

(19) 日本国特許庁(JP)

(12) 公開特許公報(A)

(11) 特許出願公開番号
特開2015-151399
(P2015-151399A)

(43) 公開日 平成27年8月24日(2015.8.24)

(51) Int.Cl.	F I	テーマコード (参考)
C O 7 D 491/153 (2006.01)	C O 7 D 491/153 C S P	3 K 1 0 7
C O 7 D 495/14 (2006.01)	C O 7 D 495/14 C	4 C O 5 0
H O 1 L 51/50 (2006.01)	H O 5 B 33/14 B	4 C O 7 1
	H O 5 B 33/22 D	
	H O 5 B 33/22 A	
審査請求 未請求 請求項の数 21 O L (全 136 頁)		

(21) 出願番号 特願2015-25710 (P2015-25710)	(71) 出願人 390019839
(22) 出願日 平成27年2月12日 (2015.2.12)	三星電子株式会社
(31) 優先権主張番号 10-2014-0016282	S a m s u n g E l e c t r o n i c s
(32) 優先日 平成26年2月12日 (2014.2.12)	C o . , L t d .
(33) 優先権主張国 韓国 (KR)	大韓民国京畿道水原市靈通区三星路129
(31) 優先権主張番号 10-2015-0011855	129, S a m s u n g - r o , Y e o n
(32) 優先日 平成27年1月26日 (2015.1.26)	g t o n g - g u , S u w o n - s i , G
(33) 優先権主張国 韓国 (KR)	y e o n g g i - d o , R e p u b l i c
	o f K o r e a
	(71) 出願人 590002817
	三星エスディアイ株式会社
	S a m s u n g S D I C o . , L t d
	.
	大韓民国京畿道龍仁市器興区貢稅路150
	- 2 0
	最終頁に続く

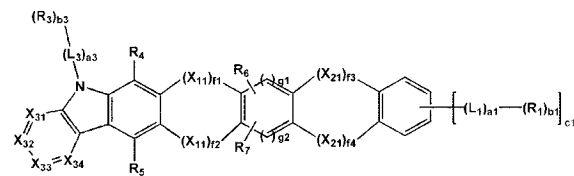
(54) 【発明の名称】 縮合環化合物及びそれを含む有機発光素子

(57) 【要約】

【課題】 縮合環化合物及びそれを含む有機発光素子を提供する。

【解決手段】 本発明の縮合環化合物は、下記化学式1で示される。

【化1】

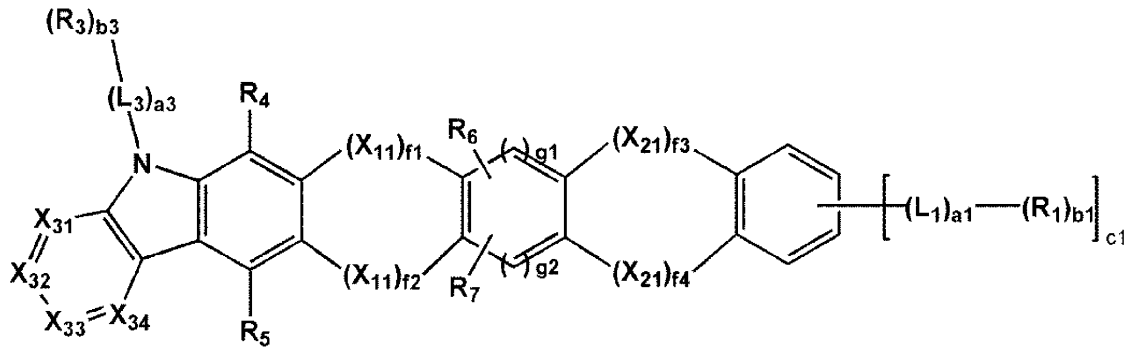


【特許請求の範囲】

【請求項 1】

下記化学式 1 で示されることを特徴とする縮合環化合物。

【化 1】



10

前記化学式 1 で、

X_{11} は、 $N - [(L_{11})_{a11} - (R_{11})_{b11}]$ 、 S 、 O 、 $S(=O)$ 、 $S(=O)_2$ 、 $C(=O)$ 、 $C(R_{12})(R_{13})$ 、 $Si(R_{12})(R_{13})$ 、 $P(R_{12})$ 、又は $P(=O)(R_{12})$ であり、 $f1$ 及び $f2$ は、互いに独立して、0 又は 1 であり、 $f1 + f2$ は 1 であり、

X_{21} は、 $N - [(L_{21})_{a21} - (R_{21})_{b21}]$ 、 S 、 O 、 $S(=O)$ 、 $S(=O)_2$ 、 $C(=O)$ 、 $C(R_{22})(R_{23})$ 、 $Si(R_{22})(R_{23})$ 、 $P(R_{22})$ 、又は $P(=O)(R_{22})$ であり、 $f3$ 及び $f4$ は、互いに独立して、0 又は 1 であり、 $f3 + f4$ は 1 であり、

$X_{31} \sim X_{34}$ は、互いに独立して、 N 又は $C - [(L_2)_{a2} - (R_2)_{b2}]$ であり、

$g1$ 及び $g2$ は、互いに独立して、0、1、又は 2 であり、 $g1 + g2$ は 2 であり、

i) 前記化学式 1 で、 $f1 = 1$ 、 $f2 = 0$ 、 $f3 = 1$ 、 $f4 = 0$ 、 $g1 = 1$ 、及び $g2 = 1$ であり、 X_{11} が $C(R_{12})(R_{13})$ である場合、 X_{21} は、 $N - [(L_{21})_{a21} - (R_{21})_{b21}]$ でなく、

ii) 前記化学式 1 で、 $f1 = 1$ 、 $f2 = 0$ 、 $f3 = 1$ 、 $f4 = 0$ 、 $g1 = 1$ 、及び $g2 = 1$ であり、 X_{11} が $N - [(L_{11})_{a11} - (R_{11})_{b11}]$ である場合、 X_{21} は、 $N - [(L_{21})_{a21} - (R_{21})_{b21}]$ でなく且つ $C(R_{22})(R_{23})$ でなく、

iii) 前記化学式 1 で、 $f1 = 1$ 、 $f2 = 0$ 、 $f3 = 0$ 、 $f4 = 1$ 、 $g1 = 0$ 、及び $g2 = 2$ であり、 X_{11} が $C(R_{12})(R_{13})$ である場合、 X_{21} は、 $N - [(L_{21})_{a21} - (R_{21})_{b21}]$ でなく、

iv) 前記化学式 1 で、 $f1 = 0$ 、 $f2 = 1$ 、 $f3 = 1$ 、 $f4 = 0$ 、 $g1 = 1$ 、及び $g2 = 1$ であり、 X_{11} が $C(R_{12})(R_{13})$ である場合、 X_{21} は、 $N - [(L_{21})_{a21} - (R_{21})_{b21}]$ でなく且つ $C(R_{22})(R_{23})$ でなく、

v) 前記化学式 1 で、 $f1 = 0$ 、 $f2 = 1$ 、 $f3 = 1$ 、 $f4 = 0$ 、 $g1 = 1$ 、及び $g2 = 1$ であり、 X_{11} が $N - [(L_{11})_{a11} - (R_{11})_{b11}]$ である場合、 X_{21} は、 $C(R_{22})(R_{23})$ でなく、

vi) 前記化学式 1 で、 $f1 = 0$ 、 $f2 = 1$ 、 $f3 = 1$ 、 $f4 = 0$ 、 $g1 = 1$ 、及び $g2 = 1$ であり、 X_{11} が S である場合、 X_{21} は、 $N - [(L_{21})_{a21} - (R_{21})_{b21}]$ でなく、

vii) 前記化学式 1 で、 $f1 = 0$ 、 $f2 = 1$ 、 $f3 = 1$ 、 $f4 = 0$ 、 $g1 = 1$ 、及び $g2 = 1$ であり、 X_{11} が $Si(R_{12})(R_{13})$ である場合、 X_{21} は、 $N - [(L_{21})_{a21} - (R_{21})_{b21}]$ でなく、

viii) 前記化学式 1 で、 $f1 = 0$ 、 $f2 = 1$ 、 $f3 = 0$ 、 $f4 = 1$ 、 $g1 = 1$ 、及び $g2 = 1$ であり、 X_{11} が $N - [(L_{11})_{a11} - (R_{11})_{b11}]$ である場合、 X_{21} は、 $C(R_{22})(R_{23})$ でなく、

ix) 前記化学式 1 で、 $f1 = 0$ 、 $f2 = 1$ 、 $f3 = 1$ 、 $f4 = 0$ 、 $g1 = 1$ 、及び $g2 = 1$ であり、 X_{11} が S である場合、 X_{21} は、 $N - [(L_{21})_{a21} - (R_{21})_{b21}]$ でなく、

x) 前記化学式 1 で、 $f1 = 0$ 、 $f2 = 1$ 、 $f3 = 1$ 、 $f4 = 0$ 、 $g1 = 1$ 、及び $g2 = 1$ であり、 X_{11} が $Si(R_{12})(R_{13})$ である場合、 X_{21} は、 $N - [(L_{21})_{a21} - (R_{21})_{b21}]$ でなく、

xi) 前記化学式 1 で、 $f1 = 0$ 、 $f2 = 1$ 、 $f3 = 0$ 、 $f4 = 1$ 、 $g1 = 1$ 、及び $g2 = 1$ であり、 X_{11} が $N - [(L_{11})_{a11} - (R_{11})_{b11}]$ である場合、 X_{21} は、 $C(R_{22})(R_{23})$ でなく、

$L_1 \sim L_3$ 、 L_{11} 、及び L_{21} は、互いに独立して、置換若しくは非置換の $C_3 - C_{10}$ シクロアルキレン基、置換若しくは非置換の $C_1 - C_{10}$ ヘテロシクロアルキレン基、置換若しくは非置換の $C_3 - C_{10}$ シクロアルケニレン基、置換若しくは非置換の C_1

50

—C₁₀ヘテロシクロアルケニレン基、置換若しくは非置換のC₆—C₆₀アリーレン基、置換若しくは非置換のC₁—C₆₀ヘテロアリーレン基、置換若しくは非置換の二価非芳香族縮合多環基、及び置換若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、

a 1～a 3、a 1 1、及びa 2 1は、互いに独立して、0～5の整数のうちから選択され、

R₁～R₇、R_{1 1}～R_{1 3}、及びR_{2 1}～R_{2 3}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、アミジノ基、ヒドラジン基、ヒドラゾン基、カルボン酸基又はその塩、スルホン酸基又はその塩、リン酸基又はその塩、置換若しくは非置換のC₁—C₆₀アルキル基、置換若しくは非置換のC₂—C₆₀アルケニル基、置換若しくは非置換のC₂—C₆₀アルキニル基、置換若しくは非置換のC₁—C₆₀アルコキシ基、置換若しくは非置換のC₃—C₁₀シクロアルキル基、置換若しくは非置換のC₁—C₁₀ヘテロシクロアルキル基、置換若しくは非置換のC₃—C₁₀シクロアルケニル基、置換若しくは非置換のC₁—C₁₀ヘテロシクロアルケニル基、置換若しくは非置換のC₆—C₆₀アリール基、置換若しくは非置換のC₆—C₆₀アリールオキシ基、置換若しくは非置換のC₆—C₆₀アリールチオ基、置換若しくは非置換のC₁—C₆₀ヘテロアリール基、置換若しくは非置換の一価非芳香族縮合多環基、置換若しくは非置換の一価非芳香族ヘテロ縮合多環基、—N(Q₁)(Q₂)、—Si(Q₃)(Q₄)(Q₅)、及び—B(Q₆)(Q₇)のうちから選択され、

b 1～b 3、b 1 1、及びb 2 1は、互いに独立して、1～5の整数のうちから選択され、

c 1は、1～4の整数のうちから選択され、

前記置換されたC₃—C₁₀シクロアルキレン基、置換されたC₁—C₁₀ヘテロシクロアルキレン基、置換されたC₃—C₁₀シクロアルケニレン基、置換されたC₁—C₁₀ヘテロシクロアルケニレン基、置換されたC₆—C₆₀アリーレン基、置換されたC₁—C₆₀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C₁—C₆₀アルキル基、置換されたC₂—C₆₀アルケニル基、置換されたC₂—C₆₀アルキニル基、置換されたC₁—C₆₀アルコキシ基、置換されたC₃—C₁₀シクロアルキル基、置換されたC₁—C₁₀ヘテロシクロアルキル基、置換されたC₃—C₁₀シクロアルケニル基、置換されたC₁—C₁₀ヘテロシクロアルケニル基、置換されたC₆—C₆₀アリール基、置換されたC₆—C₆₀アリールオキシ基、置換されたC₆—C₆₀アリールチオ基、置換されたC₁—C₆₀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の少なくとも一つは、

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、アミジノ基、ヒドラジン基、ヒドラゾン基、カルボン酸基又はその塩、スルホン酸基又はその塩、リン酸基又はその塩、C₁—C₆₀アルキル基、C₂—C₆₀アルケニル基、C₂—C₆₀アルキニル基、及びC₁—C₆₀アルコキシ基；

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、アミジノ基、ヒドラジン基、ヒドラゾン基、カルボン酸基又はその塩、スルホン酸基又はその塩、リン酸基又はその塩、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、C₆—C₆₀アリールオキシ基、C₆—C₆₀アリールチオ基、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、—N(Q_{1 1})(Q_{1 2})、—Si(Q_{1 3})(Q_{1 4})(Q_{1 5})、及び—B(Q_{1 6})(Q_{1 7})のうちの少なくとも一つで置換された、C₁—C₆₀アルキル基、C₂—C₆₀アルケニル基、C₂—C₆₀アルキニル基、及び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

10

20

30

40

50

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、カルボン酸基又はその塩、スルホン酸基又はその塩、リン酸基又はその塩、 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、 $-N(Q_{21})(Q_{22})$ 、 $-Si(Q_{23})(Q_{24})(Q_{25})$ 、及び $-B(Q_{26})(Q_{27})$ のうちの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

$-N(Q_{31})(Q_{32})$ 、 $-Si(Q_{33})(Q_{34})(Q_{35})$ 、及び $-B(Q_{36})(Q_{37})$ ；のうちから選択され、

前記 $Q_1 \sim Q_7$ 、 $Q_{11} \sim Q_{17}$ 、 $Q_{21} \sim Q_{27}$ 、及び $Q_{31} \sim Q_{37}$ 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、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、カルボン酸基又はその塩、スルホン酸基又はその塩、リン酸基又はその塩、 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、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る。

【請求項2】

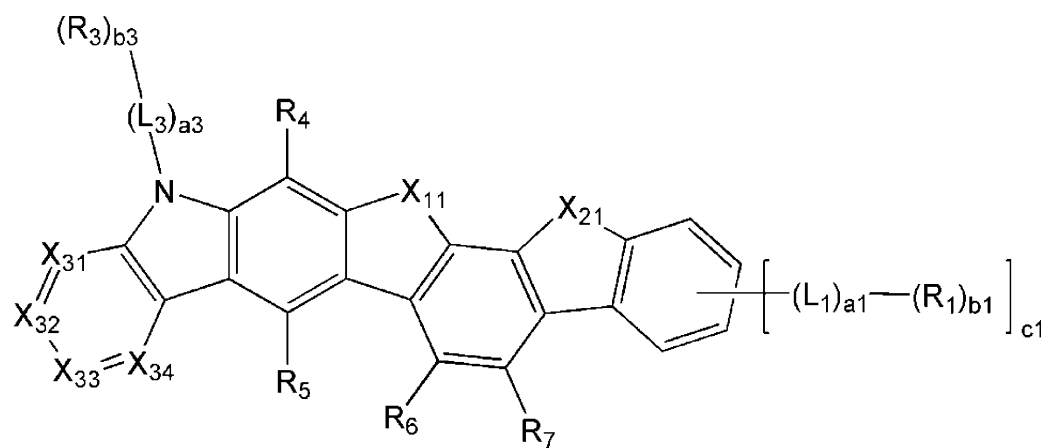
下記化学式1-1～1-12のうちのいずれか一つで示されることを特徴とする請求項1に記載の縮合環化合物。

10

20

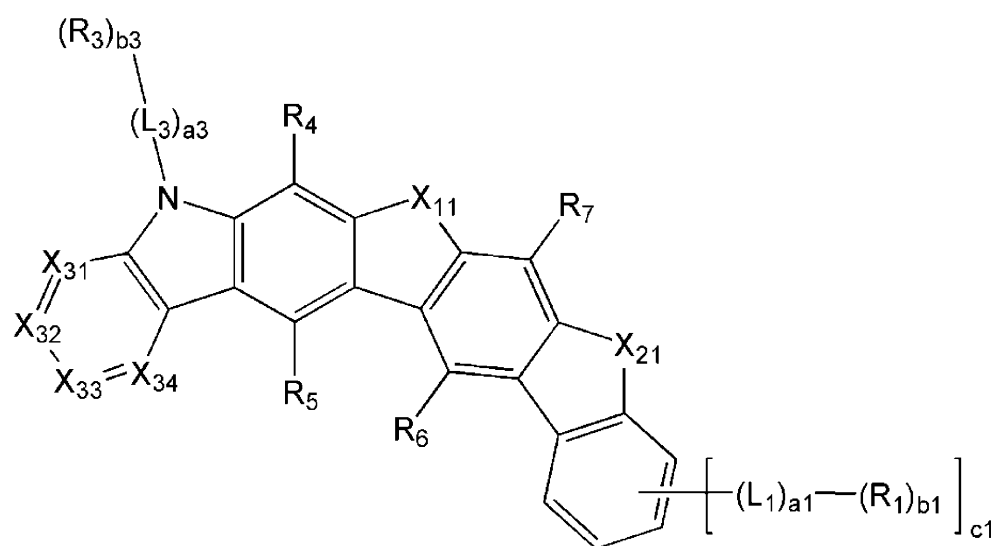
30

【化(1-1) - (1-3)】



10

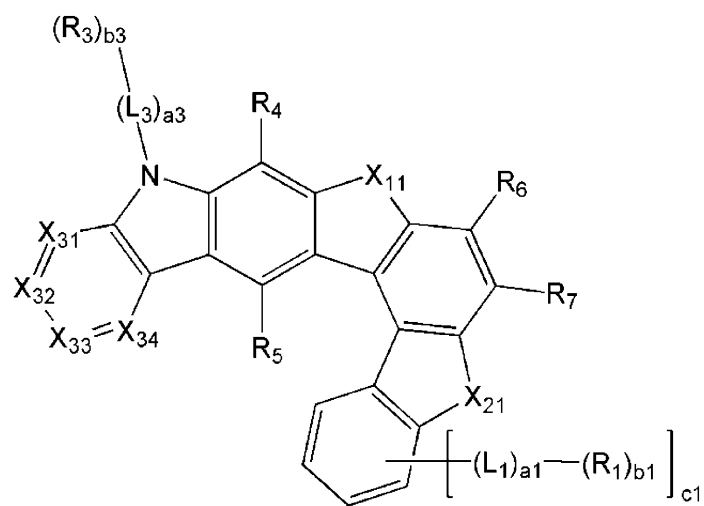
〔化1-1〕



20

30

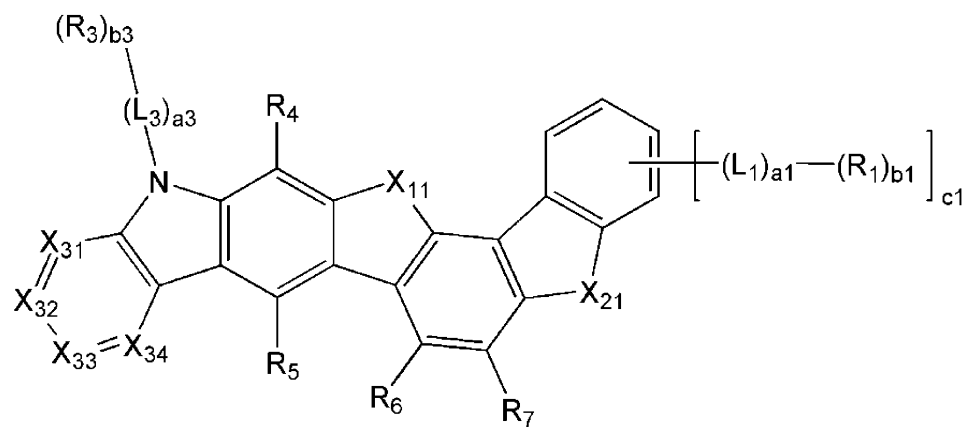
〔化1-2〕



40

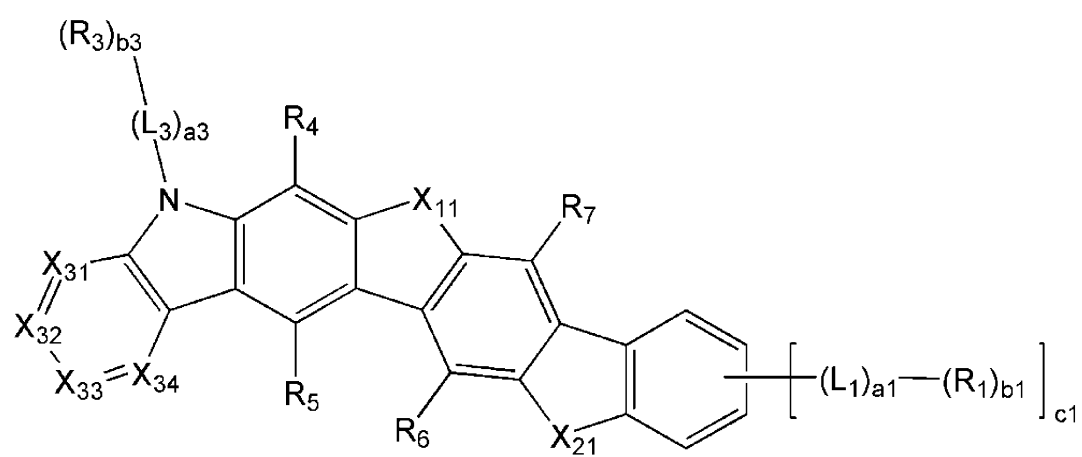
〔化1-3〕

【化(1-4) - (1-6)】



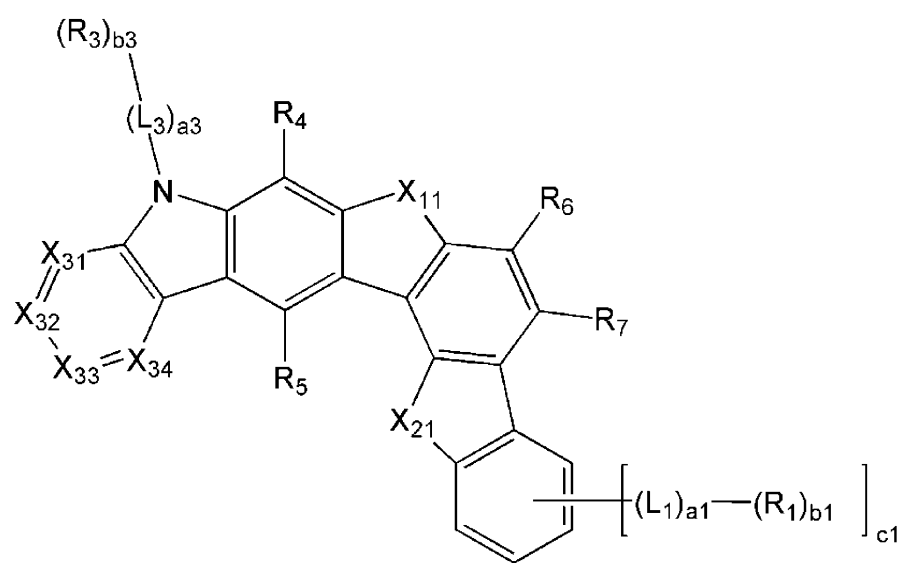
10

〔化1-4〕



20

〔化1-5〕

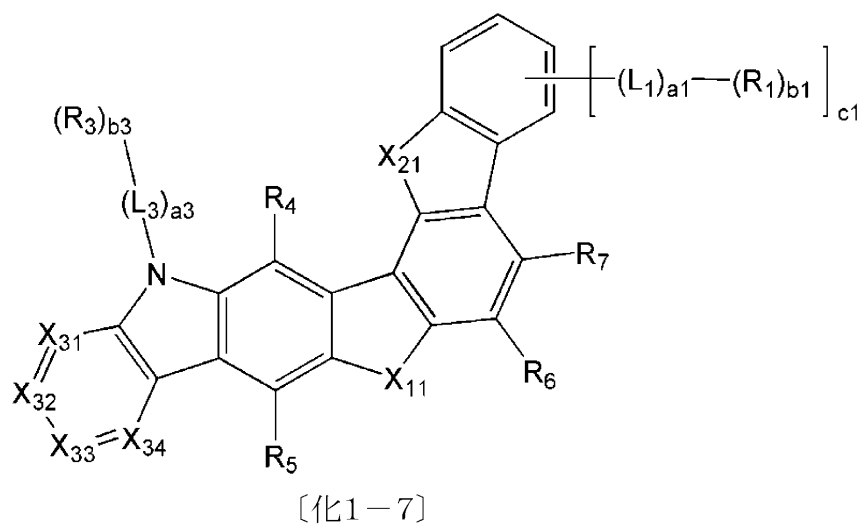


30

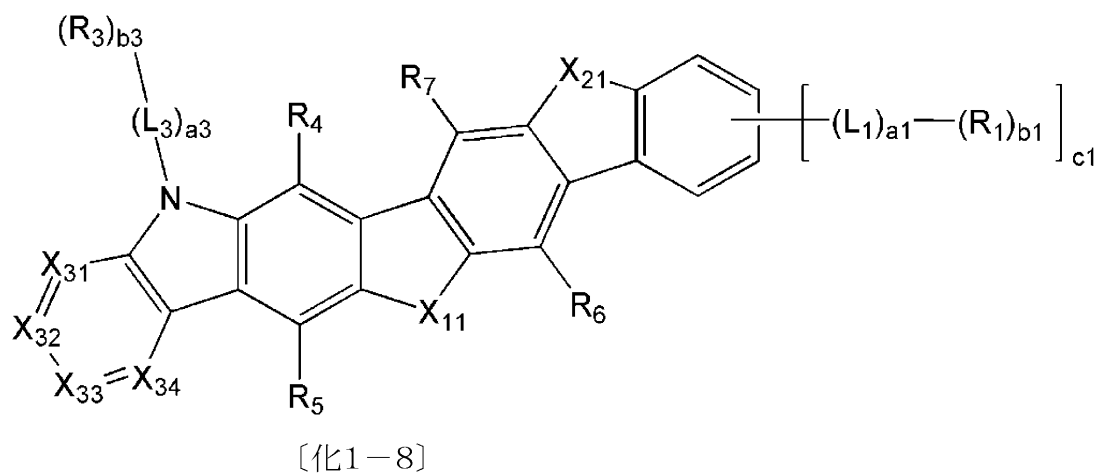
〔化1-6〕

40

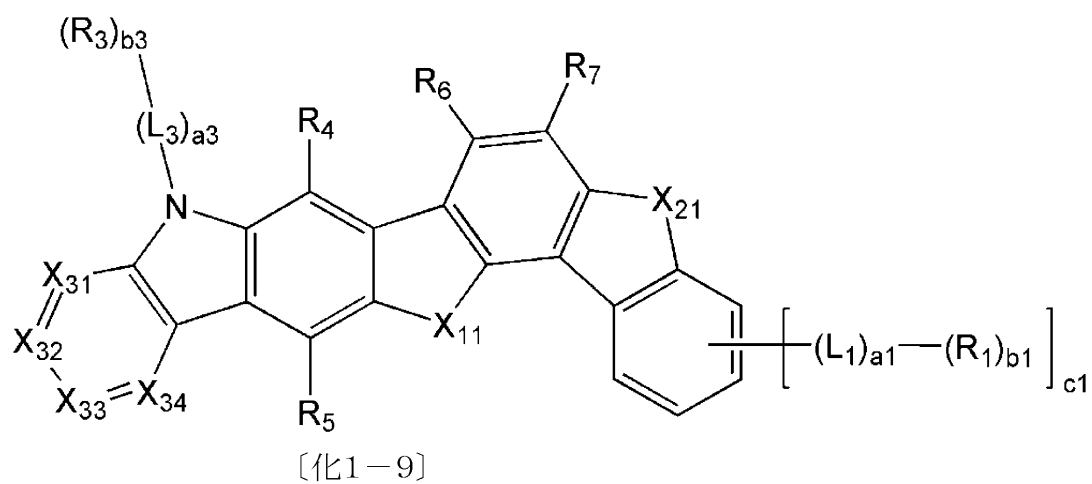
【化(1-7) - (1-9)】



10



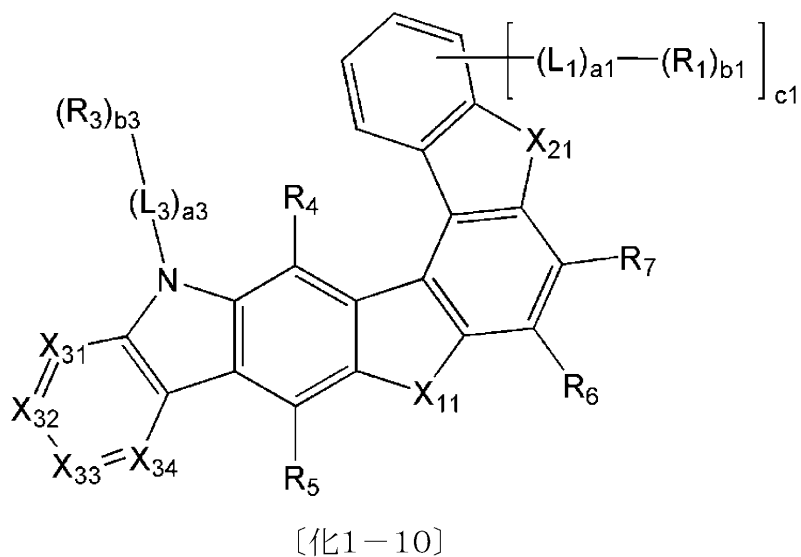
20



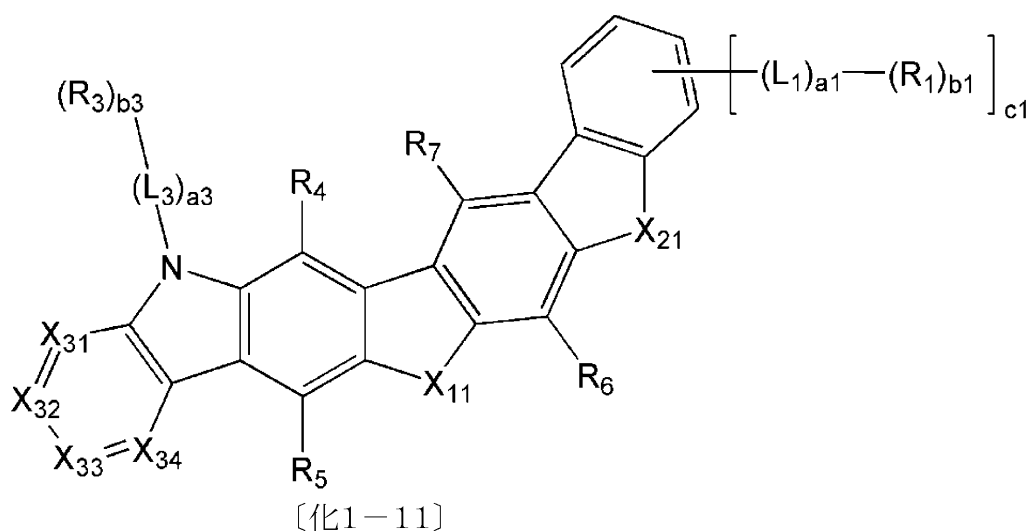
30

40

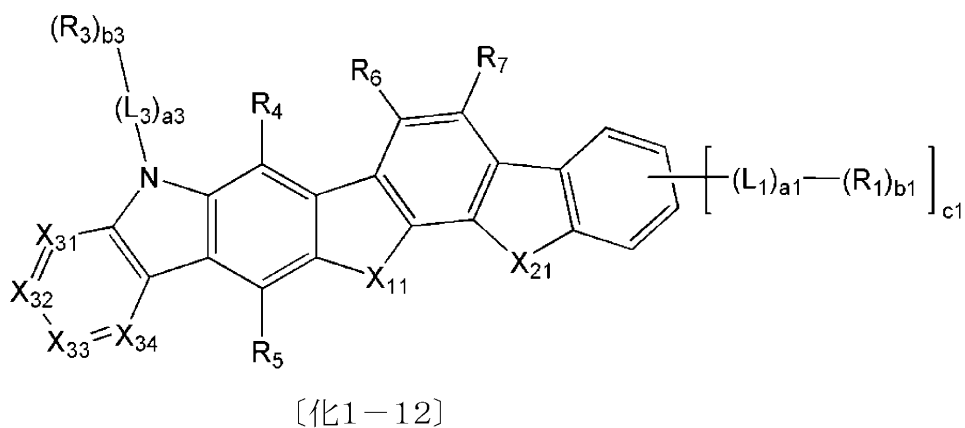
【化(1-10) - (1-12)】



10



20



30

40

前記化学式1-1~1-12で、

X_{11} は、 $N-[(L_{11})_{a11}-(R_{11})_{b11}]$ 、 S 、 O 、 $S(=O)$ 、 $S(=O)_2$ 、 $C(=O)$ 、 $C(R_{12})(R_{13})$ 、 $Si(R_{12})(R_{13})$ 、 $P(R_2)$ 、又は $P(=O)(R_{12})$ であり、

X_{21} は、 $N-[(L_{21})_{a21}-(R_{21})_{b21}]$ 、 S 、 O 、 $S(=O)$ 、 $S(=O)_2$ 、 $C(=O)$ 、 $C(R_{22})(R_{23})$ 、 $Si(R_{22})(R_{23})$ 、 $P(R_2)$

50

$_2$)、又は $P (=O) (R_{22})$ であり、

$X_{31} \sim X_{34}$ は、互いに独立して、 N 又は $C - [(L_2)_{a2} - (R_2)_{b2}]$ であり、

i) 前記化学式 1-2 で、 X_{11} が $C (R_{12}) (R_{13})$ である場合、 X_{21} は、 $N - [(L_{21})_{a21} - (R_{21})_{b21}]$ でなく、ii) 前記化学式 1-2 で、 X_{11} が $N - [(L_{11})_{a11} - (R_{11})_{b11}]$ である場合、 X_{21} は、 $N - [(L_{21})_{a21} - (R_{21})_{b21}]$ でなく且つ $C (R_{22}) (R_{23})$ でなく、iii) 前記化学式 1-4 で、 X_{11} が $C (R_{12}) (R_{13})$ である場合、 X_{21} は、 $N - [(L_{21})_{a21} - (R_{21})_{b21}]$ でなく、iv) 前記化学式 1-8 で、 X_{11} が $C (R_{12}) (R_{13})$ である場合、 X_{21} は、 $N - [(L_{21})_{a21} - (R_{21})_{b21}]$ でなく且つ $C (R_{22}) (R_{23})$ でなく、v) 前記化学式 1-8 で、 X_{11} が $N - [(L_{11})_{a11} - (R_{11})_{b11}]$ である場合、 X_{21} は、 $C (R_{22}) (R_{23})$ でなく、vi) 前記化学式 1-8 で、 X_{11} が S である場合、 X_{21} は、 $N - [(L_{21})_{a21} - (R_{21})_{b21}]$ でなく、vii) 前記化学式 1-8 で、 X_{11} が $Si (R_{12}) (R_{13})$ である場合、 X_{21} は、 $N - [(L_{21})_{a21} - (R_{21})_{b21}]$ でなく、viii) 前記化学式 1-11 で、 X_{11} が $N - [(L_{11})_{a11} - (R_{11})_{b11}]$ である場合、 X_{21} は、 $C (R_{22}) (R_{23})$ でなく、

$L_1 \sim L_3$ 、 L_{11} 、及び L_{21} は、互いに独立して、置換若しくは非置換の $C_3 - C_{10}$ シクロアルキレン基、置換若しくは非置換の $C_1 - C_{10}$ ヘテロシクロアルキレン基、置換若しくは非置換の $C_3 - C_{10}$ シクロアルケニレン基、置換若しくは非置換の $C_1 - C_{10}$ ヘテロシクロアルケニレン基、置換若しくは非置換の $C_6 - C_{60}$ アリーレン基、置換若しくは非置換の $C_1 - C_{60}$ ヘテロアリーレン基、置換若しくは非置換の二価非芳香族縮合多環基、及び置換若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、

$a_1 \sim a_3$ 、 a_{11} 、及び a_{21} は、互いに独立して、0～5の整数のうちから選択され、

$R_1 \sim R_7$ 、 $R_{11} \sim R_{13}$ 、及び $R_{21} \sim R_{23}$ 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、アミジノ基、ヒドラジン基、ヒドラゾン基、カルボン酸基又はその塩、スルホン酸基又はその塩、リン酸基又はその塩、置換若しくは非置換の $C_1 - C_{60}$ アルキル基、置換若しくは非置換の $C_2 - C_{60}$ アルケニル基、置換若しくは非置換の $C_2 - C_{60}$ アルキニル基、置換若しくは非置換の $C_1 - C_{60}$ アルコキシ基、置換若しくは非置換の $C_3 - C_{10}$ シクロアルキル基、置換若しくは非置換の $C_1 - C_{10}$ ヘテロシクロアルキル基、置換若しくは非置換の $C_3 - C_{10}$ シクロアルケニル基、置換若しくは非置換の $C_1 - C_{10}$ ヘテロシクロアルケニル基、置換若しくは非置換の $C_6 - C_{60}$ アリール基、置換若しくは非置換の $C_6 - C_{60}$ アリールオキシ基、置換若しくは非置換の $C_6 - C_{60}$ アリールチオ基、置換若しくは非置換の $C_1 - C_{60}$ ヘテロアリール基、置換若しくは非置換の一価非芳香族縮合多環基、置換若しくは非置換の一価非芳香族ヘテロ縮合多環基、 $-N (Q_1) (Q_2)$ 、 $-Si (Q_3) (Q_4) (Q_5)$ 、及び $-B (Q_6) (Q_7)$ のうちから選択され、

$b_1 \sim b_3$ 、 b_{11} 、及び b_{21} は、互いに独立して、1～5の整数のうちから選択され、

c_1 は、1～4の整数のうちから選択され、

前記置換された $C_3 - C_{10}$ 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

10

20

30

40

50

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の少なくとも一つは、

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、アミジノ基、ヒドラジン基、ヒドラゾン基、カルボン酸基又はその塩、スルホン酸基又はその塩、リン酸基又はその塩、 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、カルボン酸基又はその塩、スルホン酸基又はその塩、リン酸基又はその塩、 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、 $-N(Q_{11})(Q_{12})$ 、 $-Si(Q_{13})(Q_{14})(Q_{15})$ 、及び $-B(Q_{16})(Q_{17})$ のうちの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、又は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、カルボン酸基又はその塩、スルホン酸基又はその塩、リン酸基又はその塩、 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、 $-N(Q_{21})(Q_{22})$ 、 $-Si(Q_{23})(Q_{24})(Q_{25})$ 、及び $-B(Q_{26})(Q_{27})$ のうちの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

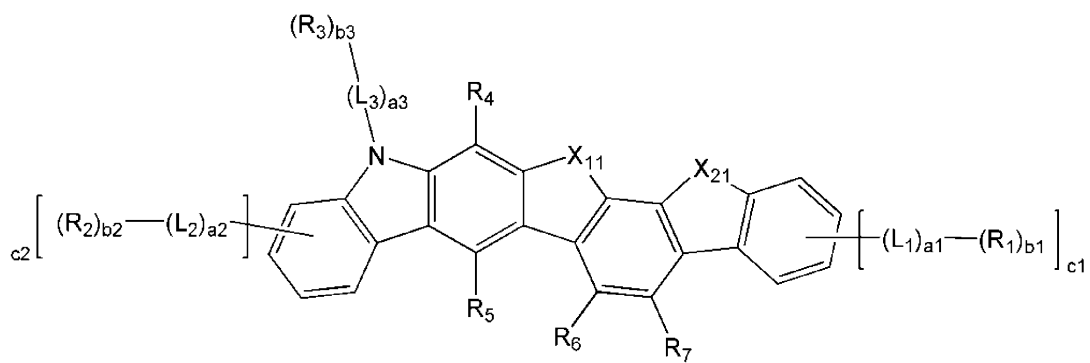
$-N(Q_{31})(Q_{32})$ 、 $-Si(Q_{33})(Q_{34})(Q_{35})$ 、及び $-B(Q_{36})(Q_{37})$ ；のうちから選択され、

前記 $Q_1 \sim Q_7$ 、 $Q_{11} \sim Q_{17}$ 、 $Q_{21} \sim Q_{27}$ 、及び $Q_{31} \sim Q_{37}$ 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、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、カルボン酸基又はその塩、スルホン酸基又はその塩、リン酸基又はその塩、 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、又は一価非芳香族ヘテロ縮合多環基のうちから選択される。

【請求項 3】

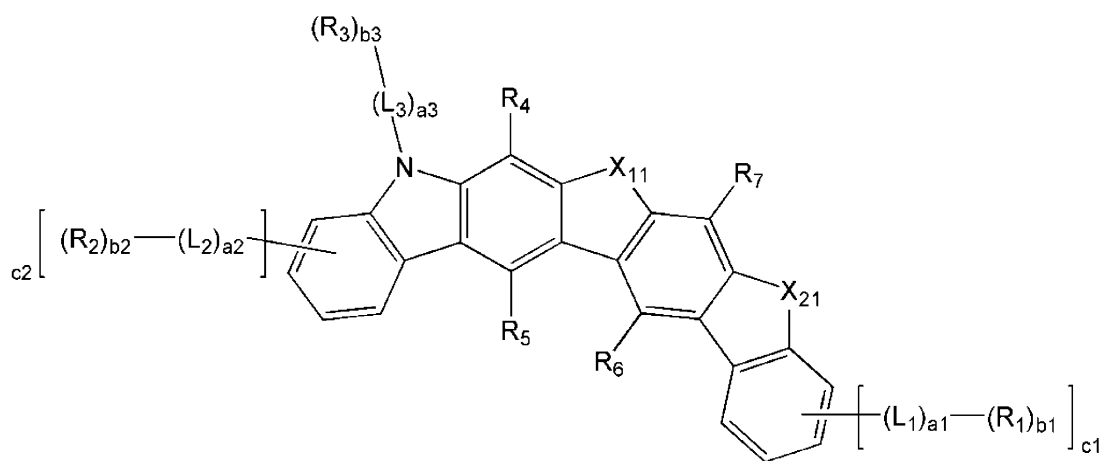
下記化学式 1 A-1 $\sim$ 1 A-12 のうちのいずれか一つで示されることを特徴とする請求項 2 に記載の縮合環化合物。

【化 (1 A - 1) - (1 A - 3) 】



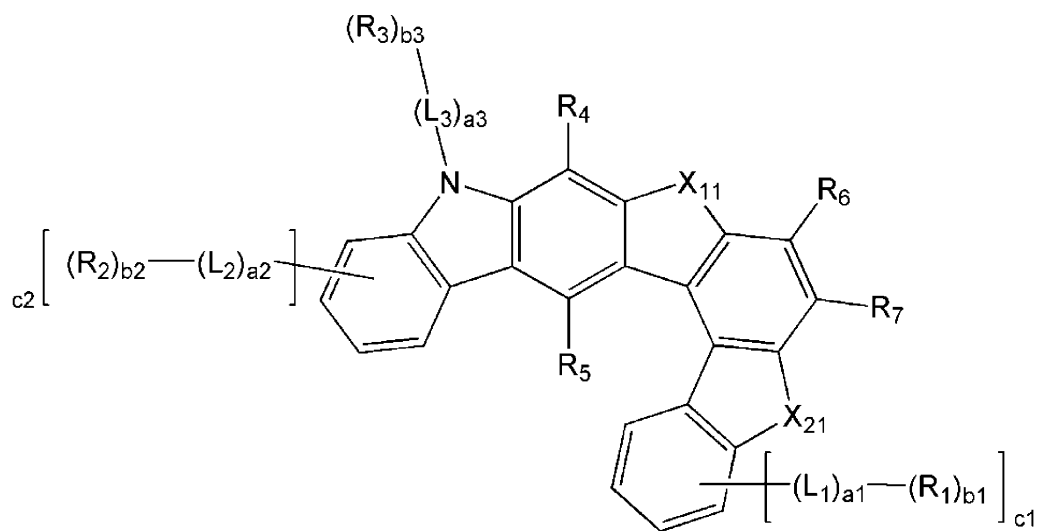
10

〔化1A-1〕



20

〔化1A-2〕

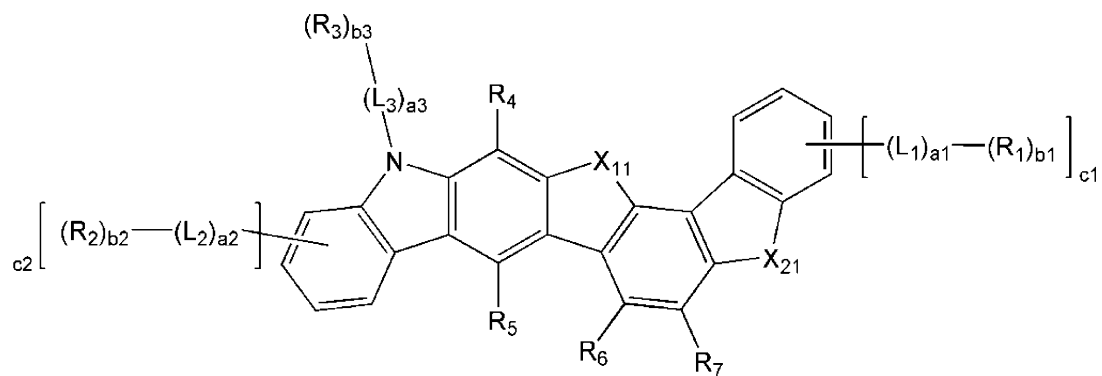


30

〔化1A-3〕

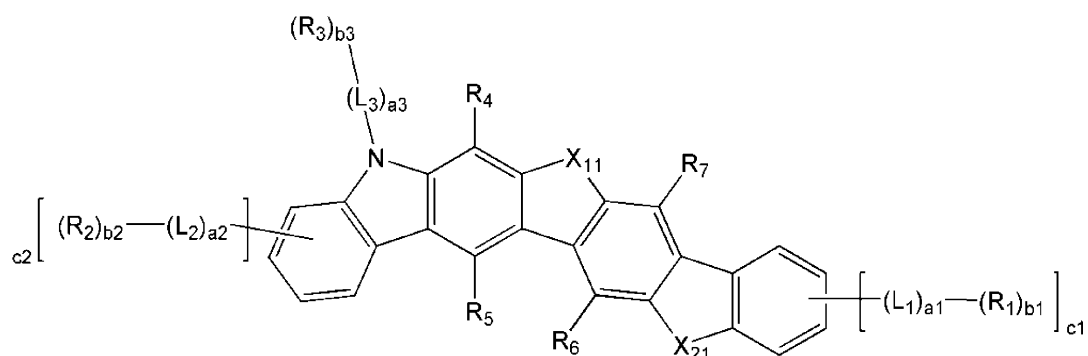
40

【化 (1 A - 4) - (1 A - 6) 】



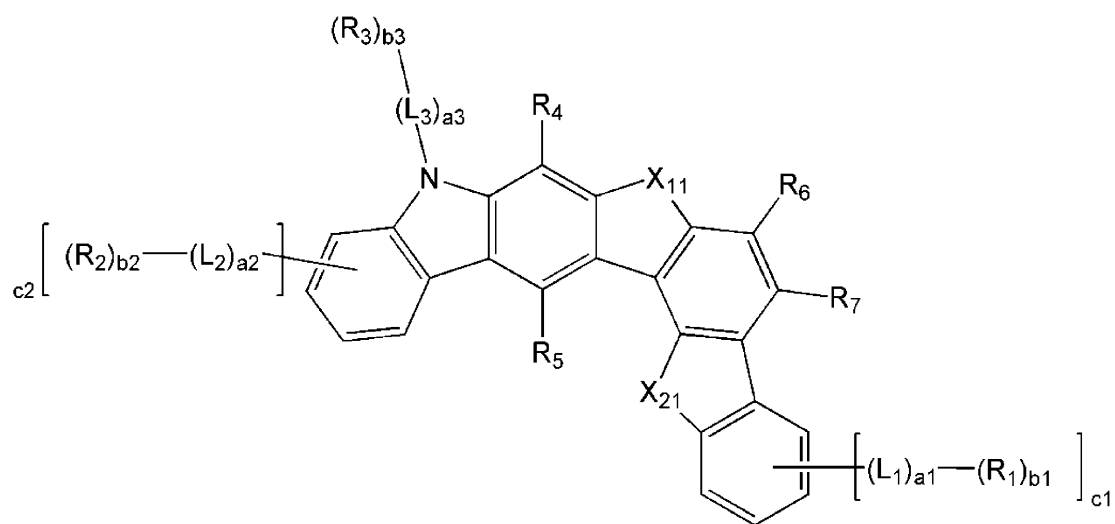
10

〔化1A-4〕



20

〔化1A-5〕

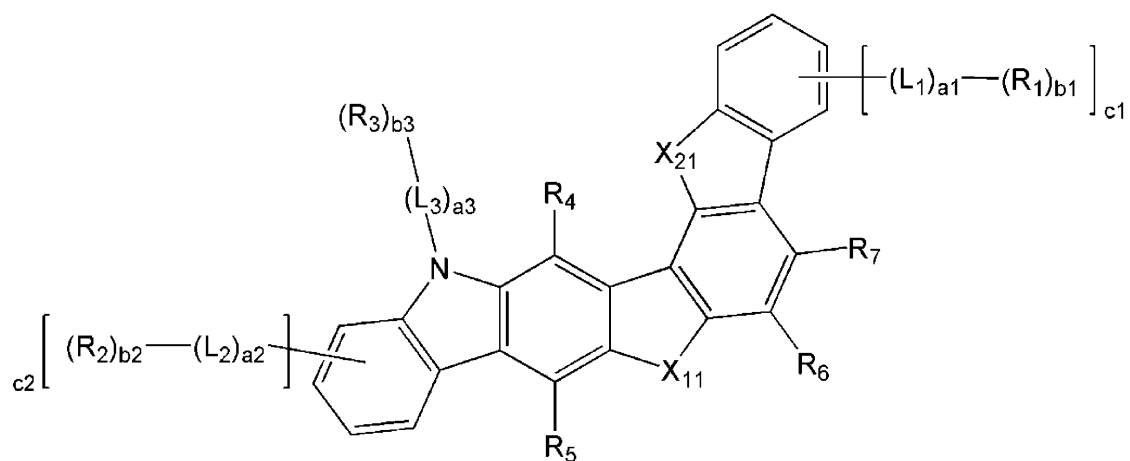


30

〔化1A-6〕

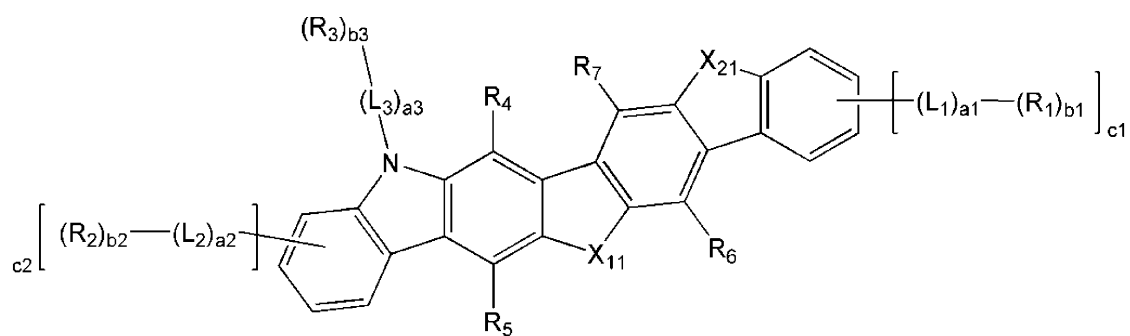
40

【化(1A-7) - (1A-9)】



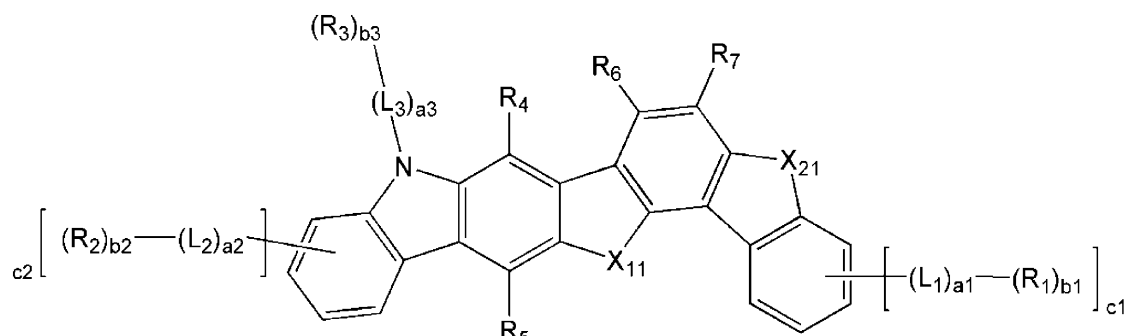
〔化1A-7〕

10



〔化1A-8〕

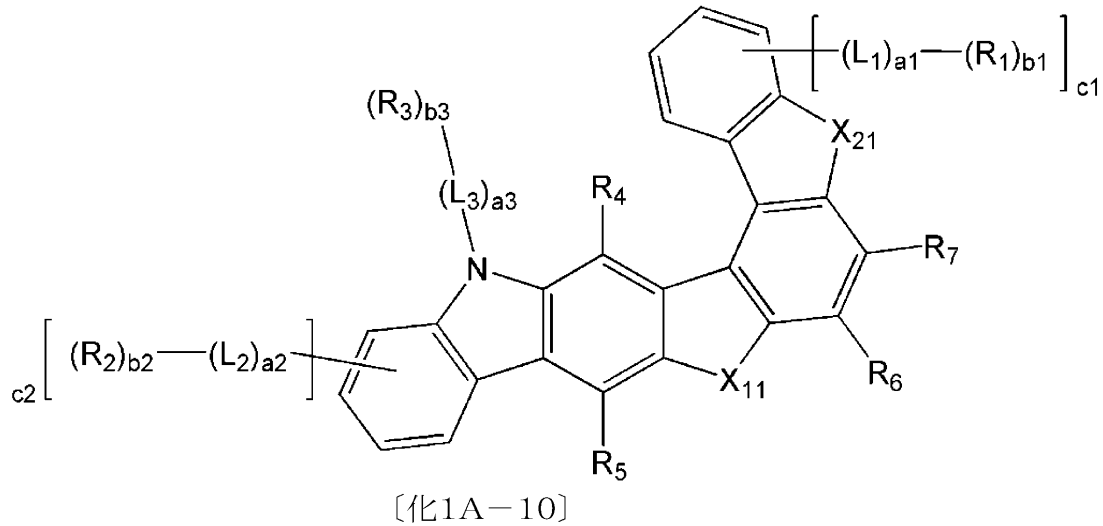
20



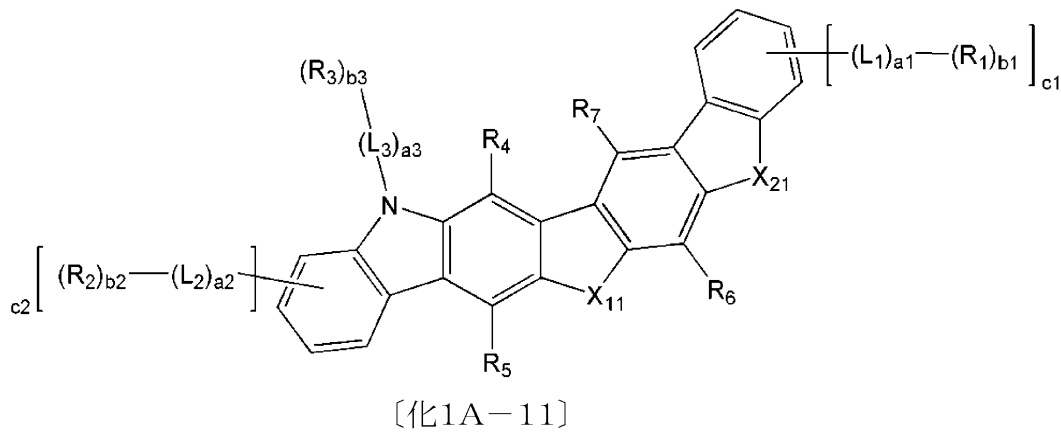
〔化1A-9〕

30

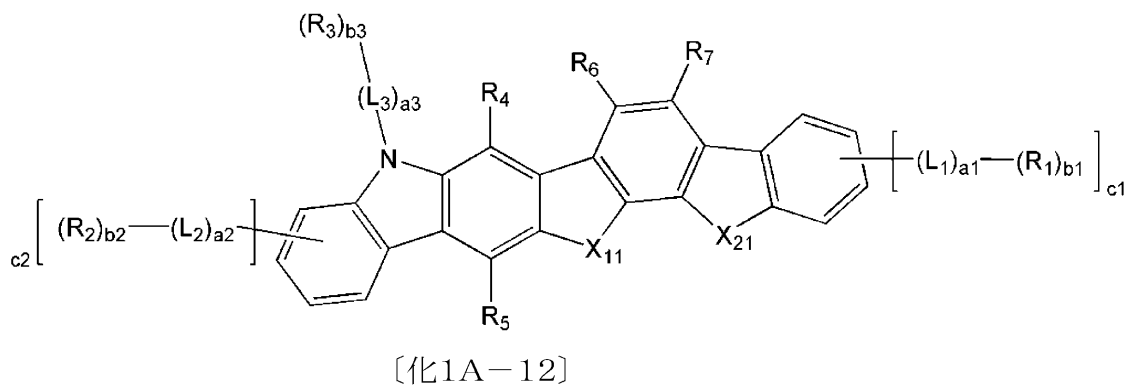
【化(1A-10) - (1A-12)】



10



20



30

前記化学式1A-1～1A-12で、 X_{11} 、 X_{21} 、 $L_1 \sim L_3$ 、 $a_1 \sim a_3$ 、 $R_1 \sim R_7$ 及び c_1 に係る説明は、前述の箇所と同一であり、 c_2 は、1～4の整数のうちから選択される。

