



공개특허 10-2021-0019025

(19) 대한민국특허청(KR)
(12) 공개특허공보(A)(11) 공개번호 10-2021-0019025
(43) 공개일자 2021년02월19일

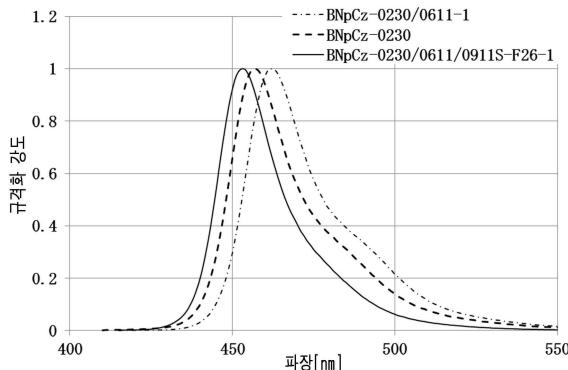
- (51) 국제특허분류(Int. Cl.)
C07F 5/02 (2006.01) *C09K 11/06* (2006.01)
G02F 1/1368 (2006.01) *H01L 27/32* (2006.01)
H01L 51/00 (2006.01) *H01L 51/50* (2006.01)
- (52) CPC특허분류
C07F 5/027 (2013.01)
C09K 11/06 (2021.01)
- (21) 출원번호 10-2020-7036950
- (22) 출원일자(국제) 2019년06월10일
심사청구일자 없음
- (85) 번역문제출일자 2020년12월22일
- (86) 국제출원번호 PCT/JP2019/022933
- (87) 국제공개번호 WO 2019/240080
국제공개일자 2019년12월19일
- (30) 우선권주장
JP-P-2018-110876 2018년06월11일 일본(JP)
JP-P-2019-047083 2019년03월14일 일본(JP)

- (71) 출원인
가코우 호정 관세이 가쿠잉
일본국 효고켄 니시노미야시 우에가하라이치반쵸
1-155
제이엔씨 주식회사
일본 도쿄도 치요다구 오테마치 2쵸메 2반 1고
- (72) 발명자
하타케야마 다쿠지
일본 효고켄 산다시 가쿠엔 2쵸메 1반치 관세이
가쿠잉 다이가쿠 리코가쿠부내
곤도 야스히로
일본 지바켄 이치하라시 고이카이간 5-1 제이엔씨
석유 화학 주식회사 이치하라 켄큐쇼내
(뒷면에 계속)
- (74) 대리인
유미특허법인

전체 청구항 수 : 총 27 항

(54) 발명의 명칭 **다환 방향족 화합물 및 그의 다양체****(57) 요약**

붕소 원자와 질소 원자 등으로 복수의 방향족환을 연결한 신규한 다환 방향족 화합물을 제공함으로써, 유기 EL 소자용 재료의 선택 사항을 증가시킨다. 또한, 신규한 다환 방향족 화합물을 유기전계 발광소자용 재료로서 사용함으로써, 우수한 유기 EL 소자를 제공한다.

대 표 도 - 도2

(52) CPC특허분류

G02F 1/1368 (2013.01)

H01L 27/32 (2013.01)

H01L 51/008 (2013.01)

H01L 51/5024 (2013.01)

C09K 2211/188 (2013.01)

(72) 발명자

사사다 야스유키

일본 지바켄 이치하라시 고이카이간 5-1 제이엔씨
석유 화학 주식회사 이치하라 겐큐쇼내

고바야시 다카히로

일본 지바켄 이치하라시 고이카이간 5-1 제이엔씨
석유 화학 주식회사 이치하라 겐큐쇼내

왕 구오팡

일본 지바켄 이치하라시 고이카이간 5-1 제이엔씨
석유 화학 주식회사 이치하라 겐큐쇼내

아나이 모토키

일본 지바肯 이치하라시 고이카이간 5-1 제이엔씨
석유 화학 주식회사 이치하라 겐큐쇼내

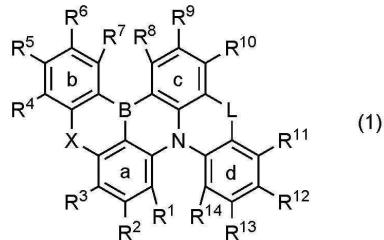
명세서

청구범위

청구항 1

하기 일반식(1)으로 표시되는 다환 방향족 화합물, 또는 하기 일반식(1)으로 표시되는 구조를 복수 가지는 다환 방향족 화합물의 다양체:

[화학식 1]



(상기 일반식(1) 중,

$R^1, R^2, R^3, R^4, R^5, R^6, R^7, R^8, R^9, R^{10}, R^{11}, R^{12}, R^{13}$ 및 R^{14} 는 각각 독립적으로, 수소, 아릴, 헤테로아릴, 디아릴아미노, 디아릴보릴(2개의 아릴은 단결합 또는 연결기를 통하여 결합하고 있어도 됨), 알킬, 시클로알킬, 알콕시 또는 아릴옥시이며, 이들에서의 적어도 1개의 수소는 또한, 아릴, 헤테로아릴, 알킬 또는 시클로알킬로 치환되어 있어도 되고, 또한, $R^1 \sim R^3, R^4 \sim R^7, R^8 \sim R^{10}$ 및 $R^{11} \sim R^{14}$ 중 인접하는 기끼리 결합하여 a환, b환, c환 및 d환 중 적어도 1개와 함께 아릴환 또는 헤테로아릴환을 형성하고 있어도 되고, 형성된 환에서의 적어도 1개의 수소는, 아릴, 헤테로아릴, 디아릴아미노, 디아릴보릴(2개의 아릴은 단결합 또는 연결기를 통하여 결합하고 있어도 됨), 알킬, 시클로알킬, 알콕시 또는 아릴옥시로 치환되어 있어도 되고, 이들에서의 적어도 1개의 수소는 또한, 아릴, 헤테로아릴, 알킬 또는 시클로알킬로 치환되어 있어도 되고,

X는 $>O, >N-R, >S$ 또는 $>Se$ 이며, 상기 $>N-R$ 의 R은, 아릴, 헤테로아릴, 알킬 또는 시클로알킬이며, 이들에서의 적어도 1개의 수소는, 아릴, 헤테로아릴, 알킬 또는 시클로알킬로 치환되어 있어도 되고,

L은 단결합, $>C(-R)_2, >O, >S$ 및 $>N-R$ 이며, 상기 $>C(-R)_2$ 및 $>N-R$ 에서의 R은 각각 독립적으로, 수소, 아릴, 헤테로아릴, 디아릴아미노, 디아릴보릴(2개의 아릴은 단결합 또는 연결기를 통하여 결합하고 있어도 됨), 알킬, 시클로알킬, 알콕시 또는 아릴옥시이며, 이들에서의 적어도 1개의 수소는 또한, 아릴, 헤테로아릴, 알킬 또는 시클로알킬로 치환되어 있어도 되고,

다만, X가 $>N-R$ 일 때, L이 $>O$ 는 아니며,

다양체인 경우의 일반식(1) 중의 R^2 는 수소이며, 그리고,

일반식(1)으로 표시되는 화합물 및 구조에서의 적어도 1개의 수소는, 시아노, 할로겐 또는 중수소로 치환되어 있어도 됨).

청구항 2

제1항에 있어서,

$R^1, R^2, R^3, R^4, R^5, R^6, R^7, R^8, R^9, R^{10}, R^{11}, R^{12}, R^{13}$ 및 R^{14} 는 각각 독립적으로, 수소, 탄소수 6~30의 아릴, 탄소수 2~30의 헤테로아릴, 디아릴아미노(다만 각각의 아릴은 탄소수 6~12의 아릴), 디아릴보릴(다만 각각의 아릴은 탄소수 6~12의 아릴이며, 2개의 아릴은 단결합 또는 연결기를 통하여 결합하고 있어도 됨), 탄소수 1~12의 알킬, 탄소수 5~10의 시클로알킬, 탄소수 1~12의 알콕시 또는 탄소수 6~30의 아릴옥시이며, 이들에서의 적어도 1개의 수소는 또한, 탄소수 6~30의 아릴, 탄소수 2~30의 헤테로아릴, 탄소수 1~12의 알킬 또는 탄소수 5~10의 시클로알킬로 치환되어 있어도 되고, 또한, $R^1 \sim R^3, R^4 \sim R^7, R^8 \sim R^{10}$ 및 $R^{11} \sim R^{14}$ 중 인접하는 기끼리

결합하여 a환, b환, c환 및 d환 중 적어도 1개와 함께 탄소수 9~16의 아릴환 또는 탄소수 6~15의 헤테로아릴환을 형성하고 있어도 되고, 형성된 환에서의 적어도 1개의 수소는, 탄소수 6~30의 아릴, 탄소수 2~30의 헤테로아릴, 디아릴아미노(다만 각각의 아릴은 탄소수 6~12의 아릴), 디아릴보릴(다만 각각의 아릴은 탄소수 6~12의 아릴이며, 2개의 아릴은 단결합 또는 연결기를 통하여 결합하고 있어도 됨), 탄소수 1~12의 알킬, 탄소수 5~10의 시클로알킬, 탄소수 1~12의 알콕시 또는 탄소수 6~30의 아릴옥시로 치환되어 있어도 되고, 이들에서의 적어도 1개의 수소는 또한, 탄소수 6~30의 아릴, 탄소수 2~30의 헤테로아릴, 탄소수 1~12의 알킬 또는 탄소수 5~10의 시클로알킬로 치환되어 있어도 되고,

X는 >0, >N-R, >S 또는 >Se이며, 상기 >N-R의 R은, 탄소수 6~30의 아릴, 탄소수 2~30의 헤테로아릴, 탄소수 1~12의 알킬 또는 탄소수 5~10의 시클로알킬이며, 이들에서의 적어도 1개의 수소는, 탄소수 6~30의 아릴, 탄소수 2~30의 헤테로아릴, 탄소수 1~12의 알킬 또는 탄소수 5~10의 시클로알킬로 치환되어 있어도 되고,

L은 단결합, >C(-R)₂, >O, >S 및 >N-R이며, 상기 >C(-R)₂ 및 >N-R에서의 R은 각각 독립적으로, 수소, 탄소수 6~30의 아릴, 탄소수 2~30의 헤테로아릴, 디아릴아미노(다만 각각의 아릴은 탄소수 6~12의 아릴), 디아릴보릴(다만 각각의 아릴은 탄소수 6~12의 아릴이며, 2개의 아릴은 단결합 또는 연결기를 통하여 결합하고 있어도 됨), 탄소수 1~12의 알킬, 탄소수 5~10의 시클로알킬, 탄소수 1~12의 알콕시 또는 탄소수 6~30의 아릴옥시이며, 이들에서의 적어도 1개의 수소는 또한, 탄소수 6~30의 아릴, 탄소수 2~30의 헤테로아릴, 탄소수 1~12의 알킬 또는 탄소수 5~10의 시클로알킬로 치환되어 있어도 되고,

다만, X가 >N-R일 때, L이 >O는 아니며,

다량체인 경우의 일반식(1) 중의 R²는 수소이며, 그리고,

일반식(1)으로 표시되는 화합물 및 구조에서의 적어도 1개의 수소는, 시아노, 할로겐 또는 중수소로 치환되어 있어도 되는,

다환 방향족 화합물 또는 그의 다량체.

청구항 3

제1항 또는 제2항에 있어서,

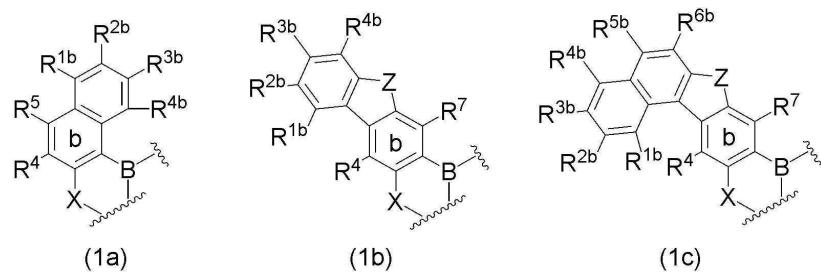
R⁴~R⁷ 중 인접하는 기끼리 결합하여 b환과 함께 형성된 아릴환 또는 헤테로아릴환이, 나프탈렌환, 페난트レン환, 안트라센환, 디벤조퓨란환, 카르바졸환, 디벤조티오펜환, 실라플루오렌환, 플루오렌환 및 이들 환에 또한 벤젠환이 축합한 환으로 이루어지는 군으로부터 선택되는, 다환 방향족 화합물 또는 그의 다량체.

청구항 4

제3항에 있어서,

R⁴~R⁷ 중 인접하는 기끼리 결합하여 b환과 함께 형성된 아릴환 또는 헤테로아릴환이, 하기 부분 구조식(1a), 부분 구조식(1b) 또는 부분 구조식(1c)으로 표시되는 환인, 다환 방향족 화합물 또는 그의 다량체:

[화학식 2]



상기 각 식 중,

R⁴, R⁵, R⁷, R^{1b}, R^{2b}, R^{3b}, R^{4b}, R^{5b} 및 R^{6b}는 각각 독립적으로, 수소, 아릴, 헤테로아릴, 디아릴아미노, 디아릴보릴(2개의 아릴은 단결합 또는 연결기를 통하여 결합하고 있어도 됨), 알킬, 시클로알킬, 알콕시 또는 아릴옥시

이며, 이들에서의 적어도 1개의 수소는 또한, 아릴, 헤테로아릴, 알킬 또는 시클로알킬로 치환되어 있어도 되고,

X는 $>O$, $>N-R$, $>S$ 또는 $>Se$ 이며, 상기 $>N-R$ 의 R은, 아릴, 헤테로아릴, 알킬 또는 시클로알킬이며, 이들에서의 적어도 1개의 수소는, 아릴, 헤테로아릴, 알킬 또는 시클로알킬로 치환되어 있어도 되고,

Z는 $>O$, $>N-R$, $>S$, $>Si(-R)_2$ 및 $>C(-R)_2$ 이며, 상기 $>N-R$, $>Si(-R)_2$ 및 $>C(-R)_2$ 에서의 R은 각각 독립적으로, 수소, 아릴, 헤테로아릴, 디아릴아미노, 디아릴보릴(2개의 아릴은 단결합 또는 연결기를 통하여 결합하고 있어도 됨), 알킬, 시클로알킬, 알콕시 또는 아릴옥시이며, 이들에서의 적어도 1개의 수소는 또한, 아릴, 헤테로아릴, 알킬 또는 시클로알킬로 치환되어 있어도 됨.

청구항 5

제1항 내지 제4항 중 어느 한 항에 있어서,

상기 X로서의 $>N-R$ 의 R이 아릴 또는 헤테로아릴이며, 상기 아릴 또는 헤테로아릴에서의 적어도 1개의 수소가 불소로 치환되어 있는, 다환 방향족 화합물 또는 그의 다양체.

청구항 6

제1항 내지 제4항 중 어느 한 항에 있어서,

상기 X로서의 $>N-R$ 의 R이 아릴 또는 헤테로아릴이며, 상기 아릴 또는 헤테로아릴에서의 상기 N에 대한 오르토위치의 적어도 1개의 수소가 불소로 치환되어 있는, 다환 방향족 화합물 또는 그의 다양체.

청구항 7

제1항 내지 제6항 중 어느 한 항에 있어서,

L이 단결합, $>O$ 또는 $>N-R$ 인, 다환 방향족 화합물 또는 그의 다양체.

청구항 8

제1항 내지 제6항 중 어느 한 항에 있어서,

L이 단결합인, 다환 방향족 화합물 또는 그의 다양체.

청구항 9

제1항 내지 제4항 중 어느 한 항에 있어서,

X가 $>O$ 이며, L이 단결합인, 다환 방향족 화합물 또는 그의 다양체.

청구항 10

제1항 내지 제6항 중 어느 한 항에 있어서,

X가 $>N-R$ 이며, L이 단결합인, 다환 방향족 화합물 또는 그의 다양체.

청구항 11

제1항 내지 제10항 중 어느 한 항에 있어서,

R^7 및 R^8 중, 한쪽이, 할로겐, 탄소수 1~6의 알킬, 탄소수 3~14의 시클로알킬, 탄소수 6~10의 아릴 또는 탄소수 2~10의 헤테로아릴이며, 다른 쪽이, 수소, 탄소수 1~6의 알킬, 탄소수 3~14의 시클로알킬, 탄소수 6~10의 아릴 또는 탄소수 2~10의 헤테로아릴인, 다환 방향족 화합물 또는 그의 다양체.

청구항 12

제1항 내지 제10항 중 어느 한 항에 있어서,

R^7 및 R^8 중, 한쪽이, 할로겐, 탄소수 1~4의 알킬, 탄소수 5~10의 시클로알킬 또는 페닐이며, 다른 쪽이,

수소, 탄소수 1~4의 알킬, 탄소수 5~10의 시클로알킬 또는 페닐인, 다환 방향족 화합물 또는 그의 다량체.

청구항 13

제1항 내지 제10항 중 어느 한 항에 있어서,

R^7 및 R^8 중, 한쪽이, 메틸, tert-부틸 또는 페닐이며, 다른 쪽이, 수소, 메틸, tert-부틸 또는 페닐인, 다환 방향족 화합물 또는 그의 다량체.

청구항 14

제1항 내지 제10항 중 어느 한 항에 있어서,

R^7 및 R^8 중, 한쪽이, 메틸 또는 tert-부틸이며, 다른 쪽이 수소 또는 메틸인, 다환 방향족 화합물 또는 그의 다량체.

청구항 15

제1항 내지 제10항 중 어느 한 항에 있어서,

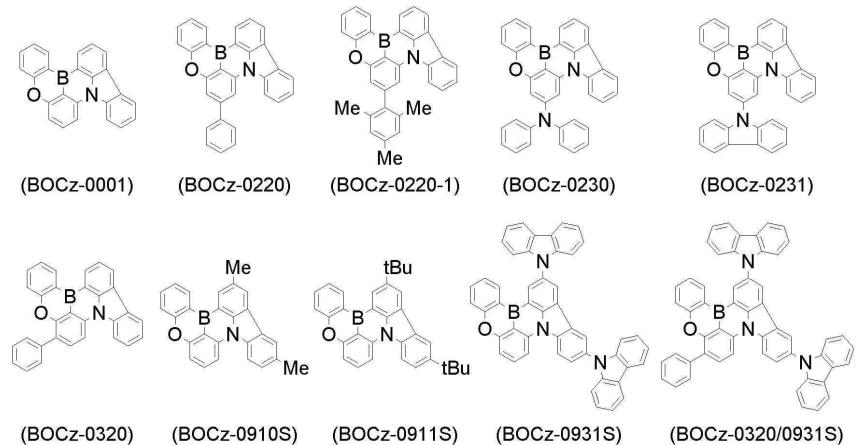
R^7 및 R^8 중, 한쪽이 메틸이며, 다른 쪽이 수소이며, X가 $>N-R$ 인 경우에는, 상기 $>N-R$ 의 R이 페닐이며, 상기 페닐에서 적어도 1개의 수소는, 탄소수 6~12의 아릴, 탄소수 2~10의 헤테로아릴, 탄소수 1~6의 알킬, 탄소수 3~14의 시클로알킬 또는 불소로 치환되어 있어도 되는, 다환 방향족 화합물 또는 그의 다량체.

청구항 16

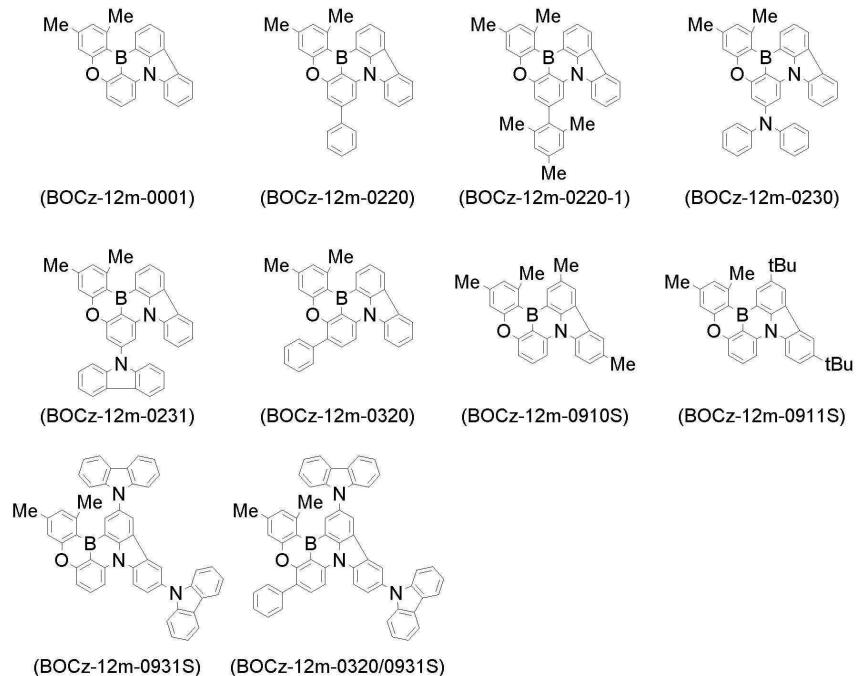
제1항에 있어서,

하기 어느 하나의 식으로 표시되는, 다환 방향족 화합물 또는 그의 다량체:

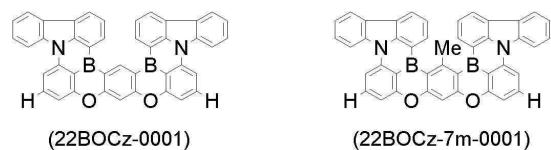
[화학식 3]



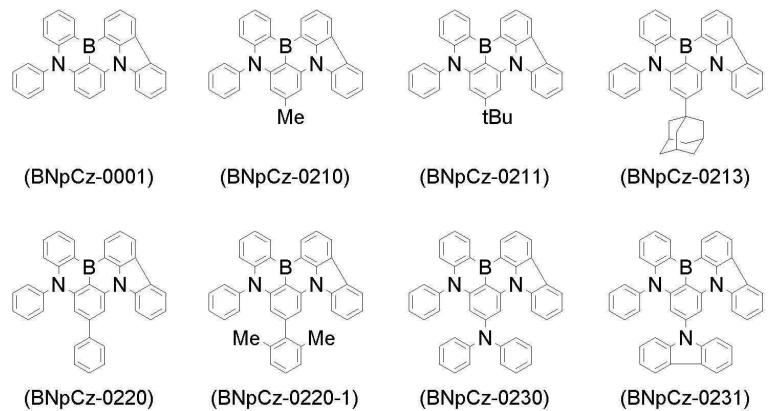
[화학식 4]



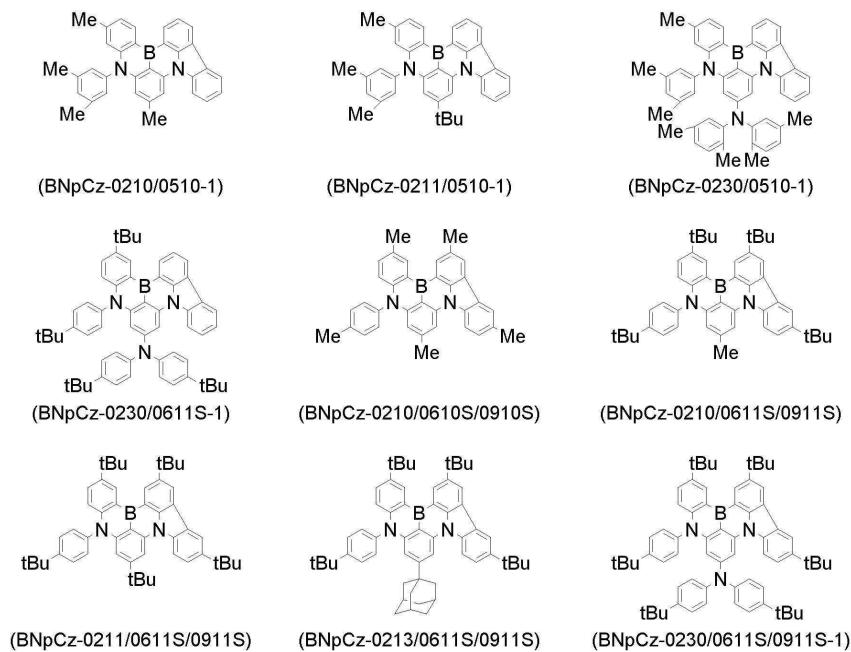
[화학식 5]



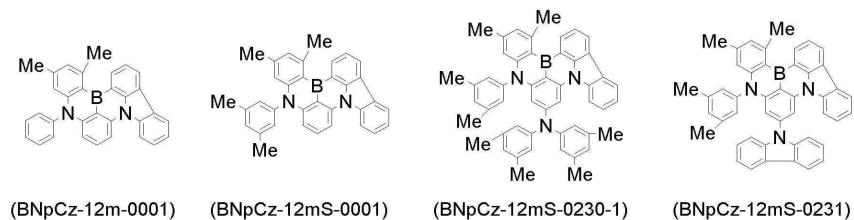
[화학식 6]



[화학식 7]



[화학식 8]



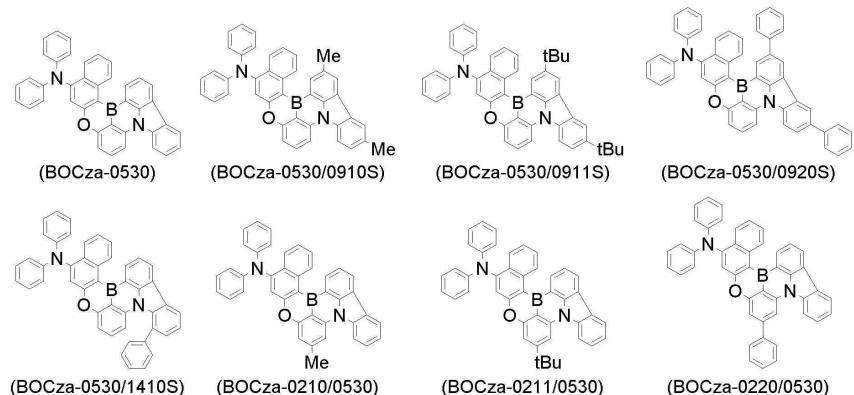
(상기 각 식 중의 「Me」는 메틸기이며, 「tBu」는 tert-부틸기임).

청구항 17

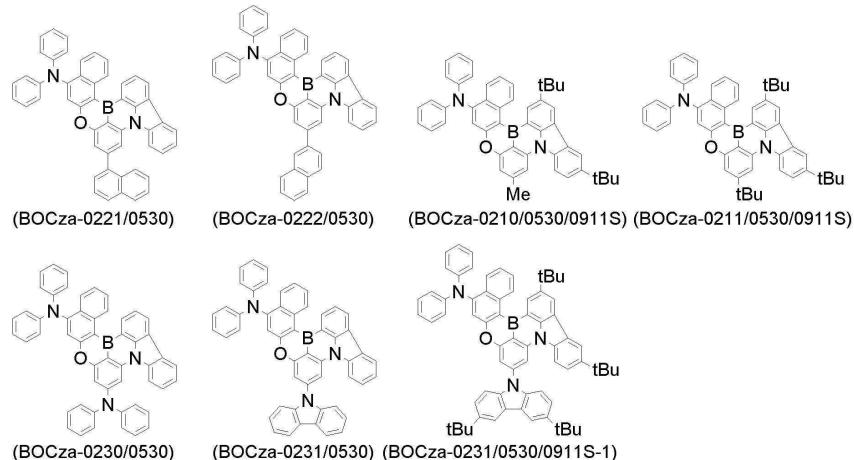
제1항에 있어서,

하기 어느 하나의 식으로 표시되는, 다환 방향족 화합물:

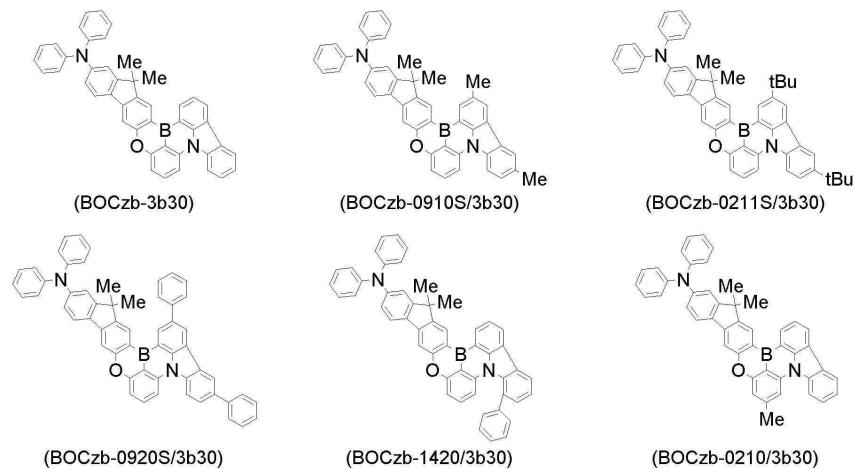
[화학식 9]



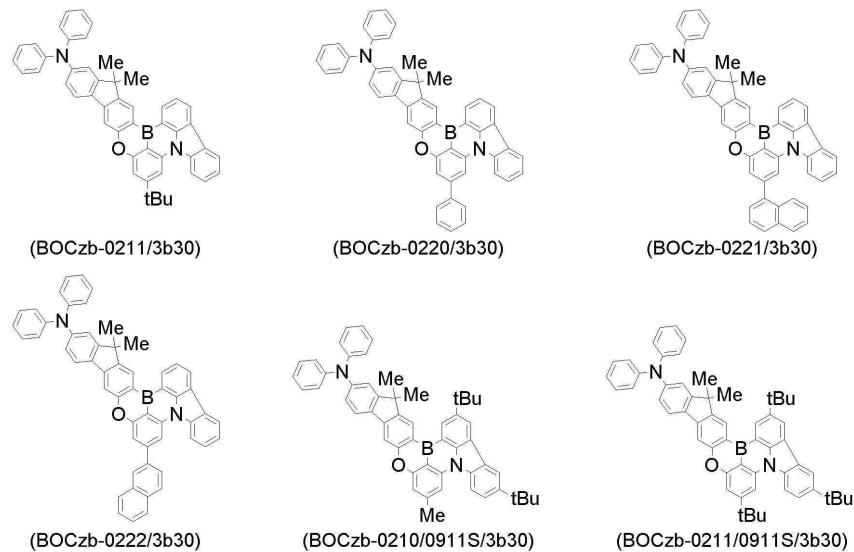
[화학식 10]



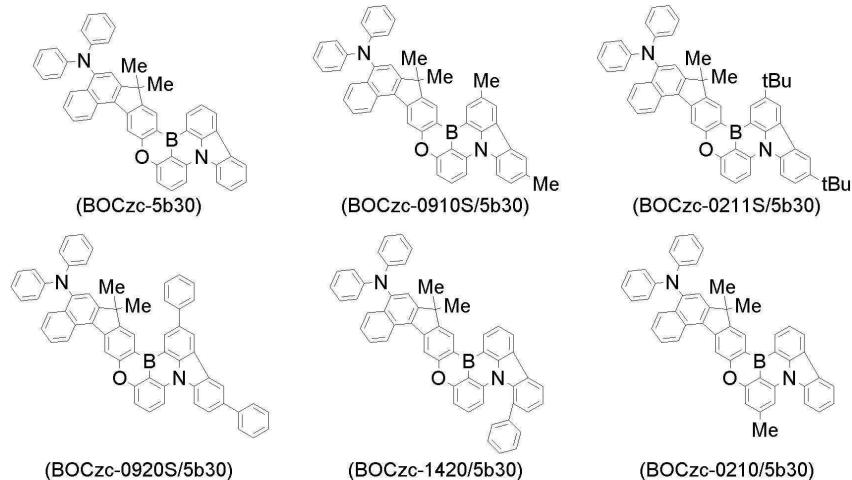
[화학식 11]



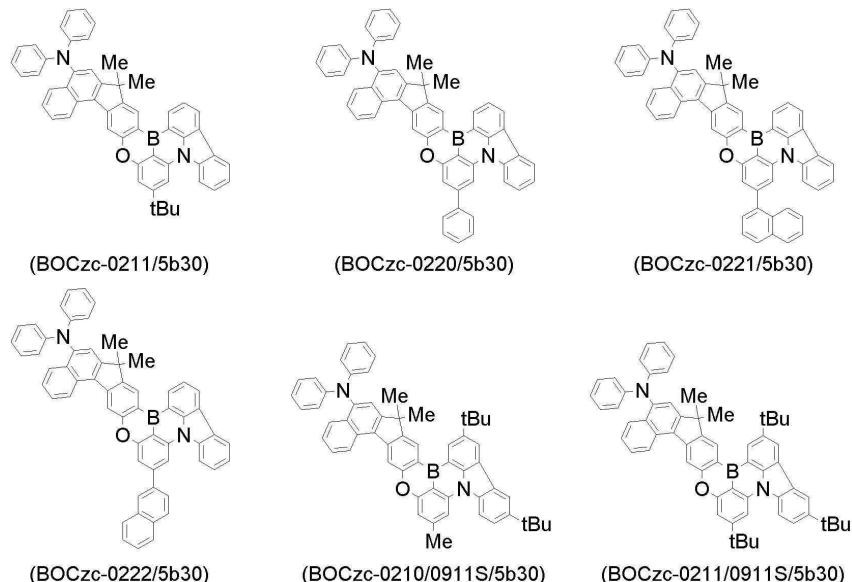
[화학식 12]



[화학식 13]



[화학식 14]



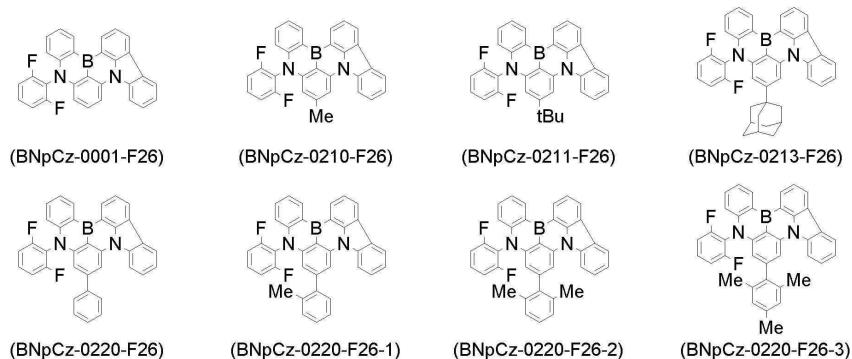
(상기 각 식 중의 「Me」는 메틸기이며, 「tBu」는 tert-부틸기임).

청구항 18

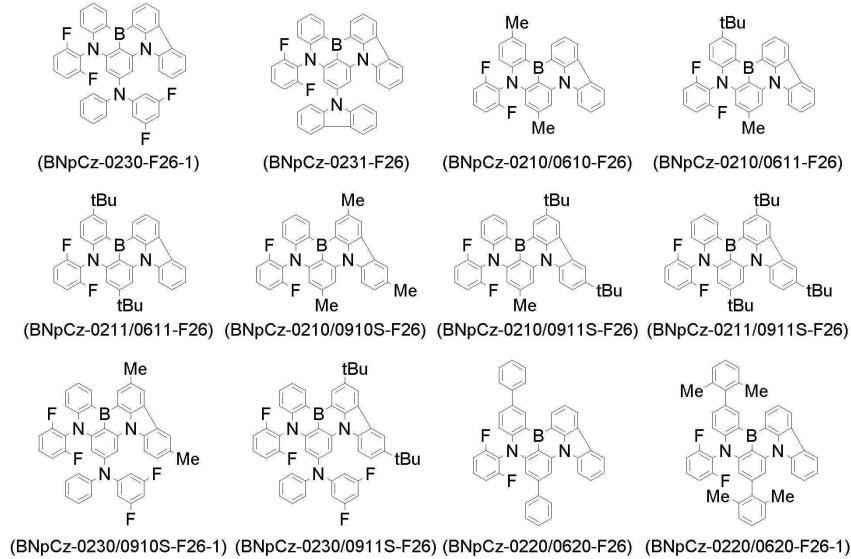
제1항에 있어서,

하기 어느 하나의 식으로 표시되는, 다환 방향족 화합물:

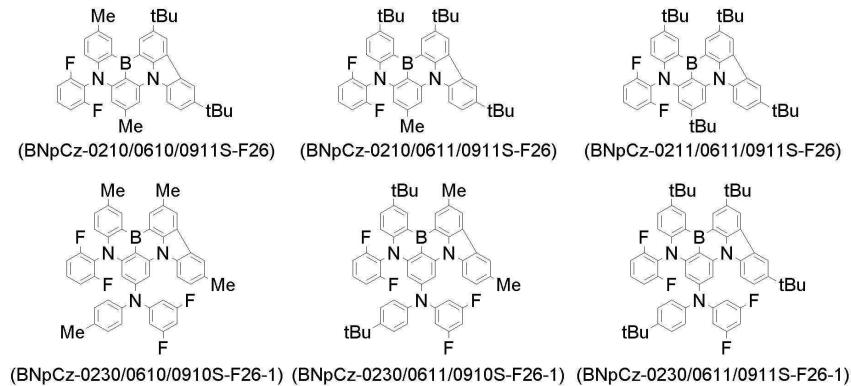
[화학식 15]



[화학식 16]



[화학식 17]



(상기 각 식 중의 「Me」는 메틸기이며, 「tBu」는 tert-부틸기임).

청구항 19

제1항 내지 제18항 중 어느 한 항에 기재된 다환 방향족 화합물 또는 그의 다양체를 함유하는, 유기 디바이스용 재료.

청구항 20

제19항에 있어서,

상기 유기 디바이스용 재료는, 유기전계 발광소자용 재료, 유기전계 효과 트랜지스터용 재료 또는 유기박막 태양전지용 재료인, 유기 디바이스용 재료.

청구항 21

제20항에 있어서,

상기 유기전계 발광소자용 재료가 발광층용 재료인, 유기 디바이스용 재료.

청구항 22

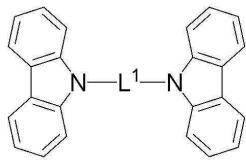
양극 및 음극으로 이루어지는 한 쌍의 전극과, 상기 한 쌍의 전극 사이에 배치되고, 제21항에 기재된 발광층용 재료를 함유하는 발광층을 가지는, 유기전계 발광소자.

청구항 23

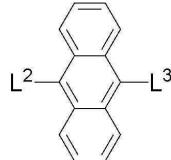
제22항에 있어서,

상기 발광층은 하기 일반식(3)으로 표시되는 화합물 및/또는 하기 일반식(4)으로 표시되는 화합물을 더욱 함유하는, 유기전계 발광소자:

[화학식 18]



(3)



(4)

(상기 일반식(3) 중, L^1 은 탄소수 6~30의 아릴렌 또는 탄소수 2~30의 헤테로아릴렌이며,

상기 일반식(4) 중, L^2 및 L^3 는 각각 독립적으로, 탄소수 6~30의 아릴 또는 탄소수 2~30의 헤테로아릴이며,

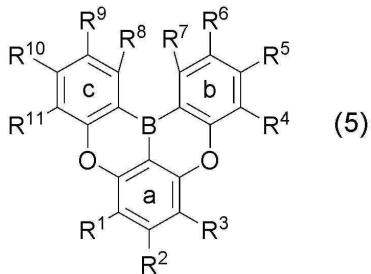
상기 각 식으로 표시되는 화합물에서의 적어도 1개의 수소는, 탄소수 1~6의 알킬, 탄소수 3~14의 시클로알킬, 시아노, 할로겐 또는 중수소로 치환되어 있어도 됨).

청구항 24

제22항 또는 제23항에 있어서,

상기 발광층은 하기 일반식(5)으로 표시되는 화합물을 더욱 함유하는, 유기전계 발광소자:

[화학식 19]



(상기 일반식(5)에 있어서,

$R^1 \sim R^{11}$ 은 각각 독립적으로, 수소, 아릴, 헤테로아릴, 디아릴아미노, 디헤테로아릴아미노, 아릴헤테로아릴아미노, 디아릴보릴(2개의 아릴은 단결합 또는 연결기를 통하여 결합하고 있어도 됨), 알킬 또는 시클로알킬이며, 이들에서의 적어도 1개의 수소는 또한, 아릴, 헤테로아릴, 디아릴아미노, 디아릴보릴(2개의 아릴은 단결합 또는 연결기를 통하여 결합하고 있어도 됨), 알킬 또는 시클로알킬로 치환되어 있어도 되고,

$R^1 \sim R^{11}$ 중 인접하는 기끼리 결합하여 a환, b환 또는 c환과 함께 아릴환 또는 헤테로아릴환을 형성하고 있어도 되고, 형성된 환에서의 적어도 1개의 수소는, 아릴, 헤테로아릴, 디아릴아미노, 디헤테로아릴아미노, 아릴헤테로아릴아미노, 디아릴보릴(2개의 아릴은 단결합 또는 연결기를 통하여 결합하고 있어도 됨), 알킬 또는 시클로알킬로 치환되어 있어도 되고, 이들에서의 적어도 1개의 수소는 또한, 아릴, 헤테로아릴, 디아릴아미노, 디아릴보릴(2개의 아릴은 단결합 또는 연결기를 통하여 결합하고 있어도 됨), 알킬 또는 시클로알킬로 치환되어 있어도 되고,

일반식(5)으로 표시되는 화합물에서의 적어도 1개의 수소는, 각각 독립적으로, 할로겐 또는 중수소로 치환되어 도 됨).

청구항 25

제22항 내지 제24항 중 어느 한 항에 있어서,

상기 음극과 상기 발광층 사이에 배치되는 전자수송층 및/또는 전자주입층을 가지고, 상기 전자수송층 및 전자주입층 중 적어도 1개는, 보란 유도체, 피리딘 유도체, 플루오란텐 유도체, BO계 유도체, 안트라센 유도체, 벤조플루오렌 유도체, 포스핀옥사이드 유도체, 피리미딘 유도체, 카르바졸 유도체, 트리아진 유도체, 벤즈이미다졸 유도체, 페난트롤린 유도체 및 퀴놀리놀레 금속 착체로 이루어지는 군으로부터 선택되는 적어도 1개를 함유하는, 유기전계 발광소자.

청구항 26

제25항에 있어서,

상기 전자수송층 및/또는 전자주입층이, 알칼리 금속, 알칼리토류 금속, 희토류 금속, 알칼리 금속의 산화물, 알칼리 금속의 할로겐화물, 알칼리토류 금속의 산화물, 알칼리토류 금속의 할로겐화물, 희토류 금속의 산화물, 희토류 금속의 할로겐화물, 알칼리 금속의 유기착체, 알칼리토류 금속의 유기착체 및 희토류 금속의 유기착체로 이루어지는 군으로부터 선택되는 적어도 1개를 더욱 함유하는, 유기전계 발광소자.

청구항 27

제22항 내지 제26항 중 어느 한 항에 기재된 유기전계 발광소자를 구비한, 표시 장치 또는 조명장치.

발명의 설명

기술 분야

[0001] 본 발명은, 다환 방향족 화합물 및 그의 다양체(이하, 이들을 합쳐서 간단히 「다환 방향족 화합물」이라고도 함)와, 이것을 사용한 유기전계 발광소자, 유기전계 효과 트랜지스터 및 유기 박막 태양전지 등의 유기 디바이스, 및 표시 장치 및 조명장치에 관한 것이다.

배경 기술

[0002] 종래, 전계발광하는 발광 소자를 사용한 표시 장치는, 전력절약화나 박형화가 가능하므로, 다양하게 연구되고, 또한 유기재료로 이루어지는 유기전계 발광소자는, 경량화나 대형화가 용이하므로 활발하게 검토되어 왔다. 특히, 광의 3원색의 하나인 청색 등의 발광 특성을 가지는 유기재료의 개발, 및 정공, 전자 등의 전하수송능(반도체나 초전도체가 될 가능성)을 구비한 유기재료의 개발에 대해서는, 고분자화합물, 저분자화합물을 막론하고 지금까지 활발하게 연구되어 왔다.

[0003] 유기 EL 소자는, 양극 및 음극으로 이루어지는 한 쌍의 전극과, 상기 한 쌍의 전극 사이에 배치되고, 유기 화합물을 포함하는 한층 또는 복수의 층으로 이루어지는 구조를 가진다. 유기 화합물을 포함하는 층에는, 발광층이나, 정공, 전자 등의 전하를 수송 또는 주입하는 전하 수송/주입층 등이 있지만, 이를 층에 적합한 각종 유기재료가 개발되어 있다.

[0004] 발광층용 재료로서는, 예를 들면, 벤조플루오렌계 화합물 등이 개발되고 있다(국제공개 제2004/061047호 공보). 또한, 정공수송 재료로서는, 예를 들면, 트리페닐아민계 화합물 등이 개발되어 있다(일본공개특허 제2001-172232호 공보). 또한, 전자수송 재료로서는, 예를 들면, 안트라센계 화합물 등이 개발되어 있다(일본공개특허 제2005-170911호 공보).

[0005] 또한, 최근에는 유기 EL 소자나 유기박막 태양전지에 사용하는 재료로서 트리페닐아민 유도체를 개량한 재료도 보고되어 있다(국제공개 제2012/118164호 공보). 이 재료는 이미 실용화되어 있는 N,N'-디페닐-N,N'-비스(3-메틸페닐)-1,1'-비페닐-4,4'-디아민(TPD)을 참고로 하여, 트리페닐아민을 구성하는 방향족환끼리를 연결함으로써 그 평면성을 높인 것을 특징으로 하는 재료이다. 이 문헌에서는, 예를 들면, NO연결계 화합물(63페이지의 화합물 1)의 전하수송 특성이 평가되어 있지만, NO연결계 화합물 이외의 재료의 제조 방법에 대해서는 기재되어 있지 않고, 또한, 연결하는 원소가 다르면 화합물 전체의 전자상태가 상이하므로, NO연결계 화합물 이외의 재료로부터 얻어지는 특성도 아직 알려져 있지 않다. 이와 같은 화합물의 예는 그 외에도 알려져 있다(국제공개 제2011/107186호 공보). 예를 들면, 3중항 여기자의 에너지(T1)가 큰 공역구조를 가지는 화합물은, 보다 짧은 파장의 인광을 발할 수 있으므로, 청색의 발광층용 재료로서 유익하다. 또한, 발광층을 협지하는 전자수송 재료나 정공수송 재료로서도 T1이 큰 신규한 공역구조를 가지는 화합물이 요구되고 있다.

[0006] 유기 EL 소자의 호스트 재료는, 일반적으로, 벤젠이나 카르바졸 등의 기존의 방향족환을 단결합이나 인 원자나

규소원자로 복수연결한 분자이다. 이는, 비교적 공역계가 작은 방향족환을 다수 연결함으로써, 호스트 재료에 필요로 하는 큰 HOMO-LUMO갭(박막에서의 밴드갭 Eg)이 담보되기 때문이다. 또한, 인광재료나 열활성형 지연 형광(TADF) 재료를 사용한 유기 EL 소자의 호스트 재료에는, 높은 3중향 여기 에너지(E_T)도 필요로 하지만, 분자에 도너 혹은 억셉터(accepter)성의 방향족환이나 치환기를 연결함으로써, 3중향 여기 상태(T1)의 SOMO1 및 SOMO2를 국재화(局在化)시키고, 양쪽 궤도간의 교환 상호 작용을 작게 함으로써, 3중향 여기 에너지(E_T)를 항상 시키는 것이 가능하게 된다. 그러나, 공역계가 작은 방향족환은 산화환원 안정성이 충분하지 않으며, 기존의 방향족환을 연결한 분자를 호스트 재료로서 사용한 소자는 수명이 충분하지 않다. 한편, 확장 π 공역계를 가지는 다환 방향족 화합물은, 일반적으로, 산화환원 안정성은 우수하지만, HOMO-LUMO갭(박막에서의 밴드갭 Eg)이나 3중향 여기 에너지(E_T)가 낮으므로, 호스트 재료에 맞지 않는 것으로 여겨져 왔다.

[0007] 또한, 최근에는 붕소 등을 중심원자로 하여 복수의 방향족환을 축합한 화합물도 보고되어 있다(국제공개 제2015/102118호 공보). 이 문헌에서는 발광층의 도편트 재료로서 상기 복수의 방향족환을 축합한 화합물을 사용한 유기 EL 소자 평가가 실시되어 있지만, 상기 문헌에는 극히 다수의 화합물이 개시되어 있고, 이들 중에서도 특히 발광 특성 등의 유기 EL 특성이 우수한 화합물을 검토하는 것은 유익하다. 발광 특성으로서는, 기본적으로는 좁은 반값폭의 발광 스펙트럼, 높은 형광양자 수율, 작은 지연 형광 수명, 큰 에너지 갭 Eg 및 작은 ΔE_{ST} 등이 요구되며, 이들 중 어느 하나 또는 복수의 특성에 있어서 우수한 것이 바람직하고, 종합적으로 우수한 특성을 가지는 경우에는 열활성화 지연 형광재료로서의 사용이 기대된다.

선행기술문헌

특허문헌

[0008] (특허문헌 0001) 국제공개 제2004/061047호 공보

(특허문헌 0002) 일본공개특허 제2001-172232호 공보

(특허문헌 0003) 일본공개특허 제2005-170911호 공보

(특허문헌 0004) 국제공개 제2012/118164호 공보

(특허문헌 0005) 국제공개 제2011/107186호 공보

(특허문헌 0006) 국제공개 제2015/102118호 공보

발명의 내용

해결하려는 과제

[0009] 전술한 바와 같이, 유기 EL 소자에서 사용되는 재료로서는 각종 재료가 개발되어 있지만, 발광 특성 등의 유기 EL 특성을 더욱 향상시키거나, 발광층용 재료 등의 유기 EL 재료의 선택 사항을 증가시키기 위하여, 종래 구체적으로는 알려져 있지 않은 화합물의 개발이 기대되고 있다.

과제의 해결 수단

[0010] 본 발명자들은, 상기 문제점을 해결하기 위해 예의(銳意) 검토한 결과, 붕소 원자와 질소 원자 또는 산소 원자 등으로 복수의 방향족환을 연결한 다환 방향족 화합물에 있어서 특정한 개소(箇所)에 축합 구조를 가지게 하고, 분자가 형성하는 평면을 넓히는 것에 의해, 그리고 이 화합물에 있어서 특정한 위치에 치환기를 도입하여 분자가 형성하는 평면을 일그러지게 함으로써, 우수한 유기 EL 소자를 얻을 수 있는 것을 발견하고, 본 발명을 완성시켰다. 즉 본 발명은, 다음과 같은 다환 방향족 화합물, 또한 다음과 같은 다환 방향족 화합물을 포함하는 유기 디바이스용 재료 등을 제공한다.

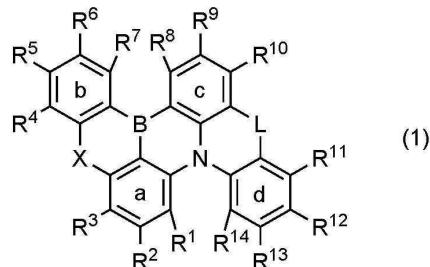
[0011] 그리고, 본 명세서에 있어서 화학 구조나 치환기를 탄소수로 나타내는 경우가 있지만, 화학 구조에 치환기가 치환한 경우나, 치환기에 또한 치환기가 치환한 경우 등에서의 탄소수는, 화학 구조나 치환기 각각의 탄소수를 의미하고, 화학 구조와 치환기의 합계 탄소수나, 치환기와 치환기의 합계 탄소수를 의미하는 것은 아니다. 예를 들면, 「탄소수 X의 치환기 A로 치환된 탄소수 Y의 치환기 B」는, 「탄소수 Y의 치환기 B」에 「탄소수 X의 치

환기 A」가 치환하는 것을 의미하고, 탄소수 Y는 치환기 A 및 치환기 B의 합계의 탄소수가 아니다. 또한 예를 들면, 「치환기 A로 치환된 탄소수 Y의 치환기 B」는, 「탄소수 Y의 치환기 B」에 「탄소수 한정이 없는) 치환기 A」가 치환하는 것을 의미하고, 탄소수 Y는 치환기 A 및 치환기 B의 합계의 탄소수가 아니다.

[0012] 항 1.

[0013] 하기 일반식(1)으로 표시되는 다환 방향족 화합물, 또는 하기 일반식(1)으로 표시되는 구조를 복수 가지는 다환 방향족 화합물의 다양체.

[0014] [화학식 20]



[0015]

[0016] (상기 식(1) 중,

[0017] R¹, R², R³, R⁴, R⁵, R⁶, R⁷, R⁸, R⁹, R¹⁰, R¹¹, R¹², R¹³ 및 R¹⁴는, 각각 독립적으로, 수소, 아릴, 헤테로아릴, 디아릴아미노, 디아릴보릴(2개의 아릴은 단결합 또는 연결기를 통하여 결합하고 있어도 됨), 알킬, 시클로알킬, 알콕시 또는 아릴옥시이며, 이들에서의 적어도 1개의 수소는 또한, 아릴, 헤�테로아릴, 알킬 또는 시클로알킬로 치환되어 있어도 되고, 또한, R¹~R³, R⁴~R⁷, R⁸~R¹⁰ 및 R¹¹~R¹⁴ 중 인접하는 기끼리 결합하여 a환, b환, c환 및 d환 중 적어도 1개와 함께 아릴환 또는 헤�테로아릴환을 형성하고 있어도 되고, 형성된 환에서의 적어도 1개의 수소는, 아릴, 헤�테로아릴, 디아릴아미노, 디아릴보릴(2개의 아릴은 단결합 또는 연결기를 통하여 결합하고 있어도 됨), 알킬, 시클로알킬, 알콕시 또는 아릴옥시로 치환되어 있어도 되고, 이들에서의 적어도 1개의 수소는 또한, 아릴, 헤�테로아릴, 알킬 또는 시클로알킬로 치환되어 있어도 되고,

[0018] X는, >O, >N-R, >S 또는 >Se이며, 상기 >N-R의 R은, 아릴, 헤�테로아릴, 알킬 또는 시클로알킬이며, 이들에서의 적어도 1개의 수소는, 아릴, 헤�테로아릴, 알킬 또는 시클로알킬로 치환되어 있어도 되고,

[0019] L은, 단결합, >C(-R)₂, >O, >S 및 >N-R이며, 상기 >C(-R)₂ 및 >N-R에서의 R은, 각각 독립적으로, 수소, 아릴, 헤�테로아릴, 디아릴아미노, 디아릴보릴(2개의 아릴은 단결합 또는 연결기를 통하여 결합하고 있어도 됨), 알킬, 시클로알킬, 알콕시 또는 아릴옥시이며, 이들에서의 적어도 1개의 수소는 또한, 아릴, 헤�테로아릴, 알킬 또는 시클로알킬로 치환되어 있어도 되고,

[0020] 다만, X가 >N-R일 때, L이 >O는 아니며,

[0021] 다양체인 경우의 식(1) 중의 R²는 수소이며, 그리고,

[0022] 일반식(1)으로 표시되는 화합물 및 구조에서의 적어도 1개의 수소는, 시아노, 할로겐 또는 중수소로 치환되어 있어도 됨).

[0023] 항 2.

[0024] R¹, R², R³, R⁴, R⁵, R⁶, R⁷, R⁸, R⁹, R¹⁰, R¹¹, R¹², R¹³ 및 R¹⁴는, 각각 독립적으로, 수소, 탄소수 6~30의 아릴, 탄소수 2~30의 헤�테로아릴, 디아릴아미노(다만 각각의 아릴은 탄소수 6~12의 아릴), 디아릴보릴(다만 각각의 아릴은 탄소수 6~12의 아릴이며, 2개의 아릴은 단결합 또는 연결기를 통하여 결합하고 있어도 됨), 탄소수 1~12의 알킬, 탄소수 5~10의 시클로알킬, 탄소수 1~12의 알콕시 또는 탄소수 6~30의 아릴옥시이며, 이들에서의 적어도 1개의 수소는 또한, 탄소수 6~30의 아릴, 탄소수 2~30의 헤�테로아릴, 탄소수 1~12의 알킬 또는 탄소수 5~10의 시클로알킬로 치환되어 있어도 되고, 또한, R¹~R³, R⁴~R⁷, R⁸~R¹⁰ 및 R¹¹~R¹⁴ 중 인접하는 기끼리 결합하여 a환, b환, c환 및 d환 중 적어도 1개와 함께 탄소수 9~16의 아릴환 또는 탄소수 6~15의 헤�테로아릴환을 형성하고 있어도 되고, 형성된 환에서의 적어도 1개의 수소는, 탄소수 6~30의 아릴, 탄소수 2~30의 헤테

로아릴, 디아릴아미노(다만 각각의 아릴은 탄소수 6~12의 아릴), 디아릴보릴(다만 각각의 아릴은 탄소수 6~12의 아릴이며, 2개의 아릴은 단결합 또는 연결기를 통하여 결합하고 있어도 됨), 탄소수 1~12의 알킬, 탄소수 5~10의 시클로알킬, 탄소수 1~12의 알콕시 또는 탄소수 6~30의 아릴옥시로 치환되어 있어도 되고, 이들에서의 적어도 1개의 수소는 또한, 탄소수 6~30의 아릴, 탄소수 2~30의 헤테로아릴, 탄소수 1~12의 알킬 또는 탄소수 5~10의 시클로알킬로 치환되어 있어도 되고,

X는, >0, >N-R, >S 또는 >Se이며, 상기 >N-R의 R은, 탄소수 6~30의 아릴, 탄소수 2~30의 헤테로아릴, 탄소수 1~12의 알킬 또는 탄소수 5~10의 시클로알킬이며, 이들에서의 적어도 1개의 수소는, 탄소수 6~30의 아릴, 탄소수 2~30의 헤테로아릴, 탄소수 1~12의 알킬 또는 탄소수 5~10의 시클로알킬로 치환되어 있어도 되고,

L은, 단결합, $>C(-R)_2$, $>O$, $>S$ 및 $>N-R$ 이며, 상기 $>C(-R)_2$ 및 $>N-R$ 에서의 R은, 각각 독립적으로, 수소, 탄소수 6~30의 아릴, 탄소수 2~30의 헤테로아릴, 디아릴아미노(다만 각각의 아릴은 탄소수 6~12의 아릴), 디아릴보릴(다만 각각의 아릴은 탄소수 6~12의 아릴이며, 2개의 아릴은 단결합 또는 연결기를 통하여 결합하고 있어도 됨), 탄소수 1~12의 알킬, 탄소수 5~10의 시클로알킬, 탄소수 1~12의 알콕시 또는 탄소수 6~30의 아릴옥시이며, 이들에서의 적어도 1개의 수소는 또한, 탄소수 6~30의 아릴, 탄소수 2~30의 헤�테로아릴, 탄소수 1~12의 알킬 또는 탄소수 5~10의 시클로알킬로 치환되어 있어도 되고,

다만, X 가 $>N-R$ 일 때, L 이 >0 는 아니며,

다량체인 경우의 식(1) 중의 R^2 는 수소이며, 그리고,

일반식(1)으로 표시되는 화합물 및 구조에서의 적어도 1개의 수소는, 시아노, 할로겐 또는 중수소로 치환되어 있어도 되는.

항 1에 기재된 다환 방향족 화합물 또는 그의 다향체.

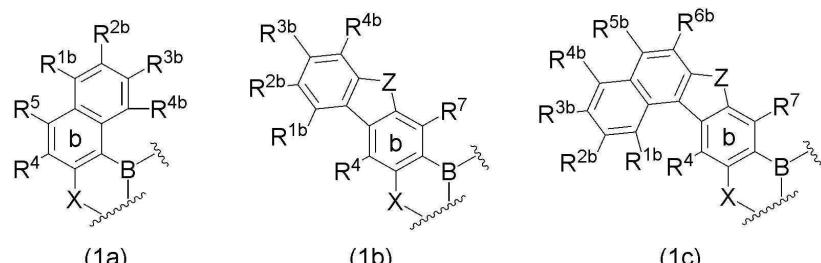
항 3.

$R^4 \sim R^7$ 중 인접하는 기끼리 결합하여 b환과 함께 형성된 아릴환 또는 헤테로아릴환이, 나프탈렌환, 페난트렌환, 안트라센환, 디벤조퓨란환, 카르바졸환, 디벤조티오펜환, 실라플루오렌환, 플루오렌환 및 이들 환에 더욱 벤젠환이 축합한 환으로 이루어지는 군으로부터 선택되는, 항 1 또는 2에 기재된 다환 방향족 화합물 또는 그의 다량체.

항 4.

$R^4 \sim R^7$ 중 인접하는 기끼리 결합하여 b환과 함께 형성된 아릴환 또는 헤테로아릴환이, 하기 부분 구조식(1a), 식(1b) 또는 식(1c)으로 표시되는 화이 핵 3에 기재된 다화 방향족 화합물 또는 그의 다향체.

[화학식 21]



각 식 중,

R^4 , R^5 , R^7 , R^{1b} , R^{2b} , R^{3b} , R^{4b} , R^{5b} 및 R^{6b} 는, 각각 독립적으로, 수소, 아릴, 헤테로아릴, 디아릴아미노, 디아릴보릴(2개의 아릴은 단결합 또는 연결기를 통하여 결합하고 있어도 됨), 알킬, 시클로알킬, 알콕시 또는 아릴옥시이며, 이들에서의 적어도 1개의 수소는 또한, 아릴, 헤테로아릴, 알킬 또는 시클로알킬로 치환되어 있어도 되고,

X는, >0, >N-R, >S 또는 >Se이며, 상기 >N-R의 R은, 아릴, 헤테로아릴, 알킬 또는 시클로알킬이며, 이들에서의 적어도 1개의 수소는, 아릴, 헤�테로아릴, 알킬 또는 시클로알킬로 치환되어 있어도 되고,

- [0040] Z는, $>O$, $>N-R$, $>S$, $>Si(-R)_2$ 및 $>C(-R)_2$ 이며, 상기 $>N-R$, $>Si(-R)_2$ 및 $>C(-R)_2$ 에서의 R은, 각각 독립적으로, 수소, 아릴, 헤테로아릴, 디아릴아미노, 디아릴보릴(2개의 아릴은 단결합 또는 연결기를 통하여 결합하고 있어도 됨), 알킬, 시클로알킬, 알콕시 또는 아릴옥시이며, 이들에서의 적어도 1개의 수소는 또한, 아릴, 헤�테로아릴, 알킬 또는 시클로알킬로 치환되어 있어도 된다.
- [0041] 항 5.
- [0042] 상기 X로서의 $>N-R$ 의 R이 아릴 또는 헤�테로아릴이며, 상기 아릴 또는 헤�테로아릴에서의 적어도 1개의 수소가 불소로 치환되어 있는, 항 1~4 중 어느 하나에 기재된 다환 방향족 화합물 또는 그의 다양체.
- [0043] 항 6.
- [0044] 상기 X로서의 $>N-R$ 의 R이 아릴 또는 헤�테로아릴이며, 상기 아릴 또는 헤�테로아릴에서의 상기 N에 대한 오르토 위치의 적어도 1개의 수소가 불소로 치환되어 있는, 항 1~4 중 어느 하나에 기재된 다환 방향족 화합물 또는 그의 다양체.
- [0045] 항 7.
- [0046] L이, 단결합, $>O$ 또는 $>N-R$ 인, 항 1~6 중 어느 하나에 기재된 다환 방향족 화합물 또는 그의 다양체.
- [0047] 항 8.
- [0048] L이, 단결합인, 항 1~6 중 어느 하나에 기재된 다환 방향족 화합물 또는 그의 다양체.
- [0049] 항 9.
- [0050] X가 $>O$ 이며, L이 단결합인, 항 1~4 중 어느 하나에 기재된 다환 방향족 화합물 또는 그의 다양체.
- [0051] 항 10.
- [0052] X가 $>N-R$ 이며, L이 단결합인, 항 1~6 중 어느 하나에 기재된 다환 방향족 화합물 또는 그의 다양체.
- [0053] 항 11.
- [0054] R^7 및 R^8 중, 한쪽이, 할로겐, 탄소수 1~6의 알킬, 탄소수 3~14의 시클로알킬, 탄소수 6~10의 아릴 또는 탄소수 2~10의 헤�테로아릴이며, 다른 쪽이, 수소, 탄소수 1~6의 알킬, 탄소수 3~14의 시클로알킬, 탄소수 6~10의 아릴 또는 탄소수 2~10의 헤�테로아릴인, 항 1~10 중 어느 하나에 기재된 다환 방향족 화합물 또는 그의 다양체.
- [0055] 항 12.
- [0056] R^7 및 R^8 중, 한쪽이, 할로겐, 탄소수 1~4의 알킬, 탄소수 5~10의 시클로알킬 또는 폐닐이며, 다른 쪽이, 수소, 탄소수 1~4의 알킬, 탄소수 5~10의 시클로알킬 또는 폐닐인, 항 1~10 중 어느 하나에 기재된 다환 방향족 화합물 또는 그의 다양체.
- [0057] 항 13.
- [0058] R^7 및 R^8 중, 한쪽이, 메틸, tert-부틸 또는 폐닐이며, 다른 쪽이, 수소, 메틸, tert-부틸 또는 폐닐인, 항 1~10 중 어느 하나에 기재된 다환 방향족 화합물 또는 그의 다양체.
- [0059] 항 14.
- [0060] R^7 및 R^8 중, 한쪽이, 메틸 또는 tert-부틸이며, 다른 쪽이 수소 또는 메틸인, 항 1~10 중 어느 하나에 기재된 다환 방향족 화합물 또는 그의 다양체.
- [0061] 항 15.
- [0062] R^7 및 R^8 중, 한쪽이 메틸이며, 다른 쪽이 수소이며, X가 $>N-R$ 인 경우에는, 상기 $>N-R$ 의 R이 폐닐이며, 상기 폐닐에서의 적어도 1개의 수소는, 탄소수 6~12의 아릴, 탄소수 2~10의 헤�테로아릴, 탄소수 1~6의 알킬, 탄소수 3~14의 시클로알킬 또는 불소로 치환되어 있어도 되는, 항 1~10 중 어느 하나에 기재된 다환 방향족 화합물 또는 그의 다양체.

[0063]

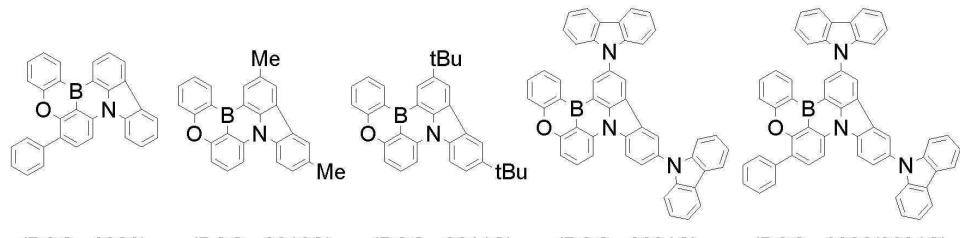
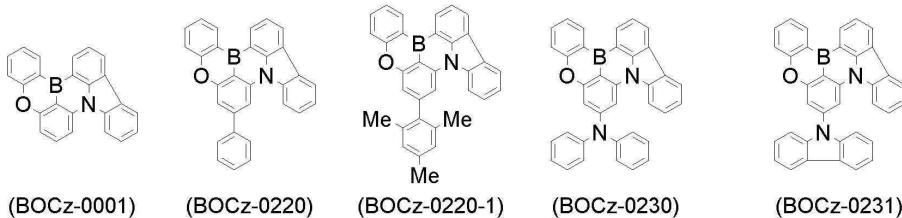
항 16.

[0064]

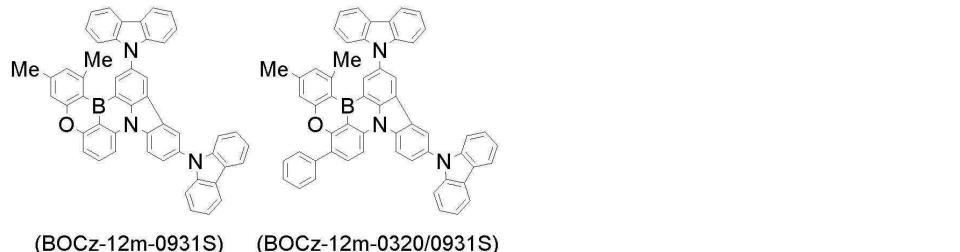
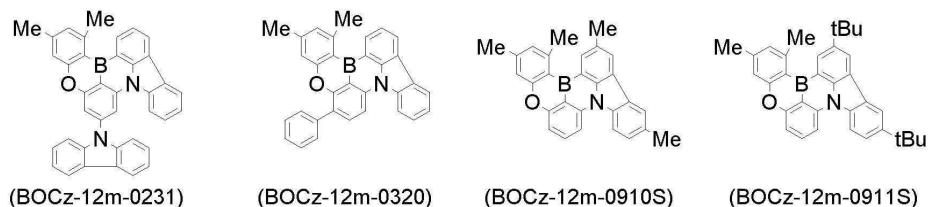
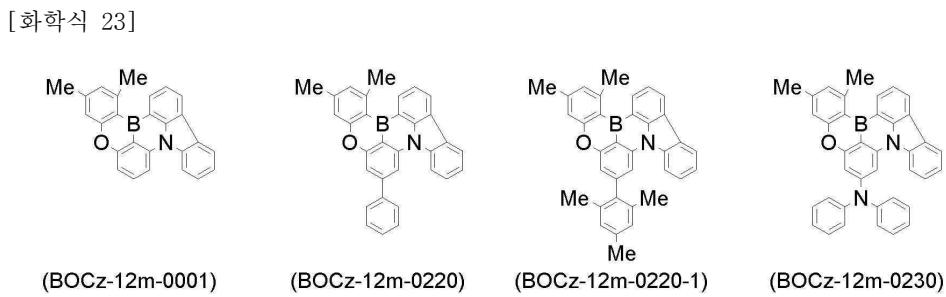
하기 어느 하나의 식으로 표시되는, 항 1에 기재된 다환 방향족 화합물 또는 그의 다량체.

[0065]

[화학식 22]

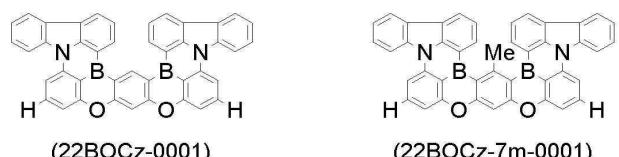


[0066]



[0068]

[화학식 23]

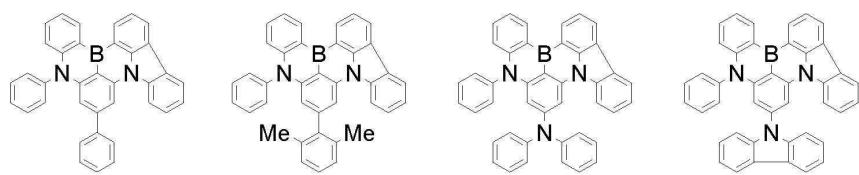
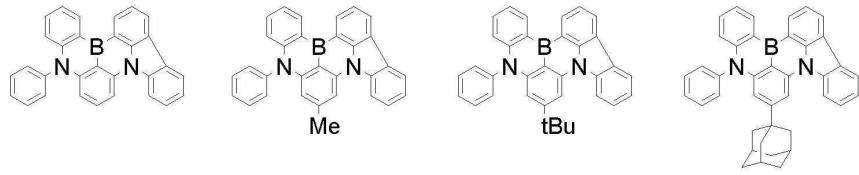


[0069]

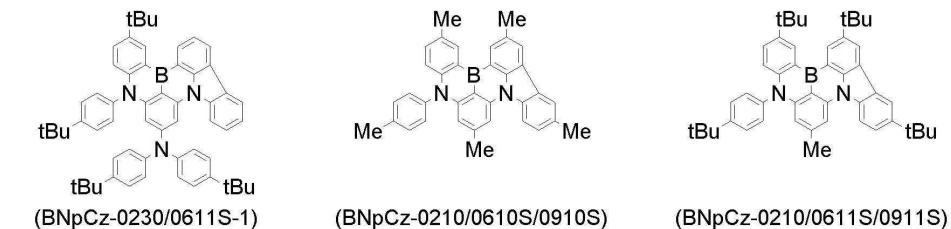
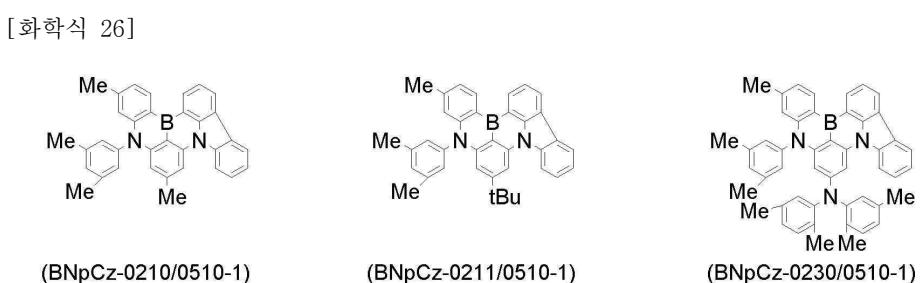
[화학식 24]

[0071]

[화학식 25]



[0072]

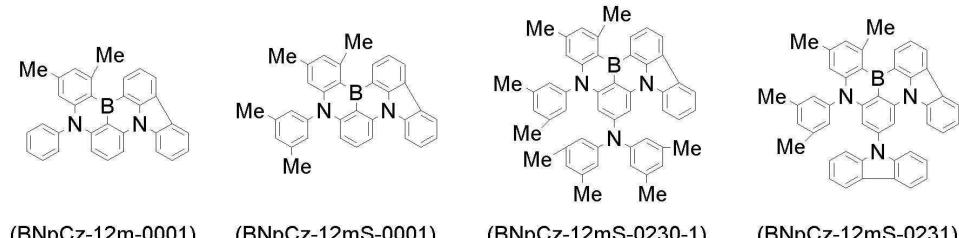


[0074]



[0075]

[화학식 27]



[0076]

(상기 각 식 중의 「Me」는 메틸기이며, 「tBu」는 tert-부틸기임).

[0077]

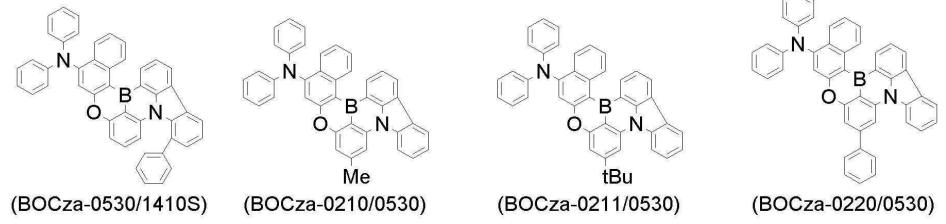
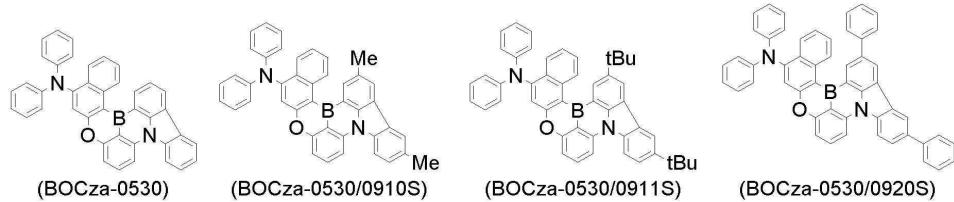
항 17.

[0078]

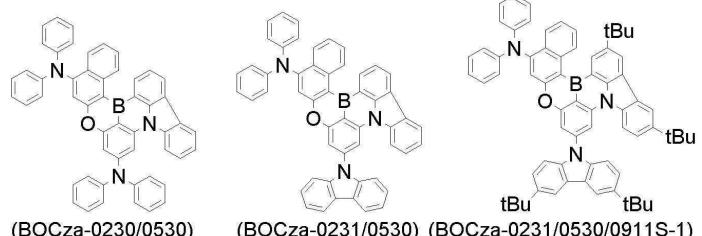
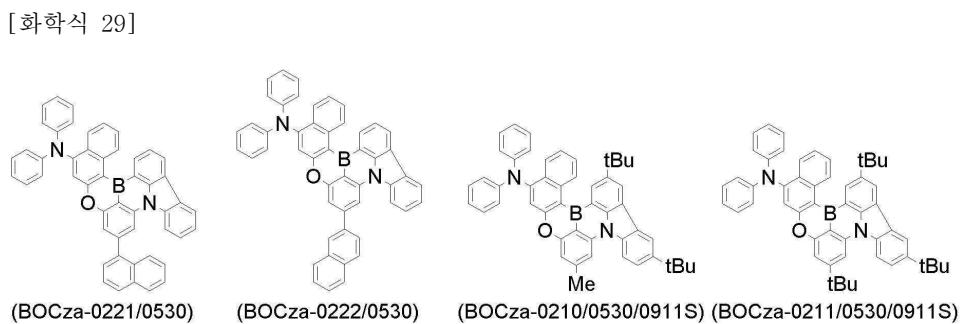
하기 어느 하나의 식으로 표시되는, 항 1에 기재된 다환 방향족 화합물.

[0080]

[화학식 28]

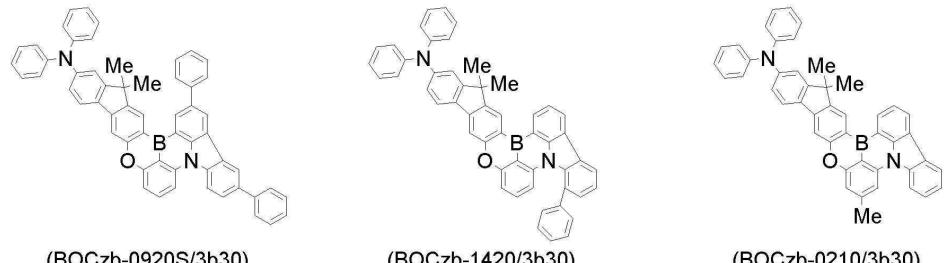
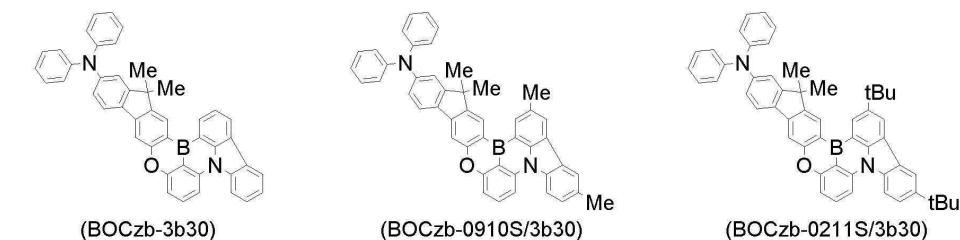


[0081]



[0083]

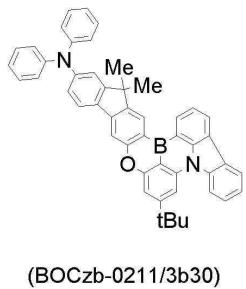
[화학식 29]



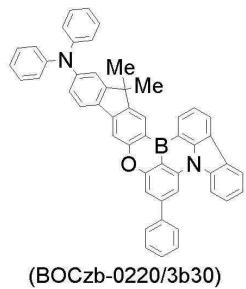
[0085]

[0086]

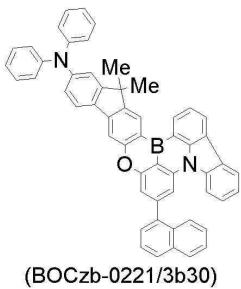
[화학식 31]



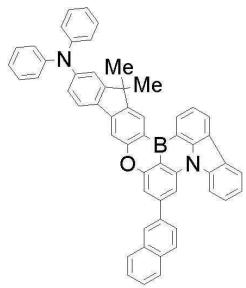
(BOCzb-0211/3b30)



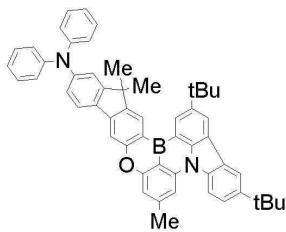
(BOCzb-0220/3b30)



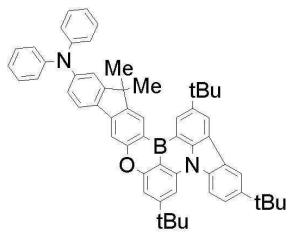
(BOCzb-0221/3b30)



(BOCzb-0222/3b30)



(BOCzb-0210/0911S/3b30)

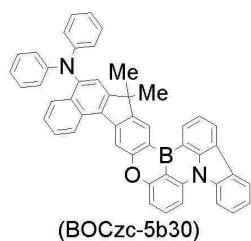


(BOCzb-0211/0911S/3b30)

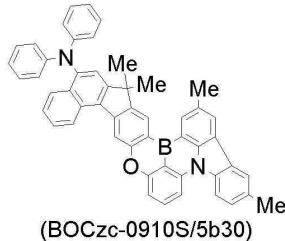
[0087]

[0088]

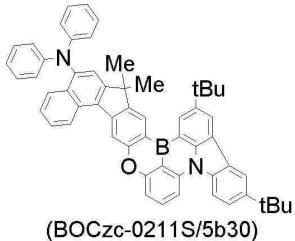
[화학식 32]



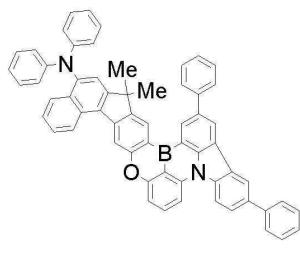
(BOCzc-5b30)



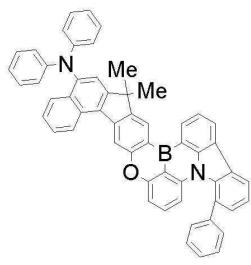
(BOCzc-0910S/5b30)



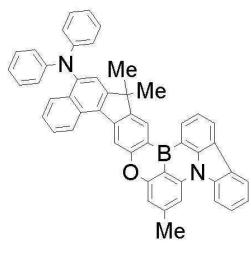
(BOCzc-0211S/5b30)



(BOCzc-0920S/5b30)



(BOCzc-1420/5b30)

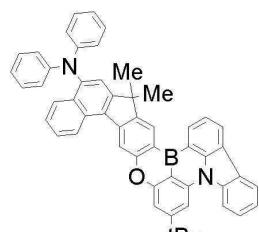


(BOCzc-0210/5b30)

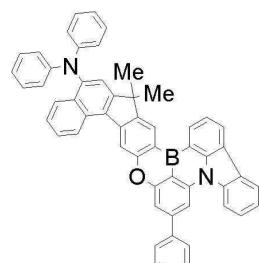
[0089]

[0090]

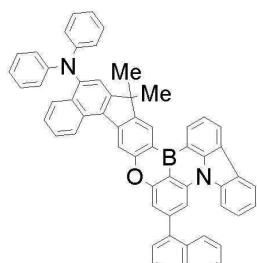
[화학식 33]



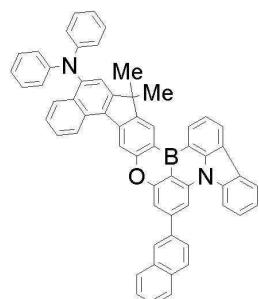
(BOCzc-0211/5b30)



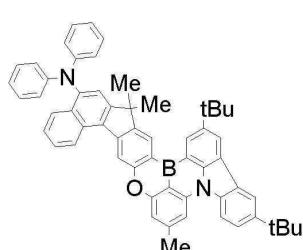
(BOCzc-0220/5b30)



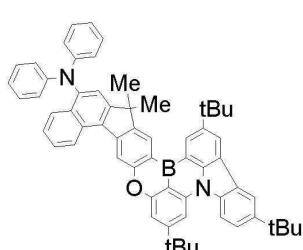
(BOCzc-0221/5b30)



(BOCzc-0222/5b30)



(BOCzc-0210/0911S/5b30)



(BOCzc-0211/0911S/5b30)

[0091]

(상기 각 식 중의 「Me」는 메틸기이며, 「tBu」는 tert-부틸기임).

[0093]

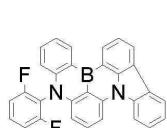
항 18.

[0094]

하기 어느 하나의 식으로 표시되는, 항 1에 기재된 다환 방향족 화합물.

[0095]

[화학식 34]



(BNpCz-0001-F26)



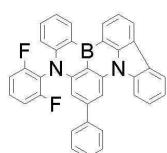
(BNpCz-0210-F26)



(BNpCz-0211-F26)



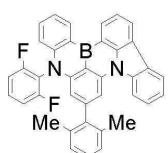
(BNpCz-0213-F26)



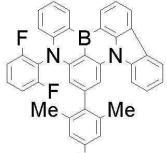
(BNpCz-0220-F26)



(BNpCz-0220-F26-1)



(BNpCz-0220-F26-2)

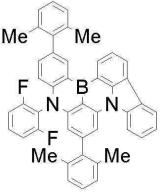
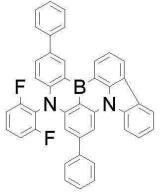
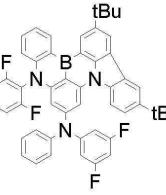
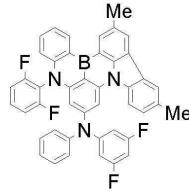
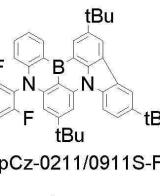
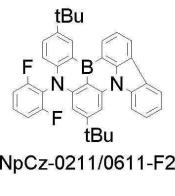
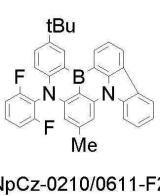


(BNpCz-0220-F26-3)

[0096]

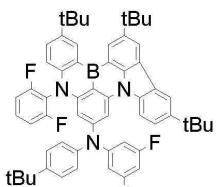
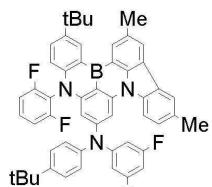
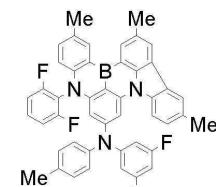
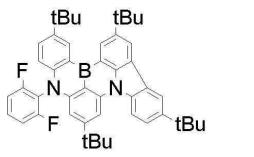
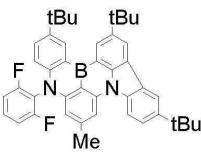
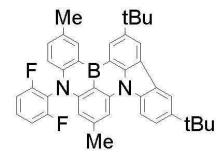
[0097]

[화학식 35]



[0098]

[화학식 36]



[0100]

(상기 각 식 중의 「Me」는 메틸기이며, 「tBu」는 tert-부틸기임).

[0101]

항 19.

[0102]

항 1~18 중 어느 하나에 기재하는 다환 방향족 화합물 또는 그의 다량체를 함유하는, 유기 디바이스용 재료.

[0103]

항 20.

[0104]

상기 유기 디바이스용 재료는, 유기전계 발광소자용 재료, 유기전계 효과 트랜지스터용 재료 또는 유기박막 태양전지용 재료인, 항 19에 기재된 유기 디바이스용 재료.

[0105]

항 21.

[0106]

상기 유기전계 발광소자용 재료가 발광층용 재료인, 항 20에 기재된 유기 디바이스용 재료.

[0107]

항 22.

[0108]

양극 및 음극으로 이루어지는 한 쌍의 전극과, 상기 한 쌍의 전극 사이에 배치되고, 항 21에 기재된 발광층용 재료를 함유하는 발광층을 가지는, 유기전계 발광소자.

[0109]

항 23.

[0110]

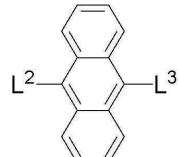
상기 발광층은 하기 일반식(3)으로 표시되는 화합물 및/또는 하기 일반식(4)으로 표시되는 화합물을 더욱 함유

하는, 항 22에 기재된 유기전계 발광소자.

[0112] [화학식 37]



(3)



(4)

[0114] (상기 일반식(3) 중, L¹은 탄소수 6~30의 아릴렌 또는 탄소수 2~30의 헤테로아릴렌이며,

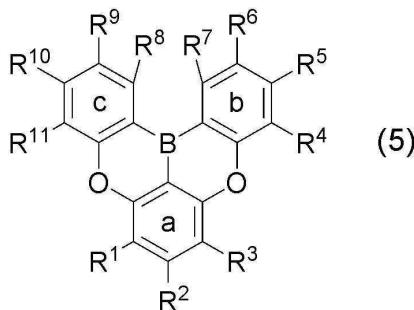
[0115] 상기 일반식(4) 중, L² 및 L³는, 각각 독립적으로, 탄소수 6~30의 아릴 또는 탄소수 2~30의 헤테로아릴이며,

[0116] 상기 각 식으로 표시되는 화합물에서의 적어도 1개의 수소는, 탄소수 1~6의 알킬, 탄소수 3~14의 시클로알킬, 시아노, 할로겐 또는 중수소로 치환되어 있어도 됨).

[0117] 항 24.

[0118] 상기 발광층은 하기 일반식(5)으로 표시되는 화합물을 더욱 함유하는, 항 22 또는 23에 기재된 유기전계 발광소자.

[0119] [화학식 38]



(5)

[0120]

[0121] (상기 일반식(5)에 있어서,

[0122] R¹~R¹¹은, 각각 독립적으로, 수소, 아릴, 헤테로아릴, 디아릴아미노, 디헤테로아릴아미노, 아릴헤테로아릴아미노, 디아릴보릴(2개의 아릴은 단결합 또는 연결기를 통하여 결합하고 있어도 됨), 알킬 또는 시클로알킬이며, 이들에서의 적어도 1개의 수소는 또한, 아릴, 헤테로아릴, 디아릴아미노, 디아릴보릴(2개의 아릴은 단결합 또는 연결기를 통하여 결합하고 있어도 됨), 알킬 또는 시클로알킬로 치환되어 있어도 되고,

[0123]

R¹~R¹¹ 중 인접하는 기끼리 결합하여 a환, b환 또는 c환과 함께 아릴환 또는 헤테로아릴환을 형성하고 있어도 되고, 형성된 환에서의 적어도 1개의 수소는, 아릴, 헤테로아릴, 디아릴아미노, 디헤테로아릴아미노, 아릴헤테로아릴아미노, 디아릴보릴(2개의 아릴은 단결합 또는 연결기를 통하여 결합하고 있어도 됨), 알킬 또는 시클로알킬로 치환되어 있어도 되고, 이들에서의 적어도 1개의 수소는 또한, 아릴, 헤테로아릴, 디아릴아미노, 디아릴보릴(2개의 아릴은 단결합 또는 연결기를 통하여 결합하고 있어도 됨), 알킬 또는 시클로알킬로 치환되어 있어도 되고,

[0124]

일반식(5)으로 표시되는 화합물에서의 적어도 1개의 수소는, 각각 독립적으로, 할로겐 또는 중수소로 치환되어 도 됨).

[0125] 항 25.

[0126] 상기 음극과 상기 발광층과의 사이에 배치되는 전자수송층 및/또는 전자주입층을 가지고, 상기 전자수송층 및 전자주입층 중 적어도 1개는, 보란 유도체, 피리딘 유도체, 플루오란텐 유도체, B0계 유도체, 안트라센 유도체, 벤조플루오렌 유도체, 포스핀옥사이드 유도체, 피리미딘 유도체, 카르바졸 유도체, 트리아진 유도체, 벤즈이미다졸 유도체, 폐난트롤린 유도체 및 쿼놀리놀계 금속 착체로 이루어지는 군으로부터 선택되는 적어도 1개를 함

유하는, 항 22~24 중 어느 하나에 기재된 유기전계 발광소자.

[0127] 항 26.

[0128] 상기 전자수송층 및/또는 전자주입층이, 알칼리 금속, 알칼리토류 금속, 희토류 금속의 산화물, 알칼리 금속의 할로겐화물, 알칼리토류 금속의 산화물, 알칼리토류 금속의 할로겐화물, 희토류 금속의 산화물, 희토류 금속의 할로겐화물, 알칼리 금속의 유기착체, 알칼리토류 금속의 유기착체 및 희토류 금속의 유기착체로 이루어지는 군으로부터 선택되는 적어도 1개를 더욱 함유하는, 항 25에 기재된 유기전계 발광소자.

[0129] 항 27.

[0130] 항 22~26 중 어느 하나에 기재된 유기전계 발광소자를 구비한 표시 장치 또는 조명장치.

발명의 효과

[0131] 본 발명의 바람직한 태양에 의하면, 종래 구체적으로는 알려져 있지 않았던, 일반식(1)으로 표시되는 다환 방향족 화합물에 의해, 발광 특성 등의 유기 EL 특성을 더욱 높이거나, 발광총용 재료등의 유기 EL 재료의 선택 사항을 증가시킬 수 있다. 이 발광 특성으로서는, 구체적으로는 발광 스펙트럼의 반값폭, 형광 양자 수율, 자연 형광 수명, 에너지 갭 Eg 및 ΔE_{ST} 등을 예로 들 수 있고, 본 발명의 바람직한 태양에 의하면, 이들 중 어느 하나 또는 복수의 특성에 있어서 우수한 효과가 얻어지고, 종합적으로 우수한 특성을 구비하는 경우에는 열활성화 자연 형광재료로서의 이용을 기대할 수 있다.

도면의 간단한 설명

[0132] 도 1은 본 실시형태에 따른 유기 EL 소자를 나타내는 개략 단면도이다.

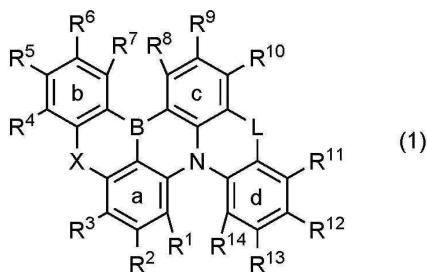
도 2는 화합물(BNpCz-0230), 화합물(BNpCz-0230/0611-1), 화합물(BNpCz-0230/0611/0911S-F26-1)의 용액에서의 형광 스펙트럼이다.

발명을 실시하기 위한 구체적인 내용

[0133] 1. 일반식(1)으로 표시되는 다환 방향족 화합물 및 그의 다양체

[0134] 본 발명은, 하기 일반식(1)으로 표시되는 다환 방향족 화합물, 또는 하기 일반식(1)으로 표시되는 구조를 복수 가지는 다환 방향족 화합물의 다양체이다.

[0135] [화학식 39]



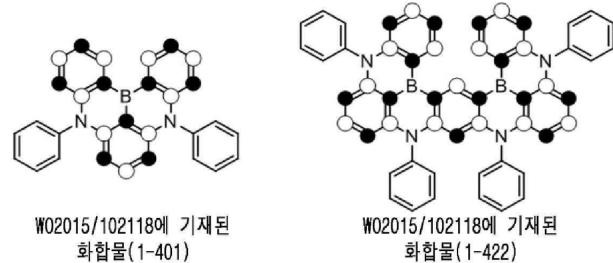
[0136] 예를 들면, 유기 EL 디스플레이용의 발광 재료로서는, 형광재료, 인광 재료, 열활성화 자연 형광(TADF) 재료의 3종류가 이용되고 있지만, 형광재료는, 발광효율이 낮으며, 약 25~62.5 % 정도이다. 한편, 인광 재료와 TADF 재료는, 발광효율이 100%에 도달하는 경우도 있지만, 모두 색순도가 낮은(발광 스펙트럼의 폭이 넓은) 문제가 있다. 디스플레이에서는, 광의 3원색인 적·녹·청색의 발광을 혼합함으로써 다양한 색을 표현하고 있지만, 각각의 색순도가 낮으면, 재현할 수 없는 색이 생기게 되어, 디스플레이의 화질이 크게 저하된다. 이에, 시판 중인 디스플레이에서는, 발광 스펙트럼으로부터 불필요한 색을 광학 필터로 제거함으로써, 색순도를 높이고 나서(스펙트럼 폭을 좁게 하고 나서) 사용하고 있다. 따라서, 원래의 스펙트럼 폭이 넓으면 제거하는 비율이 증가하므로, 발광효율이 높은 경우라도, 실질적인 효율은 크게 저하된다. 예를 들면, 시판하고 있는 스마트폰의 청색 발광 스펙트럼의 반값폭은, 약 20~25 nm 정도이지만, 일반적인 형광재료의 반값폭은 40~60 nm 정도, 인광 재료는 60~90 nm 정도, TADF 재료는 70~100 nm 정도이다. 형광재료를 사용한 경우에는 반값폭이 비교적 좁으므로, 불필요한 색을 일부 제거하는 것만으로 충분하지만, 인광 재료나 TADF 재료를 사용한 경우에는 절반 이상 제거

할 필요가 있다. 이와 같은 배경으로부터, 발광효율과 색순도의 양쪽을 겸비한 발광 재료의 개발이 기대되고 있었다.

[0138] 일반적으로 TADF 재료는, 도너로 불리우는 전자제공성의 치환기와 엑셉터로 불리우는 전자수용성의 치환기를 사용하여 분자 내의 HOMO와 LUMO를 국재화시키고, 효율적인 역항간 교차(reverse intersystem crossing)가 일어나도록 디자인되어 있지만, 도너나 엑셉터를 사용하면, 여기 상태에서의 구조 완화가 커져(어떤 분자에 있어서는, 기저 상태와 여기 상태에서는 안정 구조가 상이하므로, 외부 자극에 의해 기저 상태로부터 여기 상태로의 변환이 일어나면, 그 후, 여기 상태에서의 안정 구조로 구조가 변화됨), 색순도가 낮은 광폭의 발광 스펙트럼을 부여하게 된다.

[0139] 이에, 특허문헌 6(국제공개 제2015/102118호 공보)에서는, TADF 재료의 색순도를 비약적으로 향상시키는 새로운 분자 설계를 제안하고 있다. 상기 문헌에 개시된 예를 들면, 화합물(1-401)에서는, 봉소(전자흡인성)와 질소(전자제공성)의 다중 공명 효과를 이용함으로써, 6개의 탄소로 이루어지는 벤젠환 상의 3개의 탄소(흑색원)에 HOMO를, 나머지 3개의 탄소(백색원)에 LUMO를 국재화시키는 것에 성공하였다. 이 효율적인 역항간 교차에 의해, 상기 화합물의 발광효율은 최대 100%에 달한다. 또한, 화합물(1-401)의 봉소와 질소는 HOMO와 LUMO를 국재화시킬 뿐만 아니라, 3개의 벤젠환을 축환시킴으로써 견고한 평면구조를 유지하고, 여기 상태에서의 구조완화를 억제하는 역할도 담당하고 있어, 결과적으로 흡수 및 발광의 피크의 스토퍼드가 작은, 색순도가 높은 발광 스펙트럼을 얻는 것에도 성공하였다. 그 발광 스펙트럼의 반값폭은 28nm이며, 실용화되어 있는 고색순도의 형광재료도 능가하는 레벨의 색순도를 나타내고 있다. 또한, 2량체 화합물(1-422)에서는, 2개의 봉소와 2개의 질소가 중앙의 벤젠환에 결합함으로써, 중앙의 벤젠환에 있어서 다중 공명 효과를 더욱 증강시키고 있고, 그 결과, 극히 좁은 발광 피크 폭을 가지는 발광이 가능하게 되어 있다.

[0140] [화학식 40]



[0141] [0142] 한편, 화합물(1-401)은, 여기 1중항 에너지와 여기 3중항 에너지의 에너지 차인 ΔE_{ST} 는 비교적 작지만, 평면성이 높고 스핀 궤도 상호 작용(Spin-Orbit Coupling: SOC)이 작으므로, 자연 형광 수명(Tau(Delay))이 길고, 열활성형 자연 형광(TADF)을 이용한 유기전계 발광소자의 발광 재료로서 이용한 경우에 효율이 낮거나, 혹은 롤오프가 커지는 과제가 있었다.

[0143] 또한, 2량체 화합물(1-422)에서는, 분자의 평면성이 높고 공명이 넓어졌기 때문에 발광파장이 길어져, 실용적인 청색의 파장으로부터는 멀고, 또한, 높은 평면성 때문에 분자간 스태킹이 유도되었기 때문인지는 알 수 없지만, 발광 소자에서의 효율도 충분히 만족할 수 있을 만큼은 아닌 과제도 생겼다.

[0144] 이에 우리들은 예의 연구한 결과, (i) 다중 공명 효과를 조절하는 원소를 적절한 위치에 도입하고, (ii) 분자의 평면성을 증가시키기 위해 방향족화를 가교하고, (iii) 분자를 일그러지게 하고 평면성을 감소시키기 위해 적절한 위치에 치환기를 도입하는, 3개의 어프로치를 적절하게 조합함으로써, 화합물에 있어서, 발광파장 및 발광 스펙트럼의 반값폭 조정, 높은 발광효율 및 짧은 자연 형광수명을 실현하고, 소자에 있어서, 적절한 발광파장 및 발광 스펙트럼의 반값폭, 높은 소자효율 및 작은 롤오프를 실현했다.

[0145] 전술한 (i)에 관해서는, 구체적으로는, 본 발명의 일반식(1)으로 표시되는 다환 방향족 화합물은, X^1 및 X^2 로서 >0 , $>N-R, >S$ 또는 $>Se$ 를 가지지만, X^1 및 X^2 에 도입되는 원소의 전기 음성도에 의해, 분자의 다중 공명 효과가 영향을 받는다. 예를 들면, X^1 및/또는 X^2 에 >0 를 도입하면, $>N-R$ 의 도입에 비교하여, 일반적으로는 발광파장은 짧아지고, 발광 스펙트럼의 반값폭은 두터워진다.

[0146] 전술한 (ii)에 관해서는, 구체적으로는, 본 발명의 일반식(1)으로 표시되는 다환 방향족 화합물은, c환 및 d환을 연결하는 연결기 L을 가진다. L의 도입에 의해 공역이 길어지고, 분자의 평면성이 증가한다. 이로써, 기저

상태와 여기 상태의 궤도 중첩이 커져 천이(遷移) 확률이 증가하고 발광효율이 높아진다. 한편, 공역이 길어지는 것은 발광파장의 장파장화로 이어진다. 또한, c환, d환 및 연결기 L을 포함하여 형성되는 축합환은, L의 종류에 따라 평면성 및 유연성이 변화되고, 평면성이 높으면 발광효율의 향상이 기대되는 한편 발광파장이 장파장화하는 경우가 있고, 유연성이 높으면 문자간 스태킹의 저감이 얻어지는 한편 발광 스펙트럼의 반값폭이 두터워지는 경우가 있다.

[0147] 전술한 (iii)에 관해서는, 구체적으로는, R^7 또는 R^8 의 치환기를 조정한다. 특정한 치환기의 도입에 의해 문자가 일그러지고, 그에 따라, 1중항 및 3중항의 궤도도 모두 일그러진다. 이 궤도의 일그러짐은 보다 큰 스핀 궤도 상호 작용으로 이어지, 스핀 궤도 상호 작용이 클수록 TADF가 일어나기 쉽다. 3중항으로부터 1중항(또는 1중항로부터 3중항)으로의 천이는 전자 스핀의 반전을 수반하지만, 에너지 보존의 법칙과 각운동량 보존의 법칙에 의해 천이하는 궤도간에 전자 스핀과 동일한 궤도 각운동량의 변화가 필요하다. 치환기에 의해 유도되는 문자와 궤도 일그러짐은, 천이 시에 보다 큰 궤도각운동량의 생성으로 이어지고, 그에 따라 보다 큰 자기(磁氣) 모멘트가 유도되어, 보다 큰 스핀 궤도 상호 작용(스핀 궤도 결합이라고도 함)이 생긴다. 또한, 문자의 큰 일그러짐에 의해 평면성이 저하되므로, 문자간 스태킹 저감으로도 이어진다.

[0148] 이들 (i)~(iii)의 어프로치를 조합한 결과, 화합물에 있어서, 발광파장 및 발광 스펙트럼의 반값폭 조정, 높은 발광효율 및 짧은 지연 형광수명의 실현, 및 소자에 있어서, 적절한 발광파장 및 발광 스펙트럼의 반값폭, 높은 소자효율 및 작은 룰오프의 실현이 가능하게 되었다. 다만, 본 발명의 다환 방향족 화합물 효과는, 상기 원리에 구속되는 것은 아니다.

[0149] 상기 일반식(1)에서는,

[0150] $R^1 \sim R^{14}$ (이후, 「 R^1 등」이라고도 함)은, 각각 독립적으로, 수소, 아릴, 헤테로아릴, 디아릴아미노, 디아릴보렐(2개의 아릴은 단결합 또는 연결기를 통하여 결합하고 있어도 됨), 알킬, 시클로알킬, 알콕시 또는 아릴옥시(이상, 제1 치환기)이며, 이들에서의 적어도 1개의 수소는 또한 아릴, 헤테로아릴, 알킬 또는 시클로알킬(이상, 제2 치환기)로 치환되어 있어도 되고, 또한, $R^1 \sim R^3$, $R^4 \sim R^7$, $R^8 \sim R^{10}$ 및 $R^{11} \sim R^{14}$ 중 인접하는 기끼리 결합하여 a환, b환, c환 및 d환 중 적어도 1개와 함께 아릴환 또는 헤테로아릴환을 형성하고 있어도 되고, 형성된 환에서의 적어도 1개의 수소는 아릴, 헤테로아릴, 디아릴아미노, 디아릴보렐(2개의 아릴은 단결합 또는 연결기를 통하여 결합하고 있어도 됨), 알킬, 시클로알킬, 알콕시 또는 아릴옥시(이상, 제1 치환기)로 치환되어 있어도 되고, 이들에서의 적어도 1개의 수소는 또한 아릴, 헤테로아릴, 알킬 또는 시클로알킬(이상, 제2 치환기)로 치환되어 있어도 되고,

[0151] X는, $>O$, $>N-R$, $>S$ 또는 $>Se$ 이며, 상기 $>N-R$ 의 R은 아릴, 헤테로아릴, 알킬 또는 시클로알킬(이상, 제1 치환기)이며, 이들에서의 적어도 1개의 수소는 아릴, 헤테로아릴, 알킬 또는 시클로알킬(이상, 제2 치환기)로 치환되어 있어도 되고,

[0152] L은, 단결합, $>C(-R)_2$, $>O$, $>S$ 및 $>N-R$ 이며, 상기 $>C(-R)_2$ 및 $>N-R$ 에서의 R은, 각각 독립적으로, 수소, 아릴, 헤테로아릴, 디아릴아미노, 디아릴보렐(2개의 아릴은 단결합 또는 연결기를 통하여 결합하고 있어도 됨), 알킬, 시클로알킬, 알콕시 또는 아릴옥시(이상, 제1 치환기)이며, 이들에서의 적어도 1개의 수소는 또한 아릴, 헤테로아릴, 알킬 또는 시클로알킬(이상, 제2 치환기)로 치환되어 있어도 되고,

[0153] 다만, X가 $>N-R$ 일 때, L이 $>O$ 는 아니며,

[0154] 다양체인 경우의 식(1) 중의 R^2 는 수소이며, 그리고,

[0155] 일반식(1)으로 표시되는 화합물 및 구조에서의 적어도 1개의 수소는 시아노, 할로겐 또는 중수소로 치환되어 있어도 된다.

[0156] R^1 등의 「아릴」(제1 치환기)은, 예를 들면, 탄소수 6~30의 아릴이며, 탄소수 6~20의 아릴이 바람직하고, 탄소수 6~16의 아릴이 보다 바람직하고, 탄소수 6~12의 아릴이 더욱 바람직하고, 탄소수 6~10의 아릴이 특히 바람직하다.

[0157] 구체적인 아릴로서는, 단환계인 폐닐, 2환계인 비페닐릴, 축합 2환계인 나프틸, 3환계인 터페닐릴(m-터페닐릴, o-터페닐릴, p-터페닐릴), 축합 3환계인, 아세나프틸레닐, 플루오레닐, 폐닐레닐, 폐난트레닐, 축합 4환계인 트리페닐레닐, 피레닐, 나프타세닐, 축합 5환계인 폐릴레닐, 펜타세닐 등을 예로 들 수 있다.

- [0158] R^1 등의 「헤테로아릴」(제1 치환기)은, 예를 들면, 탄소수 2~30의 헤테로아릴이며, 탄소수 2~25의 헤테로아릴이 바람직하고, 탄소수 2~20의 헤테로아릴이 보다 바람직하고, 탄소수 2~15의 헤테로아릴이 더욱 바람직하고, 탄소수 2~10의 헤테로아릴이 특히 바람직하다. 또한, 헤테로아릴은, 예를 들면, 환 구성 원자로서 탄소 이외에 산소, 유황 및 질소로부터 선택되는 헤테로 원자를 1 내지 5 개 함유하는 복소환 등이다.
- [0159] 구체적인 헤테로아릴로서는, 예를 들면, 피롤릴, 옥사졸릴, 이소옥사졸릴, 티아졸릴, 이소티아졸릴, 이미다졸릴, 옥사디아졸릴, 티아디아졸릴, 트리아졸릴, 테트라졸릴, 피라졸릴, 피리디닐, 피리다지닐, 피라지닐, 트리아지닐, 인돌릴, 이소인돌릴, 1H-인다졸릴, 벤즈이미다졸릴, 벤즈옥사졸릴, 벤조티아졸릴, 1H-벤조트리아졸릴, 퀴놀리닐, 이소퀴놀리닐, 신놀릴, 퀴나졸리닐, 퀴녹살리닐, 프탈라지닐, 나프티리디닐, 퓨리닐, 프테리디닐, 카르바졸릴, 아크리디닐, 페녹사티이닐, 페녹사지닐, 페노티아지닐, 페나지닐, 페나자실리닐, 인돌리지닐, 퓨라닐, 벤조퓨라닐, 이소벤조퓨라닐, 디벤조퓨라닐, 티오페닐, 벤조티오페닐, 디벤조티오페닐, 퓨라자닐, 티안트레닐, 인돌로카르바졸릴, 벤조벤즈인돌로카르바졸릴, 나프토벤조퓨라닐등을 들 수 있다.
- [0160] R^1 등의 「디아릴아미노」(제1 치환기 중의 「아릴」 및 「아릴옥시」(제1 치환기 중의 「아릴」로서는, 전술한 아릴의 설명을 인용할 수 있다.
- [0161] R^1 등의 「알킬」(제1 치환기)은, 직쇄 및 분지쇄 중 어느 것이어도 되고, 예를 들면, 탄소수 1~24의 직쇄 알킬 또는 탄소수 3~24의 분지쇄 알킬이다. 탄소수 1~18의 알킬(탄소수 3~18의 분지쇄 알킬)이 바람직하고, 탄소수 1~12의 알킬(탄소수 3~12의 분지쇄 알킬)이 보다 바람직하고, 탄소수 1~6의 알킬(탄소수 3~6의 분지쇄 알킬)이 더욱 바람직하고, 탄소수 1~4의 알킬(탄소수 3~4의 분지쇄 알킬)이 특히 바람직하다.
- [0162] 구체적인 알킬로서는, 메틸, 에틸, n-프로필, 이소프로필, n-부틸, 이소부틸, sec-부틸, tert-부틸, n-펜틸, 이소펜틸, 네오펜틸, tert-펜틸, n-헥실, 1-메틸펜틸, 4-메틸-2-펜틸, 3,3-디메틸부틸, 2-에틸부틸, n-헵틸, 1-메틸헥실, n-옥틸, tert-옥틸, 1-메틸헵틸, 2-에틸헥실, 2-프로필펜틸, n-노닐, 2,2-디메틸헵틸, 2,6-디메틸-4-헵틸, 3,5,5-트리메틸헥실, n-데실, n-운데실, 1-메틸데실, n-도데실, n-트리데실, 1-헥실헵틸, n-테트라데실, n-펜타데실, n-헥사데실, n-헵타데실, n-옥타데실, n-에이코실 등을 예로 들 수 있다.
- [0163] R^1 등의 「시클로알킬」(제1 치환기)은, 1개의 환으로 이루어지는 시클로알킬, 복수의 환으로 이루어지는 시클로알킬, 환 내에서 공역하지 않는 이중 결합을 포함하는 시클로알킬 및 환 외에 분자를 포함하는 시클로알킬 중 어느 것이어도 되고, 예를 들면, 탄소수 3~24의 시클로알킬, 탄소수 3~20의 시클로알킬, 탄소수 3~16의 시클로알킬, 탄소수 3~14의 시클로알킬, 탄소수 3~12의 시클로알킬, 탄소수 5~10의 시클로알킬, 탄소수 5~8의 시클로알킬, 탄소수 5~6의 시클로알킬, 탄소수 5의 시클로알킬 등이다. 탄소수 5~10의 시클로알킬이 바람직하고, 탄소수 6~10의 시클로알킬이 보다 바람직하다.
- [0164] 구체적인 시클로알킬로서는, 시클로프로필, 시클로부틸, 시클로펜틸, 시클로헥실, 시클로헵틸, 시클로옥틸, 시클로노닐, 시클로데실, 및 이들의 탄소수 1~4의 알킬(특히 메틸) 치환체나, 노르보르네닐, 비시클로[1.0.1]부틸, 비시클로[1.1.1]펜틸, 비시클로[2.0.1]펜틸, 비시클로[1.2.1]헥실, 비시클로[3.0.1]헥실, 비시클로[2.1.2]헵틸, 비시클로[2.2.2]옥틸, 아다만틸, 디아만틸, 데카하이드로나프탈레닐, 데카하이드로아줄레닐 등을 예로 들 수 있다.
- [0165] R^1 등의 「알콕시」(제1 치환기)는, 예를 들면, 탄소수 1~24의 직쇄 또는 탄소수 3~24의 분지쇄의 알콕시이다. 탄소수 1~18의 알콕시(탄소수 3~18의 분지쇄의 알콕시)가 바람직하고, 탄소수 1~12의 알콕시(탄소수 3~12의 분지쇄의 알콕시)가 보다 바람직하고, 탄소수 1~6의 알콕시(탄소수 3~6의 분지쇄의 알콕시)가 더욱 바람직하고, 탄소수 1~4의 알콕시(탄소수 3~4의 분지쇄의 알콕시)가 특히 바람직하다.
- [0166] 구체적인 알콕시로서는, 메톡시, 에톡시, 프로포시, 이소프로포시, 부톡시, 이소부톡시, sec-부톡시, tert-부톡시, 펜틸옥시, 헥실옥시, 헵틸옥시, 옥틸옥시 등을 예로 들 수 있다.
- [0167] R^1 등의 「디아릴보릴」(제1 치환기 중의 「아릴」로서는, 전술한 아릴의 설명을 인용할 수 있다. 또한, 이 2개의 아릴은 단결합 또는 연결기(예를 들면 $>C(-R)_2$, $>O$, $>S$ 또는 $>N-R$)를 통하여 결합하고 있어도 된다. 여기서, $>C(-R)_2$ 및 $>N-R$ 의 R은, 아릴, 헤테로아릴, 디아릴아미노, 알킬, 시클로알킬, 알콕시 또는 아릴옥시(이상, 제1 치환기)이며, 상기 제1 치환기에서의 적어도 1개의 수소에는 또한 아릴, 헤테로아릴, 알킬 또는 시클로알킬(이

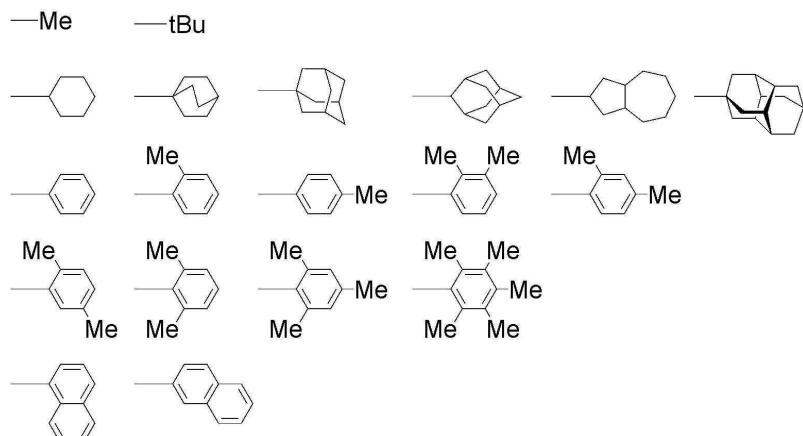
상, 제2 치환기)이 치환하고 있어도 되고, 이들 기의 구체예로서는, 전술한 R¹ 등(제1 치환기)으로서의 아릴, 헤테로아릴, 디아릴아미노, 알킬, 시클로알킬, 알콕시 또는 아릴옥시의 설명을 인용할 수 있다.

[0168] R¹ 등(제1 치환기)에 또한 치환하는 아릴, 헤테로아릴, 알킬 또는 시클로알킬(이상, 제2 치환기)로서는, 전술한 제1 치환기로서의 아릴, 헤테로아릴, 알킬 또는 시클로알킬의 설명을 인용할 수 있다.

[0169] 구체적으로는, R¹ 등(제1 치환기)의 구조의 입체장애성, 전자제공성 및 전자흡인성에 의해 발광파장을 조정할 수 있고, 바람직하게는 이하의 구조식으로 표시되는 기이며, 보다 바람직하게는, 메틸, tert-부틸, 페닐, o-톨릴, p-톨릴, 2,4-크실릴, 2,5-크실릴, 2,6-크실릴, 2,4,6-메시틸, 디페닐아미노, 디-p-톨릴아미노, 비스(p-(tert-부틸)페닐)아미노, 카르바졸릴, 3,6-디메틸카르바졸릴, 3,6-디-tert-부틸카르바졸릴 및 페녹시이며, 보다 바람직하게는, 메틸, tert-부틸, 페닐, o-톨릴, 2,6-크실릴, 2,4,6-메시틸, 디페닐아미노, 디-p-톨릴 아미노, 비스(p-(tert-부틸)페닐)아미노, 카르바졸릴, 3,6-디메틸카르바졸릴 및 3,6-디-tert-부틸카르바졸릴이다. 합성의 용이성의 관점에서는, 입체장애가 큰 것이 선택적인 합성을 위하여 바람직하며, 구체적으로는, tert-부틸, o-톨릴, p-톨릴, 2,4-크실릴, 2,5-크실릴, 2,6-크실릴, 2,4,6-메시틸, 디-p-톨릴아미노, 비스(p-(tert-부틸)페닐)아미노, 3,6-디메틸카르바졸릴 및 3,6-디-tert-부틸카르바졸릴이 바람직하다.

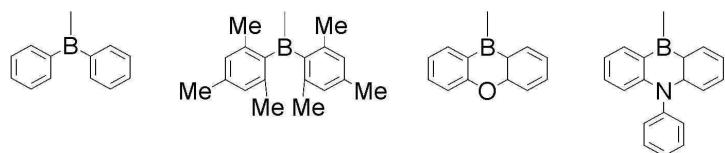
[0170] 하기 구조식에 있어서, 「Me」는 메틸, 「tBu」는 tert-부틸을 나타낸다.

[0171] [화학식 41]



[0172]

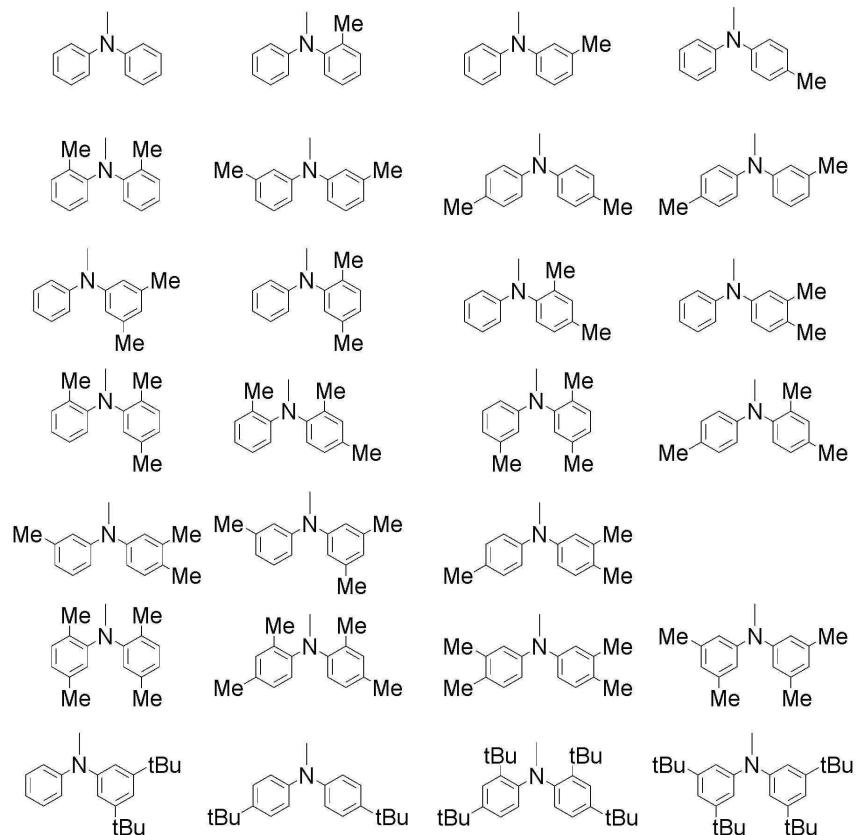
[0173] [화학식 42]



[0174]

[0175]

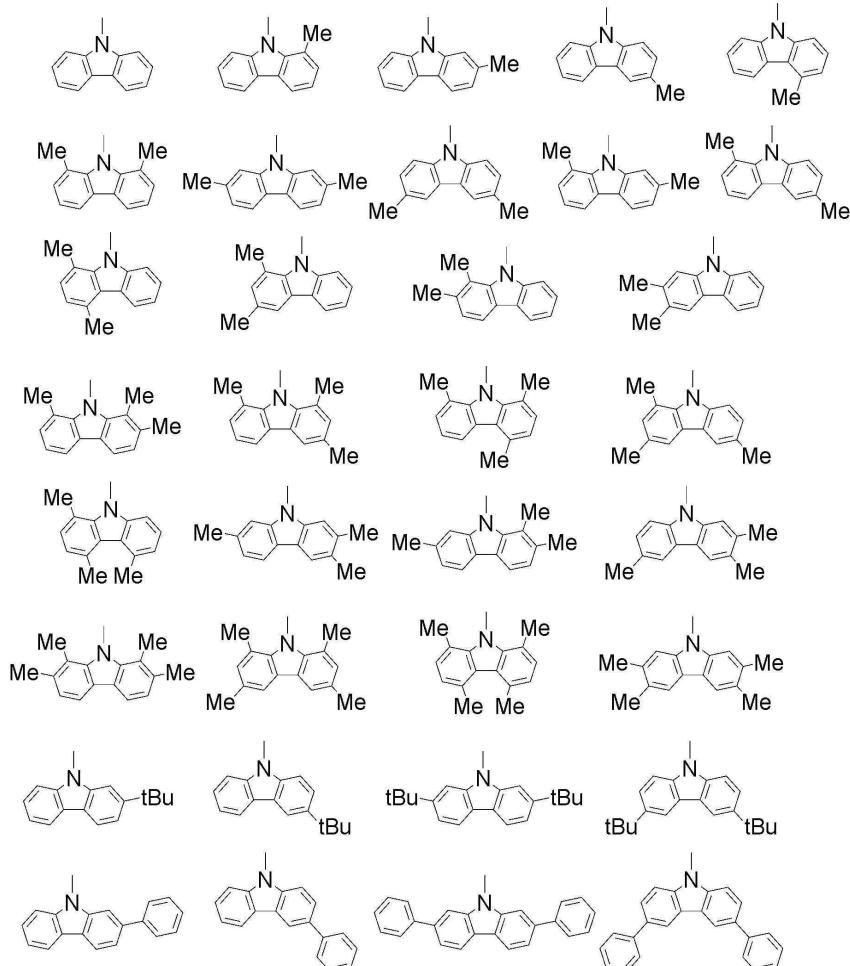
[화학식 43]



[0176]

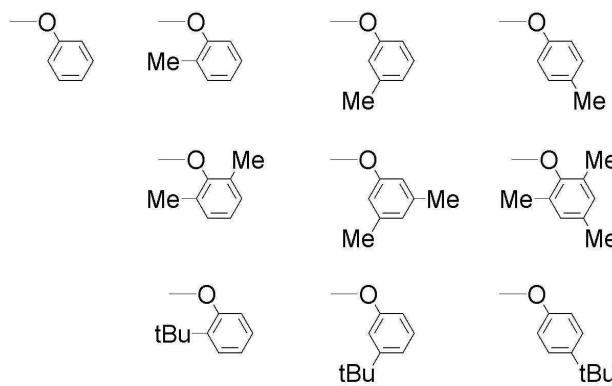
[0177]

[화학식 44]



[0178]

[화학식 45]



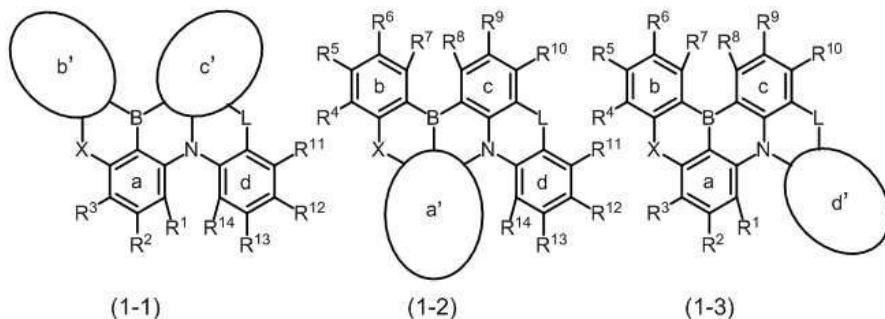
[0180]

[0181]

일반식(1)에서의 $R^1 \sim R^3$, $R^4 \sim R^7$, $R^8 \sim R^{10}$ 및 $R^{11} \sim R^{14}$ 중 인접하는 기끼리는 결합하여 a환, b환, c환 및 d환 중 적어도 1개와 함께 아릴환 또는 헤테로아릴환을 형성하고 있어도 되고, 일반식(1)으로 표시되는 다환 방향족 화합물은, a환, b환, c환 및 d환에서의 치환기의 상호의 결합 형태에 의해, 하기 일반식(1-1), 일반식(1-2) 및 일반식(1-3)에 나타낸 바와 같이, 화합물을 구성하는 환 구조가 변화된다. 각 식 중의 부호의 정의는 일반식(1)의 정의와 동일하다.

[0182]

[화학식 46]



[0183]

[0184] 식(1-1)~식(1-3) 중의 a'환, b'환, c'환 및 d'환은, 치환기 $R^1 \sim R^3$, 치환기 $R^4 \sim R^7$, 치환기 $R^8 \sim R^{10}$ 및 치환기 $R^{11} \sim R^{14}$ 중 인접하는 기끼리 결합하여, 각각 a환, b환, c환 및 d환 중 적어도 1개와 함께 형성한 아릴환 또는 헤테로아릴환을 나타낸다(a환, b환, c환 또는 d환에 다른 환 구조가 축합하여 생긴 축합환이라고도 할 수 있다). 그리고, 식에서는 나타내지는 않지만, a환, b환, c환 및 d환 모두 a'환, b'환, c'환 및 d'환으로 변화된 화합물 등, 그 외의 조합도 있다. 또한, 식(1-1)~식(1-3)으로부터 알 수 있는 바와 같이, 예를 들면, a환의 R^3 와 b환의 R^4 , b환의 R^7 과 c환의 R^8 , c환의 R^{10} 과 d환의 R^{11} , d환의 R^{14} 와 a환의 R^1 등은 「인접하는 기끼리」에는 해당하지 않으며, 이들이 결합하는 경우는 없다. 즉, 「인접하는 기」는 동일 환 상에서 인접하는 기를 의미한다.

