



(19) 대한민국특허청(KR)
(12) 등록특허공보(B1)

(45) 공고일자 2024년12월23일
(11) 등록번호 10-2746267
(24) 등록일자 2024년12월19일

(51) 국제특허분류(Int. Cl.)
C07D 495/14 (2006.01) C09K 11/06 (2006.01)
H10K 101/20 (2023.01) H10K 50/12 (2023.01)
H10K 85/60 (2023.01)
(52) CPC특허분류
C07D 495/14 (2013.01)
C09K 11/06 (2022.01)
(21) 출원번호 10-2024-7000756
(22) 출원일자(국제) 2022년06월09일
심사청구일자 2024년04월03일
(85) 번역문제출일자 2024년01월08일
(65) 공개번호 10-2024-0021221
(43) 공개일자 2024년02월16일
(86) 국제출원번호 PCT/JP2022/023247
(87) 국제공개번호 WO 2022/260119
국제공개일자 2022년12월15일
(30) 우선권주장
JP-P-2021-097473 2021년06월10일 일본(JP)
(뒷면에 계속)
(56) 선행기술조사문헌
KR1020160023655 A
(뒷면에 계속)

(73) 특허권자
이데미쓰 고산 가부시키키가이샤
일본 도쿄도 지요다쿠 오테마치 1쵸메 2방 1고
(72) 발명자
야스카와 게이이치
일본 100-8321 도쿄도 지요다쿠 오테마치 1쵸메
2방 1고 이데미쓰 고산 가부시키키가이샤 나이
마츠모토 히사토
일본 100-8321 도쿄도 지요다쿠 오테마치 1쵸메
2방 1고 이데미쓰 고산 가부시키키가이샤 나이
(뒷면에 계속)
(74) 대리인
김진희, 김태홍

전체 청구항 수 : 총 14 항

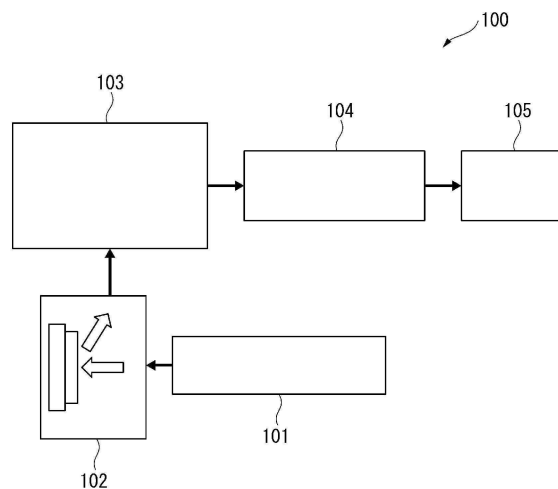
심사관 : 조혜진

(54) 발명의 명칭 화합물, 유기 일렉트로루미네센스 소자용 재료, 유기 일렉트로루미네센스 소자 및 전자 기기

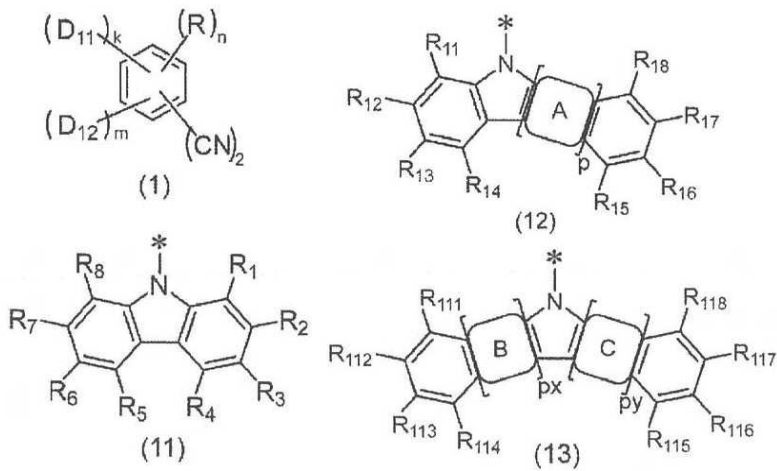
(57) 요약

본 발명은 하기 일반식(1)로 표시되는 화합물에 관한 것이다. 일반식(1)에 있어서, CN은 시아노기이며, D₁₁ 및
(뒷면에 계속)

대표도 - 도1



D₁₂는 각각 독립적으로 일반식(11), 일반식(12) 또는 일반식(13)으로 표시되는 기이며, 단, 적어도 하나의 D₁₁은 일반식(12) 또는 일반식(13)으로 표시되는 기이며, R은 수소 원자 및 아릴기 등이다.



(52) CPC특허분류

H10K 50/12 (2023.02)

H10K 85/657 (2023.02)

H10K 85/6572 (2023.02)

H10K 85/6574 (2023.02)

H10K 85/658 (2023.02)

H10K 2101/20 (2023.02)

(72) 발명자

테라다 가즈키

일본 100-8321 도쿄도 지요다쿠 오테마치 1초메 2
방 1고 이데미쓰 고산 가부시기가이샤 나이

이이다 마이코

일본 100-8321 도쿄도 지요다쿠 오테마치 1초메 2
방 1고 이데미쓰 고산 가부시기가이샤 나이

(56) 선행기술조사문헌

KR1020210038406 A

KR1020220074924 A

WO2021066059 A1

KR1020150132872 A

WO2016138077 A1

WO2017115835 A1

(30) 우선권주장

JP-P-2021-150650 2021년09월15일 일본(JP)

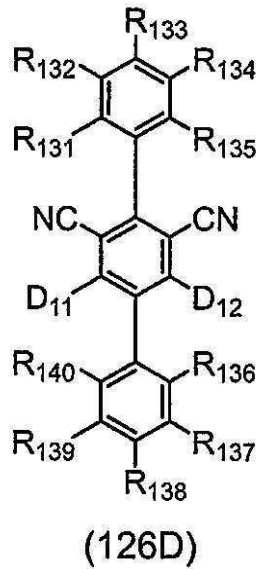
JP-P-2022-067595 2022년04월15일 일본(JP)

명세서

청구범위

청구항 1

하기 일반식(126D)로 표시되는 화합물.



(상기 일반식(126D)에 있어서,

CN은 시아노기이고,

D₁₁은 하기 일반식(132)으로 표시되는 기이며,

D₁₂는 하기 일반식(11)으로 표시되는 기이고,

R₁₃₁~R₁₄₀은, 각각 독립적으로

수소 원자,

무치환의 탄소수 1~50의 알킬기,

무치환의 탄소수 1~50의 할로알킬기,

무치환의 탄소수 2~50의 알케닐기,

무치환의 탄소수 2~50의 알킬닐기,

무치환의 고리 형성 탄소수 3~50의 시클로알킬기,

-Si(R₉₀₁)(R₉₀₂)(R₉₀₃)으로 표시되는 기,

-O-(R₉₀₄)로 표시되는 기,

-S-(R₉₀₅)로 표시되는 기,

-N(R₉₀₆)(R₉₀₇)로 표시되는 기,

무치환의 탄소수 7~50의 아랄킬기,

-C(=O)R₉₀₈로 표시되는 기,

-COOR₉₀₉로 표시되는 기,

시아노기,

니트로기,

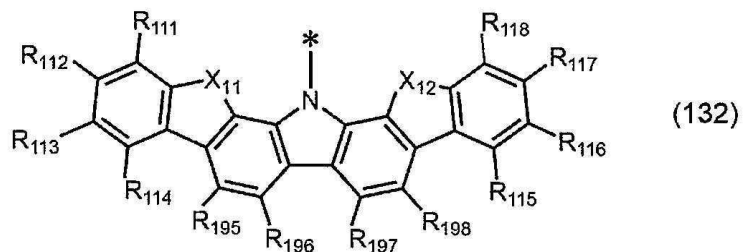
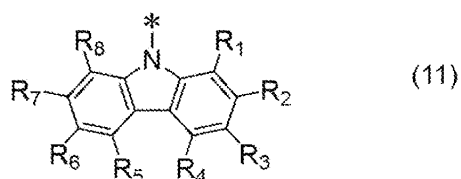
-P(=O)(R₉₃₁)(R₉₃₂)로 표시되는 기,

-Ge(R₉₃₃)(R₉₃₄)(R₉₃₅)로 표시되는 기,

-B(R₉₃₆)(R₉₃₇)로 표시되는 기,

무치환의 고리 형성 탄소수 6~50의 아릴기, 또는

무치환의 고리 형성 원자수 5~50의 복소환기이다.)



(상기 일반식(132)에서 R₁₁₁~R₁₁₈ 중의 인접하는 2개 이상으로 이루어진 조가 서로 결합하지 않고, R₁₉₅~R₁₉₈ 중의 인접하는 2개 이상으로 이루어진 조가 서로 결합하지 않으며,

상기 일반식(11)에서의 R₁~R₈, 및 상기 일반식(132)에서의 R₁₁₁~R₁₁₈ 및 R₁₉₅~R₁₉₈은, 각각 독립적으로

수소 원자,

무치환의 탄소수 1~50의 알킬기,

무치환의 탄소수 1~50의 할로알킬기,

무치환의 탄소수 2~50의 알케닐기,

무치환의 탄소수 2~50의 알키닐기,

무치환의 고리 형성 탄소수 3~50의 시클로알킬기,

-Si(R₉₀₁)(R₉₀₂)(R₉₀₃)으로 표시되는 기,

-O-(R₉₀₄)로 표시되는 기,

-S-(R₉₀₅)로 표시되는 기,

-N(R₉₀₆)(R₉₀₇)로 표시되는 기,

무치환의 탄소수 7~50의 아랄킬기,

-C(=O)R₉₀₈로 표시되는 기,

-COOR₉₀₉로 표시되는 기,

할로겐 원자,

시아노기,

니트로기,

-P(=O)(R₉₃₁)(R₉₃₂)로 표시되는 기,

-Ge(R₉₃₃)(R₉₃₄)(R₉₃₅)로 표시되는 기,

-B(R₉₃₆)(R₉₃₇)로 표시되는 기, 또는

무치환의 고리 형성 탄소수 6~50의 아릴기이며,

X₁₁ 및 X₁₂는 각각 독립적으로 황 원자 또는 산소 원자이고, *는 벤젠환과의 결합 위치를 나타낸다.)

(일반식 중, R₉₀₁, R₉₀₂, R₉₀₃, R₉₀₄, R₉₀₅, R₉₀₆, R₉₀₇, R₉₀₈, R₉₀₉, R₉₃₁, R₉₃₂, R₉₃₃, R₉₃₄, R₉₃₅, R₉₃₆ 및 R₉₃₇은, 각각 독립적으로

수소 원자,

무치환의 탄소수 1~50의 알킬기,

무치환의 고리 형성 탄소수 3~50의 시클로알킬기,

무치환의 고리 형성 탄소수 6~50의 아릴기, 또는

무치환의 고리 형성 원자수 5~50의 복소환기이며,

R₉₀₁이 복수 존재하는 경우, 복수의 R₉₀₁은 서로 동일하거나 또는 상이하고,

R₉₀₂가 복수 존재하는 경우, 복수의 R₉₀₂는 서로 동일하거나 또는 상이하고,

R₉₀₃이 복수 존재하는 경우, 복수의 R₉₀₃은 서로 동일하거나 또는 상이하고,

R₉₀₄가 복수 존재하는 경우, 복수의 R₉₀₄는 서로 동일하거나 또는 상이하고,

R₉₀₅가 복수 존재하는 경우, 복수의 R₉₀₅는 서로 동일하거나 또는 상이하고,

R₉₀₆이 복수 존재하는 경우, 복수의 R₉₀₆은 서로 동일하거나 또는 상이하고,

R₉₀₇이 복수 존재하는 경우, 복수의 R₉₀₇은 서로 동일하거나 또는 상이하고,

R₉₀₈이 복수 존재하는 경우, 복수의 R₉₀₈은 서로 동일하거나 또는 상이하고,

R₉₀₉가 복수 존재하는 경우, 복수의 R₉₀₉는 서로 동일하거나 또는 상이하고,

R₉₃₁이 복수 존재하는 경우, 복수의 R₉₃₁은 서로 동일하거나 또는 상이하고,

R₉₃₂가 복수 존재하는 경우, 복수의 R₉₃₂는 서로 동일하거나 또는 상이하고,

R₉₃₃이 복수 존재하는 경우, 복수의 R₉₃₃은 서로 동일하거나 또는 상이하고,

R₉₃₄가 복수 존재하는 경우, 복수의 R₉₃₄는 서로 동일하거나 또는 상이하고,

R₉₃₅가 복수 존재하는 경우, 복수의 R₉₃₅는 서로 동일하거나 또는 상이하고,

R₉₃₆이 복수 존재하는 경우, 복수의 R₉₃₆은 서로 동일하거나 또는 상이하고,

R₉₃₇이 복수 존재하는 경우, 복수의 R₉₃₇은 서로 동일하거나 또는 상이하다.)

청구항 2

삭제

청구항 3

제1항에 있어서,

상기 일반식(11)에서의 $R_1 \sim R_8$, 및 상기 일반식(132)에서의 $R_{111} \sim R_{118}$ 및 $R_{195} \sim R_{198}$ 은, 각각 독립적으로

수소 원자,

무치환의 탄소수 1~50의 알킬기,

무치환의 고리 형성 탄소수 3~50의 시클로알킬기, 또는

무치환의 고리 형성 탄소수 6~50의 아릴기인 화합물.

청구항 4

제1항에 있어서, 상기 일반식(132)에서의 $R_{111} \sim R_{118}$ 및 $R_{195} \sim R_{198}$ 은 각각 독립적으로 수소 원자, 또는 무치환의 고리 형성 탄소수 6~50의 아릴기이고,

상기 일반식(11)에서의 $R_1 \sim R_8$ 은 각각 독립적으로 수소 원자, 또는 무치환의 고리 형성 탄소수 6~50의 아릴기이며,

$R_{131} \sim R_{140}$ 은 각각 독립적으로 수소 원자, 무치환의 탄소수 1~50의 알킬기, 또는 무치환의 고리 형성 탄소수 6~50의 아릴기인 화합물.

청구항 5

제1항, 제3항 및 제4항 중 어느 한 항에 있어서, X_{11} 은 황 원자인 화합물.

청구항 6

제1항, 제3항 및 제4항 중 어느 한 항에 있어서, X_{11} 및 X_{12} 는 황 원자인 화합물.

청구항 7

제1항, 제3항 및 제4항 중 어느 한 항에 있어서, 중수소 원자를 포함하는 화합물.

청구항 8

제1항, 제3항 및 제4항 중 어느 한 항에 기재된 화합물을 함유하는, 유기 일렉트로루미네센스 소자용 재료.

청구항 9

양극과, 음극과, 유기층을 갖고,

상기 유기층은 제1항, 제3항 및 제4항 중 어느 한 항에 기재된 화합물을 화합물 M2로서 포함하는 것인 유기 일렉트로루미네센스 소자.

청구항 10

제9항에 있어서,

상기 유기층은 적어도 하나의 발광층을 갖고,

상기 발광층은 상기 화합물 M2를 포함하는 것인 유기 일렉트로루미네센스 소자.

청구항 11

제10항에 있어서,

상기 발광층은 상기 화합물 M2와 추가로 화합물 M1을 포함하고,

상기 화합물 M1은 형광 발광성의 화합물이며,

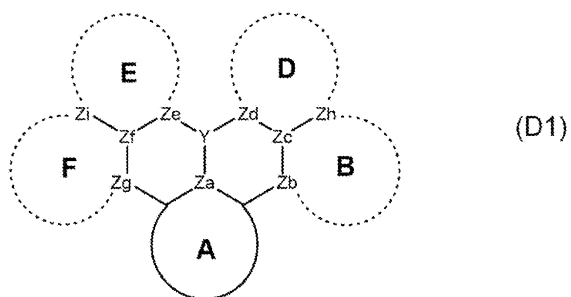
상기 화합물 M1의 최저 여기 일중항 에너지 $S_1(M1)$ 과, 상기 화합물 M2의 최저 여기 일중항 에너지 $S_1(M2)$ 이 하기 수식(수학식 1)의 관계를 충족시키는 것인 유기 일렉트로루미네센스 소자.

$$S_1(M2) > S_1(M1) \cdots (\text{수학식 1})$$

청구항 12

제11항에 있어서,

상기 화합물 M1은 하기 일반식(D1)으로 표시되는 화합물인 유기 일렉트로루미네센스 소자.



(상기 일반식(D1)에 있어서,

고리 A, 고리 B, 고리 D, 고리 E 및 고리 F는, 각각 독립적으로

무치환의 고리 형성 탄소수 6~30의 아릴환, 및

무치환의 고리 형성 원자수 5~30의 복소환으로 이루어진 군에서 선택되는 고리 구조이며,

고리 B 및 고리 D의 한쪽이 존재하거나, 또는 고리 B 및 고리 D의 양쪽이 존재하고,

고리 B 및 고리 D의 양쪽이 존재하는 경우, 고리 B 및 고리 D는 Zc과 Zh를 연결하는 결합을 공유하고,

고리 E 및 고리 F의 한쪽이 존재하거나, 또는 고리 E 및 고리 F의 양쪽이 존재하고,

고리 E 및 고리 F의 양쪽이 존재하는 경우, 고리 E 및 고리 F는 Zf와 Zi를 연결하는 결합을 공유하고,

Za는 질소 원자 또는 탄소 원자이며,

Zb는,

고리 B가 존재하는 경우, 질소 원자 또는 탄소 원자이며,

고리 B가 존재하지 않는 경우, 산소 원자, 황 원자, NRb, C(Rb₁)(Rb₂) 또는 Si(Rb₃)(Rb₄)이고,

Zc는 질소 원자 또는 탄소 원자이며,

Zd는,

고리 D가 존재하는 경우, 질소 원자 또는 탄소 원자이며,

고리 D가 존재하지 않는 경우, 산소 원자, 황 원자 또는 NRd이며,

Ze는,

고리 E가 존재하는 경우, 질소 원자 또는 탄소 원자이며,

고리 E가 존재하지 않는 경우, 산소 원자, 황 원자 또는 NRe이며,

Zf는 질소 원자 또는 탄소 원자이며,

Zg는,

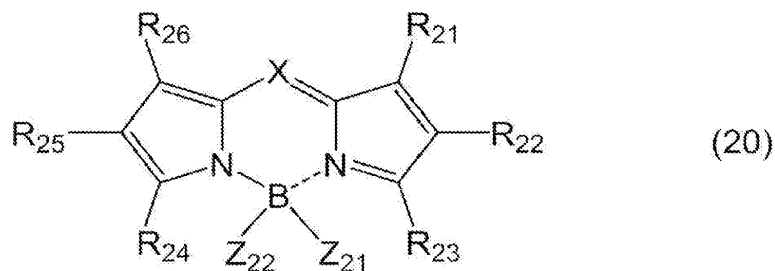
고리 F가 존재하는 경우, 질소 원자 또는 탄소 원자이며,

고리 F가 존재하지 않는 경우, 산소 원자, 황 원자, NRg, C(Rg₁)(Rg₂) 또는 Si(Rg₃)(Rg₄)이며,
 Zh는 질소 원자 또는 탄소 원자이며,
 Zi는 질소 원자 또는 탄소 원자이며,
 Y는 붕소 원자, 인 원자, SiRh, P=O 또는 P=S이며,
 Rb, Rb₁, Rb₂, Rb₃, Rb₄, Rd, Re, Rg, Rg₁, Rg₂, Rg₃, Rg₄ 및 Rh는 각각 독립적으로 수소 원자 또는 치환기이며,
 치환기로서의 Rb, Rb₁, Rb₂, Rb₃, Rb₄, Rd, Re, Rg, Rg₁, Rg₂, Rg₃, Rg₄ 및 Rh는, 각각 독립적으로
 무치환의 고리 형성 탄소수 6~30의 아릴기,
 무치환의 고리 형성 원자수 5~30의 복소환기,
 무치환의 탄소수 1~30의 알킬기,
 무치환의 고리 형성 탄소수 3~30의 시클로알킬기,
 -Si(R₉₁₁)(R₉₁₂)(R₉₁₃)으로 표시되는 기,
 -O-(R₉₁₄)로 표시되는 기,
 -S-(R₉₁₅)로 표시되는 기, 또는
 -N(R₉₁₆)(R₉₁₇)로 표시되는 기이고,
 다만, Y와 Za의 결합, Y와 Zd의 결합, 및 Y와 Ze의 결합은 모두 단일 결합이다.)
 (상기 화합물 M1에 있어서, R₉₁₁~R₉₁₇은, 각각 독립적으로
 수소 원자,
 무치환의 탄소수 1~50의 알킬기,
 무치환의 고리 형성 탄소수 3~50의 시클로알킬기,
 무치환의 고리 형성 탄소수 6~50의 아릴기, 또는
 무치환의 고리 형성 원자수 5~50의 복소환기이며,
 R₉₁₁이 복수 존재하는 경우, 복수의 R₉₁₁은 서로 동일하거나 또는 상이하고,
 R₉₁₂가 복수 존재하는 경우, 복수의 R₉₁₂는 서로 동일하거나 또는 상이하고,
 R₉₁₃이 복수 존재하는 경우, 복수의 R₉₁₃은 서로 동일하거나 또는 상이하고,
 R₉₁₄가 복수 존재하는 경우, 복수의 R₉₁₄는 서로 동일하거나 또는 상이하고,
 R₉₁₅가 복수 존재하는 경우, 복수의 R₉₁₅는 서로 동일하거나 또는 상이하고,
 R₉₁₆이 복수 존재하는 경우, 복수의 R₉₁₆은 서로 동일하거나 또는 상이하고,
 R₉₁₇이 복수 존재하는 경우, 복수의 R₉₁₇은 서로 동일하거나 또는 상이하다.)

청구항 13

제11항에 있어서,

상기 화합물 M1은 하기 일반식(20)으로 표시되는 화합물인 유기 일렉트로루미네센스 소자.



(상기 일반식(20)에 있어서,

X는 질소 원자, 또는 Y와 결합하는 탄소 원자이고,

Y는 수소 원자 또는 치환기이고,

R₂₁~R₂₆은, 각각 독립적으로 수소 원자 혹은 치환기이거나, 또는 R₂₁과 R₂₂의 조, R₂₂와 R₂₃의 조, R₂₄와 R₂₅의 조, 및 R₂₅와 R₂₆의 조의 어느 하나 이상의 조가 서로 결합하여 고리를 형성하고,

치환기로서의 Y, 및 R₂₁~R₂₆은, 각각 독립적으로

무치환의 탄소수 1~30의 알킬기,

무치환의 탄소수 1~30의 할로겐화 알킬기,

무치환의 고리 형성 탄소수 3~30의 시클로알킬기,

무치환의 고리 형성 탄소수 6~30의 아릴기,

무치환의 탄소수 1~30의 알콕시기,

무치환의 탄소수 1~30의 할로겐화 알콕시기,

무치환의 탄소수 1~30의 알킬티오기,

무치환의 고리 형성 탄소수 6~30의 아릴옥시기,

무치환의 고리 형성 탄소수 6~30의 아릴티오기,

무치환의 탄소수 2~30의 알케닐기,

무치환의 탄소수 7~30의 아랄킬기,

무치환의 고리 형성 원자수 5~30의 헤테로아릴기,

할로겐 원자,

카르복시기,

무치환의 에스테르기,

무치환의 카르바모일기,

무치환의 아미노기,

니트로기,

시아노기,

무치환의 실릴기, 및

무치환의 실록사닐기로 이루어진 군에서 선택되고,

Z₂₁ 및 Z₂₂는, 각각 독립적으로 치환기이거나, 또는 Z₂₁ 및 Z₂₂가 서로 결합하여 고리를 형성하고,

치환기로서의 Z_{21} 및 Z_{22} 는, 각각 독립적으로
 할로겐 원자,
 무치환의 탄소수 1~30의 알킬기,
 무치환의 탄소수 1~30의 할로겐화 알킬기,
 무치환의 고리 형성 탄소수 6~30의 아릴기,
 무치환의 탄소수 1~30의 알콕시기,
 무치환의 탄소수 1~30의 할로겐화 알콕시기, 및
 무치환의 고리 형성 탄소수 6~30의 아릴옥시기로 이루어진 군에서 선택된다.)

청구항 14

제10항에 있어서,
 상기 발광층은 상기 화합물 M2와 추가로 화합물 M3을 포함하고,
 상기 화합물 M2의 최저 여기 일중항 에너지 $S_1(M2)$ 과, 상기 화합물 M3의 최저 여기 일중항 에너지 $S_1(M3)$ 이, 하
 기 수식(수학식 2)의 관계를 충족시키는 것인 유기 일렉트로루미네센스 소자.

$$S_1(M3) > S_1(M2) \dots (\text{수학식 2})$$

청구항 15

제9항에 기재된 유기 일렉트로루미네센스 소자를 탑재한 전자 기기.

청구항 16

삭제

청구항 17

삭제

청구항 18

삭제

청구항 19

삭제

청구항 20

삭제

청구항 21

삭제

청구항 22

삭제

청구항 23

삭제

청구항 24

삭제

청구항 25

삭제

발명의 설명

기술 분야

[0001] 본 발명은, 화합물, 유기 일렉트로루미네센스 소자용 재료, 유기 일렉트로루미네센스 소자 및 전자 기기에 관한 것이다.

배경 기술

[0002] 유기 일렉트로루미네센스 소자(이하, 「유기 EL 소자」라고 하는 경우가 있음)에 전압을 인가하면, 양극으로부터 정공이 발광층에 주입되고, 또한 음극으로부터 전자가 발광층에 주입된다. 그리고, 발광층에 있어서, 주입된 정공과 전자가 재결합하여 여기자가 형성된다. 이때, 전자 스핀의 통계칙에 따라, 일중항 여기자가 25%의 비율로 생성되고, 삼중항 여기자가 75%의 비율로 생성된다.

[0003] 일중항 여기자로부터의 발광을 이용하는 형광형의 유기 EL 소자는, 휴대전화 및 텔레비전 등의 풀컬러 디스플레이에 응용되고 있지만, 내부 양자 효율 25%가 한계라고 여겨지고 있다. 그 때문에, 유기 EL 소자의 성능을 향상시키기 위한 검토가 이루어지고 있다.

[0004] 예컨대, 일중항 여기자에 더하여 삼중항 여기자를 이용하여 유기 EL 소자를 더욱 효율적으로 발광시키는 것이 기대되고 있다. 이러한 배경에서, 열활성화 지연 형광(이하, 단순히 「지연 형광」이라고 하는 경우가 있음)을 이용한 고효율의 형광형 유기 EL 소자가 제안되어 연구가 이루어지고 있다.

[0005] TADF(Thermally Activated Delayed Fluorescence, 열활성화 지연 형광) 기구(메커니즘)는, 일중항 준위와 삼중항 준위의 에너지 차(ΔST)가 작은 재료를 이용한 경우에, 삼중항 여기자로부터 일중항 여기자로의 역향간 교차가 열적으로 생기는 현상을 이용하는 메커니즘이다. 열활성화 지연 형광에 대해서는, 예컨대 『아다치 치하야 편, 「유기 반도체의 디바이스 물성」, 고단샤, 2012년 4월 1일 발행, 261-268 페이지』에 기재되어 있다.

[0006] 열활성화 지연 형광성(TADF성)을 나타내는 화합물(이하, TADF성 화합물이라고도 칭함)로는, 예컨대 분자 내에 도너 부위와 엑셉터 부위가 결합한 화합물이 알려져 있다.

[0007] 유기 EL 소자 및 유기 EL 소자에 이용하는 화합물에 관한 문헌으로서, 특허문헌 1, 특허문헌 2, 특허문헌 3 및 특허문헌 4를 들 수 있다.

선행기술문헌

특허문헌

[0008] (특허문헌 0001) 특허문헌 1 : 국제공개 제2014/208698호
(특허문헌 0002) 특허문헌 2 : 국제공개 제2019/195104호
(특허문헌 0003) 특허문헌 3 : 국제공개 제2019/190235호
(특허문헌 0004) 특허문헌 4 : 국제공개 제2021/066059호

발명의 내용

해결하려는 과제

[0009] 디스플레이 등의 전자 기기의 성능을 향상시키기 위해서, 유기 EL 소자의 성능을 한층 더 향상시키는 것이 요구되고 있다. 유기 EL 소자의 성능으로는, 예컨대 휘도, 발광 파장, 색도, 발광 효율, 구동 전압 및 수명을 들 수

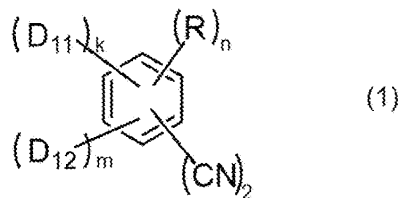
있다. 유기 EL 소자의 발광 효율을 향상시키기 위한 요소로는, 예컨대 포토루미네센스 양자 수율(PLQY: photoluminescence quantum yield)이 높은 화합물을 이용하는 것을 들 수 있다. 또한, 유기 EL 소자는 장수명도 요구되고 있다.

[0010] 본 발명은, PLQY가 높은 화합물을 제공하는 것을 목적으로 한다. 또한, 본 발명은, PLQY가 높은 화합물을 포함하는 유기 일렉트로루미네센스 소자용 재료 및 유기 일렉트로루미네센스 소자, 및 해당 유기 일렉트로루미네센스 소자를 탑재한 전자 기기를 제공하는 것도 목적으로 한다. 또한, 본 발명은, 유기 일렉트로루미네센스 소자의 고성능화, 특히 고효율화 및 장수명의 적어도 어느 하나를 실현할 수 있는 화합물을 제공하는 것도 목적으로 한다. 또한, 본 발명은, 고성능화, 특히 고효율화 및 장수명의 적어도 어느 하나를 실현할 수 있는 유기 일렉트로루미네센스 소자를 제공하는 것, 및 해당 유기 일렉트로루미네센스 소자를 탑재한 전자 기기를 제공하는 것도 목적으로 한다.

과제의 해결 수단

[0011] 본 발명의 일양태에 의하면, 하기 일반식(1)로 표시되는 화합물이 제공된다.

[0012] [화학식 1]



[0013]

[0014] (상기 일반식(1)에 있어서,

[0015] CN은 시아노기이며,

[0016] D₁₁ 및 D₁₂는, 각각 독립적으로 하기 일반식(11), 일반식(12) 또는 일반식(13)으로 표시되는 기이며, 단, 적어도 하나의 D₁₁은, 하기 일반식(12) 또는 일반식(13)으로 표시되는 기이며,

[0017] R은, 각각 독립적으로

[0018] 수소 원자,

[0019] 치환 혹은 무치환의 탄소수 1~50의 알킬기,

[0020] 치환 혹은 무치환의 탄소수 1~50의 할로알킬기,

[0021] 치환 혹은 무치환의 탄소수 2~50의 알케닐기,

[0022] 치환 혹은 무치환의 탄소수 2~50의 알키닐기,

[0023] 치환 혹은 무치환의 고리 형성 탄소수 3~50의 시클로알킬기,

[0024] -Si(R₉₀₁)(R₉₀₂)(R₉₀₃)으로 표시되는 기,

[0025] -O-(R₉₀₄)로 표시되는 기,

[0026] -S-(R₉₀₅)로 표시되는 기,

[0027] -N(R₉₀₆)(R₉₀₇)로 표시되는 기,

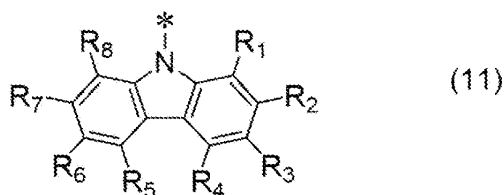
[0028] 치환 혹은 무치환의 탄소수 7~50의 아랄킬기,

[0029] -C(=O)R₉₀₈로 표시되는 기,

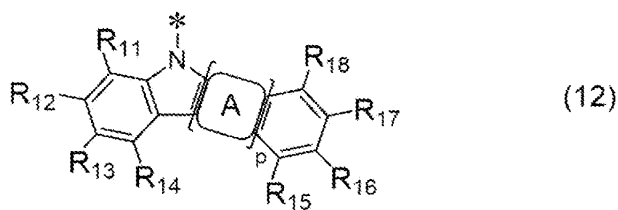
[0030] -COOR₉₀₉로 표시되는 기,

[0031] 시아노기,

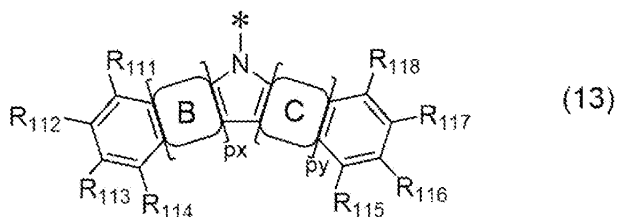
- [0032] 니트로기,
- [0033] $-P(=O)(R_{931})(R_{932})$ 로 표시되는 기,
- [0034] $-Ge(R_{933})(R_{934})(R_{935})$ 로 표시되는 기,
- [0035] $-B(R_{936})(R_{937})$ 로 표시되는 기,
- [0036] 치환 혹은 무치환의 고리 형성 탄소수 6~50의 아릴기, 또는
- [0037] 치환 혹은 무치환의 고리 형성 원자수 5~50의 복소환기이며,
- [0038] 단, 적어도 하나의 R은 치환기이며, 적어도 하나의 치환기로서의 R은,
- [0039] 상기 일반식(1) 중의 벤젠환과의 탄소-탄소 결합에 의해 결합하고,
- [0040] k는 1 또는 2이며,
- [0041] m은 0, 1 또는 2이며,
- [0042] n은 1, 2 또는 3이며,
- [0043] $k+m+n$ 은 4이며,
- [0044] k가 2일 때, 복수의 D_{11} 은 서로 동일하거나 또는 상이하고,
- [0045] m이 2일 때, 복수의 D_{12} 는 서로 동일하거나 또는 상이하고,
- [0046] n이 2 또는 3일 때, 복수의 R은 서로 동일하거나 또는 상이하다.)
- [0047] [화학식 2]



- [0048]
- [0049] [화학식 3]



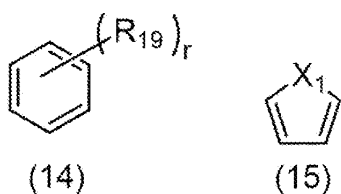
- [0050]
- [0051] [화학식 4]



- [0052]
- [0053] (상기 일반식(12)에서의 $R_{11} \sim R_{18}$ 중의 인접하는 2개 이상으로 이루어진 조의 1조 이상이,
- [0054] 서로 결합하여 치환 혹은 무치환의 단환을 형성하거나,

- [0055] 서로 결합하여 치환 혹은 무치환의 축합환을 형성하거나, 또는
- [0056] 서로 결합하지 않고,
- [0057] 상기 일반식(13)에서의 $R_{111} \sim R_{118}$ 중의 인접하는 2개 이상으로 이루어진 조의 1조 이상이,
- [0058] 서로 결합하여 치환 혹은 무치환의 단환을 형성하거나,
- [0059] 서로 결합하여 치환 혹은 무치환의 축합환을 형성하거나, 또는
- [0060] 서로 결합하지 않고,
- [0061] 상기 일반식(11)에서의 $R_1 \sim R_8$, 상기 일반식(12)에서의 치환 혹은 무치환의 단환을 형성하지 않고 또한 치환 혹은 무치환의 축합환을 형성하지 않는 $R_{11} \sim R_{18}$, 및 상기 일반식(13)에서의 치환 혹은 무치환의 단환을 형성하지 않고 또한 치환 혹은 무치환의 축합환을 형성하지 않는 $R_{111} \sim R_{118}$ 은, 각각 독립적으로
- [0062] 수소 원자,
- [0063] 치환 혹은 무치환의 탄소수 1~50의 알킬기,
- [0064] 치환 혹은 무치환의 탄소수 1~50의 할로알킬기,
- [0065] 치환 혹은 무치환의 탄소수 2~50의 알케닐기,
- [0066] 치환 혹은 무치환의 탄소수 2~50의 알키닐기,
- [0067] 치환 혹은 무치환의 고리 형성 탄소수 3~50의 시클로알킬기,
- [0068] $-\text{Si}(\text{R}_{901})(\text{R}_{902})(\text{R}_{903})$ 으로 표시되는 기,
- [0069] $-\text{O}(\text{R}_{904})$ 로 표시되는 기,
- [0070] $-\text{S}(\text{R}_{905})$ 로 표시되는 기,
- [0071] $-\text{N}(\text{R}_{906})(\text{R}_{907})$ 로 표시되는 기,
- [0072] 치환 혹은 무치환의 탄소수 7~50의 아랄킬기,
- [0073] $-\text{C}(=\text{O})\text{R}_{908}$ 로 표시되는 기,
- [0074] $-\text{COOR}_{909}$ 로 표시되는 기,
- [0075] 할로겐 원자,
- [0076] 시아노기,
- [0077] 니트로기,
- [0078] $-\text{P}(=\text{O})(\text{R}_{931})(\text{R}_{932})$ 로 표시되는 기,
- [0079] $-\text{Ge}(\text{R}_{933})(\text{R}_{934})(\text{R}_{935})$ 로 표시되는 기,
- [0080] $-\text{B}(\text{R}_{936})(\text{R}_{937})$ 로 표시되는 기,
- [0081] 치환 혹은 무치환의 고리 형성 탄소수 6~50의 아릴기, 또는
- [0082] 치환 혹은 무치환의 고리 형성 원자수 5~50의 복소환기이며,
- [0083] 상기 일반식(12) 및 상기 일반식(13)에 있어서,
- [0084] 고리 A, 고리 B 및 고리 C는, 각각 독립적으로 하기 일반식(14) 및 일반식(15)로 표시되는 고리 구조로 이루어진 군에서 선택되는 어느 하나의 고리 구조이며,
- [0085] 고리 A, 고리 B 및 고리 C는, 인접하는 고리와 임의의 위치에서 축합하고,

- [0086] p, px 및 py는, 각각 독립적으로 1, 2, 3 또는 4이며,
- [0087] p가 2, 3 또는 4인 경우, 복수의 고리 A는 서로 동일하거나 또는 상이하고,
- [0088] px가 2, 3 또는 4인 경우, 복수의 고리 B는 서로 동일하거나 또는 상이하고,
- [0089] py가 2, 3 또는 4인 경우, 복수의 고리 C는 서로 동일하거나 또는 상이하고,
- [0090] 단, 적어도 하나의 D_{11} 은, 상기 일반식(12) 또는 일반식(13)으로 표시되는 기이며, 이 D_{11} 로서의 상기 일반식(12) 중의 p가 4이며, 4개의 고리 A가 2개의 하기 일반식(14)로 표시되는 고리 구조 및 2개의 하기 일반식(15)로 표시되는 고리 구조를 포함하고, 이 D_{11} 로서의 상기 일반식(13) 중의 px 및 py가 2이며, 2개의 고리 B가 하나의 하기 일반식(14)로 표시되는 고리 구조 및 하나의 하기 일반식(15)로 표시되는 고리 구조를 포함하고, 2개의 고리 C가 하나의 하기 일반식(14)로 표시되는 고리 구조 및 하나의 하기 일반식(15)로 표시되는 고리 구조를 포함하고,
- [0091] 상기 일반식 (11)~(13) 중의 *은, 상기 일반식(1) 중의 벤젠환과의 결합 위치를 나타낸다.)
- [0092] [화학식 5]



- [0093]
- [0094] (상기 일반식(14)에 있어서,
- [0095] r은 0, 2 또는 4이며,
- [0096] 복수의 R_{19} 로 이루어진 조가,
- [0097] 서로 결합하여 치환 혹은 무치환의 단환을 형성하거나,
- [0098] 서로 결합하여 치환 혹은 무치환의 축합환을 형성하거나, 또는
- [0099] 서로 결합하지 않고,
- [0100] 상기 일반식(15)에 있어서, X_1 은 황 원자 또는 산소 원자이며,
- [0101] 치환 혹은 무치환의 단환을 형성하지 않고 또한 치환 혹은 무치환의 축합환을 형성하지 않는 R_{19} 는,
- [0102] 수소 원자,
- [0103] 치환 혹은 무치환의 탄소수 1~50의 알킬기,
- [0104] 치환 혹은 무치환의 탄소수 1~50의 할로알킬기,
- [0105] 치환 혹은 무치환의 탄소수 2~50의 알케닐기,
- [0106] 치환 혹은 무치환의 탄소수 2~50의 알키닐기,
- [0107] 치환 혹은 무치환의 고리 형성 탄소수 3~50의 시클로알킬기,
- [0108] $-\text{Si}(\text{R}_{901})(\text{R}_{902})(\text{R}_{903})$ 으로 표시되는 기,
- [0109] $-\text{O}-(\text{R}_{904})$ 로 표시되는 기,
- [0110] $-\text{S}-(\text{R}_{905})$ 로 표시되는 기,
- [0111] $-\text{N}(\text{R}_{906})(\text{R}_{907})$ 로 표시되는 기,
- [0112] 치환 혹은 무치환의 탄소수 7~50의 아랄킬기,

- [0113] $-C(=O)R_{908}$ 로 표시되는 기,
- [0114] $-COOR_{909}$ 로 표시되는 기,
- [0115] 할로겐 원자,
- [0116] 시아노기,
- [0117] 니트로기,
- [0118] $-P(=O)(R_{931})(R_{932})$ 로 표시되는 기,
- [0119] $-Ge(R_{933})(R_{934})(R_{935})$ 로 표시되는 기,
- [0120] $-B(R_{936})(R_{937})$ 로 표시되는 기,
- [0121] 치환 혹은 무치환의 고리 형성 탄소수 6~50의 아릴기, 또는
- [0122] 치환 혹은 무치환의 고리 형성 원자수 5~50의 복소환기이며,
- [0123] 복수의 R_{19} 는 서로 동일하거나 또는 상이하고,
- [0124] 복수의 X_1 은 서로 동일하거나 또는 상이하고,
- [0125] 단, 상기 일반식(13)으로 표시되는 기인 D_{11} 은, 하기 조건(Pv1), 조건(Pv2) 및 조건(Pv3)의 적어도 어느 하나를 충족시킨다.
- [0126] 조건(Pv1) : k 가 2일 때, 고리 B로서의 상기 일반식(15)로 표시되는 고리 구조 중의 X_1 및 고리 C로서의 상기 일반식(15)로 표시되는 고리 구조 중의 X_1 의 적어도 어느 하나가 산소 원자이다.
- [0127] 조건(Pv2) : k 가 2일 때, 2개의 D_{11} 은 서로 상이하다.
- [0128] 조건(Pv3) : n 이 3일 때, 고리 B로서의 상기 일반식(15)로 표시되는 고리 구조 중의 X_1 및 고리 C로서의 상기 일반식(15)로 표시되는 고리 구조 중의 X_1 은, 각각 독립적으로 황 원자 또는 산소 원자이다.)
- [0129] (일반식 중, R_{901} , R_{902} , R_{903} , R_{904} , R_{905} , R_{906} , R_{907} , R_{908} , R_{909} , R_{931} , R_{932} , R_{933} , R_{934} , R_{935} , R_{936} 및 R_{937} 은, 각각 독립적으로
- [0130] 수소 원자,
- [0131] 치환 혹은 무치환의 탄소수 1~50의 알킬기,
- [0132] 치환 혹은 무치환의 고리 형성 탄소수 3~50의 시클로알킬기,
- [0133] 치환 혹은 무치환의 고리 형성 탄소수 6~50의 아릴기, 또는
- [0134] 치환 혹은 무치환의 고리 형성 원자수 5~50의 복소환기이며,
- [0135] R_{901} 이 복수 존재하는 경우, 복수의 R_{901} 은 서로 동일하거나 또는 상이하고,
- [0136] R_{902} 가 복수 존재하는 경우, 복수의 R_{902} 는 서로 동일하거나 또는 상이하고,
- [0137] R_{903} 이 복수 존재하는 경우, 복수의 R_{903} 은 서로 동일하거나 또는 상이하고,
- [0138] R_{904} 가 복수 존재하는 경우, 복수의 R_{904} 는 서로 동일하거나 또는 상이하고,
- [0139] R_{905} 가 복수 존재하는 경우, 복수의 R_{905} 는 서로 동일하거나 또는 상이하고,
- [0140] R_{906} 이 복수 존재하는 경우, 복수의 R_{906} 은 서로 동일하거나 또는 상이하고,
- [0141] R_{907} 이 복수 존재하는 경우, 복수의 R_{907} 은 서로 동일하거나 또는 상이하고,

- [0142] R₉₀₈이 복수 존재하는 경우, 복수의 R₉₀₈은 서로 동일하거나 또는 상이하고,
- [0143] R₉₀₉가 복수 존재하는 경우, 복수의 R₉₀₉는 서로 동일하거나 또는 상이하고,
- [0144] R₉₃₁이 복수 존재하는 경우, 복수의 R₉₃₁은 서로 동일하거나 또는 상이하고,
- [0145] R₉₃₂가 복수 존재하는 경우, 복수의 R₉₃₂는 서로 동일하거나 또는 상이하고,
- [0146] R₉₃₃이 복수 존재하는 경우, 복수의 R₉₃₃은 서로 동일하거나 또는 상이하고,
- [0147] R₉₃₄가 복수 존재하는 경우, 복수의 R₉₃₄는 서로 동일하거나 또는 상이하고,
- [0148] R₉₃₅가 복수 존재하는 경우, 복수의 R₉₃₅는 서로 동일하거나 또는 상이하고,
- [0149] R₉₃₆이 복수 존재하는 경우, 복수의 R₉₃₆은 서로 동일하거나 또는 상이하고,
- [0150] R₉₃₇이 복수 존재하는 경우, 복수의 R₉₃₇은 서로 동일하거나 또는 상이하다.)
- [0151] 본 발명의 일양태에 의하면, 본 발명의 일양태에 따른 화합물을 함유하는 유기 일렉트로루미네센스 소자용 재료가 제공된다.
- [0152] 본 발명의 일양태에 의하면, 양극과, 음극과, 유기층을 갖고, 상기 유기층은 본 발명의 일양태에 따른 화합물을 화합물 M2로서 포함하는 유기 일렉트로루미네센스 소자가 제공된다.
- [0153] 본 발명의 일양태에 의하면, 본 발명의 일양태에 따른 유기 일렉트로루미네센스 소자를 탑재한 전자 기기가 제공된다.
- [0154] 본 발명의 일양태에 의하면, PLQY가 높은 화합물을 제공할 수 있다. 또한, 본 발명의 일양태에 의하면, PLQY가 높은 화합물을 포함하는 유기 일렉트로루미네센스 소자용 재료 또는 유기 일렉트로루미네센스 소자를 제공할 수 있다. 또한, 본 발명의 일양태에 의하면, 해당 유기 일렉트로루미네센스 소자를 탑재한 전자 기기를 제공할 수 있다. 또한, 본 발명의 일양태에 의하면, 유기 일렉트로루미네센스 소자의 고성능화, 특히 고효율화 및 장수명의 적어도 어느 하나를 실현할 수 있는 화합물을 제공할 수 있다. 또한, 본 발명의 일양태에 의하면, 고성능화, 특히 고효율화 및 장수명의 적어도 어느 하나를 실현할 수 있는 유기 일렉트로루미네센스 소자를 제공하는 것, 및 상기 유기 일렉트로루미네센스 소자를 탑재한 전자 기기를 제공할 수도 있다.

도면의 간단한 설명

- [0155] 도 1은 과도 PL을 측정하는 장치의 개략도이다.
- 도 2는 과도 PL의 감쇠 곡선의 일례를 도시하는 도면이다.
- 도 3은 본 발명의 제3 실시형태에 따른 유기 일렉트로루미네센스 소자의 일례의 개략 구성을 도시하는 도면이다.
- 도 4는 본 발명의 제3 실시형태에 따른 유기 일렉트로루미네센스 소자의 일례의 발광층에서의 화합물 M1 및 화합물 M2의 에너지 준위, 및 에너지 이동의 관계를 도시하는 도면이다.
- 도 5는 본 발명의 제4 실시형태에 따른 유기 일렉트로루미네센스 소자의 일례의 발광층에서의 화합물 M1, 화합물 M2 및 화합물 M3의 에너지 준위, 및 에너지 이동의 관계를 도시하는 도면이다.
- 도 6은 본 발명의 제5 실시형태에 따른 유기 일렉트로루미네센스 소자의 일례의 발광층에서의 화합물 M2 및 화합물 M3의 에너지 준위, 및 에너지 이동의 관계를 도시하는 도면이다.

발명을 실시하기 위한 구체적인 내용

- [0156] [정의]
- [0157] 본 명세서에 있어서, 수소 원자란, 중성자수가 상이한 동위체, 즉, 경수소(protium), 중수소(deuterium) 및 삼중수소(tritium)를 포함한다.
- [0158] 본 명세서에 있어서, 화학 구조식 중, 「R」 등의 기호나 중수소 원자를 나타내는 「D」가 명시되어 있지 않은

결합 가능 위치에는, 수소 원자, 즉, 경수소 원자, 중수소 원자 또는 삼중수소 원자가 결합되어 있는 것으로 한다.

[0159] 본 명세서에 있어서, 고리 형성 탄소수란, 원자가 환상으로 결합한 구조의 화합물(예컨대, 단환 화합물, 축합환 화합물, 가교 화합물, 탄소환 화합물 및 복소환 화합물)의 해당 고리 자체를 구성하는 원자 중의 탄소 원자의 수를 나타낸다. 해당 고리가 치환기에 의해 치환되는 경우, 치환기에 포함되는 탄소는 고리 형성 탄소수에는 포함하지 않는다. 이하에 기재된 「고리 형성 탄소수」에 대해서는, 별도 기재가 없는 한, 동일한 것으로 한다. 예컨대, 벤젠환은 고리 형성 탄소수가 6이고, 나프탈렌환은 고리 형성 탄소수가 10이며, 피리딘환은 고리 형성 탄소수 5이고, 푸란환은 고리 형성 탄소수 4이다. 또한, 예컨대 9,9-디페닐플루오레닐기의 고리 형성 탄소수는 13이고, 9,9'-스피로비플루오레닐기의 고리 형성 탄소수는 25이다.

[0160] 또한, 벤젠환에 치환기로서, 예컨대 알킬기가 치환되어 있는 경우, 해당 알킬기의 탄소수는 벤젠환의 고리 형성 탄소수에 포함시키지 않는다. 그 때문에, 알킬기가 치환되어 있는 벤젠환의 고리 형성 탄소수는 6이다. 또한, 나프탈렌환에 치환기로서, 예컨대 알킬기가 치환되어 있는 경우, 해당 알킬기의 탄소수는 나프탈렌환의 고리 형성 탄소수에 포함시키지 않는다. 그 때문에, 알킬기가 치환되어 있는 나프탈렌환의 고리 형성 탄소수는 10이다.

[0161] 본 명세서에 있어서, 고리 형성 원자수란, 원자가 환상으로 결합한 구조(예컨대, 단환, 축합환 및 환집합)의 화합물(예컨대, 단환 화합물, 축합환 화합물, 가교 화합물, 탄소환 화합물 및 복소환 화합물)의 해당 고리 자체를 구성하는 원자의 수를 나타낸다. 고리를 구성하지 않는 원자(예컨대, 고리를 구성하는 원자의 결합을 종단(終端)하는 수소 원자)나, 해당 고리가 치환기에 의해 치환되는 경우의 치환기에 포함되는 원자는 고리 형성 원자수에는 포함하지 않는다. 이하에 기재된 「고리 형성 원자수」에 대해서는, 별도 기재가 없는 한, 동일한 것으로 한다. 예컨대, 피리딘환의 고리 형성 원자수는 6이고, 퀴나졸린환의 고리 형성 원자수는 10이며, 푸란환의 고리 형성 원자수는 5이다. 예컨대, 피리딘환에 결합되어 있는 수소 원자 또는 치환기를 구성하는 원자의 수는, 피리딘환 형성 원자수의 수에 포함시키지 않는다. 그 때문에, 수소 원자 또는 치환기가 결합되어 있는 피리딘환의 고리 형성 원자수는 6이다. 또한, 예컨대 퀴나졸린환의 탄소 원자에 결합되어 있는 수소 원자 또는 치환기를 구성하는 원자에 대해서는, 퀴나졸린환의 고리 형성 원자수의 수에 포함시키지 않는다. 그 때문에, 수소 원자 또는 치환기가 결합되어 있는 퀴나졸린환의 고리 형성 원자수는 10이다.

[0162] 본 명세서에 있어서, 「치환 혹은 무치환의 탄소수 XX~YY의 ZZ기」라고 하는 표현에서의 「탄소수 XX~YY」는, ZZ기가 무치환인 경우의 탄소수를 나타내고, 치환되어 있는 경우의 치환기의 탄소수를 포함시키지 않는다. 여기서, 「YY」는 「XX」보다 크며, 「XX」는 1 이상의 정수를 의미하고, 「YY」는 2 이상의 정수를 의미한다.

[0163] 본 명세서에 있어서, 「치환 혹은 무치환의 원자수 XX~YY의 ZZ기」라고 하는 표현에서의 「원자수 XX~YY」는, ZZ기가 무치환인 경우의 원자수를 나타내며, 치환되어 있는 경우의 치환기의 원자수를 포함시키지 않는다. 여기서, 「YY」는 「XX」보다 크며, 「XX」는 1 이상의 정수를 의미하고, 「YY」는 2 이상의 정수를 의미한다.

[0164] 본 명세서에 있어서, 무치환의 ZZ기란 「치환 혹은 무치환의 ZZ기」가 「무치환의 ZZ기」인 경우를 나타내고, 치환의 ZZ기란 「치환 혹은 무치환의 ZZ기」가 「치환의 ZZ기」인 경우를 나타낸다.

[0165] 본 명세서에 있어서, 「치환 혹은 무치환의 ZZ기」라고 하는 경우의 「무치환」이란, ZZ기에서의 수소 원자가 치환기로 치환되어 있지 않다는 것을 의미한다. 「무치환의 ZZ기」에서의 수소 원자는 경수소 원자, 중수소 원자 또는 삼중수소 원자이다.

[0166] 또한, 본 명세서에 있어서, 「치환 혹은 무치환의 ZZ기」라고 하는 경우의 「치환」이란, ZZ기에서의 하나 이상의 수소 원자가 치환기로 치환되어 있다는 것을 의미한다. 「AA기로 치환된 BB기」라고 하는 경우의 「치환」도 마찬가지로, BB기에서의 하나 이상의 수소 원자가 AA기로 치환되어 있다는 것을 의미한다.

[0167] 「본 명세서에 기재된 치환기」

[0168] 이하, 본 명세서에 기재된 치환기에 대해서 설명한다.

[0169] 본 명세서에 기재된 「무치환의 아틸기」의 고리 형성 탄소수는, 본 명세서에 별도 기재가 없는 한, 6~50이고, 바람직하게는 6~30, 보다 바람직하게는 6~18이다.

[0170] 본 명세서에 기재된 「무치환의 복소환기」의 고리 형성 원자수는, 본 명세서에 별도 기재가 없는 한, 5~50이고, 바람직하게는 5~30, 보다 바람직하게는 5~18이다.

[0171] 본 명세서에 기재된 「무치환의 알킬기」의 탄소수는, 본 명세서에 별도 기재가 없는 한, 1~50이며, 바람직하

게는 1~20, 보다 바람직하게는 1~6이다.

[0172] 본 명세서에 기재된 「무치환의 알케닐기」의 탄소수는, 본 명세서에 별도 기재가 없는 한, 2~50이며, 바람직하게는 2~20, 보다 바람직하게는 2~6이다.

[0173] 본 명세서에 기재된 「무치환의 알킬닐기」의 탄소수는, 본 명세서에 별도 기재가 없는 한, 2~50이며, 바람직하게는 2~20, 보다 바람직하게는 2~6이다.

[0174] 본 명세서에 기재된 「무치환의 시클로알킬기」의 고리 형성 탄소수는, 본 명세서에 별도 기재가 없는 한, 3~50이며, 바람직하게는 3~20, 보다 바람직하게는 3~6이다.

[0175] 본 명세서에 기재된 「무치환의 아릴렌기」의 고리 형성 탄소수는, 본 명세서에 별도 기재가 없는 한, 6~50이며, 바람직하게는 6~30, 보다 바람직하게는 6~18이다.

[0176] 본 명세서에 기재된 「무치환의 2가의 복소환기」의 고리 형성 원자수는, 본 명세서에 별도 기재가 없는 한, 5~50이며, 바람직하게는 5~30, 보다 바람직하게는 5~18이다.

[0177] 본 명세서에 기재된 「무치환의 알킬렌기」의 탄소수는, 본 명세서에 별도 기재가 없는 한, 1~50이며, 바람직하게는 1~20, 보다 바람직하게는 1~6이다.

[0178] · 「치환 혹은 무치환의 아릴기」

[0179] 본 명세서에 기재된 「치환 혹은 무치환의 아릴기」의 구체예(구체예 군 G1)로는, 이하의 무치환의 아릴기(구체예 군 G1A), 및 치환의 아릴기(구체예 군 G1B) 등을 들 수 있다(여기서, 무치환의 아릴기란 「치환 혹은 무치환의 아릴기」가 「무치환의 아릴기」인 경우를 가리키고, 치환의 아릴기란 「치환 혹은 무치환의 아릴기」가 「치환의 아릴기」인 경우를 가리킨다.). 본 명세서에 있어서, 단순히 「아릴기」라고 하는 경우는 「무치환의 아릴기」와 「치환의 아릴기」 양쪽 모두를 포함한다.

[0180] 「치환의 아릴기」는 「무치환의 아릴기」의 하나 이상의 수소 원자가 치환기로 치환된 기를 의미한다. 「치환의 아릴기」로는, 예컨대 하기 구체예 군 G1A의 「무치환의 아릴기」의 하나 이상의 수소 원자가 치환기로 치환된 기, 및 하기 구체예 군 G1B의 치환의 아릴기의 예 등을 들 수 있다. 또한, 여기에 열거한 「무치환의 아릴기」의 예 및 「치환의 아릴기」의 예는 일례에 불과하며, 본 명세서에 기재된 「치환의 아릴기」에는, 하기 구체예 군 G1B의 「치환의 아릴기」에서의 아릴기 자체의 탄소 원자에 결합하는 수소 원자가 치환기로 더 치환된 기, 및 하기 구체예 군 G1B의 「치환의 아릴기」에서의 치환기의 수소 원자가 치환기로 더 치환된 기도 포함된다.

[0181] · 무치환의 아릴기(구체예 군 G1A):

[0182] 페닐기,

[0183] p-비페닐기,

[0184] m-비페닐기,

[0185] o-비페닐기,

[0186] p-터페닐-4-일기,

[0187] p-터페닐-3-일기,

[0188] p-터페닐-2-일기,

[0189] m-터페닐-4-일기,

[0190] m-터페닐-3-일기,

[0191] m-터페닐-2-일기,

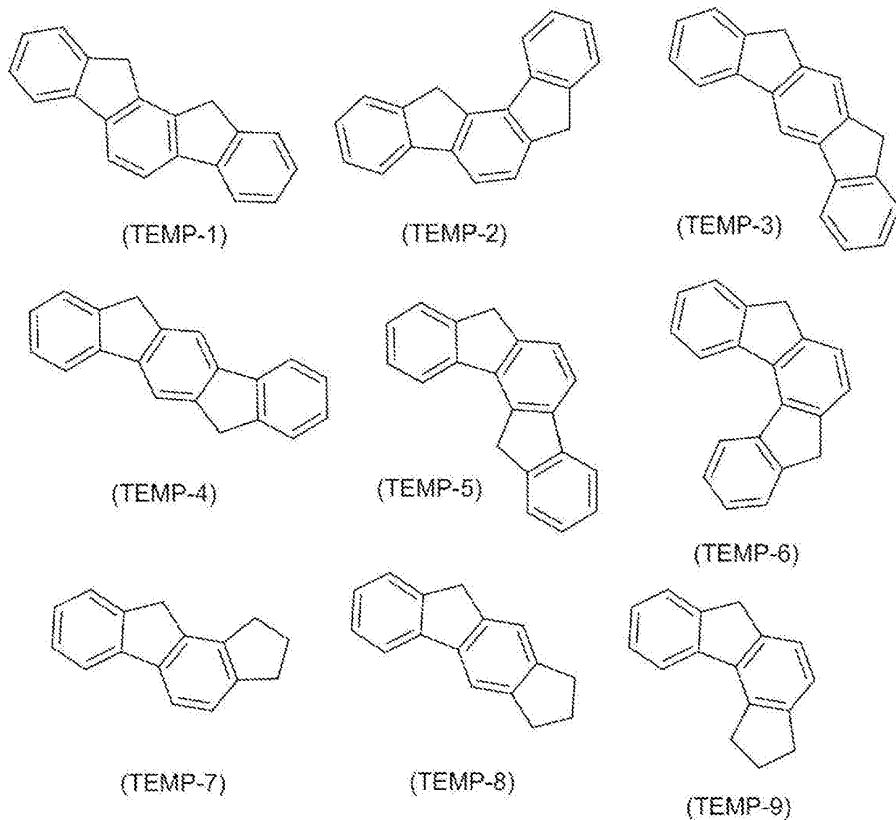
[0192] o-터페닐-4-일기,

[0193] o-터페닐-3-일기,

[0194] o-터페닐-2-일기,

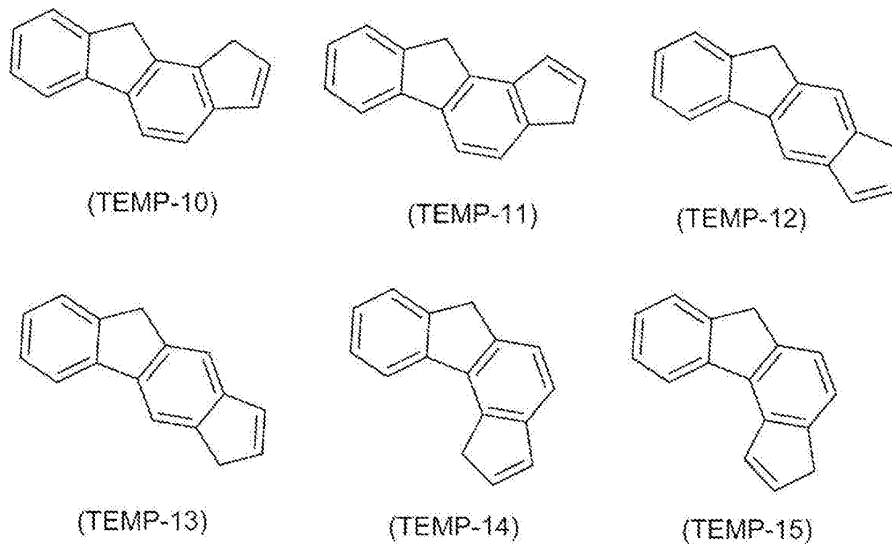
- [0195] 1-나프틸기,
- [0196] 2-나프틸기,
- [0197] 안트릴기,
- [0198] 벤조안트릴기,
- [0199] 페난트릴기,
- [0200] 벤조페난트릴기,
- [0201] 페날레닐기,
- [0202] 피레닐기,
- [0203] 크리스레닐기,
- [0204] 벤조크리스레닐기,
- [0205] 트리페닐레닐기,
- [0206] 벤조트리페닐레닐기,
- [0207] 테트라세닐기,
- [0208] 펜타세닐기,
- [0209] 플루오레닐기,
- [0210] 9,9'-스피로비플루오레닐기,
- [0211] 벤조플루오레닐기,
- [0212] 디벤조플루오레닐기,
- [0213] 플루오란테닐기,
- [0214] 벤조플루오란테닐기,
- [0215] 페릴레닐기, 및
- [0216] 하기 일반식 (TEMP-1)~(TEMP-15)로 표시되는 고리 구조에서 하나의 수소 원자를 제거함으로써 유도되는 1가의 아릴기.

[0217] [화학식 6]



[0218]

[0219] [화학식 7]



[0220]

[0221] · 치환의 아릴기(구체예 군 G1B):

[0222] o-톨릴기,

[0223] m-톨릴기,

[0224] p-톨릴기,

[0225] 파라-크실릴기,

[0226] 메타-크실릴기,

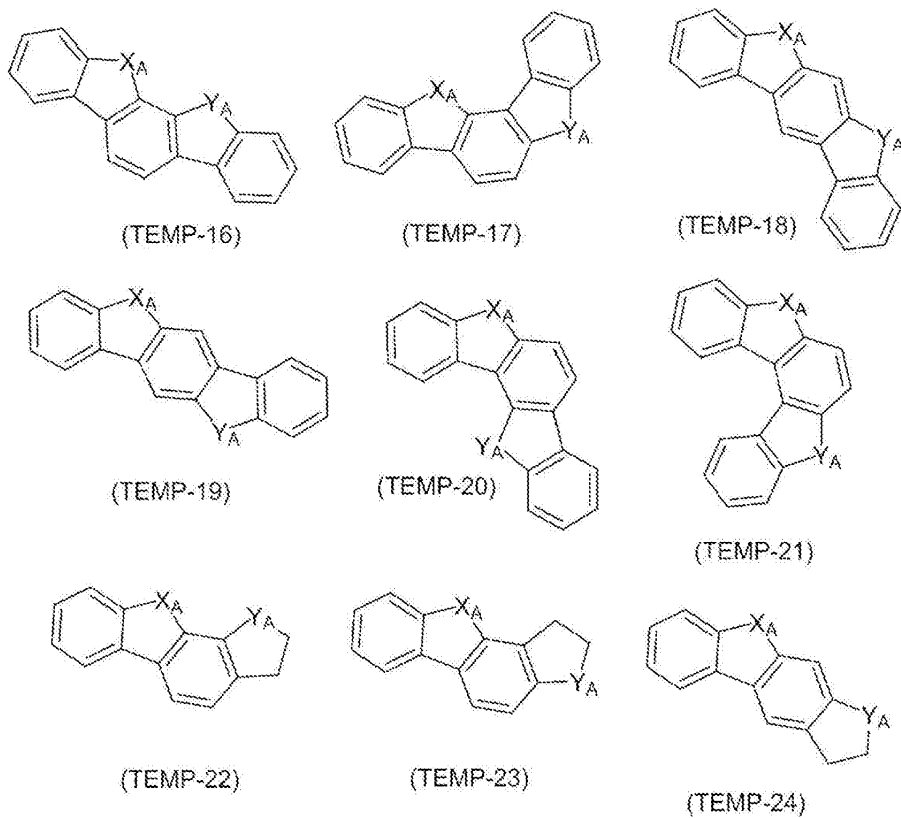
- [0227] 오르토-크실릴기,
- [0228] 파라-이소프로필페닐기,
- [0229] 메타-이소프로필페닐기,
- [0230] 오르토-이소프로필페닐기,
- [0231] 파라-t-부틸페닐기,
- [0232] 메타-t-부틸페닐기,
- [0233] 오르토-t-부틸페닐기,
- [0234] 3,4,5-트리메틸페닐기,
- [0235] 9,9-디메틸플루오레닐기,
- [0236] 9,9-디페닐플루오레닐기
- [0237] 9,9-비스(4-메틸페닐)플루오레닐기,
- [0238] 9,9-비스(4-이소프로필페닐)플루오레닐기,
- [0239] 9,9-비스(4-t-부틸페닐)플루오레닐기,
- [0240] 시아노페닐기,
- [0241] 트리페닐실릴페닐기,
- [0242] 트리메틸실릴페닐기,
- [0243] 페닐나프틸기,
- [0244] 나프틸페닐기, 및
- [0245] 상기 일반식 (TEMP-1)~(TEMP-15)로 표시되는 고리 구조로부터 유도되는 1가의 기 중 하나 이상의 수소 원자가 치환기로 치환된 기.
- [0246] · 「치환 혹은 무치환의 복소환기」
- [0247] 본 명세서에 기재된 「복소환기」는 고리 형성 원자에 헤테로 원자를 적어도 하나 포함하는 환상의 기이다. 헤테로 원자의 구체예로는 질소 원자, 산소 원자, 황 원자, 규소 원자, 인 원자 및 붕소 원자를 들 수 있다.
- [0248] 본 명세서에 기재된 「복소환기」는 단환의 기이거나 또는 축합환의 기이다.
- [0249] 본 명세서에 기재된 「복소환기」는 방향족 복소환기이거나 또는 비방향족 복소환기이다.
- [0250] 본 명세서에 기재된 「치환 혹은 무치환의 복소환기」의 구체예(구체예 군 G2)로는, 이하의 무치환의 복소환기(구체예 군 G2A), 및 치환의 복소환기(구체예 군 G2B) 등을 들 수 있다(여기서, 무치환의 복소환기란 「치환 혹은 무치환의 복소환기」가 「무치환의 복소환기」인 경우를 가리키고, 치환의 복소환기란 「치환 혹은 무치환의 복소환기」가 「치환의 복소환기」인 경우를 가리킨다.). 본 명세서에 있어서, 단순히 「복소환기」라고 하는 경우는 「무치환의 복소환기」와 「치환의 복소환기」 양쪽 모두를 포함한다.
- [0251] 「치환의 복소환기」는 「무치환의 복소환기」의 하나 이상의 수소 원자가 치환기로 치환된 기를 의미한다. 「치환의 복소환기」의 구체예는, 하기 구체예 군 G2A의 「무치환의 복소환기」의 수소 원자가 치환된 기, 및 하기 구체예 군 G2B의 치환의 복소환기의 예 등을 들 수 있다. 또한, 여기에 열거한 「무치환의 복소환기」의 예나 「치환의 복소환기」의 예는 일례에 불과하며, 본 명세서에 기재된 「치환의 복소환기」에는, 구체예 군 G2B의 「치환의 복소환기」에서의 복소환기 자체의 고리 형성 원자에 결합하는 수소 원자가 치환기로 더 치환된 기. 및 구체예 군 G2B의 「치환의 복소환기」에서의 치환기의 수소 원자가 치환기로 더 치환된 기도 포함된다.
- [0252] 구체예 군 G2A는, 예컨대 이하의 질소 원자를 포함하는 무치환의 복소환기(구체예 군 G2A1), 산소 원자를 포함하는 무치환의 복소환기(구체예 군 G2A2), 황 원자를 포함하는 무치환의 복소환기(구체예 군 G2A3), 및 하기 일반식 (TEMP-16)~(TEMP-33)으로 표시되는 고리 구조에서 하나의 수소 원자를 제거함으로써 유도되는 1가의 복소환기(구체예 군 G2A4)를 포함한다.

- [0253] 구체예 군 G2B는, 예컨대 이하의 질소 원자를 포함하는 치환의 복소환기(구체예 군 G2B1), 산소 원자를 포함하는 치환의 복소환기(구체예 군 G2B2), 황 원자를 포함하는 치환의 복소환기(구체예 군 G2B3), 및 하기 일반식 (TEMP-16)~(TEMP-33)으로 표시되는 고리 구조로부터 유도되는 1가의 복소환기 중 하나 이상의 수소 원자가 치환기로 치환된 기(구체예 군 G2B4)를 포함한다.
- [0254] · 질소 원자를 포함하는 무치환의 복소환기(구체예 군 G2A1):
- [0255] 피롤릴기,
- [0256] 이미다졸릴기,
- [0257] 피라졸릴기,
- [0258] 트리아졸릴기,
- [0259] 테트라졸릴기,
- [0260] 옥사졸릴기,
- [0261] 이소옥사졸릴기,
- [0262] 옥사디아졸릴기,
- [0263] 티아졸릴기,
- [0264] 이소티아졸릴기,
- [0265] 티아디아졸릴기,
- [0266] 피리딜기,
- [0267] 피리다지닐기,
- [0268] 피리미디닐기,
- [0269] 피라지닐기,
- [0270] 트리아지닐기,
- [0271] 인돌릴기,
- [0272] 이소인돌릴기,
- [0273] 인돌리지닐기,
- [0274] 퀴놀리지닐기,
- [0275] 퀴놀릴기,
- [0276] 이소퀴놀릴기,
- [0277] 신놀릴기,
- [0278] 프탈라지닐기,
- [0279] 퀴나졸리닐기,
- [0280] 퀴녹살리닐기,
- [0281] 벤조이미다졸릴기,
- [0282] 인다졸릴기,
- [0283] 페난트롤리닐기,
- [0284] 페난트리디닐기,
- [0285] 아크리디닐기,

- [0286] 페나지닐기,
- [0287] 카르바졸릴기,
- [0288] 벤조카르바졸릴기,
- [0289] 모르폴리노기,
- [0290] 페녹사지닐기,
- [0291] 페노티아지닐기,
- [0292] 아자카르바졸릴기, 및
- [0293] 디아자카르바졸릴기.
- [0294] · 산소 원자를 포함하는 무치환의 복소환기(구체예 군 G2A2):
- [0295] 푸릴기,
- [0296] 옥사졸릴기,
- [0297] 이소옥사졸릴기,
- [0298] 옥사디아졸릴기,
- [0299] 크산텐일기,
- [0300] 벤조푸라닐기,
- [0301] 이소벤조푸라닐기,
- [0302] 디벤조푸라닐기,
- [0303] 나프토벤조푸라닐기,
- [0304] 벤조옥사졸릴기,
- [0305] 벤조이소옥사졸릴기,
- [0306] 페녹사지닐기,
- [0307] 모르폴리노기,
- [0308] 디나프토프라닐기,
- [0309] 아자디벤조푸라닐기,
- [0310] 디아자디벤조푸라닐기,
- [0311] 아자나프토크벤조푸라닐기, 및
- [0312] 디아자나프토크벤조푸라닐기.
- [0313] · 황 원자를 포함하는 무치환의 복소환기(구체예 군 G2A3):
- [0314] 티에닐기,
- [0315] 티아졸릴기,
- [0316] 이소티아졸릴기,
- [0317] 티아디아졸릴기,
- [0318] 벤조티오펜닐기(벤조티에닐기),
- [0319] 이소벤조티오펜닐기(이소벤조티에닐기),
- [0320] 디벤조티오펜닐기(디벤조티에닐기),
- [0321] 나프토크벤조티오펜닐기(나프토크벤조티에닐기),

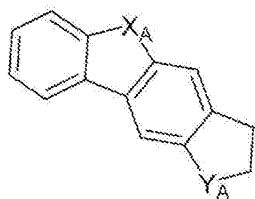
- [0322] 벤조티아졸릴기,
 [0323] 벤조이소티아졸릴기,
 [0324] 페노티아지닐기,
 [0325] 디나프토티오페닐기(디나프토티에닐기),
 [0326] 아자디벤조티오페닐기(아자디벤조티에닐기),
 [0327] 디아자디벤조티오페닐기(디아자디벤조티에닐기),
 [0328] 아자나프토벤조티오페닐기(아자나프토벤조티에닐기), 및
 [0329] 디아자나프토벤조티오페닐기(디아자나프토벤조티에닐기).
 [0330] · 하기 일반식 (TEMP-16)~(TEMP-33)으로 표시되는 고리 구조에서 하나의 수소 원자를 제거함으로써 유도되는 1
 가의 복소환기(구체에 군 G2A4):

[0331] [화학식 8]

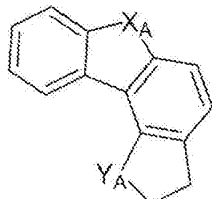


[0332]

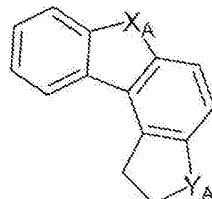
[0333] [화학식 9]



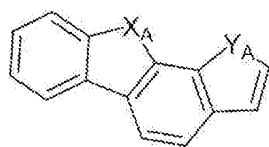
(TEMP-25)



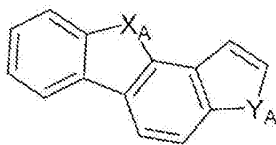
(TEMP-26)



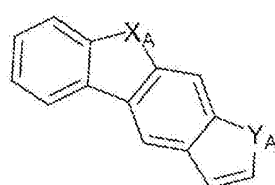
(TEMP-27)



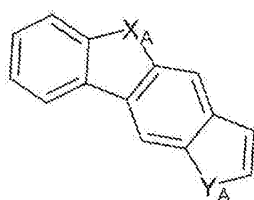
(TEMP-28)



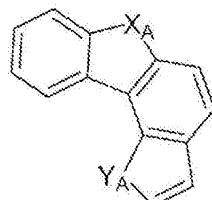
(TEMP-29)



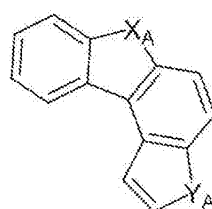
(TEMP-30)



(TEMP-31)



(TEMP-32)



(TEMP-33)

[0334]

[0335] 상기 일반식 (TEMP-16)~(TEMP-33)에 있어서, X_A 및 Y_A 는, 각각 독립적으로 산소 원자, 황 원자, NH 또는 CH_2 이다. 단, X_A 및 Y_A 중 적어도 하나는 산소 원자, 황 원자 또는 NH이다.

[0336] 상기 일반식 (TEMP-16)~(TEMP-33)에 있어서, X_A 및 Y_A 중 적어도 어느 하나가 NH 또는 CH_2 인 경우, 상기 일반식 (TEMP-16)~(TEMP-33)으로 표시되는 고리 구조로부터 유도되는 1가의 복소환기에는, 이들 NH 또는 CH_2 로부터 하나의 수소 원자를 제거하여 얻어지는 1가의 기가 포함된다.

[0337] · 질소 원자를 포함하는 치환의 복소환기(구체예 군 G2B1):

[0338] (9-페닐)카르바졸릴기,

[0339] (9-비페닐릴)카르바졸릴기,

[0340] (9-페닐)페닐카르바졸릴기,

[0341] (9-나프틸)카르바졸릴기,

[0342] 디페닐카르바졸-9-일기,

[0343] 페닐카르바졸-9-일기,

[0344] 메틸벤조이미다졸릴기,

[0345] 에틸벤조이미다졸릴기,

[0346] 페닐트리아지닐기,

[0347] 비페닐릴트리아지닐기,

[0348] 디페닐트리아지닐기,

[0349] 페닐퀴나졸리닐기, 및

- [0350] 비페닐릴퀴나졸리닐기.
- [0351] · 산소 원자를 포함하는 치환의 복소환기(구체에 군 G2B2):
- [0352] 페닐디벤조푸라닐기,
- [0353] 메틸디벤조푸라닐기,
- [0354] t-부틸디벤조푸라닐기, 및
- [0355] 스피로[9H-크산텐-9,9'-(9H)플루오렌]의 1가의 잔기.
- [0356] · 황 원자를 포함하는 치환의 복소환기(구체에 군 G2B3):
- [0357] 페닐디벤조티오페닐기,
- [0358] 메틸디벤조티오페닐기,
- [0359] t-부틸디벤조티오페닐기, 및
- [0360] 스피로[9H-티오크산텐-9,9'-(9H)플루오렌]의 1가의 잔기.
- [0361] · 상기 일반식 (TEMP-16)~(TEMP-33)으로 표시되는 고리 구조로부터 유도되는 1가의 복소환기 중 하나 이상의 수소 원자가 치환기로 치환된 기(구체에 군 G2B4):
- [0362] 상기 「1가의 복소환기의 하나 이상의 수소 원자」란, 해당 1가의 복소환기의 고리 형성 탄소 원자에 결합하고 있는 수소 원자, X_A 및 Y_A 의 적어도 어느 하나가 NH인 경우의 질소 원자에 결합하고 있는 수소 원자, 및 X_A 및 Y_A 의 한쪽이 CH_2 인 경우의 메틸렌기의 수소 원자에서 선택되는 하나 이상의 수소 원자를 의미한다.
- [0363] · 「치환 혹은 무치환의 알킬기」
- [0364] 본 명세서에 기재된 「치환 혹은 무치환의 알킬기」의 구체예(구체에 군 G3)로는, 이하의 무치환의 알킬기(구체에 군 G3A) 및 치환의 알킬기(구체에 군 G3B)를 들 수 있다(여기서, 무치환의 알킬기란 「치환 혹은 무치환의 알킬기」가 「무치환의 알킬기」인 경우를 가리키고, 치환의 알킬기란 「치환 혹은 무치환의 알킬기」가 「치환의 알킬기」인 경우를 가리킨다.). 이하, 단순히 「알킬기」라고 하는 경우는 「무치환의 알킬기」와 「치환의 알킬기」 양쪽 모두를 포함한다.
- [0365] 「치환의 알킬기」는 「무치환의 알킬기」에서의 하나 이상의 수소 원자가 치환기로 치환된 기를 의미한다. 「치환의 알킬기」의 구체예로는, 하기의 「무치환의 알킬기」(구체에 군 G3A)에서의 하나 이상의 수소 원자가 치환기로 치환된 기, 및 치환의 알킬기(구체에 군 G3B)의 예 등을 들 수 있다. 본 명세서에 있어서, 「무치환의 알킬기」에서의 알킬기는 쇄상 알킬기를 의미한다. 그 때문에, 「무치환의 알킬기」는 직쇄인 「무치환의 알킬기」 및 분기상인 「무치환의 알킬기」가 포함된다. 또한, 여기에 열거한 「무치환의 알킬기」의 예나 「치환의 알킬기」의 예는 일례에 불과하며, 본 명세서에 기재된 「치환의 알킬기」에는, 구체예 군 G3B의 「치환의 알킬기」에서의 알킬기 자체의 수소 원자가 치환기로 더 치환된 기, 및 구체예 군 G3B의 「치환의 알킬기」에서의 치환기의 수소 원자가 치환기로 더 치환된 기도 포함된다.
- [0366] · 무치환의 알킬기(구체에 군 G3A):
- [0367] 메틸기,
- [0368] 에틸기,
- [0369] n-프로필기,
- [0370] 이소프로필기,
- [0371] n-부틸기,
- [0372] 이소부틸기,
- [0373] s-부틸기, 및
- [0374] t-부틸기.

- [0375] · 치환의 알킬기(구체예 군 G3B):
- [0376] 헵타플루오로프로필기(이성체를 포함함),
- [0377] 펜타플루오로에틸기,
- [0378] 2,2,2-트리플루오로에틸기, 및
- [0379] 트리플루오로메틸기.
- [0380] · 「치환 혹은 무치환의 알케닐기」
- [0381] 본 명세서에 기재된 「치환 혹은 무치환의 알케닐기」의 구체예(구체예 군 G4)로는, 이하의 무치환의 알케닐기(구체예 군 G4A) 및 치환의 알케닐기(구체예 군 G4B) 등을 들 수 있다(여기서, 무치환의 알케닐기란 「치환 혹은 무치환의 알케닐기」가 「무치환의 알케닐기」인 경우를 가리키고, 「치환의 알케닐기」란 「치환 혹은 무치환의 알케닐기」가 「치환의 알케닐기」인 경우를 가리킨다.). 본 명세서에 있어서, 단순히 「알케닐기」라고 하는 경우는, 「무치환의 알케닐기」와 「치환의 알케닐기」 양쪽 모두를 포함한다.
- [0382] 「치환의 알케닐기」는 「무치환의 알케닐기」에서의 하나 이상의 수소 원자가 치환기로 치환된 기를 의미한다. 「치환의 알케닐기」의 구체예로는, 하기의 「무치환의 알케닐기」(구체예 군 G4A)가 치환기를 갖는 기 및 치환의 알케닐기(구체예 군 G4B)의 예 등을 들 수 있다. 또한, 여기에 열거한 「무치환의 알케닐기」의 예나 「치환의 알케닐기」의 예는 일례에 불과하며, 본 명세서에 기재된 「치환의 알케닐기」에는, 구체예 군 G4B의 「치환의 알케닐기」에서의 알케닐기 자체의 수소 원자가 치환기로 더 치환된 기, 및 구체예 군 G4B의 「치환의 알케닐기」에서의 치환기의 수소 원자가 치환기로 더 치환된 기도 포함된다.
- [0383] · 무치환의 알케닐기(구체예 군 G4A):
- [0384] 비닐기,
- [0385] 알릴기,
- [0386] 1-부테닐기,
- [0387] 2-부테닐기, 및
- [0388] 3-부테닐기.
- [0389] · 치환의 알케닐기(구체예 군 G4B):
- [0390] 1,3-부탄디에닐기,
- [0391] 1-메틸비닐기,
- [0392] 1-메틸알릴기,
- [0393] 1,1-디메틸알릴기,
- [0394] 2-메틸알릴기, 및
- [0395] 1,2-디메틸알릴기.
- [0396] · 「치환 혹은 무치환의 알키닐기」
- [0397] 본 명세서에 기재된 「치환 혹은 무치환의 알키닐기」의 구체예(구체예 군 G5)로는, 이하의 무치환의 알키닐기(구체예 군 G5A) 등을 들 수 있다(여기서, 무치환의 알키닐기란 「치환 혹은 무치환의 알키닐기」가 「무치환의 알키닐기」인 경우를 가리킨다.). 이하, 단순히 「알키닐기」라고 하는 경우는, 「무치환의 알키닐기」와 「치환의 알키닐기」 양쪽 모두를 포함한다.
- [0398] 「치환의 알키닐기」는 「무치환의 알키닐기」에서의 하나 이상의 수소 원자가 치환기로 치환된 기를 의미한다. 「치환의 알키닐기」의 구체예로는, 하기의 「무치환의 알키닐기」(구체예 군 G5A)에서의 하나 이상의 수소 원자가 치환기로 치환된 기 등을 들 수 있다.
- [0399] · 무치환의 알키닐기(구체예 군 G5A):
- [0400] 에티닐기

- [0401] · 「치환 혹은 무치환의 시클로알킬기」
- [0402] 본 명세서에 기재된 「치환 혹은 무치환의 시클로알킬기」의 구체예(구체예 군 G6)로는, 이하의 무치환의 시클로알킬기(구체예 군 G6A) 및 치환의 시클로알킬기(구체예 군 G6B) 등을 들 수 있다(여기서, 무치환의 시클로알킬기란 「치환 혹은 무치환의 시클로알킬기」가 「무치환의 시클로알킬기」인 경우를 가리키고, 치환의 시클로알킬기란 「치환 혹은 무치환의 시클로알킬기」가 「치환의 시클로알킬기」인 경우를 가리킨다.). 본 명세서에 있어서, 단순히 「시클로알킬기」라고 하는 경우는, 「무치환의 시클로알킬기」와 「치환의 시클로알킬기」 양쪽 모두를 포함한다.
- [0403] 「치환의 시클로알킬기」는 「무치환의 시클로알킬기」에서의 하나 이상의 수소 원자가 치환기로 치환된 기를 의미한다. 「치환의 시클로알킬기」의 구체예로는, 하기의 「무치환의 시클로알킬기」(구체예 군 G6A)에서의 하나 이상의 수소 원자가 치환기로 치환된 기, 및 치환의 시클로알킬기(구체예 군 G6B)의 예 등을 들 수 있다. 또한, 여기에 열거한 「무치환의 시클로알킬기」의 예나 「치환의 시클로알킬기」의 예는 일례에 불과하며, 본 명세서에 기재된 「치환의 시클로알킬기」에는, 구체예 군 G6B의 「치환의 시클로알킬기」에서의 시클로알킬기 자체의 탄소 원자에 결합하는 하나 이상의 수소 원자가 치환기로 치환된 기, 및 구체예 군 G6B의 「치환의 시클로알킬기」에서의 치환기의 수소 원자가 치환기로 더 치환된 기도 포함된다.
- [0404] · 무치환의 시클로알킬기(구체예 군 G6A):
- [0405] 시클로프로필기,
- [0406] 시클로부틸기,
- [0407] 시클로펜틸기,
- [0408] 시클로헥실기,
- [0409] 1-아다만틸기,
- [0410] 2-아다만틸기,
- [0411] 1-노르보르닐기, 및
- [0412] 2-노르보르닐기.
- [0413] · 치환의 시클로알킬기(구체예 군 G6B):
- [0414] 4-메틸시클로헥실기.
- [0415] · 「 $-\text{Si}(\text{R}_{901})(\text{R}_{902})(\text{R}_{903})$ 」으로 표시되는 기」
- [0416] 본 명세서에 기재된 $-\text{Si}(\text{R}_{901})(\text{R}_{902})(\text{R}_{903})$ 으로 표시되는 기의 구체예(구체예 군 G7)로는,
- [0417] $-\text{Si}(\text{G1})(\text{G1})(\text{G1})$,
- [0418] $-\text{Si}(\text{G1})(\text{G2})(\text{G2})$,
- [0419] $-\text{Si}(\text{G1})(\text{G1})(\text{G2})$,
- [0420] $-\text{Si}(\text{G2})(\text{G2})(\text{G2})$,
- [0421] $-\text{Si}(\text{G3})(\text{G3})(\text{G3})$, 및
- [0422] $-\text{Si}(\text{G6})(\text{G6})(\text{G6})$
- [0423] 을 들 수 있다. 여기서,
- [0424] G1은 구체예 군 G1에 기재된 「치환 혹은 무치환의 아틸기」이다.
- [0425] G2는 구체예 군 G2에 기재된 「치환 혹은 무치환의 복소환기」이다.
- [0426] G3은 구체예 군 G3에 기재된 「치환 혹은 무치환의 알킬기」이다.
- [0427] G6은 구체예 군 G6에 기재된 「치환 혹은 무치환의 시클로알킬기」이다.

- [0428] -Si(G1)(G1)(G1)에서의 복수의 G1은 서로 동일하거나 또는 상이하다.
- [0429] -Si(G1)(G2)(G2)에서의 복수의 G2는 서로 동일하거나 또는 상이하다.
- [0430] -Si(G1)(G1)(G2)에서의 복수의 G1은 서로 동일하거나 또는 상이하다.
- [0431] -Si(G2)(G2)(G2)에서의 복수의 G2는 서로 동일하거나 또는 상이하다.
- [0432] -Si(G3)(G3)(G3)에서의 복수의 G3은 서로 동일하거나 또는 상이하다.
- [0433] -Si(G6)(G6)(G6)에서의 복수의 G6은 서로 동일하거나 또는 상이하다.
- [0434] · 「-O-(R₉₀₄)로 표시되는 기」
- [0435] 본 명세서에 기재된 -O-(R₉₀₄)로 표시되는 기의 구체예(구체예 군 G8)로는,
- [0436] -O(G1),
- [0437] -O(G2),
- [0438] -O(G3), 및
- [0439] -O(G6)
- [0440] 을 들 수 있다. 여기서,
- [0441] G1은 구체예 군 G1에 기재된 「치환 혹은 무치환의 아틸기」이다.
- [0442] G2는 구체예 군 G2에 기재된 「치환 혹은 무치환의 복소환기」이다.
- [0443] G3은 구체예 군 G3에 기재된 「치환 혹은 무치환의 알킬기」이다.
- [0444] G6은 구체예 군 G6에 기재된 「치환 혹은 무치환의 시클로알킬기」이다.
- [0445] · 「-S-(R₉₀₅)로 표시되는 기」
- [0446] 본 명세서에 기재된 -S-(R₉₀₅)로 표시되는 기의 구체예(구체예 군 G9)로는,
- [0447] -S(G1),
- [0448] -S(G2),
- [0449] -S(G3), 및
- [0450] -S(G6)
- [0451] 을 들 수 있다. 여기서,
- [0452] G1은 구체예 군 G1에 기재된 「치환 혹은 무치환의 아틸기」이다.
- [0453] G2는 구체예 군 G2에 기재된 「치환 혹은 무치환의 복소환기」이다.
- [0454] G3은 구체예 군 G3에 기재된 「치환 혹은 무치환의 알킬기」이다.
- [0455] G6은 구체예 군 G6에 기재된 「치환 혹은 무치환의 시클로알킬기」이다.
- [0456] · 「-N(R₉₀₆)(R₉₀₇)로 표시되는 기」
- [0457] 본 명세서에 기재된 -N(R₉₀₆)(R₉₀₇)로 표시되는 기의 구체예(구체예 군 G10)로는,
- [0458] -N(G1)(G1),
- [0459] -N(G2)(G2),
- [0460] -N(G1)(G2),
- [0461] -N(G3)(G3), 및

- [0462] -N(G6)(G6)
- [0463] 을 들 수 있다. 여기서,
- [0464] G1은 구체예 군 G1에 기재된 「치환 혹은 무치환의 아틸기」이다.
- [0465] G2는 구체예 군 G2에 기재된 「치환 혹은 무치환의 복소환기」이다.
- [0466] G3은 구체예 군 G3에 기재된 「치환 혹은 무치환의 알킬기」이다.
- [0467] G6은 구체예 군 G6에 기재된 「치환 혹은 무치환의 시클로알킬기」이다.
- [0468] -N(G1)(G1)에서의 복수의 G1은 서로 동일하거나 또는 상이하다.
- [0469] -N(G2)(G2)에서의 복수의 G2는 서로 동일하거나 또는 상이하다.
- [0470] -N(G3)(G3)에서의 복수의 G3은 서로 동일하거나 또는 상이하다.
- [0471] -N(G6)(G6)에서의 복수의 G6은 서로 동일하거나 또는 상이하다.
- [0472] · 「할로젠 원자」
- [0473] 본 명세서에 기재된 「할로젠 원자」의 구체예(구체예 군 G11)로는 불소 원자, 염소 원자, 브롬 원자 및 요오드 원자 등을 들 수 있다.
- [0474] · 「치환 혹은 무치환의 플루오로알킬기」
- [0475] 본 명세서에 기재된 「치환 혹은 무치환의 플루오로알킬기」는, 「치환 혹은 무치환의 알킬기」에서의 알킬기를 구성하는 탄소 원자에 결합되어 있는 적어도 하나의 수소 원자가 불소 원자로 치환된 기를 의미하며, 「치환 혹은 무치환의 알킬기」에서의 알킬기를 구성하는 탄소 원자에 결합되어 있는 모든 수소 원자가 불소 원자로 치환된 기(퍼플루오로기)도 포함한다. 「무치환의 플루오로알킬기」의 탄소수는, 본 명세서에 별도 기재가 없는 한, 1~50이며, 바람직하게는 1~30이고, 보다 바람직하게는 1~18이다. 「치환의 플루오로알킬기」는 「플루오로알킬기」의 하나 이상의 수소 원자가 치환기로 치환된 기를 의미한다. 또한, 본 명세서에 기재된 「치환의 플루오로알킬기」에는, 「치환의 플루오로알킬기」에서의 알킬쇄의 탄소 원자에 결합하는 하나 이상의 수소 원자가 치환기로 더 치환된 기, 및 「치환의 플루오로알킬기」에서의 치환기의 하나 이상의 수소 원자가 치환기로 더 치환된 기도 포함된다. 「무치환의 플루오로알킬기」의 구체예로는, 상기 「알킬기」(구체예 군 G3)에서의 하나 이상의 수소 원자가 불소 원자로 치환된 기의 예 등을 들 수 있다.
- [0476] · 「치환 혹은 무치환의 할로알킬기」
- [0477] 본 명세서에 기재된 「치환 혹은 무치환의 할로알킬기」는, 「치환 혹은 무치환의 알킬기」에서의 알킬기를 구성하는 탄소 원자에 결합되어 있는 적어도 하나의 수소 원자가 할로젠 원자로 치환된 기를 의미하며, 「치환 혹은 무치환의 알킬기」에서의 알킬기를 구성하는 탄소 원자에 결합되어 있는 모든 수소 원자가 할로젠 원자로 치환된 기도 포함한다. 「무치환의 할로알킬기」의 탄소수는, 본 명세서에 별도 기재가 없는 한, 1~50이며, 바람직하게는 1~30이고, 보다 바람직하게는 1~18이다. 「치환의 할로알킬기」는 「할로알킬기」의 하나 이상의 수소 원자가 치환기로 치환된 기를 의미한다. 또한, 본 명세서에 기재된 「치환의 할로알킬기」에는, 「치환의 할로알킬기」에서의 알킬쇄의 탄소 원자에 결합하는 하나 이상의 수소 원자가 치환기로 더 치환된 기, 및 「치환의 할로알킬기」에서의 치환기의 하나 이상의 수소 원자가 치환기로 더 치환된 기도 포함된다. 「무치환의 할로알킬기」의 구체예로는, 상기 「알킬기」(구체예 군 G3)에서의 하나 이상의 수소 원자가 할로젠 원자로 치환된 기의 예 등을 들 수 있다. 할로알킬기를 할로젠화 알킬기라고 부르는 경우가 있다.
- [0478] · 「치환 혹은 무치환의 알콕시기」
- [0479] 본 명세서에 기재된 「치환 혹은 무치환의 알콕시기」의 구체예로는, -O(G3)으로 표시되는 기이며, 여기서 G3은 구체예 군 G3에 기재된 「치환 혹은 무치환의 알킬기」이다. 「무치환의 알콕시기」의 탄소수는, 본 명세서에 별도 기재가 없는 한, 1~50이며, 바람직하게는 1~30이고, 보다 바람직하게는 1~18이다.
- [0480] · 「치환 혹은 무치환의 알킬티오기」
- [0481] 본 명세서에 기재된 「치환 혹은 무치환의 알킬티오기」의 구체예로는, -S(G3)으로 표시되는 기이며, 여기서 G3은 구체예 군 G3에 기재된 「치환 혹은 무치환의 알킬기」이다. 「무치환의 알킬티오기」의 탄소수는, 본 명세

서에 별도 기재가 없는 한, 1~50이며, 바람직하게는 1~30이고, 보다 바람직하게는 1~18이다.

[0482] · 「치환 혹은 무치환의 아틸옥시기」

[0483] 본 명세서에 기재된 「치환 혹은 무치환의 아틸옥시기」의 구체예로는, -O(G1)로 표시되는 기이며, 여기서 G1은 구체예 군 G1에 기재된 「치환 혹은 무치환의 아틸기」이다. 「무치환의 아틸옥시기」의 고리 형성 탄소수는, 본 명세서에 별도 기재가 없는 한, 6~50이며, 바람직하게는 6~30이고, 보다 바람직하게는 6~18이다.

[0484] · 「치환 혹은 무치환의 아틸티오기」

[0485] 본 명세서에 기재된 「치환 혹은 무치환의 아틸티오기」의 구체예로는, -S(G1)로 표시되는 기이며, 여기서 G1은 구체예 군 G1에 기재된 「치환 혹은 무치환의 아틸기」이다. 「무치환의 아틸티오기」의 고리 형성 탄소수는, 본 명세서에 별도 기재가 없는 한, 6~50이며, 바람직하게는 6~30이고, 보다 바람직하게는 6~18이다.

[0486] · 「치환 혹은 무치환의 트리알킬실릴기」

[0487] 본 명세서에 기재된 「트리알킬실릴기」의 구체예로는, -Si(G3)(G3)(G3)으로 표시되는 기이며, 여기서 G3은 구체예 군 G3에 기재된 「치환 혹은 무치환의 알킬기」이다. -Si(G3)(G3)(G3)에서의 복수의 G3은 서로 동일하거나 또는 상이하다. 「트리알킬실릴기」의 각 알킬기의 탄소수는, 본 명세서에 별도 기재가 없는 한, 1~50이며, 바람직하게는 1~20이고, 보다 바람직하게는 1~6이다.

[0488] · 「치환 혹은 무치환의 아랄킬기」

[0489] 본 명세서에 기재된 「치환 혹은 무치환의 아랄킬기」의 구체예로는, -(G3)-(G1)로 표시되는 기이며, 여기서 G3은 구체예 군 G3에 기재된 「치환 혹은 무치환의 알킬기」이고, G1은 구체예 군 G1에 기재된 「치환 혹은 무치환의 아틸기」이다. 따라서, 「아랄킬기」는 「알킬기」의 수소 원자가 치환기로서의 「아틸기」로 치환된 기이며, 「치환의 알킬기」의 일 양태이다. 「무치환의 아랄킬기」는 「무치환의 아틸기」가 치환한 「무치환의 알킬기」이고, 「무치환의 아랄킬기」의 탄소수는, 본 명세서에 별도 기재가 없는 한, 7~50이며, 바람직하게는 7~30이고, 보다 바람직하게는 7~18이다.

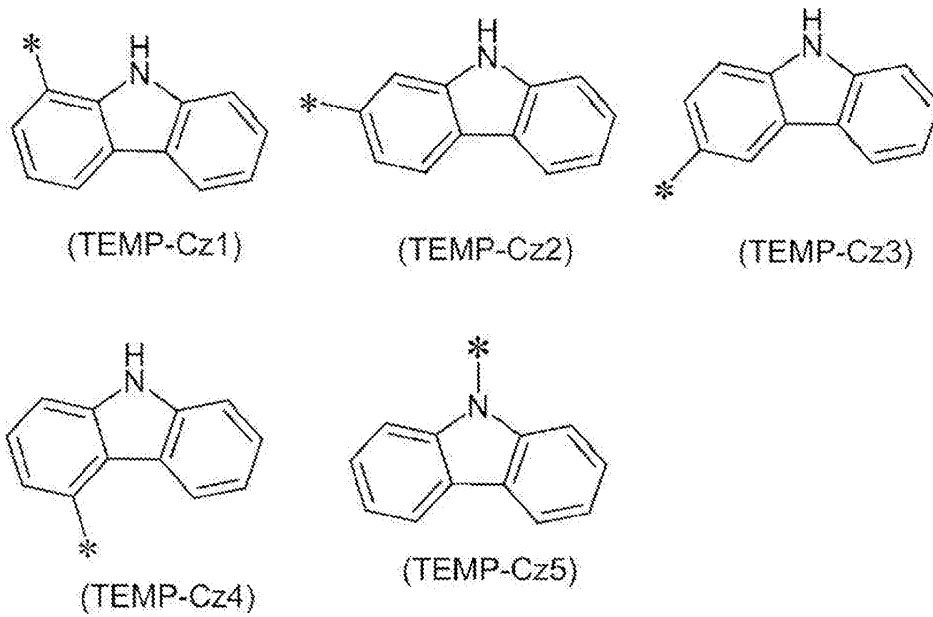
[0490] 「치환 혹은 무치환의 아랄킬기」의 구체예로는, 벤질기, 1-페닐에틸기, 2-페닐에틸기, 1-페닐이소프로필기, 2-페닐이소프로필기, 페닐-t-부틸기, α-나프틸메틸기, 1-α-나프틸에틸기, 2-α-나프틸에틸기, 1-α-나프틸이소프로필기, 2-α-나프틸이소프로필기, β-나프틸메틸기, 1-β-나프틸에틸기, 2-β-나프틸에틸기, 1-β-나프틸이소프로필기 및 2-β-나프틸이소프로필기 등을 들 수 있다.

[0491] 본 명세서에 기재된 치환 혹은 무치환의 아틸기는, 본 명세서에 별도 기재가 없는 한, 바람직하게는 페닐기, p-비페닐기, m-비페닐기, o-비페닐기, p-터페닐-4-일기, p-터페닐-3-일기, p-터페닐-2-일기, m-터페닐-4-일기, m-터페닐-3-일기, m-터페닐-2-일기, o-터페닐-4-일기, o-터페닐-3-일기, o-터페닐-2-일기, 1-나프틸기, 2-나프틸기, 안트릴기, 페난트릴기, 피레닐기, 크리스렌기, 트리페닐레닐기, 플루오레닐기, 9,9'-스피로비플루오레닐기, 9,9-디메틸플루오레닐기 및 9,9-디페닐플루오레닐기 등이다.

[0492] 본 명세서에 기재된 치환 혹은 무치환의 복소환기는, 본 명세서에 별도 기재가 없는 한, 바람직하게는 피리딜기, 피리미디닐기, 트리아지닐기, 퀴놀릴기, 이소퀴놀릴기, 퀴나졸리닐기, 벤조이미다졸릴기, 페난트롤리닐기, 카르바졸릴기(1-카르바졸릴기, 2-카르바졸릴기, 3-카르바졸릴기, 4-카르바졸릴기 또는 9-카르바졸릴기), 벤조카르바졸릴기, 아자카르바졸릴기, 디아자카르바졸릴기, 디벤조푸라닐기, 나프토벤조푸라닐기, 아자디벤조푸라닐기, 디아자디벤조푸라닐기, 디벤조티오펜기, 나프토벤조티오펜기, 아자디벤조티오펜기, 디아자디벤조티오펜기, (9-페닐)카르바졸릴기((9-페닐)카르바졸-1-일기, (9-페닐)카르바졸-2-일기, (9-페닐)카르바졸-3-일기 또는 (9-페닐)카르바졸-4-일기), (9-비페닐)카르바졸릴기, (9-페닐)페닐카르바졸릴기, 디페닐카르바졸-9-일기, 페닐카르바졸-9-일기, 페닐트리아지닐기, 비페닐릴트리아지닐기, 디페닐트리아지닐기, 페닐디벤조푸라닐기 및 페닐디벤조티오펜기 등이다.

[0493] 본 명세서에 있어서, 카르바졸릴기는, 본 명세서에 별도 기재가 없는 한, 구체적으로는 이하의 어느 하나의 기이다.

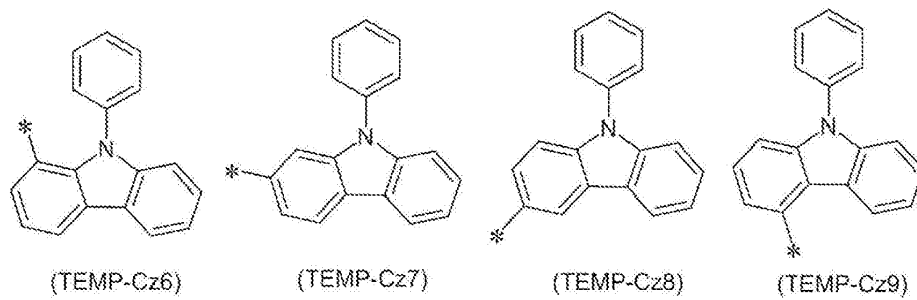
[0494] [화학식 10]



[0495]

[0496] 본 명세서에 있어서, (9-페닐)카르바졸릴기는, 본 명세서에 별도 기재가 없는 한, 구체적으로는 이하의 어느 하나의 기이다.

[0497] [화학식 11]

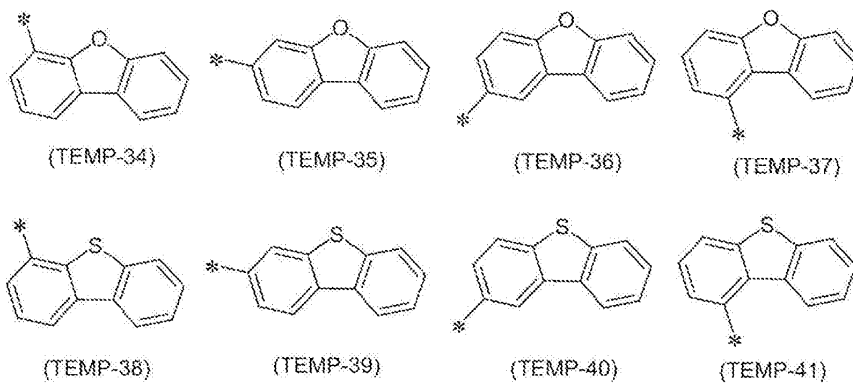


[0498]

[0499] 상기 일반식 (TEMP-Cz1)~(TEMP-Cz9) 중, *는 결합 위치를 나타낸다.

[0500] 본 명세서에 있어서, 디벤조푸라닐기 및 디벤조티오펜닐기는, 본 명세서에 별도 기재가 없는 한, 구체적으로는 이하의 어느 하나의 기이다.

[0501] [화학식 12]



[0502]

[0503] 상기 일반식 (TEMP-34)~(TEMP-41) 중, *는 결합 위치를 나타낸다.

[0504] 본 명세서에 기재된 치환 혹은 무치환의 알킬기는, 본 명세서에 별도 기재가 없는 한, 바람직하게는 메틸기, 에틸기, 프로필기, 이소프로필기, n-부틸기, 이소부틸기 및 t-부틸기 등이다.