40

【請求項4】

前記縮合環化合物が、前記化学式1-2で示される場合、下記化学式1A-2-1～1A-2-22のうちのいずれか一つで示され、前記縮合環化合物が、前記化学式1-4で示される場合、下記化学式1A-4-1～1A-4-24のうちのいずれか一つで示され、前記縮合環化合物が、前記化学式1-8で示される場合、下記化学式1A-8-1～1A-8-20のうちのいずれか一つで示され、前記縮合環化合物が、前記化学式1-11で示される場合、下記化学式1A-11-1～1A-11-24のうちのいずれか一つで示されることを特徴とする請求項2に記載の縮合環化合物。

50

【表 1】

化学式番号	当該化学式のバックボーン	当該化学式のバックボーンのうち X_{11}	当該化学式のバックボーンのうち X_{12}
1A-2-1	1A-2	$C(R_{12})(R_{13})$	$C(R_{22})(R_{23})$
1A-2-2	1A-2	$C(R_{12})(R_{13})$	O
1A-2-3	1A-2	$C(R_{12})(R_{13})$	S
1A-2-4	1A-2	$C(R_{12})(R_{13})$	$Si(R_{22})(R_{23})$
1A-2-5	1A-2	$N-[(L_{11})_{a11}-(R_{11})_{b11}]$	O
1A-2-6	1A-2	$N-[(L_{11})_{a11}-(R_{11})_{b11}]$	S
1A-2-7	1A-2		$Si(R_{22})(R_{23})$
1A-2-8	1A-2	O	$C(R_{22})(R_{23})$
1A-2-9	1A-2	O	$N-[(L_{21})_{a21}-(R_{21})_{b21}]$
1A-2-10	1A-2	O	O
1A-2-11	1A-2	O	S
1A-2-12	1A-2	O	$Si(R_{22})(R_{23})$
1A-2-13	1A-2	S	$C(R_{22})(R_{23})$
1A-2-14	1A-2	S	$N-[(L_{21})_{a21}-(R_{21})_{b21}]$
1A-2-15	1A-2	S	O
1A-2-16	1A-2	S	S
1A-2-17	1A-2	S	$Si(R_{22})(R_{23})$
1A-2-18	1A-2	$Si(R_{12})(R_{13})$	$C(R_{22})(R_{23})$
1A-2-19	1A-2	$Si(R_{12})(R_{13})$	$N-[(L_{21})_{a21}-(R_{21})_{b21}]$
1A-2-20	1A-2	$Si(R_{12})(R_{13})$	O
1A-2-21	1A-2	$Si(R_{12})(R_{13})$	S
1A-2-22	1A-2	$Si(R_{12})(R_{13})$	$Si(R_{22})(R_{23})$
1A-4-1	1A-4	$C(R_{12})(R_{13})$	$C(R_{22})(R_{23})$
1A-4-2	1A-4	$C(R_{12})(R_{13})$	O
1A-4-3	1A-4	$C(R_{12})(R_{13})$	S
1A-4-4	1A-4	$C(R_{12})(R_{13})$	$Si(R_{22})(R_{23})$
1A-4-5	1A-4	$N-[(L_{11})_{a11}-(R_{11})_{b11}]$	$C(R_{22})(R_{23})$
1A-4-6	1A-4	$N-[(L_{11})_{a11}-(R_{11})_{b11}]$	$N-[(L_{21})_{a21}-(R_{21})_{b21}]$
1A-4-7	1A-4	$N-[(L_{11})_{a11}-(R_{11})_{b11}]$	O
1A-4-8	1A-4	$N-[(L_{11})_{a11}-(R_{11})_{b11}]$	S
1A-4-9	1A-4	$N-[(L_{11})_{a11}-(R_{11})_{b11}]$	$Si(R_{22})(R_{23})$
1A-4-10	1A-4	O	$C(R_{22})(R_{23})$
1A-4-11	1A-4	O	$N-[(L_{21})_{a21}-(R_{21})_{b21}]$
1A-4-12	1A-4	O	O
1A-4-13	1A-4	O	S
1A-4-14	1A-4	O	$Si(R_{22})(R_{23})$
1A-4-15	1A-4	S	$C(R_{22})(R_{23})$
1A-4-16	1A-4	S	$N-[(L_{21})_{a21}-(R_{21})_{b21}]$
1A-4-17	1A-4	S	O
1A-4-18	1A-4	S	S
1A-4-19	1A-4	S	$Si(R_{22})(R_{23})$
1A-4-20	1A-4	$Si(R_{12})(R_{13})$	$C(R_{22})(R_{23})$
1A-4-21	1A-4	$Si(R_{12})(R_{13})$	$N-[(L_{21})_{a21}-(R_{21})_{b21}]$
1A-4-22	1A-4	$Si(R_{12})(R_{13})$	O

10

20

30

40

1A-4-23	1A-4	$\text{Si}(\text{R}_{12})(\text{R}_{13})$	S	10
1A-4-24	1A-4	$\text{Si}(\text{R}_{12})(\text{R}_{13})$	$\text{Si}(\text{R}_{22})(\text{R}_{23})$	
1A-8-1	1A-8	$\text{C}(\text{R}_{12})(\text{R}_{13})$	O	
1A-8-2	1A-8	$\text{C}(\text{R}_{12})(\text{R}_{13})$	S	
1A-8-3	1A-8	$\text{C}(\text{R}_{12})(\text{R}_{13})$	$\text{Si}(\text{R}_{22})(\text{R}_{23})$	
1A-8-4	1A-8	$\text{N}-[(\text{L}_{11})_{a11}-(\text{R}_{11})_{b11}]$	$\text{N}-[(\text{L}_{21})_{a21}-(\text{R}_{21})_{b21}]$	
1A-8-5	1A-8	$\text{N}-[(\text{L}_{11})_{a11}-(\text{R}_{11})_{b11}]$	O	
1A-8-6	1A-8	$\text{N}-[(\text{L}_{11})_{a11}-(\text{R}_{11})_{b11}]$	S	
1A-8-7	1A-8	$\text{N}-[(\text{L}_{11})_{a11}-(\text{R}_{11})_{b11}]$	$\text{Si}(\text{R}_{22})(\text{R}_{23})$	
1A-8-8	1A-8	O	$\text{C}(\text{R}_{22})(\text{R}_{23})$	20
1A-8-9	1A-8	O	$\text{N}-[(\text{L}_{21})_{a21}-(\text{R}_{21})_{b21}]$	
1A-8-10	1A-8	O	O	
1A-8-11	1A-8	O	S	
1A-8-12	1A-8	O	$\text{Si}(\text{R}_{22})(\text{R}_{23})$	
1A-8-13	1A-8	S	$\text{C}(\text{R}_{22})(\text{R}_{23})$	
1A-8-14	1A-8	S	O	
1A-8-15	1A-8	S	S	
1A-8-16	1A-8	S	$\text{Si}(\text{R}_{22})(\text{R}_{23})$	
1A-8-17	1A-8	$\text{Si}(\text{R}_{12})(\text{R}_{13})$	$\text{C}(\text{R}_{22})(\text{R}_{23})$	
1A-8-18	1A-8	$\text{Si}(\text{R}_{12})(\text{R}_{13})$	O	30
1A-8-19	1A-8	$\text{Si}(\text{R}_{12})(\text{R}_{13})$	S	
1A-8-20	1A-8	$\text{Si}(\text{R}_{12})(\text{R}_{13})$	$\text{Si}(\text{R}_{22})(\text{R}_{23})$	
1A-11-1	1A-11	$\text{C}(\text{R}_{12})(\text{R}_{13})$	$\text{C}(\text{R}_{22})(\text{R}_{23})$	
1A-11-2	1A-11	$\text{C}(\text{R}_{12})(\text{R}_{13})$	$\text{N}-[(\text{L}_{21})_{a21}-(\text{R}_{21})_{b21}]$	
1A-11-3	1A-11	$\text{C}(\text{R}_{12})(\text{R}_{13})$	O	
1A-11-4	1A-11	$\text{C}(\text{R}_{12})(\text{R}_{13})$	S	
1A-11-5	1A-11	$\text{C}(\text{R}_{12})(\text{R}_{13})$	$\text{Si}(\text{R}_{22})(\text{R}_{23})$	
1A-11-6	1A-11	$\text{N}-[(\text{L}_{11})_{a11}-(\text{R}_{11})_{b11}]$	$\text{N}-[(\text{L}_{21})_{a21}-(\text{R}_{21})_{b21}]$	
1A-11-7	1A-11	$\text{N}-[(\text{L}_{11})_{a11}-(\text{R}_{11})_{b11}]$	O	
1A-11-8	1A-11	$\text{N}-[(\text{L}_{11})_{a11}-(\text{R}_{11})_{b11}]$	S	40
1A-11-9	1A-11	$\text{N}-[(\text{L}_{11})_{a11}-(\text{R}_{11})_{b11}]$	$\text{Si}(\text{R}_{22})(\text{R}_{23})$	
1A-11-10	1A-11	O	$\text{C}(\text{R}_{22})(\text{R}_{23})$	
1A-11-11	1A-11	O	$\text{N}-[(\text{L}_{21})_{a21}-(\text{R}_{21})_{b21}]$	
1A-11-12	1A-11	O	O	
1A-11-13	1A-11	O	S	
1A-11-14	1A-11	O	$\text{Si}(\text{R}_{22})(\text{R}_{23})$	
1A-11-15	1A-11	S	$\text{C}(\text{R}_{22})(\text{R}_{23})$	
1A-11-16	1A-11	S	$\text{N}-[(\text{L}_{21})_{a21}-(\text{R}_{21})_{b21}]$	
1A-11-17	1A-11	S	O	
1A-11-18	1A-11	S	S	50
1A-11-19	1A-11	S	$\text{Si}(\text{R}_{22})(\text{R}_{23})$	
1A-11-20	1A-11	$\text{Si}(\text{R}_{12})(\text{R}_{13})$	$\text{C}(\text{R}_{22})(\text{R}_{23})$	
1A-11-21	1A-11	$\text{Si}(\text{R}_{12})(\text{R}_{13})$	$\text{N}-[(\text{L}_{21})_{a21}-(\text{R}_{21})_{b21}]$	
1A-11-22	1A-11	$\text{Si}(\text{R}_{12})(\text{R}_{13})$	O	
1A-11-23	1A-11	$\text{Si}(\text{R}_{12})(\text{R}_{13})$	S	
1A-11-24	1A-11	$\text{Si}(\text{R}_{12})(\text{R}_{13})$	$\text{Si}(\text{R}_{22})(\text{R}_{23})$	

前記化学式 1-1 ~ 1-7、及び化学式 1-9 ~ 1-12 のうちのいずれか一つで示され、

前記化学式 1-1 ~ 1-7、及び化学式 1-9 ~ 1-12 で、

X_{11} 及び X_{12} は、互いに独立して、O 又は S であるか、

X_{11} は、O 又は S であり、 X_{12} は、 $N - [(L_{21})_{a21} - (R_{21})_{b21}]$ 又は $C (R_{22}) (R_{23})$ であるか、

X_{11} は、 $N - [(L_{11})_{a11} - (R_{11})_{b11}]$ 又は $C (R_{12}) (R_{13})$ であり、 X_{12} は、O 又は S であるか、

X_{11} は、 $C (R_{12}) (R_{13})$ であり、 X_{12} は、 $C (R_{22}) (R_{23})$ であることを特徴とする請求項 2 に記載の縮合環化合物。

10

【請求項 6】

前記化学式 1-1、1-3 ~ 1-7、及び化学式 1-9 ~ 1-11 のうちのいずれか一つで示され、

前記化学式 1-1、1-3 ~ 1-7、及び化学式 1-9 ~ 1-11 で、 X_{11} は、 $N - [(L_{11})_{a11} - (R_{11})_{b11}]$ であり、 X_{12} は、 $N - [(L_{21})_{a21} - (R_{21})_{b21}]$ であることを特徴とする請求項 2 に記載の縮合環化合物。

【請求項 7】

前記化学式 1-2 で示され、

前記化学式 1-2 で、 X_{11} は、O 又は S であり、 X_{12} は、O、S 又は $N - [(L_{21})_{a21} - (R_{21})_{b21}]$ であることを特徴とする請求項 2 に記載の縮合環化合物。

20

【請求項 8】

前記 $L_1 \sim L_3$ 、 L_{11} 、及び L_{21} 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、ピロリレン基、イミダゾリレン基、ピラゾリレン基、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、イソインドリレン基、インドリレン基、インダゾリレン基、プリニレン基、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、カルバゾリレン基、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、ベンゾオキサゾリレン基、ベンゾイミダゾリレン基、フラニレン基、ベンゾフラニレン基、チオフェニレン基、ベンゾチオフェニレン基、チアゾリレン基、イソチアゾリレン基、ベンゾチアゾリレン基、イソキサゾリレン基、オキサゾリレン基、トリアゾリレン基、テトラゾリレン基、オキサジアゾリレン基、トリアジニレン基、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、イミダゾピリミジニレン基、及びイミダゾピリジニレン基；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、カルボン酸基又はその塩、スルホン酸基又はその塩、リン酸基又はその塩、 $C_1 - C_{20}$ アルキル基、 $C_1 - C_{20}$ アルコキシ基、 $C_6 - C_{20}$ アリール基、 $C_1 - C_{20}$ 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環基、及び $-Si (Q_{33}) (Q_{34}) (Q_{35})$ のうちの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

50

基、ヘキサセニレン基、ピロリレン基、イミダゾリレン基、ピラゾリレン基、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、イソインドリレン基、インドリレン基、インダゾリレン基、プリニレン基、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、カルバゾリレン基、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、ベンゾオキサゾリレン基、ベンゾイミダゾリレン基、フラニレン基、ベンゾフラニレン基、チオフェニレン基、ベンゾチオフェニレン基、チアゾリレン基、イソチアゾリレン基、ベンゾチアゾリレン基、イソキサゾリレン基、オキサゾリレン基、トリアゾリレン基、テトラゾリレン基、オキサジアゾリレン基、トリアジニレン基、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、イミダゾピリミジニレン基、及びイミダゾピリジニレン基；のうちから選択され、

10

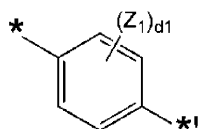
Q₃₃～Q₃₅は、互いに独立して、水素、C₁～C₂₀アルキル基、C₁～C₂₀アルコキシ基、フェニル基、ナフチル基、アントラセニル基、ピレニル基、フェナントレニル基、フルオレニル基、カルバゾリル基、ベンゾカルバゾリル基、ジベンゾカルバゾリル基、ピリジニル基、ピリミジニル基、ピラジニル基、ピリダジニル基、トリアジニル基、キノリニル基、イソキノリニル基、フタラジニル基、キノキサリニル基、シンノリニル基、及びキナゾリニル基のうちから選択されることを特徴とする請求項1乃至7のいずれか1項に記載の縮合環化合物。

【請求項9】

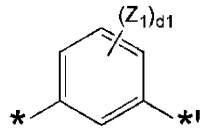
20

前記L₁～L₃、L₁₁、及びL₂₁は、互いに独立して、下記化学式2-1～2-34で示される群のうちから選択されることを特徴とする請求項1乃至7のいずれか1項に記載の縮合環化合物。

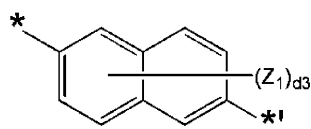
【化(2-1) - (2-19)】



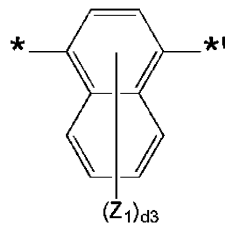
〔化2-1〕



〔化2-2〕

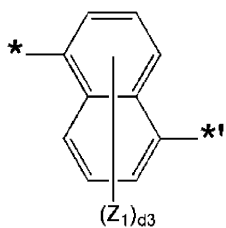


〔化2-3〕

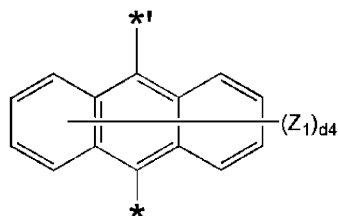


〔化2-4〕

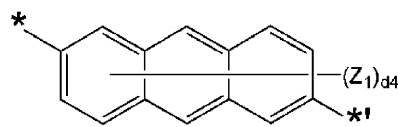
10



〔化2-5〕

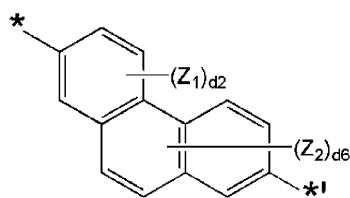


〔化2-6〕

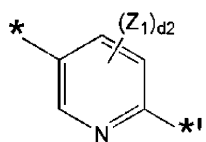


〔化2-7〕

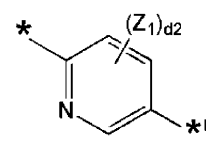
20



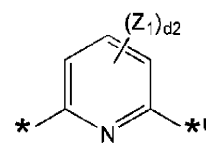
〔化2-8〕



〔化2-9〕

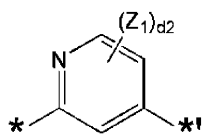


〔化2-10〕

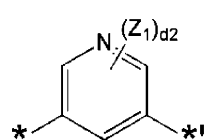


〔化2-11〕

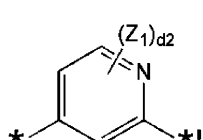
30



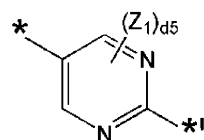
〔化2-12〕



〔化2-13〕

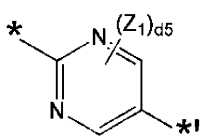


〔化2-14〕

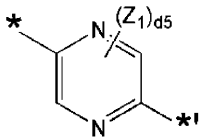


〔化2-15〕

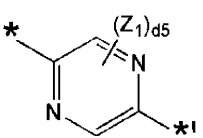
40



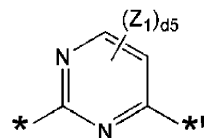
〔化2-16〕



〔化2-17〕

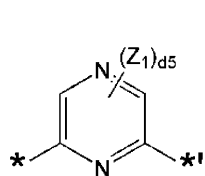


〔化2-18〕

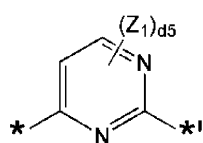


〔化2-19〕

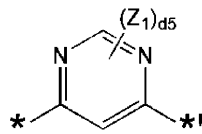
【化(2-20) - (2-34)】



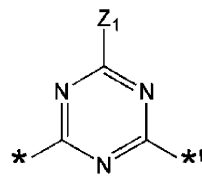
〔化2-20〕



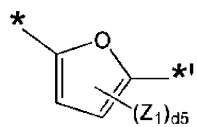
〔化2-21〕



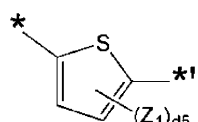
〔化2-22〕



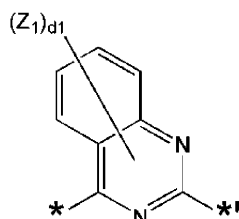
〔化2-23〕



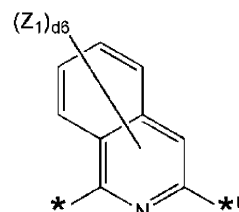
〔化2-24〕



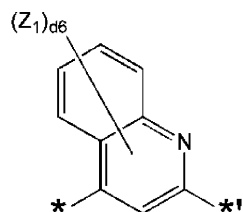
〔化2-25〕



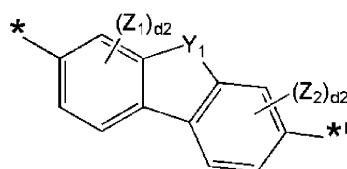
〔化2-26〕



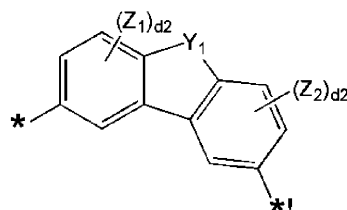
〔化2-27〕



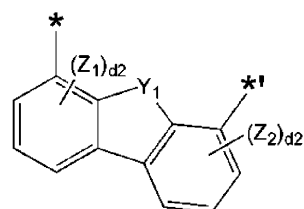
〔化2-28〕



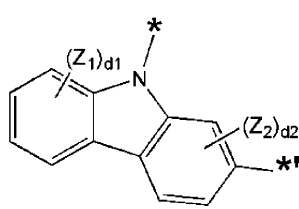
〔化2-29〕



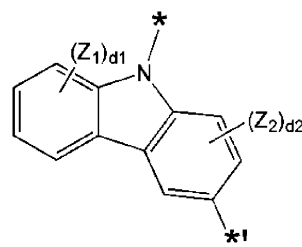
〔化2-30〕



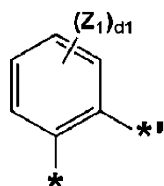
〔化2-31〕



〔化2-32〕



〔化2-33〕



〔化2-34〕

前記化学式 2-1 ~ 2-34 で、

Y_1 は、O、S、S(=O)、S(=O)₂、C(Z₃)(Z₄)、N(Z₅)、又は Si(Z₆)(Z₇) であり、

Z₁ ~ Z₇ 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、アミジノ基、ヒドラジン基、ヒドラゾン基、カルボン酸基又はその塩、スルホン酸基又はその塩、リン酸基又はその塩、C₁-C₂₀アルキル基、C₁-C₂₀アルコキシ基、フェニル基、ナフチル基、アントラセニル基、

トリフェニレニル基、ピレニル基、フェナントレニル基、フルオレニル基、クリセニル基、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、ジベンゾフラニル基、ジベンゾチオフェニル基、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、イソキノリニル基、キナゾリニル基、キノキサリニル基、ビフェニル基、及び $S_i(Q_{33})(Q_{34})(Q_{35})$ のうちから選択され、

前記 $Q_{33} \sim Q_{35}$ は、互いに独立して、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、ナフチル基、アントラセニル基、ピレニル基、フェナントレニル基、フルオレニル基、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、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、フタラジニル基、キノキサリニル基、シンノリニル基、及びキナゾリニル基のうちから選択され、

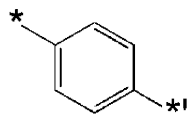
d_1 は、1～4の整数であり、 d_2 は、1～3の整数であり、 d_3 は、1～6の整数であり、 d_4 は、1～8の整数であり、 d_5 は、1又は2であり、 d_6 は、1～5の整数であり、

及び' は、それぞれ隣接する原子との結合サイトである。

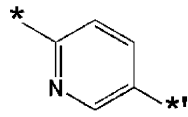
【請求項10】

前記 $L_1 \sim L_3$ 、 L_{11} 、及び L_{21} は、互いに独立して、下記化学式 3-1～3-21 のうちのいずれか1つであることを特徴とする請求項1乃至7のいずれか1項に記載の縮合環化合物。

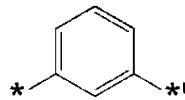
【化(3-1)-(3-21)】



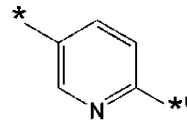
〔化3-1〕



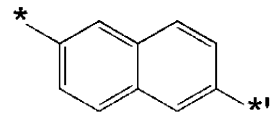
〔化3-2〕



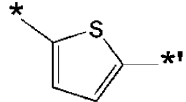
〔化3-3〕



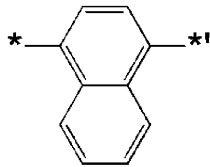
〔化3-4〕



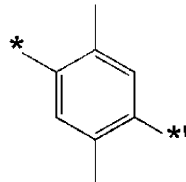
〔化3-5〕



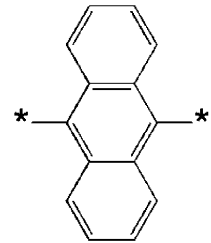
〔化3-6〕



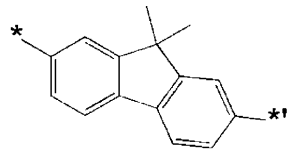
〔化3-7〕



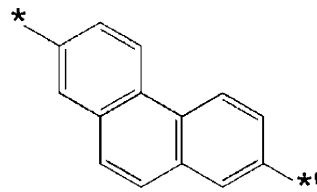
〔化3-8〕



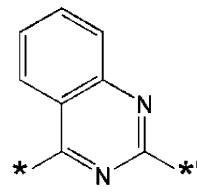
〔化3-9〕



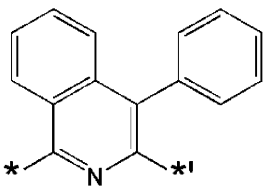
〔化3-10〕



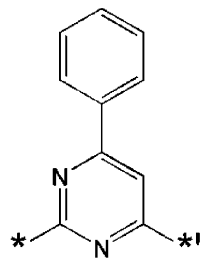
〔化3-11〕



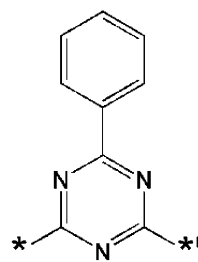
〔化3-12〕



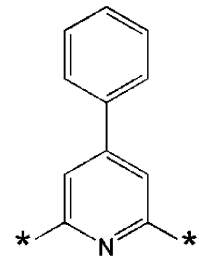
〔化3-13〕



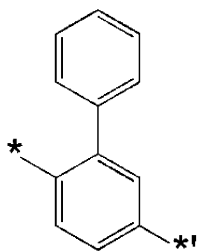
〔化3-14〕



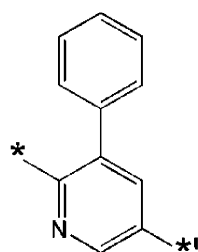
〔化3-15〕



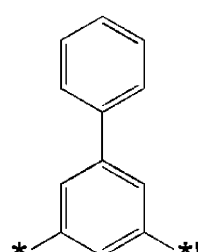
〔化3-16〕



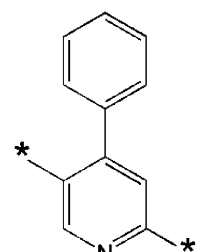
〔化3-17〕



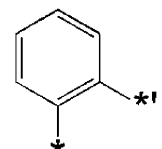
〔化3-18〕



〔化3-19〕



〔化3-20〕



〔化3-21〕

及び'は、それぞれ隣接する原子との結合サイトである。

【請求項11】

$R_1 \sim R_7$ 、 $R_{11} \sim R_{13}$ 、及び $R_{21} \sim R_{23}$ 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、アミジノ基、ヒドラジン基、ヒドラゾン基、カルボン酸基又はその塩、スルホン酸基又はその

10

20

30

40

50

塩、リン酸基又はその塩、置換若しくは非置換の $C_1 - C_{20}$ アルキル基、置換若しくは非置換の $C_1 - C_{20}$ アルコキシ基、置換若しくは非置換の $C_6 - C_{20}$ アリール基、置換若しくは非置換の $C_1 - C_{20}$ ヘテロアリール基、置換若しくは非置換の一価非芳香族縮合多環基、置換若しくは非置換の一価非芳香族ヘテロ縮合多環基、及び $-Si(Q_3)(Q_4)(Q_5)$ のうちから選択されることを特徴とする請求項 1 乃至 10 のいずれか 1 項に記載の縮合環化合物。

【請求項 12】

i) X_{11} が $N - [(L_{11})_{a11} - (R_{11})_{b11}]$ である場合、 R_3 及び R_{11} のうちの少なくとも一つ、ii) X_{12} が $N - [(L_{21})_{a11} - (R_{21})_{b11}]$ である場合、 R_3 及び R_{21} のうちの少なくとも一つ、及び iii) X_{11} が $N - [(L_{11})_{a11} - (R_{11})_{b11}]$ であり、 X_{12} が $N - [(L_{21})_{a11} - (R_{21})_{b11}]$ である場合、 R_3 、 R_{11} 、及び R_{21} のうちの少なくとも一つは、互いに独立して、置換若しくは非置換の $C_6 - C_{20}$ アリール基、置換若しくは非置換の $C_1 - C_{20}$ ヘテロアリール基、置換若しくは非置換の一価非芳香族縮合多環基、及び置換若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ことを特徴とする請求項 1 乃至 10 のいずれか 1 項に記載の縮合環化合物。

【請求項 13】

前記 R_3 は、少なくとも 1 つの窒素原子を環構成構成原子として含む、置換若しくは非置換の $C_1 - C_{30}$ ヘテロアリール基、及び置換若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ことを特徴とする請求項 1 乃至 10 のいずれか 1 項に記載の縮合環化合物。

【請求項 14】

$R_1 \sim R_7$ 、 $R_{11} \sim R_{13}$ 、及び $R_{21} \sim R_{23}$ 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、アミジノ基、ヒドラジン基、ヒドラゾン基、カルボン酸基又はその塩、スルホン酸基又はその塩、リン酸基又はその塩、 $C_1 - C_{20}$ アルキル基、及び $C_1 - C_{20}$ 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、アミジノ基、ヒドラジン基、ヒドラゾン基、カルボン酸基又はその塩、スルホン酸基又はその塩、及びリン酸基又はその塩のうちの少なくとも一つで置換された、 $C_1 - C_{20}$ アルキル基及び $C_1 - C_{20}$ アルコキシ基；

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、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、イソオキサゾリル基、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、イソインドリル基、インドリル基、インダゾリル基、プリニル基、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、カルバゾリル基、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、ベンゾフラニル基、ベンゾチオフェニル基、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、オキサジアゾリル基、トリアジニル基、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、イミダゾピリジニル基、及びイミダゾピリミジニル基；

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、アミジノ基、ヒドラジン基、ヒドラゾン基、カルボン酸基又はその塩、スルホン酸基

又はその塩、リン酸基又はその塩、 C_1-C_{20} アルキル基、 C_1-C_{20} アルコキシ基、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、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、イソオキサゾリル基、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、イソインドリル基、インドリル基、インダゾリル基、プリニル基、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、カルバゾリル基、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、ベンゾフラニル基、ベンゾチオフェニル基、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、オキサジアゾリル基、トリアジニル基、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、イミダゾピリジニル基、イミダゾピリミジニル基、ピフェニル基、及び $-Si(Q_3)_3(Q_4)(Q_5)$ のうちの少なくとも一つで置換された、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、スピローフルオレニル基、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、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、イソオキサゾリル基、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、イソインドリル基、インドリル基、インダゾリル基、プリニル基、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、カルバゾリル基、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、ベンゾフラニル基、ベンゾチオフェニル基、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、オキサジアゾリル基、トリアジニル基、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、イミダゾピリジニル基、及びイミダゾピリミジニル基；並びに

$-Si(Q_3)_3(Q_4)(Q_5)$ ；のうちから選択され、

前記 $Q_3 \sim Q_5$ 、及び $Q_{33} \sim Q_{35}$ は、互いに独立して、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、ナフチル基、アントラセニル基、ピレニル基、フェナントレニル基、フルオレニル基、クリセニル基、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、ジベンゾフラニル基、ジベンゾチオフェニル基、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、イソキノリニル基、キナゾリニル基、及びキノキサリニル基のうちから選択されることを特徴とする請求項1乃至10のいずれか1項に記載の縮合環化合物。

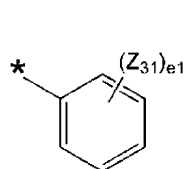
【請求項15】

$R_1 \sim R_7$ 、 $R_{11} \sim R_{13}$ 、及び $R_{21} \sim R_{23}$ は、互いに独立して、

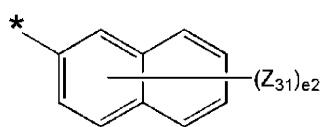
水素、重水素、 $-F$ 、 $-Cl$ 、 $-Br$ 、 $-I$ 、ヒドロキシ基、シアノ基、ニトロ基、アミノ基、アミジノ基、ヒドラジン基、ヒドラゾン基、カルボン酸基又はその塩、スルホン酸基又はその塩、リン酸基又はその塩、 C_1-C_{20} アルキル基、 C_1-C_{20} アルコキシ基、下記化学式4-1～4-31で示される群、及び $-Si(Q_3)_3(Q_4)(Q_5)$ のうちから選択され、

前記 $Q_3 \sim Q_5$ は、互いに独立して、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、ナフチル基、アントラセニル基、ピレニル基、フェナントレニル基、フルオレニル基、クリセニル基、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、ジベンゾフラニル基、ジベンゾチオフェニル基、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、イソキノリニル基、キナゾリニル基、及びキノキサリニル基のうちから選択されることを特徴とする請求項 1 乃至 10 のいずれか 1 項に記載の縮合環化合物。

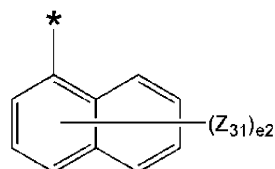
【化(4-1) - (4-23)】



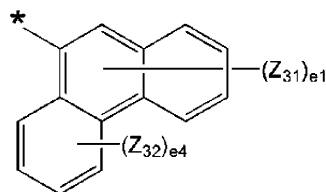
〔化4-1〕



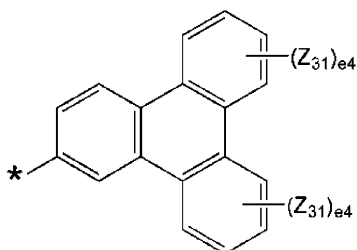
〔化4-2〕



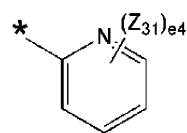
〔化4-3〕



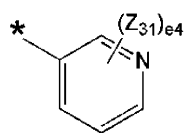
〔化4-4〕



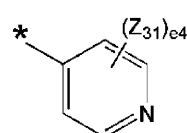
〔化4-5〕



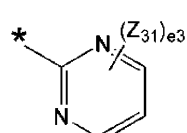
〔化4-6〕



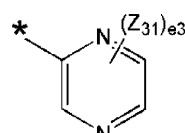
〔化4-7〕



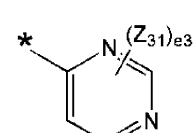
〔化4-8〕



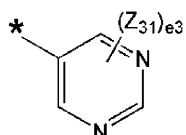
〔化4-9〕



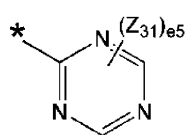
〔化4-10〕



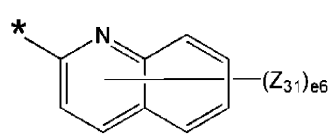
〔化4-11〕



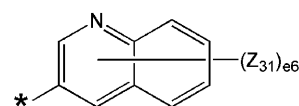
〔化4-12〕



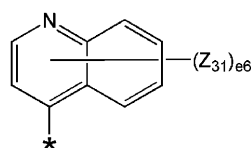
〔化4-13〕



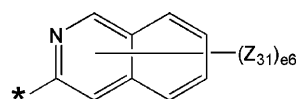
〔化4-14〕



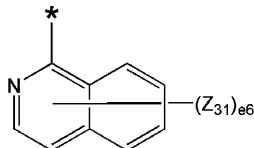
〔化4-15〕



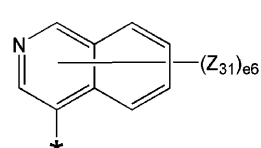
〔化4-16〕



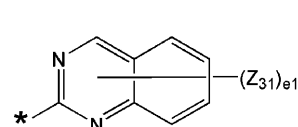
〔化4-17〕



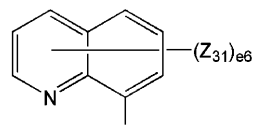
〔化4-18〕



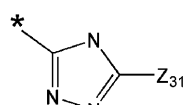
〔化4-19〕



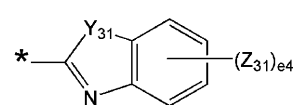
〔化4-20〕



〔化4-21〕



〔化4-22〕



〔化4-23〕

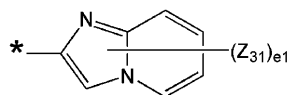
10

20

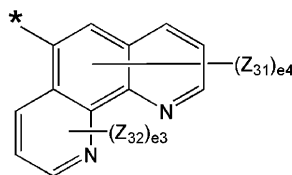
30

40

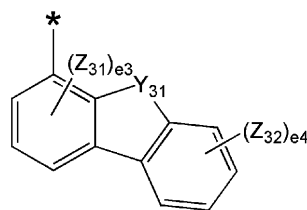
【化(4-24) - (4-31)】



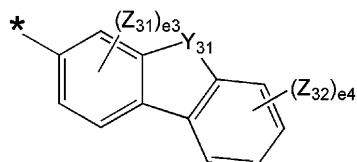
〔化4-24〕



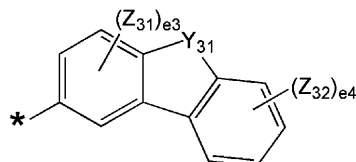
〔化4-25〕



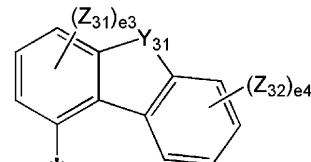
〔化4-26〕



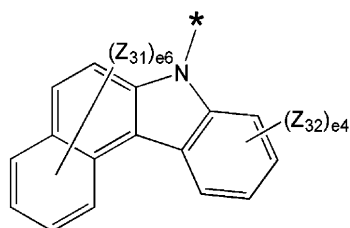
〔化4-27〕



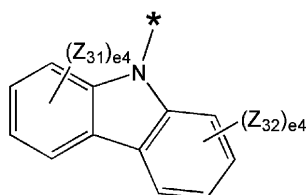
〔化4-28〕



〔化4-29〕



〔化4-30〕



〔化4-31〕

前記化学式 4-1 ~ 4-31 で、

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

$Z_{31} \sim Z_{37}$ 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、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、カルボン酸基又はその塩、スルホン酸基又はその塩、リン酸基又はその塩、 $C_1 \sim C_{20}$ アルキル基、 $C_1 \sim C_{20}$ アルコキシ基、フェニル基、ナフチル基、アントラセニル基、ピレニル基、フェナントレニル基、フルオレニル基、クリセニル基、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、ジベンゾフラニル基、ジベンゾチオフェニル基、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、イソキノリニル基、キナゾリニル基、キノキサリニル基、及び -Si(Q_{33})(Q_{34})(Q_{35}) のうちから選択され、

前記 $Q_{33} \sim Q_{35}$ は、互いに独立して、水素、 $C_1 \sim C_{20}$ アルキル基、 $C_1 \sim C_{20}$ アルコキシ基、フェニル基、ナフチル基、アントラセニル基、ピレニル基、フェナントレニル基、フルオレニル基、クリセニル基、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、ジベンゾフラニル基、ジベンゾチオフェニル基、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、イソキノリニル基、キナゾリニル基、及びキノキサリニル基のうちから選択され、

e_1 は、1 ~ 5 の整数であり、 e_2 は、1 ~ 7 の整数であり、 e_3 は、1 ~ 3 の整数であり、 e_4 は、1 ~ 4 の整数であり、 e_5 は、1 又は 2 であり、 e_6 は、1 ~ 6 の整数であり、* は、隣接する原子との結合サイトである。

【請求項 16】

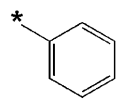
$R_1 \sim R_7$ 、 $R_{11} \sim R_{13}$ 、及び $R_{21} \sim R_{23}$ は、互いに独立して、

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

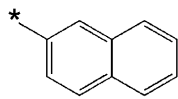
アミノ基、アミジノ基、ヒドラジン基、ヒドラゾン基、カルボン酸基又はその塩、スルホン酸基又はその塩、リン酸基又はその塩、 $C_1 - C_{20}$ アルキル基、 $C_1 - C_{20}$ アルコキシ基、下記化学式 5-1 ~ 5-55 で示される群、及び $-Si(Q_3)(Q_4)(Q_5)$ のうちから選択され、

前記 $Q_3 \sim Q_5$ は、互いに独立して、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、ナフチル基、アントラセニル基、ピレニル基、フェナントレニル基、フルオレニル基、クリセニル基、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、ジベンゾフラニル基、ジベンゾチオフェニル基、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、イソキノリニル基、キナゾリニル基、及びキノキサリニル基のうちから選択されることを特徴とする請求項 1 に記載の縮合環化合物