[0185]

형성된 「아릴환」(a'환, b'환, c'환 또는 d'환) 또는 「혜테로아릴환」(a'환, b'환, c'환 또는 d'환)은, 전술한 제1 치환기로서의 아릴 또는 혜테로아릴의, 무가의 환이다. 다만, a'환(b'환, c'환 또는 d'환)의 일부를 구성하는 a환(b환, c환 또는 d환)이 이미 탄소수 6의 벤젠환이므로, 「아릴환」에 대해서는 상기 벤젠환에 5원환 이 축합한 축합환의 합계 탄소수 9가 하한의 탄소수가 되고, 「혜테로아릴환」에 대해서는 상기 벤젠환에 5원환 이 축합한 축합환의 합계 탄소수 6이 하한의 탄소수가 된다.

[0186]

식(1-1)~식(1-3)으로 표시되는 화합물은, 예를 들면, a환(b환, c환 또는 d환)인 벤젠환에 대하여 예를 들면, 벤젠환, 인돌환, 피롤환, 벤조퓨란환 또는 벤조티오펜환이 축합하여 형성되는 a'환(b'환, c'환 또는 d'환)을 가지는 화합물이며, 형성된 축합환 a'(축합환 b', 축합환 c' 또는 축합환 d')는 각각 나프탈렌환, 카르바졸환, 인돌환, 디벤조퓨란화 또는 디벤조티오펜화이다.

[0187]

형성된 아릴환 또는 헤테로아릴환에서의 적어도 1개의 수소에 치환하는, 아릴, 헤�테로아릴, 디아릴아미노, 디아릴보릴(2개의 아릴은 단결합 또는 연결기를 통하여 결합하고 있어도 됨), 알킬, 시클로알킬, 알콕시 또는 아릴옥시(이상, 제1 치환기), 또한, 상기 제1 치환기에서의 적어도 1개의 수소에 또한 치환하는 아릴, 헤�테로아릴, 알킬 또는 시클로알킬(이상, 제2 치환기)로서는, 전술한 R¹ 등(제1 치환기)으로서의 아릴, 헤�테로아릴, 디아릴아미노, 디아릴보릴, 알킬, 시클로알킬, 알콕시 또는 아릴옥시의 설명을 인용할 수 있다.

[0188]

일반식(1)에서의 X 는, >0 , $>\text{N-R}$, $>\text{S}$ 또는 $>\text{Se}$ 이며, >0 및 $>\text{N-R}$ 이 바람직하다.

[0189]

>N-R의 R인 아릴, 헤테로아릴, 알킬 또는 시클로알킬(이상, 제1 치환기), 또한, 상기 제1 치환기에서의 적어도 1개의 수소에 또한 치환하는 아릴, 헤테로아릴, 알킬 또는 시클로알킬(이상, 제2 치환기)로서는, 전술한 R¹ 등 (제1 치환기)으로서의 아릴, 헤테로아릴, 알킬 또는 시클로알킬의 설명을 인용할 수 있다.

[0190]

일반식(1)에서의 L은, 단결합, $>C(-R)_2$, >0 , $>S$ 및 $>N-R$ 이며, 단결합, >0 또는 $>N-R$ 이 바람직하고, 단결합이 보다 바람직하다.

[0191]

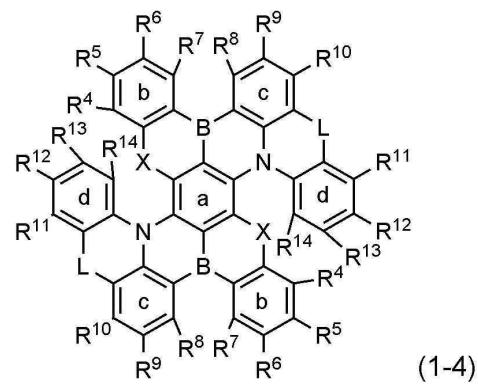
>C(-R)₂ 및 >N-R의 R인 아릴, 헤테로아릴, 디아릴아미노, 디아릴보릴(2개의 아릴은 단결합 또는 연결기를 통하여 결합하고 있어도 됨), 알킬, 시클로알킬, 알콕시 또는 아릴옥시(이상, 제1 치환기), 또한, 상기 제1 치환기에서의 적어도 1개의 수소에 또한 치환하는 아릴, 헤테로아릴, 알킬 또는 시클로알킬(이상, 제2 치환기)로서는, 전술한 R¹ 등(제1 치환기)으로서의 아릴, 헤테로아릴, 디아릴아미노, 디아릴보릴, 알킬, 시클로알킬, 알콕시 또는 아릴옥시의 설명을 인용할 수 있다.

그리고, 본 발명의 화합물에는, X가 >N-R이며, L이 >0인 화합물은 포함되지 않는다.

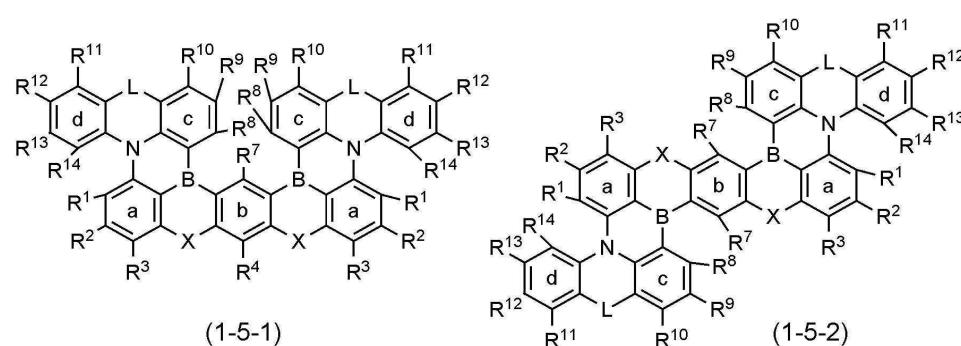
또한, 본 발명은, 일반식(1)으로 표시되는 단위구조를 복수 가지는 다환 방향족 화합물의 다양체이다. 다양체는, 2량체~6량체가 바람직하고, 2량체~3량체가 보다 바람직하고, 2량체가 특히 바람직하다. 다양체는, 1개의 화합물 중에 상기 단위구조를 복수 가지는 형태이면 되고, 예를 들면, 상기 단위구조가 단결합, 탄소수 1~3의 알킬렌기(예를 들면, 메틸렌기), 폐닐렌기, 나프틸렌기 등의 연결기로 복수 결합한 형태(연결형 다양체)에 더하여, 상기 단위구조에 포함되는 임의의 환(a환, b환, c환 또는 d환)을 복수의 단위구조로 공유하도록 하여 결합한 형태(환공유형 다양체)라도 되고, 또한, 상기 단위구조에 포함되는 임의의 환(a환, b환, c환 또는 d환)끼리 축합하도록 하여 결합한 형태(환축합형 다양체)라도 되지만, 환공유형 다양체 및 환축합형 다양체가 바람직하고, 환공유형 다양체가 보다 바람직하다.

이와 같은 다양체로서는, 예를 들면, 하기 일반식(1-4), 식(1-5-1), 식(1-5-2), 식(1-6-1) 또는 식(1-6-2)으로 표시되는 다양체가 있다. 하기 식(1-4)으로 표시되는 다양체는, 일반식(1)에서 설명하면, a환인 벤젠환을 공유하도록 하여, 복수(하기 구조식에서는 2개)의 일반식(1)으로 표시되는 단위구조를 1개의 화합물 중에 가지는 다양체(환공유형 다양체)이다. 또한, 하기 식(1-5-1)이나 식(1-5-2)으로 표시되는 다양체는, 일반식(1)에서 설명하면, b환인 벤젠환을 공유하도록 하여, 복수(하기 구조식에서는 2개)의 일반식(1)으로 표시되는 단위구조를 1개의 화합물 중에 가지는 다양체(환공유형 다양체)이다. 또한, 하기 식(1-6-1)이나 식(1-6-2)으로 표시되는 다양체는, 일반식(1)에서 설명하면, 예를 들면, 어떤 단위구조의 a환(b환, c환 또는 d환)인 벤젠환과, 어떤 단위구조의 a환(b환, c환 또는 d환)인 벤젠환이 축합하도록 하여, 복수(하기 구조식에서는 2개)의 일반식(1)으로 표시되는 단위구조를 1개의 화합물 중에 가지는 다양체(환축합형 다양체)이다. 그리고, 하기 각 식에서의 R^2 는 수소이다.

[화학식 47]

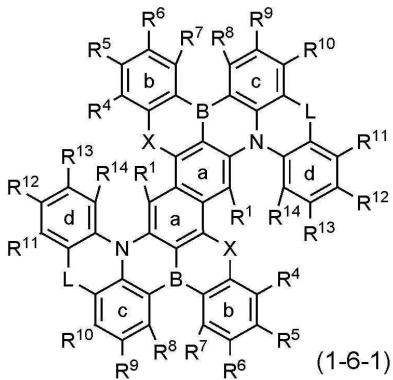


[한화시 48]

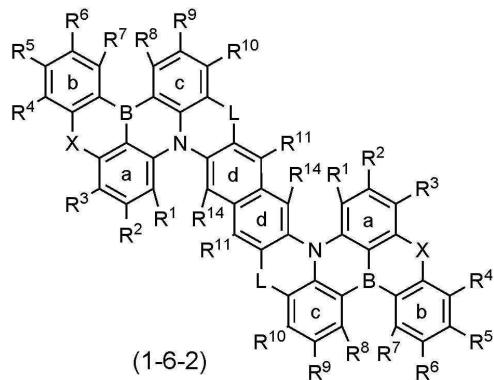


[0199]

[화학식 49]



[0200]



[0201]

다량체는, 식(1-4)으로 표현되는 다량화 형태와, 식(1-5-1) 또는 식(1-5-2)으로 표현되는 다량화 형태가 조합된 다량체라도 되고, 식(1-4), 식(1-5-1) 또는 식(1-5-2)으로 표현되는 다량화 형태와, 식(1-6-1) 또는 식(1-6-2)으로 표현되는 다량화 형태가 조합된 다량체라도 된다.

[0202]

또한, 일반식(1)으로 표시되는 다환 방향족 화합물 및 그의 다량체의 화학 구조 중의 수소는, 그 전부 또는 일부가 시아노, 할로겐 또는 중수소로 치환되어 있어도 된다. 예를 들면, 일반식(1)에 있어서는, a환, b환, c환, d환, 이들 환으로의 치환기, 및 X가 >N-R일 때의 R(=아릴, 헤테로아릴, 알킬, 시클로알킬), L이 >C(-R)₂ 및 >N-R일 때의 R(=아릴, 헤테로아릴, 디아릴아미노, 디아릴보릴, 알킬, 시클로알킬, 알콕시 또는 아릴옥시)에서의 수소가 시아노, 할로겐 또는 중수소로 치환될 수 있다. 할로겐은, 불소, 염소, 브롬 또는 요오드이며, 바람직하게는 불소, 염소 또는 브롬, 보다 바람직하게는 불소이다.

[0203]

상기 일반식(1)에서는, R⁷ 및 R⁸ 중, 한쪽이, 할로겐, 탄소수 1~6의 알킬, 탄소수 3~14의 시클로알킬, 탄소수 6~10의 아릴 또는 탄소수 2~10의 헤테로아릴이며, 다른 쪽이, 수소, 탄소수 1~6의 알킬, 탄소수 3~14의 시클로알킬, 탄소수 6~10의 아릴 또는 탄소수 2~10의 헤테로아릴인 것이 바람직하다. 또한, 이 경우에, b환의 R⁷ 및 c환의 R⁸은 인접하는 기와 결합하지는 않으며, 형성된 상기 아릴환 또는 헤테로아릴환의 일부를 구성하지는 않는다. 또한, 상기 「한쪽」은 R⁷이며, 상기 「다른 쪽」은 R⁸인 것이 바람직하다. 이 R⁷ 및 R⁸의 특징에 대해서는, 후술하는 치환기군 Z로서도 상세하게 설명한다.

[0204]

R⁷ 및 R⁸의 할로겐은, 불소, 염소, 브롬 또는 요오드이다 중원자 효과에 의한 스핀 궤도 상호 작용의 증대의 관점에서는, 분자량이 큰 할로겐이 바람직하고, 염소, 브롬 및 요오드가 바람직하며, 염소 및 브롬이 보다 바람직하고, 요오드가 더욱 바람직하다. 전기 음성도가 높은 원소의 도입에 의해 HOMO/LUMO 궤도를 깊게 하는 관점에서는, 전기 음성도가 큰 원소가 바람직하고, 불소, 염소 및 브롬이 바람직하고, 불소 및 염소가 보다 바람직하고, 불소가 더욱 바람직하다.

[0205]

R⁷ 및 R⁸의 탄소수 1~6의 알킬은, 직쇄 및 분지쇄 중 어느 것이어도 되고, 탄소수 1~4의 알킬(탄소수 3~4의 분지쇄 알킬)이 바람직하다. 구체적으로는, 메틸, 에틸, n-프로필, 이소프로필, n-부틸, 이소부틸, sec-부틸, tert-부틸, n-펜틸, 이소펜틸, 네오펜틸, tert-펜틸, n-헥실, 1-메틸펜틸, 4-메틸-2-펜틸, 3,3-디메틸부틸, 2-에틸부틸 등이며, 메틸 또는 tert-부틸이 보다 바람직하고, 메틸이 더욱 바람직하다.

[0206]

R⁷ 및 R⁸의 탄소수 3~14의 시클로알킬은, 탄소수 5~10의 시클로알킬, 탄소수 5~8의 시클로알킬, 탄소수 5~6의 시클로알킬, 탄소수 5의 시클로알킬 등이 바람직하다. 구체적으로는, 시클로프로필, 시클로부틸, 시클로펜틸, 시클로헥실, 시클로헵틸, 시클로옥틸, 시클로노닐, 시클로데실, 및 이들의 탄소수 1~4의 알킬(특히 메틸) 치환체나, 노르보르네닐, 비시클로[1.0.1]부틸, 비시클로[1.1.1]펜틸, 비시클로[2.0.1]펜틸, 비시클로[1.2.1]헥실, 비시클로[3.0.1]헥실, 비시클로[2.1.2]헵틸, 비시클로[2.2.2]옥틸, 아다만틸, 디아만틸, 데카하이드로나프탈레닐, 데카하이드로아줄레닐 등이 바람직하다.

[0207]

R⁷ 및 R⁸의 탄소수 6~10의 아릴은, 구체적으로는 폐닐 또는 나프틸이며, 폐닐이 바람직하다.

[0208]

R⁷ 및 R⁸의 탄소수 2~10의 헤테로아릴은, 구체적으로는 피롤릴, 옥사졸릴, 이소옥사졸릴, 티아졸릴, 이소티아졸

릴, 이미다졸릴, 옥사디아졸릴, 티아디아졸릴, 트리아졸릴, 테트라졸릴, 피라졸릴, 피리미디닐, 피리다지닐, 피라지닐, 트리아지닐, 인돌릴, 이소인돌릴, 1H-인다졸릴, 벤즈이미다졸릴, 벤즈옥사졸릴, 벤조티아졸릴, 1H-벤조트리아졸릴, 퀴놀리닐, 이소퀴놀리닐, 신놀릴, 퀴나졸리닐, 퀴녹살리닐, 프탈라지닐, 나프티리디닐, 퓨리닐, 프테리디닐, 인돌리지닐, 퓨라닐, 벤조퓨라닐, 이소벤조퓨라닐, 티오페닐, 벤조티오페닐, 퓨라자닐, 옥사디아졸릴 등이며, 이들 중에서도 6원환 또는 5원환의 1환 구조의 기가 바람직하다.

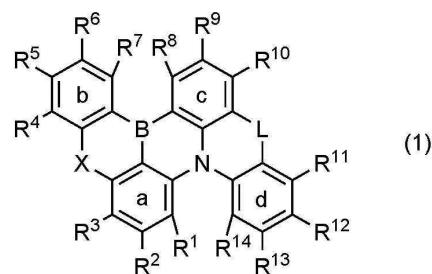
[0209] R^7 및 R^8 의 조합에 대해서는, R^7 및 R^8 중, 한쪽이, 할로겐, 탄소수 1~4의 알킬, 탄소수 5~10의 시클로알킬 또는 폐닐이며, 또한, 다른 쪽이, 수소, 탄소수 1~4의 알킬, 탄소수 5~10의 시클로알킬 또는 폐닐인 것이 바람직하고, R^7 및 R^8 의 분자량의 합이 작은 것이 바람직하다. 또한, 한쪽이, 메틸, tert-부틸 또는 폐닐이며, 또한, 다른 쪽이, 수소, 메틸, tert-부틸 또는 폐닐인 것이 보다 바람직하다. 또한, 한쪽이, 메틸 또는 tert-부틸이며, 또한, 다른 쪽이 수소 또는 메틸인 것이 더욱 바람직하다. 또한, 한쪽이 메틸이며, 또한, 다른 쪽이 수소 또는 메틸인 것이 특히 바람직하다. 또한, 한쪽이 메틸이며, 또한, 다른 쪽이 수소인 것이 가장 바람직하다. 또한, 상기 「한쪽」은 R^7 이며, 상기 「다른 쪽」은 R^8 인 것이 바람직하다.

[0210] 일반식(1)의 화합물의 합성의 관점에서는, R^7 의 대칭 위치에 있는 R^5 가 수소 이외의 기인 것이 바람직하고, R^7 및 R^5 가 동일한 기인 것이 보다 바람직하다. 또한 마찬가지로, R^8 이 수소 이외의 기인 경우, R^8 의 대칭 위치에 있는 R^{10} 도 수소 이외의 기인 것이 바람직하고, R^8 및 R^{10} 이 동일한 기인 것이 보다 바람직하다.

[0211] 또한, 본 발명에 따른 다환 방향족 화합물 및 그의 다양체는, 유기 디바이스용 재료로서 사용할 수 있다. 유기 디바이스로서는, 예를 들면, 유기전계 발광소자, 유기전계 효과 트랜지스터 또는 유기박막 태양전지 등이 있다. 특히, 유기전계 발광소자에 있어서는, 발광층의 도편트 재료로서, X가 $>N-R$ 인 화합물, X가 $>O$ 인 화합물이 바람직하고, 발광층의 호스트 재료로서 X가 $>O$ 인 화합물이 바람직하게 사용된다.

[0212] 이하, 일반식(1)으로 표시되는 다환 방향족 화합물 및 그의 다양체에 대하여, 보다 구체적으로 설명한다. 일반식(1)에서의 X는, $>O$, $>N-R$, $>S$ 또는 $>Se$ 이며, 일반식(1)의 화합물 구조와 그 화합물번호를 관련시킨 경우, 일반식(1)은 각각 일반식(BOL-1), 식(BNL-1), 식(BSL-1) 또는 식(BEL-1)으로도 기재된다. 발광효율 및 발광파장의 관점에서는 X는 $>O$ 또는 $>N-R$ 이 바람직하다. 보다 구체적으로는, 짧은 발광파장의 관점에서는 $>O$ 가 바람직하고, 높은 발광효율의 관점에서는 $>N$ 이 바람직하다. 그리고, 이후, 화합물의 일반구조를 나타낸 일반식 중의 부호의 정의는 일반식(1)의 정의와 동일하지만, 일반식 중에서는 표현의 간략화를 위해, $R^1 \sim R^{14}$ 의 부호를 생략하는 경우가 있다. 일반식이 아닌, 구체적인 화합물의 구조를 나타낸 식에서는 그러한 생략은 하지 않는다. 또한, 1개의 일반식 중에 동등한 위치의 치환기나 환 등이 복수 있는 경우, 치환기나 환 등을 나타내는 부호에 「」이나 「⁴」을 부가하는 경우가 있지만, 이 부호의 정의도 일반식(1)의 정의와 동일하다. 예를 들면, 1개의 일반식 중에 R^4 에 상당하는 위치의 치환기가 복수 있는 경우, 「 R^4 」 이외에도 「 R^4 」이나 「 R^4 」로 표시하는 경우가 있지만, 이를 부호의 정의는 일반식(1)에서의 R^4 의 정의와 동일하다.

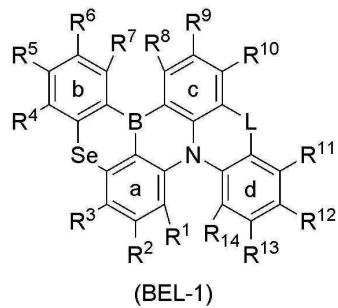
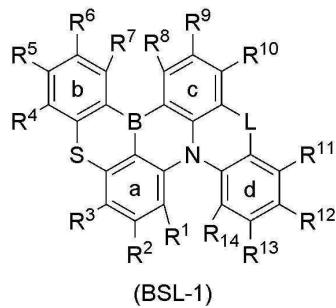
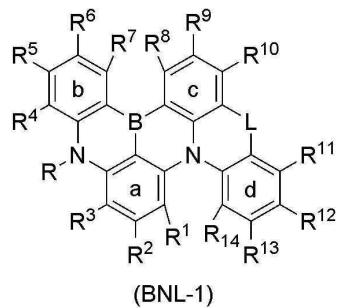
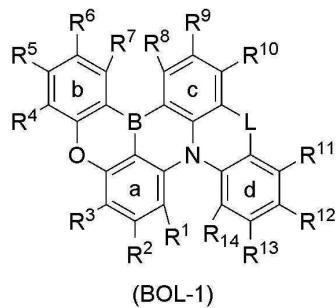
[0213] [화학식 50]



[0214]

[0215]

[화학식 51]



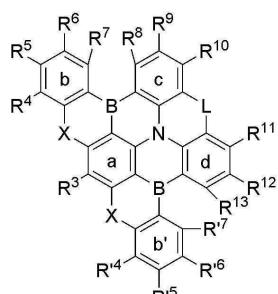
[0216]

[0217]

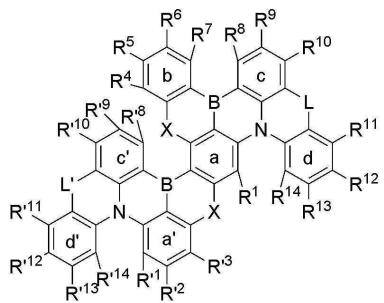
일반식(1)의 다환 방향족 화합물은, a~c 환을 공유하는 다량체라도 되고, 공유하는 환은 1개라도 되고 복수라도 된다. 다량체인 경우, b환 또는 c환을 공유하는 것이 바람직하고, b환을 공유하는 것이 보다 바람직하다. 예를 들면, 하기 일반식(20)~식(25) 및 식(30)의 다량체가 있다. 또한, 중심원소인 B(붕소)는 서로 메타 위치인 것이 바람직하다. 합성의 관점에서 대칭성이 높은 구조가 바람직하고, 구체적으로는 하기 일반식(20), 식(22), 식(23) 및 식(30)의 다량체가 바람직하다. 특성의 관점에서는 후술하는 식(22BOCz-0001)이 바람직하다. 다량체 구조가 a환에서의 R^2 , a'환에서의 R'^2 및 a''환에서의 R''^2 를 가지는 경우, R^2 , R'^2 및/또는 R''^2 는 수소이다.

[0218]

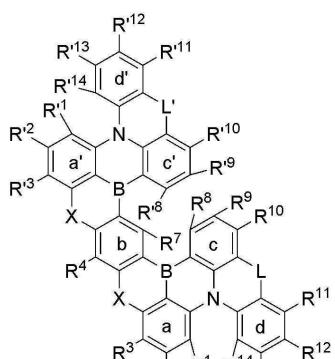
[화학식 52]



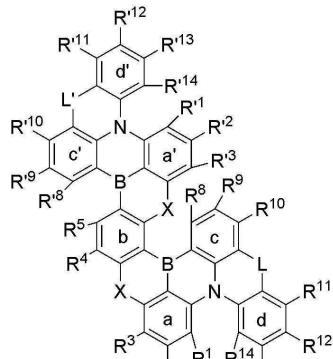
(20)



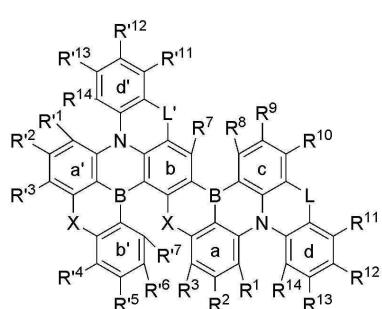
(21)



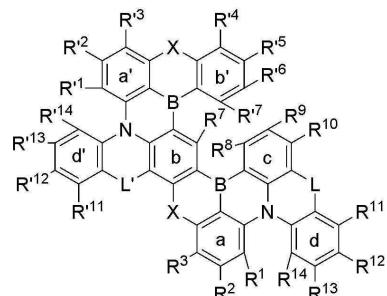
(22)



(23)



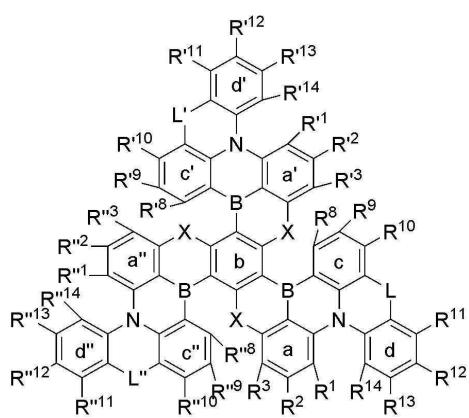
(24)



(25)

[0219]

[화학식 53]



(30)

[0221]

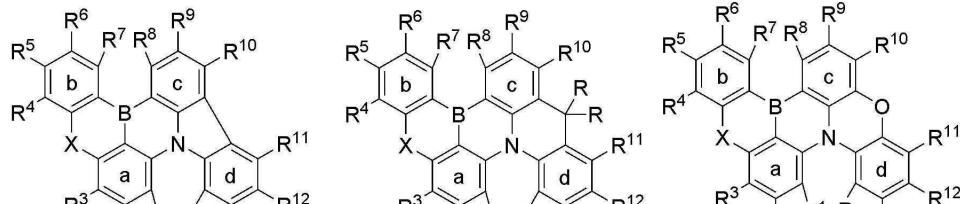
일반식(1)에 있어서, L은, 단결합, >C(-R)₂, >O, >S 및 >N-R이며, 각각, 일반식(BXCz-1), 식(BXAd-1), 식

[0222]

(BXPx-1), 식(BXPt-1) 및 식(BXPz-1)으로 표시된다. 발광효율의 관점에서는 L은 단결합 및 $>C(-R)_2$ 인 것이 바람직하고, 발광파장의 조정의 관점에서는 단결합, $>C(-R)_2$, $>O$ 및 $>N-R$ 이 바람직하다. 보다 구체적으로는 음성이 강한 결합에 의해 발광파장은 길어지고, 짧은 발광파장의 관점에서는, 단결합 및 $>C(-R)_2$ 가 바람직하다.

[0223]

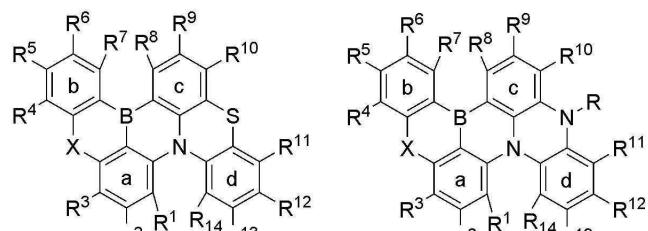
[화학식 54]



(BXCz-1)

(BXAd-1)

(BXPx-1)



(BXPt-1)

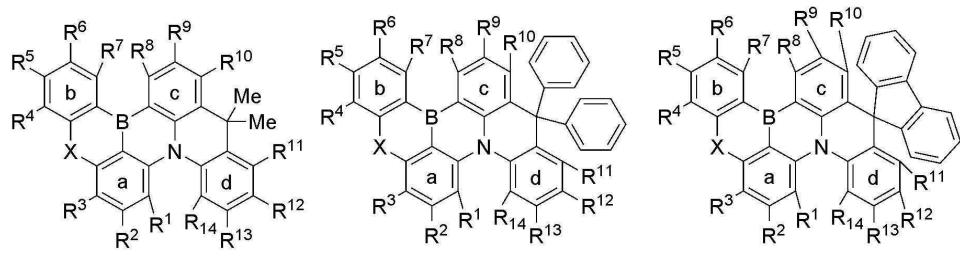
(BXPz-1)

[0224]

일반식(1)에 있어서, L이 $>C(-R)_2$ 로 표시되는 경우, 식(BXAd-1)은, 발광효율의 관점에서는 식(BXAdM-1), 식(BXAdP-1) 및 식(BXAdF-1)이 바람직하고, 합성의 관점에서 식(BXAdM-1)이 보다 바람직하다.

[0226]

[화학식 55]



(BXAdM-1)

(BXAdP-1)

(BXAdF-1)

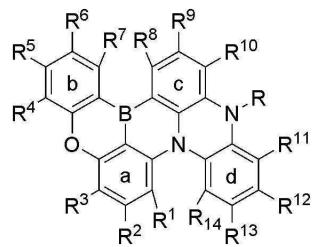
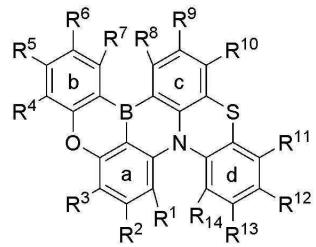
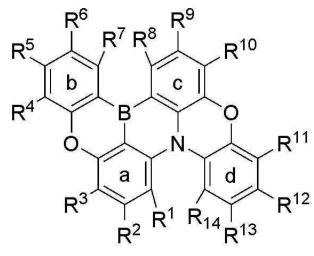
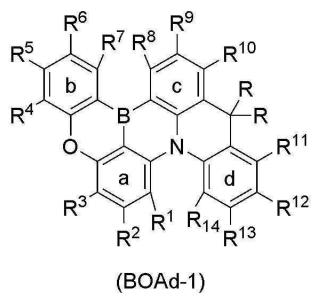
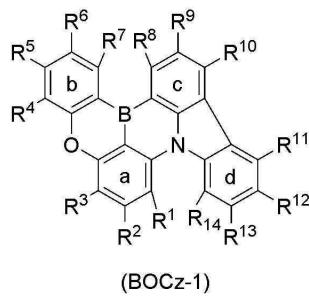
[0227]

일반식(1)에 있어서, X는, $>O$, $>N-R$, $>S$ 또는 $>Se$ 이며, 또한 L은, 단결합, $>C(-R)_2$, $>O$, $>S$ 및 $>N-R$ 이며, 각각, 일반식(BOCz-1), 식(BOAd-1), 식(BOPx-1), 식(BOPT-1), 식(BOPz-1), 일반식(BNCz-1), 식(BNAd-1), 식(BNPT-1), 식(BNPz-1), 일반식(BSCz-1), 식(BSAd-1), 식(BSPx-1), 식(BSPt-1), 식(BSPz-1), 일반식(BECz-1), 식(BEAd-1), 식(BEPx-1), 식(BEPt-1) 및 식(BEPz-1)으로 표시된다. 발광효율의 관점에서는 X는 $>O$ 또는 $>N-R$, 및 L은 단결합 또는 $>C(-R)_2$ 가 바람직하다. 발광파장의 조정 관점에서는 L은 단결합, $>C(-R)_2$, $>O$ 및 $>N-R$ 이 바람직하다.

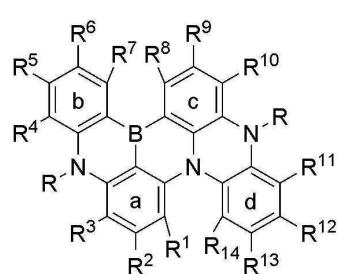
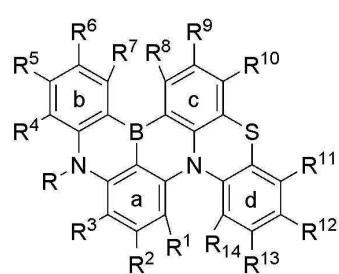
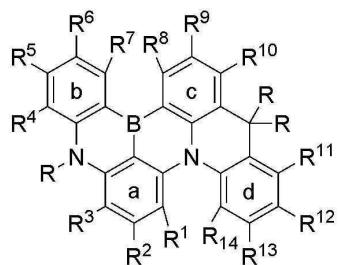
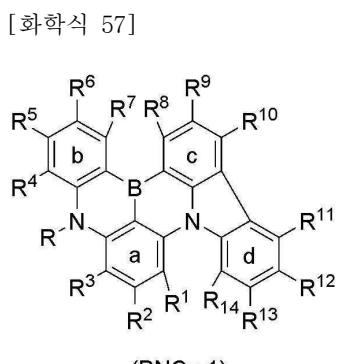
발광효율 및 발광파장의 양립의 관점에서, X는 $>O$ 또는 $>N-R$, 또한 L은 단결합 또는 $>C(-R)_2$ 가 바람직하다.

[0229]

[화학식] 56]



[0230]

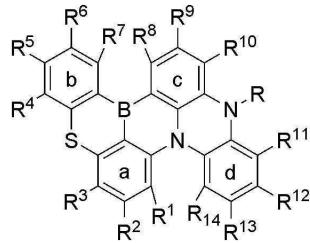
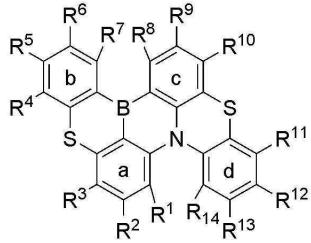
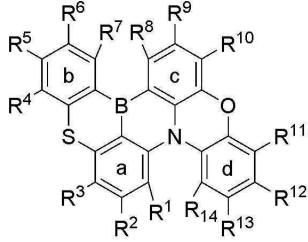
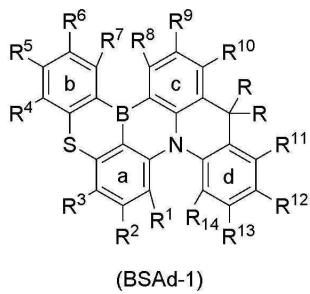
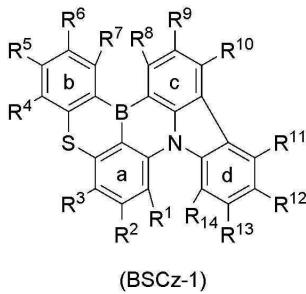


[0231]

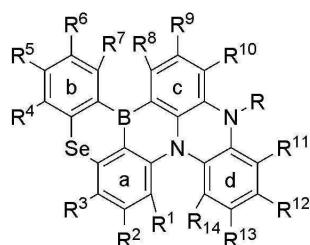
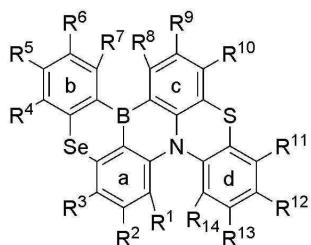
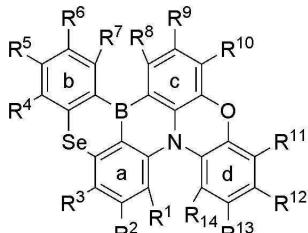
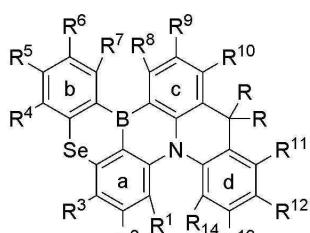
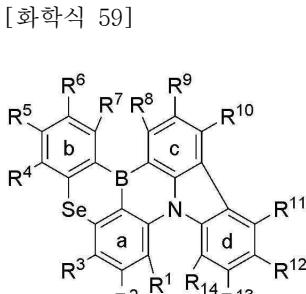
[화학식] 57]

[0233]

[화학식 58]



[0234]



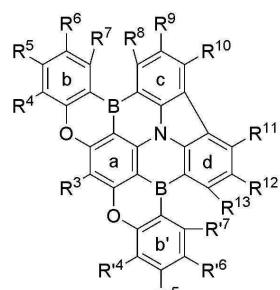
[0235]

[0236]

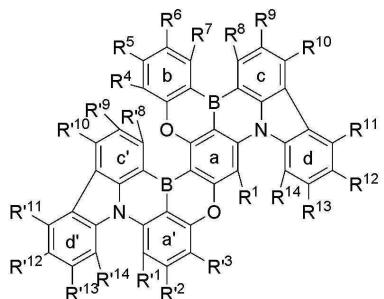
일반식(1)의 다량체인 일반식(20)~일반식(25)에 있어서, 분자량을 작게 하는 관점에서는 될수 있는 한 많은 X가 >0인 것이 바람직하다. 또한, ΔE_{ST} 를 작게 하는 관점 및/또는 짧은 자연 형광수명의 관점에서는 될수 있는 한 많은 X가 >N-R인 것이 바람직하다. 합성의 관점에서는 대칭성이 높은 구조가 바람직하고, 구체적으로는 일반식(20BOCz-0001), 식(22BOCz-0001), 식(23BOCz-0001), 식(30BOCz-0001), 식(20BNCz-0001), 식(22BNCz-0001) 및 식(22BOCz/NCz-0001) 및 식(22BOCz/NCz-0001)이 바람직하다. 특성의 관점에서는 식(22BOCz-0001), 식(22BNCz-0001) 및 식(22BOCz/NCz-0001)이 바람직하다.

[0238]

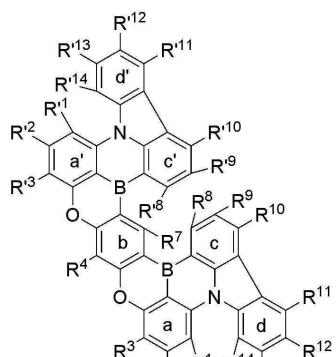
[화학식] 60]



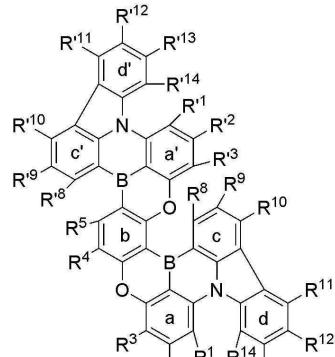
(20BOCz-0001)



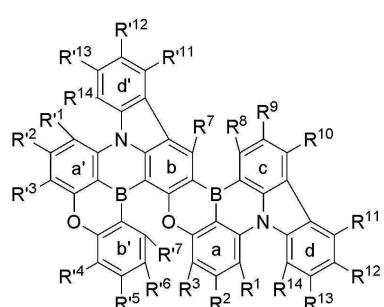
(21BOCz-0001)



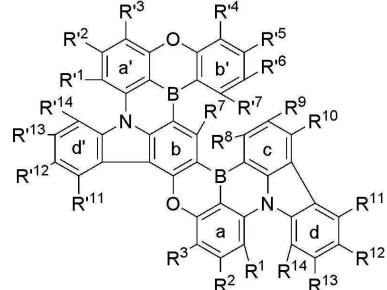
(22BOCz-0001)



(23BOCz-0001)



(24BOCz-0001)

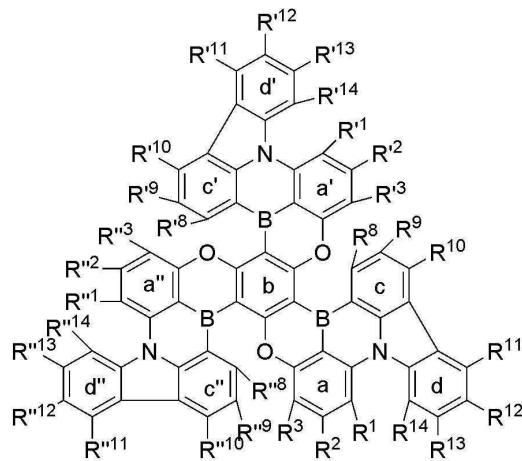


(25BOCz-0001)

[0239]

[0240]

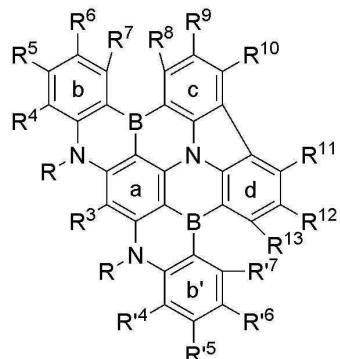
[화학식 61]



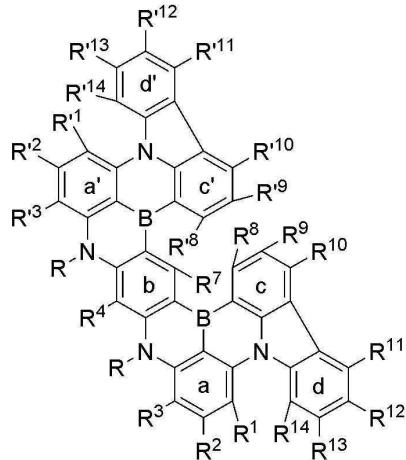
(30BOCz-0001)

[0241]

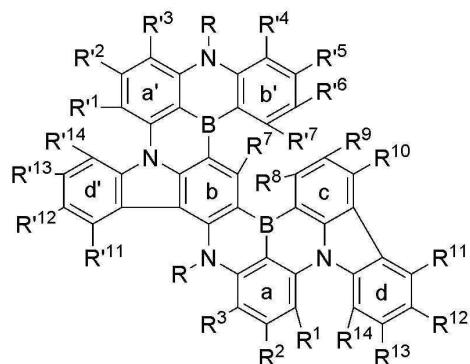
[화학식 62]



(20BNCz-0001)



(22BNCz-0001)

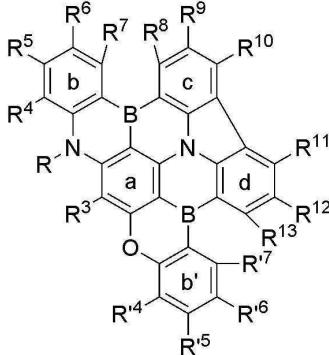


(25BNCz-0001)

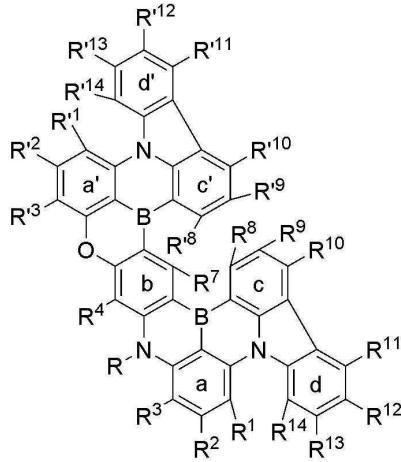
[0243]

[0244]

[화학식 63]



(20BOCz/NCz-0001)



(22BOCz/NCz-0001)

[0245]

일반식(1)에서의 $R^1 \sim R^{14}$ 는, 각각 독립적으로, 수소, 아릴, 헤테로아릴, 디아릴아미노, 디아릴보릴(2개의 아릴은 단결합 또는 연결기를 통하여 결합하고 있어도 됨), 알킬, 시클로알킬, 알콕시 또는 아릴옥시이며, 이들에서의 적어도 1개의 수소는 또한 아릴, 헤테로아릴, 알킬 또는 시클로알킬로 치환되어 있어도 되고, 또한, $R^1 \sim R^3$, $R^4 \sim R^7$, $R^8 \sim R^{10}$ 및 $R^{11} \sim R^{14}$ 중 인접하는 기끼리 결합하여 a환, b환, c환 및 d환 중 적어도 1개와 함께 아릴환 또는 헤테로아릴환을 형성하고 있어도 되고, 형성된 환에서의 적어도 1개의 수소는 아릴, 헤테로아릴, 디아릴아미노, 디아릴보릴(2개의 아릴은 단결합 또는 연결기를 통하여 결합하고 있어도 됨), 알킬, 시클로알킬, 알콕시 또는 아릴옥시로 치환되어 있어도 되고, 이들에서의 적어도 1개의 수소는 또한 아릴, 헤테로아릴, 알킬 또는 시클로알킬로 치환되어 있어도 된다.

[0247]

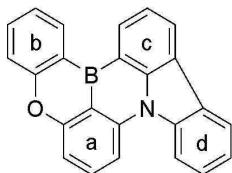
또한, 일반식(BNCz-1), 식(BNAd-1), 식(BNpt-1), 식(BNPz-1), 식(BOAd-1), 식(BOPz-1), 식(BSCz-1), 식(BSPz-1), 식(BECz-1) 및 식(BEPz-1)에서의 R에 대해서도, $R^1 \sim R^{14}$ 와 동일하게 생각할 수 있다.

[0248]

예를 들면, 일반식(BOCz-1)에 있어서, $R^1 \sim R^{14}$ 이 수소인 경우, 일반식(BOCz-0001)으로 표시된다.

[0249]

[화학식 64]



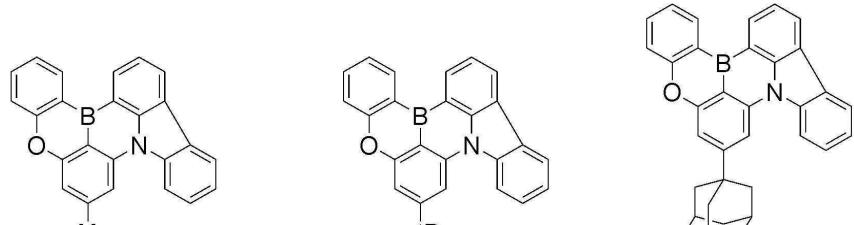
(BOCz-0001)

[0250]

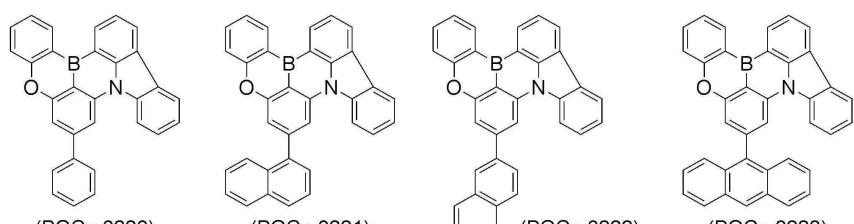
또한, 일반식(BOCz-1)에서의 $R^1 \sim R^{14}$ 이 수소가 아닌 치환기를 가지는 경우, 예를 들면, 다음 구조가 있다. 입체적인 조밀 상태의 관점에서, R^2 , R^3 , R^4 , R^5 , R^6 , R^9 , R^{10} , R^{11} , R^{12} 및 R^{13} 에는 어떠한 치환기도 가질 수 있고, 합성의 관점에서 치환 위치는 R^2 , R^3 , R^4 , R^5 , R^6 , R^9 , R^{12} 및 R^{13} 이 바람직하다.

[0252]

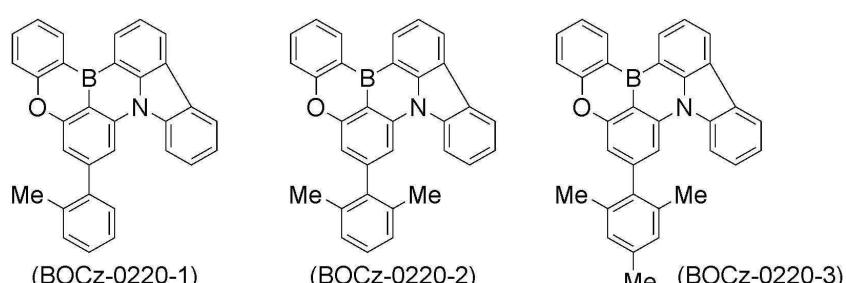
[화학식 65]



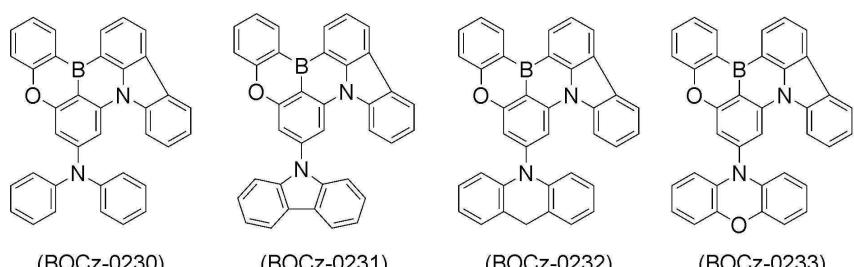
[0253]



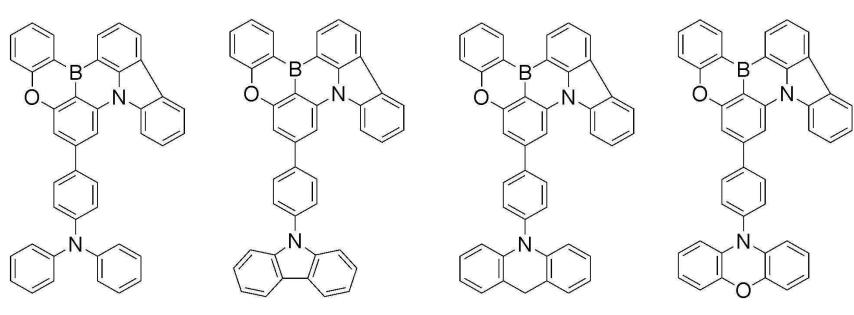
[0254]



[0255]



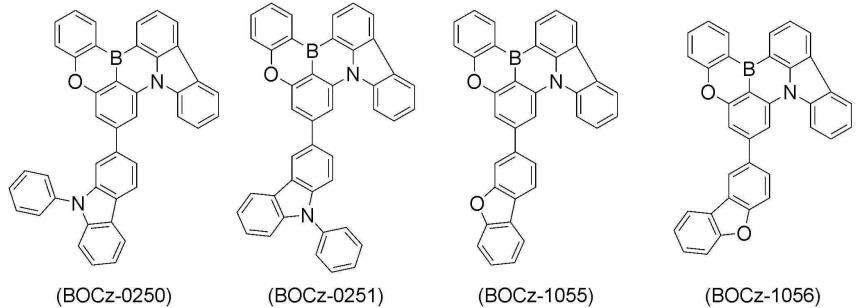
[0256]



[0257]

[0258]

[화학식 66]



(BOCz-0250)

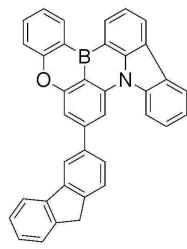
(BOCz-0251)

(BOCz-1055)

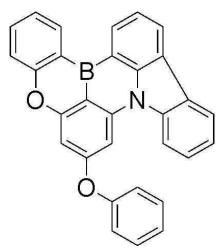
(BOCz-1056)



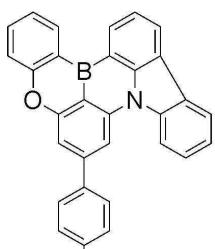
(BOCz-0261)



(BOCz-0262)



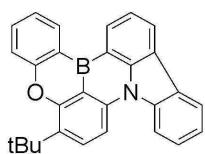
(BOCz-0270)



(BOCz-0280)



(BOCz-0310)



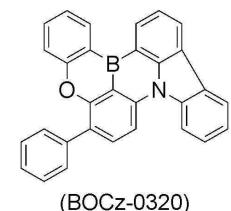
(BOCz-0311)



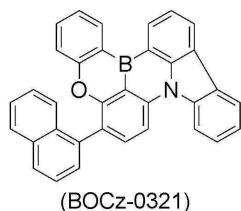
(BOCz-0312)

[0260]

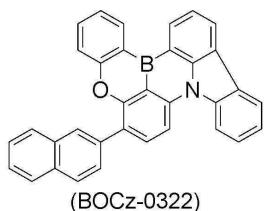
[0261]



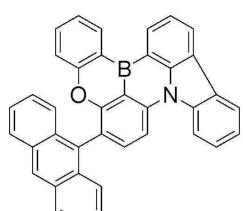
(BOCz-0320)



(BOCz-0321)

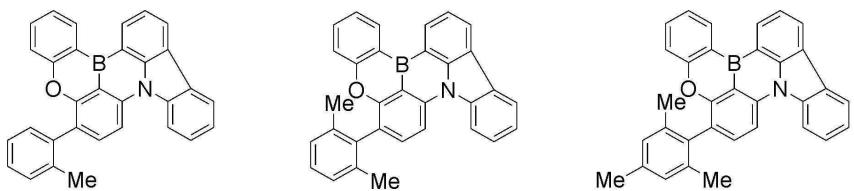


(BOCz-0322)



(BOCz-0323)

[0263]

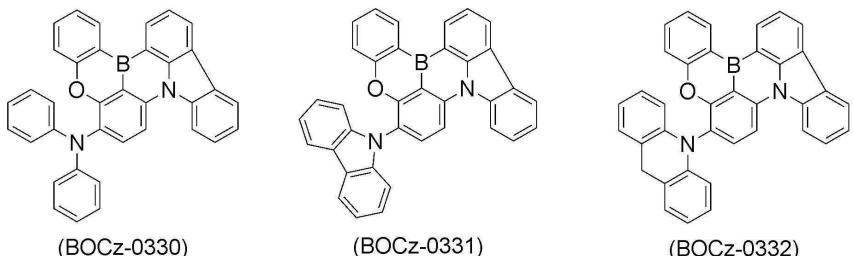


[0264]

(BOCz-0320-1)

(BOCz-0320-2)

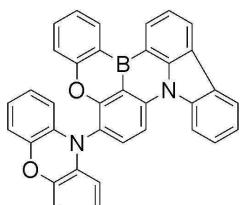
(BOCz-0320-3)



(BOCz-0330)

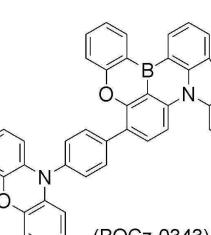
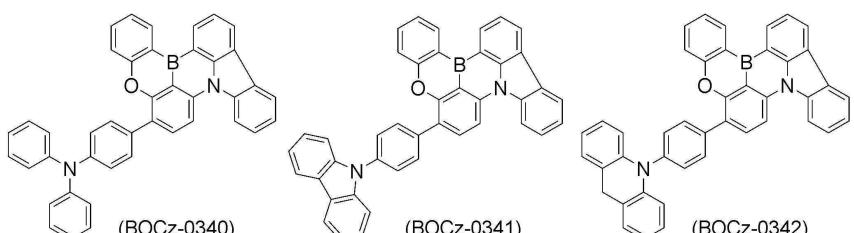
(BOCz-0331)

(BOCz-0332)

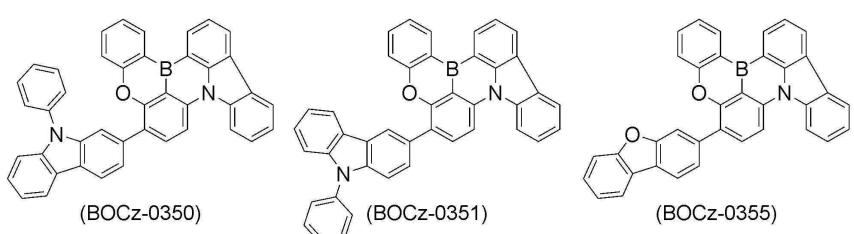


(BOCz-0333)

[0265]



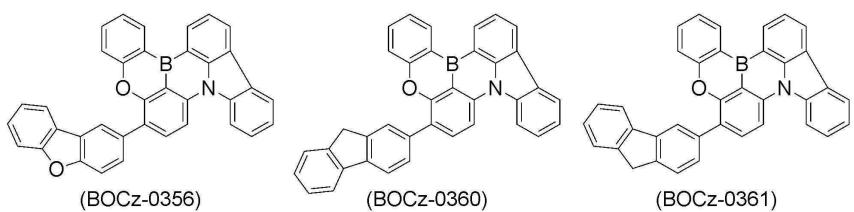
[0267]



(BOCz-0350)

(BOCz-0351)

(BOCz-0355)

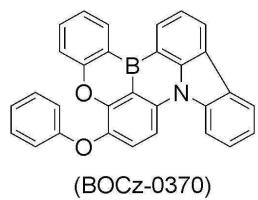


(BOCz-0356)

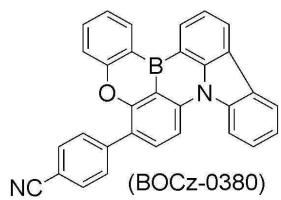
(BOCz-0360)

(BOCz-0361)

[0268]

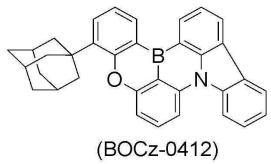
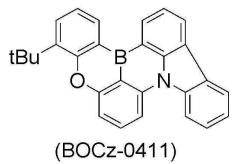
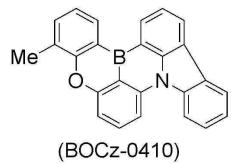


[0269]

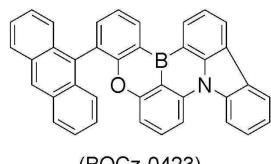
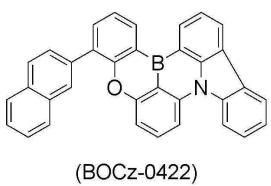
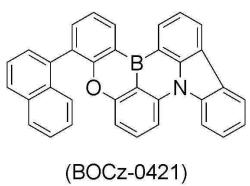
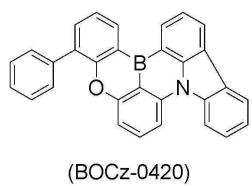


[0270]

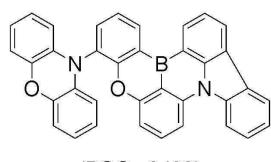
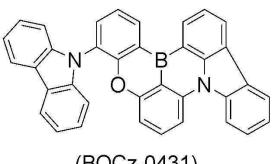
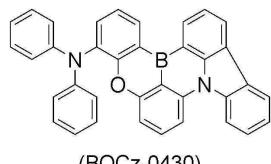
[화학식 69]



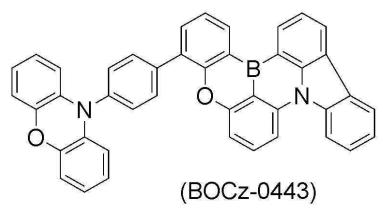
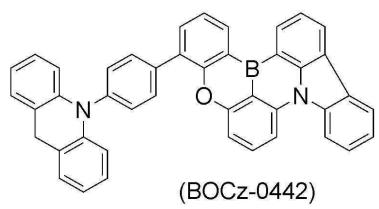
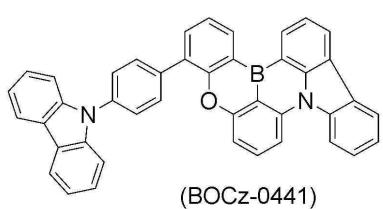
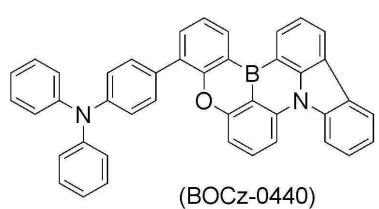
[0271]



[0272]



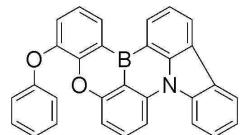
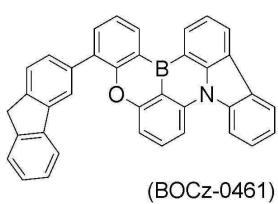
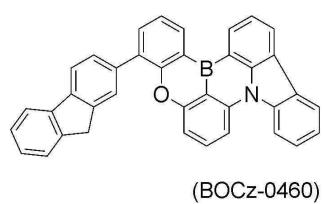
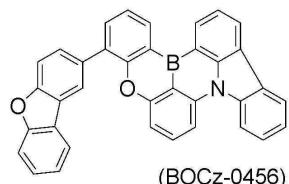
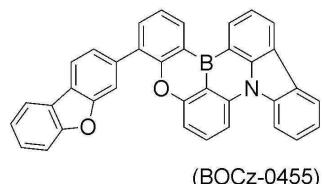
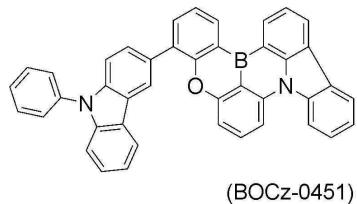
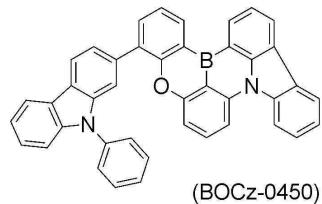
[0273]



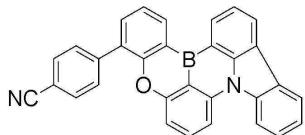
[0274]

[0275]

[화학식 70]



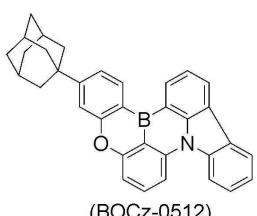
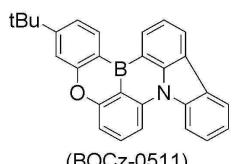
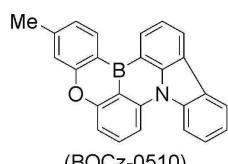
(BOCz-0470)



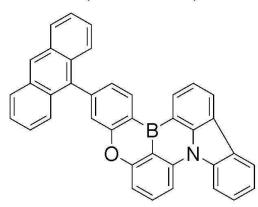
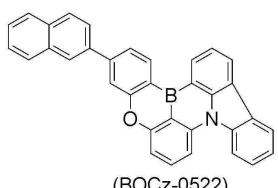
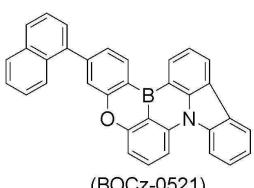
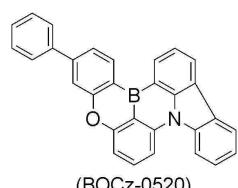
(BOCz-0480)

[0276]

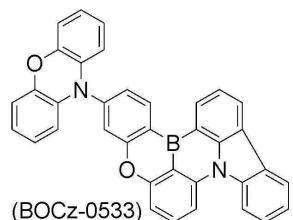
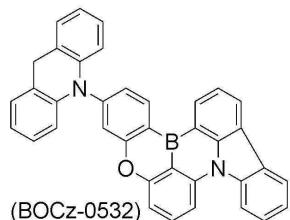
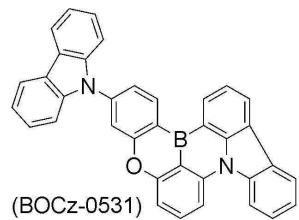
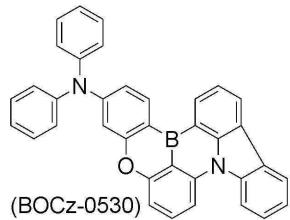
[화학식 71]



[0278]

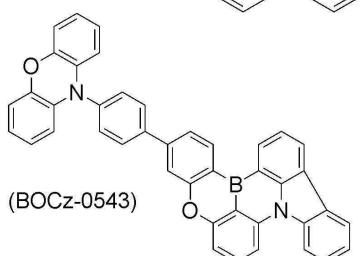
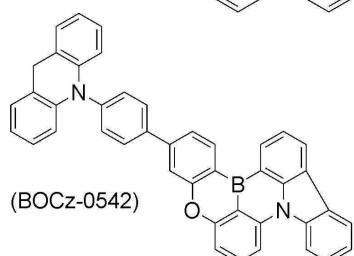
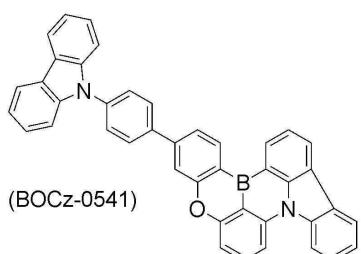
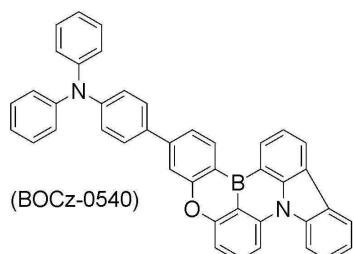


[0279]

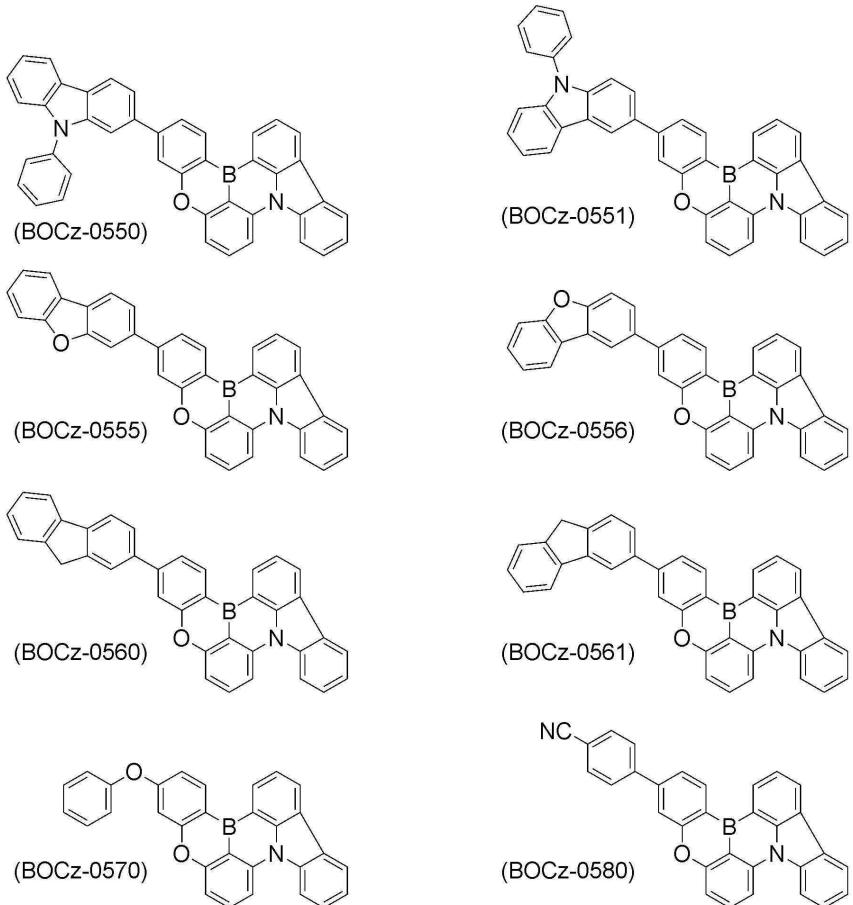


[0280]

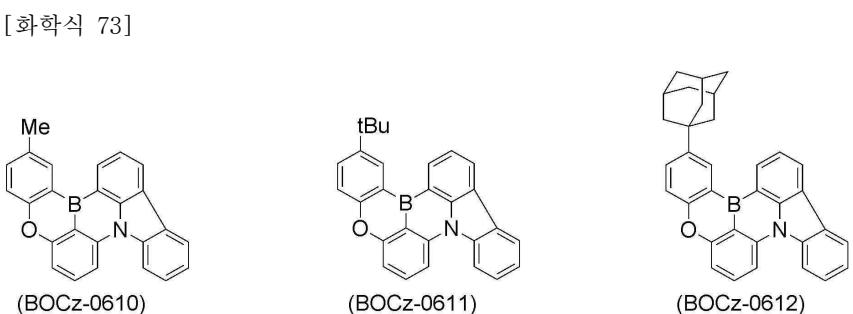
[0281] [화학식 72]



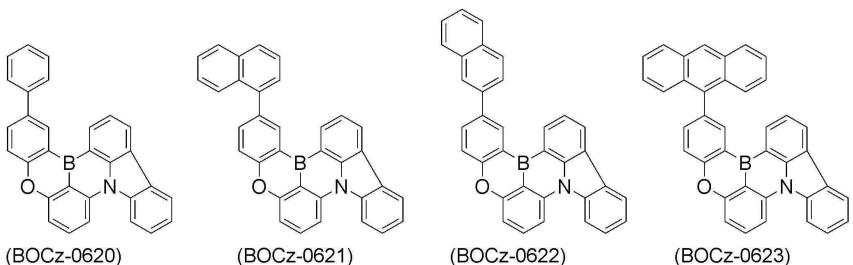
[0282]



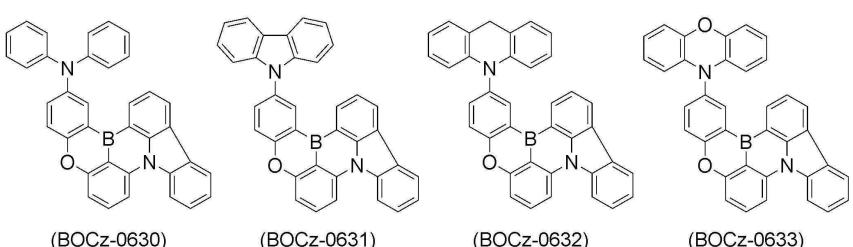
[0283]



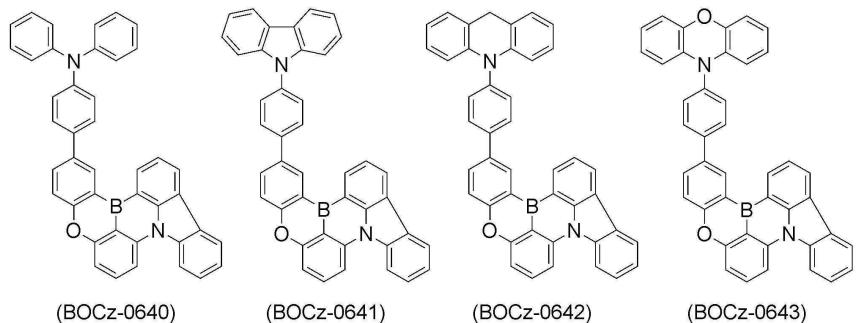
[0285]



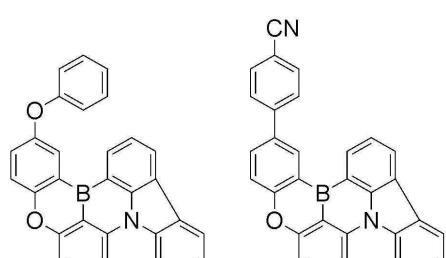
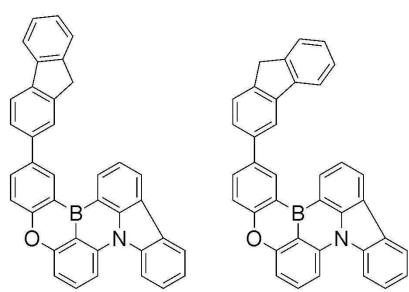
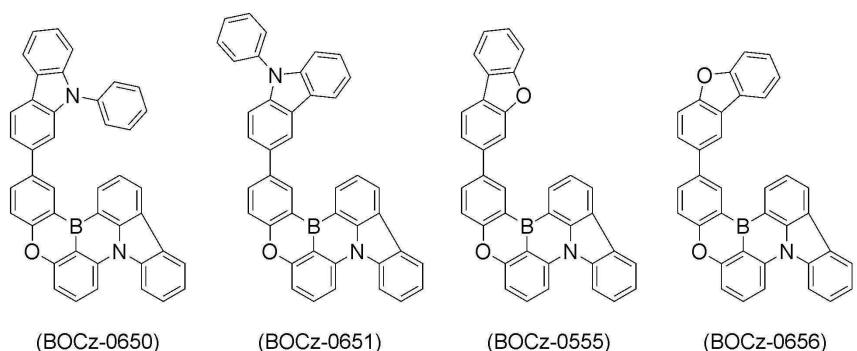
[0286]



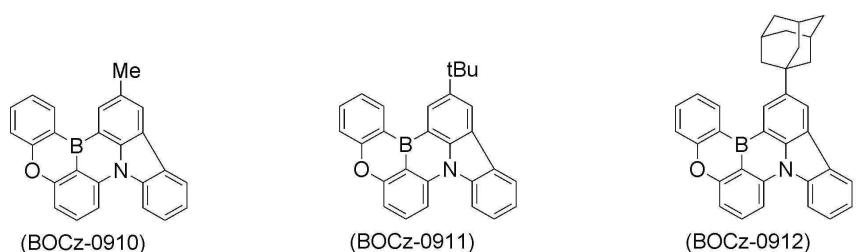
[0287]

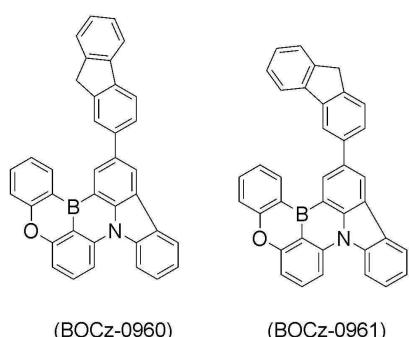
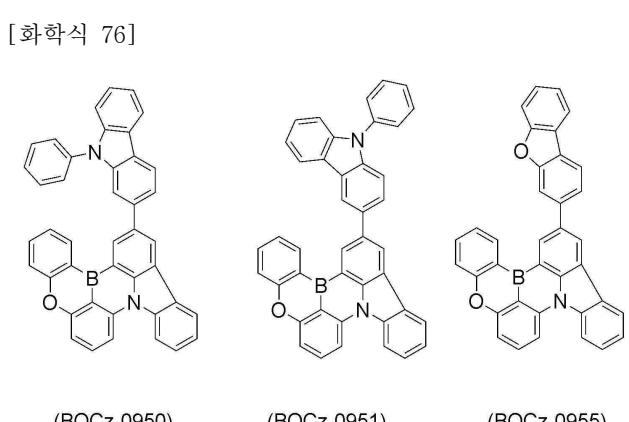
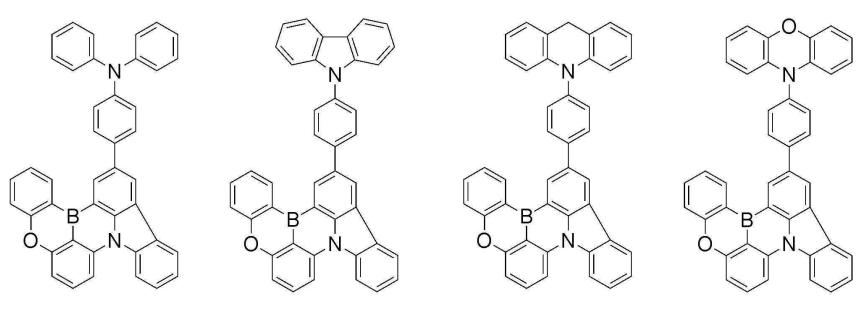
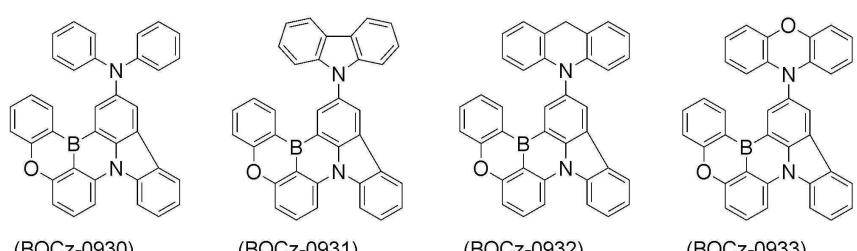
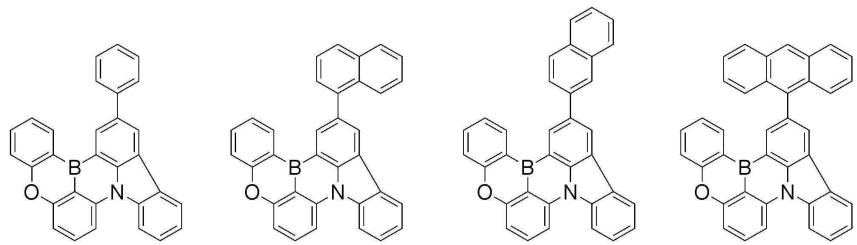


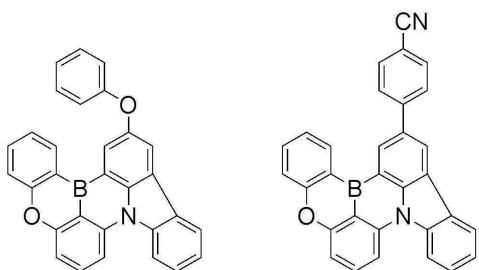
[화학식 74]



[화학식 75]

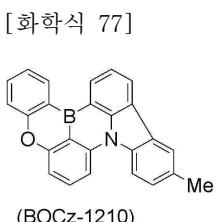




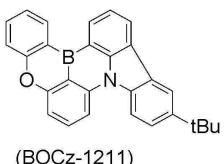


[0299] (BOCz-0970)

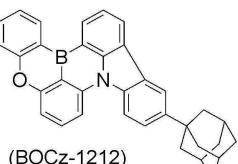
(BOCz-0980)



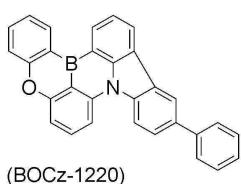
(BOCz-1210)



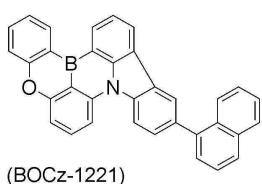
(BOCz-1211)



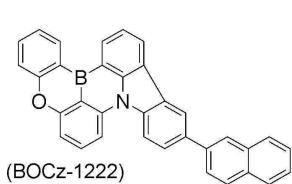
(BOCz-1212)



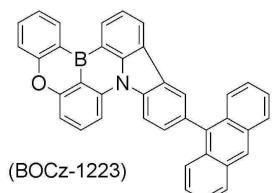
(BOCz-1220)



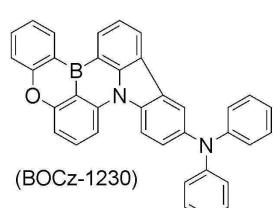
(BOCz-1221)



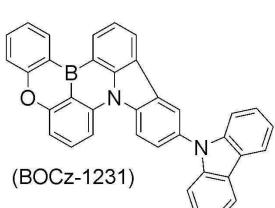
(BOCz-1222)



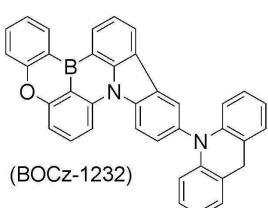
(BOCz-1223)



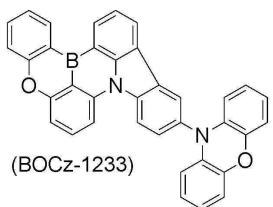
(BOCz-1230)



(BOCz-1231)



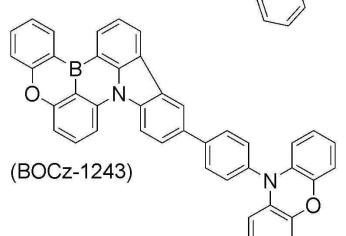
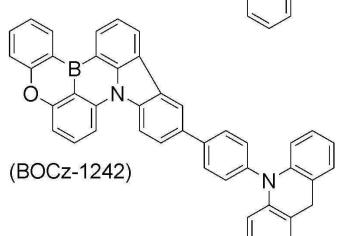
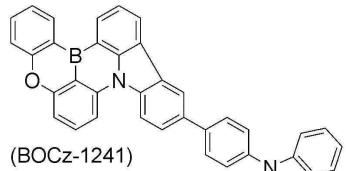
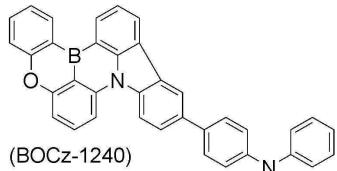
(BOCz-1232)



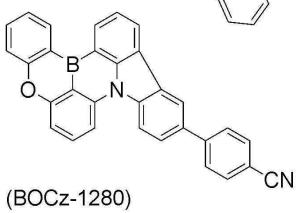
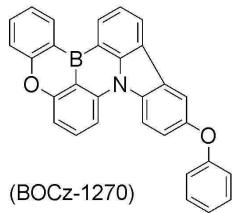
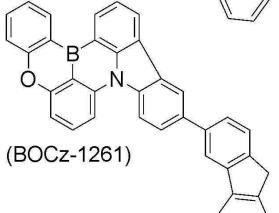
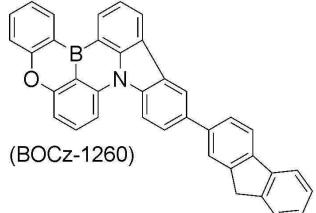
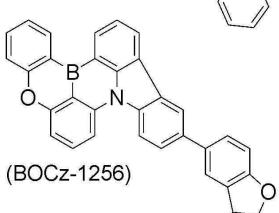
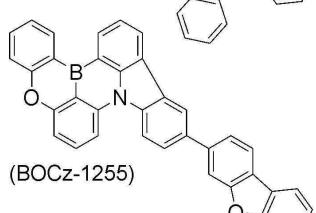
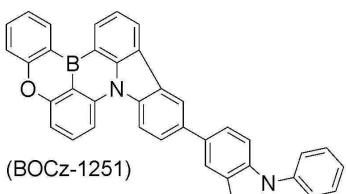
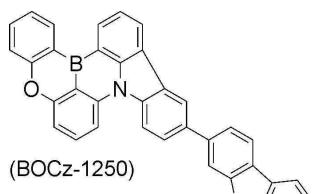
(BOCz-1233)

[0304]

[화학식 78]

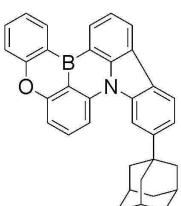
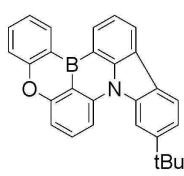
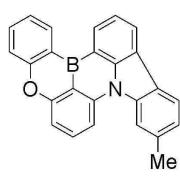


[0305]

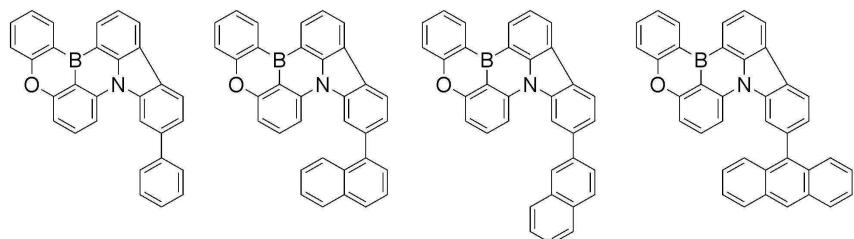


[0306]

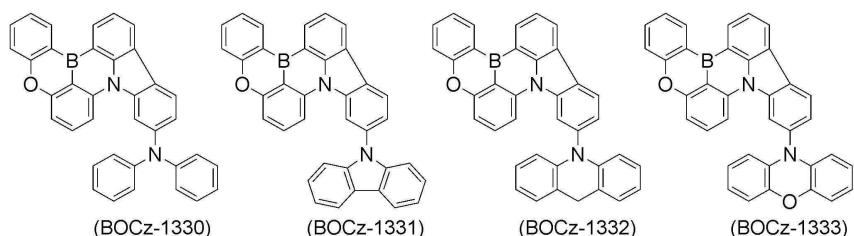
[화학식 79]



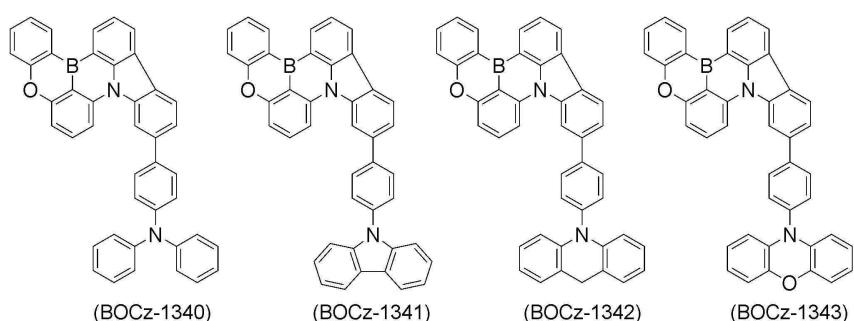
[0308]



[0309]

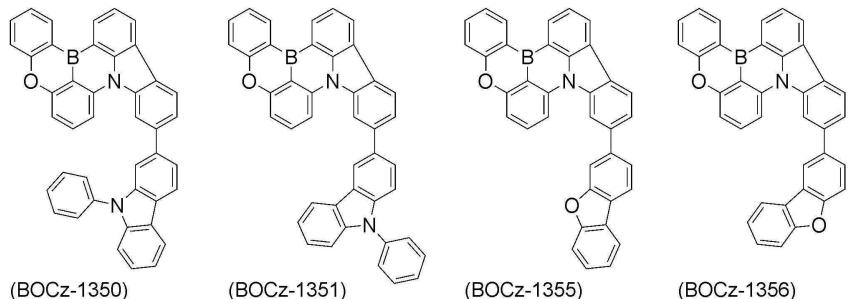


[0310]

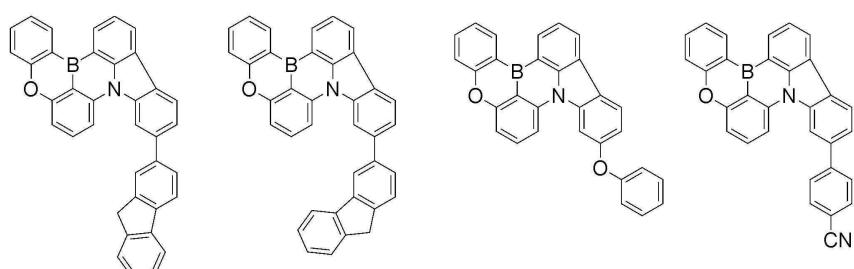


[0311]

[화학식 80]



[0312]



[0313]

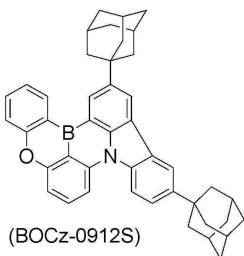
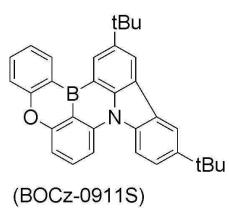
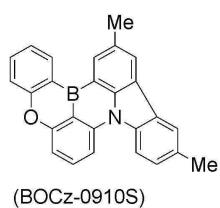
일반식(1)에 있어서 c환, d환 및 L에 의해 형성되는 방향족환(각각, 카르바졸환, 아크리딘환, 페녹사진환, 페노티아진환 및 페나진환을 부분 구조로 하여 형성할 수 있음)은 a환-N 결합에 대하여 선대칭으로 되도록 치환기를 가지는 것이 합성난이도의 관점에서 바람직하다. 즉, R⁸과 R¹³, R⁹과 R¹² 및 R¹⁰과 R¹¹이 동일한 치환기를 가지는 것이 바람직하다.

[0314]

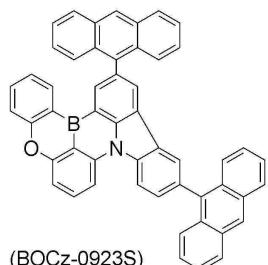
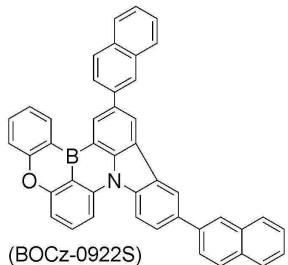
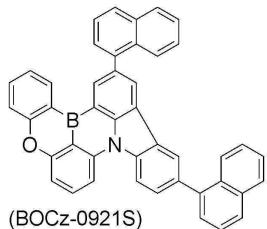
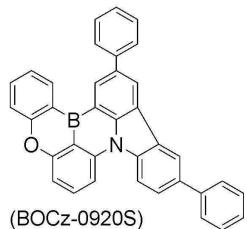
예를 들면, R⁹에 치환기를 가지는 일반식(BOCz-1)은, R¹²에도 동일한 치환기를 가지는 것이 바람직하고, 일반식 (BOCz-09##S)으로 표시된다.

[0316]

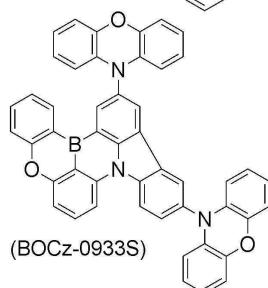
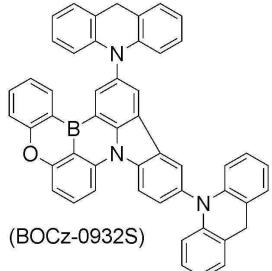
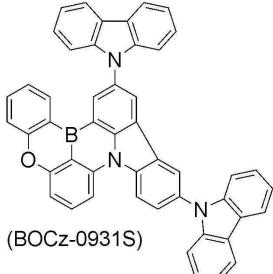
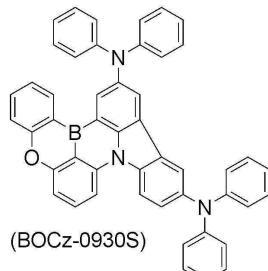
[화학식 81]



[0317]



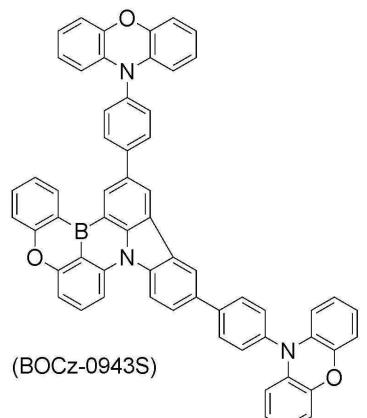
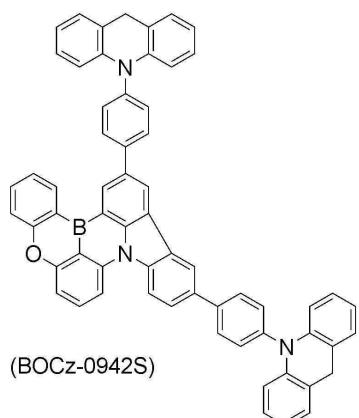
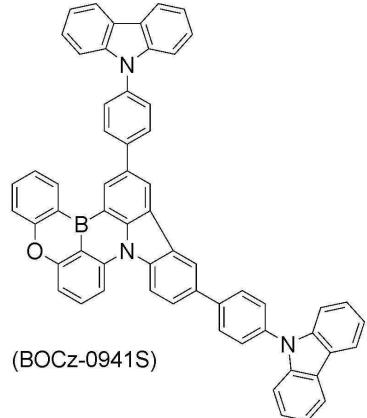
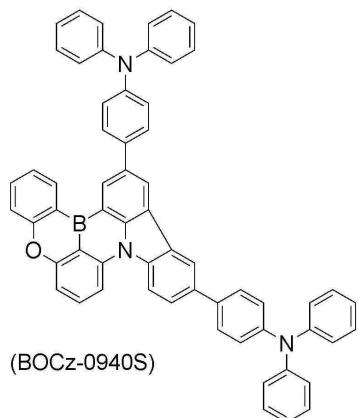
[0318]



[0319]

[0320]

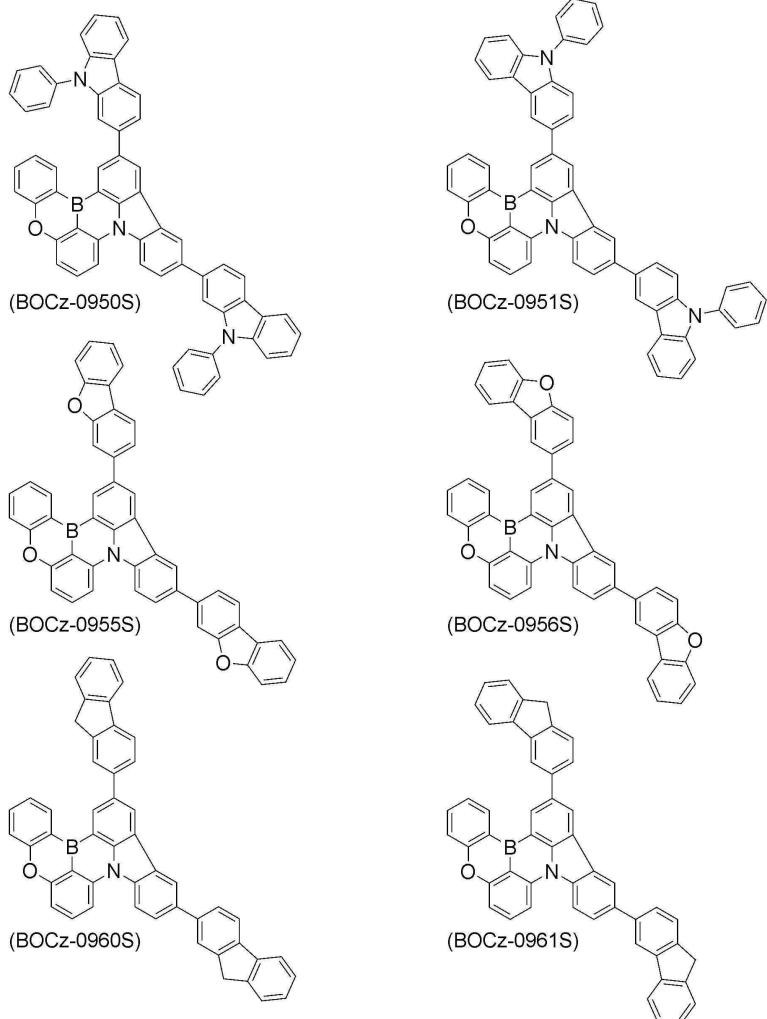
[화학식 82]



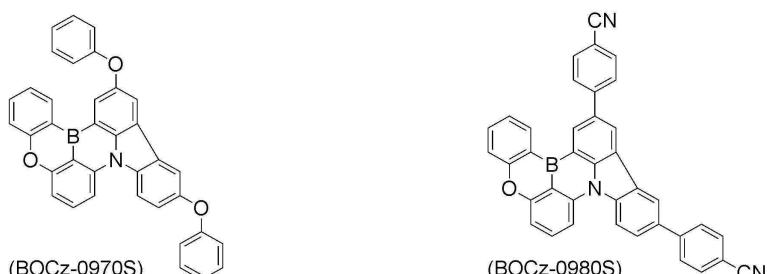
[0321]

[0322]

[화학식 83]



[0323]



[0324]

[0325] 일반식(1)의 $R^1 \sim R^{14}$ 의 복수가 치환기를 가져도 된다. 합성의 난이도의 관점에서, 서로 입체장애가 작아지도록 치환 위치가 선택된다. 동일한 환에 있어서 이웃하는 위치에 치환기를 가져도 되지만, 이 경우에는 입체장애가 작은 기가 바람직하고, 예를 들면, 메틸기 및 폐닐기가 바람직하다. 또한, 일반식(1)의 $R^1 \sim R^{14}$ 에서의 치환기의 개수는 몇 개라도 상관없지만, $R^1 \sim R^{14}$ 의 치환기의 합계 탄소수는 36 이하인 것이 바람직하다.

[0326]

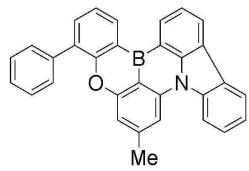
일반식(1)의 b환의 치환기인 $R^4 \sim R^7$ 에 있어서, 복수의 치환기를 가지는 경우에는, 합성의 관점에서 b환-B 결합 또는 b환-X 결합에 대하여 선대칭으로 되도록 치환기를 가지는 것이 바람직하다.

[0327]

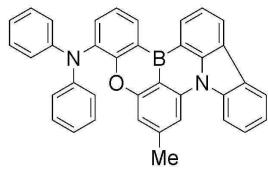
일반식(1)의 R^2 로서, 디아릴아미노, 카르바졸릴, 아크리디닐, 폐녹사지닐, 폐노티아지닐 및 폐나지닐을 가지는 경우에는, 합성의 관점에서, 카르바졸릴, 또는, a환에 결합한 N에 결합하는 탄소 원자의 인접한 탄소 원자는 치환기를 가지는 것이 바람직하다.

[0328]

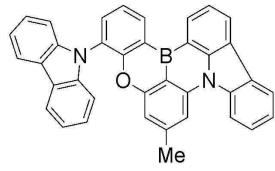
[화학식 84]



(BOCz-0210/0420)

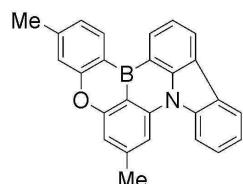


(BOCz-0210/0430)

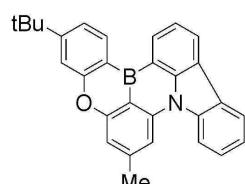


(BOCz-0210/0431)

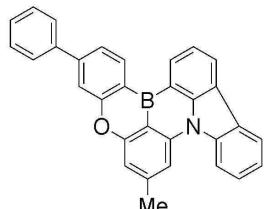
[0329]



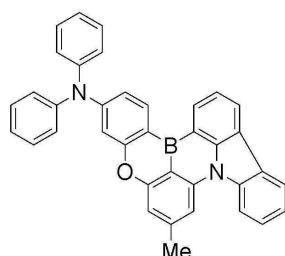
(BOCz-0210/0510)



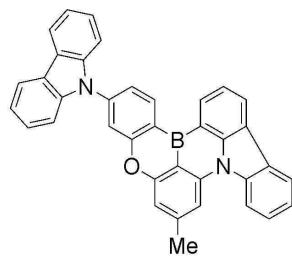
(BOCz-0210/0511)



(BOCz-0210/0520)

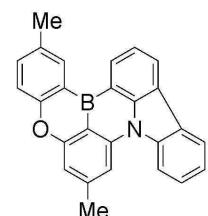


(BOCz-0210/0530)

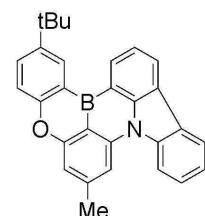


(BOCz-0210/0531)

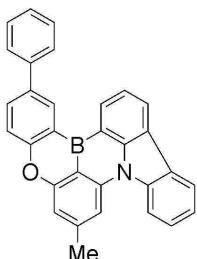
[0330]



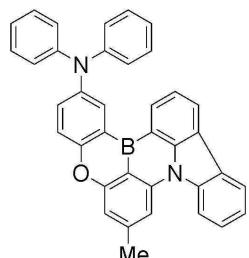
(BOCz-0210/0610)



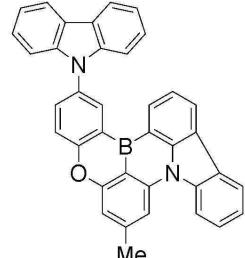
(BOCz-0210/0611)



(BOCz-0210/0620)



(BOCz-0210/0630)

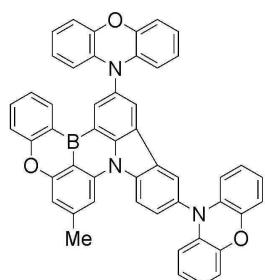
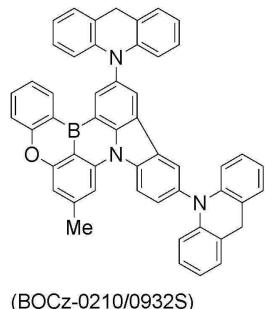
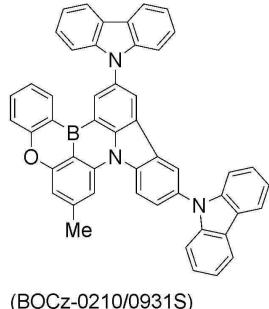
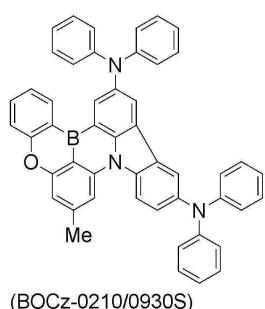
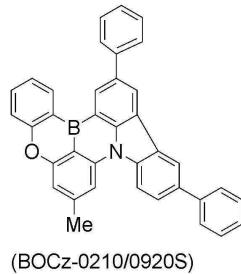
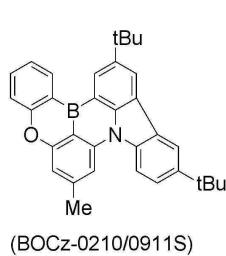
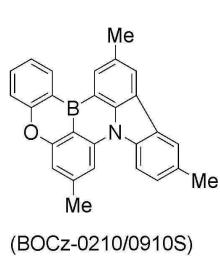


(BOCz-0210/0631)

[0331]

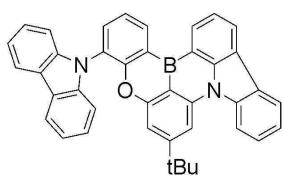
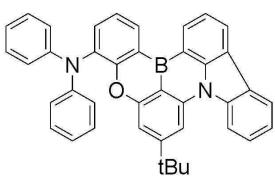
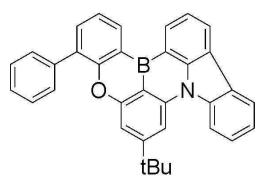
[0332]

[화학식 85]

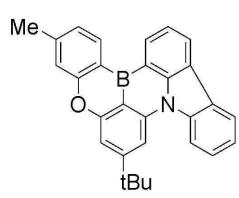


[0333]

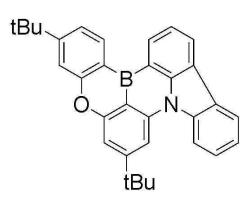
[화학식 86]



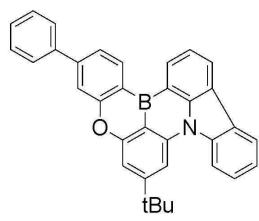
[0335]



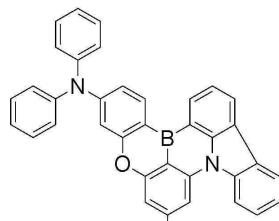
(BOCz-0211/0510)



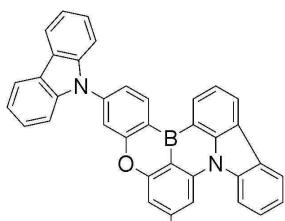
(BOCz-0211/0511)



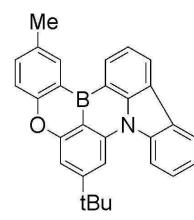
(BOCz-0211/0520)



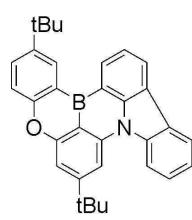
[0336] (BOCz-0211/0530)



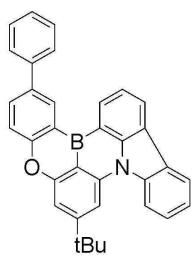
(BOCz-0211/0531)



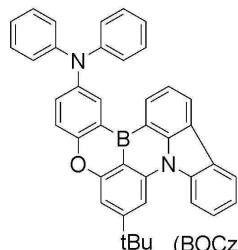
(BOCz-0211/0610)



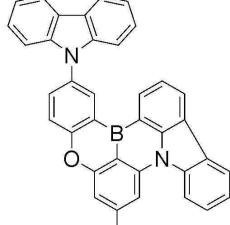
(BOCz-0211/0611)



(BOCz-0211/0620)



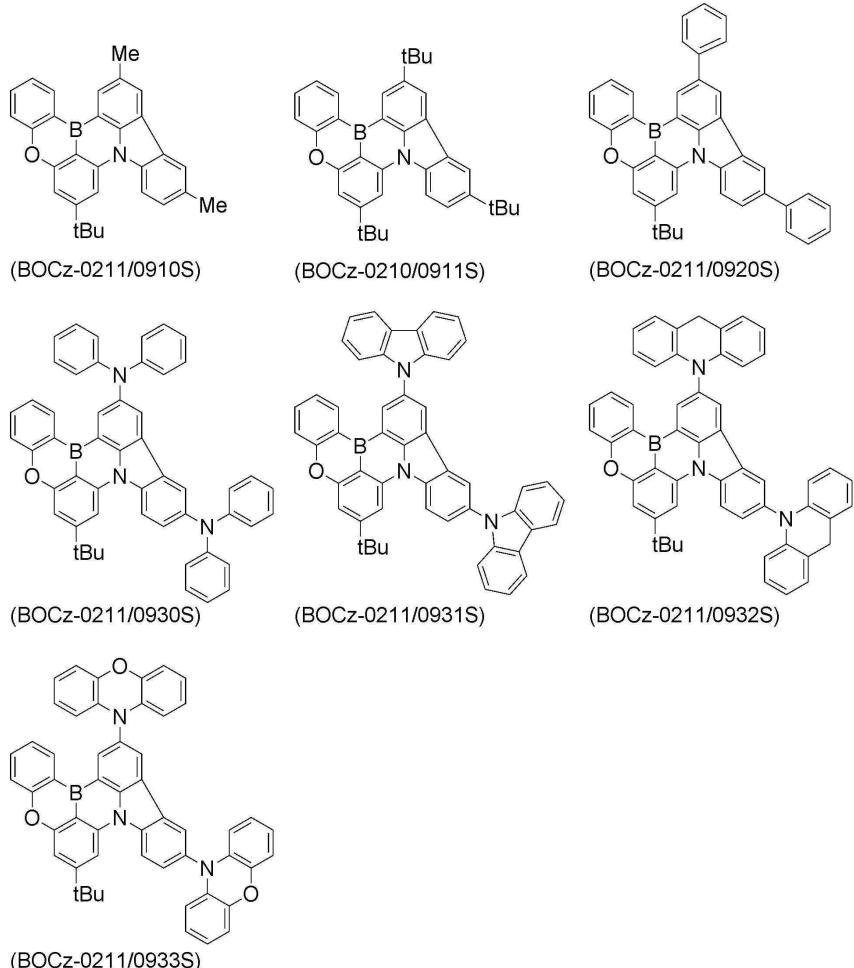
(BOCz-0211/0630)



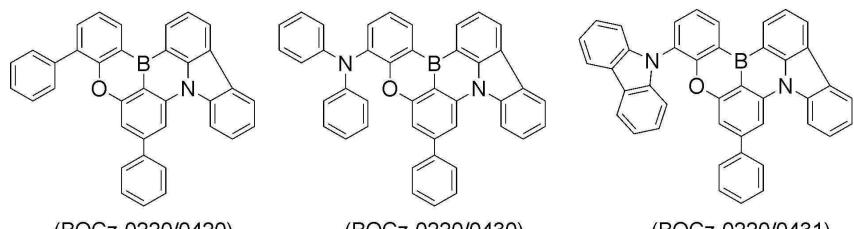
(BOCz-0211/0631)

[0338]

[화학식 87]



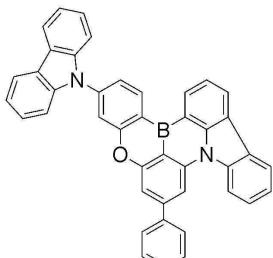
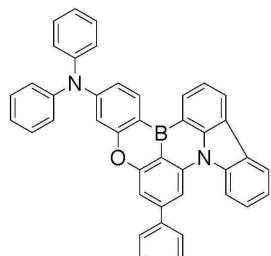
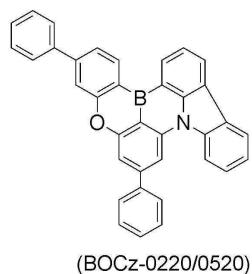
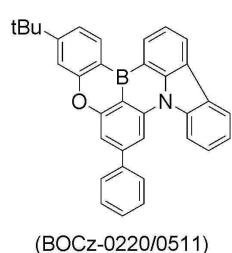
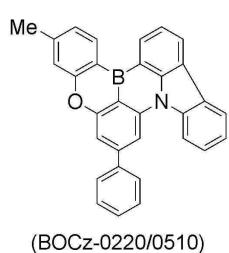
[0339]



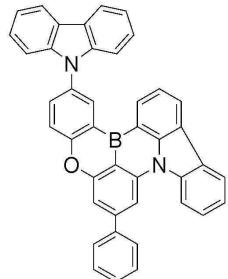
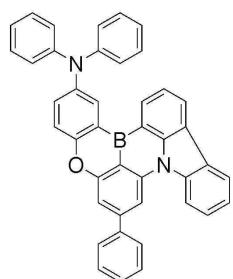
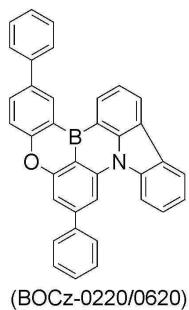
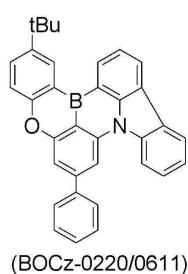
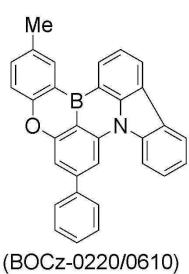
[0340]

[0341]

[화학식 88]



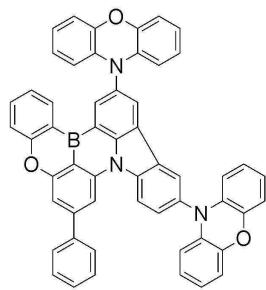
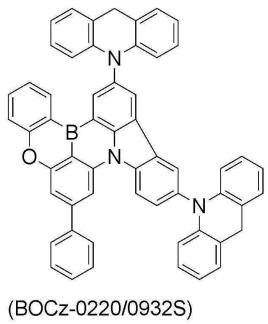
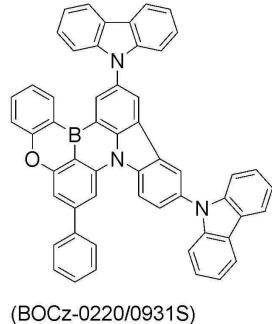
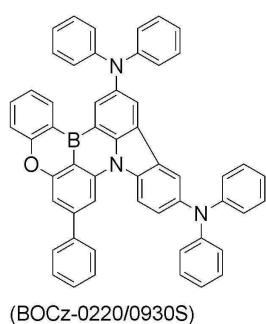
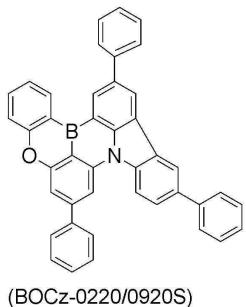
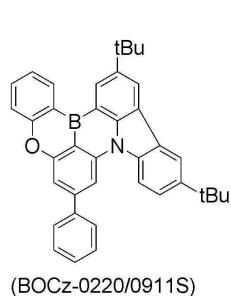
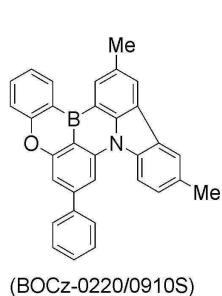
[0342]



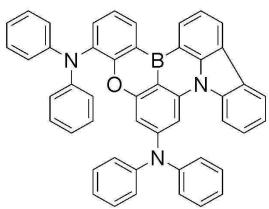
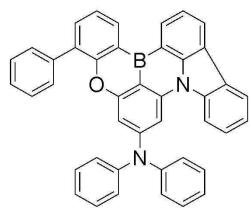
[0343]

[0344]

[화학식 89]



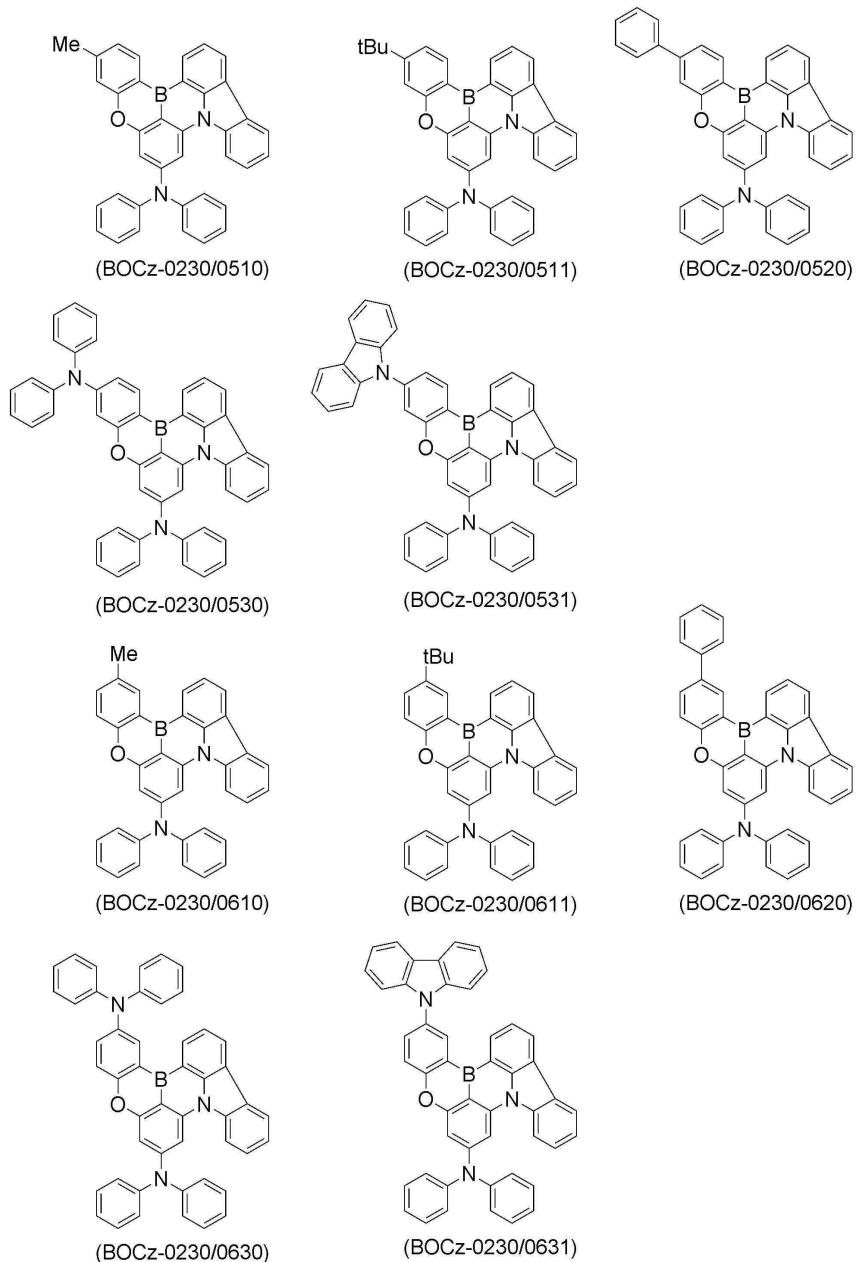
[0345]



[0346]

[0347]

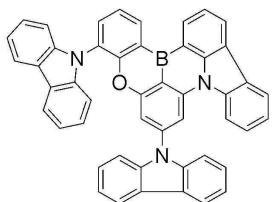
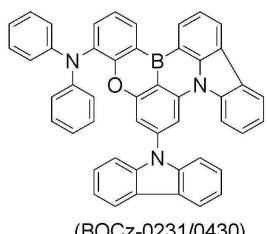
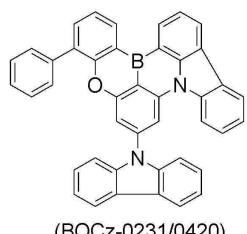
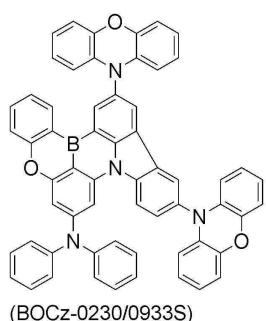
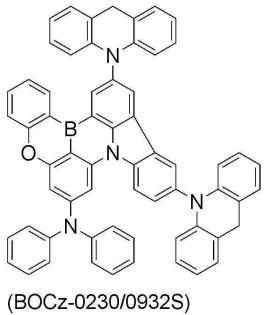
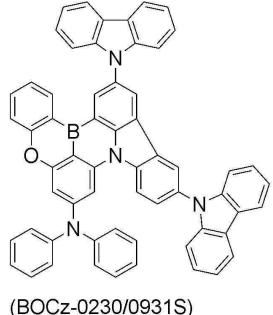
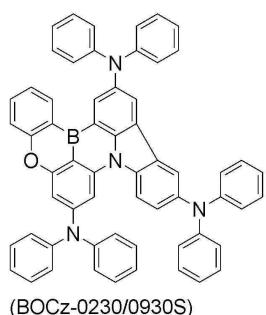
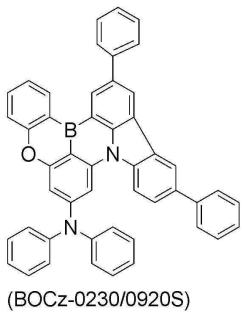
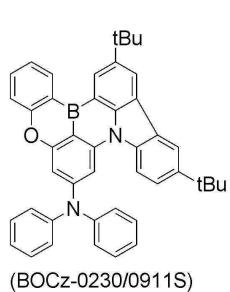
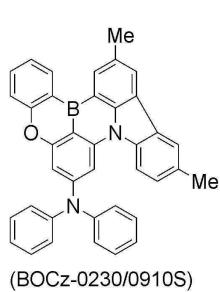
[화학식 90]



[0348]

[0349]

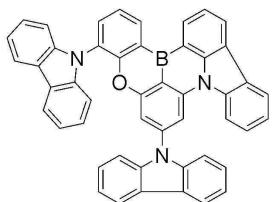
[화학식 91]



[0350]

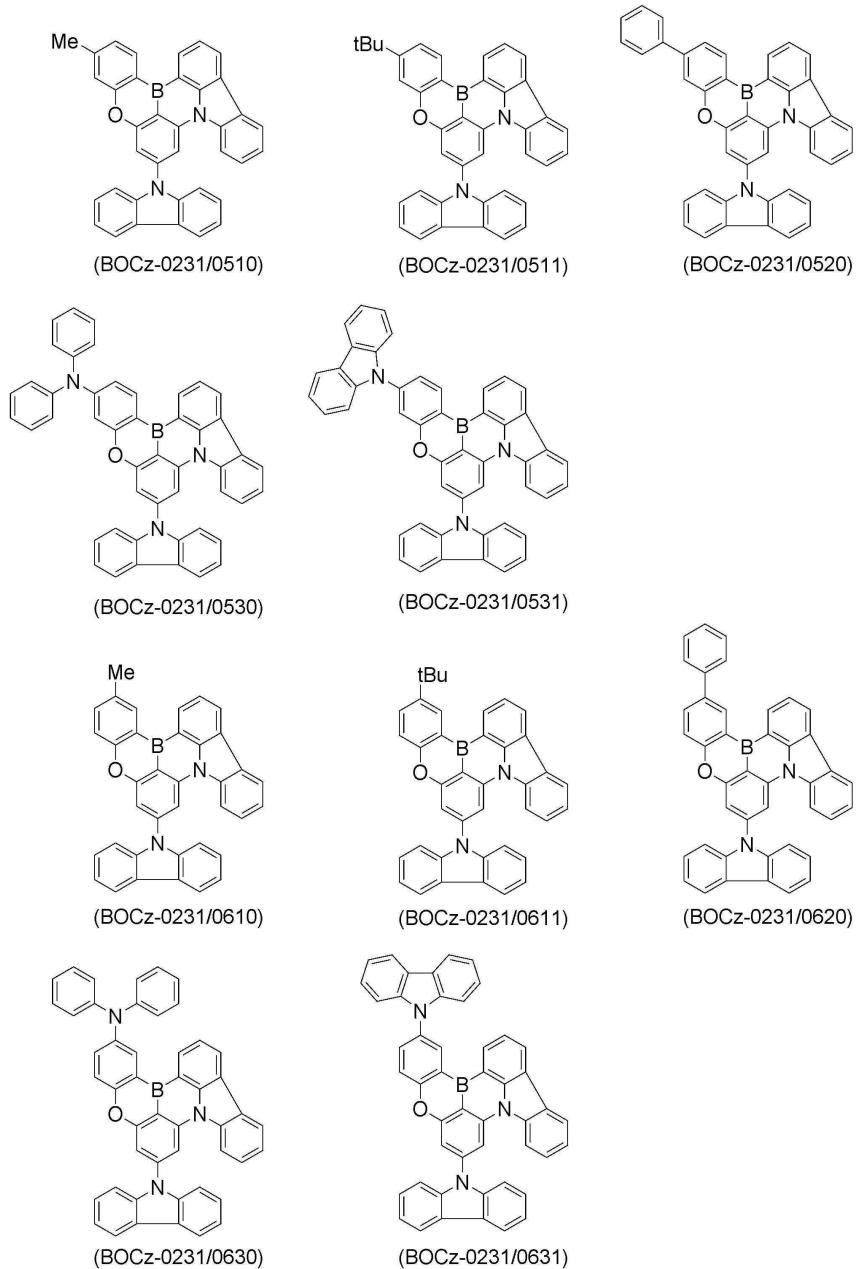


[0351]



[0352]

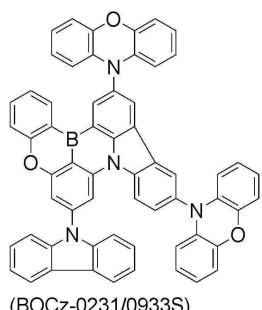
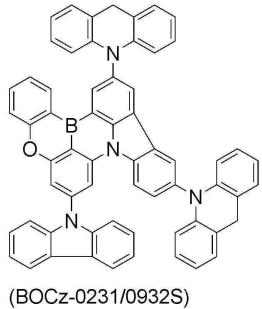
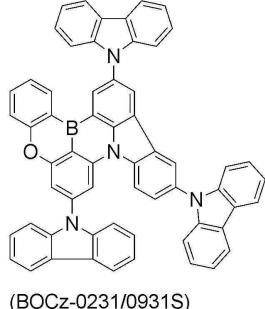
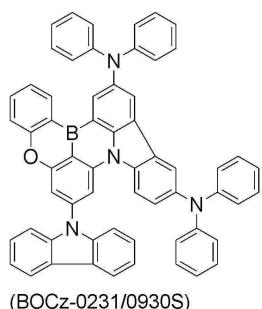
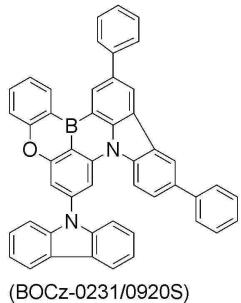
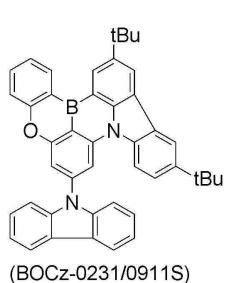
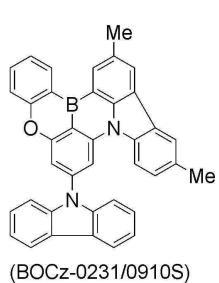
[화학식 92]



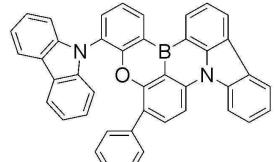
[0353]

[0354]

[화학식 93]



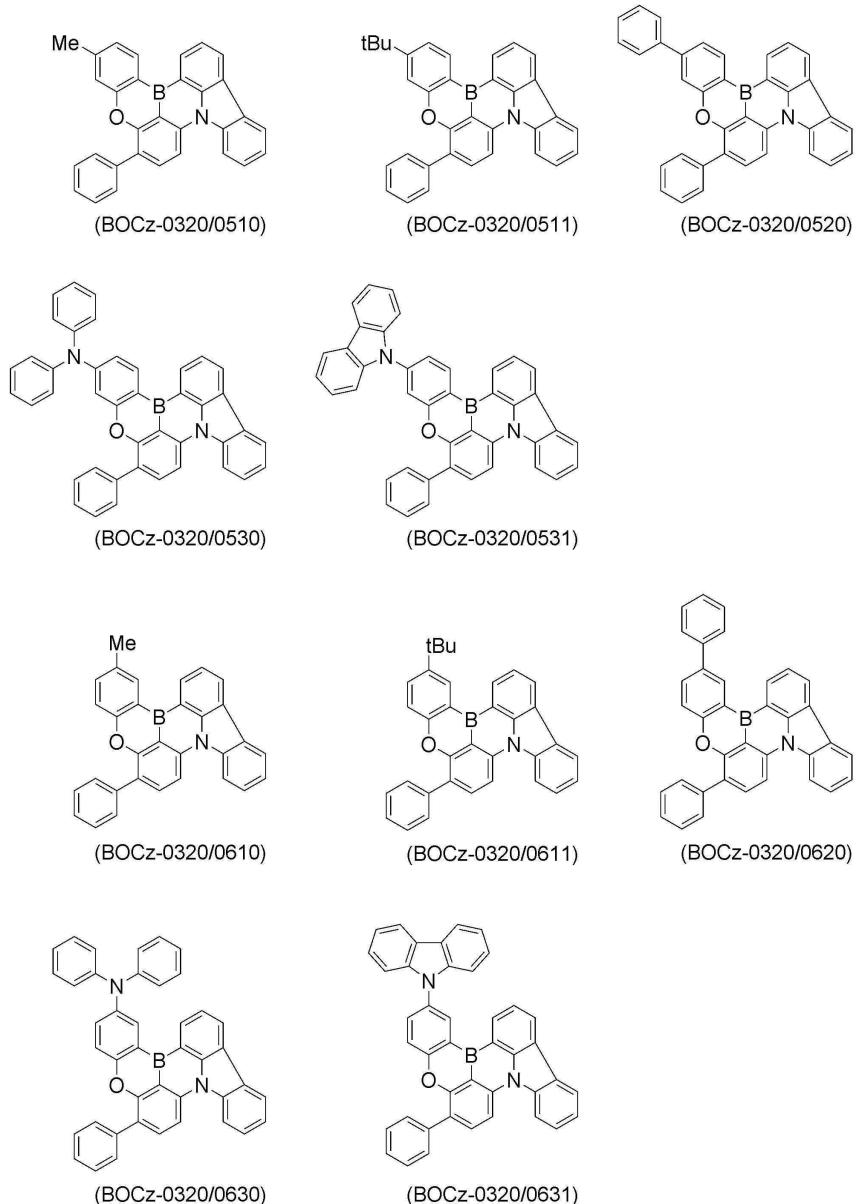
[0355]



[0356]

[0357]

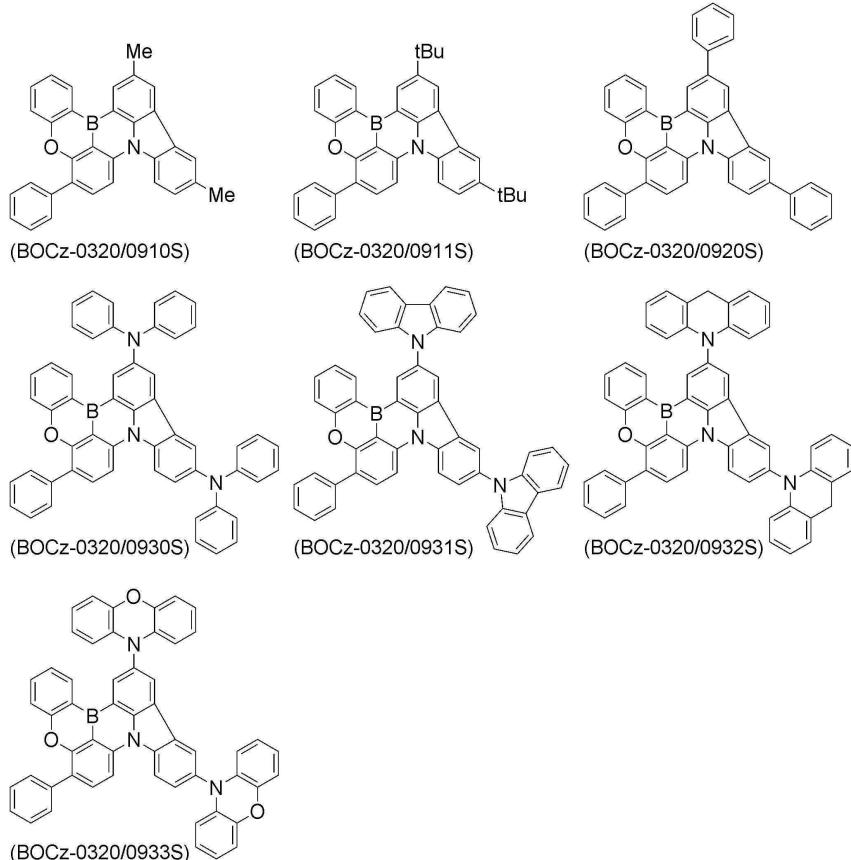
[화학식 94]



