(19) 대한민국특허청(KR)
(12) 공개특허공보(A)

(11) 공개번호 10-2024-0025546
(43) 공개일자 2024년02월27일

(51) 국제특허분류(Int. Cl.)
H10K 85/60 (2023.01) *H10K 101/20* (2023.01)
H10K 50/12 (2023.01)
(52) CPC특허분류
H10K 85/658 (2023.02)
H10K 50/12 (2023.02)
(21) 출원번호 10-2023-7044678
(22) 출원일자(국제) 2022년03월30일
심사청구일자 없음
(85) 번역문제출일자 2023년12월22일
(86) 국제출원번호 PCT/JP2022/015888
(87) 국제공개번호 WO 2022/270113
국제공개일자 2022년12월29일
(30) 우선권주장
JP-P-2021-103702 2021년06월23일 일본(JP)
(뒷면에 계속)

(71) 출원인
가부시키가이샤 큐럭스
일본 후쿠오카켄 후쿠오카시 니시쿠 규다이신마치 4-1
(72) 발명자
요시자키 마코토
일본 후쿠오카켄 후쿠오카시 니시쿠 규다이신마치 4-1 가부시키가이샤 큐럭스 나이
모리모토 게이
일본 후쿠오카켄 후쿠오카시 니시쿠 규다이신마치 4-1 가부시키가이샤 큐럭스 나이
(뒷면에 계속)
(74) 대리인
특허법인코리아나

전체 청구항 수 : 총 11 항

(54) 발명의 명칭 **유기 일렉트로 루미네선스 소자**

(57) 요 약

지연 형광 재료의 LUMO 준위보다 형광 재료의 LUMO 준위가 낮은 경우에서도 높은 발광 효율이 얻어지는 유기 일렉트로 루미네선스 소자를 제공하는 것. 발광층에, 제1 유기 화합물, 지연 형광 재료인 제2 유기 화합물 및 형광을 방사하는 제3 유기 화합물을 포함하고 있으며, 제2 유기 화합물이 제3 유기 화합물보다 LUMO의 에너지가 높고, 소자로부터의 발광의 최대 성분이 제3 유기 화합물로부터의 형광이며, 발광층에 있어서의 제3 유기 화합물의 배향값이 -0.3 이하인 유기 일렉트로 루미네선스 소자.

(52) CPC특허분류
H10K 85/636 (2023.02)
H10K 85/654 (2023.02)
H10K 85/6572 (2023.02)
H10K 85/6574 (2023.02)
C07B 2200/05 (2013.01)
H10K 2101/20 (2023.02)

(72) 발명자
황 송혜
일본 후쿠오카켕 후쿠오카시 니시쿠 규다이신마치 4-1 가부시키가이샤 큐럭스 나이
오자와 히로아키
일본 후쿠오카켕 후쿠오카시 니시쿠 규다이신마치 4-1 가부시키가이샤 큐럭스 나이
가키조에 하야토
일본 후쿠오카켕 후쿠오카시 니시쿠 규다이신마치 4-1 가부시키가이샤 큐럭스 나이
고다마 유카
일본 후쿠오카켕 후쿠오카시 니시쿠 규다이신마치 4-1 가부시키가이샤 큐럭스 나이

(30) 우선권주장
JP-P-2021-151805 2021년09월17일 일본(JP)
JP-P-2021-188860 2021년11월19일 일본(JP)
JP-P-2021-204983 2021년12월17일 일본(JP)

명 세 서

청구범위

청구항 1

양극, 음극, 및 상기 양극과 상기 음극의 사이에 발광층을 포함하는 적어도 1층의 유기층을 갖는 유기 일렉트로 루미네선스 소자로서,

상기 발광층은, 제1 유기 화합물, 제2 유기 화합물 및 제3 유기 화합물을 포함하며, 하기 식 (a) 및 하기 식 (b)를 충족시키고 있고,

상기 제2 유기 화합물은 지연 형광 재료이며,

상기 소자로부터의 발광의 최대 성분은 상기 제3 유기 화합물로부터의 형광인, 유기 일렉트로 루미네선스 소자.

[수학식 1]

$$E_{LUMO}(2) > E_{LUMO}(3) \quad \text{식 (a)}$$
$$S \leqq -0.3 \quad \text{식 (b)}$$

[여기에서,

$E_{LUMO}(2)$는, 상기 제2 유기 화합물의 LUMO의 에너지

$E_{LUMO}(3)$은, 상기 제3 유기 화합물의 LUMO의 에너지

S는, 상기 발광층에 있어서의 상기 제3 유기 화합물의 배향값을 나타낸다.]

청구항 2

청구항 1에 있어서,

상기 발광층에 있어서의 상기 제3 유기 화합물의 농도가 0.3중량%보다 큰, 유기 일렉트로 루미네선스 소자.

청구항 3

청구항 1 또는 청구항 2에 있어서,

상기 제3 유기 화합물은, 다중 공명 효과를 나타내는 붕소 원자와 질소 원자를 포함하고, 구성환수가 4개 이상인 축합환 구조를 갖는 화합물인, 유기 일렉트로 루미네선스 소자.

청구항 4

청구항 1 내지 청구항 3 중 어느 한 항에 있어서,

상기 제3 유기 화합물은, 붕소 원자와 질소 원자를 포함하는 복소 6원환에, 질소 원자를 공유하는 피롤환 및 2개의 벤젠환이 축합된 구조를 갖는 화합물인, 유기 일렉트로 루미네선스 소자.

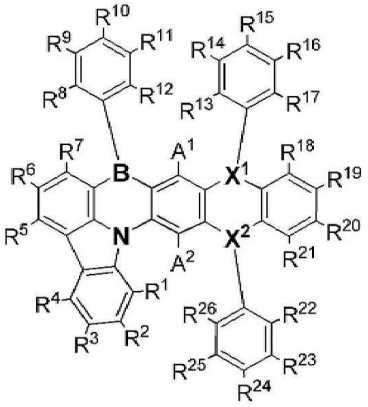
청구항 5

청구항 1 내지 청구항 4 중 어느 한 항에 있어서,

상기 제3 유기 화합물은, 하기 일반식 (16)으로 나타나는 화합물인, 유기 일렉트로 루미네선스 소자.

일반식 (16)

[화학식 1]



[일반식 (16)에 있어서, X^1 및 X^2는, 일방이 질소 원자이며, 타방이 붕소 원자이다. R^1~R^{26}, A^1, A^2는, 각각 독립적으로 수소 원자, 중수소 원자 또는 치환기를 나타낸다. R^1과 R^2, R^2와 R^3, R^3과 R^4, R^4와 R^5, R^5와 R^6, R^6과 R^7, R^7과 R^8, R^8과 R^9, R^9와 R^{10}, R^{10}과 R^{11}, R^{11}과 R^{12}, R^{13}과 R^{14}, R^{14}와 R^{15}, R^{15}와 R^{16}, R^{16}과 R^{17}, R^{17}과 R^{18}, R^{18}과 R^{19}, R^{19}와 R^{20}, R^{20}과 R^{21}, R^{21}과 R^{22}, R^{22}와 R^{23}, R^{23}과 R^{24}, R^{24}와 R^{25}, R^{25}와 R^{26}은, 서로 결합하여 환상 구조를 형성하고 있어도 된다. 단, X^1이 질소 원자일 때, R^{17}과 R^{18}은 서로 결합하여 단결합이 되어 피롤환을 형성하고, X^2가 질소 원자일 때, R^{21}과 R^{22}는 서로 결합하여 단결합이 되어 피롤환을 형성한다. 단, X^1이 질소 원자로서, R^7과 R^8 및 R^{21}과 R^{22}가 질소 원자를 개재하여 결합하여 6원환을 형성하고, R^{17}과 R^{18}이 서로 결합하여 단결합을 형성하고 있을 때, R^1~R^6 중 적어도 하나는 치환 혹은 무치환의 아릴기이거나, R^1과 R^2, R^2와 R^3, R^3과 R^4, R^4와 R^5, R^5와 R^6 중 어느 하나가 서로 결합하여 방향환 또는 복소 방향환을 형성하고 있다.]

청구항 6

청구항 1 내지 청구항 5 중 어느 한 항에 있어서,

상기 발광층에 있어서의 상기 제2 유기 화합물의 농도가 25중량% 이상인, 유기 일렉트로 루미네선스 소자.

청구항 7

청구항 1 내지 청구항 6 중 어느 한 항에 있어서,

상기 제2 유기 화합물이, 벤젠환에 1~2개의 사이아노기와 적어도 1개의 도너성기가 결합된 구조를 갖는, 유기 일렉트로 루미네선스 소자.

청구항 8

청구항 7에 있어서,

상기 도너성기가, 카바졸-9-일기를 구성하는 벤젠환에 치환 혹은 무치환의 벤조퓨란환이 축합된 구조를 갖는, 유기 일렉트로 루미네선스 소자.

청구항 9

청구항 8에 있어서,

상기 도너성기가, 치환 혹은 무치환의 5H-벤조퓨로[3,2-c]카바졸-5-일기인, 유기 일렉트로 루미네선스 소자.

청구항 10

청구항 7 내지 청구항 9 중 어느 한 항에 있어서,

상기 벤젠환에 상기 도너성기가 3개 이상 결합되어 있는, 유기 일렉트로 루미네선스 소자.

청구항 11

청구항 1 내지 청구항 10 중 어느 한 항에 있어서,

상기 제1 유기 화합물, 상기 제2 유기 화합물 및 상기 제3 유기 화합물이 하기 식 (a1)을 충족시키고 있는, 유기 일렉트로 루미네선스 소자.

$E_{LUMO}(1)>E_{LUMO}(2)>E_{LUMO}(3)$ 식 (a1)

[여기에서,

$E_{LUMO}(1)$은, 상기 제1 유기 화합물의 LUMO의 에너지

$E_{LUMO}(2)$는, 상기 제2 유기 화합물의 LUMO의 에너지

$E_{LUMO}(3)$은, 상기 제3 유기 화합물의 LUMO의 에너지

S는, 상기 발광층에 있어서의 상기 제3 유기 화합물의 배향값을 나타낸다.]

발명의 설명

기 술 분 야

[0001] 본 발명은, 발광 효율이 높은 유기 일렉트로 루미네선스 소자에 관한 것이다.

배 경 기 술

[0002] 유기 일렉트로 루미네선스 소자(유기 EL 소자)의 발광 효율을 높이는 연구가 활발히 진행되고 있다. 특히, 유기 일렉트로 루미네선스 소자의 발광층의 재료 조성을 새롭게 개발함으로써, 실온에서는 무복사 실활(失活)되어 버리는 여기 삼중항 상태의 에너지를, 여기 일중항 에너지로 변환하여 발광에 이용하는 노력이 다양하게 이루어져 오고 있다.

[0003] 예를 들면, 특허문헌 1에는, 호스트 재료와 지연 형광 재료와 형광 재료로 발광층을 구성한 3성분계의 유기 일렉트로 루미네선스 소자가 제안되고 있다. 이 발광층에서는, 호스트 재료로부터 지연 형광 재료로 이동해 온 여기 삼중항 에너지, 및, 지연 형광 재료에서 발생한 여기 삼중항 에너지가, 지연 형광 재료에서의 삼중항으로부터 일중항으로의 역항간 교차에 의하여 여기 일중항 에너지로 변환되고, 형광 재료로 이동하여 형광으로서 방사된다. 이로써, 발광층에서 발생한 여기 삼중항 에너지가 형광 재료의 발광에 유효 이용되어 높은 발광 효율이 얻어진다고 되어 있다.

선행기술문헌

특허문헌

[0004] (특허문헌 0001) 특허문헌 1: 일본 공개특허공보 2015-179809호

발명의 내용

해결하려는 과제

[0005] 그런데, 형광 재료의 발광 파장은, HOMO-LUMO 사이의 에너지 갭과 스토크스 시프트에 의존하고, 이들의 에너지 값이 상이한 다양한 형광 재료가 개발되고 있다. 그 때문에, 상기의 3성분계의 발광층에서는, 이용하는 형광 재료에 따라, 형광 재료의 LUMO의 에너지가 지연 형광 재료의 LUMO의 에너지보다 높아지는 경우도 있고, 그보다 낮아지는(깊어지는) 경우도 있다. 이러한 상황에 있어서, 본 발명자들이, 다양한 지연 형광 재료 및 형광 재료를 호스트 재료와 조합하여 발광층을 구성한 결과, 지연 형광 재료의 LUMO의 에너지보다 형광 재료의 LUMO의 에너지가 낮은 경우에 형광 재료의 농도를 높이면, 발광 효율이 저하되는 현상이 보여, 발광 효율을 충분히 향상시킬 수 없는 것이 판명되었다.

[0006] 따라서, 본 발명자들은, 호스트 재료와 지연 형광 재료와 형광 재료를 발광층에 포함하는 유기 일렉트로 루미네선스 소자로서, 지연 형광 재료의 LUMO의 에너지보다 형광 재료의 LUMO의 에너지가 낮은 경우에서도 높은 발광 효율이 얻어지는 유기 일렉트로 루미네선스 소자를 제공하는 것을 목적으로 하여 예의 검토를 진행했다.

과제의 해결 수단

[0007] 예의 검토를 진행한 결과, 본 발명자들은, 지연 형광 재료의 LUMO의 에너지보다 형광 재료의 LUMO의 에너지가 낮은 경우이더라도, 형광 재료로서 이용하는 유기 화합물 분자의 배향값 S가 -0.3 이하이면, 형광 재료의 농도를 높여도 발광 효율을 향상시킬 수 있는 것을 알아냈다.

[0008] 본 발명은 이러한 지견(知見)에 근거하여 제안된 것이며, 구체적으로, 이하의 구성을 갖는다.

[0009] [1]

[0010] 양극, 음극, 및 상기 양극과 상기 음극의 사이에 발광층을 포함하는 적어도 1층의 유기층을 갖는 유기 일렉트로 루미네선스 소자로서,

[0011] 상기 발광층은, 제1 유기 화합물, 제2 유기 화합물 및 제3 유기 화합물을 포함하며, 하기 식 (a) 및 하기 식 (b)를 충족시키고 있고,

[0012] 상기 제2 유기 화합물은 지연 형광 재료이며,

[0013] 상기 소자로부터의 발광의 최대 성분은 상기 제3 유기 화합물로부터의 형광인, 유기 일렉트로 루미네선스 소자.

[0014] [수학식 1]

[0015]
$$E_{LUMO}(2) > E_{LUMO}(3) \quad \text{식 (a)}$$
$$S \leqq -0.3 \quad \text{식 (b)}$$

[0016] [여기에서,

[0017] $E_{LUMO}(2)$는, 상기 제2 유기 화합물의 LUMO의 에너지

[0018] $E_{LUMO}(3)$은, 상기 제3 유기 화합물의 LUMO의 에너지

[0019] S는, 상기 발광층에 있어서의 상기 제3 유기 화합물의 배향값을 나타낸다.]

[0020] [2]

[0021] 상기 발광층에 있어서의 상기 제3 유기 화합물의 농도가 0.3중량%보다 큰, [1]에 기재된 유기 일렉트로 루미네선스 소자.

[0022] [3]

[0023] 상기 제3 유기 화합물은, 다중 공명 효과를 나타내는 붕소 원자와 질소 원자를 포함하고, 구성환수가 4개 이상인 축합환 구조를 갖는 화합물인, [1] 또는 [2]에 기재된 유기 일렉트로 루미네선스 소자.

[0024] [4]

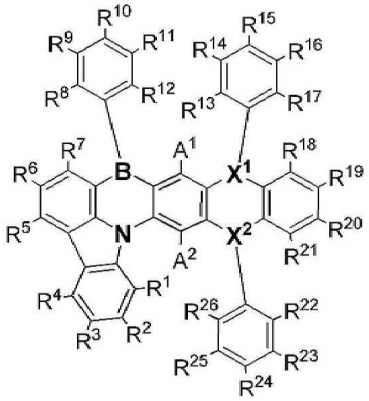
[0025] 상기 제3 유기 화합물은, 붕소 원자와 질소 원자를 포함하는 복소 6원환에, 질소 원자를 공유하는 피롤환 및 2개의 벤젠환이 축합된 구조를 갖는 화합물인, [1] 내지 [3] 중 어느 하나에 기재된 유기 일렉트로 루미네선스 소자.

[0026] [5]

[0027] 상기 제3 유기 화합물은, 하기 일반식 (16)으로 나타나는 화합물인, [1] 내지 [4] 중 어느 하나에 기재된 유기 일렉트로 루미네선스 소자.

[0028] 일반식 (16)

[0029] [화학식 1]



[0030]

[0031] [일반식 (16)에 있어서, X^1 및 X^2는, 일방이 질소 원자이며, 타방이 붕소 원자이다. R^1~R^{26}, A^1, A^2는, 각각 독립적으로 수소 원자, 중수소 원자 또는 치환기를 나타낸다. R^1과 R^2, R^2와 R^3, R^3과 R^4, R^4와 R^5, R^5와 R^6, R^6과 R^7, R^7과 R^8, R^8과 R^9, R^9와 R^{10}, R^{10}과 R^{11}, R^{11}과 R^{12}, R^{13}과 R^{14}, R^{14}와 R^{15}, R^{15}와 R^{16}, R^{16}과 R^{17}, R^{17}과 R^{18}, R^{18}과 R^{19}, R^{19}와 R^{20}, R^{20}과 R^{21}, R^{21}과 R^{22}, R^{22}와 R^{23}, R^{23}과 R^{24}, R^{24}와 R^{25}, R^{25}와 R^{26}은, 서로 결합하여 환상 구조를 형성하고 있어도 된다. 단, X^1이 질소 원자일 때, R^{17}과 R^{18}은 서로 결합하여 단결합이 되어 피롤환을 형성하고, X^2가 질소 원자일 때, R^{21}과 R^{22}는 서로 결합하여 단결합이 되어 피롤환을 형성한다. 단, X^1이 질소 원자로서, R^7과 R^8 및 R^{21}과 R^{22}가 질소 원자를 개재하여 결합하여 6원환을 형성하고, R^{17}과 R^{18}이 서로 결합하여 단결합을 형성하고 있을 때, R^1~R^6 중 적어도 하나는 치환 혹은 무치환의 아릴기이거나, R^1과 R^2, R^2와 R^3, R^3과 R^4, R^4와 R^5, R^5와 R^6 중 어느 하나가 서로 결합하여 방향환 또는 복소 방향환을 형성하고 있다.]

[0032] [6]

[0033] 상기 발광층에 있어서의 상기 제2 유기 화합물의 농도가 25중량% 이상인, [1] 내지 [5] 중 어느 하나에 기재된 유기 일렉트로 루미네선스 소자.

[0034] [7]

[0035] 상기 제2 유기 화합물이, 벤젠환에 1~2개의 사이아노기와 적어도 1개의 도너성기가 결합된 구조를 갖는, [1] 내지 [6] 중 어느 하나에 기재된 유기 일렉트로 루미네선스 소자.

[0036] [8]

[0037] 상기 도너성기가, 카바졸-9-일기를 구성하는 벤젠환에 치환 혹은 무치환의 벤조퓨란환이 축합된 구조를 갖는, [7]에 기재된 유기 일렉트로 루미네선스 소자.

[0038] [9]

[0039] 상기 도너성기가, 치환 혹은 무치환의 5H-벤조퓨로[3,2-c]카바졸-5-일기인, [8]에 기재된 유기 일렉트로 루미네선스 소자.

[0040] [10]

[0041] 상기 벤젠환에 상기 도너성기가 3개 이상 결합되어 있는, [7] 내지 [9] 중 어느 하나에 기재된 유기 일렉트로 루미네선스 소자.

[0042] [11]

[0043] 상기 제1 유기 화합물, 상기 제2 유기 화합물 및 상기 제3 유기 화합물이 하기 식 (a1)을 충족시키고 있는, [1] 내지 [10] 중 어느 하나에 기재된 유기 일렉트로 루미네선스 소자.

[0044] $E_{LUMO}(1)>E_{LUMO}(2)>E_{LUMO}(3)$ 식 (a1)

[0045] [여기에서,

[0046] $E_{LUMO}(1)$은, 상기 제1 유기 화합물의 LUMO의 에너지

[0047] $E_{LUMO}(2)$는, 상기 제2 유기 화합물의 LUMO의 에너지

[0048] $E_{LUMO}(3)$은, 상기 제3 유기 화합물의 LUMO의 에너지

[0049] S는, 상기 발광층에 있어서의 상기 제3 유기 화합물의 배향값을 나타낸다.]

발명의 효과

[0050] 본 발명에 의하면, 제1 유기 화합물과, 지연 형광 재료인 제2 유기 화합물과, 형광을 방사하는 제3 유기 화합물을 발광층에 포함하는 유기 일렉트로 루미네선스 소자에 있어서, 제2 유기 화합물의 LUMO의 에너지보다 제3 유기 화합물의 LUMO의 에너지가 낮은 경우에서도, 제3 유기 화합물의 농도를 높여 발광 효율을 향상시킬 수 있다.

발명을 실시하기 위한 구체적인 내용

[0051] 이하에 있어서, 본 발명의 내용에 대하여 상세하게 설명한다. 이하에 기재하는 구성 요건의 설명은, 본 발명의 대표적인 실시형태나 구체예에 근거하여 이루어지는 경우가 있지만, 본 발명은 그와 같은 실시형태나 구체예에 한정되는 것은 아니다. 또한, 본원에 있어서 "~"를 이용하여 나타나는 수치 범위는, "~"의 전후에 기재되는 수치를 하한값 및 상한값으로서 포함하는 범위를 의미한다. 또, 본원에 있어서 "으로 이루어진다"란, "으로 이루어진다"의 앞에 기재되는 것만으로 이루어지고, 그 이외의 것을 포함하지 않는 것을 의미한다. 또, 본 발명에 이용되는 화합물의 분자 내에 존재하는 수소 원자의 일부 또는 전부는 중수소 원자(^{2}H, 듀테리움 D)로 치환할 수 있다. 본 명세서의 화학 구조식에서는, 수소 원자는 H라고 표시하고 있거나, 그 표시를 생략하고 있다. 예를 들면 벤젠환의 환 골격 구성 탄소 원자에 결합되는 원자의 표시가 생략되어 있을 때, 표시가 생략되어 있는 개소에서는 H가 환 골격 구성 탄소 원자에 결합되어 있는 것으로 한다. 본 명세서에서 "치환기"라는 용어는, 수소 원자 및 중수소 원자 이외의 원자 또는 원자단을 의미한다. 한편, "치환 혹은 무치환의" "치환되어 있어도 된다"라는 표현은, 수소 원자가 중수소 원자 또는 치환기로 치환되어 있어도 되는 것을 의미한다. 또, 본 발명에 있어서의 "투명"이란, 가시광의 투과율이 50% 이상인 것을 말하고, 바람직하게는 80% 이상, 보다 바람직하게는 90% 이상, 더 바람직하게는 99% 이상이다. 가시광의 투과율은 자외·가시 분광 광도계에 의하여 측정할 수 있다.

[0052] 본 발명의 유기 일렉트로 루미네선스 소자는, 양극, 음극, 및, 양극과 음극의 사이에 발광층을 포함하는 적어도 1층의 유기층을 갖는 유기 일렉트로 루미네선스 소자이다. 유기층은, 발광층만으로 구성되어 있어도 되고, 발광층 이외의 유기층을 포함하고 있어도 된다. 예를 들면, 양극과 발광층, 발광층과 음극의 사이에는, 각각 유기층이 개재되어 있어도 되고, 개재되어 있지 않아도 된다. 바꾸어 말하면, 양극과 발광층은 직접 접하도록 적층되어 있어도 되고, 직접 접촉하지 않도록 적층되어 있어도 된다. 또, 발광층과 음극은 직접 접하도록 적층되어 있어도 되고, 직접 접촉하지 않도록 적층되어 있어도 된다. 발광층은, 양극과 음극의 사이에 위치하고 있으며, 양극과 음극의 사이의 영역에 발광층 전체가 돌출되지 않고 배치되어 있는 것이 바람직하다.

[0053] 본 발명의 유기 일렉트로 루미네선스 소자는, 양극, 음극, 및, 발광층을 포함하는 적어도 1층의 유기층을 지지하는 기판을 갖고 있어도 된다. 이 경우, 기판은, 양극의 발광층과 반대 측에 배치되어 있어도 되고, 음극의 발광층과 반대 측에 배치되어 있어도 된다. 또, 본 발명의 유기 일렉트로 루미네선스 소자는, 대부분의 광이 기판과 반대 측으로부터 방출되는 톱 이미션 방식의 소자여도 되고, 대부분의 광이 기판 측으로부터 방출되는 보텀 이미션 방식의 소자여도 된다. 여기에서, "대부분의 광"이란, 소자로부터 방출되는 광의 양의 60% 이상의 광인 것을 의미한다.

[0054] 본 발명의 유기 일렉트로 루미네선스 소자는, 발광층에 제1 유기 화합물과 제2 유기 화합물과 제3 유기 화합물을 포함한다. 여기에서, 제2 유기 화합물은 지연 형광 재료이다. 또, 제3 유기 화합물은 형광을 방사하는 화합물이다. 그리고, 본 발명의 유기 일렉트로 루미네선스 소자에서는, 소자로부터의 발광의 최대 성분은 제3 유기 화합물로부터의 형광이다.

[0055] 발광층에 포함되는 제2 유기 화합물과 제3 유기 화합물은 하기의 식 (a) 및 식 (b)를 충족시킨다.

[0056] $E_{LUMO}(2)>E_{LUMO}(3)$ 식 (a)

[0057] $S \leq -0.3$ 식 (b)

[0058] 본 발명의 일 양태에서는, 발광층에 포함되는 제1 유기 화합물과 제2 유기 화합물과 제3 유기 화합물은 하기의 식 (a1) 및 식 (b)를 충족시킨다.

[0059] $E_{LUMO}(1) > E_{LUMO}(2) > E_{LUMO}(3)$ 식 (a1)

[0060] $S \leq -0.3$ 식 (b)

[0061] 식 (a) 및 식 (a1)에 있어서의 $E_{LUMO}(1)$은 제1 유기 화합물의 LUMO의 에너지를 나타내고, $E_{LUMO}(2)$는 제2 유기 화합물의 LUMO의 에너지를 나타내며, $E_{LUMO}(3)$은 제3 유기 화합물의 LUMO의 에너지를 나타낸다. LUMO는 Lowest Unoccupied Molecular Orbital의 약칭이며, 대기 중 광전자 분광법(리켄 게이키사제 AC-3 등)에 의하여 구할 수 있다.

[0062] 본 발명은 식 (a)의 관계를 충족시키는 것인 점에서, 발광층에 포함되는 제2 유기 화합물의 LUMO의 에너지는 제3 유기 화합물의 LUMO의 에너지보다 높다. 식 (a1)의 관계를 충족시키는 경우는, 발광층에 포함되는 제1 유기 화합물, 제2 유기 화합물, 제3 유기 화합물 중에서는, 제1 유기 화합물의 LUMO의 에너지가 가장 높고, 제2 유기 화합물이 다음으로 높으며, 그리고 제3 유기 화합물이 가장 낮다. LUMO의 에너지차 $[E_{LUMO}(1)-E_{LUMO}(2)]$는, 예를 들면 0.1eV 이상의 범위 내로 하거나, 0.5eV 이상의 범위 내로 하거나, 0.8eV 이상의 범위 내로 하거나, 1.0eV 이상의 범위 내로 하거나 할 수 있고, 또, 2.0eV 이하의 범위 내로 하거나, 1.5eV 이하의 범위 내로 하거나, 1.3eV 이하의 범위 내로 하거나, 1.1eV 이하의 범위 내로 하거나 할 수 있다. LUMO의 에너지차 $[E_{LUMO}(2)-E_{LUMO}(3)]$은, 예를 들면 0.01eV 이상의 범위 내로 하거나, 0.05eV 이상의 범위 내로 하거나, 0.1eV 이상의 범위 내로 하거나, 0.15eV 이상의 범위 내로 하거나, 0.2eV 이상의 범위 내로 하거나 할 수 있고, 또, 0.7eV 이하의 범위 내로 하거나, 0.5eV 이하의 범위 내로 하거나, 0.4eV 이하의 범위 내로 하거나, 0.3eV 이하의 범위 내로 하거나 할 수 있다. 본 발명의 일 양태에서는, 제1 유기 화합물로서 LUMO의 에너지가 -2.0~-5.0eV의 범위 내인 화합물이나, -2.5~-4.0eV의 범위 내인 화합물을 채용하거나 할 수 있다. 본 발명의 일 양태에서는, 제2 유기 화합물로서 LUMO의 에너지가 -2.0~-5.0eV의 범위 내의 화합물이나, -2.5~-4.0eV의 범위 내의 화합물을 채용하거나 할 수 있다. 또, 본 발명의 일 양태에서는, 제3 유기 화합물로서 LUMO의 에너지가 -2.0~-5.0eV의 범위 내의 화합물이나, -2.5~-4.0eV의 범위 내의 화합물을 채용하거나 할 수 있다.

[0063] 제1 유기 화합물, 제2 유기 화합물 및 제3 유기 화합물의 HOMO 에너지의 관계는 특별히 제한되지 않는다. 예를 들면, 제2 유기 화합물의 HOMO의 에너지는, 제1 유기 화합물의 HOMO의 에너지보다 작아도 되고 커도 되며, 제1 유기 화합물의 HOMO의 에너지와 동일해도 된다. 또, 제3 유기 화합물의 HOMO의 에너지는, 제2 유기 화합물의 HOMO의 에너지보다 작아도 되고 커도 되며, 제2 유기 화합물의 HOMO의 에너지와 동일해도 된다. HOMO는 Highest occupied Molecular Orbital의 약칭이며, 대기중 광전자 분광법(리켄 게이키사제 AC-3 등)에 의하여 구할 수 있다. 본 발명의 일 양태에서는, 제1 유기 화합물로서 HOMO의 에너지가 -4.0~-6.5eV의 범위 내인 화합물이나, -5.5~-6.2eV의 범위 내인 화합물을 채용하거나 할 수 있다. 본 발명의 일 양태에서는, 제2 유기 화합물로서 HOMO의 에너지가 -4.0~-6.5eV의 범위 내의 화합물이나, -5.5~-6.2eV의 범위 내의 화합물을 채용하거나 할 수 있다. 또, 본 발명의 일 양태에서는, 제3 유기 화합물로서 HOMO의 에너지가 -4.0~-6.5eV의 범위 내의 화합물이나, -5.0~-6.0eV의 범위 내의 화합물을 채용하거나 할 수 있다.

[0064] 식 (b)에 있어서의 S는, 발광층에 있어서의 제3 유기 화합물의 배향값을 나타낸다. 본 발명은 식 (b)를 충족시키는 것이기 때문에, 발광층에 있어서의 제3 유기 화합물의 배향값은 -0.3 이하이다. 배향값은 S값이라고도 불리며, 발광층 내에 있어서의 제3 유기 화합물의 배향의 정도를 나타내는 지표이다. 음의 값이 클수록(수치가 작을수록) 배향성이 높은 것을 의미한다. 배향값(S값)은, Scientific Reports 2017, 7, 8405에 기재되는 방법에 의하여 결정할 수 있다. 본 발명의 유기 일렉트로 루미네선스 소자에서는, 제3 유기 화합물의 배향값이 -0.3 이하임으로써, 식 (a)의 LUMO 에너지의 관계를 충족시키는 것이면서, 높은 외부 양자 수율을 실현할 수 있다. 즉, 형광 재료의 배향값을 고려하고 있지 않은 종래의 유기 일렉트로 루미네선스 소자에서는, 지연 형광 재료의 LUMO의 에너지보다 형광 재료의 LUMO의 에너지가 낮은 경우에, 형광 재료의 농도를 높게 하면 발광 효율이 낮아지는 문제가 발생했다. 이에 대하여, 본 발명의 유기 일렉트로 루미네선스 소자에서는, 지연 형광 재료인 제2 유기 화합물의 LUMO의 에너지보다, 형광을 방사하는 제3 유기 화합물의 LUMO의 에너지를 낮게 설정하고 있지만, 발광층에 있어서의 제3 유기 화합물의 배향값을 -0.3 이하로 규정하고 있음으로써, 제3 유기 화합물의 농도를 높이면서 발광 효율의 향상을 도모할 수 있다. 또, 배향값이 -0.3 이하인 제3 유기 화합물은 안정성이 높고, 이

것을 발광 재료로서 이용함으로써 소자 수명이 개선된다는 효과도 얻어진다. 발광층에 있어서의 제3 유기 화합물의 배향값은 -0.38 이하인 것이 바람직하고, -0.40 이하인 것이 보다 바람직하며, -0.41 이하인 것이 더 바람직하고, -0.42 이하인 것이 보다 더 바람직하다.

[0065] 발광층에 포함되는 제1 유기 화합물과 제2 유기 화합물과 제3 유기 화합물은 하기의 식 (c)를 충족시키는 것이 바람직하다.

[0066] $E_{S1}(1)>E_{S1}(2)>E_{S1}(3)$ 식 (c)

[0067] 식 (c)에 있어서의 $E_{S1}(1)$은 제1 유기 화합물의 최저 여기 일중항 에너지를 나타내고, $E_{S1}(2)$는 제2 유기 화합물의 최저 여기 일중항 에너지를 나타내며, $E_{S1}(3)$은 제3 유기 화합물의 최저 여기 일중항 에너지를 나타낸다. 본 명세서에서는 단위로서 eV를 채용한다. 최저 여기 일중항 에너지는, 측정 대상 화합물의 박막 혹은 톨루엔 용액(농도 10^{-5}mol/L)을 조제하고, 상온(300K)에서 형광 스펙트럼을 측정함으로써 구할 수 있다(상세는 제2 유기 화합물의 설명란에 있어서의 최저 여기 일중항 에너지의 측정법을 참조).

[0068] 식 (c)에 나타내는 바와 같이, 발광층에 포함되는 제1 유기 화합물, 제2 유기 화합물, 제3 유기 화합물 중에서는, 제1 유기 화합물의 최저 여기 일중항 에너지가 가장 크고, 제2 유기 화합물이 다음으로 크며, 그리고 제3 유기 화합물이 가장 작은 것이 바람직하다. $E_{S1}(1)-E_{S1}(2)$는, 예를 들면 0.20eV 이상의 범위 내로 하거나, 0.40eV 이상의 범위 내로 하거나, 0.60eV 이상의 범위 내로 하거나 할 수 있고, 또, 1.50eV 이하의 범위 내로 하거나, 1.20eV 이하의 범위 내로 하거나, 0.80eV 이하의 범위 내로 하거나 할 수 있다. $E_{S1}(2)-E_{S1}(3)$은, 예를 들면 0.05eV 이상의 범위 내로 하거나, 0.10eV 이상의 범위 내로 하거나, 0.15eV 이상의 범위 내로 하거나 할 수 있고, 또, 0.50eV 이하의 범위 내로 하거나, 0.30eV 이하의 범위 내로 하거나, 0.20eV 이하의 범위 내로 하거나 할 수 있다. $E_{S1}(1)-E_{S1}(3)$은, 예를 들면 0.25eV 이상의 범위 내로 하거나, 0.45eV 이상의 범위 내로 하거나, 0.65eV 이상의 범위 내로 하거나 할 수 있고, 또, 2.00eV 이하의 범위 내로 하거나, 1.70eV 이하의 범위 내로 하거나, 1.30eV 이하의 범위 내로 하거나 할 수 있다.

[0069] 본 발명의 유기 일렉트로 루미네선스 소자에 있어서, 소자로부터의 발광의 최대 성분은 제3 유기 화합물로부터의 발광이다. 본 발명에 있어서의 "소자로부터의 발광"은, 20℃에서 소자를 구동했을 때에 소자로부터 방출되는 광을 의미한다. 본 발명의 유기 일렉트로 루미네선스 소자로부터의 발광은, 소자로부터의 발광의 최대 성분이 제3 유기 화합물로부터의 형광인 한, 제3 유기 화합물로부터의 인광, 제1 유기 화합물이나 제2 유기 화합물로부터의 발광을 포함하고 있어도 되지만, 이들 발광은 제3 유기 화합물로부터의 형광에 비하여 약간인 것이 바람직하다. 본 발명에서는, 소자로부터의 발광의 70% 이상이 제3 유기 화합물로부터의 형광이어도 되고, 90% 이상이 제3 유기 화합물로부터의 형광이어도 되며, 99% 이상이 제3 유기 화합물로부터의 형광이어도 된다.

[0070] 본 발명의 유기 일렉트로 루미네선스 소자의 발광층에 있어서의 제3 유기 화합물의 농도는 0.3중량%보다 큰 것이 바람직하다. 발광층에 있어서의 제3 유기 화합물의 농도는 0.35중량% 이상의 범위 내로 하거나, 0.5중량% 이상의 범위 내로 하거나, 1중량% 이상의 범위 내로 하거나, 2중량% 이상의 범위 내로 하거나 할 수 있다. 발광층에 있어서의 제3 유기 화합물의 농도는, 10중량% 이하의 범위로 하거나, 5중량% 이하의 범위로 하거나, 3중량% 이하의 범위로 하거나 할 수 있다.

[0071] 또, 본 발명의 유기 일렉트로 루미네선스 소자의 발광층에 있어서의 제1 유기 화합물, 제2 유기 화합물, 제3 유기 화합물의 농도를 각각 Conc(1), Conc(2), Conc(3)으로 했을 때, 하기 식 (d)의 관계를 충족시키는 것이 바람직하다.

[0072] $Conc(1)>Conc(2)>Conc(3)$ 식 (d)

[0073] Conc(1)은 30중량% 이상인 것이 바람직하고, 50중량% 이상의 범위 내로 하거나, 60중량% 이상의 범위 내로 하거나 할 수 있으며, 또, 99중량% 이하의 범위 내로 하거나, 85중량% 이하의 범위 내로 하거나, 70중량% 이하의 범위 내로 하거나 할 수 있다.

[0074] Conc(2)는 5중량% 이상인 것이 바람직하고, 15중량% 이상의 범위 내로 하거나, 25중량% 이상의 범위 내로 하거나, 30중량% 이상의 범위 내로 하거나 할 수 있으며, 또, 45중량% 이하의 범위 내로 하거나, 40중량% 이하의 범위 내로 하거나, 35중량% 이하의 범위 내로 하거나 할 수 있다. 본 발명의 바람직한 양태에서는, Conc(2)는 25~45중량%이다.

[0075] Conc(3)의 바람직한 범위에 대해서는, 상기의 발광층에 있어서의 제3 유기 화합물의 농도에 대한 기재를 참조할 수 있다.

[0076] Conc(1)/Conc(3)은 10 이상의 범위 내로 하거나, 50 이상의 범위 내로 하거나, 90 이상의 범위 내로 하거나 할 수 있고, 또, 10000 이하의 범위 내로 하거나, 1000 이하의 범위 내로 하거나, 200 이하의 범위 내로 하거나 할 수 있다.

[0077] Conc(2)/Conc(3)은 10 이상의 범위 내로 하거나, 50 이상의 범위 내로 하거나, 90 이상의 범위 내로 하거나 할 수 있고, 또, 10000 이하의 범위 내로 하거나, 1000 이하의 범위 내로 하거나, 200 이하의 범위 내로 하거나 할 수 있다.

[0078] 본 발명의 유기 일렉트로 루미네선스 소자의 발광층은, 붕소 이외의 금속 원소를 포함하지 않는 것이 바람직하다. 또, 붕소를 포함하는 금속 원소를 포함하지 않는 발광층을 채용할 수도 있다. 예를 들면, 발광층은, 탄소 원자, 수소 원자, 질소 원자, 산소 원자, 황 원자, 불소 원자 및 붕소 원자로 이루어지는 군으로부터 선택되는 원자로 이루어지는 화합물만으로 구성할 수 있다. 예를 들면, 발광층은, 탄소 원자, 수소 원자, 질소 원자, 산소 원자, 황 원자, 불소 원자 및 붕소 원자로 이루어지는 군으로부터 선택되는 원자로 이루어지는 화합물만으로 구성할 수 있다. 예를 들면, 발광층은, 탄소 원자, 수소 원자, 질소 원자, 산소 원자 및 황 원자로 이루어지는 군으로부터 선택되는 원자로 이루어지는 화합물만으로 구성할 수 있다. 예를 들면, 발광층은, 탄소 원자, 수소 원자, 질소 원자 및 산소 원자로 이루어지는 군으로부터 선택되는 원자로 이루어지는 화합물만으로 구성할 수 있다.

[0079] (제1 유기 화합물)

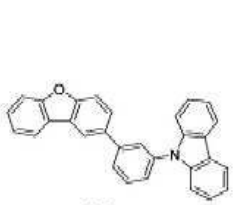
[0080] 본 발명의 유기 일렉트로 루미네선스 소자의 발광층에 이용하는 제1 유기 화합물은, 제2 유기 화합물이나 제3 유기 화합물보다 LUMO의 에너지가 높은 화합물 중에서 선택한다. 제1 유기 화합물은, 제2 유기 화합물이나 제3 유기 화합물보다 LUMO의 에너지가 높고, 또한, 제2 유기 화합물이나 제3 유기 화합물보다 큰 최저 여기 일중항 에너지를 갖는 화합물 중에서 선택하는 것이 바람직하다. 제1 유기 화합물은, 캐리어의 수송을 담당하는 호스트 재료로서의 기능을 갖는 것이 바람직하다. 또 제1 유기 화합물은, 제3 유기 화합물의 에너지를 그 화합물 중에 가두는 기능을 갖는 것이 바람직하다. 이로써, 제3 유기 화합물은, 분자 내에서 홀과 전자가 재결합함으로써 발생한 에너지, 및, 제1 유기 화합물 및 제2 유기 화합물로부터 받은 에너지를 효율적으로 발광으로 변환할 수 있다.

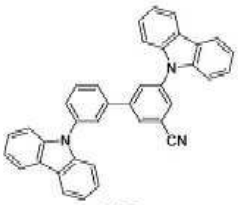
[0081] 제1 유기 화합물로서는, 정공 수송능, 전자 수송능을 갖고, 또한 발광의 장파장화를 방지하며, 또한 높은 유리 전이 온도를 갖는 유기 화합물인 것이 바람직하다. 또, 본 발명의 바람직한 일 양태에서는, 제1 유기 화합물은 지연 형광을 방사하지 않는 화합물 중에서 선택한다. 제1 유기 화합물로부터의 발광은, 본 발명의 유기 일렉트로 루미네선스 소자로부터의 발광의 1% 미만인 것이 바람직하고, 0.1% 미만인 것이 보다 바람직하며, 예를 들면 0.01% 미만, 검출 한계 이하여도 된다.

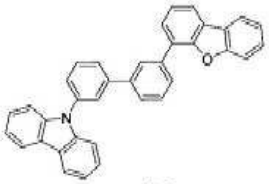
[0082] 제1 유기 화합물은 금속 원자를 포함하지 않는 것이 바람직하다. 예를 들면, 제1 유기 화합물로서, 탄소 원자, 수소 원자, 질소 원자, 산소 원자 및 황 원자로 이루어지는 군으로부터 선택되는 원자로 이루어지는 화합물을 선택할 수 있다. 예를 들면, 제1 유기 화합물로서, 탄소 원자, 수소 원자, 질소 원자 및 산소 원자로 이루어지는 군으로부터 선택되는 원자로 이루어지는 화합물을 선택할 수 있다. 예를 들면, 제1 유기 화합물로서, 탄소 원자, 수소 원자 및 질소 원자로 이루어지는 화합물을 선택할 수 있다.

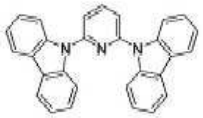
[0083] 이하에, 제1 유기 화합물로서 이용할 수 있는 바람직한 화합물을 든다.

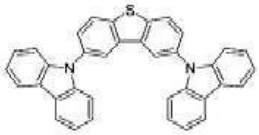
[0084] [화학식 2-1]

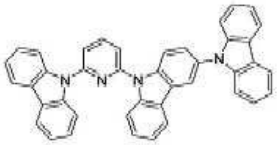

H1

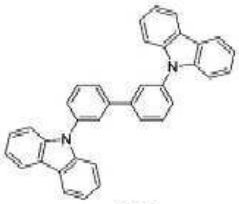

H2

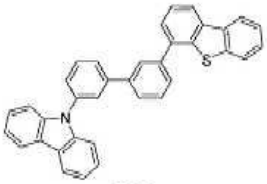

H3

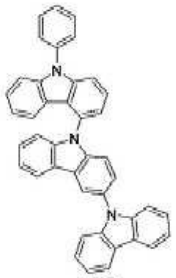

H4

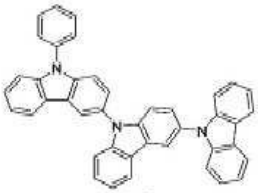

H5

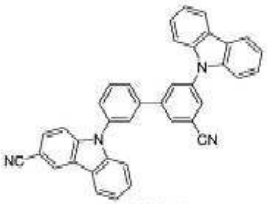

H6

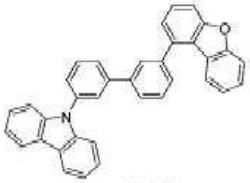

H7

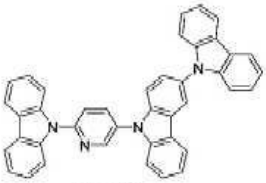

H8

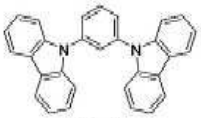

H9

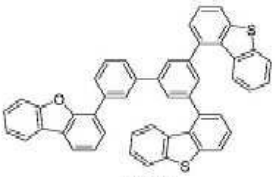

H10


H11


H12

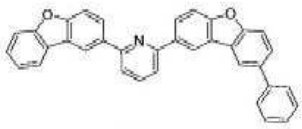

H13


H14

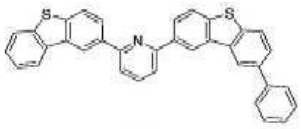

H15

[0085]

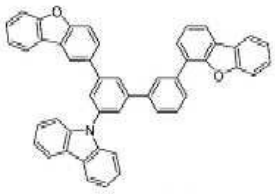
[0086] [화학식 2-2]



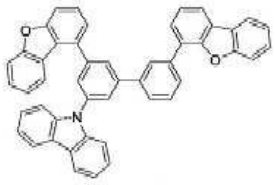
H16



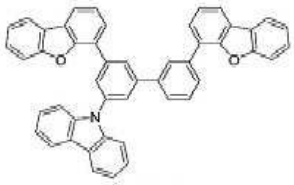
H17



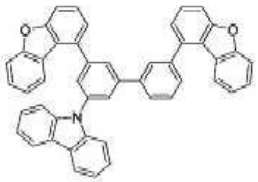
H18



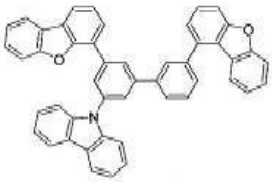
H19



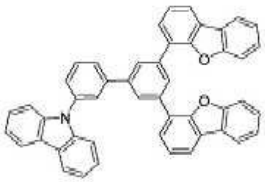
H20



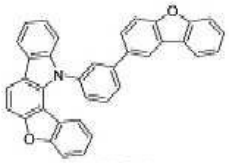
H21



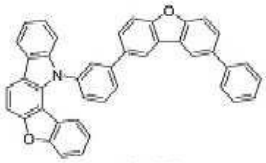
H22



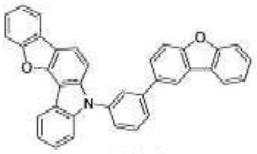
H23



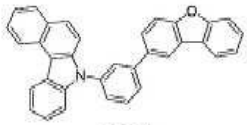
H24



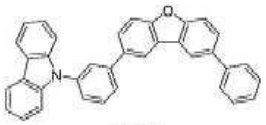
H25



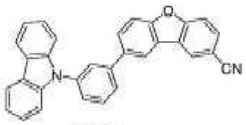
H26



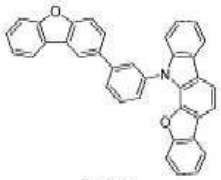
H27



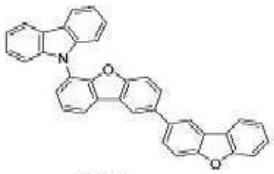
H28



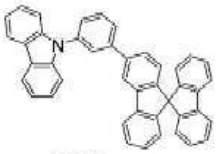
H29



H30



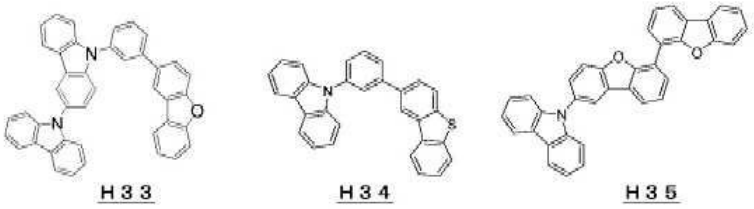
H31



H32

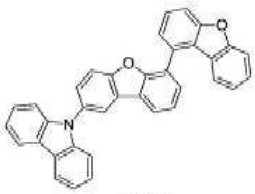
[0087]

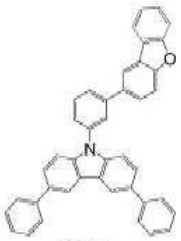
[0088] [화학식 2-3]

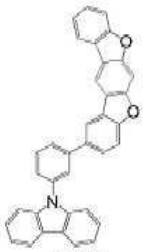

H33

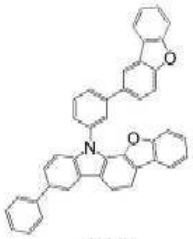
H34

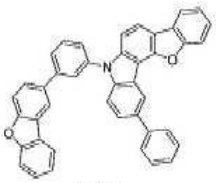
H35

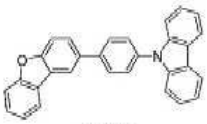

H36

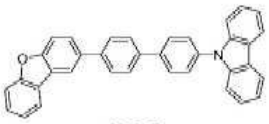

H37

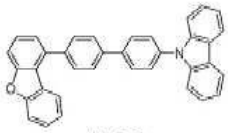

H38

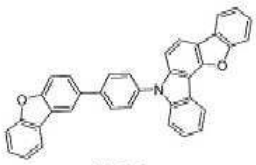

H39

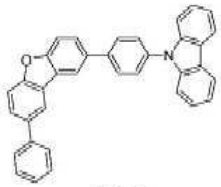

H40

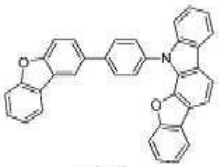

H41

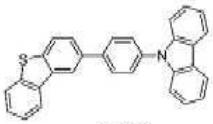

H42


H43


H44

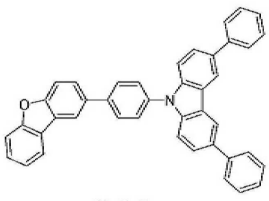

H45

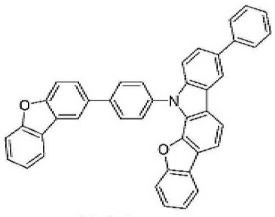

H46

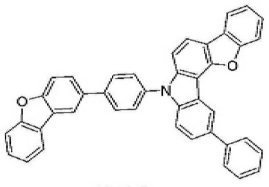

H47

[0089]

[0090] [화학식 2-4]


H48


H49


H50

[0091]

[0092] (제2 유기 화합물)

[0093] 본 발명의 유기 일렉트로 루미네선스 소자의 발광층에 이용하는 제2 유기 화합물은, 제1 유기 화합물보다 LUMO의 에너지가 낮고, 제3 유기 화합물보다 LUMO의 에너지가 높은 지연 형광 재료이다. 제2 유기 화합물은, 제1 유기 화합물보다 LUMO의 에너지가 낮고, 제3 유기 화합물보다 LUMO의 에너지가 높으며, 또한, 제1 유기 화합물보다 작고, 제3 유기 화합물보다 큰 최저 여기 일중항 에너지를 갖는 지연 형광 재료인 것이 바람직하다. 본 발명에 있어서의 "지연 형광 재료"란, 여기 상태에 있어서, 여기 삼중항 상태로부터 여기 일중항 상태로의 역항간

교차를 발생시켜, 그 여기 일중항 상태로부터 기저 상태로 되돌아갈 때에 형광(지연 형광)을 방사하는 유기 화합물이다. 본 발명에서는, 형광 수명 측정 시스템(하마마쓰 포토닉스사제 스트리크 카메라 시스템 등)에 의하여 발광 수명을 측정했을 때, 발광 수명이 100ns(나노초) 이상인 형광이 관측되는 것을 지연 형광 재료라고 한다. 제2 유기 화합물은 지연 형광을 방사할 수 있는 재료이지만, 본 발명의 유기 일렉트로 루미네선스 소자에 이용했을 때에 제2 유기 화합물에서 유래하는 지연 형광을 방사하는 것은 필수로 하지 않는다. 제2 유기 화합물로부터의 발광은, 본 발명의 유기 일렉트로 루미네선스 소자로부터의 발광의 10% 미만인 것이 바람직하고, 예를 들면 1% 미만, 0.1% 미만, 0.01% 미만, 검출 한계 이하여도 된다.

[0094] 본 발명의 유기 일렉트로 루미네선스 소자에 있어서, 제2 유기 화합물은, 여기 일중항 상태의 제1 유기 화합물로부터 에너지를 받아 여기 일중항 상태로 천이한다. 또, 제2 유기 화합물은, 여기 삼중항 상태의 제1 유기 화합물로부터 에너지를 받아 여기 삼중항 상태로 천이해도 된다. 제2 유기 화합물은 여기 일중항 에너지와 여기 삼중항 에너지의 차(ΔE_{ST})가 작은 점에서, 여기 삼중항 상태의 제2 유기 화합물은 여기 일중항 상태의 제2 유기 화합물로 역항간 교차하기 쉽다. 이들 경로에 의하여 발생한 여기 일중항 상태의 제2 유기 화합물은, 제3 유기 화합물에 에너지를 부여하여 제3 유기 화합물을 여기 일중항 상태로 천이시킨다.

[0095] 제2 유기 화합물은, 최저 여기 일중항 에너지와 77K의 최저 여기 삼중항 에너지의 차 ΔE_{ST}가 0.3eV 이하인 것이 바람직하고, 0.25eV 이하인 것이 보다 바람직하며, 0.2eV 이하인 것이 보다 바람직하고, 0.15eV 이하인 것이 보다 바람직하며, 0.1eV 이하인 것이 더 바람직하고, 0.07eV 이하인 것이 보다 더 바람직하며, 0.05eV 이하인 것이 더욱 더 바람직하고, 0.03eV 이하인 것이 더 한층 바람직하며, 0.01eV 이하인 것이 특히 바람직하다.

[0096] ΔE_{ST}가 작으면, 열에너지의 흡수에 의하여 여기 일중항 상태로부터 여기 삼중항 상태로 역항간 교차하기 쉽기 때문에, 제2 유기 화합물은 열활성화형의 지연 형광 재료로서 기능한다. 열활성화형의 지연 형광 재료는, 디바이스가 발하는 열을 흡수하여 여기 삼중항 상태로부터 여기 일중항으로 비교적 용이하게 역항간 교차하여, 그 여기 삼중항 에너지를 효율적으로 발광에 기여시킬 수 있다.

[0097] 본 발명에 있어서의, 화합물의 최저 여기 일중항 에너지(E_{S1})와 최저 여기 삼중항 에너지(E_{T1})는, 하기의 수순에 의하여 구한 값이다. ΔE_{ST}는 E_{S1}-E_{T1}을 계산함으로써 구한 값이다.

[0098] (1) 최저 여기 일중항 에너지(E_{S1})

[0099] 측정 대상 화합물의 박막 혹은 톨루엔 용액(농도 10^{-5}mol/L)을 조제하여 시료로 한다. 상온(300K)에서 이 시료의 형광 스펙트럼을 측정한다. 형광 스펙트럼은, 세로축을 발광, 가로축을 파장으로 한다. 이 발광 스펙트럼의 단파장 측의 상승에 대하여 접선을 긋고, 그 접선과 가로축의 교점의 파장값 λedge[nm]를 구한다. 이 파장값을 다음에 나타내는 환산식으로 에너지값으로 환산한 값을 E_{S1}로 한다.

[0100] 환산식: $E_{S1}[eV]=1239.85/\lambda edge$

[0101] 후술하는 실시예에 있어서의 발광 스펙트럼의 측정은, 여기 광원에 LED 광원(Thorlabs사제, M300L4)을 이용하여 검출기(하마마쓰 포토닉스사제, PMA-12 멀티 채널 분광기 C10027-01)에 의하여 행했다.

[0102] (2) 최저 여기 삼중항 에너지(E_{T1})

[0103] 최저 여기 일중항 에너지(E_{S1})의 측정에서 이용한 것과 동일한 시료를, 액체 질소에 의하여 77[K]로 냉각하고, 여기광(300nm)을 인광 측정용 시료에 조사하여, 검출기를 이용하여 인광을 측정한다. 여기광 조사 후부터 100밀리초 이후의 발광을 인광 스펙트럼으로 한다. 이 인광 스펙트럼의 단파장 측의 상승에 대하여 접선을 긋고, 그 접선과 가로축의 교점의 파장값 λedge[nm]를 구한다. 이 파장값을 다음에 나타내는 환산식으로 에너지값으로 환산한 값을 E_{T1}로 한다.

[0104] 환산식: $E_{T1}[eV]=1239.85/\lambda edge$

[0105] 인광 스펙트럼의 단파장 측의 상승에 대한 접선은 이하와 같이 긋는다. 인광 스펙트럼의 단파장 측으로부터, 스펙트럼의 극댓값 중, 가장 단파장 측의 극댓값까지 스펙트럼 곡선 상을 이동할 때에, 장파장 측을 향하여 곡선상의 각 점에 있어서의 접선을 생각한다. 이 접선은, 곡선이 상승함에 따라(즉 세로축이 증가함에 따라), 기울기가 증가한다. 이 기울기의 값이 극댓값을 취하는 점에 있어서 그은 접선을, 당해 인광 스펙트럼의 단파장 측

의 상승에 대한 접선으로 한다.

[0106] 또한, 스펙트럼의 최대 피크 강도의 10% 이하의 피크 강도를 갖는 극대점은, 상술한 가장 단파장 측의 극댓값에는 포함시키지 않고, 가장 단파장 측의 극댓값에 가장 가까운, 기울기의 값이 극댓값을 취하는 점에 있어서 그은 접선을 당해 인광 스펙트럼의 단파장 측의 상승에 대한 접선으로 한다.

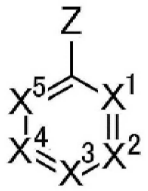
[0107] 제2 유기 화합물은 금속 원자를 포함하지 않는 것이 바람직하다. 예를 들면, 제2 유기 화합물로서, 탄소 원자, 수소 원자, 질소 원자, 산소 원자 및 황 원자로 이루어지는 군으로부터 선택되는 원자로 이루어지는 화합물을 선택할 수 있다. 예를 들면, 제2 유기 화합물로서, 탄소 원자, 수소 원자, 질소 원자 및 산소 원자로 이루어지는 군으로부터 선택되는 원자로 이루어지는 화합물을 선택할 수 있다. 예를 들면, 제2 유기 화합물로서, 탄소 원자, 수소 원자 및 질소 원자로 이루어지는 화합물을 선택할 수 있다.

[0108] 전형적인 제2 유기 화합물로서, 벤젠환에 1~2개의 사이아노기와 적어도 1개의 도너성기가 결합된 구조를 갖는 화합물을 들 수 있다. 도너성기로서, 예를 들면 치환 혹은 무치환의 카바졸-9-일기를 바람직하게 예시할 수 있다. 예를 들면, 상기 벤젠환에는 치환 혹은 무치환의 카바졸-9-일기가 3개 이상 결합되어 있는 화합물이나, 카바졸-9-일기를 구성하는 2개의 벤젠환 중 적어도 일방에, 치환 혹은 무치환의 벤조퓨란환, 치환 혹은 무치환의 벤조싸이오펜환, 치환 혹은 무치환의 인돌환, 치환 혹은 무치환의 인덴환, 치환 혹은 무치환의 실라인덴환의 각 5원환 부분이 축합된 화합물 등을 예시할 수 있다. 카바졸-9-일기를 구성하는 벤젠환에, 치환 혹은 무치환의 벤조퓨란환이 축합된 구조를 갖는 기의 구체예로서, 치환 혹은 무치환의 5H-벤조퓨란[3,2-c]카바졸-5-일기를 들 수 있다.

[0109] 제2 유기 화합물로서, 하기 일반식 (1)로 나타나고, 지연 형광을 방사하는 화합물을 바람직하게 이용할 수 있다.

[0110] 일반식 (1)

[0111] [화학식 3]

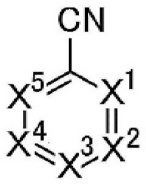
[0112] 

[0113] 일반식 (1)에 있어서, X^1~X^5는 N 또는 C-R을 나타낸다. R은 수소 원자, 중수소 원자 또는 치환기를 나타낸다. X^1~X^5 중 2개 이상이 C-R을 나타낼 때, 그들 C-R은 서로 동일해도 되고 상이해도 된다. 단, X^1~X^5 중 적어도 하나는 C-D(여기에서 말하는 D는 도너성기를 나타낸다)이다. X^1~X^5 모두가 C-R일 때, Z는 억셉터성기를 나타낸다.

[0114] 일반식 (1)로 나타나는 화합물 중에서 특히 바람직한 화합물은, 하기 일반식 (2)로 나타나는 화합물이다.

[0115] 일반식 (2)

[0116] [화학식 4]

[0117] 

[0118] 일반식 (2)에 있어서, X^1~X^5는 N 또는 C-R을 나타낸다. R은 수소 원자, 중수소 원자 또는 치환기를 나타낸다. X^1~X^5 중 2개 이상이 C-R을 나타낼 때, 그들 C-R은 서로 동일해도 되고 상이해도 된다. 단, X^1~X^5 중 적어도 하나는 C-D(여기에서 말하는 D는 도너성기를 나타낸다)이다.

[0119] 본 발명의 바람직한 일 양태에서는, X^1~X^5는 모두 C-CN은 아니다. 즉, 벤젠환에 1~2개의 사이아노기와 적어도 1개의 도너성기가 결합된 구조를 갖는 화합물이다. 본 발명의 다른 바람직한 일 양태에서는, X^2만이 C-CN을 나타

내고, X^1, X^3~X^5는 C-CN은 아니다. 즉, 아이소프탈로나이트릴의 벤젠환에 적어도 하나의 도너성기가 결합된 구조를 갖는 화합물이다. 본 발명의 다른 일 양태에서는, X^3만이 C-CN을 나타내고, X^1, X^2, X^4, X^5는 C-CN은 아니다. 즉, 테레프탈로나이트릴의 벤젠환에 적어도 하나의 도너성기가 결합된 구조를 갖는 화합물이다.

[0120] 일반식 (1)의 Z가 나타내는 억셉터성기는, Z가 결합되어 있는 환에 대하여 전자를 공여하는 성질을 갖는 기이며, 예를 들면 하메트의 σp값이 양인 기 중에서 선택할 수 있다. 일반식 (1) 및 일반식 (2)의 D가 나타내는 도너성기는, D가 결합되어 있는 환에 대하여 전자를 흡인하는 성질을 갖는 기이며, 예를 들면 하메트의 σp값이 음인 기 중에서 선택할 수 있다. 이하에 있어서, 억셉터성기를 A라고 칭하는 경우가 있다.

[0121] 여기에서, "하메트의 σp값"은, L. P. 하메트에 의하여 제창된 것이며, 파라 치환 벤젠 유도체의 반응 속도 또는 평형에 미치는 치환기의 영향을 정량화한 것이다. 구체적으로는, 파라 치환 벤젠 유도체에 있어서의 치환기와 반응 속도 상수 또는 평형 상수의 사이에 성립하는 하기 식:

[0122] $\log(k/k_0)=\rho\,\sigma p$

[0123] 또는

[0124] $\log(K/K_0)=\rho\,\sigma p$

[0125] 에 있어서의 치환기에 특유한 상수(σp)이다. 상기 식에 있어서, k는 치환기를 갖지 않는 벤젠 유도체의 속도 상수, k_0은 치환기로 치환된 벤젠 유도체의 속도 상수, K는 치환기를 갖지 않는 벤젠 유도체의 평형 상수, K_0은 치환기로 치환된 벤젠 유도체의 평형 상수, ρ는 반응의 종류와 조건에 의하여 정해지는 반응 상수를 나타낸다. 본 발명에 있어서의 "하메트의 σp값"에 관한 설명과 각 치환기의 수치에 대해서는, Hansch, C. et. al., Chem. Rev., 91, 165-195(1991)의 σp값에 관한 기재를 참조할 수 있다.

[0126] 억셉터성기의 구체예로서, 사이아노기나, 후술하는 일반식 (12)~(14)에 있어서의 A로서 바람직한 억셉터성기를 참조할 수 있다. 또, 도너성기의 구체예로서, 후술하는 일반식 (12)~(14)에 있어서의 D로서 바람직한 도너성기를 참조할 수 있다.

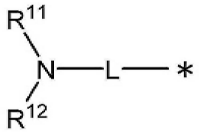
[0127] 일반식 (1) 및 일반식 (2)에 있어서, X^1~X^5는 N 또는 C-R을 나타내지만, 적어도 하나는 C-D이다. X^1~X^5 중 N의 수는, 0~4개이며, 예를 들면, X^1과 X^3과 X^5, X^1과 X^3, X^1과 X^4, X^2와 X^3, X^1과 X^5, X^2와 X^4, X^1만, X^2만, X^3만이 N인 경우를 예시할 수 있다. X^1~X^5 중 C-D의 수는 1~5개이며, 2~5개인 것이 바람직하다. 예를 들면, X^1과 X^2와 X^3과 X^4와 X^5, X^1과 X^2와 X^4와 X^5, X^1과 X^2와 X^3과 X^4, X^1과 X^3과 X^4와 X^5, X^1과 X^3과 X^5, X^1과 X^2와 X^5, X^1과 X^2와 X^4, X^1과 X^3과 X^4, X^1과 X^3, X^1과 X^4, X^2와 X^3, X^1과 X^5, X^2와 X^4, X^1만, X^2만, X^3만이 C-D인 경우를 예시할 수 있다. X^1~X^5 중 적어도 하나는 C-A여도 된다. 여기에서 말하는 A는 억셉터성기를 나타낸다. X^1~X^5 중 C-A의 수는 0~2인 것이 바람직하고, 0 또는 1인 것이 보다 바람직하다. C-A의 A로서 바람직하게는 사이아노기 및 불포화의 질소 원자를 갖는 복소환식 방향족기를 들 수 있다. 또, X^1~X^5는 각각 독립적으로 C-D 또는 C-A여도 된다.