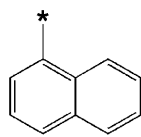
【化(5-1) - (5-22)】



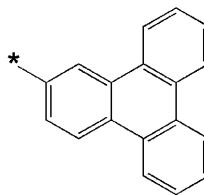
〔化5-1〕



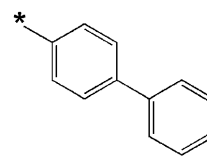
〔化5-2〕



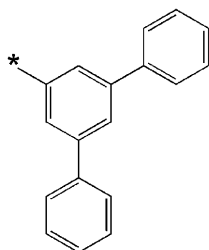
〔化5-3〕



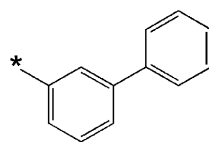
〔化5-4〕



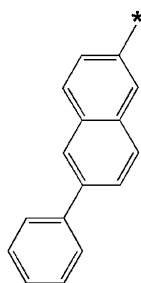
〔化5-5〕



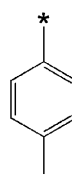
〔化5-6〕



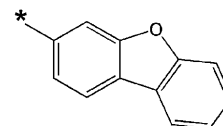
〔化5-7〕



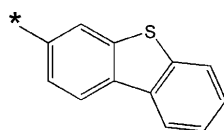
〔化5-8〕



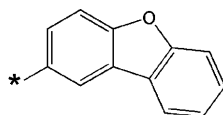
〔化5-9〕



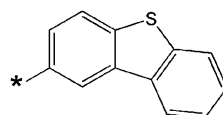
〔化5-10〕



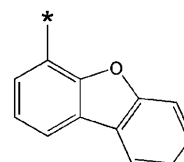
〔化5-11〕



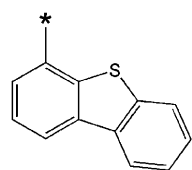
〔化5-12〕



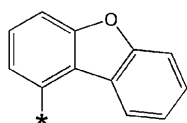
〔化5-13〕



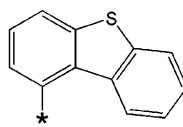
〔化5-14〕



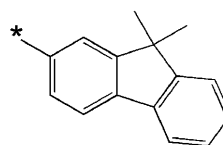
〔化5-15〕



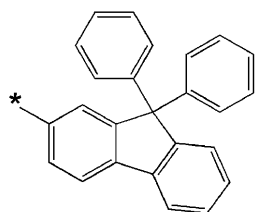
〔化5-16〕



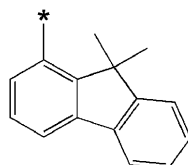
〔化5-17〕



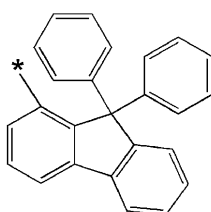
〔化5-18〕



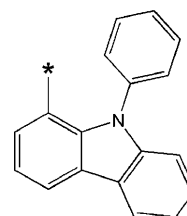
〔化5-19〕



〔化5-20〕



〔化5-21〕



〔化5-22〕

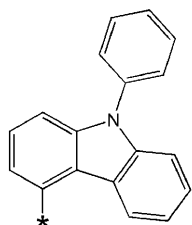
10

20

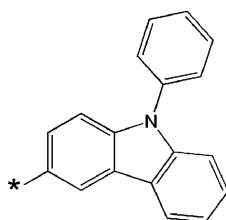
30

40

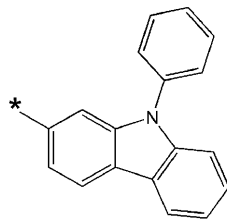
【化(5-23) - (5-45)】



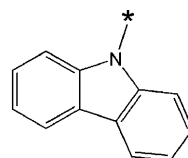
〔化5-23〕



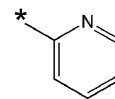
〔化5-24〕



〔化5-25〕

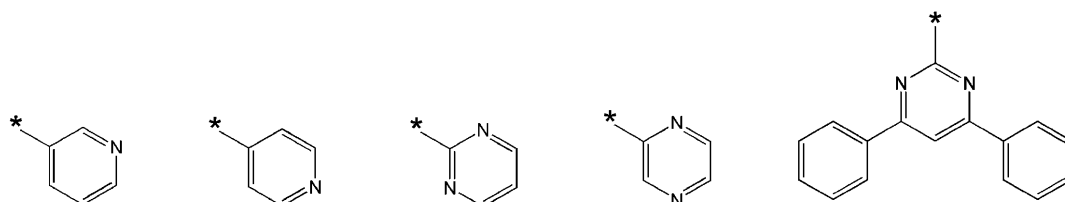


〔化5-26〕

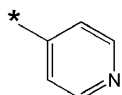


〔化5-27〕

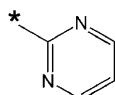
10



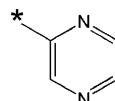
〔化5-28〕



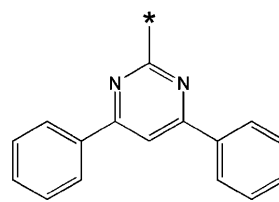
〔化5-29〕



〔化5-30〕

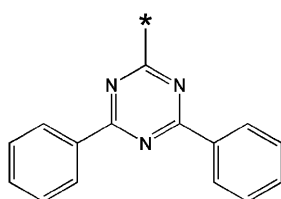


〔化5-31〕

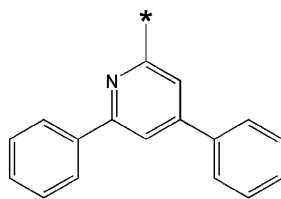


〔化5-32〕

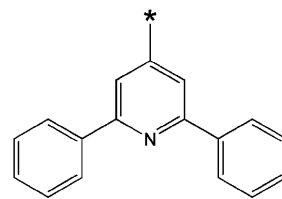
20



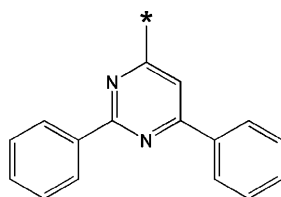
〔化5-33〕



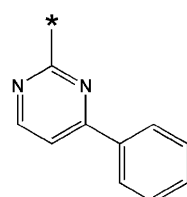
〔化5-34〕



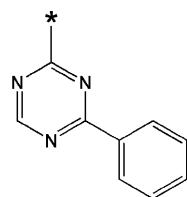
〔化5-35〕



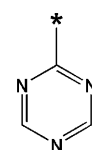
〔化5-36〕



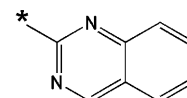
〔化5-37〕



〔化5-38〕

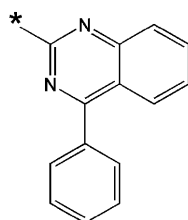


〔化5-39〕

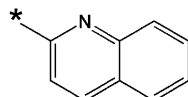


〔化5-40〕

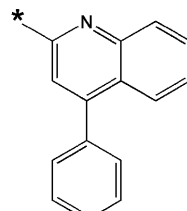
30



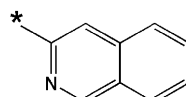
〔化5-41〕



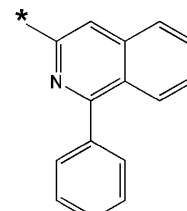
〔化5-42〕



〔化5-43〕



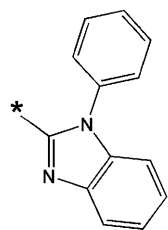
〔化5-44〕



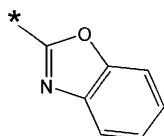
〔化5-45〕

40

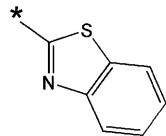
【化（５－４６）－（５－５５）】



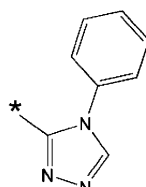
〔化５－４６〕



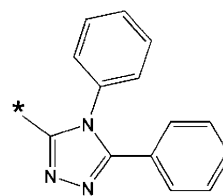
〔化５－４７〕



〔化５－４８〕

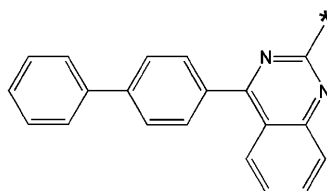


〔化５－４９〕

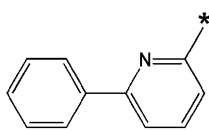


〔化５－５０〕

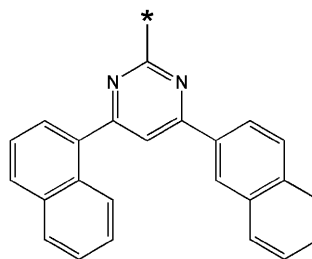
10



〔化５－５１〕

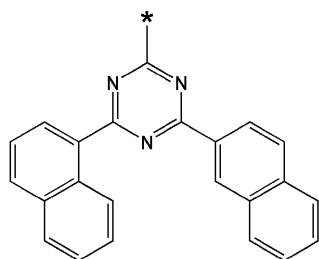


〔化５－５２〕

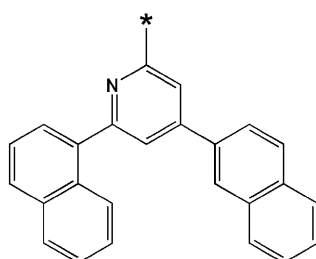


〔化５－５３〕

20



〔化５－５４〕



〔化５－５５〕

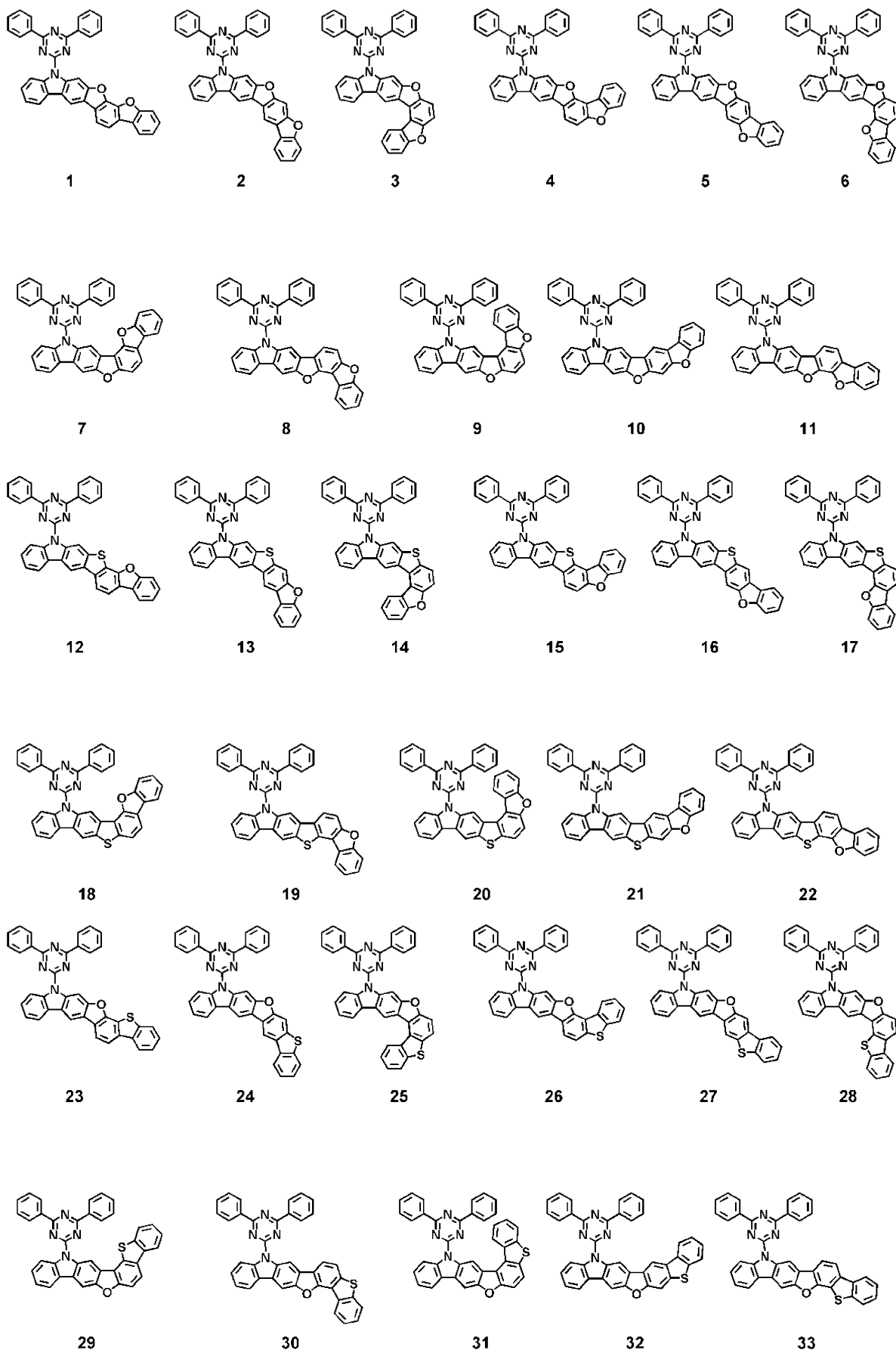
30

前記化学式 ５－１～５－５５の中の＊は、隣接する原子との結合サイトである。

【請求項 １ ７】

下記化合物 １～１ ６ ７のうちのいずれか一つであることを特徴とする請求項 １ 乃至 １ ６のいずれか １ 項に記載の縮合環化合物。

【化 1 - 3 3】



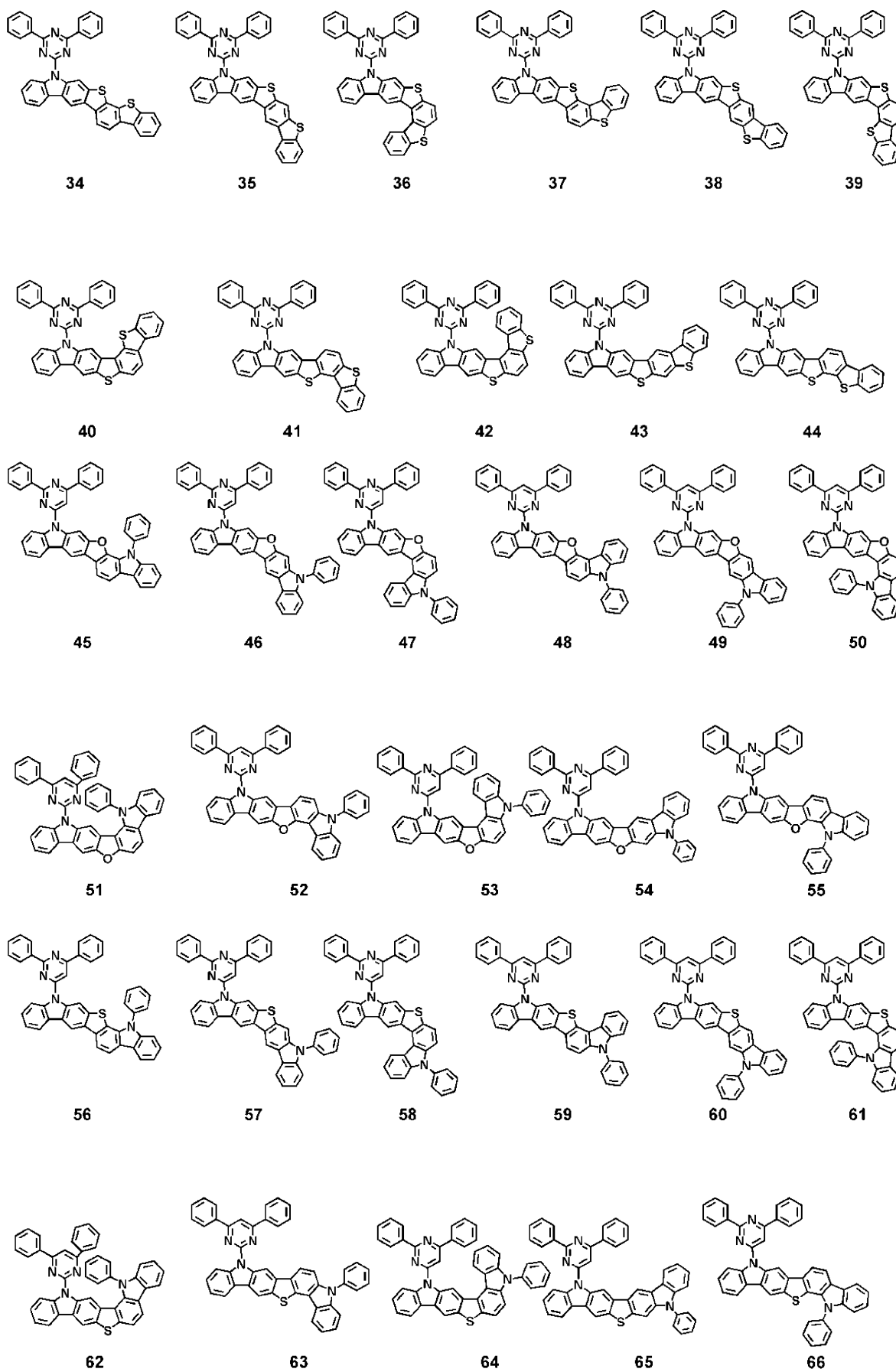
10

20

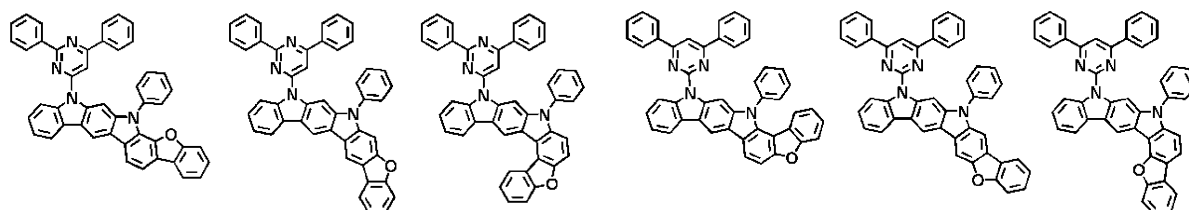
30

40

【化 3 4 - 6 6】



【化 67 - 99】



67

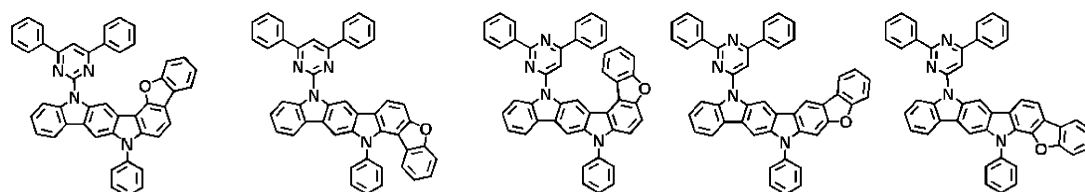
68

69

70

71

72



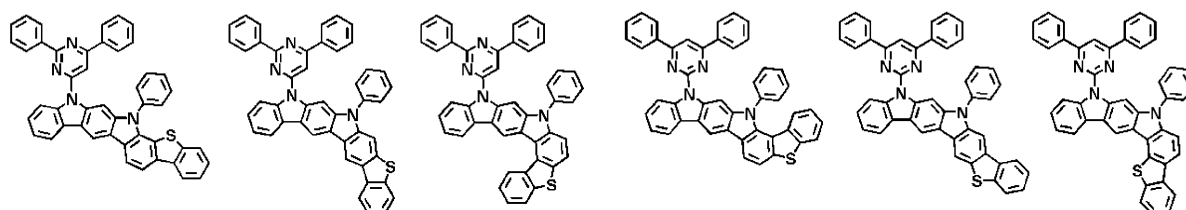
73

74

75

76

77



78

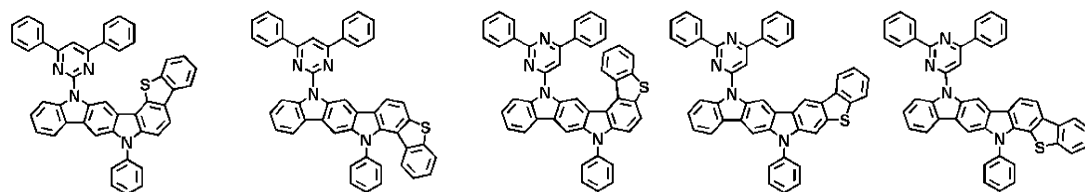
79

80

81

82

83



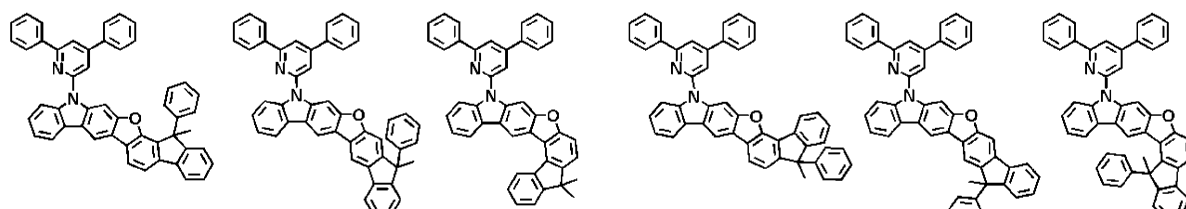
84

85

86

87

88



89

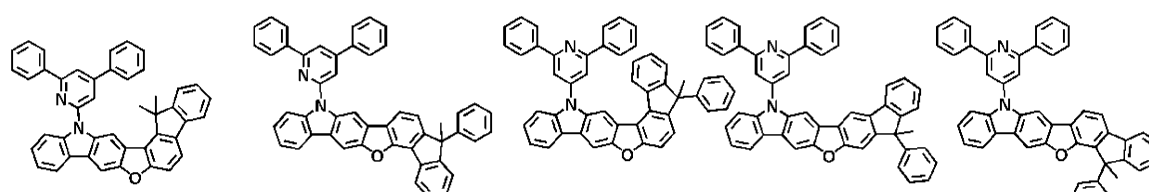
90

91

92

93

94



95

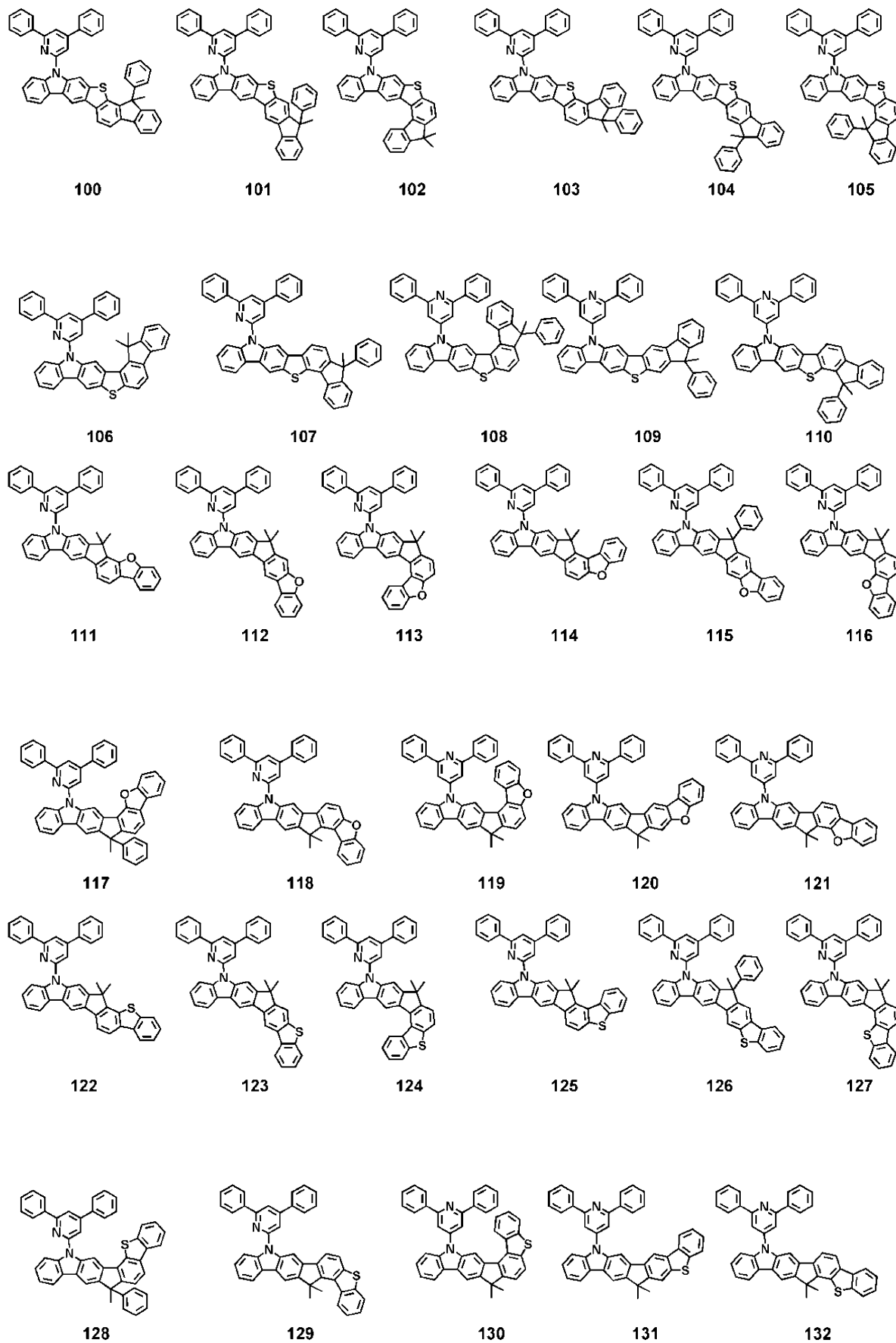
96

97

98

99

【化 1 0 0 - 1 3 2】



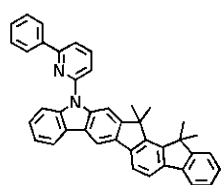
10

20

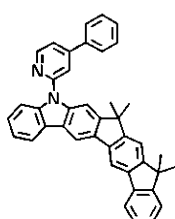
30

40

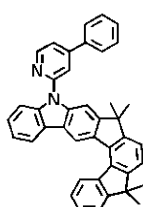
【化 1 3 3 - 1 6 4】



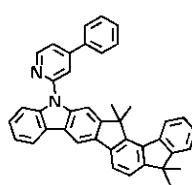
133



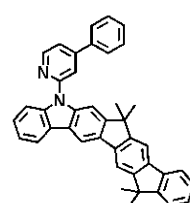
134



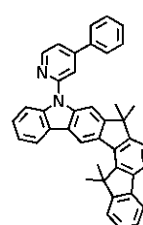
135



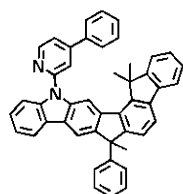
136



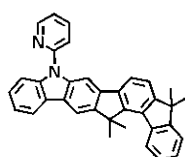
137



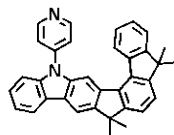
138



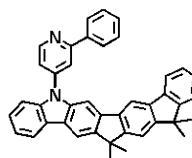
139



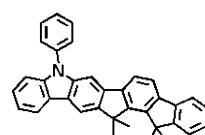
140



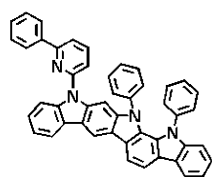
141



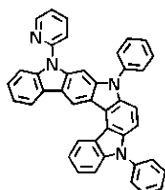
142



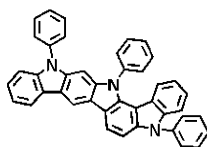
143



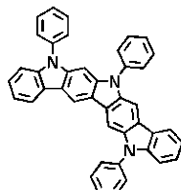
144



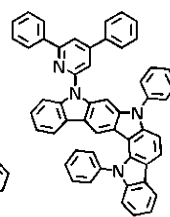
145



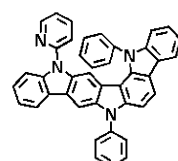
146



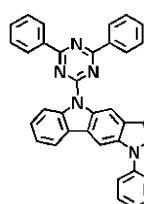
147



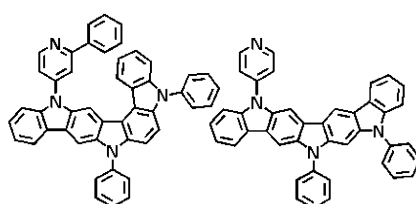
148



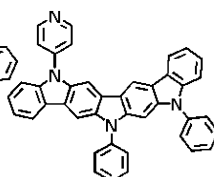
149



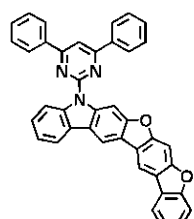
150



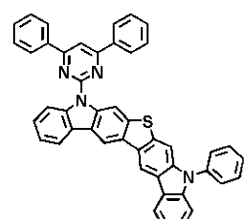
151



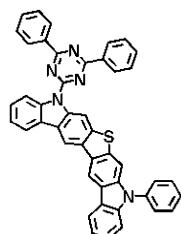
152



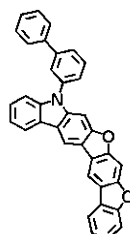
153



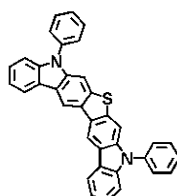
154



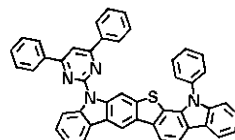
155



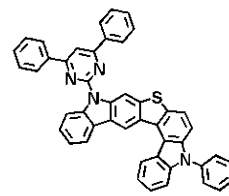
156



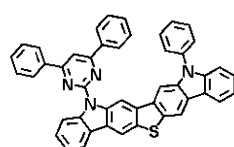
157



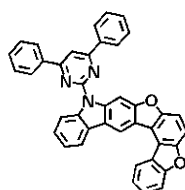
158



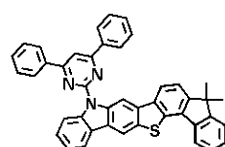
159



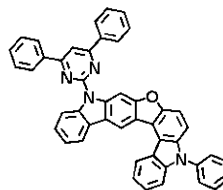
160



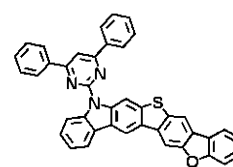
161



162



163



164

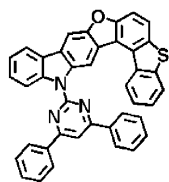
10

20

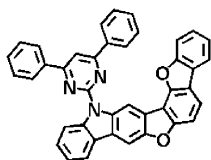
30

40

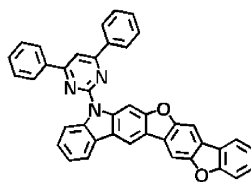
【化 1 6 5 - 1 6 7】



165



166



167

【請求項 1 8】

第 1 電極と、第 2 電極と、前記第 1 電極と前記第 2 電極との間に介在する発光層を含む請求項 1 乃至 1 7 のいずれか 1 項に記載の縮合環化合物を 1 種以上含む有機層と、を有することを特徴とする有機発光素子。

10

【請求項 1 9】

前記第 1 電極はアノードであり、前記第 2 電極はカソードであり、前記有機層は、i) 前記第 1 電極と前記発光層との間に介在し、正孔注入層、正孔輸送層、及び電子阻止層のうちの少なくとも 1 層を含む正孔輸送領域と、ii) 前記発光層と前記第 2 電極との間に介在し、正孔阻止層、電子輸送層、及び電子注入層のうちの少なくとも 1 層を含む電子輸送領域と、を含むことを特徴とする請求項 1 8 に記載の有機発光素子。

【請求項 2 0】

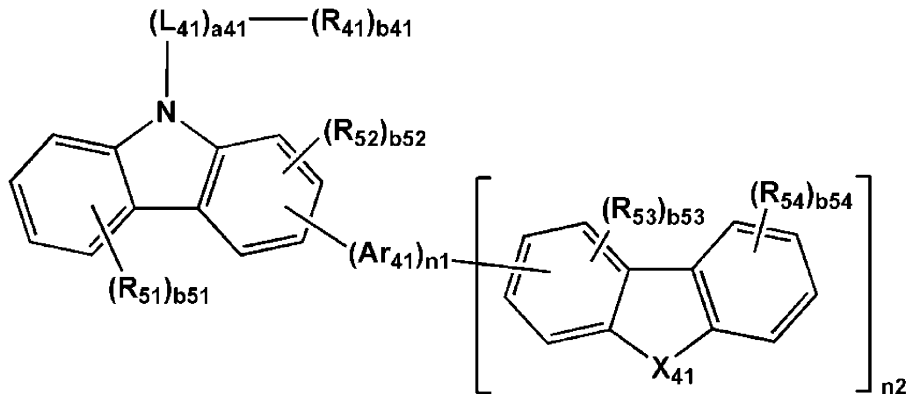
前記縮合環化合物は、前記発光層及び前記正孔輸送領域のうちの少なくともいずれか一つに含まれることを特徴とする請求項 1 8 又は 1 9 に記載の有機発光素子。

20

【請求項 2 1】

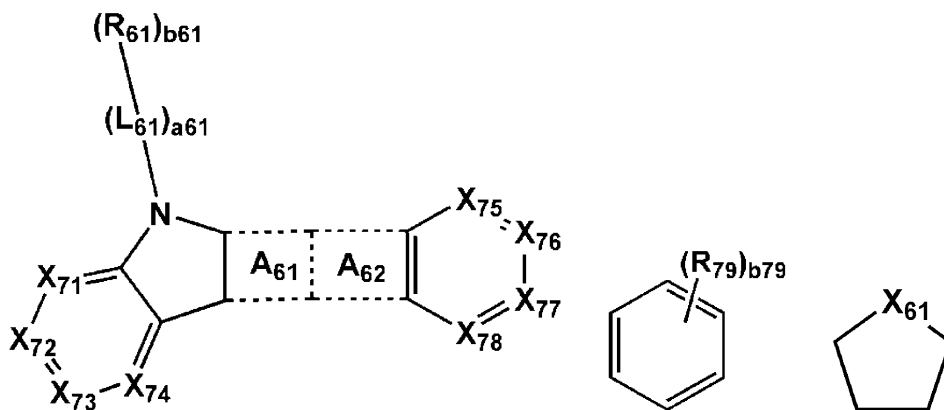
前記縮合環化合物は前記発光層に含まれ、前記発光層は、下記化学式 4 1 で示される第 1 化合物及び下記化学式 6 1 で示される第 2 化合物のうちの少なくともいずれか一つを更に含むことを特徴とする請求項 1 8 乃至 2 0 のいずれか 1 項に記載の有機発光素子。

【化 4 1 - 6 1 B】



10

〔化41〕



20

〔化61〕

〔化61A〕

〔化61B〕

前記化学式 4 1、6 1、6 1 A、6 1 Bで、

X_{41} は、 $N - [(L_{42})_{a42} - (R_{42})_{b42}]$ 、 S 、 O 、 $S(=O)$ 、 $S(=O)_2$ 、 $C(=O)$ 、 $C(R_{43})(R_{44})$ 、 $Si(R_{43})(R_{44})$ 、 $P(R_{43})$ 、 $P(=O)(R_{43})$ 、又は $C=N(R_{43})$ であり、

前記化学式 6 1で、環 A_{61} は、前記化学式 6 1 Aで示され、

前記化学式 6 1で、環 A_{62} は、前記化学式 6 1 Bで示され、

X_{61} は、 $N - [(L_{62})_{a62} - (R_{62})_{b62}]$ 、 S 、 O 、 $S(=O)$ 、 $S(=O)_2$ 、 $C(=O)$ 、 $C(R_{63})(R_{64})$ 、 $Si(R_{63})(R_{64})$ 、 $P(R_{63})$ 、 $P(=O)(R_{63})$ 、又は $C=N(R_{63})$ であり、

X_{71} は、 $C(R_{71})$ 又は N であり、 X_{72} は、 $C(R_{72})$ 又は N であり、 X_{73} は、 $C(R_{73})$ 又は N であり、 X_{74} は、 $C(R_{74})$ 又は N であり、 X_{75} は、 $C(R_{75})$ 又は N であり、 X_{76} は、 $C(R_{76})$ 又は N であり、 X_{77} は、 $C(R_{77})$ 又は N であり、 X_{78} は、 $C(R_{78})$ 又は N であり、

Ar_{41} 、 L_{41} 、 L_{42} 、 L_{61} 、及び L_{62} は、互いに独立して、置換若しくは非置換の $C_3 - C_{10}$ シクロアルキレン基、置換若しくは非置換の $C_1 - C_{10}$ ヘテロシクロアルキレン基、置換若しくは非置換の $C_3 - C_{10}$ シクロアルケニレン基、置換若しくは非置換の $C_1 - C_{10}$ ヘテロシクロアルケニレン基、置換若しくは非置換の $C_6 - C_{60}$ アリーレン基、置換若しくは非置換の $C_1 - C_{60}$ ヘテロアリーレン基、置換若しくは非置換の二価非芳香族縮合多環基、及び置換若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、

n_1 及び n_2 は、互いに独立して、0～3の整数のうちから選択され、

a_{41} 、 a_{42} 、 a_{61} 、及び a_{62} は、互いに独立して、0～5の整数のうちから選

50

択され、

$R_{41} \sim R_{44}$ 、 $R_{51} \sim R_{54}$ 、 $R_{61} \sim R_{64}$ 、及び $R_{71} \sim R_{79}$ は、互いに独立して、水素、重水素、 $-F$ （フルオロ基）、 $-Cl$ （クロロ基）、 $-Br$ （ブロモ基）、 $-I$ （ヨード基）、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、カルボン酸基又はその塩、スルホン酸基又はその塩、リン酸基又はその塩、置換若しくは非置換の C_1-C_{60} アルキル基、置換若しくは非置換の C_2-C_{60} アルケニル基、置換若しくは非置換の C_2-C_{60} アルキニル基、置換若しくは非置換の C_1-C_{60} アルコキシ基、置換若しくは非置換の C_3-C_{10} シクロアルキル基、置換若しくは非置換の C_1-C_{10} ヘテロシクロアルキル基、置換若しくは非置換の C_3-C_{10} シクロアルケニル基、置換若しくは非置換の C_1-C_{10} ヘテロシクロアルケニル基、置換若しくは非置換の C_6-C_{60} アリール基、置換若しくは非置換の C_6-C_{60} アリールオキシ基、置換若しくは非置換の C_6-C_{60} アリールチオ基、置換若しくは非置換の C_1-C_{60} ヘテロアリール基、置換若しくは非置換の一価非芳香族縮合多環基、置換若しくは非置換の一価非芳香族ヘテロ縮合多環基、 $-N(Q_1)(Q_2)$ 、 $-Si(Q_3)(Q_4)(Q_5)$ 、及び $-B(Q_6)(Q_7)$ のうちから選択され、

10

b_{41} 、 b_{42} 、 $b_{51} \sim b_{54}$ 、 b_{61} 、 b_{62} 、及び b_{79} は、互いに独立して、1～3の整数のうちから選択され、

前記置換された 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、

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、アミジノ基、ヒドラジン基、ヒドラゾン基、カルボン酸基又はその塩、スルホン酸基又はその塩、リン酸基又はその塩、 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

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、カルボン酸基又はその塩、スルホン酸基又はその塩、リン酸基又はその塩、 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、 $-N(Q_{11})(Q_{12})$ 、 $-Si(Q_{13})(Q_{14})(Q_{15})$ 、及び $-B(Q_{16})(Q_{17})$ のうち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；

40

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、アミジノ基、ヒドラジン基、ヒドラゾン基、カルボン酸基又はその塩、スルホン酸基又はその塩、リン酸基又はその塩、 C_1-C_{60} アルキル基、 C_2-C_{60} アルケニル基

50

、 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、 $-N(Q_{21})(Q_{22})$ 、 $-Si(Q_{23})(Q_{24})(Q_{25})$ 、及び $-B(Q_{26})(Q_{27})$ のうちの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；及び
 $-N(Q_{31})(Q_{32})$ 、 $-Si(Q_{33})(Q_{34})(Q_{35})$ 、及び $-B(Q_{36})(Q_{37})$ ；のうちから選択され、

10

前記 $Q_1 \sim Q_7$ 、 $Q_{11} \sim Q_{17}$ 、 $Q_{21} \sim Q_{27}$ 、及び $Q_{31} \sim Q_{37}$ は、互いに独立して、水素、 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、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る。

20

【発明の詳細な説明】

【技術分野】

【0001】

本発明は、縮合環化合物及びそれを含む有機発光素子に関する。

【背景技術】

【0002】

有機発光素子(organic light emitting device)は、自発光型素子であり、視野角が広く、コントラストに優れるだけでなく、応答時間が迅速であり、輝度、駆動電圧、及び応答速度の特性に優れ、且つ多色化が可能であるという長所を有している。

30

【0003】

一例によれば、有機発光素子は、アノード、カソード、及びアノードとカソードとの間に介在する発光層を含む有機層を含む。アノードと発光層との間には正孔輸送領域が具備され、発光層とカソードとの間には電子輸送領域が具備される。アノードから注入された正孔は正孔輸送領域を経て発光層に移動し、カソードから注入された電子は電子輸送領域を経て発光層に移動する。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。励起子が励起状態から基底状態に変わりながら光が生成される。

【発明の概要】

40

【発明が解決しようとする課題】

【0004】

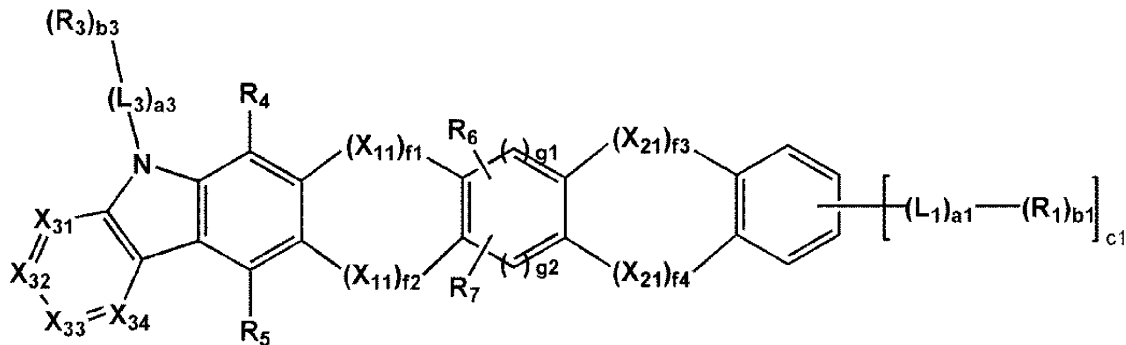
本発明は、上記従来技術に鑑みてなされたものであって、本発明の目的は、新規縮合環化合物及びそれを採用した有機発光素子を提供することにある。

【課題を解決するための手段】

【0005】

上記目的を達成するためになされた本発明の一態様による縮合環化合物は、下記化学式1で示される。

【化 1】



10

前記化学式 1 で、

X_{11} は、 $N-[(L_{11})_{a11}-(R_{11})_{b11}]$ 、 S 、 O 、 $S(=O)$ 、 $S(=O)_2$ 、 $C(=O)$ 、 $C(R_{12})(R_{13})$ 、 $Si(R_{12})(R_{13})$ 、 $P(R_{12})$ 、又は $P(=O)(R_{12})$ であり、 $f1$ 及び $f2$ は、互いに独立して、0 又は 1 であり、 $f1+f2$ は 1 であり、

X_{21} は、 $N-[(L_{21})_{a21}-(R_{21})_{b21}]$ 、 S 、 O 、 $S(=O)$ 、 $S(=O)_2$ 、 $C(=O)$ 、 $C(R_{22})(R_{23})$ 、 $Si(R_{22})(R_{23})$ 、 $P(R_{22})$ 、又は $P(=O)(R_{22})$ であり、 $f3$ 及び $f4$ は、互いに独立して、0 又は 1 であり、 $f3+f4$ は 1 であり、

20

$X_{31} \sim X_{34}$ は、互いに独立して、 N 又は $C-[(L_2)_{a2}-(R_2)_{b2}]$ であり、

$g1$ 及び $g2$ は、互いに独立して、0、1、又は 2 であり、 $g1+g2$ は 2 であり、

i) 前記化学式 1 で、 $f1=1$ 、 $f2=0$ 、 $f3=1$ 、 $f4=0$ 、 $g1=1$ 、及び $g2=1$ であり、 X_{11} が $C(R_{12})(R_{13})$ である場合、 X_{21} は、 $N-[(L_{21})_{a21}-(R_{21})_{b21}]$ でなく、ii) 前記化学式 1 で、 $f1=1$ 、 $f2=0$ 、 $f3=1$ 、 $f4=0$ 、 $g1=1$ 、及び $g2=1$ であり、 X_{11} が $N-[(L_{11})_{a11}-(R_{11})_{b11}]$ である場合、 X_{21} は、 $N-[(L_{21})_{a21}-(R_{21})_{b21}]$ でなく且つ $C(R_{22})(R_{23})$ でなく、iii) 前記化学式 1 で、 $f1=1$ 、 $f2=0$ 、 $f3=0$ 、 $f4=1$ 、 $g1=0$ 、及び $g2=2$ であり、 X_{11} が $C(R_{12})(R_{13})$ である場合、 X_{21} は、 $N-[(L_{21})_{a21}-(R_{21})_{b21}]$ でなく、iv) 前記化学式 1 で、 $f1=0$ 、 $f2=1$ 、 $f3=1$ 、 $f4=0$ 、 $g1=1$ 、及び $g2=1$ であり、 X_{11} が $C(R_{12})(R_{13})$ である場合、 X_{21} は、 $N-[(L_{21})_{a21}-(R_{21})_{b21}]$ でなく且つ $C(R_{22})(R_{23})$ でなく、v) 前記化学式 1 で、 $f1=0$ 、 $f2=1$ 、 $f3=1$ 、 $f4=0$ 、 $g1=1$ 、及び $g2=1$ であり、 X_{11} が $N-[(L_{11})_{a11}-(R_{11})_{b11}]$ である場合、 X_{21} は、 $C(R_{22})(R_{23})$ でなく、vi) 前記化学式 1 で、 $f1=0$ 、 $f2=1$ 、 $f3=1$ 、 $f4=0$ 、 $g1=1$ 、及び $g2=1$ であり、 X_{11} が S である場合、 X_{21} は、 $N-[(L_{21})_{a21}-(R_{21})_{b21}]$ でなく、vii) 前記化学式 1 で、 $f1=0$ 、 $f2=1$ 、 $f3=1$ 、 $f4=0$ 、 $g1=1$ 、及び $g2=1$ であり、 X_{11} が $Si(R_{12})(R_{13})$ である場合、 X_{21} は、 $N-[(L_{21})_{a21}-(R_{21})_{b21}]$ でなく、viii) 前記化学式 1 で、 $f1=0$ 、 $f2=1$ 、 $f3=0$ 、 $f4=1$ 、 $g1=1$ 、及び $g2=1$ であり、 X_{11} が $N-[(L_{11})_{a11}-(R_{11})_{b11}]$ である場合、 X_{21} は、 $C(R_{22})(R_{23})$ でなく、

30

40

$L_1 \sim L_3$ 、 L_{11} 、及び L_{21} は、互いに独立して、置換若しくは非置換の C_3-C_{10} シクロアルキレン基、置換若しくは非置換の C_1-C_{10} ヘテロシクロアルキレン基、置換若しくは非置換の C_3-C_{10} シクロアルケニレン基、置換若しくは非置換の C_1-C_{10} ヘテロシクロアルケニレン基、置換若しくは非置換の C_6-C_{60} アリーレン基、置換若しくは非置換の C_1-C_{60} ヘテロアリーレン基、置換若しくは非置換の二価非芳香族縮合多環基、及び置換若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

50

選択され、

a 1 ~ a 3、a 1 1、及び a 2 1 は、互いに独立して、0 ~ 5 の整数のうちから選択され、

R₁ ~ R₇、R_{1 1} ~ R_{1 3}、及び R_{2 1} ~ R_{2 3} 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、アミジノ基、ヒドラジン基、ヒドラゾン基、カルボン酸基又はその塩、スルホン酸基又はその塩、リン酸基又はその塩、置換若しくは非置換の C₁-C₆₀ アルキル基、置換若しくは非置換の C₂-C₆₀ アルケニル基、置換若しくは非置換の C₂-C₆₀ アルキニル基、置換若しくは非置換の C₁-C₆₀ アルコキシ基、置換若しくは非置換の C₃-C₁₀ シクロアルキル基、置換若しくは非置換の C₁-C₁₀ ヘテロシクロアルキル基、置換若しくは非置換の C₃-C₁₀ シクロアルケニル基、置換若しくは非置換の C₁-C₁₀ ヘテロシクロアルケニル基、置換若しくは非置換の C₆-C₆₀ アリール基、置換若しくは非置換の C₆-C₆₀ アリールオキシ基、置換若しくは非置換の C₆-C₆₀ アリールチオ基、置換若しくは非置換の C₁-C₆₀ ヘテロアリール基、置換若しくは非置換の一価非芳香族縮合多環基、置換若しくは非置換の一価非芳香族ヘテロ縮合多環基、-N (Q₁) (Q₂)、-Si (Q₃) (Q₄) (Q₅)、及び -B (Q₆) (Q₇) のうちから選択され、

b 1 ~ b 3、b 1 1、及び b 2 1 は、互いに独立して、1 ~ 5 の整数のうちから選択され、

c 1 は、1 ~ 4 の整数のうちから選択され、

前記置換された C₃-C₁₀ シクロアルキレン基、置換された C₁-C₁₀ ヘテロシクロアルキレン基、置換された C₃-C₁₀ シクロアルケニレン基、置換された C₁-C₁₀ ヘテロシクロアルケニレン基、置換された C₆-C₆₀ アリーレン基、置換された C₁-C₆₀ 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 C₁-C₆₀ アルキル基、置換された C₂-C₆₀ アルケニル基、置換された C₂-C₆₀ アルキニル基、置換された C₁-C₆₀ アルコキシ基、置換された C₃-C₁₀ シクロアルキル基、置換された C₁-C₁₀ ヘテロシクロアルキル基、置換された C₃-C₁₀ シクロアルケニル基、置換された C₁-C₁₀ ヘテロシクロアルケニル基、置換された C₆-C₆₀ アリール基、置換された C₆-C₆₀ アリールオキシ基、置換された C₆-C₆₀ アリールチオ基、置換された C₁-C₆₀ 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の少なくとも一つは、

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、アミジノ基、ヒドラジン基、ヒドラゾン基、カルボン酸基又はその塩、スルホン酸基又はその塩、リン酸基又はその塩、C₁-C₆₀ アルキル基、C₂-C₆₀ アルケニル基、C₂-C₆₀ アルキニル基、及び C₁-C₆₀ アルコキシ基；

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、アミジノ基、ヒドラジン基、ヒドラゾン基、カルボン酸基又はその塩、スルホン酸基又はその塩、リン酸基又はその塩、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、C₆-C₆₀ アリールオキシ基、C₆-C₆₀ アリールチオ基、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、-N (Q_{1 1}) (Q_{1 2})、-Si (Q_{1 3}) (Q_{1 4}) (Q_{1 5})、及び -B (Q_{1 6}) (Q_{1 7}) のうちの少なくとも一つで置換された、C₁-C₆₀ アルキル基、C₂-C₆₀ アルケニル基、C₂-C₆₀ アルキニル基、及び 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、C₆-C₆₀ アリールオキシ基、C₆-C₆₀ アリールチオ基、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；

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、カルボン酸基又はその塩、スルホン酸基又はその塩、リン酸基又はその塩、 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、 $-N(Q_{21})(Q_{22})$ 、 $-Si(Q_{23})(Q_{24})(Q_{25})$ 、及び $-B(Q_{26})(Q_{27})$ のうちの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
 $-N(Q_{31})(Q_{32})$ 、 $-Si(Q_{33})(Q_{34})(Q_{35})$ 、及び $-B(Q_{36})(Q_{37})$ ；のうちから選択され、

前記 $Q_1 \sim Q_7$ 、 $Q_{11} \sim Q_{17}$ 、 $Q_{21} \sim Q_{27}$ 、及び $Q_{31} \sim Q_{37}$ 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、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、カルボン酸基又はその塩、スルホン酸基又はその塩、リン酸基又はその塩、 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、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る。

【0006】

上記目的を達成するためになされた本発明の一態様による有機発光素子は、第1電極と、第2電極と、前記第1電極と前記第2電極との間に介在する発光層を含む前記化学式1で示される縮合環化合物を少なくとも1種以上含む有機層と、を有する。

前記縮合環化合物は前記発光層に含まれ、前記発光層は、ドーパントを更に含み、前記発光層に含まれる前記縮合環化合物は、ホストの役割を行うことができる。

【発明の効果】

【0007】

本発明によれば、縮合環化合物は、優秀な電気的特性及び熱的安定性を有し、縮合環化合物を採用した有機発光素子は、低駆動電圧、高効率、高輝度、及び長寿命特性を有することができる。

【図面の簡単な説明】

【0008】

【図1】本発明の一具現例による有機発光素子を概略的に示した断面図である。

【発明を実施するための形態】

【0009】

以下、本発明を実施するための形態の具体例を詳細に説明する。

【0010】

本発明による縮合環化合物は、下記化学式1で示される。

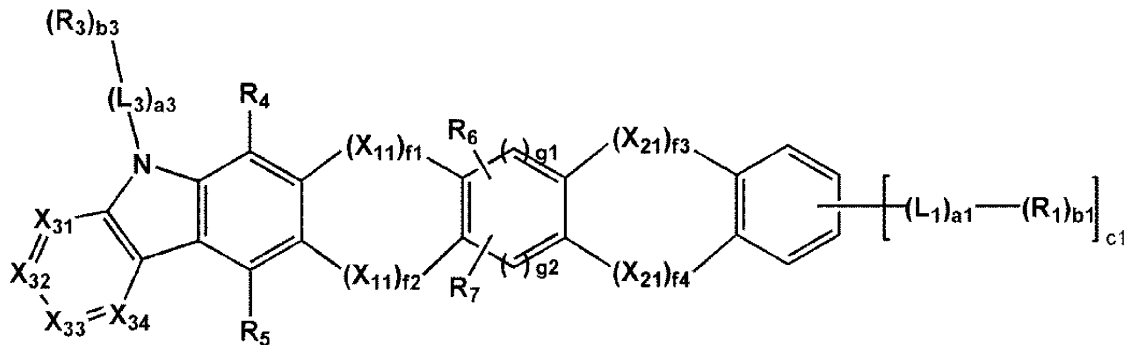
10

20

30

40

【化 1】



10

【0011】

化学式 1 で、

X_{11} は、 $N - [(L_{11})_{a11} - (R_{11})_{b11}]$ 、 S 、 O 、 $S(=O)$ 、 $S(=O)_2$ 、 $C(=O)$ 、 $C(R_{12})(R_{13})$ 、 $Si(R_{12})(R_{13})$ 、 $P(R_{12})$ 、又は $P(=O)(R_{12})$ であり、 $f1$ 及び $f2$ は、互いに独立して、0 又は 1 であり、 $f1 + f2$ は 1 であり、

X_{21} は、 $N - [(L_{21})_{a21} - (R_{21})_{b21}]$ 、 S 、 O 、 $S(=O)$ 、 $S(=O)_2$ 、 $C(=O)$ 、 $C(R_{22})(R_{23})$ 、 $Si(R_{22})(R_{23})$ 、 $P(R_{22})$ 、又は $P(=O)(R_{22})$ であり、 $f3$ 及び $f4$ は、互いに独立して、0 又は 1 であり、 $f3 + f4$ は 1 であり、

20

$X_{31} \sim X_{34}$ は、互いに独立して、 N 又は $C - [(L_2)_{a2} - (R_2)_{b2}]$ であり、

$g1$ 及び $g2$ は、互いに独立して、0、1、又は 2 であり、 $g1 + g2$ は 2 であり、

i) 化学式 1 で、 $f1 = 1$ 、 $f2 = 0$ 、 $f3 = 1$ 、 $f4 = 0$ 、 $g1 = 1$ 、及び $g2 = 1$ であり、 X_{11} が $C(R_{12})(R_{13})$ である場合、 X_{21} は、 $N - [(L_{21})_{a21} - (R_{21})_{b21}]$ でなく、ii) 化学式 1 で、 $f1 = 1$ 、 $f2 = 0$ 、 $f3 = 1$ 、 $f4 = 0$ 、 $g1 = 1$ 、及び $g2 = 1$ であり、 X_{11} が $N - [(L_{11})_{a11} - (R_{11})_{b11}]$ である場合、 X_{21} は、 $N - [(L_{21})_{a21} - (R_{21})_{b21}]$ でなく且つ $C(R_{22})(R_{23})$ でなく、iii) 化学式 1 で、 $f1 = 1$ 、 $f2 = 0$ 、 $f3 = 0$ 、 $f4 = 1$ 、 $g1 = 0$ 、及び $g2 = 2$ であり、 X_{11} が $C(R_{12})(R_{13})$ である場合、 X_{21} は、 $N - [(L_{21})_{a21} - (R_{21})_{b21}]$ でなく、iv) 化学式 1 で、 $f1 = 0$ 、 $f2 = 1$ 、 $f3 = 1$ 、 $f4 = 0$ 、 $g1 = 1$ 、及び $g2 = 1$ であり、 X_{11} が $C(R_{12})(R_{13})$ である場合、 X_{21} は、 $N - [(L_{21})_{a21} - (R_{21})_{b21}]$ でなく且つ $C(R_{22})(R_{23})$ でなく、v) 化学式 1 で、 $f1 = 0$ 、 $f2 = 1$ 、 $f3 = 1$ 、 $f4 = 0$ 、 $g1 = 1$ 、及び $g2 = 1$ であり、 X_{11} が $N - [(L_{11})_{a11} - (R_{11})_{b11}]$ である場合、 X_{21} は、 $C(R_{22})(R_{23})$ でなく、vi) 化学式 1 で、 $f1 = 0$ 、 $f2 = 1$ 、 $f3 = 1$ 、 $f4 = 0$ 、 $g1 = 1$ 、及び $g2 = 1$ であり、 X_{11} が S である場合、 X_{21} は、 $N - [(L_{21})_{a21} - (R_{21})_{b21}]$ でなく、vii) 化学式 1 で、 $f1 = 0$ 、 $f2 = 1$ 、 $f3 = 1$ 、 $f4 = 0$ 、 $g1 = 1$ 、及び $g2 = 1$ であり、 X_{11} が $Si(R_{12})(R_{13})$ である場合、 X_{21} は、 $N - [(L_{21})_{a21} - (R_{21})_{b21}]$ でなく、viii) 化学式 1 で、 $f1 = 0$ 、 $f2 = 1$ 、 $f3 = 0$ 、 $f4 = 1$ 、 $g1 = 1$ 、及び $g2 = 1$ であり、 X_{11} が $N - [(L_{11})_{a11} - (R_{11})_{b11}]$ である場合、 X_{21} は、 $C(R_{22})(R_{23})$ でなく、

30

40

$L_1 \sim L_3$ 、 L_{11} 、及び L_{21} は、互いに独立して、置換若しくは非置換の $C_3 - C_{10}$ シクロアルキレン基、置換若しくは非置換の $C_1 - C_{10}$ ヘテロシクロアルキレン基、置換若しくは非置換の $C_3 - C_{10}$ シクロアルケニレン基、置換若しくは非置換の $C_1 - C_{10}$ ヘテロシクロアルケニレン基、置換若しくは非置換の $C_6 - C_{60}$ アリーレン基、置換若しくは非置換の $C_1 - C_{60}$ ヘテロアリーレン基、置換若しくは非置換の二価非芳香族縮合多環基、及び置換若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

50

選択され、

a 1 ~ a 3、a 1 1、及び a 2 1 は、互いに独立して、0 ~ 5 の整数のうちから選択され、

R₁ ~ R₇、R_{1 1} ~ R_{1 3}、及び R_{2 1} ~ R_{2 3} 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、アミジノ基、ヒドラジン基、ヒドラゾン基、カルボン酸基又はその塩、スルホン酸基又はその塩、リン酸基又はその塩、置換若しくは非置換の C₁-C₆₀ アルキル基、置換若しくは非置換の C₂-C₆₀ アルケニル基、置換若しくは非置換の C₂-C₆₀ アルキニル基、置換若しくは非置換の C₁-C₆₀ アルコキシ基、置換若しくは非置換の C₃-C₁₀ シクロアルキル基、置換若しくは非置換の C₁-C₁₀ ヘテロシクロアルキル基、置換若しくは非置換の C₃-C₁₀ シクロアルケニル基、置換若しくは非置換の C₁-C₁₀ ヘテロシクロアルケニル基、置換若しくは非置換の C₆-C₆₀ アリール基、置換若しくは非置換の C₆-C₆₀ アリールオキシ基、置換若しくは非置換の C₆-C₆₀ アリールチオ基、置換若しくは非置換の C₁-C₆₀ ヘテロアリール基、置換若しくは非置換の一価非芳香族縮合多環基、置換若しくは非置換の一価非芳香族ヘテロ縮合多環基、-N (Q₁) (Q₂)、-Si (Q₃) (Q₄) (Q₅)、及び -B (Q₆) (Q₇) のうちから選択され、

b 1 ~ b 3、b 1 1、及び b 2 1 は、互いに独立して、1 ~ 5 の整数のうちから選択され、

c 1 は、1 ~ 4 の整数のうちから選択され、

置換された C₃-C₁₀ シクロアルキレン基、置換された C₁-C₁₀ ヘテロシクロアルキレン基、置換された C₃-C₁₀ シクロアルケニレン基、置換された C₁-C₁₀ ヘテロシクロアルケニレン基、置換された C₆-C₆₀ アリーレン基、置換された C₁-C₆₀ 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 C₁-C₆₀ アルキル基、置換された C₂-C₆₀ アルケニル基、置換された C₂-C₆₀ アルキニル基、置換された C₁-C₆₀ アルコキシ基、置換された C₃-C₁₀ シクロアルキル基、置換された C₁-C₁₀ ヘテロシクロアルキル基、置換された C₃-C₁₀ シクロアルケニル基、置換された C₁-C₁₀ ヘテロシクロアルケニル基、置換された C₆-C₆₀ アリール基、置換された C₆-C₆₀ アリールオキシ基、置換された C₆-C₆₀ アリールチオ基、置換された C₁-C₆₀ 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の少なくとも一つは、

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、アミジノ基、ヒドラジン基、ヒドラゾン基、カルボン酸基又はその塩、スルホン酸基又はその塩、リン酸基又はその塩、C₁-C₆₀ アルキル基、C₂-C₆₀ アルケニル基、C₂-C₆₀ アルキニル基、及び C₁-C₆₀ アルコキシ基；

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、アミジノ基、ヒドラジン基、ヒドラゾン基、カルボン酸基又はその塩、スルホン酸基又はその塩、リン酸基又はその塩、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、C₆-C₆₀ アリールオキシ基、C₆-C₆₀ アリールチオ基、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、-N (Q_{1 1}) (Q_{1 2})、-Si (Q_{1 3}) (Q_{1 4}) (Q_{1 5})、及び -B (Q_{1 6}) (Q_{1 7}) のうちの少なくとも一つで置換された、C₁-C₆₀ アルキル基、C₂-C₆₀ アルケニル基、C₂-C₆₀ アルキニル基、及び 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、C₆-C₆₀ アリールオキシ基、C₆-C₆₀ アリールチオ基、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；

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、アミジノ基、ヒドラジン基、ヒドラゾン基、カルボン酸基又はその塩、スルホン酸基又はその塩、リン酸基又はその塩、 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、 $-N(Q_{21})(Q_{22})$ 、 $-Si(Q_{23})(Q_{24})(Q_{25})$ 、及び $-B(Q_{26})(Q_{27})$ のうちの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

10

$-N(Q_{31})(Q_{32})$ 、 $-Si(Q_{33})(Q_{34})(Q_{35})$ 、及び $-B(Q_{36})(Q_{37})$ ；のうちから選択され、

$Q_1 \sim Q_7$ 、 $Q_{11} \sim Q_{17}$ 、 $Q_{21} \sim Q_{27}$ 、及び $Q_{31} \sim Q_{37}$ 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、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、カルボン酸基又はその塩、スルホン酸基又はその塩、リン酸基又はその塩、 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、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る。