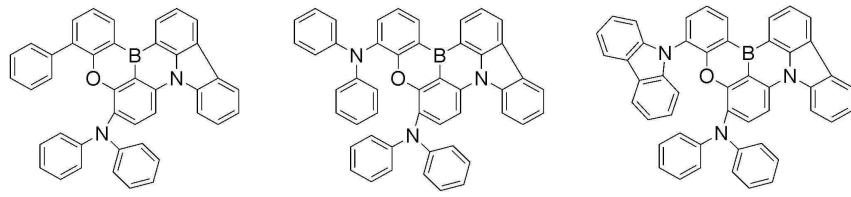
[0358]

[0359]

[화학식 95]



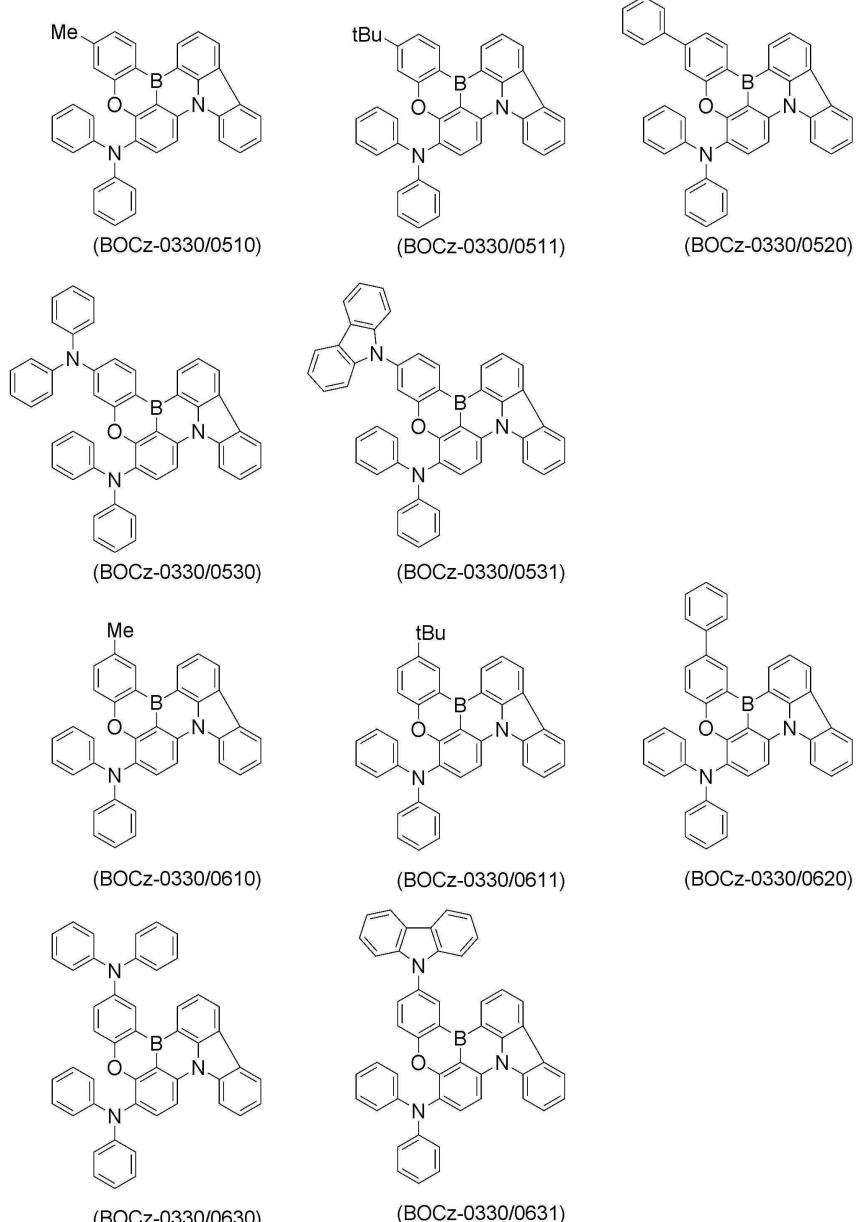
[0360]



[0361]

[0362]

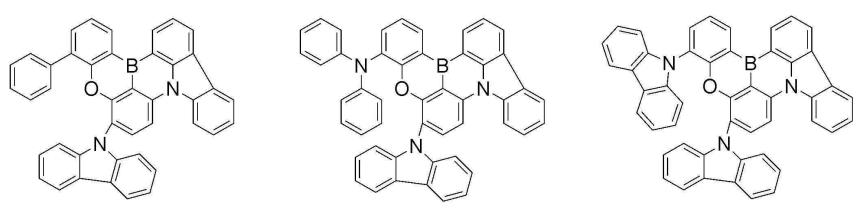
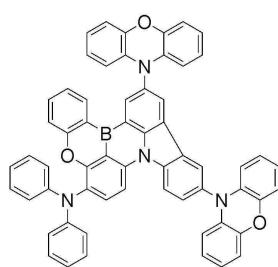
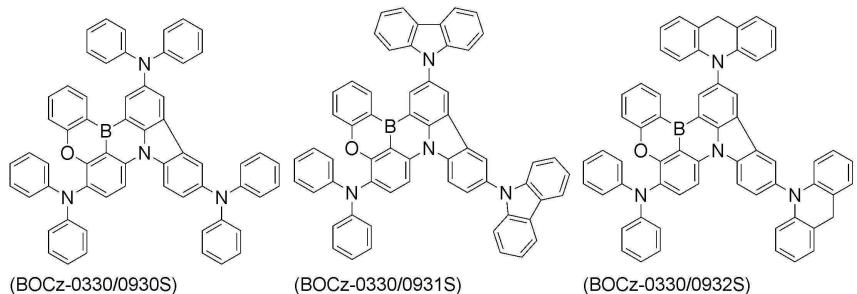
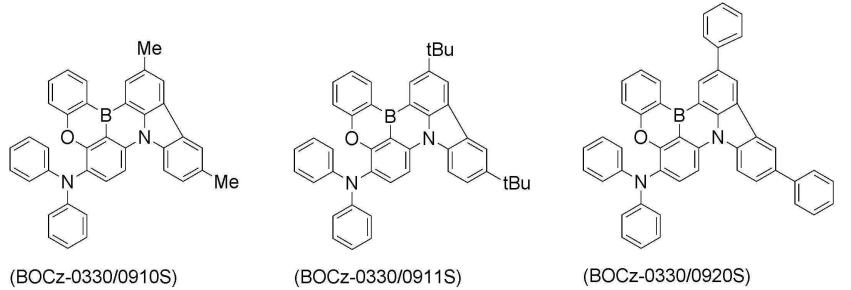
[화학식 96]



[0363]

[0364]

[화학식 97]

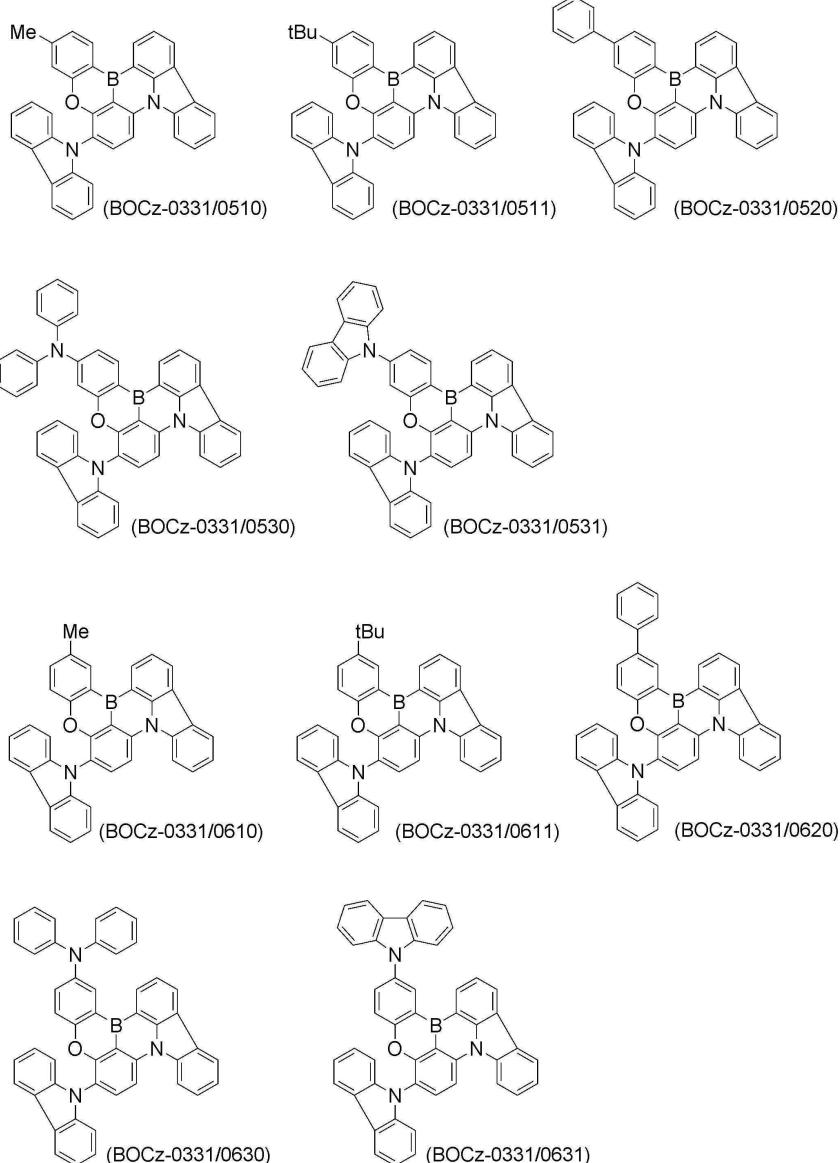


[0365]

[0366]

[0367]

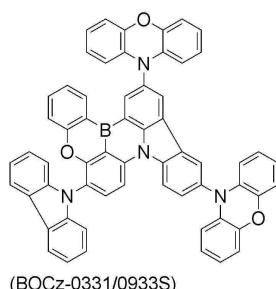
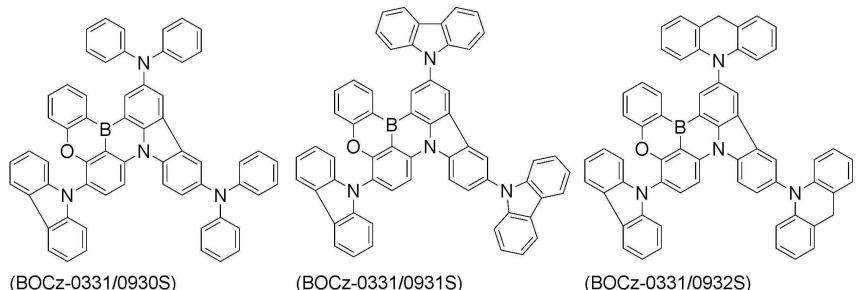
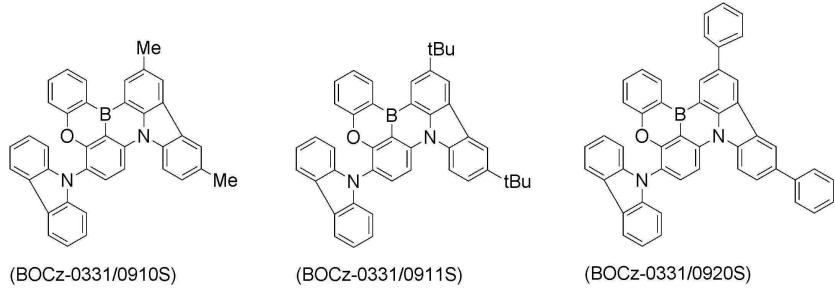
[화학식 98]



[0368]

[0369]

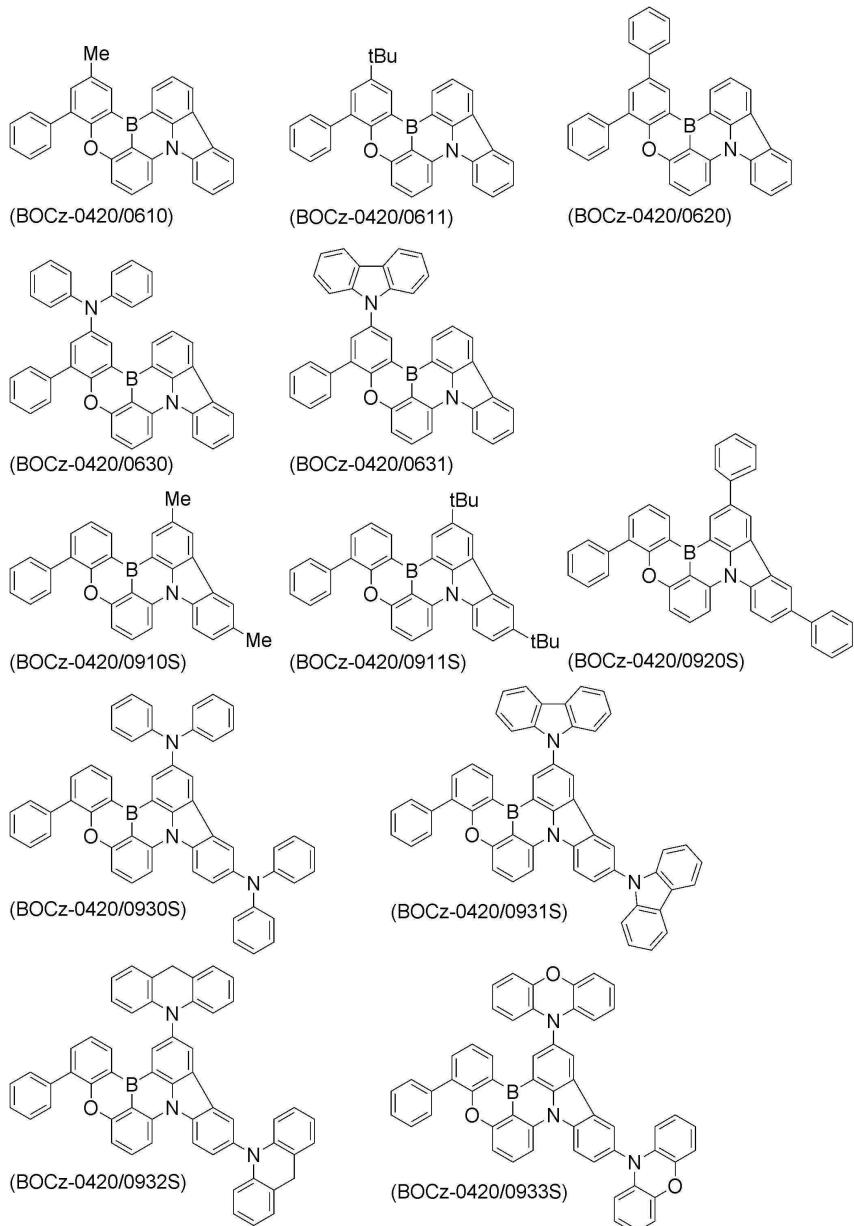
[화학식 99]



[0370]

[0371]

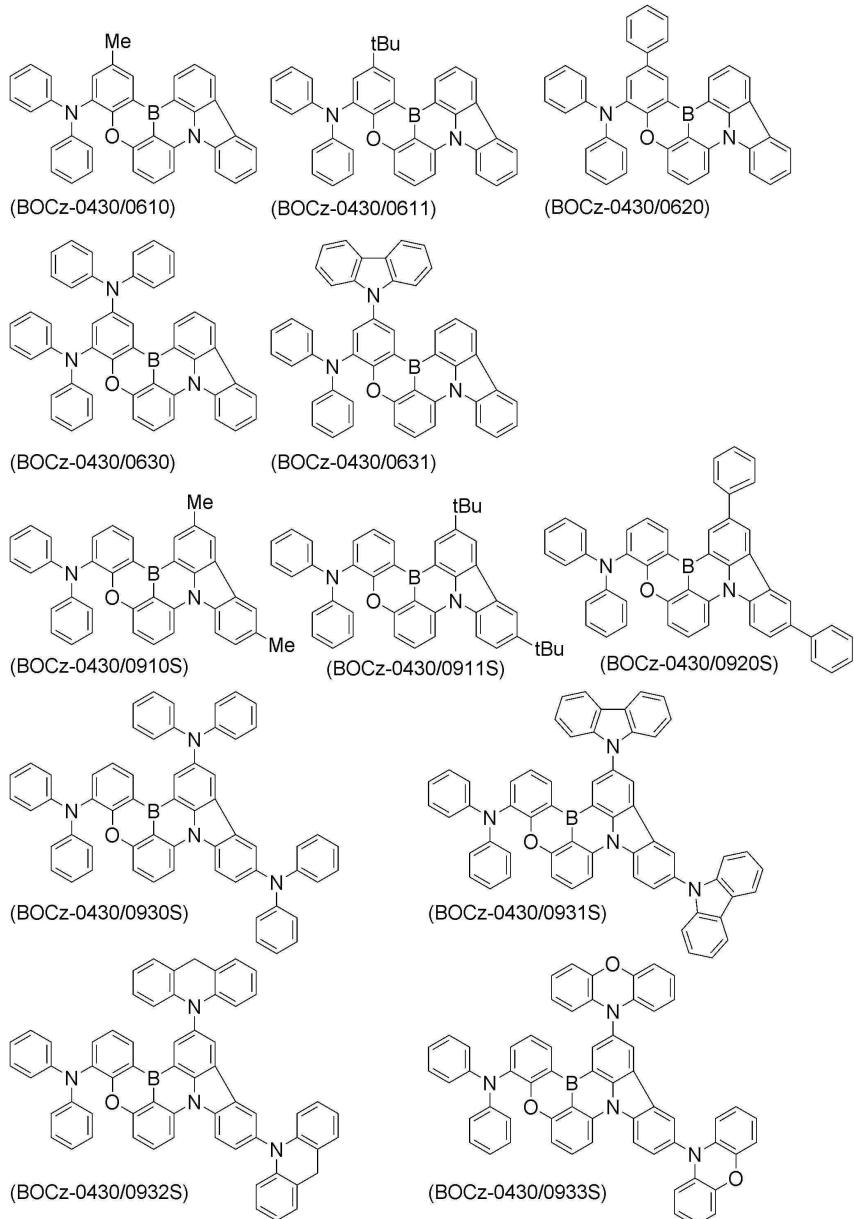
[화학식 100]



[0372]

[0373]

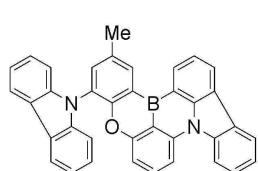
[화학식 101]



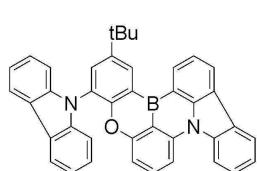
[0374]

[0375]

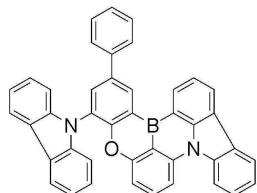
[화학식 102]



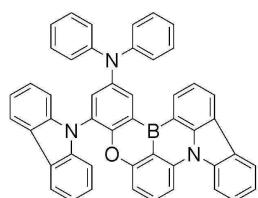
(BOCz-0431/0610)



(BOCz-0431/0611)



(BOCz-0431/0620)



(BOCz-0431/0630)

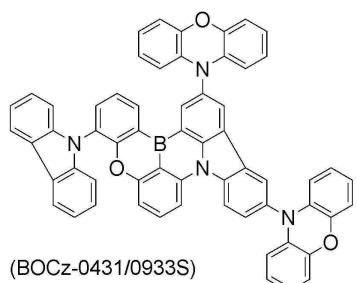
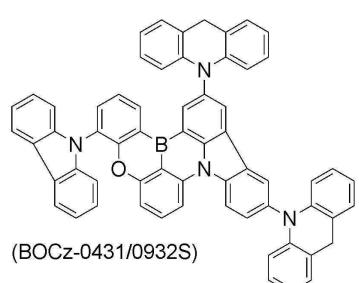
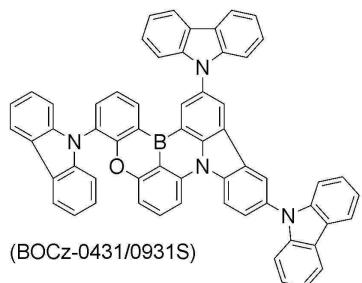
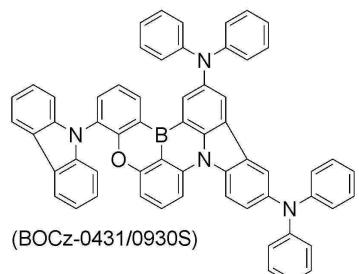
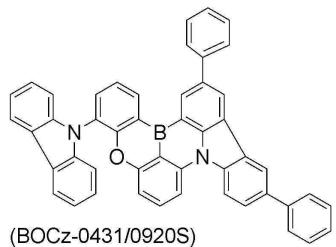
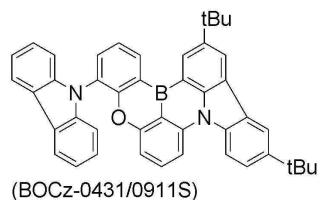
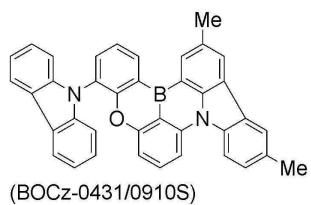


(BOCz-0431/0631)

[0376]

[0377]

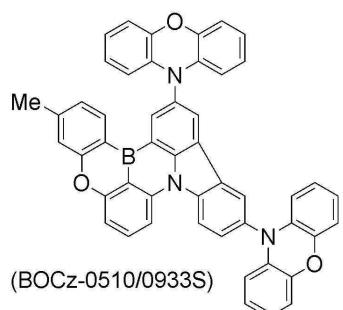
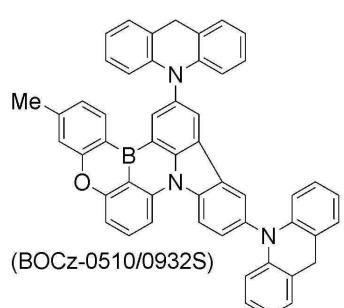
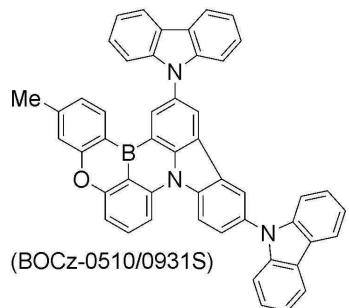
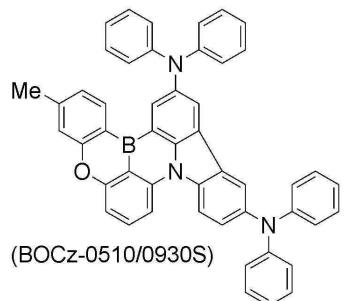
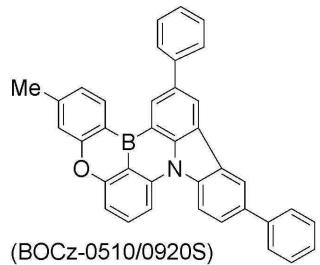
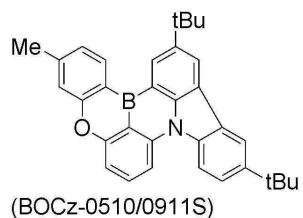
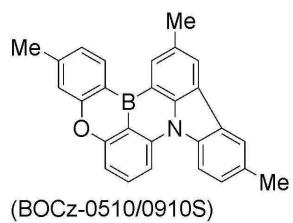
[화학식 103]



[0378]

[0379]

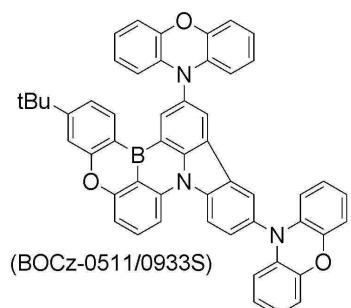
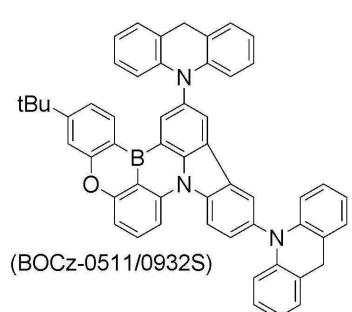
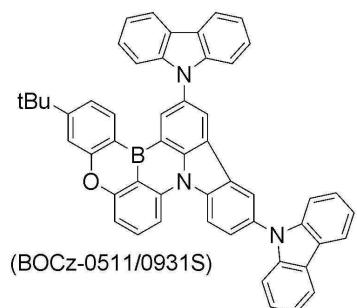
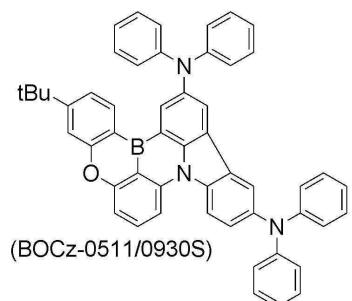
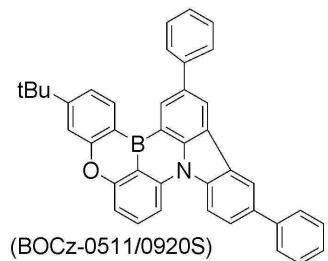
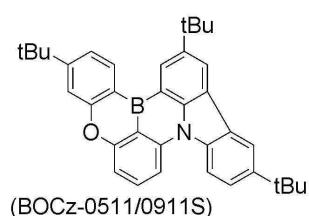
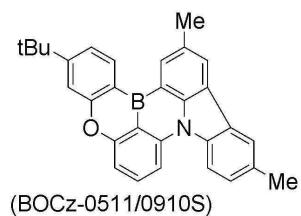
[화학식 104]



[0380]

[0381]

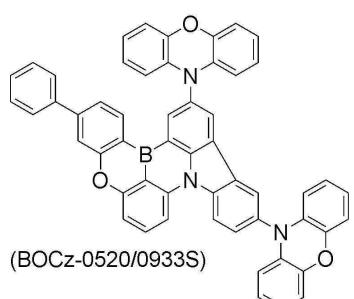
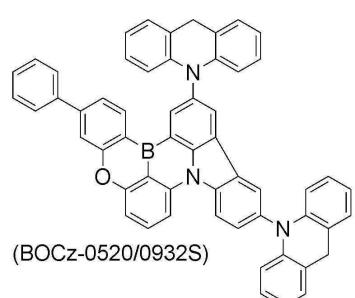
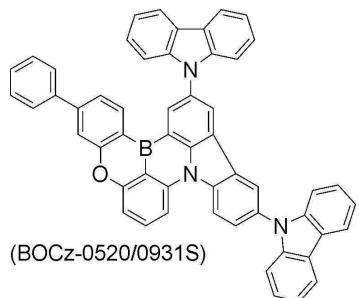
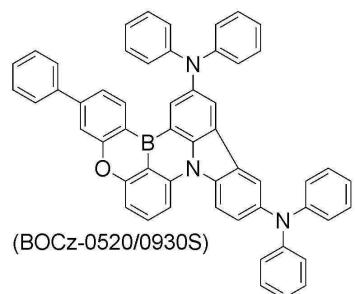
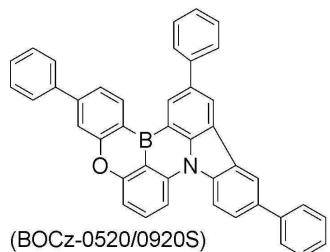
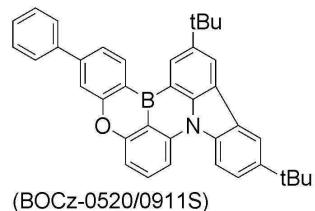
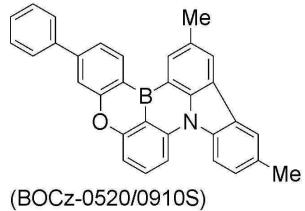
[화학식 105]



[0382]

[0383]

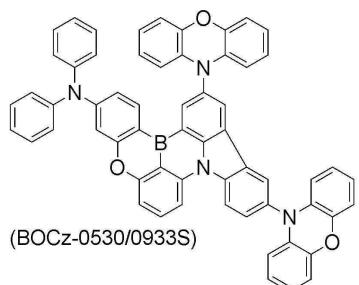
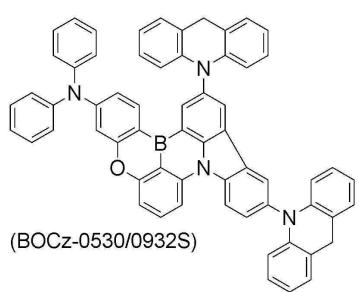
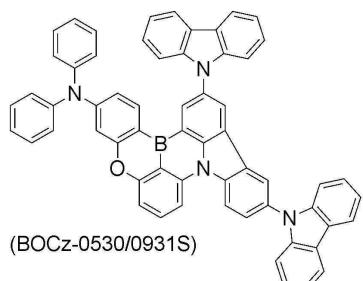
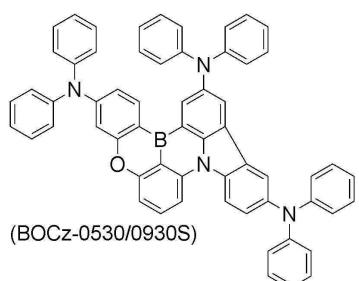
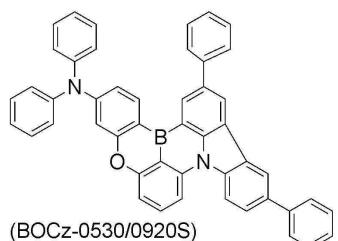
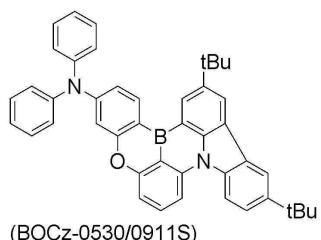
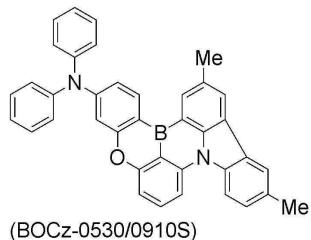
[화학식 106]



[0384]

[0385]

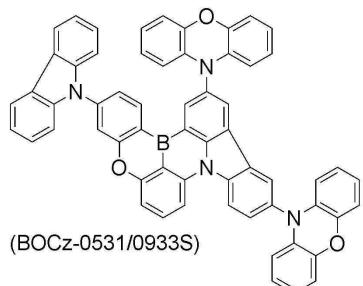
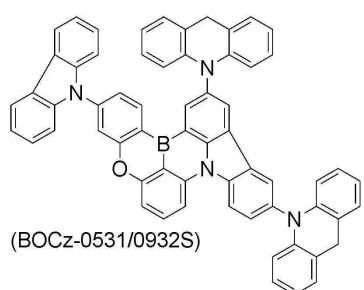
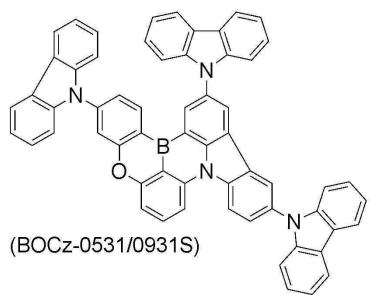
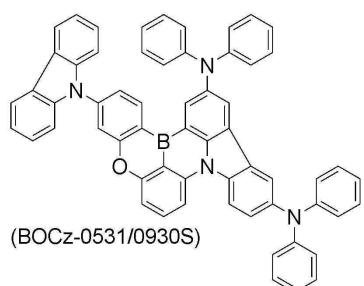
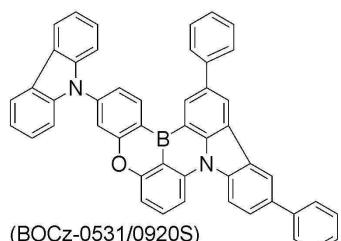
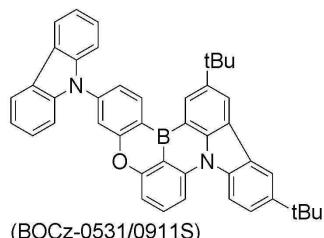
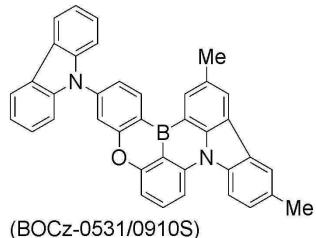
[화학식 107]



[0386]

[0387]

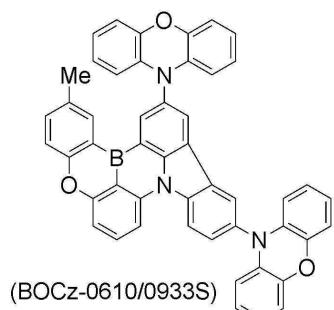
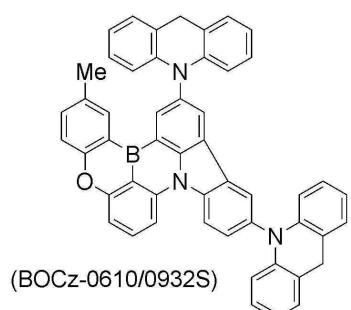
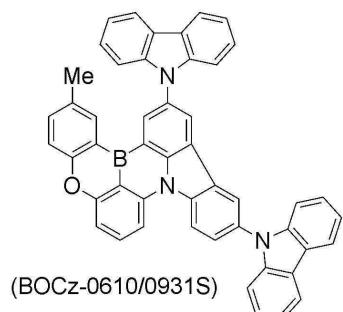
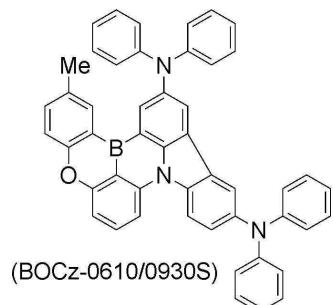
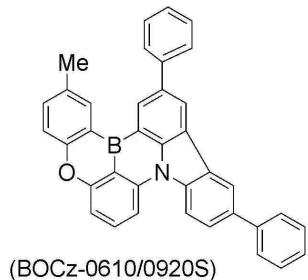
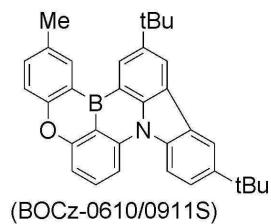
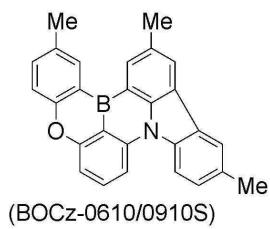
[화학식 108]



[0388]

[0389]

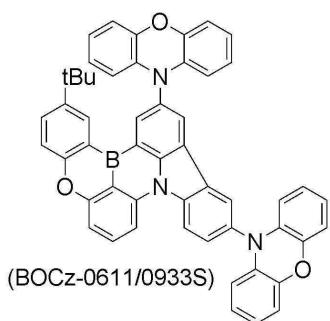
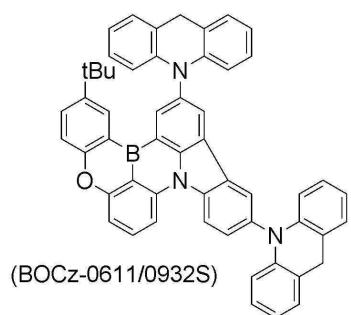
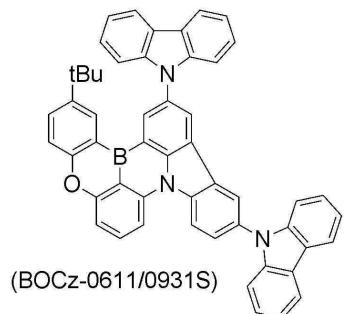
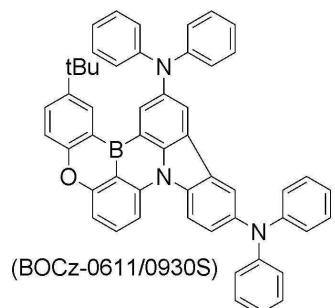
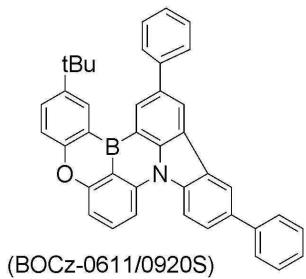
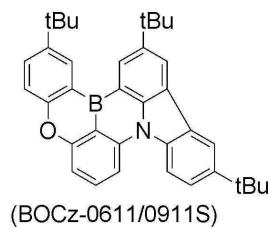
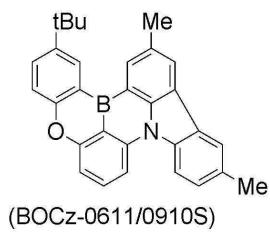
[화학식 109]



[0390]

[0391]

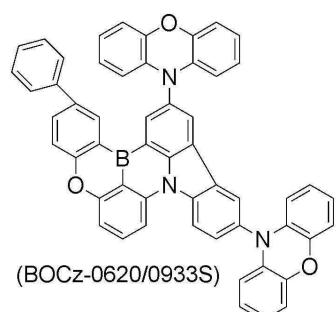
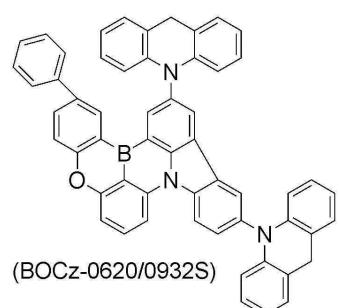
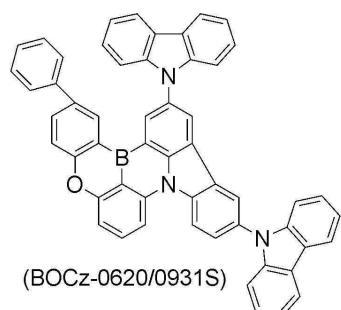
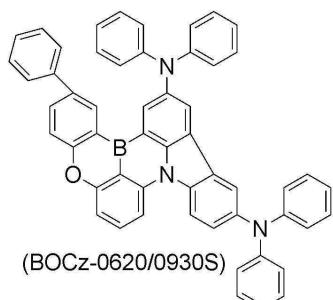
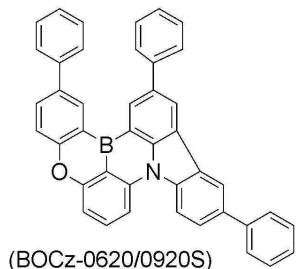
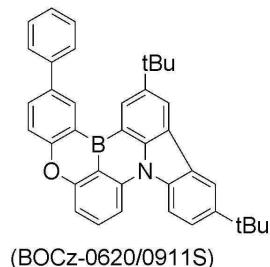
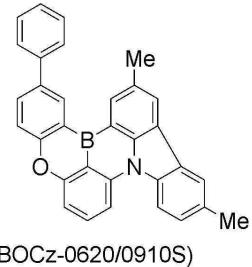
[화학식 110]



[0392]

[0393]

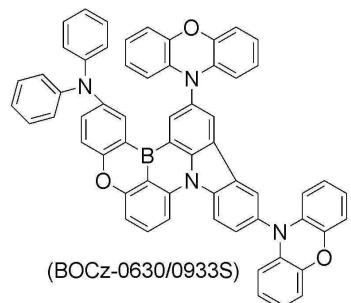
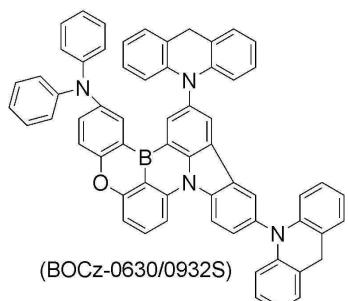
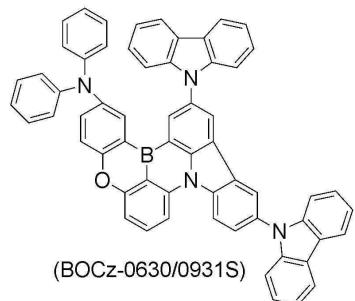
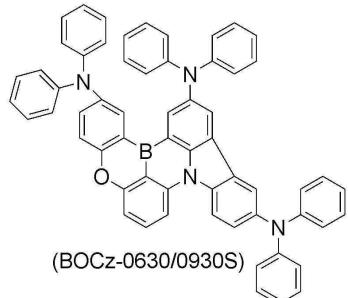
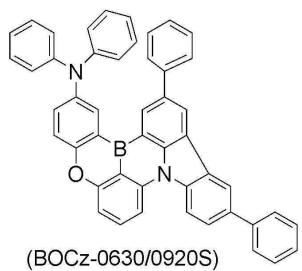
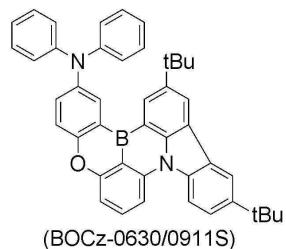
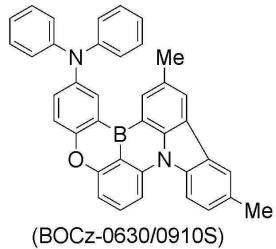
[화학식 111]



[0394]

[0395]

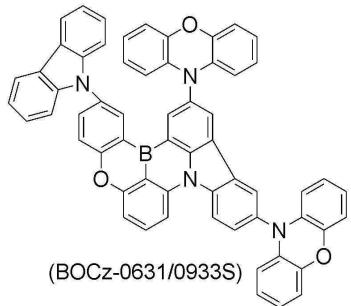
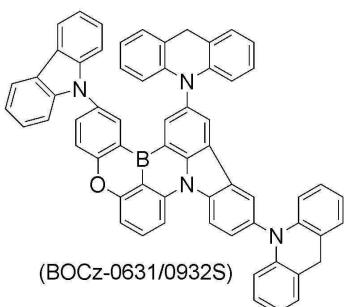
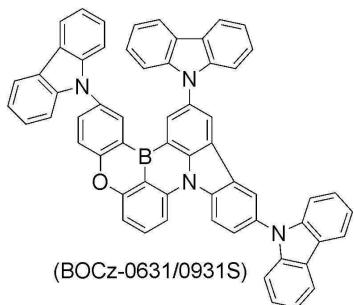
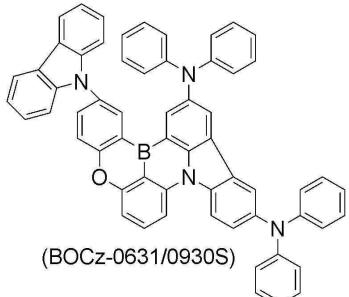
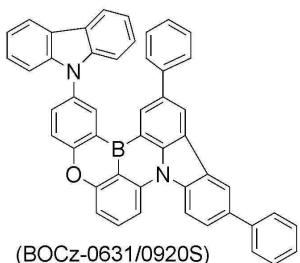
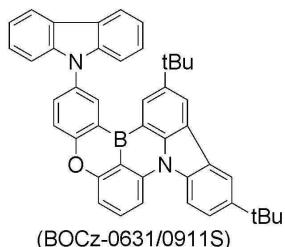
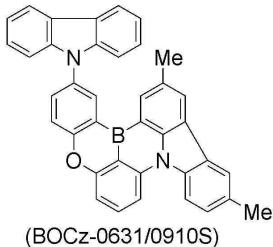
[화학식 112]



[0396]

[0397]

[화학식 113]



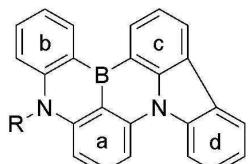
[0398]

[0399]

예를 들면, 일반식(BNCz-1)에 있어서 $R^1 \sim R^{14}$ 가 수소인 경우, 일반식(BNCz-0001)으로 표시된다.

[0400]

[화학식 114]



[0401]

>N-R에서의 R은, 페닐, 비페닐 및 터페닐이 바람직하고, 페닐이 보다 바람직하다.

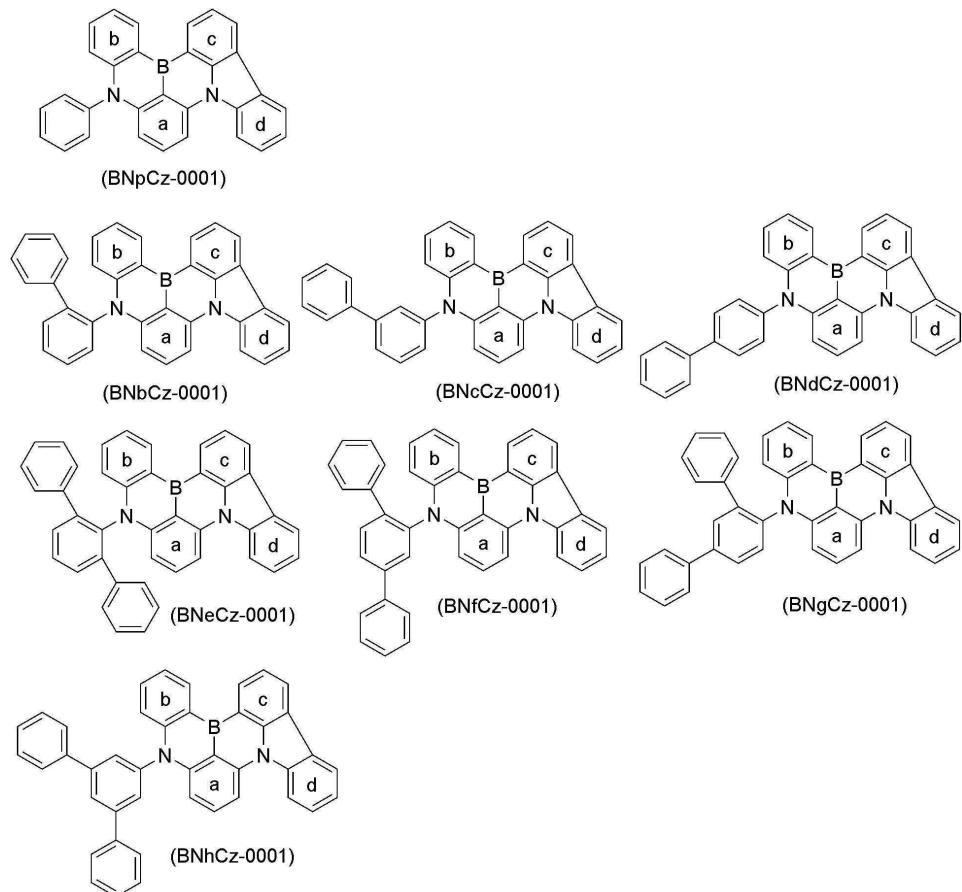
[0402]

예를 들면, 일반식(BNCz-0001)에 있어서 >N-R의 R이, 페닐, 비페닐, 터페닐인 경우, 일반식(BNpCz-0001), 식(BNbCz-0001), 식(BNcCz-0001), 식(BNdCz-0001), 식(BNeCz-0001), 식(BNfCz-0001), 식(BNgCz-0001) 및 식(BNhCz-0001)으로 표시된다. 합성 시의 안정성의 관점에서 식(BNpCz-0001)이 바람직하다. 응집성의 관점에서,

오르토 위치에 치환기를 가지는 화합물이 바람직하고, 예를 들면, 식(BNbCz-0001), 식(BNeCz-0001), 식(BNfCz-0001) 및 식(BNgCz-0001)이 바람직하다.

[0404]

[화학식 115]



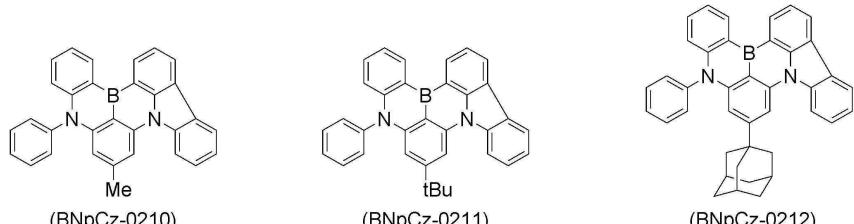
[0405]

[0406]

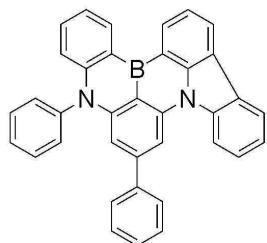
또한, 일반식(BNpCz-1)에서의 $R^1 \sim R^{14}$ 가 수소가 아닌 치환기를 가지는 경우, 예를 들면, 다음 구조가 있다. 입체적인 조밀 상태의 관점에서, R^2 , R^5 , R^6 , R^9 , R^{10} , R^{11} , R^{12} 및 R^{13} 에는 어떠한 치환기도 가질 수 있고, 합성의 관점에서 치환 위치는 R^2 , R^5 , R^6 , R^9 , R^{12} 및 R^{13} 이 바람직하다.

[0407]

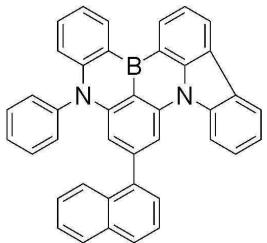
[화학식 116]



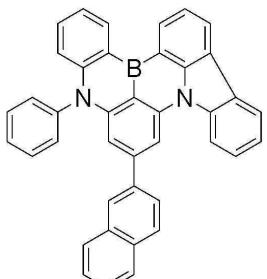
[0408]



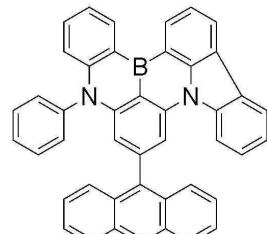
(BNpCz-0220)



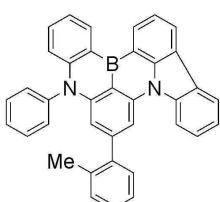
(BNpCz-0221)



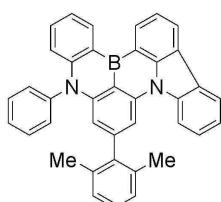
(BNpCz-0222)



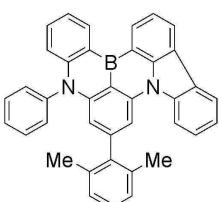
(BNpCz-0223)



(BNpCz-0220-1)

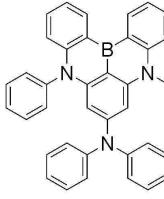


(BNpCz-0220-2)

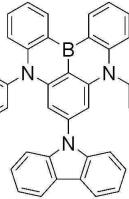


(BNpCz-0220-3)

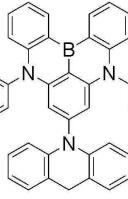
[0411] [화학식 117]



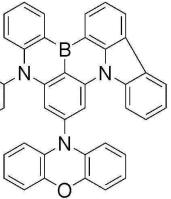
(BNpCz-0230)



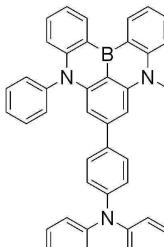
(BNpCz-0231)



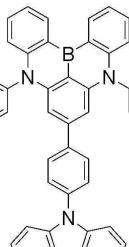
(BNpCz-0232)



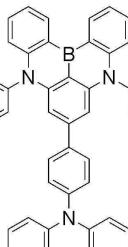
(BNpCz-0233)



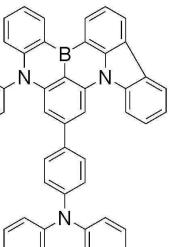
(BNpCz-0240)



(BNpCz-0241)

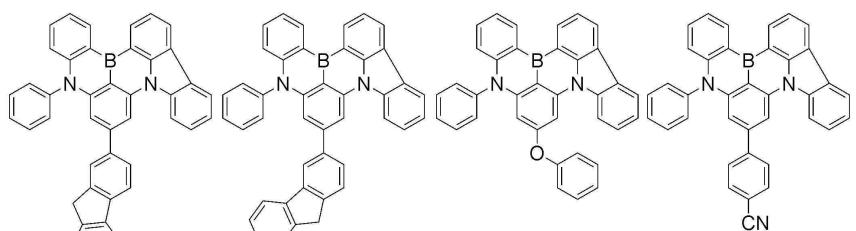
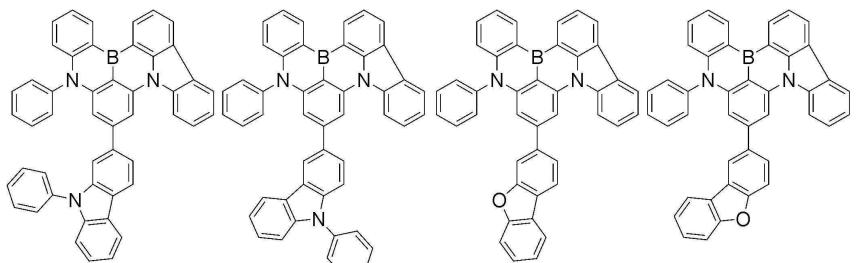


(BNpCz-0242)



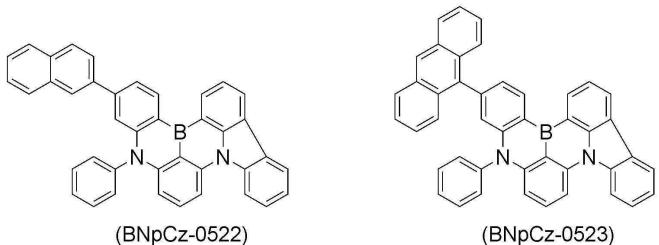
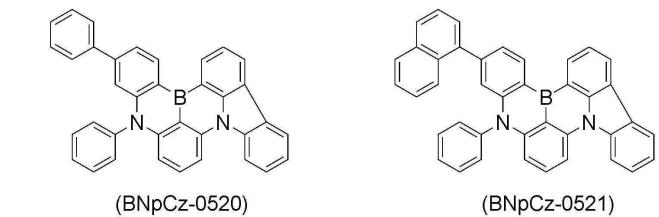
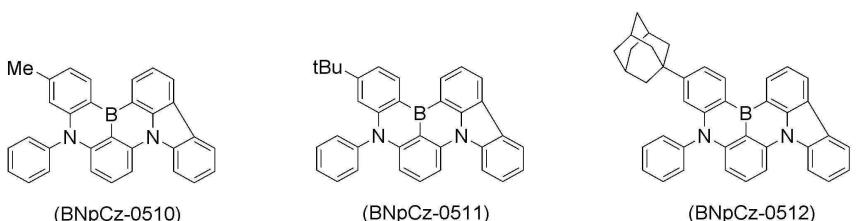
(BNpCz-0243)

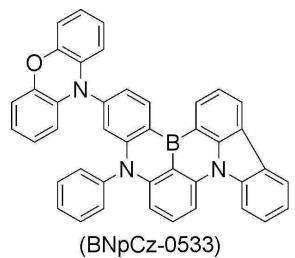
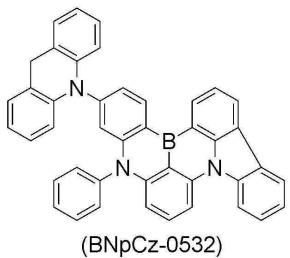
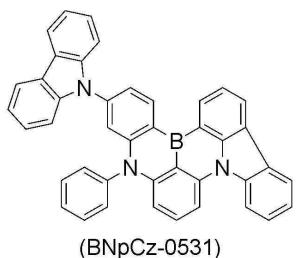
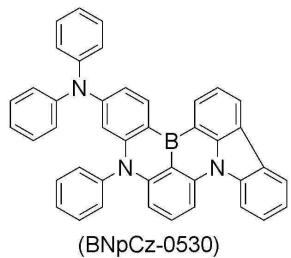
[0412]



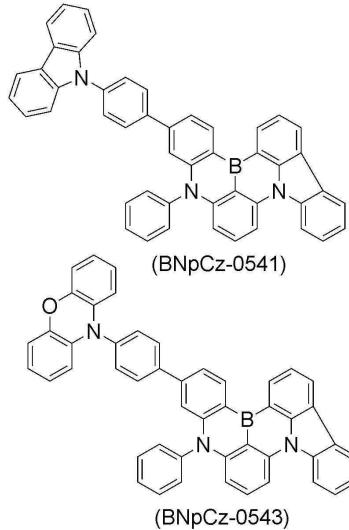
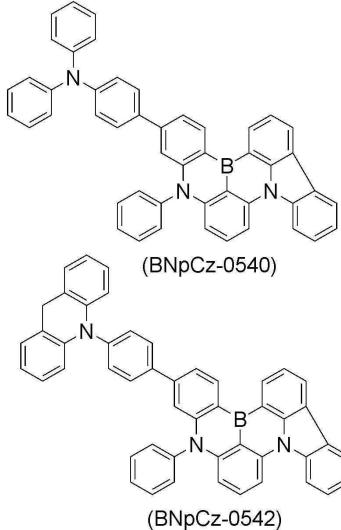
[0414]

[화학식 118]

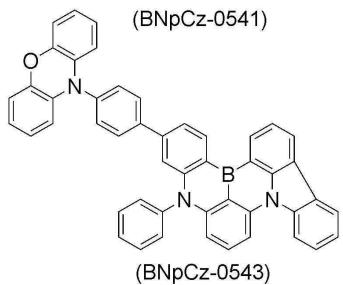
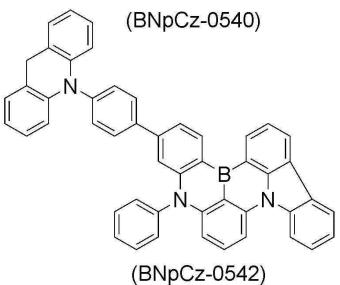


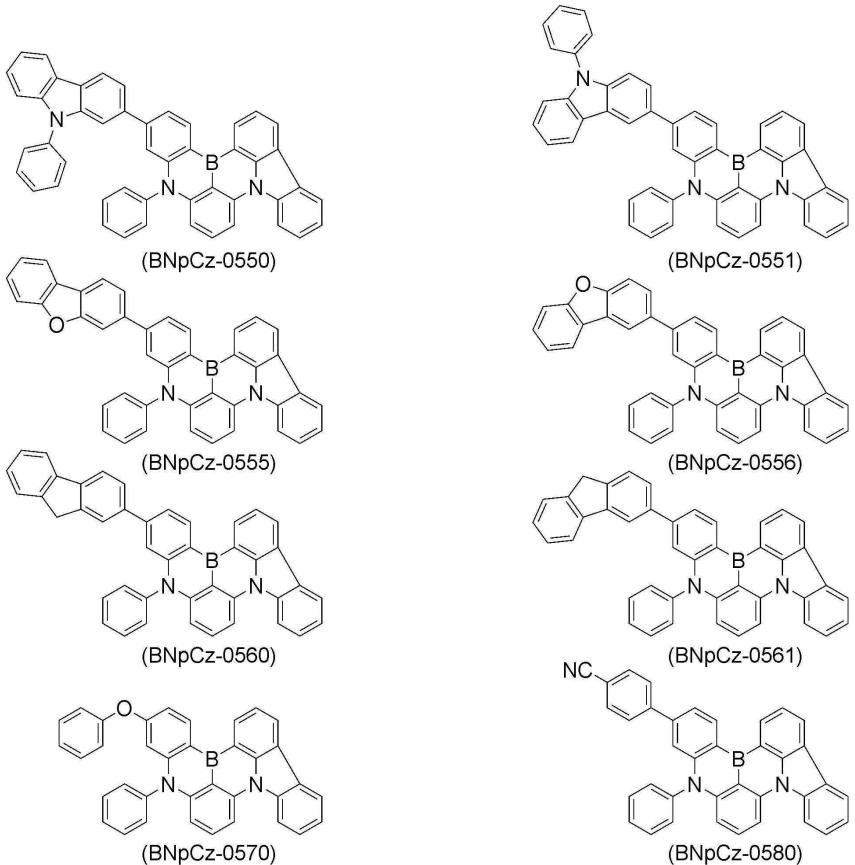


[0417]

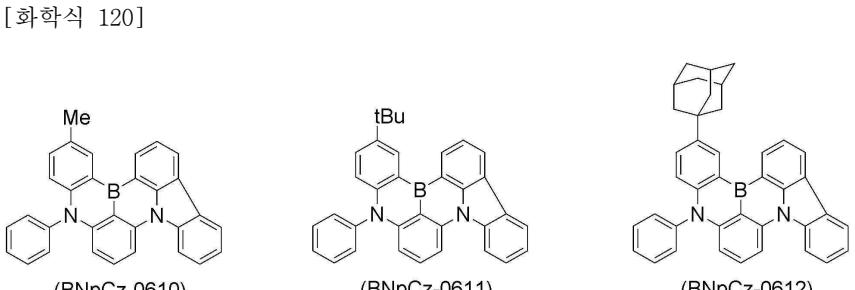


[0419]

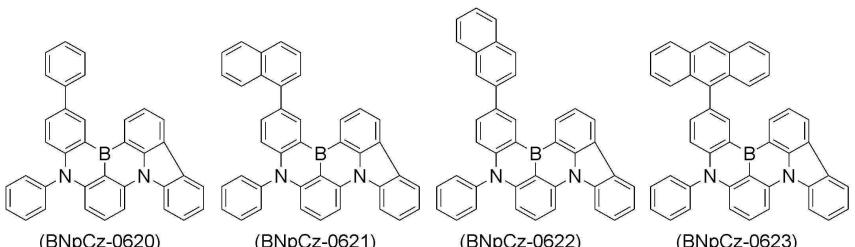




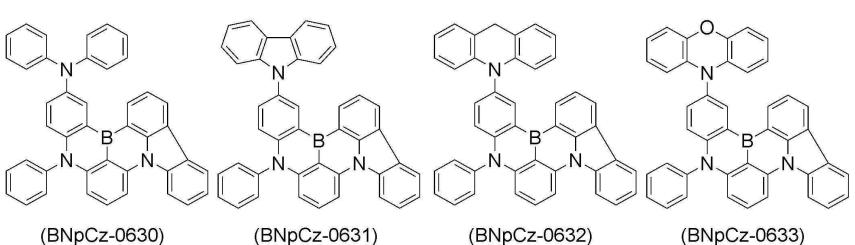
[0420]



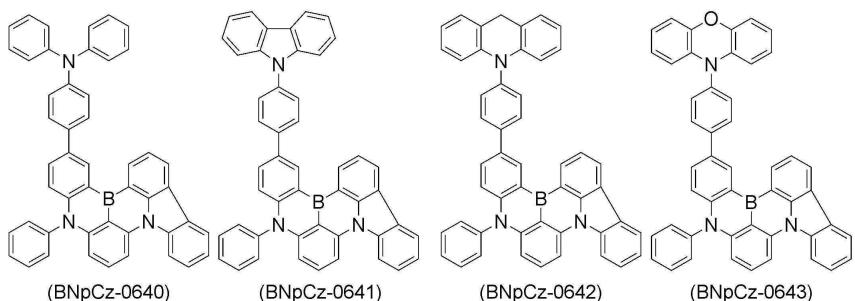
[0422]



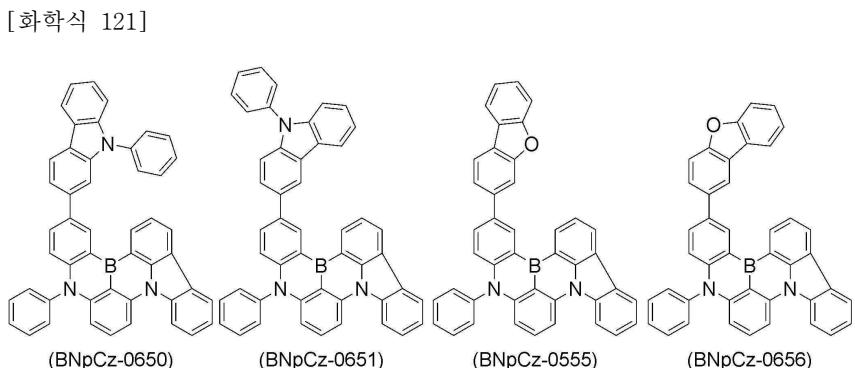
[0423]



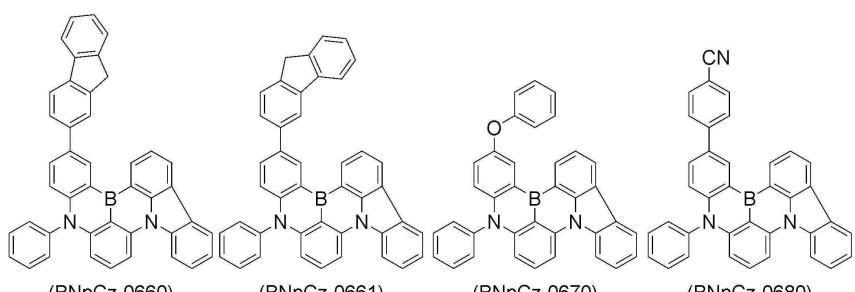
[0424]



[0425]



[0426]



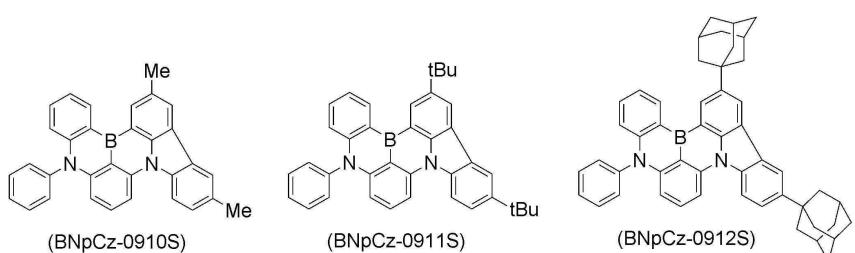
[0427]

[0428] 일반식(1)에 있어서 c환, d환 및 L에 의해 형성되는 방향족환(각각, 카르바졸환, 아크리딘환, 페녹사진환, 페노티아진환 및 페나진환을 부분 구조로 하여 형성할 수 있음)은 a환-N 결합에 대하여 선대칭으로 되도록 치환기를 가지는 것이 합성난이도의 관점에서 바람직하다. 즉, R⁸과 R¹³, R⁹과 R¹² 및 R¹⁰과 R¹¹이 동일한 치환기를 가지는 것이 바람직하다.

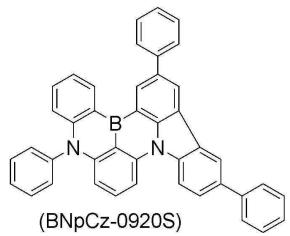
[0429]

[0429] 예를 들면, R⁹에 치환기를 가지는 일반식(BOCz-1)은, R¹²에도 동일한 치환기를 가지는 것이 바람직하고, 일반식(BOCz-09##S)으로 표시된다.

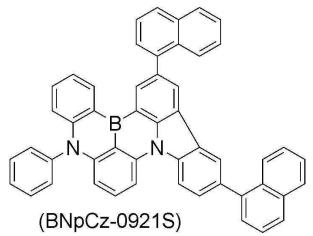
[0430] [화학식 122]



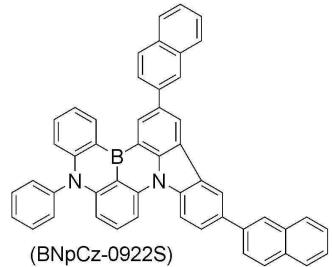
[0431]



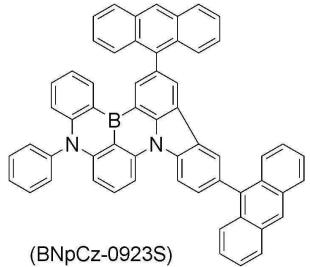
(BNpCz-0920S)



(BNpCz-0921S)

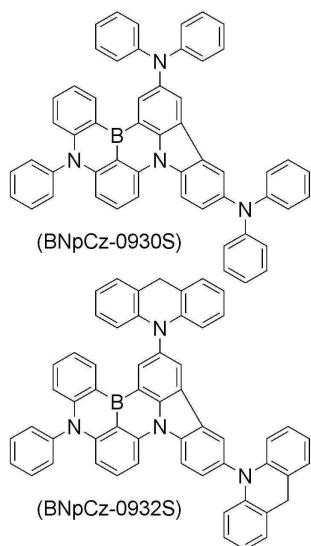


(BNpCz-0922S)

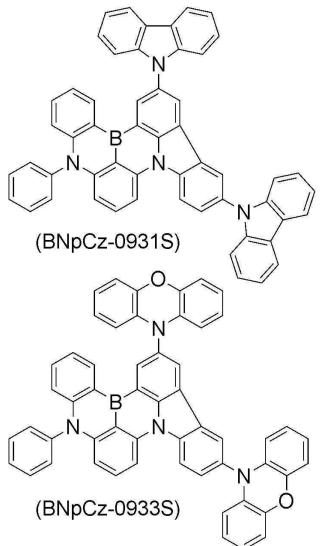


(BNpCz-0923S)

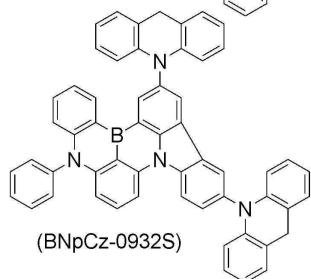
[0432]



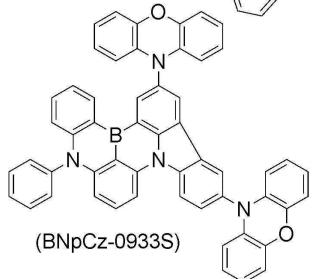
(BNpCz-0930S)



(BNpCz-0931S)



(BNpCz-0932S)

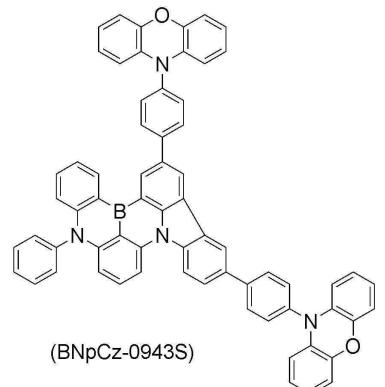
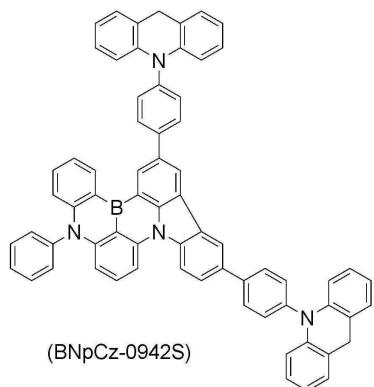
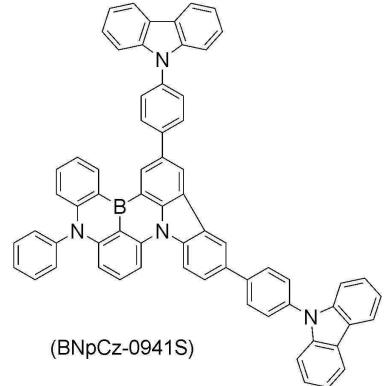
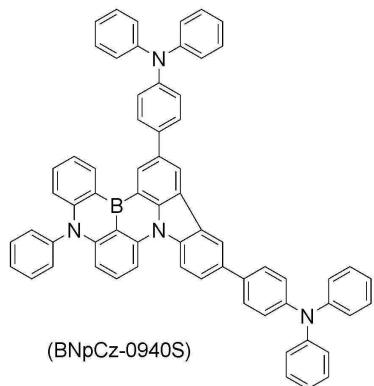


(BNpCz-0933S)

[0433]

[0434]

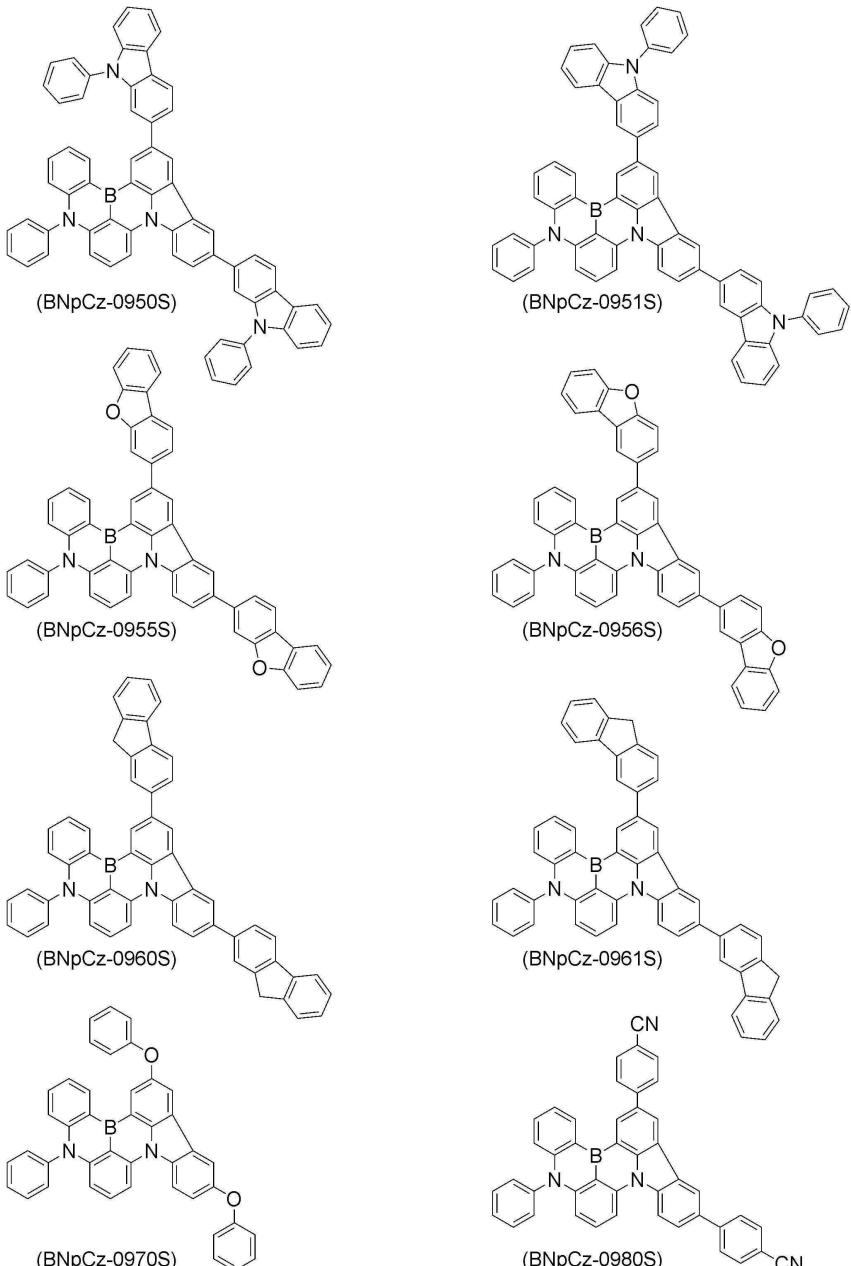
[화학식 123]



[0435]

[0436]

[화학식 124]



[0437]

[0438]

일반식(1)의 $R^1 \sim R^{14}$ 의 복수가 치환기를 가져도 된다. 합성의 난이도의 관점에서, 서로 입체장애가 작아지도록 치환 위치가 선택된다. 동일한 환에 있어서 이웃하는 위치에 치환기를 가져도 되지만, 이 경우에는 입체장애가 작은 기가 바람직하고, 예를 들면, 메틸기 및 폐닐기가 바람직하다. 또한, 일반식(1)의 $R^1 \sim R^{14}$ 에서의 치환기의 개수는 몇 개라도 상관없지만, $R^1 \sim R^{14}$ 의 치환기의 합계 탄소수는 36 이하인 것이 바람직하다.

[0439]

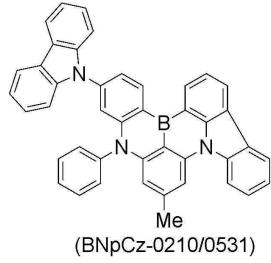
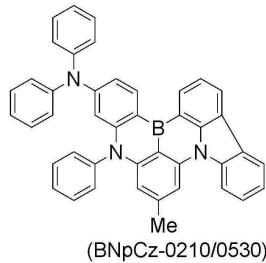
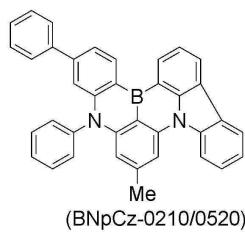
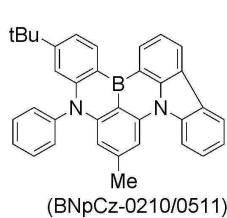
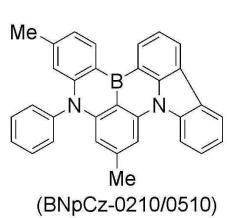
일반식(1)의 b환의 치환기인 $R^4 \sim R^7$ 에 있어서, 복수의 치환기를 가지는 경우에는, 합성의 관점에서 b환-B 결합 또는 b환-X 결합에 대하여 선대칭으로 되도록 치환기를 가지는 것이 바람직하다.

[0440]

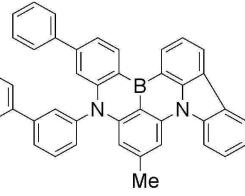
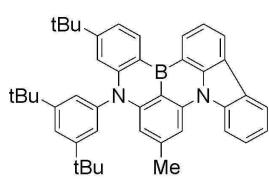
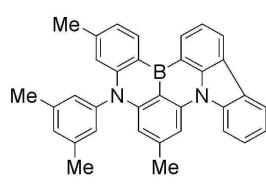
일반식(1)의 R^2 로서, 디아릴아미노, 카르바졸릴, 아크리디닐, 폐녹사지닐, 폐노티아지닐 및 폐나지닐을 가지는 경우에는, 합성의 관점에서, 카르바졸릴, 또는, a환에 결합한 N에 결합하는 탄소 원자의 인접한 탄소 원자는 치환기를 가지는 것이 바람직하다.

[0441]

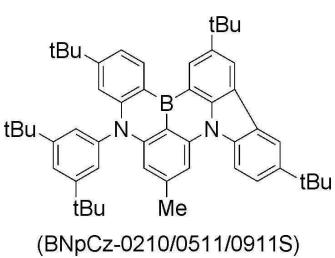
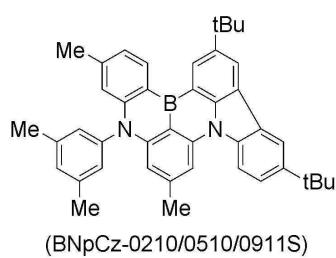
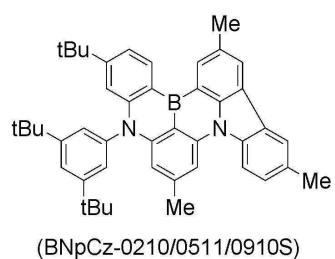
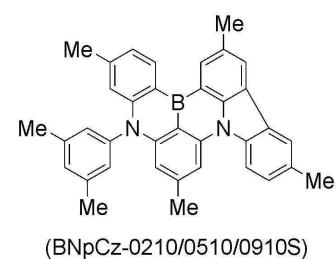
[화학식 125]



[0442]



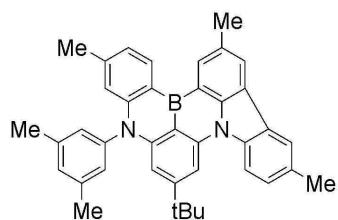
[0443]



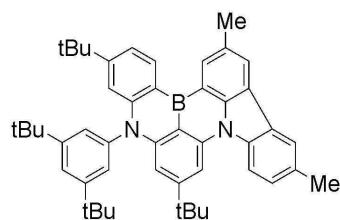
[0444]

[0445]

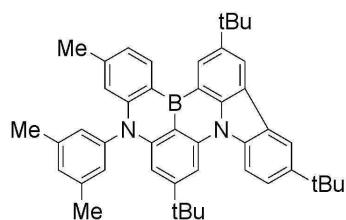
[화학식 126]



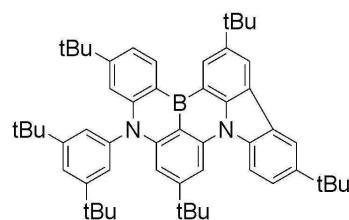
(BNpCz-0211/0510/0910S)



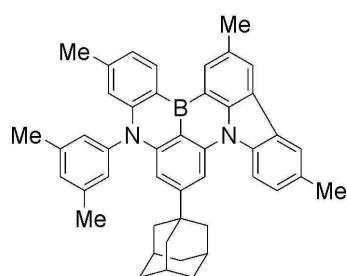
(BNpCz-0211/0511/0910S)



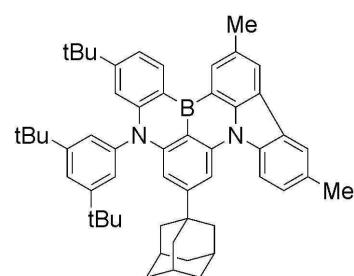
(BNpCz-0211/0510/0911S)



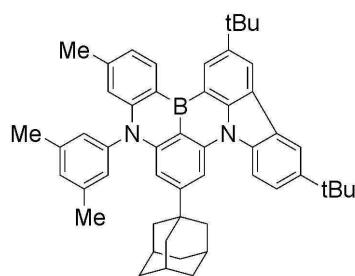
(BNpCz-0211/0511/0911S)



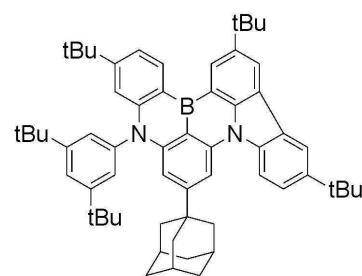
(BNpCz-0212/0510/0910S)



(BNpCz-0212/0511/0910S)



(BNpCz-0212/0510/0911S)

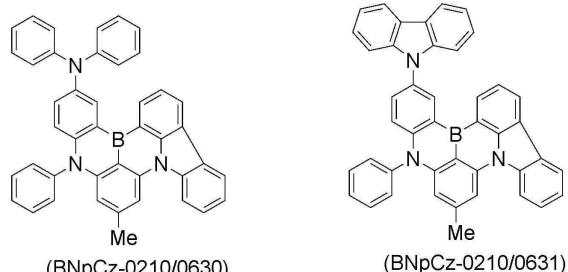
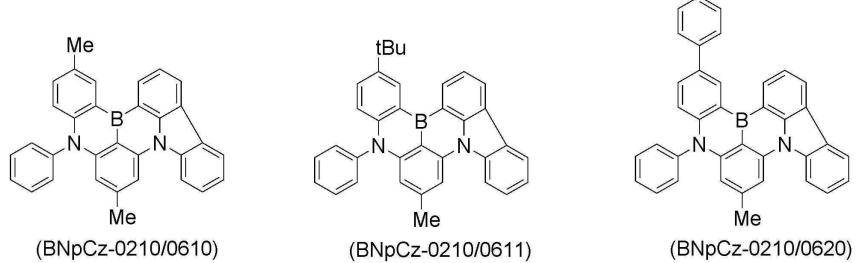


(BNpCz-0212/0511/0911S)

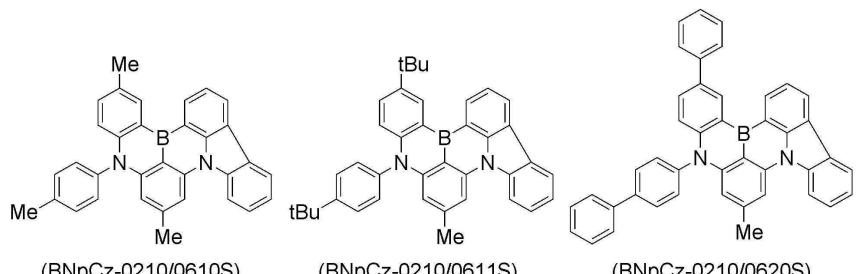
[0446]

[0448]

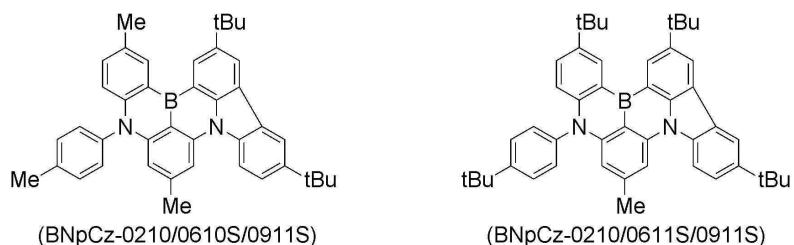
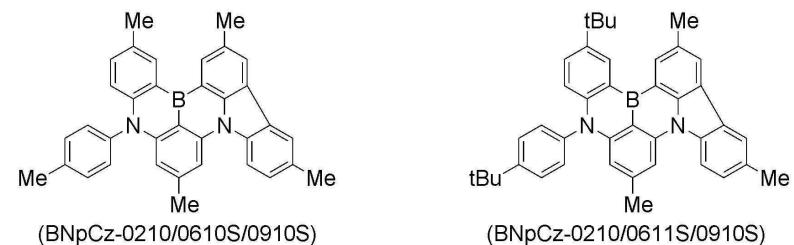
[화학식 127]



[0449]



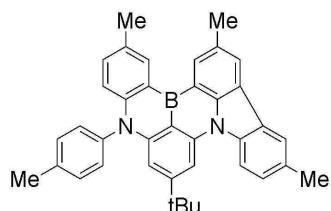
[0450]



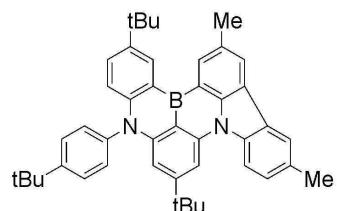
[0451]

[0452]

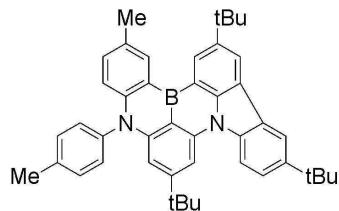
[화학식 128]



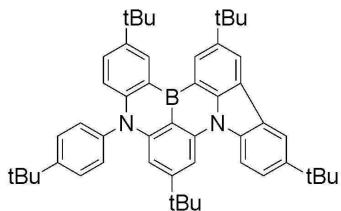
(BNpCz-0211/0610S/0910S)



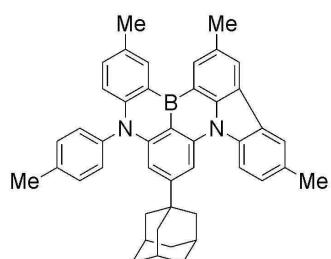
(BNpCz-0211/0611S/0910S)



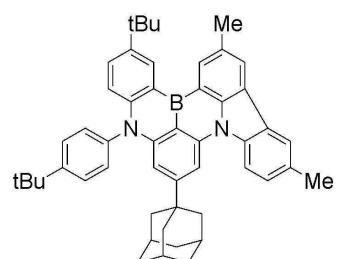
(BNpCz-0211/0610S/0911S)



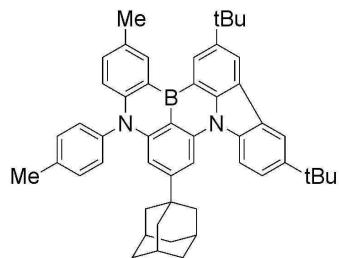
(BNpCz-0211/0611S/0911S)



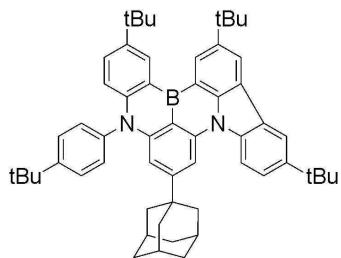
(BNpCz-0212/0610S/0910S)



(BNpCz-0212/0611S/0910S)



(BNpCz-0212/0610S/0911S)

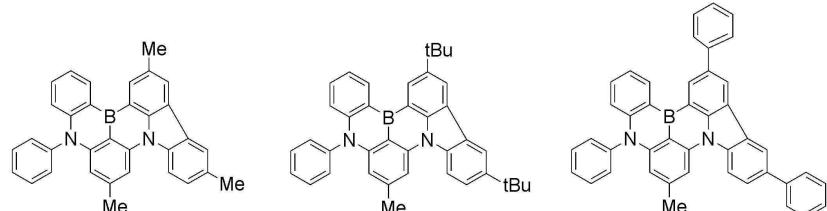


(BNpCz-0212/0611S/0911S)

[0454]

[0455]

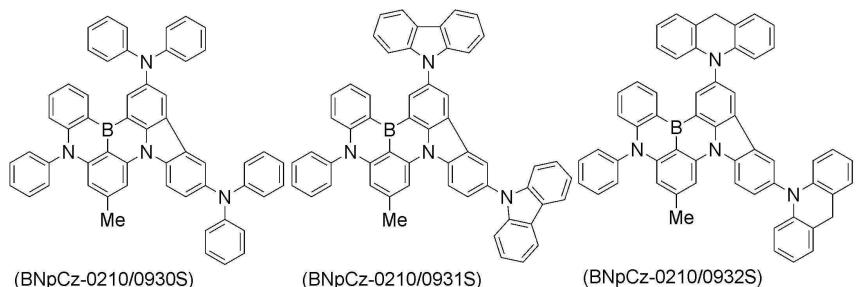
[화학식 129]



(BNpCz-0210/0910S)

(BNpCz-0210/0911S)

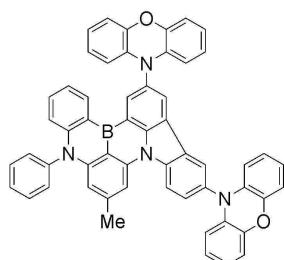
(BNpCz-0210/0920S)



(BNpCz-0210/0930S)

(BNpCz-0210/0931S)

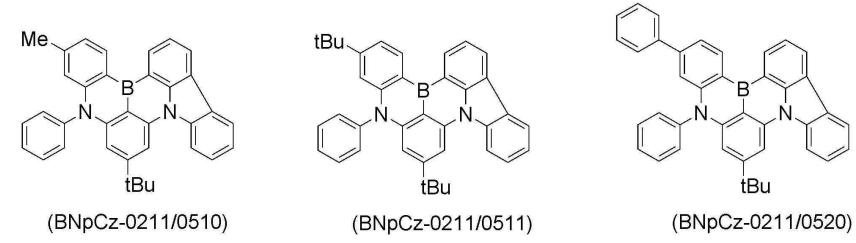
(BNpCz-0210/0932S)



(BNpCz-0210/0933S)

[0456]

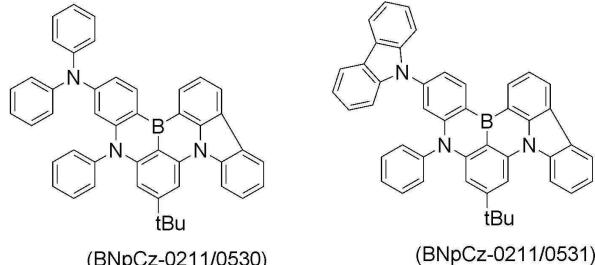
[화학식 130]



(BNpCz-0211/0510)

(BNpCz-0211/0511)

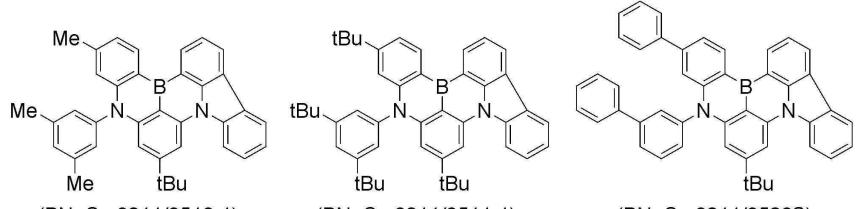
(BNpCz-0211/0520)



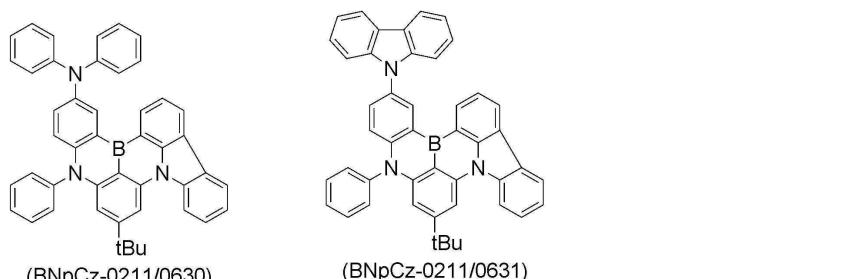
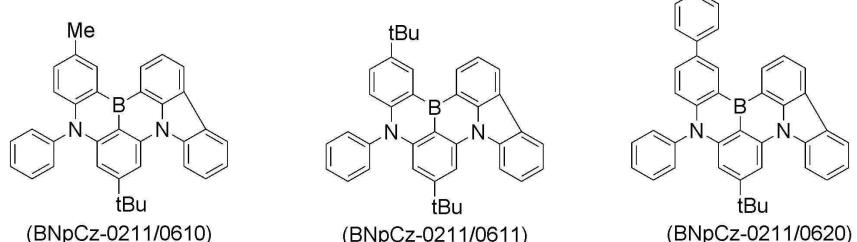
(BNpCz-0211/0530)

(BNpCz-0211/0531)

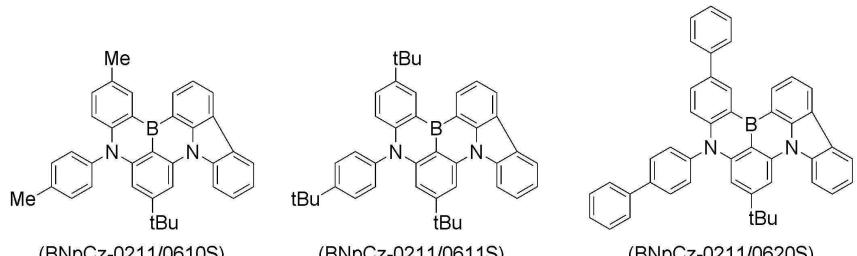
[0458]



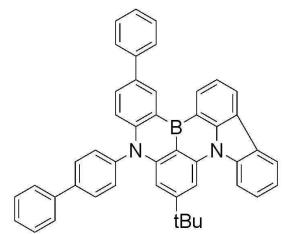
[0459]



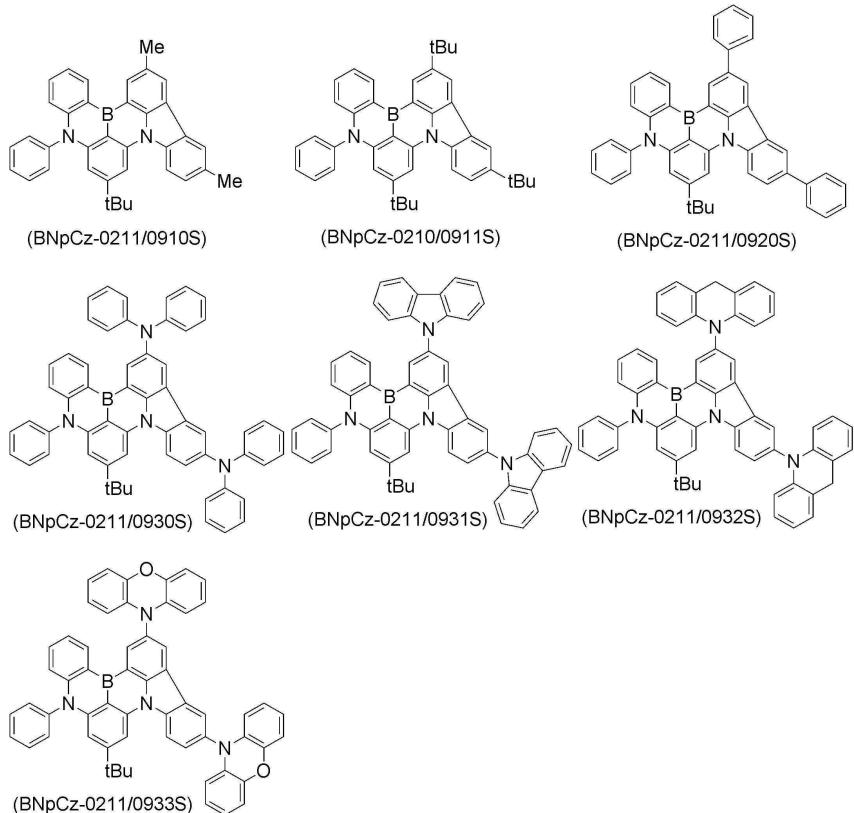
[0460]



[0461]



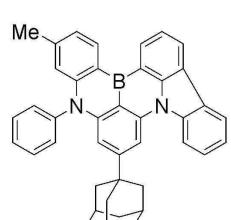
[0462]



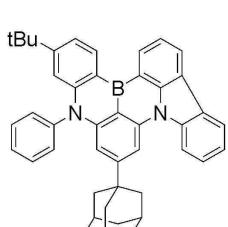
[0463]

[0464]

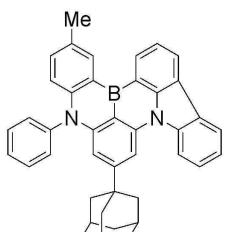
[화학식 132]



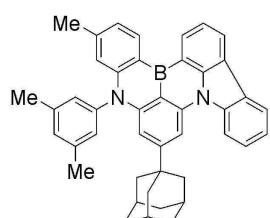
(BNpCz-0212/0510)



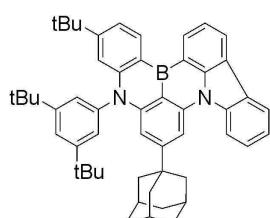
(BNpCz-0212/0511)



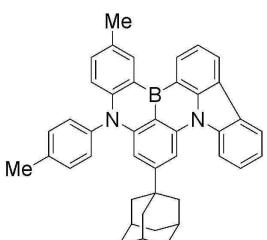
(BNpCz-0212/0610)



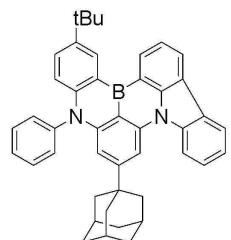
(BNpCz-0212/0510-1)



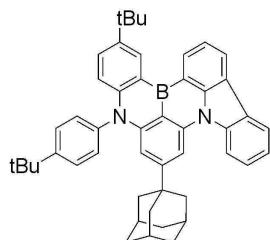
(BNpCz-0212/0511-1)



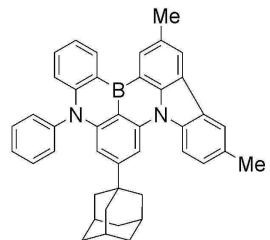
(BNpCz-0212/0610S)



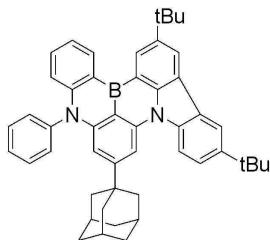
(BNpCz-0212/0611)



(BNpCz-0212/0611S)



(BNpCz-0212/0910S)

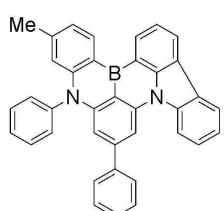


(BNpCz-0212/0911S)

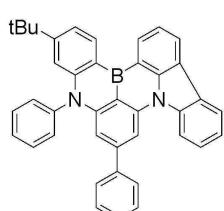
[0465]

[0466]

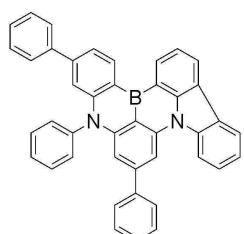
[화학식 133]



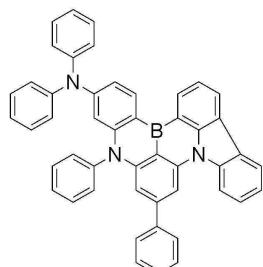
(BNpCz-0220/0510)



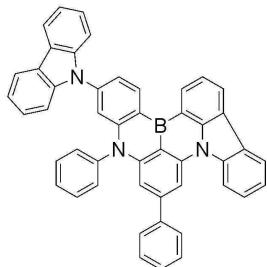
(BNpCz-0220/0511)



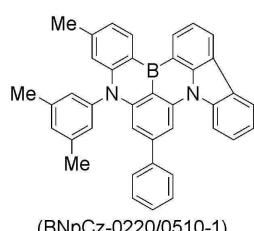
(BNpCz-0220/0520)



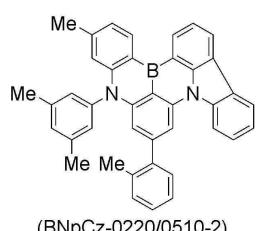
(BNpCz-0220/0530)



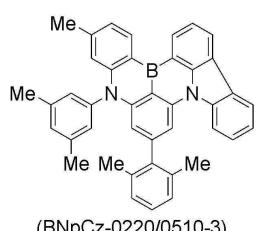
(BNpCz-0220/0531)



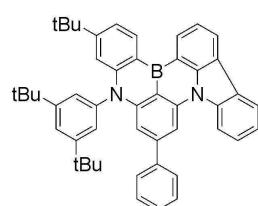
(BNpCz-0220/0510-1)



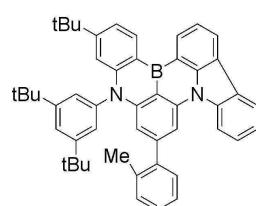
(BNpCz-0220/0510-2)



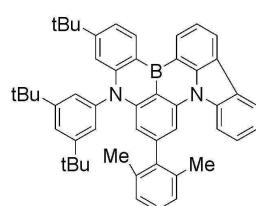
(BNpCz-0220/0510-3)



(BNpCz-0220/0511-1)



(BNpCz-0220/0511-2)



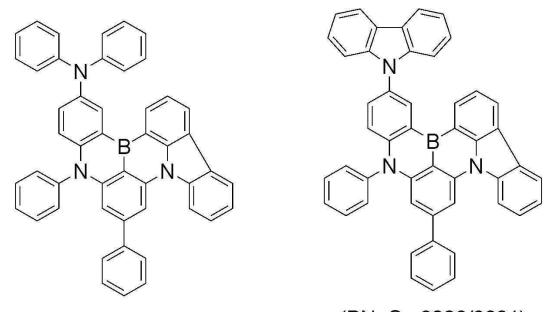
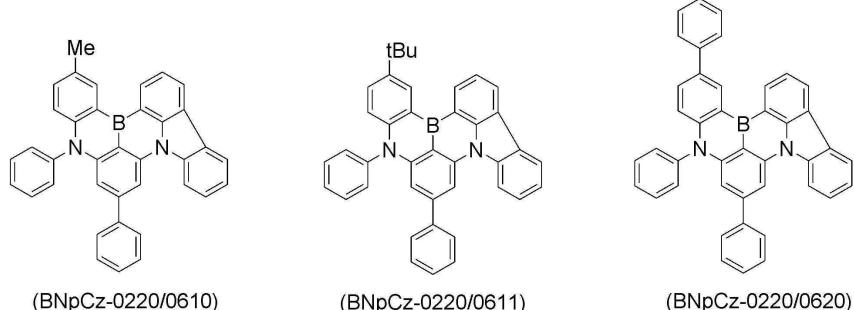
(BNpCz-0220/0511-3)

[0467]

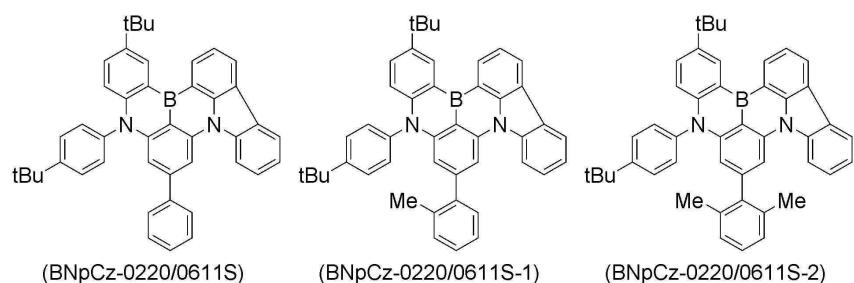
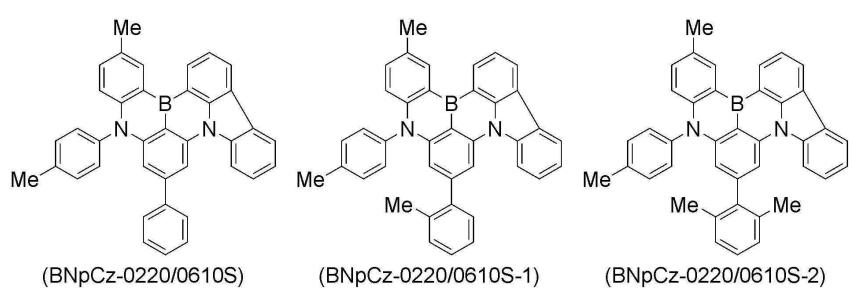
[0468]

[0469]

[화학식 134]



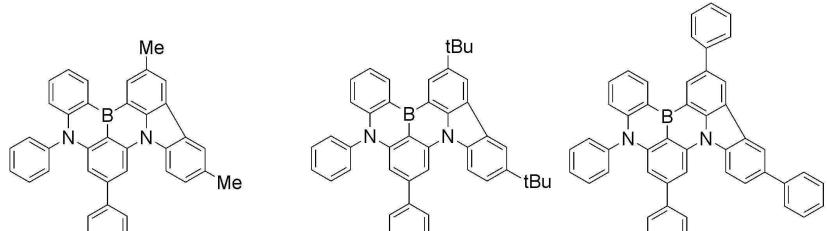
[0470]



[0471]

[0472]

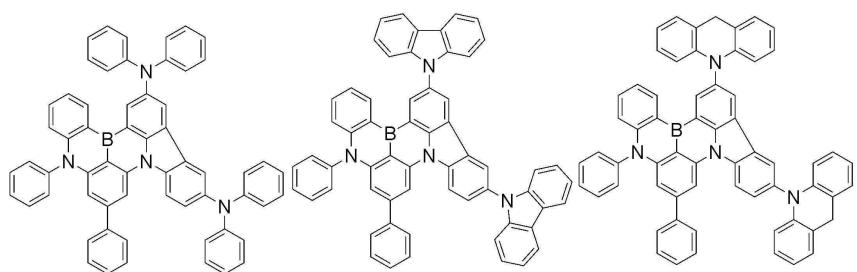
[화학식 135]



(BNpCz-0220/0910S)

(BNpCz-0220/0911S)

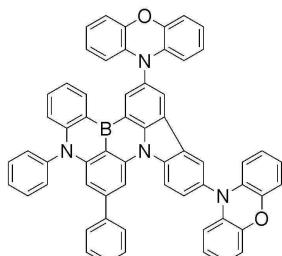
(BNpCz-0220/0920S)



(BNpCz-0220/0930S)

(BNpCz-0220/0931S)

(BNpCz-0220/0932S)

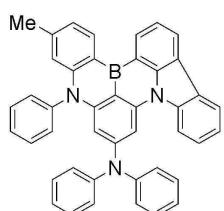


(BNpCz-0220/0933S)

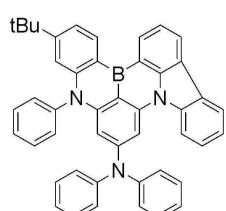
[0473]

[0474]

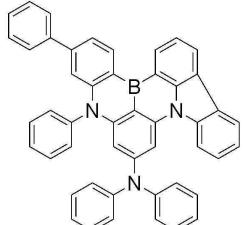
[화학식 136]



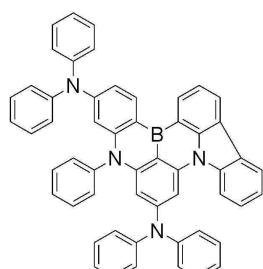
(BNpCz-0230/0510)



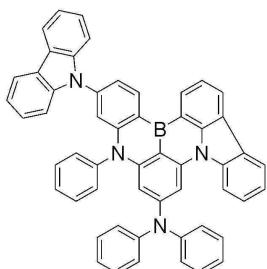
(BNpCz-0230/0511)



(BNpCz-0230/0520)

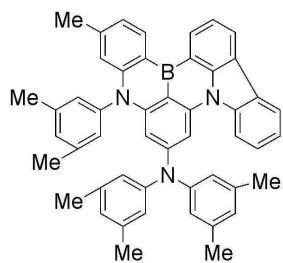


(BNpCz-0230/0530)



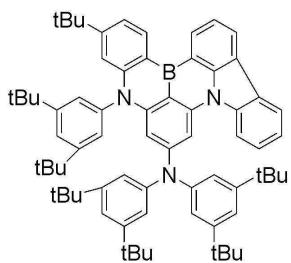
(BNpCz-0230/0531)

[0475]



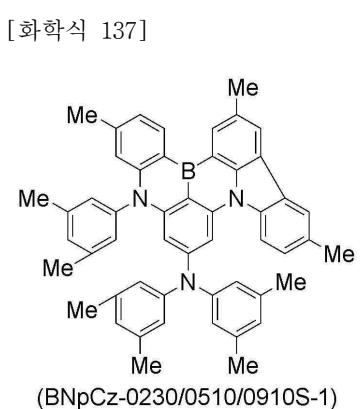
[0476]

(BNpCz-0230/0510-1)

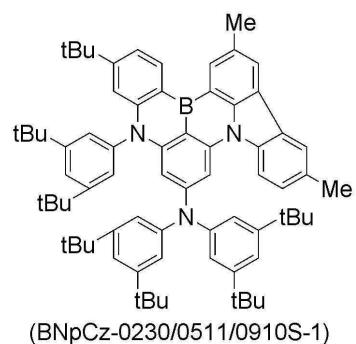


(BNpCz-0230/0511-1)

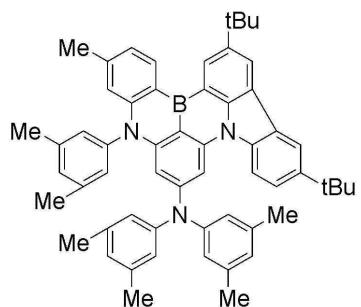
[0477]



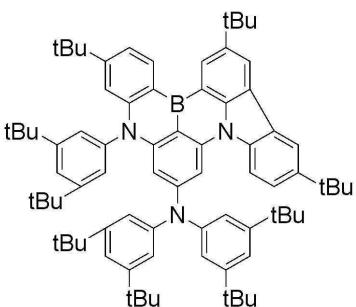
(BNpCz-0230/0510/0910S-1)



(BNpCz-0230/0511/0910S-1)

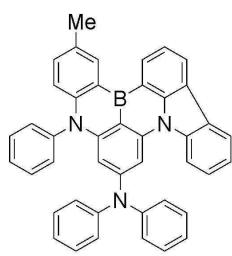


(BNpCz-0230/0510/0911S-1)

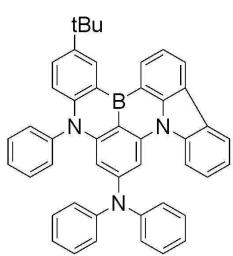


(BNpCz-0230/0511/0911S-1)

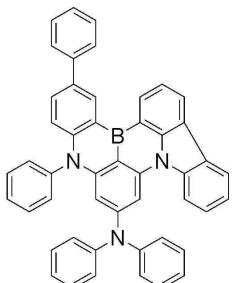
[0478]



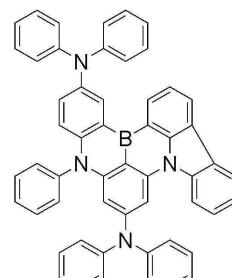
(BNpCz-0230/0610)



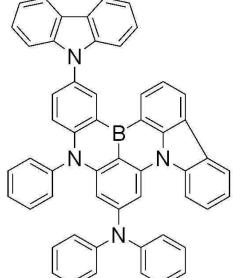
(BNpCz-0230/0611)



(BNpCz-0230/0620)



(BNpCz-0230/0630)

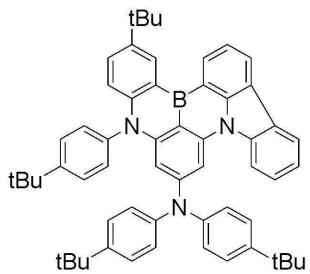
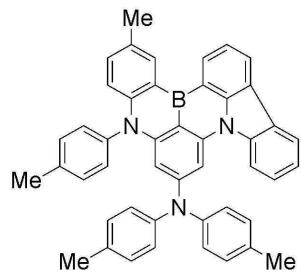


(BNpCz-0230/0631)

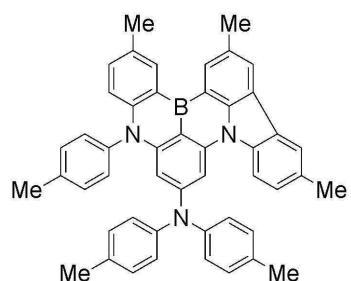
[0479]

[0480]

[화학식 138]

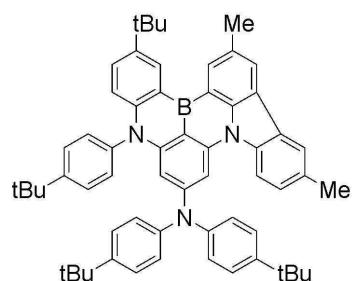


(BNpCz-0230/0610S-1)

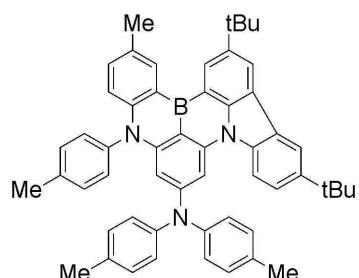


(BNpCz-0230/0610S/0910S-1)

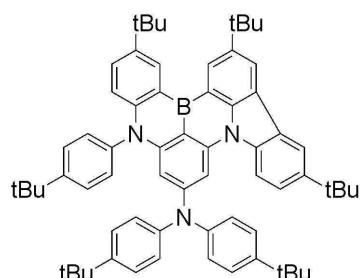
(BNpCz-0230/0611S-1)



(BNpCz-0230/0611S/0910S-1)



(BNpCz-0230/0610S/0911S-1)

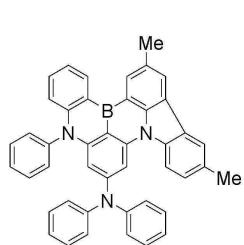


(BNpCz-0230/0611S/0911S-1)

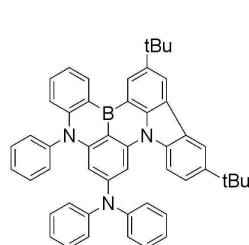
[0482]

[0483]

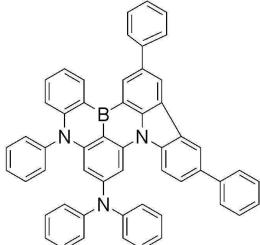
[화학식 139]



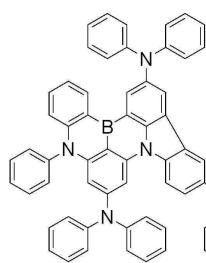
(BNpCz-0230/0910S)



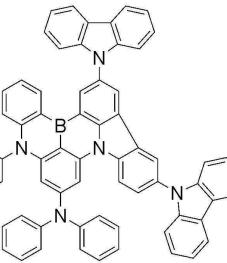
(BNpCz-0230/0911S)



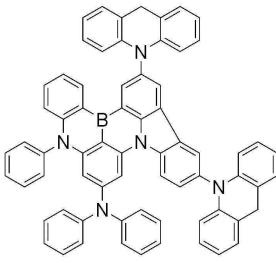
(BNpCz-0230/0920S)



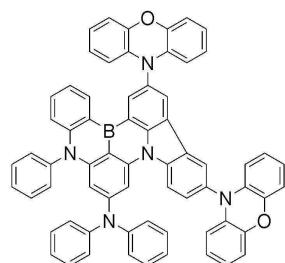
(BNpCz-0230/0930S)



(BNpCz-0230/0931S)



(BNpCz-0230/0932S)

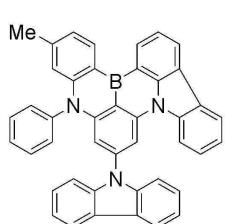


(BNpCz-0230/0933S)

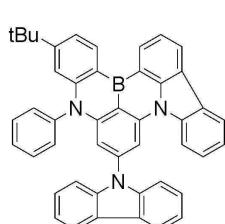
[0484]

[0485]

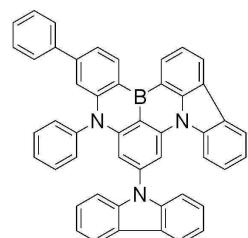
[화학식 140]



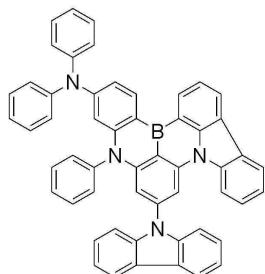
(BNpCz-0231/0510)



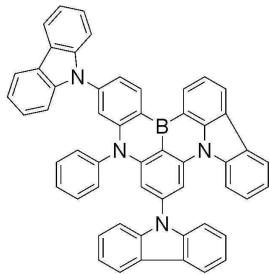
(BNpCz-0231/0511)



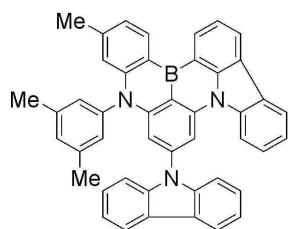
(BNpCz-0231/0520)



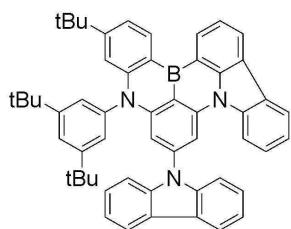
(BNpCz-0231/0530)



(BNpCz-0231/0531)

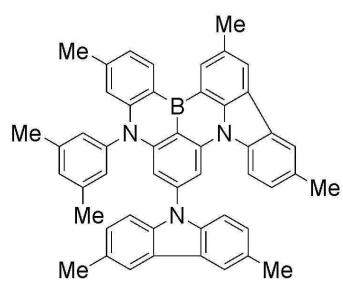


(BNpCz-0231/0510-1)

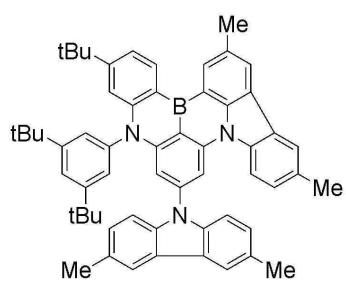


(BNpCz-0231/0511-1)

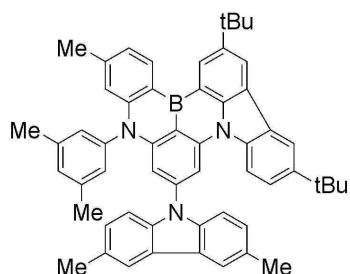
[화학식 141]



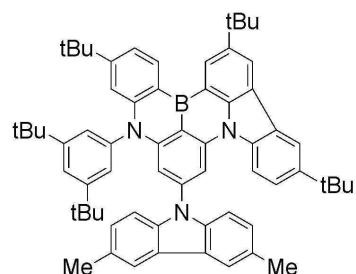
(BNpCz-0231/0510/0910S-1)



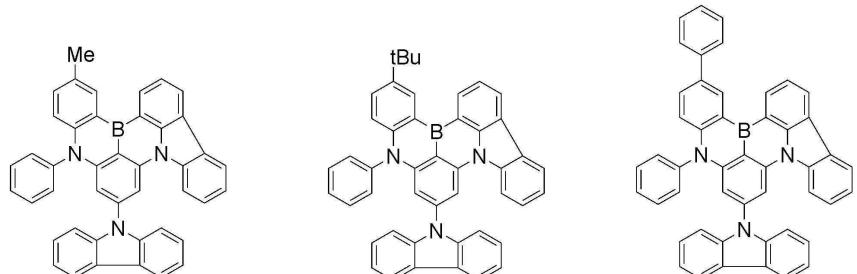
(BNpCz-0231/0511/0910S-1)



(BNpCz-0231/0510/0911S-1)



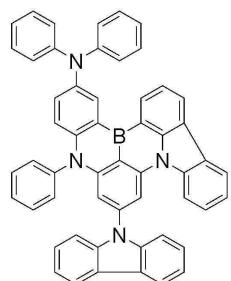
(BNpCz-0231/0511/0911S-1)



(BNpCz-0231/0610)

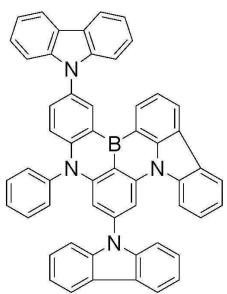
(BNpCz-0231/0611)

(BNpCz-0231/0620)

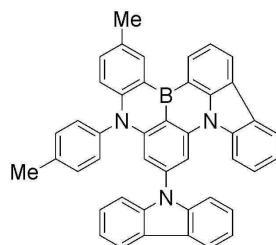


[0490]

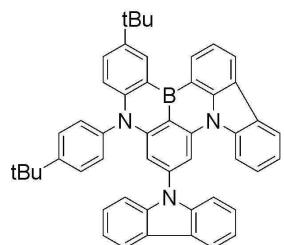
(BNpCz-0231/0630)



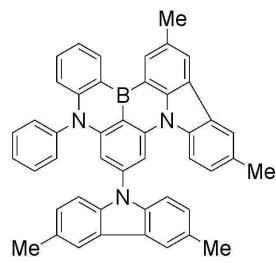
(BNpCz-0231/0631)



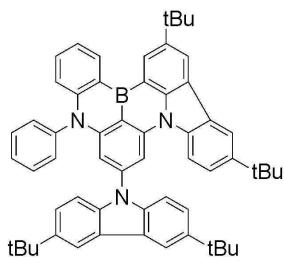
(BNpCz-0231/0610S)



(BNpCz-0231/0611S)



(BNpCz-0231/0910S-1)

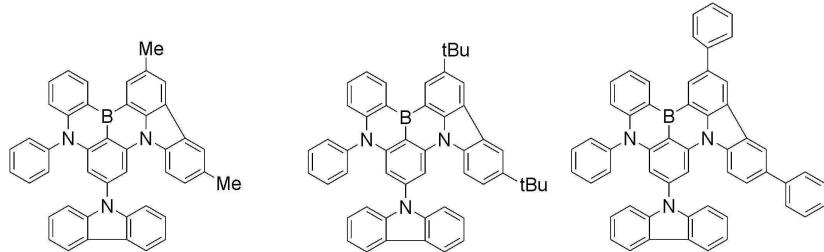


(BNpCz-0231/0911S-1)

[0492]

[0493]

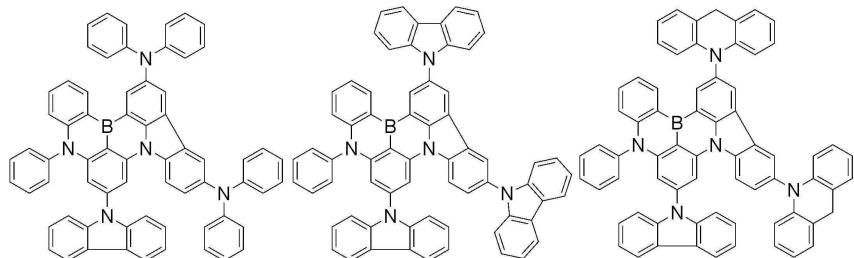
[화학식 143]



(BNpCz-0231/0910S)

(BNpCz-0231/0911S)

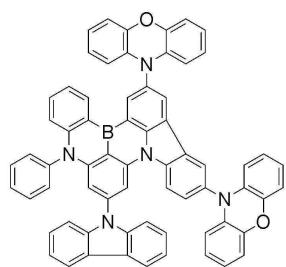
(BNpCz-0231/0920S)



(BNPCz-0231/0930S)

(BNpCz-0231/0931S)

(BNpCz-0231/0932S)

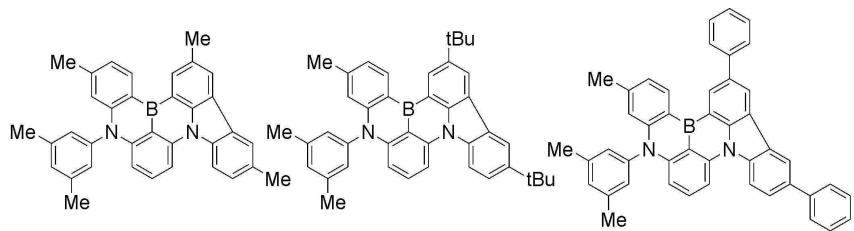
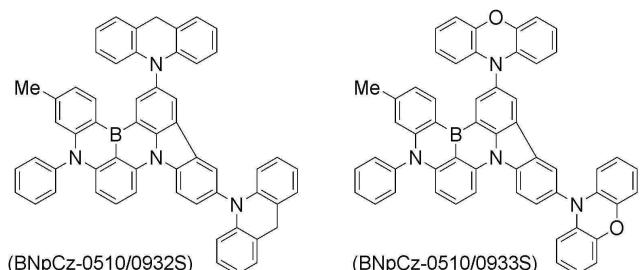
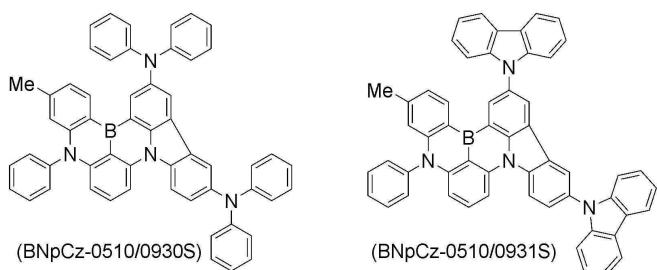
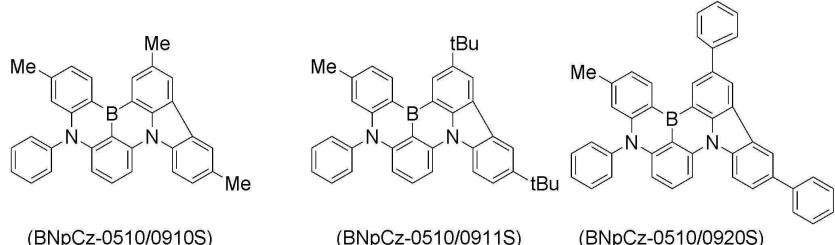


(BNpCz-0231/0933S)

[0494]

[0495]

