



(19) 대한민국특허청(KR)
(12) 공개특허공보(A)

(11) 공개번호 10-2022-0142937
(43) 공개일자 2022년10월24일

(51) 국제특허분류(Int. Cl.)
C07F 5/02 (2006.01) H01L 51/00 (2006.01)
H01L 51/50 (2006.01)
(52) CPC특허분류
C07F 5/02 (2013.01)
H01L 51/008 (2013.01)
(21) 출원번호 10-2022-0044612
(22) 출원일자 2022년04월11일
심사청구일자 없음
(30) 우선권주장
JP-P-2021-068839 2021년04월15일 일본(JP)

(71) 출원인
가꼬우 호징 관세이 가쿠잉
일본국 효고켄 니시노미야시 우에가하라이치반초
1-155
에스케이머티리얼즈제이엔씨 주식회사
경기도 화성시 동탄기흥로 560, 11층 (영천동, 동
익미라벨타워)
(72) 발명자
하타케야마 타쿠지
일본국 효고켄 산다시 가쿠잉 2-1 관세이 가쿠잉
다이가쿠 리가쿠부 내
마에다 타케토
일본국 치바현 이치하라시 고이카이간 5-1 에스케
이 제이엔씨 재팬 가부시기가이샤 내
(뒷면에 계속)
(74) 대리인
이광직, 박진석, 윤승환

전체 청구항 수 : 총 12 항

(54) 발명의 명칭 **다환방향족 화합물**

(57) 요약

유기 EL 소자 등의 유기 디바이스 재료로서 유용한 신규화합물을 제공한다.

식(1)으로 표현되는 구조단위 1개 또는 2개 이상으로 이루어지는 구조를 가지는 다환방향족 화합물이다.

Z는 N 또는 C-R11(R11은 수소 또는 치환기)이며, C환은 식(C)으로 표현되는 환이며, Y1은 B이며, X1 및 X2 중 적어도 1개는 >N-G이며, 기타는 >N-R(R은 아릴 등)이며, G는 식(G)으로 표현되는 기이며, Z^C는 N 또는 C-R^C(R^C는 수소 또는 치환기)이고, X^C는 >S 등이며, Zg의 적어도 1개는 C-Arg(Arg는 아릴 또는 헤테로아릴)이고, 기타는 C-Rg(Rg는 수소 또는 알킬 등)이며, A는 >O 등이며, 상기 구조에 있어서의 아릴환 또는 헤테로아릴환은 시클로알칸으로 축합되어 있어도 되고, 상기 구조에 있어서의 수소는 시아노, 할로겐 또는 중수소로 치환되어도 된다.

(52) CPC특허분류

H01L 51/5024 (2013.01)

(72) 발명자

코바야시 타카히로

일본국 치바현 이치하라시 고이카이간 5-1 에스케이
이 제이엔씨 재팬 가부시기가이샤 내

미나미 료

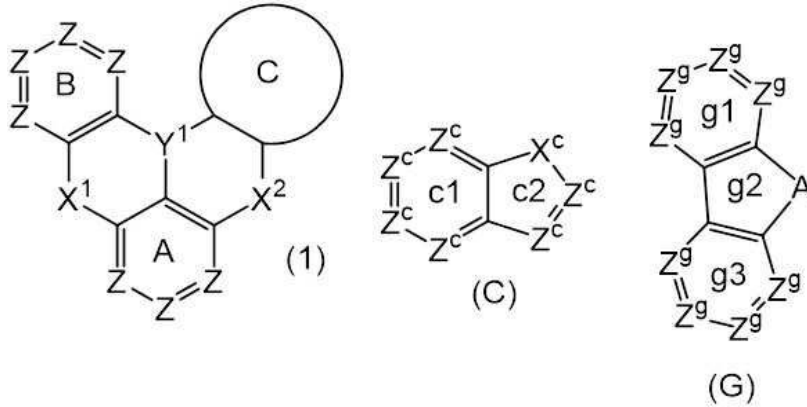
일본국 치바현 이치하라시 고이카이간 5-1 에스케이
이 제이엔씨 재팬 가부시기가이샤 내

명세서

청구범위

청구항 1

하기 식(1)으로 표현되는 구조단위 1개 또는 2개 이상으로 이루어지는 구조를 가지는 다환방향족 화합물;



식(1) 중,

Z는 각각 독립적으로, N 또는 C-R11이며, 단, Z=Z는 >O, >N-R, >C(-R)₂, >Si(-R)₂, >S, 또는 >Se이어도 되고, 상기 >N-R, 상기 >C(-R)₂ 및 상기 >Si(-R)₂의 R은 각각 독립적으로 수소, 치환 혹은 무치환의 아릴, 치환 혹은 무치환의 헤테로아릴, 치환 혹은 무치환의 알킬, 또는 치환 혹은 무치환의 시클로알킬이며, 상기 >C(-R)₂ 및 상기 >Si(-R)₂의 2개의 R은 서로 결합해서 환을 형성하고 있거나, 또는 형성하고 있지 않고,

R11은 각각 독립적으로, 수소, 치환 혹은 무치환의 아릴, 치환 혹은 무치환의 헤테로아릴, 치환 혹은 무치환의 디아릴아미노, 치환 혹은 무치환의 디헤테로아릴아미노, 치환 혹은 무치환의 아릴헤테로아릴아미노, 치환 혹은 무치환의 디아릴보릴, 치환 혹은 무치환의 알킬, 치환 혹은 무치환의 시클로알킬, 치환 혹은 무치환의 알케닐, 치환 혹은 무치환의 알콕시, 치환 혹은 무치환의 아릴옥시, 치환 혹은 무치환의 아릴티오, 또는 치환 실릴이며,

상기 디아릴아미노의 2개의 아릴은 서로 결합하지 않거나, 연결기를 통해서 결합하고 있고, 상기 디헤테로아릴아미노의 2개의 헤테로아릴은 서로 결합하지 않거나, 연결기를 통해서 결합하고 있고, 상기 아릴헤테로아릴아미노의 아릴과 헤테로아릴은 서로 결합하지 않거나, 연결기를 통해서 결합하고 있고, 상기 디아릴보릴의 2개의 아릴은 서로 결합하지 않거나, 또는, 단결합 혹은 연결기를 통해서 결합하고 있고,

인접하는 2개의 R11은 서로 결합하여 아릴환 또는 헤테로아릴환을 형성하고 있거나, 또는 형성하고 있지 않고, 상기 형성된 아릴환 및 헤테로아릴환의 적어도 하나의 수소는, 각각 독립적으로, R11로 치환되어 있거나, 또는 치환되어 있지 않고,

C환은 식(C)으로 표현되는 환이며, 식(C) 중, X^C는 >O, >N-R, >C(-R)₂, >Si(-R)₂, >S, 또는 >Se이며, 상기 >N-R, 상기 >C(-R)₂ 및 상기 >Si(-R)₂의 R은 각각 독립적으로 수소, 치환 혹은 무치환의 아릴, 치환 혹은 무치환의 헤테로아릴, 치환 혹은 무치환의 알킬, 또는 치환 혹은 무치환의 시클로알킬이며, 상기 >C(-R)₂ 및 상기 >Si(-R)₂의 2개의 R은 서로 결합해서 환을 형성하고 있거나, 또는 형성하고 있지 않고,

Z^C는 각각 독립적으로, N 또는 C-R^C이며, R^C는 각각 독립적으로, 수소, 치환 혹은 무치환의 아릴, 치환 혹은 무치환의 헤테로아릴, 치환 혹은 무치환의 디아릴아미노, 치환 혹은 무치환의 디헤테로아릴아미노, 치환 혹은 무치환의 아릴헤테로아릴아미노, 치환 혹은 무치환의 디아릴보릴, 치환 혹은 무치환의 알킬, 치환 혹은 무치환의 시클로알킬, 치환 혹은 무치환의 알케닐, 치환 혹은 무치환의 알콕시, 치환 혹은 무치환의 아릴옥시, 치환 혹은 무치환의 아릴티오, 또는 치환 실릴이며, 상기 디아릴아미노의 2개의 아릴은 서로 결합하지 않거나, 연결기를 통해서 결합하고 있고, 상기 디헤테로아릴아미노의 2개의 헤테로아릴은 서로 결합하지 않거나, 연결기를 통해서 결합하고 있고, 상기 아릴헤테로아릴아미노의 아릴과 헤테로아릴은 서로 결합하지 않거나, 연결기를 통해서 결

합하고 있고, 상기 디아릴보릴의 2개의 아릴은 서로 결합하지 않거나, 단결합 또는 연결기를 통해서 결합하고 있고,

인접하는 2개의 R^c는 서로 결합하여, 아릴환 또는 헤테로아릴환을 형성해도 되고, 상기 형성된 아릴환 및 헤테로아릴환의 적어도 하나의 수소는, 각각 독립적으로, R^c로 치환되어 있거나, 또는 치환되어 있지 않고,

단, 어느 연속하는 2개의 Z^c는 일방이 Y1과 결합하는 탄소, 타방이 X2과 결합하는 탄소이며;

Y1은, B, P, P=O, P=S, Al, Ga, As, Si-R, 또는 Ge-R이며, 상기 Si-R 및 상기 Ge-R의 R은 치환 혹은 무치환의 아릴, 치환 혹은 무치환의 헤테로아릴, 치환 혹은 무치환의 알킬, 또는 치환 혹은 무치환의 시클로알킬이며;

X1 및 X2은, >N-G, >O, >N-R(R이 G인 것을 제외한다), >C(-R)₂, >Si(-R)₂, >S, 또는 >Se이며, 상기 >N-G의 G는, 식(G)으로 표현되는 기이며, 상기 >N-R의 R은 수소, 치환 혹은 무치환의 아릴, 치환 혹은 무치환의 헤테로아릴, 치환 혹은 무치환의 알킬, 또는 치환 혹은 무치환의 시클로알킬이며, 상기 >C(-R)₂ 및 >Si(-R)₂의 R은 각각 독립적으로 수소, 치환 혹은 무치환의 아릴, 치환 혹은 무치환의 헤테로아릴, 치환 혹은 무치환의 알킬, 또는 치환 혹은 무치환의 시클로알킬이며, 상기 >C(-R)₂ 및 >Si(-R)₂의 2개의 R은 서로 결합해서 환을 형성해도 되고, 상기 >N-R의 R, 상기 >C(-R)₂ 및 >Si(-R)₂의 적어도 하나의 R은, 상기 A환 및 상기 B환의 적어도 1개, 또는 상기 A환 및 상기 C환의 적어도 1개와, 단결합 또는 연결기를 통해서 결합하고 있어도 되고,

단, X1 및 X2의 적어도 1개는, >N-G이며;

식(G)중,

Z^e는 각각 독립적으로, N, C-R^e 또는 C-Ar^e이며, R^e는 각각 독립적으로, 수소, 치환 혹은 무치환의 디아릴아미노, 치환 혹은 무치환의 디헤테로아릴아미노, 치환 혹은 무치환의 아릴헤테로아릴아미노, 치환 혹은 무치환의 디아릴보릴, 치환 혹은 무치환의 알킬, 치환 혹은 무치환의 시클로알킬, 치환 혹은 무치환의 알케닐, 치환 혹은 무치환의 알콕시, 치환 혹은 무치환의 아릴옥시, 치환 혹은 무치환의 아릴티오, 또는 치환 실릴이며, 상기 디아릴아미노의 2개의 아릴은 서로 결합하지 않거나, 연결기를 통해서 결합하고 있고, 상기 디헤테로아릴아미노의 2개의 헤테로아릴은 서로 결합하지 않거나, 연결기를 통해서 결합하고 있고, 상기 아릴헤테로아릴아미노의 아릴과 헤테로아릴은 서로 결합하지 않거나, 연결기를 통해서 결합하고 있고, 상기 디아릴보릴의 2개의 아릴은 서로 결합하지 않거나, 단결합 또는 연결기를 통해서 결합하고 있고, Ar^e는 각각 독립적으로, 치환 혹은 무치환의 아릴, 또는 치환 혹은 무치환의 헤테로아릴이며,

인접하는 2개의 R^e는 서로 결합하여, 아릴환 또는 헤테로아릴환을 형성해도 되고, 상기 형성된 아릴환 및 헤테로아릴환의 적어도 하나의 수소는, 각각 독립적으로, R^e로 치환되어 있거나, 또는 치환되어 있지 않고,

단, 적어도 하나의 Z^e는 C-Ar^e이며, 또한, 임의의 1개의 Z^e는 X1 또는 X2인 N과 결합하고 있는 탄소이며;

A는, >O, >N-R, >Si(-R)₂, >S, 또는 >Se이며, 상기 >N-R, 및 상기 >Si(-R)₂의 R은 각각 독립적으로 수소, 치환 혹은 무치환의 아릴, 치환 혹은 무치환의 헤테로아릴, 치환 혹은 무치환의 알킬, 또는 치환 혹은 무치환의 시클로알킬이며, 상기 >Si(-R)₂의 2개의 R은 서로 결합해서 환을 형성하고 있거나, 또는 형성하고 있지 않고;

상기 구조에 있어서의, 아릴환 또는 헤테로아릴환의 적어도 1개는, 적어도 하나의 시클로알칸으로 축합되어 있거나, 또는 축합되어 있지 않고, 해당 시클로알칸에 있어서의 적어도 하나의 수소는 치환되어 있어도 되고, 해당 시클로알칸에 있어서의 적어도 하나의 -CH₂-는 -O-로 치환되어 있거나, 또는 치환되어 있지 않고, 그리고;

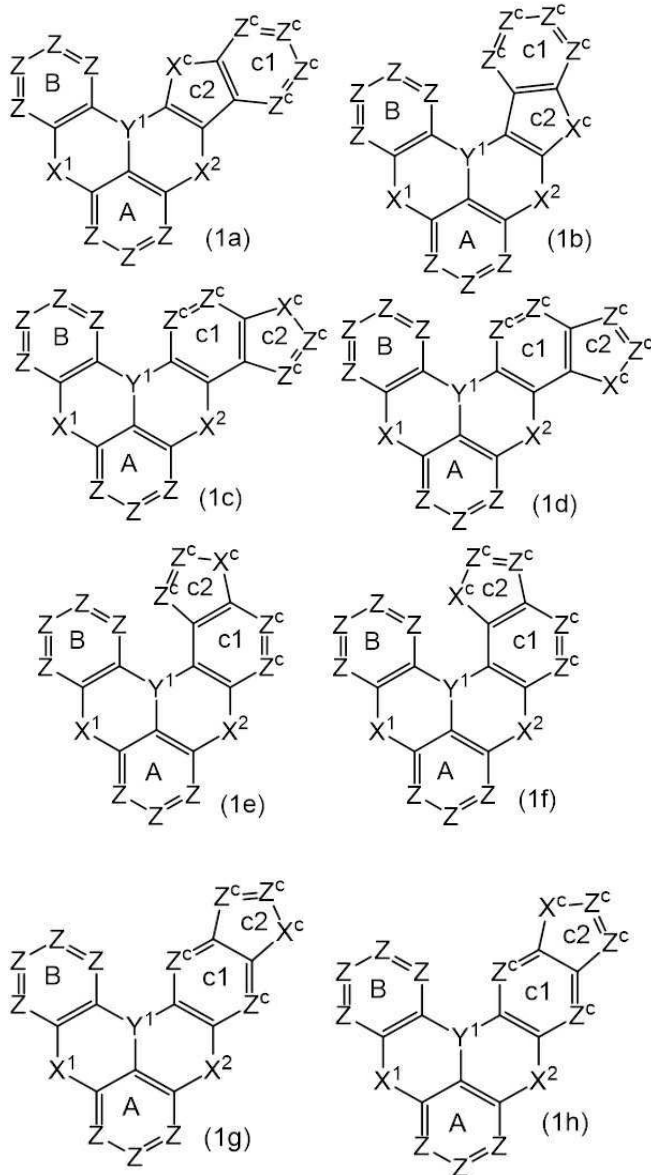
상기 구조에 있어서의 적어도 하나의 수소는 시아노, 할로젠, 또는 중수소로 치환되어 있거나, 또는 치환되어 있지 않다.

청구항 2

제1항에 있어서,

식(1)으로 표현되는 구조단위가, 식(1a), 식(1b), 식(1c), 식(1d), 식(1e), 식(1f), 식(1g) 또는 식(1h)으로

표현되는, 다환방향족 화합물;



식(1a), 식(1b), 식(1c), 식(1d), 식(1e), 식(1f), 식(1g) 및 식(1h) 중,

Z는 각각 독립적으로, N 혹은 C-R11이며, 단, Z=Z는 >O, >N-R, >C(-R)₂, >Si(-R)₂, >S, 또는 >Se이어도 되고, 상기 >N-R, 상기 >C(-R)₂ 및 상기 >Si(-R)₂의 R은 각각 독립적으로 수소, 치환 혹은 무치환의 아릴, 치환 혹은 무치환의 헤테로아릴, 치환 혹은 무치환의 알킬, 또는 치환 혹은 무치환의 시클로알킬이며, 상기 >C(-R)₂ 및 상기 >Si(-R)₂의 2개의 R은 서로 결합해서 환을 형성하고 있거나, 또는 형성하고 있지 않고,

R11은 각각 독립적으로, 수소, 치환 혹은 무치환의 아릴, 치환 혹은 무치환의 헤테로아릴, 치환 혹은 무치환의 디아릴아미노, 치환 혹은 무치환의 디헤테로아릴아미노, 치환 혹은 무치환의 아릴헤테로아릴아미노, 치환 혹은 무치환의 디아릴보릴, 치환 혹은 무치환의 알킬, 치환 혹은 무치환의 시클로알킬, 치환 혹은 무치환의 알케닐, 치환 혹은 무치환의 알콕시, 치환 혹은 무치환의 아릴옥시, 치환 혹은 무치환의 아릴티오, 또는 치환 실릴이며, 상기 디아릴아미노의 2개의 아릴은 서로 결합하지 않거나, 연결기를 통해서 결합하고 있고, 상기 디헤테로아릴아미노의 2개의 헤테로아릴은 서로 결합하지 않거나, 연결기를 통해서 결합하고 있고, 상기 아릴헤테로아릴아미노의 아릴과 헤테로아릴은 서로 결합하지 않거나, 연결기를 통해서 결합하고 있고, 상기 디아릴보릴의 2개의 아릴은 서로 결합하지 않거나, 단결합 또는 연결기를 통해서 결합하고 있고,

인접하는 2개의 R11은 서로 결합하여, 아릴환 또는 헤테로아릴환을 형성하고 있거나, 또는 형성하고 있지 않고, 상기 형성된 아릴환 및 헤테로아릴환의 적어도 하나의 수소는, 각각 독립적으로, R11로 치환되어 있거나, 또는

치환되어 있지 않고;

X^C 는 $>O$, $>N-R$, $>C(-R)_2$, $>Si(-R)_2$, $>S$, 또는 $>Se$ 이며, 상기 $>N-R$, 상기 $>C(-R)_2$ 및 상기 $>Si(-R)_2$ 의 R은 각각 독립적으로 수소, 치환 혹은 무치환의 아릴, 치환 혹은 무치환의 헤테로아릴, 치환 혹은 무치환의 알킬, 또는 치환 혹은 무치환의 시클로알킬이며, 상기 $>C(-R)_2$ 및 상기 $>Si(-R)_2$ 의 2개의 R은 서로 결합해서 환을 형성하고 있거나, 또는 형성하고 있지 않고,

Z^C 는 각각 독립적으로, N 또는 C-R^C이며, R^C는 각각 독립적으로, 수소, 치환 혹은 무치환의 아릴, 치환 혹은 무치환의 헤테로아릴, 치환 혹은 무치환의 디아릴아미노, 치환 혹은 무치환의 디헤테로아릴아미노, 치환 혹은 무치환의 아릴헤테로아릴아미노, 치환 혹은 무치환의 디아릴보릴, 치환 혹은 무치환의 알킬, 치환 혹은 무치환의 시클로알킬, 치환 혹은 무치환의 알케닐, 치환 혹은 무치환의 알콕시, 치환 혹은 무치환의 아릴옥시, 치환 혹은 무치환의 아릴티오, 또는 치환 실릴이며, 상기 디아릴아미노의 2개의 아릴은 서로 결합하지 않거나, 연결기를 통해서 결합하고 있고, 상기 디헤테로아릴아미노의 2개의 헤테로아릴은 서로 결합하지 않거나, 연결기를 통해서 결합하고 있고, 상기 아릴헤테로아릴아미노의 아릴과 헤테로아릴은 서로 결합하지 않거나, 연결기를 통해서 결합하고 있고, 상기 디아릴보릴의 2개의 아릴은 서로 결합하지 않거나, 단결합 또는 연결기를 통해서 결합하고 있고,

인접하는 2개의 R^C는 서로 결합하여, 아릴환 또는 헤테로아릴환을 형성해도 되고, 상기 형성된 아릴환 및 헤테로아릴환의 적어도 하나의 수소는, 각각 독립적으로, R^C로 치환되어 있거나, 또는 치환되어 있지 않고;

Y1은, B, P, P=O, P=S, Al, Ga, As, Si-R, 또는 Ge-R이며, 상기 Si-R 및 상기 Ge-R의 R은 치환 혹은 무치환의 아릴, 치환 혹은 무치환의 헤테로아릴, 치환 혹은 무치환의 알킬, 또는 치환 혹은 무치환의 시클로알킬이며;

X1 및 X2은, $>N-G$, $>O$, $>N-R$ (R이 G인 것을 제외한다), $>C(-R)_2$, $>Si(-R)_2$, $>S$, 또는 $>Se$ 이며, 상기 $>N-G$ 의 G는, 식(G)으로 표현되는 기이며, 상기 $>N-R$ 의 R은 수소, 치환 혹은 무치환의 아릴, 치환 혹은 무치환의 헤테로아릴, 치환 혹은 무치환의 알킬, 또는 치환 혹은 무치환의 시클로알킬이며, 상기 $>C(-R)_2$ 및 $>Si(-R)_2$ 의 R은 각각 독립적으로 수소, 치환 혹은 무치환의 아릴, 치환 혹은 무치환의 헤테로아릴, 치환 혹은 무치환의 알킬, 또는 치환 혹은 무치환의 시클로알킬이며, 상기 $>C(-R)_2$ 및 상기 $>Si(-R)_2$ 의 2개의 R은 서로 결합해서 환을 형성해도 되고, 상기 $>N-R$ 의 R, 상기 $>C(-R)_2$ 및 상기 $>Si(-R)_2$ 의 적어도 하나의 R은, 상기 A환 및 상기 B환 중 적어도 1개, 또는 상기 A환 및 상기 C환 중 적어도 1개와, 단결합 또는 연결기를 통해서 결합하고 있어도 되고,

단, X1 및 X2의 적어도 1개는, $>N-G$ 이며;

상기 구조에 있어서의, 아릴환 또는 헤테로아릴환의 적어도 1개는, 적어도 하나의 시클로알칸으로 축합되어 있거나, 또는 축합되어 있지 않고, 해당 시클로알칸에 있어서의 적어도 하나의 수소는 치환되어 있어도 되고, 해당 시클로알칸에 있어서의 적어도 하나의 $-CH_2-$ 는 $-O-$ 로 치환되어 있거나, 또는 치환되어 있지 않고, 그리고;

상기 구조에 있어서의 적어도 하나의 수소는 시아노, 할로젠, 또는 중수소로 치환되어 있거나, 또는 치환되어 있지 않다.

청구항 3

제2항에 있어서,

식(1)으로 표현되는 구조단위가 식(1a)으로 표현되는, 다환방향족 화합물.

청구항 4

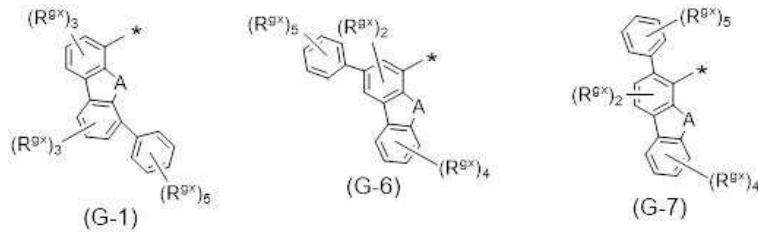
제1항 내지 제3항 중 어느 한 항에 있어서,

Z가 모두 C-R11인, 다환방향족 화합물.

청구항 5

제1항 내지 제4항 중 어느 한 항에 있어서,

식(G)으로 표현되는 기가 식(G-1), 식(G-6), 또는 식(G-7)중 어느 하나로 표현되는 기인, 다환방향족 화합물;



식 중, R^{9x}는, 각각 독립적으로, 수소, 치환 혹은 무치환의 아릴, 치환 혹은 무치환의 헤테로아릴, 치환 혹은 무치환의 디아릴아미노, 치환 혹은 무치환의 디헤테로아릴아미노, 치환 혹은 무치환의 아릴헤테로아릴아미노, 치환 혹은 무치환의 디아릴보릴, 치환 혹은 무치환의 알킬, 치환 혹은 무치환의 시클로알킬, 치환 혹은 무치환의 알케닐, 치환 혹은 무치환의 알콕시, 치환 혹은 무치환의 아릴옥시, 또는 치환 혹은 무치환의 아릴티오이며, *은 N과의 결합 위치를 나타낸다.

청구항 6

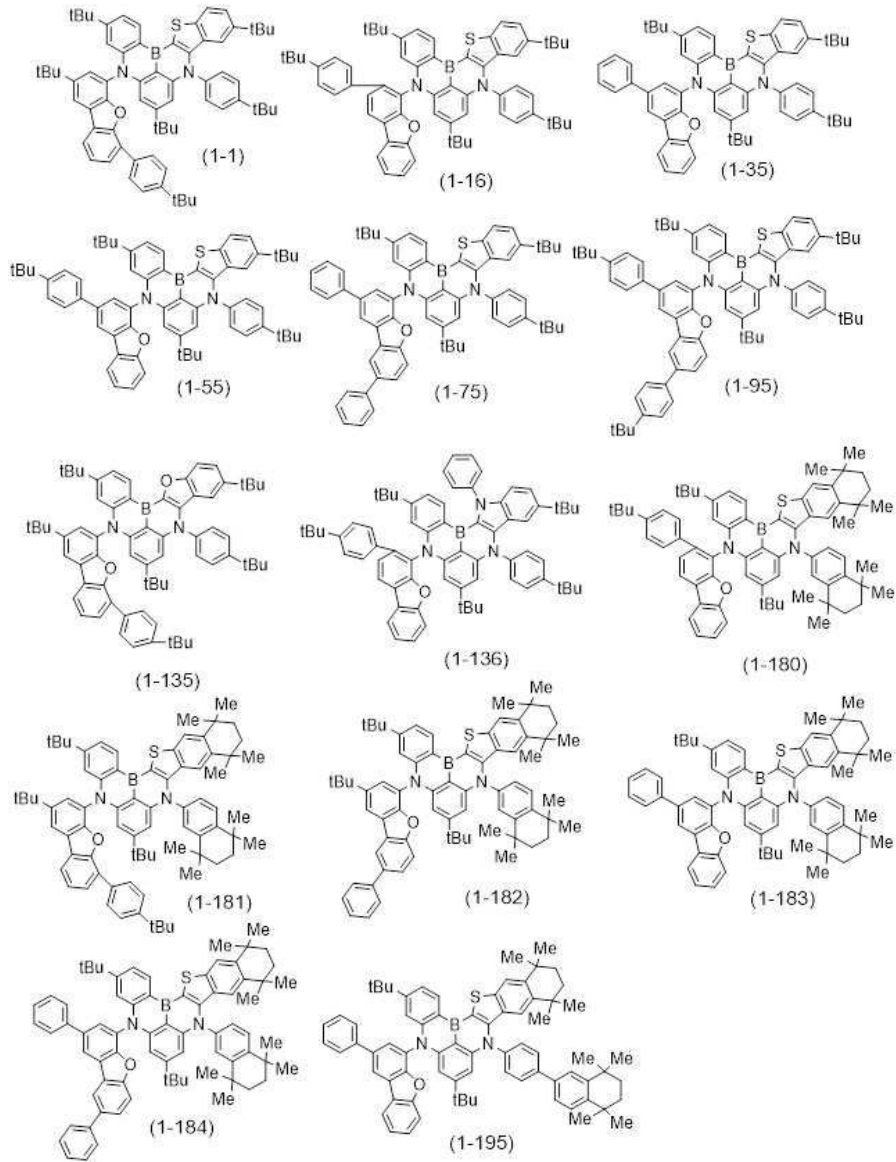
제5항에 있어서,

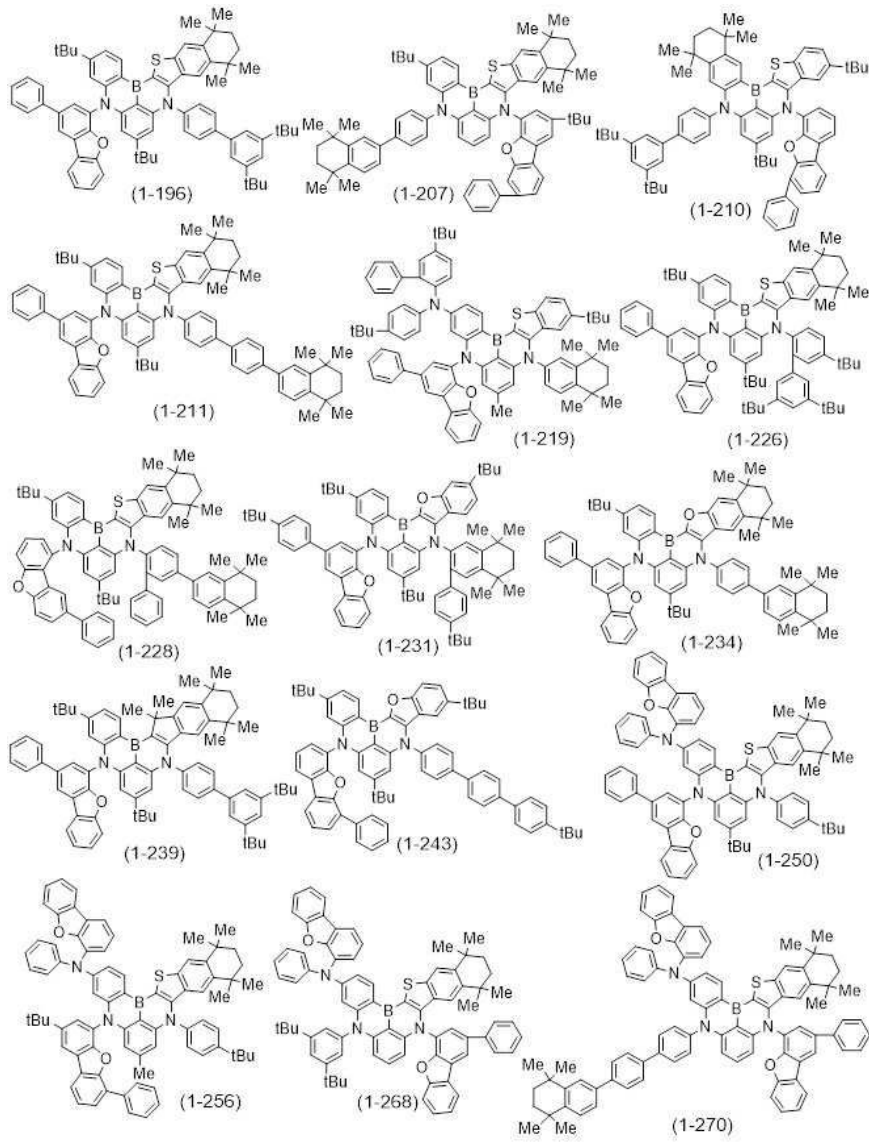
R^{9x}가 수소, 알킬, 또는 시클로알킬인, 다환방향족 화합물.

