(19) 대한민국특허청(KR)
(12) 공개특허공보(A)

(11) 공개번호 10-2020-0021976
(43) 공개일자 2020년03월02일

(51) 국제특허분류(Int. Cl.)
C09K 11/06 (2006.01) *C07C 255/58* (2006.01)
C07D 209/88 (2006.01) *C07D 405/14* (2006.01)
H01L 51/50 (2006.01)
(52) CPC특허분류
C09K 11/06 (2013.01)
C07C 255/58 (2013.01)
(21) 출원번호 10-2020-7000317
(22) 출원일자(국제) 2018년06월27일
심사청구일자 없음
(85) 번역문제출일자 2020년01월06일
(86) 국제출원번호 PCT/JP2018/024302
(87) 국제공개번호 WO 2019/004254
국제공개일자 2019년01월03일
(30) 우선권주장
JP-P-2017-124947 2017년06월27일 일본(JP)
JP-P-2018-114758 2018년06월15일 일본(JP)

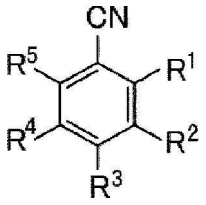
(71) 출원인
가부시키가이샤 큐럭스
일본 후쿠오카켕 후쿠오카시 니시쿠 규다이신마치 4-1
(72) 발명자
노츠카 나오토
일본 후쿠오카켕 후쿠오카시 니시쿠 규다이신마치 4-1 가부시키가이샤 큐럭스 나이
양 유석
일본 후쿠오카켕 후쿠오카시 니시쿠 규다이신마치 4-1 가부시키가이샤 큐럭스 나이
요시자키 아스카
일본 후쿠오카켕 후쿠오카시 니시쿠 규다이신마치 4-1 가부시키가이샤 큐럭스 나이
(74) 대리인
특허법인코리아나

전체 청구항 수 : 총 15 항

(54) 발명의 명칭 **발광 재료, 화합물, 지연 형광체 및 발광 소자**

(57) 요 약

하기 일반식으로 나타나는 화합물은 뛰어난 발광 재료이다. R^1~R^5는 수소 원자 또는 치환기를 나타내지만, R^1~R^5 중 하나는 사이아노기; R^1~R^5 중 1~3개는, 알킬기 또는 아릴기로 치환되어 있어도 되는 아릴기 Ar; R^1~R^5 중 1~3개는 도너성기 D(단 Ar에 해당하는 것은 제외함)이다.



(52) CPC특허분류
C07D 209/88 (2013.01)
C07D 405/14 (2013.01)
H01L 51/50 (2013.01)

명 세 서

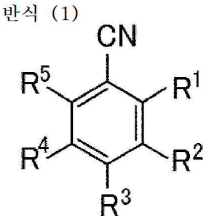
청구범위

청구항 1

하기 일반식 (1)로 나타나는 화합물로 이루어지는 발광 재료.

[화학식 1]

일반식 (1)



[일반식 (1)에 있어서,

R^1~R^5는, 각각 독립적으로 수소 원자 또는 치환기를 나타내고,

R^1~R^5 중 하나는 사이아노기를 나타내며,

R^1~R^5 중 1~3개는, 알킬기 또는 아릴기로 치환되어 있어도 되는 아릴기 Ar(단 후자의 아릴기를 구성하는 벤젠환에는, 탄소 원자 외에 산소 원자 또는 황 원자를 환골격 구성 원자로서 포함하고 있어도 되는 환이 축합하고 있어도 되지만, 산소 원자 및 황 원자 이외의 헤테로 원자를 환골격 구성 원자로서 포함하는 환이 축합하고 있는 경우는 없음)을 나타내고, R^1~R^5 중 2개 이상이 Ar일 때, 그들 Ar은 서로 동일해도 되고 달라도 되며,

R^1~R^5 중 1~3개는, 도너성기 D(단 Ar에 해당하는 것은 제외함)를 나타내고, R^1~R^5 중 2개 이상이 D일 때, 그들 D는 서로 동일해도 되고 달라도 된다.]

청구항 2

청구항 1에 있어서,

R^1~R^5가 각각 독립적으로 사이아노기, Ar 또는 D인, 발광 재료.

청구항 3

청구항 1 또는 청구항 2에 있어서,

D가 치환 아미노기를 포함하는, 발광 재료.

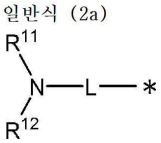
청구항 4

청구항 3에 있어서,

D가 하기 일반식 (2a)로 나타나는 기인, 발광 재료.

[화학식 2]

일반식 (2a)



[일반식 (2a)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. L은 단결합, 치환 혹은 무

치환의 아릴렌기, 또는 치환 혹은 무치환의 헤테로아릴렌기를 나타낸다. R^{11}과 R^{12}는 서로 결합하여 환상 구조를 형성해도 된다. *는, 일반식 (1)에 있어서의 벤젠환의 환골격을 구성하는 탄소 원자 (C)에 대한 결합 위치를 나타낸다.]

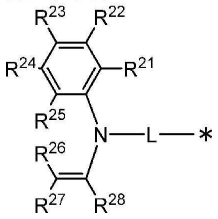
청구항 5

청구항 3에 있어서,

D가 하기 일반식 (2b)로 나타나는 기인, 발광 재료.

[화학식 3]

일반식 (2b)



[일반식 (2b)에 있어서, R^{21}~R^{28}은, 각각 독립적으로 수소 원자 또는 치환기를 나타낸다. L은 단결합, 치환 혹은 무치환의 아릴렌기, 또는 치환 혹은 무치환의 헤테로아릴렌기를 나타낸다. R^{21}과 R^{22}, R^{22}와 R^{23}, R^{23}과 R^{24}, R^{24}와 R^{25}, R^{26}과 R^{27}, R^{27}과 R^{28}은 서로 결합하여 환상 구조를 형성하기 위하여 필요한 연결기를 형성해도 된다. 또, R^{25}와 R^{26}은 서로 결합하여 단결합 또는 연결기를 형성해도 된다.]

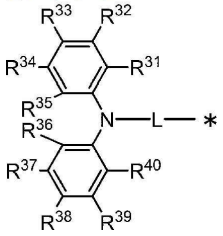
청구항 6

청구항 3에 있어서,

D가 하기 일반식 (2c)로 나타나는 기인, 발광 재료.

[화학식 4]

일반식 (2c)



[일반식 (2c)에 있어서, R^{31}~R^{40}은, 각각 독립적으로 수소 원자 또는 치환기를 나타낸다. L은 단결합, 치환 혹은 무치환의 아릴렌기, 또는 치환 혹은 무치환의 헤테로아릴렌기를 나타낸다. R^{31}과 R^{32}, R^{32}와 R^{33}, R^{33}과 R^{34}, R^{34}와 R^{35}, R^{36}과 R^{37}, R^{37}과 R^{38}, R^{38}과 R^{39}, R^{39}와 R^{40}은 서로 결합하여 환상 구조를 형성하기 위하여 필요한 연결기를 형성해도 된다. 또, R^{35}와 R^{36}은 서로 결합하여 단결합 또는 연결기를 형성해도 된다. *는, 일반식 (1)에 있어서의 벤젠환의 환골격을 구성하는 탄소 원자 (C)에 대한 결합 위치를 나타낸다.]

청구항 7

청구항 4 내지 청구항 6 중 어느 한 항에 있어서,

L이 단결합인, 발광 재료.

청구항 8

청구항 4 내지 청구항 6 중 어느 한 항에 있어서,

R^3이 사이아노기이며, L이 치환 혹은 무치환의 페닐렌기인, 발광 재료.

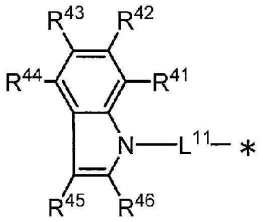
청구항 9

청구항 4 내지 청구항 8 중 어느 한 항에 있어서,

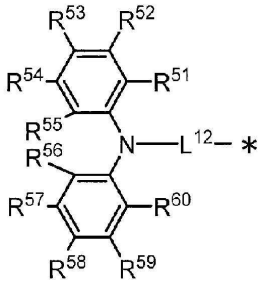
D가 하기 일반식 (3)~(6) 중 어느 하나로 나타나는 기인, 발광 재료.

[화학식 5]

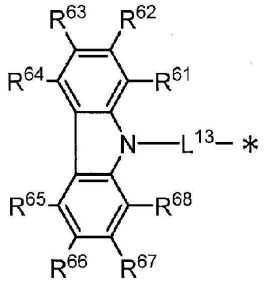
일반식 (3)



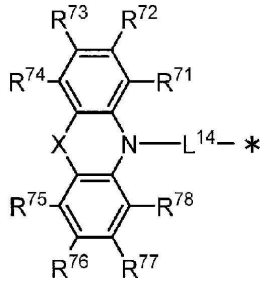
일반식 (4)



일반식 (5)



일반식 (6)



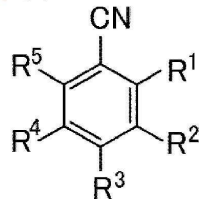
[일반식 (3)~(6)에 있어서, R^{41}~R^{46}, R^{51}~R^{60}, R^{61}~R^{68}, R^{71}~R^{78}은, 각각 독립적으로 수소 원자 또는 치환기를 나타낸다. L^{11}~L^{14}는, 단결합, 치환 혹은 무치환의 아릴렌기, 또는 치환 혹은 무치환의 헤테로아릴렌기를 나타낸다. 일반식 (6)에 있어서의 X는, 연결쇄 길이가 1원자인 2가의 산소 원자, 황 원자, 치환 혹은 무치환의 질소 원자, 치환 혹은 무치환의 탄소 원자, 치환 혹은 무치환의 규소 원자, 카보닐기, 혹은, 결합쇄 길이가 2원자인 2가의 치환 혹은 무치환의 에틸렌기, 치환 혹은 무치환의 바이닐렌기, 치환 혹은 무치환의 o-아릴렌기, 또는 치환 혹은 무치환의 o-헤테로아릴렌기를 나타낸다.]

청구항 10

하기 일반식 (1)로 나타나는 화합물.

[화학식 6]

일반식 (1)



[일반식 (1)에 있어서,

R^1~R^5는, 각각 독립적으로 수소 원자 또는 치환기를 나타내고,

R^1~R^5 중 하나는 사이아노기를 나타내며,

R^1~R^5 중 1~3개는, 알킬기 또는 아릴기로 치환되어 있어도 되는 아릴기 Ar(단 후자의 아릴기를 구성하는 벤젠환에는, 탄소 원자 외에 산소 원자 또는 황 원자를 환골격 구성 원자로서 포함하고 있어도 되는 환이 축합하고 있어도 되지만, 산소 원자 및 황 원자 이외의 헤테로 원자를 환골격 구성 원자로서 포함하는 환이 축합하고 있는 경우는 없음)을 나타내고, R^1~R^5 중 2개 이상이 Ar일 때, 그들 Ar은 서로 동일해도 되고 달라도 되며,

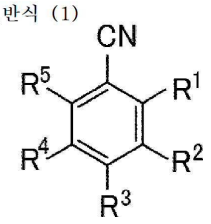
R^1~R^5 중 1~3개는, 도너성기 D(단 Ar에 해당하는 것은 제외함)를 나타내고, R^1~R^5 중 2개 이상이 D일 때, 그들 D는 서로 동일해도 되고 달라도 된다.]

청구항 11

하기 일반식 (1)로 나타나는 화합물로 이루어지는 지연 형광체.

[화학식 7]

일반식 (1)



[일반식 (1)에 있어서,

R^1~R^5는, 각각 독립적으로 수소 원자 또는 치환기를 나타내고,

R^1~R^5 중 하나는 사이아노기를 나타내며,

R^1~R^5 중 1~3개는, 알킬기 또는 아릴기로 치환되어 있어도 되는 아릴기 Ar(단 후자의 아릴기를 구성하는 벤젠환에는, 탄소 원자 외에 산소 원자 또는 황 원자를 환골격 구성 원자로서 포함하고 있어도 되는 환이 축합하고 있어도 되지만, 산소 원자 및 황 원자 이외의 헤테로 원자를 환골격 구성 원자로서 포함하는 환이 축합하고 있는 경우는 없음)을 나타내고, R^1~R^5 중 2개 이상이 Ar일 때, 그들 Ar은 서로 동일해도 되고 달라도 되며,

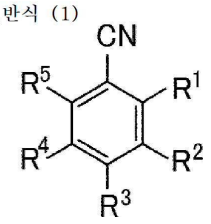
R^1~R^5 중 1~3개는, 도너성기 D(단 Ar에 해당하는 것은 제외함)를 나타내고, R^1~R^5 중 2개 이상이 D일 때, 그들 D는 서로 동일해도 되고 달라도 된다.]

청구항 12

하기 일반식 (1)로 나타나는 화합물을 포함하는 것을 특징으로 하는 발광 소자.

[화학식 8]

일반식 (1)



[일반식 (1)에 있어서,

R^1~R^5는, 각각 독립적으로 수소 원자 또는 치환기를 나타내고,

R^1~R^5 중 하나는 사이아노기를 나타내며,

R^1~R^5 중 1~3개는, 알킬기 또는 아릴기로 치환되어 있어도 되는 아릴기 Ar(단 후자의 아릴기를 구성하는 벤젠환에는, 탄소 원자 외에 산소 원자 또는 황 원자를 환골격 구성 원자로서 포함하고 있어도 되는 환이 축합하고 있어도 되지만, 산소 원자 및 황 원자 이외의 헤테로 원자를 환골격 구성 원자로서 포함하는 환이 축합하고 있는 경우는 없음)을 나타내고, R^1~R^5 중 2개 이상이 Ar일 때, 그들 Ar은 서로 동일해도 되고 달라도 되며,

R^1~R^5 중 1~3개는, 도너성기 D(단 Ar에 해당하는 것은 제외함)를 나타내고, R^1~R^5 중 2개 이상이 D일 때, 그들 D는 서로 동일해도 되고 달라도 된다.]

청구항 13

청구항 12에 있어서,

지연 형광을 방사하는 발광 소자.

청구항 14

청구항 12 또는 청구항 13에 있어서,

상기 발광 소자가 발광층을 갖고 있고, 상기 발광층이 상기 화합물과 호스트 재료를 포함하는, 발광 소자.

청구항 15

청구항 12 내지 청구항 14 중 어느 한 항에 있어서,

상기 발광 소자가 발광층을 갖고 있고, 상기 발광층이 상기 화합물과 발광 재료를 포함하는, 발광 소자.

발명의 설명

기 술 분 야

[0001] 본 발명은, 발광 재료로서 유용한 화합물과 그것을 이용한 발광 소자에 관한 것이다. 또, 본 발명은 지연 형광을 방사하는 지연 형광체에도 관한 것이다.

배 경 기 술

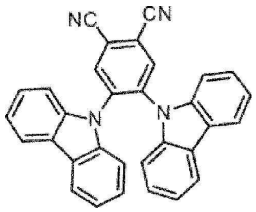
[0002] 유기 일렉트로 루미네선스 소자(유기 EL 소자) 등의 발광 소자의 발광 효율을 높이는 연구가 활발히 행해지고 있다. 특히, 유기 일렉트로 루미네선스 소자를 구성하는 전자 수송 재료, 홀 수송 재료, 발광 재료 등을 새롭게 개발하여 조합함으로써, 발광 효율을 높이는 연구가 다양하게 이루어져 오고 있다. 그 중에는, 지연 형광 재료를 이용한 유기 일렉트로 루미네선스 소자에 관한 연구도 보여진다.

[0003] 지연 형광 재료는, 여기 상태에 있어서, 여기 삼중항 상태로부터 여기 일중항 상태로의 역항간 교차를 발생시킨 후, 그 여기 일중항 상태로부터 기저 상태로 되돌아올 때에 형광을 방사하는 재료이다. 이러한 경로에 의한 형

광은, 기저 상태로부터 직접 발생한 여기 일중항 상태로부터의 형광(통상의 형광)보다 지연되어 관측되기 때문에, 지연 형광이라고 칭해지고 있다. 여기에서, 예를 들면 발광성 화합물을 캐리어의 주입에 의하여 여기한 경우, 여기 일중항 상태와 여기 삼중항 상태의 발생 확률은 통계적으로 25%:75%이기 때문에, 직접 발생한 여기 일중항 상태로부터의 형광만으로는, 발광 효율의 향상에 한계가 있다. 한편, 지연 형광 재료에서는, 여기 일중항 상태뿐만 아니라, 여기 삼중항 상태도 상기의 역항간 교차를 통한 경로에 의하여 형광 발광에 이용할 수 있기 때문에, 통상의 형광 재료에 비하여 높은 발광 효율이 얻어지게 된다.

[0004] 이와 같은 원리가 밝혀진 이후, 다양한 연구에 의하여 다양한 지연 형광 재료가 발견되기에 이르고 있다. 그러나, 지연 형광을 방사하는 재료이면, 즉시 발광 재료로서 유용한 것은 아니다. 지연 형광 재료 중에는, 역항간 교차가 비교적 발생하기 어려운 것도 있고, 지연 형광의 수명이 긴 것도 있다. 또, 고전류 밀도 영역에서 여기자가 축적되어 발광 효율이 저하되거나, 장시간 구동을 계속하면 급속히 열화되게 되는 것도 있다. 따라서, 실용성의 점에서 개선의 여지가 있는 지연 형광 재료가 매우 많은 것이 실정이다. 이 때문에, 지연 형광 재료로서 알려져 있는 사이아노벤젠 유도체에 있어서도, 과제가 있는 것이 지적되고 있다. 예를 들면, 하기의 구조를 갖는 2CzPN은 지연 형광을 방사하는 재료이지만, 발광 효율이 높지 않은 데다가, 고전류 밀도 영역에서의 발광 효율의 저하가 현저하다는 과제를 안고 있다(비특허문헌 1 참조).

[0005] [화학식 1]

[0006] 

선행기술문헌

비특허문헌

[0007] (비특허문헌 0001) 비특허문헌 1: Organic Electronics 14 (2013) 2721-2726

발명의 내용

해결하려는 과제

[0008] 이와 같은 과제를 안고 있는 것이 지적되고 있음에도 불구하고, 지연 형광 재료의 화학 구조와 특성의 관계에 대해서는 충분한 해명이 이루어지고 있다고는 말하기 어렵다. 이 때문에, 발광 재료로서 유용한 화합물의 화학 구조를 일반화하는 것은 현재 상태로서는 곤란하고, 불명확한 점이 많다.

[0009] 이와 같은 상황하에 있어서 본 발명자들은, 발광 소자용의 발광 재료로서 보다 유용한 화합물을 제공하는 것을 목적으로 하여 연구를 거듭했다. 그리고, 발광 재료로서 보다 유용한 화합물의 일반식을 이끌어내어 일반화하는 것을 목적으로 하여 예의 검토를 진행시켰다.

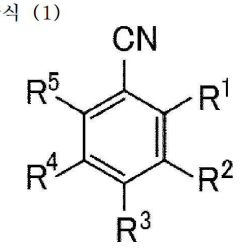
과제의 해결 수단

[0010] 상기의 목적을 달성하기 위하여 예의 검토를 진행시킨 결과, 본 발명자들은, 도너성기가 치환한 다이사이아노벤젠 유도체이며, 추가로 특정의 아릴기가 치환한 화합물이, 발광 소자용의 재료로서 유용한 것을 발견했다. 본 발명은, 이러한 발견에 근거하여 제안된 것이며, 구체적으로, 이하의 구성을 갖는다.

[0011] [1] 하기 일반식 (1)로 나타나는 화합물로 이루어지는 발광 재료.

[0012] [화학식 2]

일반식 (1)

[0013] 

[0014] [일반식 (1)에 있어서,

[0015] R^1~R^5는, 각각 독립적으로 수소 원자 또는 치환기를 나타내고,

[0016] R^1~R^5 중 하나는 사이아노기를 나타내며,

[0017] R^1~R^5 중 1~3개는, 알킬기 또는 아릴기로 치환되어 있어도 되는 아릴기 Ar(단 후자의 아릴기를 구성하는 벤젠환에는, 탄소 원자 외에 산소 원자 또는 황 원자를 환골격 구성 원자로서 포함하고 있어도 되는 환이 축합하고 있어도 되지만, 산소 원자 및 황 원자 이외의 헤테로 원자를 환골격 구성 원자로서 포함하는 환이 축합하고 있는 경우는 없음)을 나타내고, R^1~R^5 중 2개 이상이 Ar일 때, 그들 Ar은 서로 동일해도 되고 달라도 되며,

[0018] R^1~R^5 중 1~3개는, 도너성기 D(단 Ar에 해당하는 것은 제외함)를 나타내고, R^1~R^5 중 2개 이상이 D일 때, 그들 D는 서로 동일해도 되고 달라도 된다.]

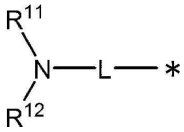
[0019] [2] R^1~R^5가 각각 독립적으로 사이아노기, Ar 또는 D인, [1]에 기재된 발광 재료.

[0020] [3] D가 치환 아미노기를 포함하는, [1] 또는 [2]에 기재된 발광 재료.

[0021] [4] D가 하기 일반식 (2a)로 나타나는 기인, [3]에 기재된 발광 재료.

[0022] [화학식 3]

일반식 (2a)

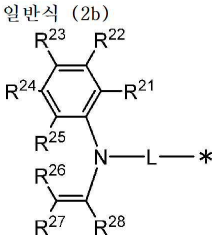
[0023] 

[0024] [일반식 (2a)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. L은 단결합, 치환 혹은 무치환의 아릴렌기, 또는 치환 혹은 무치환의 헤테로아릴렌기를 나타낸다. *는, 일반식 (1)에 있어서의 벤젠환의 환골격을 구성하는 탄소 원자 (C)에 대한 결합 위치를 나타낸다. R^{11}과 R^{12}는 서로 결합하여 환상 구조를 형성해도 된다.]

[0025] [5] D가 하기 일반식 (2b)로 나타나는 기인, [3]에 기재된 발광 재료.

[0026] [화학식 4]

일반식 (2b)

[0027] 

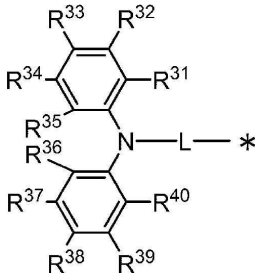
[0028] [일반식 (2b)에 있어서, R^{21}~R^{28}은, 각각 독립적으로 수소 원자 또는 치환기를 나타낸다. L은 단결합, 치환 혹은

무치환의 아릴렌기, 또는 치환 혹은 무치환의 헤테로아릴렌기를 나타낸다. R^{21}과 R^{22}, R^{22}와 R^{23}, R^{23}과 R^{24}, R^{24}와 R^{25}, R^{26}과 R^{27}, R^{27}과 R^{28}은 서로 결합하여 환상 구조를 형성하기 위하여 필요한 연결기를 형성해도 된다. 또, R^{25}와 R^{26}은 서로 결합하여 단결합 또는 연결기를 형성해도 된다.]

[0029] [6] D가 하기 일반식 (2c)로 나타나는 기인, [3]에 기재된 발광 재료.

[0030] [화학식 5]

일반식 (2c)

[0031] 

[0032] [일반식 (2c)에 있어서, R^{31}~R^{40}은, 각각 독립적으로 수소 원자 또는 치환기를 나타낸다. L은 단결합, 치환 혹은 무치환의 아릴렌기, 또는 치환 혹은 무치환의 헤테로아릴렌기를 나타낸다. R^{31}과 R^{32}, R^{32}와 R^{33}, R^{33}과 R^{34}, R^{34}와 R^{35}, R^{36}과 R^{37}, R^{37}과 R^{38}, R^{38}과 R^{39}, R^{39}와 R^{40}은 서로 결합하여 환상 구조를 형성하기 위하여 필요한 연결기를 형성해도 된다. 또, R^{35}와 R^{36}은 서로 결합하여 단결합 또는 연결기를 형성해도 된다. *는, 일반식 (1)에 있어서의 벤젠환의 환골격을 구성하는 탄소 원자 (C)에 대한 결합 위치를 나타낸다.]

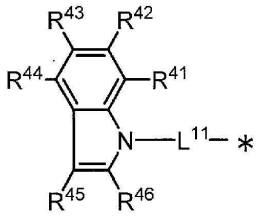
[0033] [7] L이 단결합인, [4] 내지 [6] 중 어느 한 항에 기재된 발광 재료.

[0034] [8] R^{3}이 사이아노기이며, L이 치환 혹은 무치환의 페닐렌기인, [4] 내지 [6] 중 어느 한 항에 기재된 발광 재료.

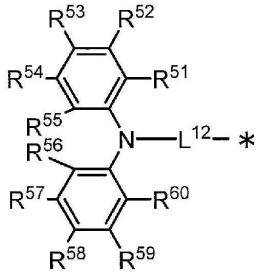
[0035] [9] D가 하기 일반식 (3)~(6) 중 어느 하나로 나타나는 기인, [4] 내지 [8] 중 어느 한 항에 기재된 발광 재료.

[0036] [화학식 6]

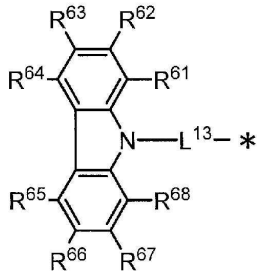
일반식 (3)



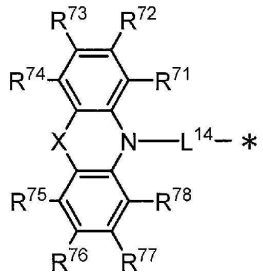
일반식 (4)



일반식 (5)



일반식 (6)



[0037]

[0038] [일반식 (3)~(6)에 있어서, R^{41}~R^{46}, R^{51}~R^{60}, R^{61}~R^{68}, R^{71}~R^{78}은, 각각 독립적으로 수소 원자 또는 치환기를 나타낸다. L^{11}~L^{14}는, 단결합, 치환 혹은 무치환의 아릴렌기, 또는 치환 혹은 무치환의 헤테로아릴렌기를 나타낸다. 일반식 (6)에 있어서의 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.]

[0039] [10] 상기 일반식 (1)로 나타나는 화합물.

[0040] [11] 상기 일반식 (1)로 나타나는 화합물로 이루어지는 지연 형광체.

[0041] [12] 상기 일반식 (1)로 나타나는 화합물을 포함하는 것을 특징으로 하는 발광 소자.

[0042] [13] 지연 형광을 방사하는 [12]에 기재된 발광 소자.

[0043] [14] 상기 발광 소자가 발광층을 갖고 있고, 상기 발광층이 상기 화합물과 호스트 재료를 포함하는, [12] 또는 [13]에 기재된 발광 소자.