[0505] · 「치환 혹은 무치환의 아릴렌기」

[0506] 본 명세서에 기재된 「치환 혹은 무치환의 아릴렌기」는, 별도 기재가 없는 한, 상기 「치환 혹은 무치환의 아릴기」로부터 아릴렌 상의 하나의 수소 원자를 제거함으로써 유도되는 2가의 기이다. 「치환 혹은 무치환의 아릴렌기」의 구체예(구체예 군 G12)로는, 구체예 군 G1에 기재된 「치환 혹은 무치환의 아릴기」로부터 아릴렌 상의 하나의 수소 원자를 제거함으로써 유도되는 2가의 기 등을 들 수 있다.

[0507] · 「치환 혹은 무치환의 2가의 복소환기」

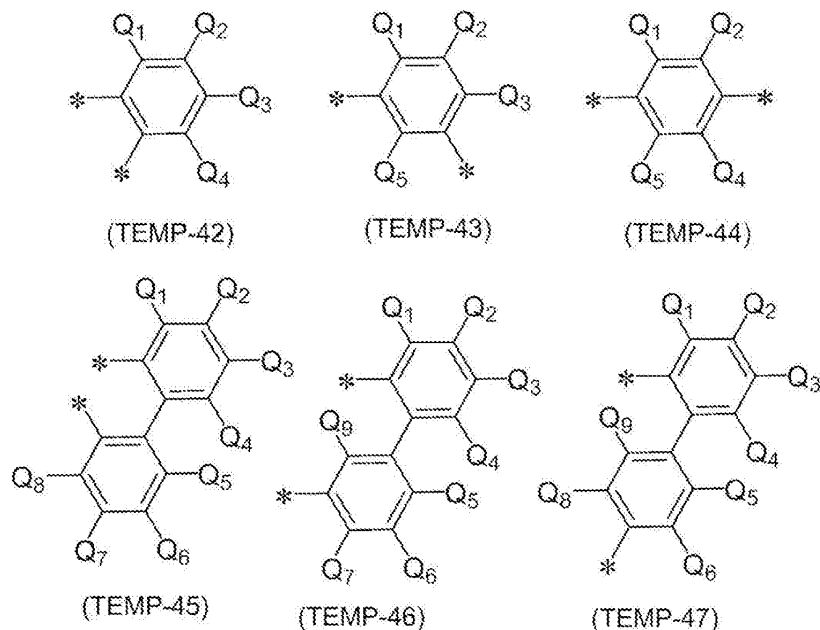
[0508] 본 명세서에 기재된 「치환 혹은 무치환의 2가의 복소환기」는, 별도 기재가 없는 한, 상기 「치환 혹은 무치환의 복소환기」로부터 복소환 상의 하나의 수소 원자를 제거함으로써 유도되는 2가의 기이다. 「치환 혹은 무치환의 2가의 복소환기」의 구체예(구체예 군 G13)로는, 구체예 군 G2에 기재된 「치환 혹은 무치환의 복소환기」로부터 복소환 상의 하나의 수소 원자를 제거함으로써 유도되는 2가의 기 등을 들 수 있다.

[0509] · 「치환 혹은 무치환의 알킬렌기」

[0510] 본 명세서에 기재된 「치환 혹은 무치환의 알킬렌기」는, 별도 기재가 없는 한, 상기 「치환 혹은 무치환의 알킬기」로부터 알킬렌 상의 하나의 수소 원자를 제거함으로써 유도되는 2가의 기이다. 「치환 혹은 무치환의 알킬렌기」의 구체예(구체예 군 G14)로는, 구체예 군 G3에 기재된 「치환 혹은 무치환의 알킬기」로부터 알킬렌 상의 하나의 수소 원자를 제거함으로써 유도되는 2가의 기 등을 들 수 있다.

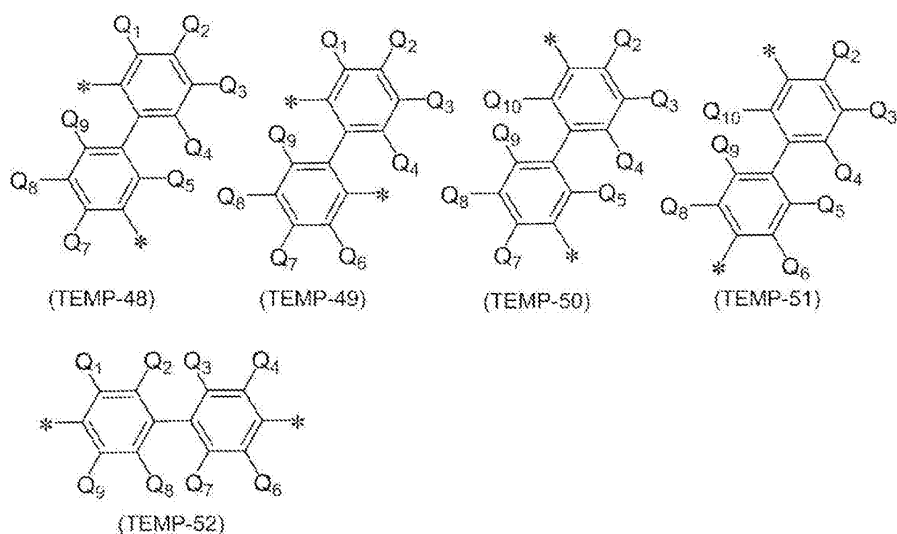
[0511] 본 명세서에 기재된 치환 혹은 무치환의 아릴렌기는, 본 명세서에 별도 기재가 없는 한, 바람직하게는 하기 일 반식 (TEMP-42)~(TEMP-68) 중 어느 하나의 기이다.

[0512] [화학식 13]



[0513]

[0514] [화학식 14]

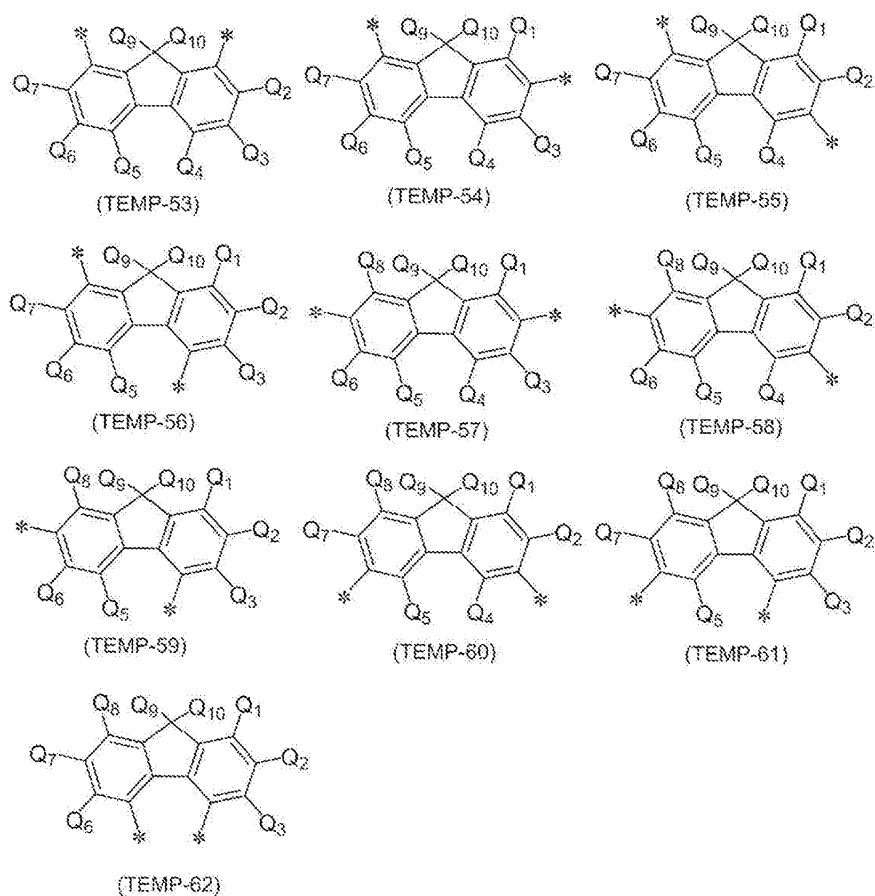


[0515]

[0516] 상기 일반식 (TEMP-42)~(TEMP-52) 중, $Q_1 \sim Q_{10}$ 은 각각 독립적으로 수소 원자 또는 치환기이다.

[0517] 상기 일반식 (TEMP-42)~(TEMP-52) 중, *는 결합 위치를 나타낸다.

[0518] [화학식 15]



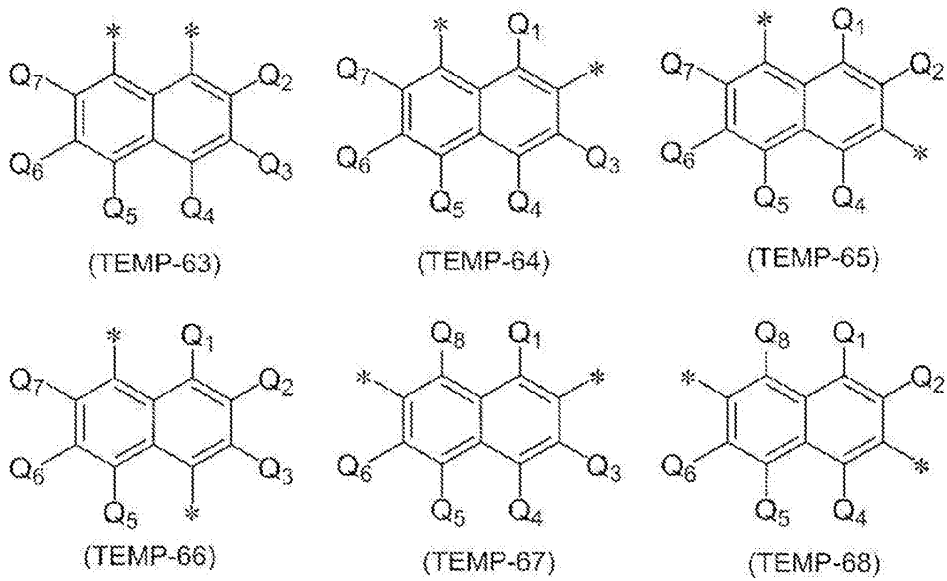
[0519]

[0520] 상기 일반식 (TEMP-53)~(TEMP-62) 중, $Q_1 \sim Q_{10}$ 은 각각 독립적으로 수소 원자 또는 치환기이다.

[0521] 식 Q_9 및 Q_{10} 은 단일 결합을 통해 서로 결합하여 고리를 형성해도 좋다.

[0522] 상기 일반식 (TEMP-53)~(TEMP-62) 중, *는 결합 위치를 나타낸다.

[0523] [화학식 16]



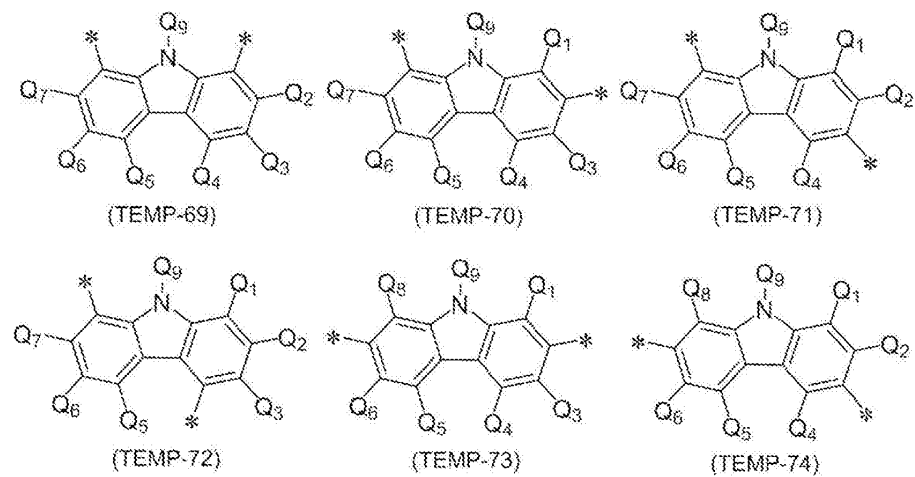
[0524]

[0525] 상기 일반식 (TEMP-63)~(TEMP-68) 중, Q₁~Q₈은 각각 독립적으로 수소 원자 또는 치환기이다.

[0526] 상기 일반식 (TEMP-63)~(TEMP-68) 중, *는 결합 위치를 나타낸다.

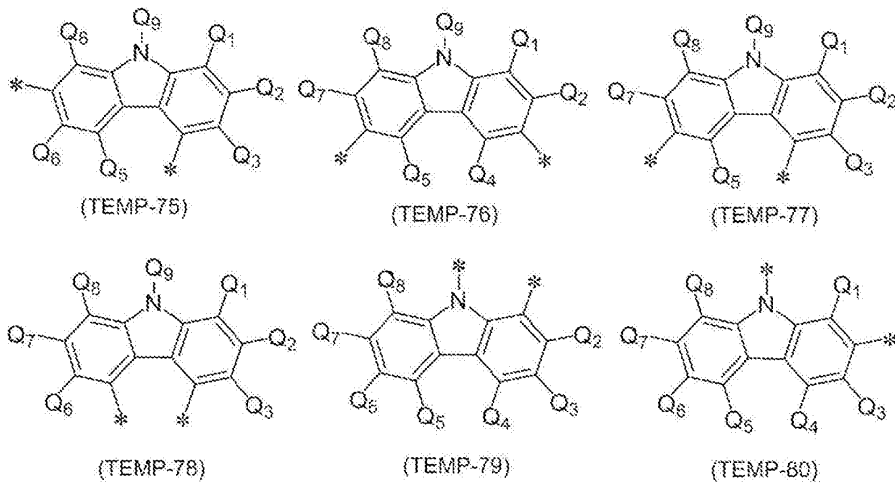
[0527] 본 명세서에 기재된 치환 혹은 무치환의 2가의 복소환기는, 본 명세서에 별도 기재가 없는 한, 바람직하게는 하기 일반식 (TEMP-69)~(TEMP-102) 중 어느 하나의 기이다.

[0528] [화학식 17]



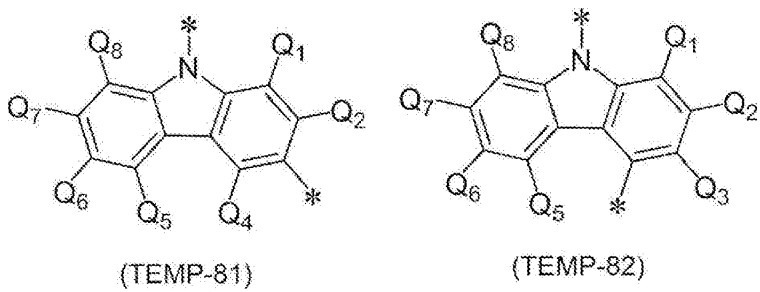
[0529]

[0530] [화학식 18]



[0531]

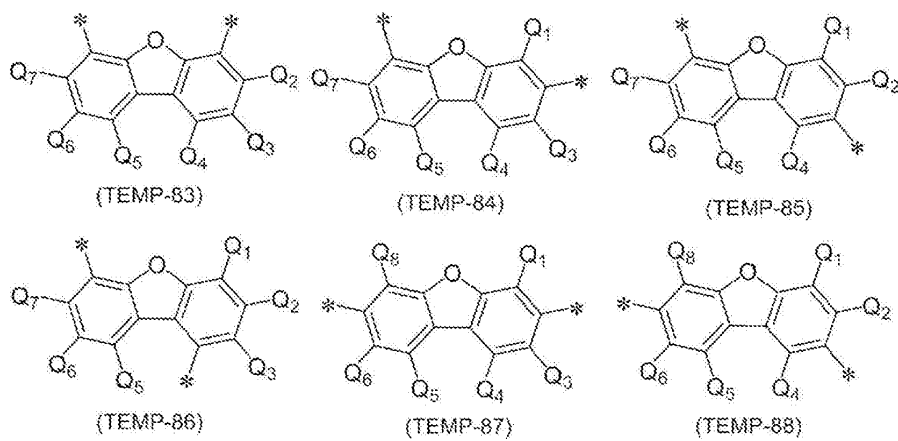
[0532] [화학식 19]



[0533]

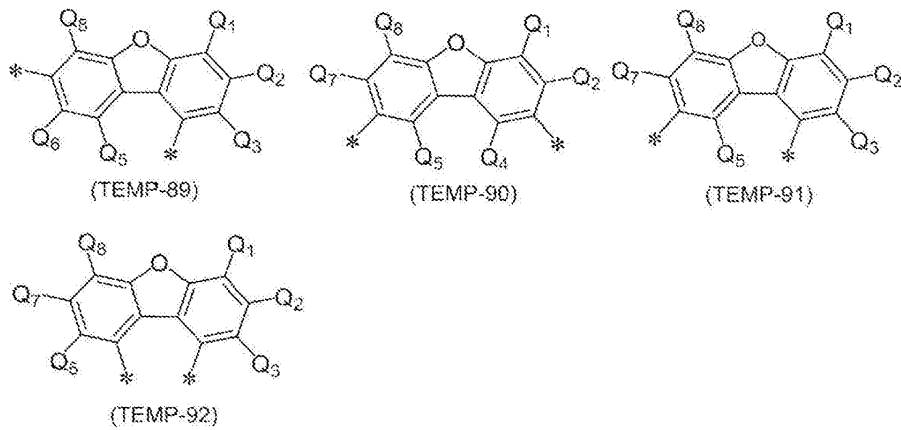
[0534] 상기 일반식 (TEMP-69)~(TEMP-82) 중, Q₁~Q₉는 각각 독립적으로 수소 원자 또는 치환기이다.

[0535] [화학식 20]



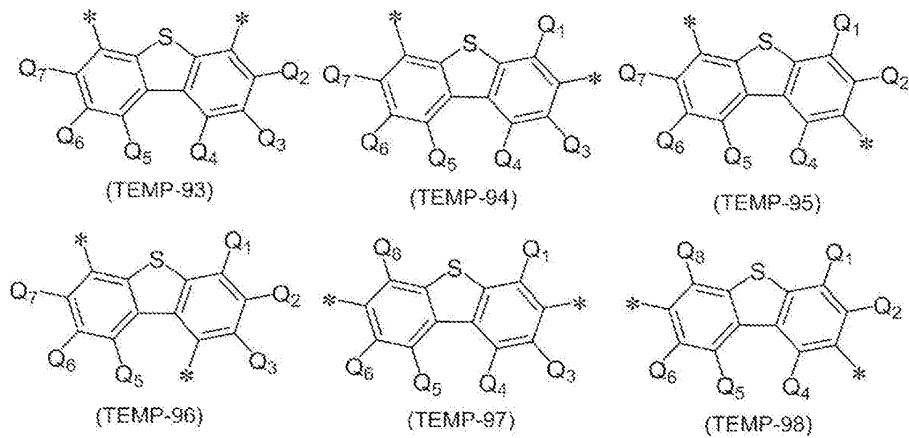
[0536]

[0537] [화학식 21]



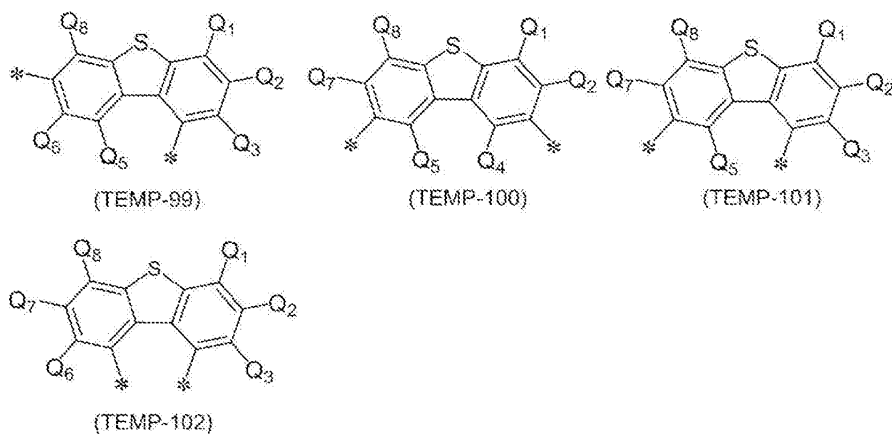
[0538]

[0539] [화학식 22]



[0540]

[0541] [화학식 23]



[0542]

[0543] 상기 일반식 (TEMP-83)~(TEMP-102) 중, Q₁~Q₈은 각각 독립적으로 수소 원자 또는 치환기이다.

[0544] 이상이 「본 명세서에 기재된 치환기」에 대한 설명이다.

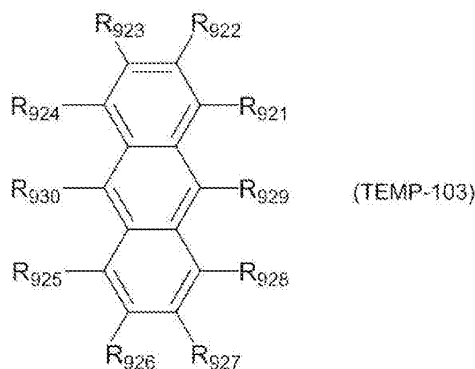
[0545] · 「결합하여 고리를 형성하는 경우」

[0546] 본 명세서에 있어서, 「인접한 2개 이상으로 이루어지는 조의 1조 이상이 서로 결합하여 치환 혹은 무치환의 단환을 형성하거나, 서로 결합하여 치환 혹은 무치환의 축합환을 형성하거나, 또는 서로 결합하지 않고」라고 하는 경우는, 「인접한 2개 이상으로 이루어지는 조의 1조 이상이 서로 결합하여 치환 혹은 무치환의 단환을 형성

하는」 경우와, 「인접한 2개 이상으로 이루어지는 조의 1조 이상이 서로 결합하여 치환 혹은 무치환의 축합환을 형성하는」 경우와, 「인접한 2개 이상으로 이루어지는 조의 1조 이상이 서로 결합하지 않는」 경우를 의미한다.

[0547] 본 명세서에서의 「인접한 2개 이상으로 이루어지는 조의 1조 이상이 서로 결합하여 치환 혹은 무치환의 단환을 형성하는」 경우, 및 「인접한 2개 이상으로 이루어지는 조의 1조 이상이 서로 결합하여 치환 혹은 무치환의 축합환을 형성하는」 경우(이하, 이들 경우를 통합하여 「결합하여 고리를 형성하는 경우」라고 부르는 경우가 있음)에 대해서 이하에 설명한다. 모골격(母骨格)이 안트라센환인 하기 일반식 (TEMP-103)으로 표시되는 안트라센 화합물의 경우를 예로 들어 설명한다.

[0548] [화학식 24]

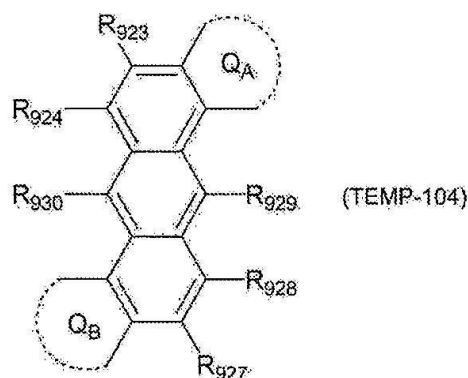


[0549]

[0550] 예컨대, R₉₂₁~R₉₃₀ 중의 「인접한 2개 이상으로 이루어지는 조의 1조 이상이 서로 결합하여 고리를 형성하는」 경우에 있어서, 1조가 되는 인접한 2개로 이루어지는 조는, R₉₂₁과 R₉₂₂의 조, R₉₂₂와 R₉₂₃의 조, R₉₂₃과 R₉₂₄의 조, R₉₂₄와 R₉₃₀의 조, R₉₃₀과 R₉₂₅의 조, R₉₂₅와 R₉₂₆의 조, R₉₂₆과 R₉₂₇의 조, R₉₂₇과 R₉₂₈의 조, R₉₂₈과 R₉₂₉의 조, 그리고 R₉₂₉와 R₉₂₁의 조이다.

[0551] 상기 「1조 이상」이란, 상기 인접한 2개 이상으로 이루어지는 조의 2조 이상이 동시에 고리를 형성해도 좋다는 것을 의미한다. 예컨대, R₉₂₁과 R₉₂₂가 서로 결합하여 고리 Q_A를 형성하고, 동시에 R₉₂₅와 R₉₂₆이 서로 결합하여 고리 Q_B를 형성한 경우, 상기 일반식 (TEMP-103)으로 표시되는 안트라센 화합물은 하기 일반식 (TEMP-104)로 표시된다.

[0552] [화학식 25]

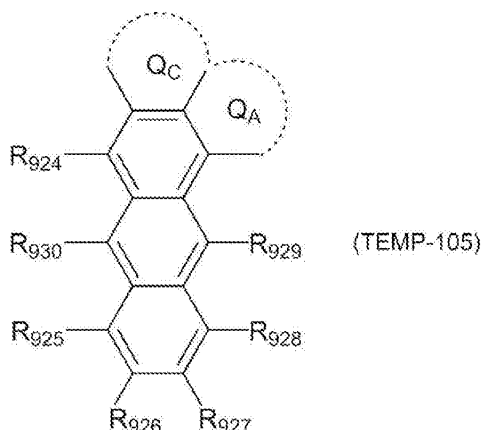


[0553]

[0554] 「인접한 2개 이상으로 이루어지는 조」가 고리를 형성하는 경우란, 전술한 예와 같이 인접한 「2개」로 이루어지는 조가 결합하는 경우뿐만 아니라, 인접한 「3개 이상」으로 이루어지는 조가 결합하는 경우도 포함한다. 예컨대, R₉₂₁과 R₉₂₂가 서로 결합하여 고리 Q_A를 형성하며, 또한 R₉₂₂와 R₉₂₃이 서로 결합하여 고리 Q_C를 형성하고, 서로 인접한 3개(R₉₂₁, R₉₂₂ 및 R₉₂₃)로 이루어지는 조가 서로 결합하여 고리를 형성하여, 안트라센 모골격에 축합하는 경우를 의미하며, 이 경우, 상기 일반식 (TEMP-103)으로 표시되는 안트라센 화합물은 하기 일반식 (TEMP-

105)로 표시된다. 하기 일반식 (TEMP-105)에 있어서, 고리 Q_A 및 고리 Q_C 는 R_{922} 를 공유한다.

[0555] [화학식 26]



[0556]

[0557] 형성되는 「단환」 또는 「축합환」은, 형성된 고리만의 구조로서, 포화의 고리여도 좋고 불포화의 고리여도 좋다. 「인접한 2개로 이루어지는 조의 1조」가 「단환」 또는 「축합환」을 형성하는 경우여도, 해당 「단환」 또는 「축합환」은 포화의 고리 또는 불포화의 고리를 형성할 수 있다. 예컨대, 상기 일반식 (TEMP-104)에 있어서 형성된 고리 Q_A 및 고리 Q_B 는 각각 「단환」 또는 「축합환」이다. 또한, 상기 일반식 (TEMP-105)에 있어서 형성된 고리 Q_A 및 고리 Q_C 는 「축합환」이다. 상기 일반식 (TEMP-105)의 고리 Q_A 와 고리 Q_C 는 고리 Q_A 와 고리 Q_C 가 축합함으로써 축합환으로 되어 있다. 상기 일반식 (TEMP-104)의 고리 Q_A 가 벤젠환이면, 고리 Q_A 는 단환이다. 상기 일반식 (TEMP-104)의 고리 Q_A 가 나프탈렌환이면, 고리 Q_A 는 축합환이다.

[0558] 「불포화의 고리」란, 방향족 탄화수소환 또는 방향족 복소환을 의미한다. 「포화의 고리」란, 지방족 탄화수소환 또는 비방향족 복소환을 의미한다.

[0559] 방향족 탄화수소환의 구체예로는, 구체예 군 G1에 있어서 구체예로서 든 기가 수소 원자에 의해 중단된 구조를 들 수 있다.

[0560] 방향족 복소환의 구체예로는, 구체예 군 G2에 있어서 구체예로서 든 방향족 복소환기가 수소 원자에 의해 중단된 구조를 들 수 있다.

[0561] 지방족 탄화수소환의 구체예로는, 구체예 군 G6에 있어서 구체예로서 든 기가 수소 원자에 의해 중단된 구조를 들 수 있다.

[0562] 「고리를 형성한다」란, 모골격의 복수의 원자만 혹은 모골격의 복수의 원자와 추가로 1 이상의 임의의 원소로 고리를 형성한다는 것을 의미한다. 예컨대, 상기 일반식 (TEMP-104)에 나타내는, R_{921} 과 R_{922} 가 서로 결합하여 형성된 고리 Q_A 는, R_{921} 이 결합하는 안트라센 골격의 탄소 원자와, R_{922} 가 결합하는 안트라센 골격의 탄소 원자와, 1 이상의 임의의 원소로 형성하는 고리를 의미한다. 구체예로는, R_{921} 과 R_{922} 로 고리 Q_A 를 형성하는 경우에 있어서, R_{921} 이 결합하는 안트라센 골격의 탄소 원자와, R_{922} 가 결합하는 안트라센 골격의 탄소 원자와, 4개의 탄소 원자로 단환의 불포화의 고리를 형성하는 경우, R_{921} 과 R_{922} 로 형성하는 고리는 벤젠환이다.

[0563] 여기서, 「임의의 원소」는, 본 명세서에 별도 기재가 없는 한, 바람직하게는 탄소 원소, 질소 원소, 산소 원소 및 황 원소로 이루어진 군에서 선택되는 적어도 1종의 원소이다. 임의의 원소에 있어서(예컨대, 탄소 원소 또는 질소 원소의 경우), 고리를 형성하지 않는 결합은, 수소 원자 등으로 중단되어도 좋고, 후술하는 「임의의 치환기」로 치환되어도 좋다. 탄소 원소 이외의 임의의 원소를 포함하는 경우, 형성되는 고리는 복소환이다.

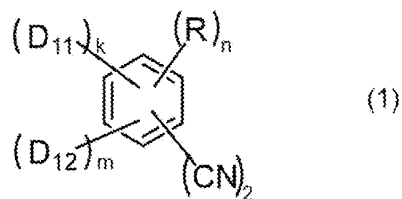
[0564] 단환 또는 축합환을 구성하는 「1 이상의 임의의 원소」는, 본 명세서에 별도 기재가 없는 한, 바람직하게는 2개 이상 15개 이하이며, 보다 바람직하게는 3개 이상 12개 이하이고, 더욱 바람직하게는 3개 이상 5개 이하이다.

[0565] 본 명세서에 별도 기재가 없는 한, 「단환」 및 「축합환」 중, 바람직하게는 「단환」이다.

- [0566] 본 명세서에 별도 기재가 없는 한, 「포화의 고리」 및 「불포화의 고리」 중, 바람직하게는 「불포화의 고리」이다.
- [0567] 본 명세서에 별도 기재가 없는 한, 「단환」은 바람직하게는 벤젠환이다.
- [0568] 본 명세서에 별도 기재가 없는 한, 「불포화의 고리」는 바람직하게는 벤젠환이다.
- [0569] 「인접한 2개 이상으로 이루어지는 조의 1조 이상」이 「서로 결합하여 치환 혹은 무치환의 단환을 형성하는」 경우 또는 「서로 결합하여 치환 혹은 무치환의 축합환을 형성하는」 경우, 본 명세서에 별도 기재가 없는 한, 바람직하게는 인접한 2개 이상으로 이루어지는 조의 1조 이상이, 서로 결합하여, 모골격의 복수의 원자와, 1개 이상 15개 이하의 탄소 원소, 질소 원소, 산소 원소 및 황 원소로 이루어진 군에서 선택되는 적어도 1종의 원소로 이루어지는 치환 혹은 무치환의 「불포화의 고리」를 형성한다.
- [0570] 상기 「단환」 또는 「축합환」이 치환기를 갖는 경우의 치환기는, 예컨대 후술하는 「임의의 치환기」이다. 상기 「단환」 또는 「축합환」이 치환기를 갖는 경우의 치환기의 구체예는, 전술한 「본 명세서에 기재된 치환기」의 항에서 설명한 치환기이다.
- [0571] 상기 「포화의 고리」 또는 「불포화의 고리」가 치환기를 갖는 경우의 치환기는, 예컨대 후술하는 「임의의 치환기」이다. 상기 「단환」 또는 「축합환」이 치환기를 갖는 경우의 치환기의 구체예는, 전술한 「본 명세서에 기재된 치환기」의 항에서 설명한 치환기이다.
- [0572] 이상이 「인접한 2개 이상으로 이루어지는 조의 1조 이상이 서로 결합하여 치환 혹은 무치환의 단환을 형성하는」 경우, 및 「인접한 2개 이상으로 이루어지는 조의 1조 이상이 서로 결합하여 치환 혹은 무치환의 축합환을 형성하는」 경우(「결합하여 고리를 형성하는 경우」)에 대한 설명이다.
- [0573] · 「치환 혹은 무치환의」라고 하는 경우의 치환기
- [0574] 본 명세서에서의 일 실시형태에서는, 상기 「치환 혹은 무치환의」라고 하는 경우의 치환기(본 명세서에 있어서 「임의의 치환기」라고 부르는 경우가 있음)는, 예컨대
- [0575] 무치환의 탄소수 1~50의 알킬기,
- [0576] 무치환의 탄소수 2~50의 알케닐기,
- [0577] 무치환의 탄소수 2~50의 알키닐기,
- [0578] 무치환의 고리 형성 탄소수 3~50의 시클로알킬기,
- [0579] $-Si(R_{901})(R_{902})(R_{903})$,
- [0580] $-O-(R_{904})$,
- [0581] $-S-(R_{905})$,
- [0582] $-N(R_{906})(R_{907})$,
- [0583] 할로젠 원자,
- [0584] 시아노기,
- [0585] 니트로기,
- [0586] 무치환의 고리 형성 탄소수 6~50의 아릴기, 및
- [0587] 무치환의 고리 형성 원자수 5~50의 복소환기
- [0588] 로 이루어진 군에서 선택되는 기 등이고, 여기서
- [0589] $R_{901} \sim R_{907}$ 는, 각각 독립적으로
- [0590] 수소 원자,
- [0591] 치환 혹은 무치환의 탄소수 1~50의 알킬기,

- [0592] 치환 혹은 무치환의 고리 형성 탄소수 3~50의 시클로알킬기,
- [0593] 치환 혹은 무치환의 고리 형성 탄소수 6~50의 아릴기, 또는
- [0594] 치환 혹은 무치환의 고리 형성 원자수 5~50의 복소환기이다.
- [0595] R₉₀₁이 2개 이상 존재하는 경우, 2개 이상의 R₉₀₁은 서로 동일하거나 또는 상이하고,
- [0596] R₉₀₂가 2개 이상 존재하는 경우, 2개 이상의 R₉₀₂는 서로 동일하거나 또는 상이하며,
- [0597] R₉₀₃이 2개 이상 존재하는 경우, 2개 이상의 R₉₀₃은 서로 동일하거나 또는 상이하고,
- [0598] R₉₀₄가 2개 이상 존재하는 경우, 2개 이상의 R₉₀₄는 서로 동일하거나 또는 상이하며,
- [0599] R₉₀₅가 2개 이상 존재하는 경우, 2개 이상의 R₉₀₅는 서로 동일하거나 또는 상이하고,
- [0600] R₉₀₆이 2개 이상 존재하는 경우, 2개 이상의 R₉₀₆은 서로 동일하거나 또는 상이하며,
- [0601] R₉₀₇이 2개 이상 존재하는 경우, 2개 이상의 R₉₀₇은 서로 동일하거나 또는 상이하다.
- [0602] 일 실시형태에서는, 상기 「치환 혹은 무치환의」라고 하는 경우의 치환기는,
- [0603] 탄소수 1~50의 알킬기,
- [0604] 고리 형성 탄소수 6~50의 아릴기, 및
- [0605] 고리 형성 원자수 5~50의 복소환기
- [0606] 로 이루어진 군에서 선택되는 기이다.
- [0607] 일 실시형태에서는, 상기 「치환 혹은 무치환의」라고 하는 경우의 치환기는,
- [0608] 탄소수 1~18의 알킬기,
- [0609] 고리 형성 탄소수 6~18의 아릴기, 및
- [0610] 고리 형성 원자수 5~18의 복소환기
- [0611] 로 이루어진 군에서 선택되는 기이다.
- [0612] 상기 임의의 치환기의 각 기의 구체예는 전술한 「본 명세서에 기재된 치환기」의 항에서 설명한 치환기의 구체예이다.
- [0613] 본 명세서에 있어서 별도 기재가 없는 한, 인접한 임의의 치환기들이 「포화의 고리」 또는 「불포화의 고리」를 형성해도 좋고, 바람직하게는 치환 혹은 무치환의 포화의 5원환, 치환 혹은 무치환의 포화의 6원환, 치환 혹은 무치환의 불포화의 5원환, 또는 치환 혹은 무치환의 불포화의 6원환을 형성하고, 보다 바람직하게는 벤젠환을 형성한다.
- [0614] 본 명세서에 있어서 별도 기재가 없는 한, 임의의 치환기는 치환기를 더 가져도 좋다. 임의의 치환기가 더 갖는 치환기로는 상기 임의의 치환기와 동일하다.
- [0615] 본 명세서에 있어서 「AA~BB」를 이용하여 표시되는 수치 범위는, 「AA~BB」 앞에 기재되는 수치 AA를 하한치로서, 「AA~BB」 뒤에 기재되는 수치 BB를 상한치로서 포함하는 범위를 의미한다.
- [0616] [제1 실시형태]
- [0617] <화합물>
- [0618] 본 실시형태에 따른 화합물은, 하기 일반식(1)로 표시되는 화합물이다.

[0619] [화학식 27]



[0620]

[0621] (상기 일반식(1)에 있어서,

[0622] CN은 시아노기이며,

[0623] D₁₁ 및 D₁₂는, 각각 독립적으로 하기 일반식(11), 일반식(12) 또는 일반식(13)으로 표시되는 기이며, 단, 적어도 하나의 D₁₁은, 하기 일반식(12) 또는 일반식(13)으로 표시되는 기이며,

[0624] R은, 각각 독립적으로

[0625] 수소 원자,

[0626] 치환 혹은 무치환의 탄소수 1~50의 알킬기,

[0627] 치환 혹은 무치환의 탄소수 1~50의 할로알킬기,

[0628] 치환 혹은 무치환의 탄소수 2~50의 알케닐기,

[0629] 치환 혹은 무치환의 탄소수 2~50의 알키닐기,

[0630] 치환 혹은 무치환의 고리 형성 탄소수 3~50의 시클로알킬기,

[0631] -Si(R₉₀₁)(R₉₀₂)(R₉₀₃)으로 표시되는 기,

[0632] -O-(R₉₀₄)로 표시되는 기,

[0633] -S-(R₉₀₅)로 표시되는 기,

[0634] -N(R₉₀₆)(R₉₀₇)로 표시되는 기,

[0635] 치환 혹은 무치환의 탄소수 7~50의 아랄킬기,

[0636] -C(=O)R₉₀₈로 표시되는 기,

[0637] -COOR₉₀₉로 표시되는 기,

[0638] 시아노기,

[0639] 니트로기,

[0640] -P(=O)(R₉₃₁)(R₉₃₂)로 표시되는 기,

[0641] -Ge(R₉₃₃)(R₉₃₄)(R₉₃₅)로 표시되는 기,

[0642] -B(R₉₃₆)(R₉₃₇)로 표시되는 기,

[0643] 치환 혹은 무치환의 고리 형성 탄소수 6~50의 아릴기, 또는

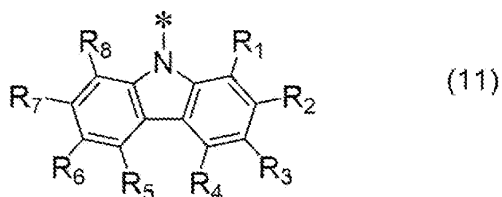
[0644] 치환 혹은 무치환의 고리 형성 원자수 5~50의 복소환기이며,

[0645] 단, 적어도 하나의 R은 치환기이며, 적어도 하나의 치환기로서의 R은,

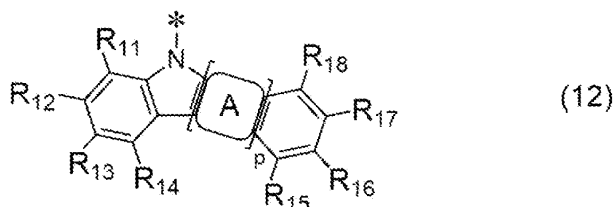
[0646] 상기 일반식(1) 중의 벤젠환과의 탄소-탄소 결합에 의해 결합하고,

[0647] k는 1 또는 2이며,

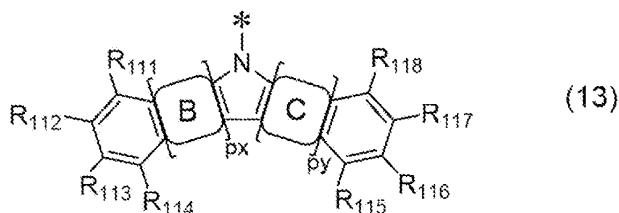
- [0648] m은 0, 1 또는 2이며,
 [0649] n은 1, 2 또는 3이며,
 [0650] k+m+n은 4이며,
 [0651] k가 2일 때, 복수의 D₁₁은 서로 동일하거나 또는 상이하고,
 [0652] m이 2일 때, 복수의 D₁₂는 서로 동일하거나 또는 상이하고,
 [0653] n이 2 또는 3일 때, 복수의 R은 서로 동일하거나 또는 상이하다.)
 [0654] [화학식 28]



- [0655]
 [0656] [화학식 29]



- [0657]
 [0658] [화학식 30]

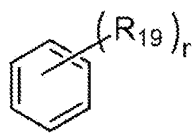


- [0659]
 [0660] (상기 일반식(12)에서의 R₁₁~R₁₈ 중의 인접하는 2개 이상으로 이루어진 조의 1조 이상이,
 [0661] 서로 결합하여 치환 혹은 무치환의 단환을 형성하거나,
 [0662] 서로 결합하여 치환 혹은 무치환의 축합환을 형성하거나, 또는
 [0663] 서로 결합하지 않고,
 [0664] 상기 일반식(13)에서의 R₁₁₁~R₁₁₈ 중의 인접하는 2개 이상으로 이루어진 조의 1조 이상이,
 [0665] 서로 결합하여 치환 혹은 무치환의 단환을 형성하거나,
 [0666] 서로 결합하여 치환 혹은 무치환의 축합환을 형성하거나, 또는
 [0667] 서로 결합하지 않고,
 [0668] 상기 일반식(11)에서의 R₁~R₈, 상기 일반식(12)에서의 치환 혹은 무치환의 단환을 형성하지 않고 또한 치환 혹은 무치환의 축합환을 형성하지 않는 R₁₁~R₁₈, 및 상기 일반식(13)에서의 치환 혹은 무치환의 단환을 형성하지 않고 또한 치환 혹은 무치환의 축합환을 형성하지 않는 R₁₁₁~R₁₁₈은, 각각 독립적으로

- [0669] 수소 원자,
- [0670] 치환 혹은 무치환의 탄소수 1~50의 알킬기,
- [0671] 치환 혹은 무치환의 탄소수 1~50의 할로알킬기,
- [0672] 치환 혹은 무치환의 탄소수 2~50의 알케닐기,
- [0673] 치환 혹은 무치환의 탄소수 2~50의 알키닐기,
- [0674] 치환 혹은 무치환의 고리 형성 탄소수 3~50의 시클로알킬기,
- [0675] $-\text{Si}(\text{R}_{901})(\text{R}_{902})(\text{R}_{903})$ 으로 표시되는 기,
- [0676] $-\text{O}(\text{R}_{904})$ 로 표시되는 기,
- [0677] $-\text{S}(\text{R}_{905})$ 로 표시되는 기,
- [0678] $-\text{N}(\text{R}_{906})(\text{R}_{907})$ 로 표시되는 기,
- [0679] 치환 혹은 무치환의 탄소수 7~50의 아랄킬기,
- [0680] $-\text{C}(=\text{O})\text{R}_{908}$ 로 표시되는 기,
- [0681] $-\text{COOR}_{909}$ 로 표시되는 기,
- [0682] 할로젠 원자,
- [0683] 시아노기,
- [0684] 니트로기,
- [0685] $-\text{P}(=\text{O})(\text{R}_{931})(\text{R}_{932})$ 로 표시되는 기,
- [0686] $-\text{Ge}(\text{R}_{933})(\text{R}_{934})(\text{R}_{935})$ 로 표시되는 기,
- [0687] $-\text{B}(\text{R}_{936})(\text{R}_{937})$ 로 표시되는 기,
- [0688] 치환 혹은 무치환의 고리 형성 탄소수 6~50의 아릴기, 또는
- [0689] 치환 혹은 무치환의 고리 형성 원자수 5~50의 복소환기이며,
- [0690] 상기 일반식(12) 및 상기 일반식(13)에 있어서,
- [0691] 고리 A, 고리 B 및 고리 C는, 각각 독립적으로 하기 일반식(14) 및 일반식(15)로 표시되는 고리 구조로 이루어진 군에서 선택되는 어느 하나의 고리 구조이며,
- [0692] 고리 A, 고리 B 및 고리 C는, 인접하는 고리와 임의의 위치에서 축합하고,
- [0693] p, px 및 py는, 각각 독립적으로 1, 2, 3 또는 4이며,
- [0694] p가 2, 3 또는 4인 경우, 복수의 고리 A는 서로 동일하거나 또는 상이하고,
- [0695] px가 2, 3 또는 4인 경우, 복수의 고리 B는 서로 동일하거나 또는 상이하고,
- [0696] py가 2, 3 또는 4인 경우, 복수의 고리 C는 서로 동일하거나 또는 상이하고,
- [0697] 단, 적어도 하나의 D_{11} 은, 상기 일반식(12) 또는 일반식(13)으로 표시되는 기이며, 이 D_{11} 로서의 상기 일반식(12) 중의 p가 4이며, 4개의 고리 A가 2개의 하기 일반식(14)로 표시되는 고리 구조 및 2개의 하기 일반식(15)로 표시되는 고리 구조를 포함하고, 이 D_{11} 로서의 상기 일반식(13) 중의 px 및 py가 2이며, 2개의 고리 B가 하나의 하기 일반식(14)로 표시되는 고리 구조 및 하나의 하기 일반식(15)로 표시되는 고리 구조를 포함하고, 2개의 고리 C가 하나의 하기 일반식(14)로 표시되는 고리 구조 및 하나의 하기 일반식(15)로 표시되는 고리 구조를 포함하고,

[0698] 상기 일반식 (11)~(13) 중의 *은, 상기 일반식(1) 중의 벤젠환과의 결합 위치를 나타낸다.)

[0699] [화학식 31]



(14)



(15)

[0700]

[0701] (상기 일반식(14)에 있어서,

[0702] r은 0, 2 또는 4이며,

[0703] 복수의 R₁₉로 이루어진 조가,

[0704] 서로 결합하여 치환 혹은 무치환의 단환을 형성하거나,

[0705] 서로 결합하여 치환 혹은 무치환의 축합환을 형성하거나, 또는

[0706] 서로 결합하지 않고,

[0707] 상기 일반식(15)에 있어서, X₁은 황 원자 또는 산소 원자이며,

[0708] 치환 혹은 무치환의 단환을 형성하지 않고 또한 치환 혹은 무치환의 축합환을 형성하지 않는 R₁₉는,

[0709] 수소 원자,

[0710] 치환 혹은 무치환의 탄소수 1~50의 알킬기,

[0711] 치환 혹은 무치환의 탄소수 1~50의 할로알킬기,

[0712] 치환 혹은 무치환의 탄소수 2~50의 알케닐기,

[0713] 치환 혹은 무치환의 탄소수 2~50의 알키닐기,

[0714] 치환 혹은 무치환의 고리 형성 탄소수 3~50의 시클로알킬기,

[0715] -Si(R₉₀₁)(R₉₀₂)(R₉₀₃)으로 표시되는 기,

[0716] -O-(R₉₀₄)로 표시되는 기,

[0717] -S-(R₉₀₅)로 표시되는 기,

[0718] -N(R₉₀₆)(R₉₀₇)로 표시되는 기,

[0719] 치환 혹은 무치환의 탄소수 7~50의 아랄킬기,

[0720] -C(=O)R₉₀₈로 표시되는 기,

[0721] -COOR₉₀₉로 표시되는 기,

[0722] 할로젠 원자,

[0723] 시아노기,

[0724] 니트로기,

[0725] -P(=O)(R₉₃₁)(R₉₃₂)로 표시되는 기,

[0726] -Ge(R₉₃₃)(R₉₃₄)(R₉₃₅)로 표시되는 기,

[0727] -B(R₉₃₆)(R₉₃₇)로 표시되는 기,

- [0728] 치환 혹은 무치환의 고리 형성 탄소수 6~50의 아릴기, 또는
- [0729] 치환 혹은 무치환의 고리 형성 원자수 5~50의 복소환기이며,
- [0730] 복수의 R_{19} 는 서로 동일하거나 또는 상이하고,
- [0731] 복수의 X_1 은 서로 동일하거나 또는 상이하고,
- [0732] 단, 상기 일반식(13)으로 표시되는 기인 D_{11} 은, 하기 조건(Pv1), 조건(Pv2) 및 조건(Pv3)의 적어도 어느 하나를 충족시킨다.
- [0733] 조건(Pv1) : k 가 2일 때, 고리 B로서의 상기 일반식(15)로 표시되는 고리 구조 중의 X_1 및 고리 C로서의 상기 일반식(15)로 표시되는 고리 구조 중의 X_1 의 적어도 어느 하나가 산소 원자이다.
- [0734] 조건(Pv2) : k 가 2일 때, 2개의 D_{11} 은 서로 상이하다.
- [0735] 조건(Pv3) : n 이 3일 때, 고리 B로서의 상기 일반식(15)로 표시되는 고리 구조 중의 X_1 및 고리 C로서의 상기 일반식(15)로 표시되는 고리 구조 중의 X_1 은, 각각 독립적으로 황 원자 또는 산소 원자이다.)
- [0736] (일반식 중, R_{901} , R_{902} , R_{903} , R_{904} , R_{905} , R_{906} , R_{907} , R_{908} , R_{909} , R_{931} , R_{932} , R_{933} , R_{934} , R_{935} , R_{936} 및 R_{937} 은, 각각 독립적으로
- [0737] 수소 원자,
- [0738] 치환 혹은 무치환의 탄소수 1~50의 알킬기,
- [0739] 치환 혹은 무치환의 고리 형성 탄소수 3~50의 시클로알킬기,
- [0740] 치환 혹은 무치환의 고리 형성 탄소수 6~50의 아릴기, 또는
- [0741] 치환 혹은 무치환의 고리 형성 원자수 5~50의 복소환기이며,
- [0742] R_{901} 이 복수 존재하는 경우, 복수의 R_{901} 은 서로 동일하거나 또는 상이하고,
- [0743] R_{902} 가 복수 존재하는 경우, 복수의 R_{902} 는 서로 동일하거나 또는 상이하고,
- [0744] R_{903} 이 복수 존재하는 경우, 복수의 R_{903} 은 서로 동일하거나 또는 상이하고,
- [0745] R_{904} 가 복수 존재하는 경우, 복수의 R_{904} 는 서로 동일하거나 또는 상이하고,
- [0746] R_{905} 가 복수 존재하는 경우, 복수의 R_{905} 는 서로 동일하거나 또는 상이하고,
- [0747] R_{906} 이 복수 존재하는 경우, 복수의 R_{906} 은 서로 동일하거나 또는 상이하고,
- [0748] R_{907} 이 복수 존재하는 경우, 복수의 R_{907} 은 서로 동일하거나 또는 상이하고,
- [0749] R_{908} 이 복수 존재하는 경우, 복수의 R_{908} 은 서로 동일하거나 또는 상이하고,
- [0750] R_{909} 가 복수 존재하는 경우, 복수의 R_{909} 는 서로 동일하거나 또는 상이하고,
- [0751] R_{931} 이 복수 존재하는 경우, 복수의 R_{931} 은 서로 동일하거나 또는 상이하고,
- [0752] R_{932} 가 복수 존재하는 경우, 복수의 R_{932} 는 서로 동일하거나 또는 상이하고,
- [0753] R_{933} 이 복수 존재하는 경우, 복수의 R_{933} 은 서로 동일하거나 또는 상이하고,
- [0754] R_{934} 가 복수 존재하는 경우, 복수의 R_{934} 는 서로 동일하거나 또는 상이하고,
- [0755] R_{935} 가 복수 존재하는 경우, 복수의 R_{935} 는 서로 동일하거나 또는 상이하고,

[0756] R_{936} 이 복수 존재하는 경우, 복수의 R_{936} 은 서로 동일하거나 또는 상이하고,

[0757] R_{937} 이 복수 존재하는 경우, 복수의 R_{937} 은 서로 동일하거나 또는 상이하다.)

[0758] 본 실시형태에 의하면, PLQY가 높은 화합물을 제공할 수 있다.

[0759] 본 실시형태에 따른 화합물에 있어서, D_{11} 및 D_{12} 가 서로 상이한 기인 경우, 또는 복수의 D_{11} 이 서로 상이한 기인 경우, 본 실시형태에 따른 화합물을 유기 EL 소자의 유기층에 이용했을 때에 정공 주입 특성이 향상되고, 발광 효율 및 수명의 적어도 어느 하나가 향상된다. 구체적으로는, D_{11} 및 D_{12} 가 상이한 산화 전위를 갖기 때문에, 단계적으로 정공이 유기층에 주입되기 때문이다.

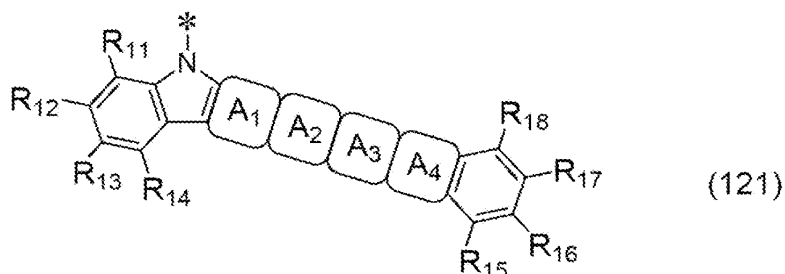
[0760] 또한, 본 실시형태에 따른 화합물에 있어서, 모든 D_{11} 및 D_{12} 가, X_1 이외의 점에서 화학 구조가 서로 동일한 기인 경우, 적어도 하나의 X_1 이 산소 원자이면, 유기 EL 소자가 장수명화된다. 적어도 하나의 X_1 이 산소 원자인 기는, 모든 X_1 이 황 원자인 기에 비교하여, 일반식(1)로 표시되는 벤젠환에 대한 결합 각도가 작아지기 때문에, 본 실시형태에 따른 화합물을 유기층에 이용함으로써 장수명화되는 것으로 고려된다.

[0761] 본 실시형태에 따른 화합물에 있어서, 상기 일반식 (11)~(13)으로 표시되는 기 등이 결합하는 상기 일반식(1)의 벤젠환이란, 상기 일반식(1)에 있어서 명시적으로 표시되어 있는 벤젠환 그 자체이며, R, D_{11} 및 D_{12} 에 포함되는 벤젠환이 아니다.

[0762] 후술하는 일반식 (110), (120), (130), (126), (127), (126A), (127A), (127B), (111), (112) 및 (113)으로 표시되는 화합물에 있어서도, 이들 일반식에 있어서 명시적으로 표시되어 있는 벤젠환 그 자체에, 상기 일반식 (11)~(13)으로 표시되는 기 등은 상기 일반식(1)의 경우와 동일하게 결합한다.

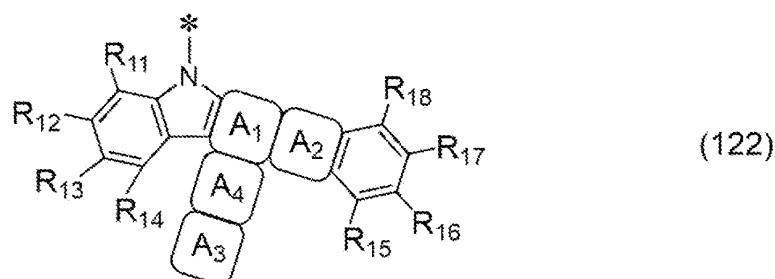
[0763] 본 실시형태에 따른 화합물에 있어서, 적어도 하나의 D_{11} 은, 하기 일반식(121), 일반식(122) 또는 일반식(131)로 표시되는 기인 것이 바람직하다.

[0764] [화학식 32]



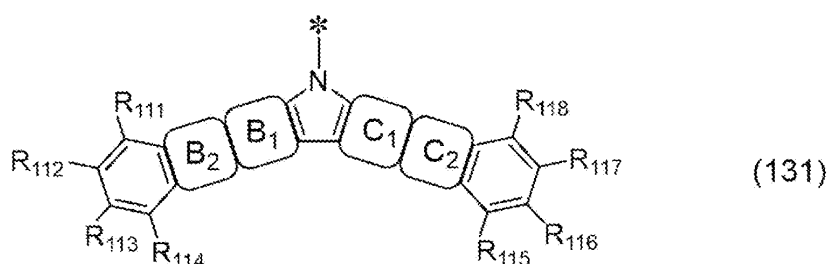
[0765]

[0766] [화학식 33]



[0767]

[0768] [화학식 34]



[0769]

[0770] (상기 일반식(121) 및 일반식(122)에 있어서, $R_{11} \sim R_{18}$ 은, 상기 일반식(12)에서의 $R_{11} \sim R_{18}$ 과 동의이며,

[0771] 고리 A_1 , 고리 A_2 , 고리 A_3 및 고리 A_4 중, 2개가 상기 일반식(14)로 표시되는 고리 구조이며, 나머지 2개가 상기 일반식(15)로 표시되는 고리 구조이며,

[0772] 상기 일반식(131)에 있어서, $R_{111} \sim R_{118}$ 은, 상기 일반식(13)에서의 $R_{111} \sim R_{118}$ 과 동의이며,

[0773] 고리 B_1 및 고리 B_2 의 한쪽이 상기 일반식(14)로 표시되는 고리 구조이며, 고리 B_1 및 고리 B_2 의 다른 한쪽이 상기 일반식(15)로 표시되는 고리 구조이며,

[0774] 고리 C_1 및 고리 C_2 의 한쪽이 상기 일반식(14)로 표시되는 고리 구조이며, 고리 C_1 및 고리 C_2 의 다른 한쪽이 상기 일반식(15)로 표시되는 고리 구조이며,

[0775] 상기 일반식(121), 일반식(122) 및 일반식(131) 중의 *은, 상기 일반식(1) 중의 벤젠환과의 결합 위치를 나타낸다.)

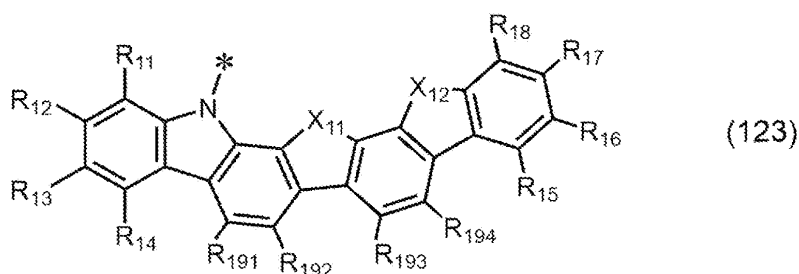
[0776] 본 실시형태에 따른 화합물에 있어서, 고리 A_1 및 고리 A_3 이 상기 일반식(14)로 표시되는 고리 구조이며, 고리 A_2 및 고리 A_4 가 상기 일반식(15)로 표시되는 고리 구조인 것이 바람직하다.

[0777] 본 실시형태에 따른 화합물에 있어서, 고리 B_1 이 상기 일반식(14)로 표시되는 고리 구조이며, 고리 B_2 가 상기 일반식(15)로 표시되는 고리 구조이며, 고리 C_1 이 상기 일반식(14)로 표시되는 고리 구조이며, 고리 C_2 가 상기 일반식(15)로 표시되는 고리 구조인 것이 바람직하다.

[0778] 본 실시형태에 따른 화합물에 있어서, 적어도 하나의 D_{11} 이 상기 일반식(131)로 표시되는 기인 것이 바람직하다.

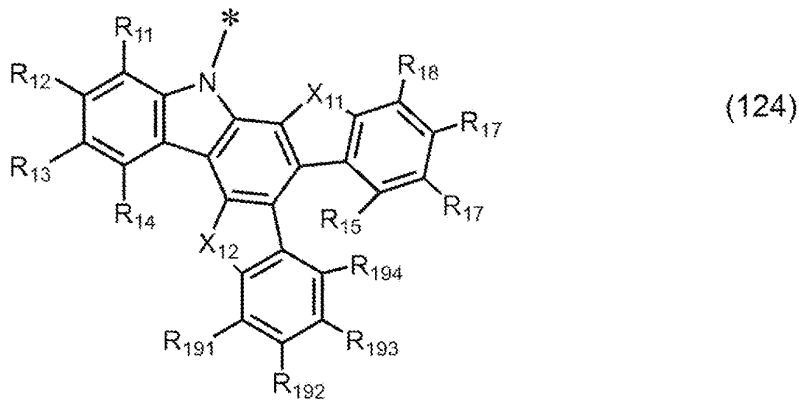
[0779] 본 실시형태에 따른 화합물에 있어서, 적어도 하나의 D_{11} 이 하기 일반식(123), 일반식(124), 일반식(125) 또는 일반식(132)로 표시되는 기인 것이 바람직하다.

[0780] [화학식 35]



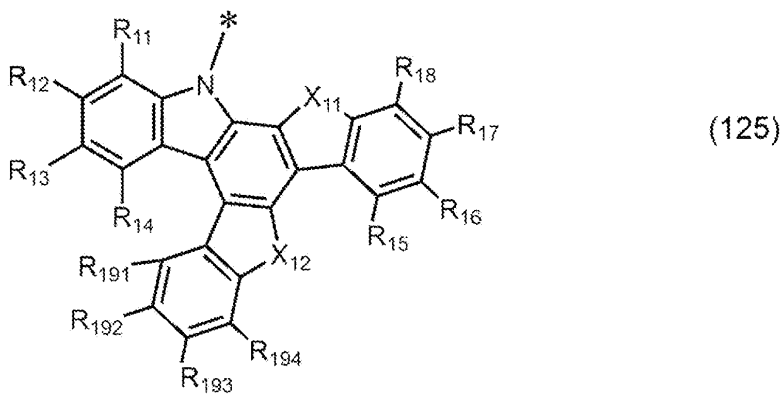
[0781]

[0782] [화학식 36]



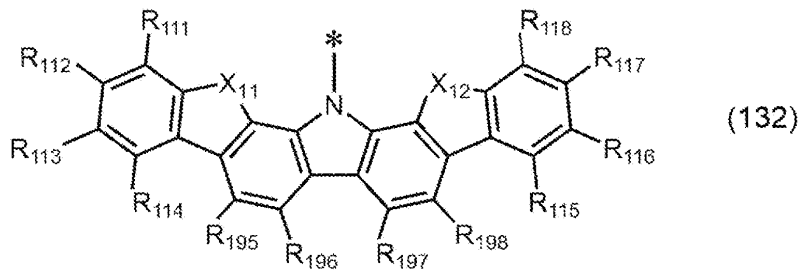
[0783]

[0784] [화학식 37]



[0785]

[0786] [화학식 38]



[0787]

[0788] (상기 일반식(123), 일반식(124) 및 일반식(125)에 있어서, R₁₁~R₁₈은 상기 일반식(12)에서의 R₁₁~R₁₈과 동의이며, R₁₉₁~R₁₉₄는 각각 독립적으로 상기 일반식(14)에서의 R₁₉와 동의이며,

[0789] 상기 일반식(132)에 있어서, R₁₁₁~R₁₁₈은 상기 일반식(13)에서의 R₁₁₁~R₁₁₈과 동의이며, R₁₉₅~R₁₉₈은 각각 독립적으로 상기 일반식(14)에서의 R₁₉와 동의이며,

[0790] 상기 일반식(123), 일반식(124), 일반식(125) 및 일반식(132)에 있어서, X₁₁ 및 X₁₂는 각각 독립적으로 상기 일반식(15)에서의 X₁과 동의이며, *는 상기 일반식(1) 중의 벤젠환과의 결합 위치를 나타낸다.)

[0791] 본 실시형태에 따른 화합물에 있어서, R₁₉₁~R₁₉₄ 중의 인접하는 2개 이상으로 이루어진 조는, 모두 서로 결합하지 않는 것이 바람직하다.

[0792] 본 실시형태에 따른 화합물에 있어서, R₁₉₅~R₁₉₈ 중의 인접하는 2개 이상으로 이루어진 조는, 모두 서로 결합하지 않는 것이 바람직하다.

[0793] 본 실시형태에 따른 화합물에 있어서, X_{11} 은 황 원자인 것이 바람직하다.

[0794] 본 실시형태에 따른 화합물에 있어서, 일반식(123), 일반식(124) 및 일반식(125)로 표시되는 기에서의 X_{11} 은 황 원자인 것이 바람직하다.

[0795] 본 실시형태에 따른 화합물에 있어서, 적어도 하나의 D_{11} 은 상기 일반식(132)로 표시되는 기인 것이 바람직하다.

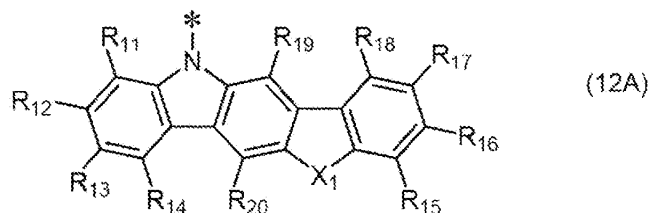
[0796] 본 실시형태에 따른 화합물에 있어서, 일반식(132)로 표시되는 기에서의 X_{11} 은 황 원자인 것이 바람직하다. 본 실시형태에 따른 화합물에 있어서, 일반식(132)로 표시되는 기에서의 X_{11} 은 황 원자이며, X_{12} 는 황 원자 또는 산소 원자인 것이 보다 바람직하다.

[0797] 본 실시형태에 따른 화합물에 있어서, D_{12} 는 상기 일반식(11) 또는 상기 일반식(12)로 표시되는 기인 것이 바람직하다.

[0798] 본 실시형태에 따른 화합물에 있어서, D_{12} 는 상기 일반식(12)로 표시되는 기인 것이 바람직하다.

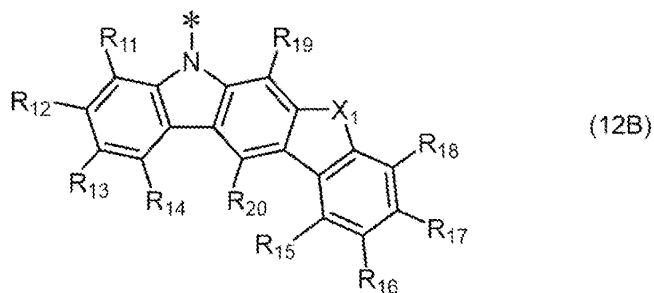
[0799] 본 실시형태에 따른 화합물에 있어서, 상기 일반식(12)로 표시되는 기는, 하기 일반식 (12A), (12B), (12C), (12D), (12E) 및 (12F)로 표시되는 기로 이루어진 군에서 선택되는 어느 하나의 기인 것이 바람직하다.

[0800] [화학식 39]



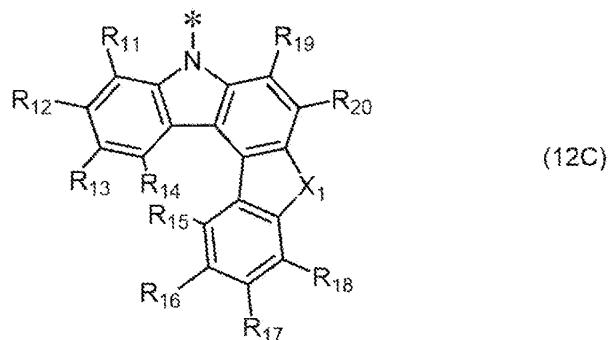
[0801]

[0802] [화학식 40]



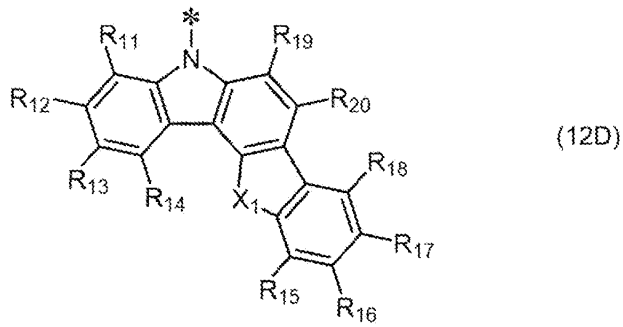
[0803]

[0804] [화학식 41]



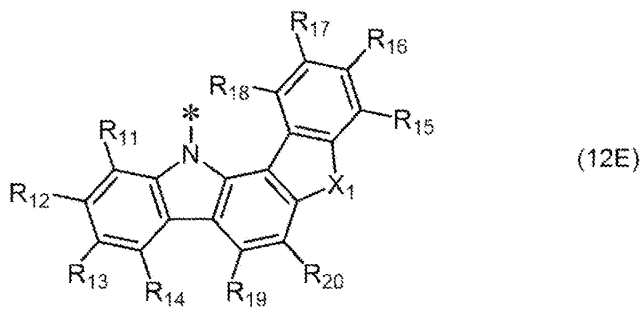
[0805]

[0806] [화학식 42]



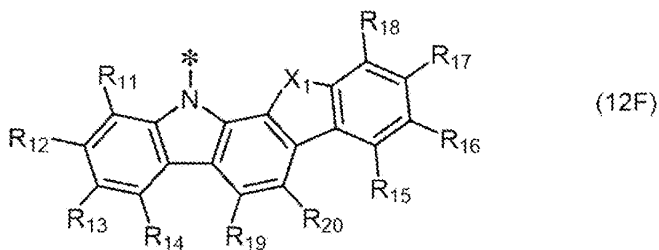
[0807]

[0808] [화학식 43]



[0809]

[0810] [화학식 44]



[0811]

[0812] (상기 일반식 (12A), (12B), (12C), (12D), (12E) 및 (12F)에 있어서,

[0813] R₁₁~R₁₈은 각각 독립적으로 상기 일반식(12)에서의 R₁₁~R₁₈과 동의이며,

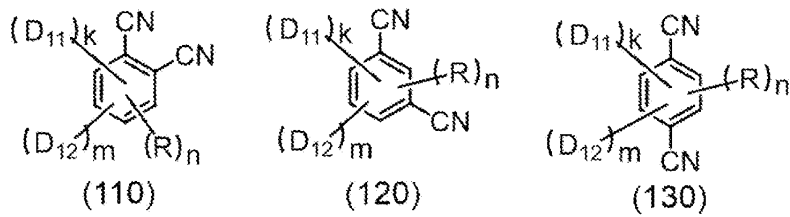
[0814] R₁₉ 및 R₂₀은 각각 독립적으로 상기 일반식(14)에서의 R₁₉와 동의이며,

[0815] X₁은 상기 일반식(15)에서의 X₁과 동의이며,

[0816] 상기 일반식 (12A), (12B), (12C), (12D), (12E) 및 (12F) 중의 *은, 상기 일반식(1) 중의 벤젠환과의 결합 위치를 나타낸다.)

[0817] 본 실시형태에 따른 화합물에 있어서, 상기 일반식(1)로 표시되는 화합물은, 하기 일반식(110), 일반식(120) 또는 일반식(130)으로 표시되는 것이 바람직하다.

[0818] [화학식 45]



[0819]

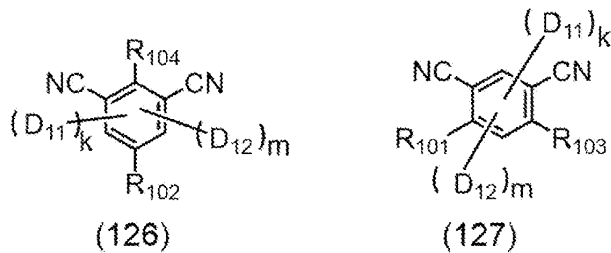
[0820] (상기 일반식(110), 일반식(120) 및 일반식(130)에 있어서, D_{11} , D_{12} , R , k , m 및 n 은, 각각 상기 일반식(1)에서의 D_{11} , D_{12} , R , k , m 및 n 과 동의이다.)

[0821] 본 실시형태에 따른 화합물에 있어서, 상기 일반식(1) 중의 n 은 2 또는 3인 것이 바람직하다.

[0822] 본 실시형태에 따른 화합물에 있어서, 상기 일반식(1) 중의 n 은 2인 것도 바람직하다.

[0823] 본 실시형태에 따른 화합물에 있어서, 상기 일반식(1)로 표시되는 화합물은, 하기 일반식(126) 또는 일반식(127)로 표시되는 것도 바람직하다.

[0824] [화학식 46]



[0825]

[0826] (상기 일반식(126) 및 일반식(127)에 있어서, D_{11} 은 상기 일반식(1)에서의 D_{11} 과 동의이며, D_{12} 는 상기 일반식(1)에서의 D_{12} 와 동의이며, $R_{101} \sim R_{104}$ 는 각각 독립적으로 상기 일반식(1)에서의 R 과 동의이며, k 는 1 또는 2이며, m 은 0 또는 1이며, $k+m$ 은 2이다.)

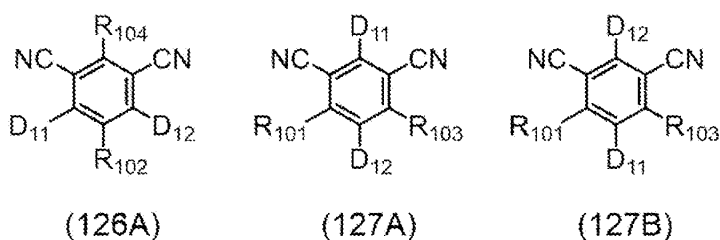
[0827] 본 실시형태에 따른 화합물에 있어서, k 가 2이며, 2개의 D_{11} 중, 한쪽의 D_{11} 이 상기 일반식(12)로 표시되는 기이며, 다른 한쪽의 D_{11} 이 상기 일반식(13)으로 표시되는 기인 것도 바람직하다.

[0828] 본 실시형태에 따른 화합물에 있어서, k 가 2이며, 2개의 D_{11} 이 상기 일반식(13)으로 표시되는 기이며, D_{11} 로서의 2개의 일반식(13)으로 표시되는 기가 서로 상이한 것도 바람직하다.

[0829] 본 실시형태에 따른 화합물에 있어서, k 및 m 이 1이며, D_{11} 및 D_{12} 중, 한쪽이 상기 일반식(12)로 표시되는 기이며, 다른 한쪽이 상기 일반식(13)으로 표시되는 기인 것도 바람직하다.

[0830] 본 실시형태에 따른 화합물에 있어서, 상기 일반식(1)로 표시되는 화합물은, 하기 일반식(126A), 일반식(127A) 또는 일반식(127B)로 표시되는 것도 바람직하다.

[0831] [화학식 47]



[0832]

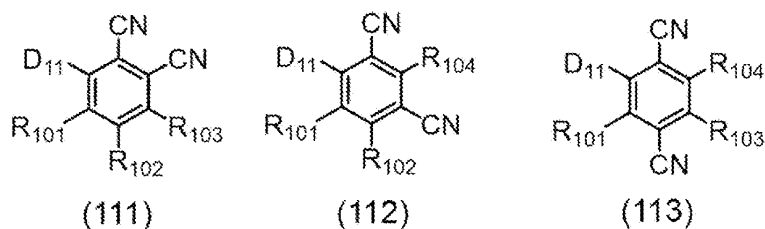
[0833] (상기 일반식(126A), 일반식(127A) 및 일반식(127B)에 있어서, D_{11} 은 상기 일반식(1)에서의 D_{11} 과 동의이며, D_{12} 는 상기 일반식(1)에서의 D_{12} 와 동의이며, $R_{101} \sim R_{104}$ 는 각각 독립적으로 상기 일반식(1)에서의 R과 동의이다.)

[0834] 상기 일반식(126A), 일반식(127A) 및 일반식(127B)에 있어서, D_{11} 및 D_{12} 는 서로 상이한 기인 것이 바람직하다.

[0835] 본 실시형태에 따른 화합물에 있어서, 상기 일반식(1) 중의 n이 3인 것도 바람직하다.

[0836] 본 실시형태에 따른 화합물에 있어서, 상기 일반식(1)로 표시되는 화합물은, 하기 일반식(111), 일반식(112) 또는 일반식(113)으로 표시되는 것도 바람직하다.

[0837] [화학식 48]



[0838]

[0839] (상기 일반식(111), 일반식(112) 및 일반식(113)에 있어서, D_{11} 은 상기 일반식(1)에서의 D_{11} 과 동의이며, $R_{101} \sim R_{104}$ 는 각각 독립적으로 상기 일반식(1)에서의 R과 동의이다.)

[0840] 본 실시형태에 따른 화합물에 있어서, 복수의 R 중의 인접하는 2개 이상으로 이루어진 조는, 모두 서로 결합하지 않는다.

[0841] 본 실시형태에 따른 화합물에 있어서, $R_{101} \sim R_{104}$ 중의 인접하는 2개 이상으로 이루어진 조는, 모두 서로 결합하지 않는다.

[0842] 본 실시형태에 따른 화합물에 있어서, 상기 일반식(1) 중의 R은, 각각 독립적으로 치환 혹은 무치환의 고리 형성 탄소수 6~14의 아릴기, 또는 치환 혹은 무치환의 고리 형성 원자수 5~14의 복소환기인 것이 바람직하다.

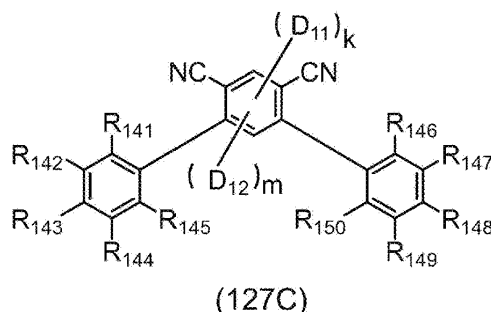
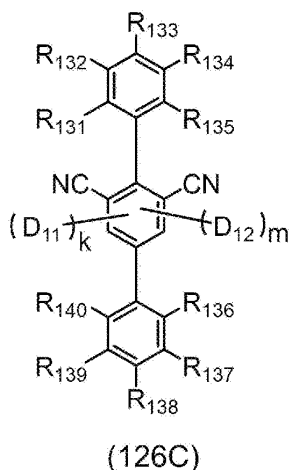
[0843] 본 실시형태에 따른 화합물에 있어서, 상기 일반식(1) 중의 R은, 각각 독립적으로 치환 혹은 무치환의 페닐기, 또는 치환 혹은 무치환의 고리 형성 원자수 6의 복소환기인 것이 바람직하다.

[0844] 본 실시형태에 따른 화합물에 있어서, $R_{101} \sim R_{104}$ 는, 각각 독립적으로 치환 혹은 무치환의 고리 형성 탄소수 6~14의 아릴기, 또는 치환 혹은 무치환의 고리 형성 원자수 5~14의 복소환기인 것이 바람직하다.

[0845] 본 실시형태에 따른 화합물에 있어서, $R_{101} \sim R_{104}$ 는, 각각 독립적으로 치환 혹은 무치환의 페닐기, 또는 치환 혹은 무치환의 고리 형성 원자수 6의 복소환기인 것이 바람직하다.

[0846] 본 실시형태에 따른 화합물에 있어서, 상기 일반식(1)로 표시되는 화합물은, 하기 일반식(126C) 또는 (127C)로 표시되는 것도 바람직하다.

[0847] [화학식 49]

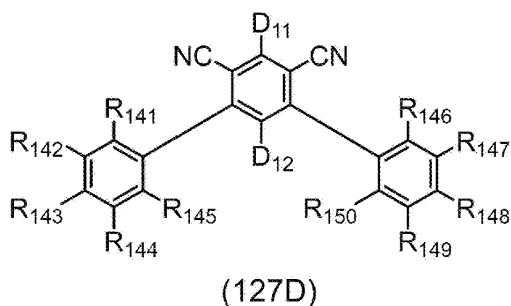
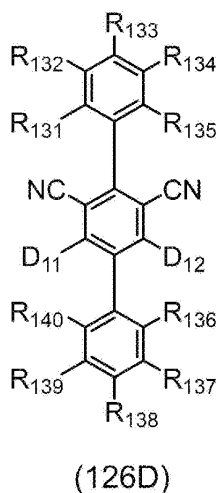


[0848]

[0849] (상기 일반식(126C) 및 일반식(127C)에 있어서, D_{11} 은 상기 일반식(1)에서의 D_{11} 과 동의이며, D_{12} 는 상기 일반식(1)에서의 D_{12} 와 동의이며, $R_{131} \sim R_{140}$ 및 $R_{141} \sim R_{150}$ 은 각각 독립적으로 상기 일반식(1)에서의 R과 동의이며, k는 1 또는 2이며, m은 0 또는 1이며, k+m은 2이다.)

[0850] 본 실시형태에 따른 화합물에 있어서, 상기 일반식(1)로 표시되는 화합물은, 하기 일반식(126D) 또는 (127D)로 표시되는 것도 바람직하다.

[0851] [화학식 50]



[0852]

[0853] (상기 일반식(126D) 및 (127D)에 있어서, D_{11} 은 상기 일반식(1)에서의 D_{11} 과 동의이며, D_{12} 는 상기 일반식(1)에서의 D_{12} 와 동의이며, $R_{131} \sim R_{140}$ 및 $R_{141} \sim R_{150}$ 은 각각 독립적으로 상기 일반식(1)에서의 R과 동의이다.)

[0854] 본 실시형태에 따른 화합물에 있어서, D_{11} 은 상기 일반식(132)로 표시되는 기이며, D_{12} 는 상기 일반식 (12A)~(12F)의 어느 하나로 표시되는 기인 것이 바람직하다.

[0855] 본 실시형태에 따른 화합물에 있어서, $R_{131} \sim R_{140}$ 및 $R_{141} \sim R_{150}$ 은, 각각 독립적으로 수소 원자, 치환 혹은 무치환의 탄소수 1~50의 알킬기, 치환 혹은 무치환의 고리 형성 탄소수 3~50의 시클로알킬기, 치환 혹은 무치환의 고리 형성 탄소수 6~50의 아릴기, 또는 치환 혹은 무치환의 고리 형성 원자수 5~50의 복소환기인 것이 바람직하고, 수소 원자, 치환 혹은 무치환의 탄소수 1~50의 알킬기, 또는 치환 혹은 무치환의 고리 형성 탄소수 6~50의 아릴기인 것이 보다 바람직하다.

[0856] 본 실시형태에 따른 화합물에 있어서, $R_1 \sim R_8$ 중의 인접하는 2개 이상으로 이루어진 조는, 모두 서로 결합하지

않는다.

- [0857] 본 실시형태에 따른 화합물에 있어서, $R_{11} \sim R_{18}$ 중의 인접하는 2개 이상으로 이루어진 조는, 모두 서로 결합하지 않는 것이 바람직하다.
- [0858] 본 실시형태에 따른 화합물에 있어서, $R_{11} \sim R_{20}$ 중의 인접하는 2개 이상으로 이루어진 조는, 모두 서로 결합하지 않는 것이 바람직하다.
- [0859] 본 실시형태에 따른 화합물에 있어서, $R_{111} \sim R_{118}$ 중의 인접하는 2개 이상으로 이루어진 조는, 모두 서로 결합하지 않는 것이 바람직하다.
- [0860] 본 실시형태에 따른 화합물에 있어서, 상기 일반식(11)에서의 $R_1 \sim R_8$, 상기 일반식(12)에서의 $R_{11} \sim R_{18}$, 상기 일반식(13)에서의 $R_{111} \sim R_{118}$ 및 상기 일반식(14)에서의 R_{19} 는, 각각 독립적으로 수소 원자, 치환 혹은 무치환의 탄소수 1~50의 알킬기, 치환 혹은 무치환의 고리 형성 탄소수 3~50의 시클로알킬기, 또는 치환 혹은 무치환의 고리 형성 탄소수 6~50의 아릴기인 것이 바람직하다.
- [0861] 본 실시형태에 따른 화합물에 있어서, 상기 일반식(11)에서의 $R_1 \sim R_8$, 상기 일반식(12)에서의 $R_{11} \sim R_{18}$, 상기 일반식(13)에서의 $R_{111} \sim R_{118}$ 및 상기 일반식(14)에서의 R_{19} 는, 각각 독립적으로 수소 원자, 무치환의 탄소수 1~50의 알킬기, 무치환의 고리 형성 탄소수 3~50의 시클로알킬기, 또는 무치환의 고리 형성 탄소수 6~50의 아릴기인 것이 바람직하다.
- [0862] 본 실시형태에 따른 화합물에 있어서, $R_{191} \sim R_{198}$ 은, 각각 독립적으로 수소 원자, 치환 혹은 무치환의 탄소수 1~50의 알킬기, 치환 혹은 무치환의 고리 형성 탄소수 3~50의 시클로알킬기, 또는 치환 혹은 무치환의 고리 형성 탄소수 6~50의 아릴기인 것이 바람직하고, 수소 원자, 무치환의 탄소수 1~50의 알킬기, 무치환의 고리 형성 탄소수 3~50의 시클로알킬기, 또는 무치환의 고리 형성 탄소수 6~50의 아릴기인 것이 보다 바람직하다.
- [0863] 본 실시형태에 따른 화합물은, 지연 형광성의 화합물인 것이 바람직하다.
- [0864] · 지연 형광성
- [0865] 지연 형광에 대해서는, 「유기 반도체의 디바이스 물성」(아다치 치하야 편, 고단샤 발행)의 261~268 페이지에 해설되어 있다. 그 문헌 중에서, 형광 발광 재료의 여기 일중항 상태와 여기 삼중항 상태의 에너지 차 ΔE_{13} 을 작게 할 수 있으면, 통상은 천이 확률이 낮은 여기 삼중항 상태에서부터 여기 일중항 상태로의 역에너지 이동이 고효율로 발생하여, 열활성화 지연 형광(Thermally Activated delayed Fluorescence, TADF)이 발현된다고 설명되어 있다. 또한, 해당 문헌 중의 도 10.38에, 지연 형광의 발생 메커니즘이 설명되어 있다. 본 실시형태에 따른 화합물은, 이러한 메커니즘으로 발생하는 열활성화 지연 형광을 나타내는 화합물인 것이 바람직하다.
- [0866] 일반적으로, 지연 형광의 발광은 과도 PL(Photo Luminescence) 측정에 의해 확인할 수 있다.
- [0867] 과도 PL 측정으로부터 얻은 감쇠 곡선에 기초하여 지연 형광의 거동을 해석할 수도 있다. 과도 PL 측정이란, 시료에 펄스 레이저를 조사하여 여기시키고, 조사를 정지한 후의 PL 발광의 감쇠 거동(과도 특성)을 측정하는 수법이다. TADF 재료에서의 PL 발광은, 최초의 PL 여기에서 생성되는 일중항 여기자로부터의 발광 성분과, 삼중항 여기자를 경유하여 생성되는 일중항 여기자로부터의 발광 성분으로 분류된다. 최초의 PL 여기에서 생성되는 일중항 여기자의 수명은, 나노초 오더이며, 매우 짧다. 그 때문에, 해당 일중항 여기자로부터의 발광은, 펄스 레이저를 조사 후, 빠르게 감쇠한다.
- [0868] 한편, 지연 형광은, 수명이 긴 삼중항 여기자를 경유하여 생성되는 일중항 여기자로부터의 발광이므로 서서히 감쇠한다. 이와 같이 최초의 PL 여기에서 생성되는 일중항 여기자로부터의 발광과, 삼중항 여기자를 경유하여 생성되는 일중항 여기자로부터의 발광에서는, 시간적으로 큰 차이가 있다. 그 때문에, 지연 형광 유래의 발광 강도를 구할 수 있다.
- [0869] 도 1에는, 과도 PL을 측정하기 위한 예시적 장치의 개략도가 도시되어 있다. 도 1을 이용한 과도 PL의 측정 방법, 및 지연 형광의 거동 해석의 일례를 설명한다.
- [0870] 도 1의 과도 PL 측정 장치(100)는, 소정 파장의 광을 조사 가능한 펄스 레이저부(101)와, 측정 시료를 수용하는 시료실(102)과, 측정 시료로부터 방사된 광을 분광하는 분광기(103)와, 2차원 이미지를 결상하기 위한 스트리크

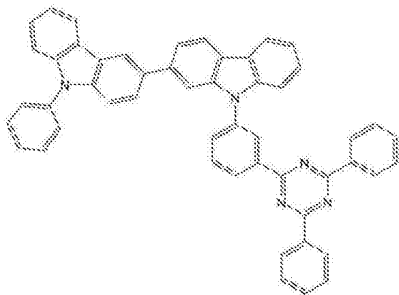
카메라(104)와, 2차원 이미지를 취입하여 분석하는 퍼스널 컴퓨터(105)를 구비한다. 한편, 과도 PL의 측정은, 도 1에 기재된 장치에 한정되지 않는다.

[0871] 시료실(102)에 수용되는 시료는, 매트릭스 재료에 대하여, 도핑 재료가 12 질량%의 농도로 도핑된 박막을 석영 기판에 성막함으로써 얻어진다.

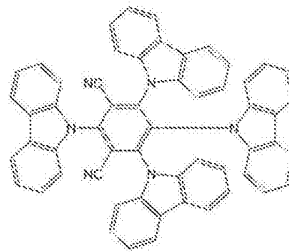
[0872] 시료실(102)에 수용된 박막 시료에 대하여, 펄스 레이저부(101)로부터 펄스 레이저를 조사하여 도핑 재료를 여기시킨다. 여기광의 조사 방향에 대하여 90도의 방향으로 발광을 취출하고, 취출한 광을 분광기(103)로 분광하고, 스트리크 카메라(104) 내에서 2차원 이미지를 결상한다. 그 결과, 종축이 시간에 대응하고, 횡축이 파장에 대응하고, 휘점이 발광 강도에 대응하는 2차원 화상을 얻을 수 있다. 이 2차원 화상을 소정의 시간축으로 잘라내면, 종축이 발광 강도이고, 횡축이 파장인 발광 스펙트럼을 얻을 수 있다. 또한, 상기 2차원 화상을 파장축으로 잘라내면, 종축이 발광 강도의 대수이고, 횡축이 시간인 감쇠 곡선(과도 PL)을 얻을 수 있다.

[0873] 예컨대, 매트릭스 재료로서 하기 참고 화합물 H1을 이용하고, 도핑 재료로서 하기 참고 화합물 D1을 이용하여, 전술한 바와 같이 하여 박막 시료 A를 제작하고, 과도 PL 측정을 행했다.

[0874] [화학식 51]



(참조 화합물 H1)



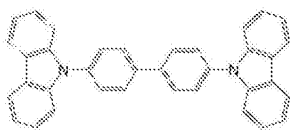
(참조 화합물 D1)

[0875]

[0876] 여기서, 전술한 박막 시료 A, 및 박막 시료 B를 이용하여 감쇠 곡선을 해석했다. 박막 시료 B는, 매트릭스 재료로서 하기 참고 화합물 H2를 이용하고, 도핑 재료로서 상기 참고 화합물 D1을 이용하여, 전술한 바와 같이 하여 박막 시료를 제작했다.

[0877] 도 2에는, 박막 시료 A 및 박막 시료 B에 대해 측정한 과도 PL로부터 얻은 감쇠 곡선이 도시되어 있다.

[0878] [화학식 52]



(참조 화합물 H2)

[0879]

[0880] 상기와 같이 과도 PL 측정에 의해, 종축을 발광 강도로 하고, 횡축을 시간으로 하는 발광 감쇠 곡선을 얻을 수 있다. 이 발광 감쇠 곡선에 기초하여, 광여기에 의해 생성된 일중항 여기 상태에서부터 발광하는 형광과, 삼중항 여기 상태를 경유하고, 역에너지 이동에 의해 생성되는 일중항 여기 상태에서부터 발광하는 지연 형광의, 형광 강도비를 추산할 수 있다. 지연 형광성의 재료에서는, 빠르게 감쇠하는 형광의 강도에 대하여, 서서히 감쇠하는 지연 형광의 강도의 비율이, 어느 정도 크다.

[0881] 구체적으로는, 지연 형광성의 재료로부터의 발광으로는, Prompt 발광(즉시 발광)과, Delay 발광(지연 발광)이 존재한다. Prompt 발광(즉시 발광)이란, 상기 지연 형광성의 재료가 흡수하는 파장의 펄스광(펄스 레이저로부터 조사되는 광)으로 여기된 후, 상기 여기 상태에서부터 즉시 관찰되는 발광이다. Delay 발광(지연 발광)이란, 상기 펄스광에 의한 여기 후, 즉시 관찰되지는 않고, 그 후 관찰되는 발광이다.

[0882] Prompt 발광과 Delay 발광의 양과 그의 비는, 문헌[“Nature 492, 234-238, 2012”](참고문헌 1)에 기재된 방법과 동일한 방법에 의해 구할 수 있다. 한편, Prompt 발광과 Delay 발광의 양의 산출에 사용되는 장치는, 상기

참고문헌 1에 기재된 장치, 또는 도 1에 기재된 장치에 한정되지 않는다.

- [0883] 또한, 본 실시형태에 따른 화합물의 지연 형광성의 측정에는, 다음에 나타내는 방법에 의해 제작한 시료를 이용한다. 예컨대, 본 실시형태에 따른 화합물을 톨루엔에 용해하고, 자기 흡수의 기여를 제거하기 위해 여기 파장에 있어서 흡광도가 0.05 이하인 희박 용액을 조제한다. 또한 산소에 의한 소광을 방지하기 위해, 시료 용액을 동결 탈기한 후에 아르곤 분위기 하에 덮개가 있는 셀에 봉입함으로써, 아르곤으로 포화된 무산소 시료 용액으로 한다.
- [0884] 상기 시료 용액의 형광 스펙트럼을 분광 형광 광도계 FP-8600(니혼분코사 제조)로 측정하고, 또한 동일한 조건으로 9,10-디페닐안트라센의 에탄올 용액의 형광 스펙트럼을 측정한다. 양 스펙트럼의 형광 면적 강도를 이용하여, 문헌[Morris et al. J. Phys. Chem. 80(1976) 969] 중의 (1)식에 의해 전체 형광 양자 수율을 산출한다.
- [0885] 본 실시형태에 있어서는, 측정 대상 화합물의 Prompt 발광(즉시 발광)의 양을 X_p 로 하고, Delay 발광(지연 발광)의 양을 X_d 로 했을 때, X_d/X_p 의 값이 0.05 이상인 것이 바람직하다.
- [0886] 본 명세서에서의 본 실시형태에 따른 화합물 이외의 화합물의 Prompt 발광과 Delay 발광의 양과 그의 비의 측정도, 본 실시형태에 따른 화합물의 Prompt 발광과 Delay 발광의 양과 그의 비의 측정과 동일하다.
- [0887] $\cdot \Delta ST$
- [0888] 본 실시형태에서는, 최저 여기 일중항 에너지 S_1 과, 77[K]에서의 에너지 갭 T_{77K} 의 차(S_1-T_{77K})를 ΔST 로서 정의한다.
- [0889] 본 실시형태에 따른 화합물의 최저 여기 일중항 에너지 $S_1(M1)$ 과, 본 실시형태에 따른 화합물의 77[K]에서의 에너지 갭 $T_{77K}(M1)$ 의 차 $\Delta ST(M1)$ 는, 바람직하게는 0.3 eV 미만, 보다 바람직하게는 0.2 eV 미만, 더욱 바람직하게는 0.1 eV 미만, 보다 더 바람직하게는 0.01 eV 미만이다. 즉, $\Delta ST(M1)$ 은, 하기 수식(수학식 10), (수학식 11), (수학식 12) 또는 (수학식 13)의 관계를 충족시키는 것이 바람직하다.
- [0890] $\Delta ST(M1)=S_1(M1)-T_{77K}(M1)<0.3 \text{ eV} \cdots (\text{수학식 } 10)$
- [0891] $\Delta ST(M1)=S_1(M1)-T_{77K}(M1)<0.2 \text{ eV} \cdots (\text{수학식 } 11)$
- [0892] $\Delta ST(M1)=S_1(M1)-T_{77K}(M1)<0.1 \text{ eV} \cdots (\text{수학식 } 12)$
- [0893] $\Delta ST(M1)=S_1(M1)-T_{77K}(M1)<0.01 \text{ eV} \cdots (\text{수학식 } 13)$
- [0894] $\cdot$ 삼중항 에너지와 77[K]에서의 에너지 갭의 관계
- [0895] 여기서, 삼중항 에너지와 77[K]에서의 에너지 갭의 관계에 대해 설명한다. 본 실시형태에서는, 77[K]에서의 에너지 갭은, 통상 정의되는 삼중항 에너지와는 상이한 점이 있다.
- [0896] 삼중항 에너지의 측정은, 다음과 같이 하여 행해진다. 우선, 측정 대상이 되는 화합물을 적절한 용매 중에 용해된 용액을 석영 유리관 내에 봉입한 시료를 제작한다. 이 시료에 대해, 저온(77[K])에서 인광 스펙트럼(종축: 인광 발광 강도, 횡축: 파장으로 한다.)을 측정하고, 이 인광 스펙트럼의 단파장측의 상승에 대하여 접선을 긋고, 그 접선과 횡축의 교점의 파장치에 기초하여, 소정의 환산식으로부터 삼중항 에너지를 산출한다.
- [0897] 여기서, 본 실시형태에 따른 화합물 중 열활성화 지연 형광성의 화합물은, ΔST 이 작은 화합물인 것이 바람직하다. ΔST 가 작으면, 저온(77[K]) 상태에서도, 항간 교차 및 역항간 교차가 발생하기 쉽고, 여기 일중항 상태와 여기 삼중항 상태가 혼재한다. 그 결과, 상기와 동일하게 하여 측정되는 스펙트럼은, 여기 일중항 상태 및 여기 삼중항 상태의 양자로부터의 발광을 포함하고 있고, 어떤 상태에서부터 발광했는지에 대해 준별(峻別)하는 것은 어렵지만, 기본적으로는 삼중항 에너지의 값이 지배적인 것으로 고려된다.
- [0898] 그 때문에, 본 실시형태에서는, 통상의 삼중항 에너지 T 와 측정 수법은 동일하지만, 그 엄밀한 의미에서 상이한 것을 구별하기 위해, 다음과 같이 하여 측정되는 값을 에너지 갭 T_{77K} 라고 칭한다. 측정 대상이 되는 화합물을 EPA(디에틸에테르:이소펜탄:에탄올=5:5:2(용적비)) 중에, 농도가 10 $\mu\text{mol/L}$ 가 되도록 용해하고, 이 용액을 석영 셀 중에 넣어 측정 시료로 한다. 이 측정 시료에 대해, 저온(77[K])에서 인광 스펙트럼(종축: 인광 발광 강도, 횡축: 파장으로 한다.)을 측정하고, 이 인광 스펙트럼의 단파장측의 상승에 대해 접선을 긋고, 그 접선과

횡축의 교점의 파장치 $\lambda_{\text{edge}}[\text{nm}]$ 에 기초하여, 다음 환산식 (F1)로부터 산출되는 에너지량을 77[K]에서의 에너지 갭 $T_{77\text{K}}$ 로 한다

[0899] 환산식 (F1): $T_{77\text{K}}[\text{eV}] = 1239.85 / \lambda_{\text{edge}}$

[0900] 인광 스펙트럼의 단파장측의 상승에 대한 접선은 이하와 같이 긋는다. 인광 스펙트럼의 단파장측으로부터, 스펙트럼의 극대치 중, 가장 단파장측의 극대치까지 스펙트럼 곡선 상을 이동할 때, 장파장측을 향해 곡선 상의 각 점에서의 접선을 고려한다. 이 접선은, 곡선이 상승함에 따라(즉 종축이 증가함에 따라), 기울기가 증가한다. 이 기울기의 값이 극대치를 취하는 점에 있어서 그 접선(즉 변곡점에서의 접선)을, 상기 인광 스펙트럼의 단파장측의 상승에 대한 접선으로 한다.

[0901] 한편, 스펙트럼의 최대 피크 강도의 15% 이하의 피크 강도를 갖는 극대점은, 전술한 가장 단파장측의 극대치에는 포함시키지 않고, 가장 단파장측의 극대치에 가장 가까운, 기울기의 값이 극대치를 취하는 점에 있어서 그 접선을 상기 인광 스펙트럼의 단파장측의 상승에 대한 접선으로 한다.

[0902] 인광의 측정에는, (주)히타치 하이테크놀로지 제조의 F-4500형 분광 형광 광도계 본체를 이용할 수 있다. 한편, 측정 장치는 이것에 한하지 않고, 냉각 장치, 및 저온용 용기와, 여기 광원과, 수광 장치를 조합함으로써, 측정해도 좋다.

[0903] · 최저 여기 일중향 에너지 S_1

[0904] 용액을 이용한 최저 여기 일중향 에너지 S_1 의 측정 방법(용액법이라고 칭하는 경우가 있음)으로는, 하기의 방법을 들 수 있다.

[0905] 측정 대상이 되는 화합물의 10 $\mu\text{mol/L}$ 톨루엔 용액을 조제하여 석영 셀에 넣고, 상온(300 K)에서 이 시료의 흡수 스펙트럼(종축: 흡수 강도, 횡축: 파장으로 함)을 측정한다. 이 흡수 스펙트럼의 장파장측의 하강에 대해 접선을 긋고, 그 접선과 횡축의 교점의 파장치 $\lambda_{\text{edge}}[\text{nm}]$ 를 다음에 나타내는 환산식 (F2)에 대입하여 최저 여기 일중향 에너지를 산출한다.

[0906] 환산식 (F2): $S_1[\text{eV}] = 1239.85 / \lambda_{\text{edge}}$

[0907] 흡수 스펙트럼 측정 장치로는, 예컨대 히타치사 제조의 분광 광도계(장치명: U3310)를 들 수 있지만, 이것에 한정되지 않는다.

[0908] 흡수 스펙트럼의 장파장측의 하강에 대한 접선은 이하와 같이 긋는다. 흡수 스펙트럼의 극대치 중, 가장 장파장측의 극대치로부터 장파장 방향으로 스펙트럼 곡선 상을 이동할 때, 곡선 상의 각 점에서의 접선을 고려한다. 이 접선은, 곡선이 하강함에 따라(즉 종축의 값이 감소함에 따라), 기울기가 감소하고 그 후 증가하는 것을 반복한다. 기울기의 값이 가장 장파장측(단, 흡광도가 0.1 이하가 되는 경우는 제외함)에서 극소치를 취하는 점에 있어서 그 접선을 해당 흡수 스펙트럼의 장파장측의 하강에 대한 접선으로 한다.

[0909] 한편, 흡광도의 값이 0.2 이하인 극대점은, 상기 가장 장파장측의 극대치에는 포함시키지 않는다.

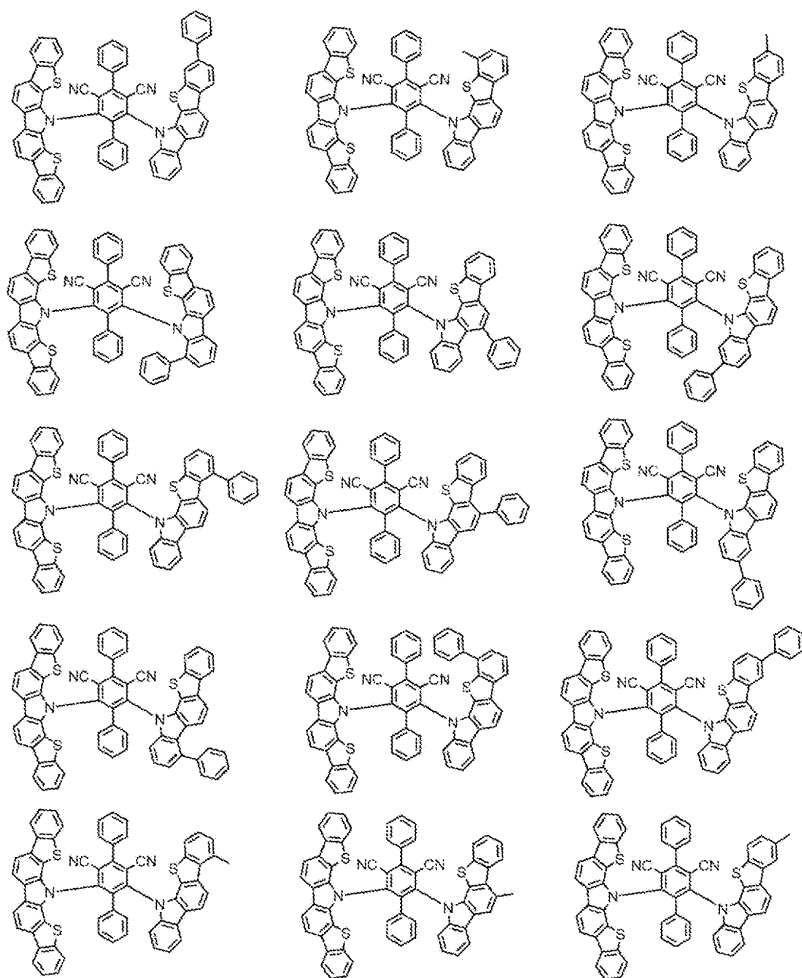
[0910] (본 실시형태에 따른 화합물의 제조 방법)

[0911] 본 실시형태에 따른 화합물은, 후술하는 실시예에 기재된 합성 방법에 따라, 또는 상기 합성 방법을 모방하여, 목적물에 맞춘 기지의 대체 반응 및 원료를 이용함으로써 제조할 수 있다.

[0912] (본 실시형태에 따른 화합물의 구체예)

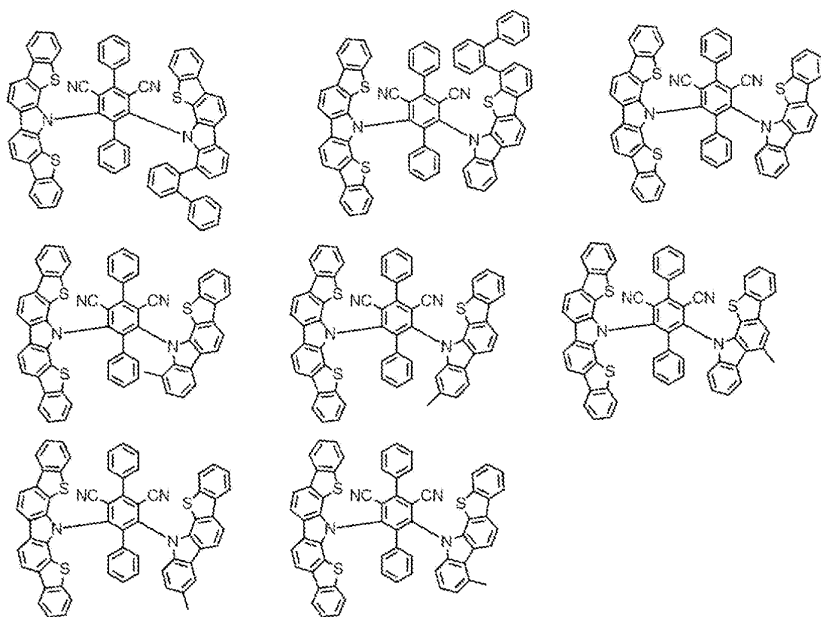
[0913] 본 실시형태에 따른 화합물의 구체예로는, 예컨대 이하의 화합물을 들 수 있다. 다만, 본 발명은, 이들 구체예에 한정되지 않는다. 본 명세서에 있어서, 중수소 원자는 화학식 중에서 D로 표기하고, 경수소 원자는 H로 표기하거나 또는 기재를 생략한다.