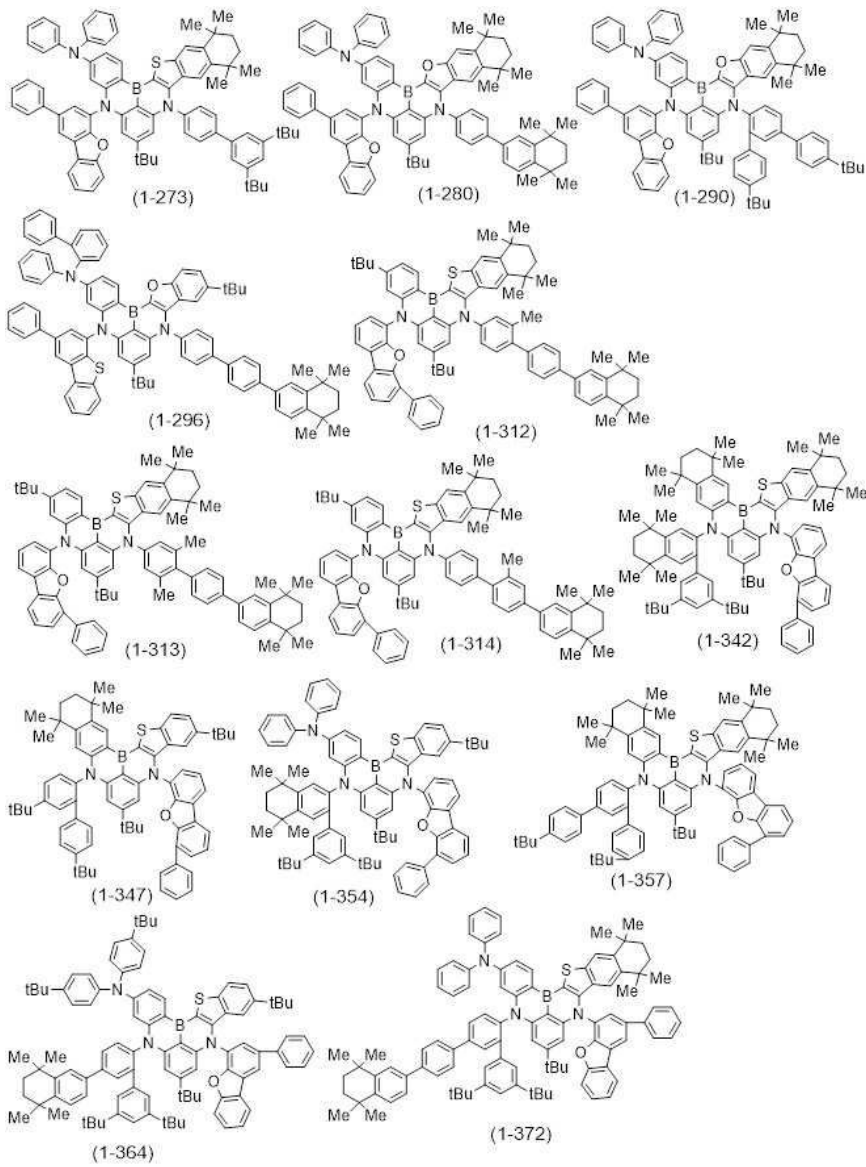
청구항 7

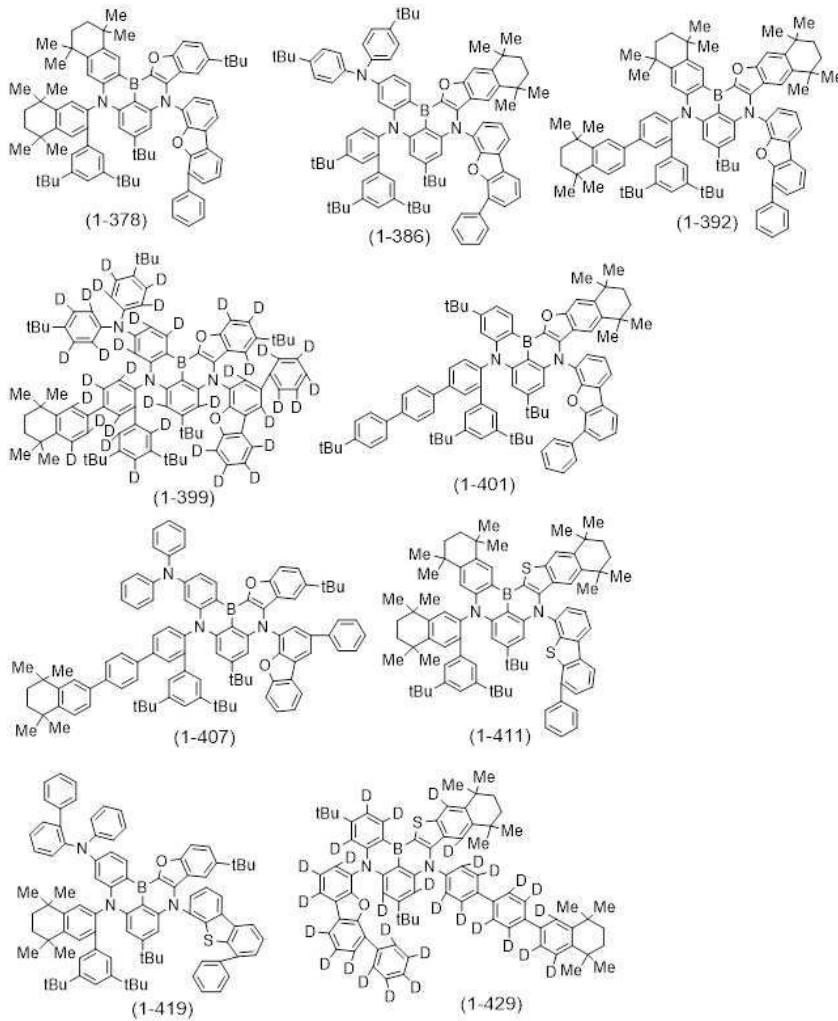
제1항에 있어서,

하기 어느 하나의 식으로 표현되는, 다환방향족 화합물;









식 중, Me은 메틸이며, tBu는 t-부틸이며, D는 중수소이다.

청구항 8

제1항 내지 제7항 중 어느 한 항에 기재된 다환방향족 화합물을 함유하는, 유기 디바이스용 재료.

청구항 9

양극 및 음극으로 이루어지는 한 쌍의 전극과, 해당 한 쌍의 전극간에 배치된 발광층을 포함하고, 상기 발광층이 제1항 내지 제7항 중 어느 한 항에 기재된 다환방향족 화합물을 함유하는, 유기 전계 발광 소자.

청구항 10

제9항에 있어서,

상기 발광층이, 호스트와, 도펀트로서의 상기 다환방향족 화합물을 포함하는, 유기 전계 발광 소자.

청구항 11

제10항에 있어서,

상기 호스트가, 안트라센 화합물, 플루오렌 화합물, 또는 디벤조크리센 화합물인, 유기 전계 발광 소자.

청구항 12

제9항 내지 제11항 중 어느 한 항에 기재된 유기 전계 발광 소자를 구비한 표시 장치 또는 조명 장치.

발명의 설명

기술분야

[0001] 본 발명은, 다환방향족 화합물에 관한 것이다. 본 발명은 특히, 질소와 붕소를 포함하는 다환방향족 화합물에 관한 것이다. 본 발명은 또한, 상기 다환방향족 화합물을 포함하는 유기 디바이스용 재료, 유기 전계 발광 소자, 표시 장치 및 조명 장치에 관한 것이다.

배경기술

[0002] 종래, 전계 발광하는 발광 소자를 사용한 표시 장치는, 전력 절감화나 박형화가 가능하여, 자주 연구되어 왔으며, 더구나, 유기재료로부터 이루어지는 유기 전계 발광 소자는, 경량화나 대형화가 용이하여 활발하게 검토되어 왔다. 특히, 광의 3원색의 하나인 청색 등의 발광특성을 가지는 유기재료의 개발 및 정공, 전자 등의 전하수송 능력(반도체나 초전도체가 될 가능성을 가진다)을 구비한 유기재료의 개발에 대해서는, 고분자 화합물, 저분자 화합물을 막론하고 지금까지 활발하게 연구되어 왔다.

[0003] 유기 전계 발광 소자는, 양극 및 음극으로 이루어지는 한 쌍의 전극과, 해당 한 쌍의 전극간에 배치되어, 유기 화합물을 포함하는 한층 또는 복수의 층으로 이루어지는 구조를 가진다. 유기 화합물을 포함하는 층에는, 발광층이나, 정공, 전자 등의 전하를 수송 또는 주입하는 전하수송/주입층 등이 있으며, 이들 층에 적당한 다양한 유기재료가 개발되고 있다.

[0004] 그 중에서, 특허문헌 1~4에는, 붕소를 함유하는 다환방향족 화합물이, 유기 전계 발광 소자 등의 재료로서 유용한 것이 개시되어 있다. 이 다환방향족 화합물을 함유하는 유기 전계 발광 소자는, 양호한 외부양자효율을 가지는 것이 보고되고 있다. 특허문헌 2 및 특허문헌 3에는, 벤조티오펜 등의 헤테로환이 축합된 구조가 개시되고 있다. 특허문헌 4에는, 디벤조퓨란환 등의 헤테로환이 치환기 부분에 도입된 구조가 개시되고 있다.

선행기술문헌

특허문헌

- [0005] (특허문헌 0001) [특허문헌1] 국제공개 제2015/102118호
- (특허문헌 0002) [특허문헌2] 국제공개 제2020/111830호
- (특허문헌 0003) [특허문헌3] 국제공개 제2020/251049호
- (특허문헌 0004) [특허문헌4] 국제공개 제2019/132028호

발명의 내용

해결하려는 과제

[0006] 상술한 바와 같이, 유기 EL 소자에 사용되는 재료로서는 여러 재료가 개발되고 있지만, 유기 EL 소자용 재료의 선택사항을 늘리기 위해서, 종래와는 다른 화합물로 이루어지는 재료의 개발이 기대되고 있다.

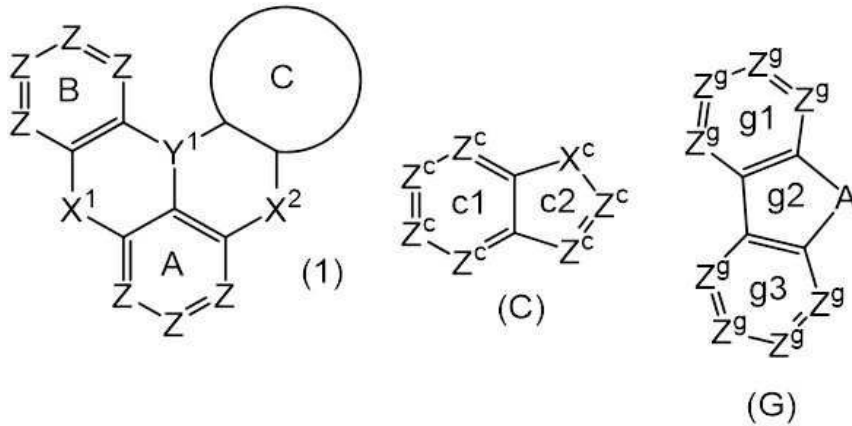
[0007] 본 발명은 유기 EL 소자 등의 유기 디바이스용 재료로서 유용한 신규화합물을 제공하는 것을 과제로 한다.

과제의 해결 수단

[0008] 본 발명자들은, 상기 과제를 해결하기 위해서 예의 검토한 결과, 특허문헌 1~4에 기재된 화합물의 구조에 있어서, 특정한 축합 구조와 치환기를 조합시킴으로써, 높은 발광효율을 나타내는 다환방향족 화합물을 제조하는 것에 성공했다. 또한, 이 다환방향족 화합물을 함유하는 층을 한 쌍의 전극간에 배치하여 유기 EL 소자를 구성하는 것에 의해, 뛰어난 유기 EL 소자가 얻어지는 것을 알아내고, 본 발명을 완성시켰다. 즉 본 발명은, 이하와 같은 다환방향족 화합물, 나아가 이하와 같은 다환방향족 화합물을 포함하는 유기 디바이스용 재료 등을 제공한다.

[0009] 본 발명은, 구체적으로는 이하의 구성을 가진다.

[0010] <1> 하기 식(1)으로 표현되는 구조단위 1개 또는 2개 이상으로 이루어지는 구조를 가지는 다환방향족 화합물;



[0011]

[0012] 식(1) 중,

[0013] Z는 각각 독립적으로, N 또는 C-R11이며, 단, Z=Z는 >O, >N-R, >C(-R)₂, >Si(-R)₂, >S, 또는 >Se이어도 되고, 상기 >N-R, 상기 >C(-R)₂ 및 상기 >Si(-R)₂의 R은 각각 독립적으로 수소, 치환 혹은 무치환의 아릴, 치환 혹은 무치환의 헤테로아릴, 치환 혹은 무치환의 알킬, 또는 치환 혹은 무치환의 시클로알킬이며, 상기 >C(-R)₂ 및 상기 >Si(-R)₂의 2개의 R은 서로 결합해서 환을 형성하고 있거나, 또는 형성하고 있지 않고,

[0014] R11은 각각 독립적으로, 수소, 치환 혹은 무치환의 아릴, 치환 혹은 무치환의 헤테로아릴, 치환 혹은 무치환의 디아릴아미노, 치환 혹은 무치환의 디헤테로아릴아미노, 치환 혹은 무치환의 아릴헤테로아릴아미노, 치환 혹은 무치환의 디아릴보릴, 치환 혹은 무치환의 알킬, 치환 혹은 무치환의 시클로알킬, 치환 혹은 무치환의 알케닐, 치환 혹은 무치환의 알콕시, 치환 혹은 무치환의 아릴옥시, 치환 혹은 무치환의 아릴티오, 또는 치환 실릴이며,

[0015] 상기 디아릴아미노의 2개의 아릴은 서로 결합하지 않거나, 연결기를 통해서 결합하고 있고, 상기 디헤테로아릴아미노의 2개의 헤테로아릴은 서로 결합하지 않거나, 연결기를 통해서 결합하고 있고, 상기 아릴헤테로아릴아미노의 아릴과 헤테로아릴은 서로 결합하지 않거나, 연결기를 통해서 결합하고 있고, 상기 디아릴보릴의 2개의 아릴은 서로 결합하지 않거나, 또는, 단결합 혹은 연결기를 통해서 결합하고 있고,

[0016] 인접하는 2개의 R11은 서로 결합하여 아릴환 또는 헤테로아릴환을 형성하고 있거나, 또는 형성하고 있지 않고, 상기 형성된 아릴환 및 헤테로아릴환의 적어도 하나의 수소는, 각각 독립적으로, R11로 치환되어 있거나, 또는 치환되어 있지 않고,

[0017] C환은 식(C)으로 표현되는 환이며, 식(C) 중, X^C는 >O, >N-R, >C(-R)₂, >Si(-R)₂, >S, 또는 >Se이며, 상기 >N-R, 상기 >C(-R)₂ 및 상기 >Si(-R)₂의 R은 각각 독립적으로 수소, 치환 혹은 무치환의 아릴, 치환 혹은 무치환의 헤테로아릴, 치환 혹은 무치환의 알킬, 또는 치환 혹은 무치환의 시클로알킬이며, 상기 >C(-R)₂ 및 상기 >Si(-R)₂의 2개의 R은 서로 결합해서 환을 형성하고 있거나, 또는 형성하고 있지 않고,

[0018] Z^C는 각각 독립적으로, N 또는 C-R^C이며, R^C는 각각 독립적으로, 수소, 치환 혹은 무치환의 아릴, 치환 혹은 무치환의 헤테로아릴, 치환 혹은 무치환의 디아릴아미노, 치환 혹은 무치환의 디헤테로아릴아미노, 치환 혹은 무치환의 아릴헤테로아릴아미노, 치환 혹은 무치환의 디아릴보릴, 치환 혹은 무치환의 알킬, 치환 혹은 무치환의 시클로알킬, 치환 혹은 무치환의 알케닐, 치환 혹은 무치환의 알콕시, 치환 혹은 무치환의 아릴옥시, 치환 혹은 무치환의 아릴티오, 또는 치환 실릴이며, 상기 디아릴아미노의 2개의 아릴은 서로 결합하지 않거나, 연결기를 통해서 결합하고 있고, 상기 디헤테로아릴아미노의 2개의 헤테로아릴은 서로 결합하지 않거나, 연결기를 통해서 결합하고 있고, 상기 아릴헤테로아릴아미노의 아릴과 헤테로아릴은 서로 결합하지 않거나, 연결기를 통해서 결합하고 있고, 상기 디아릴보릴의 2개의 아릴은 서로 결합하지 않거나, 단결합 또는 연결기를 통해서 결합하고 있고,

[0019] 인접하는 2개의 R^C는 서로 결합하여, 아릴환 또는 헤테로아릴환을 형성해도 되고, 상기 형성된 아릴환 및 헤테로

아릴환의 적어도 하나의 수소는, 각각 독립적으로, R^c 로 치환되어 있거나, 또는 치환되어 있지 않고,

[0020] 단, 어느 연속하는 2개의 Z^c 는 일방이 Y1과 결합하는 탄소, 타방이 X2과 결합하는 탄소이며;

[0021] Y1은, B, P, P=O, P=S, Al, Ga, As, Si-R, 또는 Ge-R이며, 상기 Si-R 및 상기 Ge-R의 R은 치환 혹은 무치환의 아릴, 치환 혹은 무치환의 헤테로아릴, 치환 혹은 무치환의 알킬, 또는 치환 혹은 무치환의 시클로알킬이며;

[0022] X1 및 X2은, >N-G, >O, >N-R(R이 G인 것을 제외한다), >C(-R)₂, >Si(-R)₂, >S, 또는 >Se이며, 상기 >N-G의 G는, 식(G)으로 표현되는 기이며, 상기 >N-R의 R은 수소, 치환 혹은 무치환의 아릴, 치환 혹은 무치환의 헤테로아릴, 치환 혹은 무치환의 알킬, 또는 치환 혹은 무치환의 시클로알킬이며, 상기 >C(-R)₂ 및 >Si(-R)₂의 R은 각각 독립적으로 수소, 치환 혹은 무치환의 아릴, 치환 혹은 무치환의 헤테로아릴, 치환 혹은 무치환의 알킬, 또는 치환 혹은 무치환의 시클로알킬이며, 상기 >C(-R)₂ 및 >Si(-R)₂의 2개의 R은 서로 결합해서 환을 형성해도 되고, 상기 >N-R의 R, 상기 >C(-R)₂ 및 >Si(-R)₂의 적어도 하나의 R은, 상기 A환 및 상기 B환의 적어도 1개, 또는 상기 A환 및 상기 C환의 적어도 1개와, 단결합 또는 연결기를 통해서 결합하고 있어도 되고,

[0023] 단, X1 및 X2의 적어도 1개는, >N-G이며;

[0024] 식(G)중,

[0025] Z^k 는 각각 독립적으로, N, C-R^k 또는 C-Ar^k이며, R^k는 각각 독립적으로, 수소, 치환 혹은 무치환의 디아릴아미노, 치환 혹은 무치환의 디헤테로아릴아미노, 치환 혹은 무치환의 아릴헤테로아릴아미노, 치환 혹은 무치환의 디아릴보릴, 치환 혹은 무치환의 알킬, 치환 혹은 무치환의 시클로알킬, 치환 혹은 무치환의 알케닐, 치환 혹은 무치환의 알콕시, 치환 혹은 무치환의 아릴옥시, 치환 혹은 무치환의 아릴티오, 또는 치환 실릴이며, 상기 디아릴아미노의 2개의 아릴은 서로 결합하지 않거나, 연결기를 통해서 결합하고 있고, 상기 디헤테로아릴아미노의 2개의 헤테로아릴은 서로 결합하지 않거나, 연결기를 통해서 결합하고 있고, 상기 아릴헤테로아릴아미노의 아릴과 헤테로아릴은 서로 결합하지 않거나, 연결기를 통해서 결합하고 있고, 상기 디아릴보릴의 2개의 아릴은 서로 결합하지 않거나, 단결합 또는 연결기를 통해서 결합하고 있고, Arg는 각각 독립적으로, 치환 혹은 무치환의 아릴, 또는 치환 혹은 무치환의 헤테로아릴이며,

[0026] 인접하는 2개의 R^k는 서로 결합하여, 아릴환 또는 헤테로아릴환을 형성해도 되고, 상기 형성된 아릴환 및 헤테로아릴환의 적어도 하나의 수소는, 각각 독립적으로, R^k로 치환되어 있거나, 또는 치환되어 있지 않고,

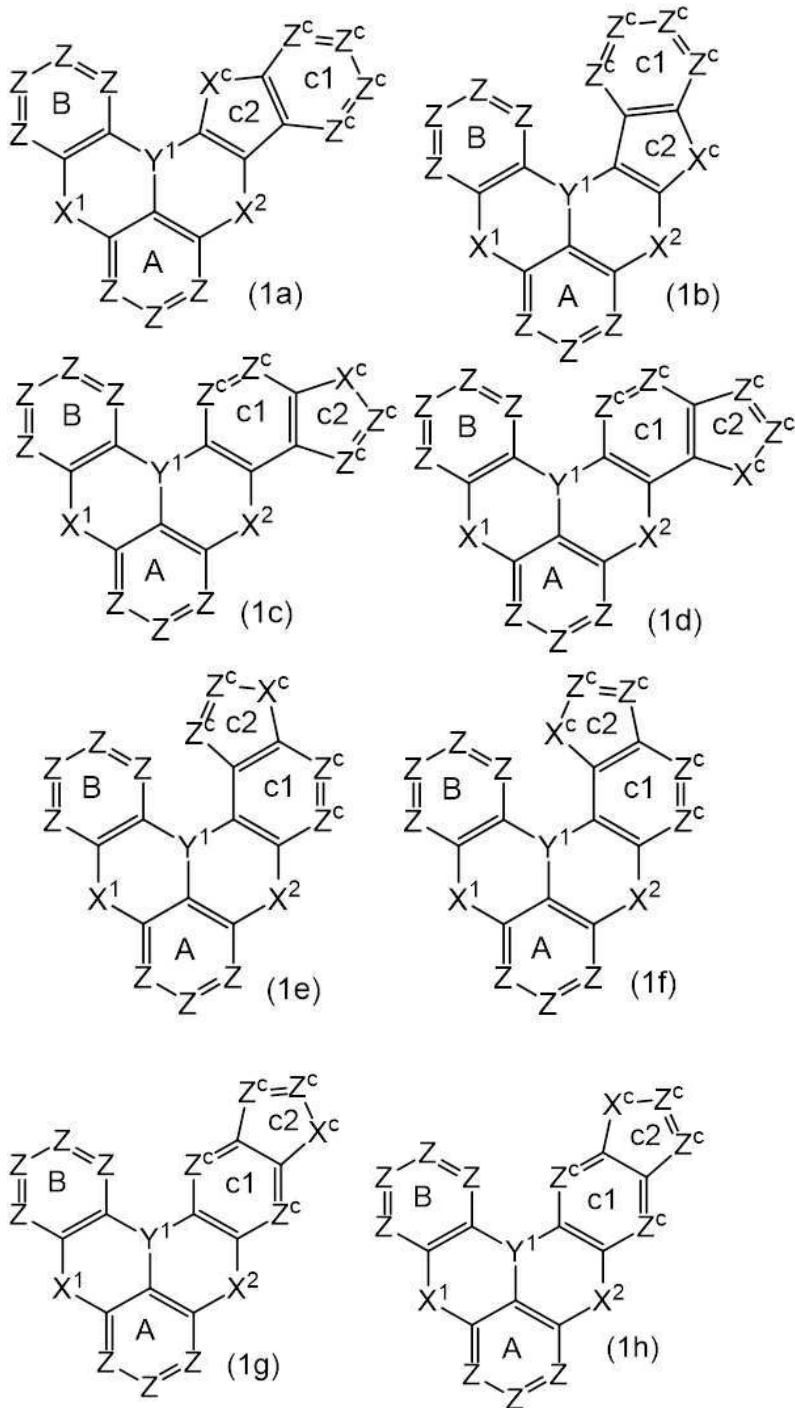
[0027] 단, 적어도 하나의 Z^k 는 C-Ar^k이며, 또한, 임의의 1개의 Z^k 는 X1 또는 X2인 N과 결합하고 있는 탄소이며;

[0028] A는, >O, >N-R, >Si(-R)₂, >S, 또는 >Se이며, 상기 >N-R, 및 상기 >Si(-R)₂의 R은 각각 독립적으로 수소, 치환 혹은 무치환의 아릴, 치환 혹은 무치환의 헤테로아릴, 치환 혹은 무치환의 알킬, 또는 치환 혹은 무치환의 시클로알킬이며, 상기 >Si(-R)₂의 2개의 R은 서로 결합해서 환을 형성하고 있거나, 또는 형성하고 있지 않고;

[0029] 상기 구조에 있어서의, 아릴환 또는 헤테로아릴환의 적어도 1개는, 적어도 하나의 시클로알칸으로 축합되어 있거나, 또는 축합되어 있지 않고, 해당 시클로알칸에 있어서의 적어도 하나의 수소는 치환되어 있어도 되고, 해당 시클로알칸에 있어서의 적어도 하나의 -CH₂-는 -O-로 치환되어 있거나, 또는 치환되어 있지 않고, 그리고;

[0030] 상기 구조에 있어서의 적어도 하나의 수소는 시아노, 할로젠, 또는 중수소로 치환되어 있거나, 또는 치환되어 있지 않다.