[0044] [15] 상기 발광 소자가 발광층을 갖고 있고, 상기 발광층이 상기 화합물과 발광 재료를 포함하는, [12] 내지

[14] 중 어느 한 항에 기재된 발광 소자.

발명의 효과

[0045] 본 발명의 화합물은, 발광 재료로서 유용하다. 또, 본 발명의 화합물 중에는 지연 형광을 방사할 수 있고, 그 여기 삼중항 에너지를 발광에 유효 이용할 수 있는 화합물도 포함된다. 이 때문에, 본 발명의 화합물을 발광 재료로서 이용한 유기 발광 소자는, 높은 발광 효율을 실현할 수 있다.

도면의 간단한 설명

[0046] 도 1은 유기 일렉트로 루미네선스 소자의 층 구성예를 나타내는 개략 단면도이다.

도 2는 실시예 1의 발명 화합물 6-1의 형광 스펙트럼과 인광 스펙트럼이다.

도 3은 실시예 1의 발명 화합물 6-1만으로 이루어지는 박막의 과도 감쇠 곡선이다.

도 4는 실시예 2의 발명 화합물 6-1의 도프 박막의 과도 감쇠 곡선이다.

도 5는 비교예 2의 비교 화합물 6-1의 도프 박막의 과도 감쇠 곡선이다.

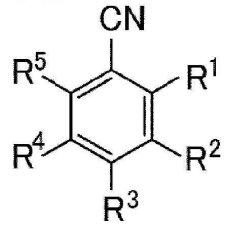
발명을 실시하기 위한 구체적인 내용

[0047] 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, 본 명세서에 있어서 "~"를 이용하여 나타나는 수치 범위는, "~"의 전후에 기재되는 수치를 하한값 및 상한값으로서 포함하는 범위를 의미한다. 또, 본 발명에 이용되는 화합물의 분자 내에 존재하는 수소 원자의 동위체종은 특별히 한정되지 않으며, 예를 들면 분자 내의 수소 원자가 모두 ^{1}H여도 되고, 일부 또는 전부가 ^{2}H(듀테리움 D)여도 된다. 또, 일본의 특허출원 2018-114758호의 기재 사항, 특히 당해 출원 명세서의 표 1~5를, 본 명세서의 일부로서 여기에 인용한다.

[0048] [일반식 (1)로 나타나는 화합물]

[0049] [화학식 7]

일반식 (1)



[0050]

[0051] 일반식 (1)의 R^{1}~R^{5}는, 각각 독립적으로 수소 원자 또는 치환기를 나타낸다.

[0052] R^{1}~R^{5} 중 하나만이 사이아노기를 나타낸다. 사이아노기를 나타내는 것은, R^{1}이어도 되고, R^{2}여도 되며, R^{3}이어도 된다.

[0053] 일반식 (1)의 R^{1}~R^{5} 중 1~3개는, 알킬기 또는 아릴기로 치환되어 있어도 되는 아릴기 Ar을 나타낸다. R^{1}~R^{5} 중에서 아릴기 Ar인 것은, 1~3개 중 어느 수여도 되지만, 1개 또는 2개인 것이 바람직하다. Ar의 결합손을 갖는 벤젠환은, 단환이어도 되고 축합환의 일부여도 된다. 벤젠환에 환이 더 축합하고 있는 경우는, 그 축합하고 있는 환은 환골격 구성 원자가 탄소 원자만으로 이루어지는 환이어도 되고, 환골격 구성 원자로서 산소 원자 또는 황 원자를 포함하는 것이어도 된다. 그러나, 벤젠환에 환이 더 축합하고 있을 때, 그 축합하고 있는 환은 환골격 구성 원자로서 산소 원자 및 황 원자 이외의 헤테로 원자를 포함하는 환인 경우는 없다. Ar의 결합손을 갖는 벤젠환에 더 축합할 수 있는 환의 예로서, 벤젠환, 퓨란환, 싸이오펜환, 사이클로펜텐환, 사이클로펜타다이엔환, 사이클로헥센환, 사이클로헥사다이엔환, 사이클로헵텐환, 사이클로헵타다이엔환, 사이클로헵타트라이엔환을 들 수 있다. Ar의 결합손을 갖는 벤젠환에는, 1개의 환이 축합하고 있어도 되고, 2개 이상의 환이 축합하고 있어도 된다. 또, Ar의 결합손을 갖는 벤젠환에 축합한 환에, 추가로 환이 축합하고 있어도 된다. 이와 같이 복수의 환

이 축합하고 있는 경우여도, 그 축합하고 있는 환은, 환골격 구성 원자가 탄소 원자만으로 이루어지는 환이거나, 환골격 구성 원자로서 산소 원자 또는 황 원자를 포함하는 환이다. 또, 2개 이상의 환이 축합하고 있을 때, 그들 2개 이상의 환은 서로 동일해도 되고 달라도 된다.

[0054] Ar의 결합손을 갖는 벤젠환 또는 그 벤젠환을 일부로서 포함하는 축합환은, 알킬기 및 아릴기 중 적어도 한쪽의 치환기로 치환되어 있어도 된다. 여기에서 말하는 치환기는, 수소 원자에 치환할 수 있는 1가의 기를 의미하고 있고, 축합하는 것을 포함하는 개념은 아니다.

[0055] 여기에서 말하는 치환기인 "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.

[0056] 여기에서 말하는 치환기인 "아릴기"는, 방향족 탄화수소환 1개만으로 이루어지는 기여도 되고, 방향족 탄화수소환에 1개 이상의 환이 축합한 기여도 된다. 방향족 탄화수소환에 1개 이상의 환이 축합한 기인 경우는, 방향족 탄화수소환, 지방족 탄화수소환 및 비방향족 복소환 중 1 이상이 방향족 탄화수소환에 축합한 기를 채용할 수 있다. 아릴기의 탄소수는, 예를 들면 6 이상, 10 이상으로 할 수 있다. 또, 탄소수는 30 이하, 18 이하, 14 이하, 10 이하로 할 수 있다. 아릴기의 구체예로서 페닐기, 1-나프틸기, 2-나프틸기, 1-안트라센일기, 2-안트라센일기, 9-안트라센일기를 들 수 있다. 치환기인 아릴기는, 알킬기나 아릴기로 더 치환되어 있어도 된다.

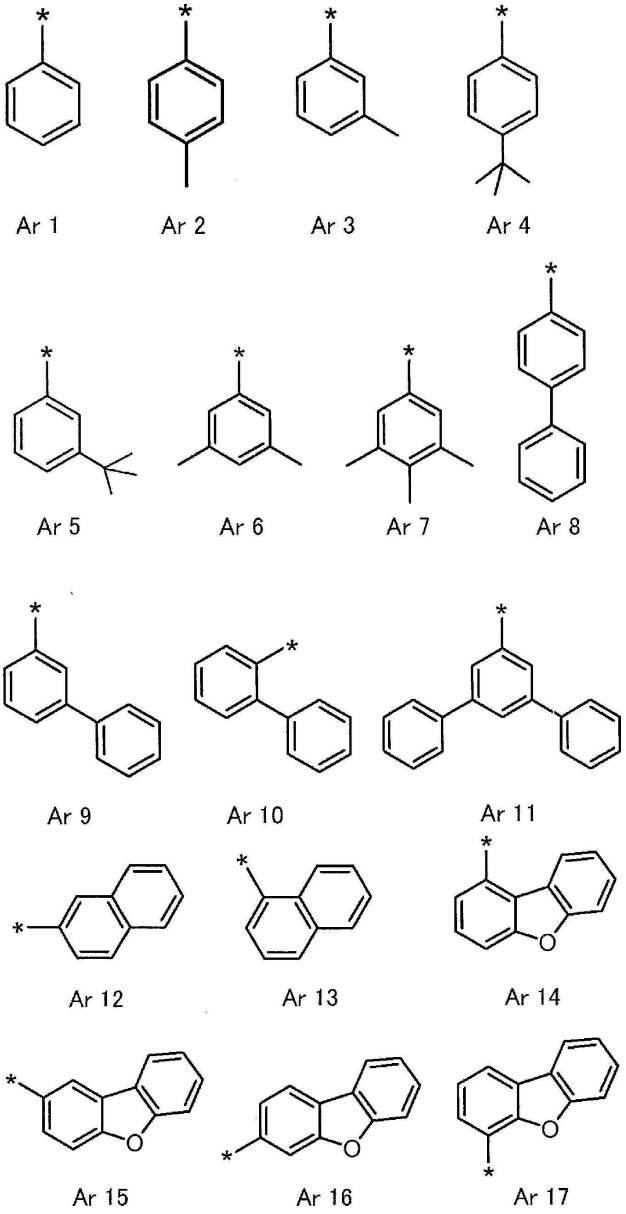
[0057] Ar의 결합손을 갖는 벤젠환이 치환기를 가질 때, 그 치환기의 치환 위치는, 3~5위 중 어느 하나인 것이 바람직하다. 예를 들면, 3위, 4위, 3위와 5위, 3위와 4위와 5위에 치환기를 갖는 경우를 바람직하게 예시할 수 있다.

[0058] Ar로 나타나는 기의 총 탄소수는, 6~50인 것이 바람직하고, 6~30인 것이 보다 바람직하며, 6~18인 것이 더 바람직하고, 6~12인 것이 보다 더 바람직하다.

[0059] Ar의 바람직한 1군으로서, 페닐기, 알킬기로 치환된 페닐기, 페닐기로 치환된 페닐기, 알킬기와 페닐기로 치환된 페닐기, 나프틸기, 알킬기로 치환된 나프틸기, 페닐기로 치환된 나프틸기, 알킬기와 페닐기로 치환된 나프틸기, 다이벤조퓨릴기, 알킬기로 치환된 다이벤조퓨릴기, 알킬기와 페닐기로 치환된 다이벤조퓨릴기, 다이벤조싸이오페닐기, 알킬기로 치환된 다이벤조싸이오페닐기, 알킬기와 페닐기로 치환된 다이벤조싸이오페닐기, 플루오렌일기, 알킬기로 치환된 플루오렌일기, 페닐기로 치환된 플루오렌일기, 알킬기와 페닐기로 치환된 플루오렌일기를 들 수 있다. Ar의 다른 바람직한 1군으로서, 페닐기, 모노알킬페닐기, 다이알킬페닐기, 트라이알킬페닐기, 테트라알킬페닐기, 펜타알킬페닐기, 모노페닐페닐기, 다이페닐페닐기, 나프틸기, 모노알킬나프틸기, 다이알킬나프틸기, 트라이알킬나프틸기, 테트라알킬나프틸기, 펜타알킬나프틸기, 모노페닐나프틸기, 다이벤조퓨릴기, 모노알킬다이벤조퓨릴기, 다이알킬다이벤조퓨릴기, 트라이알킬다이벤조퓨릴기, 테트라알킬다이벤조퓨릴기, 펜타알킬다이벤조퓨릴기, 모노페닐다이벤조퓨릴기, 다이벤조싸이오페닐기, 모노알킬다이벤조싸이오페닐기, 다이알킬다이벤조싸이오페닐기, 트라이알킬다이벤조싸이오페닐기, 테트라알킬다이벤조싸이오페닐기, 펜타알킬다이벤조싸이오페닐기, 모노페닐알킬다이벤조싸이오페닐기, 모노알킬플루오렌일기, 다이알킬플루오렌일기, 트라이알킬플루오렌일기, 테트라알킬플루오렌일기, 옥타알킬플루오렌일기, 모노페닐플루오렌일기, 다이페닐플루오렌일기, 트라이페닐플루오렌일기, 테트라페닐플루오렌일기를 들 수 있다.

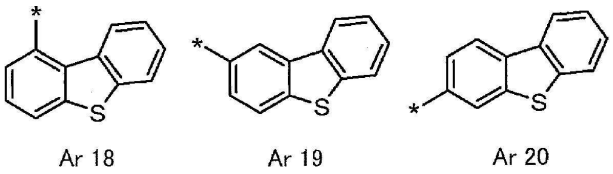
[0060] 이하에 Ar로 나타나는 기의 구체예를 들지만, 본 발명에서 채용할 수 있는 Ar은 이들 구체예에 의하여 한정적으로 해석되는 일은 없다.

[0061] [화학식 8-1]



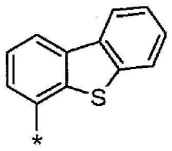
[0062]

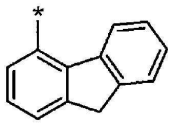
[0063] [화학식 8-2]

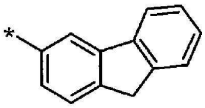

Ar 18

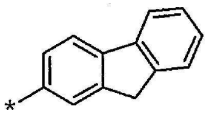
Ar 19

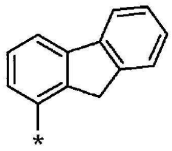
Ar 20

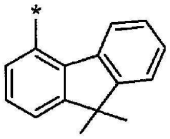

Ar 21

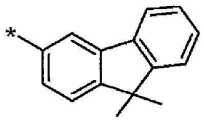

Ar 22

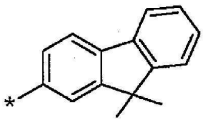

Ar 23

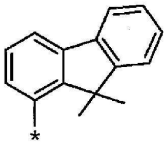

Ar 24

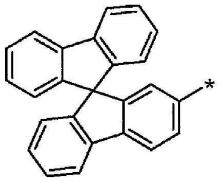

Ar 25

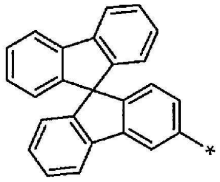

Ar 26

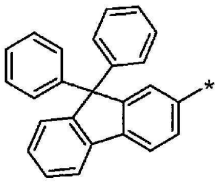

Ar 27

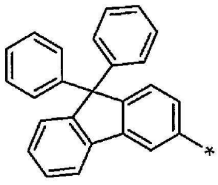

Ar 28


Ar 29


Ar 30


Ar 31


Ar 32


Ar 33

[0064]

[0065] 일반식 (1)에 있어서의 R^1~R^5 중 1~3개는, 도너성기 D를 나타낸다. 단, 도너성기 D에는, 상기의 Ar에 해당하는 것은 포함되지 않는다.

[0066] 본 명세서에 있어서의 "도너성기"는, 하메트의 σp값이 음인 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:

[0067] $\log(k/k_0)=\rho\,\sigma p$

[0068] 또는

[0069] $\log(K/K_0)=\rho\,\sigma p$

[0070] 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. 하메트의 σp값이 음인 기는 전자 공여성(도너성)을 나타내고, 하메트의 σp값이 양인 기는 전자 구인성(억셉터성)을 나타내는 경향이 있다.

[0071] 일반식 (1)에 있어서의 D는, 치환 아미노기를 포함하는 기인 것이 바람직하다. 아미노기의 질소 원자에 결합하는 치환기는, 치환 혹은 무치환의 알킬기, 치환 혹은 무치환의 알켄일기, 치환 혹은 무치환의 아릴기, 또는 치환 혹은 무치환의 헤테로아릴기인 것이 바람직하고, 치환 혹은 무치환의 아릴기, 또는 치환 혹은 무치환의 헤테로아릴기인 것이 보다 바람직하다. 특히, 치환 혹은 무치환의 다이아릴아미노기, 또는 치환 혹은 무치환의 다이헤테로아릴아미노기인 것이 바람직하다. 일반식 (1)에 있어서의 D는, 치환 아미노기의 질소 원자로 결합하는 기여도 되고, 치환 아미노기가 결합한 기로 결합하는 기여도 된다. 치환 아미노기가 결합하는 기는, π공액기인 것이 바람직하다.

[0072] 여기에서 말하는 치환기인 "알킬기"에 대해서는, 일반식 (1)에 있어서의 Ar의 치환기인 알킬기의 대응하는 기재를 참조할 수 있다.

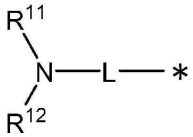
[0073] 여기에서 말하는 치환기인 "알켄일기"는, 직쇄상, 분기상, 환상 중 어느 것이어도 된다. 또, 직쇄 부분과 환상 부분과 분기 부분 중 2종 이상이 혼재하고 있어도 된다. 알켄일기의 탄소수는, 예를 들면 2 이상, 4 이상으로 할 수 있다. 또, 탄소수는 30 이하, 20 이하, 10 이하, 6 이하, 4 이하로 할 수 있다. 알켄일기의 구체예로서 에텐일기, n-프로펜일기, 아이소프로펜일기, n-뷰텐일기, 아이소뷰텐일기, n-펜텐일기, 아이소펜텐일기, n-헥센일기, 아이소헥센일기, 2-에틸헥센일기를 들 수 있다. 치환기인 알켄일기는, 치환기로 더 치환되어 있어도 된다.

[0074] 여기에서 말하는 치환기인 "아릴기" 및 "헤테로아릴기"는, 단환이어도 되고, 2개 이상의 환이 축합한 축합환이어도 된다. 축합환인 경우, 축합하고 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. 아릴렌기 또는 헤테로아릴렌기의 구체예로서, 페닐기, 1-나프틸기, 2-나프틸기, 1-안트라센일기, 2-안트라센일기, 9-안트라센일기, 2-피리딜기, 3-피리딜기, 4-피리딜기를 들 수 있다. 아릴렌기 또는 헤테로아릴렌기는, 치환기를 갖고 있어도 되고, 무치환이어도 된다. 치환기를 2개 이상 갖는 경우, 복수의 치환기는 서로 동일해도 되고 달라도 된다. 치환기로서는, 하이드록시기, 할로젠 원자, 탄소수 1~20의 알킬기, 탄소수 1~20의 알콕시기, 탄소수 1~20의 알킬싸이오기, 탄소수 1~20의 알킬 치환 아미노기, 탄소수 1~26의 아릴 치환 아미노기, 탄소수 6~40의 아릴기, 탄소수 3~40의 헤테로아릴기, 탄소수 2~10의 알켄일기, 탄소수 2~10의 알카인일기, 탄소수 2~20의 알킬아마이드기, 탄소수 7~21의 아릴아마이드기, 탄소수 3~20의 트라이알킬실릴기 등을 들 수 있다. 이들 구체예 중, 추가로 치환기에 의하여 치환 가능인 것은 치환되어 있어도 된다. 보다 바람직한 치환기는, 탄소수 1~20의 알킬기, 탄소수 1~20의 알콕시기, 탄소수 1~20의 알킬싸이오기, 탄소수 1~26의 알킬 치환 아미노기, 탄소수 1~20의 아릴 치환 아미노기, 탄소수 6~40의 아릴기, 탄소수 3~40의 헤테로아릴기이다.

[0075] 일반식 (1)에 있어서의 도너성기 D로서, 예를 들면 하기의 일반식 (2a)로 나타나는 기인 것이 바람직하다.

[0076] [화학식 9]

일반식 (2a)

[0077] 

[0078] 일반식 (2a)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)로 나타나는 기여도 되고, 후술하는 일반식 (2a), (2b), (2c), (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 달라도 된다. *는, 일반식 (1)에 있어서의 벤젠환의 환골격을 구성하는 탄소 원자 (C)에 대한 결합 위치를 나타낸다.

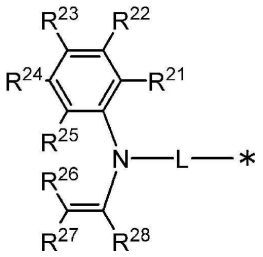
[0079] 일반식 (2a)에 있어서의 R^{11}과 R^{12}는, 서로 결합함으로써 일반식 (2a)의 질소 원자와 함께 환상 구조를 형성하고 있어도 된다.

[0080] R^{11}과 R^{12}가 나타내는 아릴기 또는 헤테로아릴기에 대해서는, 아미노기의 질소 원자에 결합하는 치환기인 아릴기와 헤테로아릴기의 설명을 참조할 수 있다.

[0081] 일반식 (2a)로 나타나는 치환기는, 하기의 일반식 (2b)로 나타나는 치환기인 것이 바람직하다.

[0082] [화학식 10]

일반식 (2b)

[0083] 

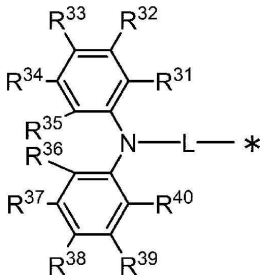
[0084] 일반식 (2b)에 있어서, R^{21}~R^{28}은, 각각 독립적으로 수소 원자 또는 치환기를 나타낸다. L은 단결합, 치환 혹은 무치환의 아릴렌기, 또는 치환 혹은 무치환의 헤테로아릴렌기를 나타낸다. R^{21}과 R^{22}, R^{22}와 R^{23}, R^{23}과 R^{24}, R^{24}와 R^{25}, R^{26}과 R^{27}, R^{27}과 R^{28}은 서로 결합하여 환상 구조를 형성하기 위하여 필요한 연결기를 형성해도 된다. 또, R^{25}와 R^{26}은 서로 결합하여 단결합 또는 연결기를 형성해도 된다. 예를 들면 R^{25}와 R^{26}은 서로 결합하여 단결합을 형성함으로써, 일반식 (2b)로 나타나는 화합물은 카바졸환을 포함하게 된다. *는, 일반식 (1)에 있어서의 벤젠환의 환골격을 구성하는 탄소 원자 (C)에 대한 결합 위치를 나타낸다. R^{21}~R^{28}이 취할 수 있는 치환기의 구체예와 바람직한 범위에 대해서는, 일반식 (1)에 있어서의 Ar의 치환기인 아릴렌기 또는 헤테로아릴렌기의 기재를 참조할 수 있다.

[0085] 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}, R^{26}과 R^{27}, R^{27}과 R^{28}은 서로 결합하여 형성하는 환상 구조는 방향환이어도 되고 지방환이어도 되며, 또 헤테로 원자를 포함하는 것이어도 되고, 추가로 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, 사이클로펜타다이엔환, 사이클로헵타트라이엔환, 사이클로헵타다이엔환, 사이클로헵타엔환, 퓨란환, 싸이오펜환, 나프티리딘환, 퀴녹살린환, 퀴놀린환 등을 들 수 있다.

[0086] 일반식 (2a)로 나타나는 치환기는, 이하의 일반식 (2c)로 나타나는 치환기인 것이 바람직하다.

[0087] [화학식 11]

일반식 (2c)

[0088] 

[0089] 일반식 (2c)에 있어서, R^{31}~R^{40}은, 각각 독립적으로 수소 원자 또는 치환기를 나타낸다. L은 단결합, 치환 혹은

무치환의 아릴렌기, 또는 치환 혹은 무치환의 헤테로아릴렌기를 나타낸다. R^{31}과 R^{32}, R^{32}와 R^{33}, R^{33}과 R^{34}, R^{34}와 R^{35}, R^{36}과 R^{37}, R^{37}과 R^{38}, R^{38}과 R^{39}, R^{39}와 R^{40}은 서로 결합하여 환상 구조를 형성하기 위하여 필요한 연결기를 형성해도 된다. 또, R^{35}와 R^{36}은 서로 결합하여 단결합 또는 연결기를 형성해도 된다. *는, 일반식 (1)에 있어서의 벤젠환의 환골격을 구성하는 탄소 원자 (C)에 대한 결합 위치를 나타낸다. R^{31}~R^{40}이 취할 수 있는 치환기의 구체예와 바람직한 범위에 대해서는, 일반식 (1)에 있어서의 Ar의 치환기인 아릴렌기 또는 헤테로아릴렌기의 기재를 참조할 수 있다.

[0090] R^{31}과 R^{32}, R^{32}와 R^{33}, R^{33}과 R^{34}, R^{34}와 R^{35}, R^{35}와 R^{36}, R^{36}과 R^{37}, R^{37}과 R^{38}, R^{38}과 R^{39}, R^{39}와 R^{40}이 서로 결합하여 형성하는 환상 구조에 대해서는, 일반식 (2a)에 있어서의 R^{21}과 R^{22}가 형성하는 환상 구조에 대응하는 기재를 참조할 수 있다.

[0091] 일반식 (2a) ~(2c)에 있어서, L은, 단결합, 치환 혹은 무치환의 아릴렌기, 또는 치환 혹은 무치환의 헤테로아릴렌기를 나타낸다. L은, 단결합, 또는 치환 혹은 무치환의 아릴렌기인 것이 바람직하다.

[0092] L이 나타내는 아릴렌기를 구성하는 방향환은, 단환이어도 되고, 2 이상의 방향환이 축합한 축합환이어도 되며, 2 이상의 방향환이 연결한 연결환이어도 된다. 2 이상의 방향환이 연결하고 있는 경우는, 직쇄상에 연결한 것이어도 되고, 분기상에 연결한 것이어도 된다. L이 나타내는 아릴렌기를 구성하는 방향환의 탄소수는, 6~22인 것이 바람직하고, 6~18인 것이 보다 바람직하며, 6~14인 것이 더 바람직하고, 6~10인 것이 보다 더 바람직하다. 아릴렌기의 구체예로서 페닐렌기, 나프탈렌다이일기, 바이페닐렌기를 들 수 있다.

[0093] 또, L이 나타내는 헤테로아릴렌기를 구성하는 복소환은, 단환이어도 되고, 1 이상의 복소환과 방향환 또는 복소환이 축합한 축합환이어도 되며, 1 이상의 복소환과 방향환 또는 복소환이 연결된 연결환이어도 된다. 복소환의 탄소수는 5~22인 것이 바람직하고, 5~18인 것이 보다 바람직하며, 5~14인 것이 더 바람직하고, 5~10인 것이 보다 더 바람직하다. 복소환을 구성하는 복소 원자는 질소 원자인 것이 바람직하다. 복소환의 구체예로서 피리딘환, 피리다진환, 피리미딘환, 트라이아졸환, 벤조트라이아졸환을 들 수 있다.

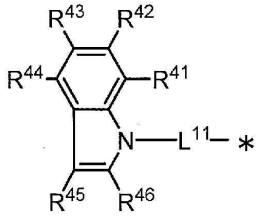
[0094] L이 나타내는 보다 바람직한 기는 페닐렌기이다. L이 페닐렌기일 때, 페닐렌기는 1,2-페닐렌기, 1,3-페닐렌기, 1,4-페닐렌기 중 어느 것이어도 되지만, 1,4-페닐렌기인 것이 바람직하다. 또, L은 치환기에 의하여 치환되어 있어도 된다. L의 치환기의 수 및 치환 위치는 특별히 제한되지 않는다. L에 도입할 수 있는 치환기의 설명과 바람직한 범위에 대해서는, 상기의 R^{11}과 R^{12}가 취할 수 있는 치환기의 설명과 바람직한 범위를 참조할 수 있다. 또, L의 아릴렌기 또는 헤테로아릴렌기에 도입할 수 있는 치환기는, 일반식 (1), (2a), (2b), (2c)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 달라도 된다.