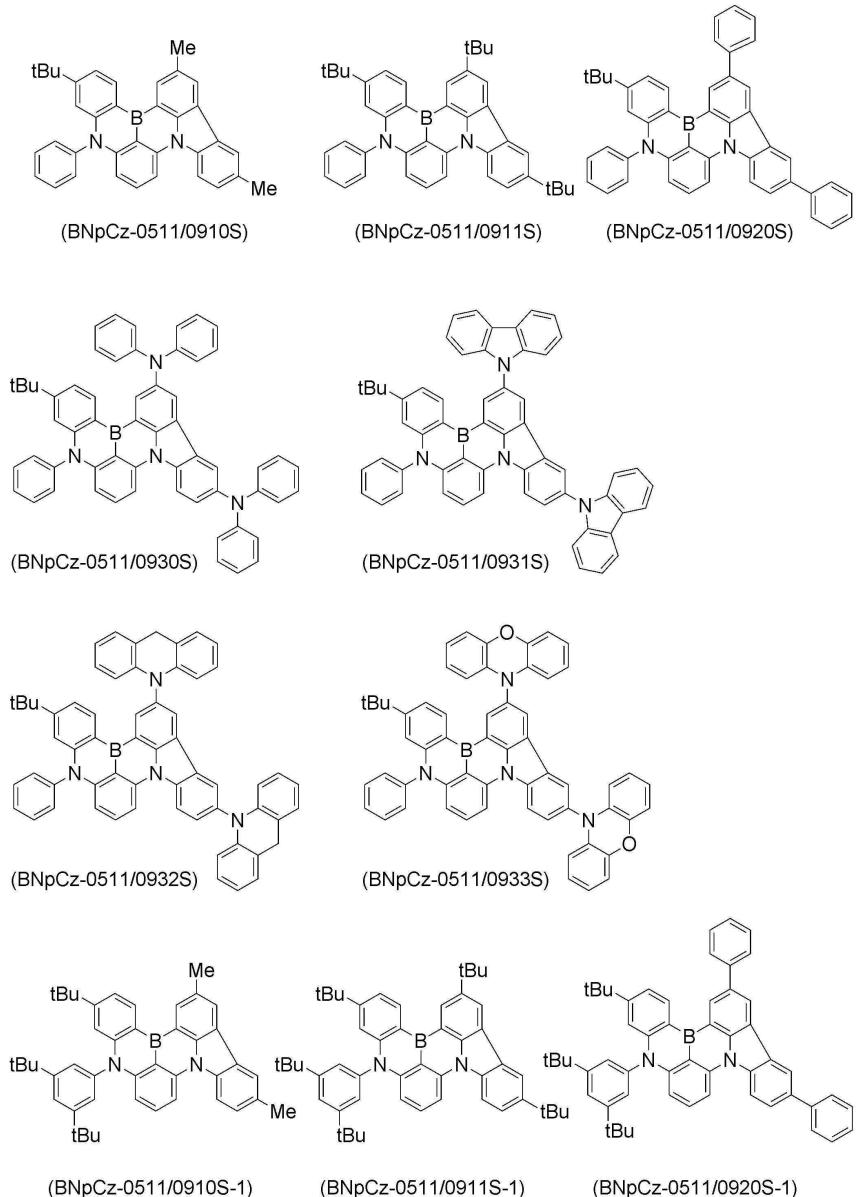
[화학식 144]



[0496]

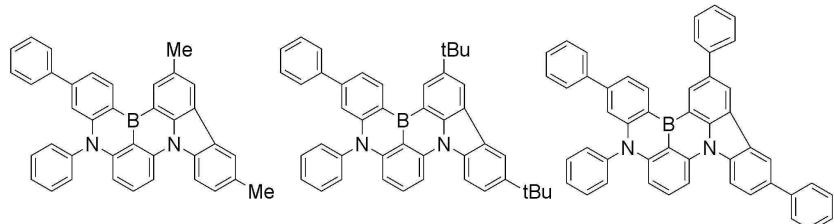
[0497]

[화학식 145]



[0499]

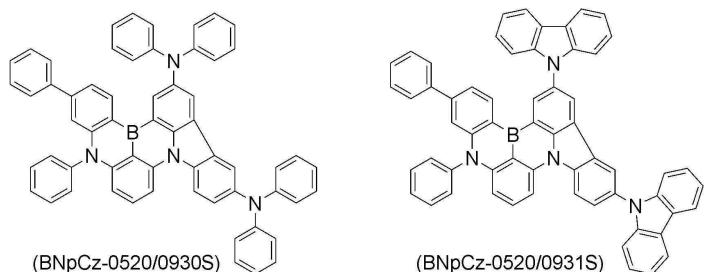
[화학식 146]



(BNpCz-0520/0910S)

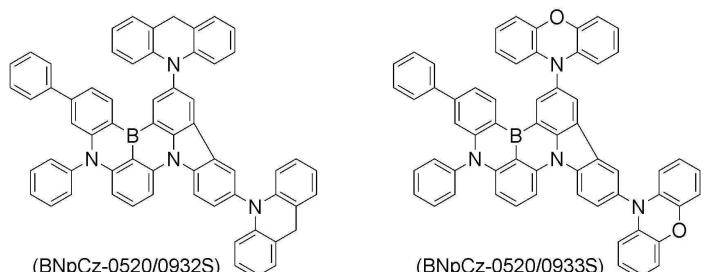
(BNpCz-0520/0911S)

(BNpCz-0520/0920S)



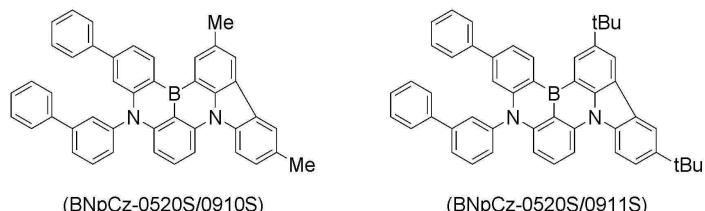
(BNpCz-0520/0930S)

(BNpCz-0520/0931S)



(BNpCz-0520/0932S)

(BNpCz-0520/0933S)



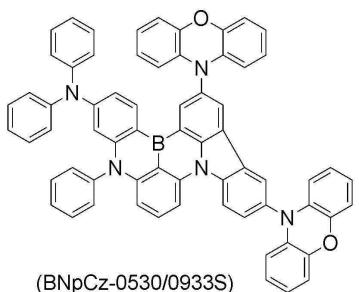
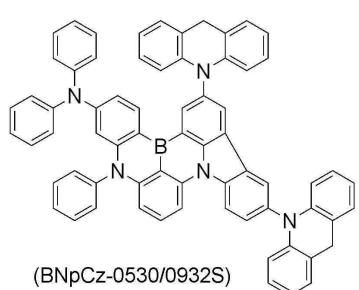
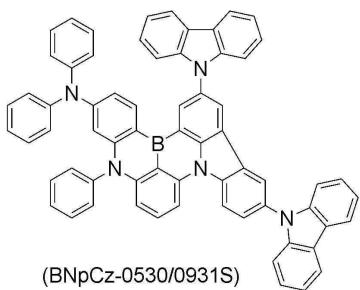
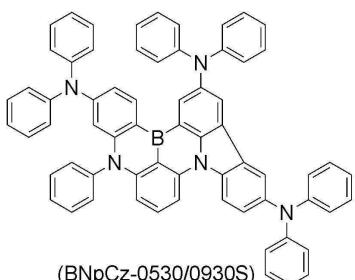
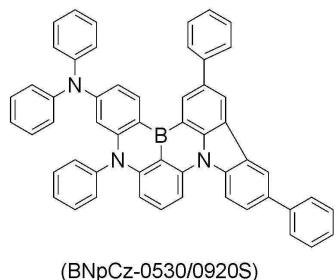
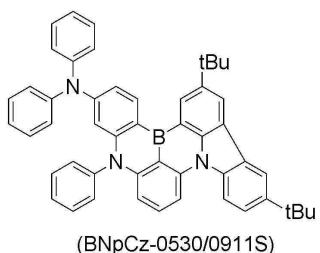
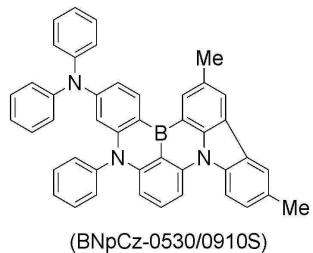
(BNpCz-0520S/0910S)

(BNpCz-0520S/0911S)

[0500]

[0501]

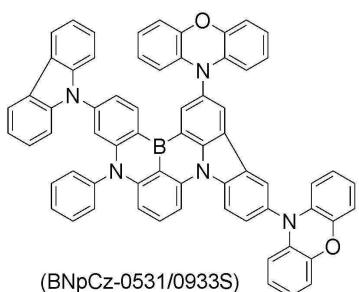
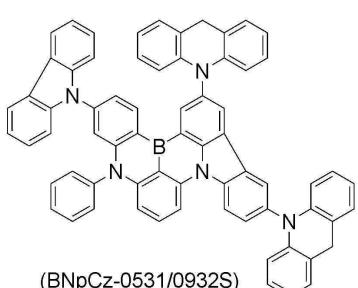
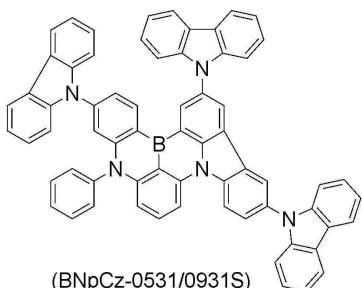
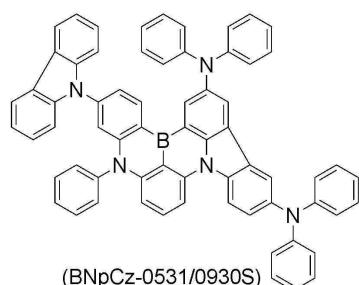
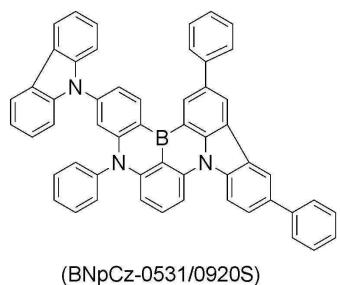
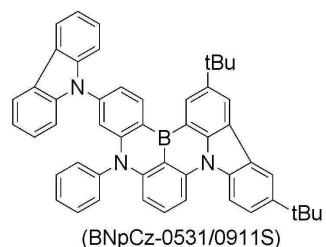
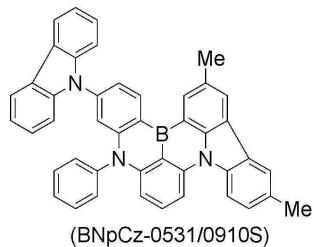
[화학식 147]



[0502]

[0503]

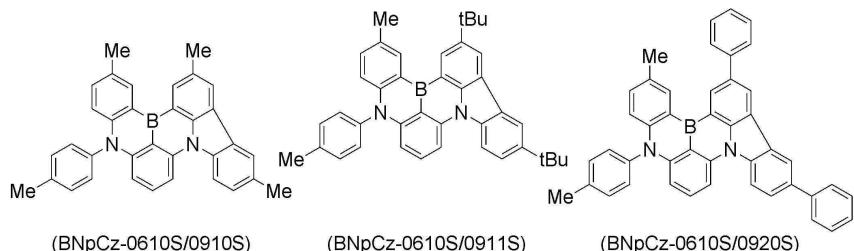
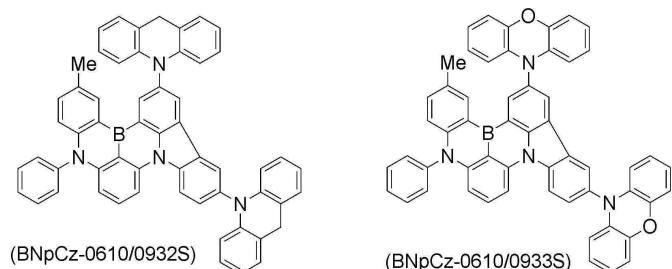
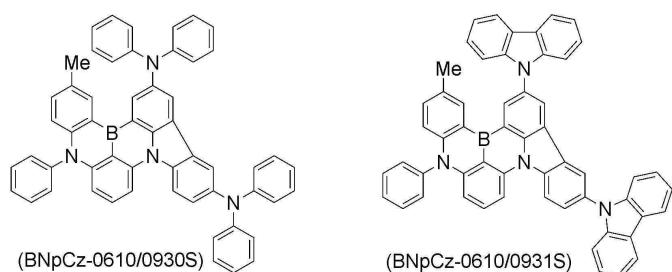
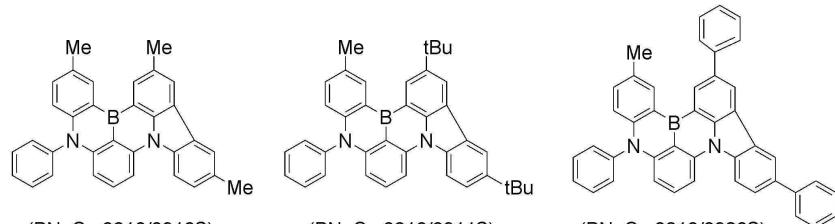
[화학식 148]



[0504]

[0505]

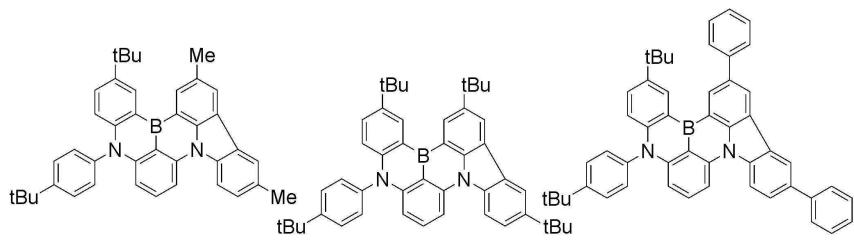
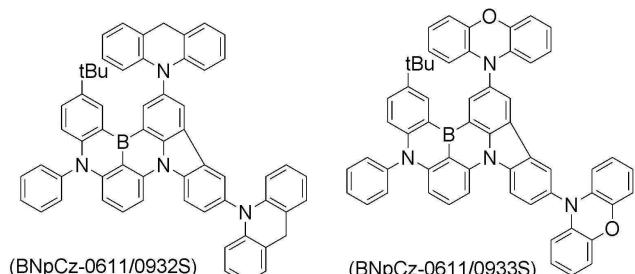
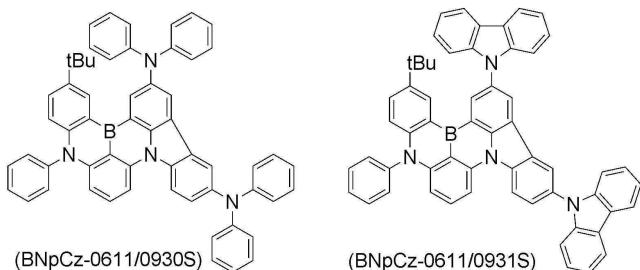
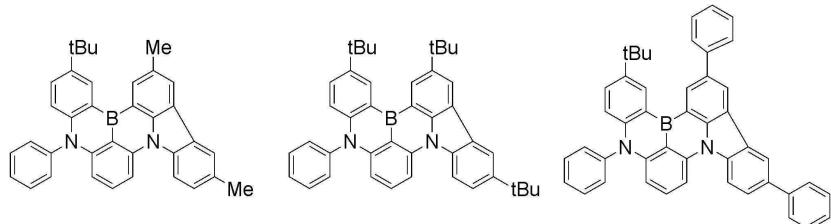
[화학식 149]



[0506]

[0507]

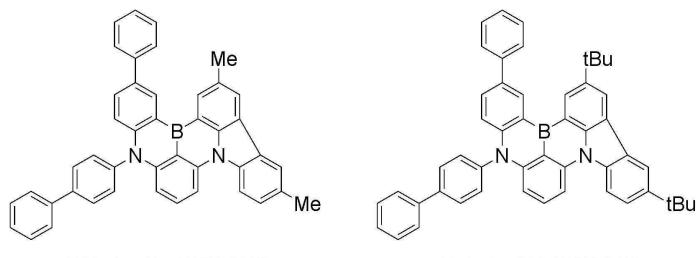
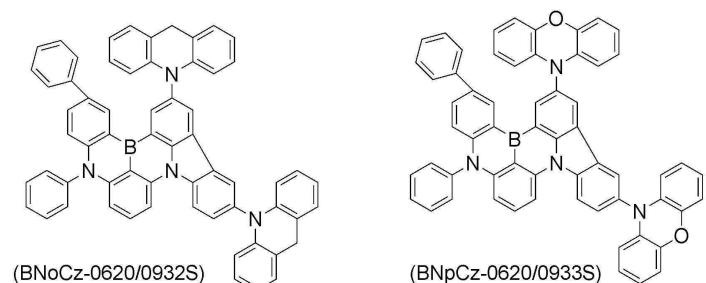
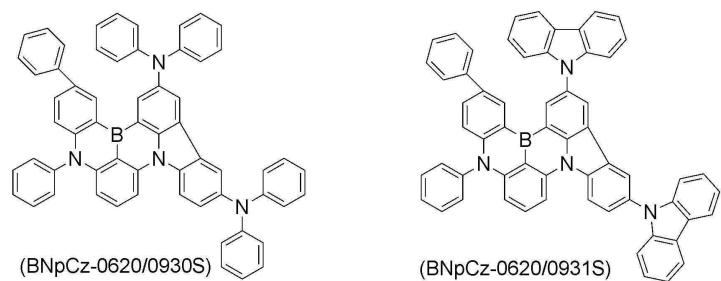
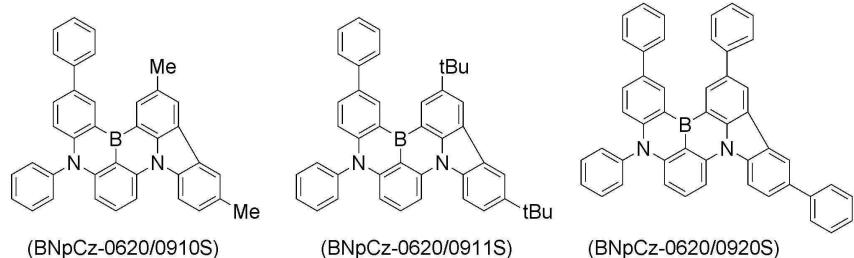
[화학식 150]



[0508]

[0509]

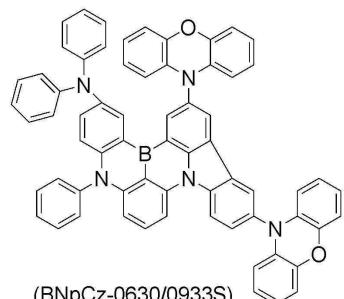
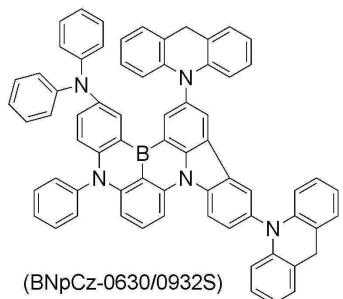
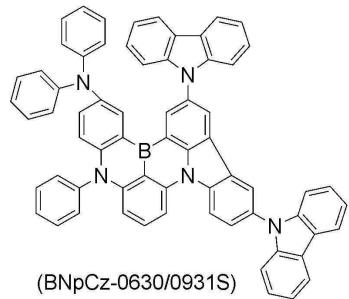
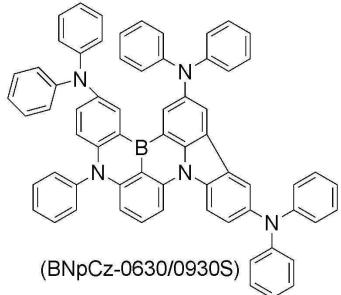
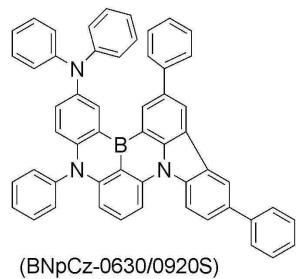
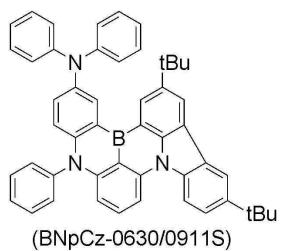
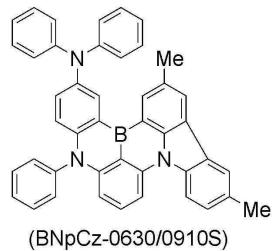
[화학식 151]



[0510]

[0511]

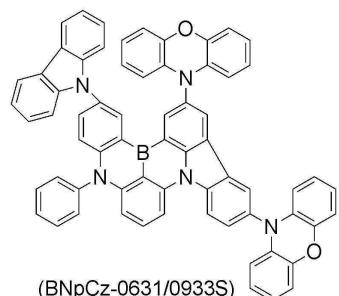
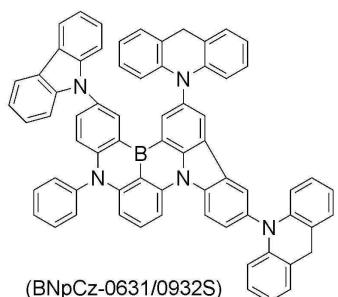
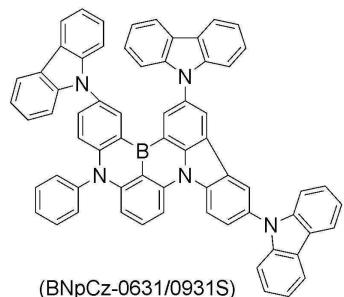
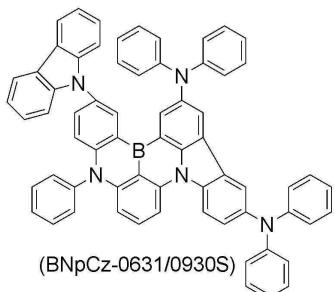
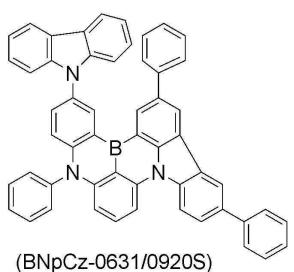
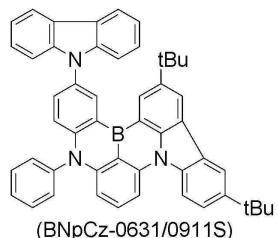
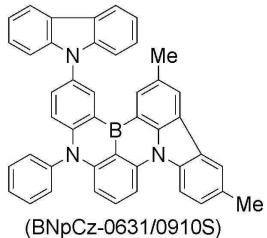
[화학식 152]



[0512]

[0513]

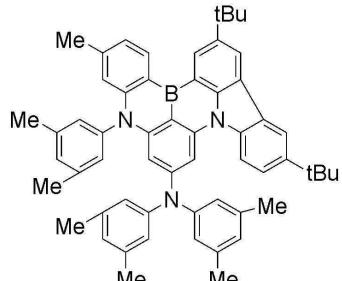
[화학식 153]



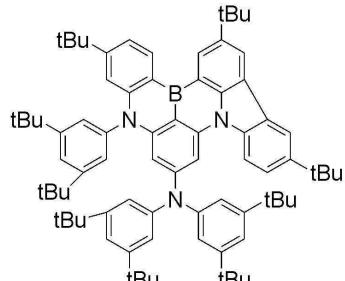
[0514]

[0515]

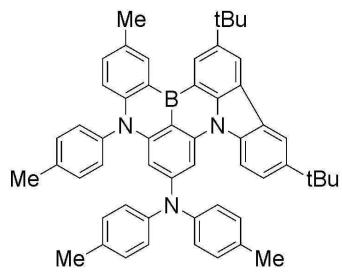
[화학식 154]



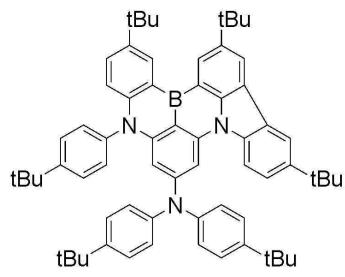
(BNpCz-0230/0510/0911S-1)



(BNpCz-0230/0511/0911S-1)



(BNpCz-0230/0610S/0911S-1)

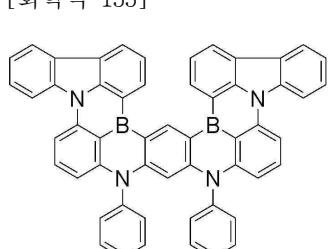


(BNpCz-0230/0611S/0911S-1)

[0516]

[0517] 일반식(22)에 있어서, B 및 N 또는 O에 의해 공유하는 b환의 다중 공명 효과를 강조함으로써, ΔE_{ST} 및/또는 자연 형광수명을 감소시켜, 소자특성의 개선을 시도하고 있다. 다중 공명 효과를 강하게 받는 a환, b환 및 a'환상의 치환기는, 결합하는 환으로의 다중 공명 효과에 강한 영향을 미침과 동시에, 치환기 자체에도 영향이 있다. 따라서, R¹~R¹⁴가 수소 이외의 치환기를 가지는 경우, 안정성의 관점에서, c환, d환, c'환 및 d'환에도 치환기를 가지는 것이 바람직하다. 또한, a환, b환 및 a'환 상에 치환기를 가지는 경우, 안정성의 관점에서, 다중 공명 효과를 약화시키는 치환기를 가지는 것이 바람직하다. 발광파장의 단파장화의 관점에서는 O를 많이 가지는 것이 바람직하고, 장파장화의 관점에서는 N을 많이 가지는 것이 바람직하다. 다중 공명 효과를 강화하는 관점에서는 N을 많이 가지는 것이 바람직하고, 다중 공명 효과를 강화하면 일반적으로 ΔE_{ST} 는 작아진다. 분자의 평면성을 증가시키는 관점에서는 O를 많이 가지는 것이 바람직하고, 평면성이 높으면 발광효율은 높아진다.

[0518]

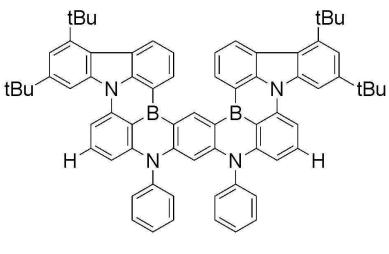
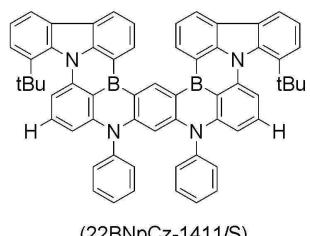
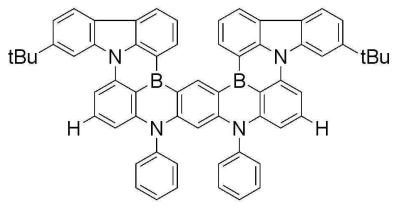
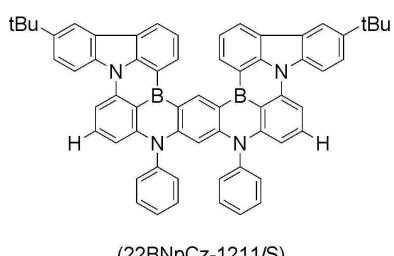
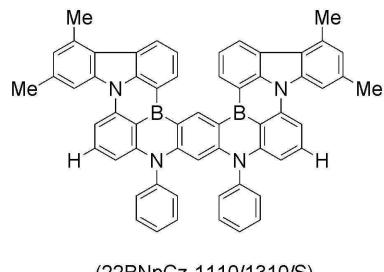
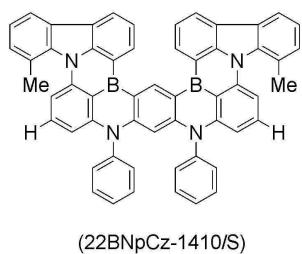
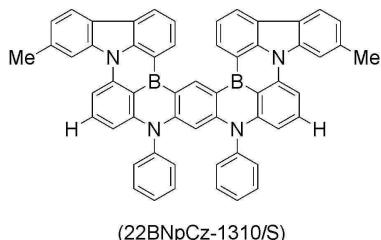
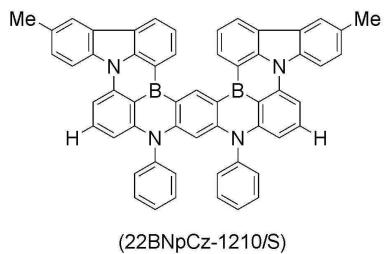


(22BNpCz-0001)

[0519]

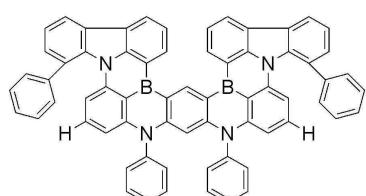
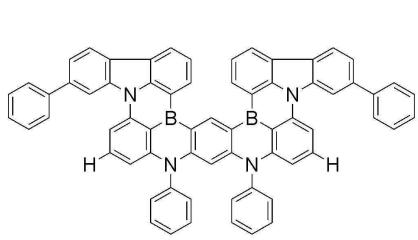
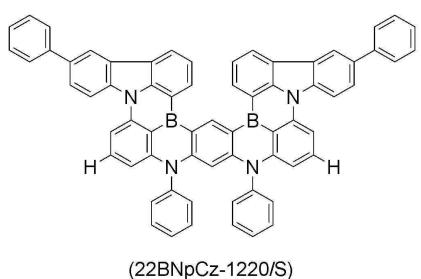
[0520]

[화학식 156]

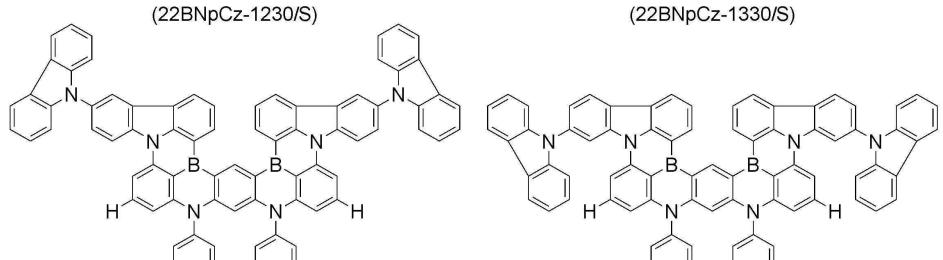
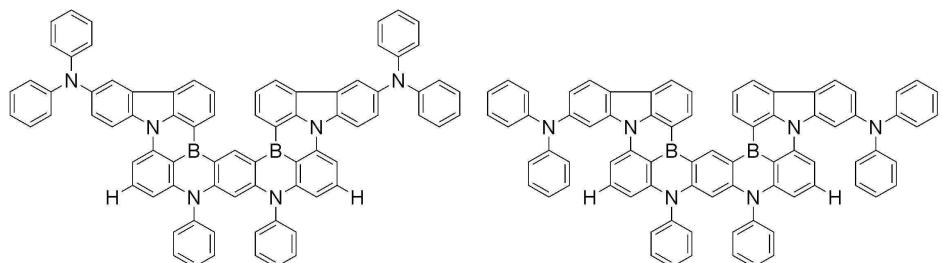


[0521]

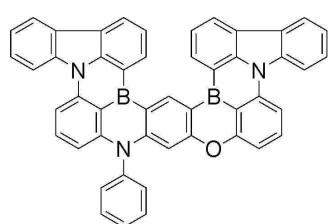
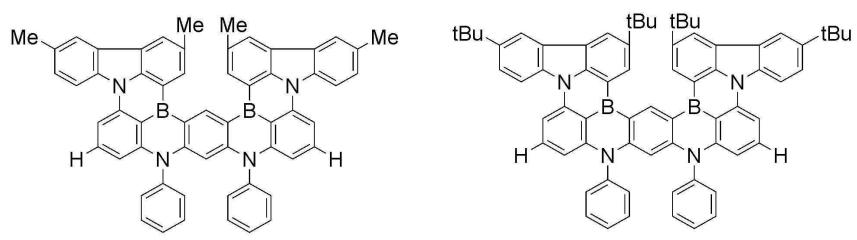
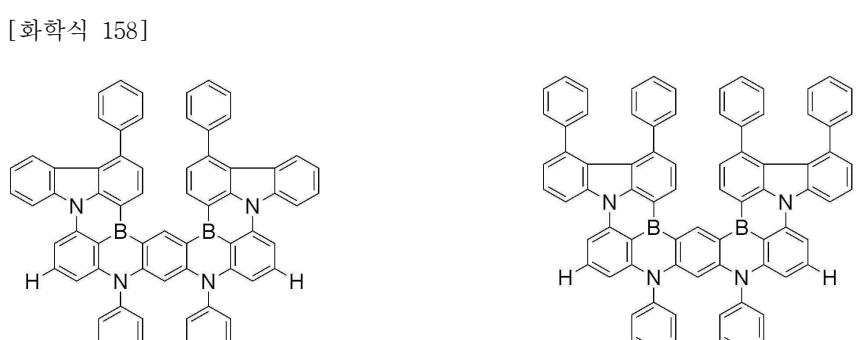
[화학식 157]



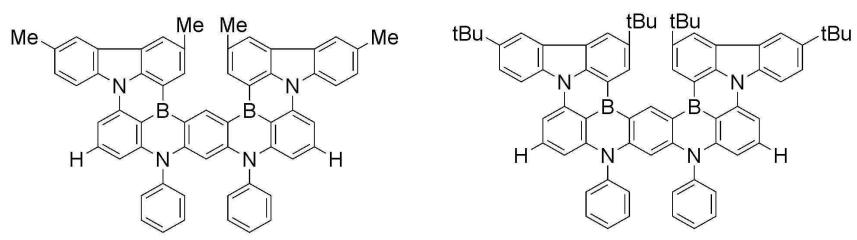
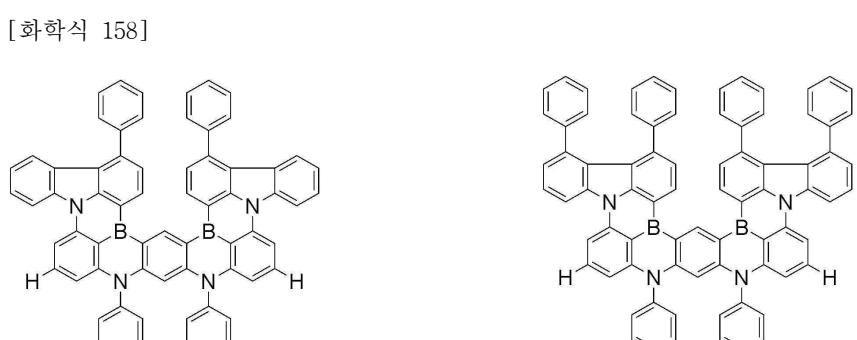
[0523]



[0524]



[0525]



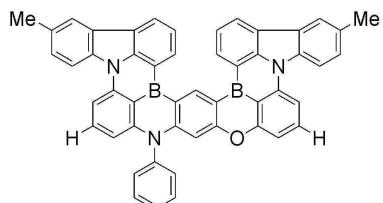
[0526]

[0527]

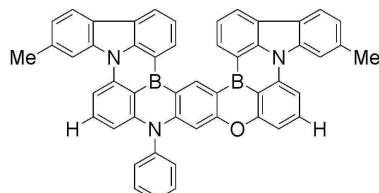
[0528]

[0529]

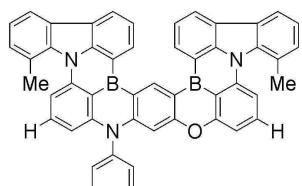
[화학식 159]



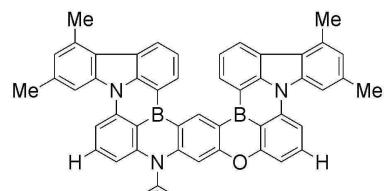
(22BOCz/NpCz-1210/S)



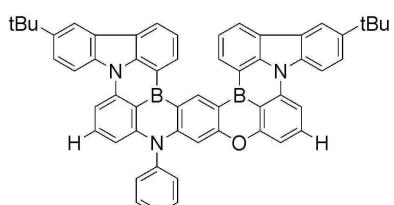
(22BOCz/NpCz-1310/S)



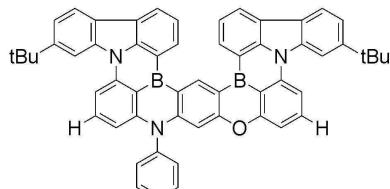
(22BOCz/NpCz-1410/S)



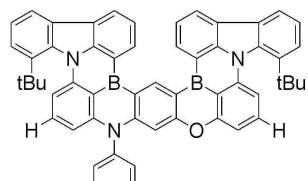
(22BOCz/NpCz-1110/1310/S)



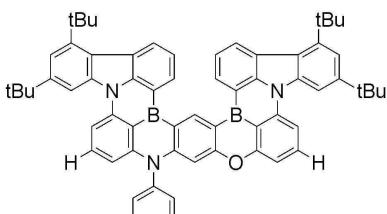
(22BOCz/NpCz-1211/S)



(22BOCz/NpCz-1311/S)



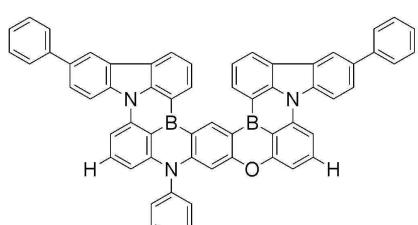
(22BOCz/NpCz-1411/S)



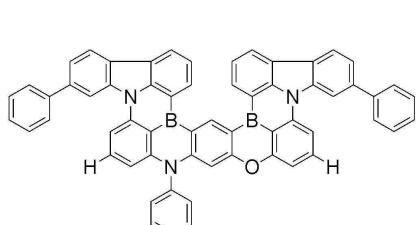
(22BOCz/NpCz-1111/1311/S)

[0530]

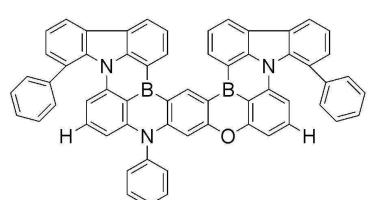
[0531]



(22BOCz/NpCz-1220/S)

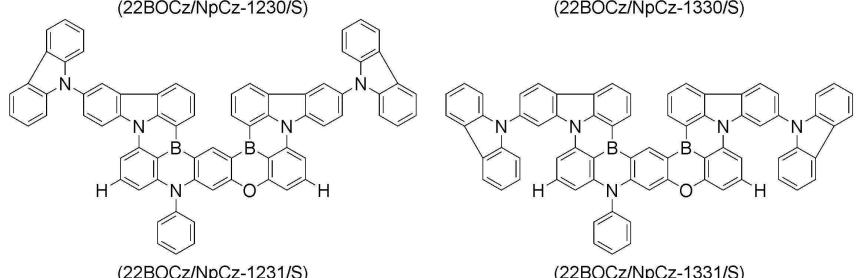
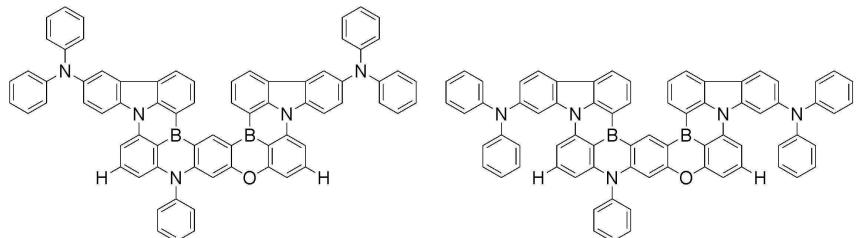


(22BOCz/NpCz-1320/S)

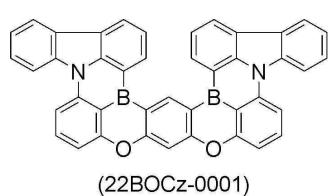
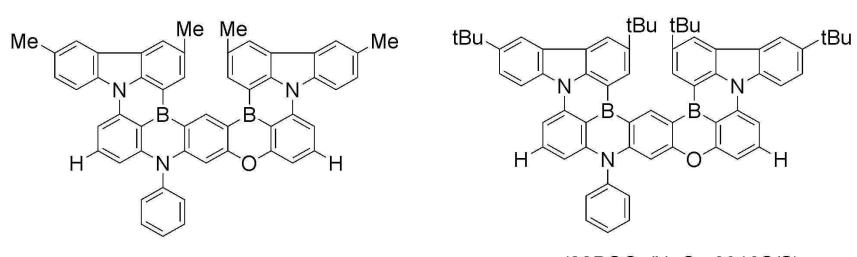
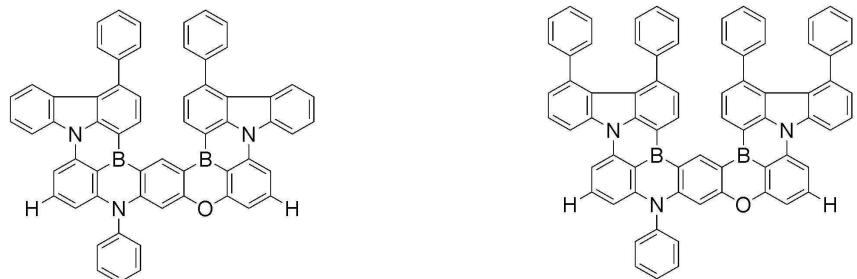


(22BOCz/NpCz-1420/S)

[0532]



[0533]

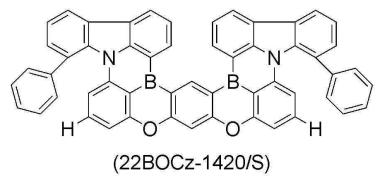
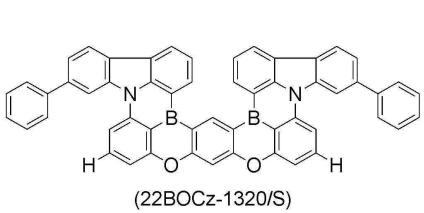
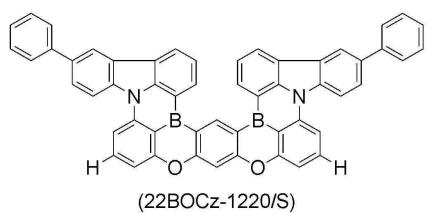
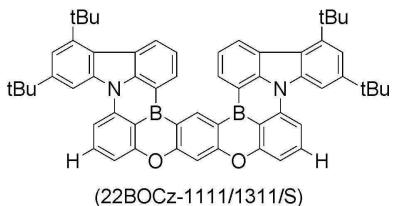
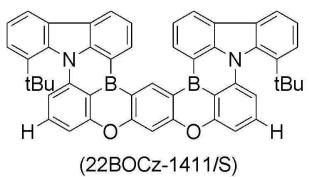
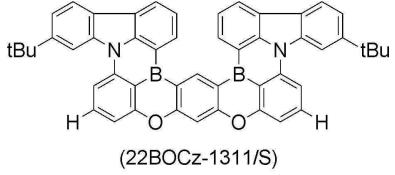
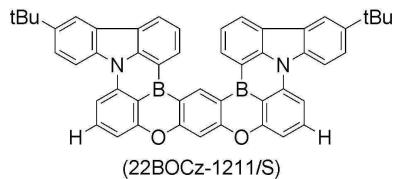
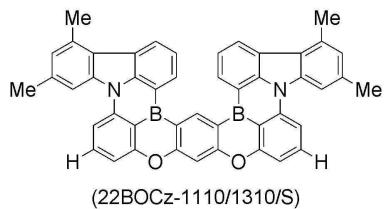
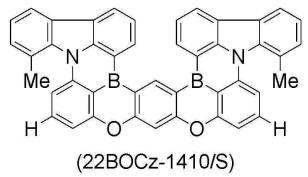
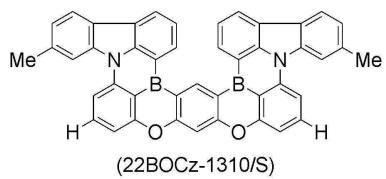
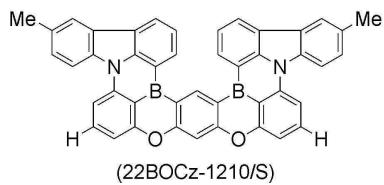


[0534]

[화학식 161]

[0538]

[화학식 162]

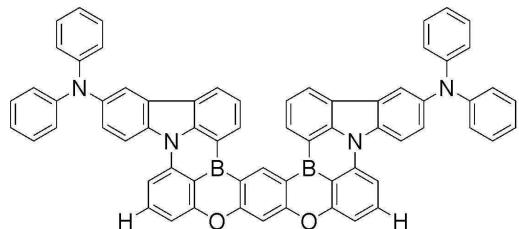


[0539]

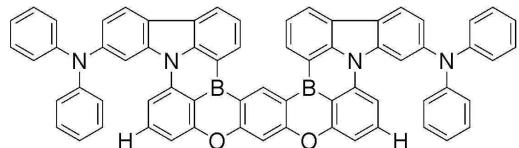
[0540]

[0541]

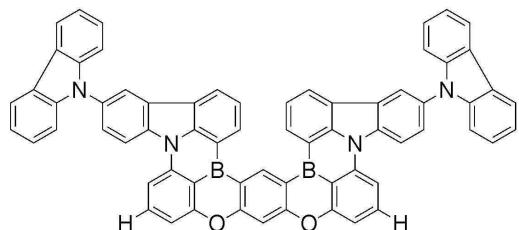
[화학식 163]



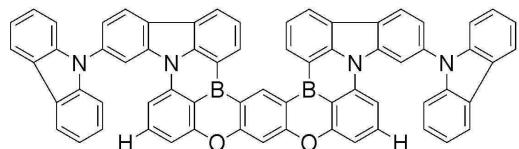
(22BOCz-1230/S)



(22BOCz-1330/S)



(22BOCz-1231/S)

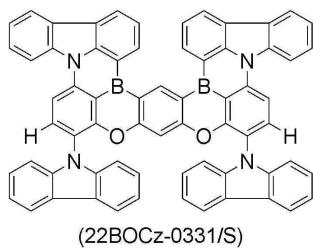
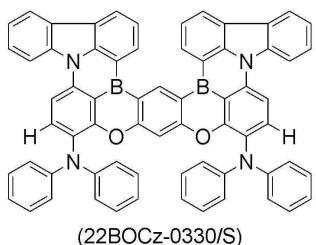
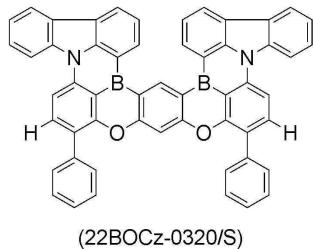
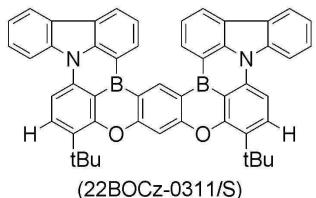
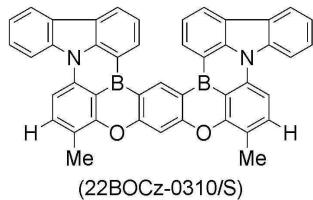


(22BOCz-1331/S)

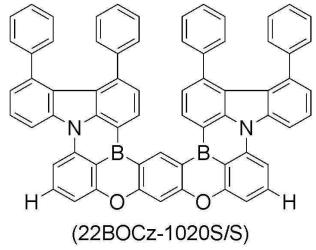
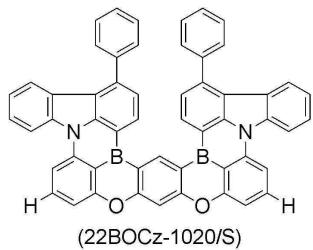
[0542]

[0543]

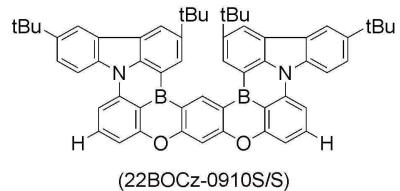
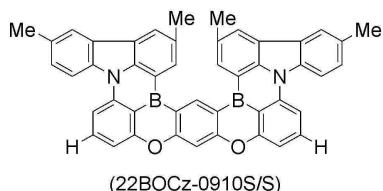
[화학식 164]



[0544]



[0545]



[0546]

[0547]

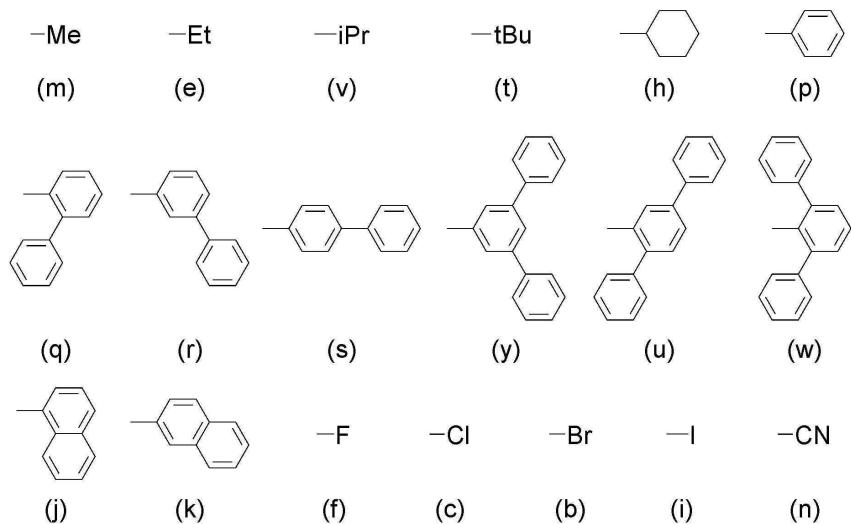
분자에 일그러짐을 부여함으로써, 스피-궤도 상호 작용을 크게 할 수 있다. 이로써, 자연 형광수명을 짧게 하고 TADF 기구(機構)를 발현시켜, 소자의 발광효율을 높게 할 수 있다. 이 목적을 위하여, 일반식(1)에 있어서, R⁷ 및/또는 R⁸에 이하에서 설명하는 치환기군 Z를 도입한다.

[0548]

일반식(1)에 있어서, R⁷ 및/또는 R⁸이 Z이며, Z는, 할로젠, 탄소수 1~6의 알킬, 탄소수 3~14의 시클로알킬, 탄소수 6~10의 아릴 또는 탄소수 2~10의 헤테로아릴이며, 구체적으로는, 하기 부분 구조식(m), 식(e), 식(V), 식(t), 식(h), 식(p), 식(q), 식(r), 식(s), 식(y), 식(u), 식(w), 식(j), 식(k), 식(f), 식(c), 식(b), 식(i) 및 식(n)의 기가 바람직하고, 이를 중에서도 식(m), 식(t), 식(p), 식(f) 및 식(n)의 기가 보다 바람직하고, 식(m) 및 식(t)의 기가 더욱 바람직하다.

[0549]

[화학식 165]



[0550]

[0551] 분자에 일그러짐을 부여함으로써, 자연 형광수명을 짧게 하고 TADF 기구를 발현시키는 관점에서, R^7 및 R^8 이 모두 Z인 것이 바람직하다. 높은 PLQY를 얻는 관점 및 분자의 안정성으로부터는, R^7 및 R^8 의 어느 한쪽만이 Z인 것이 바람직하다. 합성의 용이성의 관점에서는, R^7 이 Z인 것이 바람직하다.

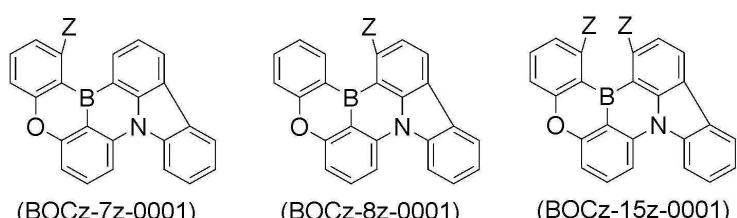
[0552] 합성의 용이성의 관점에서, R^7 이 Z일 때 R^5 에 치환기를 가지는 것이 바람직하고, 마찬가지로, R^8 이 Z일 때 R^{10} 및 /또는 R^{13} 에 치환기를 가지는 것이 바람직하고, 동일하게 R^{10} 이 Z일 때 R^8 및/또는 R^{12} 에 치환기를 가지는 것이 바람직하다. 또한, 합성의 용이성 및 안정성의 관점에서, 치환기는 작은 것이 바람직하고, 상기 식(m), 식(e), 식(V), 식(t), 식(h), 식(p), 식(q), 식(r), 식(s), 식(j), 식(k), 식(f), 식(c), 식(b), 식(i) 및 식(n)의 기가 바람직하고, 이들 중에서도 식(m), 식(e), 식(V), 식(t), 식(p), 식(f) 및 식(n)의 기가 보다 바람직하고, 식(m) 및 식(t)의 기가 더욱 바람직하고, 식(m)의 기가 가장 바람직하다.

[0553]

예를 들면, 일반식(BOCz-0001)에 있어서 R^7 및/또는 R^8 이 Z일 때, 다음과 같이 표시된다.

[0554]

[화학식 166]



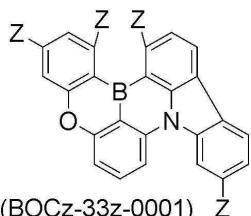
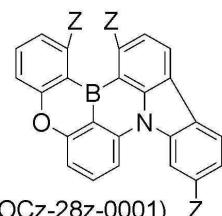
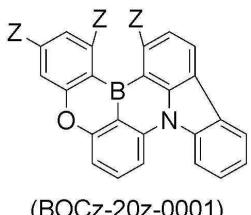
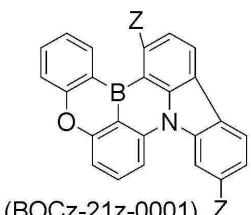
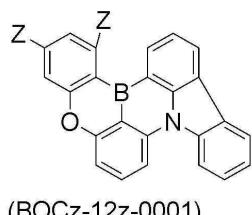
[0555]

[0556]

일반식(BOCz-7z-0001), 식(BOCz-8z-0001) 및 식(BOCz-15z-0001)에 있어서, R^5 및/또는 R^{13} 에 치환기를 가지는 것이 바람직하고, 특히 Z와 동일한 치환기를 R^5 및/또는 R^{13} 에 가질 때, 다음과 같이 표시된다.

[0557]

[화학식 167]

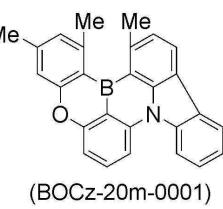
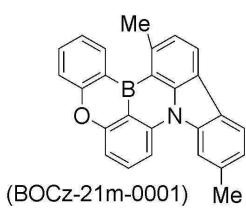
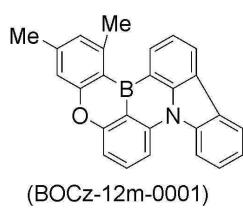
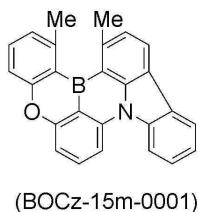
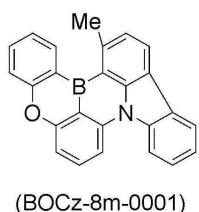


[0558]

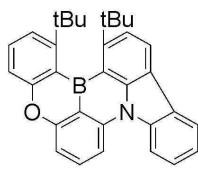
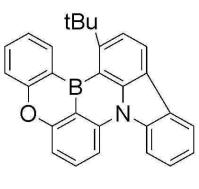
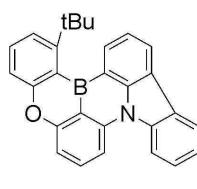
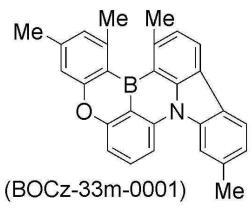
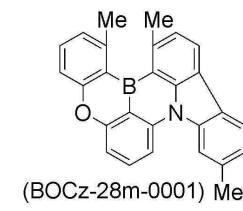
예를 들면, 일반식(BOCz-7z-0001), 식(BOCz-8z-0001), 식(BOCz-15z-0001), 식(BOCz-12z-0001), 식(BOCz-21z-0001), 식(BOCz-20z-0001), 식(BOCz-28z-0001) 및 식(BOCz-33z-0001)에 있어서, Z가 상기 식(m), (t) 및 (p)의 기일 때, 이하의 구조식으로 표시된다.

[0560]

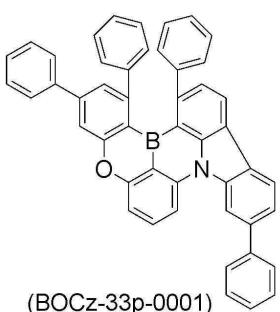
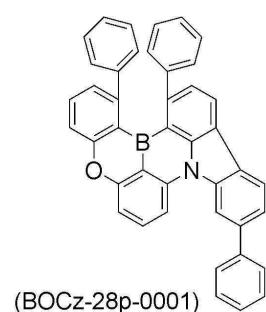
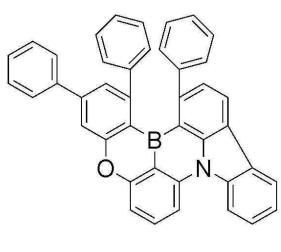
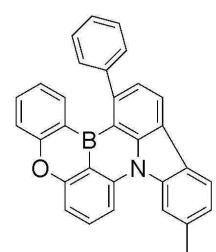
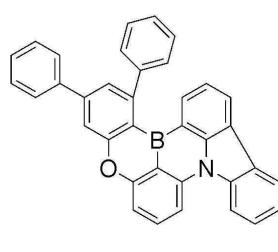
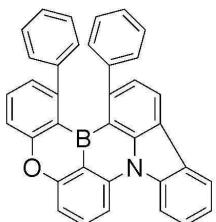
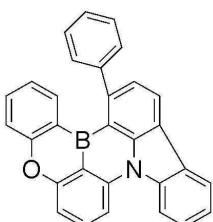
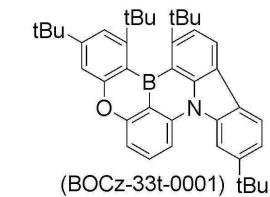
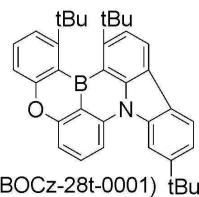
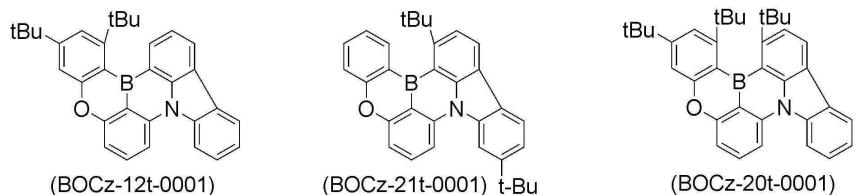
[화학식 168]



[0562]



[0563]

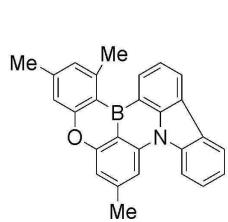


[0568] 합성의 용이성 및 안정성의 관점에서, 일반식(BOCz-7m-0001), 식(BOCz-8m-0001), 식(BOCz-12m-0001) 및 식(BOCz-21m-0001)이 바람직하고, 일반식(BOCz-7m-0001) 및 식(BOCz-12m-0001)이 보다 바람직하다. 짧은 지연 형 광수명의 관점에서, 일반식(BOCz-15m-0001), 식(BOCz-20m-0001), 식(BOCz-28m-0001) 및 식(BOCz-33m-0001)이 바람직하다.

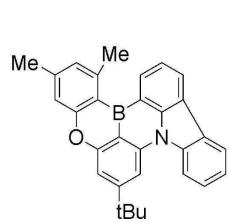
[0569] 이하는, 치환기군 Z에 의해 분자에 일그러짐이 부여된 구조의 구체예이다.

[0570]

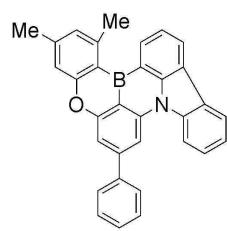
[화학식 170]



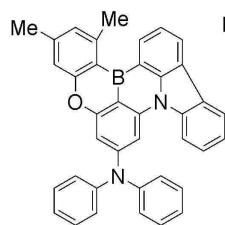
(BOCz-12m-0210)



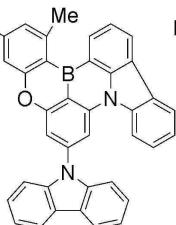
(BOCz-12m-0211)



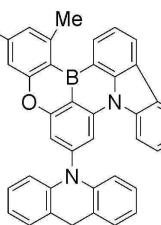
(BOCz-12m-0220)



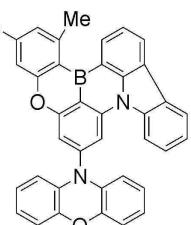
(BOCz-12m-0230)



(BOCz-12m-0231)

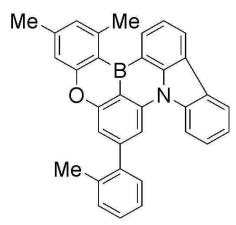


(BOCz-12m-023)

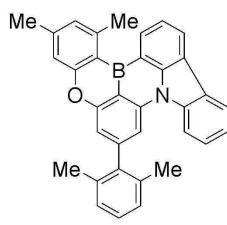


(BOCz-12m-0233)

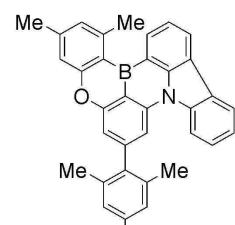
[0571]



(BOCz-12m-0220-1)



(BOCz-12m-0220-2)

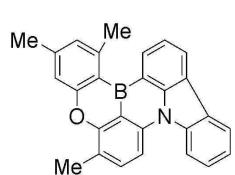


(BOCz 12m 0220 3)

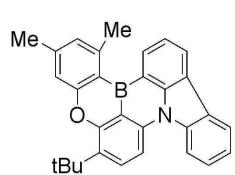
[0572]

[0573]

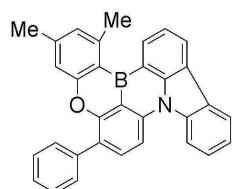
[화학식 171]



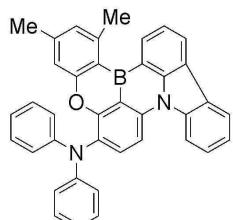
(BOCz-12m-0310)



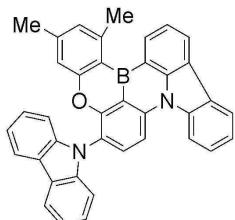
(BOCz-12m-0311)



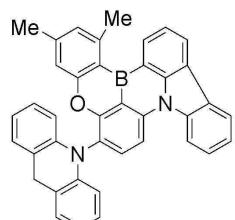
(BOCz-12m-0320)



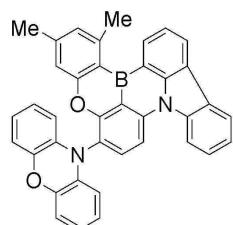
(BOCz-12m-0330)



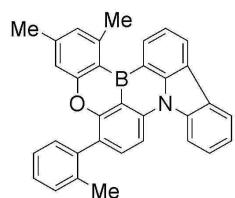
(BOCz-12m-0331)



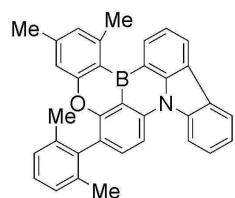
(BOCz-12m-0332)



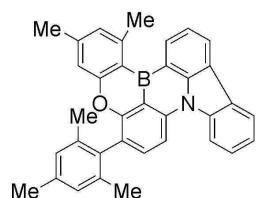
(BOCz-12m-0333)



(BOCz-12m-0320-1)



(BOCz-12m-0320-2)



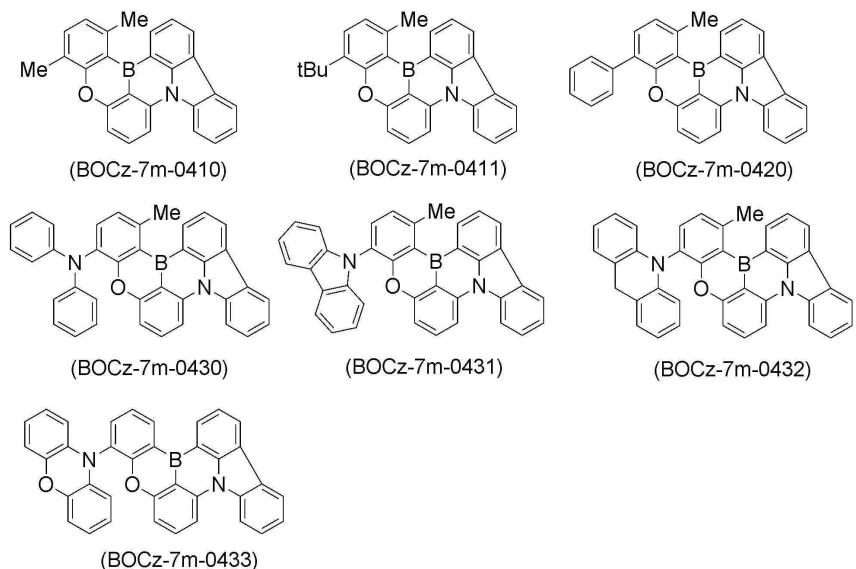
(BOCz-12m-0320-3)

[0574]

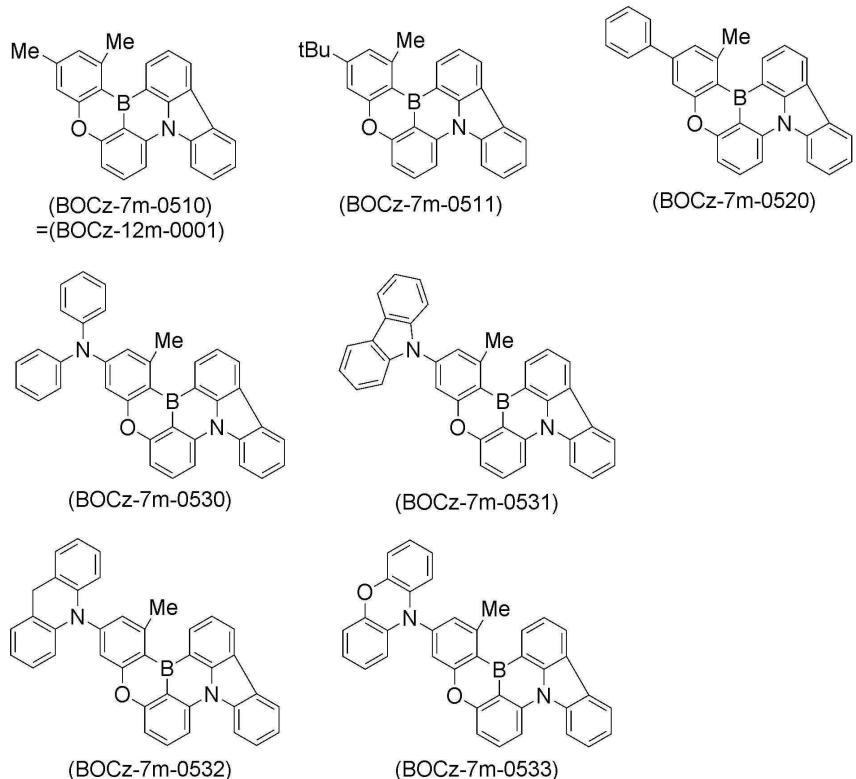
[0575]

[0576]

[화학식 172]



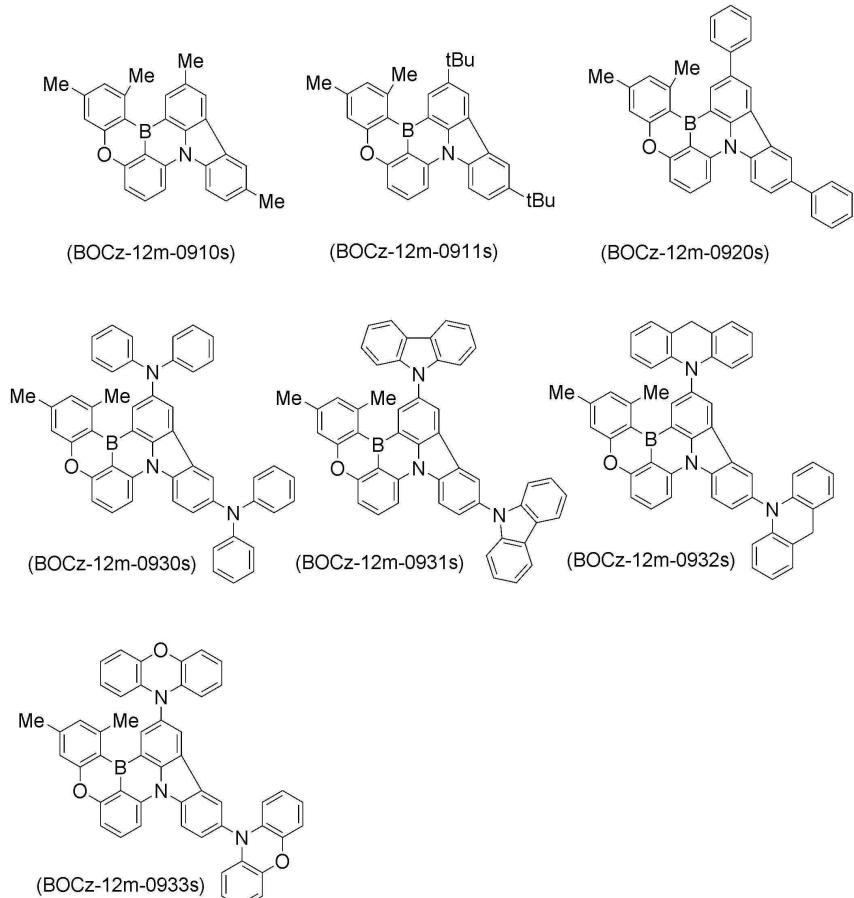
[0577]



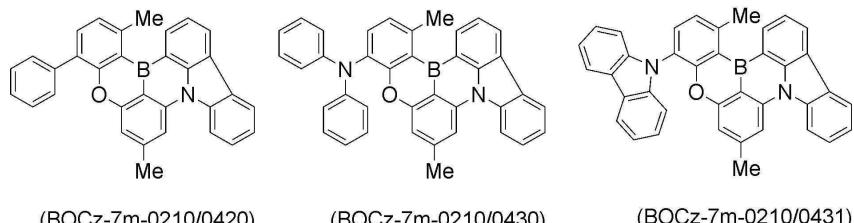
[0578]

[0579]

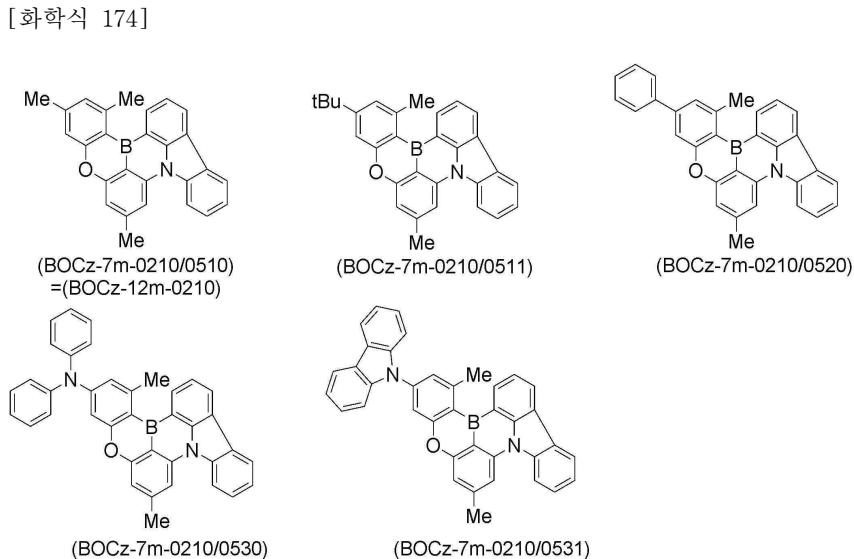
[화학식 173]



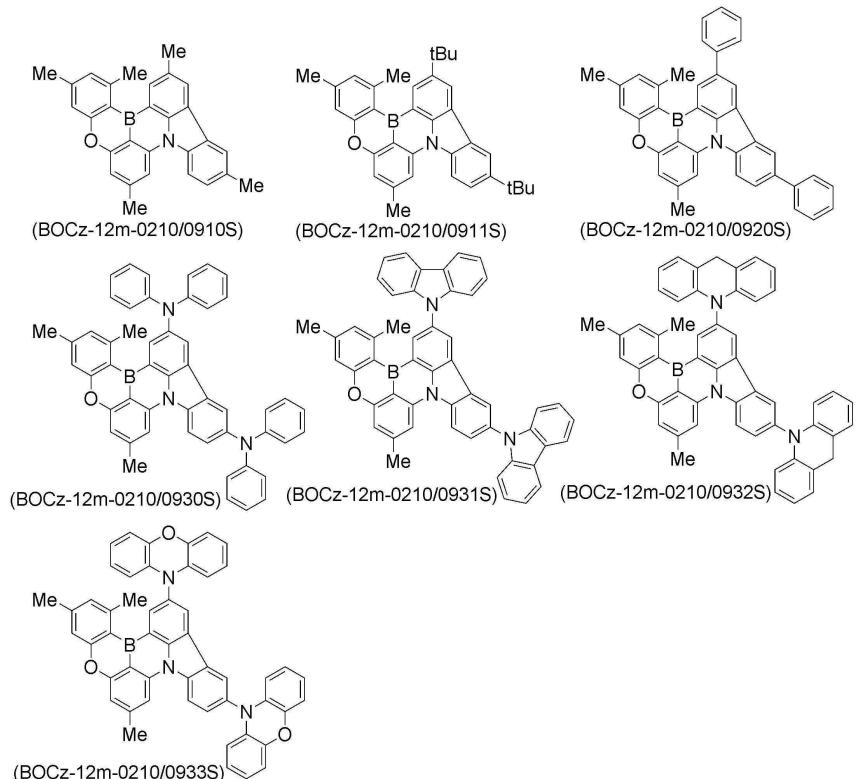
[0580]



[0581]



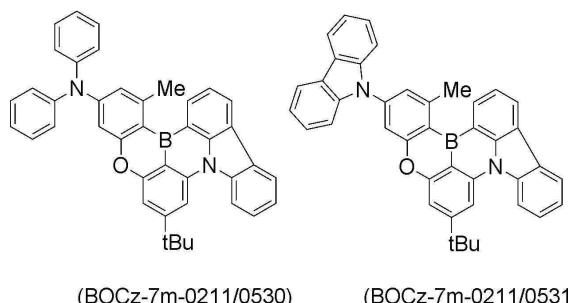
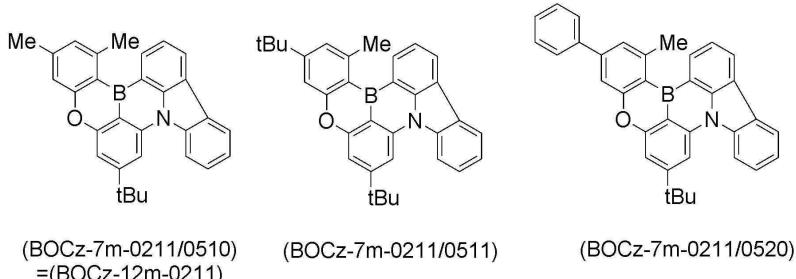
[0583]



[0584]



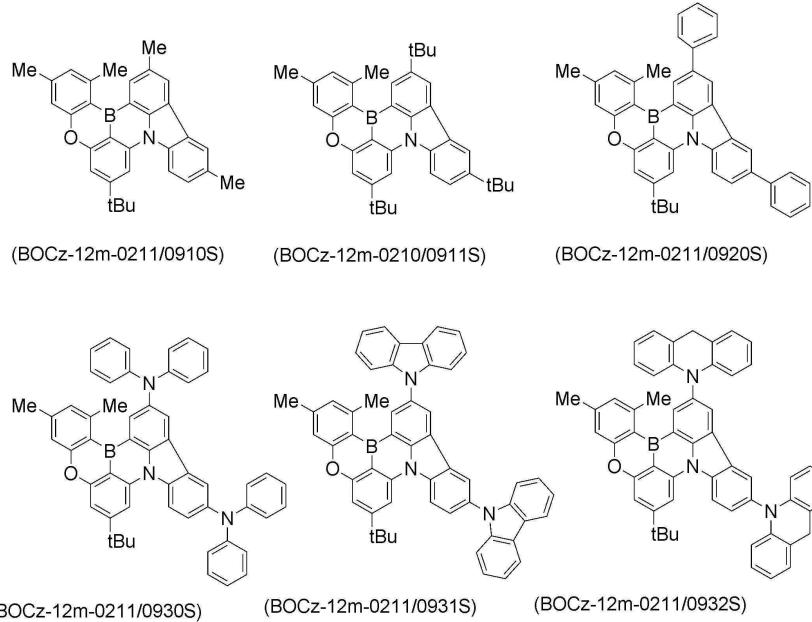
[0586]



[0587]

[0588]

[화학식 176]

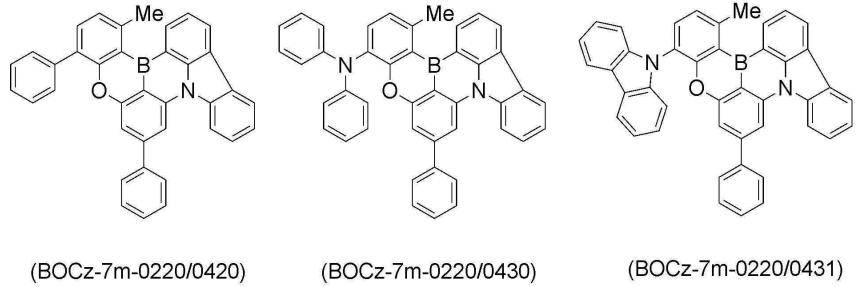


[0589]

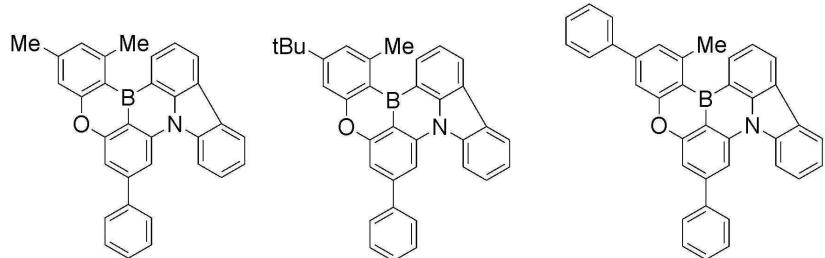
(BOCz-12m-0211/0933S)

[0590]

[화학식 177]

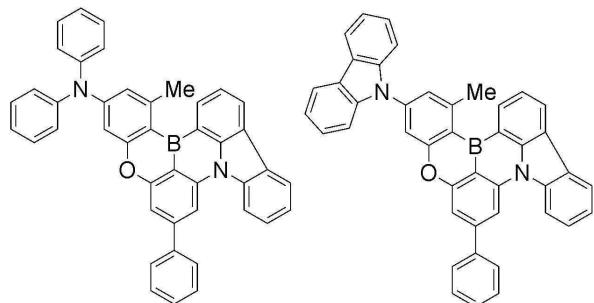


[0591]

(BOCz-7m-0220/0510)
=(BOCz-12m-0220)

(BOCz-7m-0220/0511)

(BOCz-7m-0220/0520)



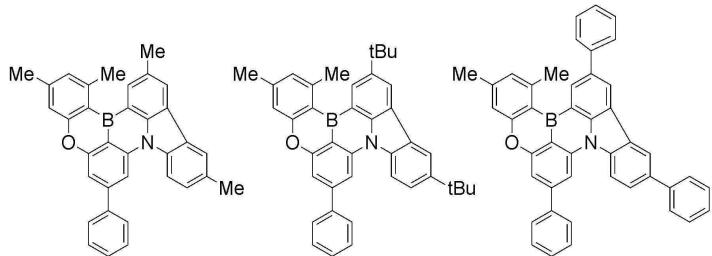
(BOCz-7m-0220/0530)

(BOCz-7m-0220/0531)

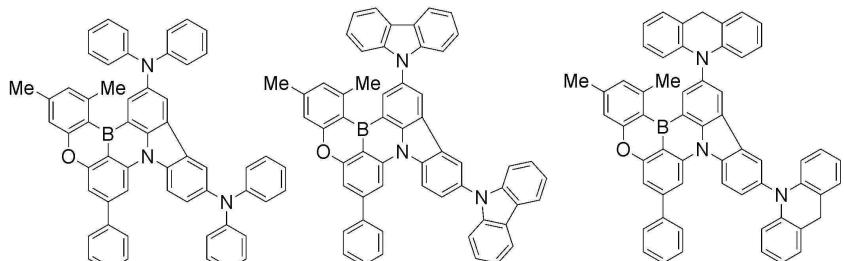
[0592]

[0593]

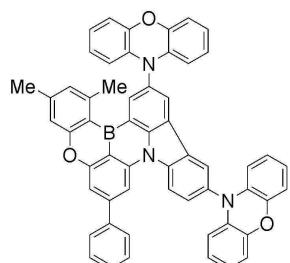
[화학식 178]



(BOCz-12m-0220/0910S) (BOCz-12m-0220/0911S) (BOCz-12m-0220/0920S)



(BOCz-12m-0220/0930S) (BOCz-12m-0220/0931S) (BOCz-12m-0220/0932S)

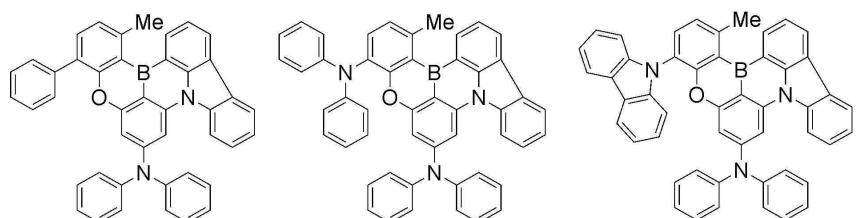


(BOCz-12m-0220/0933S)

[0594]

[0595]

[화학식 179]

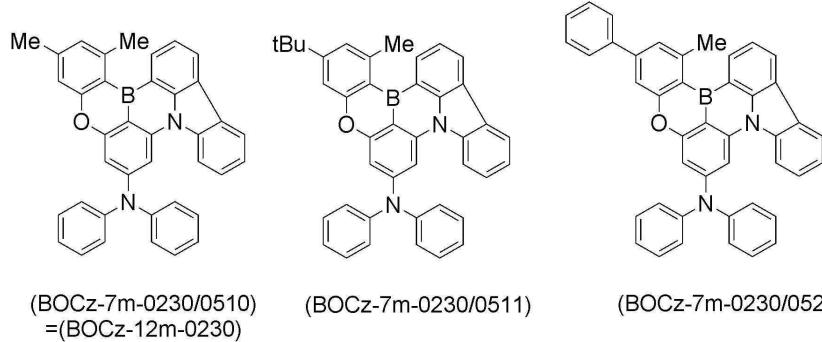


(BOCz-7m-0230/0420)

(BOCz-7m-0230/0430)

(BOCz-7m-0230/0431)

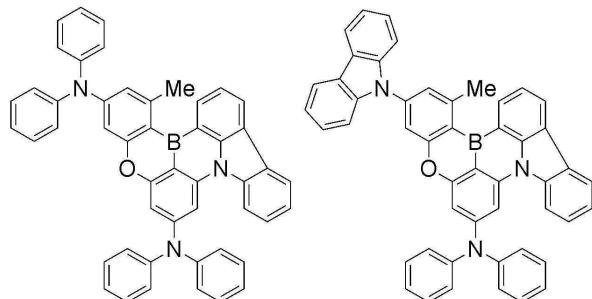
[0596]



(BOCz-7m-0230/0510)
=(BOCz-12m-0230)

(BOCz-7m-0230/0511)

(BOCz-7m-0230/0520)

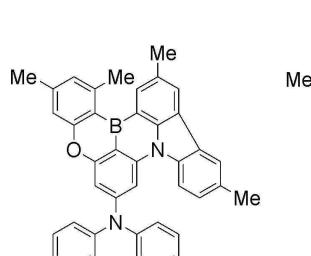


[0597] (BOCz-7m-0230/0530)

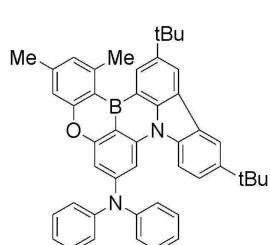
(BOCz-7m-0230/0531)

[0598]

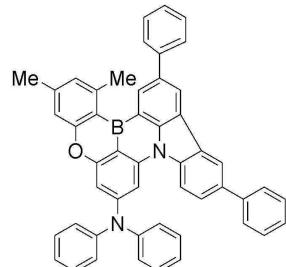
[화학식 180]



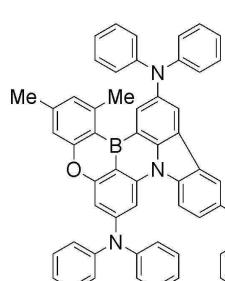
(BOCz-12m-0230/0910S)



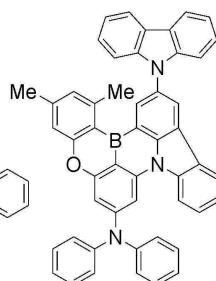
(BOCz-12m-0230/0911S)



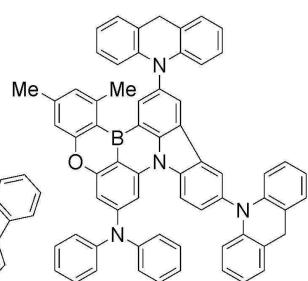
(BOCz-12m-0230/0920S)



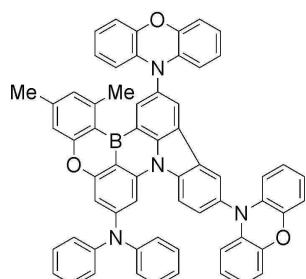
(BOCz-12m-0230/0930S)



(BOCz-12m-0230/0931S)



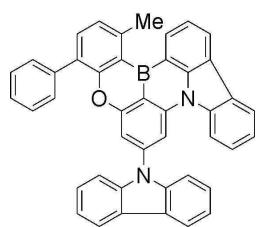
(BOCz-12m-0230/0932S)



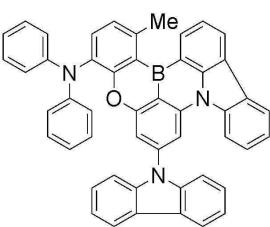
(BOCz-12m-0230/0933S)

[0599]

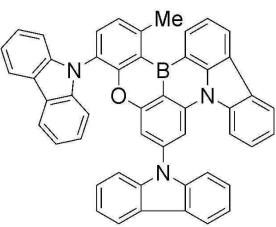
[화학식 181]



(BOCz-7m-0231/0420)



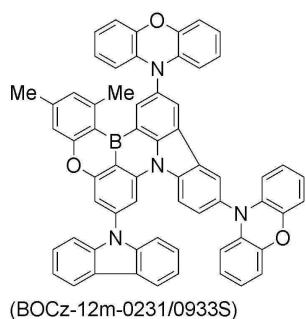
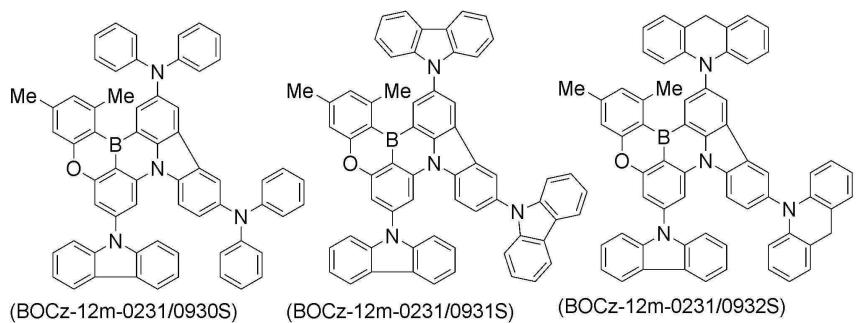
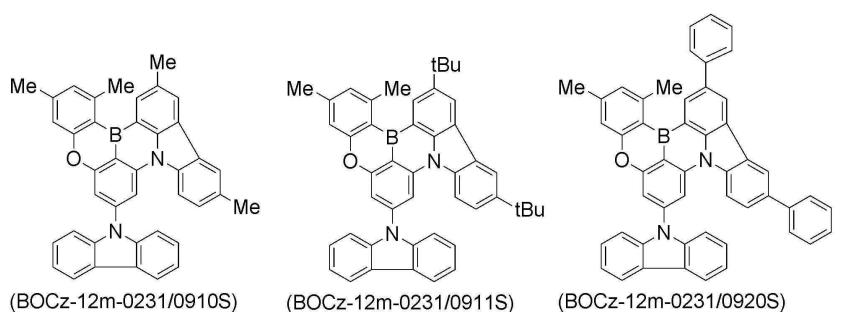
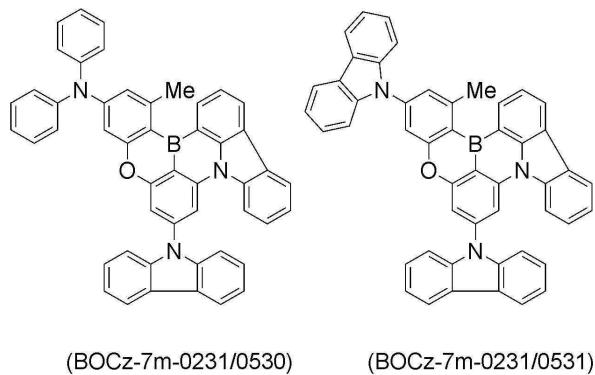
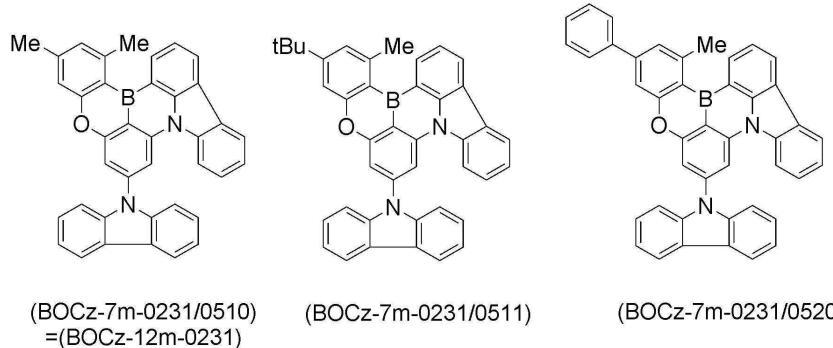
(BOCz-7m-0231/0430)



(BOCz-7m-0231/0431)

[0600]

[0601]





[0605]

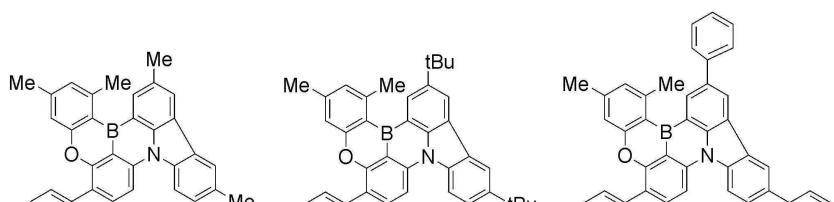
(BOCz-7m-0320/0420)

(BOCz-7m-0320/0430)

(BOCz-7m-0320/0431)

[0606]

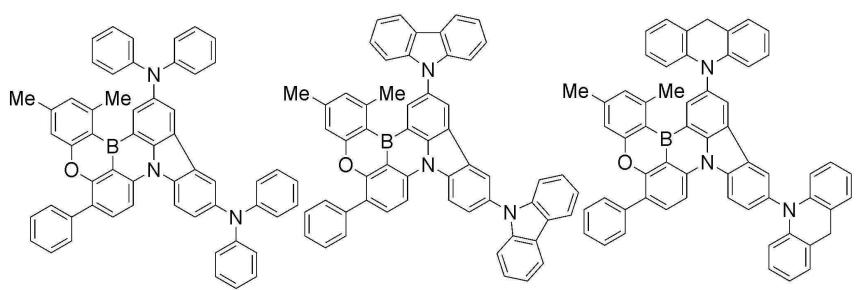
[화학식 183]



(BOCz-12m-0320/0910S)

(BOCz-12m-0320/0911S)

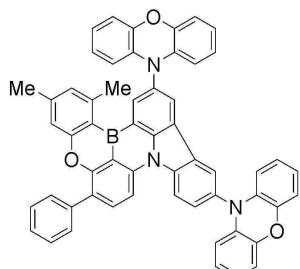
(BOCz-12m-0320/0920S)



(BOCz-12m-0320/0930S)

(BOCz-12m-0320/0931S)

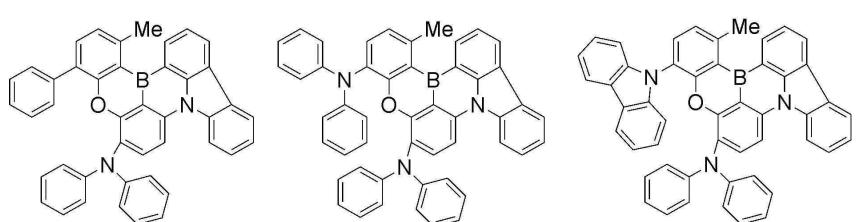
(BOCz-12m-0320/0932S)



(BOCz-12m-0320/0933S)

[0607]

[화학식 184]

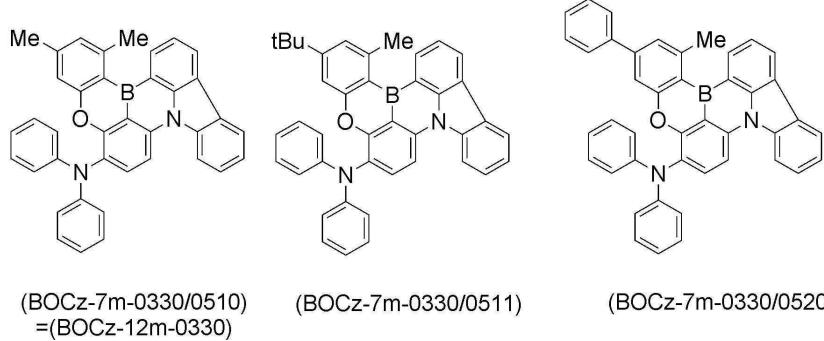


[0609]

(BOCz-7m-0330/0420)

(BOCz-7m-0330/0430)

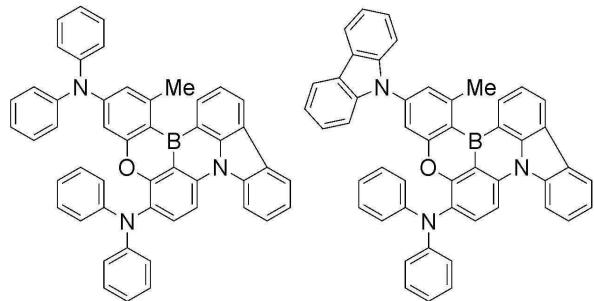
(BOCz-7m-0330/0431)



(BOCz-7m-0330/0510)
=(BOCz-12m-0330)

(BOCz-7m-0330/0511)

(BOCz-7m-0330/0520)



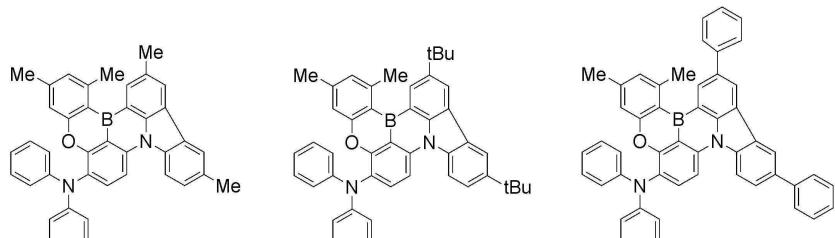
[0610]

(BOCz-7m-0330/0530)

(BOCz-7m-0330/0531)

[0611]

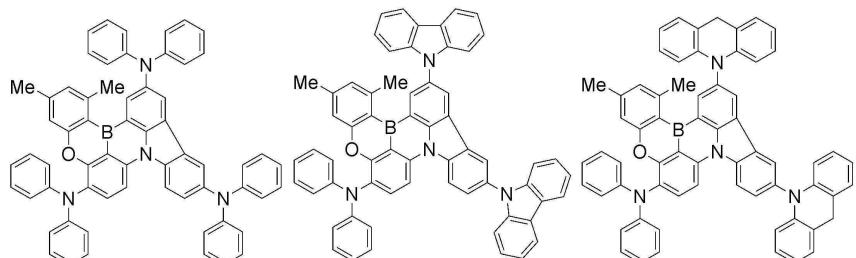
[화학식 185]



(BOCz-12m-0330/0910S)

(BOCz-12m-0330/0911S)

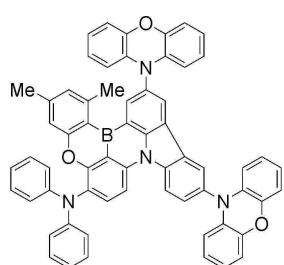
(BOCz-12m-0330/0920S)



(BOCz-12m-0330/0930S)

(BOCz-12m-0330/0931S)

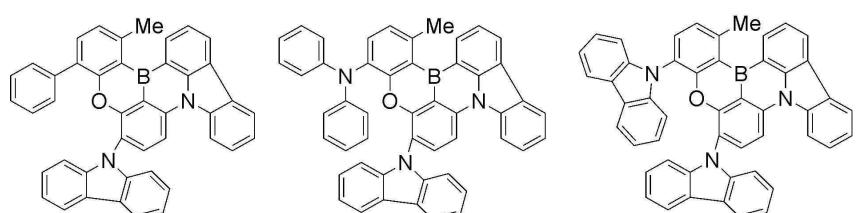
(BOCz-12m-0330/0932S)



(BOCz-12m-0330/0933S)

[0612]

[화학식 186]

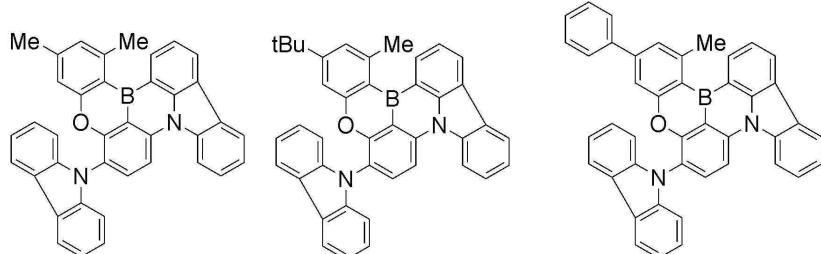


(BOCz-7m-0331/0420)

(BOCz-7m-0331/0430)

(BOCz-7m-0331/0431)

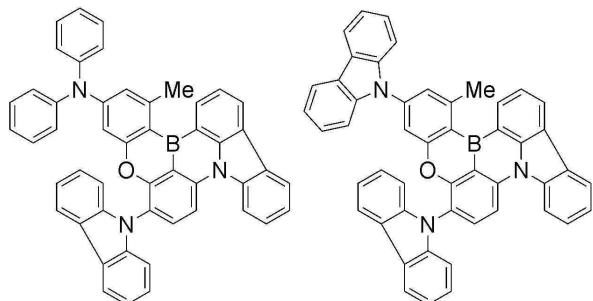
[0613]



(BOCz-7m-0331/0510)
=(BOCz-12m-0331)

(BOCz-7m-0331/0511)

(BOCz-7m-0331/0520)

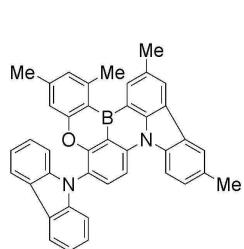


[0615] (BOCz-7m-0331/0530)

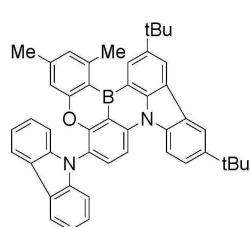
(BOCz-7m-0331/0531)

[0616]

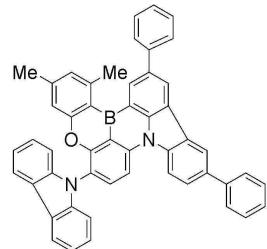
[화학식 187]



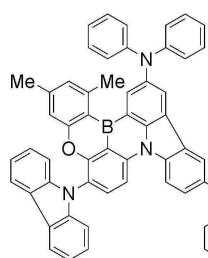
(BOCz-12m-0331/0910S)



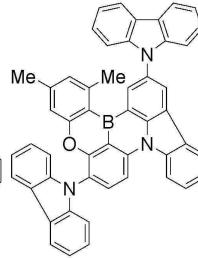
(BOCz-12m-0331/0911S)



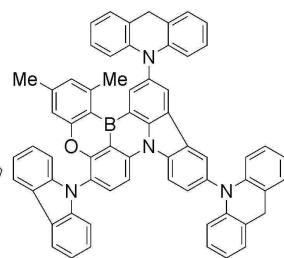
(BOCz-12m-0331/0920S)



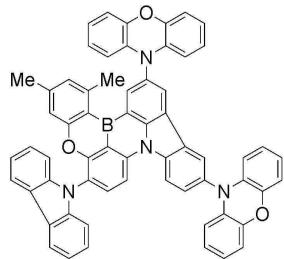
(BOCz-12m-0331/0930S)



(BOCz-12m-0331/0931S)



(BOCz-12m-0331/0932S)

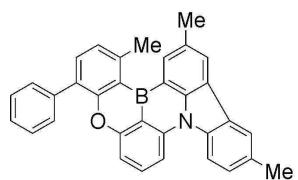


(BOCz-12m-0331/0933S)

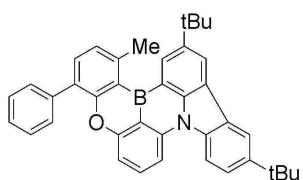
[0617]

[0618]

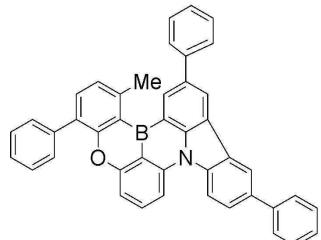
[화학식 188]



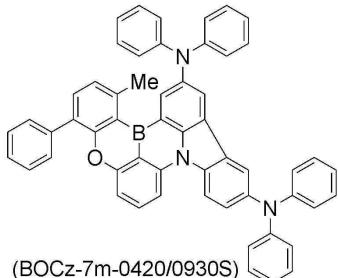
(BOCz-7m-0420/0910S)



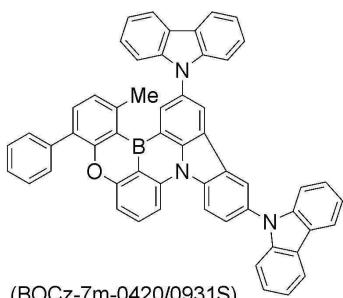
(BOCz-7m-0420/0911S)



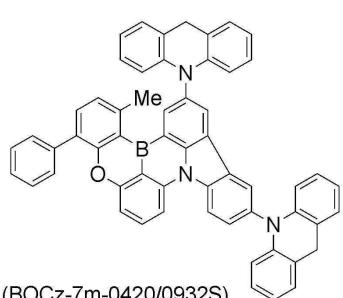
(BOCz-7m-0420/0920S)



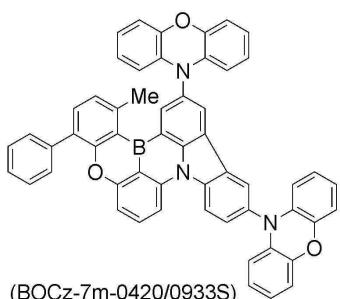
(BOCz-7m-0420/0930S)



(BOCz-7m-0420/0931S)



(BOCz-7m-0420/0932S)

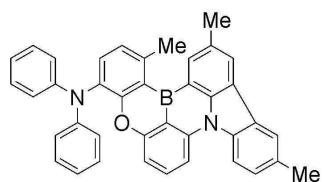


(BOCz-7m-0420/0933S)

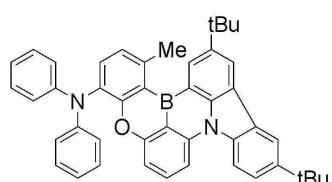
[0619]

[0620]

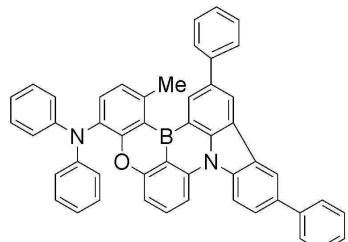
[화학식 189]



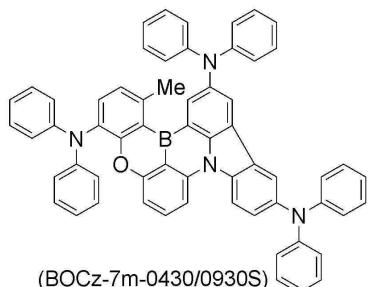
(BOCz-7m-0430/0910S)



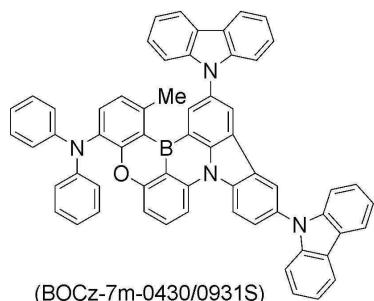
(BOCz-7m-0430/0911S)



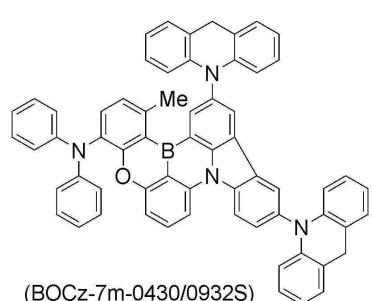
(BOCz-7m-0430/0920S)



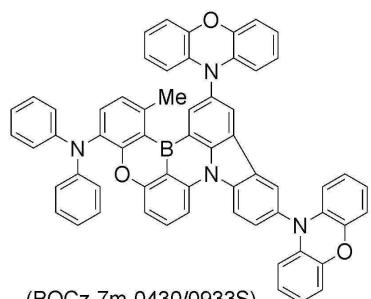
(BOCz-7m-0430/0930S)



(BOCz-7m-0430/0931S)



(BOCz-7m-0430/0932S)

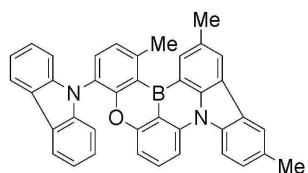


(BOCz-7m-0430/0933S)

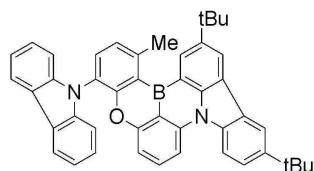
[0621]

[0622]

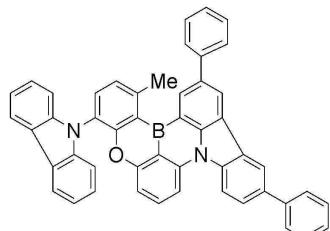
[화학식 190]



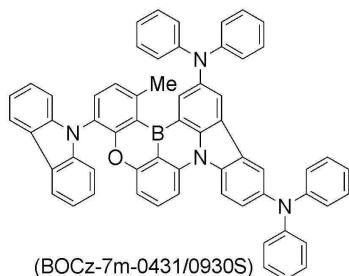
(BOCz-7m-0431/0910S)



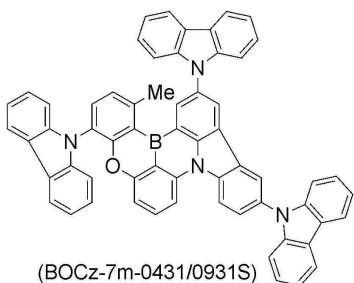
(BOCz-7m-0431/0911S)



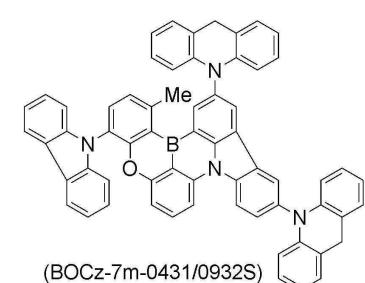
(BOCz-7m-0431/0920S)



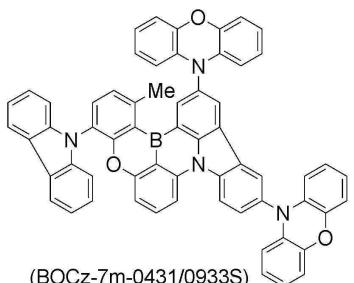
(BOCz-7m-0431/0930S)



(BOCz-7m-0431/0931S)



(BOCz-7m-0431/0932S)

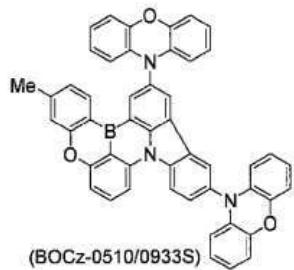
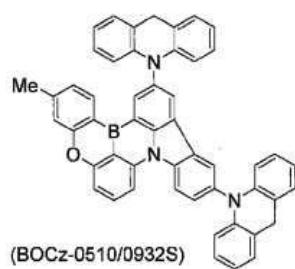
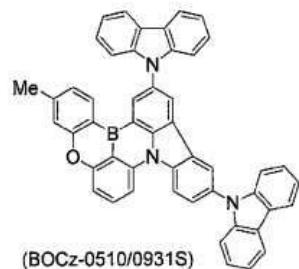
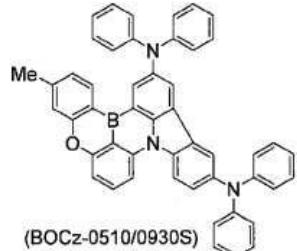
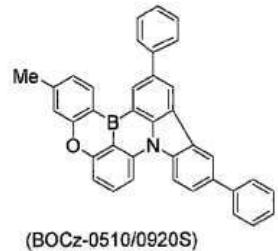
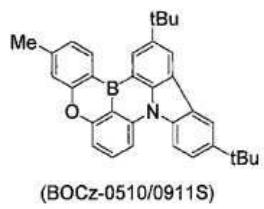
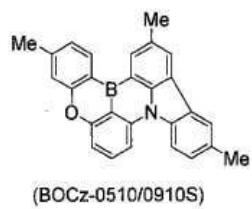


(BOCz-7m-0431/0933S)

[0623]

[0624]

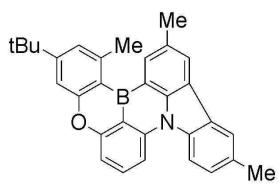
[화학식 191]



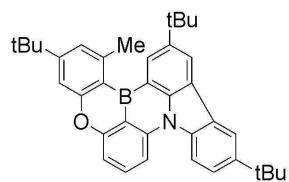
[0625]

[0626]

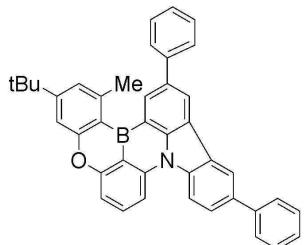
[화학식 192]



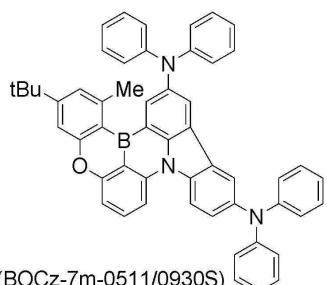
(BOCz-7m-0511/0910S)



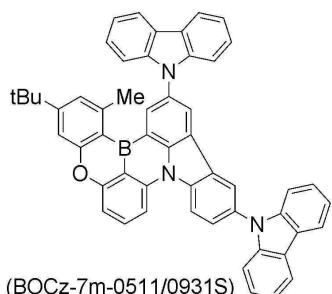
(BOCz-7m-0511/0911S)



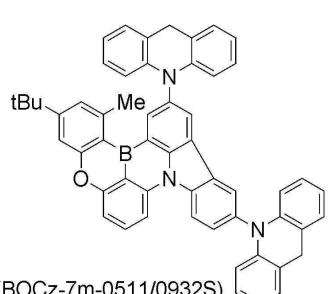
(BOCz-7m-0511/0920S)



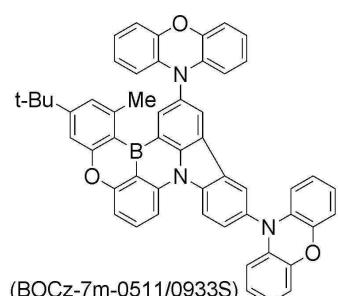
(BOCz-7m-0511/0930S)



(BOCz-7m-0511/0931S)



(BOCz-7m-0511/0932S)

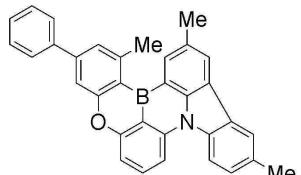


(BOCz-7m-0511/0933S)

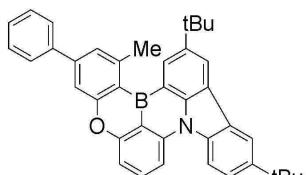
[0627]

[0628]

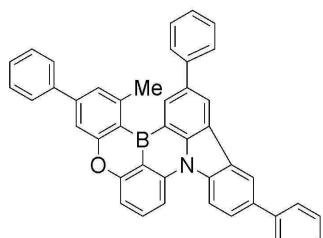
[화학식 193]



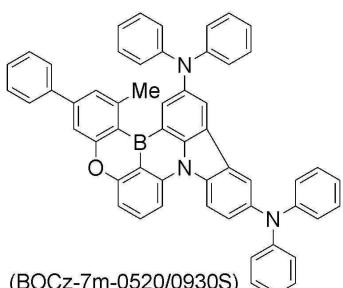
(BOCz-7m-0520/0910S)



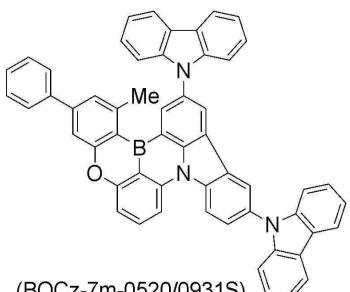
(BOCz-7m-0520/0911S)



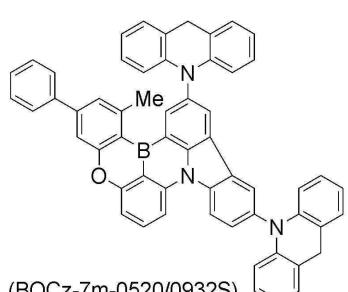
(BOCz-7m-0520/0920S)



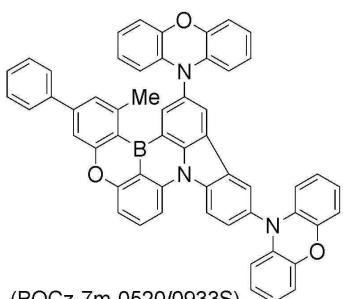
(BOCz-7m-0520/0930S)



(BOCz-7m-0520/0931S)



(BOCz-7m-0520/0932S)

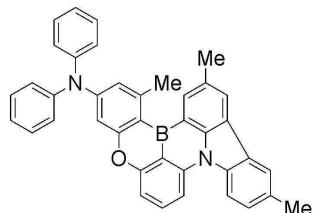


(BOCz-7m-0520/0933S)

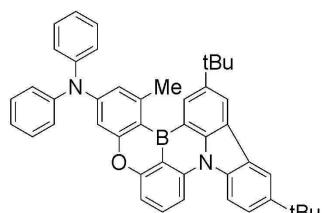
[0629]

[0630]

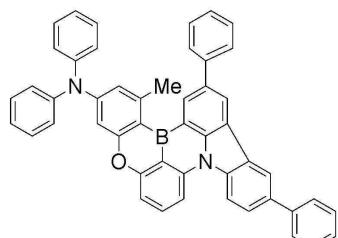
[화학식 194]



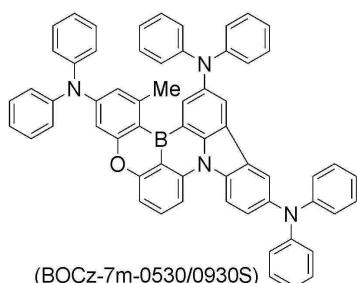
(BOCz-7m-0530/0910S)



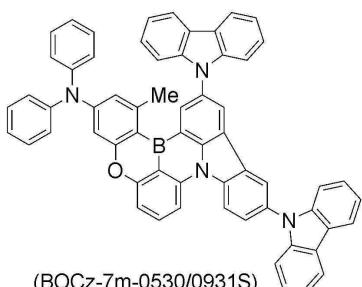
(BOCz-7m-0530/0911S)



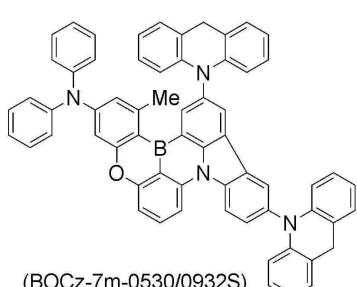
(BOCz-7m-0530/0920S)



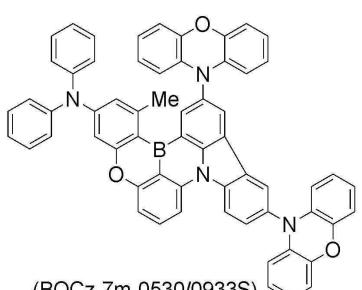
(BOCz-7m-0530/0930S)



(BOCz-7m-0530/0931S)



(BOCz-7m-0530/0932S)

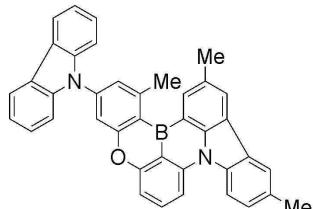


(BOCz-7m-0530/0933S)

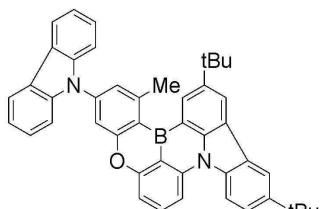
[0631]

[0632]

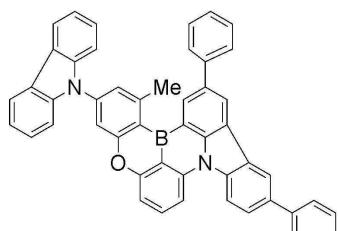
[화학식 195]



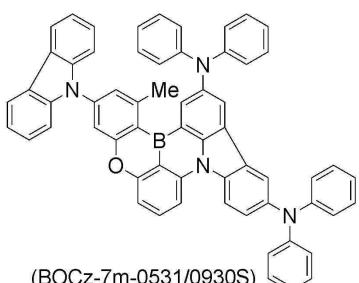
(BOCz-7m-0531/0910S)



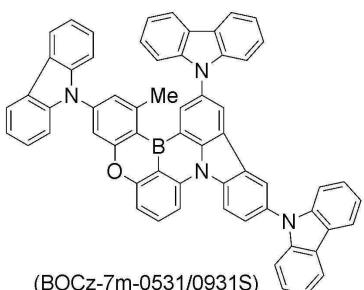
(BOCz-7m-0531/0911S)



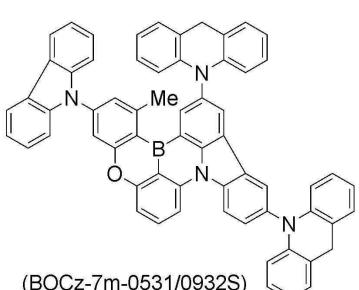
(BOCz-7m-0531/0920S)



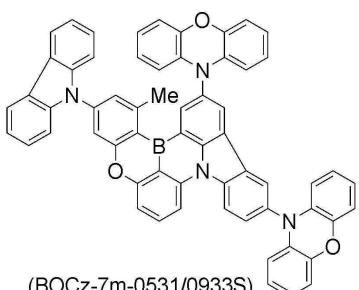
(BOCz-7m-0531/0930S)



(BOCz-7m-0531/0931S)



(BOCz-7m-0531/0932S)



(BOCz-7m-0531/0933S)

[0633]

[0634]

예를 들면, 일반식(BNpCz-0001)에 있어서 R^7 및/또는 R^{13} 이 Z일 때, 다음과 같이 표시된다.

[0635]

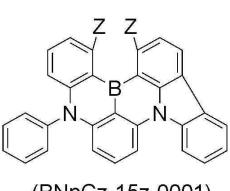
[화학식 196]



(BNpCz-7z-0001)



(BNpCz-8z-0001)



(BNpCz-15z-0001)

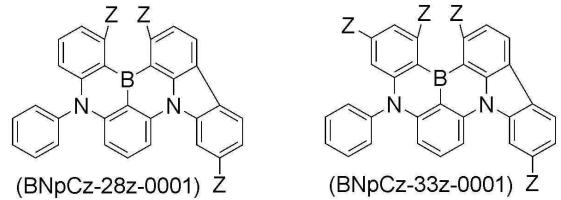
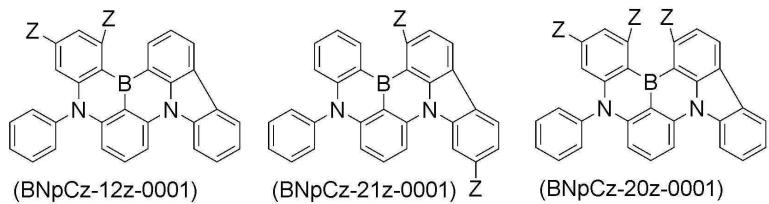
[0636]

[0637]

일반식(BNpCz-7z-0001), 식(BNpCz-8z-0001) 및 식(BNpCz-15z-0001)에 있어서, R^5 및/또는 R^{13} 에 치환기를 가지는 것이 바람직하고, 특히 Z와 동일한 치환기를 R^5 및/또는 R^{13} 에 가질 때, 다음과 같이 표시된다.

[0638]

[화학식 197]



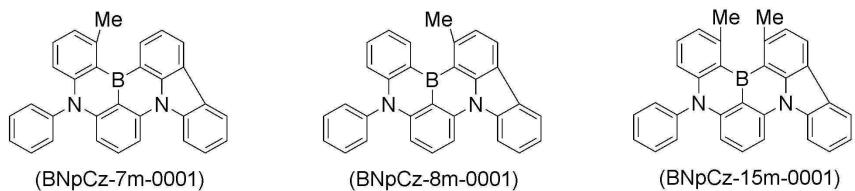
[0639]

[0640]

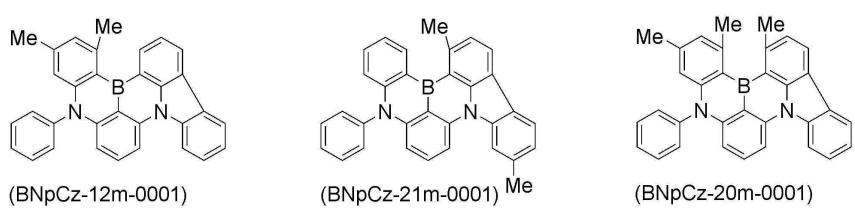
예를 들면, 일반식(BNpCz-7z-0001), 식(BNpCz-8z-0001), 식(BNpCz-15z-0001), 식(BNpCz-12z-0001), 식(BNpCz-21z-0001), 식(BNpCz-20z-0001), 식(BNpCz-28z-0001) 및 식(BNpCz-33z-0001)에 있어서, Z가 상기 식(m), (t) 및 (p)의 기호 때, 이하의 구조식으로 표시된다.

[0641]

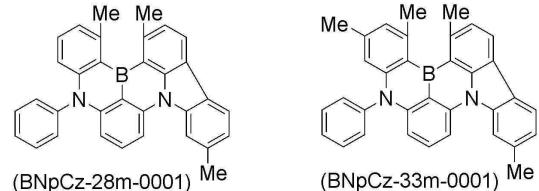
[화학식 198]



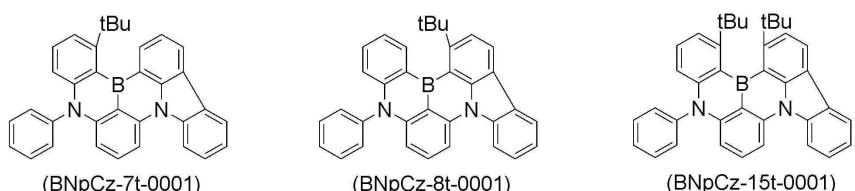
[0642]

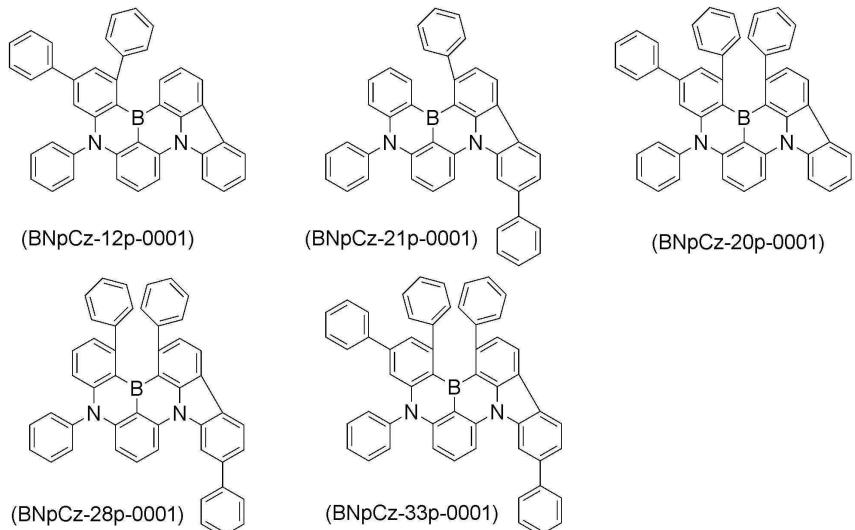


[0643]



[0644]

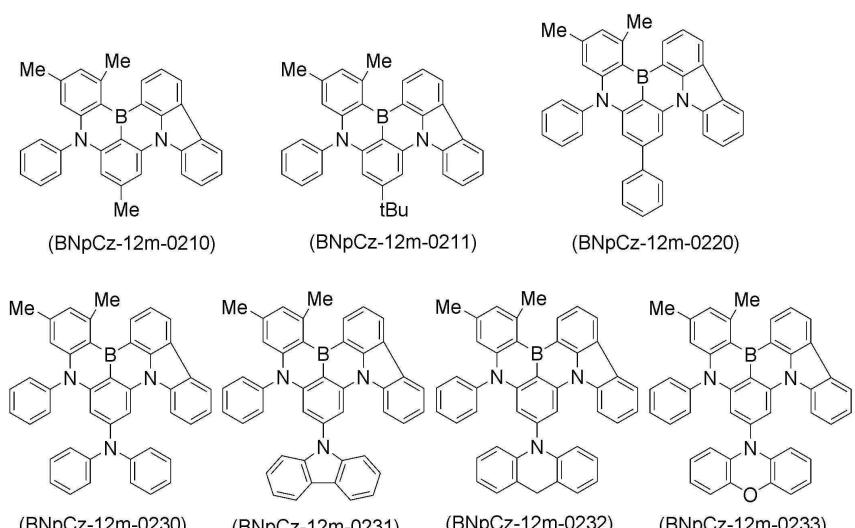


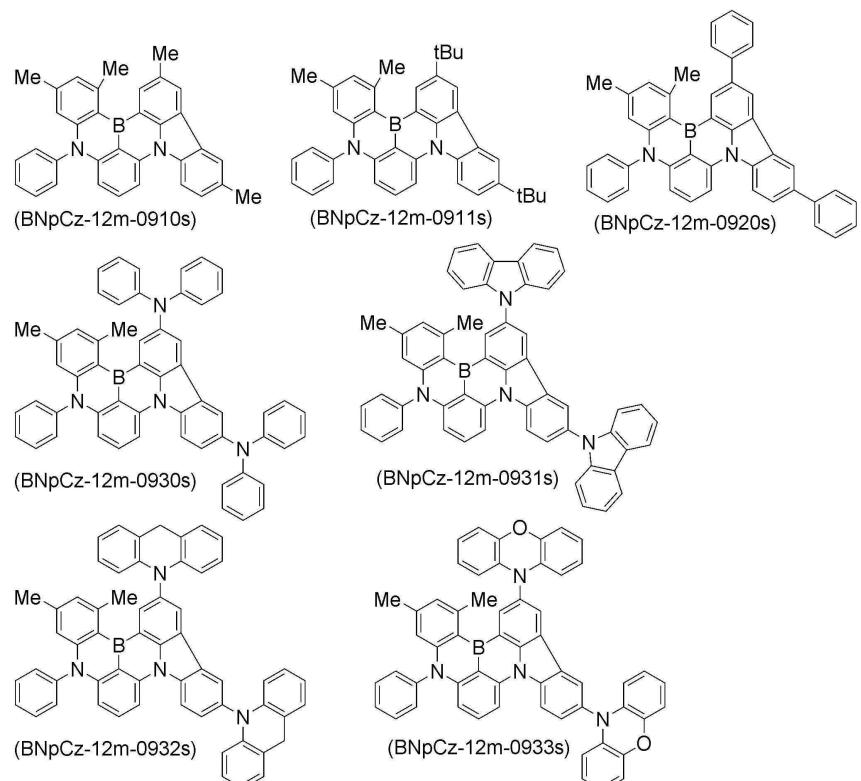
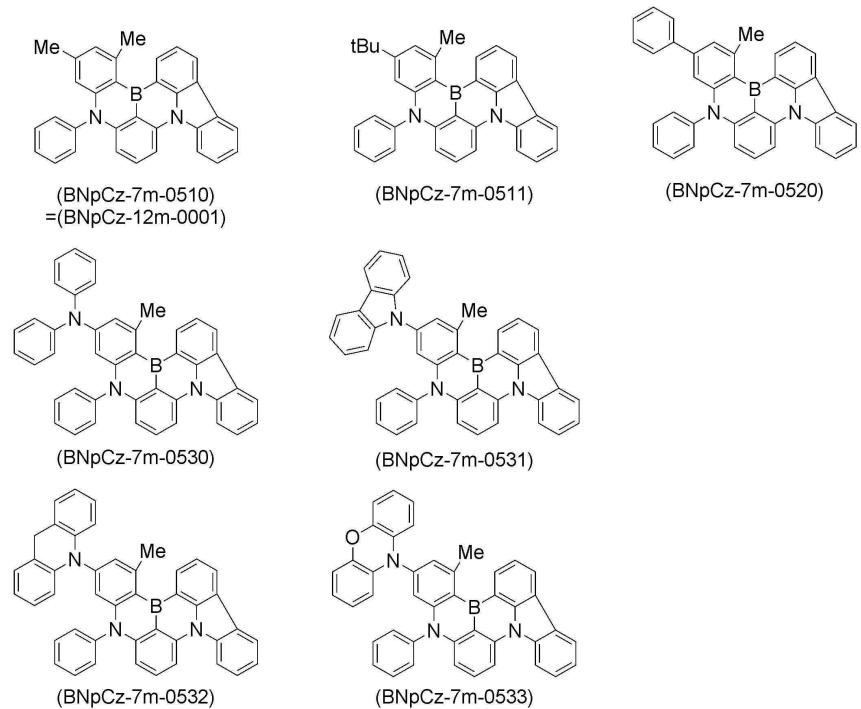


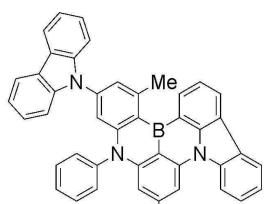
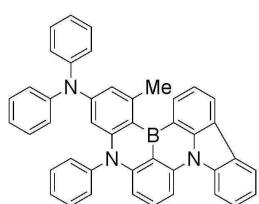
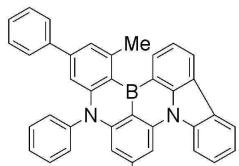
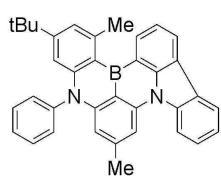
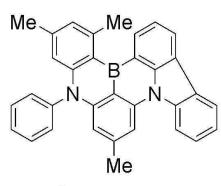
[0646] 합성의 용이성 및 안정성의 관점에서, 일반식(BNpCz-7m-0001), 식(BNpCz-8m-0001), 식(BNpCz-12m-0001) 및 식(BNpCz-21m-0001)이 바람직하고, 일반식(BNpCz-7m-0001) 및 식(BNpCz-12m-0001)이 더욱 바람직하다. 짧은 자연형 광수명의 관점에서, 일반식(BNpCz-15m-0001), 식(BNpCz-20m-0001), 식(BNpCz-28m-0001) 및 식(BNpCz-33m-0001)이 바람직하다.