[0128] X^1~X^5 중 인접하는 2개가 C-R을 나타낼 때, 2개의 R은 서로 결합하여 환상 구조를 형성하고 있어도 된다. 서로 결합하여 형성하는 환상 구조는 방향환이어도 되고 지방환이어도 되며, 또 헤테로 원자를 포함하는 것이어도 되고, 또한 환상 구조는 2환 이상의 축합환이어도 된다. 여기에서 말하는 헤테로 원자로서는, 질소 원자, 산소 원자 및 황 원자로 이루어지는 군으로부터 선택되는 것인 것이 바람직하다. 형성되는 환상 구조의 예로서, 벤젠환, 나프탈렌환, 피리딘환, 피리다진환, 피리미딘환, 피라진환, 피롤환, 이미다졸환, 피라졸환, 이미다졸린환, 옥사졸환, 아이소옥사졸환, 싸이아졸환, 아이소싸이아졸환, 사이클로헥사다이엔환, 사이클로헥센환, 사이클로펜타엔환, 사이클로헵타트라이엔환, 사이클로헵타다이엔환, 사이클로헵타엔환, 퓨란환, 싸이오펜환, 나프티리딘환, 퀴녹살린환, 퀴놀린환 등을 들 수 있다. 예를 들면 페난트렌환이나 트라이페닐렌환과 같이 다수의 환이 축합된 환을 형성해도 된다.

[0129] 일반식 (1) 및 일반식 (2)에 있어서의 도너성기 D는, 예를 들면 하기의 일반식 (3)으로 나타나는 기인 것이 바람직하다.

[0130] 일반식 (3)

[0131] [화학식 5]

[0132] 

[0133] 일반식 (3)에 있어서, R^{11}과 R^{12}는, 각각 독립적으로 치환 혹은 무치환의 알킬기, 치환 혹은 무치환의 알켄일기, 치환 혹은 무치환의 아릴기, 또는 치환 혹은 무치환의 헤테로아릴기를 나타낸다. R^{11}과 R^{12}는 서로 결합하여 환상 구조를 형성해도 된다. L은 단결합, 치환 혹은 무치환의 아릴렌기, 또는 치환 혹은 무치환의 헤테로아릴렌기를 나타낸다. L의 아릴렌기 또는 헤테로아릴렌기에 도입할 수 있는 치환기는, 일반식 (1)이나 일반식 (2)로 나타나는 기여도 되고, 후술하는 일반식 (3)~(6)으로 나타나는 기여도 된다. 이들 (1)~(6)으로 나타나는 기는 L에 도입 가능한 치환기의 최대수까지 도입되어 있어도 된다. 또, 일반식 (1)~(6)으로 나타나는 기가 복수 개 도입되어 있는 경우는, 그들 치환기는 서로 동일해도 되고 상이해도 된다. *는, 일반식 (1) 또는 일반식 (2)에 있어서의 환의 환 골격을 구성하는 탄소 원자 (C)에 대한 결합 위치를 나타낸다.

[0134] 본 명세서에 있어서 "알킬기"는, 직쇄상, 분기상, 환상 중 어느 것이어도 된다. 또, 직쇄 부분과 환상 부분과 분기 부분 중 2종 이상이 혼재하고 있어도 된다. 알킬기의 탄소수는, 예를 들면 1 이상, 2 이상, 4 이상으로 할 수 있다. 또, 탄소수는 30 이하, 20 이하, 10 이하, 6 이하, 4 이하로 할 수 있다. 알킬기의 구체예로서, 메틸기, 에틸기, n-프로필기, 아이소프로필기, n-뷰틸기, 아이소뷰틸기, tert-뷰틸기, n-펜틸기, 아이소펜틸기, n-헥실기, 아이소헥실기, 2-에틸헥실기, n-헵틸기, 아이소헵틸기, n-옥틸기, 아이소옥틸기, n-노닐기, 아이소노닐기, n-데칸일기, 아이소데칸일기, 사이클로펜틸기, 사이클로헥실기, 사이클로헵틸기를 들 수 있다. 치환기인 알킬기는, 아릴기로 더 치환되어 있어도 된다.

[0135] "알켄일기"는, 직쇄상, 분기상, 환상 중 어느 것이어도 된다. 또, 직쇄 부분과 환상 부분과 분기 부분 중 2종 이상이 혼재하고 있어도 된다. 알켄일기의 탄소수는, 예를 들면 2 이상, 4 이상으로 할 수 있다. 또, 탄소수는 30 이하, 20 이하, 10 이하, 6 이하, 4 이하로 할 수 있다. 알켄일기의 구체예로서, 에텐일기, n-프로펜일기, 아이소프로펜일기, n-뷰텐일기, 아이소뷰텐일기, n-펜텐일기, 아이소펜텐일기, n-헥센일기, 아이소헥센일기, 2-에틸헥센일기를 들 수 있다. 치환기인 알켄일기는, 치환기로 더 치환되어 있어도 된다.

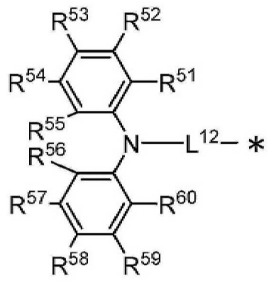
[0136] "아릴기" 및 "헤테로아릴기"는, 단환이어도 되고, 2개 이상의 환이 축합된 축합환이어도 된다. 축합환인 경우, 축합되어 있는 환의 수는 2~6인 것이 바람직하고, 예를 들면 2~4 중에서 선택할 수 있다. 환의 구체예로서, 벤젠환, 피리딘환, 피리미딘환, 트라이아진환, 나프탈렌환, 안트라센환, 페난트렌환, 트라이페닐렌환, 퀴놀린환, 피라진환, 퀴녹살린환, 나프티리딘환을 들 수 있다. 아릴기 또는 헤테로아릴기의 구체예로서, 페닐기, 1-나프틸기, 2-나프틸기, 1-안트라센일기, 2-안트라센일기, 9-안트라센일기, 2-피리딜기, 3-피리딜기, 4-피리딜기를 들 수 있다. "아릴렌기" 및 "헤테로아릴기"는, 아릴기 및 헤테로아릴기의 설명에 있어서의 가수를 1에서 2로 대체한 것으로 할 수 있다.

[0137] 치환기는, 수소 원자로 치환할 수 있는 1가의 기를 의미하고 있고, 축합되는 것을 포함하는 개념은 아니다. 치환기의 설명과 바람직한 범위에 대해서는, 후술하는 일반식 (7)의 치환기의 설명과 바람직한 범위를 참조할 수 있다.

[0138] 일반식 (3)으로 나타나는 화합물은, 하기 일반식 (4)~(6) 중 어느 하나로 나타나는 화합물인 것이 바람직하다.

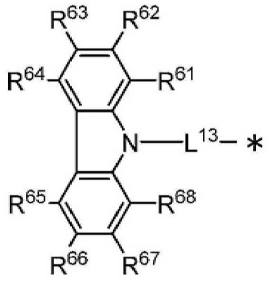
[0139] 일반식 (4)

[0140] [화학식 6]

[0141] 

[0142] 일반식 (5)

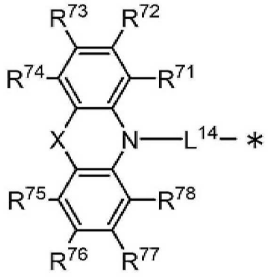
[0143] [화학식 7]



[0144]

[0145] 일반식 (6)

[0146] [화학식 8]



[0147]

[0148] 일반식 (4)~(6)에 있어서, R^{51}~R^{60}, R^{61}~R^{68}, R^{71}~R^{78}은, 각각 독립적으로 수소 원자, 중수소 원자 또는 치환기를 나타낸다. 여기에서 말하는 치환기의 설명과 바람직한 범위에 대해서는, 후술하는 일반식 (7)에 있어서의 치환기의 설명과 바람직한 범위를 참조할 수 있다. R^{51}~R^{60}, R^{61}~R^{68}, R^{71}~R^{78}은, 각각 독립적으로 상기 일반식 (4)~(6) 중 어느 하나로 나타나는 기인 것도 바람직하다. 일반식 (4)~(6)에 있어서의 치환기의 수는 특별히 제한되지 않는다. 모두가 무치환(즉 수소 원자 또는 중수소 원자)인 경우도 바람직하다. 또, 일반식 (4)~(6)의 각각에 있어서 치환기가 2개 이상 존재하는 경우, 그들 치환기는 동일해도 되고 상이해도 된다. 일반식 (4)~(6)에 치환기가 존재하고 있는 경우, 그 치환기는 일반식 (4)이면 R^{52}~R^{59} 중 어느 하나인 것이 바람직하고, 일반식 (5)이면 R^{62}~R^{67} 중 어느 하나인 것이 바람직하며, 일반식 (6)이면 R^{72}~R^{77} 중 어느 하나인 것이 바람직하다.

[0149] 일반식 (6)에 있어서 X는 연결쇄 길이가 1원자인 2가의 산소 원자, 황 원자, 치환 혹은 무치환의 질소 원자, 치환 혹은 무치환의 탄소 원자, 치환 혹은 무치환의 규소 원자, 카보닐기, 혹은, 결합쇄 길이가 2원자인 2가의 치환 혹은 무치환의 에틸렌기, 치환 혹은 무치환의 바이닐렌기, 치환 혹은 무치환의 o-아릴렌기, 또는 치환 혹은 무치환의 o-헤테로아릴렌기를 나타낸다. 치환기의 구체예와 바람직한 범위에 대해서는, 상기의 일반식 (1) 및 일반식 (2)에 있어서의 치환기의 기재를 참조할 수 있다.

[0150] 일반식 (4)~(6)에 있어서, L^{12}~L^{14}는, 단결합, 치환 혹은 무치환의 아릴렌기, 또는 치환 혹은 무치환의 헤테로아릴렌기를 나타낸다. L^{12}~L^{14}가 나타내는 아릴렌기 또는 헤테로아릴렌기의 설명과 바람직한 범위에 대해서는, L이 나타내는 아릴렌기 또는 헤테로아릴렌기의 설명과 바람직한 범위를 참조할 수 있다. L^{12}~L^{14}는, 단결합, 치환 혹은 무치환의 아릴렌기인 것이 바람직하다. 여기에서 말하는 아릴렌기나 헤테로아릴렌기의 치환기는, 일반식 (1)~(6)으로 나타나는 기여도 된다. 일반식 (1)~(6)으로 나타나는 기는 L^{11}~L^{14}에 도입 가능한 치환기의 최대수까지 도입되어 있어도 된다. 또, 일반식 (1)~(6)으로 나타나는 기가 복수 개 도입되어 있는 경우는, 그들 치환기는 서로 동일해도 되고 상이해도 된다. *는, 일반식 (1) 또는 일반식 (2)에 있어서의 환의 환 골격을 구성하는 탄소 원자 (C)에 대한 결합 위치를 나타낸다.

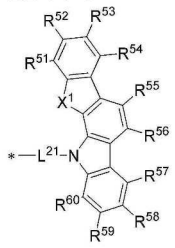
[0151] 일반식 (4)~(6)에 있어서, R^{51}과 R^{52}, R^{52}와 R^{53}, R^{53}과 R^{54}, R^{54}와 R^{55}, R^{55}와 R^{56}, R^{56}과 R^{57}, R^{57}과 R^{58}, R^{58}과 R^{59}, R^{59}와 R^{60}, R^{61}과 R^{62}, R^{62}와 R^{63}, R^{63}과 R^{64}, R^{65}와 R^{66}, R^{66}과 R^{67}, R^{67}과 R^{68}, R^{71}과 R^{72}, R^{72}와 R^{73}, R^{73}과 R^{74}, R^{75}와

R^{76}, R^{76}과 R^{77}, R^{77}과 R^{78}은, 서로 결합하여 환상 구조를 형성하고 있어도 된다. 환상 구조의 설명과 바람직한 예에 대해서는, 상기의 일반식 (1) 및 일반식 (2)의 X^1~X^5에 있어서의 환상 구조의 설명과 바람직한 예를 참조할 수 있다.

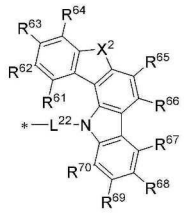
[0152] 환상 구조 중에서도 바람직한 것은, 치환 혹은 무치환의 벤조퓨란환, 치환 혹은 무치환의 벤조싸이오펜환, 치환 혹은 무치환의 인돌환, 치환 혹은 무치환의 인덴환, 치환 혹은 무치환의 실라인덴환이, 일반식 (4)~(6) 중 적어도 일방의 벤젠환에 축합된 구조이다. 보다 바람직하게는, 일반식 (5)에 축합된 하기 일반식 (5a)~(5f)로 나타나는 기이다.

[0153] [화학식 9]

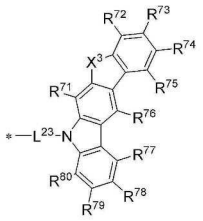
일반식 (5a)



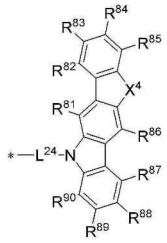
일반식 (5b)



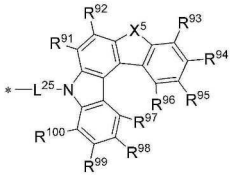
일반식 (5c)



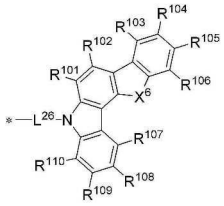
일반식 (5d)



일반식 (5e)



일반식 (5f)



[0154]

[0155] 일반식 (5a)~(5f)에 있어서, L^{11} 및 L^{21}~L^{26}은 단결합 혹은 2가의 연결기를 나타낸다. L^{11} 및 L^{21}~L^{26}의 설명과 바람직한 범위에 대해서는, 상기의 L^2의 설명과 바람직한 범위를 참조할 수 있다.

[0156] 일반식 (5a)~(5f)에 있어서, R^{41}~R^{110}은 각각 독립적으로 수소 원자 또는 치환기를 나타낸다. R^{41}과 R^{42}, R^{42}와 R^{43}, R^{43}과 R^{44}, R^{44}와 R^{45}, R^{45}와 R^{46}, R^{46}과 R^{47}, R^{47}과 R^{48}, R^{51}과 R^{52}, R^{52}와 R^{53}, R^{53}과 R^{54}, R^{54}와 R^{55}, R^{55}와 R^{56}, R^{56}과 R^{57}, R^{57}과 R^{58}, R^{58}과 R^{59}, R^{59}와 R^{60}, R^{61}과 R^{62}, R^{62}와 R^{63}, R^{63}과 R^{64}, R^{65}와 R^{66}, R^{66}과 R^{67}, R^{67}과 R^{68}, R^{68}과 R^{69}, R^{69}와 R^{70}, R^{72}와 R^{73}, R^{73}과 R^{74}, R^{74}와 R^{75}, R^{75}와 R^{76}, R^{76}과 R^{77}, R^{77}과 R^{78}, R^{78}과 R^{79}, R^{79}와 R^{80}, R^{81}과 R^{82}, R^{82}와 R^{83}, R^{83}과 R^{84}, R^{84}와 R^{85}, R^{86}과 R^{87}, R^{87}과 R^{88}, R^{88}과 R^{89}, R^{89}와 R^{90}, R^{91}과 R^{92}, R^{93}과 R^{94}, R^{94}와 R^{95}, R^{95}와 R^{96}, R^{96}과 R^{97}, R^{97}과 R^{98}, R^{99}와 R^{100}, R^{101}과 R^{102}, R^{102}와 R^{103}, R^{103}과 R^{104}, R^{104}와 R^{105}, R^{105}와 R^{106}, R^{107}과 R^{108}, R^{108}과 R^{109}, R^{109}와 R^{110}은, 서로 결합하여 환상 구조를 형성하고 있어도 된다. 서로 결합하여 형성하는 환상 구조는 방향환이어도 되고 지방환이어도 되며, 또 헤테로 원자를 포함하는 것이어도 되고, 또한 환상 구조는 2환 이상의 축합환이어도 된다. 여기에서 말하는 헤테로 원자로서는, 질소 원자, 산소 원자 및 황 원자로 이루어지는 군으로부터 선택되는 것인 것이 바람직하다. 형성되는 환상 구조의 예로서, 벤젠환, 나프탈렌환, 피리딘환, 피리다진환, 피리미딘환, 피라진환, 피롤환, 이미다졸환, 피라졸환, 이미다졸린환, 옥사졸환, 아이소옥사졸환, 싸이아졸환, 아이소싸이아졸환, 사이클로헥사다이엔환, 사이클로헥센환, 사이클로펜타엔환, 사이클로헵타트라이엔환, 사이클로헵타다이엔환, 사이클로헵타엔환, 퓨란환, 싸이오펜환, 나프티리딘환, 퀴녹살린환, 퀴놀린환 등을 들 수 있다. 예를 들면 페난트렌환이나 트라이페닐렌환과 같이 다수의 환이 축합된 환을 형성해도 된다. 일반식 (6)으로 나타나는 기에 포함되는 환의 수는 3~5의 범위 내로부터 선택해도 되고, 5~7의 범위 내로부터 선택해도 된다. 일반식 (5a)~(5f)로 나타나는 기에 포함되는 환의 수는 5~7의 범위 내로부터 선택해도 되고, 5여도 된다.

[0157] R^{41}~R^{110}이 채용할 수 있는 치환기로서, 상기의 치환기군 B의 기를 들 수 있으며, 바람직하게는 탄소수 1~10의 무치환의 알킬기, 또는 탄소수 1~10의 무치환의 알킬기로 치환되어 있어도 되는 탄소수 6~10의 아릴기이다. 본 발

명의 바람직한 일 양태에서는, R^{41}~R^{110}은 수소 원자 또는 탄소수 1~10의 무치환의 알킬기이다. 본 발명의 바람직한 일 양태에서는, R^{41}~R^{110}은 수소 원자 또는 탄소수 6~10의 무치환의 아릴기이다. 본 발명의 바람직한 일 양태에서는, R^{41}~R^{110}은 모두 수소 원자이다.

[0158] 일반식 (5a)~(5f)에 있어서의 R^{41}~R^{110}이 결합되어 있는 탄소 원자(환 골격 구성 탄소 원자)는, 각각 독립적으로 질소 원자로 치환되어 있어도 된다. 즉, 일반식 (5a)~(5f)에 있어서의 C-R^{41}~C-R^{110}은, 각각 독립적으로 N으로 치환되어 있어도 된다. 질소 원자로 치환되어 있는 수는, 일반식 (5a)~(5f)로 나타나는 기 중에서 0~4개인 것이 바람직하고, 1~2개인 것이 보다 바람직하다. 본 발명의 일 양태에서는, 질소 원자로 치환되어 있는 수는 0이다. 또, 2개 이상이 질소 원자로 치환되어 있는 경우는, 1개의 환 중에 치환되어 있는 질소 원자의 수는 1개인 것이 바람직하다.

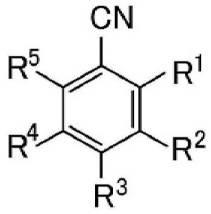
[0159] 일반식 (5a)~(5f)에 있어서, X^1~X^6은, 산소 원자, 황 원자 또는 N-R을 나타낸다. 본 발명의 일 양태에서는, X^1~X^6은 산소 원자이다. 본 발명의 일 양태에서는, X^1~X^6은 황 원자이다. 본 발명의 일 양태에서는, X^1~X^6은 N-R이다. R은 수소 원자 또는 치환기를 나타내고, 치환기인 것이 바람직하다. 치환기로서는, 상기 치환기군 A로부터 선택되는 치환기를 예시할 수 있다. 예를 들면, 무치환의 페닐기나, 알킬기나 아릴기로 이루어지는 군으로부터 선택되는 1개의 기 또는 2개 이상을 조합한 기로 치환되어 있는 페닐기를 바람직하게 채용할 수 있다.

[0160] 일반식 (5a)~(5f)에 있어서, *는 결합 위치를 나타낸다.

[0161] 본 발명에서는, 하기 일반식 (7)로 나타나고, 지연 형광을 방사하는 화합물을, 지연 형광 재료로서 특히 바람직하게 이용할 수 있다. 본 발명의 바람직한 실시형태에서는, 제2 유기 화합물로서, 일반식 (7)로 나타나는 화합물을 채용할 수 있다.

[0162] 일반식 (7)

[0163] [화학식 10]

[0164] 

[0165] 일반식 (7)에 있어서, R^1~R^5 중 0~4개는 사이아노기를 나타내고, R^1~R^5 중 적어도 1개는 치환 아미노기를 나타내며, 나머지 R^1~R^5는 수소 원자, 중수소 원자, 또는 사이아노기와 치환 아미노기 이외의 치환기를 나타낸다.

[0166] 여기에서 말하는 치환 아미노기는, 치환 혹은 무치환의 다이아릴아미노기인 것이 바람직하고, 치환 혹은 무치환의 다이아릴아미노기를 구성하는 2개의 아릴기는 서로 연결되어 있어도 된다. 연결은, 단결합으로 이루어져 있어도 되고(그 경우는 카바졸환이 형성된다), -O-, -S-, -N(R^6)-, -C(R^7)(R^8)-, -Si(R^9)(R^{10})- 등의 연결기로 이루어져 있어도 된다. 여기에서, R^6~R^{10}은 수소 원자, 중수소 원자 또는 치환기를 나타내고, R^7과 R^8, R^9와 R^{10}은, 각각 서로 연결되어 환상 구조를 형성해도 된다.

[0167] 치환 아미노기는 R^1~R^5 중 어느 것이어도 되고, 예를 들면 R^1과 R^2, R^1과 R^3, R^1과 R^4, R^1과 R^5, R^2와 R^3, R^2와 R^4, R^1과 R^2와 R^3, R^1과 R^2와 R^4, R^1과 R^2와 R^5, R^1과 R^3과 R^4, R^1과 R^3과 R^5, R^2와 R^3과 R^4, R^1과 R^2와 R^3과 R^4, R^1과 R^2와 R^3과 R^5, R^1과 R^2와 R^4와 R^5, R^1과 R^2와 R^3과 R^4와 R^5를 치환 아미노기로 하는 것 등을 할 수 있다. 사이아노기도 R^1~R^5 중 어느 것이어도 되고, 예를 들면 R^1, R^2, R^3, R^1과 R^2, R^1과 R^3, R^1과 R^4, R^1과 R^5, R^2와 R^3, R^2와 R^4, R^1과 R^2와 R^3, R^1과 R^2와 R^4, R^1과 R^2와 R^5, R^1과 R^3과 R^4, R^1과 R^3과 R^5, R^2와 R^3과 R^4를 사이아노기로 하는 것 등을 할 수 있다.

[0168] 사이아노기도 치환 아미노기도 아닌 R^1~R^5는, 수소 원자, 중수소 원자 또는 치환기를 나타낸다. 여기에서 말하는

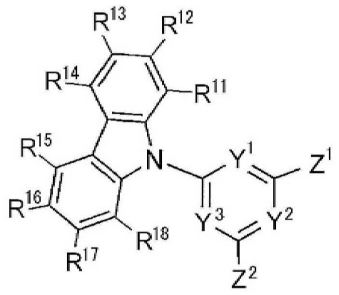
치환기의 예로서, 하이드록실기, 할로젠 원자(예를 들면 불소 원자, 염소 원자, 브로민 원자, 아이오딘 원자), 알킬기(예를 들면 탄소수 1~40), 알콕시기(예를 들면 탄소수 1~40), 알킬싸이오기(예를 들면 탄소수 1~40), 아릴기(예를 들면 탄소수 6~30), 아릴옥시기(예를 들면 탄소수 6~30), 아릴싸이오기(예를 들면 탄소수 6~30), 헤테로아릴기(예를 들면 환 골격 구성 원자수 5~30), 헤테로아릴옥시기(예를 들면 환 골격 구성 원자수 5~30), 헤테로아릴싸이오기(예를 들면 환 골격 구성 원자수 5~30), 아실기(예를 들면 탄소수 1~40), 알켄일기(예를 들면 탄소수 1~40), 알카인일기(예를 들면 탄소수 1~40), 알콕시카보닐기(예를 들면 탄소수 1~40), 아릴옥시카보닐기(예를 들면 탄소수 1~40), 헤테로아릴옥시카보닐기(예를 들면 탄소수 1~40), 실릴기(예를 들면 탄소수 1~40의 트라이알킬실릴기), 나이트로기, 여기에 열거한 기가 추가로 여기에 열거한 1 이상의 기로 치환된 기로 이루어지는 치환기군 A를 들 수 있다. 상기 다이아릴아미노기의 아릴기가 치환되어 있을 때의 치환기의 바람직한 예로서도, 상기의 치환기군 A의 치환기를 들 수 있고, 추가로 사이아노기와 치환 아미노기도 들 수 있다.

[0169] 일반식 (7)에 포함되는 화합물군과 화합물의 구체예에 대해서는, 본 명세서의 일부로서 여기에 인용하는 WO2013/154064호의 단락 0008~0048, WO2015/080183호의 단락 0009~0030, WO2015/129715호의 단락 0006~0019, 일본 공개특허공보 2017-119663호의 단락 0013~0025, 일본 공개특허공보 2017-119664호의 단락 0013~0026을 참조할 수 있다.

[0170] 또, 하기 일반식 (8)로 나타나고, 지연 형광을 방사하는 화합물도, 본 발명의 지연 형광 재료로서 특히 바람직하게 이용할 수 있다. 본 발명의 바람직한 실시형태에서는, 제2 유기 화합물로서, 일반식 (8)로 나타나는 화합물을 채용할 수 있다.

[0171] 일반식 (8)

[0172] [화학식 11]

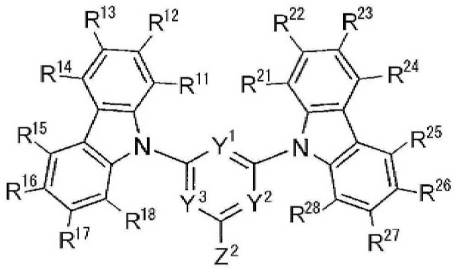
[0173] 

[0174] 일반식 (8)에 있어서, Y^1, Y^2 및 Y^3은, 어느 2개가 질소 원자이고 나머지 하나가 메타인기를 나타내거나, 또는, Y^1, Y^2 및 Y^3이 모두 질소 원자를 나타낸다. Z^1 및 Z^2는, 각각 독립적으로 수소 원자, 중수소 원자 또는 치환기를 나타낸다. R^{11}~R^{18}은, 각각 독립적으로 수소 원자, 중수소 원자 또는 치환기를 나타내고, R^{11}~R^{18} 중 적어도 하나는, 치환 혹은 무치환의 아릴아미노기, 또는 치환 혹은 무치환의 카바졸일기인 것이 바람직하다. 상기 아릴아미노기를 구성하는 벤젠환, 상기 카바졸일기를 구성하는 벤젠환은, 각각 R^{11}~R^{18}과 함께 되어 단결합 또는 연결기를 형성해도 된다. 또, 일반식 (8)로 나타나는 화합물은 분자 중에 카바졸 구조를 적어도 2개 포함한다. Z^1, Z^2가 채용할 수 있는 치환기의 예로서는, 상기의 치환기군 A의 치환기를 들 수 있다. 또, R^{11}~R^{18}, 상기 아릴아미노기, 카바졸일기가 채용할 수 있는 치환기의 구체예에 대해서는, 상기의 치환기군 A의 치환기, 사이아노기, 치환 아릴아미노기, 치환 알킬아미노기를 들 수 있다. 또한, R^{11}과 R^{12}, R^{12}와 R^{13}, R^{13}과 R^{14}, R^{15}와 R^{16}, R^{16}과 R^{17}, R^{17}과 R^{18}은, 서로 결합하여 환상 구조를 형성하고 있어도 된다.

[0175] 일반식 (8)로 나타나는 화합물 중에서도, 특히 일반식 (9)로 나타나는 화합물이 유용하다.

[0176] 일반식 (9)

[0177] [화학식 12]



[0178]

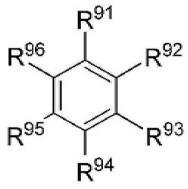
[0179] 일반식 (9)에 있어서, Y^1, Y^2 및 Y^3은, 어느 2개가 질소 원자이고 나머지 1개가 메타인기를 나타내거나, 또는, Y^1, Y^2 및 Y^3이 모두 질소 원자를 나타낸다. Z^2는, 수소 원자, 중수소 원자 또는 치환기를 나타낸다. R^{11}~R^{18} 및 R^{21}~R^{28}은, 각각 독립적으로 수소 원자, 중수소 원자 또는 치환기를 나타낸다. R^{11}~R^{18} 중 적어도 하나, 및/또는, R^{21}~R^{28} 중 적어도 하나는, 치환 혹은 무치환의 아릴아미노기, 또는 치환 혹은 무치환의 카바졸일기를 나타내는 것이 바람직하다. 상기 아릴아미노기를 구성하는 벤젠환, 상기 카바졸일기를 구성하는 벤젠환은, 각각 R^{11}~R^{18} 또는 R^{21}~R^{28}과 함께 되어 단결합 또는 연결기를 형성해도 된다. Z^2가 채용할 수 있는 치환기의 예로서는, 상기의 치환기군 A의 치환기를 들 수 있다. 또, R^{11}~R^{18}, R^{21}~R^{28}, 상기 아릴아미노기, 카바졸일기가 채용할 수 있는 치환기의 구체예에 대해서는, 상기의 치환기군 A의 치환기, 사이아노기, 치환 아릴아미노기, 치환 알킬아미노기를 들 수 있다. 또한, R^{11}과 R^{12}, R^{12}와 R^{13}, R^{13}과 R^{14}, R^{15}와 R^{16}, R^{16}과 R^{17}, R^{17}과 R^{18}, R^{21}과 R^{22}, R^{22}와 R^{23}, R^{23}과 R^{24}, R^{25}와 R^{26}, R^{26}과 R^{27}, R^{27}과 R^{28}은 서로 결합하여 환상 구조를 형성해도 된다.

[0180] 일반식 (9)에 포함되는 화합물군과 화합물의 구체예에 대해서는, 본 명세서의 일부로서 여기에 인용하는 WO2013/081088호의 단락 0020~0062나, Appl. Phys. Let, 98, 083302(2011)에 기재된 화합물을 참조할 수 있다.

[0181] 또, 하기 일반식 (10)으로 나타나고, 지연 형광을 방사하는 화합물도, 본 발명의 지연 형광 재료로서 특히 바람직하게 이용할 수 있다.

[0182] 일반식 (10)

[0183] [화학식 13]

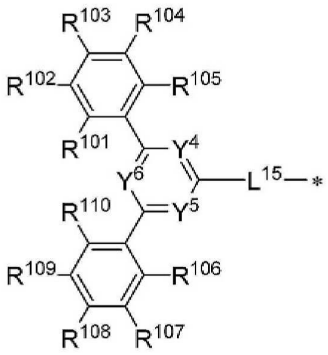


[0184]

[0185] 일반식 (10)에 있어서, R^{91}~R^{96}은 각각 독립적으로 수소 원자, 중수소 원자, 도너성기, 혹은 억셉터성기를 나타내고, 그 중 적어도 1개는, 상기 도너성기이며, 적어도 2개는, 상기 억셉터성기이다. 적어도 2개의 억셉터성기의 치환 위치는 특별히 제한되지 않지만, 서로 메타위의 관계에 있는 2개의 억셉터성기를 포함하는 것이 바람직하다. 예를 들면, R^{91}이 도너성기인 경우, 적어도 R^{92}와 R^{94}가 억셉터성기인 구조나, 적어도 R^{92}와 R^{96}이 억셉터성기인 구조를 바람직하게 예시할 수 있다. 분자 내에 존재하는 억셉터성기는, 모두 동일해도 되고 서로 상이해도 되지만, 예를 들면 모두 동일한 구조를 선택하는 것이 가능하다. 억셉터성기의 수는 2~3인 것이 바람직하고, 예를 들면 2를 선택할 수 있다. 또, 도너성기는 2개 이상 존재하고 있어도 되며, 그 경우의 도너성기도 모두 동일해도 되고 서로 상이해도 된다. 도너성기의 수는 1~3개인 것이 바람직하고, 예를 들면 1개만이어도 되고, 2개여도 된다. 또한, 도너성기와 억셉터성기의 설명과 바람직한 범위에 대해서는, 일반식 (1)의 D와 Z의 설명과 바람직한 범위를 참조할 수 있다. 특히, 일반식 (10)에 있어서 도너성기는 일반식 (3)으로 나타나는 것이 바람직하고, 억셉터성기는 사이아노기 혹은 하기 일반식 (11)로 나타나는 것이 바람직하다.

[0186] 일반식 (11)

[0187] [화학식 14]

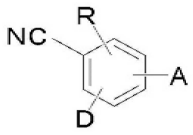
[0188] 

[0189] 일반식 (11)에 있어서, Y^4~Y^6은, 질소 원자를 나타내거나 메타인기를 나타내지만, 적어도 1개는 질소 원자이며, 바람직하게는 모두가 질소 원자를 나타낸다. R^{101}~R^{110}은 각각 독립적으로 수소 원자, 중수소 원자, 혹은 치환기를 나타내지만 적어도 하나는 알킬기인 것이 바람직하다. 여기에서 말하는 치환기의 설명과 바람직한 범위에 대해서는, 상술한 일반식 (7)에 있어서의 치환기의 설명과 바람직한 범위를 참조할 수 있다. L^{15}는 단결합 또는 연결기를 나타내고, 상술한 일반식 (3)에 있어서의 L의 설명과 바람직한 범위를 참조할 수 있다. 본 발명의 바람직한 일 양태에서는, 일반식 (11)에 있어서의 L^{15}는 단결합이다. *는, 일반식 (10)에 있어서의 환의 환 골격을 구성하는 탄소 원자 (C)에 대한 결합 위치를 나타낸다.

[0190] 본 발명의 다른 바람직한 실시형태에서는, 제2 유기 화합물로서, 일반식 (12)로 나타나는 화합물을 채용할 수 있다. 일반식 (12)로 나타나는 화합물 중에는, 일반식 (12a)로 나타나는 화합물이 포함된다.

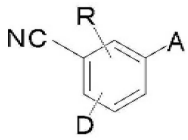
[0191] 일반식 (12)

[0192] [화학식 15]

[0193] 

[0194] 일반식 (12a)

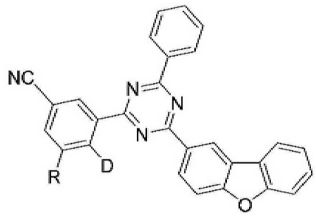
[0195] [화학식 16]

[0196] 

[0197] 일반식 (12)로 나타나는 화합물 중에서 특히 바람직한 화합물은, 하기 일반식 (13)으로 나타나는 화합물이나 일반식 (14)로 나타나는 화합물이다.

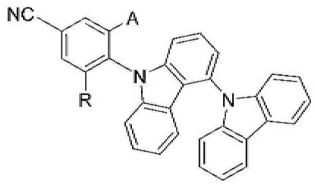
[0198] 일반식 (13)

[0199] [화학식 17]

[0200] 

[0201] 일반식 (14)

[0202] [화학식 18]



[0203]

[0204] 본 발명의 다른 바람직한 실시형태에서는, 제2 유기 화합물로서, 일반식 (15)로 나타나는 화합물을 채용할 수 있다.

[0205] [화학식 19]

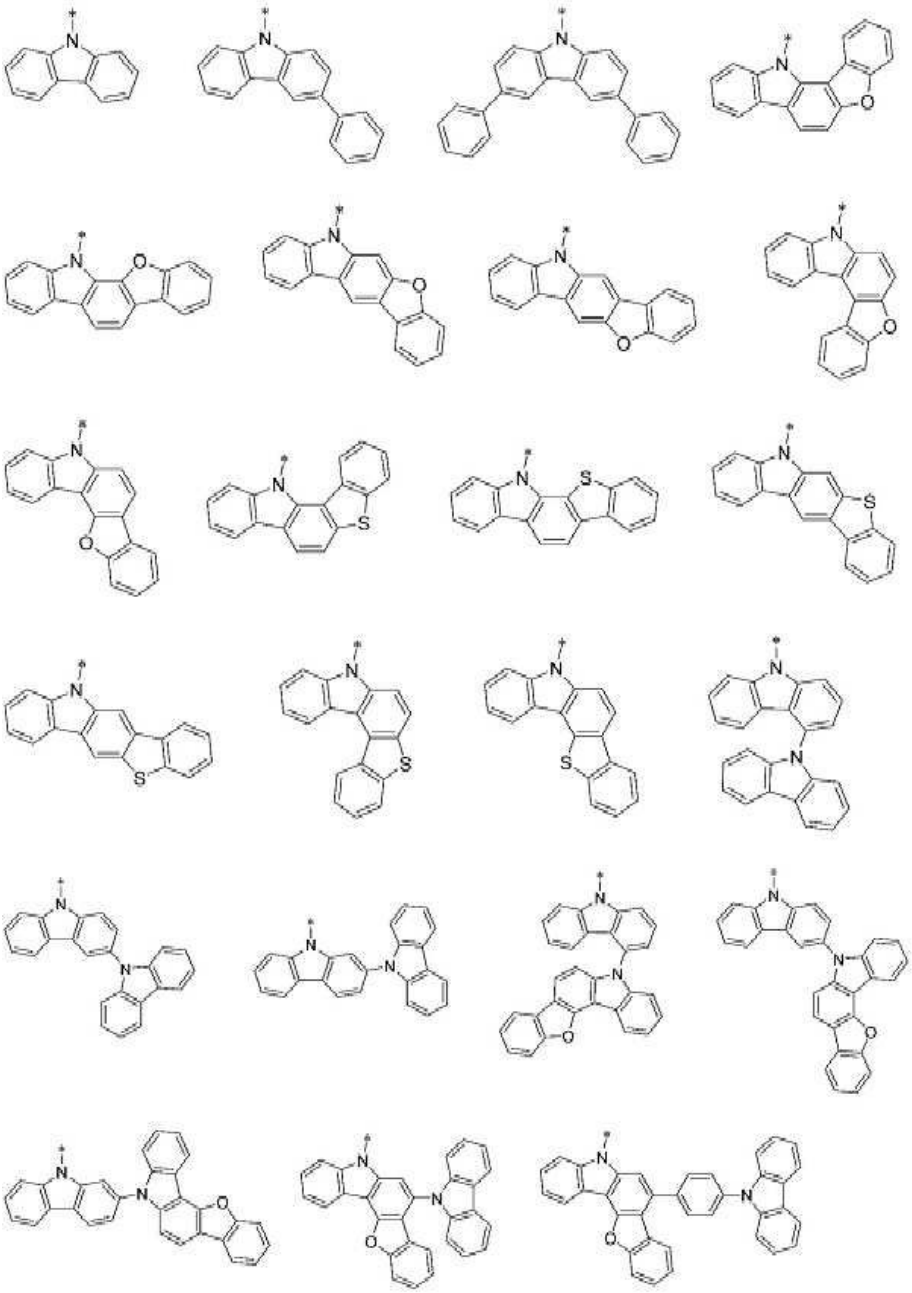


[0206]

[0207] 일반식 (12)~(15)에 있어서, D는 도너성기를 나타내고, A는 억셉터성기를 나타내며, R은 수소 원자, 중수소 원자 또는 치환기를 나타낸다. 일반식 (15)의 2개의 D는, 동일해도 되고 상이해도 된다. 도너성기 및 억셉터성기의 설명과 바람직한 범위에 대해서는, 상술한 일반식 (1)의 대응하는 설명과 바람직한 범위를 참조할 수 있다. R의 치환기로서는, 알킬기나, 알킬기 및 아릴기로 이루어지는 군으로부터 선택되는 1개의 기 또는 2개 이상을 조합한 기로 치환되어 있어도 되는 아릴기를 예시할 수 있다.

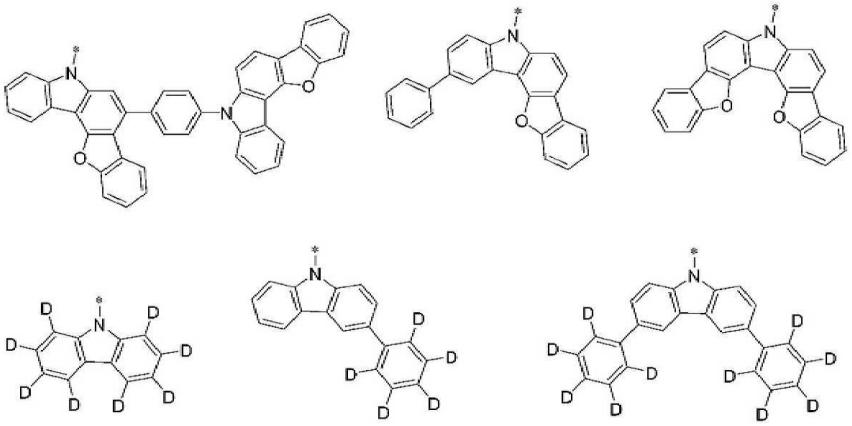
[0208] 일반식 (12)~(15)에 있어서의 D로서 바람직한 도너성기의 구체예를 이하에 든다. 이하의 구체예에 있어서, *는 결합 위치를 나타내고, "D"는 중수소 원자를 나타낸다. 이하의 구체예에 있어서, 수소 원자는 예를 들면 알킬기로 치환되어 있어도 된다. 또, 치환 혹은 무치환의 벤젠환이 더 축합되어 있어도 된다.

[0209] [화학식 20-1]



[0210]

[0211] [화학식 20-2]

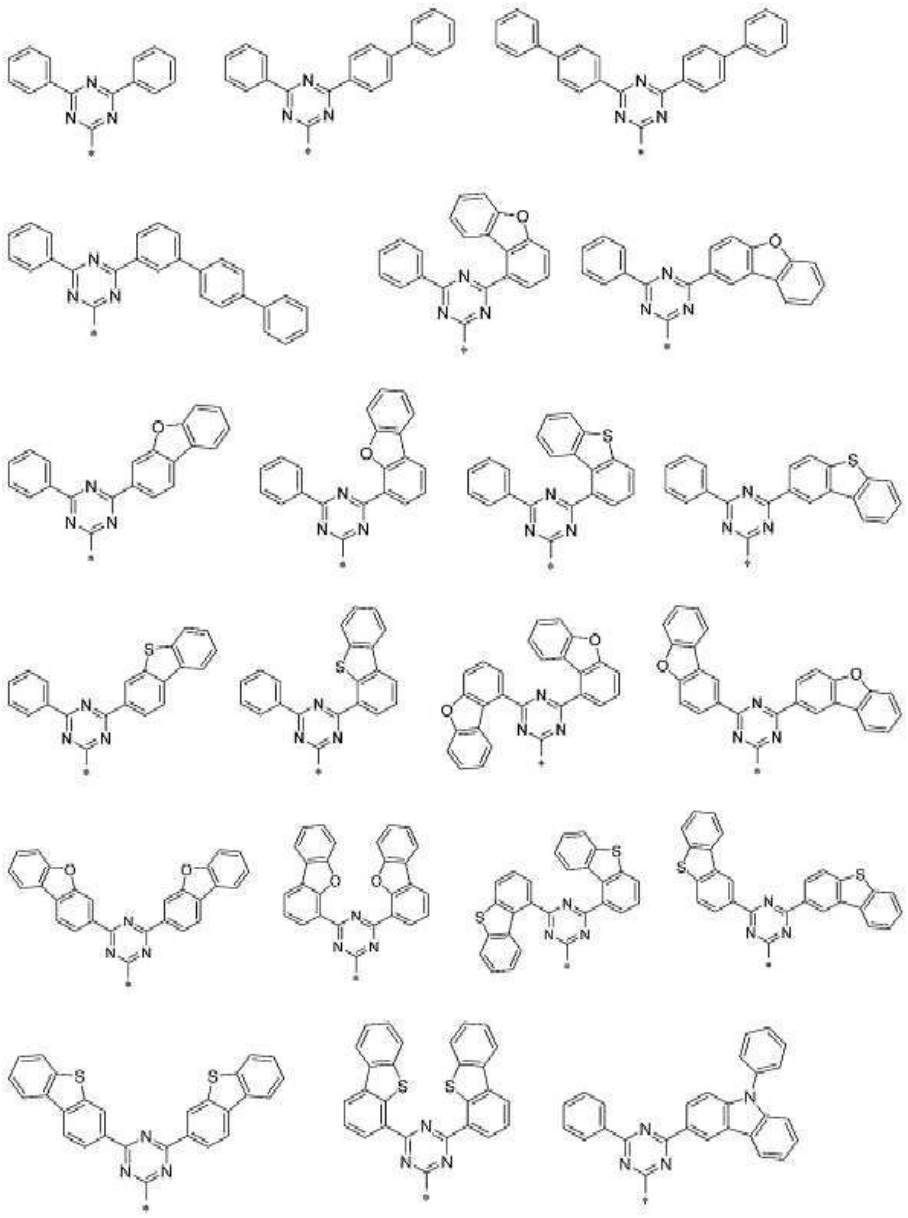


[0212]

[0213] 일반식 (12)~(14)에 있어서의 A로서 바람직한 억셉터성기의 구체예를 이하에 든다. 이하의 구체예에 있어서, *

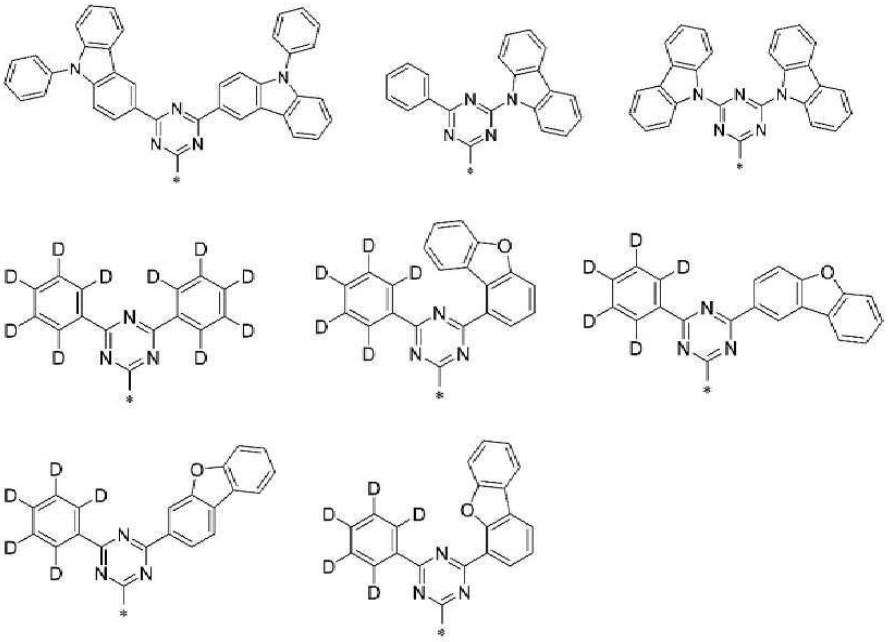
는 결합 위치를 나타내고, "D"는 듀테리움을 나타낸다.

[0214] [화학식 21-1]



[0215]

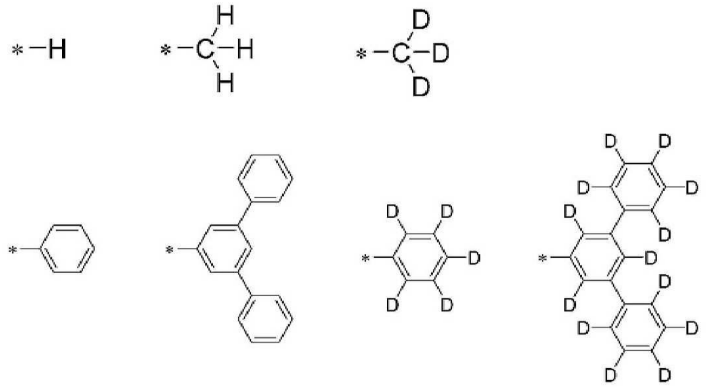
[0216] [화학식 21-2]



[0217]

[0218] 일반식 (12)~(15)에 있어서의 R로서 바람직한 예를 이하에 든다. 이하의 구체예에 있어서, *는 결합 위치를 나타내고, "D"는 듀테리움을 나타낸다.

[0219] [화학식 22]

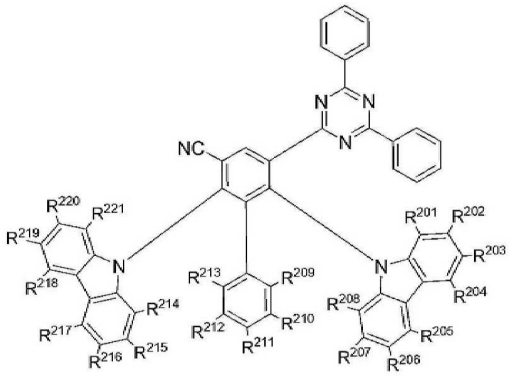


[0220]

[0221] 일반식 (15)로 나타나는 화합물 중에서 특히 바람직한 화합물은, 하기 일반식 (15a)로 나타나는 화합물이다.

[0222] 일반식 (15a)

[0223] [화학식 23]



[0224]

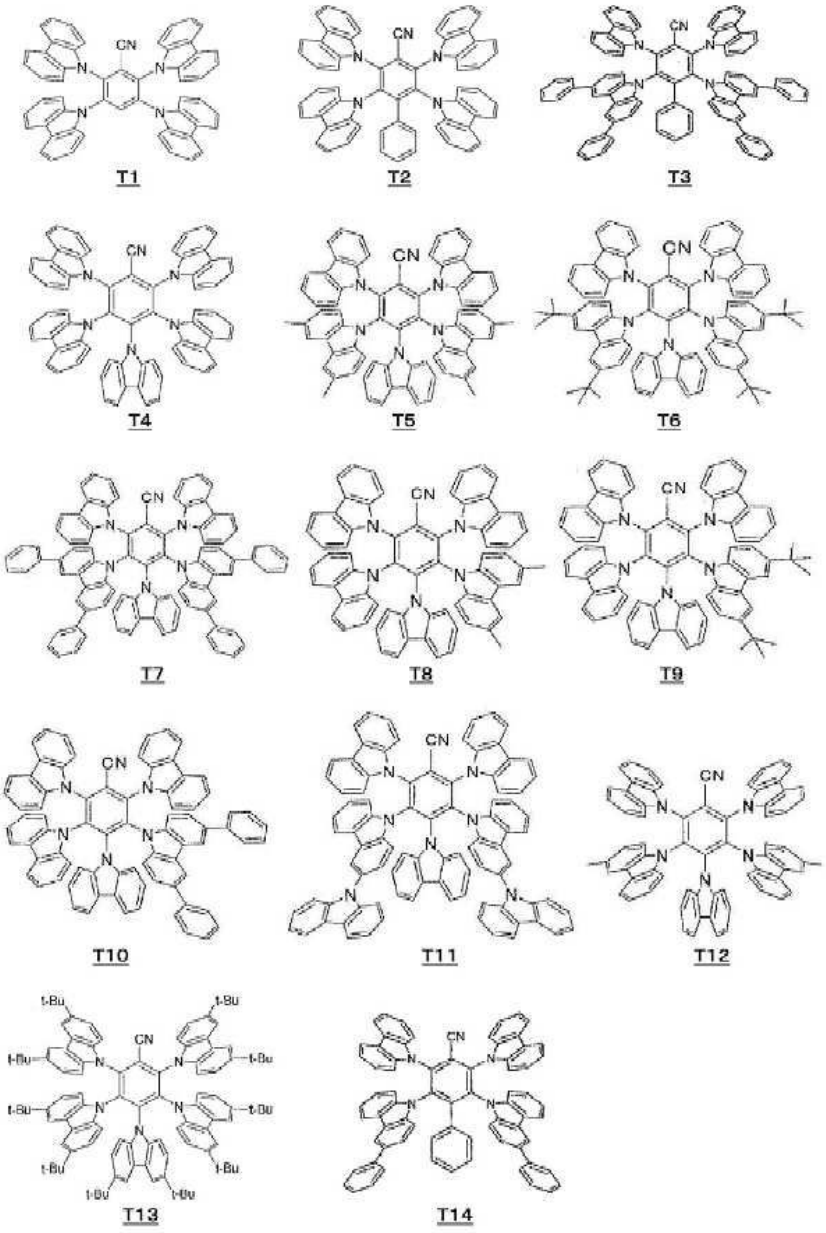
[0225] 일반식 (15a)에 있어서, R^{201}~R^{221}은 각각 독립적으로 수소 원자 또는 치환기를 나타내고, 바람직하게는 수소 원

자, 알킬기, 아릴기, 또는 알킬기와 아릴기가 결합된 기를 나타낸다. R^{201}과 R^{202}, R^{202}와 R^{203}, R^{203}과 R^{204}, R^{205}와 R^{206}, R^{206}과 R^{207}, R^{207}과 R^{208}, R^{214}와 R^{215}, R^{215}와 R^{216}, R^{216}과 R^{217}, R^{218}과 R^{219}, R^{219}와 R^{220}, R^{220}과 R^{221} 중 적어도 1세트는, 서로 결합하여 벤조퓨로 구조 또는 벤조싸이에노 구조를 형성하고 있다. 바람직하게는, R^{201}과 R^{202}, R^{202}와 R^{203}, R^{203}과 R^{204}, R^{205}와 R^{206}, R^{206}과 R^{207}, R^{207}과 R^{208} 중 1세트 또는 2세트와, R^{214}와 R^{215}, R^{215}와 R^{216}, R^{216}과 R^{217}, R^{218}과 R^{219}, R^{219}와 R^{220}, R^{220}과 R^{221} 중 1세트 또는 2세트가, 서로 결합하여 벤조퓨로 구조 또는 벤조싸이에노 구조를 형성하고 있다. 더 바람직하게는, R^{203}과 R^{204}가 서로 결합하여 벤조퓨로 구조 또는 벤조싸이에노 구조를 형성하고, 보다 더 바람직하게는 R^{203}과 R^{204}, R^{216}과 R^{217}이 서로 결합하여 벤조퓨로 구조 또는 벤조싸이에노 구조를 형성하고 있다. 특히 바람직하게는, R^{203}과 R^{204}, R^{216}과 R^{217}이 서로 결합하여 벤조퓨로 구조 또는 벤조싸이에노 구조를 형성하고 있으며, R^{206}과 R^{219}가 치환 혹은 무치환의 아릴기(바람직하게는 치환 혹은 무치환의 페닐기, 보다 바람직하게는 무치환의 페닐기)이다.

[0226] 일반식 (15a)의 수소 원자의 일부 또는 전부는 중수소 원자로 치환되어 있어도 된다. 예를 들면, 트라이아진일기에 결합되어 있는 2개의 페닐기의 수소 원자의 일부 또는 전부가 중수소 원자로 치환되어 있어도 된다. 또, 2개의 카바졸일기에 결합되어 있는 수소 원자의 일부 또는 전부가 중수소 원자로 치환되어 있어도 된다. 또, R^{209}~R^{213}이 중수소 원자여도 된다.

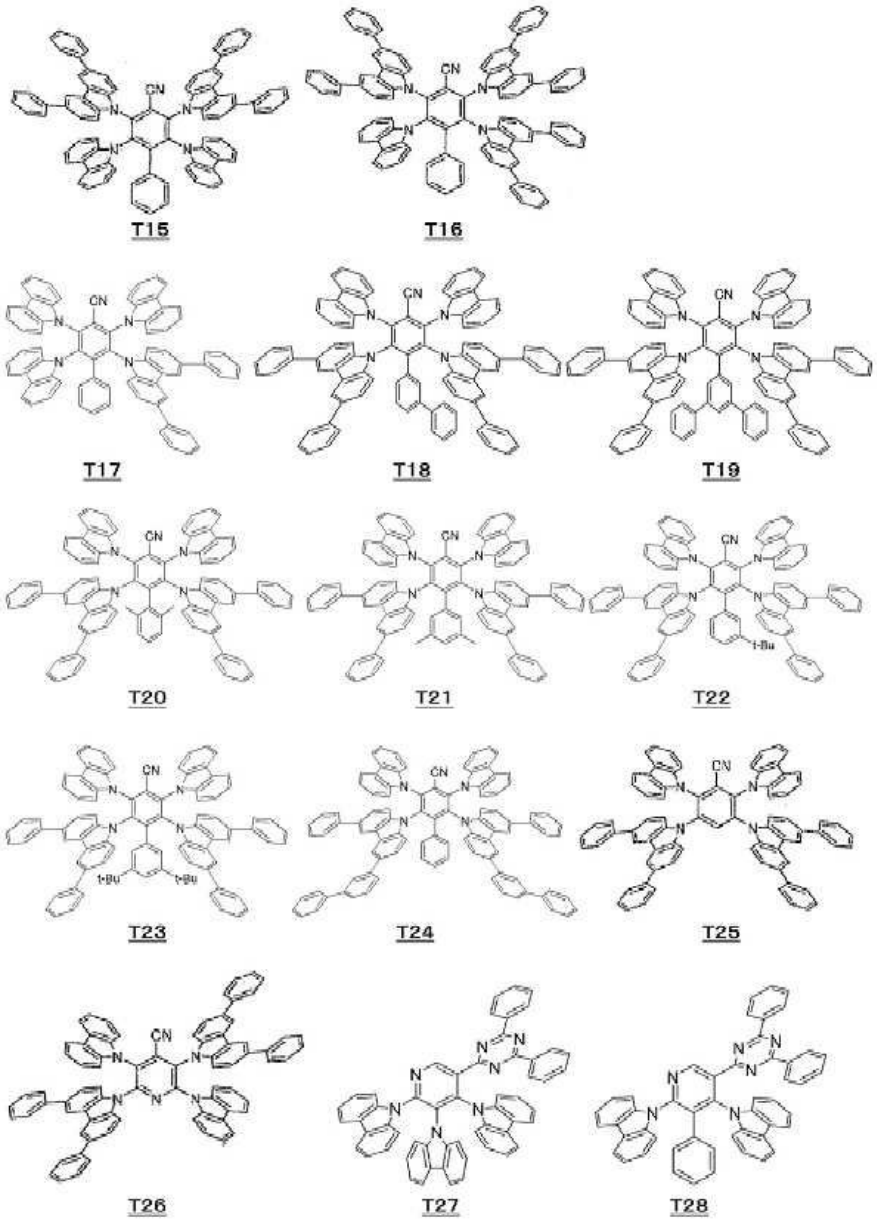
[0227] 이하에, 제2 유기 화합물로서 이용할 수 있는 바람직한 화합물을 든다. 이하의 예시 화합물의 구조식에 있어서, t-Bu는 터셔리뷰틸기를 나타낸다.

