾール基、オキサジアゾール基、トリアジン基、チアジアゾール基、イミダゾピリジン基、イミダゾピリミジン基及びアザカルバゾール基；のうちからも選択され、

前記 Q_{31} ないし Q_{33} は、互いに独立して、 C_1-C_{10} アルキル基、 C_1-C_{10} アルコキシ基、フェニル基、ビフェニル基、ターフェニル基及びナフチル基のうちからも選択される。

【0179】

前記化学式 48 で x_{e11} が 2 以上である場合、2 以上の $A r_{601}$ は、単結合を介して互いに連結される。

【0180】

他の実施形態によれば、前記化学式 48 で $A r_{601}$ は、アントラセン基でもある。さらに他の実施形態によれば、前記 48 で表示される化合物は、下記化学式 49 でも表示される：

【0181】

10

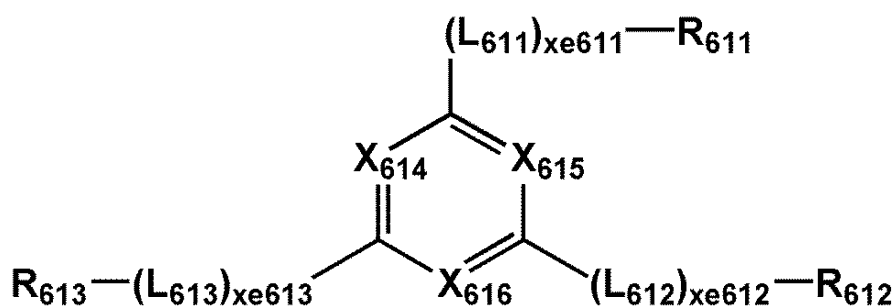
20

30

40

50

【化 4 9】



10

【0182】

前記化学式 4 9 で、

X_{614} は、NまたはC (R_{614})であり、 X_{615} は、NまたはC (R_{615})であり、 X_{616} は、NまたはC (R_{616})であり、 X_{614} ないし X_{616} において少なくとも一つは、Nであり、

L_{611} ないし L_{613} は、互いに独立して、前記 L_{601} に係わる説明を参照し、

xe_{611} ないし xe_{613} は、互いに独立して、前記 xe_1 に係わる説明を参照し、

R_{611} ないし R_{613} は、互いに独立して、前記 R_{601} に係わる説明を参照し、

20

R_{614} ないし R_{616} は、互いに独立して、水素、重水素、 $-F$ 、 $-Cl$ 、 $-Br$ 、 $-I$ 、ヒドロキシル基、シアノ基、ニトロ基、アミジノ基、ヒドラジノ基、ヒドラゾノ基、 C_1-C_{20} アルキル基、 C_1-C_{20} アルコキシ基、フェニル基、ビフェニル基、ターフェニル基及びナフチル基のうちからも選択される。

【0183】

一実施形態によれば、前記化学式 4 8 及び 4 9 で L_{601} 、及び L_{611} ないし L_{613} は、互いに独立して、

フェニレン基、ナフチレン基、フルオレニレン基、スピロ-ビフルオレニレン基、ベンゾフルオレニレン基、ジベンゾフルオレニレン基、フェナントレニレン基、アントラセニレン基、フルオランテニレン基、トリフェニレニレン基、ピレニレン基、クリセニレン基、ペリレニレン基、ペンタフェニレン基、ヘキサセニレン基、ペンタセニレン基、チオフェニレン基、フラニレン基、カルバゾリレン基、インドリレン基、イソインドリレン基、ベンゾフラニレン基、ベンゾチオフェニレン基、ジベンゾフラニレン基、ジベンゾチオフェニレン基、ベンゾカルバゾリレン基、ジベンゾカルバゾリレン基、ジベンゾシロリレン基、ピリジニレン基、イミダゾリレン基、ピラゾリレン基、チアゾリレン基、イソチアゾリレン基、オキサゾリレン基、イソキサゾリレン基、チアジアゾリレン基、オキサジアゾリレン基、ピラジニレン基、ピリミジニレン基、ピリダジニレン基、トリアジニレン基、キノリニレン基、イソキノリニレン基、ベンゾキノリニレン基、フタラジニレン基、ナフチリジニレン基、キノキサリニレン基、キナゾリニレン基、シンノリニレン基、フェナントリジニレン基、アクリジニレン基、フェナントロリニレン基、フェナジニレン基、ベンゾイミダゾリレン基、イソベンゾチアゾリレン基、ベンゾオキサゾリレン基、イソベンゾオキサゾリレン基、トリアゾリレン基、テトラゾリレン基、イミダゾピリジニレン基、イミダゾピリミジニレン基及びアザカルバゾリレン基；並びに

30

40

重水素、 $-F$ 、 $-Cl$ 、 $-Br$ 、 $-I$ 、ヒドロキシル基、シアノ基、ニトロ基、アミジノ基、ヒドラジノ基、ヒドラゾノ基、 C_1-C_{20} アルキル基、 C_1-C_{20} アルコキシ基、フェニル基、ビフェニル基、ターフェニル基、ナフチル基、フルオレニル基、スピロ-ビフルオレニル基、ベンゾフルオレニル基、ジベンゾフルオレニル基、フェナントレニル基、アントラセニル基、フルオランテニル基、トリフェニレニル基、ピレニル基、クリセニル基、ペリレニル基、ペンタフェニル基、ヘキサセニル基、ペンタセニル基、チオフェニル基、フラニル基、カルバゾリル基、インドリル基、イソインドリル基、ベンゾフラニル基

50

、ベンゾチオフェニル基、ジベンゾフラニル基、ジベンゾチオフェニル基、ベンゾカルバゾリル基、ジベンゾカルバゾリル基、ジベンゾシロリル基、ピリジニル基、イミダゾリル基、ピラゾリル基、チアゾリル基、イソチアゾリル基、オキサゾリル基、イソキサゾリル基、チアジアゾリル基、オキサジアゾリル基、ピラジニル基、ピリミジニル基、ピリダジニル基、トリアジニル基、キノリニル基、イソキノリニル基、ベンゾキノリニル基、フタラジニル基、ナフチリジニル基、キノキサリニル基、キナゾリニル基、シンノリニル基、フェナントリジニル基、アクリジニル基、フェナントロリニル基、フェナジニル基、ベンゾイミダゾリル基、イソベンゾチアゾリル基、ベンゾオキサゾリル基、イソベンゾオキサゾリル基、トリアゾリル基、テトラゾリル基、イミダゾピリジニル基、イミダゾピリミジニル基及びアザカルバゾリル基のうちから選択された少なくとも一つで置換された、フェニレン基、ナフチレン基、フルオレニレン基、スピロービフルオレニレン基、ベンゾフルオレニレン基、ジベンゾフルオレニレン基、フェナントレニレン基、アントラセニレン基、フルオランテニレン基、トリフェニレニレン基、ピレニレン基、クリセニレン基、ペリレニレン基、ペンタフェニレン基、ヘキサセニレン基、ペンタセニレン基、チオフェニレン基、フラニレン基、カルバゾリレン基、インドリレン基、イソインドリレン基、ベンゾフラニレン基、ベンゾチオフェニレン基、ジベンゾフラニレン基、ジベンゾチオフェニレン基、ベンゾカルバゾリレン基、ジベンゾカルバゾリレン基、ジベンゾシロリレン基、ピリジニレン基、イミダゾリレン基、ピラゾリレン基、チアゾリレン基、イソチアゾリレン基、オキサゾリレン基、イソキサゾリレン基、チアジアゾリレン基、オキサジアゾリレン基、ピラジニレン基、ピリミジニレン基、ピリダジニレン基、トリアジニレン基、キノリニレン基、イソキノリニレン基、ベンゾキノリニレン基、フタラジニレン基、ナフチリジニレン基、キノキサリニレン基、キナゾリニレン基、シンノリニレン基、フェナントリジニレン基、アクリジニレン基、フェナントロリニレン基、フェナジニレン基、ベンゾイミダゾリレン基、イソベンゾチアゾリレン基、ベンゾオキサゾリレン基、イソベンゾオキサゾリレン基、トリアゾリレン基、テトラゾリレン基、イミダゾピリジニレン基、イミダゾピリミジニレン基及びアザカルバゾリレン基；のうちからも選択されるが、それらに限定されるものではない。

【0184】

他の実施形態によれば、前記化学式 48 及び 49 で $x \leq 1$ 及び $x \leq 6$ 1 1 ないし $x \leq 6$ 1 3 は、互いに独立して、0、1 または 2 でもある。

【0185】

さらに他の実施形態によれば、前記化学式 48 及び 49 で R_{601} 、及び R_{611} ないし R_{613} は、互いに独立して、

フェニル基、ビフェニル基、ターフェニル基、ナフチル基、フルオレニル基、スピロービフルオレニル基、ベンゾフルオレニル基、ジベンゾフルオレニル基、フェナントレニル基、アントラセニル基、フルオランテニル基、トリフェニレニル基、ピレニル基、クリセニル基、ペリレニル基、ペンタフェニル基、ヘキサセニル基、ペンタセニル基、チオフェニル基、フラニル基、カルバゾリル基、インドリル基、イソインドリル基、ベンゾフラニル基、ベンゾチオフェニル基、ジベンゾフラニル基、ジベンゾチオフェニル基、ベンゾカルバゾリル基、ジベンゾカルバゾリル基、ジベンゾシロリル基、ピリジニル基、イミダゾリル基、ピラゾリル基、チアゾリル基、イソチアゾリル基、オキサゾリル基、イソキサゾリル基、チアジアゾリル基、オキサジアゾリル基、ピラジニル基、ピリミジニル基、ピリダジニル基、トリアジニル基、キノリニル基、イソキノリニル基、ベンゾキノリニル基、フタラジニル基、ナフチリジニル基、キノキサリニル基、キナゾリニル基、シンノリニル基、フェナントリジニル基、アクリジニル基、フェナントロリニル基、フェナジニル基、ベンゾイミダゾリル基、イソベンゾチアゾリル基、ベンゾオキサゾリル基、イソベンゾオキサゾリル基、トリアゾリル基、テトラゾリル基、イミダゾピリジニル基、イミダゾピリミジニル基及びアザカルバゾリル基；

重水素、 $-F$ 、 $-Cl$ 、 $-Br$ 、 $-I$ 、ヒドロキシル基、シアノ基、ニトロ基、アミノ基、ヒドラジノ基、ヒドラゾノ基、 C_1-C_{20} アルキル基、 C_1-C_{20} アルコキシ基、フ

フェニル基、ビフェニル基、ターフェニル基、ナフチル基、フルオレニル基、スピロービフルオレニル基、ベンゾフルオレニル基、ジベンゾフルオレニル基、フェナントレニル基、アントラセニル基、フルオランテニル基、トリフェニレニル基、ピレニル基、クリセニル基、ペリレニル基、ペンタフェニル基、ヘキサセニル基、ペンタセニル基、チオフェニル基、フラニル基、カルバゾリル基、インドリル基、イソインドリル基、ベンゾフラニル基、ベンゾチオフェニル基、ジベンゾフラニル基、ジベンゾチオフェニル基、ベンゾカルバゾリル基、ジベンゾカルバゾリル基、ジベンゾシロリル基、ピリジニル基、イミダゾリル基、ピラゾリル基、チアゾリル基、イソチアゾリル基、オキサゾリル基、イソキサゾリル基、チアジアゾリル基、オキサジアゾリル基、ピラジニル基、ピリミジニル基、ピリダジニル基、トリアジニル基、キノリニル基、イソキノリニル基、ベンゾキノリニル基、フタラジニル基、ナフチリジニル基、キノキサリニル基、キナゾリニル基、シンノリニル基、フェナントリジニル基、アクリジニル基、フェナントロリニル基、フェナジニル基、ベンゾイミダゾリル基、イソベンゾチアゾリル基、ベンゾオキサゾリル基、イソベンゾオキサゾリル基、トリアゾリル基、テトラゾリル基、イミダゾピリジニル基、イミダゾピリミジニル基及びアザカルバゾリル基のうちから選択された少なくとも一つで置換された、フェニル基、ビフェニル基、ターフェニル基、ナフチル基、フルオレニル基、スピロービフルオレニル基、ベンゾフルオレニル基、ジベンゾフルオレニル基、フェナントレニル基、アントラセニル基、フルオランテニル基、トリフェニレニル基、ピレニル基、クリセニル基、ペリレニル基、ペンタフェニル基、ヘキサセニル基、ペンタセニル基、チオフェニル基、フラニル基、カルバゾリル基、インドリル基、イソインドリル基、ベンゾフラニル基、ベンゾチオフェニル基、ジベンゾフラニル基、ジベンゾチオフェニル基、ベンゾカルバゾリル基、ジベンゾカルバゾリル基、ジベンゾシロリル基、ピリジニル基、イミダゾリル基、ピラゾリル基、チアゾリル基、イソチアゾリル基、オキサゾリル基、イソキサゾリル基、チアジアゾリル基、オキサジアゾリル基、ピラジニル基、ピリミジニル基、ピリダジニル基、トリアジニル基、キノリニル基、イソキノリニル基、ベンゾキノリニル基、フタラジニル基、ナフチリジニル基、キノキサリニル基、キナゾリニル基、シンノリニル基、フェナントリジニル基、アクリジニル基、フェナントロリニル基、フェナジニル基、ベンゾイミダゾリル基、イソベンゾチアゾリル基、ベンゾオキサゾリル基、イソベンゾオキサゾリル基、トリアゾリル基、テトラゾリル基、イミダゾピリジニル基、イミダゾピリミジニル基及びアザカルバゾリル基；並びに