[0914] [화학식 53]



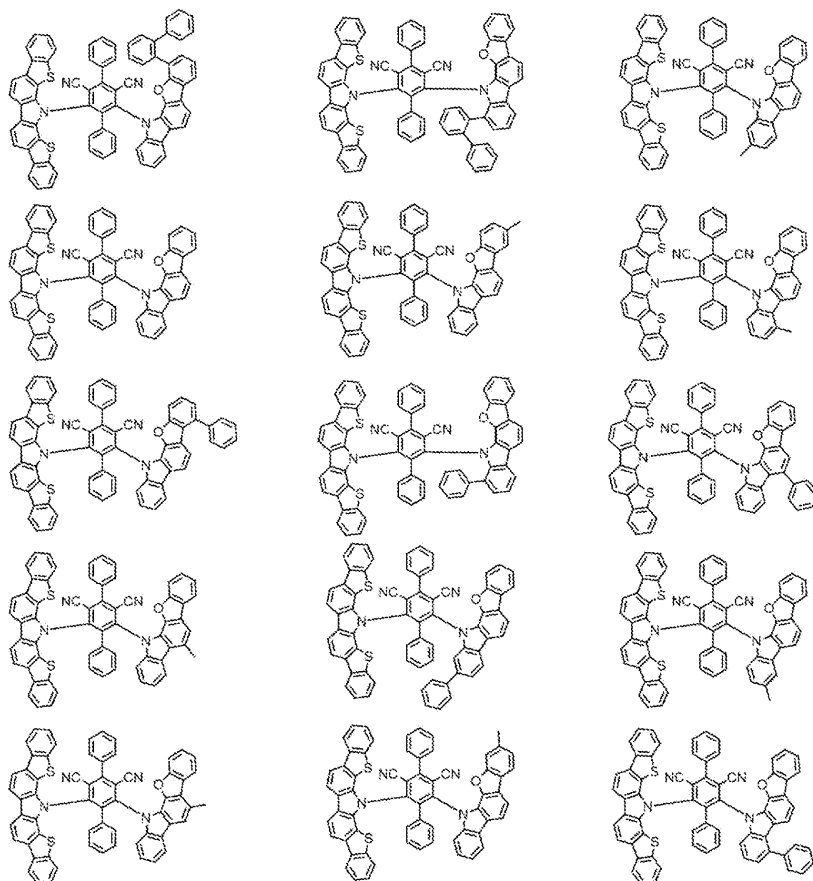
[0915]

[0916] [화학식 54]



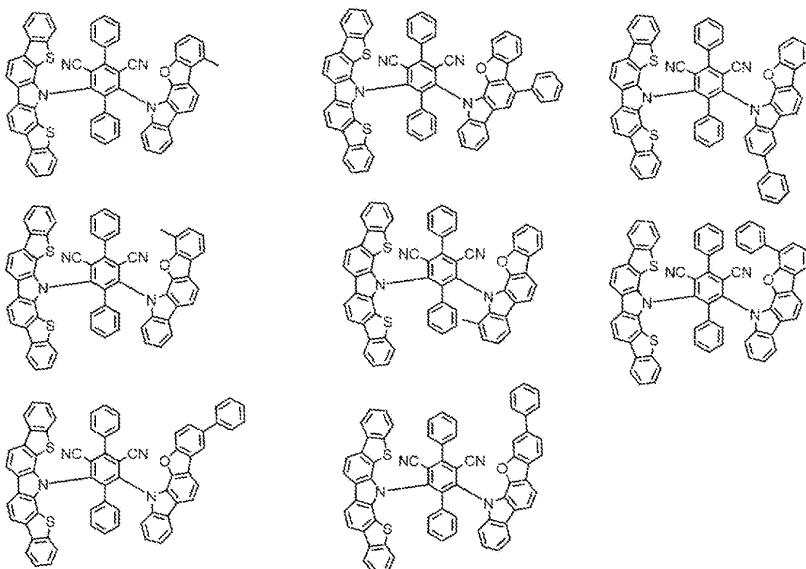
[0917]

[0918] [화학식 55]



[0919]

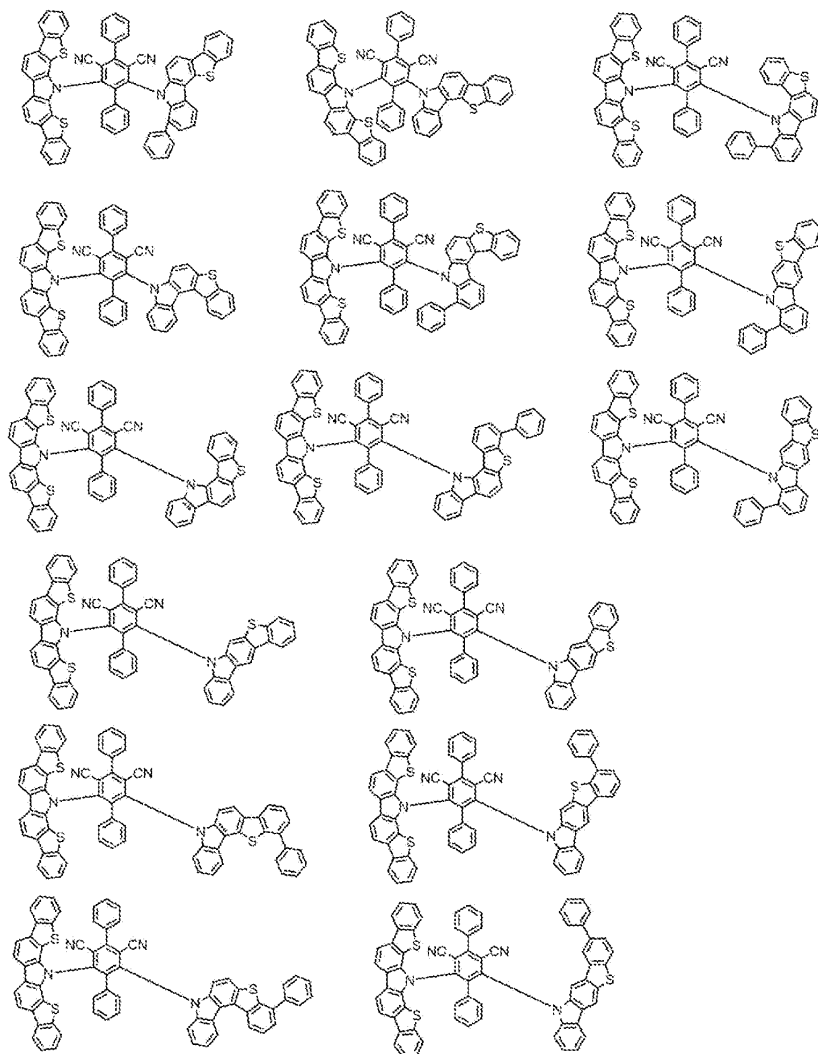
[0920] [화학식 56]



[0921]

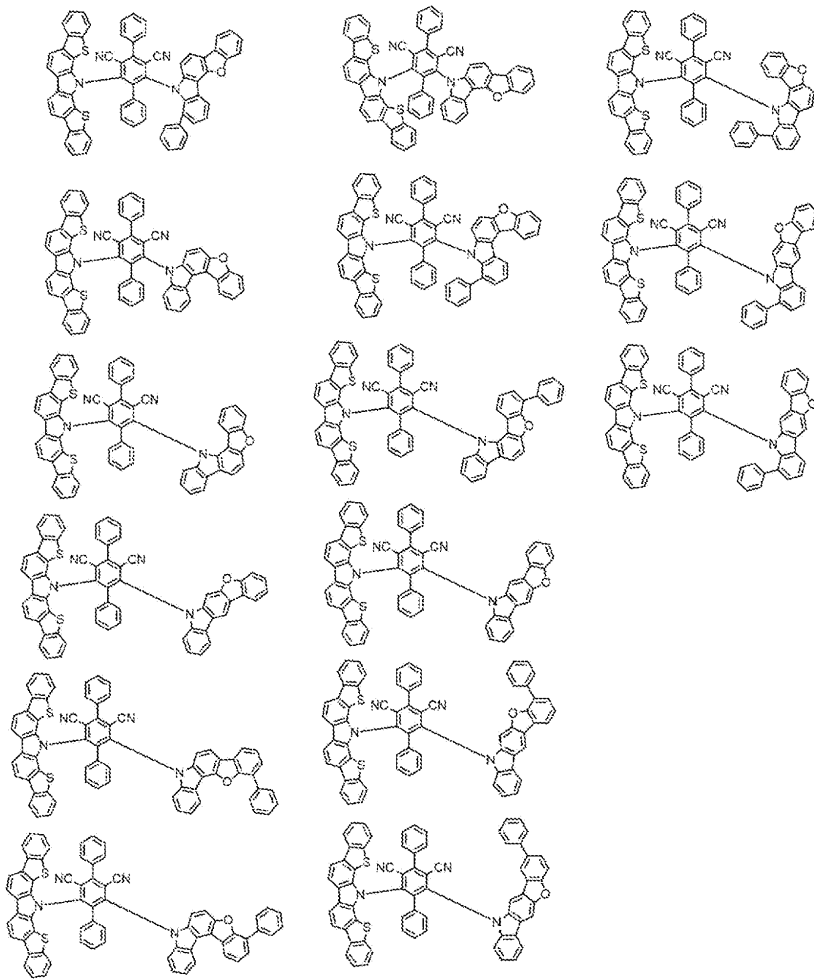
[0922]

[화학식 57]



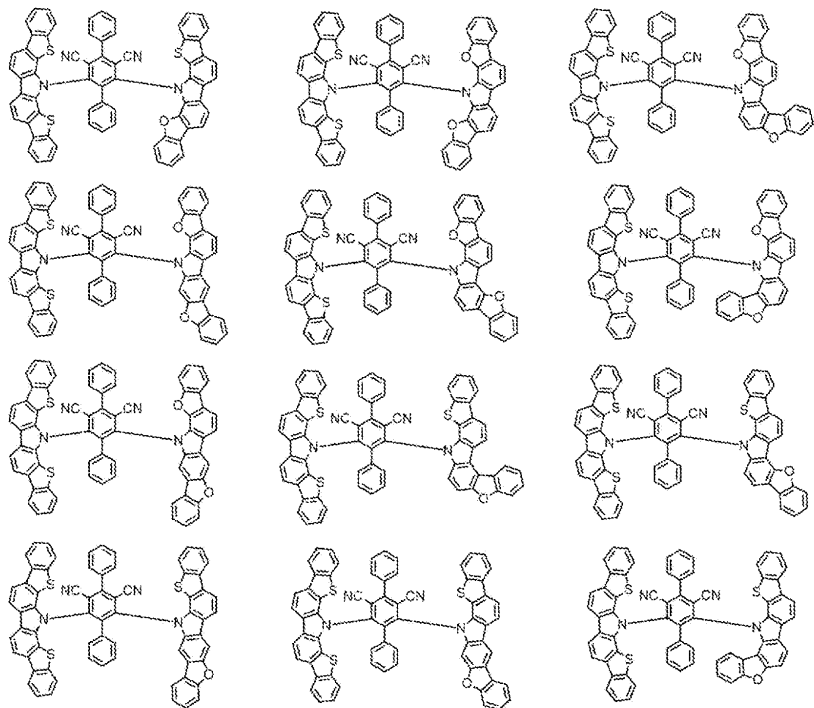
[0923]

[0924] [화학식 58]



[0925]

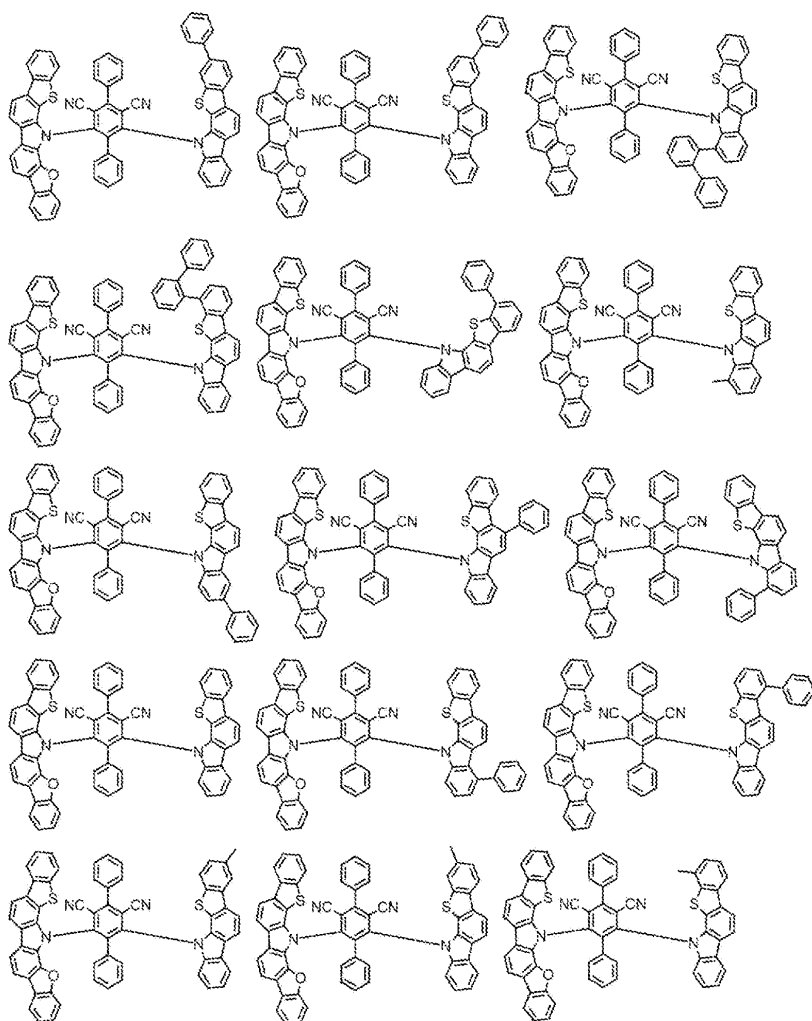
[0926] [화학식 59]



[0927]

[0928]

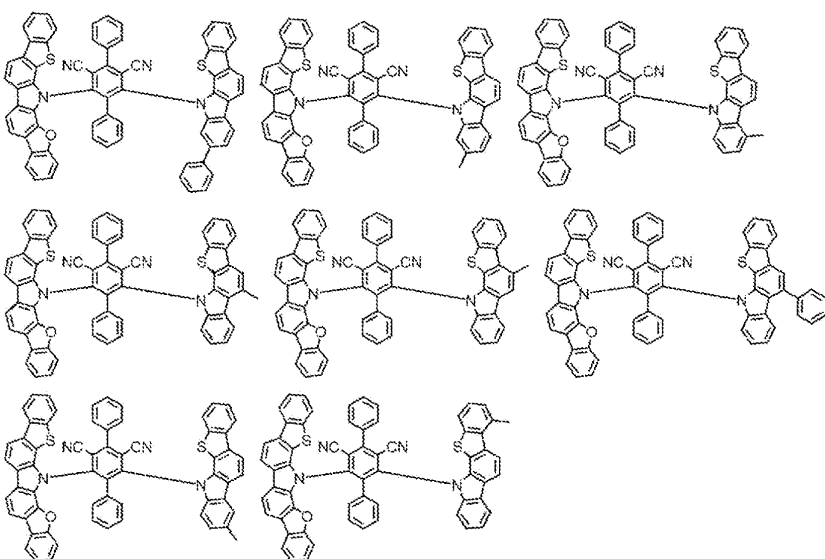
[화학식 60]



[0929]

[0930]

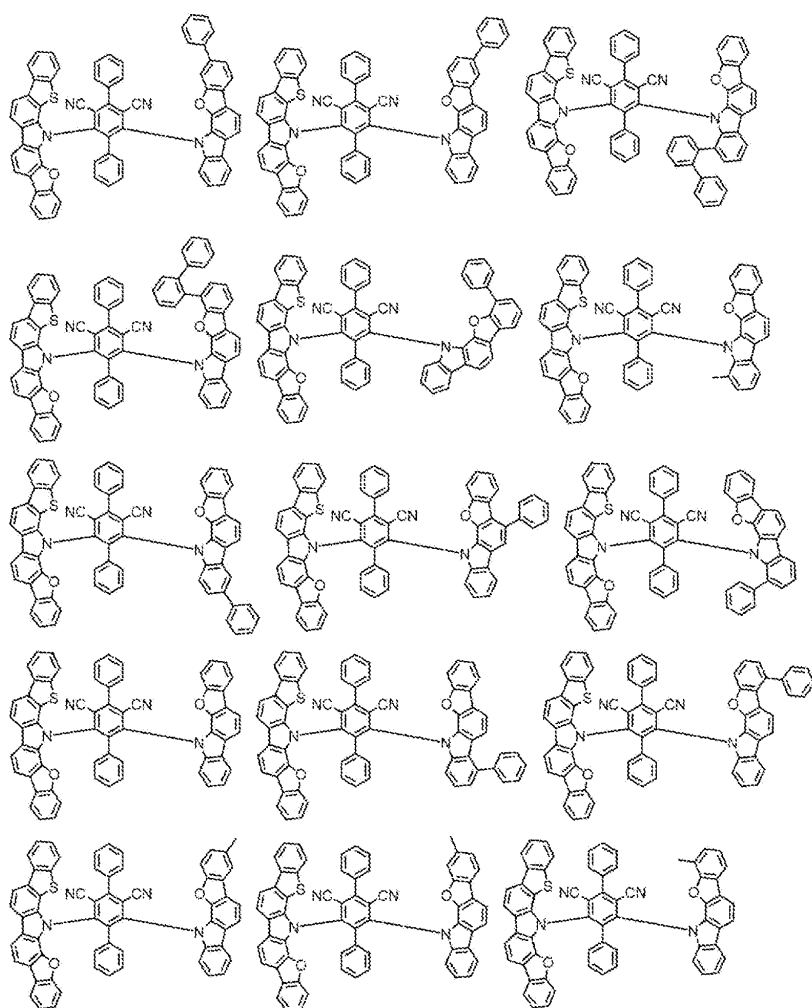
[화학식 61]



[0931]

[0932]

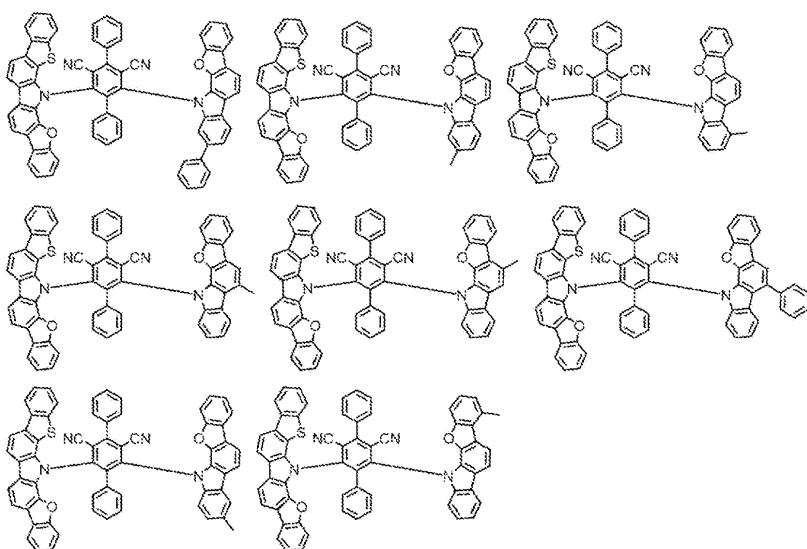
[화학식 62]



[0933]

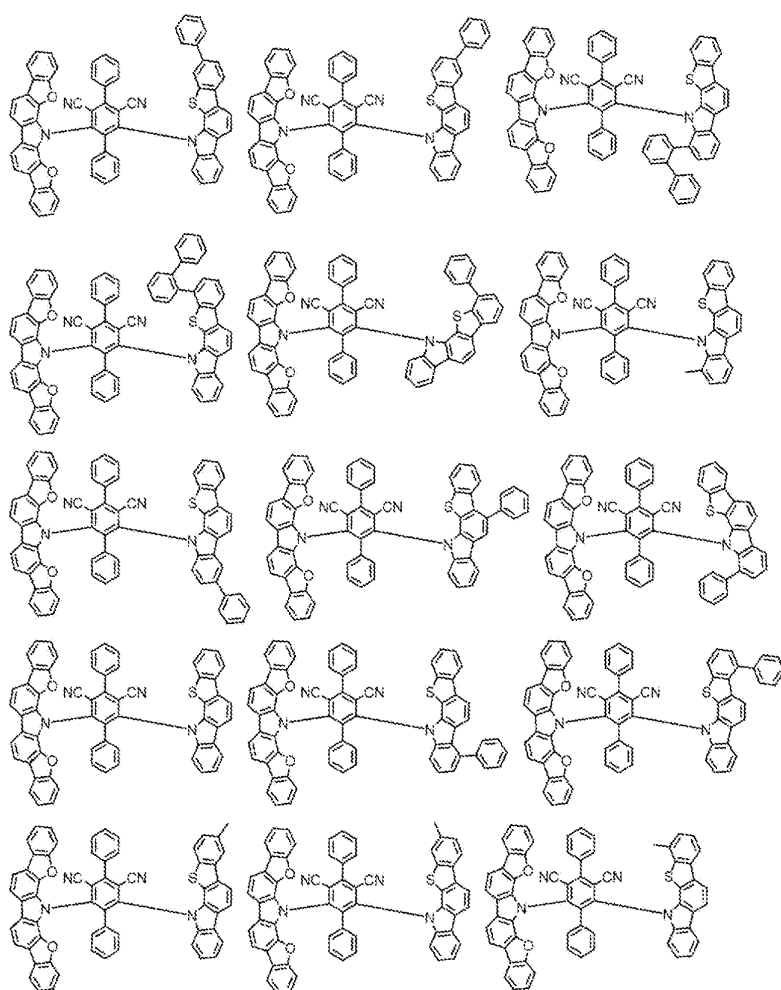
[0934]

[화학식 63]



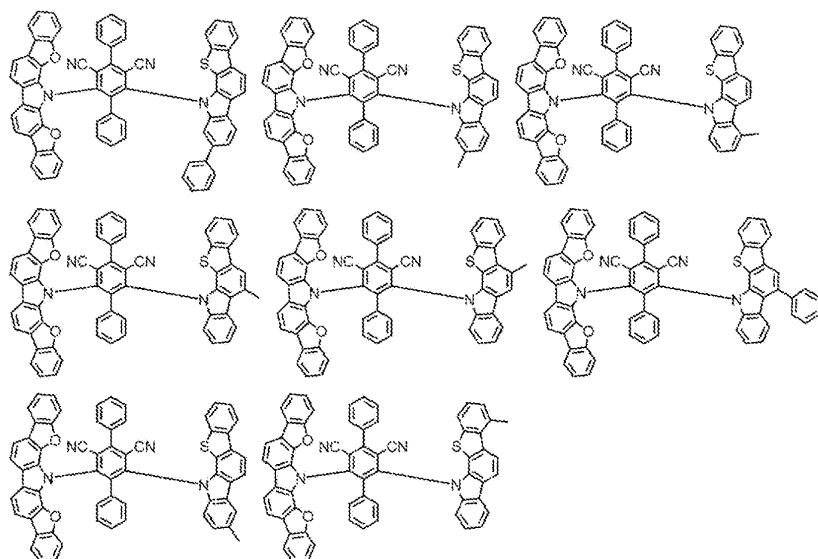
[0935]

[0936] [화학식 64]



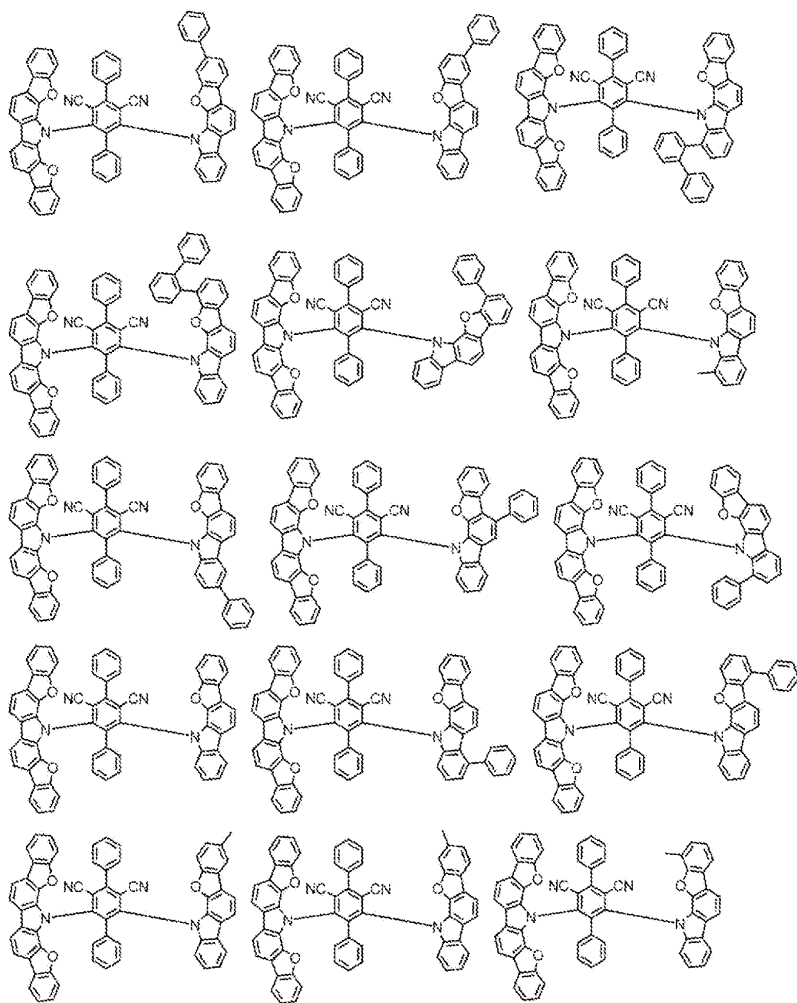
[0937]

[0938] [화학식 65]



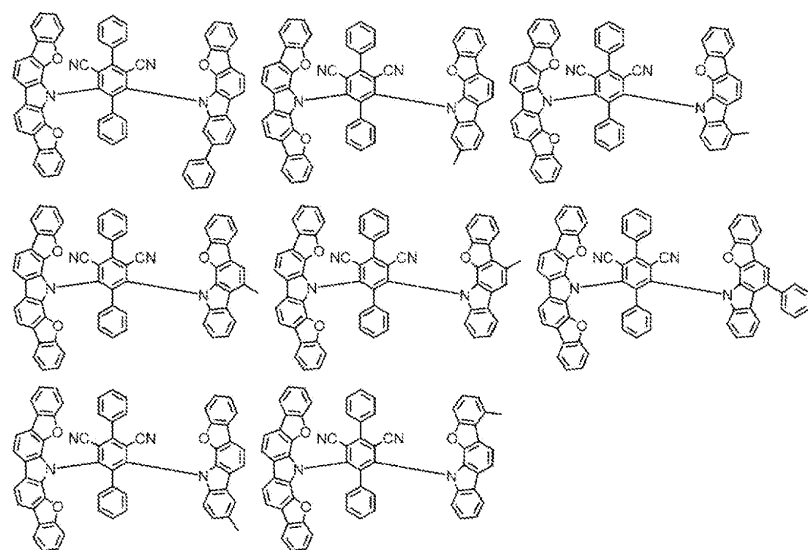
[0939]

[0940] [화학식 66]



[0941]

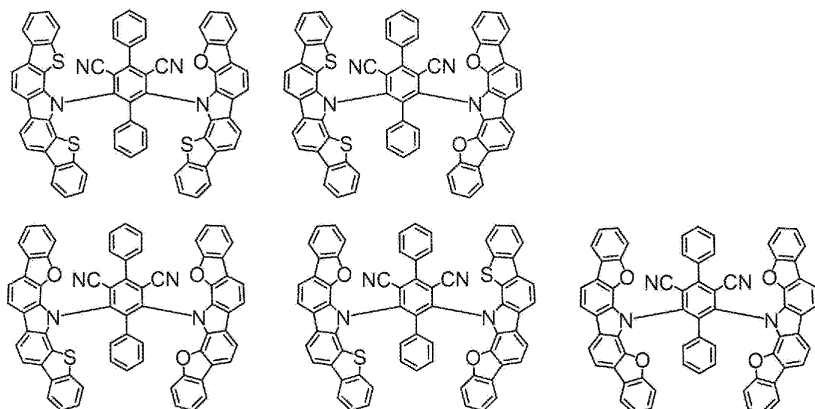
[0942] [화학식 67]



[0943]

[0944]

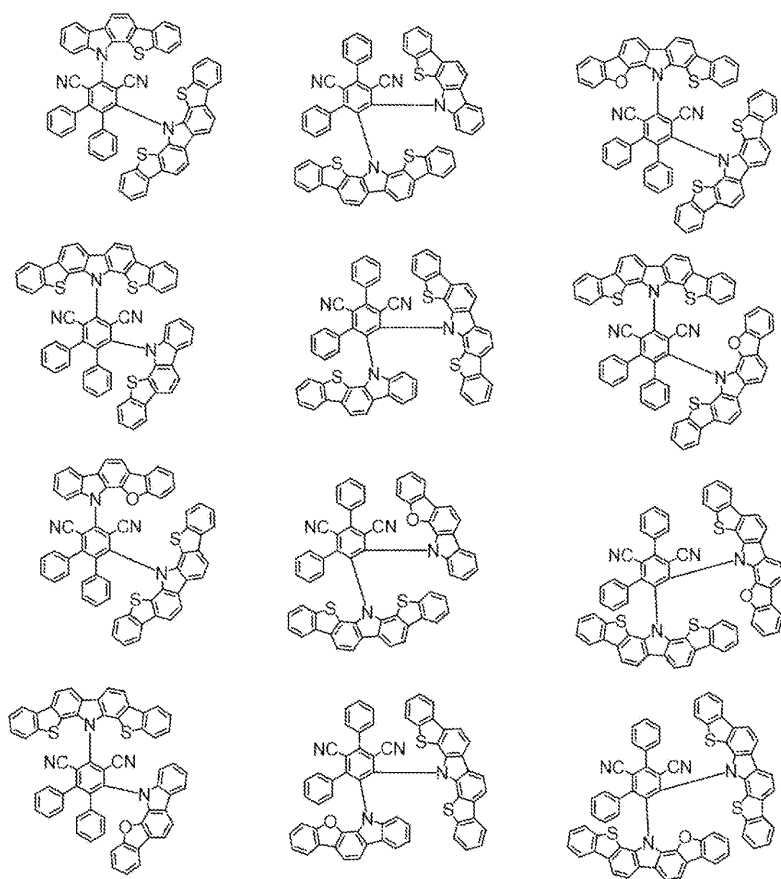
[화학식 68]



[0945]

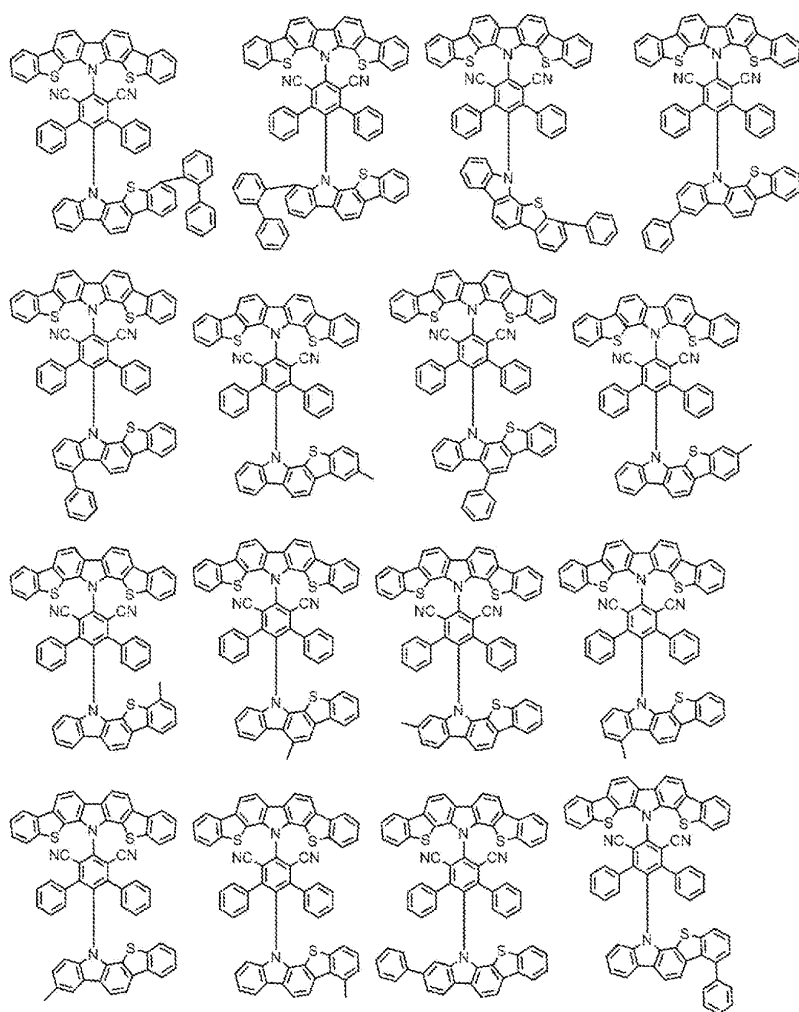
[0946]

[화학식 69]



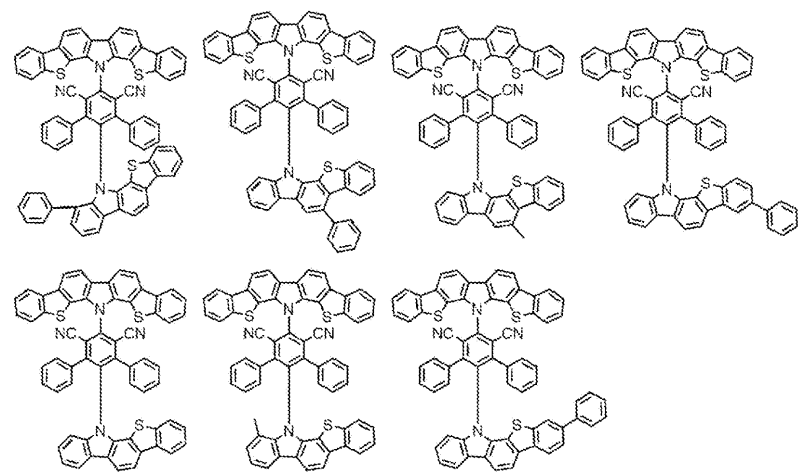
[0947]

[0948] [화학식 70]



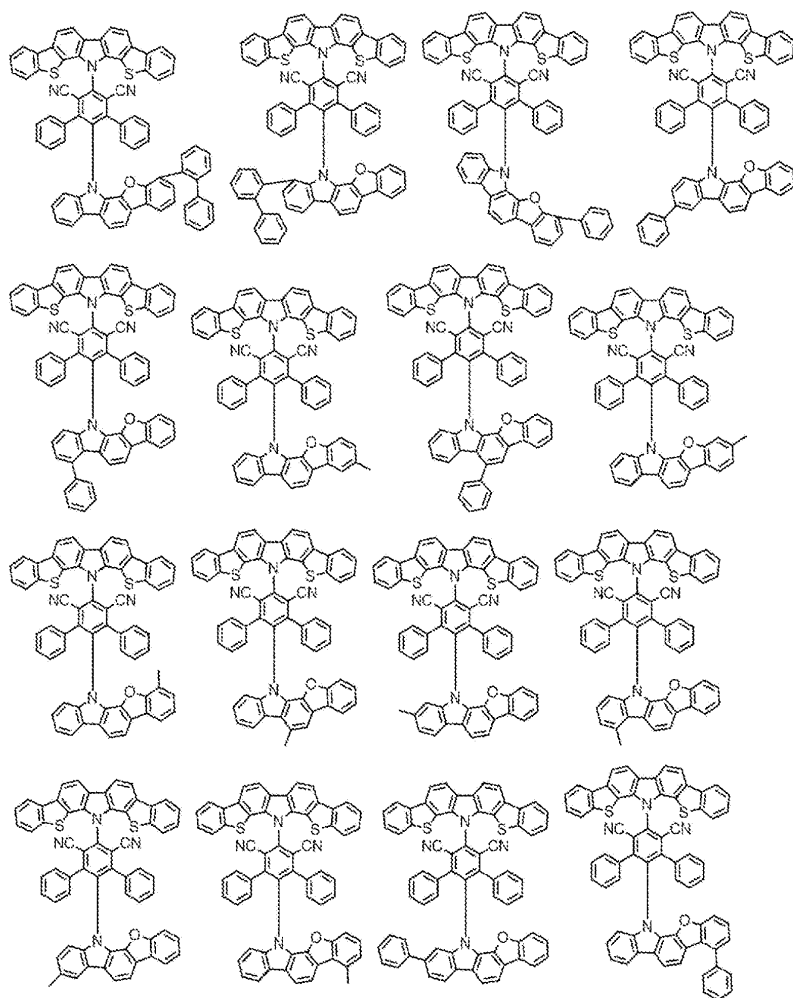
[0949]

[0950] [화학식 71]



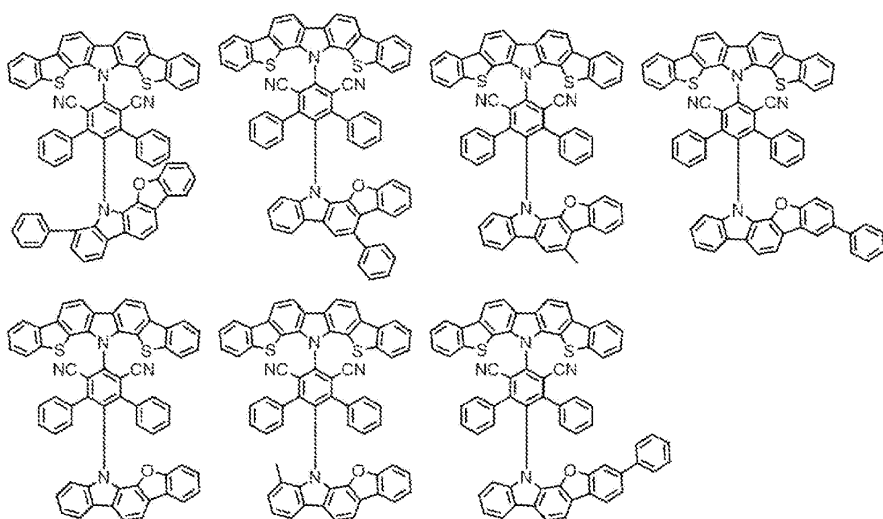
[0951]

[0952] [화학식 72]



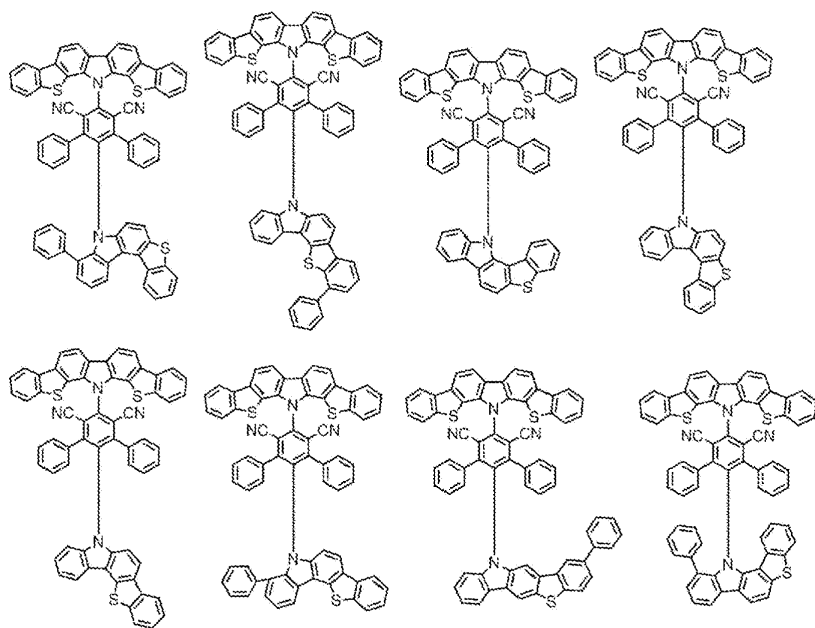
[0953]

[0954] [화학식 73]



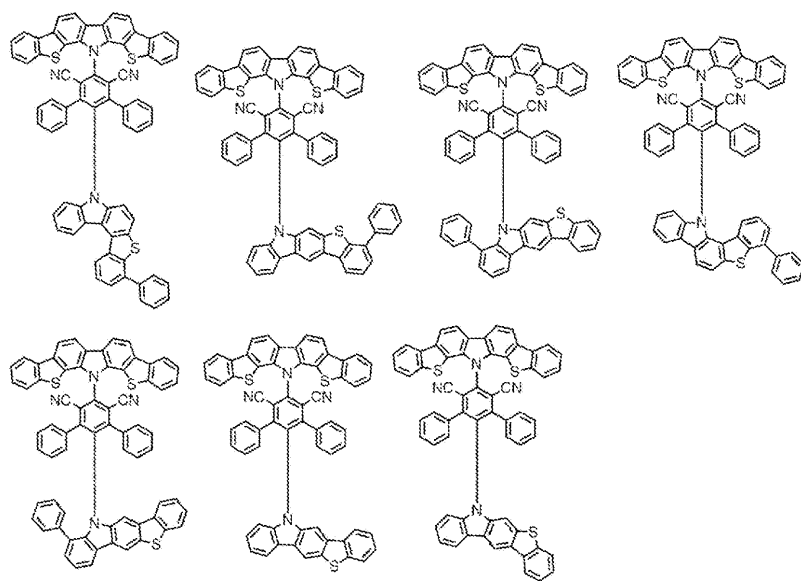
[0955]

[0956] [화학식 74]



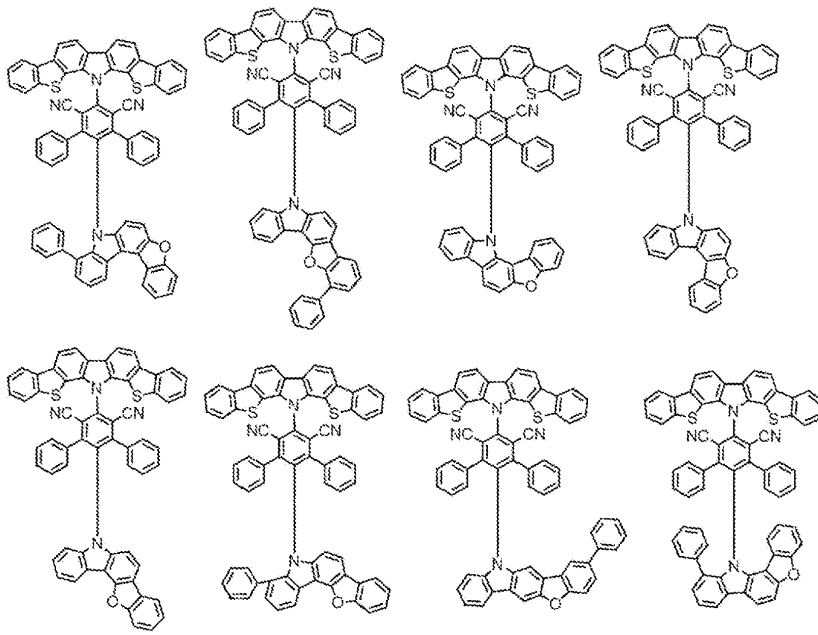
[0957]

[0958] [화학식 75]



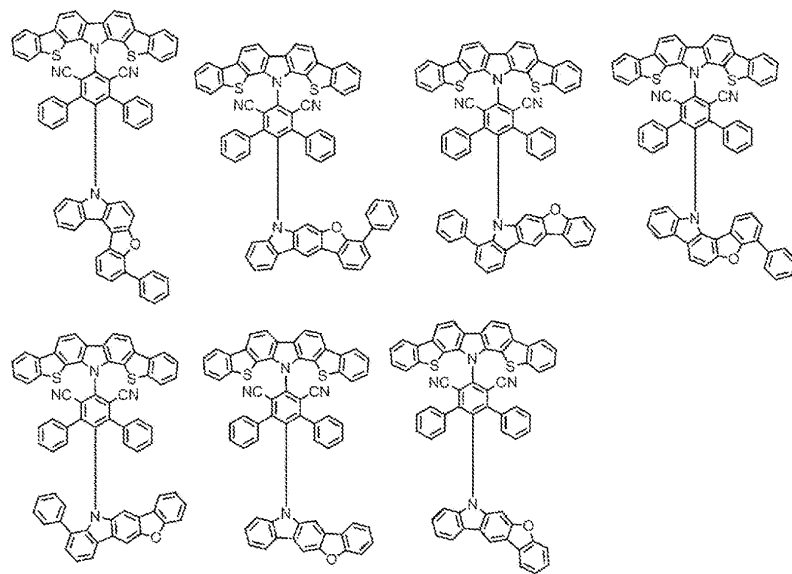
[0959]

[0960] [화학식 76]



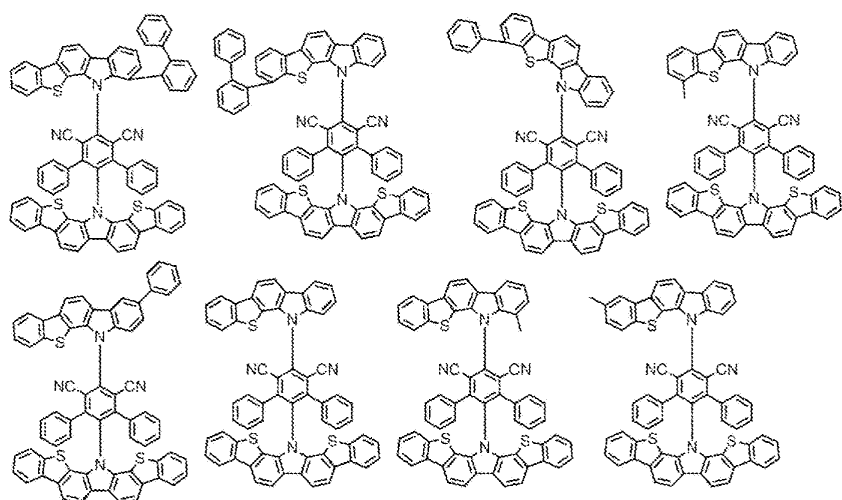
[0961]

[0962] [화학식 77]



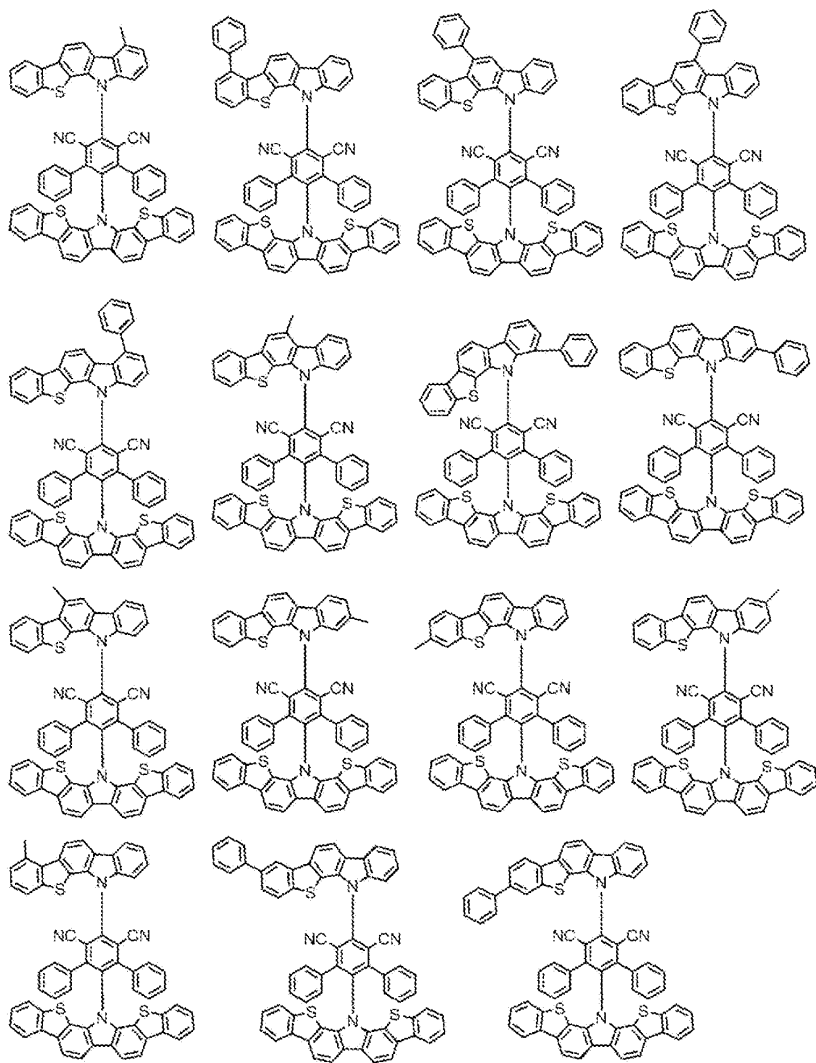
[0963]

[0964] [화학식 78]



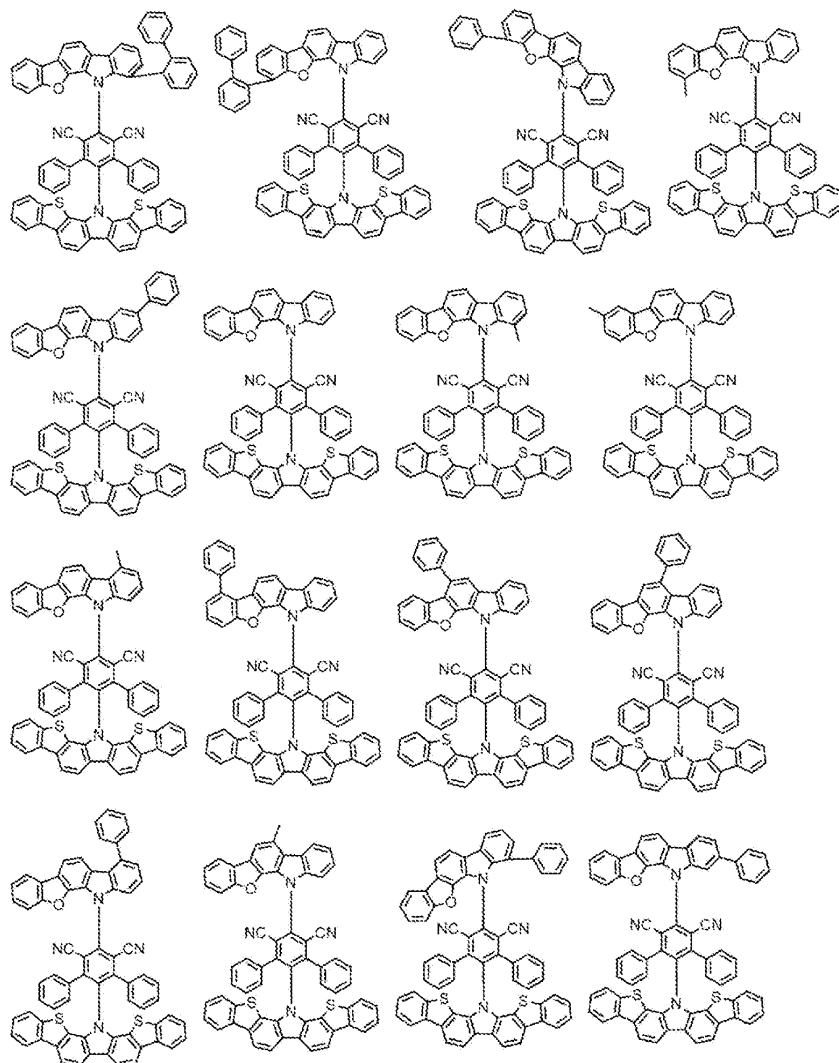
[0965]

[0966] [화학식 79]



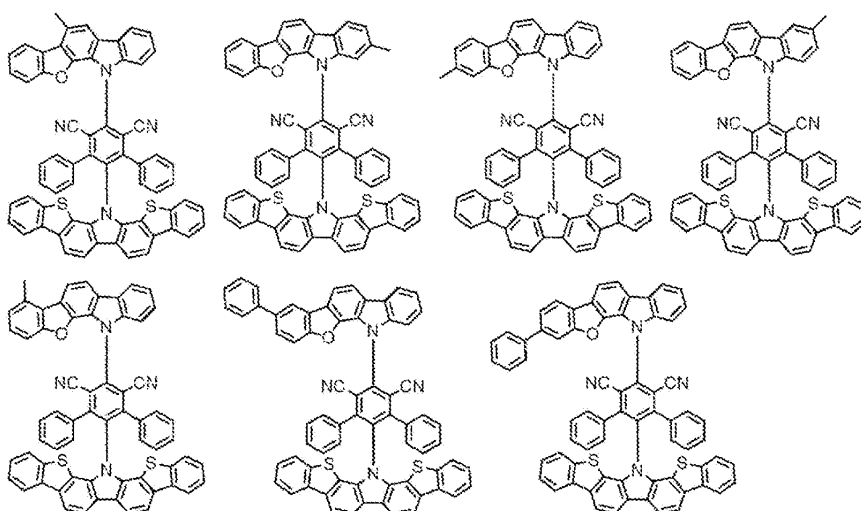
[0967]

[0968] [화학식 80]



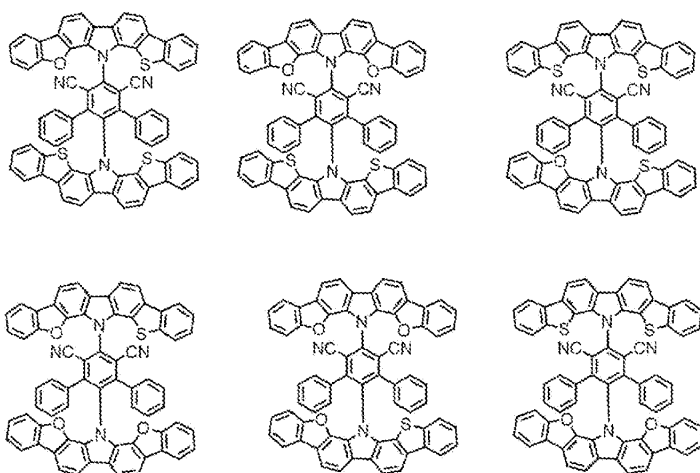
[0969]

[0970] [화학식 81]



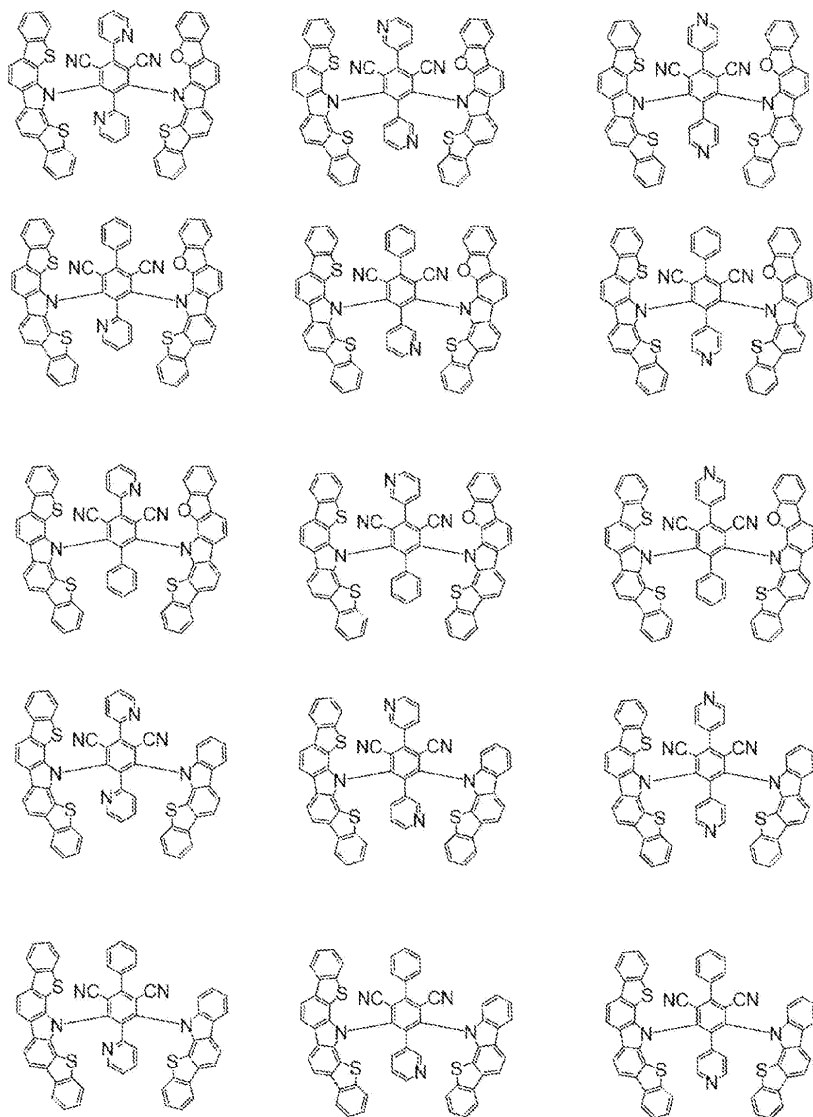
[0971]

[0972] [화학식 82]



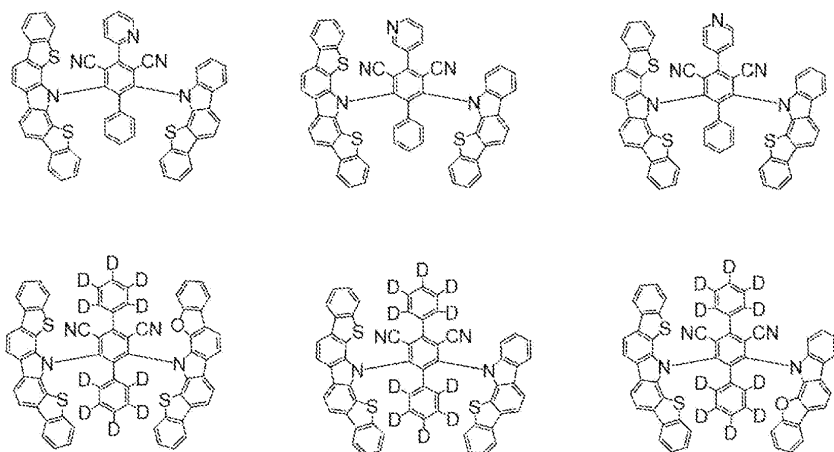
[0973]

[0974] [화학식 83]



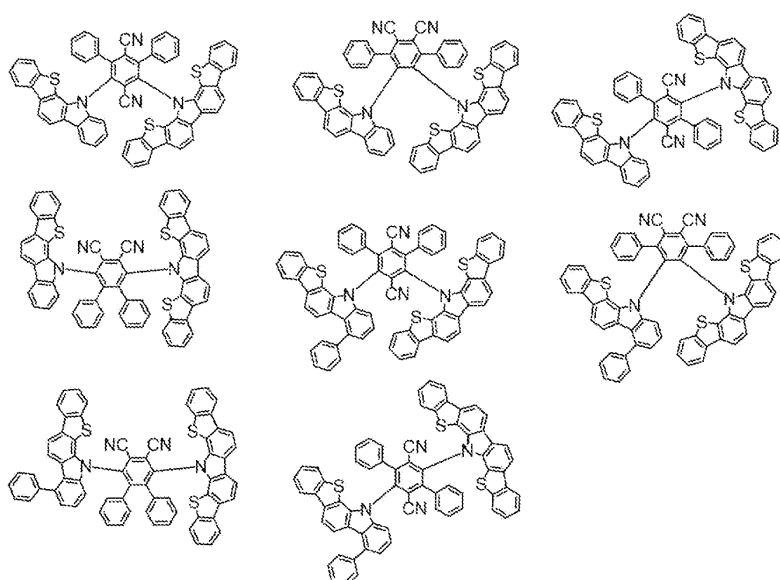
[0975]

[0976] [화학식 84]



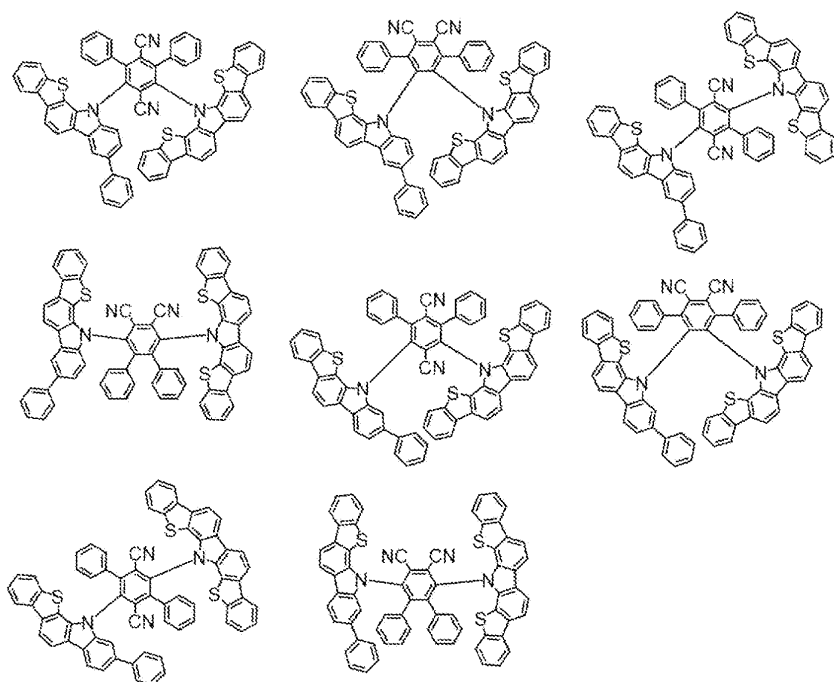
[0977]

[0978] [화학식 85]



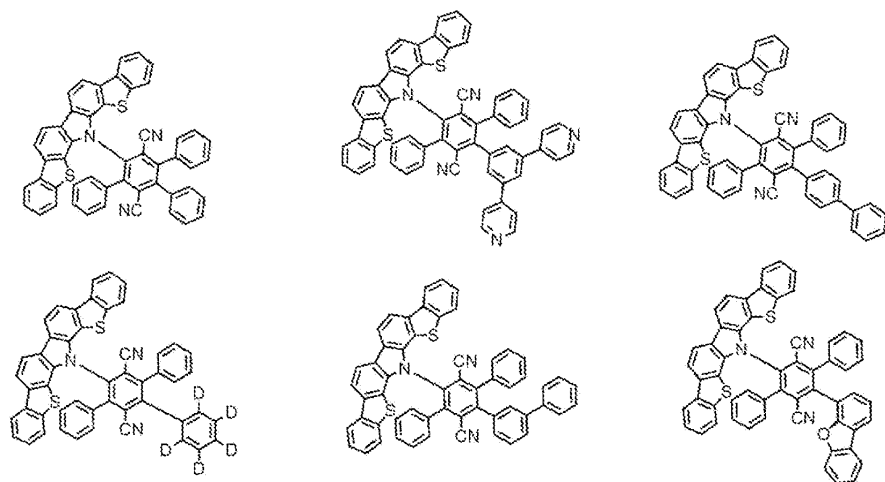
[0979]

[0980] [화학식 86]



[0981]

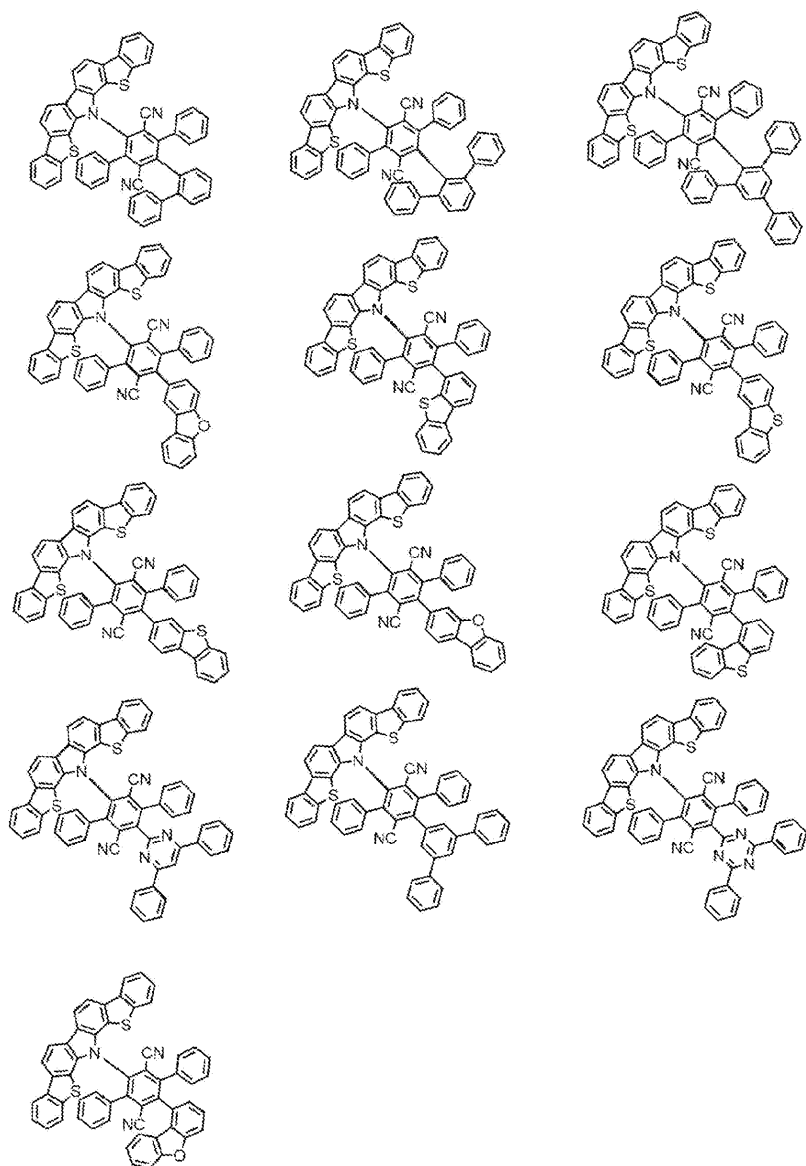
[0982] [화학식 87]



[0983]

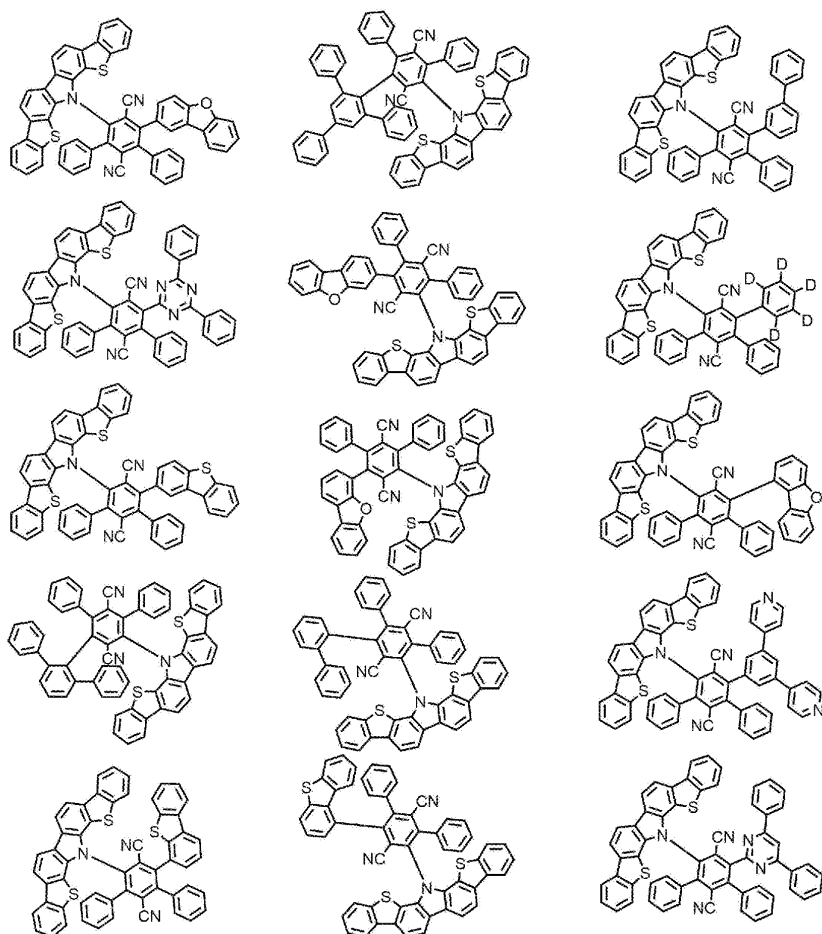
[0984]

[화학식 88]



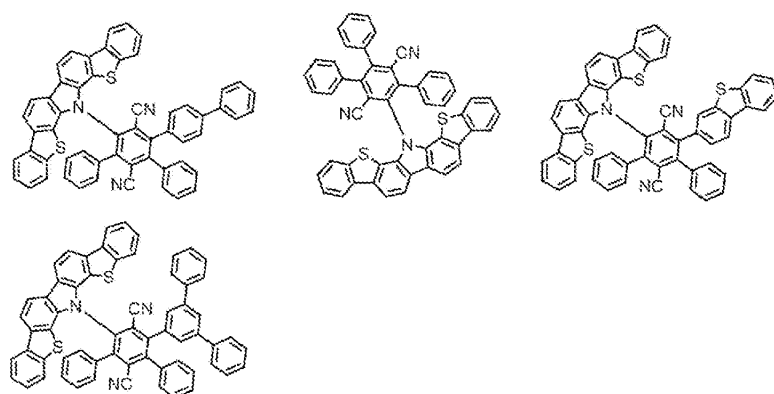
[0985]

[0986] [화학식 89]



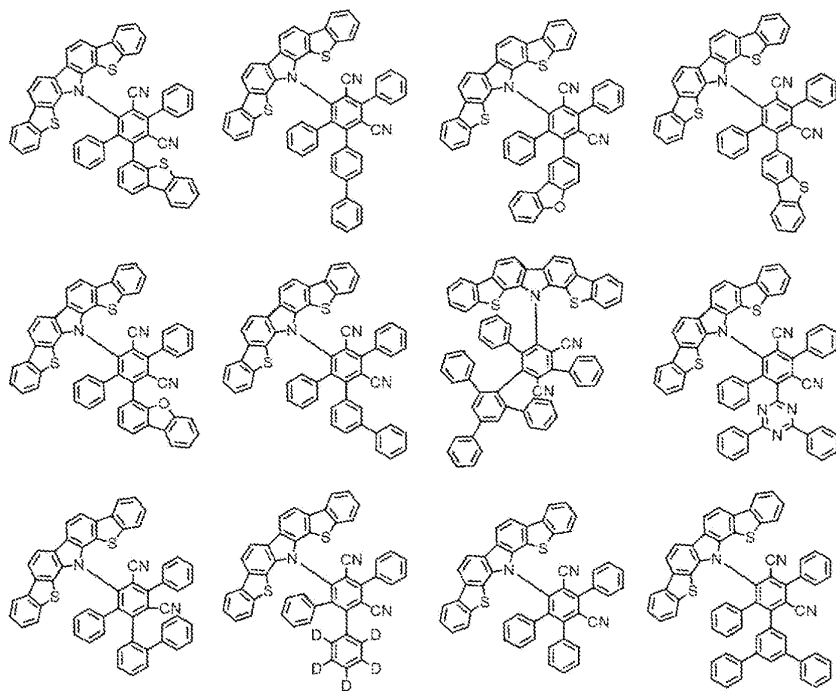
[0987]

[0988] [화학식 90]



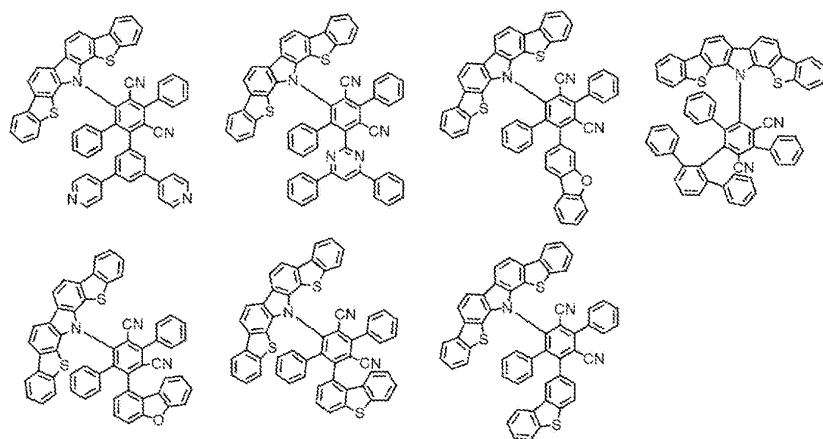
[0989]

[0990] [화학식 91]



[0991]

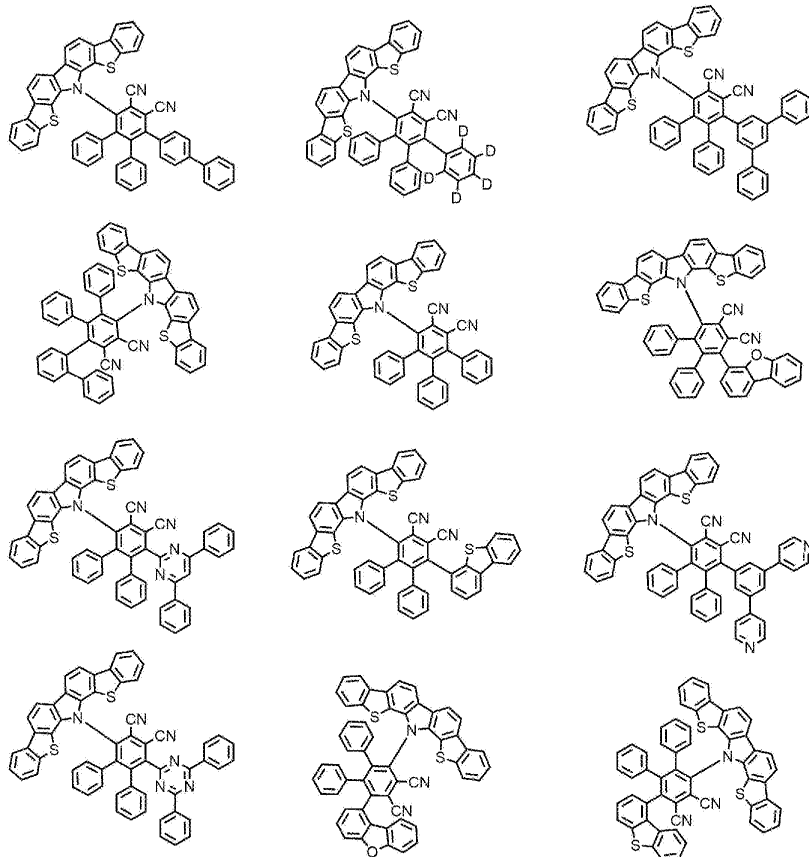
[0992] [화학식 92]



[0993]

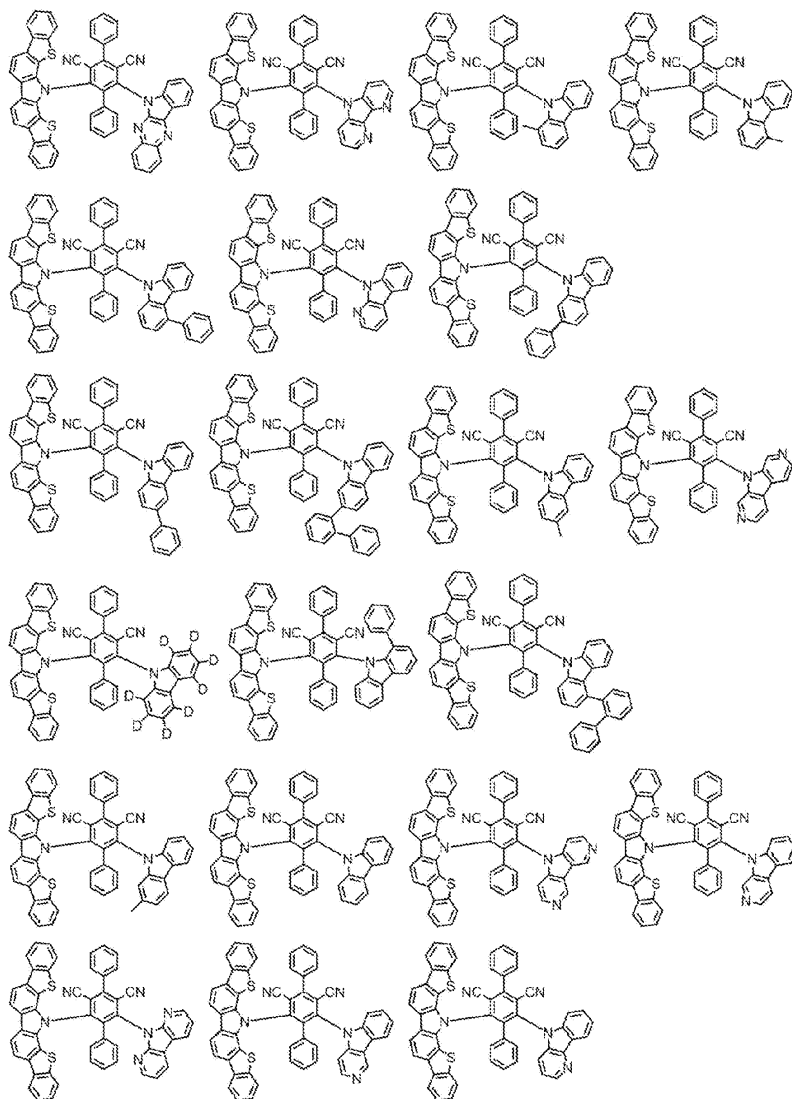
[0994]

[화학식 93]



[0995]

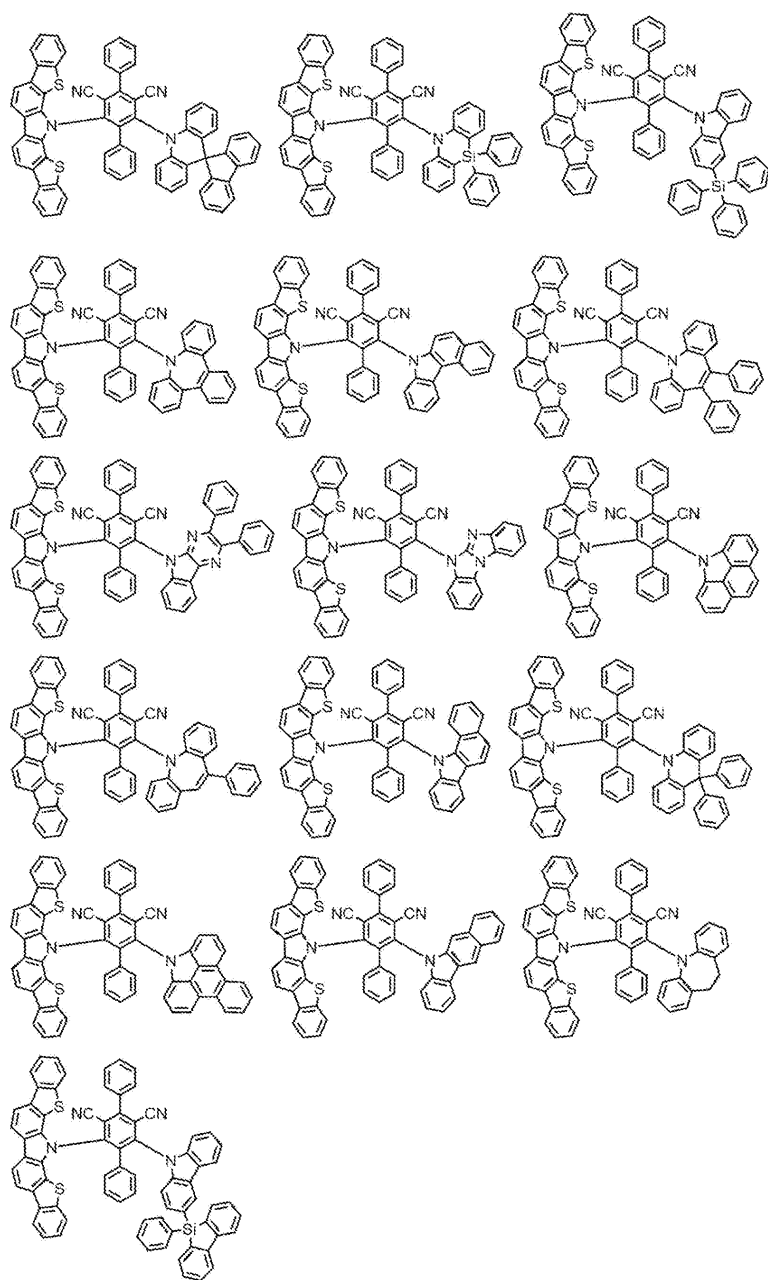
[0996] [화학식 94]



[0997]

[0998]

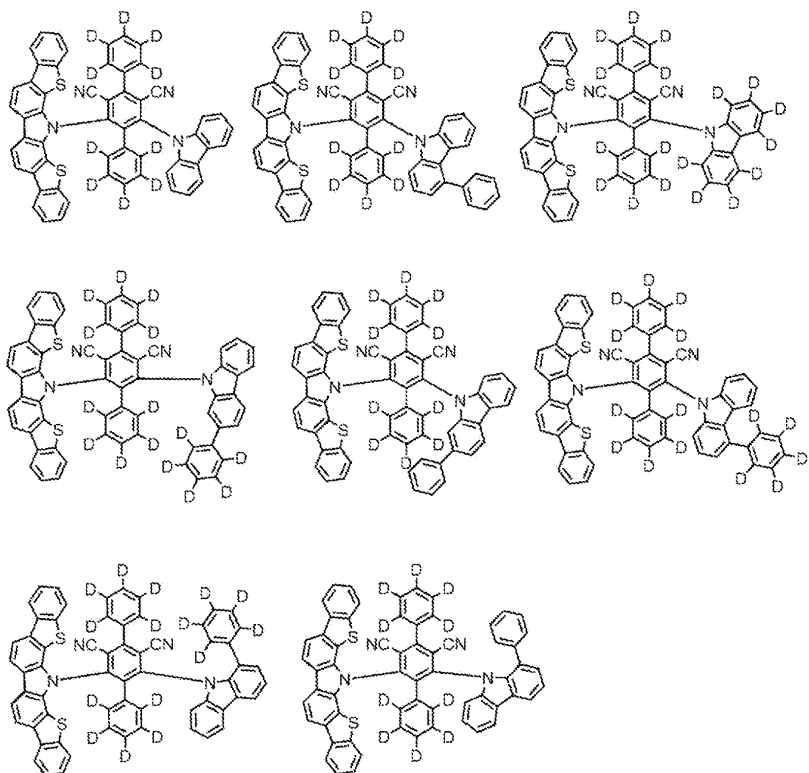
[화학식 95]



[0999]

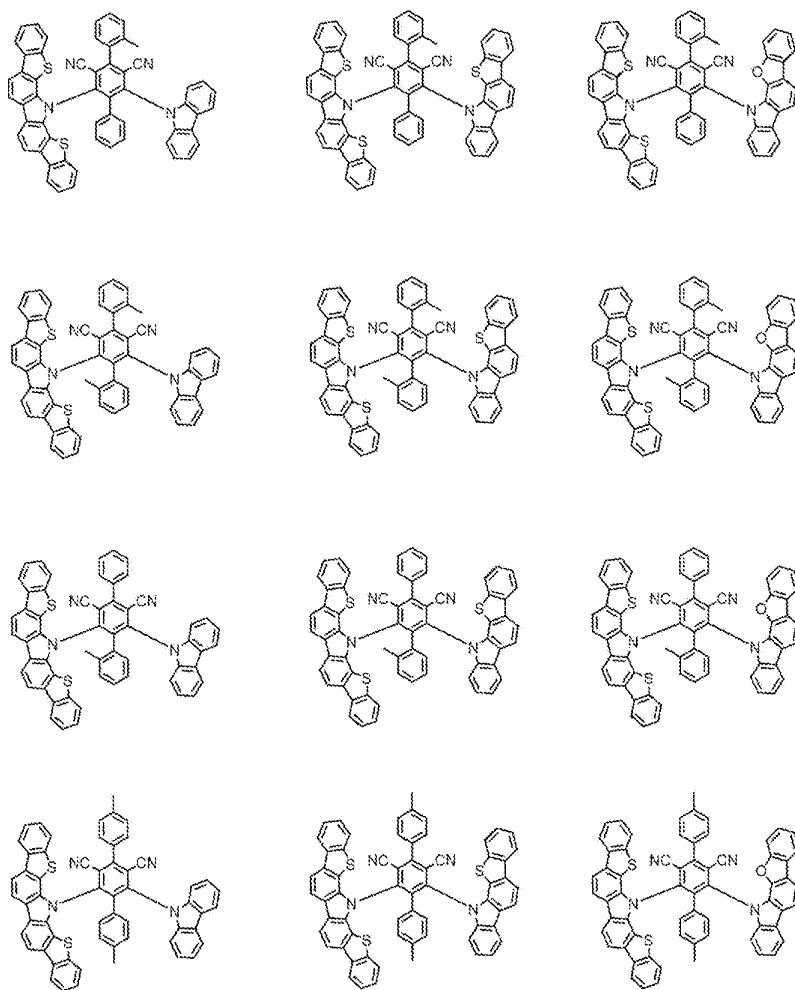
[1000]

[화학식 96]



[1001]

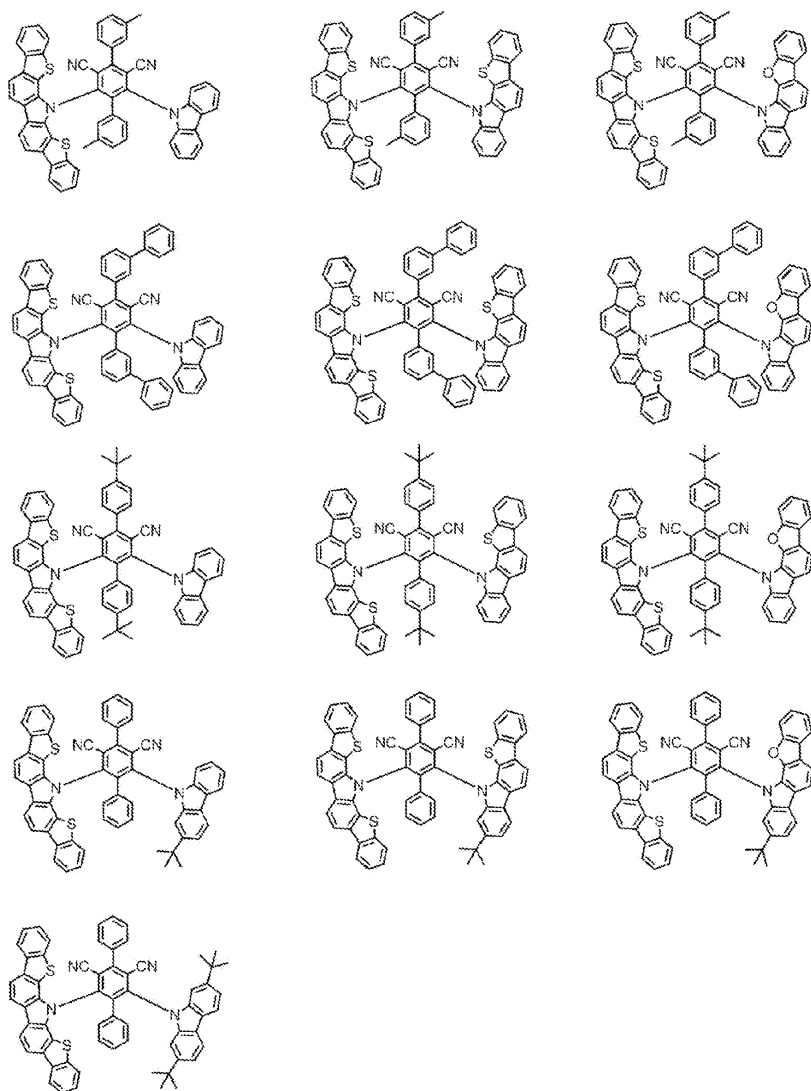
[1002] [화학식 97]



[1003]

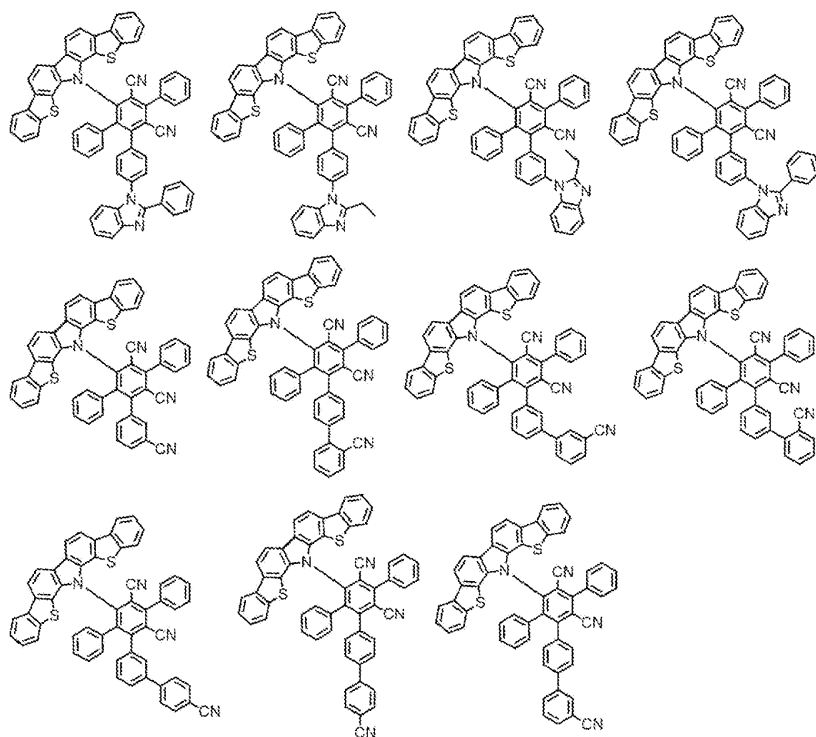
[1004]

[화학식 98]



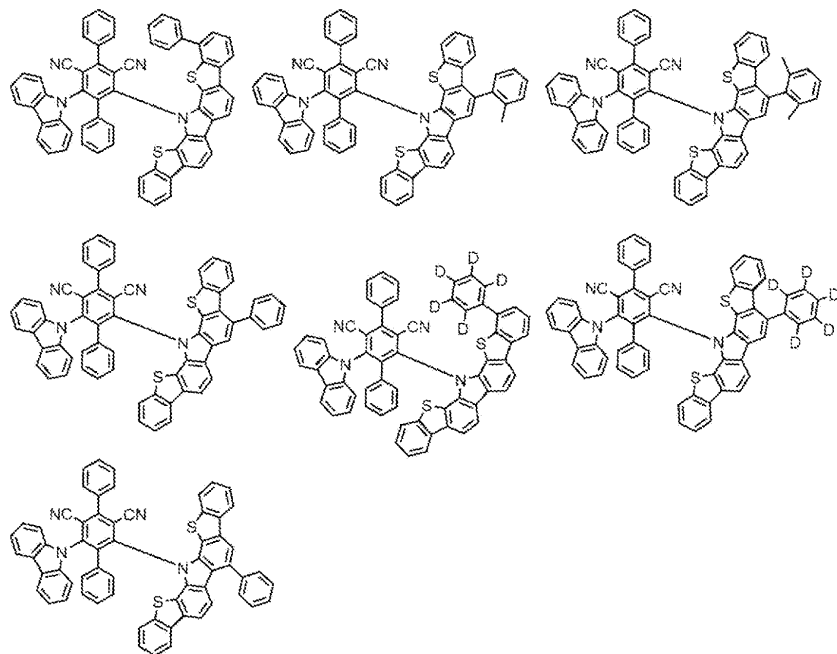
[1005]

[1006] [화학식 99]



[1007]

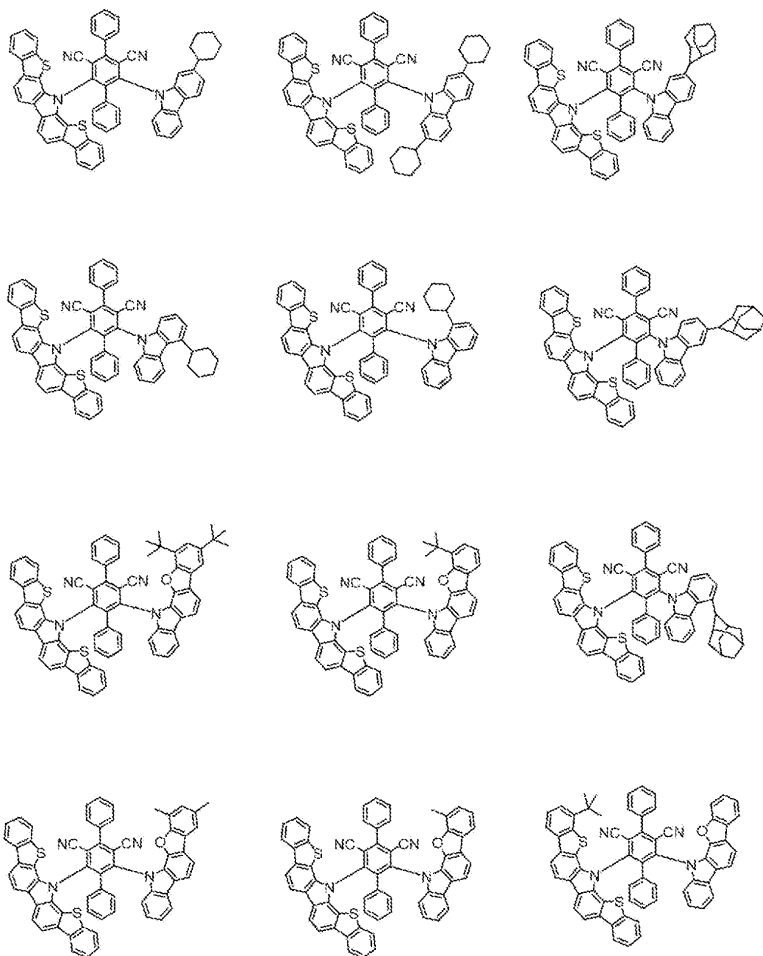
[1008] [화학식 100]



[1009]

[1010]

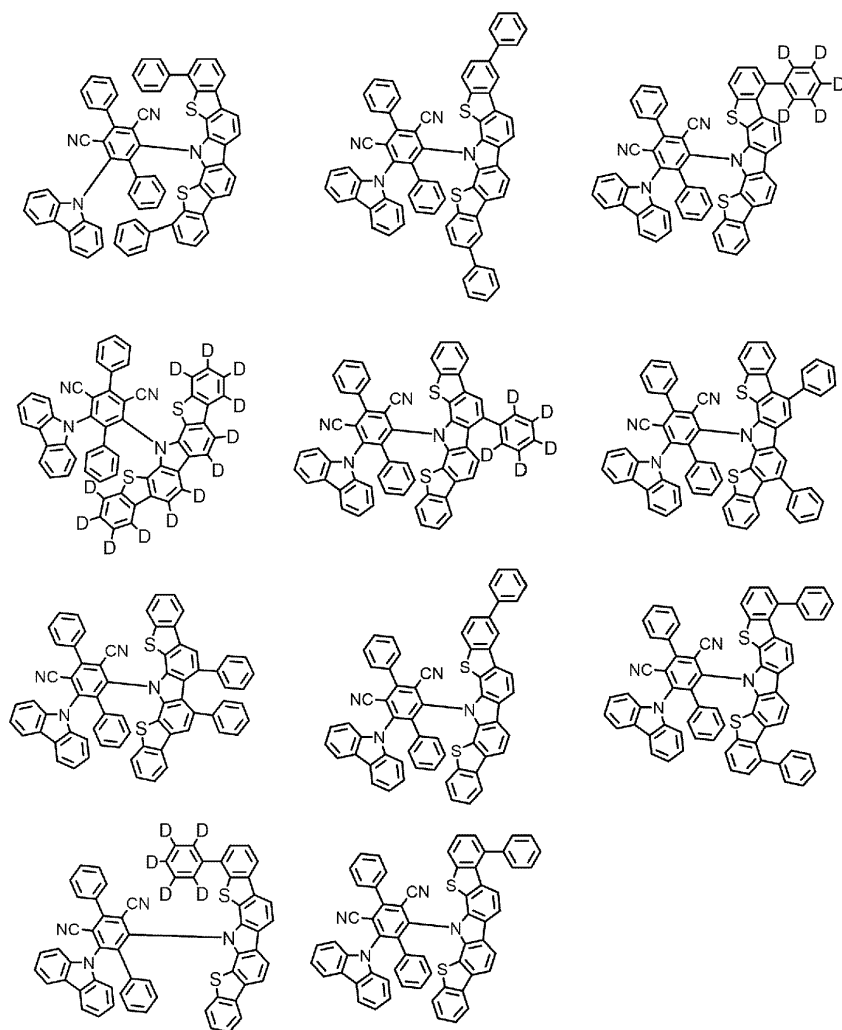
[화학식 101]



[1011]

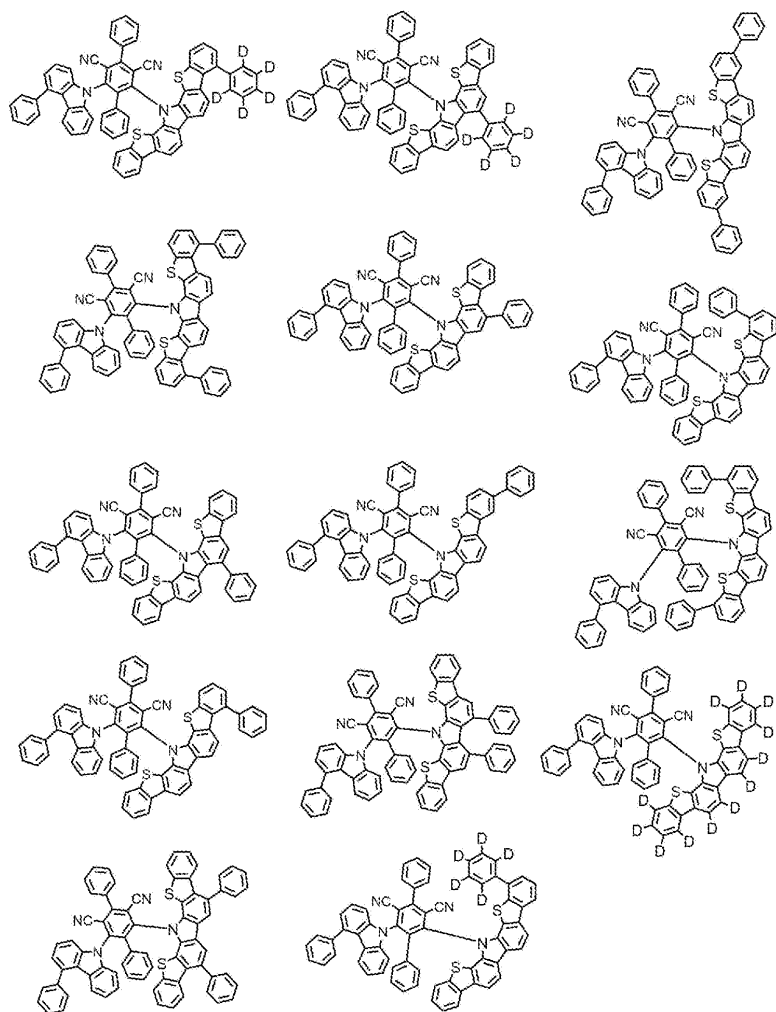
[1012]

[화학식 102]



[1013]

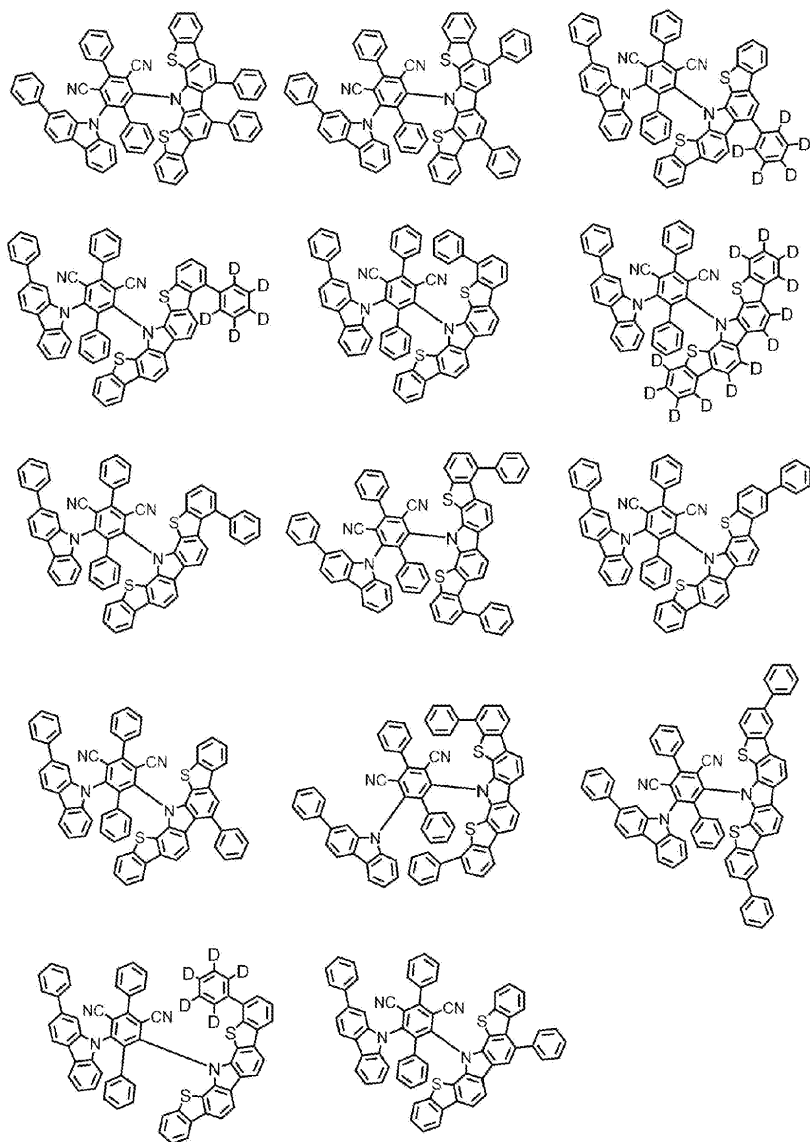
[1014] [화학식 103]



[1015]

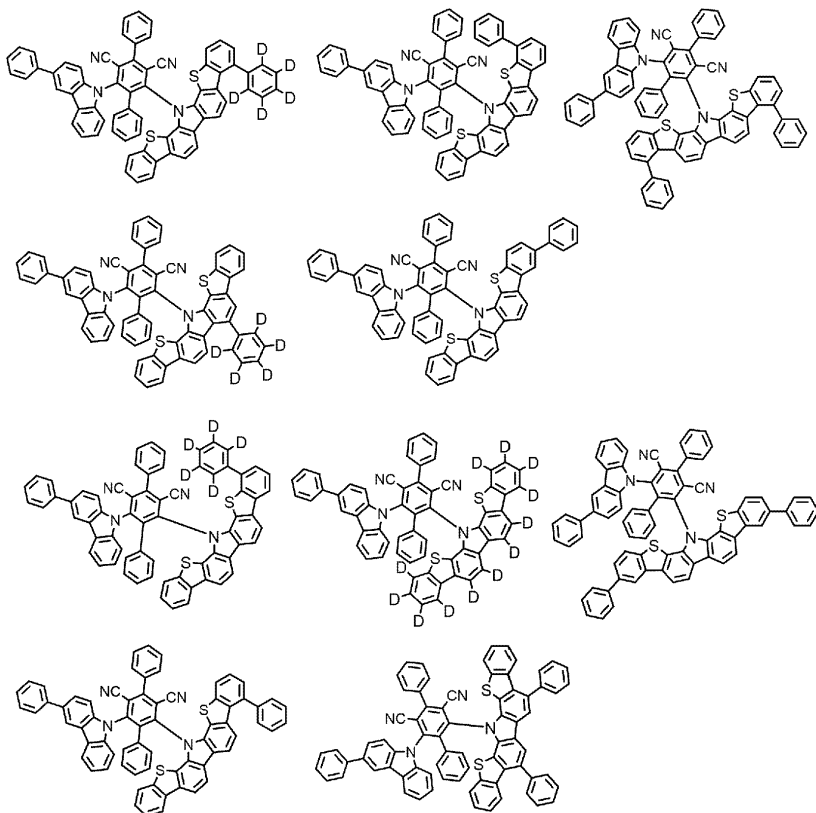
[1016]

[화학식 104]



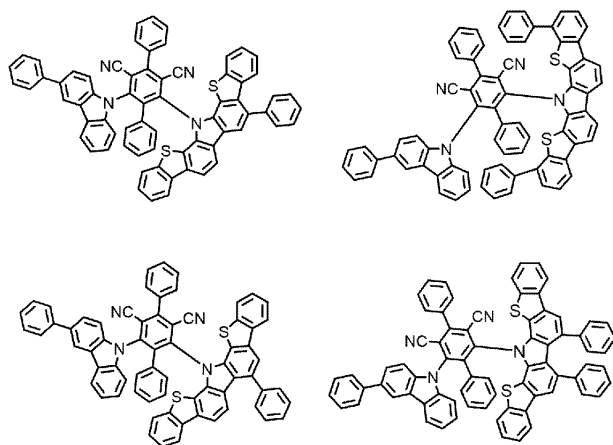
[1017]

[1018] [화학식 105]



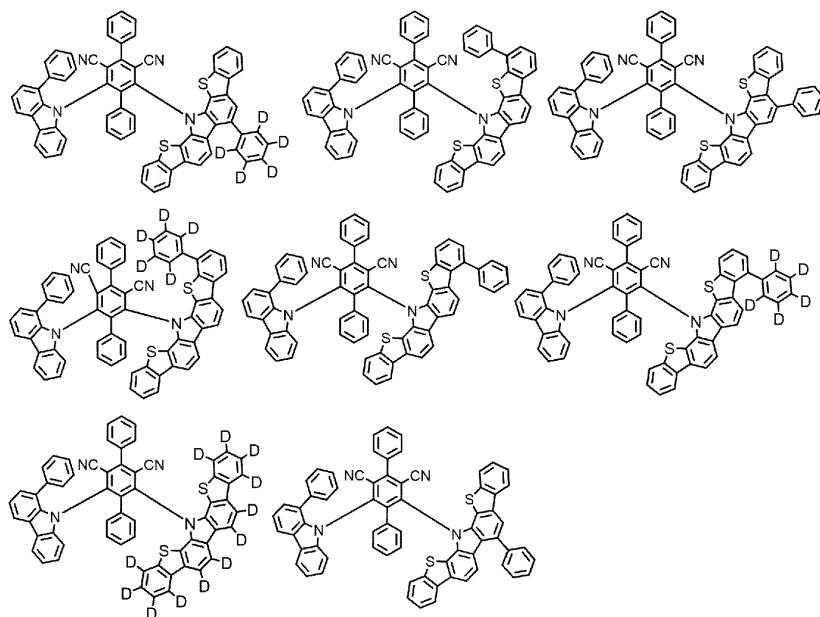
[1019]

