



(19) 대한민국특허청(KR)
(12) 공개특허공보(A)

(11) 공개번호 10-2024-0068663
(43) 공개일자 2024년05월17일

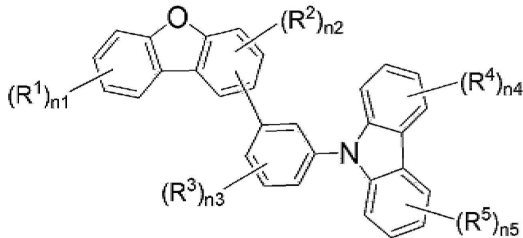
- (51) 국제특허분류(Int. Cl.)
 C07D 405/10 (2006.01) C07D 491/048 (2006.01)
 C09K 11/06 (2006.01) H10K 101/20 (2023.01)
 H10K 50/11 (2023.01) H10K 50/18 (2023.01)
 H10K 85/60 (2023.01)
- (52) CPC특허분류
 C07D 405/10 (2013.01)
 C07D 491/048 (2013.01)
- (21) 출원번호 10-2024-7010385
- (22) 출원일자(국제) 2022년08월31일
 심사청구일자 없음
- (85) 번역문제출일자 2024년03월27일
- (86) 국제출원번호 PCT/JP2022/032781
- (87) 국제공개번호 WO 2023/053835
 국제공개일자 2023년04월06일
- (30) 우선권주장
 JP-P-2021-157765 2021년09월28일 일본(JP)
 JP-P-2022-087873 2022년05월30일 일본(JP)
- (71) 출원인
 가부시키키가이샤 큐릭스
 일본 후쿠오카켄 후쿠오카시 니시쿠 규다이신마치 4-1
- (72) 발명자
 오자와 히로아키
 일본 후쿠오카켄 후쿠오카시 니시쿠 규다이신마치 4-1 가부시키키가이샤 큐릭스 나이
 모리오 모모코
 일본 후쿠오카켄 후쿠오카시 니시쿠 규다이신마치 4-1 가부시키키가이샤 큐릭스 나이
 (뒷면에 계속)
- (74) 대리인
 특허법인코리아나

전체 청구항 수 : 총 27 항

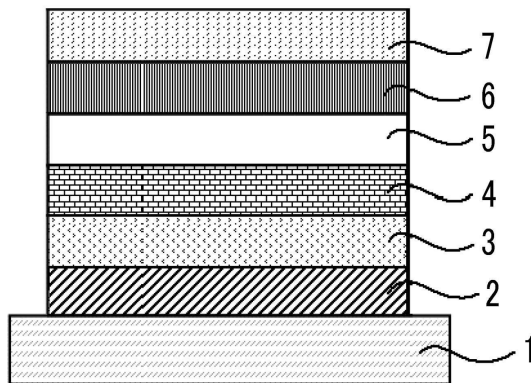
(54) 발명의 명칭 화합물, 조성물, 호스트 재료, 전자 장벽 재료 및 유기 발광 소자

(57) 요약

하기 일반식의 화합물은, 호스트 재료나 전자 장벽 재료로서 유용하다. R¹-R⁵는 중수소 원자 또는 알킬기이지만, R⁴와 R⁵ 중 1~2개는 알킬기로 치환되어 있어도 되는 페닐기이다. n1과 n3~5는 0~4, n2는 0~3이다.



대표도 - 도1



(52) CPC특허분류

C09K 11/06 (2022.01)
H10K 50/11 (2023.02)
H10K 50/181 (2023.02)
H10K 85/6572 (2023.02)
H10K 85/6574 (2023.02)
H10K 2101/20 (2023.02)

(72) 발명자

고토 아이코

일본 후쿠오카현 후쿠오카시 니시쿠 규다이신마치
4-1 가부시키가이샤 큐릭스 나이

가시와자키 다카히로

일본 후쿠오카현 후쿠오카시 니시쿠 규다이신마치
4-1 가부시키가이샤 큐릭스 나이

모리모토 게이

일본 후쿠오카현 후쿠오카시 니시쿠 규다이신마치
4-1 가부시키가이샤 큐릭스 나이

황 송혜

일본 후쿠오카현 후쿠오카시 니시쿠 규다이신마치
4-1 가부시키가이샤 큐릭스 나이

명세서

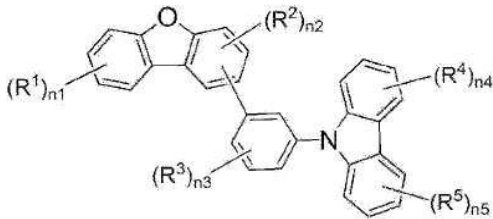
청구범위

청구항 1

하기 일반식 (1)로 나타나는 화합물.

[화학식 1]

일반식 (1)



[식 중, R¹~R³은 각각 독립적으로 중수소 원자, 또는 중수소화되어 있어도 되는 알킬기를 나타내고, R⁴ 및 R⁵는 각각 독립적으로 중수소 원자, 중수소화되어 있어도 되는 알킬기, 또는 중수소화되어 있어도 되는 알킬기 혹은 중수소 원자로 치환되어 있어도 되는 페닐기를 나타낸다. 단, R⁴와 R⁵ 중 1개 또는 2개는, 중수소화되어 있어도 되는 알킬기 혹은 중수소 원자로 치환되어 있어도 되는 페닐기이다. R¹~R⁵는, 다른 R¹~R⁵와 결합하여 환상 구조를 형성하는 경우는 없고, 인접하는 R¹끼리, 인접하는 R²끼리, 인접하는 R³끼리가 서로 결합하여 환상 구조를 형성하는 경우도 없다. 인접하는 R⁴끼리는 서로 결합하여 벤조퓨로 골격 또는 벤조티에노 골격을 형성해도 되고, 인접하는 R⁵끼리는 서로 결합하여 벤조퓨로 골격 또는 벤조티에노 골격을 형성해도 된다. n1, n3, n4, n5는 각각 독립적으로 0~4 중 어느 하나의 정수를 나타내고, n2는 0~3 중 어느 하나의 정수를 나타내며, n4와 n5의 합은 1~8이다.]

청구항 2

청구항 1에 있어서,

인접하는 R⁴끼리, 인접하는 R⁵끼리가 서로 결합하여 환상 구조를 형성하고 있지 않은, 화합물.

청구항 3

청구항 1에 있어서,

인접하는 R⁵끼리는 서로 결합하여 벤조퓨로 골격 또는 벤조티에노 골격을 형성하고 있는, 화합물.

청구항 4

청구항 1 내지 청구항 3 중 어느 한 항에 있어서,

R⁴ 및 R⁵가, 각각 독립적으로 중수소 원자 또는 페닐기이며, 상기 페닐기는 중수소 원자, 또는 중수소화되어 있어도 되는 알킬기로 치환되어 있어도 되는, 화합물.

청구항 5

청구항 1 내지 청구항 4 중 어느 한 항에 있어서,

1개의 R⁴와 1개의 R⁵만이, 각각 독립적으로, 중수소화되어 있어도 되는 알킬기 혹은 중수소 원자로 치환되어 있어도 되는 페닐기인, 화합물.

청구항 6

청구항 1 내지 청구항 4 중 어느 한 항에 있어서,

1개의 R⁴만이, 중수소화되어 있어도 되는 알킬기 혹은 중수소 원자로 치환되어 있어도 되는 페닐기인, 화합물.

청구항 7

청구항 1 내지 청구항 6 중 어느 한 항에 있어서,

R¹~R³이 중수소 원자인, 화합물.

청구항 8

청구항 1 내지 청구항 7 중 어느 한 항에 있어서,

R⁴의 적어도 하나가 중수소 원자이고, R⁵의 적어도 하나가 중수소 원자인, 화합물.

청구항 9

청구항 1 내지 청구항 8 중 어느 한 항에 있어서,

n1~n3이 0인, 화합물.

청구항 10

청구항 1 내지 청구항 9 중 어느 한 항에 있어서,

일반식 (1) 중의 다이벤조퓨란이 2위에서 일반식 (1) 중의 페닐렌기에 결합되어 있는, 화합물.

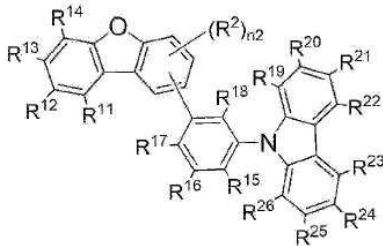
청구항 11

청구항 1 내지 청구항 10 중 어느 한 항에 있어서,

상기 화합물이 하기 일반식 (2)로 나타나는, 화합물.

[화학식 2]

일반식 (2)



[일반식 (2)에 있어서, R²는 중수소화되어 있어도 되는 알킬기를 나타내고, n2는 0~3의 정수를 나타낸다. R¹¹~R¹⁸은 각각 독립적으로 수소 원자, 중수소 원자, 또는 중수소화되어 있어도 되는 알킬기를 나타낸다. R¹⁹~R²⁶은 각각 독립적으로 수소 원자, 중수소 원자, 중수소화되어 있어도 되는 알킬기, 또는 중수소화되어 있어도 되는 알킬기 혹은 중수소 원자로 치환되어 있어도 되는 페닐기를 나타낸다. 단, R¹⁹~R²⁶ 중 1개 또는 2개는, 중수소화되어 있어도 되는 알킬기 혹은 중수소 원자로 치환되어 있어도 되는 페닐기이다. R¹⁹와 R²⁰, R²⁰과 R²¹, R²¹과 R²², R²³과 R²⁴, R²⁴와 R²⁵, R²⁵와 R²⁶은, 서로 결합하여, 벤조퓨로 골격 또는 벤조티에노 골격을 형성하고 있어도 된다.]

청구항 12

청구항 11에 있어서,

인접하는 R²끼리, R¹¹과 R¹², R¹²와 R¹³, R¹³과 R¹⁴, R¹⁵와 R¹⁶, R¹⁶과 R¹⁷, R¹⁹와 R²⁰, R²⁰과 R²¹, R²¹과 R²², R²³과 R²⁴, R²⁴와 R²⁵, R²⁵와 R²⁶은, 모두 서로 결합하여 환상 구조를 형성하고 있지 않은, 화합물.

청구항 13

청구항 11 또는 청구항 12에 있어서,

R²¹ 및 R²⁴ 중 적어도 일방이, 중수소화되어 있어도 되는 알킬기 혹은 중수소 원자로 치환되어 있어도 되는 페닐기인, 화합물.

청구항 14

청구항 1 내지 청구항 13 중 어느 한 항에 기재된 화합물을 포함하는 호스트 재료.

청구항 15

청구항 14에 있어서,

지연 형광 재료와 함께 이용하기 위한 호스트 재료.

청구항 16

청구항 1 내지 청구항 13 중 어느 한 항에 기재된 화합물을 포함하는 전자 장벽 재료.

청구항 17

청구항 1 내지 청구항 13 중 어느 한 항에 기재된 화합물에 지연 형광 재료를 도프한 조성물.

청구항 18

청구항 17에 있어서,

막 형상인, 조성물.

청구항 19

청구항 17 또는 청구항 18에 있어서,

상기 지연 형광 재료가, 벤젠환으로 치환되어 있는 사이아노기의 수가 1개인 사이아노벤젠 구조를 갖는 화합물인, 조성물.

청구항 20

청구항 17 또는 청구항 18에 있어서,

상기 지연 형광 재료가, 벤젠환으로 치환되어 있는 사이아노기의 수가 2개인 다이사이아노벤젠 구조를 갖는 화합물인, 조성물.

청구항 21

청구항 17 내지 청구항 20 중 어느 한 항에 있어서,

상기 호스트 재료 및 상기 지연 형광 재료보다 최저 여기 일중항 에너지가 낮은 형광성 화합물을 더 포함하는, 조성물.

청구항 22

청구항 17 내지 청구항 21 중 어느 한 항에 기재된 조성물로 이루어지는 층을 갖는 유기 발광 소자.

청구항 23

청구항 22에 있어서,

상기 층이, 탄소 원자, 수소 원자, 질소 원자, 산소 원자, 황 원자, 붕소 원자 및 할로젠 원자로 이루어지는 군으로부터 선택되는 원자만으로 이루어지는, 유기 발광 소자.

청구항 24

청구항 23에 있어서,

상기 층이, 탄소 원자, 수소 원자, 질소 원자, 산소 원자 및 황 원자로 이루어지는 군으로부터 선택되는 원자만으로 이루어지는, 유기 발광 소자.

청구항 25

청구항 22 내지 청구항 24 중 어느 한 항에 있어서,

유기 일렉트로 루미네선스 소자인, 유기 발광 소자.

청구항 26

청구항 22 내지 청구항 25 중 어느 한 항에 있어서,

상기 조성물이 상기 형광성 화합물을 포함하고 있지 않고, 상기 소자로부터의 발광의 최대 성분은 상기 지연 형광 재료로부터의 발광인, 유기 발광 소자.

청구항 27

청구항 22 내지 청구항 25 중 어느 한 항에 있어서,

상기 조성물이 상기 형광성 화합물을 포함하고 있으며, 상기 소자로부터의 발광의 최대 성분은 상기 형광성 화합물로부터의 발광인, 유기 발광 소자.

발명의 설명

기술 분야

[0001] 본 발명은, 호스트 재료나 전자 장벽 재료로서 유용한 화합물과, 그 화합물을 이용한 조성물과 유기 발광 소자에 관한 것이다.

배경 기술

[0002] 유기 일렉트로 루미네선스 소자(유기 EL 소자) 등의 발광 소자의 발광 효율을 높이는 연구가 활발히 행해지고 있다. 특히, 유기 일렉트로 루미네선스 소자를 구성하는 전자 수송 재료, 홀 수송 재료, 발광 재료, 호스트 재료 등을 새롭게 개발하여 조합함으로써, 발광 효율을 높이는 연구가 다양하게 이루어져 오고 있다. 그중에서, 지연 형광 재료를 이용한 유기 일렉트로 루미네선스 소자가 개발되어, 주목을 받고 있다(비특허문헌 1 참조).

[0003] 지연 형광 재료는, 여기 상태에 있어서, 여기 삼중항 상태에서부터 여기 일중항 상태로의 역항간 교차를 발생시킨 후, 그 여기 일중항 상태에서부터 기저 상태로 되돌아갈 때에 형광을 방사하는 재료이다. 이러한 경로에 의한 형광은, 기저 상태에서부터 직접 발생한 여기 일중항 상태에서부터의 형광(통상의 형광)보다 늦게 관측되기 때문에, 지연 형광이라고 칭해지고 있다. 여기에서, 예를 들면, 발광성 화합물을 캐리어의 주입에 의하여 여기한 경우, 여기 일중항 상태와 여기 삼중항 상태의 발생 확률은 통계적으로 25%:75%이기 때문에, 직접 발생한 여기 일중항 상태에서부터의 형광만으로는, 발광 효율의 향상에 한계가 있다. 한편, 지연 형광 재료에서는, 여기 일중항 상태뿐만 아니라, 여기 삼중항 상태도 상기의 역항간 교차를 통한 경로에 의하여 형광 발광에 이용할 수 있기 때문에, 통상의 형광 재료에 비하여 높은 발광 효율이 얻어지게 된다. 이와 같은 특징을 갖는 지연 형광 재료는, 일반적으로 유기 일렉트로 루미네선스 소자의 발광층에 호스트 재료와 함께 이용되어, 실제로 발광 효율의 향상에 기여하고 있다.

선행기술문헌

특허문헌

[0004] (특허문헌 0001) 비특허문헌 1: Uoyama et al, Nature, 492, 234-238(2012)

발명의 내용

해결하려는 과제

[0005] 지연 형광 재료와 조합하는 호스트 재료에는, 지연 형광 재료보다 최저 여기 일중항 에너지가 보다 큰 화합물이 선택된다. 그러나, 지연 형광을 방사하지 않는 종래의 형광 재료와 조합하여 사용되어 온 호스트 재료를, 그대로 지연 형광 재료와 조합해도 충분한 발광 성능을 실현할 수 없다. 특히 지연 형광 재료를 이용한 유기 일렉트로 루미네이션 소자에서는, 구동 전압이나 발광 수명의 점에서 개선의 여지가 있다. 이 때문에, 지연 형광 재료를 이용한 유기 발광 소자에 있어서, 높은 발광 효율을 달성하면서, 구동 전압을 억제하여, 발광 수명을 길게 하는 것을 목적으로 하여 본 발명자들은 검토를 행했다.

과제의 해결 수단

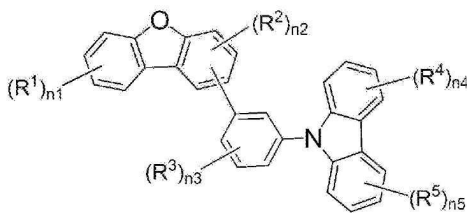
[0006] 예의 검토를 진행한 결과, 본 발명자들은, 특정 구조를 갖는 호스트 재료를 지연 형광 재료와 조합하여 이용하면, 구동 전압을 억제하면서 장수명화를 달성하여, 높은 발광 효율을 실현할 수 있는 것을 발견했다. 본 발명은, 이러한 지견(知見)에 근거하여 제안된 것이며, 구체적으로 이하의 구성을 갖는다.

[0007] [1]

[0008] 하기 일반식 (1)로 나타나는 화합물.

[0009] [화학식 1]

일반식 (1)



[0010]

[0011] [식 중, R¹-R³은 각각 독립적으로 중수소 원자, 또는 중수소화되어 있어도 되는 알킬기를 나타내고, R⁴ 및 R⁵는 각각 독립적으로 중수소 원자, 중수소화되어 있어도 되는 알킬기, 또는 중수소화되어 있어도 되는 알킬기 혹은 중수소 원자로 치환되어 있어도 되는 페닐기를 나타낸다. 단, R⁴와 R⁵ 중 1개 또는 2개는, 중수소화되어 있어도 되는 알킬기 혹은 중수소 원자로 치환되어 있어도 되는 페닐기이다. R¹-R⁵는, 다른 R¹-R⁵와 결합하여 환상 구조를 형성하는 경우는 없고, 인접하는 R¹끼리, 인접하는 R²끼리, 인접하는 R³끼리가 서로 결합하여 환상 구조를 형성하는 경우도 없다. 인접하는 R⁴끼리는 서로 결합하여 벤조퓨로 골격 또는 벤조티에노 골격을 형성해도 되고, 인접하는 R⁵끼리는 서로 결합하여 벤조퓨로 골격 또는 벤조티에노 골격을 형성해도 된다. n1, n3, n4, n5는 각각 독립적으로 0~4 중 어느 하나의 정수를 나타내고, n2는 0~3 중 어느 하나의 정수를 나타내며, n4와 n5의 합은 1~8이다.]

[0012] [2]

[0013] 인접하는 R⁴끼리, 인접하는 R⁵끼리가 서로 결합하여 환상 구조를 형성하고 있지 않은, [1]에 기재된 화합물.

[0014] [3]

[0015] 인접하는 R⁵끼리는 서로 결합하여 벤조퓨로 골격 또는 벤조티에노 골격을 형성하고 있는, [1]에 기재된 화합물.

[0016] [4]

R^{24} 와 R^{25} , R^{25} 와 R^{26} 은, 모두 서로 결합하여 환상 구조를 형성하고 있지 않은, [11]에 기재된 화합물.

- [0037] [13]
- [0038] R^{21} 및 R^{24} 중 적어도 일방이, 중수소화되어 있어도 되는 알킬기 혹은 중수소 원자로 치환되어 있어도 되는 페닐기인, [11] 또는 [12]에 기재된 화합물.
- [0039] [14]
- [0040] [1] 내지 [13] 중 어느 하나에 기재된 화합물을 포함하는 호스트 재료.
- [0041] [15]
- [0042] 자연 형광 재료와 함께 이용하기 위한 [14]에 기재된 호스트 재료.
- [0043] [16]
- [0044] [1] 내지 [13] 중 어느 하나에 기재된 화합물을 포함하는 전자 장벽 재료. 특히, 자연 형광 재료를 포함하는 발광층에 접하는 전자 장벽층에 이용하기 위한 전자 장벽 재료.
- [0045] [17]
- [0046] [1] 내지 [13] 중 어느 하나에 기재된 화합물에 자연 형광 재료를 도프한 조성물.
- [0047] [18]
- [0048] 막 형성인, [17]에 기재된 조성물.
- [0049] [19]
- [0050] 상기 자연 형광 재료가, 벤젠환으로 치환되어 있는 사이아노기의 수가 1개인 사이아노벤젠 구조를 갖는 화합물인, [17] 또는 [18]에 기재된 조성물.
- [0051] [20]
- [0052] 상기 자연 형광 재료가, 벤젠환으로 치환되어 있는 사이아노기의 수가 2개인 다이사이아노벤젠 구조를 갖는 화합물인, [17] 또는 [18]에 기재된 조성물.
- [0053] [21]
- [0054] 상기 호스트 재료 및 상기 자연 형광 재료보다 최저 여기 일중항 에너지가 낮은 형광성 화합물을 더 포함하는, [17] 내지 [20] 중 어느 하나에 기재된 조성물.
- [0055] [22]
- [0056] [17] 내지 [21] 중 어느 하나에 기재된 조성물로 이루어지는 층을 갖는 유기 발광 소자.
- [0057] [23]
- [0058] 상기 층이, 탄소 원자, 수소 원자, 질소 원자, 산소 원자, 황 원자, 붕소 원자 및 할로젠 원자로 이루어지는 군으로부터 선택되는 원자만으로 이루어지는, [22]에 기재된 유기 발광 소자.
- [0059] [24]
- [0060] 상기 층이, 탄소 원자, 수소 원자, 질소 원자, 산소 원자 및 황 원자로 이루어지는 군으로부터 선택되는 원자만으로 이루어지는, [23]에 기재된 유기 발광 소자.
- [0061] [25]
- [0062] 유기 일렉트로 루미네선스 소자인, [22] 내지 [24] 중 어느 하나에 기재된 유기 발광 소자.
- [0063] [26]
- [0064] 상기 조성물이 상기 형광성 화합물을 포함하고 있지 않고, 상기 소자로부터의 발광의 최대 성분은 상기 자연 형광 재료로부터의 발광인, [22] 내지 [25] 중 어느 하나에 기재된 유기 발광 소자.
- [0065] [27]

[0066] 상기 조성물이 상기 형광성 화합물을 포함하고 있으며, 상기 소자로부터의 발광의 최대 성분은 상기 형광성 화합물로부터의 발광인, [22] 내지 [25] 중 어느 하나에 기재된 유기 발광 소자.

발명의 효과

[0067] 본 발명의 화합물을 이용하면, 저전압으로 구동하여, 수명이 긴 유기 발광 소자를 제공할 수 있다.

도면의 간단한 설명

[0068] 도 1은 유기 일렉트로 루미네이션 소자의 층 구성예를 나타내는 개략 단면도이다.

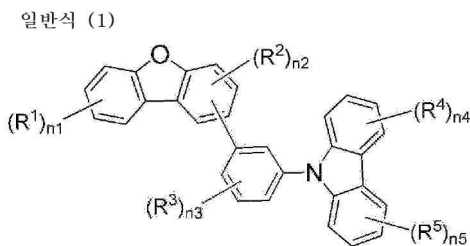
발명을 실시하기 위한 구체적인 내용

[0069] 이하에 있어서, 본 발명의 내용에 대하여 상세하게 설명한다. 이하에 기재하는 구성 요건의 설명은, 본 발명의 대표적인 실시형태나 구체예에 근거하여 이루어지는 경우가 있지만, 본 발명은 그와 같은 실시형태나 구체예에 한정되는 것은 아니다. 또한, 본 명세서에 있어서 "~"를 이용하여 나타나는 수치 범위는, "~"의 전후에 기재되는 수치를 하한값 및 상한값으로서 포함하는 범위를 의미한다. 또, 본 발명에 이용되는 화합물의 분자 내에 존재하는 수소 원자의 동위체종은 특별히 한정되지 않는다.

[0070] (일반식 (1)로 나타나는 화합물)

[0071] 본 발명에서는, 하기 일반식 (1)로 나타나는 화합물을 이용한다.

[0072] [화학식 3]



[0073]

[0074] 일반식 (1)에 있어서, R^1 ~ R^3 은 각각 독립적으로 중수소 원자, 또는 중수소화되어 있어도 되는 알킬기를 나타내고, R^4 및 R^5 는 각각 독립적으로 중수소 원자, 중수소화되어 있어도 되는 알킬기, 또는 중수소화되어 있어도 되는 알킬기 혹은 중수소 원자로 치환되어 있어도 되는 페닐기를 나타낸다. $n1$, $n3$, $n4$, $n5$ 는 각각 독립적으로 0~4 중 어느 하나의 정수를 나타내고, $n2$ 는 0~3 중 어느 하나의 정수를 나타내며, $n4$ 와 $n5$ 의 합은 1~8이다.

[0075] 본원에 있어서의 "알킬기"는, 직쇄상, 분기상, 환상 중 어느 것이어도 된다. 또, 직쇄 부분과 환상 부분과 분기 부분 중 2종 이상이 혼재하고 있어도 된다. 알킬기의 탄소수는, 예를 들면 1 이상, 2 이상, 4 이상으로 할 수 있다. 또, 탄소수는 30 이하, 20 이하, 10 이하, 6 이하, 4 이하로 할 수 있다. 알킬기의 구체예로서, 메틸기, 에틸기, n-프로필기, 아이소프로필기, n-부틸기, 아이소부틸기, tert-부틸기, n-펜틸기, 아이소펜틸기, n-헥실기, 사이클로펜틸기, 사이클로헥실기, 사이클로헵틸기를 들 수 있다. 본 발명의 일 양태에서는, 알킬기의 탄소수는 1~4이다. 본 발명의 일 양태에서는, 알킬기는 메틸기이다. 본 발명의 일 양태에서는, 알킬기는 아이소프로필기이다. 본 발명의 일 양태에서는, 알킬기는 tert-부틸기이다. 일반식 (1)로 나타나는 분자 내에 알킬기가 복수 존재할 때, 그들 알킬기는 서로 동일해도 되고 상이해도 된다. 본 발명의 일 양태에서는, 일반식 (1)로 나타나는 분자 내의 알킬기는 모두 동일하다. 일반식 (1)로 나타나는 분자 내의 알킬기의 수는 0 이상, 1 이상, 2 이상, 4 이상, 8 이상으로 할 수 있다. 일반식 (1)로 나타나는 분자 내의 알킬기의 수는, 20 이하, 10 이하, 5 이하, 3 이하로 해도 된다. 일반식 (1)로 나타나는 분자 내의 알킬기의 수는 0이어도 된다. 또한, 여기에서 말하는 알킬기의 수에는, 페닐기로 치환되어 있는 알킬기의 수도 포함된다.

[0076] R^4 및 R^5 가 취할 수 있는 "알킬기로 치환되어 있어도 되는 페닐기"는, 페닐기에 존재하는 5개의 수소 원자 중 적어도 1개가 알킬기로 치환되어 있어도 되는 것을 의미한다. 본 발명의 일 양태에서는, 페닐기는 0~3개의 알킬기로 치환되어 있다. 예를 들면 0~2개의 알킬기로 치환되어 있다. 본 발명의 일 양태에서는, 페닐기는 알킬기로 치환되어 있지 않다. 페닐기로 치환되어 있는 알킬기의 탄소수는 1~6인 것이 바람직하고, 1~4인 것이 보다 바람직하다.