[0031] <2> 식(1)으로 표현되는 구조단위가, 식(1a), 식(1b), 식(1c), 식(1d), 식(1e), 식(1f), 식(1g) 또는 식(1h)으로 표현되는, <1>에 기재된 다환방향족 화합물;



[0032]

[0033]

[0034]

[0035]

[0036]

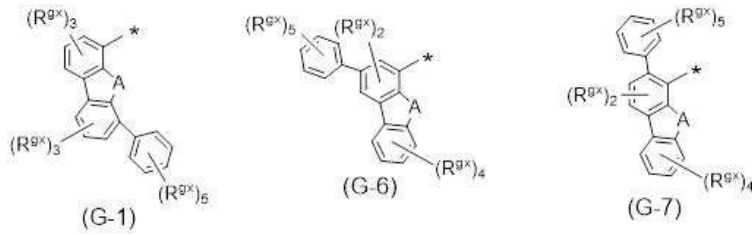
식(1a), 식(1b), 식(1c), 식(1d), 식(1e), 식(1f), 식(1g) 및 식(1h) 중,

Z는 각각 독립적으로, N 혹은 C-R11이며, 단, Z=Z는 >O, >N-R, >C(-R)₂, >Si(-R)₂, >S, 또는 >Se이어도 되고, 상기 >N-R, 상기 >C(-R)₂ 및 상기 >Si(-R)₂의 R은 각각 독립적으로 수소, 치환 혹은 무치환의 아릴, 치환 혹은 무치환의 헤테로아릴, 치환 혹은 무치환의 알킬, 또는 치환 혹은 무치환의 시클로알킬이며, 상기 >C(-R)₂ 및 상기 >Si(-R)₂의 2개의 R은 서로 결합해서 환을 형성하고 있거나, 또는 형성하고 있지 않고,

R11은 각각 독립적으로, 수소, 치환 혹은 무치환의 아릴, 치환 혹은 무치환의 헤테로아릴, 치환 혹은 무치환의 디아릴아미노, 치환 혹은 무치환의 디헤테로아릴아미노, 치환 혹은 무치환의 아릴헤테로아릴아미노, 치환 혹은 무치환의 디아릴보릴, 치환 혹은 무치환의 알킬, 치환 혹은 무치환의 시클로알킬, 치환 혹은 무치환의 알케닐, 치환 혹은 무치환의 알콕시, 치환 혹은 무치환의 아릴옥시, 치환 혹은 무치환의 아릴티오, 또는 치환 실릴이며, 상기 디아릴아미노의 2개의 아릴은 서로 결합하지 않거나, 연결기를 통해서 결합하고 있고, 상기 디헤테로아릴

아미노의 2개의 헤테로아릴은 서로 결합하지 않거나, 연결기를 통해서 결합하고 있고, 상기 아릴헤테로아릴아미노의 아릴과 헤테로아릴은 서로 결합하지 않거나, 연결기를 통해서 결합하고 있고, 상기 디아릴보릴의 2개의 아릴은 서로 결합하지 않거나, 단결합 또는 연결기를 통해서 결합하고 있고,

- [0037] 인접하는 2개의 R11은 서로 결합하여, 아릴환 또는 헤테로아릴환을 형성하고 있거나, 또는 형성하고 있지 않고, 상기 형성된 아릴환 및 헤테로아릴환의 적어도 하나의 수소는, 각각 독립적으로, R11로 치환되어 있거나, 또는 치환되어 있지 않고;
- [0038] X^C 는 >O, >N-R, >C(-R)₂, >Si(-R)₂, >S, 또는 >Se이며, 상기 >N-R, 상기 >C(-R)₂ 및 상기 >Si(-R)₂의 R은 각각 독립적으로 수소, 치환 혹은 무치환의 아릴, 치환 혹은 무치환의 헤테로아릴, 치환 혹은 무치환의 알킬, 또는 치환 혹은 무치환의 시클로알킬이며, 상기 >C(-R)₂ 및 상기 >Si(-R)₂의 2개의 R은 서로 결합해서 환을 형성하고 있거나, 또는 형성하고 있지 않고,
- [0039] Z^C 는 각각 독립적으로, N 또는 C-R^C이며, R^C 는 각각 독립적으로, 수소, 치환 혹은 무치환의 아릴, 치환 혹은 무치환의 헤테로아릴, 치환 혹은 무치환의 디아릴아미노, 치환 혹은 무치환의 디헤테로아릴아미노, 치환 혹은 무치환의 아릴헤테로아릴아미노, 치환 혹은 무치환의 디아릴보릴, 치환 혹은 무치환의 알킬, 치환 혹은 무치환의 시클로알킬, 치환 혹은 무치환의 알케닐, 치환 혹은 무치환의 알콕시, 치환 혹은 무치환의 아릴옥시, 치환 혹은 무치환의 아릴티오, 또는 치환 실릴이며, 상기 디아릴아미노의 2개의 아릴은 서로 결합하지 않거나, 연결기를 통해서 결합하고 있고, 상기 디헤테로아릴아미노의 2개의 헤테로아릴은 서로 결합하지 않거나, 연결기를 통해서 결합하고 있고, 상기 아릴헤테로아릴아미노의 아릴과 헤테로아릴은 서로 결합하지 않거나, 연결기를 통해서 결합하고 있고, 상기 디아릴보릴의 2개의 아릴은 서로 결합하지 않거나, 단결합 또는 연결기를 통해서 결합하고 있고,
- [0040] 인접하는 2개의 R^C 는 서로 결합하여, 아릴환 또는 헤테로아릴환을 형성해도 되고, 상기 형성된 아릴환 및 헤테로아릴환의 적어도 하나의 수소는, 각각 독립적으로, R^C 로 치환되어 있거나, 또는 치환되어 있지 않고;
- [0041] Y1은, B, P, P=O, P=S, Al, Ga, As, Si-R, 또는 Ge-R이며, 상기 Si-R 및 상기 Ge-R의 R은 치환 혹은 무치환의 아릴, 치환 혹은 무치환의 헤테로아릴, 치환 혹은 무치환의 알킬, 또는 치환 혹은 무치환의 시클로알킬이며;
- [0042] X1 및 X2은, >N-G, >O, >N-R(R이 G인 것을 제외한다), >C(-R)₂, >Si(-R)₂, >S, 또는 >Se이며, 상기 >N-G의 G는, 식(G)으로 표현되는 기이며, 상기 >N-R의 R은 수소, 치환 혹은 무치환의 아릴, 치환 혹은 무치환의 헤테로아릴, 치환 혹은 무치환의 알킬, 또는 치환 혹은 무치환의 시클로알킬이며, 상기 >C(-R)₂ 및 >Si(-R)₂의 R은 각각 독립적으로 수소, 치환 혹은 무치환의 아릴, 치환 혹은 무치환의 헤테로아릴, 치환 혹은 무치환의 알킬, 또는 치환 혹은 무치환의 시클로알킬이며, 상기 >C(-R)₂ 및 상기 >Si(-R)₂의 2개의 R은 서로 결합해서 환을 형성해도 되고, 상기 >N-R의 R, 상기 >C(-R)₂ 및 상기 >Si(-R)₂의 적어도 하나의 R은, 상기 A환 및 상기 B환 중 적어도 1개, 또는 상기 A환 및 상기 C환 중 적어도 1개와, 단결합 또는 연결기를 통해서 결합하고 있어도 되고,
- [0043] 단, X1 및 X2의 적어도 1개는, >N-G이며;
- [0044] 상기 구조에 있어서의, 아릴환 또는 헤테로아릴환의 적어도 1개는, 적어도 하나의 시클로알칸으로 축합되어 있거나, 또는 축합되어 있지 않고, 해당 시클로알칸에 있어서의 적어도 하나의 수소는 치환되어 있어도 되고, 해당 시클로알칸에 있어서의 적어도 하나의 -CH₂-는 -O-로 치환되어 있거나, 또는 치환되어 있지 않고, 그리고;
- [0045] 상기 구조에 있어서의 적어도 하나의 수소는 시아노, 할로젠, 또는 중수소로 치환되어 있거나, 또는 치환되어 있지 않다.
- [0046] <3> 식(1)으로 표현되는 구조단위가 식(1a)으로 표현되는, <2>에 기재된 다환방향족 화합물.
- [0047] <4> Z가 모두 C-R11인, <1>~<3> 중 어느 하나에 기재된 다환방향족 화합물.
- [0048] <5> 식(G)으로 표현되는 기가 식(G-1), 식(G-6), 또는 식(G-7)중 어느 하나로 표현되는 기인, <1>~<4>중 어느 하나에 기재된 다환방향족 화합물;



[0049]

[0050]

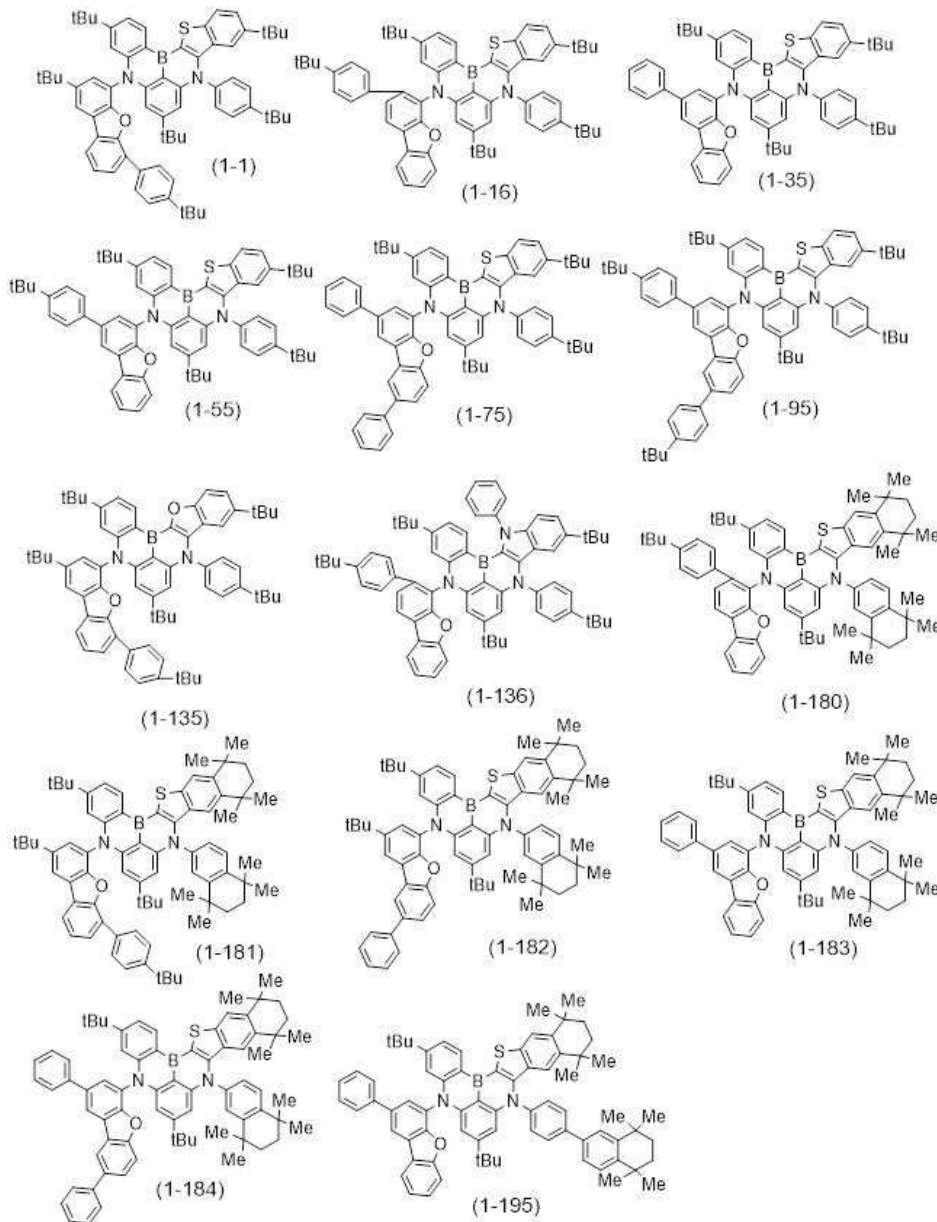
식 중, R^{9x} 는, 각각 독립적으로, 수소, 치환 혹은 무치환의 아릴, 치환 혹은 무치환의 헥테로아릴, 치환 혹은 무치환의 디아릴아미노, 치환 혹은 무치환의 디헥테로아릴아미노, 치환 혹은 무치환의 아릴헥테로아릴아미노, 치환 혹은 무치환의 디아릴보릴, 치환 혹은 무치환의 알킬, 치환 혹은 무치환의 시클로알킬, 치환 혹은 무치환의 알케닐, 치환 혹은 무치환의 알콕시, 치환 혹은 무치환의 아릴옥시, 또는 치환 혹은 무치환의 아틸티오이며, * 은 N과의 결합 위치를 나타낸다.

[0051]

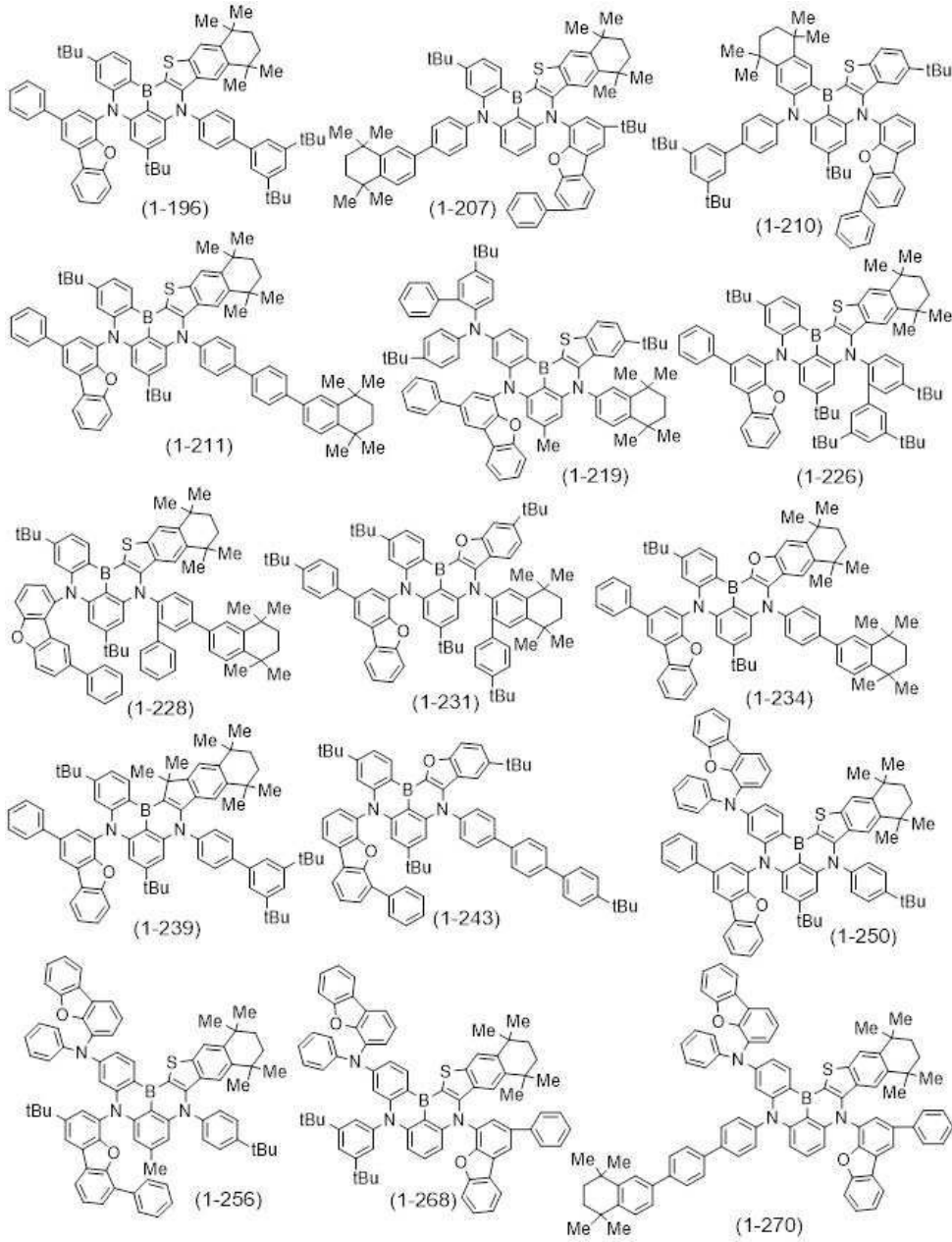
<6> R^{9x} 가 수소, 알킬, 또는 시클로알킬인, <5>에 기재된 다환방향족 화합물.

[0052]

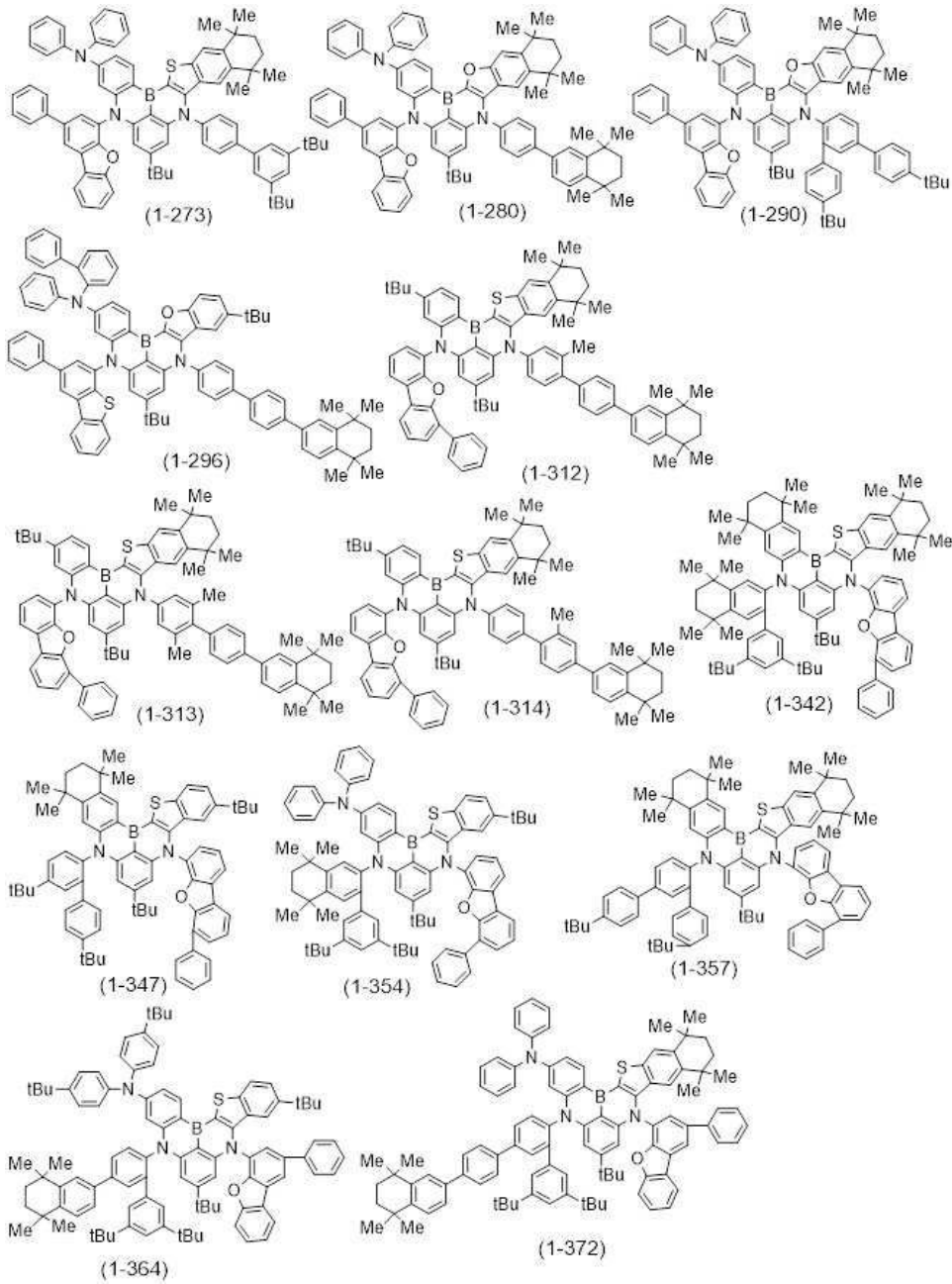
<7> 하기 어느 하나의 식으로 표현되는, <1>에 기재된 다환방향족 화합물;



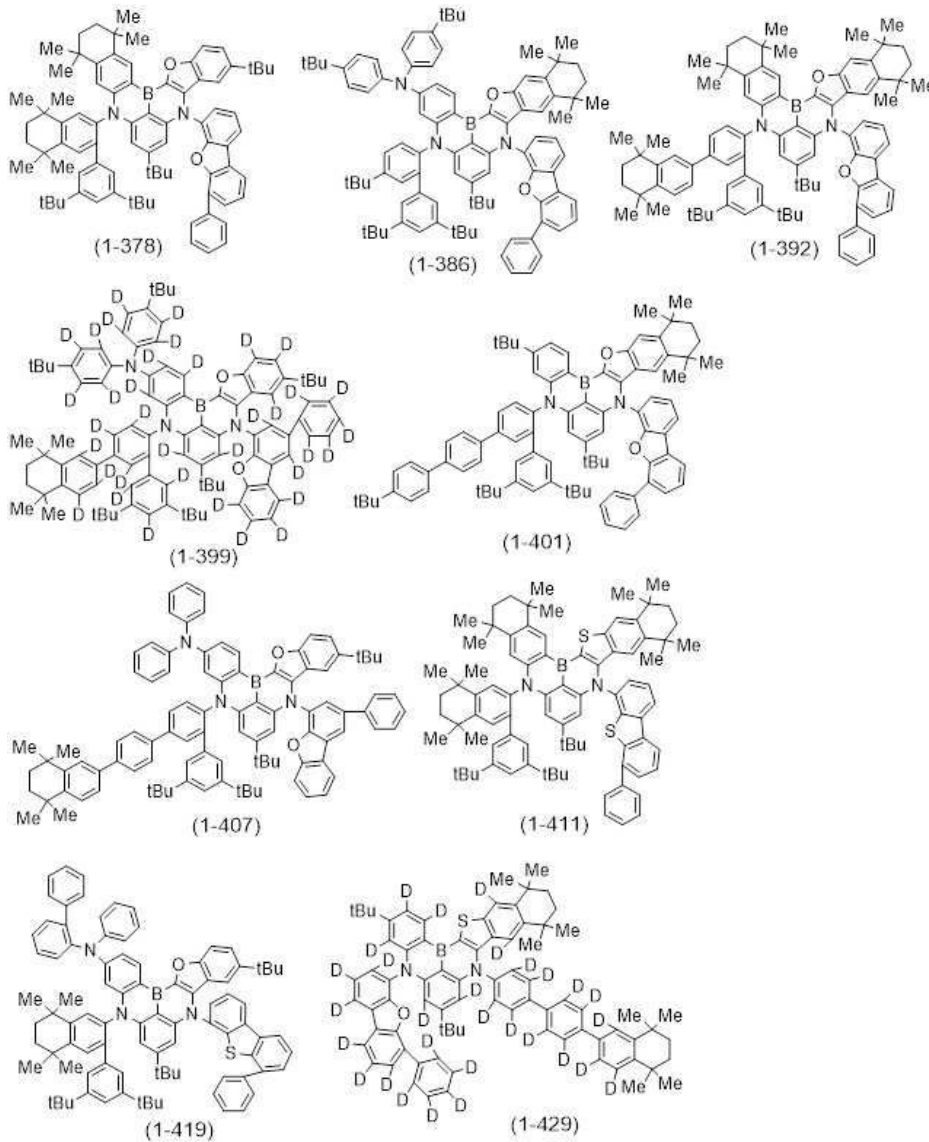
[0053]



[0054]



[0055]



[0056]

[0057]

[0058]

[0059]

[0060]

[0061]

[0062]

식 중, Me은 메틸이며, tBu는 t-부틸이며, D는 중수소이다.

<8> <1>~<7>중 어느 하나에 기재된 다환방향족 화합물을 함유하는, 유기 디바이스용 재료.

<9> 양극 및 음극으로 이루어지는 한 쌍의 전극과, 해당 한 쌍의 전극간에 배치된 발광층을 포함하고, 상기 발광층이 <1>~<7>중 어느 하나에 기재된 다환방향족 화합물을 함유하는, 유기 전계 발광 소자.

<10> 상기 발광층이, 호스트와, 도펀트로서의 상기 다환방향족 화합물을 포함하는, <9>에 기재된 유기 전계 발광 소자.

<11> 상기 호스트가, 안트라센 화합물, 플루오렌 화합물, 또는 디벤조크리센 화합물인, <10>에 기재된 유기 전계 발광 소자.

<12> <9>~<11>중 어느 하나에 기재된 유기 전계 발광 소자를 구비한 표시 장치 또는 조명 장치.

발명의 효과

[0063]

본 발명에 의해, 유기 전계 발광 소자 등의 유기 디바이스용 재료로서 유용한 신규 다환방향족 화합물이 제공된다. 본 발명의 다환방향족 화합물은 유기 전계 발광 소자 등의 유기 디바이스의 제조에 사용할 수 있다.

도면의 간단한 설명

[0064]

도1은 유기 전계 발광 소자의 일 예를 제시하는 개략단면도이다.

도2는 일반적인 형광 도펀트를 사용한 TAF소자의 호스트, 어시스팅 도펀트 및 이미팅 도펀트의 에너지 관계를

나타내는 에너지 준위도이다.

도3은 본 발명의 일 양태의 유기 전계 발광 소자에 있어서의, 호스트, 어시스팅 도펀트 및 이미팅 도펀트의 에너지 관계의 일 예를 제시하는 에너지 준위도이다.

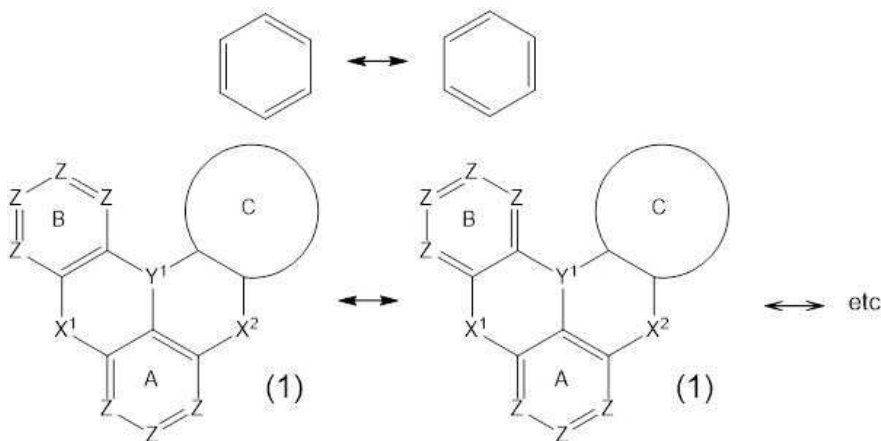
발명을 실시하기 위한 구체적인 내용

[0065] 이하에서, 본 발명에 대하여 상세하게 설명한다. 이하에 기재하는 구성 요건의 설명은 대표적인 실시형태나 구체예에 기초하여 이루어지는 경우가 있지만, 본 발명은 그러한 실시형태로 한정되는 것은 아니다. 또한, 본 명세서에 있어서 「~」를 사용하여 나타내는 수치범위는 「~」 전후에 기재되는 수치를 하한가 및 상한값으로서 포함하는 범위를 의미한다. 또한, 본 명세서에 있어서 구조식의 설명에서의 「수소」는 「수소 원자(H)」를 의미한다. 본 명세서에 있어서, 유기 전계 발광 소자를 유기 EL 소자라고 하는 경우가 있다.

[0066] 본 명세서에 있어서, 화학 구조나 치환기를 탄소수로 나타낸 것이 있으나, 화학 구조에 치환기가 치환했을 경우나, 치환기에 더 치환기가 치환했을 경우 등에서의 탄소수는, 화학 구조나 치환기 각각의 탄소수를 의미하고, 화학 구조와 치환기의 합계 탄소수나, 치환기와 치환기의 합계 탄소수를 의미하는 것은 아니다. 예를 들면, 「탄소수X의 치환기A로 치환된 탄소수Y의 치환기B」란, 「탄소수Y의 치환기B」에 「탄소수X의 치환기A」가 치환하는 것을 의미하고, 탄소수Y는 치환기A 및 치환기B의 합계의 탄소수가 아니다. 또한 예를 들면, 「치환기A로 치환된 탄소수Y의 치환기B」란, 「탄소수Y의 치환기B」에 「(탄소수 한정 없는) 치환기A」가 치환하는 것을 의미하고, 탄소수Y는 치환기A 및 치환기B의 합계 탄소수가 아니다.