[1020] [화학식 106]



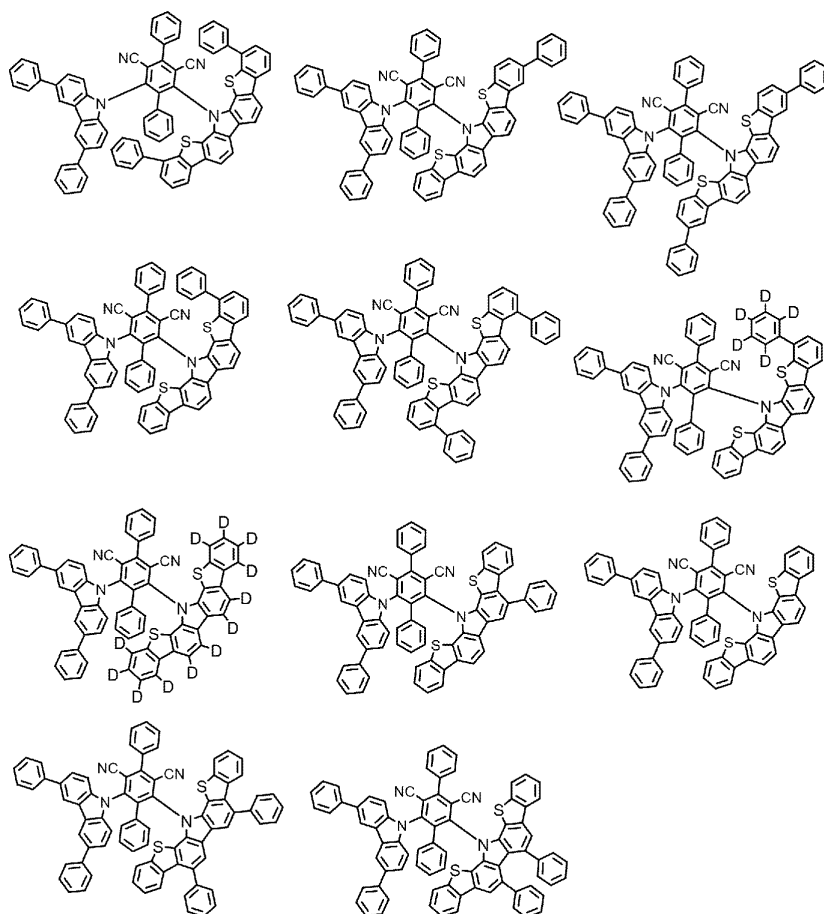
[1021]

[1022] [화학식 107]



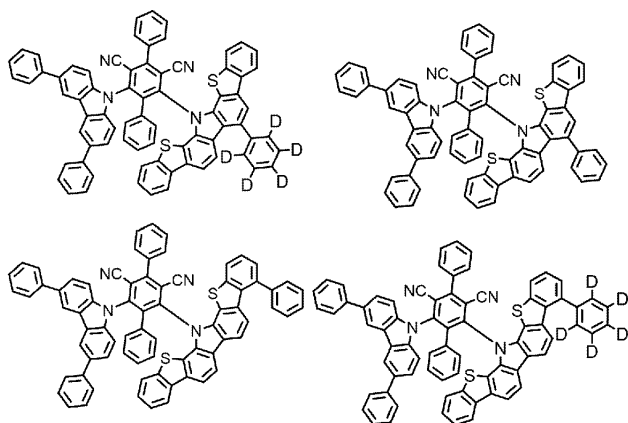
[1023]

[1024] [화학식 108]



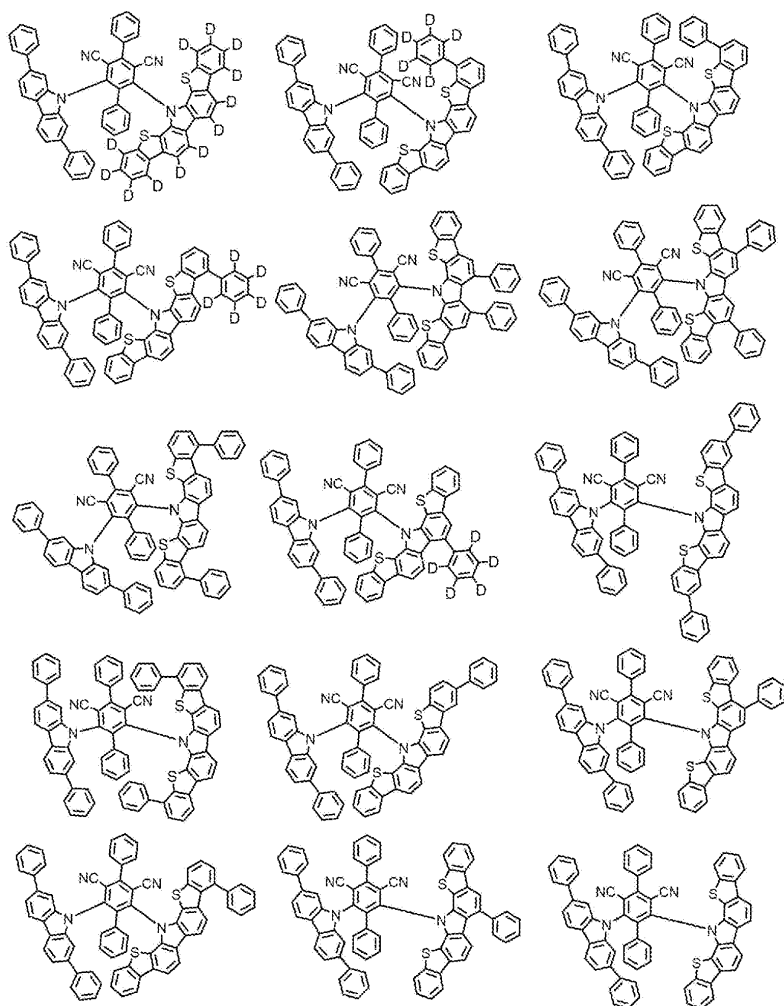
[1025]

[1026] [화학식 109]



[1027]

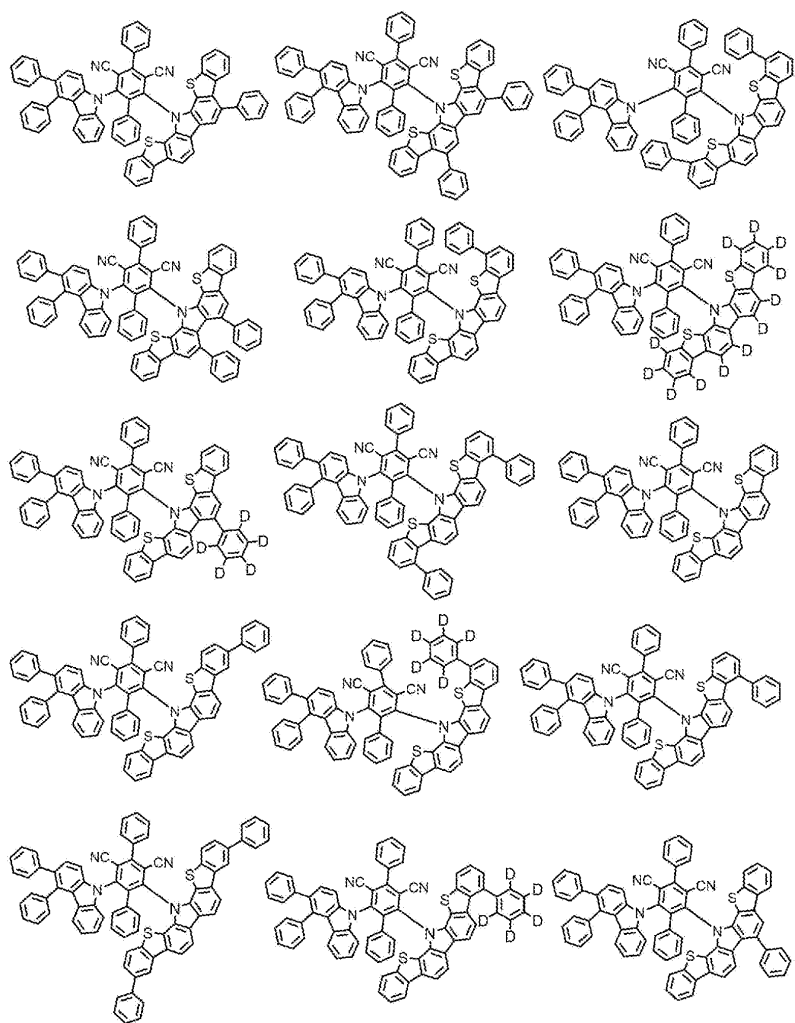
[1028] [화학식 110]



[1029]

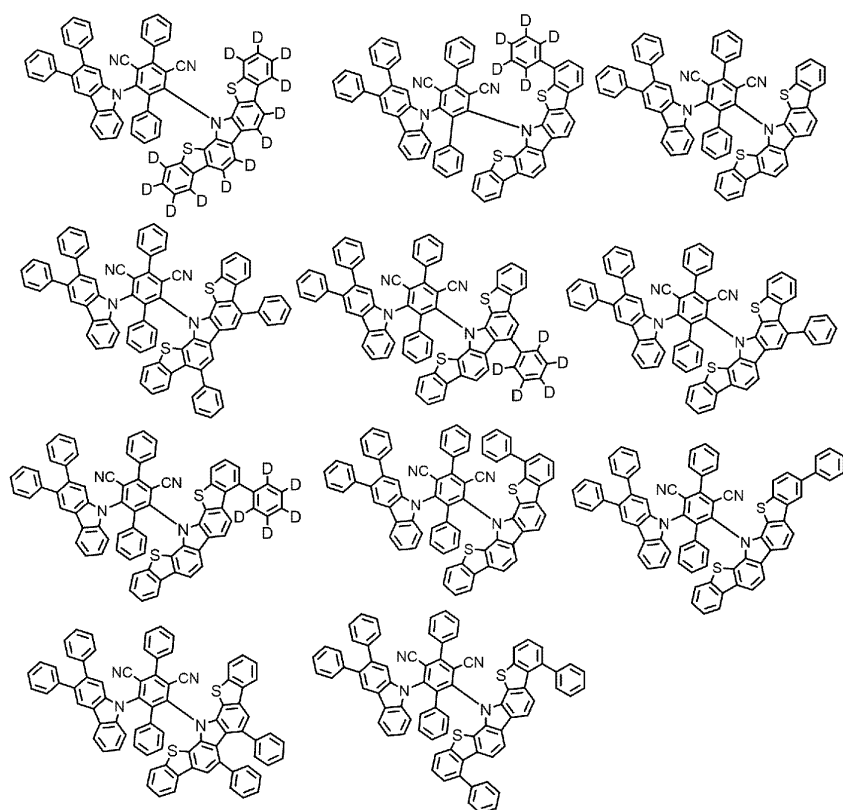
[1030]

[화학식 111]



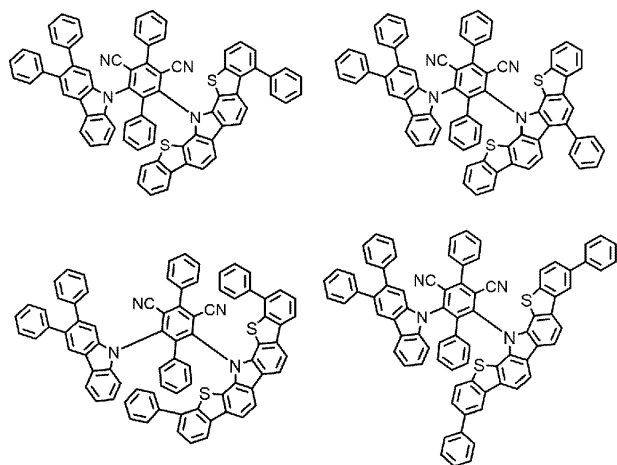
[1031]

[1032] [화학식 112]



[1033]

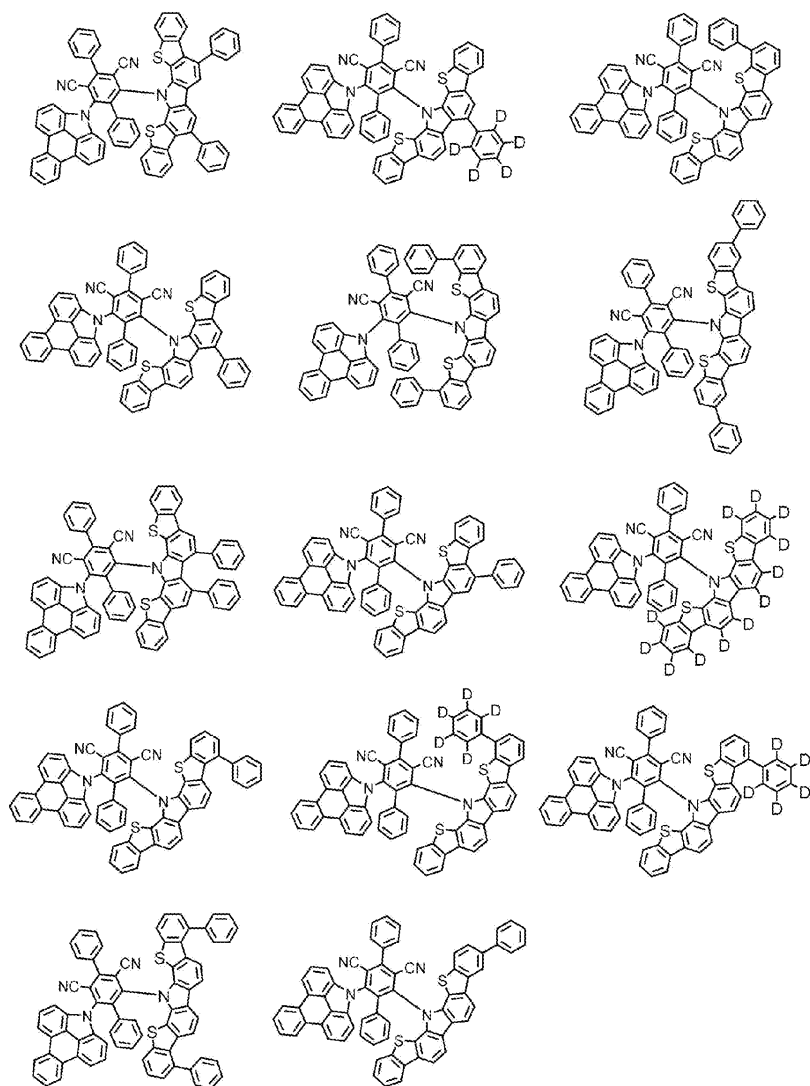
[1034] [화학식 113]



[1035]

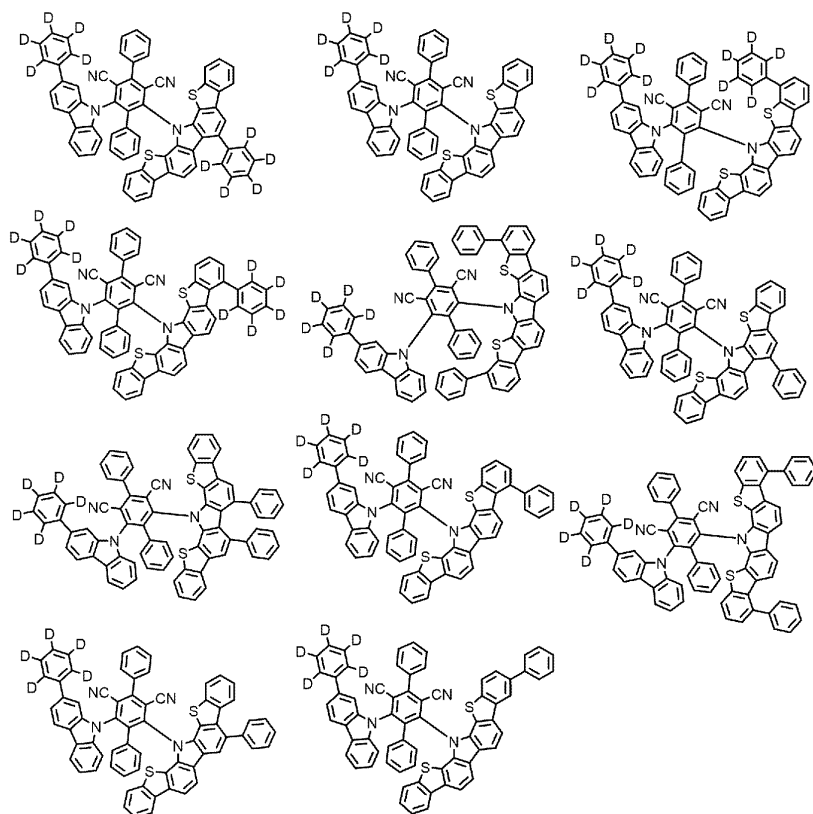
[1036]

[화학식 114]



[1037]

[1038] [화학식 115]



[1039]

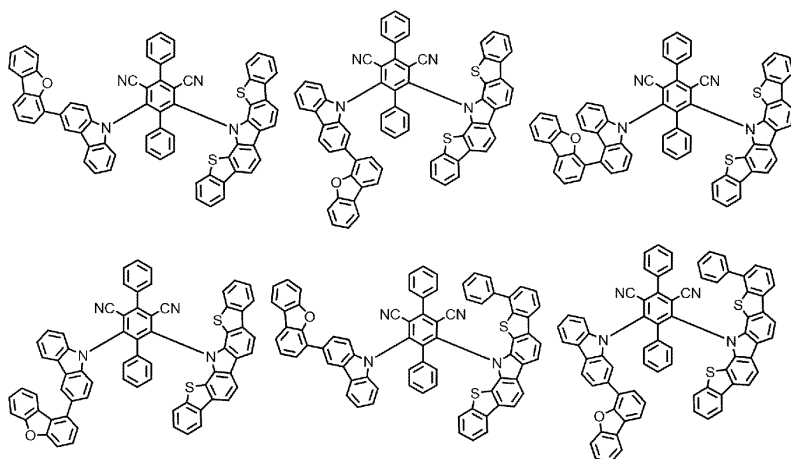
[1040] [화학식 116]



[1041]

[1042]

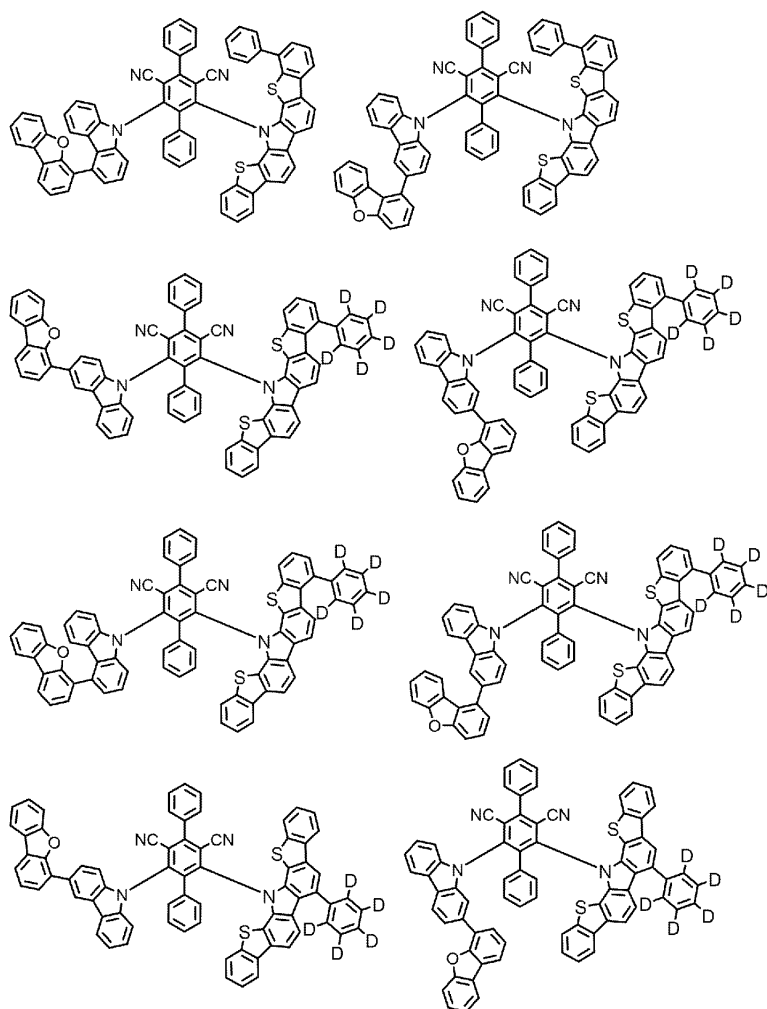
[화학식 117]



[1043]

[1044]

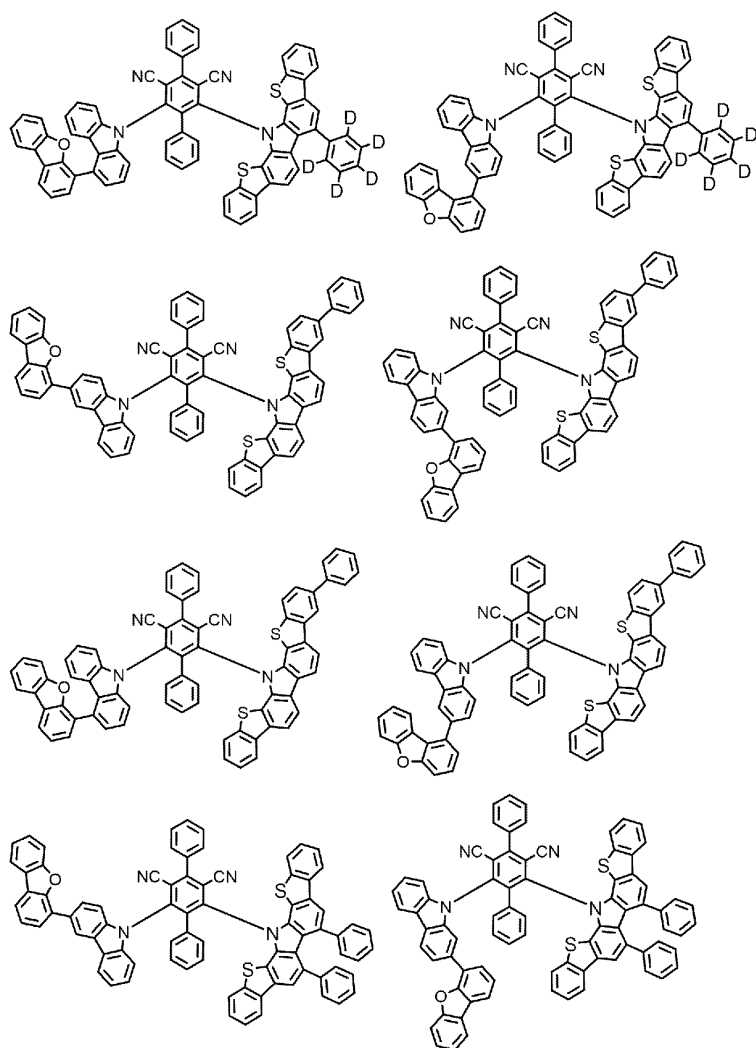
[화학식 118]



[1045]

[1046]

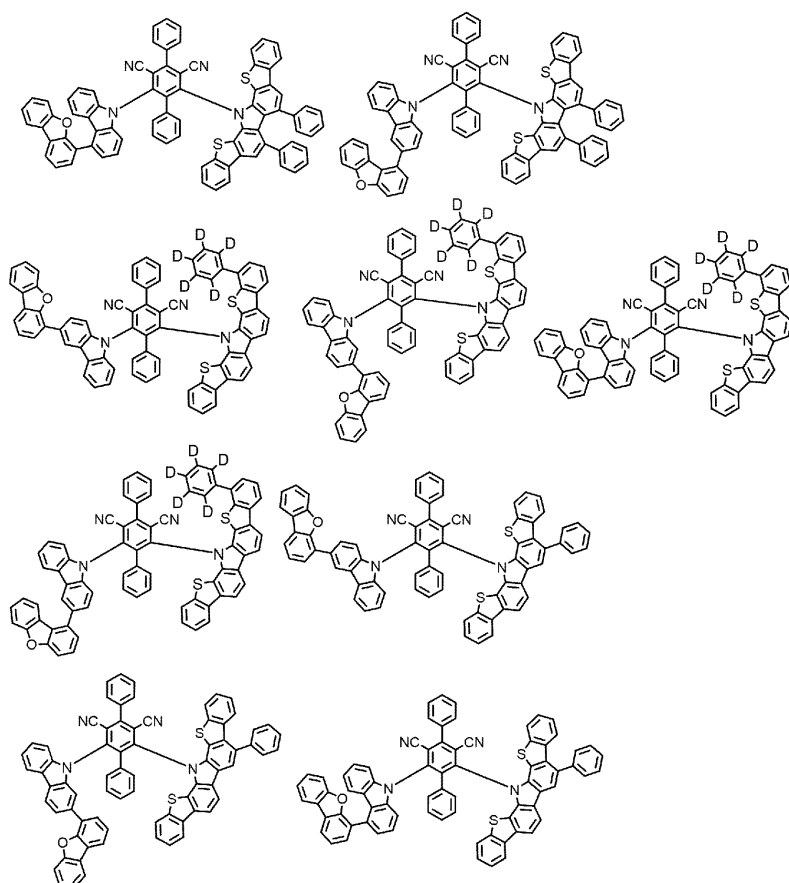
[화학식 119]



[1047]

[1048]

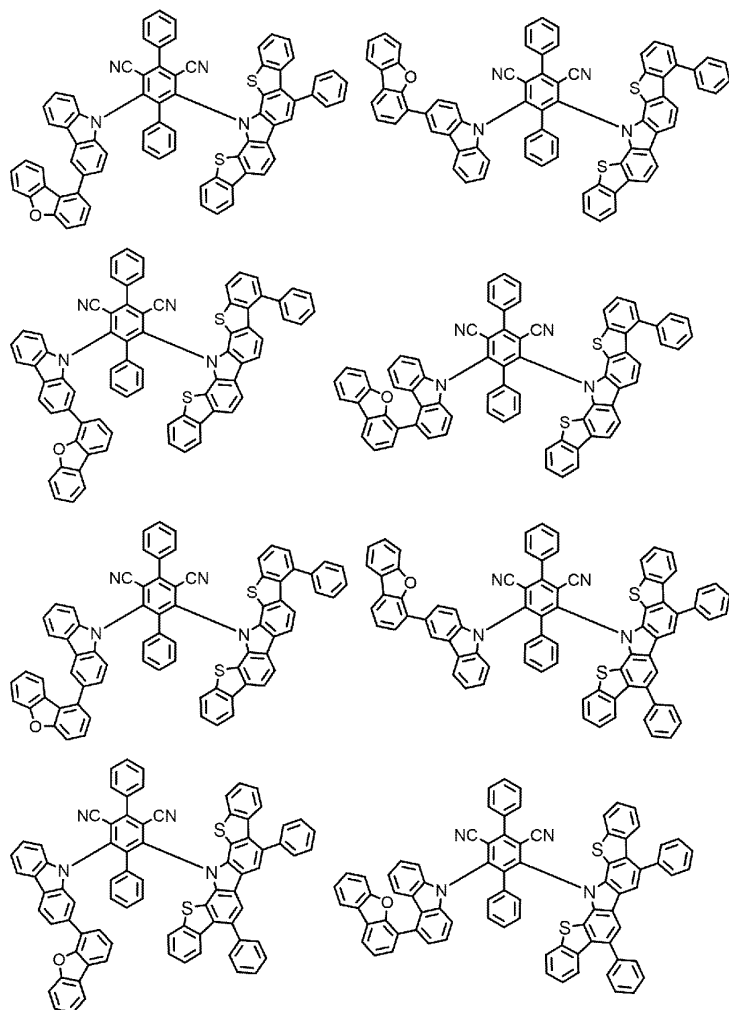
[화학식 120]



[1049]

[1050]

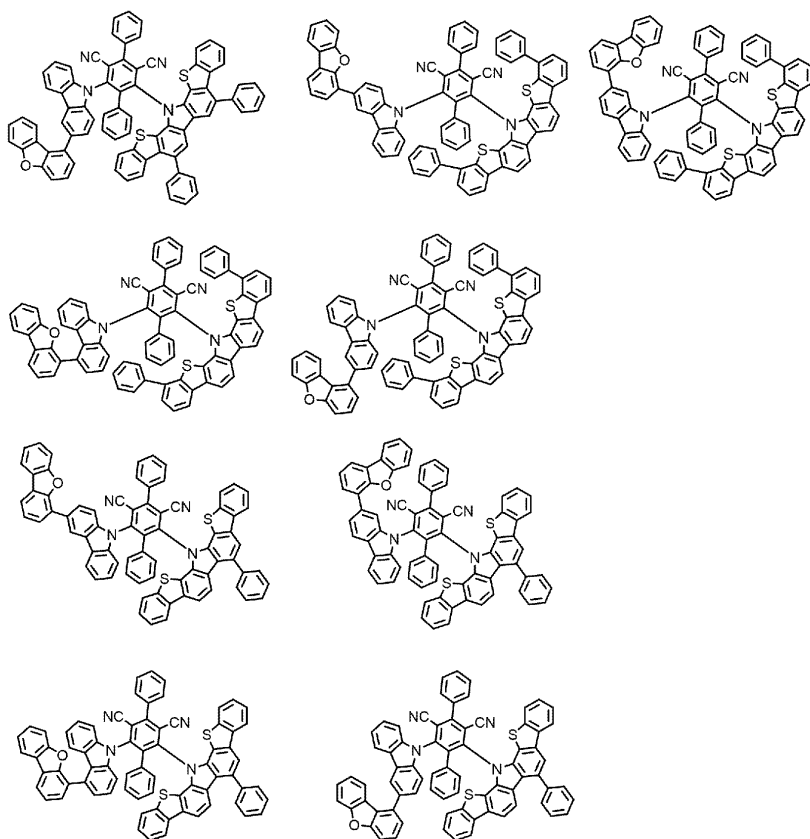
[화학식 121]



[1051]

[1052]

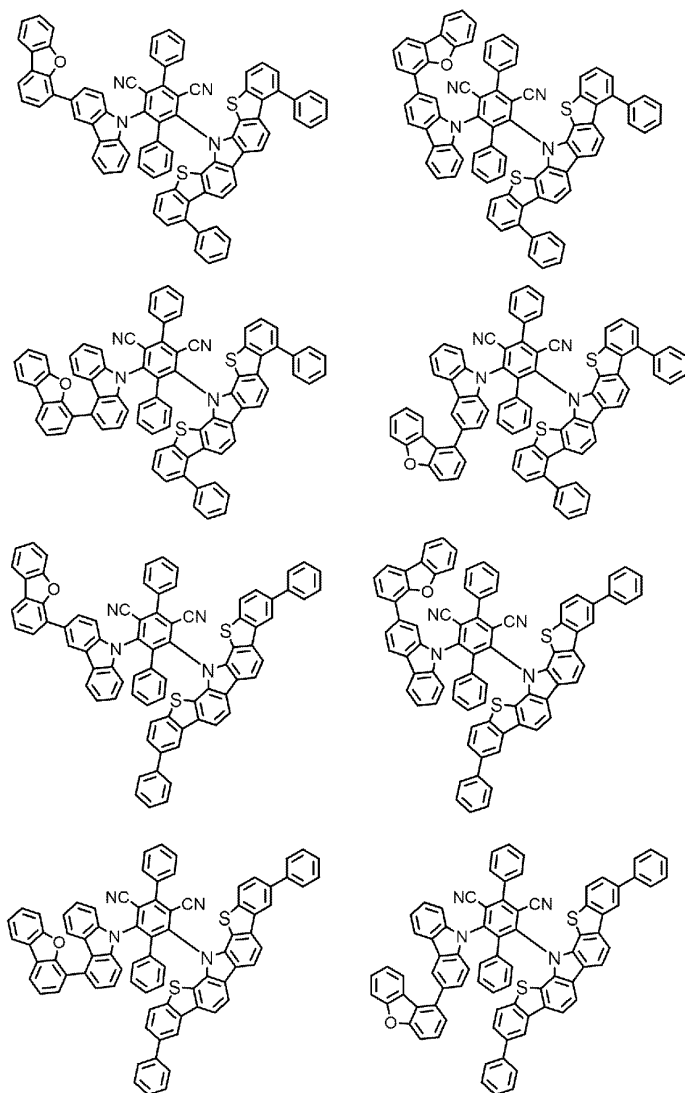
[화학식 122]



[1053]

[1054]

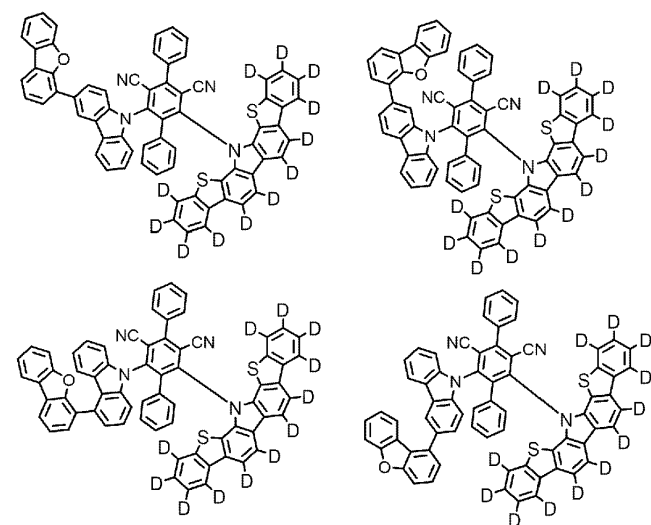
[화학식 123]



[1055]

[1056]

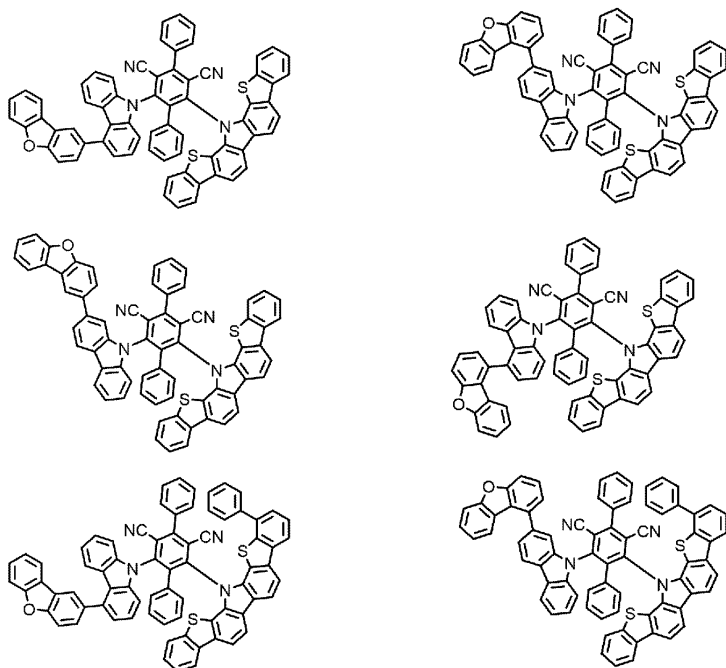
[화학식 124]



[1057]

[1058]

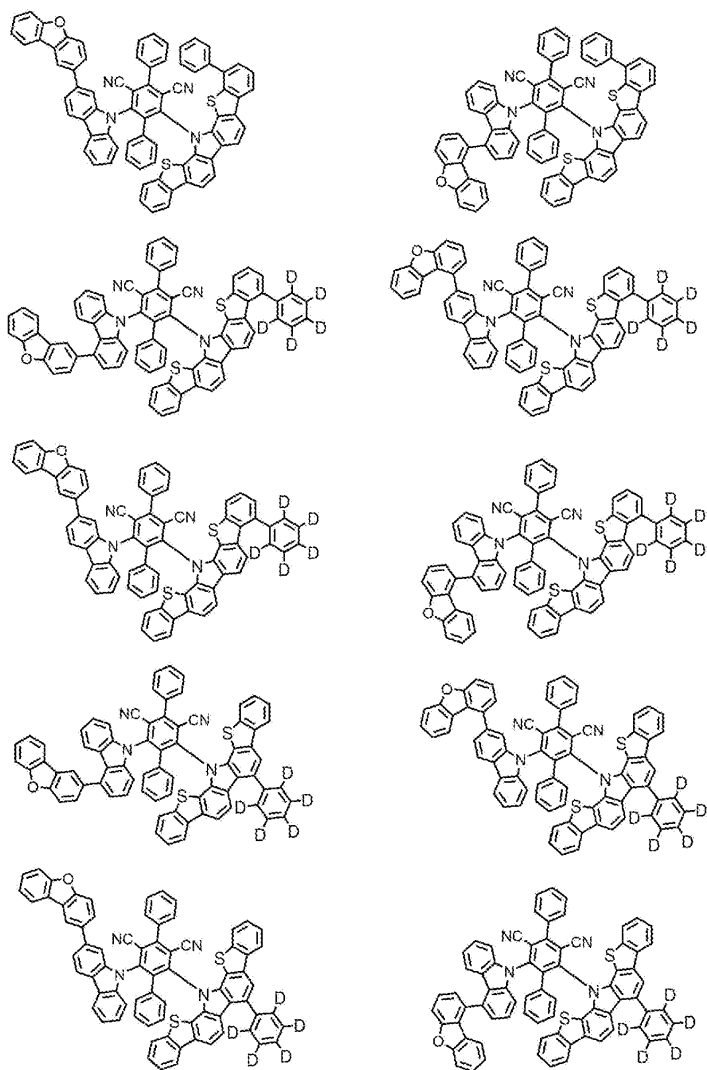
[화학식 125]



[1059]

[1060]

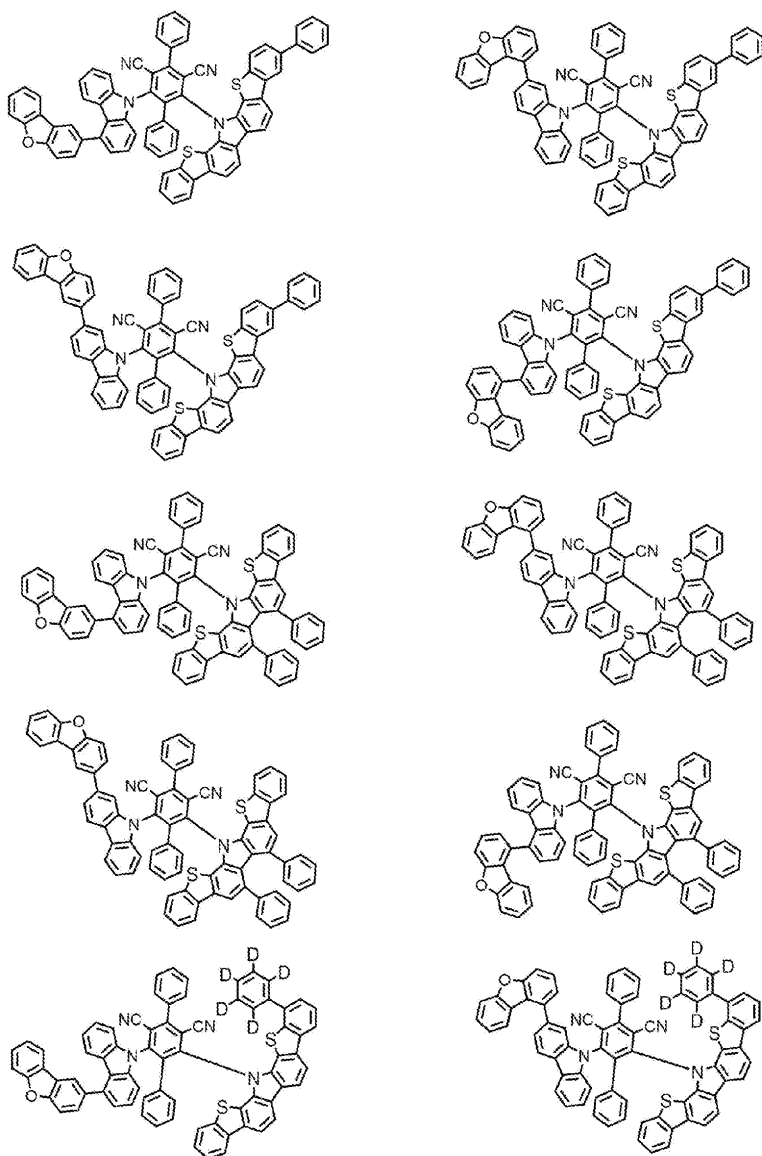
[화학식 126]



[1061]

[1062]

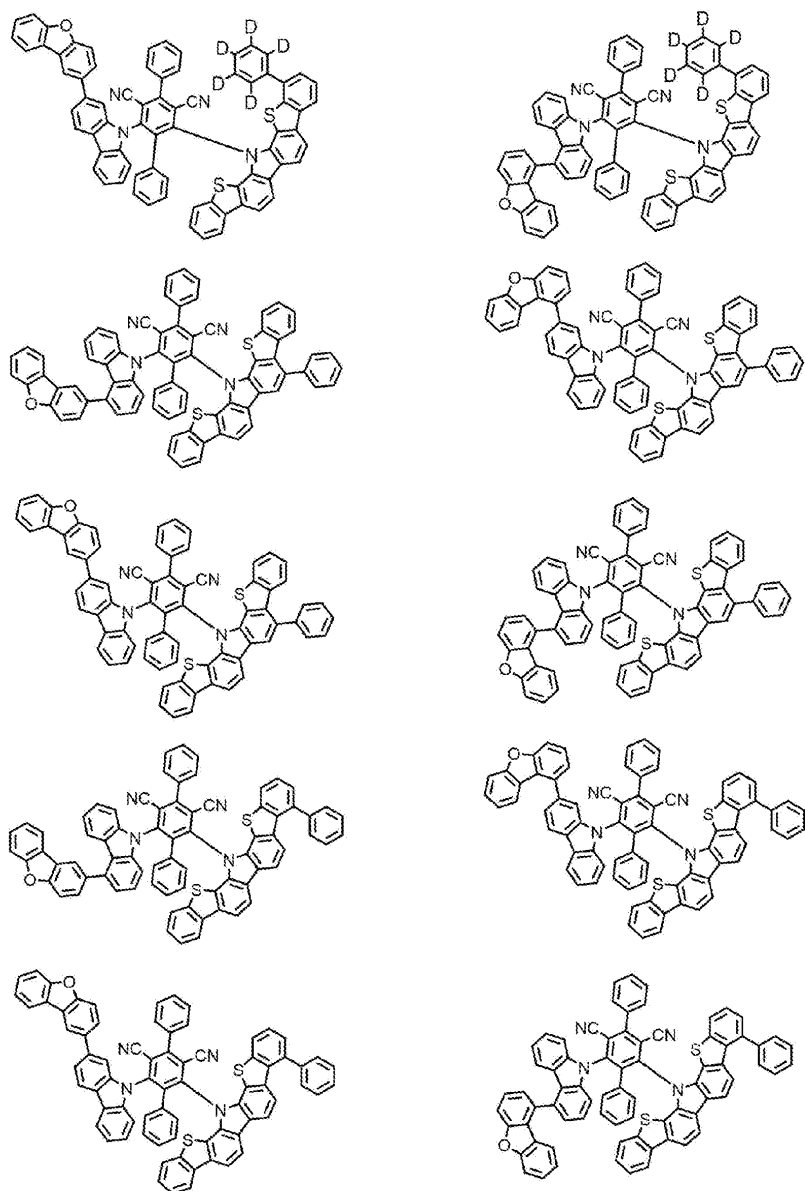
[화학식 127]



[1063]

[1064]

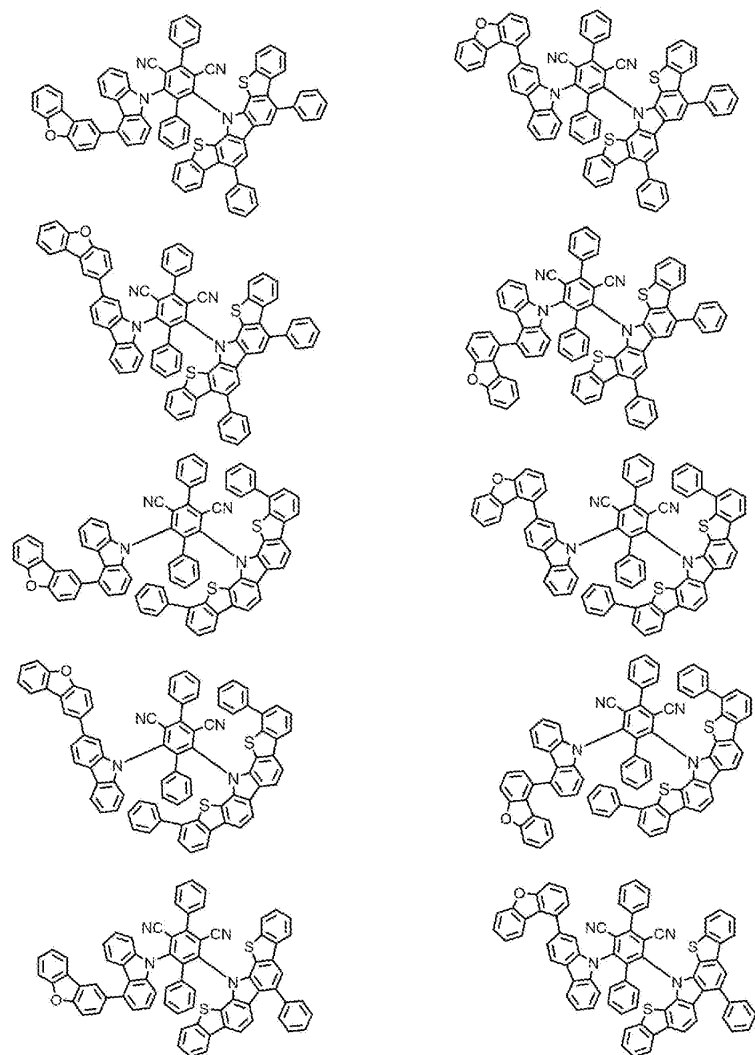
[화학식 128]



[1065]

[1066]

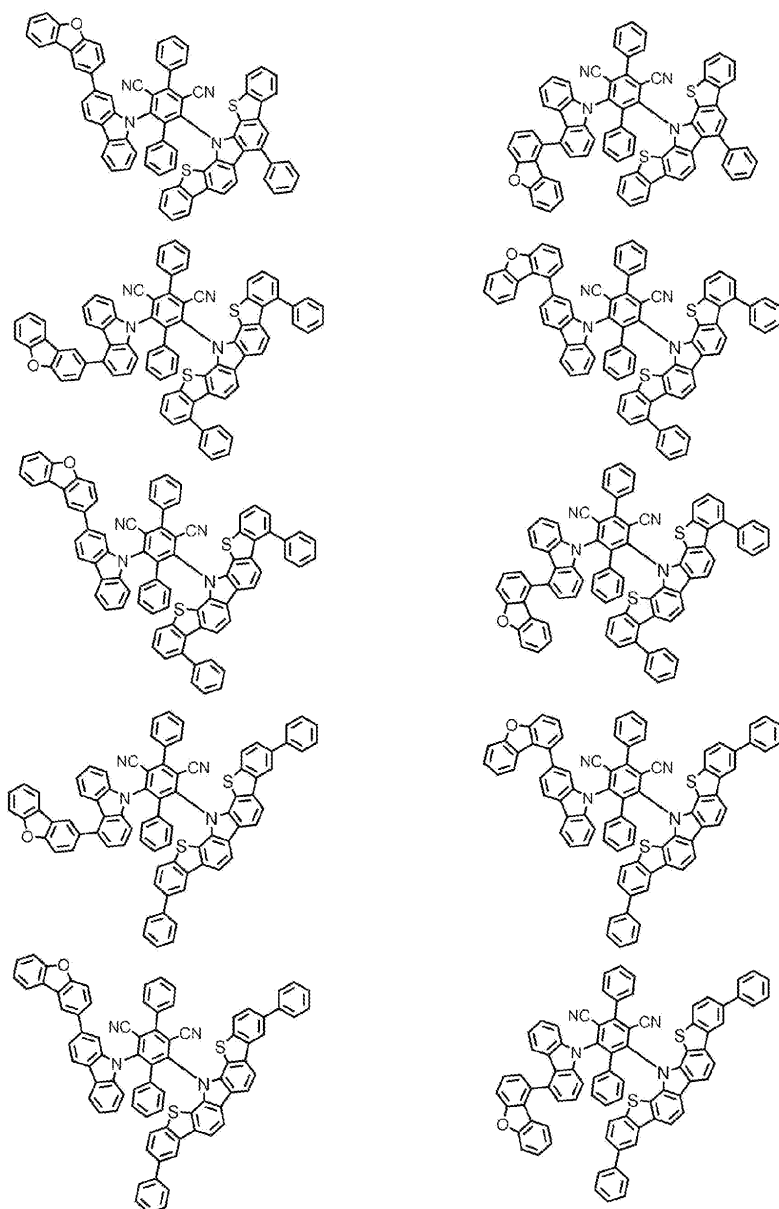
[화학식 129]



[1067]

[1068]

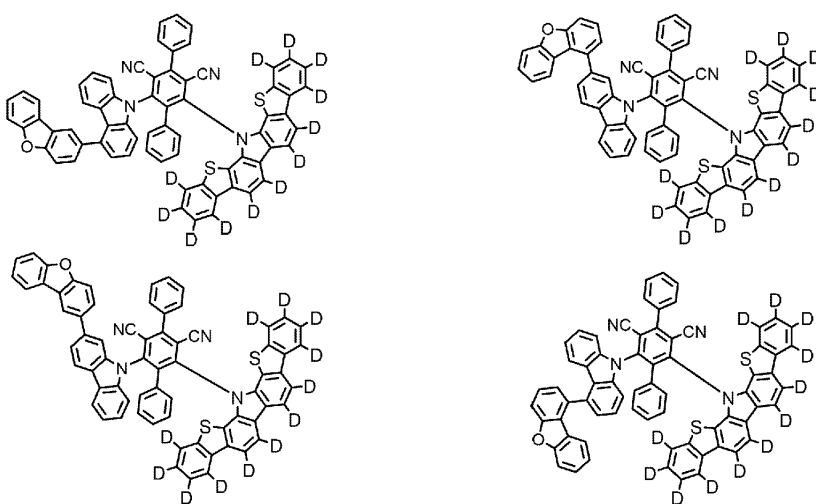
[화학식 130]



[1069]

[1070]

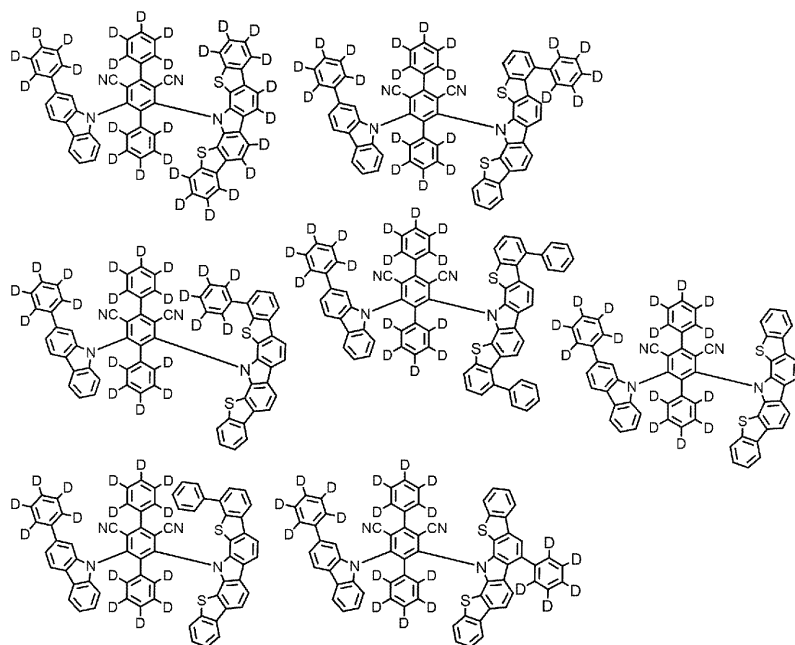
[화학식 131]



[1071]

[1072]

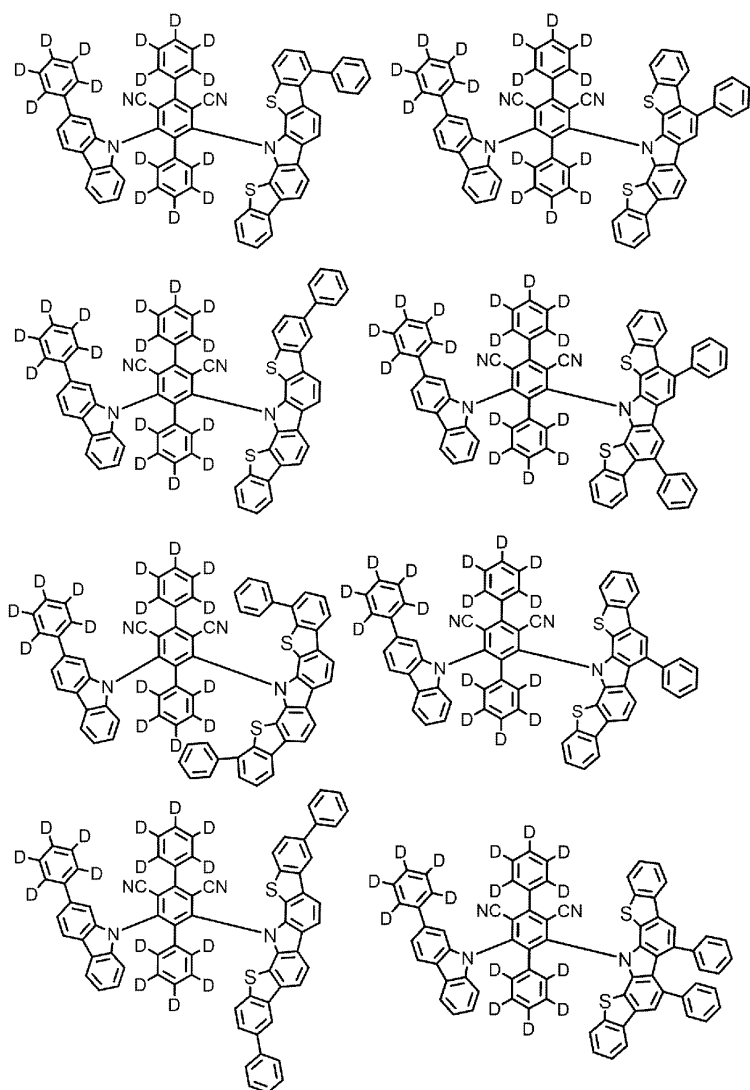
[화학식 132]



[1073]

[1074]

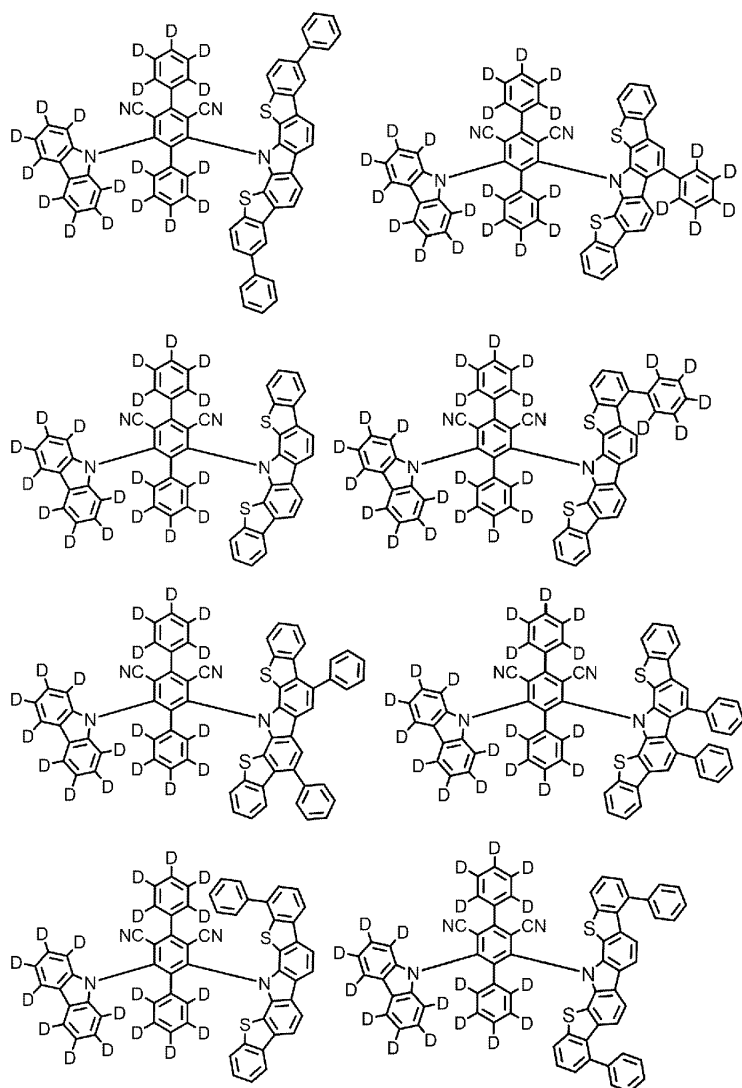
[화학식 133]



[1075]

[1076]

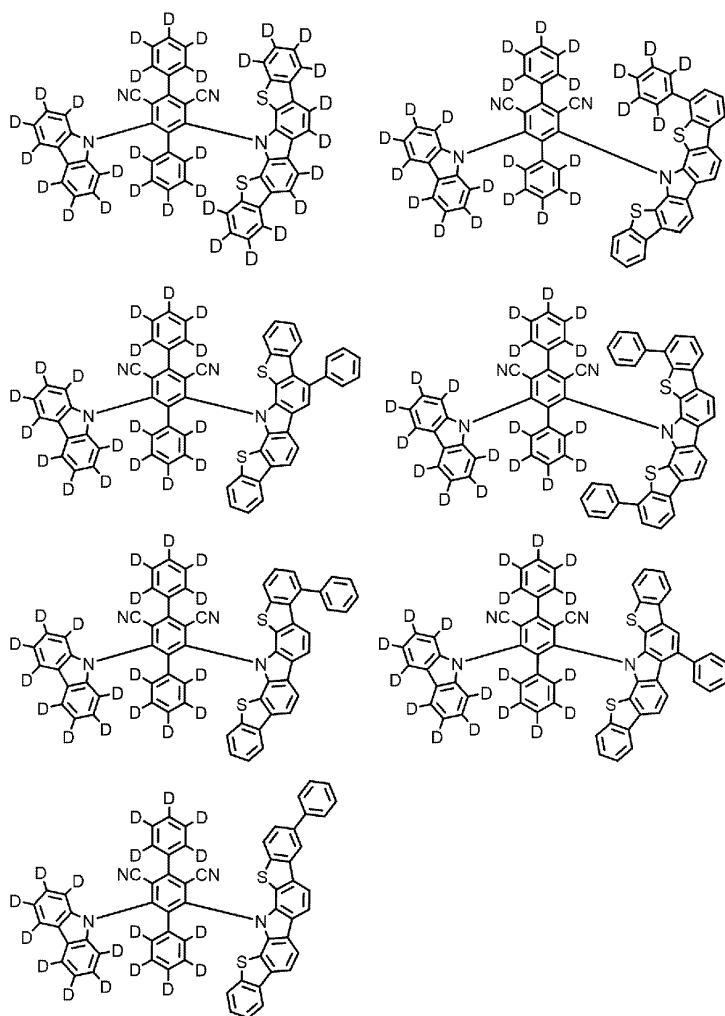
[화학식 134]



[1077]

[1078]

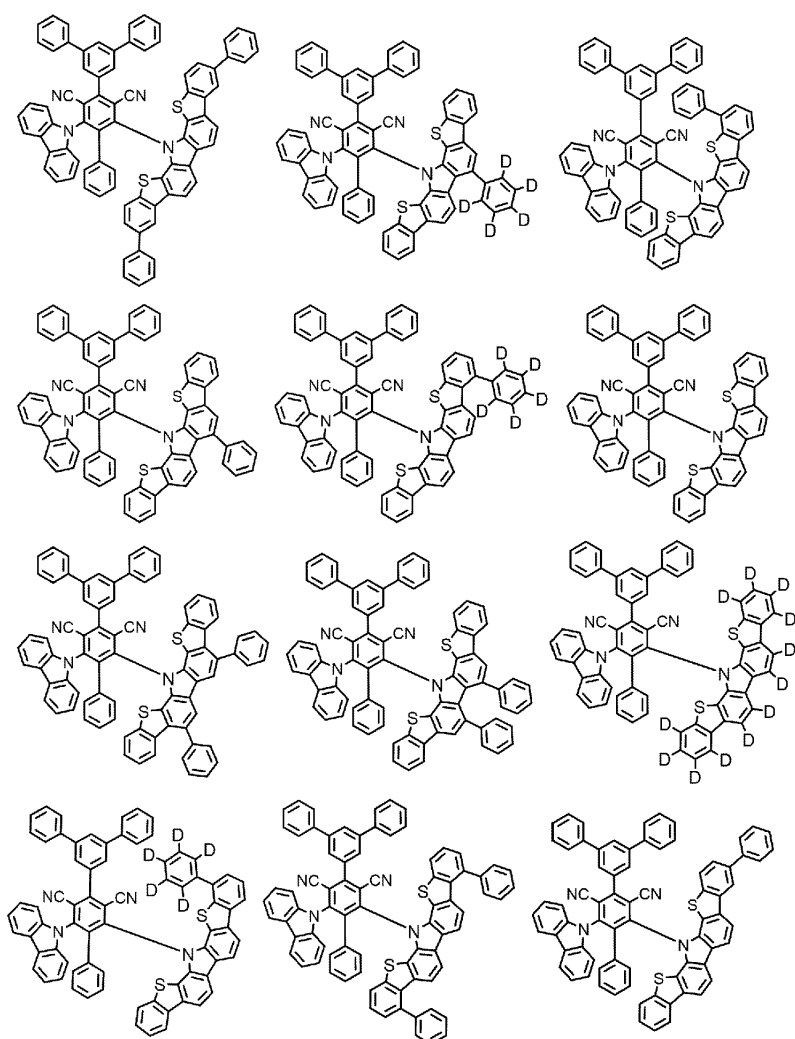
[화학식 135]



[1079]

[1080]

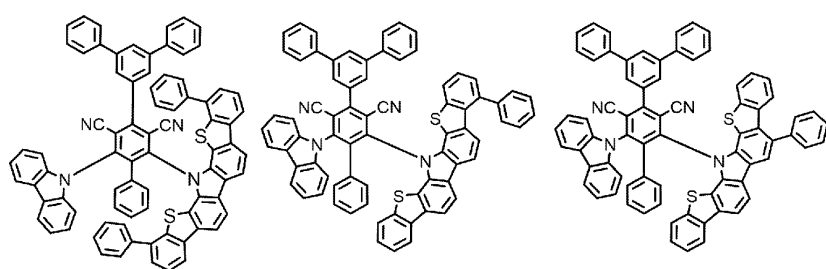
[화학식 136]



[1081]

[1082]

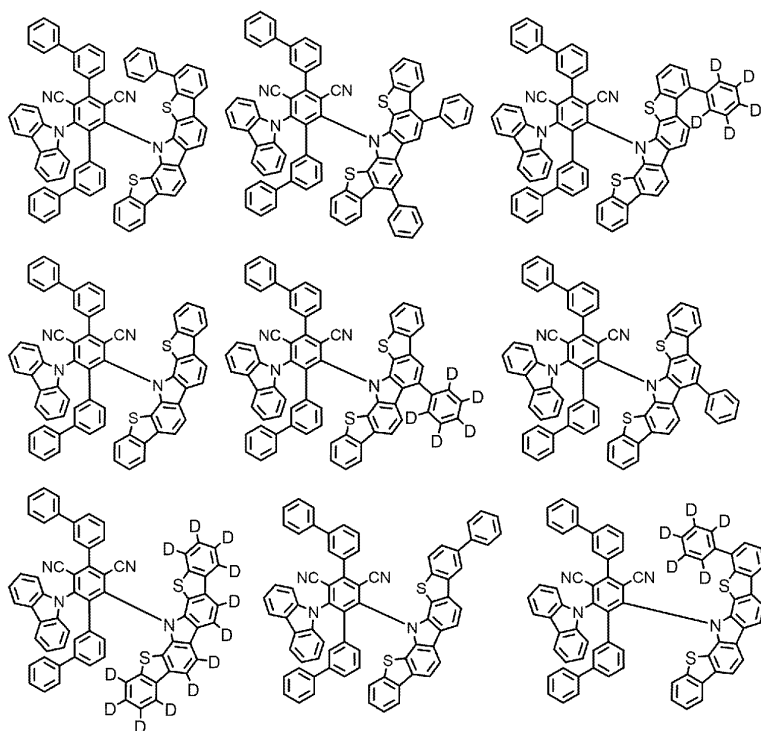
[화학식 137]



[1083]

[1084]

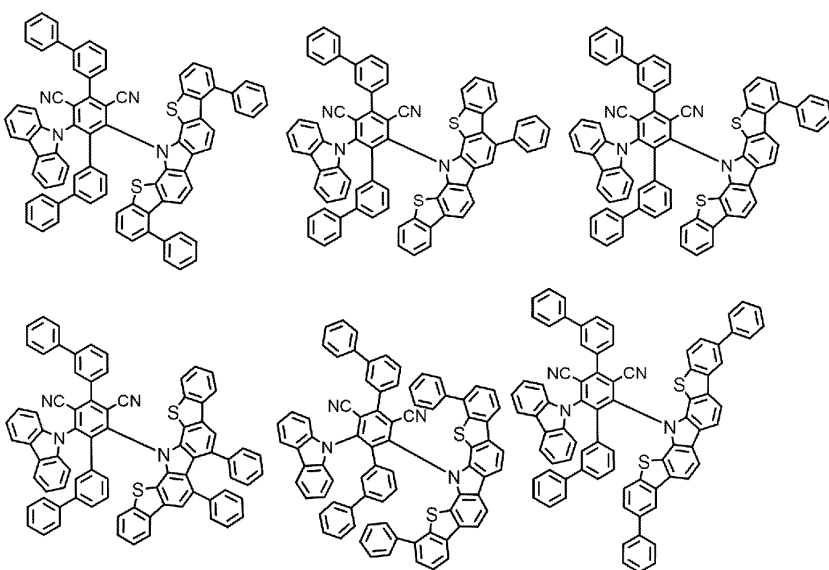
[화학식 138]



[1085]

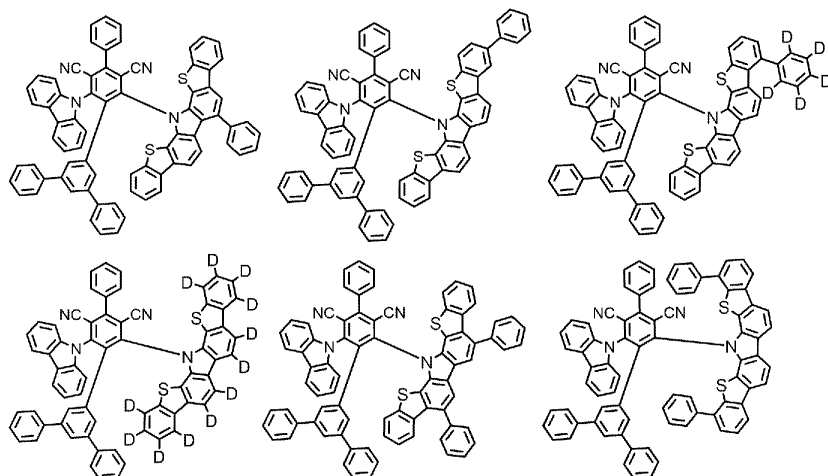
[1086]

[화학식 139]



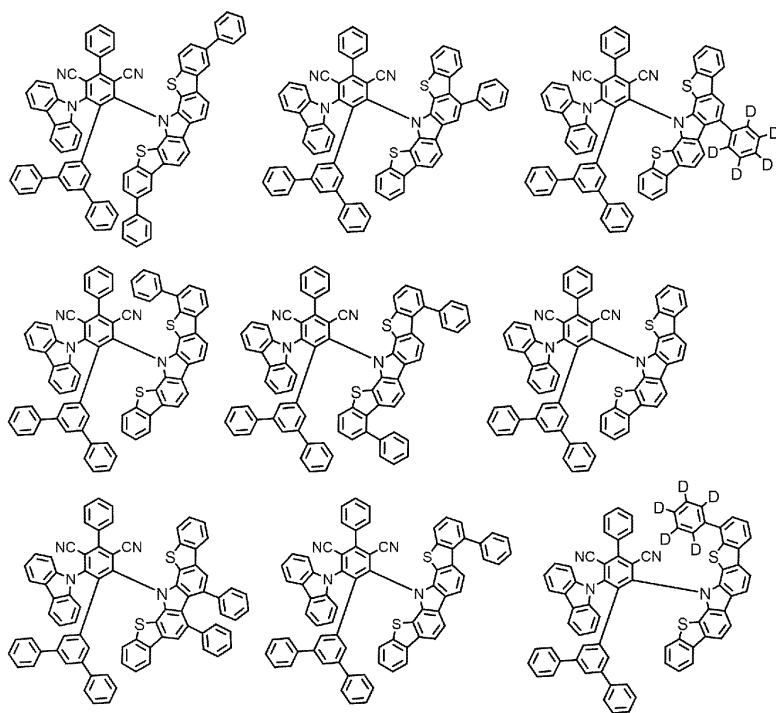
[1087]

[1088] [화학식 140]



[1089]

[1090] [화학식 141]



[1091]

[1092] [제2 실시형태]

[1093] <유기 일렉트로루미네센스 소자용 재료>

[1094] 본 실시형태에 따른 유기 일렉트로루미네센스 소자용 재료는, 제1 실시형태에 따른 화합물을 함유한다. 일양태로는, 제1 실시형태에 따른 화합물만을 포함하는 유기 일렉트로루미네센스 소자용 재료를 들 수 있고, 다른 일양태로는, 제1 실시형태에 따른 화합물과, 제1 실시형태에서의 화합물과는 상이한 다른 화합물을 포함하는 유기 일렉트로루미네센스 소자용 재료를 들 수 있다.

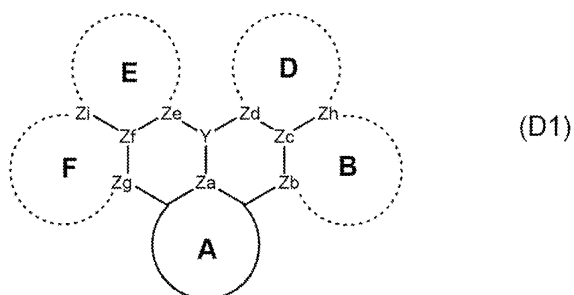
[1095] 본 실시형태의 유기 일렉트로루미네센스 소자용 재료에 있어서, 제1 실시형태에 따른 화합물이 호스트 재료인 것이 바람직하다. 이 경우, 유기 일렉트로루미네센스 소자용 재료는, 호스트 재료로서의 제1 실시형태에 따른 화합물과, 예컨대 도펀트 재료 등의 다른 화합물을 포함하고 있어도 좋다.

[1096] 또한, 본 실시형태의 유기 일렉트로루미네센스 소자용 재료에 있어서, 제1 실시형태에 따른 화합물이 지연 형광성 재료인 것이 바람직하다.

- [1097] [제3 실시형태]
- [1098] <유기 일렉트로루미네센스 소자>
- [1099] 본 실시형태에 따른 유기 EL 소자에 대해서 설명한다.
- [1100] 본 실시형태에 따른 유기 EL 소자는, 양극 및 음극의 양 전극 사이에 유기층을 구비한다. 이 유기층은, 유기 화합물로 구성되는 층을 적어도 하나 포함한다. 혹은, 이 유기층은, 유기 화합물로 구성되는 복수의 층이 적층되어 이루어진다. 유기층은 무기 화합물을 더 포함하고 있어도 좋다.
- [1101] 본 실시형태에 따른 유기 EL 소자에 있어서, 유기층은, 제1 실시형태에 따른 화합물을 포함한다. 즉, 본 실시형태에 따른 유기 EL 소자는 양극과, 음극과, 유기층을 갖고, 유기층은 제1 실시형태에 따른 화합물을 화합물 M2로서 포함한다.
- [1102] 본 실시형태의 유기 EL 소자에 있어서, 유기층은, 적어도 하나의 발광층을 갖고, 발광층이 제1 실시형태에 따른 화합물을 화합물 M2로서 포함하는 것이 바람직하다.
- [1103] 유기층은, 예컨대 하나의 발광층으로 구성되어 있어도 좋고, 유기 EL 소자에 채용될 수 있는 층을 포함하고 있어도 좋다. 유기 EL 소자에 채용될 수 있는 층으로는, 특별히 한정되지 않지만, 예컨대 정공 주입층, 정공 수송층, 전자 장벽층, 정공 장벽층, 전자 수송층 및 전자 주입층으로 이루어진 군에서 선택되는 적어도 어느 하나의 층을 들 수 있다.
- [1104] 일 실시형태에 있어서, 발광층은 금속 착체를 포함해도 좋다.
- [1105] 또한, 일 실시형태에 있어서, 발광층은 금속 착체를 포함하지 않는 것도 바람직하다.
- [1106] 또한, 일 실시형태에 있어서, 발광층은 인광 발광성 재료(도펀트 재료)를 포함하지 않는 것이 바람직하다.
- [1107] 또한, 일 실시형태에 있어서, 발광층은, 중금속 착체 및 인광 발광성의 희토류 금속 착체를 포함하지 않는 것이 바람직하다. 중금속 착체로는, 예컨대 이리듐 착체, 오스뮴 착체 및 백금 착체 등을 들 수 있다.
- [1108] 도 3에, 본 실시형태에 따른 유기 EL 소자의 일례의 개략 구성을 도시한다.
- [1109] 유기 EL 소자(1)는, 투광성의 기관(2)과, 양극(3)과, 음극(4)과, 양극(3)과 음극(4) 사이에 배치된 유기층(10)을 포함한다. 유기층(10)은, 양극(3)측으로부터 순서대로, 정공 주입층(6), 정공 수송층(7), 발광층(5), 전자 수송층(8) 및 전자 주입층(9)이, 이 순서로 적층되어 구성된다. 본 발명은, 도 3에 도시하는 유기 EL 소자의 구성에 한정되지 않는다.
- [1110] (발광층)
- [1111] 본 실시형태의 유기 EL 소자에 있어서, 발광층은, 화합물 M1 및 화합물 M2를 포함한다. 발광층에서의 화합물 M2는, 제1 실시형태에 따른 화합물인 것이 바람직하다. 이 양태의 경우, 화합물 M2는 호스트 재료(매트릭스 재료라고 칭하는 경우도 있음.)인 것이 바람직하고, 화합물 M1은 도펀트 재료(게스트 재료, 에미터 또는 발광 재료라고 칭하는 경우도 있음.)인 것도 바람직하다.
- [1112] 본 실시형태에 있어서, 발광층이 제1 실시형태에 따른 화합물을 포함하는 경우, 해당 발광층은, 인광 발광성의 금속 착체를 포함하지 않는 것이 바람직하고, 인광 발광성의 금속 착체 이외의 금속 착체도 포함하지 않는 것이 바람직하다.
- [1113] (화합물 M2)
- [1114] 화합물 M2는 제1 실시형태에 따른 화합물이다. 본 실시형태의 화합물 M2는, 열활성화 지연 형광성의 화합물인 것이 바람직하다.
- [1115] (화합물 M1)
- [1116] 화합물 M1은, 형광 발광성의 화합물인 것이 바람직하다. 화합물 M1은, 지연 형광성을 나타내지 않는 화합물인 것이 바람직하다.
- [1117] 본 실시형태의 화합물 M1은, 인광 발광성의 금속 착체가 아니다. 화합물 M1은, 중금속 착체가 아닌 것이 바람직하다. 또한, 화합물 M1은, 금속 착체가 아닌 것이 바람직하다.
- [1118] 본 실시형태의 화합물 M1으로는, 형광 발광성 재료를 이용할 수 있다. 형광 발광성 재료로는, 구체적으로는, 예

컨대 비스아릴아미노나프탈렌 유도체, 아릴 치환 나프탈렌 유도체, 비스아릴아미노안트라센 유도체, 아릴 치환 안트라센 유도체, 비스아릴아미노피렌 유도체, 아릴 치환 피렌 유도체, 비스아릴아미노크리센 유도체, 아릴 치환 크리센 유도체, 비스아릴아미노플루오란텐 유도체, 아릴 치환 플루오란텐 유도체, 인데노페릴렌 유도체, 아세나프토플루오란텐 유도체, 붕소 원자를 포함하는 화합물, 피로메텐붕소 착체 화합물, 피로메텐 골격을 갖는 화합물, 피로메텐 골격을 갖는 화합물의 금속 착체, 디케토피로로피롤 유도체, 페릴렌 유도체 및 나프타센 유도체 등을 들 수 있다.

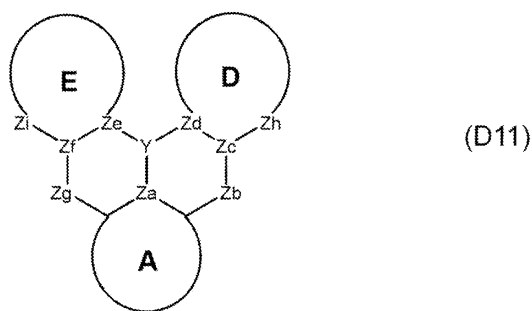
- [1119] 화합물 M1은, 최대 피크 파장이 400 nm 이상 700 nm 이하인 발광을 나타내는 화합물인 것이 바람직하다.
- [1120] 본 명세서에 있어서, 최대 피크 파장이란, 측정 대상 화합물이 10^{-6} 몰/리터 이상 10^{-5} 몰/리터 이하의 농도로 용해되어 있는 톨루엔 용액에 대해, 측정한 형광 스펙트럼에서의 발광 강도가 최대가 되는 형광 스펙트럼의 피크 파장을 말한다. 측정 장치는, 분광 형광 광도계(가부시키가이샤 히타치 하이테크 사이언스사 제조, F-7000)를 이용한다.
- [1121] 화합물 M1은, 적색의 발광 또는 녹색의 발광을 나타내는 것이 바람직하다.
- [1122] 본 명세서에 있어서, 적색의 발광이란, 형광 스펙트럼의 최대 피크 파장이 600 nm 이상 660 nm 이하인 범위 내인 발광을 말한다.
- [1123] 화합물 M1이 적색의 형광 발광성의 화합물인 경우, 화합물 M1의 최대 피크 파장은, 바람직하게는 600 nm 이상 660 nm 이하, 보다 바람직하게는 600 nm 이상 640 nm 이하, 더욱 바람직하게는 610 nm 이상 630 nm 이하이다.
- [1124] 본 명세서에 있어서, 녹색의 발광이란, 형광 스펙트럼의 최대 피크 파장이 500 nm 이상 560 nm 이하인 범위 내인 발광을 말한다.
- [1125] 화합물 M1이 녹색의 형광 발광성의 화합물인 경우, 화합물 M1의 최대 피크 파장은, 바람직하게는 500 nm 이상 560 nm 이하, 보다 바람직하게는 500 nm 이상 540 nm 이하, 더욱 바람직하게는 510 nm 이상 540 nm 이하이다.
- [1126] 본 명세서에 있어서, 청색의 발광이란, 형광 스펙트럼의 최대 피크 파장이 430 nm 이상 480 nm 이하인 범위 내인 발광을 말한다.
- [1127] 화합물 M1이 청색의 형광 발광성의 화합물인 경우, 화합물 M1의 최대 피크 파장은, 바람직하게는 430 nm 이상 480 nm 이하, 보다 바람직하게는 440 nm 이상 480 nm 이하이다.
- [1128] 유기 EL 소자로부터 발광하는 광의 최대 피크 파장의 측정은, 이하와 같이 하여 행한다.
- [1129] 전류 밀도가 10 mA/cm²가 되도록 유기 EL 소자에 전압을 인가했을 때의 분광 방사 휘도 스펙트럼을 분광 방사 휘도계 CS-2000(코니카미놀타 가부시키가이샤 제조)로 계측한다. 얻어진 분광 방사 휘도 스펙트럼에 있어서, 발광 강도가 최대가 되는 발광 스펙트럼의 피크 파장을 측정하여, 이것을 최대 피크 파장(단위: nm)으로 한다.
- [1130] (일반식(D1)로 표시되는 화합물)
- [1131] 본 실시형태에 있어서, 화합물 M1은, 하기 일반식(D1)로 표시되는 화합물인 것도 바람직하다.
- [1132] [화학식 142]



- [1133]
- [1134] (상기 일반식(D1)에 있어서,
- [1135] 고리 A, 고리 B, 고리 D, 고리 E 및 고리 F는, 각각 독립적으로
- [1136] 치환 혹은 무치환의 고리 형성 탄소수 6~30의 아릴환, 및

- [1137] 치환 혹은 무치환의 고리 형성 원자수 5~30의 복소환으로 이루어진 군에서 선택되는 고리 구조이며,
- [1138] 고리 B 및 고리 D의 한쪽이 존재하거나, 또는 고리 B 및 고리 D의 양쪽이 존재하고,
- [1139] 고리 B 및 고리 D의 양쪽이 존재하는 경우, 고리 B 및 고리 D는, Zc과 Zh를 연결하는 결합을 공유하고,
- [1140] 고리 E 및 고리 F의 한쪽이 존재하거나, 또는 고리 E 및 고리 F의 양쪽이 존재하고,
- [1141] 고리 E 및 고리 F의 양쪽이 존재하는 경우, 고리 E 및 고리 F는, Zf와 Zi를 연결하는 결합을 공유하고,
- [1142] Za는 질소 원자 또는 탄소 원자이며,
- [1143] Zb는,
- [1144] 고리 B가 존재하는 경우, 질소 원자 또는 탄소 원자이며,
- [1145] 고리 B가 존재하지 않는 경우, 산소 원자, 황 원자, NRb, C(Rb₁)(Rb₂) 또는 Si(Rb₃)(Rb₄)이고,
- [1146] Zc는 질소 원자 또는 탄소 원자이며,
- [1147] Zd는,
- [1148] 고리 D가 존재하는 경우, 질소 원자 또는 탄소 원자이며,
- [1149] 고리 D가 존재하지 않는 경우, 산소 원자, 황 원자 또는 NRd이며,
- [1150] Ze는,
- [1151] 고리 E가 존재하는 경우, 질소 원자 또는 탄소 원자이며,
- [1152] 고리 E가 존재하지 않는 경우, 산소 원자, 황 원자 또는 NRe이며,
- [1153] Zf는 질소 원자 또는 탄소 원자이며,
- [1154] Zg는,
- [1155] 고리 F가 존재하는 경우, 질소 원자 또는 탄소 원자이며,
- [1156] 고리 F가 존재하지 않는 경우, 산소 원자, 황 원자, NRg, C(Rg₁)(Rg₂) 또는 Si(Rg₃)(Rg₄)이며,
- [1157] Zh는 질소 원자 또는 탄소 원자이며,
- [1158] Zi는 질소 원자 또는 탄소 원자이며,
- [1159] Y는 붕소 원자, 인 원자, SiRh, P=O 또는 P=S이며,
- [1160] Rb, Rb₁, Rb₂, Rb₃, Rb₄, Rd, Re, Rg, Rg₁, Rg₂, Rg₃, Rg₄ 및 Rh는, 각각 독립적으로 수소 원자 또는 치환기이며,
- [1161] 치환기로서의 Rb, Rb₁, Rb₂, Rb₃, Rb₄, Rd, Re, Rg, Rg₁, Rg₂, Rg₃, Rg₄ 및 Rh는, 각각 독립적으로
- [1162] 치환 혹은 무치환의 고리 형성 탄소수 6~30의 아릴기,
- [1163] 치환 혹은 무치환의 고리 형성 원자수 5~30의 복소환기,
- [1164] 치환 혹은 무치환의 탄소수 1~30의 알킬기,
- [1165] 치환 혹은 무치환의 고리 형성 탄소수 3~30의 시클로알킬기,
- [1166] -Si(R₉₁₁)(R₉₁₂)(R₉₁₃)으로 표시되는 기,
- [1167] -O-(R₉₁₄)로 표시되는 기,
- [1168] -S-(R₉₁₅)로 표시되는 기, 또는
- [1169] -N(R₉₁₆)(R₉₁₇)로 표시되는 기이고,
- [1170] 다만, Y와 Za의 결합, Y와 Zd의 결합, 및 Y와 Ze의 결합은, 모두 단일 결합이다.)

- [1171] (상기 화합물 M1에 있어서, $R_{911} \sim R_{917}$ 은, 각각 독립적으로
- [1172] 수소 원자,
- [1173] 치환 혹은 무치환의 탄소수 1~50의 알킬기,
- [1174] 치환 혹은 무치환의 고리 형성 탄소수 3~50의 시클로알킬기,
- [1175] 치환 혹은 무치환의 고리 형성 탄소수 6~50의 아릴기, 또는
- [1176] 치환 혹은 무치환의 고리 형성 원자수 5~50의 복소환기이며,
- [1177] R_{911} 이 복수 존재하는 경우, 복수의 R_{911} 은 서로 동일하거나 또는 상이하고,
- [1178] R_{912} 가 복수 존재하는 경우, 복수의 R_{912} 는 서로 동일하거나 또는 상이하고,
- [1179] R_{913} 이 복수 존재하는 경우, 복수의 R_{913} 은 서로 동일하거나 또는 상이하고,
- [1180] R_{914} 가 복수 존재하는 경우, 복수의 R_{914} 는 서로 동일하거나 또는 상이하고,
- [1181] R_{915} 가 복수 존재하는 경우, 복수의 R_{915} 는 서로 동일하거나 또는 상이하고,
- [1182] R_{916} 이 복수 존재하는 경우, 복수의 R_{916} 은 서로 동일하거나 또는 상이하고,
- [1183] R_{917} 이 복수 존재하는 경우, 복수의 R_{917} 은 서로 동일하거나 또는 상이하다.)
- [1184] Y와 Za의 결합, Y와 Zd의 결합, 및 Y와 Ze의 결합은, 모두 단일 결합이며, 이 단일 결합은, 공유 결합이며, 배위 결합이 아니다.
- [1185] 본 명세서에 있어서, 복소환으로는, 예컨대 전술한 「본 명세서에 기재된 치환기」에서 예시한 「복소환기」로부터 결합손을 제거한 고리 구조(복소환)를 들 수 있다. 이들 복소환은 치환기를 갖고 있어도 좋고, 무치환이어도 좋다.
- [1186] 본 명세서에 있어서, 아릴환으로는, 예컨대 전술한 「본 명세서에 기재된 치환기」에서 예시한 「아릴기」로부터 결합손을 제거한 고리 구조(아릴환)를 들 수 있다. 이들 아릴환은 치환기를 갖고 있어도 좋고, 무치환이어도 좋다.
- [1187] 본 실시형태에 있어서, 화합물 M1은, 하기 일반식(D11)로 표시되는 화합물인 것도 바람직하다.
- [1188] [화학식 143]



- [1189]
- [1190] (상기 일반식(D11)에 있어서,
- [1191] 고리 A, 고리 D 및 고리 E는, 각각 독립적으로
- [1192] 치환 혹은 무치환의 고리 형성 탄소수 6~30의 아릴환, 및
- [1193] 치환 혹은 무치환의 고리 형성 원자수 5~30의 복소환
- [1194] 으로 이루어진 군에서 선택되는 고리 구조이고,
- [1195] Za는 질소 원자 또는 탄소 원자이고,

[1196] Zb는 산소 원자, 황 원자, NRb, C(Rb₁)(Rb₂) 또는 Si(Rb₃)(Rb₄)이고,

[1197] Zc는 질소 원자 또는 탄소 원자이고,

[1198] Zd는 질소 원자 또는 탄소 원자이고,

[1199] Ze는 질소 원자 또는 탄소 원자이고,

[1200] Zf는 질소 원자 또는 탄소 원자이고,

[1201] Zg는 산소 원자, 황 원자, NRg, C(Rg₁)(Rg₂) 또는 Si(Rg₃)(Rg₄)이고,

[1202] Zh는 질소 원자 또는 탄소 원자이고,

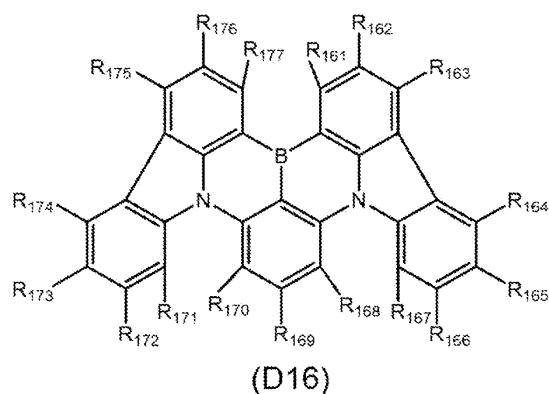
[1203] Zi는 질소 원자 또는 탄소 원자이고,

[1204] Y는 붕소 원자, 인 원자, SiRh, P=O 또는 P=S이고,

[1205] Rb, Rb₁, Rb₂, Rb₃, Rb₄, Rg, Rg₁, Rg₂, Rg₃, Rg₄ 및 Rh는, 각각 독립적으로 상기 일반식(D1)에서의 Rb, Rb₁, Rb₂, Rb₃, Rb₄, Rg, Rg₁, Rg₂, Rg₃, Rg₄ 및 Rh와 동의이다.)

[1206] 본 실시형태에 있어서, 화합물 M1은, 하기 일반식(D16)으로 표시되는 화합물인 것도 바람직하다.

[1207] [화학식 144]



[1208]

[1209] (상기 일반식(D16)에 있어서,

[1210] R₁₆₁~R₁₇₇ 중의 인접하는 2개 이상으로 이루어진 조의 1조 이상이,

[1211] 서로 결합하여 치환 혹은 무치환의 단환을 형성하거나,

[1212] 서로 결합하여 치환 혹은 무치환의 축합환을 형성하거나, 또는

[1213] 서로 결합하지 않고,

[1214] 상기 치환 혹은 무치환의 단환을 형성하지 않고 또한 상기 치환 혹은 무치환의 축합환을 형성하지 않은 R₁₆₁~R₁₇₇은, 각각 독립적으로

[1215] 수소 원자,

[1216] 치환 혹은 무치환의 탄소수 1~50의 알킬기,

[1217] 치환 혹은 무치환의 탄소수 2~50의 알케닐기,

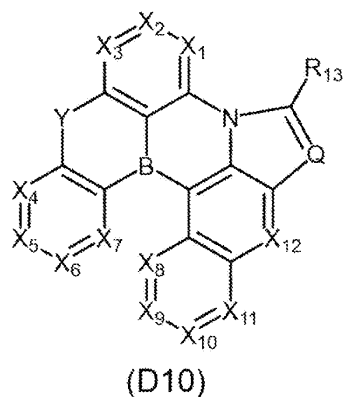
[1218] 치환 혹은 무치환의 탄소수 2~50의 알키닐기,

[1219] 치환 혹은 무치환의 고리 형성 탄소수 3~50의 시클로알킬기,

[1220] 치환 혹은 무치환의 탄소수 7~50의 아랄킬기,

- [1221] -Si(R₉₆₁)(R₉₆₂)(R₉₆₃)으로 표시되는 기,
- [1222] -O-(R₉₆₄)로 표시되는 기,
- [1223] -S-(R₉₆₅)로 표시되는 기,
- [1224] -N(R₉₆₆)(R₉₆₇)로 표시되는 기,
- [1225] -C(=O)R₉₆₈로 표시되는 기,
- [1226] -COOR₉₆₉로 표시되는 기,
- [1227] 할로젠 원자,
- [1228] 시아노기,
- [1229] 니트로기,
- [1230] 치환 혹은 무치환의 고리 형성 탄소수 6~50의 아릴기, 또는
- [1231] 치환 혹은 무치환의 고리 형성 원자수 5~50의 복소환기이고,
- [1232] R₉₆₁~R₉₆₉는, 각각 독립적으로
- [1233] 수소 원자,
- [1234] 치환 혹은 무치환의 탄소수 1~50의 알킬기,
- [1235] 치환 혹은 무치환의 고리 형성 탄소수 6~50의 아릴기, 또는
- [1236] 치환 혹은 무치환의 고리 형성 원자수 5~50의 복소환기이고,
- [1237] R₉₆₁이 복수 존재하는 경우, 복수의 R₉₆₁은 서로 동일하거나 또는 상이하고,
- [1238] R₉₆₂가 복수 존재하는 경우, 복수의 R₉₆₂는 서로 동일하거나 또는 상이하고,
- [1239] R₉₆₃이 복수 존재하는 경우, 복수의 R₉₆₃은 서로 동일하거나 또는 상이하고,
- [1240] R₉₆₄가 복수 존재하는 경우, 복수의 R₉₆₄는 서로 동일하거나 또는 상이하고,
- [1241] R₉₆₅가 복수 존재하는 경우, 복수의 R₉₆₅는 서로 동일하거나 또는 상이하고,
- [1242] R₉₆₆이 복수 존재하는 경우, 복수의 R₉₆₆은 서로 동일하거나 또는 상이하고,
- [1243] R₉₆₇이 복수 존재하는 경우, 복수의 R₉₆₇은 서로 동일하거나 또는 상이하고,
- [1244] R₉₆₈이 복수 존재하는 경우, 복수의 R₉₆₈은 서로 동일하거나 또는 상이하고,
- [1245] R₉₆₉가 복수 존재하는 경우, 복수의 R₉₆₉는 서로 동일하거나 또는 상이하다.)
- [1246] (일반식(D10)으로 표시되는 화합물)
- [1247] 본 실시형태에 따른 유기 EL 소자에 있어서, 화합물 M1은, 하기 일반식(D10)으로 표시되는 화합물인 것도 바람직하다. 상기 일반식(D1)로 표시되는 화합물은, 하기 일반식(D10)으로 표시되는 화합물인 것도 바람직하다.

[1248] [화학식 145]



[1249]

[1250] (상기 일반식(D10)에 있어서,

[1251] X_1 은 CR_1 또는 질소 원자이고,

[1252] X_2 은 CR_2 또는 질소 원자이고,

[1253] X_3 은 CR_3 또는 질소 원자이고,

[1254] X_4 은 CR_4 또는 질소 원자이고,

[1255] X_5 은 CR_5 또는 질소 원자이고,

[1256] X_6 은 CR_6 또는 질소 원자이고,

[1257] X_7 은, CR_7 이거나, 질소 원자이거나, 또는 X_8 과 단일 결합으로 결합하는 탄소 원자이고,

[1258] X_8 은, CR_8 이거나, 질소 원자이거나, 또는 X_7 과 단일 결합으로 결합하는 탄소 원자이고,

[1259] X_9 은 CR_9 또는 질소 원자이고,

[1260] X_{10} 은 CR_{10} 또는 질소 원자이고,

[1261] X_{11} 은 CR_{11} 또는 질소 원자이고,

[1262] X_{12} 은 CR_{12} 또는 질소 원자이고,

[1263] Q는 CR_Q 또는 질소 원자이고,

[1264] Y는, NR_{Y1} , 산소 원자, 황 원자, $C(R_{Y2})(R_{Y3})$ 또는 $Si(R_{Y4})(R_{Y5})$ 이며,

[1265] $R_1 \sim R_6$ 및 $R_9 \sim R_{11}$ 중의 인접하는 2개 이상으로 이루어진 조의 1조 이상이,

[1266] 서로 결합하여 치환 혹은 무치환의 단환을 형성하거나,

[1267] 서로 결합하여 치환 혹은 무치환의 축합환을 형성하거나, 또는

[1268] 서로 결합하지 않고,

[1269] R_3 , R_4 및 R_{Y1} 중의 인접하는 2개 이상으로 이루어진 조의 1조 이상이,

[1270] 서로 결합하여 치환 혹은 무치환의 단환을 형성하거나,

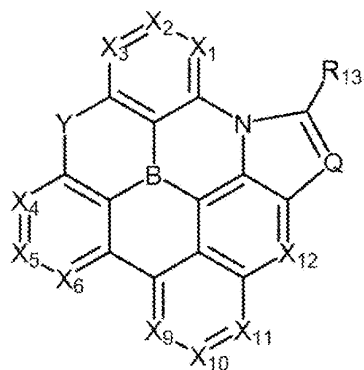
[1271] 서로 결합하여 치환 혹은 무치환의 축합환을 형성하거나, 또는

[1272] 서로 결합하지 않고,

- [1273] R_3 , R_4 및 R_{Y1} 중의 인접하는 2개 이상으로 이루어진 조의 1조 이상이 서로 결합하여 형성된 단환 또는 축합환에
서의 적어도 하나의 수소는,
- [1274] 탄소수 1~50의 알킬기,
- [1275] 고리 형성 탄소수 6~50의 아릴기,
- [1276] 고리 형성 원자수 5~50의 복소환기,
- [1277] $-O-(R_{920})$ 로 표시되는 기, 및
- [1278] $-N(R_{921})(R_{922})$ 로 표시되는 기로 이루어진 군에서 선택되는 적어도 어느 하나의 치환기로 치환되어 있거나, 혹은
치환되어 있지 않고,
- [1279] 해당 치환기에서의 적어도 하나의 수소는, 고리 형성 탄소수 6~50의 아릴기 또는 탄소수 1~50의 알킬기로 치
환되어 있거나, 혹은 치환되어 있지 않고,
- [1280] 상기 치환 혹은 무치환의 단환을 형성하지 않고 또한 상기 치환 혹은 무치환의 축합환을 형성하지 않은 $R_1 \sim R_{11}$
및 $R_{12} \sim R_{13}$, 및 R_Q 는, 각각 독립적으로
- [1281] 수소 원자,
- [1282] 치환 혹은 무치환의 탄소수 1~50의 알킬기,
- [1283] 치환 혹은 무치환의 탄소수 2~50의 알케닐기,
- [1284] 치환 혹은 무치환의 탄소수 2~50의 알키닐기,
- [1285] 치환 혹은 무치환의 고리 형성 탄소수 3~50의 시클로알킬기,
- [1286] $-Si(R_{911})(R_{912})(R_{913})$ 으로 표시되는 기,
- [1287] $-O-(R_{914})$ 로 표시되는 기,
- [1288] $-S-(R_{915})$ 로 표시되는 기,
- [1289] $-N(R_{916})(R_{917})$ 로 표시되는 기,
- [1290] 치환 혹은 무치환의 탄소수 7~50의 아랄킬기,
- [1291] $-C(=O)R_{918}$ 로 표시되는 기,
- [1292] $-COOR_{919}$ 로 표시되는 기,
- [1293] 할로젠 원자,
- [1294] 시아노기,
- [1295] 니트로기,
- [1296] 치환 혹은 무치환의 고리 형성 탄소수 6~50의 아릴기, 또는
- [1297] 치환 혹은 무치환의 고리 형성 원자수 5~50의 복소환기이고,
- [1298] 상기 치환 혹은 무치환의 단환을 형성하지 않고 또한 상기 치환 혹은 무치환의 축합환을 형성하지 않은 R_{Y1} 은,
- [1299] 치환 혹은 무치환의 탄소수 1~50의 알킬기,
- [1300] 치환 혹은 무치환의 탄소수 2~50의 알케닐기,
- [1301] 치환 혹은 무치환의 탄소수 2~50의 알키닐기,
- [1302] 치환 혹은 무치환의 고리 형성 탄소수 3~50의 시클로알킬기,

- [1303] 치환 혹은 무치환의 고리 형성 탄소수 6~50의 아릴기, 또는
- [1304] 치환 혹은 무치환의 고리 형성 원자수 5~50의 복소환기이고,
- [1305] R_{Y2} 및 R_{Y2} 으로 이루어진 조가,
- [1306] 서로 결합하여 치환 혹은 무치환의 단환을 형성하거나,
- [1307] 서로 결합하여 치환 혹은 무치환의 축합환을 형성하거나, 또는
- [1308] 서로 결합하지 않고,
- [1309] 상기 치환 혹은 무치환의 단환을 형성하지 않고 또한 상기 치환 혹은 무치환의 축합환을 형성하지 않은 R_{Y2} 및 R_{Y3} , 및 R_{Y4} 및 R_{Y5} 는, 각각 독립적으로
- [1310] 수소 원자,
- [1311] 할로겐 원자,
- [1312] 치환 혹은 무치환의 탄소수 1~50의 알킬기,
- [1313] 치환 혹은 무치환의 고리 형성 탄소수 6~50의 아릴기, 또는
- [1314] 치환 혹은 무치환의 고리 형성 원자수 5~50의 복소환기이고,
- [1315] $R_{911} \sim R_{922}$ 는, 각각 독립적으로
- [1316] 수소 원자,
- [1317] 치환 혹은 무치환의 탄소수 1~50의 알킬기,
- [1318] 치환 혹은 무치환의 고리 형성 탄소수 3~50의 시클로알킬기,
- [1319] 치환 혹은 무치환의 고리 형성 탄소수 6~50의 아릴기, 또는
- [1320] 치환 혹은 무치환의 고리 형성 원자수 5~50의 복소환기이고,
- [1321] R_{911} 이 복수 존재하는 경우, 복수의 R_{911} 은 서로 동일하거나 또는 상이하고,
- [1322] R_{912} 가 복수 존재하는 경우, 복수의 R_{912} 는 서로 동일하거나 또는 상이하고,
- [1323] R_{913} 이 복수 존재하는 경우, 복수의 R_{913} 은 서로 동일하거나 또는 상이하고,
- [1324] R_{914} 가 복수 존재하는 경우, 복수의 R_{914} 는 서로 동일하거나 또는 상이하고,
- [1325] R_{915} 가 복수 존재하는 경우, 복수의 R_{915} 는 서로 동일하거나 또는 상이하고,
- [1326] R_{916} 이 복수 존재하는 경우, 복수의 R_{916} 은 서로 동일하거나 또는 상이하고,
- [1327] R_{917} 이 복수 존재하는 경우, 복수의 R_{917} 은 서로 동일하거나 또는 상이하고,
- [1328] R_{918} 이 복수 존재하는 경우, 복수의 R_{918} 은 서로 동일하거나 또는 상이하고,
- [1329] R_{919} 가 복수 존재하는 경우, 복수의 R_{919} 는 서로 동일하거나 또는 상이하고,
- [1330] R_{920} 이 복수 존재하는 경우, 복수의 R_{920} 은 서로 동일하거나 또는 상이하고,
- [1331] R_{921} 이 복수 존재하는 경우, 복수의 R_{921} 은 서로 동일하거나 또는 상이하고,
- [1332] R_{922} 가 복수 존재하는 경우, 복수의 R_{922} 는 서로 동일하거나 또는 상이하다.)
- [1333] 상기 일반식(D10)으로 표시되는 화합물에 있어서, X_7 이 X_8 과 단일 결합으로 결합하는 탄소 원자이며, X_8 이 X_7 과 단일 결합으로 결합하는 탄소 원자인 경우, 예컨대 상기 일반식(D10)은 하기 일반식(D10A)로 표시된다.

[1334] [화학식 146]



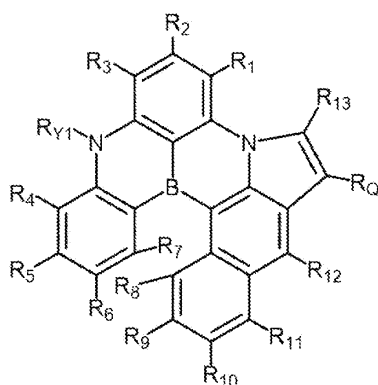
(D10A)

[1335]

[1336] (상기 일반식(D10A)에 있어서, X₁~X₆, X₉~X₁₂, Y, Q, 및 R₁₃은, 각각 독립적으로 상기 일반식(D10)에서 정의한 바와 같다.)

[1337] 상기 일반식(D10)으로 표시되는 화합물은, 하기 일반식(D12)로 표시되는 것도 바람직하다.

[1338] [화학식 147]



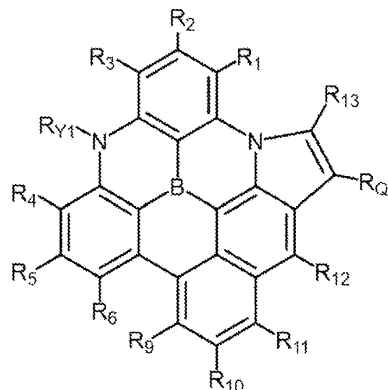
(D12)

[1339]

[1340] (상기 일반식(D12)에 있어서, R₁~R₁₃, R_{Y1}, R_Q는, 각각 독립적으로 상기 일반식(D10)에서 정의한 바와 같다.)

[1341] 상기 일반식(D10)으로 표시되는 화합물은, 하기 일반식(D12A)로 표시되는 것도 바람직하다.

[1342] [화학식 148]



(D12A)

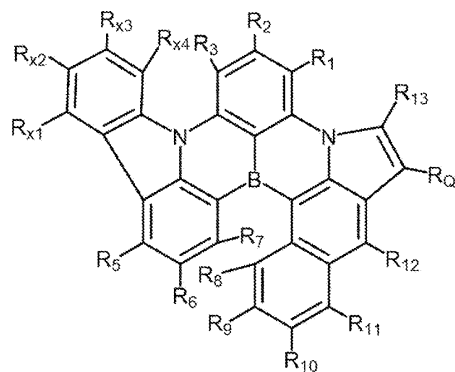
[1343]

[1344] (상기 일반식(D12A)에 있어서, R₁~R₆, R₉~R₁₃, R_{Y1}, R_Q는, 각각 독립적으로 상기 일반식(D10)에서 정의한 바와

같다.)

[1345] 상기 일반식(D10)으로 표시되는 화합물은, 하기 일반식(D13)으로 표시되는 것도 바람직하다.