－S(=O)₂(Q₆₀₁)及び－P(=O)(Q₆₀₁)(Q₆₀₂)；のうちから選択され、前記Q₆₀₁及びQ₆₀₂に係わる説明は、本明細書記載のところを参照する。

【0186】

前記電子輸送領域は、下記化合物ET1ないしET36のうちから選択された少なくとも1つの化合物を含んでもよいが、それらに限定されるものではない。

【0187】

10

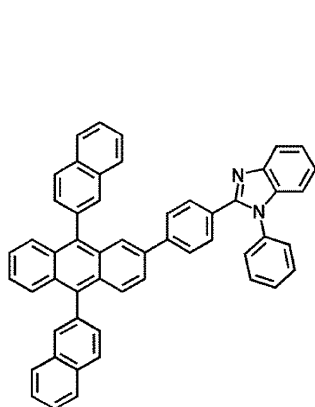
20

30

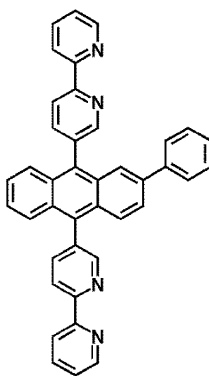
40

50

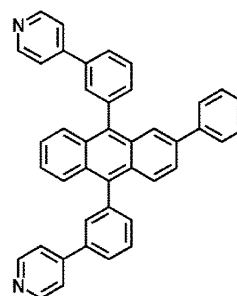
【化 5 0】



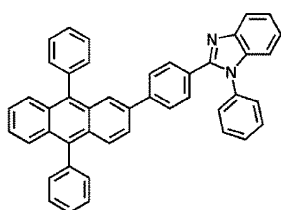
ET1



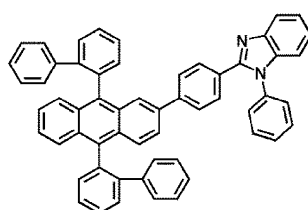
ET2



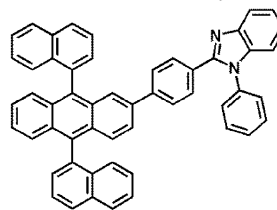
ET3



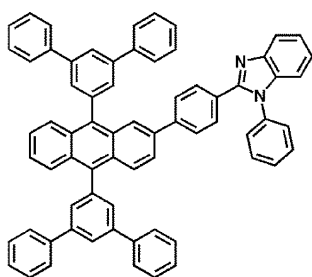
ET4



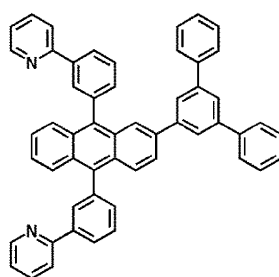
ET5



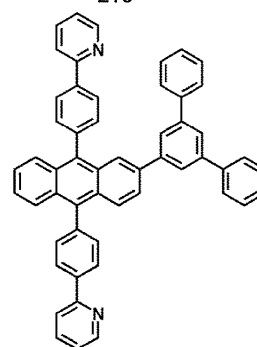
ET6



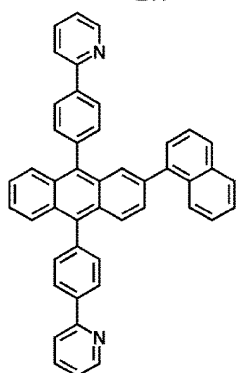
ET7



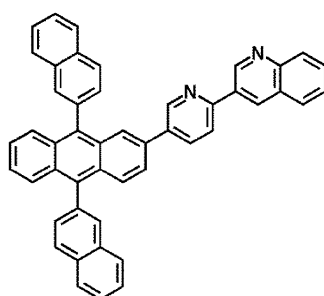
ET8



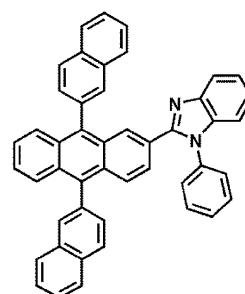
ET9



ET10



ET11



ET12

【 0 1 8 8 】

10

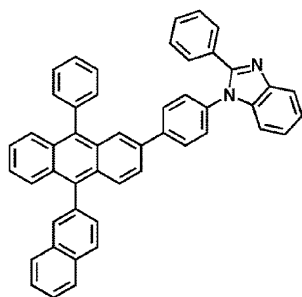
20

30

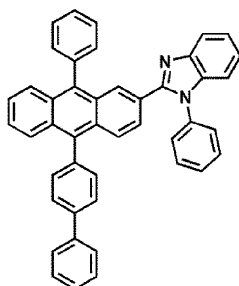
40

50

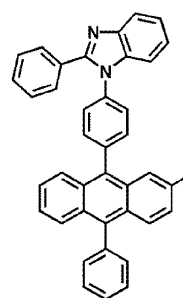
【化 5 1】



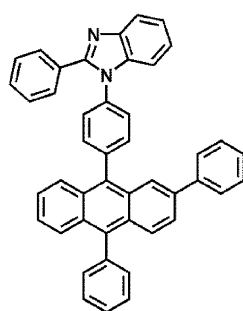
ET13



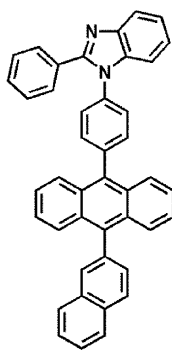
ET14



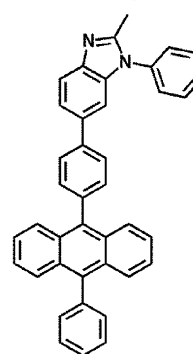
ET15



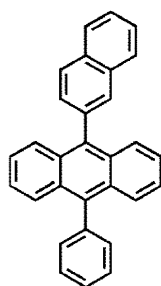
ET16



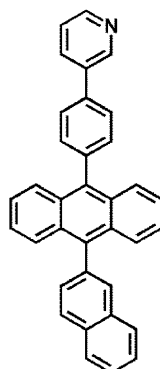
ET17



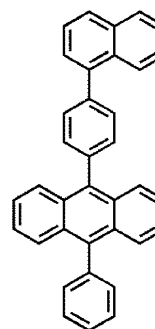
ET18



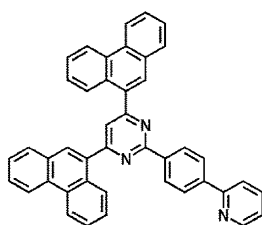
ET19



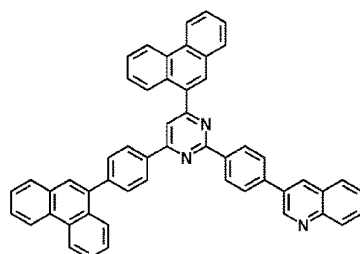
ET20



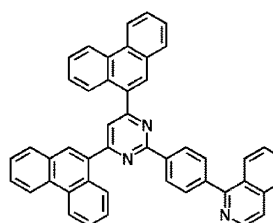
ET21



ET22



ET23



ET24

【 0 1 8 9 】

10

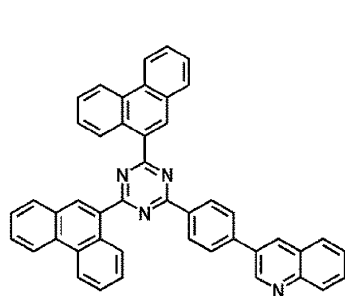
20

30

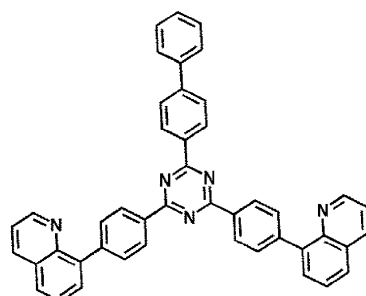
40

50

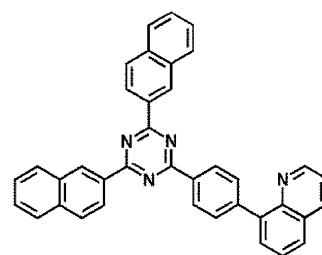
【化 5 2】



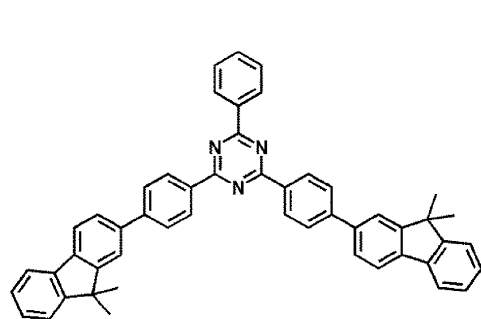
ET25



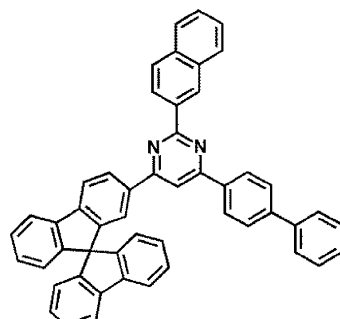
ET26



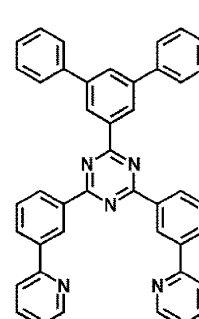
ET27



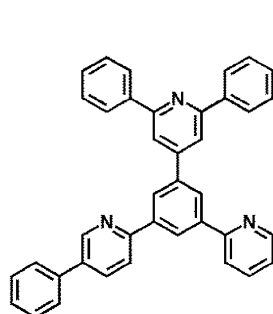
ET28



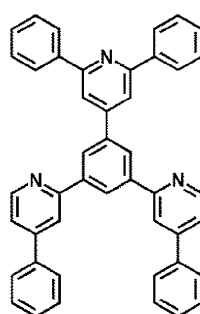
ET29



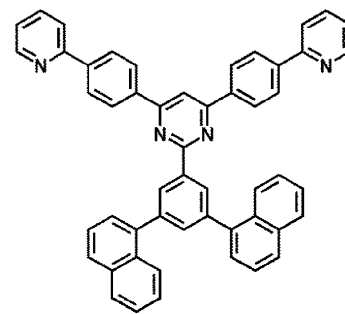
ET30



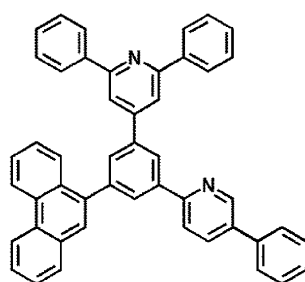
ET31



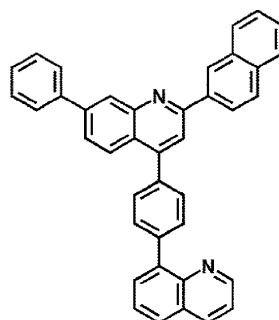
ET32



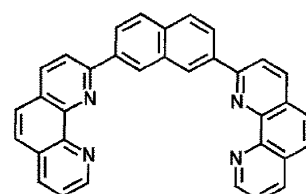
ET33



ET34



ET35



ET36

【0190】

または、前記電子輸送領域は、BCP (2, 9-dimethyl-4, 7-diphenyl-1, 10-phenanthroline)、Bphen (4, 7-diphenyl-1, 10-phenanthroline)、Alq3、BALq、TAZ (3-(biphenyl-4-yl)-5-(4-tert-butylphenyl)-4-phenyl-4H-1, 2, 4-triazole)、及びNTAZのうちから選択された少なくとも1つの化合物を含んでもよい。

【0191】

10

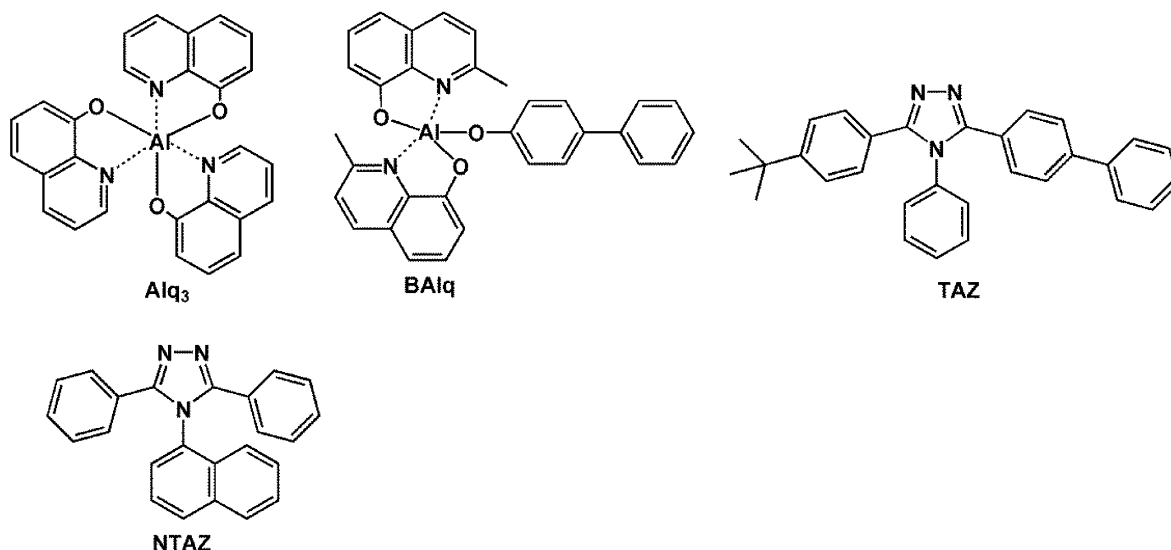
20

30

40

50

【化 5 3】



10

【0192】

前記バッファ層、正孔阻止層または電子調節層の厚みは、互いに独立して、約2 nmないし約100 nm、例えば、約3 nmないし約30 nmでもある。前記バッファ層、正孔阻止層または電子調節層の厚みが前述の範囲を満足する場合、実質的な駆動電圧の上昇なしに、優秀な正孔阻止特性または電子調節特性を得ることができる。

20

【0193】

前記電子輸送層の厚みは、約10 nmないし約100 nm、例えば、約15 nmないし約50 nmでもある。前記電子輸送層の厚みが前述の範囲を満足する場合、実質的な駆動電圧の上昇なしに、満足すべき電子輸送特性を得ることができる。

【0194】

前記電子輸送領域（例えば、前記電子輸送領域のうち電子輸送層）は、前述の物質以外に、金属含有物質をさらに含んでもよい。

【0195】

前記金属含有物質は、アルカリ金属錯体及びアルカリ土類金属錯体のうちから選択された少なくとも一つを含んでもよい。前記アルカリ金属錯体の金属イオンは、Liイオン、Naイオン、Kイオン、Rbイオン及びCsイオンのうちからも選択され、前記アルカリ土類金属錯体の金属イオンは、Beイオン、Mgイオン、Caイオン、Srイオン及びBaイオンのうちからも選択される。前記アルカリ金属錯体及びアルカリ土類金属錯体の金属イオンに配位されたりガンドは、互いに独立して、ヒドロキシキノリン、ヒドロキシイソキノリン、ヒドロキシベンゾキノリン、ヒドロシアクリジン、ヒドロキシフェナントリジン、ヒドロキシフェニルオキサゾール、ヒドロキシフェニルチアゾール、ヒドロキシジフェニルオキサジアゾール、ヒドロキシジフェニルチアジアゾール、ヒドロキシフェニルピリジン、ヒドロキシフェニルベンゾイミダゾール、ヒドロキシフェニルベンゾチアゾール、ピピリジン、フェナントロリン及びシクロペンタジエンのうちからも選択されるが、それらに限定されるものではない。