20

【0012】

化学式1において、それぞれの置換基に係る説明は、本明細書に記載した箇所を参照する。

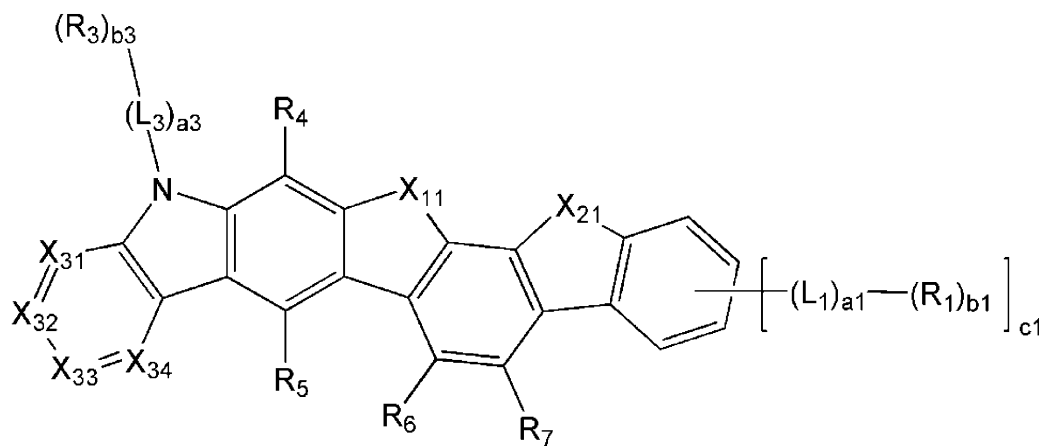
【0013】

縮合環化合物は、下記化学式1-1～1-12のうちのいずれか一つで示される。

【0014】

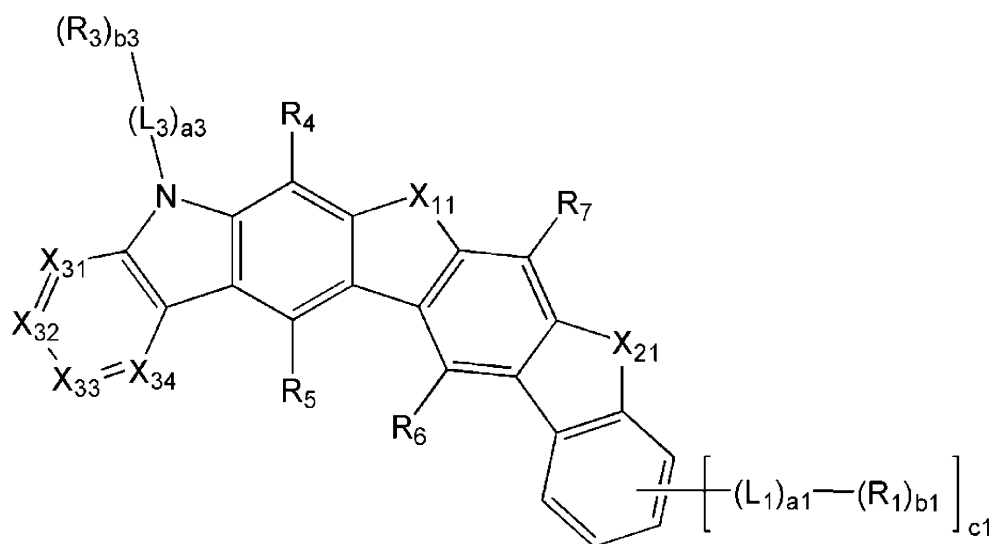
30

【化(1-1) - (1-3)】



10

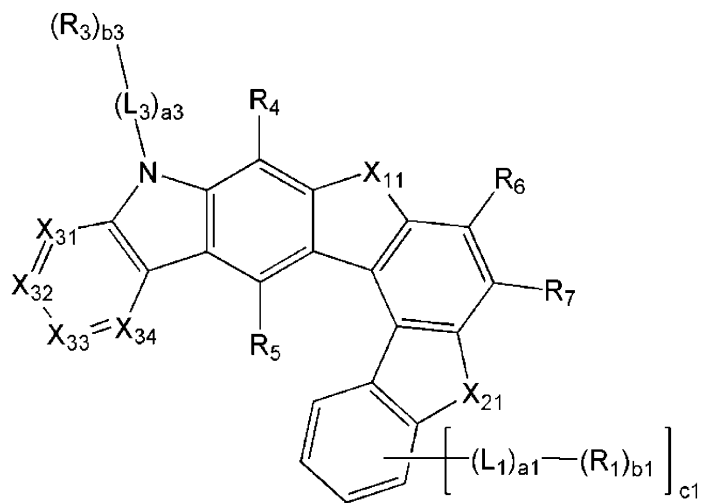
〔化1-1〕



20

30

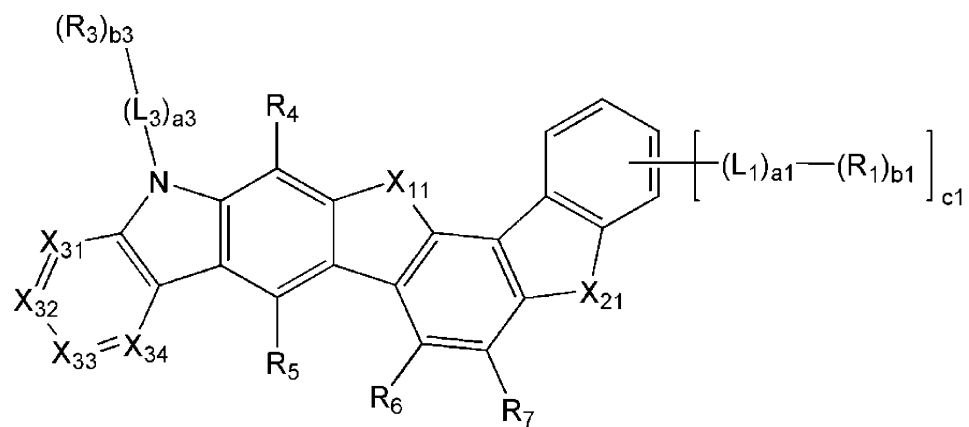
〔化1-2〕



40

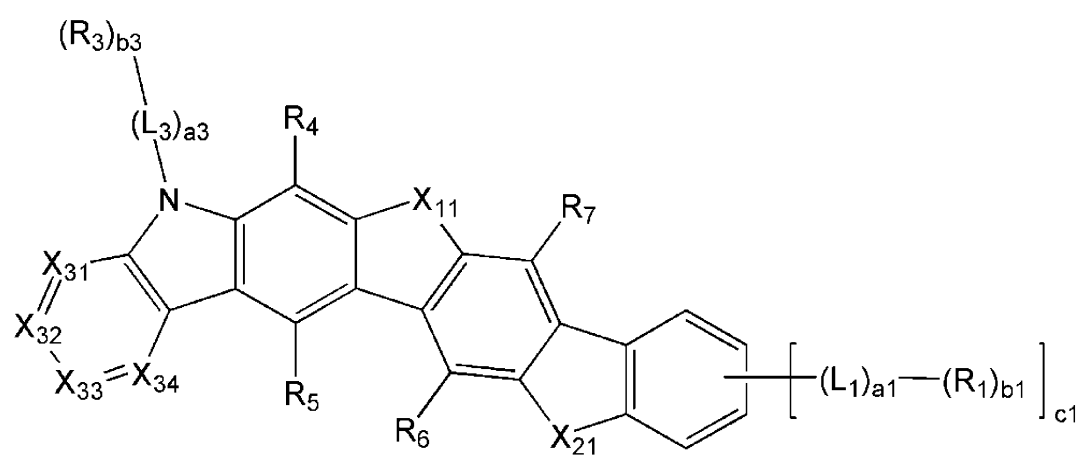
〔化1-3〕

【化(1-4) - (1-6)】



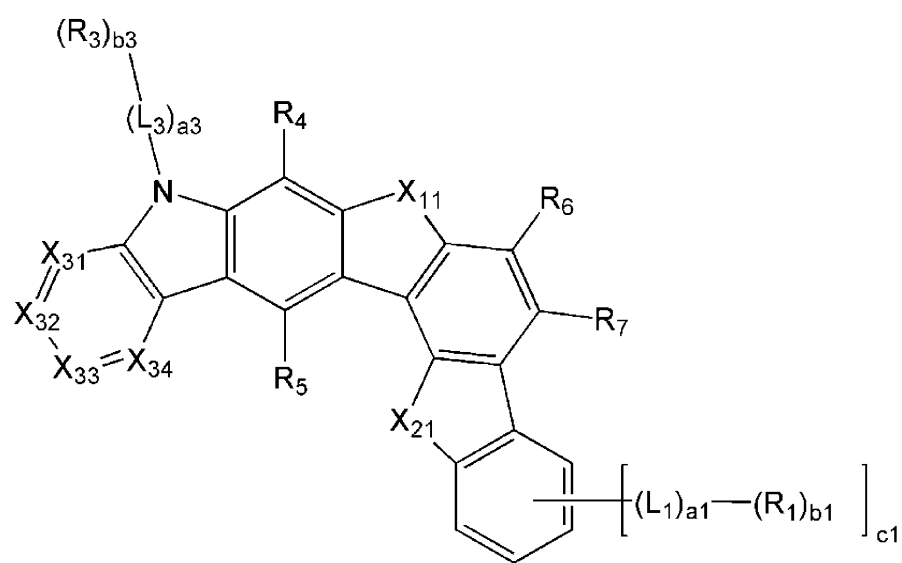
10

〔化1-4〕



20

〔化1-5〕

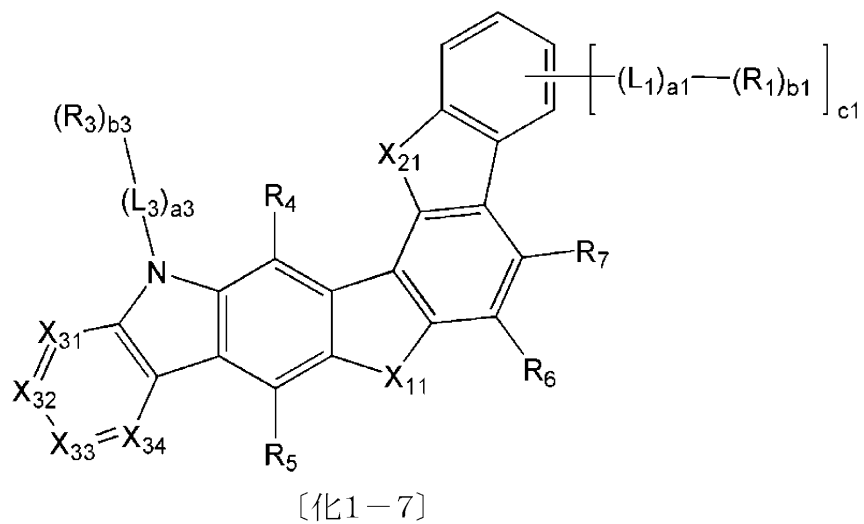


30

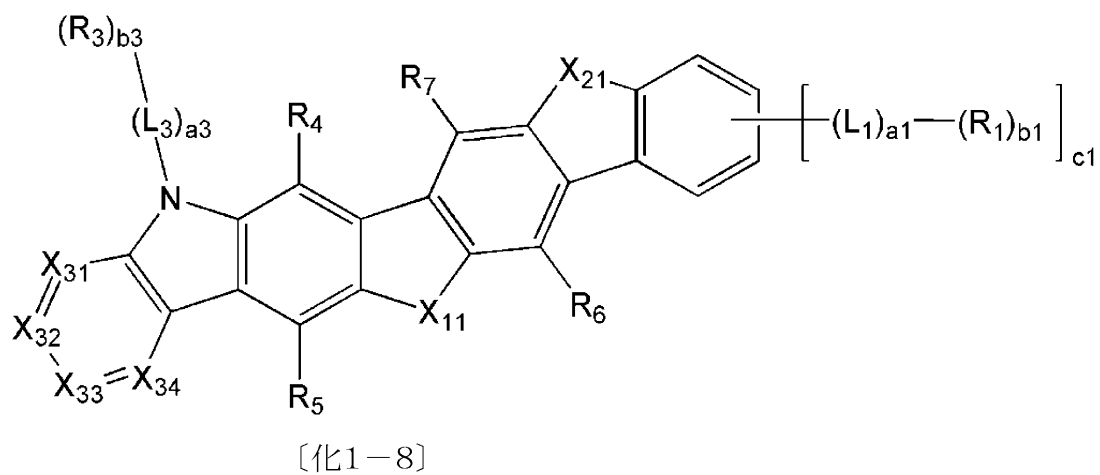
40

〔化1-6〕

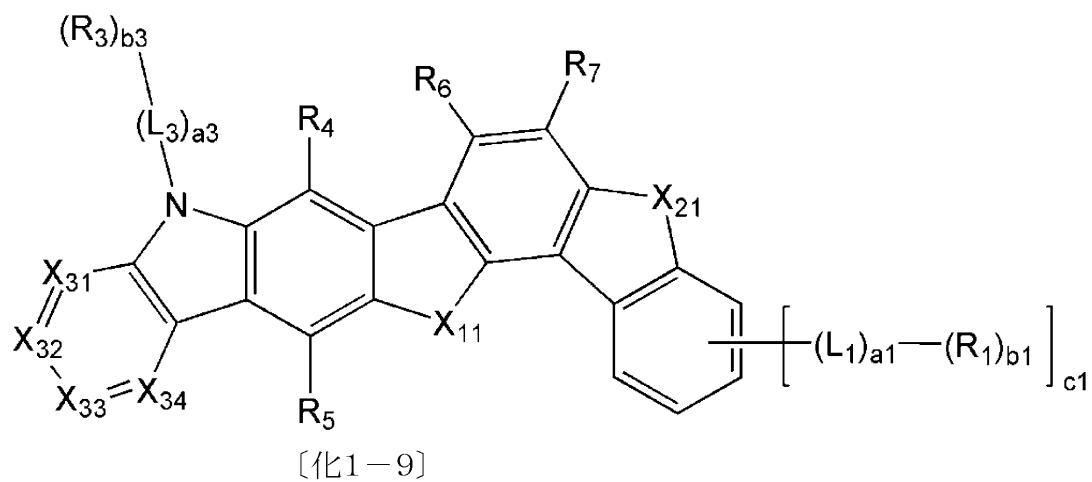
【化(1-7) - (1-9)】



10



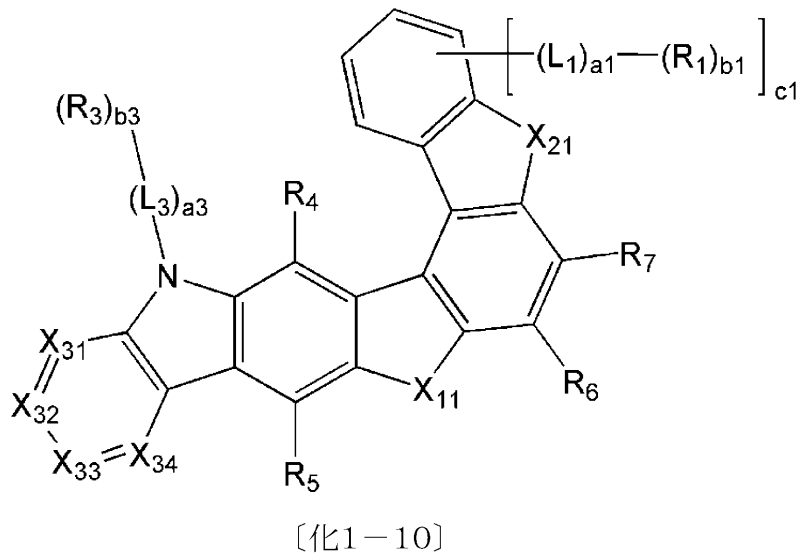
20



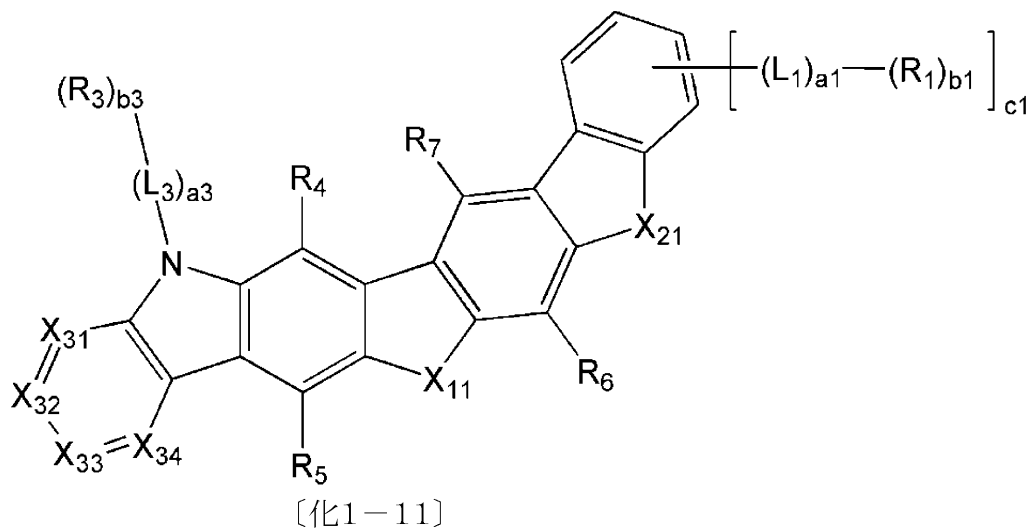
30

40

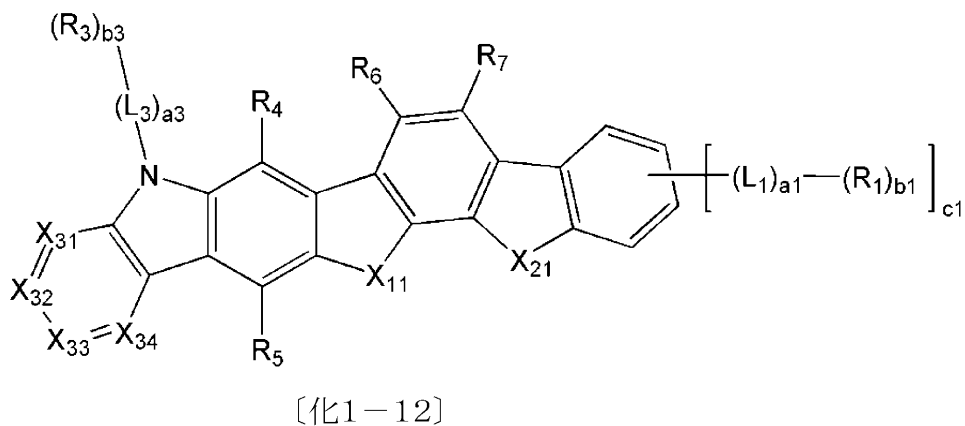
【化(1-10) - (1-12)】



10



20



30

40

【0015】

化学式1、及び1-1~1-12で、 X_{11} は、 $N - [(L_{11})_{a11} - (R_{11})_{b11}]$ 、 S 、 O 、 $S(=O)$ 、 $S(=O)_2$ 、 $C(=O)$ 、 $C(R_{12})(R_{13})$ 、 $Si(R_{12})(R_{13})$ 、 $P(R_{12})$ 、又は $P(=O)(R_{12})$ であり、 X_{21} は、 $N - [(L_{21})_{a21} - (R_{21})_{b21}]$ 、 S 、 O 、 $S(=O)$ 、 $S(=O)_2$ 、 $C(=O)$ 、 $C(R_{22})(R_{23})$ 、 $Si(R_{22})(R_{23})$ 、 $P(R_{22})$ 、又は

50

P (=O) (R_{2 2}) である。

【0016】

一具現例によれば、化学式 1、及び 1-1 ~ 1-12 で、X_{1 1} は、N-[(L_{1 1})_{a 1 1}-(R_{1 1})_{b 1 1}]、S、O、C(R_{1 2})(R_{1 3})、又は Si(R_{1 2})(R_{1 3}) であり、X_{2 1} は、N-[(L_{2 1})_{a 2 1}-(R_{2 1})_{b 2 1}]、S、O、C(R_{2 2})(R_{2 3})、又は Si(R_{2 2})(R_{2 3}) であるが、それに限定されるものではない。

【0017】

化学式 1、及び 1-1 ~ 1-12 で、X_{3 1} ~ X_{3 4} は、互いに独立して、N又はC-[(L₂)_{a 2}-(R₂)_{b 2}] である。

10

【0018】

化学式 1、及び 1-1 ~ 1-12 で、X_{3 1} ~ X_{3 4} のうちの 2 以上が C-[(L₂)_{a 2}-(R₂)_{b 2}] である場合、それらは、互いに異なるか、或いは同一である。

【0019】

一具現例によれば、化学式 1、及び 1-1 ~ 1-12 で、X_{3 1} ~ X_{3 4} は、いずれも C-[(L₂)_{a 2}-(R₂)_{b 2}] である。

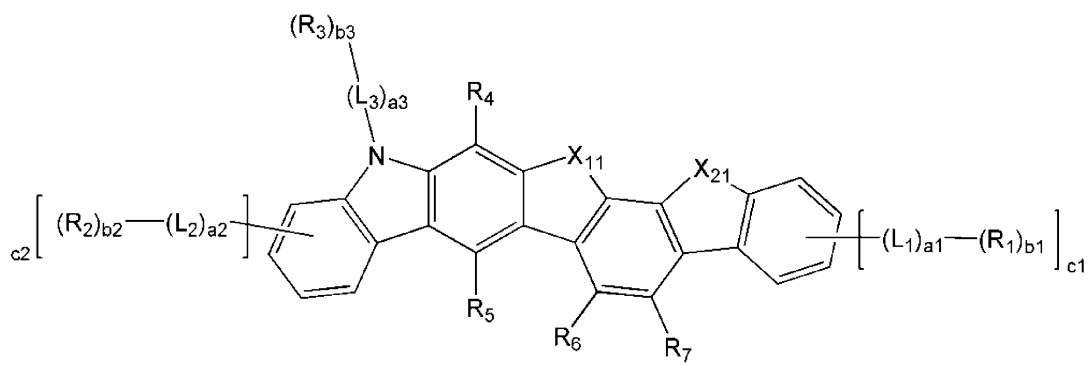
【0020】

従って、縮合環化合物は、下記化学式 1A-1 ~ 1A-12 のうちのいずれか一つで示される。

【0021】

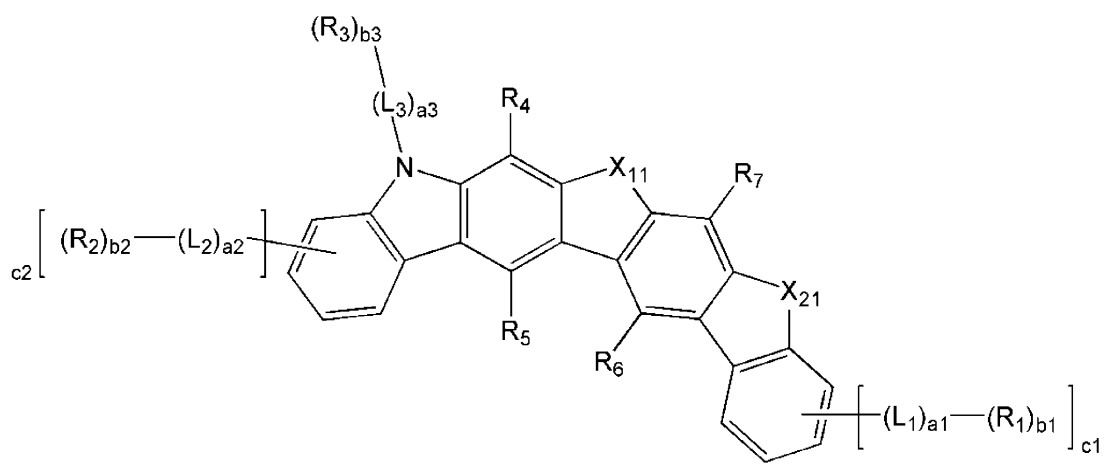
20

【化 (1 A - 1) - (1 A - 3) 】



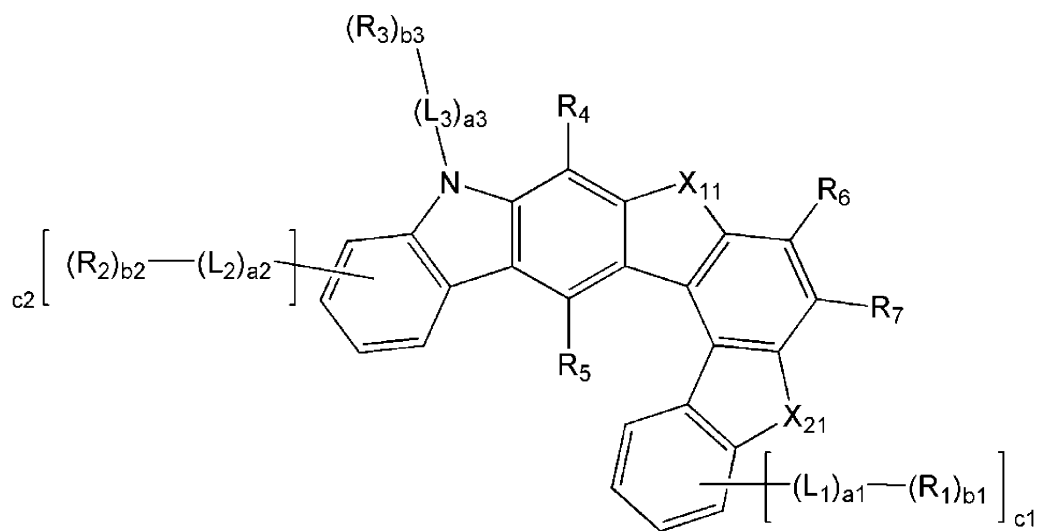
10

〔化1A-1〕



20

〔化1A-2〕

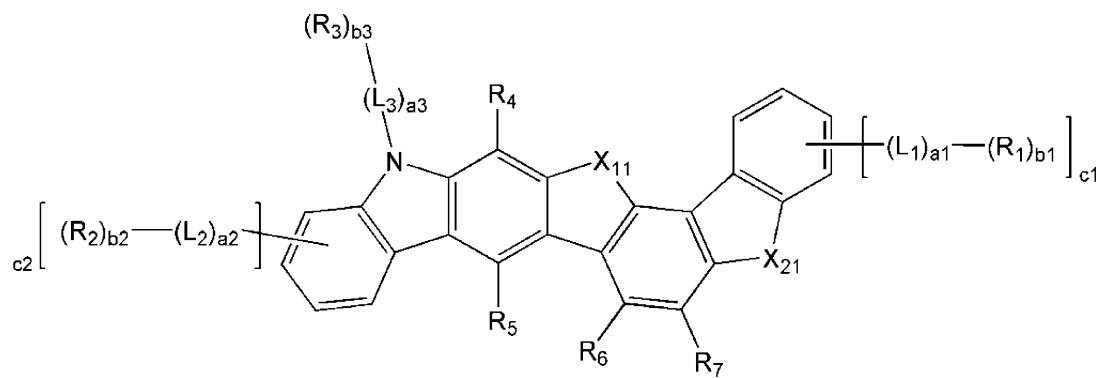


30

40

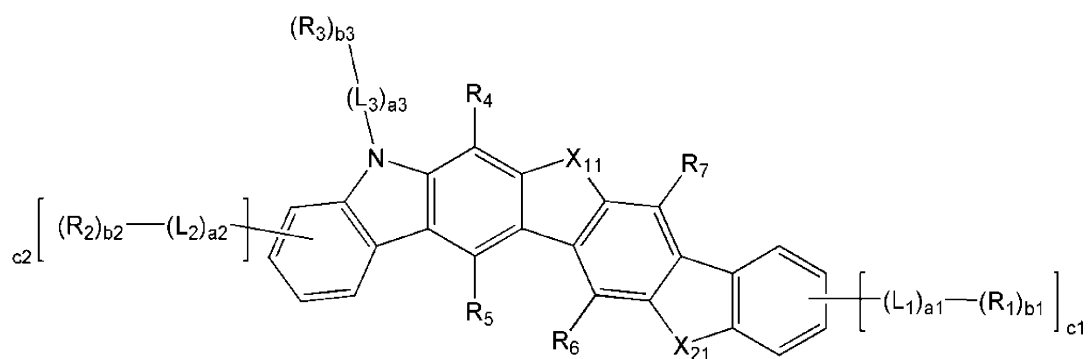
〔化1A-3〕

【化 (1 A - 4) - (1 A - 6) 】



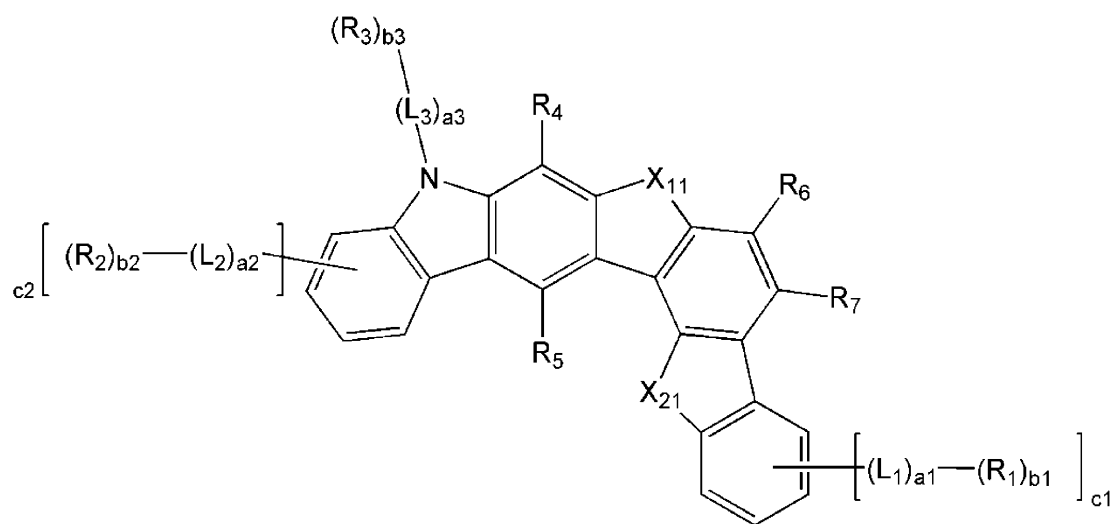
10

〔化1A-4〕



20

〔化1A-5〕

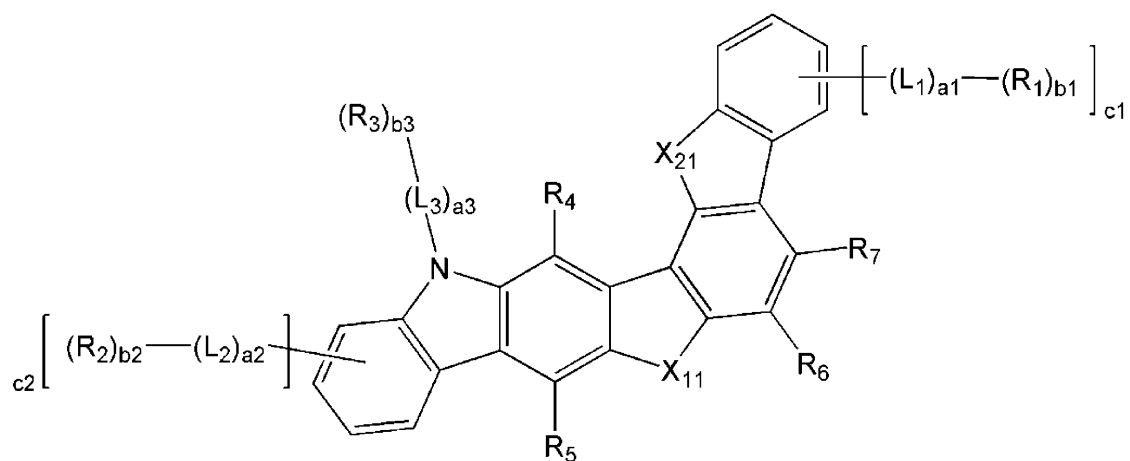


30

〔化1A-6〕

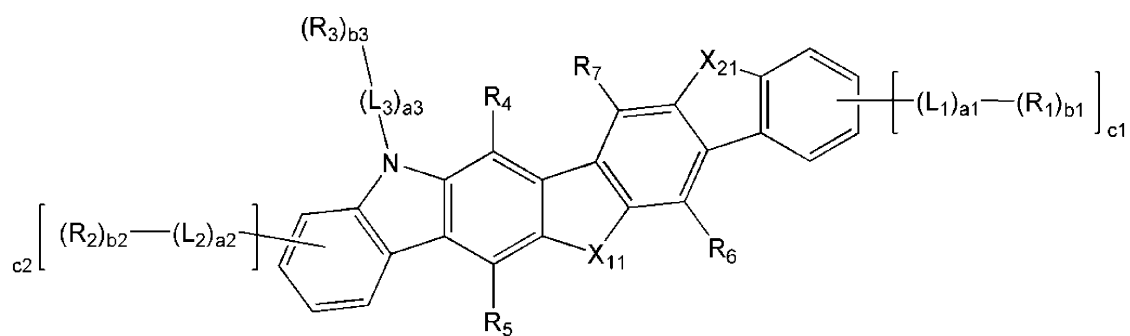
40

【化(1A-7) - (1A-9)】



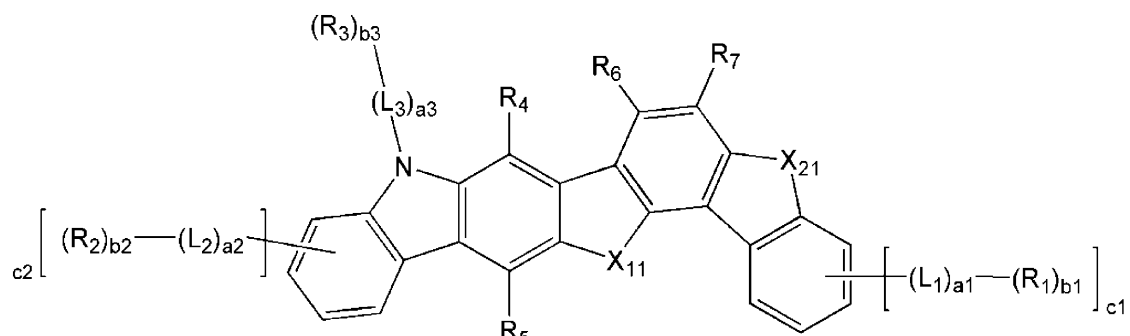
〔化1A-7〕

10



〔化1A-8〕

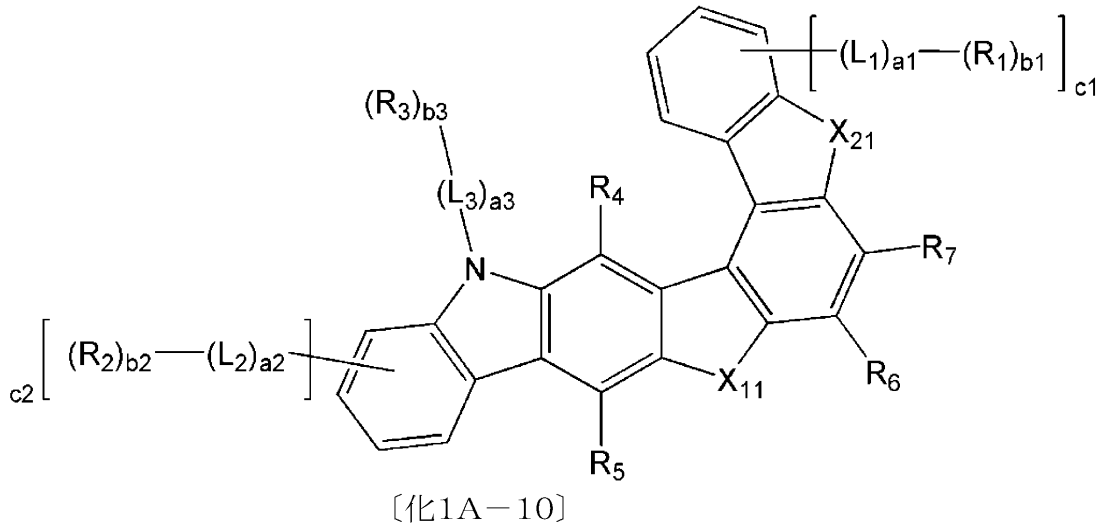
20



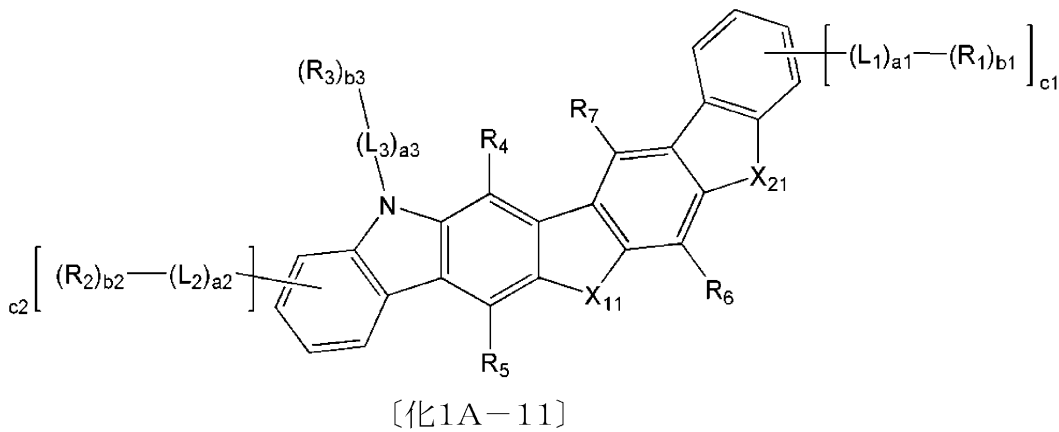
〔化1A-9〕

30

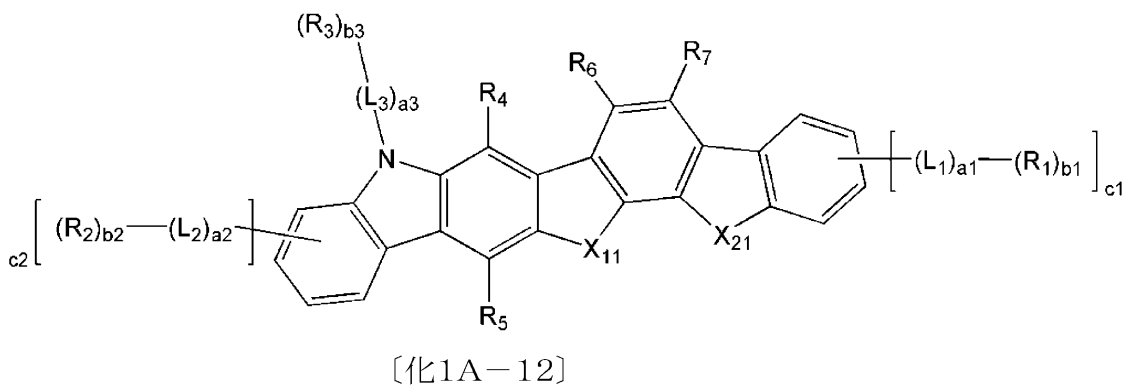
【化(1A-10) - (1A-12)】



10



20



30

【0022】

40

化学式1A-1～1A-12で、 X_{11} 、 X_{21} 、 $L_1 \sim L_3$ 、 $a_1 \sim a_3$ 、 $R_1 \sim R_7$ 、及び c_1 に係る説明は、本明細書に記載した箇所を参照し、 c_2 は、1～4の整数のうちから選択される。

【0023】

縮合環化合物が、

- i) 化学式1-2で、 X_{11} が $C(R_{12})(R_{13})$ である場合、 X_{21} は、 $N-[(L_{21})_{a_{21}}-(R_{21})_{b_{21}}]$ でなく、
- ii) 化学式1-2で、 X_{11} が $N-[(L_{11})_{a_{11}}-(R_{11})_{b_{11}}]$ である場合、 X_{21} は、 $N-[(L_{21})_{a_{21}}-(R_{21})_{b_{21}}]$ でなく且つ $C(R_{22})(R_{23})$ でなく、

50

i i i) 化学式 1-4 で、 X_{11} が $C(R_{12})(R_{13})$ である場合、 X_{21} は、 $N - [(L_{21})_{a21} - (R_{21})_{b21}]$ でなく、

i v) 化学式 1-8 で、 X_{11} が $C(R_{12})(R_{13})$ である場合、 X_{21} は、 $N - [(L_{21})_{a21} - (R_{21})_{b21}]$ でなく且つ $C(R_{22})(R_{23})$ でなく、

v) 化学式 1-8 で、 X_{11} が $N - [(L_{11})_{a11} - (R_{11})_{b11}]$ である場合、 X_{21} は、 $C(R_{22})(R_{23})$ でなく、

v i) 化学式 1-8 で、 X_{11} が S である場合、 X_{21} は、 $N - [(L_{21})_{a21} - (R_{21})_{b21}]$ でなく、

v i i) 化学式 1-8 で、 X_{11} が $Si(R_{12})(R_{13})$ である場合、 X_{21} は、 $N - [(L_{21})_{a21} - (R_{21})_{b21}]$ でなく、

v i i i) 化学式 1-11 で、 X_{11} が $N - [(L_{11})_{a11} - (R_{11})_{b11}]$ である場合、 X_{21} は、 $C(R_{22})(R_{23})$ でない。

【0024】

従って、縮合環化合物が、化学式 1-2 で示される場合、下記化学式 1A-2-1 ~ 1A-2-22 のうちのいずれか一つで示され、縮合環化合物が、化学式 1-4 で示される場合、下記化学式 1A-4-1 ~ 1A-4-24 のうちのいずれか一つで示され、縮合環化合物が、化学式 1-8 で示される場合、下記化学式 1A-8-1 ~ 1A-8-20 のうちのいずれか一つで示され、縮合環化合物が、化学式 1-11 で示される場合、下記化学式 1A-11-1 ~ 1A-11-24 のうちのいずれか一つで示されるが、それらに限定されるものではない。

【0025】

【表 1】

化学式番号	当該化学式のバックボーン	当該化学式のバックボーンのうち X_{11}	当該化学式のバックボーンのうち X_{12}
1A-2-1	1A-2	$C(R_{12})(R_{13})$	$C(R_{22})(R_{23})$
1A-2-2	1A-2	$C(R_{12})(R_{13})$	O
1A-2-3	1A-2	$C(R_{12})(R_{13})$	S
1A-2-4	1A-2	$C(R_{12})(R_{13})$	$Si(R_{22})(R_{23})$
1A-2-5	1A-2	$N-[(L_{11})_{a11}-(R_{11})_{b11}]$	O
1A-2-6	1A-2	$N-[(L_{11})_{a11}-(R_{11})_{b11}]$	S
1A-2-7	1A-2		$Si(R_{22})(R_{23})$
1A-2-8	1A-2	O	$C(R_{22})(R_{23})$
1A-2-9	1A-2	O	$N-[(L_{21})_{a21}-(R_{21})_{b21}]$
1A-2-10	1A-2	O	O
1A-2-11	1A-2	O	S
1A-2-12	1A-2	O	$Si(R_{22})(R_{23})$
1A-2-13	1A-2	S	$C(R_{22})(R_{23})$
1A-2-14	1A-2	S	$N-[(L_{21})_{a21}-(R_{21})_{b21}]$
1A-2-15	1A-2	S	O
1A-2-16	1A-2	S	S
1A-2-17	1A-2	S	$Si(R_{22})(R_{23})$
1A-2-18	1A-2	$Si(R_{12})(R_{13})$	$C(R_{22})(R_{23})$
1A-2-19	1A-2	$Si(R_{12})(R_{13})$	$N-[(L_{21})_{a21}-(R_{21})_{b21}]$
1A-2-20	1A-2	$Si(R_{12})(R_{13})$	O
1A-2-21	1A-2	$Si(R_{12})(R_{13})$	S
1A-2-22	1A-2	$Si(R_{12})(R_{13})$	$Si(R_{22})(R_{23})$
1A-4-1	1A-4	$C(R_{12})(R_{13})$	$C(R_{22})(R_{23})$
1A-4-2	1A-4	$C(R_{12})(R_{13})$	O
1A-4-3	1A-4	$C(R_{12})(R_{13})$	S
1A-4-4	1A-4	$C(R_{12})(R_{13})$	$Si(R_{22})(R_{23})$
1A-4-5	1A-4	$N-[(L_{11})_{a11}-(R_{11})_{b11}]$	$C(R_{22})(R_{23})$
1A-4-6	1A-4	$N-[(L_{11})_{a11}-(R_{11})_{b11}]$	$N-[(L_{21})_{a21}-(R_{21})_{b21}]$
1A-4-7	1A-4	$N-[(L_{11})_{a11}-(R_{11})_{b11}]$	O
1A-4-8	1A-4	$N-[(L_{11})_{a11}-(R_{11})_{b11}]$	S
1A-4-9	1A-4	$N-[(L_{11})_{a11}-(R_{11})_{b11}]$	$Si(R_{22})(R_{23})$
1A-4-10	1A-4	O	$C(R_{22})(R_{23})$
1A-4-11	1A-4	O	$N-[(L_{21})_{a21}-(R_{21})_{b21}]$
1A-4-12	1A-4	O	O
1A-4-13	1A-4	O	S
1A-4-14	1A-4	O	$Si(R_{22})(R_{23})$
1A-4-15	1A-4	S	$C(R_{22})(R_{23})$
1A-4-16	1A-4	S	$N-[(L_{21})_{a21}-(R_{21})_{b21}]$
1A-4-17	1A-4	S	O
1A-4-18	1A-4	S	S
1A-4-19	1A-4	S	$Si(R_{22})(R_{23})$
1A-4-20	1A-4	$Si(R_{12})(R_{13})$	$C(R_{22})(R_{23})$
1A-4-21	1A-4	$Si(R_{12})(R_{13})$	$N-[(L_{21})_{a21}-(R_{21})_{b21}]$
1A-4-22	1A-4	$Si(R_{12})(R_{13})$	O

10

20

30

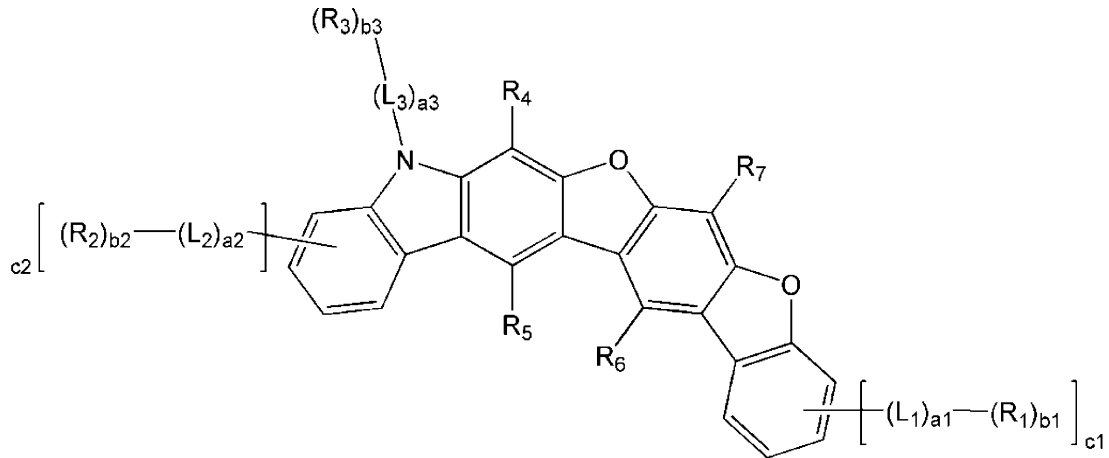
40

1A-4-23	1A-4	$\text{Si}(\text{R}_{12}) (\text{R}_{13})$	S	10
1A-4-24	1A-4	$\text{Si}(\text{R}_{12}) (\text{R}_{13})$	$\text{Si}(\text{R}_{22}) (\text{R}_{23})$	
1A-8-1	1A-8	$\text{C}(\text{R}_{12}) (\text{R}_{13})$	O	
1A-8-2	1A-8	$\text{C}(\text{R}_{12}) (\text{R}_{13})$	S	
1A-8-3	1A-8	$\text{C}(\text{R}_{12}) (\text{R}_{13})$	$\text{Si}(\text{R}_{22}) (\text{R}_{23})$	
1A-8-4	1A-8	$\text{N}-[(\text{L}_{11})_{a11} - (\text{R}_{11})_{b11}]$	$\text{N}-[(\text{L}_{21})_{a21} - (\text{R}_{21})_{b21}]$	
1A-8-5	1A-8	$\text{N}-[(\text{L}_{11})_{a11} - (\text{R}_{11})_{b11}]$	O	
1A-8-6	1A-8	$\text{N}-[(\text{L}_{11})_{a11} - (\text{R}_{11})_{b11}]$	S	
1A-8-7	1A-8	$\text{N}-[(\text{L}_{11})_{a11} - (\text{R}_{11})_{b11}]$	$\text{Si}(\text{R}_{22}) (\text{R}_{23})$	
1A-8-8	1A-8	O	$\text{C}(\text{R}_{22}) (\text{R}_{23})$	
1A-8-9	1A-8	O	$\text{N}-[(\text{L}_{21})_{a21} - (\text{R}_{21})_{b21}]$	20
1A-8-10	1A-8	O	O	
1A-8-11	1A-8	O	S	
1A-8-12	1A-8	O	$\text{Si}(\text{R}_{22}) (\text{R}_{23})$	
1A-8-13	1A-8	S	$\text{C}(\text{R}_{22}) (\text{R}_{23})$	
1A-8-14	1A-8	S	O	
1A-8-15	1A-8	S	S	
1A-8-16	1A-8	S	$\text{Si}(\text{R}_{22}) (\text{R}_{23})$	
1A-8-17	1A-8	$\text{Si}(\text{R}_{12}) (\text{R}_{13})$	$\text{C}(\text{R}_{22}) (\text{R}_{23})$	
1A-8-18	1A-8	$\text{Si}(\text{R}_{12}) (\text{R}_{13})$	O	
1A-8-19	1A-8	$\text{Si}(\text{R}_{12}) (\text{R}_{13})$	S	30
1A-8-20	1A-8	$\text{Si}(\text{R}_{12}) (\text{R}_{13})$	$\text{Si}(\text{R}_{22}) (\text{R}_{23})$	
1A-11-1	1A-11	$\text{C}(\text{R}_{12}) (\text{R}_{13})$	$\text{C}(\text{R}_{22}) (\text{R}_{23})$	
1A-11-2	1A-11	$\text{C}(\text{R}_{12}) (\text{R}_{13})$	$\text{N}-[(\text{L}_{21})_{a21} - (\text{R}_{21})_{b21}]$	
1A-11-3	1A-11	$\text{C}(\text{R}_{12}) (\text{R}_{13})$	O	
1A-11-4	1A-11	$\text{C}(\text{R}_{12}) (\text{R}_{13})$	S	
1A-11-5	1A-11	$\text{C}(\text{R}_{12}) (\text{R}_{13})$	$\text{Si}(\text{R}_{22}) (\text{R}_{23})$	
1A-11-6	1A-11	$\text{N}-[(\text{L}_{11})_{a11} - (\text{R}_{11})_{b11}]$	$\text{N}-[(\text{L}_{21})_{a21} - (\text{R}_{21})_{b21}]$	
1A-11-7	1A-11	$\text{N}-[(\text{L}_{11})_{a11} - (\text{R}_{11})_{b11}]$	O	
1A-11-8	1A-11	$\text{N}-[(\text{L}_{11})_{a11} - (\text{R}_{11})_{b11}]$	S	
1A-11-9	1A-11	$\text{N}-[(\text{L}_{11})_{a11} - (\text{R}_{11})_{b11}]$	$\text{Si}(\text{R}_{22}) (\text{R}_{23})$	40
1A-11-10	1A-11	O	$\text{C}(\text{R}_{22}) (\text{R}_{23})$	
1A-11-11	1A-11	O	$\text{N}-[(\text{L}_{21})_{a21} - (\text{R}_{21})_{b21}]$	
1A-11-12	1A-11	O	O	
1A-11-13	1A-11	O	S	
1A-11-14	1A-11	O	$\text{Si}(\text{R}_{22}) (\text{R}_{23})$	
1A-11-15	1A-11	S	$\text{C}(\text{R}_{22}) (\text{R}_{23})$	
1A-11-16	1A-11	S	$\text{N}-[(\text{L}_{21})_{a21} - (\text{R}_{21})_{b21}]$	
1A-11-17	1A-11	S	O	
1A-11-18	1A-11	S	S	
1A-11-19	1A-11	S	$\text{Si}(\text{R}_{22}) (\text{R}_{23})$	50
1A-11-20	1A-11	$\text{Si}(\text{R}_{12}) (\text{R}_{13})$	$\text{C}(\text{R}_{22}) (\text{R}_{23})$	
1A-11-21	1A-11	$\text{Si}(\text{R}_{12}) (\text{R}_{13})$	$\text{N}-[(\text{L}_{21})_{a21} - (\text{R}_{21})_{b21}]$	
1A-11-22	1A-11	$\text{Si}(\text{R}_{12}) (\text{R}_{13})$	O	
1A-11-23	1A-11	$\text{Si}(\text{R}_{12}) (\text{R}_{13})$	S	
1A-11-24	1A-11	$\text{Si}(\text{R}_{12}) (\text{R}_{13})$	$\text{Si}(\text{R}_{22}) (\text{R}_{23})$	

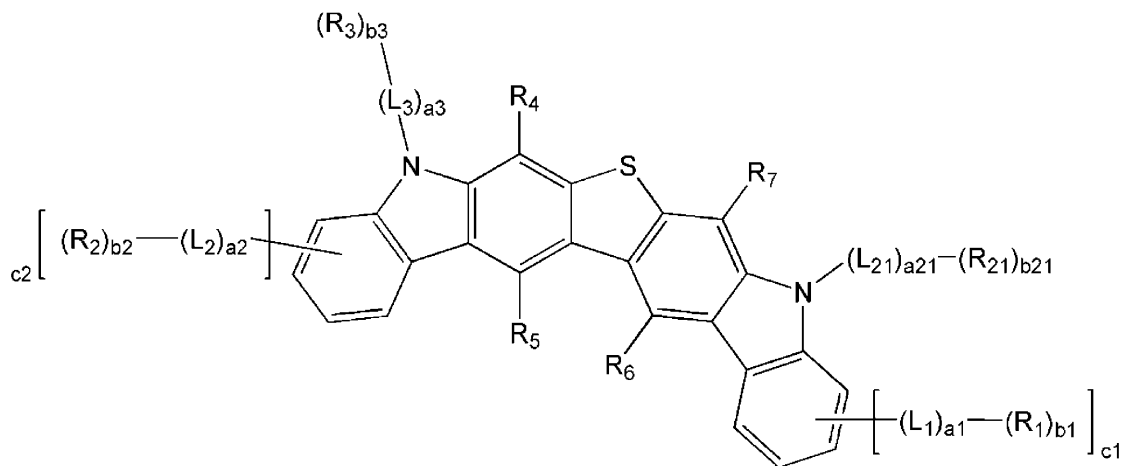
例えば、化学式 1 A-2-10 は、化学式 1 A-2 のバックボーンを有するが、X₁₁ は、O であり、X₁₂ は、O である化学式であり、化学式 1 A-2-14 は、化学式 1 A-2 のバックボーンを有するが、X₁₁ は、S であり、X₁₂ は、N-[(L₂₁)_{a21}-(R₂₁)_{b21}] である化学式である。

【0027】

【化(1A-2-10)-(1A-2-14)】



[化1A-2-10]



[化1A-2-14]

【0028】

化学式 1 A-2-1~1 A-2-22、化学式 1 A-4-1~1 A-4-24、化学式 1 A-8-1~1 A-8-20、及び化学式 1 A-11-1~1 A-11-24 の構造は、上述の箇所を参照して理解される。

【0029】

一具現例によれば、縮合環化合物は、

化学式 1-1~1-7、及び化学式 1-9~1-12 のうちのいずれか一つで示されるが、

化学式 1-1~1-7、及び化学式 1-9~1-12 で、

X₁₁ 及び X₁₂ は、互いに独立して、O 又は S であるか、

X₁₁ は、O 又は S であり、X₁₂ は、N-[(L₂₁)_{a21}-(R₂₁)_{b21}] 又は C(R₂₂)(R₂₃) であるか、

X₁₁ は、N-[(L₁₁)_{a11}-(R₁₁)_{b11}] 又は C(R₁₂)(R₁₃) であり、X₁₂ は、O 又は S であるか、或いは

X₁₁ は、C(R₁₂)(R₁₃) であり、X₁₂ は、C(R₂₂)(R₂₃) である

。

【0030】

他の具現例によれば、縮合環化合物は、

化学式 1 A-1 ~ 1 A-7、及び化学式 1 A-9 ~ 1 A-12 のうちのいずれか一つで示されるが、

化学式 1 A-1 ~ 1 A-7、及び化学式 1 A-9 ~ 1 A-12 で、

X_{11} 及び X_{12} は、互いに独立して、O 又は S であるか、

X_{11} は、O 又は S であり、 X_{12} は、 $N - [(L_{21})_{a21} - (R_{21})_{b21}]$ 又は $C(R_{22})(R_{23})$ であるか、

X_{11} は、 $N - [(L_{11})_{a11} - (R_{11})_{b11}]$ 又は $C(R_{12})(R_{13})$ であり、 X_{12} は、O 又は S であるか、或いは 10

X_{11} は、 $C(R_{12})(R_{13})$ であり、 X_{12} は、 $C(R_{22})(R_{23})$ である。

。

【0031】

更に他の具現例によれば、縮合環化合物は、化学式 1-1、1-3 ~ 1-7、及び化学式 1-9 ~ 1-11 のうちのいずれか一つで示され、化学式 1-1、1-3 ~ 1-7、及び化学式 1-9 ~ 1-11 で、 X_{11} は、 $N - [(L_{11})_{a11} - (R_{11})_{b11}]$ であり、 X_{12} は、 $N - [(L_{21})_{a21} - (R_{21})_{b21}]$ である。

【0032】

更に他の具現例によれば、縮合環化合物は、化学式 1 A-1、1 A-3 ~ 1 A-7、及び化学式 1 A-9 ~ 1 A-11 のうちのいずれか一つで示され、化学式 1 A-1、1 A-3 ~ 1 A-7、及び化学式 1 A-9 ~ 1 A-11 で、 X_{11} は、 $N - [(L_{11})_{a11} - (R_{11})_{b11}]$ であり、 X_{12} は、 $N - [(L_{21})_{a21} - (R_{21})_{b21}]$ である。 20

【0033】

更に他の具現例によれば、縮合環化合物は、化学式 1-2 で示され、化学式 1-2 で、 X_{11} は、O 又は S であり、 X_{12} は、O、S、又は $N - [(L_{21})_{a21} - (R_{21})_{b21}]$ である。

【0034】

更に他の具現例によれば、縮合環化合物は、化学式 1 A-2 で示され、化学式 1 A-2 で、 X_{11} は、O 又は S であり、 X_{12} は、O、S、又は $N - [(L_{21})_{a21} - (R_{21})_{b21}]$ である。 30

【0035】

一具現例によれば、縮合環化合物は、化学式 1-1 ~ 1-7、及び化学式 1-9 ~ 1-12 のうちのいずれか一つで示されるが、化学式 1-1 ~ 1-7、及び化学式 1-9 ~ 1-12 で、 X_{11} は、O 又は S である。 X_{11} が O 又は S である縮合環化合物は、向上した平面性を有し、O 及び S の孤立 (lone pair) 電子対によって、優秀な電荷移動性を有する。

【0036】

化学式 1、1-1 ~ 1-12、及び 1 A-1 ~ 1 A-12、並びに表 1 の化学式で、 $L_1 \sim L_3$ 、 L_{11} 、及び L_{21} は、互いに独立して、置換若しくは非置換の $C_3 - C_{10}$ シクロアルキレン基、置換若しくは非置換の $C_1 - C_{10}$ ヘテロシクロアルキレン基、置換若しくは非置換の $C_3 - C_{10}$ シクロアルケニレン基、置換若しくは非置換の $C_1 - C_{10}$ ヘテロシクロアルケニレン基、置換若しくは非置換の $C_6 - C_{60}$ アリーレン基、置換若しくは非置換の $C_1 - C_{60}$ ヘテロアリーレン基、置換若しくは非置換の二価非芳香族縮合多環基 (substituted or unsubstituted divalent non-aromatic condensed polycyclic group)、及び置換若しくは非置換の二価非芳香族ヘテロ縮合多環基 (substituted or unsubstituted divalent non-aromatic condensed heteropolycyclic group) のうち 40 50

から選択される。

【0037】

一具現例によれば、化学式1、1-1~1-12、及び1A-1~1A-12、並びに表1の化学式で、 $L_1 \sim L_3$ 、 L_{11} 、及び L_{21} は、互いに独立して、