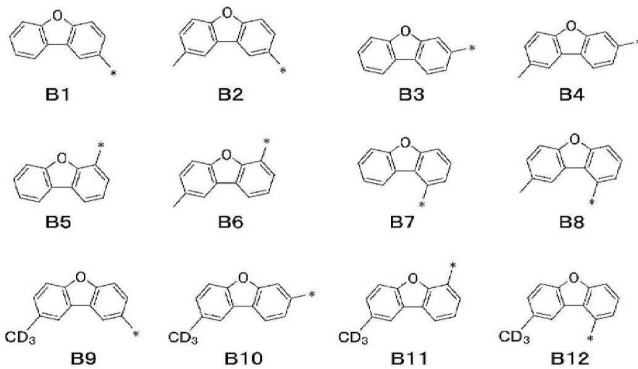
직하다. 예를 들면, 4-메틸페닐기, 3-메틸페닐기, 3,5-다이메틸페닐기, 2,4,6-트라이메틸페닐기, 2,3,4,5,6-헵타메틸페닐기, 4-아이소프로필페닐기, 3-아이소프로필페닐기, 3,5-다이아이소프로필페닐기, 4-tert-부틸페닐기, 3-tert-부틸페닐기, 3,5-다이tert-부틸페닐기를 들 수 있다. 또, 이들의 구체에 중의 알킬 치환기에 존재하는 수소 원자가 모두 중수소 원자로 치환된 기도 예시할 수 있다. 또한, 이들의 구체에 중에 존재하는 모든 수소 원자가 중수소 원자로 치환된 기도 예시할 수 있다.

[0077] 본원에 있어서의 "중수소화되어 있어도 되는 알킬기"는, 알킬기의 수소 원자 중 적어도 하나가 중수소 원자로 치환되어 있어도 되는 것을 의미한다. 알킬기의 수소 원자는 모두가 중수소 원자로 치환되어 있어도 된다. 예를 들면, 중수소화되어 있어도 되는 메틸기에는, CH₃, CDH₂, CD₂H, CD₃이 포함된다. "중수소화되어 있어도 되는 알킬기"는, 전혀 중수소화되어 있지 않은 알킬기이거나, 모든 수소 원자가 중수소 원자로 치환되어 있는 알킬기인 것이 바람직하다. 본 발명의 일 양태에서는, "중수소화되어 있어도 되는 알킬기"로서, 전혀 중수소화되어 있지 않은 알킬기를 선택한다. 본 발명의 일 양태에서는, "중수소화되어 있어도 되는 알킬기"로서, 모든 수소 원자가 중수소 원자로 치환되어 있는 알킬기를 선택한다.

[0078] 일반식 (1)에 있어서의 n1과 n2의 합은 0~7이며, 예를 들면 1~7의 범위 내로 해도 된다. 예를 들면 1~4의 범위 내로 해도 된다. 본 발명의 일 양태에서는, n1은 0~2의 정수이며, n2는 0~2의 정수이다. 본 발명의 일 양태에서는, n1은 0 또는 1이고, n2는 0 또는 1이다. 본 발명의 일 양태에서는, n1과 n2는 모두 0이다. 본 발명의 일 양태에서는, R¹ 및 R²는 각각 독립적으로 중수소 원자, 또는 중수소화되어 있어도 되는 탄소수 1~6의 알킬기이며, 바람직하게는 R¹ 및 R²는 각각 독립적으로 중수소 원자, 또는 중수소화되어 있어도 되는 탄소수 1~4의 알킬기이다. 본 발명의 일 양태에서는, R¹ 및 R²는 각각 독립적으로 중수소 원자, 또는 중수소화된 알킬기이다. 본 발명의 일 양태에서는, R¹ 및 R²는 중수소 원자이다. 본 발명의 일 양태에서는, n1과 n2의 합이 7이며, R¹ 및 R²는 중수소 원자이다.

[0079] 일반식 (1)에 있어서의, (R¹)_{n1}과 (R²)_{n2}가 치환되어 있는 다이벤조퓨란일기의 구체예를 이하에 든다. 단, 본 발명에서 채용할 수 있는 구조는 이들 구체예에 의하여 한정적으로 해석되는 경우는 없다. 본원에 있어서, *는 메타페닐렌기에 대한 결합 위치를 나타낸다. 메틸기에 대해서는 CH₃이라고 표기하지 않고, CH₃을 생략하고 있다. 이 때문에, B2, B4, B6, B8은 각각 메틸기를 갖고 있다.

[0080] [화학식 4]



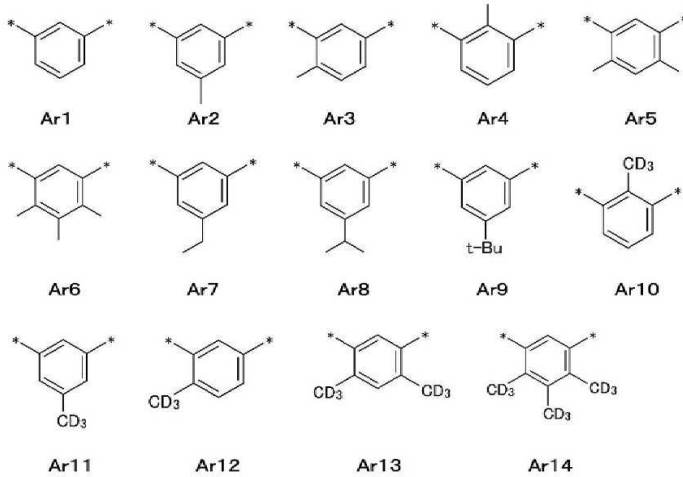
[0081] 상기 B1~B8의 수소 원자를 모두 중수소 원자로 치환한 것을, 각각 B1(D)~B8(D)로서 여기에 예시한다.

[0082] 일반식 (1)에 있어서의 n3은 0~4이다. 본 발명의 일 양태에서는, n3은 0이다. 본 발명의 일 양태에서는, n3은 1~4이다. 본 발명의 일 양태에서는, R³은 중수소 원자, 또는 중수소화되어 있어도 되는 탄소수 1~6의 알킬기이며, 바람직하게는 R³은 각각 독립적으로 중수소 원자, 또는 중수소화되어 있어도 되는 탄소수 1~4의 알킬기이다. 본 발명의 일 양태에서는, R³은 중수소 원자, 또는 중수소화된 알킬기이다. 본 발명의 일 양태에서는, R³은 중수소 원자이다. 본 발명의 일 양태에서는, n3은 4이며, R³은 중수소 원자이다.

[0083] 일반식 (1)에 있어서의, (R³)_{n3}이 치환되어 있는 메타페닐렌기의 구체예를 이하에 들지만, 본 발명에서 채용할

수 있는 구조는 이들 구체예에 의하여 한정적으로 해석되는 경우는 없다. 이하의 구체예에 있어서, *의 일방은 일반식 (1)의 카바졸에 결합하는 위치를 나타내고, 타방은 다이벤조퓨란에 결합하는 위치를 나타낸다. 본원에 있어서 메틸기에 대해서는 CH₃이라고 표기하지 않고 기재를 생략하고 있다. 예를 들면, Ar₂-Ar₆은 각각 메틸기로 치환되어 있고, Ar₇은 에틸기로 치환되어 있으며, Ar₈은 아이소프로필기로 치환되어 있다. 또한, t-Bu는 tert-부틸기를 나타내고, D는 중수소 원자를 나타낸다.

[0085] [화학식 5]



[0086]

[0087] 상기 Ar₁-Ar₉의 수소 원자를 모두 중수소 원자로 치환한 것을, 각각 Ar₁(D)-Ar₉(D)로서 여기에 예시한다.

[0088] 일반식 (1)에 있어서의 R⁴와 R⁵ 중 1개 또는 2개는, 중수소화되어 있어도 되는 알킬기 혹은 중수소 원자로 치환되어 있어도 되는 페닐기이다. 본 발명의 일 양태에서는, 여기에서 말하는 페닐기는, 중수소화되어 있어도 되는 알킬기만으로 치환되어 있다. 본 발명의 일 양태에서는, 여기에서 말하는 페닐기는 적어도 하나의 수소 원자가 중수소 원자로 치환된 페닐기이다. 본 발명의 일 양태에서는, 여기에서 말하는 페닐기는, 중수소화되어 있어도 되는 알킬기와 함께, 중수소 원자로도 치환되어 있는 페닐기이다. 본 발명의 일 양태에서는, 여기에서 말하는 페닐기는 무치환의 페닐기이다. 본 발명의 일 양태에서는, R⁴의 1개만이, 중수소화되어 있어도 되는 알킬기 혹은 중수소 원자로 치환되어 있어도 되는 페닐기이다. 본 발명의 일 양태에서는, R⁵의 1개만이, 중수소화되어 있어도 되는 알킬기 혹은 중수소 원자로 치환되어 있어도 되는 페닐기이다. 본 발명의 일 양태에서는, 1개의 R⁴와 1개의 R⁵가, 각각 독립적으로, 중수소화되어 있어도 되는 알킬기 혹은 중수소 원자로 치환되어 있어도 되는 페닐기이다. 본 발명의 일 양태에서는, R⁴의 적어도 하나가 중수소 원자이며, R⁵의 적어도 하나가 중수소 원자이다.

[0089] 일반식 (1)에 있어서의 n₄와 n₅는, 각각 0~4이고, 예를 들면 1~4이며, 예를 들면 1~3이고, 예를 들면 1 또는 2이다. n₄와 n₅의 합은 1~8이며, 예를 들면 1~4로 해도 된다. 본 발명의 일 양태에서는, n₄와 n₅의 합은 1 또는 2이다. 본 발명의 일 양태에서는, n₄와 n₅의 합은 3 또는 4이다.

[0090] 본 발명의 바람직한 일 양태에서는, R¹-R³은 각각 독립적으로 중수소 원자를 나타내고, R⁴ 및 R⁵는 각각 독립적으로 중수소 원자, 또는 중수소 원자로 치환되어 있어도 되는 페닐기를 나타내며, 단, R⁴와 R⁵ 중 1개 또는 2개는 중수소 원자로 치환되어 있어도 되는 페닐기이다.

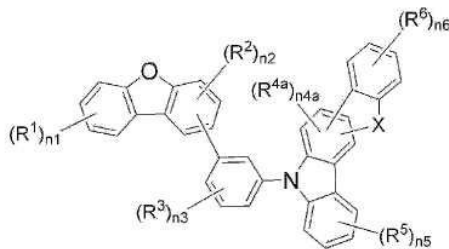
[0091] 일반식 (1)에 있어서의 R¹-R⁵는, 다른 R¹-R⁵와 결합하여 환상 구조를 형성하는 경우는 없다. 즉, R¹은 R²-R⁵와 결합하여 환상 구조를 형성하는 경우는 없고, R², R³, R⁴, R⁵에 대해서도 동일하다. 또, 인접하는 R¹끼리가 서로 결합하여 환상 구조를 형성하는 경우는 없고, 인접하는 R²끼리가 서로 결합하여 환상 구조를 형성하는 경우는 없으며, 인접하는 R³끼리가 서로 결합하여 환상 구조를 형성하는 경우도 없다. 한편, 인접하는 R⁴끼리는 서로 결합하여 벤조퓨로 골격 또는 벤조티에노 골격에 한하여 형성해도 되고, 또, 인접하는 R⁵끼리는 서로 결합하여 벤조퓨

로 골격 또는 벤조티에노 골격에 한하여 형성해도 된다. 인접하는 R⁴끼리가 서로 결합하여 벤조퓨로 골격 또는 벤조티에노 골격을 형성하고, R⁴끼리는 서로 결합하여 벤조퓨로 골격 또는 벤조티에노 골격을 형성하고 있지 않을 때, 일반식 (1)의 화합물은 하기 일반식 (1a)로 나타나는 구조를 갖는다. 또, 인접하는 R⁴끼리가 서로 결합하여 벤조퓨로 골격 또는 벤조티에노 골격을 형성하고, 인접하는 R⁵끼리가 서로 결합하여 벤조퓨로 골격 또는 벤조티에노 골격을 형성하고 있을 때, 일반식 (1)의 화합물은 하기 일반식 (1b)로 나타나는 구조를 갖는다. 일반식 (1a) 및 일반식 (1b)에 있어서, X, X¹, X²는 각각 독립적으로 산소 원자 또는 황 원자를 나타낸다. R^{4a}, R^{5a}는 각각 독립적으로 중수소 원자, 중수소화되어 있어도 되는 알킬기, 또는 중수소화되어 있어도 되는 알킬기 혹은 중수소 원자로 치환되어 있어도 되는 페닐기를 나타낸다. n_{4a} 및 n_{5a}는 각각 독립적으로 0~2 중 어느 하나의 정수이지만, 일반식 (1a)의 n_{4a}와 n₅의 합은 1 이상이며, 일반식 (1b)의 n_{4a}와 n_{5a}의 합은 1 이상이다. 또, 일반식 (1a)의 R^{4a}와 R⁵ 중 1개 또는 2개, 일반식 (1b)의 R^{4a}와 R^{5a} 중 1개 또는 2개는, 중수소화되어 있어도 되는 알킬기 혹은 중수소 원자로 치환되어 있어도 되는 페닐기이다. R⁶ 및 R⁷은, 각각 독립적으로 중수소 원자, 또는 치환기(여기에서 말하는 치환기는 수소 원자 및 중수소 원자 이외의 원자 및 원자단을 의미한다)를 나타낸다. 바람직한 R⁶ 및 R⁷은, 각각 독립적으로 중수소 원자, 중수소화되어 있어도 되는 알킬기, 또는 중수소화되어 있어도 되는 알킬기 혹은 중수소 원자로 치환되어 있어도 되는 페닐기이다. 인접하는 R⁶끼리, 인접하는 R⁷끼리가 서로 결합하여 환상 구조를 형성하는 경우는 없다. n₆ 및 n₇은 각각 독립적으로 0~4의 정수를 나타낸다. R¹~R³, R⁵, n₁~n₃, n₅의 설명에 대해서는 일반식 (1)의 대응하는 설명을 참조할 수 있다.

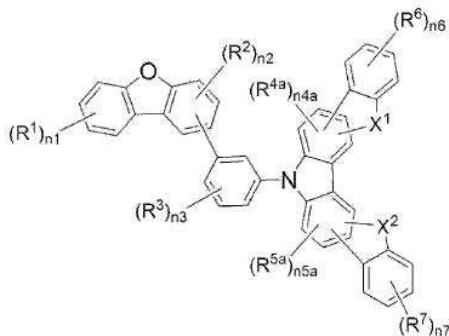
[0092]

[화학식 6]

일반식 (1a)



일반식 (1b)



[0093]

[0094]

일반식 (1a)에서는, X의 상방에 결합하고 있는 벤젠환의 오쏘위로부터 단결합이 좌하 방향으로 신장하고 있다. 이 단결합은, 카바졸 구조의 1~4위 중 어느 것에 결합해도 된다. 또, X도 카바졸 구조의 1~4위 중 어느 것에 결합해도 된다. 단, 단결합과 X는, 카바졸 구조의 골격을 구성하는 인접하는 탄소 원자에 각각 결합한다. 이 때문에, 단결합이 2위에 결합하고 있을 때는, X는 1위나 3위에 결합한다. 단결합이 3위에 결합하고 있을 때는, X는 2위나 4위에 결합한다. 단결합이 1위에 결합하고 있을 때는 X는 2위에 결합한다. 단결합이 4위에 결합하고 있을 때는 X는 3위에 결합한다. 일반식 (1a)에서는 단결합보다 X가 우측에 기재되어 있지만, 일반식 (1a)는 단결합이 X보다 좌측에 위치하는 구조도 포함하고 있는 것으로 한다. 일반식 (1b)에 있어서의 X¹과 X²에 대해서도, 일반식 (1a)의 X와 동일하다.

[0095]

일반식 (1a)의 벤조퓨로카바졸-9-일기로서, 치환 혹은 무치환의 벤조퓨로[2,3-a]카바졸-9-일기를 채용할 수 있

다. 또, 치환 혹은 무치환의 벤조퓨로[3,2-a]카바졸-9-일기를 채용할 수도 있다. 또, 치환 혹은 무치환의 벤조퓨로[2,3-b]카바졸-9-일기를 채용할 수도 있다. 또, 치환 혹은 무치환의 벤조퓨로[3,2-b]카바졸-9-일기를 채용할 수도 있다. 또, 치환 혹은 무치환의 벤조퓨로[2,3-c]카바졸-9-일기를 채용할 수도 있다. 또, 치환 혹은 무치환의 벤조퓨로[3,2-c]카바졸-9-일기를 채용할 수도 있다.

[0096] 일반식 (1a)의 Ar에 결합하는 벤조티에노카바졸-9-일기로서, 치환 혹은 무치환의 벤조티에노[2,3-a]카바졸-9-일기를 채용할 수 있다. 또, 치환 혹은 무치환의 벤조티에노[3,2-a]카바졸-9-일기를 채용할 수도 있다. 또, 치환 혹은 무치환의 벤조티에노[2,3-b]카바졸-9-일기를 채용할 수도 있다. 또, 치환 혹은 무치환의 벤조티에노[3,2-b]카바졸-9-일기를 채용할 수도 있다. 또, 치환 혹은 무치환의 벤조티에노[2,3-c]카바졸-9-일기를 채용할 수도 있다. 또, 치환 혹은 무치환의 벤조티에노[3,2-c]카바졸-9-일기를 채용할 수도 있다.

[0097] 일반식 (1b)의 비스벤조퓨로카바졸-9-일기로서, 치환 혹은 무치환의 비스벤조퓨로[2,3-a:2',3'-f]카바졸-9-일기를 채용할 수 있다. 또, 치환 혹은 무치환의 비스벤조퓨로[3,2-a:3',2'-f]카바졸-9-일기를 채용할 수도 있다. 또, 치환 혹은 무치환의 비스벤조퓨로[2,3-b:2',3'-e]카바졸-9-일기를 채용할 수도 있다. 또, 치환 혹은 무치환의 비스벤조퓨로[3,2-b:3',2'-e]카바졸-9-일기를 채용할 수도 있다. 또, 치환 혹은 무치환의 비스벤조퓨로[2,3-c:2',3'-d]카바졸-9-일기를 채용할 수도 있다. 또, 치환 혹은 무치환의 비스벤조퓨로[3,2-c:3',2'-d]카바졸-9-일기를 채용할 수도 있다.

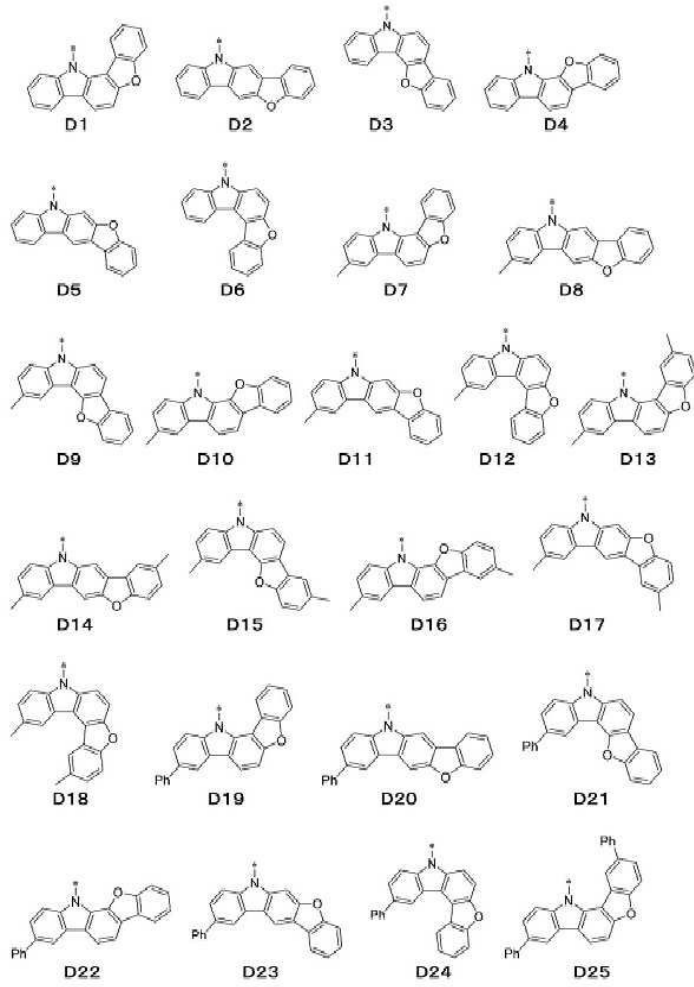
[0098] 일반식 (1b)의 비스벤조티에노카바졸-9-일기로서, 치환 혹은 무치환의 비스벤조티에노[2,3-a:2',3'-f]카바졸-9-일기를 채용할 수 있다. 또, 치환 혹은 무치환의 비스벤조티에노[3,2-a:3',2'-f]카바졸-9-일기를 채용할 수도 있다. 또, 치환 혹은 무치환의 비스벤조티에노[2,3-b:2',3'-e]카바졸-9-일기를 채용할 수도 있다. 또, 치환 혹은 무치환의 비스벤조티에노[3,2-b:3',2'-e]카바졸-9-일기를 채용할 수도 있다. 또, 치환 혹은 무치환의 비스벤조티에노[2,3-c:2',3'-d]카바졸-9-일기를 채용할 수도 있다. 또, 치환 혹은 무치환의 비스벤조티에노[3,2-c:3',2'-d]카바졸-9-일기를 채용할 수도 있다.

[0099] 본 발명의 일 양태에서는, 일반식 (1a)의 n_{4a} 가 0이다. 본 발명의 일 양태에서는, n_{4a} 가 0, n_{5a} 가 1 또는 2이며, 2개의 R^5 중 적어도 1개가, 중수소화되어 있어도 되는 알킬기 혹은 중수소 원자로 치환되어 있어도 되는 페닐기이다. 본 발명의 일 양태에서는, n_6 은 0이거나, n_6 이 4이며 4개의 R^6 이 중수소 원자이다. 본 발명의 일 양태에서는, n_6 이 1 또는 2이며, 적어도 하나의 R^6 이 중수소화되어 있어도 되는 알킬기 혹은 중수소 원자로 치환되어 있어도 되는 페닐기이다. 본 발명의 일 양태에서는, X가 산소 원자이다. 본 발명의 일 양태에서는, X가 황 원자이다.

[0100] 본 발명의 일 양태에서는, 일반식 (1b)의 n_{4a} 와 n_{5a} 의 합이 1 또는 2이다. 본 발명의 일 양태에서는, R^{4a} 와 R^{5a} 중 1개만이, 중수소화되어 있어도 되는 알킬기 혹은 중수소 원자로 치환되어 있어도 되는 페닐기이다. 본 발명의 일 양태에서는, n_6 은 0이거나, n_6 이 4이며 4개의 R^6 이 중수소 원자이다. 본 발명의 일 양태에서는, n_7 은 0이거나, n_7 이 4이며 4개의 R^7 이 중수소 원자이다. 본 발명의 일 양태에서는, n_6 이 1 또는 2이며, 적어도 하나의 R^6 이 중수소화되어 있어도 되는 알킬기 혹은 중수소 원자로 치환되어 있어도 되는 페닐기이다. 본 발명의 일 양태에서는, n_7 이 1 또는 2이며, 적어도 하나의 R^7 이 중수소화되어 있어도 되는 알킬기 혹은 중수소 원자로 치환되어 있어도 되는 페닐기이다. 본 발명의 일 양태에서는, X가 산소 원자이다. 본 발명의 일 양태에서는, X가 황 원자이다.

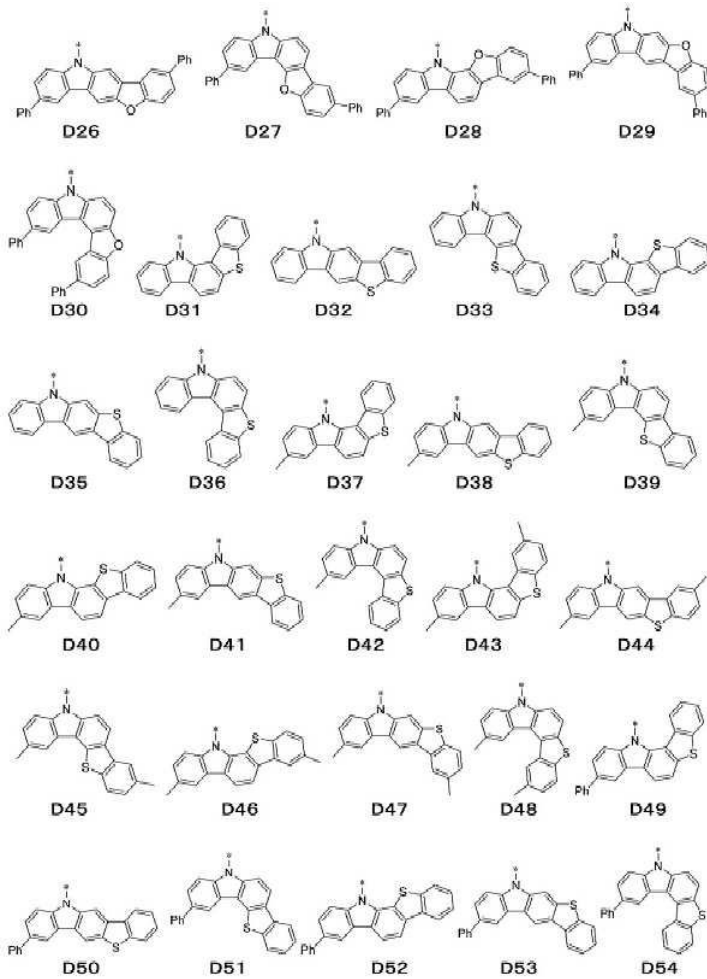
[0101] 일반식 (1a)의 벤조퓨로카바졸-9-일기와 벤조티에노카바졸-9-일기, 일반식 (1b)의 비스벤조퓨로카바졸-9-일기와 비스벤조티에노카바졸-9-일기, 및 이들의 치환체의 구체예를 이하에 든다. 단, 본 발명에서 채용할 수 있는 구조는 이들 구체예에 의하여 한정적으로 해석되는 경우는 없다. *는, 일반식 (1a) 및 일반식 (1b)의 메타페닐렌에 대한 결합 위치를 나타낸다. Ph는 무치환의 페닐기를 나타낸다. 또, 본원에 있어서 메틸기에 대해서는 CH_3 이라고 표기하지 않고, CH_3 을 생략하여 표시하고 있다. 예를 들면 D7은 메틸기를 갖는다.

[0102] [화학식 7-1]



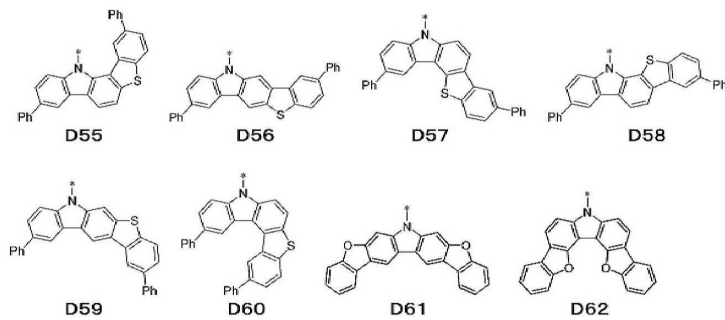
[0103]

[0104] [화학식 7-2]



[0105]

[0106] [화학식 7-3]

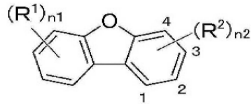


[0107]

[0108] 상기 D7~D18, D37~D48의 메틸기에 존재하는 모든 수소 원자를 중수소 원자로 치환한 기를, D7(d)~D18(d), D37(d)~D48(d)로서 여기에 개시한다. 또, D19~D30, D49~D60의 페닐기에 존재하는 모든 수소 원자를 중수소 원자로 치환한 기를, D19(d)~D30(d), D49(d)~D60(d)으로서 여기에 개시한다. 또한, D1~D62에 존재하는 모든 수소 원자를 중수소 원자로 치환한 기를, D1(D)~D62(D)로서 여기에 개시한다.