30

【0196】

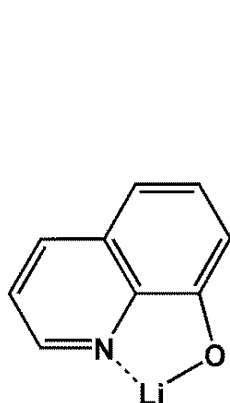
例えば、前記金属含有物質は、Li錯体を含んでもよい。前記Li錯体は、例えば、下記化合物ET-D1（リチウムキノレート、LiQ）またはET-D2を含んでもよい。

40

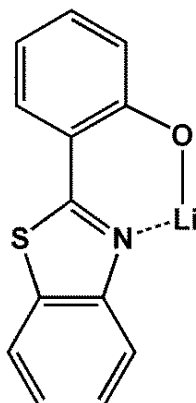
【0197】

50

【化 5 4】



ET-D1



ET-D2

【 0 1 9 8 】

前記電子輸送領域は、第 2 電極 1 9 0 からの電子注入を容易にする電子注入層を含んでもよい。前記電子注入層は、前記第 2 電極 1 9 0 と直接 (directly) 接触することができる。

【 0 1 9 9 】

前記電子注入層は、i) 単一物質からなる単一層からなる単層構造、ii) 複数の互いに異なる物質からなる単一層からなる単層構造、または iii) 複数の互いに異なる物質からなる複数の層を有する多層構造を有することができる。

【 0 2 0 0 】

前記電子注入層は、アルカリ金属、アルカリ土類金属、希土類金属、アルカリ金属化合物、アルカリ土類金属化合物、希土類金属化合物、アルカリ金属錯体、アルカリ土類金属錯体、希土類金属錯体、またはそれらのうち任意の組み合わせを含んでもよい。

【 0 2 0 1 】

前記アルカリ金属は、Li、Na、K、Rb 及び Cs のうちからも選択される。一実施形態によれば、前記アルカリ金属は、Li、Na または Cs でもある。他の実施形態によれば、前記アルカリ金属は、Li または Cs でもあるが、それらに限定されるものではない。

【 0 2 0 2 】

前記アルカリ土類金属は、Mg、Ca、Sr、及び Ba のうちからも選択される。

【 0 2 0 3 】

前記希土類金属は、Sc、Y、Ce、Tb、Yb 及び Gd のうちからも選択される。

【 0 2 0 4 】

前記アルカリ金属化合物、アルカリ土類金属化合物及び前記希土類金属化合物は、前記アルカリ金属、前記アルカリ土類金属及び希土類金属の酸化物及びハロゲン化物 (例えば、フッ化物、塩化物、臭化物、ヨード化物など) のうちからも選択される。

【 0 2 0 5 】

前記アルカリ金属化合物は、 Li_2O 、 Cs_2O 、 K_2O のようなアルカリ金属酸化物、及び LiF 、 NaF 、 CsF 、 KF 、 LiI 、 NaI 、 CsI 、 KI のようなアルカリ金属ハロゲン化物のうちからも選択される。一実施形態によれば、前記アルカリ金属化合物は、 LiF 、 Li_2O 、 NaF 、 LiI 、 NaI 、 CsI 、 KI のうちからも選択されるが、それらに限定されるものではない。

【 0 2 0 6 】

前記アルカリ土類金属化合物は、 BaO 、 SrO 、 CaO 、 $\text{Ba}_x\text{Sr}_{1-x}\text{O}$ ($0 < x < 1$)、 $\text{Ba}_x\text{Ca}_{1-x}\text{O}$ ($0 < x < 1$) のようなアルカリ土類金属化合物のうちからも選択される。一実施形態によれば、前記アルカリ土類金属化合物は、 BaO 、 SrO 及び CaO

10

20

30

40

50

Oのうちからも選択されるが、それらに限定されるものではない。

【0207】

前記希土類金属化合物は、 YbF_3 、 ScF_3 、 ScO_3 、 Y_2O_3 、 Ce_2O_3 、 GdF_3 及び TbF_3 のうちからも選択される。一実施形態によれば、前記希土類金属化合物は、 YbF_3 、 ScF_3 、 TbF_3 、 YbI_3 、 ScI_3 、 TbI_3 のうちからも選択されるが、それらに限定されるものではない。

【0208】

前記アルカリ金属錯体、アルカリ土類金属錯体及び希土類金属錯体は、前述のアルカリ金属、アルカリ土類金属及び希土類金属のイオンを含み、前記アルカリ金属錯体、アルカリ土類金属錯体及び希土類金属錯体の金属イオンに配位されたりガンドは、互いに独立して、ヒドロキシキノリン、ヒドロキシイソキノリン、ヒドロキシベンゾキノリン、ヒドロキシアクリジン、ヒドロキシフェナントリジン、ヒドロキシフェニルオキサゾール、ヒドロキシフェニルチアゾール、ヒドロキシジフェニルオキサジアゾール、ヒドロキシジフェニルチアジアゾール、ヒドロキシフェニルピリジン、ヒドロキシフェニルベンゾイミダゾール、ヒドロキシフェニルベンゾチアゾール、ピピリジン、フェナントロリン及びシクロペンタジエンのうちからも選択されるが、それらに限定されるものではない。

【0209】

前記電子注入層は、前述のアルカリ金属、アルカリ土類金属、希土類金属、アルカリ金属化合物、アルカリ土類金属化合物、希土類金属化合物、アルカリ金属錯体、アルカリ土類金属錯体、希土類金属錯体、またはそれらのうち任意の組み合わせだけからなるか、あるいは前記有機物をさらに含んでもよい。前記電子注入層が有機物をさらに含む場合、前記アルカリ金属、アルカリ土類金属、希土類金属、アルカリ金属化合物、アルカリ土類金属化合物、希土類金属化合物、アルカリ金属錯体、アルカリ土類金属錯体、希土類金属錯体、またはそれらのうち任意の組み合わせは、前記有機物からなるマトリックスに均一または不均一にも分散している。

【0210】

前記電子注入層の厚みは、約0.1nmないし約10nm、約0.3nmないし約9nmでもある。前記電子注入層の厚みが前述の範囲を満足する場合、実質的な駆動電圧の上昇なしに、満足すべき電子注入特性を得ることができる。

【0211】

[第2電極190]

前述の有機層150上には、第2電極190が配置されている。前記第2電極190は、電子注入電極であるカソード(cathode)でもあるが、このとき、前記第2電極190用物質としては、低い仕事関数を有する金属、合金、電気伝導性化合物、及びそれらの組み合わせ(combination)を使用することができる。

【0212】

前記第2電極190は、リチウム(Li)、銀(Ag)、マグネシウム(Mg)、アルミニウム(Al)、アルミニウム-リチウム(Al-Li)、カルシウム(Ca)、マグネシウム-インジウム(Mg-In)、マグネシウム-銀(Mg-Ag)、ITO(indium tin oxide) 及びIZO(indium zinc oxide)のうちから選択された少なくとも一つを含んでもよいが、それらに限定されるものではない。前記第2電極190は、透過型電極、半透過型電極または反射型電極でもある。

【0213】

前記第2電極190は、単一層である単層構造、または複数の層を有する多層構造を有することができる。

【0214】

[図2ないし図4に係わる説明]

一方、図2の有機発光素子20は、第1キャッピング層210、第1電極110、有機層150及び第2電極190が順に積層された構造を有し、図3の有機発光素子30は、第1電極110、有機層150、第2電極190及び第2キャッピング層220が順に積

10

20

30

40

50

層された構造を有し、図4の有機発光素子40は、第1キャッピング層210、第1電極110、有機層150、第2電極190及び第2キャッピング層220が順に積層された構造を有する。

【0215】

図2ないし図4において、第1電極110、有機層150及び第2電極190に係わる説明は、図1に係わる説明を参照する。

【0216】

有機発光素子20、40の有機層150において、発光層で生成された光は、半透過型電極または透過型電極である第1電極110、及び第1キャッピング層210を経て、外部で取り出され、有機発光素子30、40の有機層150において、発光層で生成された光は、半透過型電極または透過型電極である第2電極190、及び第2キャッピング層220を経て、外部で取り出される。

10

【0217】

前記第1キャッピング層210及び第2キャッピング層220は、補強干渉の原理により、外部発光効率を向上させる役割を行う。

【0218】

前記第1キャッピング層210及び第2キャッピング層220は、互いに独立して、有機物からなる有機キャッピング層、無機物からなる無機キャッピング層、または有機物及び無機物を含む複合キャッピング層でもある。

【0219】

前記第1キャッピング層210及び第2キャッピング層220において少なくとも1層は、互いに独立して、炭素環式化合物、ヘテロ環式化合物、アミン系化合物、ポルフィン誘導体 (porphine derivatives)、フタロシアニン誘導体 (phthalocyanine derivatives)、ナフタロシアニン誘導体 (naphthalocyanine derivatives)、アルカリ金属錯体及びアルカリ土類金属錯体のうちから選択された少なくとも1つの物質を含んでもよい。前記炭素環式化合物、ヘテロ環式化合物及びアミン系化合物は、選択的に、O、N、S、Se、Si、F、Cl、Br及びIのうちから選択された少なくとも1つの元素を含む置換基で置換されてもよい。一実施形態によれば、前記第1キャッピング層210及び第2キャッピング層220において少なくとも1層は、互いに独立して、アミン系化合物を含んでもよい。

20

【0220】

他の実施形態によれば、前記第1キャッピング層210及び第2キャッピング層220において少なくとも1層は、互いに独立して、前記化学式21で表示される化合物、または前記化学式22で表示される化合物を含んでもよい。

30

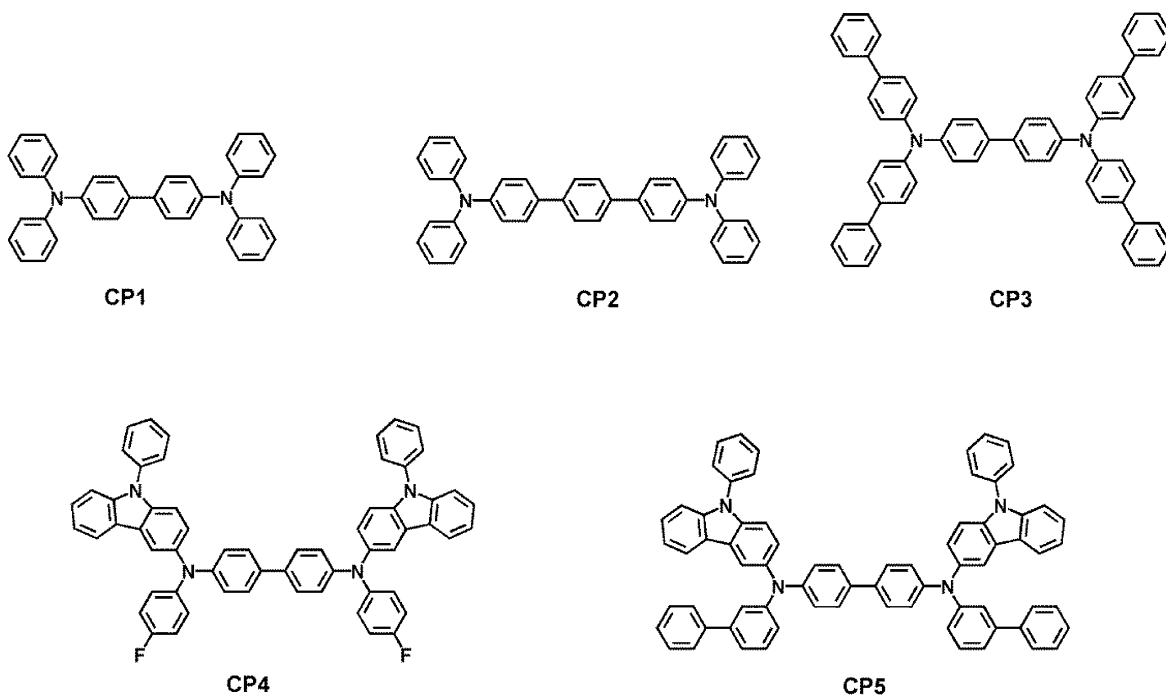
【0221】

さらに他の実施形態によれば、前記第1キャッピング層210及び第2キャッピング層220において少なくとも1層は、互いに独立して、前記化合物HT28ないしHT33、及び下記化合物CP1ないしCP5のうちから選択された化合物を含んでもよいが、それらに限定されるものではない。

【0222】

40

【化 5 5】



10

20

【0 2 2 3】

以上、前記有機発光素子について、図 1 ないし 4 を参照して説明したが、それらに限定されるものではない。

【0 2 2 4】

前記正孔輸送領域に含まれた各層、発光層及び電子輸送領域に含まれた各層は、それぞれ、真空蒸着法、スピンコーティング法、キャスト法、LB (Langmuir-Blodgett) 法、インクジェットプリンティング法、レーザプリンティング法、レーザ熱転写法 (L I T I : laser induced thermal imaging) のような多様な方法を利用して、所定領域に形成される。

30

【0 2 2 5】

真空蒸着法によって、前記正孔輸送領域に含まれた各層、発光層及び電子輸送領域に含まれた各層をそれぞれ形成する場合、蒸着条件は、例えば、約 100 ないし約 500 °C の蒸着温度、約 10^{-8} ないし約 10^{-3} torr の真空度、及び約 0.01 ないし約 10 nm / sec の蒸着速度範囲内で、形成しようとする層に含まれる材料、及び形成しようとする層の構造を考慮して選択される。

【0 2 2 6】

スピンコーティング法によって、前記正孔輸送領域に含まれた各層、発光層及び電子輸送領域に含まれた各層をそれぞれ形成する場合、コーティング条件は、例えば、約 2,000 rpm ないし約 5,000 rpm の基板回転数内、及び約 80 °C ないし 200 °C の熱処理温度範囲内で、形成しようとする層に含まれる材料、及び形成しようとする層の構造を考慮して選択される。

40

【0 2 2 7】

〔置換基の一般的な定義〕

本明細書において $C_1 - C_{60}$ アルキル基は、炭素数 1 ないし 60 の線状または分枝状の脂肪族炭化水素一価 (monovalent) 基を意味し、具体的な例には、メチル基、エチル基、プロピル基、イソブチル基、sec-ブチル基、tert-ブチル基、ペンチル基、iso-アミル基、ヘキシル基などが含まれる。本明細書において $C_1 - C_{60}$ アルキレン基は、前記 $C_1 - C_{60}$ アルキル基と同一構造を有する二価 (divalent) 基を意味する。