[0095] L이 치환기를 갖는 경우, 그 치환기는 (2a)에 있어서의 R^{11} 및 R^{12}, (2b)에 있어서의 R^{21} 및 R^{28}, (2c)에 있어서의 R^{31} 및 R^{40}과 환상 구조를 형성하고 있어도 된다.

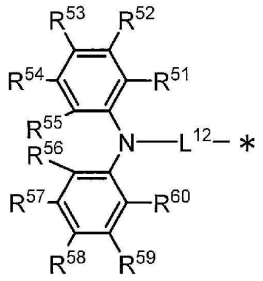
[0096] 일반식 (2a)~(2c)로 나타나는 치환기는, 하기의 일반식 (3)~(6) 중 어느 하나의 일반식으로 나타나는 치환기인 것이 바람직하고, 그 중에서 일반식 (3)~(5)로 나타나는 기가 바람직하며, 보다 바람직하게는 일반식 (5)로 나타나는 기이다.

[0097] [화학식 12]

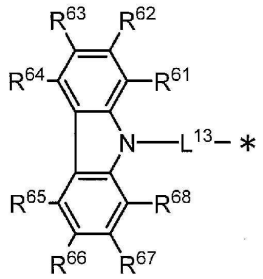
일반식 (3)



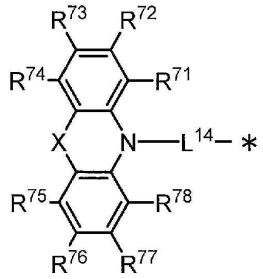
일반식 (4)



일반식 (5)



일반식 (6)



[0098]

[0099] 일반식 (3)~(6)에 있어서, R^{41}~R^{46}, R^{51}~R^{60}, R^{61}~R^{68}, R^{71}~R^{78}은, 각각 독립적으로 수소 원자 또는 치환기를 나타낸다. 여기에서 말하는 치환기의 설명과 바람직한 범위에 대해서는, 상기의 일반식 (1)에 있어서의 Ar의 치환기인 아릴렌기 또는 헤테로아릴렌기의 기재를 참조할 수 있다. R^{41}~R^{46}, R^{51}~R^{60}, R^{61}~R^{68}, R^{71}~R^{78}은, 각각 독립적으로 상기 일반식 (3)~(6) 중 어느 하나로 나타나는 기인 것도 바람직하다. 일반식 (3)~(6)에 있어서의 치환기의 수는 특별히 제한되지 않는다. 모든 것이 무치환(즉 수소 원자)인 경우도 바람직하다. 또, 일반식 (3)~(6)의 각각에 있어서 치환기가 2개 이상 있는 경우, 그들의 치환기는 동일해도 되고 달라도 된다. 일반식 (3)~(6)에 치환기가 존재하고 있는 경우, 그 치환기는 일반식 (3)이면 R^{42}~R^{46} 중 어느 하나인 것이 바람직하고, R^{45} 및 R^{46} 중 적어도 하나인 것이 보다 바람직하다. 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.

[0100] 일반식 (3)~(6)에 있어서, R^{41}과 R^{42}, R^{42}와 R^{43}, R^{43}과 R^{44}, R^{45}와 R^{46}, 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 있어

도 된다. 환상 구조의 설명과 바람직한 예에 대해서는, 상기의 일반식 (2b)에 있어서의 R^{21}과 R^{22} 등이 서로 결합하여 형성하는 환상 구조의 설명과 바람직한 예를 참조할 수 있다.

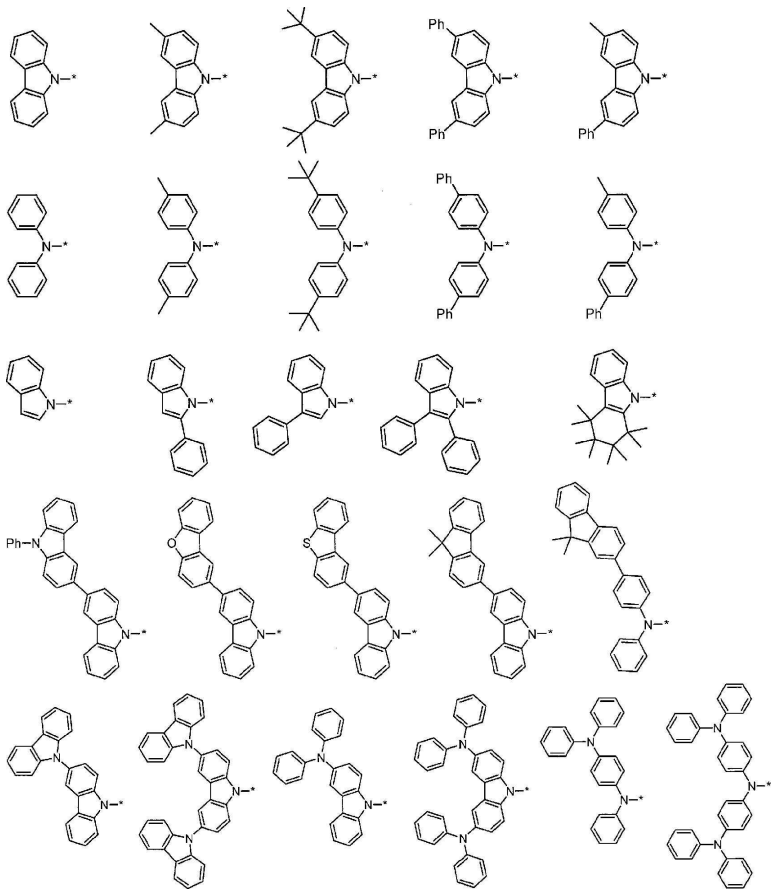
[0101] 일반식 (6)에 있어서 X는 연결쇄 길이가 1원자인 2가의 산소 원자, 황 원자, 치환 혹은 무치환의 질소 원자, 치환 혹은 무치환의 탄소 원자, 치환 혹은 무치환의 규소 원자, 카보닐기, 혹은, 결합쇄 길이가 2원자인 2가의 치환 혹은 무치환의 에틸렌기, 치환 혹은 무치환의 바이닐렌기, 치환 혹은 무치환의 o-아릴렌기, 또는 치환 혹은 무치환의 o-헤테로아릴렌기를 나타낸다. 치환기의 구체예와 바람직한 범위에 대해서는, 일반식 (2a)에 있어서의 R^{11}이 나타내는 아릴렌기 또는 헤테로아릴렌기의 치환기의 대응하는 기재를 참조할 수 있다.

[0102] 일반식 (3)~(6)에 있어서, L^{11}~L^{14}는, 단결합, 치환 혹은 무치환의 아릴렌기, 또는 치환 혹은 무치환의 헤테로아릴렌기를 나타낸다. 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 달라도 된다.

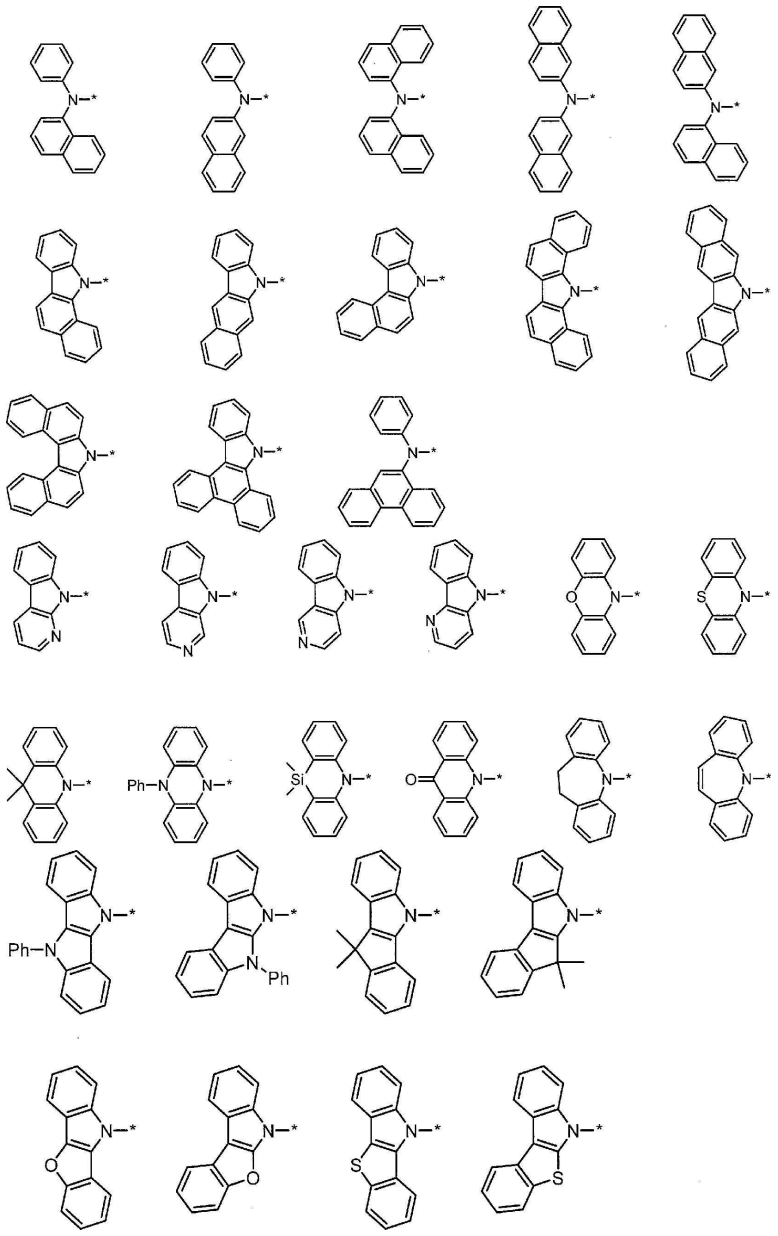
[0103] *는, 일반식 (1)에 있어서의 벤젠환의 환골격을 구성하는 탄소 원자 (C)에 대한 결합 위치를 나타낸다. L^{11}~L^{14}가 나타내는 아릴렌기 또는 헤테로아릴렌기, 이들 기에 도입할 수 있는 치환기의 설명과 바람직한 범위에 대해서는, L이 나타내는 아릴렌기 또는 헤테로아릴렌기, 이들 기에 도입할 수 있는 치환기의 설명과 바람직한 범위를 참조할 수 있다. L^{11}~L^{14}는, 단결합, 치환 혹은 무치환의 아릴렌기인 것이 바람직하다.

[0104] 이하에 치환 아미노기의 구체예를 들지만, 본 발명에서 채용할 수 있는 치환 아미노기는 이들 구체예에 의하여 한정적으로 해석되는 일은 없다. *는, 일반식 (2a)~(2c)에 있어서의 연결기 (L)에 대한 결합 위치를 나타낸다.

[0105] [화학식 13-1]

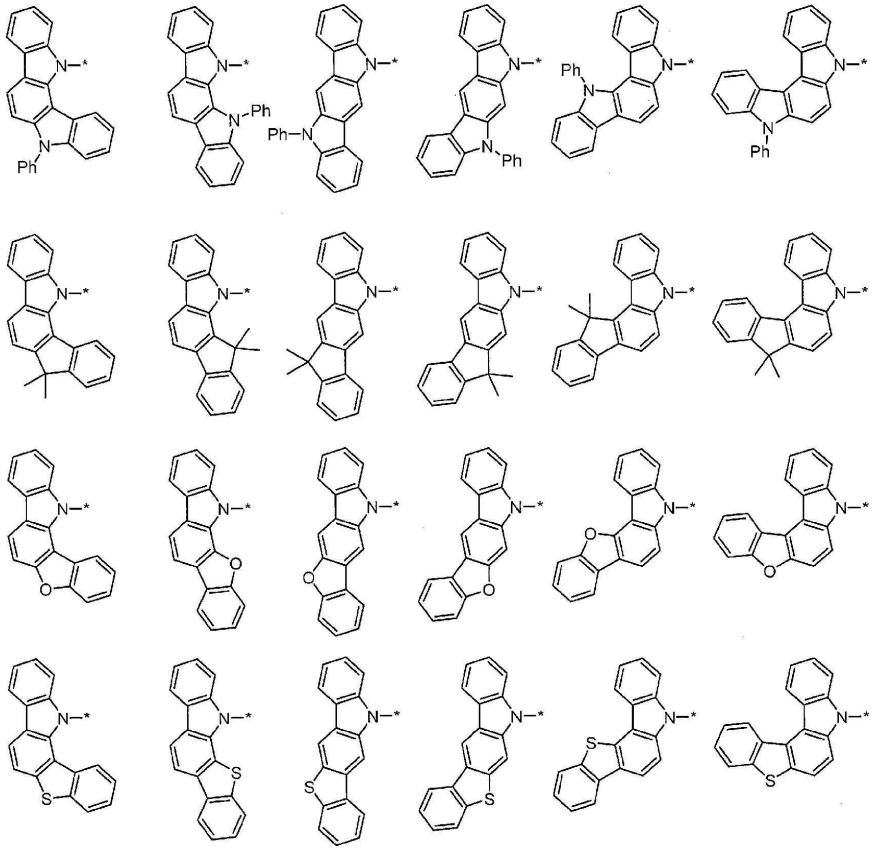
[0106] 

[0107] [화학식 13-2]



[0108]

[0109] [화학식 13-3]



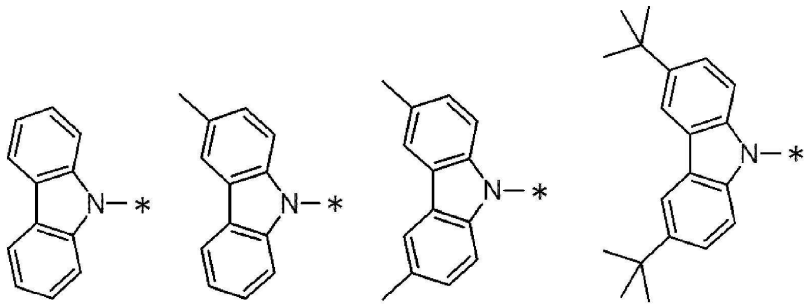
[0110]

[0111] 일반식 (1)의 R^1~R^5 중 2개 이상이 D일 때, 그들 복수의 D는 동일해도 되고 달라도 된다.

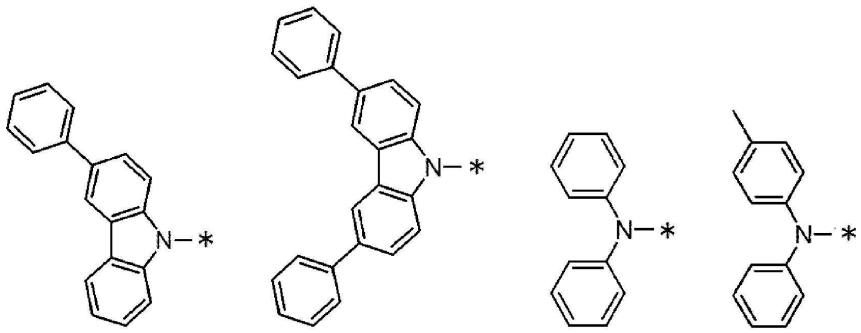
[0112] 다를 때는, 2개의 D가 모두 방향환을 갖고 있고, 2개의 D의 사이에서, 그 방향환은 공통되어 있지만, 그 방향환에 치환하고 있는 치환기의 수, 방향환의 치환기로 치환되어 있는 위치, 및, 방향환에 치환하고 있는 치환기의 구조 중 적어도 하나의 조건이 서로 다른 것인 경우가 바람직하다.

[0113] 이하에 D로 나타나는 기의 구체예를 들지만, 본 발명에서 채용할 수 있는 D는 이들 구체예에 의하여 한정적으로 해석되는 일은 없다.

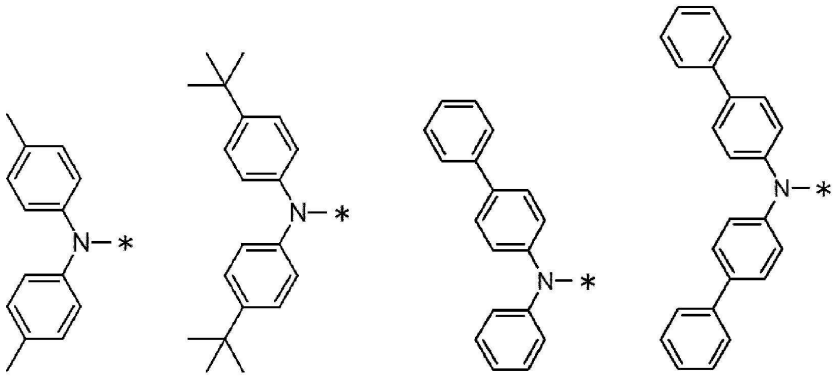
[0114] [화학식 14-1]



D1 D2 D3 D4

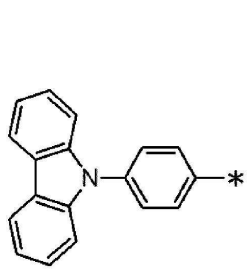


D5 D6 D7 D8

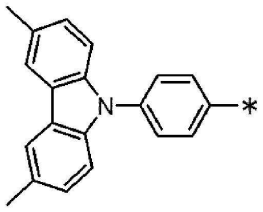


[0115] D9 D10 D11 D12

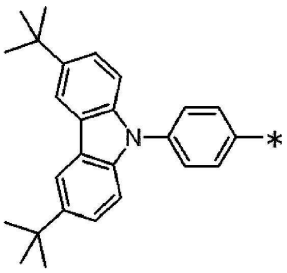
[0116] [화학식 14-2]



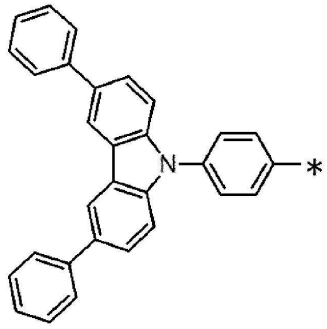
D13



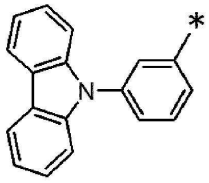
D14



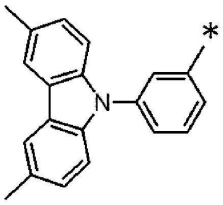
D15



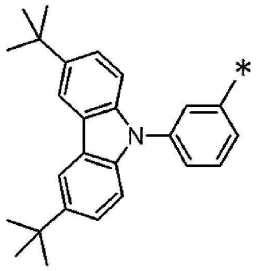
D16



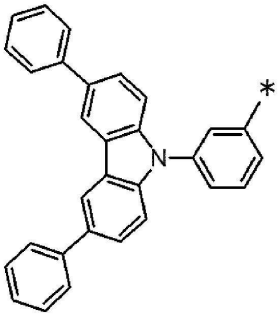
D17



D18



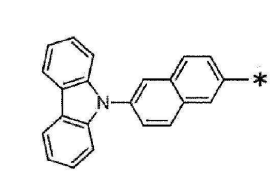
D19



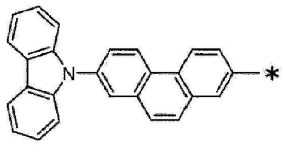
D20

[0117]

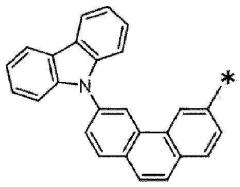
[0118] [화학식 14-3]



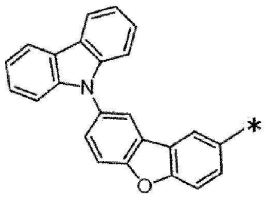
D21



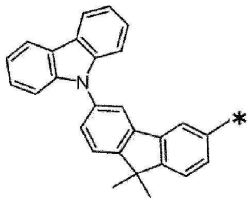
D22



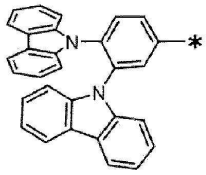
D23



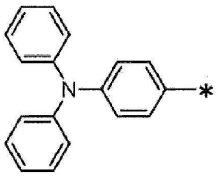
D24



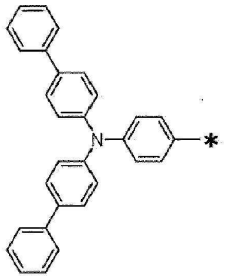
D25



D26



D27



D28

[0119]

[0120] 일반식 (1)에 있어서의 R^1~R^5는, 어느 하나가 사이아노기, 적어도 1개가 Ar, 적어도 1개가 D이다. 나머지 2개는, 수소 원자여도 되고, Ar이어도 되며 D여도 되고, Ar이나 D 이외의 치환기(단 사이아노기는 제외함)여도 된다. 나머지 2개는, 수소 원자, Ar 및 D로부터 선택되는 것이 바람직하고, Ar 및 D로부터 선택되는 것이 보다 바람직하다. 예를 들면, 나머지 2개 중 하나를 Ar로 하나를 D로 할 수 있다.

[0121] 일반식 (1)은 대칭 화합물이어도 되고, 비대칭 화합물이어도 된다.

[0122] 일반식 (1)로 나타나는 화합물은, 그 최저 여기 일중항 에너지 준위(E_{S1})와 최저 여기 삼중항 에너지 준위(E_{T1})의 에너지차 ΔE_{ST}가, 당해 화합물로부터 Ar을 제외한 참조 화합물의 ΔE_{ST}를 1로 했을 때의 상댓값이고, 0.9 이하인 것이 되며, 0.8 이하인 것이 바람직하고, 0.7 이하인 것이 보다 바람직하며, 0.6 이하인 것이 더 바람직하고, 0.5 이하인 것이 보다 더 바람직하며, 0.4 이하인 것이 특히 바람직하다. 이와 같이 참조 화합물보다 ΔE_{ST}가 작은 화합물은, 지연 형광 재료 중에서도 특히, 여기 삼중항 상태로부터 여기 일중항 상태로의 역항간 교차가 일어나기 쉽고, 지연 형광의 수명이 짧은 경향이 있다. 지연 형광 수명이 짧은 발광 재료를 일렉트로 루미네선스 소자에 이용함으로써, 고전류 밀도 영역에서의 여기자 축적에 의한 발광 효율의 저하나, 소자의 장시간 구동에 의한 열화가 완화되어, 소자 성능을 개선할 수 있다.

[0123] 화합물의 ΔE_{ST}는, 그 화합물에 대하여 측정한 형광 스펙트럼 및 인광 스펙트럼으로부터 구할 수 있고, 또 계산 화학적 수법에 따라서도 산출할 수 있다. 이들 방법으로 구한 ΔE_{ST}의 상댓값(참조 화합물의 ΔE_{ST}를 1로 했을 때의 상댓값)은 잘 부합한다. 형광 스펙트럼 및 인광 스펙트럼으로부터의 ΔE_{ST}의 산출 방법 및 계산 화학적 수법에 따르는 ΔE_{ST}의 산출 방법에 대해서는, 실시예 란의 기재를 참조할 수 있다.

[0124] 일반식 (1)로 나타나는 화합물은, 사이아노벤젠계 유도체 중에서는, 발광색의 바리에이션이 넓다. 이 때문에, 청색 영역에 대해서도 유용한 화합물을 제공하는 것이 가능하다.

[0125] 이하에 일반식 (1)로 나타나는 화합물의 구체예를 든다. 단, 본 발명에서 채용할 수 있는 일반식 (1)로 나타나는 화합물은, 하기의 구체예에 의하여 한정적으로 해석되는 일은 없다.