[1346] [화학식 149]



(D13)

[1347]

[1348] (상기 일반식(D13)에 있어서,

[1349] R₁~R₃, R₅~R₁₃ 및 R_Q는, 각각 독립적으로 상기 일반식(D10)에서 정의한 바와 같고,

[1350] R_{X1}~R_{X4} 중의 인접하는 2개 이상으로 이루어진 조의 1조 이상이,

[1351] 서로 결합하여 치환 혹은 무치환의 단환을 형성하거나,

[1352] 서로 결합하여 치환 혹은 무치환의 축합환을 형성하거나, 또는

[1353] 서로 결합하지 않고,

[1354] 상기 치환 혹은 무치환의 단환을 형성하지 않고 또한 상기 치환 혹은 무치환의 축합환을 형성하지 않은 R_{X1}~R_{X4}는, 각각 독립적으로

[1355] 수소 원자,

[1356] 치환 혹은 무치환의 탄소수 1~50의 알킬기,

[1357] 치환 혹은 무치환의 탄소수 2~50의 알케닐기,

[1358] 치환 혹은 무치환의 탄소수 2~50의 알킬닐기,

[1359] 치환 혹은 무치환의 고리 형성 탄소수 3~50의 시클로알킬기,

[1360] 치환 혹은 무치환의 탄소수 7~50의 아랄킬기,

[1361] -Si(R₉₃₁)(R₉₃₂)(R₉₃₃)로 표시되는 기,

[1362] -O-(R₉₃₄)로 표시되는 기,

[1363] -S-(R₉₃₅)로 표시되는 기,

[1364] -N(R₉₃₆)(R₉₃₇)로 표시되는 기,

[1365] 치환 혹은 무치환의 탄소수 7~50의 아랄킬기,

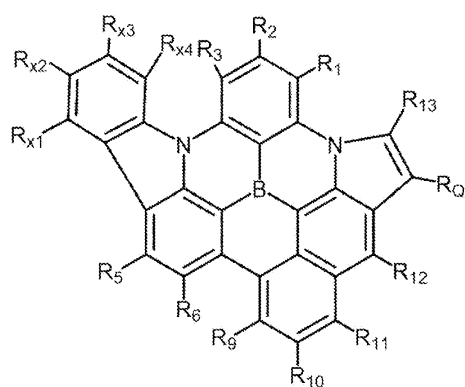
[1366] -C(=O)R₉₃₈로 표시되는 기,

[1367] -COOR₉₃₉로 표시되는 기,

[1368] 할로겐 원자,

[1369] 시아노기,

- [1370] 니트로기,
- [1371] 치환 혹은 무치환의 고리 형성 탄소수 6~50의 아릴기, 또는
- [1372] 치환 혹은 무치환의 고리 형성 원자수 5~50의 복소환기이고,
- [1373] $R_{931} \sim R_{939}$ 는, 각각 독립적으로
- [1374] 수소 원자,
- [1375] 치환 혹은 무치환의 탄소수 1~50의 알킬기,
- [1376] 치환 혹은 무치환의 고리 형성 탄소수 6~50의 아릴기, 또는
- [1377] 치환 혹은 무치환의 고리 형성 원자수 5~50의 복소환기이고,
- [1378] R_{931} 이 복수 존재하는 경우, 복수의 R_{931} 은 서로 동일하거나 또는 상이하고,
- [1379] R_{932} 가 복수 존재하는 경우, 복수의 R_{932} 는 서로 동일하거나 또는 상이하고,
- [1380] R_{933} 이 복수 존재하는 경우, 복수의 R_{933} 은 서로 동일하거나 또는 상이하고,
- [1381] R_{934} 가 복수 존재하는 경우, 복수의 R_{934} 는 서로 동일하거나 또는 상이하고,
- [1382] R_{935} 가 복수 존재하는 경우, 복수의 R_{935} 는 서로 동일하거나 또는 상이하고,
- [1383] R_{936} 이 복수 존재하는 경우, 복수의 R_{936} 은 서로 동일하거나 또는 상이하고,
- [1384] R_{937} 이 복수 존재하는 경우, 복수의 R_{937} 은 서로 동일하거나 또는 상이하고,
- [1385] R_{938} 이 복수 존재하는 경우, 복수의 R_{938} 은 서로 동일하거나 또는 상이하고,
- [1386] R_{939} 가 복수 존재하는 경우, 복수의 R_{939} 는 서로 동일하거나 또는 상이하다.)
- [1387] 한편, 상기 일반식(D13)에 있어서, 예컨대 R_5 및 R_6 로 이루어진 조가, 서로 결합하여 치환 혹은 무치환의 단환을 형성하거나, 서로 결합하여 치환 혹은 무치환의 축합환을 형성하거나, 또는 서로 결합하지 않는다.
- [1388] 상기 일반식(D10)으로 표시되는 화합물은, 하기 일반식(D13A)로 표시되는 것도 바람직하다.
- [1389] [화학식 150]

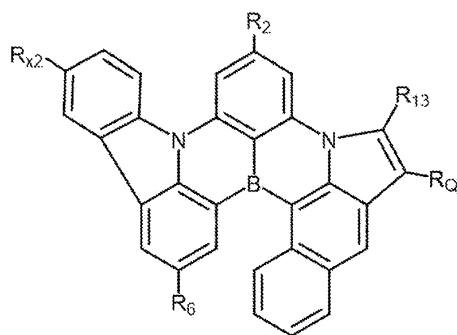


(D13A)

- [1390]
- [1391] (상기 일반식(D13A)에 있어서, $R_1 \sim R_3$, $R_5 \sim R_6$, $R_9 \sim R_{13}$ 및 R_Q 는, 각각 독립적으로 상기 일반식(D10)에서 정의한 바와 같고, $R_{x1} \sim R_{x4}$ 는, 각각 독립적으로 상기 일반식(D13)에서 정의한 바와 같다.)
- [1392] 상기 일반식(D10)으로 표시되는 화합물에 있어서, $R_1 \sim R_{13}$ 및 R_Q 는, 각각 독립적으로
- [1393] 수소 원자,

- [1394] 치환 혹은 무치환의 탄소수 1~50의 알킬기,
- [1395] 치환 혹은 무치환의 고리 형성 탄소수 6~50의 아릴기, 또는
- [1396] 치환 혹은 무치환의 고리 형성 원자수 5~50의 헤테로아릴기인 것도 바람직하다.
- [1397] 상기 일반식(D10)으로 표시되는 화합물에 있어서, $R_1 \sim R_{13}$ 및 R_Q 는, 각각 독립적으로
- [1398] 수소 원자,
- [1399] 치환 혹은 무치환의 탄소수 1~25의 알킬기,
- [1400] 치환 혹은 무치환의 고리 형성 탄소수 6~25의 아릴기, 또는
- [1401] 치환 혹은 무치환의 고리 형성 원자수 5~25의 헤테로아릴기인 것도 바람직하다.
- [1402] 상기 일반식(D10)으로 표시되는 화합물에 있어서, $R_1 \sim R_3$, $R_5 \sim R_{13}$, R_Q 및 $R_{x1} \sim R_{x4}$ 는, 각각 독립적으로
- [1403] 수소 원자,
- [1404] 치환 혹은 무치환의 탄소수 1~50의 알킬기,
- [1405] 치환 혹은 무치환의 고리 형성 탄소수 6~50의 아릴기, 또는
- [1406] 치환 혹은 무치환의 고리 형성 원자수 5~50의 헤테로아릴기인 것도 바람직하다.
- [1407] 상기 일반식(D10)으로 표시되는 화합물에 있어서, $R_1 \sim R_3$, $R_5 \sim R_{13}$, R_Q 및 $R_{x1} \sim R_{x4}$ 는, 각각 독립적으로
- [1408] 수소 원자,
- [1409] 치환 혹은 무치환의 탄소수 1~25의 알킬기,
- [1410] 치환 혹은 무치환의 고리 형성 탄소수 6~25의 아릴기, 또는
- [1411] 치환 혹은 무치환의 고리 형성 원자수 5~25의 헤테로아릴기인 것도 바람직하다.
- [1412] 상기 일반식(D10)으로 표시되는 화합물에 있어서, $R_1 \sim R_{13}$, R_Q 및 $R_{x1} \sim R_{x4}$ 는, 각각 독립적으로
- [1413] 수소 원자,
- [1414] 치환 혹은 무치환의 탄소수 1~50의 알킬기,
- [1415] 치환 혹은 무치환의 고리 형성 탄소수 6~50의 아릴기, 또는
- [1416] 치환 혹은 무치환의 고리 형성 원자수 5~50의 헤테로아릴기인 것이 바람직하다.
- [1417] 상기 일반식(D10)으로 표시되는 화합물에 있어서, $R_1 \sim R_{13}$, R_Q 및 $R_{x1} \sim R_{x4}$ 는, 각각 독립적으로
- [1418] 수소 원자,
- [1419] 치환 혹은 무치환의 탄소수 1~25의 알킬기,
- [1420] 치환 혹은 무치환의 고리 형성 탄소수 6~25의 아릴기, 또는
- [1421] 치환 혹은 무치환의 고리 형성 원자수 5~25의 헤테로아릴기인 것이 바람직하다.
- [1422] 상기 일반식(D10)으로 표시되는 화합물은, 하기 일반식(D14)로 표시되는 것도 바람직하다.

[1423] [화학식 151]



(D14)

[1424]

[1425] (상기 일반식(D14)에 있어서, R_2 , R_6 , R_{13} , R_Q 및 R_{x2} 는, 각각 독립적으로

[1426] 수소 원자,

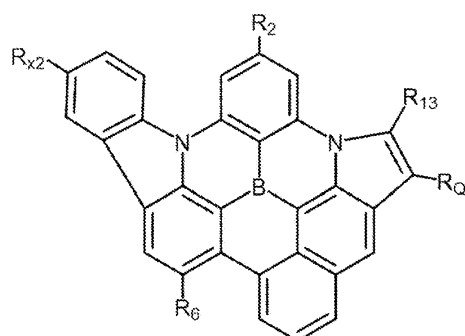
[1427] 치환 혹은 무치환의 탄소수 1~10의 알킬기,

[1428] 치환 혹은 무치환의 고리 형성 탄소수 6~12의 아릴기, 또는

[1429] 치환 혹은 무치환의 고리 형성 원자수 5~18의 헤테로아릴기이다.)

[1430] 상기 일반식(D10)으로 표시되는 화합물은, 하기 일반식(D15)로 표시되는 것도 바람직하다.

[1431] [화학식 152]



(D15)

[1432]

[1433] (상기 일반식(D15)에 있어서, R_2 , R_6 , R_{13} , R_Q 및 R_{x2} 는, 각각 독립적으로

[1434] 수소 원자,

[1435] 치환 혹은 무치환의 탄소수 1~10의 알킬기,

[1436] 치환 혹은 무치환의 고리 형성 탄소수 6~12의 아릴기, 또는

[1437] 치환 혹은 무치환의 고리 형성 원자수 5~18의 헤테로아릴기이다.)

[1438] 상기 일반식(D10)으로 표시되는 화합물에 있어서, R_{13} 및 R_Q 는, 각각 독립적으로

[1439] 치환 혹은 무치환의 탄소수 1~10의 알킬기,

[1440] 치환 혹은 무치환의 페닐기,

[1441] 치환 혹은 무치환의 나프틸기, 또는

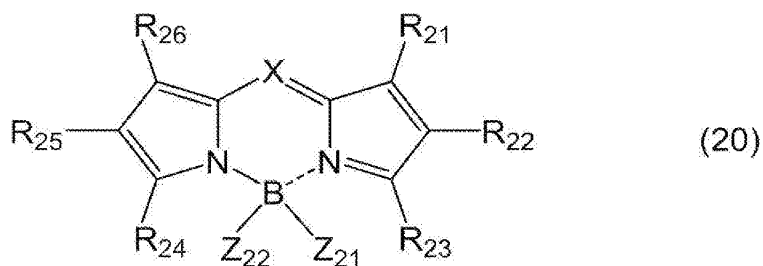
[1442] 치환 혹은 무치환의 디벤조푸라닐기인 것이 바람직하다.

[1443] 상기 일반식(D10)으로 표시되는 화합물에 있어서, R_6 및 R_{x2} 는, 각각 독립적으로 수소 원자, 또는 치환 혹은 무치환의 탄소수 1~10의 알킬기인 것이 바람직하다.

[1444] (일반식(20)으로 표시되는 화합물)

[1445] 본 실시형태에 있어서, 화합물 M1은, 하기 일반식(20)으로 표시되는 화합물인 것도 바람직하다.

[1446] [화학식 153]



[1447]

[1448] 상기 일반식(20)에 있어서,

[1449] X는 질소 원자, 또는 Y와 결합하는 탄소 원자이고,

[1450] Y는 수소 원자 또는 치환기이고,

[1451] R₂₁~R₂₆은, 각각 독립적으로 수소 원자 혹은 치환기이거나, 또는 R₂₁과 R₂₂의 조, R₂₂와 R₂₃의 조, R₂₄와 R₂₅의 조, 및 R₂₅와 R₂₆의 조의 어느 하나 이상의 조가 서로 결합하여 고리를 형성하고,

[1452] 치환기로서의 Y, 및 R₂₁~R₂₆은, 각각 독립적으로

[1453] 치환 혹은 무치환의 탄소수 1~30의 알킬기,

[1454] 치환 혹은 무치환의 탄소수 1~30의 할로젠화 알킬기,

[1455] 치환 혹은 무치환의 고리 형성 탄소수 3~30의 시클로알킬기,

[1456] 치환 혹은 무치환의 고리 형성 탄소수 6~30의 아릴기,

[1457] 치환 혹은 무치환의 탄소수 1~30의 알콕시기,

[1458] 치환 혹은 무치환의 탄소수 1~30의 할로젠화 알콕시기,

[1459] 치환 혹은 무치환의 탄소수 1~30의 알킬티오기,

[1460] 치환 혹은 무치환의 고리 형성 탄소수 6~30의 아릴옥시기,

[1461] 치환 혹은 무치환의 고리 형성 탄소수 6~30의 아릴티오기,

[1462] 치환 혹은 무치환의 탄소수 2~30의 알케닐기,

[1463] 치환 혹은 무치환의 탄소수 7~30의 아랄킬기,

[1464] 치환 혹은 무치환의 고리 형성 원자수 5~30의 헤테로아릴기,

[1465] 할로겐 원자,

[1466] 카르복시기,

[1467] 치환 혹은 무치환의 에스테르기,

[1468] 치환 혹은 무치환의 카르바모일기,

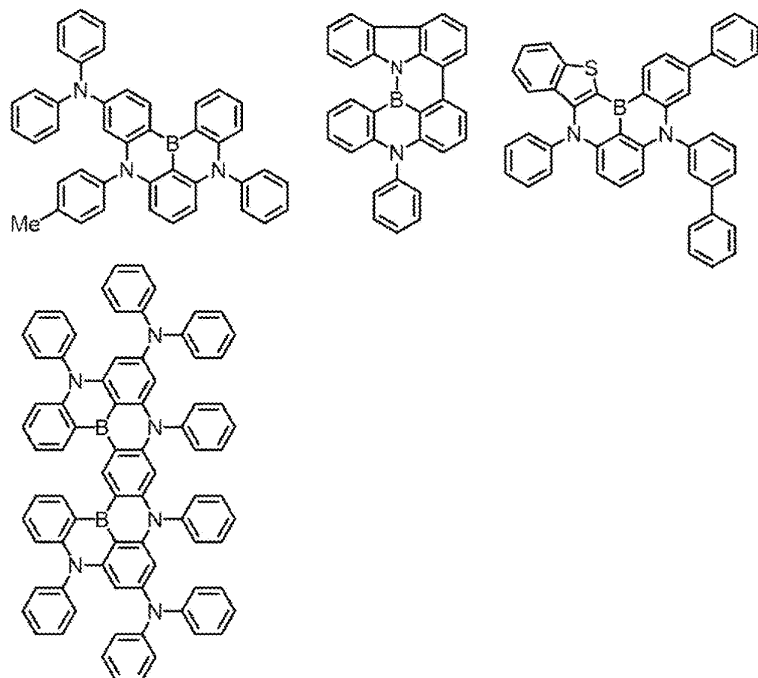
[1469] 치환 혹은 무치환의 아미노기,

[1470] 니트로기,

[1471] 시아노기,

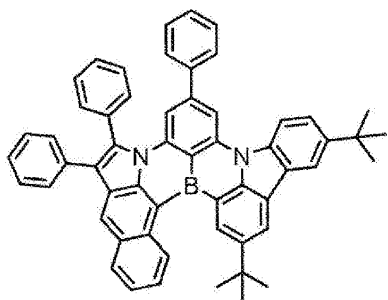
[1472] 치환 혹은 무치환의 실릴기, 및

- [1473] 치환 혹은 무치환의 실록사닐기로 이루어진 군에서 선택되고,
- [1474] Z_{21} 및 Z_{22} 는, 각각 독립적으로 치환기이거나, 또는 Z_{21} 및 Z_{22} 가 서로 결합하여 고리를 형성하고,
- [1475] 치환기로서의 Z_{21} 및 Z_{22} 는, 각각 독립적으로
- [1476] 할로겐 원자,
- [1477] 치환 혹은 무치환의 탄소수 1~30의 알킬기,
- [1478] 치환 혹은 무치환의 탄소수 1~30의 할로젠화 알킬기,
- [1479] 치환 혹은 무치환의 고리 형성 탄소수 6~30의 아릴기,
- [1480] 치환 혹은 무치환의 탄소수 1~30의 알콕시기,
- [1481] 치환 혹은 무치환의 탄소수 1~30의 할로젠화 알콕시기, 및
- [1482] 치환 혹은 무치환의 고리 형성 탄소수 6~30의 아릴옥시기로 이루어진 군에서 선택된다.
- [1483] (화합물 M1의 제조 방법)
- [1484] 본 실시형태에 따른 화합물 M1은, 공지의 합성 방법에 따라, 또는 상기 합성 방법을 모방하여, 목적물에 맞춘 기지의 대체 반응 및 원료를 이용함으로써 제조할 수 있다.
- [1485] (화합물 M1의 구체예)
- [1486] 본 실시형태의 화합물 M1의 구체예로는, 예컨대 이하의 화합물을 들 수 있다. 다만, 본 발명은, 이들 화합물의 구체예에 한정되지 않는다. 한편, 피로메텐 골격 중에서의 붕소 원자와 질소 원자의 배위 결합은, 실선, 파선, 화살표, 혹은 생략하는 등, 여러 가지 표기 방법이 있다. 본 명세서에 있어서는, 실선으로 나타내거나, 파선으로 나타내거나, 또는 기재를 생략한다.
- [1487] [화학식 154]



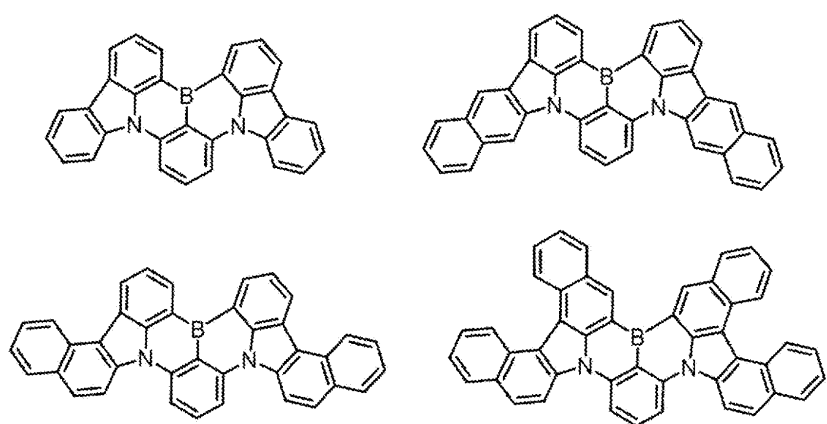
[1488]

[1489] [화학식 155]



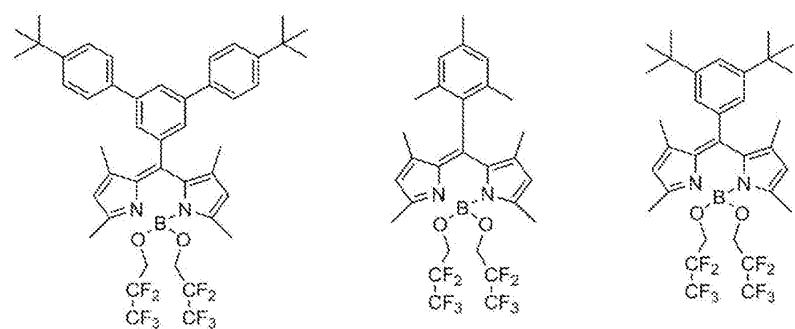
[1490]

[1491] [화학식 156]



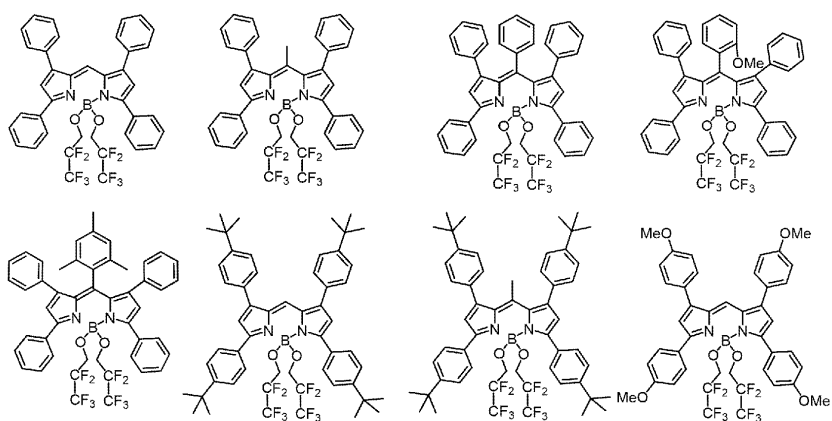
[1492]

[1493] [화학식 157]



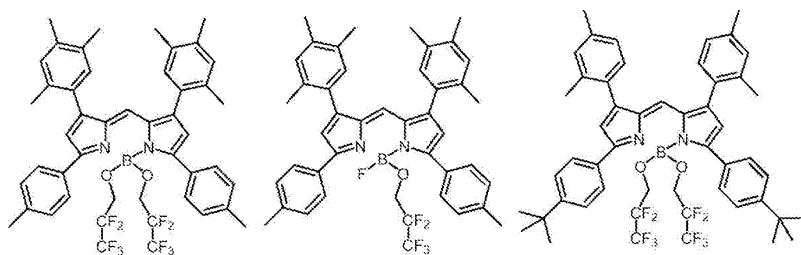
[1494]

[1495] [화학식 158]



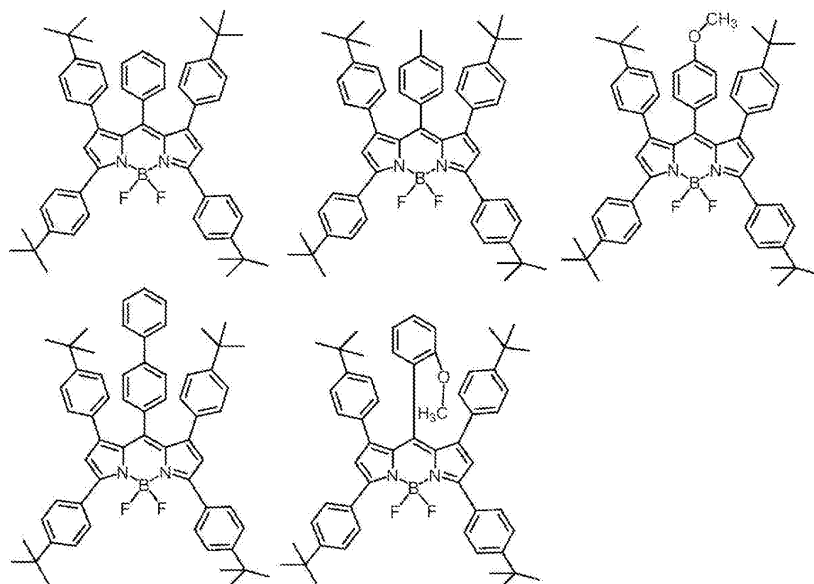
[1496]

[1497] [화학식 159]



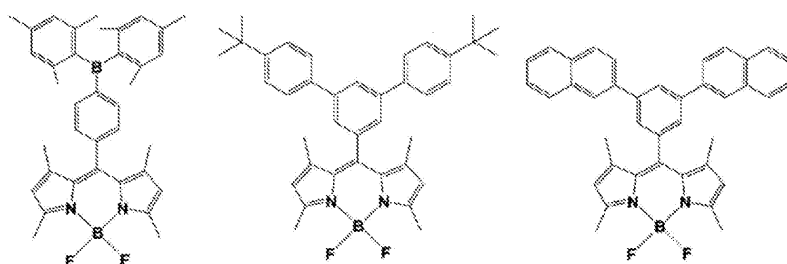
[1498]

[1499] [화학식 160]



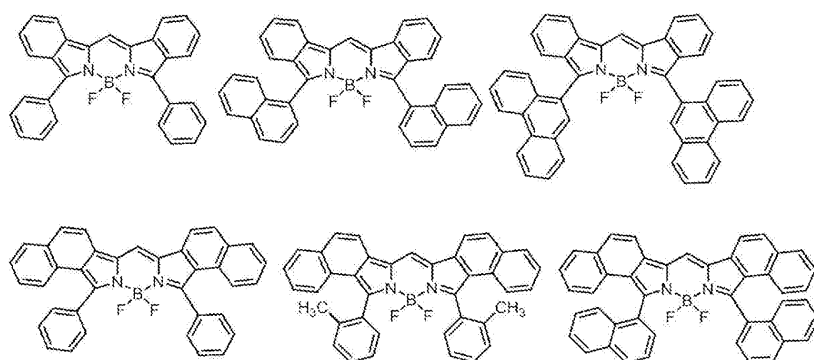
[1500]

[1501] [화학식 161]



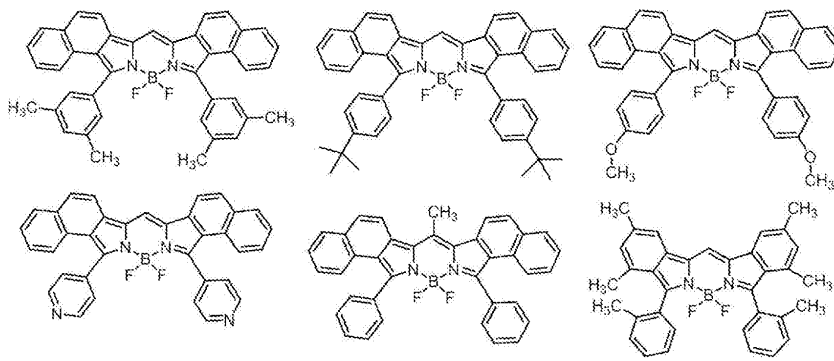
[1502]

[1503] [화학식 162]



[1504]

[1505] [화학식 163]



[1506]

[1507] <발광층에서의 화합물 M1 및 화합물 M2의 관계>

[1508] 본 실시형태의 유기 EL 소자에 있어서, 화합물 M2의 최저 여기 일중항 에너지 $S_1(M2)$ 과, 화합물 M1의 최저 여기 일중항 에너지 $S_1(M1)$ 이, 하기 수식(수학식 1)의 관계를 충족시키는 것이 바람직하다.

[1509] $S_1(M2) > S_1(M1) \dots$ (수학식 1)

[1510] 화합물 M2의 77[K]에서의 에너지 갭 $T_{77K}(M2)$ 은, 화합물 M1의 77[K]에서의 에너지 갭 $T_{77K}(M1)$ 보다 큰 것이 바람직하다. 즉, 하기 수식(수학식 5)의 관계를 충족시키는 것이 바람직하다.

[1511] $T_{77K}(M2) > T_{77K}(M1) \dots$ (수학식 5)

[1512] 본 실시형태의 유기 EL 소자를 발광시켰을 때, 발광층에 있어서, 주로 화합물 M1이 발광하고 있는 것이 바람직하다.

[1513] · TADF 기구(메커니즘)

[1514] 도 4은, 발광층에서의 화합물 M2 및 화합물 M1의 에너지 준위의 관계의 일례를 도시하는 도면이다. 도 4에 있어서, S_0 은 기저 상태를 나타낸다. $S_1(M1)$ 는, 화합물 M1의 최저 여기 일중항 상태를 나타낸다. $T_1(M1)$ 는, 화합물 M1의 최저 여기 삼중항 상태를 나타낸다. $S_1(M2)$ 은, 화합물 M2의 최저 여기 일중항 상태를 나타낸다. $T_1(M2)$ 은, 화합물 M2의 최저 여기 삼중항 상태를 나타낸다.

[1515] 도 4 중의 $S_1(M2)$ 로부터 $S_1(M1)$ 로 향하는 파선의 화살표는, 화합물 M2의 최저 여기 일중항 상태에서부터 화합물 M1로의 퍼르스터형 에너지 이동을 나타낸다.

[1516] 도 4에 도시하는 바와 같이, 화합물 M2로서 $\Delta ST(M2)$ 이 작은 화합물을 이용하면, 최저 여기 삼중항 상태 $T_1(M2)$ 은, 열에너지에 의해, 최저 여기 일중항 상태 $S_1(M2)$ 로 역항간 교차가 가능하다. 그리고, 화합물 M2의 최저 여기 일중항 상태 $S_1(M2)$ 로부터 화합물 M1로의 퍼르스터형 에너지 이동이 생기고, 최저 여기 일중항 상태 $S_1(M1)$ 가 생성된다. 그 결과, 화합물 M1의 최저 여기 일중항 상태 $S_1(M1)$ 로부터의 형광 발광을 관측할 수 있다. 이 TADF 기구에 의한 지연 형광을 이용하는 것에 의해서도, 이론적으로 내부 양자 효율을 100%까지 높일 수 있는 것으로 고려되고 있다.

[1517] 본 실시형태의 유기 EL 소자는, 적색 발광 또는 녹색 발광하는 것이 바람직하다.

[1518] 본 실시형태의 유기 EL 소자가 녹색 발광하는 경우, 유기 EL 소자로부터 발광하는 광의 주피크 파장은, 500 nm 이상 560 nm 이하인 것이 바람직하다.

[1519] 본 실시형태의 유기 EL 소자가 적색 발광하는 경우, 유기 EL 소자로부터 발광하는 광의 주피크 파장은, 600 nm 이상 660 nm 이하인 것이 바람직하다.

[1520] 본 실시형태의 유기 EL 소자가 청색 발광하는 경우, 유기 EL 소자로부터 발광하는 광의 주피크 파장은, 430 nm 이상 480 nm 이하인 것이 바람직하다.

[1521] 유기 EL 소자로부터 발광하는 광의 주피크 파장의 측정은, 이하와 같이 하여 행한다.

[1522] 전류 밀도가 10 mA/cm²가 되도록 유기 EL 소자에 전압을 인가했을 때의 분광 방사 휘도 스펙트럼을 분광 방사 휘

도계 CS-2000(코니카미놀타사 제조)로 측정한다.

- [1523] 얻어진 분광 방사 휘도 스펙트럼에 있어서, 발광 강도가 최대가 되는 발광 스펙트럼의 피크 파장을 측정하여, 이것을 주피크 파장(단위: nm)으로 한다.
- [1524] · 발광층의 막두께
- [1525] 본 실시형태의 유기 EL 소자에서의 발광층의 막두께는, 바람직하게는 5 nm 이상 50 nm 이하, 보다 바람직하게는 7 nm 이상 50 nm 이하, 더욱 바람직하게는 10 nm 이상 50 nm 이하이다. 발광층의 막두께가 5 nm 이상이면, 발광층 형성 및 색도의 조정이 용이해지기 쉽고, 50 nm 이하이면, 구동 전압의 상승이 억제되기 쉽다.
- [1526] · 발광층에서의 화합물의 함유율
- [1527] 발광층에 포함되어 있는 화합물 M2 및 화합물 M1의 함유율은, 예컨대 이하의 범위인 것이 바람직하다.
- [1528] 화합물 M2의 함유율은, 90 질량% 이상 99.9 질량% 이하여도 좋고, 95 질량% 이상 99.9 질량% 이하여도 좋고, 99 질량% 이상 99.9 질량% 이하여도 좋다.
- [1529] 화합물 M1의 함유율은, 0.01 질량% 이상 10 질량% 이하인 것이 바람직하고, 0.01 질량% 이상 5 질량% 이하인 것이 보다 바람직하고, 0.01 질량% 이상 1 질량% 이하인 것이 더욱 바람직하다.
- [1530] 한편, 본 실시형태는, 발광층에, 화합물 M2 및 화합물 M1 이외의 재료가 포함되는 것을 제외하지 않는다.
- [1531] 발광층은, 화합물 M2를 1종만 포함해도 좋고, 2종 이상 포함해도 좋다. 발광층은, 화합물 M1을 1종만 포함해도 좋고, 2종 이상 포함해도 좋다.
- [1532] (기판)
- [1533] 기판은 유기 EL 소자의 지지체로서 이용된다. 기판으로는, 예컨대 유리, 석영, 플라스틱 등을 이용할 수 있다. 또한, 가요성 기판을 이용해도 좋다. 가요성 기판이란, 절곡할 수 있는(플렉시블) 기판을 말하며, 예컨대 폴리 카보네이트, 폴리아릴레이트, 폴리에테르술폰, 폴리프로필렌, 폴리에스테르, 폴리불화비닐, 폴리염화비닐로 이루어진 플라스틱 기판 등을 들 수 있다. 또한, 무기 증착 필름을 이용할 수도 있다.
- [1534] (양극)
- [1535] 기판 상에 형성되는 양극에는, 일함수가 큰(구체적으로는 4.0 eV 이상) 금속, 합금, 전기 전도성 화합물, 및 이들의 혼합물 등을 이용하는 것이 바람직하다. 구체적으로는, 예컨대 산화인듐-산화주석(ITO: Indium Tin Oxide), 규소 혹은 산화규소를 함유한 산화인듐-산화주석, 산화인듐-산화아연, 산화텅스텐, 및 산화아연을 함유한 산화인듐, 그래핀 등을 들 수 있다. 이밖에, 금(Au), 백금(Pt), 니켈(Ni), 텅스텐(W), 크롬(Cr), 몰리브덴(Mo), 철(Fe), 코발트(Co), 구리(Cu), 팔라듐(Pd), 티탄(Ti), 또는 금속 재료의 질화물(예컨대, 질화티탄) 등을 들 수 있다.
- [1536] 이들 재료는, 통상 스퍼터링법에 의해 성막된다. 예컨대, 산화인듐-산화아연은, 산화인듐에 대하여 1 질량% 이상 10 질량% 이하의 산화아연을 첨가한 타겟을 이용함으로써, 스퍼터링법으로 형성할 수 있다. 또한, 예컨대 산화텅스텐, 및 산화아연을 함유한 산화인듐은, 산화인듐에 대하여 산화텅스텐을 0.5 질량% 이상 5 질량% 이하, 산화아연을 0.1 질량% 이상 1 질량% 이하 함유한 타겟을 이용함으로써, 스퍼터링법으로 형성할 수 있다. 그 밖에, 진공 증착법, 도포법, 잉크젯법, 스핀 코트법 등에 의해 제작해도 좋다.
- [1537] 양극 상에 형성되는 EL층 중, 양극에 접하여 형성되는 정공 주입층은, 양극의 일함수에 관계없이 정공(홀) 주입이 용이한 복합 재료를 이용하여 형성되기 때문에, 전극 재료로서 가능한 재료(예컨대, 금속, 합금, 전기 전도성 화합물, 및 이들의 혼합물, 그 밖에, 원소 주기표의 제1족 또는 제2족에 속하는 원소도 포함함)를 이용할 수 있다.
- [1538] 일함수가 작은 재료인, 원소 주기율표의 제1족 또는 제2족에 속하는 원소, 즉 리튬(Li)이나 세슘(Cs) 등의 알칼리 금속, 및 마그네슘(Mg), 칼슘(Ca), 스트론튬(Sr) 등의 알칼리 토금속, 및 이들을 포함하는 합금(예컨대, MgAg, AlLi), 유로퓸(Eu), 이테르븀(Yb) 등의 희토류 금속, 및 이들을 포함하는 합금 등을 이용할 수도 있다. 또한, 알칼리 금속, 알칼리 토금속 및 이들을 포함하는 합금을 이용하여 양극을 형성하는 경우에는 진공 증착법이나 스퍼터링법을 이용할 수 있다. 또한, 은 페이스트 등을 이용하는 경우에는 도포법이나 잉크젯법 등을 이용할 수 있다.

- [1539] (음극)
- [1540] 음극에는, 일함수가 작은(구체적으로는 3.8 eV 이하) 금속, 합금, 전기 전도성 화합물 및 이들의 혼합물 등을 이용하는 것이 바람직하다. 이러한 음극 재료의 구체예로는, 원소 주기율표의 제1족 또는 제2족에 속하는 원소, 즉 리튬(Li)이나 세슘(Cs) 등의 알칼리 금속, 및 마그네슘(Mg), 칼슘(Ca), 스트론튬(Sr) 등의 알칼리 토금속, 및 이들을 포함하는 합금(예컨대, MgAg, AlLi), 유로퓸(Eu), 이테르븀(Yb) 등의 희토류 금속 및 이들을 포함하는 합금 등을 들 수 있다.
- [1541] 한편, 알칼리 금속, 알칼리 토금속, 이들을 포함하는 합금을 이용하여 음극을 형성하는 경우에는 진공 증착법이나 스퍼터링법을 이용할 수 있다. 또한, 은 페이스트 등을 이용하는 경우에는 도포법이나 잉크젯법 등을 이용할 수 있다.
- [1542] 한편, 전자 주입층을 형성함으로써, 일함수의 대소에 상관없이, Al, Ag, ITO, 그래핀, 규소 혹은 산화규소를 함유한 산화인듐-산화주석 등 다양한 도전성 재료를 이용하여 음극을 형성할 수 있다. 이들 도전성 재료는 스퍼터링법이나 잉크젯법, 스핀 코팅법 등을 이용하여 성막할 수 있다.
- [1543] (정공 주입층)
- [1544] 정공 주입층은 정공 주입성이 높은 물질을 포함하는 층이다. 정공 주입성이 높은 물질로는, 몰리브덴 산화물, 티탄 산화물, 바나듐 산화물, 레늄 산화물, 루테튬 산화물, 크롬 산화물, 지르코늄 산화물, 하프늄 산화물, 탄탈 산화물, 은 산화물, 텅스텐 산화물, 망간 산화물 등을 이용할 수 있다.
- [1545] 또한, 정공 주입성이 높은 물질로는, 저분자의 유기 화합물인 4,4',4''-트리스(N,N-디페닐아미노)트리페닐아민(약칭: TDATA), 4,4',4''-트리스[N-(3-메틸페닐)-N-페닐아미노]트리페닐아민(약칭: MTDATA), 4,4'-비스[N-(4-디페닐아미노페닐)-N-페닐아미노]비페닐(약칭: DPAB), 4,4'-비스[N-{4-[N'-(3-메틸페닐)-N'-페닐아미노]페닐}-N-페닐아미노]비페닐(약칭: DNTPD), 1,3,5-트리스[N-(4-디페닐아미노페닐)-N-페닐아미노]벤젠(약칭: DPA3B), 3-[N-(9-페닐카르바졸-3-일)-N-페닐아미노]-9-페닐카르바졸(약칭: PCzPCA1), 3,6-비스[N-(9-페닐카르바졸-3-일)-N-페닐아미노]-9-페닐카르바졸(약칭: PCzPCA2), 3-[N-(1-나프틸)-N-(9-페닐카르바졸-3-일)아미노]-9-페닐카르바졸(약칭: PCzPCN1) 등의 방향족 아민 화합물 등도 들 수 있다.
- [1546] 또한, 정공 주입성이 높은 물질로는 고분자 화합물(올리고머, 덴드리머, 폴리머 등)을 이용할 수도 있다. 예컨대, 폴리(N-비닐카르바졸)(약칭: PVK), 폴리(4-비닐트리페닐아민)(약칭: PVTPA), 폴리[N-(4-{N'-[4-(4-디페닐아미노)페닐]페닐-N'-페닐아미노}페닐)메타크릴아미드](약칭: PTPDMA), 폴리[N,N'-비스(4-부틸페닐)-N,N'-비스(페닐)벤지딘](약칭: Poly-TPD) 등의 고분자 화합물을 들 수 있다. 또한, 폴리(3,4-에틸렌디옥시티오펜)/폴리(스티렌술포산)(PEDOT/PSS), 폴리아닐린/폴리(스티렌술포산)(PAni/PSS) 등의 산을 첨가한 고분자 화합물을 이용할 수도 있다.
- [1547] (정공 수송층)
- [1548] 정공 수송층은 정공 수송성이 높은 물질을 포함하는 층이다. 정공 수송층에는 방향족 아민 화합물, 카르바졸 유도체, 안트라센 유도체 등을 사용할 수 있다. 구체적으로는 4,4'-비스[N-(1-나프틸)-N-페닐아미노]비페닐(약칭: NPB)이나 N,N'-비스(3-메틸페닐)-N,N'-디페닐-[1,1'-비페닐]-4,4'-디아민(약칭: TPD), 4-페닐-4'-(9-페닐플루오렌-9-일)트리페닐아민(약칭: BAFLP), 4,4'-비스[N-(9,9-디메틸플루오렌-2-일)-N-페닐아미노]비페닐(약칭: DFLLDPBi), 4,4',4''-트리스(N,N-디페닐아미노)트리페닐아민(약칭: TDATA), 4,4',4''-트리스[N-(3-메틸페닐)-N-페닐아미노]트리페닐아민(약칭: MTDATA), 4,4'-비스[N-(스피로-9,9'-비플루오렌-2-일)-N-페닐아미노]비페닐(약칭: BSPB) 등의 방향족 아민 화합물 등을 이용할 수 있다. 여기에 말한 물질은 주로 10^{-6} cm²/Vs 이상의 정공 이동도를 갖는 물질이다.
- [1549] 정공 수송층에는, CBP, CzPA, PCzPA와 같은 카르바졸 유도체나, t-BuDNA, DNA, DPAnth와 같은 안트라센 유도체를 이용해도 좋다. 폴리(N-비닐카르바졸)(약칭: PVK)이나 폴리(4-비닐트리페닐아민)(약칭: PVTPA) 등의 고분자 화합물을 이용할 수도 있다.
- [1550] 다만, 전자보다 정공의 수송성이 높은 물질이라면, 이들 이외의 물질을 이용해도 좋다. 한편, 정공 수송성이 높은 물질을 포함하는 층은, 단층이어도 좋고, 상기 물질로 이루어진 층이 2층 이상 적층된 층이어도 좋다.
- [1551] (전자 수송층)

- [1552] 전자 수송층은 전자 수송성이 높은 물질을 포함하는 층이다. 전자 수송층에는 1) 알루미늄 착체, 베릴륨 착체, 아연 착체 등의 금속 착체, 2) 이미다졸 유도체, 벤조이미다졸 유도체, 아진 유도체, 카르바졸 유도체, 페난트롤린 유도체 등의 복소 방향족 화합물, 3) 고분자 화합물을 사용할 수 있다. 구체적으로는 저분자의 유기 화합물로서, Alq, 트리스(4-메틸-8-퀴놀리놀라토)알루미늄(약칭: Almq₃), 비스(10-히드록시벤조[h]퀴놀리나토)베릴륨(약칭: BeBq₂), BAq, Znq, ZnPBO, ZnBTZ 등의 금속 착체 등을 이용할 수 있다. 또한, 금속 착체 이외에도, 2-(4-비페닐릴)-5-(4-tert-부틸페닐)-1,3,4-옥사디아졸(약칭: PBD), 1,3-비스[5-(p-tert-부틸페닐)-1,3,4-옥사디아졸-2-일]벤젠(약칭: OXD-7), 3-(4-tert-부틸페닐)-4-페닐-5-(4-비페닐릴)-1,2,4-트리아졸(약칭: TAZ), 3-(4-tert-부틸페닐)-4-(4-에틸페닐)-5-(4-비페닐릴)-1,2,4-트리아졸(약칭: p-EtTAZ), 바토펜트롤린(약칭: BPhen), 바토크프로인(약칭: BCP), 4,4'-비스(5-메틸벤조옥사졸-2-일)스틸벤(약칭: BzOs) 등의 복소 방향족 화합물도 이용할 수 있다. 여기에 설명한 물질은 주로 10^{-6} cm²/Vs 이상의 전자 이동도를 갖는 물질이다. 한편, 정공 수송성보다 전자 수송성이 높은 물질이라면, 상기 이외의 물질을 전자 수송층으로서 이용해도 좋다. 또한, 전자 수송층은 단층이어도 좋고, 상기 물질로 이루어진 층이 2층 이상 적층된 층이어도 좋다.
- [1553] 또한, 전자 수송층에는 고분자 화합물을 이용할 수도 있다. 예컨대, 폴리[(9,9-디헥실플루오렌-2,7-디일)-co-(피리딘-3,5-디일)](약칭: PF-Py), 폴리[(9,9-디옥틸플루오렌-2,7-디일)-co-(2,2'-비피리딘-6,6'-디일)](약칭: PF-BPy) 등을 이용할 수 있다.
- [1554] (전자 주입층)
- [1555] 전자 주입층은 전자 주입성이 높은 물질을 포함하는 층이다. 전자 주입층에는 리튬(Li), 세슘(Cs), 칼슘(Ca), 불화리튬(LiF), 불화세슘(CsF), 불화칼슘(CaF₂), 리튬 산화물(LiOx) 등과 같은 알칼리 금속, 알칼리 토금속 또는 이들의 화합물을 이용할 수 있다. 그 밖에, 전자 수송성을 갖는 물질에 알칼리 금속, 알칼리 토금속 또는 이들의 화합물을 함유시킨 것, 구체적으로는 Alq 중에 마그네슘(Mg)을 함유시킨 것 등을 이용해도 좋다. 또한, 이 경우에는 음극으로부터의 전자 주입을 보다 효율적으로 행할 수 있다.
- [1556] 혹은 전자 주입층에 유기 화합물과 전자 공여체(도너)를 혼합하여 이루어진 복합 재료를 이용해도 좋다. 이러한 복합 재료는 전자 공여체에 의해 유기 화합물에 전자가 발생하기 때문에, 전자 주입성 및 전자 수송성이 우수하다. 이 경우, 유기 화합물로는, 발생한 전자의 수송이 우수한 재료인 것이 바람직하고, 구체적으로는, 예컨대 전술한 전자 수송층을 구성하는 물질(금속 착체나 복소 방향족 화합물 등)을 이용할 수 있다. 전자 공여체로는, 유기 화합물에 대하여 전자 공여성을 나타내는 물질이면 된다. 구체적으로는 알칼리 금속이나 알칼리 토금속이나 희토류 금속이 바람직하고, 리튬, 세슘, 마그네슘, 칼슘, 에르븀, 이테르븀 등을 들 수 있다. 또한, 알칼리 금속 산화물이나 알칼리 토금속 산화물이 바람직하고, 리튬 산화물, 칼슘 산화물, 바륨 산화물 등을 들 수 있다. 또한, 산화마그네슘과 같은 루이스 염기를 이용할 수도 있다. 또한, 테트라티아폴발렌(약칭: TTF) 등의 유기 화합물을 이용할 수도 있다.
- [1557] (층형성 방법)
- [1558] 본 실시형태의 유기 EL 소자의 각 층의 형성 방법으로는, 상기에서 특별히 언급한 것 외에는 제한되지 않지만, 진공 증착법, 스퍼터링법, 플라즈마법, 이온 플레이팅법 등의 건식 성막법이나, 스핀 코팅법, 디핑법, 플로우 코팅법, 잉크젯법 등의 습식 성막법 등의 공지된 방법을 채용할 수 있다.
- [1559] (막두께)
- [1560] 본 실시형태의 유기 EL 소자의 각 유기층의 막두께는, 상기에서 특별히 언급한 것 외에는 제한되지 않지만, 일반적으로 막두께가 지나치게 얇으면 핀홀 등의 결함이 생기기 쉽고, 반대로 지나치게 두꺼우면 높은 인가 전압이 필요해져 효율이 나빠지기 때문에, 통상은 수 nm 내지 1 μm의 범위가 바람직하다.
- [1561] 제3 실시형태에 따른 유기 EL 소자는, 발광층에, 화합물 M2로서의 제1 실시형태의 화합물과, 화합물 M2보다 작은 최저 여기 일중항 에너지를 갖는 화합물 M1을 함유하고 있다. 제3 실시형태에 따른 유기 EL 소자는, PLQY가 높은 제1 실시형태에 따른 화합물(화합물 M2)을 포함하기 때문에, 제3 실시형태에 의하면, 고효율화 및 장수명의 적어도 어느 하나를 실현할 수 있는 고성능의 유기 EL 소자를 제공할 수 있다.
- [1562] [제4 실시형태]
- [1563] 제4 실시형태에 따른 유기 EL 소자의 구성에 대해서 설명한다. 제4 실시형태의 설명에 있어서 제3 실시형태와 동일한 구성 요소는, 동일한 부호나 명칭을 붙이거나 하여 설명을 생략 혹은 간략화한다. 또한, 제4 실시형태에

서는, 특별히 언급되지 않은 재료나 화합물에 대해서는, 제3 실시형태에서 설명한 재료나 화합물과 동일한 재료나 화합물을 이용할 수 있다.

[1564] 제4 실시형태에 따른 유기 EL 소자는, 발광층이 화합물 M3을 더 포함하고 있다는 점에서, 제3 실시형태에 따른 유기 EL 소자와 상이하다. 그 밖의 점에 대해서는 제3 실시형태와 동일하다.

[1565] 즉, 제4 실시형태에 있어서, 발광층은, 화합물 M3과, 화합물 M2와, 화합물 M1을 포함한다. 이 양태의 경우, 화합물 M2는 호스트 재료인 것이 바람직하고, 화합물 M1은 도펀트 재료인 것이 바람직하다.

[1566] (화합물 M3)

[1567] 본 실시형태의 화합물 M3은, 열활성화 지연 형광성의 화합물이어도 좋고, 열활성화 지연 형광성을 나타내지 않는 화합물이어도 좋지만, 열활성화 지연 형광성을 나타내지 않는 화합물인 것이 바람직하다.

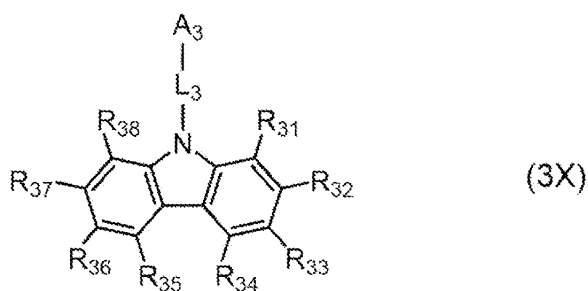
[1568] 화합물 M3으로는, 특별히 한정되지 않지만, 아민 화합물 이외의 화합물인 것이 바람직하다. 또한, 예컨대 화합물 M3으로는, 카르바졸 유도체, 디벤조푸란 유도체, 디벤조티오펜 유도체를 이용할 수 있지만, 이들 유도체에 한정되지 않는다.

[1569] 본 실시형태에 있어서, 화합물 M3은, 하기 일반식 (3X) 또는 (3Y)로 표시되는 화합물인 것이 바람직하다.

[1570] (일반식(3X)로 표시되는 화합물)

[1571] 화합물 M3은, 하기 일반식(3X)로 표시되는 화합물인 것도 바람직하다.

[1572] [화학식 164]



[1573]

[1574] (상기 일반식(3X)에 있어서,

[1575] A₃은,

[1576] 치환 혹은 무치환의 고리 형성 탄소수 6~50의 아릴기, 또는

[1577] 치환 혹은 무치환의 고리 형성 원자수 5~50의 복소환기이고,

[1578] L₃은,

[1579] 단일 결합,

[1580] 치환 혹은 무치환의 고리 형성 탄소수 6~50의 아릴렌기,

[1581] 치환 혹은 무치환의 고리 형성 원자수 5~50의 2가의 복소환기,

[1582] 치환 혹은 무치환의 고리 형성 탄소수 6~50의 아릴렌기, 및 치환 혹은 무치환의 고리 형성 원자수 5~50의 2가의 복소환기로 이루어진 군에서 선택되는 2개의 기가 결합하여 형성되는 2가의 기, 또는

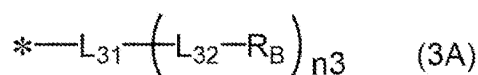
[1583] 치환 혹은 무치환의 고리 형성 탄소수 6~30의 아릴렌기 및 치환 혹은 무치환의 고리 형성 원자수 5~30의 2가의 복소환기로 이루어진 군에서 선택되는 3개의 기가 결합하여 형성되는 2가의 기이고,

[1584] R₃₁~R₃₈ 중의 인접하는 2개 이상으로 이루어진 조의 1조 이상이,

[1585] 서로 결합하여 치환 혹은 무치환의 단환을 형성하거나,

[1586] 서로 결합하여 치환 혹은 무치환의 축합환을 형성하거나, 또는

- [1587] 서로 결합하지 않고,
- [1588] 상기 치환 혹은 무치환의 단환을 형성하고 또한 상기 치환 혹은 무치환의 축합환을 형성하지 않은 $R_{31} \sim R_{38}$ 은, 각각 독립적으로
- [1589] 수소 원자,
- [1590] 치환 혹은 무치환의 탄소수 1~50의 알킬기,
- [1591] 치환 혹은 무치환의 탄소수 1~50의 할로알킬기,
- [1592] 치환 혹은 무치환의 탄소수 2~50의 알케닐기,
- [1593] 치환 혹은 무치환의 탄소수 2~50의 알키닐기,
- [1594] 치환 혹은 무치환의 고리 형성 탄소수 3~50의 시클로알킬기,
- [1595] $-\text{Si}(R_{901})(R_{902})(R_{903})$ 으로 표시되는 기,
- [1596] $-\text{O}(R_{904})$ 로 표시되는 기,
- [1597] $-\text{S}(R_{905})$ 로 표시되는 기,
- [1598] $-\text{N}(R_{906})(R_{907})$ 로 표시되는 기,
- [1599] 치환 혹은 무치환의 탄소수 7~50의 아랄킬기,
- [1600] $-\text{C}(=\text{O})R_{908}$ 로 표시되는 기,
- [1601] $-\text{COOR}_{909}$ 로 표시되는 기,
- [1602] 할로겐 원자,
- [1603] 시아노기,
- [1604] 니트로기,
- [1605] $-\text{P}(=\text{O})(R_{931})(R_{932})$ 로 표시되는 기,
- [1606] $-\text{Ge}(R_{933})(R_{934})(R_{935})$ 로 표시되는 기,
- [1607] $-\text{B}(R_{936})(R_{937})$ 로 표시되는 기,
- [1608] 치환 혹은 무치환의 고리 형성 탄소수 6~50의 아릴기,
- [1609] 치환 혹은 무치환의 고리 형성 원자수 5~50의 복소환기, 또는
- [1610] 하기 일반식(3A)로 표시되는 기이다.)
- [1611] [화학식 165]

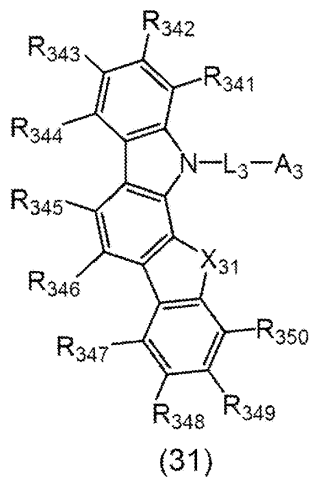


- [1612]
- [1613] (상기 일반식(3A)에 있어서,
- [1614] R_B 는,
- [1615] 치환 혹은 무치환의 탄소수 1~50의 알킬기,
- [1616] 치환 혹은 무치환의 탄소수 1~50의 할로알킬기,
- [1617] 치환 혹은 무치환의 탄소수 2~50의 알케닐기,

- [1618] 치환 혹은 무치환의 탄소수 2~50의 알킬닐기,
- [1619] 치환 혹은 무치환의 고리 형성 탄소수 3~50의 시클로알킬기,
- [1620] $-\text{Si}(\text{R}_{901})(\text{R}_{902})(\text{R}_{903})$ 으로 표시되는 기,
- [1621] $-\text{O}(\text{R}_{904})$ 로 표시되는 기,
- [1622] $-\text{S}(\text{R}_{905})$ 로 표시되는 기,
- [1623] $-\text{N}(\text{R}_{906})(\text{R}_{907})$ 로 표시되는 기,
- [1624] 치환 혹은 무치환의 탄소수 7~50의 아랄킬기,
- [1625] $-\text{C}(=\text{O})\text{R}_{908}$ 로 표시되는 기,
- [1626] $-\text{COOR}_{909}$ 로 표시되는 기,
- [1627] 할로겐 원자,
- [1628] 시아노기,
- [1629] 니트로기,
- [1630] $-\text{P}(=\text{O})(\text{R}_{931})(\text{R}_{932})$ 로 표시되는 기,
- [1631] $-\text{Ge}(\text{R}_{933})(\text{R}_{934})(\text{R}_{935})$ 로 표시되는 기,
- [1632] $-\text{B}(\text{R}_{936})(\text{R}_{937})$ 로 표시되는 기,
- [1633] 치환 혹은 무치환의 고리 형성 탄소수 6~50의 아릴기, 또는
- [1634] 치환 혹은 무치환의 고리 형성 원자수 5~50의 복소환기이고,
- [1635] R_B 가 복수 존재할 때, 복수의 R_B 는 서로 동일하거나 또는 상이하고,
- [1636] L_{31} 은,
- [1637] 단일 결합,
- [1638] 치환 혹은 무치환의 고리 형성 탄소수 6~50의 아릴렌기, 해당 아릴렌기로부터 유도되는 3가의 기, 4가의 기, 5가의 기 혹은 6가의 기,
- [1639] 치환 혹은 무치환의 고리 형성 원자수 5~50의 2가의 복소환기, 해당 복소환기로부터 유도되는 3가의 기, 4가의 기, 5가의 기 혹은 6가의 기, 또는
- [1640] 치환 혹은 무치환의 고리 형성 탄소수 6~50의 아릴렌기, 및 치환 혹은 무치환의 고리 형성 원자수 5~50의 2가의 복소환기로 이루어진 군에서 선택되는 2개의 기가 결합하여 형성되는 2가의 기, 해당 2가의 기로부터 유도되는 3가의 기, 4가의 기, 5가의 기 혹은 6가의 기이고,
- [1641] L_{32} 는,
- [1642] 단일 결합,
- [1643] 치환 혹은 무치환의 고리 형성 탄소수 6~50의 아릴렌기,
- [1644] 치환 혹은 무치환의 고리 형성 원자수 5~50의 2가의 복소환기이고,
- [1645] n_3 은 1, 2, 3, 4 또는 5이고,
- [1646] L_{31} 이 단일 결합인 경우, n_3 은 1이며, L_{32} 가 상기 일반식(3X) 중에서의 6원환의 탄소 원자와 결합하고,
- [1647] L_{32} 가 복수 존재할 때, 복수의 L_{32} 는 서로 동일하거나 또는 상이하고,

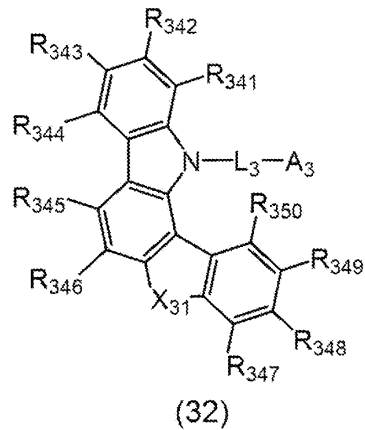
- [1648] *는, 상기 일반식(3X) 중에서의 6원환의 탄소 원자와의 결합 부위이다.)
- [1649] (화합물 M3에 있어서, R₉₀₁, R₉₀₂, R₉₀₃, R₉₀₄, R₉₀₅, R₉₀₆, R₉₀₇, R₉₀₈, R₉₀₉, R₉₃₁, R₉₃₂, R₉₃₃, R₉₃₄, R₉₃₅, R₉₃₆ 및 R₉₃₇은, 각각 독립적으로
- [1650] 수소 원자,
- [1651] 치환 혹은 무치환의 탄소수 1~50의 알킬기,
- [1652] 치환 혹은 무치환의 고리 형성 탄소수 3~50의 시클로알킬기,
- [1653] 치환 혹은 무치환의 고리 형성 탄소수 6~50의 아릴기, 또는
- [1654] 치환 혹은 무치환의 고리 형성 원자수 5~50의 복소환기이고,
- [1655] R₉₀₁이 복수 존재하는 경우, 복수의 R₉₀₁은 서로 동일하거나 또는 상이하고,
- [1656] R₉₀₂가 복수 존재하는 경우, 복수의 R₉₀₂는 서로 동일하거나 또는 상이하고,
- [1657] R₉₀₃이 복수 존재하는 경우, 복수의 R₉₀₃은 서로 동일하거나 또는 상이하고,
- [1658] R₉₀₄가 복수 존재하는 경우, 복수의 R₉₀₄는 서로 동일하거나 또는 상이하고,
- [1659] R₉₀₅가 복수 존재하는 경우, 복수의 R₉₀₅는 서로 동일하거나 또는 상이하고,
- [1660] R₉₀₆이 복수 존재하는 경우, 복수의 R₉₀₆은 서로 동일하거나 또는 상이하고,
- [1661] R₉₀₇이 복수 존재하는 경우, 복수의 R₉₀₇은 서로 동일하거나 또는 상이하고,
- [1662] R₉₀₈이 복수 존재하는 경우, 복수의 R₉₀₈은 서로 동일하거나 또는 상이하고,
- [1663] R₉₀₉가 복수 존재하는 경우, 복수의 R₉₀₉는 서로 동일하거나 또는 상이하고,
- [1664] R₉₃₁이 복수 존재하는 경우, 복수의 R₉₃₁은 서로 동일하거나 또는 상이하고,
- [1665] R₉₃₂가 복수 존재하는 경우, 복수의 R₉₃₂는 서로 동일하거나 또는 상이하고,
- [1666] R₉₃₃이 복수 존재하는 경우, 복수의 R₉₃₃은 서로 동일하거나 또는 상이하고,
- [1667] R₉₃₄가 복수 존재하는 경우, 복수의 R₉₃₄는 서로 동일하거나 또는 상이하고,
- [1668] R₉₃₅가 복수 존재하는 경우, 복수의 R₉₃₅는 서로 동일하거나 또는 상이하고,
- [1669] R₉₃₆이 복수 존재하는 경우, 복수의 R₉₃₆은 서로 동일하거나 또는 상이하고,
- [1670] R₉₃₇이 복수 존재하는 경우, 복수의 R₉₃₇은 서로 동일하거나 또는 상이하다.)
- [1671] 화합물 M3은, 하기 일반식 (31)~(36)의 어느 하나로 표시되는 화합물인 것도 바람직하다.

[1672] [화학식 166]



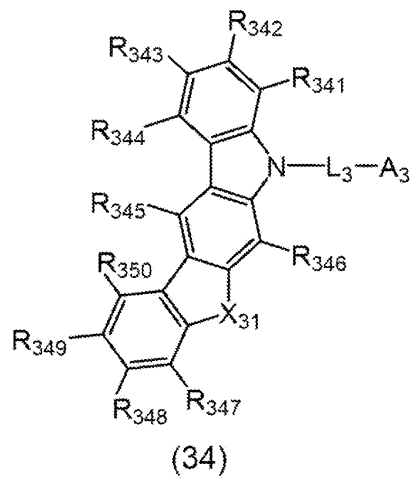
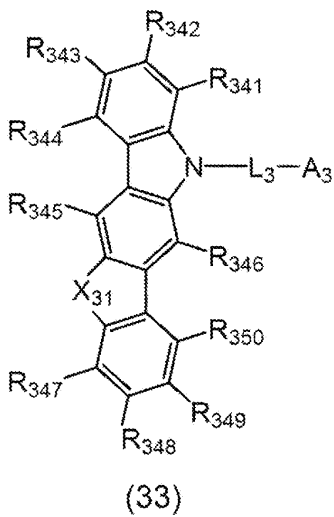
[1673]

[1674] [화학식 167]



[1675]

[1676] [화학식 168]



[1677]

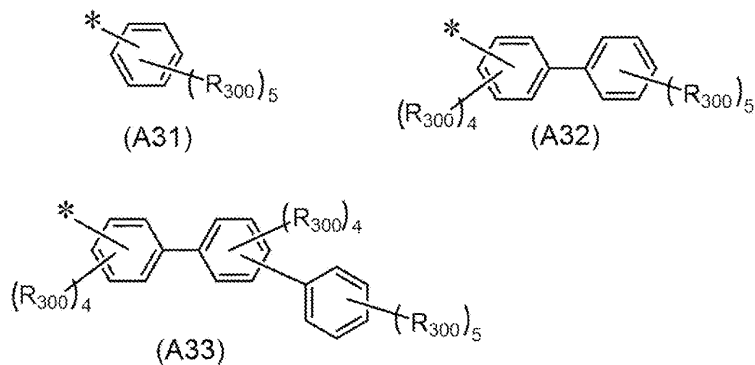
[1678] (상기 일반식(31)~(36)에 있어서,

[1679] A_3 및 L_3 은, 각각 상기 일반식(3X)에서의 A_3 및 L_3 과 동의이고,

[1680] $R_{341} \sim R_{350}$ 중의 인접하는 2개 이상으로 이루어진 조의 1조 이상이,

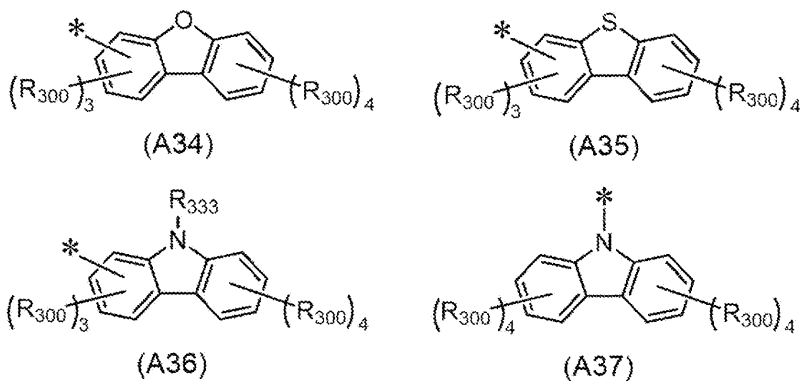
- [1681] 서로 결합하여 치환 혹은 무치환의 단환을 형성하거나,
- [1682] 서로 결합하여 치환 혹은 무치환의 축합환을 형성하거나, 또는
- [1683] 서로 결합하지 않고,
- [1684] X_{31} 은 황 원자, 산소 원자, NR_{352} 또는 $CR_{353}R_{354}$ 이고,
- [1685] R_{353} 및 R_{354} 로 이루어진 조가,
- [1686] 서로 결합하여 치환 혹은 무치환의 단환을 형성하거나,
- [1687] 서로 결합하여 치환 혹은 무치환의 축합환을 형성하거나,
- [1688] 또는 서로 결합하지 않고,
- [1689] 상기 치환 혹은 무치환의 단환을 형성하지 않고 또한 상기 치환 혹은 무치환의 축합환을 형성하지 않은 $R_{341} \sim R_{350}$ 과, R_{352} 와, 상기 치환 혹은 무치환의 단환을 형성하지 않고 또한 상기 치환 혹은 무치환의 축합환을 형성하지 않은 R_{353} 및 R_{354} 는, 각각 독립적으로 상기 치환 혹은 무치환의 단환을 형성하지 않고 또한 상기 치환 혹은 무치환의 축합환을 형성하지 않은 $R_{31} \sim R_{38}$ 과 동의이다.)
- [1690] 화합물 M3에 있어서, R_{352} 는,
- [1691] 치환 혹은 무치환의 탄소수 1~50의 알킬기,
- [1692] 치환 혹은 무치환의 고리 형성 탄소수 6~50의 아릴기, 또는
- [1693] 치환 혹은 무치환의 고리 형성 원자수 5~50의 복소환기인 것이 바람직하다.
- [1694] 화합물 M3에 있어서, R_{353} 및 R_{354} 로 이루어진 조가,
- [1695] 서로 결합하여 치환 혹은 무치환의 단환을 형성하거나,
- [1696] 서로 결합하여 치환 혹은 무치환의 축합환을 형성하거나, 또는
- [1697] 서로 결합하지 않고,
- [1698] 치환 혹은 무치환의 단환을 형성하지 않고 또한 치환 혹은 무치환의 축합환을 형성하지 않은 R_{353} 및 R_{354} 는, 각각 독립적으로
- [1699] 치환 혹은 무치환의 탄소수 1~50의 알킬기,
- [1700] 치환 혹은 무치환의 고리 형성 탄소수 6~50의 아릴기, 또는
- [1701] 치환 혹은 무치환의 고리 형성 원자수 5~50의 복소환기인 것이 바람직하다.
- [1702] 화합물 M3에 있어서, X_{31} 은 황 원자 또는 산소 원자인 것이 바람직하다.
- [1703] 화합물 M3에 있어서, A_3 은, 하기 일반식 (A31)~(A37)의 어느 하나로 표시되는 기인 것이 바람직하다.

[1704] [화학식 169]



[1705]

[1706] [화학식 170]



[1707]

[1708] (상기 일반식(A31)~(A37)에 있어서,

[1709] 복수의 R_{300} 중의 인접하는 2개 이상으로 이루어진 조의 1조 이상이,

[1710] 서로 결합하여 치환 혹은 무치환의 단환을 형성하거나,

[1711] 서로 결합하여 치환 혹은 무치환의 축합환을 형성하거나, 또는

[1712] 서로 결합하지 않고,

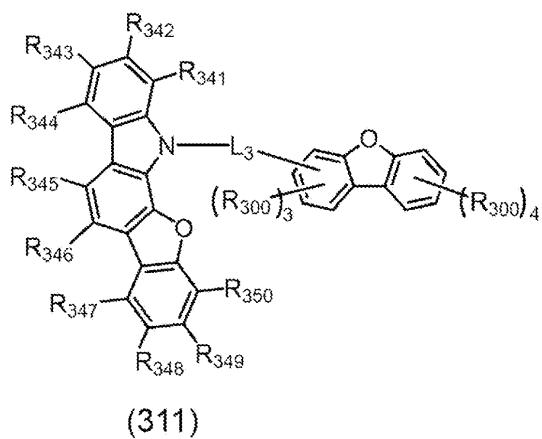
[1713] 상기 치환 혹은 무치환의 단환을 형성하지 않고 또한 상기 치환 혹은 무치환의 축합환을 형성하지 않은 R_{300} , 및 R_{333} 은, 각각 독립적으로 상기 치환 혹은 무치환의 단환을 형성하지 않고 또한 상기 치환 혹은 무치환의 축합환을 형성하지 않은 $R_{31} \sim R_{38}$ 과 동의이고,

[1714] 상기 일반식 (A31)~(A37) 중의 *은, 각각 상기 화합물 M3의 L_3 과의 결합 위치를 나타낸다.)

[1715] 화합물 M3에 있어서, A_3 은, 상기 일반식 (A34), (A35) 또는 (A37)로 표시되는 기인 것도 바람직하다.

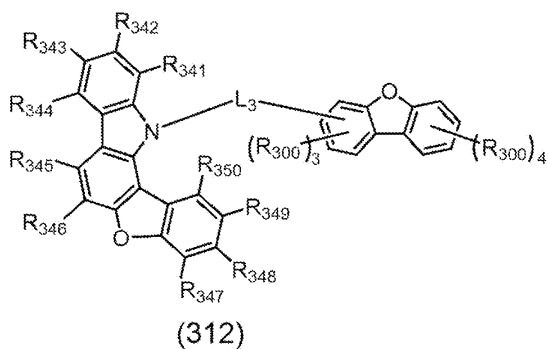
[1716] 화합물 M3은, 하기 일반식 (311)~(316)의 어느 하나로 표시되는 화합물인 것도 바람직하다.

[1717] [화학식 171]



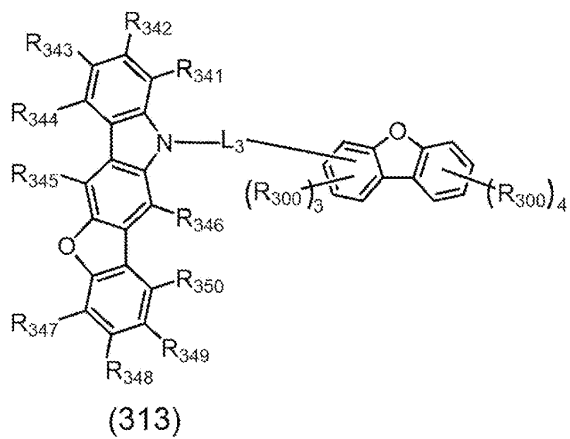
[1718]

[1719] [화학식 172]



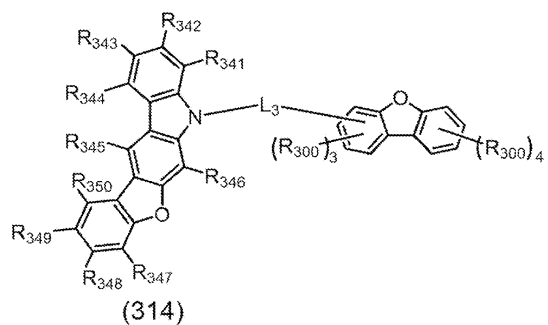
[1720]

[1721] [화학식 173]



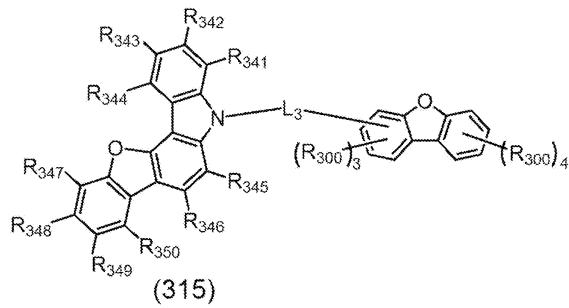
[1722]

[1723] [화학식 174]



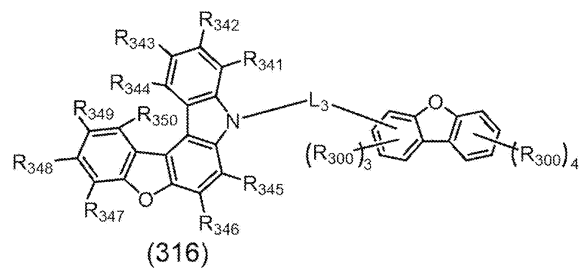
[1724]

[1725] [화학식 175]



[1726]

[1727] [화학식 176]



[1728]

[1729] (상기 일반식(311)~(316)에 있어서,

[1730] L_3 은, 상기 일반식(3X)에서의 L_3 과 동의이고,

[1731] 복수의 R_{300} 중의 인접하는 2개 이상으로 이루어진 조의 1조 이상이,

[1732] 서로 결합하여 치환 혹은 무치환의 단환을 형성하거나,

[1733] 서로 결합하여 치환 혹은 무치환의 축합환을 형성하거나, 또는

[1734] 서로 결합하지 않고,

[1735] $R_{341} \sim R_{350}$ 중의 인접하는 2개 이상으로 이루어진 조의 1조 이상이,

[1736] 서로 결합하여 치환 혹은 무치환의 단환을 형성하거나,

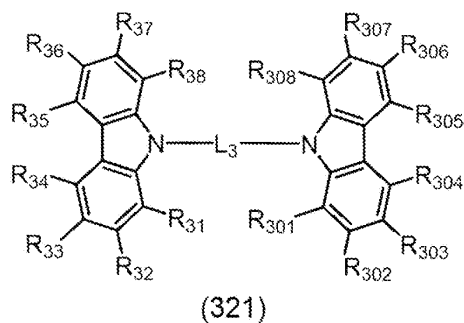
[1737] 서로 결합하여 치환 혹은 무치환의 축합환을 형성하거나, 또는

[1738] 서로 결합하지 않고,

[1739] 상기 치환 혹은 무치환의 단환을 형성하지 않고 또한 상기 치환 혹은 무치환의 축합환을 형성하지 않은 R_{300} , 및 상기 치환 혹은 무치환의 단환을 형성하지 않고 또한 상기 치환 혹은 무치환의 축합환을 형성하지 않은 $R_{341} \sim R_{350}$ 은, 각각 독립적으로 상기 치환 혹은 무치환의 단환을 형성하지 않고 또한 상기 치환 혹은 무치환의 축합환을 형성하지 않은 $R_{31} \sim R_{38}$ 과 동의이다.)

[1740] 화합물 M3은, 하기 일반식(321)로 표시되는 화합물인 것도 바람직하다.

[1741] [화학식 177]



[1742]

[1743] (상기 일반식(321)에 있어서,

[1744] L_3 은, 상기 일반식(3X)에서의 L_3 과 동의이고,

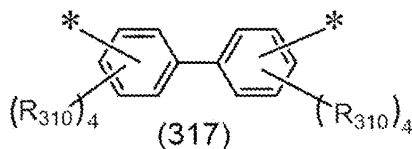
[1745] $R_{31} \sim R_{38}$ 및 $R_{301} \sim R_{308}$ 은, 각각 독립적으로 상기 치환 혹은 무치환의 단환을 형성하지 않고 또한 상기 치환 혹은 무치환의 축합환을 형성하지 않은 $R_{31} \sim R_{38}$ 과 동의이다.)

[1746] 화합물 M3에 있어서, L_3 은, 단일 결합 또는 치환 혹은 무치환의 고리 형성 탄소수 6~50의 아릴렌기인 것이 바람직하다.

[1747] 화합물 M3에 있어서, L_3 은, 단일 결합, 치환 혹은 무치환의 페닐렌기, 치환 혹은 무치환의 비페닐렌기, 또는 치환 혹은 무치환의 테페닐렌기인 것이 바람직하다.

[1748] 화합물 M3에 있어서, L_3 은, 하기 일반식(317)로 표시되는 기인 것이 바람직하다.

[1749] [화학식 178]



[1750]

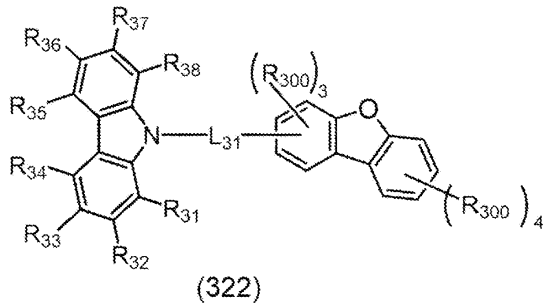
[1751] (상기 일반식(317)에 있어서, R_{310} 은, 각각 독립적으로 상기 치환 혹은 무치환의 단환을 형성하지 않고 또한 상기 치환 혹은 무치환의 축합환을 형성하지 않은 $R_{31} \sim R_{38}$ 과 동의이고, *는, 각각 독립적으로 결합 위치를 나타낸다.)

[1752] 화합물 M3에 있어서, L_3 은, 하기 일반식(318) 또는 일반식(319)로 표시되는 2가의 기를 포함하는 것도 바람직하다.

[1753] 화합물 M3에 있어서, L_3 은, 하기 일반식(318) 또는 일반식(319)로 표시되는 2가의 기인 것도 바람직하다.

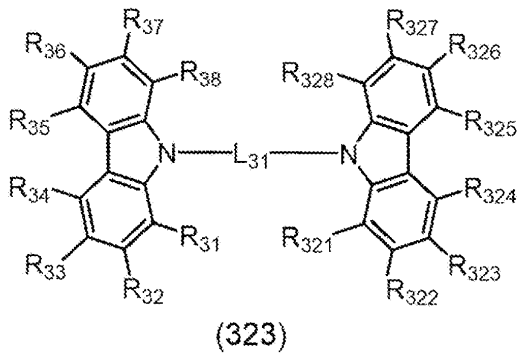
[1754] 화합물 M3은, 하기 일반식(322) 또는 일반식(323)으로 표시되는 화합물인 것도 바람직하다.

[1755] [화학식 179]



[1756]

[1757] [화학식 180]



[1758]

[1759] (상기 일반식(322) 및 일반식(323)에 있어서,

[1760] L_{31} 은,

[1761] 치환 혹은 무치환의 고리 형성 탄소수 6~50의 아틸렌기,

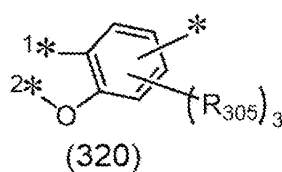
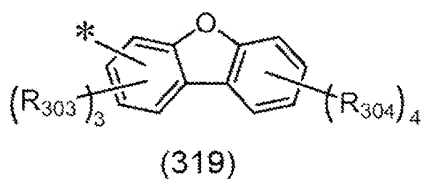
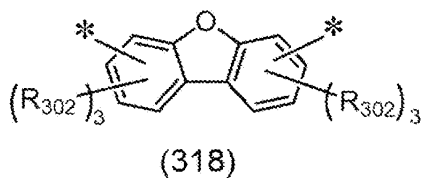
[1762] 치환 혹은 무치환의 고리 형성 원자수 5~50의 2가의 복소환기, 또는

[1763] 치환 혹은 무치환의 고리 형성 탄소수 6~50의 아틸렌기, 및 치환 혹은 무치환의 고리 형성 원자수 5~50의 2가의 복소환기로 이루어진 군에서 선택되는 2개의 기가 결합하여 형성되는 2가의 기이고,

[1764] 단, L_{31} 은, 하기 일반식(318) 또는 일반식(319)로 표시되는 2가의 기를 포함하고,

[1765] $R_{31} \sim R_{38}$, R_{300} 및 $R_{321} \sim R_{328}$ 은, 각각 독립적으로 상기 치환 혹은 무치환의 단환을 형성하지 않고 또한 상기 치환 혹은 무치환의 축합환을 형성하지 않은 $R_{31} \sim R_{38}$ 과 동의이다.)

[1766] [화학식 181]



[1767]

[1768] (상기 일반식(319)에 있어서,

[1769] 복수의 R_{304} 중의 인접하는 2개로 이루어진 조가, 서로 결합하여 상기 일반식(320)으로 표시되는 고리를 형성하고,

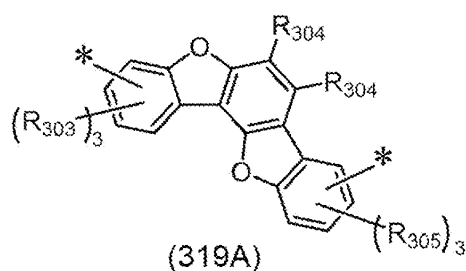
[1770] 상기 일반식(320)에 있어서, 1* 및 2*은, 각각 독립적으로 R₃₀₄가 결합하고 있는 고리와의 결합 위치를 나타내고,

[1771] 상기 일반식(318)에서의 R_{302} , 상기 일반식(319)에서의 R_{303} , 상기 일반식(320)으로 표시되는 고리를 형성하지 않는 R_{304} , 및 상기 일반식(320)에서의 R_{305} 는, 각각 독립적으로 상기 치환 혹은 무치환의 단환을 형성하지 않고 또한 상기 치환 혹은 무치환의 축합환을 형성하지 않은 $R_{31} \sim R_{38}$ 과 동의이고,

[1772] 상기 일반식 (318)~(320)에서의 *는, 각각 결합 위치를 나타낸다.)

[1773] 화합물 M3에 있어서, L_3 또는 L_{31} 로서의 상기 일반식(319)로 표시되는 기는, 예컨대 하기 일반식(319A)로 표시되는 기이다.

[1774] [화학식 182]



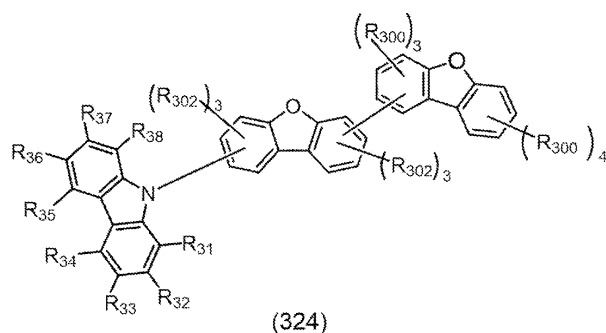
[1775]

[1776] (상기 일반식(319A)에 있어서, R_{303} , R_{304} 및 R_{305} 는, 각각 독립적으로 상기 치환 혹은 무치환의 단환을 형성하지 않고 또한 상기 치환 혹은 무치환의 축합환을 형성하지 않은 $R_{31} \sim R_{38}$ 과 동의이고, 상기 일반식(319A)에서의 *는, 각각 결합 위치를 나타낸다.)

[1777] 화합물 M3은, 상기 일반식(322)로 표시되는 화합물이며, L₃₁은, 상기 일반식(318)로 표시되는 기인 것도 바람직하다.

[1778] 화합물 M3은, 하기 일반식(324)로 표시되는 화합물인 것도 바람직하다.

[1779] [화학식 183]



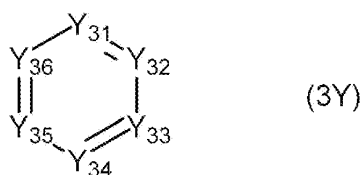
[1780]

[1781] (상기 일반식(324)에 있어서, $R_{31} \sim R_{38}$, R_{300} 및 R_{302} 는, 각각 독립적으로 상기 치환 혹은 무치환의 단환을 형성하지 않고 또한 상기 치환 혹은 무치환의 축환화를 형성하지 않은 $R_{31} \sim R_{38}$ 과 동의이다.)

[1782] 상기 치환 혹은 무치환의 단환을 형성하지 않고 또한 상기 치환 혹은 무치환의 축합환을 형성하지 않은 R₃₁~R₃₈은, 각각 독립적으로

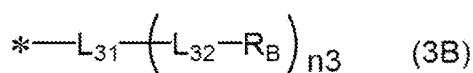
[1783] 수소 원자,

- [1784] 치환 혹은 무치환의 탄소수 1~50의 알킬기,
 [1785] 치환 혹은 무치환의 고리 형성 탄소수 6~50의 아릴기,
 [1786] 치환 혹은 무치환의 고리 형성 원자수 5~50의 복소환기, 또는
 [1787] 상기 일반식(3A)로 표시되는 기이고,
 [1788] 상기 일반식(3A)에서의 R_b 는,
 [1789] 치환 혹은 무치환의 탄소수 1~50의 알킬기,
 [1790] 치환 혹은 무치환의 고리 형성 탄소수 6~50의 아릴기, 또는
 [1791] 치환 혹은 무치환의 고리 형성 원자수 5~50의 복소환기인 것이 바람직하다.
 [1792] 상기 치환 혹은 무치환의 단환을 형성하지 않고 또한 상기 치환 혹은 무치환의 축합환을 형성하지 않은 $R_{31} \sim R_{38}$ 은, 각각 독립적으로
 [1793] 수소 원자,
 [1794] 치환 혹은 무치환의 고리 형성 탄소수 6~50의 아릴기, 또는
 [1795] 상기 일반식(3A)로 표시되는 기이고,
 [1796] 상기 일반식(3A)에서의 R_b 는, 치환 혹은 무치환의 고리 형성 탄소수 6~50의 아릴기인 것이 바람직하다.
 [1797] 상기 치환 혹은 무치환의 단환을 형성하지 않고 또한 상기 치환 혹은 무치환의 축합환을 형성하지 않은 $R_{31} \sim R_{38}$ 은, 각각 독립적으로
 [1798] 수소 원자,
 [1799] 치환 혹은 무치환의 페닐기, 또는
 [1800] 상기 일반식(3A)로 표시되는 기이고,
 [1801] 상기 일반식(3A)에서의 R_b 는, 치환 혹은 무치환의 페닐기인 것이 바람직하다.
 [1802] 화합물 M3은, 피리딘환, 피리미딘환 및 트리아진환을 갖지 않는 화합물인 것도 바람직하다.
 [1803] (일반식(3Y)로 표시되는 화합물)
 [1804] 화합물 M3은, 하기 일반식(3Y)로 표시되는 화합물인 것도 바람직하다.
 [1805] [화학식 184]



- [1806]
 [1807] (상기 일반식(3Y)에 있어서,
 [1808] $Y_{31} \sim Y_{36}$ 은, 각각 독립적으로 CR_3 또는 질소 원자이고,
 [1809] 단, $Y_{31} \sim Y_{36}$ 중 2개 이상이 질소 원자이고,
 [1810] R_3 이 복수 존재하는 경우, 복수의 R_3 중의 인접하는 2개 이상으로 이루어진 조의 1조 이상이,
 [1811] 서로 결합하여 치환 혹은 무치환의 단환을 형성하거나,
 [1812] 서로 결합하여 치환 혹은 무치환의 축합환을 형성하거나, 또는

- [1813] 서로 결합하지 않고,
- [1814] 상기 치환 혹은 무치환의 단환을 형성하지 않고 또한 상기 치환 혹은 무치환의 축합환을 형성하지 않은 R₃은, 각각 독립적으로
- [1815] 수소 원자,
- [1816] 치환 혹은 무치환의 탄소수 1~50의 알킬기,
- [1817] 치환 혹은 무치환의 탄소수 1~50의 할로알킬기,
- [1818] 치환 혹은 무치환의 탄소수 2~50의 알케닐기,
- [1819] 치환 혹은 무치환의 탄소수 2~50의 알키닐기,
- [1820] 치환 혹은 무치환의 고리 형성 탄소수 3~50의 시클로알킬기,
- [1821] -Si(R₉₀₁)(R₉₀₂)(R₉₀₃)으로 표시되는 기,
- [1822] -O-(R₉₀₄)로 표시되는 기,
- [1823] -S-(R₉₀₅)로 표시되는 기,
- [1824] -N(R₉₀₆)(R₉₀₇)로 표시되는 기,
- [1825] 치환 혹은 무치환의 탄소수 7~50의 아랄킬기,
- [1826] -C(=O)R₉₀₈로 표시되는 기,
- [1827] -COOR₉₀₉로 표시되는 기,
- [1828] 할로겐 원자,
- [1829] 시아노기,
- [1830] 니트로기,
- [1831] -P(=O)(R₉₃₁)(R₉₃₂)로 표시되는 기,
- [1832] -Ge(R₉₃₃)(R₉₃₄)(R₉₃₅)로 표시되는 기,
- [1833] -B(R₉₃₆)(R₉₃₇)로 표시되는 기,
- [1834] 치환 혹은 무치환의 고리 형성 탄소수 6~50의 아릴기,
- [1835] 치환 혹은 무치환의 고리 형성 원자수 5~50의 복소환기, 또는
- [1836] 하기 일반식(3B)로 표시되는 기이다.)
- [1837] [화학식 185]



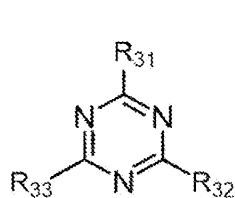
- [1838]
- [1839] (상기 일반식(3B)에 있어서, R_B, L₃₁, L₃₂ 및 n₃은, 각각 독립적으로 상기 일반식(3A)에서의 R_B, L₃₁, L₃₂ 및 n₃과 동의이고,
- [1840] R_B가 복수 존재할 때, 복수의 R_B는 서로 동일하거나 또는 상이하고,
- [1841] L₃₁이 단일 결합인 경우, n₃은 1이며, L₃₂가 상기 일반식(3Y) 중에서의 6원환의 탄소 원자와 결합하고,
- [1842] L₃₂가 복수 존재할 때, 복수의 L₃₂는 서로 동일하거나 또는 상이하고,

[1843] *는, 상기 일반식(3Y) 중에서의 6원환의 탄소 원자와의 결합 부위이다.)

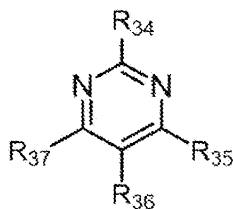
[1844] 화합물 M3은, 분자 중에 피리딘환을 포함하지 않는 것이 바람직하다.

[1845] 화합물 M3은, 하기 일반식(31a) 또는 일반식(32a)로 표시되는 화합물인 것도 바람직하다.

[1846] [화학식 186]



(31a)



(32a)

[1847]

[1848] (상기 일반식(32a)에 있어서,

[1849] R₃₅~R₃₇ 중의 인접하는 2개 이상으로 이루어진 조의 1조 이상이,

[1850] 서로 결합하여 치환 혹은 무치환의 단환을 형성하거나,

[1851] 서로 결합하여 치환 혹은 무치환의 축합환을 형성하거나, 또는

[1852] 서로 결합하지 않고,

[1853] 상기 일반식(31a)에서의 R₃₁~R₃₃, 및 상기 일반식(32a)에서의 R₃₄ 및 상기 치환 혹은 무치환의 단환을 형성하지 않고 또한 상기 치환 혹은 무치환의 축합환을 형성하지 않은 R₃₅~R₃₇은, 각각 독립적으로 상기 일반식(3Y)에서의 R₃과 동의이다.)

[1854] 화합물 M3은, 상기 일반식(31a)로 표시되는 화합물인 것도 바람직하다.

[1855] 상기 일반식(3Y)에서의 R₃은, 각각 독립적으로

[1856] 수소 원자,

[1857] 치환 혹은 무치환의 탄소수 1~50의 알킬기,

[1858] 치환 혹은 무치환의 고리 형성 탄소수 6~50의 아릴기,

[1859] 치환 혹은 무치환의 고리 형성 원자수 5~50의 복소환기, 또는

[1860] 상기 일반식(3B)로 표시되는 기인 것이 바람직하다.

[1861] 상기 일반식(3Y)에서의 R₃은, 각각 독립적으로

[1862] 수소 원자,

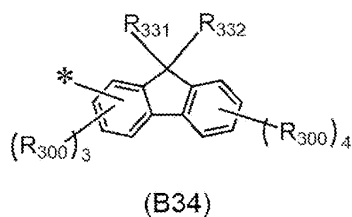
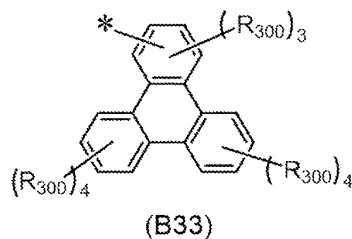
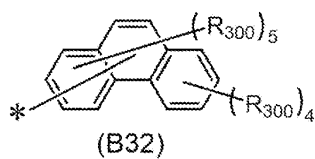
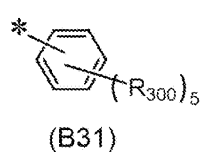
[1863] 치환 혹은 무치환의 탄소수 1~50의 알킬기,

[1864] 치환 혹은 무치환의 고리 형성 탄소수 6~50의 아릴기, 또는

[1865] 상기 일반식(3B)로 표시되는 기인 것이 바람직하다.

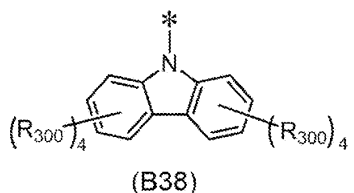
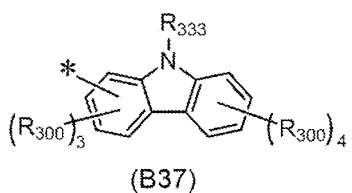
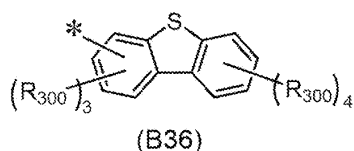
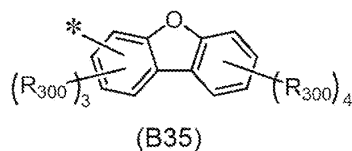
[1866] 상기 일반식(3Y)로 표시되는 화합물 M3은, 분자 중에, 하기 일반식(B31)~(B44)로 표시되는 기로 이루어진 군에서 선택되는 적어도 하나의 기를 갖는 것이 바람직하다.

[1867] [화학식 187]



[1868]

[1869] [화학식 188]



[1870]

[1871] (상기 일반식 (B31)~(B38)에 있어서,

[1872] 복수의 R_{300} 중의 인접하는 2개 이상으로 이루어진 조의 1조 이상이,

[1873] 서로 결합하여 치환 혹은 무치환의 단환을 형성하거나,

[1874] 서로 결합하여 치환 혹은 무치환의 축합환을 형성하거나, 또는

[1875] 서로 결합하지 않고,

[1876] R_{331} 및 R_{332} 로 이루어진 조가,

[1877] 서로 결합하여 치환 혹은 무치환의 단환을 형성하거나,

[1878] 서로 결합하여 치환 혹은 무치환의 축합환을 형성하거나, 또는

[1879] 서로 결합하지 않고,

[1880] 상기 치환 혹은 무치환의 단환을 형성하지 않고 또한 상기 치환 혹은 무치환의 축합환을 형성하지 않은 R_{300} , R_{331} 및 R_{332} , 및 R_{333} 은, 각각 독립적으로

[1881] 수소 원자,

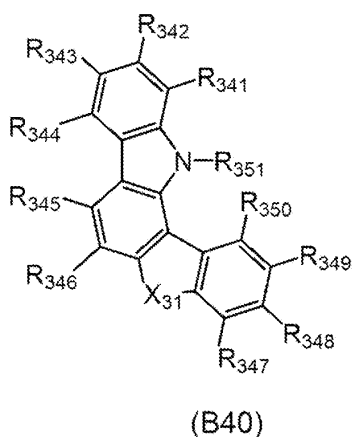
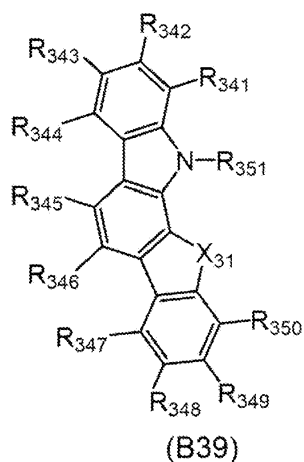
[1882] 치환 혹은 무치환의 탄소수 1~50의 알킬기,

[1883] 치환 혹은 무치환의 탄소수 1~50의 할로알킬기,

[1884] 치환 혹은 무치환의 탄소수 2~50의 알케닐기,

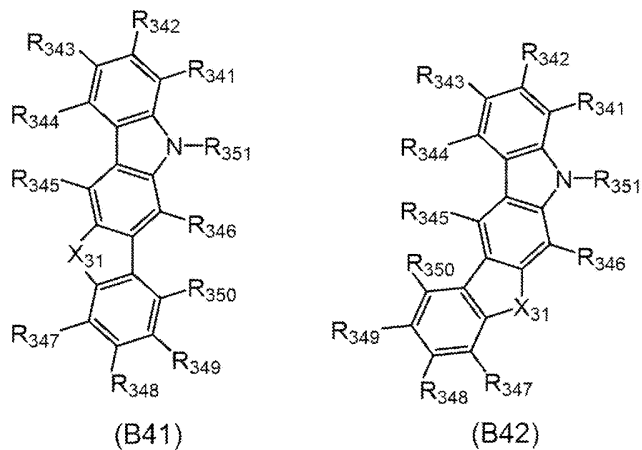
[1885] 치환 혹은 무치환의 탄소수 2~50의 알키닐기,

- [1886] 치환 혹은 무치환의 고리 형성 탄소수 3~50의 시클로알킬기,
 [1887] $-\text{Si}(\text{R}_{901})(\text{R}_{902})(\text{R}_{903})$ 으로 표시되는 기,
 [1888] $-\text{O}-(\text{R}_{904})$ 로 표시되는 기,
 [1889] $-\text{S}-(\text{R}_{905})$ 로 표시되는 기,
 [1890] $-\text{N}(\text{R}_{906})(\text{R}_{907})$ 로 표시되는 기,
 [1891] 치환 혹은 무치환의 탄소수 7~50의 아랄킬기,
 [1892] $-\text{C}(=\text{O})\text{R}_{908}$ 로 표시되는 기,
 [1893] $-\text{COOR}_{909}$ 로 표시되는 기,
 [1894] 할로젠 원자,
 [1895] 시아노기,
 [1896] 니트로기,
 [1897] 치환 혹은 무치환의 고리 형성 탄소수 6~50의 아릴기, 또는
 [1898] 치환 혹은 무치환의 고리 형성 원자수 5~50의 복소환기이고,
 [1899] 상기 일반식 (B31)~(B38) 중의 *은, 각각 상기 화합물 M3의 분자 중에서의 다른 원자와의 결합 위치를 나타낸다.)
 [1900] [화학식 189]



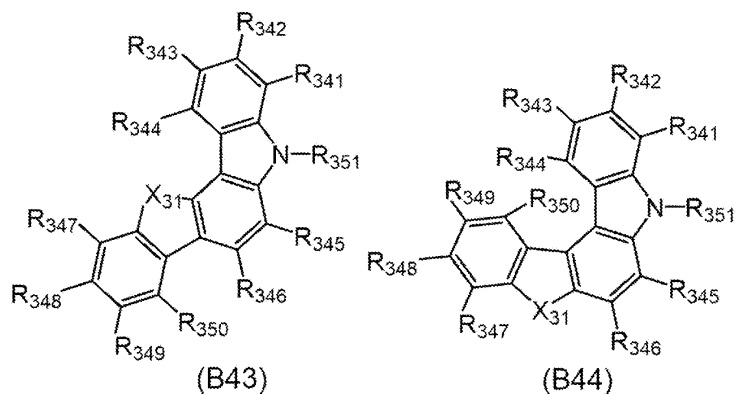
[1901]

[1902] [화학식 190]



[1903]

[1904] [화학식 191]



[1905]

[1906] (상기 일반식(B39)~(B44)에 있어서,

[1907] $R_{341} \sim R_{350}$ 중의 인접하는 2개 이상으로 이루어진 조의 1조 이상이,

[1908] 서로 결합하여 치환 혹은 무치환의 단환을 형성하거나,

[1909] 서로 결합하여 치환 혹은 무치환의 축합환을 형성하거나, 또는

[1910] 서로 결합하지 않고,

[1911] 다만, $R_{341} \sim R_{351}$ 중의 적어도 하나가, 상기 화합물 M3의 분자 중에서의 다른 원자와의 결합 위치를 나타내고,

[1912] X_{31} 은 황 원자, 산소 원자, NR_{352} 또는 $CR_{353}R_{354}$ 이고,

[1913] R_{353} 및 R_{354} 로 이루어진 조가,

[1914] 서로 결합하여 치환 혹은 무치환의 단환을 형성하거나,

[1915] 서로 결합하여 치환 혹은 무치환의 축합환을 형성하거나, 또는

[1916] 서로 결합하지 않고,

[1917] 상기 화합물 M3의 분자 중에서의 다른 원자와의 결합 위치가 아니며, 상기 치환 혹은 무치환의 단환을 형성하지 않고 또한 상기 치환 혹은 무치환의 축합환을 형성하지 않은 $R_{341} \sim R_{351}$ 과, R_{352} 와, 상기 치환 혹은 무치환의 단환을 형성하지 않고 또한 상기 치환 혹은 무치환의 축합환을 형성하지 않은 R_{353} 및 R_{354} 는, 각각 독립적으로

[1918] 수소 원자,

[1919] 치환 혹은 무치환의 탄소수 1~50의 알킬기,

- [1920] 치환 혹은 무치환의 탄소수 1~50의 할로알킬기,
- [1921] 치환 혹은 무치환의 탄소수 2~50의 알케닐기,
- [1922] 치환 혹은 무치환의 탄소수 2~50의 알키닐기,
- [1923] 치환 혹은 무치환의 고리 형성 탄소수 3~50의 시클로알킬기,
- [1924] $-\text{Si}(\text{R}_{901})(\text{R}_{902})(\text{R}_{903})$ 으로 표시되는 기,
- [1925] $-\text{O}-(\text{R}_{904})$ 로 표시되는 기,
- [1926] $-\text{S}-(\text{R}_{905})$ 로 표시되는 기,
- [1927] $-\text{N}(\text{R}_{906})(\text{R}_{907})$ 로 표시되는 기,
- [1928] 치환 혹은 무치환의 탄소수 7~50의 아랄킬기,
- [1929] $-\text{C}(=\text{O})\text{R}_{908}$ 로 표시되는 기,
- [1930] $-\text{COOR}_{909}$ 로 표시되는 기,
- [1931] 할로젠 원자,
- [1932] 시아노기,
- [1933] 니트로기,
- [1934] 치환 혹은 무치환의 고리 형성 탄소수 6~50의 아릴기, 또는
- [1935] 치환 혹은 무치환의 고리 형성 원자수 5~50의 복소환기이다.)
- [1936] 상기 일반식(3Y)로 표시되는 화합물 M3은, 분자 중에, 상기 일반식 (B38)~(B44)로 표시되는 기로 이루어진 군에서 선택되는 적어도 하나의 기를 갖는 것이 바람직하다.
- [1937] 상기 일반식(3Y)에 있어서, $\text{Y}_{31} \sim \text{Y}_{63}$ 중 적어도 하나가 CR_3 이며,
- [1938] 적어도 하나의 R_3 이 상기 일반식(3B)로 표시되는 기이고, R_B 가 상기 일반식 (B31)~(B44)로 표시되는 기의 어느 하나인 것이 바람직하다.
- [1939] 상기 일반식(3Y)에 있어서, $\text{Y}_{31} \sim \text{Y}_{36}$ 중 적어도 하나가 CR_3 이며,
- [1940] 적어도 하나의 R_3 이 상기 일반식(3B)로 표시되는 기이고, R_B 가 상기 일반식 (B38)~(B44)로 표시되는 기의 어느 하나인 것이 바람직하다.
- [1941] 상기 일반식 (3A) 및 (3B)에 있어서, L_{31} 은,
- [1942] 단일 결합,
- [1943] 치환 혹은 무치환의 고리 형성 탄소수 6~50의 아릴렌기, 해당 아릴렌기로부터 유도되는 3가의 기, 4가의 기, 5가의 기 혹은 6가의 기, 또는
- [1944] 치환 혹은 무치환의 고리 형성 탄소수 6~50의 아릴렌기로 이루어진 군에서 선택되는 2개의 기가 결합하여 형성되는 2가의 기, 해당 2가의 기로부터 유도되는 3가의 기, 4가의 기, 5가의 기 혹은 6가의 기이고,
- [1945] L_{32} 은, 각각 독립적으로
- [1946] 단일 결합, 또는
- [1947] 치환 혹은 무치환의 고리 형성 탄소수 6~50의 아릴렌기인 것이 바람직하다.
- [1948] 상기 일반식 (3A) 및 (3B)에 있어서, L_{31} 은,
- [1949] 단일 결합, 또는

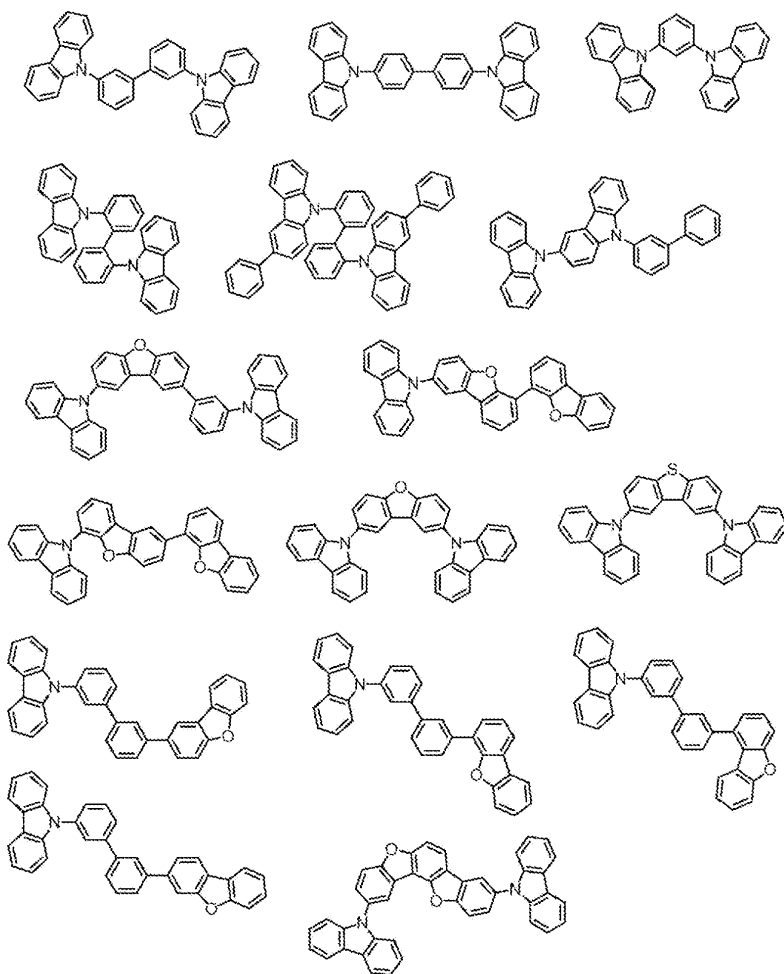
- [1950] 치환 혹은 무치환의 고리 형성 탄소수 6~50의 아릴렌기이고,
- [1951] n_3 은 1이며,
- [1952] L_{32} 는,
- [1953] 단일 결합, 또는
- [1954] 치환 혹은 무치환의 고리 형성 탄소수 6~50의 아릴렌기인 것이 바람직하다.
- [1955] 상기 일반식 (3A) 및 (3B)에 있어서, L_{31} 은,
- [1956] 단일 결합,
- [1957] 치환 혹은 무치환의 페닐렌기,
- [1958] 치환 혹은 무치환의 비페닐렌기, 또는
- [1959] 치환 혹은 무치환의 페닐렌기 및 치환 혹은 무치환의 비페닐렌기로 이루어진 군에서 선택되는 2개의 기가 결합하여 형성되는 2가의 기, 해당 2가의 기로부터 유도되는 3가의 기, 4가의 기, 5가의 기 혹은 6가의 기이고,
- [1960] n_3 은 1이며,
- [1961] L_{32} 는,
- [1962] 단일 결합,
- [1963] 치환 혹은 무치환의 페닐렌기, 또는
- [1964] 치환 혹은 무치환의 비페닐렌기인 것이 바람직하다.
- [1965] 상기 일반식 (3X) 및 (3Y)로 표시되는 화합물에 있어서, R_{352} 는,
- [1966] 치환 혹은 무치환의 탄소수 1~50의 알킬기,
- [1967] 치환 혹은 무치환의 고리 형성 탄소수 6~50의 아릴기, 또는
- [1968] 치환 혹은 무치환의 고리 형성 원자수 5~50의 복소환기인 것이 바람직하다.
- [1969] 상기 일반식 (3X) 및 (3Y)로 표시되는 화합물에 있어서, R_{353} 및 R_{354} 로 이루어진 조가,
- [1970] 서로 결합하여 치환 혹은 무치환의 단환을 형성하거나,
- [1971] 서로 결합하여 치환 혹은 무치환의 축합환을 형성하거나, 또는
- [1972] 서로 결합하지 않고,
- [1973] 치환 혹은 무치환의 단환을 형성하지 않고 또한 치환 혹은 무치환의 축합환을 형성하지 않은 R_{353} 및 R_{354} 는, 각각 독립적으로
- [1974] 치환 혹은 무치환의 탄소수 1~50의 알킬기,
- [1975] 치환 혹은 무치환의 고리 형성 탄소수 6~50의 아릴기, 또는
- [1976] 치환 혹은 무치환의 고리 형성 원자수 5~50의 복소환기인 것이 바람직하다.
- [1977] 상기 일반식 (3X) 및 (3Y)로 표시되는 화합물에 있어서, 「치환 혹은 무치환의」라고 하는 경우의 치환기가,
- [1978] 무치환의 탄소수 1~25의 알킬기,
- [1979] 무치환의 탄소수 2~25의 알케닐기,
- [1980] 무치환의 탄소수 2~25의 알키닐기,
- [1981] 무치환의 고리 형성 탄소수 3~25의 시클로알킬기,

- [1982] -Si(R₉₀₁)(R₉₀₂)(R₉₀₃)으로 표시되는 기,
- [1983] -O-(R₉₀₄)로 표시되는 기,
- [1984] -S-(R₉₀₅)로 표시되는 기,
- [1985] -N(R₉₀₆)(R₉₀₇)로 표시되는 기,
- [1986] 무치환의 탄소수 7~50의 아랄킬기,
- [1987] -C(=O)R₉₀₈로 표시되는 기,
- [1988] -COOR₉₀₉로 표시되는 기,
- [1989] -P(=O)(R₉₃₁)(R₉₃₂)로 표시되는 기,
- [1990] -Ge(R₉₃₃)(R₉₃₄)(R₉₃₅)로 표시되는 기,
- [1991] -B(R₉₃₆)(R₉₃₇)로 표시되는 기,
- [1992] -S(=O)₂R₉₃₈로 표시되는 기,
- [1993] 할로겐 원자,
- [1994] 시아노기,
- [1995] 니트로기,
- [1996] 무치환의 고리 형성 탄소수 6~25의 아릴기, 또는
- [1997] 무치환의 고리 형성 원자수 5~25의 복소환기이고,
- [1998] R₉₀₁~R₉₀₉ 및 R₉₃₁~R₉₃₈은, 각각 독립적으로
- [1999] 수소 원자,
- [2000] 무치환의 탄소수 1~25의 알킬기,
- [2001] 무치환의 고리 형성 탄소수 6~25의 아릴기, 또는
- [2002] 무치환의 고리 형성 원자수 5~25의 복소환기인 것이 바람직하다.
- [2003] 상기 일반식 (3X) 및 (3Y)로 표시되는 화합물에 있어서, 「치환 혹은 무치환의」라고 하는 경우의 치환기가,
- [2004] 할로겐 원자,
- [2005] 무치환의 탄소수 1~25의 알킬기,
- [2006] 무치환의 고리 형성 탄소수 6~25의 아릴기, 또는
- [2007] 무치환의 고리 형성 원자수 5~25의 복소환기인 것이 바람직하다.
- [2008] 상기 일반식 (3X) 및 (3Y)로 표시되는 화합물에 있어서, 「치환 혹은 무치환의」라고 하는 경우의 치환기가,
- [2009] 무치환의 탄소수 1~10의 알킬기,
- [2010] 무치환의 고리 형성 탄소수 6~12의 아릴기, 또는
- [2011] 무치환의 고리 형성 원자수 5~12의 복소환기인 것이 바람직하다.
- [2012] 상기 일반식 (3X) 및 (3Y)로 표시되는 화합물에 있어서, 「치환 혹은 무치환」이라고 기재된 기는, 모두 「무치환」의 기인 것도 바람직하다.
- [2013] (화합물 M3의 제조 방법)
- [2014] 본 실시형태에 따른 화합물 M3은, 공지의 방법에 의해 제조할 수 있다.