[0647] 이하는, 치환기군 Z에 의해 분자에 일그러짐이 부여된 구조의 구체예이다.

[화학식 199]

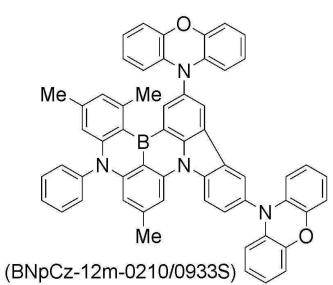
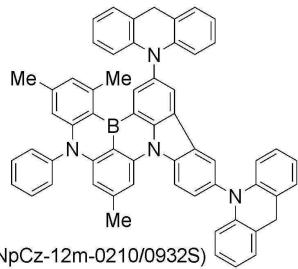
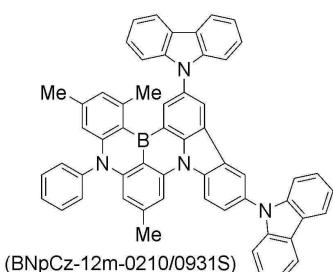
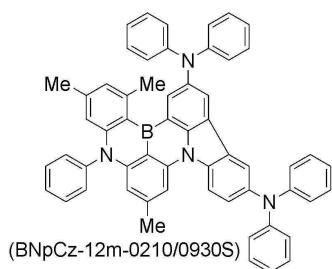
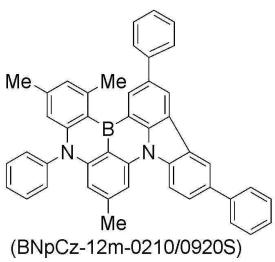
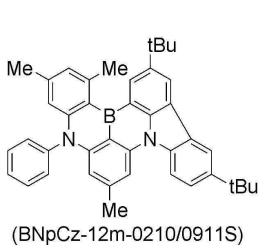
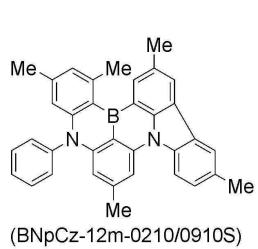




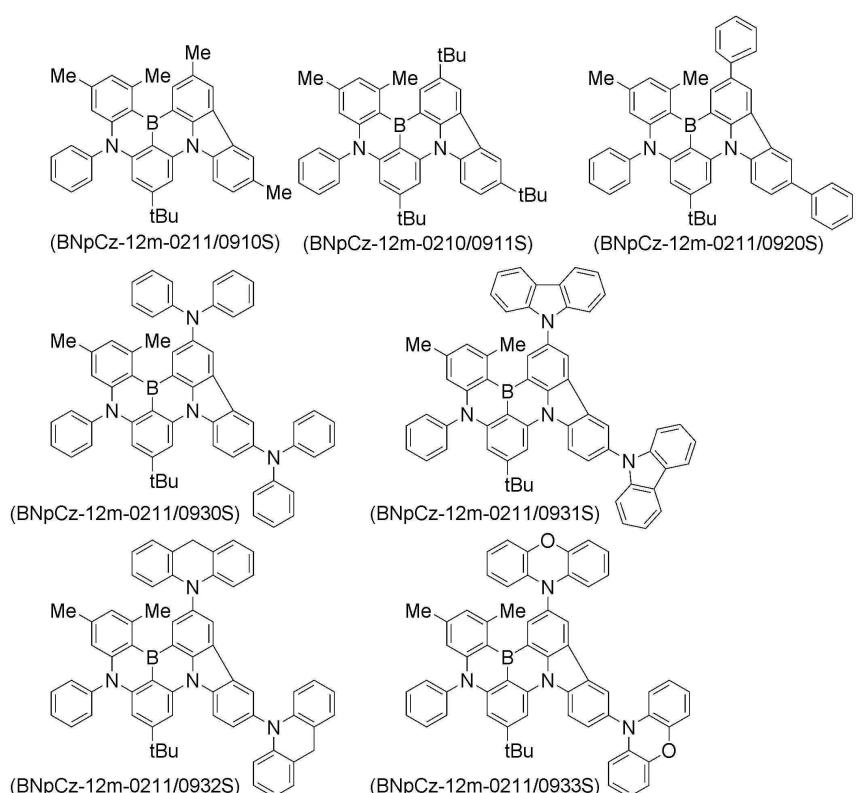
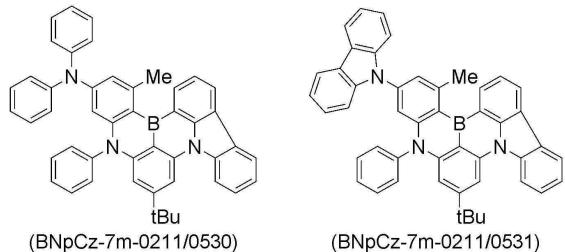
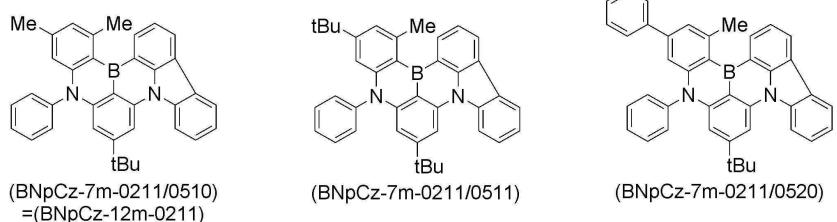


[0653]

[화학식 201]

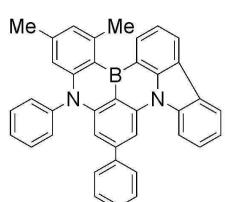
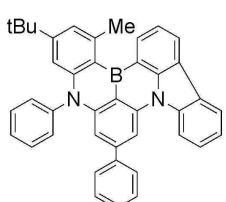


[0655]

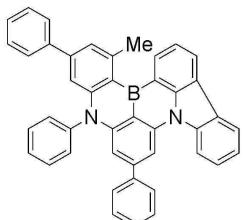


[0657]

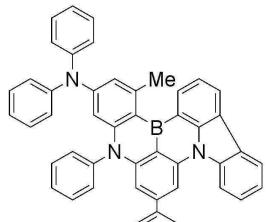
[화학식 202]

(BNpCz-7m-0220/0510)
=(BNpCz-12m-0220)

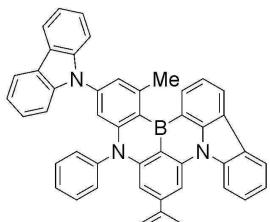
(BNpCz-7m-0220/0511)



(BNpCz-7m-0220/0520)



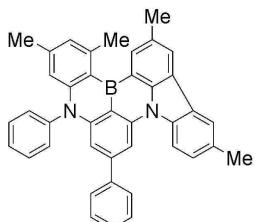
(BNpCz-7m-0220/0530)



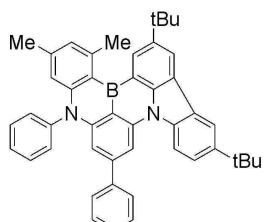
(BNpCz-7m-0220/0531)

[0659]

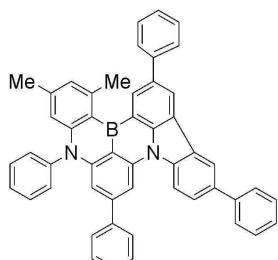
[화학식 203]



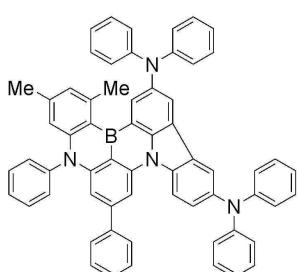
(BNpCz-12m-0220/0910S)



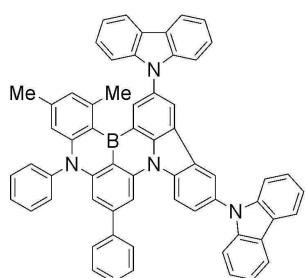
(BNpCz-12m-0220/0911S)



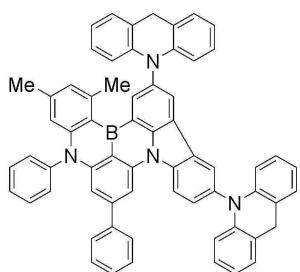
(BNpCz-12m-0220/0920S)



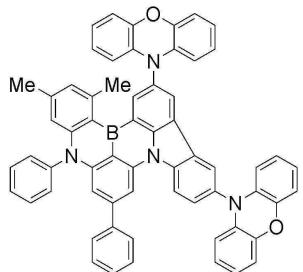
(BNpCz-12m-0220/0930S)



(BNpCz-12m-0220/0931S)



(BNpCz-12m-0220/0932S)

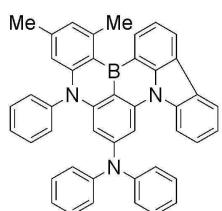
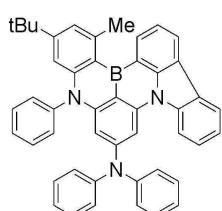


(BNpCz-12m-0220/0933S)

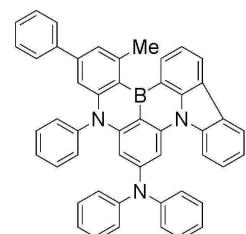
[0661]

[0662]

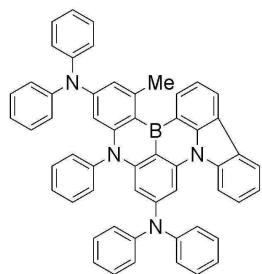
[화학식 204]

(BNpCz-7m-0230/0510)
=(BNpCz-12m-0230)

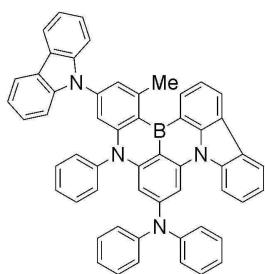
(BNpCz-7m-0230/0511)



(BNpCz-7m-0230/0520)



(BNpCz-7m-0230/0530)

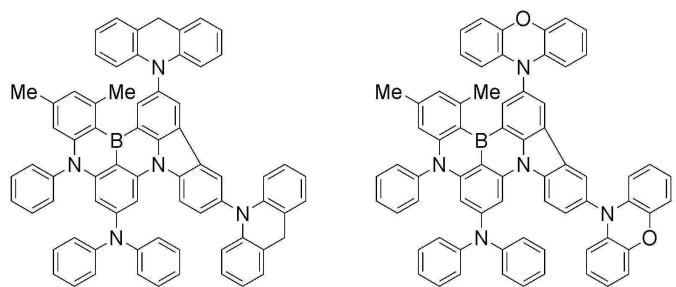
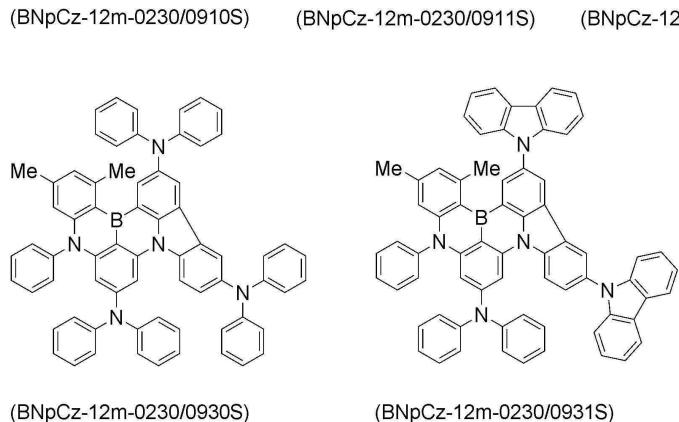
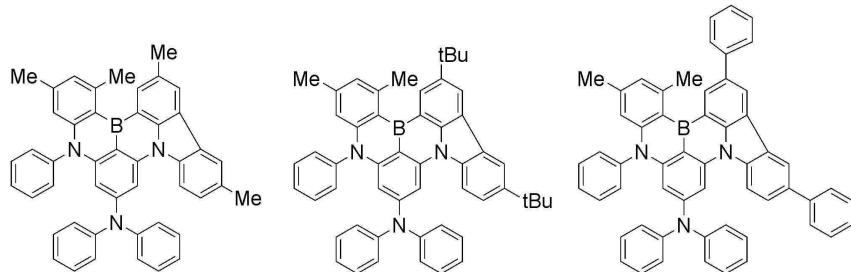


(BNpCz-7m-0230/0531)

[0663]

[0664]

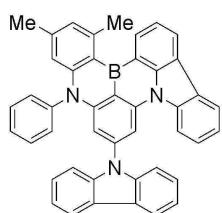
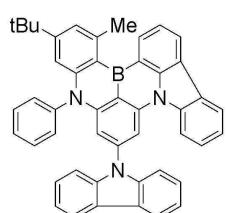
[화학식 205]



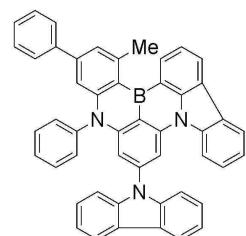
[0665]

[0666]

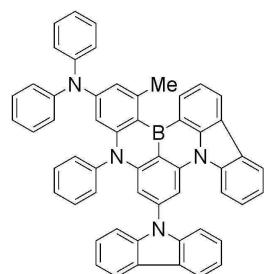
[화학식 206]

(BNpCz-7m-0231/0510)
=(BNpCz-12m-0231)

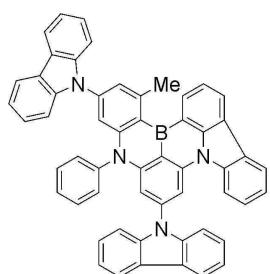
(BNpCz-7m-0231/0511)



(BNpCz-7m-0231/0520)



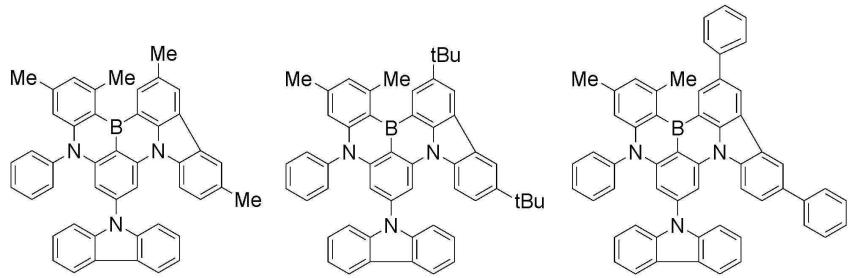
(BNpCz-7m-0231/0530)



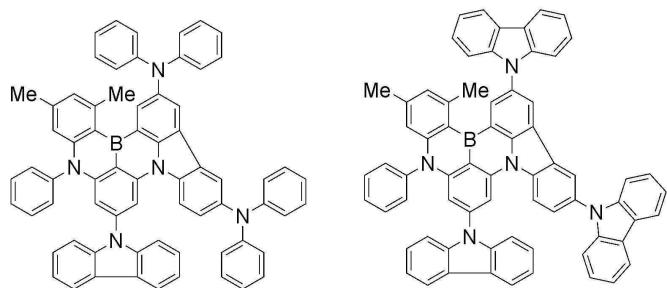
(BNpCz-7m-0231/0531)

[0668]

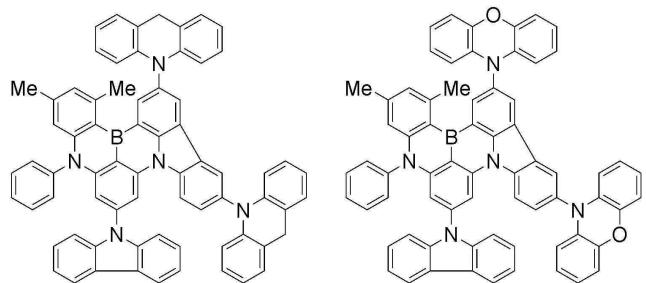
[화학식 207]



(BNpCz-12m-0231/0910S) (BNpCz-12m-0231/0911S) (BNpCz-12m-0231/0920S)



(BNpCz-12m-0231/0930S) (BNpCz-12m-0231/0931S)

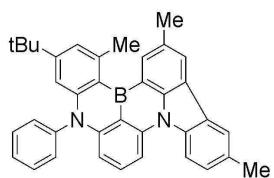


[0669]

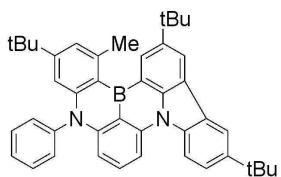
(BNpCz-12m-0231/0932S) (BNpCz-12m-0231/0933S)

[0670]

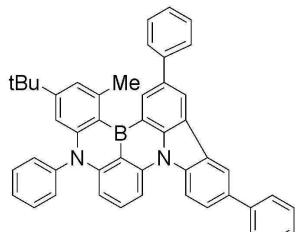
[화학식 208]



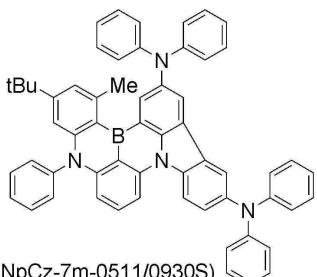
(BNpCz-7m-0511/0910S)



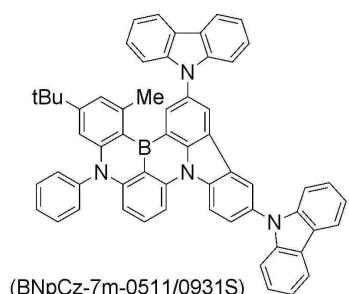
(BNpCz-7m-0511/0911S)



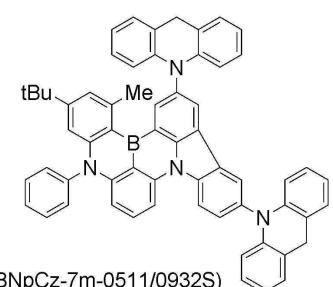
(BNpCz-7m-0511/0920S)



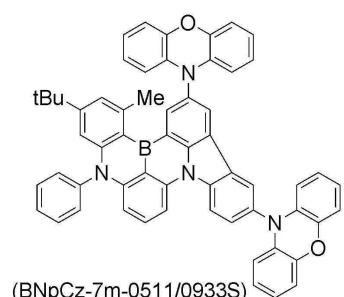
(BNpCz-7m-0511/0930S)



(BNpCz-7m-0511/0931S)



(BNpCz-7m-0511/0932S)

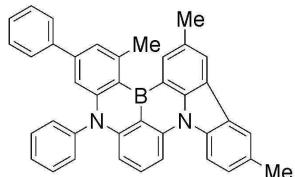


(BNpCz-7m-0511/0933S)

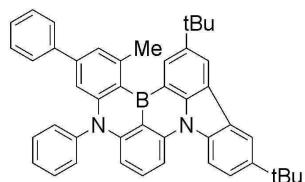
[0671]

[0672]

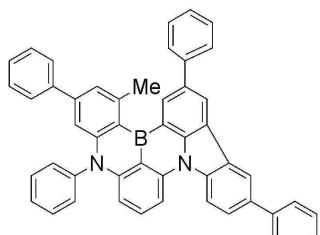
[화학식 209]



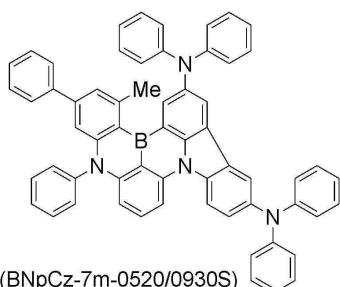
(BNpCz-7m-0520/0910S)



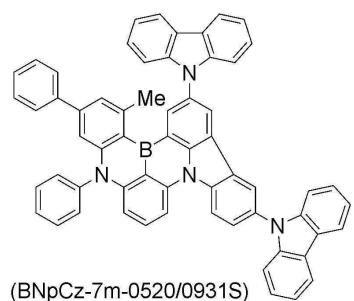
(BNpCz-7m-0520/0911S)



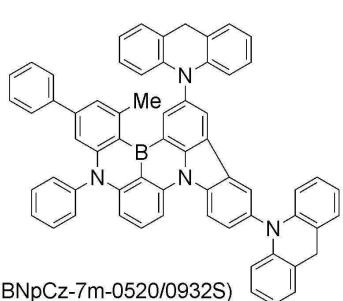
(BNpCz-7m-0520/0920S)



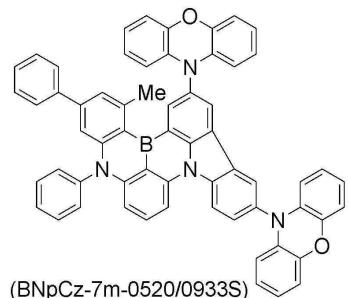
(BNpCz-7m-0520/0930S)



(BNpCz-7m-0520/0931S)



(BNpCz-7m-0520/0932S)

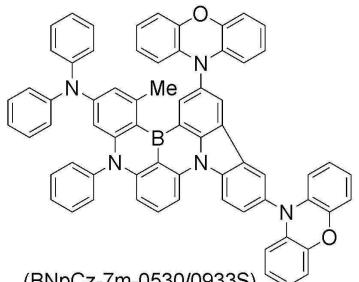
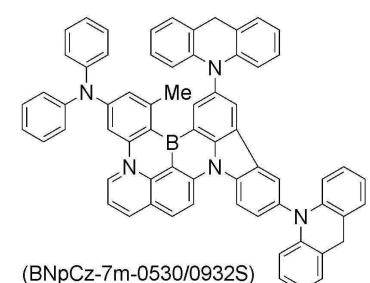
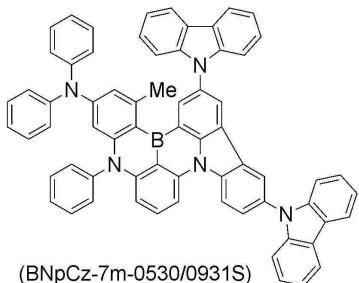
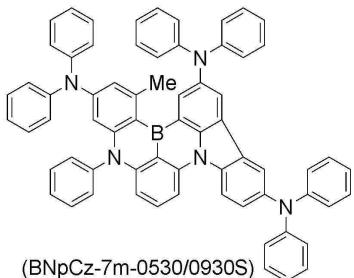
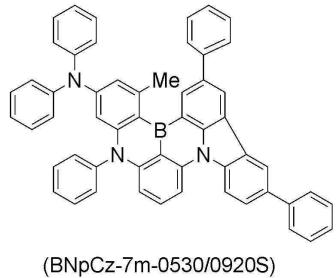
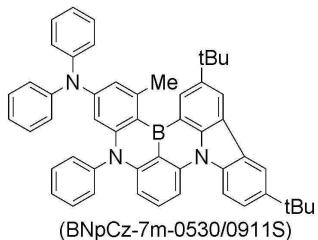
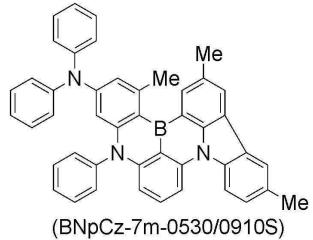


(BNpCz-7m-0520/0933S)

[0673]

[0674]

[화학식 210]



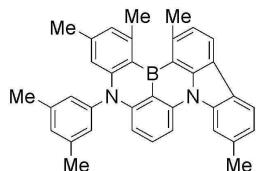
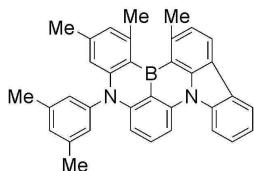
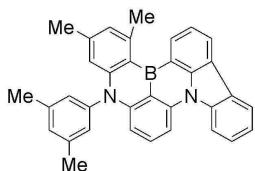
[0675]

[0676]

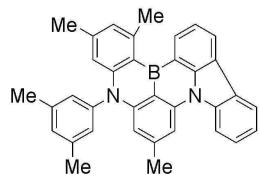
합성의 관점에서, a환-X(여기서는 >N-R의 N)에 대하여 대칭성이 높은 것이 바람직하다. 즉, >N-R에서의 페닐의 N에 대하여 3번 위치 및 5번 위치에 치환기를 가지는 것이 바람직하고, 구체적으로는 b환 상의 치환기와 동종의 기를 가지는 것이 바람직하고, N에 대하여 3번 위치 및 5번 위치에 메틸기를 가지는 것이 바람직하다.

[0677]

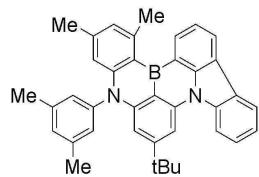
[화학식 211]



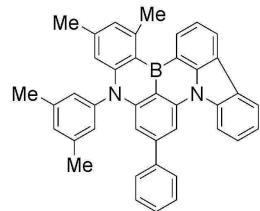
[0678]



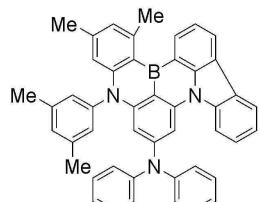
(BNpCz-12mS-0210)



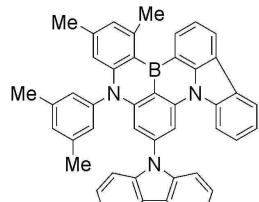
(BNpCz-12mS-0211)



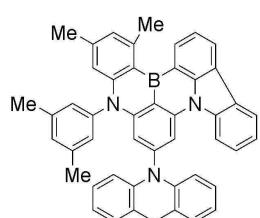
(BNpCz-12mS-0220)



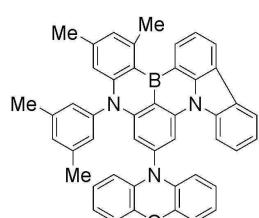
(BNpCz-12mS-0230)



(BNpCz-12mS-0231)



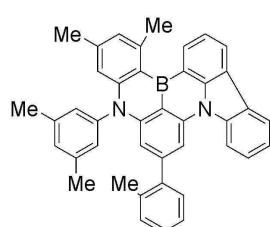
(BNpCz-12mS-0232)



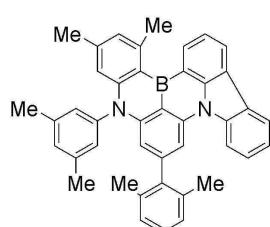
(BNpCz-12mS-0233)

[0679]

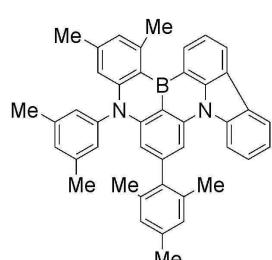
[0680]



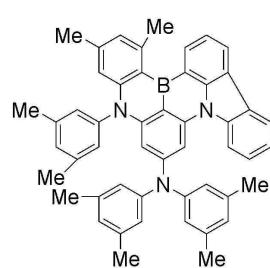
(BNpCz-12mS-0220-1)



(BNpCz-12mS-0220-2)



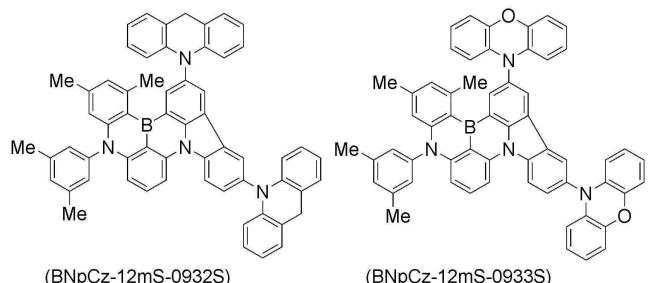
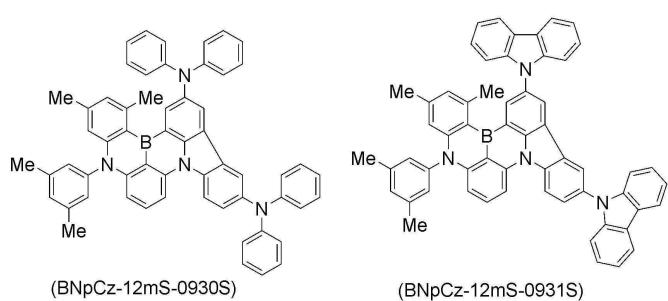
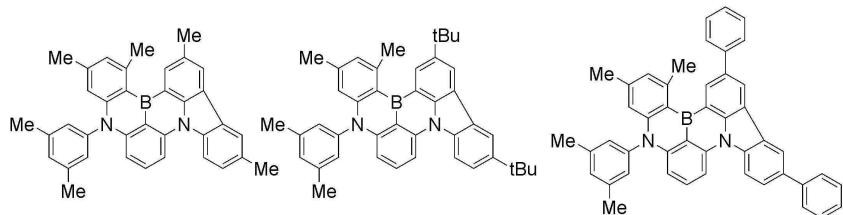
(BNpCz-12mS-0220-3)



(BNpCz-12mS-0230-1)

[0682]

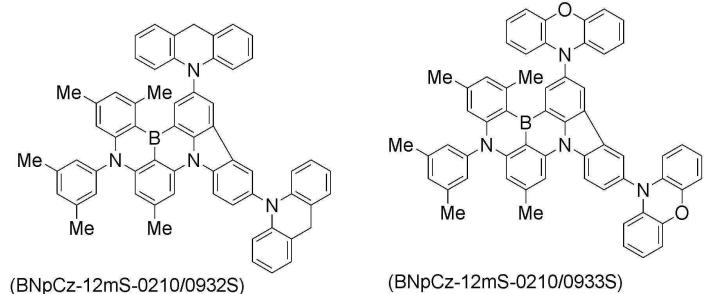
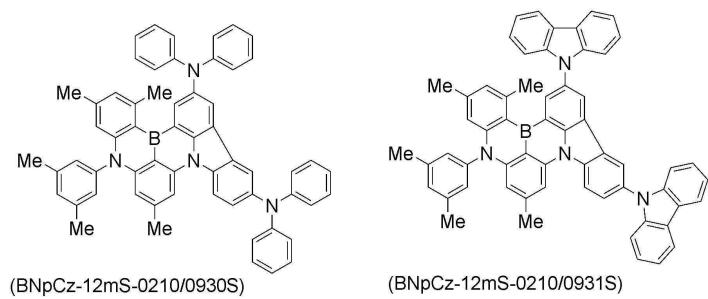
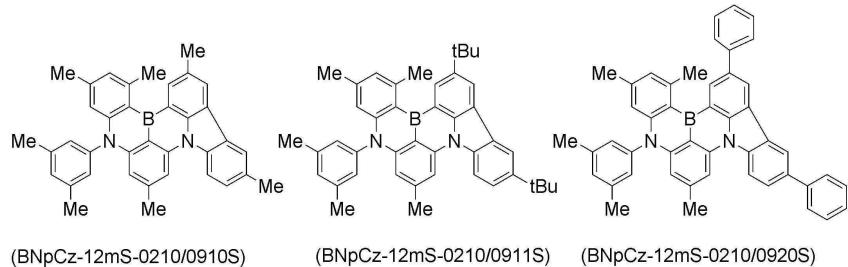
[화학식 213]



[0683]

[0684]

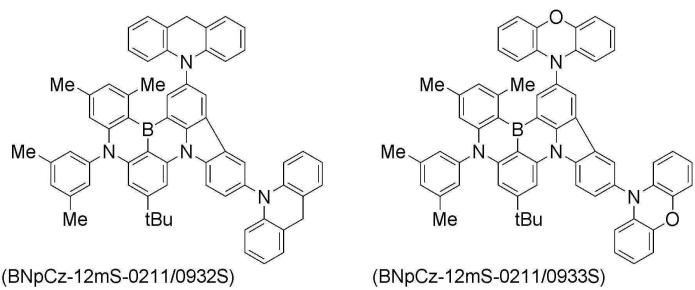
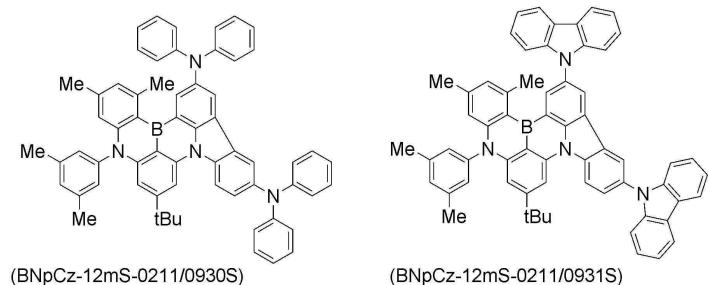
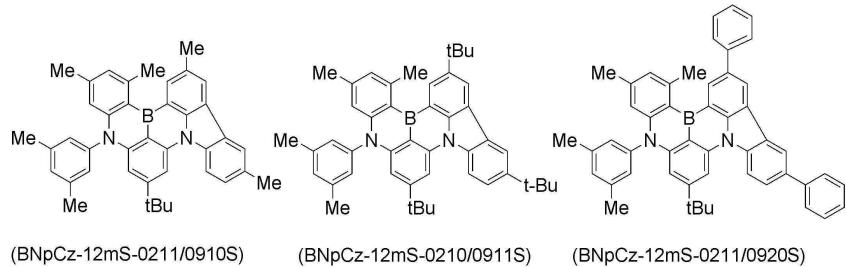
[화학식 214]



[0685]

[0686]

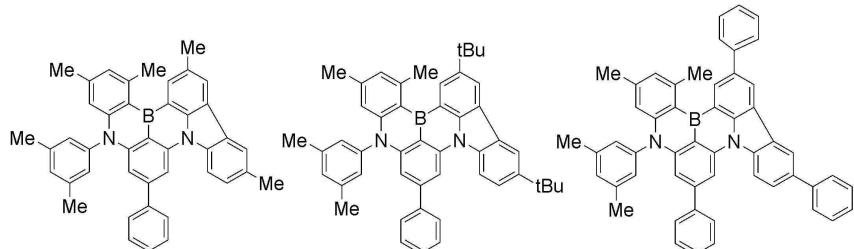
[화학식 215]



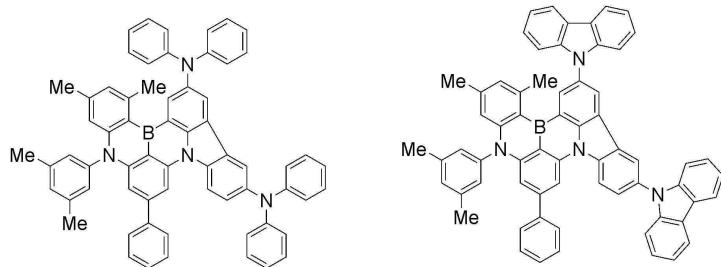
[0687]

[0688]

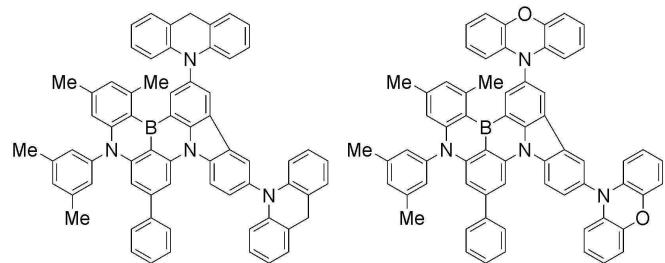
[화학식 216]



(BNpCz-12mS-0220/0910S) (BNpCz-12mS-0220/0911S) (BNpCz-12mS-0220/0920S)



(BNpCz-12mS-0220/0930S) (BNpCz-12mS-0220/0931S)

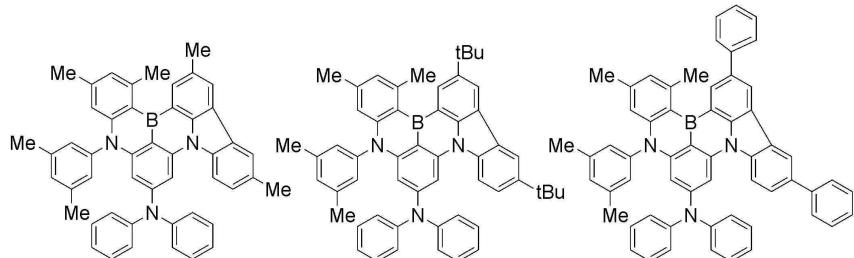


(BNpCz-12mS-0220/0932S) (BNpCz-12mS-0220/0933S)

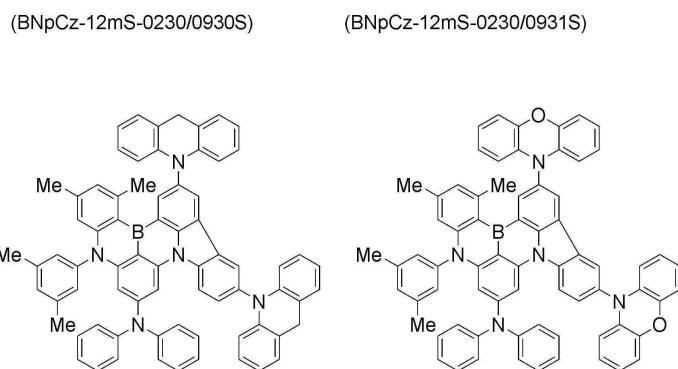
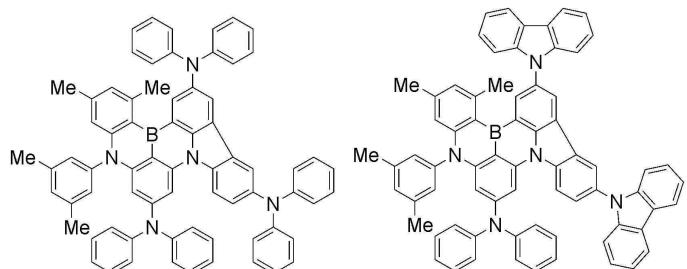
[0689]

[0690]

[화학식 217]



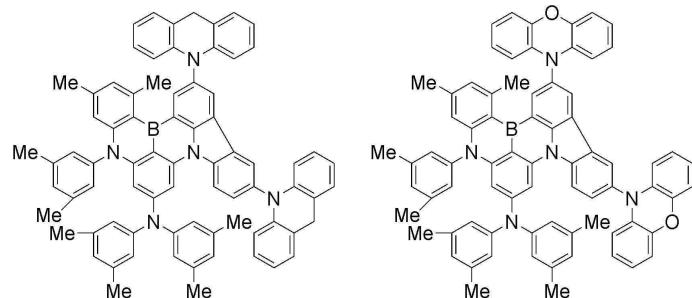
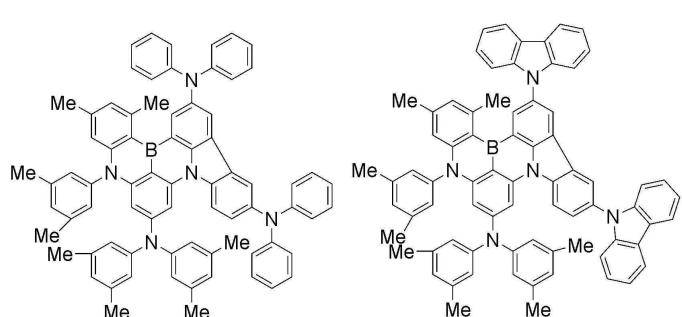
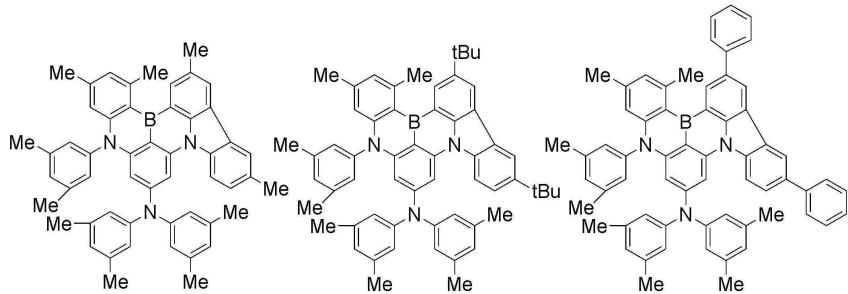
(BNpCz-12mS-0230/0910S) (BNpCz-12mS-0230/0911S) (BNpCz-12mS-0230/0920S)



[0691]

[0692]

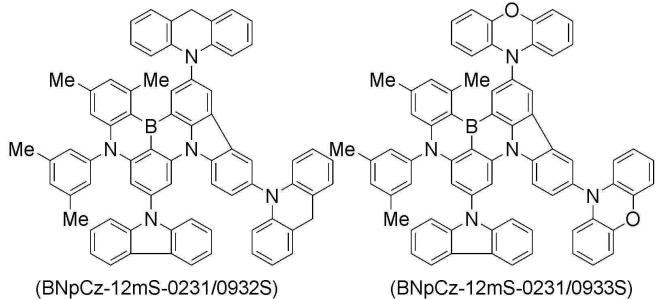
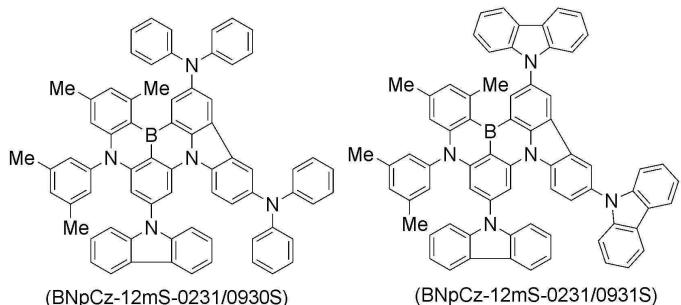
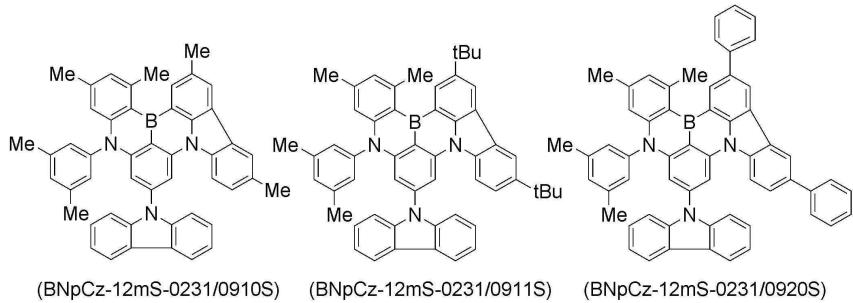
[화학식 218]



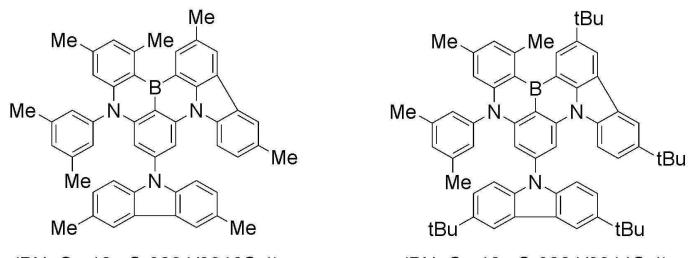
[0693]

[0694]

[화학식 219]



[0695]



[0696]



[0697]

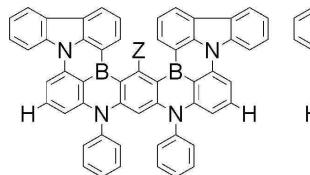
합성의 용이성의 관점에서, R^7 이 Z에 치환기를 가지는 것이 바람직하고, 마찬가지로, R^8 이 Z일 때 R'^8 에 치환기를 가지는 것이 바람직하고, R^7 이 Z에 치환기를 가지는 것이 보다 바람직하다. 또한, 합성의 용이성 및 안정성의 관점에서, 치환기는 작은 것이 바람직하고, 상기 식(m), 식(e), 식(V), 식(t), 식(h), 식(p), 식(q), 식(r), 식(s), 식(j), 식(k), 식(f), 식(c), 식(b), 식(i) 및 식(n)의 기가 바람직하고, 이를 중에서도 식(m), 식(e), 식(V), 식(t), 식(p), 식(f) 및 식(n)의 기가 보다 바람직하고, 식(m) 및 식(t)의 기가 더욱 바람직하고, 식(m)의 기가 가장 바람직하다.

[0698]

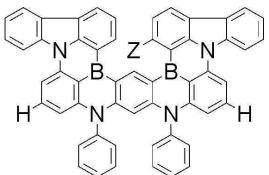
예를 들면, 이하의 식으로 표시된다.

[0699]

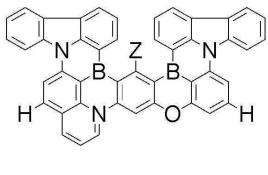
[화학식 220]



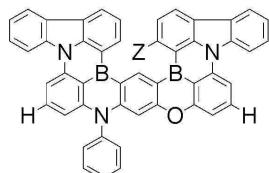
(22BNpCz-7Z-0001)



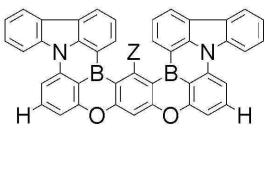
(22BNpCz-8Z-0001)



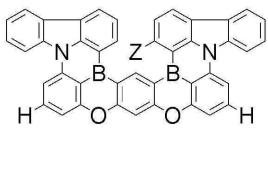
(22BOCz/NpCz-7Z-0001)



(22BOCz/NpCz-8Z-0001)

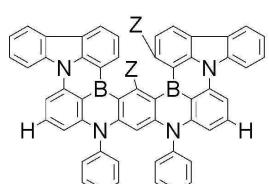


(22BOCz-7Z-0001)

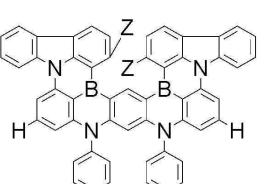


(22BOCz-8Z-0001)

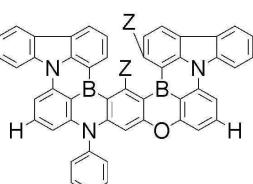
[0700]



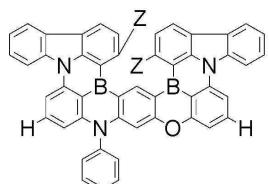
(22BNpCz-15Z-0001)



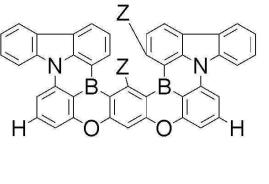
(22BNpCz-8Z/S-0001)



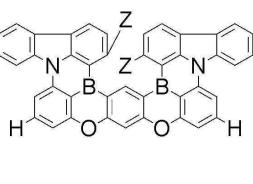
(22BOCz/NpCz-15Z-0001)



(22BOCz/NpCz-8Z/S-0001)



(22BOCz-15Z-0001)



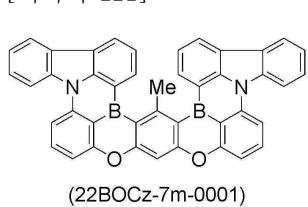
(22BOCz-8Z/S-0001)

[0701]

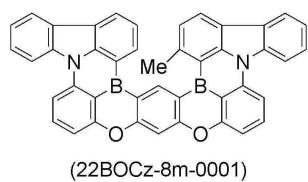
[0702]

또한, 일반식(22)에 있어서도, 분자에 일그러짐을 부여하여 스피-궤도 상호 작용을 크게 함으로써, 자연 형광수명을 짧게 하고, TADF의 발현과 소자효율을 개선할 목적으로, R^7 및/또는 R^8 에 치환기군 Z를 도입해도 된다. 대칭성의 관점에서 R^7 에 치환기를 가지는 것이 바람직하다.

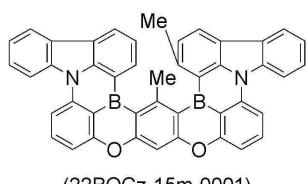
[0703]



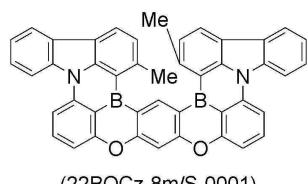
(22BOCz-7m-0001)



(22BOCz-8m-0001)

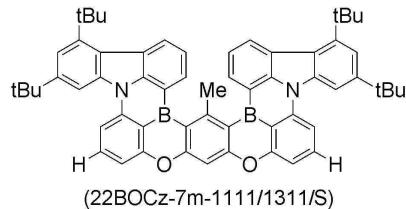
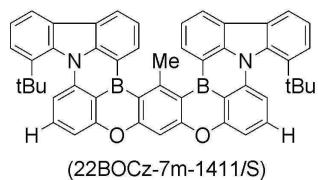
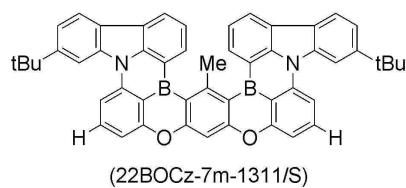
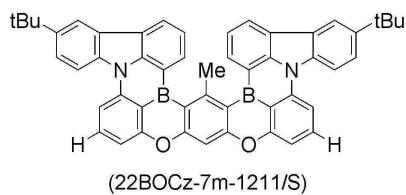
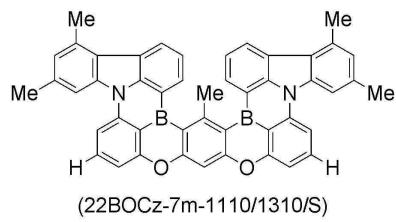
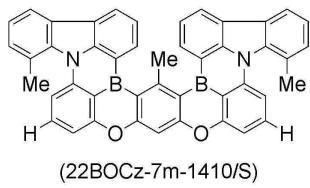
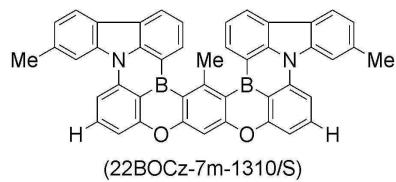
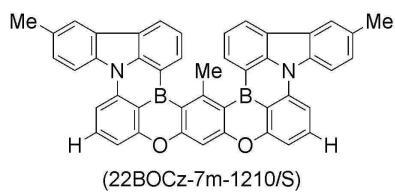


(22BOCz-15m-0001)

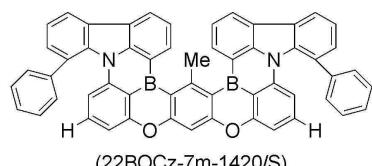
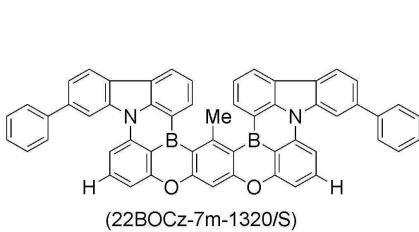
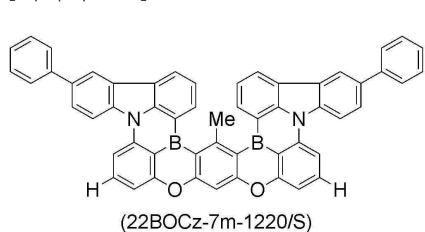


(22BOCz-8m/S-0001)

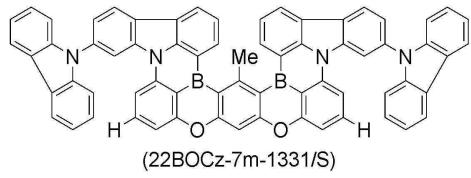
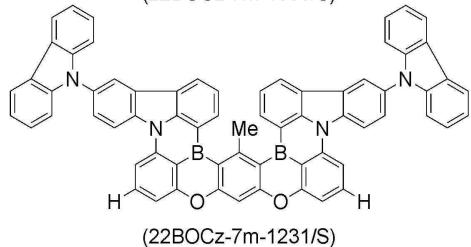
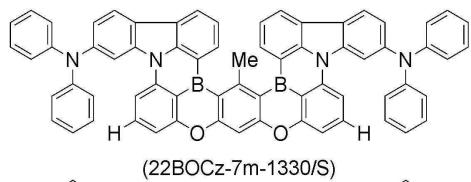
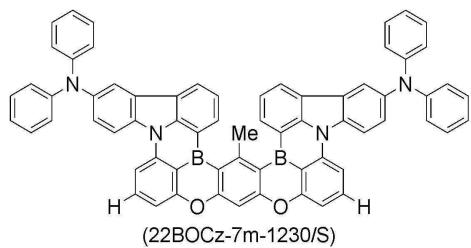
[0704]



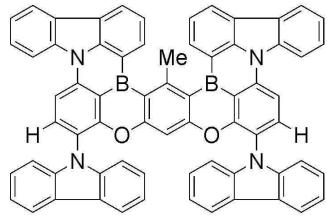
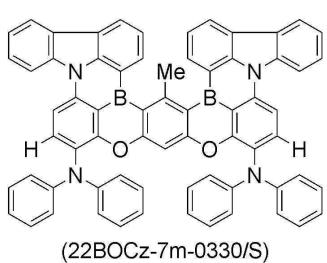
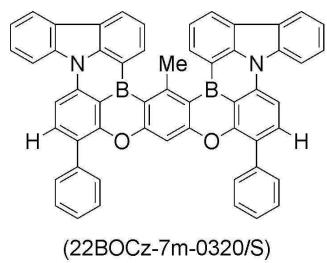
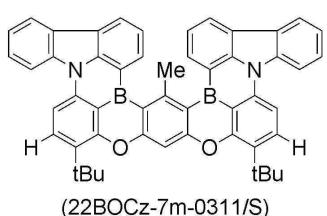
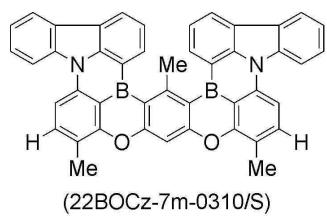
[0705]



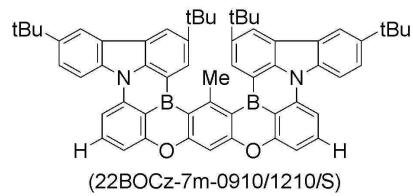
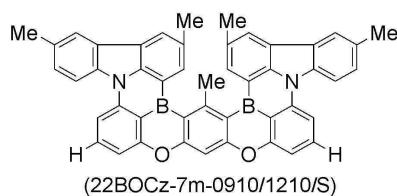
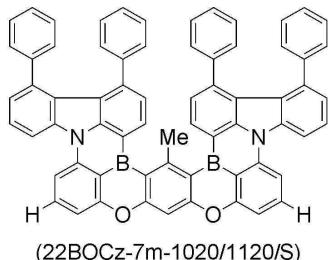
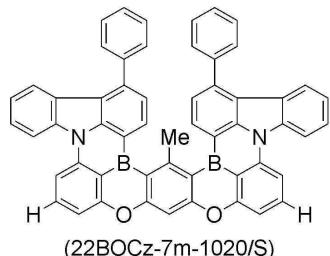
[0707]



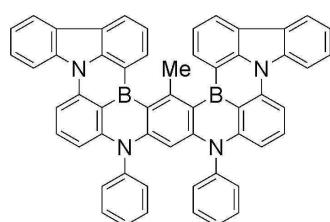
[0708]



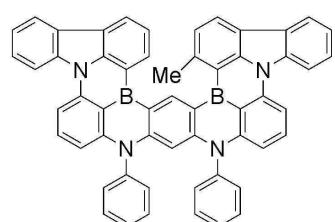
[0709] [화학식 223]



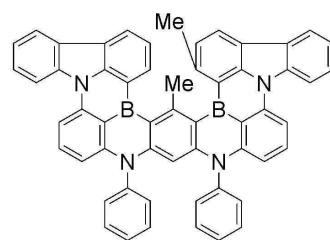
[화학식 224]



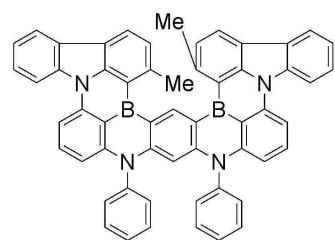
(22BNpCz-7m-0001)



(22BNpCz-8m-0001)



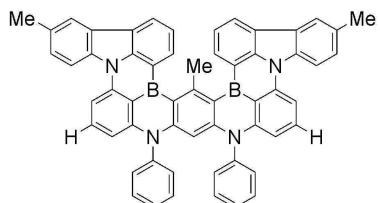
(22BNpCz-15m-0001)



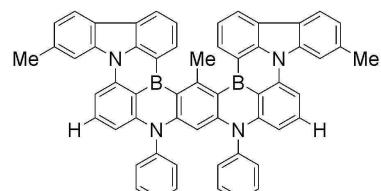
(22BNpCz-8m/S-0001)

[0715]

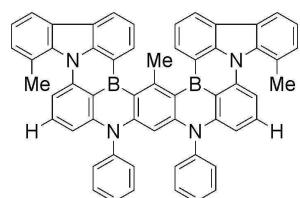
[화학식 225]



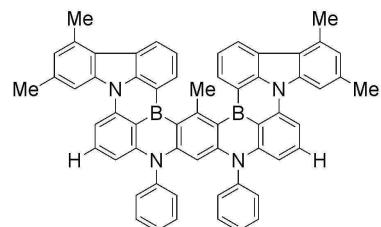
(22BNpCz-7m-1210/S)



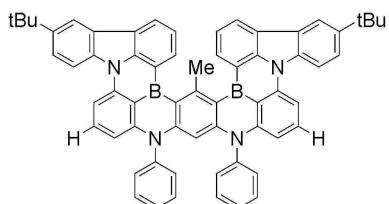
(22BNpCz-7m-1310/S)



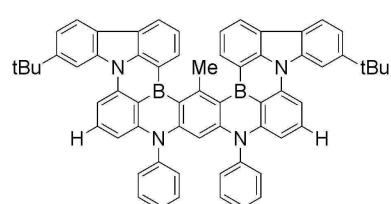
(22BNpCz-7m-1410/S)



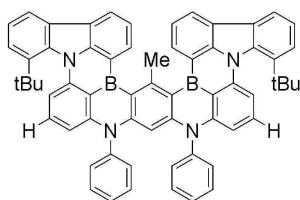
(22BNpCz-7m-1110/1310/S)



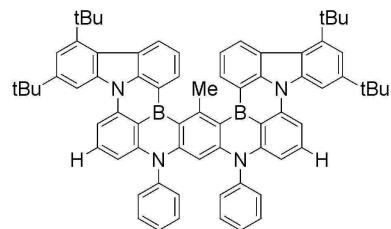
(22BNpCz-7m-1211/S)



(22BNpCz-7m-1311/S)



(22BNpCz-7m-1411/S)

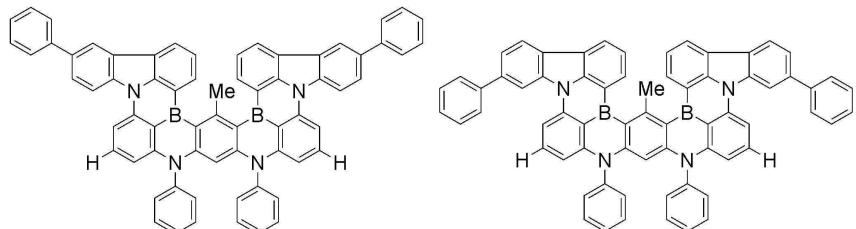


(22BNpCz-7m-1111/1311/S)

[0716]

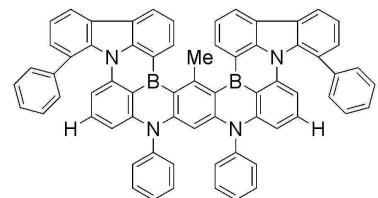
[0717]

[화학식 226]



(22BNpCz-7m-1220/S)

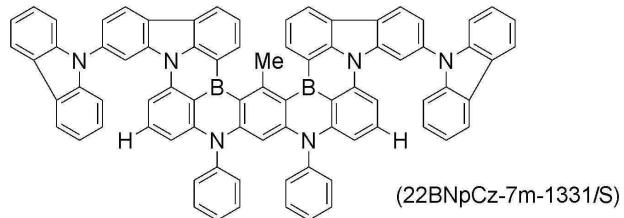
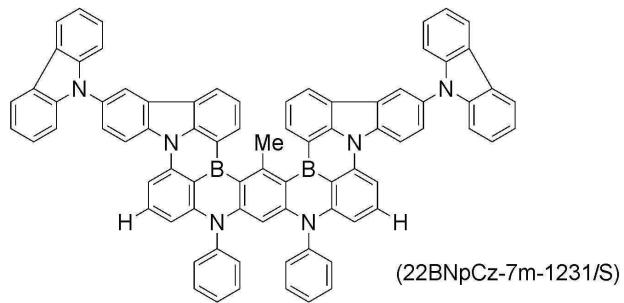
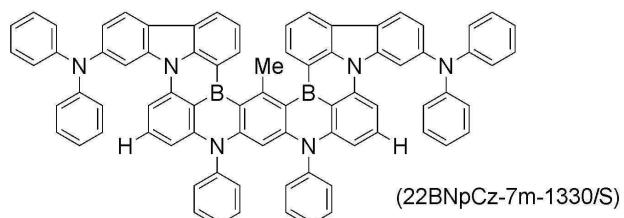
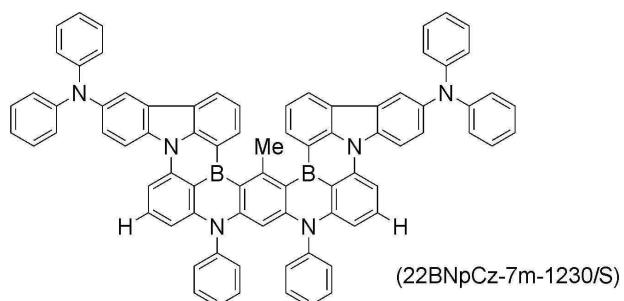
(22BNpCz-7m-1320/S)



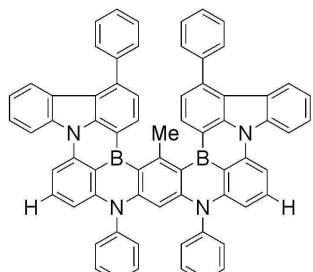
(22BNpCz-7m-1420/S)

[0718]

[화학식 227]

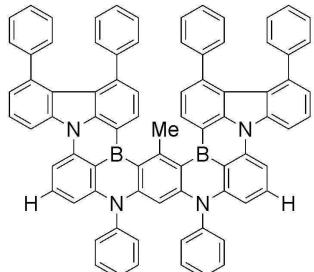


[0720]



[0721]

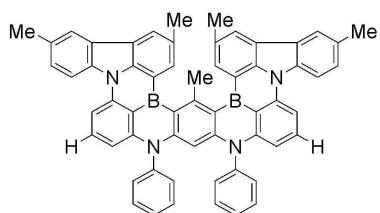
(22BNpCz-7m-1020/S)



(22BNpCz-7m-1020/1120/S)

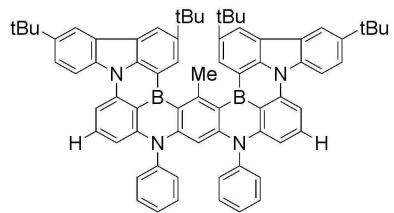
[0722]

[화학식 228]

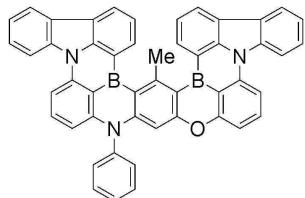


[0723]

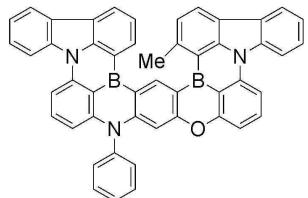
(22BNpCz-7m-0910/1210/S)



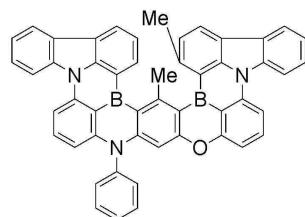
(22BNpCz-7m-0910/1210/S)



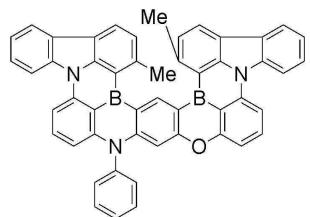
(22BOCz/NpCz-7m-0001)



(22BOCz/NpCz-8m-0001)



(22BOCz/NpCz-15m-0001)

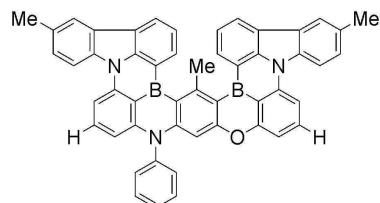


(22BOCz/NpCz-8m/S-0001)

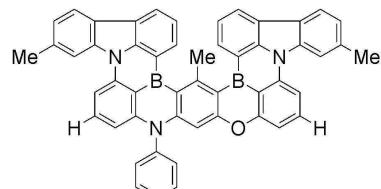
[0724]

[0725]

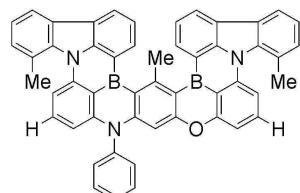
[화학식 229]



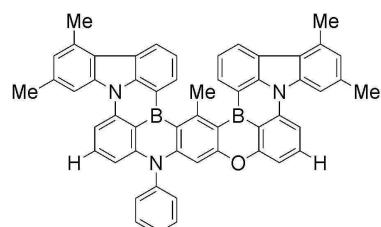
(22BOCz/NpCz-7m-1210/S)



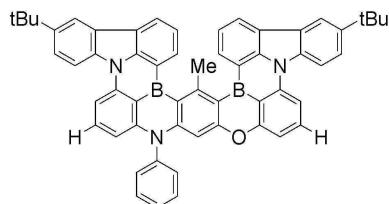
(22BOCz/NpCz-7m-1310/S)



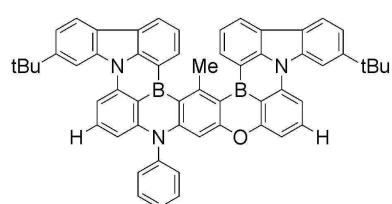
(22BOCz/NpCz-7m-1410/S)



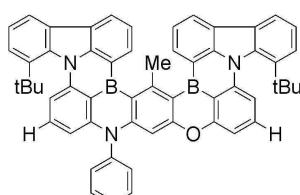
(22BOCz/NpCz-7m-1110/1310/S)



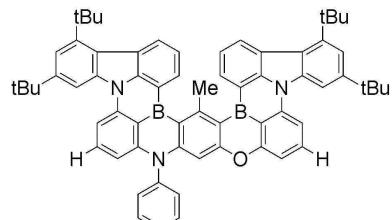
(22BOCz/NpCz-7m-1211/S)



(22BOCz/NpCz-7m-1311/S)



(22BOCz/NpCz-7m-1411/S)

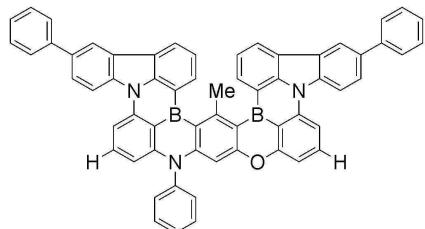


(22BOCz/NpCz-7m-1111/1311/S)

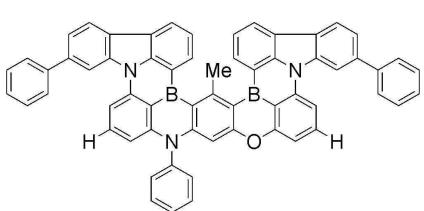
[0726]

[0727]

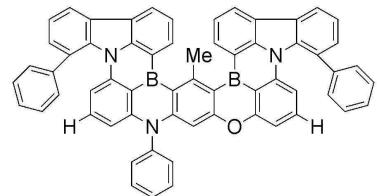
[화학식 230]



(22BOCz/NpCz-7m-1220/S)



(22BOCz/NpCz-7m-1320/S)

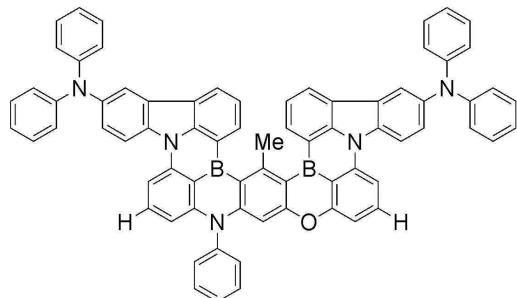


(22BOCz/NpCz-7m-1420/S)

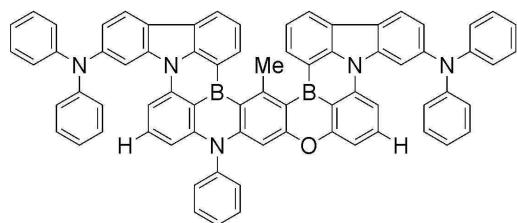
[0728]

[0729]

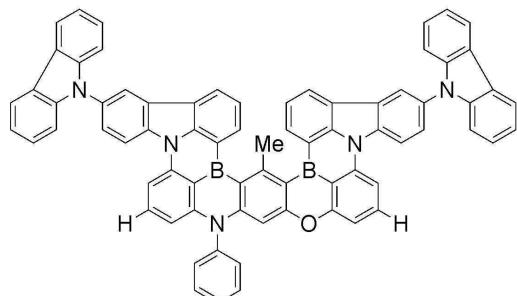
[화학식 231]



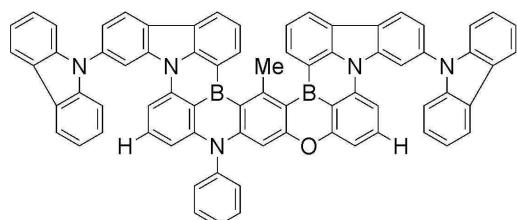
(22BOCz/NpCz-7m-1230/S)



(22BOCz/NpCz-7m-1330/S)



(22BOCz/NpCz-7m-1231/S)

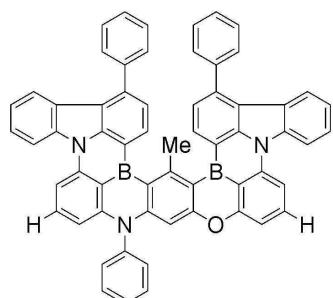


(22BOCz/NpCz-7m-1331/S)

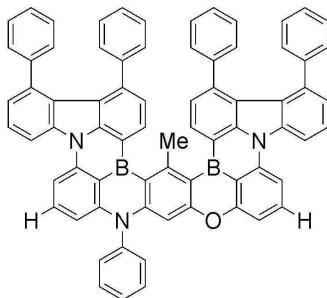
[0730]

[0731]

[화학식 232]

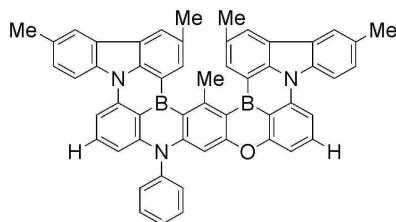


(22BOCz/NpCz-7m-1020/S)

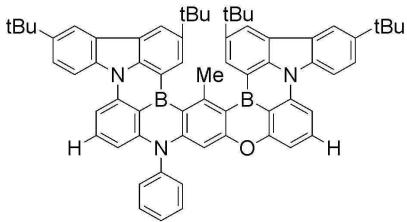


(22BOCz/NpCz-7m-1020/1120/S)

[0732]



(22BOCz/NpCz-7m-0910/1210/S)



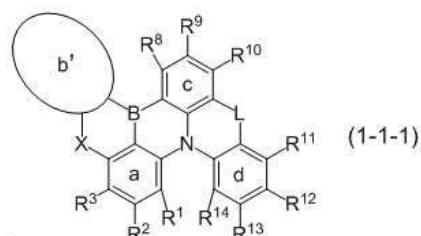
(22BOCz/NpCz-7m-0910/1210/S)

[0733]

[0734] 또한, 이하에, 본 발명의 화합물의 다음의 형태인, $R^1 \sim R^3$, $R^4 \sim R^7$, $R^8 \sim R^{10}$ 및 $R^{11} \sim R^{14}$ 중 인접하는 결합하여 a환, b환, c환 및/또는 d환과 함께 축합환을 형성한 다환 방향족 화합물에 대하여 설명한다. 본 화합물은 상기 일반식(1-1), 식(1-2) 및 식(1-3)에서 설명한 화합물이다. 보다 구체적으로는, $R^4 \sim R^7$ 중 인접하는 기끼리 결합하여, b환과 함께 b'환을 형성한 하기 일반식(1-1-1)으로 표시되는 화합물을 예로 들 수 있다.

[0735]

[화학식 233]

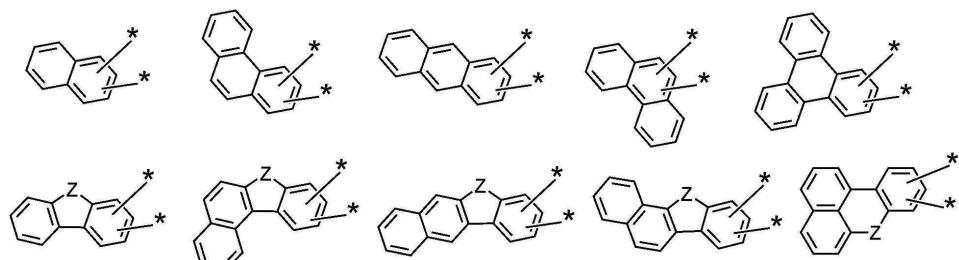


[0736]

[0737] 상기 식(1-1-1)에서의, b'환은 아릴환 또는 헤테로아릴환(바람직하게는 탄소수 9~16의 아릴환 또는 탄소수 6~15의 헤테로아릴환)이며, 예를 들면, 나프탈렌환, 페난트レン환, 안트라센환, 디벤조퓨란환, 카르바졸환, 디벤조티오펜환, 실라플루오렌환, 플루오렌환 및 이들 환에 또한 벤젠환이 축합한 환이며, 구체적으로는 하기 부분 구조로 표시되는 환이다. 하기 부분 구조 중, *은 X 및 B와의 결합을 나타내고, Z는, >O, >N-R, >S, >Si(-R)₂ 또는 >C(-R)₂이며, 각 환으로의 치환기의 부호는 생략하고 있다.

[0738]

[화학식 234]

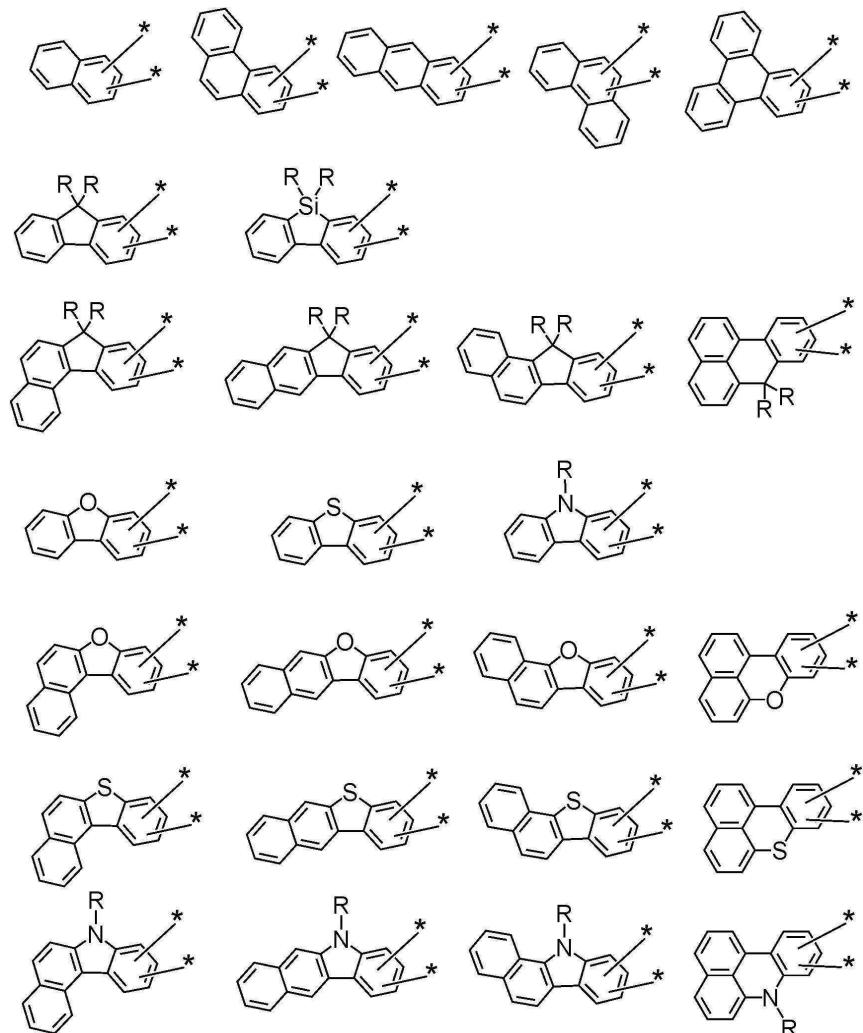


[0739]

[0740] Z는, >O, >N-R, 및 >C(-R)₂가 바람직하고, >C(-R)₂가 보다 바람직하다. 구체적인 부분 구조를 이하에 나타낸다.

[0741]

[화학식 235]



[0742]

[0743]

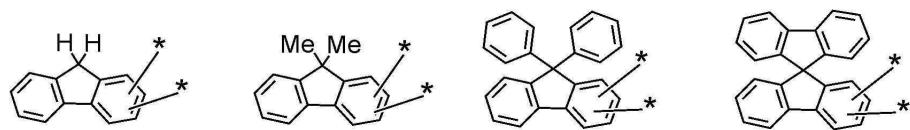
형성된 아릴환 또는 헤테로아릴환에서의 적어도 1개의 수소에 치환하는, 아릴, 헤테로아릴, 디아릴아미노, 디아릴보릴(2개의 아릴은 단결합 또는 연결기를 통하여 결합하고 있어도 됨), 알킬, 시클로알킬, 알콕시, 아릴옥시 또는 R(이상, 제1 치환기), 또한, 상기 제1 치환기에서의 적어도 1개의 수소에 또한 치환하는 아릴, 헤테로아릴, 알킬 또는 시클로알킬(이상, 제2 치환기)로서는, 전술한 R¹ 등(제1 치환기)으로서의 아릴, 헤테로아릴, 디아릴아미노, 디아릴보릴, 알킬, 시클로알킬, 알콕시 또는 아릴옥시의 설명을 인용할 수 있다.

[0744]

예를 들면, >C(-R)₂의 R이, 수소, 메틸기, 폐닐기, 폐닐기끼리 결합하여 스피로플루오렌기를 형성한 경우는, 이하의 구조식으로 표시된다.

[0745]

[화학식 236]



[0746]

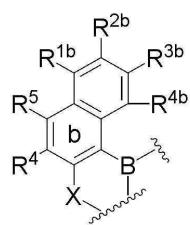
[0747]

이하, 부분 구조식(1a), 식(1b) 또는 식(1c)으로 표시되는 환을 포함하는, 일반식(1a), 식(1b) 또는 식(1c)으로 표시되는 다환 방향족 화합물 및 그의 다양체에 대하여, 보다 구체적으로 설명한다. 부분 구조식(1a), 식(1b) 또는 식(1c)은, 일반식(1a), 식(1b) 또는 식(1c)에서의 일부이며, 각각의 식 중에서 사용하는 부호의 정의는 일반식(1)에서의 정의와 동일하다(R^{1b} ~ R^{6b}는 R¹ ~ R¹⁴의 정의와 동일하다). 일반식(1a), 식(1b) 또는 식(1c)에서의 X는, >O, >N-R, >S 또는 >Se이며, 일반식(1a), 식(1b) 또는 식(1c)의 화합물 구조와 그 화합물번호를 관련시킨 경우, 일반식(1a), 식(1b) 또는 식(1c)은 각각 일반식(BOLa-1), 식(BNLa-1), 식(BELa-1), 식

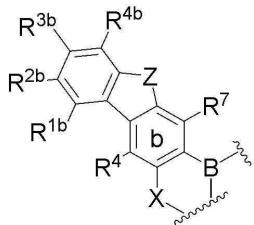
(BOLb-1), 식(BNLb-1), 식(BSLb-1), 식(BELb-1), 식(BOLc-1), 식(BNLc-1), 식(BSLc-1) 또는 식(BELc-1)으로도 기재된다. 발광효율 및 발광파장의 관점에서는 X는 >0가 바람직하다. 그리고, 이후, 화합물의 일반 구조를 나타낸 일반식에서는 표현의 간략화를 위해, R¹~R¹⁴의 부호를 생략하는 경우가 있다. 일반식이 아닌, 구체적인 화합물의 구조를 나타낸 식에서는 그러한 생략은 하지 않는다.

[0748]

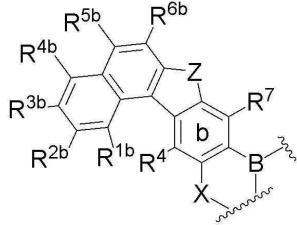
[화학식 237]



(1a)



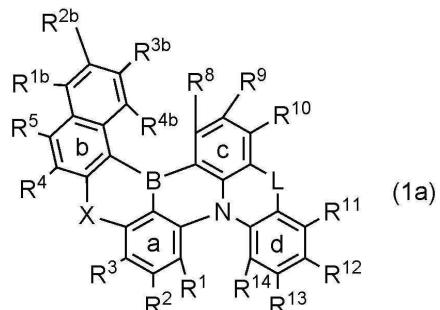
(1b)



(1c)

[0749]

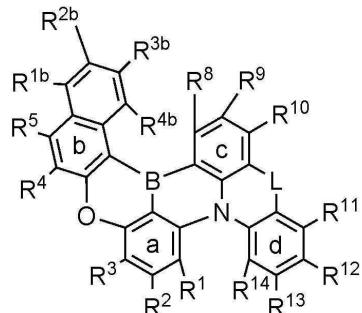
[화학식 238]



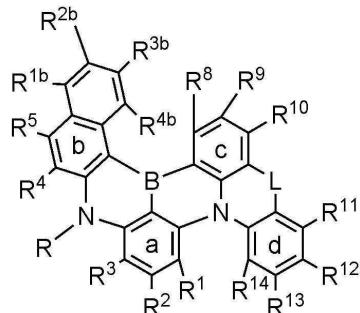
(1a)

[0751]

[화학식 239]

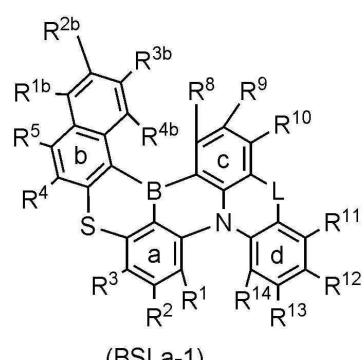


(BOLa-1)

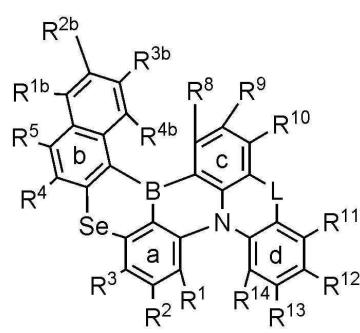


(BNLa-1)

[0752]



(BSLa-1)

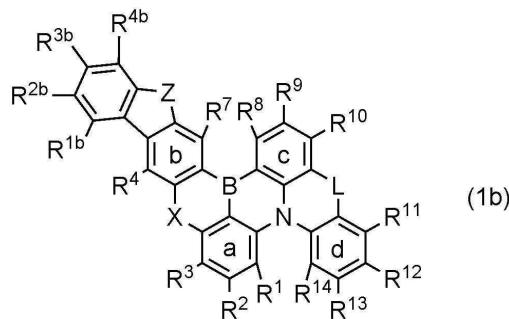


(BELa-1)

[0753]

[0754]

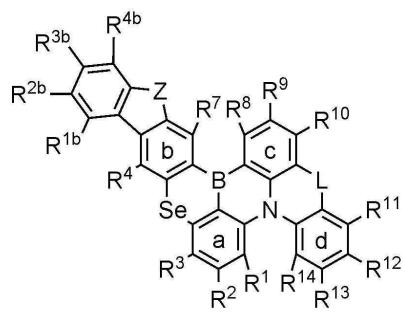
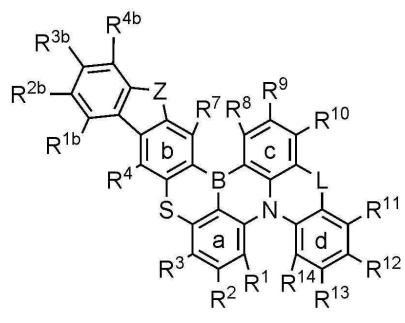
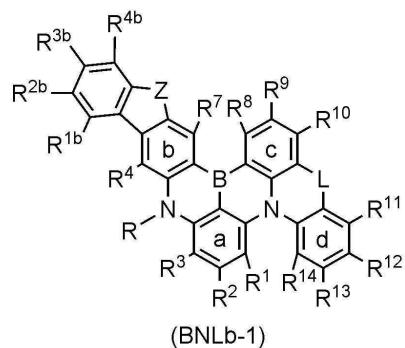
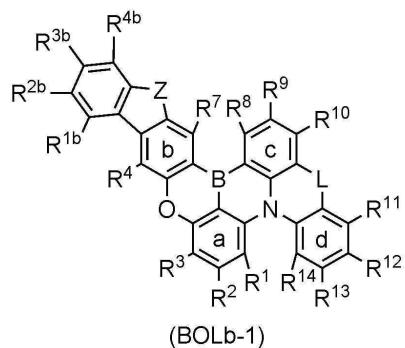
[화학식 240]



[0755]

[0756]

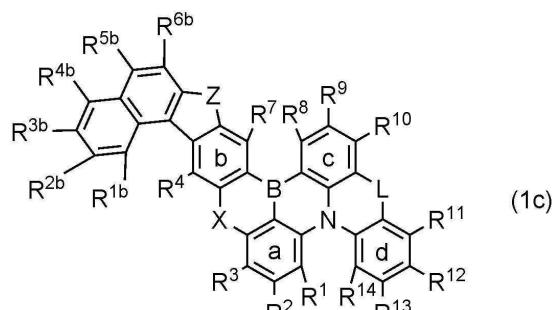
[화학식 241]



[0757]

[0758]

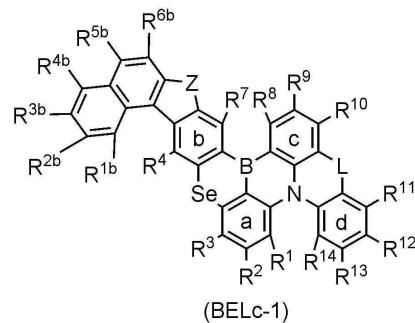
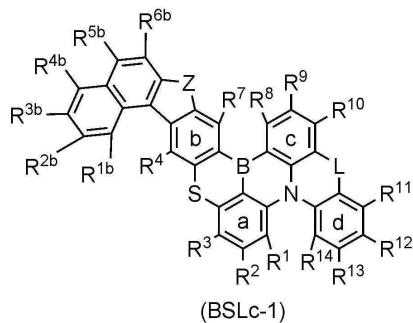
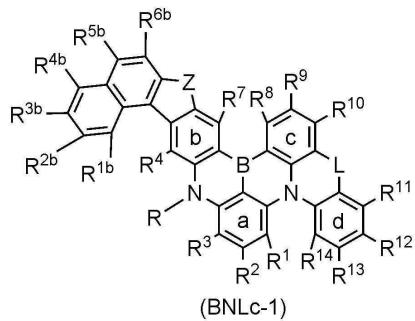
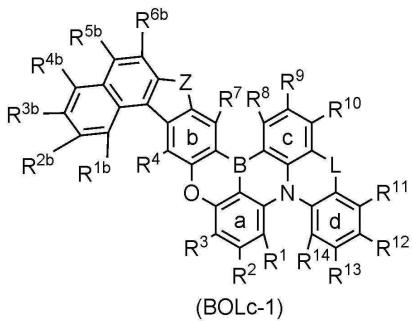
[화학식 242]



[0759]

[0760]

[화학식 243]

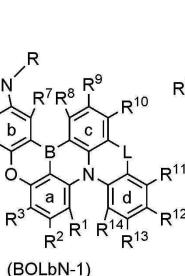
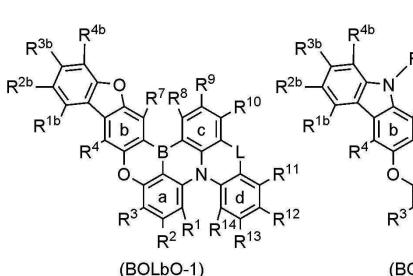


[0761]

[0762]

또한, 일반식(BOLb-1) 및 식(BOLc-1)에 있어서, Z가, >O, >N-R, 및 >C(-R)₂일 때, 각각, 일반식(BOLbO-1), 식(BOLbN-1), 식(BOLbC-1), 식(BOLcO-1), 식(BOLcN-1) 또는 식(BOLcC-1)으로 표시된다. 발광파장의 관점에서는, Z가, >O, >C(-R)₂가 바람직하고, >C(-R)₂가 보다 바람직하다. 또한, >N-R 및 >C(-R)₂에서의 R은, 승화 온도의 낮음의 관점에서 분자량이 작은 것이 바람직하고, 안정성의 관점에서, 탄소수 1~24의 치환기가 바람직하다. 더욱 상세하게는, >N-R에서의 R은, 폐닐, 비페닐, 터페닐, 피리딘, 피라진, 피리미딘 또는 트리아진이 바람직하고, 폐닐이 보다 바람직하다. >C(-R)₂에서의 R은, 메틸, 에틸, 이소프로필, tert-부틸 및 폐닐이 바람직하고, 메틸이 보다 바람직하다. 또한, >C(-R)₂에서의 R은 서로 결합하여 아릴환을 형성해도 되고, 예를 들면, 스피로플루오렌을 형성해도 된다.

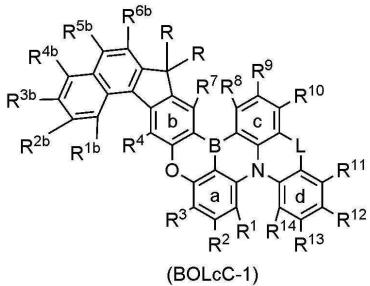
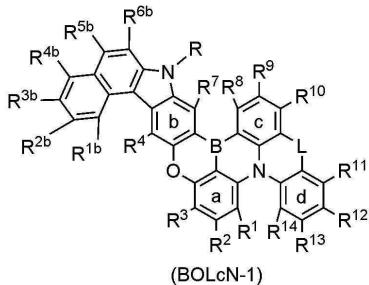
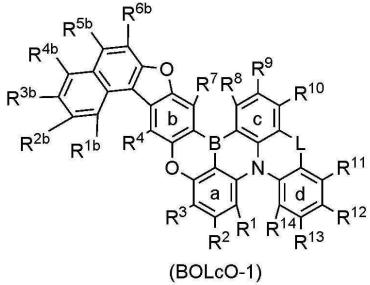
[0763]



[0764]

[0765]

[화학식 245]



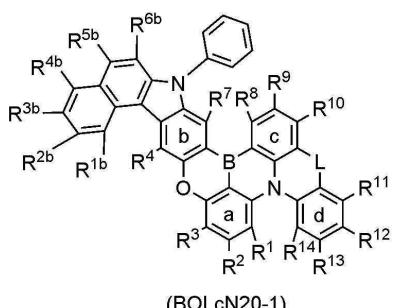
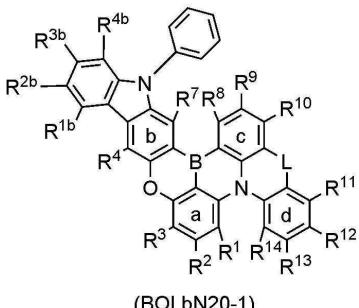
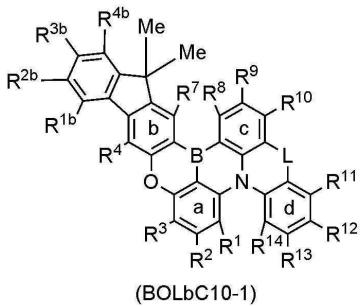
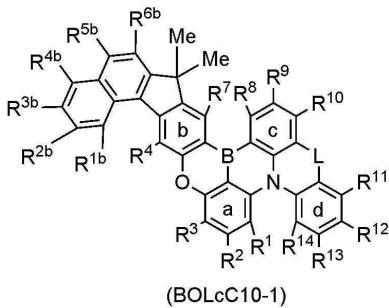
[0766]

[0767]

또한, Z가 $>\text{C}(-\text{R})_2\text{O}$ 이며, 또한, R이 메틸기인 경우, 일반식(BOLbC10-1) 또는 식(BOLcC10-1)으로 표시된다. 또한, Z가 $>\text{N}-\text{R}\text{O}$ 이며, 또한, R이 폐닐기인 경우, 일반식(BOLbN20-1) 또는 식(BOLcN20-1)으로 표시된다.

[0768]

[화학식 246]



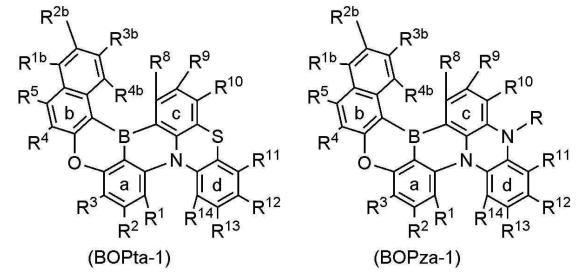
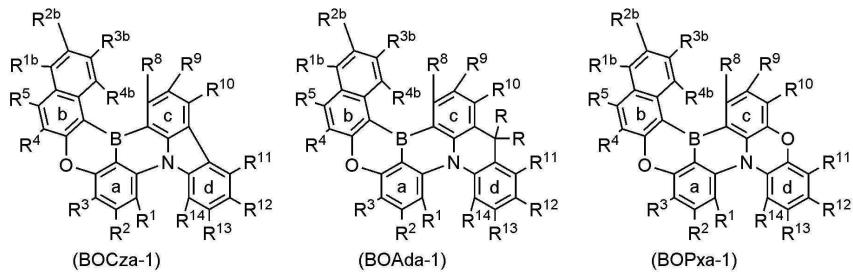
[0769]

[0770]

일반식(1-1-1)에 있어서, X가 $>\text{O}\text{O}$ 이며, Z가 $>\text{C}(-\text{Me})_2\text{O}$ 이며, L이, 단결합, $>\text{C}(-\text{R})_2$, $>\text{O}$, $>\text{S}$ 및 $>\text{N}-\text{R}$ 인 경우, 각각, 일반식(BOCzbC10-1)(간편하게 일반식(BOCzb-1)으로도 기재함), 식(BOAdbC10-1), 식(BOPxbC10-1), 식(BOPtbC10-1), 식(BOPzbC10-1), 일반식(BOCzcC10-1)(간편하게 일반식(BOCzc-1)으로도 기재함), 식(BOAdcC10-1), 식(BOPxcC10-1), 식(BOPtcC10-1), 식(BOPzcC10-1)으로 표시된다. 발광효율의 관점에서는, L은 단결합이 바람직하다. 발광파장의 조정의 관점에서는 L은 단결합, $>\text{C}(-\text{R})_2$, $>\text{O}$ 및 $>\text{N}-\text{R}$ 이 바람직하다. 발광효율 및 발광파장의 양립의 관점에서, L은 단결합이 바람직하다.

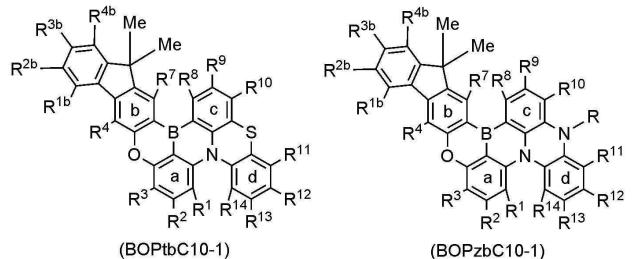
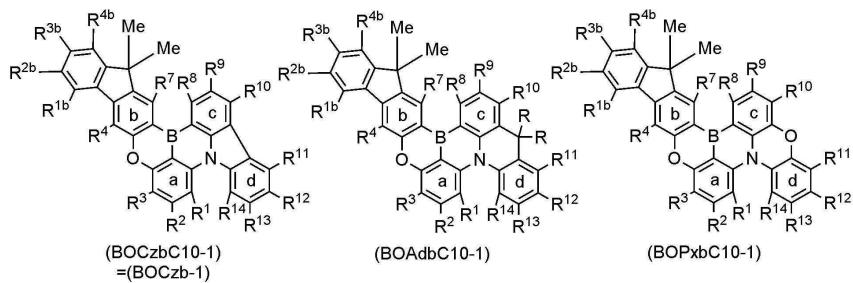
[0771]

[화학식] 247]



[0772]

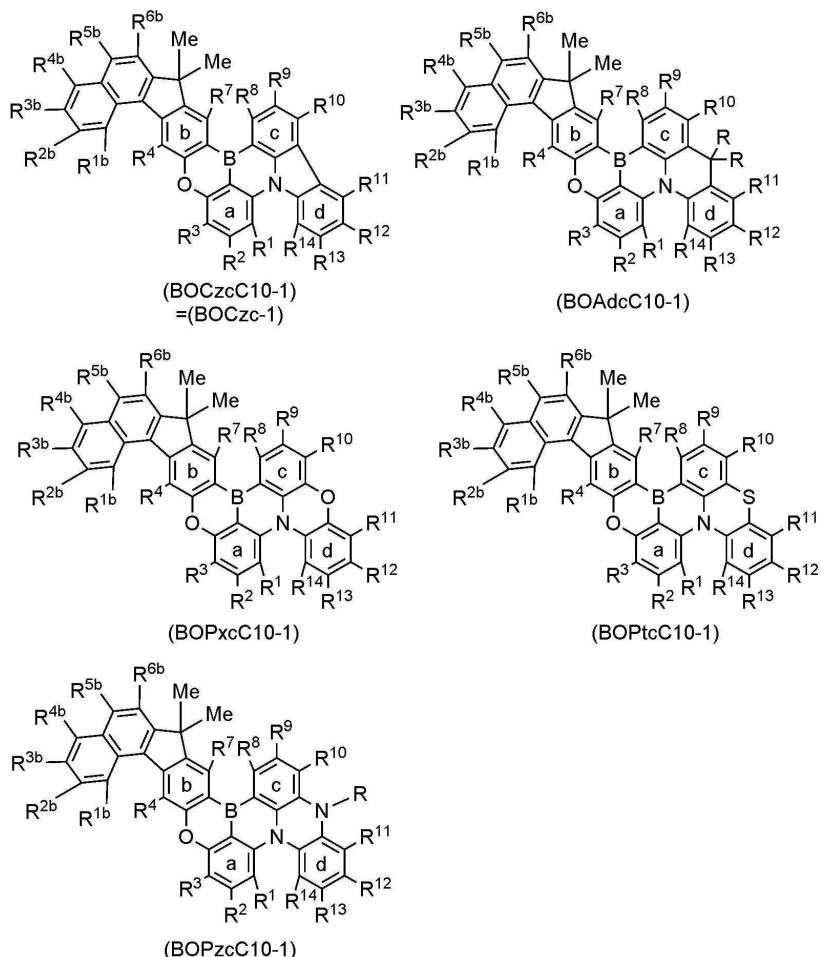
[화학식] 248]



[0774]

[0775]

[화학식 249]



[0776]

[0777] 일반식(1-1-1), 식(1a), 식(1b) 및 식(1c)에서의, R¹~R⁵, R⁷~R¹⁴ 및 R^{1b}~R^{6b}, 및 >N-R, >C(-R)₂ 및 >Si(-R)₂ 중

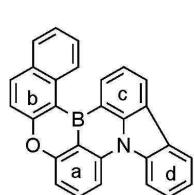
의 R에 대해서도, 각각 독립적으로, 일반식(1)과 마찬가지로, 수소, 아릴, 헤테로아릴, 디아릴아미노, 디아릴보릴(2개의 아릴은 단결합 또는 연결기를 통하여 결합하고 있어도 됨), 알킬, 시클로알킬, 알콕시 또는 아릴옥시이며, 이들에서의 적어도 1개의 수소는 또한 아릴, 헤테로아릴, 알킬 또는 시클로알킬로 치환되어 있어도 되고, 또한, R¹~R³, R⁸~R¹⁰ 및 R¹¹~R¹⁴ 중 인접하는 기끼리 결합하여 a환, c환 및 d환 중 적어도 1개와 함께 아릴환 또는 헤테로아릴환을 형성하고 있어도 되고, 형성된 환에서의 적어도 1개의 수소는 아릴, 헤테로아릴, 디아릴아미노, 디아릴보릴(2개의 아릴은 단결합 또는 연결기를 통하여 결합하고 있어도 됨), 알킬, 시클로알킬, 알콕시 또는 아릴옥시로 치환되어 있어도 되고, 이들에서의 적어도 1개의 수소는 또한 아릴, 헤테로아릴, 알킬 또는 시클로알킬로 치환되어 있어도 된다.

[0778]

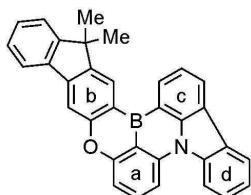
예를 들면, 일반식(BOCza-1)에 있어서, R¹~R⁵, R⁸~R¹⁴ 및 R^{b1}~R^{b4}이 수소인 경우, 일반식(BOCza-0001)으로 표시된다. 일반식(BOCzb-1)에 있어서, R¹~R⁴, R⁷~R¹⁴ 및 R^{b1}~R^{b4}이 수소인 경우, 일반식(BOCzb-0001)으로 표시된다. 일반식(BOCzc-1)에 있어서, R¹~R⁴, R⁷~R¹⁴ 및 R^{b1}~R^{b6}가 수소인 경우, 일반식(BOCzc-0001)으로 표시된다.

[0779]

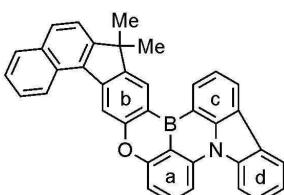
[화학식 250]



(BOCza-0001)



(BOCzb-0001)



(BOCzc-0001)

[0780]

[0781] 일반식(BOCza-1)에서의 $R^1 \sim R^5$, $R^8 \sim R^{14}$ 및 $R^{b1} \sim R^{b4}$ 가 수소가 아닌 치환기를 가지는 경우, 예를 들면, 하기 구조식이 있다. 입체적인 조밀 상태의 관점에서, R^2 , R^3 , R^4 , R^5 , R^9 , R^{10} , R^{11} , R^{12} , R^{13} 및 R^{14} 는 어떠한 치환기도 가능할 수 있고, 합성의 관점에서 치환 위치는 R^2 , R^5 , R^9 , R^{10} , R^{12} , R^{13} 및 R^{14} 가 바람직하다.

[0782]

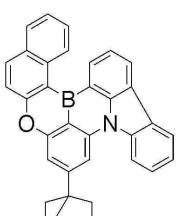
[화학식 251]



(BOCza-0210)



(BOCza-0211)



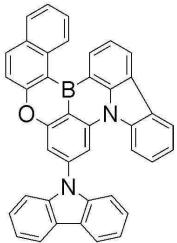
(BOCza-0212)



(BOCza-0220)



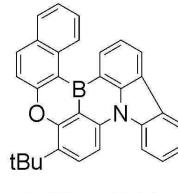
(BOCza-0230)



(BOCza-0231)



(BOCza-0310)



(BOCza-0311)



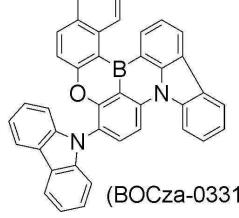
(BOCza-0312)



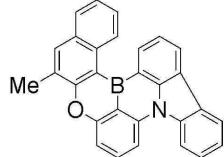
(BOCza-0320)



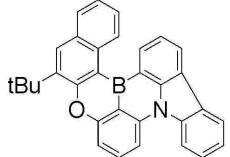
(BOCza-0330)



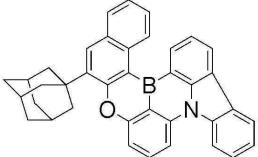
(BOCza-0331)



(BOCza-0410)



(BOCza-0411)

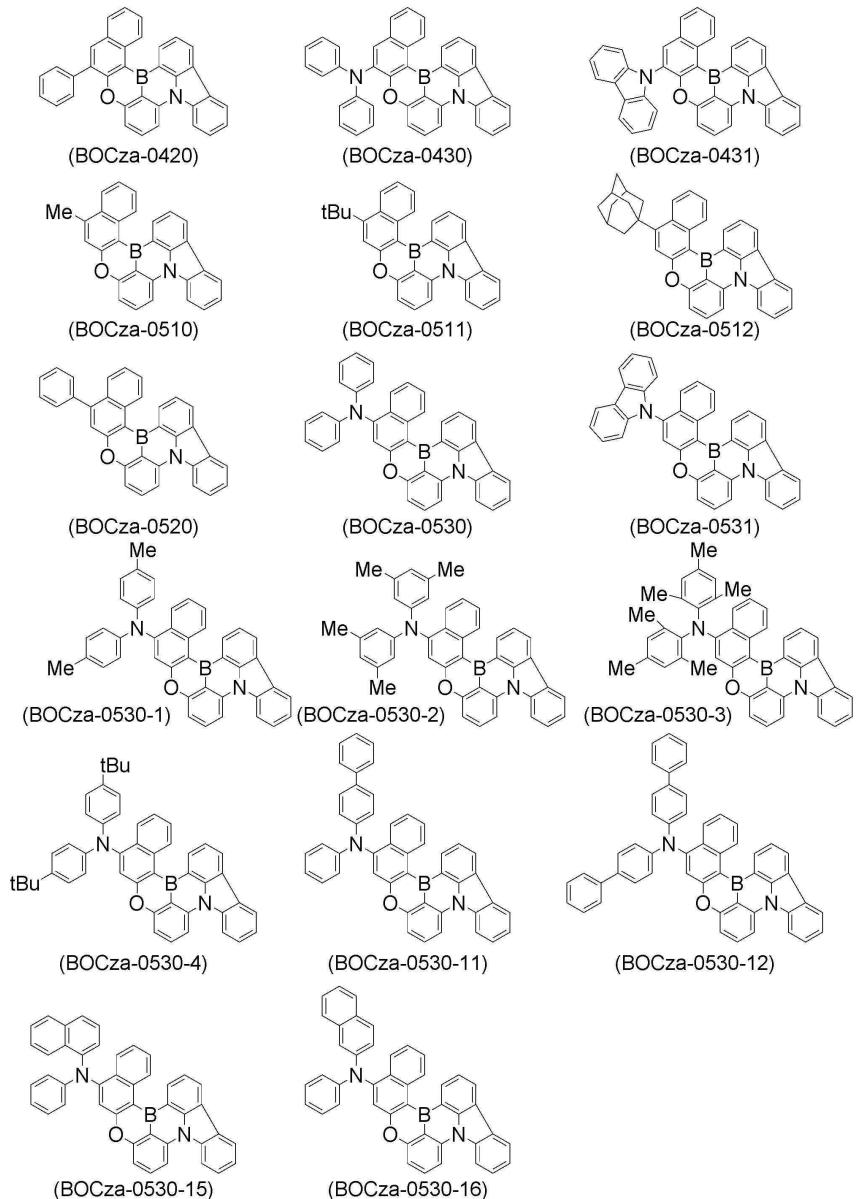


(BOCza-0412)

[0783]

[0784]

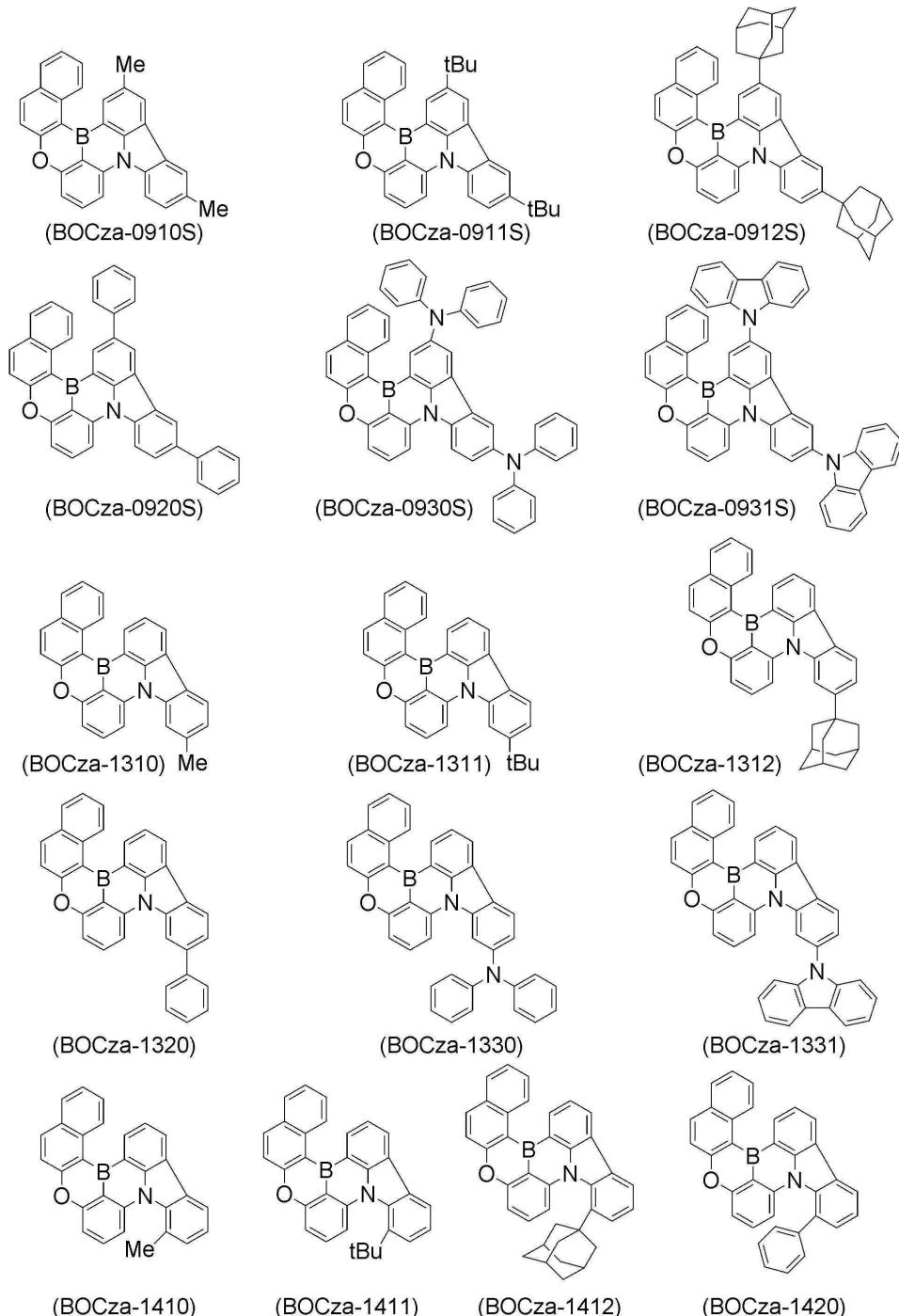
[화학식 252]



[0785]

[0786]

[화학식 253]



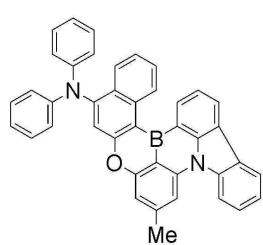
[0787]

[0788]

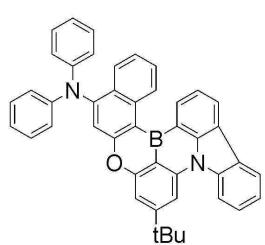
발광파장 및 발광효율의 관점에서, 치환기로서, 질소 원자가 치환하는 것이 바람직하고, 구체적인 치환기는, 디페닐아민, 카르바졸 및 페녹사진이 바람직하고, 디페닐아민 및 카르바졸이 보다 바람직하고, 디페닐아민이 더욱 바람직하다. 상기 디페닐아민, 카르바졸 및 페녹사진에서의 수소 원자는, 아릴, 헤테로아릴, 알킬 또는 시클로알킬로 치환되어 있어도 된다. 또한, 치환 위치는 봉소 원자에 대하여 파라 위치에 치환하는 것이 바람직하고, 구체적으로는, R^2 , R^5 및 R^{10} 이 바람직하고, R^2 및 R^5 가 보다 바람직하고, R^5 가 더욱 바람직하다.

[0789]

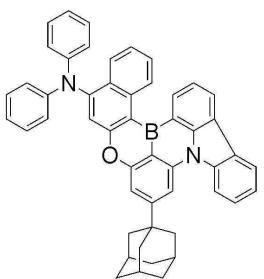
[화학식 254]



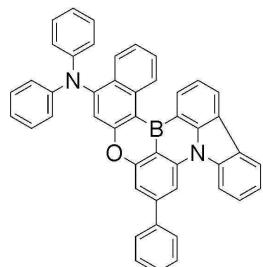
(BOCza-0210/0530)



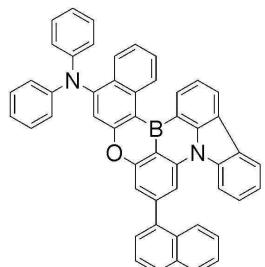
(BOCza-0211/0530)



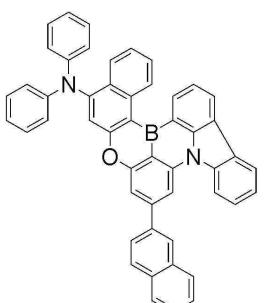
(BOCza-0212/0530)



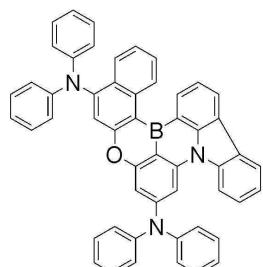
(BOCza-0220/0530)



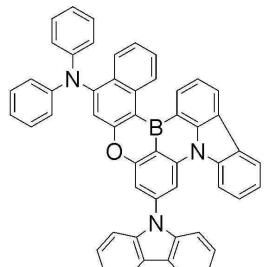
(BOCza-0221/0530)



(BOCza-0222/0530)



(BOCza-0230/0530)

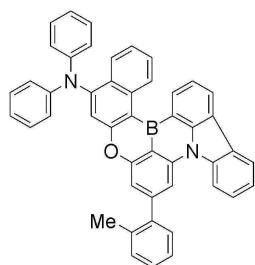


(BOCza-0231/0530)

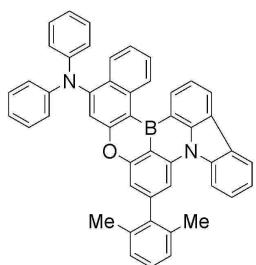
[0790]

[0791]

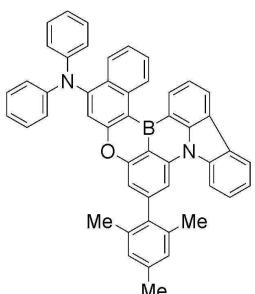
[화학식 255]



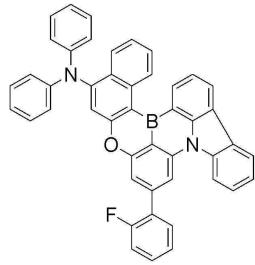
(BOCza-0220/0530-1)



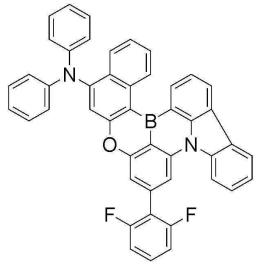
(BOCza-0220/0530-2)



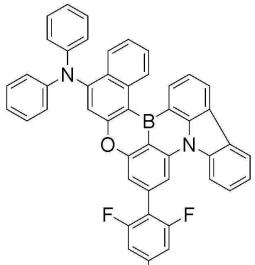
(BOCza-0220/0530-3)



(BOCza-0220/0530-11)

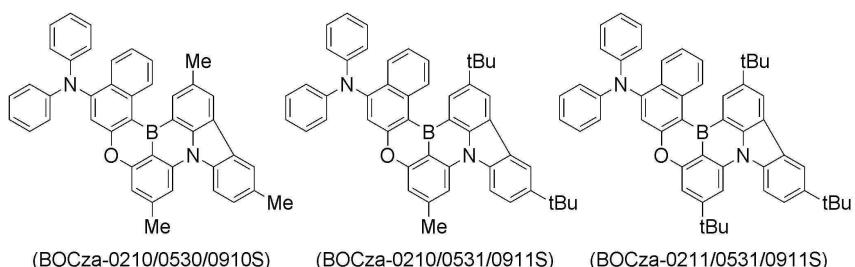
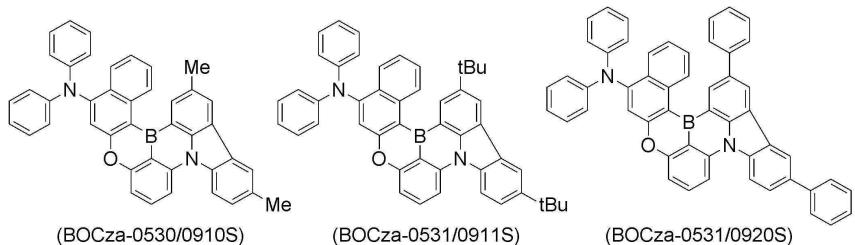


(BOCza-0220/0530-12)

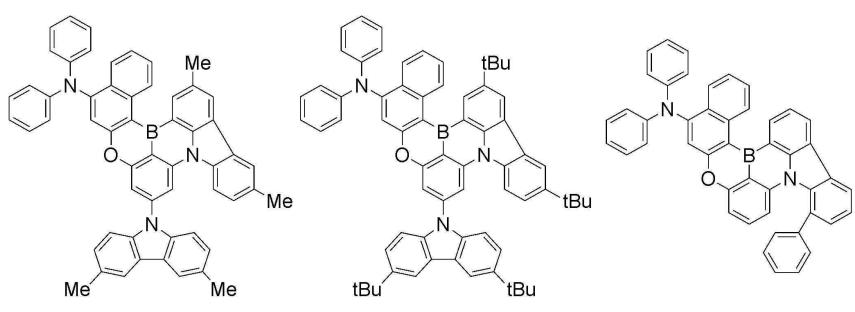


(BOCza-0220/0530-13)

[0792]



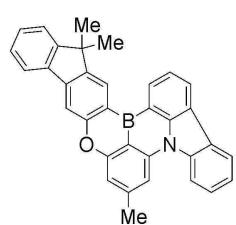
[화학식 256]



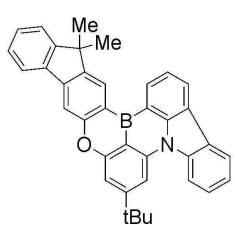
[0797] 일반식(BOCzb-1)에서의 $R^1 \sim R^4$, $R^7 \sim R^{14}$ 및 $R^{b1} \sim R^{b4}$ 가 수소가 아닌 치환기를 가지는 경우, 예를 들면, 하기 구조식이 있다. 입체적인 조밀 상태의 관점에서, R^2 , R^3 , R^4 , R^9 , R^{10} , R^{11} , R^{12} , R^{13} 및 R^{14} 는 어떠한 치환기도 가질 수 있고, 합성의 관점에서 치환 위치는 R^2 , R^9 , R^{12} , R^{13} 및 R^{14} 가 바람직하다.