[0067] 본 명세서에 기재되어 있는 화학구조식(후술하는 식(1)과 같이 마쿠쉬 구조식으로 그려진 일반식을 포함한다)은 평면 구조식이기 때문에, 실제로는 엔란티오 이성체, 디아스테레오 이성체, 또는 회전 이성체와 같은 다양한 이성체구조가 존재할 경우가 있다. 본명 세서에 있어서는, 특히 한정하지 않는 한, 기재되어 있는 화합물은 그 평면구조식으로부터 생각할 수 있는 임의의 이성체구조이어도 되고, 또한 가능한 이성체로부터 구성되는 임의의 비율의 혼합물이어도 된다.

[0068] 본 명세서에서는 방향족 화합물의 구조식에 대해서 다수 기재하고 있다. 방향족 화합물은 이중 결합과 단결합을 조합시켜서 기재하고 있지만, 실제로는 π전자가 공명하고 있기 때문에 단일인 물질에 대해서도, 이중 결합과 단결합이 교대로 교체되는 등의 등가인 공명 구조가 복수 존재한다. 본 명세서에 있어서는 1개의 물질에 대해서 1개의 공명 구조식 밖에 기재하지 않지만, 특별히 한정되지 않는 한, 유기 화학적으로 등가인 기타의 공명 구조식도 포함되어 있는 것으로 한다. 이것은 후술하는 「Z=Z」 등의 기재에서 참조된다. 예를 들면 후술하는 식(1) 중의 「Z=Z」에 관해서는 예를 나타내면 하기와 같다. 단, 이에 한정되지 않고, 기재되고 있는 1개의 공명 구조식뿐만 아니라, 생각될 수 있는 다른 등가인 공명 구조식에도 당연히 적용된다.



[0069] 한편, 본 명세서에서는 「~하고 있어도 된다」라고 하는 표현과, 「~되지 않거나, 또는 ~되고 있다」라는 2개의 표현을 사용하지만, 이 양자는 같은 의미를 가지는 표현이다.

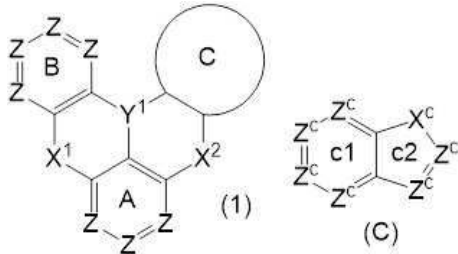
[0071] 본 명세서중에 있어서 「인접한다」라는 표현은, 특히 한정하지 않는 한, 동일한 환에서 인접하고 있는 것을 가리킨다.

[0072] 본 명세서에 있어서는, 치환기는, 다른 치환기로 더 치환되어 있는 경우가 있다.(치환기에 관해서, 「치환 혹은 무치환의」라고 설명되는 경우가 있다). 이는 치환기(「제1 치환기」)의 적어도 하나의 수소가 새로운 치환기

(「제2 치환기」)로 치환되어 있거나, 또는 치환되지 않고 있는 것을 의미한다. 이 제1 치환기(제1 치환기)와 제2 치환기(제2 치환기)에 관해서는, 각각 명세서중의 기재를 참조할 수 있다.

[0073] <1. 다환방향족 화합물>

[0074] 본 발명의 다환방향족 화합물은 식(1)으로 표현되는 구조단위 1개 또는 2개 이상으로 이루어지는 구조를 가지는 다환방향족 화합물이다. 본 발명의 다환방향족 화합물은 발광양자수율(PLQY)이 높고, 발광 반치폭이 좁고, 색순도가 우수하다.

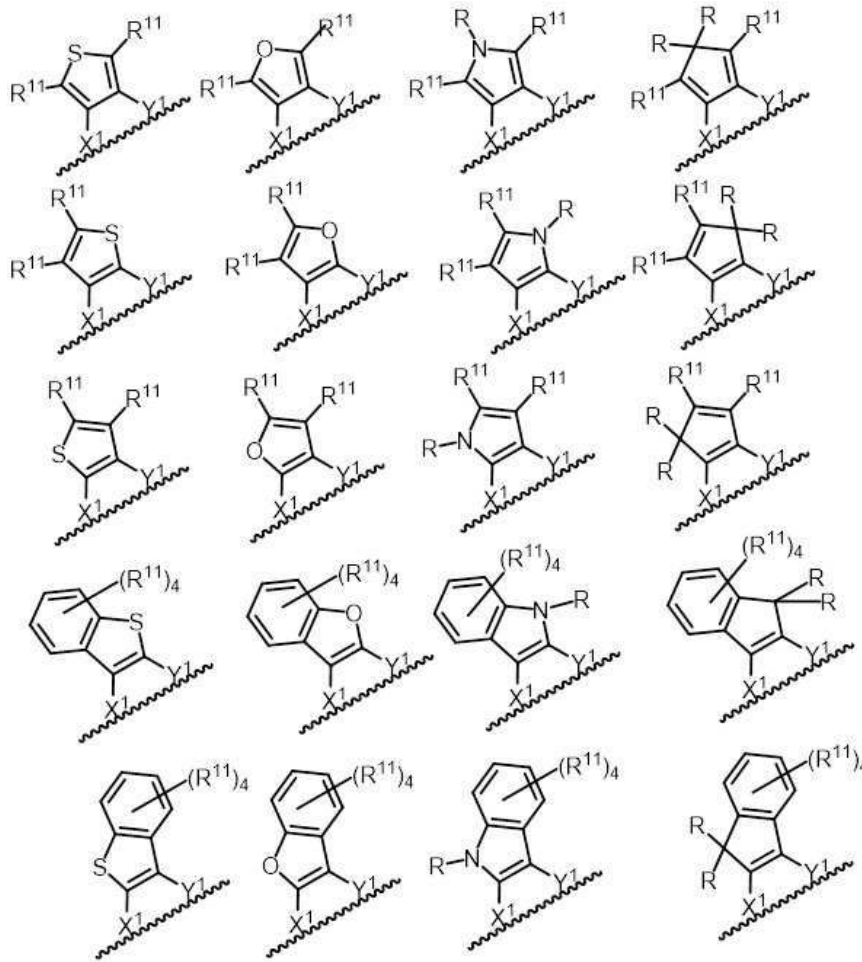


[0075] 식(1) 중, A환, B환에 있어서, Z는 각각 독립적으로, N 또는 C-R11이거나, 또는, Z=Z는 >O, >N-R, >C(-R)₂, >Si(-R)₂, >S, 또는 >Se이며, 상기 >N-R, 상기 >C(-R)₂ 및 상기 >Si(-R)₂의 R은 각각 독립적으로 수소, 치환 혹은 무치환의 아릴, 치환 혹은 무치환의 헤테로아릴, 치환 혹은 무치환의 알킬, 또는 치환 혹은 무치환의 시클로알킬이며, 상기 >C(-R)₂ 및 상기 >Si(-R)₂의 2개의 R은 서로 결합해서 환을 형성하고 있거나, 또는 형성하지 않고 있다. 여기에서, 상기 아릴, 헤테로아릴, 알킬, 시클로알킬을 제1 치환기로 칭한다. 이 기는 「치환 혹은 무치환의」라고 설명되어 있는데, 적어도 하나의 수소가 치환될 경우에는, 아릴, 헤테로아릴, 디아릴아미노, 알킬, 시클로알킬, 또는 치환 실릴이 바람직하다. 이들, 아릴, 헤테로아릴, 디아릴아미노, 알킬, 시클로알킬, 치환 실릴을 제2 치환기로 칭한다.

[0077] C-R11의 R11은 각각 독립적으로, 수소, 치환 혹은 무치환의 아릴, 치환 혹은 무치환의 헤테로아릴, 치환 혹은 무치환의 디아릴아미노, 치환 혹은 무치환의 디헤테로아릴아미노, 치환 혹은 무치환의 아릴헤테로아릴아미노, 치환 혹은 무치환의 디아릴보릴, 치환 혹은 무치환의 알킬, 치환 혹은 무치환의 시클로알킬, 치환 혹은 무치환의 알케닐, 치환 혹은 무치환의 알콕시, 치환 혹은 무치환의 아릴옥시, 치환 혹은 무치환의 아릴티오, 또는 치환 실릴이다. 여기에서, 상기 아릴, 상기 헤테로아릴, 상기 디아릴아미노, 상기 디헤테로아릴아미노, 상기 아릴헤테로아릴아미노, 상기 디아릴보릴, 상기 알킬, 상기 시클로알킬, 상기 알케닐, 상기 알콕시, 상기 아릴옥시, 상기 아릴티오, 및 상기 치환 실릴을 제1 치환기라고 칭한다. 이 기는 「치환 혹은 무치환의」라고 설명되어 있는데, 적어도 하나의 수소가 치환될 경우에는, 아릴, 헤테로아릴, 디아릴아미노, 알킬, 시클로알킬, 또는 치환 실릴이 바람직하다. 이들, 아릴, 헤테로아릴, 디아릴아미노, 알킬, 시클로알킬, 및 치환 실릴을 제2 치환기라고 칭한다.

[0078] R11로서는, 수소, 치환 혹은 무치환의 아릴, 치환 혹은 무치환의 헤테로아릴, 치환 혹은 무치환의 디아릴아미노, 치환 혹은 무치환의 알킬, 치환 혹은 무치환의 시클로알킬, 또는 치환 실릴이 바람직하다.

[0079] 다음으로, 「Z=Z는 각각 독립적으로 >O, >N-R, >C(-R)₂, >Si(-R)₂, >S, 또는 >Se이며」라고 하는 기재에 대해서 설명한다. 예를 들면, 식(1) 중의 A환에 있어서, 「Z=Z」의 개소가 >O, >N-R, >C(-R)₂, >Si(-R)₂, >S, 또는 >Se로 치환되어 얻어지는 환으로서, 시클로펜타디엔환, 피롤환, 퓨란환, 티오펜환 등을 들 수 있다. A환 등에 있어서, 1개의 Z=Z가 >N-R, >O, >S, >C(-R)₂이며, 나머지의 Z가 C-R11인 예, 나아가 1개의 Z=Z가 >N-R, >O, >S, >C(-R)₂이며, 또한 나머지의 Z가 C-R11이며, 후술하는 바와 같이 인접하는 R11이 벤젠환을 형성하고 있는 예를 든다. 단, A환 등이 취할 수 있는 형태로서는, 다음의 예에 한정되는 것은 아니다.



[0080]

[0081]

상기한 바와 같이, 방향족화합물에는 유기 화학적으로 완전히 등가인 공명 구조식이 존재하므로, 가능한 어느 하나의 공명 구조식을 기초로 하여도 된다. 한편, Z=Z인 상기 >N-R, 상기 >C(-R)₂ 및 상기 >Si(-R)₂의 R은 각각 독립적으로 수소, 치환 혹은 무치환의 아릴, 치환 혹은 무치환의 헤테로아릴, 치환 혹은 무치환의 알킬, 또는 치환 혹은 무치환의 시클로알킬이며, 상기 >C(-R)₂ 및 상기 >Si(-R)₂의 2개의 R은 서로 결합해서 환을 형성하고 있거나, 또는 형성하고 있지 않다. 이 기는 「치환 혹은 무치환의」라고 설명되어 있는데, 적어도 하나의 수소가 치환될 경우에는, 아릴, 헤테로아릴, 디아릴아미노, 알킬, 시클로알킬, 또는 치환 실릴이 바람직하다. 이 제 1 치환기와 제2 치환기에 관해서, 또한 여기에서 사용된 어구 및 그 바람직한 범위에 관해서는, 명세서중의 기재를 참조할 수 있다.

[0082]

한편, 식(1) 중, Z는 각각 독립적으로 모두 C-R11인 것이 바람직하다. 또한, 이 때, 벤젠환상에서 Y1의 파라 자리가 되는 R11이 수소 또는 수소의외의 치환기이며, 기타의 R11이 수소인 것이 바람직하다. B환에 있어서는, 벤젠환상에서 Y1의 파라 자리가 되는 R11이 수소의외의 치환기이며, 기타의 R11이 수소인 것이 보다 바람직하다. 이 때의 치환기로서는, 제1 치환기로서 후술하는 바람직한 치환기를 들 수 있고, 예를 들면 식(tR)으로 표현되는 터셔리 알킬(t-부틸 혹은 t-아밀 등), 시클로알킬, 식(tR)으로 표현되는 터셔리 알킬 혹은 알킬로 치환되어 있어도 되는 디아릴아미노 혹은 아릴헤테로아릴아미노 등을 들 수 있다. A환에 있어서는, 벤젠환상에서 Y1의 파라 자리가 되는 R11이 수소 또는 알킬(메틸 또는 t-부틸 등)이며, 기타의 R11이 수소인 것이 보다 바람직하다.

[0083]

인접하는 2개의 R11은 서로 결합하여, 아릴환 또는 헤테로아릴환을 형성해도 된다. 형성된 아릴환 및 헤테로아릴환의 적어도 하나의 수소는, 각각 독립적으로, R11(단, 여기에서는 R11이 수소를 나타낼 경우 및 R11이 서로 결합해서 환을 형성할 경우를 제외한다)으로 치환되어 있거나, 또는 치환되어 있지 않다. 또한 여기에서 사용된 어구 및 그 바람직한 범위에 관해서는, 명세서중의 기재를 참조할 수 있다.

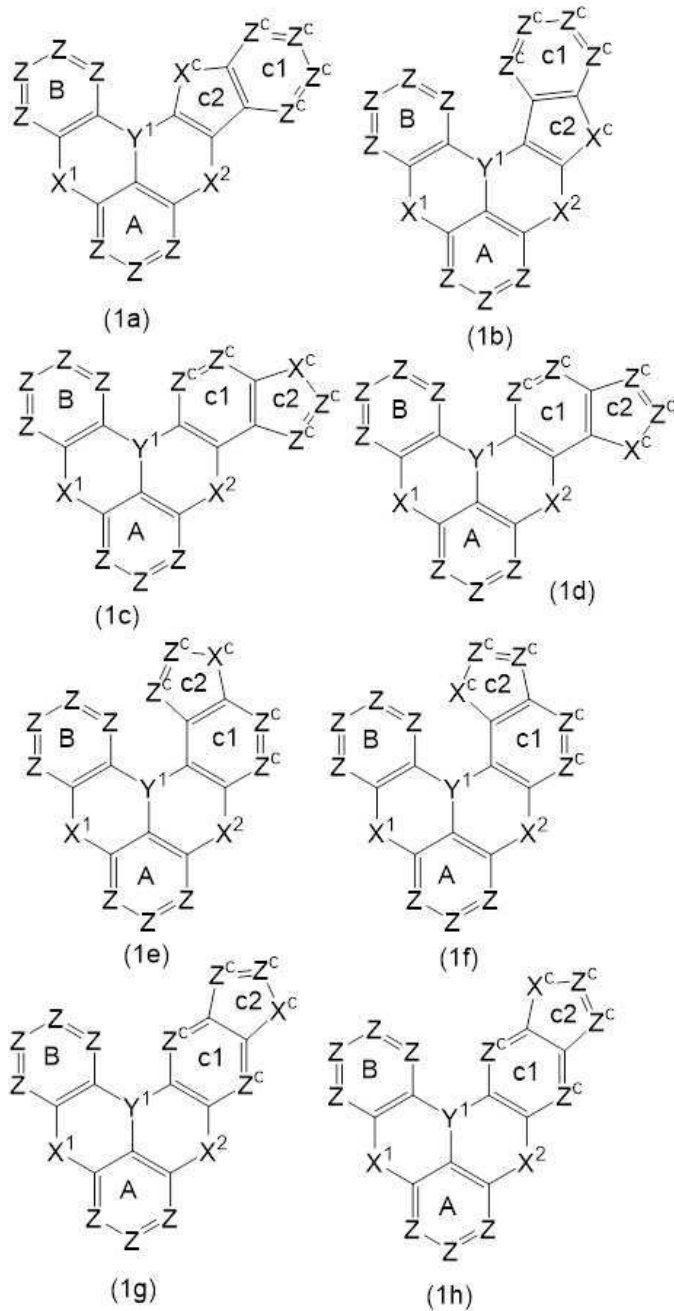
[0084]

형성된 아릴환으로서의 벤젠환, 나프탈렌환, 인덴환, 또는 시클로펜타디엔환이 바람직하고, 형성되는 헤테로아릴환으로서의, 티오펜환, 피롤환, 퓨란환, 벤조티오펜환, 벤조퓨란환, 또는 인돌환이 바람직하다.

[0085]

식(1) 중, C환은 식(C)으로 표현되는 환구조이다. 식(C)중, 어느 연속하는 2개의 Z^C는 일방이 Y1과 결합하는 탄

소, 타방이 X2과 결합하는 탄소이다. 즉 Y1 및 X2은 C환상에 있어서 인접하고 있다. 이것은 하기에 나타내는 대로, c1환의 어느 연속하는 2개의 Z^c가 Y1 및 X2과 결합해도 되고, 또한 c2환의 어느 연속하는 2개의 Z^c가 Y1 및 X2과 결합해도 되는 것을 의미한다. 그 바람직한 형태를 하기에 나타낸다. 식(1a), 식(1b), 식(1c), 식(1d), 식(1e), 식(1f), 식(1g) 및 식(1h)에 있어서, Z^c가 각각 독립적으로 모두 C-R1인 형태가 바람직하고, 또 식(1c), 식(1d), 식(1e), 식(1f), 식(1g) 및 식(1h)에 있어서는, c2환의 Z^c가 각각 독립적으로 모두 C-R^c이며, 후술하는 바와 같이, 인접하는 R^c가 서로 결합을 형성해서 아릴환(바람직하게는 벤젠환)을 형성하고 있는 형태도 바람직하다. 또한, 식(1a), 식(1b), 식(1c), 식(1d), 식(1e), 식(1f), 식(1g) 및 식(1h)에 있어서는, 식(1a), 식(1b)이 바람직하고, 식(1a)이 가장 바람직하다. 마찬가지로 각 부호, 어구의 설명에 관해서는, 후술하는 본 명세서의 기재를 참조할 수 있다.



[0086]

[0087]

식(1a)~식(1h) 중, X^c는 >O, >N-R, >C(-R)₂, >Si(-R)₂, >S, 또는 >Se이며, 상기 >N-R, 상기 >C(-R)₂ 및 상기 >Si(-R)₂의 R은 각각 독립적으로 수소, 치환 혹은 무치환의 아릴, 치환 혹은 무치환의 헤테로아릴, 치환 혹은 무치환의 알킬, 또는 치환 혹은 무치환의 시클로알킬이며, 상기 >C(-R)₂ 및 상기 >Si(-R)₂의 2개의 R은 서로 결

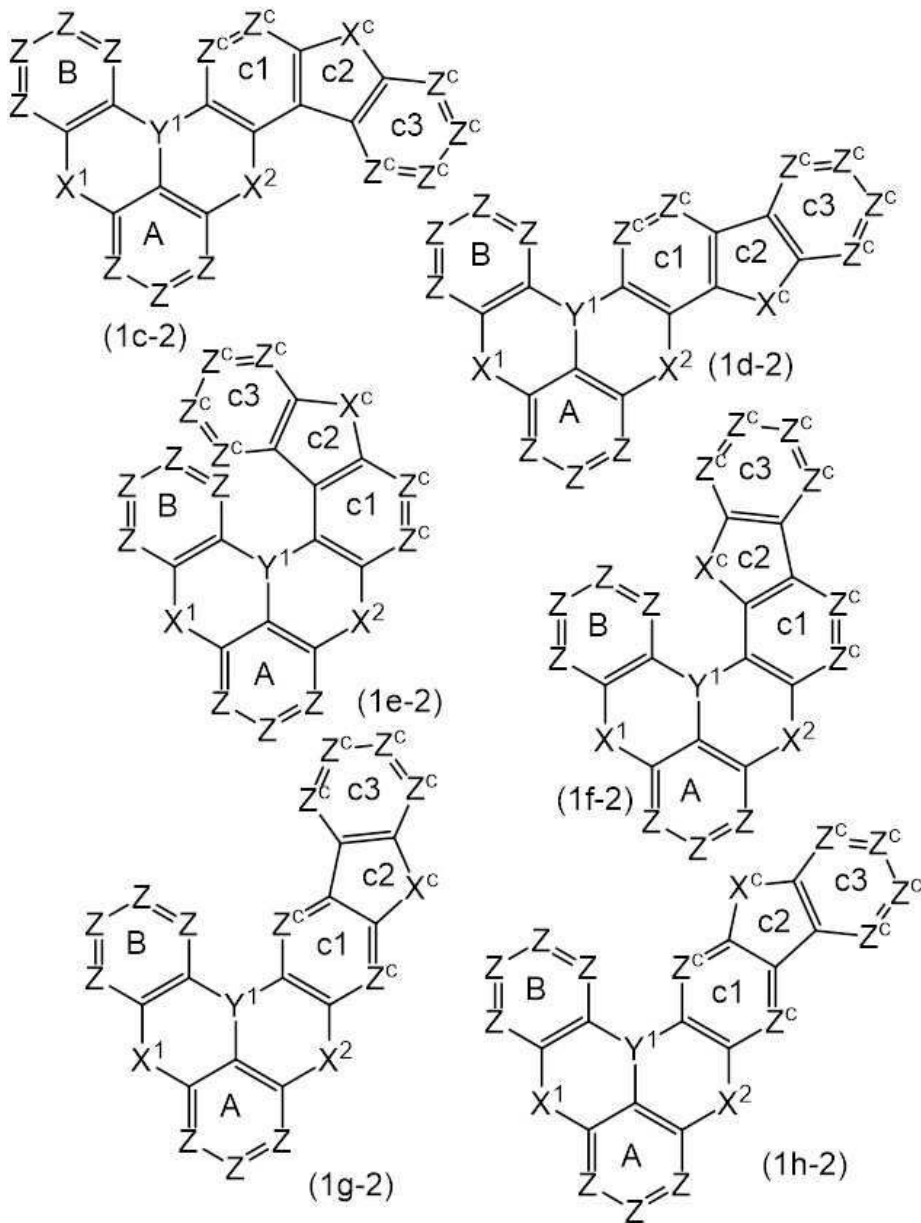
합해서 환을 형성하고 있거나, 또는 형성하지 않고 있다. 이 기는 「치환 혹은 무치환의」라고 설명되어 있는데, 적어도 하나의 수소가 치환될 경우에는, 아릴, 헤테로아릴, 디아릴아미노, 알킬, 시클로알킬, 또는 치환 실릴이 바람직하다. 이 제1 치환기와 제2 치환기에 관해서, 또한 여기에서 사용된 어구, 및 그 바람직한 범위에 관해서는, 명세서중의 기재를 참조할 수 있다.

[0088] 식(1a)~식(1h) 중, Z^C 는 각각 독립적으로, N 또는 C-R^C이며, R^C는 각각 독립적으로, 수소, 치환 혹은 무치환의 아릴, 치환 혹은 무치환의 헤테로아릴, 치환 혹은 무치환의 디아릴아미노, 치환 혹은 무치환의 디헤테로아릴아미노, 치환 혹은 무치환의 아릴헤테로아릴아미노, 치환 혹은 무치환의 디아릴보릴, 치환 혹은 무치환의 알킬, 치환 혹은 무치환의 시클로알킬, 치환 혹은 무치환의 알케닐, 치환 혹은 무치환의 알콕시, 치환 혹은 무치환의 아릴옥시, 치환 혹은 무치환의 아릴티오, 또는 치환 실릴이다.

[0089] 이 기는 「치환 혹은 무치환의」라고 설명되어 있는데, 적어도 하나의 수소가 치환될 경우에는, 아릴, 헤테로아릴, 디아릴아미노, 알킬, 시클로알킬, 또는 치환 실릴이 바람직하다. 이 제1 치환기와 제2 치환기에 관해서, 또한 여기에서 사용된 어구 및 그 바람직한 범위에 관해서는, 명세서중의 기재를 참조할 수 있다.

[0090] 인접하는 2개의 R^C는 서로 결합하여, 아릴환 또는 헤테로아릴환을 형성해도 좋다. 형성된 아릴환 및 헤테로아릴환의 적어도 하나의 수소는, 각각 독립적으로, R^C로 치환되어 있거나, 또는 치환되어 있지 않다. 또한 여기에서 사용된 어구 및 그 바람직한 범위에 관해서는, 명세서중의 기재를 참조할 수 있다.

[0091] 식(1c), 식(1d), 식(1e), 식(1f), 식(1g) 및 식(1h)에 있어서는, c2환의 Z^C 는, 각각 독립적으로, N 또는 C-R^C이며, 또한 인접하는 C-R^C는 서로 결합을 형성해서 아릴환, 또는 헤테로아릴환(바람직하게는 아릴환이며, 보다 바람직하게는 벤젠환)을 형성하고 있는 것이 바람직하다. 이 바람직한 형태를 하기에 나타낸다. 식(1c-2), 식(1d-2), 식(1e-2), 식(1f-2), 식(1g-2) 및 식(1h-2)의 각부호의 정의, 및 그 바람직한 범위에 관해서는, 식(1c), 식(1d), 식(1e), 식(1f), 식(1g) 및 식(1h)의 설명을 참조할 수 있다.



[0092]

[0093]

식(1) 중, 및 그 바람직한 형태 중, Y1은, 각각 독립적으로, B, P, P=O, P=S, Al, Ga, As, Si-R, 또는 Ge-R이며, B, P=O 또는 P=S가 바람직하고, B가 가장 바람직하다. 상기 Si-R 및 Ge-R의 R은, 탄소수 6~12의 아릴, 탄소수 1~6의 알킬, 또는 탄소수 3~14의 시클로알킬이다. 식(1)의 Y1에 있어서의 Si-R 및 Ge-R의 R은, 아릴, 알킬 또는 시클로알킬이지만, 이 아릴, 알킬 또는 시클로알킬로서는 상술하는 기를 들 수 있다. 특히 탄소수 6~10의 아릴(예를 들면 페닐, 나프틸 등), 탄소수 1~5의 알킬(예를 들면 메틸, 에틸 등) 또는 탄소수 5~10의 시클로알킬(바람직하게는 시클로헥실이나 아다만틸)이 바람직하다.

[0094]

식(1)에 있어서의 X1 및 X2은, 각각 독립적으로, >N-G, >O, >N-R(이 G인 것을 제외한다), >Si(-R)₂, >C(-R)₂, >S, >Se이며, 단, X1 및 X2의 적어도 1개는 >N-G다. >N-G에 있어서의 G는 후술하는 식(G)으로 표현되는 1가의 기이다. X1 및 X2의 일방이 >N-G일 경우의, 타방의 X1혹은 X2은 >N-G, >N-R, >C(-R)₂, 또는 >O인 것이 바람직하고, >N-G, 또는 >N-R인 것이 보다 바람직하다.

[0095]

X1 또는 X2인 >N-R의 R은, 수소, 치환되어 있어도 되는 아릴(단 치환기로서 아미노를 제외한다), 치환되어 있어도 되는 헤테로아릴, 치환되어 있어도 되는 알킬 또는 치환되어 있어도 되는 시클로알킬이다. G인 것은 포함되지 않는다. X1 및 X2인 >Si(-R)₂의 R은, 각각 독립적으로, 수소, 치환되어 있어도 되는 아릴, 치환되어 있어도 되는 헤테로아릴, 치환되어 있어도 되는 알킬 또는 치환되어 있어도 되는 시클로알킬이다.

[0096]

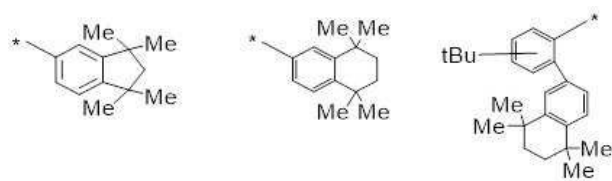
X1 또는 X2인 >Si(-R)₂ 및 >C(-R)₂의 R은, 각각 독립적으로, 수소, 치환되어 있어도 되는 아릴, 치환되어 있어

도 되는 헤테로아릴, 치환되어 있어도 되는 알킬, 또는 치환되어 있어도 되는 시클로알킬이며, 2개의 R은 동일 한 것이 바람직하고, 그리고 2개의 R은 결합해서 환을 형성하고 있어도 된다.

[0097] X1 또는 X2인 >N-R, >Si(-R)₂, 또는 >C(-R)₂의 R에 있어서의 아릴, 헤테로아릴, 알킬, 시클로알킬에 대해서는, 상기의 제1 치환기로서의 그들의 설명을 참조할 수 있다.