[0228] [화학식 24-1]



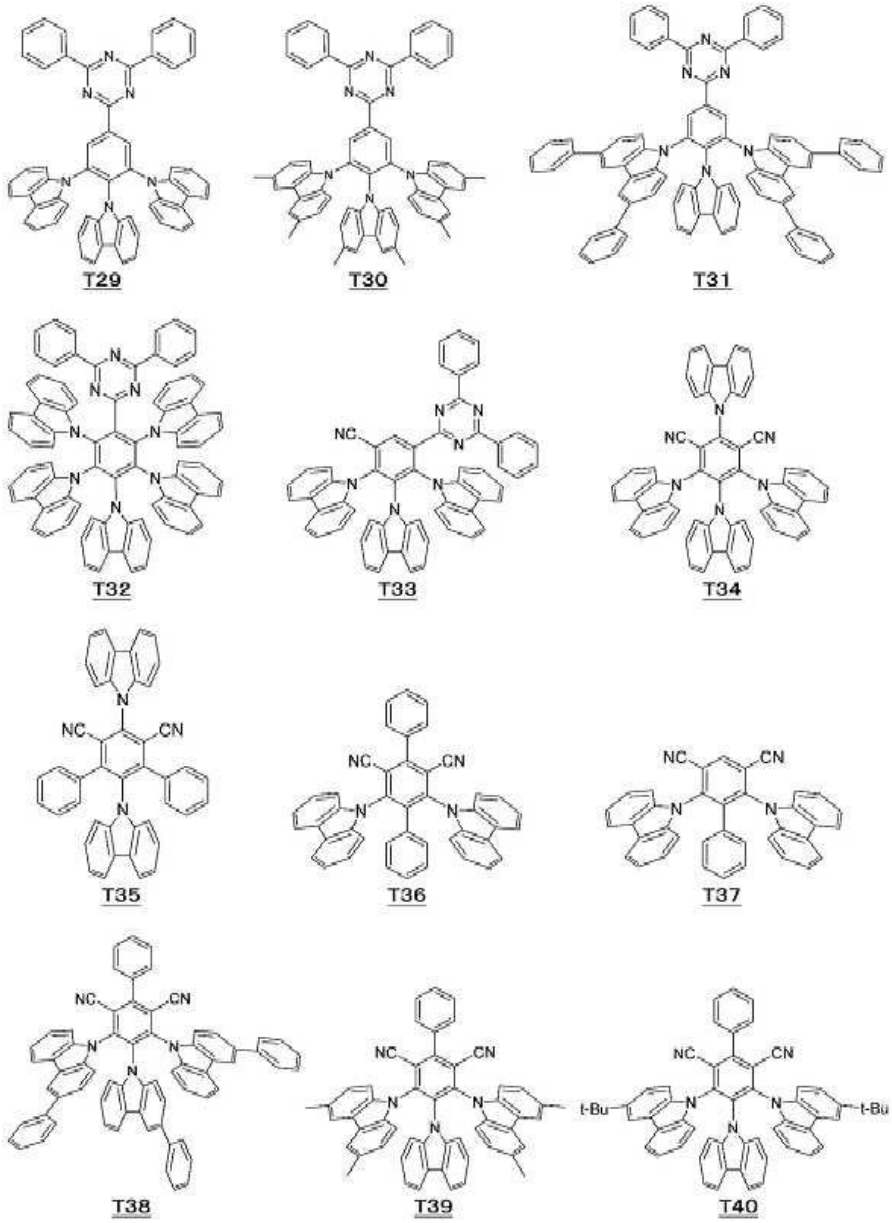
[0229]

[0230] [화학식 24-2]



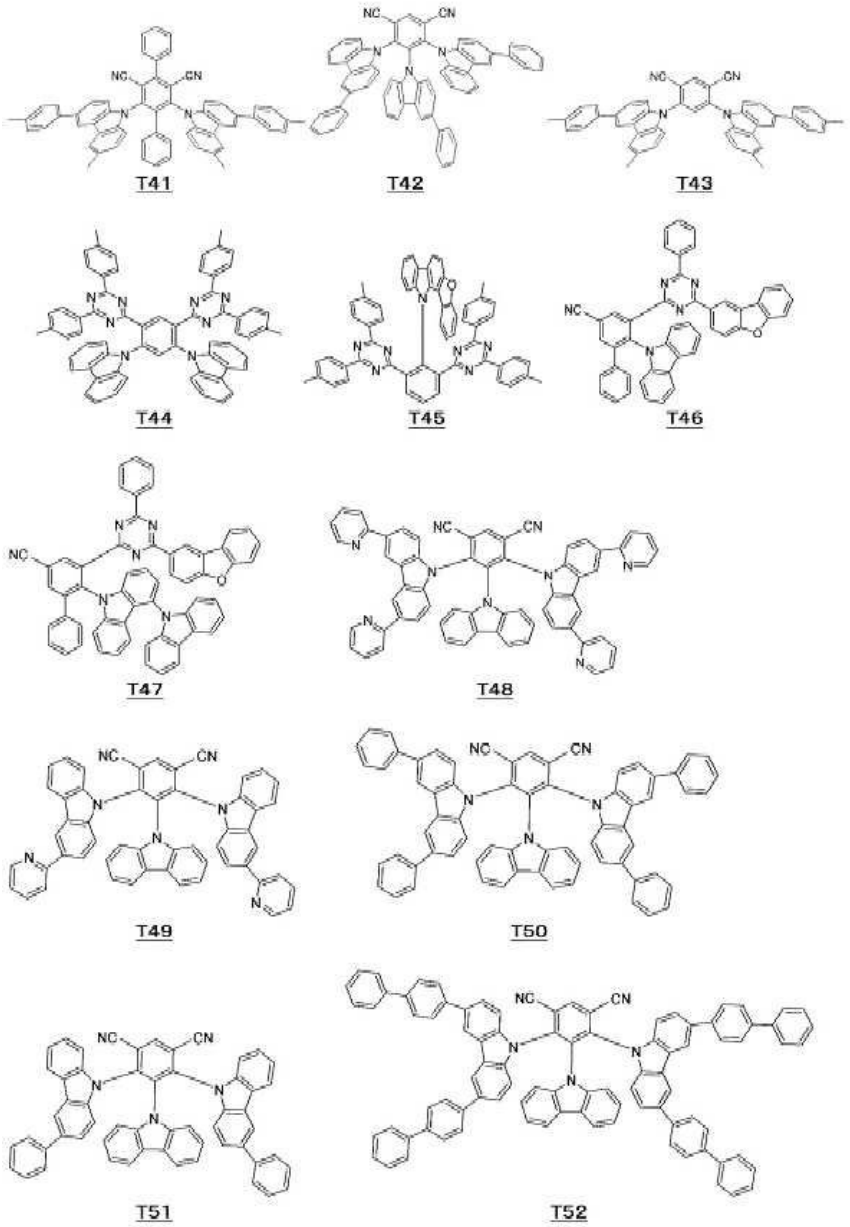
[0231]

[0232] [화학식 24-3]



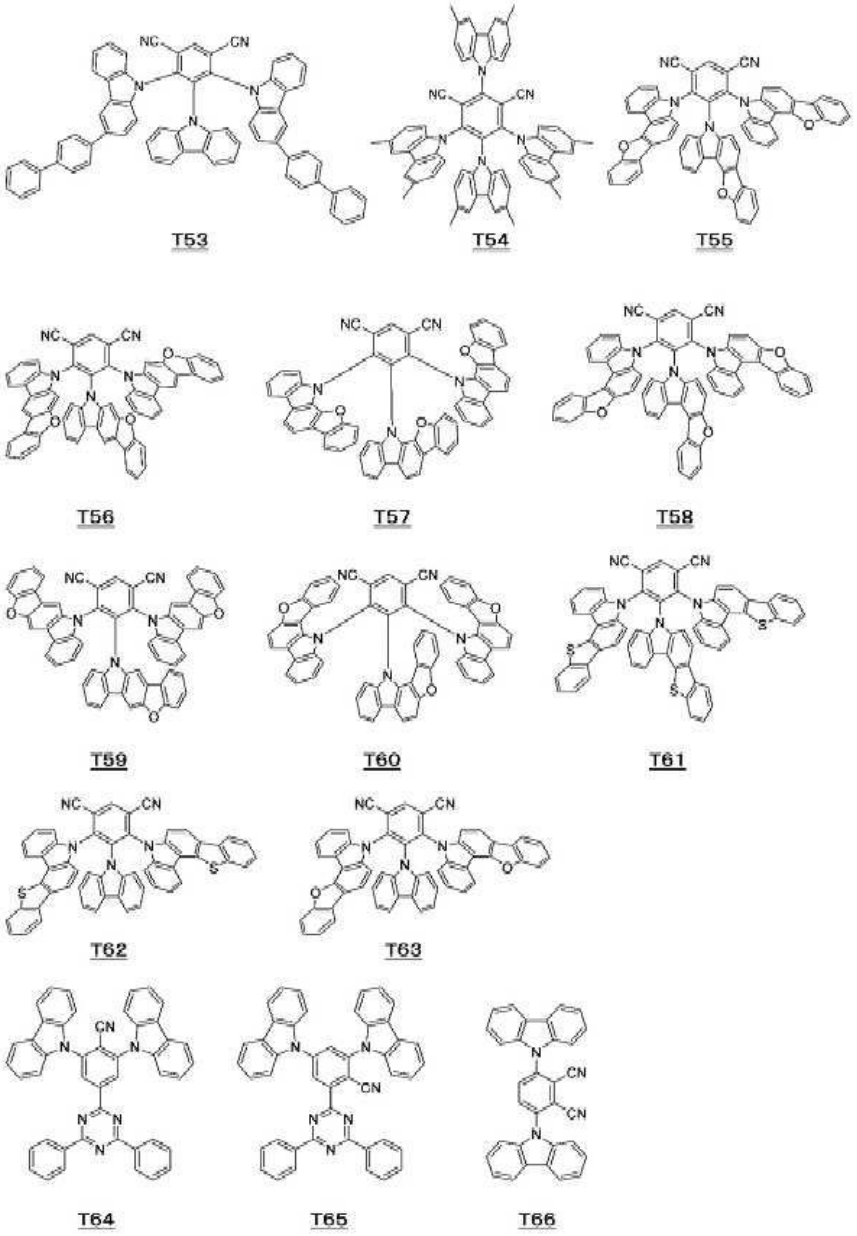
[0233]

[0234] [화학식 24-4]



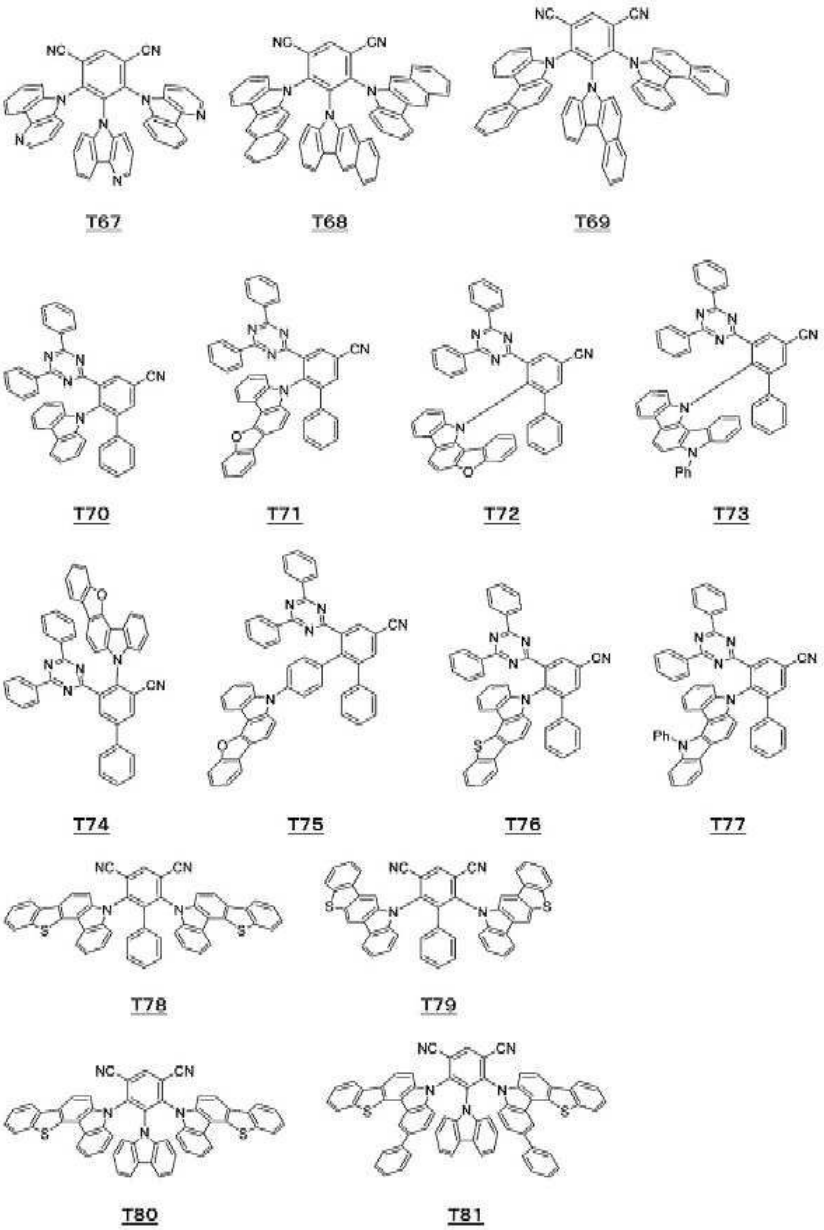
[0235]

[0236] [화학식 24-5]



[0237]

[0238] [화학식 24-6]

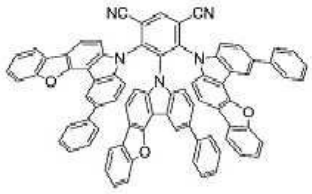


[0239]

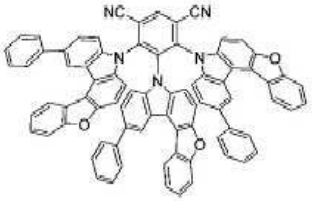
[0240] [화학식 24-7]



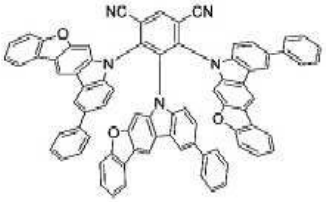
T82



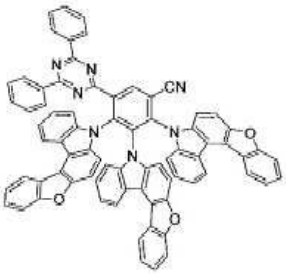
T83



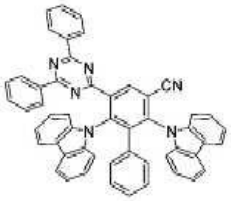
T84



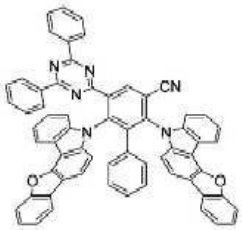
T85



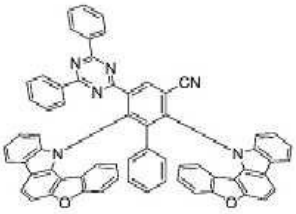
T86



T87



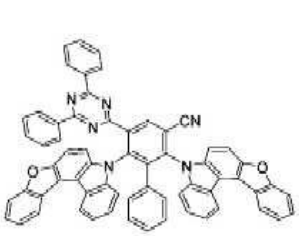
T88



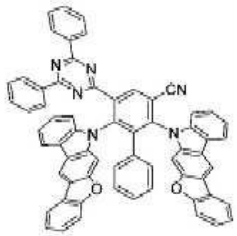
T89

[0241]

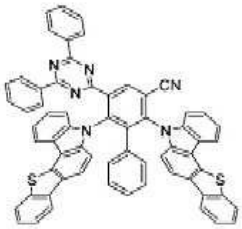
[0242] [화학식 24-8]



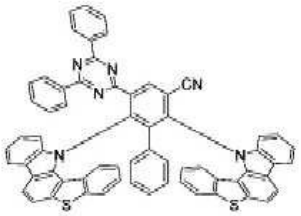
T90



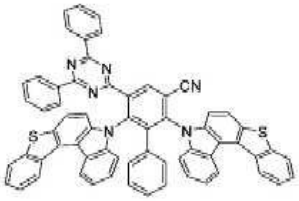
T91



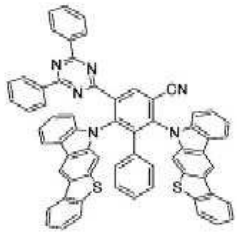
T92



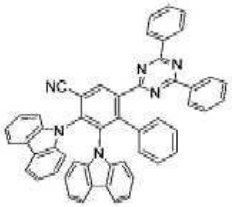
T93



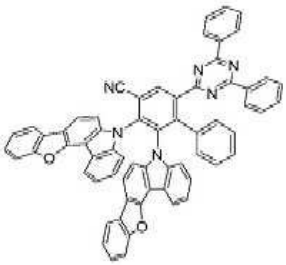
T94



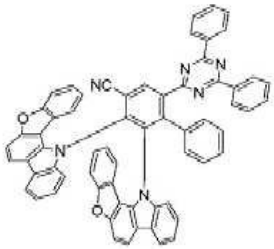
T95



T96



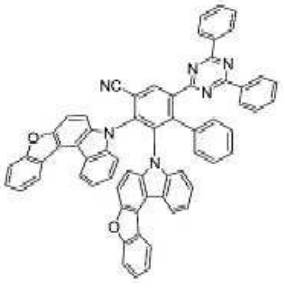
T97



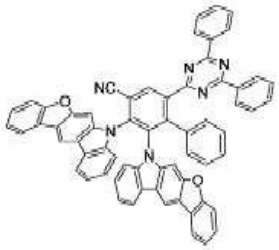
T98

[0243]

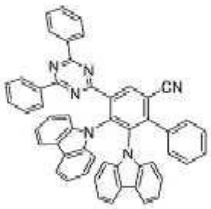
[0244] [화학식 24-9]



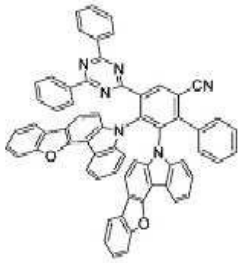
T99



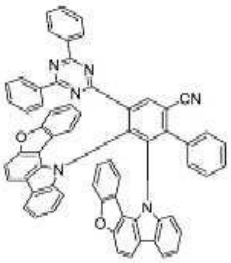
T100



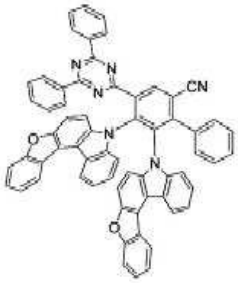
T101



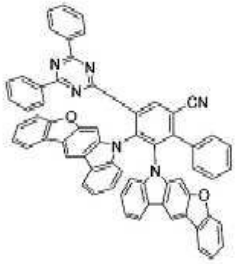
T102



T103



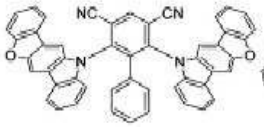
T104



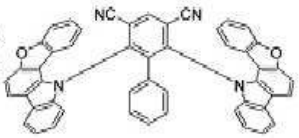
T105



T106



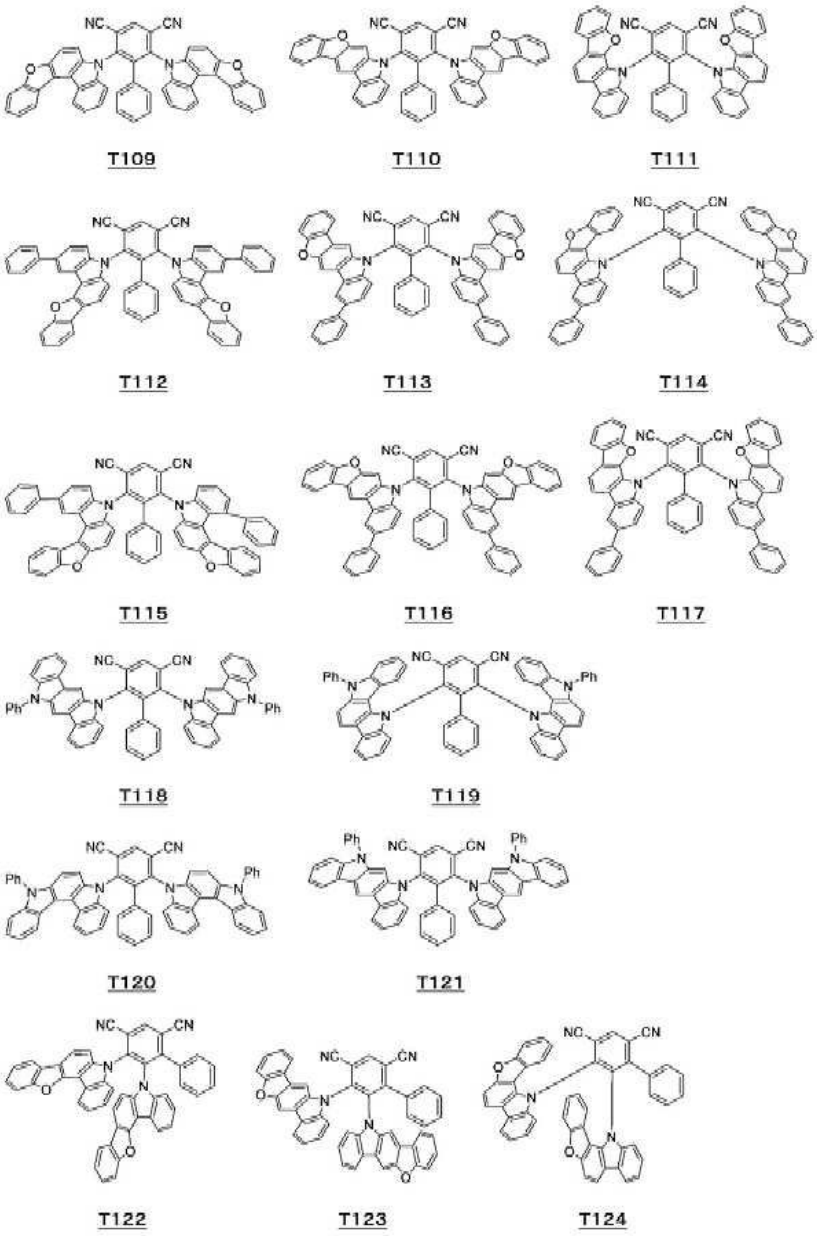
T107



T108

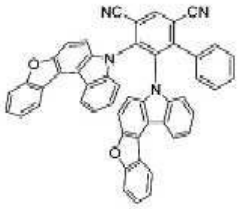
[0245]

[0246] [화학식 24-10]

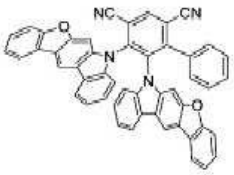


[0247]

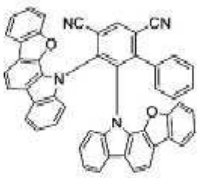
[0248] [화학식 24-11]



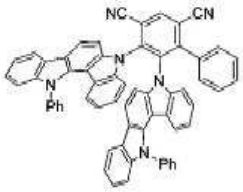
T125



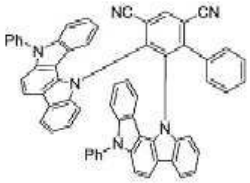
T126



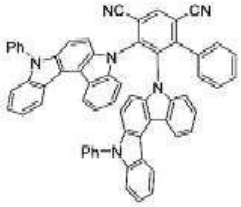
T127



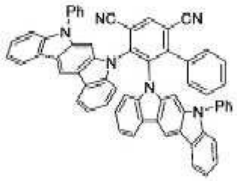
T128



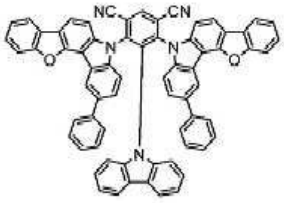
T129



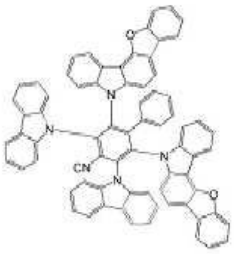
T130



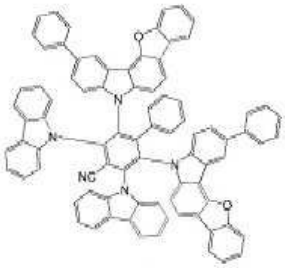
T131



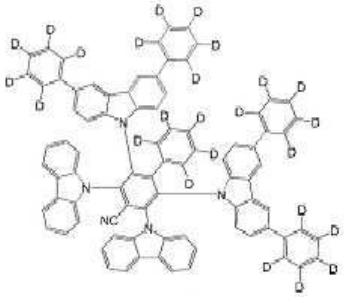
T132



T133



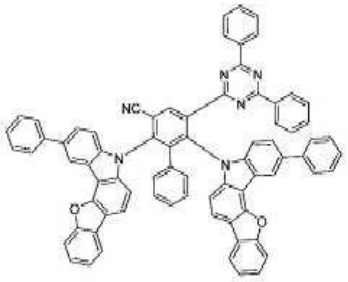
T134



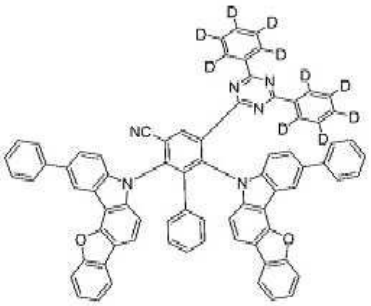
T135

[0249]

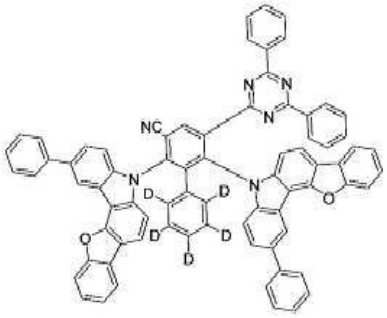
[0250] [화학식 24-12]



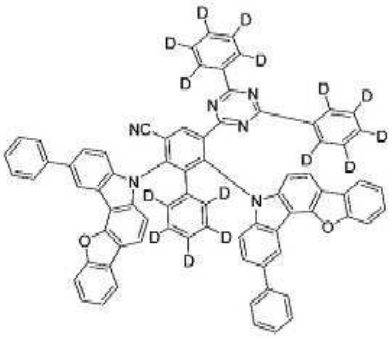
T136



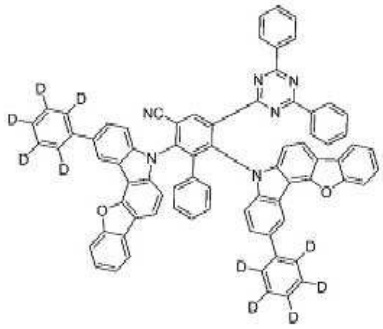
T137



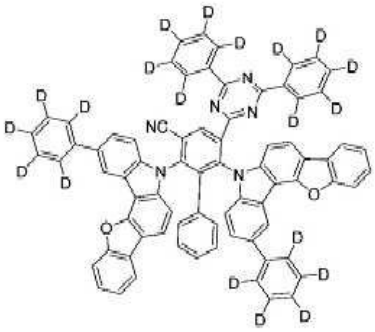
T138



T139



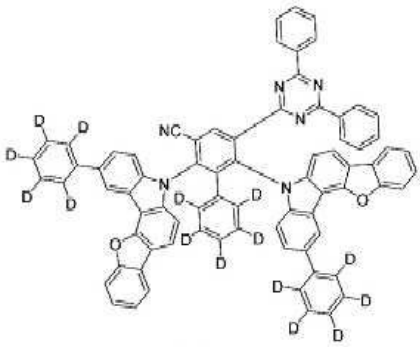
T140



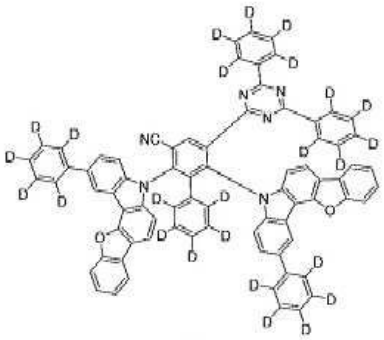
T141

[0251]

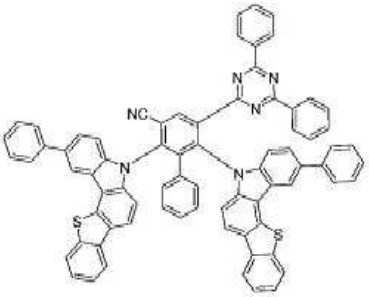
[0252] [화학식 24-13]



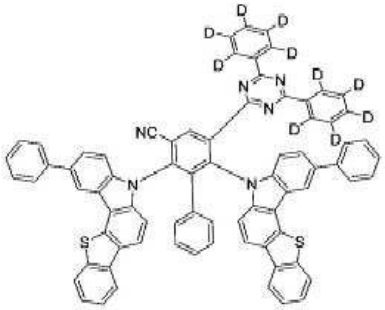
T142



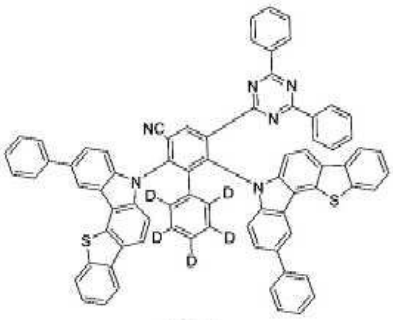
T143



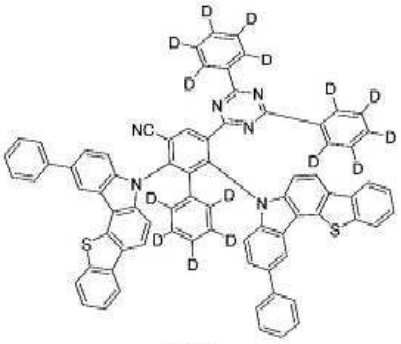
T144



T145



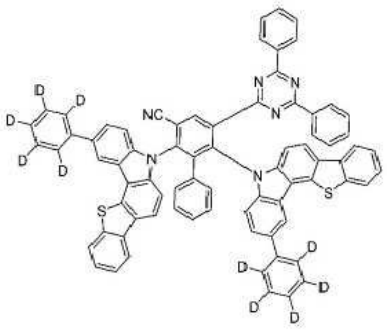
T146



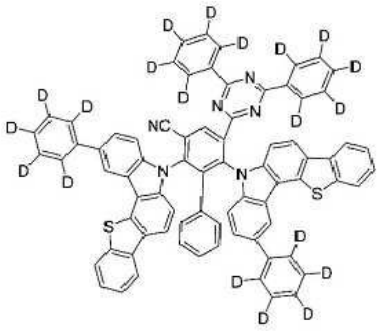
T147

[0253]

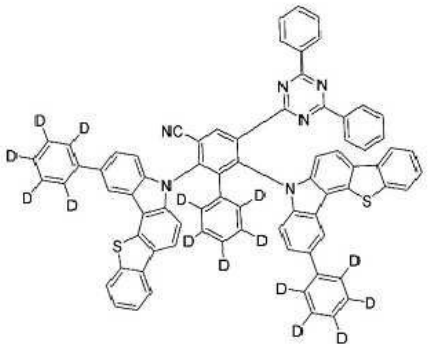
[0254] [화학식 24-14]



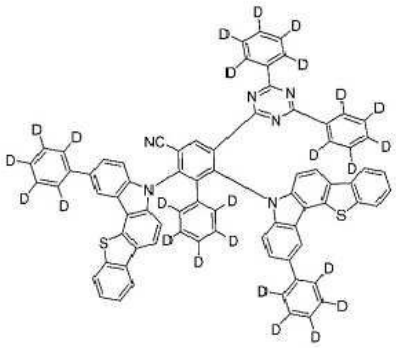
T148



T149



T150



T151

[0255]

[0256] 제2 유기 화합물에는, 상기 이외에도 공지의 지연 형광 재료를 적절히 조합하여 이용할 수 있다. 또, 알려져 있지 않은 지연 형광 재료이더라도, 이용하는 것이 가능하다. 특히, 본 명세서의 일부로서 여기에 인용하는 일본 특허출원 2021-188860호의 단락 0013~0042에 기재되는 일반식 (1)로 나타나는 화합물, 특히 단락 0043~0048에 기재되는 화합물을 바람직하게 이용할 수 있다.

[0257] 지연 형광 재료로서, WO2013/154064호의 단락 0008~0048 및 0095~0133, WO2013/011954호의 단락 0007~0047 및 0073~0085, WO2013/011955호의 단락 0007~0033 및 0059~0066, WO2013/081088호의 단락 0008~0071 및 0118~0133, 일본 공개특허공보 2013-256490호의 단락 0009~0046 및 0093~0134, 일본 공개특허공보 2013-116975호의 단락 0008~0020 및 0038~0040, WO2013/133359호의 단락 0007~0032 및 0079~0084, WO2013/161437호의 단락 0008~0054 및 0101~0121, 일본 공개특허공보 2014-9352호의 단락 0007~0041 및 0060~0069, 일본 공개특허공보 2014-9224호의 단락 0008~0048 및 0067~0076, 일본 공개특허공보 2017-119663호의 단락 0013~0025, 일본 공개특허공보 2017-119664호의 단락 0013~0026, 일본 공개특허공보 2017-222623호의 단락 0012~0025, 일본 공개특허공보 2017-226838호의 단락 0010~0050, 일본 공개특허공보 2018-100411호의 단락 0012~0043, WO2018/047853호의 단락 0016~0044에 기재되는 일반식에 포함되는 화합물, 특히 예시 화합물이며, 지연 형광을 방사하는 것을 들 수 있다. 또, 일본 공개특허공보 2013-253121호, WO2013/133359호, WO2014/034535호, WO2014/115743호, WO2014/122895호, WO2014/126200호, WO2014/136758호, WO2014/133121호, WO2014/136860호, WO2014/196585호, WO2014/189122호, WO2014/168101호, WO2015/008580호, WO2014/203840호, WO2015/002213호, WO2015/016200호, WO2015/019725호, WO2015/072470호, WO2015/108049호, WO2015/080182호, WO2015/072537호, WO2015/080183호, 일본 공개특허공보 2015-129240호, WO2015/129714호, WO2015/129715호, WO2015/133501호, WO2015/136880호, WO2015/137244호, WO2015/137202호, WO2015/137136호, WO2015/146541호, WO2015/159541호에 기재되는 발광 재료이며, 지연 형광을 방사하는 것을 채용할 수도 있다. 또한, 이 단락에 기재되는 상기의 공보는, 본 명세서의 일부로서 여기에 인용하고 있다.

[0258] (제3 유기 화합물)

[0259] 본 발명의 유기 일렉트로 루미네선스 소자의 발광층에 이용하는 제3 유기 화합물은, 형광을 방사하는 화합물이며, 제1 유기 화합물이나 제2 유기 화합물보다 LUMO의 에너지가 낮은 화합물이다. 제3 유기 화합물은, 형광을 방사하는 화합물이며, 제1 유기 화합물이나 제2 유기 화합물보다 LUMO의 에너지가 낮고, 또한, 제1 유기 화합물

이나 제2 유기 화합물보다 작은 최저 여기 일중항 에너지를 갖는 화합물인 것이 바람직하다. 본 발명의 유기 일렉트로 루미네선스 소자에서는, 발광층에 있어서의 제3 유기 화합물의 배향값이 -0.3 이하이다. 그리고, 본 발명의 유기 일렉트로 루미네선스 소자에서는, 제3 유기 화합물에서 유래하는 형광을 방사한다. 제3 유기 화합물로부터의 발광은 통상은 지연 형광을 포함한다. 소자로부터의 발광의 최대 성분은 제3 유기 화합물로부터의 형광이다. 즉, 본 발명의 유기 일렉트로 루미네선스 소자로부터의 발광 중, 제3 유기 화합물로부터의 형광의 발광량이 최대이다.

[0260] 본 발명의 바람직한 양태에서는, 제3 유기 화합물은, 여기 일중항 상태의 제1 유기 화합물, 여기 일중항 상태의 제2 유기 화합물, 여기 삼중항 상태로부터 역항간 교차하여 여기 일중항 상태가 된 제2 유기 화합물로부터 에너지를 받아 여기 일중항 상태로 천이한다. 또 본 발명의 보다 바람직한 양태에서는, 제3 유기 화합물은, 여기 일중항 상태의 제2 유기 화합물과, 여기 삼중항 상태로부터 역항간 교차하여 여기 일중항 상태가 된 제2 유기 화합물로부터 에너지를 받아 여기 일중항 상태로 천이한다. 발생한 제3 유기 화합물의 여기 일중항 상태는, 그 후 기저 상태로 되돌아갈 때에 형광을 방사한다.

[0261] 제3 유기 화합물로서는, 소정의 조건을 충족시키는 형광 재료(형광 발광성의 화합물)이면 특별히 제한 없이 이용할 수 있다. 여기에서, "형광 재료"란, 형광 수명 측정 시스템(하마마쓰 포토닉스사제 스트리크 카메라 시스템 등)에 의하여 발광 수명을 측정했을 때, 발광 수명이 100ns(나노초) 미만인 형광이 관측되는 것을 말한다. 제3 유기 화합물로부터의 발광에는 지연 형광이나 인광이 포함되어 있어도 상관없지만, 제3 유기 화합물로부터의 발광의 최대 성분은 형광이다. 본 발명의 일 양태에서는, 유기 일렉트로 루미네선스 소자는 인광을 방사하지 않거나, 인광의 방사량은 형광의 1% 이하이다.

[0262] 제3 유기 화합물은, 본 발명의 조건을 충족시키는 것이면 2종 이상을 이용해도 된다. 예를 들면, 발광색이 상이한 2종 이상의 제3 유기 화합물을 병용함으로써, 원하는 색을 발광시키는 것이 가능해진다. 또, 1종류의 제3 유기 화합물을 이용하여 제3 유기 화합물로부터 단색 발광시켜도 된다.

[0263] 본 발명에서는, 제3 유기 화합물로서 이용할 수 있는 화합물의 최대 발광 파장은 특별히 제한되지 않는다. 이 때문에, 가시 영역(380~780nm)에 최대 발광 파장을 갖는 발광 재료나 적외 영역(780nm~1mm)에 최대 발광 파장을 갖는 발광 재료나 자외 영역(예를 들면 280~380nm)에 최대 발광 파장을 갖는 화합물 등을 적절히 선택하여 사용하는 것이 가능하다. 바람직한 것은, 가시 영역에 최대 발광 파장을 갖는 형광 재료이다. 예를 들면, 380~780nm의 영역 내에 있어서의 최대 발광 파장이 380~570nm의 범위 내에 있는 발광 재료를 선택하여 이용하거나, 최대 발광 파장이 570~650nm의 범위 내에 있는 발광 재료를 선택하여 이용하거나, 최대 발광 파장이 650~700nm의 범위 내에 있는 발광 재료를 선택하여 이용하거나, 최대 발광 파장이 700~780nm의 범위 내에 있는 발광 재료를 선택하여 이용하거나 해도 된다.

[0264] 본 발명의 바람직한 양태에서는, 제2 유기 화합물의 발광 파장 영역과 제3 유기 화합물의 흡수 파장 영역의 사이에 중첩이 있도록, 각 화합물을 선택하여 조합한다. 특히, 제2 유기 화합물의 발광 스펙트럼의 단파장 측의 에지와, 제3 유기 화합물의 흡수 스펙트럼의 장파장 측의 에지가 중첩되어 있는 것이 바람직하다.

[0265] 제3 유기 화합물은 붕소 원자 이외의 금속 원자를 포함하지 않는 것이 바람직하다. 예를 들면, 제3 유기 화합물은 붕소 원자와 불소 원자를 함께 포함하는 화합물이어도 된다. 또, 붕소 원자를 포함하지만 불소 원자를 포함하지 않는 화합물이어도 된다. 또, 금속 원자를 전혀 포함하지 않는 것이어도 된다. 예를 들면, 제3 유기 화합물로서, 탄소 원자, 수소 원자, 중수소 원자, 질소 원자, 산소 원자, 황 원자, 불소 원자 및 붕소 원자로 이루어지는 군으로부터 선택되는 원자로 이루어지는 화합물을 선택할 수 있다. 예를 들면, 제3 유기 화합물로서, 탄소 원자, 수소 원자, 중수소 원자, 질소 원자, 산소 원자, 불소 원자 및 붕소 원자로 이루어지는 군으로부터 선택되는 원자로 이루어지는 화합물을 선택할 수 있다. 예를 들면, 제3 유기 화합물로서, 탄소 원자, 수소 원자, 중수소 원자, 질소 원자, 산소 원자, 황 원자 및 붕소 원자로 이루어지는 군으로부터 선택되는 원자로 이루어지는 화합물을 선택할 수 있다. 예를 들면, 제3 유기 화합물로서, 탄소 원자, 수소 원자, 중수소 원자, 질소 원자 및 붕소 원자로 이루어지는 군으로부터 선택되는 원자로 이루어지는 화합물을 선택할 수 있다. 예를 들면, 제3 유기 화합물로서, 탄소 원자, 수소 원자, 중수소 원자, 질소 원자, 산소 원자 및 황 원자로 이루어지는 군으로부터 선택되는 원자로 이루어지는 화합물을 선택할 수 있다. 예를 들면, 제3 유기 화합물로서, 탄소 원자, 수소 원자, 중수소 원자, 질소 원자 및 산소 원자로 이루어지는 군으로부터 선택되는 원자로 이루어지는 화합물을 선택할 수 있다. 예를 들면, 제3 유기 화합물로서, 탄소 원자 및 수소 원자로 이루어지는 화합물을 선택할 수 있다.

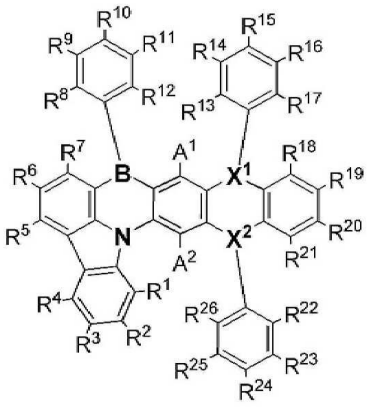
[0266] 제3 유기 화합물로서는, 붕소 원자와 질소 원자의 다중 공명 효과를 갖는 화합물이나, 안트라센, 피렌, 페릴렌

등의 축합 방향족환 구조를 포함하는 화합물을 예시할 수 있다. 또, 제3 유기 화합물로서는, 다중 공명 효과를 나타내는 붕소 원자와 질소 원자를 포함하고, 구성환수가 4개 이상인 축합환 구조를 갖는 화합물을 예시할 수 있다. 또한, 제3 유기 화합물로서는, 붕소 원자와 질소 원자를 포함하는 복소 6원환에, 질소 원자를 공유하는 피롤환과 2개의 벤젠환이 축합된 구조를 갖는 화합물도 예시할 수 있다.

[0267] 본 발명의 바람직한 일 양태에서는, 제3 유기 화합물로서 하기 일반식 (16)으로 나타나는 화합물을 이용한다.

[0268] 일반식 (16)

[0269] [화학식 25]



[0270]

[0271] 일반식 (16)에 있어서, X^1 및 X^2는, 일방이 질소 원자이며, 타방이 붕소 원자이다. 본 발명의 일 양태에서는, X^1이 질소 원자이며, X^2가 붕소 원자이다. 이때, R^{17}과 R^{18}은 서로 결합하여 단결합이 되어 피롤환을 형성한다. 본 발명의 다른 일 양태에서는, X^1이 붕소 원자이며, X^2가 질소 원자이다. 이때, R^{21}과 R^{22}는 서로 결합하여 단결합이 되어 피롤환을 형성한다.

[0272] 일반식 (16)에 있어서, R^1~R^{26}, A^1, A^2는, 각각 독립적으로 수소 원자, 중수소 원자 또는 치환기를 나타낸다.

[0273] R^1과 R^2, R^2와 R^3, R^3과 R^4, R^4와 R^5, R^5와 R^6, R^6과 R^7, R^7과 R^8, R^8과 R^9, R^9와 R^{10}, R^{10}과 R^{11}, R^{11}과 R^{12}, R^{13}과 R^{14}, R^{14}와 R^{15}, R^{15}와 R^{16}, R^{16}과 R^{17}, R^{17}과 R^{18}, R^{18}과 R^{19}, R^{19}와 R^{20}, R^{20}과 R^{21}, R^{21}과 R^{22}, R^{22}와 R^{23}, R^{23}과 R^{24}, R^{24}와 R^{25}, R^{25}와 R^{26}은, 서로 결합하여 환상 구조를 형성하고 있어도 된다.

[0274] R^7과 R^8이 결합하여 형성하는 환상 구조는, 환 골격 구성 원자로서 붕소 원자와 4개의 탄소 원자를 포함한다. R^{17}과 R^{18}이 결합하여 형성하는 환상 구조는, X^1이 붕소 원자일 때, 환 골격 구성 원자로서 붕소 원자와 4개의 탄소 원자를 포함한다. X^1이 질소 원자일 때, 환상 구조는 피롤환에 한정된다. R^{21}과 R^{22}가 결합하여 형성하는 환상 구조는, X^2가 붕소 원자일 때, 환 골격 구성 원자로서 붕소 원자와 4개의 탄소 원자를 포함한다. X^2가 질소 원자일 때, 환상 구조는 피롤환에 한정된다. R^7과 R^8, R^{17}과 R^{18}, R^{21}과 R^{22}가 서로 결합하여 붕소 원자를 포함하는 환상 구조를 형성할 때, 그 환상 구조는 5~7원환인 것이 바람직하고, 5 또는 6원환인 것이 보다 바람직하며, 6원환인 것이 더 바람직하다. R^7과 R^8, R^{17}과 R^{18}, R^{21}과 R^{22}가 서로 결합할 때는, 서로 결합하여 단결합, -O-, -S-, $-N(R^{27})-$, $-C(R^{28})(R^{29})-$, $-Si(R^{30})(R^{31})-$, $-B(R^{32})-$, -CO-, -CS-를 형성하는 것이 바람직하고, -O-, -S- 또는 $-N(R^{27})-$을 형성하는 것이 보다 바람직하며, $-N(R^{27})-$을 형성하는 것이 더 바람직하다. 여기에서, R^{27}~R^{32}는, 각각 독립적으로 수소 원자, 중수소 원자 또는 치환기를 나타낸다. 치환기로서는, 후술하는 치환기군 A~E 중 어느 하나로부터 선택되는 기를 채용해도 되지만, 치환 혹은 무치환의 알킬기, 치환 혹은 무치환의 아릴기, 치환 혹은 무치환의 헤테로아릴기인 것이 바람직하고, 특히 R^{27}은 치환 혹은 무치환의 아릴기인 것이 바람직하다. R^{27}~R^{32}가 치환기일 때, R^7과 R^8이 서로 결합하여 형성하는 환에 있어서의 R^{27}~R^{32}는 R^6 및 R^9 중 적어도 일방과 결합하여 환상 구조를 더 형성해도 되고, R^{17}과 R^{18}이 서로 결합하여 형성하는 환에 있어서의 R^{27}~R^{32}는 R^{16} 및 R^{19} 중 적어도

일방과 결합하여 환상 구조를 더 형성해도 되며, R^{21}과 R^{22}가 서로 결합하여 형성하는 환에 있어서의 R^{27}~R^{32}는 R^{20} 및 R^{23} 중 적어도 일방과 결합하여 환상 구조를 더 형성해도 된다. 본 발명의 일 양태에서는, R^7과 R^8, R^{17}과 R^{18}, R^{21}과 R^{22} 중 1세트만이 서로 결합되어 있다. 본 발명의 일 양태에서는, R^7과 R^8, R^{17}과 R^{18}, R^{21}과 R^{22} 중 2세트만이 서로 결합되어 있다. 본 발명의 일 양태에서는, R^7과 R^8, R^{17}과 R^{18}, R^{21}과 R^{22} 모두가 서로 결합되어 있다.

[0275] R^1과 R^2, R^2와 R^3, R^3과 R^4, R^4와 R^5, R^5와 R^6, R^6과 R^7, R^8과 R^9, R^9와 R^{10}, R^{10}과 R^{11}, R^{11}과 R^{12}, R^{13}과 R^{14}, R^{14}와 R^{15}, R^{15}와 R^{16}, R^{16}과 R^{17}, R^{18}과 R^{19}, R^{19}와 R^{20}, R^{20}과 R^{21}, R^{22}와 R^{23}, R^{23}과 R^{24}, R^{24}와 R^{25}, R^{25}와 R^{26}이 서로 결합하여 형성하는 환상 구조는, 방향환이어도 되고 지방환이어도 되며, 또 헤테로 원자를 포함하는 것이어도 되고, 또한 다른 환이 1환 이상 축합되어 있어도 된다. 여기에서 말하는 헤테로 원자로서는, 질소 원자, 산소 원자 및 황 원자로 이루어지는 군으로부터 선택되는 것인 것이 바람직하다. 형성되는 환상 구조의 예로서, 벤젠환, 피리딘환, 피리다진환, 피리미딘환, 피라진환, 피롤환, 이미다졸환, 피라졸환, 트라이아졸환, 이미다졸린환, 퓨란환, 싸이오펜환, 옥사졸환, 아이소옥사졸환, 싸이아졸환, 아이소싸이아졸환, 사이클로헥사다이엔환, 사이클로헥센환, 사이클로펜텐환, 사이클로헵타트라이엔환, 사이클로헵타다이엔환, 사이클로헵텐환, 및 이들 환으로 이루어지는 군으로부터 선택되는 1개 이상의 환이 더 축합된 환을 들 수 있다. 본 발명의 바람직한 일 양태에서는, 환상 구조는 치환 혹은 무치환의 벤젠환(환이 더 축합되어 있어도 된다)이며, 예를 들면, 알킬기 또는 아릴기로 치환되어 있어도 되는 벤젠환이다. 본 발명의 바람직한 일 양태에서는, 환상 구조는 치환 혹은 무치환의 복소 방향환이며, 바람직하게는 벤조퓨란의 퓨란환, 벤조싸이오펜의 싸이오펜환이다. R^1과 R^2, R^2와 R^3, R^3과 R^4, R^4와 R^5, R^5와 R^6, R^6과 R^7, R^8과 R^9, R^9와 R^{10}, R^{10}과 R^{11}, R^{11}과 R^{12}, R^{13}과 R^{14}, R^{14}와 R^{15}, R^{15}와 R^{16}, R^{16}과 R^{17}, R^{18}과 R^{19}, R^{19}와 R^{20}, R^{20}과 R^{21}, R^{22}와 R^{23}, R^{23}과 R^{24}, R^{24}와 R^{25}, R^{25}와 R^{26} 중, 서로 결합하여 환상 구조를 형성하고 있는 조합의 수는 0이어도 되고, 예를 들면 1~6 중 어느 하나여도 된다. 예를 들면 1~4 중 어느 하나여도 되고, 1을 선택하거나, 2를 선택하거나, 3 또는 4를 선택하거나 할 수 있다. 본 발명의 일 양태에서는, R^1과 R^2, R^2와 R^3, R^3과 R^4로부터 선택되는 1세트가 서로 결합하여 환상 구조를 형성하고 있다. 본 발명의 일 양태에서는, R^5와 R^6이 서로 결합하여 환상 구조를 형성하고 있다. 본 발명의 일 양태에서는, R^9와 R^{10}, R^{10}과 R^{11}, R^{11}과 R^{12}로부터 선택되는 1세트가 서로 결합하여 환상 구조를 형성하고 있다. 본 발명의 일 양태에서는, R^1과 R^2, R^{13}과 R^{14}가 모두 서로 결합하여 환상 구조를 형성하고 있다. 본 발명의 일 양태에서는, R^1과 R^2, R^2와 R^3, R^3과 R^4로부터 선택되는 1세트가 서로 결합하여 환상 구조를 형성하고 있고, 또한, R^5와 R^6이 서로 결합하여 환상 구조를 형성하고 있다. 본 발명의 일 양태에서는, R^5와 R^6, R^{19}와 R^{20}이 모두 서로 결합하여 환상 구조를 형성하고 있다.

[0276] 인접하는 R^n(n=1~26)과 서로 결합되어 있지 않은 R^1~R^{26}은, 수소 원자, 중수소 원자 또는 치환기이다. 치환기로서는, 후술하는 치환기군 A~E 중 어느 하나로부터 선택되는 기를 채용할 수 있다.

[0277] R^1~R^{26}이 채용할 수 있는 바람직한 치환기는, 치환 혹은 무치환의 알킬기, 치환 혹은 무치환의 아릴기, 치환 혹은 무치환의 헤테로아릴기이며, 예를 들면 치환기는 치환 혹은 무치환의 아릴기여도 되고, 예를 들면 치환기는 치환 혹은 무치환의 알킬기여도 된다. 여기에서 말하는 알킬기, 아릴기, 헤테로아릴기의 치환기도 치환기군 A~E 중 어느 하나로부터 선택되는 기를 채용할 수 있지만, 바람직하게는 알킬기, 아릴기 및 헤테로아릴기로 이루어지는 군으로부터 선택되는 1 이상의 기이며, 보다 바람직하게는 치환기군 E의 기이고, 무치환이어도 된다. 본 발명의 바람직한 일 양태에서는, R^1~R^6 중 적어도 하나는 치환기이며, 바람직하게는 치환기군 E의 기이다. 예를 들면 R^1~R^6 중 적어도 하나가 치환기이며, 바람직하게는 치환기군 E의 기이다. 예를 들면, R^5 및 R^6 중 적어도 하나가 치환기이며, 바람직하게는 치환기군 E의 기이다. 본 발명의 바람직한 일 양태에서는, R^3 및 R^6 중 적어도 일방이 치환기이고, 보다 바람직하게는 양방이 치환기이며, 바람직하게는 치환기군 E의 기이다. 본 발명의 바람직한 일 양태에서는, X^1이 질소 원자일 때, R^{15} 및 R^{20} 중 적어도 일방이 치환기이며, 보다 바람직하게는 양방이 치환기이고, 바람직하게는 치환기군 E의 기이다. 이때, R^{16}과 R^{17}은 서로 결합하여 단결합을 형성하고 있다. 본 발명의 바람직한 일 양태에서는, X^2가 질소 원자일 때, R^{19} 및 R^{24} 중 적어도 일방이 치환기이며, 보다 바람직하

게는 양방이 치환기이고, 바람직하게는 치환기군 E의 기이다. 이때, R^{21}과 R^{22}는 서로 결합하여 단결합을 형성하고 있다. 본 발명의 일 양태에서는, R^{8} 및 R^{12} 중 적어도 일방이 치환기이며, 바람직하게는 양방이 치환기이다. 본 발명의 일 양태에서는, R^{8}, R^{10} 및 R^{12}가 치환기이다. R^{8}~R^{12}의 치환기로서는, 무치환의 알킬기가 바람직하다. X^{1}이 붕소 원자일 때, R^{13} 및 R^{17} 중 적어도 일방이 치환기이며, 바람직하게는 양방이 치환기이다. 본 발명의 일 양태에서는, X^{1}이 붕소 원자일 때, R^{13}, R^{15} 및 R^{17}이 치환기이다. X^{1}이 붕소 원자일 때, R^{13}~R^{17}의 치환기로서는, 무치환의 알킬기가 바람직하다. X^{2}가 붕소 원자일 때, R^{22} 및 R^{26} 중 적어도 일방이 치환기이며, 바람직하게는 양방이 치환기이다. 본 발명의 일 양태에서는, X^{2}가 붕소 원자일 때, R^{22}, R^{24} 및 R^{26}이 치환기이다. X^{2}가 붕소 원자일 때, R^{22}~R^{26}의 치환기로서는, 무치환의 알킬기가 바람직하다.

[0278] A^{1} 및 A^{2}는, 수소 원자, 중수소 원자 또는 치환기이다. 치환기로서는, 후술하는 치환기군 A~E 중 어느 하나로부터 선택되는 기를 채용할 수 있다.

[0279] A^{1} 및 A^{2}가 채용할 수 있는 바람직한 치환기는, 억셉터성기이다. 억셉터성기는, 하메트의 σp값이 양인 기이다. 여기에서, "하메트의 σp값"은, L. P. 하메트에 의하여 제창된 것이며, 파라 치환 벤젠 유도체의 반응 속도 또는 평형에 미치는 치환기의 영향을 정량화한 것이다. 구체적으로는, 파라 치환 벤젠 유도체에 있어서의 치환기와 반응 속도 상수 또는 평형 상수의 사이에 성립하는 하기 식:

[0280] $\log(k/k_0)=\rho\,\sigma p$

[0281] 또는

[0282] $\log(K/K_0)=\rho\,\sigma p$

[0283] 에 있어서의 치환기에 특유한 상수(σp)이다. 상기 식에 있어서, k_0은 치환기를 갖지 않는 벤젠 유도체의 속도 상수, k는 치환기로 치환된 벤젠 유도체의 속도 상수, K_0은 치환기를 갖지 않는 벤젠 유도체의 평형 상수, K는 치환기로 치환된 벤젠 유도체의 평형 상수, ρ는 반응의 종류와 조건에 의하여 정해지는 반응 상수를 나타낸다. 본 발명에 있어서의 "하메트의 σp값"에 관한 설명과 각 치환기의 수치에 대해서는, Hansch, C. et. al., Chem. Rev., 91, 165-195(1991)의 σp값에 관한 기재를 참조할 수 있다.

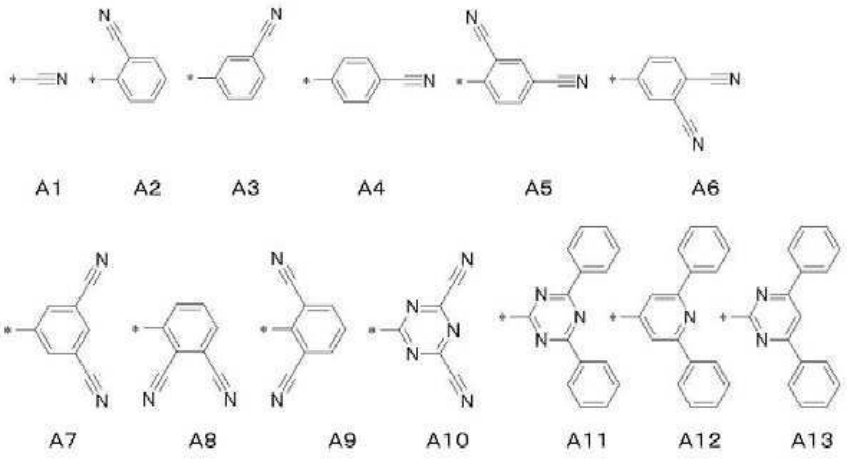
[0284] A^{1} 및 A^{2}가 채용할 수 있는 억셉터성기는, 하메트의 σp값이 0.2보다 큰 기인 것이 보다 바람직하다. 하메트의 σp값이 0.2보다 큰 기로서, 사이아노기, 적어도 사이아노기로 치환되어 있는 아릴기, 불소 원자를 포함하는 기, 환 골격 구성 원자로서 질소 원자를 포함하는 치환 혹은 무치환의 헤테로아릴기를 들 수 있다. 여기에서 말하는 적어도 사이아노기로 치환되어 있는 아릴기는, 사이아노기 이외의 치환기(예를 들면 알킬기나 아릴기)로 치환되어 있어도 되지만, 사이아노기만으로 치환되어 있는 아릴기여도 된다. 적어도 사이아노기로 치환되어 있는 아릴기는, 적어도 사이아노기로 치환되어 있는 페닐기인 것이 바람직하다. 사이아노기의 치환수는 1 또는 2인 것이 바람직하고, 예를 들면 1이어도 되며, 2여도 된다. 불소 원자를 포함하는 기는, 불소 원자, 불화 알킬기, 불소 원자 또는 불화 알킬기로 적어도 치환된 아릴기를 들 수 있다. 불화 알킬기는, 퍼플루오로알킬기인 것이 바람직하고, 탄소 원자수는 1~6인 것이 바람직하며, 1~3인 것이 보다 바람직하다. 또, 환 골격 구성 원자로서 질소 원자를 포함하는 헤테로아릴기는, 단환이어도 되고, 2개 이상의 환이 축합한 축합환이어도 된다. 축합환인 경우, 축합한 후의 환의 수는 2~6인 것이 바람직하고, 예를 들면 2~4 중에서 선택하거나, 2로 하거나 할 수 있다. 헤테로아릴기를 구성하는 환의 구체예로서, 피리딘환, 피리미딘환, 피라진환, 트라이아진환, 퀴놀린환, 아이소퀴놀린환, 퀴나졸린환, 퀴녹살린환, 퀴나졸린환이나 퀴녹살린환 이외의 나프티리딘환을 들 수 있다. 헤테로아릴기를 구성하는 환은, 중수소 원자나 치환기로 치환되어 있어도 되고, 치환기로서는 예를 들면, 알킬기, 아릴기 및 헤테로아릴기로 이루어지는 군으로부터 선택되는 1개의 기 또는 2개 이상으로 구성되는 기를 들 수 있다. A^{1} 및 A^{2}가 채용할 수 있는 억셉터성기로서 특히 바람직한 것은 사이아노기이다.

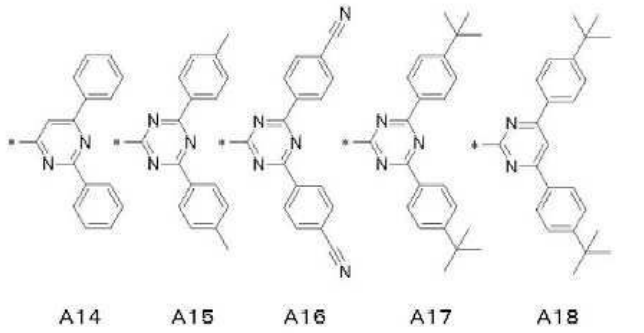
[0285] 본 발명의 일 양태에서는, A^{1} 및 A^{2}는, 각각 독립적으로 수소 원자 또는 중수소 원자이다. 본 발명의 일 양태에서는, A^{1} 및 A^{2} 중 적어도 일방은 억셉터성기이다. 본 발명의 일 양태에서는, A^{1} 및 A^{2}의 양방이 억셉터성기이다. 본 발명의 일 양태에서는, A^{1} 및 A^{2}가 사이아노기이다. 본 발명의 일 양태에서는, A^{1} 및 A^{2}가

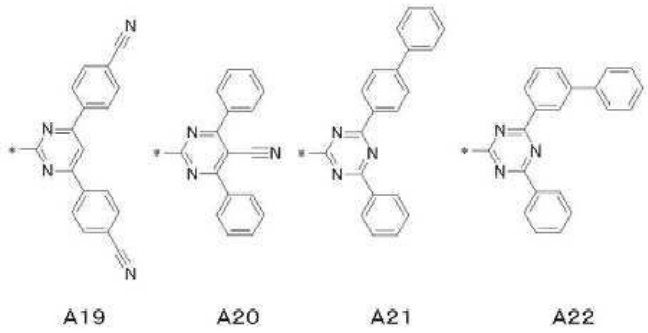
할로젠 원자이며, 예를 들면 브로민 원자이다.

[0286] 이하에 있어서, 본 발명에서 채용할 수 있는 억셉터성기의 구체예를 나타낸다. 단, 본 발명에 있어서 이용할 수 있는 억셉터성기는 이하의 구체예에 의하여 한정적으로 해석되는 것은 아니다. 본 명세서 중에서는 메틸기는 표시를 생략하고 있다. 이 때문에, 예를 들면 A15이면, 4-메틸페닐기가 2개 포함되는 기를 나타내고 있다. 또 "D"는 중수소 원자를 나타낸다. *는 결합 위치를 나타낸다.

[0287] [화학식 26-1]

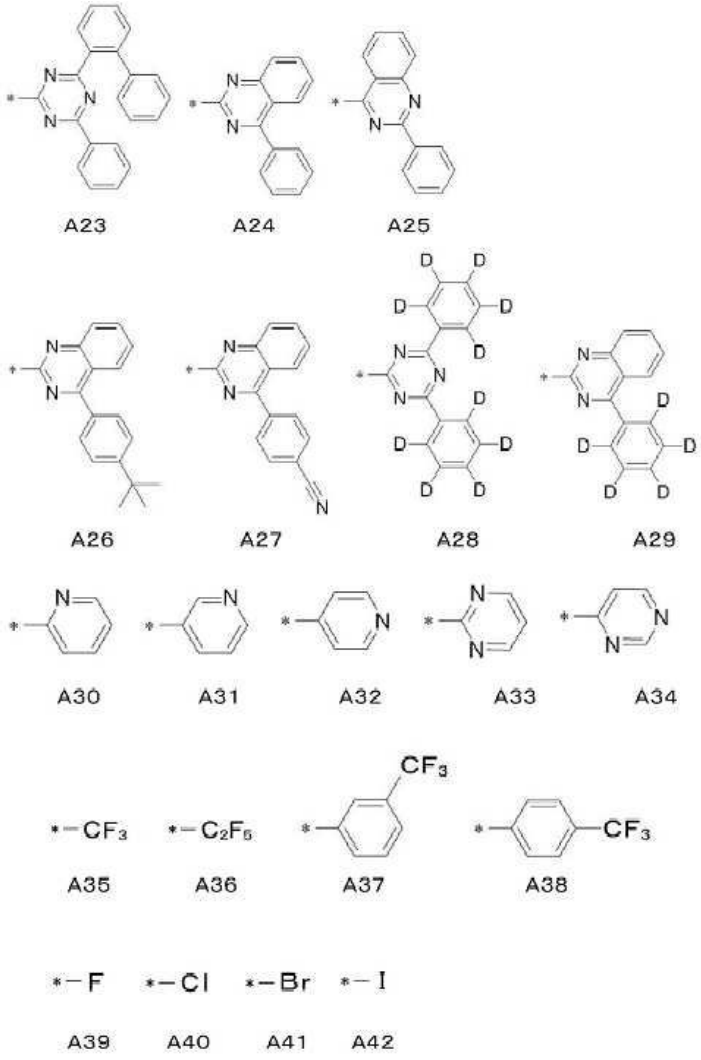






[0288]

[0289] [화학식 26-2]

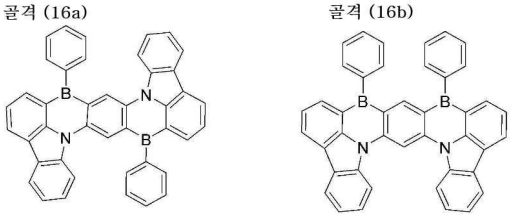


[0290]

[0291] 또한, X^1이 질소 원자이며, R^7과 R^8이 질소 원자를 개재하여 결합하여 6원환을 형성하고, R^{21}과 R^{22}가 질소 원자를 개재하여 결합하여 6원환을 형성하며, R^{17}과 R^{18}이 서로 결합하여 단결합을 형성하고 있을 때, R^1~R^6 중 적어도 하나는 치환 혹은 무치환의 아릴기이거나, R^1과 R^2, R^2와 R^3, R^3과 R^4, R^4와 R^5, R^5와 R^6 중 어느 하나가 서로 결합하여 방향환(축합되어 있어도 되는 치환 혹은 무치환의 벤젠환) 또는 복소 방향환(바람직하게는 축합되어 있어도 되는 치환 혹은 무치환의 벤조퓨란의 퓨란환, 축합되어 있어도 되는 치환 혹은 무치환의 벤조싸이오펜의 싸이오펜환)을 형성하고 있다.

[0292] 일반식 (16)의 X^1이 질소 원자일 때, 본 발명의 화합물은 하기의 골격 (16a)를 갖는다. 일반식 (16)의 X^2가 질소 원자일 때, 본 발명의 화합물은 하기의 골격 (16b)를 갖는다.

[0293] [화학식 27]



[0294]

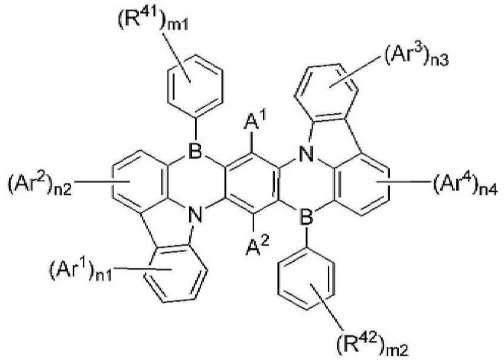
[0295] 골격 (16a) 및 (16b)에 있어서의 각 수소 원자는, 중수소 원자 또는 치환기로 치환되어 있어도 된다. 또, 인접하는 수소 원자와 함께 연결기로 치환되어 환상 구조를 형성하고 있어도 된다. 상세에 대해서는, 일반식 (16)의

대응하는 R^{1}~R^{26}, A^{1}, A^{2}의 기재를 참조할 수 있다. 골격 (16a) 및 (16b)에 있어서 붕소 원자에 결합되어 있는 페닐기가 모두 메시틸기, 2,6-다이아이소프로필페닐기 또는 2,4,6-트라이아이소프로필페닐기로 치환되어 있는 화합물 등을 예시할 수 있다. 본 발명의 일 양태에서는, 골격 (16a) 및 (16b)에 있어서의 각 수소 원자는, 인접하는 수소 원자와 함께 연결기로 치환되어 환상 구조를 형성하고 있지 않다.

[0296] 골격 (16a)를 갖는 화합물의 바람직한 일군으로서, 하기 일반식 (16a)로 나타나는 화합물을 예시할 수 있다.

[0297] 일반식 (16a)

[0298] [화학식 28]

[0299] 

[0300] 일반식 (16a)에 있어서, Ar^{1}~Ar^{4}는 각각 독립적으로 치환 혹은 무치환의 아릴기, 또는 치환 혹은 무치환의 헤테로아릴기를 나타낸다. R^{41} 및 R^{42}는, 각각 독립적으로 치환 혹은 무치환의 알킬기를 나타낸다. m1 및 m2는 각각 독립적으로 0~5의 정수를 나타내고, n1 및 n3은 각각 독립적으로 0~4의 정수를 나타내며, n2 및 n4는 각각 독립적으로 0~3의 정수를 나타낸다. A^{1}, A^{2}는, 각각 독립적으로 수소 원자, 중수소 원자 또는 치환기를 나타낸다.