[2015] (화합물 M3의 구체예)

[2016] 본 실시형태의 화합물 M3의 구체예로는, 예컨대 이하의 화합물을 들 수 있다. 다만, 본 발명은, 이들 화합물의 구체예에 한정되지 않는다.

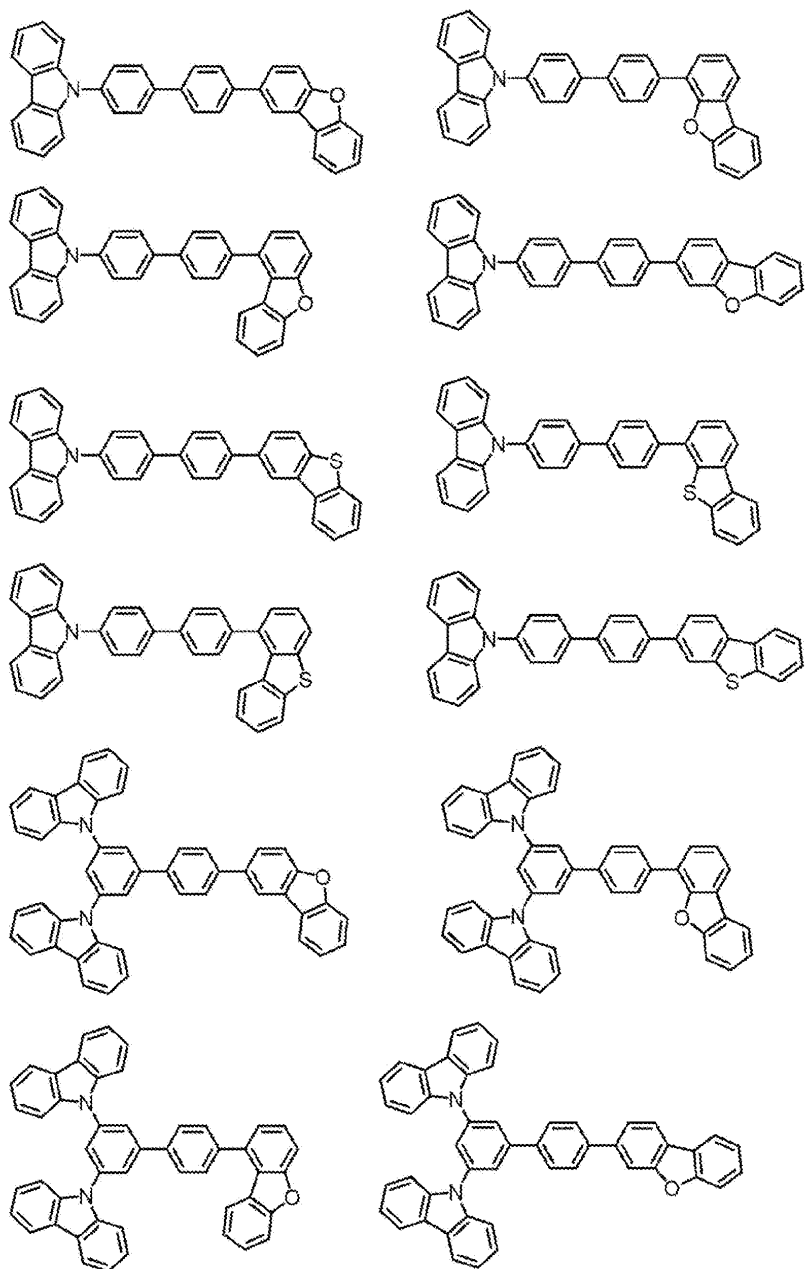
[2017] [화학식 192]



[2018]

[2019]

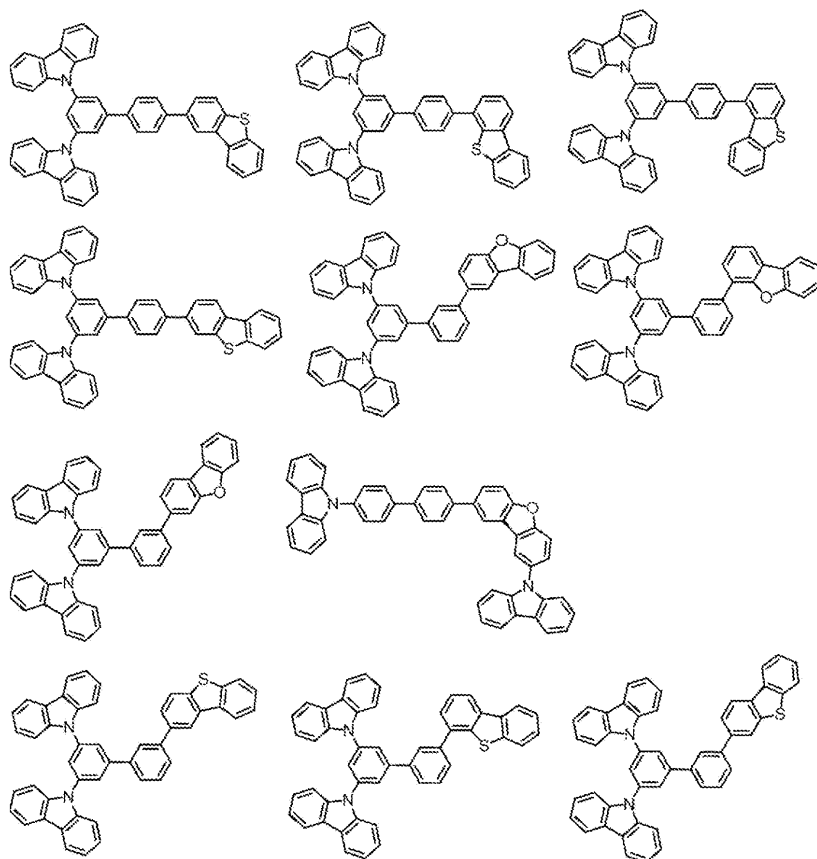
[화학식 193]



[2020]

[2021]

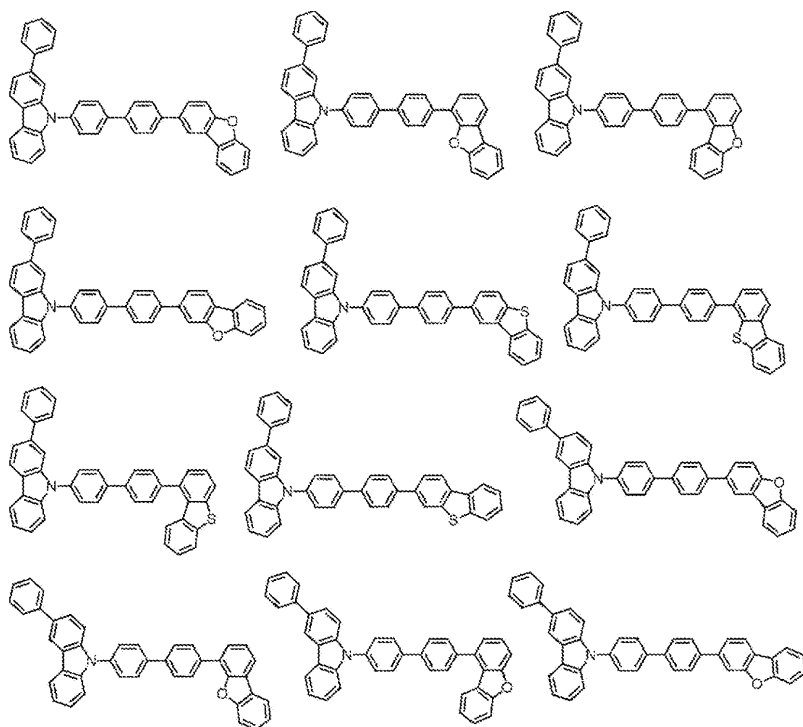
[화학식 194]



[2022]

[2023]

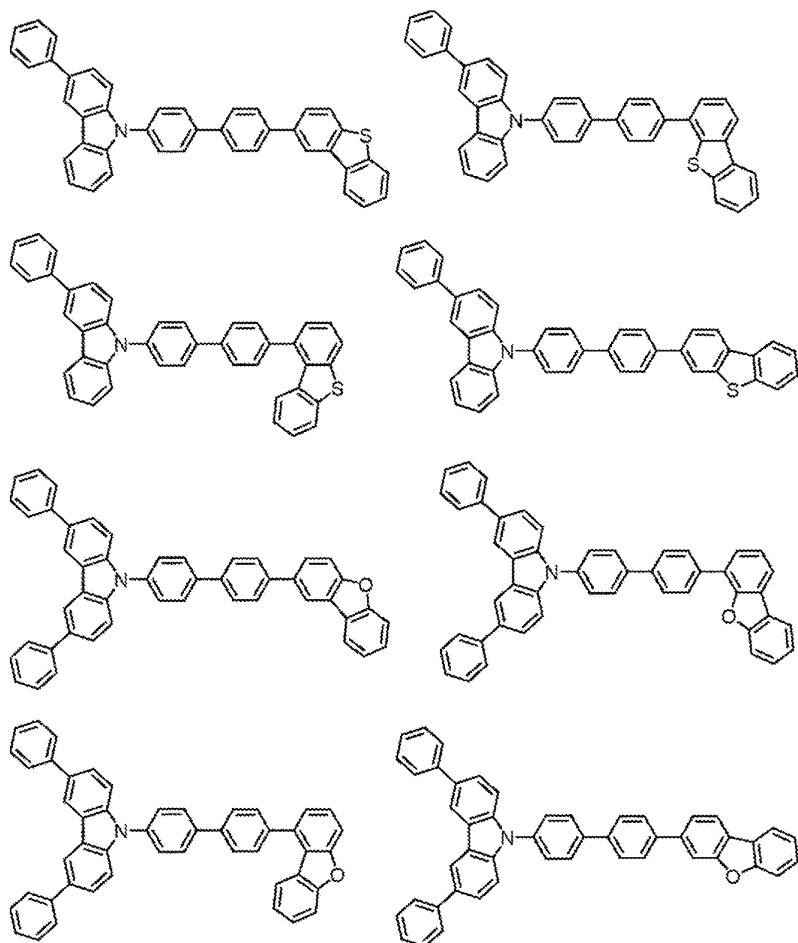
[화학식 195]



[2024]

[2025]

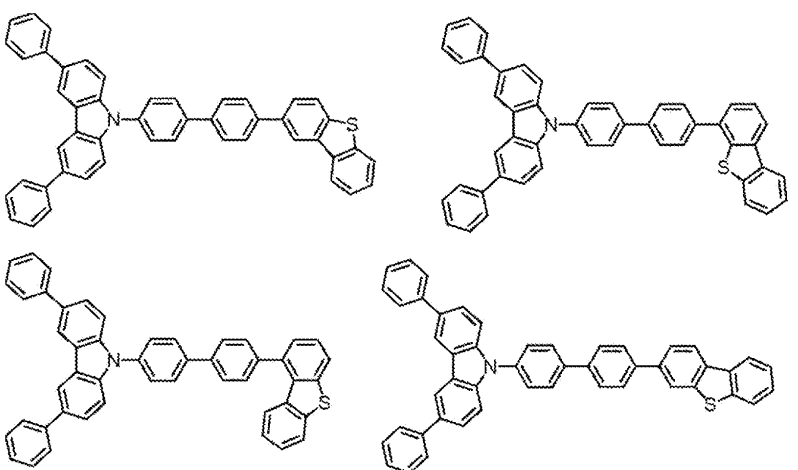
[화학식 196]



[2026]

[2027]

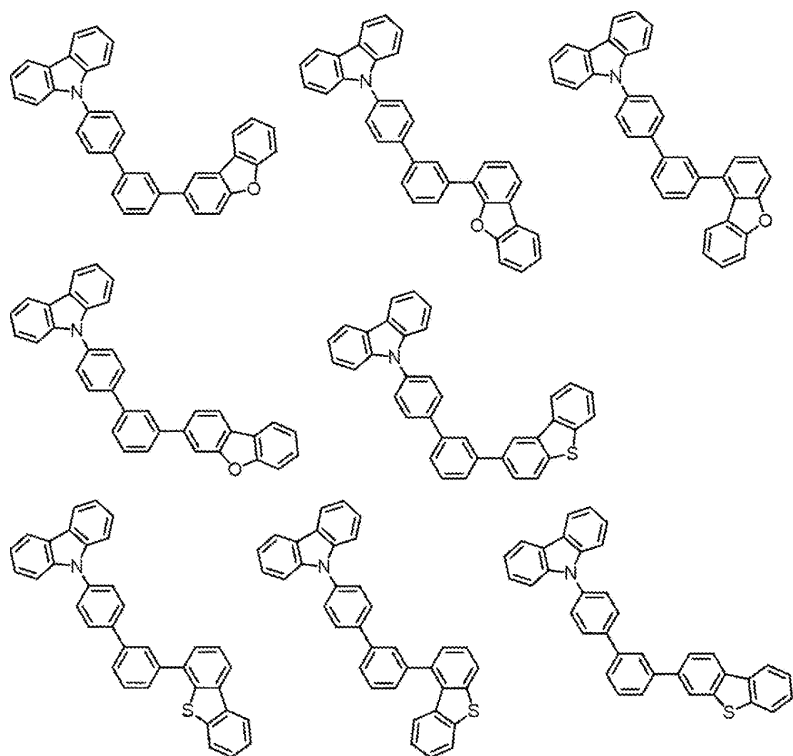
[화학식 197]



[2028]

[2029]

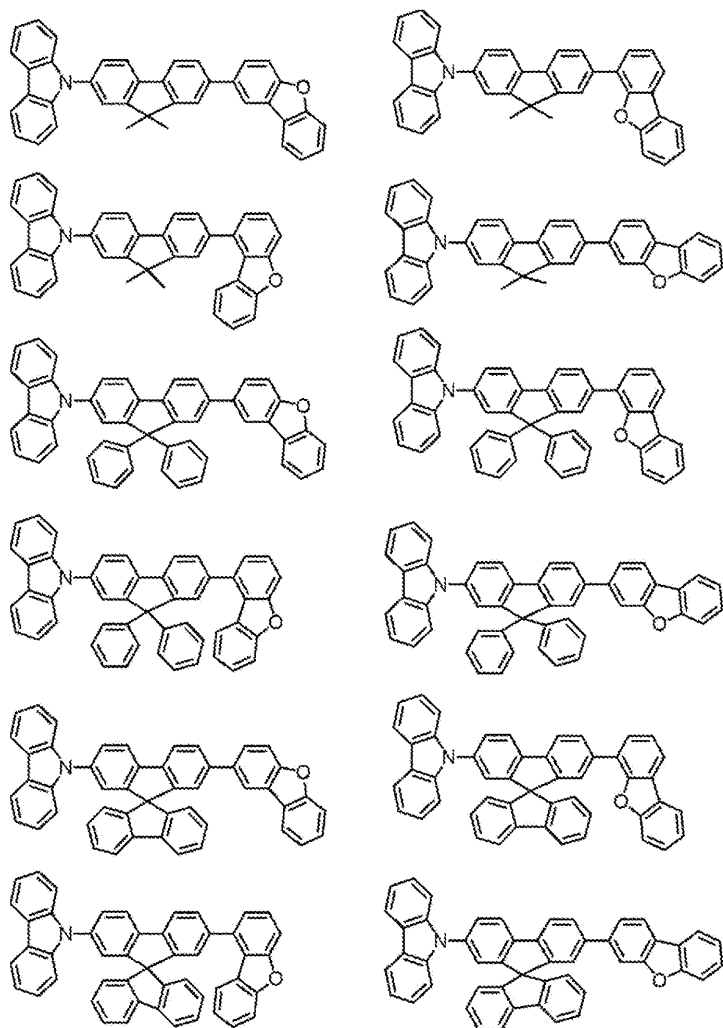
[화학식 198]



[2030]

[2031]

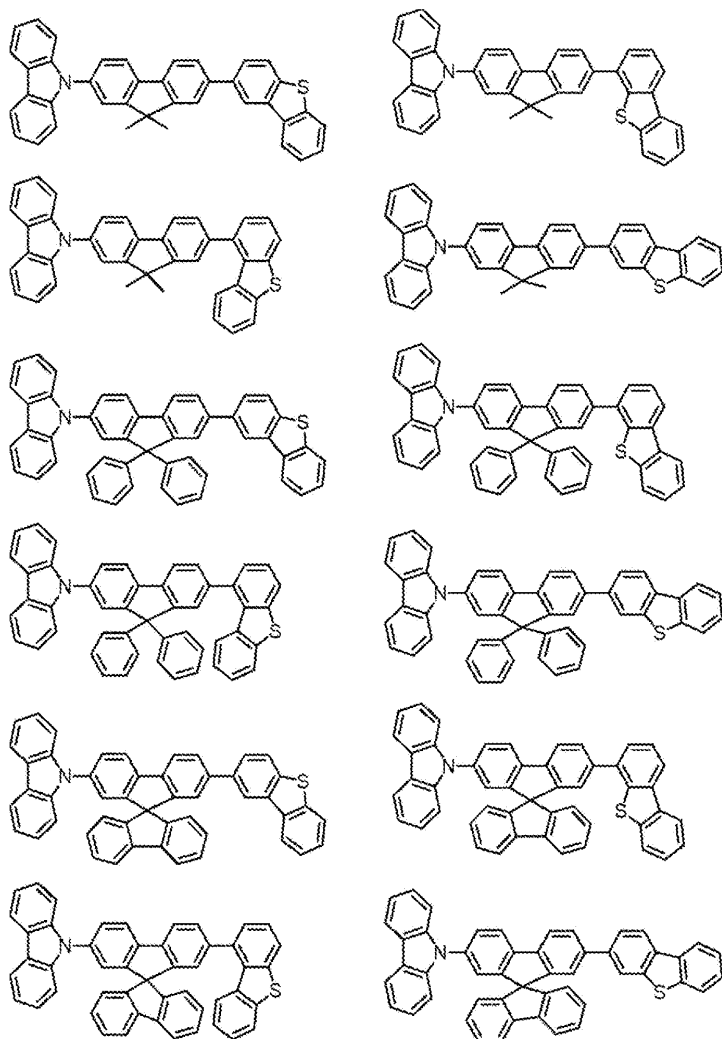
[화학식 199]



[2032]

[2033]

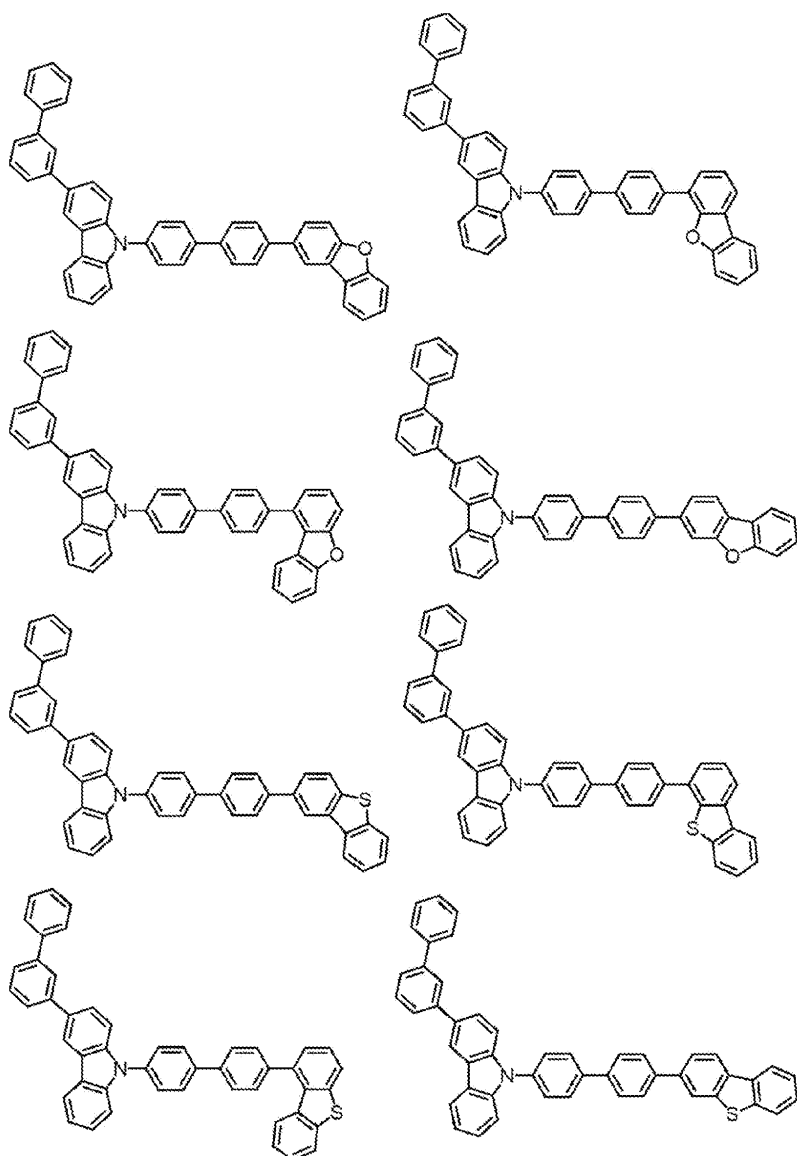
[화학식 200]



[2034]

[2035]

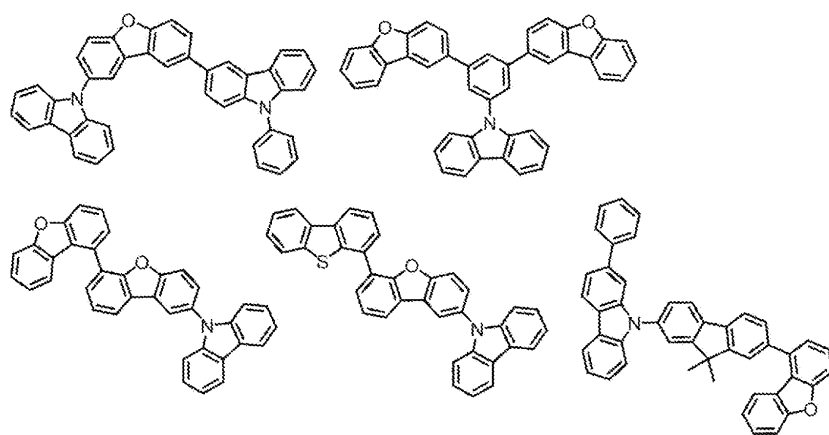
[화학식 201]



[2036]

[2037]

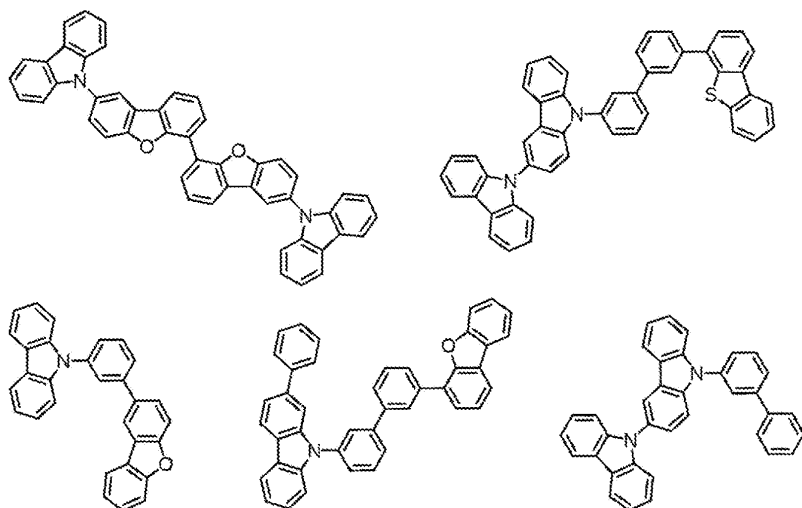
[화학식 202]



[2038]

[2039]

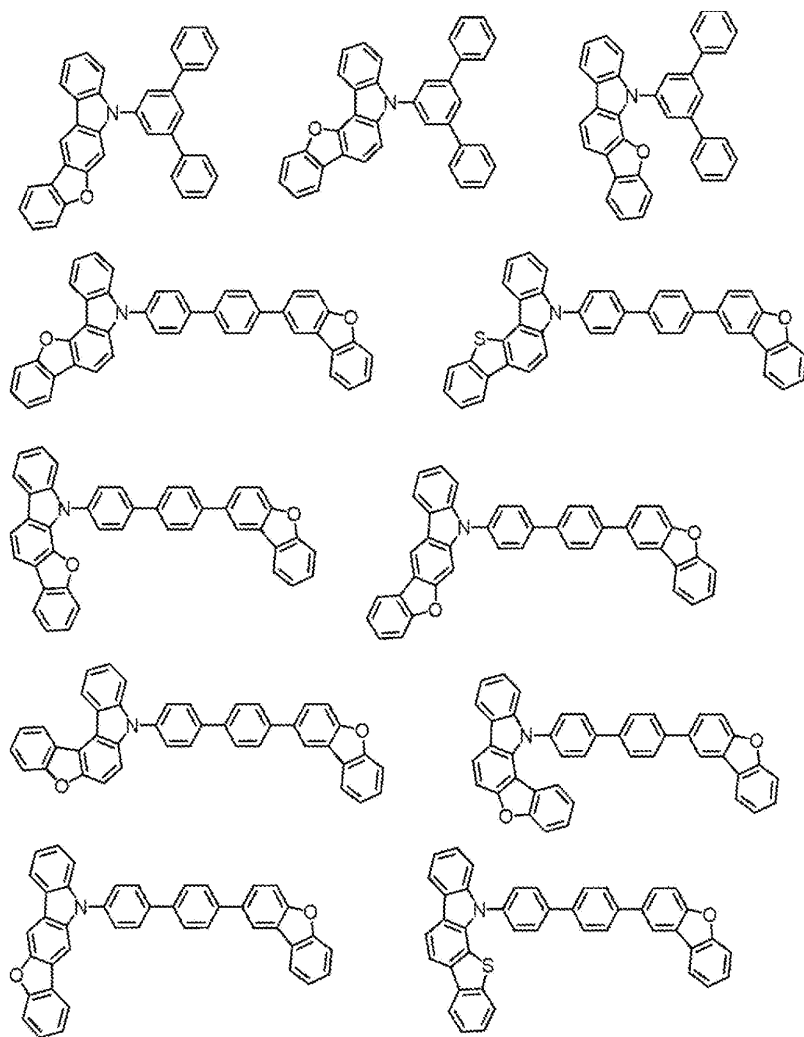
[화학식 203]



[2040]

[2041]

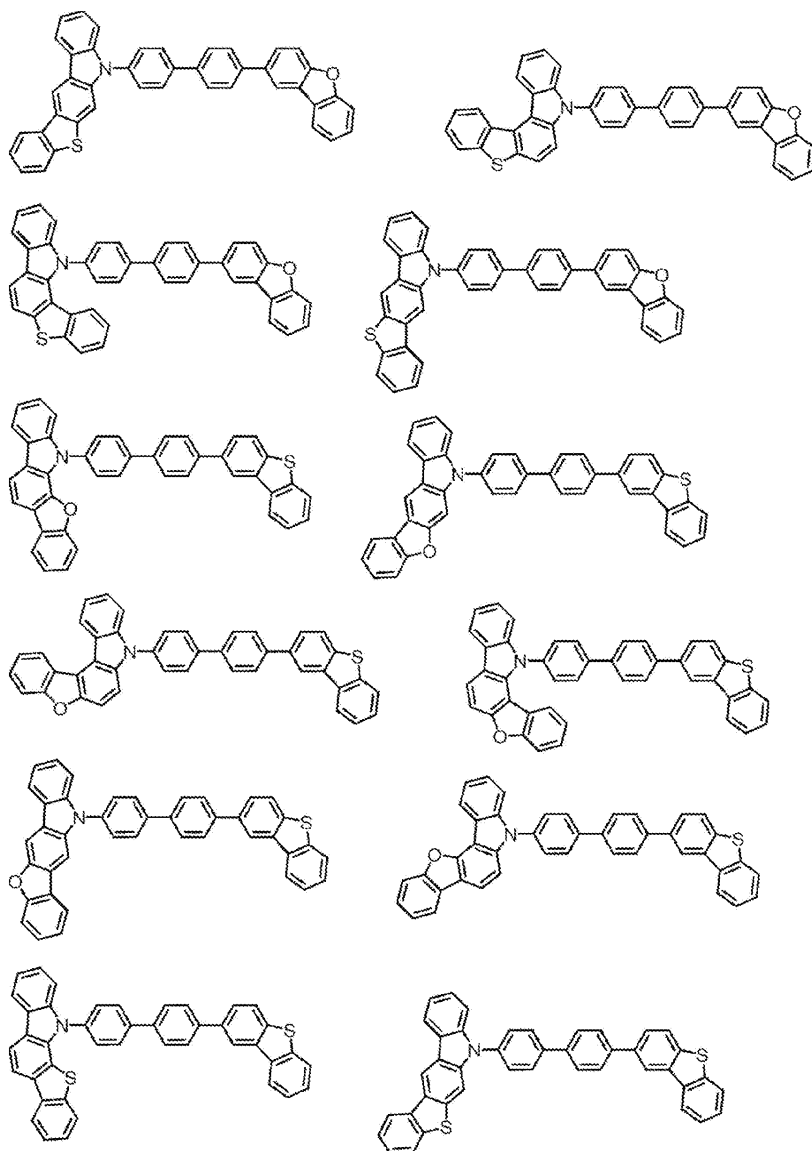
[화학식 204]



[2042]

[2043]

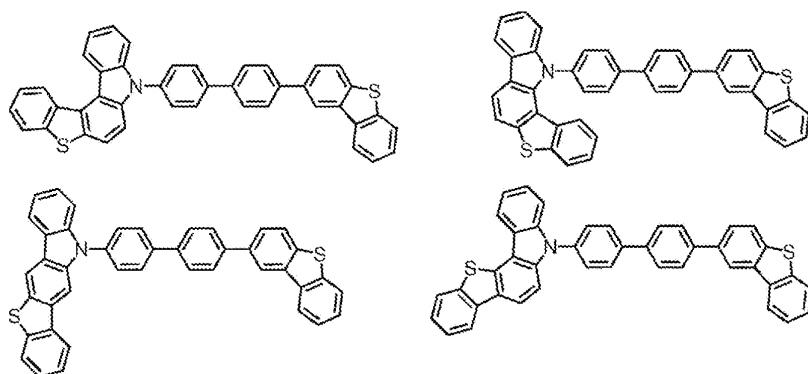
[화학식 205]



[2044]

[2045]

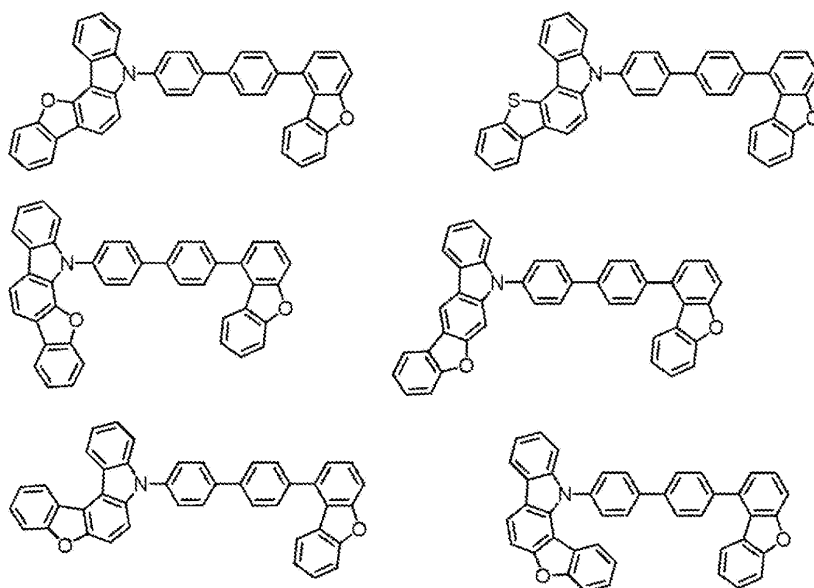
[화학식 206]



[2046]

[2047]

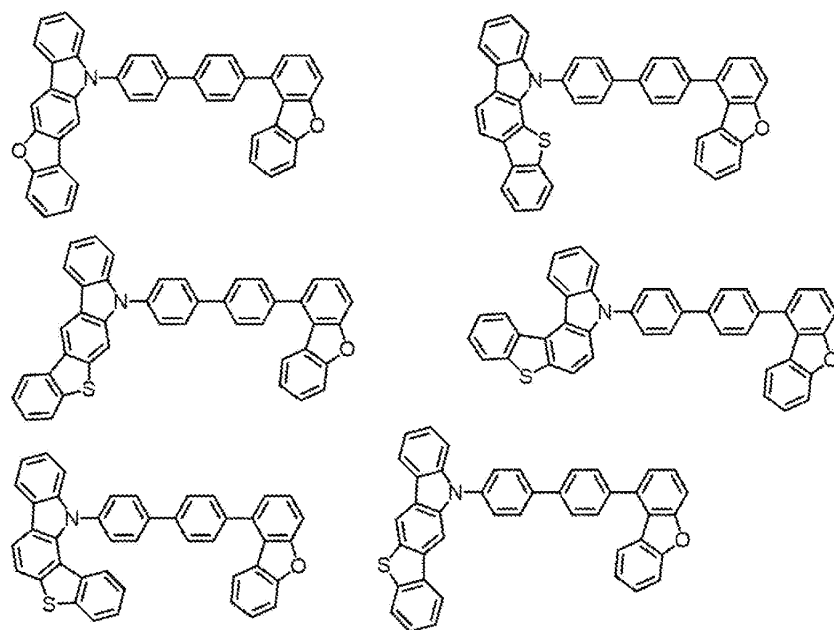
[화학식 207]



[2048]

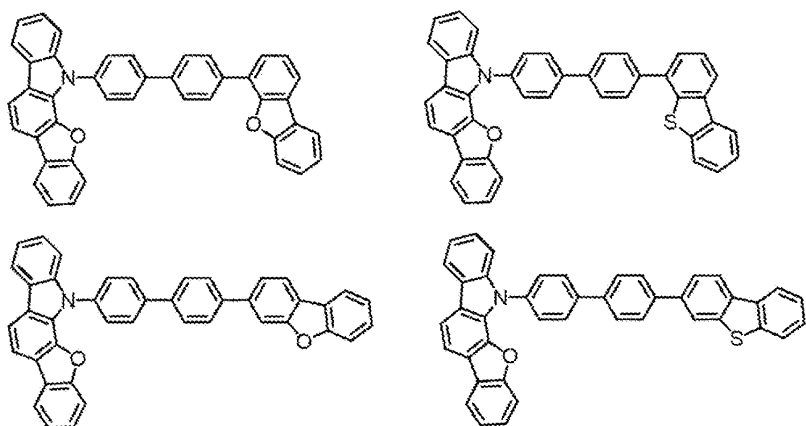
[2049]

[화학식 208]



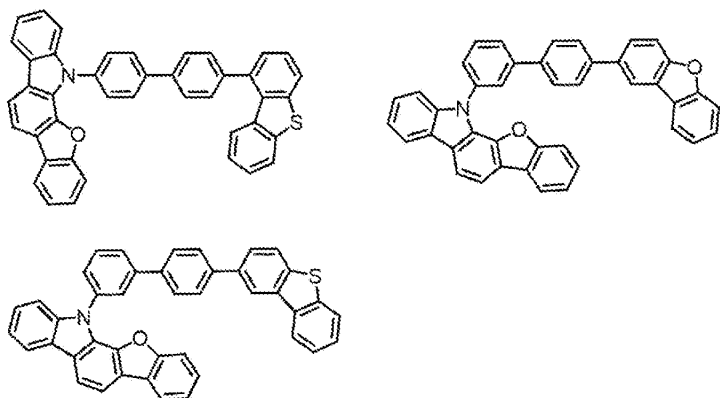
[2050]

[2051] [화학식 209]



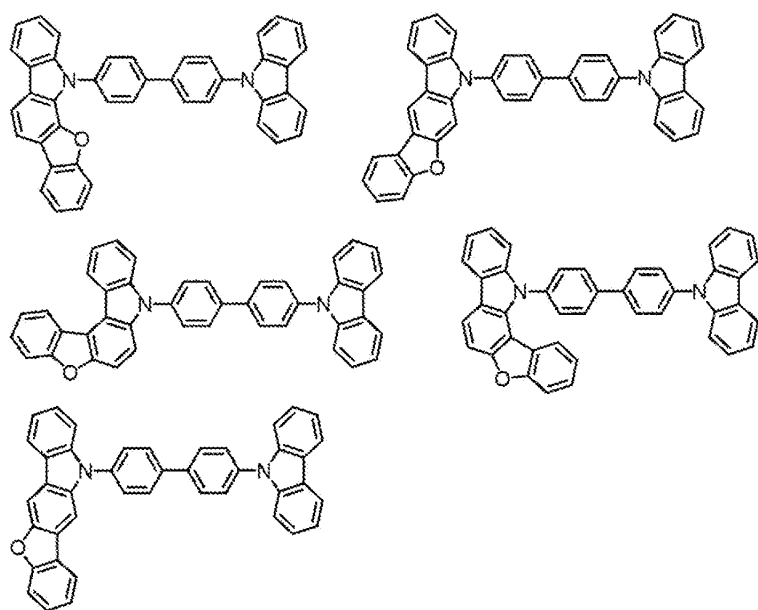
[2052]

[2053] [화학식 210]



[2054]

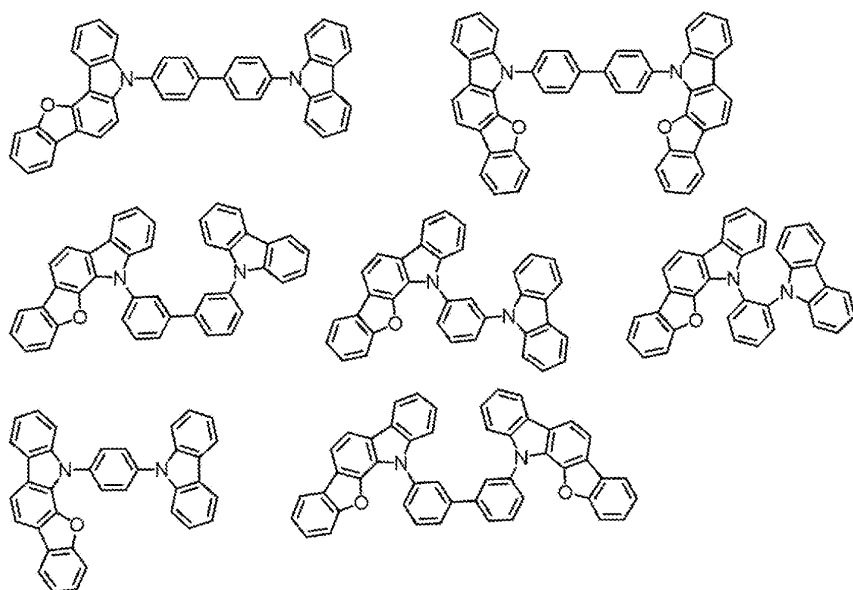
[2055] [화학식 211]



[2056]

[2057]

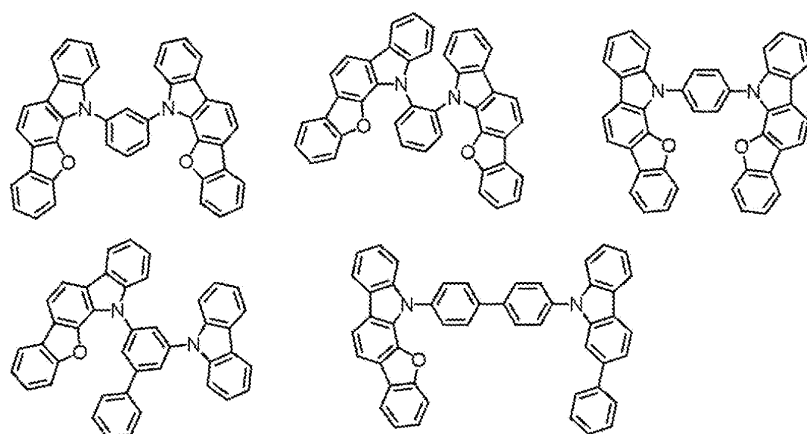
[화학식 212]



[2058]

[2059]

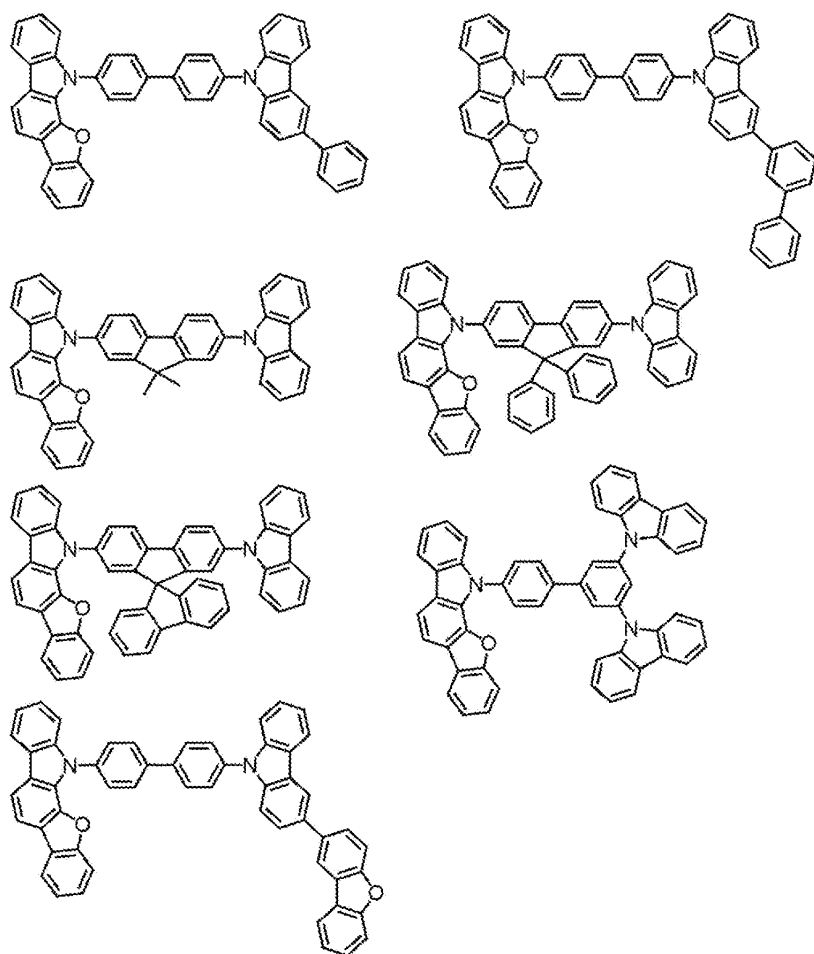
[화학식 213]



[2060]

[2061]

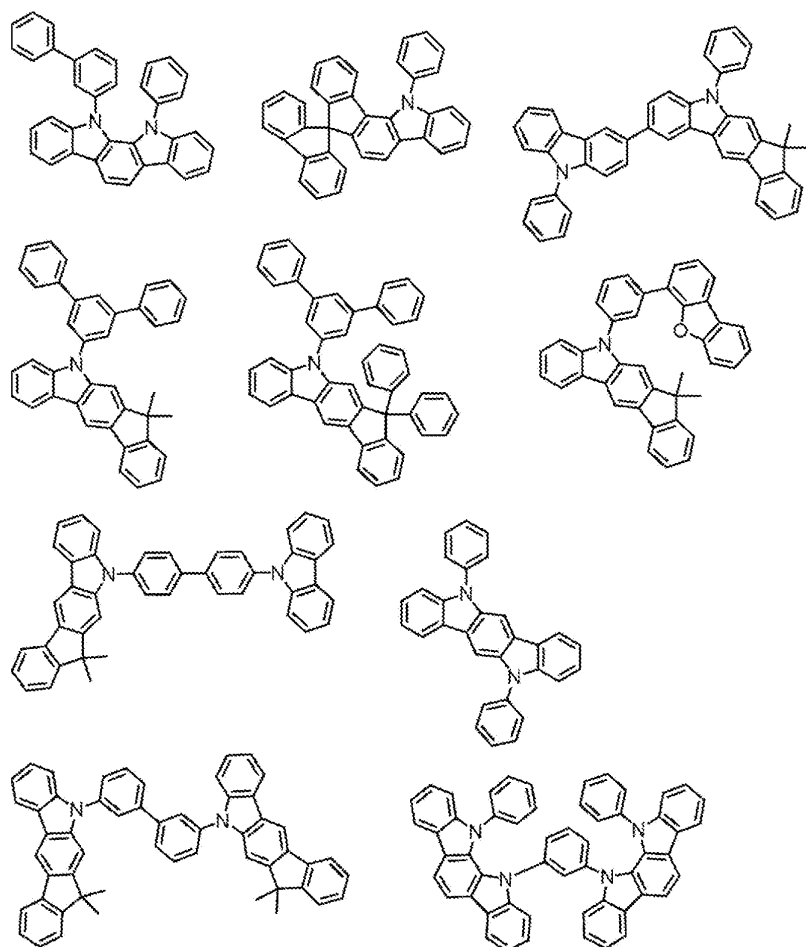
[화학식 214]



[2062]

[2063]

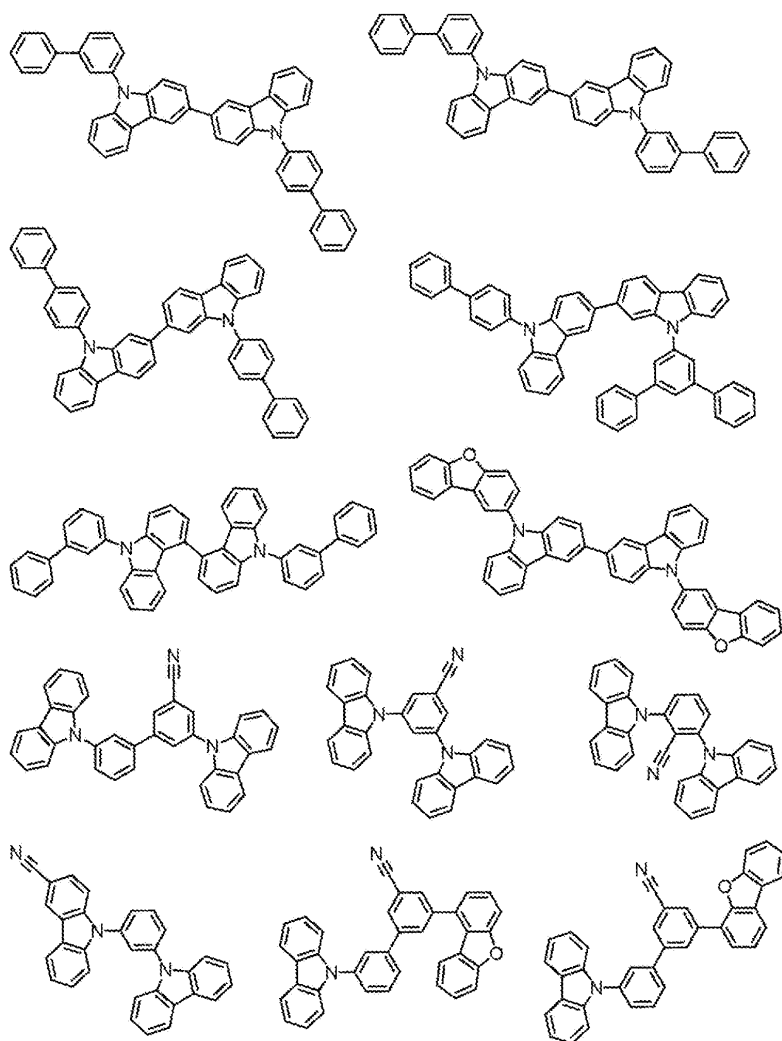
[화학식 215]



[2064]

[2065]

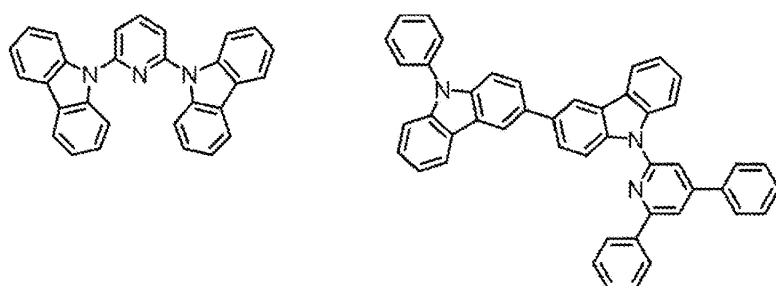
[화학식 216]



[2066]

[2067]

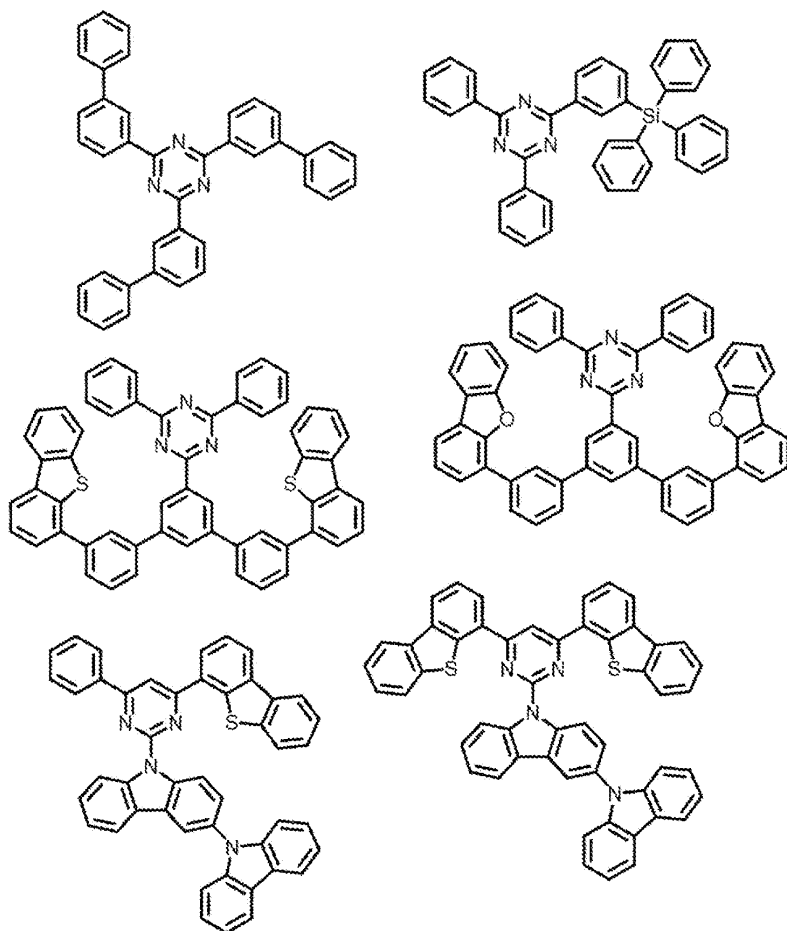
[화학식 217]



[2068]

[2069]

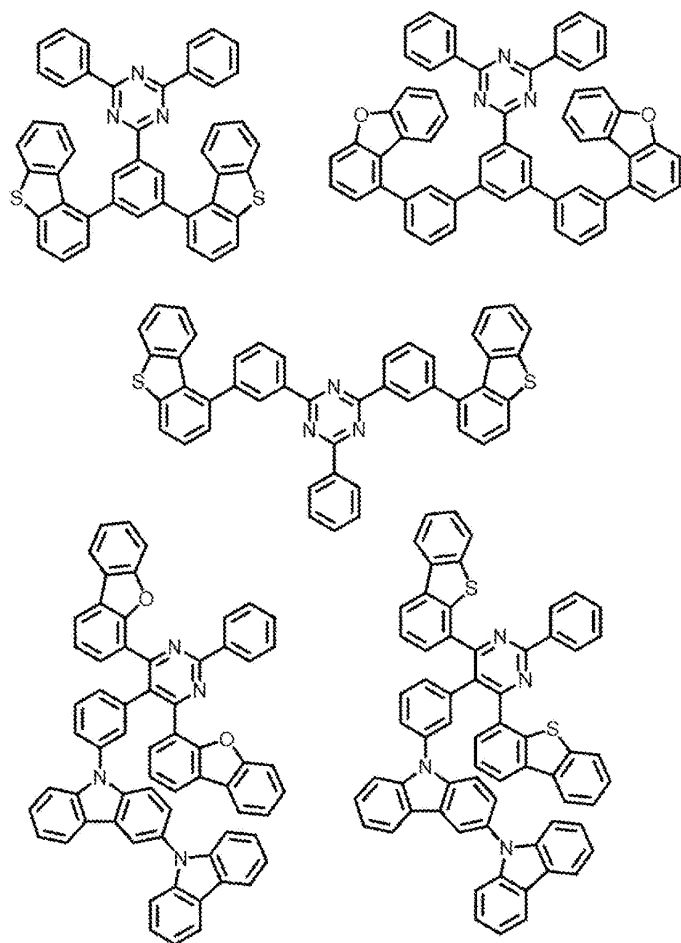
[화학식 218]



[2070]

[2071]

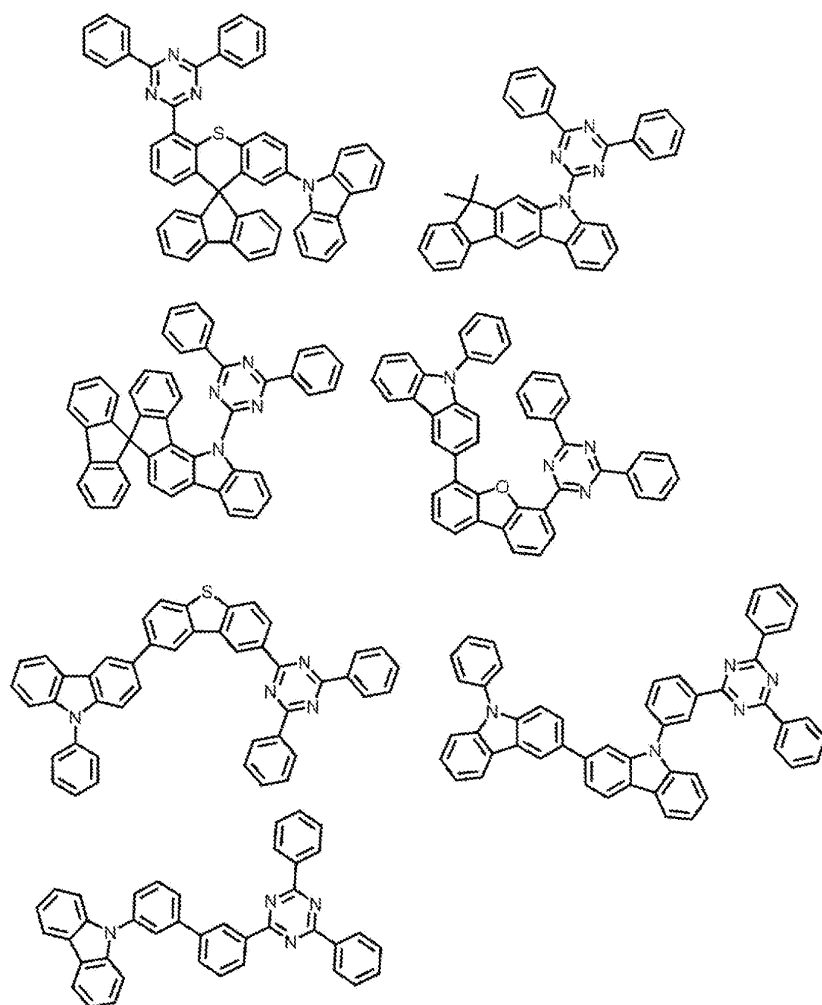
[화학식 219]



[2072]

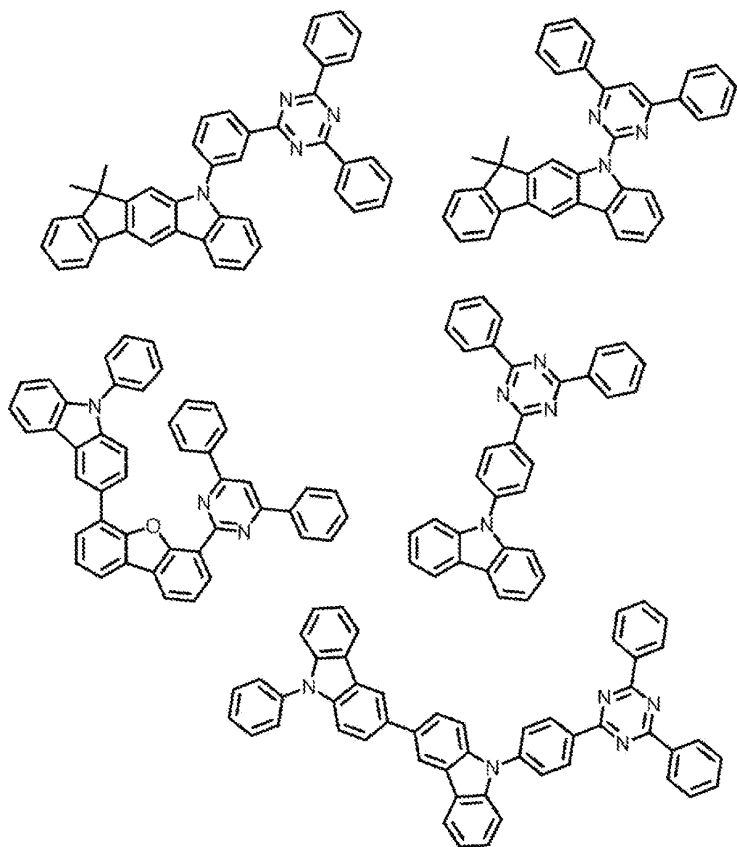
[2073]

[화학식 220]



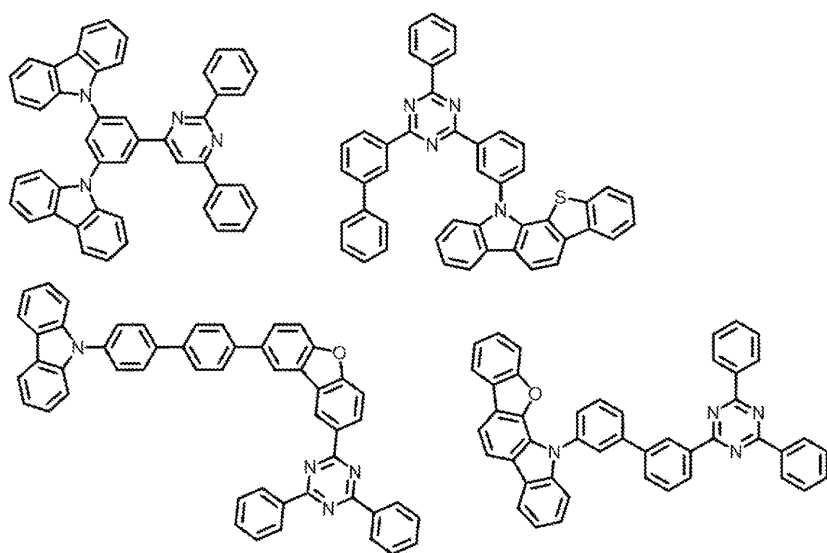
[2074]

[2075] [화학식 221]



[2076]

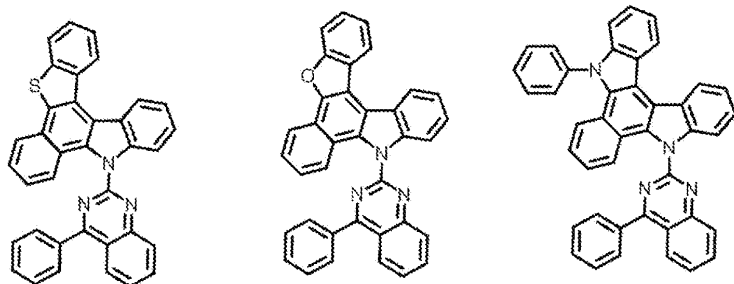
[2077] [화학식 222]



[2078]

[2079]

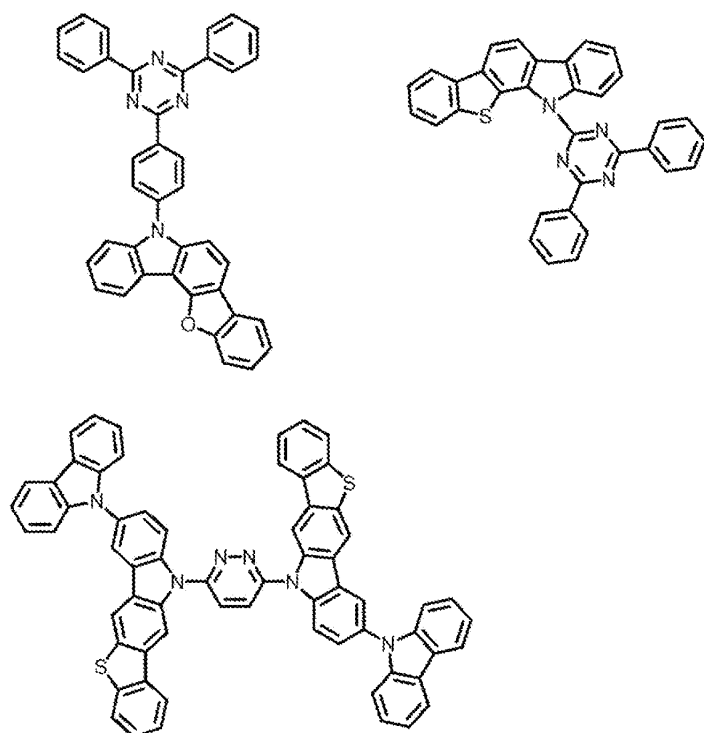
[화학식 223]



[2080]

[2081]

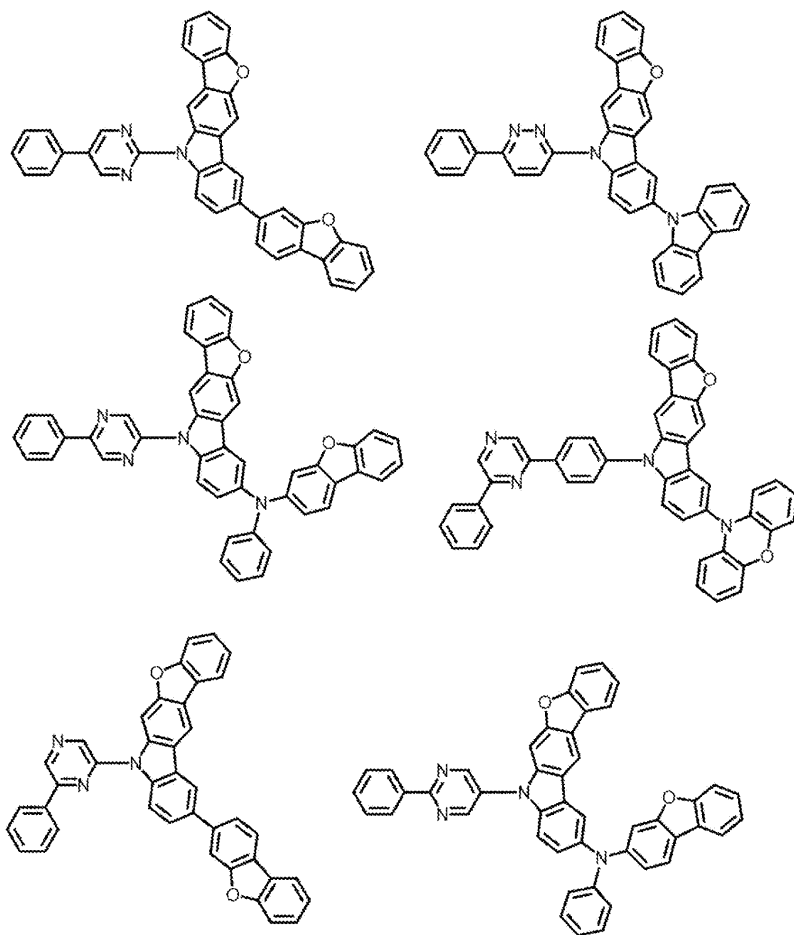
[화학식 224]



[2082]

[2083]

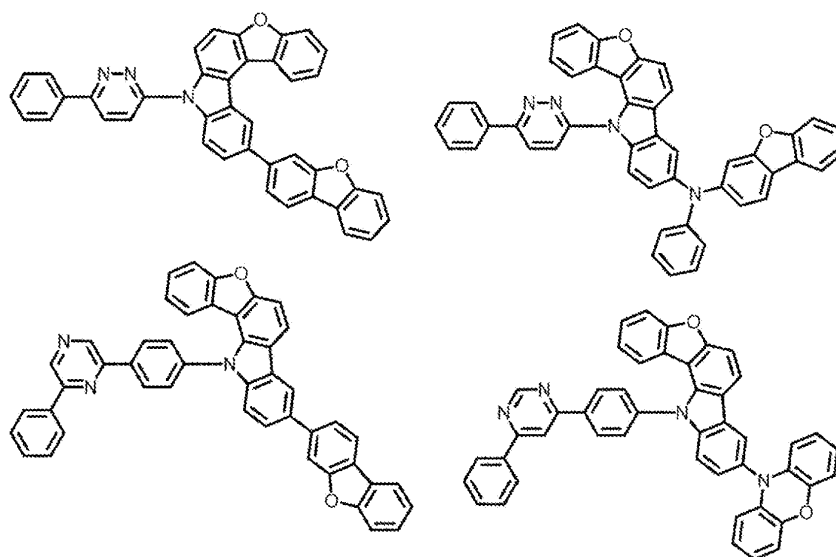
[화학식 225]



[2084]

[2085]

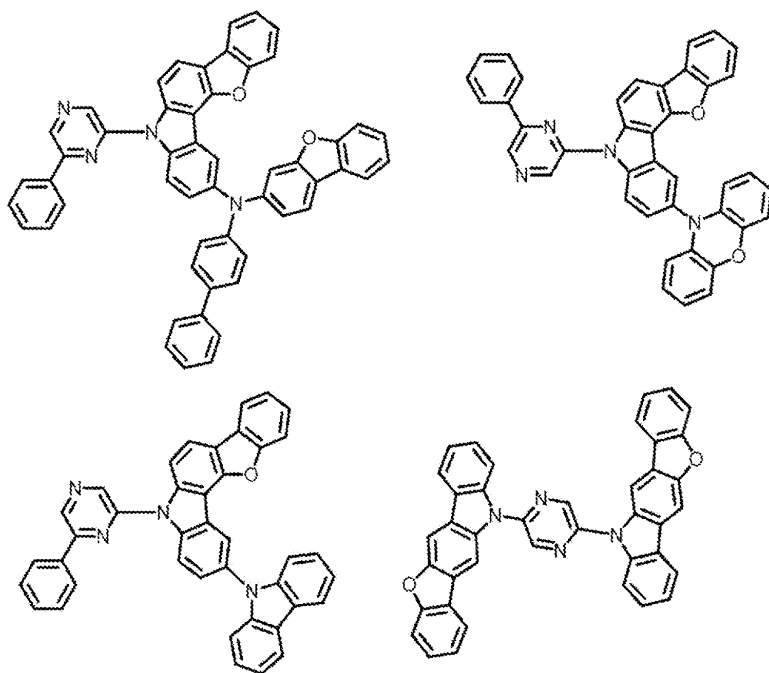
[화학식 226]



[2086]

[2087]

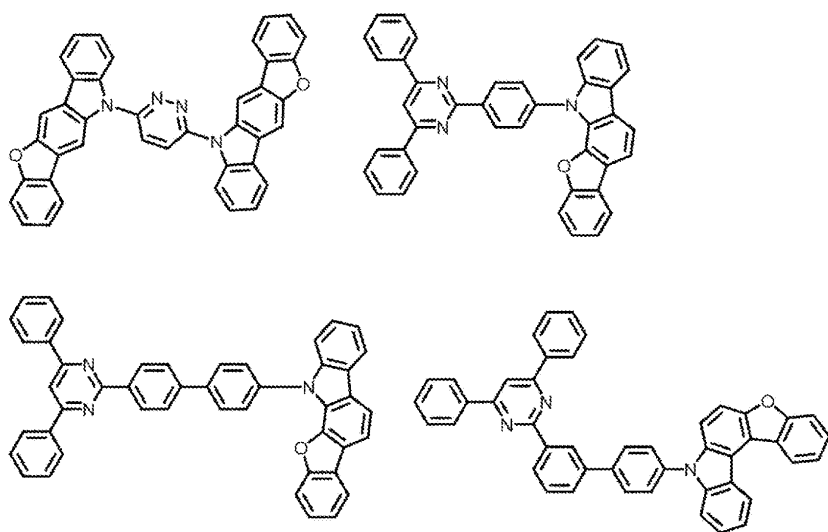
[화학식 227]



[2088]

[2089]

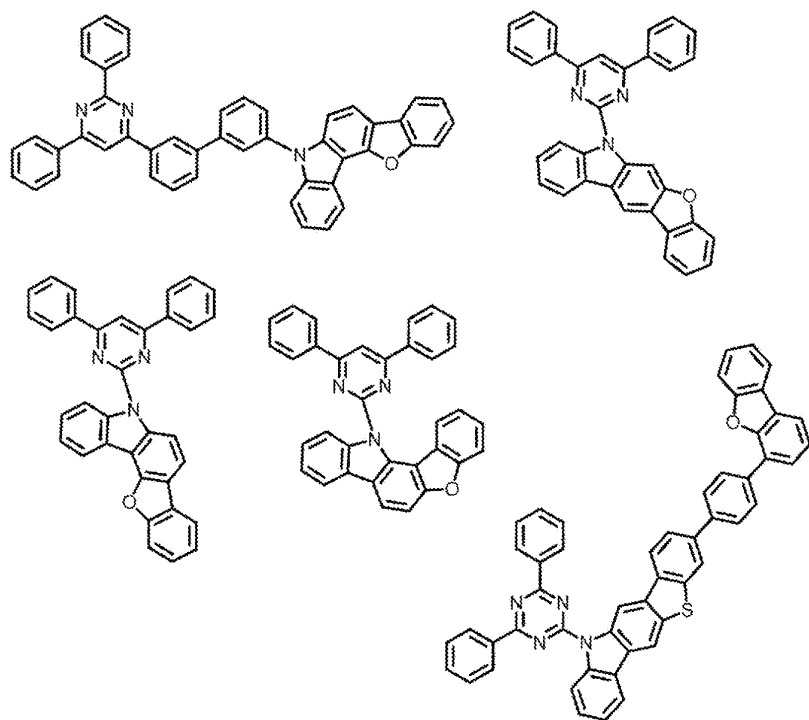
[화학식 228]



[2090]

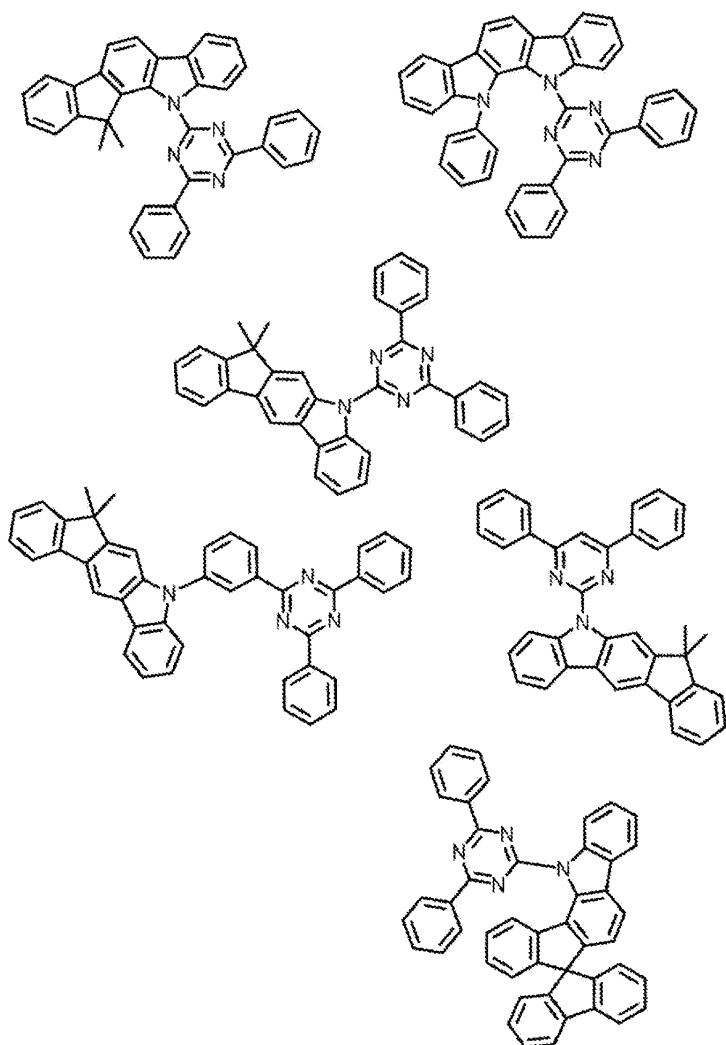
[2091]

[화학식 229]



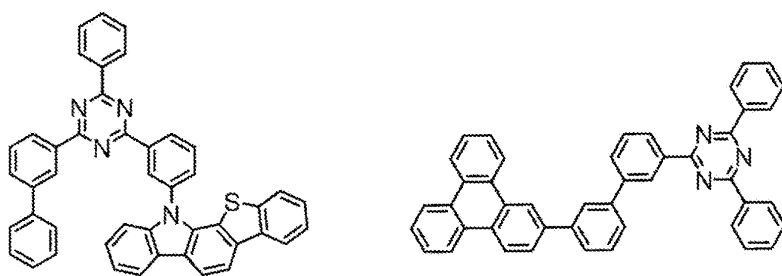
[2092]

[2093] [화학식 230]



[2094]

[2095] [화학식 231]



[2096]

[2097] <발광층에서의 화합물 M3, 화합물 M2 및 화합물 M1의 관계>

[2098] 본 실시형태의 유기 EL 소자에 있어서, 화합물 M2의 최저 여기 일중항 에너지 $S_1(M2)$ 과, 화합물 M1의 최저 여기 일중항 에너지 $S_1(M1)$ 이, 하기 수식(수학식 1)의 관계를 충족시키는 것이 바람직하다.

[2099] $S_1(M2) > S_1(M1) \dots$ (수학식 1)

[2100] 본 실시형태의 유기 EL 소자에 있어서, 화합물 M2의 최저 여기 일중항 에너지 $S_1(M2)$ 과, 화합물 M3의 최저 여기 일중항 에너지 $S_1(M3)$ 은, 하기 수식(수학식 2)의 관계를 충족시키는 것이 바람직하다.

- [2101] $S_1(M3) > S_1(M2) \cdots$ (수학식 2)
- [2102] 또한, 화합물 M3의 최저 여기 일중항 에너지 $S_1(M3)$ 은, 화합물 M1의 최저 여기 일중항 에너지 $S_1(M1)$ 보다 큰 것이 바람직하다.
- [2103] $S_1(M3) > S_1(M1) \cdots$ (수학식 2A)
- [2104] 화합물 M3의 최저 여기 일중항 에너지 $S_1(M3)$ 과, 화합물 M2의 최저 여기 일중항 에너지 $S_1(M2)$ 과, 화합물 M1의 최저 여기 일중항 에너지 $S_1(M1)$ 은, 하기 수식(수학식 2B)의 관계를 충족시키는 것이 바람직하다.
- [2105] $S_1(M3) > S_1(M2) > S_1(M1) \cdots$ (수학식 2B)
- [2106] 본 실시형태의 유기 EL 소자에 있어서, 화합물 M3의 77[K]에서의 에너지 갭 $T_{77K}(M3)$ 은, 화합물 M2의 77[K]에서의 에너지 갭 $T_{77K}(M2)$ 보다 큰 것이 바람직하다.
- [2107] 본 실시형태의 유기 EL 소자에 있어서, 화합물 M2의 77[K]에서의 에너지 갭 $T_{77K}(M2)$ 은, 화합물 M1의 77[K]에서의 에너지 갭 $T_{77K}(M1)$ 보다 큰 것이 바람직하다.
- [2108] 본 실시형태의 유기 EL 소자에 있어서, 화합물 M3, 화합물 M2 및 화합물 M1은, 하기 수식(수학식 5A)의 관계를 충족시키는 것이 바람직하다.
- [2109] $T_{77K}(M3) > T_{77K}(M2) > T_{77K}(M1) \cdots$ (수학식 5A)
- [2110] 본 실시형태의 유기 EL 소자를 발광시킬 때, 발광층에 있어서, 주로 형광 발광성의 화합물 M1이 발광하고 있는 것이 바람직하다.
- [2111] 본 실시형태의 유기 EL 소자는, 적색 발광 또는 녹색 발광하는 것이 바람직하다.
- [2112] · 발광층에서의 화합물의 함유율
- [2113] 발광층에 포함되어 있는 화합물 M3, 화합물 M2 및 화합물 M1의 함유율은, 예컨대 이하의 범위인 것이 바람직하다.
- [2114] 화합물 M3의 함유율은, 10 질량% 이상 80 질량% 이하인 것이 바람직하다.
- [2115] 화합물 M2의 함유율은, 10 질량% 이상 80 질량% 이하인 것이 바람직하고, 10 질량% 이상 60 질량% 이하인 것이 보다 바람직하고, 20 질량% 이상 60 질량% 이하인 것이 더욱 바람직하다.
- [2116] 화합물 M1의 함유율은, 0.01 질량% 이상 10 질량% 이하인 것이 바람직하고, 0.01 질량% 이상 5 질량% 이하인 것이 보다 바람직하고, 0.01 질량% 이상 1 질량% 이하인 것이 더욱 바람직하다.
- [2117] 발광층에서의 화합물 M3, 화합물 M2 및 화합물 M1의 합계 함유율의 상한은, 100 질량%이다. 한편, 본 실시형태는, 발광층에, 화합물 M3, 화합물 M2 및 화합물 M1 이외의 재료가 포함되는 것을 제외하지 않는다.
- [2118] 발광층은, 화합물 M3을 1종만 포함해도 좋고, 2종 이상 포함해도 좋다. 발광층은, 화합물 M2를 1종만 포함해도 좋고, 2종 이상 포함해도 좋다. 발광층은, 화합물 M1을 1종만 포함해도 좋고, 2종 이상 포함해도 좋다.
- [2119] 도 5는, 발광층에서의 화합물 M3, 화합물 M2 및 화합물 M1의 에너지 준위의 관계의 일례를 도시하는 도면이다. 도 5에 있어서, S_0 은 기저 상태를 나타낸다. $S_1(M1)$ 은 화합물 M1의 최저 여기 일중항 상태를 나타내고, $T_1(M1)$ 은 화합물 M1의 최저 여기 삼중항 상태를 나타낸다. $S_1(M2)$ 은 화합물 M2의 최저 여기 일중항 상태를 나타내고, $T_1(M2)$ 은 화합물 M2의 최저 여기 삼중항 상태를 나타낸다. $S_1(M3)$ 은 화합물 M3의 최저 여기 일중항 상태를 나타내고, $T_1(M3)$ 은 화합물 M3의 최저 여기 삼중항 상태를 나타낸다. 도 5 중의 $S_1(M2)$ 로부터 $S_1(M1)$ 로 향하는 파선의 화살표는, 화합물 M2의 최저 여기 일중항 상태에서부터 화합물 M1의 최저 여기 일중항 상태로의 피르스터형 에너지 이동을 나타낸다.
- [2120] 도 5에 도시하는 바와 같이, 화합물 M2로서 $\Delta ST(M2)$ 가 작은 화합물을 이용하면, 최저 여기 삼중항 상태 $T_1(M2)$ 은, 열에너지에 의해, 최저 여기 일중항 상태 $S_1(M2)$ 로 역향간 교차가 가능하다. 그리고, 화합물 M2의 최저 여기 일중항 상태 $S_1(M2)$ 로부터 화합물 M1로의 피르스터형 에너지 이동이 생기고, 최저 여기 일중항 상태 $S_1(M1)$ 가 생성된다. 그 결과, 화합물 M1의 최저 여기 일중항 상태 $S_1(M1)$ 로부터의 형광 발광을 관측할 수 있다.

이 TADF 메커니즘에 의한 지연 형광을 이용하는 것에 의해서도, 이론적으로 내부 양자 효율을 100%까지 높일 수 있는 것으로 고려되고 있다.

[2121] 제4 실시형태에 따른 유기 EL 소자는, 발광층에, 화합물 M2로서의 제1 실시형태의 화합물과, 화합물 M2보다 작은 최저 여기 일중항 에너지를 갖는 화합물 M1과, 화합물 M2보다 큰 최저 여기 일중항 에너지를 갖는 화합물 M3을 함유하고 있다. 제4 실시형태에 따른 유기 EL 소자는, PLQY가 높은 제1 실시형태에 따른 화합물(화합물 M2)을 포함하기 때문에, 제4 실시형태에 의하면, 고효율화 및 수명 장기화의 적어도 어느 하나를 실현할 수 있는 고성능의 유기 EL 소자를 제공할 수 있다.

[2122] [제5 실시형태]

[2123] 제5 실시형태에 따른 유기 EL 소자의 구성에 대해서 설명한다. 제5 실시형태의 설명에 있어서 제3 실시형태 또는 제4 실시형태와 동일한 구성 요소는, 동일 부호나 명칭을 붙이거나 하여 설명을 생략 혹은 간략화한다. 또한, 제5 실시형태에서는, 특별히 언급되지 않는 재료나 화합물에 대해서는, 제3 실시형태 또는 제4 실시형태에서 설명한 재료나 화합물과 동일한 재료나 화합물을 이용할 수 있다.

[2124] 제5 실시형태에 따른 유기 EL 소자는, 발광층이 화합물 M2 및 화합물 M3을 포함하고, 화합물 M1을 포함하지 않는다는 점에서, 제3 실시형태 또는 제4 실시형태에 따른 유기 EL 소자와 상이하다. 그 밖의 점에 대해서는 제3 실시형태 또는 제4 실시형태와 동일하다.

[2125] 즉, 제5 실시형태에 있어서, 발광층은 화합물 M2와 화합물 M3을 포함한다.

[2126] 이 양태의 경우, 화합물 M3은 호스트 재료인 것이 바람직하고, 화합물 M2는 도펀트 재료인 것이 바람직하다.

[2127] 본 실시형태에 있어서, 발광층이 제1 실시형태에 따른 화합물을 포함하는 경우, 상기 발광층은, 인광 발광성의 금속 착체를 포함하지 않는 것이 바람직하고, 인광 발광성의 금속 착체 이외의 금속 착체도 포함하지 않는 것이 바람직하다.

[2128] <화합물 M2>

[2129] 화합물 M2는, 제1 실시형태에 따른 화합물이다.

[2130] 화합물 M2는, 지연 형광성의 화합물인 것이 바람직하다.

[2131] <화합물 M3>

[2132] 화합물 M3은, 제4 실시형태에 있어서 설명한 화합물 M3과 동일하다.

[2133] <발광층에서의 화합물 M2 및 화합물 M3의 관계>

[2134] 본 실시형태의 유기 EL 소자에 있어서, 화합물 M2의 최저 여기 일중항 에너지 $S_1(M2)$ 과, 화합물 M3의 최저 여기 일중항 에너지 $S_1(M3)$ 은, 하기 수식(수학식 2)의 관계를 충족시키는 것이 바람직하다.

[2135] $S_1(M3) > S_1(M2) \cdots$ (수학식 2)

[2136] 화합물 M3의 77[K]에서의 에너지 갭 $T_{77K}(M3)$ 은, 화합물 M2의 77[K]에서의 에너지 갭 $T_{77K}(M2)$ 보다 큰 것이 바람직하다.

[2137] 도 6은, 본 발명의 실시형태에 따른 발광의 원리를 설명하기 위한 도면이다.

[2138] 도 6에 있어서, S0은 기저 상태를 나타낸다. $S_1(M2)$ 은 화합물 M2의 최저 여기 일중항 상태를 나타내고, $T_1(M2)$ 은 화합물 M2의 최저 여기 삼중항 상태를 나타낸다. $S_1(M3)$ 은 화합물 M3의 최저 여기 일중항 상태를 나타내고, $T_1(M3)$ 은 화합물 M3의 최저 여기 삼중항 상태를 나타낸다.

[2139] 도 6에 도시하는 바와 같이, 화합물 M2로서 $\Delta S(T(M2))$ 가 작은 화합물을 이용하면, 화합물 M2의 최저 여기 삼중항 상태 $T_1(M2)$ 은, 열에너지에 의해, 최저 여기 일중항 상태 $S_1(M2)$ 로 역항간 교차가 가능하다.

[2140] 이 화합물 M2에서 생기는 역항간 교차를 이용함으로써, 예컨대 하기 (i) 또는 하기 (ii)에 나타난 바와 같은 발광을 관측할 수 있다.

[2141] (i) 발광층이, 화합물 M2의 최저 여기 일중항 상태 $S_1(M2)$ 보다 작은 최저 여기 일중항 상태 S1의 형광 도펀트를 포함하지 않는 경우는, 화합물 M2의 최저 여기 일중항 상태 $S_1(M2)$ 로부터의 발광을 관측할 수 있다.

- [2142] (ii) 발광층이, 화합물 M2의 최저 여기 일중항 상태 S1(M2)보다 작은 최저 여기 일중항 상태 S1의 형광 도펀트 (제3 실시형태 또는 제4 실시형태에서는 형광 발광성의 화합물 M1)를 포함하는 경우는, 형광 도펀트로부터의 발광을 관측할 수 있다.
- [2143] 한편, 본 실시형태의 유기 EL 소자에 있어서는, 상기 (i)에 나타내는 발광을 관측할 수 있다. 전술한 제3 실시형태 또는 제4 실시형태의 유기 EL 소자에 있어서는, 상기 (ii)에 나타내는 발광을 관측할 수 있다.
- [2144] · 발광층에서의 화합물의 함유율
- [2145] 발광층에 포함되어 있는 화합물 M2 및 화합물 M3의 함유율은, 예컨대 이하의 범위인 것이 바람직하다.
- [2146] 화합물 M2의 함유율은, 10 질량% 이상 90 질량% 이하인 것이 바람직하고, 10 질량% 이상 80 질량% 이하인 것이 보다 바람직하고, 10 질량% 이상 60 질량% 이하인 것이 더욱 바람직하고, 20 질량% 이상 60 질량% 이하인 것이 더욱 바람직하다.
- [2147] 화합물 M3의 함유율은, 10 질량% 이상 90 질량% 이하인 것이 바람직하다.
- [2148] 발광층에서의 화합물 M2 및 화합물 M3의 합계 함유율의 상한은, 100 질량%이다.
- [2149] 발광층은, 화합물 M2를 1종만 포함해도 좋고, 2종 이상 포함해도 좋다. 발광층은, 화합물 M3을 1종만 포함해도 좋고, 2종 이상 포함해도 좋다.
- [2150] 제5 실시형태에 따른 유기 EL 소자는, 발광층에, 화합물 M2로서의 제1 실시형태의 화합물과, 화합물 M2보다 큰 최저 여기 일중항 에너지를 갖는 화합물 M3을 함유하고 있다. 제5 실시형태에 따른 유기 EL 소자는, PLQY가 높은 제1 실시형태에 따른 화합물(화합물 M2)을 포함하기 때문에, 제5 실시형태에 의하면, 고효율화 및 장수명화의 적어도 어느 하나를 실현할 수 있는 고성능의 유기 EL 소자를 제공할 수 있다.
- [2151] [제6 실시형태]
- [2152] [전자 기기]
- [2153] 본 실시형태에 관한 전자 기기는, 전술한 실시형태의 어느 하나의 유기 EL 소자를 탑재하고 있다. 전자 기기로는, 예컨대 표시 장치 및 발광 장치 등을 들 수 있다. 표시 장치로는, 예컨대 표시 부품(예컨대, 유기 EL 패널 모듈 등), 텔레비전, 휴대전화, 태블릿 및 퍼스널 컴퓨터 등을 들 수 있다. 발광 장치로는, 예컨대 조명 및 차량용 등기구 등을 들 수 있다.
- [2154] [실시형태의 변형]
- [2155] 한편, 본 발명은 전술한 실시형태에 한정되지 않고, 본 발명의 목적을 달성할 수 있는 범위에서의 변경, 개량 등은 본 발명에 포함된다.
- [2156] 예컨대, 발광층은, 1층에 한정되지 않고, 복수의 발광층이 적층되어 있어도 좋다. 유기 EL 소자가 복수의 발광층을 갖는 경우, 적어도 하나의 발광층이 상기 실시형태에서 설명한 조건을 충족시키면 된다. 예컨대, 그 밖의 발광층이 형광 발광형의 발광층이어도 좋고, 삼중항 여기 상태로부터 직접 기저 상태로의 전자 천이에 의한 발광을 이용한 인광 발광형의 발광층이어도 좋다.
- [2157] 또한, 유기 EL 소자가 복수의 발광층을 갖는 경우, 이들 발광층이 서로 인접하여 형성되어 있어도 좋고, 중간층을 통해 복수의 발광 유닛이 적층된 소위 탠덤형의 유기 EL 소자이어도 좋다.
- [2158] 또한, 예컨대 발광층의 양극측 및 음극측의 적어도 한쪽에 장벽층을 인접시켜 형성해도 좋다. 장벽층은 발광층에 접하여 배치되며, 정공, 전자 및 여기자의 적어도 어느 하나를 저지하는 것이 바람직하다.
- [2159] 예컨대, 발광층의 음극측에서 접하여 장벽층이 배치된 경우, 해당 장벽층은 전자를 수송하고 또한 정공이 상기 장벽층보다 음극측의 층(예컨대, 전자 수송층)에 도달하는 것을 저지한다. 유기 EL 소자가 전자 수송층을 포함하는 경우는, 발광층과 전자 수송층의 사이에 상기 장벽층을 포함하는 것이 바람직하다.
- [2160] 또한, 발광층의 양극측에서 접하여 장벽층이 배치된 경우, 해당 장벽층은 정공을 수송하고 또한 전자가 상기 장벽층보다 양극측의 층(예컨대, 정공 수송층)에 도달하는 것을 저지한다. 유기 EL 소자가 정공 수송층을 포함하는 경우는, 발광층과 정공 수송층의 사이에 상기 장벽층을 포함하는 것이 바람직하다.
- [2161] 또한, 여기 에너지가 발광층으로부터 그 주변층으로 누출되지 않도록 장벽층을 발광층에 인접시켜 형성해도 좋다. 발광층에서 생성된 여기자가 그 장벽층보다 전극측의 층(예컨대, 전자 수송층 및 정공 수송층 등)으로 이동

하는 것을 저지한다.

[2162] 발광층과 장벽층은 접합되어 있는 것이 바람직하다.

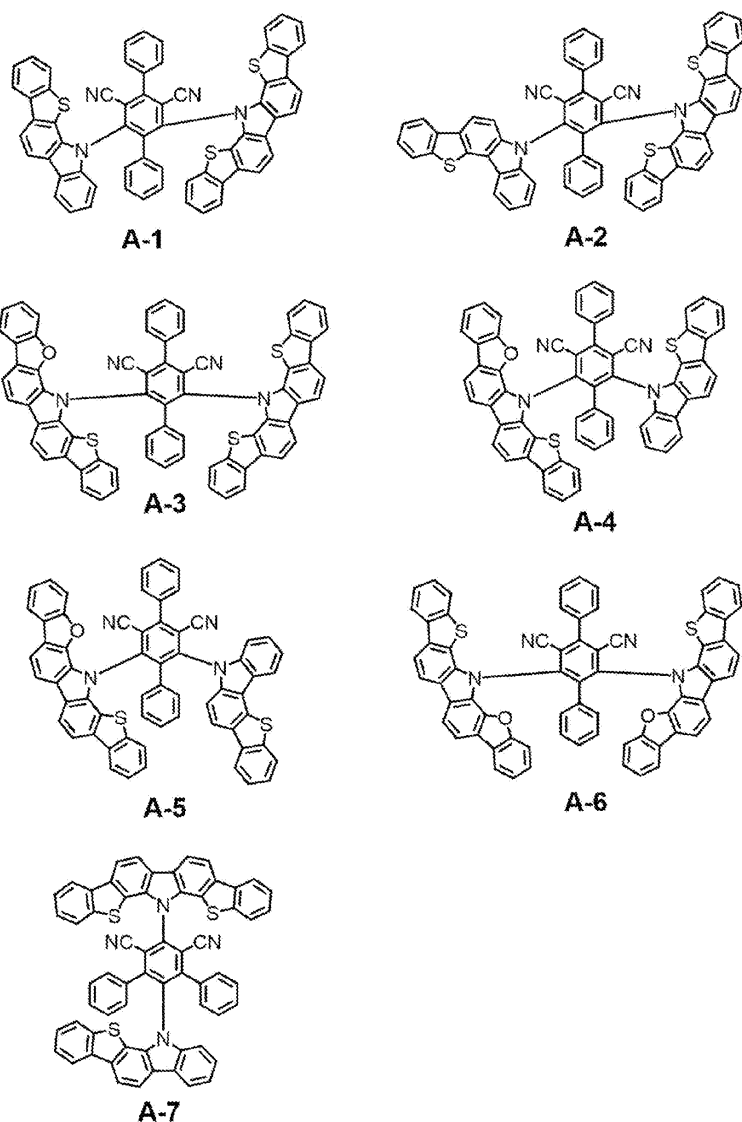
[2163] 그 밖에, 본 발명의 실시예에서의 구체적인 구조 및 형상 등은 본 발명의 목적을 달성할 수 있는 범위에서 다른 구조 등으로 해도 좋다.

[2164] 실시예

[2165] <화합물>

[2166] 실시예 1-1~1-5, 실시예 2-1~2-11, 실시예 3-1~3-24, 및 실시예 4-1~4-25에 따른 유기 EL 소자의 제조에 이용한 일반식(1)로 표시되는 화합물의 구조를 이하에 나타낸다.

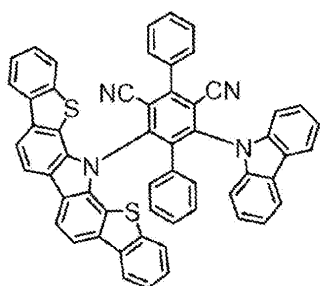
[2167] [화학식 232]



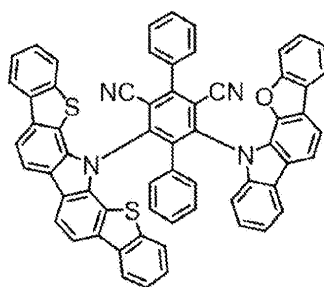
[2168]

[2169]

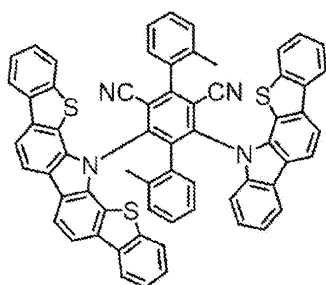
[화학식 233]



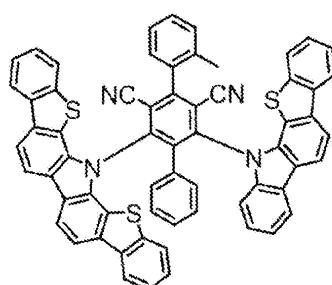
A-9



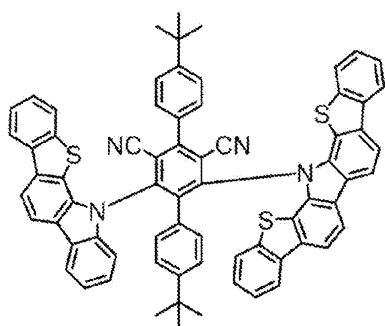
A-10



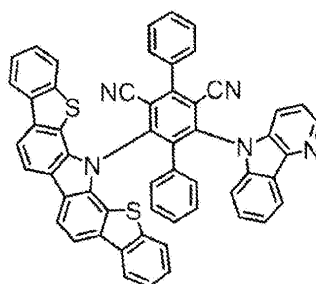
A-11



A-12



A-13

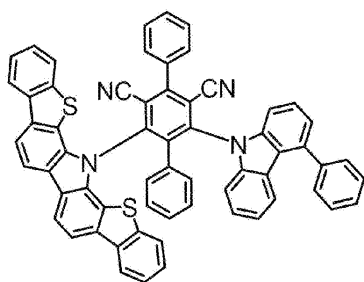


A-14

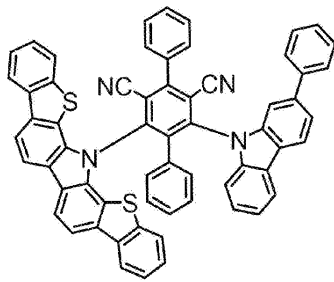
[2170]

[2171]

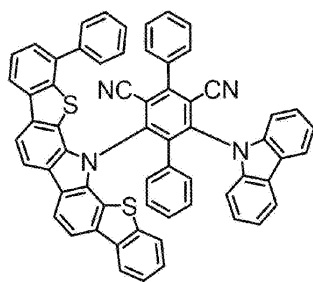
[화학식 234]



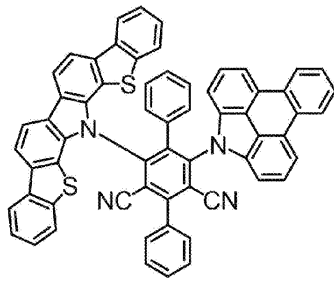
A-15



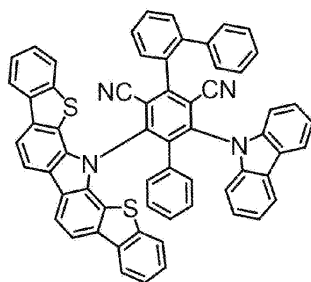
A-16



A-17



A-19

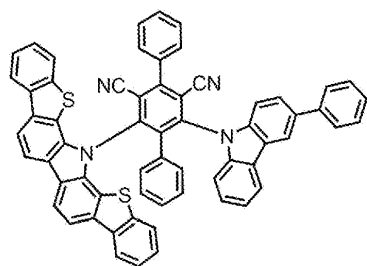


A-20

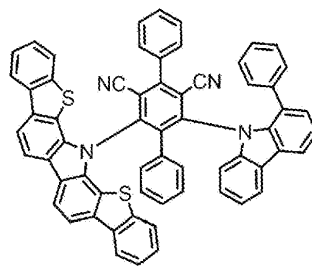
[2172]

[2173]

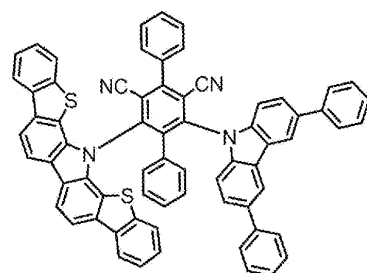
[화학식 235]



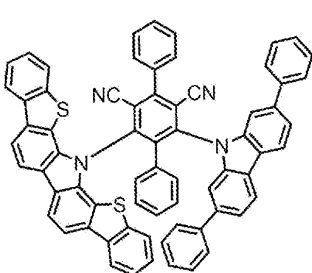
A-21



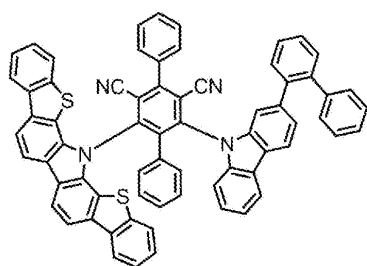
A-22



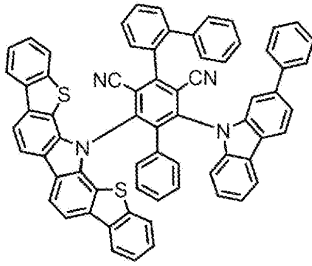
A-23



A-24



A-25

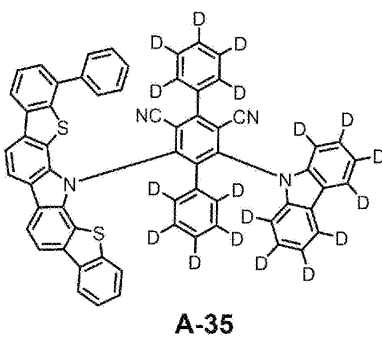
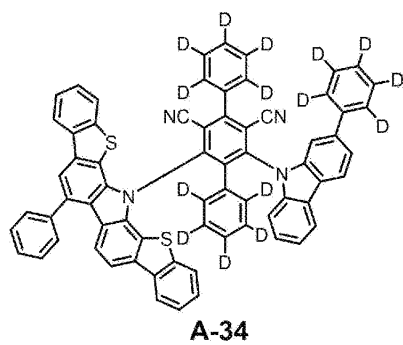
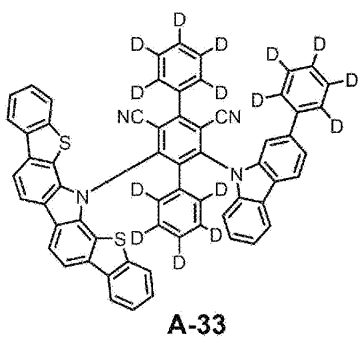
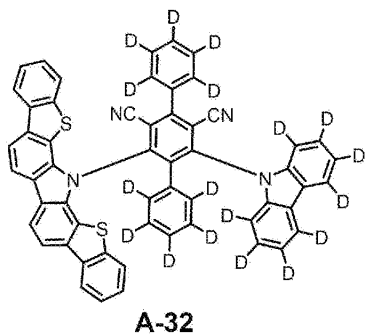
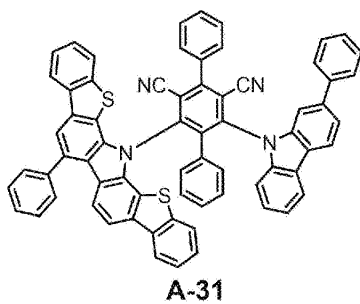
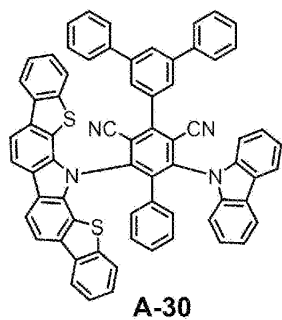


A-26

[2174]

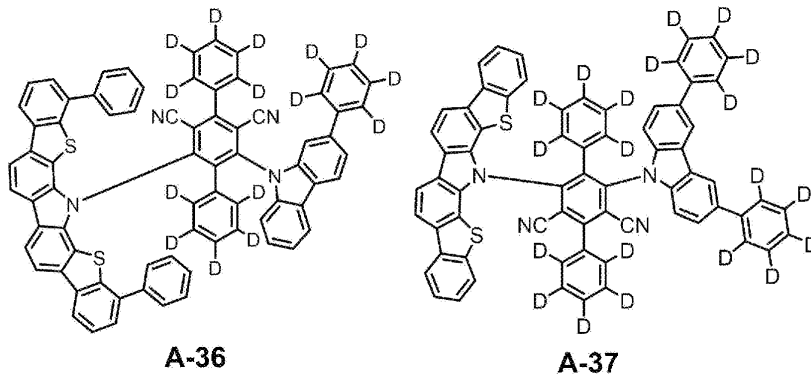
[2175]

[화학식 236]



[2176]

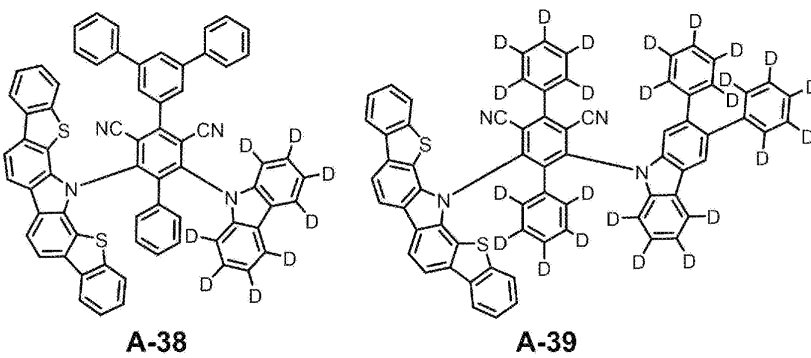
[2177] [화학식 237]



[2178]

[2179]

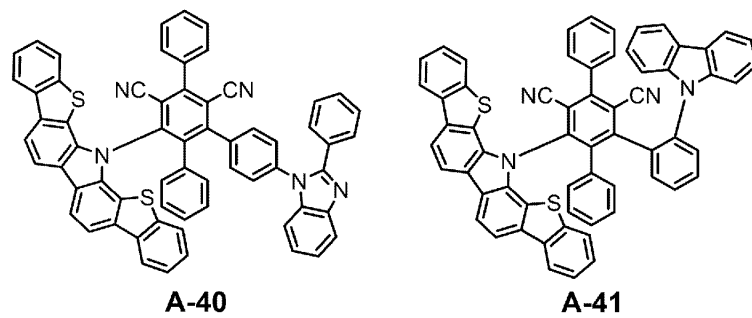
[화학식 238]



[2180]

[2181]

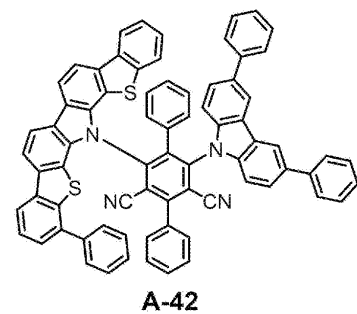
[화학식 239]



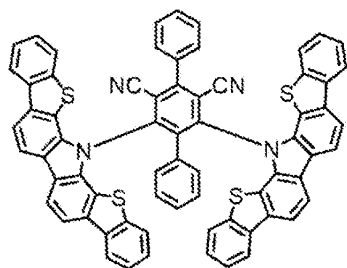
[2182]

[2183]

비교예 1-1, 비교예 2-1, 비교예 3-1 및 비교예 4-1에 따른 유기 EL 소자의 제조에 이용한 화합물의 구조를 이하에 나타낸다.