[0798]

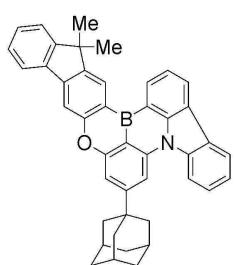
[화학식 257]



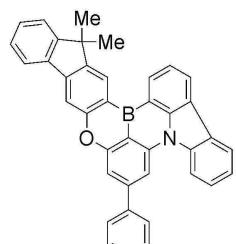
(BOCzb-0210)



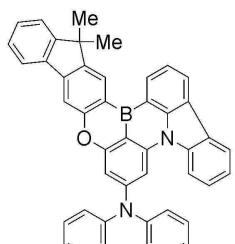
(BOCzb-0211)



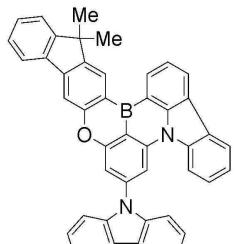
(BOCzb-0212)



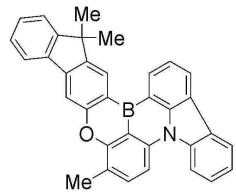
(BOCzb-0220)



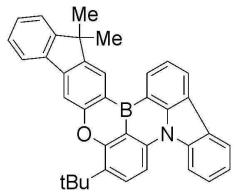
(BOCzb-0230)



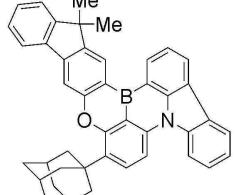
(BOCzb-0231)



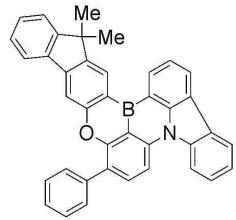
(BOCzb-0310)



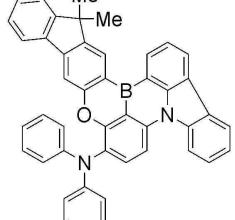
(BOCzb-0311)



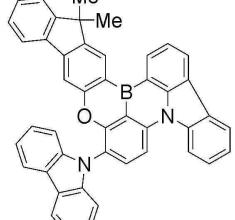
(BOCzb-0312)



(BOCzb-0320)



(BOCzb-0330)

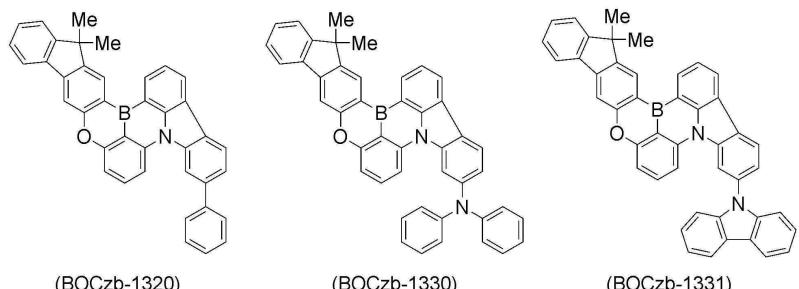
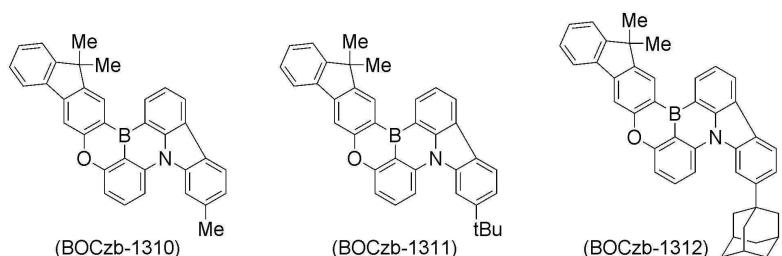
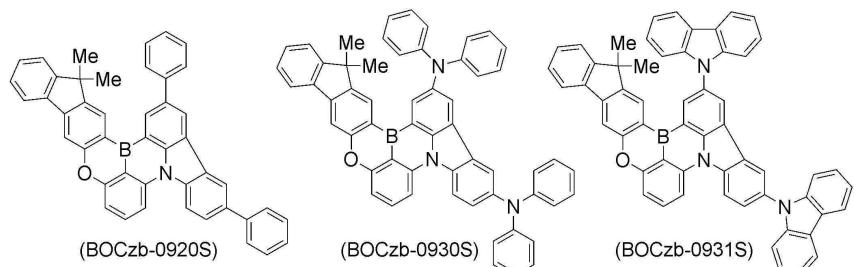
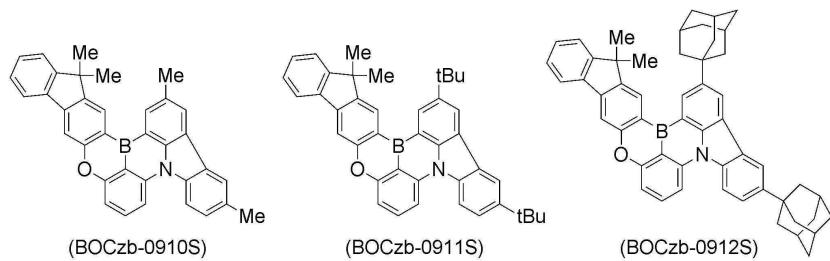


(BOCzb-0331)

[0799]

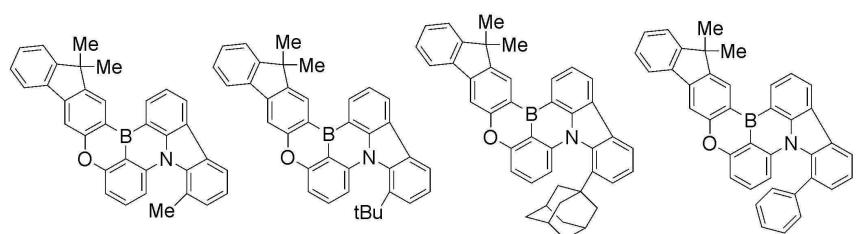
[0800]

[화학식 258]

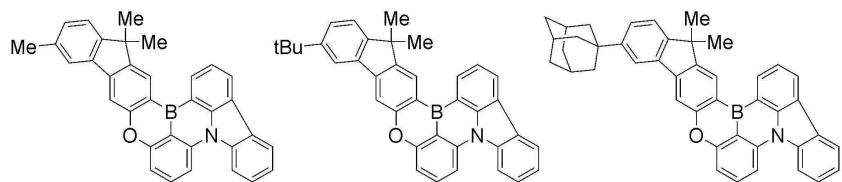


[0801]

[화학식 259]



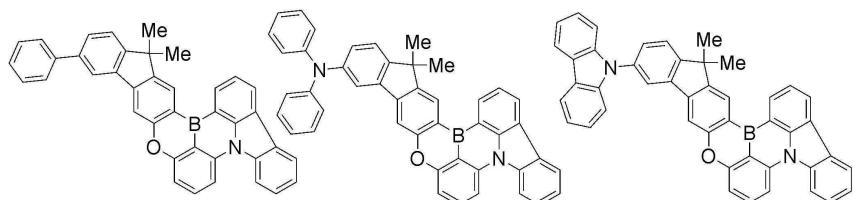
[0803]



(BOCzb-2b10)

(BOCzb-2b11)

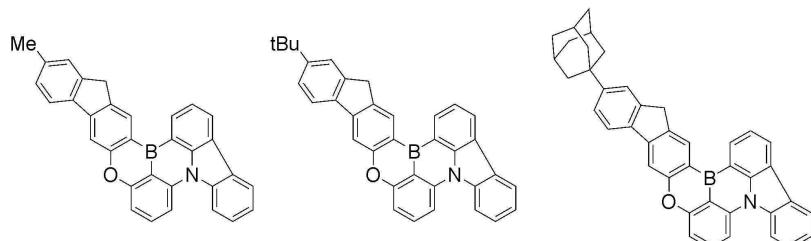
(BOCzb-2b12)



(BOCzb-2b20)

(BOCzb-2b30)

(BOCzb-2b31)



(BOCzb-3b10)

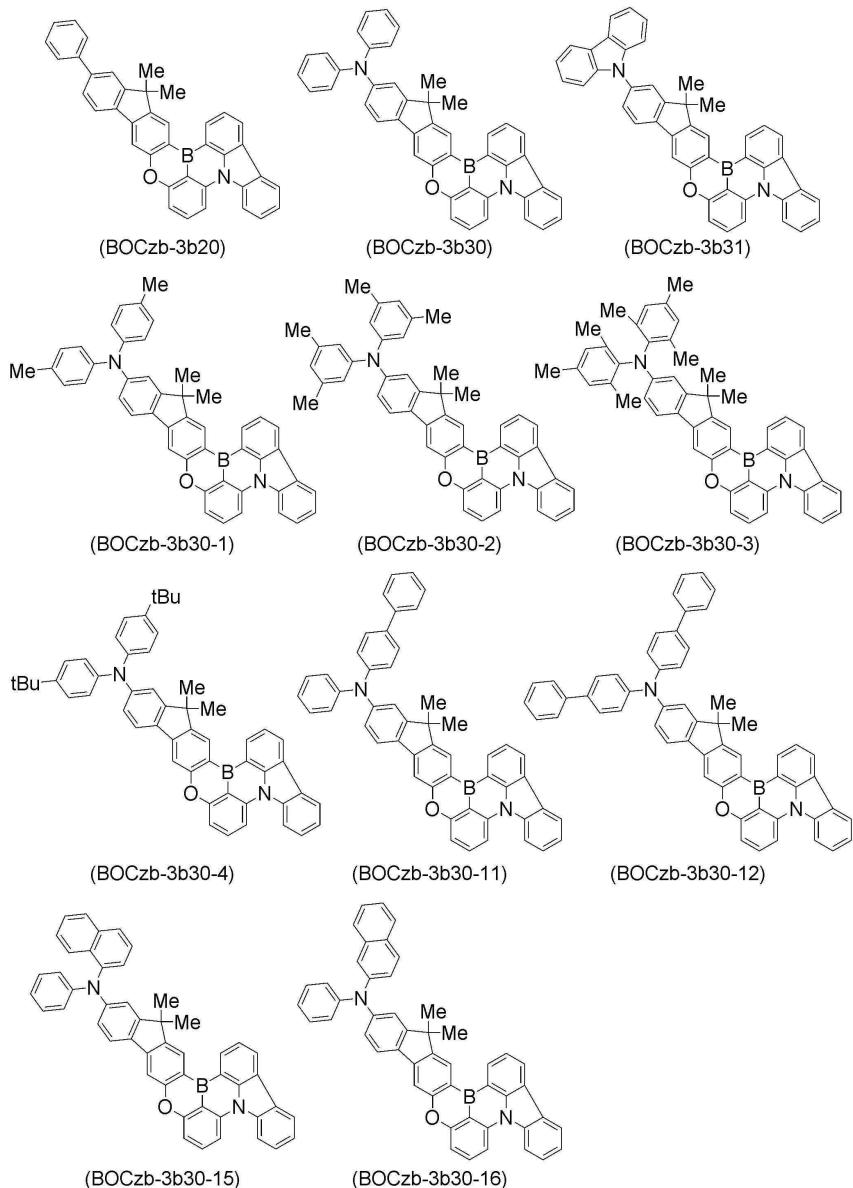
(BOCzb-3b11)

(BOCzb-3b12)

[0804]

[0805]

[화학식 260]



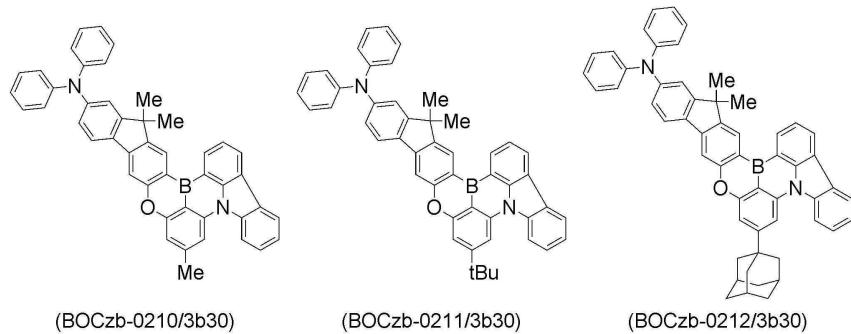
[0806]

[0807]

발광파장 및 발광효율의 관점에서, 치환기로서, 질소 원자가 치환하는 것이 바람직하고, 구체적인 치환기는, 디페닐아민, 카르바졸 및 폐녹사진이 바람직하고, 디페닐아민 및 카르바졸이 보다 바람직하고, 디페닐아민이 더욱 바람직하다. 상기 디페닐아민, 카르바졸 및 폐녹사진에서의 수소 원자는, 아릴, 헤테로아릴, 알킬 또는 시클로알킬로 치환되어 있어도 된다. 또한, 치환 위치는 봉소 원자에 대하여 파라 위치 또는 $R^{1b} \sim R^{4b}$ 중 적어도 1개에 치환하는 것이 바람직하고, 구체적으로는, R^2 , R^{10} , R^{1b} , R^{2b} , R^{3b} 및 R^{4b} 가 바람직하고, R^2 및 R^{3b} 가 보다 바람직하고, R^{3b} 가 더욱 바람직하다.

[0808]

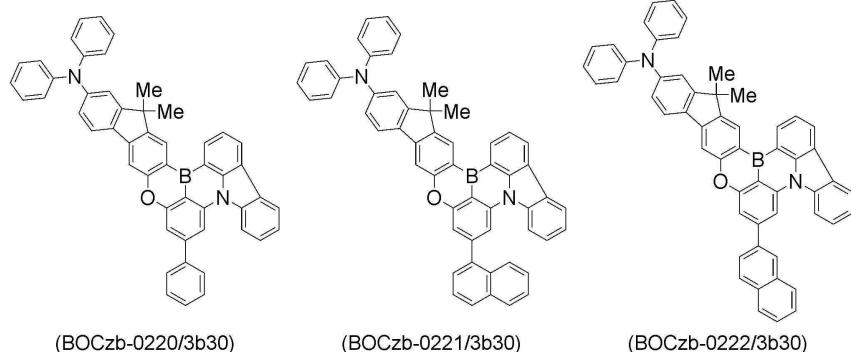
[화학식 261]



(BOCzb-0210/3b30)

(BOCzb-0211/3b30)

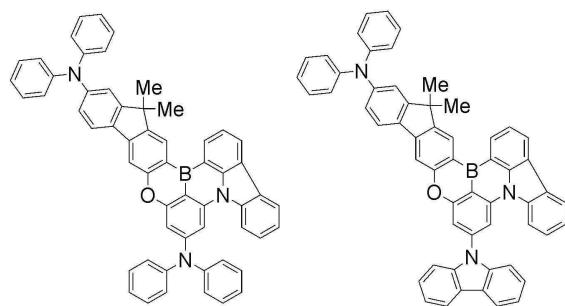
(BOCzb-0212/3b30)



(BOCzb-0220/3b30)

(BOCzb-0221/3b30)

(BOCzb-0222/3b30)



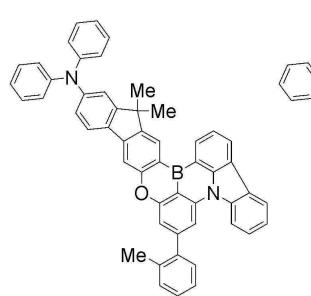
(BOCzb-0230/3b30)

(BOCzb-0231/3b30)

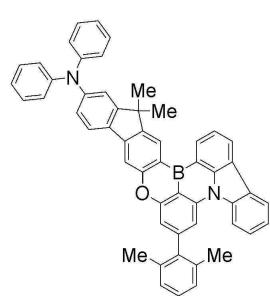
[0809]

[0810]

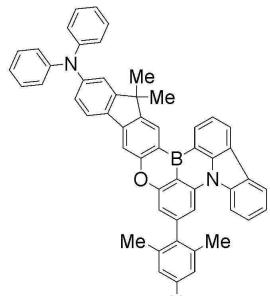
[화학식 262]



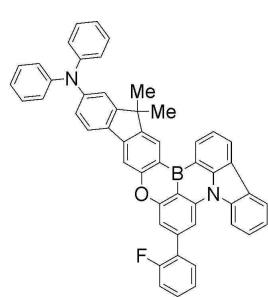
(BOCzb-0220/3b30-1)



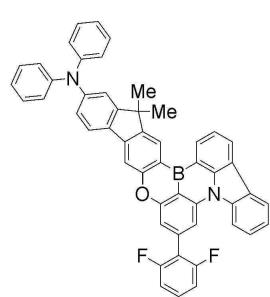
(BOCzb-0220/3b30-2)



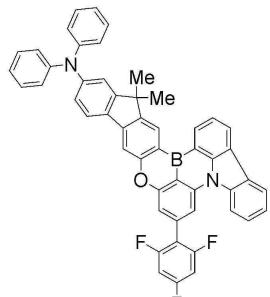
(BOCzb-0220/3b30-3)



(BOCzb-0220/3b30-11)



(BOCzb-0220/3b30-12)

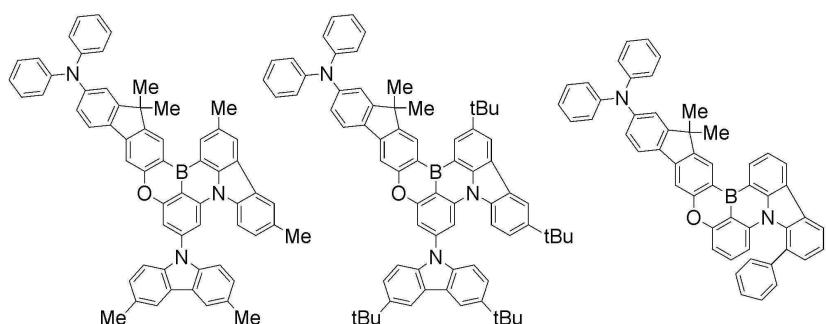
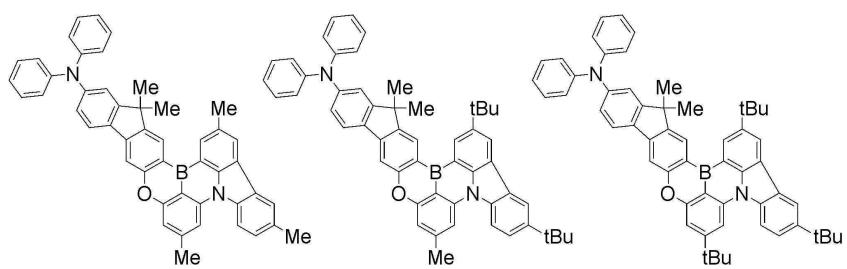
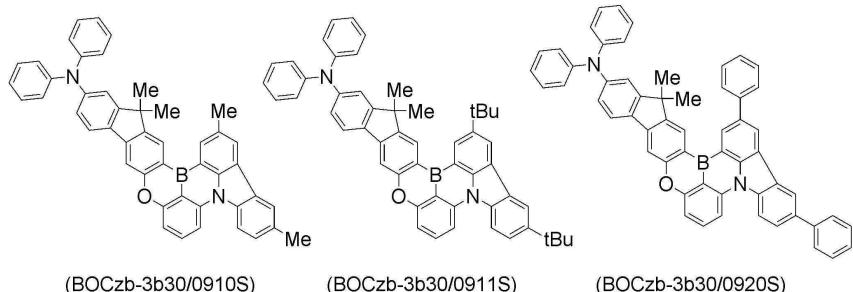


(BOCzb-0220/3b30-13)

[0811]

[0812]

[화학식 263]



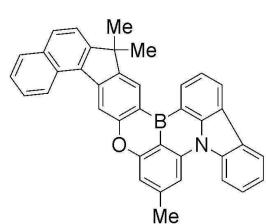
[0813]

[0814]

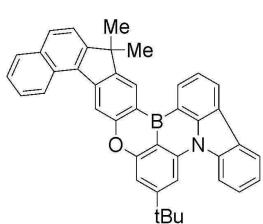
일반식(BOCzb-1)에서의 $R^1 \sim R^4$, $R^7 \sim R^{14}$ 및 $R^{b1} \sim R^{b6}$ 은 수소가 아닌 치환기를 가지는 경우, 예를 들면, 하기 구조식이 있다. 입체적인 조밀 상태의 관점에서, R^2 , R^3 , R^4 , R^9 , R^{10} , R^{11} , R^{12} , R^{13} 및 R^{14} 는 어떠한 치환기도 가질 수 있고, 합성의 관점에서 치환 위치는 R^2 , R^3 , R^{12} , R^{13} 및 R^{14} 가 바람직하다.

[0815]

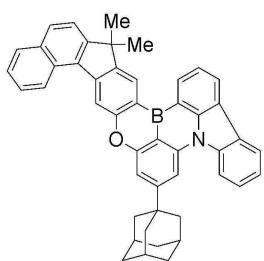
[화학식 264]



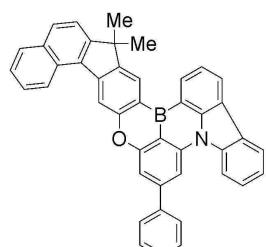
(BOCzc-0210)



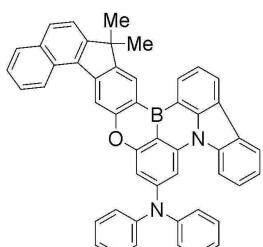
(BOCzc-0211)



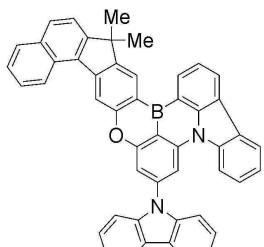
(BOCzc-0212)



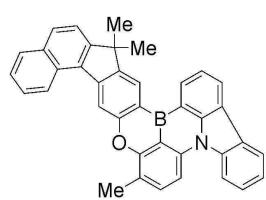
(BOCzc-0220)



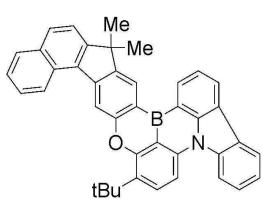
(BOCzc-0230)



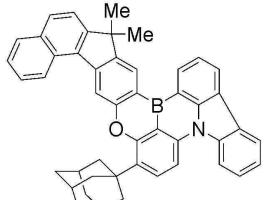
(BOCzc-0231)



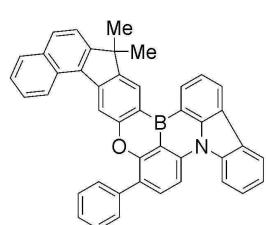
(BOCzc-0310)



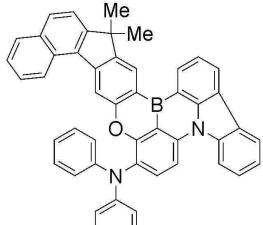
(BOCzc-0311)



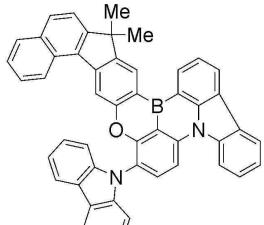
(BOCzc-0312)



(BOCzc-0320)



(BOCzc-0330)

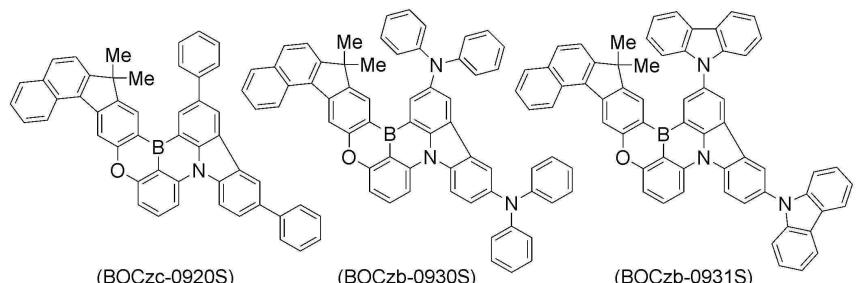
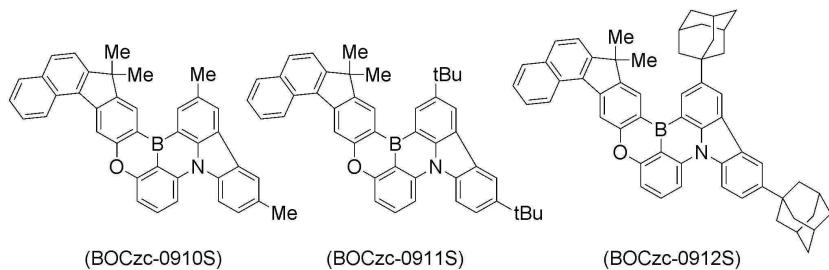


(BOCzc-0331)

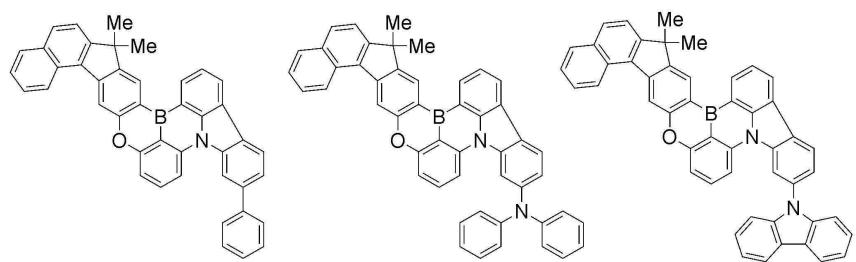
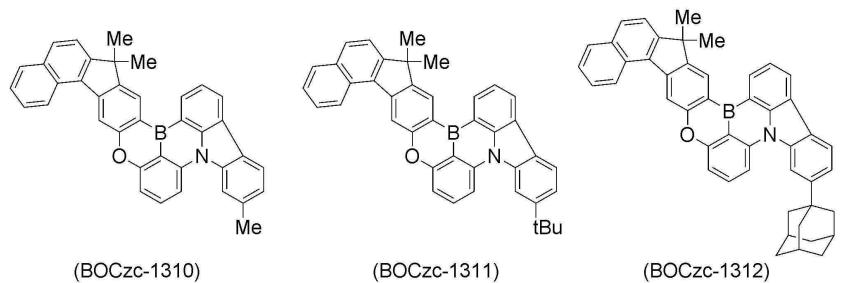
[0816]

[0817]

[화학식 265]



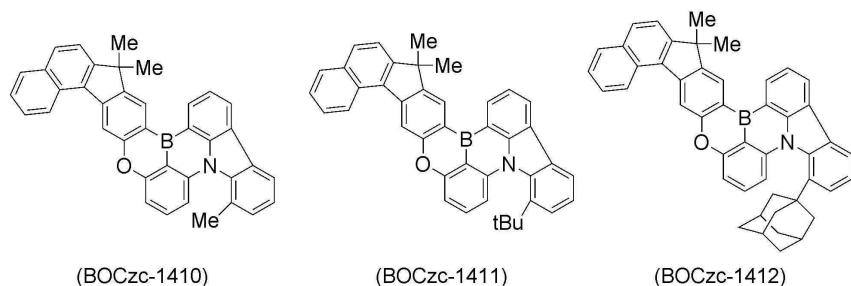
[0818]



[0819]

[0820]

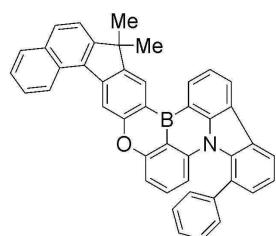
[화학식 266]



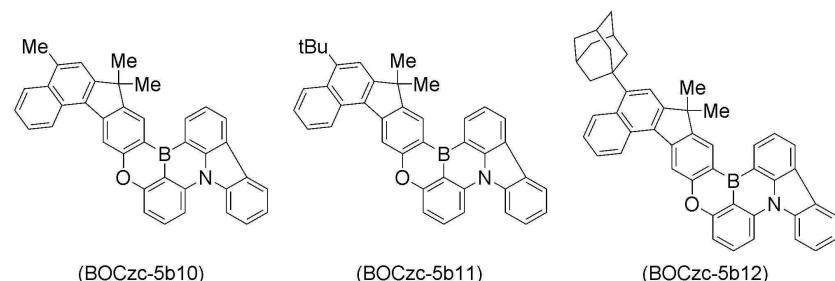
(BOCzc-1410)

(BOCzc-1411)

(BOCzc-1412)



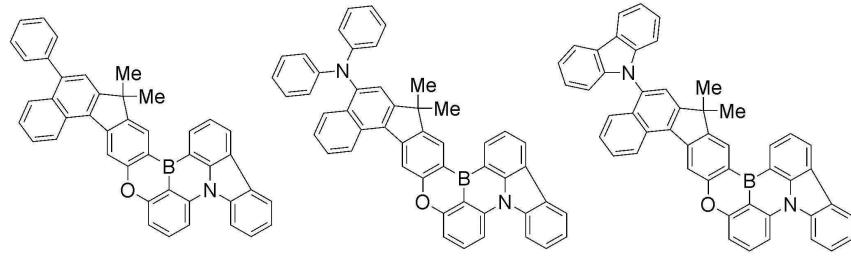
(BOCzc-1420)



(BOCzc-5b10)

(BOCzc-5b11)

(BOCzc-5b12)



(BOCzc-5b20)

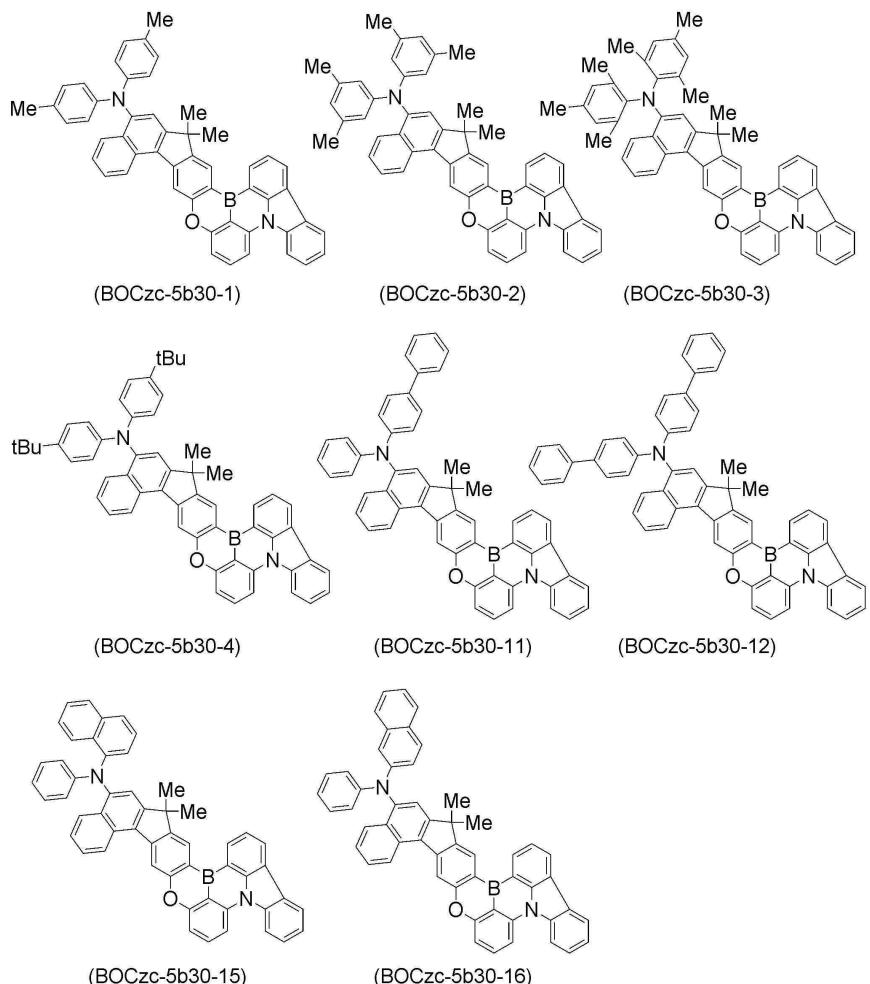
(BOCzc-5b30)

(BOCzc-5b31)

[0822]

[0823]

[화학식 267]



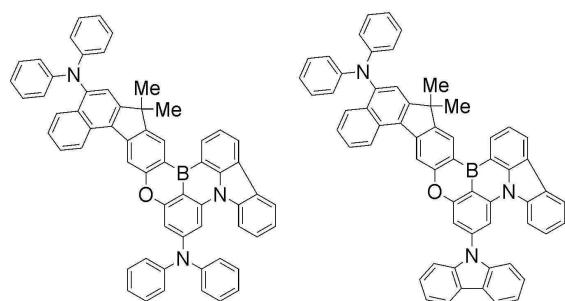
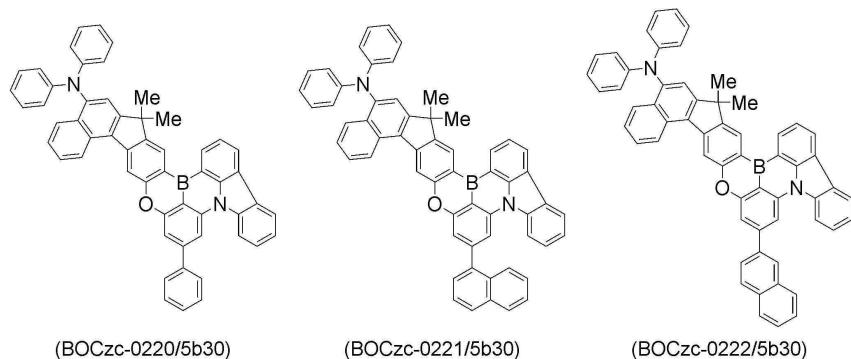
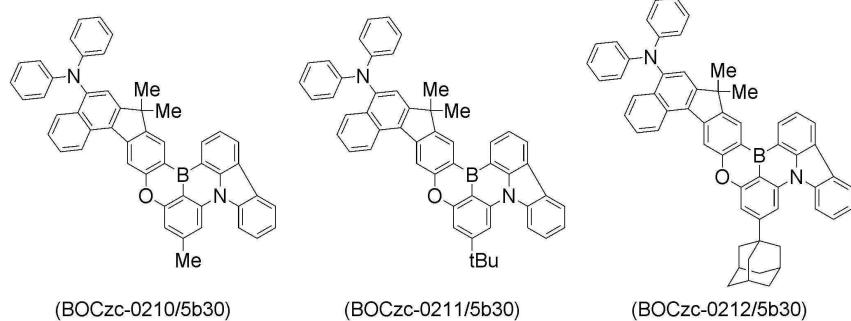
[0824]

[0825]

발광파장 및 발광효율의 관점에서, 치환기로서, 질소 원자가 치환하는 것이 바람직하고, 구체적인 치환기는, 디페닐아민, 카르바졸 및 폐녹사진이 바람직하고, 디페닐아민 및 카르바졸이 보다 바람직하고, 디페닐아민이 더욱 바람직하다. 상기 디페닐아민, 카르바졸 및 폐녹사진에서의 수소 원자는, 아릴, 헤테로아릴, 알킬 또는 시클로알킬로 치환되어 있어도 된다. 또한, 치환 위치는 봉소 원자에 대하여 파라 위치 또는 R^{5b} 또는 R^{6b} 에 치환하는 것이 바람직하고, 구체적으로는, R^2 , R^{10} , 및 R^{5b} 가 바람직하고, R^2 및 R^{5b} 가 보다 바람직하고, R^{5b} 가 더욱 바람직하다.

[0826]

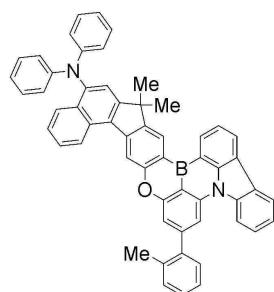
[화학식 268]



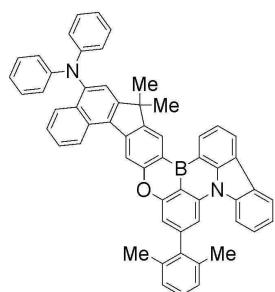
[0827]

[0828]

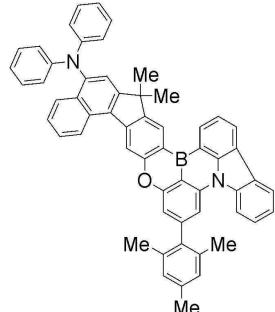
[화학식 269]



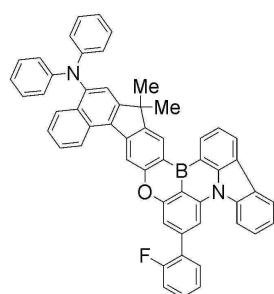
(BOCzc-0220/5b30-1)



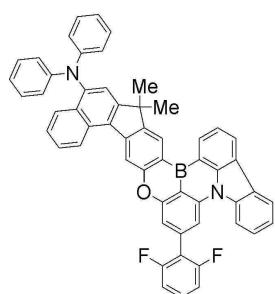
(BOCzc-0220/5b30-2)



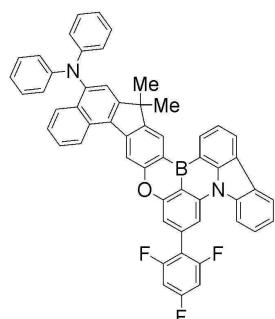
(BOCzc-0220/5b30-3)



(BOCzc-0220/5b30-11)



(BOCzc-0220/5b30-12)

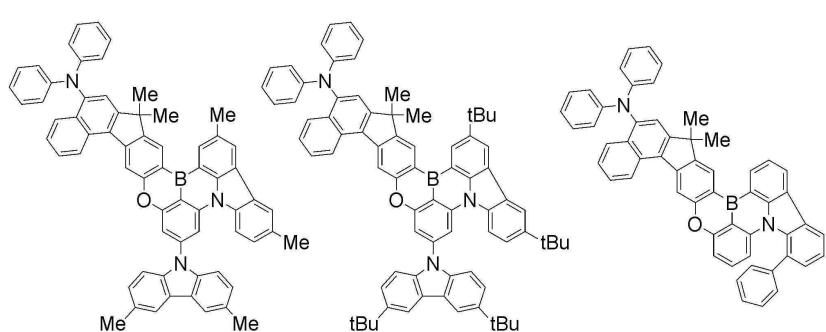
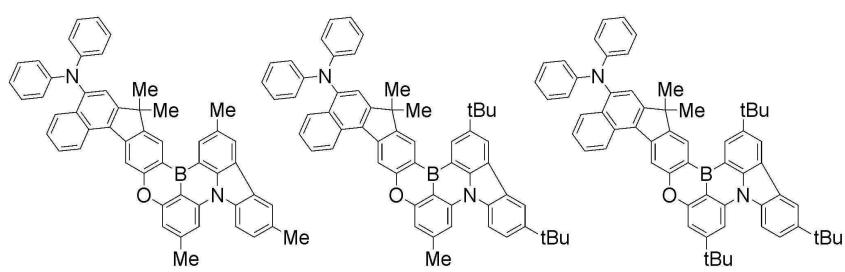
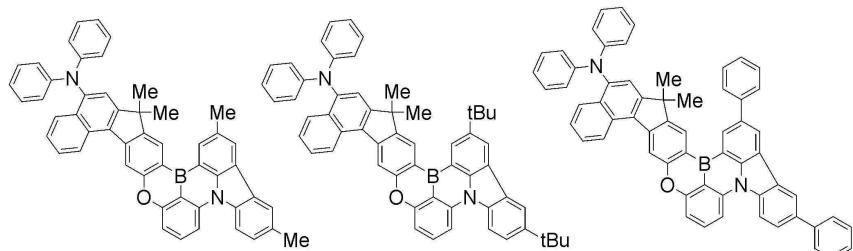


(BOCzc-0220/5b30-13)

[0829]

[0830]

[화학식 270]



[0831]

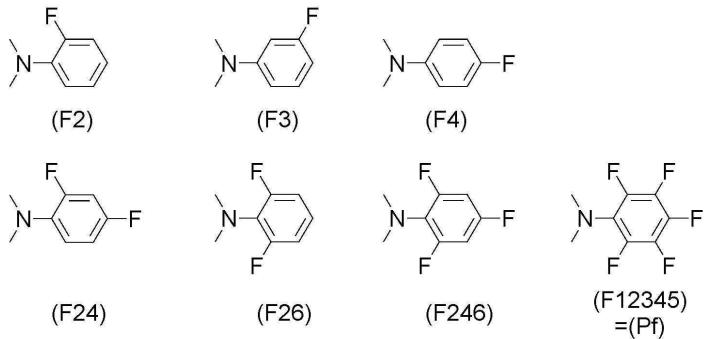
[0832] 일반식(BNL-1)에 있어서, >N-R에서의 R에, 전기 음성도가 큰 원자를 포함함으로써 단파장화할 수 있다. 구체적으로는, 일반식(BNL-1)의 >N-R에서의 R이, 아릴 혹은 헤테로아릴이며, 질소 원자에 결합하는 아릴 또는 헤테로아릴이, 적어도 1개의 탄소보다 전기 음성도가 큰 원자를 포함하는 것이 바람직하고, 적어도 1개의 불소원자를 포함하는 것이 보다 바람직하다. 단파장화의 위해서는, a환과 b환을 연결하는 질소 원자에 결합하는 아릴 혹은 헤테로아릴에, 전기 음성도가 큰 원자를 많이 가지는 것이 바람직하고, 또한, a환과 b환을 연결하는 질소 원자에 대하여, 오르토 위치에 전기 음성도가 큰 원자를 가지는 것이 바람직하다.

[0833]

[0833] 예를 들면, 이하의 부분 구조식이 있다. 부분 구조식 중의 질소 원자는 a환과 b환을 연결하는 질소 원자를 나타낸다. 단파장화의 효과는 부분 구조식(Pf)이 가장 크다. 안정성 및 합성의 관점에서, 식(F2), 식(F4), 식(F24), 식(F26) 및 식(F246)이 바람직하고, 식(F2), 식(F24) 및 식(F26)이 보다 바람직하고, 식(F26)이 더욱 바람직하다.

[0834]

[화학식 271]



[0835]

[0836]

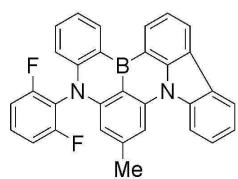
일반식(BNpCz-1)에서의 >N-R의 R^o, 식(F26)인 경우, 하기 구조식을 예로 들 수 있다. 입체적인 조밀 상태의 관점에서, R², R⁵, R⁶, R⁹, R¹⁰, R¹¹, R¹² 및 R¹³은 어떠한 치환기도 가질 수 있고, 합성의 관점에서 치환 위치는 R², R⁵, R⁶, R⁹, R¹² 및 R¹³o] 바람직하다.

[0837]

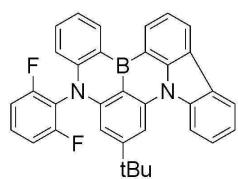
합성의 용이성, 발광파장의 더 한층의 단파장화, 높은 발광효율 및 높은 TADF 활성의 위해서는, R², R⁵, R⁶, R⁹ 및 R¹²에 알킬기 또는 시클로알킬기를 가지는 것이 바람직하다. 상기한 치환은, 유연한 치환기 또는 입체장애가 큰 치환기를 도입함으로써, 화합물의 응집을 억제할 수 있다. 합성의 용이성, 발광파장의 장파장화 및 매우 높은 발광효율의 위해서는, R², R⁵, R⁶, R⁹ 및 R¹²에 아릴기를 가지는 것이 바람직하다. 아릴기의 도입은 높은 발광효율을 제공한다. 발광파장의 단파장화, 매우 높은 발광효율 및 높은 TADF 활성의 위해서는, R² 및 R⁵에 디아릴아민기 및 카르바졸릴기를 가지는 것이 바람직하다. 분자의 대칭성을 고려함으로써, 디아릴아민기 및 카르바졸릴기에 있어서도 합성의 용이성을 개선할 수 있다.

[0838]

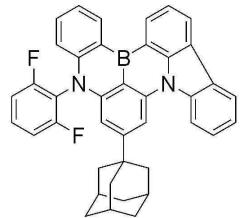
[화학식 272]



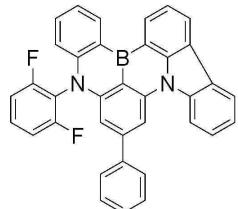
(BNpCz-0210-F26)



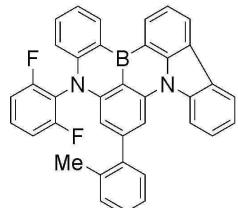
(BNpCz-0211-F26)



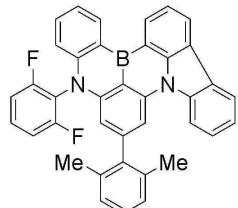
(BNpCz-0212-F26)



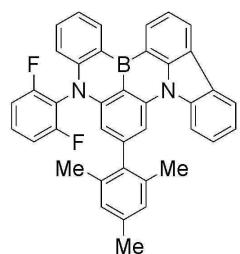
(BNpCz-0220-F26)



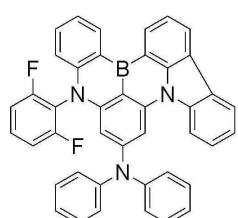
(BNpCz-0220-F26-1)



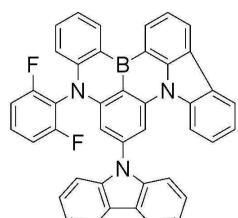
(BNpCz-0220-F26-2)



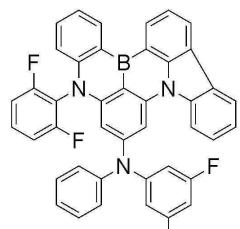
(BNpCz-0220-F26-3)



(BNpCz-0230-F26)



(BNpCz-0231-F26)

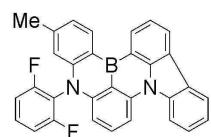


(BNpCz-0230-F26-1)

[0839]

[0840]

[화학식 273]



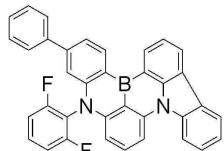
(BNpCz-0510-F26)



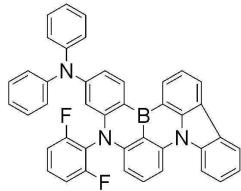
(BNpCz-0511-F26)



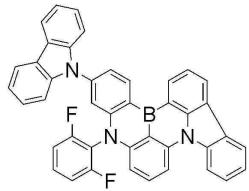
(BNpCz-0512-F26)



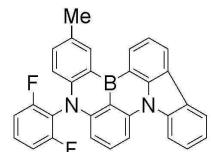
(BNpCz-0520-F26)



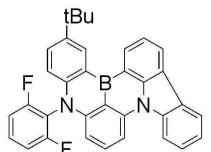
(BNpCz-0530-F26)



(BNpCz-0531-F26)



(BNpCz-0610-F26)



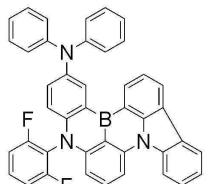
(BNpCz-0611-F26)



(BNpCz-0612-F26)



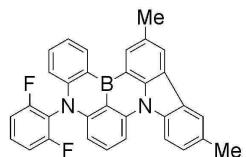
(BNpCz-0620-F26)



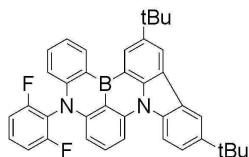
(BNpCz-0630-F26)



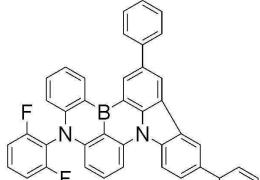
(BNpCz-0631-F26)



(BNpCz-0910S-F26)



(BNpCz-0911S-F26)

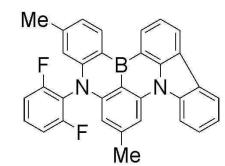


(BNpCz-0920S-F26)

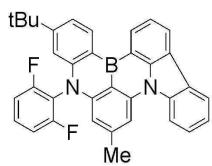
[0841]

[0842]

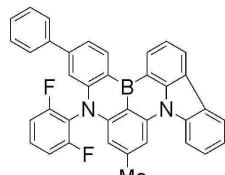
[화학식 274]



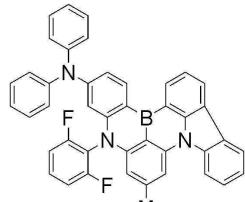
(BNpCz-0210/0510-F26)



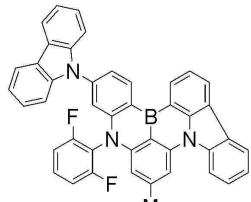
(BNpCz-0210/0511-F26)



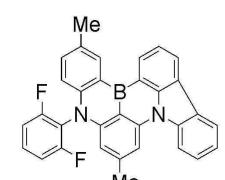
(BNpCz-0210/0520-F26)



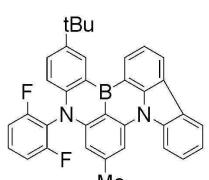
(BNpCz-0210/0530-F26)



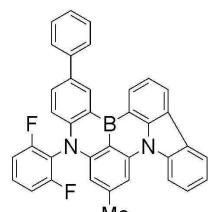
MC
(BNpCz-0210/0531-F26)



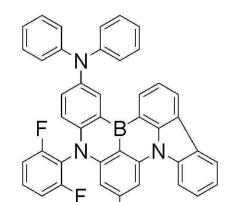
(BNpCz-0210/0610-F26)



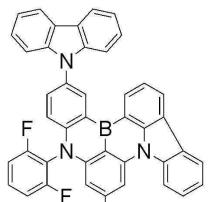
(BNpCz-0210/0611-F26)



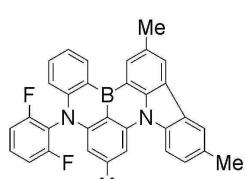
(BNpCz-0210/0620-F26)



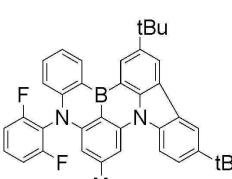
Me
(BN-2 2212/2000 Eas)



Me
(BNL-S-2212/2021-522)



(BNpCz-0210/0910S-E26)

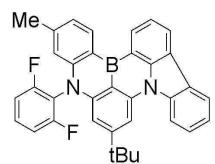


(BNpCz-0210/0920S-E26)

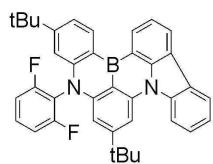
[0843]

[0844]

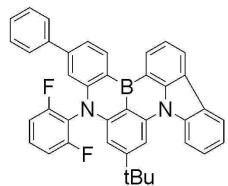
[화학식 275]



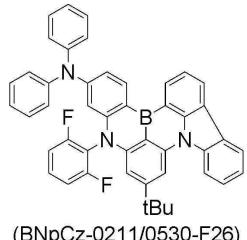
(BNpCz-0211/0510-F26)



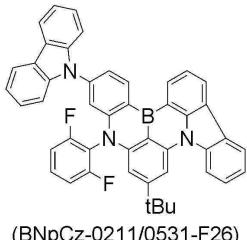
(BNpCz-0211/0511-F26)



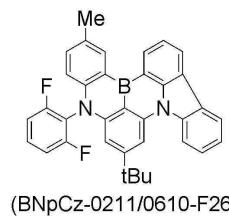
(BNpCz-0211/0520-F26)



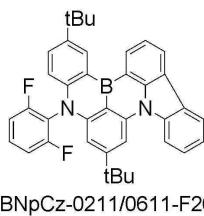
(BNpCz-0211/0530-F26)



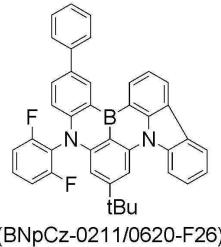
(BNpCz-0211/0531-F26)



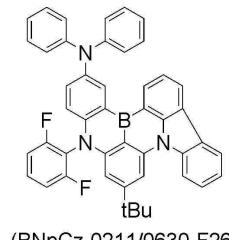
(BNpCz-0211/0610-F26)



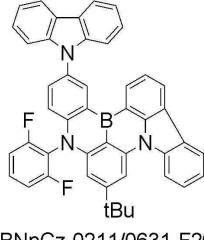
(BNpCz-0211/0611-F26)



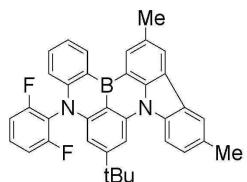
(BNpCz-0211/0620-F26)



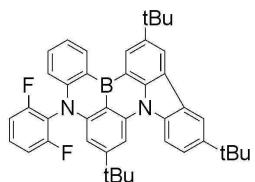
(BNpCz-0211/0630-F26)



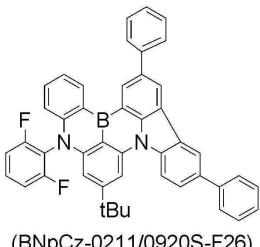
(BNpCz-0211/0631-F26)



(BNpCz-0211/0910S-F26)



(BNpCz-0210/0911S-F26)

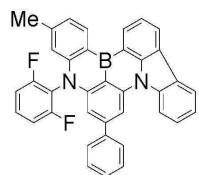


(BNpCz-0211/0920S-F26)

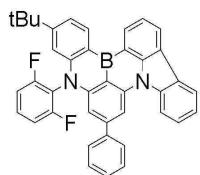
[0845]

[0846]

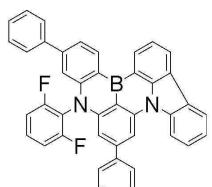
[화학식 276]



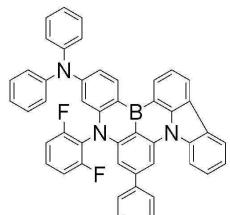
(BNpCz-0220/0510-F26)



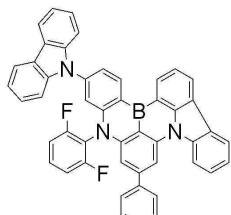
(BNpCz-0220/0511-F26)



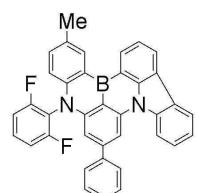
(BNpCz-0220/0520-F26)



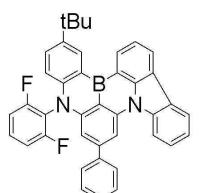
(BNpCz-0220/0530-F26)



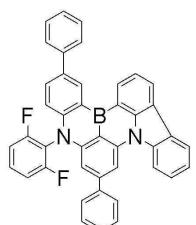
(BNpCz-0220/0531-F26)



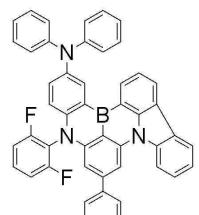
(BNpCz-0220/0610-F26)



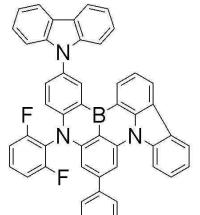
(BNpCz-0220/0611-F26)



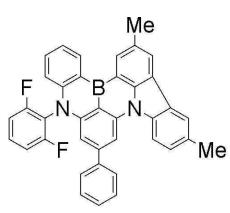
(BNpCz-0220/0620-F26)



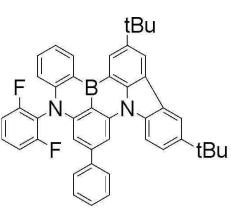
(BNpCz-0220/0630-F26)



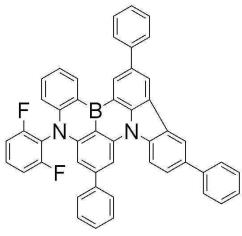
(BNpCz-0220/0631-F26)



(BNpCz-0220/0910S-F26)



(BNpCz-0220/0911S-F26)

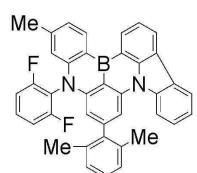


(BNpCz-0220/0920S-F26)

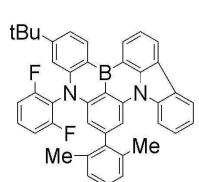
[0847]

[0848]

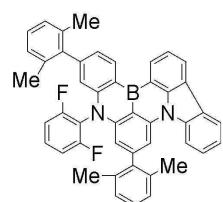
[화학식 277]



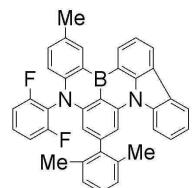
(BNpCz-0220/0510-F26-1)



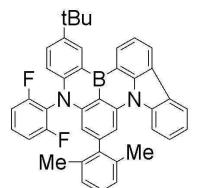
(BNpCz-0220/0511-F26-1)



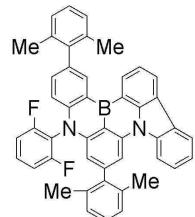
(BNpCz-0220/0520-F26-1)



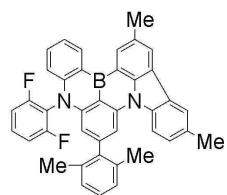
(BNpCz-0220/0610-F26-1)



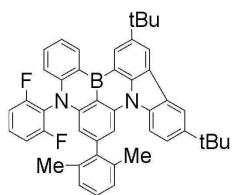
(BNpCz-0220/0611-F26-1)



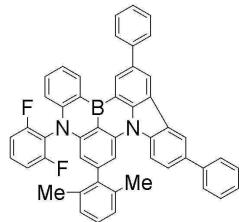
(BNpCz-0220/0620-F26-1)



(BNpCz-0220/0910S-F26-1)



(BNpCz-0220/0911S-F26-1)

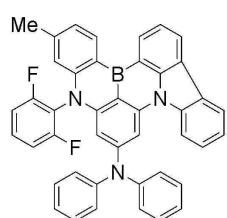


(BNpCz-0220/0920S-F26-1)

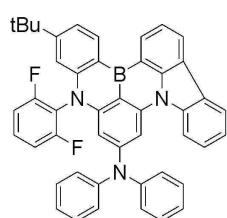
[0849]

[0850]

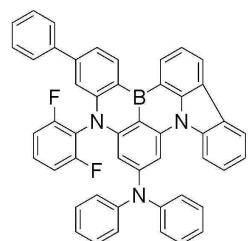
[화학식 278]



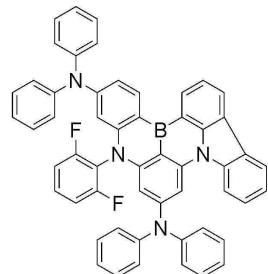
(BNpCz-0230/0510-F26)



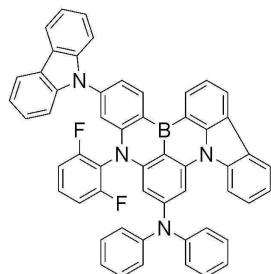
(BNpCz-0230/0511-F26)



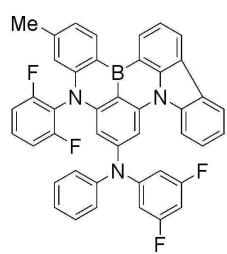
(BNpCz-0230/0520-F26)



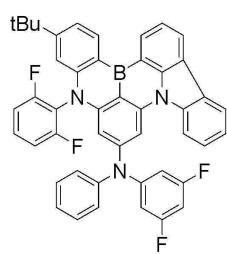
(BNpCz-0230/0530-F26)



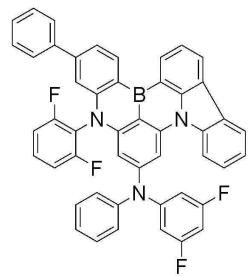
(BNpCz-0230/0531-F26)



(BNpCz-0230/0510-F26-1)



(BNpCz-0230/0511-F26-1)

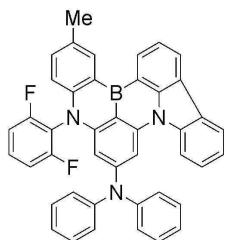


(BNpCz-0230/0520-F26-1)

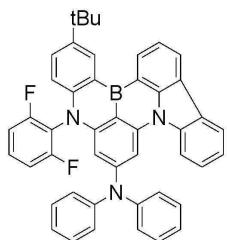
[0851]

[0852]

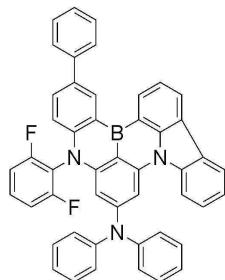
[화학식 279]



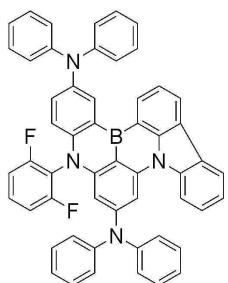
(BNpCz-0230/0610-F26)



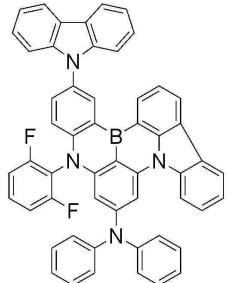
(BNpCz-0230/0611-F26)



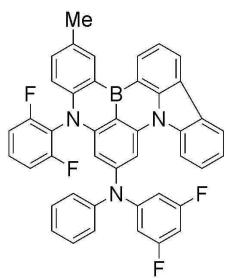
(BNpCz-0230/0620-F26)



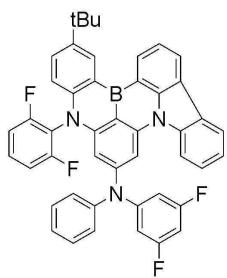
(BNpCz-0230/0630-F26)



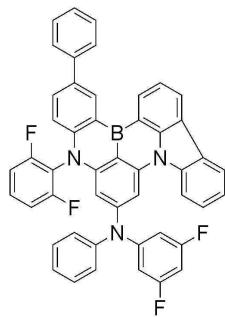
(BNpCz-0230/0631-F26)



(BNpCz-0230/0610-F26-1)



(BNpCz-0230/0611-F26-1)

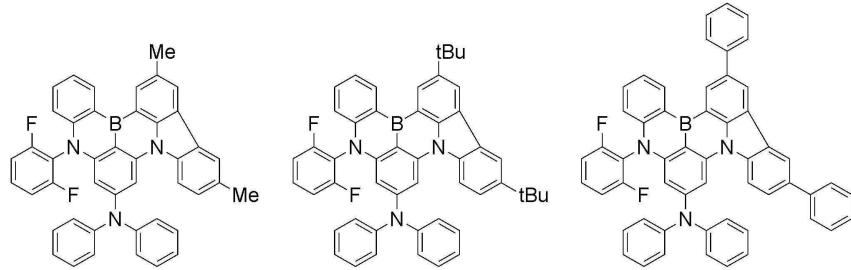


(BNpCz-0230/0620-F26-1)

[0853]

[0854]

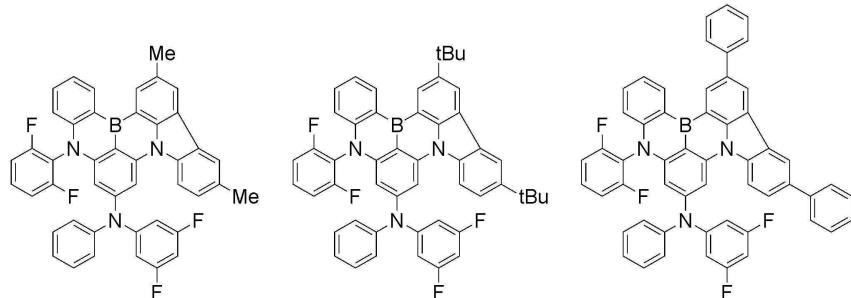
[화학식 280]



(BNpCz-0230/0910S-F26)

(BNpCz-0230/0911S-F26)

(BNpCz-0230/0920S-F26)



(BNpCz-0230/0910S-F26-1)

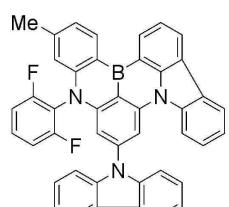
(BNpCz-0230/0911S-F26-1)

(BNpCz-0230/0920S-F26-1)

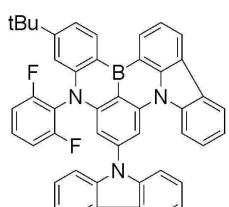
[0855]

[0856]

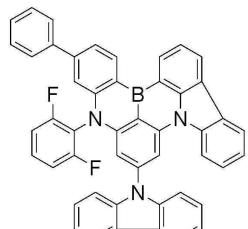
[화학식 281]



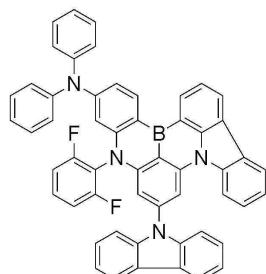
(BNpCz-0231/0510-F26)



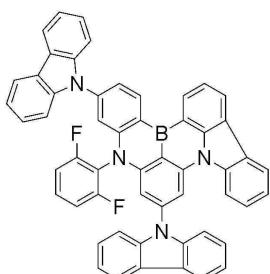
(BNpCz-0231/0511-F26)



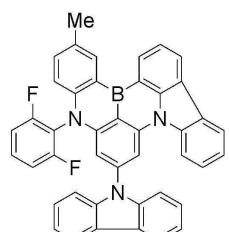
(BNpCz-0231/0520-F26)



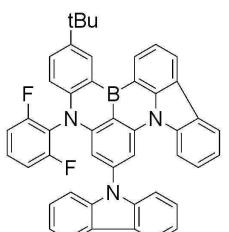
(BNpCz-0231/0530-F26)



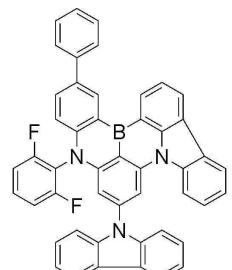
(BNpCz-0231/0531-F26)



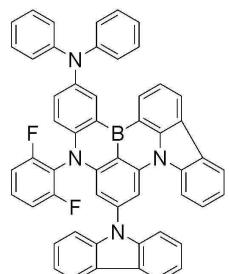
(BNpCz-0231/0610-F26)



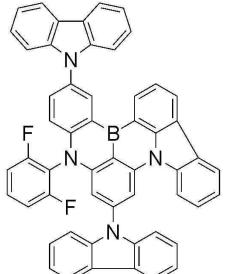
(BNpCz-0231/0611-F26)



(BNpCz-0231/0620-F26)



(BNpCz-0231/0630-F26)

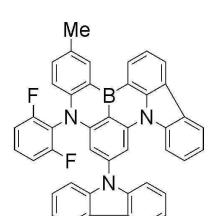


(BNpCz-0231/0631-F26)

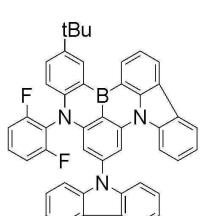
[0857]

[0858]

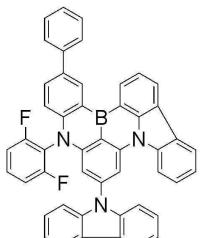
[화학식 282]



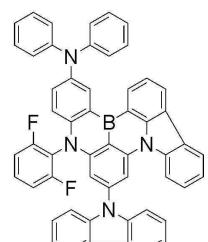
(BNpCz-0231/0610-F26)



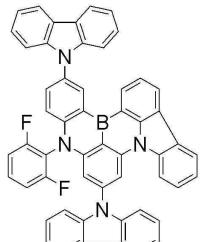
(BNpCz-0231/0611-F26)



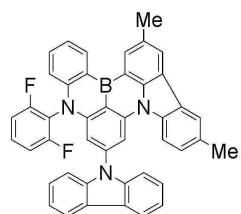
(BNpCz-0231/0620-F26)



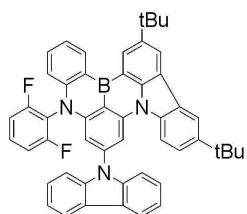
(BNpCz-0231/0630-F26)



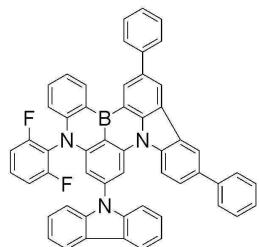
(BNpCz-0231/0631-F26)



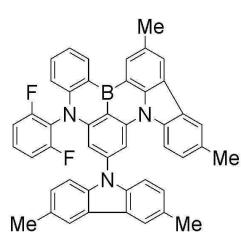
(BNpCz-0231/0910S-F26)



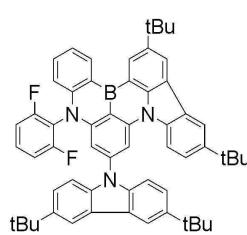
(BNpCz-0231/0911S-F26)



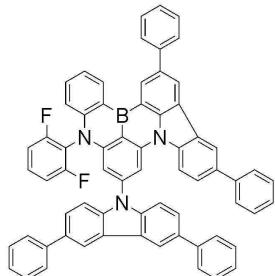
(BNpCz-0231/0920S-F26)



(BNpCz-0231/0910S-F26-1)



(BNpCz-0231/0911S-F26-1)

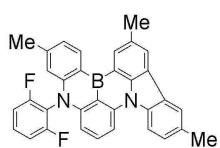


(BNpCz-0231/0920S-F26-1)

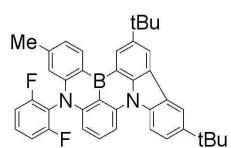
[0859]

[0860]

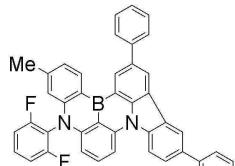
[화학식 283]



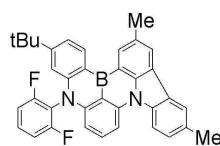
(BNpCz-0510/0910S-F26)



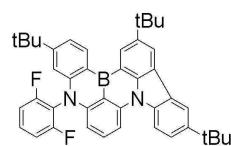
(BNpCz-0510/0911S-F26)



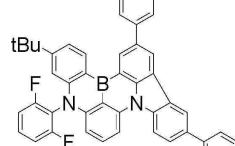
(BNpCz-0510/0920S-F26)



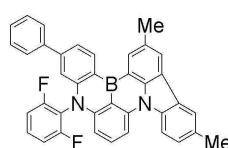
(BNpCz-0511/0910S-F26)



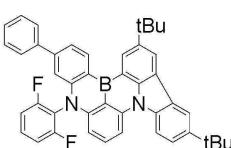
(BNpCz-0511/0911S-F26)



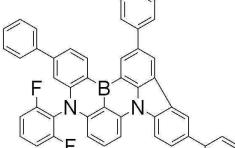
(BNpCz-0511/0920S-F26)



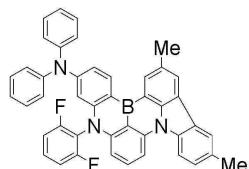
(BNpCz-0520/0910S-F26)



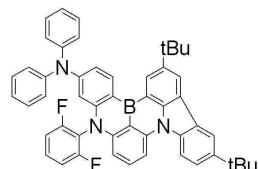
(BNpCz-0520/0911S-F26)



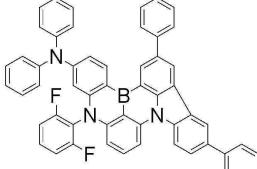
(BNpCz-0520/0920S-F26)



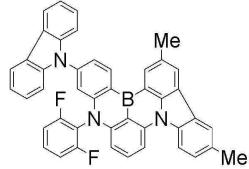
(BNpCz-0530/0910S-F26)



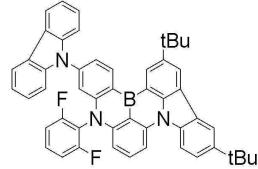
(BNpCz-0530/0911S-F26)



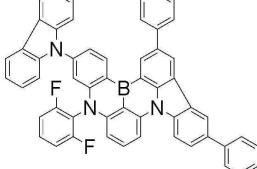
(BNpCz-0530/0920S-F26)



(BNpCz-0531/0910S-F26)



(BNpCz-0531/0911S-F26)

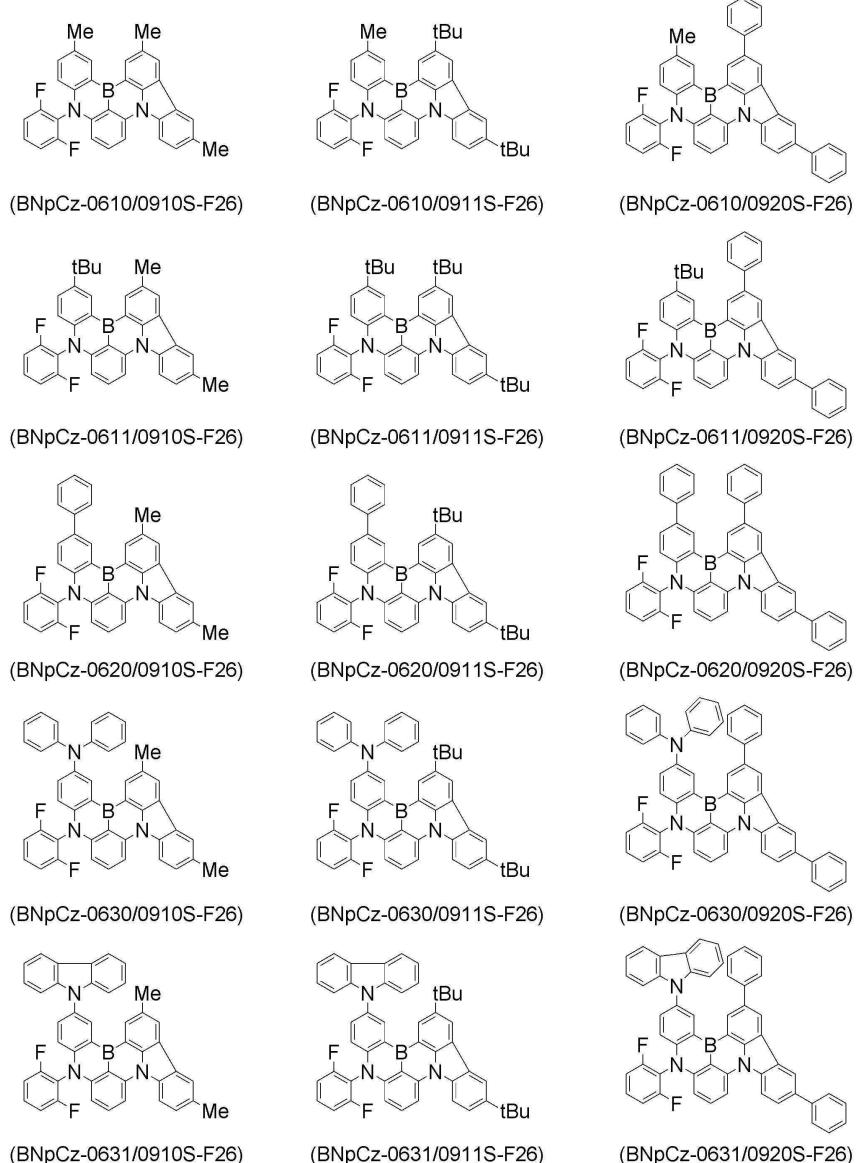


(BNpCz-0531/0920S-F26)

[0861]

[0862]

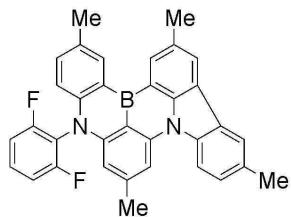
[화학식 284]



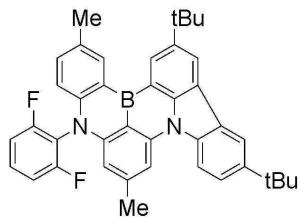
[0863]

[0864]

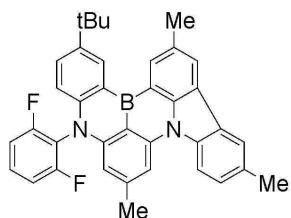
[화학식 285]



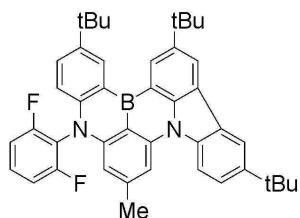
(BNpCz-0210/0610/0910S-F26)



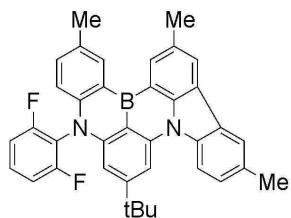
(BNpCz-0210/0610/0911S-F26)



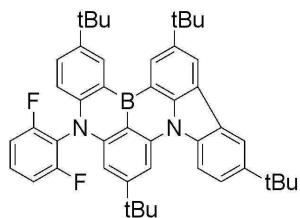
(BNpCz-0210/0611/0910S-F26)



(BNpCz-0210/0611/0911S-F26)



(BNpCz-0211/0610/0910S-F26)

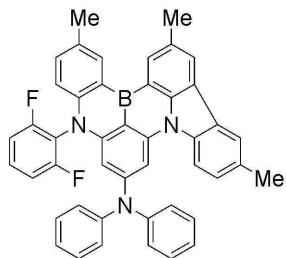


(BNpCz-0211/0611/0911S-F26)

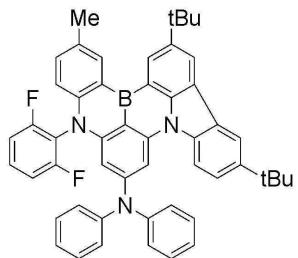
[0865]

[0866]

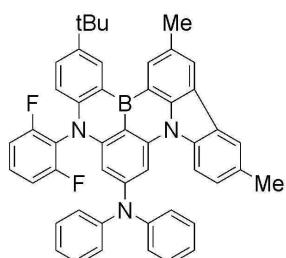
[화학식 286]



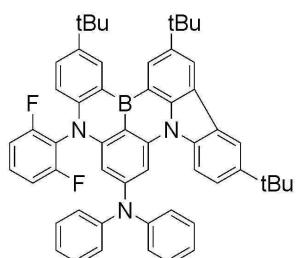
(BNpCz-0230/0610/0910S-F26)



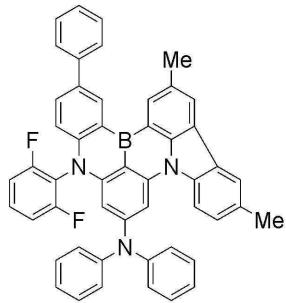
(BNpCz-0230/0610/0911S-F26)



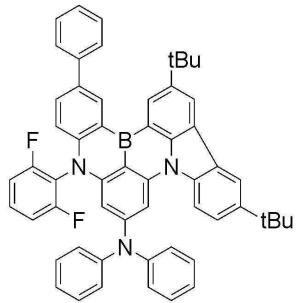
(BNpCz-0230/0611/0910S-F26)



(BNpCz-0230/0611/0911S-F26)



(BNpCz-0230/0620/0910S-F26)

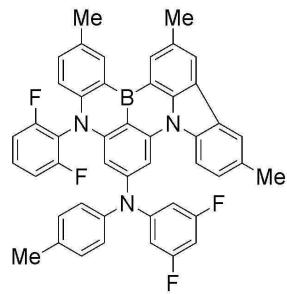


(BNpCz-0230/0620/0911S-F26)

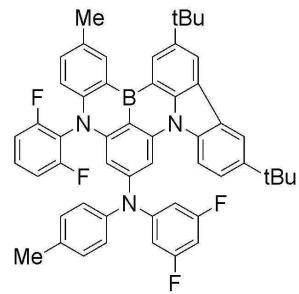
[0867]

[0868]

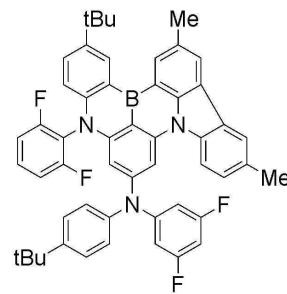
[화학식 287]



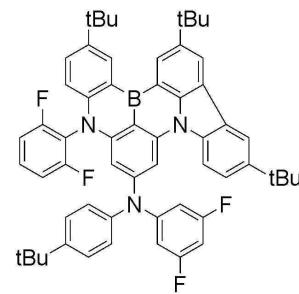
(BNpCz-0230/0610/0910S-F26-1)



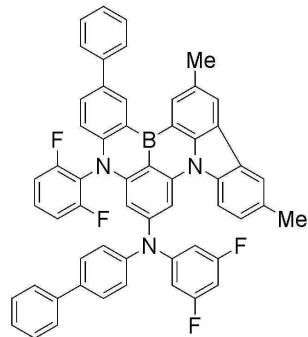
(BNpCz-0230/0610/0911S-F26-1)



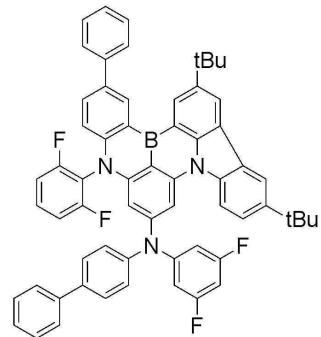
(BNpCz-0230/0611/0910S-F26-1)



(BNpCz-0230/0611/0911S-F26-1)



(BNpCz-0230/0620/0910S-F26-1)

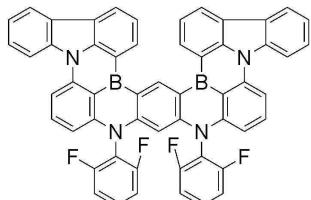


(BNpCz-0230/0620/0911S-F26-1)

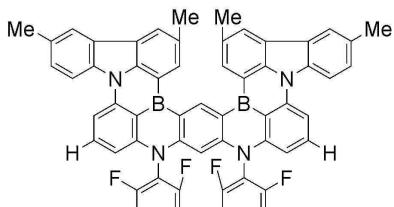
[0869]

[0870]

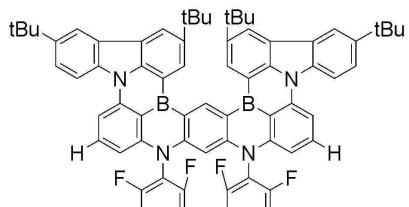
[화학식 288]



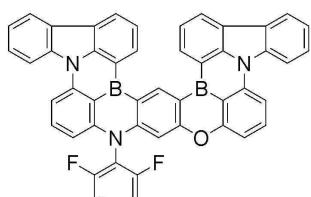
(22BNpCz-0001-F26)



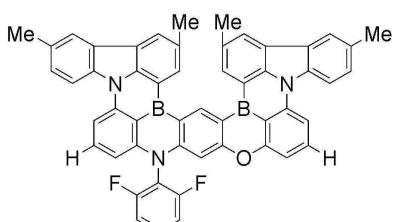
(22BNpCz-0910S/S-F26)



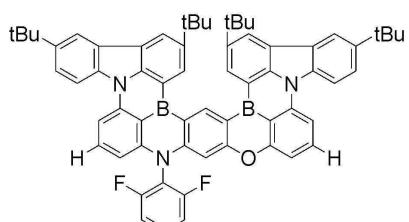
(22BNpCz-0910S/S-F26)



(22BOCz/NpCz-0001-F26)



(22BOCz/NpCz-0910S/S-F26)



(22BOCz/NpCz-0910S/S-F26)

[0871]

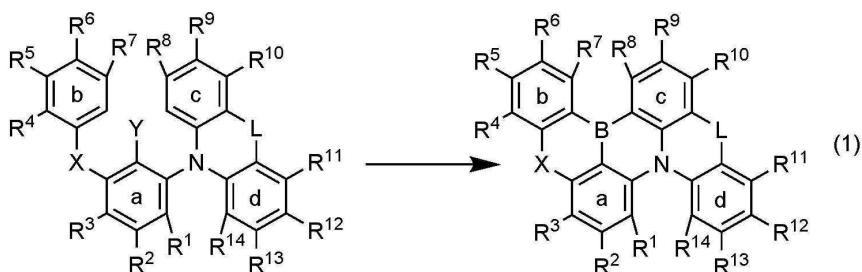
2. 다환 방향족 화합물의 제조 방법

[0873]

일반식(1)으로 표시되는 다환 방향족 화합물 및 그의 다양체는, 예를 들면, 국제공개 제2015/102118호 공보에 개시되어 있는 방법을 응용함으로써 합성할 수 있다. 즉, 하기 스킴(scheme)과 같이 연결기 L을 가지는 중간체를 합성하여, 그것을 텐덤 혜테로 폴리엘 크라프트 반응(연속적인 방향족 친전자치환반응)으로 환화시킴으로써 원하는 다환 방향족 화합물 및 그의 다양체를 합성할 수 있다. 하기 스킴 중, Y는 할로겐 또는 수소를 나타내고, 그 외의 부호의 정의는 전술한 정의와 동일하다.

[0874]

[화학식 289]



[0875]

상기 스킴 중의 환화 전의 중간체도, 동일하게 국제공개 제2015/102118호 공보 등에 나타나 있는 방법으로 합성할 수 있다. 즉 부호발트-하트위그(Buchwald-Hartwig) 반응이나 스즈키(鈴木) 커플링 반응, 또는 친핵치환반응

이나 울만(Ullmann) 반응 등에 의한 에테르화 반응 등을 적절하게 조합함으로써, 원하는 치환기를 가지는 중간체를 합성할 수 있다.

[0877] 상기 스킴에 나타낸, 텐덤 헤테로 폴리엘 크라프트 반응에 의한 환화는, a환, b환 및 c환을 결합하는 B(붕소)를 도입하는 반응이다. 먼저, X 및 N(질소) 사이의 Y(수소 원자)을 n-부틸리튬, sec-부틸리튬 또는 tert-부틸리튬 등으로 오르토메탈화한다. 다음으로, 3염화 봉소나 3브롬화 봉소 등을 가하여, 리튬-봉소의 금속교환을 행한 후, N,N-디이소프로필에틸아민 등의 브뢴스테드 염기를 가함으로써, 텐덤 보라 프리텔 크라프트 반응시켜, 목적물을 얻을 수 있다. 여기서는, 반응을 촉진시키기 위해 3염화 알루미늄 등의 루이스 산을 가해도 된다.

[0878] 또한, 오르토메탈화에 의해 원하는 위치에 리튬을 도입하는 방법뿐만 아니라, 리튬을 도입하고자 하는 위치에 브롬 원자 등의 할로겐을 도입하여, 할로겐-메탈 교환에 의해서도 원하는 위치에 리튬을 도입할 수 있다.

[0879] 또한, 상기 스킴에서의 X 및 N(질소) 사이의 Y(수소 원자)의 오르토메탈화를 거치지 않고, 텐덤 헤테로 폴리엘 크라프트 반응에 의한 환화를 행할 수도 있고, 그 경우에는, 원료에 3염화 봉소, 3브롬화 봉소 및 3요오드화 봉소 등을 가하여 환류(還流)한다. 이 경우에도, 반응촉진을 위해 N,N-디이소프로필에틸아민 등의 브뢴스테드 염기 및/또는 3염화 알루미늄 등의 루이스산을 가해도 된다.

[0880] 또한, 상기 부분 구조식(1a), 식(1b) 또는 식(1c)으로 표시되는 환을 포함하는, 일반식(1a), 식(1b) 또는 식(1c)으로 표시되는 다환 방향족 화합물에 대해서도, 목적물에 맞는 원료를 사용하여, 전술한 방법으로 합성할 수 있다.

3. 유기 디바이스

[0882] 이후에 예시하는 화학 구조식 중의 「Me」는 메틸기, 「tBu」는 tert-부틸기를 나타낸다. 본 발명에 따른 다환방향족 화합물은, 유기 디바이스용 재료로서 사용할 수 있다. 유기 디바이스로서는, 예를 들면, 유기전계 발광소자, 유기전계 효과 트랜지스터 또는 유기박막 태양전지 등이 있다.

3-1. 유기전계 발광소자

[0884] 본 발명에 따른 다환 방향족 화합물은, 예를 들면, 유기전계 발광소자의 재료로서 사용할 수 있다. 이하에서, 본 실시형태에 따른 유기 EL 소자에 대하여 도면에 기초하여 상세하게 설명한다. 도 1은, 본 실시형태에 따른 유기 EL 소자를 나타내는 개략 단면도이다.

<유기전계 발광소자의 구조>

[0886] 도 1에 나타낸 유기전계 발광소자(100)는, 기판(101)과, 기판(101) 상에 설치된 양극(102)과, 양극(102) 위에 설치된 정공주입층(103)과, 정공주입층(103) 위에 설치된 정공수송층(104)과, 정공수송층(104) 위에 설치된 발광층(105)과, 발광층(105) 위에 설치된 전자수송층(106)과, 전자수송층(106) 위에 설치된 전자주입층(107)과, 전자주입층(107) 위에 설치된 음극(108)을 가진다.

[0887] 그리고, 유기전계 발광소자(100)는, 제작 순서를 반대로 하여, 예를 들면, 기판(101)과, 기판(101) 상에 설치된 음극(108)과, 음극(108) 위에 설치된 전자주입층(107)과, 전자주입층(107) 위에 설치된 전자수송층(106)과, 전자수송층(106) 위에 설치된 발광층(105)과, 발광층(105) 위에 설치된 정공수송층(104)과, 정공수송층(104) 위에 설치된 정공주입층(103)과, 정공주입층(103) 위에 설치된 양극(102)을 가지는 구성으로 해도 된다.

[0888] 상기한 각 층 모두가 없으면 안되는 것은 아니며, 최소 구성 단위를 양극(102)과 발광층(105)과 음극(108)으로 이루어지는 구성으로 하고, 정공주입층(103), 정공수송층(104), 전자수송층(106), 전자주입층(107)은 임의로 설치되는 층이다. 또한, 상기한 각 층은, 각각 단일층으로 되어 되고, 복수층으로 되어도 된다.

[0889] 유기전계 발광소자를 구성하는 층의 태양으로서는, 전술한 「기판/양극/정공주입층/정공수송층/발광층/전자수송층/전자주입층/음극」의 구성 태양 이외에, 「기판/양극/정공수송층/발광층/전자수송층/전자주입층/음극」, 「기판/양극/정공주입층/발광층/전자수송층/전자주입층/음극」, 「기판/양극/정공주입층/정공수송층/발광층/전자수송층/전자주입층/음극」, 「기판/양극/정공수송층/발광층/전자수송층/전자주입층/음극」, 「기판/양극/정공수송층/발광층/전자주입층/음극」, 「기판/양극/정공수송층/발광층/전자수송층/음극」, 「기판/양극/정공주입층/발광층/전자수송층/음극」, 「기판/양극/발광층/전자수송층/전자수송층/음극」의 구성 태양이라도 된다.

<유기전계 발광소자에서의 기판>

- [0891] 기판(101)은, 유기전계 발광소자(100)의 지지체이며, 통상, 석영, 유리, 금속, 플라스틱 등이 사용된다. 기판(101)은, 목적에 따라 판형, 필름형, 또는 시트형으로 형성되고, 예를 들면, 유리판, 금속판, 금속박, 플라스틱 필름, 플라스틱 시트 등이 사용된다. 그 중에서도, 유리판, 및 폴리에스테르, 폴리메타크릴레이트, 폴리카보네이트, 폴리솔폰 등이 투명한 합성 수지제의 판자가 바람직하다. 유리 기판이라면, 소다라임 유리나 무알칼리 유리 등이 사용되고, 또한 두께도 기계적 강도를 유지하기에 충분한 두께이면 되며, 예를 들면, 0.2mm 이상이면 된다. 두께의 상한값으로서는, 예를 들면, 2mm 이하, 바람직하게는 1mm 이하이다. 유리의 재질에 대해서는, 유리로부터의 용출 이온이 적은 것이 바람직하므로 무알칼리 유리가 바람직하지만, SiO₂ 등의 배리어 코팅을 실시한 소다라임 유리도 시판되고 있으므로 이것을 사용할 수 있다. 또한, 기판(101)에는, 가스 배리어성을 높이기 위하여, 적어도 한쪽 면에 치밀한 실리콘 산화막 등의 가스 배리어막을 형성해도 되고, 특히 가스 배리어성이 낮은 합성 수지제의 판자, 필름 또는 시트를 기판(101)으로서 사용하는 경우에는 가스 배리어막을 형성하는 것이 바람직하다.
- [0892] <유기전계 발광소자에서의 양극>
- [0893] 양극(102)은, 발광층(105)에 정공을 주입하는 역할을 한다. 그리고, 양극(102)과 발광층(105) 사이에 정공주입층(103) 및/또는 정공수송층(104)이 설치되어 있는 경우에는, 이들을 통하여 발광층(105)에 정공을 주입하게 된다.
- [0894] 양극(102)을 형성하는 재료로서는, 무기 화합물 및 유기 화합물을 예로 들 수 있다. 무기 화합물로서는, 예를 들면, 금속(알루미늄, 금, 은, 니켈, 팔라듐, 크롬 등), 금속 산화물(인듐의 산화물, 주석의 산화물, 인듐-주석 산화물(ITO), 인듐-아연 산화물(IZO) 등), 할로겐화금속(요오드화동 등), 유화동, 카본블랙, ITO 유리나 네사글래스 등이 있다. 유기 화합물로서는, 예를 들면, 폴리(3-메틸티오펜) 등의 폴리티오펜, 폴리피롤, 폴리아닐린 등의 도전성 폴리머 등이 있다. 그 외, 유기전계 발광소자의 양극으로서 사용되고 있는 물질 중에서 적절하게 선택하여 사용할 수 있다.
- [0895] 투명 전극의 저항은, 발광 소자의 발광에 충분한 전류를 공급할 수 있으면 되므로, 한정되지 않지만, 발광 소자의 소비 전력의 관점에서는 저저항인 것이 바람직하다. 예를 들면, 300Ω/□ 이하의 ITO 기판이면 소자 전극으로서 가능하지만, 현재에는 10Ω/□ 정도의 기판의 공급도 가능하므로, 예를 들면, 100~5 Ω/□, 바람직하게는 50~5 Ω/□의 저저항품을 사용하는 것이 특히 바람직하다. ITO의 두께는 저항값에 맞게 임의로 선택할 수 있지만, 통상 50~300 nm의 사이에서 사용하는 경우가 많다.
- [0896] <유기전계 발광소자에서의 정공주입층, 정공수송층>
- [0897] 정공주입층(103)은, 양극(102)으로부터 이동해 오는 정공을, 효율적으로 발광층(105) 내 또는 정공수송층(104) 내에 주입하는 역할을 한다. 정공수송층(104)은, 양극(102)으로부터 주입된 정공 또는 양극(102)으로부터 정공주입층(103)을 통하여 주입된 정공을, 발광층(105)에 효율적으로 수송하는 역할을 한다. 정공주입층(103) 및 정공수송층(104)는, 각각, 정공주입·수송 재료의 1종 또는 2종 이상을 적층, 혼합하거나, 정공주입·수송 재료와 고분자 결착제(結着劑)의 혼합물에 의해 형성된다. 또한, 정공주입·수송 재료에 염화철(III)과 같은 무기염을 첨가하여 층을 형성해도 된다.
- [0898] 정공주입·수송성 물질로서는 전계가 인가된 전극 사이에 있어서 양극으로부터의 정공을 효율적으로 주입·수송하는 것이 필요하며, 정공주입 효율이 높고, 주입된 정공을 효율적으로 수송하는 것이 바람직하다. 이를 위해서는 이온화 포텐셜이 작고, 또한 정공이동도가 크며, 나아가서는 안정성이 우수하고, 트랩이 되는 불순물이 제조시 및 사용 시에 쉽게 생기지 않는 물질인 것이 바람직하다.
- [0899] 정공주입층(103) 및 정공수송층(104)을 형성하는 재료로서는, 광 도전 재료에 있어서, 정공의 전하수송 재료로서 종래부터 관용되고 있는 화합물, p형 반도체, 유기전계 발광소자의 정공주입층 및 정공수송층에 사용되고 있는 공지의 화합물 중에서 임의의 화합물을 선택하여 사용할 수 있다.
- [0900] 이들의 구체예는, 카르바졸 유도체(N-페닐카르바졸, 폴리비닐카르바졸 등), 비스(N-아릴카르바졸) 또는 비스(N-알킬카르바졸) 등의 비스카르바졸 유도체, 트리아릴아민 유도체(방향족 제3급 아미노를 주쇄 또는 측쇄에 가지는 폴리머, 1,1-비스(4-디-p-톨릴아미노페닐)시클로헥산, N,N'-디페닐-N,N'-디(3-메틸페닐)-4,4'-디아미노비페닐, N,N'-디페닐-N,N'-디나프틸-4,4'-디아미노비페닐, N,N'-디페닐-N,N'-디(3-메틸페닐)-4,4'-디페닐-1,1'-디아민, N,N'-디나프틸-N,N'-디페닐-4,4'-디페닐-1,1'-디아민, N⁴,N^{4'}-디페닐-N⁴,N^{4'}-비스(9-페닐-9H-카르바졸-3-일)-[1,1'-비페닐]-4,4'-디아민, N⁴,N^{4'},N^{4'}-테트라[1,1'-비페

닐]-4-일)-[1,1'-비페닐]-4,4'-디아민, 4,4',4''-트리스(3-메틸페닐(페닐)아미노)트리페닐아민 등의 트리페닐아민 유도체, 스타바스트아민 유도체 등), 스텔벤 유도체, 프탈로시아닌 유도체(무금속, 동 프탈로시아닌 등), 피라졸린 유도체, 히드라존계 화합물, 벤조퓨란 유도체나 티오펜 유도체, 옥사디아졸 유도체, 퀴논살린 유도체(예를 들면, 1,4,5,8,9,12-헥사아자트리페닐렌-2,3,6,7,10,11-헥사카르보니트릴 등), 포르피린 유도체 등의 복소환화합물, 폴리실란 등이다. 폴리머계에서는 상기 단량체를 측쇄에 가지는 폴리카보네이트나 스티렌 유도체, 폴리비닐카르바졸 및 폴리실란 등이 바람직하지만, 발광 소자의 제작에 필요한 박막을 형성하고, 양극으로부터 정공을 주입할 수 있고, 또한 정공을 수송할 수 있는 화합물이라면 특별히 한정되지 않는다.

[0901] 또한, 유기반도체의 도전성은, 그 도핑에 의해, 강한 영향을 받는 것도 알려져 있다. 이와 같은 유기 반도체 매트릭스 물질은, 전자제공성이 양호한 화합물, 또는, 전자수용성이 양호한 화합물로 구성되어 있다. 전자 제공 물질의 도핑을 위하여, 테트라시아노퀴논디메탄(TCNQ) 또는 2,3,5,6-테트라플루오로테트라시아노-1,4-벤조퀴논디메탄(F4TCNQ) 등의 강한 전자 수용체가 알려져 있다(예를 들면, 문헌 「M. Pfeiffer, A. Beyer, T. Fritz, K. Leo, Appl. Phys. Lett., 73(22), 3202-3204(1998)」 및 문헌 「J. Blochwitz, M. Pfeiffer, T. Fritz, K. Leo, Appl. Phys. Lett., 73(6), 729-731(1998)」을 참조). 이들은, 전자 제공형 베이스 물질(정공수송 물질)에서의 전자 이동 프로세스에 의해, 소위 정공을 생성한다. 정공의 수 및 이동도에 의해, 베이스 물질의 전도성이, 상당히 크게 변화된다. 정공수송 특성을 가지는 매트릭스 물질로서는, 예를 들면, 벤지딘 유도체(TPD 등) 또는 스타바스트아민 유도체(TDATA 등), 또는 특정한 금속 프탈로시아닌(특히, 아연 프탈로시아닌(ZnPc) 등)이 알려져 있다(일본공개특허 제2005-167175호 공보).

[0902] <유기전계 발광소자에서의 발광층>

[0903] 발광층(105)은, 전계가 인가된 전극 사이에 있어서, 양극(102)으로부터 주입된 정공과, 음극(108)으로부터 주입된 전자를 재결합시킴으로써 발광하는 층이다. 발광층(105)을 형성하는 재료로서는, 정공과 전자의 재결합에 의해 여기되어 발광하는 화합물(발광성 화합물)이면 되고, 안정한 박막 형상을 형성할 수 있고, 또한, 고체 상태에서 강한 발광(형광) 효율을 나타내는 화합물인 것이 바람직하다. 본 발명에서는, 발광층용의 재료로서, 상기 일반식(1)으로 표시되는 다환 방향족 화합물을 사용할 수 있다.

[0904] 발광층은 단일층이라도 되고 복수층으로 이루어져도 되며 어느 쪽이라도 되고, 각각 발광층용 재료(호스트 재료, 도편트 재료)에 의해 형성된다. 호스트 재료와 도편트 재료는, 각각 1종류라도 되고, 복수의 조합이라도, 어느 것이라도 된다. 도편트 재료는 호스트 재료의 전체에 포함되어 있어도, 부분적으로 포함되어 있어도, 어느 것이어도 된다. 도핑 방법으로서는, 호스트 재료와의 공중착법에 의해 형성할 수 있지만, 호스트 재료와 미리 혼합하고 나서 동시에 중착하거나, 유기용매와 함께 호스트 재료와 미리 혼합하고 나서 습식성막법에 의해 제막하거나 해도 된다.

[0905] 호스트 재료의 사용량은 호스트 재료의 종류에 따라 상이하고, 그 호스트 재료의 특성에 맞추어서 정하면 된다. 호스트 재료의 사용량의 기준은, 바람직하게는 발광층용 재료 전체의 50~99.999 중량%이며, 보다 바람직하게는 80~99.95 중량%이며, 더욱 바람직하게는 90~99.9 중량%이다.

[0906] 도편트 재료의 사용량은 도편트 재료의 종류에 따라 상이하고, 그 도편트 재료의 특성에 맞추어서 정하면 된다. 도편트 재료의 사용량의 기준은, 바람직하게는 발광층용 재료 전체의 0.001~50 중량%이며, 보다 바람직하게는 0.05~20 중량%이며, 더욱 바람직하게는 0.1~10 중량%이다. 상기한 범위이면, 예를 들면, 농도소광현상을 방지할 수 있는 점에서 바람직하다.

[0907] 한편, 열활성화 지연 형광 도편트 재료를 사용한 유기전계 발광소자에 있어서는, 도편트 재료의 사용량은 저농도인 것이 농도소광현상을 방지할 수 있는 점에서 바람직하지만, 도편트 재료의 사용량이 고농도인 것이 열활성화 지연 형광 기구의 효율의 점에서는 바람직하다. 또한, 열활성화 지연 형광 어시스트 도편트 재료를 사용한 유기전계 발광소자에 있어서는, 도편트 재료의 열활성화 지연 형광 기구의 효율의 점에서는, 어시스트 도편트 재료의 사용량에 비교하여 도편트 재료의 사용량이 저농도인 것이 바람직하다.

[0908] 어시스트 도편트 재료가 사용되는 경우에서의, 호스트 재료, 어시스트 도편트 재료 및 도편트 재료의 사용량의 기준은, 각각, 발광층용 재료 전체의 40~99.999 중량%, 59~1 중량% 및 20~0.001 중량%이며, 바람직하게는, 각각, 60~99.99 중량%, 39~5 중량% 및 10~0.01 중량%이며, 보다 바람직하게는, 70~99.95 중량%, 29~10 중량% 및 5~0.05중량%이다. 본 발명에 따른 화합물 및 그의 고분자화합물은 어시스트 도편트 재료로서 사용할 수도 있다.

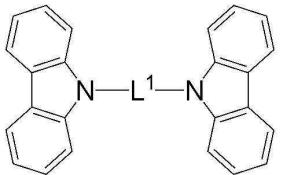
[0909] 호스트 재료로서는, 이전부터 발광체로서 알려진 안트라센이나 피렌 등의 축합환 유도체, 비스스티릴안트라센

유도체나 디스티릴벤젠 유도체 등의 비스스티릴 유도체, 테트라페닐부타디엔 유도체, 시클로펜타디엔 유도체, 플루오렌 유도체, 벤조플루오렌 유도체 등을 예로 들 수 있다.

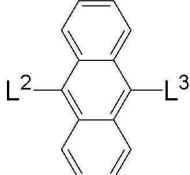
[0910] 호스트 재료의 T1 에너지는, 발광층 내에서의 TADF의 발생을 저해하지 않고 촉진시키는 관점에서, 발광층 내에 있어서 가장 높은 T1 에너지를 가지는 도편트 재료 또는 어시스트 도편트 재료의 T1 에너지에 비교하여 높은 것이 바람직하고, 구체적으로는, 호스트 재료의 T1 에너지는, 0.01eV 이상이 바람직하고, 0.03eV 이상이 보다 바람직하고, 0.1eV 이상이 더욱 바람직하다. 또한, 호스트 재료에 TADF 활성인 화합물을 사용해도 된다.

[0911] 호스트 재료로서는, 예를 들면, 하기 일반식(3)으로 표시되는 화합물 및하기 일반식(4)으로 표시되는 화합물이 있다. 바람직하게는 일반식(3)으로 표시되는 화합물이다.

[0912] [화학식 290]



(3)



(4)

[0913] [0914] 상기 식(3) 중, L¹은 탄소수 6~30의 아릴렌 또는 탄소수 2~30의 헤테로아릴렌이며, 탄소수 6~24의 아릴렌이 바람직하고, 탄소수 6~16의 아릴렌이 보다 바람직하고, 탄소수 6~12의 아릴렌이 더욱 바람직하고, 탄소수 6~10의 아릴렌이 특히 바람직하고, 또한, 탄소수 2~25의 헤테로아릴렌이 바람직하고, 탄소수 2~20의 헤테로아릴렌이 보다 바람직하고, 탄소수 2~15의 헤�테로아릴렌이 더욱 바람직하고, 탄소수 2~10의 헤테로아릴렌이 특히 바람직하다. 아릴렌으로서 구체적으로는, 벤젠환, 비페닐환, 나프탈렌환, 터페닐환, 아세나프틸렌환, 플루오렌환, 페닐렌환, 페난트렌환, 트리페닐렌환, 피렌환, 나프타센환, 페릴렌환 및 펜타센환 등의 2가의 기를 예로 들 수 있다. 또한, 헤테로아릴렌으로서 구체적으로는, 피롤환, 옥사졸환, 이소옥사졸환, 티아졸환, 이소티아졸환, 이미다졸환, 옥사디아졸환, 티아디아졸환, 트리아졸환, 테트라졸환, 피라졸환, 피리딘환, 피리미딘환, 피리다진환, 피라진환, 트리아진환, 인돌환, 이소인돌환, 1H-인다졸환, 벤즈이미다졸환, 벤즈옥사졸환, 벤조티아졸환, 1H-벤조트리아졸환, 퀴놀린환, 이소퀴놀린환, 신놀린환, 퀴나졸린환, 퀴녹살린환, 프탈라진환, 나프티리딘환, 퓨린환, 프테리딘환, 카르바졸환, 아크리딘환, 페녹사티인환, 페녹사진환, 페노티아진환, 페나진환, 페나자실린환, 인돌리진환, 퓨란환, 벤조퓨란환, 이소벤조퓨란환, 디벤조퓨란환, 티오웬환, 벤조티오웬환, 디벤조티오웬환, 퓨라잔환, 옥사디아졸환, 티안트렌환, 인돌로카르바졸환, 벤즈인돌로카르바졸환, 벤조벤즈인돌로카르바졸환 및 나프토벤조퓨란환 등의 2가의 기를 예로 들 수 있다.

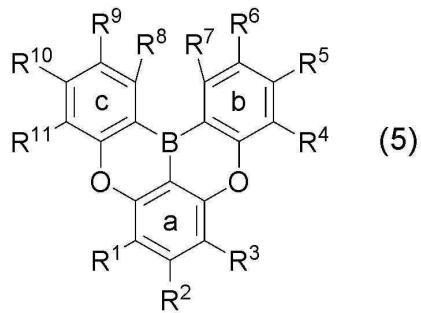
[0915] 상기 식(4) 중, L² 및 L³는, 각각 독립적으로, 탄소수 6~30의 아릴 또는 탄소수 2~30의 헤테로아릴이다. 아릴로서는, 탄소수 6~24의 아릴이 바람직하고, 탄소수 6~16의 아릴이 보다 바람직하고, 탄소수 6~12의 아릴이 더욱 바람직하고, 탄소수 6~10의 아릴이 특히 바람직하며, 구체적으로는, 벤젠환, 비페닐환, 나프탈렌환, 터페닐환, 아세나프틸렌환, 플루오렌환, 페닐렌환, 페난트렌환, 트리페닐렌환, 피렌환, 나프타센환, 페릴렌환 및 펜타센환 등의 1가의 기를 예로 들 수 있다. 헤테로아릴로서는, 탄소수 2~25의 헤테로아릴이 바람직하고, 탄소수 2~20의 헤테로아릴이 보다 바람직하고, 탄소수 2~15의 헤테로아릴이 더욱 바람직하고, 탄소수 2~10의 헤테로아릴이 특히 바람직하며, 구체적으로는, 피롤환, 옥사졸환, 이소옥사졸환, 티아졸환, 이소티아졸환, 이미다졸환, 옥사디아졸환, 티아디아졸환, 트리아졸환, 테트라졸환, 피라졸환, 피리딘환, 피리미딘환, 피리다진환, 피라진환, 트리아진환, 인돌환, 이소인돌환, 1H-인다졸환, 벤즈이미다졸환, 벤즈옥사졸환, 벤조티아졸환, 1H-벤조트리아졸환, 퀴놀린환, 이소퀴놀린환, 신놀린환, 퀴나졸린환, 퀴녹살린환, 프탈라진환, 나프티리딘환, 퓨린환, 프테리딘환, 카르바졸환, 아크리딘환, 페녹사티인환, 페녹사진환, 페노티아진환, 페나진환, 페나자실린환, 인돌리진환, 퓨란환, 벤조퓨란환, 이소벤조퓨란환, 디벤조퓨란환, 티오웬환, 벤조티오웬환, 디벤조티오웬환, 퓨라잔환, 옥사디아졸환, 티안트렌환, 인돌로카르바졸환, 벤즈인돌로카르바졸환, 벤조벤즈인돌로카르바졸환 및 나프토벤조퓨란환 등의 1가의 기를 예로 들 수 있다.

[0916] 식(3) 또는 식(4)으로 표시되는 화합물에서의 적어도 1개의 수소는, 탄소수 1~6의 알킬, 탄소수 3~14의 시클로알킬, 시아노, 할로겐 또는 중수소로 치환되어 있어도 된다.

[0917] 또한, 호스트 재료로서는, 예를 들면, 하기 일반식(5)으로 표시되는 화합물이 있다.

[0918]

[화학식 291]



[0919]

[0920]

(상기 식(5)에 있어서,

[0921]

$R^1 \sim R^{11}$ 은, 각각 독립적으로, 수소, 아릴, 헤테로아릴, 디아릴아미노, 디헤테로아릴아미노, 아릴헤테로아릴아미노, 디아릴보릴(2개의 아릴은 단결합 또는 연결기를 통하여 결합하고 있어도 됨), 알킬 또는 시클로알킬(이상, 제1 치환기)이며, 이들에서의 적어도 1개의 수소는 또한 아릴, 헤테로아릴, 디아릴아미노, 디아릴보릴(2개의 아릴은 단결합 또는 연결기를 통하여 결합하고 있어도 됨), 알킬 또는 시클로알킬(이상, 제2 치환기)로 치환되어 있어도 되고,

[0922]

$R^1 \sim R^{11}$ 중 인접하는 기끼리 결합하여 a환, b환 또는 c환과 함께 아릴환 또는 헤테로아릴환을 형성하고 있어도 되고, 형성된 환에서의 적어도 1개의 수소는, 아릴, 헤테로아릴, 디아릴아미노, 디헤테로아릴아미노, 아릴헤테로아릴아미노, 디아릴보릴(2개의 아릴은 단결합 또는 연결기를 통하여 결합하고 있어도 됨), 알킬 또는 시클로알킬(이상, 제1 치환기)로 치환되어 있어도 되고, 이들에서의 적어도 1개의 수소는 또한 아릴, 헤테로아릴, 디아릴아미노, 디아릴보릴(2개의 아릴은 단결합 또는 연결기를 통하여 결합하고 있어도 됨), 알킬 또는 시클로알킬(이상, 제2 치환기)로 치환되어 있어도 되고,

[0923]

식(5)으로 표시되는 화합물에서의 적어도 1개의 수소는, 각각 독립적으로, 할로겐 또는 중수소로 치환되어도 된다.

[0924]

바람직하게는, 상기 식(5)에 있어서,

[0925]

$R^1 \sim R^{11}$ 은, 각각 독립적으로, 수소, 탄소수 6~30의 아릴, 탄소수 2~30의 헤테로아릴, 디아릴아미노(단 아릴은 탄소수 6~12의 아릴), 디아릴보릴(다만 각각의 아릴은 탄소수 6~12의 아릴이며, 2개의 아릴은 단결합 또는 연결기를 통하여 결합하고 있어도 됨), 탄소수 1~12의 알킬 또는 탄소수 3~16의 시클로알킬이며, 이들에서의 적어도 1개의 수소는 또한 탄소수 6~30의 아릴, 탄소수 2~30의 헤테로아릴, 디아릴아미노(단 아릴은 탄소수 6~12의 아릴), 디아릴보릴(다만 각각의 아릴은 탄소수 6~12의 아릴이며, 2개의 아릴은 단결합 또는 연결기를 통하여 결합하고 있어도 됨), 탄소수 1~12의 알킬 또는 탄소수 3~16의 시클로알킬로 치환되어 있어도 되고,

[0926]

$R^1 \sim R^{11}$ 중 인접하는 기끼리 결합하여 a환, b환 또는 c환과 함께 탄소수 9~16의 아릴환 또는 탄소수 6~15의 헤테로아릴환을 형성하고 있어도 되고, 형성된 환에서의 적어도 1개의 수소는, 탄소수 6~30의 아릴, 탄소수 2~30의 헤테로아릴, 디아릴아미노(단 아릴은 탄소수 6~12의 아릴), 디아릴보릴(다만 각각의 아릴은 탄소수 6~12의 아릴이며, 2개의 아릴은 단결합 또는 연결기를 통하여 결합하고 있어도 됨), 탄소수 1~12의 알킬 또는 탄소수 3~16의 시클로알킬로 치환되어 있어도 되고, 이들에서의 적어도 1개의 수소는 또한 탄소수 6~30의 아릴, 탄소수 2~30의 헤테로아릴, 디아릴아미노(단 아릴은 탄소수 6~12의 아릴), 디아릴보릴(다만 각각의 아릴은 탄소수 6~12의 아릴이며, 2개의 아릴은 단결합 또는 연결기를 통하여 결합하고 있어도 됨), 탄소수 1~12의 알킬 또는 탄소수 3~16의 시클로알킬로 치환되어 있어도 된다.

[0927]

더욱 바람직하게는, 상기 식(5)에 있어서,

[0928]

$R^1 \sim R^{11}$ 은, 각각 독립적으로, 수소, 탄소수 6~16의 아릴, 탄소수 2~15의 헤테로아릴, 디아릴아미노(단 아릴은 탄소수 6~10의 아릴), 디아릴보릴(다만 각각의 아릴은 탄소수 6~10의 아릴이며, 2개의 아릴은 단결합 또는 연결기를 통하여 결합하고 있어도 됨), 탄소수 1~6의 알킬 또는 탄소수 3~14의 시클로알킬이며, 이들에서의 적어도 1개의 수소는 또한 탄소수 6~16의 아릴, 탄소수 2~15의 헤테로아릴, 디아릴아미노(단 아릴은 탄소수 6~10의 아릴), 디아릴보릴(다만 각각의 아릴은 탄소수 6~10의 아릴이며, 2개의 아릴은 단결합 또는 연결기를

통하여 결합하고 있어도 됨), 탄소수 1~6의 알킬 또는 탄소수 3~14의 시클로알킬로 치환되어 있어도 되고,

[0929] $R^1 \sim R^{11}$ 중 인접하는 기끼리 결합하여 a환, b환 또는 c환과 함께 탄소수 9~12의 아릴환 또는 탄소수 6~12의 헤테로아릴환을 형성하고 있어도 되고, 형성된 환에서의 적어도 1개의 수소는, 탄소수 6~16의 아릴, 탄소수 2~15의 헤테로아릴, 디아릴아미노(다만 아릴은 탄소수 6~10의 아릴), 디아릴보릴(다만 각각의 아릴은 탄소수 6~10의 아릴이며, 2개의 아릴은 단결합 또는 연결기를 통하여 결합하고 있어도 됨), 탄소수 1~6의 알킬 또는 탄소수 3~14의 시클로알킬로 치환되어 있어도 되고, 이들에서의 적어도 1개의 수소는 또한 탄소수 6~16의 아릴, 탄소수 2~15의 헤테로아릴, 디아릴아미노(다만 아릴은 탄소수 6~10의 아릴), 디아릴보릴(다만 각각의 아릴은 탄소수 6~10의 아릴이며, 2개의 아릴은 단결합 또는 연결기를 통하여 결합하고 있어도 됨), 탄소수 1~6의 알킬 또는 탄소수 3~14의 시클로알킬로 치환되어 있어도 된다.

[0930] 상기 제1 치환기 및 제2 치환기에 있어서, 아릴, 헤테로아릴, 디아릴아미노, 디헤테로아릴아미노 및 아릴헤테로아릴아미노에서의 「아릴」이나 「헤테로아릴」로서는, 이하의 예를 들 수 있다.

[0931] 구체적인 「아릴」로서는, 예를 들면, 탄소수 6~30의 아릴이 있고, 탄소수 6~24의 아릴이 바람직하고, 탄소수 6~20의 아릴이 보다 바람직하고, 탄소수 6~16의 아릴이 더욱 바람직하고, 탄소수 6~12의 아릴이 특히 바람직하고, 탄소수 6~10의 아릴이 가장 바람직하다. 예를 들면, 단환계 아릴인 폐닐, 2환계 아릴인 (2-, 3-, 4-)비페닐릴, 축합 2환계 아릴인 (1-, 2-)나프틸, 3환계 아릴인 터페닐릴(m -터페닐-2'-일, m -터페닐-4'-일, m -터페닐-5'-일, o-터페닐-3'-일, o-터페닐-4'-일, p-터페닐-2'-일, m -터페닐-2-일, m -터페닐-3-일, m -터페닐-4-일, o-터페닐-2-일, o-터페닐-3-일, o-터페닐-4-일, p-터페닐-2-일, p-터페닐-3-일, p-터페닐-4-일), 축합 3환계 아릴인, 아세나프틸렌-(1-, 3-, 4-, 5-)일, 플루오렌-(1-, 2-, 3-, 4-, 9-)일, 폐날렌-(1-, 2-)일, (1-, 2-, 3-, 4-, 9-)폐난트릴, 4환계 아릴인 쿼터페닐릴($5'$ -페닐- m -터페닐-2-일, $5'$ -페닐- m -터페닐-3-일, $5'$ -페닐- m -터페닐-4-일, m -쿼터페닐릴), 축합 4환계 아릴인 트리페닐렌-(1-, 2-)일, 폐렌-(1-, 2-, 4-)일, 나프타센-(1-, 2-, 5-)일, 축합 5환계 아릴인 폐릴렌-(1-, 2-, 3-)일, 웬타센-(1-, 2-, 5-, 6-)일 등이 있다.

[0932] 구체적인 「헤테로아릴」로서는, 예를 들면, 탄소수 2~30의 헤테로아릴이 있고, 탄소수 2~25의 헤테로아릴이 바람직하고, 탄소수 2~20의 헤테로아릴이 보다 바람직하고, 탄소수 2~15의 헤테로아릴이 더욱 바람직하고, 탄소수 2~10의 헤테로아릴이 특히 바람직하다. 예를 들면, 퓨릴, 티에닐, 피롤릴, 옥사졸릴, 이소옥사졸릴, 티아졸릴, 이소티아졸릴, 이미다졸릴, 피라졸릴, 옥사디아졸릴, 퓨라자닐, 티아디아졸릴, 트리아졸릴, 테트라졸릴, 피리딜, 피리미디닐, 피리다지닐, 피라지닐, 트리아지닐, 벤조퓨라닐, 이소벤조퓨라닐, 벤조 [b]티에닐, 인돌릴, 이소인돌릴, 1H-인다졸릴, 벤즈이미다졸릴, 벤즈옥사졸릴, 벤조티아졸릴, 1H-벤조트리아졸릴, 쿠놀릴, 이소쿠놀릴, 신놀릴, 퀴나졸릴, 쿠녹살리닐, 프탈라지닐, 나프티리디닐, 퓨리닐, 프테리디닐, 카르바졸릴, 아크리디닐, 폐녹사지닐, 폐노티아지닐, 폐나지닐, 폐녹사티이닐, 티안트레닐, 인돌리지닐 등이 있다.

[0933] 상기 제1 치환기 및 제2 치환기에 있어서, 「알킬」로서는, 직쇄 및 분지쇄 중 어느 것이어도 되고, 예를 들면, 탄소수 1~24의 직쇄 알킬 또는 탄소수 3~24의 분지쇄 알킬이 있고, 탄소수 1~18의 알킬(탄소수 3~18의 분지쇄 알킬)이 바람직하고, 탄소수 1~12의 알킬(탄소수 3~12의 분지쇄 알킬)이 보다 바람직하고, 탄소수 1~6의 알킬(탄소수 3~6의 분지쇄 알킬)이 더욱 바람직하고, 탄소수 1~4의 알킬(탄소수 3~4의 분지쇄 알킬)이 특히 바람직하고, 메틸이 가장 바람직하다. 예를 들면, 메틸, 에틸, n-프로필, 이소프로필, n-부틸, 이소부틸, sec-부틸, tert-부틸, n-펜틸, 이소펜틸, 네오펜틸, tert-펜틸, n-헥실, 1-메틸펜틸, 4-메틸-2-펜틸, 3,3-디메틸부틸, 2-에틸부틸, n-헵틸, 1-메틸헥실, n-옥틸, tert-옥틸, 1-메틸헵틸, 2-에틸헥실, 2-프로필펜틸, n-노닐, 2,2-디메틸헵틸, 2,6-디메틸-4-헵틸, 3,5,5-트리메틸헥실, n-데실, n-운데실, 1-메틸데실, n-도데실, n-트리데실, 1-헥실헵틸, n-테트라데실, n-펜타데실, n-헵타데실, n-옥타데실, n-에이코실 등이 있다.

[0934] 상기 제1 치환기 및 제2 치환기에 있어서, 「시클로알킬」로서는, 탄소수 3~24의 시클로알킬, 탄소수 3~20의 시클로알킬, 탄소수 3~16의 시클로알킬, 탄소수 3~14의 시클로알킬, 탄소수 5~10의 시클로알킬, 탄소수 5~8의 시클로알킬, 탄소수 5~6의 시클로알킬, 탄소수 5의 시클로알킬 등을 예로 들 수 있다.

[0935] 구체적인 시클로알킬로서는, 시클로프로필, 시클로부틸, 시클로펜틸, 시클로헥실, 시클로헵틸, 시클로옥틸, 시클로노닐, 시클로데실, 및 이들의 탄소수 1~4의 알킬(특히 메틸) 치환체나, 노르보르네닐, 비시클로[1.0.1]부틸, 비시클로[1.1.1]펜틸, 비시클로[2.0.1]펜틸, 비시클로[1.2.1]헥실, 비시클로[3.0.1]헥실, 비시클로[2.1.2]헵틸, 비시클로[2.2.2]옥틸, 아다만틸, 디아만틸, 데카하이드로나프탈레닐, 데카하이드로아줄레닐 등을 예로 들 수 있다.

[0936] 상기 제1 치환기 및 제2 치환기에 있어서, 「디아릴보릴」중의 「아릴」로서는, 전술한 아릴의 설명을 인용할

수 있다. 또한, 이 2개의 아릴은 단결합 또는 연결기(예를 들면 $>C(-R)_2$, $>O$, $>S$ 또는 $>N-R$)를 통하여 결합하고 있어도 된다. 여기서, $>C(-R)_2$ 및 $>N-R$ 의 R은, 아릴, 헤테로아릴, 디아릴아미노, 알킬 또는 시클로알킬(이상, 제1 치환기)이며, 상기 제1 치환기에서의 적어도 1개의 수소에는 또한 아릴, 헤테로아릴, 알킬 또는 시클로알킬(이상, 제2 치환기)이 치환하고 있어도 되고, 이들 기의 구체예로서는, 전술한 제1 치환기 및 제2 치환기로서의 아릴, 헤테로아릴, 디아릴아미노, 알킬 또는 시클로알킬의 설명을 인용할 수 있다.

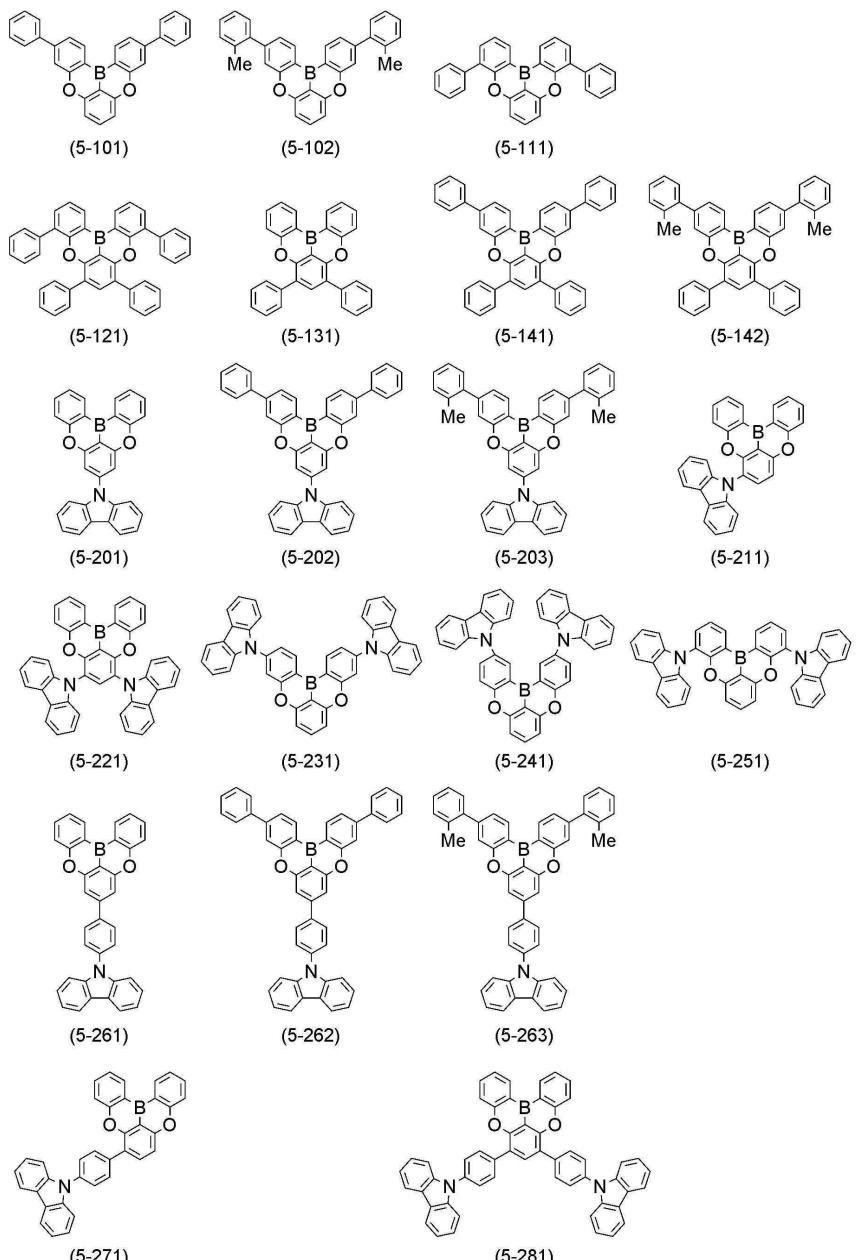
[0937] 제1 치환기가 아릴인 경우의 치환 위치는, R^1 , R^3 , R^4 , R^5 , R^{10} 및 R^{11} 이 바람직하고, 예를 들면, R^1 및 R^3 로의 치환, R^5 및 R^{10} 로의 치환, R^4 및 R^{11} 로의 치환이 보다 바람직하고, 아릴은 페닐기가 바람직하다.

[0938] 제1 치환기가 헤테로아릴인 경우의 치환 위치는, R^1 , R^2 , R^3 , R^4 , R^5 , R^6 , R^9 , R^{10} 및 R^{11} 이 바람직하고, 예를 들면, R^1 로의 치환, R^2 로의 치환, R^3 로의 치환, R^1 및 R^3 로의 치환, R^4 및 R^{11} 로의 치환, R^5 및 R^{10} 로의 치환, R^6 및 R^9 으로의 치환이 보다 바람직하고, 헤테로아릴은 카르바졸릴기가 바람직하다. 이 헤테로아릴(예를 들면, 카르바졸릴)은 페닐렌기를 통하여 상기 위치에 치환하고 있어도 된다.

[0939] 식(5)으로 표시되는 화합물이 구체적인 예로서는, 예를 들면, 하기 구조식으로 표시되는 화합물이 있다. 그리고, 식 중의 「Me」는 메틸기이다.

[0940]

[화학식 292]



[0941]

[0942]

식(5)으로 표시되는 화합물은, 먼저 a~c 환을 결합기(-O-)로 결합시킴으로써 중간체를 제조하고(제1 반응), 그 후에, a~c 환을 B(붕소)로 결합시킴으로써 최종 생성물을 제조할 수 있다(제2 반응). 제1 반응에서는, 예를 들면, 친핵치환 반응이나 울만 반응과 같은 일반적 에테르화 반응을 이용할 수 있다. 또한, 제2 반응에서는, 텐덤 헤테로 폴리엘 크라프트 반응(연속적인 방향족 친전자치환반응)을 이용할 수 있다. 제1 및 제2 반응의 상세한 것은, 국제공개 제2015/102118호 공보에 기재된 설명을 참고할 수 있다.

[0943]

또한, 호스트 재료에 대하여, 다른 예로서는, 예를 들면, Advanced Materials, 2017, 29, 1605444, Journal of Material Chemistry C, 2016, 4, 11355-11381, Chemical Science, 2016, 7, 3355-3363, Thin Solid Films, 2016, 619, 120-124 등에 기재된 호스트 재료를 사용할 수 있다. 또한, TADF 유기 EL 소자는 발광층의 호스트 재료에 높은 T1 에너지를 필요로 하기 때문에, Chemistry Society Reviews, 2011, 40, 2943-2970에 기재된 인광 유기 EL 소자에 적합한 호스트 재료도 TADF 유기 EL 소자용의 호스트 재료로서 사용할 수 있다.

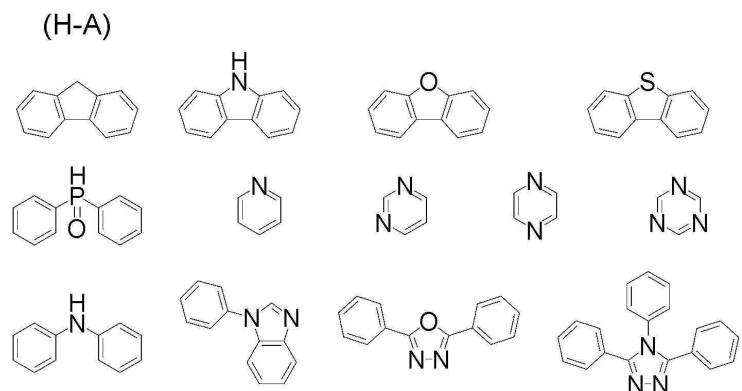
[0944]

보다 구체적으로는, 호스트 화합물은, 하기 식으로 표시되는 부분 구조(H-A)군으로부터 선택되는 적어도 1개의 구조를 가지는 화합물이며, 부분 구조(H-A)군 중의 각 구조에서의 적어도 1개의 수소 원자는, 부분 구조(H-A)군 또는 부분 구조(H-B)군 중의 어느 하나의 구조로 치환되어 있어도 되고, 이를 구조에서의 적어도 1개의 수소는, 중수소, 할로겐, 시아노, 탄소수 1~4의 알킬(예를 들면, 메틸이나 tert-부틸), 탄소수 5~10의 시클로알킬(예

를 들면, 시클로헥실이나 아다만틸), 트리메틸실릴 또는 폐닐로 치환되어 있어도 된다.