[0109] 일반식 (1)의 좌측에 표기되는 다이벤조퓨란은, 1~4위 중 어느 것으로 메타페닐렌기에 결합해도 된다. 본 발명의 바람직한 일 양태에서는 다이벤조퓨란은 2위에서 메타페닐렌기에 결합한다. 본 발명의 일 양태에서는 다이벤조퓨란은 1위에서 메타페닐렌기에 결합한다. 본 발명의 일 양태에서는 다이벤조퓨란은 3위에서 메타페닐렌기에 결합한다. 본 발명의 일 양태에서는 다이벤조퓨란은 4위에서 메타페닐렌기에 결합한다. 또한, 다이벤조퓨란의 1~4위는 하기와 같다.

[0110] [화학식 8]



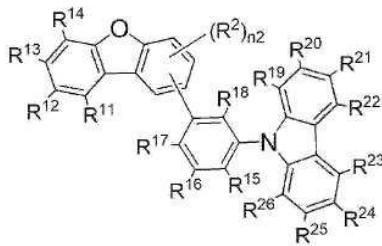
[0111]

[0112] 일반식 (1) 중에는, 사이아노기는 존재하지 않는다. 본 발명의 바람직한 일 양태에서는, 일반식 (1)은 탄소 원자, 수소 원자, 질소 원자, 산소 원자 및 황 원자만으로 이루어진다. 본 발명의 바람직한 일 양태에서는, 일반식 (1)은 탄소 원자, 수소 원자, 질소 원자 및 산소 원자만으로 이루어진다. 일반식 (1)로 나타나는 화합물의 분자량은 499 이상이며, 800 이하인 것이 바람직하고, 700 이하인 것이 보다 바람직하며, 600 이하인 것이 보다 더 바람직하고, 예를 들면 550 이하여도 되며, 530 이하여도 된다.

[0113] 일반식 (1)로 나타나는 화합물로서, 하기 일반식 (2)로 나타나는 화합물을 바람직하게 예시할 수 있다.

[0114] [화학식 9]

일반식 (2)



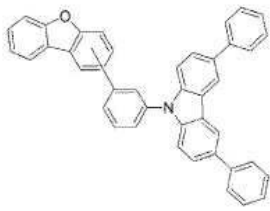
[0115]

[0116] 일반식 (2)에 있어서, R²는 중수소화되어 있어도 되는 알킬기를 나타내고, n2는 0~3의 정수를 나타낸다. R¹¹~R¹⁸은 각각 독립적으로 수소 원자, 중수소 원자, 또는 중수소화되어 있어도 되는 알킬기를 나타낸다. R¹⁹~R²⁶은 각각 독립적으로 수소 원자, 중수소 원자, 중수소화되어 있어도 되는 알킬기, 또는 중수소화되어 있어도 되는 알킬기 혹은 중수소 원자로 치환되어 있어도 되는 페닐기를 나타낸다. 단, R¹⁹~R²⁶ 중 1개 또는 2개는, 중수소화되어 있어도 되는 알킬기 혹은 중수소 원자로 치환되어 있어도 되는 페닐기이다. R¹⁹와 R²⁰, R²⁰과 R²¹, R²¹과 R²², R²³과 R²⁴, R²⁴와 R²⁵, R²⁵와 R²⁶은, 서로 결합하여, 벤조퓨로 골격 또는 벤조티에노 골격을 형성하고 있어도 된다.

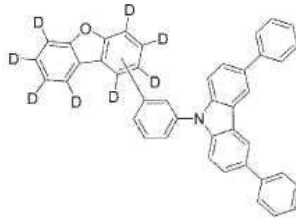
[0117] 본 발명의 바람직한 일 양태에서는, R²¹과 R²⁴ 중 적어도 일방이, 중수소화되어 있어도 되는 알킬기 혹은 중수소 원자로 치환되어 있어도 되는 페닐기이다. 본 발명의 바람직한 일 양태에서는, R²¹과 R²⁴의 양방이, 중수소화되어 있어도 되는 알킬기 혹은 중수소 원자로 치환되어 있어도 되는 페닐기이다. 예를 들면, R²¹과 R²⁴ 중 적어도 일방이 무치환의 페닐기이다. 예를 들면, R²¹과 R²⁴의 양방이 무치환의 페닐기이다. 본 발명의 일 양태에서는, R¹⁹와 R²⁰, R²⁰과 R²¹, R²¹과 R²², R²³과 R²⁴, R²⁴와 R²⁵, R²⁵와 R²⁶은, 모두 서로 결합하여 환상 구조를 형성하고 있지 않다. 본 발명의 일 양태에서는, R¹⁹와 R²⁰, R²⁰과 R²¹, R²¹과 R²², R²³과 R²⁴, R²⁴와 R²⁵, R²⁵와 R²⁶ 중 1세트만이, 서로 결합하여 벤조퓨로 골격 또는 벤조티에노 골격을 형성하고 있다. 본 발명의 일 양태에서는, R¹⁹와 R²⁰, R²⁰과 R²¹, R²¹과 R²² 중 1세트만과, R²³과 R²⁴, R²⁴와 R²⁵, R²⁵와 R²⁶ 중 1세트만이, 서로 결합하여 벤조퓨로 골격 또는 벤조티에노 골격을 형성하고 있다. 본 발명의 일 양태에서는, R¹²가 중수소화되어 있어도 되는 알킬기를 나타낸다.

[0118] 이하에, 일반식 (1)로 나타나는 화합물의 구체예를 들지만, 본 발명에서 이용할 수 있는 화합물은 이들 구체예에 의하여 한정적으로 해석되는 경우는 없다. 이하의 각 구조에 대하여, 다이벤조퓨란의 결합 위치에 따라 4종의 화합물을 특정하고 있다.

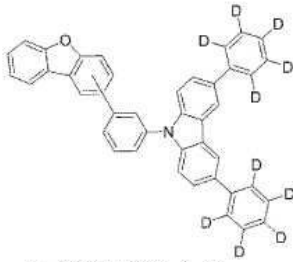
[0119] [화학식 10-1]



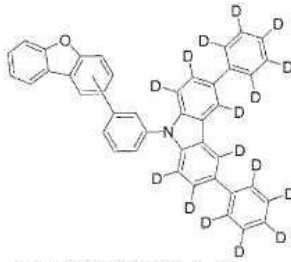
- 1 : 다이벤조퓨란-1-일
- 2 : 다이벤조퓨란-2-일
- 3 : 다이벤조퓨란-3-일
- 4 : 다이벤조퓨란-4-일



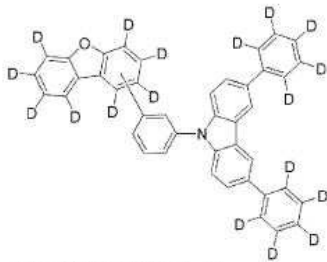
- 5 : 다이벤조퓨란-1-일
- 6 : 다이벤조퓨란-2-일
- 7 : 다이벤조퓨란-3-일
- 8 : 다이벤조퓨란-4-일



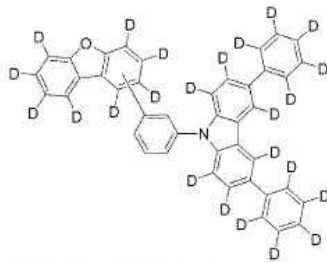
- 9 : 다이벤조퓨란-1-일
- 10 : 다이벤조퓨란-2-일
- 11 : 다이벤조퓨란-3-일
- 12 : 다이벤조퓨란-4-일



- 13 : 다이벤조퓨란-1-일
- 14 : 다이벤조퓨란-2-일
- 15 : 다이벤조퓨란-3-일
- 16 : 다이벤조퓨란-4-일



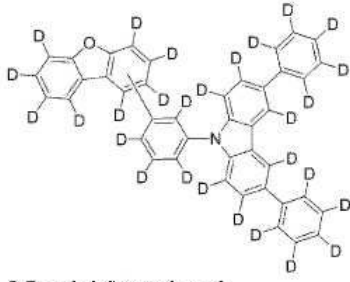
- 17 : 다이벤조퓨란-1-일
- 18 : 다이벤조퓨란-2-일
- 19 : 다이벤조퓨란-3-일
- 20 : 다이벤조퓨란-4-일



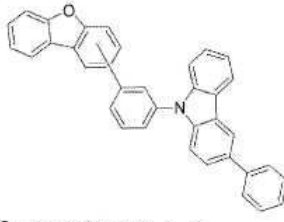
- 21 : 다이벤조퓨란-1-일
- 22 : 다이벤조퓨란-2-일
- 23 : 다이벤조퓨란-3-일
- 24 : 다이벤조퓨란-4-일

[0120]

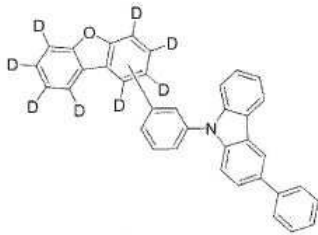
[0121] [화학식 10-2]



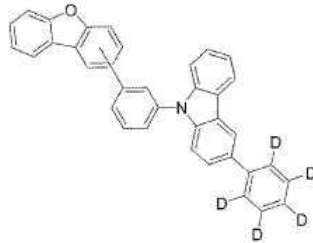
- 25 : 다이벤조퓨란-1-일
- 26 : 다이벤조퓨란-2-일
- 27 : 다이벤조퓨란-3-일
- 28 : 다이벤조퓨란-4-일



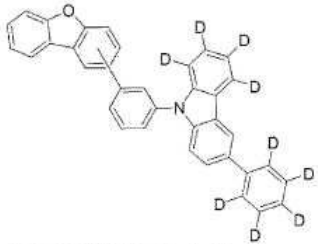
- 29 : 다이벤조퓨란-1-일
- 30 : 다이벤조퓨란-2-일
- 31 : 다이벤조퓨란-3-일
- 32 : 다이벤조퓨란-4-일



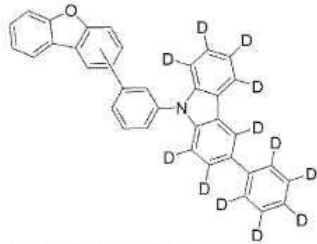
- 33 : 다이벤조퓨란-1-일
- 34 : 다이벤조퓨란-2-일
- 35 : 다이벤조퓨란-3-일
- 36 : 다이벤조퓨란-4-일



- 37 : 다이벤조퓨란-1-일
- 38 : 다이벤조퓨란-2-일
- 39 : 다이벤조퓨란-3-일
- 40 : 다이벤조퓨란-4-일



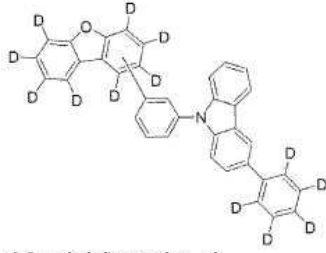
- 41 : 다이벤조퓨란-1-일
- 42 : 다이벤조퓨란-2-일
- 43 : 다이벤조퓨란-3-일
- 44 : 다이벤조퓨란-4-일



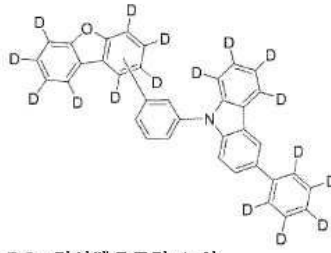
- 45 : 다이벤조퓨란-1-일
- 46 : 다이벤조퓨란-2-일
- 47 : 다이벤조퓨란-3-일
- 48 : 다이벤조퓨란-4-일

[0122]

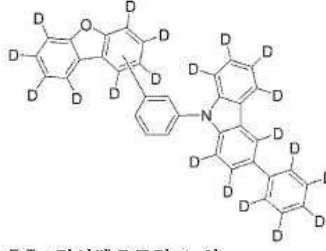
[0123] [화학식 10-3]



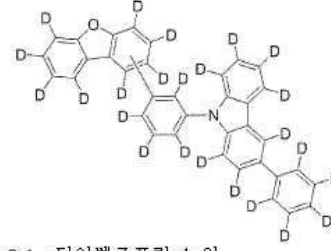
49 : 다이벤조퓨란-1-일
 50 : 다이벤조퓨란-2-일
 51 : 다이벤조퓨란-3-일
 52 : 다이벤조퓨란-4-일



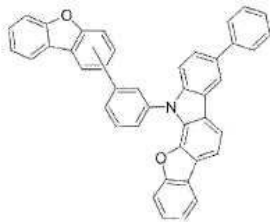
53 : 다이벤조퓨란-1-일
 54 : 다이벤조퓨란-2-일
 55 : 다이벤조퓨란-3-일
 56 : 다이벤조퓨란-4-일



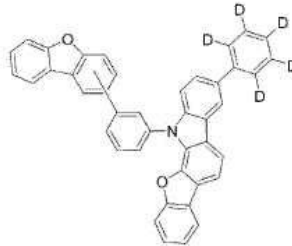
57 : 다이벤조퓨란-1-일
 58 : 다이벤조퓨란-2-일
 59 : 다이벤조퓨란-3-일
 60 : 다이벤조퓨란-4-일



61 : 다이벤조퓨란-1-일
 62 : 다이벤조퓨란-2-일
 63 : 다이벤조퓨란-3-일
 64 : 다이벤조퓨란-4-일



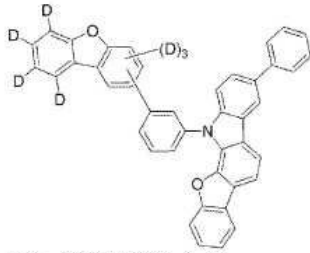
65 : 다이벤조퓨란-1-일
 66 : 다이벤조퓨란-2-일
 67 : 다이벤조퓨란-3-일
 68 : 다이벤조퓨란-4-일



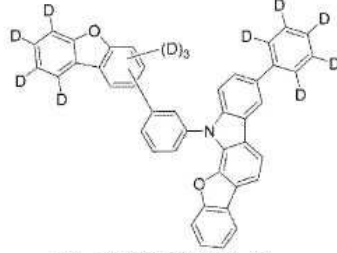
69 : 다이벤조퓨란-1-일
 70 : 다이벤조퓨란-2-일
 71 : 다이벤조퓨란-3-일
 72 : 다이벤조퓨란-4-일

[0124]

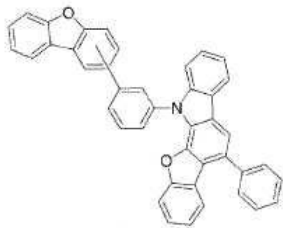
[0125] [화학식 10-4]



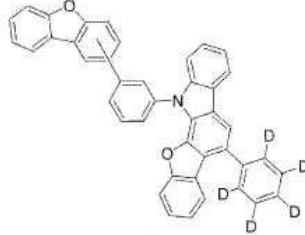
73 : 다이벤조퓨란-1-일
74 : 다이벤조퓨란-2-일
75 : 다이벤조퓨란-3-일
76 : 다이벤조퓨란-4-일



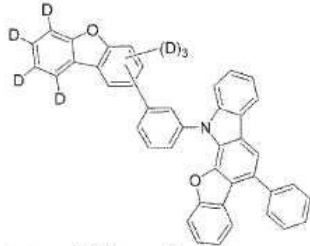
77 : 다이벤조퓨란-1-일
78 : 다이벤조퓨란-2-일
79 : 다이벤조퓨란-3-일
80 : 다이벤조퓨란-4-일



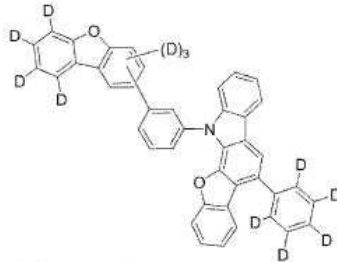
81 : 다이벤조퓨란-1-일
82 : 다이벤조퓨란-2-일
83 : 다이벤조퓨란-3-일
84 : 다이벤조퓨란-4-일



85 : 다이벤조퓨란-1-일
86 : 다이벤조퓨란-2-일
87 : 다이벤조퓨란-3-일
88 : 다이벤조퓨란-4-일



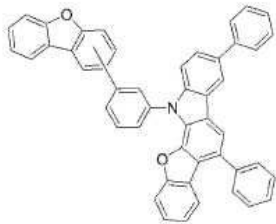
89 : 다이벤조퓨란-1-일
90 : 다이벤조퓨란-2-일
91 : 다이벤조퓨란-3-일
92 : 다이벤조퓨란-4-일



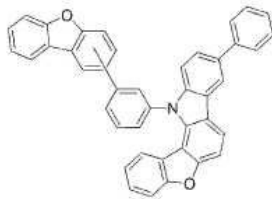
93 : 다이벤조퓨란-1-일
94 : 다이벤조퓨란-2-일
95 : 다이벤조퓨란-3-일
96 : 다이벤조퓨란-4-일

[0126]

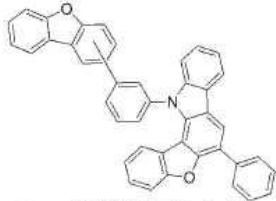
[0127] [화학식 10-5]



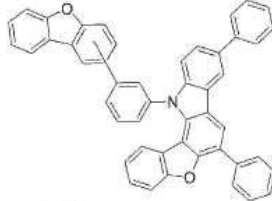
97 : 다이벤조퓨란-1-일
98 : 다이벤조퓨란-2-일
99 : 다이벤조퓨란-3-일
100 : 다이벤조퓨란-4-일



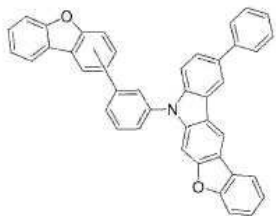
101 : 다이벤조퓨란-1-일
102 : 다이벤조퓨란-2-일
103 : 다이벤조퓨란-3-일
104 : 다이벤조퓨란-4-일



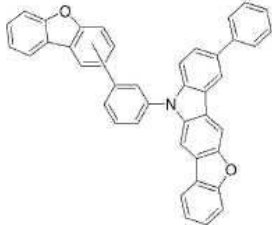
105 : 다이벤조퓨란-1-일
106 : 다이벤조퓨란-2-일
107 : 다이벤조퓨란-3-일
108 : 다이벤조퓨란-4-일



109 : 다이벤조퓨란-1-일
110 : 다이벤조퓨란-2-일
111 : 다이벤조퓨란-3-일
112 : 다이벤조퓨란-4-일



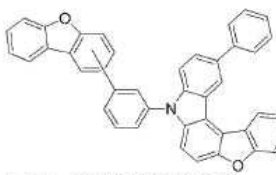
113 : 다이벤조퓨란-1-일
114 : 다이벤조퓨란-2-일
115 : 다이벤조퓨란-3-일
116 : 다이벤조퓨란-4-일



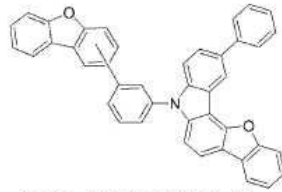
117 : 다이벤조퓨란-1-일
118 : 다이벤조퓨란-2-일
119 : 다이벤조퓨란-3-일
120 : 다이벤조퓨란-4-일

[0128]

[0129] [화학식 10-6]



121 : 다이벤조퓨란-1-일
122 : 다이벤조퓨란-2-일
123 : 다이벤조퓨란-3-일
124 : 다이벤조퓨란-4-일



125 : 다이벤조퓨란-1-일
126 : 다이벤조퓨란-2-일
127 : 다이벤조퓨란-3-일
128 : 다이벤조퓨란-4-일

[0130]

[0131]

본 발명의 일 양태에서는, 일반식 (1)로 나타나는 화합물로서, 상기 화합물 1-64 중 어느 하나를 선택할 수 있다. 본 발명의 일 양태에서는, 일반식 (1)로 나타나는 화합물로서, 상기 화합물 65-128 중 어느 하나를 선택할 수 있다.

[0132]

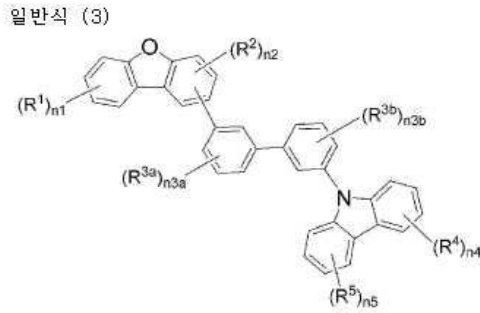
일반식 (1)로 나타나는 화합물은, 발광 재료를 도프하기 위한 호스트 재료로서 유용하다. 특히 지연 형광 재료를 도프하기 위한 호스트 재료로서 유용하다. 도프하는 재료는 1종뿐만 아니라, 복수 종이어도 된다. 도프하는 재료는, 일반식 (1)로 나타나는 화합물보다, 최저 여기 일중항 에너지가 낮은 것 중에서 선택한다.

[0133]

일반식 (1)로 나타나는 화합물은, 전자 장벽 재료로서도 유용하다. 특히 지연 형광 재료를 이용한 유기 발광 소자에 있어서 전자 장벽 재료로서 유용하다. 예를 들면, 유기 일렉트로 루미네선스 소자 등의 유기 발광 소자에 있어서 전자 장벽층에 효과적으로 이용할 수 있다. 특히 지연 형광 재료를 이용한 발광층에 인접하는 전자 장벽층에 효과적으로 이용할 수 있다.

[0134] 일반식 (1)의 유사 화합물로서, 일반식 (1)의 메타페닐렌 연결 구조를 바이페닐렌 연결 구조로 치환한 하기 일반식 (3)으로 나타나는 화합물이 있다. 일반식 (3)으로 나타나는 화합물도 호스트 재료로서 유용하고, 또, 전자 장벽 재료로서 유용하지만, 일반식 (1)로 나타나는 화합물은 일반식 (3)으로 나타나는 화합물보다 더 호스트 재료나 전자 장벽 재료로서의 효과가 우수하여, 유용성이 높다. 또한, 하기 일반식 (3)에 있어서의 R^1 , R^2 , R^4 , R^5 , $n1$, $n2$, $n4$, $n5$ 의 설명에 대해서는 일반식 (1)의 대응하는 설명을 참조할 수 있다. 일반식 (3)에 있어서의 R^{3a} , R^{3b} 에 대해서는 일반식 (1)의 R^3 의 설명을 참조할 수 있다. 또, 일반식 (3)의 구체예에 대해서는, 일반식 (1)의 구체예의 페닐렌 연결 구조를 바이페닐렌 연결 구조로 치환한 것을 들 수 있다.

[0135] [화학식 11]



[0136]

[0137] (지연 형광 재료)

[0138] 일반식 (1)로 나타나는 화합물은, 지연 형광 재료와 함께 이용하기 위한 호스트 재료로서 유용하다.

[0139] 여기에서 말하는 "지연 형광 재료"란, 여기 상태에 있어서, 여기 삼중항 상태에서부터 여기 일중항 상태로의 역항간 교차를 발생시켜, 그 여기 일중항 상태에서부터 기저 상태로 되돌아갈 때에 지연 형광을 방사하는 유기 화합물이다. 본 발명에서는, 형광 수명 측정 시스템(하마마쓰 포토닉스사제 스트리크 카메라 시스템 등)에 의하여 발광 수명을 측정했을 때, 발광 수명이 100ns(나노초) 이상인 형광이 관측되는 것을 지연 형광 재료라고 한다.

[0140] 일반식 (1)로 나타나는 화합물과 지연 형광 재료를 조합하여 이용했을 때, 지연 형광 재료는, 여기 일중항 상태의 일반식 (1)로 나타나는 화합물로부터 에너지를 받아 여기 일중항 상태로 천이한다. 또, 지연 형광 재료는, 여기 삼중항 상태의 일반식 (1)로 나타나는 화합물로부터 에너지를 받아 여기 삼중항 상태로 천이해도 된다. 지연 형광 재료는 여기 일중항 에너지와 여기 삼중항 에너지의 차(ΔE_{ST})가 작은 점에서, 여기 삼중항 상태의 지연 형광 재료는 여기 일중항 상태의 지연 형광 재료로 역항간 교차하기 쉽다. 이들 경로에 의하여 발생한 여기 일중항 상태의 지연 형광 재료가 발광에 기여한다.

[0141] 지연 형광 재료는, 최저 여기 일중항 에너지와 77K의 최저 여기 삼중항 에너지의 차 ΔE_{ST} 가 0.3eV 이하인 것이 바람직하고, 0.25eV 이하인 것이 보다 바람직하며, 0.2eV 이하인 것이 보다 바람직하고, 0.15eV 이하인 것이 보다 바람직하며, 0.1eV 이하인 것이 더 바람직하고, 0.07eV 이하인 것이 보다 더 바람직하며, 0.05eV 이하인 것이 한층 더 바람직하고, 0.03eV 이하인 것이 더욱 더 바람직하며, 0.01eV 이하인 것이 특히 바람직하다.

[0142] ΔE_{ST} 가 작으면, 열에너지의 흡수에 의하여 여기 일중항 상태에서부터 여기 삼중항 상태로 역항간 교차하기 쉽기 때문에, 열활성화형의 지연 형광 재료로서 기능한다. 열활성화형의 지연 형광 재료는, 디바이스가 발하는 열을 흡수하여 여기 삼중항 상태에서부터 여기 일중항으로 비교적 용이하게 역항간 교차하여, 그 여기 삼중항 에너지를 효율적으로 발광에 기여시킬 수 있다.

[0143] 본 발명에 있어서의, 화합물의 최저 여기 일중항 에너지(E_{S1})와 최저 여기 삼중항 에너지(E_{T1})는, 하기의 수순에 의하여 구한 값이다. ΔE_{ST} 는 $E_{S1}-E_{T1}$ 을 계산함으로써 구한 값이다.

[0144] (1) 최저 여기 일중항 에너지(E_{S1})

[0145] 측정 대상 화합물의 박막 혹은 톨루엔 용액(농도 10^{-5} mol/L)을 조제하여 시료로 한다. 상온(300K)에서 이 시료의 형광 스펙트럼을 측정한다. 형광 스펙트럼은, 세로축을 발광, 가로축을 파장으로 한다. 이 발광 스펙트럼의 단파장 측의 상승에 대하여 접선을 긋고, 그 접선과 가로축의 교점의 파장값 $\lambda_{edge}[nm]$ 를 구한다. 이 파장값을

다음에 나타내는 환산식으로 에너지값으로 환산한 값을 E_{S1} 로 한다.

[0146] 환산식: $E_{S1}[eV]=1239.85/\lambda_{edge}$

[0147] 후술하는 실시예에 있어서의 발광 스펙트럼의 측정은, 여기 광원에 LED 광원(Thorlabs사제, M300L4)을 이용하여 검출기(하마마쓰 포토닉스사제, PMA-12 멀티 채널 분광기 C10027-01)에 의하여 행했다.

[0148] (2) 최저 여기 삼중항 에너지(E_{T1})

[0149] 최저 여기 일중항 에너지(E_{S1})의 측정에서 이용한 것과 동일한 시료를, 액체 질소에 의하여 77[K]로 냉각하고, 여기광(300nm)을 인광 측정용 시료에 조사하며, 검출기를 이용하여 인광을 측정한다. 여기광 조사 후부터 100밀리초 이후의 발광을 인광 스펙트럼으로 한다. 이 인광 스펙트럼의 단파장 측의 상승에 대하여 접선을 긋고, 그 접선과 가로축의 교점의 파장값 $\lambda_{edge}[nm]$ 를 구한다. 이 파장값을 다음에 나타내는 환산식으로 에너지값으로 환산한 값을 E_{T1} 로 한다.