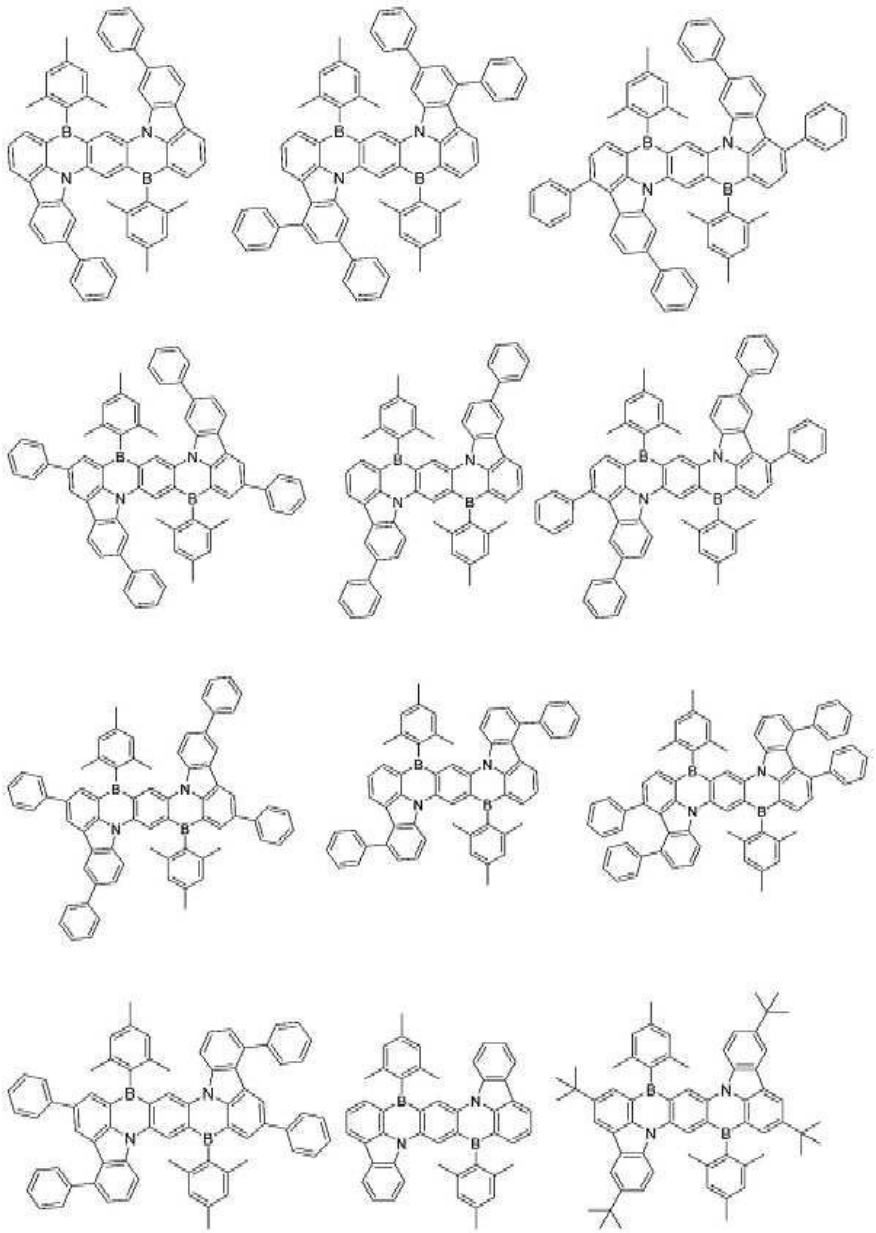
[0301] 본 발명의 일 양태에서는, n1~n4는 각각 독립적으로 0~2의 정수를 나타낸다. 본 발명의 바람직한 일 양태에서는, n1~n4 중 적어도 하나는 1 이상이고, 바람직하게는 n1 및 n2 중 적어도 하나는 1 이상이며, n3 및 n4 중 적어도 하나는 1 이상이다. 본 발명의 일 양태에서는, n1 및 n3이 각각 독립적으로 1 또는 2이며, n2 및 n4가 0이다. 본 발명의 일 양태에서는 n2 및 n4가 각각 독립적으로 1 또는 2이며, n1 및 n3이 0이다. 본 발명의 일 양태에서는, n1~n4는 각각 독립적으로 1 또는 2이다. 본 발명의 일 양태에서는, n1과 n3은 동일하고, n2와 n4는 동일하다. 본 발명의 일 양태에서는, n1과 n3은 1이며, n2와 n4는 0이다. 본 발명의 일 양태에서는, n1과 n3은 0이며, n2와 n4는 1이다. 본 발명의 일 양태에서는, n1~n4는 모두 1이다. Ar^{1}~Ar^{4}의 결합 위치는, 카바졸환의 3, 6위 중 적어도 하나여도 되고, 2, 7위 중 적어도 하나여도 되며, 1, 8위 중 적어도 하나여도 되고, 4, 5위 중 적어도 하나여도 된다. Ar^{1}~Ar^{4}의 결합 위치는, 카바졸환의 3, 6위의 양방이어도 되고, 2, 7위의 양방이어도 되며, 1, 8위의 양방이어도 되고, 4, 5위의 양방이어도 된다. 예를 들면, 3, 6위 중 적어도 하나를 바람직하게 선택할 수 있고, 혹은, 3, 6위의 양방을 더 바람직하게 선택할 수 있다. 본 발명의 바람직한 일 양태에서는, Ar^{1}~Ar^{4}는 모두 동일한 기이다. 본 발명의 바람직한 일 양태에서는, Ar^{1}~Ar^{4}는 각각 독립적으로 치환 혹은 무치환의 아릴기이며, 보다 바람직하게는 치환 혹은 무치환의 페닐기 또는 나프틸기이고, 더 바람직하게는 치환 혹은 무치환의 페닐기이다. 치환기로서는 후술하는 치환기군 A~E 중 어느 하나로부터 선택되는 기를 들 수 있지만, 무치환의 페닐기도 바람직하다. Ar^{1}~Ar^{4}의 바람직한 구체예로서, 페닐기, o-바이페닐기, m-바이페닐기, p-바이페닐기, 터페닐기를 들 수 있다.

[0302] 본 발명의 일 양태에서는, m1 및 m2는 각각 독립적으로 0이다. 본 발명의 일 양태에서는, m1 및 m2는 각각 독립적으로 1~5 중 어느 하나의 정수이다. 본 발명의 일 양태에서는, m1과 m2는 동일하다. 본 발명의 일 양태에서는, R^{41} 및 R^{42}는 탄소수 1~6의 알킬기이며, 예를 들면 탄소수 1~3의 알킬기 중에서 선택하거나, 메틸기를 선택하거나 할 수 있다. 알킬기의 치환 위치는, 붕소 원자에 결합되어 있는 탄소 원자를 1위로 하여, 2위만, 3위만, 4위만, 3위와 5위, 2위와 4위, 2위와 6위, 2위와 4위와 6위 등을 예시할 수 있으며, 적어도 2위인 것이 바람직하고, 적어도 2위와 6위인 것이 보다 바람직하다.

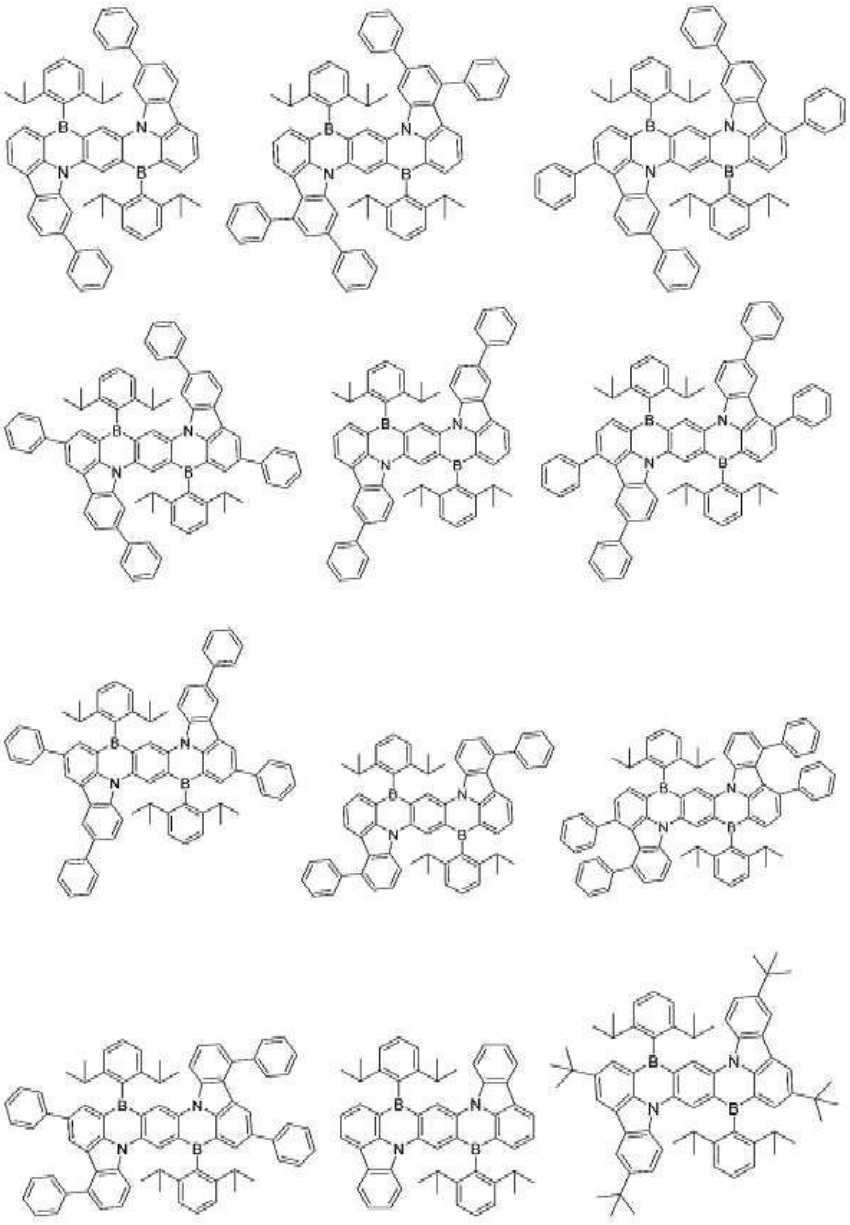
[0303] A^1 및 A^2의 설명과 바람직한 범위에 대해서는, 일반식 (16)의 대응하는 기재를 참조할 수 있다.

[0304] 이하에 있어서, 일반식 (16a)로 나타나는 화합물의 구체예를 든다. 본 발명에서 이용할 수 있는 일반식 (16a)의 화합물은, 하기의 구체예에 의하여 한정적으로 해석되는 경우는 없다.

[0305] [화학식 29-1]

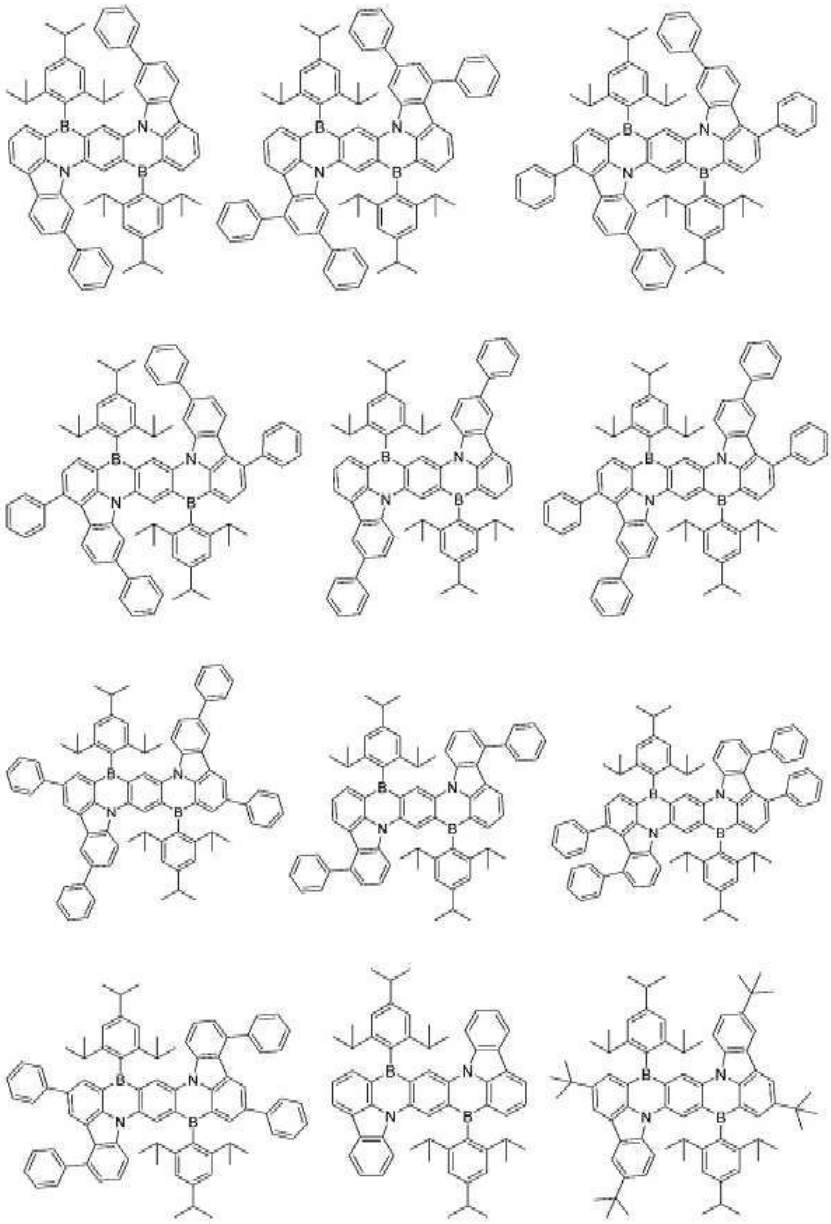
[0306] 

[0307] [화학식 29-2]



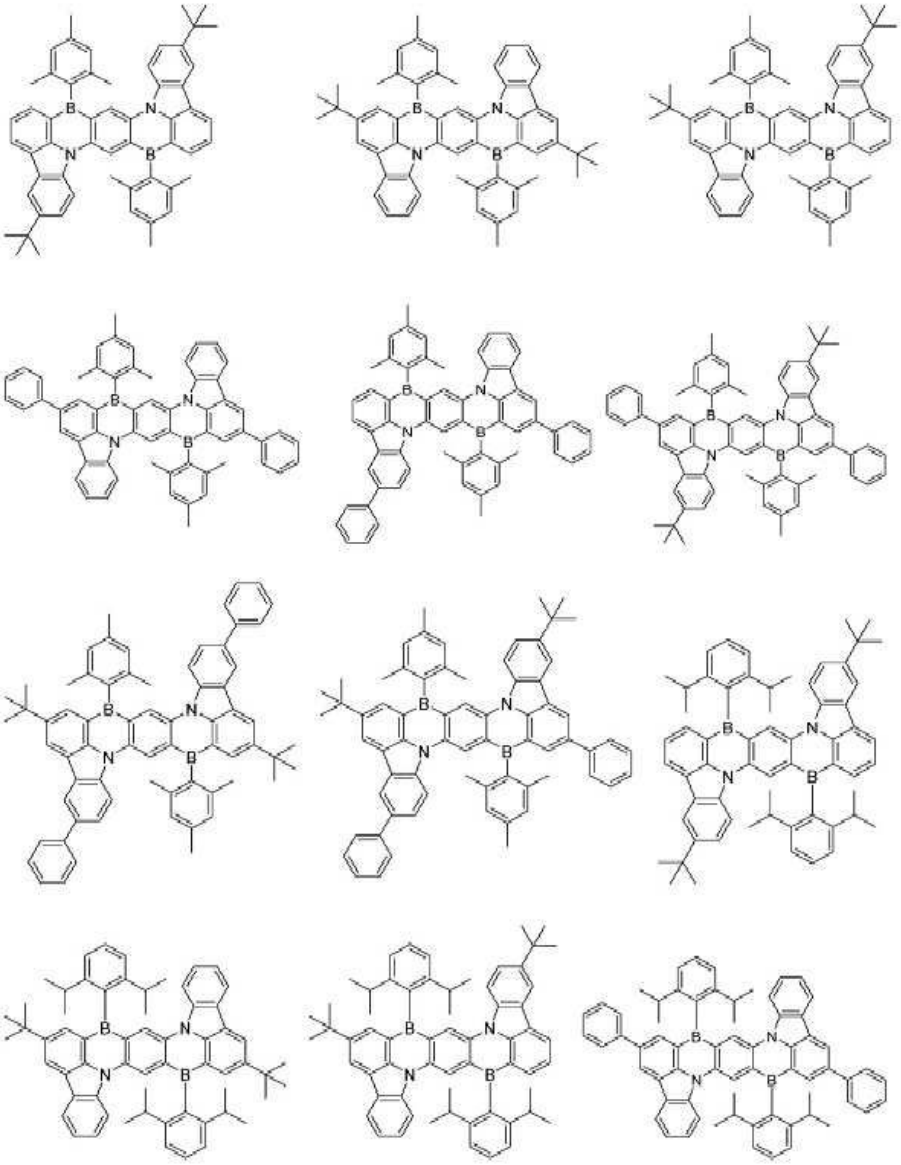
[0308]

[0309] [화학식 29-3]



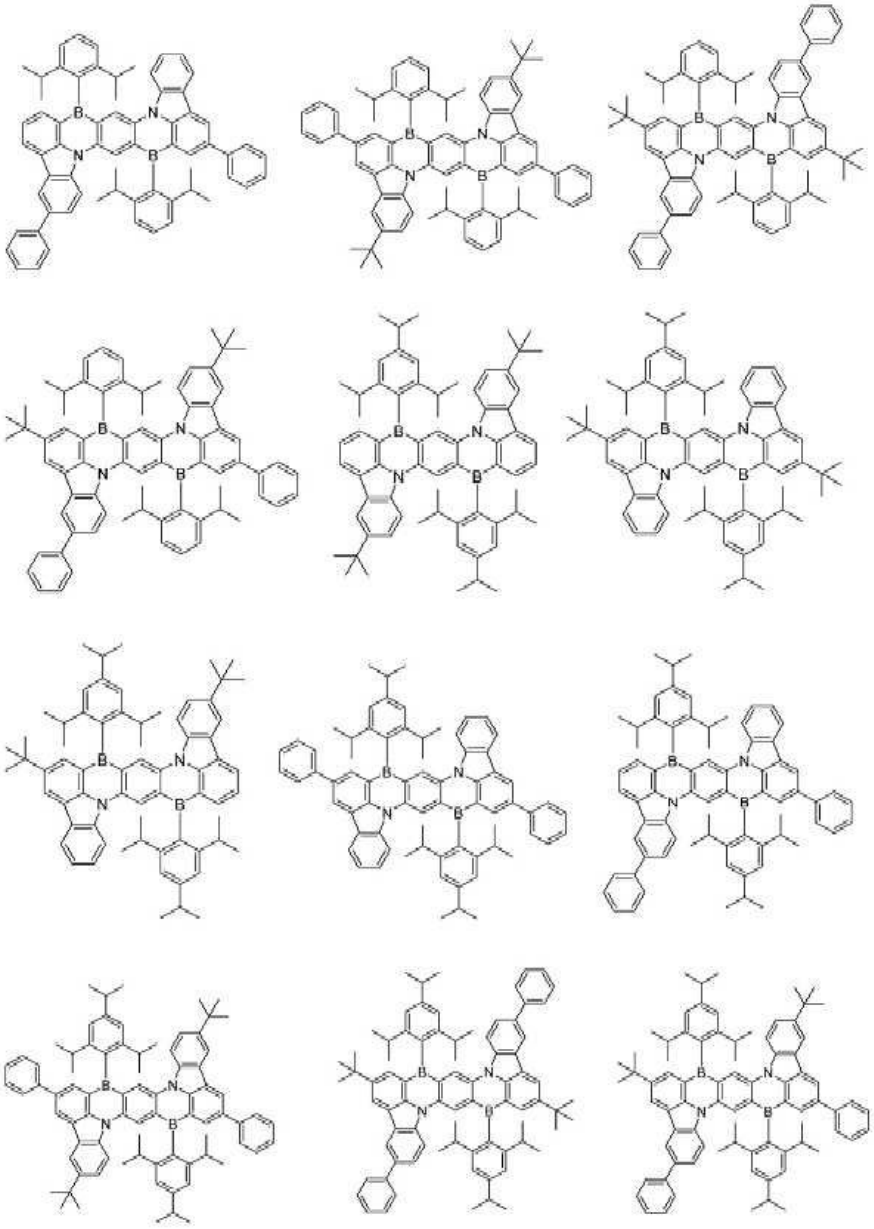
[0310]

[0311] [화학식 29-4]



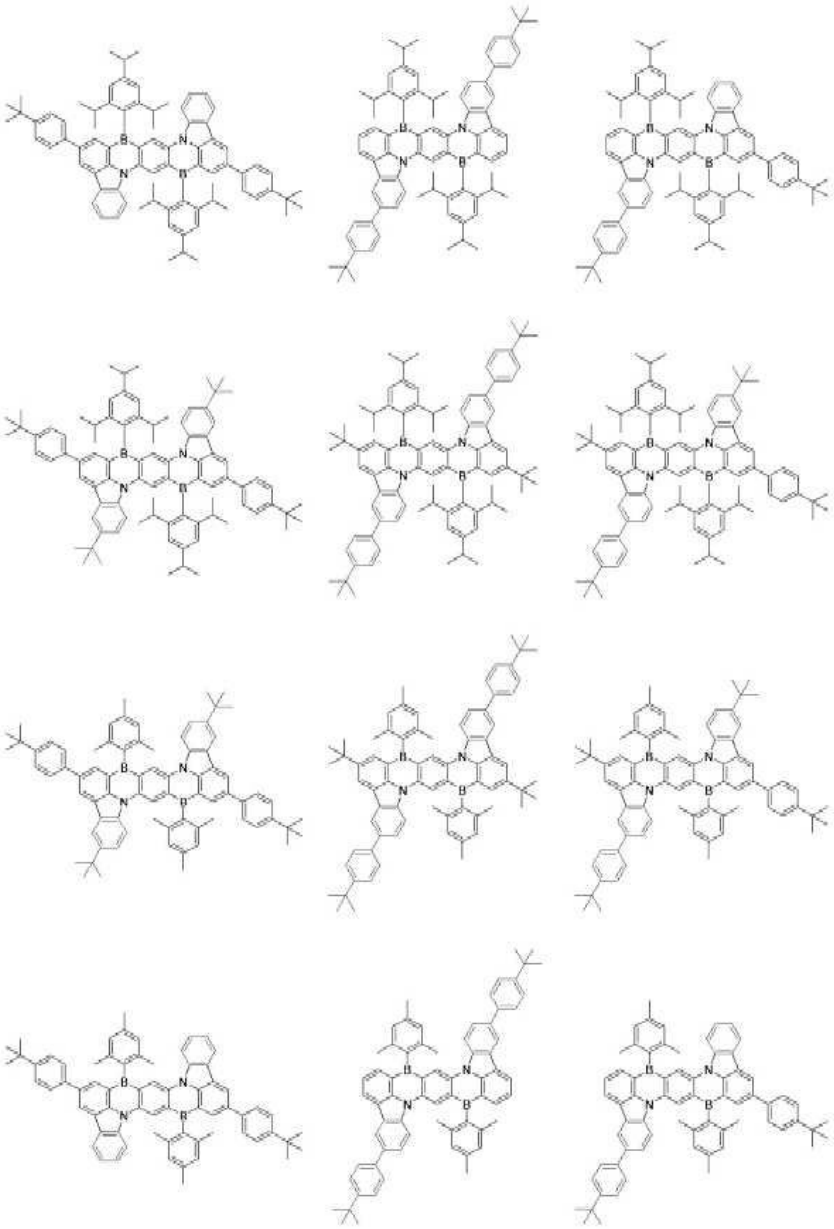
[0312]

[0313] [화학식 29-5]



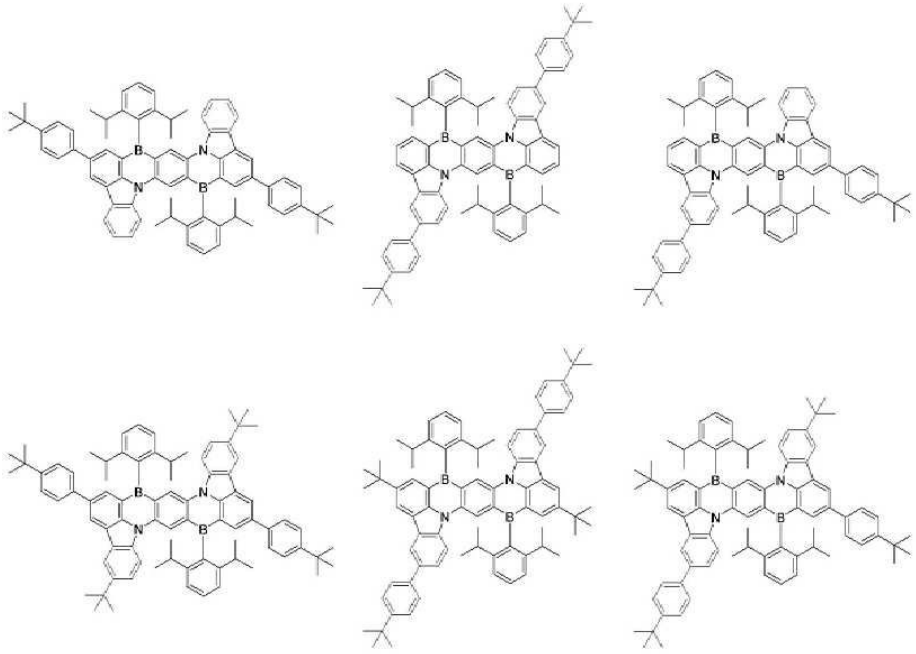
[0314]

[0315] [화학식 29-6]



[0316]

[0317] [화학식 29-7]

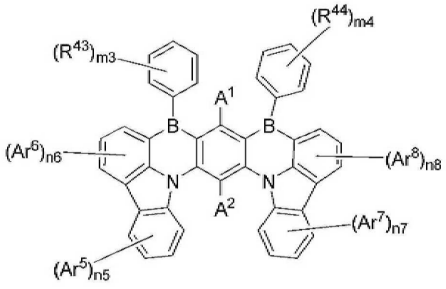


[0318]

[0319] 골격 (16b)를 갖는 화합물의 바람직한 일군으로서, 하기 일반식 (16b)로 나타나는 화합물을 예시할 수 있다.

[0320] 일반식 (16b)

[0321] [화학식 30]

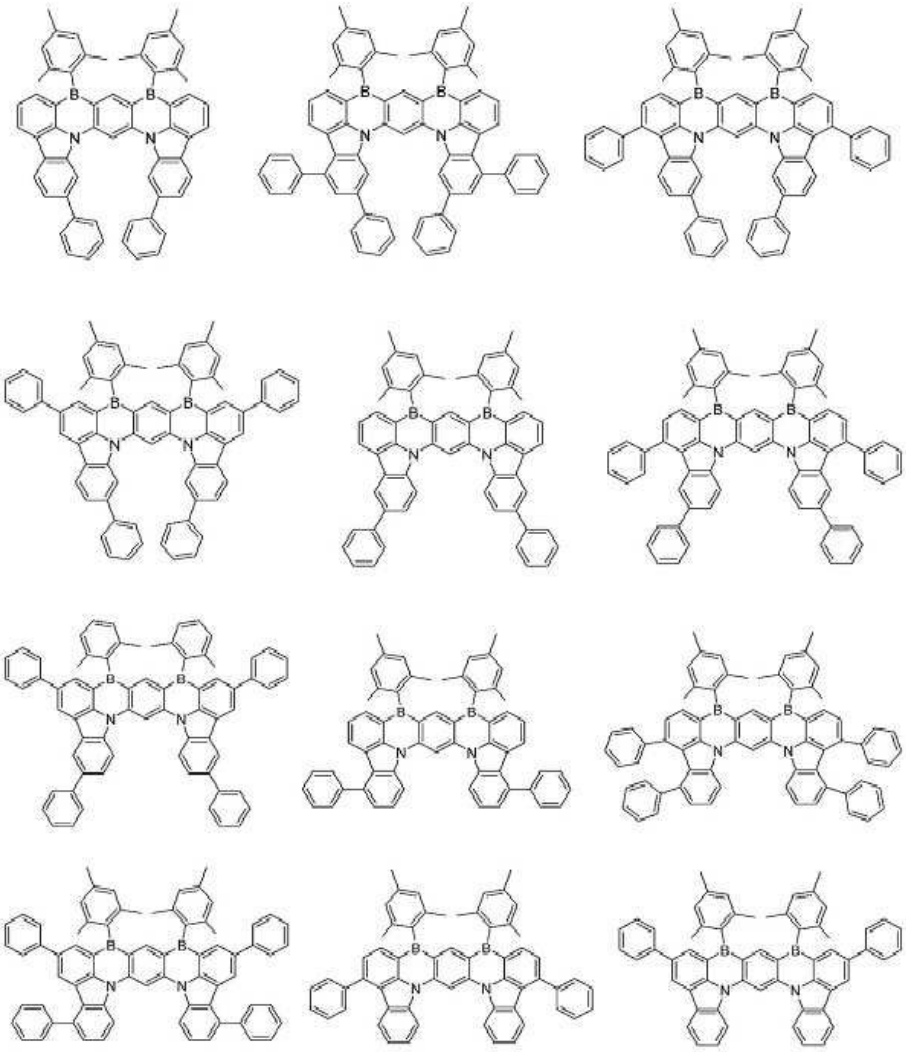


[0322]

[0323] 일반식 (16b)에 있어서, Ar^5~Ar^8은, 각각 독립적으로 치환 혹은 무치환의 아릴기, 또는 치환 혹은 무치환의 헤테로아릴기를 나타낸다. R^{43} 및 R^{44}는, 각각 독립적으로 치환 혹은 무치환의 알킬기를 나타낸다. m3 및 m4는 각각 독립적으로 0~5의 정수를 나타내고, n6 및 n8은 각각 독립적으로 0~3의 정수를 나타내며, n5 및 n7은 각각 독립적으로 0~4의 정수를 나타낸다. A^1, A^2는, 각각 독립적으로 수소 원자, 중수소 원자 또는 치환기를 나타낸다. Ar^5~Ar^8, R^{43} 및 R^{44}, m3 및 m4, n5~n8, A^1, A^2의 상세에 대해서는, 일반식 (16a)의 Ar^1~Ar^4, R^{41} 및 R^{42}, m1 및 m2, n1~n4, A^1, A^2의 기재를 참조할 수 있다.

[0324] 이하에 있어서, 일반식 (16b)로 나타나는 화합물의 구체예를 든다. 본 발명에서 이용할 수 있는 일반식 (16b)의 화합물은, 하기의 구체예에 의하여 한정적으로 해석되는 경우는 없다.

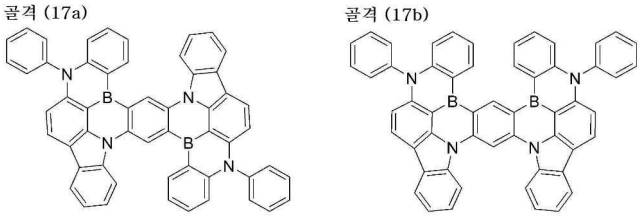
[0325] [화학식 31]



[0326]

[0327] 일반식 (16)의 R^7과 R^8이 서로 결합하여 N-Ph를 형성할 때, 본 발명의 화합물은 X^1이 질소 원자일 때에 예를 들면 하기의 골격 (17a)를 갖고, X^2가 질소 원자일 때에 예를 들면 하기의 골격 (17b)를 갖는다. Ph는 페닐기이다.

[0328] [화학식 32]



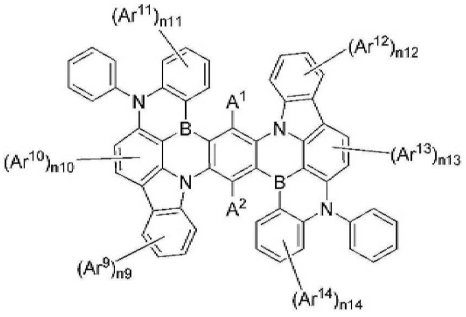
[0329]

[0330] 골격 (17a) 및 (17b)에 있어서의 각 수소 원자는, 중수소 원자 또는 치환기로 치환되어 있어도 된다. 또, 인접하는 수소 원자와 함께 연결기로 치환되어 환상 구조를 형성하고 있어도 된다. 상세에 대해서는, 일반식 (16)의 대응하는 R^1~R^{26}, A^1, A^2의 기재를 참조할 수 있다. 골격 (17a)에 포함되어 있는 카바졸 부분 구조를 구성하는 벤젠환의 적어도 하나의 수소 원자는, 치환 혹은 무치환의 아릴기로 치환되어 있다. 본 발명의 일 양태에서는, 골격 (17a) 및 (17b)에 있어서의 각 수소 원자는, 인접하는 수소 원자와 함께 연결기로 치환되어 환상 구조를 형성하고 있지 않다.

[0331] 골격 (17a)를 갖는 화합물의 바람직한 일군으로서, 하기 일반식 (17a)로 나타나는 화합물을 예시할 수 있다.

[0332] 일반식 (17a)

[0333] [화학식 33]

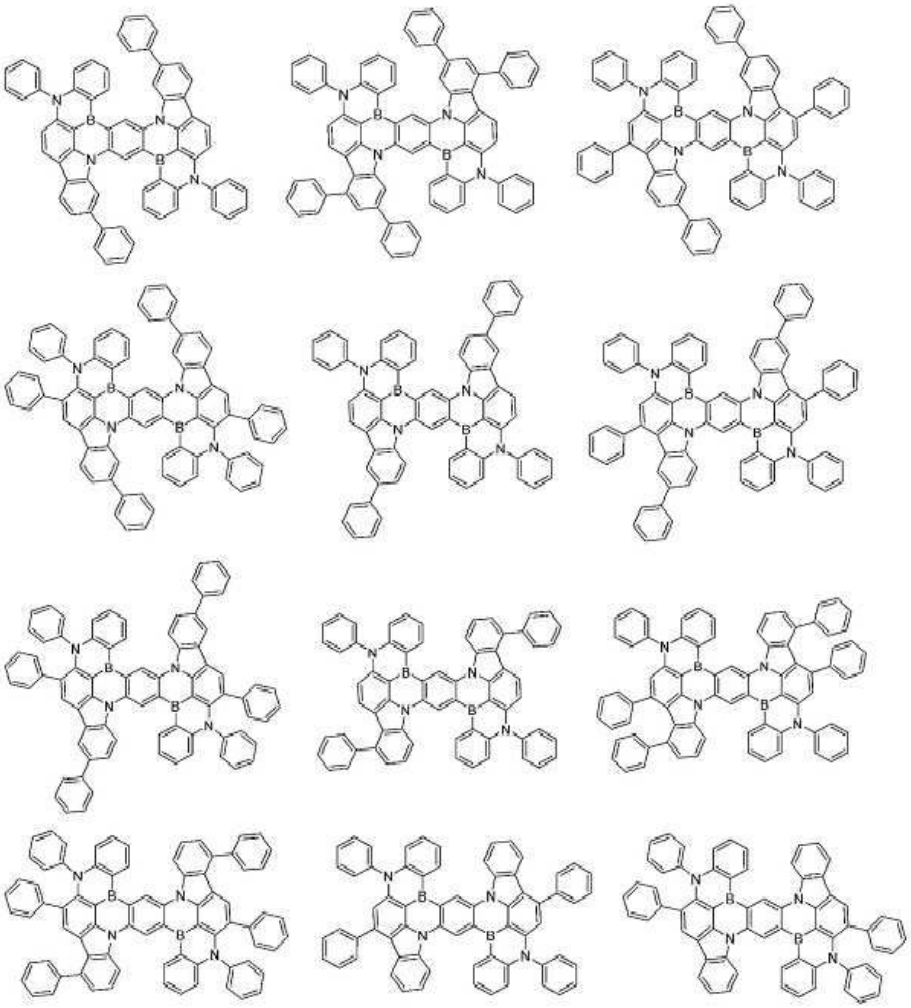
[0334] 

[0335] 일반식 (17a)에 있어서, Ar^{9}~Ar^{14}는 각각 독립적으로 치환 혹은 무치환의 아릴기, 또는 치환 혹은 무치환의 헤테로아릴기를 나타낸다. n9, n11, n12, n14는 각각 독립적으로 0~4의 정수를 나타내고, n10 및 n13은 각각 독립적으로 0~2의 정수를 나타낸다. 단, n9, n10, n12, n13 중 적어도 하나는 1 이상이다. A^{1}, A^{2}는, 각각 독립적으로 수소 원자, 중수소 원자 또는 치환기를 나타낸다.

[0336] 본 발명의 일 양태에서는, n9~n14는 각각 독립적으로 0~2의 정수를 나타낸다. 본 발명의 일 양태에서는, n9~n14 중 적어도 하나는 1 이상이며, 예를 들면, n9 및 n12를 1 이상으로 하거나, n10 및 n13을 1 이상으로 하거나 할 수 있다. 본 발명의 바람직한 일 양태에서는, n9, n10, n12, n13 중 적어도 하나는 1 이상이다. 본 발명의 일 양태에서는, n9 및 n12가 각각 독립적으로 1 또는 2이며, n10, n11, n13, n14가 0이다. 본 발명의 일 양태에서는 n10 및 n13이 각각 독립적으로 1 또는 2이며, n9, n11, n12, n14가 0이다. 본 발명의 일 양태에서는, n9 및 n12가 각각 독립적으로 1 또는 2이고, n10 및 n13이 각각 독립적으로 1 또는 2이며, n11 및 n14가 0이다. 본 발명의 일 양태에서는, n9~n14는 모두 1이다. Ar^{9}~Ar^{14}의 결합 위치는, 카바졸환의 3, 6위로 하거나, 그 외의 위치로 하거나 할 수 있다. 본 발명의 바람직한 일 양태에서는, Ar^{9}~Ar^{14}는 모두 동일한 기이다. Ar^{9}~Ar^{14}의 바람직한 기에 대해서는, Ar^{1}~Ar^{4}의 대응하는 기재를 참조할 수 있다. A^{1} 및 A^{2}의 설명과 바람직한 범위에 대해서는, 일반식 (16)의 대응하는 기재를 참조할 수 있다.

[0337] 이하에 있어서, 일반식 (17a)로 나타나는 화합물의 구체예를 든다. 본 발명에서 이용할 수 있는 일반식 (17a)의 화합물은, 하기의 구체예에 의하여 한정적으로 해석되는 경우는 없다.

[0338] [화학식 34]

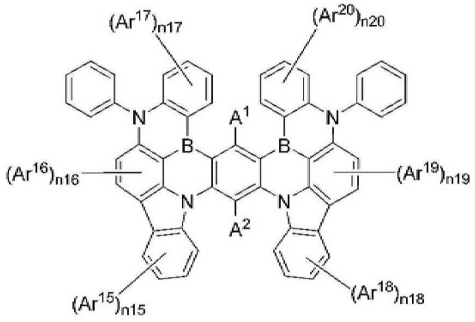


[0339]

[0340] 골격 (17b)를 갖는 화합물의 바람직한 일군으로서, 하기 일반식 (17b)로 나타나는 화합물을 예시할 수 있다.

[0341] 일반식 (17b)

[0342] [화학식 35]



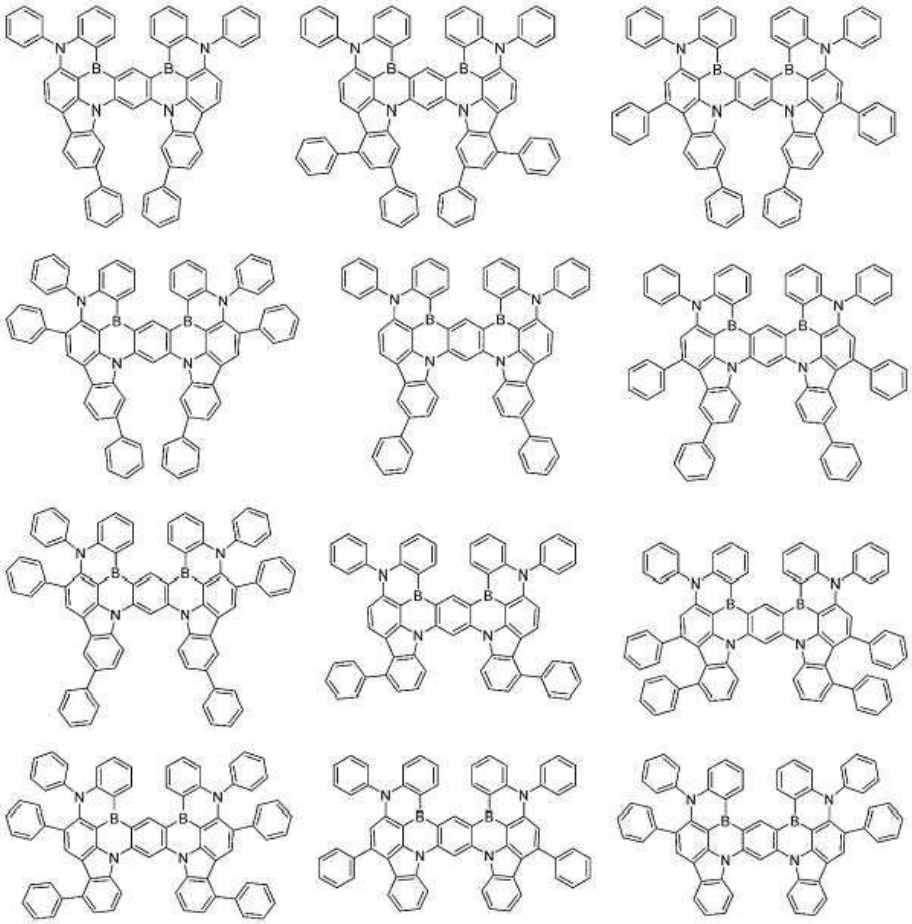
[0343]

[0344] 일반식 (17b)에 있어서, Ar^{15}~Ar^{20}은 각각 독립적으로 치환 혹은 무치환의 아릴기, 또는 치환 혹은 무치환의 헤테로아릴기를 나타낸다. n15, n17, n18, n20은 각각 독립적으로 0~4의 정수를 나타내고, n16 및 n19는 각각 독립적으로 0~2의 정수를 나타낸다. A^1, A^2는, 각각 독립적으로 수소 원자, 중수소 원자 또는 치환기를 나타낸다. Ar^{15}~Ar^{20}, n15~n20, A^1, A^2의 상세에 대해서는, 일반식 (17a)의 Ar^9~Ar^{14}, n9~n14, A^1, A^2의 기재를 순서대로 참조할 수 있다.

[0345] 이하에 있어서, 일반식 (17b)로 나타나는 화합물의 구체예를 든다. 본 발명에서 이용할 수 있는 일반식 (17b)의

화합물은, 하기의 구체예에 의하여 한정적으로 해석되는 경우는 없다.

[0346] [화학식 36]

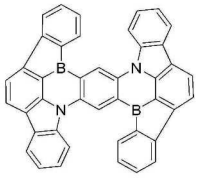


[0347]

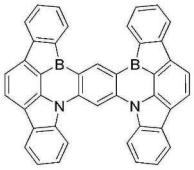
[0348] 일반식 (16)의 R^7과 R^8이 서로 결합하여 단결합을 형성할 때, 본 발명의 화합물은 X^1이 질소 원자일 때에 예를 들면 하기의 골격 (18a)를 갖고, X^2가 질소 원자일 때에 예를 들면 하기의 골격 (18b)를 갖는다.

[0349] [화학식 37]

골격 (18a)



골격 (18b)



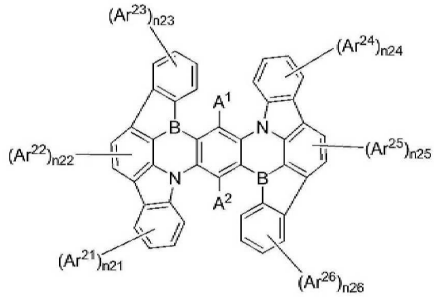
[0350]

[0351] 골격 (18a) 및 (18b)에 있어서의 각 수소 원자는, 중수소 원자 또는 치환기로 치환되어 있어도 된다. 또, 인접하는 수소 원자와 함께 연결기로 치환되어 환상 구조를 형성하고 있어도 된다. 상세에 대해서는, 일반식 (16)의 대응하는 R^1~R^{26}, A^1, A^2의 기재를 참조할 수 있다. 본 발명의 일 양태에서는, 골격 (18a) 및 (18b)에 있어서의 각 수소 원자는, 인접하는 수소 원자와 함께 연결기로 치환되어 환상 구조를 형성하고 있지 않다.

[0352] 골격 (18a)를 갖는 화합물의 바람직한 일군으로서, 하기 일반식 (18a)로 나타나는 화합물을 예시할 수 있다.

[0353] 일반식 (18a)

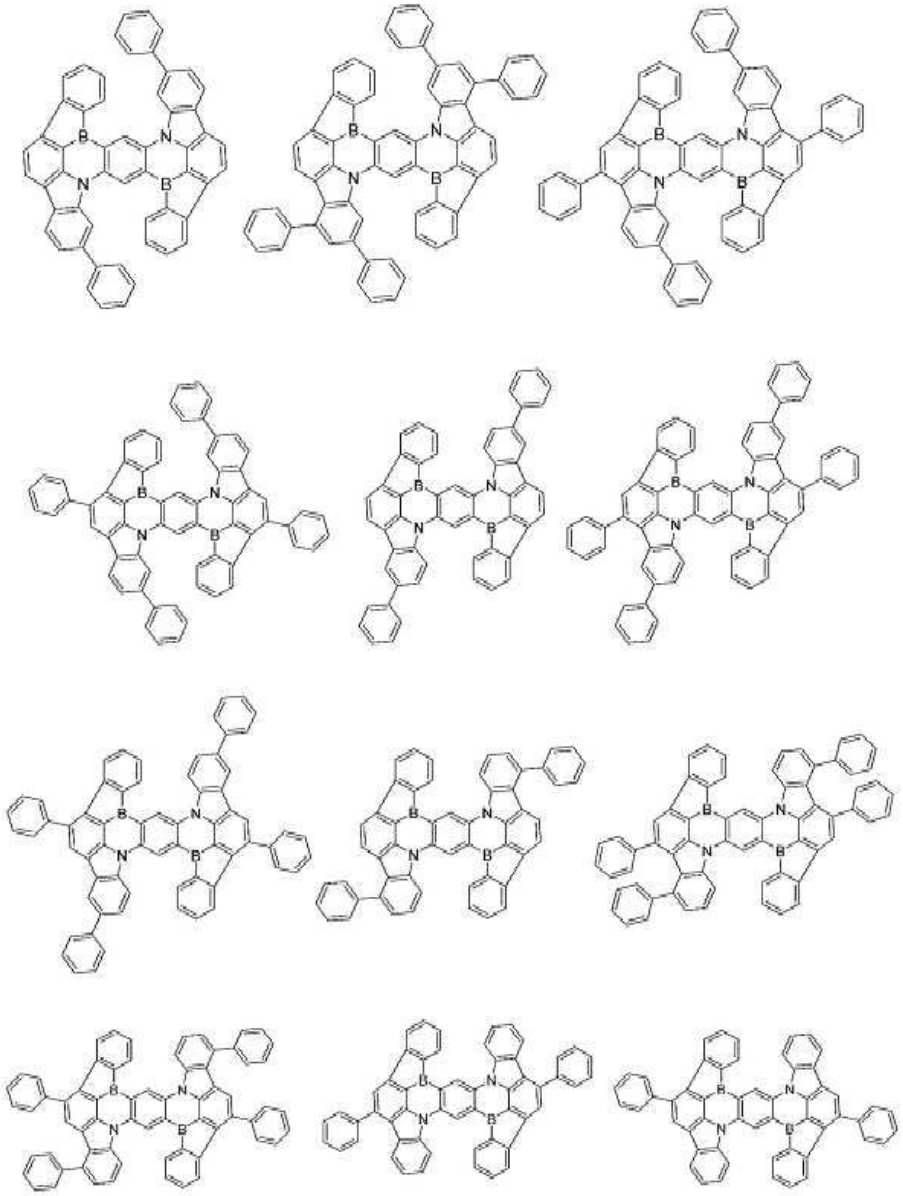
[0354] [화학식 38]

[0355] 

[0356] 일반식 (18a)에 있어서, Ar^{21}~Ar^{26}은 각각 독립적으로 치환 혹은 무치환의 아릴기, 또는 치환 혹은 무치환의 헤테로아릴기를 나타낸다. n21, n23, n24, n26은 각각 독립적으로 0~4의 정수를 나타내고, n22 및 n25는 각각 독립적으로 0~2의 정수를 나타낸다. A^1, A^2는, 각각 독립적으로 수소 원자, 중수소 원자 또는 치환기를 나타낸다. Ar^{21}~Ar^{25}, n21~n25의 상세에 대해서는, 일반식 (17a)의 Ar^9~Ar^{14}, n9~n14, A^1, A^2의 기재를 참조할 수 있다.

[0357] 이하에 있어서, 일반식 (18a)로 나타나는 화합물의 구체예를 든다. 본 발명에서 이용할 수 있는 일반식 (18a)의 화합물은, 하기의 구체예에 의하여 한정적으로 해석되는 경우는 없다.

[0358] [화학식 39]

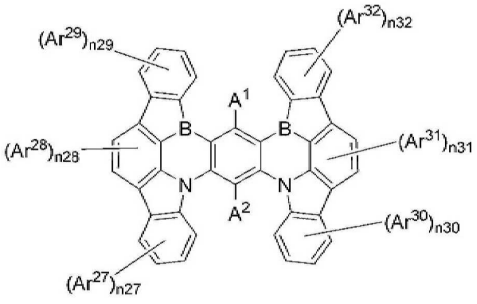


[0359]

[0360] 골격 (18b)를 갖는 화합물의 바람직한 일군으로서, 하기 일반식 (18b)로 나타나는 화합물을 예시할 수 있다.

[0361] 일반식 (18b)

[0362] [화학식 40]



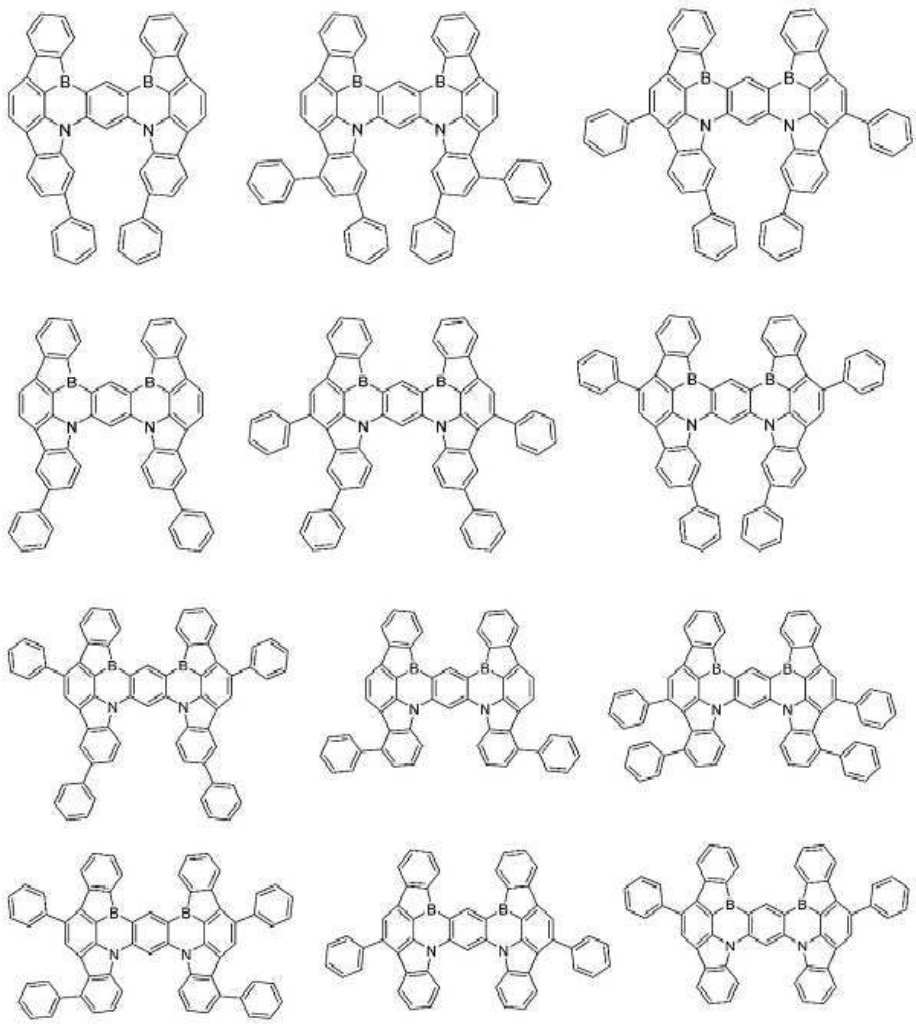
[0363]

[0364] 일반식 (18b)에 있어서, Ar^{27}~Ar^{32}는 각각 독립적으로 치환 혹은 무치환의 아릴기, 또는 치환 혹은 무치환의 헤테로아릴기를 나타낸다. n27, n29, n30, n32는 각각 독립적으로 0~4의 정수를 나타내고, n28 및 n31은 각각 독

립적으로 0~2의 정수를 나타낸다. A^1, A^2는, 각각 독립적으로 수소 원자, 중수소 원자 또는 치환기를 나타낸다. Ar^{27}~Ar^{32}, n27~n32, A^1, A^2의 상세에 대해서는, 일반식 (17b)의 Ar^{15}~Ar^{20}, n15~n20, A^1, A^2의 기재를 순서대로 참조할 수 있다.

[0365] 이하에 있어서, 일반식 (18b)로 나타나는 화합물의 구체예를 든다. 본 발명에서 이용할 수 있는 일반식 (18b)의 화합물은, 하기의 구체예에 의하여 한정적으로 해석되는 경우는 없다.

[0366] [화학식 41]

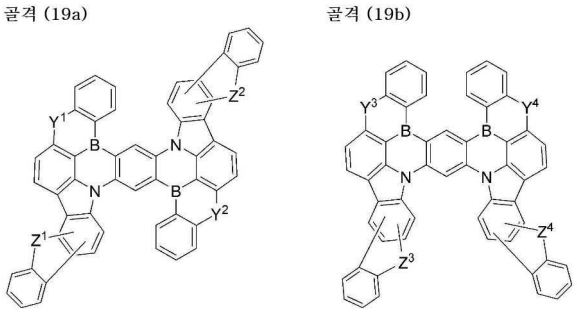


[0367]

[0368] 본 발명의 바람직한 일 양태에서는, 일반식 (16)에 존재하는 카바졸 부분 구조를 구성하는 2개의 벤젠환에 다른 환이 축합되어 있는 화합물을 선택한다. 그중에서도, 벤퓨란환이 축합된 화합물, 벤조싸이오펜환이 축합된 화합물, 벤젠환이 축합된 화합물을 특히 바람직하게 선택할 수 있다. 이하에 있어서, 이들 환이 축합된 화합물에 대하여 구체예를 들면서 설명한다.

[0369] 일반식 (16)에 존재하는 카바졸 부분 구조를 구성하는 2개의 벤젠환 중 붕소 원자가 직접 결합되어 있지 않은 벤젠환에, 벤조퓨란환 또는 벤조싸이오펜환이 축합된 화합물을 바람직하게 들 수 있다. 그와 같은 화합물의 예로서, 하기의 골격 (19a)를 갖는 화합물과, 하기의 골격 (19b)를 갖는 화합물을 예시할 수 있다.

[0370] [화학식 42]

[0371] 

[0372] 골격 (19a) 및 (19b)에 있어서, Y^1~Y^4는, 각각 독립적으로 수소 원자 2개, 단결합 또는 $N(R^{27})$을 나타낸다. 여기에서 말하는 수소 원자 2개는, 붕소 원자에 결합되어 있는 2개의 벤젠환이 서로 연결되어 있지 않은 상태를 나타내고 있다. Y^1과 Y^2는 동일하고, Y^3과 Y^4는 동일한 것이 바람직하지만, 각각 상이해도 된다. 본 발명의 일 양태에서는, Y^1~Y^4는 단결합이다. 본 발명의 일 양태에서는, Y^1~Y^4는 $N(R^{27})$이다. R^{27}은, 수소 원자, 중수소 원자 또는 치환기를 나타낸다.

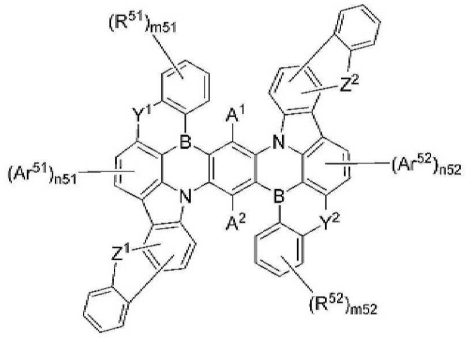
[0373] Z^1~Z^4는, 각각 독립적으로 산소 원자 또는 황 원자를 나타낸다. Z^1과 Z^2는 동일하고, Z^3과 Z^4는 동일한 것이 바람직하지만, 각각 상이해도 된다. 본 발명의 일 양태에서는 Z^1~Z^4는 산소 원자이다. 이때, 벤조퓨란의 퓨란환이, (19a) 및 (19b)에 있어서의 카바졸 부분 구조를 구성하는 벤젠환에 축합되어 있다. 축합되어 있는 퓨란환의 방향은 제한되지 않는다. 본 발명의 일 양태에서는, Z^1~Z^4는 황 원자이다. 이때, 벤조싸이오펜의 싸이오펜환이, (19a) 및 (19b)에 있어서의 카바졸 부분 구조를 구성하는 벤젠환에 축합되어 있다. 축합되어 있는 싸이오펜환의 방향은 제한되지 않는다.

[0374] 골격 (19a) 및 (19b)에 있어서의 각 수소 원자는, 중수소 원자 또는 치환기로 치환되어 있어도 된다. 또, 인접하는 수소 원자와 함께 연결기로 치환되어 환상 구조를 형성하고 있어도 된다. 상세에 대해서는, 일반식 (16)의 대응하는 R^1~R^{26}, A^1, A^2의 기재를 참조할 수 있다. 본 발명의 일 양태에서는, 골격 (19a) 및 (19b)에 있어서의 각 수소 원자는, 인접하는 수소 원자와 함께 연결기로 치환되어 환상 구조를 형성하고 있지 않다.

[0375] 골격 (19a)를 갖는 화합물의 바람직한 일군으로서, 하기 일반식 (19a)로 나타나는 화합물을 예시할 수 있다. 구체예 중의 X는 산소 원자 또는 황 원자이며, X가 산소 원자인 화합물과 X가 황 원자인 화합물이 각각 개시되어 있는 것으로 한다. 이후의 다른 일반식으로 나타나는 화합물의 구체예 중의 X도 동일한 의미를 나타낸다.

[0376] 일반식 (19a)

[0377] [화학식 43]

[0378] 

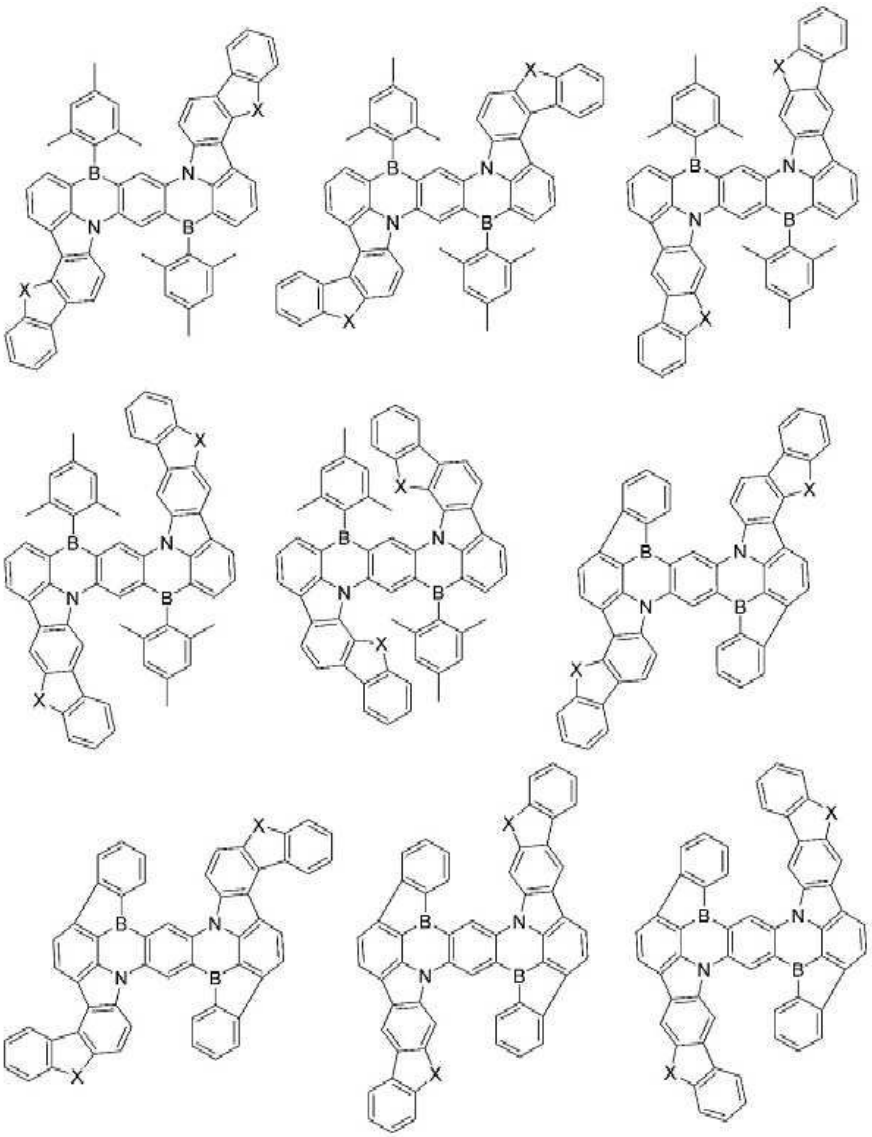
[0379] 일반식 (19a)에 있어서, Ar^{51} 및 Ar^{52}는 각각 독립적으로 치환 혹은 무치환의 아릴기, 또는 치환 혹은 무치환의 헤테로아릴기를 나타낸다. R^{51} 및 R^{52}는 각각 독립적으로 치환 혹은 무치환의 알킬기를 나타낸다. m51 및 m52는 각각 독립적으로 0~4의 정수를 나타낸다. n51 및 n52는 각각 독립적으로 0~2의 정수를 나타낸다. Y^1~Y^4는, 각각 독립적으로 수소 원자 2개, 단결합 또는 $N(R^{27})$을 나타낸다. R^{27}은, 수소 원자, 중수소 원자 또는 치환기를 나타

낸다. Z^1~Z^4는, 각각 독립적으로 산소 원자 또는 황 원자를 나타낸다. A^1, A^2는, 각각 독립적으로 수소 원자, 중수소 원자 또는 치환기를 나타낸다.

[0380] 본 발명의 일 양태에서는, n51과 n52는 동일한 수이다. 예를 들면, n51과 n52는 0이어도 되고, n51과 n52는 1이어도 된다. 본 발명의 일 양태에서는, m51과 m52는 동일한 수이다. 본 발명의 일 양태에서는, m51과 m52는 0~3의 정수이다. 예를 들면, m51과 m52는 0이어도 되고, m51과 m52는 1이어도 되며, m51과 m52는 2여도 되고, m51과 m52는 3이어도 된다. Ar^{51}, Ar^{52}, R^{51}, R^{52}, A^1, A^2의 바람직한 기에 대해서는, 일반식 (16a)의 Ar^1~Ar^4, R^{41}~R^{42}, A^1, A^2의 대응하는 기재를 참조할 수 있다.

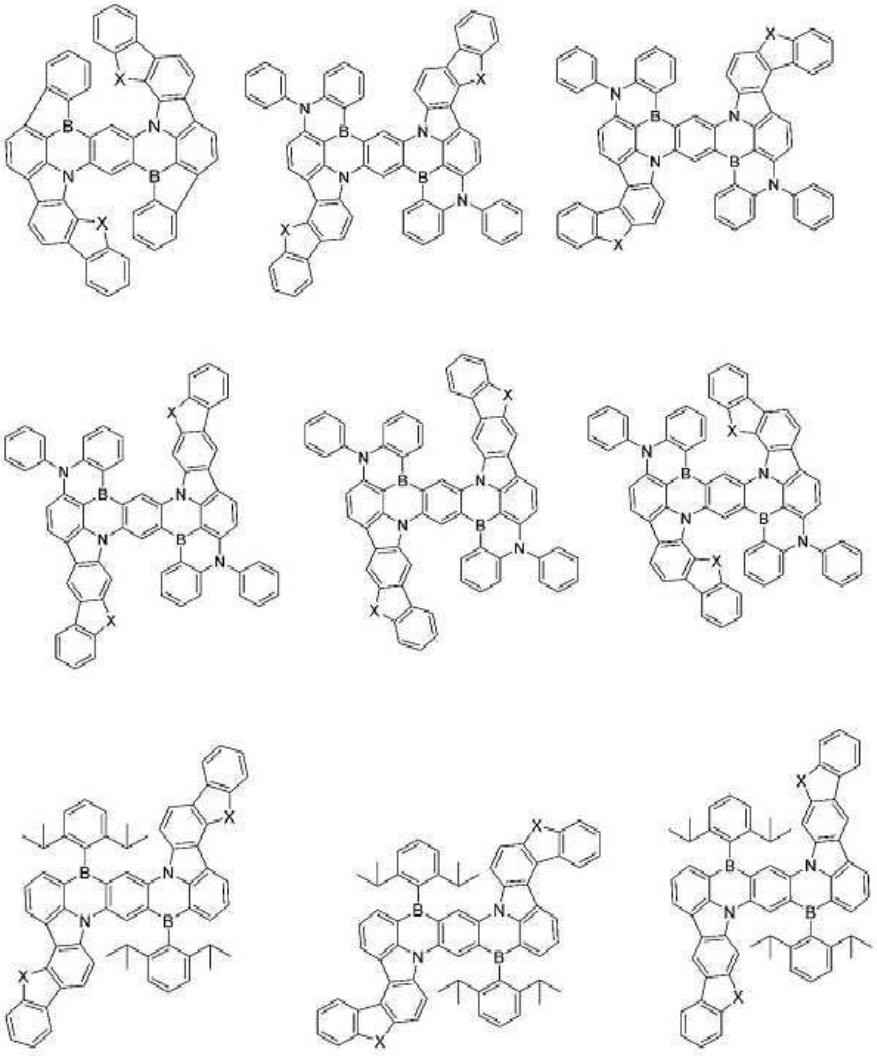
[0381] 이하에 있어서, 일반식 (19a)로 나타나는 화합물의 구체예를 든다. 본 발명에서 이용할 수 있는 일반식 (19a)의 화합물은, 하기의 구체예에 의하여 한정적으로 해석되는 경우는 없다. X를 포함하는 구체예에 대해서는, 분자 내의 모든 X가 산소 원자인 화합물과, 분자 내의 모든 X가 황 원자인 화합물이 각각 개시되어 있는 것으로 한다. 분자 내의 X의 일부가 산소 원자이고 그 외가 황 원자인 화합물도 채용할 수 있다.