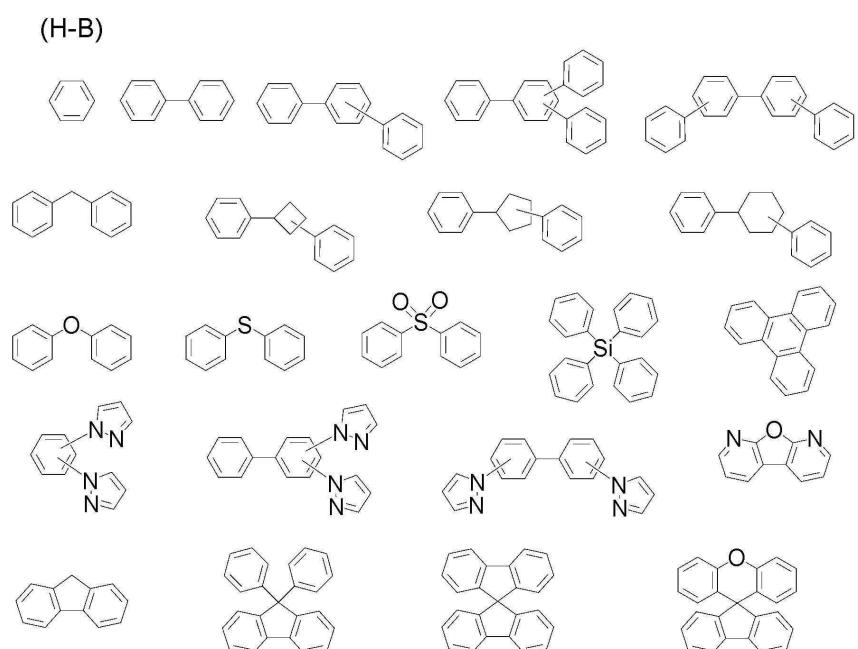
[0945]

[화학식 293]



[0946]

[화학식 294]



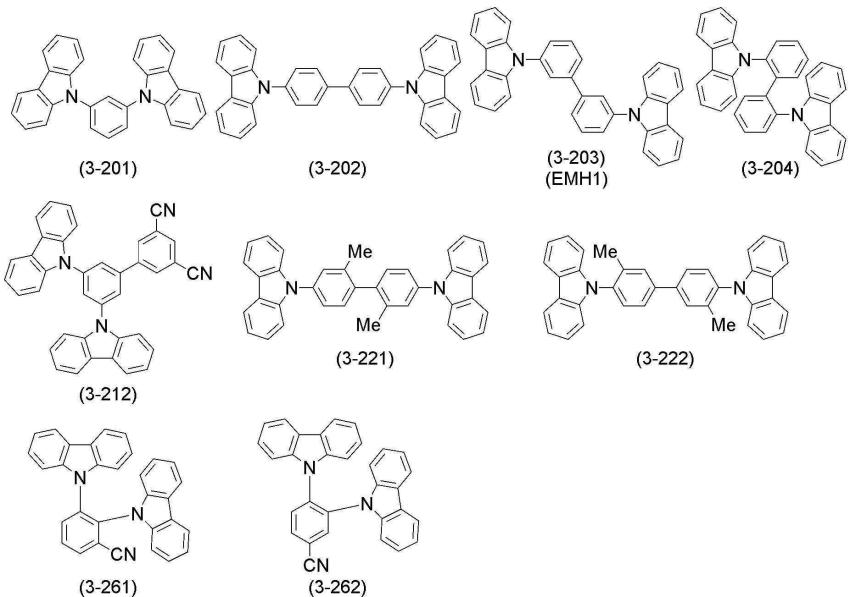
[0948]

[0949]

호스트 화합물로서는, 바람직하게는 이하에 열거한 어느 하나의 구조식으로 표시되는 화합물이며, 이들 중에서도, 보다 바람직하게는 상기 부분 구조(H-A)군으로부터 선택되는 구조를 1~3 개, 및 상기 부분 구조(H-B)군으로부터 선택되는 구조를 1개 가지는 화합물이며, 더욱 바람직하게는 상기 부분 구조(H-A)군으로서 카르바졸기를 가지는 화합물이며, 특히 바람직하게는 하기 식(3-201), 식(3-202), 식(3-203), 식(3-204), 식(3-212), 식(3-221), 식(3-222), 식(3-261) 또는 식(3-262)으로 표시되는 화합물이다. 그리고, 이하에 열거한 구조식에 있어서는, 적어도 1개의 수소는, 할로겐, 시아노, 탄소수 1~4의 알킬(예를 들면, 메틸이나 tert-부틸), 탄소수 5~10의 시클로알킬(예를 들면, 시클로헥실이나 아다만틸), 폐닐 또는 나프틸 등으로 치환되어 있어도 된다.

[0950]

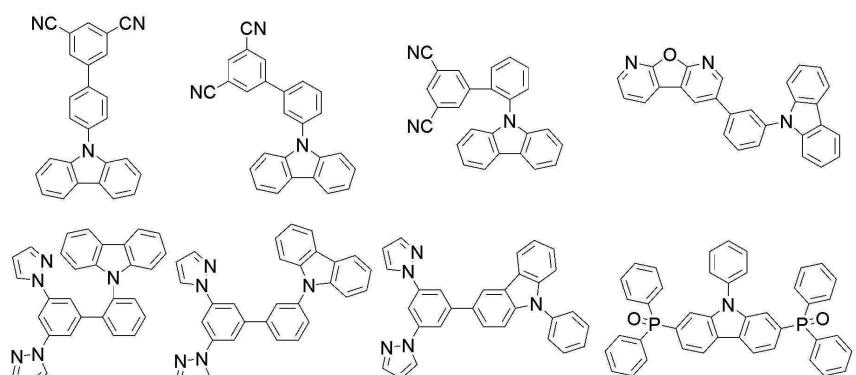
[화학식 295]



[0951]

[0952]

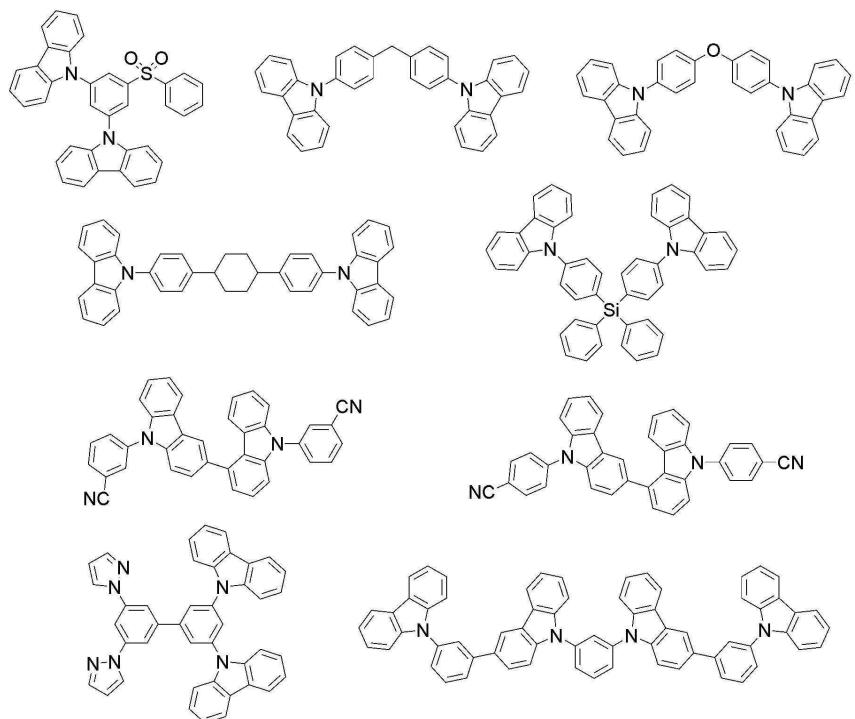
[화학식 296]



[0953]

[0954]

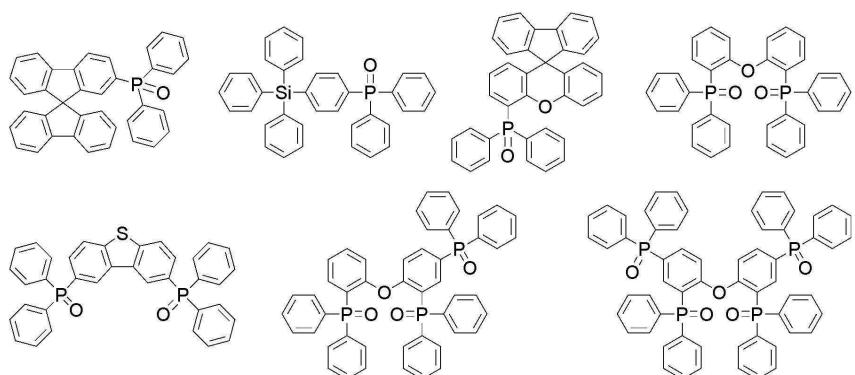
[화학식 297]



[0955]

[0956]

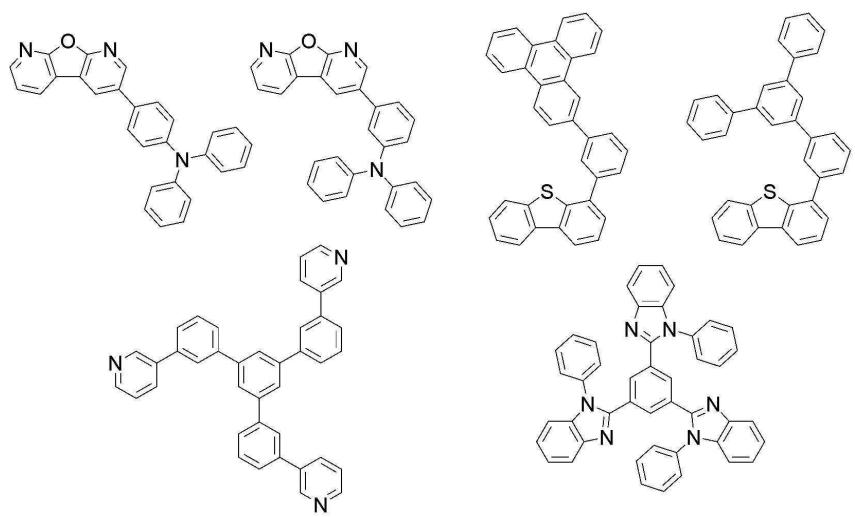
[화학식 298]



[0957]

[0958]

[화학식 299]

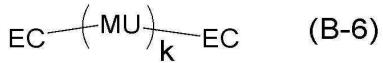


[0959]

[0960]

또한, 이하의 고분자 호스트 재료를 사용할 수도 있다.

[0961] [화학식 300]



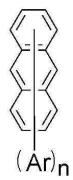
[0962]

식(B-6)에 있어서, MU는, 각각 독립적으로, 일반식(B-1)~식(B-5)으로 표시되는 화합물의 2가의 기로 이루어지는 군으로부터 선택되는 적어도 1개이며, MU 중의 2개의 수소가 EC 또는 MU와 치환되고, EC는, 각각 독립적으로, 수소, 아릴, 헤테로아릴, 디아릴아미노, 디헤테로아릴아미노, 아릴헤테로아릴아미노 또는 아릴옥시이며, 이들에서의 적어도 1개의 수소는 또한 아릴, 헤테로아릴 또는 디아릴아미노로 치환되어 있어도 되고, k는 2~50000의 정수이다. k는 100~40000의 정수인 것이 바람직하고, 500~25000의 정수인 것이 보다 바람직하다.

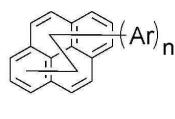
[0964]

여기서, 일반식(B-1)~식(B-5)으로 표시되는 화합물은 이하의 화합물이다. 바람직하게는, 일반식(B-3)~식(B-5)으로 표시되는 화합물이다.

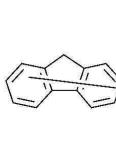
[0965] [화학식 301]



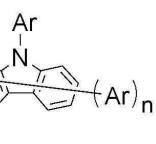
(B-1)



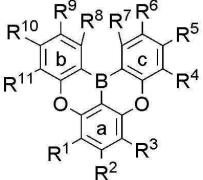
(B-2)



(B-3)



(B-4)



(B-5)

[0966]

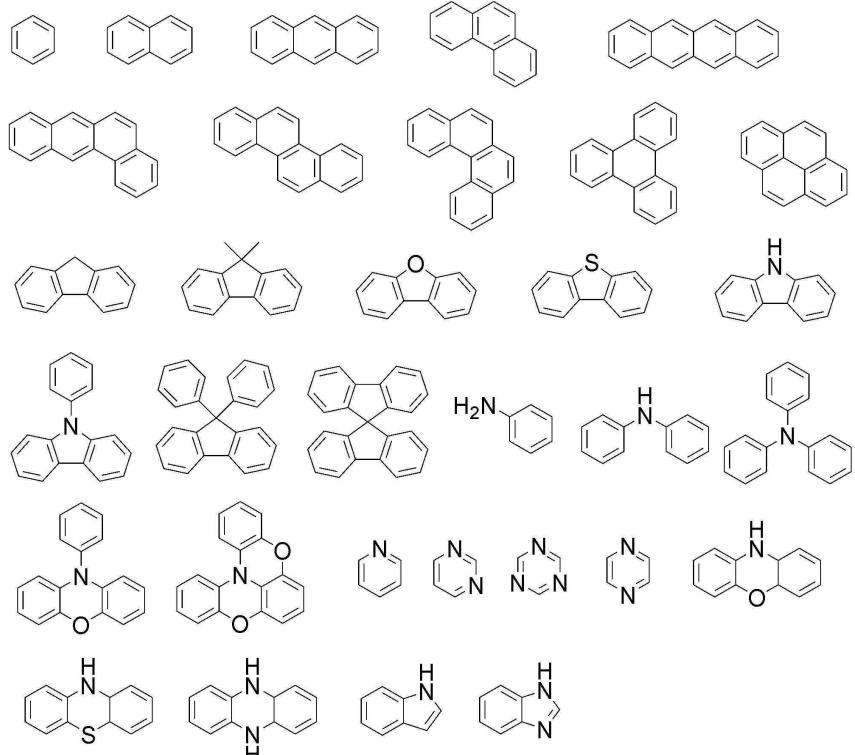
식(B-1)~식(B-4)에 있어서, Ar은, 각각 독립적으로, 수소, 아릴, 헤테로아릴, 디아릴아미노, 디헤테로아릴아미노, 아릴헤테로아릴아미노 또는 아릴옥시이며, 이들에서의 적어도 1개의 수소는 또한 아릴, 헤테로아릴 또는 디아릴아미노로 치환되어 있어도 되고, Ar 중 인접하는 기끼리 결합하여, 각각 안트라센환, 피렌환, 플루오렌환 또는 카르바졸환의 모 골격과 함께, 아릴환 또는 헤테로아릴환을 형성하고 있어도 되고, 형성된 환에서의 적어도 1개의 수소는, 아릴, 헤테로아릴, 디아릴아미노, 디헤테로아릴아미노, 아릴헤테로아릴아미노 또는 아릴옥시로 치환되어 있어도 된다. 각각의 기의 구체적인 설명은, 전술한 일반식(1)이나 일반식(2)의 다환 방향족 화합물에서의 설명을 인용할 수 있다. 각 식 중의 n은 1~6의 정수, 바람직하게는 1~4의 정수, 보다 바람직하게는 1~2의 정수, 특히 바람직하게는 1이다.

[0968]

식(B-1)~식(B-4)에 있어서, 「Ar」의 구체예로서는, 예를 들면, 이하에 예로 드는 구조로부터 유도되는 1가의 기, 또는, 하기 구조의 조합으로부터 유도되는 1가의 기를 예시할 수 있다.

[0969]

[화학식 302]



[0970]

[0971]

식(B-5)에 있어서, $R^1 \sim R^{11}$ 은, 각각 독립적으로, 수소, 아릴, 헤테로아릴, 디아릴아미노, 디헤테로아릴아미노, 아릴헤테로아릴아미노 또는 아릴옥시이며, 이들에서의 적어도 1개의 수소는 또한 아릴, 헤테로아릴 또는 디아릴 아미노에서 치환되어 있어도 되고,

[0972]

$R^1 \sim R^{11}$ 중 인접하는 기끼리 결합하여 a환, b환 또는 c환과 함께 아릴환 또는 헤테로아릴환을 형성하고 있어도 되고, 형성된 환에서의 적어도 1개의 수소는, 아릴, 헤테로아릴, 디아릴아미노, 디헤테로아릴아미노, 아릴헤테로아릴아미노 또는 아릴옥시로 치환되어 있어도 되고, 이들에서의 적어도 1개의 수소는 또한 아릴, 헤테로아릴 또는 디아릴아미노에서 치환되어 있어도 된다.

[0973]

각 기의 구체적인 설명은, 전술한 일반식(1)의 다환 방향족 화합물에서의 설명을 인용할 수 있다.

[0974]

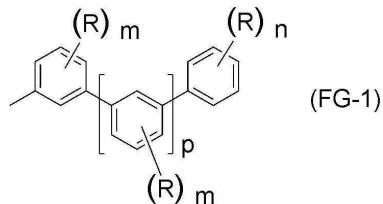
식(B-1)~식(B-5)으로 표시되는 화합물에서의 적어도 1개의 수소는, 후술하는 식(FG-1)으로 표시되는 기, 후술하는 식(FG-2)으로 표시되는 기, 또는 탄소수 1~24의 알킬, 탄소수 3~24의 시클로알킬, 할로겐 또는 중수소로 치환되어 있어도 되고, 또한 상기 알킬에서의 임의의 $-CH_2-$ 는 $-O-$ 또는 $-Si(CH_3)_2-$ 로 치환되어 있어도 되고, 상기 알킬에서의 상기 식(B-1)~식(B-5)으로 표시되는 화합물에 직결하고 있는 $-CH_2-$ 를 제외한 임의의 $-CH_2-$ 는 탄소수 6~24의 아릴렌으로 치환되어 있어도 되고, 상기 알킬 또는 시클로알킬에서의 임의의 수소는 불소로 치환되어 있어도 된다.

[0975]

식(B-6) 중의 EC에서의 적어도 1개의 수소는, 하기 일반식(FG-1)으로 표시되는 기, 하기 일반식(FG-2)으로 표시되는 기, 탄소수 1~24의 알킬, 탄소수 3~24의 시클로알킬, 할로겐 또는 중수소로 치환되어 있어도 되고, 또한 상기 알킬에서의 임의의 $-CH_2-$ 는 $-O-$ 또는 $-Si(CH_3)_2-$ 로 치환되어 있어도 되고, 상기 알킬 또는 시클로알킬에서의 임의의 수소는 불소로 치환되어 있어도 된다.

[0976]

[화학식 303]



[0977]

[0978]

(상기 식(FG-1)에 있어서,

[0979]

R은, 각각 독립적으로, 불소, 트리메틸실릴, 트리플루오로메틸, 탄소수 1~24의 알킬 또는 탄소수 3~24의 시클로알킬이며, 상기 알킬에서의 임의의 $-CH_2-$ 는 $-O-$ 로 치환되어 있어도 되고, 상기 알킬에서의 페닐 또는 페닐렌에 직결하고 있는 $-CH_2-$ 를 제외한 임의의 $-CH_2-$ 는 탄소수 6~24의 아릴렌으로 치환되어 있어도 되고, 상기 시클로알킬에서의 적어도 1개의 수소는 탄소수 1~24의 알킬 또는 탄소수 6~12의 아릴로 치환되어 있어도 되고,

[0980]

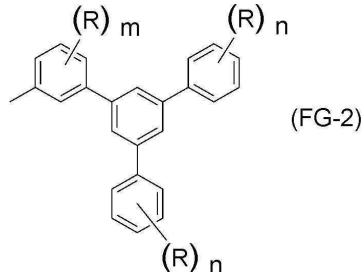
인접하는 2개의 R이 알킬 또는 시클로알킬일 때, 이들은 결합하여 환을 형성하고 있어도 되고,

[0981]

m은 각각 독립적으로 0~4의 정수이며, n은 0~5의 정수이며, p는 1~5의 정수임).

[0982]

[화학식 304]



[0983]

(상기 식(FG-2)에 있어서,

[0984]

R은, 각각 독립적으로, 불소, 트리메틸실릴, 트리플루오로메틸, 탄소수 1~24의 알킬, 탄소수 3~24의 시클로알킬 또는 탄소수 6~12의 아릴이며, 상기 알킬에서의 임의의 $-CH_2-$ 는 $-O-$ 로 치환되어 있어도 되고, 상기 알킬에서의 페닐 또는 페닐렌에 직결하고 있는 $-CH_2-$ 를 제외한 임의의 $-CH_2-$ 는 탄소수 6~24의 아릴렌으로 치환되어 있어도 되고, 상기 시클로알킬에서의 적어도 1개의 수소는 탄소수 1~24의 알킬 또는 탄소수 6~12의 아릴에서 치환되어 있어도 되고, 상기 아릴에서의 적어도 1개의 수소는 탄소수 1~24의 알킬로 치환되어 있어도 되고,

[0985]

인접하는 2개의 R이 알킬 또는 시클로알킬일 때, 이들은 결합하여 환을 형성하고 있어도 되고,

[0986]

m은 0~4의 정수이며, n은 각각 독립적으로 0~5의 정수임).

[0987]

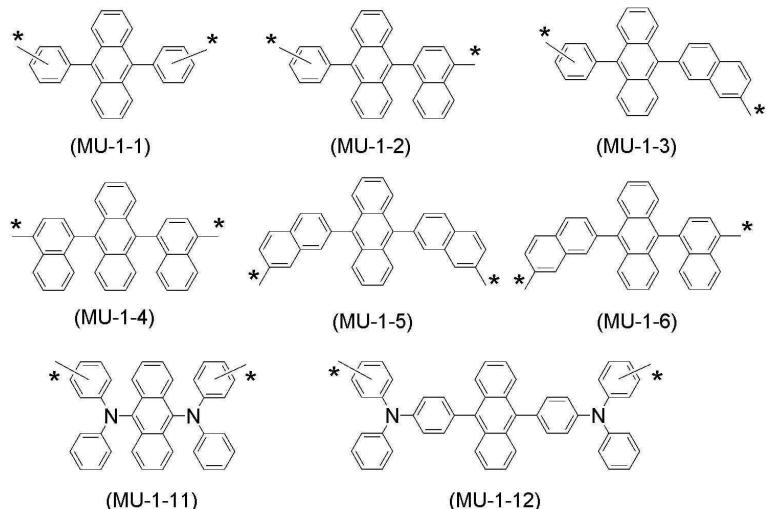
MU로서는, 예를 들면, 하기 일반식(MU-1-1)~식(MU-1-12), 하기 일반식(MU-2-1)~식(MU-2-202), 하기 일반식(MU-3-1)~식(MU-3-201), 하기 일반식(MU-4-1)~식(MU-4-122) 및 하기 일반식(MU-5-1)~일반식(MU-5-12)으로 표시되는 2가의 기가 있다. 또한, EC로서는, 예를 들면, 하기 일반식(EC-1)~식(EC-29)으로 표시되는 기가 있다. 이들에 있어서, MU는 *에 있어서 MU 또는 EC와 결합하고, EC는 *에 있어서 MU와 결합한다.

[0988]

또한, 식(B-6)으로 표시되는 화합물은, 전하수송의 관점에서, 문자 내에 식(B-6-X1)으로 표시되는 2가의 기를 적어도 1개 가지는 것이 바람직하고, 식(B-6-X1)으로 표시되는 2가의 기를 식(B-6)으로 표시되는 화합물의 문자량에 대하여 10% 이상 가지는 것이 보다 바람직하다. 여기서, 식(B-6-X1)으로 표시되는 2가의 기는 *에 있어서 MU 또는 EC와 결합한다.

[0990]

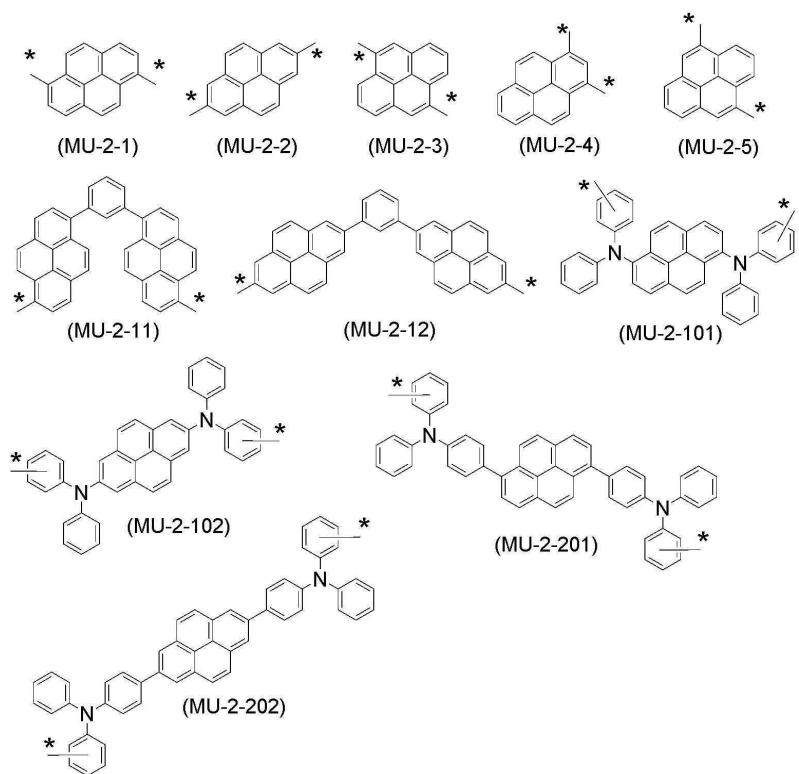
[화학식 305]



[0991]

[0992]

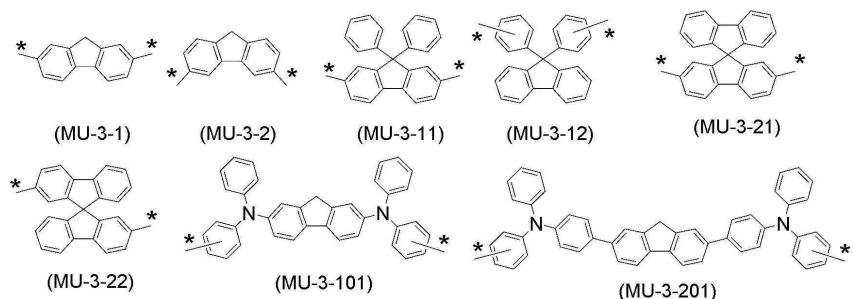
[화학식 306]



[0993]

[0994]

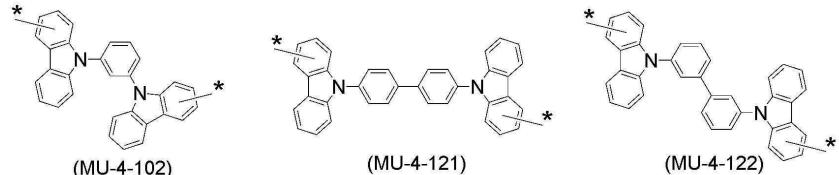
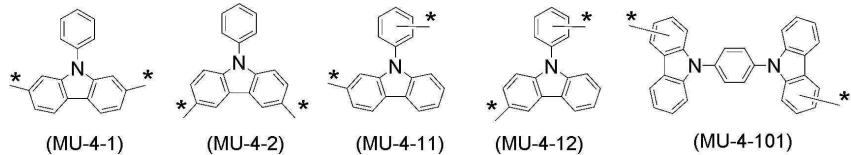
[화학식 307]



[0995]

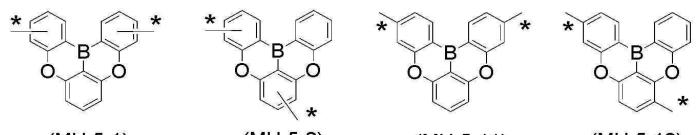
[0996]

[화학식 308]



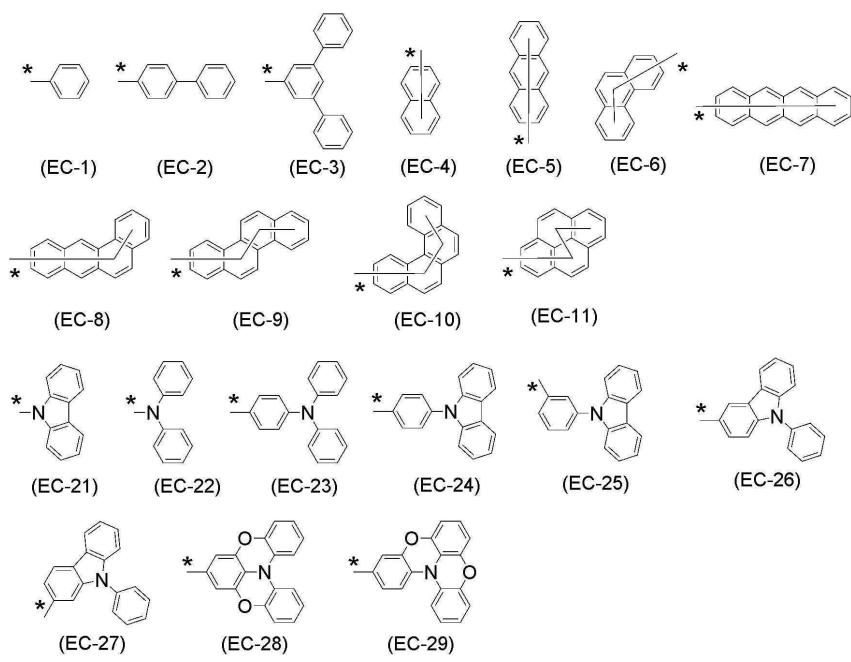
[0997]

[화학식 309]



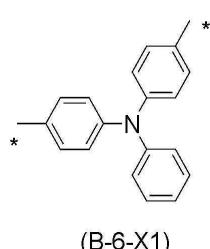
[0999]

[화학식 310]



[1001]

[화학식 311]



[1003]

식(B-6)으로 표시되는 화합물은, 용해성 및 도포 제막성의 관점에서, 분자 중의 MU총수(n)의 10~100 %의 MU가 탄소수 1~24의 알킬 또는 탄소수 3~24의 시클로알킬을 가지는 것이 바람직하고, 분자 중의 MU총수(n)의 30~100 %의 MU가 탄소수 1~18의 알킬(탄소수 3~18의 분지쇄 알킬) 또는 탄소수 3~20의 시클로알킬을 가지는 것이 보다 바람직하고, 분자 중의 MU총수(n)의 50~100 %의 MU가 탄소수 1~12의 알킬(탄소수 3~12의 분지쇄 알

킬) 또는 탄소수 3~16의 시클로알킬을 가지는 것이 더욱 바람직하다. 한편, 면내 배향성 및 전하수송의 관점에서는, 분자 중의 MU총수(n)의 10~100 %의 MU가 탄소수 7~24의 알킬 또는 탄소수 3~24의 시클로알킬을 가지는 것이 바람직하고, 분자 중의 MU총수(n)의 30~100 %의 MU가 탄소수 7~24의 알킬(탄소수 7~24의 분지쇄 알킬) 또는 탄소수 3~24의 시클로알킬을 가지는 것이 보다 바람직하다.

[1005]

또한, 도편트 재료로서는, 특별히 한정되지 않고, 기지(既知)의 화합물을 사용할 수 있고, 원하는 발광색에 따라 다양한 재료 중에서 선택할 수 있다. 구체적으로는, 예를 들면, 페난트렌, 안트라센, 피렌, 테트라센, 웨타센, 페릴렌, 나프토피렌, 디벤조피렌, 루브렌 및 크리센 등의 축합환 유도체, 벤즈옥사졸 유도체, 벤조티아졸 유도체, 벤즈이미다졸 유도체, 벤조트리아졸 유도체, 옥사졸 유도체, 옥사디아졸 유도체, 티아졸 유도체, 이미다졸 유도체, 티아디아졸 유도체, 트리아졸 유도체, 피라졸린 유도체, 스틸벤 유도체, 티오펜 유도체, 테트라페닐부타디엔 유도체, 시클로펜타디엔 유도체, 비스스티릴안트라센 유도체나 디스티릴벤젠 유도체 등의 비스스티릴 유도체(일본공개특허 평1-245087호 공보), 비스스티릴아릴렌 유도체(일본공개특허 평2-247278호 공보), 디아자인다센 유도체, 퓨란 유도체, 벤조퓨란 유도체, 페닐이소벤조퓨란, 디메시틸이소벤조퓨란, 디(2-메틸페닐)이소벤조퓨란, 디(2-트리플루오로메틸페닐)이소벤조퓨란, 페닐이소벤조퓨란 등의 이소벤조퓨란 유도체, 디벤조퓨란 유도체, 7-디알킬아미노쿠마린 유도체, 7-피페리디노쿠마린 유도체, 7-하이드록시쿠마린 유도체, 7-메톡시쿠마린 유도체, 7-아세톡시쿠마린 유도체, 3-벤조티아졸릴쿠마린 유도체, 3-벤즈이미다졸릴쿠마린 유도체, 3-벤즈옥사졸릴쿠마린 유도체 등의 쿠마린 유도체, 디시아노메틸렌피란 유도체, 디시아노메틸렌티오피란 유도체, 폴리메틴 유도체, 시아닌 유도체, 옥소벤즈안트라센 유도체, 크산텐 유도체, 로다민 유도체, 플루오레세인 유도체, 페릴룹 유도체, 카르보스티릴 유도체, 아크리딘 유도체, 옥사진 유도체, 페닐렌옥사이드 유도체, 퀴나클리돈 유도체, 퀴나졸린 유도체, 피롤로피리딘 유도체, 프로피리딘 유도체, 1,2,5-티아디아졸로피렌 유도체, 피로메텐 유도체, 페리논 유도체, 피롤로파롤 유도체, 스쿠아릴룹 유도체, 비오란트론 유도체, 페나진 유도체, 아크리돈 유도체, 데아자플라빈 유도체, 플루오렌 유도체 및 벤조플루오렌 유도체 등이 있다.

[1006]

발색광마다 예시하면, 청색~청록색 도편트 재료로서는, 나프탈렌, 안트라센, 페난트렌, 피렌, 트리페닐렌, 페릴렌, 플루오렌, 인덴, 크리센 등의 방향족 탄화 수소 화합물이나 그의 유도체, 퓨란, 피롤, 티오펜, 실룰, 9-실라플루오렌, 9,9'-스페로비실라플루오렌, 벤조티오펜, 벤조퓨란, 인돌, 디벤조티오펜, 디벤조퓨란, 이미다조피리딘, 페난트롤린, 피라진, 나프티리딘, 퀴녹살린, 피롤로피리딘, 티옥산텐 등의 방향족복소환 화합물이나 그의 유도체, 디스티릴벤젠 유도체, 테트라페닐부타디엔 유도체, 스틸벤 유도체, 알다진 유도체, 쿠마린 유도체, 이미다졸, 티아졸, 티아디아졸, 카르바졸, 옥사졸, 옥사디아졸, 트리아졸 등의 아졸 유도체 및 그의 금속 치체 및 N,N'-디페닐-N,N'-디(3-메틸페닐)-4,4'-디페닐-1,1'-디아민으로 대표되는 방향족 아민 유도체 등을 예로 들 수 있다.

[1007]

또한, 녹색~황색 도편트 재료로서는, 쿠마린 유도체, 프탈이미드 유도체, 나프탈이미드 유도체, 페리논 유도체, 피롤로피롤 유도체, 시클로펜타디엔 유도체, 아쿠리돈 유도체, 퀴나클리돈 유도체 및 루브렌 등의 나프타센 유도체 등을 예로 들 수 있고, 또한 상기 청색~청록색 도편트 재료로서 예시한 화합물에, 아릴, 헤테로아릴, 아릴비닐, 아미노, 시아노 등 장파장화를 가능하게 하는 치환기를 도입한 화합물도 바람직한 예로서 들 수 있다.

[1008]

또한, 주황색~적색 도편트 재료로서는, 비스(디이소프로필페닐)페릴렌테트라카르복시산이미드 등의 나프탈이미드 유도체, 페리논 유도체, 아세틸아세톤이나 벤조일아세톤과 페난트롤린 등을 배위자로 하는 Eu 치체 등의 희토류 치체, 4-(디시아노메틸렌)-2-메틸-6-(p-디메틸아미노스티릴)-4H-피란이나 그의 유사체, 마그네슘프탈로시아닌, 알루미늄클로로프탈로시아닌 등의 금속 프탈로시아닌 유도체, 로다민 화합물, 데아자플라빈 유도체, 쿠마린 유도체, 퀴나클리돈 유도체, 페녹사진 유도체, 옥사진 유도체, 퀴나졸린 유도체, 피롤로피리딘 유도체, 스쿠아릴룹 유도체, 비오란트론 유도체, 페나진 유도체, 페녹사존 유도체 및 티아디아졸로피렌 유도체 등을 예로 들 수 있고, 또한 상기 청색~청록색 및 녹색~황색 도편트 재료로서 예시한 화합물에, 아릴, 헤테로아릴, 아릴비닐, 아미노, 시아노 등 장파장화를 가능하게 하는 치환기를 도입한 화합물도 바람직한 예로서 들 수 있다.

[1009]

그 외, 도편트로서는, 가가쿠고교 2004년 6월호 13페이지, 및 거기에서 예로 든 참고문헌 등에 기재된 화합물 등 중에서 적절하게 선택하여 사용할 수 있다.

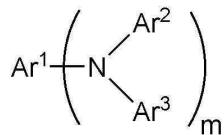
[1010]

상술한 도편트 재료 중에서도, 특히 스틸벤 구조를 가지는 아민, 페릴렌 유도체, 보란 유도체, 방향족 아민 유도체, 쿠마린 유도체, 피란 유도체 또는 피렌 유도체가 바람직하다.

[1011]

스틸벤 구조를 가지는 아민은, 예를 들면, 하기 식으로 표시된다.

[1012] [화학식 312]



[1013]

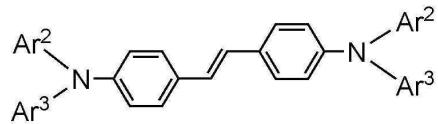
[1014] 상기 식 중, Ar^1 은 탄소수 6~30의 아릴에 유래하는 m 가의 기이며, Ar^2 및 Ar^3 는, 각각 독립적으로 탄소수 6~30의 아릴이지만, $\text{Ar}^1 \sim \text{Ar}^3$ 중 적어도 1개는 스틸벤 구조를 가지고, $\text{Ar}^1 \sim \text{Ar}^3$ 는, 아릴, 헤테로아릴, 알킬, 시클로알킬, 트리 치환 실릴(아릴, 알킬 및/또는 시클로알킬로 트리 치환된 실릴) 또는 시아노로 치환되어 있어도 되고, 그리고, m 은 1~4의 정수이다.

[1015]

스틸벤 구조를 가지는 아민은, 하기 식으로 표시되는 디아미노스틸벤이 보다 바람직하다.

[1016]

[화학식 313]



[1017]

[1018] 상기 식 중, Ar^2 및 Ar^3 는, 각각 독립적으로 탄소수 6~30의 아릴이며, Ar^2 및 Ar^3 는, 아릴, 헤테로아릴, 알킬, 시클로알킬, 트리 치환 실릴(아릴, 알킬 및/또는 시클로알킬로 트리 치환된 실릴) 또는 시아노로 치환되어 있어도 된다.

[1019]

탄소수 6~30의 아릴의 구체예는, 폐닐, 나프틸, 아세나프틸레닐, 플루오레닐, 폐닐레닐, 폐난트레닐, 안톨릴, 플루오란테닐, 트리페닐레닐, 피레닐, 크리세닐, 나프타세닐, 폐릴레닐, 스틸베닐, 디스티릴페닐, 디스티릴비페닐릴, 디스티릴플루오레닐 등을 들 수 있다.

[1020]

스틸벤 구조를 가지는 아민의 구체예는, N,N,N',N'-테트라(4-비페닐릴)-4,4'-디아미노스틸벤, N,N,N',N'-테트라(1-나프틸)-4,4'-디아미노스틸벤, N,N,N',N'-테트라(2-나프틸)-4,4'-디아미노스틸벤, N,N'-디(2-나프틸)-N,N'-디페닐-4,4'-디아미노스틸벤, N,N'-디(9-페난트릴)-N,N'-디페닐-4,4'-디아미노스틸벤, 4,4'-비스[4"-비스(디페닐아미노)스티릴]-비페닐, 1,4-비스[4"-비스(디페닐아미노)스티릴]-벤젠, 2,7-비스[4"-비스(디페닐아미노)스티릴]-9,9-디메틸플루오렌, 4,4'-비스(9-에틸-3-카르바조비닐렌)-비페닐, 4,4'-비스(9-페닐-3-카르바조비닐렌)-비페닐 등을 들 수 있다.

[1021]

또한, 일본공개특허 제2003-347056호 공보, 및 일본공개특허 제2001-307884호 공보 등에 기재된 스틸벤 구조를 가지는 아민을 사용해도 된다.

[1022]

페릴렌 유도체로서는, 예를 들면, 3,10-비스(2,6-디메틸페닐)페릴렌, 3,10-비스(2,4,6-트리메틸페닐)페릴렌, 3,10-디페닐페릴렌, 3,4-디페닐페릴렌, 2,5,8,11-테트라-tert-부틸페릴렌, 3,4,9,10-테트라페닐페릴렌, 3-(1'-피레닐)-8,11-디(tert-부틸)페릴렌, 3-(9'-안톨릴)-8,11-디(tert-부틸)페릴렌, 3,3'-비스(8, 11-디(tert-부틸)페릴렌) 등이 있다.

[1023]

또한, 일본공개특허 평11-97178호 공보, 일본공개특허 제2000-133457호 공보, 일본공개특허 제2000-26324호 공보, 일본공개특허 제2001-267079호 공보, 일본공개특허 제2001-267078호 공보, 일본공개특허 제2001-267076호 공보, 일본공개특허 제2000-34234호 공보, 일본공개특허 제2001-267075호 공보, 및 일본공개특허 제2001-217077호 공보 등에 기재된 페릴렌 유도체를 사용해도 된다.

[1024]

보란 유도체로서는, 예를 들면, 1,8-디페닐-10-(디메시틸보릴)안트라센, 9-페닐-10-(디메시틸보릴)안트라센, 4-(9'-안톨릴)디메시틸보릴나프탈렌, 4-(10'-페닐-9'-안톨릴)디메시틸보릴나프탈렌, 9-(디메시틸보릴)안트라센, 9-(4'-비페닐릴)-10-(디메시틸보릴)안트라센, 9-(4'-(N-카르바졸릴)페닐)-10-(디메시틸보릴)안트라센 등이 있다.

[1025]

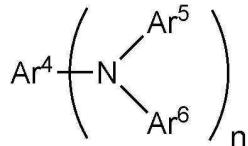
또한, 국제공개 제2000/40586호 팜플렛 등에 기재된 보란 유도체를 사용해도 된다.

[1026]

방향족 아민 유도체는, 예를 들면, 하기 식으로 표시된다.

[1027]

[화학식 314]



[1028]

[1029] 상기 식 중, Ar^4 는 탄소수 6~30의 아릴에 유래하는 n가의 기이며, Ar^5 및 Ar^6 는 각각 독립적으로 탄소수 6~30의 아릴이며, $\text{Ar}^4 \sim \text{Ar}^6$ 는, 아릴, 헤테로아릴, 알킬, 시클로알킬, 트리 치환 실릴(아릴, 알킬 및/또는 시클로알킬로 트리 치환된 실릴) 또는 시아노로 치환되어 있어도 되고, 그리고, n은 1~4의 정수이다.

[1030]

[1030] 특히, Ar^4 가 안트라센, 크리센, 플루오렌, 벤조플루오렌 또는 피렌에 유래하는 2가의 기이며, Ar^5 및 Ar^6 가 각각 독립적으로 탄소수 6~30의 아릴이며, $\text{Ar}^4 \sim \text{Ar}^6$ 는, 아릴, 헤�테로아릴, 알킬, 시클로알킬, 트리 치환 실릴(아릴, 알킬 및/또는 시클로알킬로 트리 치환된 실릴) 또는 시아노로 치환되어 있어도 되고, 그리고, n은 2인, 방향족 아민 유도체가 보다 바람직하다.

[1031]

[1031] 탄소수 6~30의 아릴 구체예는, 페닐, 나프틸, 아세나프틸레닐, 플루오레닐, 페닐레닐, 페난트레닐, 안톨릴, 플루오란테닐, 트리페닐레닐, 피레닐, 크리세닐, 나프타세닐, 페릴레닐, 웬타세닐 등을 들 수 있다.

[1032]

[1032] 방향족 아민 유도체로서는, 크리센계로서는, 예를 들면, N,N,N',N'-테트라페닐크리센-6,12-디아민, N,N,N',N'-테트라(p-톨릴)크리센-6,12-디아민, N,N,N',N'-테트라(m-톨릴)크리센-6,12-디아민, N,N,N',N'-테트라키스(4-이소프로필페닐)크리센-6,12-디아민, N,N,N',N'-테트라(나프탈렌-2-일)크리센-6,12-디아민, N,N'-디페닐-N,N'-디(p-톨릴)크리센-6,12-디아민, N,N'-디페닐-N,N'-비스(4-에틸페닐)크리센-6,12-디아민, N,N'-디페닐-N,N'-비스(4-이소프로필페닐)크리센-6,12-디아민, N,N'-디페닐-N,N'-비스(4-tert-부틸페닐)크리센-6,12-디아민, N,N'-비스(4-이소프로필페닐)-N,N'-디(p-톨릴)크리센-6,12-디아민 등이 있다.

[1033]

[1033] 또한, 피렌계로서는, 예를 들면, N,N,N',N'-테트라페닐피렌-1,6-디아민, N,N,N',N'-테트라(p-톨릴)피렌-1,6-디아민, N,N,N',N'-테트라(m-톨릴)피렌-1,6-디아민, N,N,N',N'-테트라키스(4-이소프로필페닐)피렌-1,6-디아민, N,N,N',N'-테트라키스(3,4-디메틸페닐)피렌-1,6-디아민, N,N'-디페닐-N,N'-디(p-톨릴)피렌-1,6-디아민, N,N'-디페닐-N,N'-비스(4-에틸페닐)피렌-1,6-디아민, N,N'-디페닐-N,N'-비스(4-이소프로필페닐)피렌-1,6-디아민, N,N'-디페닐-N,N'-비스(4-tert-부틸페닐)피렌-1,6-디아민, N,N'-비스(4-이소프로필페닐)-N,N'-디(p-톨릴)피렌-1,6-디아민, N,N,N',N'-테트라키스(3,4-디메틸페닐)-3,8-디페닐피렌-1,6-디아민, N,N,N,N-테트라페닐피렌-1,8-디아민, N,N'-비스(비페닐-4-일)-N,N'-디페닐피렌-1,8-디아민, N¹,N⁶-디페닐-N¹,N⁶-비스-(4-트리메틸실라닐-페닐)-1H,8H-피렌-1,6-디아민 등이 있다.

[1034]

[1034] 또한, 안트라센계로서는, 예를 들면, N,N,N,N-테트라페닐안트라센-9,10-디아민, N,N,N',N'-테트라(p-톨릴)안트라센-9,10-디아민, N,N,N',N'-테트라(m-톨릴)안트라센-9,10-디아민, N,N,N',N'-테트라키스(4-이소프로필페닐)안트라센-9,10-디아민, N,N'-디페닐-N,N'-디(p-톨릴)안트라센-9,10-디아민, N,N'-디페닐-N,N'-디(m-톨릴)안트라센-9,10-디아민, N,N'-디페닐-N,N'-비스(4-에틸페닐)안트라센-9,10-디아민, N,N'-디페닐-N,N'-비스(4-이소프로필페닐)안트라센-9,10-디아민, N,N'-디페닐-N,N'-비스(4-tert-부틸페닐)안트라센-9,10-디아민, N,N'-비스(4-이소프로필페닐)-N,N'-디(p-톨릴)안트라센-9,10-디아민, 2,6-디-tert-부틸-N,N,N',N'-테트라(p-톨릴)안트라센-9,10-디아민, 2,6-디-tert-부틸-N,N',N'-비스(4-이소프로필페닐)-N,N'-디(p-톨릴)안트라센-9,10-디아민, 2,6-디시클로헥실-N,N'-비스(4-이소프로필페닐)-N,N'-디(p-톨릴)안트라센-9,10-디아민, 2,6-디시클로헥실-N,N'-비스(4-이소프로필페닐)-N,N'-디(p-톨릴)안트라센-9,10-디아민, 9,10-비스(4-디페닐아미노-페닐)안트라센, 9,10-비스(4-디(2-나프틸아미노)페닐)안트라센, 10-디-p-톨릴 아미노-9-(4-디-p-톨릴아미노-1-나프틸)안트라센, 10-디페닐아미노-9-(4-디페닐아미노-1-나프틸)안트라센, 10-디페닐아미노-9-(6-디페닐아미노-2-나프틸)안트라센 등이 있다.

[1035]

[1035] 또한, 다른 것으로는, [4-(4-디페닐아미노-페닐)나프탈렌-1-일]-디페닐아민, [6-(4-디페닐아미노-페닐)나프탈렌-2-일]-디페닐아민, 4,4'-비스[4-디페닐아미노나프탈렌-1-일]비페닐, 4,4'-비스[6-디페닐아미노나프탈렌-2-일]비페닐, 4,4"-비스[4-디페닐아미노나프탈렌-1-일]-p-터페닐, 4,4"-비스[6-디페닐아미노나프탈렌-2-일]-p-터페닐

등을 예로 들 수 있다.

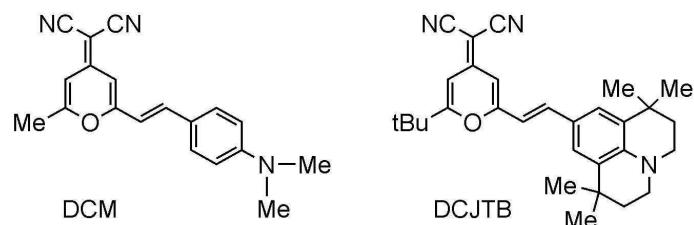
[1036] 또한, 일본공개특허 제2006-156888호 공보 등에 기재된 방향족 아민 유도체를 사용해도 된다.

[1037] 쿠마린 유도체로서는, 쿠마린-6, 쿠마린-334 등을 예로 들 수 있다.

[1038] 또한, 일본공개특허 제2004-43646호 공보, 일본공개특허 제2001-76876호 공보, 및 일본공개특허 평6-298758호 공보 등에 기재된 쿠마린 유도체를 사용해도 된다.

[1039] 피란 유도체로서는, 하기 DCM, DCJTB 등을 예로 들 수 있다.

[1040] [화학식 315]



[1041] [1042] 또한, 일본공개특허 제2005-126399호 공보, 일본공개특허 제2005-097283호 공보, 일본공개특허 제2002-234892호 공보, 일본공개특허 제2001-220577호 공보, 일본공개특허 제2001-081090호 공보, 및 일본공개특허 제2001-052869호 공보 등에 기재된 비 난 유도체를 사용할 수도 있다.

[1043] <유기전계 발광소자에서의 전자주입층, 전자수송층>

[1044] 전자주입층(107)은, 음극(108)으로부터 이동하여 오는 전자를, 효율적으로 발광층(105) 내 또는 전자수송층(106) 내에 주입하는 역할을 행한다. 전자수송층(106)은, 음극(108)으로부터 주입된 전자 또는 음극(108)으로부터 전자주입층(107)을 통하여 주입된 전자를, 효율적으로 발광층(105)에 수송하는 역할을 행한다. 전자수송층(106) 및 전자주입층(107)은, 각각, 전자 수송·주입 재료의 1종 또는 2종 이상을 적층, 혼합하거나, 전자 수송·주입 재료와 고분자 결착제의 혼합물에 의해 형성된다.

[1045] 전자 주입·수송층은, 음극으로부터 전자가 주입되고, 또한 전자를 수송하는 것을 담당하는 층이며, 전자 주입 효율이 높고, 주입된 전자를 효율적으로 수송하는 것이 바람직하다. 이를 위해서는 전자 친화력이 크고, 또한 전자 이동도가 크고, 또한 안정성이 우수하고, 트랩이 되는 불순물이 제조 시 및 사용 시에 쉽게 발생하지 않는 물질인 것이 바람직하다. 그러나, 정공과 전자의 수송 밸런스를 고려할 경우, 양극으로부터의 정공이 재결합하지 않고 음극 측으로 흐르는 것을 효율적으로 저지할 수 있는 역할을 주로 행하는 경우에는, 전자 수송 능력이 그렇게 높지 않아도, 발광 효율을 향상시키는 효과는 전자 수송 능력이 높은 재료와 동등하게 가진다. 따라서, 본 실시형태에 있어서의 전자 주입·수송층은, 정공의 이동을 효율적으로 저지할 수 있는 층의 기능도 포함되어 도 된다.

[1046] 전자수송층(106) 또는 전자주입층(107)을 형성하는 재료(전자 수송 재료)로서는, 광 도전 재료에 있어서 전자 전달 화합물로서 종래부터 관용되고 있는 화합물, 유기전계 발광소자의 전자주입층 및 전자수송층에 사용되고 있는 공지의 화합물 중에서 임의로 선택하여 사용할 수 있다.

[1047] 전자수송층 또는 전자주입층에 사용되는 재료로서는, 탄소, 수소, 산소, 유황, 규소 및 인 중에서 선택되는 1종 이상의 원자로 구성되는 방향족환 혹은 복소방향족환으로 이루어지는 화합물, 피롤 유도체 및 그의 축합환 유도체 및 전자 수용성 질소를 가지는 금속 착체 중에서 선택되는 적어도 1종을 함유하는 것이 바람직하다. 구체적으로는, 나프탈렌, 안트라센 등의 축합환계 방향족환 유도체, 4,4'-비스(디페닐에테닐)비페닐로 대표되는 스티릴계 방향족환 유도체, 페리논 유도체, 쿠마린 유도체, 나프탈이미드 유도체, 안트라퀴논이나 디페노퀴논 등의 퀴논 유도체, 인옥사이드 유도체, 카르바졸 유도체 및 인돌 유도체 등을 예로 들 수 있다. 전자 수용성 질소를 가지는 금속 착체로서는, 예를 들면, 하이드록시페닐옥사졸 착체 등의 하이드록시아졸 착체, 아조메틴 착체, 트로폴론 금속 착체, 플라보놀 금속 착체 및 벤조퀴놀린 금속 착체 등을 예로 들 수 있다. 이들 재료는 단독으로 도 사용되지만, 상이한 재료와 혼합하여 사용해도 된다.

[1048] 또한, 다른 전자 전달 화합물의 구체예로서, 피리딘 유도체, 나프탈렌 유도체, 안트라센 유도체, 페난트롤린 유도체, 페리논 유도체, 쿠마린 유도체, 나프탈이미드 유도체, 안트라퀴논 유도체, 디페노퀴논 유도체, 디페닐퀴논 유도체, 페릴렌 유도체, 옥사디아졸 유도체(1,3-비스[(4-tert-부틸페닐)1,3,4-옥사디아졸릴]페닐렌 등), 티

오oven 유도체, 트리아졸 유도체(N-나프틸-2,5-디페닐-1,3,4-트리아졸 등), 티아디아졸 유도체, 옥신 유도체의 금속 착체, 퀴놀리놀계 금속 착체, 퀴녹살린 유도체, 퀴녹살린 유도체의 폴리머, 벤자졸류 화합물, 갈륨 착체, 피라졸 유도체, 퍼플루오로화 폐닐렌 유도체, 트리아진 유도체, 피라진 유도체, 벤조퀴놀린 유도체(2,2'-비스(벤조[h]퀴놀린-2-일)-9,9'-스피로비플루오렌 등), 이미다조피리딘 유도체, 보란 유도체, 벤즈이미다졸 유도체(트리스(N-페닐벤즈이미다졸-2-일)벤젠 등), 벤즈옥사졸 유도체, 벤조티아졸 유도체, 퀴놀린 유도체, 터페리딘 등의 올리고피리딘 유도체, 비페리딘 유도체, 터페리딘 유도체(1,3-비스(4'-(2,2':6'2''-터페리디닐))벤젠 등), 나프티리딘 유도체(비스(1-나프틸)-4-(1,8-나프티리딘-2-일)페닐포스핀옥사이드 등), 알다진 유도체, 카르바졸 유도체, 인돌 유도체, 인옥사이드 유도체, 비스스티릴 유도체 등을 들 수 있다.

[1049] 또한, 전자 수용성 질소를 가지는 금속 착체를 사용할 수도 있고, 예를 들면, 퀴놀리놀계 금속 착체나 하이드록시페닐옥사졸 착체 등의 하이드록시아졸 착체, 아조메틴 착체, 트로폴론 금속 착체, 플라보놀 금속 착체 및 벤조퀴놀린 금속 착체 등이 있다.

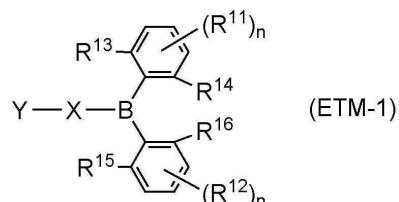
[1050] 전술한 재료는 단독으로도 사용되지만, 상이한 재료와 혼합하여 사용해도 된다.

[1051] 전술한 재료 중에서도, 보란 유도체, 피리딘 유도체, 플루오란텐 유도체, BO계 유도체, 안트라센 유도체, 벤조플루오렌 유도체, 포스핀옥사이드 유도체, 피리미딘 유도체, 카르바졸 유도체, 트리아진 유도체, 벤즈이미다졸 유도체, 페난트롤린 유도체, 및 퀴놀리놀계 금속 착체가 바람직하다.

[1052] <보란 유도체>

[1053] 보란 유도체는, 예를 들면, 하기 일반식(ETM-1)으로 표시되는 화합물이며, 상세하게는 일본공개특허 제2007-27587호 공보에 개시되어 있다.

[1054] [화학식 316]

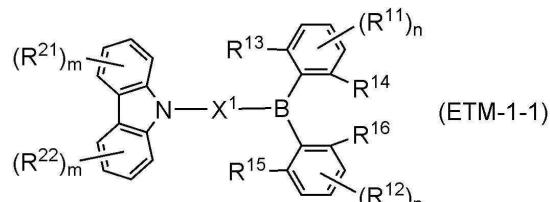


[1055]

[1056] 상기 식(ETM-1) 중, R^{11} 및 R^{12} 는, 각각 독립적으로, 수소, 알킬, 시클로알킬, 치환되어 있어도 되는 아릴, 치환되어 있는 실릴, 치환되어 있어도 되는 질소함유 복소환, 또는 시아노 중 적어도 1개이며, $\text{R}^{13} \sim \text{R}^{16}$ 은, 각각 독립적으로, 치환되어 있어도 되는 알킬, 치환되어 있어도 되는 시클로알킬 또는 치환되어 있어도 되는 아릴이며, X는, 치환되어 있어도 되는 아릴렌이며, Y는, 치환되어 있어도 되는 탄소수 16 이하의 아릴, 치환되어 있는 보릴, 또는 치환되어 있어도 되는 카르바졸릴이며, 그리고, n은 각각 독립적으로 0~3의 정수이다. 또한, 「치환되어 있어도 되는」 또는 「치환되어 있는」 경우의 치환기로서는, 아릴, 헤테로아릴, 알킬 또는 시클로알킬 등을 예로 들 수 있다.

[1057] 상기 일반식(ETM-1)으로 표시되는 화합물 중에서도, 하기 일반식(ETM-1-1)으로 표시되는 화합물이나 하기 일반식(ETM-1-2)으로 표시되는 화합물이 바람직하다

[1058] [화학식 317]



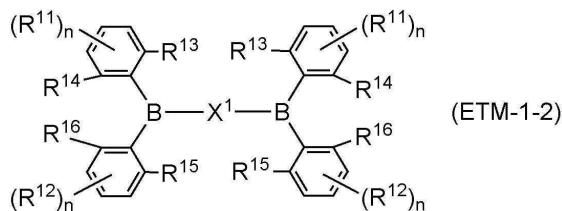
[1059]

[1060] 식(ETM-1-1) 중, R^{11} 및 R^{12} 는, 각각 독립적으로, 수소, 알킬, 시클로알킬, 치환되어 있어도 되는 아릴, 치환되어 있는 실릴, 치환되어 있어도 되는 질소 함유 복소환, 또는 시아노 중 적어도 1개이며, $\text{R}^{13} \sim \text{R}^{16}$ 은, 각각 독립적으로, 치환되어 있어도 되는 알킬, 치환되어 있어도 되는 시클로알킬 또는 치환되어 있어도 되는 아릴이며,

R^{21} 및 R^{22} 는, 각각 독립적으로, 수소, 알킬, 시클로알킬, 치환되어 있어도 되는 아릴, 치환되어 있는 실릴, 치환되어 있어도 되는 질소 함유 복소환, 또는 시아노 중 적어도 1개이며, X^1 은, 치환되어 있어도 되는 탄소수 20 이하의 아릴렌이며, n 은 각각 독립적으로 0~3의 정수이며, 그리고, m 은 각각 독립적으로 0~4의 정수이다. 또한, 「치환되어 있어도 되는」 또는 「치환되어 있는」 경우의 치환기로서는, 아릴, 헤테로아릴, 알킬 또는 시클로알킬 등을 예로 들 수 있다.

[1061]

[화학식 318]



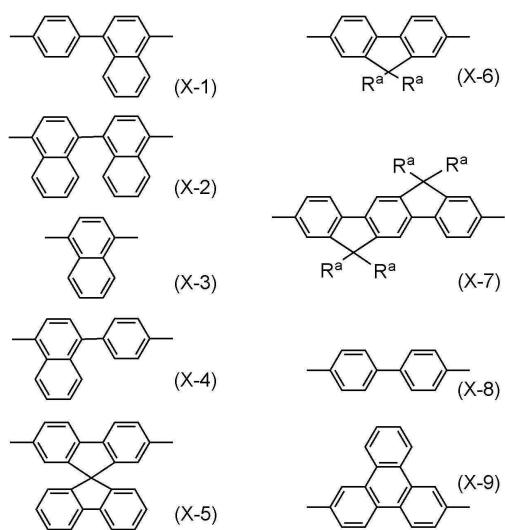
[1062]

식(ETM-1-2) 중, R^{11} 및 R^{12} 는, 각각 독립적으로, 수소, 알킬, 시클로알킬, 치환되어 있어도 되는 아릴, 치환되어 있는 실릴, 치환되어 있어도 되는 질소 함유 복소환, 또는 시아노 중 적어도 1개이며, $R^{13} \sim R^{16}$ 은, 각각 독립적으로, 치환되어 있어도 되는 알킬, 치환되어 있어도 되는 시클로알킬 또는 치환되어 있어도 되는 아릴이며, X^1 은, 치환되어 있어도 되는 탄소수 20 이하의 아릴렌이며, 그리고, n 은 각각 독립적으로 0~3의 정수이다. 또한, 「치환되어 있어도 되는」 또는 「치환되어 있는」 경우의 치환기로서는, 아릴, 헤테로아릴, 알킬 또는 시클로알킬 등을 예로 들 수 있다.

[1064]

 X^1 의 구체적인 예로서는, 하기 식(X-1)~식(X-9) 중 어느 하나로 표시되는 2가의 기를 들 수 있다.

[1065]



[1066]

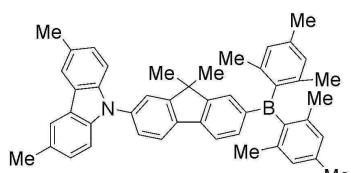
(각 식 중, R^a 는, 각각 독립적으로 알킬기, 시클로알킬기 또는 치환되어 있어도 되는 페닐기이다.)

[1068]

이 보란 유도체의 구체예로서는, 예를 들면, 이하의 화합물이 있다.

[1069]

[화학식 320]



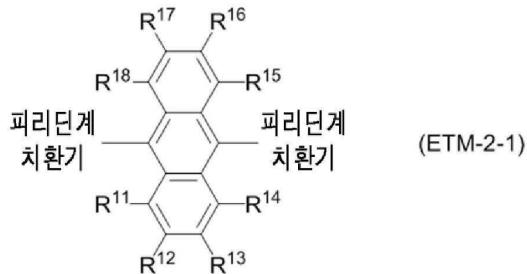
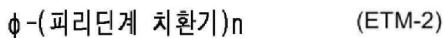
[1070]

이 보란 유도체는 공지의 원료와 공지의 합성 방법을 사용하여 제조할 수 있다.

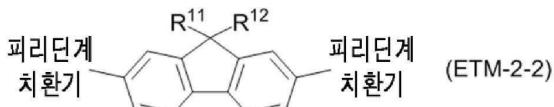
[1072] <피리딘 유도체>

[1073] 피리딘 유도체는, 예를 들면, 하기 식(ETM-2)으로 표시되는 화합물이며, 바람직하게는 식(ETM-2-1) 또는 식(ETM-2-2)으로 표시되는 화합물이다.

[1074] [화학식 321]



(ETM-2-1)



(ETM-2-2)

[1075]

[1076] ϕ 는, n가의 아릴환(바람직하게는 n가의 벤젠환, 나프탈렌환, 안트라센환, 플루오렌환, 벤조플루오렌환, 페닐렌환, 폐난트렌환 또는 트리페닐렌환)이며, n은 1~4의 정수이다.

[1077]

상기 식(ETM-2-1)에 있어서, R¹¹~R¹⁸은, 각각 독립적으로, 수소, 알킬(바람직하게는 탄소수 1~24의 알킬), 시클로알킬(바람직하게는 탄소수 3~12의 시클로알킬) 또는 아릴(바람직하게는 탄소수 6~30의 아릴)이다.

[1078]

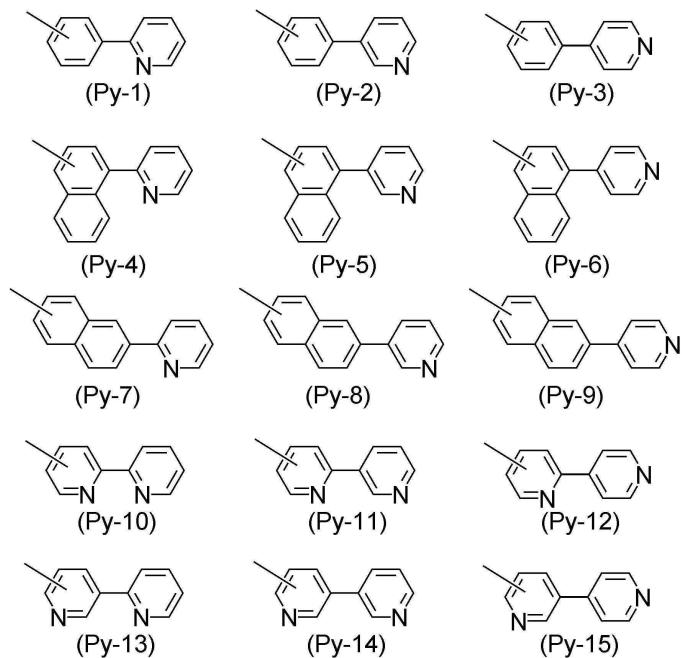
상기 식(ETM-2-2)에 있어서, R¹¹ 및 R¹²는, 각각 독립적으로, 수소, 알킬(바람직하게는 탄소수 1~24의 알킬), 시클로알킬(바람직하게는 탄소수 3~12의 시클로알킬) 또는 아릴(바람직하게는 탄소수 6~30의 아릴)이며, R¹¹ 및 R¹²는 결합하여 환을 형성하고 있어도 된다.

[1079]

각 식에 있어서, 「피리딘계 치환기」는, 하기 식(Py-1)~식(Py-15) 중 어느 하나이며, 피리딘계 치환기는 각각 독립적으로 탄소수 1~4의 알킬 또는 탄소수 5~10의 시클로알킬로 치환되어 있어도 된다. 또한, 피리딘계 치환기는 페닐렌기나 나프탈렌기를 통하여 각 식에서의 ϕ , 안트라센환 또는 플루오렌환에 결합하고 있어도 된다.

[1080]

[화학식 322]

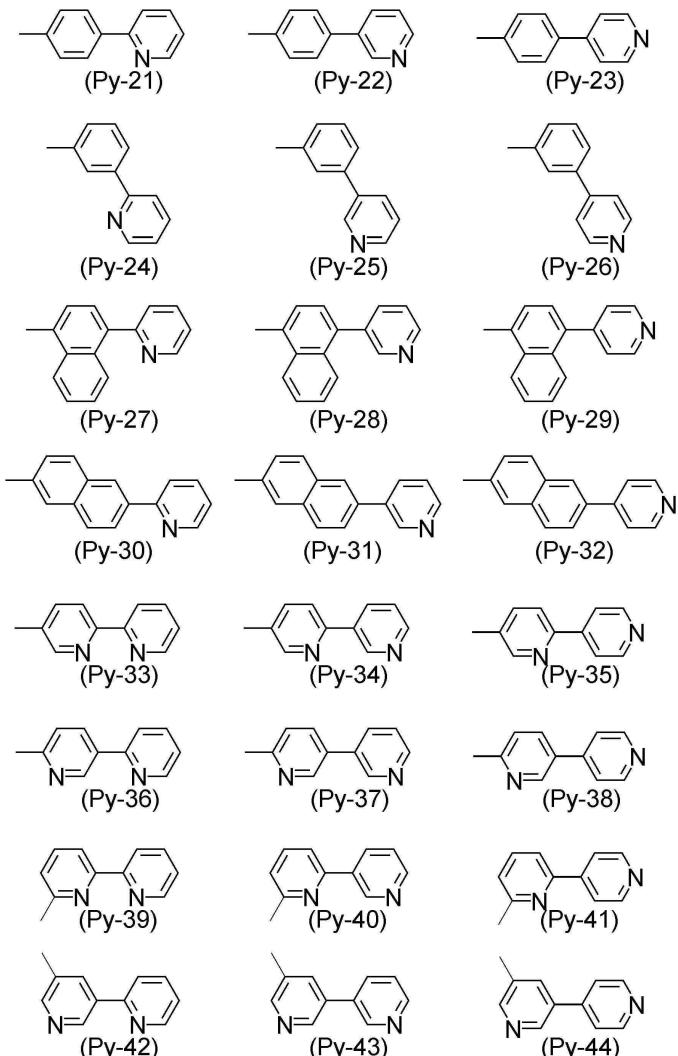


[1081]

피리딘계 치환기는, 상기 식(Py-1)~식(Py-15) 중 어느 하나이지만, 이들 중에서도, 하기 식(Py-21)~식(Py-44) 중 어느 하나인 것이 바람직하다.

[1083]

[화학식 323]



[1084]

[1085]

각 피리딘 유도체에서의 적어도 1개의 수소가 중수소로 치환되어 있어도 되고, 또한, 상기 식(ETM-2-1) 및 식(ETM-2-2)에서의 2개의 「피리딘계 치환기」 중 한쪽은 아릴로 치환되어 있어도 된다.

[1086]

$R^{11} \sim R^{18}$ 에서의 「알킬」로서는, 직쇄 및 분지쇄 중 어느 것이라도 되고, 예를 들면, 탄소수 1~24의 직쇄 알킬 또는 탄소수 3~24의 분지쇄 알킬이 있다. 바람직한 「알킬」은, 탄소수 1~18의 알킬(탄소수 3~18의 분지쇄 알킬)이다. 보다 바람직한 「알킬」은, 탄소수 1~12의 알킬(탄소수 3~12의 분지쇄 알킬)이다. 더욱 바람직한 「알킬」은, 탄소수 1~6의 알킬(탄소수 3~6의 분지쇄 알킬)이다. 특히 바람직한 「알킬」은, 탄소수 1~4의 알킬(탄소수 3~4의 분지쇄 알킬)이다.

[1087]

구체적인 「알킬」로서는, 메틸, 에틸, n-프로필, 이소프로필, n-부틸, 이소부틸, sec-부틸, tert-부틸, n-펜틸, 이소펜틸, 네오펜틸, tert-펜틸, n-헥실, 1-메틸펜틸, 4-메틸-2-펜틸, 3,3-디메틸부틸, 2-에틸부틸, n-헵틸, 1-메틸헵실, n-옥틸, tert-옥틸, 1-메틸헵틸, 2-에틸헵실, 2-프로필펜틸, n-노닐, 2,2-디메틸헵틸, 2,6-디메틸-4-헵틸, 3,5,5-트리메틸헵실, n-데실, n-운데실, 1-메틸데실, n-도데실, n-트리데실, 1-헥실헵틸, n-테트라데실, n-펜타데실, n-헥사데실, n-헵타데실, n-옥타데실, n-에이코실 등을 예로 들 수 있다.

[1088]

피리딘계 치환기에 치환하는 탄소수 1~4의 알킬로서는, 상기 알킬의 설명을 인용할 수 있다.

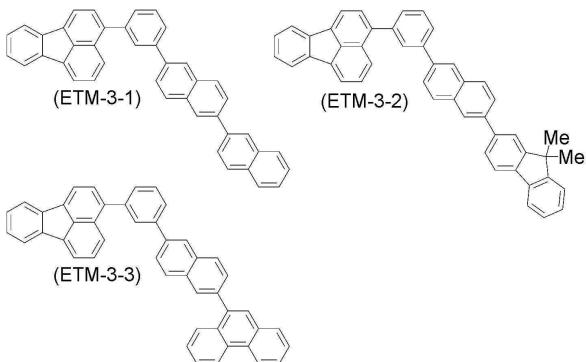
[1089]

$R^{11} \sim R^{18}$ 에서의 「시클로알킬」로서는, 예를 들면, 탄소수 3~12의 시클로알킬이 있다. 바람직한 「시클로알킬」은, 탄소수 3~10의 시클로알킬이다. 보다 바람직한 「시클로알킬」은, 탄소수 3~8의 시클로알킬이다. 더욱 바람직한 「시클로알킬」은, 탄소수 3~6의 시클로알킬이다. 구체적인 「시클로알킬」로서는, 시클로프로필, 시클로부틸, 시클로펜틸, 시클로헥실, 메틸시클로펜틸, 시클로헵틸, 메틸시클로헥실, 시클로옥틸 또는 디메틸시클로헥실 등을 예로 들 수 있다.

- [1090] 피리딘계 치환기에 치환하는 탄소수 5~10의 시클로알킬로서는, 상기 알킬의 설명을 인용할 수 있다.
- [1091] R¹¹~R¹⁸에서의 「아릴」로서는, 바람직한 아릴은 탄소수 6~30의 아릴이며, 보다 바람직한 아릴은 탄소수 6~18의 아릴이며, 더욱 바람직하게는 탄소수 6~14의 아릴이며, 특히 바람직하게는 탄소수 6~12의 아릴이다.
- [1092] 구체적인 「탄소수 6~30의 아릴」로서는, 단환계 아릴인 페닐, 축합 2환계 아릴인 (1-, 2-)나프틸, 축합 3환계 아릴인, 아세나프틸렌-(1-, 3-, 4-, 5-)일, 플루오렌-(1-, 2-, 3-, 4-, 9-)일, 폐닐렌-(1-, 2-)일, (1-, 2-, 3-, 4-, 9-)페난트릴, 축합 4환계 아릴인 트리페닐렌-(1-, 2-)일, 피렌-(1-, 2-, 4-)일, 나프타센-(1-, 2-, 5-)일, 축합 5환계 아릴인 폐릴렌-(1-, 2-, 3-)일, 펜타센-(1-, 2-, 5-, 6-)일 등을 예로 들 수 있다.
- [1093] 바람직한 「탄소수 6~30의 아릴」은, 페닐, 나프틸, 폐난트릴, 크리세닐 또는 트리페닐레닐 등을 예로 들 수 있고, 더욱 바람직하게는 페닐, 1-나프틸, 2-나프틸 또는 폐난트릴을 예로 들 수 있고, 특히 바람직하게는 페닐, 1-나프틸 또는 2-나프틸을 예로 들 수 있다.
- [1094] 상기 식(ETM-2-2)에서의 R¹¹ 및 R¹²는 결합하여 환을 형성하고 있어도 되고, 그 결과, 플루오렌 골격의 5원환에는, 시클로부탄, 시클로펜탄, 시클로펜텐, 시클로펜타디엔, 시클로헥산, 플루오렌 또는 인덴 등이 스피로 결합하고 있어도 된다.
- [1095] 이 피리딘 유도체의 구체예로서는, 예를 들면, 이하의 화합물이 있다.
- [1096] [화학식 324]
-
- [1097] [화학식 324]
- [1098] 이 피리딘 유도체는 공지의 원료와 공지의 합성 방법을 사용하여 제조할 수 있다.
- [1099] <플루오란텐 유도체>
- [1100] 플루오란텐 유도체는, 예를 들면, 하기 일반식(ETM-3)으로 표시되는 화합물이며, 상세하게는 국제공개 제2010/134352호 공보에 개시되어 있다.
- [1101] [화학식 325]
- (ETM-3)
- [1102] [화학식 325]
- [1103] 상기 식(ETM-3) 중, X¹²~X²¹은 수소, 할로겐, 칙쇄, 분지 혹은 환형의 알킬, 칙쇄, 분지 혹은 환형의 알콕시, 치환 혹은 무치환의 아릴, 또는 치환 혹은 무치환의 헤테로아릴을 나타낸다. 여기서, 치환되어 있는 경우의 치환기로서는, 아릴, 헤�테로아릴, 알킬 또는 시클로알킬 등을 예로 들 수 있다.
- [1104] 이 플루오란텐 유도체의 구체예로서는, 예를 들면, 이하의 화합물이 있다.

[1105]

[화학식 326]



[1106]

[1107]

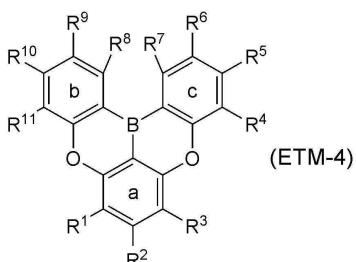
<B0계 유도체>

[1108]

B0계 유도체는, 예를 들면, 하기 식(ETM-4)으로 표시되는 다환 방향족 화합물, 또는 하기 식(ETM-4)으로 표시되는 구조를 복수 가지는 다환 방향족 화합물의 다양체이다.

[1109]

[화학식 327]



[1110]

[1111]

$R^1 \sim R^{11}$ 은, 각각 독립적으로, 수소, 아릴, 헤테로아릴, 디아릴아미노, 디헵테로아릴아미노, 아릴헵테로아릴아미노, 디아릴보릴(2개의 아릴은 단결합 또는 연결기를 통하여 결합하고 있어도 됨), 알킬, 시클로알킬, 알콕시 또는 아릴옥시이며, 이들에서의 적어도 1개의 수소는 아릴, 헤테로아릴, 알킬 또는 시클로알킬로 치환되어 있어도 된다.

[1112]

또한, $R^1 \sim R^{11}$ 중 인접하는 기끼리 결합하여 a환, b환 또는 c환과 함께 아릴환 또는 헤테로아릴환을 형성하고 있어도 되고, 형성된 환에서의 적어도 1개의 수소는 아릴, 헤테로아릴, 디아릴아미노, 디헵테로아릴아미노, 아릴헵테로아릴아미노, 디아릴보릴(2개의 아릴은 단결합 또는 연결기를 통하여 결합하고 있어도 됨), 알킬, 시클로알킬, 알콕시 또는 아릴옥시로 치환되어 있어도 되고, 이들에서의 적어도 1개의 수소는 아릴, 헤테로아릴, 알킬 또는 시클로알킬로 치환되어 있어도 된다.

[1113]

또한, 식(ETM-4)으로 표시되는 화합물 또는 구조에서의 적어도 1개의 수소가 할로겐 또는 중수소로 치환되어 있어도 된다.

[1114]

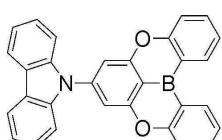
식(ETM-4)에서의 치환기나 환 형성의 형태, 또한 식(ETM-4)의 구조가 복수 합쳐져서 생기는 다양체의 설명에 대해서는, 상기 일반식(1)으로 표시되는 화합물이나 그의 다양체의 설명을 인용할 수 있다.

[1115]

이) B0계 유도체의 구체예로서는, 예를 들면, 하기 화합물이 있다.

[1116]

[화학식 328]



[1117]

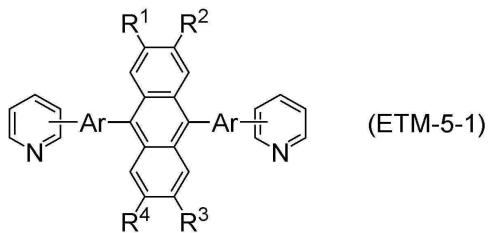
이) B0계 유도체는 공지의 원료와 공지의 합성 방법을 사용하여 제조할 수 있다.

[1119]

<안트라센 유도체>

[1120] 안트라센 유도체에 1개는, 예를 들면, 하기 식(ETM-5-1)으로 표시되는 화합물이다.

[1121] [화학식 329]

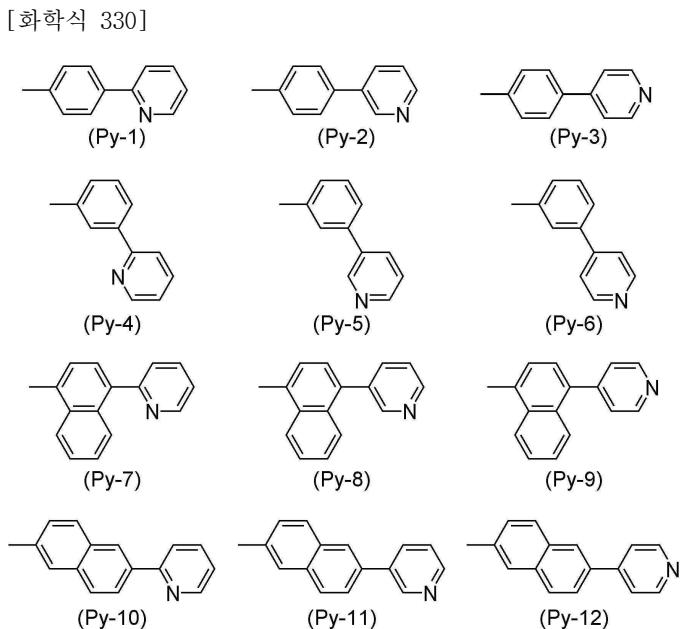


[1122]

[1123] Ar은, 각각 독립적으로, 2가의 벤젠 또는 나프탈렌이며, R¹~R⁴는, 각각 독립적으로, 수소, 탄소수 1~6의 알킬, 탄소수 3~6의 시클로알킬 또는 탄소수 6~20의 아릴이다.

[1124] Ar은, 각각 독립적으로, 2가의 벤젠 또는 나프탈렌으로부터 적절하게 선택할 수 있고, 2개의 Ar이 상이해도 되고 동일해도 되지만, 안트라센 유도체의 합성의 용이성의 관점에서는 동일한 것이 바람직하다. Ar은 피리딘과 결합하여, 「Ar 및 피리딘으로 이루어지는 부위」를 형성하고 있고, 이 부위는 예를 들면 하기 식(Py-1)~식(Py-12) 중 어느 하나로 표시되는 기로서 안트라센에 결합되어 있다.

[1125]



[1126]

[1127] 이들 기 중에서도, 상기 식(Py-1)~식(Py-9) 중 어느 하나로 표시되는 기가 바람직하고, 상기 식(Py-1)~식(Py-6) 중 어느 하나로 표시되는 기가 보다 바람직하다. 안트라센에 결합하는 2개의 「Ar 및 피리딘으로 이루어지는 부위」는, 그 구조가 동일해도 되고 상이해도 되지만, 안트라센 유도체의 합성의 용이성의 관점에서는 동일한 구조인 것이 바람직하다. 다만, 소자 특성의 관점에서는, 2개의 「Ar 및 피리딘으로 이루어지는 부위」의 구조가 동일해도 되고 상이해도 된다.

[1128]

R¹~R⁴에서의 탄소수 1~6의 알킬에 대해서는 직쇄 및 분지쇄 중 어느 하나라도 된다. 즉, 탄소수 1~6의 직쇄 알킬 또는 탄소수 3~6의 분지쇄 알킬이다. 보다 바람직하게는, 탄소수 1~4의 알킬(탄소수 3~4의 분지쇄 알킬)이다. 구체예로서는, 메틸, 에틸, n-프로필, 이소프로필, n-부틸, 이소부틸, sec-부틸, tert-부틸, n-펜틸, 이소펜틸, 네오펜틸, tert-펜틸, n-헥실, 1-메틸펜틸, 4-메틸-2-펜틸, 3,3-디메틸부틸, 또는 2-에틸부틸 등을 들 수 있고, 메틸, 에틸, n-프로필, 이소프로필, n-부틸, 이소부틸, sec-부틸, 또는 tert-부틸이 바람직하고, 메틸, 에틸, 또는 tert-부틸이 보다 바람직하다.

[1129]

R¹~R⁴에서의 탄소수 3~6의 시클로알킬의 구체예로서는, 시클로프로필, 시클로부틸, 시클로펜틸, 시클로헥실, 메틸시클로펜틸, 시클로헵틸, 메틸시클로헥실, 시클로옥틸 또는 디메틸시클로헥실 등을 들 수 있다.

[1130]

R¹~R⁴에서의 탄소수 6~20의 아릴에 대해서는, 탄소수 6~16의 아릴이 바람직하고, 탄소수 6~12의 아릴이 보다

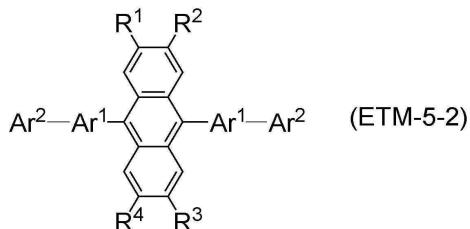
바람직하고, 탄소수 6~10의 아릴이 특히 바람직하다.

[1131] 「탄소수 6~20의 아릴」의 구체예로서는, 단환계 아릴인 페닐, (o-, m-, p-)톨릴, (2,3-, 2,4-, 2,5-, 2,6-, 3,4-, 3, 5-)크실릴, 메시틸(2,4,6-트리메틸페닐), (o-, m-, p-)쿠메닐, 2환계 아릴인 (2-, 3-, 4-)비페닐릴, 축합 2환계 아릴인 (1-, 2-)나프틸, 3환계 아릴인 터페닐릴(m-터페닐-2'-일, m-터페닐-4'-일, m-터페닐-5'-일, o-터페닐-3'-일, o-터페닐-4'-일, p-터페닐-2'-일, m-터페닐-3-일, m-터페닐-4-일, o-터페닐-2-일, o-터페닐-3-일, o-터페닐-4-일, p-터페닐-2-일, p-터페닐-3-일, p-터페닐-4-일), 축합 3환계 아릴인, 안트라센-(1-, 2-, 9-)일, 아세나프틸렌-(1-, 3-, 4-, 5-)일, 플루오렌-(1-, 2-, 3-, 4-, 9-)일, 페닐렌-(1-, 2-)일, (1-, 2-, 3-, 4-, 9-)페난트릴, 축합 4환계 아릴인 트리페닐렌-(1-, 2-)일, 피렌-(1-, 2-, 4-)일, 테트라센-(1-, 2-, 5-)일, 축합 5환계 아릴인 폐릴렌-(1-, 2-, 3-)일 등을 들 수 있다.

[1132] 바람직한 「탄소수 6~20의 아릴」은, 페닐, 비페닐릴, 터페닐릴 또는 나프틸이며, 보다 바람직하게는, 페닐, 비페닐릴, 1-나프틸, 2-나프틸 또는 m-터페닐-5'-일이며, 더욱 바람직하게는, 페닐, 비페닐릴, 1-나프틸 또는 2-나프틸이며, 가장 바람직하게는 페닐이다.

[1133] 안트라센 유도체의 하나는, 예를 들면, 하기 식(ETM-5-2)으로 표시되는 화합물이다.

[1134] [화학식 331]



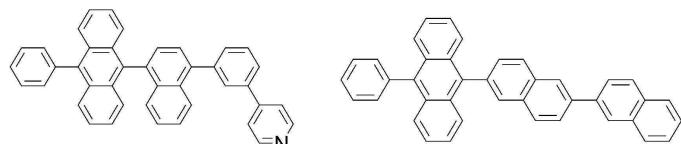
[1135] Ar¹은, 각각 독립적으로, 단결합, 2가의 벤젠, 나프탈렌, 안트라센, 플루오렌, 또는 페닐렌이다.

[1136] Ar²는, 각각 독립적으로, 탄소수 6~20의 아릴이며, 상기 식(ETM-5-1)에서의 「탄소수 6~20의 아릴」과 동일한 설명을 인용할 수 있다. 탄소수 6~16의 아릴이 바람직하고, 탄소수 6~12의 아릴이 보다 바람직하고, 탄소수 6~10의 아릴이 특히 바람직하다. 구체예로서는, 페닐, 비페닐릴, 나프틸, 터페닐릴, 안트라세닐, 아세나프틸레닐, 플루오레닐, 페닐레닐, 페난트릴, 트리페닐레닐, 피렌, 테트라세닐, 폐릴레닐 등을 들 수 있다.

[1137] R¹~R⁴은, 각각 독립적으로, 수소, 탄소수 1~6의 알킬, 탄소수 3~6의 시클로알킬 또는 탄소수 6~20의 아릴이며, 상기 식(ETM-5-1)에서의 설명을 인용할 수 있다.

[1138] 이들 안트라센 유도체의 구체예로서는, 예를 들면 하기 화합물이 있다.

[1139] [화학식 332]

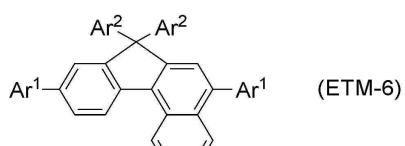


[1140] 이들 안트라센 유도체는 공지의 원료와 공지의 합성 방법을 사용하여 제조할 수 있다.

[1141] <벤조플루오렌 유도체>

[1142] 벤조플루오렌 유도체는, 예를 들면 하기 식(ETM-6)으로 표시되는 화합물이다.

[1143] [화학식 333]

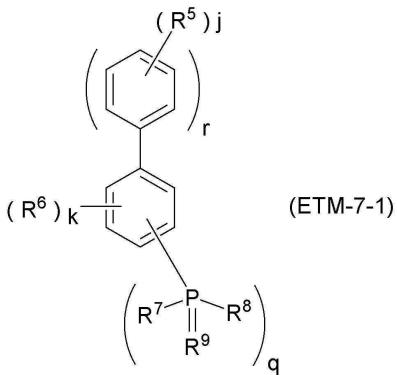


[1144]

- [1147] Ar¹은, 각각 독립적으로, 탄소수 6~20의 아릴이며, 상기 식(ETM-5-1)에서의 「탄소수 6~20의 아릴」과 동일한 설명을 인용할 수 있다. 탄소수 6~16의 아릴이 바람직하고, 탄소수 6~12의 아릴이 보다 바람직하고, 탄소수 6~10의 아릴이 특히 바람직하다. 구체예로서는, 폐닐, 비페닐릴, 나프틸, 터페닐릴, 안트라세닐, 아세나프틸레닐, 플루오레닐, 폐날레닐, 폐난트릴, 트리페닐레닐, 피레닐, 테트라세닐, 폐릴레닐 등을 들 수 있다.
- [1148] Ar²는, 각각 독립적으로, 수소, 알킬(바람직하게는 탄소수 1~24의 알킬), 시클로알킬(바람직하게는 탄소수 3~12의 시클로알킬) 또는 아릴(바람직하게는 탄소수 6~30의 아릴)이며, 2개의 Ar²는 결합하여 환을 형성하고 있어도 된다.
- [1149] Ar²에서의 「알킬」로서는, 칙쇄 및 분지쇄 중 어느 것이라도 되고, 예를 들면, 탄소수 1~24의 칙쇄 알킬 또는 탄소수 3~24의 분지쇄 알킬이 있다. 바람직한 「알킬」은, 탄소수 1~18의 알킬(탄소수 3~18의 분지쇄 알킬)이다. 보다 바람직한 「알킬」은, 탄소수 1~12의 알킬(탄소수 3~12의 분지쇄 알킬)이다. 더욱 바람직한 「알킬」은, 탄소수 1~6의 알킬(탄소수 3~6의 분지쇄 알킬)이다. 특히 바람직한 「알킬」은, 탄소수 1~4의 알킬(탄소수 3~4의 분지쇄 알킬)이다. 구체적인 「알킬」로서는, 메틸, 에틸, n-프로필, 이소프로필, n-부틸, 이소부틸, sec-부틸, tert-부틸, n-펜틸, 이소펜틸, 네오펜틸, tert-펜틸, n-헥실, 1-메틸펜틸, 4-메틸-2-펜틸, 3,3-디메틸부틸, 2-에틸부틸, n-헵틸, 1-메틸헵실 등을 예로 들 수 있다.
- [1150] Ar²에서의 「시클로알킬」로서는, 예를 들면 탄소수 3~12의 시클로알킬이 있다. 바람직한 「시클로알킬」은, 탄소수 3~10의 시클로알킬이다. 보다 바람직한 「시클로알킬」은, 탄소수 3~8의 시클로알킬이다. 더욱 바람직한 「시클로알킬」은, 탄소수 3~6의 시클로알킬이다. 구체적인 「시클로알킬」로서는, 시클로프로필, 시클로부틸, 시클로펜틸, 시클로헥실, 메틸시클로펜틸, 시클로헵틸, 메틸시클로헥실, 시클로옥틸 또는 디메틸시클로헥실 등을 예로 들 수 있다.
- [1151] Ar²에서의 「아릴」로서는, 바람직한 아릴은 탄소수 6~30의 아릴이며, 보다 바람직한 아릴은 탄소수 6~18의 아릴이며, 더욱 바람직하게는 탄소수 6~14의 아릴이며, 특히 바람직하게는 탄소수 6~12의 아릴이다.
- [1152] 구체적인 「탄소수 6~30의 아릴」로서는, 폐닐, 나프틸, 아세나프틸레닐, 플루오레닐, 폐날레닐, 폐난트릴, 트리페닐레닐, 피레닐, 나프타세닐, 폐릴레닐, 펜타세닐 등을 예로 들 수 있다.
- [1153] 2개의 Ar²은 결합하여 환을 형성하고 있어도 되고, 그 결과, 플루오렌 골격의 5원환에는, 시클로부탄, 시클로펜탄, 시클로펜텐, 시클로펜타디엔, 시클로헥산, 플루오렌 또는 인덴 등이 스피로 결합하고 있어도 된다.
- [1154] 이 벤조플루오렌 유도체의 구체예로서는, 예를 들면 하기 화합물이 있다.
- [1155] [화학식 334]
-
- [1156] 이 벤조플루오렌 유도체는 공지의 원료와 공지의 합성 방법을 사용하여 제조할 수 있다.
- [1157] <포스핀옥사이드 유도체>
- [1158] 포스핀옥사이드 유도체는, 예를 들면 하기 식(ETM-7-1)으로 표시되는 화합물이다.
- [1159] 상세한 것은 국제공개 제2013/079217호 공보에도 기재되어 있다.

[1161]

[화학식 335]



[1162]

R^5 는, 치환 또는 무치환의, 탄소수 1~20의 알킬, 탄소수 3~20의 시클로알킬, 탄소수 6~20의 아릴 또는 탄소수 5~20의 헤테로아릴이며,

R^6 는, CN, 치환 또는 무치환의, 탄소수 1~20의 알킬, 탄소수 3~20의 시클로알킬, 탄소수 1~20의 헤테로알킬, 탄소수 6~20의 아릴, 탄소수 5~20의 헤�테로아릴, 탄소수 1~20의 알콕시 또는 탄소수 6~20의 아릴옥시이며,

R^7 및 R^8 은, 각각 독립적으로, 치환 또는 무치환의, 탄소수 6~20의 아릴 또는 탄소수 5~20의 헤�테로아릴이며,

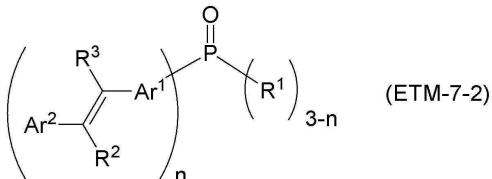
R^9 은 산소 또는 유황이며,

j 는 0 또는 1이며, k 는 0 또는 1이며, r 은 0~4의 정수이며, q 는 1~3의 정수이다.

[1168] 여기서, 치환되어 있는 경우의 치환기로서는, 아릴, 헤테로아릴, 알킬 또는 시클로알킬 등을 예로 들 수 있다.

[1169] 포스핀옥사이드 유도체는, 예를 들면, 하기 식(ETM-7-2)으로 표시되는 화합물이라도 된다.

[1170] [화학식 336]



[1171]

$R^1 \sim R^3$ 는, 동일해도 되고 상이해도 되며, 수소, 알킬기, 시클로알킬기, 아랄킬기, 알케닐기, 시클로알케닐기, 알키닐기, 알콕시기, 알킬티오기, 시클로알킬티오기, 아릴에테르기, 아릴티오에테르기, 아릴기, 복소환기, 할로겐, 시아노기, 알데히드기, 카르보닐기, 카르복실기, 아미노기, 니트로기, 질린기, 및 인접 치환기와의 사이에 형성되는 축합환 중에서 선택된다.

[1173] Ar^1 은, 동일해도 되고 상이해도 되며, 아릴렌기 또는 헤테로아릴렌기이며, Ar^2 는, 동일해도 되고 상이해도 되며, 아릴기 또는 헤테로아릴기이다. 다만, Ar^1 및 Ar^2 중 적어도 한쪽은 치환기를 가지고 있거나, 또는 인접 치환기와의 사이에 축합환을 형성하고 있다. n 은 0~3의 정수이며, n 이 0일 때 불포화 구조 부분은 존재하지 않고, n 이 3일 때 R^1 은 존재하지 않는다.

[1174] 이들 치환기 중에서, 알킬기는, 예를 들면, 메틸기, 에틸기, 프로필기, 부틸기 등의 포화 지방족 탄화 수소기를 나타내고, 이것은 무치환이라도 되고 치환되어 있어도 상관없다. 치환되어 있는 경우의 치환기에는 특별히 제한은 없고, 예를 들면, 알킬기, 아릴기, 복소환기 등이 있고, 이 점은, 이하의 기재에서도 공통된다. 또한, 알킬기의 탄소수는 특별히 한정되지 않지만, 입수의 용이성이나 비용의 점에서, 통상, 1~20의 범위이다.

[1175] 또한, 시클로알킬기는, 예를 들면, 시클로프로필, 시클로헥실, 노르보르닐, 아다만틸 등의 포화 지환식 탄화 수소기를 나타내고, 이것은 무치환이라도 되고 치환되어 있어도 상관없다. 알킬기 부분의 탄소수는 특별히 한정되

지 않지만, 통상, 3~20의 범위이다.

[1176] 또한, 아랄킬기는, 예를 들면, 벤질기, 폐닐에틸기 등의 지방족 탄화 수소를 개재한 방향족 탄화 수소기를 나타내고, 지방족 탄화 수소와 방향족 탄화 수소는 모두 무치환이라도 되고 치환되어 있어도 상관없다. 지방족 부분의 탄소수는 특별히 한정되지 않지만, 통상, 1~20의 범위이다.

[1177] 또한, 알케닐기는, 예를 들면, 비닐기, 알릴기, 부타디에닐기 등의 이중 결합을 포함하는 불포화지방족탄화 수소기를 나타내고, 이것은 무치환이라도 되고 치환되어 있어도 상관없다. 알케닐기의 탄소수는 특별히 한정되지 않지만, 통상, 2~20의 범위이다.

[1178] 또한, 시클로알케닐기는, 예를 들면, 시클로펜테닐기, 시클로펜타디에닐기, 시클로헥센기 등의 이중 결합을 포함하는 불포화 지환식 탄화 수소기를 나타내고, 이것은 무치환이라도 되고 치환되어 있어도 상관없다.

[1179] 또한, 알키닐기는, 예를 들면, 아세틸레닐기 등의 3중 결합을 포함하는 불포화 지방족 탄화 수소기를 나타내고, 이것은 무치환이라도 되고 치환되어 있어도 상관없다. 알키닐기의 탄소수는 특별히 한정되지 않지만, 통상, 2~20의 범위이다.

[1180] 또한, 알콕시기는, 예를 들면, 메톡시기 등의 에테르 결합을 통한 지방족 탄화 수소기를 나타내고, 지방족 탄화 수소기는 무치환이라도 되고 치환되어 있어도 상관없다. 알콕시기의 탄소수는 특별히 한정되지 않지만, 통상, 1~20의 범위이다.

[1181] 또한, 알킬티오기는, 알콕시기의 에테르 결합의 산소 원자가 유황 원자로 치환된 것이다.

[1182] 또한, 시클로알킬티오기는, 시클로알콕시기의 에테르 결합의 산소 원자가 유황 원자로 치환된 것이다.

[1183] 또한, 아릴에테르기는, 예를 들면, 폐녹시기 등의 에테르 결합을 통한 방향족 탄화 수소기를 나타내고, 방향족 탄화 수소기는 무치환이라도 되고 치환되어 있어도 상관없다. 아릴에테르기의 탄소수는 특별히 한정되지 않지만, 통상, 6~40의 범위이다.

[1184] 또한, 아릴티오에테르기는, 아릴에테르기의 에테르 결합의 산소 원자가 유황 원자로 치환된 것이다.

[1185] 또한, 아릴기는, 예를 들면, 폐닐기, 나프틸기, 비페닐릴기, 폐난트릴기, 터페닐기, 피페닐기 등의 방향족 탄화 수소기를 나타낸다. 아릴기는, 무치환이라도 되고 치환되어 있어도 상관없다. 아릴기의 탄소수는 특별히 한정되지 않지만, 통상, 6~40의 범위이다.

[1186] 또한, 복소환기는, 예를 들면, 퓨라닐기, 티오페닐기, 옥사졸릴기, 피리딜 기, 퀴놀리닐기, 카르바졸릴기 등의 탄소 이외의 원자를 가지는 환형 구조기를 나타내고, 이것은 무치환이라도 되고 치환되어 있어도 상관없다. 복소환기의 탄소수는 특별히 한정되지 않지만, 통상, 2~30의 범위이다.

[1187] 할로겐은, 불소, 염소, 브롬, 요오드를 나타낸다.

[1188] 알데히드기, 카르보닐기, 아미노기에는, 지방족 탄화 수소, 지환식 탄화 수소, 방향족 탄화 수소, 복소환 등으로 치환된 기도 포함할 수 있다.

[1189] 또한, 지방족 탄화 수소, 지환식 탄화 수소, 방향족 탄화 수소, 복소환은 무치환이라도 되고 치환되어 있어도 상관없다.

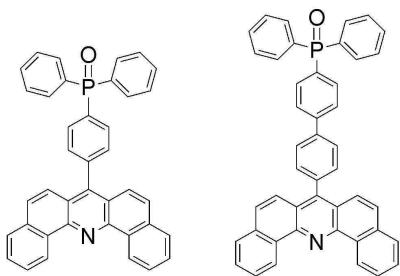
[1190] 실릴기는, 예를 들면, 트리메틸실릴기 등의 규소 화합물기를 나타내고, 이것은 무치환이라도 되고 치환되어 있어도 상관없다. 실릴기의 탄소수는 특별히 한정되지 않지만, 통상, 3~20의 범위이다. 또한, 규소수는, 통상, 1~6이다.

[1191] 인접 치환기와의 사이에 형성되는 축합환은, 예를 들면, Ar^1 과 R^2 , Ar^1 과 R^3 , Ar^2 와 R^2 , Ar^2 와 R^3 , R^2 와 R^3 , Ar^1 과 Ar^2 등의 사이에서 형성된 공역 또는 비공역의 축합환이다. 여기서, n 이 1인 경우, 2개의 R 끼리 공역 또는 비공역의 축합환을 형성해도 된다. 이들 축합환은, 환내 구조에 질소, 산소, 유황 원자를 포함해도 되고, 또한 다른 환과 축합해도 된다.

[1192] 이 포스핀옥사이드 유도체의 구체예로서는, 예를 들면 하기 화합물이 있다.

[1193]

[화학식 337]



[1194]

이 포스핀옥사이드 유도체는 공지의 원료와 공지의 합성 방법을 사용하여 제조할 수 있다.

[1195]

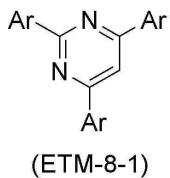
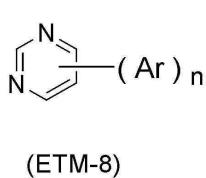
<피리미딘 유도체>

[1196]

피리미딘 유도체는, 예를 들면 하기 식(ETM-8)으로 표시되는 화합물이며, 바람직하게는 하기 식(ETM-8-1)으로 표시되는 화합물이다. 상세한 것은 국제공개 제2011/021689호 공보에도 기재되어 있다.

[1197]

[화학식 338]



[1198]

Ar은, 각각 독립적으로, 치환되어 있어도 되는 아릴, 또는 치환되어 있어도 되는 헤테로아릴이다. n은 1~4의 정수이며, 바람직하게는 1~3의 정수이며, 보다 바람직하게는 2 또는 3이다.

[1199]

「치환되어 있어도 되는 아릴」의 「아릴」로서는, 예를 들면, 탄소수 6~30의 아릴이 있고, 바람직하게는 탄소수 6~24의 아릴, 보다 바람직하게는 탄소수 6~20의 아릴, 더욱 바람직하게는 탄소수 6~12의 아릴이다.

[1200]

구체적인 「아릴」로서는, 단환계 아릴인 폐닐, 2환계 아릴인 (2-, 3-, 4-)비페닐릴, 축합 2환계 아릴인 (1-, 2-)나프틸, 3환계 아릴인 터페닐릴(*m*-터페닐-2'-일, *m*-터페닐-4'-일, *m*-터페닐-5'-일, o-터페닐-3'-일, o-터페닐-4'-일, p-터페닐-2'-일, *m*-터페닐-2-일, *m*-터페닐-3-일, *m*-터페닐-4-일, o-터페닐-2-일, o-터페닐-3-일, o-터페닐-4-일, p-터페닐-2-일, p-터페닐-3-일, p-터페닐-4-일), 축합 3환계 아릴인, 아세나프틸렌-(1-, 3-, 4-, 5-)일, 플루오レン-(1-, 2-, 3-, 4-, 9-)일, 폐날렌-(1-, 2-)일, (1-, 2-, 3-, 4-, 9-)폐난트릴, 4환계 아릴인 쿼터페닐릴 (5'-페닐-*m*-터페닐-2-일, 5'-페닐-*m*-터페닐-3-일, 5'-페닐-*m*-터페닐-4-일, *m*-쿼터페닐릴), 축합 4환계 아릴인 트리페닐렌-(1-, 2-)일, 피렌-(1-, 2-, 4-)일, 나프타센-(1-, 2-, 5-)일, 축합 5환계 아릴인 폐릴렌-(1-, 2-, 3-)일, 웬타센-(1-, 2-, 5-, 6-)일 등을 예로 들 수 있다.

[1201]

「치환되어 있어도 되는 헤테로아릴」의 「헤테로아릴」로서는, 예를 들면, 탄소수 2~30의 헤테로아릴이 있고, 탄소수 2~25의 헤테로아릴이 바람직하고, 탄소수 2~20의 헤�테로아릴이 보다 바람직하고, 탄소수 2~15의 헤테로아릴이 더욱 바람직하고, 탄소수 2~10의 헤�테로아릴이 특히 바람직하다. 또한, 헤테로아릴로서는, 예를 들면 환 구조 원자로서 탄소 이외에 산소, 유황 및 질소로부터 선택되는 헤테로 원자를 1 내지 5 개 함유하는 복소환 등이 있다.

[1202]

구체적인 헤테로아릴로서는, 예를 들면, 퓨릴, 티에닐, 피롤릴, 옥사졸릴, 이소옥사졸릴, 티아졸릴, 이소티아졸릴, 이미다졸릴, 피라졸릴, 옥사디아졸릴, 퓨라자닐, 티아디아졸릴, 트리아졸릴, 테트라졸릴, 피리딜, 피리미디닐, 피리다지닐, 피라지닐, 트리아지닐, 벤조퓨라닐, 이소벤조퓨라닐, 벤조[b]티에닐, 인돌릴, 이소인돌릴, 1H-인디졸릴, 벤즈이미다졸릴, 벤즈옥사졸릴, 벤조티아졸릴, 1H-벤조트리아졸릴, 퀴놀릴, 이소퀴놀릴, 신놀릴, 퀴나졸릴, 퀴녹살리닐, 프탈라지닐, 나프티리디닐, 퓨리닐, 프테리디닐, 카르바졸릴, 아크리디닐, 폐녹사지닐, 폐노티아지닐, 폐나지닐, 폐녹사티이닐, 티안트레닐, 인돌리지닐 등이 있다.

[1203]

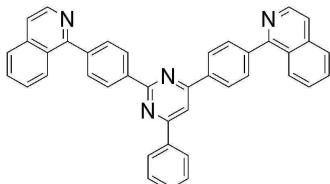
또한, 상기 아릴 및 헤�테로아릴은 치환되어 있어도 되고, 각각 예를 들면, 상기 아릴이나 헤�테로아릴로 치환되어 있어도 된다.

[1204]

이 피리미딘 유도체의 구체예로서는, 예를 들면 하기 화합물이 있다.

[1207]

[화학식 339]



[1208]

이 피리미딘 유도체는 공지의 원료와 공지의 합성 방법을 사용하여 제조할 수 있다.

[1209]

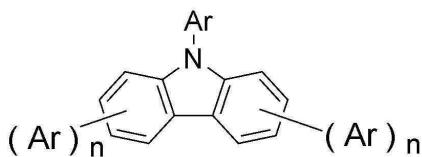
<카르바졸 유도체>

[1210]

카르바졸 유도체는, 예를 들면 하기 식(ETM-9)으로 표시되는 화합물, 또는 그것이 단결합 등으로 복수 결합한 다량체이다. 상세한 것은 미국공개공보 2014/0197386호 공보에 기재되어 있다.

[1211]

[화학식 340]



[1212]

(ETM-9)

[1213]

Ar은, 각각 독립적으로, 치환되어 있어도 되는 아릴, 또는 치환되어 있어도 되는 헤테로아릴이다. n은 독립적으로 0~4의 정수이며, 바람직하게는 0~3의 정수이며, 보다 바람직하게는 0 또는 1이다.

[1214]

「치환되어 있어도 되는 아릴」의 「아릴」로서는, 예를 들면, 탄소수 6~30의 아릴이 있고, 바람직하게는 탄소수 6~24의 아릴, 보다 바람직하게는 탄소수 6~20의 아릴, 더욱 바람직하게는 탄소수 6~12의 아릴이다.

[1215]

구체적인 「아릴」로서는, 단환계 아릴인 폐닐, 2환계 아릴인 (2-, 3-, 4-)비페닐릴, 축합 2환계 아릴인 (1-, 2-)나프틸, 3환계 아릴인 터페닐릴(m-터페닐-2'-일, m-터페닐-4'-일, m-터페닐-5'-일, o-터페닐-3'-일, o-터페닐-4'-일, p-터페닐-2'-일, m-터페닐-2-일, m-터페닐-3-일, m-터페닐-4-일, o-터페닐-2-일, o-터페닐-3-일, o-터페닐-4-일, p-터페닐-2-일, p-터페닐-3-일, p-터페닐-4-일), 축합 3환계 아릴인, 아세나프틸렌-(1-, 3-, 4-, 5-)일, 플루오렌-(1-, 2-, 3-, 4-, 9-)일, 폐닐렌-(1-, 2-)일, (1-, 2-, 3-, 4-, 9-)폐난트릴, 4환계 아릴인 쿼터페닐릴 (5'-페닐-m-터페닐-2-일, 5'-페닐-m-터페닐-3-일, 5'-페닐-m-터페닐-4-일, m-쿼터페닐릴), 축합 4환계 아릴인 트리페닐렌-(1-, 2-)일, 폐렌-(1-, 2-, 4-)일, 나프타센-(1-, 2-, 5-)일, 축합 5환계 아릴인 폐릴렌-(1-, 2-, 3-)일, 펜타센-(1-, 2-, 5-, 6-)일 등이 있다.

[1216]

「치환되어 있어도 되는 헤테로아릴」의 「헤테로아릴」로서는, 예를 들면, 탄소수 2~30의 헤테로아릴이 있고, 탄소수 2~25의 헤테로아릴이 바람직하고, 탄소수 2~20의 헤테로아릴이 보다 바람직하고, 탄소수 2~15의 헤테로아릴이 더욱 바람직하고, 탄소수 2~10의 헤테로아릴이 특히 바람직하다. 또한, 헤테로아릴로서는, 예를 들면 환 구조 원자로서 탄소 이외에 산소, 유황 및 질소로부터 선택되는 헤테로 원자를 1 내지 5 개 함유하는 복소환 등이 있다.

[1217]

구체적인 헤테로아릴로서는, 예를 들면, 퓨릴, 티에닐, 피롤릴, 옥사졸릴, 이소옥사졸릴, 티아졸릴, 이소티아졸릴, 이미다졸릴, 피라졸릴, 옥사디아졸릴, 퓨라자닐, 티아디아졸릴, 트리아졸릴, 테트라졸릴, 피리딜, 피리미디닐, 피리다지닐, 피라지닐, 트리아지닐, 벤조퓨라닐, 이소벤조퓨라닐, 벤조[b]티에닐, 인돌릴, 이소인돌릴, 1H-인다졸릴, 벤즈이미다졸릴, 벤즈옥사졸릴, 벤조티아졸릴, 1H-벤조트리아졸릴, 퀴놀릴, 이소퀴놀릴, 신놀릴, 퀴나졸릴, 퀴녹살리닐, 프탈라지닐, 나프티리디닐, 퓨리닐, 프테리디닐, 카르바졸릴, 아크리디닐, 폐녹사지닐, 폐노티아지닐, 폐나지닐, 폐녹사티이닐, 티안트레닐, 인돌리지닐 등이 있다.

[1218]

또한, 상기 아릴 및 헤테로아릴은 치환되어 있어도 되고, 각각 예를 들면, 상기 아릴이나 헤테로아릴로 치환되어 있어도 된다.

[1219]

카르바졸 유도체는, 상기 식(ETM-9)으로 표시되는 화합물이 단결합 등으로 복수 결합한 다량체라도 된다.

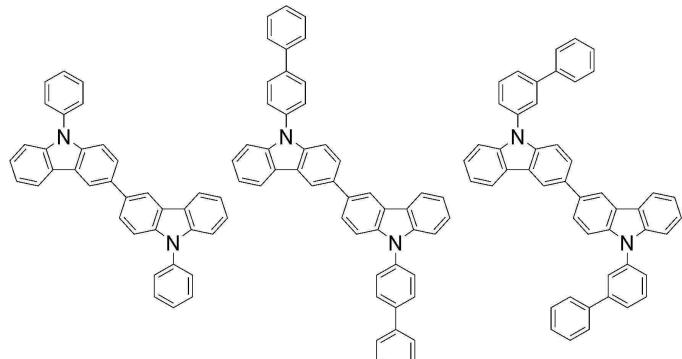
[1220]

이 경우에, 단결합 이외에, 아릴환(바람직하게는 다가의 벤젠환, 나프탈렌환, 안트라센환, 플루오렌환, 벤조플

루오렌환, 폐닐렌환, 폐난트렌환 또는 트리페닐렌환)으로 결합되어 있어도 된다.

[1222] 이 카르바졸 유도체의 구체예로서는, 예를 들면 하기 화합물이 있다.

[1223] [화학식 341]



[1224]

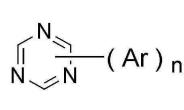
[1225] 이 카르바졸 유도체는 공지의 원료와 공지의 합성 방법을 사용하여 제조할 수 있다.

[1226] <트리아진 유도체>

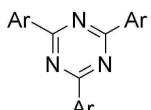
[1227] 트리아진 유도체는, 예를 들면 하기 식(ETM-10)으로 표시되는 화합물이며, 바람직하게는 하기 식(ETM-10-1)으로 표시되는 화합물이다. 상세한 것은 미국공개 공보 2011/0156013호 공보에 기재되어 있다.

[1228]

[화학식 342]



(ETM-10)



(ETM-10-1)

[1229]

[1230] Ar은, 각각 독립적으로, 치환되어 있어도 되는 아릴, 또는 치환되어 있어도 되는 헤테로아릴이다. n은 1~3의 정수이며, 바람직하게는 2 또는 3이다.

[1231]

「치환되어 있어도 되는 아릴」의 「아릴」로서는, 예를 들면, 탄소수 6~30의 아릴이 있고, 바람직하게는 탄소수 6~24의 아릴, 보다 바람직하게는 탄소수 6~20의 아릴, 더욱 바람직하게는 탄소수 6~12의 아릴이다.

[1232]

구체적인 「아릴」로서는, 단환계 아릴인 폐닐, 2환계 아릴인 (2-, 3-, 4-)비페닐릴, 축합 2환계 아릴인 (1-, 2-)나프틸, 3환계 아릴인 터페닐릴(*m*-터페닐-2'-일, *m*-터페닐-4'-일, *m*-터페닐-5'-일, *o*-터페닐-3'-일, *o*-터페닐-4'-일, *p*-터페닐-2'-일, *m*-터페닐-2-일, *m*-터페닐-3-일, *m*-터페닐-4-일, *o*-터페닐-2-일, *o*-터페닐-3-일, *o*-터페닐-4-일, *p*-터페닐-2-일, *p*-터페닐-3-일, *p*-터페닐-4-일), 축합 3환계 아릴인, 아세나프틸렌-(1-, 3-, 4-, 5-)일, 플루오렌-(1-, 2-, 3-, 4-, 9-)일, 폐닐렌-(1-, 2-)일, (1-, 2-, 3-, 4-, 9-)페난트릴, 4환계 아릴인 쿼터페닐릴 (5'-페닐-*m*-터페닐-2-일, 5'-페닐-*m*-터페닐-3-일, 5'-페닐-*m*-터페닐-4-일, *m*-쿼터페닐릴), 축합 4환계 아릴인 트리페닐렌-(1-, 2-)일, 피렌-(1-, 2-, 4-)일, 나프타센-(1-, 2-, 5-)일, 축합 5환계 아릴인 폐릴렌-(1-, 2-, 3-)일, 펜타센-(1-, 2-, 5-, 6-)일 등을 예로 들 수 있다.

[1233]

「치환되어 있어도 되는 헤테로아릴」의 「헤테로아릴」로서는, 예를 들면, 탄소수 2~30의 헤테로아릴이 있고, 탄소수 2~25의 헤테로아릴이 바람직하고, 탄소수 2~20의 헤테로아릴이 보다 바람직하고, 탄소수 2~15의 헤테로아릴이 더욱 바람직하고, 탄소수 2~10의 헤테로아릴이 특히 바람직하다. 또한, 헤테로아릴로서는, 예를 들면, 환 구성 원자로서 탄소 이외에 산소, 유황 및 질소로부터 선택되는 헤테로 원자를 1개 내지 5개 함유하는 복소환 등이 있다.

[1234]

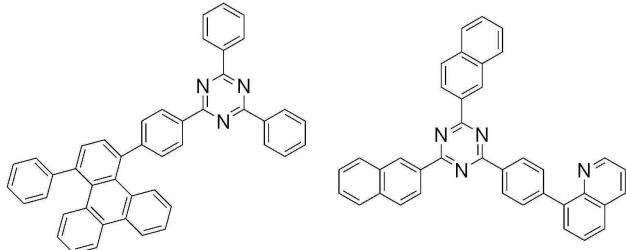
구체적인 헤테로아릴로서는, 예를 들면, 퓨릴, 티에닐, 피롤릴, 옥사졸릴, 이소옥사졸릴, 티아졸릴, 이소티아졸릴, 이미다졸릴, 피라졸릴, 옥사디아졸릴, 퓨라자닐, 티아디아졸릴, 트리아졸릴, 테트라졸릴, 피리딜, 피리미디닐, 피리다지닐, 피라지닐, 트리아지닐, 벤조퓨라닐, 이소벤조퓨라닐, 벤조[b]티에닐, 인돌릴, 이소인돌릴, 1H-인디졸릴, 벤즈이미다졸릴, 벤즈옥사졸릴, 벤조티아졸릴, 1H-벤조트리아졸릴, 퀴놀릴, 이소퀴놀릴, 신놀릴, 퀴나졸릴, 퀴녹살리닐, 프탈라지닐, 나프티리디닐, 퓨리닐, 프테리디닐, 카르바졸릴, 아크리디닐, 폐녹사지닐, 폐

노티아지닐, 페나지닐, 페녹사티이닐, 티안트레닐, 인돌리지닐 등이 있다.

[1235] 또한, 상기 아릴 및 헤테로아릴은 치환되어 있어도 되고, 각각 예를 들면, 상기 아릴이나 헤테로아릴로 치환되어 있어도 된다.

[1236] 이 트리아진 유도체의 구체예로서는, 예를 들면, 하기 화합물이 있다.

[1237] [화학식 343]



[1238]

[1239] 이 트리아진 유도체는 공지의 원료와 공지의 합성 방법을 사용하여 제조할 수 있다.

[1240] <벤즈이미다졸 유도체>

[1241] 벤즈이미다졸 유도체는, 예를 들면, 하기 식(ETM-11)으로 표시되는 화합물이다.

[1242] [화학식 344]

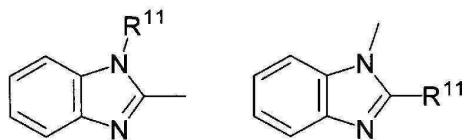
ϕ —(벤즈이미다졸계 치환기)ⁿ (ETM-11)

[1243]

[1244] ϕ 는, n가의 아릴환(바람직하게는 n가의 벤젠환, 나프탈렌환, 안트라센환, 플루오렌환, 벤조플루오렌환, 페날렌환, 페난트렌환 또는 트리페닐렌환)이며, n은 1~4의 정수이며, 「벤즈이미다졸계 치환기」는, 상기 식(ETM-2), 식(ETM-2-1) 및 식(ETM-2-2)에 있어서의 「페리딘계 치환기」 중의 페리딜기가 벤즈이미다졸기로 치환된 치환기이며, 벤즈이미다졸 유도체에 있어서의 1개 이상의 수소는 중수소로 치환되어 있어도 된다.

[1245]

[화학식 345]



벤즈이미다졸기

[1246]

[1247] 상기 벤즈이미다졸기에 있어서의 R¹¹은, 수소, 탄소수 1~24의 알킬, 탄소수 3~12의 시클로알킬 또는 탄소수 6~30의 아릴이며, 상기 식(ETM-2-1) 및 식(ETM-2-2)에 있어서의 R¹¹의 설명을 인용할 수 있다.

[1248]

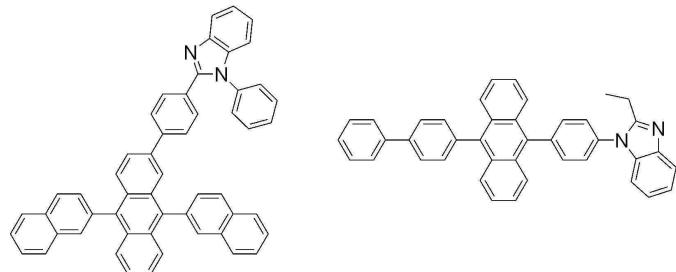
ϕ 는, 또한 안트라센환 또는 플루오렌환인 것이 바람직하고, 이 경우의 구조는 상기 식(ETM-2-1) 또는 식(ETM-2-2)에서의 설명을 인용할 수 있고, 각 식 중의 R¹¹~R¹⁸은 상기 식(ETM-2-1) 또는 식(ETM-2-2)에서의 설명을 인용할 수 있다. 또한, 상기 식(ETM-2-1) 또는 식(ETM-2-2)에서는 2개의 페리딘계 치환기가 결합한 형태로 설명되고 있지만, 이들을 벤즈이미다졸계 치환기로 치환할 때는, 양쪽의 페리딘계 치환기를 벤즈이미다졸계 치환기로 치환해도 되고(즉 n=2), 어느 하나의 페리딘계 치환기를 벤즈이미다졸계 치환기로 치환하고 다른 쪽의 페리딘계 치환기를 R¹¹~R¹⁸로 치환해도 된다(즉 n=1). 또한, 예를 들면, 상기 식(ETM-2-1)에 있어서의 R¹¹~R¹⁸ 중 하나 이상을 벤즈이미다졸계 치환기로 치환하고 「페리딘계 치환기」를 R¹¹~R¹⁸로 치환해도 된다.

[1249]

이 벤즈이미다졸 유도체의 구체예로서는, 예를 들면 1-페닐-2-(4-(10-페닐안트라센-9-일)페닐)-1H-벤조[d]이미다졸, 2-(4-(10-(나프탈렌-2-일)안트라센-9-일)페닐)-1-페닐-1H-벤조[d]이미다졸, 2-(3-(10-(나프탈렌-2-일)안트라센-9-일)페닐)-1-페닐-1H-벤조[d]이미다졸, 5-(10-(나프탈렌-2-일)안트라센-9-일)-1,2-디페닐-1H-벤조[d]이

미다졸, 1-(4-(10-(나프탈렌-2-일)안트라센-9-일)페닐)-2-페닐-1H-벤조[d]이미다졸, 2-(4-(9,10-디(나프탈렌-2-일)안트라센-2-일)페닐)-1-페닐-1H-벤조[d]이미다졸, 1-(4-(9,10-디(나프탈렌-2-일)안트라센-2-일)페닐)-2-페닐-1H-벤조[d]이미다졸, 5-(9,10-디(나프탈렌-2-일)-1,2-디페닐-1H-벤조[d]이미다졸 등이 있다.

[1250] [화학식 346]



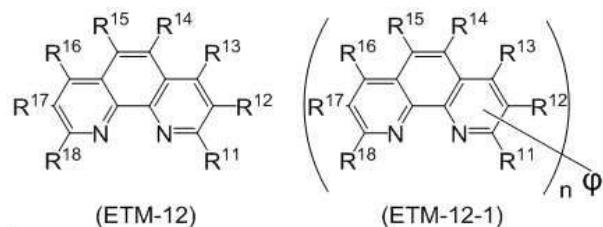
[1251]

[1252] 이 벤즈이미다졸 유도체는 공지의 원료와 공지의 합성 방법을 사용하여 제조할 수 있다.

[1253] <페난트롤린 유도체>

[1254] 페난트롤린 유도체는, 예를 들면, 하기 식(ETM-12) 또는 식(ETM-12-1)으로 표시되는 화합물이다. 상세한 것은 국제 공개2006/021982호 공보에 기재되어 있다.

[1255] [화학식 347]



[1256]

[1257] ϕ 는, n가의 아릴환(바람직하게는 n가의 벤젠환, 나프탈렌환, 안트라센환, 플루오렌환, 벤조플루오렌환, 페닐렌환, 페난트렌환 또는 트리페닐렌환)이며, n은 1~4의 정수이다.

[1258]

각 식의 $R^{11} \sim R^{18}$ 은, 각각 독립적으로, 수소, 알킬(바람직하게는 탄소수 1~24의 알킬), 시클로알킬(바람직하게는 탄소수 3~12의 시클로알킬) 또는 아릴(바람직하게는 탄소수 6~30의 아릴)이다. 또한, 상기 식(ETM-12-1)에 있어서는 $R^{11} \sim R^{18}$ 중 어느 하나가 아릴환인 ϕ 와 결합한다.