[0098] X1 또는 X2인 >N-R의 R은 치환되어 있어도 되는 아릴, 치환되어 있어도 되는 헤테로아릴, 또는 치환되어 있어도 되는 시클로알킬인 것이 바람직하고, 치환되어 있어도 되는 아릴 또는 치환되어 있어도 되는 헤테로아릴인 것이 보다 바람직하다. 시클로알킬의 예로서는, 후술하는 예를 제시할 수 있다. 여기에서, 아릴로서는, 페닐, 비페닐릴(특히, 2-비페닐릴, 또는 4-비페닐릴), 및 터페닐릴(특히, 터페닐-2'-일, 또는 터페닐-4'-일)이 바람직하고, 헤테로아릴로서는, 벤조티에닐(2-벤조티에닐, 6-벤조티에닐 등), 벤조퓨라닐(2-벤조퓨라닐, 3-벤조퓨라닐, 5-벤조퓨라닐 등), 디벤조퓨라닐(2-디벤조퓨라닐, 3-디벤조퓨라닐, 4-디벤조퓨라닐, 5-디벤조퓨라닐 등)등이 바람직하다. 치환기로서는 하기 식(tR)으로 표현되는 터서리알킬(특히, t-부틸), 또는 시클로알킬(특히, 아다만틸)이 바람직하다. 아릴 및 헤테로아릴에 있어서의 치환기수는 0-2개가 바람직하고, 1개 또는 2개가 보다 바람직하고, 1개가 더욱 바람직하다. 상기의 아릴에 있어서의 아릴환이 후술과 같이 치환되어 있어도 되는 시클로알칸으로 축합되어 있는 경우도 바람직하다. 구체적인 시클로알칸으로서, 후술되는 것을 참조할 수 있다.

[0099] X1 또는 X2인 >N-R의 R으로서 특히 바람직한 예로서는, 치환되어 있어도 되는 2-비페닐릴 또는 4-비페닐릴, 치환되어 있어도 되는 터페닐-2'-일 또는 터페닐-4'-일, 및 시클로알칸으로 축합되어 있는 아릴(치환되어 있어도 좋다)을 들 수 있다. 치환되어 있어도 되는 2-비페닐릴 또는 4-비페닐릴로서는, 1-3개의 t-부틸로 치환되고 있는 2-비페닐릴 또는 4-비페닐릴이 특히 바람직하다. 치환되어 있어도 되는 터페닐-2'-일 또는 터페닐-4'-일로서는, 무치환의 [1,1':3',1''-터페닐]-2'-일 또는 1-3개의 t-부틸로 치환되어 있는 [1,1':4',1''-터페닐]-4'-일이 특히 바람직하다. 시클로알칸으로 축합되어 있는 아릴로서는, 특히 이하가 바람직하다.

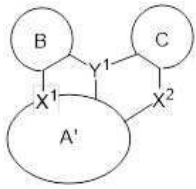


[0100] (Me은 메틸, tBu는 t-부틸, *은 결합 위치를 나타낸다)

[0101] X1 및 X2중 어느 하나가 >N-R일 때, >N-R의 R은, 시클로알칸으로 축합되어 있는 아릴(치환되어 있어도 된다)인 것도 바람직하다.

[0102] X1 또는 X2인 >N-R, >Si(-R)₂ 및 >C(-R)₂의 적어도 1개에 있어서의 R은 연결기 또는 단결합에 의해 A환 및 B환 중 어느 하나, 또는 A환 및 C환 중 어느 하나와 결합하고 있어도 된다. 즉, X1인 >N-R, >Si(-R)₂ 및 >C(-R)₂의 적어도 1개에 있어서의 R은 연결기 또는 단결합에 의해 A환 및 B환 중 어느 하나와 결합하고 있어도 되고, X2인 >N-R, >Si(-R)₂ 및 >C(-R)₂의 적어도 1개에 있어서의 R은 연결기 또는 단결합에 의해 A환 및 C환 중 어느 하나와 결합하고 있어도 된다. 연결기로서는, -O-, -S-, 또는 -C(-R13)₂-이 바람직하다. 상기 「-C(-R13)₂-」의 R13은, 수소, 알킬 또는 시클로알킬이지만, 이 알킬 또는 시클로알킬로서는 각각 제1 치환기로서 상술하는 기를 들 수 있다. 특히 탄소수 1~5의 알킬(예를 들면 메틸, 에틸 등) 또는 탄소수 5~10의 시클로알킬(바람직하게는 시클로헥실이나 아다만틸)이 바람직하다.

[0103] 또한, 상기 규정은, 하기 식(1-3-2)으로 표현되는, >N-R인 X1이 축합환 A'에 받아들여진 환구조를 가지는 화합물로 표현할 수 있다. 즉, 예를 들면 벤젠환인 A'환에 대하여 X1 및 X2중 어느 하나를 받아들여도록 하고 다른 환이 축합하여 형성되는 A'환을 가지는 화합물이다. 형성되어 얻어진 축합환 A'는 예를 들면, 카르바졸환, 페녹사진환, 또는 페노티아진환이다.



(1-3-2)

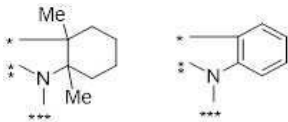
[0105]

[0106]

일 예로서, 상기 >N-R의 R이 치환되어 있어도 되는 시클로알킬이며, 또한 A환, B환, 또는 C환과 단결합으로 결합하고 있는 형태도 바람직하다. 시클로알킬로서는, 치환되어 있어도 되는 시클로펜틸, 또는 치환되어 있어도 되는 시클로헥실이 바람직하다.

[0107]

전술한 바와 같이, 형성되어 얻어진 축합환의 특히 바람직한 예로서 식(A11) 또는 식(A12)으로 표현되는 구조를 들 수 있다. 식(A11) 및 식(A12) 중, *은 「X1 또는 X2인 >N-R, >Si(-R)₂ 및 >C(-R)₂의 적어도 1개에 있어서의 R은 연결기 또는 단결합에 의해 A환 및 B환 중 어느 하나, 또는 A환 및 C환 중 어느 하나와 결합하고 있어도 된다」라고 하는 상기의 규정에 있어서, 단결합에 의해 결합하고 있는 형태에 대응하고 있다. 전술한 바와 같이, 이 경우, 메틸기가 치환하고 있는 2개의 탄소는 부제탄소이며, 식(1)으로 표현되는 화합물로서는 디아스테레오머 및 에난티오머가 존재할 수 있지만, 식(1)으로 표현되는 화합물로서는 그들의 어느 이성체이어도 되고, 또한 가능한 이성체가 임의의 비로 혼합되고 있는 형태이어도 된다.



(A11)

(A12)

[0108]

[0109]

식(A11) 중, Me은 메틸이며, *과 **의 위치에서 X1 또는 X2이 결합하는 2개의 환의 일방 환에, ***의 위치에서 타방의 환에 결합하고 있다.

[0110]

상기의 바람직한 범위의 R인 >N-R을 X1 또는 X2로서 가지는 본 발명의 화합물을 발광 재료로 해서 소자의 제조에 사용하는 것에 의해, 발광효율이나 소자수명을 더욱 향상시킬 수 있다.

[0111]

식(1)의 X1 또는 X2인 >Si(-R)₂의 R은, 수소, 치환되어 있어도 되는 아릴, 치환되어 있어도 되는 헤테로아릴, 치환되어 있어도 되는 알킬, 또는 치환되어 있어도 되는 시클로알킬이다. 여기에서, 치환되어 있을 때의 치환기로서는 상술한 제2 치환기를 들 수 있다. 이 아릴, 헤테로아릴, 알킬 또는 시클로알킬로서는 각각 제1 치환기로서 상술하는 기를 들 수 있다. 특히 탄소수 6~10의 아릴(예를 들면 페닐, 나프틸 등), 탄소수 2~15의 헤테로아릴(예를 들면 카르바졸릴 등), 탄소수 1~5의 알킬(예를 들면 메틸, 에틸 등) 또는 탄소수 5~10의 시클로알킬(바람직하게는 시클로헥실이나 아다만틸)이 바람직하다.

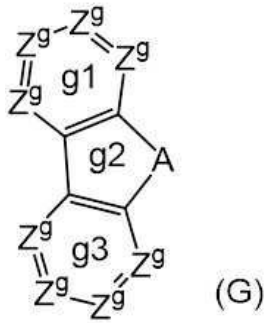
[0112]

식(1)의 X1 또는 X2인 >C(-R)₂의 R은, 수소, 치환되어 있어도 되는 아릴, 치환되어 있어도 되는 헤테로아릴, 치환되어 있어도 되는 알킬 또는 치환되어 있어도 되는 시클로알킬이다. 여기에서, 치환되어 있을 때의 치환기로서는 상술한 제2 치환기를 들 수 있다. 이 아릴, 헤테로아릴, 알킬 또는 시클로알킬로서는 각각 제1 치환기로서 상술하는 기를 들 수 있다. 특히 탄소수 6~10의 아릴(예를 들면 페닐, 나프틸 등), 탄소수 2~15의 헤테로아릴(예를 들면 카르바졸릴 등), 탄소수 1~5의 알킬(예를 들면 메틸, 에틸 등) 또는 탄소수 5~10의 시클로알킬(바람직하게는 시클로헥실이나 아다만틸)이 바람직하다.

[0113]

다음에 식(1)에 있어서의, 식(G)으로 표현되는 기에 대해서 설명한다. X1 및 X2의 적어도 1개는, >N-G이다.

[0114] G는, 하기 식(G)으로 표현되는 1가의 기이다.



[0115]

[0116] Z^g 는 각각 독립적으로, N, $C-R^g$ 또는 $C-Ar^g$ 이다.

[0117] R^g 는 각각 독립적으로, 수소, 치환 혹은 무치환의 디아릴아미노, 치환 혹은 무치환의 디헤테로아릴아미노, 치환 혹은 무치환의 아릴헤테로아릴아미노, 치환 혹은 무치환의 디아릴보릴, 치환 혹은 무치환의 알킬, 치환 혹은 무치환의 시클로알킬, 치환 혹은 무치환의 알케닐, 치환 혹은 무치환의 알콕시, 치환 혹은 무치환의 아릴옥시, 치환 혹은 무치환의 아릴티오, 또는 치환 실릴이다. 또한, Ar^g 는 각각 독립적으로, 치환 혹은 무치환의 아릴, 또는 치환 혹은 무치환의 헤테로아릴이다. 이 기는 「치환 혹은 무치환의」라고 설명되어 있는데, 적어도 하나의 수소가 치환될 경우에는, 아릴, 헤테로아릴, 디아릴아미노, 알킬, 시클로알킬, 또는 치환 실릴이 바람직하다.

[0118] R^g 는 수소, 치환 혹은 무치환의 디아릴아미노, 치환 혹은 무치환의 알킬, 치환 또는 무치환의 시클로알킬 또는 치환 실릴인 것이 바람직하고, 수소 또는 알킬(특히 후술하는 tR)인 것이 가장 바람직하다. 또한 여기에서 사용된 어구 및 그 바람직한 범위에 관해서는, 명세서중의 기재를 참조할 수 있다. 식(G)중, 0~3개의 R^g 가 수소이외의 치환기이며, 기타의 R^g 는 수소인 것이 바람직하고, 0~2개의 R^g 가 수소이외의 치환기이며, 기타의 R^g 는 수소인 것이 보다 바람직하고, 0~1개의 R^g 가 수소이외의 치환기이며, 기타의 R^g 는 수소인 것이 더욱 바람직하다.

[0119] 식(G)중, 적어도 하나의 Z^g 는 $C-Ar^g$ 이지만, 1~3개의 Z^g 가 $C-Ar^g$ 인 것이 바람직하고, 1~2개의 Z^g 가 $C-Ar^g$ 인 것이 보다 바람직하고, 1개의 Z^g 가 $C-Ar^g$ 인 것이 더욱 바람직하다.

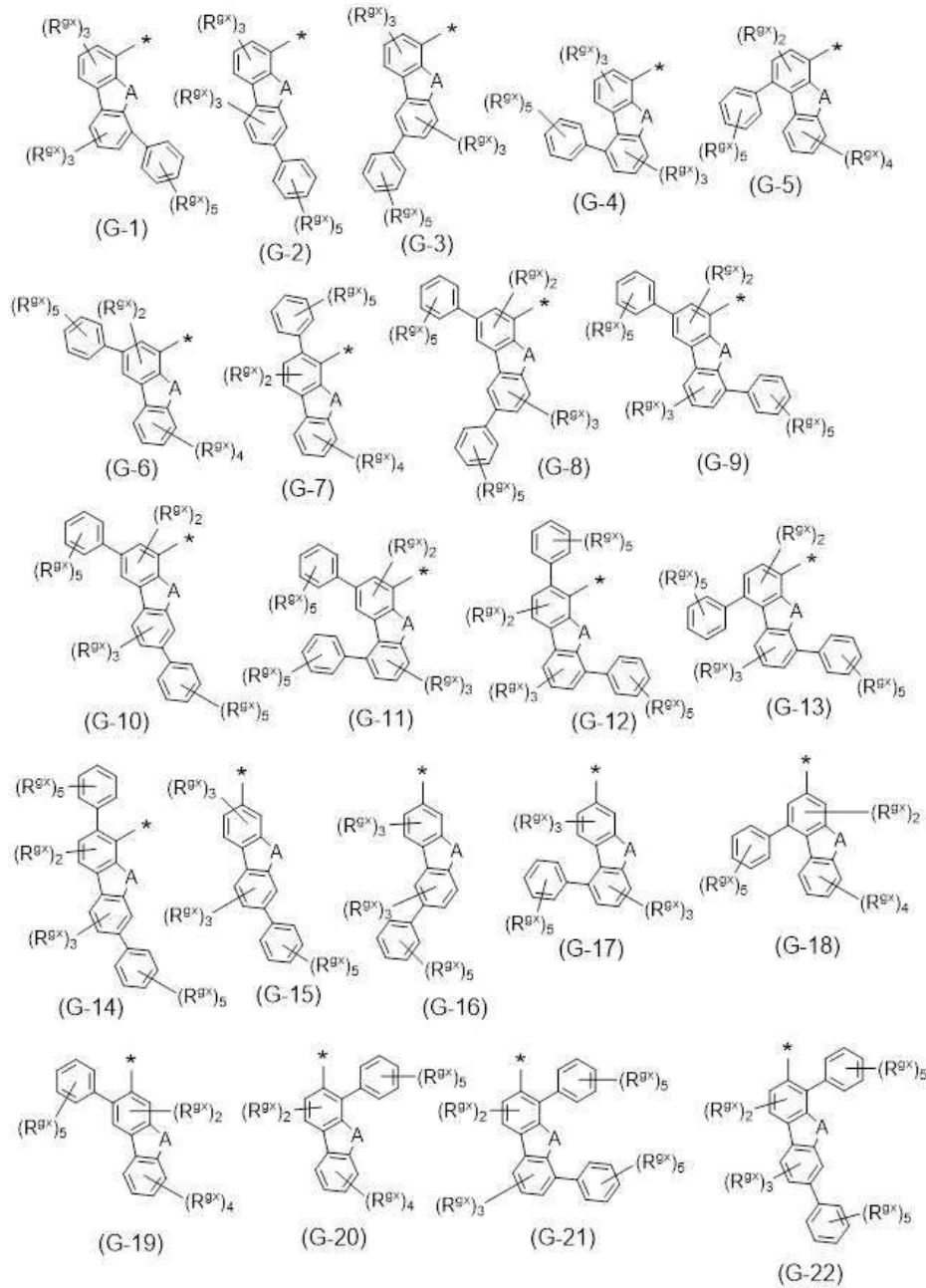
[0120] 인접하는 2개의 R^g 는 서로 결합하여, 아릴환 또는 헤테로아릴환을 형성해도 되고, 상기 형성된 아릴환 및 헤테로아릴환의 적어도 하나의 수소는, R^g (단, 여기에서는 R^g 가 수소를 나타낼 경우 및 R^g 가 서로 결합해서 환을 형성할 경우를 제외한다)로 치환되지 않거나, 또는 치환되어 있다. 여기서 설명된 어구, 그 바람직한 범위에 관해서는, 명세서중의 기재를 참조할 수 있다.

[0121] 또한, 임의의 1개의 Z^g 는, X1 및/또는 X2인 $>N-G$ 의 N과 결합하는 탄소다. 즉, 결합손은 g1환 또는 g2환에 존재한다.

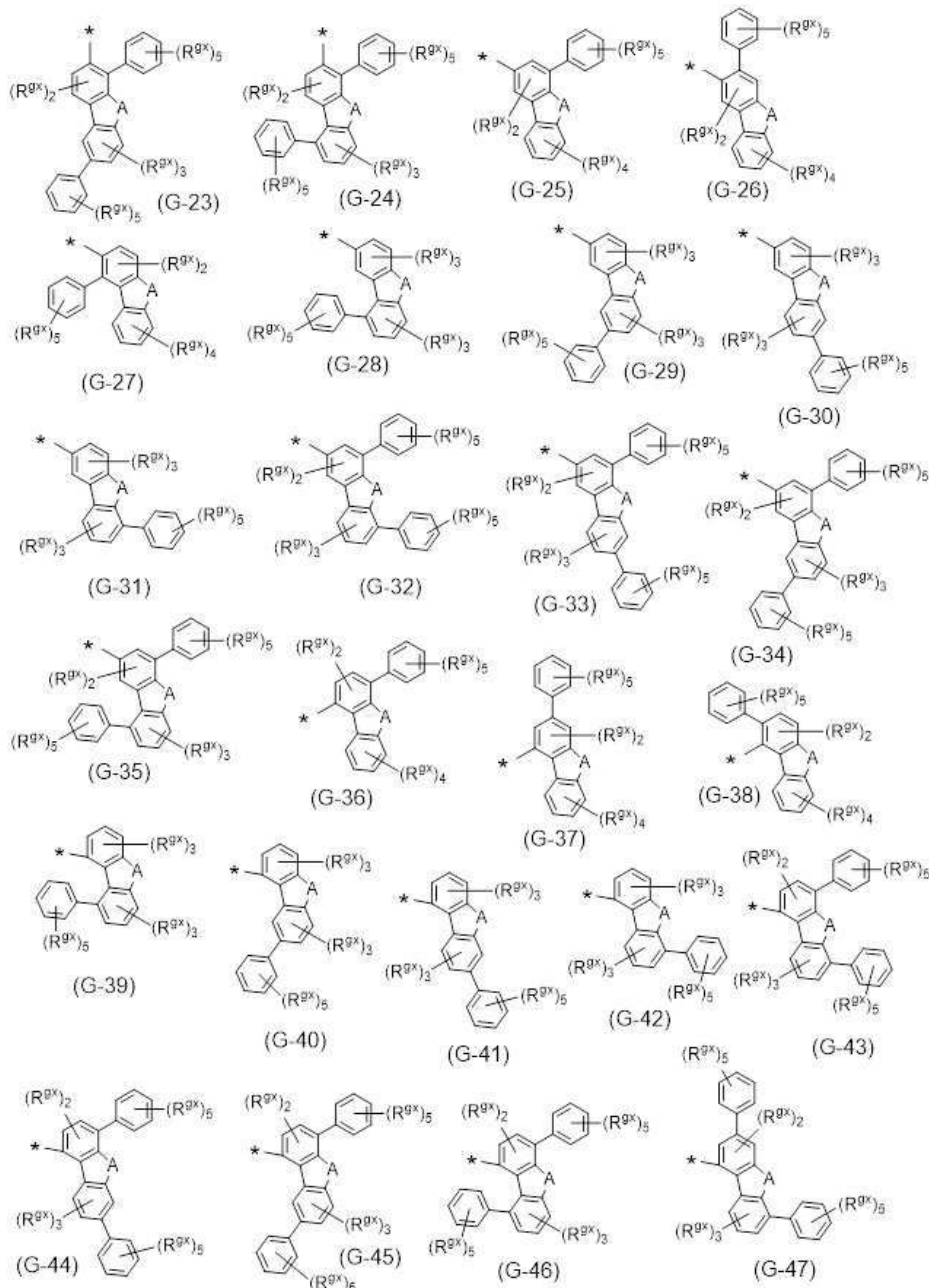
[0122] A는, $>O$, $>N-R$, $>Si(-R)_2$, $>S$, 또는 $>Se$ 이며, 상기 $>N-R$, 및 상기 $>Si(-R)_2$ 의 R은 각각 독립적으로 수소, 치환 혹은 무치환의 아릴, 치환 혹은 무치환의 헤테로아릴, 치환 혹은 무치환의 알킬, 치환 혹은 무치환의 시클로알킬이며, 상기 $>Si(-R)_2$ 의 2개의 R은 서로 결합해서 환을 형성하고 있거나, 또는 형성하지 않고 있다. 이 기는 「치환 혹은 무치환의」라고 설명되어 있는데, 적어도 하나의 수소가 치환될 경우에는, 아릴, 헤테로아릴, 디아릴아미노, 알킬, 시클로알킬, 또는 치환 실릴이 바람직하다. 여기서 설명된 어구, 그 바람직한 범위에 관해서는, 명세서중의 기재를 참조할 수 있지만, A로서는, $>O$, $>N-R$, 혹은 $>S$ 인 것이 바람직하고, $>O$ 혹은 $>N-R$ 인 것이 보다 바람직하다.

[0123] 식(G)으로 표현되는 1가의 기의 구체적인 형태로서는 하기 식(G-1)~(G-56)중 어느 하나로 표현되는 1가의 기를 들 수 있다. 단 식(G)으로 표현되는 1가의 기는, 이 예에 한정되는 것이 아니다. 마찬가지로 하기 식(G-1)~(G-56) 중, R^{ex} 는, 각각 독립적으로, 수소, 치환 혹은 무치환의 아릴, 치환 혹은 무치환의 헤테로아릴, 치환 혹은 무치환의 디아릴아미노, 치환 혹은 무치환의 디헤테로아릴아미노, 치환 혹은 무치환의 아릴헤테로아릴아미노,

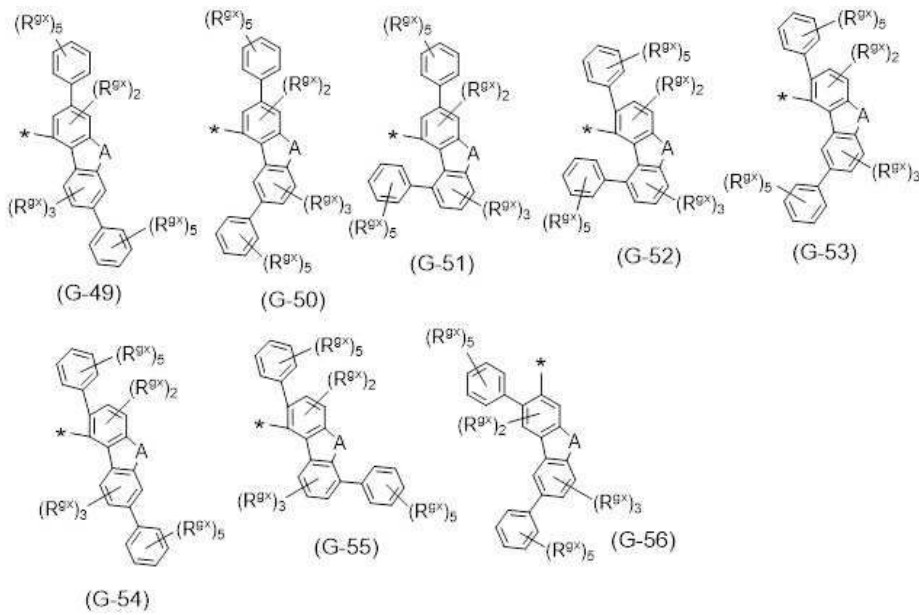
치환 혹은 무치환의 디아릴보릴, 치환 혹은 무치환의 알킬, 치환 혹은 무치환의 시클로알킬, 치환 혹은 무치환의 알케닐, 치환 혹은 무치환의 알콕시, 치환 혹은 무치환의 아릴옥시, 또는 치환 혹은 무치환의 아릴티오이지만, 수소, 알킬(특히 후술하는 tR, 바람직하게는 t-부틸), 또는 시클로알킬이 바람직하다. 각 식의 각 환에 있어서의 0~2이 수소이외의 기인 것이 바람직하고, 0~1이 수소이외의 기인 것이 바람직하다. *은 X1 또는 X2인 >N-G중의 N과의 결합 위치를 나타낸다.



[0124]



[0125]



[0126]

[0127]

상기 식(G-1)~식(G-56) 중, 식(G-1), 식(G-2), 식(G-3), 식(G-4), 식(G-5), 식(G-6), 식(G-7), 식(G-15), 식(G-16), 식(G-17), 식(G-18), 식(G-19)식(G-20), 식(G-25), 식(G-26), 식(G-27), 식(G-28), 식(G-29), 식(G-30), 식(G-31), 식(G-36), 식(G-37), 식(G-38), 식(G-39), 식(G-40), 식(G-41), 또는 식(G-42)이 바람직하고, 식(G-1), 식(G-3), 식(G-6), 또는 식(G-7)이 보다 바람직하고, 식(G-1), 식(G-6), 또는 식(G-7)이 더욱 바람직하다. 식(G-1), 또는 식(G-6), 또는 식(G-7)은, 전압과 외부양자효율의 관점에서 바람직하다.

[0128]

본 발명의 다환방향족 화합물은 식(1), 및 그 바람직한 형태로 표현되는 구조단위 1개 또는 2개 이상으로 이루어지는 구조를 가지는 다환방향족 화합물이다. 상기 구조단위 1개로 이루어지는 구조를 가지는 다환방향족 화합물로서는, 식(1)으로 표현되는 구조단위로서 상기에서 설명한 식으로 표현되는 다환방향족 화합물을 제시할 수 있다. 식(1)으로 표현되는 구조단위 2개 이상으로 이루어지는 구조를 가지는 다환방향족 화합물로서는, 식(1)으로 표현되는 구조단위로서 상기에서 설명한 식으로 표현되는 다환방향족 화합물의 다량체에 해당하는 화합물을 들 수 있다. 다량체는, 2~6량체가 바람직하고, 2~3량체가 보다 바람직하고, 2량체가 특히 바람직하다. 다량체는, 1개의 화합물 중에 상기 단위구조를 복수 가지는 형태이면 되고, 상기 구조단위에 포함되는 임의의 환(A환, B환 또는 C환)을 복수의 단위구조에서 공유하도록 해서 결합한 형태이어도 되고, 또한, 상기 단위구조에 포함되는 임의의 환(A환, B환 또는 C환)끼리가 축합하도록 해서 결합한 형태이면 된다. 또한, 상기 단위구조가 단결합, 탄소수 1~3의 알킬렌, 페닐렌, 나프틸렌 등의 연결기에서 복수결합한 형태이어도 된다. 이들 중, 환을 공유하도록 해서 결합한 형태가 바람직하다.

[0129]

식(1)으로 표현되는 구조단위 1개 또는 2개이상으로 이루어지는 구조를 가지는 다환방향족 화합물, 및 그 바람직한 형태에 있어서의 아릴환 및 헤테로아릴환으로 이루어지는 군으로부터 선택되는 적어도 1개는, 적어도 하나의 시클로알칸으로 축합되지 않거나, 또는 축합되어 있다.

[0130]

시클로알칸으로서, 탄소수 3~24의 시클로알칸이면 된다. 이 때의 시클로알칸에 있어서의 적어도 하나의 수소는, 탄소수 6~30의 아릴, 탄소수 2~30의 헤테로아릴, 탄소수 1~24의 알킬 또는 탄소수 3~24의 시클로알킬로 치환되어 있어도 되고, 해당 시클로알칸에 있어서의 적어도 하나의 -CH₂-는 -O-으로 치환되어 있어도 되지만, 모두가 -CH₂-인 시클로알칸이 바람직하다.

[0131]

식(1)으로 표현되는 구조단위 1개 또는 2개이상으로 이루어지는 구조가 적어도 하나의 시클로알칸으로 축합되어 있을 경우, 적어도 하나의 시클로알칸은, 탄소수 3~20의 시클로알칸이며, 해당 시클로알칸에 있어서의 적어도 하나의 수소가, 탄소수 6~16의 아릴, 탄소수 2~22의 헤테로아릴, 탄소수 1~12의 알킬 또는 탄소수 3~16의 시클로알킬로 치환되어 있어도 되는 시클로알칸인 것이 바람직하다.

[0132]

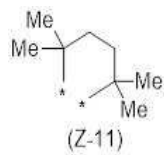
「시클로알칸」로서는, 탄소수 3~24의 시클로알칸, 탄소수 3~20의 시클로알칸, 탄소수 3~16의 시클로알칸, 탄소수 3~14의 시클로알칸, 탄소수 5~10의 시클로알칸, 탄소수 5~8의 시클로알칸, 탄소수 5~6의 시클로알칸, 탄소수 6의 시클로알칸 등을 들 수 있다.