[2184] [화학식 240]

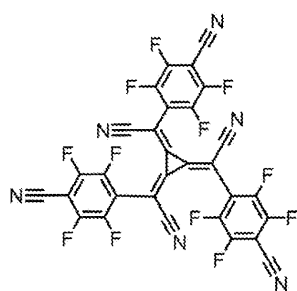


Ref-1

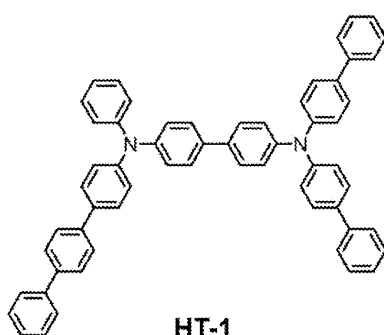
[2185]

[2186] 실시예 1-1~1-5, 실시예 2-1~2-11, 실시예 3-1~3-24, 실시예 4-1~4-25, 비교예 1-1, 비교예 2-1, 비교예 3-1 및 비교예 4-1에 따른 유기 EL 소자의 제조에 이용한 그 밖의 화합물의 구조를 이하에 나타낸다.

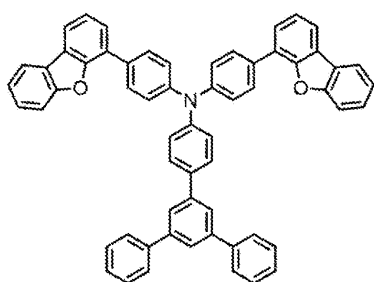
[2187] [화학식 241]



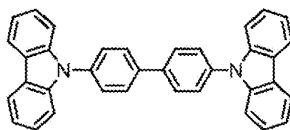
HA



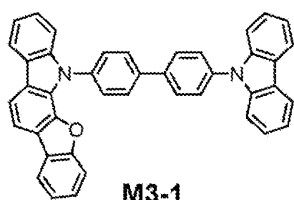
HT-1



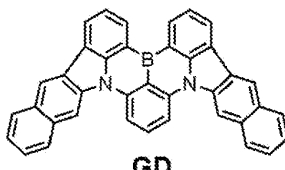
HT-2



CBP



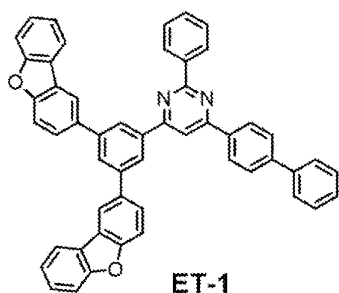
M3-1



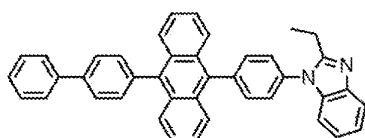
GD

[2188]

[2189] [화학식 242]



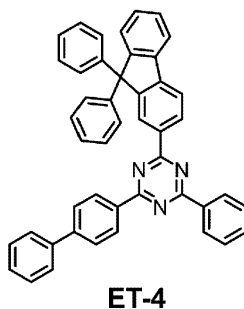
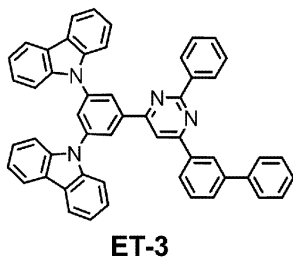
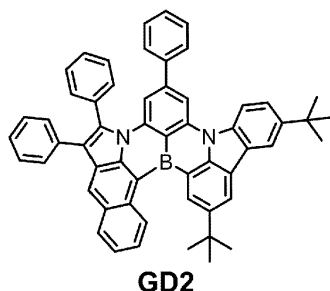
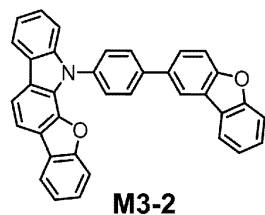
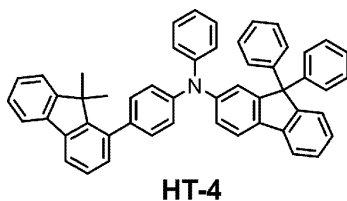
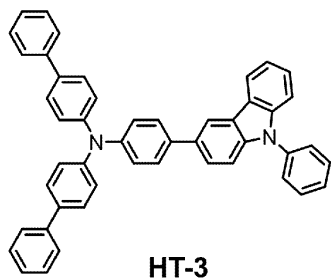
ET-1



ET-2

[2190]

[2191] [화학식 243]



[2192]

[2193] <유기 EL 소자의 제작(1)>

[2194] 유기 EL 소자를 이하와 같이 제작하여 평가했다.

[2195] (실시예 1-1)

[2196] 25 mm×75 mm×1.1 mm 두께의 ITO 투명 전극(양극)이 구비된 유리 기판(지오마텍 가부시키가이샤 제조)을, 이소프로필알코올 중에서 5분간 초음파 세정을 행한 후, UV 오존 세정을 1분간 행했다. ITO의 막두께는 130 nm으로 했다.

[2197] 세정 후의 투명 전극 라인이 구비된 상기 유리 기판을 진공 증착 장치의 기판 홀더에 장착하고, 우선 투명 전극 라인이 형성되어 있는 측의 면 위에 투명 전극을 덮도록 하여 화합물 HT-1과 화합물 HA를 공증착하여, 막두께 10 nm의 정공 주입층을 형성했다. 정공 주입층에서의 화합물 HT-1의 농도를 97 질량%로 하고, 화합물 HA의 농도를 3 질량%로 했다.

[2198] 다음으로, 이 정공 주입층 상에 화합물 HT-1을 증착하여, 막두께 110 nm의 제1 정공 수송층을 형성했다.

[2199] 다음으로, 이 제1 정공 수송층 상에 화합물 HT-2를 증착하여, 막두께 5 nm의 제2 정공 수송층을 형성했다.

[2200] 다음으로, 이 제2 정공 수송층 상에 화합물 CBP을 증착하여, 막두께 5 nm의 전자 장벽층을 형성했다.

[2201] 다음으로, 이 전자 장벽층 상에, 화합물 M3으로서의 화합물 M3-1과, 화합물 M2로서의 화합물 A-1을 공증착하여, 막두께 25 nm의 발광층을 형성했다. 발광층에서의 화합물 M3-1의 농도를 75 질량%로 하고, 화합물 A-1의 농도를 25 질량%로 했다.

[2202] 다음으로, 이 발광층 상에 화합물 ET-1을 증착하여, 막두께 5 nm의 정공 장벽층을 형성했다.

[2203] 다음으로, 이 정공 장벽층 상에 화합물 ET-2를 증착하여, 막두께 50 nm의 전자 수송층을 형성했다.

[2204] 다음으로, 이 전자 수송층 상에 LiF를 증착하여, 막두께 1 nm의 전자 주입층을 형성했다.

- [2205] 그리고, 이 전자 주입층 상에 금속알루미늄(Al)을 증착하여, 막두께 80 nm의 금속 Al 음극을 형성했다.
- [2206] 실시예 1-1에 따른 유기 EL 소자의 소자 구성을 대략적으로 나타내면, 다음과 같다.
- [2207] ITO(130)/HT-1:HA(10,97%:3%)/HT-1(110)/HT-2(5)/CBP(5)/M3-1:A-1(25,75%:25%)/ET-1(5)/ET-2(50)/LiF(1)/Al(80)
- [2208] 한편, 괄호 내의 숫자는 막두께(단위: nm)를 나타낸다.
- [2209] 마찬가지로 괄호 내에서, 퍼센트 표시된 숫자(97%:3%)는, 정공 주입층에서의 화합물 HT-1 및 화합물 HA의 비율(질량%)을 나타내고, 퍼센트 표시된 숫자(75%:25%)는, 발광층에서의 화합물 M3-1 및 화합물 A-1의 비율(질량%)을 나타낸다. 이하, 동일한 표기로 한다.
- [2210] (실시예 1-2~실시예 1-5)
- [2211] 실시예 1-2~실시예 1-5의 유기 EL 소자는, 각각 실시예 1-1의 발광층에 이용한 화합물 M2로서의 화합물 A-1을 표 1에 기재된 화합물 M2로 변경한 것 외에, 실시예 1-1과 동일하게 하여 제작했다.
- [2212] (비교예 1-1)
- [2213] 비교예 1-1의 유기 EL 소자는, 실시예 1-1의 발광층에 이용한 화합물 M2로서의 화합물 A-1을 표 1에 기재된 화합물 M2로 변경한 것 외에, 실시예 1-1과 동일하게 하여 제작했다.
- [2214] (실시예 2-1)
- [2215] 실시예 2-1의 유기 EL 소자는, 실시예 1-1의 발광층 대신에, 화합물 M3으로서의 화합물 M3-1과, 화합물 M2로서의 화합물 A-1과, 화합물 M1으로서의 화합물 GD를 공증착하여, 막두께 25 nm의 발광층을 형성하고, 상기 발광층에서의 화합물 M3-1의 농도를 74 질량%로 하고, 화합물 A-1의 농도를 25 질량%로 하고, 화합물 GD의 농도를 1 질량%로 한 것 외에, 실시예 1-1과 동일하게 하여 제작했다.
- [2216] 실시예 2-1에 따른 유기 EL 소자의 소자 구성을 대략적으로 나타내면, 다음과 같다.
- [2217] ITO(130)/HT-1:HA(10,97%:3%)/HT-1(110)/HT-2(5)/CBP(5)/M3-1:A-1:GD(25,74%:25%:1%)/ET-1(5)/ET-2(50)/LiF(1)/Al(80)
- [2218] (실시예 2-2~실시예 2-11)
- [2219] 실시예 2-2~실시예 2-11의 유기 EL 소자는, 각각 실시예 2-1의 발광층에 이용한 화합물 M2로서의 화합물 A-1을 표 2에 기재된 화합물 M2로 변경한 것 외에, 실시예 2-1과 동일하게 하여 제작했다.
- [2220] (비교예 2-1)
- [2221] 비교예 2-1의 유기 EL 소자는, 실시예 2-1의 발광층에 이용한 화합물 M2로서의 화합물 A-1을 표 2에 기재된 화합물 M2로 변경한 것 외에, 실시예 2-1과 동일하게 하여 제작했다.
- [2222] <유기 EL 소자의 평가(1)>
- [2223] 제작한 유기 EL 소자에 대해 이하의 평가를 행했다. 평가 결과를 표 1 및 표 2에 나타낸다. 한편, 비교예 1-1 및 2-1에서 사용한 비교 화합물 Ref-1은 화합물 M2에 해당하지 않지만, 편의적으로 화합물 M2와 동일한 열에 표기한다. 또한, 각 실시예의 발광층에서 사용한 화합물의 평가 결과도 표 1 및 표 2에 나타낸다.
- [2224] (수명 LT95)
- [2225] 제작한 유기 EL 소자에, 전류 밀도가 50 mA/cm²가 되도록 전압을 인가하고, 초기 휘도에 대하여 휘도가 95%가 되기까지의 시간(LT95(단위: 시간))을 수명으로서 측정했다. 휘도는, 분광 방사 휘도계 CS-2000(코니카미놀타 가부시키키가이샤 제조)을 이용하여 측정했다. 표 1에 「LT95(상대치)」(단위:%)를 나타낸다.
- [2226] 표 1에 나타내는 「LT95(상대치)」는, 각 예(실시예 1-1~실시예 1-5 및 비교예 1-1)의 LT95의 측정치, 및 하기 수식(수학식 1X)에 기초하여 산출했다.
- [2227] $LT95(\text{상대치}) = (\text{각 예의 } LT95 / \text{비교예 1-1의 } LT95) \times 100 \cdots (\text{수학식 1X})$
- [2228] (외부 양자 효율 EQE)
- [2229] 제작한 유기 EL 소자에, 전류 밀도가 10.00 mA/cm²가 되도록 전압을 인가했을 때의 분광 방사 휘도 스펙트럼을

분광 방사 휘도계 CS-2000(코니카미놀타 가부시키키가이샤 제조)으로 계측했다. 얻어진 분광 방사 휘도 스펙트럼으로부터, 램버시안 방사를 행했다고 가정하여 외부 양자 효율 EQE(단위:%)를 산출했다. 표 2에 「EQE(상대치)」(단위:%)를 나타낸다.

[2230] 표 2에 나타내는 「EQE(상대치)」는, 각 예(실시에 2-1~실시에 2-11 및 비교예 2-1)의 EQE의 측정치, 및 하기 수식(수학식 2X)에 기초하여 산출했다.

[2231] $EQE(\text{상대치}) = (\text{각 예의 EQE} / \text{비교예 2-1의 EQE}) \times 100 \cdots (\text{수학식 2X})$

[2232] (최대 피크 파장 λ_p 및 발광 반치폭 FWHM)

[2233] 유기 EL 소자의 전류 밀도가 10.00 mA/cm²가 되도록 소자에 전압을 인가했을 때의 분광 방사 휘도 스펙트럼을 분광 방사 휘도계 CS-2000(코니카미놀타 가부시키키가이샤 제조)로 계측했다. 얻어진 분광 방사 휘도 스펙트럼으로부터, 최대 피크 파장 λ_p (단위: nm) 및 발광 반치폭 FWHM(단위: nm)을 구했다. FWHM은 Full Width at Half Maximum의 약칭이다.

[2234] (CIE1931 색도)

[2235] 유기 EL 소자의 전류 밀도가 10.00 mA/cm²가 되도록 소자에 전압을 인가했을 때의 CIE1931 색도 좌표(x, y)를 분광 방사 휘도계 CS-2000(코니카미놀타 가부시키키가이샤 제조)로 계측했다.

[2236] [표 1]

	화합물 M2					화합물 M3			소자 평가				
	명칭	λ [nm]	PLQY	S_1 [eV]	$\Delta S^{\dagger}$ [eV]	명칭	S_1 [eV]	T_{77K} [eV]	CIE _x	CIE _y	LT95 (상대치) [%]	λ_p [nm]	FWHM [nm]
실시예1-1	A-1	498	0.90	2.58	<0.01	M3-1	3.42	2.89	0.367	0.592	504	535	82
실시예1-2	A-2	496	0.96	2.62	<0.01	M3-1	3.42	2.89	0.365	0.590	112	534	84
실시예1-3	A-3	493	0.99	2.52	<0.01	M3-1	3.42	2.89	0.341	0.603	216	528	80
실시예1-4	A-4	491	0.94	2.67	<0.01	M3-1	3.42	2.89	0.343	0.589	259	531	87
실시예1-5	A-7	490	0.91	2.75	<0.01	M3-1	3.42	2.89	0.370	0.571	137	542	93
비교예1-1	Ref-1	504	0.87	2.52	<0.01	M3-1	3.42	2.89	0.395	0.582	100	542	80

[2237]

[2238] [표 2]

	화합물 M2					화합물 M3	화합물 M1			CIE _x	CIE _y	EQE (상대치) [%]	λ _p [nm]	FWHM [nm]
	명칭	λ [nm]	PLQY	S ₁ [eV]	ΔST [eV]	명칭	명칭	S ₁ [eV]	T _{77K} [eV]					
실시예2-1	A-1	496	0.90	2.58	<0.01	M3-1	GD	2.45	2.18	0.295	0.639	107	516	40.0
실시예2-2	A-3	493	0.99	2.52	<0.01	M3-1	GD	2.45	2.18	0.257	0.665	121	515	33.2
실시예2-3	A-4	491	0.94	2.67	<0.01	M3-1	GD	2.45	2.18	0.238	0.672	110	514	31.0
실시예2-4	A-5	484	0.98	2.70	<0.01	M3-1	GD	2.45	2.18	0.225	0.677	103	514	30.0
실시예2-5	A-6	475	0.95	2.69	<0.01	M3-1	GD	2.45	2.18	0.212	0.686	115	515	30.0
실시예2-6	A-9	494	0.90	2.65	<0.01	M3-1	GD	2.45	2.18	0.230	0.676	122	513	29.0
실시예2-7	A-10	489	0.90	2.69	<0.01	M3-1	GD	2.45	2.18	0.244	0.668	138	514	30.0
실시예2-8	A-11	495	0.85	2.65	<0.01	M3-1	GD	2.45	2.18	0.259	0.665	122	515	32.0
실시예2-9	A-12	499	0.87	2.58	<0.01	M3-1	GD	2.45	2.18	0.291	0.645	114	515	38.0
실시예2-10	A-13	496	1.00	2.58	<0.01	M3-1	GD	2.45	2.18	0.227	0.677	123	513	29.0
실시예2-11	A-14	505	0.99	2.64	<0.01	M3-1	GD	2.45	2.18	0.290	0.643	112	514	36.0
비교예2-1	Ref-1	504	0.87	2.52	<0.01	M3-1	GD	2.45	2.18	0.368	0.597	100	522	82.5

[2239]

[2240] <유기 EL 소자의 제작(2)>

[2241] (실시예 3-1)

[2242] 25 mm×75 mm×1.1 mm 두께의 ITO 투명 전극(양극)이 구비된 유리 기판(지오마텍 가부시키키가이샤 제조)을, 이소프로필알코올 중에서 5분간 초음파 세정을 행한 후, UV 오존 세정을 1분간 행했다. ITO의 막두께는 130 nm으로

했다.

- [2243] 세정 후의 투명 전극 라인이 구비된 상기 유리 기판을 진공 증착 장치의 기판 홀더에 장착하고, 우선 투명 전극 라인이 형성되어 있는 측의 면 위에 투명 전극을 덮도록 하여 화합물 HT-3과 화합물 HA를 공증착하여, 막두께 10 nm의 정공 주입층을 형성했다. 정공 주입층에서의 화합물 HT-3의 농도를 97 질량%로 하고, 화합물 HA의 농도를 3 질량%로 했다.
- [2244] 다음으로, 이 정공 주입층 상에 화합물 HT-3을 증착하여, 막두께 90 nm의 제1 정공 수송층을 형성했다.
- [2245] 다음으로, 이 제1 정공 수송층 상에 화합물 HT-4를 증착하여, 막두께 30 nm의 제2 정공 수송층을 형성했다.
- [2246] 다음으로, 이 제2 정공 수송층 상에, 화합물 M3으로서의 화합물 M3-2와, 화합물 M2로서의 화합물 A-1을 공증착하여, 막두께 25 nm의 발광층을 형성했다. 발광층에서의 화합물 M3-2의 농도를 75 질량%로 하고, 화합물 A-1의 농도를 25 질량%로 했다.
- [2247] 다음으로, 이 발광층 상에 화합물 ET-3을 증착하여, 막두께 5 nm의 정공 장벽층을 형성했다.
- [2248] 다음으로, 이 정공 장벽층 상에, 화합물 ET-4와, 화합물 Liq를 공증착하여, 막두께 50 nm의 전자 수송층을 형성했다. 전자 수송층에서의 화합물 ET-4의 농도를 50 질량%로 하고, 화합물 Liq의 농도를 50 질량%로 했다. 한편, Liq는, (8-퀴놀리노라토)리튬((8-Quinololinolato)lithium)의 약칭이다.
- [2249] 다음으로, 이 전자 수송층 상에 이테르븀(Yb)을 증착하여, 막두께 1 nm의 전자 주입층을 형성했다.
- [2250] 그리고, 이 전자 주입층 상에 금속 알루미늄(Al)을 증착하여, 막두께 80 nm의 금속 Al 음극을 형성했다.
- [2251] 실시예 3-1에 따른 유기 EL 소자의 소자 구성을 대략적으로 나타내면, 다음과 같다.
- [2252] ITO(130)/HT-3:HA(10,97%:3%)/HT-3(90)/HT-4(30)/M3-2:A-1(25,75%:25%)/ET-3(5)/ET-4:LiQ(50,50%:50%)/Yb(1)/Al(80)
- [2253] (실시예 3-2~실시예 3-20)
- [2254] 실시예 3-2~실시예 3-20의 유기 EL 소자는, 각각 실시예 3-1의 발광층에 이용한 화합물 M2로서의 화합물 A-1을 표 3에 기재된 화합물 M2로 변경한 것 외에, 실시예 3-1과 동일하게 하여 제작했다.
- [2255] (실시예 3-21~실시예 3-24)
- [2256] 실시예 3-21~실시예 3-24의 유기 EL 소자는, 각각 실시예 3-1의 발광층에 이용한 화합물 M2로서의 화합물 A-1을 표 4에 기재된 화합물 M2로 변경한 것 외에, 실시예 3-1과 동일하게 하여 제작했다.
- [2257] (비교예 3-1)
- [2258] 비교예 3-1의 유기 EL 소자는, 실시예 3-1의 발광층에 이용한 화합물 M2로서의 화합물 A-1을 표 3에 기재된 화합물 M2로 변경한 것 외에, 실시예 3-1과 동일하게 하여 제작했다.
- [2259] (실시예 4-1)
- [2260] 실시예 4-1의 유기 EL 소자는, 실시예 3-1의 발광층 대신에, 화합물 M3으로서의 화합물 M3-2와, 화합물 M2로서의 화합물 A-40과, 화합물 M1으로서의 화합물 GD2를 공증착하여, 막두께 25 nm의 발광층을 형성하고, 해당 발광층에서의 화합물 M3-2의 농도를 74.4 질량%로 하고, 화합물 A-40의 농도를 25 질량%로 하고, 화합물 GD2의 농도를 0.6 질량%로 한 것 외에, 실시예 3-1과 동일하게 하여 제작했다.
- [2261] 실시예 4-1에 따른 유기 EL 소자의 소자 구성을 대략적으로 나타내면, 다음과 같다.
- [2262] ITO(130)/HT-3:HA(10,97%:3%)/HT-3(90)/HT-4(30)/M3-2:A-40:GD2(25,74.4%:25%:0.6%)/ET-3(5)/ET-4:LiQ(50,50%:50%)/Yb(1)/Al(80)
- [2263] (실시예 4-2)
- [2264] 실시예 4-2의 유기 EL 소자는, 실시예 4-1의 발광층에 이용한 화합물 M2로서의 화합물 A-40을 표 5에 기재된 화합물 M2로 변경한 것 외에, 실시예 4-1과 동일하게 하여 제작했다.
- [2265] (실시예 4-3~실시예 4-25)
- [2266] 실시예 4-3~실시예 4-25의 유기 EL 소자는, 각각 실시예 4-1의 발광층에 이용한 화합물 M2로서의 화합물 A-

40을 표 6 및 표 7에 기재된 화합물 M2로 변경한 것 외에, 실시예 4-1과 동일하게 하여 제작했다.

(비교예 4-1)

비교예 4-1의 유기 EL 소자는, 실시예 4-1의 발광층에 이용한 화합물 M2로서의 화합물 A-40을 표 5에 기재된 화합물 M2로 변경한 것 외에, 실시예 4-1과 동일하게 하여 제작했다.

<유기 EL 소자의 평가(2)>

실시예 3-1~3-24, 실시예 4-1~4-25, 비교예 3-1 및 비교예 4-1에 있어서 제작한 유기 EL 소자에 대해, <유기 EL 소자의 평가(1)>에 기재된 방법으로, 표 3, 표 4, 표 5, 표 6 및 표 7에 나타내는 항목의 평가를 했다. 평가 결과를 표 3, 표 4, 표 5, 표 6 및 표 7에 나타낸다.

표 3 및 표 4에 나타내는 「EQE(상대치)」는, 각 예(실시예 3-1~3-24 및 비교예 3-1)의 EQE의 측정치, 및 하기 수식(수학식 3X)에 기초하여 산출했다.

EQE(상대치)=(각 예의 EQE/비교예 3-1의 EQE)×100…(수학식 3X)

표 5, 표 6 및 표 7에 나타내는 「EQE(상대치)」는, 각 예(실시예 4-1~4-25 및 비교예 4-1)의 EQE의 측정치, 및 하기 수식(수학식 4X)에 기초하여 산출했다.

EQE(상대치)=(각 예의 EQE/비교예 4-1의 EQE)×100…(수학식 4X)

[표 3]

	화합물 M2					화합물 M3			소자 평가				
	명칭	λ [nm]	PLQY	S ₁ [eV]	ΔST [eV]	명칭	S ₁ [eV]	T _{77K} [eV]	CIE _x	CIE _y	EQE (상대치) [%]	λ _p [nm]	FWHM [nm]
실시예 3-1	A-1	498	0.90	2.58	<0.01	M3-2	3.43	2.89	0.369	0.597	105	535	78
실시예 3-2	A-9	494	0.90	2.65	<0.01	M3-2	3.43	2.89	0.333	0.605	113	527	78
실시예 3-3	A-15	494	0.91	2.65	<0.01	M3-2	3.43	2.89	0.333	0.602	113	528	81
실시예 3-4	A-16	495	0.83	2.66	<0.01	M3-2	3.43	2.89	0.332	0.606	110	527	77
실시예 3-5	A-17	498	0.99	2.64	<0.01	M3-2	3.43	2.89	0.327	0.605	114	526	79
실시예 3-6	A-20	488	0.85	2.68	<0.01	M3-2	3.43	2.89	0.292	0.604	123	519	75
실시예 3-7	A-21	495	0.87	2.63	<0.01	M3-2	3.43	2.89	0.344	0.602	111	528	79
실시예 3-8	A-22	492	0.87	2.67	<0.01	M3-2	3.43	2.89	0.301	0.601	114	521	78
실시예 3-9	A-23	499	0.90	2.60	<0.01	M3-2	3.43	2.89	0.352	0.604	116	531	77
실시예 3-10	A-24	497	0.84	2.63	<0.01	M3-2	3.43	2.89	0.338	0.607	108	527	76
실시예 3-11	A-25	493	0.78	2.66	<0.01	M3-2	3.43	2.89	0.308	0.606	122	522	76
실시예 3-12	A-26	491	0.86	2.66	<0.01	M3-2	3.43	2.89	0.311	0.606	108	522	77
실시예 3-13	A-31	504	0.90	2.60	<0.01	M3-2	3.43	2.89	0.342	0.607	125	529	77
실시예 3-14	A-32	493	0.92	2.67	<0.01	M3-2	3.43	2.89	0.324	0.606	114	524	77
실시예 3-15	A-33	495	0.89	2.67	<0.01	M3-2	3.43	2.89	0.328	0.607	113	525	77
실시예 3-16	A-34	502	0.89	2.59	<0.01	M3-2	3.43	2.89	0.335	0.609	129	526	76
실시예 3-17	A-35	498	0.95	2.65	<0.01	M3-2	3.43	2.89	0.321	0.607	118	525	78
실시예 3-18	A-36	495	0.99	2.69	<0.01	M3-2	3.43	2.89	0.305	0.610	117	521	75
실시예 3-19	A-38	497	0.88	2.64	<0.01	M3-2	3.43	2.89	0.332	0.604	105	527	79
실시예 3-20	A-39	495	0.90	2.64	<0.01	M3-2	3.43	2.89	0.327	0.607	114	526	77
비교예 3-1	Ref-1	504	0.87	2.52	<0.01	M3-2	3.43	2.89	0.416	0.570	100	548	75

[2277] [표 4]

	화합물 M2					화합물 M3			소자 평가				
	명칭	λ [nm]	PLQY	S_1 [eV]	ΔST [eV]	명칭	S_1 [eV]	T_{77K} [eV]	CIE _x	CIE _y	EQE (상대치) [%]	λ_p [nm]	FWHM [nm]
실시예 3-21	A-19	492	0.85	2.66	<0.01	M3-2	3.43	2.89	0.338	0.604	112	530	79
실시예 3-22	A-30	497	0.92	2.64	<0.01	M3-2	3.43	2.89	0.330	0.605	107	527	79
실시예 3-23	A-37	499	0.86	2.60	<0.01	M3-2	3.43	2.89	0.364	0.598	118	535	79
실시예 3-24	A-42	500	0.84	2.60	<0.01	M3-2	3.43	2.89	0.359	0.601	112	533	77
비교예 3-1 (다시 게시함)	Ref-1	504	0.87	2.52	<0.01	M3-2	3.43	2.89	0.416	0.570	100	548	75

[2278]

[2279] [표 5]

	화합물 M2					화합물 M3	화합물 M1			소자 평가				
	명칭	λ [nm]	PLQY	S_1 [eV]	ΔST [eV]	명칭	명칭	S_1 [eV]	T_{77K} [eV]	CIE _x	CIE _y	EQE (상대치) [%]	λ_p [nm]	FWHM [nm]
실시예 4-1	A-40	489	0.82	2.71	<0.01	M3-2	GD2	2.39	1.99	0.209	0.693	127	518	28.3
실시예 4-2	A-41	495	0.70	2.70	<0.01	M3-2	GD2	2.39	1.99	0.203	0.698	137	518	27.4
비교예 4-1	Ref-1	504	0.87	2.52	<0.01	M3-2	GD2	2.39	1.99	0.291	0.660	100	521	34.0

[2280]

[2281] [표 6]

	화합물 M2					화합물 M3	화합물 M1			소자 평가				
	명칭	λ [nm]	PLQY	S_1 [eV]	ΔST [eV]	명칭	명칭	S_1 [eV]	T_{77K} [eV]	CIE _x	CIE _y	EQE (상대치) [%]	λ_p [nm]	FWHM [nm]
실시예 4-3	A-9	494	0.90	2.65	<0.01	M3-2	GD2	2.39	1.99	0.230	0.693	122	519	29.0
실시예 4-4	A-15	494	0.91	2.65	<0.01	M3-2	GD2	2.39	1.99	0.240	0.692	123	519	30.0
실시예 4-5	A-16	495	0.83	2.66	<0.01	M3-2	GD2	2.39	1.99	0.250	0.690	119	519	29.0
실시예 4-6	A-17	498	0.99	2.64	<0.01	M3-2	GD2	2.39	1.99	0.230	0.690	132	519	29.0
실시예 4-7	A-19	492	0.85	2.66	<0.01	M3-2	GD2	2.39	1.99	0.250	0.690	124	520	28.0
실시예 4-8	A-20	488	0.85	2.68	<0.01	M3-2	GD2	2.39	1.99	0.220	0.690	137	518	28.0
실시예 4-9	A-21	495	0.87	2.63	<0.01	M3-2	GD2	2.39	1.99	0.250	0.680	121	519	32.0
실시예 4-10	A-22	492	0.87	2.67	<0.01	M3-2	GD2	2.39	1.99	0.220	0.700	136	518	28.0
실시예 4-11	A-23	499	0.90	2.60	<0.01	M3-2	GD2	2.39	1.99	0.290	0.660	121	520	35.0
실시예 4-12	A-24	497	0.84	2.63	<0.01	M3-2	GD2	2.39	1.99	0.250	0.680	122	519	30.0
실시예 4-13	A-25	493	0.78	2.66	<0.01	M3-2	GD2	2.39	1.99	0.230	0.690	141	518	29.0
실시예 4-14	A-26	491	0.86	2.66	<0.01	M3-2	GD2	2.39	1.99	0.230	0.690	125	518	29.0
비교예 4-1 (다시 게시함)	Ref-1	504	0.87	2.52	<0.01	M3-2	GD2	2.39	1.99	0.291	0.660	100	521	34.0

[2282]

[2283] [표 7]

	화합물 M2					화합물 M3		화합물 M1		소자 평가				
	명칭	λ [nm]	PLQY	S_1 [eV]	ΔST [eV]	명칭	명칭	S_1 [eV]	$T_{77\%}$ [eV]	CIE _x	CIE _y	EQE (상대치) [%]	λ_p [nm]	FWHM [nm]
실시예 4-15	A-30	497	0.92	2.64	<0.01	M3-2	GD2	2.39	1.99	0.240	0.690	126	519	29.0
실시예 4-16	A-31	504	0.90	2.60	<0.01	M3-2	GD2	2.39	1.99	0.260	0.680	130	519	31.0
실시예 4-17	A-32	493	0.92	2.67	<0.01	M3-2	GD2	2.39	1.99	0.240	0.690	126	518	29.0
실시예 4-18	A-33	495	0.89	2.67	<0.01	M3-2	GD2	2.39	1.99	0.240	0.680	124	519	29.0
실시예 4-19	A-34	502	0.89	2.59	<0.01	M3-2	GD2	2.39	1.99	0.250	0.690	132	519	29.0
실시예 4-20	A-35	498	0.95	2.65	<0.01	M3-2	GD2	2.39	1.99	0.220	0.700	135	519	28.0
실시예 4-21	A-36	495	0.99	2.69	<0.01	M3-2	GD2	2.39	1.99	0.220	0.700	143	518	28.0
실시예 4-22	A-37	499	0.86	2.60	<0.01	M3-2	GD2	2.39	1.99	0.290	0.660	120	520	28.0
실시예 4-23	A-38	497	0.88	2.64	<0.01	M3-2	GD2	2.39	1.99	0.240	0.690	126	519	29.0
실시예 4-24	A-39	495	0.90	2.64	<0.01	M3-2	GD2	2.39	1.99	0.230	0.690	129	519	28.0
실시예 4-25	A-42	500	0.84	2.60	<0.01	M3-2	GD2	2.39	1.99	0.300	0.650	122	520	34.0
비교예 4-1 (다시 게시함)	Ref-1	504	0.87	2.52	<0.01	M3-2	GD2	2.39	1.99	0.291	0.660	100	521	34.0

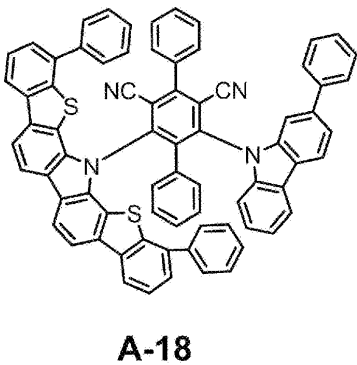
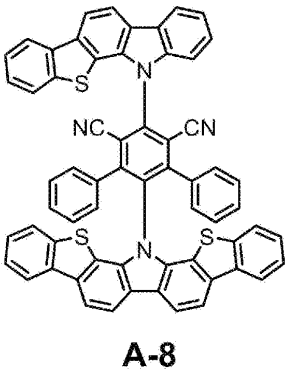
[2284]

[2285] 일반식(1)로 표시되는 화합물을 이용한 실시예에 따른 유기 EL 소자에 의하면, 비교예에 따른 유기 EL 소자에 비교하여, 소자 성능이 향상되었다.

[2286] <화합물의 평가>

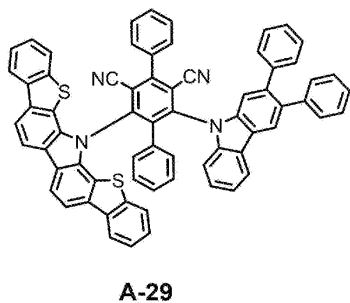
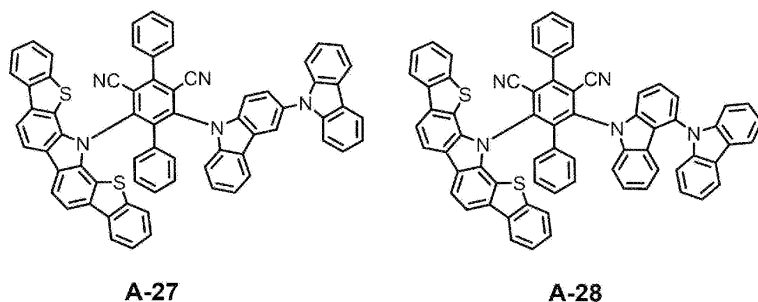
[2287] 실시예의 제조에 이용한 화합물 및 하기 화합물에 대해 평가했다.

[2288] [화학식 244]



[2289]

[2290] [화학식 245]



[2291]

[2292] (형광 양자 수율(PLQY)의 측정)

[2293] 측정 대상이 되는 화합물을, 농도가 5 $\mu\text{mol/L}$ 이 되도록, 톨루엔에 용해하여 톨루엔 용액을 조제했다. 그 후, 조액 후의 용액을 5분간 질소 버블링하여, 외기가 혼입되지 않도록 밀폐했다.

[2294] 조제한 측정 대상 화합물의 톨루엔 용액에 대해, 절대 PL(포토루미네센스) 양자 수율 측정 장치 Quantaurus-QY(하마마쓰 호토니쿠스 주식회사 제조)를 이용하여 PLQY를 측정했다.

[2295] (화합물의 최대 피크 파장)

[2296] 화합물의 최대 피크 파장 λ 은, 이하의 방법에 의해 측정했다.

[2297] 측정 대상이 되는 화합물의 5 $\mu\text{mol/L}$ 톨루엔 용액을 조제하여 석영 셀에 넣고, 상온(300 K)에서 이 시료의 발광 스펙트럼(종축: 발광 강도, 횡축: 파장으로 한다.)을 측정했다. 본 실시예에서는, 발광 스펙트럼을 가부시키가이샤 히타치 하이테크 사이언스 제조의 분광 형광 광도계(장치명: F-7000)로 측정했다. 한편, 발광 스펙트럼 측정 장치는, 여기서 이용한 장치에 한정되지 않는다. 발광 스펙트럼에 있어서, 발광 강도가 최대가 되는 발광 스펙트럼의 피크 파장을 최대 피크 파장 λ 로 했다.

[2298] (화합물의 지연 형광성)

[2299] 지연 형광성은 도 1에 도시하는 장치를 이용하여 과도 PL을 측정함으로써 확인했다. 상기 화합물 A-1을 톨루엔에 용해하고, 자기 흡수의 기여를 제거하기 위해 여기 파장에 있어서 흡광도가 0.05 이하인 희박 용액을 조제했다. 또한 산소에 의한 소광을 방지하기 위해, 시료 용액을 동결 탈기한 후에 아르곤 분위기 하에 덮개가 있는 셀에 봉입함으로써, 아르곤으로 포화된 무산소 시료 용액으로 했다.

[2300] 상기 시료 용액의 형광 스펙트럼을 분광 형광 광도계 FP-8600(니혼분코사 제조)으로 측정하고, 또한 동일한 조건으로 9,10-디페닐안트라센의 에탄올 용액의 형광 스펙트럼을 측정했다. 양 스펙트럼의 형광 면적 강도를 이용하여, 문헌[Morris et al. J.Phys.Chem.80(1976) 969] 중의 (1)식에 의해 전체 형광 양자 수율을 산출했다.

[2301] 상기 화합물 A-1이 흡수하는 파장의 펄스광(펄스 레이저로부터 조사되는 광)으로 여기된 후, 상기 여기 상태에서 바로 관찰되는 Prompt 발광(즉시 발광)과, 상기 여기 후, 바로는 관찰되지 않고, 그 후 관찰되는 Delay 발광(지연 발광)이 존재한다. 본 실시예에서의 지연 형광 발광이란, Delay 발광(지연 발광)의 양이 Prompt 발광(즉시 발광)의 양에 대하여 5% 이상을 의미한다. 구체적으로는, Prompt 발광(즉시 발광)의 양을 X_p 로 하고, Delay 발광(지연 발광)의 양을 X_d 로 할 때, X_d/X_p 의 값이 0.05 이상인 것을 의미한다.

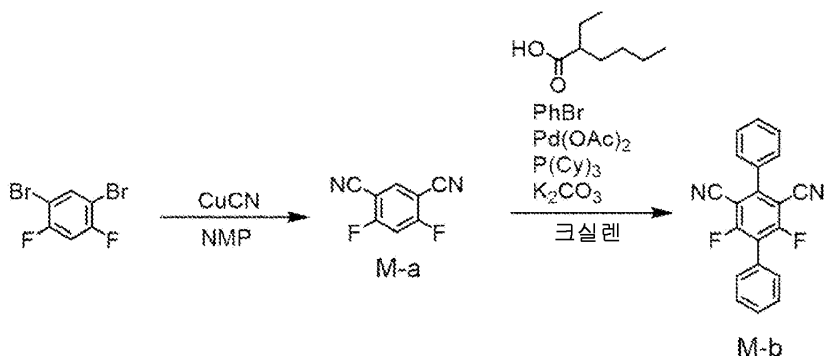
- [2302] Prompt 발광과 Delay 발광의 양과 그의 비는, 문헌[“Nature 492, 234-238, 2012”](참고문헌 1)에 기재된 방법과 동일한 방법으로 구할 수 있다. 한편, Prompt 발광과 Delay 발광의 양의 산출에 사용되는 장치는, 상기 참고문헌 1에 기재된 장치, 또는 도 1에 기재된 장치에 한정되지 않는다.
- [2303] 화합물 A-2~A-42 및 비교 화합물 Ref-1에 대해서도, 화합물 A-1과 동일하게 측정했다.
- [2304] 화합물 A-1~A-42 및 비교 화합물 Ref-1에 대해, Delay 발광(지연 발광)의 양이 Prompt 발광(즉시 발광)의 양에 대하여 5% 이상인 것이 확인되었다. 구체적으로는, 화합물 A-1~A-42 및 비교 화합물 Ref-1에 대해, X_D/X_P 의 값이 0.05 이상이었다.
- [2305] (최저 여기 일중항 에너지 S_1)
- [2306] 측정 대상 화합물의 최저 여기 일중항 에너지 S_1 은, 전술한 용액법에 의해 측정했다.
- [2307] (에너지 갭 T_{77K} 및 ΔST)
- [2308] 측정 대상 화합물의 에너지 갭 T_{77K} 은, 전술한 「삼중항 에너지와 77[K]에서의 에너지 갭의 관계」에서 기재한 에너지 갭 TT_{77K} 의 측정 방법에 의해 측정했다.
- [2309] 화합물 A-1~A-42 및 비교 화합물 Ref-1에 대해, 에너지 갭 T_{77K} 의 값과 상기 최저 여기 일중항 에너지 S_1 의 값으로부터 ΔST 를 확인했다. 표 8의 「<0.01」은, ΔST 가 0.01 eV 미만인 것을 나타낸다.

표 8

화합물	λ	PLQY	S_1	ΔST	화합물	λ	PLQY	S_1	ΔST
명칭	[nm]		[eV]	[eV]	명칭	[nm]		[eV]	[eV]
A-1	498	0.90	2.58	<0.01	A-26	491	0.86	2.66	<0.01
A-2	496	0.96	2.62	<0.01	A-27	531	0.48	2.57	<0.01
A-3	493	0.99	2.52	<0.01	A-28	502	0.93	2.57	<0.01
A-4	491	0.94	2.67	<0.01	A-29	495	0.87	2.65	<0.01
A-5	484	0.98	2.70	<0.01	A-30	497	0.92	2.64	<0.01
A-6	475	0.95	2.69	<0.01	A-31	504	0.90	2.60	<0.01
A-7	490	0.91	2.75	<0.01	A-32	493	0.92	2.67	<0.01
A-8	489	0.86	2.80	<0.01	A-33	495	0.89	2.67	<0.01
A-9	494	0.90	2.65	<0.01	A-34	502	0.89	2.59	<0.01
A-10	489	0.90	2.69	<0.01	A-35	498	0.95	2.65	<0.01
A-11	495	0.85	2.65	<0.01	A-36	495	0.99	2.69	<0.01
A-12	499	0.87	2.58	<0.01	A-37	499	0.86	2.60	<0.01
A-13	496	1.00	2.58	<0.01	A-38	497	0.88	2.64	<0.01
A-14	505	0.99	2.64	<0.01	A-39	495	0.90	2.64	<0.01
A-15	494	0.91	2.65	<0.01	A-40	489	0.82	2.71	<0.01
A-16	495	0.83	2.66	<0.01	A-41	495	0.70	2.70	<0.01
A-17	498	0.99	2.64	<0.01	A-42	500	0.84	2.60	<0.01
A-18	495	0.99	2.70	<0.01	Ref-1	504	0.87	2.52	<0.01
A-19	492	0.85	2.66	<0.01	M3-1	—	—	3.42	0.53
A-20	488	0.85	2.68	<0.01	M3-2	—	—	3.43	0.54
A-21	495	0.87	2.63	<0.01	GD	508	0.75	2.45	0.27
A-22	492	0.87	2.67	<0.01	GD2	512	0.91	2.39	0.40
A-23	499	0.90	2.60	<0.01					
A-24	497	0.84	2.63	<0.01					
A-25	493	0.78	2.66	<0.01					

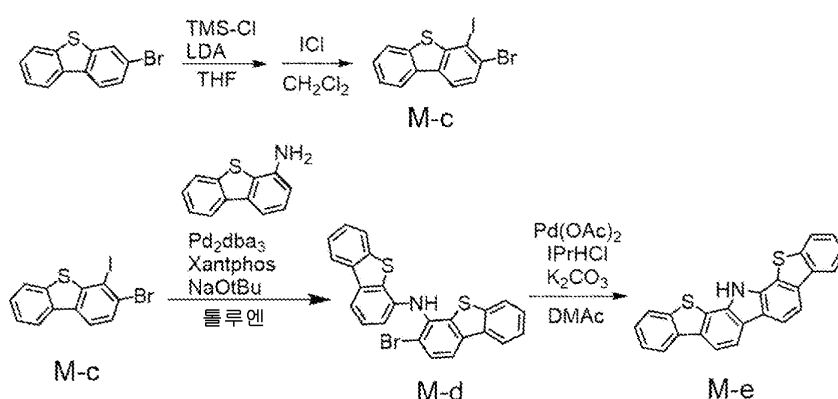
[2310]

- [2311] <합성예>
 [2312] (화합물 A-1의 합성)
 [2313] 화합물 A-1의 합성 방법을 이하에 설명한다.
 [2314] [화학식 246]



- [2315]
 [2316] 질소 분위기 하에, 2 L의 3구 플라스크에, 1,5-디브로모-2,4-디플루오로벤젠 165 g, 607 mmol), 시아노구리(120 g, 1335 mmol) 및 NMP(800 ml)을 넣고, 150℃에서 5시간 교반했다. 반응 혼합물에 염화메틸렌 1 L을 가하고, 세라이트를 이용하여 여과하고, 여과액을 증발기를 이용하여 농축했다. 농축 후에 얻어진 고체를 실리카 겔 크로마토그래피로 정제하여 58 g의 백색 고체를 얻었다. 얻어진 백색 고체를 GC-MS(Gas Chromatograph Mass Spectrometer)의 분석에 의해 중간체 M-a로 동정했다(수율 58%). NMP는 N-메틸-2-피롤리돈의 약칭이다.
 [2317] 질소 분위기 하에, 500 mL의 3구 플라스크에, 중간체 M-a(20 g, 122 mmol), 탄산칼륨(33.7 g, 244 mmol), 디아세톡시팔라듐(1.368 g, 6.09 mmol), 트리시클로헥실포스핀(5.13 g, 18.28 mmol), 브로모벤젠(31.9 ml, 305 mmol), 2-에틸헥산산(7.81 ml, 48.7 mmol) 및 크실렌(250 ml)을 넣고, 100℃에서 5시간 교반했다. 반응 용액에 염화메틸렌 200 ml를 가하여 세라이트에 통과시켰다. 얻어진 용액의 염화메틸렌을 제거하고, 침전한 고체를 여과했다. 얻어진 고체를 실리카 겔 컬럼 크로마토그래피로 정제하여 12 g의 백색 고체를 얻었다. 얻어진 백색 고체를 GC-MS의 분석에 의해 중간체 M-b로 동정했다(수율 31%).

- [2318] [화학식 247]



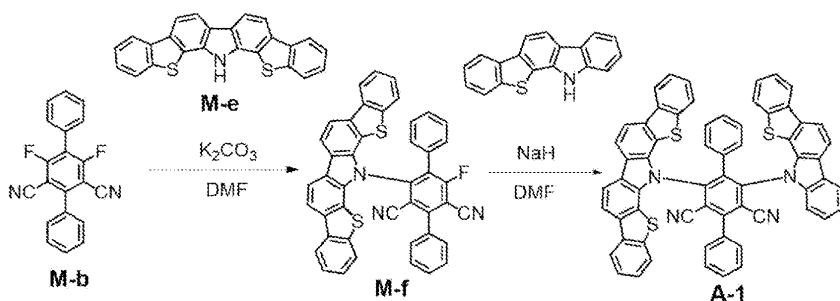
- [2319]
 [2320] 질소 분위기 하에, 500 ml의 3구 플라스크에, 3-브로모벤조티오펜(26.3 g, 100 mmol), 클로로트리메틸실란(33 g, 300 mmol) 및 THF(150 mL)을 넣었다. 드라이 아이스/아세톤 바스에서, 3구 플라스크 내의 재료를 -78℃까지 냉각시키고 나서, 리튬디이소프로필아미드를 125 ml(2 M, THF 용액) 적하했다. -78℃에서 2시간 교반한 후 실온으로 되돌리고, 2시간 더 교반했다. 교반 후, 3구 플라스크에 물(100 mL)을 가하고 나서, 아세트산에틸로 유기층을 추출하고, 추출한 유기층을 물 및 식염수로 세정하고, 황산마그네슘으로 건조시킨 후, 용매를 회전식 증발기로 감압 제거했다. 얻어진 액체에 디클로로메탄(200 ml)을 가하고, 계속해서 일염화요오드(49 g, 300 mmol)를, 0℃에서 적하한 후, 40℃에서 6시간 교반했다. 실온으로 되돌리고, 포화 아황산수소나트륨 수용액(100

mL)을 가하고, 디클로로메탄에 의해 유기층을 추출하고, 추출한 유기층을 물 및 식염수로 세정하고, 세정 후의 유기층을 황산마그네슘으로 건조시키고, 건조된 유기층을 회전식 증발기로 농축했다. 농축 후에 얻어진 화합물을 실리카 겔 컬럼 크로마토그래피에 의해 정제하여, 중간체 M-c(28 g, 72 mmol, 수율 72%)을 얻었다.

[2321] 질소 분위기 하에, 500 mL의 3구 플라스크에 중간체 M-c(24.5 g, 63.0 mmol), 디벤조[b,d]티오펜-4-아민(12.55 g, 63.0 mmol), 트리스(디벤질리덴아세톤)디팔라듐(0)(0.865 g, 0.945 mmol), Xantphos(크산트포스)(1.385 g, 1.889 mmol), 나트륨 tert-부톡시드(9.08 g, 94 mmol) 및 톨루엔 210 mL를 가하여, 60℃에서 8시간 가열 교반 후에 실온(25℃)까지 냉각시켰다. 석출된 고체를 여과하여 취하고, 톨루엔 200 mL로 세정하여, 25 g의 백색 고체를 얻었다. 얻어진 백색 고체를 GC-MS의 분석에 의해 중간체 M-d로 동정했다(수율 86%).

[2322] 질소 분위기 하에, 200 mL의 3구 플라스크에, 중간체 M-d(9.5 g, 20.7 mmol), 1,3-비스(2,6-디이소프로필페닐)이미다졸륨클로라이드(IPrHCl)(0.36 g, 0.82 mmol), 아세트산팔라듐(II)(0.093 g, 0.41 mmol), 탄산칼륨(5.8 g, 42 mmol) 및 N,N-디메틸아세트아미드(DMAc) 60 mL를 가하여, 160℃에서 10시간 교반 후에 실온(25℃)까지 냉각시켰다. 석출된 고체를 여과하여 취하고, 아세톤으로 세정하여, 6.9 g의 백색 고체를 얻었다. 얻어진 백색 고체를 ASAP-MS의 분석에 의해 중간체 M-e로 동정했다(수율 86%). ASAP-MS는, Atmospheric Pressure Solid Analysis Probe Mass Spectrometry의 약칭이다.

[2323] [화학식 248]



[2324]

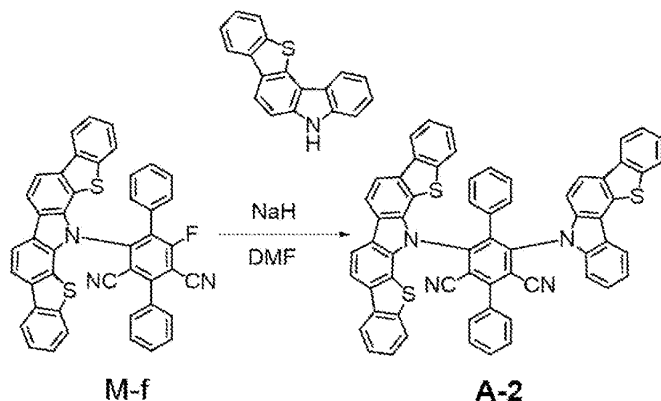
[2325] 질소 분위기 하에, 200 mL의 3구 플라스크에, 중간체 M-14(3.0 g, 9.48 mmol), 중간체 M-e(3.6 g, 9.5 mmol), 탄산칼륨(2.6 g, 19 mmol) 및 DMF 50 mL를 넣고, 100℃에서 4시간 교반했다. 반응 용액에 이온 교환수 100 mL를 넣고, 석출된 고체를 여과하여 취했다. 여과하여 취한 고체를 실리카 겔 컬럼 크로마토그래피로 정제하여, 4.1 g의 황색 고체를 얻었다. 얻어진 황색 고체를 ASAP-MS의 분석에 의해 중간체 M-f로 동정했다(수율 64%). DMF는 N,N-디메틸포름아미드의 약칭이다.

[2326] 질소 분위기 하에, 100 mL의 3구 플라스크에, 12H-[1]벤조티오펜[2,3-a]카르바졸(0.809 g, 2.96 mmol), 수소화 나트륨(40 질량% 오일 함유)(0.14 g, 3.55 mmol), 및 DMF를 15 mL 넣고, 0℃에서 30분 교반했다. 다음으로 반응 혼합물에 중간체 M-f(2 g, 2.96 mmol)를 넣고, 실온에서 2시간 교반했다. 반응 혼합물에 물 50 mL를 가하고, 석출된 고체를 실리카 겔 컬럼 크로마토그래피로 정제하여, 1.6 g의 황색 고체를 얻었다. 얻어진 황색 고체를 ASAP-MS의 분석에 의해 화합물 A-1로 동정했다(수율 58%).

[2327] (화합물 A-2의 합성)

[2328] 화합물 A-2의 합성 방법을 이하에 설명한다.

[2329] [화학식 249]



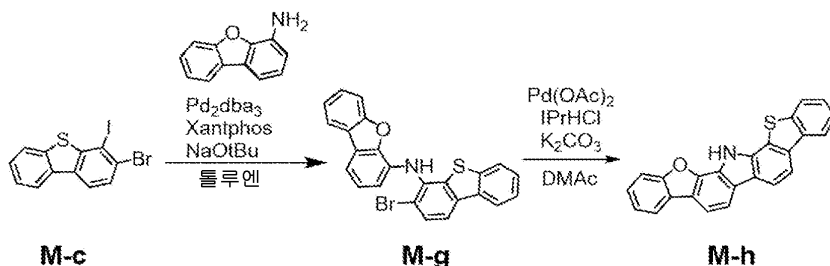
[2330]

[2331] 질소 분위기 하에, 100 mL의 3구 플라스크에, 5H-벤조[4,5]티에노[3,2-c]카르바졸(0.971 g, 3.55 mmol), 수소화나트륨(40 질량% 오일 함유)(0.14 g, 3.55 mmol), 및 DMF를 15 mL 넣고, 0℃에서 30분 교반했다. 다음으로 반응 혼합물에 중간체 M-f(2 g, 2.96 mmol)를 넣고, 실온에서 2시간 교반했다. 반응 혼합물에 물 50 mL를 가하고, 석출된 고체를 실리카 겔 컬럼 크로마토그래피로 정제하여, 2.2 g의 황색 고체를 얻었다. 얻어진 황색 고체를 ASAP-MS의 분석에 의해 화합물 A-2로 동정했다(수율 80%).

[2332] (화합물 A-3의 합성)

[2333] 화합물 A-3의 합성 방법을 이하에 설명한다.

[2334] [화학식 250]

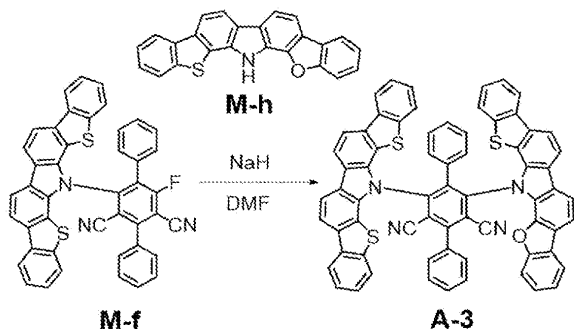


[2335]

[2336] 질소 분위기 하에, 500 mL의 3구 플라스크에 중간체 M-c(20 g, 51.4 mmol), 디벤조[b,d]푸란-4-아민(9.42 g, 51.4 mmol), Pd₂dba₃(0.706 g, 0.771 mmol), (9,9-디메틸-9H-크산텐-4,5-디일)비스(트리페닐-14-포스판)(1.130 g, 1.542 mmol), NaOt-Bu(7.41 g, 77 mmol) 및 톨루엔(171 mL)을 가하고, 60℃에서 8시간 가열 교반 후에 실온(25℃)까지 냉각시켰다. 석출된 고체를 여과하여 취하고, 톨루엔 200 mL로 세정하여, 19 g의 백색 고체를 얻었다. 얻어진 백색 고체를 GC-MS의 분석에 의해 중간체 M-g로 동정했다(수율 83%).

[2337] 질소 분위기 하에, 300 mL의 3구 플라스크에, 중간체 M-g(15 g, 33.8 mmol), 1,3-비스(2,6-디이소프로필페닐)이미다졸륨클로라이드(IPrHCl)(0.430 g, 1.013 mmol), 아세트산팔라듐(II)(0.114 g, 0.506 mmol), 탄산칼륨(9.80 g, 70.9 mmol) 및 DMAc(169 mL)을 가하고, 140℃에서 6시간 교반 후에 실온(25℃)까지 냉각시켰다. 석출된 고체를 여과하여 취하고, 아세톤으로 세정하여, 8.4 g의 백색 고체를 얻었다. 얻어진 백색 고체를 ASAP-MS의 분석에 의해 중간체 M-h로 동정했다(수율 69%).

[2338] [화학식 251]



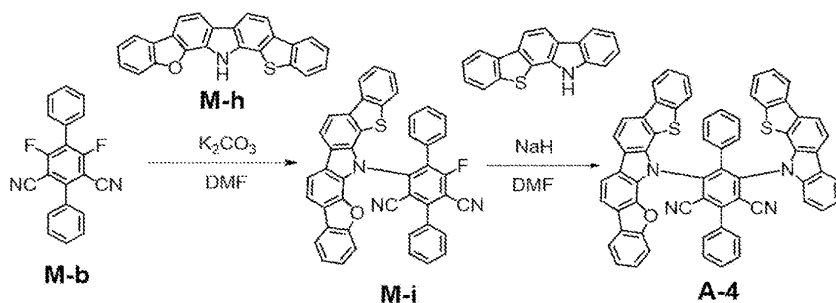
[2339]

[2340] 질소 분위기 하에, 100 mL의 3구 플라스크에, 중간체 M-h(0.532 g, 1.465 mmol), 수소화나트륨(40 질량% 오일 함유)(0.064 g, 1.598 mmol), 및 DMF를 15 mL 넣고, 0℃에서 30분 교반했다. 다음으로 반응 혼합물에 중간체 M-f(0.9 g, 1.332 mmol)를 넣고, 실온에서 2시간 교반했다. 반응 혼합물에 물 50 mL를 가하고, 석출된 고체를 실리카 겔 컬럼 크로마토그래피로 정제하여, 0.7 g의 황색 고체를 얻었다. 얻어진 황색 고체를 ASAP-MS의 분석에 의해 화합물 A-3으로 동정했다(수율 52%).

[2341] (화합물 A-4의 합성)

[2342] 화합물 A-4의 합성 방법을 이하에 설명한다.

[2343] [화학식 252]



[2344]

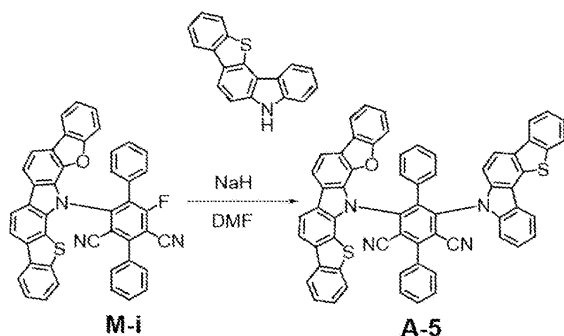
[2345] 질소 분위기 하에, 200 mL의 3구 플라스크에 중간체 M-b(3 g, 9.48 mmol), 인산삼칼륨(4.03 g, 18.97 mmol), 중간체 M-h(3.45 g, 9.48 mmol) 및 DMF(47.4 mL)을 넣고, 60℃에서 4시간 교반했다. 반응 용액에 이온 교환수 100 mL를 넣고, 석출된 고체를 여과하여 취했다. 여과하여 취한 고체를 실리카 겔 컬럼 크로마토그래피로 정제하여, 4.9 g의 황색 고체를 얻었다. ASAP-MS의 분석에 의해 중간체 M-i로 동정했다(수율 78%).

[2346] 질소 분위기 하에, 100 mL의 3구 플라스크에, 12H-[1]벤조티에노[2,3-a]카르바졸(0.912 g, 3.33 mmol), 수소화나트륨(40 질량% 오일 함유)(0.133 g, 3.33 mmol), 및 DMF(15.16 mL)을 넣고, 0℃에서 30분 교반했다. 다음으로 반응 혼합물에 중간체 M-i(2 g, 3.03 mmol)를 넣고, 실온에서 2시간 교반했다. 반응 혼합물에 물 50 mL를 가하고, 석출된 고체를 실리카 겔 컬럼 크로마토그래피로 정제하여, 1.1 g의 황색 고체를 얻었다. 얻어진 황색 고체를 ASAP-MS의 분석에 의해 화합물 A-4로 동정했다(수율 40%).

[2347] (화합물 A-5의 합성)

[2348] 화합물 A-5의 합성 방법을 이하에 설명한다.

[2349] [화학식 253]



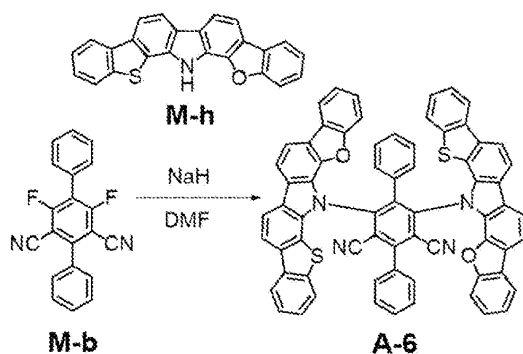
[2350]

[2351] 질소 분위기 하에, 100 mL의 3구 플라스크에, 5H-벤조[4,5]티에노[3,2-c]카르바졸(0.646 g, 2.365 mmol), 수소화나트륨(40 질량% 오일 함유)(0.095 g, 2.365 mmol), 및 DMF(19.70 mL)을 넣고, 0℃에서 30분 교반했다. 다음으로 반응 혼합물에 중간체 M-i(1.3 g, 1.970 mmol)를 넣고, 실온에서 2시간 교반했다. 반응 혼합물에 물 50 mL를 가하고, 석출된 고체를 실리카 겔 컬럼 크로마토그래피로 정제하여, 1.4 g의 황색 고체를 얻었다. 얻어진 황색 고체를 ASAP-MS의 분석에 의해 화합물 A-5로 동정했다(수율 78%).

[2352] (화합물 A-6의 합성)

[2353] 화합물 A-6의 합성 방법을 이하에 설명한다.

[2354] [화학식 254]



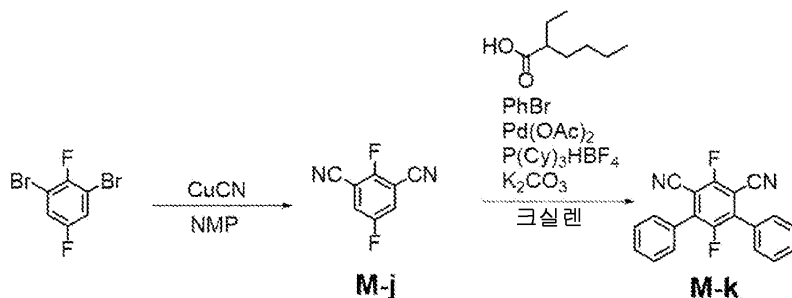
[2355]

[2356] 질소 분위기 하에, 100 mL의 3구 플라스크에, 중간체 M-h(1 g, 3.16 mmol), 수소화나트륨(40 질량% 오일 함유)(0.278 g, 6.96 mmol), 및 DMF(15.8 mL)을 넣고, 0℃에서 30분 교반했다. 다음으로 반응 혼합물에 중간체 M-b(2.53 g, 6.96 mmol)를 넣고, 100℃에서 2시간 교반했다. 반응 혼합물에 물 50 mL를 가하고, 석출된 고체를 실리카 겔 컬럼 크로마토그래피로 정제하여, 2.1 g의 황색 고체를 얻었다. 얻어진 황색 고체를 ASAP-MS의 분석에 의해 화합물 A-6으로 동정했다(수율 66%).

[2357] (화합물 A-7의 합성)

[2358] 화합물 A-7의 합성 방법을 이하에 설명한다.

[2359] [화학식 255]

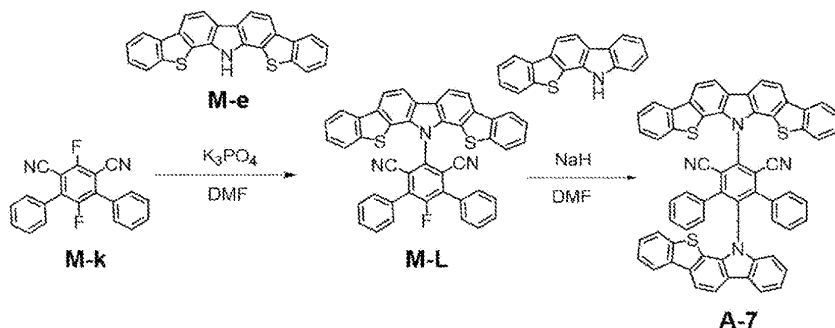


[2360]

[2361] 질소 분위기 하에, 1 L의 3구 플라스크에, 1,3-디브로모-2,5-디플루오로벤젠(35 g, 129 mmol), 시아노구리(25.4 g, 283 mmol) 및 NMP (257 ml)을 넣고, 150°C 에서 5시간 교반했다. 반응 혼합물에 염화메틸렌 500 mL를 가하여, 세라이트를 이용하여 여과하고, 여과액을 증발기를 이용하여 농축했다. 농축 후에 얻어진 고체를 실리카 겔 크로마토그래피로 정제하고, 에탄올로 재결정하여 12 g의 백색 고체를 얻었다. 얻어진 백색 고체를 GC-MS의 분석에 의해 중간체 **M-j**로 동정했다(수율 57%).

[2362] 질소 분위기 하에, 300 mL의 3구 플라스크에, 2,5-디플루오로이소프탈로니트릴(6.3 g, 38.4 mmol), 탄산칼륨(11.67 g, 84 mmol), 디아세톡시팔라듐(0.431 g, 1.919 mmol), 트리시클로헥실포스포늄테트라플루오로보레이트(2.120 g, 5.76 mmol), 브로모벤젠(12.05 ml, 115 mmol), 2-에틸헥산산(2.460 ml, 15.36 mmol) 및 크실렌(80 ml)을 넣고, 100°C 에서 5시간 교반했다. 반응 용액에 염화메틸렌 100 ml를 가하여, 세라이트에 통과시켰다. 얻어진 용액의 염화메틸렌을 농축하고, 침전한 고체를 여과했다. 얻어진 고체를 실리카 겔 컬럼 크로마토그래피로 정제하여, 5.2 g의 백색 고체를 얻었다. 얻어진 백색 고체를 GC-MS의 분석에 의해 중간체 **M-k**로 동정했다(수율 43%).

[2363] [화학식 256]



[2364]

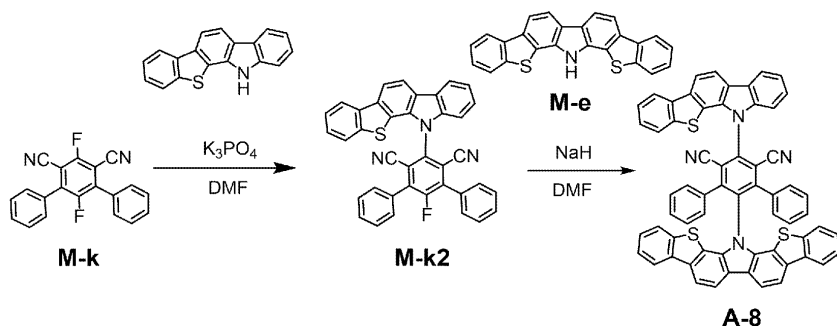
[2365] 질소 분위기 하에, 200 mL의 3구 플라스크에, 중간체 **M-k**(1.5 g, 4.74 mmol), 중간체 **M-e**(1.8 g, 4.74 mmol), 인산삼칼륨(3.02 g, 14.23 mmol) 및 DMF (23.71 ml)을 넣고, 60°C 에서 4시간 교반했다. 반응 용액에 이온 교환수 100 ml를 넣고, 석출된 고체를 여과하여 취했다. 여과하여 취한 고체를 실리카 겔 컬럼 크로마토그래피로 정제하여, 2 g의 황색 고체를 얻었다. 얻어진 황색 고체를 ASAP-MS의 분석에 의해 중간체 **M-L**로 동정했다(수율 62%).

[2366] 질소 분위기 하에, 100 mL의 3구 플라스크에, 12H-[1]벤조티에노[2,3-a]카르바졸(0.922 g, 3.37 mmol), 수소화나트륨(40 질량% 오일 함유)(0.124 g, 3.09 mmol), 및 DMF (14.06 ml)을 넣고, 0°C 에서 30분 교반했다. 다음으로 반응 혼합물에 중간체 **M-L**(1.9 g, 2.81 mmol)를 넣고, 70°C 에서 8시간 교반했다. 반응 혼합물에 물 50 mL를 가하고, 석출된 고체를 실리카 겔 컬럼 크로마토그래피로 정제하여, 1.8 g의 황색 고체를 얻었다. 얻어진 황색 고체를 ASAP-MS의 분석에 의해 화합물 **A-7**로 동정했다(수율 69%).

[2367] (화합물 **A-8**의 합성)

[2368] 화합물 **A-8**의 합성 방법을 이하에 설명한다.

[2369] [화학식 257]



[2370]

[2371] 질소 분위기 하에, 200 mL의 3구 플라스크에, 중간체 M-k(2.4 g, 7.59 mmol), 12H-[1]벤조티에노[2,3-a]카르바줄(2.074 g, 7.59 mmol), 인산삼칼륨(4.83 g, 22.76 mmol) 및 DMF(37.9 ml)을 넣고, 50℃에서 4시간 교반했다. 반응 용액에 이온 교환수 100 ml를 넣고, 석출된 고체를 여과하여 취했다. 여과하여 취한 고체를 실리카 겔 컬럼 크로마토그래피로 정제하여, 4 g의 황색 고체를 얻었다. 얻어진 황색 고체를 ASAP-MS의 분석에 의해 중간체 M-k2로 동정했다(수율 93%).

[2372]

질소 분위기 하에, 100 mL의 3구 플라스크에, 중간체 M-e(1.332 g, 3.51 mmol), 수소화나트륨(40 질량% 오일 함유)(0.154 g, 3.86 mmol), 및 DMF(14.06 ml)을 넣고, 0℃에서 30분 교반했다. 다음으로 반응 혼합물에 중간체 M-k2(2 g, 3.51 mmol)를 넣고, 170℃에서 14시간 교반했다. 반응 혼합물에 물 50 mL를 가하고, 석출된 고체를 실리카 겔 컬럼 크로마토그래피로 정제하여, 0.98 g의 황색 고체를 얻었다. 얻어진 황색 고체를 ASAP-MS의 분석에 의해 화합물 A-8로 동정했다(수율 30%).

[2373]

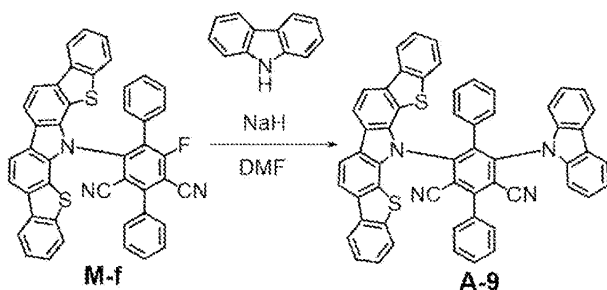
(화합물 A-9의 합성)

[2374]

화합물 A-9의 합성 방법을 이하에 설명한다.

[2375]

[화학식 258]



[2376]

[2377] 질소 분위기 하에, 100 mL의 3구 플라스크에, 9H-카르바줄(2.313 g, 13.84 mmol), 수소화나트륨(40 질량% 오일 함유)(0.488 g, 12.21 mmol), 및 DMF(40.7 ml)을 넣고, 0℃에서 30분 교반했다. 다음으로 반응 혼합물에 중간체 M-f(5.5 g, 8.14 mmol)를 넣고, 실온에서 2시간 교반했다. 반응 혼합물에 메탄올 20 mL를 가하고, 석출된 고체를 실리카 겔 컬럼 크로마토그래피로 정제하여, 6.3 g의 황색 고체를 얻었다. 얻어진 황색 고체를 ASAP-MS의 분석에 의해 화합물 A-9로 동정했다(수율 94%).

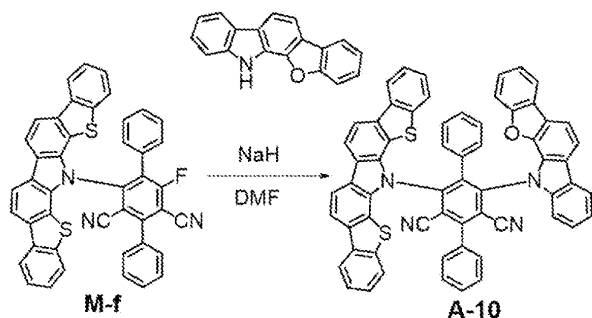
[2378]

(화합물 A-10의 합성)

[2379]

화합물 A-10의 합성 방법을 이하에 설명한다.

[2380] [화학식 259]



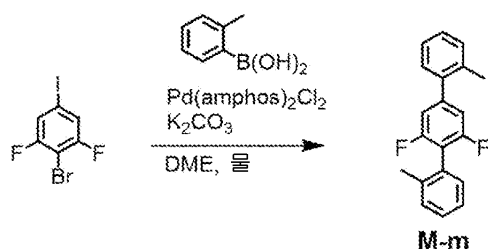
[2381]

[2382] 질소 분위기 하에, 100 mL의 3구 플라스크에 12H-벤조푸로[2,3-a]카르바졸(1.466 g, 5.70 mmol), 수소화나트륨(40 질량% 오일 함유)(0.228 g, 5.70 mmol), 및 DMF(17.26 ml)을 넣고, 0℃에서 30분 교반했다. 다음으로 반응 혼합물에 중간체 M-f(3.5 g, 5.18 mmol)를 넣고, 실온에서 2시간 교반했다. 반응 혼합물에 메탄올 20 mL를 가하고, 석출된 고체를 실리카 겔 컬럼 크로마토그래피로 정제하여, 3.7 g의 황색 고체를 얻었다. 얻어진 황색 고체를 ASAP-MS의 분석에 의해 화합물 A-10으로 동정했다(수율 78%).

[2383] (화합물 A-11의 합성)

[2384] 화합물 A-11의 합성 방법을 이하에 설명한다.

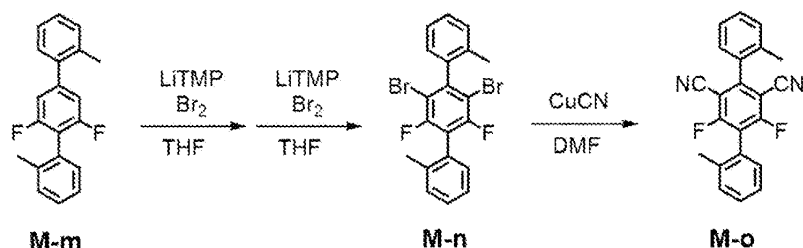
[2385] [화학식 260]



[2386]

[2387] 질소 분위기 하에, 200 mL의 3구 플라스크에, 5-브로모-1,3-디플루오로-2-요오도벤젠(4.00 g, 12.54 mmol), o-톨릴보론산(3.75 g, 27.60 mmol), 탄산칼륨(10.40 g, 75.00 mmol), 비스[디-tert-부틸(4-디메틸아미노페닐)포스핀]디클로로팔라듐(0.266 g, 0.376 mmol), DME(66.9 ml) 및 이온 교환수(16.7 ml)를 넣고, 90℃에서 5시간 교반했다. 반응 용액에 이온 교환수 100 ml를 넣고, 아세트산에틸로 유기층을 추출하고, 추출한 유기층을 물 및 식염수로 세정하고, 세정 후의 유기층을 황산마그네슘으로 건조시킨 후, 용매를 회전식 증발기로 감압 제거했다. 농축 후에 얻어진 화합물을 실리카 겔 컬럼 크로마토그래피에 의해 정제하여, 중간체 M-m(3.50 g, 11.9 mmol, 수율 95%)을 얻었다.

[2388] [화학식 261]



[2389]

[2390] 질소 분위기 하에, 200 ml의 3구 플라스크에, 2,2,6,6-테트라메틸피페리딘(2.428 ml, 14.27 mmol), 및 THF(20 ml)을 가했다. 드라이 아이스/아세톤 배스에서, 3구 플라스크 내의 재료를 -78℃까지 냉각시키고 나서, n-부틸리튬을 14.3 ml(1.6 M, 헥산 용액) 적하했다. 0℃에서 20분 교반하고, -78℃까지 냉각시킨 후, 중간체 M-m(3.5 g, 11.89 mmol)를 THF 20 ml에 녹인 용액을 가하여 15분 교반했다. 교반 후, 용액에 브롬(1.218 ml, 23.78 mmol)을 가하고, 실온으로 되돌리고 나서 20분 교반했다. 교반 후, 용액에 포화 아황산수소나트륨 수용액(100

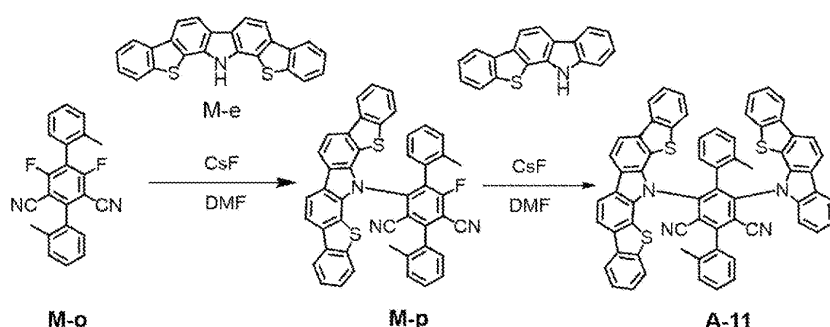
mL)을 가하고, 헥산에 의해 유기층을 추출하고, 추출한 유기층을 물 및 식염수로 세정하고, 세정 후의 유기층을 황산마그네슘으로 건조시키고, 건조된 유기층을 회전식 증발기로 농축했다. 농축 후에 얻어진 화합물을 실리카 겔 컬럼 크로마토그래피에 통과시키고, 용매를 회전식 증발기로 감압 제거했다. 얻어진 액체를 THF 20 ml에 녹여 조제한 용액을, 다시 조제한 LiTMP의 THF 용액에 -78℃에서 적하하고 15분 교반했다. 거기에 브롬(0.77 ml, 15.0 mmol)을 가하고, 실온으로 되돌리고 나서 20분 교반했다. 교반 후의 용액에 포화 아황산수소나트륨 수용액(100 mL)을 가하고, 헥산에 의해 유기층을 추출하고, 추출한 유기층을 물 및 식염수로 세정하고, 세정 후의 유기층을 황산마그네슘으로 건조시키고, 건조된 유기층을 회전식 증발기로 농축했다. 농축 후에 얻어진 화합물을 실리카 겔 컬럼 크로마토그래피에 의해 정제하여, 중간체 M-n(2.75 g, 6.07 mmol, 수율 51%)을 얻었다. LiTMP는, 리튬 2,2,6,6-테트라메틸피페리디드의 약칭이다.

[2391]

질소 분위기 하에, 1 L의 3구 플라스크에, 중간체 M-n(2.75 g, 6.07 mmol), 시아노구리(1.31 g, 14.6 mmol) 및 DMF(66 ml)을 넣고, 150℃에서 5시간 교반했다. 반응 혼합물에 염화메틸렌 500 mL를 가하여, 세라이트를 이용하여 여과하고, 여과액을 증발기로 농축했다. 농축 후에 얻어진 고체를 실리카 겔 크로마토그래피로 정제하여, 1.0 g의 백색 고체를 얻었다. 얻어진 백색 고체를 GC-MS의 분석에 의해 중간체 M-o로 동정했다(수율 44%).

[2392]

[화학식 262]



[2393]

[2394]

질소 분위기 하에, 100 mL의 3구 플라스크에 중간체 M-o(1.0 g, 2.90 mmol), 불화세슘(1.32 g, 8.71 mmol), 중간체 M-e(1.1 g, 2.90 mmol) 및 DMF(10.0 ml)을 넣고, 실온에서 20시간 교반했다. 반응 용액에 이온 교환수를 50 ml 넣고, 석출된 고체를 여과하여 취했다. 여과하여 취한 고체를 실리카 겔 컬럼 크로마토그래피로 정제하여, 1.5 g의 황색 고체를 얻었다. 얻어진 황색 고체를 ASAP-MS의 분석에 의해 중간체 M-p로 동정했다(수율 75%).

[2395]

질소 분위기 하에, 100 mL의 3구 플라스크에, 중간체 M-p(1.54 g, 2.20 mmol), 12H-[1]벤조티에노[2,3-a]카바졸(0.718 g, 2.63 mmol), 불화세슘(1.00 g, 6.56 mmol), 및 DMF(11.0 ml)을 넣고, 50℃에서 1시간 교반했다. 반응 혼합물에 물 50 mL를 가하고, 석출된 고체를 실리카 겔 컬럼 크로마토그래피로 정제하여, 1.62 g의 황색 고체를 얻었다. 얻어진 황색 고체를 ASAP-MS의 분석에 의해 화합물 A-11로 동정했다(수율 77%).

[2396]

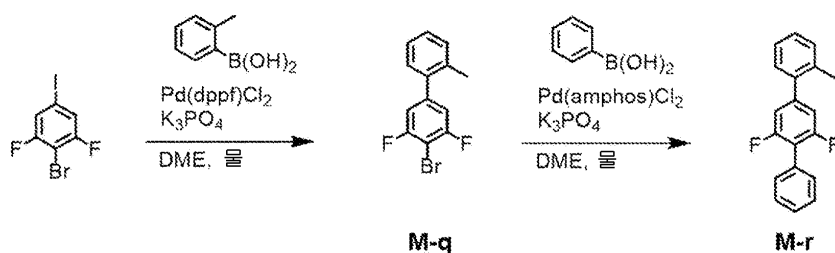
(화합물 A-12의 합성)

[2397]

화합물 A-12의 합성 방법을 이하에 설명한다.

[2398]

[화학식 263]



[2399]

[2400]

질소 분위기 하에, 200 mL의 3구 플라스크에, 5-브로모-1,3-디플루오로-2-요오도벤젠(5.00 g, 15.68 mmol), o-톨릴보론산(2.13 g, 15.68 mmol), 인산칼륨(9.98 g, 47.00 mmol), [1,1'-비스(디페닐포스피노)페로센]디클로로 팔라듐(II)디클로로메탄 부가물(0.128 g, 0.157 mmol), DME(84.1 ml) 및 이온 교환수(20.9 ml)를 넣고, 실온에

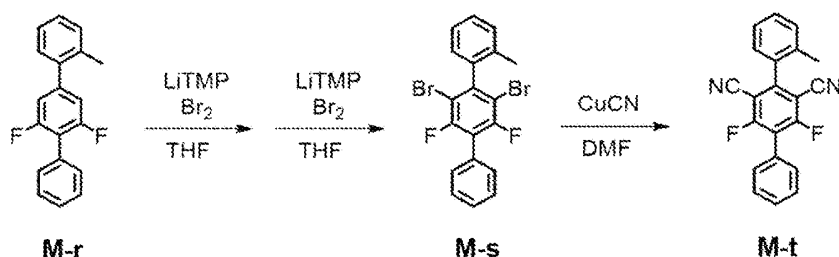
서 1시간 교반했다. 반응 용액에 이온 교환수 100 ml를 넣고, 아세트산에틸로 유기층을 추출하고, 추출한 유기층을 물 및 식염수로 세정하고, 세정 후의 유기층을 황산마그네슘으로 건조시킨 후, 용매를 회전식 증발기로 감압 제거했다. 농축 후에 얻어진 화합물을 실리카 겔 컬럼 크로마토그래피에 의해 정제하여, 중간체 M-q(3.47 g, 12.3 mmol, 수율 78%)을 얻었다.

[2401]

질소 분위기 하에, 200 mL의 3구 플라스크에, 중간체 M-q(3.47 g, 12.3 mmol), 페닐보론산(2.26 g, 18.54 mmol), 인산칼륨(7.87 g, 37.1 mmol), 비스[디-tert-부틸(4-디메틸아미노페닐)포스핀]디클로로팔라듐(0.101 g, 0.124 mmol), DME(65.9 ml) 및 이온 교환수(16.5 ml)를 넣고, 60℃에서 2시간 교반했다. 반응 용액에 이온 교환수 100 ml를 넣고, 아세트산에틸로 유기층을 추출하고, 추출한 유기층을 물 및 식염수로 세정하고, 세정 후의 유기층을 황산마그네슘으로 건조시킨 후, 용매를 회전식 증발기로 감압 제거했다. 농축 후에 얻어진 화합물을 실리카 겔 컬럼 크로마토그래피에 의해 정제하여, 중간체 M-r(3.15 g, 11.2 mmol, 수율 90%)을 얻었다.

[2402]

[화학식 264]



[2403]

[2404]

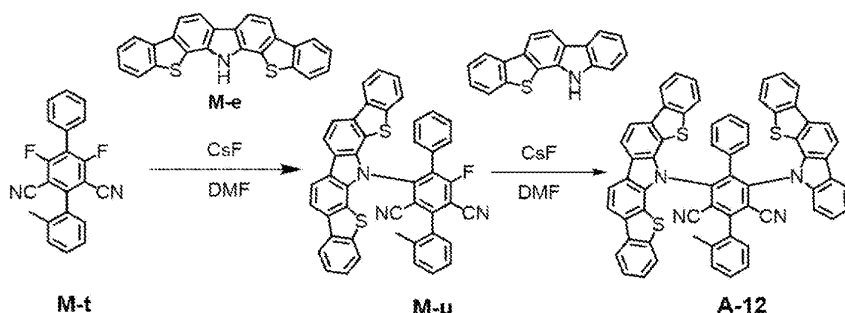
질소 분위기 하에, 200 ml의 3구 플라스크에, 2,2,6,6-테트라메틸피페리딘(3.19 ml, 18.73 mmol) 및 THF(40 ml)을 가했다. 드라이 아이스/아세톤 배스에서, 3구 플라스크 내의 재료를 -78℃까지 냉각시키고 나서, n-부틸리튬을 18.7 ml(1.6 M, 헥산 용액) 적하했다. 0℃에서 20분 교반하여, -78℃까지 냉각시킨 후, 중간체 M-r(3.15 g, 11.2 mmol)를 THF 20 ml에 녹인 용액을 가하여 15분 교반했다. 교반 후, 용액에 브롬(1.28 ml, 25.0 mmol)을 가하고, 실온으로 되돌리고 나서 20분 교반했다. 교반 후, 용액에 포화 아황산수소나트륨 수용액(100 mL)을 가하고, 헥산에 의해 유기층을 추출하고, 추출한 유기층을 물 및 식염수로 세정하고, 세정 후의 유기층을 황산마그네슘으로 건조시키고, 건조된 유기층을 회전식 증발기로 농축했다. 농축 후에 얻어진 화합물을 실리카 겔 컬럼 크로마토그래피에 통과시키고, 용매를 회전식 증발기로 감압 제거했다. 얻어진 액체를 THF 20 ml에 녹여 조제한 용액을, 다시 조제한 LiTMP의 THF 용액에 -78℃에서 적하하여 15분 교반했다. 거기에 브롬(1.28 ml, 25.0 mmol)을 가하고, 실온으로 되돌리고 나서 20분 교반했다. 교반 후, 용액에 포화 아황산수소나트륨 수용액(100 mL)을 가하고, 헥산에 의해 유기층을 추출하고, 추출한 유기층을 물 및 식염수로 세정하고, 세정 후의 유기층을 황산마그네슘으로 건조시키고, 건조된 유기층을 회전식 증발기로 농축했다. 농축 후에 얻어진 화합물을 실리카 겔 컬럼 크로마토그래피에 의해 정제하여, 중간체 M-s(4.16 g, 9.51 mmol, 수율 85%)를 얻었다.

[2405]

질소 분위기 하에, 1 L의 3구 플라스크에, 중간체 M-s(4.16 g, 9.51 mmol), 시아노구리(2.20 g, 24.6 mmol) 및 DMF(112 ml)를 넣고, 160℃에서 10시간 교반했다. 반응 혼합물에 염화메틸렌 500 mL를 가하여, 세라이트를 이용하여 여과하고, 여과액을 증발기로 농축했다. 농축 후에 얻어진 고체를 실리카 겔 크로마토그래피로 정제하여, 1.57 g의 백색 고체를 얻었다. 얻어진 백색 고체를 GC-MS의 분석에 의해 중간체 M-t로 동정했다(수율 42%).

[2406]

[화학식 265]



[2407]

[2408]

질소 분위기 하에, 100 mL의 3구 플라스크에 중간체 M-t(1.0 g, 3.03 mmol), 불화세슘(1.38 g, 9.08 mmol),

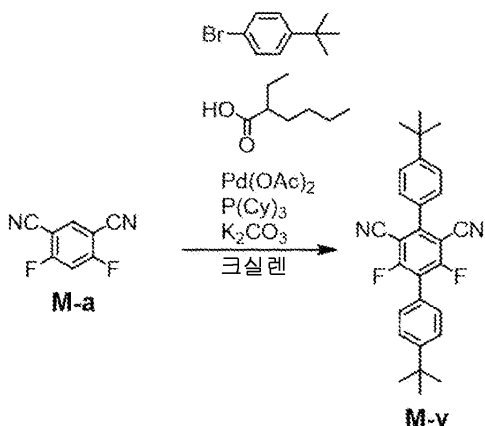
중간체 M-e(1.15 g, 3.03 mmol) 및 DMF(15.0 ml)을 넣고, 실온에서 20시간 교반했다. 반응 용액에 이온 교환수 50 ml를 넣고, 석출된 고체를 여과하여 취했다. 여과하여 취한 고체를 실리카 겔 컬럼 크로마토그래피로 정제하여, 1.55 g의 황색 고체를 얻었다. 얻어진 황색 고체를 ASAP-MS의 분석에 의해 중간체 M-u로 동정했다(수율 74%).

[2409] 질소 분위기 하에, 100 mL의 가지 플라스크에, 중간체 M-u(1.55 g, 2.25 mmol), 12H-[1]벤조티에노[2,3-a]카르바졸(0.737 g, 2.70 mmol), 불화세슘(1.02 g, 6.74 mmol), 및 DMF(11.0 ml)을 넣고, 50℃에서 1시간 교반했다. 반응 혼합물에 물 50 mL를 가하고, 석출된 고체를 실리카 겔 컬럼 크로마토그래피로 정제하여, 1.6 g의 황색 고체를 얻었다. 얻어진 황색 고체를 ASAP-MS의 분석에 의해 화합물 A-12로 동정했다(수율 75%).

[2410] (화합물 A-13의 합성)

[2411] 화합물 A-13의 합성 방법을 이하에 설명한다.

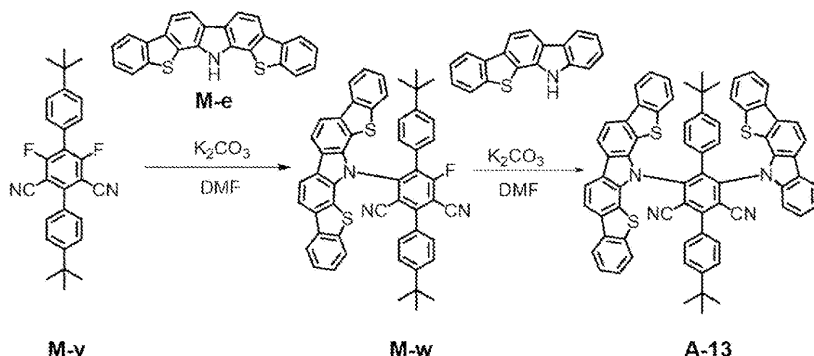
[2412] [화학식 266]



[2413]

[2414] 질소 분위기 하에, 500 mL의 3구 플라스크에, 중간체 M-a(20 g, 122 mmol), 디아세톡시팔라듐(1.368 g, 6.09 mmol), 트리시클로헥실포스핀(5.13 g, 18.28 mmol), 탄산칼륨(42.1 g, 305 mmol) 및 크실렌(244 ml)을 가하고, 실온에서 30분 교반했다. 그 후, 2-에틸헥산산(7.81 ml, 48.7 mmol) 및 1-브로모-4-(tert-부틸)벤젠(45.7 ml, 268 mmol)을 넣고, 100℃에서 5시간 교반했다. 반응 용액을 실온으로 되돌리고, 염화메틸렌 200 ml를 가하여, 세라이트에 통과시켰다. 얻어진 용액의 염화메틸렌을 제거하고, 침전한 고체를 여과했다. 얻어진 고체를 실리카 겔 컬럼 크로마토그래피로 정제하여, 36 g의 백색 고체를 얻었다. 얻어진 백색 고체를 GC-MS의 분석에 의해 중간체 M-v로 동정했다(수율 69%).

[2415] [화학식 267]



[2416]

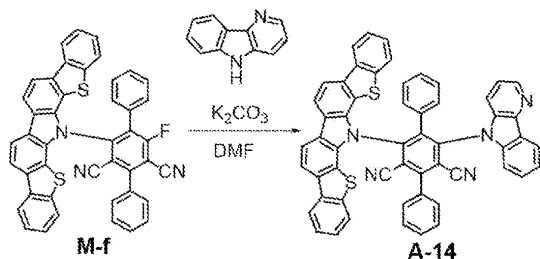
[2417] 질소 분위기 하에, 200 mL의 3구 플라스크에, 중간체 M-v(7.2 g, 16.80 mmol), 중간체 M-e(6.38 g, 16.80 mmol), 탄산칼륨(4.64 g, 33.6 mmol) 및 DMF(56.0 ml)을 넣고, 100℃에서 4시간 교반했다. 반응 용액에 이온 교환수 100 ml를 넣고, 석출된 고체를 여과하여 취했다. 여과하여 취한 고체를 실리카 겔 컬럼 크로마토그래피로 정제하여, 12 g의 황색 고체를 얻었다. 얻어진 황색 고체를 ASAP-MS의 분석에 의해 중간체 M-w로 동정했다(수율 91%).

[2418] 질소 분위기 하에, 100 mL의 3구 플라스크에, 중간체 M-w(3 g, 3.81 mmol), 12H-벤조[4,5]티에노[2,3-a]카르바졸(1.249 g, 4.57 mmol), 탄산칼륨(0.789 g, 5.71 mmol) 및 DMF(12.69 ml)을 넣고, 120℃에서 4시간 교반했다. 반응 혼합물에 물 50 mL를 가하고, 석출된 고체를 실리카 겔 컬럼 크로마토그래피로 정제하여, 3.5 g의 황색 고체를 얻었다. 얻어진 황색 고체를 ASAP-MS의 분석에 의해 화합물 A-13으로 동정했다(수율 88%).

[2419] (화합물 A-14의 합성)

[2420] 화합물 A-14의 합성 방법을 이하에 설명한다.

[2421] [화학식 268]



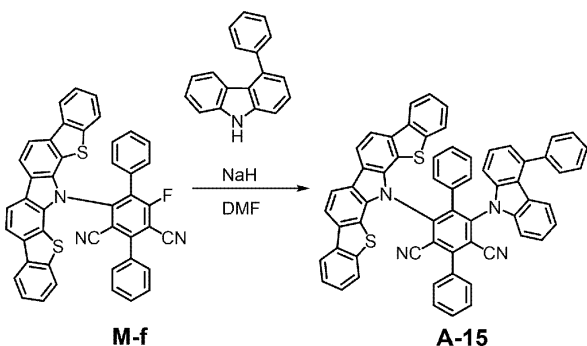
[2422]

[2423] 질소 분위기 하에, 100 mL의 3구 플라스크에, 5H-피리도[3,2-b]인돌(0.684 g, 4.07 mmol), 탄산칼륨(0.614 g, 4.44 mmol), 중간체 M-f(2.5 g, 3.70 mmol) 및 DMF(12.33 ml)을 넣고, 140℃에서 4시간 교반했다. 반응 혼합물에 메탄올 20 mL를 가하고, 석출된 고체를 실리카 겔 컬럼 크로마토그래피로 정제하여, 3.1 g의 황색 고체를 얻었다. 얻어진 황색 고체를 ASAP-MS의 분석에 의해 화합물 A-14로 동정했다(수율 88%).

[2424] (화합물 A-15의 합성)

[2425] 화합물 A-15의 합성 방법을 이하에 설명한다.

[2426] [화학식 269]



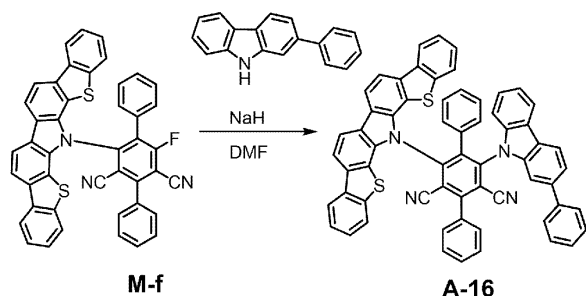
[2427]

[2428] 질소 분위기 하에, 100 mL의 3구 플라스크에, 4-페닐-9H-카르바졸(1.1 g, 4.44 mmol), 수소화나트륨(40 질량% 오일 함유)(0.18 g, 4.44 mmol), 및 DMF(37 ml)을 넣고, 0℃에서 1시간 교반했다. 다음으로 0℃에서 중간체 M-f(2.5 g, 3.70 mmol)를 넣고, 천천히 실온까지 승온하고, 1시간 실온에서 더 교반했다. 교반 후, 반응 혼합물에 이온 교환수를 30 ml 가하고, 석출된 고체를 여과했다. 얻어진 고체를 실리카 겔 컬럼 크로마토그래피로 정제하여, 황색 고체를 얻었다. 얻어진 황색 고체를 ASAP-MS의 분석에 의해 화합물 A-15로 동정했다(수율 72%).

[2429] (화합물 A-16의 합성)

[2430] 화합물 A-16의 합성 방법을 이하에 설명한다.

[2431] [화학식 270]



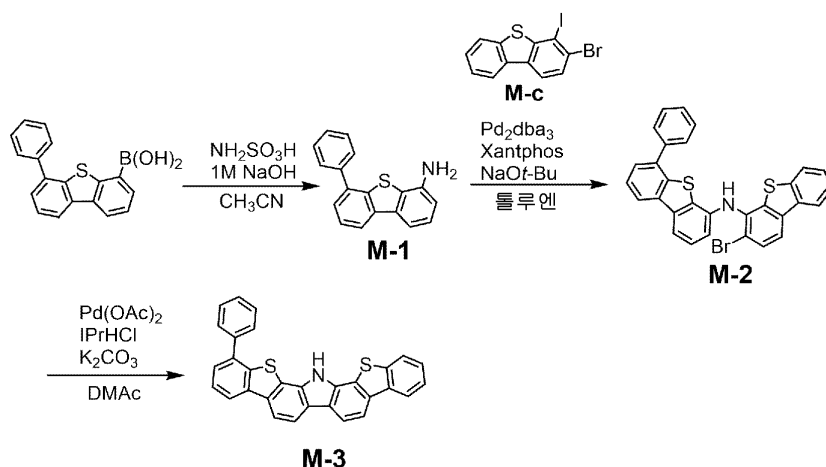
[2432]

[2433] 질소 분위기 하에, 100 mL의 3구 플라스크에, 2-페닐-9H-카르바졸(1.1 g, 4.44 mmol), 수소화나트륨(40 질량% 오일 함유)(0.18 g, 4.44 mmol), 및 DMF(37 ml)을 넣고, 0℃에서 1시간 교반했다. 다음으로 0℃에서 중간체 M-f(2.5 g, 3.70 mmol)를 넣고, 천천히 실온까지 승온하고, 1시간 실온에서 더 교반했다. 반응 혼합물에 이온 교환수를 30 ml 가하고, 석출된 고체를 여과했다. 얻어진 고체를 실리카 겔 컬럼 크로마토그래피로 정제하여, 황색 고체를 얻었다. 얻어진 황색 고체를 ASAP-MS의 분석에 의해 화합물 A-16으로 동정했다(수율 63%).

[2434] (화합물 A-17의 합성)

[2435] 화합물 A-17의 합성 방법을 이하에 설명한다.

[2436] [화학식 271]



[2437]

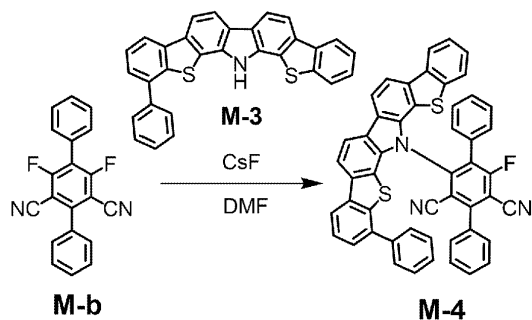
[2438] 질소 분위기 하에, 1000 mL의 3구 플라스크에, 보론산, B-(6-페닐-4-디벤조티에닐)-(40 g, 132 mmol), 술파민산(29.7 g, 263 mmol), 아세트니트릴(658 ml), 및 수산화나트륨(1 M)(881 ml, 881 mmol)을 넣고 실온에서 24시간 교반했다. 교반 후, 톨루엔을 이용하여 추출하고, 유기층을 회수했다. 다음 날, 회수한 유기층을 증발기를 이용하여 용매를 제거했다. 얻어진 고체를 실리카 겔 컬럼 크로마토그래피로 정제하여 17 g의 백색 고체를 얻었다. 얻어진 백색 고체를 GC-MS의 분석에 의해 중간체 M-1로 동정했다(수율 48%).

[2439] 질소 분위기 하에, 500 ml의 3구 플라스크에 중간체 M-1(10.6 g, 38.6 mmol), 중간체 M-c(15 g, 38.6 mmol), 트리스(디벤질리덴아세톤)디팔라듐(0)(0.353 g, 0.386 mmol), Xantphos(1.13 g, 1.54 mmol), 나트륨 tert-부톡시드(5.56 g, 57.8 mmol) 및 톨루엔(129 ml)을 가하고, 100℃에서 8시간 가열 교반 후에 실온(25℃)까지 냉각시켰다. 냉각 후에 얻어진 용액을 실리카 겔 크로마토그래피로 정제하여, 25 g의 백색 고체를 얻었다. 얻어진 백색 고체를 ASAP-MS의 분석에 의해 중간체 M-2로 동정했다(수율 77%).