【0 2 2 8】

50

本明細書において C_2-C_{60} アルケニル基は、前記 C_2-C_{60} アルキル基の中間または末端に、1以上の炭素二重結合を含む炭化水素基を意味し、その具体的な例には、エテニル基、プロペニル基、ブテニル基などが含まれる。本明細書において C_2-C_{60} アルケニレン基は、前記 C_2-C_{60} アルケニル基と同一構造を有する二価基を意味する。

【0229】

本明細書において C_2-C_{60} アルキニル基は、前記 C_2-C_{60} アルキル基の中間または末端に、1以上の炭素三重結合を含む炭化水素基を意味し、その具体的な例には、エチニル基、プロピニル基などが含まれる。本明細書において C_2-C_{60} アルキニレン基は、前記 C_2-C_{60} アルキニル基と同一構造を有する二価基を意味する。

【0230】

本明細書において C_1-C_{60} アルコキシ基は、 $-OA_{101}$ （ここで、 A_{101} は、前記 C_1-C_{60} アルキル基である）の化学式を有する一価基を意味し、その具体的な例には、メトキシ基、エトキシ基、イソプロピルオキシ基などが含まれる。

【0231】

本明細書において C_3-C_{10} シクロアルキル基は、炭素数3ないし10の一価飽和炭化水素単環式基を意味し、その具体例には、シクロプロピル基、シクロブチル基、シクロペンチル基、シクロヘキシル基、シクロヘプチル基などが含まれる。本明細書において C_3-C_{10} シクロアルキレン基は、前記 C_3-C_{10} シクロアルキル基と同一構造を有する二価基を意味する。

【0232】

本明細書において C_1-C_{10} ヘテロシクロアルキル基は、N、O、Si、P及びSのうちから選択された少なくとも1つのヘテロ原子を環形成原子として含む炭素数1ないし10の一価単環式基を意味し、その具体例には、1,2,3,4-オキサトリアゾリジニル基(1,2,3,4-oxatriazolidinyl)、テトラヒドロフラニル基(tetrahydrofuranyl)、テトラヒドロチオフェニル基などが含まれる。本明細書において C_1-C_{10} ヘテロシクロアルキレン基は、前記 C_1-C_{10} ヘテロシクロアルキル基と同一構造を有する二価基を意味する。

【0233】

本明細書において C_3-C_{10} シクロアルケニル基は、炭素数3ないし10の一価単環式基であり、環内に少なくとも1つの二重結合を有するが、芳香族性(aromaticity)を有さない基を意味し、その具体例には、シクロペンテニル基、シクロヘキセニル基、シクロヘプテニル基などが含まれる。本明細書において C_3-C_{10} シクロアルケニレン基は、前記 C_3-C_{10} シクロアルケニル基と同一構造を有する二価基を意味する。

【0234】

本明細書において C_1-C_{10} ヘテロシクロアルケニル基は、N、O、Si、P及びSのうちから選択された少なくとも1つのヘテロ原子を環形成原子として含む炭素数1ないし10の一価単環式基であり、環内に少なくとも1つの二重結合を有する。前記 C_1-C_{10} ヘテロシクロアルケニル基の具体例には、4,5-ジヒドロ-1,2,3,4-オキサトリアゾリル基、2,3-ジヒドロフラニル基、2,3-ジヒドロチオフェニル基などが含まれる。本明細書において C_1-C_{10} ヘテロシクロアルケニレン基は、前記 C_1-C_{10} ヘテロシクロアルケニル基と同一構造を有する二価基を意味する。

【0235】

本明細書において C_6-C_{60} アリール基は、炭素数6ないし60個の炭素環式芳香族系を有する一価基を意味し、 C_6-C_{60} アリーレン基は、炭素数6ないし60個の炭素環式芳香族系を有する二価基を意味する。前記 C_6-C_{60} アリール基の具体例には、フェニル基、ナフチル基、アントラセニル基、フェナントレニル基、ピレニル基、クリセニル基などが含まれる。前記 C_6-C_{60} アリール基及び C_6-C_{60} アリーレン基が2以上の環を含む場合、前記2以上の環は、互いに縮合される。

【0236】

本明細書において C_1-C_{60} ヘテロアリール基は、N、O、Si、P及びSのうちから

10

20

30

40

50

選択された少なくとも1つのヘテロ原子を環形成原子として含み、炭素数1ないし60個のヘテロ環式芳香族系を有する一価基を意味し、 C_1-C_{60} ヘテロアリーレン基は、N、O、Si、P及びSのうちから選択された少なくとも1つのヘテロ原子を環形成原子として含み、炭素数1ないし60個のヘテロ環式芳香族系を有する二価基を意味する。前記 C_1-C_{60} ヘテロアリール基の具体例には、ピリジニル基、ピリミジニル基、ピラジニル基、ピリダジニル基、トリアジニル基、キノリニル基、イソキノリニル基などが含まれる。前記 C_1-C_{60} ヘテロアリール基及び C_1-C_{60} ヘテロアリーレン基が2以上の環を含む場合、2以上の環は、互いに縮合される。

本明細書において C_6-C_{60} アリールオキシ基は、 $-OA_{102}$ （ここで、 A_{102} は、前記 C_6-C_{60} アリール基である）を示し、前記 C_6-C_{60} アリールチオ基は、 $-SA_{103}$ （ここで、 A_{103} は、前記 C_6-C_{60} アリール基である）を示す。

10

【0237】

本明細書において一価非芳香族縮合多環基（non-aromatic condensed polycyclic group）は、2以上の環が互いに縮合されており、環形成原子として炭素のみを含み、分子全体が非芳香族性（non-aromaticity）を有する一価基（例えば、炭素数8ないし60である）を意味する。前記一価非芳香族縮合多環基の具体例には、フルオレニル基などが含まれる。本明細書において二価非芳香族縮合多環基は、前記一価非芳香族縮合多環基と同一構造を有する二価基を意味する。

【0238】

本明細書において一価非芳香族ヘテロ縮合多環基（non-aromatic condensed hetero polycyclic group）は、2以上の環が互いに縮合されており、環形成原子として炭素以外に、N、O、Si、P及びSのうちから選択された少なくとも1つのヘテロ原子を含み、分子全体が非芳香族性を有する一価基（例えば、炭素数1ないし60である）を意味する。前記一価非芳香族ヘテロ縮合多環基の具体例には、カルバゾリル基などが含まれる。本明細書において二価非芳香族ヘテロ縮合多環基は、前記一価非芳香族ヘテロ縮合多環基と同一構造を有する二価基を意味する。

20

【0239】

本明細書において C_5-C_{60} 炭素環式基とは、環形成原子として炭素のみを含む炭素数5ないし60の単環式基または多環式基を意味する。前記 C_5-C_{60} 炭素環式基は、芳香族炭素環式基または非芳香族炭素環式基でもある。前記 C_5-C_{60} 炭素環式基は、ベンゼンのような環、フェニル基のような一価基、またはフェニレン基のような二価基でもある。または、前記 C_5-C_{60} 炭素環式基に連結された置換基の個数により、前記 C_5-C_{60} 炭素環式基は、三価基または四価基でもあるというように、多様な変形が可能である。

30

【0240】

本明細書において C_1-C_{60} ヘテロ環式基とは、前記 C_5-C_{60} 炭素環式基と同一構造を有するが、環形成原子として、炭素（炭素数は、1ないし60でもある）以外に、N、O、Si、P及びSのうちから選択された少なくとも1つのヘテロ原子を含む基を意味する。

【0241】

本明細書において、前記置換された C_5-C_{60} 炭素環式基、置換された C_1-C_{60} ヘテロ環式基、置換された C_3-C_{10} シクロアルキレン基、置換された C_1-C_{10} ヘテロシクロアルキレン基、置換された C_3-C_{10} シクロアルケニレン基、置換された C_1-C_{10} ヘテロシクロアルケニレン基、置換された C_6-C_{60} アリーレン基、置換された C_1-C_{60} ヘテロアリーレン基、置換された二価非芳香族縮合多環基、置換された二価非芳香族ヘテロ縮合多環基、置換された C_1-C_{60} アルキル基、置換された C_2-C_{60} アルケニル基、置換された C_2-C_{60} アルキニル基、置換された C_1-C_{60} アルコキシ基、置換された C_3-C_{10} シクロアルキル基、置換された C_1-C_{10} ヘテロシクロアルキル基、置換された C_3-C_{10} シクロアルケニル基、置換された C_1-C_{10} ヘテロシクロアルケニル基、置換された C_6-C_{60} アリール基、置換された C_6-C_{60} アリールオキシ基、置換された C_6-C_{60} アリールチオ基、置換された C_1-C_{60} ヘテロアリール基、置換された一価非芳香族縮合多環基、及び置換された一価非芳香族ヘテロ縮合多環基の置換基のうち少なくとも一つは、

40

50

重水素 ($-D$)、 $-F$ 、 $-Cl$ 、 $-Br$ 、 $-I$ 、ヒドロキシル基、シアノ基、ニトロ基、アミノ基、ヒドラジノ基、ヒドラゾノ基、 C_1-C_{60} アルキル基、 C_2-C_{60} アルケニル基、 C_2-C_{60} アルキニル基及び C_1-C_{60} アルコキシ基；

重水素、 $-F$ 、 $-Cl$ 、 $-Br$ 、 $-I$ 、ヒドロキシル基、シアノ基、ニトロ基、アミノ基、ヒドラジノ基、ヒドラゾノ基、 C_3-C_{10} シクロアルキル基、 C_1-C_{10} ヘテロシクロアルキル基、 C_3-C_{10} シクロアルケニル基、 C_1-C_{10} ヘテロシクロアルケニル基、 C_6-C_{60} アリール基、 C_6-C_{60} アリールオキシ基、 C_6-C_{60} アリールチオ基、 C_1-C_6 ヘテロアリール基、一価非芳香族縮合多環基、一価非芳香族ヘテロ縮合多環基、 $-Si(Q_{11})(Q_{12})(Q_{13})$ 、 $-N(Q_{11})(Q_{12})$ 、 $-B(Q_{11})(Q_{12})$ 、 $-C(=O)(Q_{11})$ 、 $-S(=O)_2(Q_{11})$ 及び $-P(=O)(Q_{11})(Q_{12})$ のうちから選択された少なくとも一つで置換された、 C_1-C_{60} アルキル基、 C_2-C_{60} アルケニル基、 C_2-C_{60} アルキニル基及び C_1-C_{60} アルコキシ基；

C_3-C_{10} シクロアルキル基、 C_1-C_{10} ヘテロシクロアルキル基、 C_3-C_{10} シクロアルケニル基、 C_1-C_{10} ヘテロシクロアルケニル基、 C_6-C_{60} アリール基、 C_6-C_{60} アリールオキシ基、 C_6-C_{60} アリールチオ基、 C_1-C_{60} ヘテロアリール基、一価非芳香族縮合多環基及び一価非芳香族ヘテロ縮合多環基；

重水素、 $-F$ 、 $-Cl$ 、 $-Br$ 、 $-I$ 、ヒドロキシル基、シアノ基、ニトロ基、アミノ基、ヒドラジノ基、ヒドラゾノ基、 C_1-C_{60} アルキル基、 C_2-C_{60} アルケニル基、 C_2-C_{60} アルキニル基、 C_1-C_{60} アルコキシ基、 C_3-C_{10} シクロアルキル基、 C_1-C_{10} ヘテロシクロアルキル基、 C_3-C_{10} シクロアルケニル基、 C_1-C_{10} ヘテロシクロアルケニル基、 C_6-C_{60} アリール基、 C_6-C_{60} アリールオキシ基、 C_6-C_{60} アリールチオ基、 C_1-C_{60} ヘテロアリール基、一価非芳香族縮合多環基、一価非芳香族ヘテロ縮合多環基、 $-Si(Q_{21})(Q_{22})(Q_{23})$ 、 $-N(Q_{21})(Q_{22})$ 、 $-B(Q_{21})(Q_{22})$ 、 $-C(=O)(Q_{21})$ 、 $-S(=O)_2(Q_{21})$ 及び $-P(=O)(Q_{21})(Q_{22})$ のうちから選択された少なくとも一つで置換された、 C_3-C_{10} シクロアルキル基、 C_1-C_{10} ヘテロシクロアルキル基、 C_3-C_{10} シクロアルケニル基、 C_1-C_{10} ヘテロシクロアルケニル基、 C_6-C_{60} アリール基、 C_6-C_{60} アリールオキシ基、 C_6-C_{60} アリールチオ基、 C_1-C_{60} ヘテロアリール基、一価非芳香族縮合多環基及び一価非芳香族ヘテロ縮合多環基；並びに

$-Si(Q_{31})(Q_{32})(Q_{33})$ 、 $-N(Q_{31})(Q_{32})$ 、 $-B(Q_{31})(Q_{32})$ 、 $-C(=O)(Q_{31})$ 、 $-S(=O)_2(Q_{31})$ 及び $-P(=O)(Q_{31})(Q_{32})$ ；のうちから選択され、

前記 Q_{11} ないし Q_{13} 、 Q_{21} ないし Q_{23} 、及び Q_{31} ないし Q_{33} は、互いに独立して、水素、重水素、 $-F$ 、 $-Cl$ 、 $-Br$ 、 $-I$ 、ヒドロキシル基、シアノ基、ニトロ基、アミノ基、ヒドラジノ基、ヒドラゾノ基、 C_1-C_{60} アルキル基、 C_2-C_{60} アルケニル基、 C_2-C_{60} アルキニル基、 C_1-C_{60} アルコキシ基、 C_3-C_{10} シクロアルキル基、 C_1-C_{10} ヘテロシクロアルキル基、 C_3-C_{10} シクロアルケニル基、 C_1-C_{10} ヘテロシクロアルケニル基、 C_6-C_{60} アリール基、 C_1-C_{60} ヘテロアリール基、一価非芳香族縮合多環基、一価非芳香族ヘテロ縮合多環基、ビフェニル基及びターフェニル基のうちからも選択される。

【0242】

本明細書において「Ph」は、フェニル基を意味し、「Me」は、メチル基を意味し、「Et」は、エチル基を意味し、「ter-Bu」または「Bu^t」は、tert-ブチル基を意味し、「OMe」は、メトキシ基を意味する。

【0243】

本明細書において「ビフェニル基」は、「フェニル基で置換されたフェニル基」を意味する。前記「ビフェニル基」は、置換基が「 C_6-C_{60} アリール基」である「置換されたフェニル基」に属する。