[0150] 환산식: $E_{T1}[eV]=1239.85/\lambda_{edge}$

[0151] 인광 스펙트럼의 단파장 측의 상승에 대한 접선은 이하와 같이 긋는다. 인광 스펙트럼의 단파장 측으로부터, 스펙트럼의 극댓값 중, 가장 단파장 측의 극댓값까지 스펙트럼 곡선 상을 이동할 때에, 장파장 측을 향하여 곡선 상의 각 점에 있어서의 접선을 생각한다. 이 접선은, 곡선이 상승함에 따라(즉 세로축이 증가함에 따라), 기울기가 증가한다. 이 기울기의 값이 극댓값을 취하는 점에 있어서 그은 접선을, 당해 인광 스펙트럼의 단파장 측의 상승에 대한 접선으로 한다.

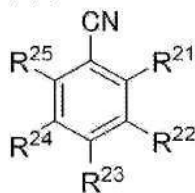
[0152] 또한, 스펙트럼의 최대 피크 강도의 10% 이하의 피크 강도를 갖는 극대점은, 상술한 가장 단파장 측의 극댓값에는 포함시키지 않고, 가장 단파장 측의 극댓값에 가장 가까운, 기울기의 값이 극댓값을 취하는 점에 있어서 그은 접선을 당해 인광 스펙트럼의 단파장 측의 상승에 대한 접선으로 한다.

[0153] 본 발명의 바람직한 일 양태에서는, 지연 형광 재료로서, 벤젠환으로 치환되어 있는 사이아노기의 수가 1개인 사이아노벤젠 구조를 갖는 화합물(사이아노벤젠 유도체)을 이용한다. 본 발명의 다른 바람직한 일 양태에서는, 지연 형광 재료로서, 벤젠환으로 치환되어 있는 사이아노기의 수가 2개인 다이사이아노벤젠 구조를 갖는 화합물(다이사이아노벤젠 유도체)을 이용한다. 본 발명의 다른 바람직한 일 양태에서는, 지연 형광 재료로서, 벤젠환의 환 골격 구성 탄소 원자 중 적어도 하나가 질소 원자로 치환된 아자벤젠 구조를 갖는 화합물(아자벤젠 유도체)을 이용한다.

[0154] 본 발명의 바람직한 일 양태에서는, 지연 형광 재료로서 하기 일반식 (4)로 나타나는 화합물을 이용한다.

[0155] [화학식 12]

일반식 (4)

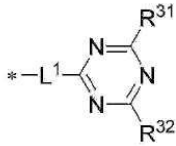


[0156]

[0157] 일반식 (4)에 있어서, $R^{21}\sim R^{23}$ 중 1개는 사이아노기 또는 하기 일반식 (5)로 나타나는 기를 나타내고, $R^{21}\sim R^{23}$ 중 나머지 2개와 R^{24} 및 R^{25} 중 적어도 1개는 하기 일반식 (6)으로 나타나는 기를 나타내며, $R^{21}\sim R^{25}$ 의 나머지는 수소 원자 또는 치환기(단 여기에서 말하는 치환기는 사이아노기, 하기 일반식 (5)로 나타나는 기, 하기 일반식 (6)으로 나타나는 기가 아니다)를 나타낸다.

[0158] [화학식 13]

일반식 (5)

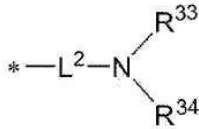


[0159]

[0160] 일반식 (5)에 있어서, L¹은 단결합 혹은 2가의 연결기를 나타내고, R³¹ 및 R³²는 각각 독립적으로 수소 원자 또는 치환기를 나타내며, *는 결합 위치를 나타낸다.

[0161] [화학식 14]

일반식 (6)



[0162]

[0163] 일반식 (6)에 있어서, L²는 단결합 또는 2가의 연결기를 나타내고, R³³ 및 R³⁴는 각각 독립적으로 수소 원자 또는 치환기를 나타내며, *는 결합 위치를 나타낸다.

[0164] 본 발명의 바람직한 일 양태에서는, R²²가 사이아노기이다. 본 발명의 바람직한 일 양태에서는, R²²가 일반식 (5)로 나타나는 기이다. 본 발명의 일 양태에서는, R²¹이 사이아노기 또는 일반식 (5)로 나타나는 기이다. 본 발명의 일 양태에서는, R²³이 사이아노기 또는 일반식 (5)로 나타나는 기이다. 본 발명의 일 양태에서는, R²¹-R²³ 중 하나가 사이아노기이다. 본 발명의 일 양태에서는, R²¹-R²³ 중 하나가 일반식 (5)로 나타나는 기이다.

[0165] 본 발명의 바람직한 일 양태에서는, 일반식 (5)에 있어서의 L¹은 단결합이다. 본 발명의 일 양태에서는, L¹은 2가의 연결기이며, 바람직하게는 치환 혹은 무치환의 아릴렌기, 또는 치환 혹은 무치환의 헤테로아릴렌기이고, 보다 바람직하게는 치환 혹은 무치환의 아릴렌기이며, 더 바람직하게는 치환 혹은 무치환의 1,4-페닐렌기(치환 기로서 예를 들면 탄소수 1~3의 알킬기)이다.

[0166] 본 발명의 일 양태에서는, 일반식 (5)에 있어서의 R³¹ 및 R³²는 각각 독립적으로, 알킬기(예를 들면 탄소수 1~40), 아릴기(예를 들면 탄소수 6~30), 헤테로아릴기(예를 들면 환 골격 구성 원자수 5~30), 알켄일기(예를 들면 탄소수 1~40) 및 알카인일기(예를 들면 탄소수 1~40)로 이루어지는 군으로부터 선택되는 1개의 기 또는 2개 이상을 조합한 기이다(이하에 있어서 이들 기를 "치환기군 A의 기"라고 한다). 본 발명의 바람직한 일 양태에서는, R³¹ 및 R³²는 각각 독립적으로, 치환 혹은 무치환의 아릴기(예를 들면 탄소수 6~30)이며, 아릴기의 치환기로서는 치환기군 A의 기를 들 수 있다. 본 발명의 바람직한 일 양태에서는, R³¹ 및 R³²는 동일하다.

[0167] 본 발명의 바람직한 일 양태에서는, 일반식 (6)에 있어서의 L²는 단결합이다. 본 발명의 일 양태에서는, L²는 2가의 연결기이며, 바람직하게는 치환 혹은 무치환의 아릴렌기, 또는 치환 혹은 무치환의 헤테로아릴렌기이고, 보다 바람직하게는 치환 혹은 무치환의 아릴렌기이며, 더 바람직하게는 치환 혹은 무치환의 1,4-페닐렌기(치환 기로서 예를 들면 탄소수 1~3의 알킬기)이다.

[0168] 본 발명의 일 양태에서는, 일반식 (6)에 있어서의 R³³ 및 R³⁴는 각각 독립적으로, 치환 혹은 무치환의 알킬기(예를 들면 탄소수 1~40), 치환 혹은 무치환의 알켄일기(예를 들면 탄소수 1~40), 치환 혹은 무치환의 아릴기(예를 들면 탄소수 6~30), 또는 치환 혹은 무치환의 헤테로아릴기(예를 들면 탄소수 5~30)를 나타낸다. 여기에서 말하는 알킬기, 알켄일기, 아릴기, 헤테로아릴기의 치환기로서는, 하이드록실기, 할로젠 원자(예를 들면 불소 원자, 염소 원자, 브로민 원자, 아이오딘 원자), 알킬기(예를 들면 탄소수 1~40), 알콕시기(예를 들면 탄소수 1~40), 알킬싸이오기(예를 들면 탄소수 1~40), 아릴기(예를 들면 탄소수 6~30), 아릴옥시기(예를 들면 탄소수 6~30),

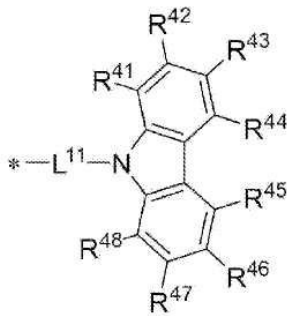
아릴싸이오기(예를 들면 탄소수 6~30), 헤테로아릴기(예를 들면 환 골격 구성 원자수 5~30), 헤테로아릴옥시기(예를 들면 환 골격 구성 원자수 5~30), 헤테로아릴싸이오기(예를 들면 환 골격 구성 원자수 5~30), 아실기(예를 들면 탄소수 1~40), 알킬일기(예를 들면 탄소수 1~40), 알카인일기(예를 들면 탄소수 1~40), 알콕시카보닐기(예를 들면 탄소수 1~40), 아릴옥시카보닐기(예를 들면 탄소수 1~40), 헤테로아릴옥시카보닐기(예를 들면 탄소수 1~40), 실릴기(예를 들면 탄소수 1~40의 트라이알킬실릴기), 나이트로기 및 사이아노기로 이루어지는 군으로부터 선택되는 1개의 기 또는 2개 이상을 조합한 기를 들 수 있다(이하에 있어서 이들 기를 "치환기군 B의 기"라고 한다).

[0169] R^{33} 과 R^{34} 는, 서로 단결합 또는 연결기를 통하여 결합하여 환상 구조를 형성해도 된다. 특히 R^{33} 과 R^{34} 가 아릴기인 경우는, 서로 단결합 또는 연결기를 통하여 결합하여 환상 구조를 형성하는 것이 바람직하다. 여기에서 말하는 연결기로서는 $-O-$, $-S-$, $-N(R^{35})-$, $-C(R^{36})(R^{37})-$, $-C(=O)-$ 를 들 수 있으며, $-O-$, $-S-$, $-N(R^{35})-$, $-C(R^{36})(R^{37})-$ 이 바람직하고, $-O-$, $-S-$, $-N(R^{35})-$ 가 보다 바람직하다. R^{35} ~ R^{37} 은 각각 독립적으로 수소 원자 또는 치환기를 나타낸다. 치환기로서는, 상기 치환기군 A의 기를 선택하거나, 상기 치환기군 B의 기를 선택하거나 할 수 있으며, 바람직하게는 탄소수 1~10의 알킬기 및 탄소수 6~14의 아릴기로 이루어지는 군으로부터 선택되는 1개의 기 또는 2개 이상을 조합한 기이다.

[0170] 일반식 (6)으로 나타나는 기는, 하기 일반식 (7)로 나타나는 기인 것이 바람직하다.

[0171] [화학식 15]

일반식 (7)



[0172]

[0173] 일반식 (7)의 L^{11} 은 단결합 혹은 2가의 연결기를 나타낸다. L^{11} 의 설명과 바람직한 범위에 대해서는, 상기의 L^2 의 설명과 바람직한 범위를 참조할 수 있다.

[0174] 일반식 (7)의 R^{41} ~ R^{48} 은 각각 독립적으로 수소 원자 또는 치환기를 나타낸다. R^{41} 과 R^{42} , R^{42} 와 R^{43} , R^{43} 과 R^{44} , R^{44} 와 R^{45} , R^{45} 와 R^{46} , R^{46} 과 R^{47} , R^{47} 과 R^{48} 은, 서로 결합하여 환상 구조를 형성하고 있어도 된다. 서로 결합하여 형성하는 환상 구조는 방향환이어도 되고 지방환이어도 되며, 또 헤테로 원자를 포함하는 것이어도 되고, 또한 환상 구조는 2환 이상의 축합환이어도 된다. 여기에서 말하는 헤테로 원자로서는, 질소 원자, 산소 원자 및 황 원자로 이루어지는 군으로부터 선택되는 것인 것이 바람직하다. 형성되는 환상 구조의 예로서, 벤젠환, 나프탈렌환, 피리딘환, 피리다진환, 피리미딘환, 피라진환, 피롤환, 이미다졸환, 피라졸환, 이미다졸린환, 옥사졸환, 아이소옥사졸환, 싸이아졸환, 아이소싸이아졸환, 사이클로헥사다이엔환, 사이클로헥센환, 사이클로헵타엔환, 사이클로헵타트리엔환, 사이클로헵타다이엔환, 사이클로헵타엔환, 퓨란환, 싸이오펜환, 나프티리딘환, 퀴놀살린환, 퀴놀린환 등을 들 수 있다. 예를 들면 페난트렌환이나 트라이페닐렌환과 같이 다수의 환이 축합된 환을 형성해도 된다. 바람직한 예로서, 벤조퓨란환이나 벤조싸이오펜환을 예시할 수 있다(퓨란환과 싸이오펜환으로 축합). 일반식 (7)로 나타나는 기에 포함되는 환의 수는 3~5의 범위 내로부터 선택해도 되고, 5~7의 범위 내로부터 선택해도 된다.

[0175] R^{41} ~ R^{48} 이 채용할 수 있는 치환기로서, 상기의 치환기군 B의 기를 들 수 있으며, 바람직하게는 탄소수 1~10의 무치환의 알킬기, 또는 탄소수 1~10의 무치환의 알킬기로 치환되어 있어도 되는 탄소수 6~10의 아릴기이다. 본 발명의 바람직한 일 양태에서는, R^{41} ~ R^{48} 은 수소 원자 또는 탄소수 1~10의 무치환의 알킬기이다. 본 발명의 바람직한 일 양태에서는, R^{41} ~ R^{48} 은 수소 원자 또는 탄소수 6~10의 무치환의 아릴기이다. 본 발명의 바람직한 일 양태

에서는, R⁴¹~R⁴⁸은 모두가 수소 원자이다.

[0176] 본 발명의 바람직한 일 양태에서는, 일반식 (4)의 R²¹~R²⁵ 중 2개 이상이 일반식 (7)로 나타나는 기이며, 그들의 일반식 (7)로 나타나는 기는 모두가 동일하지 않고, 서로 R⁴¹~R⁴⁸ 중 적어도 1개가 상이하다. 본 발명의 바람직한 일 양태에서는, 일반식 (4)의 R²¹~R²⁵ 중 2개 이상이 일반식 (7)로 나타나는 기이며, R²¹~R²⁵ 중 1개가 중수소 원자 또는 알킬기로 치환되어 있어도 되는 폐닐기이다.

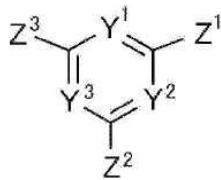
[0177] 일반식 (7)에 있어서, *는 결합 위치를 나타낸다.

[0178] 본 발명의 바람직한 일 양태에서는, 자연 형광 재료로서 아자벤젠 유도체를 이용한다. 본 발명의 바람직한 일 양태에서는, 아자벤젠 유도체는, 벤젠환의 환 골격 구성 탄소 원자 중 3개가 질소 원자로 치환된 아자벤젠 구조를 갖는다. 예를 들면, 1,3,5-트리아진 구조를 갖는 아자벤젠 유도체를 바람직하게 선택할 수 있다. 본 발명의 바람직한 일 양태에서는, 아자벤젠 유도체는, 벤젠환의 환 골격 구성 탄소 원자 중 2개가 질소 원자로 치환된 아자벤젠 구조를 갖는다. 예를 들면, 피리다진 구조, 피리미딘 구조, 피라진 구조를 갖는 아자벤젠 유도체를 들 수 있으며, 피리미딘 구조를 갖는 아자벤젠 유도체를 바람직하게 선택할 수 있다. 본 발명의 일 양태에서는, 아자벤젠 유도체는, 벤젠환의 환 골격 구성 탄소 원자 중 하나가 질소 원자로 치환된 피리딘 구조를 갖는다.

[0179] 본 발명의 바람직한 일 양태에서는, 자연 형광 재료로서 하기 일반식 (8)로 나타나는 화합물을 이용한다.

[0180] [화학식 16]

일반식 (8)



[0181]

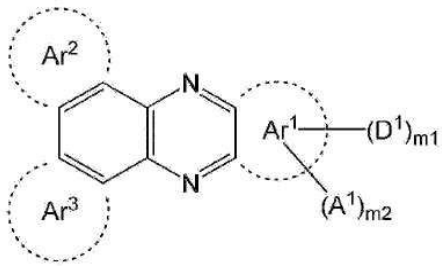
[0182] 일반식 (8)에 있어서, Y¹, Y² 및 Y³은, 적어도 하나가 질소 원자이고 나머지가 메타인기를 나타낸다. 본 발명의 일 양태에서는, Y¹이 질소 원자이고, Y² 및 Y³이 메타인기이다. 바람직하게는 Y¹ 및 Y²가 질소 원자이며, Y³이 메타인기이다. 보다 바람직하게는, Y¹~Y³ 모두가 질소 원자이다.

[0183] 일반식 (8)에 있어서, Z¹~Z³은, 각각 독립적으로 수소 원자 또는 치환기를 나타내지만, 적어도 하나는 도너성의 치환기이다. 도너성의 치환기는, 하메트의 σ_p값이 음인 기를 의미한다. 바람직하게는, Z¹~Z³ 중 적어도 1개는, 다이아릴아미노 구조(질소 원자에 결합하는 2개의 아릴기는 서로 결합하고 있어도 된다)를 포함하는 기이고, 보다 바람직하게는 상기 일반식 (6)으로 나타나는 기이며, 예를 들면 상기 일반식 (7)로 나타나는 기이다. 본 발명의 일 양태에서는, Z¹~Z³ 중 하나만이 일반식 (6) 또는 (7)로 나타나는 기이다. 본 발명의 일 양태에서는, Z¹~Z³ 중 2개만이 각각 독립적으로 일반식 (6) 또는 (7)로 나타나는 기이다. 본 발명의 일 양태에서는, Z¹~Z³ 모두가 각각 독립적으로 일반식 (6) 또는 (7)로 나타나는 기이다. 일반식 (6) 및 일반식 (7)의 상세와 바람직한 범위에 대해서는, 상기의 대응하는 기재를 참조할 수 있다. 일반식 (6) 및 일반식 (7)로 나타나는 기가 아닌, 나머지 Z¹~Z³은, 치환 혹은 무치환의 아릴기(예를 들면 탄소수 6~40, 바람직하게는 6~20)인 것이 바람직하고, 여기에서 말하는 아릴기의 치환기로서는, 아릴기(예를 들면 탄소수 6~20, 바람직하게는 6~14) 및 알킬기(예를 들면 탄소수 1~20, 바람직하게는 1~6)로 이루어지는 군으로부터 선택되는 1개의 기 또는 2개 이상을 조합한 기를 예시할 수 있다. 본 발명의 일 양태에서는, 일반식 (8)은 사이아노기를 포함하지 않는다.

[0184] 본 발명의 바람직한 일 양태에서는, 자연 형광 재료로서 하기 일반식 (9)로 나타나는 화합물을 이용한다.

[0185] [화학식 17]

일반식 (9)

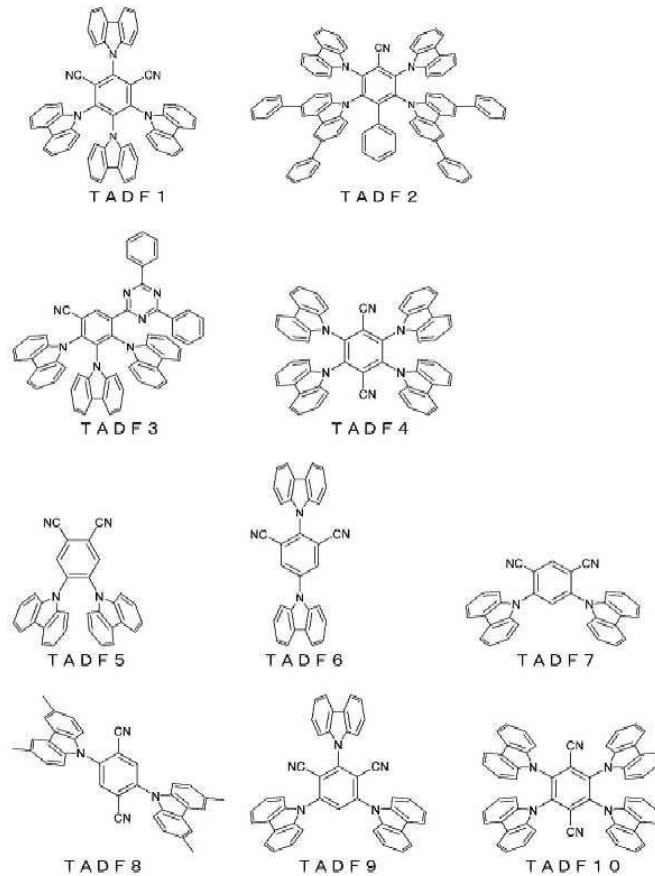


[0186]

[0187] 일반식 (9)에 있어서, Ar^1 은, 하기 A^1 및 D^1 로 치환되어 있어도 되는 환상 구조를 형성하고, 벤젠환, 나프탈렌환, 안트라센환, 또는 페난트렌환을 나타낸다. Ar^2 , Ar^3 은, 각각 환상 구조를 형성하고 있어도 되고, 환상 구조를 형성하고 있는 경우는 벤젠환, 나프탈렌환, 피리딘환, 또는 사이아노기로 치환된 벤젠환을 나타낸다. m_1 은 0~2 중 어느 하나의 정수를 나타내고, m_2 는 0~1 중 어느 하나의 정수를 나타낸다. A^1 은 사이아노기, 페닐기, 피리미딜기, 트리아질기, 혹은 벤조나이트릴기를 나타낸다. D^1 은, 치환 혹은 무치환의 5H-인돌로[3,2,1-de]페나진-5-일기, 또는 나프탈렌 구조를 포함하지 않는 치환 혹은 무치환의 헤테로환 축합 카바졸일기를 나타내며, 일반식 (9) 중에 복수의 D^1 이 존재하는 경우 그들은 동일해도 되고 상이해도 된다. 또, D^1 의 치환기는, 서로 결합하여 환상 구조를 형성하고 있어도 된다.

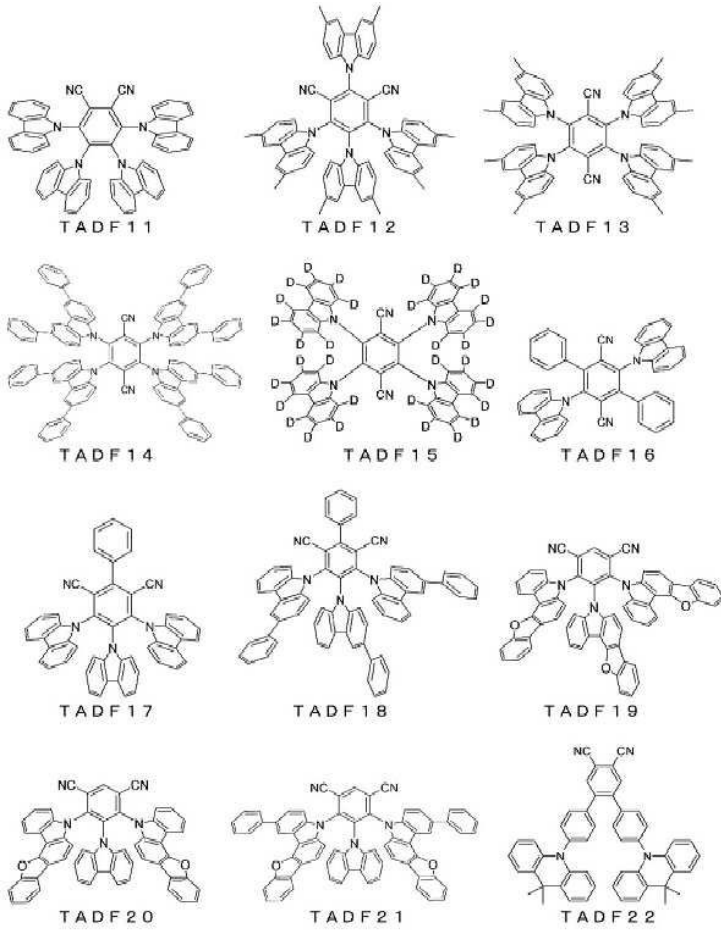
[0188] 이하에, 자연 형광 재료로서 이용할 수 있는 바람직한 화합물을 들지만, 본 발명에서 이용할 수 있는 자연 형광 재료는 이들 구체예에 의하여 한정적으로 해석되는 경우는 없다.