[0126] [표 1]

No	R^1	R^2	R^3	R^4	R^5
1	D1	D1	CN	D1	Ar1
2	D1	D1	CN	Ar1	Ar1
3	D1	Ar1	CN	D1	Ar1
4	Ar1	D1	CN	D1	Ar1
5	D1	Ar1	CN	Ar1	Ar1
6	D1	D1	CN	H	Ar1
7	D1	H	CN	D1	Ar1
8	D1	H	CN	Ar1	D1
9	D1	H	CN	Ar1	Ar1
10	D1	Ar1	CN	H	Ar1
11	D1	Ar1	CN	Ar1	H
12	D1	H	CN	H	Ar1
13	D1	H	CN	Ar1	H
14	D1	Ar1	CN	H	H
15	CN	D1	D1	D1	Ar1
16	CN	D1	D1	Ar1	D1
17	CN	D1	D1	Ar1	Ar1
18	CN	D1	Ar1	D1	Ar1
19	CN	Ar1	D1	D1	Ar1
20	CN	D1	Ar1	Ar1	Ar1
21	CN	Ar1	D1	Ar1	Ar1
22	CN	D1	H	Ar1	D1
23	CN	D1	H	D1	Ar1
24	CN	D1	Ar1	D1	H
25	CN	D1	D1	Ar1	H
26	CN	H	D1	D1	Ar1
27	CN	D1	H	Ar1	Ar1
28	CN	D1	Ar1	H	Ar1
29	CN	H	Ar1	D1	Ar1
30	CN	Ar1	D1	H	Ar1
31	CN	D1	Ar1	Ar1	H
32	CN	Ar1	D1	H	H
33	CN	Ar1	H	D1	H
34	CN	D1	H	Ar1	H
35	CN	H	D1	Ar1	H
36	CN	D1	H	H	Ar1
37	CN	D1	Ar1	Ar1	D1
38	D1	CN	D1	D1	Ar1
39	D1	CN	D1	Ar1	D1
40	Ar1	CN	D1	D1	D1
41	D1	CN	D1	Ar1	Ar1
42	D1	CN	Ar1	D1	Ar1
43	Ar1	CN	D1	D1	Ar1
44	Ar1	CN	D1	Ar1	D1

No	R^1	R^2	R^3	R^4	R^5
45	D1	CN	Ar1	Ar1	Ar1
46	Ar1	CN	D1	Ar1	Ar1
47	Ar1	CN	Ar1	D1	Ar1
48	D1	CN	D1	H	Ar1
49	D1	CN	H	D1	Ar1
50	H	CN	D1	D1	Ar1
51	Ar1	CN	D1	D1	H
52	H	CN	D1	Ar1	D1
53	Ar1	CN	D1	H	D1
54	Ar1	CN	Ar1	H	D1
55	Ar1	CN	H	Ar1	D1
56	H	CN	Ar1	Ar1	D1
57	D1	CN	Ar1	Ar1	H
58	H	CN	Ar1	D1	Ar1
59	D1	CN	Ar1	H	Ar1
60	H	CN	H	D1	Ar1
61	H	CN	D1	H	Ar1
62	D1	CN	H	H	Ar1
63	Ar1	CN	H	H	D1
64	D1	CN	H	Ar1	H
65	Ar1	CN	H	D1	H
66	D1	Ar2	CN	D1	Ar2
67	D1	Ar3	CN	D1	Ar3
68	D1	Ar4	CN	D1	Ar4
69	D1	Ar5	CN	D1	Ar5
70	D1	Ar6	CN	D1	Ar6
71	D1	Ar7	CN	D1	Ar7
72	D1	Ar8	CN	D1	Ar8
73	D1	Ar9	CN	D1	Ar9
74	D1	Ar10	CN	D1	Ar10
75	D1	Ar11	CN	D1	Ar11
76	D1	Ar12	CN	D1	Ar12
77	D1	Ar13	CN	D1	Ar13
78	D1	Ar14	CN	D1	Ar14
79	D1	Ar15	CN	D1	Ar15
80	D1	Ar16	CN	D1	Ar16
81	D1	Ar17	CN	D1	Ar17
82	D1	Ar18	CN	D1	Ar18
83	D1	Ar19	CN	D1	Ar19
84	D1	Ar20	CN	D1	Ar20
85	D1	Ar21	CN	D1	Ar21
86	D1	Ar22	CN	D1	Ar22
87	D1	Ar23	CN	D1	Ar23
88	D1	Ar24	CN	D1	Ar24

[0127]

[0128] [표 2]

No	R^1	R^2	R^3	R^4	R^5
89	D1	Ar25	CN	D1	Ar25
90	D1	Ar26	CN	D1	Ar26
91	D1	Ar27	CN	D1	Ar27
92	D1	Ar28	CN	D1	Ar28
93	D1	Ar29	CN	D1	Ar29
94	D1	Ar30	CN	D1	Ar30
95	D1	Ar31	CN	D1	Ar31
96	D1	Ar32	CN	D1	Ar32
97	D1	Ar33	CN	D1	Ar33
98	D2	Ar1	CN	D2	Ar1
99	D3	Ar1	CN	D3	Ar1
100	D4	Ar1	CN	D4	Ar1
101	D5	Ar1	CN	D5	Ar1
102	D6	Ar1	CN	D6	Ar1
103	D7	Ar1	CN	D7	Ar1
104	D8	Ar1	CN	D8	Ar1
105	D9	Ar1	CN	D9	Ar1
106	D10	Ar1	CN	D10	Ar1
107	D11	Ar1	CN	D11	Ar1
108	D12	Ar1	CN	D12	Ar1
109	D13	Ar1	CN	D13	Ar1
110	D14	Ar1	CN	D14	Ar1
111	D15	Ar1	CN	D15	Ar1
112	D16	Ar1	CN	D16	Ar1
113	D17	Ar1	CN	D17	Ar1
114	D18	Ar1	CN	D18	Ar1
115	D19	Ar1	CN	D19	Ar1
116	D20	Ar1	CN	D20	Ar1
117	D21	Ar1	CN	D21	Ar1
118	D22	Ar1	CN	D22	Ar1
119	D23	Ar1	CN	D23	Ar1
120	D24	Ar1	CN	D24	Ar1
121	D25	Ar1	CN	D25	Ar1
122	D26	Ar1	CN	D26	Ar1
123	D27	Ar1	CN	D27	Ar1
124	D28	Ar1	CN	D28	Ar1
125	D1	CN	Ar2	D1	Ar2
126	D1	CN	Ar3	D1	Ar3
127	D1	CN	Ar4	D1	Ar4
128	D1	CN	Ar5	D1	Ar5
129	D1	CN	Ar6	D1	Ar6
130	D1	CN	Ar7	D1	Ar7
131	D1	CN	Ar8	D1	Ar8
132	D1	CN	Ar9	D1	Ar9

No	R^1	R^2	R^3	R^4	R^5
133	D1	CN	Ar10	D1	Ar10
134	D1	CN	Ar11	D1	Ar11
135	D1	CN	Ar12	D1	Ar12
136	D1	CN	Ar13	D1	Ar13
137	D1	CN	Ar14	D1	Ar14
138	D1	CN	Ar15	D1	Ar15
139	D1	CN	Ar16	D1	Ar16
140	D1	CN	Ar17	D1	Ar17
141	D1	CN	Ar18	D1	Ar18
142	D1	CN	Ar19	D1	Ar19
143	D1	CN	Ar20	D1	Ar20
144	D1	CN	Ar21	D1	Ar21
145	D1	CN	Ar22	D1	Ar22
146	D1	CN	Ar23	D1	Ar23
147	D1	CN	Ar24	D1	Ar24
148	D1	CN	Ar25	D1	Ar25
149	D1	CN	Ar26	D1	Ar26
150	D1	CN	Ar27	D1	Ar27
151	D1	CN	Ar28	D1	Ar28
152	D1	CN	Ar29	D1	Ar29
153	D1	CN	Ar30	D1	Ar30
154	D1	CN	Ar31	D1	Ar31
155	D1	CN	Ar32	D1	Ar32
156	D1	CN	Ar33	D1	Ar33
157	D2	CN	Ar1	D2	Ar1
158	D3	CN	Ar1	D3	Ar1
159	D4	CN	Ar1	D4	Ar1
160	D5	CN	Ar1	D5	Ar1
161	D6	CN	Ar1	D6	Ar1
162	D7	CN	Ar1	D7	Ar1
163	D8	CN	Ar1	D8	Ar1
164	D9	CN	Ar1	D9	Ar1
165	D10	CN	Ar1	D10	Ar1
166	D11	CN	Ar1	D11	Ar1
167	D12	CN	Ar1	D12	Ar1
168	D13	CN	Ar1	D13	Ar1
169	D14	CN	Ar1	D14	Ar1
170	D15	CN	Ar1	D15	Ar1
171	D16	CN	Ar1	D16	Ar1
172	D17	CN	Ar1	D17	Ar1
173	D18	CN	Ar1	D18	Ar1
174	D19	CN	Ar1	D19	Ar1
175	D20	CN	Ar1	D20	Ar1
176	D21	CN	Ar1	D21	Ar1

[0129]

[0130] [표 3]

No	R^1	R^2	R^3	R^4	R^5
177	D22	CN	Ar1	D22	Ar1
178	D23	CN	Ar1	D23	Ar1
179	D24	CN	Ar1	D24	Ar1
180	D25	CN	Ar1	D25	Ar1
181	D26	CN	Ar1	D26	Ar1
182	D27	CN	Ar1	D27	Ar1
183	D28	CN	Ar1	D28	Ar1
184	Ar2	CN	D1	Ar2	D1
185	Ar3	CN	D1	Ar3	D1
186	Ar4	CN	D1	Ar4	D1
187	Ar5	CN	D1	Ar5	D1
188	Ar6	CN	D1	Ar6	D1
189	Ar7	CN	D1	Ar7	D1
190	Ar8	CN	D1	Ar8	D1
191	Ar9	CN	D1	Ar9	D1
192	Ar10	CN	D1	Ar10	D1
193	Ar11	CN	D1	Ar11	D1
194	Ar12	CN	D1	Ar12	D1
195	Ar13	CN	D1	Ar13	D1
196	Ar14	CN	D1	Ar14	D1
197	Ar15	CN	D1	Ar15	D1
198	Ar16	CN	D1	Ar16	D1
199	Ar17	CN	D1	Ar17	D1
200	Ar18	CN	D1	Ar18	D1
201	Ar19	CN	D1	Ar19	D1
202	Ar20	CN	D1	Ar20	D1
203	Ar21	CN	D1	Ar21	D1
204	Ar22	CN	D1	Ar22	D1
205	Ar23	CN	D1	Ar23	D1
206	Ar24	CN	D1	Ar24	D1
207	Ar25	CN	D1	Ar25	D1
208	Ar26	CN	D1	Ar26	D1
209	Ar27	CN	D1	Ar27	D1
210	Ar28	CN	D1	Ar28	D1
211	Ar29	CN	D1	Ar29	D1
212	Ar30	CN	D1	Ar30	D1
213	Ar31	CN	D1	Ar31	D1
214	Ar32	CN	D1	Ar32	D1
215	Ar33	CN	D1	Ar33	D1
216	Ar1	CN	D2	Ar1	D2
217	Ar1	CN	D3	Ar1	D3
218	Ar1	CN	D4	Ar1	D4
219	Ar1	CN	D5	Ar1	D5
220	Ar1	CN	D6	Ar1	D6

No	R^1	R^2	R^3	R^4	R^5
221	Ar1	CN	D7	Ar1	D7
222	Ar1	CN	D8	Ar1	D8
223	Ar1	CN	D9	Ar1	D9
224	Ar1	CN	D10	Ar1	D10
225	Ar1	CN	D11	Ar1	D11
226	Ar1	CN	D12	Ar1	D12
227	Ar1	CN	D13	Ar1	D13
228	Ar1	CN	D14	Ar1	D14
229	Ar1	CN	D15	Ar1	D15
230	Ar1	CN	D16	Ar1	D16
231	Ar1	CN	D17	Ar1	D17
232	Ar1	CN	D18	Ar1	D18
233	Ar1	CN	D19	Ar1	D19
234	Ar1	CN	D20	Ar1	D20
235	Ar1	CN	D21	Ar1	D21
236	Ar1	CN	D22	Ar1	D22
237	Ar1	CN	D23	Ar1	D23
238	Ar1	CN	D24	Ar1	D24
239	Ar1	CN	D25	Ar1	D25
240	Ar1	CN	D26	Ar1	D26
241	Ar1	CN	D27	Ar1	D27
242	Ar1	CN	D28	Ar1	D28
243	D1	CN	D1	Ar2	D1
244	D1	CN	D1	Ar3	D1
245	D1	CN	D1	Ar4	D1
246	D1	CN	D1	Ar5	D1
247	D1	CN	D1	Ar6	D1
248	D1	CN	D1	Ar7	D1
249	D1	CN	D1	Ar8	D1
250	D1	CN	D1	Ar9	D1
251	D1	CN	D1	Ar10	D1
252	D1	CN	D1	Ar11	D1
253	D1	CN	D1	Ar12	D1
254	D1	CN	D1	Ar13	D1
255	D1	CN	D1	Ar14	D1
256	D1	CN	D1	Ar15	D1
257	D1	CN	D1	Ar16	D1
258	D1	CN	D1	Ar17	D1
259	D1	CN	D1	Ar18	D1
260	D1	CN	D1	Ar19	D1
261	D1	CN	D1	Ar20	D1
262	D1	CN	D1	Ar21	D1
263	D1	CN	D1	Ar22	D1
264	D1	CN	D1	Ar23	D1

[0131]

[0132] [표 4]

No	R^1	R^2	R^3	R^4	R^5
265	D1	CN	D1	Ar24	D1
266	D1	CN	D1	Ar25	D1
267	D1	CN	D1	Ar26	D1
268	D1	CN	D1	Ar27	D1
269	D1	CN	D1	Ar28	D1
270	D1	CN	D1	Ar29	D1
271	D1	CN	D1	Ar30	D1
272	D1	CN	D1	Ar31	D1
273	D1	CN	D1	Ar32	D1
274	D1	CN	D1	Ar33	D1
275	D2	CN	D2	Ar1	D2
276	D3	CN	D3	Ar1	D3
277	D4	CN	D4	Ar1	D4
278	D5	CN	D5	Ar1	D5
279	D6	CN	D6	Ar1	D6
280	D7	CN	D7	Ar1	D7
281	D8	CN	D8	Ar1	D8
282	D9	CN	D9	Ar1	D9
283	D10	CN	D10	Ar1	D10
284	D11	CN	D11	Ar1	D11
285	D12	CN	D12	Ar1	D12
286	D13	CN	D13	Ar1	D13
287	D14	CN	D14	Ar1	D14
288	D15	CN	D15	Ar1	D15
289	D16	CN	D16	Ar1	D16
290	D17	CN	D17	Ar1	D17
291	D18	CN	D18	Ar1	D18
292	D19	CN	D19	Ar1	D19
293	D20	CN	D20	Ar1	D20
294	D21	CN	D21	Ar1	D21
295	D22	CN	D22	Ar1	D22
296	D23	CN	D23	Ar1	D23
297	D24	CN	D24	Ar1	D24
298	D25	CN	D25	Ar1	D25
299	D26	CN	D26	Ar1	D26
300	D27	CN	D27	Ar1	D27
301	D28	CN	D28	Ar1	D28
302	Ar2	CN	D1	D1	D1
303	Ar3	CN	D1	D1	D1
304	Ar4	CN	D1	D1	D1
305	Ar5	CN	D1	D1	D1
306	Ar6	CN	D1	D1	D1
307	Ar7	CN	D1	D1	D1
308	Ar8	CN	D1	D1	D1

No	R^1	R^2	R^3	R^4	R^5
309	Ar9	CN	D1	D1	D1
310	Ar10	CN	D1	D1	D1
311	Ar11	CN	D1	D1	D1
312	Ar12	CN	D1	D1	D1
313	Ar13	CN	D1	D1	D1
314	Ar14	CN	D1	D1	D1
315	Ar15	CN	D1	D1	D1
316	Ar16	CN	D1	D1	D1
317	Ar17	CN	D1	D1	D1
318	Ar18	CN	D1	D1	D1
319	Ar19	CN	D1	D1	D1
320	Ar20	CN	D1	D1	D1
321	Ar21	CN	D1	D1	D1
322	Ar22	CN	D1	D1	D1
323	Ar23	CN	D1	D1	D1
324	Ar24	CN	D1	D1	D1
325	Ar25	CN	D1	D1	D1
326	Ar26	CN	D1	D1	D1
327	Ar27	CN	D1	D1	D1
328	Ar28	CN	D1	D1	D1
329	Ar29	CN	D1	D1	D1
330	Ar30	CN	D1	D1	D1
331	Ar31	CN	D1	D1	D1
332	Ar32	CN	D1	D1	D1
333	Ar33	CN	D1	D1	D1
334	Ar1	CN	D2	D2	D2
335	Ar1	CN	D3	D3	D3
336	Ar1	CN	D4	D4	D4
337	Ar1	CN	D5	D5	D5
338	Ar1	CN	D6	D6	D6
339	Ar1	CN	D7	D7	D7
340	Ar1	CN	D8	D8	D8
341	Ar1	CN	D9	D9	D9
342	Ar1	CN	D10	D10	D10
343	Ar1	CN	D11	D11	D11
344	Ar1	CN	D12	D12	D12
345	Ar1	CN	D13	D13	D13
346	Ar1	CN	D14	D14	D14
347	Ar1	CN	D15	D15	D15
348	Ar1	CN	D16	D16	D16
349	Ar1	CN	D17	D17	D17
350	Ar1	CN	D18	D18	D18
351	Ar1	CN	D19	D19	D19
352	Ar1	CN	D20	D20	D20

[0133]

[0134] [표 5]

No	R^1	R^2	R^3	R^4	R^5
353	Ar1	CN	D21	D21	D21
354	Ar1	CN	D22	D22	D22
355	Ar1	CN	D23	D23	D23
356	Ar1	CN	D24	D24	D24
357	Ar1	CN	D25	D25	D25
358	Ar1	CN	D26	D26	D26
359	Ar1	CN	D27	D27	D27
360	Ar1	CN	D28	D28	D28
361	D1	Ar1	CN	D1	Ar2
362	D1	Ar1	CN	D1	Ar3
363	D1	Ar1	CN	D1	Ar4
364	D1	Ar1	CN	D1	Ar5
365	D1	Ar1	CN	D1	Ar6
366	D1	Ar1	CN	D1	Ar7
367	D1	Ar1	CN	D1	Ar8
368	D1	Ar1	CN	D1	Ar9
369	D1	Ar1	CN	D1	Ar10
370	D1	Ar1	CN	D1	Ar11
371	D1	Ar1	CN	D1	Ar12
372	D1	Ar1	CN	D1	Ar13
373	D1	Ar1	CN	D1	Ar14
374	D1	Ar1	CN	D1	Ar15
375	D1	Ar1	CN	D1	Ar16
376	D1	Ar1	CN	D1	Ar17
377	D1	Ar1	CN	D1	Ar18
378	D1	Ar1	CN	D1	Ar19
379	D1	Ar1	CN	D1	Ar20
380	D1	Ar1	CN	D1	Ar21
381	D1	Ar1	CN	D1	Ar22
382	D1	Ar1	CN	D1	Ar23
383	D1	Ar1	CN	D1	Ar24
384	D1	Ar1	CN	D1	Ar25
385	D1	Ar1	CN	D1	Ar26
386	D1	Ar1	CN	D1	Ar27
387	D1	Ar1	CN	D1	Ar28
388	D1	Ar1	CN	D1	Ar29
389	D1	Ar1	CN	D1	Ar30
390	D1	Ar1	CN	D1	Ar31
391	D1	Ar1	CN	D1	Ar32
392	D1	Ar1	CN	D1	Ar33
393	D1	Ar1	CN	D2	Ar1
394	D1	Ar1	CN	D3	Ar1
395	D1	Ar1	CN	D4	Ar1
396	D1	Ar1	CN	D5	Ar1
397	D1	Ar1	CN	D6	Ar1
398	D1	Ar1	CN	D7	Ar1
399	D1	Ar1	CN	D8	Ar1
400	D1	Ar1	CN	D9	Ar1
401	D1	Ar1	CN	D10	Ar1
402	D1	Ar1	CN	D11	Ar1
403	D1	Ar1	CN	D12	Ar1
404	D1	Ar1	CN	D13	Ar1
405	D1	Ar1	CN	D14	Ar1
406	D1	Ar1	CN	D15	Ar1
407	D1	Ar1	CN	D16	Ar1
408	D1	Ar1	CN	D17	Ar1
409	D1	Ar1	CN	D18	Ar1
410	D1	Ar1	CN	D19	Ar1
411	D1	Ar1	CN	D20	Ar1
412	D1	Ar1	CN	D21	Ar1
413	D1	Ar1	CN	D22	Ar1
414	D1	Ar1	CN	D23	Ar1
415	D1	Ar1	CN	D24	Ar1
416	D1	Ar1	CN	D25	Ar1
417	D1	Ar1	CN	D26	Ar1
418	D1	Ar1	CN	D27	Ar1
419	D1	Ar1	CN	D28	Ar1
420	D7	Ar1	CN	D8	Ar1
421	D7	Ar1	CN	D9	Ar1
422	D7	Ar1	CN	D10	Ar1
423	D7	Ar1	CN	D11	Ar1
424	D7	Ar1	CN	D12	Ar1
425	D13	Ar1	CN	D14	Ar1
426	D13	Ar1	CN	D15	Ar1
427	D13	Ar1	CN	D16	Ar1
428	D13	Ar1	CN	D17	Ar1
429	D13	Ar1	CN	D18	Ar1
430	D13	Ar1	CN	D19	Ar1
431	D13	Ar1	CN	D20	Ar1
432	D17	Ar1	CN	D18	Ar1
433	D17	Ar1	CN	D19	Ar1
434	D17	Ar1	CN	D20	Ar1

[0135]

[0136] 일반식 (1)로 나타나는 화합물의 분자량은, 예를 들면 일반식 (1)로 나타나는 화합물을 포함하는 유기층을 증착법에 의하여 제막하고 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 (1)로 나타나는 최소 화합물의 분자량이다.

[0137] 일반식 (1)로 나타나는 화합물은, 분자량에 관계없이 도포법으로 성막해도 된다. 도포법을 이용하면, 분자량이 비교적 큰 화합물이어도 성막하는 것이 가능하다. 일반식 (1)로 나타나는 화합물은, 사이아노벤젠계 화합물 중에서는 유기용매에 용해하기 쉽다고 하는 이점이 있다. 이 때문에, 일반식 (1)로 나타나는 화합물은 도포법을 적용하기 쉬운 데다가, 정제하여 순도를 높이기 쉽다.

[0138] 본 발명을 응용하여, 분자 내에 일반식 (1)로 나타나는 구조를 복수 개 포함하는 화합물을, 발광 재료로서 이용하는 것도 생각할 수 있다.

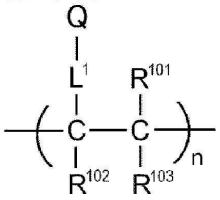
[0139] 예를 들면, 일반식 (1)로 나타나는 구조 중에 미리 중합성기를 존재시켜 두고, 그 중합성기를 중합시킴으로써 얻어지는 중합체를, 발광 재료로서 이용하는 것이 생각된다. 구체적으로는, 일반식 (1)의 R^1~R^5 중 어느 하나에 중합성 관능기를 포함하는 모노머를 준비하여, 이것을 단독으로 중합시키거나, 다른 모노머와 함께 공중합시킴

으로써, 반복 단위를 갖는 중합체를 얻어, 그 중합체를 발광 재료로서 이용하는 것이 생각된다. 혹은, 일반식 (1)로 나타나는 구조를 갖는 화합물끼리를 커플링시킴으로써, 2량체나 3량체를 얻어, 그것들을 발광 재료로서 이용하는 것도 생각할 수 있다.

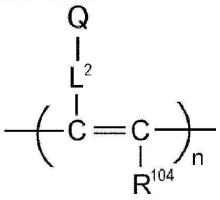
[0140] 일반식 (1)로 나타나는 구조를 포함하는 반복 단위를 갖는 중합체의 예로서, 하기 일반식 (3) 또는 (4)로 나타나는 구조를 포함하는 중합체를 들 수 있다.

[0141] [화학식 15]

[0142] 일반식 (3)



일반식 (4)



[0143] 일반식 (3) 또는 (4)에 있어서, Q는 일반식 (1)로 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 나타내고, 치환 혹은 무치환의 알킬렌기, 또는 치환 혹은 무치환의 아릴렌기인 것이 바람직하며, 탄소수 1~10의 치환 혹은 무치환의 알킬렌기, 또는 치환 혹은 무치환의 페닐렌기인 것이 보다 바람직하다.

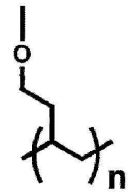
[0144] 일반식 (3) 또는 (4)에 있어서, R^{101}, R^{102}, R^{103} 및 R^{104}는, 각각 독립적으로 치환기를 나타낸다. 바람직하게는, 탄소수 1~6의 치환 혹은 무치환의 알킬기, 탄소수 1~6의 치환 혹은 무치환의 알콕시기, 할로젠 원자이고, 보다 바람직하게는 탄소수 1~3의 무치환의 알킬기, 탄소수 1~3의 무치환의 알콕시기, 불소 원자, 염소 원자이며, 더 바람직하게는 탄소수 1~3의 무치환의 알킬기, 탄소수 1~3의 무치환의 알콕시기이다.

[0145] L^1 및 L^2로 나타나는 연결기는, Q를 구성하는 일반식 (1)의 R^1~R^5 중 어느 하나에 결합할 수 있다. 1개의 Q에 대하여 연결기가 2개 이상 연결하여 가교 구조나 그물코 구조를 형성하고 있어도 된다.

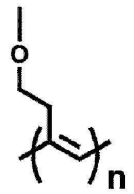
[0146] 반복 단위의 구체적인 구조예로서, 하기 식 (5)~(8)로 나타나는 구조를 들 수 있다.

[0147] [화학식 16]

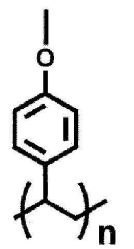
[0148] 식 (5)



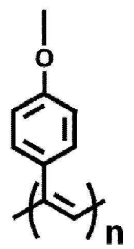
식 (6)



식 (7)



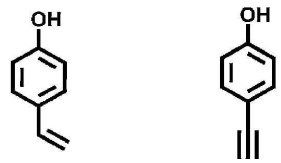
식 (8)



[0149] 이들 식 (5)~(8)을 포함하는 반복 단위를 갖는 중합체는, 일반식 (1)의 R^1~R^5 중 어느 하나에 하이드록시기를 도입해 두고, 그것을 링커로서 하기 화합물을 반응시켜 중합성기를 도입하며, 그 중합성기를 중합시킴으로써 합성할 수 있다.

[0150] [화학식 17]



[0151] 

[0152] 분자 내에 일반식 (1)로 나타나는 구조를 포함하는 중합체는, 일반식 (1)로 나타나는 구조를 갖는 반복 단위만으로 이루어지는 중합체여도 되고, 그 이외의 구조를 갖는 반복 단위를 포함하는 중합체여도 된다. 또, 중합체 중에 포함되는 일반식 (1)로 나타나는 구조를 갖는 반복 단위는, 단일종이어도 되고, 2종 이상이어도 된다. 일반식 (1)로 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.

[0153] [일반식 (1)로 나타나는 화합물의 합성 방법]

[0154] 일반식 (1)로 나타나는 화합물은, 신규 화합물이다.

[0155] 일반식 (1)로 나타나는 화합물은, 기존의 반응을 조합하는 것에 의하여 합성할 수 있다. 예를 들면, 테트라할로게노다이사이아노벤젠을 출발 물질로 하여, NaH의 존재하에 카바졸과 반응시킴으로써, 일부의 할로젠 원자 대신에 도너성기인 카바졸일기를 도입한 다이사이아노벤젠 유도체를 얻을 수 있다. 얻어진 다이사이아노벤젠 유도체에 촉매 존재하에서 트라이뷰틸페닐스탄네인을 반응시킴으로써, 할로젠 원자를 페닐기에 치환하면, 카바졸일기와 페닐기를 갖는 일반식 (1)로 나타나는 다이사이아노벤젠 유도체를 합성할 수 있다. 이 반응의 구체적인 조건이나 반응 순서에 대해서는, 후술의 합성예를 참고로 할 수 있다. 또, 그 외의 일반식 (1)로 나타나는 화합물도, 동일한 순서나 공지의 합성법을 이용함으로써 합성하는 것이 가능하다.

[0156] [유기 발광 소자]

[0157] 본 발명의 일반식 (1)로 나타나는 화합물은, 유기 발광 소자의 발광 재료로서 유용하다. 이 때문에, 본 발명의 일반식 (1)로 나타나는 화합물은, 유기 발광 소자의 발광층에 발광 재료로서 효과적으로 이용할 수 있다. 또, 본 발명의 일반식 (1)로 나타나는 화합물은, 호스트 또는 어시스트 도펀트로서 이용해도 된다.

[0158] 일반식 (1)로 나타나는 화합물 중에는, 지연 형광을 방사하는 지연 형광체가 포함되어 있다. 즉 본 발명은, 일반식 (1)로 나타나는 구조를 갖는 지연 형광체의 발명과, 일반식 (1)로 나타나는 화합물을 지연 형광체로서 사용하는 발명과 일반식 (1)로 나타나는 화합물을 이용하여 지연 형광을 발광시키는 방법의 발명도 제공한다. 그와 같은 화합물을 발광 재료로서 이용한 유기 발광 소자는, 지연 형광을 방사하고, 발광 효율이 높다는 특징을 갖는다. 그 원리를, 유기 일렉트로 루미네선스 소자를 예를 들어 설명하면 이하와 같이 된다.