フェニレン基 (phenylene)、ペンタレニレン基 (pentalenylene)、インデニレン基 (indenylene)、ナフチレン基 (naphthylene)、アズレニレン基 (azulenylene)、ヘプタレニレン基 (heptalenylene)、インダセニレン基 (indacenylene)、アセナフチレン基 (acenaphthylene)、フルオレニレン基 (fluorenylene)、スピロフルオレニレン基 (spirofluorenylene)、フェナレニレン基 (phenalenylene)、フェナントレニレン基 (phenanthrenylene)、アントラセニレン基 (anthracenylene)、フルオランテニレン基 (fluoranthenylene)、トリフェニレニレン基 (triphenylene)、ピレニレン基 (pyrenylene)、クリセニレン基 (chrysenylene)、ナフタセニレン基 (naphthacenylene)、ピセニレン基 (picenylene)、ペリレニレン基 (perylene)、ペンタフェニレン基 (pentaphenylene)、ヘキサセニレン基 (hexacenylene)、ピロリレン基 (pyrrolylene)、イミダゾリレン基 (imidazolylene)、ピラゾリレン基 (pyrazolylene)、ピリジニレン基 (pyridinylene)、ピラジニレン基 (pyrazinylene)、ピリミジニレン基 (pyrimidinylene)、ピリダジニレン基 (pyridazinylene)、イソインドリレン基 (isoindolylene)、インドリレン基 (indolylene)、インダゾリレン基 (indazolylene)、プリニレン基 (purinylene)、キノリニレン基 (quinolinylene)、イソキノリニレン基 (isoquinolinylene)、ベンゾキノリニレン基 (benzoquinolinylene)、フタラジニレン基 (phthalazinylene)、ナフチリジニレン基 (naphthyridinylene)、キノキサリニレン基 (quinoxalinylene)、キナゾリニレン基 (quinazolinylene)、シンノリニレン基 (cinnolinylene)、カルバゾリレン基 (carbazolylene)、フェナントリジニレン基 (phenanthridinylene)、アクリジニレン基 (acridinylene)、フェナントロリニレン基 (phenanthrolinylene)、フェナジニレン基 (phenazinylene)、ベンゾオキサゾリレン基 (benzooxazolylene)、ベンゾイミダゾリレン基 (benzoimidazolylene)、フラニレン基 (furanylene)、ベンゾフラニレン基 (benzofuranylene)、チオフェニレン基 (thiophenylene)、ベンゾチオフェニレン基 (benzothiophenylene)、チアゾリレン基 (thiazolylene)、イソチアゾリレン基 (isothiazolylene)、ベンゾチアゾリレン基 (benzothiazolylene)、イソキサゾリレン基 (isoxazolylene)、オキサゾリレン基 (oxazolylene)、トリアゾリレン基 (triazolylene)、テトラゾリレン基 (tetrazolylene)、オキサジアゾリレン基 (oxadiazolylene)、トリアジニレン基 (triazinylene)、ジベンゾフラニレン基 (dibenzofuranylene)、ジベンゾチオフェニレン基 (dibenzothiophenylene)、ベンゾカルバゾリレン基 (benzocarbazolylene)、ジベンゾカルバゾリレン基 (dibenzocarbazolylene)、イミダゾピリミジニレン基 (imidazopyrimidinylene)、及びイミダゾピリジニレン基 (imidazopyridinylene) ; 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、アミジノ基、ヒドラジン基、ヒドラゾン基、カルボン酸基又はその塩、スルホン酸基又はその塩、リン酸基又はその塩、 $C_1 - C_{20}$ アルキル基、 $C_1 - C_{20}$ アルコキシ基

10

20

30

40

50

、 C_6-C_{20} アリール基、 C_1-C_{20} 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環基、及び-Si (Q_{33}) (Q_{34}) (Q_{35}) のうちの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、フルオラントレニレン基、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、ピロリレン基、イミダゾリレン基、ピラゾリレン基、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、イソインドリレン基、インドリレン基、インダゾリレン基、プリニレン基、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、カルバゾリレン基、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、ベンゾオキサゾリレン基、ベンゾイミダゾリレン基、フラニレン基、ベンゾフラニレン基、チオフェニレン基、ベンゾチオフェニレン基、チアゾリレン基、イソチアゾリレン基、ベンゾチアゾリレン基、イソキサゾリレン基、オキサゾリレン基、トリアゾリレン基、テトラゾリレン基、オキサジアゾリレン基、トリアジニレン基、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、イミダゾピリミジニレン基、及びイミダゾピリジニレン基；のうちから選択され、

10

$Q_{33} \sim Q_{35}$ は、互いに独立して、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、ナフチル基、アントラセニル基、ピレニル基、フェナントレニル基、フルオレニル基、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、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、フタラジニル基、キノキサリニル基、シンノリニル基、及びキナゾリニル基のうちから選択される。

20

【0038】

他の具現例によれば、化学式 1、1-1 $\sim$ 1-12、及び 1A-1 $\sim$ 1A-12、並びに表 1 の化学式で、 $L_1 \sim L_3$ 、 L_{11} 、及び L_{21} は、フェニレン基、ナフチレン基、及びトリフェニレン基；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、アミジノ基、ヒドラジン基、ヒドラゾン基、カルボン酸基又はその塩、スルホン酸基又はその塩、リン酸基又はその塩、 C_1-C_{20} アルキル基、 C_1-C_{20} アルコキシ基、フェニル基、ナフチル基、アントラセニル基、トリフェニレニル基、ピレニル基、フェナントレニル基、及びクリセニル基のうちの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、及びトリフェニレン基；のうちから選択されるが、それらに限定されるものではない。

30

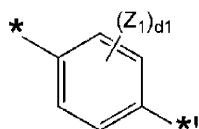
【0039】

更に他の具現例によれば、化学式 1、1-1 $\sim$ 1-12、及び 1A-1 $\sim$ 1A-12、並びに表 1 の化学式で、 $L_1 \sim L_3$ 、 L_{11} 、及び L_{21} は、互いに独立して、化学式 2-1 $\sim$ 2-34 のうちのいずれか一つである。

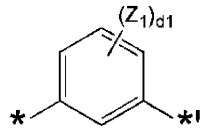
【0040】

40

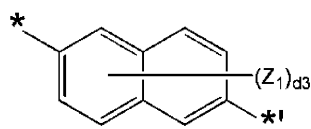
【化(2-1) - (2-19)】



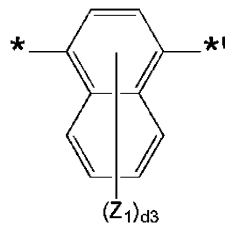
〔化2-1〕



〔化2-2〕

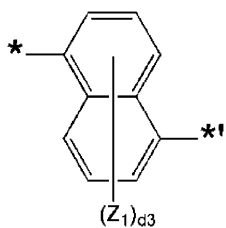


〔化2-3〕

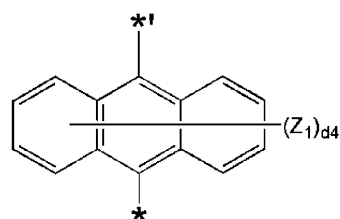


〔化2-4〕

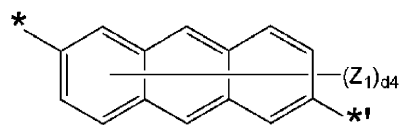
10



〔化2-5〕

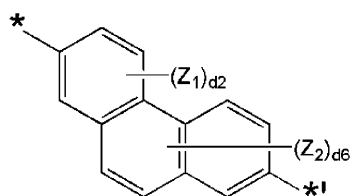


〔化2-6〕

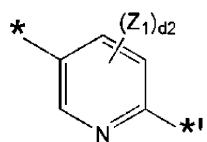


〔化2-7〕

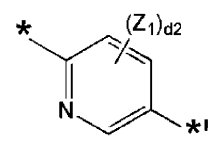
20



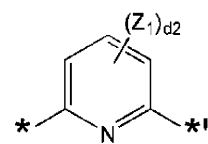
〔化2-8〕



〔化2-9〕

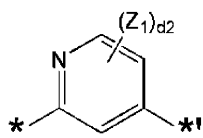


〔化2-10〕

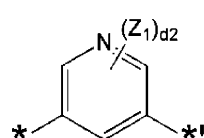


〔化2-11〕

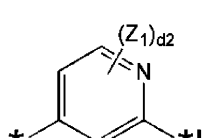
30



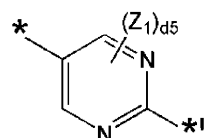
〔化2-12〕



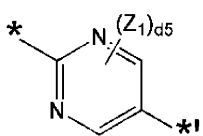
〔化2-13〕



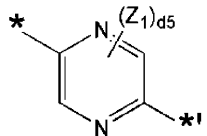
〔化2-14〕



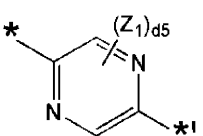
〔化2-15〕



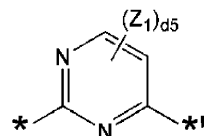
〔化2-16〕



〔化2-17〕



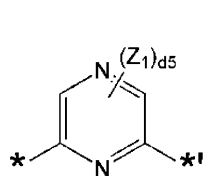
〔化2-18〕



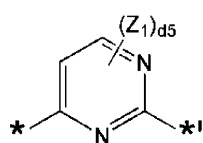
〔化2-19〕

40

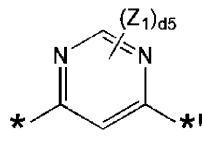
【化(2-20) - (2-34)】



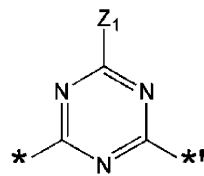
〔化2-20〕



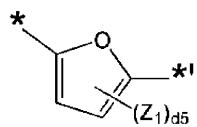
〔化2-21〕



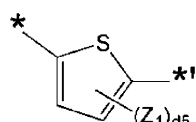
〔化2-22〕



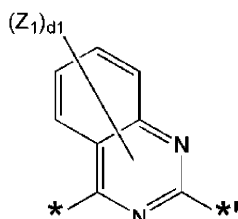
〔化2-23〕



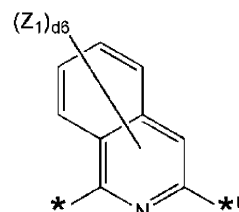
〔化2-24〕



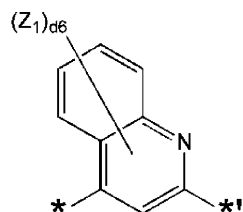
〔化2-25〕



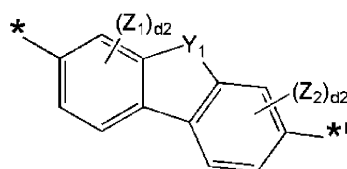
〔化2-26〕



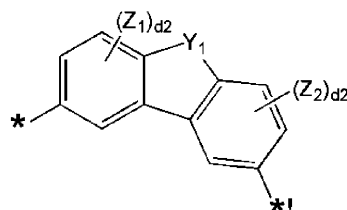
〔化2-27〕



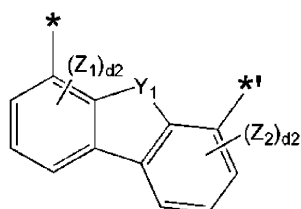
〔化2-28〕



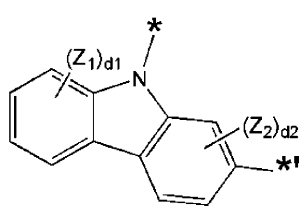
〔化2-29〕



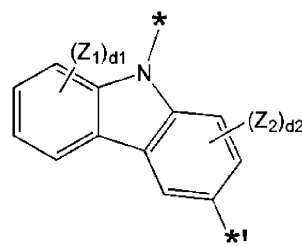
〔化2-30〕



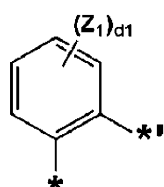
〔化2-31〕



〔化2-32〕



〔化2-33〕



〔化2-34〕

【0041】

化学式 2-1 ~ 2-34 で、

Y_1 は、O、S、 $S(=O)$ 、 $S(=O)_2$ 、 $C(Z_3)(Z_4)$ 、 $N(Z_5)$ 、又は $Si(Z_6)(Z_7)$ であり、

$Z_1 \sim Z_7$ 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、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、カルボン酸基又はその塩、スルホン酸基又はその塩、リン酸基又はその塩、 $C_1 - C_{20}$

10

20

30

40

50

アルキル基、 $C_1 - C_{20}$ アルコキシ基、フェニル基、ナフチル基、アントラセニル基、トリフェニレニル基、ピレニル基、フェナントレニル基、フルオレニル基、クリセニル基、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、ジベンゾフラニル基、ジベンゾチオフェニル基、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、イソキノリニル基、キナゾリニル基、キノキサリニル基、ビフェニル基、及び $S i (Q_{33}) (Q_{34}) (Q_{45})$ のうちから選択され、

$Q_{33} \sim Q_{35}$ は、互いに独立して、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、ナフチル基、アントラセニル基、ピレニル基、フェナントレニル基、フルオレニル基、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、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、フタラジニル基、キノキサリニル基、シンノリニル基、及びキナゾリニル基のうちから選択され、

d_1 は、1～4の整数であり、 d_2 は、1～3の整数であり、 d_3 は、1～6の整数であり、 d_4 は、1～8の整数であり、 d_5 は、1又は2であり、 d_6 は、1～5の整数であり、

及び' は、それぞれ隣接する原子との結合サイトである。

【0042】

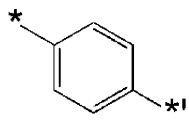
更に他の具現例によれば、化学式 1、 $1-1 \sim 1-12$ 、及び $1A-1 \sim 1A-12$ 、並びに表 1 の化学式で、 $L_1 \sim L_3$ 、 L_{11} 、及び L_{21} は、互いに独立して、化学式 $3-1 \sim 3-21$ で示される群のうちから選択されるが、それらに限定されるものではない。

【0043】

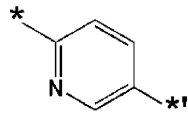
10

20

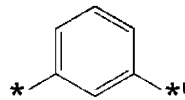
【化(3-1)-(3-21)】



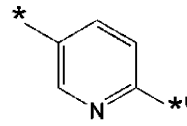
〔化3-1〕



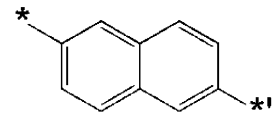
〔化3-2〕



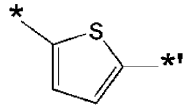
〔化3-3〕



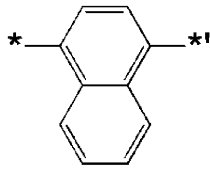
〔化3-4〕



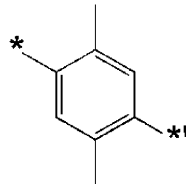
〔化3-5〕



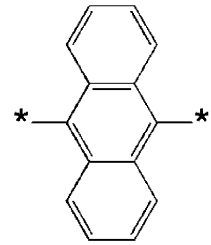
〔化3-6〕



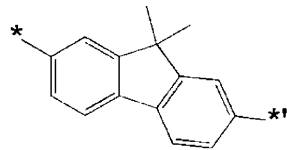
〔化3-7〕



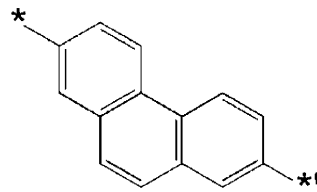
〔化3-8〕



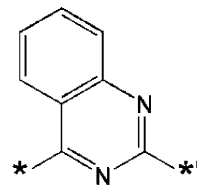
〔化3-9〕



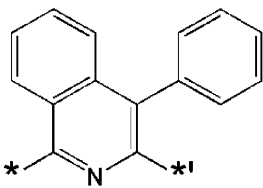
〔化3-10〕



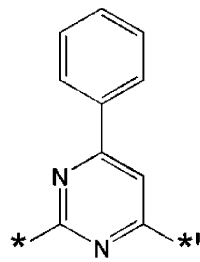
〔化3-11〕



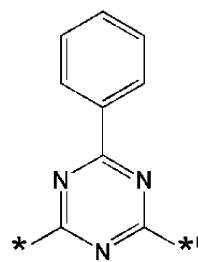
〔化3-12〕



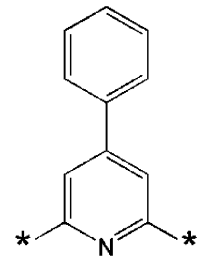
〔化3-13〕



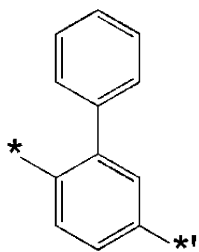
〔化3-14〕



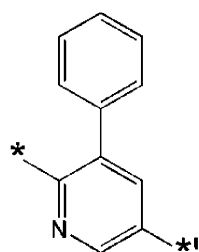
〔化3-15〕



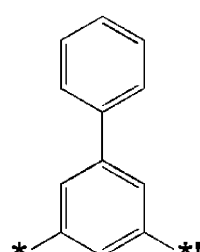
〔化3-16〕



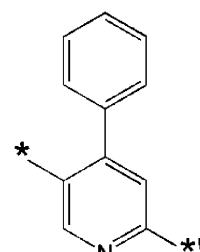
〔化3-17〕



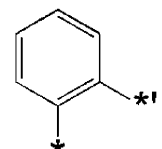
〔化3-18〕



〔化3-19〕



〔化3-20〕



〔化3-21〕

【0044】

及び'は、それぞれ隣接する原子との結合サイトである。

【0045】

更に他の具現例によれば、化学式1、1-1~1-12、及び1A-1~1A-12、並びに表1の化学式で、 $L_1 \sim L_3$ 、 L_{11} 、及び L_{21} は、互いに独立して、

10

20

30

40

50

フェニレン基、ナフチレン基、ピリジニレン基、ピリミジニレン基、及びトリアジニレン基；

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、アミジノ基、ヒドラジン基、ヒドラゾン基、カルボン酸基又はその塩、スルホン酸基又はその塩、リン酸基又はその塩、 C_1-C_{20} アルキル基、 C_1-C_{20} アルコキシ基、フェニル基、ナフチル基、ピリジニル基、ピリミジニル基、及びトリアジニル基のうちの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、ピリジニレン基、ピリミジニレン基、及びトリアジニレン基；のうちから選択されるが、それらに限定されるものではない。

【0046】

化学式1、 $1-1 \sim 1-12$ 、及び $1A-1 \sim 1A-12$ 、並びに表1の化学式で、 a_1 は、 L_1 の個数を示したものであり、0、1、2、3、4、又は5、例えば、0、1、又は2、他の例としては、0又は1である。 a_1 が0である場合、 $-(L_1)_{a_1}-$ は、単一結合になる。 a_1 が2以上である場合、2以上の L_1 は、互いに同じであるか、又は異なる。 a_2 、 a_3 、 a_{11} 、及び a_{21} に係る説明は、 a_1 に係る説明、及び化学式1、 $1-1 \sim 1-12$ 、及び $1A-1 \sim 1A-12$ 、並びに表1の化学式を参照して理解される。

【0047】

化学式1、 $1-1 \sim 1-12$ 、及び $1A-1 \sim 1A-12$ 、並びに表1の化学式で、 $R_1 \sim R_7$ 、 $R_{11} \sim R_{13}$ 、及び $R_{21} \sim R_{23}$ 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、アミジノ基、ヒドラジン基、ヒドラゾン基、カルボン酸基又はその塩、スルホン酸基又はその塩、リン酸基又はその塩、置換若しくは非置換の C_1-C_{60} アルキル基、置換若しくは非置換の C_2-C_{60} アルケニル基、置換若しくは非置換の C_2-C_{60} アルキニル基、置換若しくは非置換の C_1-C_{60} アルコキシ基、置換若しくは非置換の C_3-C_{10} シクロアルキル基、置換若しくは非置換の C_1-C_{10} ヘテロシクロアルキル基、置換若しくは非置換の C_3-C_{10} シクロアルケニル基、置換若しくは非置換の C_1-C_{10} ヘテロシクロアルケニル基、置換若しくは非置換の C_6-C_{60} アリール基、置換若しくは非置換の C_6-C_{60} アリールオキシ基、置換若しくは非置換の C_6-C_{60} アリールチオ基、置換若しくは非置換の C_1-C_{60} ヘテロアリール基、置換若しくは非置換の一価非芳香族縮合多環基、置換若しくは非置換の一価非芳香族ヘテロ縮合多環基、 $-N(Q_1)(Q_2)$ 、 $-Si(Q_3)(Q_4)(Q_5)$ 、及び $-B(Q_6)(Q_7)$ のうちから選択される。

【0048】

一具現例によれば、化学式1、 $1-1 \sim 1-12$ 、及び $1A-1 \sim 1A-12$ 、並びに表1の化学式で、 $R_1 \sim R_7$ 、 $R_{11} \sim R_{13}$ 、及び $R_{21} \sim R_{23}$ 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、アミジノ基、ヒドラジン基、ヒドラゾン基、カルボン酸基又はその塩、スルホン酸基又はその塩、リン酸基又はその塩、置換若しくは非置換の C_1-C_{20} アルキル基、置換若しくは非置換の C_1-C_{20} アルコキシ基、置換若しくは非置換の C_6-C_{20} アリール基、置換若しくは非置換の C_1-C_{20} ヘテロアリール基、置換若しくは非置換の一価非芳香族縮合多環基、置換若しくは非置換の一価非芳香族ヘテロ縮合多環基、及び $-Si(Q_3)(Q_4)(Q_5)$ のうちから選択される。

【0049】

更に他の具現例によれば、化学式1、 $1-1 \sim 1-12$ 、及び $1A-1 \sim 1A-12$ 、並びに表1の化学式で、 $i) X_{11}$ が $N-[(L_{11})_{a_{11}}-(R_{11})_{b_{11}}]$ である場合、 R_3 及び R_{11} のうちの少なくとも一つ、 $ii) X_{12}$ が $N-[(L_{21})_{a_{11}}-(R_{21})_{b_{11}}]$ である場合、 R_3 及び R_{21} のうちの少なくとも一つ、及び $iii) X_{11}$ が $N-[(L_{11})_{a_{11}}-(R_{11})_{b_{11}}]$ であり、 X_{12} が $N-[(L_{21})_{a_{11}}-(R_{21})_{b_{11}}]$ である場合、 R_3 、 R_{11} 、及び R_{21} のうちの少な

10

20

30

40

50

くとも一つは、互いに独立して、置換若しくは非置換の C_6-C_{20} アリール基、置換若しくは非置換の C_2-C_{20} ヘテロアリール基、置換若しくは非置換の一価非芳香族縮合多環基、及び置換若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。

【0050】

更に他の具現例によれば、化学式 1、1-1~1-12、及び 1A-1~1A-12、並びに表 1 の化学式で、 R_3 は、少なくとも一つの窒素原子を環構成構成原子として含む、置換若しくは非置換の C_1-C_{30} ヘテロアリール基、及び置換若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、それらに限定されるものではない。

【0051】

更に他の具現例によれば、化学式 1、1-1~1-12、及び 1A-1~1A-12、並びに表 1 の化学式で、 $R_1 \sim R_7$ 、 $R_{11} \sim R_{13}$ 、及び $R_{21} \sim R_{23}$ 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、アミジノ基、ヒドラジン基、ヒドラゾン基、カルボン酸基又はその塩、スルホン酸基又はその塩、リン酸基又はその塩、 C_1-C_{20} アルキル基、及び C_1-C_{20} アルコキシ基；

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、アミジノ基、ヒドラジン基、ヒドラゾン基、カルボン酸基又はその塩、スルホン酸基又はその塩、及びリン酸基又はその塩のうち少なくとも一つで置換された、 C_1-C_{20} アルキル基及び C_1-C_{20} アルコキシ基；

フェニル基 (phenyl)、ペンタレニル基 (pentalenyl)、インデニル基 (indenyl)、ナフチル基 (naphthyl)、アズレニル基 (azulenyl)、ヘプタレニル基 (heptalenyl)、インダセニル基 (indacenyl)、アセナフチル基 (acenaphthyl)、フルオレニル基 (fluorenyl)、スピロフルオレニル基 (spirofluorenyl)、ベンゾフルオレニル基 (benzofluorenyl)、ジベンゾフルオレニル基 (dibenzofluorenyl)、フェナレニル基 (phenalenyl)、フェナントレニル基 (phenanthrenyl)、アントラセニル基 (anthracenyl)、フルオランテニル基 (fluoranthenyl)、トリフェニレニル基 (triphenylenyl)、ピレニル基 (pyrenyl)、クリセニル基 (chrysenyl)、ナフタセニル基 (naphthacenyl)、ピセニル基 (picenyl)、ペリレニル基 (perylene)、ペンタフェニル基 (pentaphenyl)、ヘキサセニル基 (hexacenyl)、ペンタセニル基 (pentacenyl)、ルビセニル基 (rubicenyl)、コロネニル基 (coronenyl)、オバレニル基 (ovalenyl)、ピロリル基 (pyrrolyl)、チオフェニル基 (thiophenyl)、フラニル基 (furanly)、イミダゾリル基 (imidazolyl)、ピラゾリル基 (pyrazolyl)、チアゾリル基 (thiazolyl)、イソチアゾリル基 (isothiazolyl)、オキサゾリル基 (oxazolyl)、イソオキサゾリル基 (isooxazolyl)、ピリジニル基 (pyridinyl)、ピラジニル基 (pyrazinyl)、ピリミジニル基 (pyrimidinyl)、ピリダジニル基 (pyridazinyl)、イソインドリル基 (isoindolyl)、インドリル基 (indolyl)、インダゾリル基 (indazolyl)、プリーニル基 (purinyl)、キノリニル基 (quinolinyl)、イソキノリニル基 (isoquinolinyl)、ベンゾキノリニル基 (benzoquinolinyl)、フタラジニル基 (phthalazinyl)、ナフチリジニル基 (naphthylridinyl)、キノキサリニル基 (quinoxalinyl)、キナゾリニル基 (quinazolinyl)、シンノリニル基 (cinnolinyl)、カルバゾリル基 (carbazolyl)、フェナントリジニル基 (phenanthridinyl)、アクリジニル基 (acridinyl)、フェナントロリニル基 (phenanthroli

10

20

30

40

50

nyl)、フェナジニル基(phenazinyl)、ベンゾイミダゾリル基(benzimidazolyl)、ベンゾフラニル基(benzofuranyl)、ベンゾチオフェニル基(benzothiophenyl)、イソベンゾチアゾリル基(isobenzothiazolyl)、ベンゾオキサゾリル基(benzooxazolyl)、イソベンゾオキサゾリル基(isobenzooxazolyl)、トリアゾリル基(triazolyl)、テトラゾリル基(tetrazolyl)、オキサジアゾリル基(oxadiazolyl)、トリアジニル基(triazinyl)、ジベンゾフラニル基(dibenzofuranyl)、ジベンゾチオフェニル基(dibenzothiophenyl)、ベンゾカルバゾリル基(benzocarbazolyl)、ジベンゾカルバゾリル基(dibenzocarbazolyl)、イミダゾピリジニル基(imidazopyridinyl)、及びイミダゾピリミジニル基(imidazopyrimidinyl)；

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、アミジノ基、ヒドラジン基、ヒドラゾン基、カルボン酸基又はその塩、スルホン酸基又はその塩、リン酸基又はその塩、 C_1-C_{20} アルキル基、 C_1-C_{20} アルコキシ基、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、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、イソオキサゾリル基、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、イソインドリル基、インドリル基、インダゾリル基、プリニル基、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、カルバゾリル基、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、ベンゾフラニル基、ベンゾチオフェニル基、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、オキサジアゾリル基、トリアジニル基、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、イミダゾピリジニル基、イミダゾピリミジニル基、ビフェニル基、及び $-Si(Q_3)_3(Q_4)(Q_5)$ のうちの少なくとも一つで置換された、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、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、イソオキサゾリル基、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、イソインドリル基、インドリル基、インダゾリル基、プリニル基、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、カルバゾリル基、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、ベンゾフラニル基、ベンゾチオフェニル基、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、オキサジアゾリル基、トリアジニル基、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、イミダゾピリジニル基、及びイミダゾピリミジニル；及び

$-Si(Q_3)_3(Q_4)(Q_5)$ ；のうちから選択され、

$Q_3 \sim Q_5$ 、及び $Q_{33} \sim Q_{35}$ は、互いに独立して、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、ナフチル基、アントラセニル基、ピレニル基、フェナントレニル基、フルオレニル基、クリセニル基、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、ジベンゾフラニル基、ジベンゾチオフェニル基、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、イソキノリニル基、キナゾリニル基、及びキノキサリニル基のうちから選択されるが、それらに限定されるものではない。

【0052】

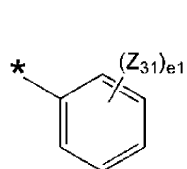
更に他の具現例によれば、化学式 1、 $1-1 \sim 1-12$ 、及び $1A-1 \sim 1A-12$ 、並びに表 1 の化学式で、 $R_1 \sim R_7$ 、 $R_{11} \sim R_{13}$ 、及び $R_{21} \sim R_{23}$ は、互いに独立して、

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、アミジノ基、ヒドラジン基、ヒドラゾン基、カルボン酸基又はその塩、スルホン酸基又はその塩、リン酸基又はその塩、 $C_1 - C_{20}$ アルキル基、 $C_1 - C_{20}$ アルコキシ基、下記化学式 $4-1 \sim 4-31$ で示される群、及び $-Si(Q_3)(Q_4)(Q_5)$ のうちから選択され、

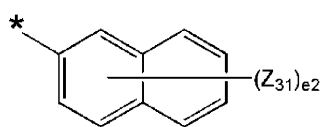
$Q_3 \sim Q_5$ は、互いに独立して、水素、 $C_1 - C_{20}$ アルキル基、 $C_1 - C_{20}$ アルコキシ基、フェニル基、ナフチル基、アントラセニル基、ピレニル基、フェナントレニル基、フルオレニル基、クリセニル基、カルバゾリル基、ベンゾカルバゾリル基、ジベンゾカルバゾリル基、ジベンゾフラニル基、ジベンゾチオフェニル基、ピリジニル基、ピリミジニル基、トリアジニル基、キノリニル基、イソキノリニル基、キナゾリニル基、及びキノキサリニル基のうちから選択されるが、それらに限定されるものではない。

【0053】

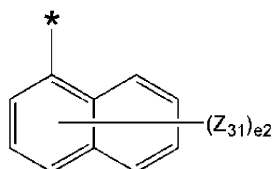
【化 (4 - 1) - (4 - 2 3) 】



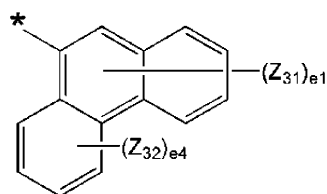
〔化4-1〕



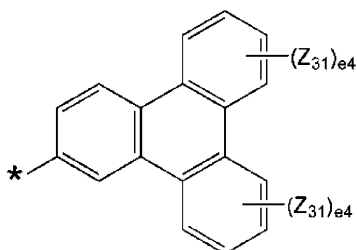
〔化4-2〕



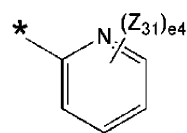
〔化4-3〕



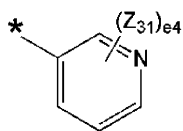
〔化4-4〕



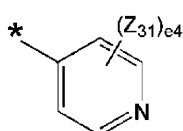
〔化4-5〕



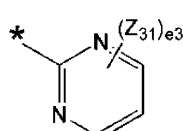
〔化4-6〕



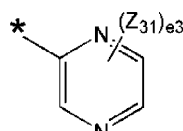
〔化4-7〕



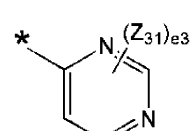
〔化4-8〕



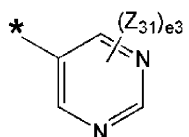
〔化4-9〕



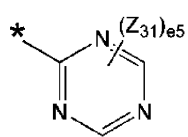
〔化4-10〕



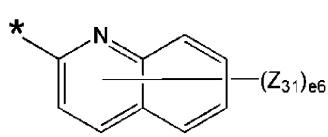
〔化4-11〕



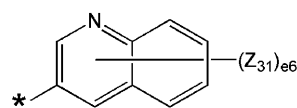
〔化4-12〕



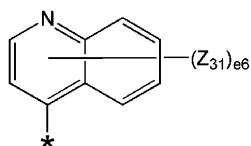
〔化4-13〕



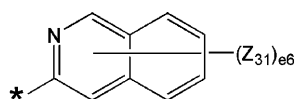
〔化4-14〕



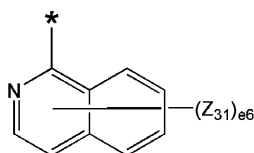
〔化4-15〕



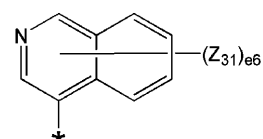
〔化4-16〕



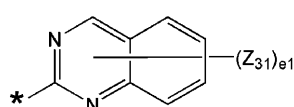
〔化4-17〕



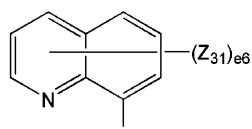
〔化4-18〕



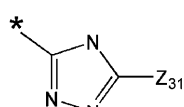
〔化4-19〕



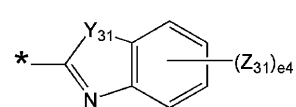
〔化4-20〕



〔化4-21〕



〔化4-22〕



〔化4-23〕

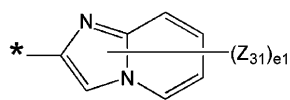
10

20

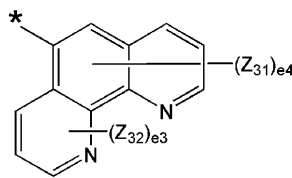
30

40

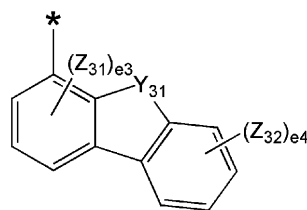
【化(4-24) - (4-31)】



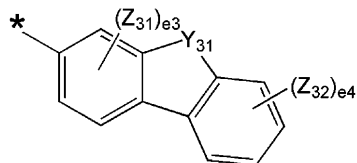
〔化4-24〕



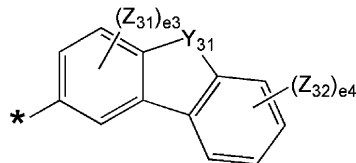
〔化4-25〕



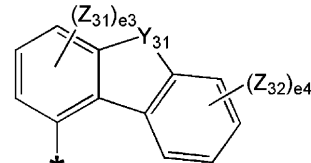
〔化4-26〕



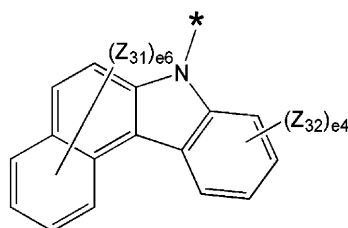
〔化4-27〕



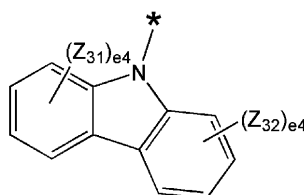
〔化4-28〕



〔化4-29〕



〔化4-30〕



〔化4-31〕

【0054】

化学式4-1～4-31で、

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

$Z_{31} \sim Z_{37}$ 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、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、カルボン酸基又はその塩、スルホン酸基又はその塩、リン酸基又はその塩、 $C_1 - C_{20}$ アルキル基、 $C_1 - C_{20}$ アルコキシ基、フェニル基、ナフチル基、アントラセニル基、ピレニル基、フェナントレニル基、フルオレニル基、クリセニル基、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、ジベンゾフラニル基、ジベンゾチオフェニル基、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、イソキノリニル基、キナゾリニル基、キノキサリニル基、及び-Si(Q_{33})(Q_{34})(Q_{35})のうちから選択され、

$Q_{33} \sim Q_{35}$ は、互いに独立して、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、ナフチル基、アントラセニル基、ピレニル基、フェナントレニル基、フルオレニル基、クリセニル基、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、ジベンゾフラニル基、ジベンゾチオフェニル基、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、イソキノリニル基、キナゾリニル基、及びキノキサリニル基のうちから選択され、

e_1 は、1～5の整数であり、 e_2 は、1～7の整数であり、 e_3 は、1～3の整数であり、 e_4 は、1～4の整数であり、 e_5 は、1又は2であり、 e_6 は、1～6の整数であり、*は、隣接する原子との結合サイトである。

【0055】

更に他の具現例によれば、化学式1、1-1～1-12、及び1A-1～1A-12、

10

20

30

40

50

並びに表 1 の化学式で、 $R_1 \sim R_7$ 、 $R_{11} \sim R_{13}$ 、及び $R_{21} \sim R_{23}$ は、互いに独立して、

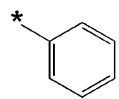
水素、重水素、 $-F$ 、 $-Cl$ 、 $-Br$ 、 $-I$ 、ヒドロキシ基、シアノ基、ニトロ基、アミノ基、アミジノ基、ヒドラジン基、ヒドラゾン基、カルボン酸基又はその塩、スルホン酸基又はその塩、リン酸基又はその塩、 $C_1 - C_{20}$ アルキル基、 $C_1 - C_{20}$ アルコキシ基、下記化学式 5-1 ~ 5-55 で示される群、又は $-Si(Q_3)(Q_4)(Q_5)$ のうちから選択され、

$Q_3 \sim Q_5$ は、互いに独立して、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、ナフチル基、アントラセニル基、ピレニル基、フェナントレニル基、フルオレニル基、クリセニル基、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、ジベンゾフラニル基、ジベンゾチオフェニル基、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、イソキノリニル基、キナゾリニル基、及びキノキサリニル基のうちから選択されるが、それらに限定されるものではない。

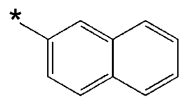
10

【0056】

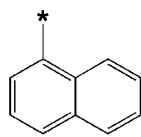
【化(5-1) - (5-22)】



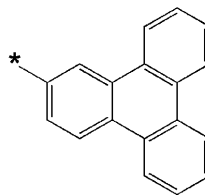
〔化5-1〕



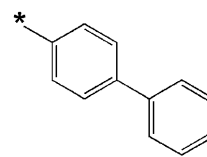
〔化5-2〕



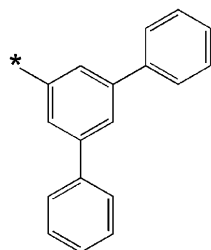
〔化5-3〕



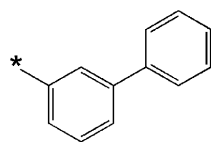
〔化5-4〕



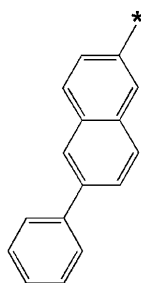
〔化5-5〕



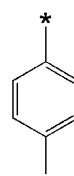
〔化5-6〕



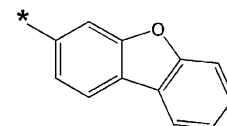
〔化5-7〕



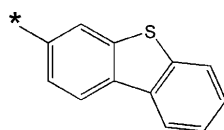
〔化5-8〕



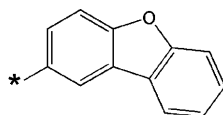
〔化5-9〕



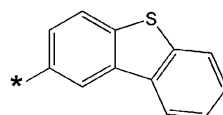
〔化5-10〕



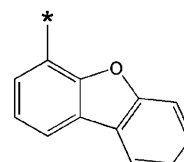
〔化5-11〕



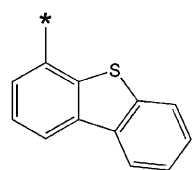
〔化5-12〕



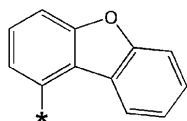
〔化5-13〕



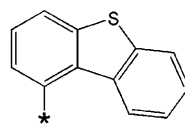
〔化5-14〕



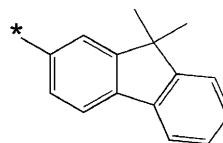
〔化5-15〕



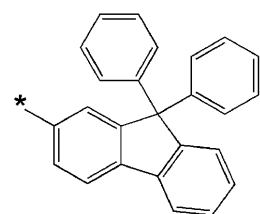
〔化5-16〕



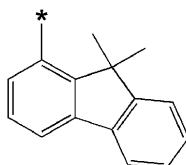
〔化5-17〕



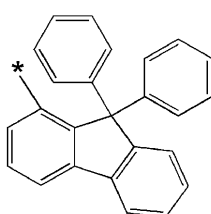
〔化5-18〕



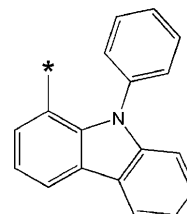
〔化5-19〕



〔化5-20〕



〔化5-21〕



〔化5-22〕

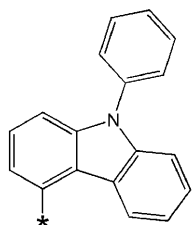
10

20

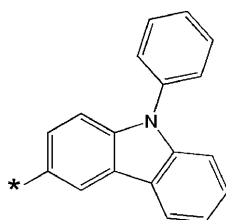
30

40

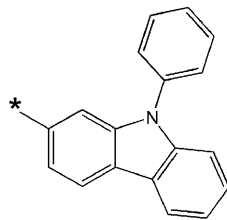
【化(5-23) - (5-45)】



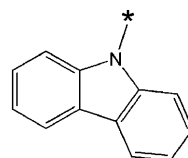
〔化5-23〕



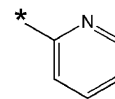
〔化5-24〕



〔化5-25〕

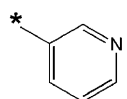


〔化5-26〕

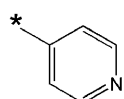


〔化5-27〕

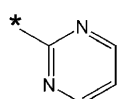
10



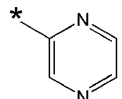
〔化5-28〕



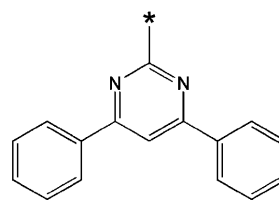
〔化5-29〕



〔化5-30〕

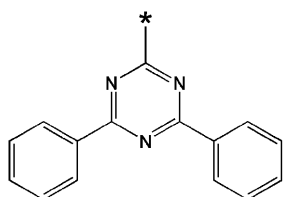


〔化5-31〕

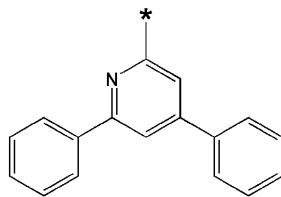


〔化5-32〕

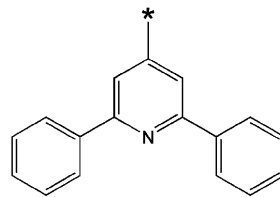
20



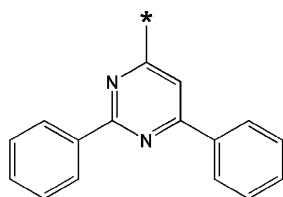
〔化5-33〕



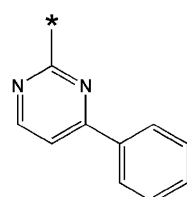
〔化5-34〕



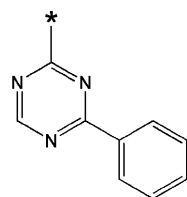
〔化5-35〕



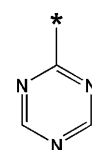
〔化5-36〕



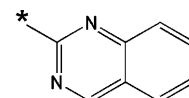
〔化5-37〕



〔化5-38〕

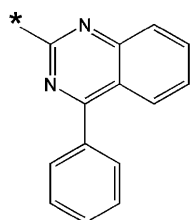


〔化5-39〕

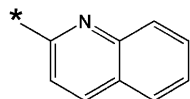


〔化5-40〕

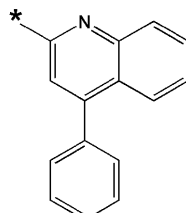
30



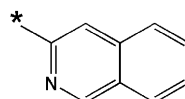
〔化5-41〕



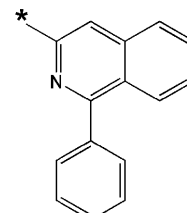
〔化5-42〕



〔化5-43〕



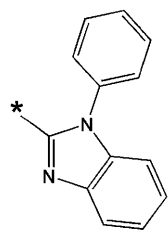
〔化5-44〕



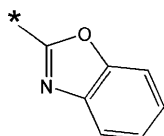
〔化5-45〕

40

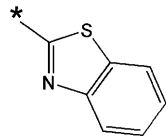
【化（５－４６）－（５－５５）】



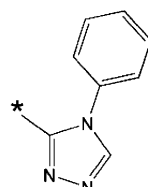
〔化5-46〕



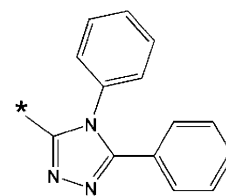
〔化5-47〕



〔化5-48〕

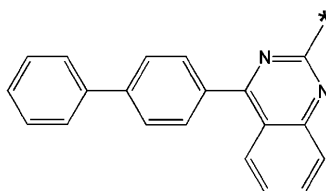


〔化5-49〕

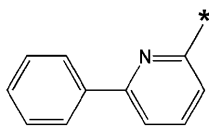


〔化5-50〕

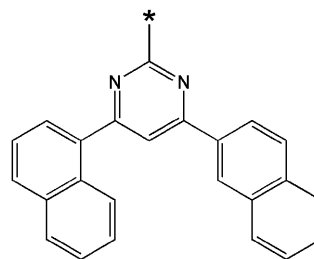
10



〔化5-51〕

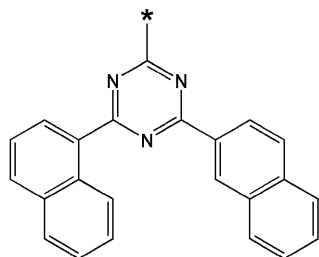


〔化5-52〕

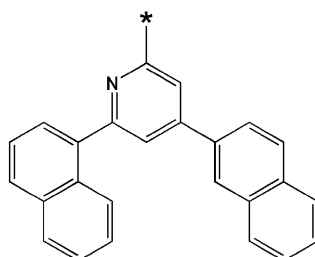


〔化5-53〕

20



〔化5-54〕



〔化5-55〕

30

前記化学式 5-1～5-55 の中の*は、隣接する原子との結合サイトである。

【0057】

更に他の具現例によれば、化学式 1、1-1～1-12、及び 1A-1～1A-12、並びに表 1 の化学式で、 R_1 、 R_2 、及び $R_4 \sim R_7$ は、水素であるが、それに限定されるものではない。

【0058】

化学式 1、1-1～1-12、及び 1A-1～1A-12、並びに表 1 の化学式で、 b_1 は、 R_1 の個数を示したものであり、1～5 の整数のうちから選択される。例えば、 b_1 は、1 又は 2 である。他の例として、 b_1 は、1 である。 b_1 が 2 以上である場合、2 以上の R_1 は、互いに同じであるか、又は異なる。 b_2 、 b_3 、 b_{11} 、及び b_{12} に係る説明は、 b_1 に係る説明、及び化学式 1、1-1～1-12、及び 1A-1～1A-12、並びに表 1 の化学式を参照して理解される。

40

【0059】

化学式 1、1-1～1-12、及び 1A-1～1A-12、並びに表 1 の化学式で、 c_1 は、 $-(L_1)_{a_1}-(R_1)_{b_1}$ の個数を示したものであり、1～4 の整数のうちから選択される。例えば、 c_1 は、1 又は 2 である。 c_1 が 2 以上である場合、2 以上の $-(L_1)_{a_1}-(R_1)_{b_1}$ は、互いに同じであるか、又は異なる。

【0060】

化学式 1、1-1～1-12、及び 1A-1～1A-12、並びに表 1 の化学式で、 X_{11} が $C(R_{12})(R_{13})$ 又は $Si(R_{12})(R_{13})$ である場合、 R_{12} と R_1

50

R_3 は、互いに同じであるか、又は異なる。例えば、 X_{11} が $C(R_{12})(R_{13})$ である場合、 R_{12} は、メチル基であり、 R_{13} は、フェニル基であるなど、多様な変形が可能である。

【0061】

化学式 1、 $1-1 \sim 1-12$ 、及び $1A-1 \sim 1A-12$ 、並びに表 1 の化学式で、 X_{21} が $C(R_{22})(R_{23})$ 又は $Si(R_{22})(R_{23})$ である場合、 R_{22} と R_{23} は、互いに同じであるか、又は異なる。例えば、 X_{21} が $C(R_{22})(R_{23})$ である場合、 R_{22} は、メチル基であり、 R_{23} は、フェニル基であるなど、多様な変形が可能である。

【0062】

化学式 1、 $1-1 \sim 1-12$ 、及び $1A-1 \sim 1A-12$ 、並びに表 1 の化学式で、 L_3 は、置換若しくは非置換の C_6-C_{60} アリーレン基、及び置換若しくは非置換の二価非芳香族縮合多環基のうちから選択され、 R_3 は、置換若しくは非置換の C_6-C_{60} アリール基、及び置換若しくは非置換の一価非芳香族縮合多環基のうちから選択される。

【0063】

例えば、化学式 1、 $1-1 \sim 1-12$ 、及び $1A-1 \sim 1A-12$ 、並びに表 1 の化学式で、 L_3 は、フェニレン基、ナフチレン基、及びトリフェニレン基；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、アミジノ基、ヒドラジン基、ヒドラゾン基、カルボン酸基又はその塩、スルホン酸基又はその塩、リン酸基又はその塩、 C_1-C_{20} アルキル基、 C_1-C_{20} アルコキシ基、フェニル基、ナフチル基、アントラセニル基、トリフェニレニル基、ピレニル基、フェナントレニル基、及びクリセニル基のうち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、及びトリフェニレン基；のうちから選択され、 R_3 は、化学式 $4-1 \sim 4-5$ のうちから選択される。

【0064】

更に他の具現例によれば、 L_3 が、置換若しくは非置換の C_6-C_{60} アリーレン基、及び置換若しくは非置換の二価非芳香族縮合多環基のうちから選択され、 R_3 が、置換若しくは非置換の C_6-C_{60} アリール基、及び置換若しくは非置換の一価非芳香族縮合多環基のうちから選択される化学式 1 で示される縮合環化合物は、例えば、後述する有機発光素子の正孔輸送領域に含まれる。

【0065】

更に他の具現例によれば、化学式 1、 $1-1 \sim 1-12$ 、及び $1A-1 \sim 1A-12$ 、並びに表 1 の化学式で、 R_3 は、電子輸送性成分である。例えば、化学式 1、 $1-1 \sim 1-12$ 、及び $1A-1 \sim 1A-12$ 、並びに表 1 の化学式で、 R_3 は、置換若しくは非置換の C_1-C_{60} ヘテロアリール基、又は置換若しくは非置換の一価非芳香族ヘテロ縮合多環基である。

【0066】

例えば、化学式 1、 $1-1 \sim 1-12$ 、及び $1A-1 \sim 1A-12$ 、並びに表 1 の化学式で、 R_3 は、化学式 $4-6 \sim 4-25$ で示される群のうちから選択されるが、それらに限定されるものではない。

【0067】

更に他の具現例によれば、 R_3 が置換若しくは非置換の C_1-C_{60} ヘテロアリール基、又は置換若しくは非置換の一価非芳香族ヘテロ縮合多環基である化学式 1 で示される縮合環化合物は、例えば、後述する有機発光素子の発光層に含まれる。