【0244】

本明細書において「ターフェニル基」は、「ビフェニル基で置換されたフェニル基」を

意味する。前記「ターフェニル基」は、置換基が「 C_6-C_{60} アリール基で置換された C_6-C_{60} アリール基」である「置換されたフェニル基」に属する。

【0245】

本明細書において、*及び*'は、他の定義がない限り、当該化学式において、隣接原子との結合サイトを意味する。

【0246】

以下、合成例及び実施例を挙げ、本発明の一実施形態による化合物及び有機発光素子についてさらに具体的に説明する。下記合成例において、「Aの代わりにBを使用した」という表現において、Aのモル当量とBのモル当量は、互いに同一である。

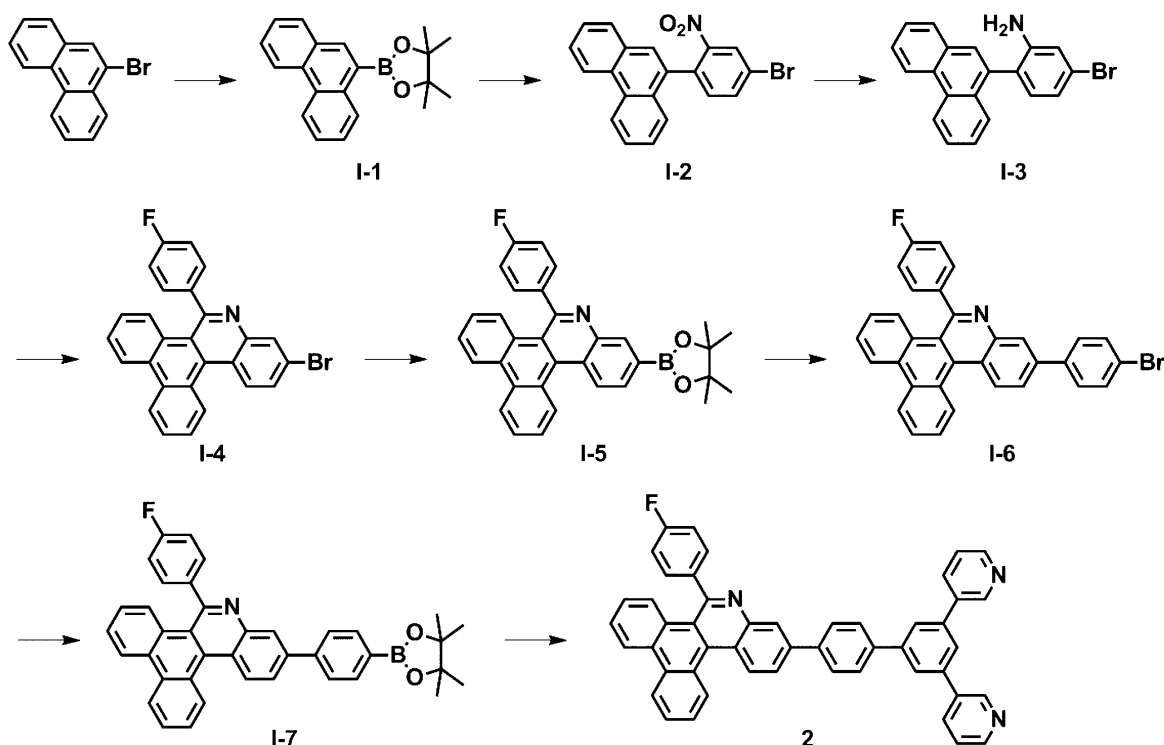
【実施例】

【0247】

合成例1：化合物2の合成

【0248】

【化56】



【0249】

中間体I-1の合成

9-ブロモフェナントレン2.60g(10mmol)をテトラヒドロフラン(THF)30mLに溶かした後、 -78°C でn-ブチルリチウム4mL(ヘキサン中で2.5M)を添加した。1時間後、同温度で、2-イソプロポキシ-4,4,5,5-テトラメチル-1,3,2-ジオキサボロラン2.0mL(10mmol)を添加した。室温で5時間攪拌した後、水を添加してジエチルエーテル(30mL)で3回洗浄した。洗浄されたジエチルエーテル層を MgSO_4 で乾燥させた後、減圧乾燥させて生成物を得た後、シリカゲルカラムクロマトグラフィで分離精製し、中間体I-1 2.34g(収率77%)を得た。生成された化合物は、LC-MS(liquid chromatography-mass spectrometry)によって確認した。

$\text{C}_{20}\text{H}_{21}\text{BO}_2$: M+1 304.2

【0250】

中間体I-2の合成

中間体I-1 3.04g(10.0mmol)、1,4-ジブロモ-2-ニトロベン

ゼン 2.80 g (10.0 mmol)、Pd(PPh₃)₄ 0.58 g (0.50 mmol)、テトラブチルアンモニウムブロミド (TBAB) 0.16 g (0.5 mmol) 及び Na₂CO₃ 3.18 g (30.0 mmol) を、トルエン/エタノール/H₂O (3/3/1) 混合溶液 60 mL に溶かした後、80 °C で 16 時間攪拌した。反応溶液を常温に冷却させた後、水 60 mL とジエチルエーテル 60 mL とで 3 回抽出した。そこから得た有機層を硫酸マグネシウムで乾燥させ、溶媒を蒸発させて得られた残留物を、シリカゲルカラムクロマトグラフィで分離精製し、中間体 I-2 3.03 g (収率 80%) を得た。生成された化合物は、LC-MS で確認した。

C₂₀H₁₂BrNO₂: M+1 377.0

【0251】

中間体 I-3 の合成

中間体 I-2 3.78 g (10.0 mmol)、スズ 3.56 g (30 mmol) 及び塩酸 5 mL (50 mmol、36.5% 濃度) をエチルアルコール 60 mL に溶かした後、100 °C で 8 時間攪拌した。反応溶液を常温に冷却させた後、減圧フィルタして得た濾過液に、水酸化ナトリウム 3 g を 10 mL の水に溶かして得られた水溶液を添加した後、水 60 mL とジクロロメタン 60 mL とで 3 回抽出した。そこから得た有機層を硫酸マグネシウムで乾燥させ、溶媒を蒸発させて得られた残留物をシリカゲルカラムクロマトグラフィで分離精製し、中間体 I-3 3.17 g (収率 91%) を得た。生成された化合物は、LC-MS で確認した。

C₂₀H₁₄BrN: M+1 347.0

【0252】

中間体 I-4 の合成

中間体 I-3 3.48 g (10 mmol) と 4-フルオロベンズアルデヒド 2.48 g (20 mmol) とをトリフルオロ酢酸 10 mL に溶かした後、シールチューブで 130 °C で 3 日間攪拌した。反応溶液を常温に冷却させた後、NaHCO₃ でクエンチ (quenching) した後、水 60 mL とジクロロメタン 60 mL とで 3 回抽出した。そこから得た有機層を硫酸マグネシウムで乾燥させ、溶媒を蒸発させて得られた残留物をシリカゲルカラムクロマトグラフィで分離精製し、中間体 I-4 2.71 g (収率 60%) を得た。生成された化合物は、LC-MS で確認した。

C₂₇H₁₅BrFN: M+1 451.0

【0253】

中間体 I-5 の合成

9-ブロモフェナントレンの代わりに、中間体 I-4 を使用したという点を除いては、前記中間体 I-1 の合成方法と同一方法を利用して、中間体 I-5 3.80 g (収率 76%) を得た。生成された化合物は、LC-MS によって確認した。

C₃₃H₂₇BFNO₂: M+1 499.2

【0254】

中間体 I-6 の合成

中間体 I-1 の代わりに、中間体 I-5 を使用し、1,4-ジブロモ-2-ニトロベンゼンの代わりに、1-ブロモ-4-ヨードベンゼンを使用したという点を除いては、前記中間体 I-2 の合成方法と同一方法を利用して、中間体 I-6 3.80 g (収率 72%) を得た。生成された化合物は、LC-MS によって確認した。

C₃₃H₁₉BrFN: M+1 527.1

【0255】

中間体 I-7 の合成

9-ブロモフェナントレンの代わりに、中間体 I-6 を使用したという点を除いては、前記中間体 I-1 の合成方法と同一方法を利用して、中間体 I-7 4.03 g (収率 70%) を得た。生成された化合物は、LC-MS によって確認した。

C₃₉H₃₁BFNO₂: M+1 575.2

【0256】

10

20

30

40

50

化合物 2 の合成

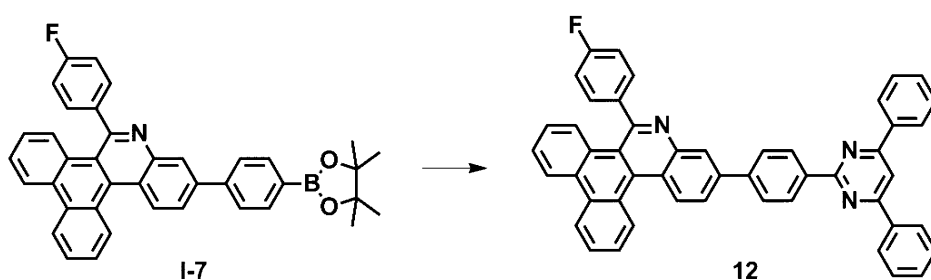
中間体 I-7 5.75 g (10 mmol)、3,3'-(5-ブromo-1,3-フェニレン)ジピリジン 3.11 g (10 mmol)、Pd(PPh₃)₄ (テトラキス(トリフェニルホスフィン)パラジウム) 0.58 g (0.5 mmol)、及び K₂CO₃ 4.14 g (30 mmol) を、THF/H₂O (2/1 体積比) 混合溶液 60 mL に溶かした後、80℃で16時間撹拌した。前記反応溶液を室温に冷やした後、水 40 mL を加え、エチルエーテル 50 mL で3回抽出した。集められた有機層を硫酸マグネシウムで乾燥させ、溶媒を蒸発させて得られた残留物をシリカゲルカラムクロマトグラフィで分離精製し、化合物 2 4.21 g (収率 62%) を得た。生成された化合物は、MS/FAB (fast atom bombardment) と¹H NMR (nuclear magnetic resonance) によって確認した。
C₄₉H₃₀FN₃ cal. 679.24、found 679.25

【0257】

合成例 2：化合物 12 の合成

【0258】

【化57】



3,3'-(5-ブromo-1,3-フェニレン)ジピリジンの代わりに、2-クロロ-4,6-ジフェニルピリジンを使用したという点を除いては、前記化合物 2 の合成方法と同一方法を利用し、化合物 12 4.21 g (収率 62%) を得た。生成された化合物は、MS/FAB と¹H NMR とによって確認した。

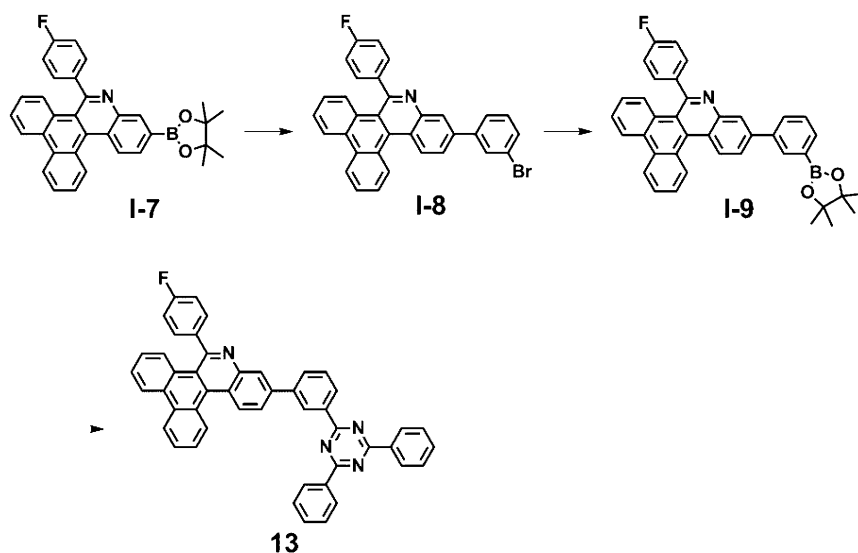
C₄₉H₃₀FN₃ cal. 679.24、found 679.25

【0259】

合成例 3：化合物 13 の合成

【0260】

【化58】



10

20

30

40

50

【0261】

中間体 I-8 の合成

1-ブロモ-4-ヨードベンゼンの代わりに、1-ブロモ-3-ヨードベンゼンを使用したという点を除いては、前記中間体 I-6 の合成方法と同一方法を利用し、中間体 I-8 3.80 g (収率 72%) を得た。生成された化合物は、LC-MS によって確認した。

$C_{33}H_{19}BrFN$: $M+1$ 527.1

【0262】

中間体 I-9 の合成

中間体 I-6 の代わりに、中間体 I-8 を使用したという点を除いては、前記中間体 I-7 の合成方法と同一方法を利用し、中間体 I-9 4.55 g (収率 79%) を得た。生成された化合物は、LC-MS によって確認した。

$C_{39}H_{31}BFNO_2$: $M+1$ 575.2

【0263】

化合物 13 の合成

中間体 I-7 の代わりに、中間体 I-9 を使用し、3,3'-(5-ブロモ-1,3-フェニレン)ジピリジンの代わりに、2-クロロ-4,6-ジフェニル-1,3,5-トリアジンを使用したという点を除いては、前記化合物 2 の合成方法と同一方法を利用し、化合物 13 4.56 g (収率 67%) を得た。生成された化合物は、MS/FAB と ^1H NMR とによって確認した。

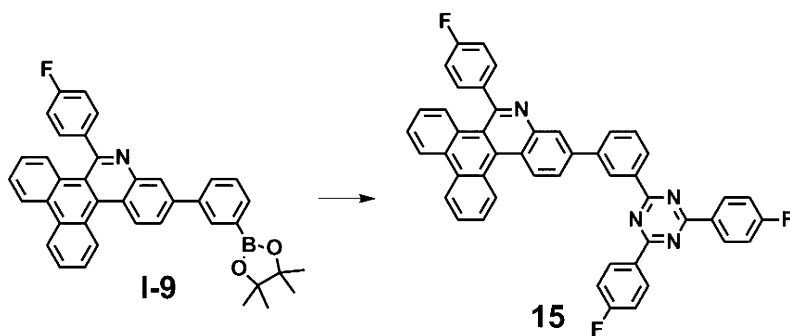
$C_{48}H_{29}FN_4$ cal. 680.24, found 680.23