[0159] 유기 일렉트로 루미네선스 소자에 있어서는, 정부의 양전극으로부터 발광 재료로 캐리어를 주입하고, 여기 상태의 발광 재료를 생성하여, 발광시킨다. 통상, 캐리어 주입형의 유기 일렉트로 루미네선스 소자의 경우, 생성한 여기자 중, 여기 일중항 상태로 여기되는 것은 25%이며, 나머지 75%는 여기 삼중항 상태로 여기된다. 따라서, 여기 삼중항 상태로부터의 발광인 인광을 이용하는 편이, 에너지의 이용 효율이 높다. 그러나, 여기 삼중항 상태는 수명이 길기 때문에, 여기 상태의 포화나 여기 삼중항 상태의 여기자와의 상호작용에 의한 에너지의 실활이 일어나, 일반적으로 인광의 양자 수율이 높지 않은 것이 많다. 한편, 지연 형광 재료는, 항간 교차 등에 의하여 여기 삼중항 상태로 에너지가 천이한 후, 삼중항-삼중항 소멸 혹은 열에너지의 흡수에 의하여, 여기 일중항 상태로 역항간 교차되고 형광을 방사한다. 유기 일렉트로 루미네선스 소자에 있어서는, 그 중에서도 열에너지의 흡수에 의한 열활성화형의 지연 형광 재료가 특히 유용하다고 생각된다. 유기 일렉트로 루미네선스 소자에 지연 형광 재료를 이용한 경우, 여기 일중항 상태의 여기자는 통상 대로 형광을 방사한다. 한편, 여기 삼중항 상태의 여기자는, 디바이스가 발하는 열을 흡수하여 여기 일중항에 항간 교차되고 형광을 방사한다. 이때, 여기 일중항으로부터의 발광이기 때문에 형광과 동일 파장에서의 발광이면서, 여기 삼중항 상태로부터 여기 일중항 상태로의 역항간 교차에 의하여, 발생하는 광의 수명(발광 수명)은 통상의 형광보다 길어지기 때문에, 이들보다 지연된 형광으로서 관찰된다. 이것을 지연 형광으로서 정의할 수 있다. 이와 같은 열활성화형의 역항간 교차 기

구를 이용하면, 캐리어 주입 후에 열에너지의 흡수를 거침으로써, 통상은 25%밖에 생성하지 않았던 여기 일중항 상태의 화합물의 비율을 25% 이상으로 끌어올리는 것이 가능해진다. 100℃ 미만의 낮은 온도에서도 강한 형광 및 지연 형광을 발하는 화합물을 이용하면, 디바이스의 열로 충분히 여기 삼중항 상태로부터 여기 일중항 상태로의 항간 교차가 발생하고 지연 형광을 방사하기 때문에, 발광 효율을 비약적으로 향상시킬 수 있다.

[0160] 본 발명의 일반식 (1)로 나타나는 화합물을 발광층의 발광 재료로서 이용함으로써, 유기 포토 루미네선스 소자(유기 PL 소자)나 유기 일렉트로 루미네선스 소자(유기 EL 소자) 등의 뛰어난 유기 발광 소자를 제공할 수 있다. 유기 포토 루미네선스 소자는, 기판 상에 적어도 발광층을 형성한 구조를 갖는다. 또, 유기 일렉트로 루미네선스 소자는, 적어도 양극, 음극, 및 양극과 음극의 사이에 유기층을 형성한 구조를 갖는다. 유기층은, 적어도 발광층을 포함하는 것이며, 발광층만으로 이루어지는 것이어도 되고, 발광층 외에 1층 이상의 유기층을 갖는 것이어도 된다. 그와 같은 다른 유기층으로서, 정공 수송층, 정공 주입층, 전자 저지층, 정공 저지층, 전자 주입층, 전자 수송층, 여기자 저지층 등을 들 수 있다. 정공 수송층은 정공 주입 기능을 가진 정공 주입 수송층이어도 되고, 전자 수송층은 전자 주입 기능을 가진 전자 주입 수송층이어도 된다. 구체적인 유기 일렉트로 루미네선스 소자의 구조예를 도 1에 나타낸다. 도 1에 있어서, 1은 기판, 2는 양극, 3은 정공 주입층, 4는 정공 수송층, 5는 발광층, 6은 전자 수송층, 7은 음극을 나타낸다.

[0161] 이하에 있어서, 유기 일렉트로 루미네선스 소자의 각 부재 및 각층에 대하여 설명한다. 또한, 기판과 발광층의 설명은 유기 포토 루미네선스 소자의 기판과 발광층에도 해당한다.

[0162] (기판)

[0163] 본 발명의 유기 일렉트로 루미네선스 소자는, 기판에 지지되어 있는 것이 바람직하다. 이 기판에 대해서는, 특별히 제한은 없고, 종래부터 유기 일렉트로 루미네선스 소자에 관용되어 있는 것이면 되며, 예를 들면 유리, 투명 플라스틱, 석영, 실리콘 등으로 이루어지는 것을 이용할 수 있다.

[0164] (양극)

[0165] 유기 일렉트로 루미네선스 소자에 있어서의 양극으로서는, 일함수가 큰(4eV 이상) 금속, 합금, 전기 전도성 화합물 및 이들의 혼합물을 전극 재료로 하는 것이 바람직하게 이용된다. 이와 같은 전극 재료의 구체예로서는 Au 등의 금속, CuI, 인듐틴옥사이드(ITO), SnO_2, ZnO 등의 도전성 투명 재료를 들 수 있다. 또, IDIXO(In_2O_3-ZnO) 등 비정질이고 투명 도전막을 제작 가능한 재료를 이용해도 된다. 양극은 이들 전극 재료를 증착이나 스퍼터링 등의 방법에 의하여, 박막을 형성시켜, 포토리소그래피법으로 원하는 형상의 패턴을 형성해도 되고, 혹은 패턴 정밀도를 그다지 필요로 하지 않는 경우는(100㎛ 이상 정도), 상기 전극 재료의 증착이나 스퍼터링 시에 원하는 형상의 마스크를 통하여 패턴을 형성해도 된다. 혹은, 유기 도전성 화합물과 같이 도포 가능한 재료를 이용하는 경우에는, 인쇄 방식, 코팅 방식 등 습식 성막법을 이용할 수도 있다. 이 양극에서 발광을 취출하는 경우에는, 투과율을 10%보다 크게 하는 것이 바람직하고, 또 양극으로서의 시트 저항은 수백 Ω/sq.(ohms per square) 이하가 바람직하다. 또한 막두께는 재료에도 따르지만, 통상 10~1000nm, 바람직하게는 10~200nm의 범위에서 선택된다.

[0166] (음극)

[0167] 한편, 음극으로서는, 일함수가 작은(4eV 이하) 금속(전자 주입성 금속이라고 칭함), 합금, 전기 전도성 화합물 및 이들의 혼합물을 전극 재료로 하는 것이 이용된다. 이와 같은 전극 재료의 구체예로서는, 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, 희토류 금속 등을 들 수 있다. 이들 중에서, 전자 주입성 및 산화 등에 대한 내구성의 점에서, 전자 주입성 금속과 이보다 일함수의 값이 크고 안정적인 금속인 제2 금속과의 혼합물, 예를 들면 마그네슘/은 혼합물, 마그네슘/알루미늄 혼합물, 마그네슘/인듐 혼합물, 알루미늄/산화 알루미늄(Al_2O_3) 혼합물, 리튬/알루미늄 혼합물, 알루미늄 등이 적합하다. 음극은 이들 전극 재료를 증착이나 스퍼터링 등의 방법에 의하여 박막을 형성시킴으로써, 제작할 수 있다. 또, 음극으로서의 시트 저항은 수백 Ω/sq.(ohms per square) 이하가 바람직하고, 막두께는 통상 10nm~5㎛, 바람직하게는 50~200nm의 범위에서 선택된다. 또한, 발광한 광을 투과시키기 때문에, 유기 일렉트로 루미네선스 소자의 양극 또는 음극 중 어느 한쪽이, 투명 또는 반투명이면 발광 휘도가 향상되어 적합하다.

[0168] 또, 양극의 설명으로 든 도전성 투명 재료를 음극에 이용함으로써, 투명 또는 반투명의 음극을 제작할 수 있고, 이를 응용함으로써 양극과 음극의 양쪽 모두가 투과성을 갖는 소자를 제작할 수 있다.

[0169] (발광층)

[0170] 발광층은, 양극 및 음극의 각각으로부터 주입된 정공 및 전자가 재결합함으로써 여기자가 생성된 후, 발광하는 층이며, 발광 재료를 단독으로 발광층에 사용해도 되지만, 바람직하게는 발광 재료와 호스트 재료를 포함한다. 발광 재료로서는, 일반식 (1)로 나타나는 본 발명의 화합물 군으로부터 선택되는 1종 또는 2종 이상을 이용할 수 있다. 본 발명의 유기 일렉트로 루미네선스 소자 및 유기 포토 루미네선스 소자가 높은 발광 효율을 발현하기 위해서는, 발광 재료에 생성한 일중항 여기자 및 삼중항 여기자를, 발광 재료 중에 가두는 것이 중요하다. 따라서, 발광층 중에 발광 재료에 더하여 호스트 재료를 이용하는 것이 바람직하다. 호스트 재료로서는, 여기 일중항 에너지, 여기 삼중항 에너지 중 적어도 어느 한쪽이 본 발명의 발광 재료보다 높은 값을 갖는 유기 화합물을 이용할 수 있다. 그 결과, 본 발명의 발광 재료에 생성한 일중항 여기자 및 삼중항 여기자를, 본 발명의 발광 재료의 분자 중에 가두는 것이 가능해지고, 그 발광 효율을 충분히 취출하는 것이 가능해진다. 단, 일중항 여기자 및 삼중항 여기자를 충분히 가둘 수 없어도, 높은 발광 효율을 얻는 것이 가능한 경우도 있기 때문에, 높은 발광 효율을 실현할 수 있는 호스트 재료이면 특별한 제약 없이 본 발명에 이용할 수 있다. 본 발명의 유기 발광 소자 또는 유기 일렉트로 루미네선스 소자에 있어서, 발광은 발광층에 포함되는 본 발명의 발광 재료로부터 발생한다. 이 발광은 형광 발광 및 지연 형광 발광의 양쪽 모두를 포함한다. 단, 발광의 일부 혹은 부분적으로 호스트 재료로부터의 발광이 있어도 상관없다.

[0171] 발광층에 있어서의 일반식 (1)로 나타나는 화합물의 함유량은, 50중량% 미만으로 하는 것이 바람직하다. 또한, 일반식 (1)로 나타나는 화합물의 함유량의 상한값은 30중량% 미만으로 하는 것이 바람직하고, 또, 함유량의 상한값은 예를 들면 20중량% 미만, 10중량% 미만, 5중량% 미만, 3중량% 미만, 1중량% 미만, 0.5중량% 미만으로 할 수도 있다. 하한값은 0.001중량% 이상으로 하는 것이 바람직하고, 예를 들면 0.01중량% 초과, 0.1중량% 초과, 0.5중량% 초과, 1중량% 초과로 할 수도 있다.

[0172] 발광층에 있어서의 호스트 재료로서는, 정공 수송능, 전자 수송능을 갖고, 또한 발광의 장파장화를 방지하며, 게다가 높은 유리 전이 온도를 갖는 유기 화합물인 것이 바람직하다.

[0173] 일반식 (1)로 나타나는 화합물은, 발광층의 호스트 재료로서 사용할 수도 있다.

[0174] (주입층)

[0175] 주입층이란, 구동 전압 저하나 발광 휘도 향상을 위하여 전극과 유기층 사이에 마련되는 층으로, 정공 주입층과 전자 주입층이 있고, 양극과 발광층 또는 정공 수송층의 사이, 및 음극과 발광층 또는 전자 수송층의 사이에 존재시켜도 된다. 주입층은 필요에 따라서 마련할 수 있다.

[0176] (저지층)

[0177] 저지층은, 발광층 중에 존재하는 전하(전자 혹은 정공) 및/또는 여기자의 발광층 밖으로의 확산을 저지할 수 있는 층이다. 전자 저지층은, 발광층 및 정공 수송층의 사이에 배치될 수 있고, 전자가 정공 수송층 쪽을 향하여 발광층을 통과하는 것을 저지한다. 동일하게, 정공 저지층은 발광층 및 전자 수송층의 사이에 배치될 수 있고, 정공이 전자 수송층 쪽을 향하여 발광층을 통과하는 것을 저지한다. 저지층은 또, 여기자가 발광층의 외측으로 확산하는 것을 저지하기 위하여 이용할 수 있다. 즉 전자 저지층, 정공 저지층은 각각 여기자 저지층으로서의 기능도 겸비할 수 있다. 본 명세서에서 말하는 전자 저지층 또는 여기자 저지층은, 하나의 층으로 전자 저지층 및 여기자 저지층의 기능을 갖는 층을 포함하는 의미로 사용된다.

[0178] (정공 저지층)

[0179] 정공 저지층이란 넓은 의미에서는 전자 수송층의 기능을 갖는다. 정공 저지층은 전자를 수송하면서, 정공이 전자 수송층에 도달하는 것을 저지하는 역할이 있고, 이로써 발광층 중에서의 전자와 정공의 재결합 확률을 향상시킬 수 있다. 정공 저지층의 재료로서는, 후술하는 전자 수송층의 재료를 필요에 따라서 이용할 수 있다.

[0180] (전자 저지층)

[0181] 전자 저지층이란, 넓은 의미에서는 정공을 수송하는 기능을 갖는다. 전자 저지층은 정공을 수송하면서, 전자가 정공 수송층에 도달하는 것을 저지하는 역할이 있고, 이로써 발광층 중에서의 전자와 정공이 재결합할 확률을 향상시킬 수 있다.

[0182] (여기자 저지층)

[0183] 여기자 저지층이란, 발광층 중에서 정공과 전자가 재결합함으로써 발생한 여기자가 전하 수송층으로 확산하는

것을 저지하기 위한 층이며, 본 층의 삽입에 의하여 여기자를 효율적으로 발광층 중에 가두는 것이 가능해져, 소자의 발광 효율을 향상시킬 수 있다. 여기자 저지층은 발광층에 인접하여 양극 측, 음극 측 중 어느 것에도 삽입할 수 있고, 양쪽 모두 동시에 삽입하는 것도 가능하다. 즉, 여기자 저지층을 양극 측에 갖는 경우, 정공 수송층과 발광층의 사이에, 발광층에 인접하여 그 층을 삽입할 수 있고, 음극 측에 삽입하는 경우, 발광층과 음극의 사이에, 발광층에 인접하여 그 층을 삽입할 수 있다. 또, 양극과, 발광층의 양극 측에 인접하는 여기자 저지층의 사이에는, 정공 주입층이나 전자 저지층 등을 가질 수 있고, 음극과, 발광층의 음극 측에 인접하는 여기자 저지층의 사이에는, 전자 주입층, 전자 수송층, 정공 저지층 등을 가질 수 있다. 저지층을 배치하는 경우, 저지층으로서 이용하는 재료의 여기 일중항 에너지 및 여기 삼중항 에너지 중 적어도 어느 한쪽은, 발광 재료의 여기 일중항 에너지 및 여기 삼중항 에너지보다 높은 것이 바람직하다.

[0184] (정공 수송층)

[0185] 정공 수송층이란 정공을 수송하는 기능을 갖는 정공 수송 재료로 이루어지고, 정공 수송층은 단층 또는 복수층 마련할 수 있다.

[0186] 정공 수송 재료로서는, 정공의 주입 또는 수송, 전자의 장벽성 중 어느 하나를 갖는 것이며, 유기물, 무기물 중 어느 것이어도 된다. 사용할 수 있는 공지의 정공 수송 재료로서는 예를 들면, 트라이아졸 유도체, 옥사다이아졸 유도체, 이미다졸 유도체, 카바졸 유도체, 인돌로카바졸 유도체, 폴리아릴알케인유도체, 피라졸린 유도체 및 피라졸론 유도체, 페닐렌다이아민 유도체, 아릴아민 유도체, 아미노 치환 칼콘 유도체, 옥사졸 유도체, 스타이릴안트라센 유도체, 플루오렌온 유도체, 하이드라존 유도체, 스틸벤 유도체, 실라제인 유도체, 아닐린계 공중합체, 또 도전성 고분자 올리고머, 특히 싸이오펜올리고머 등을 들 수 있지만, 포피린 화합물, 방향족 제3급 아민 화합물 및 스타이릴아민 화합물을 이용하는 것이 바람직하고, 방향족 제3급 아민 화합물을 이용하는 것이 보다 바람직하다.

[0187] (전자 수송층)

[0188] 전자 수송층이란 전자를 수송하는 기능을 갖는 재료로 이루어지고, 전자 수송층은 단층 또는 복수층 마련할 수 있다.

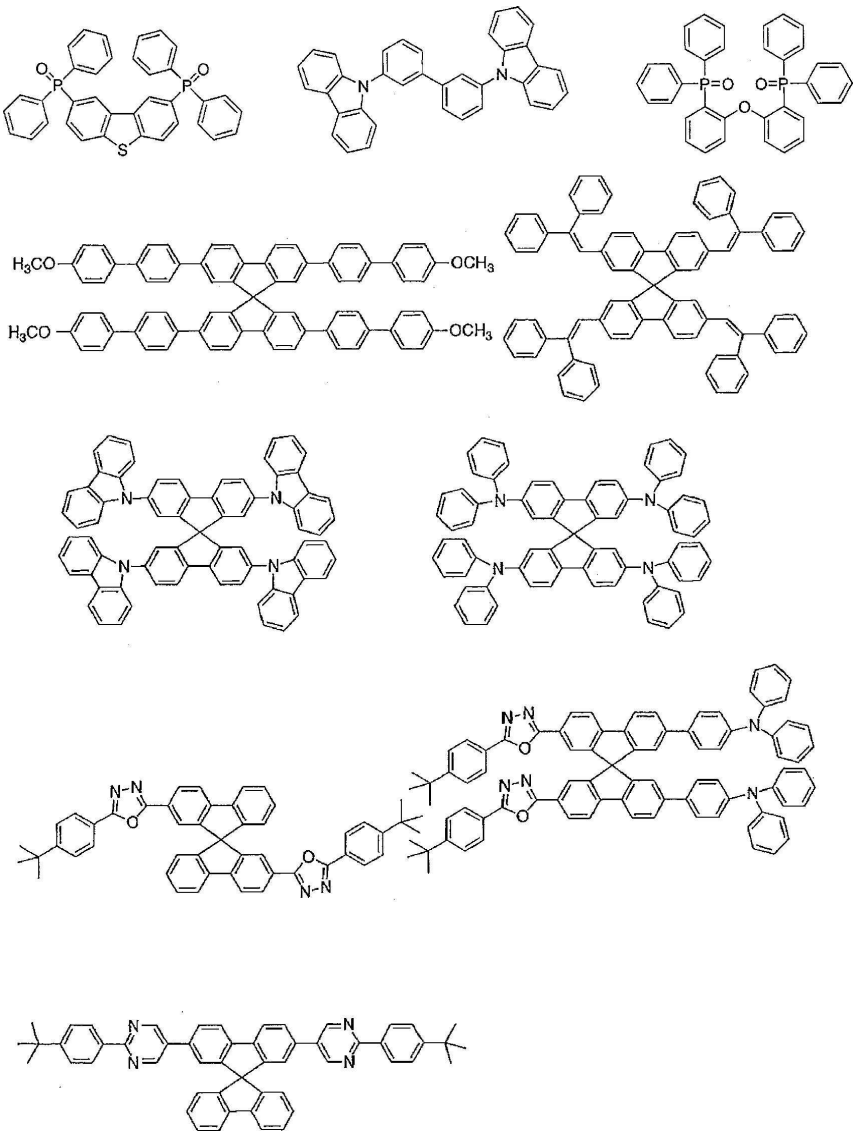
[0189] 전자 수송 재료(정공 저지 재료를 겸하는 경우도 있음)로서는, 음극으로부터 주입된 전자를 발광층에 전달하는 기능을 갖고 있으면 된다. 사용할 수 있는 전자 수송층으로서는 예를 들면, 나이트로 치환 플루오렌 유도체, 다이페닐퀴논 유도체, 싸이오피란다이옥사이드 유도체, 카보다이이미드, 플루오렌일리덴메테인 유도체, 안트라퀴노다이메테인 및 안트론 유도체, 옥사다이아졸 유도체 등을 들 수 있다. 또한, 상기 옥사다이아졸 유도체에 있어서, 옥사다이아졸환의 산소 원자를 황 원자에 치환한 싸이아다이아졸 유도체, 전자 흡인기로서 알려져 있는 퀴녹살린환을 갖는 퀴녹살린 유도체도, 전자 수송 재료로서 이용할 수 있다. 또한 이들 재료를 고분자쇄에 도입한, 또는 이들 재료를 고분자의 주쇄로 한 고분자 재료를 이용할 수도 있다.

[0190] 유기 일렉트로 루미네선스 소자를 제작할 때에는, 일반식 (1)로 나타나는 화합물을 1층의 유기층(예를 들면, 전자 수송층)에 이용할 뿐만 아니라, 복수의 유기층에도 이용해도 된다. 그때, 각 유기층에 이용하는 일반식 (1)로 나타나는 화합물은, 서로 동일해도 되고 달라도 된다. 예를 들면, 전자 수송층이나 발광층 외에, 상기의 주입층, 저지층, 정공 저지층, 전자 저지층, 여기자 저지층, 정공 수송층 등에도 일반식 (1)로 나타나는 화합물을 이용해도 된다. 이들 층의 제막 방법은 특별히 한정되지 않으며, 드라이 프로세스, 웨트 프로세스 중 어느 쪽으로 제작해도 된다.

[0191] 이하에, 유기 일렉트로 루미네선스 소자에 이용할 수 있는 바람직한 재료를 구체적으로 예시한다. 단, 본 발명에 있어서 이용할 수 있는 재료는, 이하의 예시 화합물에 의하여 한정적으로 해석되는 일은 없다. 또, 특정의 기능을 갖는 재료로서 예시한 화합물이어도, 그 외의 기능을 갖는 재료로서 전용하는 것도 가능하다.

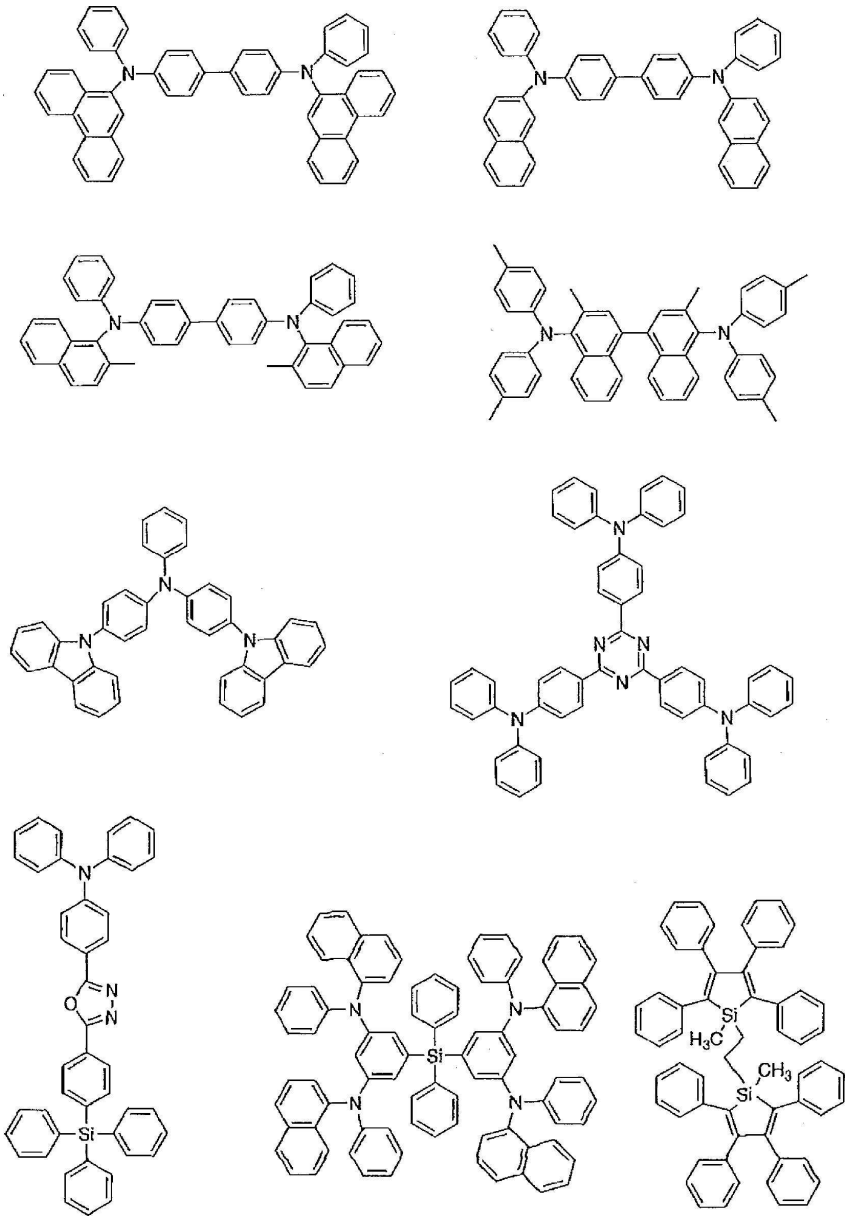
[0192] 먼저, 발광층의 호스트 재료로서도 이용할 수 있는 바람직한 화합물을 든다.