[2440] 질소 분위기 하에, 200 ml의 3구 플라스크에, 중간체 M-2(8.5 g, 15.84 mmol), 1,3-비스(2,6-디이소프로필페닐)이미다졸륨클로라이드(IPrHCl)(0.202 g, 0.475 mmol), 아세트산팔라듐(II)(0.053 g, 0.238 mmol), 탄산칼륨(4.60 g, 33.3 mmol) 및 N,N-디메틸아세트아미드(DMAc)(52.8 ml)를 가하고, 160℃에서 10시간 교반 후에 실온(25℃)까지 냉각시켰다. 석출된 고체를 여과하여 취하고, 메탄올로 세정하고 7.2 g의 백색 고체를 얻었다. 얻어진 백색 고체를 ASAP-MS의 분석에 의해 중간체 M-3으로 동정했다(수율

73%).

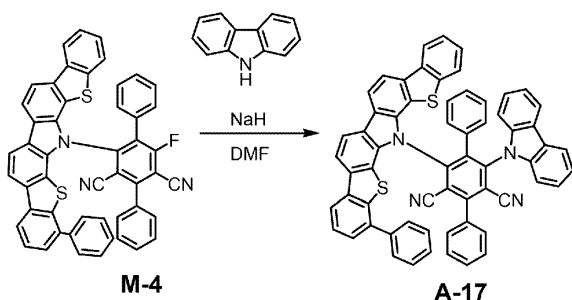
[2441] [화학식 272]



[2442]

[2443] 질소 분위기 하에, 100 mL의 가지 플라스크에 중간체 M-3(4.0 g, 8.8 mmol), 불화세슘(2.7 g, 17.6 mmol), 중간체 M-b(2.9 g, 9.22 mmol) 및 DMF(30 ml)을 넣고, 실온에서 12시간 교반했다. 교반 후, 반응 용액에 이온 교환수 50 ml를 넣고, 석출된 고체를 여과하여 취했다. 여과하여 취한 고체를 실리카 겔 컬럼 크로마토그래피로 정제하여, 5.5 g의 황색 고체를 얻었다. 얻어진 황색 고체를 ASAP-MS의 분석에 의해 중간체 M-4로 동정했다(수율 83%).

[2444] [화학식 273]



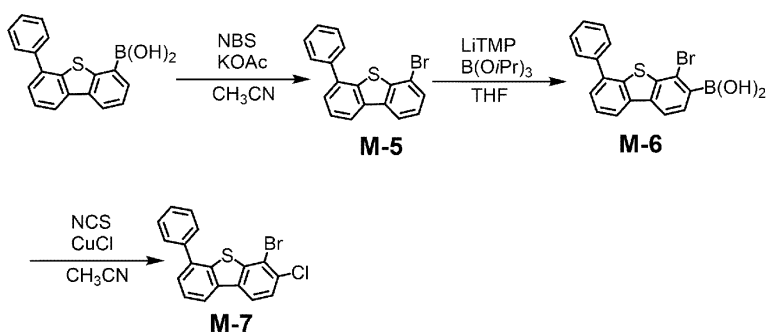
[2445]

[2446] 질소 분위기 하에, 100 mL의 3구 플라스크에, 9H-카르바졸(1.0 g, 45.98 mmol), 수소화나트륨(40 질량% 오일 함유)(0.24 g, 5.98 mmol), 및 DMF(40 ml)을 넣고, 0℃에서 1시간 교반했다. 다음으로 0℃에서 중간체 M-4(3.0 g, 3.99 mmol)를 넣고, 천천히 실온까지 승온하고, 1시간 실온에서 더 교반했다. 교반 후, 반응 혼합물에 이온 교환수를 30 ml 가하고, 석출된 고체를 여과했다. 얻어진 고체를 실리카 겔 컬럼 크로마토그래피로 정제하여, 황색 고체 2.9 g을 얻었다. 얻어진 황색 고체를 ASAP-MS의 분석에 의해 화합물 A-17로 동정했다(수율 81%).

[2447] (화합물 A-18의 합성)

[2448] 화합물 A-18의 합성 방법을 이하에 설명한다.

[2449] [화학식 274]



[2450]

[2451] 질소 분위기 하에, 1000 mL의 3구 플라스크에, 보론산, B-(6-페닐-4-디벤조티에닐)-(50 g, 164 mmol), N-브로모숙신이미드(NBS)(32.2 g, 181 mmol), 아세트산칼륨(KOAc)(3.23 g, 32.9 mmol) 및 아세트니트릴(470 ml)을 넣

고, 50℃에서 6시간 교반했다. 교반 후, 반응 혼합물에 이온 교환수를 400 mL 가하고, 석출된 고체를 실리카 겔 컬럼 크로마토그래피로 정제하여 44 g의 백색 고체를 얻었다. 얻어진 백색 고체를 ASAP-MS의 분석에 의해 중간체 M-5로 동정했다(수율 79%).

[2452]

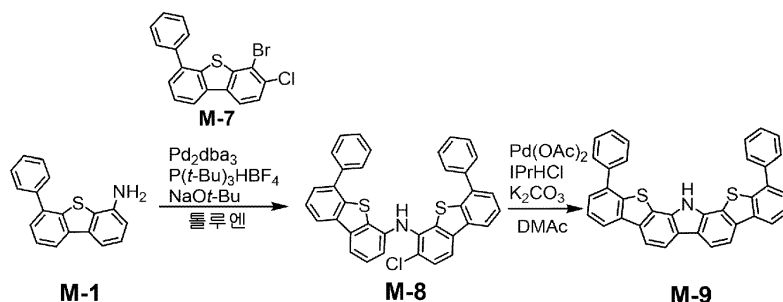
질소 분위기 하에, 1000 mL의 3구 플라스크에 2,2,6,6-테트라메틸피페리딘(26.1 mL, 153 mmol) 및 THF(236 mL)을 넣고, 아이스 배스를 이용하여 0℃까지 냉각했다. 냉각 후의 반응 용액에 n-부틸리튬(1.6 M 헥산 용액)(96 mL, 153 mmol)을 적하했다. 적하 후, 0℃에서 30분간 교반했다. 다음으로 드라이 아이스/메탄올 배스를 이용하여 -78℃까지 냉각시켰다. 냉각 후, 트리이소프로필 보레이트(33.3 g, 177 mmol), 중간체 M-5(40 g, 118 mmol)의 순으로 넣고, -78℃로부터 실온까지 천천히 승온하면서 교반했다. 반응 종료 후, 염산 10%를 100 mL 적하했다. 적하 후, 유기층을 회수하고, 얻어진 고체를 톨루엔으로 세정하여, 40 g의 백색 고체를 얻었다. 얻어진 백색 고체를 ASAP-MS의 분석에 의해 중간체 M-6으로 동정했다(수율 89%).

[2453]

질소 분위기 하에, 1000 mL의 3구 플라스크에, 중간체 M-6(40 g, 104 mmol), N-클로로숙신이미드(NCS)(13.94 g, 104 mmol), 염화구리(I)(10.34 g, 104 mmol) 및 아세트니트릴(348 mL)을 넣고, 60℃에서 6시간 교반했다. 반응 혼합물에 염화메틸렌을 300 mL 가하여 세라이트에 통과시키고, 얻어진 용액을 농축했다. 얻어진 고체를 실리카 겔 컬럼 크로마토그래피로 정제하여 28 g의 백색 고체를 얻었다. 얻어진 백색 고체를 ASAP-MS의 분석에 의해 중간체 M-7로 동정했다(수율 72%).

[2454]

[화합식 275]



[2455]

[2456]

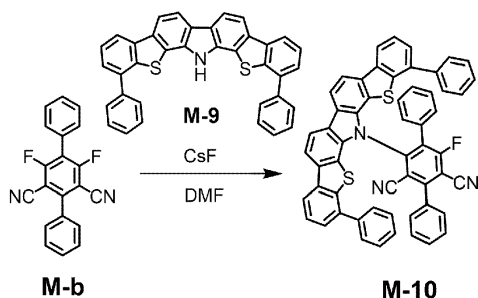
질소 분위기 하에, 100 mL의 3구 플라스크에 중간체 M-1(3.5 g, 12.6 mmol), 중간체 M-7(4.7 g, 12.6 mmol), 트리스(디벤질질리덴아세톤)디팔라듐(0)(0.353 g, 0.386 mmol), 트리-*tert*-부틸포스포늄테트라플루오로보레이트(0.17 g, 0.19 mmol), 나트륨 *tert*-부톡사이드(1.8 g, 19.0 mmol) 및 톨루엔(42 mL)을 가하고, 60℃에서 8시간 가열 교반 후에 실온(25℃)까지 냉각시켰다. 얻어진 용액을 실리카 겔 크로마토그래피로 정제하여, 5 g의 백색 고체를 얻었다. 얻어진 백색 고체를 ASAP-MS의 분석에 의해 중간체 M-8로 동정했다(수율 70%).

[2457]

질소 분위기 하에, 500 mL의 3구 플라스크에, 중간체 M-8(25 g, 44 mmol), 1,3-비스(2,6-디이소프로필페닐)이미다졸륨클로라이드(IPrHCl)(0.202 g, 0.475 mmol), 아세트산팔라듐(II)(0.15 g, 0.66 mmol), 탄산칼륨(13 g, 92 mmol) 및 N,N-디메틸아세트아미드(DMAc)(220 mL)를 가하고, 160℃에서 10시간 교반 후에 실온(25℃)까지 냉각시켰다. 석출된 고체를 여과하여 취하고, 메탄올로 세정하여, 18 g의 백색 고체를 얻었다. 얻어진 백색 고체를 ASAP-MS의 분석에 의해 중간체 M-9로 동정했다(수율 77%).

[2458]

[화합식 276]



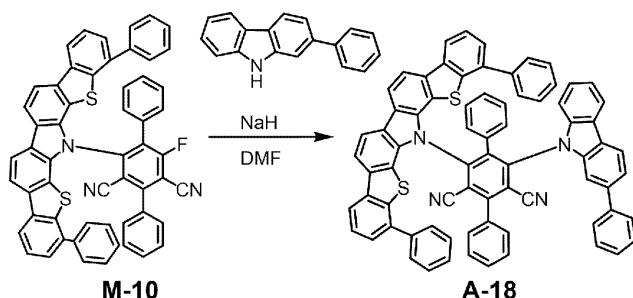
[2459]

[2460]

질소 분위기 하에, 500 mL의 3구 플라스크에 중간체 M-9(18 g, 8.8 mmol), 불화세슘(7.7 g, 51 mmol), 중간체 M-b(11 g, 35.5 mmol) 및 DMF(230 mL)을 넣고, 실온에서 12시간 교반했다. 반응 용액에 이온 교환수 200 mL를

넣고, 석출된 고체를 여과하여 취했다. 여과하여 취한 고체를 실리카 겔 컬럼 크로마토그래피로 정제하여, 20 g의 황색 고체를 얻었다. 얻어진 황색 고체를 ASAP-MS의 분석에 의해 중간체 M-10으로 동정했다(수율 71%).

[2461] [화학식 277]



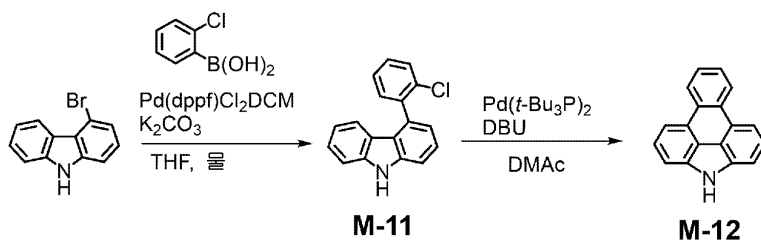
[2462]

[2463] 질소 분위기 하에, 100 mL의 3구 플라스크에, 2-페닐-9H-카르바졸(1.4 g, 5.80 mmol), 수소화나트륨(40 질량% 오일 함유)(0.23 g, 5.80 mmol), 및 DMF(50 ml)을 넣고, 0℃에서 1시간 교반했다. 다음으로 0℃에서 중간체 M-10(4.0 g, 4.83 mmol)을 넣고, 천천히 실온까지 승온하고, 1시간 실온에서 더 교반했다. 반응 혼합물에 이온 교환수를 30 ml 가하고, 석출된 고체를 여과하여 취했다. 얻어진 고체를 실리카 겔 컬럼 크로마토그래피로 정제하여, 황색 고체 2.9 g을 얻었다. 얻어진 황색 고체를 ASAP-MS의 분석에 의해 화합물 A-18로 동정했다(수율 89%).

[2464] (화합물 A-19의 합성)

[2465] 화합물 A-19의 합성 방법을 이하에 설명한다.

[2466] [화학식 278]

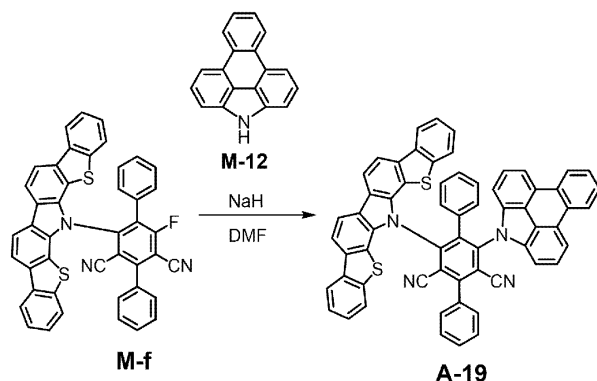


[2467]

[2468] 질소 분위기 하에, 500 mL의 3구 플라스크에, 4-브로모-9H-카르바졸(66.6 g, 271 mmol), (2-클로로페닐)보론산(44.4 g, 284 mmol), 탄산칼륨(56.1 g, 406 mmol), [1,1'-비스(디페닐포스피노)페로센]디클로로팔라듐(II)디클로로메탄 부가물(1.1 g, 1.35 mmol), THF(200 ml) 및 이온 교환수(65 ml)를 넣고, 실온에서 8시간 교반했다. 교반 후 반응 용액을 농축했다. 농축 후의 반응 용액에 이온 교환수 100 ml를 넣고, 톨루엔으로 유기층을 추출하고, 추출한 유기층을 물 및 식염수로 세정하고, 황산마그네슘으로 건조시킨 후, 용매를 회전식 증발기로 감압 제거했다. 용매의 감압 제거 후에 얻어진 화합물을 실리카 겔 컬럼 크로마토그래피에 의해 정제하여 백색 고체를 얻었다. 얻어진 백색 고체를 ASAP-MS를 이용하여 중간체 M-11로 동정했다(수율 96%).

[2469] 질소 분위기 하에, 100 ml의 3구 플라스크에, 중간체 M-11(6 g, 21.6 mmol), 디아자비스클로로테센(DBU)(9.67 ml, 64.8 mmol), 비스(트리-tert-부틸포스핀)팔라듐(0)(0.552 g, 1.080 mmol) 및 N,N-디메틸아세트아미드(DMAc)(22 ml)를 가하고, 20시간 가열 교반 환류했다. 반응 종료 후에 이온 교환수 100 ml를 넣고, 톨루엔으로 유기층을 추출하고, 추출한 유기층을 물 및 식염수로 세정하고, 황산나트륨으로 건조시킨 후, 용매를 회전식 증발기로 감압 제거했다. 용매의 감압 제거 후에 얻어진 화합물을 실리카 겔 컬럼 크로마토그래피에 의해 정제하여, 백색 고체 2.8 g을 얻었다. 얻어진 백색 고체를 ASAP-MS를 이용하여 중간체 M-12로 동정했다(수율 54%).

[2470] [화학식 279]



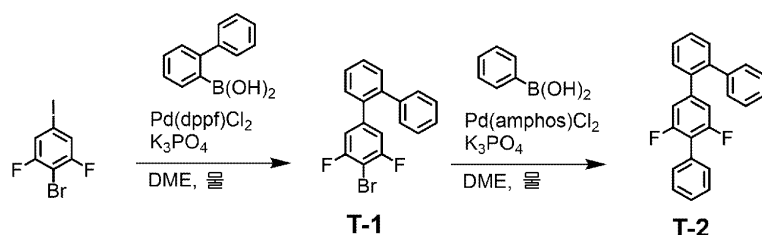
[2471]

[2472] 질소 분위기 하에, 200 mL의 3구 플라스크에, 중간체 M-12(1.29 g, 5.33 mmol), 수소화나트륨(40 질량% 오일 함유)(0.21 g, 5.33 mmol), 및 DMF(45 ml)을 넣고, 0℃에서 1시간 교반했다. 다음으로 0℃에서 중간체 M-f(3.0 g, 4.44 mmol)를 넣고, 천천히 실온까지 승온하고, 1시간 실온에서 더 교반했다. 반응 혼합물에 아세트산에틸을 50 ml 가하고, 고체를 여과했다. 얻어진 고체를 실리카 겔 컬럼 크로마토그래피로 정제하여, 황색 고체를 3.4 g 얻었다. 얻어진 황색 고체를 ASAP-MS의 분석에 의해 화합물 A-19로 동정했다(수율 85%).

[2473] (화합물 A-20의 합성)

[2474] 화합물 A-20의 합성 방법을 이하에 설명한다.

[2475] [화학식 280]

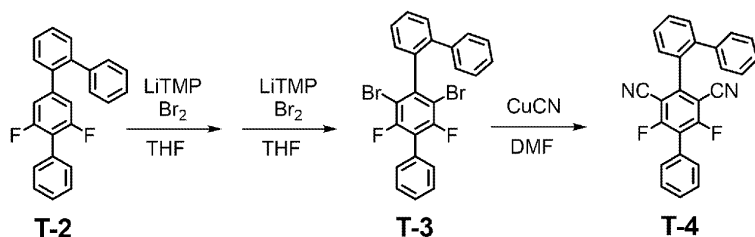


[2476]

[2477] 질소 분위기 하에, 200 mL의 3구 플라스크에, 2-브로모-1,3-디플루오로-5-요오도벤젠(7.00 g, 21.95 mmol), [1,1'-비페닐]-2-일보론산(4.78 g, 24.15 mmol), 인산칼륨(13.98 g, 65.90 mmol), [1,1'-비스(디페닐포스피노)페로센]디클로로팔라듐(II)디클로로메탄 부가물(0.359 g, 0.439 mmol), DME(117 ml) 및 이온 교환수(29 ml)를 넣고, 실온에서 8시간 교반했다. 반응 용액을 농축한 후, 이온 교환수 20 ml를 넣고, 디클로로메탄으로 유기층을 추출하고, 추출한 유기층을 물 및 식염수로 세정하고, 황산마그네슘으로 건조시킨 후, 용매를 회전식 증발기로 감압 제거했다. 용매의 감압 제거 후에 얻어진 화합물을 실리카 겔 컬럼 크로마토그래피에 의해 정제하여, 중간체 T-1(6.97 g, 20.05 mmol, 수율 91%)을 얻었다.

[2478] 질소 분위기 하에, 200 mL의 3구 플라스크에, 중간체 T-1(6.97 g, 20.05 mmol), 페닐보론산(2.95 g, 24.23 mmol), 탄산칼륨(12.86 g, 60.6 mmol), 1,1'-비스(디페닐포스피노)페로센]디클로로팔라듐(II)디클로로메탄 부가물(0.330 g, 0.404 mmol), DME(108 ml) 및 이온 교환수(26.9 ml)를 넣고, 60℃에서 4시간 교반했다. 반응 용액을 농축한 후, 이온 교환수 20 ml를 넣고, 디클로로메탄으로 유기층을 추출하고, 추출한 유기층을 물 및 식염수로 세정하고, 황산마그네슘으로 건조시킨 후, 용매를 회전식 증발기로 감압 제거했다. 용매의 감압 제거 후에 얻어진 화합물을 실리카 겔 컬럼 크로마토그래피에 의해 정제하여, 중간체 T-2(6.23 g, 18.1 mmol, 수율 90%)를 얻었다.

[2479] [화학식 281]



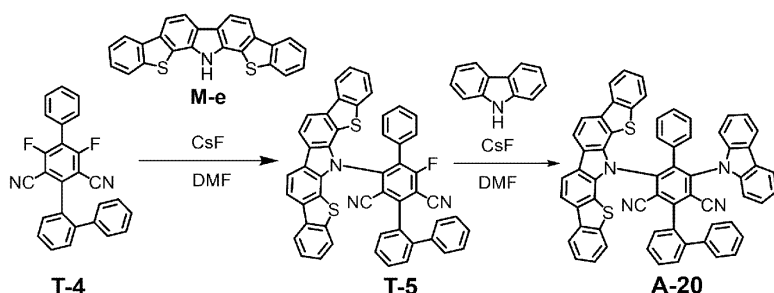
[2480]

[2481] 질소 분위기 하에, 200 mL의 3구 플라스크에, 2,2,6,6-테트라테르티로피페리딘(6.16 mL, 36.2 mmol) 및 THF(60 mL)을 가했다. 드라이 아이스/아세톤 배스에서, 3구 플라스크 내의 재료를 -78℃까지 냉각시킨 후, n-부틸리튬을 22.6 mL(1.6 M, 헥산 용액) 적하했다. 0℃에서 20분 교반하고, -78℃까지 냉각시킨 후, 중간체 T-2(6.2 g, 18.1 mmol)를 THF 60 mL에 녹인 용액을 3구 플라스크에 가하여 20분 교반했다. 반응 용액에 브롬(2.32 mL, 45.0 mmol)을 가하고, 실온으로 되돌리고 나서 20분 교반했다. 반응 용액에 포화 아황산수소나트륨 수용액(100 mL)을 가하고, 아세트산에틸에 의해 유기층을 추출하고, 추출한 유기층을 물 및 식염수로 세정하고, 세정 후의 유기층을 황산마그네슘으로 건조시키고, 건조된 유기층을 회전식 증발기로 농축했다. 농축 후에 얻어진 화합물을 실리카 겔 컬럼 크로마토그래피에 통과시키고, 용매를 회전식 증발기로 감압 제거했다. 얻어진 액체를 THF 60 mL에 녹이고, 다시 조제한 LiTMP의 THF 용액에 -78℃에서 적하하여 15분 교반했다. 반응 용액에 브롬(2.32 mL, 45.0 mmol)을 가하고, 실온으로 되돌리고 나서 20분 교반했다. 반응 용액에 포화 아황산수소나트륨 수용액(100 mL)을 가하고, 헥산에 의해 유기층을 추출하고, 추출한 유기층을 물 및 식염수로 세정하고, 세정 후의 유기층을 황산마그네슘으로 건조시키고, 건조된 유기층을 회전식 증발기로 농축했다. 농축 후에 얻어진 화합물을 실리카 겔 컬럼 크로마토그래피에 의해 정제하여, 중간체 T-3(8.1 g, 16.2 mmol, 수율 89%)을 얻었다.

[2482]

질소 분위기 하에, 1 L의 3구 플라스크에, 중간체 T-3(8.1 g, 16.2 mmol), 시아노구리(3.19 g, 35.6 mmol) 및 NMP(162 mL)을 넣고, 180℃에서 10시간 교반했다. 반응 혼합물에 염화메틸렌 500 mL를 가하여, 세라이트를 이용하여 여과하고, 여과액을 증발기로 농축했다. 얻어진 고체를 실리카 겔 크로마토그래피로 정제하여, 1.74 g의 백색 고체를 얻었다. 얻어진 백색 고체를 GC-MS의 분석에 의해 중간체 T-4로 동정했다(수율 27%).

[2483] [화학식 282]



[2484]

[2485] 질소 분위기 하에, 100 mL의 3구 플라스크에 중간체 T-4(1.95 g, 4.97 mmol), 불화세슘(2.27 g, 14.9 mmol), 중간체 M-e(1.89 g, 4.97 mmol) 및 DMF(49.7 mL)을 넣고, 실온에서 20시간 교반했다. 반응 용액에 이온 교환수 50 mL를 넣고, 석출된 고체를 여과하여 취했다. 여과하여 취한 고체를 실리카 겔 컬럼 크로마토그래피로 정제하여, 2.9 g의 황색 고체를 얻었다. 얻어진 황색 고체를 ASAP-MS의 분석에 의해 중간체 T-5로 동정했다(수율 78%).

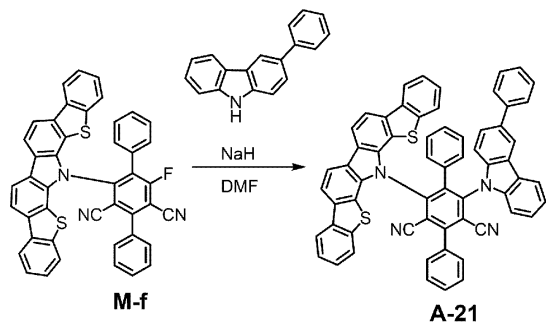
[2486]

질소 분위기 하에, 100 mL의 3구 플라스크에, 중간체 T-5(1.5 g, 2.00 mmol), 9H-카르바졸(0.567 g, 3.39 mmol), 불화세슘(0.909 g, 5.98 mmol), 및 DMF(20 mL)을 넣고, 80℃에서 4시간 교반했다. 반응 혼합물에 메탄올 200 mL를 가하고, 석출된 고체를 컬럼 크로마토그래피로 정제하여, 0.9 g의 황색 고체를 얻었다. 얻어진 황색 고체를 ASAP-MS의 분석에 의해 화합물 A-20으로 동정했다(수율 50%).

[2487] (화합물 A-21의 합성)

[2488] 화합물 A-21의 합성 방법을 이하에 설명한다.

[2489] [화학식 283]



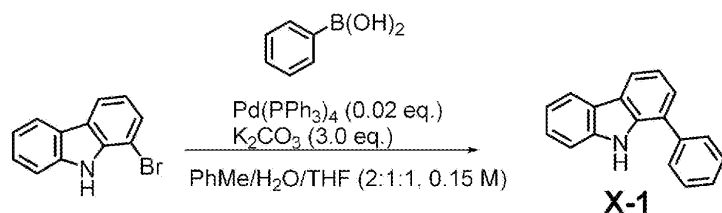
[2490]

[2491] 질소 분위기 하에, 100 mL의 3구 플라스크에, 3-페닐-9H-카르바졸(1.1 g, 4.44 mmol), 수소화나트륨(40 질량% 오일 함유)(0.18 g, 4.44 mmol) 및 DMF(37 ml)을 넣고, 0℃에서 1시간 교반했다. 다음으로 반응 용액에 0℃에서 중간체 M-f(2.5 g, 3.70 mmol)를 넣고, 천천히 실온까지 승온하고, 1시간 실온에서 더 교반했다. 반응 혼합물에 이온 교환수를 30 ml 가하고, 석출된 고체를 여과했다. 얻어진 고체를 실리카 겔 컬럼 크로마토그래피로 정제하여, 황색 고체 2.7 g을 얻었다. 얻어진 황색 고체를 ASAP-MS의 분석에 의해 화합물 A-21로 동정했다(수율 81%).

[2492] (화합물 A-22의 합성)

[2493] 화합물 A-22의 합성 방법을 이하에 설명한다.

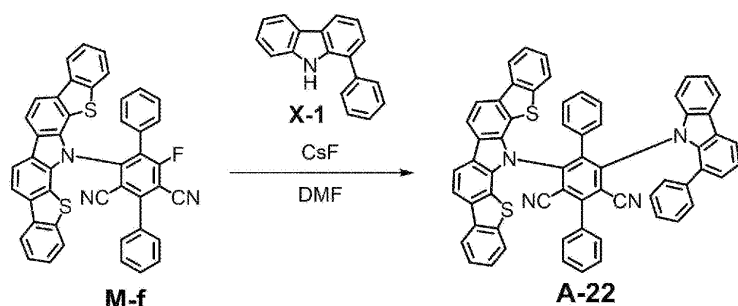
[2494] [화학식 284]



[2495]

[2496] 질소 분위기 하에, 500 mL의 3구 플라스크에, 1-브로모-9H-카르바졸(10 g, 40.6 mmol), 페닐보론산(7.43 g, 60.9 mmol), 탄산칼륨(16.85 g, 122 mmol), 테트라키스트리페닐포스핀팔라듐(0.939 g, 0.813 mmol), 톨루엔(135 ml), THF(67.7 ml) 및 이온 교환수(67.7 ml)를 넣고, 100℃에서 5시간 교반했다. 실온에 방랭 후, 반응 용액에 이온 교환수를 가하고, 톨루엔으로 유기층을 추출했다. 유기층을 황산나트륨으로 건조시킨 후, 용매를 회전식 증발기로 감압 제거했다. 농축 후에 얻어진 화합물을 실리카 겔 컬럼 크로마토그래피(헥산/디클로로메탄 =80%:20%)에 의해 정제하여, 중간체 X-1(8.50 g, 34.9 mmol, 수율 86%)을 얻었다.

[2497] [화학식 285]



[2498]

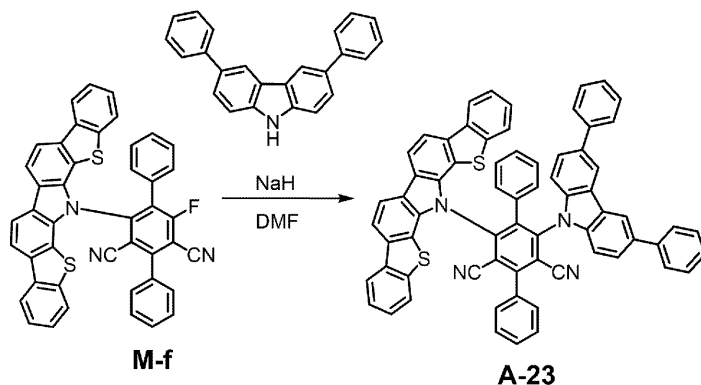
[2499] 질소 분위기 하에, 100 mL의 3구 플라스크에, 중간체 M-f(1.58 g, 2.34 mmol), 중간체 X-1(0.683 g, 2.81 mmol), 불화세슘(1.776 g, 11.69 mmol) 및 DMF(23.4 ml)을 넣고, 130℃에서 5시간, 150℃에서 4시간 교반했다. 실온에 방랭 후, 반응 혼합물에 물을 가하고, 석출된 고체를 메탄올로 세정했다. 고체를 컬럼 크로마토그래피로 정제하여, 0.339 g의 황색 고체를 얻었다. 얻어진 황색 고체를 ASAP-MS의 분석에 의해 화합물 A-22로 동정했다

(수율 16%).

(화합물 A-23의 합성)

화합물 A-23의 합성 방법을 이하에 설명한다.

[화학식 286]

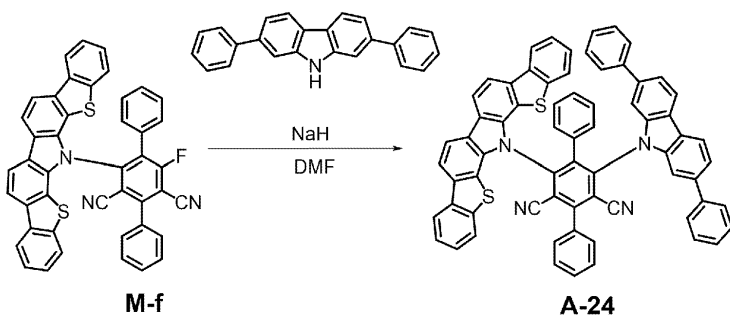


질소 분위기 하에, 100 ml의 3구 플라스크에, 3,6-디페닐카르바졸(1.418 g, 4.44 mmol) 및 DMF(37.0 ml)을 넣고, 0℃에서 빙랭했다. 빙랭 후의 반응 용액에 수소화나트륨(40 질량% 오일 함유)(0.178 g, 4.44 mmol)을 넣고, 0℃에서 1시간 교반했다. 반응 용액에 0℃에서 중간체 M-f(2.5 g, 3.70 mmol)를 넣고, 천천히 실온까지 승온하고, 1시간 실온에서 더 교반했다. 반응 혼합물에 이온 교환수를 30 ml 가하고, 석출된 고체를 여과했다. 얻어진 고체를 실리카 겔 컬럼 크로마토그래피로 정제하여, 황색 고체 3.3 g을 얻었다. 얻어진 황색 고체를 ASAP-MS의 분석에 의해 화합물 A-23으로 동정했다(수율 91%).

(화합물 A-24의 합성)

화합물 A-24의 합성 방법을 이하에 설명한다.

[화학식 287]

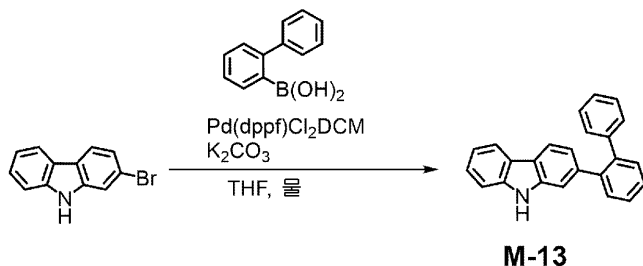


질소 분위기 하에, 100 ml의 3구 플라스크에, 2,7-디페닐카르바졸(1.418 g, 4.44 mmol) 및 DMF(37.0 ml)을 넣고, 0℃에서 빙랭했다. 빙랭 후의 반응 용액에 수소화나트륨(40 질량% 오일 함유)(0.178 g, 4.44 mmol)을 넣고, 0℃에서 1시간 교반했다. 반응 용액에 0℃에서 중간체 M-f(2.5 g, 3.70 mmol)를 넣고, 천천히 실온까지 승온하고, 1시간 실온에서 더 교반했다. 반응 혼합물에 이온 교환수를 30 ml 가하고, 석출된 고체를 여과했다. 얻어진 고체를 실리카 겔 컬럼 크로마토그래피로 정제하여, 황색 고체 2.8 g을 얻었다. 얻어진 황색 고체를 ASAP-MS의 분석에 의해 화합물 A-24로 동정했다(수율 78%).

(화합물 A-25의 합성)

화합물 A-25의 합성 방법을 이하에 설명한다.

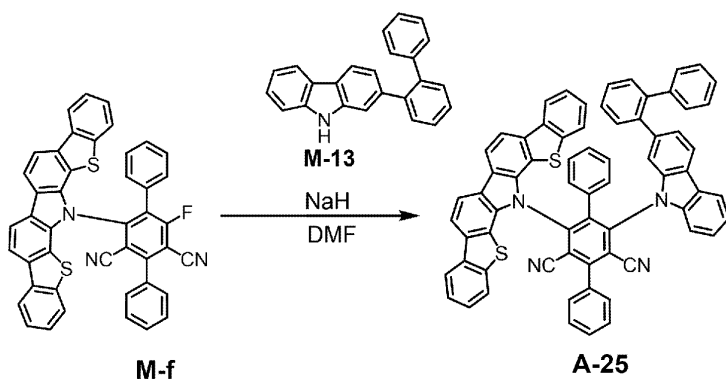
[2512] [화학식 288]



[2513]

[2514] 질소 분위기 하에, 100 mL의 3구 플라스크에, 2-브로모카르바졸(10 g, 40.6 mmol), 2-비페닐보론산(8.45 g, 42.7 mmol), 탄산칼륨(8.42 g, 60.9 mmol), [1,1'-비스(디페닐포스포노)페로센]디클로로팔라듐(II)디클로로메탄 부가물(1.1 g, 1.35 mmol), THF(30 ml) 및 이온 교환수(10 ml)를 넣고, 실온에서 8시간 교반했다. 반응 용액을 농축한 후, 이온 교환수 30 ml를 넣고, 톨루엔으로 유기층을 추출하고, 추출한 유기층을 물 및 식염수로 세정하고, 황산마그네슘으로 건조시킨 후, 용매를 회전식 증발기로 감압 제거했다. 용매의 감압 제거 후에 얻어진 화합물을 실리카 겔 컬럼 크로마토그래피로 정제하여, 백색 고체를 11 g 얻었다. 얻어진 백색 고체를 ASAP-MS를 이용하여 중간체 M-13으로 동정했다(수율 85%).

[2515] [화학식 289]



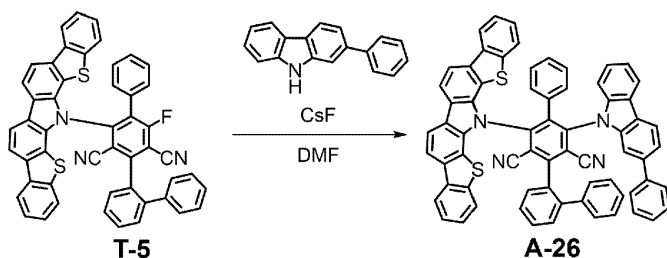
[2516]

[2517] 질소 분위기 하에, 100 ml의 3구 플라스크에, 중간체 M-13(1.42 g, 4.44 mmol) 및 DMF(40 ml)을 넣고, 0℃에서 빙랭했다. 빙랭 후의 반응 용액에 수소화나트륨(40 질량% 오일 함유)(0.18 g, 4.44 mmol)을 넣고, 0℃에서 1시간 교반했다. 0℃에서 중간체 M-f(2.5 g, 3.70 mmol)를 넣고, 천천히 실온까지 승온하고, 1시간 실온에서 더 교반했다. 반응 혼합물에 이온 교환수를 30 ml 가하고, 석출된 고체를 여과했다. 얻어진 고체를 실리카 겔 컬럼 크로마토그래피로 정제하여, 황색 고체 1.9 g을 얻었다. 얻어진 황색 고체를 ASAP-MS의 분석에 의해 화합물 A-25로 동정했다(수율 78%).

[2518] (화합물 A-26의 합성)

[2519] 화합물 A-26의 합성 방법을 이하에 설명한다.

[2520] [화학식 290]



[2521]

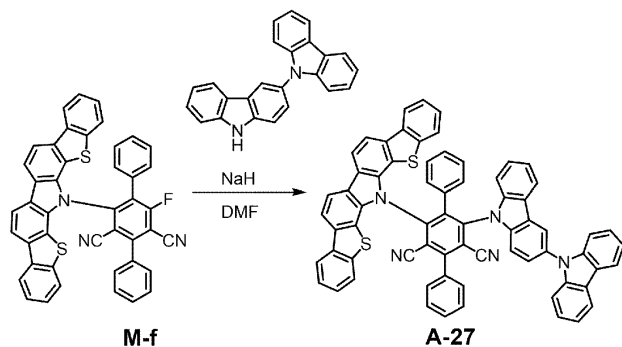
[2522] 질소 분위기 하에, 100 mL의 가지 플라스크에, 중간체 T-5(1.4 g, 1.86 mmol), 2-페닐-9H-카르바졸(0.770 g, 3.17 mmol), 불화세슘(0.849 g, 5.59 mmol) 및 DMF(18.6 ml)을 넣고, 80℃에서 5시간 교반했다. 반응 혼합물에

메탄올 200 mL에 가하고, 석출된 고체를 컬럼 크로마토그래피로 정제하여, 0.8 g의 황색 고체를 얻었다. 얻어진 황색 고체를 ASAP-MS의 분석에 의해 화합물 A-26으로 동정했다(수율 44%).

[2523] (화합물 A-27의 합성)

[2524] 화합물 A-27의 합성 방법을 이하에 설명한다.

[2525] [화학식 291]



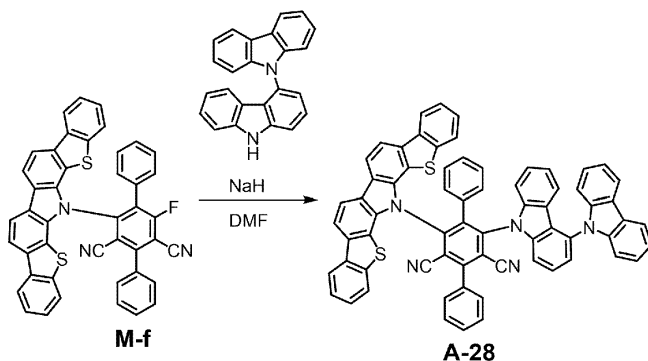
[2526]

[2527] 질소 분위기 하에, 100 mL의 3구 플라스크에, 3,9'-비[9H-카르바졸](1.77 g, 5.33 mmol), 수소화나트륨(40 질량% 오일 함유)(0.21 g, 5.33 mmol) 및 DMF(45 ml)을 넣고, 0℃에서 1시간 교반했다. 다음으로 반응 용액에 0℃에서 중간체 M-f(3.0 g, 4.44 mmol)를 넣고, 천천히 실온까지 승온하고, 1시간 실온에서 더 교반했다. 반응 혼합물에 이온 교환수를 30 ml 가하고, 석출된 고체를 여과했다. 얻어진 고체를 실리카 젤 컬럼 크로마토그래피로 정제하여, 황색 고체 2.7 g을 얻었다. 얻어진 황색 고체를 ASAP-MS의 분석에 의해 화합물 A-27로 동정했다(수율 62%).

[2528] (화합물 A-28의 합성)

[2529] 화합물 A-28의 합성 방법을 이하에 설명한다.

[2530] [화학식 292]



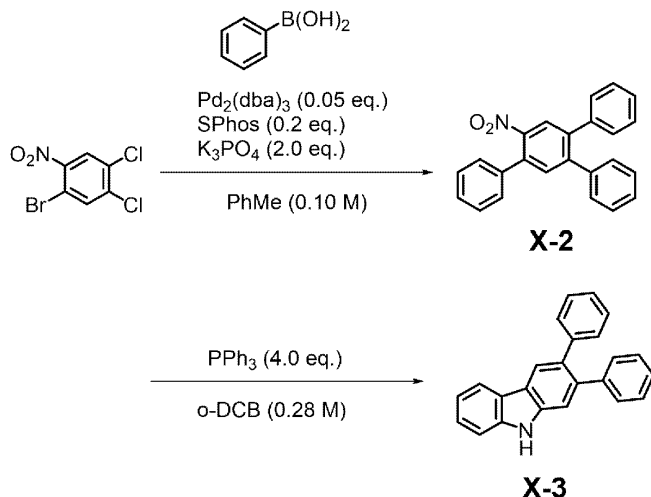
[2531]

[2532] 질소 분위기 하에, 100 mL의 3구 플라스크에, 4,9'-비[9H-카르바졸](0.83 g, 2.49 mmol), 수소화나트륨(40 질량% 오일 함유)(0.11 g, 2.84 mmol) 및 DMF(24 ml)을 넣고, 0℃에서 1시간 교반했다. 다음으로 반응 용액에 0℃에서 중간체 M-f(1.6 g, 2.37 mmol)를 넣고, 천천히 실온까지 승온하고, 1시간 실온에서 더 교반했다. 반응 혼합물에 이온 교환수를 20 ml 가하고, 석출된 고체를 여과했다. 얻어진 고체를 실리카 젤 컬럼 크로마토그래피로 정제하여, 황색 고체 1.7 g을 얻었다. 얻어진 황색 고체를 ASAP-MS의 분석에 의해 화합물 A-28로 동정했다(수율 73%).

[2533] (화합물 A-29의 합성)

[2534] 화합물 A-29의 합성 방법을 이하에 설명한다.

[2535] [화학식 293]



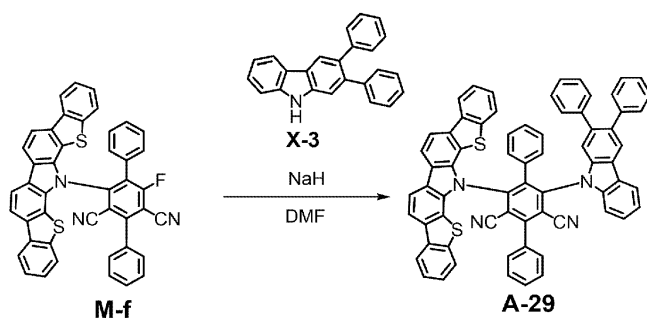
[2536]

[2537] 질소 분위기 하에, 1000 mL의 가지 플라스크에, 1-브로모-4,5-디클로로-2-니트로벤젠(8 g, 29.5 mmol), 페닐보론산(36 g, 295 mmol), 인산삼칼륨(16.85 g, 122 mmol), 트리스(디벤질리덴아세톤)디팔라듐(0)(1.30 g, 1.420 mmol), SPhos(2-디시클로헥실포스피노-2',6'-디메톡시비페닐)(2.40 g, 5.85 mmol) 및 톨루엔(135 ml)을 가하여, 110℃에서 6시간 교반했다. 실온에 방랭 후, 반응 용액에 이온 교환수 20 ml를 넣고, 아세트산에틸로 유기층을 추출했다. 유기층을 물로 세정하고, 황산나트륨으로 건조시킨 후, 용매를 회전식 증발기로 감압 제거했다. 용매의 감압 제거 후에 얻어진 화합물을 실리카 겔 컬럼 크로마토그래피(헥산/아세트산에틸=90%:10%-70%:30%)에 의해 정제하여, 중간체 X-2(1.15 g, 3.23 mmol, 수율 11%)를 얻었다.

[2538]

질소 분위기 하에, 100 mL의 가지 플라스크에, 중간체 X-2(1 g, 2.85 mmol), 트리페닐포스핀(3 g, 11.44 mmol) 및 o-디클로로벤젠(10 ml)을 가하여, 180℃에서 6시간 교반했다. 실온에 방랭 후, 반응 용액에 반응액을 감압 증류에 의해 농축했다. 농축 후에 얻어진 화합물을 실리카 겔 컬럼 크로마토그래피(헥산/아세트산에틸=95%:5%-50%:50%)에 의해 정제하여, 중간체 X-3(0.66 g, 2.08 mmol, 수율 73%)을 얻었다.

[2539] [화학식 294]



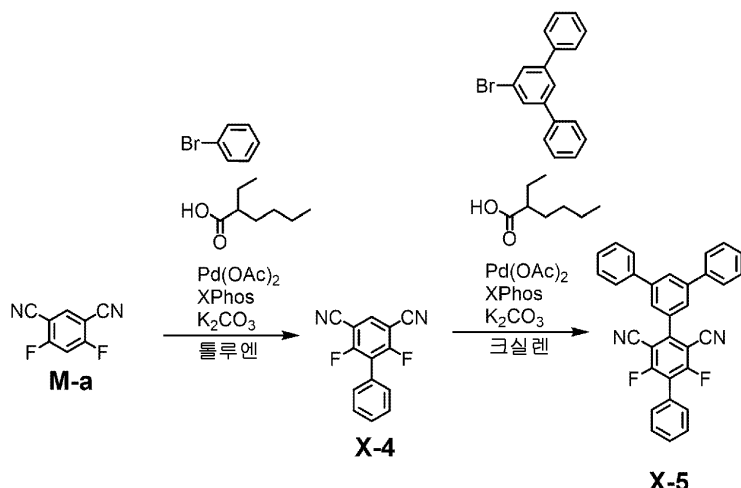
[2540]

[2541] 질소 분위기 하에, 50 mL의 3구 플라스크에, 방랭 하에, 중간체 X-3(0.446 g, 1.40 mmol)의 DMF(8.0 mL) 용액에 수소화나트륨(60 질량%, 0.056 g, 1.40 mmol)을 가하여, 동온도에서 30분간 교반했다. 반응액에 중간체 M-f(0.94 g, 1.40 mmol)의 DMF(5.4 ml) 용액을 적하하고, 실온으로 승온하여 6시간 교반했다. 반응 혼합물에 물을 가하고, 석출된 고체를 메탄올로 세정했다. 고체를 컬럼 크로마토그래피로 정제하여, 0.339 g의 황색 고체를 얻었다. 얻어진 황색 고체를 ASAP-MS의 분석에 의해 화합물 A-29로 동정했다(수율 16%).

[2542] (화합물 A-30의 합성)

[2543] 화합물 A-30의 합성 방법을 이하에 설명한다.

[2544] [화학식 295]

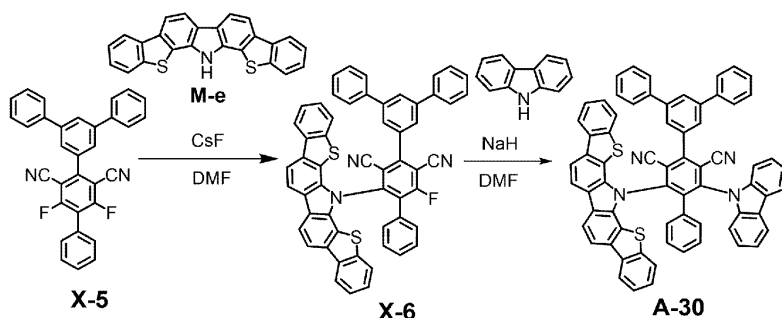


[2545]

[2546] 질소 분위기 하에, 1000 mL의 3구 플라스크에, 중간체 M-a(20 g, 122 mmol), 디아세톡시팔라듐(0.41 g, 1.83 mmol), XPhos(2-디시클로헥실포스피노-2',4',6'-트리이소프로필비페닐)(1.74 g, 3.66 mmol), 탄산칼륨(25.3 g, 183 mmol) 및 톨루엔(300 ml)을 가하고, 실온에서 30분 교반했다. 그 후, 반응 용액에 2-에틸헥산산(1.95 ml, 12.19 mmol) 및 브로모벤젠(10.84 ml, 104 mmol)을 넣고, 40℃에서 밤새 교반했다. 교반 후, 반응 용액을 실온으로 되돌리고, 물을 가하고, 침전한 고체를 여과했다. 얻어진 고체를 실리카 패드에 통과시키고, 톨루엔으로 재결정함으로써, 13.2 g의 백색 고체를 얻었다. 얻어진 백색 고체를 GC-MS의 분석에 의해 중간체 X-4로 동정했다(수율 44%).

[2547] 질소 분위기 하에, 200 mL의 3구 플라스크에, 중간체 X-4(2 g, 8.33 mmol), 5'-브로모-1,1':3',1''-터페닐(3 g, 9.70 mmol), 디아세톡시팔라듐(0.20 g, 0.82 mmol), XPhos(2-디시클로헥실포스피노-2',4',6'-트리이소프로필비페닐)(0.80 g, 1.678 mmol), 탄산칼륨(3 g, 21.71 mmol) 및 크실렌(40 ml)을 가하고, 실온에서 10분 교반했다. 그 후, 반응 용액에 2-에틸헥산산(0.06 ml, 0.374 mmol)을 가하고, 130℃에서 5시간 교반했다. 교반 후, 반응 용액을 실온으로 되돌리고, 물을 가하고, 아세트산에틸로 유기층을 2회 추출했다. 추출한 유기층을 물로 세정하고, 황산나트륨으로 세정한 후, 용매를 감압 하 증류 제거했다. 얻어진 잔사를 실리카 겔 컬럼 크로마토그래피로 정제하여, 2.20 g의 백색 고체를 얻었다. 얻어진 백색 고체를 ASAP-MS의 분석에 의해 중간체 X-5로 동정했다(수율 56%).

[2548] [화학식 296]



[2549]

[2550] 질소 분위기 하에, 300 mL의 3구 플라스크에 중간체 X-5(2.70 g, 5.76 mmol), 불화세슘(2.50 g, 16.46 mmol), 중간체 M-e(2.20 g, 5.80 mmol) 및 DMF(50 ml)을 가하고, 실온에서 20시간 교반했다. 반응 용액에 이온 교환수 50 ml를 가하고, 석출된 고체를 여과하여 취하고, 메탄올로 세정했다. 세정 후의 고체를 실리카 겔 컬럼 크로마토그래피로 정제하여, 3.14 g의 황색 고체를 얻었다. 얻어진 황색 고체를 ASAP-MS의 분석에 의해 중간체 X-6으로 동정했다(수율 65%).

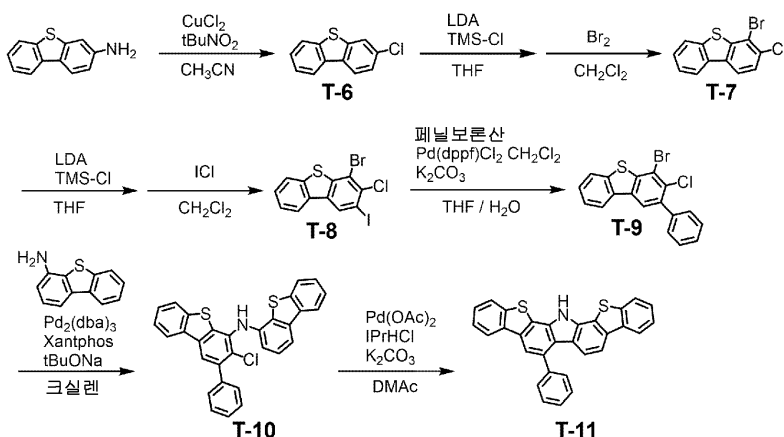
[2551] 질소 분위기 하에, 100 mL의 3구 플라스크에, 빙랭 하에, 카르바졸(0.36 g, 2.51 mmol)의 DMF(7 mL) 용액에 수소화나트륨(60 질량%, 0.080 g, 2.00 mmol)을 가하고, 동온도에서 30분간 교반했다. 반응액에 중간체 X-

6(1.50 g, 1.812 mmol)의 DMF(7 ml) 용액을 적하하고, 실온으로 승온하여 18시간 교반했다. 반응 혼합물에 물을 가하고, 석출된 고체를 메탄올로 세정했다. 고체를 컬럼 크로마토그래피로 정제하여, 0.925 g의 황색 고체를 얻었다. 얻어진 황색 고체를 ASAP-MS의 분석에 의해 화합물 A-30으로 동정했다(수율 52%).

[2552] (화합물 A-31의 합성)

[2553] 화합물 A-31의 합성 방법을 이하에 설명한다.

[2554] [화학적식 297]



[2555]

[2556] 질소 분위기 하에, 300 mL의 3구 플라스크에 염화구리(II)(12.1 g, 90 mmol), 아세트니트릴(70 ml), 및 아질산 tert-부틸(13.18 ml, 113 mmol)을 넣고, 65℃로 승온했다. 디벤조[b,d]티오펜-3-아민(15 g, 75 mmol)을 아세트니트릴(90 ml)에 녹여 용액을 조제하고, 이 용액을 15분에 걸쳐 반응 용액에 적하했다. 적하 후의 반응 용액을 1시간 교반한 후, 방랭하고, 6 N 염산(150 ml)을 가하여 교반했다. 교반 후의 반응 용액을 톨루엔으로 추출하고, 식염수로 세정 후 농축했다. 농축 후에 얻어진 화합물을 실리카 겔 컬럼 크로마토그래피로 정제하여, 12 g의 백색 고체를 얻었다. 얻어진 백색 고체를 ASAP-MS의 분석에 의해 중간체 T-6으로 동정했다(수율 73%).

[2557] 질소 분위기 하에, 500 ml의 3구 플라스크에, 중간체 T-6(12.0 g, 54.9 mmol), 클로로트리메틸실란(17.5 g, 110 mmol) 및 THF(180 mL)을 넣었다. 드라이 아이스/아세톤 배스에서, 3구 플라스크 내의 재료를 -78℃까지 냉각시키고 나서, 리튬디이소프로필아미드(LDA)를 30 ml(2 M, THF 용액) 적하했다. -78℃에서 30분 교반한 후, 실온으로 되돌려 3시간 더 교반했다. 교반 후, 3구 플라스크에 물(100 mL)을 가하고 나서, 아세트산에틸로 유기층을 추출하고, 추출한 유기층을 물 및 식염수로 세정하고, 황산마그네슘으로 건조시킨 후, 용매를 회전식 증발기로 감압 제거했다. 얻어진 액체에 디클로로메탄 200 ml 가하고, 계속해서 브롬(13.2 g, 83 mmol)을 0℃에서 적하한 후, 실온에서 4시간 교반했다. 교반 후의 반응 용액에 포화 아황산수소나트륨 수용액(100 mL)을 가하고, 디클로로메탄에 의해 유기층을 추출하고, 추출한 유기층을 물 및 식염수로 세정하고, 세정 후의 유기층을 황산마그네슘으로 건조시키고, 건조된 유기층을 회전식 증발기로 농축했다. 농축 후에 얻어진 화합물을 실리카 겔 컬럼 크로마토그래피에 의해 정제하여, 중간체 T-7(14 g, 47 mmol, 수율 86%)을 얻었다.

[2558] 질소 분위기 하에, 500 ml의 3구 플라스크에, 중간체 T-7(12.0 g, 54.9 mmol), 클로로트리메틸실란(15.0 g, 94 mmol), 및 THF(160 mL)을 넣었다. 드라이 아이스/아세톤 배스에서, 3구 플라스크 내의 재료를 -78℃까지 냉각시키고 나서, 리튬디이소프로필아미드를 26 ml(2 M, THF 용액) 적하했다. -78℃에서 20분 교반한 후, 실온으로 되돌려 3시간 더 교반했다. 교반 후, 3구 플라스크에 물(100 mL)을 가하고 나서, 아세트산에틸로 유기층을 추출하고, 추출한 유기층을 물 및 식염수로 세정하고, 황산마그네슘으로 건조시킨 후, 용매를 회전식 증발기로 감압 제거했다. 얻어진 액체에 디클로로메탄 200 ml 가하고, 계속해서 일염화요오드(11.6 g, 71.4 mmol)를 0℃에서 적하한 후, 실온에서 4시간 교반했다. 교반 후의 반응 용액에 포화 아황산수소나트륨 수용액(100 mL)을 가하고, 디클로로메탄에 의해 유기층을 추출하고, 추출한 유기층을 물 및 식염수로 세정하고, 세정 후의 유기층을 황산마그네슘으로 건조시키고, 건조된 유기층을 회전식 증발기로 농축했다. 농축 후에 얻어진 화합물을 실리카 겔 컬럼 크로마토그래피에 의해 정제하여, 중간체 T-8(19.5 g, 46 mmol, 수율 97%)을 얻었다.

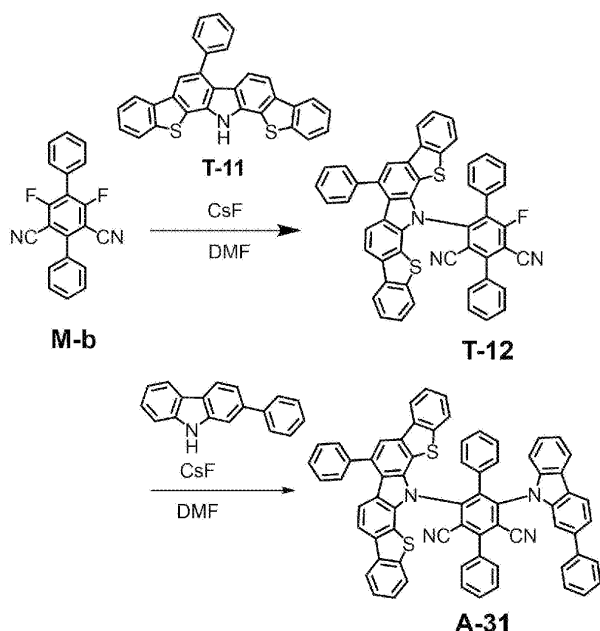
[2559] 질소 분위기 하에, 200 mL의 3구 플라스크에, 중간체 T-8(19.5 g, 46 mmol), 페닐보론산(5.61 g, 46 mmol), 탄산칼륨(19.1 g, 138 mmol), [1,1'-비스(디페닐포스피노)페로센]디클로로팔라듐(II)디클로로메탄 부가물(1.13 g, 1.38 mmol), THF(123 ml) 및 이온 교환수(31 ml)를 넣고, 40℃에서 7시간 교반했다. 반응 용액을 농축한 후,

이온 교환수 100 ml를 넣고, 디클로로메탄으로 유기층을 추출하고, 추출한 유기층을 물 및 식염수로 세정하고, 황산마그네슘으로 건조시킨 후, 용매를 회전식 증발기로 감압 제거했다. 용매의 감압 제거 후에 얻어진 화합물을 실리카 겔 컬럼 크로마토그래피에 의해 정제하여, 중간체 T-9(2.50 g, 5.89 mmol, 수율 13%)을 얻었다.

[2560] 질소 분위기 하에, 500 ml의 3구 플라스크에 중간체 T-9(2.5 g, 5.89 mmol), 디벤조[b,d]티오펜-4-아민(1.33 g, 6.69 mmol), 트리스(디벤질리텐아세톤)디팔라듐(0)(0.092 g, 0.10 mmol), Xantphos(크산트포스)(0.116 g, 0.401 mmol), 나트륨 tert-부톡시드(0.964 g, 10.0 mmol) 및 크실렌 35 mL를 가하고, 60℃에서 17시간 가열 교반 후에 실온(25℃)까지 냉각시켰다. 반응 용액을 농축한 후, 실리카 겔 컬럼 크로마토그래피에 의해 정제하여 2.5 g의 백색 고체를 얻었다. 얻어진 백색 고체를 ASAP-MS의 분석에 의해 중간체 T-10으로 동정했다(수율 68%).

[2561] 질소 분위기 하에, 200 ml의 3구 플라스크에, 중간체 T-10(2.5 g, 4.57 mmol), 1,3-비스(2,6-디이소프로필페닐)이미다졸륨클로라이드(IPrHCl)(0.086 g, 0.203 mmol), 아세트산팔라듐(II)(0.023 g, 0.102 mmol), 탄산칼륨(1.76 g, 12.7 mmol) 및 N,N-디메틸아세트아미드(DMAc) 17 mL를 가하고, 180℃에서 9시간 교반 후에 실온(25℃)까지 냉각시켰다. 반응 용액에 이온 교환수 30 ml를 가하고, 아세트산에 킬로 유기층을 추출하고, 유기층을 농축했다. 얻어진 고체를 실리카 겔 컬럼 크로마토그래피로 정제하여, 1.7 g의 백색 고체를 얻었다. 얻어진 백색 고체를 ASAP-MS의 분석에 의해 중간체 T-11로 동정했다(수율 73%).

[2562] [화학식 298]



[2563]

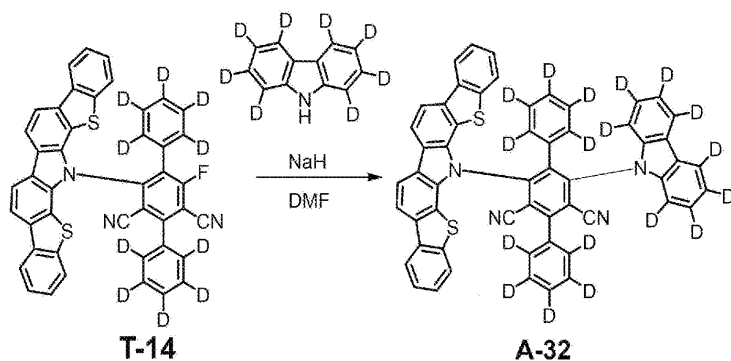
[2564] 질소 분위기 하에, 100 mL의 3구 플라스크에 중간체 M-b(0.791 g, 2.50 mmol), 불화세슘(1.14 g, 7.51 mmol), 중간체 T-11(1.14 g, 2.50 mmol) 및 DMF(20.9 ml)을 넣고, 실온에서 20시간 교반했다. 반응 용액에 이온 교환수를 50 ml 넣고, 석출된 고체를 여과하여 취했다. 여과하여 취한 고체를 실리카 겔 컬럼 크로마토그래피로 정제하여, 1.7 g의 황색 고체를 얻었다. 얻어진 황색 고체를 ASAP-MS의 분석에 의해 중간체 T-12로 동정했다(수율 92%).

[2565] 질소 분위기 하에, 100 mL의 3구 플라스크에, 중간체 T-12(1.73 g, 2.30 mmol), 2-페닐-9H-카르바졸(0.840 g, 3.45 mmol), 불화세슘(1.05 g, 6.90 mmol) 및 DMF(7.7 ml)을 넣고, 80℃에서 1시간 교반했다. 교반 후, 석출된 고체를 여과하여 취하고, 컬럼 크로마토그래피로 정제하여, 0.9 g의 황색 고체를 얻었다. 얻어진 황색 고체를 ASAP-MS의 분석에 의해 화합물 A-31로 동정했다(수율 40%).

[2566] (화합물 A-32의 합성)

[2567] 화합물 A-32의 합성 방법을 이하에 설명한다.

[2568] [화학식 299]



[2569]

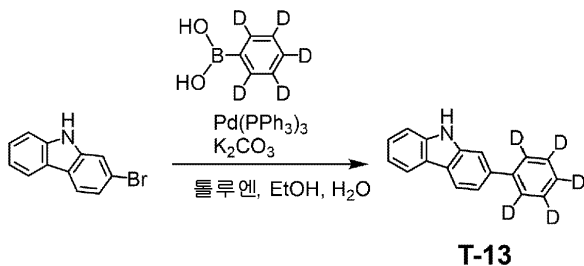
[2570] (화합물 A-32의 합성)

[2571] 질소 분위기 하에, 100 mL의 3구 플라스크에, 카르바졸-1,2,3,4,5,6,7,8-d8(1.2 g, 6.6 mmol), 수소화나트륨 (40 질량% 오일 함유)(0.27 g, 6.6 mmol), 및 DMF(45 ml)을 넣고, 0℃에서 30분 교반했다. 다음으로 반응 혼합물에 중간체 T-14(3.0 g, 4.4 mmol)를 넣고, 실온에서 2시간 교반했다. 반응 혼합물에 메탄올 20 mL를 가하고, 석출된 고체를 실리카 겔 컬럼 크로마토그래피로 정제하여, 3.2 g의 황색 고체를 얻었다. 얻어진 황색 고체를 ASAP-MS의 분석에 의해 화합물 A-32로 동정했다(수율 87%).

[2572] (화합물 A-33의 합성)

[2573] 화합물 A-33의 합성 방법을 이하에 설명한다.

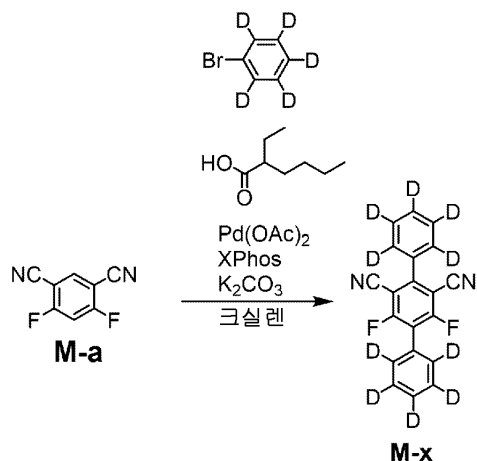
[2574] [화학식 300]



[2575]

[2576] 질소 분위기 하에, 300 mL의 3구 플라스크에, 2-브로모-9H-카르바졸(16 g, 65 mmol), 페닐-d5-보론산(9.90 g, 78 mmol), 탄산칼륨(27.0 g, 195 mmol), 테트라키스트리페닐포스핀팔라듐(0)(1.50 g, 1.30 mmol), 톨루엔(108 ml), THF(54 ml) 및 이온 교환수(54 ml)를 넣고, 80℃에서 4시간 교반했다. 반응 용액을 톨루엔으로 유기층을 추출하고, 추출한 유기층을 물 및 식염수로 세정하고, 황산마그네슘으로 건조시킨 후, 용매를 회전식 증발기로 감압 제거했다. 용매의 감압 제거 후에 얻어진 화합물을 실리카 겔 컬럼 크로마토그래피에 의해 정제하여, 중간체 T-13(2.50 g, 5.89 mmol, 수율 13%)을 얻었다.

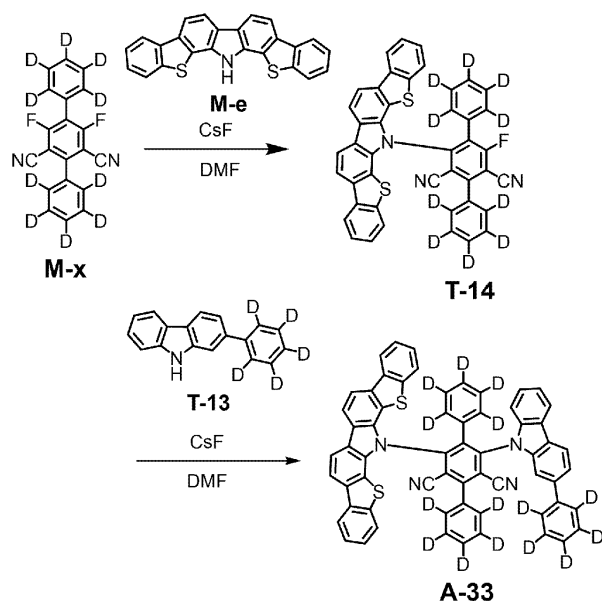
[2577] [화학식 301]



[2578]

[2579] 질소 분위기 하에, 1000 mL의 3구 플라스크에, 중간체 M-a(34 g, 207 mmol), 디아세톡시팔라듐(1.40 g, 6.22 mmol), XPhos(2-디시클로헥실포스피노-2',4',6'-트리이소프로필비페닐)(5.93 g, 12.4 mmol), 탄산칼륨(86 g, 622 mmol) 및 크실렌(414 ml)을 가하고, 실온에서 30분 교반했다. 교반 후의 반응 용액에 2-에틸헥산산(6.64 ml, 41.4 mmol) 및 브로모벤젠-d5(101 g, 622 mmol)을 넣고, 100℃에서 5시간 교반했다. 교반 후, 반응 용액을 실온으로 되돌리고, 침전한 고체를 여과했다. 얻어진 고체를 크실렌으로 재결정하여 48 g의 백색 고체를 얻었다. 얻어진 백색 고체를 GC-MS의 분석에 의해 중간체 M-x로 동정했다(수율 71%).

[2580] [화학식 302]



[2581]

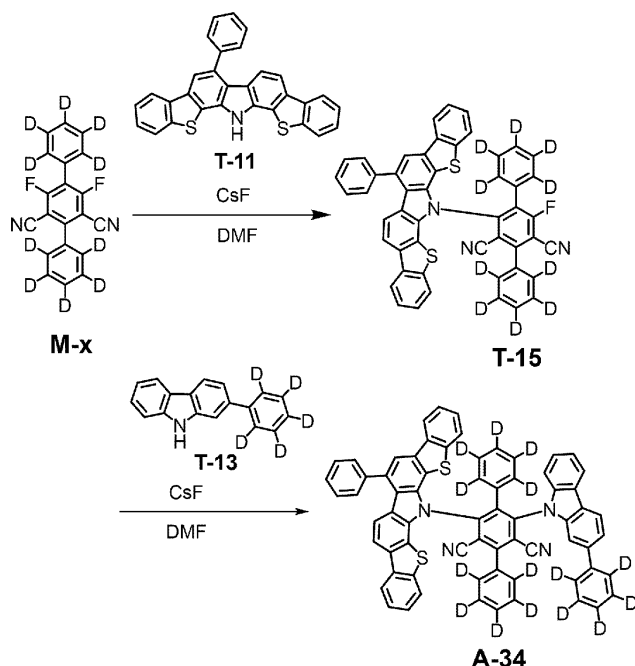
[2582] 질소 분위기 하에, 300 mL의 3구 플라스크에 중간체 M-x(19.6 g, 60.0 mmol), 불화세슘(16.6 g, 109 mmol), 중간체 M-e(20.7 g, 54.5 mmol) 및 DMF(182 ml)을 넣고, 실온에서 20시간 교반했다. 교반 후의 반응 용액에 이온 교환수 200 ml를 넣고, 석출된 고체를 여과하여 취했다. 여과하여 취한 고체를 실리카 겔 컬럼 크로마토그래피로 정제하여, 2.4 g의 황색 고체를 얻었다. 얻어진 황색 고체를 ASAP-MS의 분석에 의해 중간체 T-14로 동정했다(수율 91%).

[2583] 질소 분위기 하에, 100 mL의 3구 플라스크에, 중간체 T-14(2.5 g, 3.65 mmol), 중간체 T-13(1.36 g, 5.47 mmol), 불화세슘(1.66 g, 10.9 mmol) 및 DMF(37 ml)을 넣고, 80℃에서 4시간 교반했다. 교반 및 방랭 후, 반응 용액에 메탄올 70 ml를 가하고, 석출된 고체를 여과했다. 얻어진 고체를 컬럼 크로마토그래피로 정제하여, 1.71 g의 황색 고체를 얻었다. 얻어진 황색 고체를 ASAP-MS의 분석에 의해 화합물 A-33으로 동정했다(수율 51%).

[2584] (화합물 A-34의 합성)

[2585] 화합물 A-34의 합성 방법을 이하에 설명한다.

[2586] [화학식 303]



[2587]

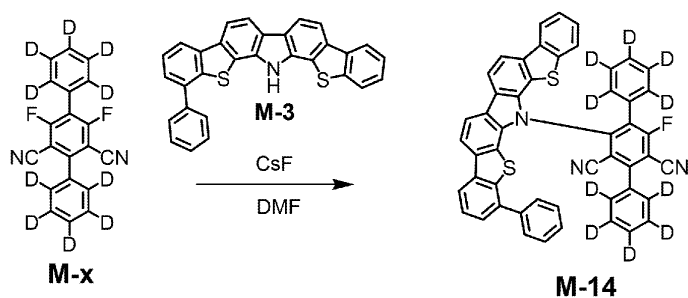
[2588] 질소 분위기 하에, 100 mL의 가지 플라스크에 중간체 M-x(1.11 g, 34.0 mmol), 불화세슘(1.15 g, 10.2 mmol), 중간체 T-11(1.55 g, 3.40 mmol) 및 DMF(11.3 ml)을 넣고, 실온에서 20시간 교반했다. 교반 후의 반응 용액에 이온 교환수 20 ml를 넣고, 석출된 고체를 여과하여 취했다. 여과하여 취한 고체를 실리카 겔 컬럼 크로마토그래피로 정제하여, 2.4 g의 황색 고체를 얻었다. 얻어진 황색 고체를 ASAP-MS의 분석에 의해 중간체 T-15로 동정했다(수율 91%).

[2589] 질소 분위기 하에, 100 mL의 가지 플라스크에, 중간체 T-15(2.4 g, 3.19 mmol), 중간체 T-13(1.17 g, 4.72 mmol), 불화세슘(1.44 g, 9.45 mmol) 및 DMF(11 ml)을 넣고, 80℃에서 2시간 교반했다. 석출된 고체를 여과하고, 컬럼 크로마토그래피로 정제하여, 1.46 g의 황색 고체를 얻었다. 얻어진 황색 고체를 ASAP-MS의 분석에 의해 화합물 A-34로 동정했다(수율 47%).

[2590] (화합물 A-35의 합성)

[2591] 화합물 A-35의 합성 방법을 이하에 설명한다.

[2592] [화학식 304]

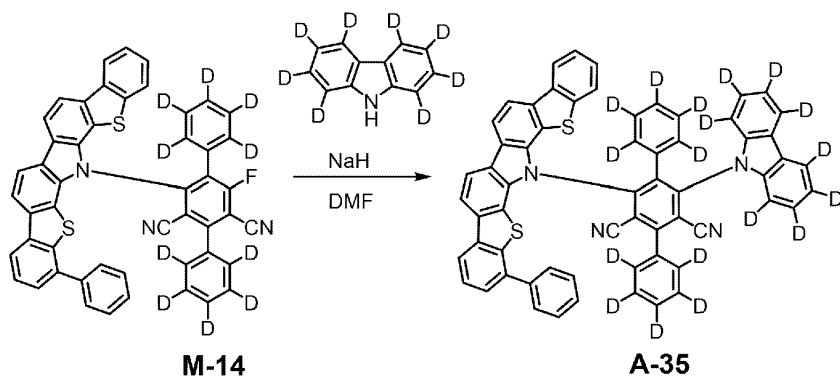


[2593]

[2594] 질소 분위기 하에, 100 mL의 가지 플라스크에 중간체 M-3(3.5 g, 7.7 mmol), 불화세슘(2.3 g, 15.4 mmol), 중간체 M-x(2.3 g, 8.07 mmol) 및 DMF(30 ml)을 넣고, 실온에서 12시간 교반했다. 교반 후의 반응 용액에 이온 교환수 50 ml를 넣고, 석출된 고체를 여과하여 취했다. 여과하여 취한 고체를 실리카 겔 컬럼 크로마토그래피로 정제하여, 5.1 g의 황색 고체를 얻었다. 얻어진 황색 고체를 ASAP-MS의 분석에 의해 중간체 M-14로 동정했다(수

을 87%).

[2595] [화학식 305]



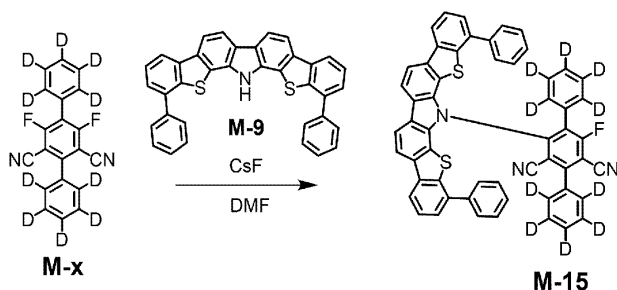
[2596]

[2597] 질소 분위기 하에, 50 mL의 3구 플라스크에, 카르바졸-1,2,3,4,5,6,7,8-d8(0.24 g, 1.34 mmol), 수소화나트륨(40 질량% 오일 함유)(0.058 g, 1.34 mmol) 및 DMF(10 ml)을 넣고, 0℃에서 1시간 교반했다. 교반 후의 반응 용액에 0℃에서 중간체 M-14(0.6 g, 0.79 mmol)를 넣고, 천천히 실온까지 승온하고, 1시간 실온에서 더 교반했다. 반응 혼합물에 이온 교환수를 10 ml 가하고, 석출된 고체를 여과했다. 얻어진 고체를 실리카 겔 컬럼 크로마토그래피로 정제하여, 황색 고체 0.47 g을 얻었다. 얻어진 황색 고체를 ASAP-MS의 분석에 의해 화합물 A-35로 동정했다(수율 65%).

[2598] (화합물 A-36의 합성)

[2599] 화합물 A-36의 합성 방법을 이하에 설명한다.

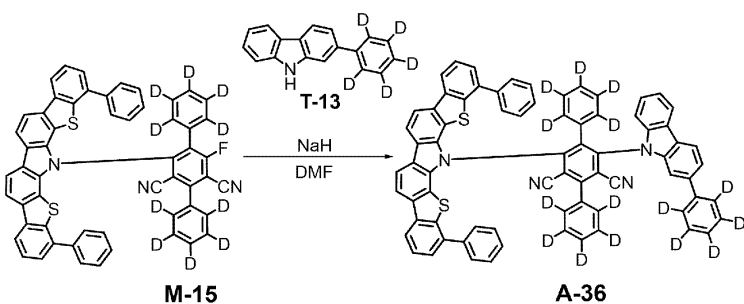
[2600] [화학식 306]



[2601]

[2602] 질소 분위기 하에, 100 mL의 3구 플라스크에 중간체 M-9(3.0 g, 5.60 mmol), 불화세슘(2.6 g, 16.9 mmol), 중간체 M-x(1.9 g, 5.92 mmol) 및 DMF(20 ml)을 넣고, 실온에서 12시간 교반했다. 교반 후의 반응 용액에 이온 교환수 20 ml를 넣고, 석출된 고체를 여과하여 취했다. 여과하여 취한 고체를 실리카 겔 컬럼 크로마토그래피로 정제하여, 4.4 g의 황색 고체를 얻었다. 얻어진 황색 고체를 ASAP-MS의 분석에 의해 중간체 M-15로 동정했다(수율 93%).

[2603] [화학식 307]



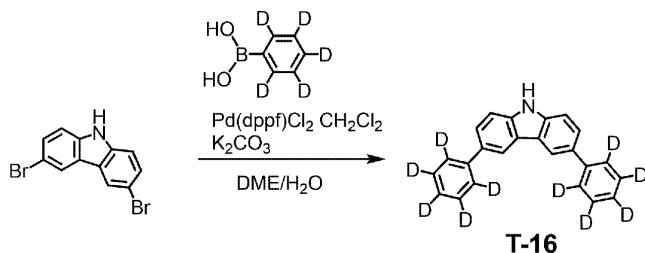
[2604]

[2605] 질소 분위기 하에, 100 mL의 3구 플라스크에, 중간체 T-13(0.76 g, 3.04 mmol), 수소화나트륨(40 질량% 오일 함유)(0.12 g, 3.04 mmol) 및 DMF(20 ml)을 넣고, 0℃에서 1시간 교반했다. 교반 후의 반응 용액에 0℃에서 중간체 M-15(1.7 g, 2.03 mmol)를 넣고, 천천히 실온까지 승온하고, 1시간 실온에서 더 교반했다. 반응 혼합물에 이온 교환수를 20 ml 가하고, 석출된 고체를 여과했다. 얻어진 고체를 실리카 겔 컬럼 크로마토그래피로 정제하여, 황색 고체 1.84 g을 얻었다. 얻어진 황색 고체를 ASAP-MS의 분석에 의해 화합물 A-36으로 동정했다(수율 85%).

[2606] (화합물 A-37의 합성)

[2607] 화합물 A-37의 합성 방법을 이하에 설명한다.

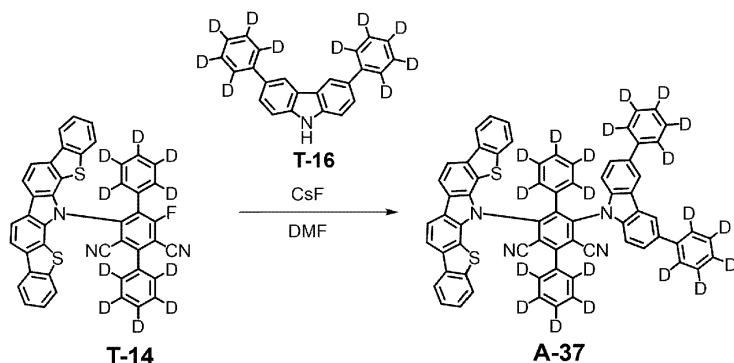
[2608] [화학식 308]



[2609]

[2610] 질소 분위기 하에, 200 mL의 3구 플라스크에, 3,6-디브로모-9H-카르바졸(10 g, 30.8 mmol), 페닐-d5-보란산(8.59 g, 67.7 mmol), 탄산칼륨(12.8.0 g, 92 mmol), [1,1'-비스(디페닐포스피노)페로센]디클로로팔라듐(II)디클로로메탄 부가물(0.754 g, 0.923 mmol), DME(82 ml) 및 이온 교환수(20.5 ml)을 넣고, 80℃에서 4시간 교반했다. 반응 용액을 농축한 후, 디클로로메탄으로 유기층을 추출하고, 유기층을 물 및 식염수로 세정하고, 황산 마그네슘으로 건조시킨 후, 용매를 회전식 증발기로 감압 제거했다. 용매의 감압 제거 후에 얻어진 화합물을 실리카 겔 컬럼 크로마토그래피 및 톨루엔 재결정에 의해 정제하여, 중간체 T-16(7.64 g, 23.0 mmol, 수율 75%)을 얻었다.

[2611] [화학식 309]



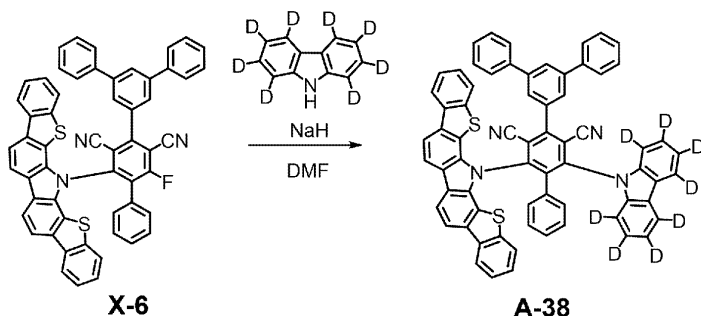
[2612]

[2613] 질소 분위기 하에, 100 mL의 3구 플라스크에, 중간체 T-14(2.5 g, 3.65 mmol), 중간체 T-16(1.80 g, 5.47 mmol), 불화세슘(1.66 g, 10.9 mmol) 및 DMF(36.5 ml)을 넣고, 80℃에서 3시간 교반했다. 교반 및 방랭 후, 반응 용액에 메탄올 70 ml를 가하고, 석출된 고체를 여과했다. 얻어진 고체를 컬럼 크로마토그래피로 정제하여, 1.50 g의 황색 고체를 얻었다. 얻어진 황색 고체를 ASAP-MS의 분석에 의해 화합물 A-37로 동정했다(수율 41%).

[2614] (화합물 A-38의 합성)

[2615] 화합물 A-38의 합성 방법을 이하에 설명한다.

[2616] [화학식 310]



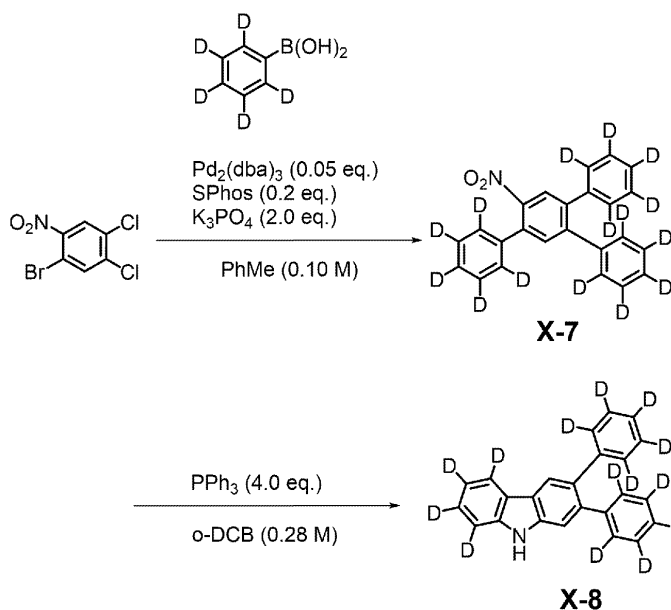
[2617]

[2618] 질소 분위기 하에, 100 mL의 가지 플라스크에, 빙랭 하에, 9H-카르바졸-1,2,3,4,5,6,7,8-d8(0.41 g, 2.36 mmol)의 DMF(10 mL) 용액에 수소화나트륨(60 질량%, 0.087 g, 2.17 mmol)을 가하고, 동온도에서 30분간 교반했다. 교반 후의 반응 용액에 중간체 X-6(1.63 g, 1.969 mmol)의 DMF(10 ml) 용액을 적하하고, 실온으로 승온하여 18시간 교반했다. 반응 혼합물에 물을 가하고, 석출된 고체를 메탄올로 세정했다. 세정 후의 고체를 컬럼 크로마토그래피로 정제하여, 1.14 g의 황색 고체를 얻었다. 얻어진 황색 고체를 ASAP-MS의 분석에 의해 화합물 A-38로 동정했다(수율 59%).

[2619] (화합물 A-39의 합성)

[2620] 화합물 A-39의 합성 방법을 이하에 설명한다.

[2621] [화학식 311]



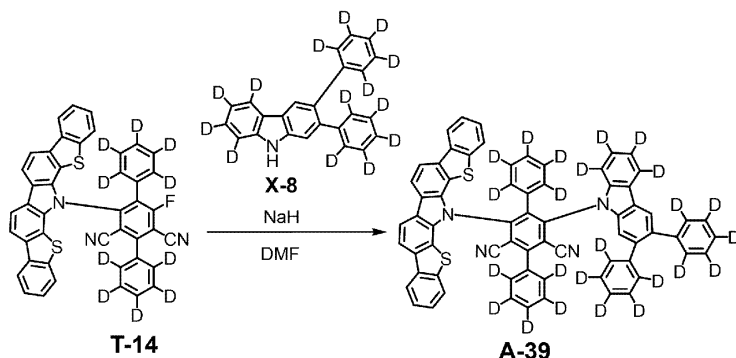
[2622]

[2623] 질소 분위기 하에, 1000 mL의 3구 플라스크에, 1-브로모-4,5-디클로로-2-니트로벤젠(10 g, 36.9 mmol), (페닐-d5)보론산(42.1 g, 332 mmol), 인산삼칼륨(15.67 g, 73.8 mmol), 트리스(디벤질리덴아세톤)디팔라듐(0)(1.69 g, 1.846 mmol), SPhos(3.03 g, 7.38 mmol) 및 톨루엔(PhMe)(369 ml)을 가하고, 110℃에서 9시간 교반했다. 교반 후, 반응 용액을 실온으로 방랭하고, 방랭 후, 이온 교환수를 가하고, 아세트산에틸로 유기층을 2회 추출했다. 유기층을 황산나트륨으로 건조시킨 후, 용매를 회전식 증발기로 감압 제거했다. 용매의 감압 제거 후에 얻어진 화합물을 실리카 겔 컬럼 크로마토그래피(헥산/디클로로메탄=67%:33%)에 의해 정제하여, 중간체 X-7(3.01 g, 8.21 mmol, 수율 22%)을 얻었다.

[2624] 질소 분위기 하에, 200 mL의 가지 플라스크에, 중간체 X-7(3 g, 8.19 mmol), 트리페닐포스핀(7 g, 26.69 mmol) 및 o-디클로로벤젠(30 ml)을 가하고, 180℃에서 12시간 교반했다. 교반 후, 반응 용액을 실온으로 방랭하고, 방랭 후, 반응 용액을 감압 증류에 의해 농축했다. 얻어진 화합물을 실리카 겔 컬럼 크로마토그래피(헥산/아세트

산에틸=95%:5%-50%:50%)에 의해 정제하여, 중간체 X-8(1.47 g, 4.41 mmol, 수율 58%)을 얻었다.

[2625] [화학적식 312]



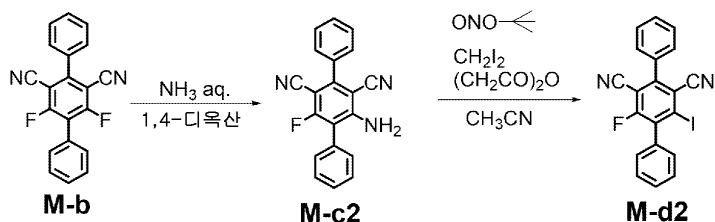
[2626]

[2627] 질소 분위기 하에, 50 mL의 3구 플라스크에, 빙랭 하에, 중간체 X-8(0.77 g, 2.31 mmol)의 DMF(7.0 mL) 용액에 수소화나트륨(60 질량%, 0.09 g, 2.29 mmol)을 가하고, 동온도에서 30분간 교반했다. 교반 후의 반응 용액에 중간체 T-14(1.50 g, 2.19 mmol)의 DMF(7.0 mL) 용액을 적하하고, 실온으로 승온하여 15시간 교반했다. 반응 혼합물에 물을 가하고, 석출된 고체를 메탄올로 세정했다. 세정 후의 고체를 컬럼 크로마토그래피로 정제하여, 1.03 g의 황색 고체를 얻었다. 얻어진 황색 고체를 ASAP-MS의 분석에 의해 화합물 A-39로 동정했다(수율 47%).

[2628] (화합물 A-40의 합성)

[2629] 화합물 A-40의 합성 방법을 이하에 설명한다.

[2630] [화학적식 313]

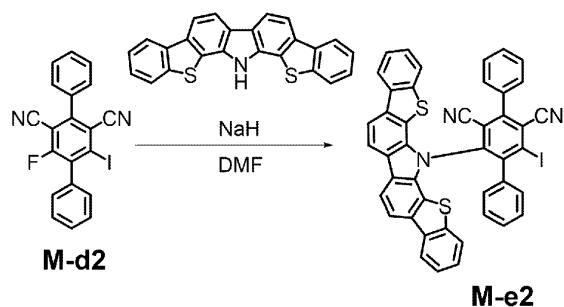


[2631]

[2632] 질소 분위기 하에, 500 mL의 3구 플라스크에, 중간체 M-b(25 g, 79 mmol) 및 1,4-디옥산 160 mL를 넣고, 다음으로 30 질량% 암모니아수 25 mL를 넣고, 80℃에서 10시간 가열 교반했다. 교반 후에 반응 용액을 실온(25℃)으로 되돌리고, 증발기를 이용하여 용매를 증류 제거하고, 얻어진 고체를 실리카 겔 컬럼 크로마토그래피로 정제하여, 23 g의 백색 고체를 얻었다. 얻어진 백색 고체를 GC-MS에 의해 중간체 M-c2로 동정했다(수율 93%).

[2633] 질소 분위기 하에, 1000 mL의 3구 플라스크에, 중간체 M-c2(23 g, 73 mmol) 및 아세트니트릴 150 mL를 넣고, 다음으로 디요도메탄(8.86 mL, 110 mmol), 및 tert-부틸니트릴(44.0 mL, 367 mmol)을 넣어 5분 교반하고, 다음으로 무수아세트산(139 mL, 1468 mmol)을 넣고, 25℃에서 4시간 교반했다. 반응 종료 후, 반응 용액에 이온 교환수를 500 mL 넣고, 석출된 고체를 회수했다. 회수한 고체를 실리카 겔 컬럼 크로마토그래피로 정제하여, 27 g의 백색 고체를 얻었다. 얻어진 백색 고체를 GC-MS에 의해 중간체 M-d2로 동정했다(수율 87%).

[2634] [화학식 314]

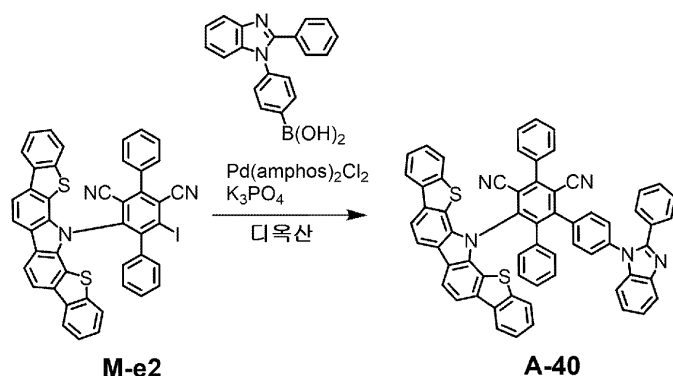


[2635]

[2636] 질소 분위기 하에, 300 mL의 3구 플라스크에 14H-비스[1]벤조티에노[2,3-a:3',2'-i]카르바졸(6.3 g, 16.5 mmol), 수소화나트륨(40 질량% 오일 함유)(0.73 g, 18.2 mmol), 및 DMF(83 ml)을 넣고, 0℃에서 1시간 교반했다. 다음으로 반응 혼합물에 중간체 M-d2(7.0 g, 16.5 mmol)를 넣고, 실온에서 2시간 교반했다. 반응 혼합물에 물 100 mL를 가하고, 석출된 고체를 실리카 겔 컬럼 크로마토그래피로 정제하여, 11 g의 황색 고체를 얻었다. 얻어진 황색 고체를 ASAP-MS의 분석에 의해 중간체 M-e2로 동정했다(수율 85%).

[2637] 14H-비스[1]벤조티에노[2,3-a:3',2'-i]카르바졸은 WO 2021/066059 A1 기재와 동일한 방법으로 합성했다.

[2638] [화학식 315]



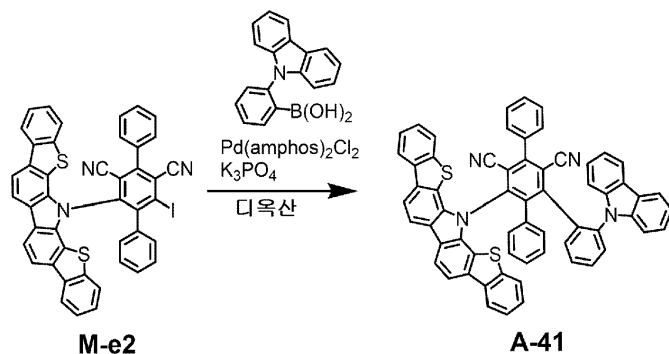
[2639]

[2640] 질소 분위기 하 300 mL의 3구 플라스크에, 중간체 M-e2(2.5 g, 3.20 mmol), 4-(2-페닐-1H-벤즈이미다졸-1-일)페닐보론산(1.5 g, 4.80 mmol), 비스[디-tert-부틸(4-디메틸아미노페닐)포스핀]디클로로팔라듐(0.111 g, 0.16 mmol), 인산삼칼륨(1.69 g, 8.0 mmol) 및 1,4-디옥산(16 ml)을 넣고, 100℃에서 5시간 교반했다. 교반 후의 반응 용액에 이온 교환수 50 ml를 넣고, 석출된 고체를 실리카 겔 컬럼 크로마토그래피로 정제하여, 2.6 g의 황색 고체를 얻었다. 얻어진 황색 고체를 ASAP-MS의 분석에 의해 화합물 A-40으로 동정했다(수율 88%).

[2641] (화합물 A-41의 합성)

[2642] 화합물 A-41의 합성 방법을 이하에 설명한다.

[2643] [화학식 316]



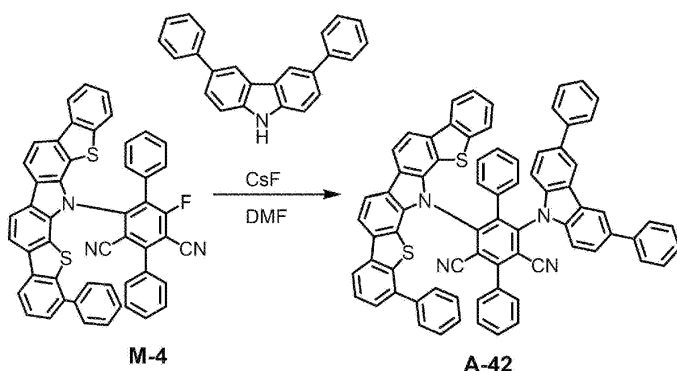
[2644]

[2645] 질소 분위기 하에, 300 mL의 3구 플라스크에, 중간체 M-e2(4.0 g, 5.10 mmol), (2-(9H-카르바졸-9-일)페닐)보론산(2.2 g, 7.66 mmol), 비스[디-tert-부틸(4-디메틸아미노페닐)포스핀]디클로로팔라듐(0.181 g, 0.255 mmol), 인산삼칼륨(2.71 g, 12.76 mmol) 및 1,4-디옥산(25.5 ml)을 넣고, 100℃에서 5시간 교반했다. 교반 후의 반응 용액에 이온 교환수 100 ml를 넣고, 석출된 고체를 실리카 겔 컬럼 크로마토그래피로 정제하여, 3.4 g의 황색 고체를 얻었다. 얻어진 황색 고체를 ASAP-MS의 분석에 의해 화합물 A-41로 동정했다(수율 74%).

[2646] (화합물 A-42의 합성)

[2647] 화합물 A-42의 합성 방법을 이하에 설명한다.

[2648] [화학식 317]



[2649]

[2650] 질소 분위기 하에, 100 mL의 3구 플라스크에, 중간체 M-4(1.5 g, 2.0 mmol), 3,6-디페닐카르바졸(1.0 g, 3.0 mmol), 불화세슘(0.91 g, 5.98 mmol), 및 DMF(20 ml)을 넣고, 실온에서 4시간 교반했다. 교반 후, 반응 혼합물에 이온 교환수를 30 ml 가하고, 석출된 고체를 여과했다. 얻어진 고체를 실리카 겔 컬럼 크로마토그래피로 정제하여, 황색 고체 2.0 g을 얻었다. 얻어진 황색 고체를 ASAP-MS의 분석에 의해 화합물 A-42로 동정했다(수율 95%).

[2651] (비교 화합물 Ref-1의 합성)

[2652] 비교 화합물 Ref-1은 WO 2021/066059 A1의 기재에 따라서 합성했다.

부호의 설명

[2653] 1...유기 EL 소자

2...기관

3...양극

4...음극

5...발광층

6...정공 주입층

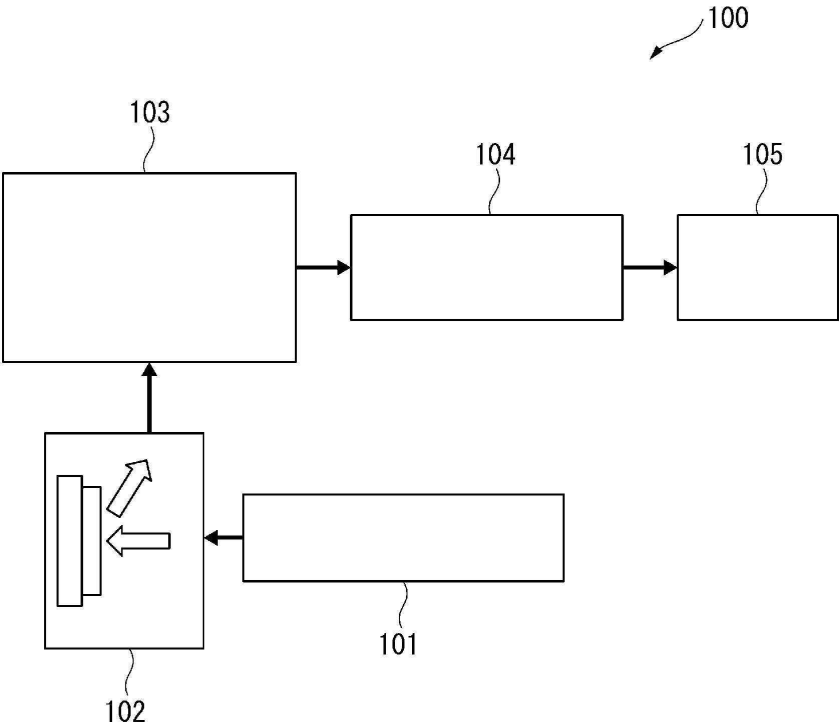
7...정공 수송층

8...전자 수송층

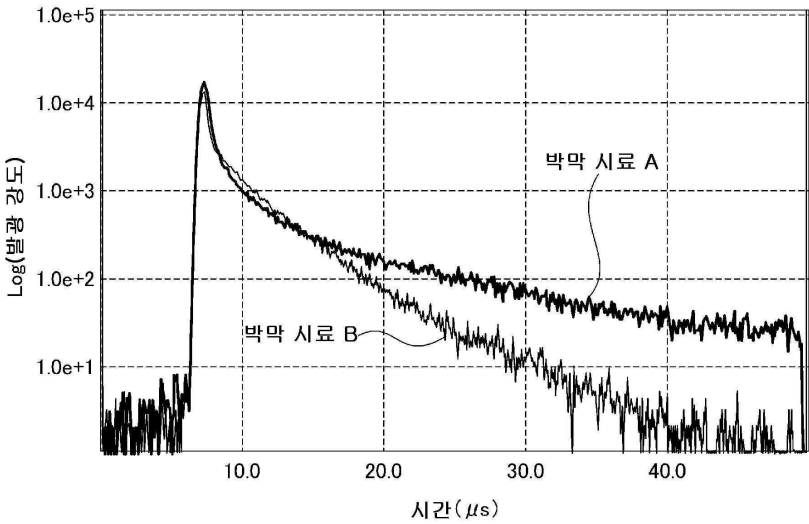
9...전자 주입층.

도면

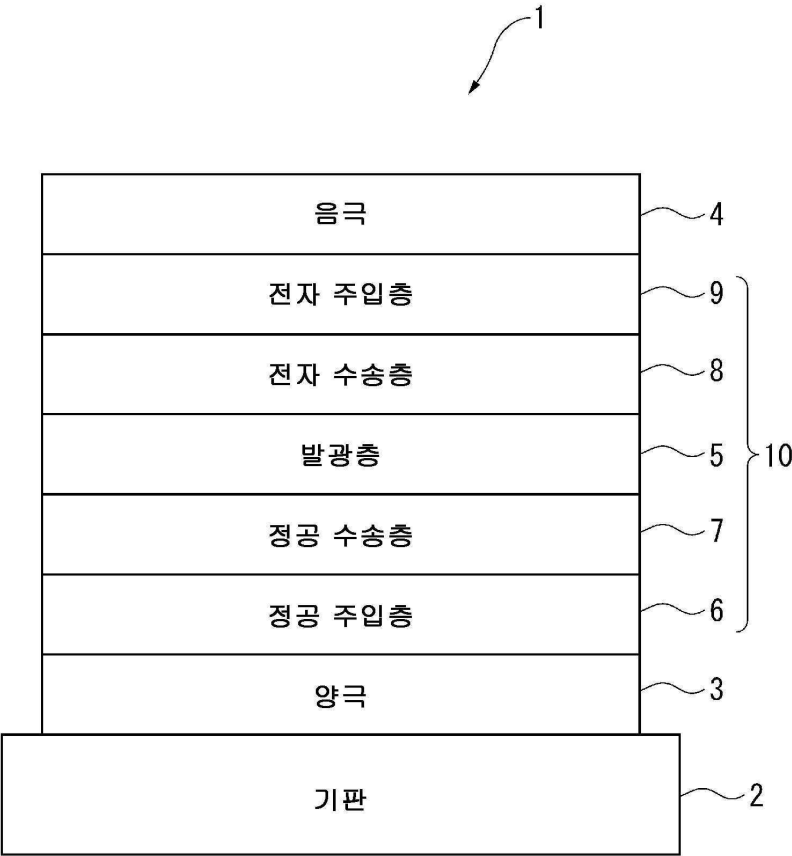
도면1



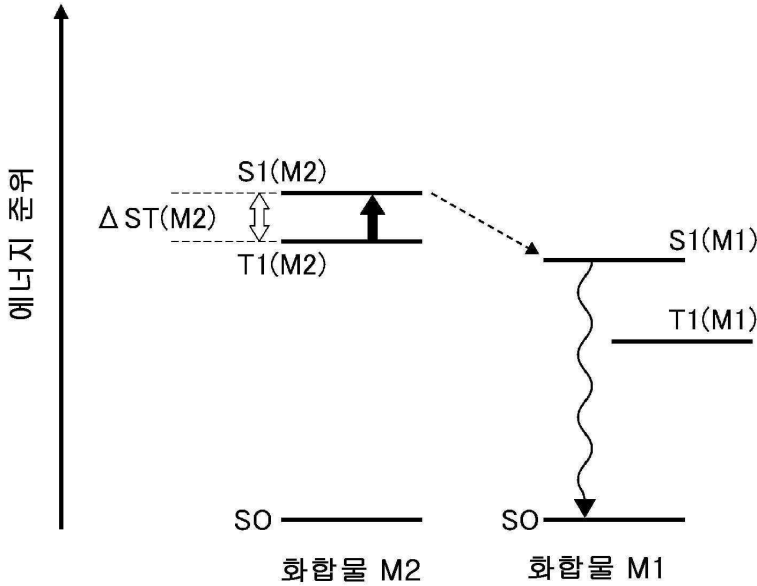
도면2



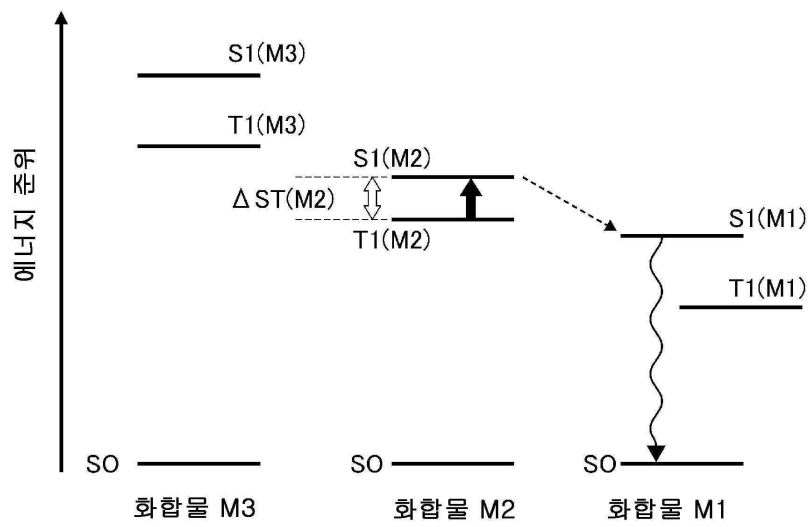
도면3



도면4



도면5



도면6