[0133]

구체적인 시클로알칸으로서, 시클로프로판, 시클로부탄, 시클로펜탄, 시클로헥산, 시클로헵탄, 시클로옥탄,

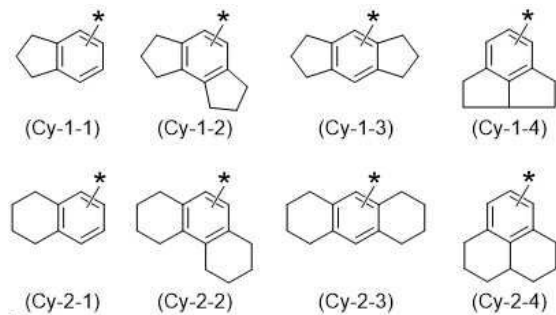
시클로노난, 시클로데칸, 노보넨, 비시클로[1.1.0]부탄, 비시클로[1.1.1]펜탄, 비시클로[2.1.0]펜탄, 비시클로[2.1.1]헥산, 비시클로[3.1.0]헥산, 비시클로[2.2.1]헵탄, 비시클로[2.2.2]옥탄, 아다만탄, 디아만탄, 데카히드로나프탈렌 및 데카히드로아즈렌 및, 이 탄소수 1~5의 알킬(특히 메틸)치환체, 할로젠(특히 불소)치환체 및 중수소치환체 등을 들 수 있다.

[0134] 이들 중에서도, 예를 들면 하기 구조식으로 나타내는 것 같은, 시클로알칸의 α 위치 탄소(아릴환 또는 헤테로아릴환에 축합되는 시클로알킬에 있어서, 축합부위의 탄소에 인접하는 위치의 탄소, 벤질 자리에 상당한다)에 있어서 적어도 하나의 수소가 치환된 구조가 바람직하고, α 위치의 탄소에 있어서의 2개의 수소가 치환된 구조가 보다 바람직하고, 2개의 α 위치의 탄소에 있어서의 합계 4개의 수소가 치환된 구조가 더욱 바람직하다. 이것은 화학적으로 활성인 부위를 보호하고, 화합물의 내구성을 향상시키기 위해서다. 이 치환기로서는, 탄소수 1~5의 알킬(특히 메틸)치환체, 할로젠(특히 불소)치환체 및 중수소 치환체 등을 들 수 있다. 특히, 아릴환 또는 헤테로아릴환에 있어서 인접하는 탄소원자에 하기 식(Z-11)으로 표현되는 부분 구조가 결합한 구조가 되고 있는 것이 바람직하다.

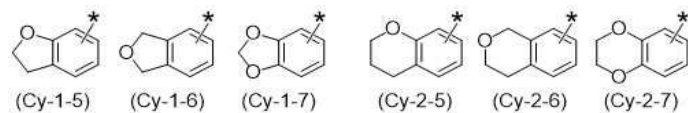


[0135] 식(Z-11) 중, Me은 메틸을 나타내고, *은 결합 위치를 나타낸다.
 [0136]

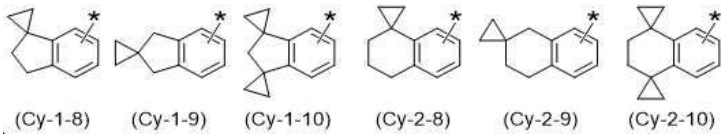
[0137] 1개의 아릴환 또는 헤테로아릴환에 축합되는 시클로알칸의 수는, 1~3개가 바람직하고, 1개 또는 2개가 보다 바람직하고, 1개가 더욱 바람직하다. 예를 들면 1개의 벤젠환(페닐)에 1개 또는 복수의 시클로알칸이 축합된 예를 이하에 나타낸다. *은 결합 위치를 나타내고, 그 위치는 벤젠환을 구성하고 또한 시클로알칸을 구성하지 않고 있는 탄소 중 어느 것이어도 된다. 식(Cy-1-4) 및 식(Cy-2-4)과 같이 축합된 시클로알칸끼리가 축합되어도 된다. 축합되는 환(기)이 벤젠환(페닐)이외의 다른 아릴환 또는 헤테로아릴환의 경우이여도, 축합되는 시클로알칸이 시클로펜탄 또는 시클로헥산 이외의 다른 시클로알칸의 경우이여도, 마찬가지로이다.



[0138] 시클로알칸에 있어서 적어도 하나의 -CH₂-는 -O-로 치환되어 있어도 된다. 예를 들면 1개의 벤젠환(페닐)에 축합된 시클로알칸에 있어서의 1개 또는 복수의 -CH₂-가 -O-로 치환된 예를 이하에 나타낸다. 축합되는 환(기)이 벤젠환(페닐)이외의 다른 방향족환 또는 복소방향족환의 경우이여도, 축합되는 시클로알칸이 시클로펜탄 또는 시클로헥산 이외의 다른 시클로알칸의 경우이여도, 마찬가지로이다.



[0140] 시클로알칸에 있어서 적어도 하나의 수소는 치환되어 있어도 되고, 이 치환기로서는, 예를 들면, 아릴, 헤테로아릴, 디아릴아미노, 디헤테로아릴아미노, 아릴헤테로아릴아미노, 디아릴보릴, 알킬, 시클로알킬, 알콕시, 아릴옥시, 치환 실릴, 중수소, 시아노 또는 할로젠을 들 수 있고, 이들의 상세한 것은, 본 명세서중의 제1 치환기의 설명을 인용할 수 있다. 이 치환기 중에서도, 알킬(예를 들면 탄소수 1~6의 알킬), 시클로알킬(예를 들면 탄소수 3~14의 시클로알킬), 할로젠(예를 들면 불소) 및 중수소 등이 바람직하다. 또한, 시클로알킬이 치환될 경우는 스피로 구조를 형성하는 치환 형태라도 되고, 이 예를 이하에 나타낸다.
 [0141]

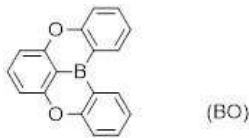


- [0142] (Cy-1-8) (Cy-1-9) (Cy-1-10) (Cy-2-8) (Cy-2-9) (Cy-2-10)
- [0143] 시클로알칸 축합의 형태로서는, 먼저, 식(1)으로 표현되는 구조단위 1개 또는 2개 이상으로 이루어지는 구조를 가지는 다환방향족 화합물로 있어서의 A환, B환 및 C환(c1환 또는 c2환)에 있어서의 어느 환이 시클로알칸으로 축합된 형태를 들 수 있다.
- [0144] 시클로알칸 축합의 다른 형태로서는, 식(1)으로 표현되는 구조단위 1개 또는 2개 이상으로 이루어지는 구조를 가지는 다환방향족 화합물, 및 그 바람직한 형태에 있어서, X1 및 X2이 1개인 >N-R의 R이 시클로알칸으로 축합된 형태, 또는 X1 및 X2이 1개인 >N-G의 G가 시클로알칸으로 축합된 형태, 또는 시클로알칸으로 축합된 디아릴아미노(이의 아릴 부분에 축합), 시클로알칸으로 축합된 카르바졸릴(이의 벤젠환 부분에 축합) 또는 시클로알칸으로 축합된 벤조 카르바졸릴(이의 벤젠환 부분에 축합)을 가지는 예를 들 수 있다. 디아릴아미노에 대해서는 상기 「제1 치환기」로 설명한 기를 들 수 있다.
- [0145] 식(1)으로 표현되는 구조단위 1개 또는 2개 이상으로 이루어지는 구조를 가지는 다환방향족 화합물, 및 그 바람직한 형태, 상기의 시클로알칸 축합은, A환, B환, 또는 C환에 축합되어 있는 형태가 바람직하고, B환 또는 C환에 축합되어 있는 형태가 보다 바람직하다. 또 B환 및 C환의 양쪽에 축합되어 있는 형태도 바람직하다.
- [0146] 한편, 본 발명의 다환방향족 화합물에 시클로알칸 구조를 도입함으로써, 융점이나 승화 온도의 저하를 기대할 수 있다. 이는, 높은 순도가 요구되는 유기 EL 소자 등의 유기 디바이스용 재료의 정제법으로서 거의 불가결한 승화 정제에 있어서, 비교적 저온으로 정제할 수 있기 때문에 재료의 열분해 등을 피할 수 있는 것을 의미한다. 또한 이는, 유기 EL 소자 등의 유기 디바이스를 제작하는데 유력한 수단인 진공증착 프로세스에 대해서도 마찬가지로, 비교적 저온으로 프로세스를 실시할 수 있기 때문에, 재료의 열분해를 피할 수 있고, 결과로서 고성능 유기 디바이스를 얻을 수 있다. 또한, 시클로알칸 구조의 도입에 의해 유기용매에의 용해성이 향상되기 때문에, 도포 프로세스를 이용한 소자제작에도 적용하는 것이 가능해진다. 단, 본 발명은 특히 이 원리에 한정되는 것은 아니다. 이로부터 식(1)으로 표현되는 구조단위 1개 또는 2개 이상으로 이루어지는 구조를 가지는 다환방향족 화합물, 및 그 바람직한 형태에 있어서는, 상기의 시클로알칸 축합이 도입되고 있는 것이 바람직하다.
- [0147] 식(1)으로 표현되는 구조단위, 및 그 바람직한 형태의 1개 또는 2개 이상으로 이루어지는 구조중의 수소는, 그 모두 또는 일부가 중수소, 시아노, 또는 할로젠으로 치환되어 있거나, 또는 치환되어 있지 않다.
- [0148] 예를 들면, 식(1)으로 표현되는 구조단위, 및 그 바람직한 형태 1개 또는 2개 이상으로 이루어지는 구조에 있어서는, A환, B환, C환, A-C환에의 치환기, Y1이 Si-R 또는 Ge-R일 때의 R(=알킬, 시클로알킬, 아릴), 및, X1 및 X2중 1개의 >N-R의 R, 또는 X1 및 X2중 1개의 >N-G의 G에 있어서의 수소가 중수소, 시아노 또는 할로젠으로 치환될 수 있지만, 이들 중에서도 아릴이나 헤테로아릴에 있어서의 모두 또는 일부의 수소가 중수소, 시아노, 또는 할로젠으로 치환된 양태를 들 수 있다. 할로젠은, 불소, 염소, 브롬 또는 요오드이며, 바람직하게는 불소, 염소, 또는 브롬, 보다 바람직하게는 불소 또는 염소이며, 불소가 더욱 바람직하다. 특히 수소가 중수소로 치환되는 형태는, 화합물의 안정성을 향상시키기 때문에 바람직하다. 1개의 수소가 중수소로 치환되는 것이 바람직하고, 복수의 수소가 중수소로 치환되는 것이 보다 바람직하고, 방향족부분의 수소가 모두 중수소로 치환되는 것이 더욱 바람직하고, 모든 수소가 중수소로 치환되는 것이 가장 바람직하다.
- [0149] 「아릴환」으로서, 예를 들면, 탄소수 6~30의 아릴환을 들 수 있어, 탄소수 6~16의 아릴환이 바람직하고, 탄소수 6~12의 아릴환이 보다 바람직하고, 탄소수 6~10의 아릴환이 특히 바람직하다.
- [0150] 구체적인 「아릴환」으로서, 단환계인 벤젠환, 2환계인 비페닐환, 축합 2환계인 나프탈렌환, 인덴환, 3환계인 터페닐환(m-터페닐, o-터페닐, p-터페닐), 축합 3환계인, 아세나프틸렌환, 플루오렌환, 페날렌환, 페난트렌환, 안트라센환, 축합 4환계인 트리페닐렌환, 피렌환, 나프타센환, 크리센환, 축합 5환계인 페틸렌환, 펜타센환 등을 들 수 있다. 또한, 플루오렌환, 벤조플루오렌환, 인덴환에는, 각각 플루오렌환, 벤조플루오렌환, 시클로펜탄환 등이 스피로 결합한 구조도 포함된다. 또한, 플루오렌환, 벤조플루오렌환 및 인덴환은, 메틸렌의 2개의 수소 중 2개가 각각 후술하는 제1 치환기로서의 메틸 등의 알킬로 치환하여, 디메틸플루오렌환, 디메틸벤조플루오렌환 및 디메틸인덴환 등으로 되어 있는 것도 포함된다.
- [0151] 「헤테로아릴환」으로서, 예를 들면, 탄소수 2~30의 헤테로아릴환을 들 수 있고, 탄소수 2~25의 헤테로아릴환이 바람직하고, 탄소수 2~20의 헤테로아릴환이 보다 바람직하며, 탄소수 2~15의 헤테로아릴환이 더욱 바람직하

고, 탄소수 2~10의 헤테로아릴환이 특히 바람직하다. 또한, 「헤테로아릴환」으로서는, 예를 들면 환구성 원자로서 탄소 이외에 산소, 황 및 질소에서 선택되는 헤테로 원자를 1개 내지 5개 함유하는 복소환 등을 들 수 있다.

[0152] 구체적 「헤테로아릴환」으로서는, 예를 들면, 피롤환, 옥사졸환, 이소 옥사졸환, 티아졸환, 이소 티아졸환, 이미다졸환, 옥사디아졸환, 티아디아졸환, 트리아졸환, 테트라졸환, 피라졸환, 피리딘환, 피리미딘환, 피리다진환, 피라진환, 트리아진환, 인돌환, 이소인돌환, 1H-인다졸환, 벤조이미다졸환, 벤조옥사졸환, 벤조티아졸환, 1H-벤조트리아졸환, 퀴놀린환, 이소퀴놀린환, 신놀린환, 키나졸린환, 퀴녹살린환, 프탈라진환, 나프트리딘환, 퓨린환, 프테리딘환, 카르바졸환, 카르보린환, 아크리딘환, 페녹사티인환, 페녹사진환, 페노티아진환, 페나진환, 페나자실린환, 인돌리진환, 퓨란환, 벤조퓨란환, 이소벤조퓨란환, 디벤조퓨란환, 티오펜환, 벤조티오펜환, 디벤조티오펜환, 퓨라잔환, 티안트렌환, 인돌로 카르바졸환, 벤조 인돌로 카르바졸환, 디벤조인돌로카르바졸환, 나프토벤조퓨란환, 디옥신환, 디히드로아크리딘환, 잔텐환, 티오잔텐환, 디벤조디옥신환 등을 들 수 있다. 또한, 디히드로아크리딘환, 잔텐환, 티오잔텐환은, 메틸렌의 2개의 수소 중 2개가 각각 후술하는 제1 치환기로서의 메틸 등의 알킬에 치환하여, 디메틸디히드로아크리딘환, 디메틸 잔텐환, 디메틸 티오잔텐환 등이 되어 있는 것도 바람직하다. 또 2환계인 비피리딘환, 페닐 피리딘환, 피리딜 페닐환, 3환계인 터피리딘환, 비스피리딜페닐환, 피리딜 비페닐환도 「헤테로아릴환」으로 들 수 수 있다. 또한, 「헤테로아릴환」에는 피란환도 포함되는 것으로 한다.

[0153] 또한, 하기 식(B0)도 헤테로아릴환에 포함한다.



[0154] 상기 「아릴환」 또는 「헤테로아릴환」에 있어서의 적어도 하나의 수소는, 제1 치환기인, 치환 혹은 무치환의 「아릴」, 치환 혹은 무치환의 「헤테로아릴」, 치환 혹은 무치환의 「디아릴아미노」, 치환 혹은 무치환의 「디헤테로아릴아미노」, 치환 혹은 무치환의 「아릴헤테로아릴아미노」, 치환 혹은 무치환의 「디아릴보릴」, 치환 혹은 무치환의 「알킬」, 치환 혹은 무치환의 「알케닐」, 치환 혹은 무치환의 「시클로알킬」, 치환 혹은 무치환의 「알콕시」, 치환 혹은 무치환의 「아릴옥시」, 치환 혹은 무치환의 「아릴티오」, 또는 「치환 실릴」로 치환되어 있어도 된다.

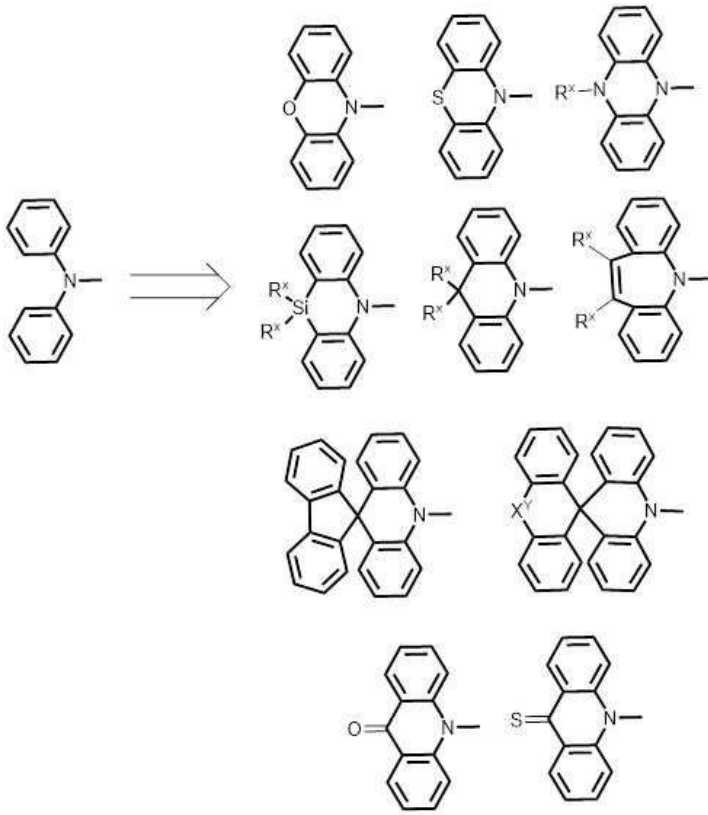
[0156] 구체적으로 「아릴」로서는, 상술한 「아릴환」으로부터 수소를 1개 제외한 1가의 기이며, 예를 들면, 탄소수 6~30의 아릴을 들 수 있고, 탄소수 6~24의 아릴이 바람직하고, 탄소수 6~20의 아릴이 보다 바람직하고, 탄소수 6~16의 아릴이 더욱 바람직하고, 탄소수 6~12의 아릴이 특히 바람직하고, 탄소수 6~10의 아릴이 가장 바람직하다.

[0157] 또한, 「헤테로아릴」로서는, 상술한 「헤테로아릴환」으로부터 수소를 1개 제외한 1가의 기이며, 예를 들면, 탄소수 2~30의 헤테로아릴을 들 수 있고, 탄소수 2~25의 헤테로아릴이 바람직하고, 탄소수 2~20의 헤테로아릴이 보다 바람직하고, 탄소수 2~15의 헤테로아릴이 더욱 바람직하고, 탄소수 2~10의 헤테로아릴이 특히 바람직하다. 또한, 헤테로아릴로서는, 예를 들면 환구성 원자로서 탄소이외에 산소, 황 및 질소로부터 선택되는 헤테로 원자를 1개 내지 5개 함유하는 복소환 등을 들 수 있다.

[0158] 제1 치환기로서의 「치환 혹은 무치환의 디아릴아미노」, 「치환 혹은 무치환의 디헤테로아릴아미노」, 「치환 혹은 무치환의 아릴헤테로아릴아미노」의 각각에 있어서의 아릴이나 헤테로아릴로서는 상술한 「아릴」이나 「헤테로아릴」로 설명한 것을, 그 바람직한 범위와 함께 인용할 수 있다.

[0159] 디아릴아미노에 있어서, 2개의 아릴은 서로 결합하지 않거나, 또는 연결기를 통해서 결합하고 있다. 디헤테로아릴아미노에 있어서, 2개의 헤테로아릴은 서로 결합하지 않거나, 또는 연결기를 통해서 결합하고 있다. 아릴헤테로아릴아미노에 있어서, 아릴과 헤테로아릴은 서로 결합하지 않거나, 또는 연결기를 통해서 결합하고 있다. 즉, 본 명세서로 단지 「디아릴아미노」, 「디헤테로아릴아미노」 또는 「아릴헤테로아릴아미노」라고 기재되고 있을 경우는, 특히 한정 없이, 각각 「상기 디아릴아미노의 2개의 아릴은 서로 결합하지 않거나, 또는 연결기를 통해서 결합하고 있다」, 「상기 디헤테로아릴아미노의 2개의 헤테로아릴은 서로 결합하지 않거나, 또는 연결기를 통해서 결합하고 있다」 및 「상기 아릴헤테로아릴아미노의 아릴과 헤테로아릴은 서로 결합하지 않거나, 또는 연결기를 통해서 결합하고 있다」라는 설명이 가해지고 있는 것으로 한다.

[0160] 상기의 「서로 결합하지 않거나, 또는 연결기를 통해서 결합하고 있다」라는 기재는, 하기에 나타낸 바와 같이 예를 들면 디페닐아미노의 2개의 페닐이 연결기로 결합을 형성하고 있는 것도 의미할 수 있는 것을 나타낸다. 또한 이 설명은 아릴이나 헤테로아릴로 형성된, 디헤테로아릴아미노 및 아릴헤테로아릴아미노에 대해서도 적용된다.



[0161] 연결기로서는 구체적으로는, $>O$, $>N-R^X$, $>C(-R^X)_2$, $>Si(-R^X)_2$, $>S$, $>CO$, $>CS$, $>SO$, $>SO_2$, 및 $>Se$ 를 들 수 있고,

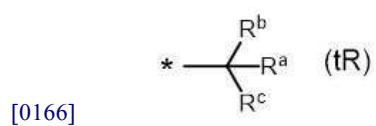
[0162] R^X 는 각각 독립적으로 알킬, 시클로알킬, 아릴 또는 헤테로아릴이며, 이들은 알킬, 시클로알킬, 아릴 또는 헤테로아릴로 치환되어 있어도 되고, 또한 $>C(-R^X)_2$, $>Si(-R^X)_2$ 에 있어서의 R^X 는, 단결합 또는 연결기 X^Y 를 통해서 결합해서 환을 형성해도 된다. X^Y 로서는 $>O$, $>N-R^Y$, $>C(-R^Y)_2$, $>Si(-R^Y)_2$, $>S$, $>CO$, $>CS$, $>SO$, $>SO_2$, 및 $>Se$ 를 들 수 있고, R^Y 는 각각 독립적으로 알킬, 시클로알킬, 아릴 또는 헤테로아릴이며, 이들은 알킬, 시클로알킬, 아릴 또는 헤테로아릴로 치환되어 있어도 된다. 단, X^Y 가 $>C(-R^Y)_2$ 및 $>Si(-R^Y)_2$ 의 경우에는, 2개의 R^Y 는 결합해서 환을 더 형성하지는 않는다. 나아가 연결기로서는, 알케닐렌도 들 수 있다. 해당 알케닐렌의 임의의 수소는 각각 독립적으로 R^X 로 치환되어 있어도 되고, R^X 는 각각 독립적으로 알킬, 시클로알킬, 치환 실릴, 아릴 및 헤테로아릴이며, 이들은 알킬, 시클로알킬, 치환 실릴, 아릴로 치환되어 있어도 된다.

[0163] 또한 제1 치환기로서의 「알킬」로서는, 직쇄 및 분기쇄 중 어느 하나라도 되고, 예를 들면, 탄소수 1~24의 직쇄 알킬 또는 탄소수 3~24의 분기쇄 알킬을 들 수 있다. 탄소수 1~18의 알킬(탄소수 3~18의 분기쇄 알킬)이 바람직하고, 탄소수 1~12의 알킬(탄소수 3~12의 분기쇄 알킬)이 보다 바람직하며, 탄소수 1~8의 알킬(탄소수 3~8의 분기쇄 알킬)이 더욱 바람직하고, 탄소수 1~6의 알킬(탄소수 3~6의 분기쇄 알킬)이 특히 바람직하며, 탄소수 1~5의 알킬(탄소수 3~5의 분기쇄 알킬)이 가장 바람직하다.

[0164] 구체적인 알킬로서는, 메틸, 에틸, n-프로필, 이소프로필, n-부틸, 이소부틸, s-부틸, t-부틸, n-펜틸, 이소펜틸, 네오펜틸, t-펜틸(t-아밀), n-헥실, 1-메틸펜틸, 4-메틸-2-펜틸, 3,3-디메틸부틸, 2-에틸부틸, n-헵틸, 1-메틸헥실, n-옥틸, t-옥틸(1,1,3,3-테트라메틸부틸), 1-메틸헵틸, 2-에틸헥실, 2-프로필펜틸, n-노닐, 2,2-디메틸헵틸, 2,6-디메틸-4-헵틸, 3,5,5-트리메틸헥실, n-데실, n-운데실, 1-메틸데실, n-도데실, n-트리데실, 1-헥실헵틸, n-테트라데실, n-펜타데실, n-헥사데실, n-헵타데실, n-옥타데실, n-에이코실 등을 들 수 있다. 또한,

예를 들면, 1-에틸-1-메틸프로필, 1,1-디에틸프로필, 1,1-디메틸부틸, 1-에틸-1-메틸부틸, 1,1,4-트리메틸펜틸, 1,1,2-트리메틸프로필, 1,1-디메틸옥틸, 1,1-디메틸펜틸, 1,1-디메틸헥틸, 1,1,5-트리메틸헥실, 1-에틸-1-메틸헥실, 1-에틸-1,3-디메틸부틸, 1,1,2,2-테트라메틸프로필, 1-부틸-1-메틸펜틸, 1,1-디에틸부틸, 1-에틸-1-메틸펜틸, 1,1,3-트리메틸부틸, 1-프로필-1-메틸펜틸, 1,1,2-트리메틸프로필, 1-에틸-1,2,2-트리메틸프로필, 1-프로필-1-메틸부틸, 1,1- 디메틸헥실 등도 들 수 있다.

[0165] 상기의 「알킬」을 포함하는 치환기로서, 하기 식(tR)로 나타내어지는 터셔리알킬은, A환, B환 및 C환에 있어서의 아릴환 또는 헤테로아릴환에의 치환기로서, 특히 바람직한 것 중 하나이다. 이와 같은 부피가 큰 치환기에 의해 분자간 거리가 증가하기 때문에 발광양자수율(PLQY)이 향상되기 때문이다. 또한, 식(tR)로 나타내어지는 터셔리알킬이 제2 치환기로서 다른 치환기에 치환되고 있는 치환기도 바람직하다. 구체적으로는, (tR)로 나타내어지는 터셔리알킬로 치환된 디아릴아미노, (tR)로 나타내어지는 터셔리알킬로 치환된 카르바졸릴(바람직하게는, N-카르바졸릴) 또는 (tR)로 나타내어지는 터셔리알킬로 치환된 벤조카르바졸릴(바람직하게는, N-벤조카르바졸릴)을 들 수 있다. 「디아릴아미노」에 대해서는 하기 「제1 치환기」로서 설명하는 기를 들 수 있다. 디아릴아미노, 카르바졸릴 및 벤조카르바졸릴에의 식(tR)의 기의 치환 형태로서는, 이들 기에서의 아릴환 또는 벤젠환의 일부 또는 모든 수소가 식(tR)의 기로 치환된 예를 들 수 있다.



[0167] 식(tR) 중, R^a, R^b, 및 R^c는 각각 독립적으로 탄소수 1~24의 알킬이며, 상기 알킬에서의 임의의 -CH₂-는 -O-로 치환되어 있어도 되고, 식(tR)로 나타내어지는 기는 *에 있어서 식(1)로 나타내어지는 구조 단위를 포함하는 구조에 있어서의 적어도 하나의 수소와 치환된다.

[0168] R^a, R^b 및 R^c의 「탄소수 1~24의 알킬」로서는, 직쇄 및 분기쇄 중 어느 하나라도 되고, 예를 들면, 탄소수 1~24의 직쇄 알킬 또는 탄소수 3~24의 분기쇄 알킬, 탄소수 1~18의 알킬(탄소수 3~18의 분기쇄 알킬), 탄소수 1~12의 알킬(탄소수 3~12의 분기쇄 알킬), 탄소수 1~6의 알킬(탄소수 3~6의 분기쇄 알킬), 탄소수 1~4의 알킬(탄소수 3~4의 분기쇄 알킬)을 들 수 있다.

[0169] 식(1)의 식(tR)에서의 R^a, R^b, 및 R^c의 탄소수의 합계는 탄소수 3~20이 바람직하고, 탄소수 3~10이 특히 바람직하다.