[0189] [화학식 18-1]



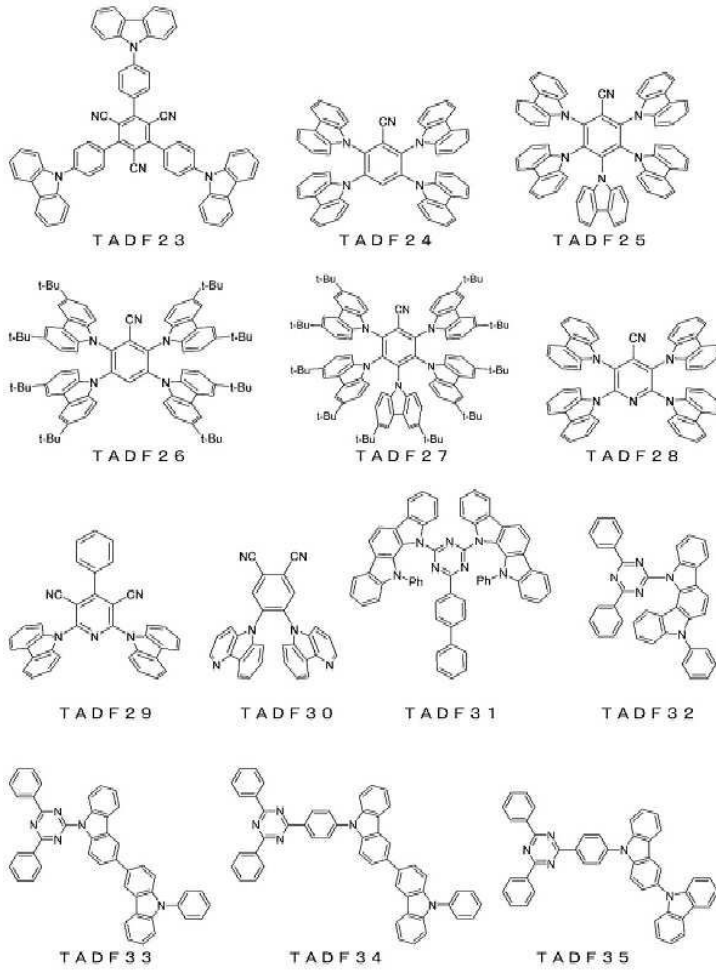
[0190]

[0191] [화학식 18-2]



[0192]

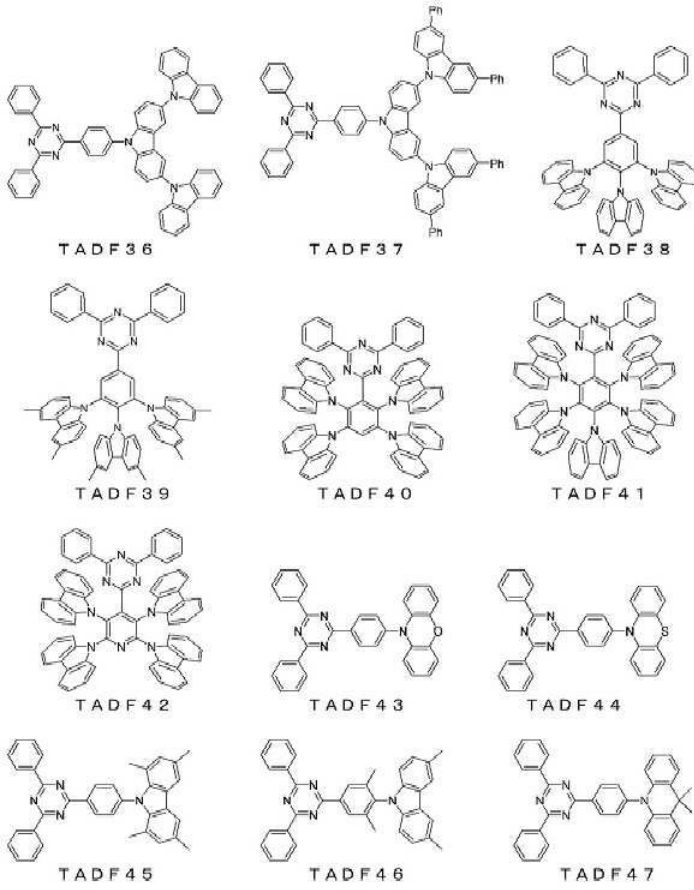
[0193] [화학식 18-3]



[0194]

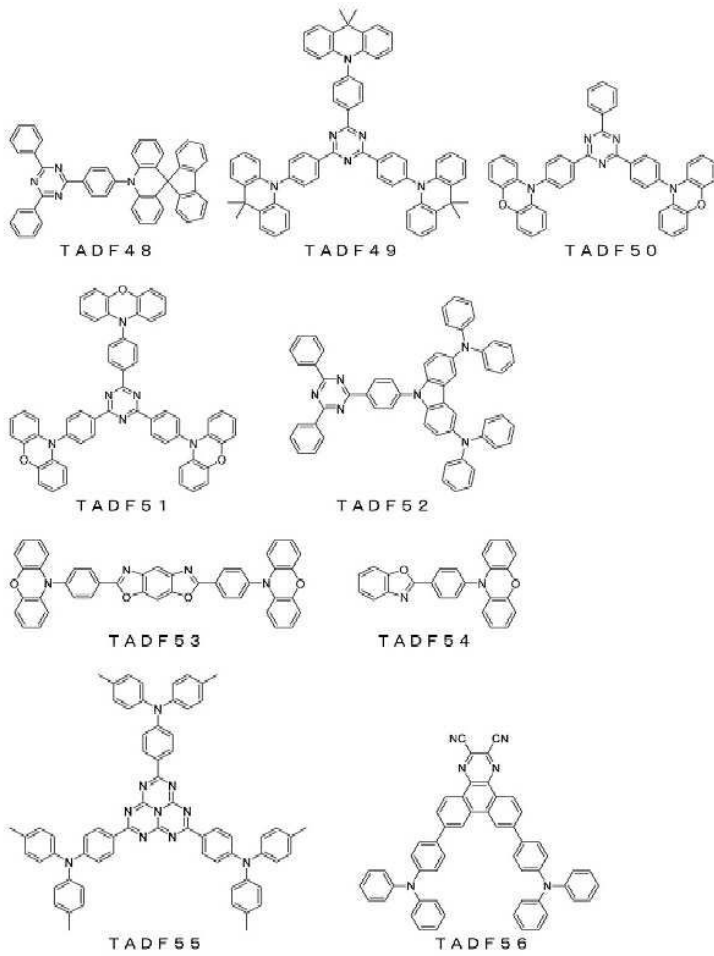
[0195]

[화학식 18-4]



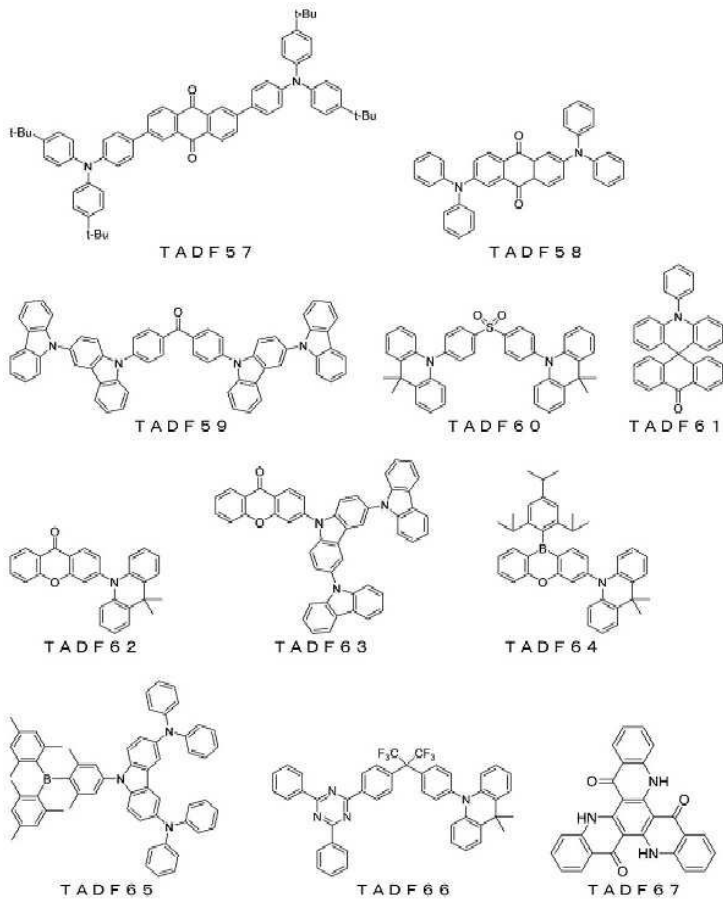
[0196]

[0197] [화학식 18-5]



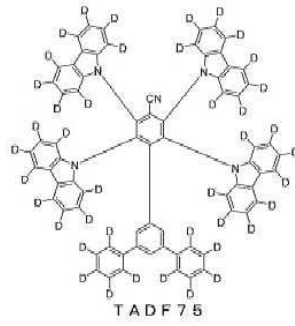
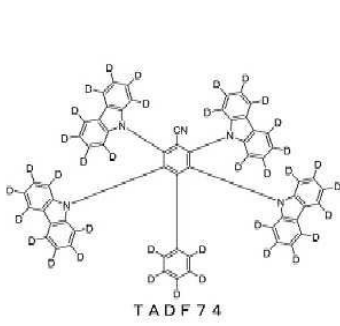
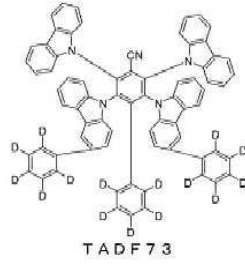
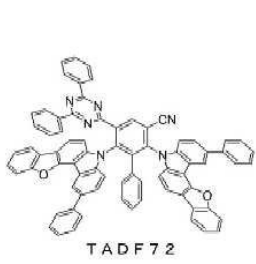
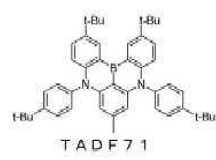
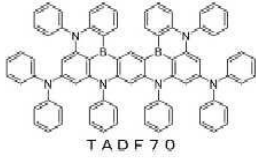
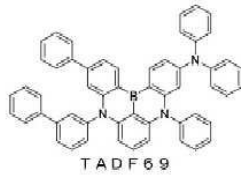
[0198]

[0199] [화학식 18-6]



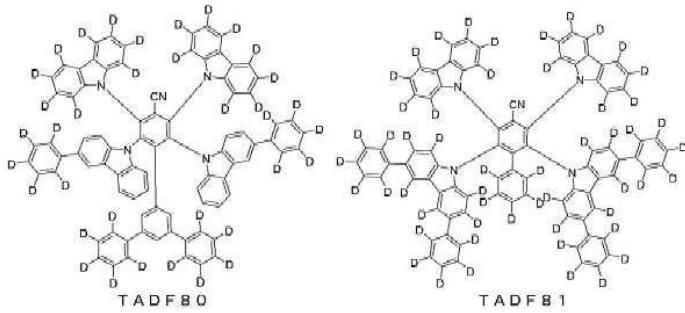
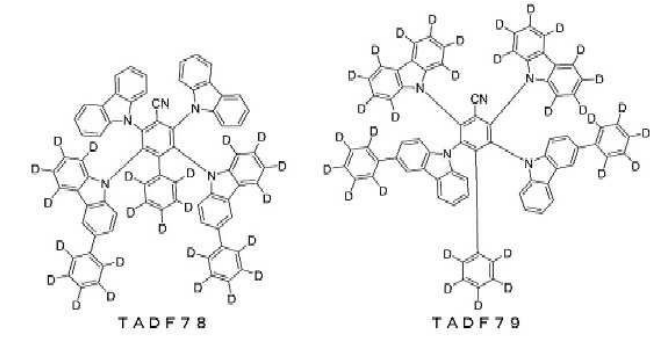
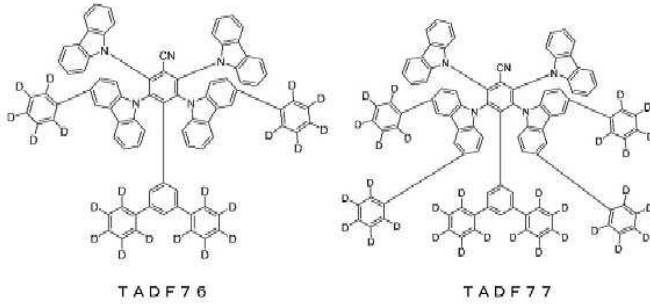
[0200]

[0201] [화학식 18-7]



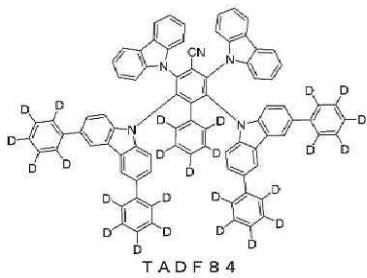
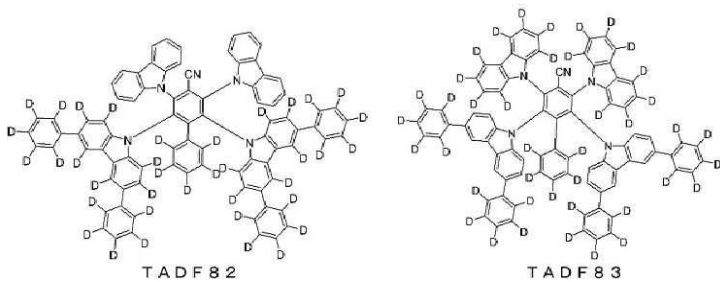
[0202]

[0203] [화학식 18-8]



[0204]

[0205] [화학식 18-9]



[0206]

[0207] 본 발명에서는, 상기 이외에도 공지 지연 형광 재료를 일반식 (1)로 나타나는 화합물과 적절히 조합하여 이용할 수 있다. 또, 알려져 있지 않은 지연 형광 재료이더라도, 이용하는 것이 가능하다.

[0208] 지연 형광 재료로서, W02013/154064호의 단락 0008~0048 및 0095~0133, W02013/011954호의 단락 0007~0047 및 0073~0085, W02013/011955호의 단락 0007~0033 및 0059~0066, W02013/081088호의 단락 0008~0071 및

0118~0133, 일본 공개특허공보 2013-256490호의 단락 0009~0046 및 0093~0134, 일본 공개특허공보 2013-116975호의 단락 0008~0020 및 0038~0040, W02013/133359호의 단락 0007~0032 및 0079~0084, W02013/161437호의 단락 0008~0054 및 0101~0121, 일본 공개특허공보 2014-9352호의 단락 0007~0041 및 0060~0069, 일본 공개특허공보 2014-9224호의 단락 0008~0048 및 0067~0076, 일본 공개특허공보 2017-119663호의 단락 0013~0025, 일본 공개특허공보 2017-119664호의 단락 0013~0026, 일본 공개특허공보 2017-222623호의 단락 0012~0025, 일본 공개특허공보 2017-226838호의 단락 0010~0050, 일본 공개특허공보 2018-100411호의 단락 0012~0043, W02018/047853호의 단락 0016~0044에 기재되는 일반식에 포함되는 화합물, 특히 예시 화합물이며, 지연 형광을 방사하는 것들을 수 있다. 또, 일본 공개특허공보 2013-253121호, W02013/133359호, W02014/034535호, W02014/115743호, W02014/122895호, W02014/126200호, W02014/136758호, W02014/133121호, W02014/136860호, W02014/196585호, W02014/189122호, W02014/168101호, W02015/008580호, W02014/203840호, W02015/002213호, W02015/016200호, W02015/019725호, W02015/072470호, W02015/108049호, W02015/080182호, W02015/072537호, W02015/080183호, 일본 공개특허공보 2015-129240호, W02015/129714호, W02015/129715호, W02015/133501호, W02015/136880호, W02015/137244호, W02015/137202호, W02015/137136호, W02015/146541호, W02015/159541호에 기재되는 발광 재료로서, 지연 형광을 방사하는 것을 채용할 수도 있다. 또한, 이 단락에 기재되는 상기의 공보는, 본 명세서의 일부로서 여기에 인용하고 있다.

[0209] 본 발명에서 이용하는 지연 형광 재료는 금속 원자를 포함하지 않는 것이 바람직하다. 예를 들면, 지연 형광 재료로서, 탄소 원자, 수소 원자, 질소 원자, 산소 원자 및 황 원자로 이루어지는 군으로부터 선택되는 원자로 이루어지는 화합물을 선택할 수 있다. 예를 들면, 지연 형광 재료로서, 탄소 원자, 수소 원자, 질소 원자 및 산소 원자로 이루어지는 군으로부터 선택되는 원자로 이루어지는 화합물을 선택할 수 있다. 예를 들면, 지연 형광 재료로서, 탄소 원자, 수소 원자 및 질소 원자로 이루어지는 화합물을 선택할 수 있다.

[0210] 또한, 본 명세서에 있어서의 알킬기, 알켄일기, 아릴기, 헤테로아릴기 등은, 다른 설명이 없는 한 하기의 내용을 나타낸다.

[0211] "알킬기"는, 직쇄상, 분기상, 환상 중 어느 것이어도 된다. 또, 직쇄 부분과 환상 부분과 분기 부분 중 2종 이상이 혼재하고 있어도 된다. 알킬기의 탄소수는, 예를 들면 1 이상, 2 이상, 4 이상으로 할 수 있다. 또, 탄소수는 30 이하, 20 이하, 10 이하, 6 이하, 4 이하로 할 수 있다. 알킬기의 구체예로서, 메틸기, 에틸기, n-프로필기, 아이소프로필기, n-뷰틸기, 아이소뷰틸기, tert-뷰틸기, n-펜틸기, 아이소펜틸기, n-헥실기, 아이소헥실기, 2-에틸헥실기, n-헵틸기, 아이소헵틸기, n-옥틸기, 아이소옥틸기, n-노닐기, 아이소노닐기, n-데칸일기, 아이소데칸일기, 사이클로펜틸기, 사이클로헥실기, 사이클로헵틸기를 들 수 있다. 치환기인 알킬기는, 아릴기보다 더 치환되어 있어도 된다. "알콕시기", "알킬싸이오기", "아실기" 및 "알콕시카보닐기"의 알킬 부분에 대해서도, 여기에서 말하는 "알킬기"의 설명을 참조할 수 있다.

[0212] "알켄일기"는, 직쇄상, 분기상, 환상 중 어느 것이어도 된다. 또, 직쇄 부분과 환상 부분과 분기 부분 중 2종 이상이 혼재하고 있어도 된다. 알켄일기의 탄소수는, 예를 들면 2 이상, 4 이상으로 할 수 있다. 또, 탄소수는 30 이하, 20 이하, 10 이하, 6 이하, 4 이하로 할 수 있다. 알켄일기의 구체예로서, 에텐일기, n-프로펜일기, 아이소프로펜일기, n-뷰텐일기, 아이소뷰텐일기, n-펜텐일기, 아이소펜텐일기, n-헥센일기, 아이소헥센일기, 2-에틸헥센일기를 들 수 있다. 치환기인 알켄일기는, 치환기로 더 치환되어 있어도 된다.

[0213] "아릴기" 및 "헤테로아릴기"는, 단환이어도 되고, 2개 이상의 환이 축합된 축합환이어도 된다. 축합환인 경우, 축합되어 있는 환의 수는 2~6인 것이 바람직하고, 예를 들면 2~4 중에서 선택할 수 있다. 환의 구체예로서, 벤젠환, 피리딘환, 피리미딘환, 트리아진환, 나프탈렌환, 안트라센환, 페난트렌환, 트라이페닐렌환, 퀴놀린환, 피라진환, 퀴놀살린환, 나프티리딘환을 들 수 있다. 아릴기 또는 헤테로아릴기의 구체예로서, 페닐기, 1-나프틸기, 2-나프틸기, 1-안트라센일기, 2-안트라센일기, 9-안트라센일기, 2-피리딜기, 3-피리딜기, 4-피리딜기를 들 수 있다. "아릴렌기" 및 "헤테로아릴기"는, 아릴기 및 헤테로아릴기의 설명에 있어서의 가수를 1 내지 2로 대체한 것으로 할 수 있다. "아릴옥시기", "아릴싸이오기" 및 "아릴옥시카보닐기"의 아릴 부분에 대해서도, 여기에서 말하는 "아릴기"의 설명을 참조할 수 있다. "헤테로아릴옥시기", "헤테로아릴싸이오기" 및 "헤테로아릴옥시카보닐기"의 헤테로아릴 부분에 대해서도, 여기에서 말하는 "헤테로아릴기"의 설명을 참조할 수 있다.

[0214] (조성물)

[0215] 본 발명의 조성물은, 일반식 (1)로 나타나는 화합물과 지연 형광 재료를 포함한다. 본 발명의 일 양태에서는, 조성물은, 1종 이상의 일반식 (1)로 나타나는 화합물과, 1종 이상의 지연 형광 재료만으로 구성된다. 본 발명의 일 양태에서는, 조성물은, 1종의 일반식 (1)로 나타나는 화합물과, 1종의 지연 형광 재료만으로 구성된다. 본

발명의 일 양태에서는, 조성물은 일반식 (1)로 나타나는 화합물과 지연 형광 재료 이외에 제3 성분을 포함한다. 여기에서 말하는 제3 성분은, 일반식 (1)로 나타나는 화합물이 아니고, 또, 지연 형광 재료도 아니다. 제3 성분은 1종만 포함되어 있어도 되고, 2종 이상이 포함되어 있어도 된다. 조성물에 있어서의 제3 성분의 함유량은, 30중량% 이하의 범위 내에서 선택해도 되고, 10중량% 이하의 범위 내에서 선택해도 되며, 1중량% 이하의 범위 내에서 선택해도 되고, 0.1중량% 이하의 범위 내에서 선택해도 된다. 본 발명의 일 양태에서는, 제3 성분은 발광하지 않는다. 본 발명의 일 양태에서는, 제3 성분은 형광을 발광한다. 본 발명의 바람직한 일 양태에서는, 본 발명 조성물로부터의 발광의 최대 성분은 형광(지연 형광을 포함한다)이다.

[0216] 본 발명의 조성물에 있어서, 일반식 (1)로 나타나는 화합물은 지연 형광 재료보다 중량 기준의 함유량이 많다. 일반식 (1)로 나타나는 화합물의 함유량은, 지연 형광 재료의 함유량의 3중량배 이상의 범위 내에서 선택해도 되고, 10중량배 이상의 범위 내에서 선택해도 되며, 100중량배 이상의 범위 내에서 선택해도 되고, 1000중량배 이상의 범위 내에서 선택해도 되며, 또, 예를 들면 10000중량배 이하의 범위 내에서 선택해도 된다.

[0217] 본 발명의 조성물에서는, 일반식 (1)로 나타나는 화합물의 여기 일중항 에너지보다 작은 여기 일중항 에너지를 갖는 지연 형광 재료를 선택하는 것이 바람직하다. 여기 일중항 에너지의 차는, 0.1eV 이상으로 하거나, 0.3eV 이상으로 하거나, 0.5eV 이상으로 하거나 해도 되고, 2eV 이하로 하거나, 1.5eV 이하로 하거나, 1.0eV 이하로 하거나 해도 된다.

[0218] 본 발명의 조성물은, 금속 원소를 포함하지 않는 것이 바람직하다. 본 발명의 일 양태에서는, 본 발명의 조성물은 탄소 원자, 수소 원자, 질소 원자, 산소 원자, 황 원자, 붕소 원자 및 할로젠 원자로 이루어지는 군으로부터 선택되는 원자만으로 이루어진다. 본 발명의 일 양태에서는, 본 발명의 조성물은 탄소 원자, 수소 원자, 질소 원자, 산소 원자 및 황 원자로 이루어지는 군으로부터 선택되는 원자만으로 이루어진다.

[0219] 또, 본 발명의 일 양태에서는, 일반식 (1)로 나타나는 화합물은, 지연 형광 재료 및 형광성 화합물과 함께 이용하기 위한 호스트 재료로서 유용하다. 이 때문에, 본 발명의 일 양태에서는, 본 발명의 조성물은 일반식 (1)로 나타나는 화합물과 지연 형광 재료 외에 형광성 화합물도 포함한다.

[0220] 형광성 화합물은, 일반식 (1)로 나타나는 화합물 및 지연 형광 재료보다 최저 여기 일중항 에너지(E_{S1})가 작은 것이 바람직하다. 형광성 화합물은, 여기 일중항 상태의 일반식 (1)로 나타나는 화합물 및 지연 형광 재료와, 여기 삼중항 상태로부터 역항간 교차하여 여기 일중항 상태가 된 지연 형광 재료로부터 에너지를 전달받아 여기 일중항 상태로 천이하고, 그 후 기저 상태로 되돌아갈 때에 형광을 방출한다. 형광성 화합물로서는, 이와 같이 일반식 (1)로 나타나는 화합물 및 지연 형광 재료로부터 에너지를 받아 형광을 방출할 수 있는 것이면 특별히 한정되지 않고, 발광은 형광이어도, 지연 형광이어도 상관없다. 그중에서도, 형광성 화합물로서 이용하는 발광체는, 최저 여기 일중항 에너지 준위로부터 기저 에너지 준위로 되돌아갈 때에 형광을 방출하는 것인 것이 바람직하다. 형광성 화합물은, 2종 이상을 이용해도 된다. 예를 들면, 발광색이 상이한 2종 이상의 형광성 화합물을 병용함으로써, 원하는 색을 발광시키는 것이 가능해진다.

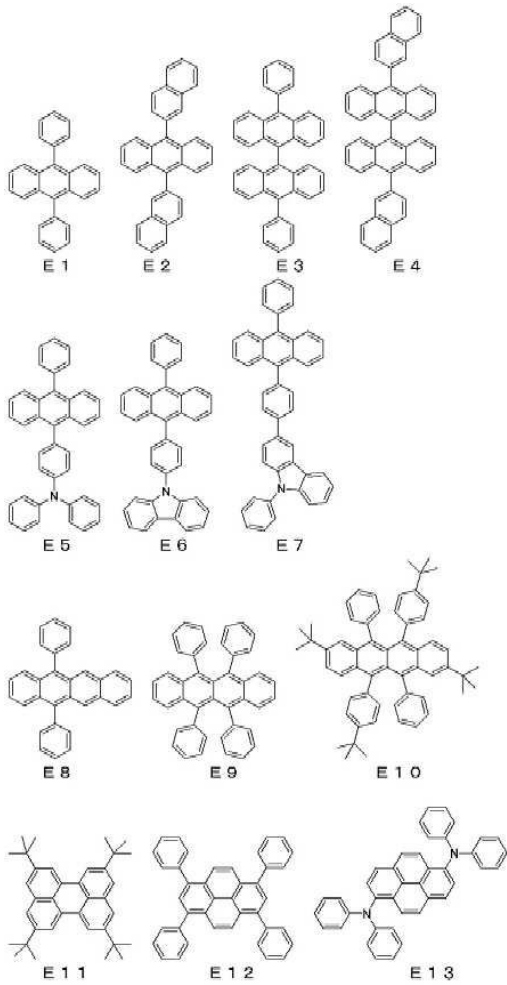
[0221] 형광성 화합물로서는, 안트라센 유도체, 테트라센 유도체, 나프타센 유도체, 피렌 유도체, 페릴렌 유도체, 크리센 유도체, 루브렌 유도체, 쿠마린 유도체, 피란 유도체, 스틸벤 유도체, 플루오렌 유도체, 안트릴 유도체, 피로메텐 유도체, 터페닐 유도체, 터페닐렌 유도체, 플루오란텐 유도체, 아민 유도체, 퀴나크리돈 유도체, 옥사다리아졸 유도체, 말로노나이트릴 유도체, 피란 유도체, 카바졸 유도체, 줄롤리딘 유도체, 싸이아졸 유도체, 금속 (Al, Zn)을 갖는 유도체, 다이아자보라나프토안트라센 등의 함불소 다환 방향족 골격을 갖는 화합물 등의 다중 공명 효과를 갖는 화합물 등을 이용하는 것이 가능하다. 이들 예시 골격에는 치환기를 가져도 되고, 치환기를 갖고 있지 않아도 된다. 또, 이들의 예시 골격끼리를 조합해도 된다.

[0222] 형광성 화합물의 구체예로서는, 지연 형광 재료의 구체예로서 든 화합물을 들 수 있다. 이때, 본 발명의 조성물에는 2종 이상의 지연 형광 재료가 포함되게 되지만, 최저 여기 일중항 에너지가 보다 높은 편이 어시스트 도펀트로서 기능하고, 최저 여기 일중항 에너지가 보다 낮은 편이 주로 발광하는 형광성 화합물로서 기능한다. 형광성 화합물로서 이용되는 화합물은, 60% 이상의 PL 발광 양자 수율을 나타내는 것이 바람직하고, 80% 이상인 것이 보다 바람직하다. 또, 형광성 화합물로서 이용되는 화합물은, 50ns 이하의 순간 형광 수명을 나타내는 것이 바람직하고, 20ns 이하인 것이 보다 바람직하다. 이 때의 순간 형광 수명이란, 열활성형 지연 형광을 나타내는 화합물에 대하여, 발광 수명 측정을 행했을 때에 관측되는 복수의 지수 감쇠 성분 중 가장 빨리 감쇠하는 성분의 발광 수명이다. 또, 제3 화합물로서 이용되는 화합물은, 최저 여기 일중항($S1$)으로부터 기저 상태로의 형광 방사 속도가 $S1$ 로부터 최저 여기 삼중항($T1$)으로의 항간 교차 속도보다 큰 것이 바람직하다. 화합물의 속도 상수의 산출 방법에 대해서는, 열활성형 지연 형광 재료에 관한 공지의 문헌(H. Uoyama, et al., Nature 492,

234(2012)나 K. Masui, et al., Org. Electron. 14, 2721(2013) 등)을 참조할 수 있다.

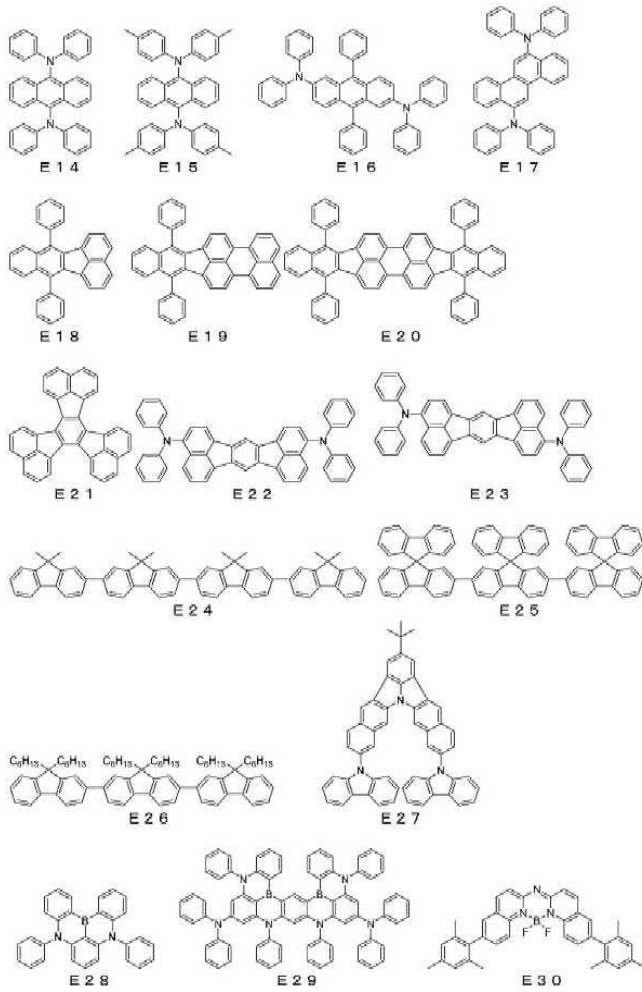
[0223] 이하에, 지연 형광 재료와 함께 이용하는 형광성 화합물로서 이용할 수 있는 바람직한 화합물을 들지만, 본 발명에서 이용할 수 있는 형광성 화합물은 이들 구체예에 의하여 한정적으로 해석되는 경우는 없다.