[1259]

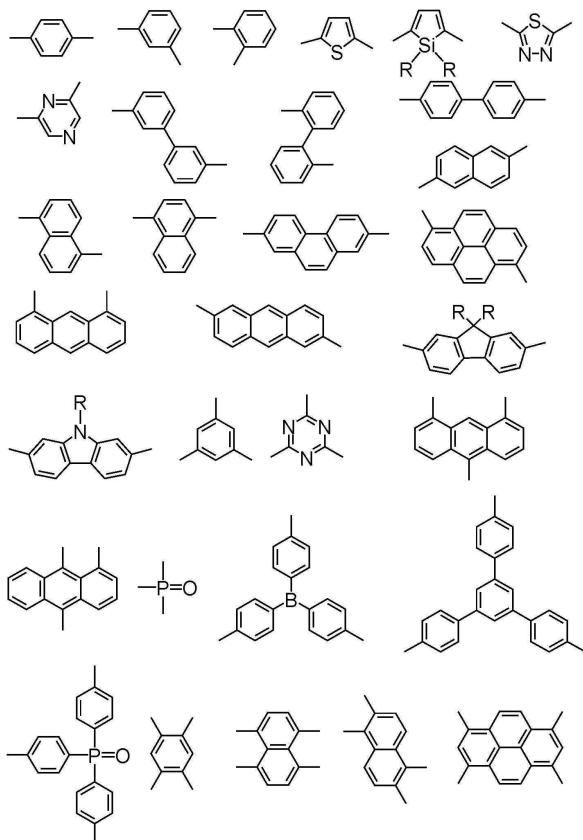
각각의 페난트롤린 유도체에 있어서의 1개 이상의 수소가 중수소로 치환되어 있어도 된다.

[1260]

$R^{11} \sim R^{18}$ 에 있어서의 알킬, 시클로알킬 및 아릴로서는, 상기 식(ETM-2)에 있어서의 $R^{11} \sim R^{18}$ 의 설명을 인용할 수 있다. 또한, ϕ 는 상기한 예 외에, 예를 들면, 이하의 구조식이 있다. 그리고, 하기 구조식 중의 R은, 각각 독립적으로, 수소, 메틸, 에틸, 이소프로필, 시클로헥실, 페닐, 1-나프틸, 2-나프틸, 비페닐릴 또는 터페닐릴이다.

[1261]

[화학식 348]



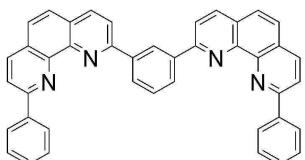
[1262]

[1263]

이 폐난트롤린 유도체의 구체예로서는, 예를 들면 4,7-디페닐-1,10-페난트롤린, 2,9-디메틸-4,7-디페닐-1,10-페난트롤린, 9,10-디(1,10-페난트롤린-2-일)안트라센, 2,6-디(1,10-페난트롤린-5-일)파리딘, 1,3,5-트리(1,10-페난트롤린-5-일)벤젠, 9,9'-디플루오로-비스(1,10-페난트롤린-5-일), 바소큐프로인이나 1,3-비스(2-페닐-1,10-페난트롤린-9-일)벤젠이나 하기 구조식으로 표시되는 화합물이 있다.

[1264]

[화학식 349]



[1265]

[1266]

이 폐난트롤린 유도체는 공지의 원료와 공지의 합성 방법을 사용하여 제조할 수 있다.

[1267]

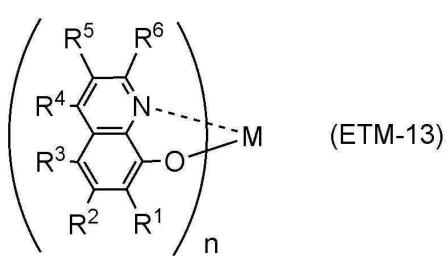
<퀴놀리놀계 금속 착체>

[1268]

퀴놀리놀계 금속 착체는, 예를 들면, 하기 일반식(ETM-13)으로 표시되는 화합물이 있다.

[1269]

[화학식 350]



[1270]

[1271]

식 중, $R^1 \sim R^6$ 는, 각각 독립적으로, 수소, 불소, 알킬, 시클로알킬, 아랄킬, 알케닐, 시아노, 알콕시 또는 아릴

이며, M은 Li, Al, Ga, Be 또는 Zn이며, n은 1~3의 정수이다.

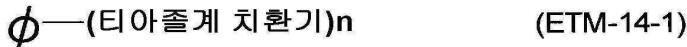
[1272] 퀴놀리놀계 금속 착체의 구체예로서는, 8-퀴놀리놀리튬, 트리스(8-퀴놀리놀레이트)알루미늄, 트리스(4-메틸-8-퀴놀리놀레이트)알루미늄, 트리스(5-메틸-8-퀴놀리놀레이트)알루미늄, 트리스(3,4-디메틸-8-퀴놀리놀레이트)알루미늄, 트리스(4,5-디메틸-8-퀴놀리놀레이트)알루미늄, 트리스(4,6-디메틸-8-퀴놀리놀레이트)알루미늄, 비스(2-메틸-8-퀴놀리놀레이트)(페놀레이트)알루미늄, 비스(2-메틸-8-퀴놀리놀레이트)(2-메틸페놀레이트)알루미늄, 비스(2-메틸-8-퀴놀리놀레이트)(3-메틸페놀레이트)알루미늄, 비스(2-메틸-8-퀴놀리놀레이트)(4-메틸페놀레이트)알루미늄, 비스(2-메틸-8-퀴놀리놀레이트)(3-페닐페놀레이트)알루미늄, 비스(2-메틸-8-퀴놀리놀레이트)(4-페닐페놀레이트)알루미늄, 비스(2-메틸-8-퀴놀리놀레이트)(2,3-디메틸페놀레이트)알루미늄, 비스(2-메틸-8-퀴놀리놀레이트)(2,6-디메틸페놀레이트)알루미늄, 비스(2-메틸-8-퀴놀리놀레이트)(3,4-디메틸페놀레이트)알루미늄, 비스(2-메틸-8-퀴놀리놀레이트)(3,5-디메틸페놀레이트)알루미늄, 비스(2-메틸-8-퀴놀리놀레이트)(3,5-디-tert-부틸페놀레이트)알루미늄, 비스(2-메틸-8-퀴놀리놀레이트)(2,6-디페닐페놀레이트)알루미늄, 비스(2-메틸-8-퀴놀리놀레이트)(2,4,6-트리페닐페놀레이트)알루미늄, 비스(2-메틸-8-퀴놀리놀레이트)(2,4,6-트리메틸페놀레이트)알루미늄, 비스(2-메틸-8-퀴놀리놀레이트)(1-나프톨레이트)알루미늄, 비스(2-메틸-8-퀴놀리놀레이트)(2-나프톨레이트)알루미늄, 비스(2,4-디메틸-8-퀴놀리놀레이트)(2-페닐페놀레이트)알루미늄, 비스(2,4-디메틸-8-퀴놀리놀레이트)(3-페닐페놀레이트)알루미늄, 비스(2,4-디메틸-8-퀴놀리놀레이트)(4-페닐페놀레이트)알루미늄, 비스(2,4-디메틸-8-퀴놀리놀레이트)(3,5-디메틸페놀레이트)알루미늄, 비스(2,4-디메틸-8-퀴놀리놀레이트)(3,5-디-tert-부틸페놀레이트)알루미늄, 비스(2-메틸-8-퀴놀리놀레이트)(2,4,6-트리페닐페놀레이트)알루미늄, 비스(2-메틸-8-퀴놀리놀레이트)(2,4,6-트리메틸페놀레이트)알루미늄, 비스(2-메틸-8-퀴놀리놀레이트)(1-나프톨레이트)알루미늄, 비스(2-메틸-8-퀴놀리놀레이트)(2-나프톨레이트)알루미늄, 비스(2,4-디메틸-8-퀴놀리놀레이트)(2-페닐페놀레이트)알루미늄, 비스(2,4-디메틸-8-퀴놀리놀레이트)(3-페닐페놀레이트)알루미늄, 비스(2,4-디메틸-8-퀴놀리놀레이트)(4-페닐페놀레이트)알루미늄, 비스(2,4-디메틸-8-퀴놀리놀레이트)(3,5-디-tert-부틸페놀레이트)알루미늄, 비스(2-메틸-8-퀴놀리놀레이트)알루미늄- μ -옥소-비스(2-메틸-8-퀴놀리놀레이트)알루미늄, 비스(2,4-디메틸-8-퀴놀리놀레이트)알루미늄- μ -옥소-비스(2,4-디메틸-8-퀴놀리놀레이트)알루미늄- μ -옥소-비스(2-메틸-4-에틸-8-퀴놀리놀레이트)알루미늄- μ -옥소-비스(2-메틸-4-에틸-8-퀴놀리놀레이트)알루미늄, 비스(2-메틸-4-메톡시-8-퀴놀리놀레이트)알루미늄- μ -옥소-비스(2-메틸-4-메톡시-8-퀴놀리놀레이트)알루미늄, 비스(2-메틸-5-시아노-8-퀴놀리놀레이트)알루미늄- μ -옥소-비스(2-메틸-5-시아노-8-퀴놀리놀레이트)알루미늄, 비스(2-메틸-5-트리플루오로메틸-8-퀴놀리놀레이트)알루미늄- μ -옥소-비스(2-메틸-5-트리플루오로메틸-8-퀴놀리놀레이트)알루미늄, 비스(10-하이드록시벤조[h]퀴놀린)베릴륨 등을 들 수 있다.

[1273] 이 퀴놀리놀계 금속 착체는 공지의 원료와 공지의 합성 방법을 사용하여 제조할 수 있다.

[1274] <티아졸 유도체 및 벤조티아졸 유도체>

[1275] 티아졸 유도체는, 예를 들면, 하기 식(ETM-14-1)으로 표시되는 화합물이다.

[1276] [화학식 351]

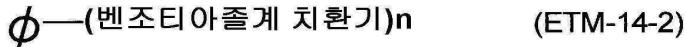


[1277]

[1278] 벤조티아졸 유도체는, 예를 들면, 하기 식(ETM-14-2)으로 표시되는 화합물이다.

[1279]

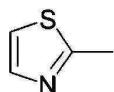
[화학식 352]



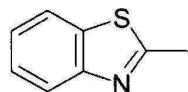
[1280]

[1281] 각 식의 ϕ 는, n가의 아릴환(바람직하게는 n가의 벤젠환, 나프탈렌환, 안트라센환, 플루오렌환, 벤조플루오렌환, 페닐렌환, 페난트렌환 또는 트리페닐렌환)이며, n은 1~4의 정수이며, 「티아졸계 치환기」나 「벤조티아졸계 치환기」는, 상기 식(ETM-2), 식(ETM-2-1) 및 식(ETM-2-2)에 있어서의 「피리딘계 치환기」 중의 피리딜기가 하기 티아졸기나 벤조티아졸기로 치환된 치환기이며, 티아졸 유도체 및 벤조티아졸 유도체에 있어서의 1개 이상의 수소가 중수소로 치환되어 있어도 된다.

[1282] [화학식 353]



티아졸기



벤조티아졸기

[1283]

- [1284] ϕ 는, 또한 안트라센환 또는 플루오렌환인 것이 바람직하고, 이 경우의 구조는 상기 식(ETM-2-1) 또는 식(ETM-2-2)에서의 설명을 인용할 수 있고, 각 식 중의 $R^{11} \sim R^{18}$ 은 상기 식(ETM-2-1) 또는 식(ETM-2-2)에서의 설명을 인용할 수 있다. 또한, 상기 식(ETM-2-1) 또는 식(ETM-2-2)에서는 2개의 피리딘계 치환기가 결합한 형태로 설명되고 있지만, 이들을 티아졸계 치환기(또는 벤조티아졸계 치환기)로 치환할 때는, 양쪽의 피리딘계 치환기를 티아졸계 치환기(또는 벤조티아졸계 치환기)로 치환해도 되고(즉 n=2), 어느 하나의 피리딘계 치환기를 티아졸계 치환기(또는 벤조티아졸계 치환기)로 치환하고 다른 쪽의 피리딘계 치환기를 $R^{11} \sim R^{18}$ 로 치환해도 된다(즉 n=1). 또한, 예를 들면, 상기 식(ETM-2-1)에 있어서의 $R^{11} \sim R^{18}$ 중 하나 이상을 티아졸계 치환기(또는 벤조티아졸계 치환기)로 치환하고 「피리딘계 치환기」를 $R^{11} \sim R^{18}$ 로 치환해도 된다.
- [1285] 이들 티아졸 유도체 또는 벤조티아졸 유도체는 공지의 원료와 공지의 합성 방법을 사용하여 제조할 수 있다.
- [1286] 전자수송층 또는 전자주입층에는, 전자수송층 또는 전자주입층을 형성하는 재료를 환원할 수 있는 물질을 더 포함해도 된다. 이 환원성 물질은, 일정한 환원성을 가지는 물질이라면, 다양한 물질이 사용되며, 예를 들면, 알칼리 금속, 알칼리토류 금속, 희토류 금속, 알칼리 금속의 산화물, 알칼리 금속의 할로겐화물, 알칼리토류 금속의 산화물, 알칼리토류 금속의 할로겐화물, 희토류 금속의 산화물, 희토류 금속의 할로겐화물, 알칼리 금속의 유기착체, 알칼리토류 금속의 유기착체 및 희토류 금속의 유기착체로 이루어지는 군으로부터 선택되는 적어도 1개를 바람직하게 사용할 수 있다.
- [1287] 바람직한 환원성 물질로서는, Na(일함수 2.36eV), K(일함수 2.28eV), Rb(일함수 2.16eV) 또는 Cs(일함수 1.95eV) 등의 알칼리 금속이나, Ca(일함수 2.9eV), Sr(일함수 2.0~2.5eV) 또는 Ba(일함수 2.52eV) 등의 알칼리토류 금속을 예로 들 수 있으며, 일함수가 2.9eV 이하인 물질이 특히 바람직하다. 이들 중, 보다 바람직한 환원성 물질은, K, Rb 또는 Cs의 알칼리 금속이며, 더욱 바람직하게는 Rb 또는 Cs이며, 가장 바람직한 것은 Cs이다. 이들 알칼리 금속은, 특히 환원 능력이 높고, 전자수송층 또는 전자주입층을 형성하는 재료로의 비교적 소량의 첨가에 의해, 유기 EL 소자에 있어서의 발광 휘도의 향상이나 장수명화가 도모된다. 또한, 일함수가 2.9eV 이하인 환원성 물질로서, 이들 2종 이상의 알칼리 금속의 조합도 바람직하고, 특히, Cs를 포함한 조합, 예를 들면, Cs와 Na, Cs와 K, Cs와 Rb, 또는 Cs와 Na와 K의 조합이 바람직하다. Cs를 포함하는 것에 의해, 환원 능력을 효율적으로 발휘할 수 있고, 전자수송층 또는 전자주입층을 형성하는 재료로의 첨가에 의해, 유기 EL 소자에 있어서의 발광 휘도의 향상이나 장수명화가 도모된다.
- [1288] <유기전계 발광소자에서의 음극>
- [1289] 음극(108)은, 전자주입층(107) 및 전자수송층(106)을 통하여, 발광층(105)에 전자를 주입하는 역할을 한다.
- [1290] 음극(108)을 형성하는 재료로서는, 전자를 유기층에 효율적으로 주입할 수 있는 물질이면 특별히 한정되지 않지만, 양극(102)을 형성하는 재료와 동일한 물질을 사용할 수 있다. 그 중에서도, 주석, 인듐, 칼슘, 알루미늄, 은, 동, 니켈, 크롬, 김, 백금, 철, 아연, 리튬, 나트륨, 칼륨, 세슘 및 마그네슘 등의 금속 또는 이들의 합금(마그네슘-은 합금, 마그네슘-인듐 합금, 불화 리튬/알루미늄 등의 알루미늄-리튬 합금 등) 등이 바람직하다. 전자 주입 효율을 높여 소자 특성을 향상시키기 위해서는, 리튬, 나트륨, 칼륨, 세슘, 칼슘, 마그네슘 또는 이들 낮은 일함수 금속을 포함하는 합금이 유효하다. 그러나, 이들 낮은 일함수 금속은 일반적으로 대기중에서 불안정한 경우가 많다. 이 점을 개선하기 위해, 예를 들면, 유기층에 미량의 리튬, 세슘이나 마그네슘을 도핑하여, 안정성이 높은 전극을 사용하는 방법이 알려져 있다. 그 외의 도편트로서는, 불화 리튬, 불화 세슘, 산화 리튬 및 산화 세슘과 같은 무기염도 사용할 수 있다. 다만, 이들로 한정되지 않는다.
- [1291] 또한, 전극 보호를 위해 백금, 금, 은, 동, 철, 주석, 알루미늄 및 인듐 등의 금속, 또는 이들 금속을 사용한 합금, 그리고 실리카, 티타니아 및 질화 규소 등의 무기물, 폴리비닐알코올, 염화 비닐, 탄화수소계 고분자 화합물 등을 적층하는 것을, 바람직한 예로서 들 수 있다. 이들 전극의 제작법도, 저항 가열, 전자 빔 증착, 스퍼터링, 이온 플레이팅 및 코팅 등, 도통할 수 있다면, 특별히 한정되지 않는다.
- [1292] <각 층에서 사용해도 되는 결착제>
- [1293] 이상의 정공 주입층, 정공 수송층, 발광층, 전자수송층 및 전자주입층에 사용되는 재료는 단독으로 각 층을 형성할 수 있지만, 고분자 결착제로서 폴리염화비닐, 폴리카보네이트, 폴리스티렌, 폴리(N-비닐카르바졸), 폴리메틸메타크릴레이트, 폴리부틸메타크릴레이트, 폴리에스테르, 폴리술폰, 폴리페닐렌옥사이드, 폴리부타디엔, 탄화수소 수지, 케톤 수지, 페녹시 수지, 폴리아미드, 에틸 셀룰로오스, 아세트산 비닐 수지, ABS 수지, 폴리우레탄

수지 등의 용제 가용성 수지나, 페놀 수지, 크실렌 수지, 석유 수지, 우레아 수지, 멜라민 수지, 불포화 폴리에스테르 수지, 알키드 수지, 에폭시 수지, 실리콘 수지 등의 경화성 수지 등에 분산시켜 사용하는 것도 가능하다.

[1294] <유기전계 발광소자의 제작 방법>

[1295] 유기전계 발광소자를 구성하는 각 층은, 각 층을 구성할 재료를 증착법(蒸着法), 저항 가열 증착, 전자빔 증착, 스퍼터링, 분자 적층법, 인쇄법, 스판코팅법 또는 캐스팅법, 코팅법 등의 방법으로 박막으로 함으로써, 형성할 수 있다. 이와 같이 하여 형성된 각 층의 막 두께에 대해서는 특별히 한정되지 않고, 재료의 성질에 따라 적절하게 설정할 수 있지만, 통상 2 nm~5000 nm의 범위이다. 막 두께는 통상, 수정 발진(發振)식 막 두께 측정 장치 등으로 측정할 수 있다. 증착법을 사용하여 박막화하는 경우, 그 증착 조건은, 재료의 종류, 막의 목적으로 하는 결정(結晶) 구조 및 회합 구조 등에 의해 따라 상이하다. 증착 조건은 일반적으로, 증착용 도가니의 가열 온도 +50~+400 °C, 진공도 10^{-6} ~ 10^{-3} Pa, 증착 속도 0.01~50 nm/초, 기판 온도 -150~+300 °C, 막 두께 2nm~5μm의 범위에서 적절하게 설정하는 것이 바람직하다.

[1296] <유기전계 발광소자의 응용예>

[1297] 또한, 본 발명은, 유기전계 발광소자를 구비한 표시 장치 또는 유기전계 발광소자를 구비한 조명 장치 등에도 응용할 수 있다.

[1298] 유기전계 발광소자를 구비한 표시 장치 또는 조명 장치는, 본 실시형태에 따른 유기전계 발광소자와 공지의 구동 장치를 접속하는 등 공지의 방법에 의해 제조할 수 있고, 직류 구동, 펄스 구동, 교류 구동 등 공지의 구동 방법을 적절하게 사용하여 구동할 수 있다.

[1299] 표시 장치로서는, 예를 들면, 컬러 평판 디스플레이 등의 패널 디스플레이, 플렉시블 컬러 유기 전계 발광(EL) 디스플레이 등의 플렉시블 디스플레이 등이 있다(예를 들면, 일본공개특허 평10-335066호 공보, 일본공개특허 제2003-321546호 공보, 일본공개특허 제2004-281086호 공보 등 참조). 또한, 디스플레이의 표시 방식으로서는, 예를 들면, 매트릭스 및/또는 세그먼트 방식 등이 있다. 그리고, 매트릭스 표시와 세그먼트 표시는 동일한 패널 중에 공존하고 있어도 된다.

[1300] 매트릭스에서는, 표시를 위한 화소가 격자형이나 모자이크형 등 2차원적으로 배치되어 있고, 화소의 집합으로 문자나 화상을 표시한다. 화소의 형상이나 사이즈는 용도에 따라 정해진다. 예를 들면, 컴퓨터, 모니터, 텔레비전의 화상 및 문자 표시에는, 통상 1변이 300μm 이하인 4각형 화소가 사용되고, 또한 표시 패널과 같은 대형 디스플레이의 경우에는, 1변이 mm 오더의 화소를 사용하게 된다. 흑백 표시의 경우에는, 동일 색의 화소를 배열하면 되지만, 컬러 표시의 경우에는, 적, 녹, 청색 화소를 나란히 표시시킨다. 이 경우에, 전형적으로는 멜타 타입과 스트라이프 타입이 있다. 그리고, 이 매트릭스의 구동 방법으로서는, 선 순차 구동 방법이나 액티브 매트릭스의 어느 쪽이라도 된다. 선 순차 구동 쪽이 구조가 간단한 이점이 있지만, 동작 특성을 고려한 경우, 액티브 매트릭스 쪽이 뛰어난 경우가 있어, 이것도 용도에 따라 구분하여 사용하는 것이 필요하다.

[1301] 세그먼트 방식(타입)에서는, 미리 결정된 정보를 표시하도록 패턴을 형성하고, 정해진 영역을 발광 시키게 된다. 예를 들면, 디지털 시계(digital clock)나 온도계에서의 시각이나 온도 표시, 오디오 기기나 전자 조리기 등의 동작 상태 표시 및 자동차의 패널 표시 등이 있다.

[1302] 조명 장치로서는, 예를 들면, 실내 조명 등의 조명 장치, 액정 표시 장치의 백라이트 등이 있다(예를 들면, 일본공개특허 제2003-257621호 공보, 일본공개특허 제2003-277741호 공보, 일본공개특허 제2004-119211호 공보 등 참조). 백라이트는, 주로 자발광하지 않는 표시 장치의 시인성(視認性)을 향상시킬 목적으로 사용되고, 액정 표시 장치, 시계, 오디오 장치, 자동차 패널, 표시판 및 표식 등에 사용된다. 특히, 액정 표시 장치, 그 중에서도 박형화가 과제로 되어 있는 컴퓨터용도의 백라이트로서는, 종래 방식이 형광등이나 도광판으로 이루어지고 있으므로 박형화가 곤란한 것을 고려하면, 본 실시형태에 따른 발광 소자를 사용한 백라이트는 박형이며 경량이 특징이 된다.

[1303] 3-2. 그 외의 유기 디바이스

[1304] 본 발명에 따른 다환 방향족 화합물은, 전술한 유기전계 발광소자 이외에, 유기 전계 효과 트랜지스터 또는 유기 박막 태양전지 등의 제작에 사용할 수 있다.

[1305] 유기 전계 효과 트랜지스터는, 전압 입력에 의해 발생시킨 전계에 의해 전류를 제어하는 트랜지스터이며, 소스

전극과 드레인 전극 이외에 게이트 전극이 설치되어 있다. 게이트 전극에 전압을 인가하면 전계가 생기고, 소스 전극과 드레인 전극 사이를 흐르는 전자(혹은 홀)의 흐름을 임의로 막아서 전류를 제어할 수 있는 트랜지스터이다. 전계 효과 트랜지스터는, 단순한 트랜지스터(바이폴라 트랜지스터(bipolar transistor))에 비교하여 소형화가 용이하며, 집적 회로 등을 구성하는 소자로서 자주 사용되고 있다.

[1306] 유기 전계 효과 트랜지스터의 구조는, 통상, 본 발명에 따른 다환 방향족 화합물을 사용하여 형성되는 유기 반도체 활성층에 접하여 소스 전극 및 드레인 전극이 형성되어 있고, 또한 유기 반도체 활성층에 접한 절연층(유전체층)을 협지하여 게이트 전극이 설치되어 있으면 된다. 그 소자 구조로서는, 예를 들면, 이하의 구조가 있다.

(1) 기판/게이트 전극/절연체층/소스 전극 · 드레인 전극/유기 반도체 활성층

[1308] (2) 기판/게이트 전극/절연체층/유기 반도체 활성층/소스 전극 · 드레인 전극

[1309] (3) 기판/유기 반도체 활성층/소스 전극 · 드레인 전극/절연체층/게이트 전극

[1310] (4) 기판/소스 전극 · 드레인 전극/유기 반도체 활성층/절연체층/게이트 전극

[1311] 이와 같이 구성된 유기 전계 효과 트랜지스터는, 액티브 매트릭스 구동 방식의 액정 모니터나 유기 발광 소자 디스플레이의 화소 구동 스위칭 소자 등으로서 적용할 수 있다.

[1312] 유기 박막 태양전지는, 유리 등의 투명 기판 상에 ITO 등의 양극, 홀 수송층, 광전 변환층, 전자수송층, 음극이 적층된 구조를 가진다. 광전 변환층은 양극 측에 p형 반도체층을 가지고, 음극 측에 n형 반도체층을 가지고 있다. 본 발명에 따른 다환 방향족 화합물은, 그 물성에 따라, 홀 수송층, p형 반도체층, n형 반도체층, 전자수송층의 재료로서 사용하는 것이 가능하다. 본 발명에 따른 다환 방향족 화합물은, 유기 박막 태양전지에 있어서 홀 수송 재료나 전자수송 재료로서 기능할 수 있다. 유기 박막 태양전지는, 상기한 것 이외에 홀 블록층, 전자 블록층, 전자주입층, 홀 주입층, 평활화층 등을 적절하게 구비하고 있어도 된다. 유기 박막 태양전지에는, 유기 박막 태양전지에 사용되는 기지(既知)의 재료를 적절하게 선택하고 조합하여 사용할 수 있다.

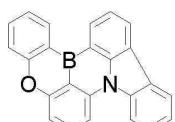
[1313] [실시예]

[1314] 이하, 본 발명을 실시예에 의해 구체적으로 설명하지만, 본 발명은 이를 실시예에 의해 전혀 한정되지 않는다. 이하는 실시예에서 합성한 화합물이다.

[1315] 합성예(1)

[1316] 화합물(BOCz-0001): 5-옥사-8b-아자-15b-보라벤조[a]나프토[1,2,3-hi]아세안트릴렌의 합성

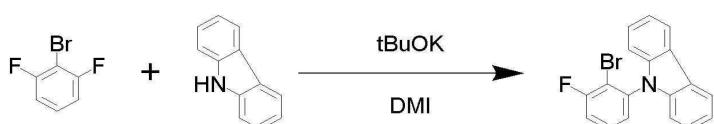
[1317] [화학식 354]



[1318] (BOCz-0001)

[1319] 질소 분위기 하, 1,6-디플루오로-2-브로모벤젠(1.68ml, 15mmol), 카르바졸(1.62g, 10mmol), tert-BuOK(1.68g, 15mmol) 및 1,3-디메틸-2-이미다졸리디논(DMI, 30ml)이 들어간 플라스크를 120°C로 가열하고, 20시간 교반했다. 반응용액을 실온까지 냉각하고, DMI를 감압 증류 제거한 후, 실리카겔쇼트페스컬럼(용리액: 헥산)을 사용하여 여과하고, 용매를 감압 증류 제거함으로써 9-(2-브로모-3-플루오로페닐)-9H-카르바졸(1.56g, 수율 56%)을 얻었다.

[1320] [화학식 355]



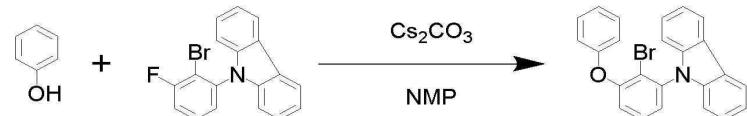
[1321]

[1322] NMR 측정에 의해 얻어진 화합물의 구조를 확인했다.

[1323] $^1\text{H-NMR}$ (400MHz, CDCl_3): $\delta=7.07(\text{d}, 2\text{H}), 7.30\text{-}7.36(\text{m}, 4\text{H}), 7.41(\text{t}, 2\text{H}), 7.51(\text{d}, 1\text{H}), 8.15(\text{d}, 2\text{H})$.

[1324] 질소 분위기 하, 폐놀(0.367g, 3.9mmol), 9-(2-브로모-3-플루오로페닐)-9H-카르바졸(1.02g, 3.0mmol), 탄산 세슘(1.47g, 4.5mmol) 및 N-메틸피롤리돈(NMP, 10ml)이 들어간 플라스크를 120°C로 가열하고, 20시간 교반했다. 반응용액을 실온까지 냉각하고 톨루엔(20ml)을 가한 후, 0.5N 수산화 나트륨 수용액(50ml)을 사용하여 3회 추출함으로써, 9-(2-브로모-3-페녹시페닐)-9H-카르바졸(0.862mg, 수율 70%)을 얻었다.

[1325] [화학식 356]



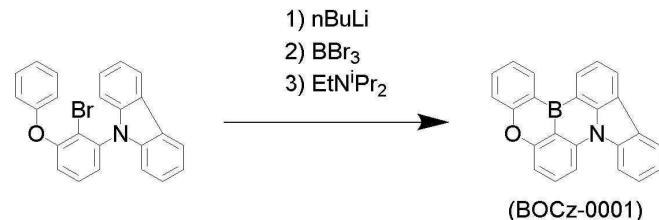
[1326]

[1327] NMR 측정에 의해 얻어진 화합물의 구조를 확인했다.

[1328] $^1\text{H-NMR}$ (500MHz, CDCl_3): $\delta=7.08\text{-}7.14(\text{m}, 5\text{H}), 7.19(\text{t}, 1\text{H}), 7.25\text{-}7.32(\text{m}, 3\text{H}), 7.39\text{-}7.45(\text{m}, 5\text{H}), 8.15(\text{d}, 2\text{H})$.

[1329] 질소 분위기 하, 9-(2-브로모-3-페녹시페닐)-9H-카르바졸(0.249g, 0.6mmol) 및 tert-부틸벤젠(3.0ml)이 들어간 플라스크에, 1.6M의 n-부틸리튬헥산 용액(0.41ml)을 -42°C에서 가하였다. 30분간 교반한 후, 0°C까지 승온(昇溫)하고, 30분간 감압 증류 제거함으로써 브롬화 부탄을 제거했다. 그 후, -42°C까지 냉각하고 3브롬화 붕소($62.4 \mu\text{l}$)를 가하고, 30분간 교반했다. 0°C까지 승온하고, N,N-디이소프로필에틸아민(0.21ml)을 가하고 100°C에서 15시간 가열 교반했다. 그 후, 실리카겔쇼트패스컬럼(용리액: 톨루엔)을 사용하여 여과하고, 용매를 감압 증류 제거하여 조생성물(粗生成物)을 얻었다. 다음으로, 아세토니트릴을 사용하여 조생성물을 세정함으로써, 화합물(BOCz-0001)(35.6mg, 수율 18%)을 얻었다.

[1330] [화학식 357]



[1331]

[1332] NMR 측정에 의해 얻어진 화합물의 구조를 확인했다.

[1333] $^1\text{H-NMR}$ (500MHz, (CDCl_3)): $\delta=7.28(\text{d}, 1\text{H}), 7.37\text{-}7.45(\text{m}, 2\text{H}), 7.53\text{-}7.64(\text{m}, 3\text{H}), 7.68(\text{t}, 1\text{H}), 7.85(\text{t}, 1\text{H}), 8.17\text{-}8.20(\text{m}, 2\text{H}), 8.33\text{-}8.39(\text{dd}, 2\text{H}), 8.76\text{-}8.81(\text{dd}, 2\text{H})$.

[1334] $^{13}\text{C-NMR}$ (126MHz, (CDCl_3)): 107.7(1C), 109.6(1C), 114.4(1C), 118.0(1C), 120.9(1C), 122.1(1C), 122.4(1C), 122.8(1C), 122.9(1C), 124.0(1C), 126.9(1C), 127.0(1C), 133.1(1C), 133.3(1C), 134.1(1C), 135.0(1C), 140.0(1C), 142.5(1C), 143.3(1C), 159.3(1C), 160.0(1C).

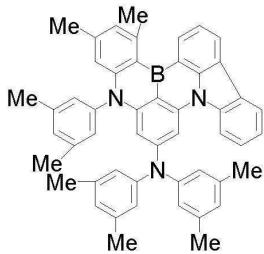
[1335] The NMR signal of the carbon α to the boron was not observed.

[1336] 합성예(2)

[1337] 화합물(BNpCz-12mS-0230-1): N,N,5-트리스(3,5-디메틸페닐)-1,3-디메틸-5H-5,8b-디아자-15b,보라벤조[a]나프토[1,2,3-hi]아세안트릴렌-7-아민의 합성

[1338]

[화학식 358]



[1339]

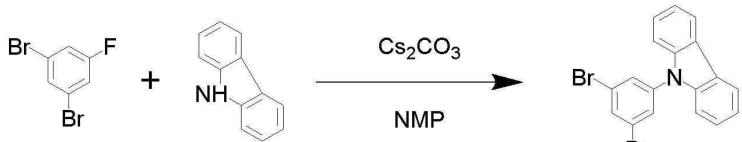
(BNpCz-12mS-0230-1)

[1340]

질소 분위기 하, 1-플루오로-3,5-디브로모벤젠(3.77g, 15mmol), 카르바졸(17.4g, 18mmol), 탄산 세슘(9.77g, 30mmol) 및 N-메틸피롤리돈(NMP, 50ml)이 들어간 플라스크를 120°C로 가열하고, 20시간 교반했다. 반응용액을 실온까지 냉각하고, NMP를 감압 증류 제거한 후, 실리카겔쇼트패스컬럼(용리액: 헥산)을 사용하여 여과하고, 용매를 감압 증류 제거함으로써, 9-(3,5-디브로모페닐)-9H-카르바졸(2.69g, 수율 47%)을 얻었다.

[1341]

[화학식 359]



[1342]

NMR 측정에 의해 얻어진 화합물의 구조를 확인했다.

[1343]

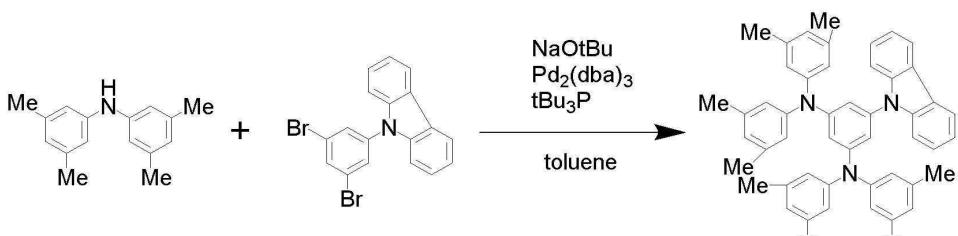
¹H-NMR(400MHz, CDCl₃): δ=7.29(s, 2H), 7.40–7.46(m, 4H), 7.70(s, 2H), 7.76(s, 1H), 8.12(d, 2H).

[1344]

질소 분위기 하, 비스(3,5-디메틸페닐)아민(2.97g, 13mmol), 9-(3,5-디브로모페닐)-9H-카르바졸(0.976g, 5.0mmol), Pd₂(dba)₃(54.9mg, 0.060mmol), 트리-tert-부틸포스핀(24.3mg, 0.12mmol), NaOtBu(1.73g, 18mmol) 및 톨루엔(60ml)이 들어간 플라스크를 80°C로 가열하고, 40시간 교반했다. 반응액을 실온까지 냉각하고, 실리카겔쇼트패스컬럼(용리액: 톨루엔)을 사용하여 여과하고, 용매를 감압 증류 제거하여 조생성물을 얻었다. 얻어진 조생성물을 메탄올로 세정함으로써, 5-(9H-카르바졸-9-일)-N¹,N¹,N³,N³-테트라카스(3,5-디메틸페닐)벤젠-1,3-디아민(3.66g, 수율 88%)을 백색 고체로서 얻었다.

[1345]

[화학식 360]



[1346]

NMR 측정에 의해 얻어진 화합물의 구조를 확인했다.

[1347]

¹H-NMR(400MHz, CDCl₃): δ=2.23(s, 24H), 6.64(s, 4H), 6.72(s, 2H), 6.76–6.79(m, 9H), 7.22(t, 2H), 7.36(d, 2H), 7.44(d, 2H), 8.05(d, 2H).

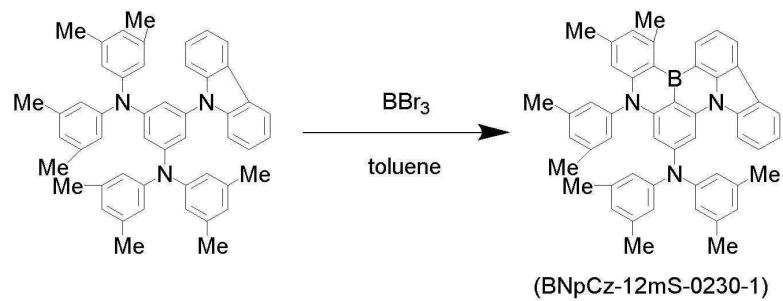
[1348]

5-(9H-카르바졸-9-일)-N¹,N¹,N³,N³-테트라카스(3,5-디메틸페닐)벤젠-1,3-디아민(0.207mg, 0.3mmol) 및 톨루엔(3.0ml)이 들어간 플라스크에, 질소 분위기 하, 실온에서, 3브롬화 봉소(341.7 μl, 3.6mmol)를 가하였다. 적어 종료 후, 130°C까지 승온하고 30시간 교반했다. 그 후, 다시 실온까지 냉각하고, 인산 완충용액(pH 7, 20ml)을 반응 혼합물에 가하여, 수층(水層)을 분리하고, 디클로로메탄으로 추출하였다(20ml, 3회). 그 후, 반응 용액을 증류 제거하여 조생성물을 얻었다. 얻어진 조생성물을 아세토니트릴로 세정함으로써, 화합물(BNpCz-12mS-0230-

1)을 얻었다(0.160mg, 수율 77%).

[1351]

[화학식 361]



[1352]

NMR 측정에 의해 얻어진 화합물의 구조를 확인했다.

[1353]

¹H-NMR(500MHz, (CDCl₃)₂): δ=2.24(s, 12H), 2.30(m, 9H), 2.84(s, 3H), 5.79(s, 1H), 6.42(s, 1H), 6.75(m, 3H), 6.79–6.82(m, 6H), 6.93(s, 1H), 7.02(s, 1H), 7.34(t, 1H), 7.52(t, 1H), 7.60(s, 1H), 7.77(d, 1H), 8.16(d, 1H), 8.21(d, 1H), 8.33(d, 2H).

[1354]

¹³C-NMR(126MHz, CDCl₃): 21.2(2C), 21.2(4C), 22.0(1C), 25.0(1C), 98.5(1C), 101.0(1C), 114.0(1C), 114.7(1C), 120.8(1C), 120.9(1C), 121.6(1C), 121.7(1C), 122.6(1C), 122.8(1C), 123.7(4C), 124.0(1C), 125.1(1C), 125.2(1C), 125.7(2C), 126.1(1C), 127.1(1C), 127.5(2C), 129.5(1C), 134.7(1C), 138.8(4C), 139.4(1C), 140.1(2C), 140.3(1C), 141.8(1C), 142.1(1C), 143.2(1C), 143.7(1C), 146.6(2C), 147.3(1C), 148.4(1C), 151.6(1C).

[1355]

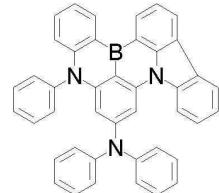
합성예(3)

[1356]

화합물(BNpCz-0230): N,N,5-트리페닐-5H-5,8b-디아자-15b-보라벤조[a]나프토[1,2,3-hi]아세안트릴렌-7-아민의 합성

[1357]

[화학식 362]



[1358]

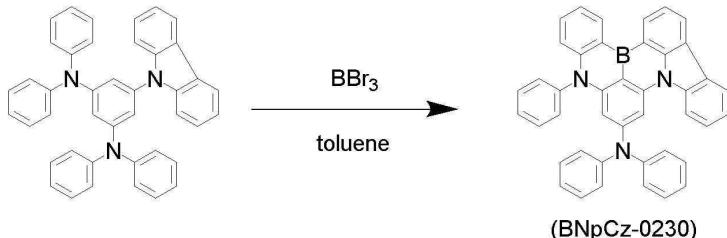
(BNpCz-0230)

[1359]

5-(9H-카르바졸-9-일)-N¹,N¹,N³,N³-테트라페닐벤젠-1,3-디아민(57.6mg, 0.1mmol) 및 틀루엔(1.0ml)으로 들어간 플라스크에, 질소 분위기 하, 실온에서, 3브롬화 봉소(40.0 μl, 0.4mmol)를 가하였다. 적하 종료 후, 120°C까지 승온하고 20시간 교반했다. 그 후, 다시 실온까지 냉각하고, 인산 완충용액(pH 7, 20ml)을 반응혼합물에 가하여, 수축층을 분리하고, 틀루엔(40ml, 1회), 디클로로메탄(40ml, 2회)으로 추출했다. 그 후, 반응용액을 실리카겔 컬럼(용리액: 헥산/틀루엔=2/1(용량비))을 사용하여 정제함으로써, 화합물(BNpCz-0230)을 얻었다(12.6mg, 수율 22%).

[1361]

[화학식 363]



[1362]

[1363]

NMR 측정에 의해 얻어진 화합물의 구조를 확인했다.

[1364]

$^1\text{H-NMR}$ (400MHz, (CDCl_3)): $\delta=5.90(\text{s}, 1\text{H})$, $6.73(\text{d}, 1\text{H})$, $7.10(\text{s}, 2\text{H})$, $7.19(\text{d}, 4\text{H})$, $7.26\text{--}7.33(\text{m}, 9\text{H})$, $7.39(\text{d}, 2\text{H})$, $7.48\text{--}7.52(\text{m}, 2\text{H})$, $7.61\text{--}7.64(\text{m}, 2\text{H})$, $7.70(\text{d}, 1\text{H})$, $8.15(\text{d}, 1\text{H})$, $8.28(\text{d}, 1\text{H})$, $8.88(\text{d}, 1\text{H})$, $8.97(\text{d}, 1\text{H})$.

[1365]

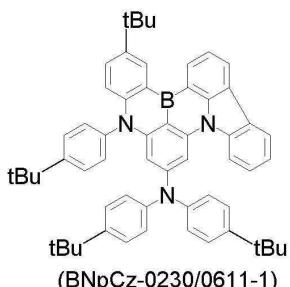
합성예(4)

[1366]

화합물(BNpCz-0230/0611-1): 2-(tert-부틸)-N,N,5-트리스(4-(tert-부틸)페닐)-5H-5,8b-디아자-15b-보라벤조[a]나프토[1,2,3-hi]아세안트릴렌-7-아민의 합성

[1367]

[화학식 364]

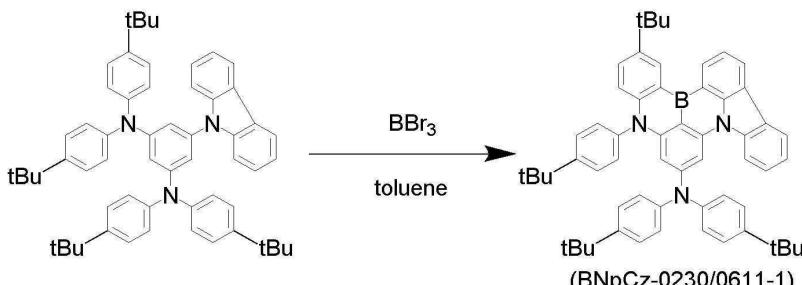


[1368]

$\text{N}^1,\text{N}^1,\text{N}^3,\text{N}^3\text{-테트라카이스}(4\text{-(tert-부틸)페닐})\text{-5-(9H-카르바졸-9-일)벤젠-1,3-디아민}$ (79.8mg, 0.1mmol) 및 톨루엔(1.0ml)이 들어간 플라스크에, 질소 분위기 하, 실온에서, 3브롬화 붕소($40.0\ \mu\text{l}$, 0.4mmol)를 가하였다. 적하 종료 후, 120°C 까지 승온하고 20시간 교반했다. 그 후, 다시 실온까지 냉각하여, 인산 완충용액(pH 7, 20ml)을 반응혼합물에 가하여 수축을 분리하고, 톨루엔(40ml, 1회), 디클로로메탄(40ml, 2회)으로 추출했다. 그 후, 반응용액을 실리카겔 컬럼(용리액: 헥산/톨루엔=2/1(용량비))을 사용하여 정제함으로써, 화합물(BNpCz-0230/0611-1)을 얻었다(45.1mg, 수율 56%).

[1370]

[화학식 365]



[1371]

NMR 측정에 의해 얻어진 화합물의 구조를 확인했다.

[1372]

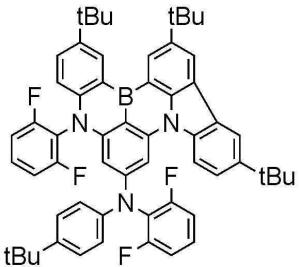
$^1\text{H-NMR}$ (400MHz, (CDCl_3)): $\delta=1.34(\text{s}, 9\text{H})$, $1.35(\text{s}, 18\text{H})$, $1.47(\text{s}, 9\text{H})$, $6.18(\text{s}, 1\text{H})$, $6.66(\text{s}, 1\text{H})$, $7.11(\text{d}, 4\text{H})$, $7.14\text{--}7.24(\text{m}, 8\text{H})$, $7.46\text{--}7.52(\text{m}, 6\text{H})$, $7.58(\text{d}, 1\text{H})$, $7.62(\text{t}, 1\text{H})$, $8.14(\text{d}, 1\text{H})$, $8.27(\text{d}, 1\text{H})$.

[1374]

합성예(5)

[1375] 화합물(BNpCz-0230/0611/0911S-F26-1): 2,11,14-트리-tert-부틸-N-(4-(tert-부틸)페닐)-N,5-비스(2,6-디플루오로페닐)-5H-5,8b-디아자-15b-보라벤조[a]나프토[1,2,3-hi]아세안트릴렌-7-아민의 합성

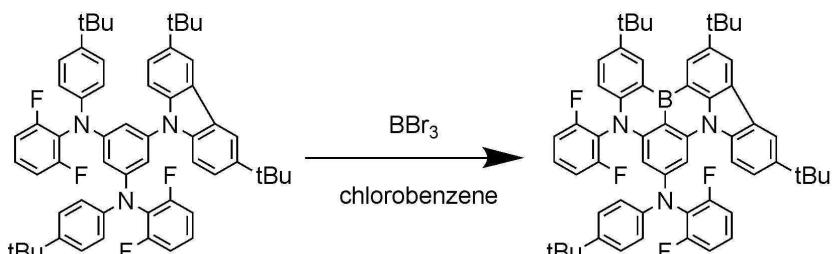
[1376] [화학식 366]



[1377] (BNpCz-0230/0611/0911S-F26-1)

[1378] N^1,N^3 -비스(4-(tert-부틸)페닐)-5-(3,6-디-tert-부틸-9H-카르바졸-9-일)- N^1,N^3 -비스(2,6-디플루오로페닐)벤젠-1,3-디아민(87.1mg, 0.1mmol) 및 클로로벤젠(1.0ml)이 들어간 플라스크에, 질소 분위기 하, 실온에서, 3브롬화붕소(40.0 μ l, 0.4mmol)를 가하였다. 적하 종료 후, 140°C까지 승온하고 20시간 교반했다. 그 후, 다시 실온까지 냉각하고, 인산 완충용액(pH 7, 40ml)을 반응혼합물에 가하여 수층을 분리하고, 디클로로메탄으로 추출하였다(40ml, 3회). 그 후, 반응용액을 실리카겔 컬럼(용리액: 헥산/톨루엔=2/1(용량비))을 사용하여 정제하고, 용매를 감압 증류 제거하여 조생성물을 얻었다. 얻어진 조생성물을 헥산으로 세정한 후, 아세토니트릴로 세정함으로써, 화합물(BNpCz-0230/0611/0911S-F26-1)을 얻었다(12.5mg, 수율 14%).

[1379] [화학식 367]



(BNpCz-0230/0611/0911S-F26-1)

[1380]

NMR 측정에 의해 얻어진 화합물의 구조를 확인했다.

[1381] 1 H-NMR(500MHz, ($CDCl_3$)): δ =1.38(s, 9H), 1.44(s, 9H), 1.47(s, 9H), 1.61(s, 9H), 5.65(s, 1H), 6.70(d, 1H), 6.95-6.98(m, 2H), 7.01-7.05(m, 2H), 7.26-7.28(m, 2H), 7.30(d, 2H), 7.33-7.36(m, 1H), 7.38-7.40(m, 3H), 7.50-7.53(m, 2H), 8.15(s, 1H), 8.32(s, 1H), 9.05(s, 1H), 9.07(s, 1H).

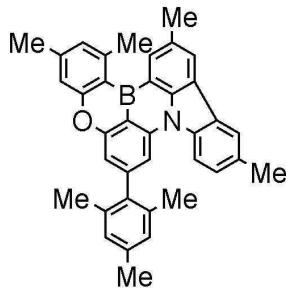
[1382] 13 C-NMR(127MHz, ($CDCl_3$)): 31.4(3C), 31.6(3C), 31.7(3C), 32.3(3C), 34.3(1C), 34.5(1C), 34.6(1C), 35.1(1C), 94.0(1C), 95.3(1C), 112.3(4C), 112.5(1C), 112.6(1C), 112.8(1C), 113.2(1C), 114.7(1C), 116.9(1C), 118.5(1C), 118.7(1C), 119.2(1C), 123.1(1C), 123.5(1C), 125.8(2C), 126.3(2C), 126.9(1C), 127.7(1C), 129.4(1C), 129.5(1C), 129.9(1C), 131.5(1C), 137.8(1C), 141.5(1C), 141.9(1C), 142.6(1C), 144.0(1C), 144.1(1C), 144.5(1C), 147.7(1C), 148.5(1C), 152.0(1C), 159.3(2C), 161.3(2C).

[1383] 합성예(6)

[1384] 화합물(BOCz-12m-0220/0910S-1): 7-메시틸-1,3,11,14-테트라메틸-5-옥사-8b-아자-15b-보라벤조[a]나프토[1,2,3-hi]아세안트릴렌의 합성

[1386]

[화학식 368]



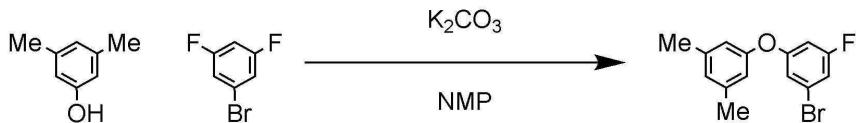
(BOCz-12m-0220/0910S-1)

[1387]

질소 분위기 하, 3,5-디메틸페놀(6.3g) 및 1-브로모-3,5-디플루오로벤젠(10g)을 N-메틸피롤리돈(NMP, 32m1)에 용해시키고, 거기에 탄산 칼륨(14.3g)을 가하고, 180°C에서 6시간 교반했다. 반응 후, 반응액에 물과 헵탄을 가하여 교반한 후, 유기층을 분리하고 수세하였다. 그 후, 유기층을 농축하여 조생성물을 얻었다. 조생성물을 실리카겔ショ트컬럼(용리액: 헵탄)으로 정제함으로써, 1-브로모-3-(3,5-디메틸페녹시)-5-플루오로벤젠을 얻었다(12.0g).

[1389]

[화학식 369]

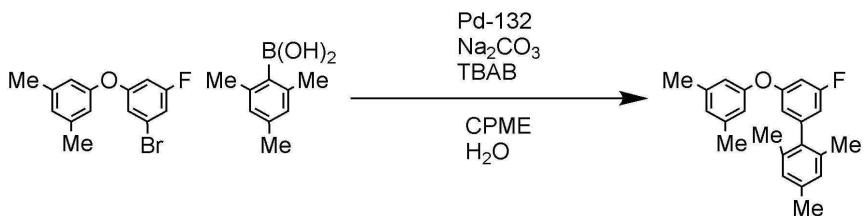


[1390]

질소 분위기 하, 1-브로모-3-(3,5-디메틸페녹시)-5-플루오로벤젠(11.5g), 2,4,6-트리메틸페닐보론산(6.7g), 팔라듐 촉매로서 디클로로비스[(디-tert-부틸(4-디메틸아미노페닐)포스피노)]팔라듐(Pd-132, 0.27g), 탄산나트륨(8.2g), 테트라부틸암모늄브로미드(TBAB, 2.5g), 물(120m1) 및 시클로펜틸메틸에테르(CPME, 120m1)를 플라스크에 넣고, 가열 환류 하에서 3시간 가열했다. 반응 후, 반응액에 물과 톨루엔을 가하여 교반한 후, 유기층을 분리하고 수세하였다. 그 후, 유기층을 농축하여 조생성물을 얻었다. 조생성물을 실리카겔ショ트컬럼(용리액: 헵탄)으로 정제함으로써, 3'-(3,5-디메틸페녹시)-5'-플루오로-2,4,6-트리메틸-1,1'-비페닐을 얻었다(11.4g).

[1392]

[화학식 370]

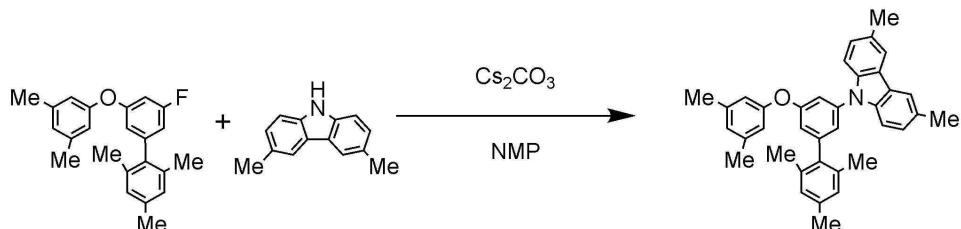


[1393]

질소 분위기 하, 3'-(3,5-디메틸페녹시)-5'-플루오로-2,4,6-트리메틸-1,1'-비페닐(8.5g) 및 3,6-디메틸-9H-카르바졸(5.3g)을 N-메틸피롤리돈(NMP, 34m1)에 용해시키고, 거기에 탄산 세슘(20.0g)을 가하고, 180°C에서 5시간 교반했다. 반응 후, 반응액에 물과 톨루엔을 가하여 교반한 후, 유기층을 분리하고 수세하였다. 그 후, 유기층을 농축하여 조생성물을 얻었다. 조생성물을 실리카겔ショ트컬럼(용리액: 톨루엔/헵탄=1/2(용량비))으로 정제함으로써, 9-(5-(3,5-디메틸페녹시)-2',4',6'-트리메틸-[1,1'-비페닐]-3-일)-3,6-디메틸-9H-카르바졸을 얻었다(11.8g).

[1395]

[화학식 371]



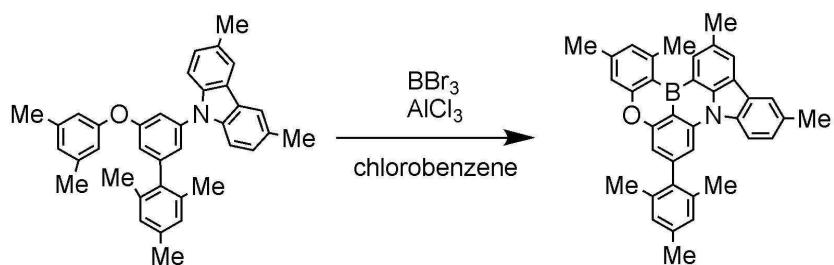
[1396]

[1397]

질소 분위기 하, 9-(5-(3, 5-디메틸페녹시)-2',4',6'-트리메틸-[1,1'-비페닐]-3-일)-3,6-디메틸-9H-카르바졸 (3.5g), 1M의 3브롬화 브로우 헵탄 용액(82.4ml) 및 염화 알루미늄(0.96g)을 클로로벤젠(70ml)에 용해시키고, 가열 환류 하에서 3시간 교반했다. 반응액을 실온까지 냉각하고, 빙욕(冰浴)으로 식힌 아세트산 나트륨 수용액, 이어서, 톨루엔을 가하여 분액했다. 유기층을 농축한 후에, 실리카겔 셀럼(용리액: 톨루엔/헵탄=1/3(용량 비))으로 정제했다. 얻어진 조생성물을 헵탄으로 재침전시킴으로써, 화합물(BOCz-12m-0220/0910S-1)을 얻었다 (1.0g).

[1398]

[화학식 372]



(BOCz-12m-0220/0910S-1)

[1399]

NMR 측정에 의해 얻어진 화합물의 구조를 확인했다.

[1400]

$^1\text{H-NMR}$ (400MHz, (CDCl_3)): $\delta=2.12(\text{s}, 6\text{H}), 2.40(\text{s}, 3\text{H}), 2.49(\text{s}, 3\text{H}), 2.56(\text{s}, 3\text{H}), 2.69(\text{s}, 3\text{H}), 2.92(\text{s}, 3\text{H}), 7.04(\text{s}, 2\text{H}), 7.05(\text{d}, 1\text{H}), 7.08(\text{s}, 1\text{H}), 7.22(\text{br}, 1\text{H}), 7.30(\text{dd}, 1\text{H}), 7.89(\text{d}, 1\text{H}), 7.98(\text{br}, 1\text{H}), 8.09(\text{d}, 1\text{H}), 8.13(\text{d}, 1\text{H}), 8.32(\text{br}, 1\text{H}).$

[1401]

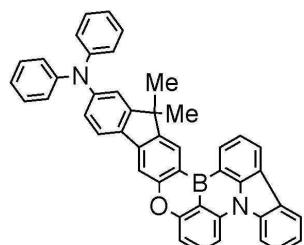
합성 예(7)

[1402]

화합물(BOCzb-3b30): 14,14-디메틸-N,N-디페닐-14H-8-옥사-4b-아자-15b-보라벤조[a]인데노[1',2':6,7]나프토[1,2,3-hi]아세나프틸렌-12-아민의 합성

[1403]

[화학식 373]



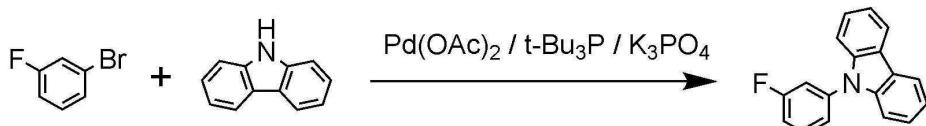
(BOCzb-3b30)

[1404]

질소 분위기 하, 카르바졸(1당량), 1-브로모-3-플루오로벤젠(1.2당량), 아세트산 팔라듐(II)($\text{Pd}(\text{OAc})_2$, 0.04당량), 트리(tert-부틸)포스핀($t\text{-Bu}_3\text{P}$, 0.12당량), 인산 칼륨(4당량) 및 크실렌(용량ml): 카르바졸 중량(g)의 10배)을 플라스크에 넣고, 10시간 이상 환류한다. 반응 종료 후, 반응액을 냉각하고, 여과하여 고체를 제거한 후, 여과액을 감압 농축하여, 얻어진 조생성물을 실리카겔 셀럼(용리액: 헵탄/톨루엔 혼합용매)으로 정제함으로써, 9-(3-플루오로페닐)-9H-카르바졸을 얻었다. 이 때, 용리액 중의 톨루엔의 비율을 서서히 증가시켜 목적물을 용

출(溶出)시켰다.

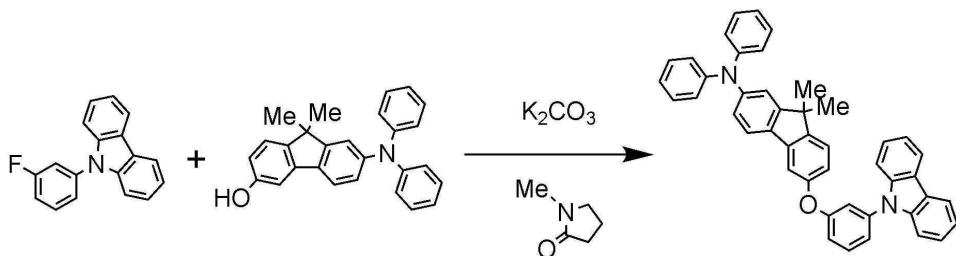
[1407] [화학식 374]



[1408]

[1409] 질소 분위기 하, 7-(디페닐아미노)-9,9-디메틸-9H-플루오렌-3-올(1당량), 9-(3-플루오로페닐)-9H-카르바졸(1당량), 탄산 칼륨(2.5당량) 및 NMP(용량(ml): 7-(디페닐아미노)-9,9-디메틸-9H-플루오렌-3-올의 중량(g)의 4배)가 들어간 플라스크를, 환류 온도에서 5시간 이상 가열 교반한다. 반응 종료 후, 반응액을 실온까지 냉각하고, 물을 가하여 석출한 침전물(조생성물)을 흡인 여과로 채취했다. 얻어진 조생성물을 물, 이어서, 메탄올로 세정한 후, 실리카겔 컬럼(용리액: 헵탄/톨루엔 혼합용매)으로 정제함으로써, 6-(3-(9H-카르바졸-9-일)페녹시)-9,9-디메틸-N,N-디페닐-9H-플루오렌-2-아민을 얻었다. 이 때, 용리액 중의 톨루エン의 비율을 서서히 증가시켜 목적물을 용출시켰다.

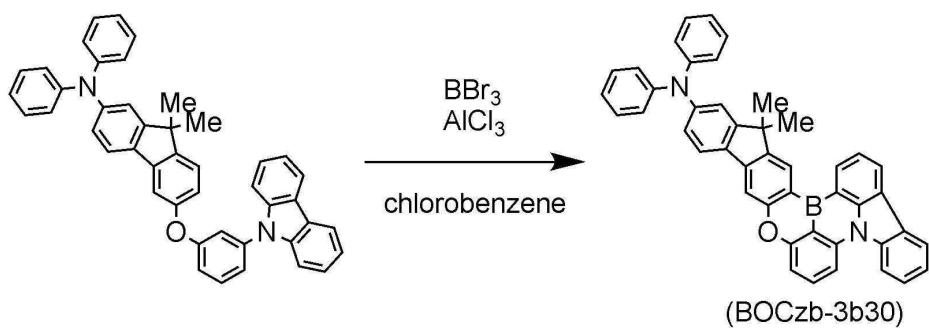
[1410] [화학식 375]



[1411]

[1412] 질소 분위기 하, 6-(3-(9H-카르바졸-9-일)페녹시)-9,9-디메틸-N,N-디페닐-9H-플루오렌-2-아민(1당량), 1M의 3브롬화 브로우 헥타 용액(12당량) 및 염화 알루미늄(1.1당량)을 클로로벤젠(용량(ml): 6-(3-(9H-카르바졸-9-일)페녹시)-9,9-디메틸-N,N-디페닐-9H-플루오렌-2-아민의 중량(g)의 20배)에 용해시키고, 가열 환류 하에서 3시간 이상 교반한다. 반응 종료 후, 반응액을 실온까지 냉각하고, 빙욕으로 식힌 아세트산 나트륨 수용액, 이어서, 톨루엔을 가하여서 분액한다. 유기층을 농축 한 후에, 실리카겔 컬럼(용리액: 헵탄/톨루엔 혼합용매)으로 정제함으로써, 화합물(BOCzb-3b30)을 얻었다. 이 때, 용리액 중의 톨루エン의 비율을 서서히 증가시켜 목적물을 용출시켰다.

[1413] [화학식 376]



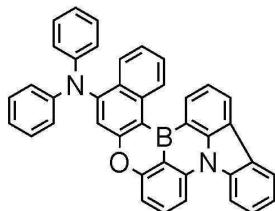
[1414]

[1415] 합성예(8)

[1416] 화합물(BOCza-0530): N,N-디페닐-7-옥사-10b-아자-17b-보라프플루오란텐[1,2,3-no]테트라펜-5-아민의 합성

[1417]

[화학식 377]



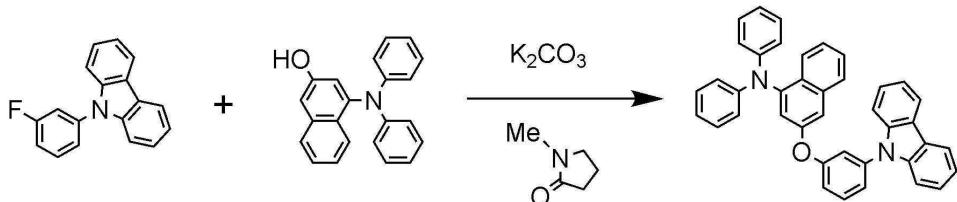
(BOCza-0530)

[1418]

질소 분위기 하, 4-(디페닐아미노)나프탈렌-2-올(1당량), 9-(3-플루오로페닐)-9H-카르바졸(1당량), 탄산 칼륨(2.5당량) 및 NMP(용량(ml): 4-(디페닐아미노)나프탈렌-2-올의 중량(g)의 4배)기 들어간 플라스크를, 환류 온도에서 5시간 이상 가열 교반한다. 반응 종료 후, 반응액을 실온까지 냉각하고, 물을 가하여 석출한 침전물(조생성물)을 흡인 여과로 채취했다. 얻어진 조생성물을 물, 이어서, 메탄올로 세정한 후, 실리카겔 컬럼(용리액: 헵탄/톨루엔 혼합용매)으로 정제함으로써, 3-(3-(9H-카르바졸-9-일)페녹시)-N,N-디페닐나프탈렌-1-아민을 얻었다. 이 때, 용리액 중의 톨루エン의 비율을 서서히 증가시켜 목적물을 용출시켰다.

[1420]

[화학식 378]

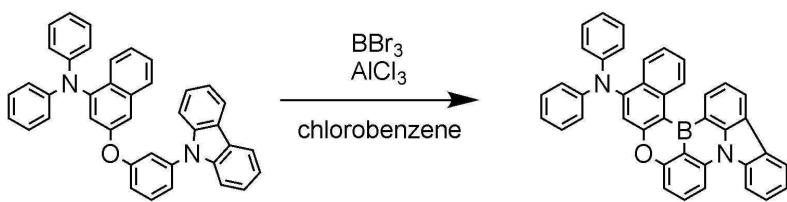


[1421]

질소 분위기 하, 3-(3-(9H-카르바졸-9-일)페녹시)-N,N-디페녹시나프탈렌-1-아민(1당량), 1M의 3브롬화 붕소 헵탄 용액(12당량) 및 염화 알루미늄(1.1당량)을 클로로벤젠(용량(ml): 3-(3-(9H-카르바졸-9-일)페녹시)-N,N-디페닐나프탈렌-1-아민의 중량(g)의 20배)에 용해시키고, 가열 환류 하에서 3시간 이상 교반하였다. 반응 종료 후, 반응액을 실온까지 냉각하고, 빙욕으로 식힌 아세트산 나트륨 수용액, 이어서, 톨루엔을 가하여 분액하였다. 유기층을 농축한 후에, 실리카겔 컬럼(용리액: 헵탄/톨루엔 혼합용매)으로 정제함으로써, 화합물(BOCza-0530)을 얻었다. 이 때, 용리액 중의 톨루エン의 비율을 서서히 증가시켜 목적물을 용출시켰다.

[1423]

[화학식 379]



[1424]

원료의 화합물을 적절하게 변경함으로써, 전술한 합성예에 준한 방법으로, 본 발명의 다른 화합물을 합성할 수 있다.

[1426]

다음으로, 본 발명의 화합물의 기초 물성의 평가와 본 발명의 화합물을 사용한 유기 EL 소자의 제작과 평가에 대하여 기재한다.

[1427]

<기초 물성의 평가>

[1428]

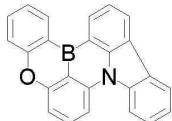
샘플의 준비

[1429]

평가 대상의 화합물의 흡수 특성과 발광 특성(형광과 인광)을 평가하는 경우, 평가 대상의 화합물을 용매에 용해하여 용매 중에서 평가하는 경우와 박막 상태로 평가하는 경우가 있다. 또한, 박막 상태로 평가하는 경우에는, 평가 대상의 화합물 유기 EL 소자에서의 사용 태양에 따라, 평가 대상의 화합물만을 박막화하고 평가하는 경우와 평가 대상의 화합물을 적절한 매트릭스 재료 중에 분산하고 박막화하여 평가하는 경우가 있다.

- [1430] 매트릭스 재료로서는, 시판하고 있는 PMMA(폴리메틸메타크릴레이트) 또는 PSt(폴리스티렌) 등의 투명 폴리머를 사용할 수 있다. PMMA에 분산된 박막 샘플은, 예를 들면, PMMA와 평가 대상의 화합물을 톨루엔 중에서 용해시킨 후, 스판 코팅법에 의해 석영제의 투명 지지기판($10\text{mm} \times 10\text{mm}$) 상에 박막을 형성하여 제작할 수 있다. 다른 투명 폴리머를 사용한 경우도 동일한 수순으로 박막을 작성할 수 있다.
- [1431] 또한, 매트릭스 재료가 호스트 재료인 경우의 박막 샘플의 제작 방법을 이하에 기술한다. 석영제의 투명 지지기판($10\text{mm} \times 10\text{mm} \times 1.0\text{mm}$)을 시판하고 있는 증착장치(조슈(長州)산업(주) 제조)의 기판 홀더에 고정하고, 호스트 재료를 넣은 몰리브덴제 증착용 보트, 도편트 재료를 넣은 몰리브덴제 증착용 보트를 장착한다. 다음으로, 진공 조를 $5 \times 10^{-4}\text{Pa}$ 까지 감압하고, 호스트 재료가 들어간 증착용 보트와 도편트 재료가 들어간 증착용 보트를 동시에 가열하여 적절한 막 두께로 되도록 증착하여 호스트 재료와 도편트 재료의 혼합 박막을 형성한다. 호스트 재료와 도편트 재료의 설정 중량비에 따라 증착속도를 제어한다.
- [1432] 흡수 특성과 발광 특성의 평가
- [1433] 상기 샘플의 흡수 스펙트럼 측정은, 자외가시근적외선 분광광도계((주)시마즈제작소(島津製作所), UV-2600)를 사용하여 행하였다. 또한, 상기 샘플의 형광 스펙트럼 또는 인광 스펙트럼의 측정은, 분광형광광도계(히타치하이테크(주) 제조, F-7000)를 사용하여 행하였다.
- [1434] 형광 스펙트럼의 측정에 대해서는, 실온에서 적절한 여기파장으로 여기하고 포토 루미네센스를 측정했다. 인광 스펙트럼의 측정에 대해서는, 부속의 냉각 유닛을 사용하여, 상기 샘플을 액체 질소에 침지한 상태(온도 77K)에서 측정했다. 인광 스펙트럼을 관측하기 위하여, 광학 층퍼를 사용하여 여기광 조사로부터 측정 개시까지의 자연 시간을 조정했다. 샘플은 적절한 여기파장으로 여기하고 포토 루미네센스를 측정했다.
- [1435] 또한, 절대 PL 양자 수율 측정장치(하마마쓰포토닉스(주) 제조, C9920-02G)를 사용하여 형광 양자 수율(PLQY)을 측정한다.
- [1436] 형광 수명(지연 형광)의 평가
- [1437] 형광수명측정장치(하마마쓰포토닉스(주) 제조, C11367-01)를 사용하여 300K에서 형광수명을 측정한다. 적절한 여기파장으로 측정되는 극대발광파장에 있어서 형광수명이 빠른 성분과 늦은 성분(형광수명 $0.1\mu\text{sec}$ 이상)을 관측한다. 빠른 형광성분(프롬프트)이 관찰되지 않게 된 점(기준으로서, 빠른 형광성분의 형광수명의 5배)의 강도(광자수)를 시점, 시점에 대하여 강도가 1/10로 된 점을 종점으로 하고, 단일 지수함수로서 피팅을 행하여 구해지는 시정수(時定數)보다, 늦은 형광성분(딜레이)의 형광수명을 구한다. 형광을 발광하는 일반적인 유기 EL 재료의 실온에서의 형광수명측정에서는, 열에 의한 3중항 성분의 실활에 의해, 인광에 유래하는 3중항 성분이 관여하는 늦은 성분이 관측되는 경우는 거의 없다. 평가 대상의 화합물에 있어서 늦은 성분이 관측된 경우에는, 여기 수명이 긴 3중항 에너지가 열활성화에 의해 1중항 에너지로 이동하여 지연 형광으로서 관측된 것을 나타내게 된다.
- [1438] 에너지 갭(Eg)의 산출
- [1439] 전술한 방법에 의해 얻어진 흡수 스펙트럼의 장파장 말단 A(nm)로부터 $Eg=1240/A$ 로 산출된다.
- [1440] E_s , E_t 및 ΔE_{st} 의 산출
- [1441] 1중항 여기 에너지(E_s)는, 형광 스펙트럼의 극대발광파장 B(nm)로부터 $E_s=1240/B$ 로 산출된다. 또한, 3중항 여기 에너지(E_t)는, 인광 스펙트럼의 극대발광파장 C(nm)로부터 $E_t=1240/C$ 로 산출된다.
- [1442] ΔE_{st} 는 E_s 와 E_t 의 에너지 차인 $\Delta E_{st}=E_s-E_t$ 로 정의된다. 또한, ΔE_{st} 는, 예를 들면, "Purely organic electroluminescent material realizing 100% conversion from electricity to light", H. Kaji, H. Suzuki, T. Fukushima, K. Shizu, K. Katsuaki, S. Kubo, T. Komino, H. Oiwa, F. Suzuki, A. Wakamiya, Y. Murata, C. Adachi, Nat. Commun. 2015, 6, 8476.에 기재된 방법으로도 산출할 수 있다.
- [1443] 화합물(BOCz-0001)의 기초 물성의 평가

[1444] [화학식 380]



(BOCz-0001)

[1445]

[분산막에서의 흡수 및 발광 특성]

[1447]

측정의 결과, 흡수 피크 파장 425nm, 형광 피크 파장 447nm, 77K에서의 형광 피크 파장 450nm, 77K에서의 인광 피크 파장 480nm, 형광 피크 반값폭 40nm, PLQY75%의, 깊은 청색이면서 반값폭이 좁은 발광이 얻어졌다. 또한, 77K에서의 형광 피크 파장 및 77K에서의 인광 피크 파장으로부터, ΔE_{ST} 는 0.17eV로 산출했다.

[1448]

이상으로부터, 화합물(BOCz-0001)은, 깊은 청색이면서 반값폭이 좁은 발광이 얻어지므로, 깊은 청색의 형광 발광 재료로서 기대할 수 있다.

[1449]

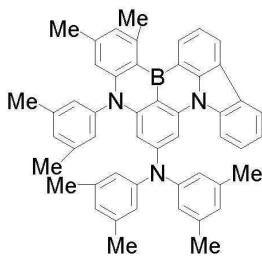
화합물(BOCz-0001)은, 진동자 강도를 저하시키지 않고 높은 PLQY가 얻어지고, 또한, 작은 ΔE_{ST} 를 가지고, 반값 폭이 좁은 깊은 청색으로 발광하므로, OLED의 도편트로서 바람직하다.

[1450]

화합물(BNpCz-12mS-0230-1)의 기초 물성의 평가

[1451]

[화학식 381]



(BNpCz-12mS-0230-1)

[1452]

[회박 용액에서의 흡수 및 발광 특성]

[1454]

화합물(BNpCz-12mS-0230-1)을 2.0×10^{-5} mol/L의 농도로 툴루엔에 용해시키고, 흡수 스펙트럼 및 형광 스펙트럼을 측정했다. 형광 스펙트럼 측정 시의 여기파장은 형광 스펙트럼에 중첩되지 않도록 임의로 선택했다.

[1455]

측정의 결과, 흡수 피크 파장 447nm, 형광 피크 파장 463nm, 형광 피크 반값폭 24nm, PLQY65%의, 깊은 청색이면서 반값폭이 좁은 발광이 얻어졌다.

[1456]

[회박 용액에서의 지연 형광수명]

[1457]

화합물(BNpCz-12mS-0230-1)의 용액 중에서의 지연 형광수명을 계측했다. 감쇠 커브로부터 산출한 지연 형광수명 tau(Delay)는 $2.4 \mu\text{sec}$ 였다.

[1458]

이상으로부터, 화합물(BNpCz-12mS-0230-1)은, 깊은 청색이면서 반값폭이 좁은 발광이 얻어지고, 또한, 작은 ΔE_{ST} 와 작은 tau(delay)를 가지므로, 열활성화 지연 형광재료로서 기대할 수 있다.

[1459]

[분산막에서의 흡수 및 발광 특성]

[1460]

화합물(BNpCz-12mS-0230-1)을 1중량%의 농도로 PMMA에 분산하여 제작한 박막으로부터 흡수 및 발광 특성을 계측했다. 측정의 결과, 흡수 피크 파장 446nm, 형광 피크 파장 465nm, 77K에서의 형광 피크 파장 466nm, 77K에서의 인광 피크 파장 495nm, 형광 피크 반값폭 30nm, PLQY83%의, 깊은 청색이면서 반값폭이 좁은 발광이 얻어졌다. 또한 형광 피크 파장 및 인광 피크 파장으로부터 ΔE_{ST} 는 0.15eV로 산출했다.

[1461]

[분산막에서의 지연 형광수명]

[1462]

화합물(BNpCz-12mS-0230-1)을 1중량%의 농도로 PMMA에 분산하여 제작한 박막으로부터 지연 형광수명을

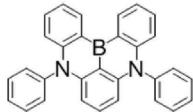
계측했다. 감쇠 커브로부터 산출한 지연 형광수명 τ_{delay} 는 $26 \mu\text{sec}$ 였다.

[1463] 화합물(BNpCz-12mS-0230-1)은, 일반식(1)의 Z^1 에 메틸기를 가지고, 분자가 형성하는 평면이 불균일하게 되므로, 스핀-궤도 상호 작용을 증강할 수 있고, 매우 작은 지연 형광수명이 얻어진다. 한편, 분자가 형성하는 평면을 불균일하게 하는 것은, 진동자 강도를 저하시키기 때문에 PLQY가 저하하는 경우가 많지만, 적절한 분자 설계에 의해 충분한 PLQY가 얻어지다. 화합물(BNpCz-12mS-0230-1)은, 양호한 PLQY, 매우 작은 τ_{delay} 및 매우 좁은 반값폭을 가지고, 깊은 청색으로 발광하므로, TADF 기구를 이용하는 OLED의 도편트로서 바람직하다.

[1464] 비교 화합물 1의 기초 물성의 평가

[1465] 국제공개 제2015/102118호 공보에 개시된 식(1-401)의 화합물을 비교 화합물 1로 하여, 기초 물성을 평가했다.

[1466] [화학식 382]



비교화합물 1

[1467] [분산막에서의 흡수 및 발광 특성]

[1469] 측정의 결과, 흡수 피크 파장 439nm , 형광 피크 파장 456nm , 77K 에서의 형광 피크 파장 459nm , 77K 에서의 인광 피크 파장 492nm , 형광 피크 반값폭 36nm , PLQY 86%의, 깊은 청색이면서 반값폭이 좁은 발광이 얻어졌다. 또한 형광 피크 파장 및 인광 피크 파장으로부터 ΔE_{ST} 는 0.20eV 로 산출했다.

[1470] [분산막에서의 지연 형광수명]

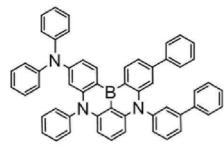
[1471] 비교 화합물 1을 1중량%의 농도로 PMMA에 분산하여 제작한 박막으로부터 지연 형광수명을 계측했다. 감쇠 커브로부터 산출한 지연 형광수명 τ_{delay} 는 $94 \mu\text{sec}$ 였다.

[1472] 이상으로부터, 일반식(1)의 Z^1 이 수소인 비교 화합물 1은, 청색이면서 반값폭이 좁은 발광이 얻어지고, 또한, ΔE_{ST} 는 작지만, τ_{delay} 은 큼ingly 크고, TADF를 이용한 OLED 소자의 발광 재료로서는 바람직하지 않은 것을 알 수 있다. 또한, ΔE_{ST} 가 작으므로, 소자 구성을 연구함으로써 TADF를 발현시킬 수 있을 가능성도 있지만, 롤 오프가 크고 성능이 뒤지는 소자가 될 것으로 예상된다.

[1473] 비교 화합물 2의 기초 물성의 평가

[1474] 국제공개 제2015/102118호 공보에 개시된 식(1-2676)의 화합물을 비교 화합물 2로 하여 기초 물성을 평가했다.

[1475] [화학식 383]



비교화합물 2

[1477] [분산막에서의 흡수 및 발광 특성]

[1478] 측정의 결과, 흡수 피크 파장 444nm , 형광 피크 파장 465nm , 77K 에서의 형광 피크 파장 468nm , 77K 에서의 인광 피크 파장 496nm , 형광 피크 반값폭 29nm , PLQY 95%의, 깊은 청색이면서 반값폭이 좁은 발광이 얻어졌다. 또한 77K 에서의 형광 피크 파장 및 77K 에서의 인광 피크 파장으로부터 ΔE_{ST} 는 0.15eV 로 산출했다.

[1479] [분산막에서의 지연 형광수명]

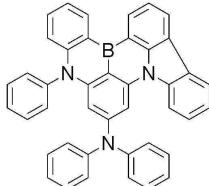
[1480] 비교 화합물 2를 1중량%의 농도로 PMMA에 분산하여 제작한 박막으로부터 지연 형광수명을 계측했다. 감쇠 커브로부터 산출한 지연 형광수명 τ_{delay} 는 $48 \mu\text{sec}$ 였다.

[1481] 이상으로부터, 일반식(1)의 Z^1 이 수소인 비교 화합물 2는, 청색이면서 반값폭이 좁은 발광이 얻어지고, 또한,

ΔE_{ST} 는 작지만, $\tau_{(delay)}$ 은 극히 크고 TADF를 이용한 OLED 소자의 발광 재료로서는 바람직하지 않은 것을 알 수 있다. 또한, ΔE_{ST} 가 작으므로, 소자 구성을 연구함으로써 TADF를 발현시킬 수 있을 가능성도 있지만, 롤오프가 크고 성능이 뒤지는 소자가 될 것으로 예상된다.

[1482] 화합물(BNpCz-0230)의 기초 물성의 평가

[1483] [화학식 384]



(BNpCz-0230)

[1484]

[회박 용액에서의 흡수 및 발광 특성]

[1485] 화합물(BNpCz-0230)을 2.0×10^{-5} mol/L의 농도로 툴루엔에 용해시키고, 흡수 스펙트럼 및 형광 스펙트럼을 측정했다. 형광 스펙트럼 측정 시의 여기파장은 형광 스펙트럼에 중첩되지 않도록 임의로 선택했다.

[1486]

측정의 결과, 흡수 피크 파장 444nm, 형광 피크 파장 457nm, 형광 피크 반값폭 23nm(도 2), PLQY88%의, 깊은 청색이면서 반값폭이 좁은 발광이 얻어졌다.

[1487]

[분산막에서의 흡수 및 발광 특성]

[1488]

화합물(BNpCz-0230)을 1중량%의 농도로 PMMA에 분산하여 제작한 박막으로부터 흡수 및 발광 특성을 계측했다. 측정의 결과, 흡수 피크 파장 442nm, 형광 피크 파장 461nm, 77K에서의 형광 피크 파장 461nm, 77K에서의 인광 피크 파장 492nm, 형광 피크 반값폭 30nm, PLQY84%의, 깊은 청색이면서 반값폭이 좁은 발광이 얻어졌다. 또한 77K에서의 형광 피크 파장 및 77K에서의 인광 피크 파장으로부터 ΔE_{ST} 는 0.17eV로 산출했다.

[1489]

[분산막에서의 자연 형광수명]

[1490]

화합물(BNpCz-0230)을 1중량%의 농도로 PMMA에 분산하여 제작한 박막으로부터 자연 형광수명을 계측했다. 감쇠 커브로부터 자연 형광수명 $\tau_{(Delay)}$ 를 산출한 바, 자연 형광수명 $\tau_{(Delay)}$ 는 33 μ sec였다.

[1491]

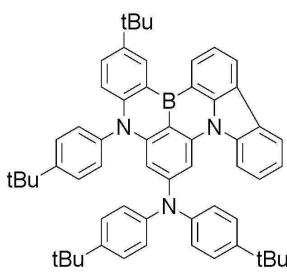
이상으로부터, 화합물(BNpCz-0230)은, 깊은 청색이면서 반값폭이 좁은 발광이 얻어지므로, 깊은 청색의 형광 발광 재료로서 기대할 수 있다. 또한, 화합물(BNpCz-0230)은, 양호한 PLQY, 매우 작은 $\tau_{(delay)}$ 및 매우 좁은 반값폭을 가지고, 깊은 청색으로 발광하므로, TADF 기구를 이용하는 OLED의 도편트로서 바람직하다.

[1492]

화합물(BNpCz-0230/0611-1)의 기초 물성의 평가

[1493]

[화학식 385]



(BNpCz-0230/0611-1)

[1494]

[회박 용액에서의 흡수 및 발광 특성]

[1495]

화합물(BNpCz-0230/0611-1)을 2.0×10^{-5} mol/L의 농도로 툴루엔에 용해시키고, 흡수 스펙트럼 및 형광 스펙트럼을 측정했다. 형광 스펙트럼 측정 시의 여기파장은 형광 스펙트럼에 중첩되지 않도록 임의로 선택했다.

[1496]

측정의 결과, 흡수 피크 파장 448nm, 형광 피크 파장 462nm, 형광 피크 반값폭 26nm(도 2), PLQY86%의, 깊은

청색이면서 반값폭이 좁은 발광이 얻어졌다.

[1499] [분산막에서의 흡수 및 발광 특성]

[1500] 화합물(BNpCz-0230/0611-1)을 1중량%의 농도로 PMMA에 분산하여 제작한 박막으로부터 흡수 및 발광 특성을 계측했다. 측정의 결과, 흡수 피크 파장 447nm, 형광 피크 파장 465nm, 77K에서의 형광 피크 파장 467nm, 77K에서의 인광 피크 파장 498nm, 형광 피크 반값폭 30nm, PLQY80%의, 깊은 청색이면서 반값폭이 좁은 발광이 얻어졌다. 또한 77K에서의 형광 피크 파장 및 77K에서의 인광 피크 파장으로부터 ΔE_{ST} 는 0.17eV로 산출했다.

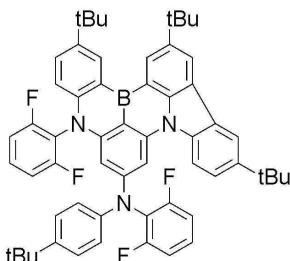
[1501] [분산막에서의 지연 형광수명]

[1502] 화합물(BNpCz-0230/0611-1)을 1중량%의 농도로 PMMA에 분산하여 제작한 박막으로부터 지연 형광수명을 계측했다. 감쇠 커브보다 지연 형광수명 $\tau_{au}(\text{Delay})$ 을 산출한 바, 31 μsec 였다.

[1503] 이상으로부터, 화합물(BNpCz-0230/0611-1)은, 깊은 청색이면서 반값폭이 좁은 발광이 얻어지므로, 깊은 청색의 형광 발광 재료로서 기대할 수 있다. 또한, 화합물(BNpCz-0230/0611-1)은, 양호한 PLQY, 매우 작은 $\tau_{au}(\text{delay})$ 및 매우 좁은 반값폭을 가지고, 깊은 청색으로 발광하므로, TADF 기구를 이용하는 OLED의 도전트로서 바람직하다.

[1504] 화합물(BNpCz-0230/0611/0911S-F26-1)의 기초 물성의 평가

[1505] [화학식 386]



[1506] (BNpCz-0230/0611/0911S-F26-1)

[1507] [희박 용액에서의 흡수 및 발광 특성]

[1508] 화합물(BNpCz-0230/0611/0911S-F26-1)을 $2.0 \times 10^{-5}\text{ mol/L}$ 의 농도로 틀루엔에 용해시키고, 흡수 스펙트럼 및 형광 스펙트럼을 측정했다. 형광 스펙트럼 측정 시의 여기파장은 형광 스펙트럼에 중첩되지 않도록 임의로 선택했다.

[1509] 측정의 결과, 흡수 피크 파장 439nm, 형광 피크 파장 453nm, 형광 피크 반값폭 22nm(도 2), PLQY91%의, 깊은 청색이면서 반값폭이 좁은 발광이 얻어졌다.

[1510] 이상으로부터, 화합물(BNpCz-0230/0611/0911S-F26-1)은, 깊은 청색이면서 반값폭이 좁은 발광이 얻어지므로, 깊은 청색의 형광 발광 재료로서 기대할 수 있다. 또한, 화합물(BNpCz-0230) 및 화합물(BNpCz-0230/0611-1)과 비교하면, 질소 원자에 대하여 오르토 위치에 불소 원자를 가지는 아릴의 치환기의 효과에 의해, 발광파장이 단파장화한 것이 명확하다.

[1511] 기초 물성의 평가 결과를 이하에 정리하여 나타내었다.

[1512]

[표 1]

화합물 번호	측정 환경	흡수 파장 nm	형광 파장 nm	형광 파장 77K nm	인광 파장 77K nm	반값폭 nm	PLQY %	ΔE_{ST} eV	Tau μ 초
(BOCz-0001)	막	425	447	450	480	40	75	0.17	-
(BNpCz-12mS -0230-1)	용액	447	463	-	-	24	65	-	2.4
(BNpCz-12mS -0230-1)	막	446	465	466	492	30	83	0.15	26
비교화합물 1	막	439	456	459	492	36	86	0.20	94
비교화합물 2	막	444	465	468	496	29	95	0.15	48
(BNpCz-0230)	용액	444	457	-	-	23	88	-	-
(BNpCz-0230)	막	442	461	461	492	30	84	0.17	33
(BNpCz-0230 /0611-1)	용액	448	462	-	-	26	86	-	-
(BNpCz-0230 /0611-1)	막	447	465	467	498	30	80	0.17	31
(BNpCz-0230/0611 /0911S-F26-1)	용액	439	453	-	-	22	91	-	-

[1513]

[1514] <유기 EL 소자의 평가>

[1515] 이상과 같이, 본 발명의 화합물은, 충분히 양호한 PLQY 및 매우 작은 tau(delay)를 가지고, 반값폭이 좁은 깊은 청색으로 발광하므로, TADF 기구를 이용하는 OLED의 도편트로서 바람직하다.

[1516] 평가 항목 및 평가 방법

[1517] 평가 항목으로서는, 구동전압(V), 발광파장(nm), CIE색도(x, y), 외부양자효율(%), 발광스펙트럼의 최대파장(nm), 반값폭(nm) 및 롤오프 등이 있다. 이를 평가 항목은, 적절한 발광휘도 시의 값을 사용할 수 있다.

[1518]

발광 소자의 양자효율에는, 내부양자효율과 외부양자효율이 있지만, 내부양자효율은, 발광 소자의 발광층에 전자(또는 정공)로서 주입되는 외부 에너지가 순수하게 광자로 변환되는 비율을 나타내고 있다. 한편, 외부양자효율은, 이 광자가 발광 소자의 외부까지 방출된 양에 기초하여 산출되고, 발광층에 있어서 발생한 광자는, 그 일부가 발광 소자의 내부에서 흡수되거나 혹은 계속 반사되거나 하여, 발광 소자의 외부로 방출되지 않으므로, 외부양자효율은 내부양자효율보다 낮아진다.

[1519]

분광 방사휘도(발광 스펙트럼)와 외부양자효율의 측정 방법은 하기와 같다. 어드밴티스트사에서 제조한 전압/전류발생기 R6144을 사용하여, 전압을 인가함으로써 소자를 발광 시켰다. TOPCON사에서 제조한 분광 방사휘도계 SR-3AR을 사용하여, 발광면에 대하여 수직방향으로부터 가시광 영역의 분광 방사휘도를 측정했다. 발광면이 완전화산면인 것으로 가정하고, 측정한 각 파장성분의 분광 방사휘도의 값을 파장 에너지로 나누고 π 를 곱한 수치가 각 파장에서의 포톤수이다. 다음으로, 관측한 전체 파장 영역에서 포톤수를 적산하여, 소자로부터 방출된 전체 포톤수로 했다. 인가 전류값을 소전하로 나눈 수치를 소자에 주입한 캐리어수로 하고, 소자로부터 방출된 전체 포톤수를 소자에 주입한 캐리어수로 나눈 수치가 외부양자효율이다. 또한, 발광 스펙트럼의 반값폭은, 극대발광파장을 중심으로 하고, 그 강도가 50%가 되는 상하의 파장 사이의 폭으로서 구해진다.

[1520] 롤오프는 소자에 전압을 인가했을 때, 전압의 인가에 따라 효율이 저하되는 현상이며, 이것은 작은 것이 바람직하다. TADF 소자에 있어서는, 도편트 또는 어시스트 도편트의 tau(delay)가 클 때 롤오프가 커지고, tau(delay)가 작을 때 롤오프가 작아진다. 롤오프의 정도의 비교 및 평가 방법으로서는, 임의의 2점의 휘도 또는 전류밀도에서의 효율을 비교함으로써 평가할 수 있다. 효율이 높고 롤오프도 작은 것이 바람직하다.

[1521] 유기 EL 소자의 제작

[1522] 유기 EL 소자를 제작하고, 전압을 인가하여 전류밀도, 휘도, 색도 및 외부양자효율 등을 측정한다. 제작한 유기 EL 소자의 구성으로서, 이하의 구성 A(표 2), 구성 B(표 3) 및 구성 C(표 4)의 3개를 선정하여 평가한다. 구성 A~C는 열활성화형 지연 형광용 재료에 적합한 구성이다. 구성 A는 문헌(Adv. Mater. 2016, 28, 2777-2781)에서 나타낸 높은 효율을 기대할 수 있는 소자 구성이다. 구성 B는 문헌(Scientific Reports, 6, 2016, 22463)에서 나타낸 비교적 높은 효율과 장기간의 구동안정성을 기대할 수 있는 소자 구성이다. 구성 C는 문헌(Thin Solid Films, 619, 2016, 120-124)에서 나타낸, 구성 A와는 상이한 호스트 재료를 적용한 소자 구성이다. 다만, 본 발명의 화합물 적용은 이러한 구성으로 한정되지 않으며, 각 층의 막 두께나 구성 재료는 본 발명의 화합물의 기초 물성에 따라 적절하게 변경할 수 있다.

[1523]

(유기 EL 소자의 구성 A)

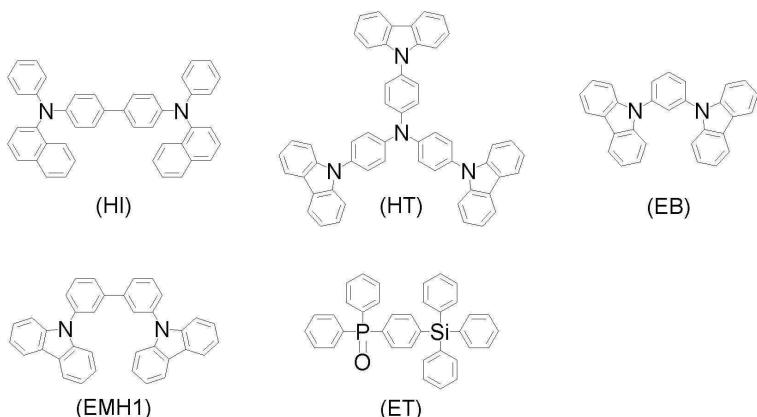
	정공 주입층 (40nm)	정공 수송층 (15nm)	전자 저지층 (15nm)	발광층 (20nm)		전자 수송층 (40nm)	음극 (1nm/ 100nm)
				호스트	도편트		
실시예 1	HI	HT	EB	EMH1	화합물 (BNpCz-12mS -0230-1)	ET	LiF/AI

[1524]

[1525] 표 2에 있어서, 「HI」는 N,N'-디페닐-N,N'-디나프틸-4,4'-디아미노비페닐이며, 「HT」는 4,4',4"-트리스(N-카르바졸릴)트리페닐아민이며, 「EB」는 1,3-비스(N-카르바졸릴)벤젠이며, 「EMH1」은 3,3'-비스(N-카르바졸릴)-1,1'-비페닐이며, 「ET」는 디페닐[4-(트리페닐실릴)페닐]포스핀옥사이드이다. 이하에 화학 구조를 나타낸다.

[1526]

[화학식 387]



[1527]

<실시예 1>

[1528] <구성 A: 화합물(BNpCz-12mS-0230-1)을 도편트로 한 소자>

[1529] 스퍼터링에 의해 200nm의 두께로 제막한 ITO를 50nm까지 연마한, 26mm×28mm×0.7mm의 유리 기판((주)오프토사 이언스 제조)을 투명 지지기판으로 한다. 이 투명 지지기판을 시판하고 있는 증착장치(조슈산업(주) 제조)의 기판 홀더에 고정하고, HI, HT, EB, EMH1, 화합물(BNpCz-12mS-0230-1), 및 ET를 각각 넣은 탄탈제 증착용 보트, LiF 및 알루미늄을 각각 넣은 질화 알루미늄제 증착용 보트를 장착한다.

[1530]

[1531] 투명 지지기판의 ITO막 위에 순차적으로, 하기 각 층을 형성했다. 진공조를 5×10^{-4} Pa까지 감압하고, 먼저, HI를 가열하여 막 두께 40nm로 되도록 증착하고, 다음으로, HT를 가열하여 막 두께 15nm로 되도록 증착하여 2층으로 이루어지는 정공층을 형성한다. 다음으로, EB를 가열하여 막 두께 15nm로 되도록 증착하여 전자저지층을 형성한

다. 다음으로, EMH1과 화합물(BNpCz-12mS-0230-1)을 동시에 가열하여 막 두께 20nm로 되도록 증착하여 발광층을 형성한다. EMH1과 화합물(BNpCz-12mS-0230-1)의 중량비가 약 99:1로 되도록 증착속도를 조절한다. 다음으로, ET를 가열하여 막 두께 40nm로 되도록 증착하여 전자수송층을 형성한다. 각 층의 증착속도는 0.01~1 nm/초이다. 그 후, LiF를 가열하여 막 두께 1nm로 되도록 0.01~0.1nm/초의 증착속도로 증착하고, 이어서, 알루미늄을 가열하여 막 두께 100nm로 되도록 증착하여 음극을 형성하여, 유기 EL 소자가 얹어진다. 이 때, 알루미늄의 증착속도는 1~10 nm/초로 되도록 조절한다.

[1532] ITO 전극을 양극, 알루미늄 전극을 음극으로 하여 직류 전압을 인가하고, 휘도, 색도 및 외부양자 효율 등을 측정한다.

[1533] [표 3]

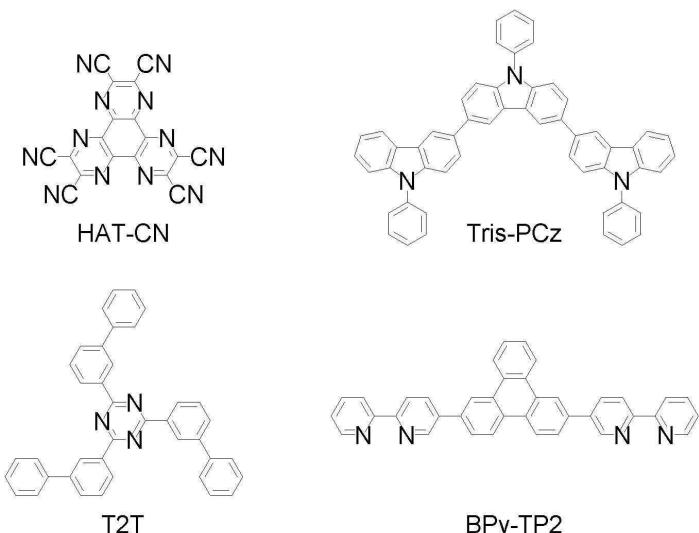
(유기 EL 소자의 구성 B)

	정공 주입층 (10nm)	정공 수송층 (30nm)	발광층 (30nm)		전자 수송층 1 (10nm)	전자 수송층 2 (30nm)	음극 (1nm/ 100nm)
			호스트	도편트			
실시예 2	HAT-CN	Tris-PCz	EMH1	화합물 (BNpCz-12mS -0230-1)	T2T	BPy-TP2	LiF/AI

[1534]

[1535] 표 3에 있어서, 「HAT-CN」은 1,4,5,8,9,12-헥사아자트리페닐렌헥사카르보니트릴이며, 「Tris-PCz」는 9,9',9''-트리페닐-9H,9H',9H''-3,3',6',3"-터카르바졸이며, 「T2T」는 2,4,6-트리[1,1'-비페닐]-3-일]-1,3,5-트리아진이며, 「BPy-TP2」는 2,7-디([2,2'-비페리딘]-5-일)트리페닐렌이다. 이하에 화학 구조를 나타낸다.

[1536] [화학식 388]



[1537]

<실시예 2>

[1538] <구성 B: 화합물(BNpCz-12mS-0230-1)을 도편트로 사용한 소자>

[1539]

스퍼터링에 의해 제막한 ITO를 50nm까지 연마한, 26mm×28mm×0.7mm의 유리 기판((주)오프토사이언스)을 투명 지지기판으로 한다. 이 투명 지지기판을 시판하고 있는 증착장치((주)조슈산업)의 기판 홀더에 고정하고, HAT-CN, Tris-PCz, EMH1, 화합물(BNpCz-12mS-0230-1), T2T, 및 BPy-TP2를 각각 넣은 탄탈제 증착용 도가니, LiF 및 알루미늄을 각각 넣은 질화 알루미늄제 증착용 도가니를 장착한다.

[1540]

투명 지지기판의 ITO막 위에 순차적으로, 하기 각 층을 형성한다. 전공조를 2.0×10^{-4} Pa까지 감압하고, 먼저, HAT-CN을 가열하여 막 두께 10nm로 되도록 증착하고, 이어서, Tris-PCz를 가열하여 막 두께 30nm로 되도록 증착함으로써 2층으로 이루어지는 정공층을 형성한다. 다음으로, EMH1과 화합물(BNpCz-12mS-0230-1)을 동시에 가열하여 막 두께 30nm로 되도록 증착하여 발광층을 형성한다. EMH1과 화합물(BNpCz-12mS-0230-1)의 중량비가 약

90:10으로 되도록 증착속도를 조절한다. 다음으로, T2T를 가열하여 막 두께 10nm로 되도록 증착하고, 이어서, BPy-TP2를 30nm로 되도록 증착하여 2층으로 이루어지는 전자수송층을 형성한다. 각 층의 증착속도는 0.01~1 nm/초이다. 그 후, LiF를 가열하여 막 두께 1nm로 되도록 0.01~0.1 nm/초의 증착속도로 증착하고, 이어서, 알루미늄을 가열하여 막 두께 100nm로 되도록 0.1~2 nm/초의 증착속도로 증착하여 음극을 형성함으로써, 유기 EL 소자가 얻어진다.

[1542]

[표 4]

(유기 EL 소자의 구성 C)

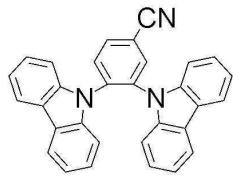
	정공 주입층 (10nm)	정공 수송층 1 (25nm)	정공 수송층 2 (10nm)	발광층 (30nm)		전자 수송층 1 (10nm)	전자 수송층 2 (40nm)	음극 (1nm/ 100nm)
				호스트	도편트			
실시예 3	HAT -CN	Tris -PCz	EB	화합물 2CzBN	화합물 (BNpCz-12mS -0230-1)	화합물 2CzBN	Bpy- TP2	LiF/AI

[1543]

표 4에 있어서, 「2CzBN」은 3,4-디(9H-카르바졸-9-일)벤조니트릴이다. 이하에 화학 구조를 나타낸다.

[1544]

[화학식 389]



2CzBN

[1545]

<실시예 3>

[1546]

<구성 C: 화합물(BNpCz-12mS-0230-1)을 도편트로 사용한 소자>

[1547]

스퍼터링에 의해 제막한 ITO를 50nm까지 연마한, 26mm×28mm×0.7mm의 유리 기판((주)오프토사이언스)을 투명 지지기판으로 한다. 이 투명 지지기판을 시판하고 있는 증착장치((주)조슈산업)의 기판 홀더에 고정하고, HAT-CN, Tris-PCz, EB, 2CzBN, 화합물(BNpCz-12mS-0230-1), 및 BPy-TP2를 각각 넣은 탄탈제 증착용 도가니, LiF 및 알루미늄을 넣은 질화 알루미늄제 증착용 도가니를 장착한다.

[1548]

투명 지지기판의 ITO막 위에 순차적으로, 하기 각 층을 형성한다. 전공조를 2.0×10^{-4} Pa까지 감압하고, 먼저, HAT-CN을 가열하여 막 두께 10nm로 되도록 증착하고, 이어서, Tris-PCz를 가열하여 막 두께 25nm로 되도록 증착하고, 이어서, EB를 가열하여 10nm로 되도록 증착함으로써 3층으로 이루어지는 정공층을 형성한다. 다음으로, 2CzBN과 화합물(BNpCz-12mS-0230-1)을 동시에 가열하여 막 두께 30nm로 되도록 증착하여 발광층을 형성한다. 2CzBN과 화합물(BNpCz-12mS-0230-1)의 중량비가 약 90:10으로 되도록 증착속도를 조절한다. 다음으로, 2CzBN을 가열하여 막 두께 10nm로 되도록 증착하고, 이어서, BPy-TP2를 40nm로 되도록 증착하여 2층으로 이루어지는 전자수송층을 형성한다. 각 층의 증착속도는 0.01~1 nm/초이다. 그 후, LiF를 가열하여 막 두께 1nm로 되도록 0.01~0.1 nm/초의 증착속도로 증착하고, 이어서, 알루미늄을 가열하여 막 두께 100nm로 되도록 0.1~2 nm/초의 증착속도로 증착하여 음극을 형성함으로써, 유기 EL 소자가 얻어진다.

[1549]

다음으로, 표 5에 기재된 구성 D의 소자를 제작한다. 구성 D는 열활성화형 자연 형광용 재료에 적합한 구성인 구성 A의 호스트를 변경하여, 발광층에서의 전하 밸런스를 조정한 구성이다. 다만, 본 발명의 화합물 적용은 이러한 구성으로 한정되지 않고, 각 층의 막 두께나 구성 재료는 본 발명의 화합물의 기초 물성에 따라 적절하게 변경할 수 있다.

[1552]

[표 5]

(유기 EL 소자의 구성 D)

	정공 주입층 (40nm)	정공 수송층 (15nm)	전자 저지층 (15nm)	발광층 (20nm)		전자 수송층 (30nm)	음극 (1nm/ 100nm)
				호스트	도편트		
실시예 4	HI	HT	EB	BH1	화합물 (BNpCz-12mS -0230-1)	ET	LiF/AI
비교예 1	HI	HT	EB	BH1	비교화합물 2	ET	LiF/AI

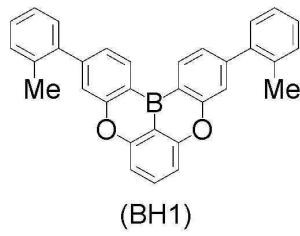
[1553]

[1554]

표 5에 있어서, 「BH1」은 3,11-디-o-톨릴-5,9-디옥사-13b-보라나프토[3,2,1-de]안트라센이다. 이하에 화학 구조를 나타낸다.

[1555]

[화학식 390]



[1556]

<실시예 4>

[1558]

<구성 D: 화합물(BNpCz-12mS-0230-1)을 도편트로 사용한 소자>

[1559]

스퍼터링에 의해 200nm의 두께로 제막한 ITO를 50nm까지 연마한, 26mm×28mm×0.7mm의 유리 기판((주)오프토사이언스 제조)을 투명 지지기판으로 했다. 이 투명 지지기판을 시판하고 있는 종착장치(조슈산업(주) 제조)의 기판 홀더에 고정하고, HI, HT, EB, BH1, 화합물(BNpCz-12mS-0230-1), 및 ET를 각각 넣은 탄탈제 종착용 보트, LiF 및 알루미늄을 각각 넣은 질화 알루미늄제 종착용 보트를 장착했다.

[1560]

투명 지지기판의 ITO막 위에 순차적으로, 하기 각 층을 형성했다. 진공조를 5×10^{-4} Pa까지 감압하고, 먼저, HI를 가열하여 막 두께40nm로 되도록 증착하고, 다음으로, HT를 가열하여 막 두께 15nm로 되도록 증착하여 전자저지층을 형성했다. 다음으로, EB를 가열하여 막 두께 15nm로 되도록 증착하여 전자저지층을 형성했다. 다음으로, BH1과 화합물(BNpCz-12mS-0230-1)을 동시에 가열하여 막 두께 20nm로 되도록 증착하여 발광층을 형성했다. BH1과 화합물(BNpCz-12mS-0230-1)의 중량비가 약 99:1로 되도록 증착속도를 조절했다. 다음으로, ET를 가열하여 막 두께 30nm로 되도록 증착하여 전자수송층을 형성했다. 각 층의 증착속도는 0.01~1 nm/초였다. 그 후, LiF를 가열하여 막 두께 1nm로 되도록 0.01~0.1nm/초의 증착속도로 증착하고, 이어서, 알루미늄을 가열하여 막 두께 100nm로 되도록 증착하여 음극을 형성하고, 유기 EL 소자가 얻어졌다. 이 때, 알루미늄의 증착속도는 1~10 nm/초로 되도록 조절했다.

[1561]

ITO 전극을 양극, 알루미늄 전극을 음극으로 하여 직류 전압을 인가하고, 휙도, 색도 및 외부양자효율을 측정했다. $100\text{cd}/\text{m}^2$ 발광 시의 발광 스펙트럼은 반값폭(FWHM) 26nm이고 피크 파장 467nm이며, 반값폭이 좁은 깊은 청색의 발광이 관찰되었다. 또한, $100\text{cd}/\text{m}^2$ 발광 시의 외부양자효율은 17.8%, $1000\text{cd}/\text{m}^2$ 발광 시의 외부양자효율은 11.8%로서, 높은 양자효율이 얻어졌다.

[1562]

<비교예 1>

[1563]

<구성 A: 비교 화합물 2를 도편트로 사용한 소자>

[1564]

도편트를 비교 화합물 2로 변경한 이외에는 실시예 4과 동일한 수순 및 구성으로 EL소자를 얻었다. $100\text{cd}/\text{m}^2$ 발광 시의 발광 스펙트럼은 반값폭(FWHM) 27nm이고 피크 파장 464nm이며, 반값폭이 좁은 깊은 청색의 발광이 관찰되었다. 한편, $100\text{cd}/\text{m}^2$ 발광 시의 외부양자효율은 13.8%, $1000\text{cd}/\text{m}^2$ 발광 시의 외부양자효율은 5.5%로서, 실시

예 4와 비교하여 효율이 낮고, 롤오프도 컸다.

[1565] 다음으로, 표 6에 기재된 구성 E의 소자를 제작한다. 구성 E는 발광층에서의 TTF(Triplet-Triplet Fusion: 3종 항쌍소멸을 이용한 1중항 생성)의 이용에 적합한 구성이다. 다만, 본 발명의 화합물 적용은 이러한 구성으로 한정되지 않고, 각 층의 막 두께나 구성 재료는 본 발명의 화합물의 기초 물성에 따라 적절하게 변경할 수 있다.

[표 6]

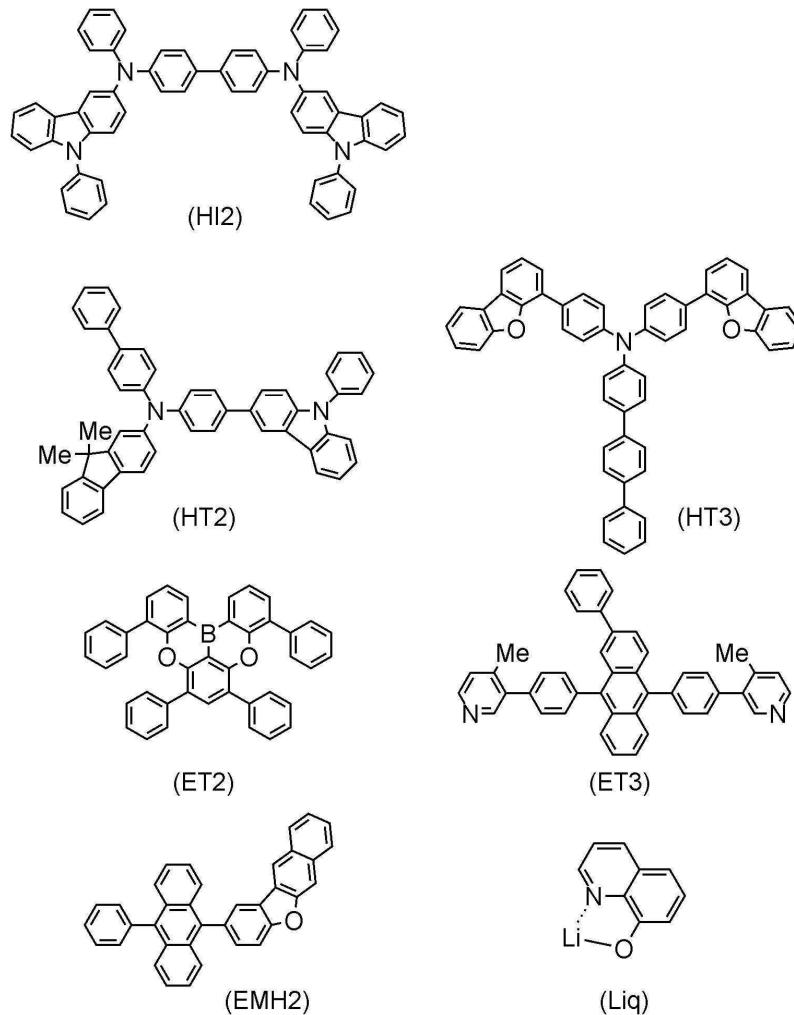
(유기 EL 소자의 구성 E)

	정공 주입층 1 (40nm)	정공 주입층 2 (5nm)	정공 수송층 1 (45nm)	정공 수송층 2 (10nm)	발광층 (25nm)		전자 수송층 1 (5nm)	전자 수송층 2 (25nm)	음극 1nm/ 100nm
					호스트	도편트			
실시예 5	HI2	HAT -CN	HT2	HT3	EMH2	(BOCz- 0001)	ET2	ET3 + Liq	LiF/AI

[1568] 표 6에서 「HI2」는 $N^4,N^{4'}-페닐-N^4,N^{4'}-비스(9-페닐-9H-카르바졸-3-일)-[1,1'-비페닐]-4,4'-디아민이며, 「HT2」는 $N-([1,1'-비페닐]-4-일)-9,9-디메틸- $N-(4-(9-페닐-9H-카르바졸-3-일)페닐)-9H-플루오렌-2-아민이며, 「HT3」는 $N,N-비스(4-(디벤조[b,d]퓨란-4-일)페닐)-[1,1':4',1"-터페닐]-4-아민이며, 「EMH2」는 2-(10-페닐안트라센-9-일)나프토[2,3-b]벤조퓨란이며, 「ET2」는 4,6,8,10-테트라페닐[1,4]벤즈옥사볼리니노[2,3,4-k1]페녹사볼리니노이며, 「ET3」는 3,3'-(2-페닐안트라센-9,10-디일)비스(4,1-페닐렌))비스(4-메틸파리딘)이다. 「Liq」와 함께 이하에 화학 구조를 나타낸다.$$$$

[1569]

[화학식 391]



[1570]

<실시 예 5>

[1572]

<호스트가 EMH2, 도편트가 화합물(BOCz-0001)인 소자>

[1573]

스퍼터링에 의해 180nm의 두께로 제막한 ITO를 150nm까지 연마한, 26mm×28mm×0.7mm의 유리 기판((주)오프토사이언스 제조)을 투명 지지기판으로 한다. 이 투명 지지기판을 시판하고 있는 중착장치(쇼와(昭和)진공(주)제조)의 기판 홀더에 고정하고, HI2, HAT-CN, HT2, HT3, EMH2, 화합물(BOCz-0001), ET2 및 ET3를 각각 넣은 몰리브덴제 중착용 보트, Liq, LiF 및 알루미늄을 각각 넣은 질화 알루미늄제 중착용 보트를 장착한다.

[1574]

투명 지지기판의 ITO막 위에 순차적으로, 하기 각 층을 형성했다. 진공조를 5×10^{-4} Pa까지 감압하고, 먼저, HI2를 가열하여 막 두께 40nm로 되도록 중착하고, 다음으로, HAT-CN을 가열하여 막 두께 5nm로 되도록 중착하고, 다음으로, HT2를 가열하여 막 두께 45nm로 되도록 중착하고, 다음으로, HT3를 가열하여 막 두께 10nm로 되도록 중착하여, 4층으로 이루어지는 정공층을 형성한다. 다음으로, EMH2와 화합물(BOCz-0001)을 동시에 가열하여 막 두께 25nm로 되도록 중착하여 발광층을 형성한다. EMH2와 화합물(BOCz-0001)의 중량비가 약 98:2로 되도록 중착속도를 조절한다. 또한, ET2를 가열하여 막 두께 5nm로 되도록 중착하고, 다음으로, ET3와 Liq를 동시에 가열하여 막 두께 25nm로 되도록 중착하여, 2층으로 이루어지는 전자층을 형성한다. ET3와 Liq의 중량비가 약 50:50으로 되도록 중착속도를 조절한다. 각 층의 중착속도는 0.01~1 nm/초로 한다. 그 후, LiF를 가열하여 막 두께 1nm로 되도록 0.01~0.1 nm/초의 중착속도로 중착하고, 이어서, 알루미늄을 가열하여 막 두께 100nm로 되도록 중착하여 음극을 형성하고, 유기 EL 소자가 얻어진다.

[1575]

ITO 전극을 양극, LiF/알루미늄 전극을 음극으로 하여 직류 전압을 인가함으로써 청색발광이 얻어진다.

[1576]

다음으로, 표 7에 기재된 구성 F의 소자를 제작한다. 구성 F는 열활성화형 지연 형광용 재료의 어시스팅 도편트로의 이용에 적합한 구성이다. 구성 F는 문헌(Adv. Mater. 2016, 28, 2777-2781)에서 나타낸 높은 효율을 기대할 수 있는 소자구성이다. 구성 F에 있어서 어시스팅 도편트는 열활성화 지연 형광재료이며, 호스트 및 이미팅 도편트는 열활성화 지연 형광재료이지만 없어도 된다. 다만, 본 발명의 화합물 적용은 이러한 구성으로 한정되지 않고, 각 층의 막 두께나 구성 재료는 본 발명의 화합물의 기초 물성에 따라 적절하게 변경할 수 있다.

[1577]

[표 7]

(유기 EL 소자의 구성 F)

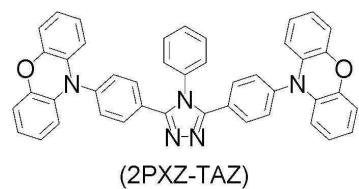
	정공 주입층 (40nm)	정공 수송층 (15nm)	전자 저지층 (15nm)	발광층 (20nm)			전자 수송층 (30nm)	음극 (1nm/ 100nm)
				호스트	어시스팅 도편트	이미팅 도편트		
실시예 6	HI	HT	EB	EMH1	화합물 (2PXZ-TAZ)	화합물 (BNpCz-12mS-0230-1)	ET	LiF/AI

[1578]

표 7에서의 화합물 「2PXZ-TAZ」의 화학 구조를 이하에 나타낸다.

[1580]

[화학식 392]



[1581]

<실시예 6>

[1583]

<구성 F: 호스트 화합물을 EMH1, 어시스팅 도편트를 화합물(2PXZ-TAZ), 이미팅 도편트를 화합물(BNpCz-12mS-0230-1)로 한 소자>

[1584]

스퍼터링에 의해 200nm의 두께로 제막한 ITO를 50nm까지 연마한, 26mm×28mm×0.7mm의 유리 기판((주)오프토사이언스 제조)을 투명 지지기판으로 한다. 이 투명 지지기판을 시판하고 있는 중착장치(조슈산업(주) 제조)의 기판 홀더에 고정하고, HI, HT, EB, EMH1, 화합물(2PXZ-TAZ), 화합물(BNpCz-12mS-0230-1), 및 ET를 각각 넣은 탄탈제 중착용 보트, LiF 및 알루미늄을 각각 넣은 질화 알루미늄제 중착용 보트를 장착한다.

[1585] 투명 지지기판의 ITO막 위에 순차적으로, 하기 각 층을 형성한다. 전공조를 5×10^{-4} Pa까지 감압하고, 먼저, HI를 가열하여 막 두께 40nm로 되도록 증착하고, 다음으로, HT를 가열하여 막 두께 15nm로 되도록 증착하여 2층으로 이루어지는 정공층을 형성한다. 다음으로, EB를 가열하여 막 두께 15nm로 되도록 증착하여 전자저지층을 형성한다. 다음으로, 호스트로서 EMH1, 어시스팅 도편트로서 화합물(2PXZ-TAZ) 및 이미팅 도편트로서 화합물(BNpCz-12mS-0230-1)을 동시에 가열하여 막 두께 20nm로 되도록 공증착하여 발광층을 형성한다. 호스트, 어시스팅 도편트 및 이미팅 도편트의 중량비가 약 90:9:1로 되도록 증착속도를 조절한다. 다음으로, ET를 가열하여 막 두께 30nm로 되도록 증착하여 전자수송층을 형성한다. 이상의 각 층의 증착속도는 0.01~1 nm/초로 한다. 그 후, LiF를 가열하여 막 두께 1nm로 되도록 0.01~0.1 nm/초의 증착속도로 증착하고, 이어서, 알루미늄을 가열하여 막 두께 100nm로 되도록 증착하여 음극을 형성하여, 유기 EL 소자가 얻어진다. 이 때, 알루미늄의 증착속도는 1~10 nm/초로 되도록 조절한다.

[1586] ITO 전극을 양극, 알루미늄 전극을 음극으로 하여 직류 전압을 인가함으로써, 깊은 청색(딥 블루)의 발광이 관찰된다.

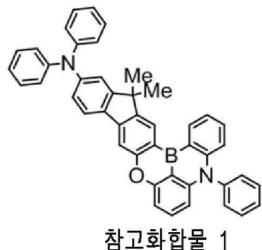
[1587] <TADF 화합물로서의 평가>

[1588] 다음으로, DFT 계산을 사용하여 TADF 활성인 발광 재료의 구조를 설계했다. B3LYP/6-31G(d)법을 사용하여 기저 상태의 구조 최적화를 행한 후, Time-dependent DFT법을 사용하여 기저 상태로부터의 수직 여기 에너지를 계산하고, 1중향 여기 에너지(E_s)로부터 발광파장을 예측했다. 모든 계산은 양자화학계산프로그램 Firefly(A. A. Granovsky, Firefly version 8)를 사용하여 행하였다.

[1589] <계산 참고예 1>

[1590] 참고 화합물 1의 1중향 여기 에너지는 2.9040eV이며, 파장으로 환산하면 427nm였다. 참고 화합물 1을 일본특허 출원 2017-562549에 기재된 방법으로 합성하고, 1% PSt 분산막 중의 발광파장을 측정한 바 448nm였다. 계산에 의해 1중향 여기 에너지로부터 예상되는 파장에 비교하여 발광파장은 21nm 장파장 측이었다.

[1591] [화학식 393]



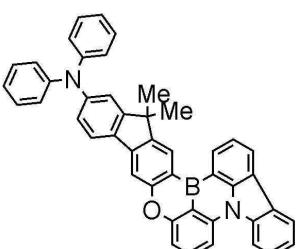
[1592] 참고화합물 1

[1593] 본 발명의 구조를 가지는 분자라면 계산 참고예 1과 실측값이 동일한 경향이라는 가정 하에, 상기 화합물의 발광파장을 판별했다. 구체적으로는, 실제 발광파장은 여기 1중향 에너지의 계산 결과에 비교하여 21nm 전후 길이 질 가능성이 있다고 가정했다.

[1594] <계산 실시예 1>

[1595] 화합물(BOCzb-3b30)의 1중향 여기 에너지는 2.7943eV이며, 파장으로 환산하면 444nm이므로, 예상되는 발광파장은 465nm였다. 계산 결과로부터, 화합물(BOCzb-3b30)은 청색발광이 얻어질 것으로 예상되었다.

[1596] [화학식 394]

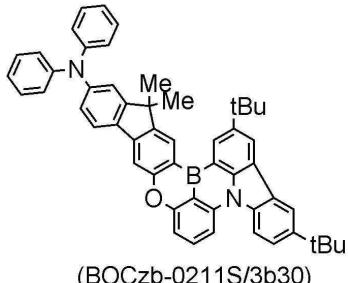


[1597] (BOCzb-3b30)

[1598] <계산 실시예 2>

[1599] 화합물(BOCzb-0211S/3b30)의 1중향 여기 에너지는 2.8048eV이며, 파장으로 환산하면 442nm이므로, 예상되는 발광파장은 463nm였다. 계산 결과로부터, 화합물(BOCzb-0211S/3b30)은 청색발광이 얻어질 것으로 예상되었다.

[1600] [화학식 395]



[1601]

<계산 실시예 3>

[1603] 화합물(BOCza-0530)의 1중향 여기 에너지는 2.8146eV이며, 파장으로 환산하면 441nm이므로, 예상되는 발광파장은 462nm였다. 계산 결과로부터, 화합물(BOCza-0530)은 청색발광이 얻어질 것으로 예상되었다.

[1604]

[화학식 396]



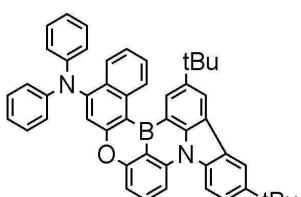
[1605]

<계산 실시예 4>

[1607] 화합물(BOCza-0530/0911S)의 1중향 여기 에너지는 2.8122eV이며, 파장으로 환산하면 441nm이므로, 예상되는 발광파장은 462nm였다. 계산 결과로부터, 화합물(BOCza-0530/0911S)은 청색발광이 얻어질 것으로 예상되었다.

[1608]

[화학식 397]



[1609]

[산업상 이용가능성]

[1611]

본 발명에서는, 신규한 다환 방향족 화합물을 제공함으로써, 유기 EL 소자용 재료의 선택 사항을 증가시킬 수 있다. 또한, 신규한 다환 방향족 화합물을 유기전계 발광소자용 재료로서 사용함으로써, 우수한 유기 EL 소자, 이것을 구비한 표시 장치 및 이것을 구비한 조명장치 등을 제공할 수 있다.

부호의 설명

[1612]

100: 유기전계 발광소자

101: 기판

102: 양극

103: 정공주입층

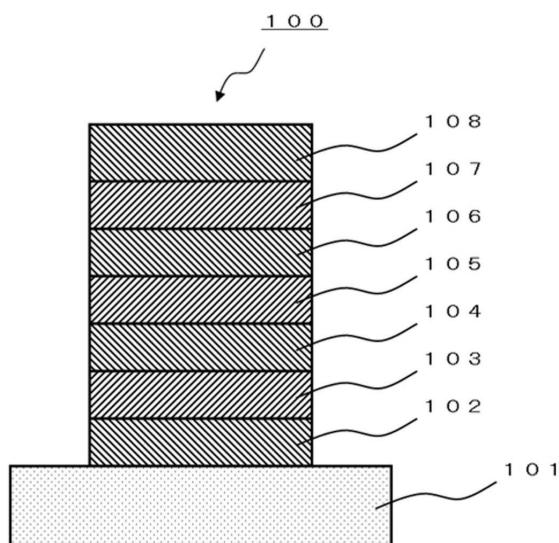
104: 정공수송총

105: 발광총

106: 전자수송총

107: 전자주입총

108: 음극

도면**도면1****도면2**