【0068】

縮合環化合物は、下記化合物 $1 \sim 167$ のうちのいずれか一つであるが、それらに限定されるものではない。

【0069】

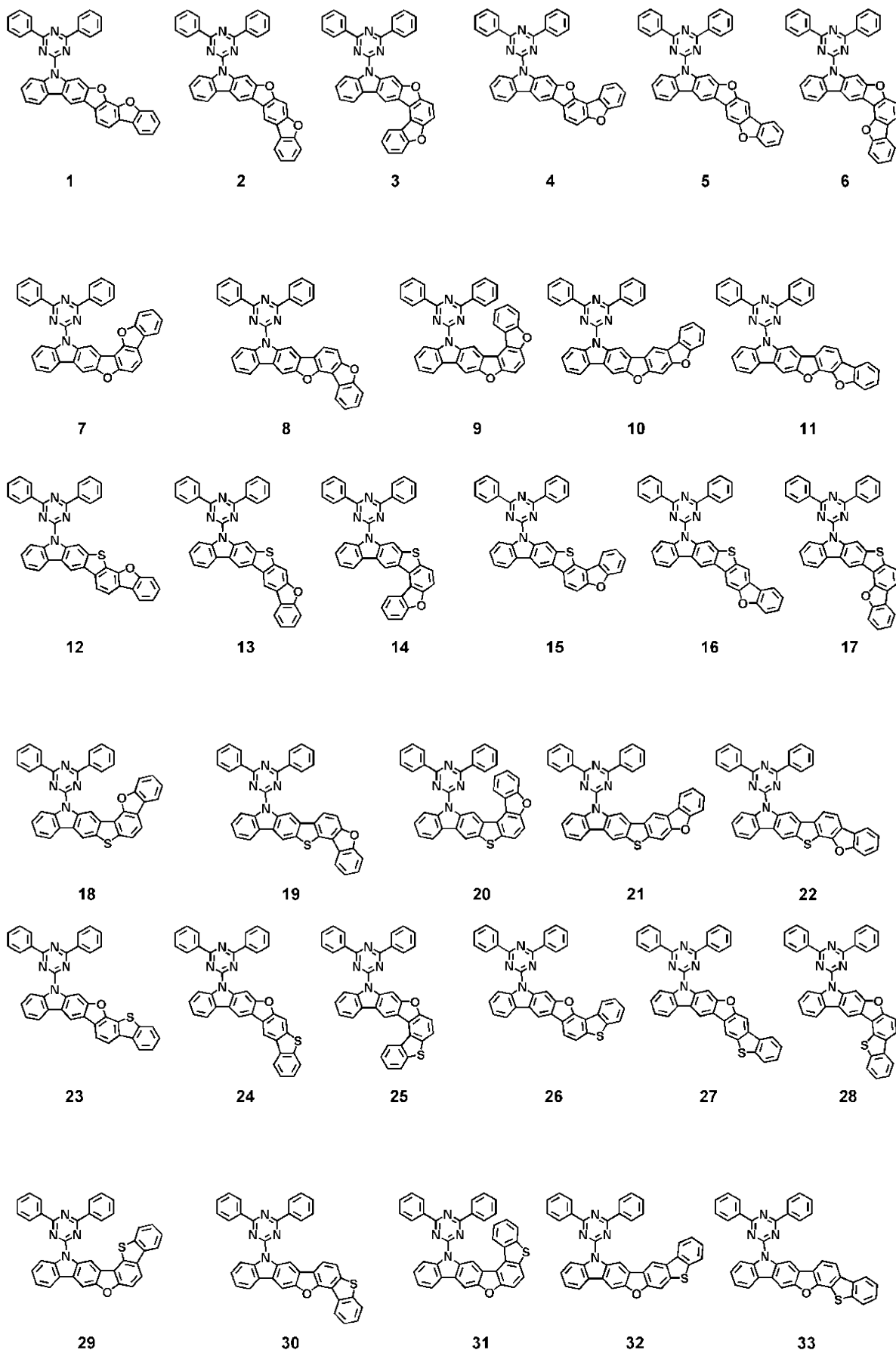
10

20

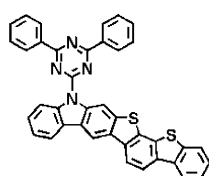
30

40

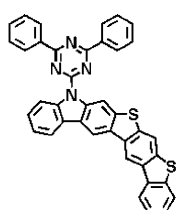
【化 1 - 3 3】



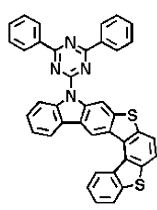
【化 3 4 - 6 6】



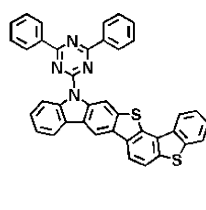
34



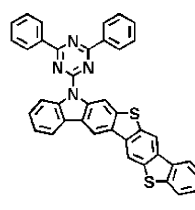
35



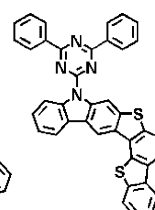
36



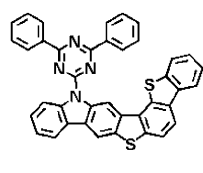
37



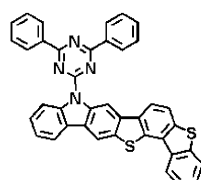
38



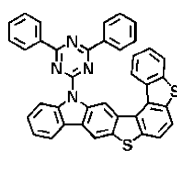
39



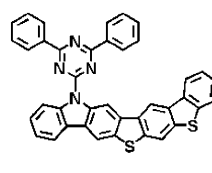
40



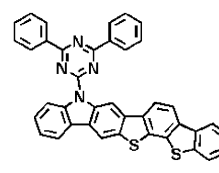
41



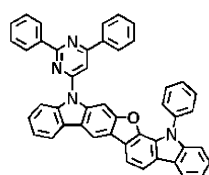
42



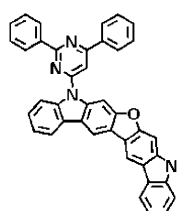
43



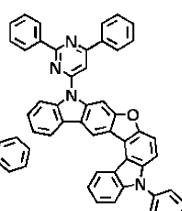
44



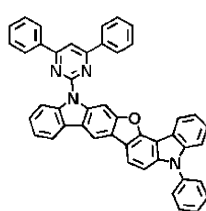
45



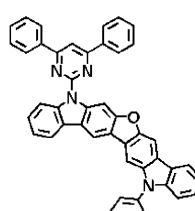
46



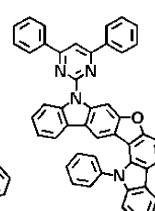
47



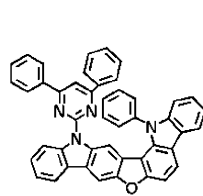
48



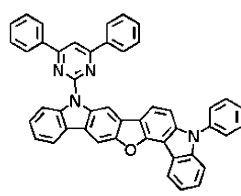
49



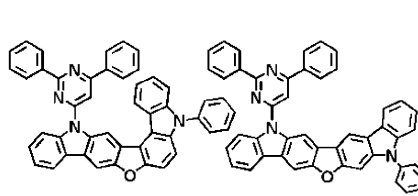
50



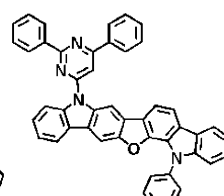
51



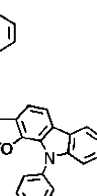
52



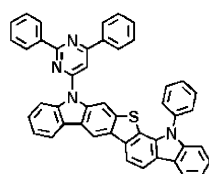
53



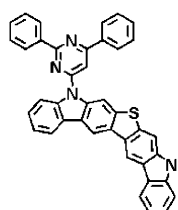
54



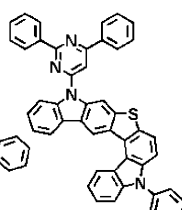
55



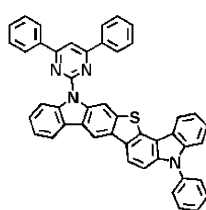
56



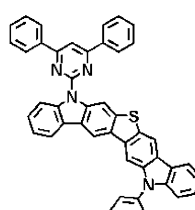
57



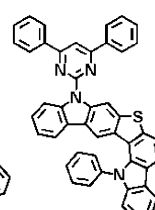
58



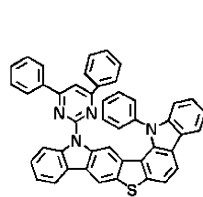
59



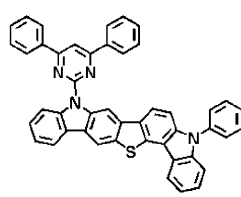
60



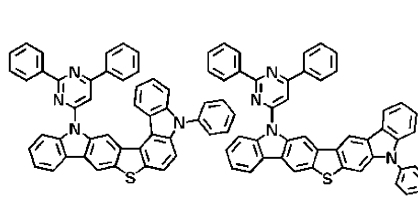
61



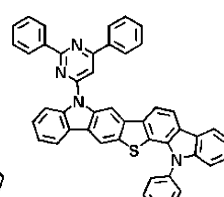
62



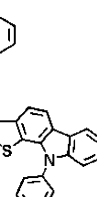
63



64

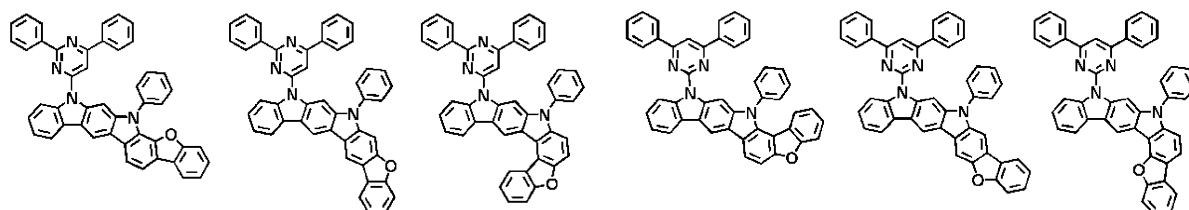


65



66

【化 67 - 99】



67

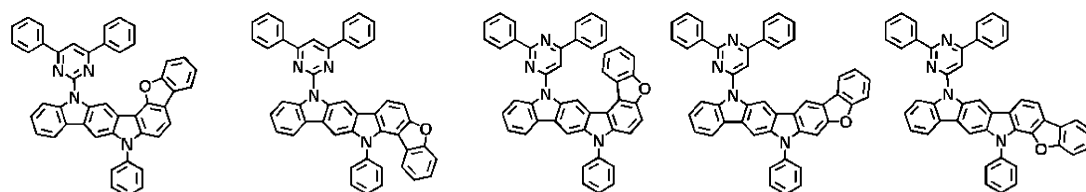
68

69

70

71

72



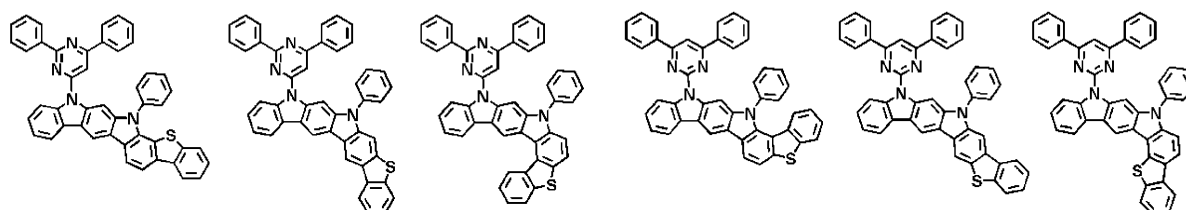
73

74

75

76

77



78

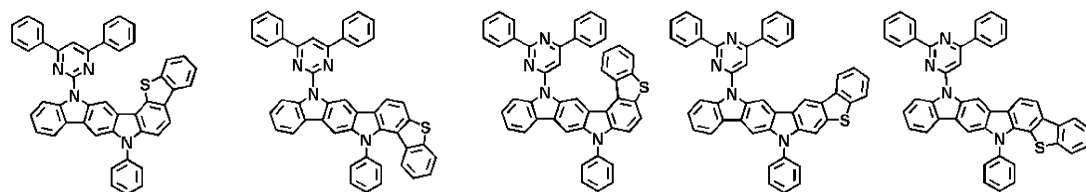
79

80

81

82

83



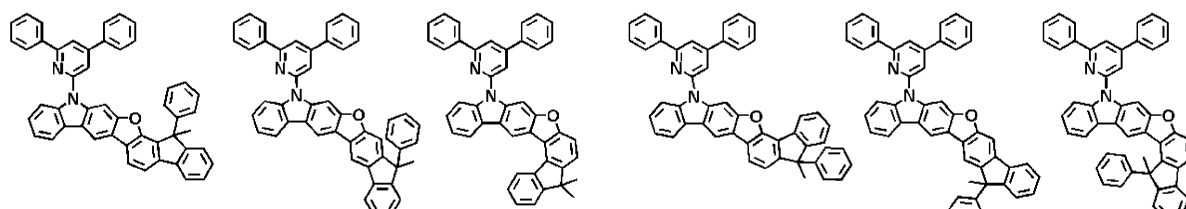
84

85

86

87

88



89

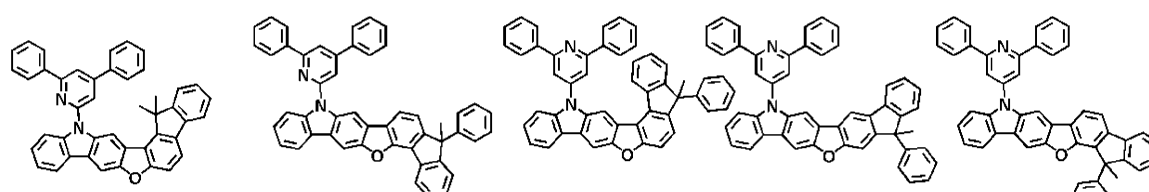
90

91

92

93

94



95

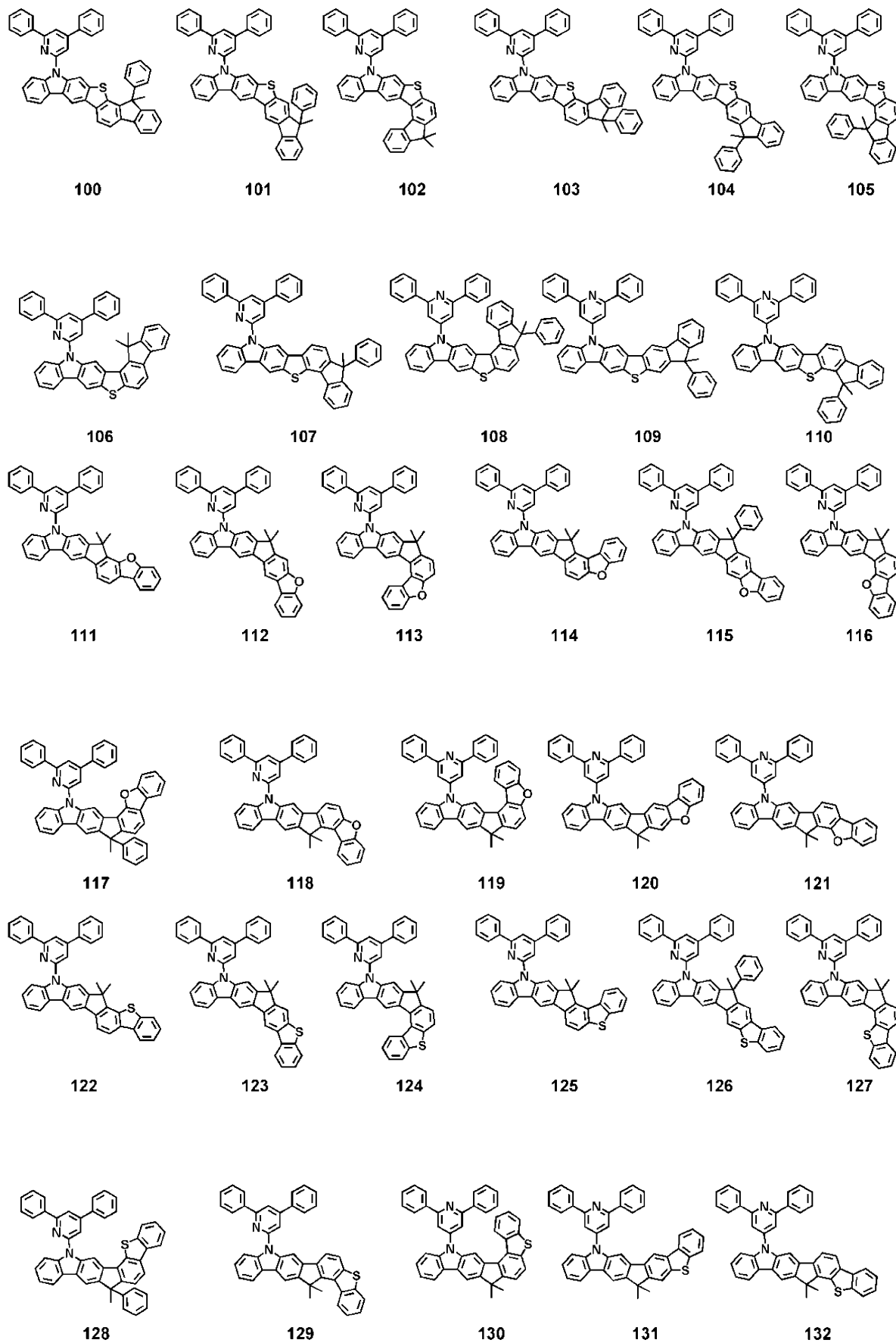
96

97

98

99

【化 1 0 0 - 1 3 2】



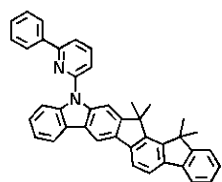
10

20

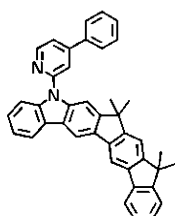
30

40

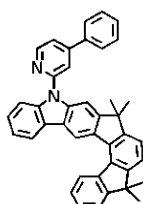
【化 1 3 3 - 1 6 4】



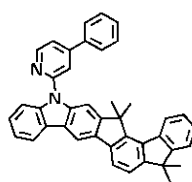
133



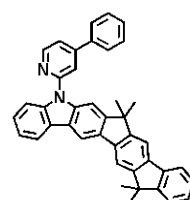
134



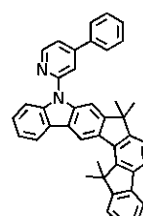
135



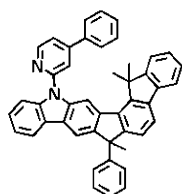
136



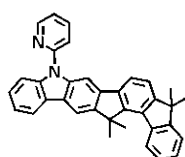
137



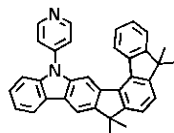
138



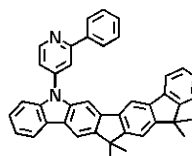
139



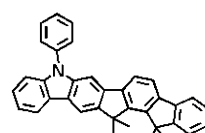
140



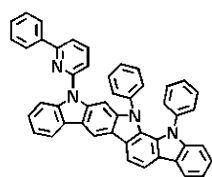
141



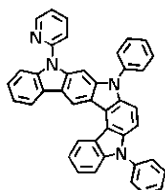
142



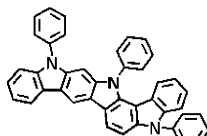
143



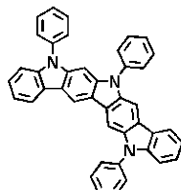
144



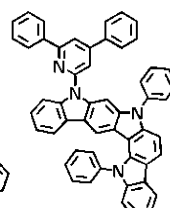
145



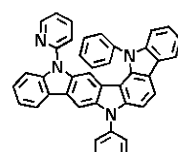
146



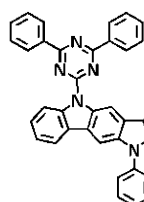
147



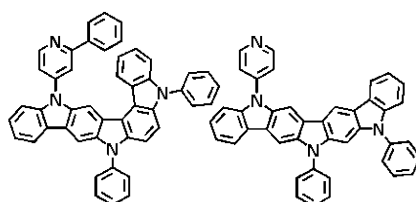
148



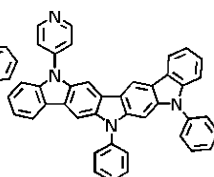
149



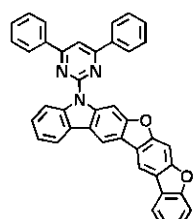
150



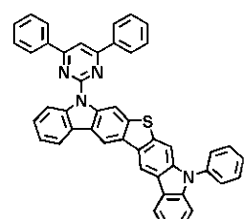
151



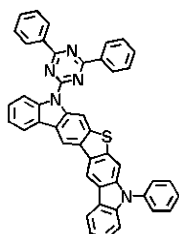
152



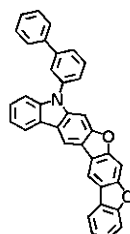
153



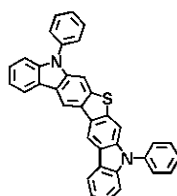
154



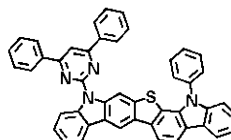
155



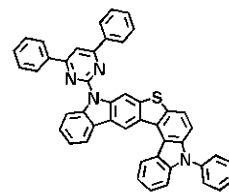
156



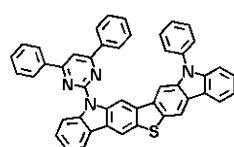
157



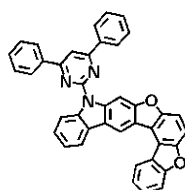
158



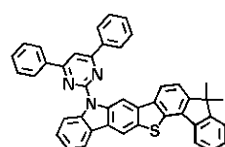
159



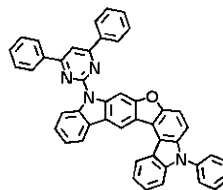
160



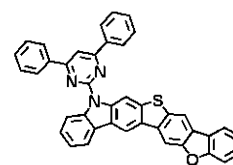
161



162



163



164

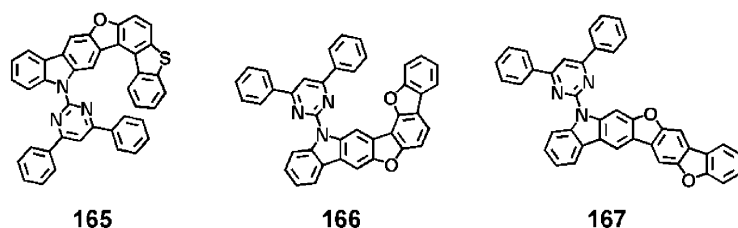
10

20

30

40

【化 1 6 5 - 1 6 7】



【0 0 7 0】

化学式 1 で示される縮合環化合物は、化学式 1 のように、多数の環が互いに融合された強固な構造のコアを有するが、相対的に高い T_g （例えば、 130°C 以上の T_g ）、及び相対的に低い T_{ev} （例えば、 350°C 以下の T_{ev} ）を有する。それにより、化学式 1 で示される縮合環化合物は、優秀な工程耐熱性を有する。

【0 0 7 1】

また、化学式 1 で示される縮合環化合物は、化学式 1 において、 X_{11} 及び X_{21} （化学式 1 で、 X_{11} 及び X_{21} のリストは、本明細書に記載した箇所を参照する）に多様な基が存在するが、分子において電子輸送成分及び正孔輸送成分がまんべんなく分布するバイポーラ（bipolar）構造を有する。それにより、化学式 1 で示される縮合環化合物は、電気素子、例えば有機発光素子用材料（例えば、有機発光素子用ホスト又は正孔輸送層材料）として使用するのに適する HOMO（highest occupied molecular orbital）、LUMO（lowest unoccupied molecular orbital）、及び T_1 エネルギーのレベルを有する。

【0 0 7 2】

例えば、化合物 50、59～63、153、154、158～166 に係る HOMO、LUMO、及び T_1 エネルギーのレベルについて、ガウシアンを利用してシミュレーション評価した結果は、下記表 2 の通りである。

【0 0 7 3】

【表 2】

化合物No.	HOMO(eV)	LUMO(eV)	T^1 (eV)
50	-5.101	-1.734	2.783
59	-5.007	-1.784	2.675
60	-5.013	-1.807	2.683
61	-5.137	-1.757	2.778
62	-5.074	-1.804	2.658
63	-4.971	-1.777	2.565
153	-5.302	1.845	2.793
154	-5.041	-1.743	2.759
158	-5.089	-1.812	2.708
159	-5.005	-1.738	2.677
160	-5.042	-1.809	2.657
161	-5.374	-1.799	2.781
162	-5.236	-1.846	2.680
163	-5.047	-1.729	2.712
164	-5.323	-1.805	2.696
165	-5.329	-1.862	2.619
166	-5.407	-1.767	2.734

【0 0 7 4】

表 2 から、化学式 1 で示される縮合環化合物は、電気素子用材料、例えば有機発光素子

用材料（例えば、有機発光素子のホスト又は正孔輸送層材料）として使用するのに適する HOMO、LUMO、及び T_1 エネルギーのレベルを有することが確認される。

【0075】

一具現例によれば、化学式 1 で示される縮合環化合物は、有機発光素子用緑色リン光ホスト又は正孔輸送層材料として使用されるが、それらに限定されるものではない。

【0076】

化学式 1 で示される縮合環化合物の合成方法は、後述する合成例を参照して当業者が容易に認識することができる。

【0077】

化学式 1 で示される縮合環化合物は、有機発光素子の有機層、例えば有機層のうちの発光層のホストとして使用するのに適するが、他の側面によれば、第 1 電極と、第 2 電極と、第 1 電極と第 2 電極との間に介在させる発光層を含む化学式 1 で示される縮合環化合物を少なくとも 1 種以上含む有機層と、を含む有機発光素子が提供される。

10

【0078】

有機発光素子は、上述のような化学式 1 で示される縮合環化合物を含む有機層を具備することにより、低駆動電圧、高効率、高輝度、及び長寿命を有することができる。

【0079】

化学式 1 で示される縮合環化合物は、有機発光素子の 1 対の電極間に使用される。例えば、縮合環化合物は、発光層、第 1 電極と発光層との間の正孔輸送領域（例えば、正孔注入層、正孔輸送層、及び電子阻止層のうちの少なくとも 1 層を含む）、及び発光層と第 2 電極との間の電子輸送領域（例えば、正孔阻止層、電子輸送層、及び電子注入層のうちの少なくとも 1 層を含む）のうちの少なくとも一つに含まれる。例えば、化学式 1 で示される縮合環化合物は、発光層及び正孔輸送領域のうちの少なくとも一つに含まれる。このとき、縮合環化合物が発光層に存在する場合、発光層は、ドーパントを更に含み、発光層に含まれる縮合環化合物は、ホストの役割を行う。発光層は、緑色光を放出する緑色発光層であり、ドーパントは、リン光ドーパントである。

20

【0080】

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」というのは、「（有機層が）化学式 1 の範疇に属する 1 種の縮合環化合物、又は化学式 1 の範疇に属する互いに異なる 2 種以上の縮合環化合物を含む」と解釈される。

30

【0081】

例えば、有機層は、縮合環化合物として、化合物 1 のみを含む。このとき、化合物 1 は、有機発光素子の発光層に存在する。或いは、有機層は、縮合環化合物として、化合物 1 及び化合物 2 を含む。このとき、化合物 1 及び化合物 2 は、同一層に存在（例えば、化合物 1 及び化合物 2 は、いずれも発光層に存在する）するか、或いは互いに異なる層に存在（例えば、化合物 1 は発光層に存在し、化合物 2 は正孔輸送層に存在する）する。

【0082】

例えば、第 1 電極がアノードであり、第 2 電極がカソードであり、有機層は、i) 第 1 電極と発光層との間に介在して、正孔注入層、正孔輸送層、及び電子阻止層のうちの少なくとも 1 層を含む正孔輸送領域と、ii) 発光層と第 2 電極との間に介在して、正孔阻止層、電子輸送層、及び電子注入層のうちの少なくとも 1 層を含む電子輸送領域と、を含む。

40

【0083】

本明細書において「有機層」は、有機発光素子のうち、第 1 電極と第 2 電極との間に介在する単一及び／又は複数の層を示す用語である。「有機層」は、有機化合物だけではなく、金属を含む有機金属錯体なども含む。

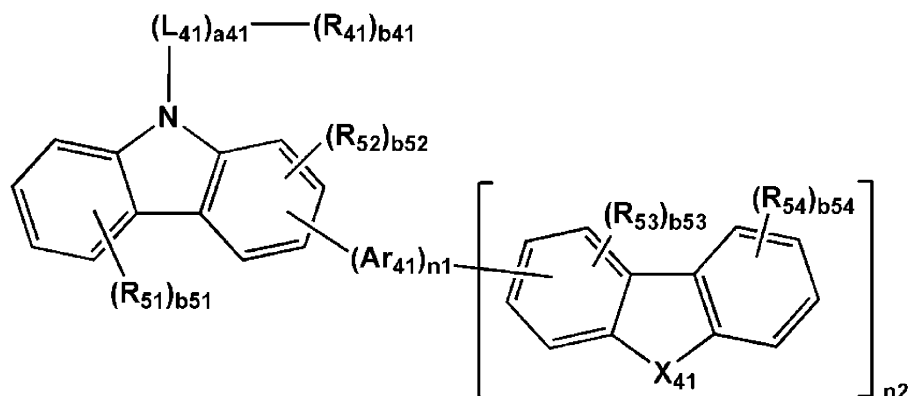
【0084】

更に他の具現例によれば、有機発光素子の有機層は、上述のような化学式 1 で示される縮合環化合物以外に、下記化学式 4 1 で示される第 1 化合物、及び下記化学式 6 1 で示される第 2 化合物のうちの少なくとも一つを更に含む。

50

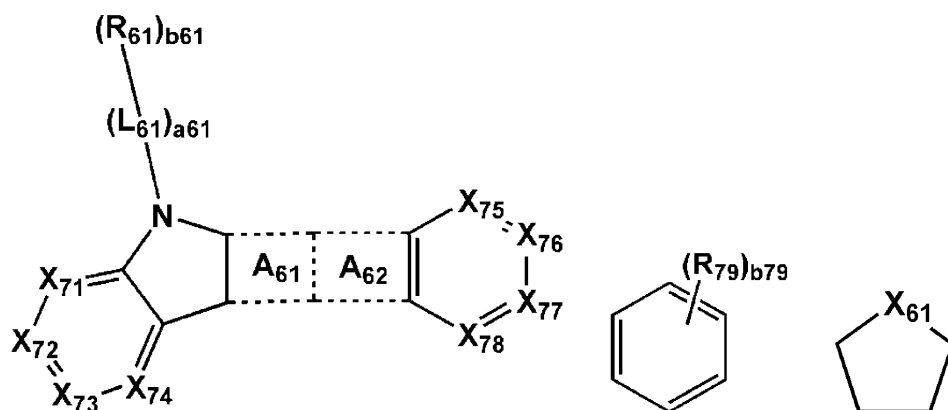
【 0 0 8 5 】

【 化 4 1 - 6 1 B 】



10

〔化41〕



20

〔化61〕

〔化61A〕

〔化61B〕

【 0 0 8 6 】

30

化学式 4 1、6 1、6 1 A、6 1 Bで、

X_{41} は、 $N - [(L_{42})_{a42} - (R_{42})_{b42}]$ 、 S 、 O 、 $S(=O)$ 、 $S(=O)_2$ 、 $C(=O)$ 、 $C(R_{43})(R_{44})$ 、 $Si(R_{43})(R_{44})$ 、 $P(R_{43})$ 、 $P(=O)(R_{43})$ 、又は $C=N(R_{43})$ であり、

化学式 6 1で、環 A_{61} は、化学式 6 1 Aで示され、

化学式 6 1で、環 A_{62} は、化学式 6 1 Bで示され、

X_{61} は、 $N - [(L_{62})_{a62} - (R_{62})_{b62}]$ 、 S 、 O 、 $S(=O)$ 、 $S(=O)_2$ 、 $C(=O)$ 、 $C(R_{63})(R_{64})$ 、 $Si(R_{63})(R_{64})$ 、 $P(R_{63})$ 、 $P(=O)(R_{63})$ 、又は $C=N(R_{63})$ であり、

40

X_{71} は、 $C(R_{71})$ 又は N であり、 X_{72} は、 $C(R_{72})$ 又は N であり、 X_{73} は、 $C(R_{73})$ 又は N であり、 X_{74} は、 $C(R_{74})$ 又は N であり、 X_{75} は、 $C(R_{75})$ 又は N であり、 X_{76} は、 $C(R_{76})$ 又は N であり、 X_{77} は、 $C(R_{77})$ 又は N であり、 X_{78} は、 $C(R_{78})$ 又は N であり、

Ar_{41} 、 L_{41} 、 L_{42} 、 L_{61} 、及び L_{62} は、互いに独立して、置換若しくは非置換の $C_3 - C_{10}$ シクロアルキレン基、置換若しくは非置換の $C_1 - C_{10}$ ヘテロシクロアルキレン基、置換若しくは非置換の $C_3 - C_{10}$ シクロアルケニレン基、置換若しくは非置換の $C_1 - C_{10}$ ヘテロシクロアルケニレン基、置換若しくは非置換の $C_6 - C_{60}$ アリーレン基、置換若しくは非置換の $C_1 - C_{60}$ ヘテロアリーレン基、置換若しくは非置換の二価非芳香族縮合多環基、及び置換若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、

50

n_1 及び n_2 は、互いに独立して、0～3の整数のうちから選択され、

a_{41} 、 a_{42} 、 a_{61} 、及び a_{62} は、互いに独立して、0～5の整数のうちから選択され、

$R_{41} \sim R_{44}$ 、 $R_{51} \sim R_{54}$ 、 $R_{61} \sim R_{64}$ 、及び $R_{71} \sim R_{79}$ は、互いに独立して、水素、重水素、 $-F$ （フルオロ基）、 $-Cl$ （クロロ基）、 $-Br$ （ブロモ基）、 $-I$ （ヨード基）、ヒドロキシ基、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、カルボン酸基又はその塩、スルホン酸基又はその塩、リン酸基又はその塩、置換若しくは非置換の C_1-C_{60} アルキル基、置換若しくは非置換の C_2-C_{60} アルケニル基、置換若しくは非置換の C_2-C_{60} アルキニル基、置換若しくは非置換の C_1-C_{60} アルコキシ基、置換若しくは非置換の C_3-C_{10} シクロアルキル基、置換若しくは非置換の C_1-C_{10} ヘテロシクロアルキル基、置換若しくは非置換の C_3-C_{10} シクロアルケニル基、置換若しくは非置換の C_1-C_{10} ヘテロシクロアルケニル基、置換若しくは非置換の C_6-C_{60} アリール基、置換若しくは非置換の C_6-C_{60} アリールオキシ基、置換若しくは非置換の C_6-C_{60} アリールチオ基、置換若しくは非置換の C_1-C_{60} ヘテロアリール基、置換若しくは非置換の一価非芳香族縮合多環基、置換若しくは非置換の一価非芳香族ヘテロ縮合多環基、 $-N(Q_1)(Q_2)$ 、 $-Si(Q_3)(Q_4)(Q_5)$ 、及び $-B(Q_6)(Q_7)$ のうちから選択され、

10

b_{41} 、 b_{42} 、 $b_{51} \sim b_{54}$ 、 b_{61} 、 b_{62} 、及び b_{79} は、互いに独立して、1～3の整数のうちから選択され、

20

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の少なくとも一つは、

30

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、アミジノ基、ヒドラジン基、ヒドラゾン基、カルボン酸基又はその塩、スルホン酸基又はその塩、リン酸基又はその塩、 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、カルボン酸基又はその塩、スルホン酸基又はその塩、リン酸基又はその塩、 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、 $-N(Q_{11})(Q_{12})$ 、 $-Si(Q_{13})(Q_{14})(Q_{15})$ 、及び $-B(Q_{16})(Q_{17})$ のうちの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；

40

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

50

基、アミジノ基、ヒドラジン基、ヒドラゾン基、カルボン酸基又はその塩、スルホン酸基又はその塩、リン酸基又はその塩、 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、 $-N(Q_{21})(Q_{22})$ 、 $-Si(Q_{23})(Q_{24})(Q_{25})$ 、及び $-B(Q_{26})(Q_{27})$ のうちの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；及び

$-N(Q_{31})(Q_{32})$ 、 $-Si(Q_{33})(Q_{34})(Q_{35})$ 、及び $-B(Q_{36})(Q_{37})$ ；のうちから選択され、

$Q_1 \sim Q_7$ 、 $Q_{11} \sim Q_{17}$ 、 $Q_{21} \sim Q_{27}$ 、及び $Q_{31} \sim Q_{37}$ は、互いに独立して、水素、 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、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る。

【0087】

例えば、有機発光素子において、 i) 化学式1で示される縮合環化合物、及び ii) 化学式41で示される第1化合物、及び化学式61で示される第2化合物のうちの少なくとも一つが、いずれも発光層に含まれる。

【0088】

他の例として、発光層が、第1ホスト、第2ホスト、及びドーパントを含むが、第1ホストが、化学式1で示される縮合環化合物を含み、第2ホストが、化学式41で示される第1化合物、及び化学式61で示される第2化合物のうちの少なくとも一つを含む。

【0089】

第1ホストと第2ホストとの重量比は、 $1:99 \sim 99:1$ 、例えば $10:90 \sim 90:10$ の範囲内で選択される。重量比の範囲を満足する場合、第1ホストによる電子輸送特性、及び第2ホストによる正孔輸送特性が均衡をなし、有機発光素子の発光効率及び寿命が向上する。

【0090】

環 A_{61} は、化学式61において隣接する5員環及び環 A_{62} のそれぞれと、炭素を共有しながら融合される。環 A_{62} は、下記化学式61において隣接する環 A_{61} 及び6員環のそれぞれと炭素を共有しながら融合される。

【0091】

一具現例によれば、 X_{41} は、 $N-[(L_{42})_{a42}-(R_{42})_{b42}]$ 、 S 、又は O であるが、それらに限定されるものではない。

【0092】

他の具現例によれば、 X_{61} は、 $N-[(L_{62})_{a62}-(R_{62})_{b62}]$ 、 S 、又は O であるが、それらに限定されるものではない。

【0093】

更に他の具現例によれば、化学式61で、 X_{71} は、 $C(R_{71})$ であり、 X_{72} は、 $C(R_{72})$ であり、 X_{73} は、 $C(R_{73})$ であり、 X_{74} は、 $C(R_{74})$ であり、 X_{75} は、 $C(R_{75})$ であり、 X_{76} は、 $C(R_{76})$ であり、 X_{77} は、 $C(R_{77})$ であり、 X_{78} は、 $C(R_{78})$ であるが、それらに限定されるものではない。

【0094】

10

20

30

40

50

化学式 61 で、 $R_{71} \sim R_{74}$ のうちの少なくとも 2 個は、選択的に、互いに連結され、飽和環又は不飽和環（例えば、ベンゼン、ナフタレンなど）を形成する。

【0095】

一方、化学式 61 で、 $R_{75} \sim R_{78}$ のうちの少なくとも 2 個は、選択的に、互いに連結され、飽和環又は不飽和環（例えば、ベンゼン、ナフタレンなど）を形成する。

【0096】

化学式 41、61、61A、61B で、 Ar_{41} 、 L_{41} 、 L_{42} 、 L_{61} 、及び L_{62} の具現例は、互いに独立して、本明細書において、 L_1 の具現例のうちから選択される。

【0097】

一具現例によれば、化学式 41、61、61A、61B で、 Ar_{41} 、 L_{41} 、 L_{42} 、 L_{61} 、及び L_{62} 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、フルオラントレニレン基、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、ピロリレン基、イミダゾリレン基、ピラゾリレン基、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、イソインドリレン基、インドリレン基、インダゾリレン基、プリニレン基、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、カルバゾリレン基、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、ベンゾオキサゾリレン基、ベンゾイミダゾリレン基、フラニレン基、ベンゾフラニレン基、チオフェニレン基、ベンゾチオフェニレン基、チアゾリレン基、イソチアゾリレン基、ベンゾチアゾリレン基、イソオキサゾリレン基、オキサゾリレン基、トリアゾリレン基、テトラゾリレン基、オキサジアゾリレン基、トリアジニレン基、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、イミダゾピリミジニレン基、及びイミダゾピリジニレン基；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、アミジノ基、ヒドラジン基、ヒドラゾン基、カルボン酸基又はその塩、スルホン酸基又はその塩、リン酸基又はその塩、 $C_1 - C_{20}$ アルキル基、 $C_1 - C_{20}$ アルコキシ基、 $C_6 - C_{20}$ 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環基、 $-Si(Q_{33})(Q_{34})(Q_{35})$ のうちの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、フルオラントレニレン基、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、ピロリレン基、イミダゾリレン基、ピラゾリレン基、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、イソインドリレン基、インドリレン基、インダゾリレン基、プリニレン基、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、カルバゾリレン基、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、ベンゾオキサゾリレン基、ベンゾイミダゾリレン基、フラニレン基、ベンゾフラニレン基、チオフェニレン基、ベンゾチオフェニレン基、チアゾリレン基、イソチアゾリレン基、ベンゾチアゾリレン基、イソオキサゾリレン基、オキサゾリレン基、トリアゾリレン基、テトラゾリレン基、オキサジアゾリレン基、トリアジニレン基、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、イミダゾピリミジニレン基、及

10

20

30

40

50

びイミダゾピリジニレン基；のうちから選択され、

$Q_{33} \sim Q_{35}$ は、互いに独立して、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、ナフチル基、アントラセニル基、ピレニル基、フェナントレニル基、フルオレニル基、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、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、フタラジニル基、キノキサリニル基、シンノリニル基、及びキナゾリニル基；のうちから選択される。

【0098】

他の具現例によれば、化学式 41、61、61A、61B で、 Ar_{41} 、 L_{41} 、 L_{42} 、 L_{61} 、及び L_{62} は、互いに独立して、置換若しくは非置換の $C_3 - C_{10}$ シクロアルキレン基、置換若しくは非置換の $C_3 - C_{10}$ シクロアルケニレン基、置換若しくは非置換の $C_6 - C_{60}$ アリーレン基、及び置換若しくは非置換の二価非芳香族縮合多環基のうちから選択される。

【0099】

更に他の具現例によれば、化学式 41、61、61A、61B で、 Ar_{41} 、 L_{41} 、 L_{42} 、 L_{61} 、及び L_{62} 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、スピローフルオレニレン基、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、フルオラントレニレン基、トリフェニレニレン基、ピレニレン基、及びクリセニレン基；及び

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、カルボン酸基又はその塩、スルホン酸基又はその塩、リン酸基又はその塩、 $C_1 - C_{20}$ アルキル基、 $C_1 - C_{20}$ アルコキシ基、フェニル基、フェニル基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、スピローフルオレニル基、フェナレニル基、フェナントレニル基、アントラセニル基、フルオラントレニル基、トリフェニレニル基、ピレニル基、及びクリセニル基のうち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、フルオラントレニレン基、トリフェニレニレン基、ピレニレン基、及びクリセニレン基；のうちから選択されるが、それらに限定されるものではない。

【0100】

化学式 41 で、 a_{41} は、 L_{41} の個数を示したものであり、0～5 の整数である。例えば、 a_{41} は、0、1、又は 2 である。 a_{41} が 0 である場合、化学式 41 で、 $*-(L_{41})_{a_{41}}-*'$ は、単一結合になる。 a_{41} が 2 以上である場合、2 以上の L_{41} は、互いに同一であるか、又は異なる。 a_{42} 、 a_{61} 、及び a_{62} は、それぞれ L_{42} 、 L_{61} 、及び L_{62} の個数を示したものであり、 a_{41} に係る説明を参照する。

【0101】

n_1 は、化学式 41 において、 Ar_{41} の個数を示したものであり、0～3 の整数のうちから選択される。一具現例によれば、 n_1 は、0 又は 1 である。例えば、 n_1 は、0 であるが、それに限定されるものではない。

【0102】

例えば、化学式 41、61、61A、61B で、 a_{41} 、 a_{42} 、 a_{61} 、及び a_{62} は、互いに独立して、0 又は 1 であるが、それらに限定されるものではない。

【0103】

化学式 41、61、61A、61B で、 $R_{41} \sim R_{44}$ 、 $R_{51} \sim R_{54}$ 、 $R_{61} \sim R_{64}$ 、及び $R_{71} \sim R_{79}$ の具現例は、互いに独立して、本明細書において、 R_1 の具現例のうちから選択される。

【0104】

一具現例によれば、化学式 41 及び 61 で、 $R_{41} \sim R_{44}$ 、 $R_{51} \sim R_{54}$ 、 $R_{61} \sim R_{64}$ 、及び $R_{71} \sim R_{79}$ 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、アミジノ基、ヒドラジン基、ヒドラゾン基、カルボン酸基又はその塩、スルホン酸基又はその塩、リン酸基又はその塩、 $C_1 - C_{20}$ アルキル基、及び $C_1 - C_{20}$ アルコキシ基；

フェニル基、ペンタレニル基、ナフチル基、フルオレニル基、スピローフルオレニル基、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、ピセニル基、ペリレニル基、ペンタフェニル基、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、及びジベンゾカルバゾリル基；及び

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、カルボン酸基又はその塩、スルホン酸基又はその塩、リン酸基又はその塩、 $C_1 - C_{20}$ アルキル基、 $C_1 - C_{20}$ アルコキシ基、フェニル基、ペンタレニル基、ナフチル基、フルオレニル基、スピローフルオレニル基、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、ピセニル基、ペリレニル基、ペンタフェニル基、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、及びジベンゾカルバゾリル基のうちの少なくとも一つで置換された、フェニル基、ペンタレニル基、ナフチル基、フルオレニル基、スピローフルオレニル基、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、ピセニル基、ペリレニル基、ペンタフェニル基、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、及びジベンゾカルバゾリル基；のうちから選択されるが、それらに限定されるものではない。

【0105】

更に他の具現例によれば、化学式41で、 R_{51} 、 R_{53} 、及び R_{54} 、並びに化学式61で、 $R_{71} \sim R_{79}$ 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、アミジノ基、ヒドラジン基、ヒドラゾン基、カルボン酸基又はその塩、スルホン酸基又はその塩、リン酸基又はその塩、 $C_1 - C_{20}$ アルキル基、 $C_2 - C_{20}$ アルケニル基、 $C_2 - C_{20}$ アルキニル基、及び $C_1 - C_{20}$ アルコキシ基のうちから選択される。

【0106】

更に他の具現例によれば、化学式41で、 R_{51} 、 R_{53} 、及び R_{54} 、並びに化学式61で、 $R_{71} \sim R_{79}$ は、いずれも水素である。

【0107】

更に他の具現例によれば、化学式41で、 R_{41} 、 R_{42} 、及び R_{52} 、並びに化学式61で、 R_{61} 及び R_{62} は、互いに独立して、化学式4-1～4-31のうちの一つで示される。

【0108】

更に他の具現例によれば、化学式41で、 R_{41} 、 R_{42} 、及び R_{52} 、並びに化学式61で、 R_{61} 及び R_{62} は、互いに独立して、化学式4-1～4-5、及び化学式4-26～4-31のうちの一つで示される。

【0109】

更に他の具現例によれば、化学式41で、 R_{41} 、 R_{42} 、及び R_{52} 、並びに化学式61で、 R_{61} 及び R_{62} は、互いに独立して、化学式5-1～5-26、及び化学式5-56～5-85のうちの一つで示されるが、それらに限定されるものではない。

【0110】

第1化合物は、下記化学式41-1～41-12のうちの一つで示され、第2化合物は、下記化学式61-1～61-6のうちの一つで示されるが、それらに限定されるもので

10

20

30

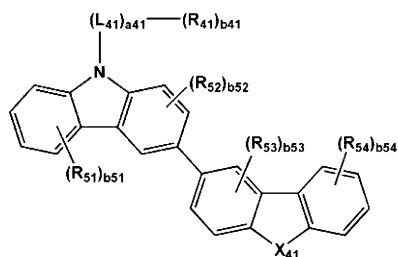
40

50

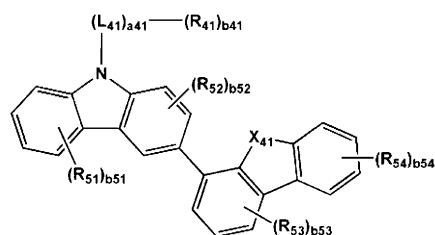
はない。

【 0 1 1 1 】

【 化 (4 1 - 1) - (4 1 - 8) 】

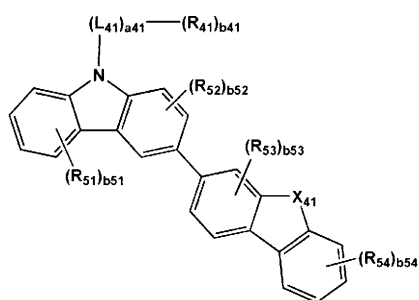


[化41-1]

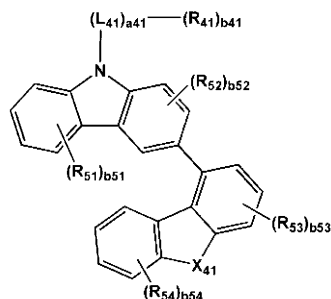


[化41-2]

10

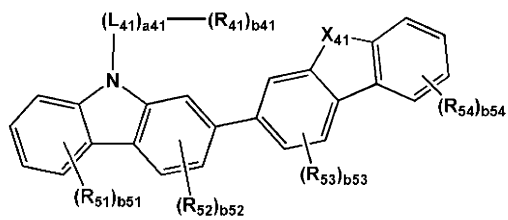


[化41-3]

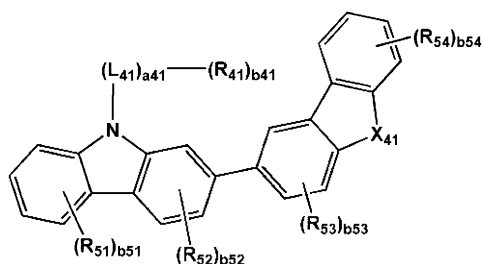


[化41-4]

20

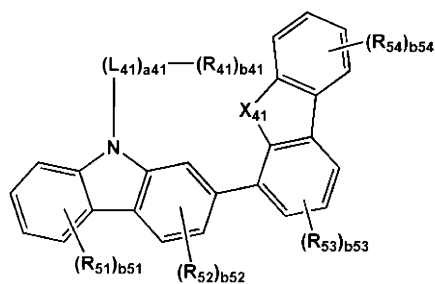


[化41-5]

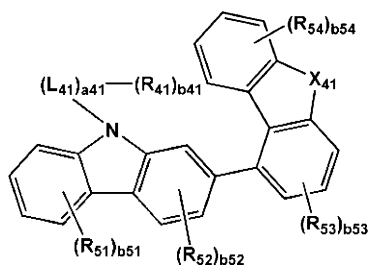


[化41-6]

30



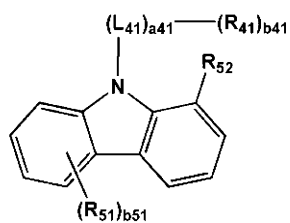
[化41-7]



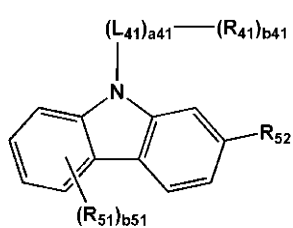
[化41-8]

40

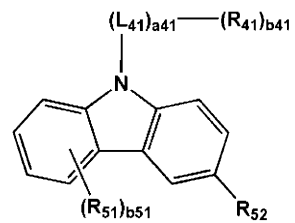
【化 (4 1 - 9) - (4 1 - 1 2) 】



〔化41-9〕

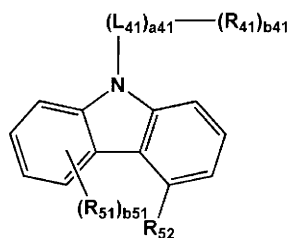


〔化41-10〕



〔化41-11〕

10

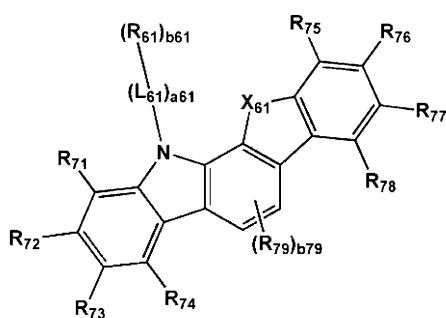


〔化41-12〕

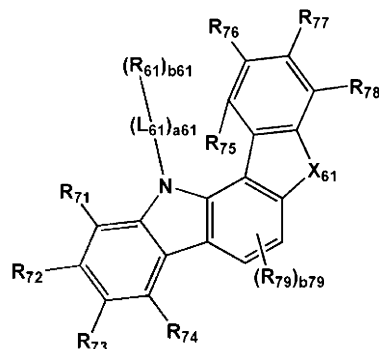
【 0 1 1 2 】

20

【化(61-1) - (61-6)】

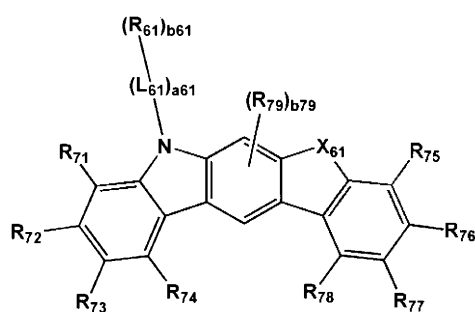


〔化61-1〕

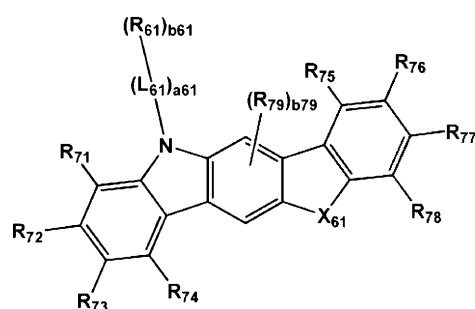


〔化61-2〕

10

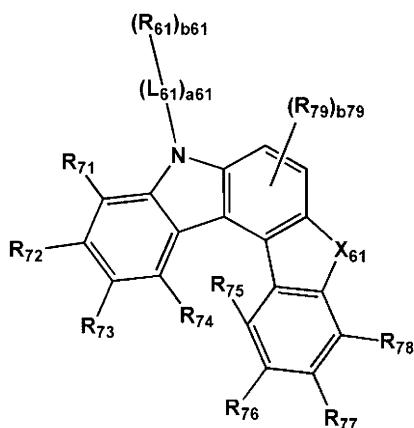


〔化61-3〕

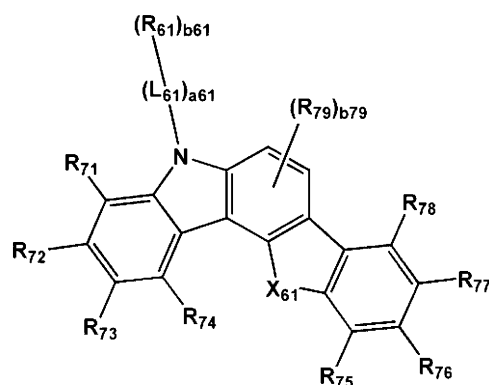


〔化61-4〕

20



〔化61-5〕



〔化61-6〕

30

【0113】

化学式41-1～41-12、及び化学式61-1～61-6で、 X_{41} 、 X_{61} 、 L_{41} 、 L_{42} 、 a_{41} 、 a_{42} 、 L_{61} 、 L_{62} 、 a_{61} 、 a_{62} 、 R_{41} ～ R_{44} 、 b_{41} 、 b_{42} 、 R_{61} ～ R_{64} 、 b_{61} 、 b_{62} 、 R_{71} ～ R_{79} 、及び b_{79} に係る説明は、本明細書に記載した箇所を参照する。

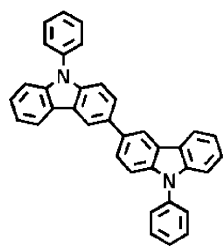
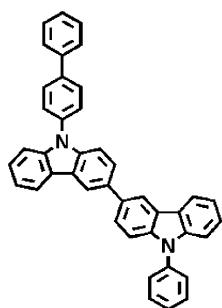
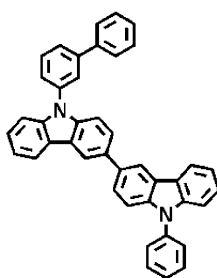
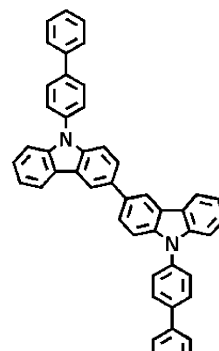
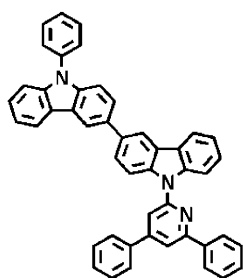
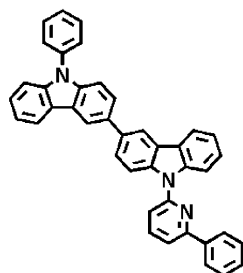
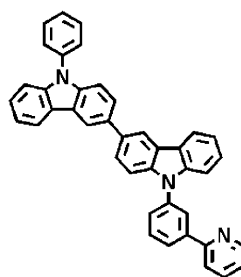
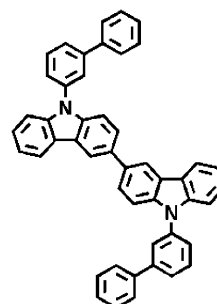
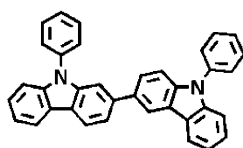
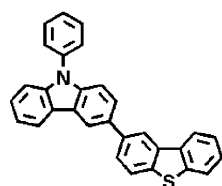
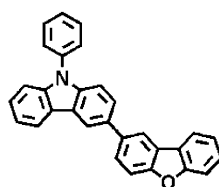
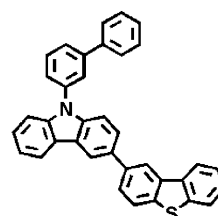
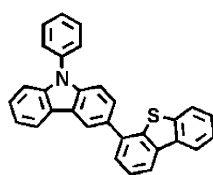
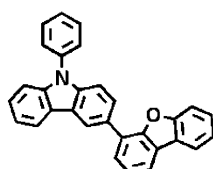
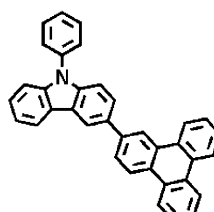
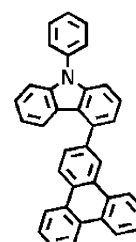
40

【0114】

一具現例によれば、化学式41で示される第1化合物は、下記化合物A1～A83のうちの一つを含み、化学式61で示される第2化合物は、下記化合物B1～B20のうちの一つを含むが、それらに限定されるものではない。

【0115】

【化 A 1 - A 1 6】

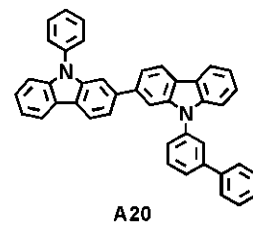
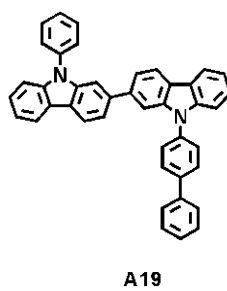
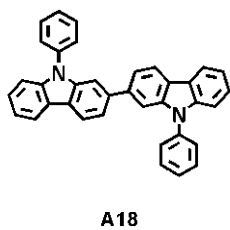
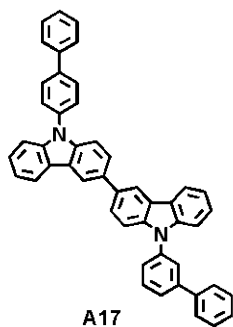
**A1****A2****A3****A4****A5****A6****A7****A8****A9****A10****A11****A12****A13****A14****A15****A16**

10

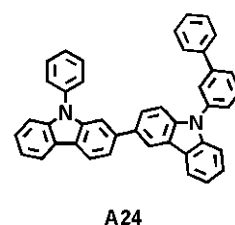
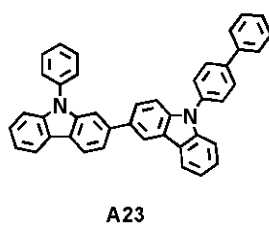
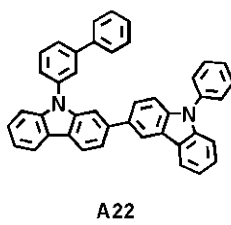
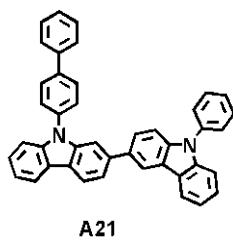
20

30

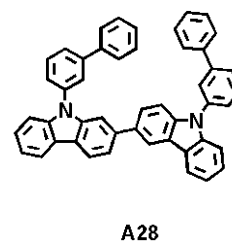
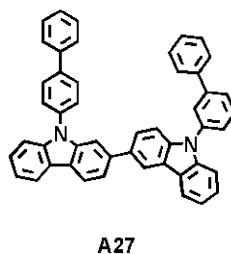
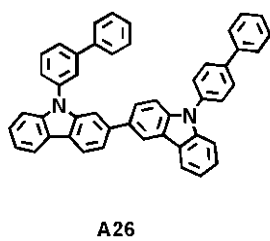
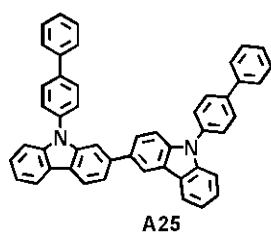
【化 A 1 7 - A 2 8】