【0264】

合成例 4: 化合物 15 の合成

【0265】

【化59】



【0266】

3,3'-(5-ブロモ-1,3-フェニレン)ジピリジンの代わりに、2-クロロ-4,6-ビス(4-フルオロフェニル)-1,3,5-トリアジンを使用したという点を除いては、前記化合物 13 の合成方法と同一方法を利用し、化合物 15 5.02 g (収率 70%) を得た。生成された化合物は、MS/FAB と ^1H NMR とによって確認した。

$C_{48}H_{27}F_3N_4$ cal. 716.22, found 716.21

【0267】

合成例 5: 化合物 17 の合成

【0268】

10

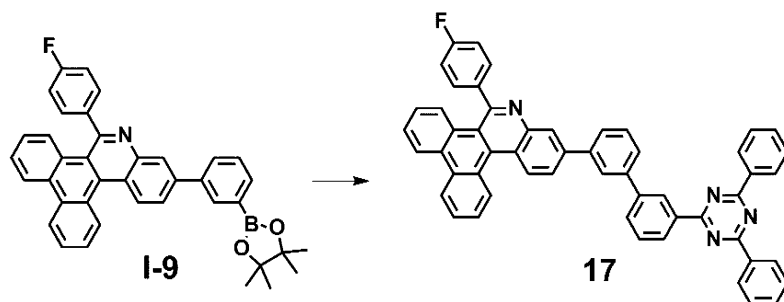
20

30

40

50

【化 6 0】



10

【 0 2 6 9】

3, 3' - (5 - ブロモ - 1, 3 - フェニレン) ジピリジンの代わりに、2 - 3 - ブロモフェニル) - 4, 6 - ジフェニル - 1, 3, 5 - トリアジンを使用したという点を除いては、前記化合物 13 の合成方法と同一方法を利用し、化合物 17 5.22 g (収率 69%) を得た。生成された化合物は、MS / FAB と ^1H NMR とによって確認した。

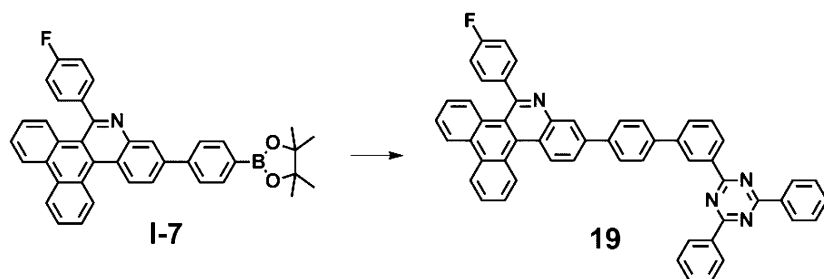
$\text{C}_{54}\text{H}_{33}\text{FN}_4$ cal. 756.27、found 756.28

【 0 2 7 0】

合成例 6：化合物 19 の合成

【 0 2 7 1】

【化 6 1】



20

30

【 0 2 7 2】

3, 3' - (5 - ブロモ - 1, 3 - フェニレン) ジピリジンの代わりに、2 - 3 - ブロモフェニル) - 4, 6 - ジフェニル - 1, 3, 5 - トリアジンを使用したという点を除いては、前記化合物 2 の合成方法と同一方法を利用し、化合物 19 4.92 g (収率 65%) を得た。生成された化合物は、MS / FAB と ^1H NMR とによって確認した。

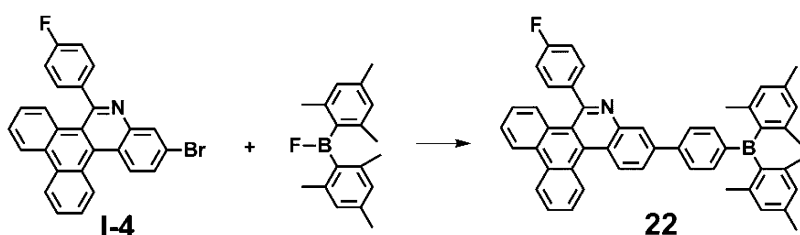
$\text{C}_{54}\text{H}_{33}\text{FN}_4$ cal. 756.27、found 756.26

【 0 2 7 3】

合成例 7：化合物 22 の合成

【 0 2 7 4】

【化 6 2】



40

【 0 2 7 5】

50

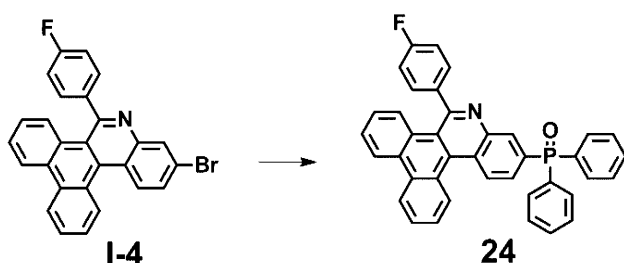
中間体 I-4 4.52 g (10 mmol) を THF 50 mL に溶かした後、 -78°C で *n*-ブチリチウム 4 mL (ヘキサン中で 2.5 M) を添加した。1 時間後、同温度で、ジメシチルフルオロボラン (dimesitylboron fluoride) 2.95 g (10 mmol) を添加した。室温で 12 時間攪拌した後、水を添加し、酢酸エチル (30 mL) で 3 回洗浄した。洗浄に用いた酢酸エチル層を MgSO_4 で乾燥させた後、減圧乾燥させて生成物を得た後、シリカゲルカラムクロマトグラフィで分離精製し、化合物 22 5.02 g (収率 72%) 得た。生成された化合物は、MS/FAB と ^1H NMR によって確認した。
 $\text{C}_{51}\text{H}_{41}\text{BFN}$ cal. 697.33、found 697.32

【0276】

合成例 8：化合物 24 の合成

【0277】

【化 63】



【0278】

中間体 I-4 4.52 g (10 mmol) を THF 100 mL に溶かした後、 -78°C で *n*-ブチリチウム 4 mL (ヘキサン中で 2.5 M) を添加した。1 時間後、クロロジフェニルホスフィン 2.20 g (10 mmol) を徐々に滴加した後、3 時間攪拌し、反応混合物を常温に上げた後、水を添加し、酢酸エチル (30 mL) で 3 回洗浄した。洗浄に用いた酢酸エチル層を MgSO_4 で乾燥させた後、減圧乾燥させて中間体を得た。中間体をジクロロメタン 40 mL に溶かした後、過酸化水素水 (4 mL) を添加した後、常温で 20 時間攪拌した。水 20 mL を加え、ジクロロメタン 20 mL で 3 回抽出した。集められた有機層を硫酸マグネシウムで乾燥させ、溶媒を蒸発させて得られた残留物をシリカゲルカラムクロマトグラフィで分離精製し、化合物 24 4.70 g (収率 82%) を得た。生成された化合物は、MS/FAB と ^1H NMR によって確認した。

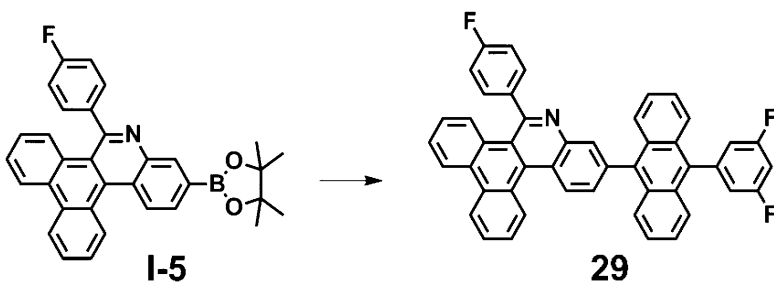
$\text{C}_{39}\text{H}_{25}\text{FNO}$ cal. 573.17、found 573.18

【0279】

合成例 9：化合物 29 の合成

【0280】

【化 64】



【0281】

中間体 I-7 の代わりに、中間体 I-5 を使用し、3,3'-(5-ブromo-1,3-フェニレン)ジピリジンの代わりに、9-ブromo-10-3,5-ジフルオロフェニル)アントラセンを使用したという点を除いては、前記化合物 2 の合成方法と同一方法を利用し

、化合物 29 4.17 g (収率 63%) を得た。生成された化合物は、MS/FABと¹H NMRとによって確認した。

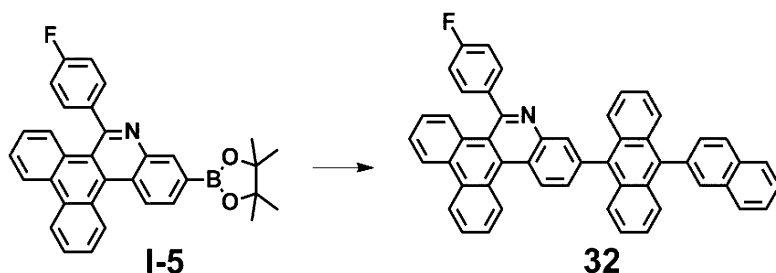
C₄₇H₂₆F₃N cal. 661.20、found 661.21

【0282】

合成例 10：化合物 32 の合成

【0283】

【化65】



10

【0284】

中間体 I-7 の代わりに、中間体 I-5 を使用し、3,3'-(5-ブromo-1,3-フェニレン)ジピリジンの代わりに、9-ブromo-10-(ナフタレン-2-イル)アントラセンを使用したという点を除いては、前記化合物 2 の合成方法と同一方法を利用し、化合物 32 4.53 g (収率 67%) を得た。生成された化合物は、MS/FABと¹H NMRとによって確認した。

20

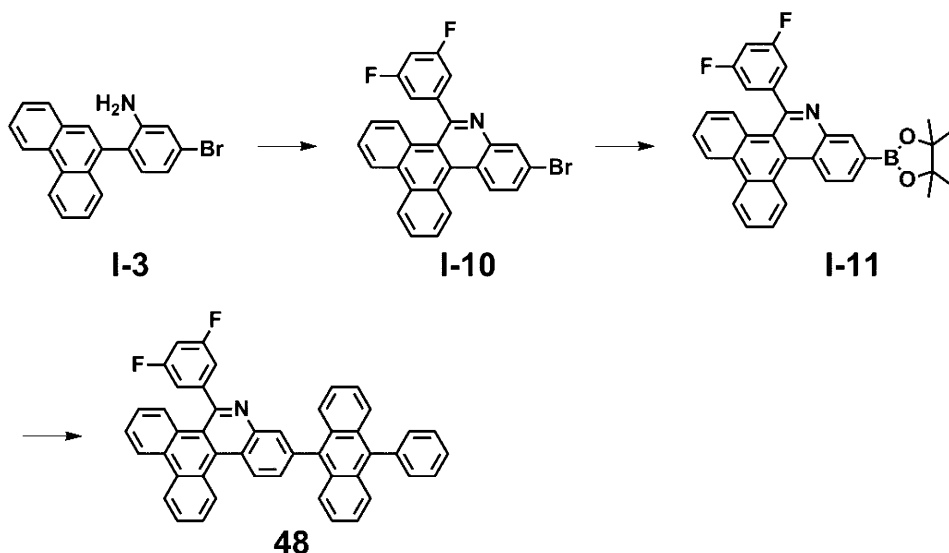
C₅₁H₃₀FN cal. 675.24、found 675.25

【0285】

合成例 11：化合物 48 の合成

【0286】

【化66】



30

40

【0287】

中間体 I-10 の合成

4-フルオロベンズアルデヒドの代わりに、3,5-ジフルオロベンズアルデヒドを使用したという点を除いては、前記中間体 I-4 の合成方法と同一方法を利用し、中間体 I-10 3.81 g (収率 81%) を得た。生成された化合物は、LC-MSによって確認した。

50

$C_{27}H_{14}BrF_2N$: $M+1$ 469.1

【0288】

中間体 I-11 の合成

中間体 I-4 の代わりに、中間体 I-10 を使用したという点を除いては、前記中間体 I-5 の合成方法と同一方法を利用し、中間体 I-11 4.45 g (収率 86%) を得た。生成された化合物は、LC-MS を介して確認した。

$C_{33}H_{26}BF_2NO_2$: $M+1$ 517.2

【0289】

化合物 48 の合成

中間体 I-5 の代わりに、中間体 I-11 を使用し、3,3'-(5-ブromo-1,3-フェニレン)ジピリジンの代わりに、9-ブromo-10-フェニルアントラセンを使用したという点を除いては、前記化合物 2 の合成方法と同一方法を利用し、化合物 48 4.70 g (収率 73%) を得た。生成された化合物は、MS/FAB と ^1H NMR によって確認した。

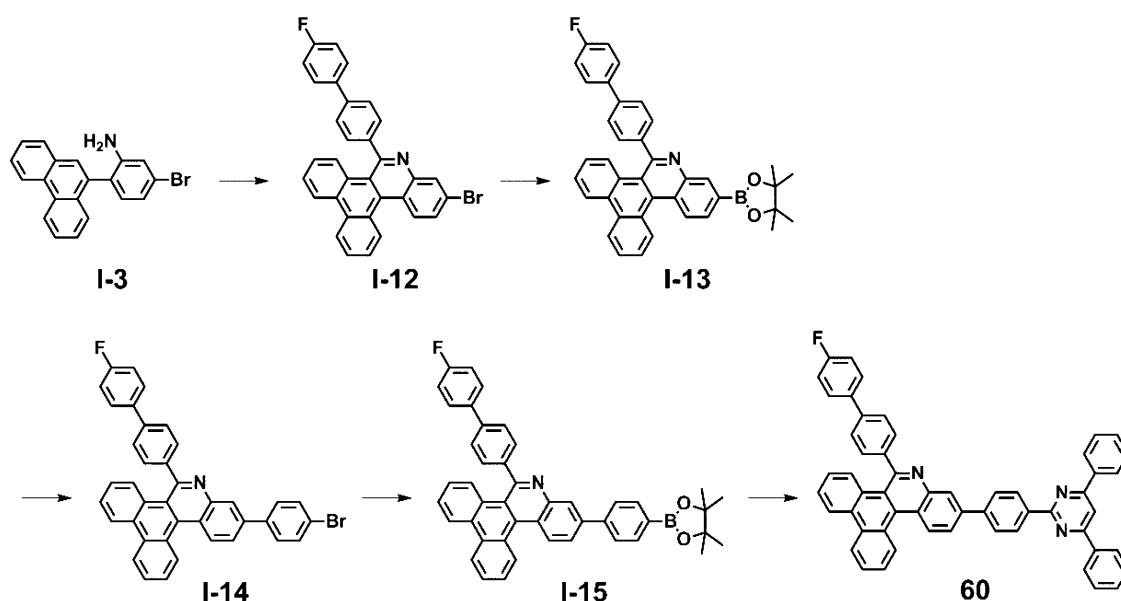
$C_{47}H_{27}F_2N$ cal. 643.21, found 643.22