[0170] R^a, R^b, 및 R^c의 구체적인 알킬로서는, 메틸, 에틸, n-프로필, 이소프로필, n-부틸, 이소부틸, s-부틸, t-부틸, n-펜틸, 이소펜틸, 네오펜틸, t-펜틸, n-헥실, 1-메틸펜틸, 4-메틸-2-펜틸, 3,3-디메틸부틸, 2-에틸부틸, n-헥틸, 1-메틸헥실, n-옥틸, t-옥틸, 1-메틸헥틸, 2-에틸헥실, 2-프로필펜틸, n-노닐, 2,2-디메틸헥틸, 2,6-디메틸-4-헥틸, 3,5,5-트리메틸헥실, n-데실, n-운데실, 1-메틸데실, n-도데실, n-트리데실, 1-헥실헥틸, n-테트라데실, n-펜타데실, n-헥사데실, n-헵타데실, n-옥타데실, n-에이코실 등을 들 수 있다.

[0171] 식(tR)으로 나타내어지는 기로서는, 예를 들면 t-부틸, t-아밀, 1-에틸-1-메틸프로필, 1,1-디에틸프로필, 1,1-디메틸부틸, 1-에틸-1-메틸 부틸, 1,1,3,3-테트라메틸부틸, 1,1,4-트리메틸펜틸, 1,1,2-트리메틸프로필, 1,1-디메틸옥틸, 1,1-디메틸펜틸, 1,1-디메틸헥틸, 1,1,5-트리메틸헥실, 1-에틸-1-메틸헥실, 1-에틸-1,3-디메틸부틸, 1,1,2,2-테트라메틸프로필, 1-부틸-1-메틸펜틸, 1,1-디에틸부틸, 1-에틸-1-메틸펜틸, 1,1,3-트리메틸부틸, 1-프로필-1-메틸펜틸, 1,1,2-트리메틸프로필, 1-에틸-1,2,2-트리메틸프로필, 1-프로필-1-메틸부틸, 1,1- 디메틸헥실 등을 들 수 있다. 이들 가운데, t-부틸 및 t-아밀이 바람직하다.

[0172] 또한, 제1 치환기로서의 「시클로알킬」로서는, 탄소수 3~24의 시클로알킬, 탄소수 3~20의 시클로알킬, 탄소수 3~16의 시클로알킬, 탄소수 3~14의 시클로알킬, 탄소수 5~10의 시클로알킬, 탄소수 5~8의 시클로알킬, 탄소수 5~6의 시클로알킬, 탄소수 5의 시클로알킬 등을 들 수 있다. 본 명세서의 시클로헥실로서는 후술에서 열거하는 대로, 단환의 시클로헥실 등 이외에, 아다만틸과 같은 다환식의 것 등도 포함한다.

[0173] 구체적인 시클로알킬로서는, 시클로프로필, 시클로부틸, 시클로펜틸, 시클로헥실, 시클로헵틸, 시클로옥틸, 시클로노닐, 시클로 데실, 노보네닐, 비시클로[1.1.0]부틸, 비시클로[1.1.1]펜틸, 비시클로[2.1.0]펜틸, 비시클로[2.1.1]헥실, 비시클로[3.1.0]헥실, 비시클로[2.2.1]헵틸, 비시클로[2.2.2]옥틸, 아다만틸, 디아만틸, 데카히드로나프타데닐, 데카히드로아즈레닐, 및 이들 탄소수 1~5의 알킬(특히 메틸)치환체 등을 들 수 있다.

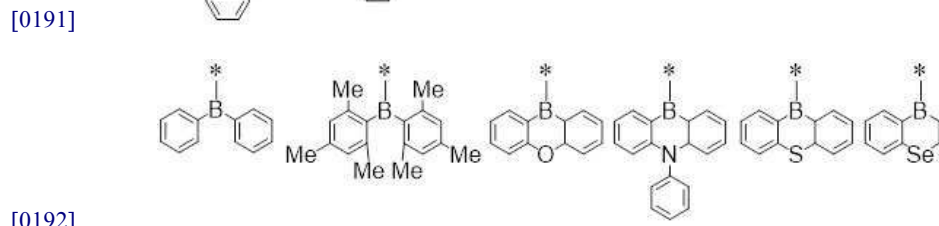
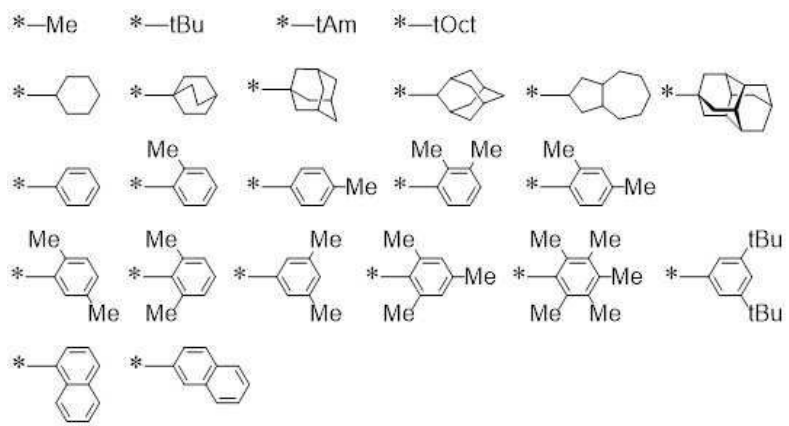
- [0174] 제1 치환기로서의 「알케닐」로서는, 2~24의 직쇄 알케닐 또는 탄소수 4~24의 분기쇄 알케닐을 들 수 있다. 탄소수 2~18의 알케닐이 바람직하고, 탄소수 2~12의 알케닐이 보다 바람직하고, 탄소수 2~6의 알케닐이 더욱 바람직하고, 탄소수 2~4의 알케닐이 특히 바람직하다.
- [0175] 구체적 「알케닐」로서는, 비닐, 알릴, 부타디에닐 등을 들 수 있다.
- [0176] 또한 제1 치환기로서의 「알콕시」로서는, 예를 들면, 탄소수 1~24의 직쇄 또는 탄소수 3~24의 분기쇄 알콕시를 들 수 있다. 탄소수 1~18의 알콕시(탄소수 3~18의 분기쇄 알콕시)가 바람직하고, 탄소수 1~12의 알콕시(탄소수 3~12의 분기쇄 알콕시)가 보다 바람직하며, 탄소수 1~6의 알콕시(탄소수 3~6의 분기쇄 알콕시)가 더욱 바람직하고, 탄소수 1~5의 알콕시(탄소수 3~5의 분기쇄 알콕시)가 특히 바람직하다.
- [0177] 구체적 알콕시로서는, 메톡시, 에톡시, 프로폭시, 이소프로폭시, 부톡시, 이소부톡시, s-부톡시, t-부톡시, t-아밀옥시, 헥실옥시, 헵틸옥시, 옥틸옥시 등을 들 수 있다.
- [0178] 제1 치환기로서의 「아릴옥시」로서는, -OH기의 수소가 아릴로 치환된 기이며, 이의 아릴 및 그 바람직한 범위는 상술에서 설명한 것을 인용할 수 있다.
- [0179] 제1 치환기로서의 「아릴티오」로서는, -SH기의 수소가 아릴로 치환된 기이며, 이의 아릴 및 그 바람직한 범위는 상술에서 설명한 것을 인용할 수 있다.
- [0180] 또한, 제1 치환기로서의 「치환 실릴」로서는, 예를 들면, 알킬, 시클로알킬, 및 아릴로 이루어지는 군으로부터 선택되는 3개의 치환기로 치환된 실릴을 들 수 있다. 예를 들면, 트리알킬실릴, 트리시클로알킬실릴, 디알킬시클로알킬실릴, 알킬디시클로알킬실릴, 트리아릴실릴, 디알킬아릴실릴, 및 알킬디아릴실릴을 들 수 있다.
- [0181] 「트리알킬실릴」로서는, 실릴에 있어서의 3개의 수소가 각각 독립적으로 알킬로 치환된 기를 들 수 있고, 이의 알킬 및 그 바람직한 범위는 상술한 제1 치환기에 있어서의 「알킬」로 설명한 기를 인용할 수 있다. 치환하는데 바람직한 알킬은, 탄소수 1~5의 알킬이며, 구체적으로는 메틸, 에틸, 프로필, 이소프로필, 부틸, sec-부틸, t-부틸, t-아밀 등을 들 수 있다.
- [0182] 구체적 트리알킬실릴로서는, 트리메틸실릴, 트리에틸실릴, 트리프로필실릴, 트리아이소프로필실릴, 트리부틸실릴, 트리sec-부틸실릴, 트리t-부틸실릴, 트리t-아밀실릴, 에틸디메틸실릴, 프로필디메틸실릴, 이소 프로필디메틸실릴, 부틸디메틸실릴, sec-부틸디메틸실릴, t-부틸디메틸실릴, t-아밀디메틸실릴, 메틸디에틸실릴, 프로필디에틸실릴, 이소 프로필디에틸실릴, 부틸디에틸실릴, sec-부틸디에틸실릴, t-부틸디에틸실릴, t-아밀디에틸실릴, 메틸디프로필실릴, 에틸디프로필실릴, 부틸디프로필실릴, sec-부틸디프로필실릴, t-부틸디프로필실릴, t-아밀디프로필실릴, 메틸이소프로필실릴, 에틸이소프로필실릴, 부틸이소프로필실릴, sec-부틸이소프로필실릴, t-부틸이소프로필실릴, t-아밀이소프로필실릴 등을 들 수 있다.
- [0183] 「트리시클로알킬실릴」로서는, 실릴기에 있어서의 3개의 수소가 각각 독립적으로 시클로알킬로 치환된 기를 들 수 있고, 이의 시클로알킬 및 그 바람직한 범위는 상술한 제1 치환기에 있어서의 「시클로알킬」로 설명한 기를 인용할 수 있다. 치환하는데 바람직한 시클로알킬은, 탄소수 5~10의 시클로알킬이며, 구체적으로는 시클로펜틸, 시클로헥실, 시클로헵틸, 시클로옥틸, 시클로노닐, 시클로데실, 비시클로[1.1.1]펜틸, 비시클로[2.1.0]펜틸, 비시클로[2.1.1]헥실, 비시클로[3.1.0]헥실, 비시클로[2.2.1]헵틸, 비시클로[2.2.2]옥틸, 아다만틸, 데카히드로나프타레닐, 데카히드로아즈레닐 등을 들 수 있다.
- [0184] 구체적 트리시클로알킬실릴로서는, 트리시클로펜틸실릴, 트리시클로헥실실릴 등을 들 수 있다.
- [0185] 2개의 알킬과 1개의 시클로알킬이 치환한 디알킬시클로알킬실릴과, 1개의 알킬과 2개의 시클로알킬이 치환한 알킬디시클로알킬실릴의 구체예로서는, 상술한 구체적 알킬 및 시클로알킬로부터 선택되는 기가 치환한 실릴을 들 수 있다.
- [0186] 2개의 알킬과 1개의 아릴이 치환한 디알킬아릴실릴, 1개의 알킬과 2개의 아릴이 치환한 알킬디아릴실릴, 및 3개의 아릴이 치환한 트리아릴실릴의 구체예로서는, 상술한 구체적 알킬 및 아릴로부터 선택되는 기가 치환한 실릴을 들 수 있다. 트리아릴실릴의 구체예로서는, 특히 트리페닐실릴을 들 수 있다.
- [0187] 또한, 제1 치환기의 「디아릴보릴」중의 「아릴」 및 그의 바람직한 범위로서는, 상술한 아릴의 설명을 인용할 수 있다. 또한, 이의 2개의 아릴은 단결합 또는 연결기를 통해서 결합하고 있어도 된다. 연결기로서는, 예를 들면 >C(-R)₂, >O, >S, 및 >N-R을 들 수 있다. 여기에서, >C(-R)₂ 및 >N-R의 R은, 아릴, 헤테로아릴, 디아릴아미노, 알킬, 시클로알킬, 알콕시 또는 아릴옥시(이상, 제1 치환기)이며, 해당 제1 치환기에는 아릴, 헤테로아릴,

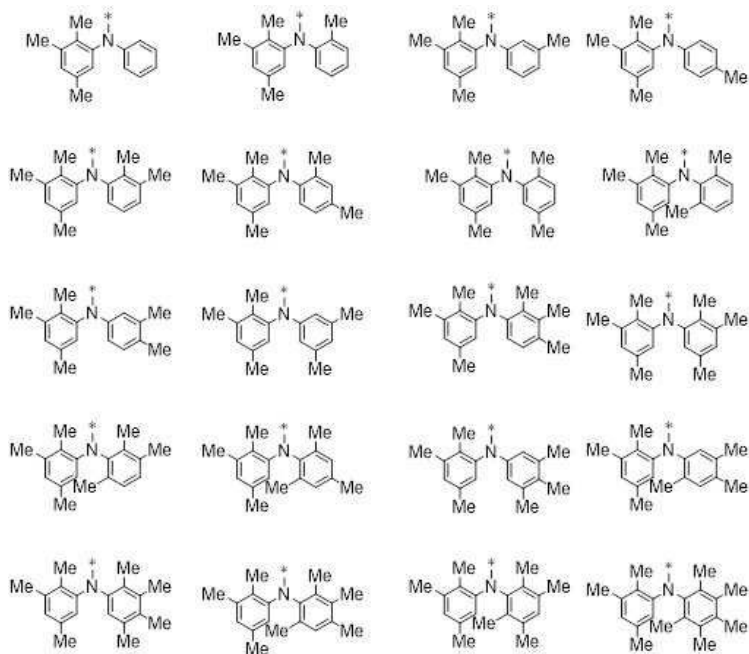
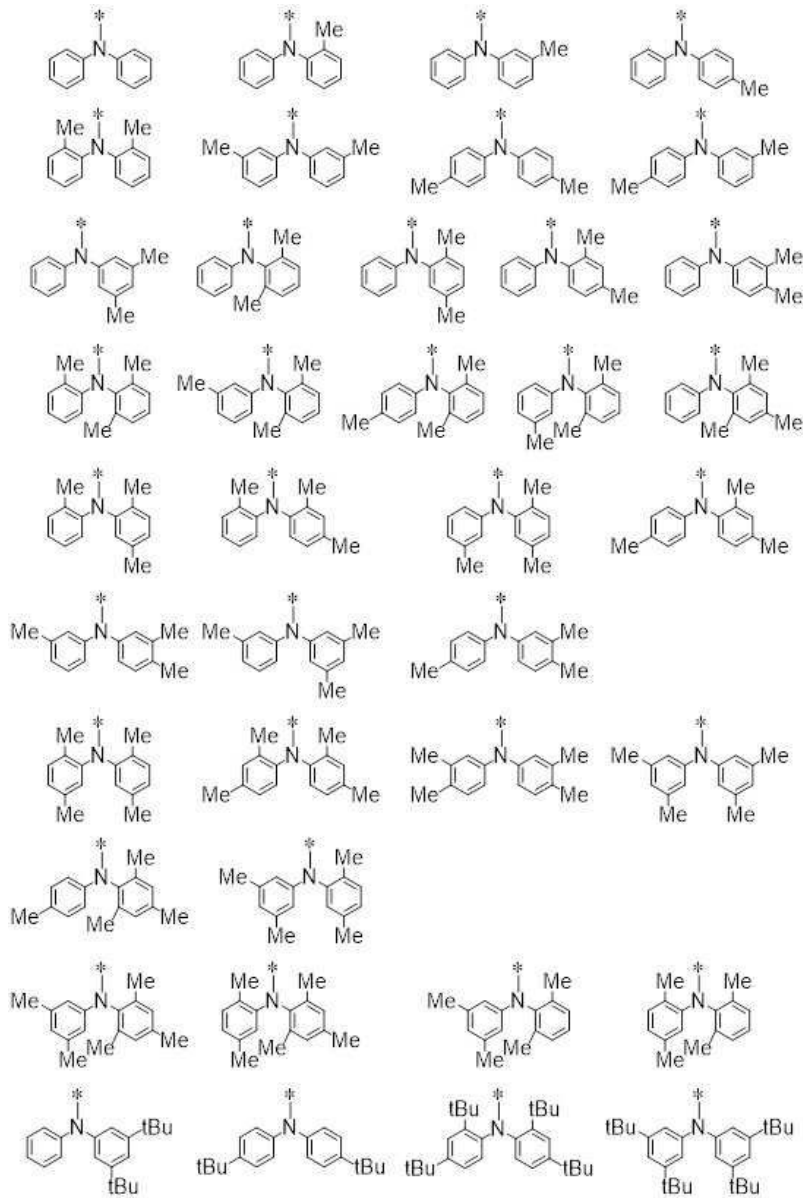
알킬 또는 시클로알킬(이상, 제2 치환기)이 더 치환되고 있어도 되고, 이 기의 구체예로서는, 상술한 제1 치환기로서의 아릴, 헤테로아릴, 디아릴아미노, 알킬, 시클로알킬, 알콕시, 또는 아릴옥시의 설명을 인용할 수 있다. 본 명세서에서 단지 「디아릴보릴」이라고 기재되고 있을 경우는, 특히 한정 없이, 각각 「상기 디아릴보릴의 2개의 아릴은 서로 결합하지 않거나, 또는 단결합 혹은 연결기를 통해서 결합하고 있다」라고 하는 설명이 가해지고 있는 것으로 한다.

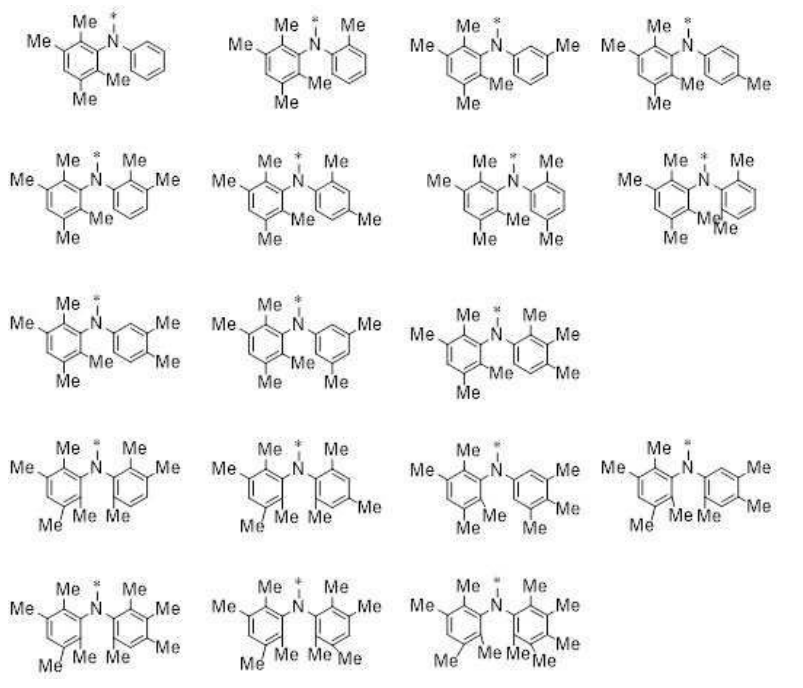
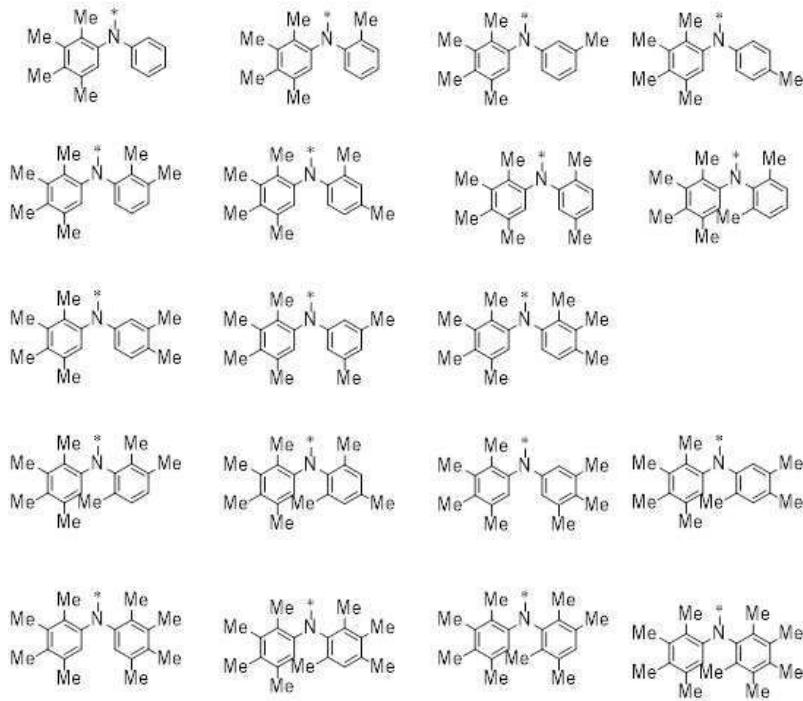
[0188] 제1 치환기(제1 치환기)인, 치환 혹은 무치환의 「아릴」, 치환 혹은 무치환의 「헤테로아릴」, 치환 혹은 무치환의 「디아릴아미노」, 치환 혹은 무치환의 「디헤테로아릴아미노」, 치환 혹은 무치환의 「아릴헤테로아릴아미노」, 치환 혹은 무치환의 「디아릴보릴」, 치환 혹은 무치환의 「알킬」, 치환 혹은 무치환의 「시클로알킬」, 치환 혹은 무치환의 「알케닐」, 치환 혹은 무치환의 「알콕시」, 치환 혹은 무치환의 「아릴옥시」, 치환 혹은 무치환의 「아릴티오」, 또는, 치환 「실릴」은 치환 또는 무치환이라고 설명되고 있는 대로, 그들에 있어서의 적어도 하나의 수소가 제2 치환기(제2 치환기)로 치환되어 있어도 된다. 이 제2 치환기로서는, 특별한 기재가 없을 경우는, 바람직하게는, 아릴, 헤테로아릴, 디아릴아미노, 알킬, 시클로알킬, 또는 치환 실릴을 들 수 있고, 그들의 구체예는, 제1 치환기로서의 「아릴」, 「헤테로아릴」, 「디아릴아미노」, 「알킬」, 「시클로알킬」 또는 「치환 실릴」의 설명을 참조할 수 있다. 또한, 제2 치환기로서의 아릴이나 헤테로아릴에는, 그들에 있어서의 적어도 하나의 수소가, 페닐 등의 아릴(구체예는 상술한 기), 메틸, t-부틸 등의 알킬(구체예는 상술한 기) 또는 시클로헥실 등의 시클로알킬(구체예는 상술한 기)로 치환된 구조도 제2 치환기로서의 아릴이나 헤테로아릴에 포함된다. 그 일 예로서는, 제2 치환기가 카르바졸릴의 경우에는, 9위에 있어서의 적어도 하나의 수소가, 페닐 등의 아릴, 메틸 등의 알킬 또는 시클로헥실 등의 시클로알킬로 치환된 카르바졸릴도 제2 치환기로서의 헤테로아릴에 포함된다. 이 기재는, 본 명세서중에 있어서 그 외의 제1 치환기와 제2 치환기에 관한 설명에도 적용할 수 있다.

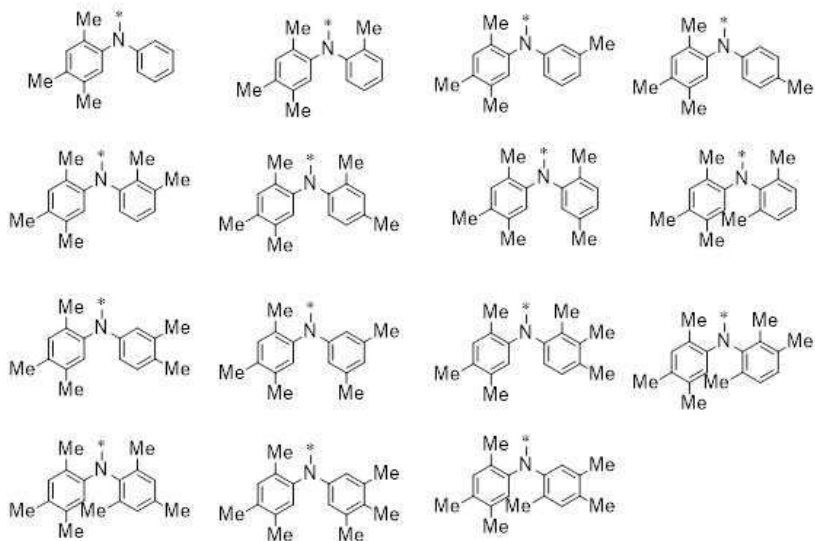
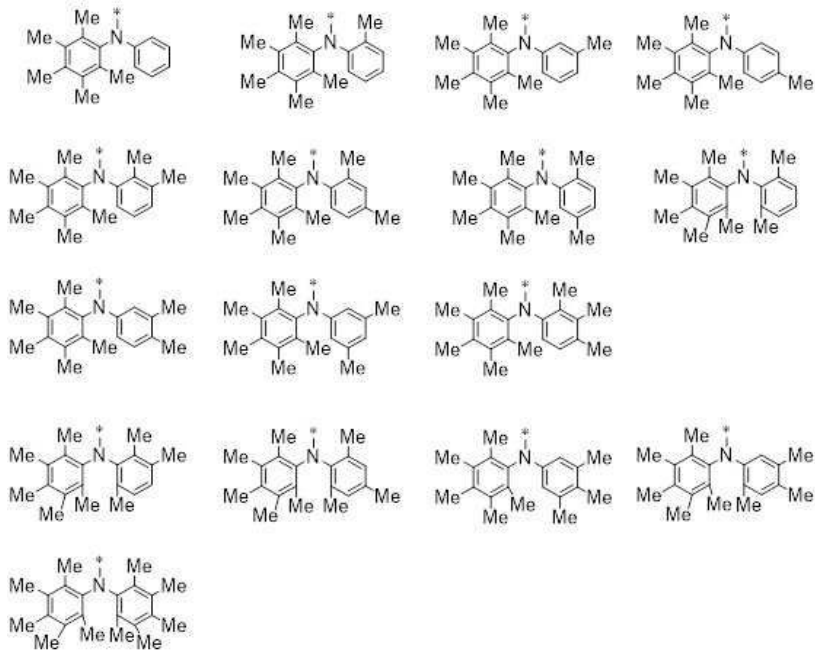
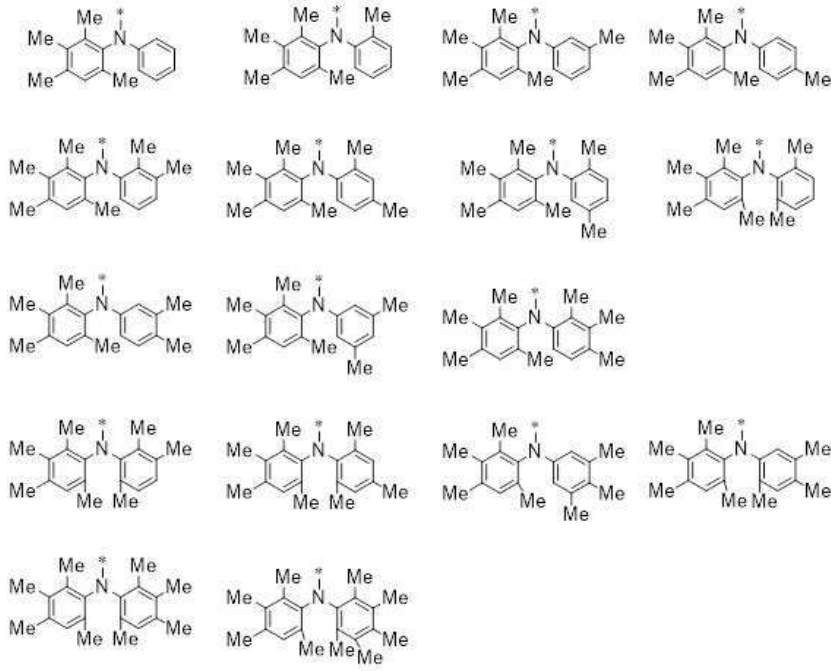
[0189] 제1 치환기의 구조 입체 장애성, 전자 공여성 및 전자 구인성에 의해, 발광파장을 조정할 수 있다. 바람직하게는 이하의 구조식으로 나타내어지는 기이며, 보다 바람직하게는, 메틸, t-부틸, t-아밀, t-옥틸, 네오펜틸, 아다만틸, 페닐, o-트릴, p-트릴, 2,4-크실릴, 2,5-크실릴, 2,6-크실릴, 2,4,6-메시틸, 디페닐아미노, 디-p-트릴아미노, 비스(p-(t-부틸)페닐)아미노, 카르바졸릴, 3,6-디메틸카르바졸릴, 3,6-디-t-부틸카르바졸릴 및 페녹시이며, 더욱 바람직하게는, 메틸, t-부틸, t-아밀, t-옥틸, 네오펜틸, 아다만틸, 페닐, o-트릴, 2,6-크실릴, 2,4,6-메시틸, 디페닐아미노, 디-p-트릴아미노, 비스(p-(t-부틸)페닐)아미노, 카르바졸릴, 3,6-디메틸카르바졸릴 및 3,6-디-t-부틸카르바졸릴이다. 합성의 용이함의 관점에서는, 입체 장애가 큰 편이 선택적인 합성을 위해 바람직하고, 구체적으로는, t-부틸, t-아밀, t-옥틸, 아다만틸, o-트릴, p-트릴, 2,4-크실릴, 2,5-크실릴, 2,6-크실릴, 2,4,6-메시틸, 디-p-트릴아미노, 비스(p-(t-부틸)페닐)아미노, 3,6-디메틸카르바졸릴 및 3,6-디-t-부틸카르바졸릴이 바람직하다.