[0382] [화학식 44-1]



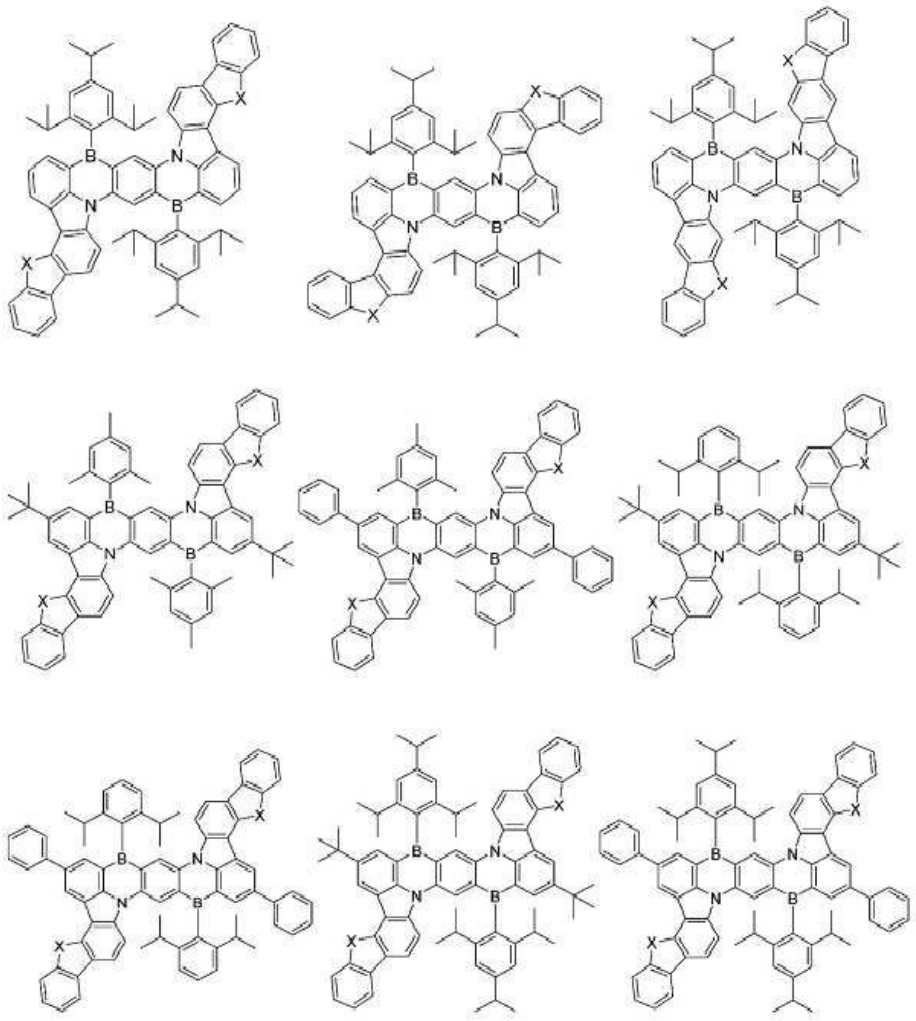
[0383]

[0384] [화학식 44-2]



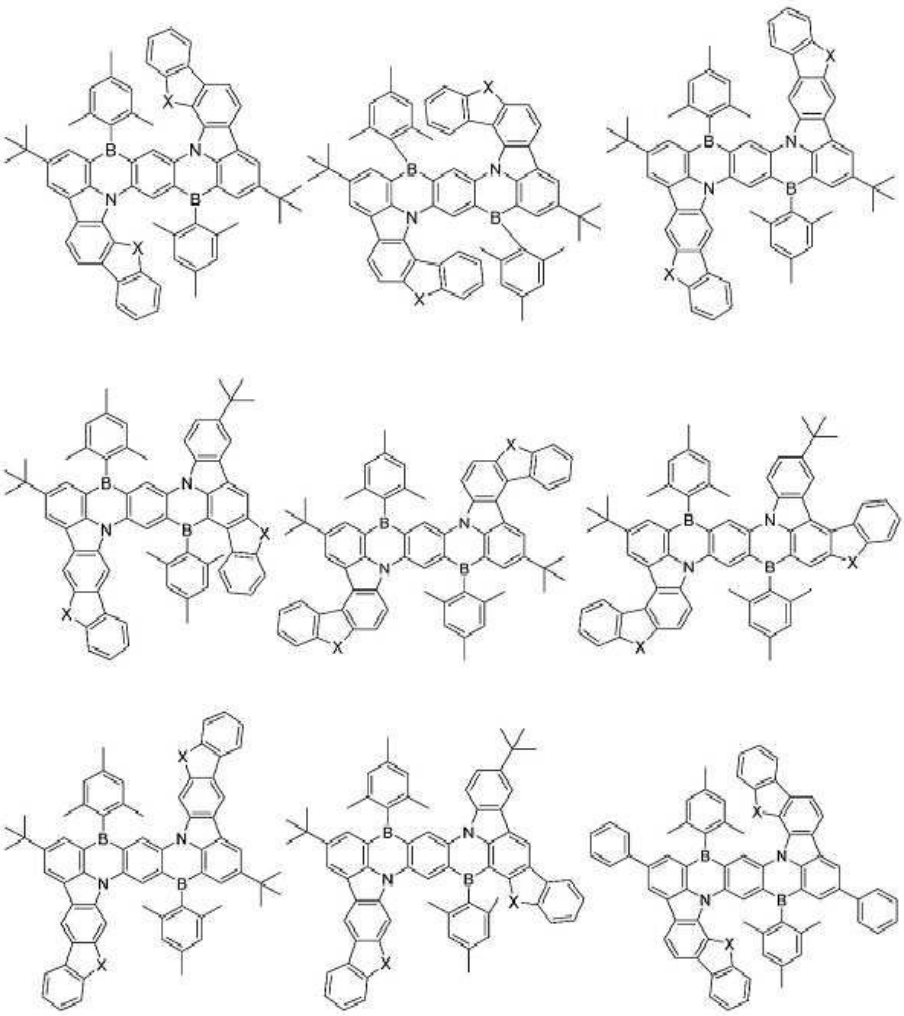
[0385]

[0386] [화학식 44-3]



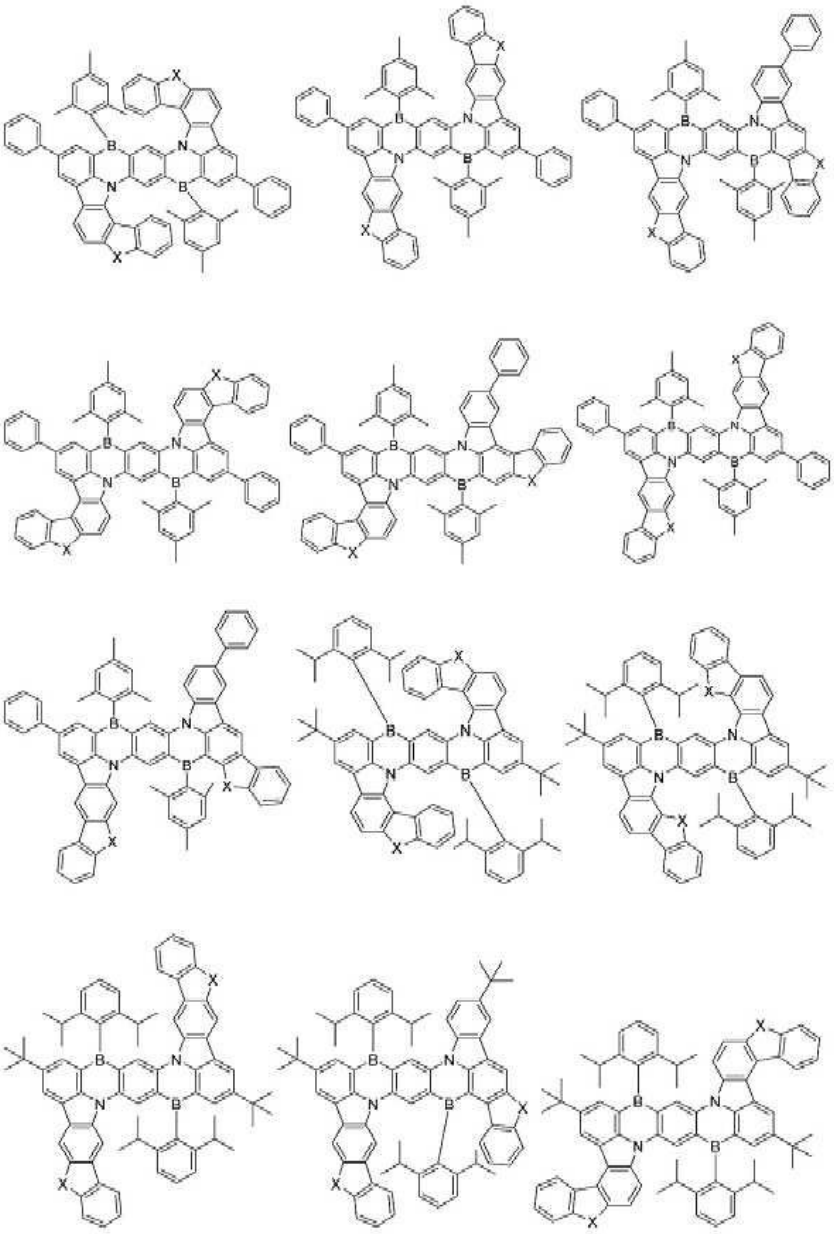
[0387]

[0388] [화학식 44-4]



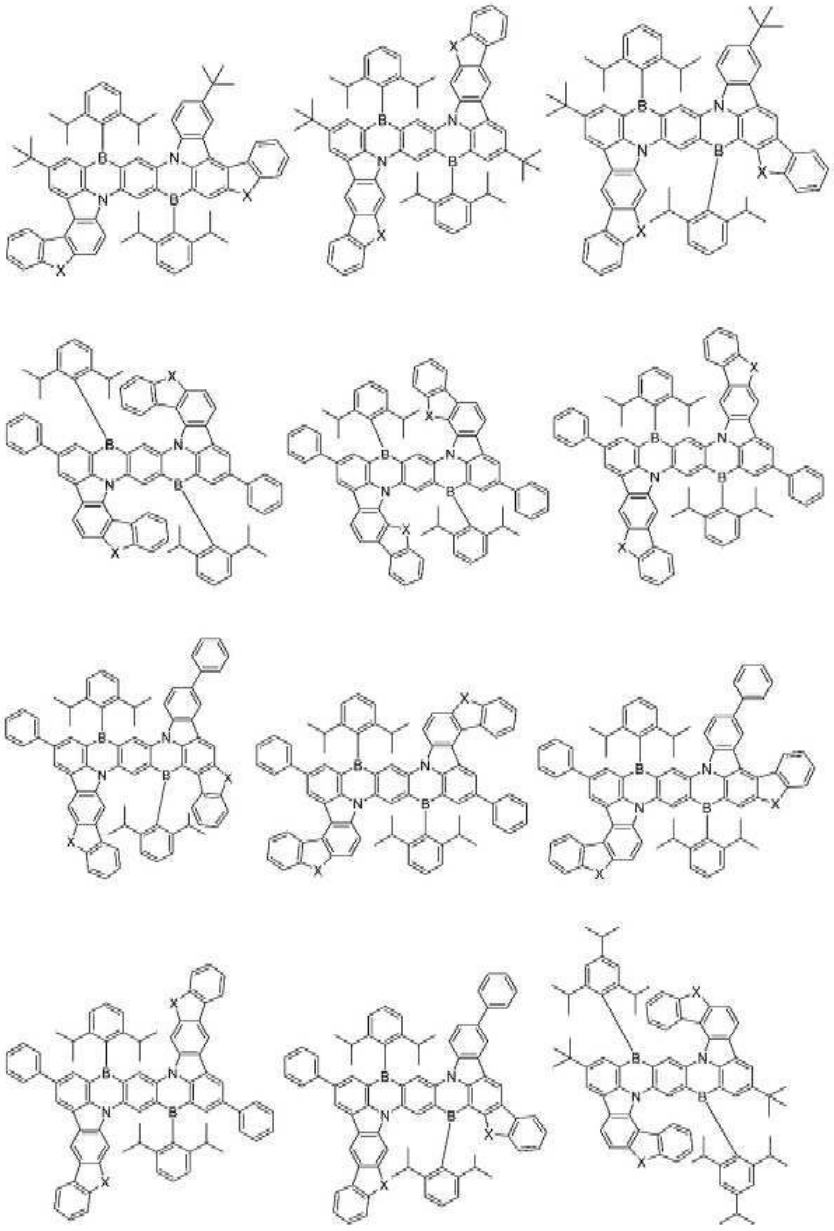
[0389]

[0390] [화학식 44-5]



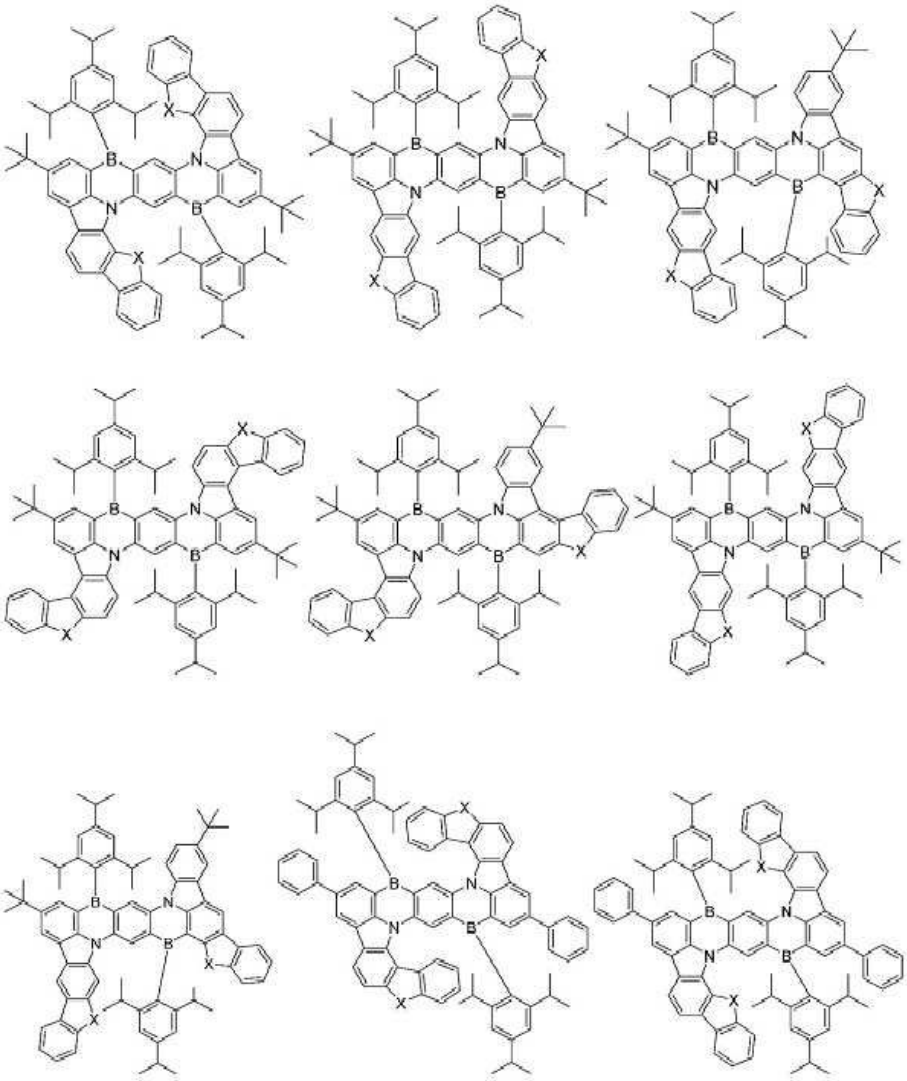
[0391]

[0392] [화학식 44-6]



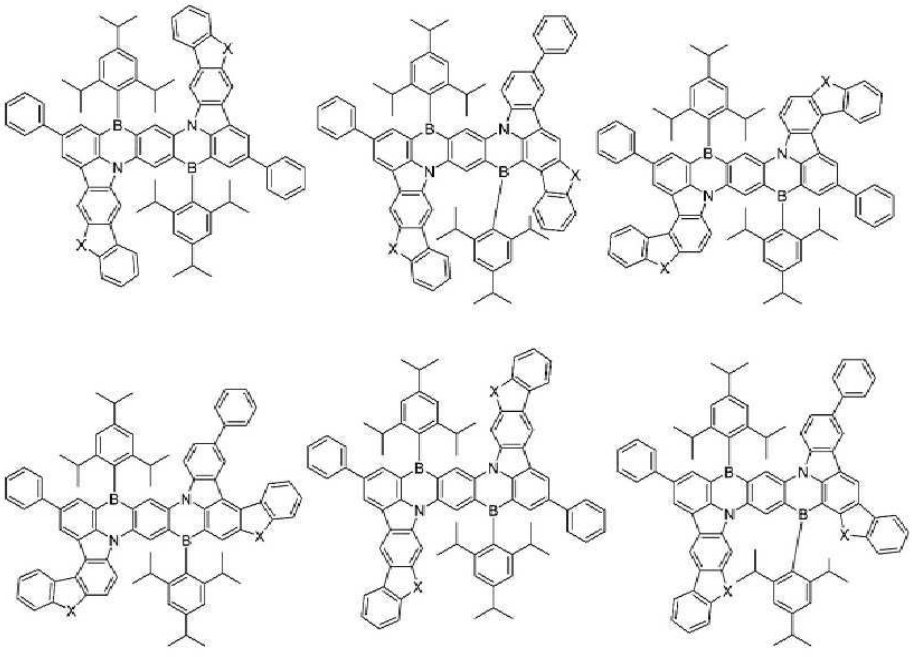
[0393]

[0394] [화학식 44-7]



[0395]

[0396] [화학식 44-8]

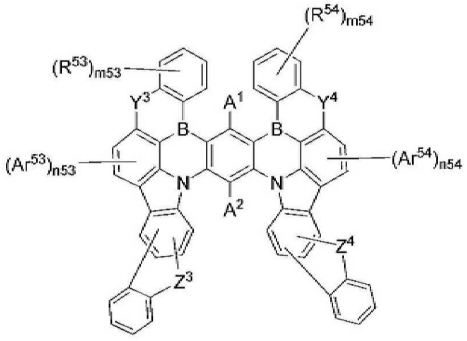


[0397]

[0398] 골격 (19b)를 갖는 화합물의 바람직한 일군으로서, 하기 일반식 (19b)로 나타나는 화합물을 예시할 수 있다.

[0399] 일반식 (19b)

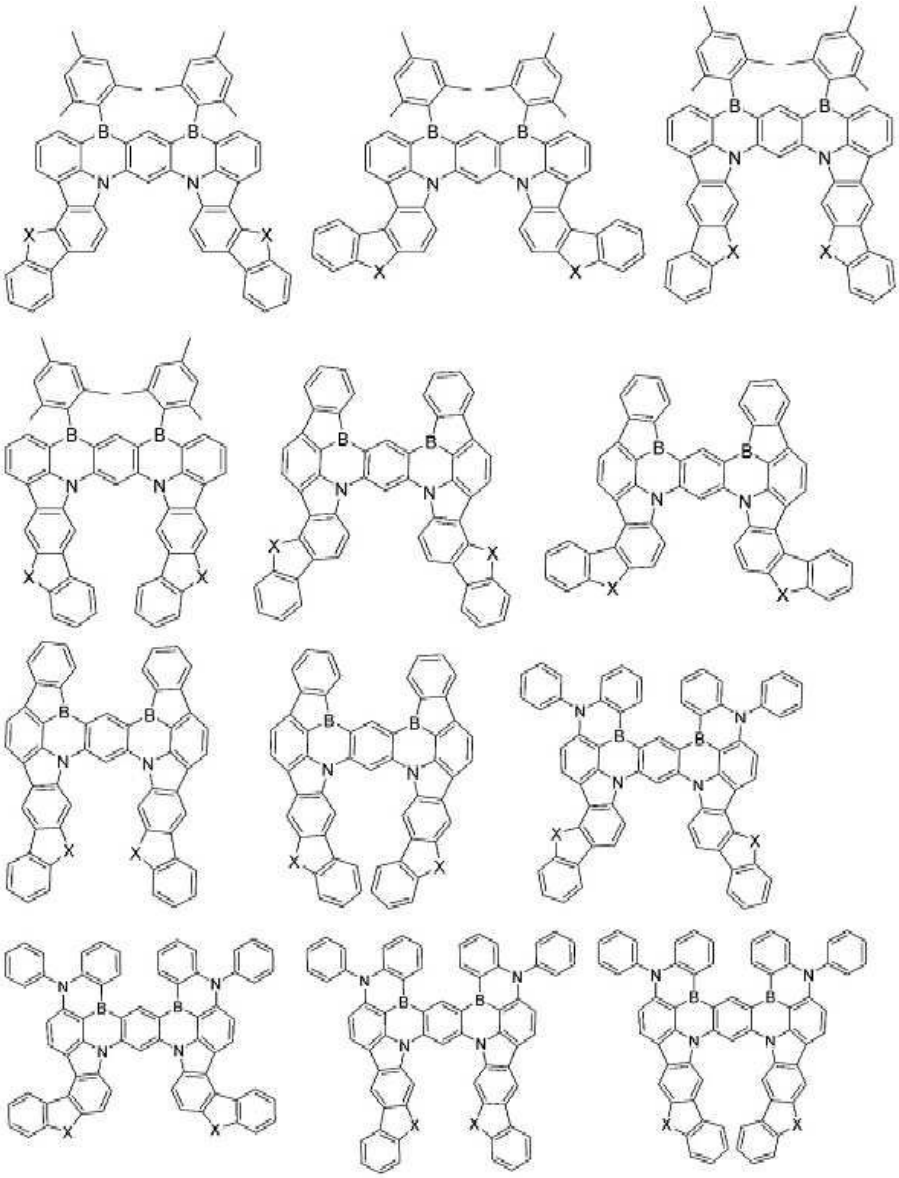
[0400] [화학식 45]

[0401] 

[0402] 일반식 (19b)에 있어서, Ar^{53} 및 Ar^{54}는 각각 독립적으로 치환 혹은 무치환의 아릴기, 또는 치환 혹은 무치환의 헤테로아릴기를 나타낸다. R^{53} 및 R^{54}는 각각 독립적으로 치환 혹은 무치환의 알킬기를 나타낸다. m53 및 m54는 각각 독립적으로 0~4의 정수를 나타낸다. n53 및 n54는 각각 독립적으로 0~2의 정수를 나타낸다. Y^3 및 Y^4는, 각각 독립적으로 수소 원자 2개, 단결합 또는 $N(R^{27})$을 나타낸다. R^{27}은, 수소 원자, 중수소 원자 또는 치환기를 나타낸다. Z^3 및 Z^4는, 각각 독립적으로 산소 원자 또는 황 원자를 나타낸다. A^1, A^2는, 각각 독립적으로 수소 원자, 중수소 원자 또는 치환기를 나타낸다. Ar^{53}, Ar^{54}, R^{53}, R^{54}, m53, m54, n53, n54, A^1, A^2의 상세에 대해서는, 일반식 (19a)의 Ar^{51}, Ar^{52}, R^{51}, R^{52}, m51, m52, n51, n52, A^1, A^2의 기재를 참조할 수 있다.

[0403] 이하에 있어서, 일반식 (19b)로 나타나는 화합물의 구체예를 든다. 본 발명에서 이용할 수 있는 일반식 (19b)의 화합물은, 하기의 구체예에 의하여 한정적으로 해석되는 경우는 없다. X를 포함하는 구체예에 대해서는, 분자 내의 모든 X가 산소 원자인 화합물과, 분자 내의 모든 X가 황 원자인 화합물이 각각 개시되어 있는 것으로 한다. 분자 내의 X의 일부가 산소 원자이고 그 외가 황 원자인 화합물도 채용할 수 있다.

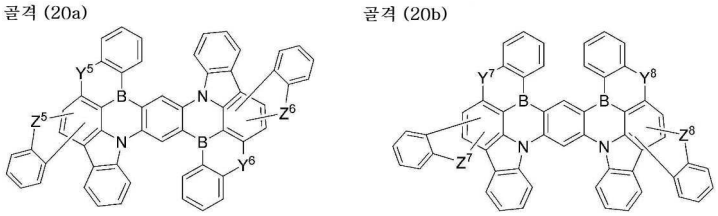
[0404] [화학식 46]



[0405]

[0406] 일반식 (16)에 존재하는 카바졸 부분 구조를 구성하는 2개의 벤젠환 중 붕소 원자가 직접 결합되어 있는 벤젠환에, 벤조퓨란환 또는 벤조싸이오펜환이 축합된 화합물을 바람직하게 들 수 있다. 그와 같은 화합물의 예로서, 하기의 골격 (20a)를 갖는 화합물과, 하기의 골격 (20b)를 갖는 화합물을 예시할 수 있다.

[0407] [화학식 47]



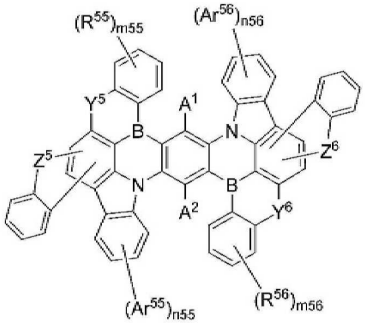
[0408]

[0409] 골격 (20a) 및 (20b)에 있어서, Y^5~Y^8은, 각각 독립적으로 수소 원자 2개, 단결합 또는 $N(R^{27})$을 나타낸다. Z^5~Z^8은, 각각 독립적으로 산소 원자 또는 황 원자를 나타낸다. Y^5~Y^8, Z^5~Z^8의 상세에 대해서는, 골격 (19a) 및 (19b)의 대응하는 기재를 참조할 수 있다. 본 발명의 일 양태에서는, 골격 (20a) 및 (20b)에 있어서의 각 수소 원자는, 인접하는 수소 원자와 함께 연결기로 치환되어 환상 구조를 형성하고 있지 않다.

[0410] 골격 (20a)를 갖는 화합물의 바람직한 일군으로서, 하기 일반식 (20a)로 나타나는 화합물을 예시할 수 있다.

[0411] 일반식 (20a)

[0412] [화학식 48]

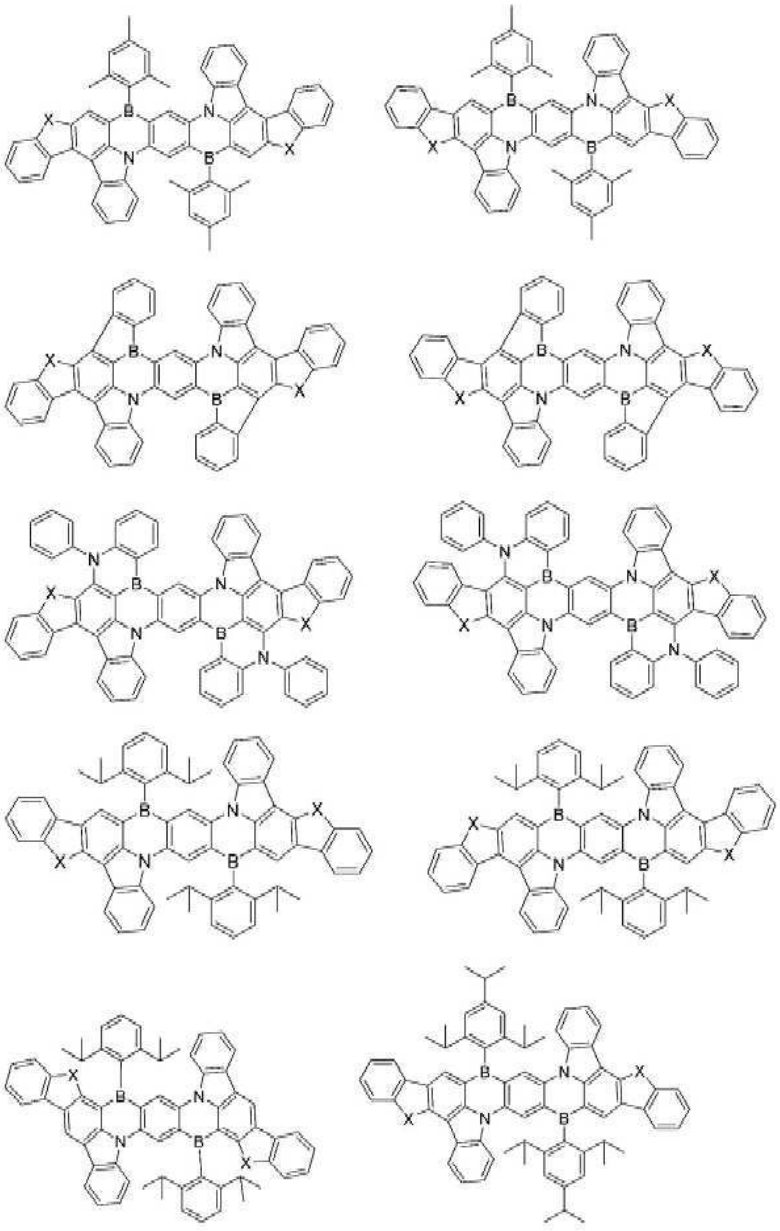
[0413] 

[0414] 일반식 (20a)에 있어서, Ar^{55} 및 Ar^{56}은 각각 독립적으로 치환 혹은 무치환의 아릴기, 또는 치환 혹은 무치환의 헤테로아릴기를 나타낸다. R^{55} 및 R^{56}은 각각 독립적으로 치환 혹은 무치환의 알킬기를 나타낸다. m55 및 m56은 각각 독립적으로 0~4의 정수를 나타낸다. n55 및 n56은 각각 독립적으로 0~4의 정수를 나타낸다. Y^5 및 Y^6은, 각각 독립적으로 수소 원자 2개, 단결합 또는 $N(R^{27})$을 나타낸다. R^{27}은, 수소 원자, 중수소 원자 또는 치환기를 나타낸다. Z^5 및 Z^6은, 각각 독립적으로 산소 원자 또는 황 원자를 나타낸다. A^1, A^2는, 각각 독립적으로 수소 원자, 중수소 원자 또는 치환기를 나타낸다.

[0415] 본 발명의 일 양태에서는, n55와 n56은 0~2의 정수이다. 예를 들면, n55와 n56은 0이어도 되고, n55와 n56은 1이어도 된다. 본 발명의 일 양태에서는, m51과 m52는 동일한 수이다. m55와 m56의 상세에 대해서는, 일반식 (19a)의 m51과 m52의 기재를 참조할 수 있다. Ar^{55}, Ar^{56}, R^{55}, R^{56}, A^1, A^2의 바람직한 기에 대해서는, 일반식 (16a)의 Ar^1, Ar^3, R^{41}, R^{42}, A^1, A^2의 대응하는 기재를 참조할 수 있다.

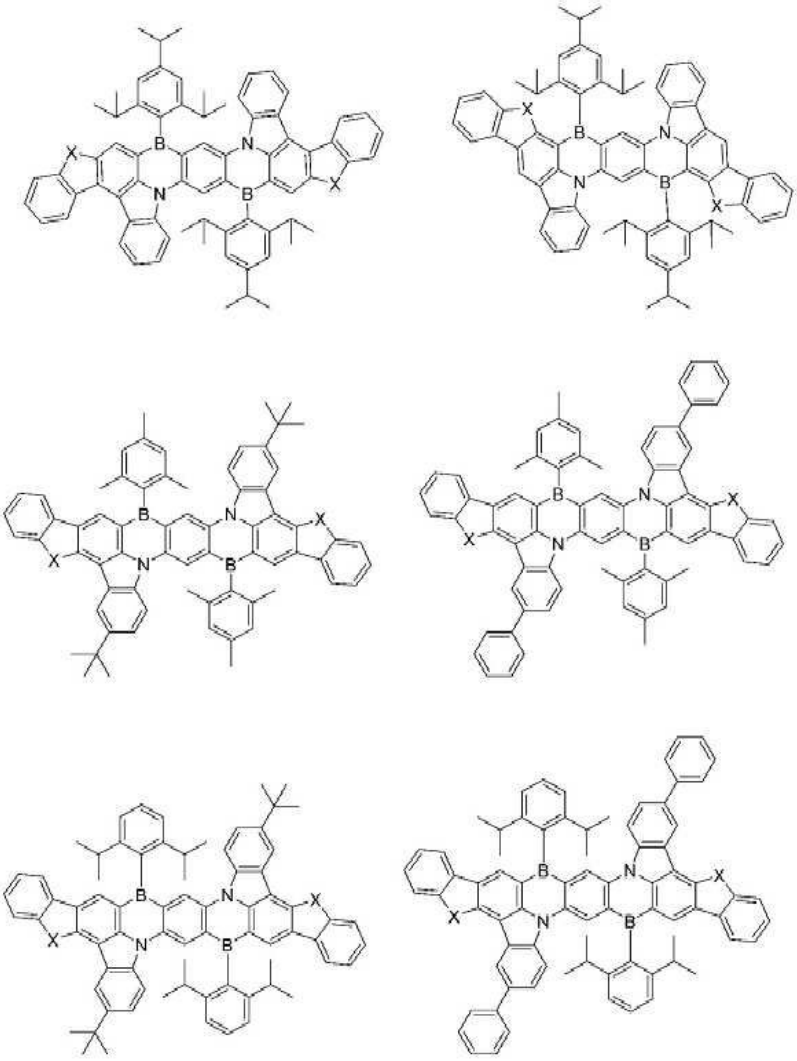
[0416] 이하에 있어서, 일반식 (20a)로 나타나는 화합물의 구체예를 든다. 본 발명에서 이용할 수 있는 일반식 (20a)의 화합물은, 하기의 구체예에 의하여 한정적으로 해석되는 경우는 없다. X를 포함하는 구체예에 대해서는, 분자 내의 모든 X가 산소 원자인 화합물과, 분자 내의 모든 X가 황 원자인 화합물이 각각 개시되어 있는 것으로 한다. 분자 내의 X의 일부가 산소 원자이고 그 외가 황 원자인 화합물도 채용할 수 있다.

[0417] [화학식 49-1]



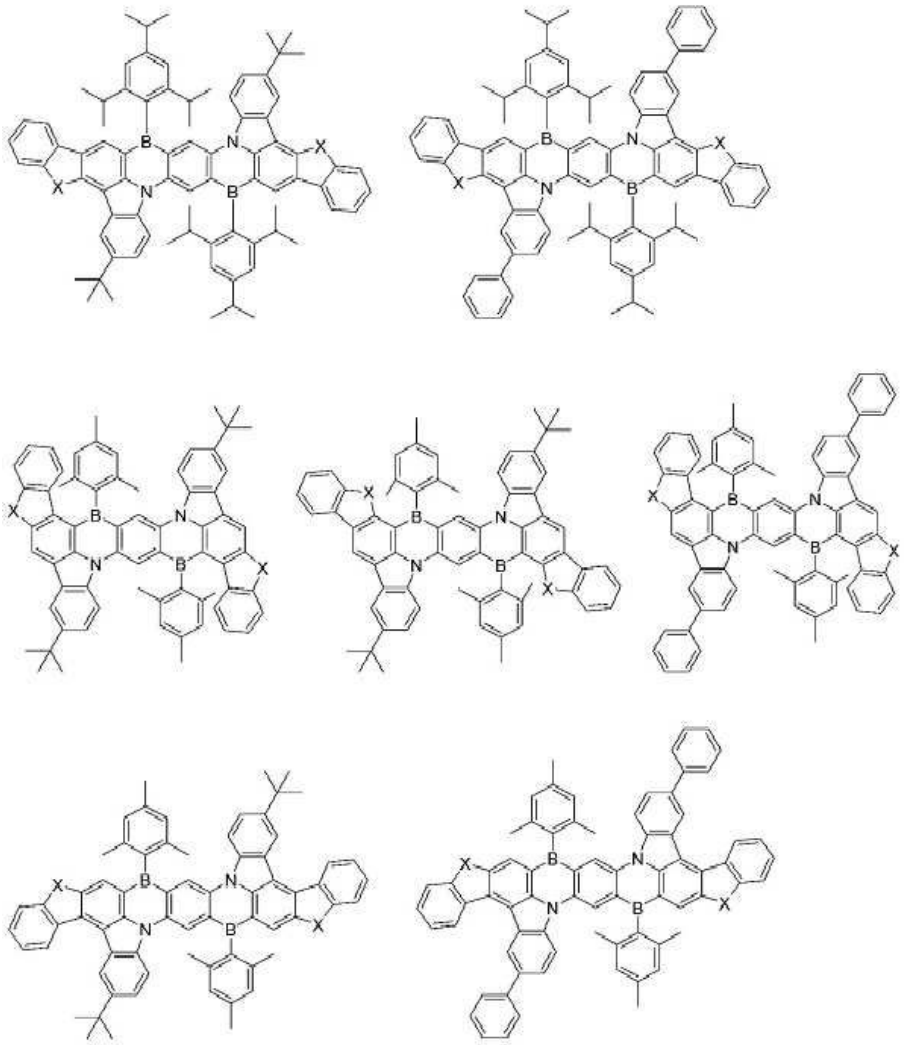
[0418]

[0419] [화학식 49-2]



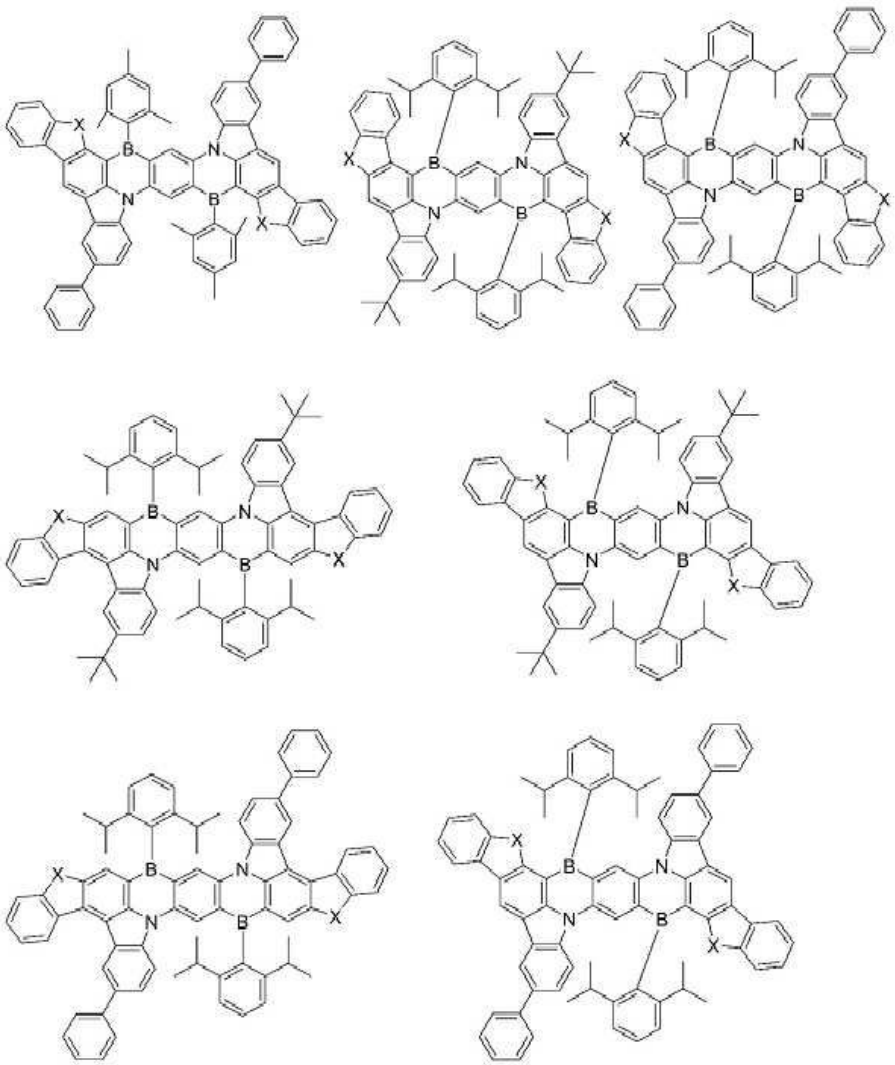
[0420]

[0421] [화학식 49-3]



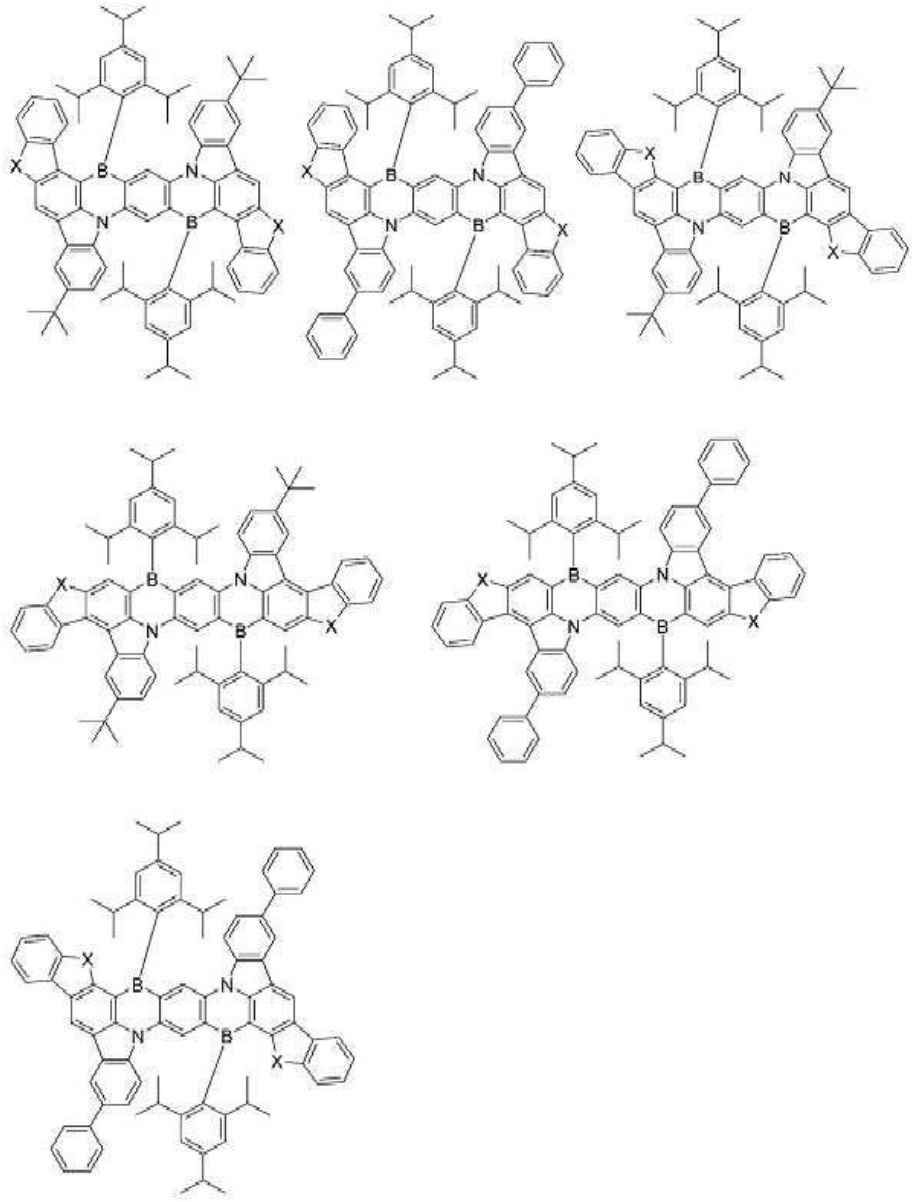
[0422]

[0423] [화학식 49-4]



[0424]

[0425] [화학식 49-5]

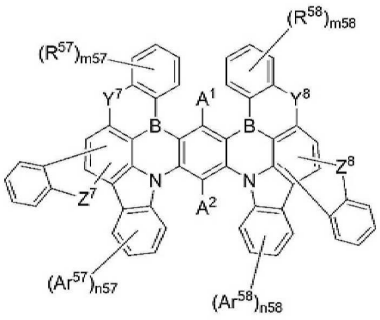


[0426]

[0427] 골격 (20b)를 갖는 화합물의 바람직한 일군으로서, 하기 일반식 (20b)로 나타나는 화합물을 예시할 수 있다.

[0428] 일반식 (20b)

[0429] [화학식 50]



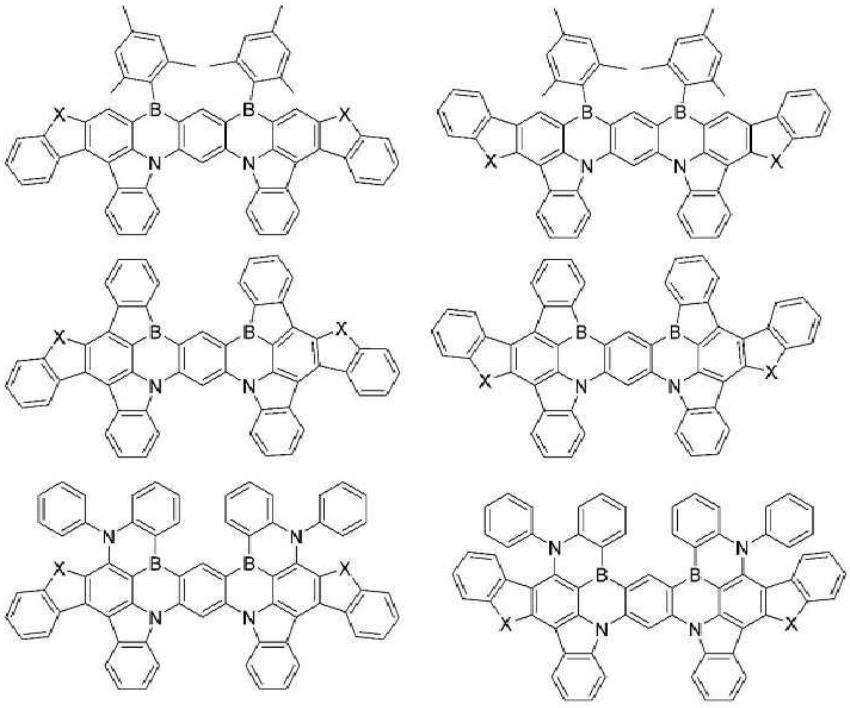
[0430]

[0431] 일반식 (20b)에 있어서, Ar^{57} 및 Ar^{58}은 각각 독립적으로 치환 혹은 무치환의 아릴기, 또는 치환 혹은 무치환의 헤테로아릴기를 나타낸다. R^{57} 및 R^{58}은 각각 독립적으로 치환 혹은 무치환의 알킬기를 나타낸다. m57 및 m58은

각각 독립적으로 0~4의 정수를 나타낸다. n57 및 n58은 각각 독립적으로 0~4의 정수를 나타낸다. Y^7 및 Y^8은, 각각 독립적으로 수소 원자 2개, 단결합 또는 $N(R^{27})$을 나타낸다. R^{27}은, 수소 원자, 중수소 원자 또는 치환기를 나타낸다. Z^7 및 Z^8은, 각각 독립적으로 산소 원자 또는 황 원자를 나타낸다. A^1, A^2는, 각각 독립적으로 수소 원자, 중수소 원자 또는 치환기를 나타낸다. Ar^{57}, Ar^{58}, R^{57}, R^{58}, m57, m58, n57, n58, A^1, A^2의 상세에 대해서는, 일반식 (20a)의 Ar^{55}, Ar^{56}, R^{55}, R^{56}, m55, m56, n55, n56, A^1, A^2의 기재를 참조할 수 있다.

[0432] 이하에 있어서, 일반식 (20b)로 나타나는 화합물의 구체예를 든다. 본 발명에서 이용할 수 있는 일반식 (20b)의 화합물은, 하기의 구체예에 의하여 한정적으로 해석되는 경우는 없다. X를 포함하는 구체예에 대해서는, 분자 내의 모든 X가 산소 원자인 화합물과, 분자 내의 모든 X가 황 원자인 화합물이 각각 개시되어 있는 것으로 한다. 분자 내의 X의 일부가 산소 원자이고 그 외가 황 원자인 화합물도 채용할 수 있다.

[0433] [화학식 51]

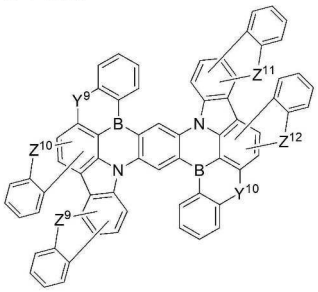


[0434]

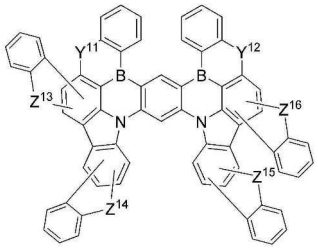
[0435] 일반식 (16)에 존재하는 카바졸 부분 구조를 구성하는 2개의 벤젠환의 양방에, 벤조퓨란환 또는 벤조싸이오펜환이 축합된 화합물을 바람직하게 들 수 있다. 그와 같은 화합물의 예로서, 하기의 골격 (21a)를 갖는 화합물과, 하기의 골격 (21b)를 갖는 화합물을 예시할 수 있다.

[0436] [화학식 52]

골격 (21a)



골격 (21b)



[0437]

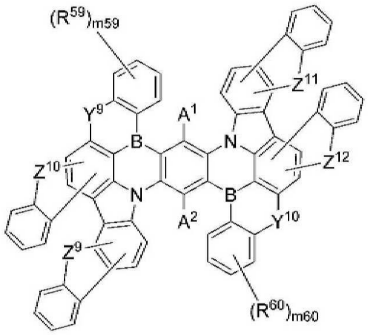
[0438] 골격 (21a) 및 (21b)에 있어서, Y^9~Y^{12}는, 각각 독립적으로 수소 원자 2개, 단결합 또는 $N(R^{27})$을 나타낸다. Z^9~Z^{16}은, 각각 독립적으로 산소 원자 또는 황 원자를 나타낸다. Z^9~Z^{16}은 동일한 것이 바람직하지만, 상이해도 상관없다. 본 발명의 일 양태에서는, Z^9~Z^{16}은 산소 원자이다. 본 발명의 일 양태에서는, Z^9~Z^{16}은 황 원자이다.

Y^9~Y^{12}의 상세에 대해서는, 골격 (19a) 및 (19b)의 대응하는 기재를 참조할 수 있다. 본 발명의 일 양태에서는, 골격 (21a) 및 (21b)에 있어서의 각 수소 원자는, 인접하는 수소 원자와 함께 연결기로 치환되어 환상 구조를 형성하고 있지 않다.

[0439] 골격 (21a)를 갖는 화합물의 바람직한 일군으로서, 하기 일반식 (21a)로 나타나는 화합물을 예시할 수 있다.

[0440] 일반식 (21a)

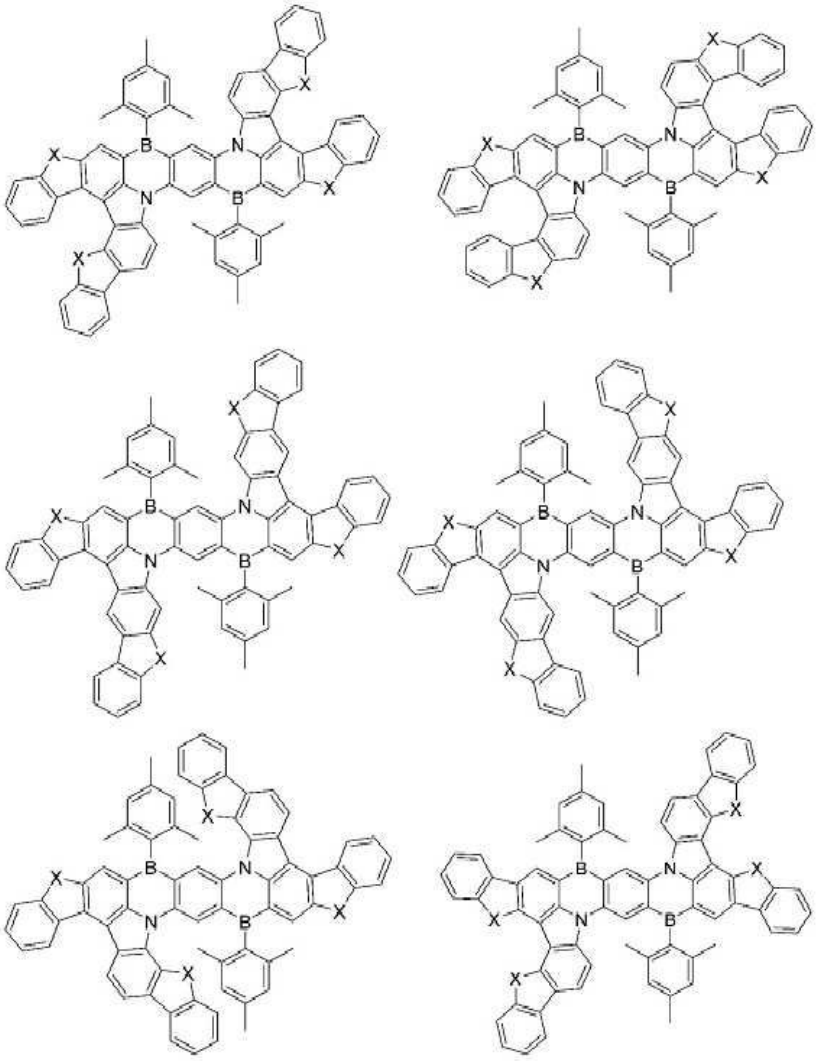
[0441] [화학식 53]

[0442] 

[0443] 일반식 (21a)에 있어서, R^{59} 및 R^{60}은 각각 독립적으로 치환 혹은 무치환의 알킬기를 나타낸다. m59 및 m60은 각각 독립적으로 0~4의 정수를 나타낸다. Y^9 및 Y^{10}은, 각각 독립적으로 수소 원자 2개, 단결합 또는 N(R^{27})을 나타낸다. R^{27}은, 수소 원자, 중수소 원자 또는 치환기를 나타낸다. Z^9~Z^{12}는, 각각 독립적으로 산소 원자 또는 황 원자를 나타낸다. A^1, A^2는, 각각 독립적으로 수소 원자, 중수소 원자 또는 치환기를 나타낸다. R^{59}, R^{60}, m59, m60, Z^9~Z^{12}, A^1, A^2의 상세에 대해서는, 일반식 (20a)의 R^{55}, R^{56}, m55, m56, A^1, A^2와, 골격 (21a)에 있어서의 Z^9~Z^{12}의 기재를 참조할 수 있다.

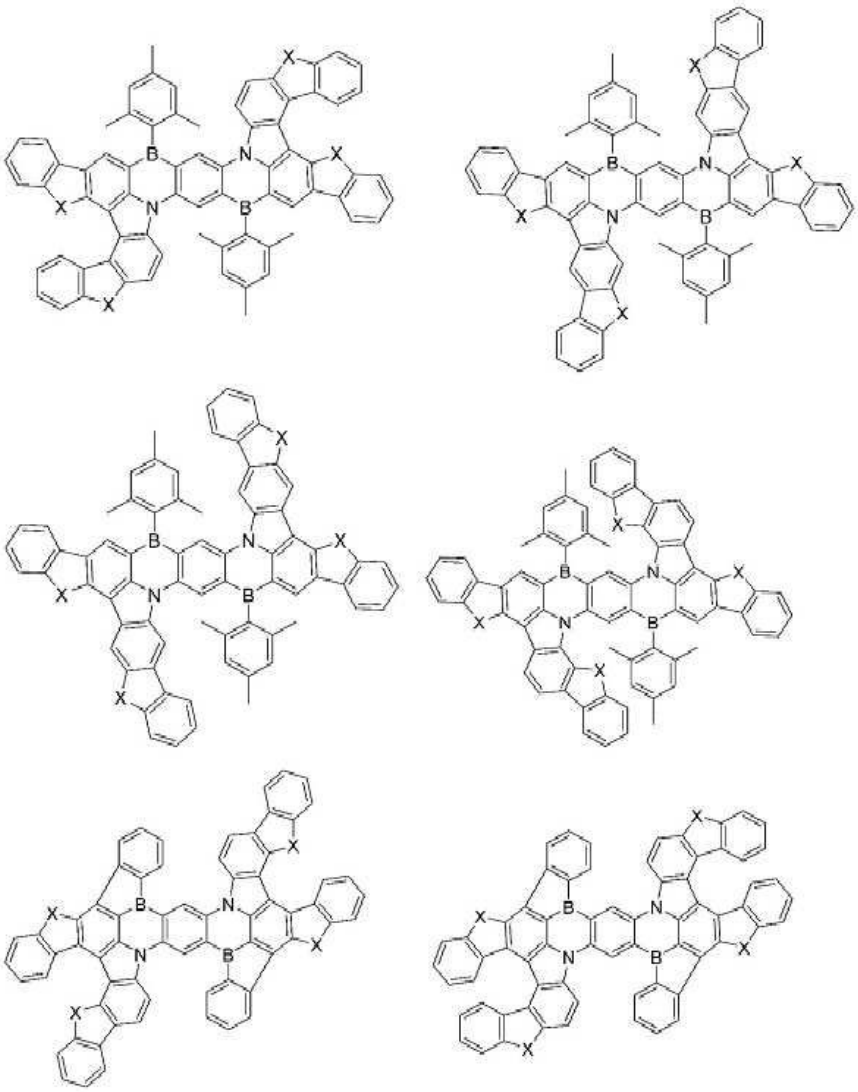
[0444] 이하에 있어서, 일반식 (21a)로 나타나는 화합물의 구체예를 든다. 본 발명에서 이용할 수 있는 일반식 (21a)의 화합물은, 하기의 구체예에 의하여 한정적으로 해석되는 경우는 없다. X를 포함하는 구체예에 대해서는, 분자 내의 모든 X가 산소 원자인 화합물과, 분자 내의 모든 X가 황 원자인 화합물이 각각 개시되어 있는 것으로 한다. 분자 내의 X의 일부가 산소 원자이고 그 외가 황 원자인 화합물도 채용할 수 있다.

[0445] [화학식 54-1]



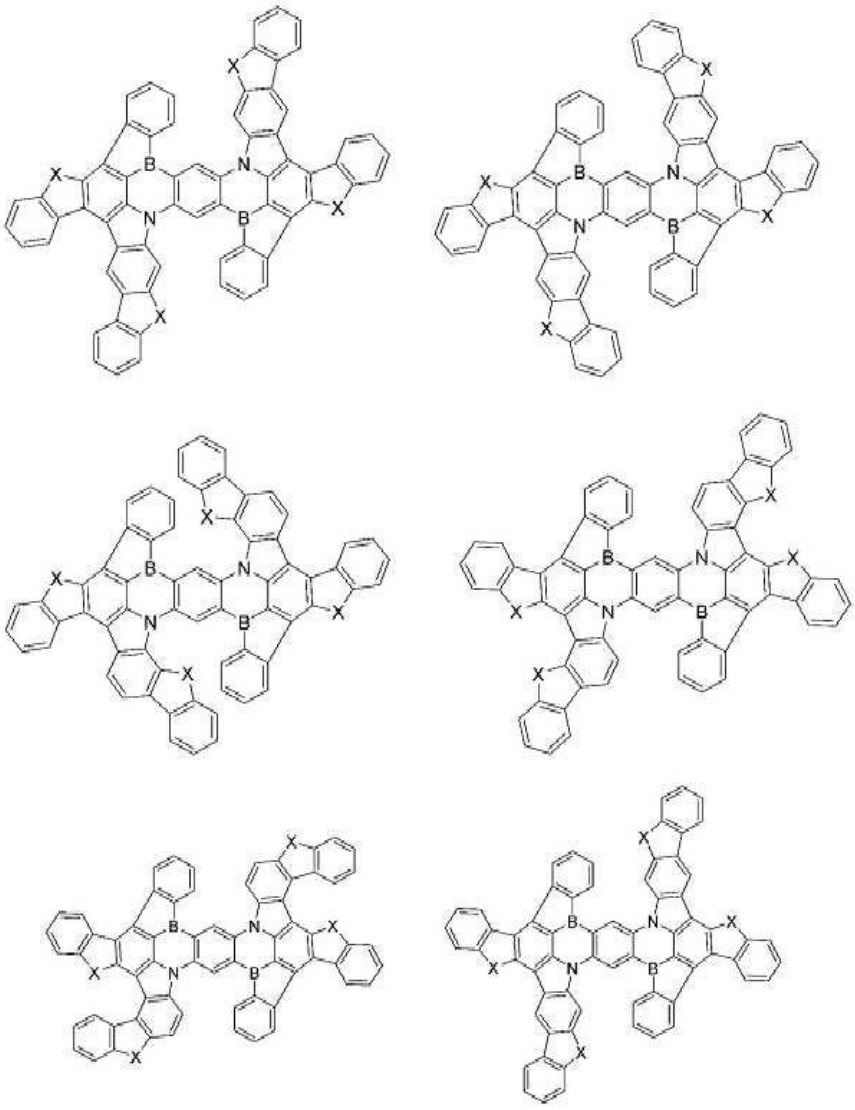
[0446]

[0447] [화학식 54-2]



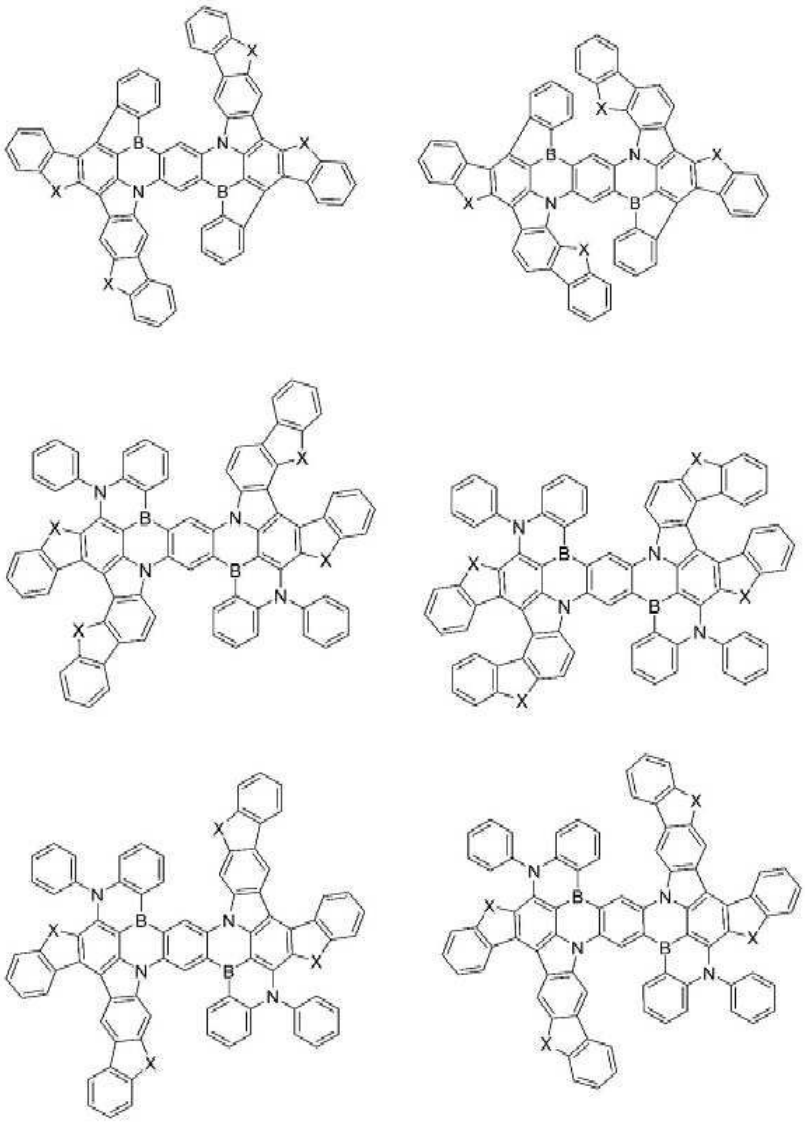
[0448]

[0449] [화학식 54-3]



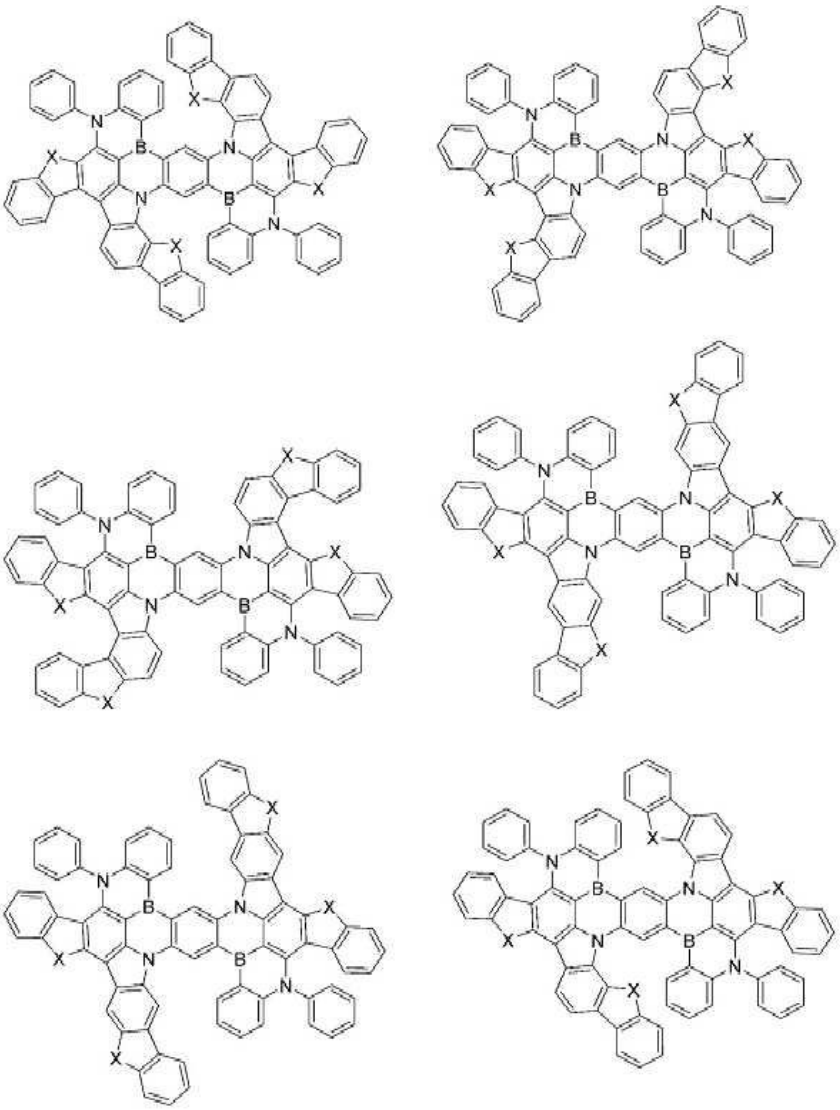
[0450]

[0451] [화학식 54-4]



[0452]

[0453] [화학식 54-5]

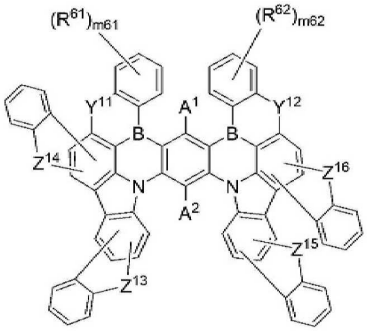


[0454]

[0455] 골격 (21b)를 갖는 화합물의 바람직한 일군으로서, 하기 일반식 (21b)로 나타나는 화합물을 예시할 수 있다.