[0224] [화학식 19-1]



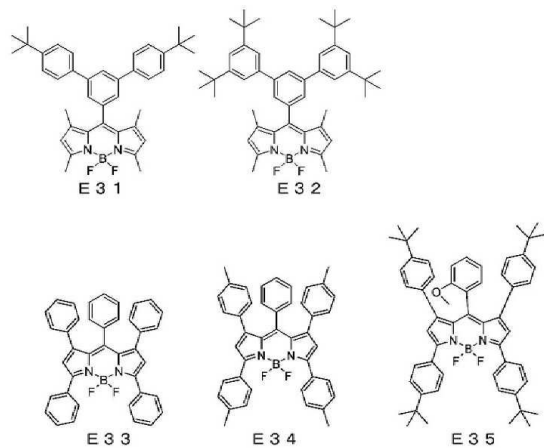
[0225]

[0226] [화학식 19-2]



[0227]

[0228] [화학식 19-3]



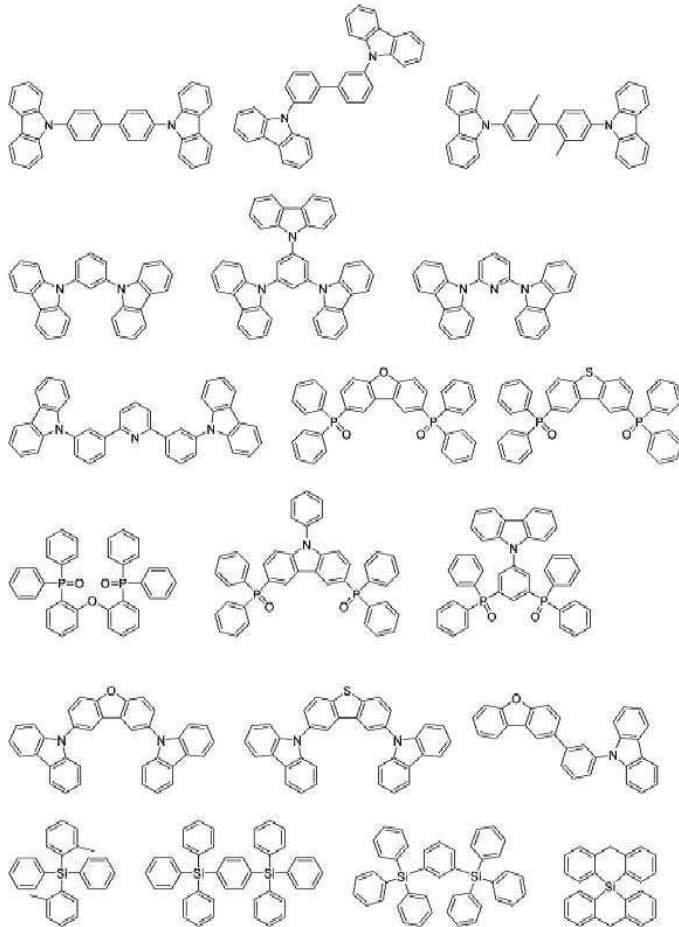
[0229]

[0230] 또, W02015/022974호의 단락 0220-0239에 기재된 화합물도, 본 발명의 형광성 화합물로서, 특히 바람직하게 채용할 수 있다.

[0231] 또, 본 발명의 일 양태에서는, 일반식 (1)로 나타나는 화합물을 다른 호스트 재료와 함께 이용하여, 복수의 호스트 재료를 포함하는 발광층(조성물)으로서 이용할 수 있다. 즉, 본 발명의 일 양태에서는, 본 발명의 조성물은 일반식 (1)로 나타나는 화합물을 포함하는 복수의 호스트 재료를 함유한다. 본 발명의 조성물에는, 일반식 (1)로 나타나는 복수 종의 화합물을 이용해도 되고, 일반식 (1)로 나타나는 화합물과 일반식 (1)로 나타나지 않는 호스트 재료를 조합하여 이용해도 된다.

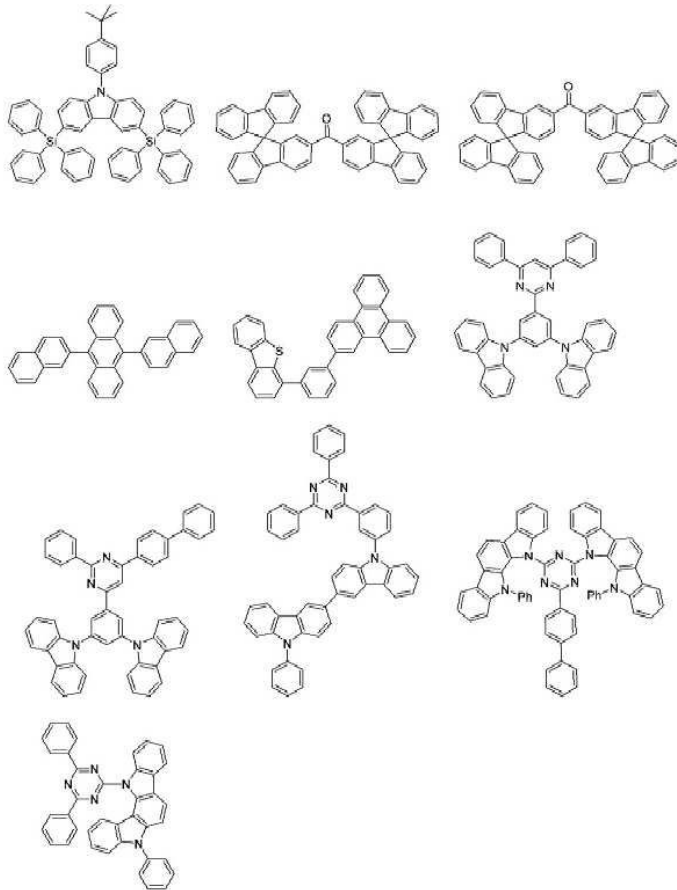
[0232] 이하에, 일반식 (1)로 나타나는 화합물과 함께 이용되는 제2 호스트 재료로서 이용할 수 있는 바람직한 화합물을 들지만, 본 발명에서 이용할 수 있는 제2 호스트 재료는 이들 구체예에 의하여 한정적으로 해석되는 경우는 없다.

[0233] [화학식 20-1]



[0234]

[0235] [화학식 20-2]



[0236]

[0237] 본 발명의 조성물의 형태는 특별히 제한되지 않는다. 본 발명의 특히 바람직한 일 양태에서는, 본 발명의 조성물은 막(필름) 형상이다. 본 발명의 조성물로 이루어지는 막은 습식 공정으로 형성해도 되고, 건식 공정으로 형성해도 된다.

[0238] 습식 공정에서는, 본 발명의 조성물을 용해한 용액을 면에 도포하여, 용매의 제거 후에 발광층을 형성한다. 습식 공정으로서, 스핀 코트법, 슬릿 코트법, 잉크젯법(스프레이법), 그라비아 인쇄법, 오프셋 인쇄법, 플렉소 인쇄법을 들 수 있지만, 이들에 한정되는 것은 아니다. 습식 공정에서는, 본 발명의 조성물을 용해할 수 있는 적절한 유기 용매를 선택하여 이용한다. 일 실시형태에서는, 본 발명의 조성물에 포함되는 화합물에, 유기 용매에 대한 용해성을 높이는 치환기(예를 들면 알킬기)를 도입할 수 있다.

[0239] 건식 공정으로서의 진공 증착법을 바람직하게 채용할 수 있다. 진공 증착법을 채용하는 경우는, 본 발명의 조성물을 구성하는 각 화합물을 개별의 증착원으로부터 공증착시켜도 되고, 전체 화합물을 혼합한 단일의 증착원으로부터 공증착시켜도 된다. 단일의 증착원을 이용하는 경우는, 전체 화합물의 분말을 혼합한 혼합 분말을 이용해도 되고, 그 혼합 분말을 압축한 압축 성형체를 이용해도 되며, 각 화합물을 가열 용융하여 혼합한 후에 냉각한 혼합물을 이용해도 된다. 일 실시형태에서는, 단일의 증착원에 포함되는 복수의 화합물의 증착 속도(증량 감소 속도)가 일치 내지 대략 일치하는 조건에서 공증착을 행함으로써, 증착원에 포함되는 복수의 화합물의 조성비에 대응하는 조성비의 막을 형성할 수 있다. 형성되는 막의 조성비와 동일한 조성비로 복수의 화합물을 혼합하여 증착원으로 하면, 원하는 조성비를 갖는 막을 간편하게 형성할 수 있다. 일 실시형태에서는, 공증착되는 각 화합물이 동일한 증량 감소율이 되는 온도를 특정하여, 그 온도를 공증착 시의 온도로서 채용할 수 있다. 막을 증착법에 의하여 제작하는 경우는, 조성물을 구성하는 각 화합물의 분자량은 1500 이하인 것이 바람직하고, 1200 이하인 것이 보다 바람직하며, 1000 이하인 것이 더 바람직하고, 900 이하인 것이 보다 더 바람직하다. 분자량의 하한값은, 예를 들면 450이거나, 500이거나, 600이거나 해도 된다.

[0240] (유기 발광 소자)

[0241] 본 발명의 조성물로 이루어지는 발광층을 형성함으로써, 유기 포토 루미네선스 소자(유기 PL 소자)나 유기 일렉트로 루미네선스 소자(유기 EL 소자) 등의 우수한 유기 발광 소자를 제공할 수 있다. 본 발명의 유기 발광 소자

는 형광 발광 소자이며, 소자로부터의 발광의 최대 성분은 형광이다(여기에서 말하는 형광에는 지연 형광이 포함된다).

- [0242] 발광층의 두께는 예를 들면 1~15nm로 하거나, 2~10nm로 하거나, 3~7nm로 할 수 있다.
- [0243] 유기 포토 루미네선스 소자는, 기재 상에 적어도 발광층을 형성한 구조를 갖는다. 또, 유기 일렉트로 루미네선스 소자는, 적어도 양극, 음극, 및 양극과 음극의 사이에 유기층을 형성한 구조를 갖는다. 유기층은, 적어도 발광층을 포함하는 것이며, 발광층만으로 이루어지는 것이어도 되고, 발광층 외에 1층 이상의 유기층을 갖는 것이어도 된다. 그와 같은 다른 유기층으로서, 정공 수송층, 정공 주입층, 전자 장벽층, 정공 장벽층, 전자 주입층, 전자 수송층, 여기자 장벽층 등을 들 수 있다. 정공 수송층은 정공 주입 기능을 가진 정공 주입 수송층이어도 되고, 전자 수송층은 전자 주입 기능을 가진 전자 주입 수송층이어도 된다. 구체적인 유기 일렉트로 루미네선스 소자의 구조예를 도 1에 나타낸다. 도 1에 있어서, 1은 기재, 2는 양극, 3은 정공 주입층, 4는 정공 수송층, 5는 발광층, 6은 전자 수송층, 7은 음극을 나타낸다.
- [0244] 본 발명의 유기 발광 소자가 다과장 발광형의 유기 발광 소자일 때, 가장 단과장인 발광이 지연 형광을 포함하는 것으로 할 수 있다. 또, 가장 단과장인 발광이 지연 형광을 포함하지 않는 것으로 할 수도 있다.
- [0245] 본 발명의 구성물을 이용한 유기 발광 소자는, 열적 또는 전자적 수단으로 여기될 때, 자외 영역, 가시 스펙트럼 중 청색, 녹색, 황색, 오렌지색, 적색 영역(예를 들면 420~500nm, 500~600nm 또는 600~700nm) 또는 근적외선 영역에서 광을 발할 수 있다. 예를 들면 유기 발광 소자는 적색 또는 오렌지색 영역(예를 들면 620~780nm)에서 광을 발할 수 있다. 예를 들면 유기 발광 소자는 오렌지색 또는 황색 영역(예를 들면 570~620nm)에서 광을 발할 수 있다. 예를 들면 유기 발광 소자는 녹색 영역(예를 들면 490~575nm)에서 광을 발할 수 있다. 예를 들면 유기 발광 소자는 청색 영역(예를 들면 400~490nm)에서 광을 발할 수 있다. 예를 들면 유기 발광 소자는 자외 스펙트럼 영역(예를 들면 280~400nm)에서 광을 발할 수 있다. 예를 들면 유기 발광 소자는 적외 스펙트럼 영역(예를 들면 780nm~2 μm)에서 광을 발할 수 있다.
- [0246] 본 발명의 구성물을 이용한 유기 발광 소자로부터의 발광의 최대 성분은, 본 발명의 구성물에 포함되는 지연 형광 재료로부터의 발광인 것이 바람직하다. 일반식 (1)로 나타나는 화합물로부터의 발광은, 유기 발광 소자로부터의 발광의 10% 미만인 것이 바람직하고, 예를 들면 1% 미만, 0.1% 미만, 0.01% 미만, 검출 한계 이하여도 된다. 지연 형광 재료로부터의 발광은, 유기 발광 소자로부터의 발광의 예를 들면 50% 초과, 90% 초과, 99% 초과여도 된다. 본 발명의 구성물을 포함하는 층(발광층)이 제3 성분으로서 형광 재료를 포함하는 경우는, 유기 발광 소자로부터의 발광의 최대 성분은 그 형광 재료로부터의 발광이어도 된다. 그 경우는, 발광 재료로부터의 발광은 유기 발광 소자로부터의 발광의 예를 들면 50% 초과, 90% 초과, 99% 초과여도 된다.
- [0247] 이하에 있어서, 유기 일렉트로 루미네선스 소자의 각 부재 및 발광층 이외의 각층(各層)에 대하여 설명한다.
- [0248] 기재:
- [0249] 몇 개의 실시형태에서는, 본 발명의 유기 일렉트로 루미네선스 소자는 기재에 의하여 지지되며, 당해 기재는 특별히 한정되지 않고, 유기 일렉트로 루미네선스 소자에서 일반적으로 이용되는, 예를 들면 유리, 투명 플라스틱, 퀴즈 및 실리콘에 의하여 형성된 어느 하나의 재료를 이용하면 된다.
- [0250] 양극:
- [0251] 몇 개의 실시형태에서는, 유기 일렉트로 루미네선스 장치의 양극은, 금속, 합금, 도전성 화합물 또는 그들의 조합으로 제조된다. 몇 개의 실시형태에서는, 상기의 금속, 합금 또는 도전성 화합물은 높은 일(work) 함수(4eV 이상)를 갖는다. 몇 개의 실시형태에서는, 상기 금속은 Au이다. 몇 개의 실시형태에서는, 도전성의 투명 재료는, CuI, 산화 인듐·주석(ITO), SnO₂ 및 ZnO로부터 선택된다. 몇 개의 실시형태에서는, IDIXO(In₂O₃-ZnO) 등의, 투명한 도전성 필름을 형성할 수 있는 어모퍼스 재료를 사용한다. 몇 개의 실시형태에서는, 상기 양극은 박막이다. 몇 개의 실시형태에서는, 상기 박막은 증착 또는 스퍼터링에 의하여 제작된다. 몇 개의 실시형태에서는, 상기 필름은 포토리소그래피 방법에 의하여 패터닝된다. 몇 개의 실시형태에서는, 패턴이 고정밀도일 필요가 없는(예를 들면 약 100 μm 이상) 경우, 당해 패턴은, 전극 재료에 대한 증착 또는 스퍼터링에 적합한 형상의 마스크를 이용하여 형성해도 된다. 몇 개의 실시형태에서는, 유기 도전성 화합물 등의 코팅 재료를 도포할 수 있을 때, 프린트법이나 코팅법 등의 습식 필름 형성 방법이 이용된다. 몇 개의 실시형태에서는, 방사광이 양극을 통과할 때, 양극은 10% 초과와 투과도를 갖고, 당해 양극은, 단위 면적당 수백 옴 이하의 시트 저항을 갖는다. 몇 개의 실시형태에서는, 양극의 두께는 10~1,000nm이다. 몇 개의 실시형태에서는, 양극의 두께는 10~200nm

이다. 몇 개의 실시형태에서는, 양극의 두께는 이용하는 재료에 따라 변동된다.

[0252] 음극:

[0253] 몇 개의 실시형태에서는, 상기 음극은, 낮은 일 함수를 갖는 금속(4eV 이하)(전자 주입 금속이라고 칭해진다), 합금, 도전성 화합물 또는 그 조합 등의 전극 재료로 제작된다. 몇 개의 실시형태에서는, 상기 전극 재료는, 나트륨, 나트륨-칼륨 합금, 마그네슘, 리튬, 마그네슘-구리 혼합물, 마그네슘-은 혼합물, 마그네슘-알루미늄 혼합물, 마그네슘-인듐 혼합물, 알루미늄-산화 알루미늄(Al_2O_3) 혼합물, 인듐, 리튬-알루미늄 혼합물 및 희토류 원소로부터 선택된다. 몇 개의 실시형태에서는, 전자 주입 금속과, 전자 주입 금속보다 높은 일 함수를 갖는 안정적인 금속인 제2 금속의 혼합물이 이용된다. 몇 개의 실시형태에서는, 상기 혼합물은, 마그네슘-은 혼합물, 마그네슘-알루미늄 혼합물, 마그네슘-인듐 혼합물, 알루미늄-산화 알루미늄(Al_2O_3) 혼합물, 리튬-알루미늄 혼합물 및 알루미늄으로부터 선택된다. 몇 개의 실시형태에서는, 상기 혼합물은 전자 주입 특성 및 산화에 대한 내성을 향상시킨다. 몇 개의 실시형태에서는, 음극은, 증착 또는 스퍼터링에 의하여 전극 재료를 박막으로 하여 형성시킴으로써 제조된다. 몇 개의 실시형태에서는, 상기 음극은 단위 면적당 수백 옴 이하의 시트 저항을 갖는다. 몇 개의 실시형태에서는, 상기 음극의 두께는 10nm~5 μ m이다. 몇 개의 실시형태에서는, 상기 음극의 두께는 50~200nm이다. 몇 개의 실시형태에서는, 방사광을 투과시키기 위하여, 유기 일렉트로 루미네선스 소자의 양극 및 음극 중 어느 하나는 투명 또는 반투명이다. 몇 개의 실시형태에서는, 투명 또는 반투명의 일렉트로 루미네선스 소자는 광 방사 회도를 향상시킨다.

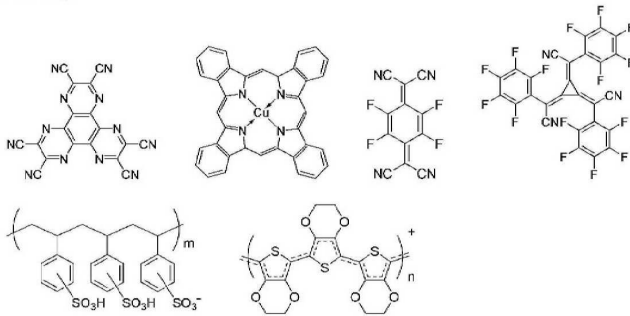
[0254] 몇 개의 실시형태에서는, 상기 음극을, 상기 양극에 관하여 상술한 도전성의 투명한 재료로 형성됨으로써, 투명 또는 반투명의 음극이 형성된다. 몇 개의 실시형태에서는, 소자는 양극과 음극을 포함하지만, 모두 투명 또는 반투명이다.

[0255] 주입층:

[0256] 주입층은, 전극과 유기층의 사이의 층이다. 몇 개의 실시형태에서는, 상기 주입층은 구동 전압을 감소시켜, 광 방사 회도를 증가시킨다. 몇 개의 실시형태에서는, 상기 주입층은, 정공 주입층과 전자 주입층을 포함한다. 상기 주입층은, 양극과 발광층 또는 정공 수송층의 사이, 및 음극과 발광층 또는 전자 수송층의 사이에 배치할 수 있다. 몇 개의 실시형태에서는, 주입층이 존재한다. 몇 개의 실시형태에서는, 주입층이 존재하지 않는다.

[0257] 이하에, 정공 주입 재료로서 이용할 수 있는 바람직한 화합물예를 든다.

[0258] [화학식 21]



[0259] 다음으로, 전자 주입 재료로서 이용할 수 있는 바람직한 화합물예를 든다.

[0261] [화학식 22]



[0263] 장벽층:

[0264] 장벽층은, 발광층에 존재하는 전하(전자 또는 정공) 및/또는 여기자가, 발광층의 외측으로 확산되는 것을 저지할 수 있는 층이다. 몇 개의 실시형태에서는, 전자 장벽층은, 발광층과 정공 수송층의 사이에 존재하고, 전자가 발광층을 통과하여 정공 수송층에 도달하는 것을 저지한다. 몇 개의 실시형태에서는, 정공 장벽층은, 발광층과 전자 수송층의 사이에 존재하고, 정공이 발광층을 통과하여 전자 수송층에 도달하는 것을 저지한다. 몇 개의 실

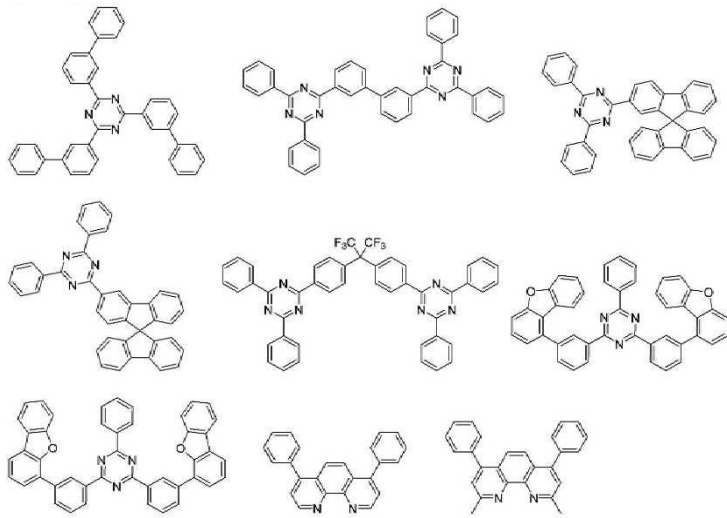
시형태에서는, 장벽층은, 여기자가 발광층의 외측으로 확산되는 것을 저지한다. 몇 개의 실시형태에서는, 전자 장벽층 및 정공 장벽층은 여기자 장벽층을 구성한다. 본 명세서에서 이용하는 용어 "전자 장벽층" 또는 "여기자 장벽층"에는, 전자 장벽층의, 및 여기자 장벽층의 기능의 양방을 갖는 층이 포함된다.

[0265] 정공 장벽층:

[0266] 정공 장벽층은, 전자 수송층으로서 기능한다. 몇 개의 실시형태에서는, 전자의 수송 동안, 정공 장벽층은 정공이 전자 수송층에 도달하는 것을 저지한다. 몇 개의 실시형태에서는, 정공 장벽층은, 발광층에 있어서의 전자와 정공의 재결합의 확률을 높인다. 정공 장벽층에 이용하는 재료는, 전자 수송층에 대하여 상술한 것과 동일한 재료여도 된다.

[0267] 이하에, 정공 장벽층에 이용할 수 있는 바람직한 화합물예를 든다.

[0268] [화학식 23]

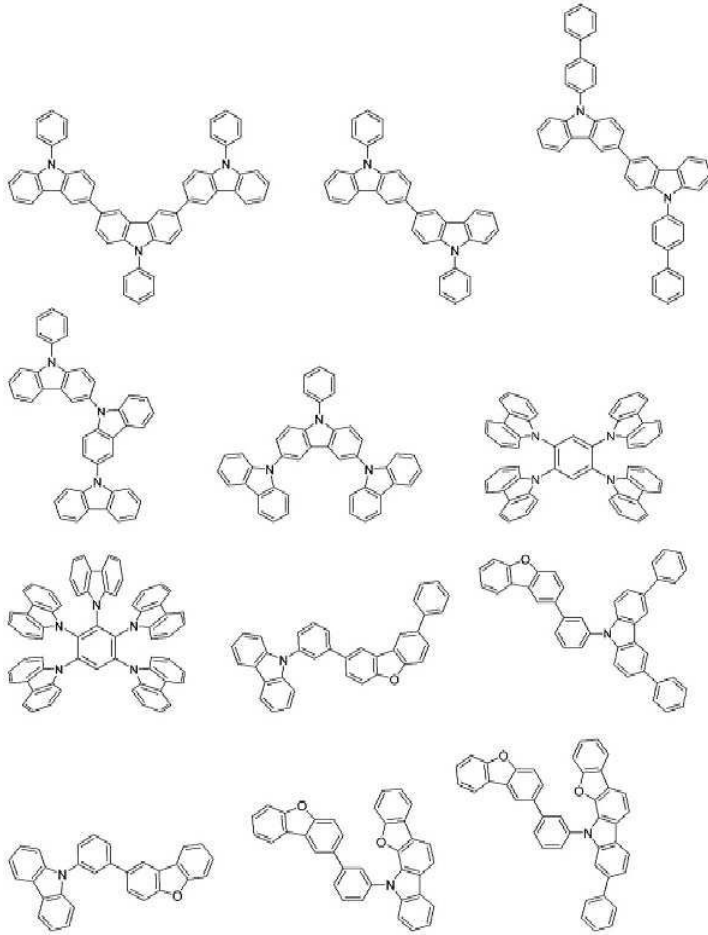


[0269] 전자 장벽층:

[0271] 전자 장벽층은, 정공을 수송한다. 몇 개의 실시형태에서는, 정공의 수송 동안, 전자 장벽층은 전자가 정공 수송층에 도달하는 것을 저지한다. 몇 개의 실시형태에서는, 전자 장벽층은, 발광층에 있어서의 전자와 정공의 재결합의 확률을 높인다. 전자 장벽층에 이용하는 재료는, 정공 수송층에 대하여 상술한 것과 동일한 재료여도 된다.

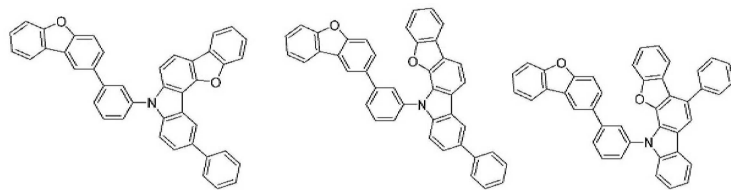
[0272] 이하에 전자 장벽 재료로서 이용할 수 있는 바람직한 화합물의 구체예를 든다.