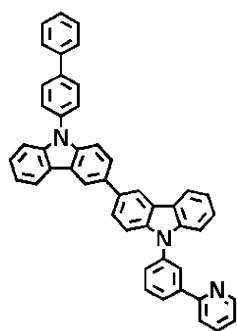
10



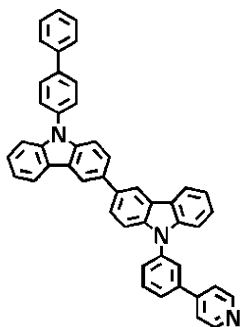
20



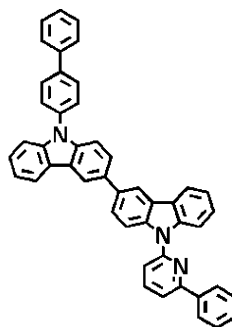
【化 A 2 9 - A 4 0】



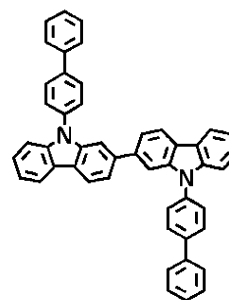
A29



A30

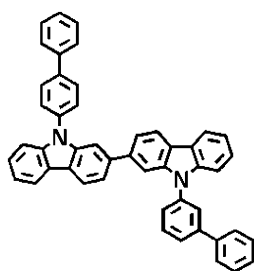


A31

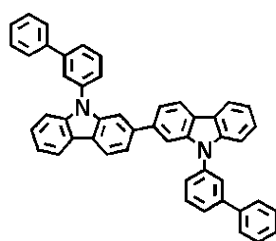


A32

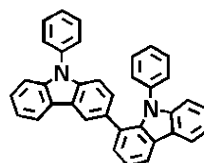
10



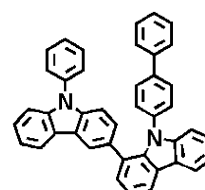
A33



A34

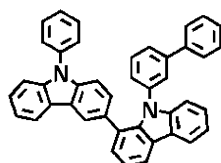


A35

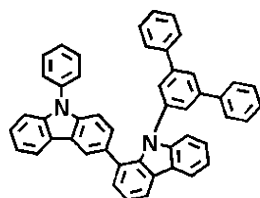


A36

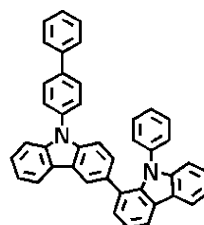
20



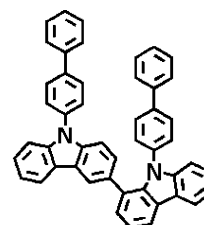
A37



A38



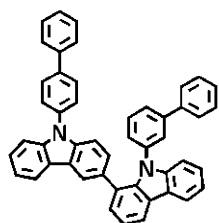
A39



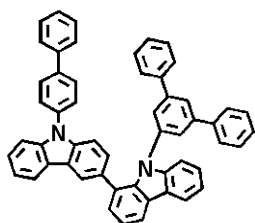
A40

30

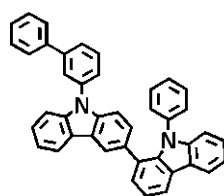
【化 A 4 1 - A 5 2】



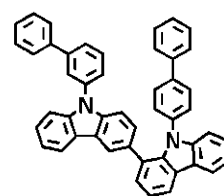
A41



A42

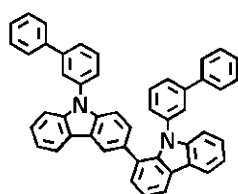


A43

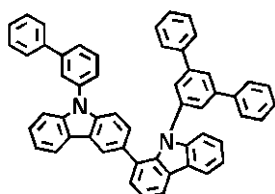


A44

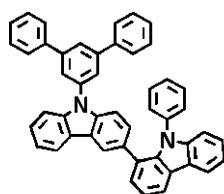
10



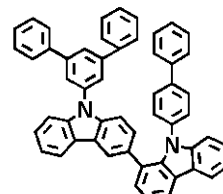
A45



A46

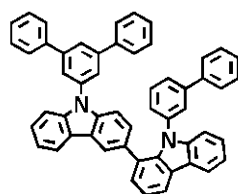


A47

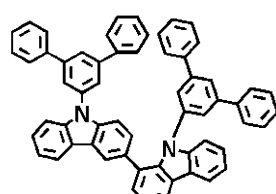


A48

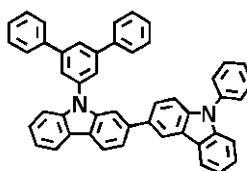
20



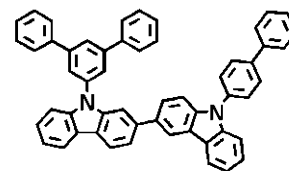
A49



A50

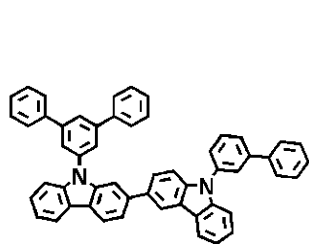


A51

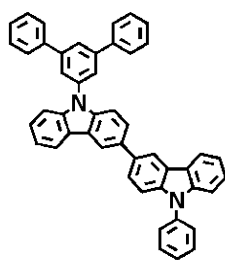


A52

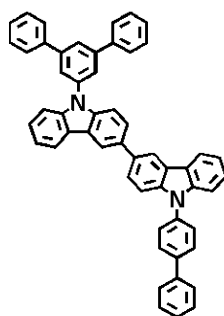
【化 A 5 3 - A 6 4】



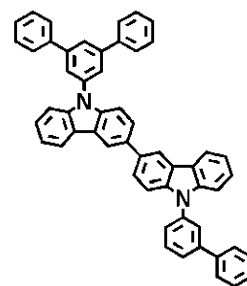
A53



A54

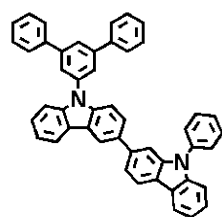


A55

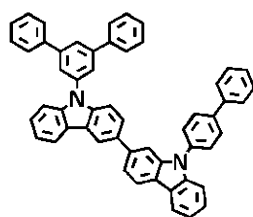


A56

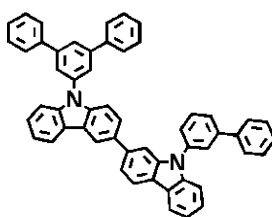
10



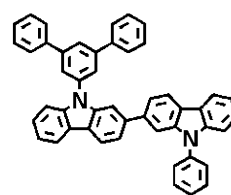
A57



A58

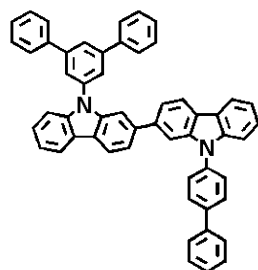


A59

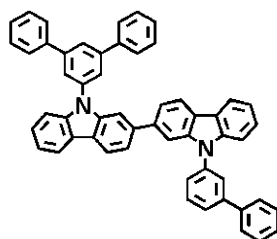


A60

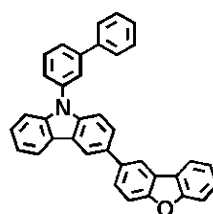
20



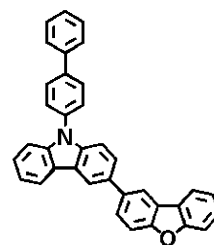
A61



A62



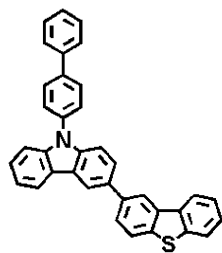
A63



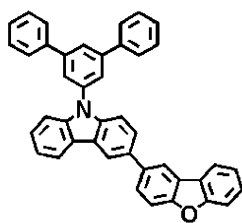
A64

30

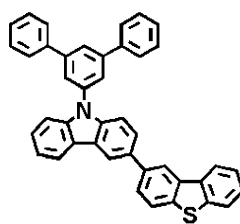
【化 A 6 5 - A 7 6】



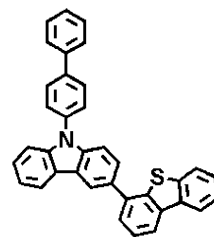
A65



A66

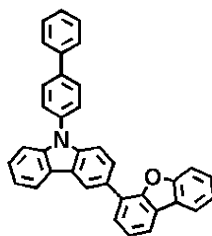


A67

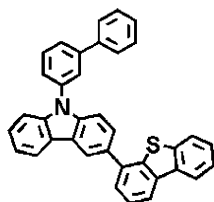


A68

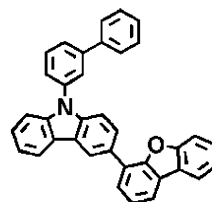
10



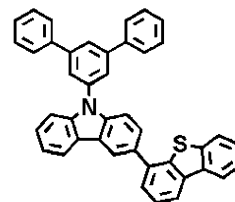
A69



A70

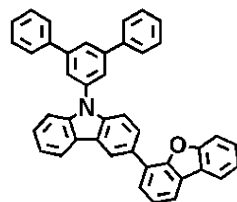


A71

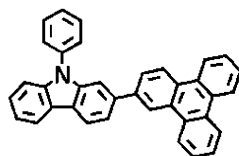


A72

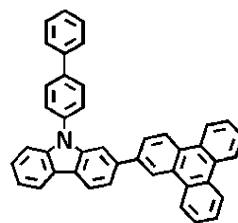
20



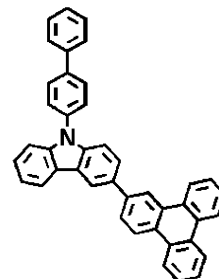
A73



A74



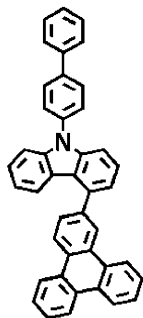
A75



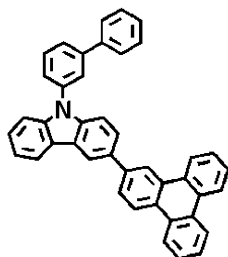
A76

30

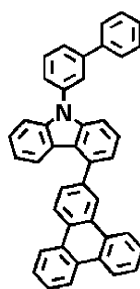
【化 A 7 7 - A 8 3】



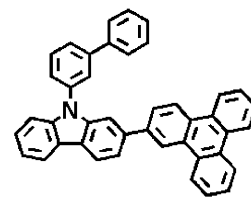
A77



A78

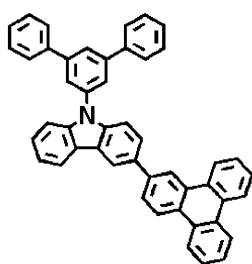


A79

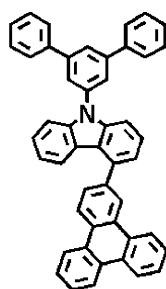


A80

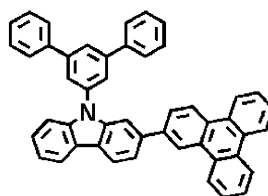
10



A81



A82

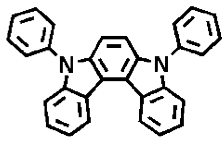


A83

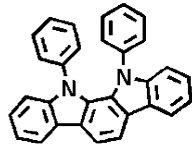
20

【 0 1 1 6】

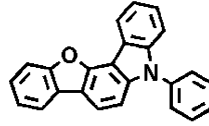
【化 B 1 - B 2 0】



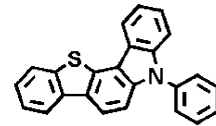
B1



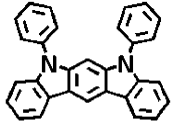
B2



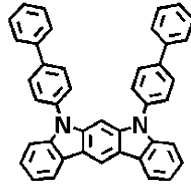
B3



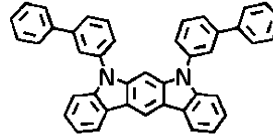
B4



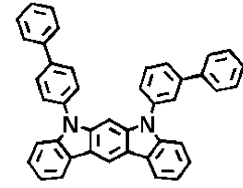
B5



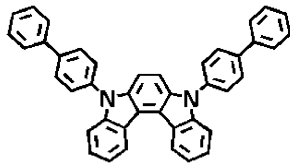
B6



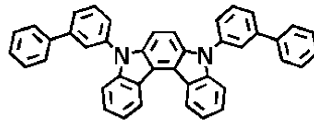
B7



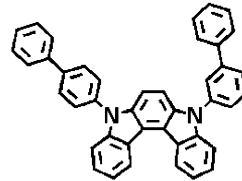
B8



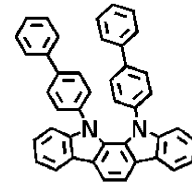
B9



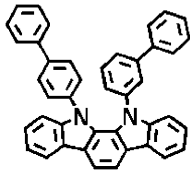
B10



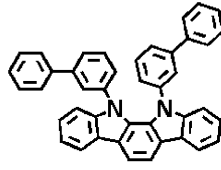
B11



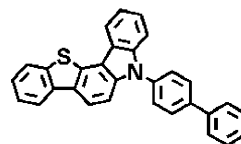
B12



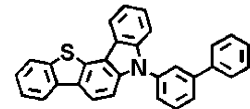
B13



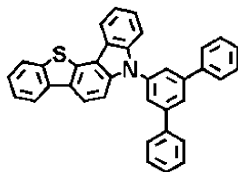
B14



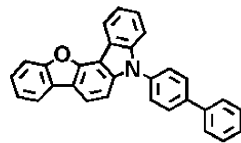
B15



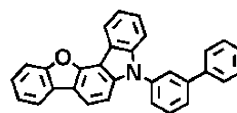
B16



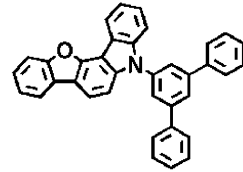
B17



B18



B19



B20

【0 1 1 7】

有機発光素子、例えば有機発光素子の発光層が、化学式 1 で示される縮合環化合物以外に、化学式 4 1 で示される第 1 化合物、及び化学式 6 1 で示される第 2 化合物のうちの少なくとも一つを更に含む場合、有機発光素子において、正孔輸送と電子輸送との均衡がより効果的に達成され、有機発光素子の効率、輝度、及び寿命特性が向上する。

【0 1 1 8】

化学式 1 で示される縮合環化合物、化学式 4 1 で示される第 1 化合物、及び化学式 6 1 で示される第 2 化合物の合成方法は、後述する合成例を参照して当業者であるならば容易に認識することができる。

10

20

30

40

50

【0119】

図1は、本発明の一具現例による有機発光素子10を概略的に示した断面図である。以下、図1を参照し、本発明の一具現例による有機発光素子の構造及び製造方法について説明すると、次の通りである。有機発光素子10は、第1電極11、有機層15、及び第2電極19が順に積層された構造を有する。

【0120】

第1電極11の下部、又は第2電極19の上部には、基板が更に配置される。基板としては、一般的な有機発光素子で使用される基板を使用することができるが、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又は透明プラスチック基板を使用することが望ましい。

10

【0121】

第1電極11は、例えば、基板上部に、第1電極用物質を、蒸着法又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。第1電極11は、アノードである。第1電極用物質は、正孔注入が容易になるように、高い仕事関数を有する物質のうちから選択される。第1電極11は、反射型電極、半透過型電極、又は透過型電極である。第1電極用物質としては、酸化インジウムスズ（ITO）、酸化インジウム亜鉛（IZO）、酸化スズ（ SnO_2 ）、酸化亜鉛（ZnO）などを利用することができる。或いは、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）のような金属を利用することができる。

20

【0122】

第1電極11は、単一層、又は2以上の層を含む多層の構造を有する。

【0123】

第1電極11の上部には、有機層15が配置される。

【0124】

有機層15は、正孔輸送領域（hole transport region）、発光層（emission layer）、及び電子輸送領域（electron transport region）を含む。

【0125】

正孔輸送領域は、第1電極11と発光層との間に配置される。

30

【0126】

正孔輸送領域は、正孔注入層、正孔輸送層、電子阻止層、及びバッファ層のうちの少なくとも1層を含む。

【0127】

正孔輸送領域は、正孔注入層のみを含むか、又は正孔輸送層のみを含む。或いは、正孔輸送領域は、第1電極11から順に積層された正孔注入層／正孔輸送層、又は正孔注入層／正孔輸送層／電子阻止層の構造を有する。

【0128】

正孔輸送領域が正孔注入層を含む場合、正孔注入層（HIL）は、第1電極11の上部に、真空蒸着法、スピンコーティング法、キャスト法、LB（Langmuir-Blodgett）法のような多様な方法を利用して形成される。

40

【0129】

真空蒸着法によって正孔注入層を形成する場合、その蒸着条件は、正孔注入層材料として使用する化合物、目的とする正孔注入層の構造、及び熱的特性などによって異なり、例えば、蒸着温度約100～約500℃、真空度約 10^{-8} ～約 10^{-3} torr、蒸着速度約0.01～約100 Å/sec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。

【0130】

スピンコーティング法によって正孔注入層を形成する場合、コーティング条件は、正孔注入層の材料として使用する化合物、目的とする正孔注入層の構造、及び熱的特性によ

50

って異なり、約 2,000 rpm～約 5,000 rpm のコーティング速度、コーティング後の溶媒除去のための熱処理温度が約 80℃～約 200℃の温度範囲で選択されるが、それらに限定されるものではない。

【0131】

正孔輸送層及び電子阻止層の形成条件は、正孔注入層の形成条件を参照する。

【0132】

正孔輸送領域は、上述のような縮合環化合物のうちの 1 種以上を含む。例えば、正孔輸送領域において、正孔輸送層は、上述のような縮合環化合物のうちの 1 種以上を含む。

【0133】

一具現例によれば、正孔輸送領域（例えば、正孔輸送領域において正孔輸送層）は、化学式 1 で示された縮合環化合物を含むが、化学式 1 において、 L_3 は、置換若しくは非置換の C_6-C_{60} アリーレン基、及び置換若しくは非置換の二価非芳香族縮合多環基のうちから選択され、 R_3 は、置換若しくは非置換の C_6-C_{60} アリール基、及び置換若しくは非置換の一価非芳香族縮合多環基のうちから選択される。

10

【0134】

他の具現例によれば、正孔輸送領域（例えば、正孔輸送領域において正孔輸送層）は、化学式 1 で示された縮合環化合物を含むが、化学式 1 において、 L_3 は、

フェニレン基、ナフチレン基、及びトリフェニレン基；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、アミジノ基、ヒドラジン基、ヒドラゾン基、カルボン酸基又はその塩、スルホン酸基又はその塩、リン酸基又はその塩、 C_1-C_{20} アルキル基、 C_1-C_{20} アルコキシ基、フェニル基、ナフチル基、アントラセニル基、トリフェニレニル基、ピレニル基、フェナントレニル基、及びクリセニル基のうちの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、及びトリフェニレン基；のうちから選択され、

20

R_3 は、化学式 4-1～4-5 のうちから選択される。

【0135】

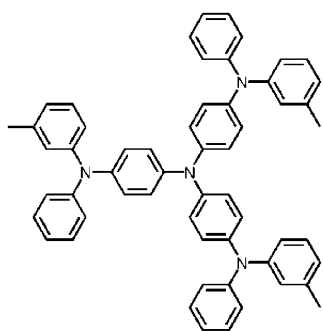
或いは、正孔輸送領域は、例えば、4,4',4"-トリリス（3-メチルフェニルフェニルアミノ）トリフェニルアミン（m-MTDA TA）、4,4',4"-トリリス{N,Nジフェニルアミノ}トリフェニルアミン（TDA TA）、4,4',4"-トリリス（N,N-2-ナフチルフェニルアミノ）トリフェニルアミン（2-TNA TA）、N,N'-ージ（1-ナフチル）-N,N'-ージフェニルベンジジン（NPB）、 β -NPB、N,N'-ージフェニル-N,N'-ージ（m-トリル）ベンジジン（TPD）、Spiro-TPD、Spiro-NPB、メチル化NPB、1,1-ビス[4-[N,N'-ージ（p-トリル）アミノ]フェニル]シクロヘキサン（TAPC）、4-4'-ビス[N,N'-（3-トリル）アミノ]-3-3'-ジメチルビフェニル（HMTPD）、4,4',4"-トリリス（N-カルバゾリル）トリフェニルアミン（TC TA）、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 201 で示される化合物、及び下記化学式 202 で示される化合物のうちの少なくとも一つを含む。

30

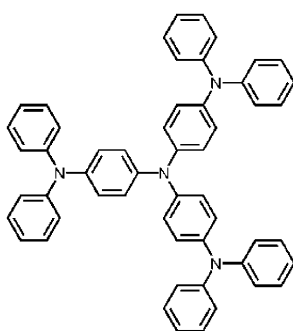
40

【0136】

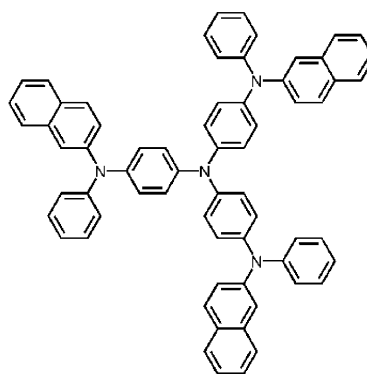
【化 1 3 6】



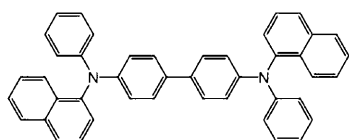
m-MTDATA



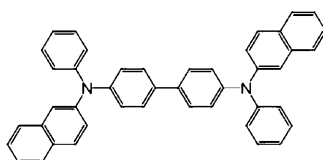
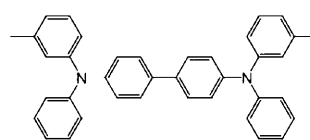
TDATA



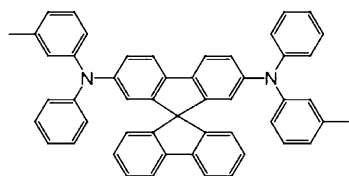
2-TNATA



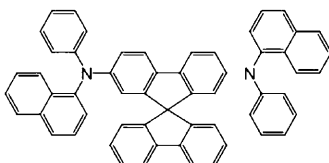
NPB

 β -NPB

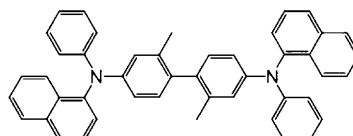
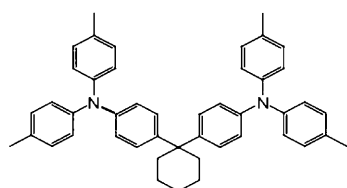
TPD



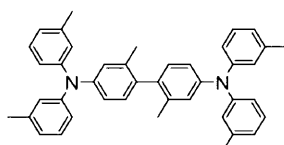
Spiro-TPD



Spiro-NPB

 α -NPB

TAPC



HMTPD

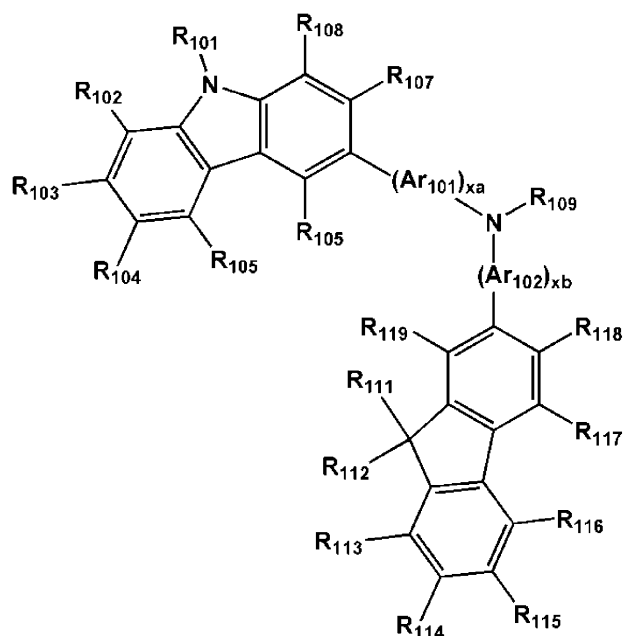
10

20

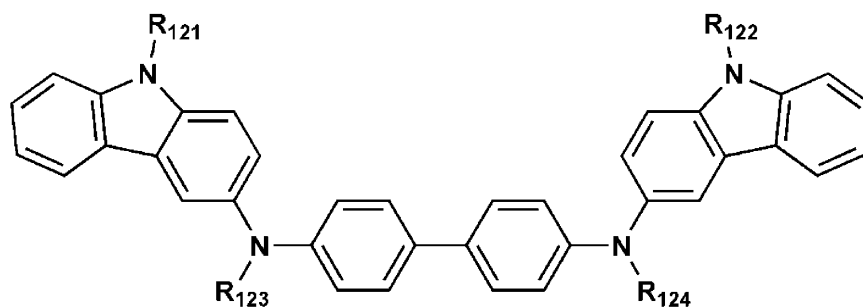
30

【 0 1 3 7】

【化201-202】



〔化201〕



〔化202〕

【0138】

化学式201で、 Ar_{101} 及び Ar_{102} 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、アセナフチレン基、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、及びペンタセニレン基；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、アミジノ基、ヒドラジン基、ヒドラゾン基、カルボン酸基又はその塩、スルホン酸基又はその塩、リン酸基又はその塩、 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_3-C_{10} シクロアルケニル基、 C_1-C_{10} ヘテロシクロアルキル基、 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のうちの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、アセナフチレン基、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、及びペンタセニレン基；のうちから選択される。

【0139】

化学式201で、 x_a 及び x_b は、互いに独立して、0～5の整数、又は0、1、又は2である。例えば、 x_a が1であり、 x_b が0であるが、それらに限定されるものではない。

【0140】

化学式201及び202で、 $R_{101} \sim R_{108}$ 、 $R_{111} \sim R_{119}$ 、及び $R_{121} \sim R_{124}$ 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、アミジノ基、ヒドラジン基、ヒドラゾン基、カルボン酸基又はその塩、スルホン酸基又はその塩、リン酸基又はその塩、 $C_1 - C_{10}$ アルキル基（例えば、メチル基、エチル基、プロピル基、ブチル基、ペンチル基、ヘキシル基など）、及び $C_1 - C_{10}$ アルコキシ基（例えば、メトキシ基、エトキシ基、プロポキシ基、ブトキシ基、ペントキシ基など）；

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、カルボン酸基又はその塩、スルホン酸基又はその塩、及びリン酸基又はその塩のうちのいずれか一つ以上で置換された、 $C_1 - C_{10}$ アルキル基、及び $C_1 - C_{10}$ アルコキシ基；

フェニル基、ナフチル基、アントラセニル基、フルオレニル基、及びピレニル基；及び重水素、 $-F$ 、 $-Cl$ 、 $-Br$ 、 $-I$ 、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、カルボン酸基又はその塩、スルホン酸基又はその塩、リン酸基又はその塩、 $C_1 - C_{10}$ アルキル基、及び $C_1 - C_{10}$ アルコキシ基のうちのいずれか一つ以上で置換された、フェニル基、ナフチル基、アントラセニル基、フルオレニル基、及びピレニル基；のうちから選択されるが、それらに限定されるものではない。

【0141】

化学式201で、 R_{109} は、

フェニル基、ナフチル基、アントラセニル基、及びピリジニル基；及び

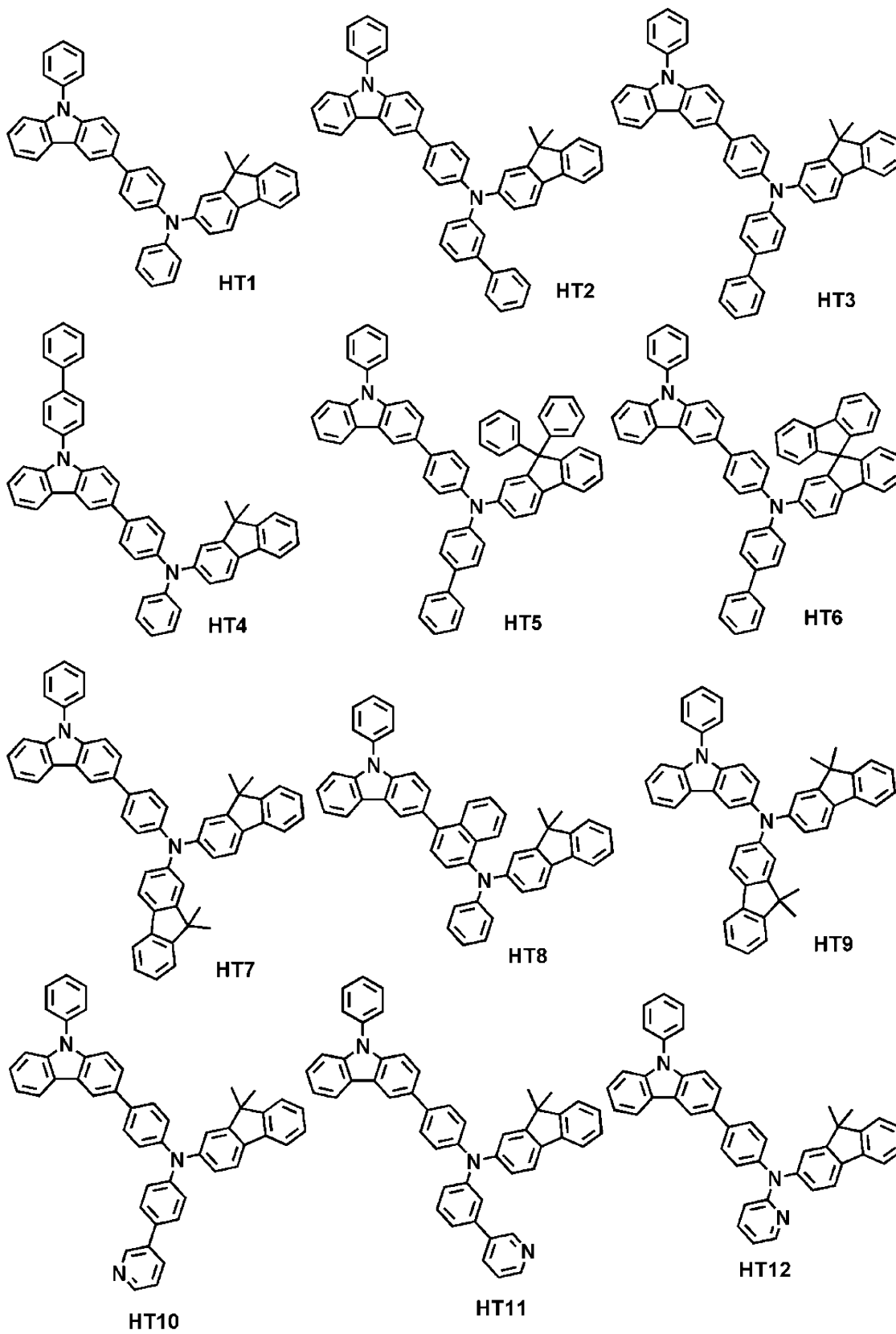
重水素、 $-F$ 、 $-Cl$ 、 $-Br$ 、 $-I$ 、ヒドロキシル基、シアノ基、ニトロ基、アミノ基、アミジノ基、ヒドラジン基、ヒドラゾン基、カルボン酸基又はその塩、スルホン酸基又はその塩、リン酸基又はその塩、 $C_1 - C_{20}$ アルキル基、及び $C_1 - C_{20}$ アルコキシ基のうちのいずれか一つ以上で置換された、フェニル基、ナフチル基、アントラセニル基、及びピリジニル基；のうちから選択される。

【0142】

一具現例によれば、化学式201で示される化合物は、下記化学式201Aで示されるが、それに限定されるものではない。

【0143】

【化HT1-HT12】



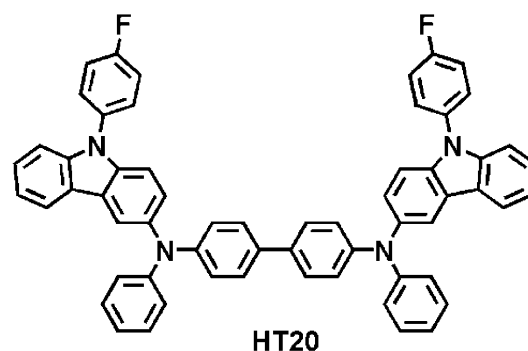
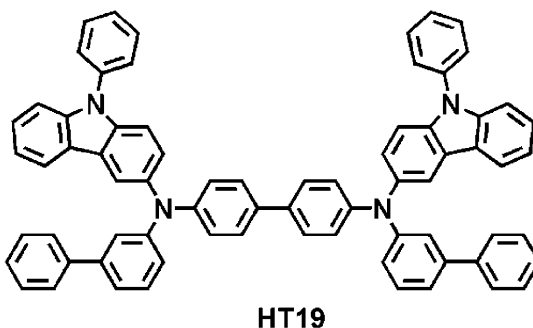
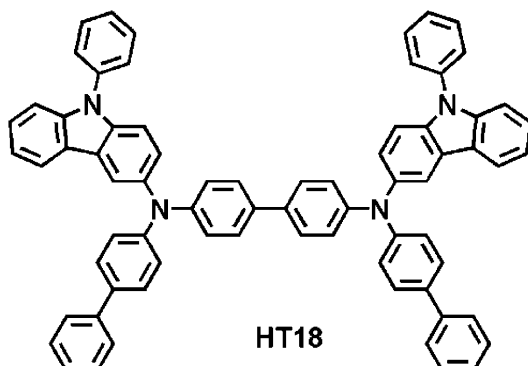
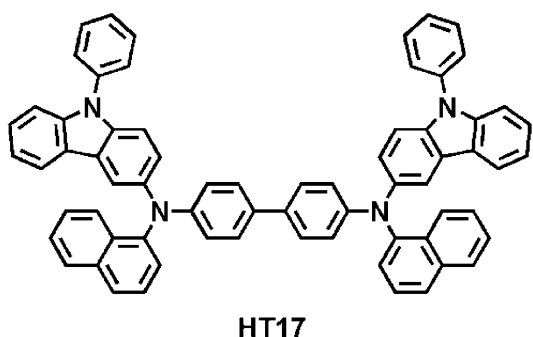
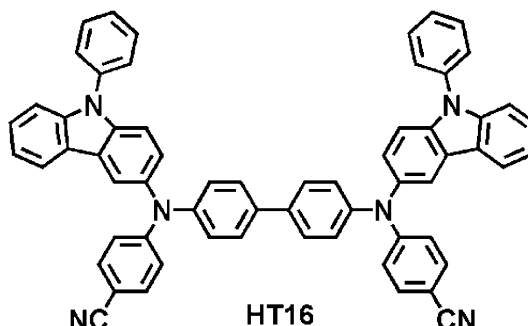
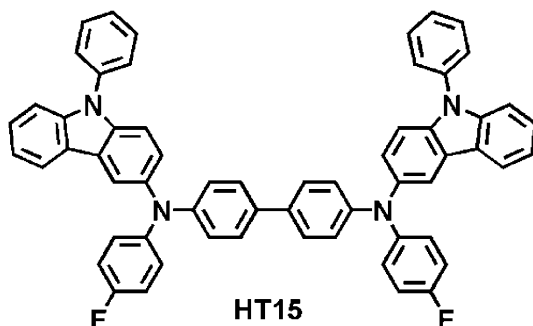
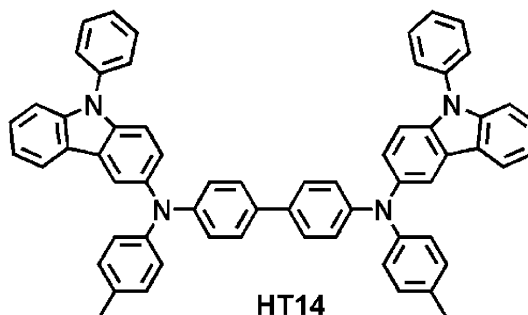
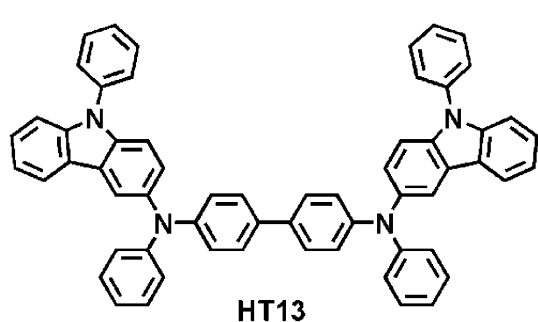
10

20

30

40

【化HT13-HT20】



【0147】

正孔輸送領域の厚みは、約100 Å～約10,000 Å、例えば約100 Å～約1,000 Åである。正孔輸送領域が正孔注入層及び正孔輸送層をいずれも含む場合、正孔注入層の厚みは、約100 Å～約10,000 Å、例えば約100 Å～約1,000 Åであり、正孔輸送層の厚みは、約50 Å～約2,000 Å、例えば約100 Å～約1,500 Åである。正孔輸送領域、正孔注入層、及び正孔輸送層の厚みが、上述のような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。

【0148】

正孔輸送領域は、上述のような物質以外に、導電性向上のために電荷生成物質を更に含む。電荷生成物質は、正孔輸送領域内に、均一に、又は不均一に分散される。

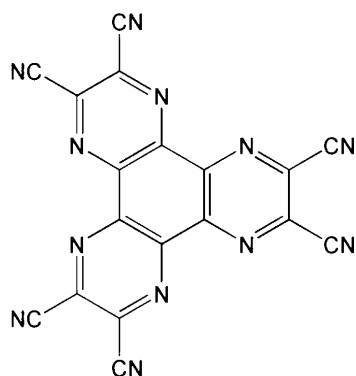
【0149】

電荷生成物質は、例えば、p-ドーパントである。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のいずれか一つであるが、それらに限定されるものではない。例えば、p-ドーパントの非制限的な例としては、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-テトラシアノ-1, 4-ベンゾキノジメタン（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；及び下記化合物HT-D1のようなシアノ基含有化合物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。

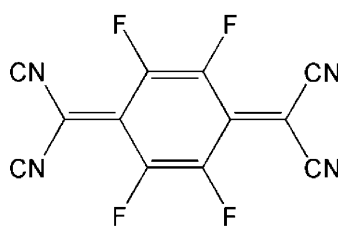
【0150】

【化150】

10



〔化合物HT-D1〕



〔F4-TCNQ〕

20

【0151】

正孔輸送領域は、バッファ層を更に含む。

【0152】

バッファ層は、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、効率を上昇させる役割を行う。

【0153】

正孔輸送領域の上部に、真空蒸着法、スピンコーティング法、キャスト法、LB法のような方法を利用して、発光層（EML）を形成する。真空蒸着法及びスピンコーティング法によって発光層を形成する場合、その蒸着条件及びコーティング条件は、使用する化合物によって異なるが、一般的に、正孔注入層の形成と略同一の条件範囲のうちから選択される。

30

【0154】

発光層は、ホスト及びドーパントを含む。ホストは、化学式1で示される縮合環化合物のうちの1種以上を含む。

【0155】

例えば、ホストは、化学式1で示される縮合環化合物を含むが、化学式1においてR₃は、置換若しくは非置換のC₁-C₆₀ヘテロアリール基、又は置換若しくは非置換の一価非芳香族ヘテロ縮合多環基である。

40

【0156】

一具現例によれば、ホストは、化学式1で示される縮合環化合物を含むが、化学式1においてR₃は、化学式4-6～4-25で示される群のうちから選択される。

【0157】

有機発光素子が、フルカラー有機発光素子である場合、発光層は、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。或いは、発光層は、赤色発光層、緑色発光層、及び／又は青色発光層が積層された構造を有することにより白色光を放出するなど、多様な変形例が可能である。赤色発光層、緑色発光層、及び青色発光層において、ホストは、化学式1で示される縮合環化合物のうちの1種以上を含む。一具現例によれば、緑色

50

発光層のうちのホストは、化学式 1 で示される縮合環化合物のうちの 1 種以上を含む。

【0158】

一方、発光層において、ホストは、第 1 ホスト及び第 2 ホストを含むが、第 1 ホストは、化学式 1 で示される縮合環化合物のうちの 1 種以上を含み、第 2 ホストは、化学式 4 1 で示される第 1 化合物、及び化学式 6 1 で示される第 2 化合物のうちの少なくとも一つを含む。

【0159】

発光層において、ドーパントは、蛍光放出メカニズムによって光を放出する蛍光ドーパント、或いはリン光放出メカニズムによって光を放出するリン光ドーパントを含む。

【0160】

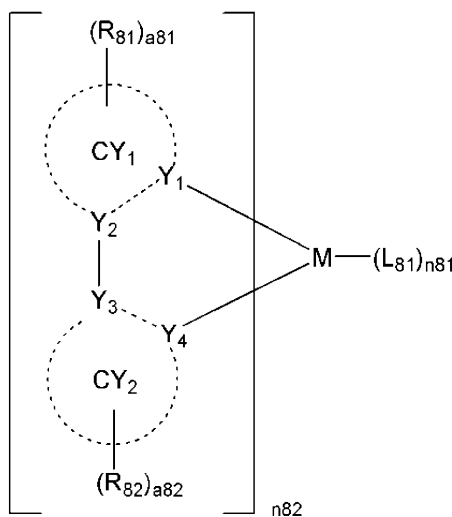
一具現例によれば、発光層は、化学式 1 で示される縮合環化合物のうちの 1 種以上を含むホスト及びリン光ドーパントを含む。

【0161】

リン光ドーパントは、下記化学式 8 1 で示される有機金属化合物を含む。

【0162】

【化 8 1】



【0163】

化学式 8 1 で、

M は、イリジウム (Ir)、白金 (Pt)、オスミウム (Os)、チタン (Ti)、ジルコニウム (Zr)、ハフニウム (Hf)、ユーロピウム (Eu)、テルビウム (Tb)、又はツリウム (Tm) であり、

$Y_1 \sim Y_4$ は、互いに独立して、炭素 (C) 又は窒素 (N) であり、

Y_1 と Y_2 は、単一結合又は二重結合を介して連結されており、 Y_3 と Y_4 は、単一結合又は二重結合を介して連結されており、

CY_1 及び CY_2 は、互いに独立して、ベンゼン、ナフタレン、フルオレン、スピロフルオレン、インデン、ピロール、チオフェン、フラン (furan)、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、イソオキサゾール (isooxazole)、ピリジン、ピラジン、ピリミジン、ピリダジン、キノリン、イソキノリン、ベンゾキノリン、キノキサリン、キナゾリン、カルバゾール、ベンゾイミダゾール、ベンゾフラン (benzofuran)、ベンゾチオフェン、イソベンゾチオフェン、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、ジベンゾフラン (dibenzofuran)、又はジベンゾチオフェンであり、 CY_1 と CY_2 は、選択的に (optionally)、単一結合又は有機連結基 (organic linking group) を介して、互いに結合され、

R_{81} 及び R_{82} 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、アミジノ基、ヒドラジン基、ヒドラゾン基、カルボン酸基又はその塩、スルホン酸基又はその塩、リン酸基又はその塩、 $-SF_5$ 、置換若しくは非置換の C_1-C_{60} アルキル基、置換若しくは非置換の C_2-C_{60} アルケニル基、置換若しくは非置換の C_2-C_{60} アルキニル基、置換若しくは非置換の C_1-C_{60} アルコキシ基、置換若しくは非置換の C_3-C_{10} シクロアルキル基、置換若しくは非置換の C_1-C_{10} ヘテロシクロアルキル基、置換若しくは非置換の C_3-C_{10} シクロアルケニル基、置換若しくは非置換の C_1-C_{10} ヘテロシクロアルケニル基、置換若しくは非置換の C_6-C_{60} アリール基、置換若しくは非置換の C_6-C_{60} アリールオキシ基、置換若しくは非置換の C_6-C_{60} アリールチオ基、置換若しくは非置換の C_1-C_{60} ヘテロアリール基、置換若しくは非置換の一価非芳香族縮合多環基、置換若しくは非置換の一価非芳香族ヘテロ縮合多環基、 $-N(Q_1)(Q_2)$ 、 $-Si(Q_3)(Q_4)(Q_5)$ 、又は $-B(Q_6)(Q_7)$ であり、

10

a_{81} 及び a_{82} は、互いに独立して、1～5の整数のうちから選択され、

n_{81} は、0～4の整数のうちから選択され、

n_{82} は、1、2、又は3であり、

L_{81} は、一価有機配位子、二価有機配位子、又は三価有機配位子である。

【0164】

R_{81} 及び R_{82} に係る説明は、本明細書における R_{11} に係る説明を参照する。

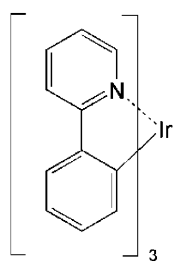
リン光ドーパントは、下記化合物PD1～PD74のうちの少なくとも一つを含むが、それらに限定されるものではない（このうち化合物PD1は、 $Ir(ppy)_3$ である）

20

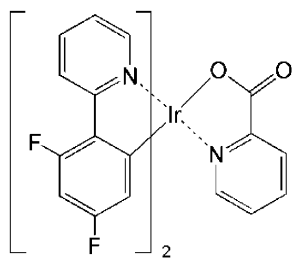
。

【0165】

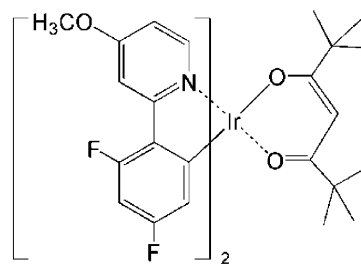
【化 P D 1 - P D 1 2】



PD1

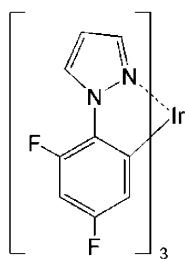


PD2

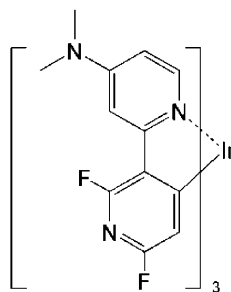


PD3

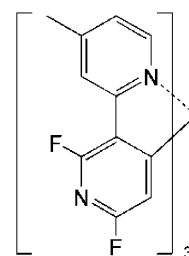
10



PD4

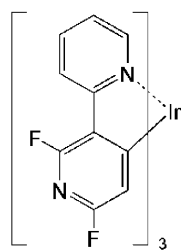


PD5

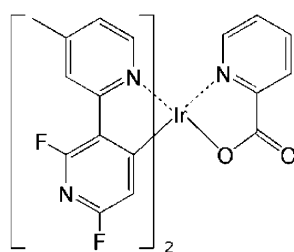


PD6

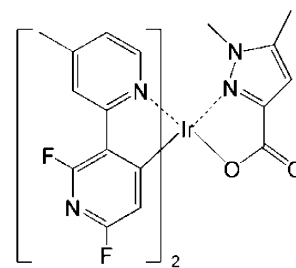
20



PD7

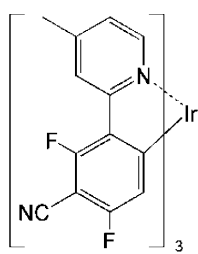


PD8

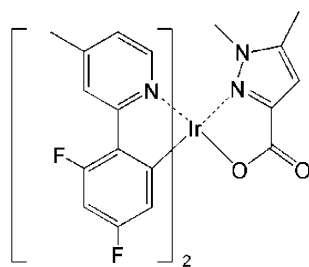


PD9

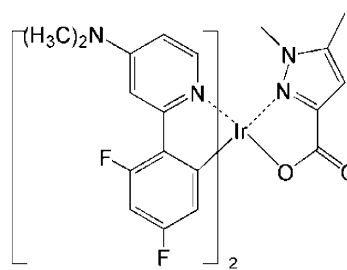
30



PD10



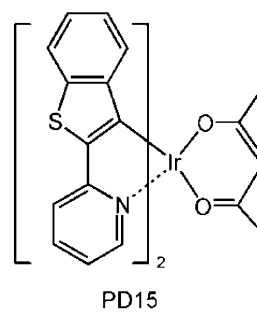
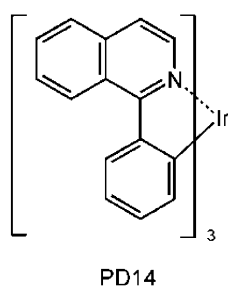
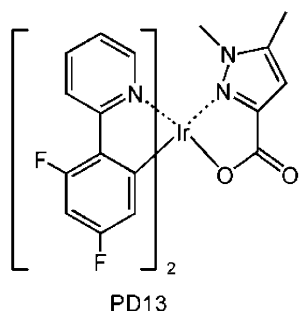
PD11



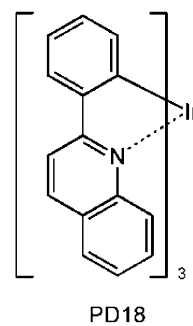
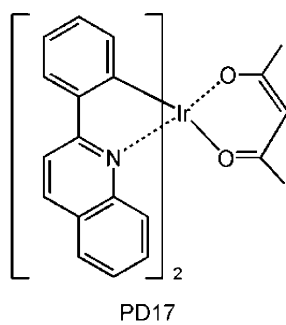
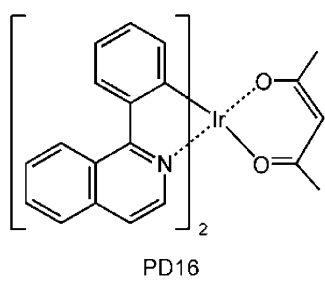
PD12

40

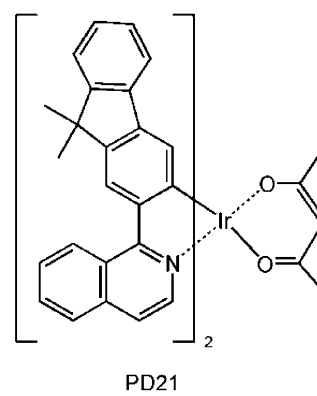
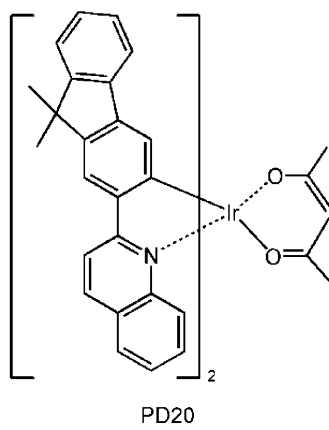
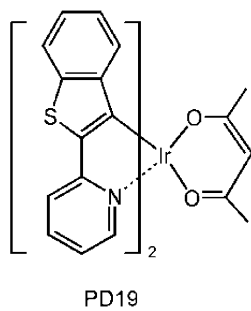
【化 P D 1 3 - P D 2 1】



10

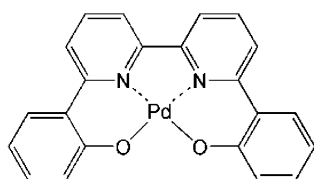


20

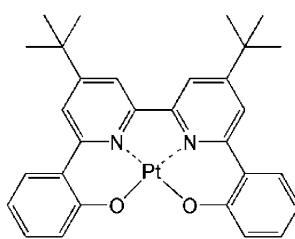


30

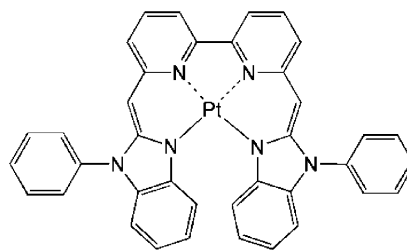
【化 P D 2 2 - P D 3 3】



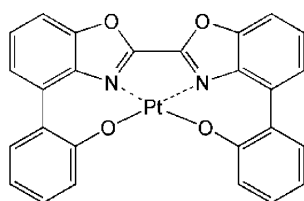
PD22



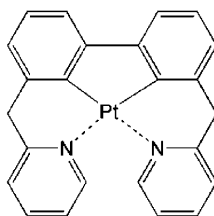
PD23



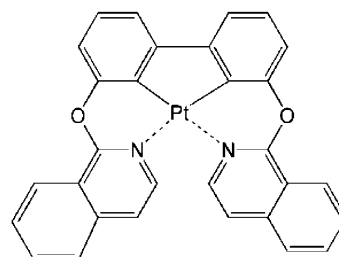
PD24



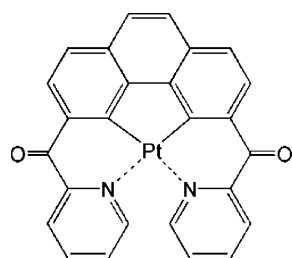
PD25



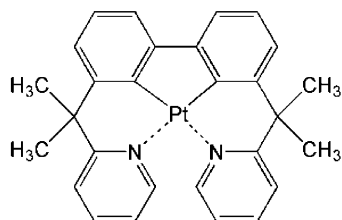
PD26



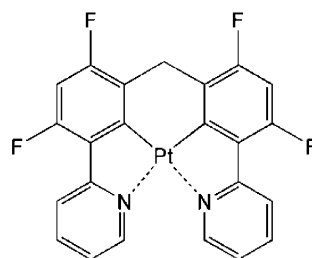
PD27



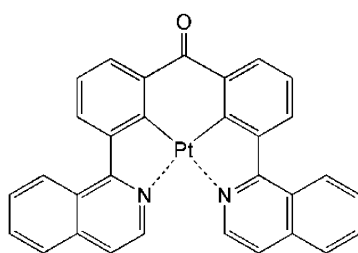
PD28



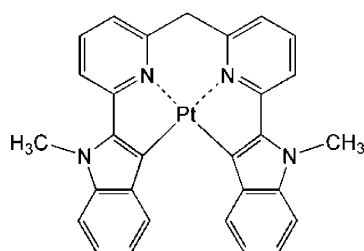
PD29



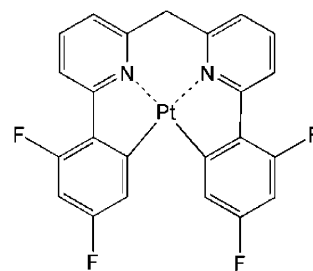
PD30



PD31



PD32



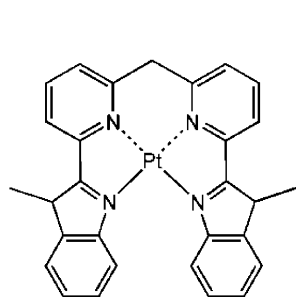
PD33

10

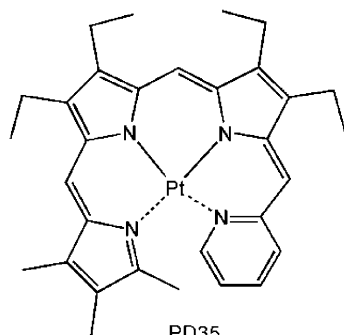
20

30

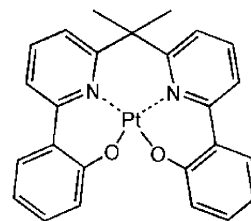
【化 P D 3 4 - P D 4 5】



PD34

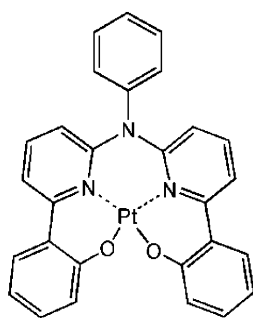


PD35

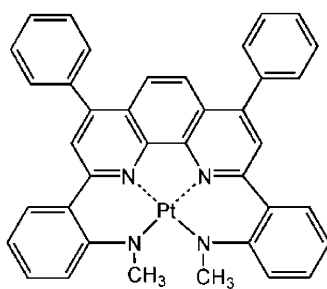


PD36

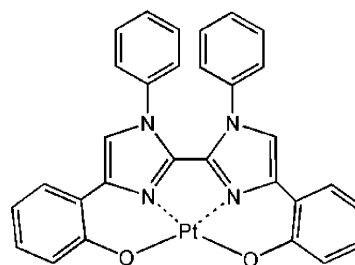
10



PD37

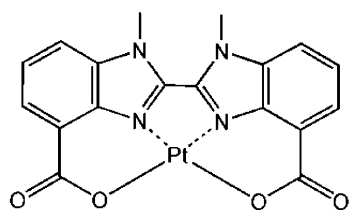


PD38

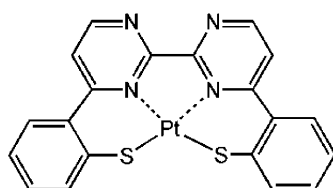


PD39

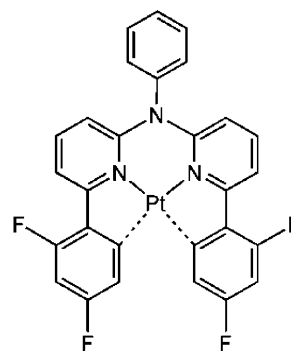
20



PD40

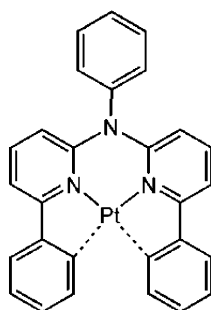


PD41

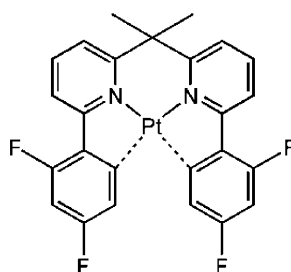


PD42

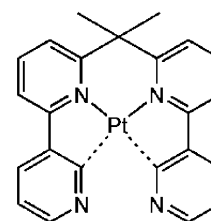
30



PD43



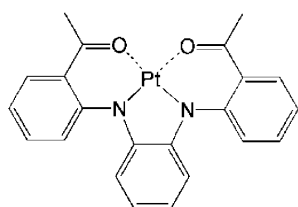
PD44



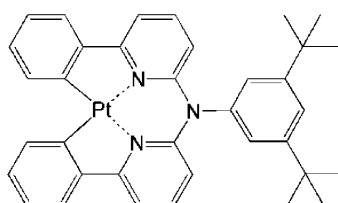
PD45

40

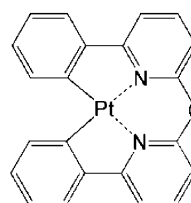
【化 P D 4 6 - P D 5 7】



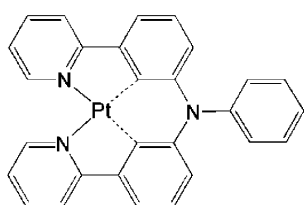
PD46



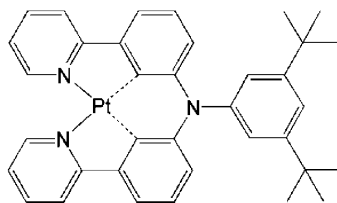
PD47



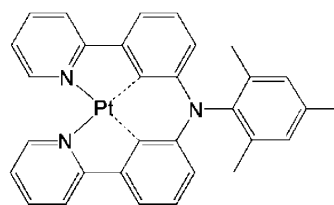
PD48



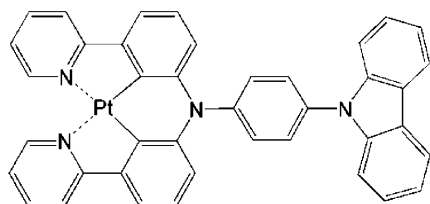
PD49



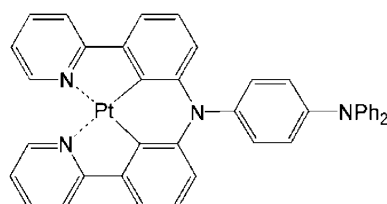
PD50



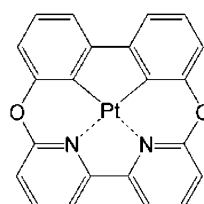
PD51



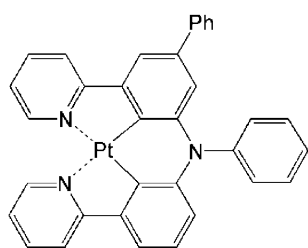
PD52



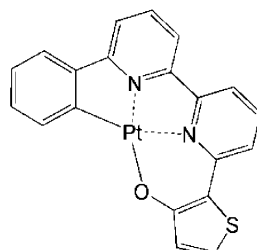
PD53



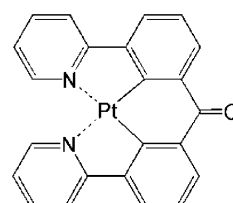
PD54



PD55



PD56



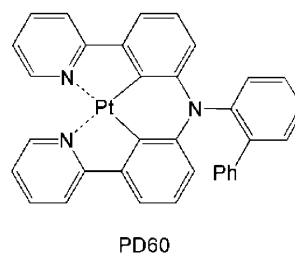
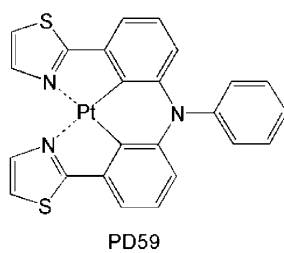
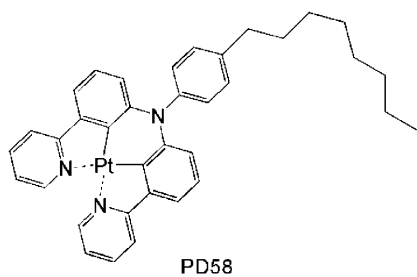
PD57