[0456] 일반식 (21b)

[0457] [화학식 55]



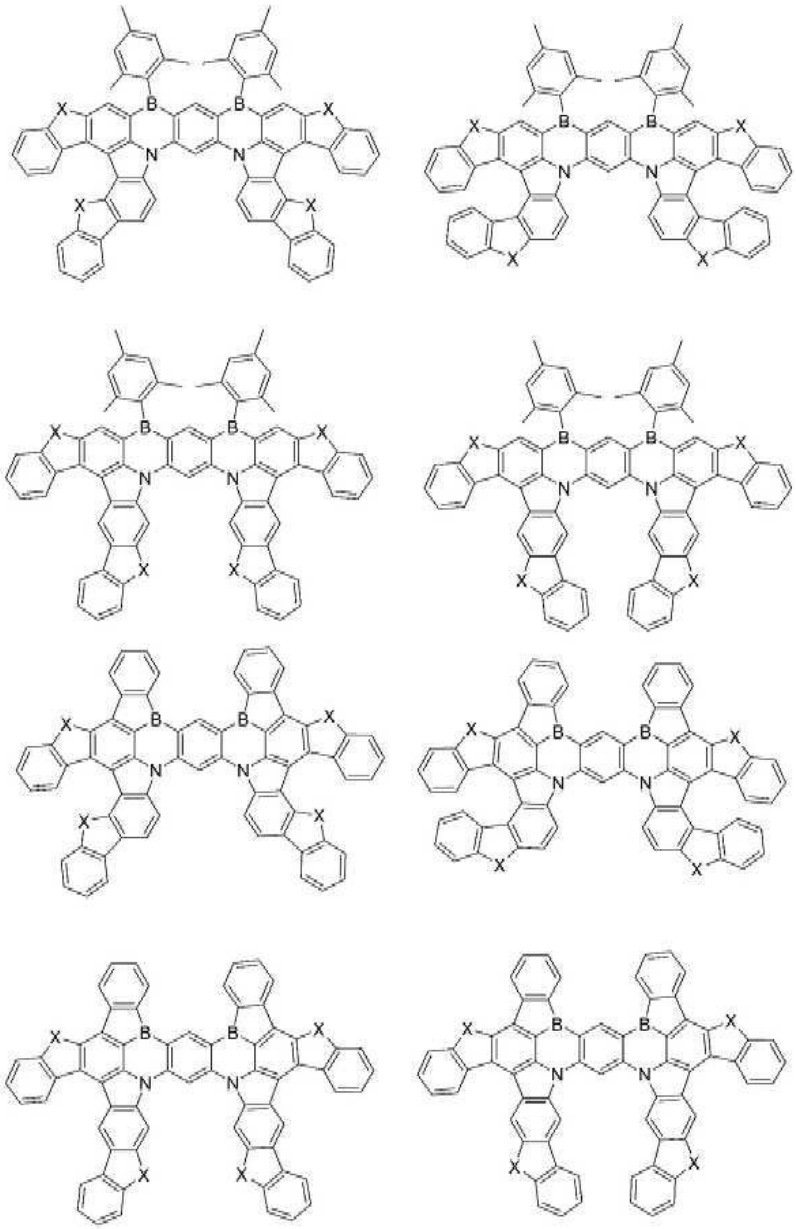
[0458]

[0459] 일반식 (21b)에 있어서, R^{61} 및 R^{62}는 각각 독립적으로 치환 혹은 무치환의 알킬기를 나타낸다. m61 및 m60은 각각 독립적으로 0~4의 정수를 나타낸다. Y^{11} 및 Y^{12}는, 각각 독립적으로 수소 원자 2개, 단결합 또는 N(R^{27})을 나타낸다. R^{27}은, 수소 원자, 중수소 원자 또는 치환기를 나타낸다. Z^{13}~Z^{16}은, 각각 독립적으로 산소 원자 또는 황

원자를 나타낸다. A^1, A^2는, 각각 독립적으로 수소 원자, 중수소 원자 또는 치환기를 나타낸다. R^{61}, R^{62}, m61, m62, Z^{13}~Z^{16}, A^1, A^2의 상세에 대해서는, 일반식 (21a)의 R^{59}, R^{60}, m59, m60, A^1, A^2와, 골격 (21b)에 있어서의 Z^{13}~Z^{16}의 기재를 참조할 수 있다.

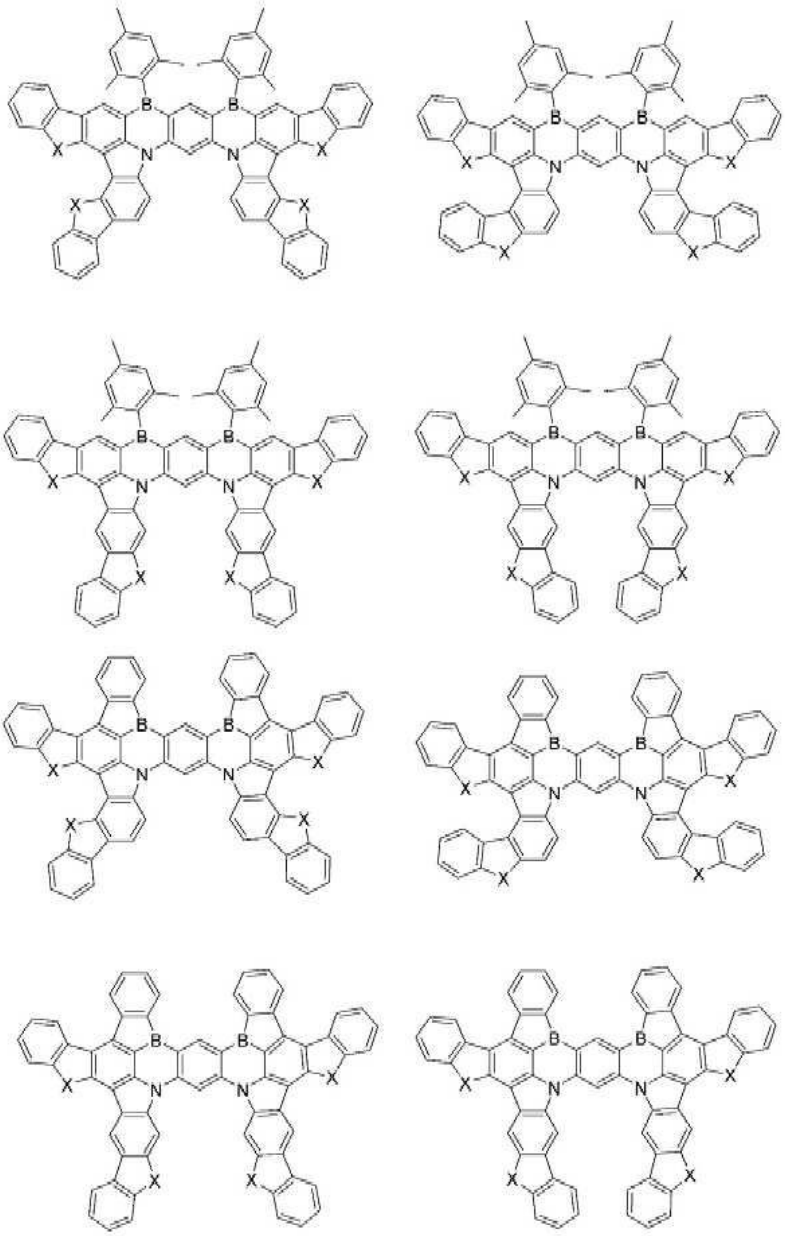
[0460] 이하에 있어서, 일반식 (21b)로 나타나는 화합물의 구체예를 든다. 본 발명에서 이용할 수 있는 일반식 (21b)의 화합물은, 하기의 구체예에 의하여 한정적으로 해석되는 경우는 없다. X를 포함하는 구체예에 대해서는, 분자 내의 모든 X가 산소 원자인 화합물과, 분자 내의 모든 X가 황 원자인 화합물이 각각 개시되어 있는 것으로 한다. 분자 내의 X의 일부가 산소 원자이고 그 외가 황 원자인 화합물도 채용할 수 있다.

[0461] [화학식 56-1]



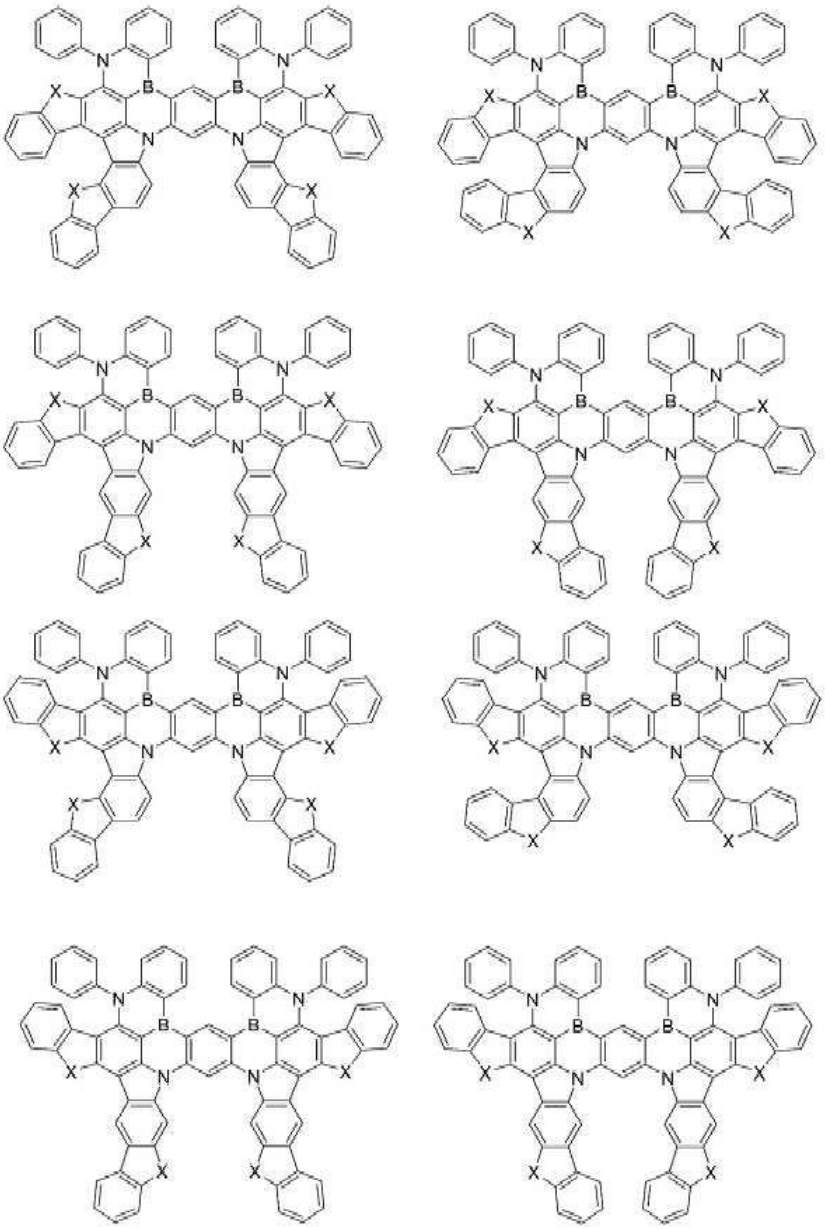
[0462]

[0463] [화학식 56-2]



[0464]

[0465] [화학식 56-3]

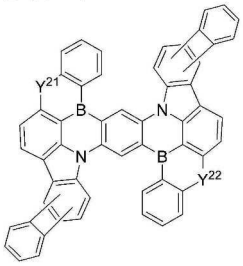


[0466]

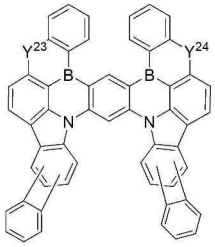
[0467] 일반식 (16)에 존재하는 카바졸 부분 구조를 구성하는 2개의 벤젠환 중 붕소 원자가 직접 결합되어 있지 않은 벤젠환에, 벤젠환이 축합된 화합물을 바람직하게 들 수 있다. 그와 같은 화합물의 예로서, 하기의 골격 (22a)를 갖는 화합물과, 하기의 골격 (22b)를 갖는 화합물을 예시할 수 있다.

[0468] [화학식 57]

골격 (22a)



골격 (22b)



[0469]

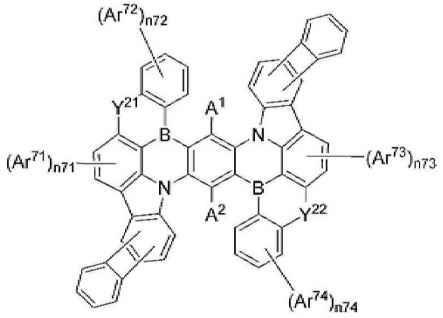
[0470] 골격 (22a) 및 (22b)에 있어서, Y^{21}~Y^{24}는, 각각 독립적으로 수소 원자 2개, 단결합 또는 $N(R^{27})$을 나타낸다.

Y^{21}~Y^{24}의 상세에 대해서는, 골격 (19a) 및 (19b)의 Y^{1}~Y^{4}의 기재를 참조할 수 있다. 본 발명의 일 양태에서는, 골격 (22a) 및 (22b)에 있어서의 각 수소 원자는, 인접하는 수소 원자와 함께 연결기로 치환되어 환상 구조를 형성하고 있지 않다.

[0471] 골격 (22a)를 갖는 화합물의 바람직한 일군으로서, 하기 일반식 (22a)로 나타나는 화합물을 예시할 수 있다.

[0472] 일반식 (22a)

[0473] [화학식 58]

[0474] 

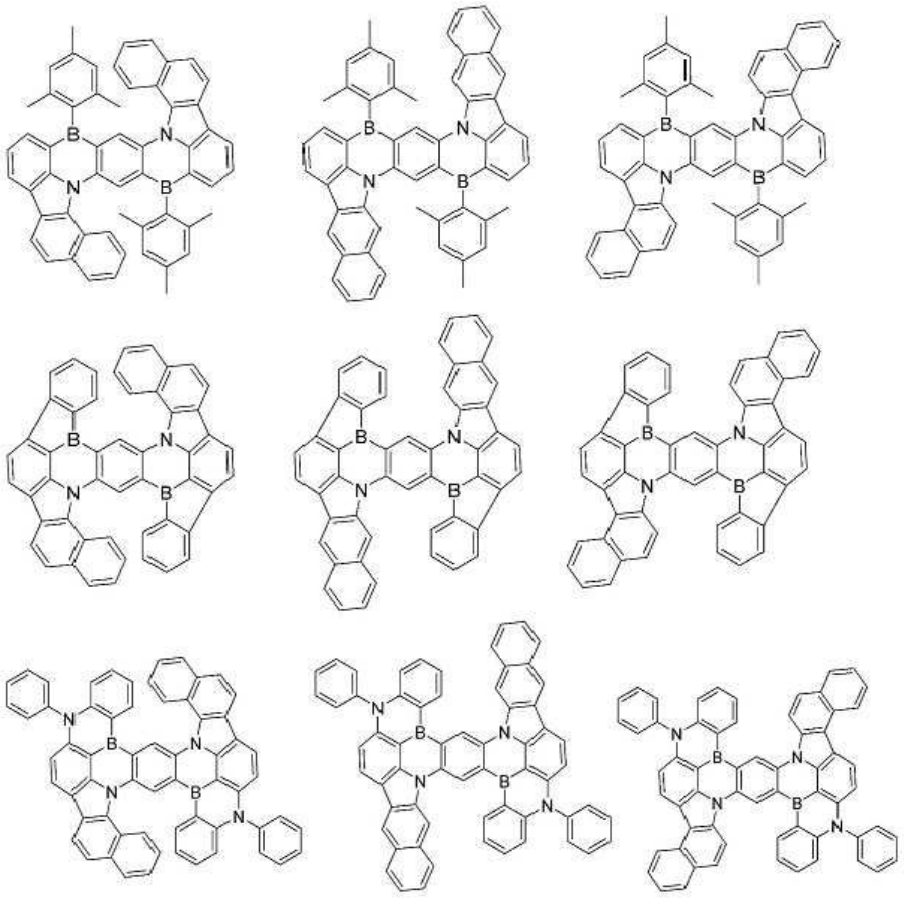
[0475] 일반식 (22a)에 있어서, Ar^{71}~Ar^{74}는 각각 독립적으로 치환 혹은 무치환의 아릴기, 또는 치환 혹은 무치환의 헤테로아릴기를 나타낸다. n71 및 n73은 각각 독립적으로 0~2의 정수를 나타낸다. n72 및 n74는 각각 독립적으로 0~4의 정수를 나타낸다. Y^{21} 및 Y^{22}는, 각각 독립적으로 수소 원자 2개, 단결합 또는 $N(R^{27})$을 나타낸다. R^{27}은, 수소 원자, 중수소 원자 또는 치환기를 나타낸다. A^{1}, A^{2}는, 각각 독립적으로 수소 원자, 중수소 원자 또는 치환기를 나타낸다.

[0476] 본 발명의 일 양태에서는, n71~n74는 0~2의 정수이다. 본 발명의 일 양태에서는, n71과 n73은 동일한 수이며, n72와 n74는 동일한 수이다. n71~n74가 동일한 수여도 된다. 예를 들면, n71~n74는 0이어도 된다. n71~n74는 모두 1이어도 된다. 또, 예를 들면, n71과 n73은 0이어도 되고, n72와 n74는 1이어도 된다.

[0477] Ar^{71}~Ar^{74}, A^{1}, A^{2}의 바람직한 기에 대해서는, 일반식 (16a)의 Ar^{1}~Ar^{4}, A^{1}, A^{2}의 대응하는 기재를 참조할 수 있다.

[0478] 이하에 있어서, 일반식 (22a)로 나타나는 화합물의 구체예를 든다. 본 발명에서 이용할 수 있는 일반식 (22a)의 화합물은, 하기의 구체예에 의하여 한정적으로 해석되는 경우는 없다.

[0479] [화학식 59]

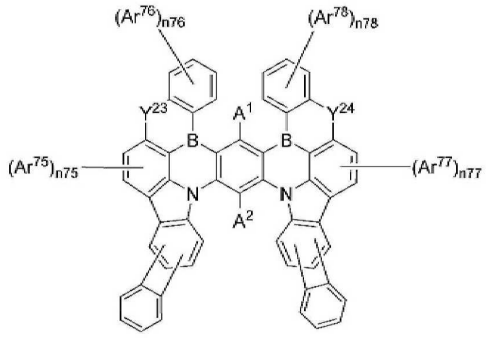


[0480]

[0481] 골격 (22b)를 갖는 화합물의 바람직한 일군으로서, 하기 일반식 (22b)로 나타나는 화합물을 예시할 수 있다.

[0482] 일반식 (22b)

[0483] [화학식 60]

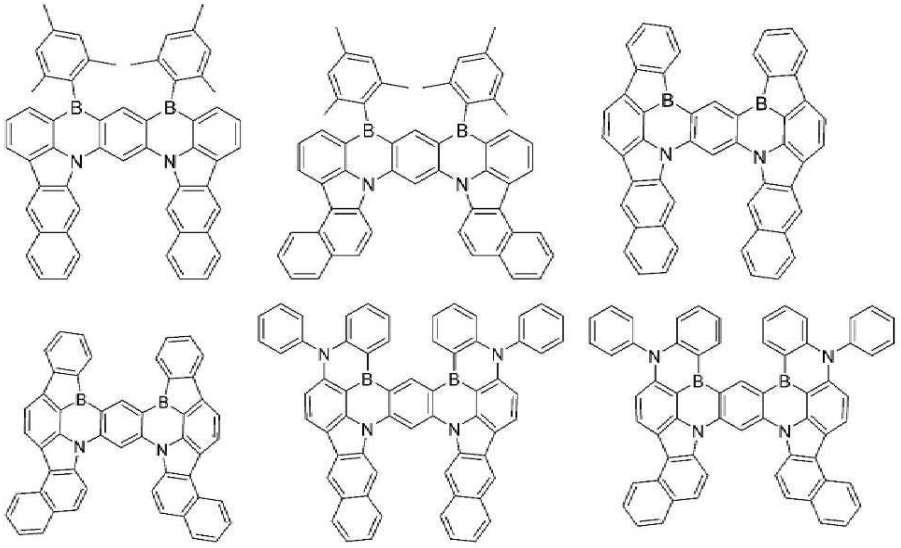


[0484]

[0485] 일반식 (22b)에 있어서, Ar^{75}~Ar^{78}은 각각 독립적으로 치환 혹은 무치환의 아릴기, 또는 치환 혹은 무치환의 헤테로아릴기를 나타낸다. n75 및 n77은 각각 독립적으로 0~2의 정수를 나타낸다. n76 및 n78은 각각 독립적으로 0~4의 정수를 나타낸다. Y^{23} 및 Y^{24}는, 각각 독립적으로 수소 원자 2개, 단결합 또는 $N(R^{27})$을 나타낸다. R^{27}은, 수소 원자, 중수소 원자 또는 치환기를 나타낸다. n75~n78의 상세한 설명에 대해서는, 순서대로, 일반식 (22a)의 n71~n74의 기재를 참조할 수 있다. Ar^{75}~Ar^{78}의 바람직한 기에 대해서는, 일반식 (16a)의 Ar^{1}~Ar^{4}의 대응하는 기재를 참조할 수 있다.

[0486] 이하에 있어서, 일반식 (22b)로 나타나는 화합물의 구체예를 든다. 본 발명에서 이용할 수 있는 일반식 (22b)의 화합물은, 하기의 구체예에 의하여 한정적으로 해석되는 경우는 없다.

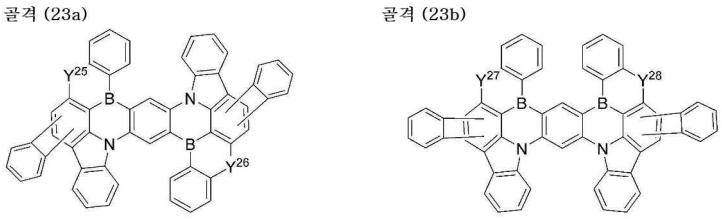
[0487] [화학식 61]



[0488]

[0489] 일반식 (16)에 존재하는 카바졸 부분 구조를 구성하는 2개의 벤젠환 중 붕소 원자가 직접 결합되어 있는 벤젠환에, 벤젠환이 축합된 화합물을 바람직하게 들 수 있다. 그와 같은 화합물의 예로서, 하기의 골격 (23a)를 갖는 화합물과, 하기의 골격 (23b)를 갖는 화합물을 예시할 수 있다.

[0490] [화학식 62]



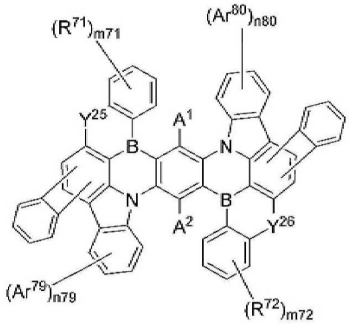
[0491]

[0492] 골격 (23a) 및 (23b)에 있어서, Y^{25}~Y^{28}은, 각각 독립적으로 수소 원자 2개, 단결합 또는 $N(R^{27})$을 나타낸다. Y^{25}~Y^{28}의 상세에 대해서는, 골격 (19a) 및 (19b)의 대응하는 기재를 참조할 수 있다. 본 발명의 일 양태에서는, 골격 (23a) 및 (23b)에 있어서의 각 수소 원자는, 인접하는 수소 원자와 함께 연결기로 치환되어 환상 구조를 형성하고 있지 않다.

[0493] 골격 (23a)를 갖는 화합물의 바람직한 일군으로서, 하기 일반식 (23a)로 나타나는 화합물을 예시할 수 있다.

[0494] 일반식 (23a)

[0495] [화학식 63]



[0496]

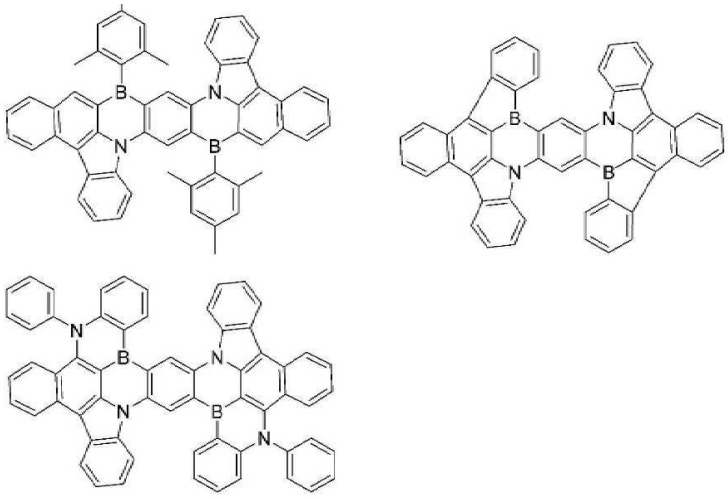
[0497] 일반식 (23a)에 있어서, Ar^{79} 및 Ar^{80}은 각각 독립적으로 치환 혹은 무치환의 아릴기, 또는 치환 혹은 무치환의 헤테로아릴기를 나타낸다. R^{71} 및 R^{72}는 각각 독립적으로 치환 혹은 무치환의 알킬기를 나타낸다. m71 및 m72는

각각 독립적으로 0~4의 정수를 나타낸다. n79 및 n80은 각각 독립적으로 0~4의 정수를 나타낸다. Y^{25} 및 Y^{26}은, 각각 독립적으로 수소 원자 2개, 단결합 또는 N(R^{27})을 나타낸다. R^{27}은, 수소 원자, 중수소 원자 또는 치환기를 나타낸다. A^1, A^2는, 각각 독립적으로 수소 원자, 중수소 원자 또는 치환기를 나타낸다.

[0498] 본 발명의 일 양태에서는, n79 및 n80은 0~2의 정수이다. 본 발명의 일 양태에서는, n79와 n80은 동일한 수이며, 예를 들면 모두 0이어도 되고, 모두 1이어도 된다. 본 발명의 일 양태에서는, m71 및 m72는 0~2의 정수이다. 본 발명의 일 양태에서는, m71 및 m72는 동일한 수이며, 예를 들면 모두 0이어도 되고, 모두 1이어도 된다. Ar^{79}, Ar^{80}, R^{71}, R^{72}, A^1, A^2의 바람직한 기에 대해서는, 일반식 (16a)의 Ar^1, Ar^3, R^{41}, R^{42}, A^1, A^2의 대응하는 기재를 참조할 수 있다.

[0499] 이하에 있어서, 일반식 (23a)로 나타나는 화합물의 구체예를 든다. 본 발명에서 이용할 수 있는 일반식 (23a)의 화합물은, 하기의 구체예에 의하여 한정적으로 해석되는 경우는 없다.

[0500] [화학식 64]

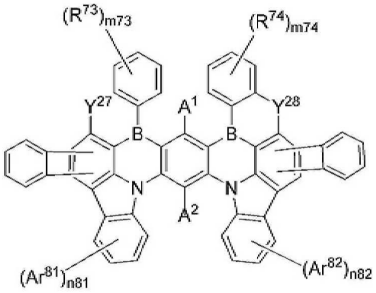


[0501]

[0502] 골격 (23b)를 갖는 화합물의 바람직한 일군으로서, 하기 일반식 (23b)로 나타나는 화합물을 예시할 수 있다.

[0503] 일반식 (23b)

[0504] [화학식 65]



[0505]

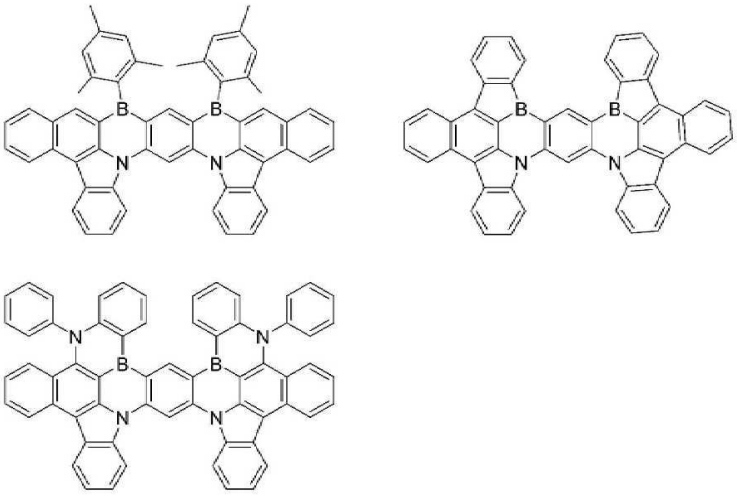
[0506] 일반식 (23b)에 있어서, Ar^{81} 및 Ar^{82}는 각각 독립적으로 치환 혹은 무치환의 아릴기, 또는 치환 혹은 무치환의 헤테로아릴기를 나타낸다. R^{73} 및 R^{74}는 각각 독립적으로 치환 혹은 무치환의 알킬기를 나타낸다. m73 및 m74는 각각 독립적으로 0~4의 정수를 나타낸다. n81 및 n82는 각각 독립적으로 0~4의 정수를 나타낸다. Y^{27} 및 Y^{28}은, 각각 독립적으로 수소 원자 2개, 단결합 또는 N(R^{27})을 나타낸다. R^{27}은, 수소 원자, 중수소 원자 또는 치환기를 나타낸다. A^1, A^2는, 각각 독립적으로 수소 원자, 중수소 원자 또는 치환기를 나타낸다.

[0507] m73, m74, n81, n82의 상세한 설명에 대해서는, 일반식 (23a)의 m71, m72, n79, n80의 기재를 참조할 수 있다. Ar^{81}, Ar^{82}, R^{73}, R^{74}, A^1, A^2의 바람직한 기에 대해서는, 일반식 (16a)의 Ar^1, Ar^3, R^{41}, R^{42}, A^1, A^2의 대응하는 기

재를 참조할 수 있다.

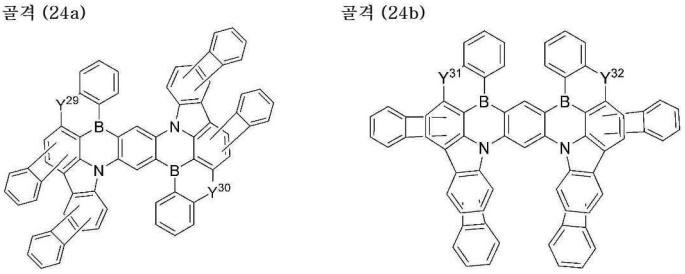
[0508] 이하에 있어서, 일반식 (23b)로 나타나는 화합물의 구체예를 든다. 본 발명에서 이용할 수 있는 일반식 (23b)의 화합물은, 하기의 구체예에 의하여 한정적으로 해석되는 경우는 없다.

[0509] [화학식 66]

[0510] 

[0511] 일반식 (16)에 존재하는 카바졸 부분 구조를 구성하는 2개의 벤젠환의 양방에, 벤젠환이 축합된 화합물을 바람직하게 들 수 있다. 그와 같은 화합물의 예로서, 하기의 골격 (24a)를 갖는 화합물과, 하기의 골격 (24b)를 갖는 화합물을 예시할 수 있다.

[0512] [화학식 67]

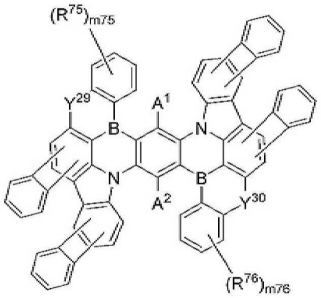
[0513] 

[0514] 골격 (24a) 및 (24b)에 있어서, Y^{29}~Y^{32}는, 각각 독립적으로 수소 원자 2개, 단결합 또는 $N(R^{27})$을 나타낸다. Y^{29}~Y^{32}의 상세에 대해서는, 골격 (19a) 및 (19b)의 대응하는 기재를 참조할 수 있다. 본 발명의 일 양태에서는, 골격 (24a) 및 (24b)에 있어서의 각 수소 원자는, 인접하는 수소 원자와 함께 연결기로 치환되어 환상 구조를 형성하고 있지 않다.

[0515] 골격 (24a)를 갖는 화합물의 바람직한 일군으로서, 하기 일반식 (24a)로 나타나는 화합물을 예시할 수 있다.

[0516] 일반식 (24a)

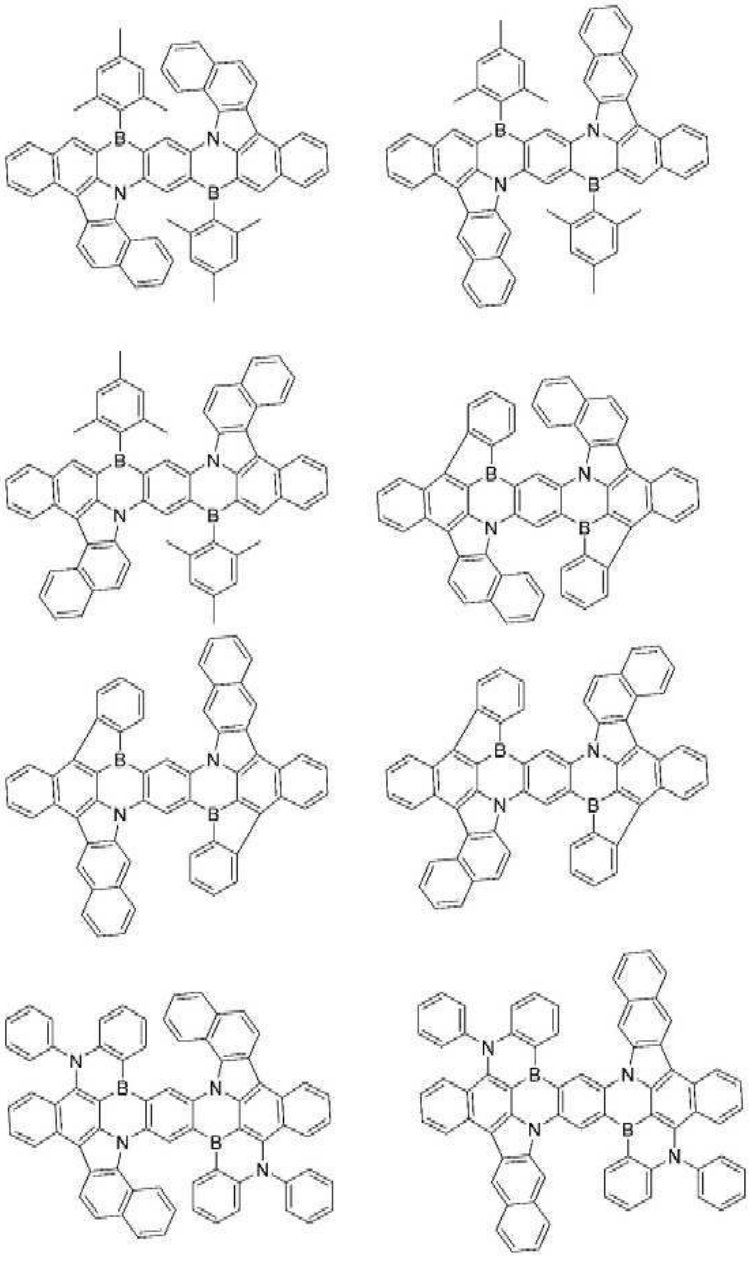
[0517] [화학식 68]

[0518] 

[0519] 일반식 (24a)에 있어서, R^{75} 및 R^{76}은 각각 독립적으로 치환 혹은 무치환의 알킬기를 나타낸다. m75 및 m76은 각각 독립적으로 0~4의 정수를 나타낸다. Y^{29} 및 Y^{30}은, 각각 독립적으로 수소 원자 2개, 단결합 또는 $N(R^{27})$을 나타낸다. R^{27}은, 수소 원자, 중수소 원자 또는 치환기를 나타낸다. A^1, A^2는, 각각 독립적으로 수소 원자, 중수소 원자 또는 치환기를 나타낸다. R^{75}, R^{76}, m75, m76, A^1, A^2의 상세에 대해서는, 일반식 (23a)의 R^{71}, R^{72}, m71, m72, A^1, A^2의 기재를 참조할 수 있다.

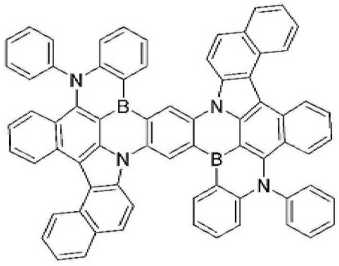
[0520] 이하에 있어서, 일반식 (24a)로 나타나는 화합물의 구체예를 든다. 본 발명에서 이용할 수 있는 일반식 (24a)의 화합물은, 하기의 구체예에 의하여 한정적으로 해석되는 경우는 없다.

[0521] [화학식 69-1]



[0522]

[0523] [화학식 69-2]

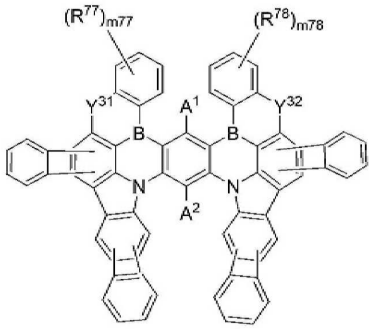


[0524]

[0525] 골격 (24b)를 갖는 화합물의 바람직한 일군으로서, 하기 일반식 (24b)로 나타나는 화합물을 예시할 수 있다.

[0526] 일반식 (24b)

[0527] [화학식 70]

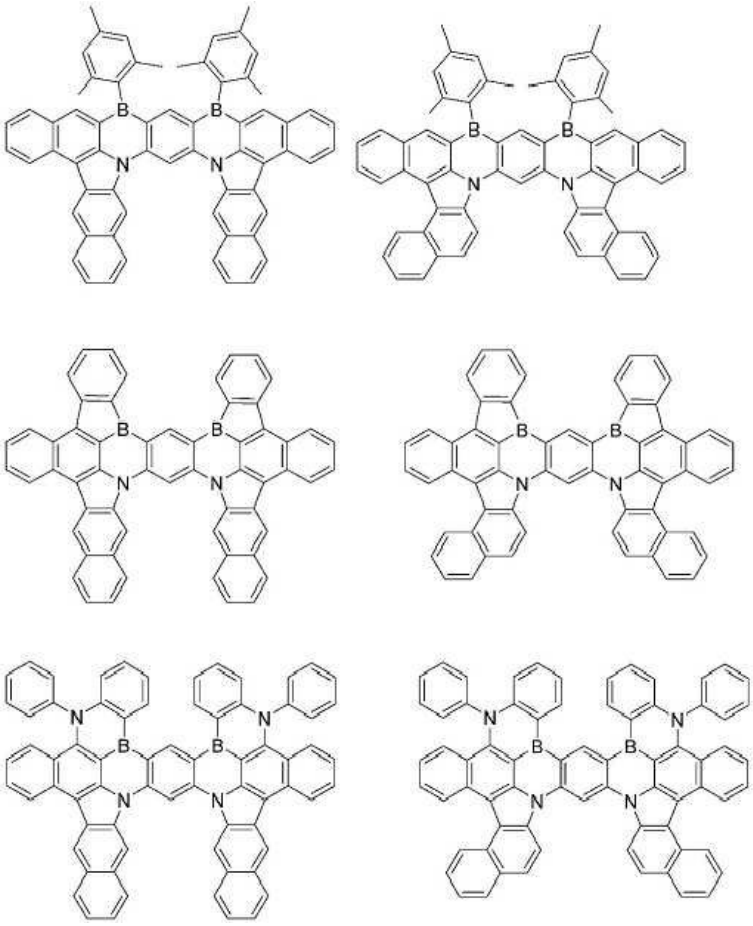


[0528]

[0529] 일반식 (24b)에 있어서, R^{77} 및 R^{78}은 각각 독립적으로 치환 혹은 무치환의 알킬기를 나타낸다. m77 및 m78은 각각 독립적으로 0~4의 정수를 나타낸다. Y^{31} 및 Y^{32}는, 각각 독립적으로 수소 원자 2개, 단결합 또는 $N(R^{27})$을 나타낸다. R^{27}은, 수소 원자, 중수소 원자 또는 치환기를 나타낸다. A^1, A^2는, 각각 독립적으로 수소 원자, 중수소 원자 또는 치환기를 나타낸다. R^{77}, R^{78}, m77, m78, A^1, A^2의 상세에 대해서는, 일반식 (23a)의 R^{71}, R^{72}, m71, m72, A^1, A^2의 기재를 참조할 수 있다.

[0530] 이하에 있어서, 일반식 (24b)로 나타나는 화합물의 구체예를 든다. 본 발명에서 이용할 수 있는 일반식 (24b)의 화합물은, 하기의 구체예에 의하여 한정적으로 해석되는 경우는 없다.

[0531] [화학식 71]

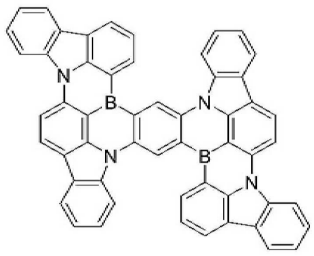


[0532]

[0533] 일반식 (16)으로 나타나는 화합물로서는, 분자 내에 4개 이상의 카바졸 부분 구조를 포함하는 화합물도 바람직하다. 그와 같은 화합물의 예로서, 하기의 골격 (25)를 갖는 화합물을 예시할 수 있다.

[0534] 골격 (25)

[0535] [화학식 72]



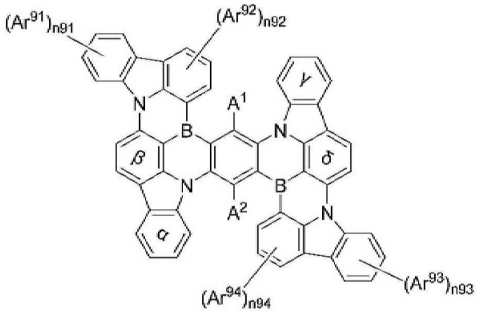
[0536]

[0537] 골격 (25)에 있어서의 각 수소 원자는, 중수소 원자 또는 치환기로 치환되어 있어도 된다. 또, 인접하는 수소 원자와 함께 연결기로 치환되어 환상 구조를 형성하고 있어도 된다. 상세에 대해서는, 일반식 (16)의 대응하는 R^{1}~R^{26}, A^{1}, A^{2}의 기재를 참조할 수 있다. 골격 (25)에 포함되어 있는 카바졸 부분 구조를 구성하는 벤젠환의 적어도 하나의 수소 원자는, 치환 혹은 무치환의 아릴기로 치환되어 있다. 본 발명의 일 양태에서는, 골격 (25)에 있어서의 각 수소 원자는, 인접하는 수소 원자와 함께 연결기로 치환되어 환상 구조를 형성하고 있지 않다.

[0538] 골격 (25)를 갖는 화합물의 바람직한 일군으로서, 하기 일반식 (25)로 나타나는 화합물을 예시할 수 있다.

[0539] 일반식 (25)

[0540] [화학식 73]

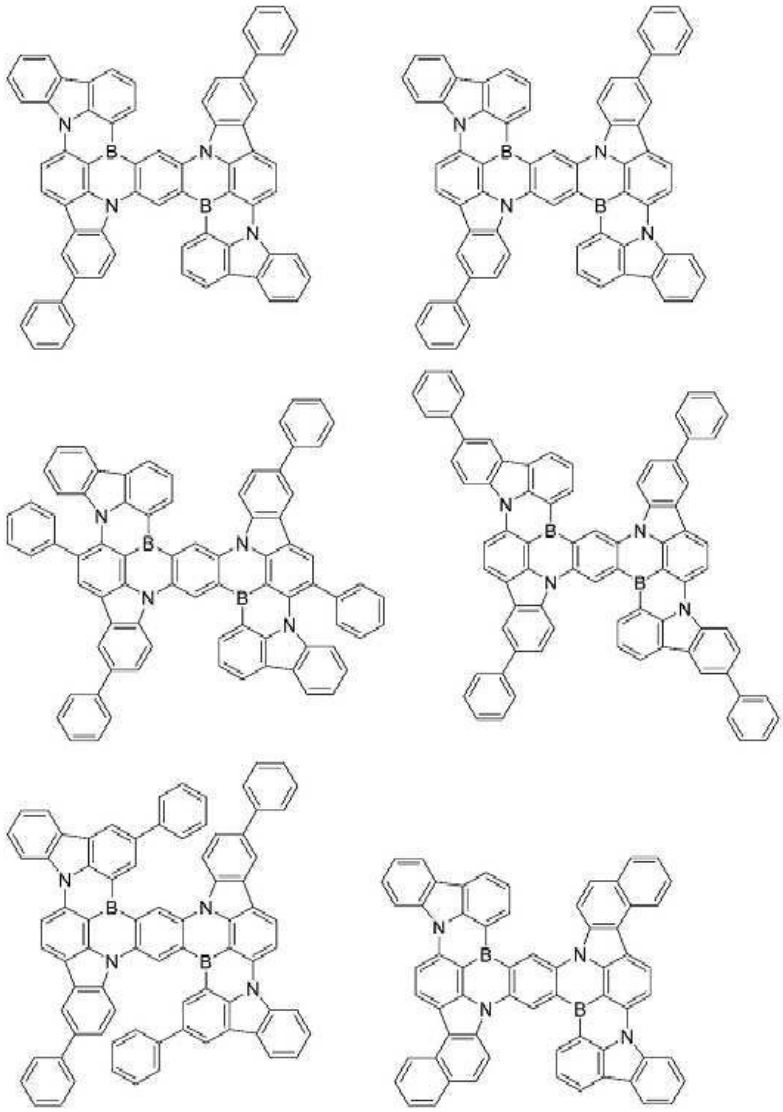
[0541] 

[0542] 일반식 (25)에 있어서, Ar^{91}~Ar^{94}는 각각 독립적으로 치환 혹은 무치환의 아릴기, 또는 치환 혹은 무치환의 헤테로아릴기를 나타낸다. n91 및 n93은 각각 독립적으로 0~4의 정수를 나타내고, n92 및 n94는 각각 독립적으로 0~3의 정수를 나타낸다. α환, β환, γ환, δ환은 치환되어 있어도 되고, 적어도 하나의 환은, 치환 혹은 무치환의 아릴기로 치환되어 있거나, 치환되어 있어도 되는 벤젠환이 축합되어 있거나, 치환 혹은 무치환의 벤조퓨란의 퓨란환 또는 치환 혹은 무치환의 벤조싸이오펜의 싸이오펜환이 축합되어 있다. A^1, A^2는, 각각 독립적으로 수소 원자, 중수소 원자 또는 치환기를 나타낸다.

[0543] 본 발명의 일 양태에서는, n91~n94는 0~2의 정수이다. 본 발명의 일 양태에서는, n91과 n93은 동일한 수이며, n92와 n94는 동일한 수이다. n91~n94는 모두가 동일한 수여도 되고, 예를 들면 모두 0이어도 되며, 모두 1이어도 된다. Ar^{91}~Ar^{94}의 바람직한 기에 대해서는, 일반식 (16a)의 Ar^1~Ar^4의 대응하는 기재를 참조할 수 있다. 본 발명의 일 양태에서는, α환과 γ환은 동일한 치환기를 갖고 있거나, 동일한 축합 구조를 갖고 있으며, β환과 δ환은 동일한 치환기를 갖고 있거나, 동일한 축합 구조를 갖고 있다. 본 발명의 일 양태에서는, β환과 δ환이 함께 치환 혹은 무치환의 아릴기로 치환되어 있거나, 치환되어 있어도 되는 벤젠환이 축합되어 있거나, 치환 혹은 무치환의 벤조퓨란의 퓨란환 또는 치환 혹은 무치환의 벤조싸이오펜의 싸이오펜환이 축합되어 있다. 본 발명의 일 양태에서는, α환과 γ환이 함께 치환 혹은 무치환의 아릴기로 치환되어 있거나, 치환되어 있어도 되는 벤젠환이 축합되어 있거나, 치환 혹은 무치환의 벤조퓨란의 퓨란환 또는 치환 혹은 무치환의 벤조싸이오펜의 싸이오펜환이 축합되어 있다. 본 발명의 일 양태에서는, α환, β환, γ환, δ환의 모두가, 치환 혹은 무치환의 아릴기로 치환되어 있거나, 치환되어 있어도 되는 벤젠환이 축합되어 있거나, 치환 혹은 무치환의 벤조퓨란의 퓨란환 또는 치환 혹은 무치환의 벤조싸이오펜의 싸이오펜환이 축합되어 있다. A^1 및 A^2의 설명과 바람직한 범위에 대해서는, 일반식 (16)의 대응하는 기재를 참조할 수 있다.

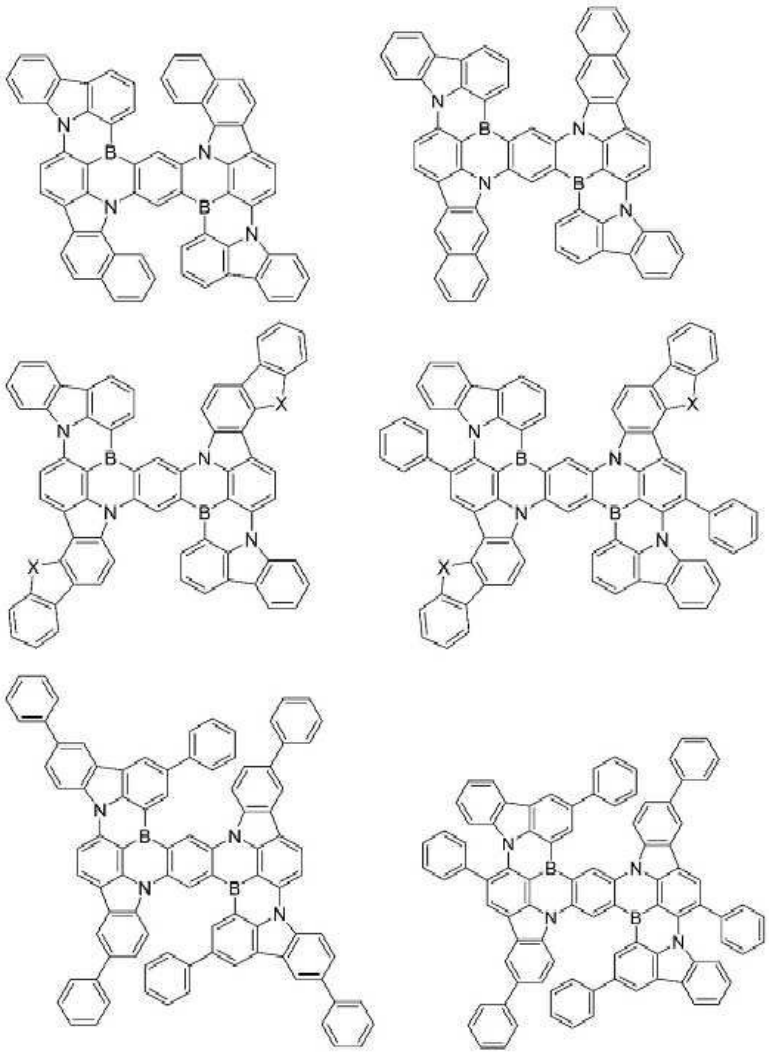
[0544] 이하에 있어서, 일반식 (25)로 나타나는 화합물의 구체예를 든다. 본 발명에서 이용할 수 있는 일반식 (25)의 화합물은, 하기의 구체예에 의하여 한정적으로 해석되는 경우는 없다.

[0545] [화학식 74-1]



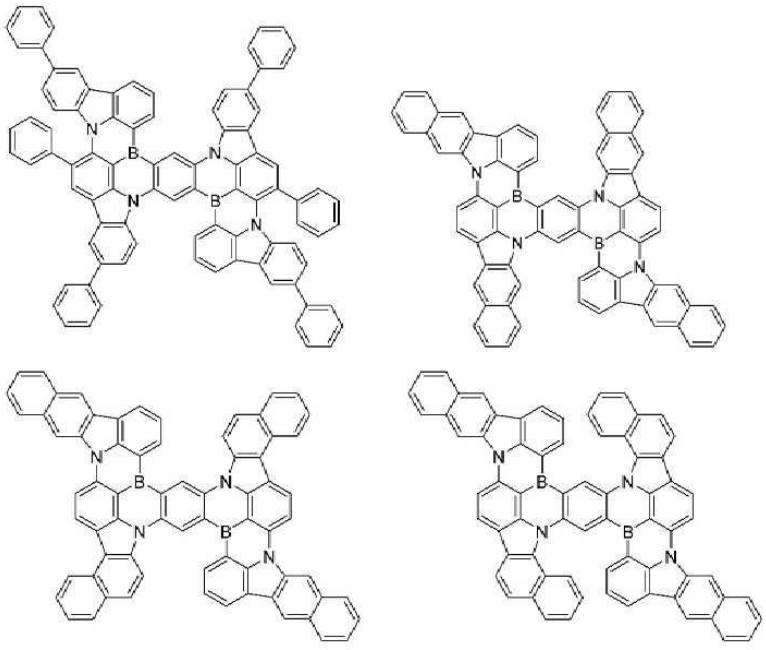
[0546]

[0547] [화학식 74-2]



[0548]

[0549] [화학식 74-3]



[0550]

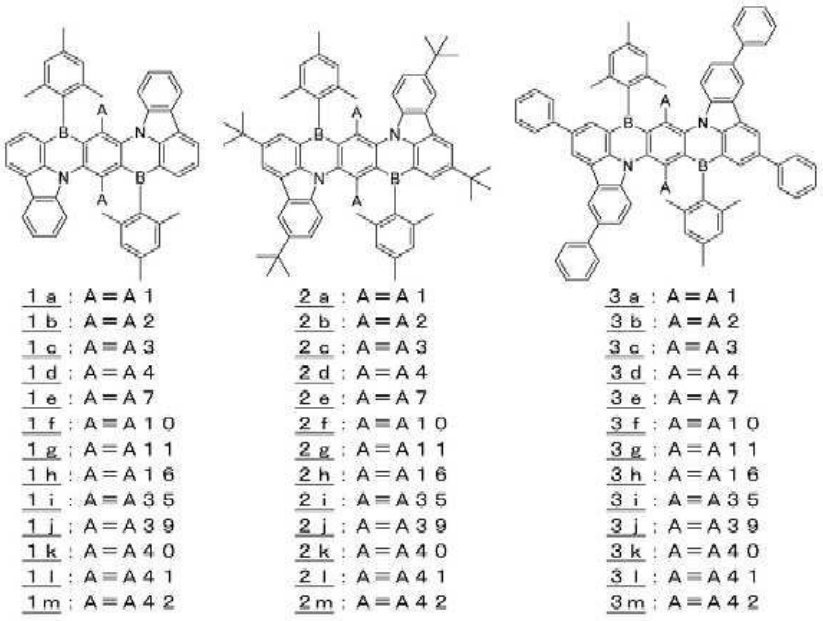
[0551] 본 발명의 일 양태에서는, 상기 골격 (16a)~(25)는, 다른 환이 축합되어 있지 않은 골격이다. 본 발명의 일 양

태에서는, 상기 골격 (16a)~(25)는, 다른 환이 축합되어 있어도 되는 골격이다. 여기에서 말하는 다른 환에 대해서는, 상기의 R^1과 R^2, R^2와 R^3, R^3과 R^4, R^4와 R^5, R^5와 R^6, R^6과 R^7, R^8과 R^9, R^9와 R^{10}, R^{10}과 R^{11}, R^{11}과 R^{12}, R^{13}과 R^{14}, R^{14}와 R^{15}, R^{15}와 R^{16}, R^{16}과 R^{17}, R^{18}과 R^{19}, R^{19}와 R^{20}, R^{20}과 R^{21}, R^{22}와 R^{23}, R^{23}과 R^{24}, R^{24}와 R^{25}, R^{25}와 R^{26}이 서로 결합하여 형성하는 환상 구조의 기재를 참조할 수 있다.

[0552] 본 발명의 일 양태에서는, 일반식 (16)의 A^1과 A^2가 억셉터성기이다. 예를 들면, A^1과 A^2의 위치가 억셉터성기이며, 골격 (16a)~(25) 중 어느 하나를 갖는 화합물을 들 수 있다. 억셉터성기의 설명과 구체예에 대해서는, 상기의 일반식 (16)의 A^1과 A^2의 억셉터성기의 설명과 구체예를 참조할 수 있다.

[0553] 이하에 있어서, A^1과 A^2가 억셉터성기인 화합물의 구체예를 든다. 본 발명에서 이용할 수 있는 A^1과 A^2가 억셉터성기인 화합물은, 하기의 구체예에 의하여 한정적으로 해석되는 경우는 없다. 이하의 구체예는, A^1과 A^2가 모두 "A"인 구조를 갖고 있으며, 그 "A"를 개별적으로 특정함으로써 각 화합물의 구조를 특정하고 있다.