[0273] [화학식 24-1]



[0274]

[0275] [화학식 24-2]



[0276]

[0277] 여기자 장벽층:

[0278] 여기자 장벽층은, 발광층에 있어서의 정공과 전자의 재결합을 통하여 발생한 여기자가 전자 수송층까지 확산되는 것을 저지한다. 몇 개의 실시형태에서는, 여기자 장벽층은, 발광층에 있어서의 여기자의 유효한 구속 (confinement)을 가능하게 한다. 몇 개의 실시형태에서는, 장치의 광 방사 효율이 향상된다. 몇 개의 실시형태에서는, 여기자 장벽층은, 양극 측과 음극 측 중 어느 하나에서, 및 그 양측의 발광층에 인접한다. 몇 개의 실시형태에서는, 여기자 장벽층이 양극 측에 존재할 때, 당해 층은, 정공 수송층과 발광층의 사이에 존재하고, 당해 발광층에 인접해도 된다. 몇 개의 실시형태에서는, 여기자 장벽층이 음극 측에 존재할 때, 당해 층은, 발광층과 음극의 사이에 존재하고, 당해 발광층에 인접해도 된다. 몇 개의 실시형태에서는, 정공 주입층, 전자 장벽층 또는 동일한 층은, 양극과, 양극 측의 발광층에 인접하는 여기자 장벽층의 사이에 존재한다. 몇 개의 실시형태에서는, 정공 주입층, 전자 장벽층, 정공 장벽층 또는 동일한 층은, 음극과, 음극 측의 발광층에 인접하는 여기자 장벽층의 사이에 존재한다. 몇 개의 실시형태에서는, 여기자 장벽층은, 여기 일중항 에너지와 여기 삼중항 에너지를 포함하고, 그 적어도 하나가, 각각, 발광 재료의 여기 일중항 에너지와 여기 삼중항 에너지보다 높다.

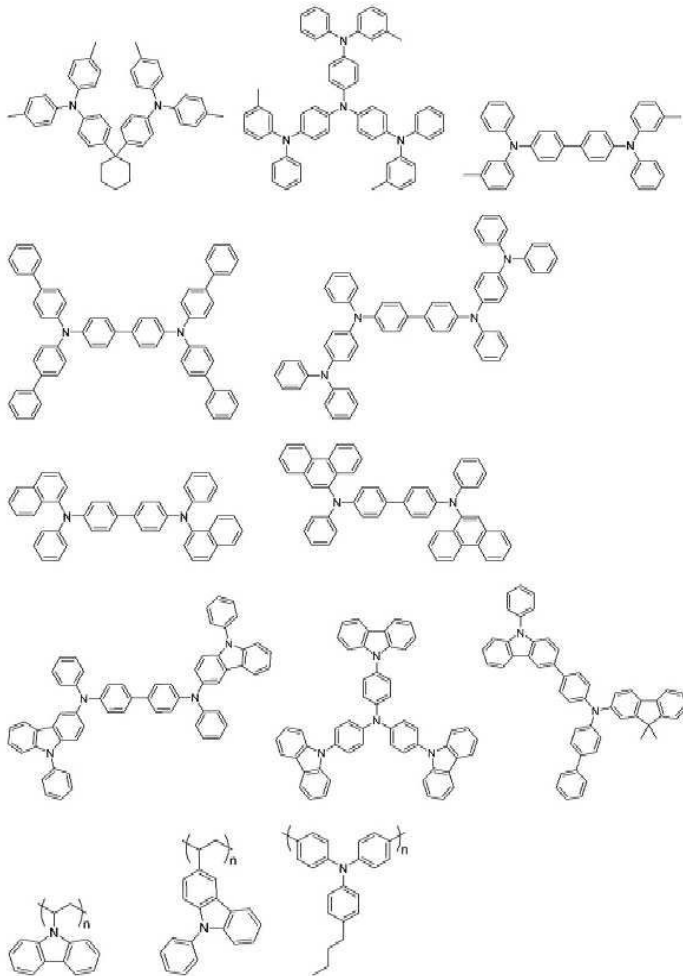
[0279] 정공 수송층:

[0280] 정공 수송층은, 정공 수송 재료를 포함한다. 몇 개의 실시형태에서는, 정공 수송층은 단층이다. 몇 개의 실시형

태에서는, 정공 수송층은 복수의 층을 갖는다.

[0281] 몇 개의 실시형태에서는, 정공 수송 재료는, 정공의 주입 또는 수송 특성 및 전자의 장벽 특성 중 하나의 특성을 갖는다. 몇 개의 실시형태에서는, 정공 수송 재료는 유기 재료이다. 몇 개의 실시형태에서는, 정공 수송 재료는 무기 재료이다. 본 발명에서 사용할 수 있는 공지의 정공 수송 재료의 예로서는, 한정되지 않지만, 트리아졸 유도체, 옥사다리아졸 유도체, 이미다졸 유도체, 카바졸 유도체, 인돌로카바졸 유도체, 폴리아릴알케인 유도체, 피라졸린 유도체, 피라졸론 유도체, 페닐렌다이아민 유도체, 알릴아민 유도체, 아미노 치환 칼콘 유도체, 옥사졸 유도체, 스타이릴안트라센 유도체, 플루오렌온 유도체, 하이드라존 유도체, 스틸벤 유도체, 실라제인 유도체, 아닐린 코폴리머 및 도전성 폴리머 올리고머(특히 싸이오펜 올리고머), 또는 그 조합을 들 수 있다. 몇 개의 실시형태에서는, 정공 수송 재료는 포피린 화합물, 방향족 3급 아민 화합물 및 스타이릴아민 화합물로부터 선택된다. 몇 개의 실시형태에서는, 정공 수송 재료는 방향족 3급 아민 화합물이다. 이하에 정공 수송 재료로서 이용할 수 있는 바람직한 화합물의 구체예를 든다.

[0282] [화학식 25]



[0283]

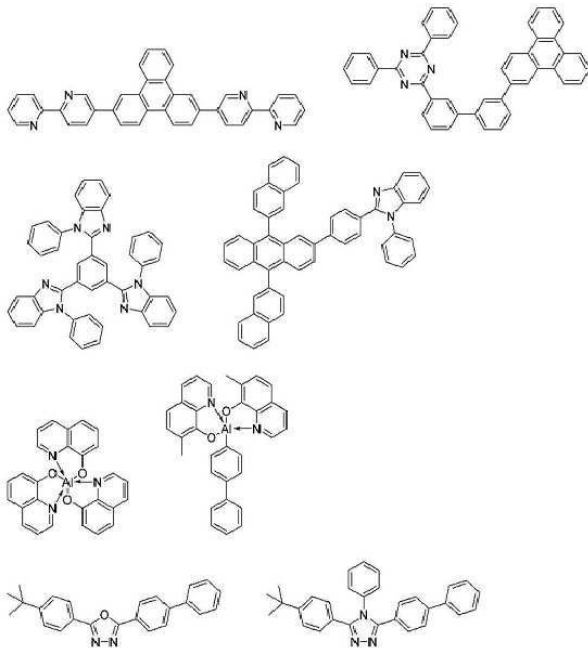
[0284] 전자 수송층:

[0285] 전자 수송층은, 전자 수송 재료를 포함한다. 몇 개의 실시형태에서는, 전자 수송층은 단층이다. 몇 개의 실시형태에서는, 전자 수송층은 복수의 층을 갖는다.

[0286] 몇 개의 실시형태에서는, 전자 수송 재료는, 음극으로부터 주입된 전자를 발광층에 수송하는 기능만 있으면 된다. 몇 개의 실시형태에서는, 전자 수송 재료는 또, 정공 장벽 재료로서도 기능한다. 본 발명에서 사용할 수 있는 전자 수송층의 예로서는, 한정되지 않지만, 나이트로 치환 플루오렌 유도체, 다이페닐퀴논 유도체, 싸이오피란다이옥사이드 유도체, 카보다이이미드, 플루오렌일리덴메테인 유도체, 안트라퀴노다이메테인, 안트론 유도체, 옥사다리아졸 유도체, 아졸 유도체, 아진 유도체 또는 그 조합, 또는 그 폴리머를 들 수 있다. 몇 개의 실시형태에서는, 전자 수송 재료는 싸이아다리아졸 유도체 또는 퀴놀살린 유도체이다. 몇 개의 실시형태에서는, 전자

수송 재료는 폴리머 재료이다. 이하에 전자 수송 재료로서 이용할 수 있는 바람직한 화합물의 구체예를 든다.

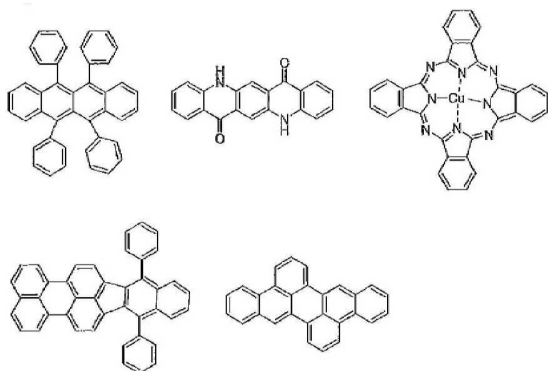
[0287] [화학식 26]



[0288]

[0289] 또한, 각 유기층에 첨가 가능한 재료로서 바람직한 화합물예를 든다. 예를 들면, 안정화 재료로서 첨가하는 것이 생각된다.

[0290] [화학식 27]



[0291]

[0292] 유기 일렉트로 루미네선스 소자에 이용할 수 있는 바람직한 재료를 구체적으로 예시했지만, 본 발명에 있어서 이용할 수 있는 재료는, 이하의 예시 화합물에 의하여 한정적으로 해석되는 경우는 없다. 또, 특정 기능을 갖는 재료로서 예시한 화합물이어도, 그 외의 기능을 갖는 재료로서 전용(轉用)하는 것도 가능하다.

[0293] 디바이스:

[0294] 몇 개의 실시형태에서는, 발광층은 디바이스 중에 포함된다. 예를 들면, 디바이스에는, OLED 밸브, OLED 램프, 텔레비전용 디스플레이, 컴퓨터용 모니터, 휴대 전화 및 태블릿이 포함되지만, 이들에 한정되지 않는다.

[0295] 몇 개의 실시형태에서는, 전자 디바이스는, 양극, 음극, 및 당해 양극과 당해 음극의 사이의 발광층을 포함하는 적어도 하나의 유기층을 갖는 OLED를 포함한다.

[0296] 몇 개의 실시형태에서는, 본원 명세서에 기재된 구성물은, OLED 또는 광전자 디바이스 등의, 다양한 감광성 또는 광활성화 디바이스에 포함될 수 있다. 몇 개의 실시형태에서는, 상기 구성물은 디바이스 내의 전하 이동 또는 에너지 이동의 촉진에, 및/또는 정공 수송 재료로서 유용할 수 있다. 상기 디바이스로서는, 예를 들면 유기 발광 다이오드(OLED), 유기 집적 회선(OIC), 유기 전계 효과 트랜지스터(O-FET), 유기 박막 트랜지스터(O-TFT), 유기 발광 트랜지스터(O-LET), 유기 태양 전지(O-SC), 유기 광학 검출 장치, 유기 광 수용체, 유기 자장 렌칭

(field-quench) 장치(O-FQD), 발광 연료 전지(LEC) 또는 유기 레이저 다이오드(O-레이저)를 들 수 있다.

- [0297] 램프 또는 램프:
- [0298] 몇 개의 실시형태에서는, 전자 디바이스는, 양극, 음극, 당해 양극과 당해 음극의 사이의 발광층을 포함하는 적어도 하나의 유기층을 포함하는 OLED를 포함한다.
- [0299] 몇 개의 실시형태에서는, 디바이스는 색채가 상이한 OLED를 포함한다. 몇 개의 실시형태에서는, 디바이스는 OLED의 조합을 포함하는 어레이를 포함한다. 몇 개의 실시형태에서는, OLED의 상기 조합은, 3색의 조합(예를 들면 RGB)이다. 몇 개의 실시형태에서는, OLED의 상기 조합은, 적색도 녹색도 청색도 아닌 색(예를 들면 오렌지색 및 황녹색)의 조합이다. 몇 개의 실시형태에서는, OLED의 상기 조합은, 2색, 4색 또는 그 이상의 색의 조합이다.
- [0300] 몇 개의 실시형태에서는, 디바이스는,
- [0301] 장착면을 갖는 제1 면과 그와 반대의 제2 면을 갖고, 적어도 하나의 개구부를 획정(劃定)하는 회로 기판과,
- [0302] 상기 장착면 상의 적어도 하나의 OLED이며, 당해 적어도 하나의 OLED가, 양극, 음극, 및 당해 양극과 당해 음극의 사이의 발광층을 포함하는 적어도 하나의 유기층을 포함하는, 발광하는 구성을 갖는 적어도 하나의 OLED와,
- [0303] 회로 기판용의 하우징과,
- [0304] 상기 하우징의 단부(端部)에 배치된 적어도 하나의 커넥터이며, 상기 하우징 및 상기 커넥터가 조명 설비에 대한 장착에 적합한 패키지를 획정하는, 적어도 하나의 커넥터를 구비하는 OLED 라이트이다.
- [0305] 몇 개의 실시형태에서는, 상기 OLED 라이트는, 복수의 방향으로 광이 방사되도록 회로 기판에 장착된 복수의 OLED를 갖는다. 몇 개의 실시형태에서는, 제1 방향으로 발해진 일부의 광은 편광되어 제2 방향으로 방사된다. 몇 개의 실시형태에서는, 반사기를 이용하여 제1 방향으로 발해진 광을 편광한다.
- [0306] 디스플레이 또는 스크린:
- [0307] 몇 개의 실시형태에서는, 본 발명의 발광층은 스크린 또는 디스플레이에 있어서 사용할 수 있다. 몇 개의 실시형태에서는, 본 발명에 관한 화합물은, 한정되지 않지만 진공 증발, 퇴적, 증착 또는 화학 증착(CVD) 등의 공정을 이용하여 기재 상으로 퇴적시킨다. 몇 개의 실시형태에서는, 상기 기재는, 독특한 애스펙트비의 픽셀을 제공하는 2면 에칭에 있어서 유용한 포토 플레이트 구조이다. 상기 스크린(또한 마스크라고도 불린다)은, OLED 디스플레이의 제조 공정에서 이용된다. 대응하는 아트 워크 패턴의 설계에 의하여, 수직 방향에서는 픽셀의 사이의 매우 가파르고 좁은 타이 바의, 및 수평 방향에서는 큰 광범위의 사각(斜角) 개구부의 배치를 가능하게 한다. 이로써, TFT 백 플레인 상으로의 화학 증착을 최적화하면서, 고해상도 디스플레이에 필요로 하는 픽셀의 미세한 패턴 구성이 가능해진다.
- [0308] 픽셀의 내부 패턴닝에 의하여, 수평 및 수직 방향에서의 다양한 애스펙트비의 3차원 픽셀 개구부를 구성하는 것이 가능해진다. 또한, 픽셀 영역 중의 화상화된 "스트라이프" 또는 하프톤 원(圓)의 사용은, 이들 특정 패턴을 언더 컷하여 기재로부터 제거될 때까지, 특정 영역에 있어서의 에칭이 보호된다. 그때, 모든 픽셀 영역은 동일한 에칭 속도로 처리되지만, 그 깊이는 하프톤 패턴에 의하여 변화한다. 하프톤 패턴의 사이즈 및 간격을 변경함으로써, 픽셀 내에서의 보호율이 다양한 상이한 에칭이 가능해지고, 가파른 수직 사각을 형성하는 데 필요한 국재화(局在化)된 깊은 에칭이 가능해진다.
- [0309] 증착 마스크용의 바람직한 재료는 인바(invar)이다. 인바는, 제철소에서 긴 박형 시트상으로 냉연(冷延)된 금속 합금이다. 인바는, 니켈 마스크로서 스핀 맨드릴 상으로 전착할 수 없다. 증착용 마스크 내에 개구 영역을 형성하기 위한 적절하고 또한 저비용의 방법은, 습식 화학 에칭에 의한 방법이다.
- [0310] 몇 개의 실시형태에서는, 스크린 또는 디스플레이 패턴은, 기재 상의 픽셀 매트릭스이다. 몇 개의 실시형태에서는, 스크린 또는 디스플레이 패턴은, 리소그래피(예를 들면 포토리소그래피 및 e빔 리소그래피)를 사용하여 가공된다. 몇 개의 실시형태에서는, 스크린 또는 디스플레이 패턴은, 습식 화학 에칭을 사용하여 가공된다. 가일층의 실시형태에서는, 스크린 또는 디스플레이 패턴은, 플라즈마 에칭을 사용하여 가공된다.
- [0311] 디바이스의 제조 방법:
- [0312] OLED 디스플레이는, 일반적으로는, 대형의 마더 패널을 형성하고, 다음으로 당해 마더 패널을 셀 패널 단위로 절단함으로써 제조된다. 통상은, 마더 패널 상의 각 셀 패널은, 베이스 기재 상에, 활성층과 소스/드레인 전극

을 갖는 박막 트랜지스터(TFT)를 형성하고, 상기 TFT에 평탄화 필름을 도포하여, 픽셀 전극, 발광층, 상대 전극 및 캡슐화층을 순서대로 경시적으로 형성하며, 상기 마더 패널로부터 절단함으로써 형성된다.

- [0313] 본 발명의 다른 양태에서는, 유기 발광 다이오드(OLED) 디스플레이의 제조 방법을 제공하며, 당해 방법은,
- [0314] 마더 패널의 베이스 기재 상에 장벽층을 형성하는 공정과,
- [0315] 상기 장벽층 상에, 셀 패널 단위로 복수의 디스플레이 유닛을 형성하는 공정과,
- [0316] 상기 셀 패널의 디스플레이 유닛의 각각의 위에 캡슐화층을 형성하는 공정과,
- [0317] 상기 셀 패널 간의 인터페이스부에 유기 필름을 도포하는 공정을 포함한다.
- [0318] 몇 개의 실시형태에서는, 장벽층은, 예를 들면 SiNx로 형성된 무기 필름이며, 장벽층의 단부는 폴리이미드 또는 아크릴로 형성된 유기 필름으로 피복된다. 몇 개의 실시형태에서는, 유기 필름은, 마더 패널이 셀 패널 단위로 부드럽게 절단되도록 보조한다.
- [0319] 몇 개의 실시형태에서는, 박막 트랜지스터(TFT)층은, 발광층과, 게이트 전극과, 소스/드레인 전극을 갖는다. 복수의 디스플레이 유닛의 각각은, 박막 트랜지스터(TFT)층과, TFT층 상에 형성된 평탄화 필름과, 평탄화 필름 상에 형성된 발광 유닛을 가져도 되고, 상기 인터페이스부에 도포된 유기 필름은, 상기 평탄화 필름의 재료와 동일한 재료로 형성되어, 상기 평탄화 필름의 형성과 동시에 형성된다. 몇 개의 실시형태에서는, 상기 발광 유닛은, 부동태화층과, 그 사이의 평탄화 필름과, 발광 유닛을 피복하여 보호하는 캡슐화층에 의하여 TFT층과 연결된다. 상기 제조 방법 중 몇 개의 실시형태에서는, 상기 유기 필름은, 디스플레이 유닛에도 캡슐화층에도 연결되지 않는다.
- [0320] 상기 유기 필름과 평탄화 필름의 각각은, 폴리이미드 및 아크릴 중 어느 하나를 포함해도 된다. 몇 개의 실시형태에서는, 상기 장벽층은 무기 필름이어도 된다. 몇 개의 실시형태에서는, 상기 베이스 기재는 폴리이미드로 형성되어도 된다. 상기 방법은 또한, 폴리이미드로 형성된 베이스 기재 중 하나의 표면에 장벽층을 형성하기 전에, 당해 베이스 기재의 또 하나의 표면에 유리 재료로 형성된 캐리어 기재를 장착하는 공정과, 인터페이스부를 따른 절단 전에, 상기 캐리어 기재를 베이스 기재로부터 분리하는 공정을 포함해도 된다. 몇 개의 실시형태에서는, 상기 OLED 디스플레이는 플렉시블한 디스플레이이다.
- [0321] 몇 개의 실시형태에서는, 상기 부동태화층은, TFT층의 피복을 위하여 TFT층 상에 배치된 유기 필름이다. 몇 개의 실시형태에서는, 상기 평탄화 필름은, 부동태화층 상에 형성된 유기 필름이다. 몇 개의 실시형태에서는, 상기 평탄화 필름은, 장벽층의 단부에 형성된 유기 필름과 동일하게, 폴리이미드 또는 아크릴로 형성된다. 몇 개의 실시형태에서는, OLED 디스플레이의 제조 시, 상기 평탄화 필름 및 유기 필름은 동시에 형성된다. 몇 개의 실시형태에서는, 상기 유기 필름은, 장벽층의 단부에 형성되어도 되고, 그로써, 당해 유기 필름의 일부가 직접 베이스 기재와 접촉하며, 당해 유기 필름의 나머지 부분이, 장벽층의 단부를 둘러싸면서, 장벽층과 접촉한다.
- [0322] 몇 개의 실시형태에서는, 상기 발광층은, 픽셀 전극과, 상대 전극과, 당해 픽셀 전극과 당해 상대 전극의 사이에 배치된 유기 발광층을 갖는다. 몇 개의 실시형태에서는, 상기 픽셀 전극은, TFT층의 소스/드레인 전극에 연결되어 있다.
- [0323] 몇 개의 실시형태에서는, TFT층을 통하여 픽셀 전극에 전압이 인가될 때, 픽셀 전극과 상대 전극의 사이에 적절한 전압이 형성되며, 그로써 유기 발광층이 광을 방사하여, 그로써 화상이 형성된다. 이하, TFT층과 발광 유닛을 갖는 화상 형성 유닛을, 디스플레이 유닛이라고 칭한다.
- [0324] 몇 개의 실시형태에서는, 디스플레이 유닛을 피복하고, 외부의 수분의 침투를 방지하는 캡슐화층은, 유기 필름과 무기 필름이 교대로 적층되는 박막상의 캡슐화 구조로 형성되어도 된다. 몇 개의 실시형태에서는, 상기 캡슐화층은, 복수의 박막이 적층된 박막상 캡슐화 구조를 갖는다. 몇 개의 실시형태에서는, 인터페이스부에 도포되는 유기 필름은, 복수의 디스플레이 유닛의 각각과 간격을 두고 배치된다. 몇 개의 실시형태에서는, 상기 유기 필름은, 일부의 유기 필름이 직접 베이스 기재와 접촉하고, 유기 필름의 나머지 부분이 장벽층의 단부를 둘러싸는 한편 장벽층과 접촉하는 양태로 형성된다.
- [0325] 일 실시형태에서는, OLED 디스플레이는 플렉시블이며, 폴리이미드로 형성된 유연한 베이스 기재를 사용한다. 몇 개의 실시형태에서는, 상기 베이스 기재는 유리 재료로 형성된 캐리어 기재 상에 형성되고, 다음으로 당해 캐리어 기제가 분리된다.
- [0326] 몇 개의 실시형태에서는, 장벽층은, 캐리어 기재의 반대 측의 베이스 기재의 표면에 형성된다. 일 실시형태에서

는, 상기 장벽층은, 각 셀 패널의 사이즈에 따라 패턴화된다. 예를 들면, 베이스 기제가 마더 패널의 모든 표면에 형성되는 한편, 장벽층이 각 셀 패널의 사이즈에 따라 형성되고, 그로써, 셀 패널의 장벽층 사이의 인터페이스부에 홈이 형성된다. 각 셀 패널은, 상기 홈을 따라 절단할 수 있다.

[0327] 몇 개의 실시형태에서는, 상기의 제조 방법은, 추가로 인터페이스부를 따라 절단하는 공정을 포함하고, 거기에는 홈이 장벽층에 형성되며, 적어도 일부의 유기 필름이 홈에서 형성되어, 당해 홈이 베이스 기제에 침투하지 않는다. 몇 개의 실시형태에서는, 각 셀 패널의 TFT층이 형성되며, 무기 필름인 부동태화층과 유기 필름인 평탄화 필름이, TFT층 상에 배치되어, TFT층을 피복한다. 예를 들면 폴리이미드 또는 아크릴제의 평탄화 필름이 형성됨과 동시에, 인터페이스부의 홈은, 예를 들면 폴리이미드 또는 아크릴제의 유기 필름으로 피복된다. 이것은, 각 셀 패널이 인터페이스부에서 홈을 따라 절단될 때, 발생한 충격을 유기 필름에 흡수시킴으로써 금이 발생하는 것을 방지한다. 즉, 모든 장벽층이 유기 필름 없이 완전히 노출되어 있는 경우, 각 셀 패널이 인터페이스부에서 홈을 따라 절단될 때, 발생한 충격이 장벽층에 전달되며, 그로써 금이 발생하는 리스크가 증가한다. 그러나, 일 실시형태에서는, 장벽층 간의 인터페이스부의 홈이 유기 필름으로 피복되어, 유기 필름이 없으면 장벽층에 전달될 수 있는 충격을 흡수하기 위하여, 각 셀 패널을 부드럽게 절단하여, 장벽층에서 금이 발생하는 것을 방지해도 된다. 일 실시형태에서는, 인터페이스부의 홈을 피복하는 유기 필름 및 평탄화 필름은, 서로 간격을 두고 배치된다. 예를 들면, 유기 필름 및 평탄화 필름이 하나의 층으로서 서로 접촉되어 있는 경우에는, 평탄화 필름과 유기 필름이 남아 있는 부분을 통하여 디스플레이 유닛에 외부의 수분이 침입할 우려가 있기 때문에, 유기 필름 및 평탄화 필름은, 유기 필름이 디스플레이 유닛으로부터 간격을 두고 배치되도록, 서로 간격을 두고 배치된다.

[0328] 몇 개의 실시형태에서는, 디스플레이 유닛은, 발광 유닛의 형성에 의하여 형성되며, 캡슐화층은, 디스플레이 유닛을 피복하기 위하여 디스플레이 유닛 상에 배치된다. 이로써, 마더 패널이 완전히 제조된 후, 베이스 기제를 담지하는 캐리어 기제가 베이스 기제로부터 분리된다. 몇 개의 실시형태에서는, 레이저 광선이 캐리어 기제로 방사되면, 캐리어 기제는, 캐리어 기제와 베이스 기제의 사이의 열팽창률의 상위(相違)에 의하여, 베이스 기제로부터 분리된다.

[0329] 몇 개의 실시형태에서는, 마더 패널은, 셀 패널 단위로 절단된다. 몇 개의 실시형태에서는, 마더 패널은, 커터를 이용하여 셀 패널 간의 인터페이스부를 따라 절단된다. 몇 개의 실시형태에서는, 마더 패널이 따라 절단되는 인터페이스부의 홈이 유기 필름으로 피복되어 있기 때문에, 절단 동안, 당해 유기 필름이 충격을 흡수한다. 몇 개의 실시형태에서는, 절단 동안, 장벽층에서 금이 발생하는 것을 방지할 수 있다.

[0330] 몇 개의 실시형태에서는, 상기 방법은 제품의 불량률을 감소시켜, 그 품질을 안정시킨다.

[0331] 다른 양태는, 베이스 기제 상에 형성된 장벽층과, 장벽층 상에 형성된 디스플레이 유닛과, 디스플레이 유닛 상에 형성된 캡슐화층과, 장벽층의 단부에 도포된 유기 필름을 갖는 OLED 디스플레이이다.