10

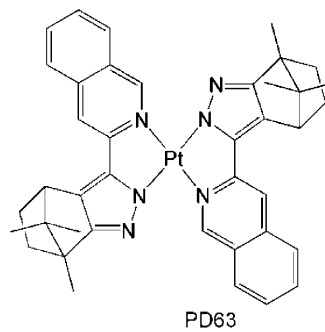
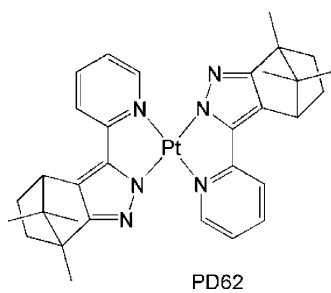
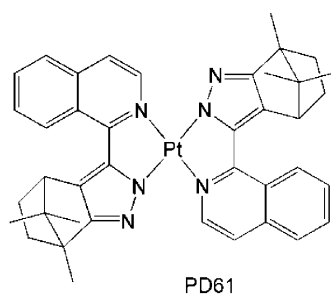
20

30

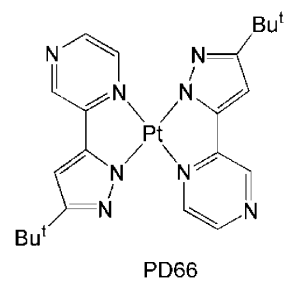
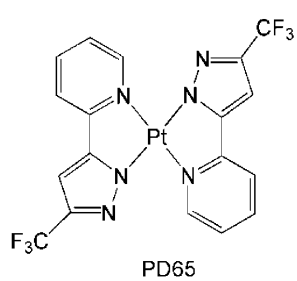
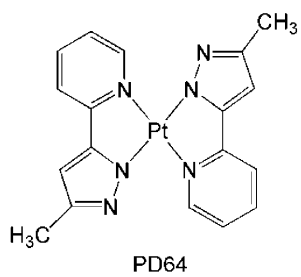
【化 P D 5 8 - P D 6 9】



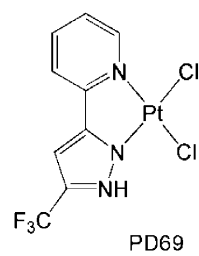
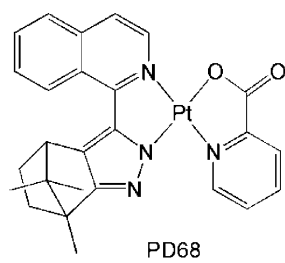
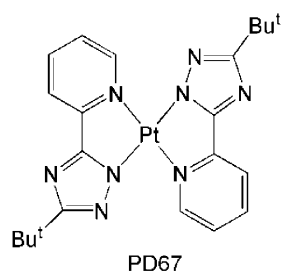
10



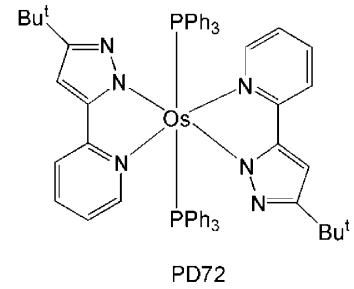
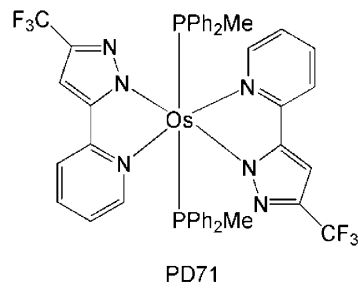
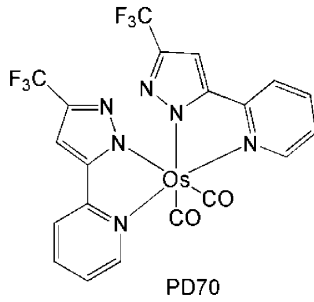
20



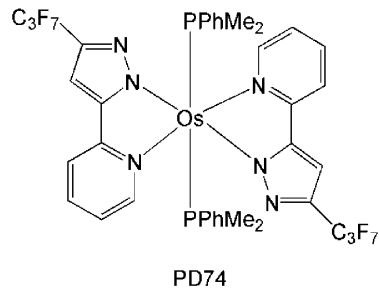
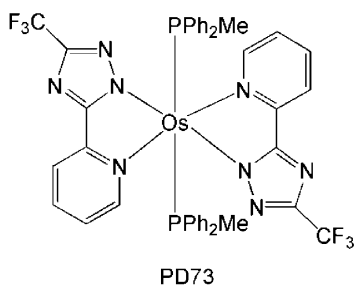
30



【化 P D 7 0 - P D 7 4】



10



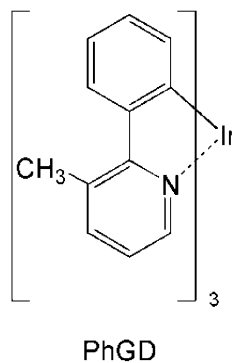
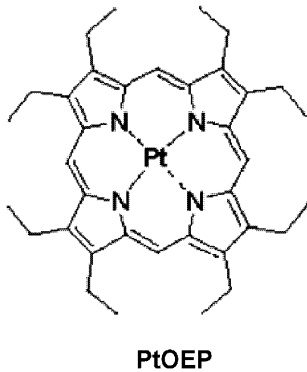
20

【 0 1 6 6】

或いは、リン光ドーパントは、下記 P t O E P 又は化合物 P h G D を含む。

【 0 1 6 7】

【化 1 6 7】



30

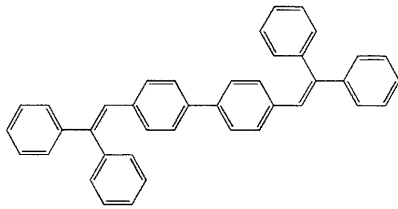
【 0 1 6 8】

蛍光ドーパントは、下記 4, 4' - ビス (2, 2 - ジフェニルエテニル) - 1, 1' - ビフェニル (D P V B i)、D P A V B i、T B P e、4 - ジシアノメチレン - 2 - (p - ジメチルアミノスチリル) - 6 - メチル - 4 H - ピラン (D C M)、ジクロロメタン (D C M) 又は 4 - (ジシアノメチレン) - 2 - t e r t - ブチル - 6 - (1, 1, 7, 7 - テトラメチルジュロリジン - 4 - イル - ビニル) - 4 H - ピラン (D C J T B)、C o u m a r i n 6、及び 10 - (2 - ベンゾチアゾリル) - 2, 3, 6, 7 - テトラヒドロ - 1, 2, 7, 7 - テトラメチル - 1 H, 5 H, 11 H - [1] ベンゾピラノ [6, 7, 8 - i j] キノリジン - 11 - オン (C 5 4 5 T) のうちの少なくとも一つを含む。

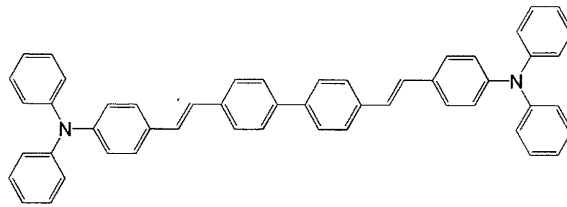
【 0 1 6 9】

40

【化 1 6 9】

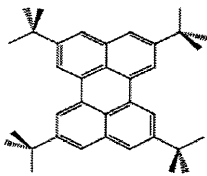


DPVBi

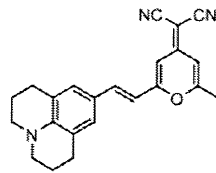


DPAVB

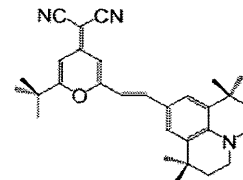
10



TBPe

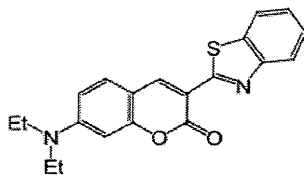


DCM

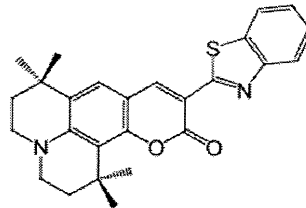


DCJTb

20



Coumarin 6



C545T

【 0 1 7 0 】

発光層がホスト及びドーパントを含む場合、ドーパントの含量は、一般的に、ホスト約 100 重量部を基準にして、約 0.01～約 20 重量部の範囲で選択されるが、それに限定されるものではない。

30

【 0 1 7 1 】

発光層の厚みは、約 100 Å～約 1,000 Å、例えば約 200 Å～約 600 Åである。発光層の厚みが上述のような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発光特性を示す。

【 0 1 7 2 】

次に、発光層の上部に、電子輸送領域が配置される。

【 0 1 7 3 】

電子輸送領域は、正孔阻止層、電子輸送層、及び電子注入層のうちの少なくとも 1 層を含む。

40

【 0 1 7 4 】

例えば、電子輸送領域は、電子輸送層、正孔阻止層／電子輸送層／電子注入層、又は電子輸送層／電子注入層の構造を有するが、それらに限定されるものではない。電子輸送層は、単一層、又は 2 以上の互いに異なる物質を含む多層構造を有する。

【 0 1 7 5 】

電子輸送領域の正孔阻止層、電子輸送層、及び電子注入層の形成条件は、正孔注入層の形成条件を参照する。

【 0 1 7 6 】

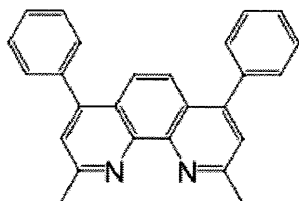
電子輸送領域が正孔阻止層を含む場合、正孔阻止層は、例えば、下記 2,9-ジメチル-4,7-ジフェニル-1,10-フェナントロリン (BCP) 及び Bphen のうちの

50

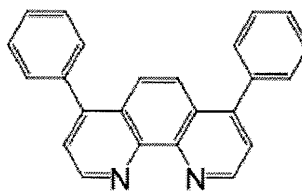
少なくとも一つを含むが、それらに限定されるものではない。

【0177】

【化177】



BCP



Bphen

10

【0178】

正孔阻止層の厚みは、約20 Å～約1,000 Å、例えば約30 Å～約300 Åである。正孔阻止層の厚みが上述のような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を得ることができる。

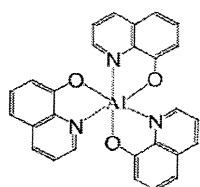
【0179】

電子輸送層は、BCP、Bphen、及び下記トリス(8-キノリノラト)アルミニウム(Alq3)、アルミニウム(III)ビス(2-メチル-8-ヒドロキシキノリン)-4-フェニルフェノレート(BAlq)、1,2,4-トリアゾール誘導体(TAZ)、及びNTAZのうちの少なくとも一つを更に含む。

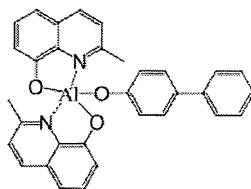
20

【0180】

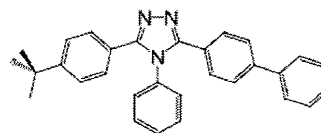
【化180】



Alq₃

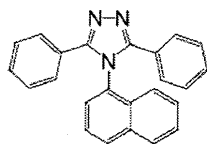


BAlq



TAZ

30



NTAZ

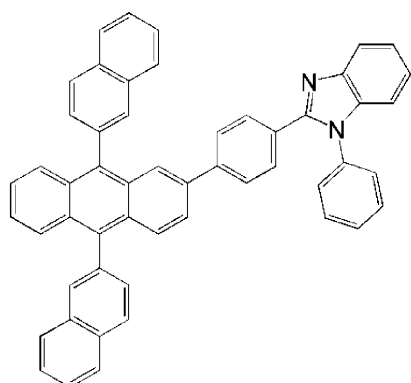
【0181】

或いは、電子輸送層は、下記化合物ET1及びET2のうちの少なくとも一つを含むが、それらに限定されるものではない。

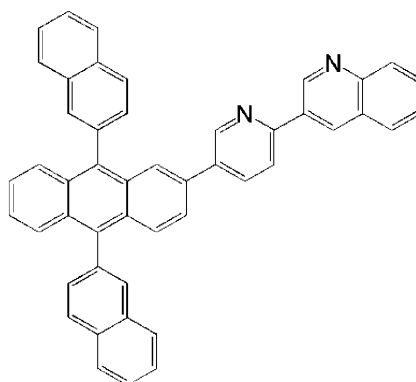
40

【0182】

【化 E T 1 - E T 2】



ET1



ET2

10

【0183】

電子輸送層の厚みは、約 $100 \text{ \AA}$ ～ 約 $1,000 \text{ \AA}$ 、例えば約 $150 \text{ \AA}$ ～ 約 $500 \text{ \AA}$ である。電子輸送層の厚みが上述のような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。

【0184】

電子輸送層は、上述のような物質以外に、金属含有物質を更に含む。

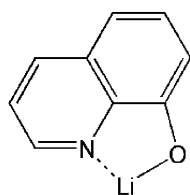
20

【0185】

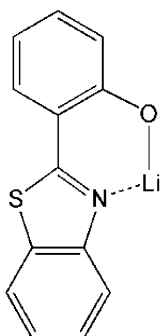
金属含有物質は Li 錯体を含む。Li 錯体は、例えば下記化合物 ET-D1（リチウムキノレート（LiQ））又は ET-D2 を含む。

【0186】

【化（ET-D1）-（ET-D2）】



ET-D1



ET-D2

30

【0187】

また、電子輸送領域は、第2電極19から電子の注入を容易にする電子注入層（EIL）を含む。

【0188】

電子注入層は、LiF、NaCl、CsF、 Li_2O 、及びBaOのうちから選択される少なくとも一つを含む。

40

【0189】

電子注入層の厚みは、約 $1 \text{ \AA}$ ～ 約 $100 \text{ \AA}$ 、例えば約 $3 \text{ \AA}$ ～ 約 $90 \text{ \AA}$ である。電子注入層の厚みが上述のような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。

【0190】

有機層15の上部には、第2電極19が具備される。第2電極19は、カソードである。第2電極19の形成用物質としては、相対的に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を使用することができる。具体的な例としては、

50

リチウム (Li)、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) などを、第2電極19の形成用物質として使用する。或いは、前面発光素子を得るために、ITO、IZOを利用して透過型第2電極19を形成するなど、多様な変形が可能である。

【0191】

以上、有機発光素子について、図1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。

【0192】

本明細書において、 C_1-C_{60} アルキル基は、 C_1-C_{60} 線形又は分枝型の脂肪族炭化水素一価 (monovalent) 基を意味し、具体的な例としては、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、 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。

10

【0193】

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、 C_1-C_{60} アルキル基) の化学式を有する一価基を意味し、その具体的な例としては、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。

【0194】

本明細書において、 C_2-C_{60} アルケニル基は、 C_2-C_{60} アルキル基の中間又は末端に、一つ以上の炭素二重結合を含む構造を有し、その具体的な例としては、エテニル基、プロフェニル基、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、 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。

20

【0195】

本明細書において、 C_2-C_{60} アルキニル基は、 C_2-C_{60} アルキル基の中間又は末端に、一つ以上の炭素三重結合を含む構造を有し、その具体的な例としては、エチニル基 (ethynyl)、プロピニル基 (propynyl) 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、 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。

30

【0196】

本明細書において、 C_3-C_{10} シクロアルキル基は、 C_3-C_{10} 一価飽和炭化水素単環基を意味し、その具体例としては、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を含む。本明細書において、 C_3-C_{10} シクロアルキレン基は、 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。

【0197】

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、P、及びSのうちから選択される少なくとも1つのヘテロ原子を環形成原子として含む C_1-C_{10} 一価単環基を意味し、その具体例としては、テトラヒドロフラン基 (tetrahydrofuryl)、テトラヒドロチオフェニル基などを含む。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、 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。

40

【0198】

本明細書において、 C_3-C_{10} シクロアルケニル基は、 C_3-C_{10} 一価単環基であり、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、その具体例としては、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を含む。本明細書において、 C_3-C_{10} シクロアルケニレン基は、 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。

【0199】

50

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、P、及びSのうちから選択される少なくとも1つのヘテロ原子を環形成原子として含む C_1-C_{10} 一価単環基であり、環内に少なくとも1つの二重結合を有する。 C_1-C_{10} ヘテロシクロアルケニル基の具体例としては、2,3-ヒドロフラニル基、2,3-ヒドロチオフェニル基などを含む。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、 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。

【0200】

本明細書において、 C_6-C_{60} アリール基は、 C_6-C_{60} 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、 C_6-C_{60} 炭素環式芳香族系を有する二価基を意味する。 C_6-C_{60} アリール基の具体例としては、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、クリセニル基などを含む。 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、2以上の環は互いに融合される。

10

【0201】

本明細書において、 C_1-C_{60} ヘテロアリール基は、N、O、P、及びSのうちから選択される少なくとも1つのヘテロ原子を環形成原子として含み、 C_1-C_{60} 炭素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、P、及びSのうちから選択される少なくとも1つのヘテロ原子を環形成原子として含み、 C_1-C_{60} 炭素環式芳香族系を有する二価基を意味する。 C_1-C_{60} ヘテロアリール基の具体例としては、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を含む。 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以上の環は互いに融合される。

20

【0202】

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、 C_6-C_{60} アリール基）を示し、 C_6-C_{60} アリールチオ基（arylthio）は、 $-SA_{103}$ （ここで、 A_{103} は、 C_6-C_{60} アリール基である）を示す。

【0203】

本明細書において、一価非芳香族縮合多環基は、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（例えば、炭素数は、8～60である）、分子全体が非芳香族性（non-aromaticity）を有する一価基を意味する。非芳香族縮合多環基の具体例としては、フルオレニル基などを含む。本明細書において、二価非芳香族縮合多環基は、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。

30

【0204】

本明細書において、一価非芳香族ヘテロ縮合多環基は、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（例えば、炭素数は、1～60である）以外に、N、O、P、及びSのうちから選択されるヘテロ原子を含み、分子全体が非芳香族性を有する一価基を意味する。一価非芳香族ヘテロ縮合多環基は、カルバゾリル基などを含む。本明細書において、二価非芳香族ヘテロ縮合多環基は、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。

40

【0205】

本明細書において、置換された C_1-C_{60} アルキレン基、置換された C_2-C_{60} アルケニレン基、置換された C_2-C_{60} アルキニレン基、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_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

50

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うちの少なくとも1つの置換基は、

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、アミジノ基、ヒドラジン基、ヒドラゾン基、カルボン酸基又はその塩、スルホン酸基又はその塩、リン酸基又はその塩、 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、カルボン酸基又はその塩、スルホン酸基又はその塩、リン酸基又はその塩、 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、 $-N(Q_{11})(Q_{12})$ 、 $-Si(Q_{13})(Q_{14})(Q_{15})$ 、及び $-B(Q_{16})(Q_{17})$ のうちの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、カルボン酸基又はその塩、スルホン酸基又はその塩、リン酸基又はその塩、 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、 $-N(Q_{21})(Q_{22})$ 、 $-Si(Q_{23})(Q_{24})(Q_{25})$ 、及び $-B(Q_{26})(Q_{27})$ のうちの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；及び

$-N(Q_{31})(Q_{32})$ 、 $-Si(Q_{33})(Q_{34})(Q_{35})$ 、及び $-B(Q_{36})(Q_{37})$ ；のうちから選択される。

【0206】

また、本明細書において、 $Q_1 \sim Q_7$ 、 $Q_{11} \sim Q_{17}$ 、及び $Q_{31} \sim Q_{37}$ は、互いに独立して、水素、 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、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る。

【0207】

例えば、置換された C_1-C_{60} アルキレン基、置換された C_2-C_{60} アルケニレン基、置換された C_2-C_{60} アルキニレン基、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_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少なくとも一つの置換基は、

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、アミジノ基、ヒドラジン基、ヒドラゾン基、カルボン酸基又はその塩、スルホン酸基又はその塩、リン酸基又はその塩、 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、カルボン酸基又はその塩、スルホン酸基又はその塩、リン酸基又はその塩、 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、 $-N(Q_{11})(Q_{12})$ 、 $-Si(Q_{13})(Q_{14})(Q_{15})$ 、及び $-B(Q_{16})(Q_{17})$ のうちの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；

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、スピローフルオレニル基、フェナレニル基、フェナントレニル基、アントラセニル基、フルオラントレニル基、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、ペントフェニル基、ヘキサセニル基、ピロリル基、イミダゾリル基、ピラゾリル基、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、イソインドリル基、インドリル基、インダゾリル基、プリニル基、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、カルバゾリル基、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、ベンゾオキサゾリル基、ベンゾイミダゾリル基、フラニル基、ベンゾフラニル基、チオフエニル基、ベンゾチオフエニル基、チアゾリル基、イソチアゾリル基、ベンゾチアゾリル基、イソオキサゾリル基、オキサゾリル基、トリアゾリル基、テトラゾリル基、オキサジアゾリル基、トリアジニル基、ジベンゾフラニル基、ジベンゾチオフエニル基、ベンゾカルバゾリル基、ジベンゾカルバゾリル基、イミダゾピリミジニル基、及びイミダゾピリジニル基；

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、カルボン酸基又はその塩、スルホン酸基又はその塩、リン酸基又はその塩、 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、 $-N(Q_{21})(Q_{22})$ 、 $-Si(Q_{23})(Q_{24})(Q_{25})$ 、及び $-B(Q_{26})(Q_{27})$ のうちの少なくとも一つで置換された、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、スピローフルオレニル基、フェナレニル基、フェナントレニル基、アントラセニル基、フルオラントレニル基、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

10

20

30

40

50

基、ペンタフェニル基、ヘキサセニル基、ピロリル基、イミダゾリル基、ピラゾリル基、
 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、イソインドリル基、イ
 ンドリル基、インダゾリル基、プリニル基、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、カルバゾリル基、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、ベンゾオキサゾリル基、ベンゾイミダゾリル基、フラニル
 基、ベンゾフラニル基、チオフェニル基、ベンゾチオフェニル基、チアゾリル基、イソチ
 アゾリル基、ベンゾチアゾリル基、イソオキサゾリル基、オキサゾリル基、トリアゾリル
 基、テトラゾリル基、オキサジアゾリル基、トリアジニル基、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、イミダゾピリミ
 ジニル基、及びイミダゾピリジニル基；及び

—N (Q₃₁) (Q₃₂)、—Si (Q₃₃) (Q₃₄) (Q₃₅)、及び—B (Q₃₆) (Q₃₇)；のうちから選択され、

Q₁～Q₇、Q₁₁～Q₁₇、Q₂₁～Q₂₇、及びQ₃₁～Q₃₇は、互いに独立し
 て、水素、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、シクロペンチル基、シクロヘキシル基、シクロヘプチ
 ル基、シクロオクチル基、シクロペンテニル基、シクロヘプセニル基、シクロヘプテニル
 基、フェニル基、ナフチル基、アントラセニル基、ピレニル基、フェナントレニル基、フ
 ルオレニル基、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、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、フタラジニル基、キノキサリニル基、シンノリニル基、及びキ
 ナゾリニル基のうちの少なくとも一つで置換された、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、フルオラントレニル基、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
 、ピロリル基、イミダゾリル基、ピラゾリル基、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、イソインドリル基、インドリル基、インダゾリル基、プリニル
 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、カルバゾリル基、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、ベンゾオ
 キサゾリル基、ベンゾイミダゾリル基、フラニル基、ベンゾフラニル基、チオフェニル基
 、ベンゾチオフェニル基、チアゾリル基、イソチアゾリル基、ベンゾチアゾリル基、イソ
 オキサゾリル基、オキサゾリル基、トリアゾリル基、テトラゾリル基、オキサジアゾリル
 基、トリアジニル基、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、イミダゾピリミジニル基、及びイミダゾピリジニル基の
 うちから選択されるが、それらに限定されるものではない。

【0208】

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。

【0209】

以下、合成例及び実施例を挙げ、本発明の一具現例による化合物及び有機発光素子につ
 いて、更に具体的に説明するが、本発明は、下記の合成例及び実施例に限定されるもので
 はない。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、
 「B」の使用量と「A」の使用量は、モル当量基準で同一である。

【0210】

〔実施例〕

《合成例1：化合物153の合成》

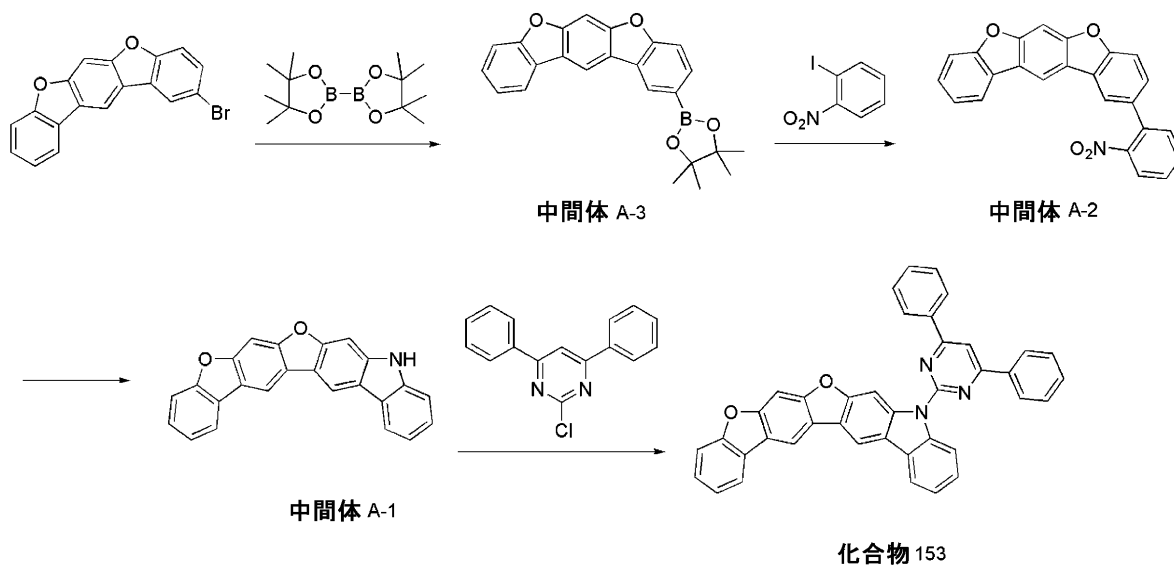
10

20

30

40

【化 1 5 3】



10

【0 2 1 1】

《中間体 A-3 の合成》

2-ブロモベンゾ [1, 2-b : 5, 4-b'] ビスベンゾフラン 11.4 g、4, 4, 4', 4', 5, 5, 5', 5'-オクタメチル-2, 2'-ビ(1, 3, 2-ジオキサボロラン) 11.3 g、PdCl₂(dppf) 0.5 g、及び KOAc 8.8 g をフラスコに入れ、真空環境を設けた後、窒素雰囲気を作り、そこに、ジメチルホルムアミド (DMF) 150 ml を入れ、100℃で8時間加熱撹拌した。そこから得られた反応物を MeOH 1,000 ml に注いで結晶化させた後、撹拌して濾過して得られた固体を、トルエン 500 ml に加熱して溶解させた。そこから得られた反応物をシリカで濾過し、残留溶液が 100 ml になるように溶媒を除去した後、MeOH 1 L に添加して結晶化させた後で乾燥させ、中間体 A-3 (79.4 g) を得た。

20

【0 2 1 2】

《中間体 A-2 の合成》

中間体 A-3 1 g、1-ヨード-2-ニトロベンゼン 0.8 g、Pd(PPh₃)₄ 0.3 g、及び K₂CO₃ 1 g をテトラヒドロフラン (THF) / H₂O (1 : 1) 20 ml に入れ、90℃で8時間加熱撹拌した。そこから得られた反応物を、塩化メチレン 20 ml を利用して、2回抽出して得られた抽出物に、MgSO₄ 2 g を添加して水分を除去した後、シリカゲルカラムクロマトグラフィで精製し、中間体 A-2 (0.85 g) を得た。

30

【0 2 1 3】

《中間体 A-1 の合成》

中間体 A-2 1 g 及び PPh₃ 2.1 g を 1, 2-ジクロロベンゼン 15 ml に入れ、22時間加熱撹拌した後、溶媒を蒸溜除去し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精製し、中間体 A-1 (0.59 g) を得た。

40

【0 2 1 4】

《化合物 153 の合成》

中間体 A-1 1 g、2-クロロ-4, 6-ジフェニルピリミジン 0.95 g、Pd₂(dba)₃ 0.1 g、NaOtBu 0.6 g をフラスコに入れて真空環境を設けた後、窒素雰囲気を作り、そこに、トリ(tert-ブチル)ホスフィン 0.1 g とトルエン 15 ml とを入れ、110℃で8時間加熱撹拌した。そこから得られた反応物に対して、真空下で溶媒を除去してシリカゲルカラムクロマトグラフィで精製し、化合物 153 (1.41 g) を得た。生成された化合物は、LC-MS (chromatography-mass spectroscopy) で確認した。

50

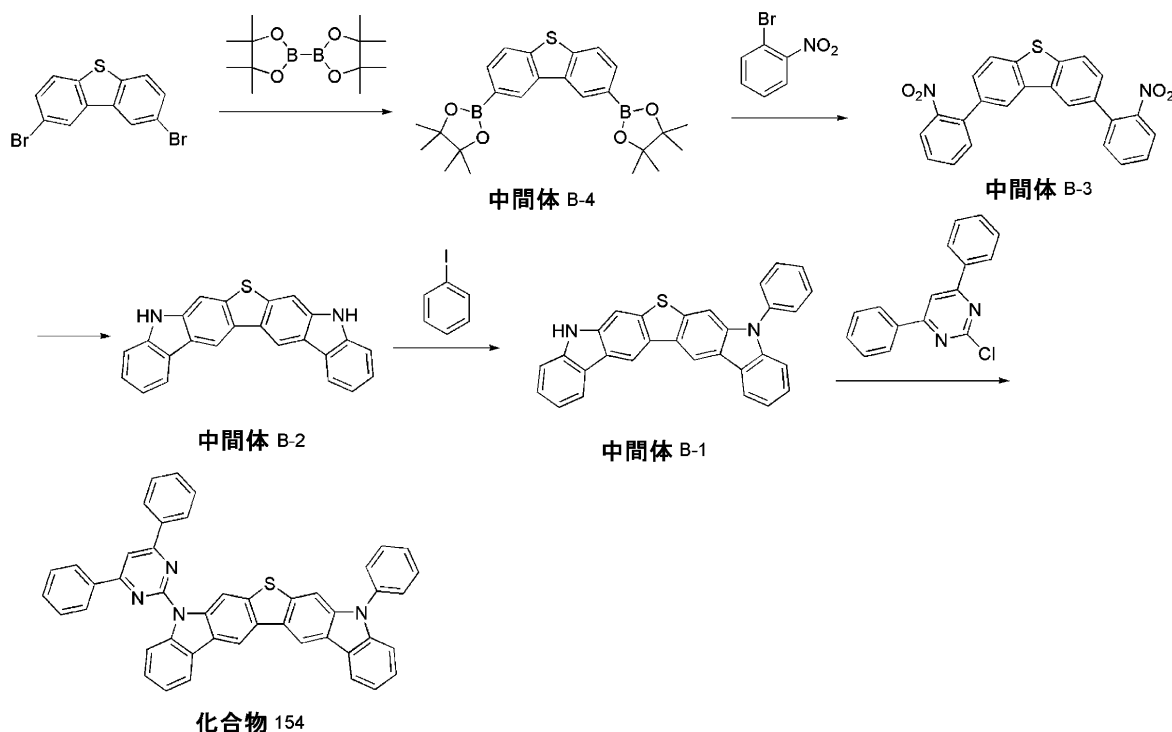
$C_{40}H_{23}N_3O_2$: $M+577.19$

^1H NMR (500 MHz, $CDCl_3$) : δ , ppm 8.59 (d, 1H), 8.25~8.22 (m, 2H), 8.17 (d, 1H), 8.04~8.02 (m, 4H), 7.74~7.73 (m, 2H), 7.53~7.50 (m, 1H), 7.45~7.35 (m, 9H), 7.32~7.28 (m, 1H), 7.16~7.13 (m, 1H), 7.00 (s, 1H)

【0215】

《合成例2：化合物154の合成》

【化154】



【0216】

《中間体B-4の合成》

2,8-ジブロモジベンゾ[b,d]チオフェン1.0g、4,4,4',4',5,5,5',5'-オクタメチル-2,2'-ビ(1,3,2-ジオキサボロラン)2.2g、 $PdCl_2$ (dppf) 0.2g、及びKOAc 1.7gをフラスコに入れ、真空環境を設けた後、窒素雰囲気を作り後、そこに、DMF 15.0mlを入れ、80℃で18時間加熱撹拌した。そこから得られた反応物に H_2O 10.0mlを添加した後、撹拌して濾過して得られた固体を、MeOH 50mlで洗浄し、残った固体をシリカゲルカラムクロマトグラフィで精製し、中間体B-4 (1.1g)を得た。

【0217】

《中間体B-3の合成》

中間体B-4 1g、1-ヨード-2-ニトロベンゼン1.2g、 $Pd(PPh_3)_4$ 0.3g及び K_2CO_3 1.9gを、THF/ H_2O (1:1) 30mlに入れ、80℃で10時間加熱撹拌した。そこから得られた反応物を、塩化メチレンを利用して抽出し、得られた抽出物に $MgSO_4$ を添加し、水分を除去して得られた濃縮物をシリカゲルカラムクロマトグラフィで精製し、中間体B-3 (0.81g)を得た。

【0218】

《中間体B-2の合成》

中間体B-3 1g及び PPh_3 3.1gを1,2-ジクロロベンゼン12mlに入れ、24時間加熱撹拌した後、溶媒を蒸溜除去し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精製し、中間体B-2 0.31gを得た。

【0219】

《中間体 B-1 の合成》

中間体 B-2 1 g、ヨードベンゼン 0.6 g、 $\text{Pd}_2(\text{dba})_3$ 0.2 g、 NaOtBu 0.6 g をフラスコに入れ、真空環境を設けた後、窒素雰囲気を作った。そこに、トリ(tert-ブチル)ホスフィン 0.1 g とトルエン 15 ml とを入れ、110℃で8時間加熱攪拌して得られた反応物に対して、真空下で溶媒を除去してシリカゲルカラムクロマトグラフィで精製し、中間体 B-1 (0.8 g) を得た。

【0220】

《化合物 154 の合成》

中間体 B-1 1 g、2-クロロ-4,6-ジフェニルピリミジン 1.1 g、 $\text{Pd}_2(\text{dba})_3$ 0.2 g、 NaOtBu 0.5 g をフラスコに入れ、真空環境を設けた後、窒素雰囲気を作った。そこに、トリ(tert-ブチル)ホスフィン 0.1 g とトルエン 15 ml とを入れ、110℃で8時間加熱攪拌して得られた反応物に対して、真空下で溶媒を除去してシリカゲルカラムクロマトグラフィで精製し、化合物 154 (0.95 g) を得た。生成された化合物は、LC-MS で確認した。

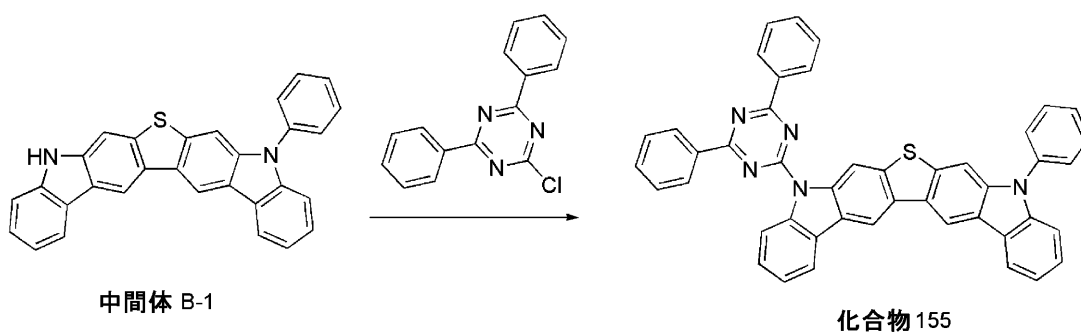
$\text{C}_{46}\text{H}_{28}\text{N}_4\text{S}$: M+668.31

^1H NMR (300 MHz, CDCl_3) : δ , ppm 8.90 (d, 1H), 8.04 (d, 1H), 7.93 (d, 1H), 7.85 (d, 1H), 7.74 (d, 1H), 7.60 (s, 2H), 7.47 (td, 2H), 7.35~7.11 (m, 15H), 7.06~7.00 (m, 1H), 6.80 (t, 2H), 6.58 (t, 1H)

【0221】

《合成例 3 : 化合物 155 の合成》

【化 155】



【0222】

中間体 B-1 1 g を DMF 11 ml に添加した後、 NaH 0.2 g を添加し、常温で30分間攪拌した後、2-クロロ-4,6-ジフェニル-1,3,5-トリアジン 0.9 g を添加した後、8時間常温で攪拌した。そこから得られた反応物に塩化メチレンを添加して固形粉を溶解させ、 H_2O を使用して洗浄した後、 MgSO_4 を使用して、水分を除去して濃縮した。そこから得られた濃縮物をシリカゲルカラムクロマトグラフィで精製し、化合物 155 (1.38 g) を得た。生成された化合物は、LC-MS で確認した。

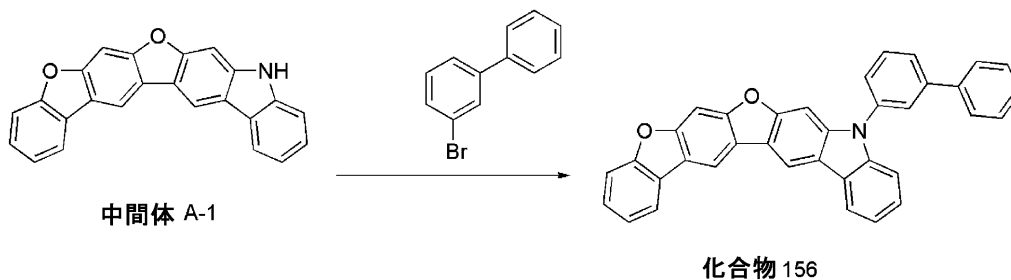
$\text{C}_{45}\text{H}_{27}\text{N}_5\text{S}$: M+669.24

^1H NMR (300 MHz, CDCl_3) : δ , ppm 8.93 (d, 1H), 8.03 (d, 1H), 7.92 (d, 2H), 7.69 (q, 4H), 7.51 (td, 2H), 7.40~7.08 (m, 13H), 7.06~7.00 (m, 1H), 6.83 (t, 2H), 6.58 (t, 1H)

【0223】

《合成例 4 : 化合物 156 の合成》

【化 1 5 6】



10

【0 2 2 4】

中間体 A-1 1 g、3-ブロモ-1, 1'-ビフェニル 0.81 g、 $\text{Pd}_2(\text{dba})_3$ 0.1 g、及び NaOtBu 0.6 g をフラスコに入れ、真空環境を設けた後、窒素雰囲気を作った。そこに、トリ(tert-ブチル)ホスフィン 0.1 g とトルエン 15 ml とを入れ、110℃で12時間加熱攪拌して得られた反応物に対して、真空下で溶媒を除去してシリカゲルカラムクロマトグラフィで精製し、化合物 156 (1.18 g) を得た。生成された化合物は、LC-MS で確認した。

$\text{C}_{36}\text{H}_{21}\text{NO}_2$: $M+499.18$

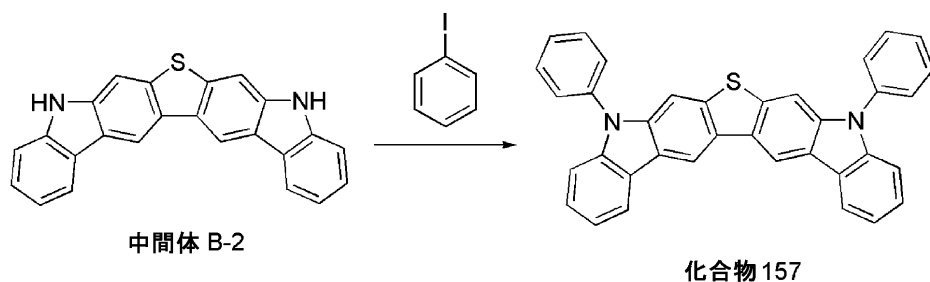
^1H NMR (500 MHz, DMSO) : δ , ppm 9.33 (s, 1H), 8.30 (d, 1H), 8.23 (d, 1H), 8.17~8.15 (m, 2H), 7.78 (d, 1H), 7.72 (d, 1H), 7.64~7.36 (m, 13H), 7.29~7.26 (m, 1H)

20

【0 2 2 5】

《合成例 5 : 化合物 157 の合成》

【化 1 5 7】



30

【0 2 2 6】

中間体 B-2 1 g、ヨードベンゼン 1.6 g、 $\text{Pd}_2(\text{dba})_3$ 0.2 g、及び NaOtBu 1.01 g をフラスコに入れ、真空環境を設けた後、窒素雰囲気を作った。そこに、トリ(tert-ブチル)ホスフィン 0.1 g とトルエン 15 ml とを入れ、110℃で8時間加熱攪拌して得られた反応物に対して、真空下で溶媒を除去してシリカゲルカラムクロマトグラフィで精製し、化合物 157 (0.4 g) を得た。生成された化合物は、LC-MS で確認した。

40

$\text{C}_{36}\text{H}_{22}\text{N}_2\text{S}$: $M+514.54$

^1H NMR (300 MHz, CDCl_3) : δ , ppm 8.20~8.15 (m, 2H), 8.01 (d, 1H), 7.96~7.92 (m, 2H), 7.87 (d, 1H), 7.63 (d, 1H), 7.51~7.28 (m, 10H), 7.20~7.14 (m, 2H), 7.10~7.04 (m, 2H), 6.82~6.76 (m, 1H)

【0 2 2 7】

《実施例 1》

アノードとして、ITO/Ag/ITO が、70/1,000/70 Å 蒸着されたガラス基板を、50 mm × 50 mm × 0.5 mm サイズに切り、イソプロピルアルコールと純

50

水とを利用して、それぞれ 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て真空蒸着装置に設けた。

【0228】

ガラス基板上的のアノード（ITO／Ag／ITO）上に、2-TNATA を真空蒸着し、600 Å 厚の正孔注入層を形成した後、正孔注入層上に、4,4'-ビス[N-（1-ナフチル）-N-フェニルアミノ]ビフェニル（NPB）を真空蒸着し、1,000 Å 厚の正孔輸送層を形成した。

【0229】

正孔輸送層の上部に、化合物153（ホスト）及びIr（ppy）₃（ドーパント）を、90：10の重量比で共蒸着し、250 Å 厚の発光層を形成した。

10

【0230】

発光層の上部に、BCP を真空蒸着し、50 Å 厚の正孔阻止層を形成した後、正孔阻止層上に、Alq₃ を真空蒸着し、350 Å 厚の電子輸送層を形成し、電子輸送層上にLiF を真空蒸着し、10 Å 厚の電子注入層を形成した後、電子注入層上に、Mg 及びAg を90：10の重量比で真空蒸着し、120 Å 厚のカソードを形成することによって、有機発光素子を製作した。

【0231】

《実施例2、実施例3及び比較例1》

発光層の形成時、ホストとして、化合物153の代わりに、下記表3に記載されるような化合物を使用したという点を除いては、実施例1と同一の方法を利用して有機発光素子を製作した。

20

【0232】

《評価例1》

実施例1～3、及び比較例1の有機発光素子の駆動電圧、電流密度、効率、及び輝度を、電流電圧計（Keithley SMU 236）から電源を供給し、輝度計PR650 Spectroscan Source Measurement Unit（PhotoResearch社製）を利用して評価し、その結果を下記表3に示した。

【0233】

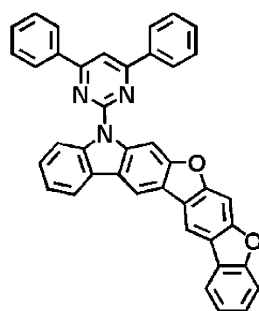
【表3】

30

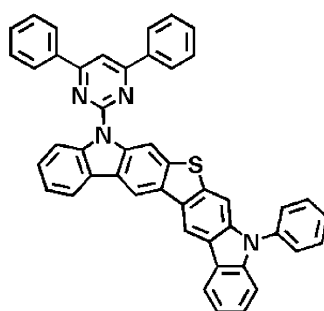
	ホスト	駆動電圧 (V)	電流密度 (mA/cm ²)	輝度 (cd/m ²)	効率 (cd/A)
実施例1	化合物153	4.1	10	5,332	54.3
実施例2	化合物154	3.7	10	4,960	43.1
実施例3	化合物155	3.5	10	4,813	48.3
比較例1	CBP	6.8	10	4,766	47.7

【0234】

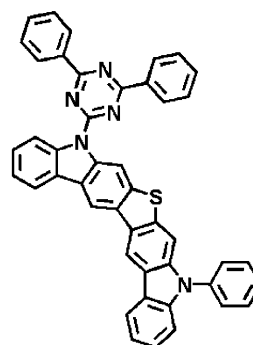
【化 2 3 4】



153

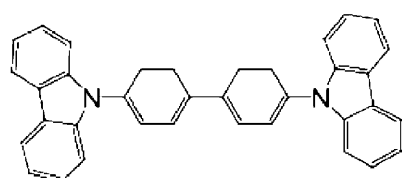


154



155

10



CBP

20

【 0 2 3 5】

表 3 から、実施例 1 ～ 3 の有機発光素子は、比較例 1 の有機発光素子に比べ、低駆動電圧、高効率、及び高輝度を有することが確認される。

【 0 2 3 6】

《実施例 4》

正孔輸送層の形成時、NPBの代わりに、化合物化合物 1 5 6 を使用し、発光層の形成時、ホストとして、化合物 1 5 3 の代わりに、CBPを使用したという点を除いては、実施例 1 と同一の方法を利用して有機発光素子を製作した。

【 0 2 3 7】

《実施例 5》

正孔輸送層の形成時、化合物 1 5 6 の代わりに、化合物 1 5 7 を使用したという点を除いては、実施例 4 と同一の方法を利用して有機発光素子を製作した。

30

【 0 2 3 8】

《評価例 2》

実施例 4、5、及び比較例 1 の有機発光素子の駆動電圧を、電流電圧計（Keithley SMU 2 3 6）から電源を供給して評価し、その結果を下記表 4 に示した。

【 0 2 3 9】

【表 4】

	正孔輸送層	駆動電圧(V)	電流密度(mA/cm ²)
実施例4	化合物156	6. 1	10
実施例5	化合物157	6. 6	10
比較例1	NPB	6. 8	10

40

【 0 2 4 0】

表 4 から、実施例 4 及び 5 の有機発光素子は、比較例 1 の有機発光素子に比べ、低駆動電圧を有することが確認される。

【 0 2 4 1】

《実施例 6》

発光層の形成時、化合物 1 5 5（ホスト）及び Ir（ppy）₃（ドーパント）を、8

50

5 : 15 の重量比で共蒸着したという点を除いては、実施例 1 と同一の方法を利用して有機発光素子を製作した。

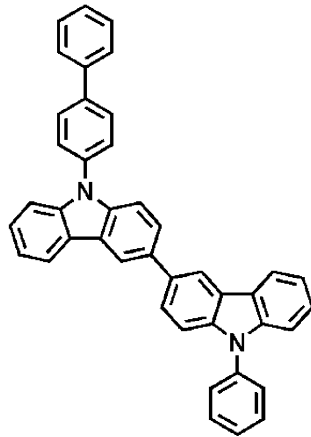
【0242】

《実施例 7》

発光層の形成時、化合物 155（第 1 ホスト）、化合物 A2（第 2 ホスト）、及び Ir（ppy）₃（ドーパント）を、45 : 45 : 10 の重量比で共蒸着したという点を除いては、実施例 1 と同一の方法を利用して有機発光素子を製作した。

【0243】

【化 A2】



A2

【0244】

《評価例 3》

実施例 6 及び 7 の有機発光素子の駆動電圧、電流密度、効率、及び輝度を、電流電圧計（Keithley SMU236）から電源を供給し、輝度計 PR650 Spectroscan Source Measurement Unit（PhotoResearch 社製）を利用して評価し、表 5 に示した。比較のために、表 5 に比較例 1 のデータも示した。

【0245】

【表 5】

	ホスト	駆動電圧 (V)	電流密度 (mA/cm ²)	輝度 (cd/m ²)	効率 (cd/A)
実施例 6	化合物 155 (ホスト及びドーパントの重量 比=85:15)	3.9	10	6,884	50.9
実施例 7	化合物 155 及び 化合物 A2 (1:1 の重量比)	3.8	10	5,662	56.7
比較例 1	CBP	6.8	10	4,766	47.7

【0246】

表 5 から、実施例 6 及び 7 の有機発光素子は、比較例 1 の有機発光素子に比べ、低駆動電圧、高輝度、及び高効率を有することが確認される。

【0247】

以上、本発明の実施形態について詳細に説明したが、本発明は、上述の実施形態に限定されるものではなく、本発明の技術的範囲から逸脱しない範囲内で多様に変更実施することが可能である。

【産業上の利用可能性】

【0248】

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。

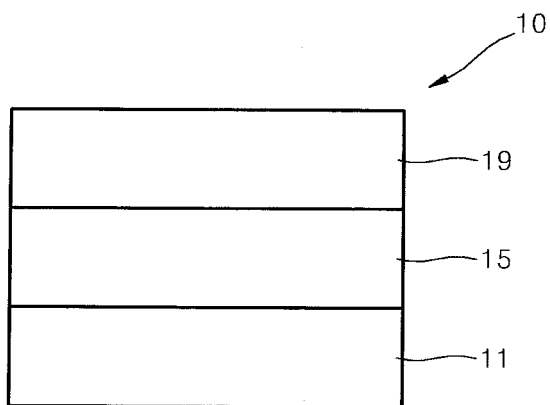
【符号の説明】

【0249】

- 10 有機発光素子
- 11 第1電極
- 15 有機層
- 19 第2電極

10

【図1】



フロントページの続き

(74)代理人 110000051

特許業務法人共生国際特許事務所

(72)発明者 金 相 模

大韓民国 京畿道 水原市 霊通区 三星路 1 3 0 三星綜合技術院内

(72)発明者 權 五 ヒョン

大韓民国 京畿道 水原市 霊通区 三星路 1 3 0 三星綜合技術院内

(72)発明者 崔 炳 基

大韓民国 京畿道 水原市 霊通区 三星路 1 3 0 三星綜合技術院内

(72)発明者 黄 圭 榮

大韓民国 京畿道 水原市 霊通区 三星路 1 3 0 三星綜合技術院内

Fターム(参考) 3K107 AA01 CC02 CC03 CC12 CC21 DD53 DD59 DD71 DD74 DD78

4C050 AA01 AA08 BB04 CC16 DD07 EE01 FF01 GG01 HH04

4C071 AA01 AA08 BB02 BB06 CC02 CC21 EE12 FF03 GG10 JJ01

JJ05 LL05