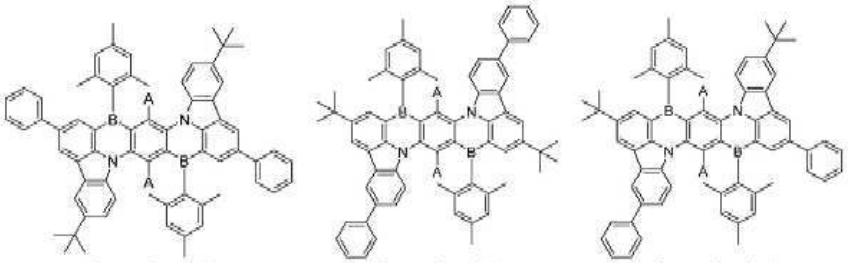
[0554] [화학식 75-1]



1a : A=A1
1b : A=A2
1c : A=A3
1d : A=A4
1e : A=A7
1f : A=A10
1g : A=A11
1h : A=A16
1i : A=A35
1j : A=A39
1k : A=A40
1l : A=A41
1m : A=A42

2a : A=A1
2b : A=A2
2c : A=A3
2d : A=A4
2e : A=A7
2f : A=A10
2g : A=A11
2h : A=A16
2i : A=A35
2j : A=A39
2k : A=A40
2l : A=A41
2m : A=A42

3a : A=A1
3b : A=A2
3c : A=A3
3d : A=A4
3e : A=A7
3f : A=A10
3g : A=A11
3h : A=A16
3i : A=A35
3j : A=A39
3k : A=A40
3l : A=A41
3m : A=A42



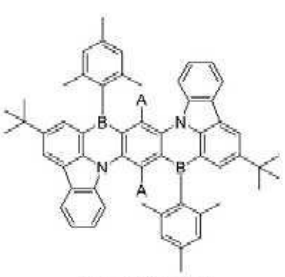
4a : A=A1
4b : A=A2
4c : A=A3
4d : A=A4
4e : A=A7
4f : A=A10
4g : A=A11
4h : A=A16
4i : A=A35
4j : A=A39
4k : A=A40
4l : A=A41
4m : A=A42

5a : A=A1
5b : A=A2
5c : A=A3
5d : A=A4
5e : A=A7
5f : A=A10
5g : A=A11
5h : A=A16
5i : A=A35
5j : A=A39
5k : A=A40
5l : A=A41
5m : A=A42

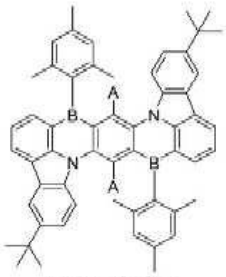
6a : A=A1
6b : A=A2
6c : A=A3
6d : A=A4
6e : A=A7
6f : A=A10
6g : A=A11
6h : A=A16
6i : A=A35
6j : A=A39
6k : A=A40
6l : A=A41
6m : A=A42

[0555]

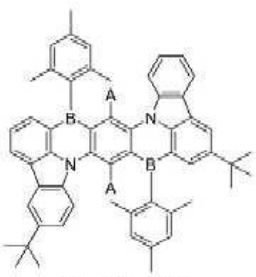
[0556] [화학식 75-2]



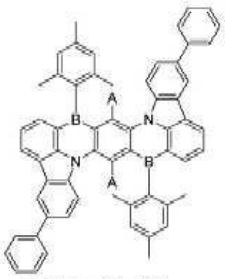
7a : A=A1
7b : A=A2
7c : A=A3
7d : A=A4
7e : A=A7
7f : A=A10
7g : A=A11
7h : A=A16
7i : A=A35
7j : A=A39
7k : A=A40
7l : A=A41
7m : A=A42



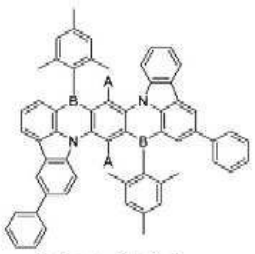
8a : A=A1
8b : A=A2
8c : A=A3
8d : A=A4
8e : A=A7
8f : A=A10
8g : A=A11
8h : A=A16
8i : A=A35
8j : A=A39
8k : A=A40
8l : A=A41
8m : A=A42



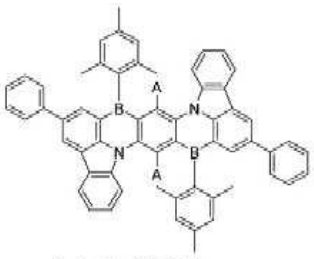
9a : A=A1
9b : A=A2
9c : A=A3
9d : A=A4
9e : A=A7
9f : A=A10
9g : A=A11
9h : A=A16
9i : A=A35
9j : A=A39
9k : A=A40
9l : A=A41
9m : A=A42



10a : A=A1
10b : A=A2
10c : A=A3
10d : A=A4
10e : A=A7
10f : A=A10
10g : A=A11
10h : A=A16
10i : A=A35
10j : A=A39
10k : A=A40
10l : A=A41
10m : A=A42



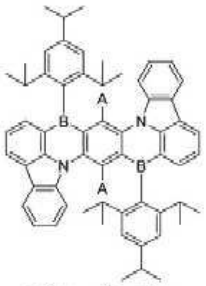
11a : A=A1
11b : A=A2
11c : A=A3
11d : A=A4
11e : A=A7
11f : A=A10
11g : A=A11
11h : A=A16
11i : A=A35
11j : A=A39
11k : A=A40
11l : A=A41
11m : A=A42



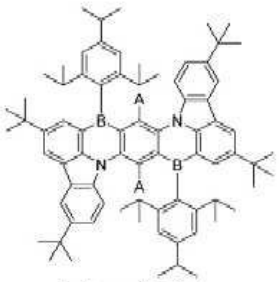
12a : A=A1
12b : A=A2
12c : A=A3
12d : A=A4
12e : A=A7
12f : A=A10
12g : A=A11
12h : A=A16
12i : A=A35
12j : A=A39
12k : A=A40
12l : A=A41
12m : A=A42

[0557]

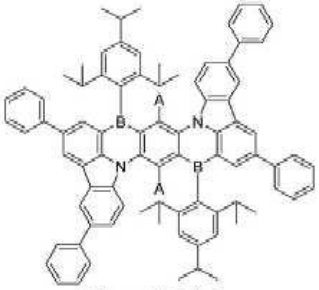
[0558] [화학식 75-3]



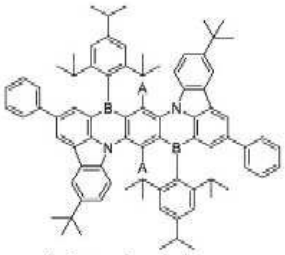
13a : A=A1
13b : A=A2
13c : A=A3
13d : A=A4
13e : A=A7
13f : A=A10
13g : A=A11
13h : A=A16
13i : A=A35
13j : A=A39
13k : A=A40
13l : A=A41
13m : A=A42



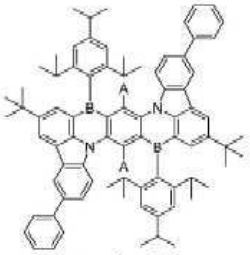
14a : A=A1
14b : A=A2
14c : A=A3
14d : A=A4
14e : A=A7
14f : A=A10
14g : A=A11
14h : A=A16
14i : A=A35
14j : A=A39
14k : A=A40
14l : A=A41
14m : A=A42



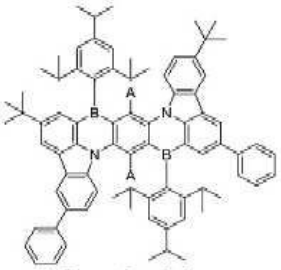
15a : A=A1
15b : A=A2
15c : A=A3
15d : A=A4
15e : A=A7
15f : A=A10
15g : A=A11
15h : A=A16
15i : A=A35
15j : A=A39
15k : A=A40
15l : A=A41
15m : A=A42



16a : A=A1
16b : A=A2
16c : A=A3
16d : A=A4
16e : A=A7
16f : A=A10
16g : A=A11
16h : A=A16
16i : A=A35
16j : A=A39
16k : A=A40
16l : A=A41
16m : A=A42



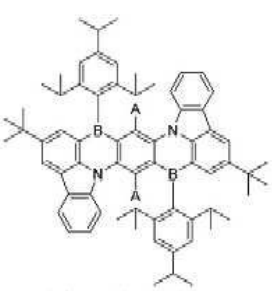
17a : A=A1
17b : A=A2
17c : A=A3
17d : A=A4
17e : A=A7
17f : A=A10
17g : A=A11
17h : A=A16
17i : A=A35
17j : A=A39
17k : A=A40
17l : A=A41
17m : A=A42



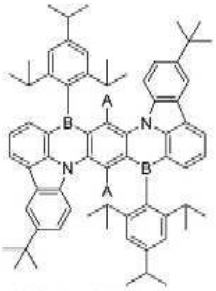
18a : A=A1
18b : A=A2
18c : A=A3
18d : A=A4
18e : A=A7
18f : A=A10
18g : A=A11
18h : A=A16
18i : A=A35
18j : A=A39
18k : A=A40
18l : A=A41
18m : A=A42

[0559]

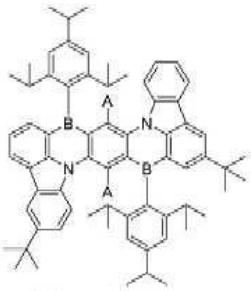
[0560] [화학식 75-4]



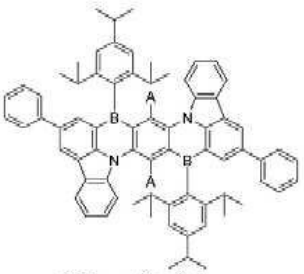
19a : A=A1
19b : A=A2
19c : A=A3
19d : A=A4
19e : A=A7
19f : A=A10
19g : A=A11
19h : A=A16
19i : A=A35
19j : A=A39
19k : A=A40
19l : A=A41
19m : A=A42



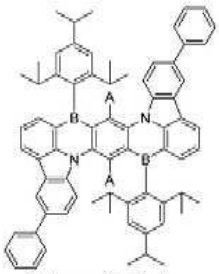
20a : A=A1
20b : A=A2
20c : A=A3
20d : A=A4
20e : A=A7
20f : A=A10
20g : A=A11
20h : A=A16
20i : A=A35
20j : A=A39
20k : A=A40
20l : A=A41
20m : A=A42



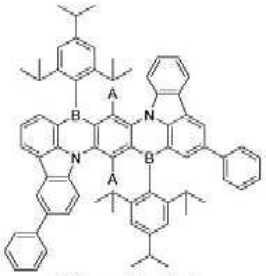
21a : A=A1
21b : A=A2
21c : A=A3
21d : A=A4
21e : A=A7
21f : A=A10
21g : A=A11
21h : A=A16
21i : A=A35
21j : A=A39
21k : A=A40
21l : A=A41
21m : A=A42



22a : A=A1
22b : A=A2
22c : A=A3
22d : A=A4
22e : A=A7
22f : A=A10
22g : A=A11
22h : A=A16
22i : A=A35
22j : A=A39
22k : A=A40
22l : A=A41
22m : A=A42



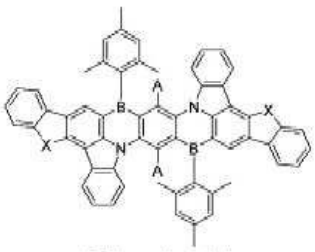
23a : A=A1
23b : A=A2
23c : A=A3
23d : A=A4
23e : A=A7
23f : A=A10
23g : A=A11
23h : A=A16
23i : A=A35
23j : A=A39
23k : A=A40
23l : A=A41
23m : A=A42



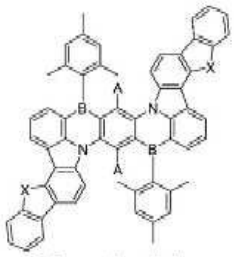
24a : A=A1
24b : A=A2
24c : A=A3
24d : A=A4
24e : A=A7
24f : A=A10
24g : A=A11
24h : A=A16
24i : A=A35
24j : A=A39
24k : A=A40
24l : A=A41
24m : A=A42

[0561]

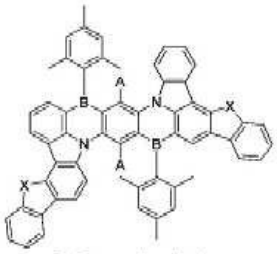
[0562] [화학식 75-5]



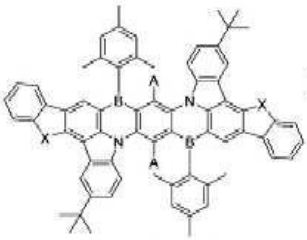
25a : A=A1
25b : A=A2
25c : A=A3
25d : A=A4
25e : A=A7
25f : A=A10
25g : A=A11
25h : A=A16
25i : A=A35
25j : A=A39
25k : A=A40
25l : A=A41
25m : A=A42



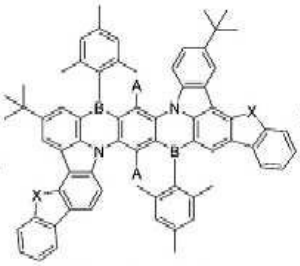
26a : A=A1
26b : A=A2
26c : A=A3
26d : A=A4
26e : A=A7
26f : A=A10
26g : A=A11
26h : A=A16
26i : A=A35
26j : A=A39
26k : A=A40
26l : A=A41
26m : A=A42



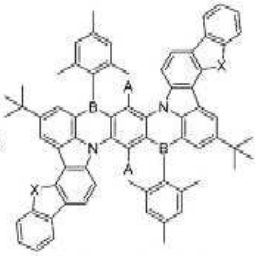
27a : A=A1
27b : A=A2
27c : A=A3
27d : A=A4
27e : A=A7
27f : A=A10
27g : A=A11
27h : A=A16
27i : A=A35
27j : A=A39
27k : A=A40
27l : A=A41
27m : A=A42



28a : A=A1
28b : A=A2
28c : A=A3
28d : A=A4
28e : A=A7
28f : A=A10
28g : A=A11
28h : A=A16
28i : A=A35
28j : A=A39
28k : A=A40
28l : A=A41
28m : A=A42



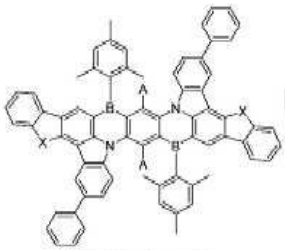
29a : A=A1
29b : A=A2
29c : A=A3
29d : A=A4
29e : A=A7
29f : A=A10
29g : A=A11
29h : A=A16
29i : A=A35
29j : A=A39
29k : A=A40
29l : A=A41
29m : A=A42



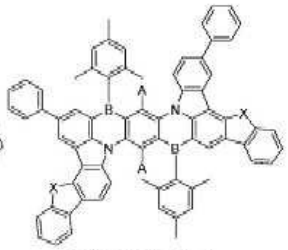
30a : A=A1
30b : A=A2
30c : A=A3
30d : A=A4
30e : A=A7
30f : A=A10
30g : A=A11
30h : A=A16
30i : A=A35
30j : A=A39
30k : A=A40
30l : A=A41
30m : A=A42

[0563]

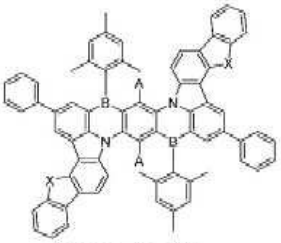
[0564] [화학식 75-6]



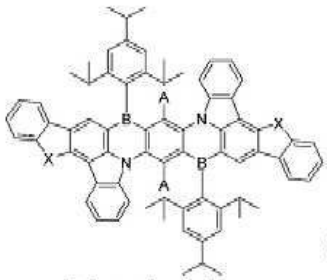
31a : A=A1
31b : A=A2
31c : A=A3
31d : A=A4
31e : A=A7
31f : A=A10
31g : A=A11
31h : A=A16
31i : A=A35
31j : A=A39
31k : A=A40
31l : A=A41
31m : A=A42



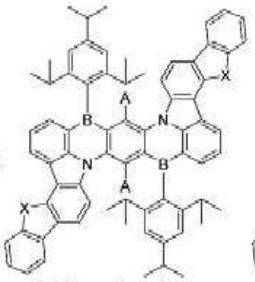
32a : A=A1
32b : A=A2
32c : A=A3
32d : A=A4
32e : A=A7
32f : A=A10
32g : A=A11
32h : A=A16
32i : A=A35
32j : A=A39
32k : A=A40
32l : A=A41
32m : A=A42



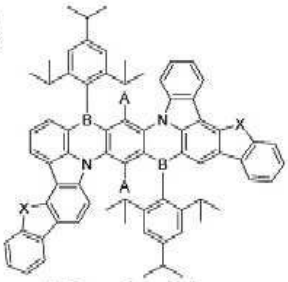
33a : A=A1
33b : A=A2
33c : A=A3
33d : A=A4
33e : A=A7
33f : A=A10
33g : A=A11
33h : A=A16
33i : A=A35
33j : A=A39
33k : A=A40
33l : A=A41
33m : A=A42



34a : A=A1
34b : A=A2
34c : A=A3
34d : A=A4
34e : A=A7
34f : A=A10
34g : A=A11
34h : A=A16
34i : A=A35
34j : A=A39
34k : A=A40
34l : A=A41
34m : A=A42



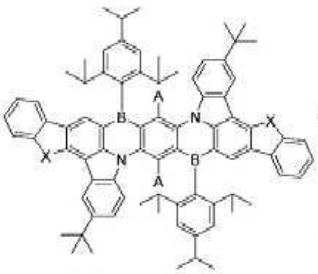
35a : A=A1
35b : A=A2
35c : A=A3
35d : A=A4
35e : A=A7
35f : A=A10
35g : A=A11
35h : A=A16
35i : A=A35
35j : A=A39
35k : A=A40
35l : A=A41
35m : A=A42



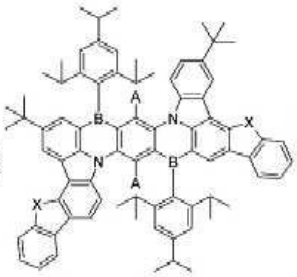
36a : A=A1
36b : A=A2
36c : A=A3
36d : A=A4
36e : A=A7
36f : A=A10
36g : A=A11
36h : A=A16
36i : A=A35
36j : A=A39
36k : A=A40
36l : A=A41
36m : A=A42

[0565]

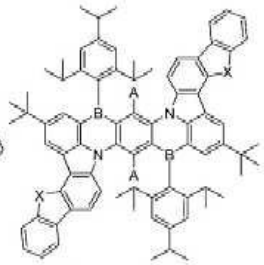
[0566] [화학식 75-7]



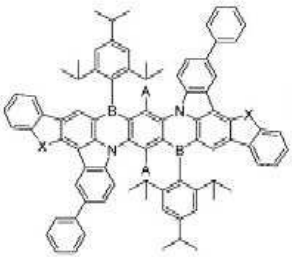
37a : A=A1
37b : A=A2
37c : A=A3
37d : A=A4
37e : A=A7
37f : A=A10
37g : A=A11
37h : A=A16
37i : A=A35
37j : A=A39
37k : A=A40
37l : A=A41
37m : A=A42



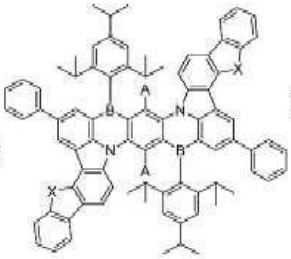
38a : A=A1
38b : A=A2
38c : A=A3
38d : A=A4
38e : A=A7
38f : A=A10
38g : A=A11
38h : A=A16
38i : A=A35
38j : A=A39
38k : A=A40
38l : A=A41
38m : A=A42



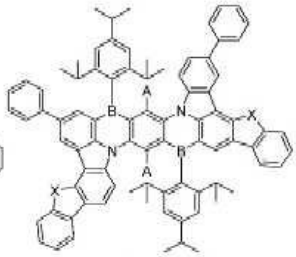
39a : A=A1
39b : A=A2
39c : A=A3
39d : A=A4
39e : A=A7
39f : A=A10
39g : A=A11
39h : A=A16
39i : A=A35
39j : A=A39
39k : A=A40
39l : A=A41
39m : A=A42



40a : A=A1
40b : A=A2
40c : A=A3
40d : A=A4
40e : A=A7
40f : A=A10
40g : A=A11
40h : A=A16
40i : A=A35
40j : A=A39
40k : A=A40
40l : A=A41
40m : A=A42



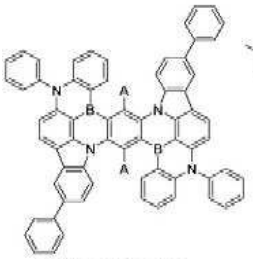
41a : A=A1
41b : A=A2
41c : A=A3
41d : A=A4
41e : A=A7
41f : A=A10
41g : A=A11
41h : A=A16
41i : A=A35
41j : A=A39
41k : A=A40
41l : A=A41
41m : A=A42



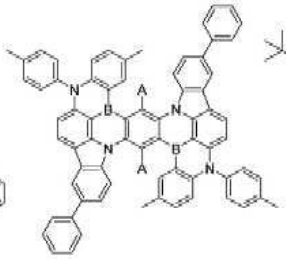
42a : A=A1
42b : A=A2
42c : A=A3
42d : A=A4
42e : A=A7
42f : A=A10
42g : A=A11
42h : A=A16
42i : A=A35
42j : A=A39
42k : A=A40
42l : A=A41
42m : A=A42

[0567]

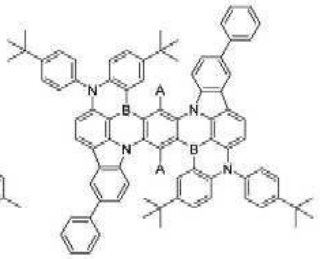
[0568] [화학식 75-8]



43a : A=A1
43b : A=A2
43c : A=A3
43d : A=A4
43e : A=A7
43f : A=A10
43g : A=A11
43h : A=A16
43i : A=A35
43j : A=A39
43k : A=A40
43l : A=A41
43m : A=A42



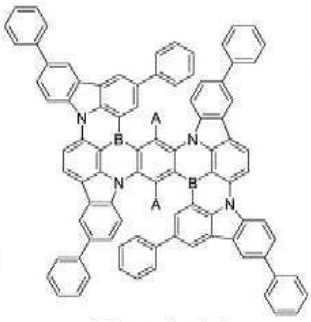
44a : A=A1
44b : A=A2
44c : A=A3
44d : A=A4
44e : A=A7
44f : A=A10
44g : A=A11
44h : A=A16
44i : A=A35
44j : A=A39
44k : A=A40
44l : A=A41
44m : A=A42



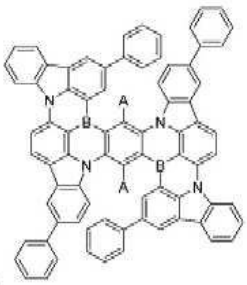
45a : A=A1
45b : A=A2
45c : A=A3
45d : A=A4
45e : A=A7
45f : A=A10
45g : A=A11
45h : A=A16
45i : A=A35
45j : A=A39
45k : A=A40
45l : A=A41
45m : A=A42



46a : A=A1
46b : A=A2
46c : A=A3
46d : A=A4
46e : A=A7
46f : A=A10
46g : A=A11
46h : A=A16
46i : A=A35
46j : A=A39
46k : A=A40
46l : A=A41
46m : A=A42



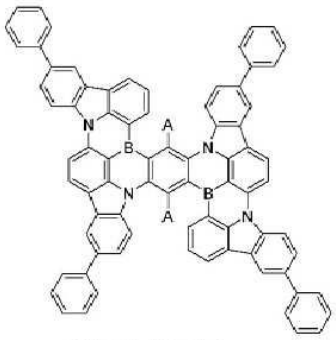
47a : A=A1
47b : A=A2
47c : A=A3
47d : A=A4
47e : A=A7
47f : A=A10
47g : A=A11
47h : A=A16
47i : A=A35
47j : A=A39
47k : A=A40
47l : A=A41
47m : A=A42



48a : A=A1
48b : A=A2
48c : A=A3
48d : A=A4
48e : A=A7
48f : A=A10
48g : A=A11
48h : A=A16
48i : A=A35
48j : A=A39
48k : A=A40
48l : A=A41
48m : A=A42

[0569]

[0570] [화학식 75-9]



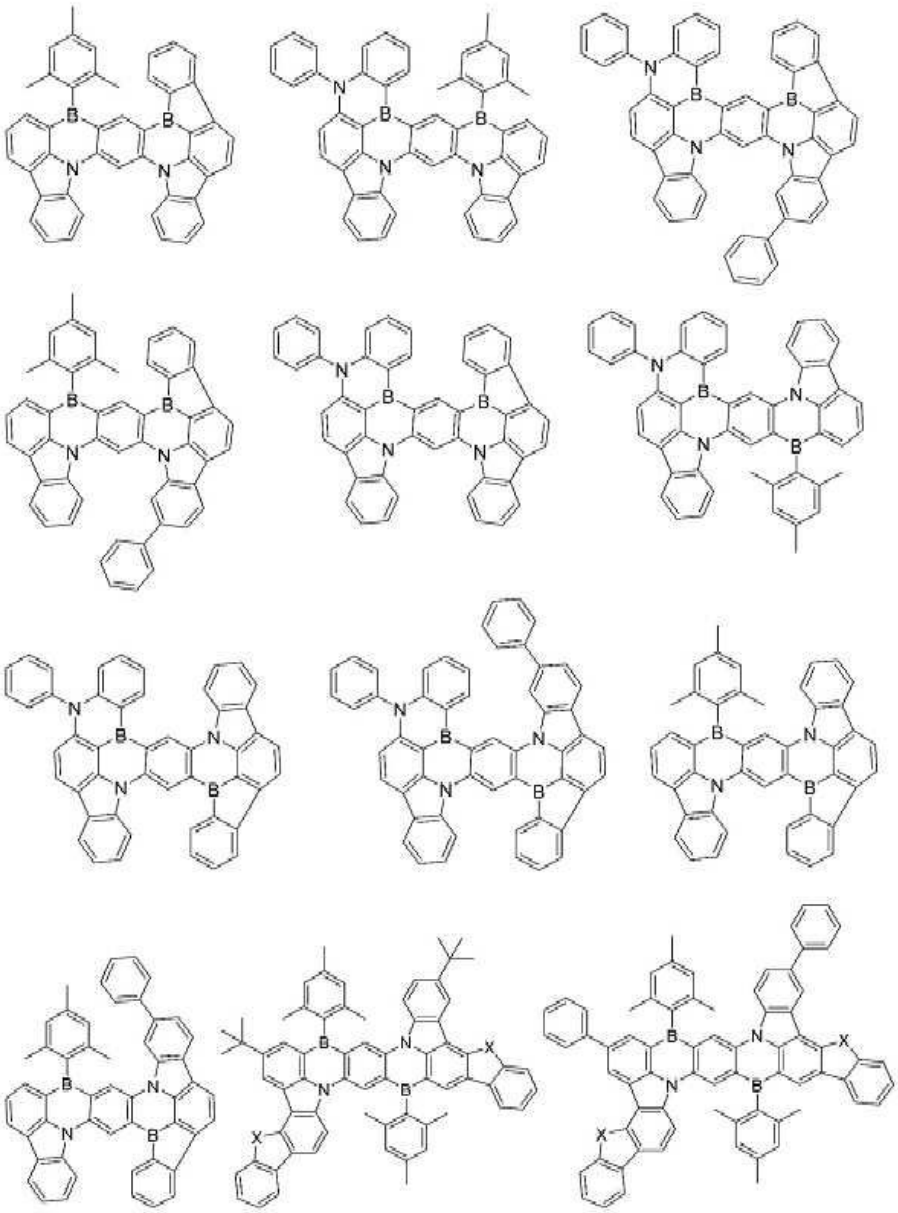
49a : A=A1
49b : A=A2
49c : A=A3
49d : A=A4
49e : A=A7
49f : A=A10
49g : A=A11
49h : A=A16
49i : A=A35
49j : A=A39
49k : A=A40
49l : A=A41
49m : A=A42

[0571]

[0572] 본 발명의 일 양태에서는, 일반식 (16)으로 나타나는 화합물로서 회전 대칭 구조를 갖는 화합물을 선택한다. 본 발명의 일 양태에서는, 일반식 (16)으로 나타나는 화합물로서 비대칭 구조를 갖는 화합물을 선택한다. 본 발명의 일 양태에서는, 일반식 (16)으로 나타나는 화합물로서 비대칭 구조를 갖는 화합물을 선택한다.

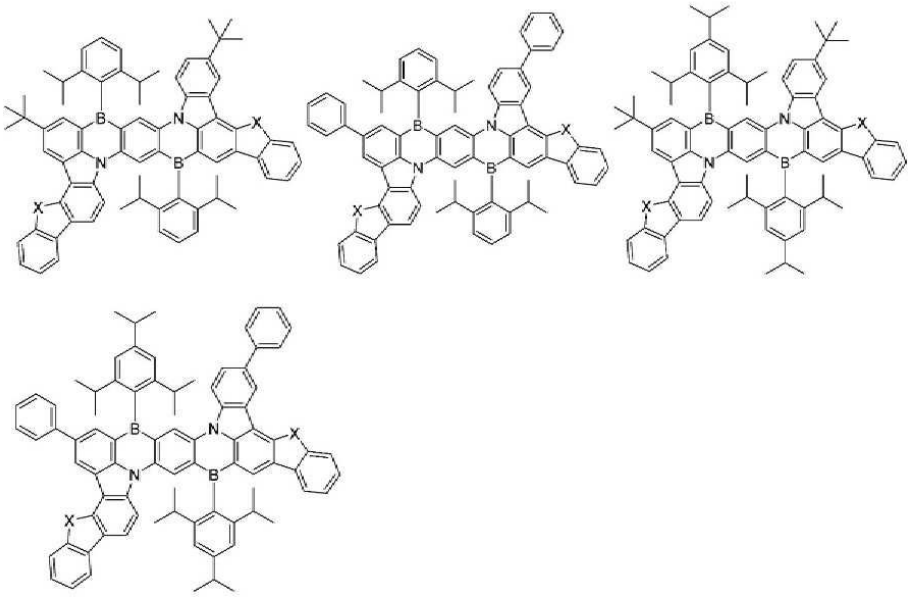
[0573] 이하에 비대칭 골격을 갖는 화합물의 구체예를 든다. 본 발명에서 이용할 수 있는 비대칭 골격을 갖는 화합물이나 비대칭 구조를 갖는 화합물은, 하기의 구체예에 의하여 한정적으로 해석되는 경우는 없다. X를 포함하는 구체예에 대해서는, 분자 내의 모든 X가 산소 원자인 화합물과, 분자 내의 모든 X가 황 원자인 화합물이 각각 개시되어 있는 것으로 한다. 분자 내의 X의 일부가 산소 원자이고 그 외가 황 원자인 화합물도 채용할 수 있다.

[0574] [화학식 76-1]



[0575]

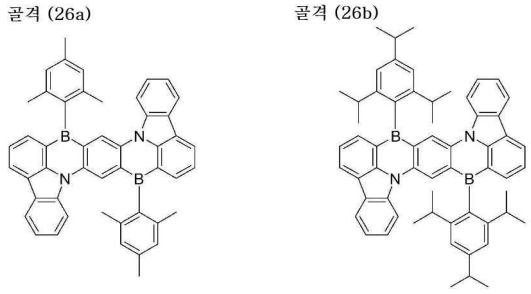
[0576] [화학식 76-2]



[0577]

[0578] 본 발명의 특히 바람직한 양태에서는, 제3 유기 화합물로서, 하기의 골격 (26a) 또는 골격 (26b)에 tert-뷰틸기 및 페닐기 중 적어도 일방을 도입한 화합물을 선택한다.

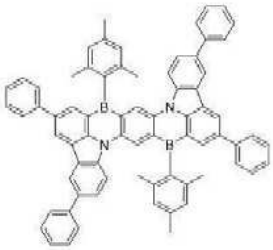
[0579] [화학식 77]



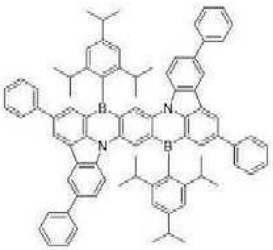
[0580]

[0581] 이하에 있어서, 골격 (26a) 또는 골격 (26b)에 tert-뷰틸기 및 페닐기 중 적어도 일방을 도입한 화합물의 구체예를 든다. 본 발명에서 이용할 수 있는 일반식 (16)의 화합물은, 하기의 구체예에 의하여 한정적으로 해석되는 경우는 없다.

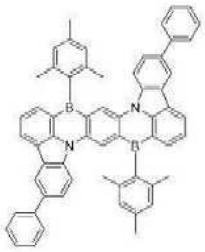
[0582] [화학식 78-1]



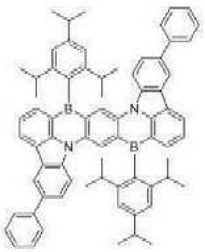
F101



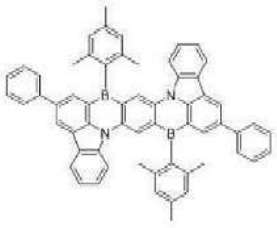
F102



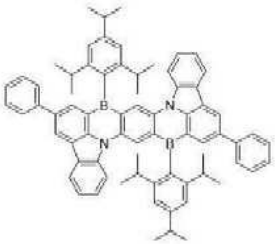
F103



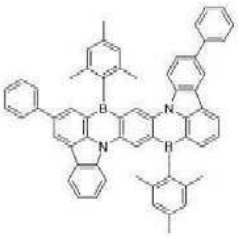
F104



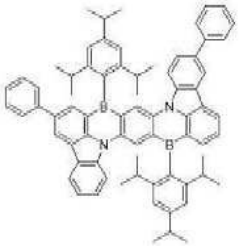
F105



F106



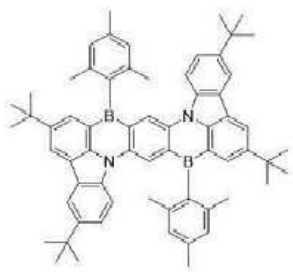
F107



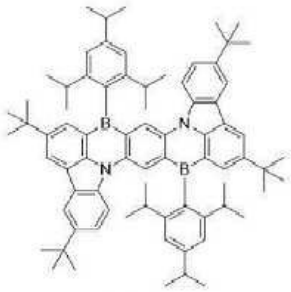
F108

[0583]

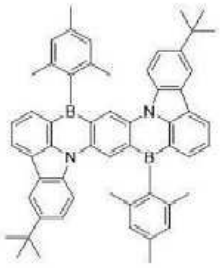
[0584] [화학식 78-2]



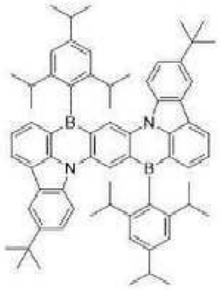
F109



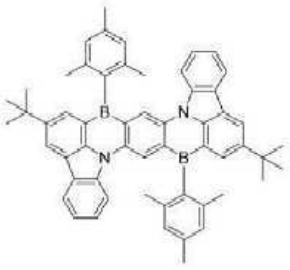
F110



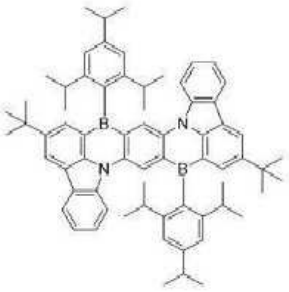
F111



F112



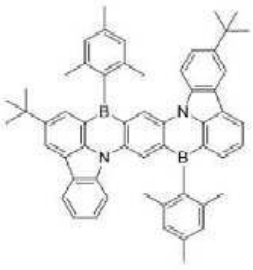
F113



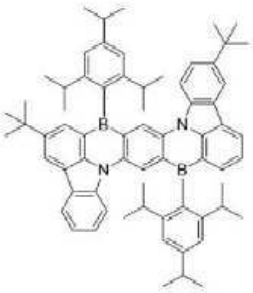
F114

[0585]

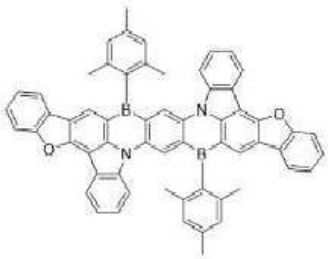
[0586] [화학식 78-3]



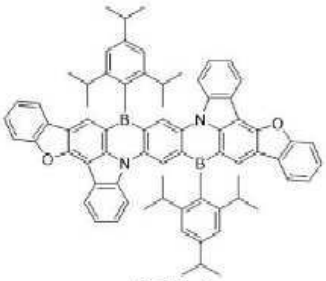
F115



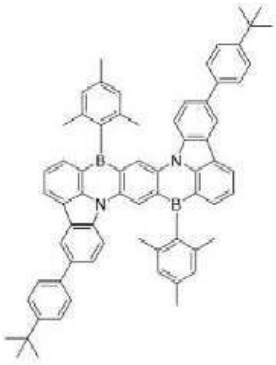
F116



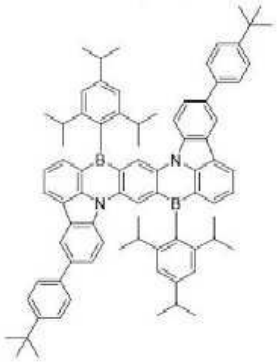
F117



F118



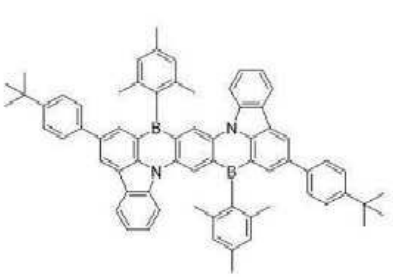
F119



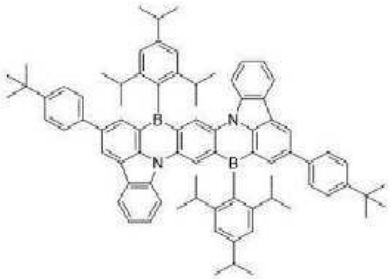
F120

[0587]

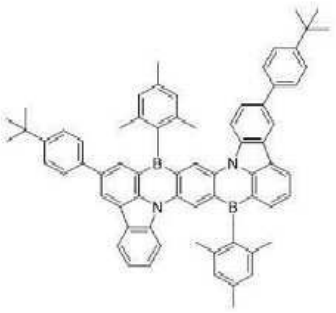
[0588] [화학식 78-4]



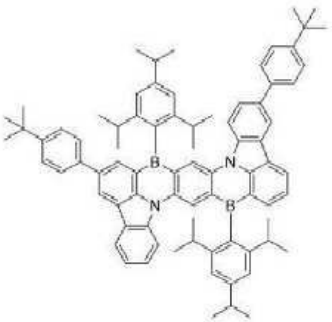
F121



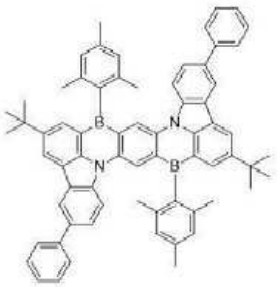
F122



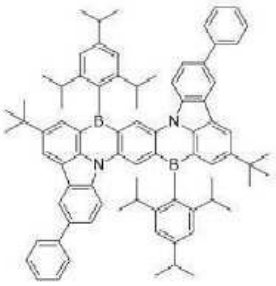
F123



F124



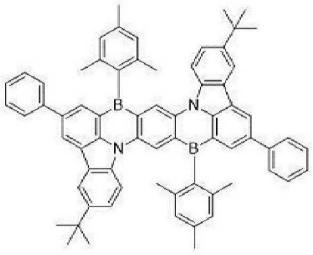
F125



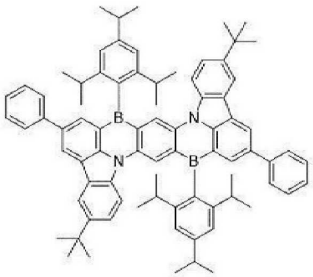
F126

[0589]

[0590] [화학식 78-5]



F127



F128

[0591]

[0592] 일반식 (16)으로 나타나는 화합물의 분자량은, 예를 들면 일반식 (16)으로 나타나는 화합물을 포함하는 유기층을 증착법에 의하여 제막하여 이용하는 것을 의도하는 경우에는, 1500 이하인 것이 바람직하고, 1200 이하인 것이 보다 바람직하며, 1000 이하인 것이 더 바람직하고, 900 이하인 것이 보다 더 바람직하다. 분자량의 하한값은, 일반식 (16)으로 나타나는 화합물군의 최소 화합물의 분자량이다. 바람직하게는 624 이상이다.

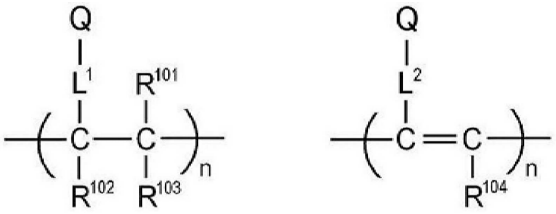
[0593] 일반식 (16)으로 나타나는 화합물은, 분자량에 관계없이 도포법으로 성막해도 된다. 도포법을 이용하면, 분자량이 비교적 큰 화합물이더라도 성막하는 것이 가능하다. 일반식 (16)으로 나타나는 화합물은 유기 용매에 용해되기 쉽다는 이점이 있다. 이 때문에, 일반식 (16)으로 나타나는 화합물은 도포법을 적용하기 쉬운 데다가, 정제하여 순도를 높이기 쉽다.

[0594] 본 발명을 응용하여, 분자 내에 일반식 (16)으로 나타나는 구조를 복수 개 포함하는 화합물을, 발광 재료로서 이용하는 것도 생각된다.

[0595] 예를 들면, 일반식 (16)으로 나타나는 구조 중에 미리 중합성기를 존재시켜 두고, 그 중합성기를 중합시킴으로써 얻어지는 중합체를, 발광 재료로서 이용하는 것이 생각된다. 구체적으로는, 일반식 (16)으로 나타나는 구조 중 어느 하나에 중합성 관능기를 포함하는 모노머를 준비하고, 이것을 단독으로 중합시키거나, 다른 모노머와 함께 공중합시킴으로써, 반복 단위를 갖는 중합체를 얻어, 그 중합체를 발광 재료로서 이용하는 것이 생각된다. 혹은, 일반식 (16)으로 나타나는 화합물끼리를 커플링시킴으로써, 이량체나 삼량체를 얻어, 그들을 발광 재료로서 이용하는 것도 생각된다.

[0596] 일반식 (16)으로 나타나는 구조를 포함하는 반복 단위를 갖는 중합체의 예로서, 하기 일반식으로 나타나는 구조를 포함하는 중합체를 들 수 있다.

[0597] [화학식 79]

[0598] 

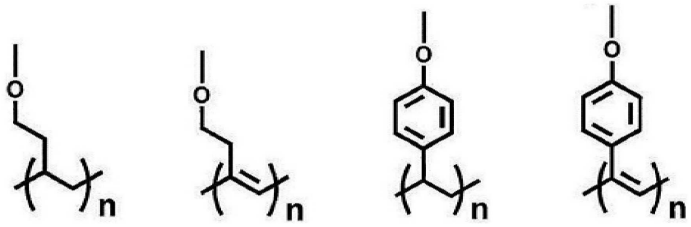
[0599] 상기 일반식에 있어서, Q는 일반식 (16)으로 나타나는 구조를 포함하는 기를 나타내고, L^1 및 L^2는 연결기를 나타낸다. 연결기의 탄소수는, 바람직하게는 0~20이고, 보다 바람직하게는 1~15이며, 더 바람직하게는 2~10이다. 연결기는 $-X^{11}-L^{11}-$로 나타나는 구조를 갖는 것인 것이 바람직하다. 여기에서, X^{11}은 산소 원자 또는 황 원자를 나타내고, 산소 원자인 것이 바람직하다. L^{11}은 연결기를 나타내며, 치환 혹은 무치환의 알킬렌기, 또는 치환 혹은 무치환의 아릴렌기인 것이 바람직하고, 탄소수 1~10의 치환 혹은 무치환의 알킬렌기, 또는 치환 혹은 무치환의 페닐렌기인 것이 보다 바람직하다.

[0600] R^{101}, R^{102}, R^{103} 및 R^{104}는, 각각 독립적으로 치환기를 나타낸다. 바람직하게는, 탄소수 1~6의 치환 혹은 무치환의 알킬기, 탄소수 1~6의 치환 혹은 무치환의 알콕시기, 할로젠 원자이고, 보다 바람직하게는 탄소수 1~3의 무치환의 알킬기, 탄소수 1~3의 무치환의 알콕시기, 불소 원자, 염소 원자이며, 더 바람직하게는 탄소수 1~3의 무치환의 알킬기, 탄소수 1~3의 무치환의 알콕시기이다.

[0601] L^1 및 L^2로 나타나는 연결기는, Q를 구성하는 일반식 (16)으로 나타나는 구조 중 어느 하나의 위치에 결합할 수 있다. 1개의 Q에 대하여 연결기가 2개 이상 연결하여 가교 구조나 그물코 구조를 형성하고 있어도 된다.

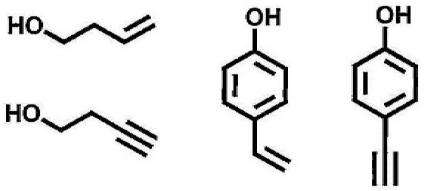
[0602] 반복 단위의 구체적인 구조예로서, 하기 식으로 나타나는 구조를 들 수 있다.

[0603] [화학식 80]

[0604] 

[0605] 이들 식을 포함하는 반복 단위를 갖는 중합체는, 일반식 (16)으로 나타나는 구조 중 어느 하나의 위치에 하이드록시기를 도입해 두고, 그것을 링커로서 하기 화합물을 반응시켜 중합성기를 도입하며, 그 중합성기를 중합시킴으로써 합성할 수 있다.

[0606] [화학식 81]



[0607]

[0608] 분자 내에 일반식 (16)으로 나타나는 구조를 포함하는 중합체는, 일반식 (16)으로 나타나는 구조를 갖는 반복 단위만으로 이루어지는 중합체여도 되고, 그 이외의 구조를 갖는 반복 단위를 포함하는 중합체여도 된다. 또, 중합체 중에 포함되는 일반식 (16)으로 나타나는 구조를 갖는 반복 단위는, 단일종이어도 되고, 2종 이상이어도 된다. 일반식 (16)으로 나타나는 구조를 갖지 않는 반복 단위로서는, 통상의 공중합에 이용되는 모노머로부터 유도되는 것을 들 수 있다. 예를 들면, 에틸렌, 스타이렌 등의 에틸렌성 불포화 결합을 갖는 모노머로부터 유도되는 반복 단위를 들 수 있다.

[0609] 일반식 (16)으로 나타나는 화합물은, 금속 원자를 포함하지 않는 것이 바람직하다. 여기에서 말하는 금속 원자에는 붕소 원자는 포함되지 않는다. 예를 들면, 일반식 (16)으로 나타나는 화합물로서, 탄소 원자, 수소 원자, 중수소 원자, 질소 원자, 산소 원자, 황 원자 및 붕소 원자로 이루어지는 군으로부터 선택되는 원자로 이루어지는 화합물을 선택할 수 있다. 예를 들면, 일반식 (16)으로 나타나는 화합물로서, 탄소 원자, 수소 원자, 중수소 원자, 질소 원자, 산소 원자 및 붕소 원자로 이루어지는 군으로부터 선택되는 원자로 이루어지는 화합물을 선택할 수 있다. 예를 들면, 일반식 (16)으로 나타나는 화합물로서, 탄소 원자, 수소 원자, 중수소 원자, 질소 원자, 황 원자 및 붕소 원자로 이루어지는 군으로부터 선택되는 원자로 이루어지는 화합물을 선택할 수 있다. 예를 들면, 일반식 (16)으로 나타나는 화합물로서, 탄소 원자, 수소 원자, 중수소 원자, 질소 원자 및 붕소 원자로 이루어지는 군으로부터 선택되는 원자로 이루어지는 화합물을 선택할 수 있다. 예를 들면, 일반식 (16)으로 나타나는 화합물로서, 탄소 원자, 수소 원자, 질소 원자, 산소 원자, 황 원자 및 붕소 원자로 이루어지는 군으로부터 선택되는 원자로 이루어지는 화합물을 선택할 수 있다.

[0610] 본 명세서에 있어서 "알킬기"는, 직쇄상, 분기상, 환상 중 어느 것이어도 된다. 또, 직쇄 부분과 환상 부분과 분기 부분 중 2종 이상이 혼재하고 있어도 된다. 알킬기의 탄소수는, 예를 들면 1 이상, 2 이상, 4 이상으로 할 수 있다. 또, 탄소수는 30 이하, 20 이하, 10 이하, 6 이하, 4 이하로 할 수 있다. 알킬기의 구체예로서, 메틸기, 에틸기, n-프로필기, 아이소프로필기, n-뷰틸기, 아이소뷰틸기, tert-뷰틸기, n-펜틸기, 아이소펜틸기, n-헥실기, 아이소헥실기, 2-에틸헥실기, n-헵틸기, 아이소헵틸기, n-옥틸기, 아이소옥틸기, n-노닐기, 아이소노닐기, n-데칸일기, 아이소데칸일기, 사이클로펜틸기, 사이클로헥실기, 사이클로헵틸기를 들 수 있다. 치환기인 알킬기는, 아릴기로 더 치환되어 있어도 된다.

[0611] "알켄일기"는, 직쇄상, 분기상, 환상 중 어느 것이어도 된다. 또, 직쇄 부분과 환상 부분과 분기 부분 중 2종 이상이 혼재하고 있어도 된다. 알켄일기의 탄소수는, 예를 들면 2 이상, 4 이상으로 할 수 있다. 또, 탄소수는 30 이하, 20 이하, 10 이하, 6 이하, 4 이하로 할 수 있다. 알켄일기의 구체예로서, 에텐일기, n-프로펜일기, 아이소프로펜일기, n-뷰텐일기, 아이소뷰텐일기, n-펜텐일기, 아이소펜텐일기, n-헥센일기, 아이소헥센일기, 2-에틸헥센일기를 들 수 있다. 치환기인 알켄일기는, 치환기로 더 치환되어 있어도 된다.

[0612] "아릴기" 및 "헤테로아릴기"는, 단환이어도 되고, 2개 이상의 환이 축합된 축합환이어도 된다. 축합환인 경우, 축합되어 있는 환의 수는 2~6인 것이 바람직하고, 예를 들면 2~4 중에서 선택할 수 있다. 환의 구체예로서, 벤젠환, 피리딘환, 피리미딘환, 트라이아진환, 나프탈렌환, 안트라센환, 페난트렌환, 트라이페닐렌환, 퀴놀린환, 피라진환, 퀴녹살린환, 나프티리딘환을 들 수 있고, 이들이 축합된 환이어도 된다. 아릴기 또는 헤테로아릴기의 구체예로서, 페닐기, 1-나프틸기, 2-나프틸기, 1-안트라센일기, 2-안트라센일기, 9-안트라센일기, 2-피리딜기, 3-피리딜기, 4-피리딜기를 들 수 있다. 아릴기의 환 골격 구성 원자수는 6~40인 것이 바람직하고, 6~20인 것이 보다 바람직하며, 6~14의 범위 내에서 선택하거나, 6~10의 범위 내에서 선택하거나 해도 된다. 헤테로아릴기의 환 골격 구성 원자수는 4~40인 것이 바람직하고, 5~20인 것이 보다 바람직하며, 5~14의 범위 내에서 선택하거나, 5~10의 범위 내에서 선택하거나 해도 된다. "아릴렌기" 및 "헤테로아릴기"는, 아릴기 및 헤테로아릴기의 설명에 있어서의 가수를 1에서 2로 대체한 것으로 할 수 있다.

[0613] 본 명세서에 있어서 "치환기군 A"란, 하이드록실기, 할로젠 원자(예를 들면 불소 원자, 염소 원자, 브로민 원자, 아이오딘 원자), 알킬기(예를 들면 탄소수 1~40), 알콕시기(예를 들면 탄소수 1~40), 알킬싸이오기(예를

들면 탄소수 1~40), 아릴기(예를 들면 탄소수 6~30), 아릴옥시기(예를 들면 탄소수 6~30), 아릴싸이오기(예를 들면 탄소수 6~30), 헤테로아릴기(예를 들면 환 골격 구성 원자수 5~30), 헤테로아릴옥시기(예를 들면 환 골격 구성 원자수 5~30), 헤테로아릴싸이오기(예를 들면 환 골격 구성 원자수 5~30), 아실기(예를 들면 탄소수 1~40), 알켄일기(예를 들면 탄소수 1~40), 알카인일기(예를 들면 탄소수 1~40), 알콕시카보닐기(예를 들면 탄소수 1~40), 아릴옥시카보닐기(예를 들면 탄소수 1~40), 헤테로아릴옥시카보닐기(예를 들면 탄소수 1~40), 실릴기(예를 들면 탄소수 1~40의 트라이알킬실릴기) 및 나이트로기로 이루어지는 군으로부터 선택되는 1개의 기 또는 2개 이상을 조합한 기를 의미한다.

[0614] 본 명세서에 있어서 "치환기군 B"란, 알킬기(예를 들면 탄소수 1~40), 알콕시기(예를 들면 탄소수 1~40), 아릴기(예를 들면 탄소수 6~30), 아릴옥시기(예를 들면 탄소수 6~30), 헤테로아릴기(예를 들면 환 골격 구성 원자수 5~30), 헤테로아릴옥시기(예를 들면 환 골격 구성 원자수 5~30), 다이아릴아미노기(예를 들면 탄소 원자수 0~20)로 이루어지는 군으로부터 선택되는 1개의 기 또는 2개 이상을 조합한 기를 의미한다.

[0615] 본 명세서에 있어서 "치환기군 C"란, 알킬기(예를 들면 탄소수 1~20), 아릴기(예를 들면 탄소수 6~22), 헤테로아릴기(예를 들면 환 골격 구성 원자수 5~20), 다이아릴아미노기(예를 들면 탄소 원자수 12~20)로 이루어지는 군으로부터 선택되는 1개의 기 또는 2개 이상을 조합한 기를 의미한다.

[0616] 본 명세서에 있어서 "치환기군 D"란, 알킬기(예를 들면 탄소수 1~20), 아릴기(예를 들면 탄소수 6~22) 및 헤테로아릴기(예를 들면 환 골격 구성 원자수 5~20)로 이루어지는 군으로부터 선택되는 1개의 기 또는 2개 이상을 조합한 기를 의미한다.

[0617] 본 명세서에 있어서 "치환기군 E"란, 알킬기(예를 들면 탄소수 1~20) 및 아릴기(예를 들면 탄소수 6~22)로 이루어지는 군으로부터 선택되는 1개의 기 또는 2개 이상을 조합한 기를 의미한다.

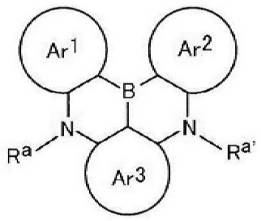
[0618] 본 명세서에 있어서 "치환기"나 "치환 혹은 무치환의"라고 기재되어 있는 경우의 치환기는, 예를 들면 치환기군 A 중에서 선택해도 되고, 치환기군 B 중에서 선택해도 되며, 치환기군 C 중에서 선택해도 되고, 치환기군 D 중에서 선택해도 되며, 치환기군 E 중에서 선택해도 된다.

[0619] 제3 유기 화합물로서, 이하의 화합물도 이용할 수 있다.

[0620] 본 발명의 바람직한 일 양태에서는, 제3 유기 화합물로서 하기 일반식 (27)로 나타나는 화합물을 이용한다.

[0621] 일반식 (27)

[0622] [화학식 82]

[0623] 

[0624] 상기 일반식 (27)에 있어서, Ar^1~Ar^3은 각각 독립적으로, 아릴환 또는 헤테로아릴환이며, 이들 환에 있어서의 적어도 하나의 수소 원자는 치환되어 있어도 되고, 또 환이 축합되어 있어도 된다. 수소 원자가 치환되어 있는 경우, 중수소 원자, 아릴기, 헤테로아릴기 및 알킬기로 이루어지는 군으로부터 선택되는 1개의 기나 2개 이상을 조합한 기로 치환되어 있는 것이 바람직하다. 또, 환이 축합되어 있는 경우는, 벤젠환이나 복소 방향환(예를 들면 퓨란환, 싸이오펜환, 피롤환 등)이 축합되어 있는 것이 바람직하다. R^a 및 $R^{a'}$는 각각 독립적으로 치환기를 나타내고, 바람직하게는, 중수소 원자, 아릴기, 헤테로아릴기 및 알킬기로 이루어지는 군으로부터 선택되는 1개의 기나 2개 이상을 조합한 기이다. R^a와 Ar^1, Ar^1과 Ar^2, Ar^2와 $R^{a'}$, $R^{a'}$와 Ar^3, Ar^3과 R^a는, 서로 결합하여 환상 구조를 형성하고 있어도 된다.

[0625] 일반식 (27)로 나타나는 화합물에는, 적어도 하나의 카바졸 구조가 포함되어 있는 것이 바람직하다. 예를 들면, 카바졸 구조를 구성하는 일방의 벤젠환이 Ar^1로 나타나는 환이어도 되고, 카바졸 구조를 구성하는 일방의 벤젠환이 Ar^2로 나타나는 환이어도 되며, 카바졸 구조를 구성하는 일방의 벤젠환이 Ar^3으로 나타나는 환이어도 된다.

또, Ar^1~Ar^3 중 어느 하나 이상에 카바졸일기가 결합되어 있어도 된다. 예를 들면, Ar^3으로 나타나는 환에 치환 혹은 무치환의 카바졸-9-일기가 결합되어 있어도 된다.

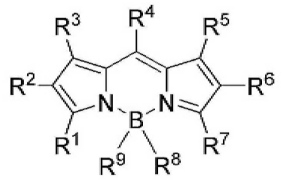
[0626] Ar^1~Ar^3에는, 안트라센, 피렌, 페릴렌 등의 축합 방향족환 구조가 결합되어 있어도 된다. 또, Ar^1~Ar^3으로 나타나는 환은, 축합 방향족환 구조를 구성하는 하나의 환이어도 된다. 또한 R^a 및 $R^{a'}$ 중 적어도 일방이, 축합 방향족환 구조를 갖는 기여도 된다.

[0627] 일반식 (27)로 나타나는 골격은, 화합물 중에 복수 개 존재하고 있어도 된다. 예를 들면, 일반식 (27)로 나타나는 골격끼리가 단결합 또는 연결기를 통하여 서로 결합된 구조를 갖고 있어도 된다. 또, 일반식 (27)로 나타나는 골격에는, 붕소 원자, 질소 원자, 산소 원자, 황 원자에 의하여 벤젠환끼리를 연결시킨 다중 공명 효과를 나타내는 구조가 더 부가되어 있어도 된다.

[0628] 본 발명의 바람직한 일 양태에서는, 제3 유기 화합물로서 BODIPY(4,4-difluoro-4-bora-3a,4a-diaza-s-indacene) 구조를 포함하는 화합물을 이용한다. 예를 들면, 하기 일반식 (28)로 나타나는 화합물을 이용한다.

[0629] 일반식 (28)

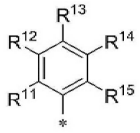
[0630] [화학식 83]

[0631] 

[0632] 일반식 (28)에 있어서, R^1~R^7은 각각 독립적으로 수소 원자, 중수소 원자 또는 치환기이다. R^1~R^7 중 적어도 하나는, 하기 일반식 (29)로 나타나는 기인 것이 바람직하다.

[0633] 일반식 (29)

[0634] [화학식 84]

[0635] 

[0636] 일반식 (29)에 있어서, R^{11}~R^{15}는 각각 독립적으로 수소 원자, 중수소 원자 또는 치환기를 나타내고, *는 결합 위치를 나타낸다.

[0637] 일반식 (29)로 나타나는 기는, 일반식 (28)의 R^1~R^7 중 1개여도 되고, 2개여도 되며, 3개여도 된다. 또, 적어도 4개로 해도 되고, 예를 들면 4개 또는 5개로 할 수 있다. 본 발명의 바람직한 일 양태에서는, R^1~R^7 중 하나가 일반식 (29)로 나타나는 기이다. 본 발명의 바람직한 일 양태에서는, 적어도 R^1, R^3, R^5, R^7이 일반식 (29)로 나타나는 기이다. 본 발명의 바람직한 일 양태에서는, R^1, R^3, R^4, R^5, R^7만이 일반식 (29)로 나타나는 기이다. 본 발명의 바람직한 일 양태에서는, R^1, R^3, R^4, R^5, R^7이 일반식 (29)로 나타나는 기이며, R^2 및 R^4가 수소 원자, 중수소 원자, 무치환의 알킬기(예를 들면 탄소수 1~10), 또는 무치환의 아릴기(예를 들면 탄소수 6~14)이다. 본 발명의 일 양태에서는, R^1~R^7 모두가 일반식 (29)로 나타나는 기이다.

[0638] 본 발명의 바람직한 일 양태에서는, R^1과 R^7이 동일하다. 본 발명의 바람직한 일 양태에서는, R^3과 R^5가 동일하다. 본 발명의 바람직한 일 양태에서는, R^2와 R^6이 동일하다. 본 발명의 바람직한 일 양태에서는, R^1과 R^7이 동일하고, R^3과 R^5가 동일하며, 또한, R^1과 R^3은 서로 상이하다. 본 발명의 바람직한 일 양태에서는, R^1, R^3, R^5, R^7이 동일하다. 본 발명의 바람직한 일 양태에서는, R^1과 R^4와 R^7이 동일하고, R^3이나 R^5와는 상이하다. 본

발명의 바람직한 일 양태에서는, R^3과 R^4와 R^5가 동일하고, R^1이나 R^7과는 상이하다. 본 발명의 바람직한 일 양태에서는, R^1, R^3, R^5, R^7은, 모두 R^4와는 상이하다.

[0639] 일반식 (29)의 R^{11}~R^{15}가 채용할 수 있는 치환기로서는, 예를 들면 상기 치환기군 A의 기를 선택할 수 있다. R^{11}~R^{15}가 채용할 수 있는 치환기는, 치환 혹은 무치환의 알킬기(예를 들면 탄소수 1~40), 치환 혹은 무치환의 알콕시기(예를 들면 탄소수 1~40), 치환 혹은 무치환의 아릴기(예를 들면 탄소수 6~30), 치환 혹은 무치환의 아릴옥시기(예를 들면 탄소수 6~30), 치환 혹은 무치환의 아미노기(예를 들면 탄소 원자수 0~20)로 이루어지는 군으로부터 선택되는 1개의 기 또는 2개 이상을 조합한 기인 것이 바람직하다(이하에 있어서 이들 기를 "치환기군 C의 기"라고 한다). 치환기군 C 중에서도, 탄소수 1~20의 무치환의 알킬기, 탄소수 1~20의 무치환의 알콕시기, 탄소수 6~14의 무치환의 아릴기, 탄소수 6~14의 아릴옥시기, 또는 환 골격 구성 원자수 5~20의 무치환의 다이아릴아미노기를 선택하는 것이 바람직하다(이하에 있어서 이들 기를 "치환기군 D의 기"라고 한다). 여기에서 말하는 치환 아미노기로서는, 다이 치환 아미노기가 바람직하고, 아미노기에 대한 2개의 치환기로서는, 각각 독립적으로 치환 혹은 무치환의 아릴기, 치환 혹은 무치환의 헤테로아릴기, 또는 치환 혹은 무치환의 알킬기인 것이 바람직하며, 치환 혹은 무치환의 아릴기인 것(다이아릴아미노기인 것)이 특히 바람직하다. 다이아릴아미노기의 2개의 아릴기가 채용할 수 있는 치환기로서는, 상기 치환기군 A의 기를 선택하거나, 상기 치환기군 B의 기를 선택하거나, 상기 치환기군 C의 기를 선택하거나 할 수 있다. 다이아릴아미노기의 2개의 아릴기는 서로 단결합 또는 연결기를 개재하여 결합되어 있어도 되고, 여기에서 말하는 연결기에 대해서는 R^{33}과 R^{34}에 있어서의 연결기의 설명을 참조할 수 있다. 다이아릴아미노기의 구체예로서, 예를 들면 치환 혹은 무치환의 카바졸-9-일기를 채용할 수 있다. 치환 혹은 무치환의 카바졸-9-일기로서는, 예를 들면 상기 일반식 (6)의 L^{11}이 단결합인 기를 들 수 있다.

[0640] 본 발명의 바람직한 일 양태에서는, 일반식 (29)의 R^{13}만이 치환기이며, R^{11}, R^{12}, R^{14}, R^{15}는 수소 원자이다. 본 발명의 바람직한 일 양태에서는, 일반식 (29)의 R^{11}만이 치환기이며, R^{12}, R^{13}, R^{14}, R^{15}는 수소 원자이다. 본 발명의 바람직한 일 양태에서는, 일반식 (29)의 R^{11}과 R^{13}만이 치환기이며, R^{12}, R^{14}, R^{15}는 수소 원자이다.

[0641] 일반식 (28)의 R^1~R^7 중에는, 일반식 (29)의 R^{11}~R^{15}가 모두 수소 원자인 기(즉 페닐기)가 포함되어 있어도 된다. 예를 들면, R^2, R^4, R^6은 페닐기여도 된다.

[0642] 일반식 (28)에 있어서, R^8 및 R^9는 각각 독립적으로 수소 원자, 중수소 원자, 할로젠 원자, 알킬기(예를 들면 탄소수 1~40), 알콕시기(예를 들면 탄소수 1~40), 아릴옥시기(예를 들면 탄소수 6~30) 및 사이아노기로 이루어지는 군으로부터 선택되는 1개의 기 또는 2개 이상을 조합한 기인 것이 바람직하다. 본 발명의 바람직한 실시형태에서는, R^8과 R^9는 동일하다. 본 발명의 바람직한 실시형태에서는, R^8과 R^9는 할로젠 원자이며, 특히 바람직하게는 불소 원자이다.

[0643] 본 발명의 일 양태에서는, 일반식 (28)의 R^1~R^9에 존재하는 치환 혹은 무치환의 알콕시기, 치환 혹은 무치환의 아릴옥시기, 치환 혹은 무치환의 아미노기의 수는 합계로 3개 이상인 것이 바람직하고, 예를 들면 3개인 화합물을 채용하거나, 혹은 4개인 화합물을 채용하거나 할 수 있다. 보다 바람직하게는, 일반식 (28)의 R^1~R^7에 존재하는 치환 혹은 무치환의 알콕시기, 치환 혹은 무치환의 아릴옥시기, 치환 혹은 무치환의 아미노기의 수는 합계로 3개 이상인 것이 바람직하고, 예를 들면 3개인 화합물을 채용하거나, 혹은 4개인 화합물을 채용하거나 할 수 있다. 이때, R^8과 R^9에는 알콕시기, 아릴옥시기, 아미노기가 존재하지 않아도 된다. 더 바람직하게는, 일반식 (28)의 R^1, R^3, R^4, R^5, R^7에 존재하는 치환 혹은 무치환의 알콕시기, 치환 혹은 무치환의 아릴옥시기, 치환 혹은 무치환의 아미노기의 수는 합계로 3개 이상인 것이 바람직하고, 예를 들면 3개인 화합물을 채용하거나, 혹은 4개인 화합물을 채용하거나 할 수 있다. 이때, R^2, R^6, R^8, R^9에는 알콕시기, 아릴옥시기, 아미노기가 존재하지 않아도 된다. 본 발명의 바람직한 일 양태에서는, 치환 혹은 무치환의 알콕시기가 3개 이상 존재한다. 본 발명의 바람직한 일 양태에서는, 치환 혹은 무치환의 알콕시기가 4개 이상 존재한다. 본 발명의 바람직한 일 양태에서는, 치환 혹은 무치환의 알콕시기가 1개 이상과, 치환 혹은 무치환의 아릴옥시기가 2개 이상 존재한다. 본 발명의 바람직한 일 양태에서는, 치환 혹은 무치환의 알콕시기가 2개 이상과, 치환 혹은 무치환의 아미노기가 1개

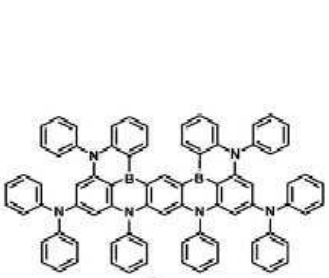
이상 존재한다. 본 발명의 바람직한 일 양태에서는, R^1, R^4, R^7에 각각 치환 혹은 무치환의 알콕시기 또는 치환 혹은 무치환의 아릴옥시기가 존재한다. 본 발명의 바람직한 일 양태에서는, R^1, R^4, R^7에 각각 치환 혹은 무치환의 알콕시기가 존재한다.

[0644] 본 발명의 일 양태에서는, 일반식 (28)의 R^1~R^9에 존재하는 하메트의 σp값이 -0.2 미만인 치환기의 합계는 3개 이상이다. 하메트의 σp값이 -0.2 미만인 치환기로서, 예를 들면 메톡시기(-0.27), 에톡시기(-0.24), n-프로폭시기(-0.25), 아이소프로폭시기(-0.45), n-뷰톡시기(-0.32)를 들 수 있다. 한편, 불소 원자(0.06), 메틸기(-0.17), 에틸기(-0.15), tert-뷰틸기(-0.20), n-헥실기(-0.15), 사이클로헥실기(-0.15) 등은 하메트의 σp값이 -0.2 미만인 치환기가 아니다.

[0645] 본 발명의 일 양태에서는, 일반식 (28)의 R^1~R^9에 존재하는 하메트의 σp값이 -0.2 미만인 치환기의 수가 3개인 화합물을 채용하거나, 혹은 4개인 화합물을 채용하거나 할 수 있다. 보다 바람직하게는, 일반식 (28)의 R^1~R^7에 존재하는 하메트의 σp값이 -0.2 미만인 치환기의 수가 3개 이상인 것이 바람직하고, 예를 들면 3개인 화합물을 채용하거나, 혹은 4개인 화합물을 채용하거나 할 수 있다. 이때, R^8과 R^9에는 하메트의 σp값이 -0.2 미만인 치환기가 존재하지 않아도 된다. 더 바람직하게는, 일반식 (28)의 R^1, R^3, R^4, R^5, R^7에 존재하는 하메트의 σp값이 -0.2 미만인 치환기의 수는 3개 이상인 것이 바람직하고, 예를 들면 3개인 화합물을 채용하거나, 혹은 4개인 화합물을 채용하거나 할 수 있다. 이때, R^2, R^6, R^8, R^9에는 하메트의 σp값이 -0.2 미만인 치환기가 존재하지 않아도 된다. 본 발명의 바람직한 일 양태에서는, R^1, R^4, R^7에 각각 하메트의 σp값이 -0.2 미만인 치환기가 존재한다.

[0646] 이하에, 제3 유기 화합물로서 이용할 수 있는 바람직한 화합물을 든다. 이하의 예시 화합물의 구조식에 있어서, t-Bu는 터셔리뷰틸기를 나타낸다.