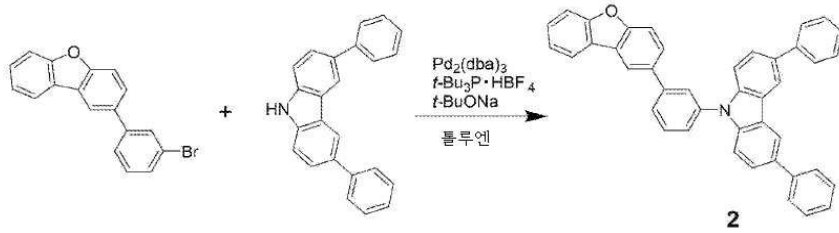
[0332] 실시예

[0333] 이하에 합성예와 실시예를 들어 본 발명의 특징을 더 구체적으로 설명한다. 이하에 나타내는 재료, 처리 내용, 처리 수순 등은, 본 발명의 취지를 벗어나지 않는 한 적절히 변경할 수 있다. 따라서, 본 발명의 범위는 이하에 나타내는 구체예에 의하여 한정적으로 해석되어야 하는 것은 아니다. 또한, 발광 특성의 평가는, 소스 미터(키슬리사제: 2400시리즈), 반도체 파라미터·애널라이저(애질런트·테크놀로지사제: E5273A), 광 파워미터 측정 장치(뉴 포트사제: 1930C), 광학 분광기(오션 옵틱스사제: USB2000), 분광 방사계(툽콘사제: SR-3) 및 스트리크 카메라(하마마쓰 포토닉스(주)제 C4334형)를 이용하여 행했다. 또, HOMO와 LUMO의 에너지의 측정은 대기 중 광전자 분광법(리켄 게이키사제 AC-3 등)에 의하여 행했다.

[0334] 이하의 합성예에 있어서, 일반식 (1)에 포함되는 화합물을 합성했다.

[0335] (합성예 1) 화합물 2의 합성

[0336] [화학식 28]



[0337]

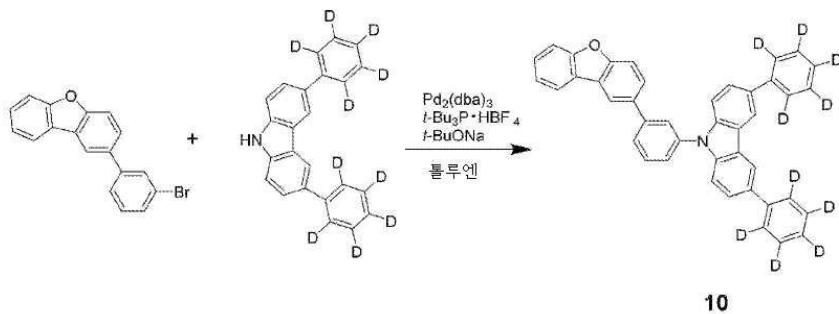
[0338] 질소 분위기하, 2-(3-브로모페닐)다이벤조퓨란(20g, 61.9mmol), 3,6-다이페닐카바졸(19.8g, 61.9mmol), 트리스(다이벤질리덴아세톤)다이팔라듐(0)(5.67g, 6.19mmol), 트라이-tert-부틸포스포늄테트라플루오로보레이트(3.59g, 12.4mmol) 및 나트륨 tert-부톡사이드(11.9g, 123.8mmol)를 400ml의 톨루엔에 더하여, 24시간 환류했다. 반응 용액을 실온까지 냉각하여, 클로로폼을 더했다. 얻어진 유기층을 물로 2회 세정하여, 황산 마그네슘으로 건조, 용매를 제거했다. 얻어진 고체를 실리카겔 칼럼 크로마토그래피(전개 용매: 클로로폼/n-헥세인=3:7)에 의하여 정제했다. 또한 재결정(톨루엔/메탄올)에 의하여 백색 고체를 얻었다(20g, 58%).

[0339] ^1H NMR(400MHz, CDCl_3 , δ): 8.43(s, 2H), 8.22(s, 1H), 7.99(d, J=8Hz, 1H), 7.94(s, 1H), 7.84-7.57(m, 14H), 7.49(m, 5H), 7.37(m, 3H).

[0340] MS(ASAP): 562.32(M+H⁺). Calcd for $\text{C}_{42}\text{H}_{27}\text{NO}$: 561.21.

[0341] (합성예 2) 화합물 10의 합성

[0342] [화학식 29]



[0343]

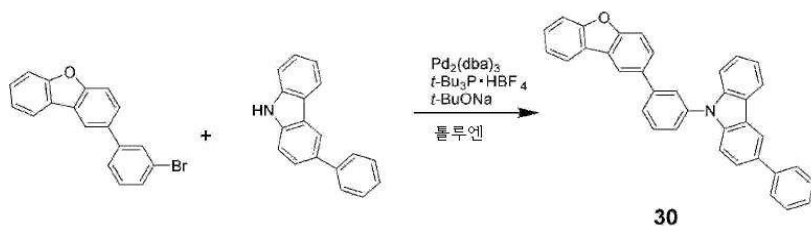
[0344] 질소 분위기하, 2-(3-브로모페닐)다이벤조퓨란(1.96g, 6.07mmol), 3,6-다이(페닐-2,3,4,5,6-d5)-9H-카바졸(2g, 6.07mmol), 트리스(다이벤질리덴아세톤)다이팔라듐(0)(0.56g, 0.61mmol), 트라이-tert-부틸포스포늄테트라플루오로보레이트(0.35g, 1.21mmol) 및 나트륨 tert-부톡사이드(1.17g, 12.1mmol)를 40ml의 톨루엔에 더하여, 24시간 환류했다. 반응 용액을 실온까지 냉각하여, 클로로폼을 더했다. 얻어진 유기층을 물로 2회 세정하여, 황산 마그네슘으로 건조, 용매를 제거했다. 얻어진 고체를 실리카겔 칼럼 크로마토그래피(전개 용매: 클로로폼/n-헥세인=3:7)에 의하여 정제했다. 또한 재결정(톨루엔/메탄올)에 의하여 백색 고체를 얻었다(2.55g, 73%).

[0345] ^1H NMR(400MHz, CDCl_3 , δ): 8.43(s, 2H), 8.22(s, 1H), 7.99(d, J=8Hz, 1H), 7.94(s, 1H), 7.84-7.56(m, 10H), 7.49(t, J=8Hz, 1H), 7.37(t, J=8Hz, 1H).

[0346] MS(ASAP): 572.40(M+H⁺). Calcd for $\text{C}_{42}\text{H}_{17}\text{D}_{10}\text{NO}$: 571.27.

[0347] (합성예 3) 화합물 30의 합성

[0348] [화학식 30]



[0349]

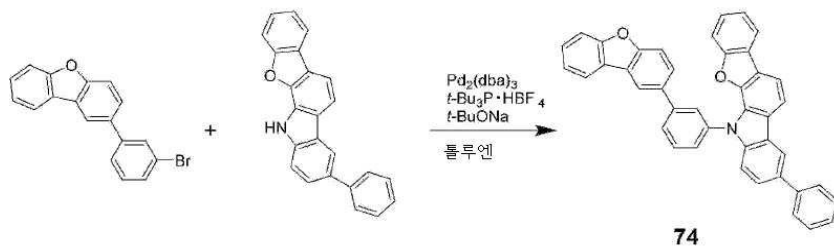
[0350] 질소 분위기하, 2-(3-브로모페닐)다이벤조퓨란(2g, 6.19mmol), 3-페닐카바졸(1.51g, 6.19mmol), 트리스(다이벤질리텐아세톤)다이팔라듐(0)(0.57g, 0.62mmol), 트라이-tert-부틸포스포늄테트라플루오로보레이트(0.36g, 1.24mmol) 및 나트륨 tert-부톡사이드(1.19g, 12.4mmol)를 50ml의 톨루엔에 더하여, 24시간 환류했다. 반응 용액을 실온까지 냉각하여, 클로로폼을 더했다. 얻어진 유기층을 물로 2회 세정하여, 황산 마그네슘으로 건조, 용매를 제거했다. 얻어진 고체를 실리카겔 칼럼 크로마토그래피(전개 용매: 클로로폼/n-헥세인=1:1)에 의하여 정제했다. 또한 재결정(톨루엔/메탄올)에 의하여 백색 고체를 얻었다(2.39g, 80%).

[0351] $^1\text{H NMR}$ (400MHz, CDCl_3 , δ): 8.38(s, 1H), 8.23-8.21(m, 2H), 7.99(d, J=8Hz, 1H), 7.92(s, 1H), 7.84-7.44(m, 15H), 7.39-7.32(m, 3H).

[0352] MS(ASAP): 486.29(M+H⁺). Calcd for $\text{C}_{36}\text{H}_{23}\text{NO}$: 485.18.

[0353] (합성예 4) 화합물 74의 합성

[0354] [화학식 31]



[0355]

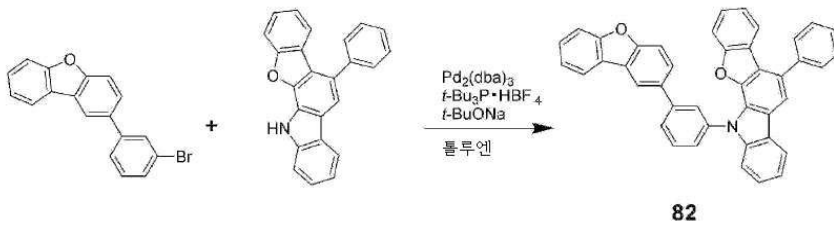
[0356] 질소 분위기하, 2-(3-브로모페닐)다이벤조퓨란(2g, 6.19mmol), 3-페닐-12H-벤조퓨로[2,3-a]카바졸(2.06g, 6.19mmol), 트리스(다이벤질리텐아세톤)다이팔라듐(0)(0.57g, 0.62mmol), 트라이-tert-부틸포스포늄테트라플루오로보레이트(0.36g, 1.24mmol) 및 나트륨 tert-부톡사이드(1.19g, 12.4mmol)의 톨루엔 용액(45mL)을 130℃에서 24시간 교반했다. 반응 용액을 실온까지 냉각하여, 클로로폼(300mL)을 더했다. 얻어진 유기층을 물(300mL)로 2회 세정하여, 황산 마그네슘으로 건조, 용매를 제거했다. 얻어진 고체를 실리카겔 칼럼 크로마토그래피(클로로폼:헥세인=1:1)에 의하여 정제했다. 또한 재결정(톨루엔/메탄올)함으로써 화합물 74를 얻었다(1.74g, 49%).

[0357] $^1\text{H NMR}$ (400MHz, CDCl_3 , δ): 8.43(s, 1H), 8.32(s, 1H), 8.11(d, J=8.0Hz, 1H), 8.07(m, 2H), 7.94-7.82(m, 4H), 7.77-7.68(m, 6H), 7.65(d, J=8.0Hz, 1H), 7.58(d, J=8.0Hz, 1H), 7.55-7.31(m, 8H).

[0358] MS(ASAP): 576.12(M+H⁺). Calcd for $\text{C}_{42}\text{H}_{25}\text{NO}_2$: 575.91.

[0359] (합성예 5) 화합물 82의 합성

[0360] [화학식 32]



[0361]

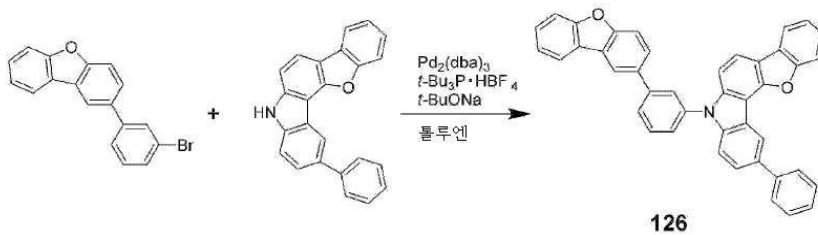
[0362] 질소 분위기하, 2-(3-브로모페닐)다이벤조퓨란(10.6g, 32.7mmol), 6-페닐-12H-벤조퓨로[2,3-a]카바졸(10.9g, 32.7mmol), 트리스(다이벤질리텐아세톤)다이팔라듐(0)(3.0g, 3.2mmol), 트라이-tert-부틸포스포늄테트라플루오로보레이트(1.9g, 6.5mmol), 나트륨 tert-부톡사이드(6.3g, 65.6mmol)의 톨루엔 용액(240mL)을 130℃에서 14시간 교반했다. 반응 용액에 톨루엔을 더하여, 세라이트/실리카겔/세라이트가 깔린 부호너 깔때기로 여과했다. 용매를 제거 후, 아세트산 에틸로 세정, 여과하여 갈색의 고체를 얻었다. 얻어진 고체를 클로로벤젠, 톨루엔으로 각각 재결정함으로써 화합물 82를 얻었다(12.4g, 65%).

[0363] $^1\text{H NMR}(400\text{MHz}, \text{CDCl}_3, \delta)$: 8.32(d, $J=2.0\text{Hz}$, 1H), 8.22(d, $J=8.0\text{Hz}$, 1H), 8.07(d, $J=1.7\text{Hz}$, 1H), 8.04(s, 1H), 7.89-7.83(m, 3H), 7.78-7.73(m, 4H), 7.66(d, $J=8.4\text{Hz}$, 2H), 7.61-7.57(m, 3H), 7.54-7.44(m, 5H), 7.38-7.30(m, 3H), 7.17-7.13(td, $J=7.4\text{Hz}$, 1.2Hz, 1H)

[0364] MS(ASAP): 576.37(M+H⁺). Calcd for C₄₂H₂₅NO₂: 575.19.

[0365] (합성예 6) 화합물 126의 합성

[0366] [화학식 33]



[0367]

[0368] 질소 분위기하, 2-(3-브로모페닐)다이벤조퓨란(0.97g, 3.00mmol), 2-페닐-5H-벤조퓨로[3,2-c]카바졸(1.0g, 3.00mmol), 트리스(다이벤질리텐아세톤)다이팔라듐(0)(0.27g, 0.30mmol), 트라이-tert-부틸포스포늄테트라플루오로보레이트(0.17g, 0.60mmol), 나트륨 tert-부톡사이드(0.58g, 6.00mmol)의 톨루엔 용액(15mL)을 130℃에서 17시간 교반했다. 반응 용액에 클로로폼을 더하여, 세라이트가 깔린 부호너 깔때기로 여과했다. 용매를 제거 후, 클로로폼으로 세정, 여과하여 갈색의 고체를 얻었다. 얻어진 고체를 실리카겔 칼럼 크로마토그래피(클로로폼:헥세인=2:8)로 정제하고, 추가로 재결정(톨루엔/메탄올)함으로써 화합물 126을 얻었다(1.09g, 63%).

[0369] $^1\text{H NMR}(400\text{MHz}, \text{CDCl}_3, \delta)$: 8.81(s, 1H), 8.24(s, 1H), 8.02-7.97(m, 4H), 7.89-7.82(m, 3H), 7.80-7.74(m, 4H), 7.69-7.61(m, 4H), 7.66-7.44(m, 5H), 7.42-7.35(m, 3H).

[0370] MS(ASAP): 575.21(M⁺). Calcd for C₄₂H₂₅NO₂: 575.19.

[0371] (실시예 1)

[0372] 막두께 50nm의 인듐·주석 산화물(ITO)로 이루어지는 양극이 형성된 유리 기판 상에, 이하의 각 박막을 진공 증착법으로, 진공도 5.0×10^{-5} Pa로 적층함으로써 유기 일렉트로 루미네선스 소자를 제작했다.

[0373] 먼저, ITO 상에 HAT-CN을 10nm의 두께로 형성하고, 그 위에, NPD를 30nm의 두께로 형성하며, 또한 그 위에 EBL1을 10nm의 두께로 형성했다. 다음으로, 지연 형광 재료(TADF21)와 화합물 2를 상이한 증착원으로부터 공증착하고, 40nm의 두께의 층을 형성하여 발광층으로 했다. 이때 지연 형광 재료의 함유량은 35질량%, 화합물 2의 함유

량은 65질량%로 했다. 다음으로, SF3-TRZ를 10nm의 두께로 형성한 후, Liq와 SF3-TRZ를 상이한 증착원으로부터 공증착하여, 30nm의 두께의 층을 형성했다. 이 층에 있어서의 Liq와 SF3-TRZ의 함유량은 각각 30질량%와 70질량%로 했다. 또한 Liq를 2nm의 두께로 형성하고, 이어서 알루미늄(Al)을 100nm의 두께로 증착함으로써 음극을 형성하여, 유기 일렉트로 루미네선스 소자를 제작했다. 이 소자를 EL 소자 1로 했다.

[0374] 또, 화합물 2 대신에 비교 화합물 A를 이용하여, 비교 EL 소자 1을 제작했다.

[0375] 제작한 각 유기 일렉트로 루미네선스 소자의 전류 밀도 $6.3\text{mA}/\text{cm}^2$ 에 있어서의 구동 전압을 측정된 결과, EL 소자 1(본 발명)은 비교 EL 소자 1(비교예)보다 0.3V 낮았다. 이 점에서 일반식 (1)로 나타나는 화합물을 지연 형광 재료의 호스트 재료로서 이용한 유기 일렉트로 루미네선스 소자는, 양호한 전기 전도성을 갖는 것이 확인되었다.

[0376] (실시예 2)

[0377] 실시예 1에 있어서의 EL 소자 1에서 이용한 TADF21 대신에 TADF18을 이용한 점만을 변경하여, 실시예 1과 동일한 수순에 의하여 유기 일렉트로 루미네선스 소자를 제작했다. 이 소자를 EL 소자 2로 했다.

[0378] EL 소자 2에서 이용한 화합물 2 대신에 비교 화합물 B를 이용하여, 동일하게 하여 유기 일렉트로 루미네선스 소자를 제작했다. 이 소자를 비교 EL 소자 2로 했다.

[0379] 제작한 각 유기 일렉트로 루미네선스 소자를 전류 밀도 $12.6\text{mA}/\text{cm}^2$ 로 구동시켜, 발광 강도가 구동 개시 시의 95%가 될 때까지의 시간(LT95)을 측정했다. 그 결과, EL 소자 2의 LT95를 1로 했을 때, 비교 EL 소자 2의 LT95는 0.6이었다. 이 점에서 일반식 (1)로 나타나는 화합물을 이용한 경우는 소자 수명이 길어지는 것이 확인되었다.

[0380] (실시예 3)

[0381] 실시예 1에 있어서의 EL 소자 1에서 이용한 TADF21 대신에 TADF2를 이용한 점만을 변경하여, 실시예 1과 동일한 수순에 의하여 유기 일렉트로 루미네선스 소자를 제작했다. 이 소자를 EL 소자 3으로 했다.

[0382] EL 소자 3에서 이용한 화합물 2 대신에 비교 화합물 B를 이용하여, 동일하게 하여 유기 일렉트로 루미네선스 소자를 제작했다. 이 소자를 비교 EL 소자 3으로 했다.

[0383] 제작한 각 유기 일렉트로 루미네선스 소자를 전류 밀도 $5.5\text{mA}/\text{cm}^2$ 로 구동시켜, 발광 강도가 구동 개시 시의 95%가 될 때까지의 시간(LT95)을 측정했다. 그 결과, EL 소자 3의 LT95를 1로 했을 때, 비교 EL 소자 3의 LT95는 0.8이었다. 이 점에서 일반식 (1)로 나타나는 화합물을 이용한 경우는 소자 수명이 길어지는 것이 확인되었다.

[0384] (실시예 4)

[0385] 실시예 1에 있어서의 비교 EL 소자 1(비교예)에서 이용한 EBL1 대신에 화합물 2를 이용한 점만을 변경하여, 실시예 1과 동일한 수순에 의하여 유기 일렉트로 루미네선스 소자를 제작했다. 이 소자를 EL 소자 4로 하여, 실시예 1과 동일하게 전류 밀도 $6.3\text{mA}/\text{cm}^2$ 에 있어서의 구동 전압을 측정했다. EL 소자 4(본 발명)의 구동 전압은 비교 EL 소자 1(비교예)의 구동 전압보다 0.23V 낮았다. 이 점에서 일반식 (1)로 나타나는 화합물은 전자 장벽 재료로서도 유용한 것이 확인되었다.

[0386] 또한, 실시예 1에 있어서의 비교 EL 소자 1(비교예)에서 이용한 EBL1 대신에 참고 화합물 a를 이용한 점만을 변경하여, 실시예 1과 동일한 수순에 의하여 제작한 유기 일렉트로 루미네선스 소자도 비교 EL 소자 1보다 구동 전압은 낮았지만, EL 소자 4에는 미치지 않고, 명확한 차가 있었다.

[0387] (실시예 5)

[0388] 막두께 50nm의 인듐·주석 산화물(ITO)로 이루어지는 양극이 형성된 유리 기판 상에, 이하의 각 박막을 진공 증착법으로, 진공도 $5.0 \times 10^{-5}\text{Pa}$ 로 적층함으로써 유기 일렉트로 루미네선스 소자를 제작했다.

[0389] 먼저, ITO 상에 HAT-CN을 10nm의 두께로 형성하고, 그 위에, NPD를 30nm의 두께로 형성하며, 또한 그 위에 Tris-PCz를 10nm의 두께로 형성했다. 다음으로, 지연 형광 재료(TADF72)와 화합물 74를 상이한 증착원으로부터 공증착하고, 40nm의 두께의 층을 형성하여 발광층으로 했다. 이때 지연 형광 재료의 함유량은 35질량%, 화합물 74의 함유량은 65질량%로 했다. 다음으로, SF3-TRZ를 10nm의 두께로 형성한 후, Liq와 SF3-TRZ를 상이한 증착원

으로부터 공증착하여, 30nm의 두께의 층을 형성했다. 이 층에 있어서의 Liq와 SF3-TRZ의 함유량은 각각 30질량%와 70질량%로 했다. 또한 Liq를 2nm의 두께로 형성하고, 이어서 알루미늄(Al)을 100nm의 두께로 증착함으로써 음극을 형성하여, 유기 일렉트로 루미네선스 소자를 제작했다. 이 소자를 EL 소자 5로 했다.

[0390] 화합물 74 대신에 화합물 82를 이용하여 EL 소자 6을 제작하고, 화합물 74 대신에 화합물 126을 이용하여, EL 소자 7을 제작했다.

[0391] 제작한 각 유기 일렉트로 루미네선스 소자의 전류 밀도 6.3mA/cm²에 있어서의 구동 전압과 외부 양자 효율(EQE), 전류 밀도 12.6mA/cm²에 있어서의 소자 수명(LT95)을 측정된 결과를, 이하의 표에 EL 소자 6을 기준으로 한 상대값으로 나타낸다. 표의 결과는, 일반식 (1)로 나타나는 화합물을 호스트 재료로서 이용한 유기 일렉트로 루미네선스 소자는, 모두 양호한 전기 전도성을 갖고, 높은 발광 효율과, 긴 수명을 실현하는 것이 확인되었다.

[0392] [표 1]

| | 호스트 재료 | 구동 전압 (상대값) | EQE (상대 비율) | LT95 (상대 비율) |
|---------|---------|----------------|----------------|-----------------|
| EL 소자 5 | 화합물 74 | -0.09V | 0.94 배 | 1.47 배 |
| EL 소자 6 | 화합물 82 | 0 | 1 | 1 |
| EL 소자 7 | 화합물 126 | -0.09V | 1.07 배 | 1.03 배 |

[0393]

[0394] (실시예 6)

[0395] 막두께 50nm의 인듐·주석 산화물(ITO)로 이루어지는 양극이 형성된 유리 기판 상에, 이하의 각 박막을 진공 증착법으로, 진공도 5.0×10⁻⁵Pa로 적층함으로써 유기 일렉트로 루미네선스 소자를 제작했다.

[0396] 먼저, ITO 상에 HAT-CN을 10nm의 두께로 형성하고, 그 위에, NPD를 30nm의 두께로 형성하며, 또한 그 위에 화합물 2를 10nm의 두께로 형성했다. 다음으로, 지연 형광 재료(TADF21)와 비교 화합물 A를 상이한 증착원으로부터 공증착하고, 40nm의 두께의 층을 형성하여 발광층으로 했다. 이때 지연 형광 재료의 함유량은 35질량%, 비교 화합물 A의 함유량은 65질량%로 했다. 다음으로, SF3-TRZ를 10nm의 두께로 형성한 후, Liq와 SF3-TRZ를 상이한 증착원으로부터 공증착하여, 30nm의 두께의 층을 형성했다. 이 층에 있어서의 Liq와 SF3-TRZ의 함유량은 각각 30질량%와 70질량%로 했다. 또한 Liq를 2nm의 두께로 형성하고, 이어서 알루미늄(Al)을 100nm의 두께로 증착함으로써 음극을 형성하여, 유기 일렉트로 루미네선스 소자를 제작했다. 이 소자를 EL 소자 8로 했다.

[0397] 또, 화합물 2 대신에 화합물 30을 이용하여, EL 소자 9를 제작했다.

[0398] 또, 화합물 2 대신에 비교 화합물 A를 이용하여, 비교 EL 소자 5를 제작했다.

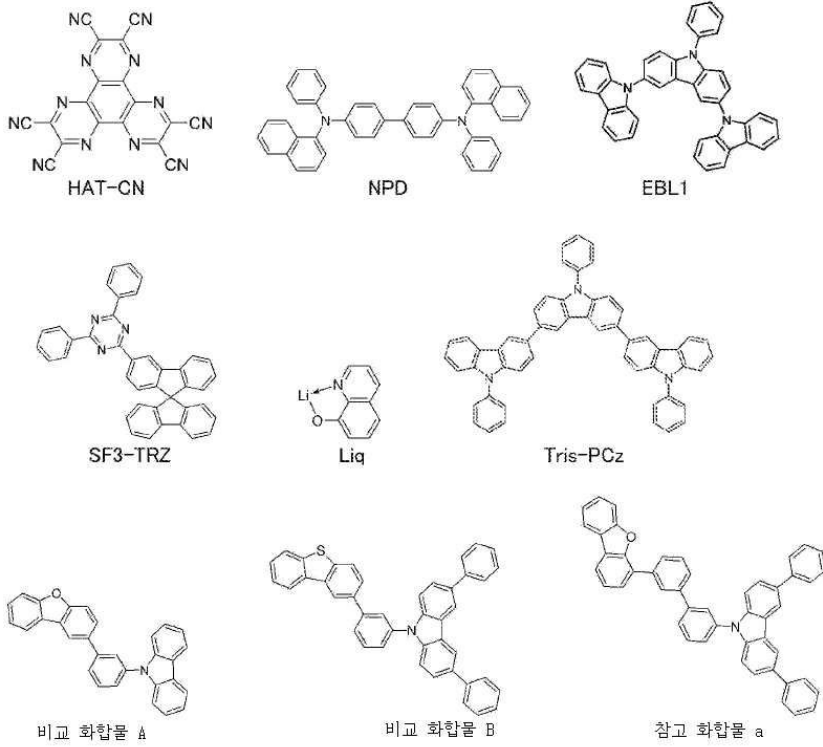
[0399] 제작한 각 유기 일렉트로 루미네선스 소자의 전류 밀도 6.3mA/cm²에 있어서의 구동 전압과 외부 양자 효율(EQE)을 측정된 결과를, 이하의 표에 비교 EL 소자 5를 기준으로 한 상대값으로 나타낸다. 표의 결과는, 일반식 (1)로 나타나는 화합물을 전자 장벽 재료로서 이용한 유기 일렉트로 루미네선스 소자는, 양호한 전기 전도성을 갖고, 높은 발광 효율을 실현하는 것이 확인되었다.

[0400] [표 2]

| | 전자 장벽 재료 | 구동 전압 (상대값) | EQE (상대 비율) |
|------------|----------|----------------|----------------|
| EL 소자 8 | 화합물 2 | -0.81V | 1.11 배 |
| EL 소자 9 | 화합물 30 | -0.81V | 1.07 배 |
| 비교 EL 소자 5 | 비교 화합물 A | 0 | 1 |

[0401]

[0402] [화학식 34]



[0403]

부호의 설명

[0404]

- 1 기체
- 2 양극
- 3 정공 주입층
- 4 정공 수송층
- 5 발광층
- 6 전자 수송층
- 7 음극

도면

도면1