[0193] [화학식 18]



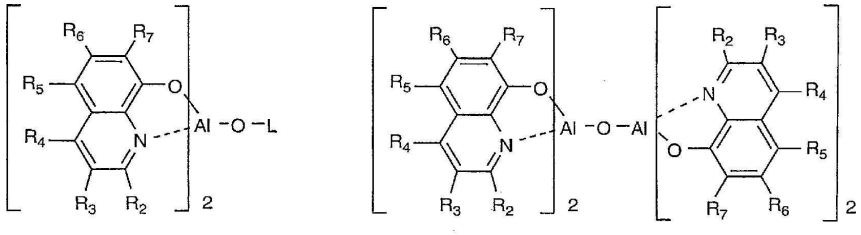
[0194]

[0195] [화학식 19-1]



[0196]

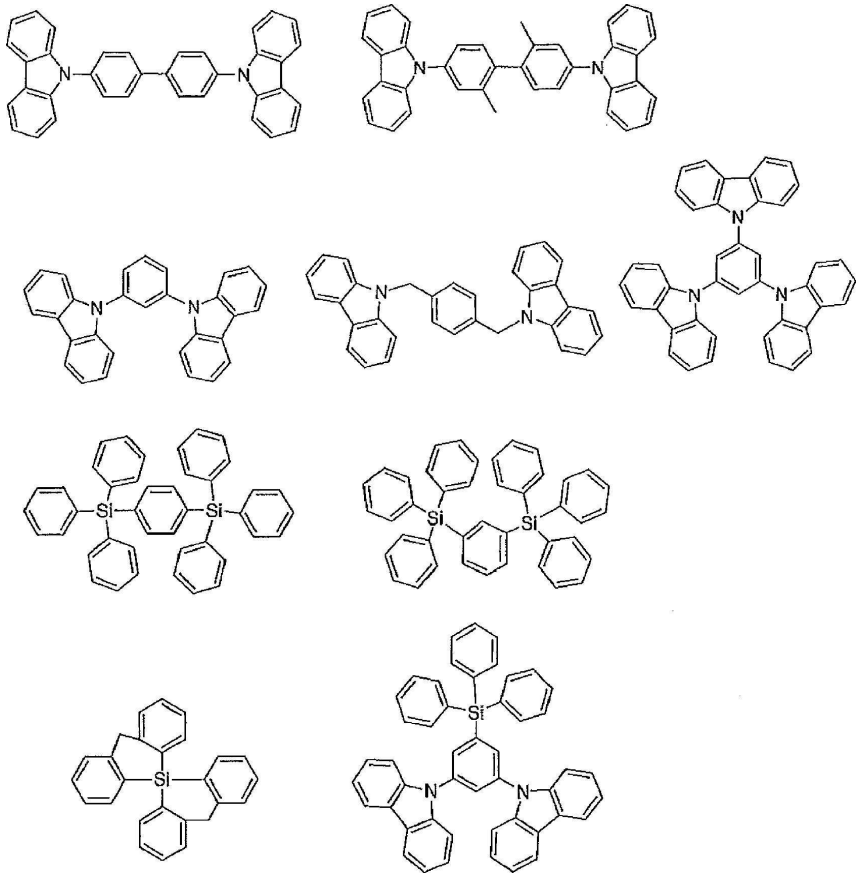
[0197] [화학식 19-2]



$R_2 - R_7$ = H or substituent
L = ligand

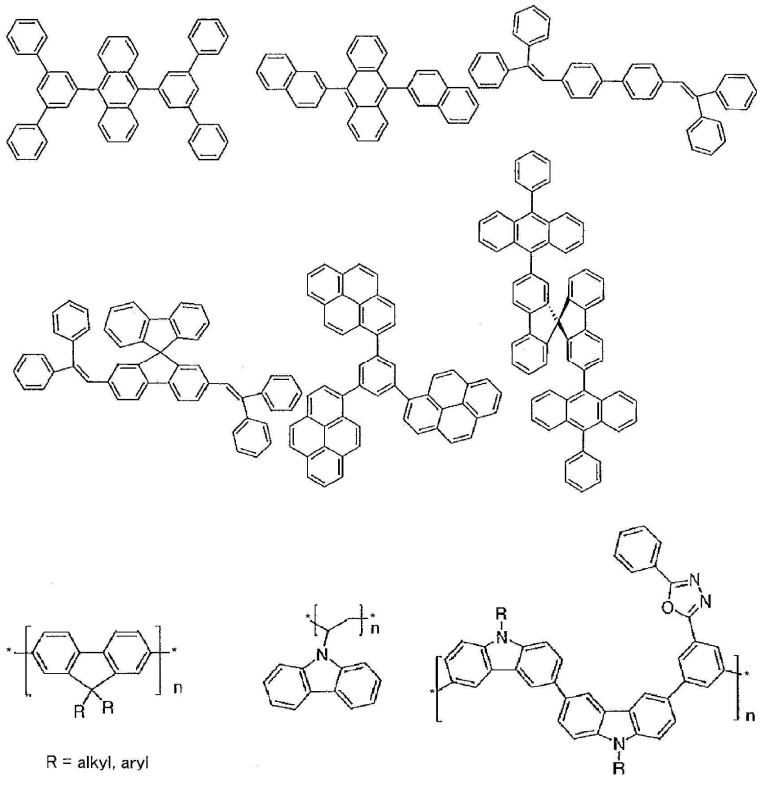
[0198]

[0199] [화학식 20]



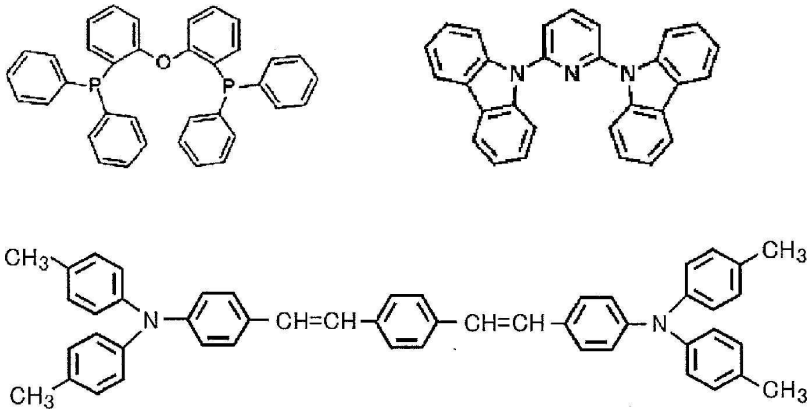
[0200]

[0201] [화학식 21]



[0202]

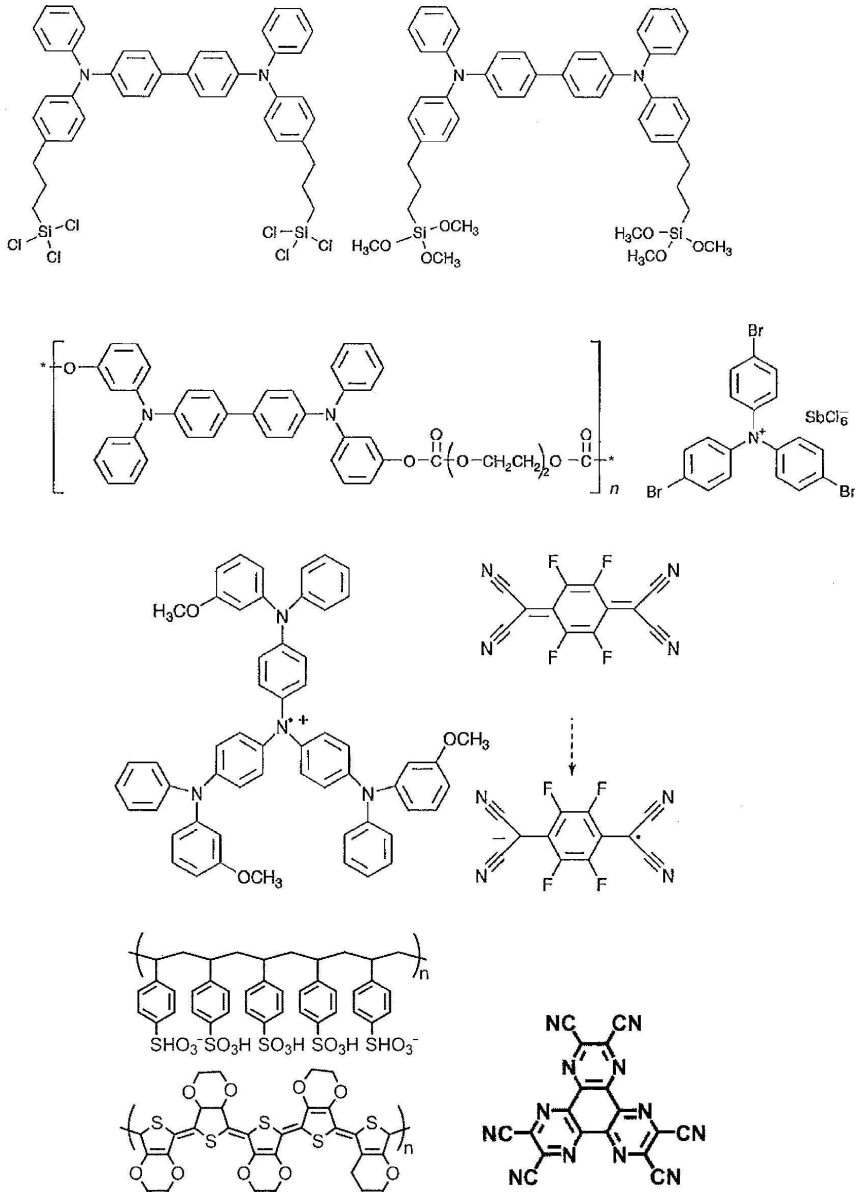
[0203] [화학식 22]



[0204]

[0205] 다음으로, 정공 주입 재료로서 이용할 수 있는 바람직한 화합물예를 든다.

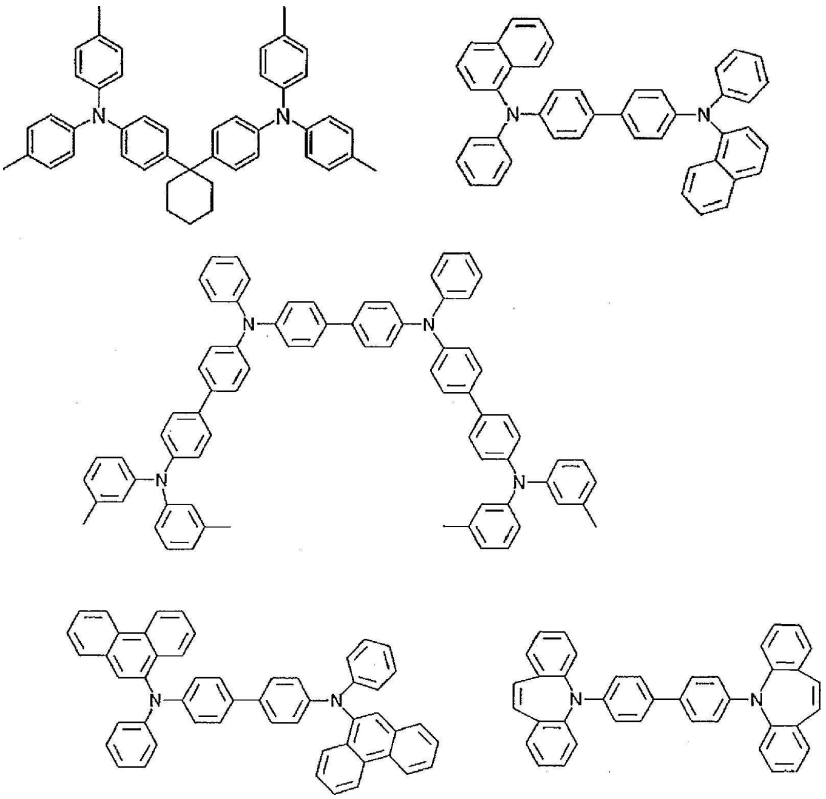
[0206] [화학식 23]



[0207]

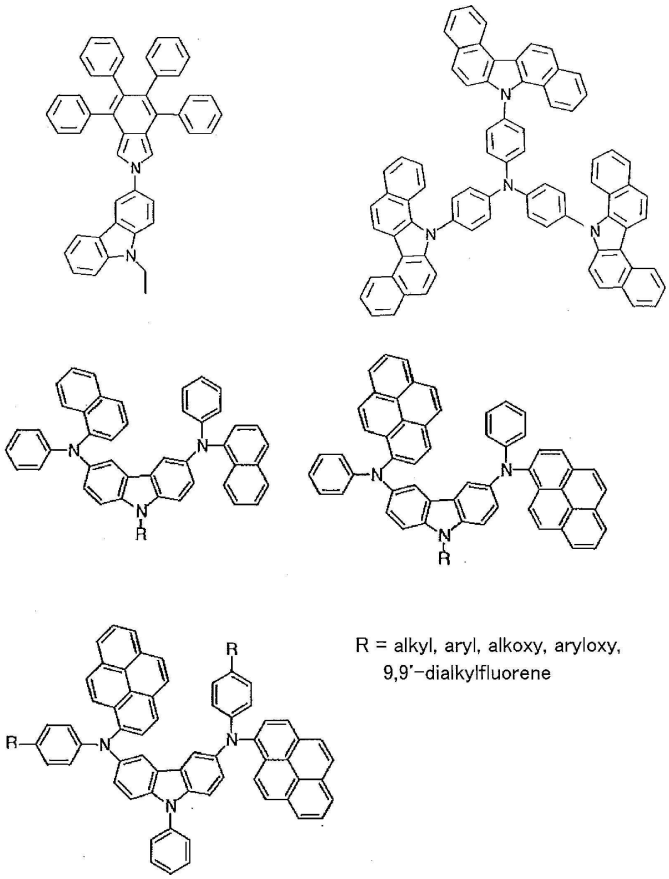
[0208] 다음으로, 정공 수송 재료로서 이용할 수 있는 바람직한 화합물예를 든다.

[0209] [화학식 24]



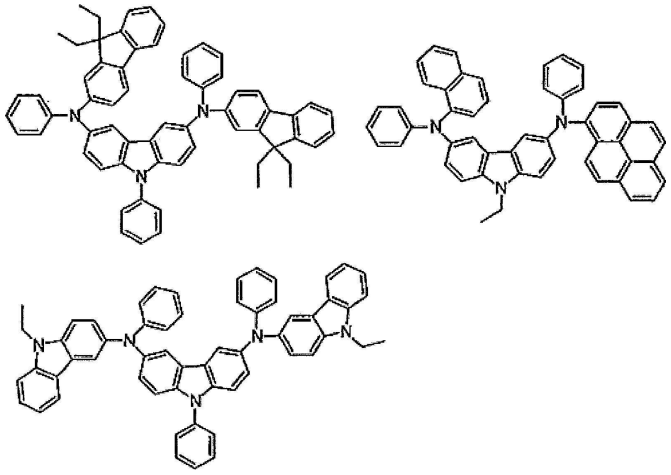
[0210]

[0211] [화학식 25-1]



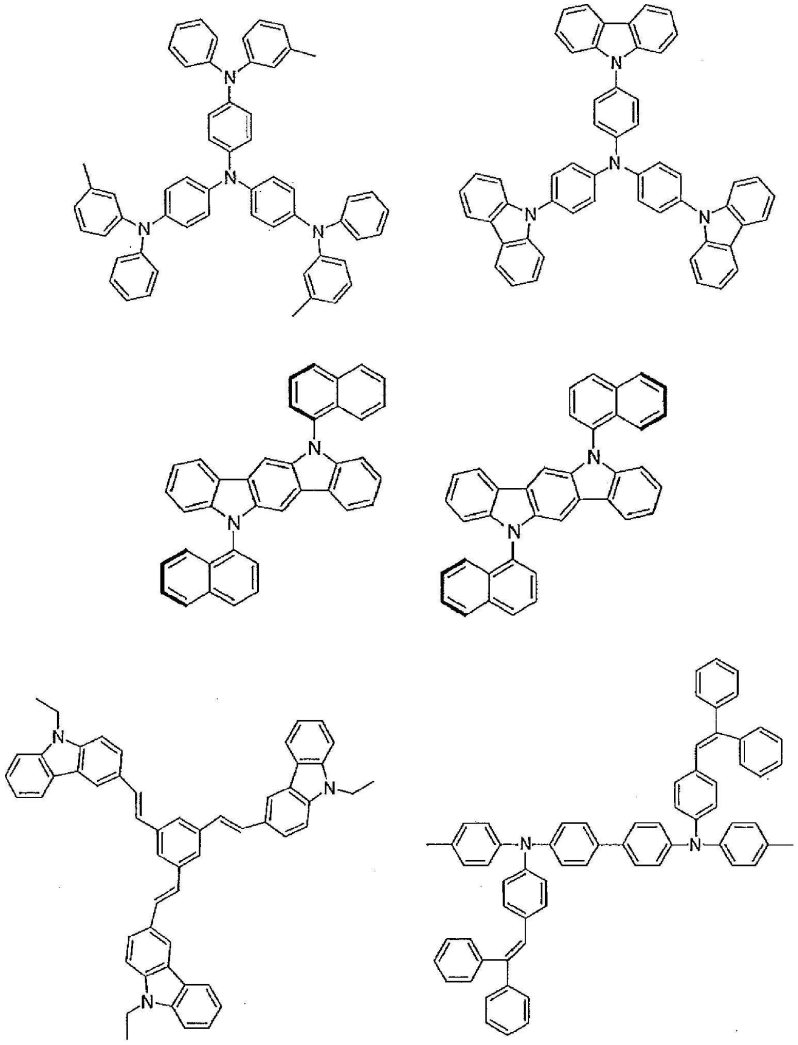
[0212]

[0213] [화학식 25-2]



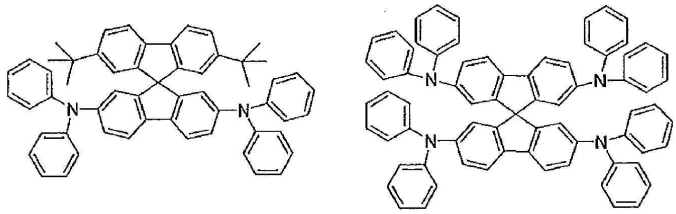
[0214]

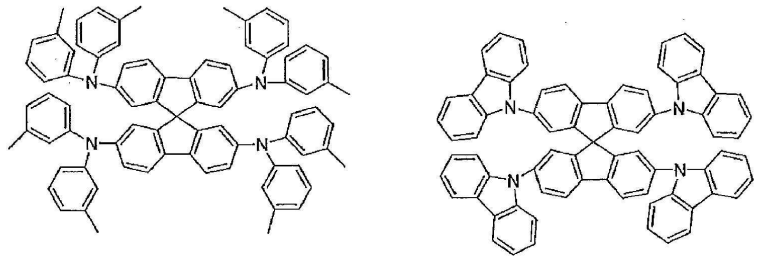
[0215] [화학식 26]

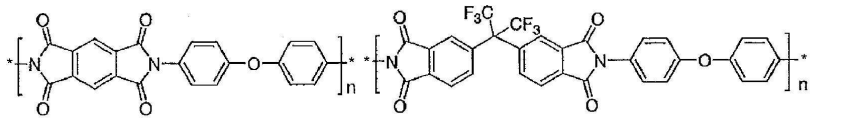


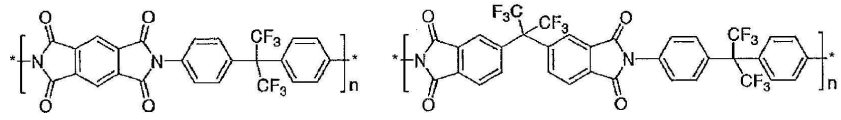
[0216]

[0217] [화학식 27]



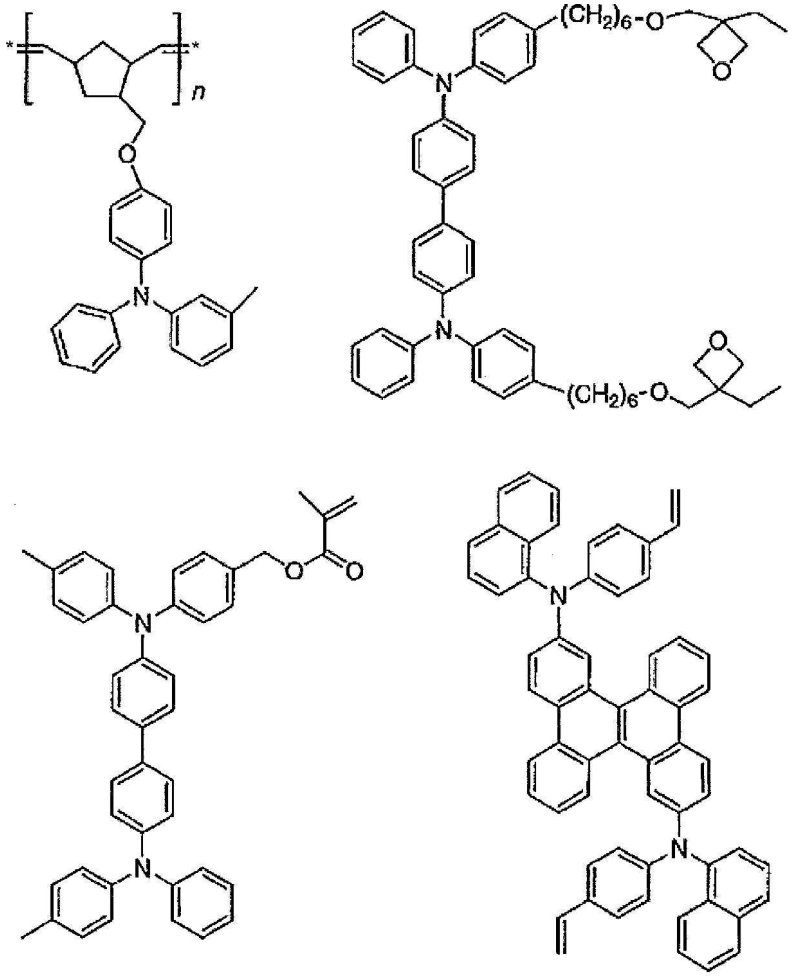






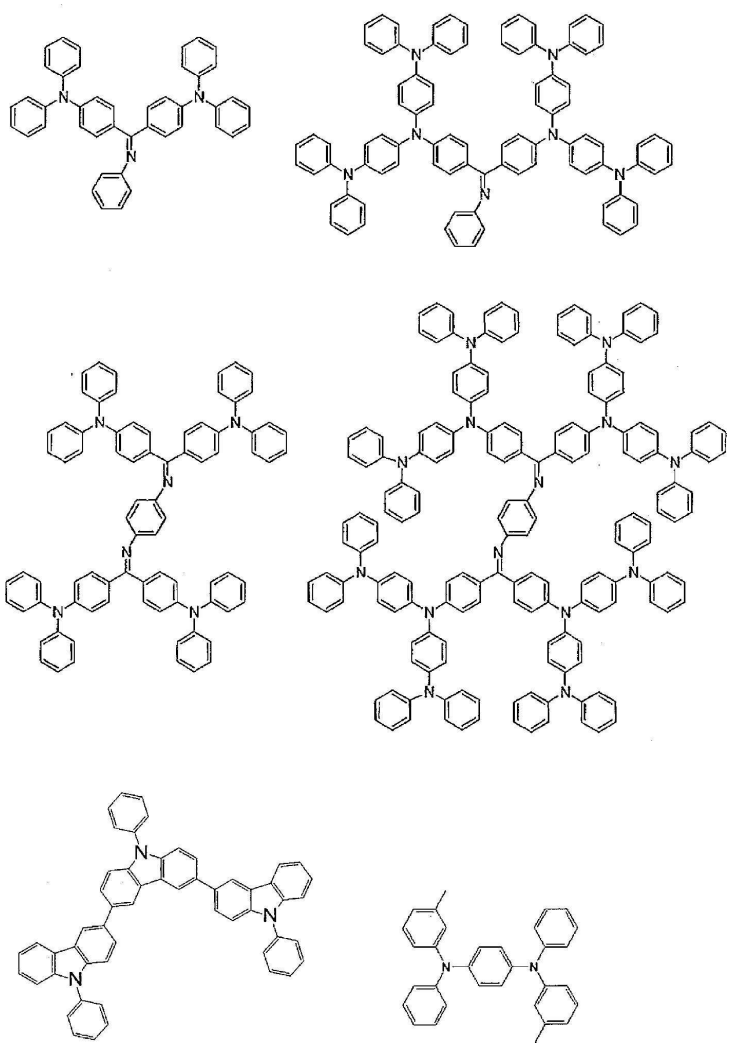
[0218]

[0219] [화학식 28]



[0220]

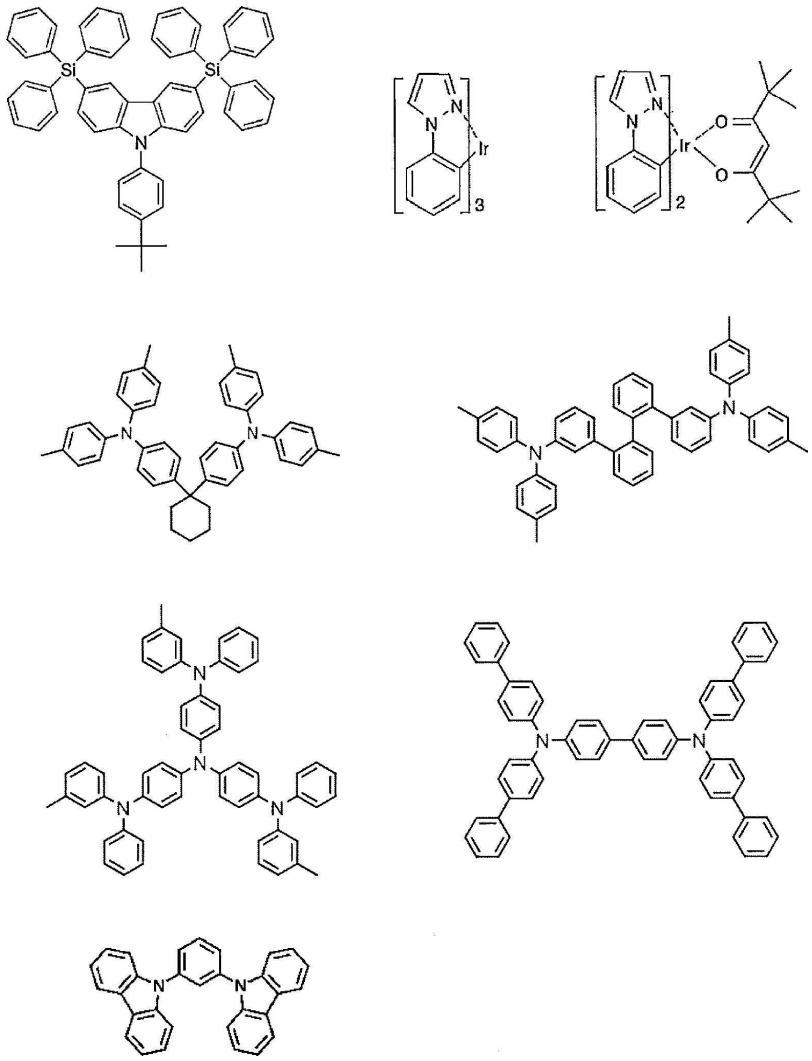
[0221] [화학식 29]



[0222]

[0223] 다음으로, 전자 저지 재료로서 이용할 수 있는 바람직한 화합물예를 든다.