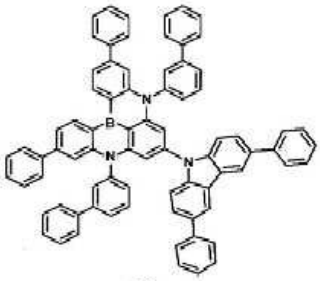
[0647] [화학식 85-1]



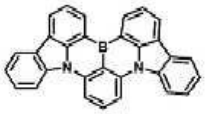
F1



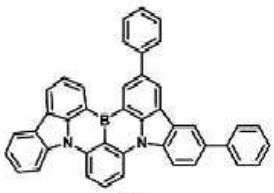
F2



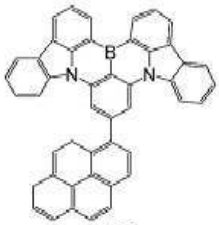
F3



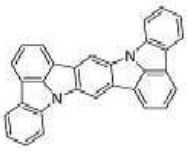
F4



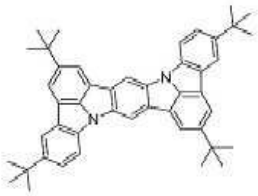
F5



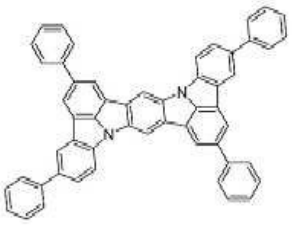
F6



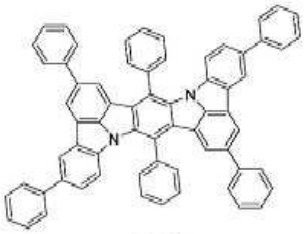
F7



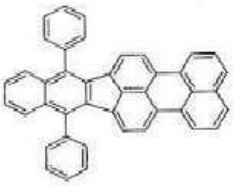
F8



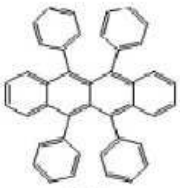
F9



F10



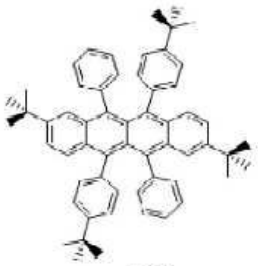
F11



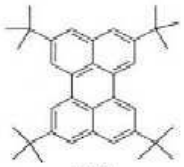
F12

[0648]

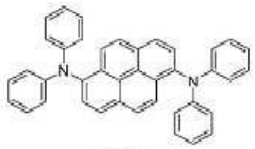
[0649] [화학식 85-2]



F13



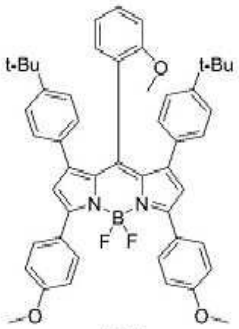
F14



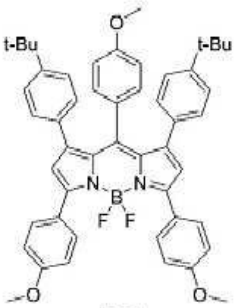
F15



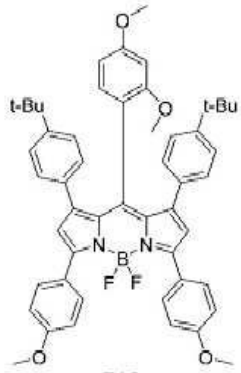
F16



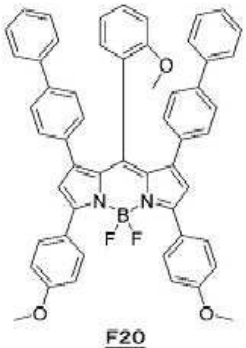
F17



F18



F19



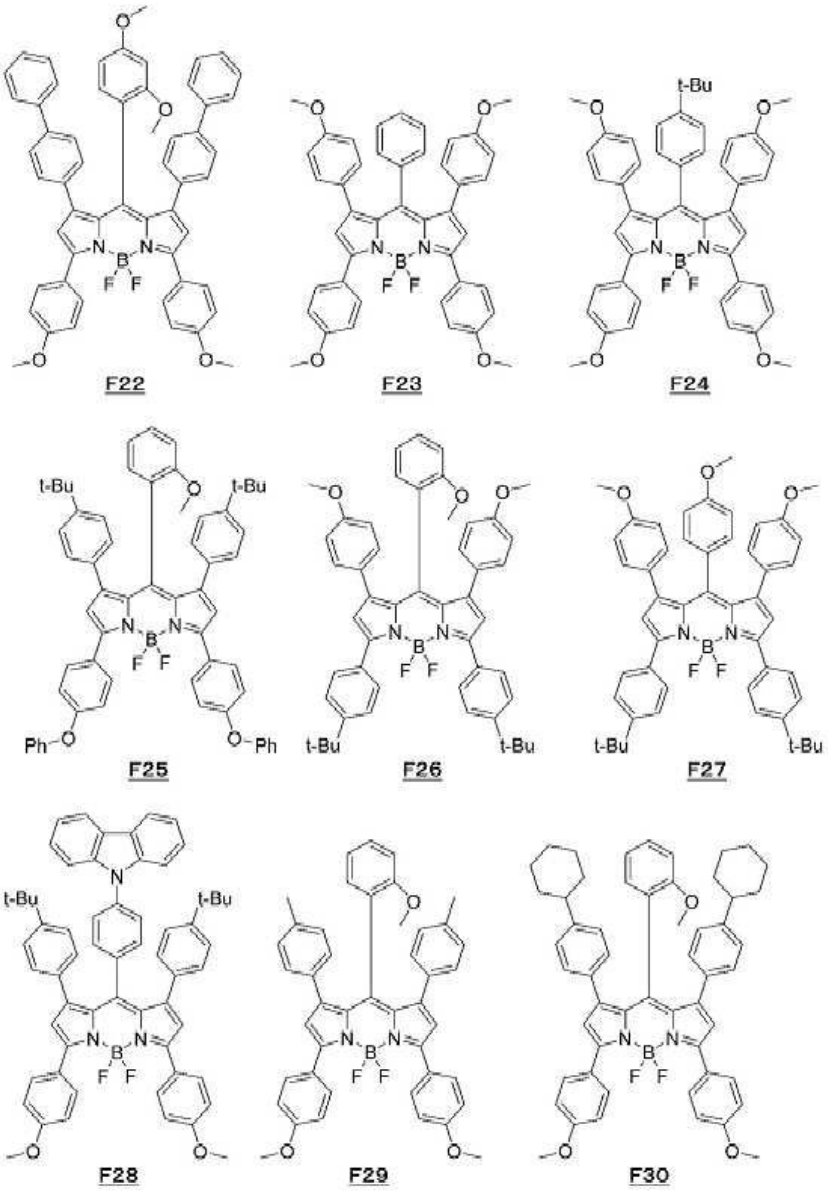
F20



F21

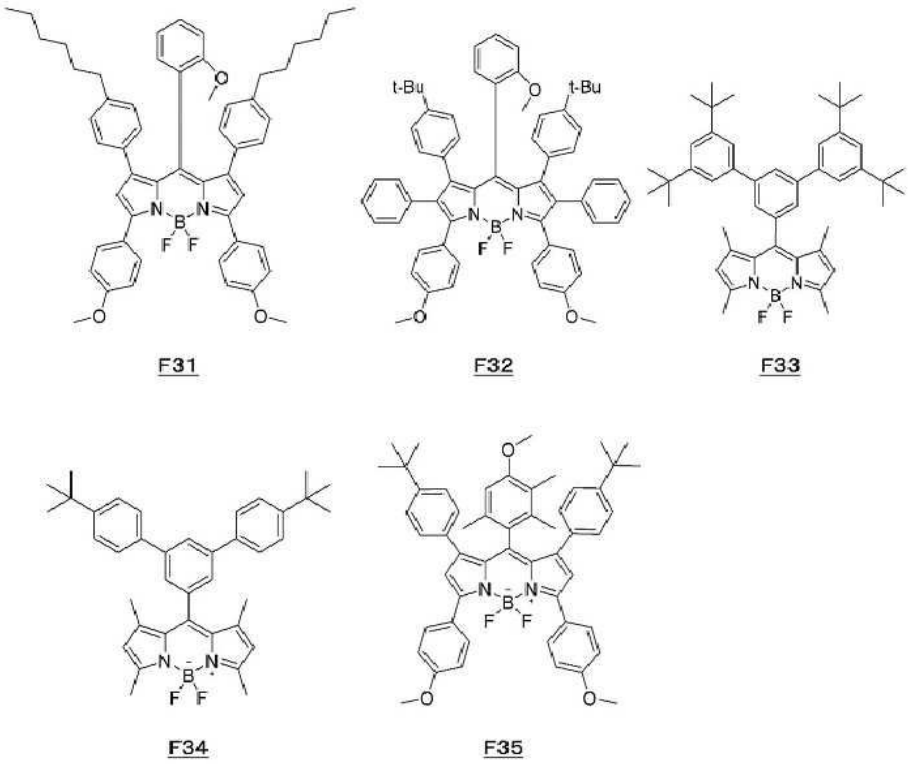
[0650]

[0651] [화학식 85-3]



[0652]

[0653] [화학식 85-4]



[0654]

[0655] 상기 예시 화합물의 유도체로서, 적어도 하나의 수소 원자가 중수소 원자, 알킬기, 아릴기, 헤테로아릴기, 다이아릴아미노기로 치환된 화합물을 들 수 있다.

[0656] 또, WO2015/022974호의 단락 0220~0239, WO2019/111971호의 단락 0066 및 0117, WO2021/015177호의 단락 0196~0255에 기재된 화합물도, 본 발명의 제3 유기 화합물로서 특히 바람직하게 이용할 수 있다.

[0657] (발광층)

[0658] 본 발명의 유기 일렉트로 루미네선스 소자의 발광층은, 조건 (a) 및 (b)를 충족시키는 제1 유기 화합물과 제2 유기 화합물과 제3 유기 화합물을 포함한다. 본 발명의 바람직한 양태에서는, 제2 유기 화합물로서 화합물 T132를 이용하고, 제3 유기 화합물로서 화합물 F101~F128로 이루어지는 군으로부터 선택되는 화합물을 이용한다. 발광층은, 제1 유기 화합물과 제2 유기 화합물과 제3 유기 화합물 이외에, 전하나 에너지의 수수를 행하는 화합물이나 붕소 이외의 금속 원소를 포함하지 않는 구성으로 할 수 있다. 또 발광층은, 탄소 원자, 수소 원자, 중수소 원자, 질소 원자, 붕소 원자, 산소 원자 및 황 원자로 이루어지는 군으로부터 선택되는 원자로 이루어지는 화합물만으로 구성할 수도 있다. 예를 들면, 발광층은, 탄소 원자, 수소 원자, 중수소 원자, 질소 원자, 붕소 원자 및 산소 원자로 이루어지는 군으로부터 선택되는 원자로 이루어지는 화합물만으로 구성할 수 있다. 예를 들면, 발광층은, 탄소 원자, 수소 원자, 중수소 원자, 질소 원자, 붕소 원자 및 황 원자로 이루어지는 군으로부터 선택되는 원자로 이루어지는 화합물만으로 구성할 수 있다. 예를 들면, 발광층은, 탄소 원자, 수소 원자, 중수소 원자, 질소 원자 및 붕소 원자로 이루어지는 군으로부터 선택되는 원자로 이루어지는 화합물만으로 구성할 수 있다. 예를 들면, 발광층은, 탄소 원자, 수소 원자, 중수소 원자, 질소 원자, 산소 원자 및 황 원자로 이루어지는 군으로부터 선택되는 원자로 이루어지는 화합물만으로 구성할 수 있다. 예를 들면, 발광층은, 탄소 원자, 수소 원자, 중수소 원자 및 질소 원자로 이루어지는 군으로부터 선택되는 원자로 이루어지는 화합물만으로 구성할 수 있다. 발광층은, 탄소 원자, 수소 원자, 질소 원자 및 산소 원자로 이루어지는 군으로부터 선택되는 원자로 구성되는 제1 유기 화합물과, 탄소 원자, 수소 원자, 중수소 원자, 질소 원자, 산소 원자 및 황 원자로 이루어지는 군으로부터 선택되는 원자로 구성되는 제2 유기 화합물과, 탄소 원자, 수소 원자, 중수소 원자, 질소 원자, 붕소 원자, 산소 원자 및 황 원자로 이루어지는 군으로부터 선택되는 원자로 구성되는 제3 유기 화합물을 포함하는 것이어도 된다. 또, 발광층은, 탄소 원자, 수소 원자, 질소 원자 및 산소 원자로 이루어지는 군으로부터 선택되는 원자로 구성되는 제1 유기 화합물과, 탄소 원자, 수소 원자, 중수소 원자 및 질소 원자로 이루어지는 군으로부터 선택되는 원자로 구성되는 제2 유기 화합물과, 탄소 원자, 수소 원자, 중수소 원자, 질

소 원자 및 붕소 원자로 이루어지는 군으로부터 선택되는 원자로 구성되는 제3 유기 화합물을 포함하는 것이어도 된다.

[0659] 발광층은, 제1 유기 화합물, 제2 유기 화합물 및 제3 유기 화합물을 공증착함으로써 형성해도 되고, 제1 유기 화합물, 제2 유기 화합물 및 제3 유기 화합물을 용해시킨 용액을 이용하여 도포법에 의하여 형성해도 된다. 공증착에 의하여 발광층을 형성할 때에는, 제1 유기 화합물, 제2 유기 화합물 및 제3 유기 화합물 중 2개 이상을 미리 혼합하고 있는 도가니 등에 넣어 증착원으로 하고, 그 증착원을 이용하여 공증착에 의하여 발광층을 형성해도 된다. 예를 들면, 제1 유기 화합물 및 제2 유기 화합물을 미리 혼합하여 하나의 증착원을 작성해 두고, 그 증착원과 제3 유기 화합물의 증착원을 이용하여 공증착함으로써 발광층을 형성해도 된다.

[0660] 이하에 있어서, 유기 일렉트로 루미네선스 소자의 각 부재 및 발광층 이외의 각층(各層)에 대하여 설명한다.

[0661] 기재:

[0662] 몇 개의 실시형태에서는, 본 발명의 유기 일렉트로 루미네선스 소자는 기재에 의하여 지지되며, 당해 기재는 특별히 한정되지 않고, 유기 일렉트로 루미네선스 소자에서 일반적으로 이용되는, 예를 들면 유리, 투명 플라스틱, 쿼츠 및 실리콘에 의하여 형성된 어느 하나의 재료를 이용하면 된다.

[0663] 양극:

[0664] 몇 개의 실시형태에서는, 유기 일렉트로 루미네선스 장치의 양극은, 금속, 합금, 도전성 화합물 또는 그들의 조합으로 제조된다. 몇 개의 실시형태에서는, 상기의 금속, 합금 또는 도전성 화합물은 높은 일 함수(4eV 이상)를 갖는다. 몇 개의 실시형태에서는, 상기 금속은 Au이다. 몇 개의 실시형태에서는, 도전성의 투명 재료는, CuI, 산화 인듐·주석(ITO), SnO_2 및 ZnO로부터 선택된다. 몇 개의 실시형태에서는, IDIXO(In_2O_3-ZnO) 등의, 투명한 도전성 필름을 형성할 수 있는 어모퍼스 재료를 사용한다. 몇 개의 실시형태에서는, 상기 양극은 박막이다. 몇 개의 실시형태에서는, 상기 박막은 증착 또는 스퍼터링에 의하여 제작된다. 몇 개의 실시형태에서는, 상기 필름은 포토리소그래피 방법에 의하여 패턴화된다. 몇 개의 실시형태에서는, 패턴이 고정밀도일 필요가 없는(예를 들면 약 100 μm 이상) 경우, 당해 패턴은, 전극 재료에 대한 증착 또는 스퍼터링에 적합한 형상의 마스크를 이용하여 형성해도 된다. 몇 개의 실시형태에서는, 유기 도전성 화합물 등의 코팅 재료를 도포할 수 있을 때, 프린트법이나 코팅법 등의 습식 필름 형성 방법이 이용된다. 몇 개의 실시형태에서는, 방사광이 양극을 통과할 때, 양극은 10% 초과의 투과도를 갖고, 당해 양극은, 단위 면적당 수백 옴 이하의 시트 저항을 갖는다. 몇 개의 실시형태에서는, 양극의 두께는 10~1,000nm이다. 몇 개의 실시형태에서는, 양극의 두께는 10~200nm이다. 몇 개의 실시형태에서는, 양극의 두께는 이용하는 재료에 따라 변동된다.

[0665] 음극:

[0666] 몇 개의 실시형태에서는, 상기 음극은, 낮은 일 함수를 갖는 금속(4eV 이하)(전자 주입 금속이라고 칭해진다), 합금, 도전성 화합물 또는 그 조합 등의 전극 재료로 제작된다. 몇 개의 실시형태에서는, 상기 전극 재료는, 나트륨, 나트륨-칼륨 합금, 마그네슘, 리튬, 마그네슘-구리 혼합물, 마그네슘-은 혼합물, 마그네슘-알루미늄 혼합물, 마그네슘-인듐 혼합물, 알루미늄-산화 알루미늄(Al_2O_3) 혼합물, 인듐, 리튬-알루미늄 혼합물 및 희토류 원소로부터 선택된다. 몇 개의 실시형태에서는, 전자 주입 금속과, 전자 주입 금속보다 높은 일 함수를 갖는 안정적인 금속인 제2 금속의 혼합물이 이용된다. 몇 개의 실시형태에서는, 상기 혼합물은, 마그네슘-은 혼합물, 마그네슘-알루미늄 혼합물, 마그네슘-인듐 혼합물, 알루미늄-산화 알루미늄(Al_2O_3) 혼합물, 리튬-알루미늄 혼합물 및 알루미늄으로부터 선택된다. 몇 개의 실시형태에서는, 상기 혼합물은 전자 주입 특성 및 산화에 대한 내성을 향상시킨다. 몇 개의 실시형태에서는, 음극은, 증착 또는 스퍼터링에 의하여 전극 재료를 박막으로 하여 형성시킴으로써 제조된다. 몇 개의 실시형태에서는, 상기 음극은 단위 면적당 수백 옴 이하의 시트 저항을 갖는다. 몇 개의 실시형태에서는, 상기 음극의 두께는 10nm~5 μm이다. 몇 개의 실시형태에서는, 상기 음극의 두께는 50~200nm이다. 몇 개의 실시형태에서는, 방사광을 투과시키기 위하여, 유기 일렉트로 루미네선스 소자의 양극 및 음극 중 어느 하나는 투명 또는 반투명이다. 몇 개의 실시형태에서는, 투명 또는 반투명의 일렉트로 루미네선스 소자는 광 방사 휘도를 향상시킨다.

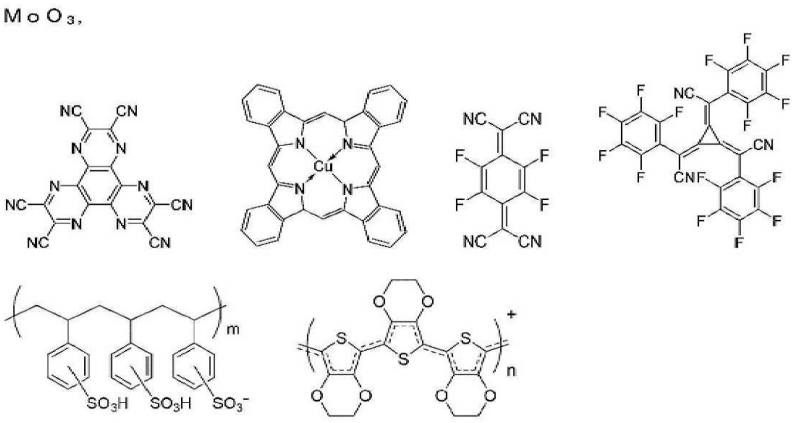
[0667] 몇 개의 실시형태에서는, 상기 음극을, 상기 양극에 관하여 상술한 도전성의 투명한 재료로 형성됨으로써, 투명 또는 반투명의 음극이 형성된다. 몇 개의 실시형태에서는, 소자는 양극과 음극을 포함하지만, 모두 투명 또는 반투명이다.

[0668] 주입층:

[0669] 주입층은, 전극과 유기층의 사이의 층이다. 몇 개의 실시형태에서는, 상기 주입층은 구동 전압을 감소시켜, 광방사 휘도를 증강시킨다. 몇 개의 실시형태에서는, 상기 주입층은, 정공 주입층과 전자 주입층을 포함한다. 상기 주입층은, 양극과 발광층 또는 정공 수송층의 사이, 및 음극과 발광층 또는 전자 수송층의 사이에 배치할 수 있다. 몇 개의 실시형태에서는, 주입층이 존재한다. 몇 개의 실시형태에서는, 주입층이 존재하지 않는다.

[0670] 이하에, 정공 주입 재료로서 이용할 수 있는 바람직한 화합물예를 든다.

[0671] [화학식 86]

[0672] 

[0673] 다음으로, 전자 주입 재료로서 이용할 수 있는 바람직한 화합물예를 든다.

[0674] [화학식 87]

[0675] 

[0676] 장벽층:

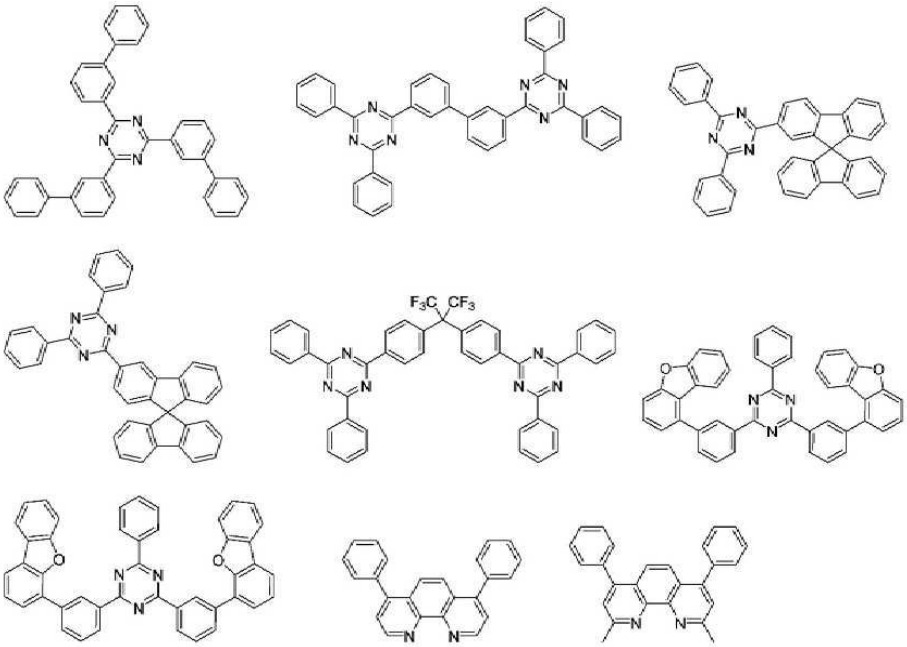
[0677] 장벽층은, 발광층에 존재하는 전하(전자 또는 정공) 및/또는 여기자가, 발광층의 외측으로 확산되는 것을 저지할 수 있는 층이다. 몇 개의 실시형태에서는, 전자 장벽층은, 발광층과 정공 수송층의 사이에 존재하고, 전자가 발광층을 통과하여 정공 수송층에 도달하는 것을 저지한다. 몇 개의 실시형태에서는, 정공 장벽층은, 발광층과 전자 수송층의 사이에 존재하고, 정공이 발광층을 통과하여 전자 수송층에 도달하는 것을 저지한다. 몇 개의 실시형태에서는, 장벽층은, 여기자가 발광층의 외측으로 확산되는 것을 저지한다. 몇 개의 실시형태에서는, 전자 장벽층 및 정공 장벽층은 여기자 장벽층을 구성한다. 본 명세서에서 이용하는 용어 "전자 장벽층" 또는 "여기자 장벽층"에는, 전자 장벽층의, 및 여기자 장벽층의 기능의 양방을 갖는 층이 포함된다.

[0678] 정공 장벽층:

[0679] 정공 장벽층은, 전자 수송층으로서 기능한다. 몇 개의 실시형태에서는, 전자의 수송 동안, 정공 장벽층은 정공이 전자 수송층에 도달하는 것을 저지한다. 몇 개의 실시형태에서는, 정공 장벽층은, 발광층에 있어서의 전자와 정공의 재결합의 확률을 높인다. 정공 장벽층에 이용하는 재료는, 전자 수송층에 대하여 상술한 것과 동일한 재료여도 된다.

[0680] 이하에, 정공 장벽층에 이용할 수 있는 바람직한 화합물예를 든다.

[0681] [화학식 88]



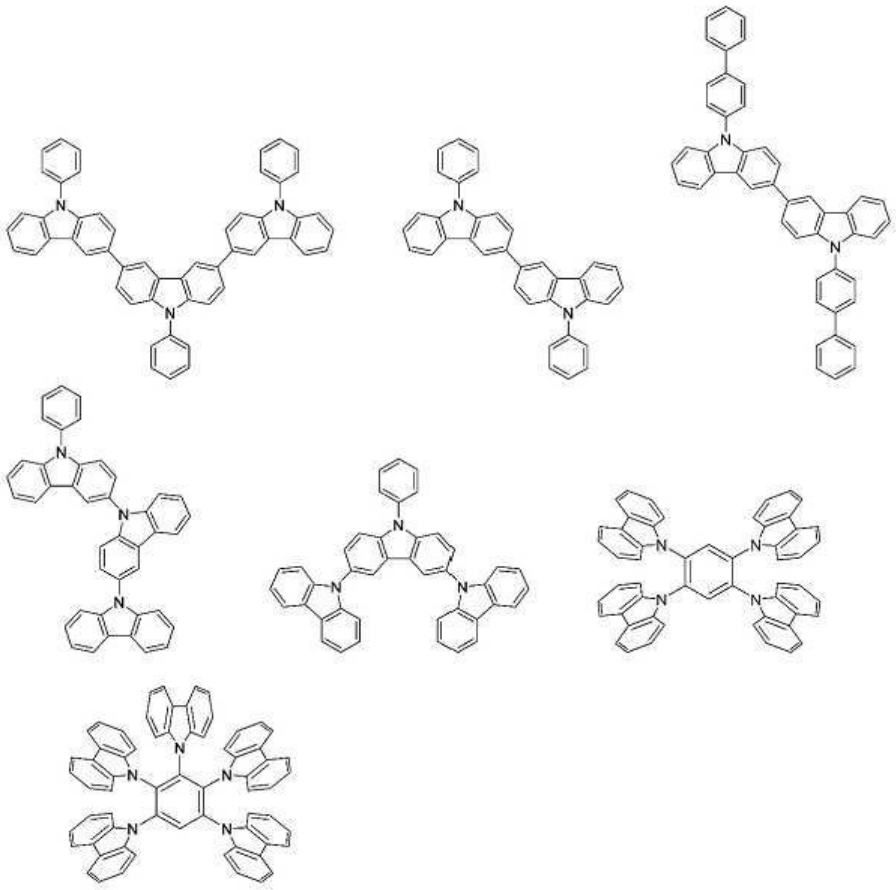
[0682]

[0683] 전자 장벽층:

[0684] 전자 장벽층은, 정공을 수송한다. 몇 개의 실시형태에서는, 정공의 수송 동안, 전자 장벽층은 전자가 정공 수송층에 도달하는 것을 저지한다. 몇 개의 실시형태에서는, 전자 장벽층은, 발광층에 있어서의 전자와 정공의 재결합의 확률을 높인다. 전자 장벽층에 이용하는 재료는, 정공 수송층에 대하여 상술한 것과 동일한 재료여도 된다.

[0685] 이하에 전자 장벽 재료로서 이용할 수 있는 바람직한 화합물의 구체예를 든다.

[0686] [화학식 89]



[0687]

[0688] 여기자 장벽층:

[0689] 여기자 장벽층은, 발광층에 있어서의 정공과 전자의 재결합을 통하여 발생한 여기자가 전자 수송층까지 확산되는 것을 저지한다. 몇 개의 실시형태에서는, 여기자 장벽층은, 발광층에 있어서의 여기자의 유효한 구속(confinement)을 가능하게 한다. 몇 개의 실시형태에서는, 장치의 광 방사 효율이 향상된다. 몇 개의 실시형태에서는, 여기자 장벽층은, 양극 측과 음극 측 중 어느 하나에서, 및 그 양측의 발광층에 인접한다. 몇 개의 실시형태에서는, 여기자 장벽층이 양극 측에 존재할 때, 당해 층은, 정공 수송층과 발광층의 사이에 존재하고, 당해 발광층에 인접해도 된다. 몇 개의 실시형태에서는, 여기자 장벽층이 음극 측에 존재할 때, 당해 층은, 발광층과 음극의 사이에 존재하고, 당해 발광층에 인접해도 된다. 몇 개의 실시형태에서는, 정공 주입층, 전자 장벽층 또는 동일한 층은, 양극과, 양극 측의 발광층에 인접하는 여기자 장벽층의 사이에 존재한다. 몇 개의 실시형태에서는, 정공 주입층, 전자 장벽층, 정공 장벽층 또는 동일한 층은, 음극과, 음극 측의 발광층에 인접하는 여기자 장벽층의 사이에 존재한다. 몇 개의 실시형태에서는, 여기자 장벽층은, 여기 일중항 에너지와 여기 삼중항 에너지를 포함하고, 그 적어도 하나가, 각각, 발광 재료의 여기 일중항 에너지와 여기 삼중항 에너지보다 높다.

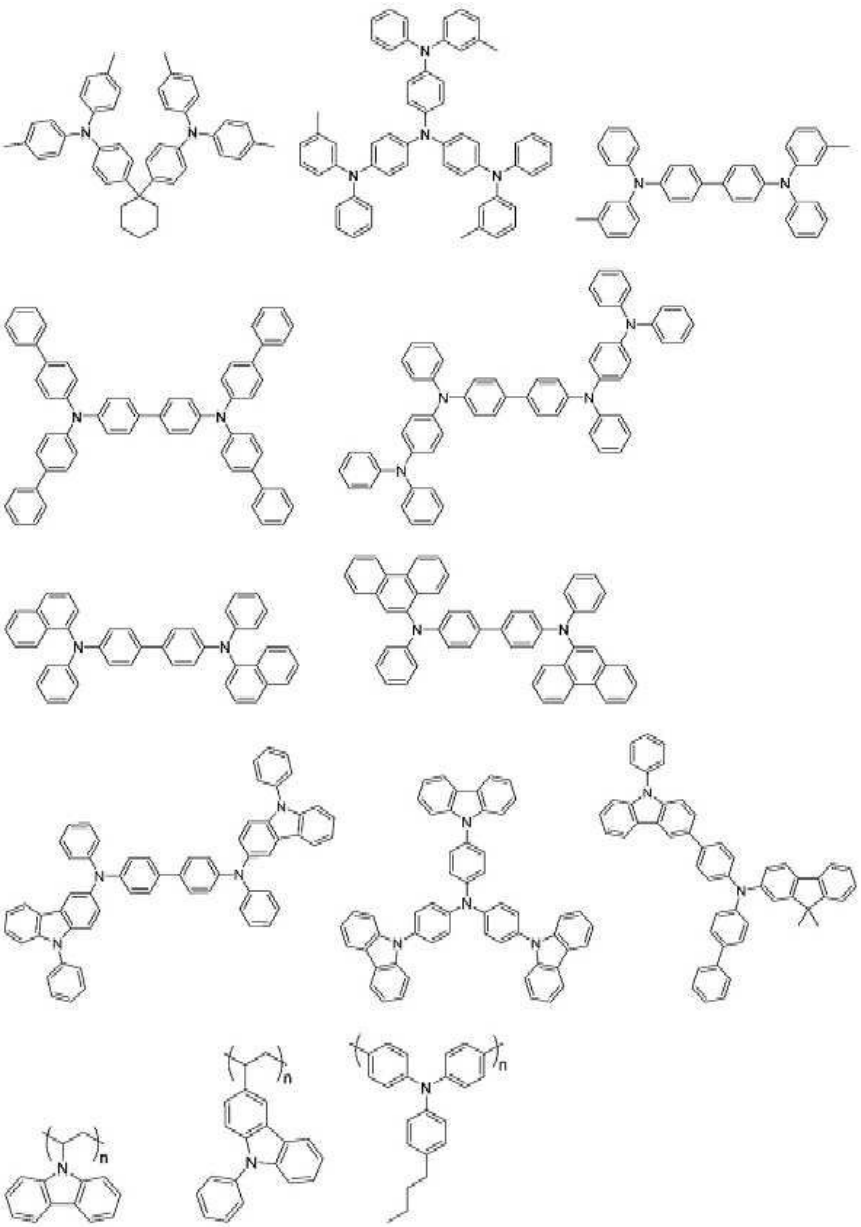
[0690] 정공 수송층:

[0691] 정공 수송층은, 정공 수송 재료를 포함한다. 몇 개의 실시형태에서는, 정공 수송층은 단층이다. 몇 개의 실시형태에서는, 정공 수송층은 복수의 층을 갖는다.

[0692] 몇 개의 실시형태에서는, 정공 수송 재료는, 정공의 주입 또는 수송 특성 및 전자의 장벽 특성 중 하나의 특성을 갖는다. 몇 개의 실시형태에서는, 정공 수송 재료는 유기 재료이다. 몇 개의 실시형태에서는, 정공 수송 재료는 무기 재료이다. 본 발명에서 사용할 수 있는 공지의 정공 수송 재료의 예로서는, 한정되지 않지만, 트라이아졸 유도체, 옥사다이아졸 유도체, 이미다졸 유도체, 카바졸 유도체, 인돌로카바졸 유도체, 폴리아릴알케인 유도체, 피라졸린 유도체, 피라졸론 유도체, 페닐렌다이아민 유도체, 알릴아민 유도체, 아미노 치환 칼콘 유도체, 옥사졸 유도체, 스타이릴안트라센 유도체, 플루오렌온 유도체, 하이드라존 유도체, 스틸벤 유도체, 실라제인 유도체, 아닐린 코폴리머 및 도전성 폴리머 올리고머(특히 싸이오펜 올리고머), 또는 그 조합을 들 수 있다. 몇 개의 실시형태에서는, 정공 수송 재료는 포피린 화합물, 방향족 3급 아민 화합물 및 스타이릴아민 화합물로부터

선택된다. 몇 개의 실시형태에서는, 정공 수송 재료는 방향족 3급 아민 화합물이다. 이하에 정공 수송 재료로서 이용할 수 있는 바람직한 화합물의 구체예를 든다.

[0693] [화학식 90]



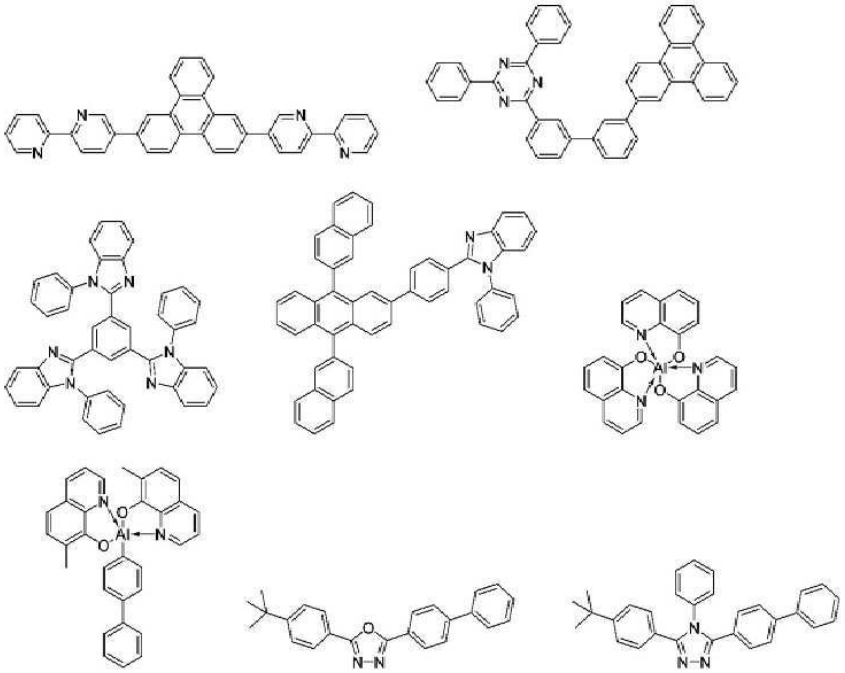
[0694]

[0695] 전자 수송층:

[0696] 전자 수송층은, 전자 수송 재료를 포함한다. 몇 개의 실시형태에서는, 전자 수송층은 단층이다. 몇 개의 실시형태에서는, 전자 수송층은 복수의 층을 갖는다.

[0697] 몇 개의 실시형태에서는, 전자 수송 재료는, 음극으로부터 주입된 전자를 발광층에 수송하는 기능만 있으면 된다. 몇 개의 실시형태에서는, 전자 수송 재료는 또, 정공 장벽 재료로서도 기능한다. 본 발명에서 사용할 수 있는 전자 수송층의 예로서는, 한정되지 않지만, 나이트로 치환 플루오렌 유도체, 다이페닐퀴논 유도체, 싸이오피란다이옥사이드 유도체, 카보다이이미드, 플루오렌일리덴메테인 유도체, 안트라퀴노다이메테인, 안트론 유도체, 옥사다이아졸 유도체, 아졸 유도체, 아진 유도체 또는 그 조합, 또는 그 폴리머를 들 수 있다. 몇 개의 실시형태에서는, 전자 수송 재료는 싸이아다이아졸 유도체 또는 퀴녹살린 유도체이다. 몇 개의 실시형태에서는, 전자 수송 재료는 폴리머 재료이다. 이하에 전자 수송 재료로서 이용할 수 있는 바람직한 화합물의 구체예를 든다.

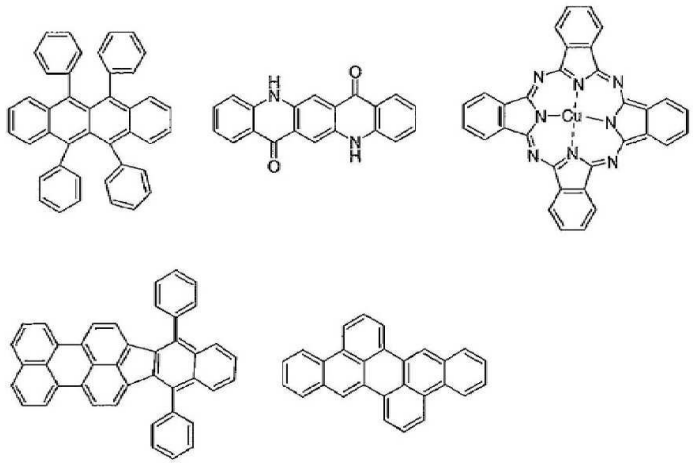
[0698] [화학식 91]



[0699]

[0700] 또한, 각 유기층에 첨가 가능한 재료로서 바람직한 화합물예를 든다. 예를 들면, 안정화 재료로서 첨가하는 것 등이 생각된다.

[0701] [화학식 92]



[0702]

[0703] 유기 일렉트로 루미네선스 소자에 이용할 수 있는 바람직한 재료를 구체적으로 예시했지만, 본 발명에 있어서 이용할 수 있는 재료는, 이하의 예시 화합물에 의하여 한정적으로 해석되는 경우는 없다. 또, 특정 기능을 갖는 재료로서 예시한 화합물이더라도, 그 외의 기능을 갖는 재료로서 전용하는 것도 가능하다.

[0704] 디바이스:

[0705] 몇 개의 실시형태에서는, 발광층은 디바이스 중에 포함된다. 예를 들면, 디바이스에는, OLED 밸브, OLED 램프, 텔레비전용 디스플레이, 컴퓨터용 모니터, 휴대 전화 및 태블릿이 포함되지만, 이들에 한정되지 않는다.

[0706] 몇 개의 실시형태에서는, 전자 디바이스는, 양극, 음극, 및 당해 양극과 당해 음극의 사이의 발광층을 포함하는 적어도 하나의 유기층을 갖는 OLED를 포함한다.

[0707] 몇 개의 실시형태에서는, 본원 명세서에 기재된 구성물은, OLED 또는 광전자 디바이스 등의, 다양한 감광성 또는 광활성화 디바이스에 포함될 수 있다. 몇 개의 실시형태에서는, 상기 구성물은 디바이스 내의 전하 이동 또는 에너지 이동의 촉진에, 및/또는 정공 수송 재료로서 유용할 수 있다. 상기 디바이스로서는, 예를 들면 유기

발광 다이오드(OLED), 유기 집적 회선(OIC), 유기 전계 효과 트랜지스터(O-FET), 유기 박막 트랜지스터(O-TFT), 유기 발광 트랜지스터(O-LET), 유기 태양 전지(O-SC), 유기 광학 검출 장치, 유기 광 수용체, 유기 자장 퀜칭(field-quench) 장치(O-FQD), 발광 연료 전지(LEC) 또는 유기 레이저 다이오드(O-레이저)를 들 수 있다.

[0708] 밸브 또는 램프:

[0709] 몇 개의 실시형태에서는, 전자 디바이스는, 양극, 음극, 당해 양극과 당해 음극의 사이의 발광층을 포함하는 적어도 하나의 유기층을 포함하는 OLED를 포함한다.

[0710] 몇 개의 실시형태에서는, 디바이스는 색채가 상이한 OLED를 포함한다. 몇 개의 실시형태에서는, 디바이스는 OLED의 조합을 포함하는 어레이를 포함한다. 몇 개의 실시형태에서는, OLED의 상기 조합은, 3색의 조합(예를 들면 RGB)이다. 몇 개의 실시형태에서는, OLED의 상기 조합은, 적색도 녹색도 청색도 아닌 색(예를 들면 오렌지색 및 황녹색)의 조합이다. 몇 개의 실시형태에서는, OLED의 상기 조합은, 2색, 4색 또는 그 이상의 색의 조합이다.

[0711] 몇 개의 실시형태에서는, 디바이스는,

[0712] 장착면을 갖는 제1 면과 그와 반대의 제2 면을 갖고, 적어도 하나의 개구부를 획정(劃定)하는 회로 기판과,

[0713] 상기 장착면 상의 적어도 하나의 OLED이며, 당해 적어도 하나의 OLED가, 양극, 음극, 및 당해 양극과 당해 음극의 사이의 발광층을 포함하는 적어도 하나의 유기층을 포함하는, 발광하는 구성을 갖는 적어도 하나의 OLED와,

[0714] 회로 기판용의 하우징과,

[0715] 상기 하우징의 단부(端部)에 배치된 적어도 하나의 커넥터이며, 상기 하우징 및 상기 커넥터가 조명 설비에 대한 장착에 적합한 패키지를 획정하는, 적어도 하나의 커넥터를 구비하는 OLED 라이트이다.

[0716] 몇 개의 실시형태에서는, 상기 OLED 라이트는, 복수의 방향으로 광이 방사되도록 회로 기판에 장착된 복수의 OLED를 갖는다. 몇 개의 실시형태에서는, 제1 방향으로 발해진 일부의 광은 편광되어 제2 방향으로 방사된다. 몇 개의 실시형태에서는, 반사기를 이용하여 제1 방향으로 발해진 광을 편광한다.

[0717] 디스플레이 또는 스크린:

[0718] 몇 개의 실시형태에서는, 본 발명의 발광층은 스크린 또는 디스플레이에 있어서 사용할 수 있다. 몇 개의 실시형태에서는, 본 발명에 관한 화합물은, 한정되지 않지만 진공 증발, 퇴적, 증착 또는 화학 증착(CVD) 등의 공정을 이용하여 기재 상으로 퇴적시킨다. 몇 개의 실시형태에서는, 상기 기재는, 독특한 애스펙트비의 픽셀을 제공하는 2면 에칭에 있어서 유용한 포토 플레이트 구조이다. 상기 스크린(또한 마스크라고도 불린다)은, OLED 디스플레이의 제조 공정에서 이용된다. 대응하는 아트 워크 패턴의 설계에 의하여, 수직 방향에서는 픽셀의 사이의 매우 가파르고 좁은 타이 바의, 및 수평 방향에서는 큰 광범위의 사각(斜角) 개구부의 배치를 가능하게 한다. 이로써, TFT 백 플레인 상으로의 화학 증착을 최적화하면서, 고해상도 디스플레이에 필요해지는 픽셀의 미세한 패턴 구성이 가능해진다.

[0719] 픽셀의 내부 패터닝에 의하여, 수평 및 수직 방향에서의 다양한 애스펙트비의 3차원 픽셀 개구부를 구성하는 것이 가능해진다. 또한, 픽셀 영역 중 화상화된 "스트라이프" 또는 하프톤 원(圓)의 사용은, 이들 특정 패턴을 언더 컷하여 기재로부터 제거될 때까지, 특정 영역에 있어서의 에칭이 보호된다. 그때, 모든 픽셀 영역은 동일한 에칭 속도로 처리되지만, 그 깊이는 하프톤 패턴에 의하여 변화한다. 하프톤 패턴의 사이즈 및 간격을 변경함으로써, 픽셀 내에서의 보호율이 다양한 상이한 에칭이 가능해져, 가파른 수직 사각을 형성하는 데 필요한 국재화(局在化)된 깊은 에칭이 가능해진다.

[0720] 증착 마스크용의 바람직한 재료는 인바(invar)이다. 인바는, 제철소에서 긴 박형 시트상으로 냉연(冷延)된 금속 합금이다. 인바는, 니켈 마스크로서 스핀 맨드릴 상으로 전착할 수 없다. 증착용 마스크 내에 개구 영역을 형성하기 위한 적절하고 또한 저비용의 방법은, 습식 화학 에칭에 의한 방법이다.

[0721] 몇 개의 실시형태에서는, 스크린 또는 디스플레이 패턴은, 기재 상의 픽셀 매트릭스이다. 몇 개의 실시형태에서는, 스크린 또는 디스플레이 패턴은, 리소그래피(예를 들면 포토리소그래피 및 e빔 리소그래피)를 사용하여 가공된다. 몇 개의 실시형태에서는, 스크린 또는 디스플레이 패턴은, 습식 화학 에칭을 사용하여 가공된다. 가일층의 실시형태에서는, 스크린 또는 디스플레이 패턴은, 플라즈마 에칭을 사용하여 가공된다.

[0722] 디바이스의 제조 방법:

[0723] OLED 디스플레이는, 일반적으로는, 대형의 마더 패널을 형성하고, 다음으로 당해 마더 패널을 셀 패널 단위로 절단함으로써 제조된다. 통상은, 마더 패널 상의 각 셀 패널은, 베이스 기재 상에, 활성층과 소스/드레인 전극을 갖는 박막 트랜지스터(TFT)를 형성하고, 상기 TFT에 평탄화 필름을 도포하여, 픽셀 전극, 발광층, 상대 전극 및 캡슐화층을 순서대로 경시적으로 형성하며, 상기 마더 패널로부터 절단함으로써 형성된다.

[0724] 본 발명의 다른 양태에서는, 유기 발광 다이오드(OLED) 디스플레이의 제조 방법을 제공하며, 당해 방법은,

[0725] 마더 패널의 베이스 기재 상에 장벽층을 형성하는 공정과,

[0726] 상기 장벽층 상에, 셀 패널 단위로 복수의 디스플레이 유닛을 형성하는 공정과,

[0727] 상기 셀 패널의 디스플레이 유닛의 각각의 위에 캡슐화층을 형성하는 공정과,

[0728] 상기 셀 패널 간의 인터페이스부에 유기 필름을 도포하는 공정을 포함한다.

[0729] 몇 개의 실시형태에서는, 장벽층은, 예를 들면 SiNx로 형성된 무기 필름이며, 장벽층의 단부는 폴리이미드 또는 아크릴로 형성된 유기 필름으로 피복된다. 몇 개의 실시형태에서는, 유기 필름은, 마더 패널이 셀 패널 단위로 부드럽게 절단되도록 보조한다.

[0730] 몇 개의 실시형태에서는, 박막 트랜지스터(TFT)층은, 발광층과, 게이트 전극과, 소스/드레인 전극을 갖는다. 복수의 디스플레이 유닛의 각각은, 박막 트랜지스터(TFT)층과, TFT층 상에 형성된 평탄화 필름과, 평탄화 필름 상에 형성된 발광 유닛을 가져도 되고, 상기 인터페이스부에 도포된 유기 필름은, 상기 평탄화 필름의 재료와 동일한 재료로 형성되어, 상기 평탄화 필름의 형성과 동시에 형성된다. 몇 개의 실시형태에서는, 상기 발광 유닛은, 부동태화층과, 그 사이의 평탄화 필름과, 발광 유닛을 피복하여 보호하는 캡슐화층에 의하여 TFT층과 연결된다. 상기 제조 방법 중 몇 개의 실시형태에서는, 상기 유기 필름은, 디스플레이 유닛에도 캡슐화층에도 연결되지 않는다.

[0731] 상기 유기 필름과 평탄화 필름의 각각은, 폴리이미드 및 아크릴 중 어느 하나를 포함해도 된다. 몇 개의 실시형태에서는, 상기 장벽층은 무기 필름이어도 된다. 몇 개의 실시형태에서는, 상기 베이스 기재는 폴리이미드로 형성되어도 된다. 상기 방법은 또한, 폴리이미드로 형성된 베이스 기재의 하나의 표면에 장벽층을 형성하기 전에, 당해 베이스 기재의 또 하나의 표면에 유리 재료로 형성된 캐리어 기재를 장착하는 공정과, 인터페이스부를 따른 절단 전에, 상기 캐리어 기재를 베이스 기재로부터 분리하는 공정을 포함해도 된다. 몇 개의 실시형태에서는, 상기 OLED 디스플레이는 플렉시블한 디스플레이이다.

[0732] 몇 개의 실시형태에서는, 상기 부동태화층은, TFT층의 피복을 위하여 TFT층 상에 배치된 유기 필름이다. 몇 개의 실시형태에서는, 상기 평탄화 필름은, 부동태화층 상에 형성된 유기 필름이다. 몇 개의 실시형태에서는, 상기 평탄화 필름은, 장벽층의 단부에 형성된 유기 필름과 동일하게, 폴리이미드 또는 아크릴로 형성된다. 몇 개의 실시형태에서는, OLED 디스플레이의 제조 시, 상기 평탄화 필름 및 유기 필름은 동시에 형성된다. 몇 개의 실시형태에서는, 상기 유기 필름은, 장벽층의 단부에 형성되어도 되고, 그로써, 당해 유기 필름의 일부가 직접 베이스 기재와 접촉하며, 당해 유기 필름의 나머지 부분이, 장벽층의 단부를 둘러싸면서, 장벽층과 접촉한다.

[0733] 몇 개의 실시형태에서는, 상기 발광층은, 픽셀 전극과, 상대 전극과, 당해 픽셀 전극과 당해 상대 전극의 사이에 배치된 유기 발광층을 갖는다. 몇 개의 실시형태에서는, 상기 픽셀 전극은, TFT층의 소스/드레인 전극에 연결되어 있다.

[0734] 몇 개의 실시형태에서는, TFT층을 통하여 픽셀 전극에 전압이 인가될 때, 픽셀 전극과 상대 전극의 사이에 적절한 전압이 형성되며, 그로써 유기 발광층이 광을 방사하여, 그로써 화상이 형성된다. 이하, TFT층과 발광 유닛을 갖는 화상 형성 유닛을, 디스플레이 유닛이라고 칭한다.

[0735] 몇 개의 실시형태에서는, 디스플레이 유닛을 피복하여, 외부의 수분의 침투를 방지하는 캡슐화층은, 유기 필름과 무기 필름이 교대로 적층되는 박막상의 캡슐화 구조로 형성되어도 된다. 몇 개의 실시형태에서는, 상기 캡슐화층은, 복수의 박막이 적층된 박막상 캡슐화 구조를 갖는다. 몇 개의 실시형태에서는, 인터페이스부에 도포되는 유기 필름은, 복수의 디스플레이 유닛의 각각과 간격을 두고 배치된다. 몇 개의 실시형태에서는, 상기 유기 필름은, 일부의 유기 필름이 직접 베이스 기재와 접촉하며, 유기 필름의 나머지 부분이 장벽층의 단부를 둘러싸는 한편 장벽층과 접촉하는 양태로 형성된다.

[0736] 일 실시형태에서는, OLED 디스플레이는 플렉시블이며, 폴리이미드로 형성된 유연한 베이스 기재를 사용한다. 몇 개의 실시형태에서는, 상기 베이스 기재는 유리 재료로 형성된 캐리어 기재 상에 형성되고, 다음으로 당해 캐리

어 기재가 분리된다.

[0737] 몇 개의 실시형태에서는, 장벽층은, 캐리어 기재의 반대 측의 베이스 기재의 표면에 형성된다. 일 실시형태에서는, 상기 장벽층은, 각 셀 패널의 사이즈에 따라 패턴화된다. 예를 들면, 베이스 기재가 마더 패널의 모든 표면상에 형성되는 한편, 장벽층이 각 셀 패널의 사이즈에 따라 형성되고, 그로써, 셀 패널의 장벽층의 사이의 인터페이스부에 홈이 형성된다. 각 셀 패널은, 상기 홈을 따라 절단할 수 있다.

[0738] 몇 개의 실시형태에서는, 상기의 제조 방법은, 추가로 인터페이스부를 따라 절단하는 공정을 포함하고, 거기에는 홈이 장벽층에 형성되며, 적어도 일부의 유기 필름이 홈에서 형성되어, 당해 홈이 베이스 기재에 침투하지 않는다. 몇 개의 실시형태에서는, 각 셀 패널의 TFT층이 형성되며, 무기 필름인 부동태화층과 유기 필름인 평탄화 필름이, TFT층 상에 배치되어, TFT층을 피복한다. 예를 들면 폴리이미드 또는 아크릴제의 평탄화 필름이 형성됨과 동시에, 인터페이스부의 홈은, 예를 들면 폴리이미드 또는 아크릴제의 유기 필름으로 피복된다. 이것은, 각 셀 패널이 인터페이스부에서 홈을 따라 절단될 때, 발생한 충격을 유기 필름에 흡수시킴으로써 금이 발생하는 것을 방지한다. 즉, 모든 장벽층이 유기 필름 없이 완전히 노출되어 있는 경우, 각 셀 패널이 인터페이스부에서 홈을 따라 절단될 때, 발생한 충격이 장벽층에 전달되며, 그로써 금이 발생하는 리스크가 증가한다. 그러나, 일 실시형태에서는, 장벽층 간의 인터페이스부의 홈이 유기 필름으로 피복되어, 유기 필름이 없으면 장벽층에 전달될 수 있는 충격을 흡수하기 위하여, 각 셀 패널을 소프트하게 절단하여, 장벽층에서 금이 발생하는 것을 방지해도 된다. 일 실시형태에서는, 인터페이스부의 홈을 피복하는 유기 필름 및 평탄화 필름은, 서로 간격을 두고 배치된다. 예를 들면, 유기 필름 및 평탄화 필름이 하나의 층으로서 서로 접속되어 있는 경우에는, 평탄화 필름과 유기 필름이 남아 있는 부분을 통하여 디스플레이 유닛에 외부의 수분이 침입할 우려가 있기 때문에, 유기 필름 및 평탄화 필름은, 유기 필름이 디스플레이 유닛으로부터 간격을 두고 배치되도록, 서로 간격을 두고 배치된다.

[0739] 몇 개의 실시형태에서는, 디스플레이 유닛은, 발광 유닛의 형성에 의하여 형성되며, 캡슐화층은, 디스플레이 유닛을 피복하기 위하여 디스플레이 유닛 상에 배치된다. 이로써, 마더 패널이 완전히 제조된 후, 베이스 기재를 담지하는 캐리어 기재가 베이스 기재로부터 분리된다. 몇 개의 실시형태에서는, 레이저 광선이 캐리어 기재로 방사되면, 캐리어 기재는, 캐리어 기재와 베이스 기재의 사이의 열팽창률의 상위(相違)에 의하여, 베이스 기재로부터 분리된다.

[0740] 몇 개의 실시형태에서는, 마더 패널은, 셀 패널 단위로 절단된다. 몇 개의 실시형태에서는, 마더 패널은, 커터를 이용하여 셀 패널 간의 인터페이스부를 따라 절단된다. 몇 개의 실시형태에서는, 마더 패널이 따라 절단되는 인터페이스부의 홈이 유기 필름으로 피복되어 있기 때문에, 절단 동안, 당해 유기 필름이 충격을 흡수한다. 몇 개의 실시형태에서는, 절단 동안, 장벽층에서 금이 발생하는 것을 방지할 수 있다.

[0741] 몇 개의 실시형태에서는, 상기 방법은 제품의 불량률을 감소시켜, 그 품질을 안정시킨다.

[0742] 다른 양태는, 베이스 기재 상에 형성된 장벽층과, 장벽층 상에 형성된 디스플레이 유닛과, 디스플레이 유닛 상에 형성된 캡슐화층과, 장벽층의 단부에 도포된 유기 필름을 갖는 OLED 디스플레이이다.

[0743] 실시예

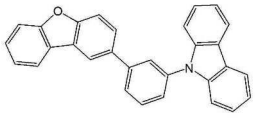
[0744] 이하에 실시예를 들어 본 발명의 특징을 더 구체적으로 설명한다. 이하에 나타내는 재료, 처리 내용, 처리 수순 등은, 본 발명의 취지를 벗어나지 않는 한 적절히 변경할 수 있다. 따라서, 본 발명의 범위는 이하에 나타내는 구체예에 의하여 한정적으로 해석되어야 하는 것은 아니다. 또한, 발광 성능의 평가는, 소스 미터(키슬리사제: 2400시리즈), 반도체 파라미터·애널라이저(애질런트·테크놀로지사제: E5273A), 광 파워미터 측정 장치(뉴 포트사제: 1930C), 광학 분광기(오션 옵틱스사제: USB2000), 분광 방사계(톱콘사제: SR-3) 및 스트리크 카메라(하마마쓰 포토닉스(주)제 C4334형)를 이용하여 행하고, 배향값의 측정은, 분자 배향 특성 측정 장치(하마마쓰 포토닉스(주)제 C14234-01)를 이용하여 행했다.

[0745] <실시예 및 비교예에서 이용한 제1~제3 유기 화합물>

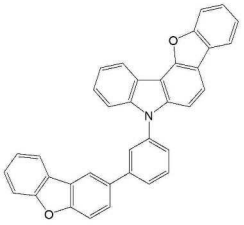
[0746] 이하의 각 실시예 및 각 비교예에서 이용한 제1~제3 유기 화합물을 이하에 나타낸다.

[0747] [화학식 93-1]

제1 유기 화합물

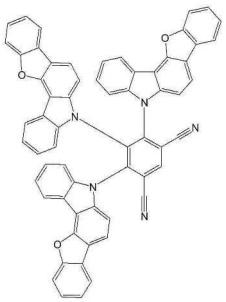


H1

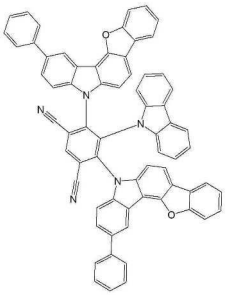


H41

제2 유기 화합물(지연 형광 재료)

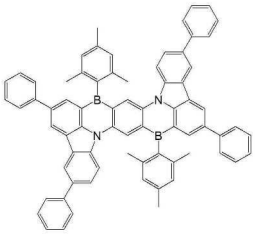


T55

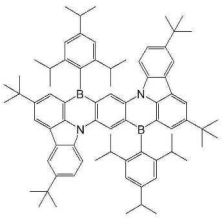


T132

제3 유기 화합물(형광 재료)



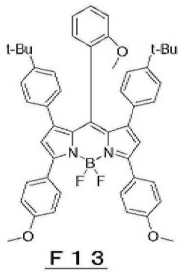
F101



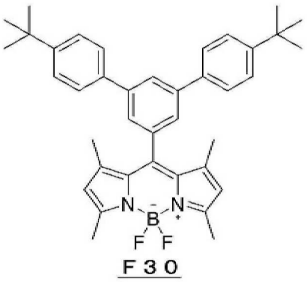
F110

[0748]

[0749] [화학식 93-2]



F13



F30

[0750]

[0751] 상기의 화합물의 HOMO의 에너지 E_{HOMO}, LUMO의 에너지 E_{LUMO}를 하기 표 1에 나타낸다. 또, 일부의 화합물에 대하여 측정한 최저 여기 일중항 에너지 E_{S1}과 최저 여기 삼중항 에너지 E_{T1}도 함께 나타낸다.

[0752] [표 1]

		E_{LUMO}	E_{HOMO}	E_{S1}	E_{T1}
제1 유기 화합물	화합물 H1	-2.63	-6.13	-3.69	-2.83
	화합물 H41	-2.50	-5.87	-3.50	-2.70
제2 유기 화합물	화합물 T55	-3.55	-5.98	-2.43	-2.24
	화합물 T132	-3.46	-5.92	-2.44	-
제3 유기 화합물	화합물 F101	-3.70	-5.93	-2.34	-
	화합물 F110	-3.57	-5.91	-2.44	-
	화합물 F13	-3.79	-5.76	-	-
	화합물 F30	-3.65	-5.95	-	-

[0753] (단위 eV)

[0754] (실시예 1~10, 비교예 5~7, 9, 10, 12)

[0755] 막두께 50nm의 인듐·주석 산화물(ITO)로 이루어지는 양극이 형성된 두께 2mm의 유리 기재 상에, 각 박막을 진공 증착법으로, 진공도 1×10^{-6}Pa로 적층했다. 먼저, ITO 상에 HATCN을 5nm의 두께로 증착하여 정공 주입층을 형성하고, 그 위에 NPD를 60nm의 두께로 증착하여 정공 수송층을 형성했다. 계속해서, EB1을 5nm의 두께로 증착하여 전자 블록층을 형성했다. 다음으로, 표 2 또는 표 3에 나타내는 조성이 되도록, 제1 유기 화합물과 제2 유기 화합물과 제3 유기 화합물을 상이한 증착원으로부터 공증착하여, 40nm의 두께의 발광층을 형성했다. 다음으로, HB1을 10nm의 두께로 증착하여 정공 블록층을 형성하고, 계속해서, ET1을 30nm의 두께로 증착하여 전자 수송층을 형성했다. 또한, Liq를 2nm의 두께로 증착하여 전자 주입층을 형성하고, 이어서 알루미늄(Al)을 100nm의 두께로 증착함으로써 음극을 형성했다. 이로써, 유기 일렉트로 루미네선스 소자를 제작했다. 여기에서 제작한 소자는, 모두 식 (a)를 충족시키고, 발광의 최대 성분이 제3 유기 화합물로부터의 형광인 것이 확인되었다.

[0756] (비교예 1~4, 8, 11)

[0757] 발광층을 형성할 때, 제3 유기 화합물의 증착원을 이용하지 않고, 제1 유기 화합물과 제2 유기 화합물의 공증착에 의하여, 표 2에 나타내는 조성의 발광층을 형성한 것 이외에는, 실시예 1과 동일하게 하여 유기 일렉트로 루미네선스 소자를 제작했다.

[0758] (발광층의 조성과 평가 결과)

[0759] 실시예 1~6, 비교예 1~10에서 제작한 각 소자에 대하여, 발광층의 조성과, 외부 양자 효율 EQE 및 발광 극대 파장의 측정 결과를 표 2에 나타낸다. 발광층의 조성 중, 실시예 1~4, 비교예 5~7, 9, 10의 제3 유기 화합물의 조성비는, 제1 유기 화합물과 제2 유기 화합물의 전체 중량에 대한 비율(중량%)로 나타내고, 그 외의 유기 화합물의 조성비는, 발광층을 구성하는 유기 화합물의 전체 중량에 대한 비율(중량%)로 나타냈다. 또, 표 2 중, "-"는 제3 유기 화합물을 첨가하고 있지 않은 것을 나타낸다.

[0760] [표 2]

실시예 No.	발광층의 조성						제3 유기 화합물의 배향값 S	평가 결과	
	제1 유기 화합물		제2 유기 화합물		제3 유기 화합물			EQE (%)	발광 극대 파장 (nm)
	화합물	함유량 (wt%)	화합물	함유량 (wt%)	화합물	함유량 (wt%)			
비교예 1	H1	55.0	T132	45.0	-		-	15.37	536
실시예 1	H1	55.0	T132	45.0	F110	0.5	-0.42	17.30	529
실시예 2	H1	55.0	T132	45.0	F110	1.0	-0.43	18.93	529
비교예 2	H1	65.0	T132	35.0	-		-	16.97	532
실시예 3	H1	65.0	T132	35.0	F110	0.5	-0.39	19.82	528
실시예 4	H1	65.0	T132	35.0	F110	1.0	-0.39	20.96	529
비교예 3	H1	65.0	T132	35.0	-		-	17.50	539
실시예 5	H1	64.5	T132	35.0	F101	0.5	-0.31	19.00	542
실시예 6	H1	64.0	T132	35.0	F101	1.0	-0.34	20.20	544
비교예 4	H1	55.0	T132	45.0	-		-	15.10	540
비교예 5	H1	55.0	T132	45.0	F30	0.3	0.12	13.90	523
비교예 6	H1	55.0	T132	45.0	F30	0.5	0.13	12.90	523
비교예 7	H1	55.0	T132	45.0	F30	1.0	0.13	11.50	523
비교예 8	H1	65.0	T132	35.0	-		-	16.2	540
비교예 9	H1	65.0	T132	35.0	F30	0.5	0.12	15.0	524
비교예 10	H1	65.0	T132	35.0	F30	1.0	0.13	12.5	524
비교예 11	H41	60.0	T55	40.0	-		-	13.17	554
비교예 12	H41	59.5	T55	40.0	F13	0.5	-0.29	10.40	634

[0761]

[0762] 표 2에 나타내는 바와 같이, 제3 유기 화합물의 배향값 S가 -0.3 이하인 실시예 1~6의 소자는, 제3 유기 화합물을 발광층에 포함하지 않는 비교예 1~3의 소자에 비하여 높은 외부 양자 효율을 나타냈다. 또, 제3 유기 화합물의 농도가 보다 높은 실시예 2, 4, 6의 소자 쪽이, 실시예 1, 3, 5의 소자보다 높은 외부 양자 효율이 얻어졌다. 이에 대하여, 제3 유기 화합물의 배향값 S가 -0.3보다 큰 비교예 5~7, 9~10, 12의 소자는, 각각 발광층에 제3 유기 화합물을 포함하지 않는 것 이외에는 동일한 구성의 비교예 4, 8, 11의 소자보다 외부 양자 효율이 저하되어 있었다. 또, 비교예 5~7 및 비교예 9~10의 결과로부터, 제3 유기 화합물의 농도가 높아질수록, 외부 양자 효율이 저하되는 경향이 보였다. 이상의 결과로부터, 제2 유기 화합물의 LUMO의 에너지보다 제3 유기 화합물의 LUMO의 에너지가 낮은 소자이더라도, 제3 유기 화합물의 배향값 S가 -0.3 이하이면, 제3 유기 화합물의 농도를 높여 외부 양자 효율의 향상이 도모되는 것이 확인되었다.

[0763] 실시예 7~10에서 제작한 각 소자의 발광층의 조성과 내구성의 평가 결과를 표 3에 나타낸다. 표 3 중의 "LT95%"는, 각 소자를 12.6mA/cm^2의 전류 밀도로 연속 구동하여 휘도가 초기 휘도의 95%가 될 때까지의 시간(T95%)을 측정하고, 그 T95%의 값을, 실시예 7에서 제작한 소자의 T95%로 나누어 산출한 상댓값이다. LT95%가 큰 값일수록, 내구성이 우수한 것을 의미한다.

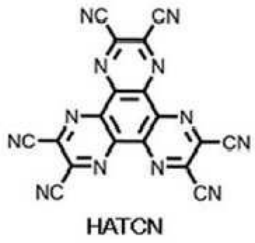
[0764] [표 3]

실시예 No.	발광층의 조성						제3 유기 화합물의 배향값 S	LT95%
	제1 유기 화합물		제2 유기 화합물		제3 유기 화합물			
	화합물	함유량 (wt%)	화합물	함유량 (wt%)	화합물	함유량 (wt%)		
실시예 7	H1	79.2	T132	20.0	F110	0.8	-0.40	1
실시예 8	H1	74.2	T132	25.0	F110	0.8	-0.41	1.5
실시예 9	H1	69.2	T132	30.0	F110	0.8	-0.40	2.0
실시예 10	H1	64.2	T132	35.0	F110	0.8	-0.39	2.2

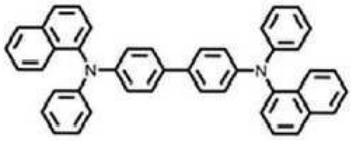
[0765]

[0766] 실시예 7~10의 소자는, 발광층에 있어서의 제2 유기 화합물의 농도를 변화시킨 것이며, 발광 극대 파장이 529nm, 외부 양자 효율이 약 22%로 동등했다. 또, 표 3으로부터, 제2 유기 화합물의 농도를 높게 함으로써, 소자의 내구성이 개선되는 경향이 나타났다.

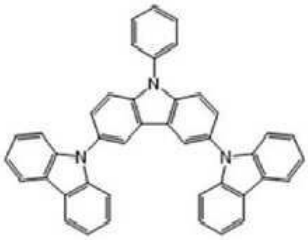
[0767] [화학식 94]



HATCN



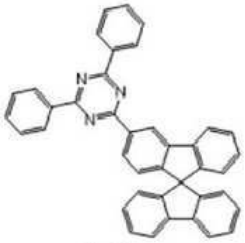
NPD



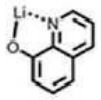
EB1



HB1



ET1



Liq

[0768]

산업상 이용가능성

[0770] 본 발명에 의하면, 제1 유기 화합물과, 지연 형광 재료인 제2 유기 화합물과, 형광을 방사하는 제3 유기 화합물을 발광층에 포함하는 유기 일렉트로 루미네선스 소자에 있어서, 제2 유기 화합물의 LUMO의 에너지보다 제1 유기 화합물 쪽이 LUMO의 에너지가 낮은 경우에서도, 제2 유기 화합물의 농도를 높여, 외부 양자 효율의 향상을 도모할 수 있다. 이로써, 제3 유기 화합물의 LUMO 에너지의 선택의 폭을 확대할 수 있기 때문에, 유기 일렉트로 루미네선스 소자의 재료 설계의 자유도를 높일 수 있다. 그 때문에, 본 발명은 산업상 이용가능성이 높다.