【0290】

合成例 12: 化合物 60 の合成

【0291】

【化 67】



【0292】

中間体 I-12 の合成において、4-フルオロベンズアルデヒドの代わりに、4'-フルオロ-[1,1'-ビフェニル]-4-カルバルデヒドを使用したという点を除いては、前記化合物 12 の合成方法と同一方法を利用し、化合物 60 5.67 g (収率 75%) を得た。生成された化合物は、MS/FAB と ^1H NMR によって確認した。

$C_{55}H_{34}FN_3$ cal. 755.27, found 755.26

【0293】

合成例 13: 化合物 72 の合成

【0294】

10

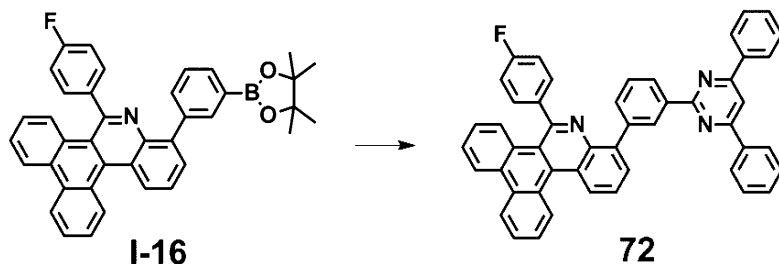
20

30

40

50

【化 6 8】



10

【0 2 9 5】

中間体 I-2 の合成において、1, 4-ジブロモ-2-ニトロベンゼンの代わりに、1, 3-ジブロモ-2-ニトロベンゼンを使用し、中間体 I-7 の合成において、1, 4-ジブロモベンゼンの代わりに、1, 3-ジブロモベンゼンを使用したという点を除いては、前記化合物 12 の合成方法と同一方法を利用し、化合物 72 4.96 g (収率 73%) を得た。生成された化合物は、MS/FAB と ^1H NMR によって確認した。

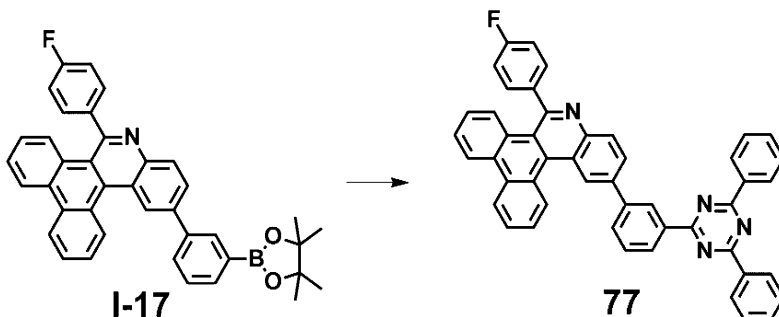
$\text{C}_{49}\text{H}_{30}\text{FN}_3$ cal. 679.24, found 679.23

【0 2 9 6】

合成例 14: 化合物 77 の合成

【0 2 9 7】

【化 6 9】



30

【0 2 9 8】

中間体 I-2 の合成において、1, 4-ジブロモ-2-ニトロベンゼンの代わりに、2, 4-ジブロモ-1-ニトロベンゼンを使用し、中間体 I-7 の合成において、1, 4-ジブロモベンゼンの代わりに、1, 3-ジブロモベンゼンを使用したという点を除いては、前記化合物 12 の合成方法と同一方法を利用し、化合物 77 4.90 g (収率 72%) を得た。生成された化合物は、MS/FAB と ^1H NMR とを介して確認した。

$\text{C}_{48}\text{H}_{29}\text{FN}_4$ cal. 680.24, found 680.25

【0 2 9 9】

下記表 1、2 に、合成された化合物の ^1H NMR 及び MS/FAB を示した。表 1、2 に示した化合物以外の他の化合物も、前述の合成経路及び原料物質を参照し、当該技術分野の当業者であるならば、その合成方法を容易に認識することができるであろう。

40

【0 3 0 0】

50

【表 1】

表 1

化合物	¹ H NMR (CDCl ₃ , 400MHz)	MS/FAB	
		found	calc.
2	8.96–8.92 (m, 2H), 8.87–8.82 (m, 2H), 8.74–8.70 (m, 2H), 8.67–8.62 (m, 3H), 8.60–8.57 (m, 1H), 8.20 (dd, 1H), 8.10–8.00 (m, 5H), 7.94–7.85 (m, 7H), 7.80–7.62 (m, 4H), 7.49 (d, 1H), 7.47 (d, 1H), 7.23–7.17 (m, 2H)	679.25	679.24
12	8.86–8.82 (m, 2H), 8.73–8.70 (m, 1H), 8.66–8.62 (m, 1H), 8.60–8.53 (m, 3H), 8.30–8.26 (m, 4H), 8.20 (dd, 1H), 8.10–8.02 (m, 4H), 7.96 (s, 1H), 7.80–7.63 (m, 4H), 7.53–7.48 (m, 4H), 7.30 (t, 1H), 7.29 (dd, 1H), 7.27 (t, 1H), 7.25–7.20 (m, 2H)	679.25	679.24
13	8.85–8.78 (m, 6H), 8.73–8.70 (m, 2H), 8.66–8.55 (m, 3H), 8.40 (dd, 1H), 8.11–8.05 (m, 3H), 7.98–7.96 (m, 1H), 7.80–7.59 (m, 9H), 7.42–7.38 (m, 2H), 7.23–7.19 (m, 2H)	680.23	680.24
15	8.86–8.82 (m, 2H), 8.73–8.70 (m, 2H), 8.66–8.58 (m, 3H), 8.40 (dd, 1H), 8.35–8.30 (m, 4H), 8.11–8.06 (m, 3H), 7.99–7.96 (m, 1H), 7.80–7.62 (m, 5H), 7.30–7.18 (m, 6H)	716.21	716.22
17	8.85–8.78 (m, 6H), 8.72–8.70 (m, 1H), 8.65–8.56 (m, 4H), 8.24–8.18 (m, 2H), 8.10–8.06 (m, 3H), 7.94–7.74 (m, 3H), 7.70–7.49 (m, 9H), 7.42–7.30 (m, 3H), 7.23–7.17 (m, 2H)	756.28	756.27
19	8.85–8.80 (m, 6H), 8.73–8.57 (m, 5H), 8.20–8.18 (m, 1H), 8.10–7.96 (m, 5H), 7.86–7.82 (m, 3H), 7.80–7.54 (m, 9H), 7.42–7.38 (m, 2H), 7.23–7.20 (m, 2H)	756.26	756.27
22	8.85–8.83 (m, 2H), 8.72–8.57 (m, 3H), 8.27–8.25 (m, 1H), 8.10–8.01 (m, 3H), 7.80–7.51 (m, 8H), 7.23–7.17 (m, 2H), 6.79–6.77 (m, 4H), 2.19 (s, 18H)	697.32	697.33
24	8.89–8.85 (m, 2H), 8.73–8.62 (m, 4H), 8.12–8.07 (m, 2H), 7.86–7.60 (m, 9H), 7.52–7.39 (m, 6H), 7.23–7.20 (m, 2H)	573.18	573.17
29	8.85–8.81 (m, 2H), 8.75–8.63 (m, 3H), 8.45–8.43 (m, 1H), 8.26–8.23 (m, 2H), 8.15–8.13 (m, 1H), 8.10–7.97 (m, 2H), 7.80–7.54 (m, 6H), 7.40–7.32 (m, 4H), 7.23–7.17 (m, 2H), 7.05–6.98 (m, 2H), 6.66–6.60 (m, 1H)	661.21	661.2
32	8.87–8.82 (m, 2H), 8.73–8.62 (m, 3H), 8.45–8.43 (m, 1H), 8.15–8.07 (m, 3H), 8.00–7.89 (m, 7H), 7.80–7.54 (m, 8H), 7.38–7.32 (m, 4H), 7.25–7.19 (m, 2H)	675.25	675.24

【0301】

10

20

30

40

50

【表 2】

表 2

化合物	^1H NMR (CDCl_3 , 400MHz)	MS/FAB	
		found	calc.
48	8.91–8.88 (m, 1H), 8.85–8.82 (m, 1H), 8.73–8.61 (m, 3H), 8.51–8.50 (m, 1H), 8.15–8.13 (m, 1H), 7.83–7.62 (m, 10H), 7.56–7.45 (m, 4H), 7.41–7.28 (m, 5H), 6.98–6.92 (m, 1H)	643.22	643.21
60	8.86–8.83 (m, 2H), 8.73–8.70 (m, 1H), 8.66–8.53 (m, 4H), 8.30–8.26 (m, 6H), 8.20 (dd, 1H), 8.05–8.00 (m, 3H), 7.96 (s, 1H), 7.88–7.85 (m, 2H), 7.80–7.62 (m, 4H), 7.53–7.48 (m, 4H), 7.31–7.26 (m, 2H), 7.18–7.13 (m, 2H), 6.71–6.65 (m, 2H)	755.26	755.27
72	8.93–8.86 (m, 3H), 8.72–8.70 (m, 1H), 8.58–8.56 (m, 1H), 8.50–8.47 (m, 1H), 8.37–8.35 (m, 1H), 8.29–8.21 (m, 5H), 8.13–8.09 (m, 2H), 7.99 (s, 1H), 7.87–7.61 (m, 7H), 7.53–7.48 (m, 4H), 7.31–7.17 (m, 4H)	679.23	679.24
77	8.93–8.86 (m, 2H), 8.81–8.70 (m, 7H), 8.59–8.55 (m, 2H), 8.36–8.34 (m, 1H), 8.15 (dd, 1H), 8.07–8.02 (m, 2H), 7.91–7.88 (m, 1H), 7.80–7.69 (m, 3H), 7.65–7.55 (m, 6H), 7.42–7.38 (m, 2H), 7.23–7.16 (m, 2H)	680.25	680.24

【0302】

前記合成例 1 ないし 14 によって合成された化合物以外の他の化合物も、前述の合成経路及び原料物質を参照し、当該技術分野の当業者であるならば、その合成方法を容易に認識することができるであろう。

【0303】

実施例 1

アノードは、コーニング (Corning) $15\ \Omega/\text{cm}^2$ ($120\ \text{nm}$) ITO ガラス基板を $50\ \text{mm} \times 50\ \text{mm} \times 0.7\ \text{mm}$ のサイズに切り、イソプロピルアルコールと純水とを利用し、各 5 分間超音波洗浄した後、30 分間紫外線を照射し、オゾンに露出させて洗浄し、真空蒸着装置に前記ガラス基板を設けた。

【0304】

前記基板上に、まず正孔注入層として、公知の物質である 2-TNATA を真空蒸着し、 $60\ \text{nm}$ 厚に形成した後、続けて、正孔輸送性化合物として、公知の物質である 4,4'-ビス [N-(1-ナフチル)-N-フェニルアミノ] ビフェニル (NPB) を $30\ \text{nm}$ 厚に真空蒸着して正孔輸送層を形成した。

【0305】

10

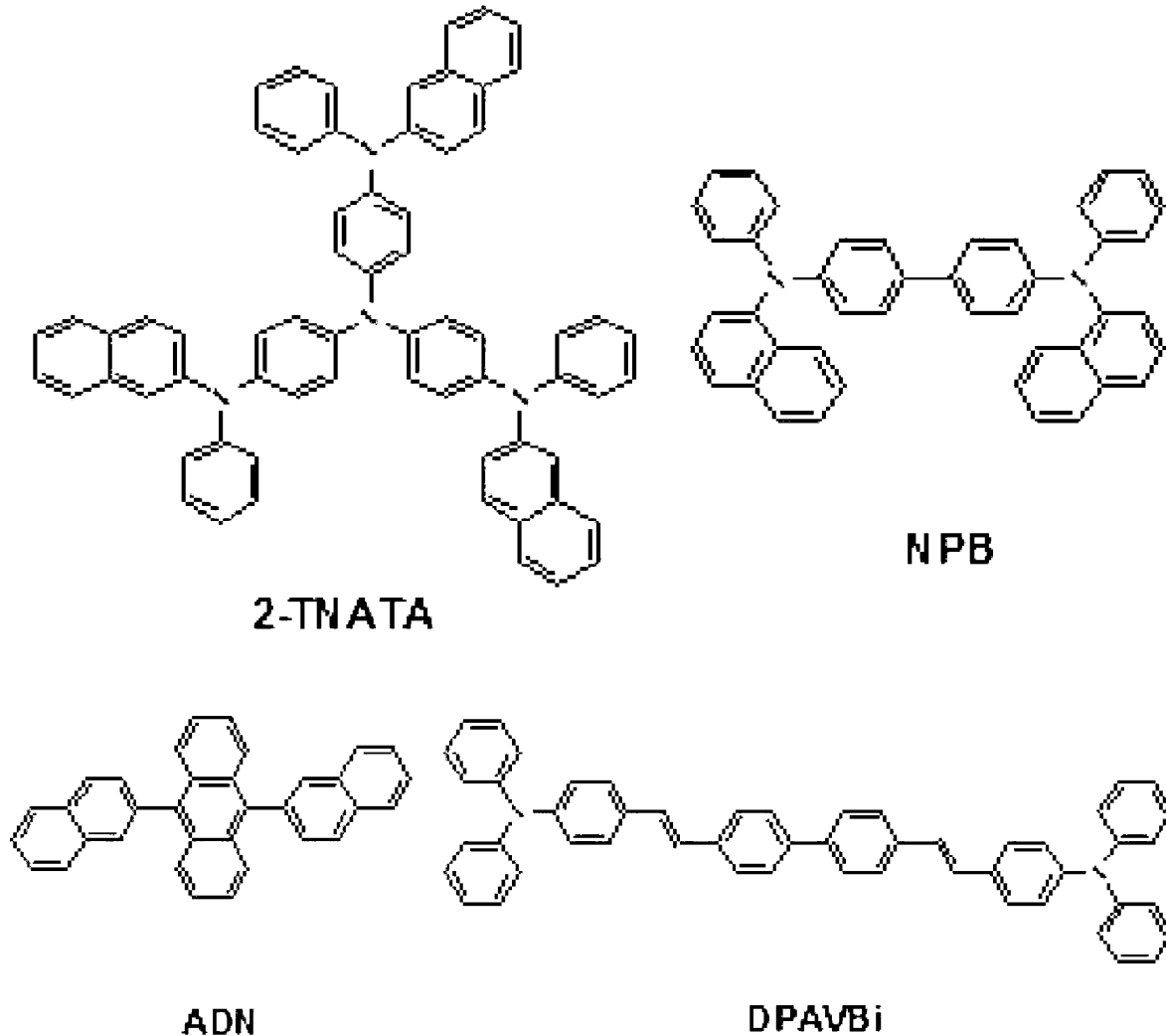
20

30

40

50

【化 7 0】



【0306】

前記正孔輸送層上に、公知の青色蛍光ホストで化合物である9,10-ジナフタレン-2-イル-アントラセン(ADN)を使用し、青色蛍光ドーパントとして、公知の化合物である4,4'-ビス[2-(4-(N,N-ジフェニルアミノ)フェニル)ビニル]ビフェニル(DPAVBi)を、重量比98:2で同時蒸着し、30nm厚に発光層を形成した。