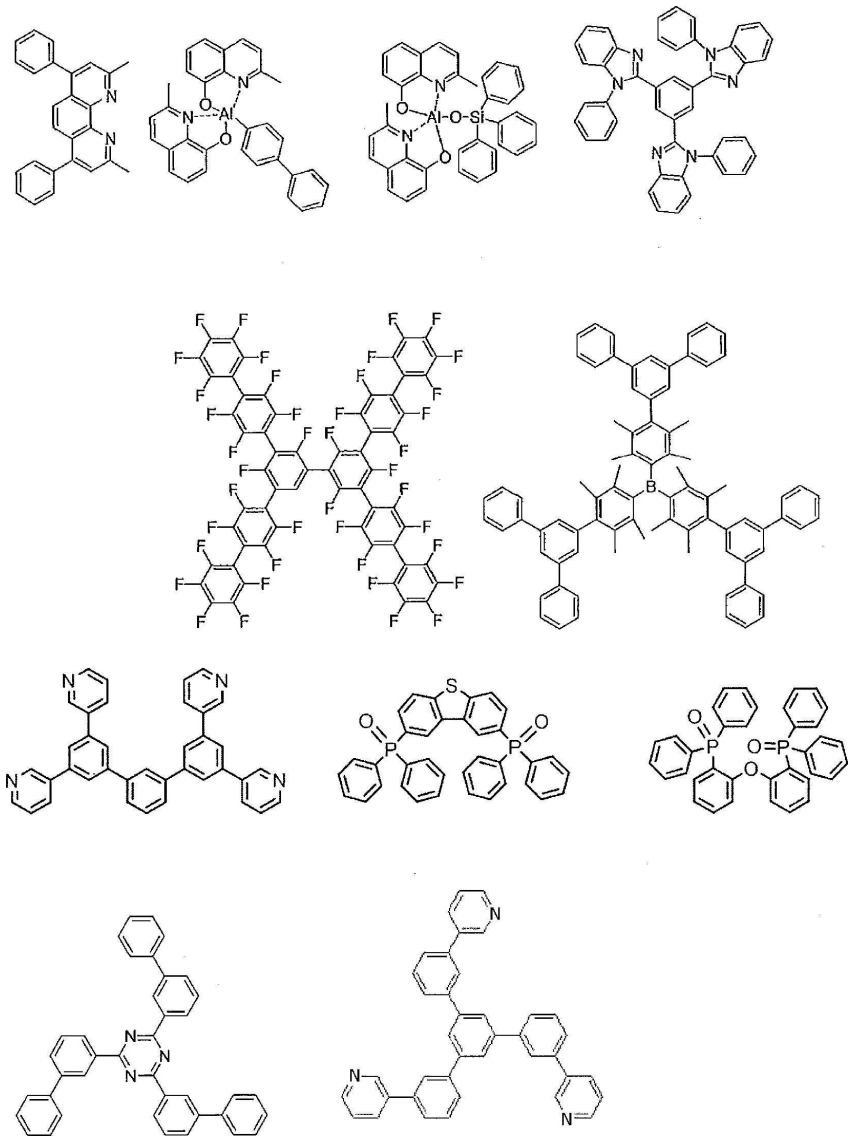
[0224] [화학식 30]



[0225]

[0226] 다음으로, 정공 저지 재료로서 이용할 수 있는 바람직한 화합물예를 든다.

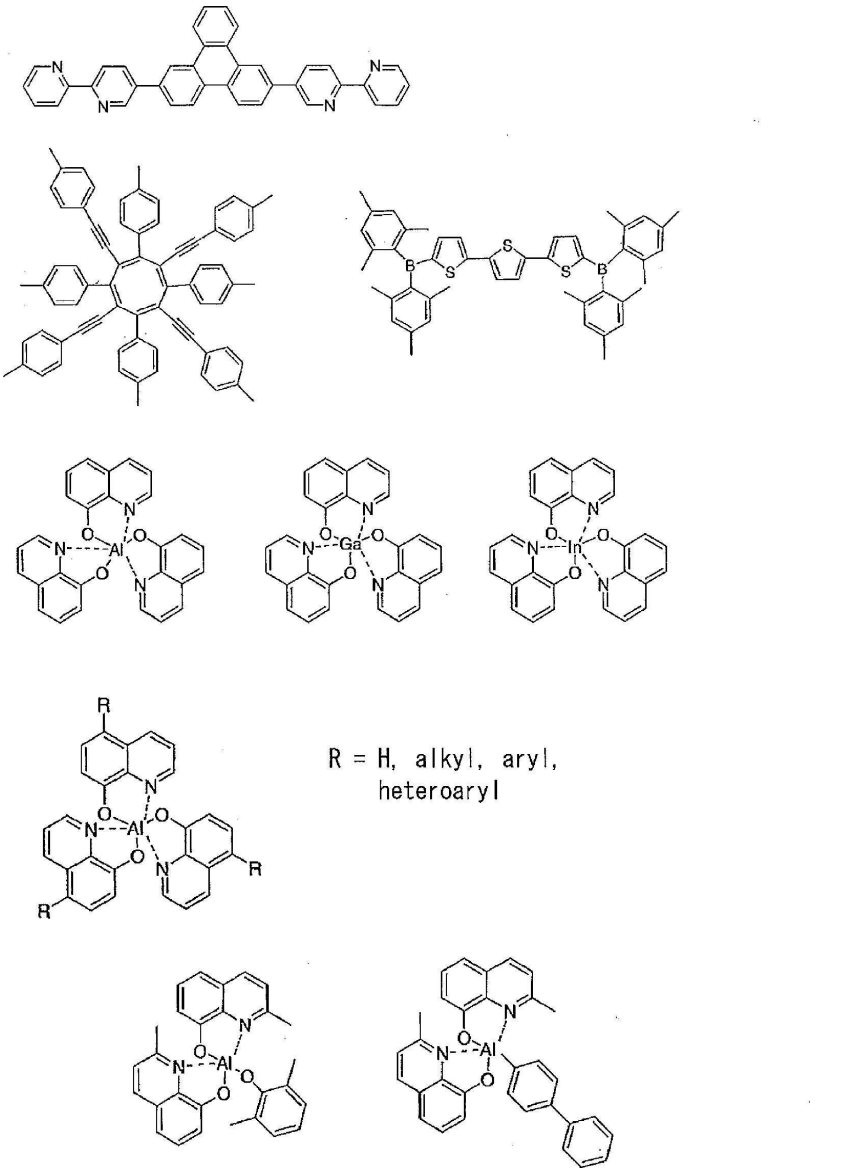
[0227] [화학식 31]



[0228]

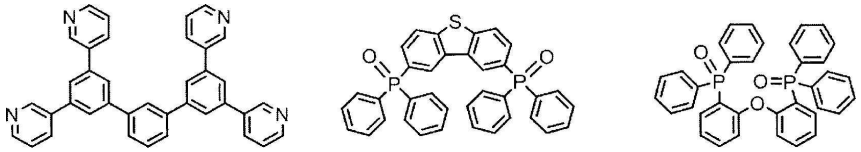
[0229] 다음으로, 전자 수송 재료로서 이용할 수 있는 바람직한 화합물예를 든다.

[0230] [화학식 32-1]



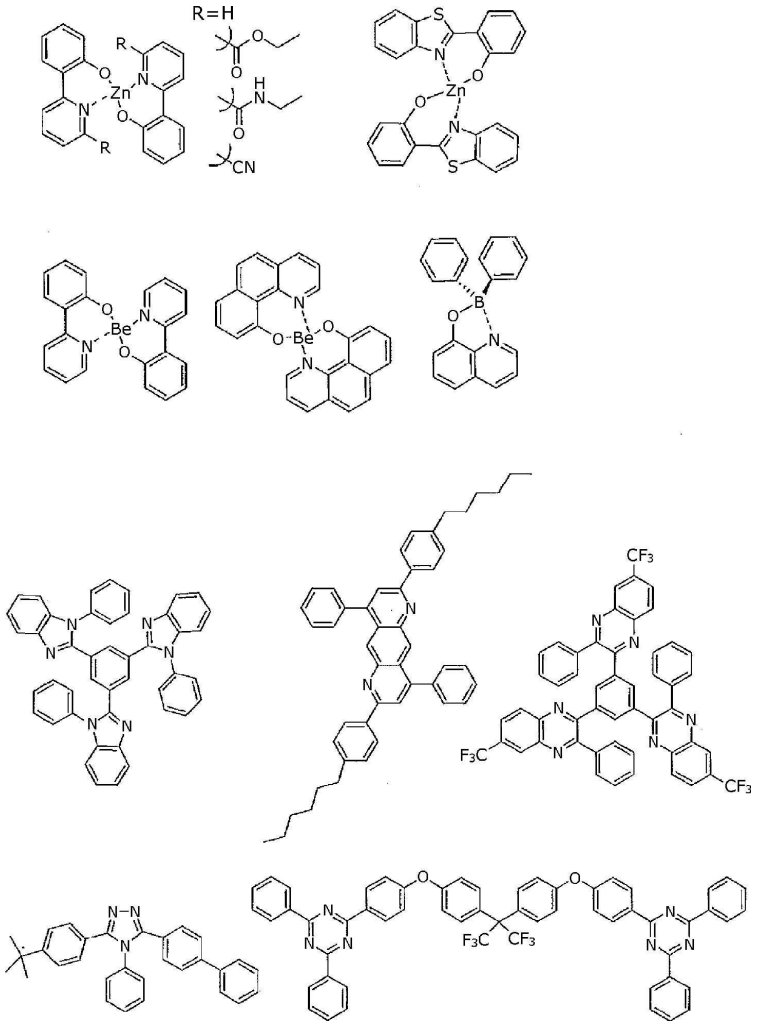
[0231]

[0232] [화학식 32-2]



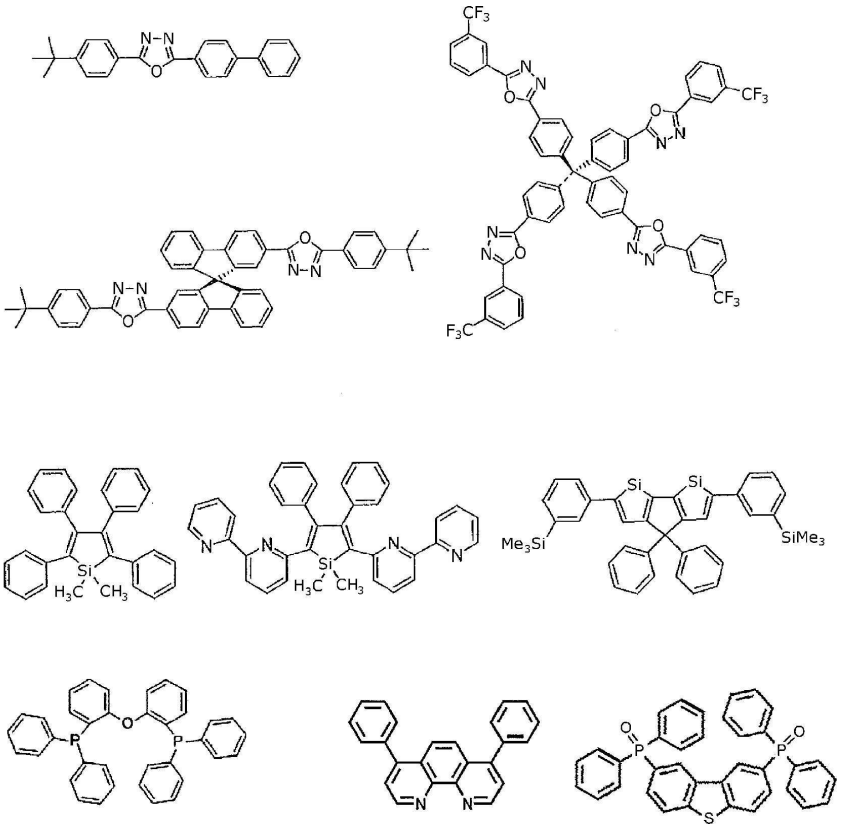
[0233]

[0234] [화학식 33]



[0235]

[0236] [화학식 34]

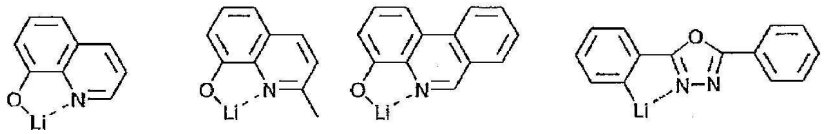


[0237]

[0238] 다음으로, 전자 주입 재료로서 이용할 수 있는 바람직한 화합물예를 든다.

[0239] [화학식 35]

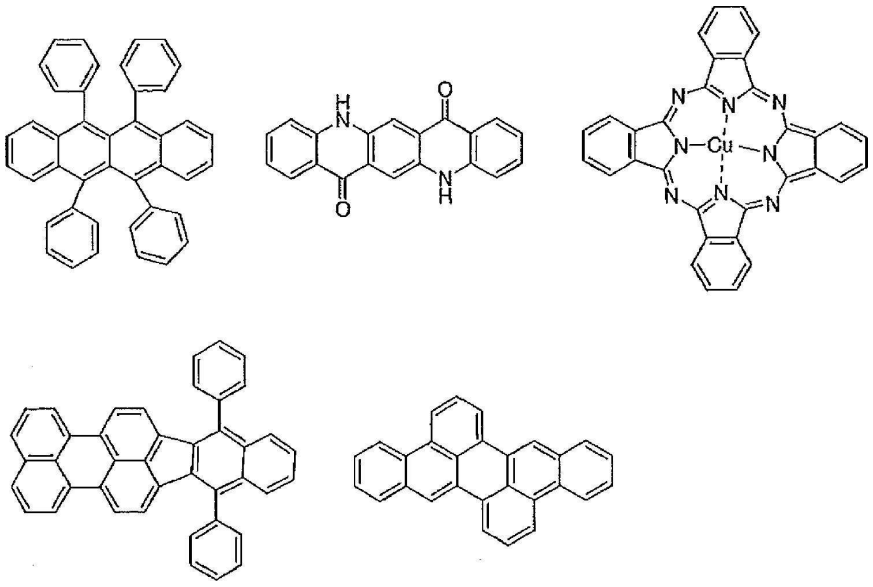
LiF, CsF



[0240]

[0241] 추가로 첨가 가능한 재료로서 바람직한 화합물예를 든다. 예를 들면, 안정화 재료로서 첨가하는 것 등이 생각된다.

[0242] [화학식 36]



[0243]

[0244] 상술의 방법에 의하여 제작된 유기 일렉트로 루미네선스 소자는, 얻어진 소자의 양극과 음극의 사이에 전계를 인가함으로써 발광한다. 이때, 여기 일중항 에너지에 의한 발광이면, 그 에너지 레벨에 따른 파장의 광이, 형광 발광 및 지연 형광 발광으로서 확인된다. 또, 여기 삼중항 에너지에 의한 발광이면, 그 에너지 레벨에 따른 파장이, 인광으로서 확인된다. 통상의 형광은, 지연 형광 발광보다 형광 수명이 짧기 때문에, 발광 수명은 형광과 지연 형광으로 구별할 수 있다.

[0245] 한편, 인광에 대해서는, 본 발명의 화합물과 같은 통상의 유기 화합물에서는, 여기 삼중항 에너지는 불안정하고, 열실활의 속도 상수가 크며, 발광의 속도 상수가 작은 것으로부터 즉시 실활하기 때문에, 실온에서는 대부분 관측할 수 없다. 통상의 유기 화합물의 여기 삼중항 에너지를 측정하기 위해서는, 극저온의 조건에서의 발광을 관측함으로써 측정 가능하다.

[0246] 본 발명의 유기 일렉트로 루미네선스 소자는, 단일의 소자, 어레이상으로 배치된 구조로 이루어지는 소자, 양극과 음극이 X-Y 매트릭스상으로 배치된 구조 중 어느 하나에 있어서도 적용할 수 있다. 본 발명에 의하면, 발광층에 일반식 (1)로 나타나는 화합물을 함유시킴으로써, 발광 효율이 크게 개선된 유기 발광 소자가 얻어진다. 본 발명의 유기 일렉트로 루미네선스 소자 등의 유기 발광 소자는, 더 다양한 용도로 응용하는 것이 가능하다. 예를 들면, 본 발명의 유기 일렉트로 루미네선스 소자를 이용하여, 유기 일렉트로 루미네선스 표시 장치를 제조하는 것이 가능하고, 상세한 것에 대해서는, 도키토 시즈오, 아다치 치하야, 무라타 히데유키 공저 "유기 EL 디스플레이"(옴샤)를 참조할 수 있다. 또, 특히 본 발명의 유기 일렉트로 루미네선스 소자는, 수요가 큰 유기 일렉트로 루미네선스 조명이나 백 라이트에 응용할 수도 있다.

[0247] 실시예

[0248] 이하에 합성예 및 실시예를 들어 본 발명의 특징을 더 구체적으로 설명한다. 이하에 나타내는 재료, 처리 내용, 처리 절차 등은, 본 발명의 취지를 벗어나지 않는 한 적절히 변경할 수 있다. 따라서, 본 발명의 범위는 이하에 나타내는 구체예에 의하여 한정적으로 해석되어야 하는 것은 아니다.

[0249] 이하에 있어서의 발광 특성의 평가는, 소스 미터(키슬리사제: 2400 시리즈), 반도체 파라미터 · 애널라이저(애질런트 · 테크놀로지사제: E5273A), 광파워 미터 측정 장치(뉴 포트사제: 1930C), 광학 분광기(오션 옵틱스사제: USB2000), 분광 방사계(톱콘사제: SR-3), 질소 가스 레이저(USHO제, 여기 파장 337nm) 및 스트리크 카메라(하마마쓰 포토닉스(주)제 C4334형)를 이용하여 행했다.

[0250] [최저 여기 일중항 에너지 준위(E_{S1})와 최저 여기 삼중항 에너지 준위(E_{T1})의 차 ΔE_{ST}의 측정]

[0251] 화합물의 최저 여기 일중항 에너지 준위(E_{S1})와 최저 여기 삼중항 에너지 준위(E_{T1})의 차 ΔE_{ST}는, 그 화합물에 대하여 측정한 형광 스펙트럼 및 인광 스펙트럼으로부터 최저 여기 일중항 에너지 준위(E_{S1})와 최저 여기 삼중항 에너지 준위(E_{T1})를 이하의 방법으로 산출하고, $\Delta E_{ST}=E_{S1}-E_{T1}$을 계산함으로써 구했다.

[0252] (1) 최저 여기 일중항 에너지 준위(E_{S1})

[0253] 측정 대상 화합물의 박막 혹은 톨루엔 용액(농도 10^{-5}mol/L)을 조제하여 시료로 했다. 상온(300K)에서 이 시료의 형광 스펙트럼을 측정했다. 형광 스펙트럼은, 세로축을 발광, 가로축을 파장으로 했다. 이 발광 스펙트럼의 단파 측의 시작점에 대하여 접선을 긋고, 그 접선과 가로축과의 교점의 파장값 λedge[nm]를 구했다. 이 파장값을 다음에 나타내는 환산식으로 에너지값으로 환산한 값을 E_{S1}로 했다.

[0254] 환산식: E_{S1}[eV]=1239.85/λedge

[0255] 발광 스펙트럼의 측정은, 여기 광원에 LED 광원(Thorlabs사제, M340L4)을 이용하여 검출기(하마마쓰 포토닉스사제, PMA-50)에 의하여 행했다.

[0256] (2) 최저 여기 삼중항 에너지 준위(E_{T1})

[0257] 최저 여기 일중항 에너지 준위(E_{S1})의 측정에서 이용한 것과 동일한 시료를, 액체 질소에 의하여 77[K]로 냉각하고, 여기광(340nm)을 인광 측정용 시료에 조사하며, 검출기를 이용하여 인광을 측정했다. 여기광 조사 후부터 100밀리초 이후의 발광을 인광 스펙트럼으로 했다. 이 인광 스펙트럼의 단파장 측의 시작점에 대하여 접선을 긋고, 그 접선과 가로축과의 교점의 파장값 λedge[nm]를 구했다. 이 파장값을 다음에 나타내는 환산식으로 에너지값으로 환산한 값을 E_{T1}로 했다.

[0258] 환산식: E_{T1}[eV]=1239.85/λedge

[0259] 인광 스펙트럼의 단파장 측의 시작점에 대한 접선은 이하와 같이 그었다. 인광 스펙트럼의 단파장 측으로부터, 스펙트럼의 극댓값 중, 가장 단파장 측의 극댓값까지 스펙트럼 곡선 상을 이동할 때에, 장파장 측을 향하여 곡선 상의 각 점에 있어서의 접선을 생각한다. 이 접선은, 곡선이 융기할수록(즉 세로축이 증가할수록), 기울기가 증가한다. 이 기울기의 값이 극대값을 취하는 점에 있어서 그은 접선을, 당해 인광 스펙트럼의 단파장 측의 시작점에 대한 접선으로 했다.

[0260] 또한, 스펙트럼의 최대 피크 강도의 10% 이하의 피크 강도를 갖는 극대점은, 상술한 가장 단파장 측의 극댓값에는 포함하지 않고, 가장 단파장 측의 극댓값에 가장 가까운, 기울기의 값이 극대값을 받는 점에 있어서 그은 접선을 당해 인광 스펙트럼의 단파장 측의 시작점에 대한 접선으로 했다.

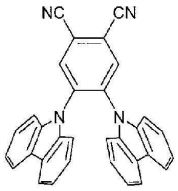
[0261] [최저 여기 일중항 에너지 준위(E_{S1})와 최저 여기 삼중항 에너지 준위(E_{T1})의 차 ΔE_{ST}의 계산 화학적 수법에 따른 산출]

[0262] 본 실시예에서는, 화합물의 최저 여기 일중항 에너지 준위(E_{S1})와 최저 여기 삼중항 에너지 준위(E_{T1})의 차 ΔE_{ST}를, 계산 화학적 수법에 따라서도 산출했다. 계산 화학적 수법에는, Gaussian사 Gaussian09 및 Gaussian16 프로그램을 사용했다. 여기에서, 기저 일중항 상태 S_0에서의 분자 구조의 최적화 및 전자 상태의 계산에는 B3LYP/6-31G(d)법을 이용하고, 최저 여기 일중항 에너지 준위(E_{S1})와 최저 여기 삼중항 에너지 준위(E_{T1})의 계산에는 시간 의존 밀도 범함수법(TD-DFT)법을 이용했다. 얻어진 최저 여기 일중항 에너지 준위(E_{S1})와 최저 여기 삼중항 에너지 준위(E_{T1})로부터 $\Delta E_{ST}=E_{S1}-E_{T1}$을 계산했다.

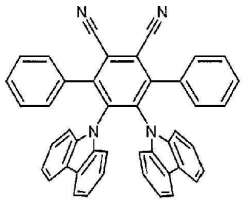
[0263] [본 실시예에서 사용한 화합물]

[0264] 이하에, 본 실시예에서 사용한 발명 화합물 및 비교 화합물, 도프막의 호스트로서 사용한 mCBP의 구조를 나타낸다.

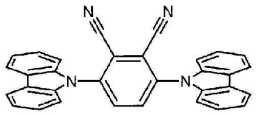
[0265] [화학식 37-1]



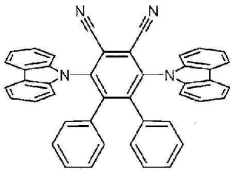
비교 화합물 1-1



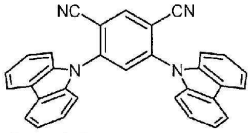
발명 화합물 1-1



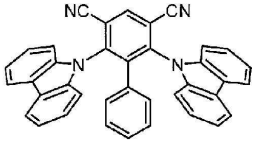
비교 화합물 2-1



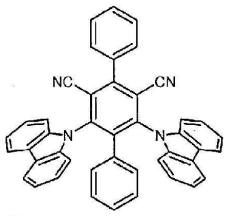
발명 화합물 2-1



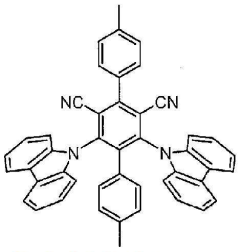
비교 화합물 3-1



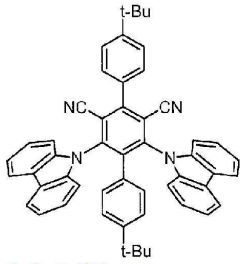
발명 화합물 3-1



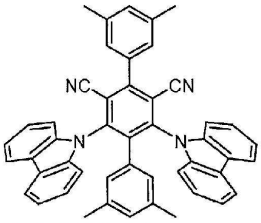
발명 화합물 3-2



발명 화합물 3-3



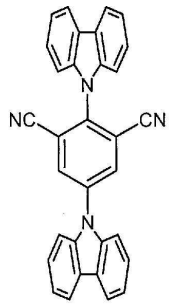
발명 화합물 3-4



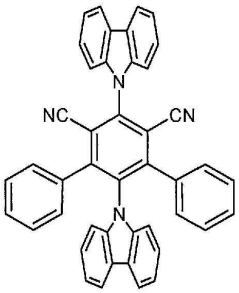
발명 화합물 3-5

[0266]

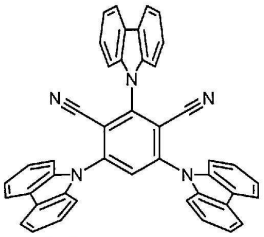
[0267] [화학식 37-2]



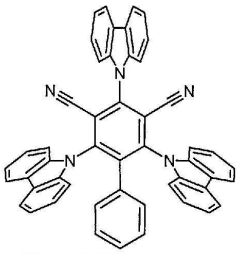
비교 화합물 4-1



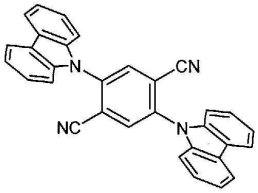
발명 화합물 4-1



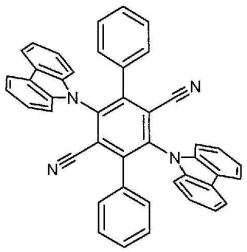
비교 화합물 5-1



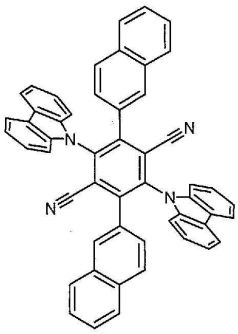
발명 화합물 5-1



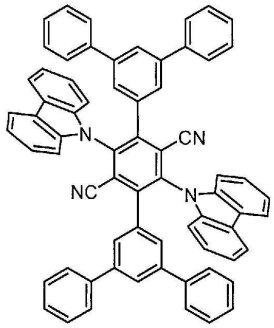
비교 화합물 6-1



발명 화합물 6-1



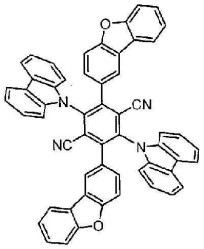
발명 화합물 6-2



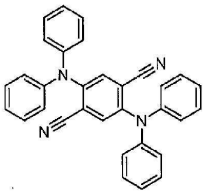
발명 화합물 6-3

[0268]

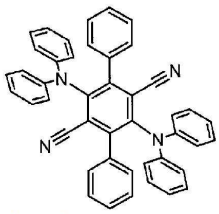
[0269] [화학식 37-3]



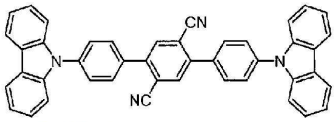
발명 화합물 6-4



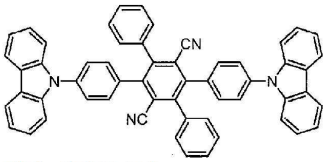
비교 화합물 7-1



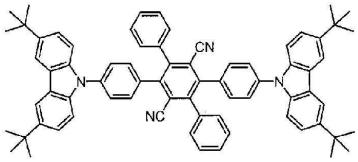
발명 화합물 7-1



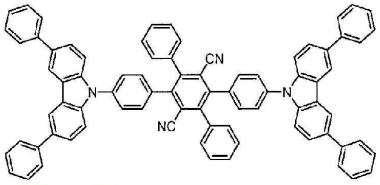
비교 화합물 8-1



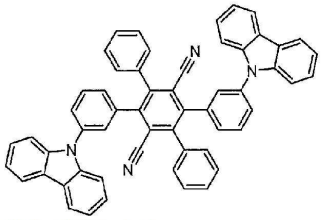
발명 화합물 8-1



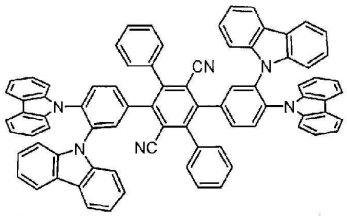
발명 화합물 8-2



발명 화합물 8-3



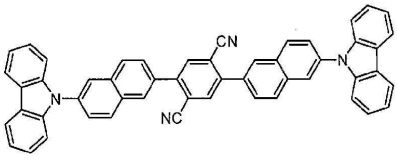
발명 화합물 8-4



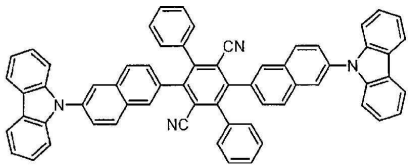
발명 화합물 8-5

[0270]

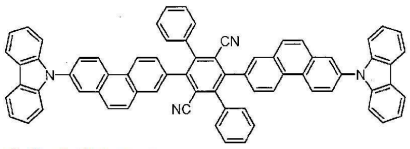
[0271] [화학식 37-4]



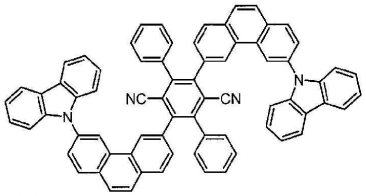
비교 화합물 9-1



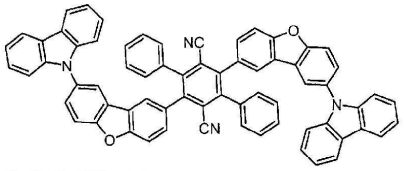
발명 화합물 9-1



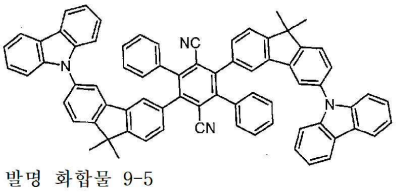
발명 화합물 9-2



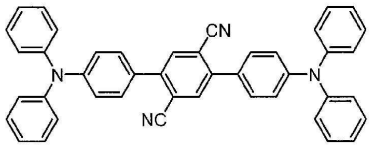
발명 화합물 9-3



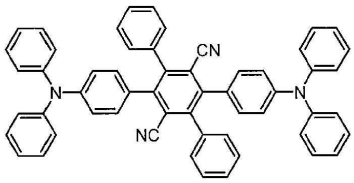
발명 화합물 9-4



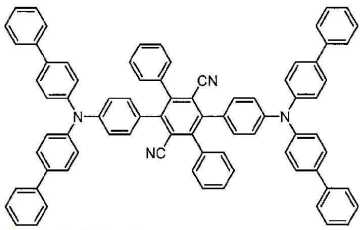
발명 화합물 9-5



비교 화합물 10-1



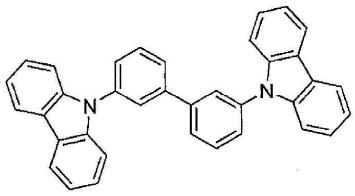
발명 화합물 10-1



발명 화합물 10-2

[0272]

[0273] [화학식 37-5]



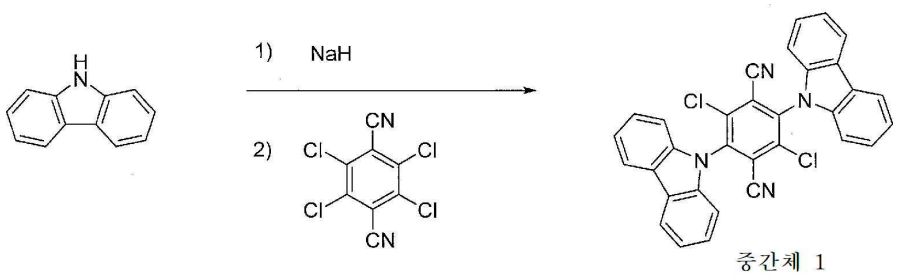
[0274] mCBP

[0275] [A] 화합물의 합성

[0276] (합성예 1) 발명 화합물 6-1의 합성

[0277] (1) 중간체 1의 합성

[0278] [화학식 38]



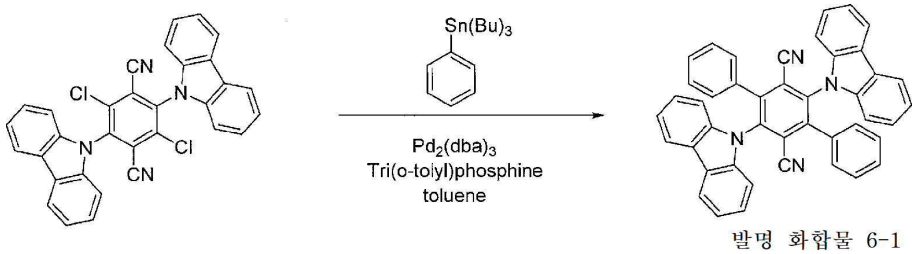
[0279] 중간체 1

[0280] 60% 수소화 나트륨 0.94mg(23.5mmol)을 300mL 3구 플라스크에 넣고, 수소화 나트륨을 건조시켜, 당해 플라스크 내를 질소 치환하며, 테트라하이드로퓨란(탈수 용매) 200mL를 첨가하여 교반했다. 이 혼합물에 9H-카바졸 3.14g(18.8mmol)을 첨가하고, 질소 기류하, 실온에서 60분 교반했다. 교반 후, 이 혼합물에 테트라클로로테레프탈로나이트릴 2.50g(9.40mmol)을 첨가하고, 이 혼합물을 질소 분위기하, 실온에서 12시간 교반했다. 교반 후, 이 혼합물에, 물을 첨가하여 교반하고 이 침전물을 여과했다. 여과 후, 이 혼합물을 실리카 젤 칼럼 크로마토그래피에 의하여 정제했다. 칼럼 크로마토그래피는 톨루엔:헥세인의 혼합 용매를 전개 용매로서 이용했다. 얻어진 프랙션을 농축하여 얻은 고체를 아세톤과 헥세인의 혼합 용매로 재결정한바, 황색 분말상 고체를 수량 2.01g, 수율 40.3%로 얻었다.

[0281] ^{1}H NMR(500Hz, $CDCl_3$, δ): 8.21(d, J=10Hz, 2H), 7.54(td, J=7.5Hz, J=1Hz, 2H), 7.45(td, J=7. 5Hz, J=1Hz, 2H), 7.15(d, J=8.5Hz, 2H)

[0282] 매스 스펙트럼 분석: 526.0

[0283] [화학식 39]



[0284] 발명 화합물 6-1

[0285] (2) 발명 화합물 6-1의 합성

[0286] 200mL 3구 플라스크에, 중간체 1을 1.55g(2.93mmol), 트라이뷰틸페닐스탄네인을 3.2g(8.8mmol), 트리스(다이벤질리덴아세톤)다이팔라듐(0)을 0.10g(0.093mmol), 트라이(o-톨릴)포스핀을 0.26g(0.88mmol) 넣고, 당해 플라스크 내를 질소 치환했다. 이 혼합물에 톨루엔 70mL를 첨가하고, 질소 분위기하, 100℃에서 24시간 교반했다. 이 혼합물을 실리카 젤 칼럼 크로마토그래피에 의하여 정제했다. 칼럼 크로마토그래피는 아세트산 에틸:헥세인=1:9의 혼합 용매를 전개 용매로서 이용했다. 얻어진 프랙션을 농축하여 얻은 고체를 아세톤과 헥세인의 혼합 용매로 재결정한바, 황색 분말상 고체를 수량 0.36g, 수율 20.2%로 얻었다.

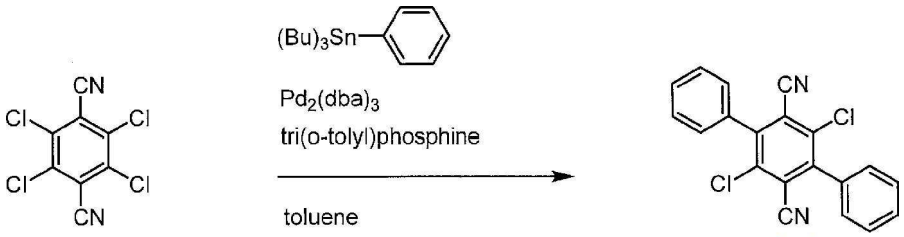
[0287] ^{1}H NMR(500Hz, $CDCl_3$, δ): 8.03(d, J=7.9Hz, 4H), 7.42(t, J=8.0Hz, 4H), 7.28(t, J=7.9Hz, 4H), 7.19(d, J=8. 1Hz, 4H), 7.14(d, J=7.0Hz, 4H), 7.09(t, J=7.9Hz, 2H), 7.42(t, J=7.7Hz, 4H)

[0288] 매스 스펙트럼 분석: 610.10

[0289] (합성예 2) 발명 화합물 8-1의 합성

[0290] (1) 중간체 2의 합성

[0291] [화학식 40]



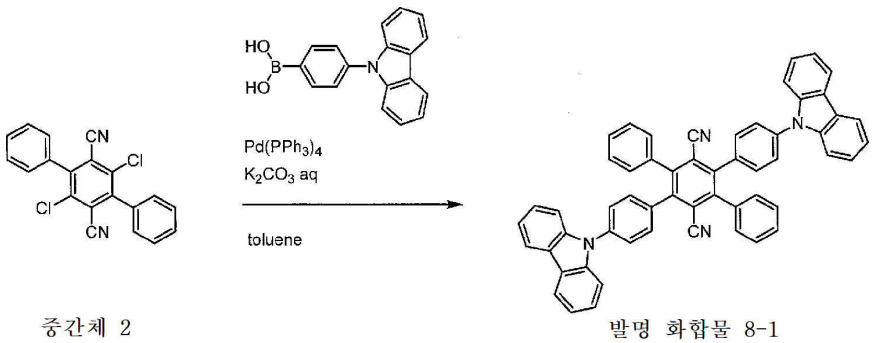
[0292] 중간체 2

[0293] 테트라클로로테레프탈로나이트릴 0.26g(1.0mmol), 트라이뷰틸페닐스탄네인 0.81g(2.2mmol), 트리스(다이벤질리덴아세톤)다이팔라듐(0) 0.03g(0.03mmol) 및 트라이(o-톨릴)포스핀 0.09g(0.3mmol)을 플라스크에 넣고, 당해 플라스크 내를 질소 치환한 후, 톨루엔 20mL를 첨가하며, 질소 분위기하, 120℃에서 24시간 교반했다. 교반 후, 혼합물을 실온으로 되돌리고, 실리카 젤 칼럼 크로마토그래피에 의하여 정제했다. 칼럼 크로마토그래피의 전개 용매에는 톨루엔 및 헥세인을 사용했다. 얻어진 프랙션을 농축하여 얻은 고체를 다이클로로메테인 및 헥세인으로 재결정한바, 중간체 2가 수량 0.070g, 수율 20%로 얻어졌다.

[0294] 매스 스펙트럼 분석: 347.98

[0295] (2) 발명 화합물 8-1의 합성

[0296] [화학식 41]



[0297] 중간체 2 발명 화합물 8-1

[0298] 중간체 2를 0.17g(0.5mmol)과, 4-(9H-카바졸일)페닐보론산 0.31g(1.1mmol) 및 탈수 톨루엔 15mL를 쉬링크관에 넣는다. 이 혼합물에 테트라키스(트라이페닐포스핀)팔라듐(0) 0.11g(0.1mmol), 2M의 탄산 칼륨 수용액 6mL를 첨가하고, 80℃에서 72시간 교반한다. 교반 후, 혼합물을 실온으로 되돌리고, 혼합물 중의 석출물을 여과 채취한다. 이 석출물을, 물, 헥세인, 메탄올로 차례로 세정함으로써 발명 화합물 8-1이 얻어진다.

[0299] [B] 계산 화학적 수법에 따른 ΔE_{ST}의 산출

[0300] 상기의 각 발명 화합물 및 각 비교 화합물에 대하여, 계산 화학적 수법에 의하여 산출한 최저 여기 일중항 에너지 준위(E_{S1}), 최저 여기 삼중항 에너지 준위(E_{T1}) 및 그들의 에너지차 ΔE_{ST}를 표 6~15에 나타낸다. 각 표에 있어서의 발명 화합물의 "상댓값"은, 각 발명 화합물의 ΔE_{ST}를, 대응하는 비교 화합물(동일한 표에 게재한 비교 화합물)의 ΔE_{ST}를 1.00으로서 산출한 상댓값이다.

[0301] [표 6]

	E_{S1} (eV)	E_{T1} (eV)	ΔE_{ST} (eV)	상댓값
비교 화합물 1-1	2.842	2.501	0.341	1.00
발명 화합물 1-1	2.627	2.473	0.154	0.45

[0302]

[0303] [표 7]

	E_{S1} (eV)	E_{T1} (eV)	ΔE_{ST} (eV)	상댓값
비교 화합물 2-1	2.665	2.489	0.176	1.00
발명 화합물 2-1	2.598	2.553	0.045	0.25

[0304]

[0305] [표 8]

	E_{S1} (eV)	E_{T1} (eV)	ΔE_{ST} (eV)	상댓값
비교 화합물 3-1	2.806	2.601	0.205	1.00
발명 화합물 3-1	2.584	2.524	0.061	0.30
발명 화합물 3-2	2.629	2.570	0.059	0.29
발명 화합물 3-3	2.651	2.591	0.061	0.29
발명 화합물 3-4	2.657	2.596	0.061	0.30
발명 화합물 3-5	2.662	2.604	0.059	0.29

[0306]

[0307] [표 9]

	E_{S1} (eV)	E_{T1} (eV)	ΔE_{ST} (eV)	상댓값
비교 화합물 4-1	2.704	2.599	0.105	1.00
발명 화합물 4-1	2.719	2.663	0.055	0.53

[0308]

[0309] [표 10]

	E_{S1} (eV)	E_{T1} (eV)	ΔE_{ST} (eV)	상댓값
비교 화합물 5-1	2.684	2.568	0.116	1.00
발명 화합물 5-1	2.487	2.449	0.039	0.33

[0310]

[0311] [표 11]

	E_{S1} (eV)	E_{T1} (eV)	ΔE_{ST} (eV)	상댓값
비교 화합물 6-1	2.477	2.294	0.183	1.00
발명 화합물 6-1	2.498	2.420	0.079	0.43
발명 화합물 6-2	2.509	2.426	0.084	0.46
발명 화합물 6-3	2.493	2.415	0.078	0.42
발명 화합물 6-4	2.477	2.414	0.063	0.35

[0312]

[0313] [표 12]

	E_{S1} (eV)	E_{T1} (eV)	ΔE_{ST} (eV)	상댓값
비교 화합물 7-1	2.531	2.097	0.434	1.00
발명 화합물 7-1	2.379	2.133	0.246	0.57

[0314]

[0315] [표 13]

	E_{S1} (eV)	E_{T1} (eV)	ΔE_{ST} (eV)	상댓값
비교 화합물 8-1	2.577	2.419	0.158	1.00
발명 화합물 8-1	2.706	2.642	0.064	0.40
발명 화합물 8-2	2.566	2.516	0.050	0.32
발명 화합물 8-3	2.554	2.515	0.039	0.24
발명 화합물 8-4	2.452	2.375	0.077	0.49
발명 화합물 8-5	2.586	2.574	0.012	0.08

[0316]

[0317] [표 14]

	E_{S1} (eV)	E_{T1} (eV)	ΔE_{ST} (eV)	상댓값
비교 화합물 9-1	2.586	2.336	0.250	1.00
발명 화합물 9-1	2.746	2.525	0.221	0.88
발명 화합물 9-2	2.800	2.618	0.182	0.73
발명 화합물 9-3	2.755	2.560	0.196	0.78
발명 화합물 9-4	2.766	2.761	0.004	0.02
발명 화합물 9-5	2.778	2.776	0.003	0.01

[0318]

[0319] [표 15]

	E_{S1} (eV)	E_{T1} (eV)	ΔE_{ST} (eV)	상댓값
비교 화합물 10-1	2.517	2.236	0.281	1.00
발명 화합물 10-1	2.534	2.434	0.100	0.35
발명 화합물 10-2	2.452	2.375	0.077	0.27

[0320]

[0321] 각 표에 나타내고 있는 바와 같이, 사이아노기와 아릴기와 도너성기를 갖는 각 발명 화합물은, 그에 대응하는 비교 화합물(아릴기 Ar을 제외한 비교 화합물)에 비해 ΔE_{ST}값이 작은 값이었다.

[0322] [C] 박막의 제작과 평가

[0323] (실시예 1) 발명 화합물 6-1만으로 이루어지는 박막의 제작과 평가

[0324] 석영 기판 상에 진공 증착법으로, 진공도 1×10^{-3}Pa 미만의 조건으로 발명 화합물 6-1을 증착하고, 발명 화합물 6-1만으로 이루어지는 박막을 70nm의 두께로 형성했다.

[0325] 얻어진 박막에 대하여, 337nm 여기광을 이용하여 발광 스펙트럼을 관측한바, 피크 파장(λ_{max})은 530nm였다. 도 2에 형광 스펙트럼과 인광 스펙트럼을 나타낸다. 337nm 여기광을 이용하여 관측한 발광의 과도 감쇠 곡선을 도 3에 나타낸다. 지연 형광의 수명(τ_d)은 5.62μs(마이크로초)였다. 또, ΔE_{ST}를 측정한바 0.123eV였다. 또한 300nm 여기광을 이용하여 광 발광 양자 효율(PLQY)을 측정한바, 공기 중에서 36.0%, 질소 중에서 39.9%였다.

[0326] (실시예 2) 발명 화합물 6-1을 이용한 도프 박막의 제작과 평가

[0327] 석영 기판 상에 진공 증착법으로, 진공도 1×10^{-3}Pa 미만의 조건으로 발명 화합물 6-1과 mCBP를 다른 증착원으로부터 증착하고, 발명 화합물 6-1의 농도가 20중량%인 박막을 100nm의 두께로 형성했다.

[0328] 얻어진 박막에 대하여, 337nm 여기광을 이용하여 발광 스펙트럼을 관측한바, 피크 파장(λ_{max})은 518nm였다. 337nm 여기광을 이용하여 관측한 발광의 과도 감쇠 곡선을 도 4에 나타낸다. 지연 형광의 수명(τ_d)은 9.16μs(마이크로초)였다. 또한 300nm 여기광을 이용하여 광 발광 양자 효율(PLQY)을 측정한바, 질소 중에서 65.7%였다.

[0329] (비교예 1) 비교 화합물 6-1만으로 이루어지는 박막의 제작과 평가

[0330] 발명 화합물 6-1 대신에 비교 화합물 6-1을 이용한 것 이외에는, 실시예 1과 동일하게 하여, 비교 화합물 6-1만으로 이루어지는 박막을 70nm의 두께로 형성했다.

[0331] 얻어진 박막의 ΔE_{ST}를 측정한바 0.213eV였다.

[0332] (비교예 2) 비교 화합물 6-1을 이용한 도프 박막의 제작과 평가

[0333] 발명 화합물 6-1 대신에 비교 화합물 6-1을 이용한 것 이외에는, 실시예 2와 동일하게 하여, 비교 화합물 6-1의 농도가 20중량%인 박막을 100nm의 두께로 형성했다.

[0334] 얻어진 박막에 대하여, 337nm 여기광을 이용하여 관측한 발광의 과도 감쇠 곡선을 도 5에 나타낸다. 또, 도 5에는, 도 4에 나타낸 실시예 2의 발광의 과도 감쇠 곡선을, 가로축 및 세로축의 스케일을 바꾸어 함께 나타낸다.

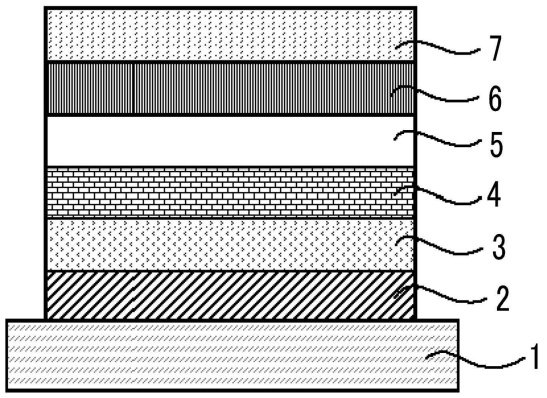
비교예 2의 박막의 지연 형광의 수명(τ_d)은 76.8μs(마이크로초)였다.

[0335] 실시예 1 및 비교예 1의 측정 결과를 비교한바, 실시예 1에서 제작한 발명 화합물 6-1의 박막의 ΔE_{ST}는, 비교예 1에서 제작한 비교 화합물 6-1의 박막의 ΔE_{ST}에 대하여, 대략 0.58배였다. 또, 표 11의 계산 결과를 보면, 발명 화합물 6-1의 ΔE_{ST}는, 비교 화합물 6-1의 박막의 ΔE_{ST}에 대하여, 대략 0.43배이다. 이것으로부터, ΔE_{ST}의 계산 결과의 경향이 실측값의 경향과 부합하고 있는 것이 확인되었다. 또, 실시예 2의 박막의 지연 형광의 수명(τ_d)은, 비교예 2의 박막의 지연 형광의 수명(τ_d)에 대하여, 대략 0.12배이며, 발명 화합물 6-1의 τ_d는 비교 화합물 6-1의 τ_d에 비하여 훨씬 더 짧은 것이었다. 이는, 발명 화합물 6-1에서는, ΔE_{ST}가 작음으로써 여기 삼중항 상태로부터 여기 일중항 상태로의 역항간 교차가 용이하게 일어나기 때문이다.

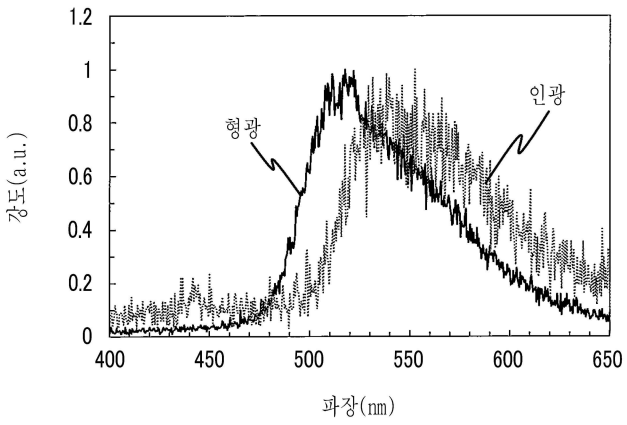
[0336] 이상의 측정 결과 및 계산 결과로부터, 본 실시예에서 채용한 발명 화합물은, 모두 대응하는 비교 화합물에 비하여 ΔE_{ST}가 작은 것이 나타나고, 이로써, 이들 발명 화합물이 역항간 교차를 발생시키기 쉬운 것, 즉, 그 지연 형광 수명이 짧은 것이 밝혀졌다. 이와 같이 발광 수명이 짧은 화합물을 적용한 일렉트로 루미네선스 소자는, 고전류 밀도 영역에서의 여기자의 축적에 의한 발광 효율의 저하나, 소자의 장시간 구동에 의한 열화가 완화되어 뛰어난 소자 성능을 나타낸다. 이들 결과로부터, 일반식 (1)로 나타나는 화합물이, 이러한 발광 소자의 실현에 크게 공헌할 수 있는 것임을 알았다.

도면

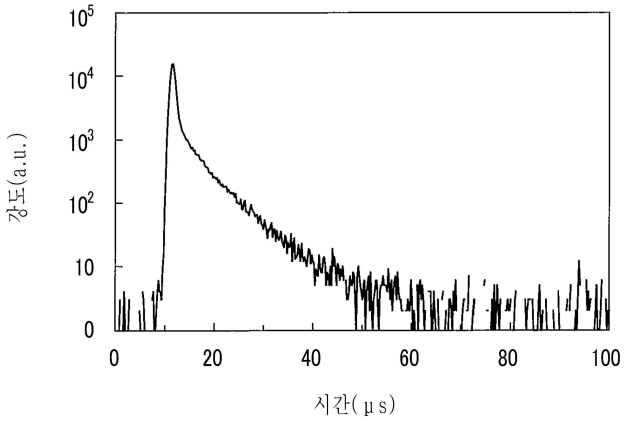
도면1



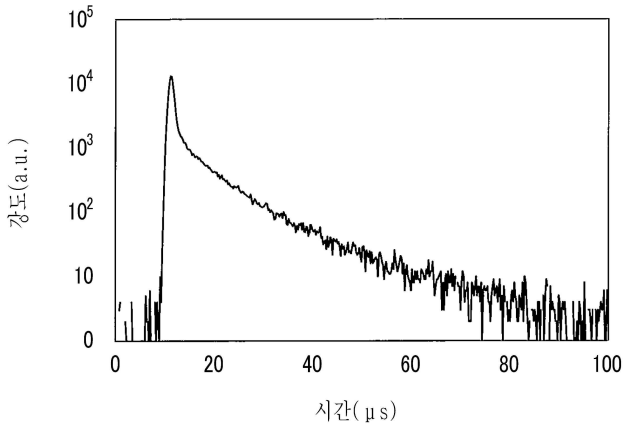
도면2



도면3



도면4



도면5