【0307】

続けて、前記発光層上に、電子輸送層として、本発明の化合物2を30nm厚に蒸着した後、該電子輸送層上に、ハロゲン化アルカリ金属であるLiFを電子注入層として、1nm厚に蒸着し、Alを300nm(陰極電極)の厚みに真空蒸着し、LiF/Al電極を形成することにより、有機電界発光素子を製造した。

【0308】

実施例2

電子輸送層の形成時、前記化合物2の代わりに、化合物12を利用したことを除いては、実施例1と同一に行い、有機EL素子を製作した。

【0309】

実施例3

電子輸送層の形成時、前記化合物2の代わりに、化合物13を利用したことを除いては、実施例1と同一に行い、有機EL素子を製作した。

【0310】

実施例4

電子輸送層の形成時、前記化合物 2 の代わりに、化合物 1 5 を利用したことを除いては、実施例 1 と同一に行い、有機 E L 素子を製作した。

【0311】

実施例 5

電子輸送層の形成時、前記化合物 2 の代わりに、化合物 1 7 を利用したことを除いては、実施例 1 と同一に行い、有機 E L 素子を製作した。

【0312】

実施例 6

電子輸送層の形成時、前記化合物 2 の代わりに、化合物 1 9 を利用したことを除いては、実施例 1 と同一に行い、有機 E L 素子を製作した。

【0313】

実施例 7

電子輸送層の形成時、前記化合物 2 の代わりに、化合物 2 2 を利用したことを除いては、実施例 1 と同一に行い、有機 E L 素子を製作した。

【0314】

実施例 8

電子輸送層の形成時、前記化合物 2 の代わりに、化合物 2 4 を利用したことを除いては、実施例 1 と同一に行い、有機 E L 素子を製作した。

【0315】

実施例 9

電子輸送層の形成時、前記化合物 2 の代わりに、化合物 2 9 を利用したことを除いては、実施例 1 と同一に行い、有機 E L 素子を製作した。

【0316】

実施例 10

電子輸送層の形成時、前記化合物 2 の代わりに、化合物 3 2 を利用したことを除いては、実施例 1 と同一に行い、有機 E L 素子を製作した。

【0317】

実施例 11

電子輸送層の形成時、前記化合物 2 の代わりに、化合物 4 8 を利用したことを除いては、実施例 1 と同一に行い、有機 E L 素子を製作した。

【0318】

実施例 12

電子輸送層の形成時、前記化合物 2 の代わりに、化合物 6 0 を利用したことを除いては、実施例 1 と同一に行い、有機 E L 素子を製作した。

【0319】

実施例 13

電子輸送層の形成時、前記化合物 2 の代わりに、化合物 7 2 を利用したことを除いては、実施例 1 と同一に行い、有機 E L 素子を製作した。

【0320】

実施例 14

電子輸送層の形成時、前記化合物 2 の代わりに、化合物 7 7 を利用したことを除いては、実施例 1 と同一に行い、有機 E L 素子を製作した。

【0321】

比較例 1

電子輸送層の形成時、前記化合物 2 の代わりに、公知の物質である化合物 2 0 0 を利用したことを除いては、実施例 1 と同一に行い、有機 E L 素子を製作した。

【0322】

10

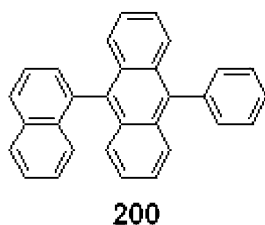
20

30

40

50

【化 7 1】



【 0 3 2 3 】

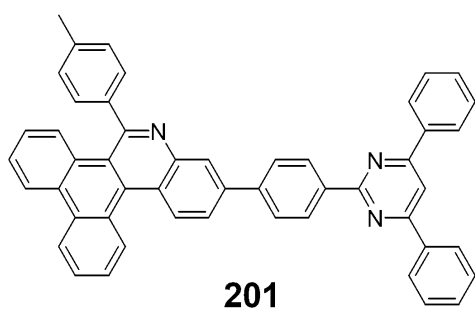
10

比較例 2

電子輸送層の形成時、前記化合物 2 代わりに、下記化合物 2 0 1 を使用したことを除いては、実施例 1 と同一に行い、有機 E L 素子を製作した。

【 0 3 2 4 】

【化 7 2】



20

【 0 3 2 5 】

実施例 1 ないし実施例 1 4、及び比較例 1，2 によって得られた有機 E L 素子に対して、電流密度 $50 \text{ mA} / \text{cm}^2$ の駆動電圧、輝度、効率 (cd / A) 及び半減寿命を測定し、下記表 3 に示した。

【 0 3 2 6 】

30

40

50

【表 3】

表 3

	材料	駆動	電流密度	輝度	効率	発光光	半減寿命
		電圧 (V)	(mA/cm ²)	(cd/m ²)	(cd/A)		(hr@100mA/cm ²)
実施例1	化合物2	3.65	50	3,550	7.1	青色	700
実施例2	化合物12	3.25	50	3,790	7.58	青色	705
実施例3	化合物13	3.28	50	3,805	7.61	青色	717
実施例4	化合物15	3.2	50	3,810	7.62	青色	753
実施例5	化合物17	3.21	50	3,830	7.66	青色	723
実施例6	化合物19	3.2	50	3,825	7.65	青色	735
実施例7	化合物22	3.36	50	3,760	7.52	青色	727
実施例8	化合物24	3.7	50	3,700	7.4	青色	712
実施例9	化合物29	3.29	50	3,800	7.6	青色	728
実施例10	化合物32	3.27	50	3,795	7.59	青色	720
実施例11	化合物48	3.25	50	3,810	7.62	青色	713
実施例12	化合物60	3.3	50	3,785	7.57	青色	709
実施例13	化合物72	3.35	50	3,780	7.56	青色	725
実施例14	化合物77	3.32	50	3,775	7.55	青色	716
比較例1	化合物200	4.28	50	3,050	6.1	青色	485
比較例2	化合物201	3.85	50	3,515	7.03	青色	572

【0327】

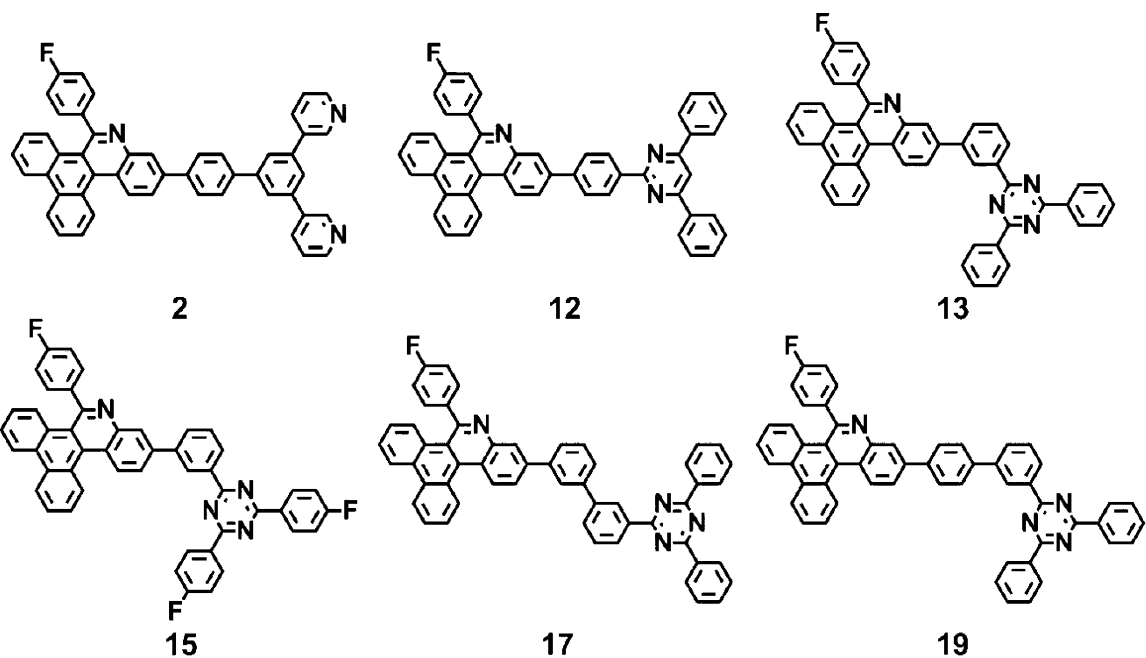
前記表3から、本発明の化合物を電子輸送材料として使用した場合、公知の物質である化合物200だけではなく、化合物201と比較し、駆動電圧が低くなり、効率、輝度が大幅に向上した優秀なI-V-L特性を示し、特に、寿命改善効果において卓越した結果を示した。

【0328】

すなわち、本発明の化合物が、素子の電子輸送材料として使用される場合、駆動電圧、輝度、効率及び寿命側面において、優秀な効果を発揮することができるということが分かる。

【0329】

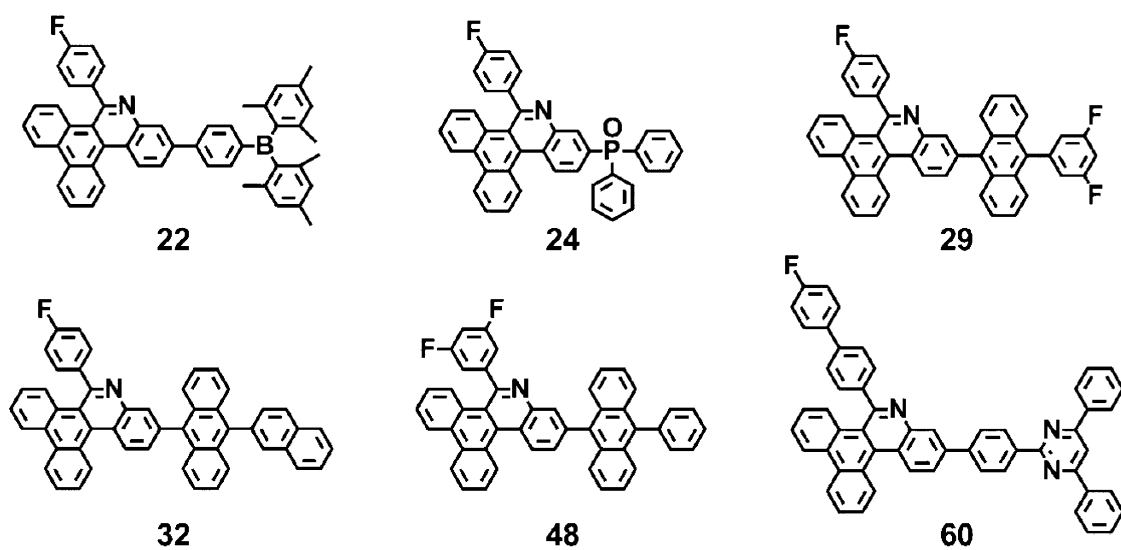
【化 7 3】



10

【 0 3 3 0】

【化 7 4】

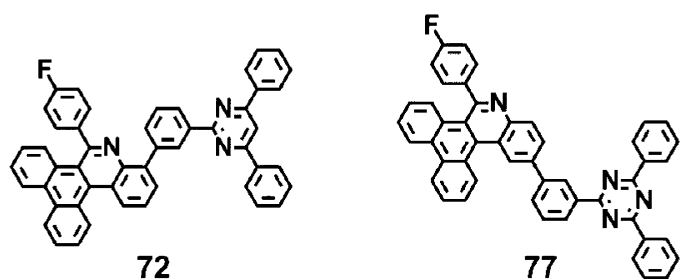


20

30

【 0 3 3 1】

【化 7 5】



40

【 0 3 3 2】

本発明について、前記合成例及び実施例を参照して説明したが、それらは、例示的なも

50

のに過ぎず、本発明に属する技術分野の当業者であるならば、それらから、多様な変形、及び均等な他の実施例が可能であるという点を理解するであろう。従って、本発明の真の技術的保護範囲は、特許請求の範囲の技術的思想によって決められるものである。

【産業上の利用可能性】

【0333】

本発明の、縮合環化合物、及びそれを含む有機発光素子は、例えば、発光関連の技術分野に効果的に適用可能である。

【符号の説明】

【0334】

10, 20, 30, 40 有機発光素子
110 第1電極
150 有機層
190 第2電極
210 第1キャッピング層
220 第2キャッピング層

10

20

30

40

50

【図面】

【図 1】

10

190
150
110

【図 2】

20

190
150
110
210

10

【図 3】

30

220
190
150
110

【図 4】

40

220
190
150
110
210

20

30

40

50

フロントページの続き

(51)国際特許分類

F I

C 0 7 D 471/04 (2006.01)

C 0 7 D 401/10

C 0 7 F 5/02 (2006.01)

C 0 7 D 471/04 1 1 2 Z

C 0 7 F 9/576(2006.01)

C 0 7 F 5/02 A

C 0 7 F 9/576

1 三星ディスプレイ株式會社内

(72)発明者 李 孝榮

大韓民国 京畿道 龍仁市 器興區 三星路1 三星ディスプレイ株式會社内

(72)発明者 金 榮國

大韓民国 京畿道 龍仁市 器興區 三星路1 三星ディスプレイ株式會社内

(72)発明者 黄 哲煥

大韓民国 京畿道 龍仁市 器興區 三星路1 三星ディスプレイ株式會社内

審査官 安田 周史

(56)参考文献 米国特許出願公開第2015/0349275 (US, A1)

(58)調査した分野 (Int.Cl., DB名)

C 0 7 D 221/18

C 0 7 D 401/10

C 0 7 D 471/04

C 0 7 D 401/04

C 0 7 F 5/02

C 0 7 F 9/576

H 0 5 B 33/12

H 0 1 L 51/50

CAplus/REGISTRY (STN)