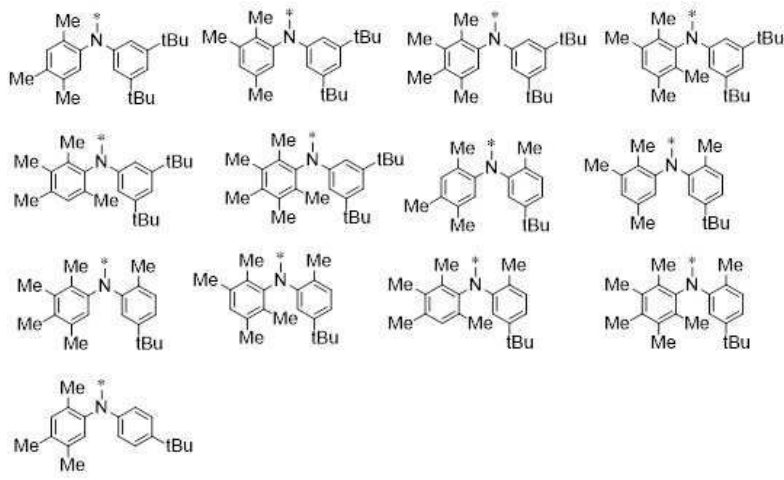
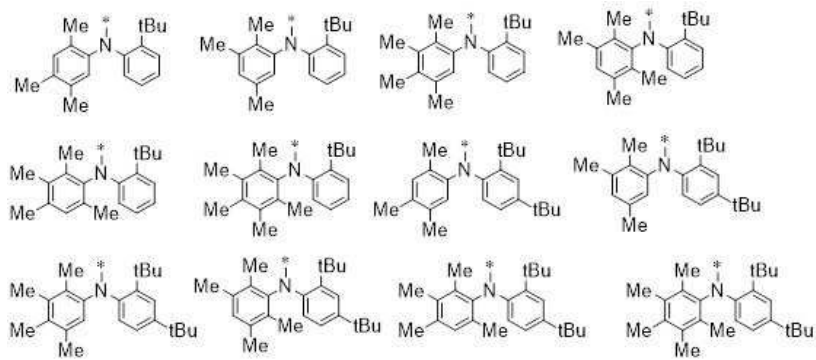
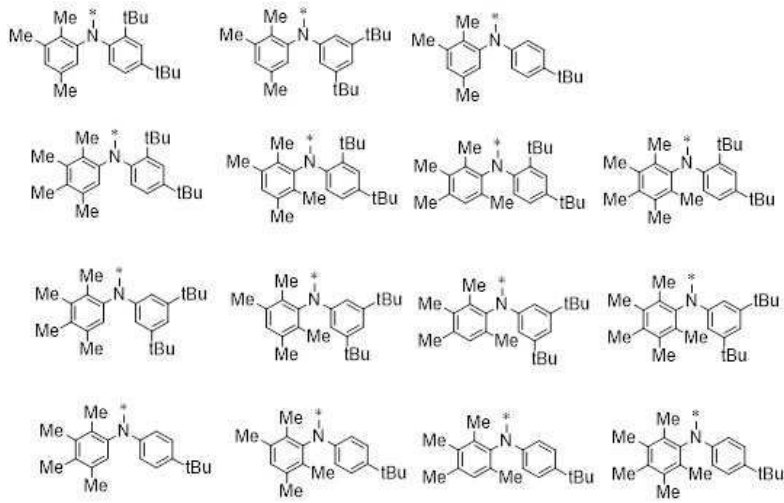
[0190] 하기 구조식에 있어서, 「Me」은 메틸, 「tBu」는 t-부틸, 「tAm」은 t-아밀, 「tOct」는 t-옥틸, *은 결합 위치를 나타낸다.

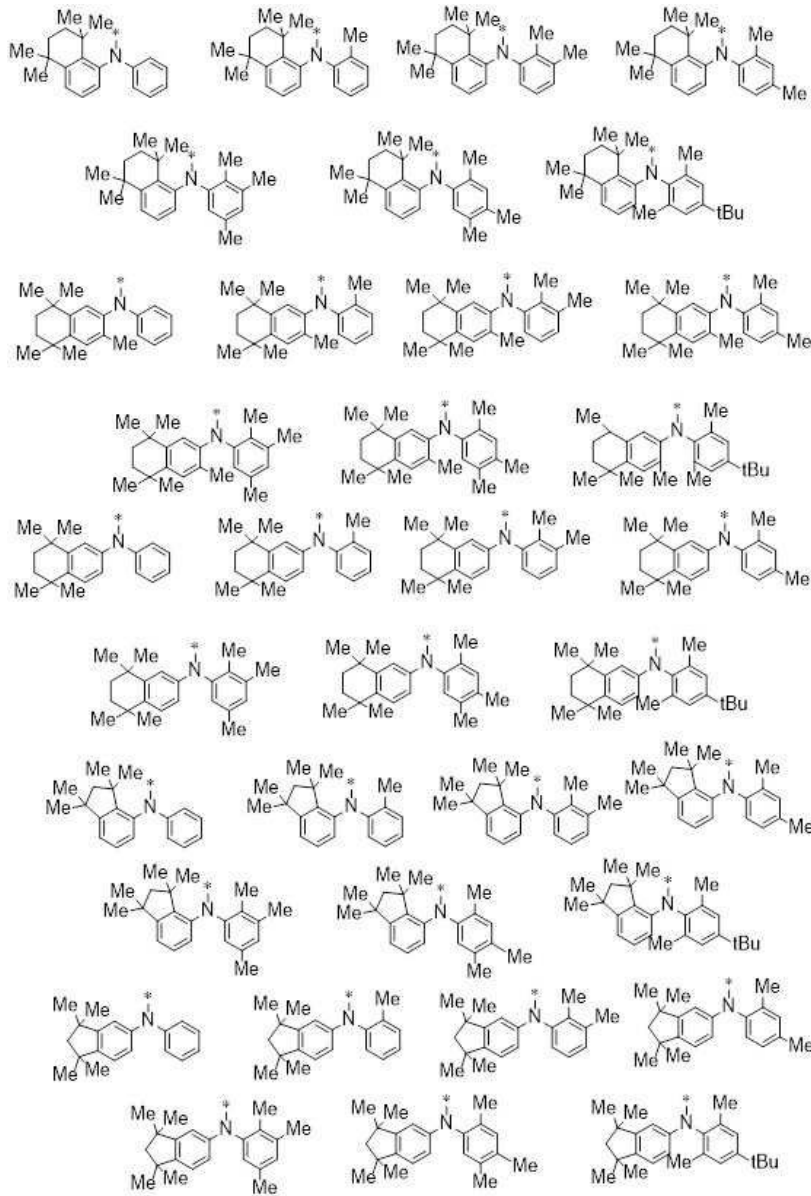




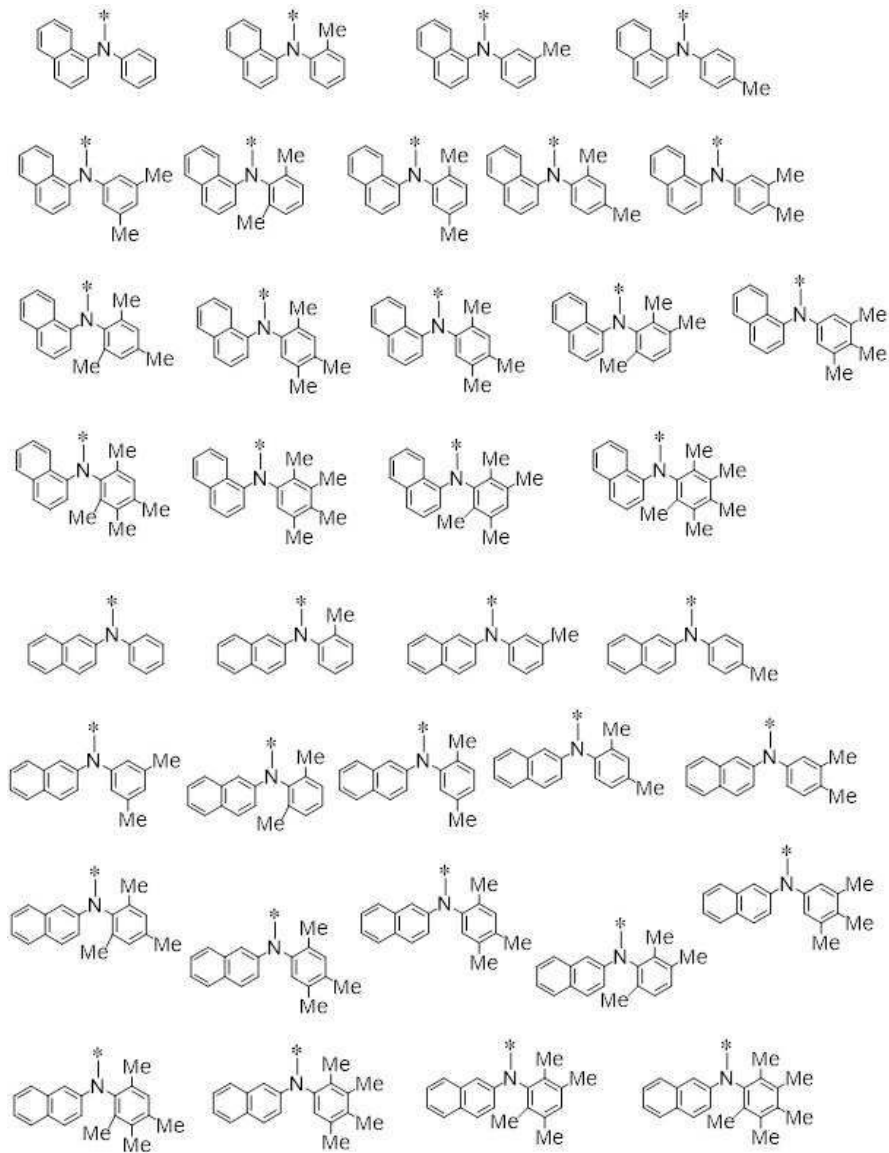




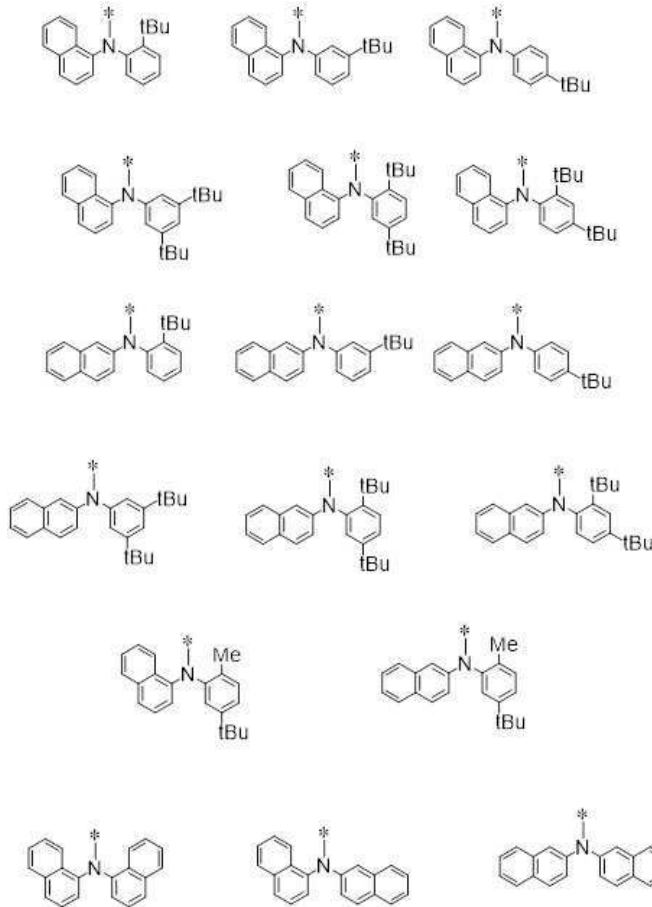




[0205]



[0206]



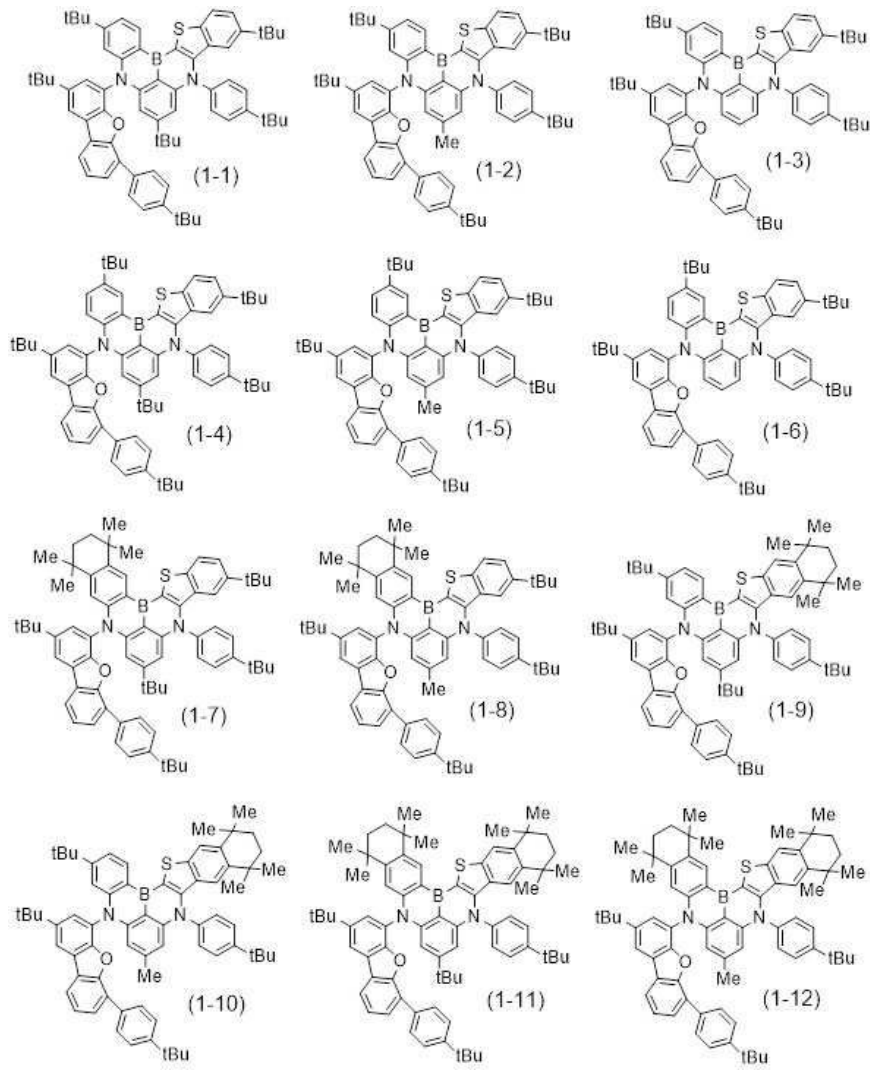
[0207]

[0208]

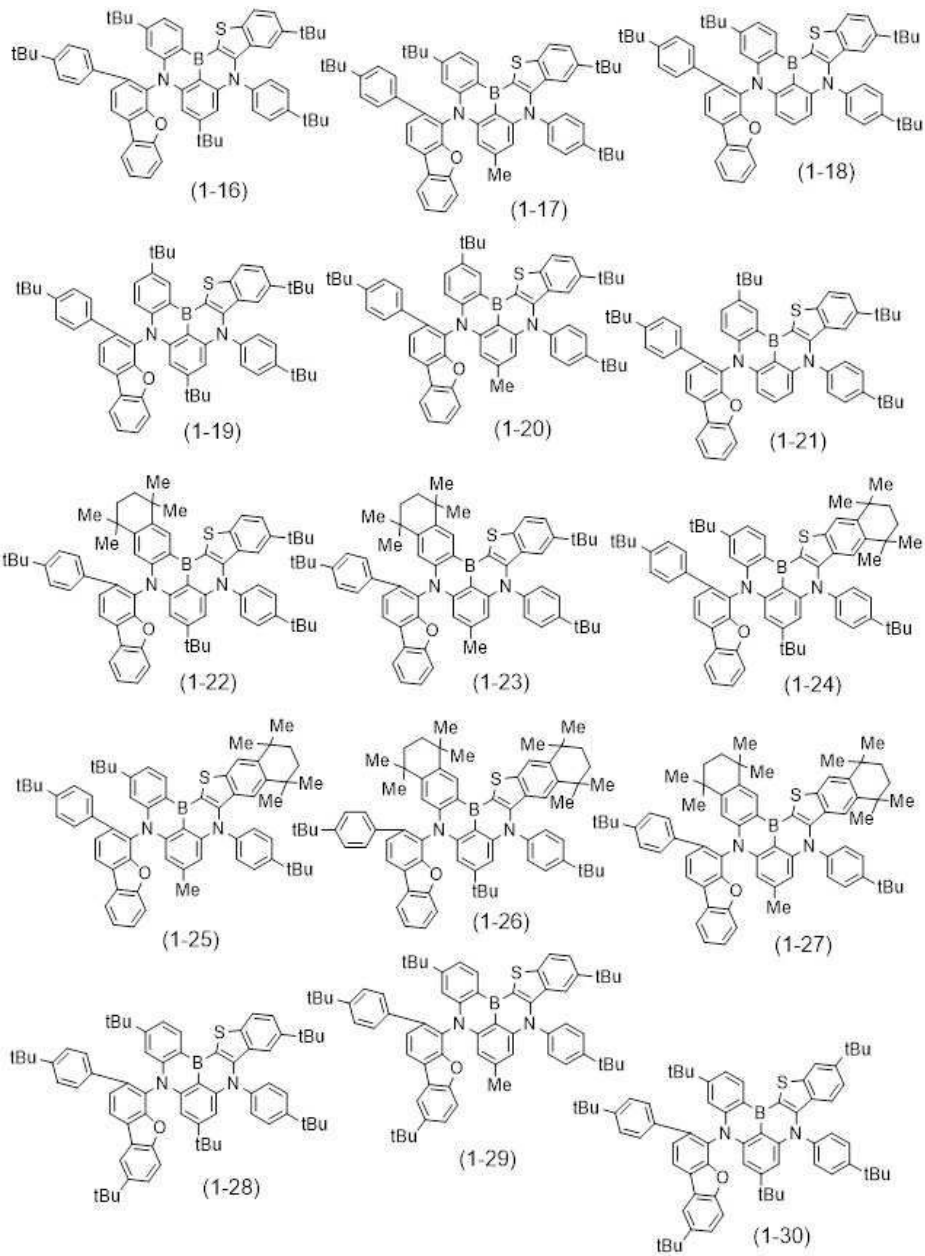
식(1)으로 표현되는 구조단위, 및 그 바람직한 형태 1개 또는 2개 이상으로 이루어지는 구조를 가지는 다환방향족 화합물은, 상술한 식(tR)으로 표현되는 터셔리 알킬(t-부틸혹은 t-아밀 등), 네오펜틸 또는 아다만틸을 적어도 1개 포함하는 구조인 것이 바람직하고, 식(tR)으로 표현되는 터셔리 알킬(t-부틸혹은 t-아밀 등)을 포함하는 것이 바람직하다. 이러한 부피가 큰 치환기에 의해 분자간 거리가 증가하기 때문에 발광양자수율(PLQY)이 향상되기 때문이다. 또한, 치환기로서는, 디아릴아미노도 바람직하다. 나아가, 식(tR)의 기로 치환된 디아릴아미노, 식(tR)의 기로 치환된 카르바졸릴(바람직하게는, N-카르바졸릴) 또는 식(tR)의 기로 치환된 벤조 카르바졸릴(바람직하게는, N-벤조 카르바졸릴)도 바람직하다. 디아릴아미노, 카르바졸릴 및 벤조카르바졸릴에의 식(tR)의 기의 치환 형태로서는, 이 기에 있어서의 아릴환 또는 벤젠환의 일부 또는 모든 수소가 식(tR)의 기로 치환된 예를 들 수 있다.

[0209]

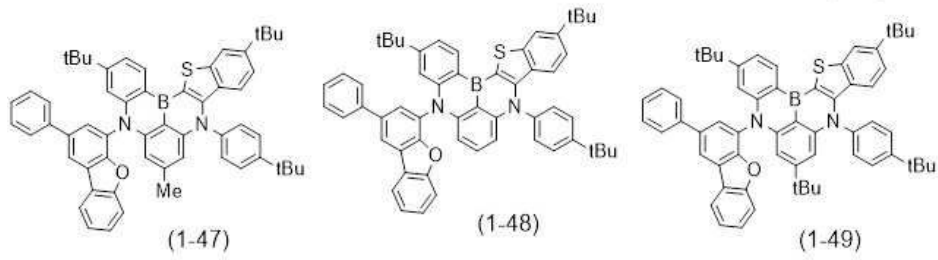
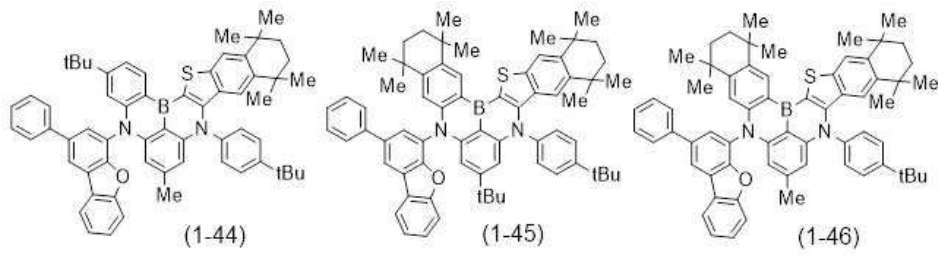
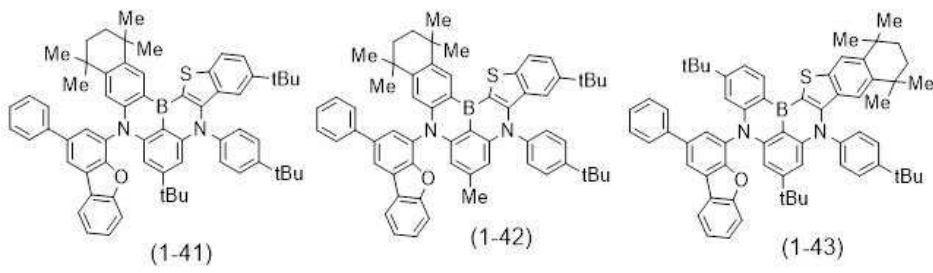
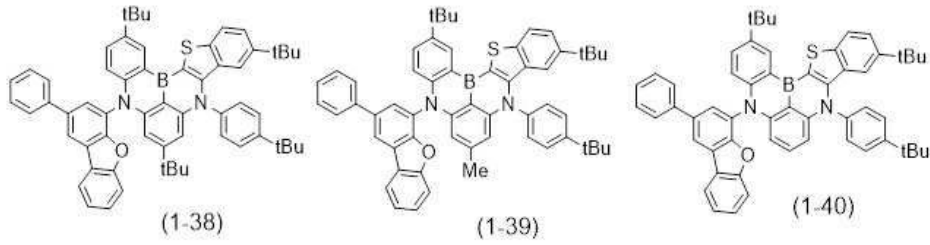
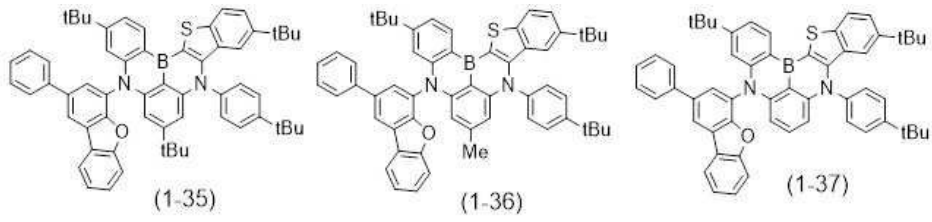
본 발명의 식(1)으로 표현되는 다환방향족 화합물의 추가적인 구체예로서는, 이하의 화합물을 들 수 있다. 하기 구조식에 있어서, 「Me」은 메틸, 「tBu」는 t-부틸, 「D」는 중수소를 나타낸다. 한편, 하기 구조는 일 예이다.



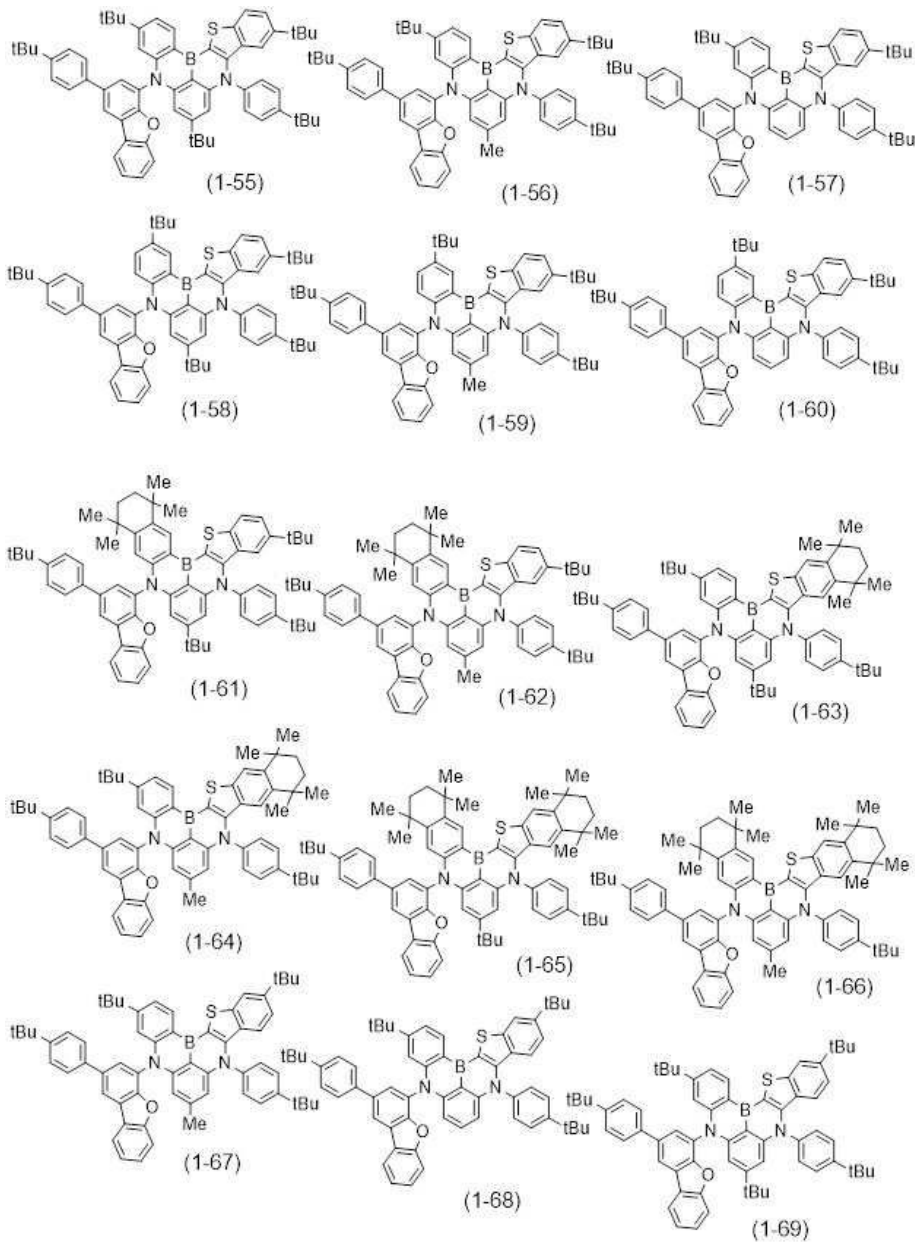
[0210]



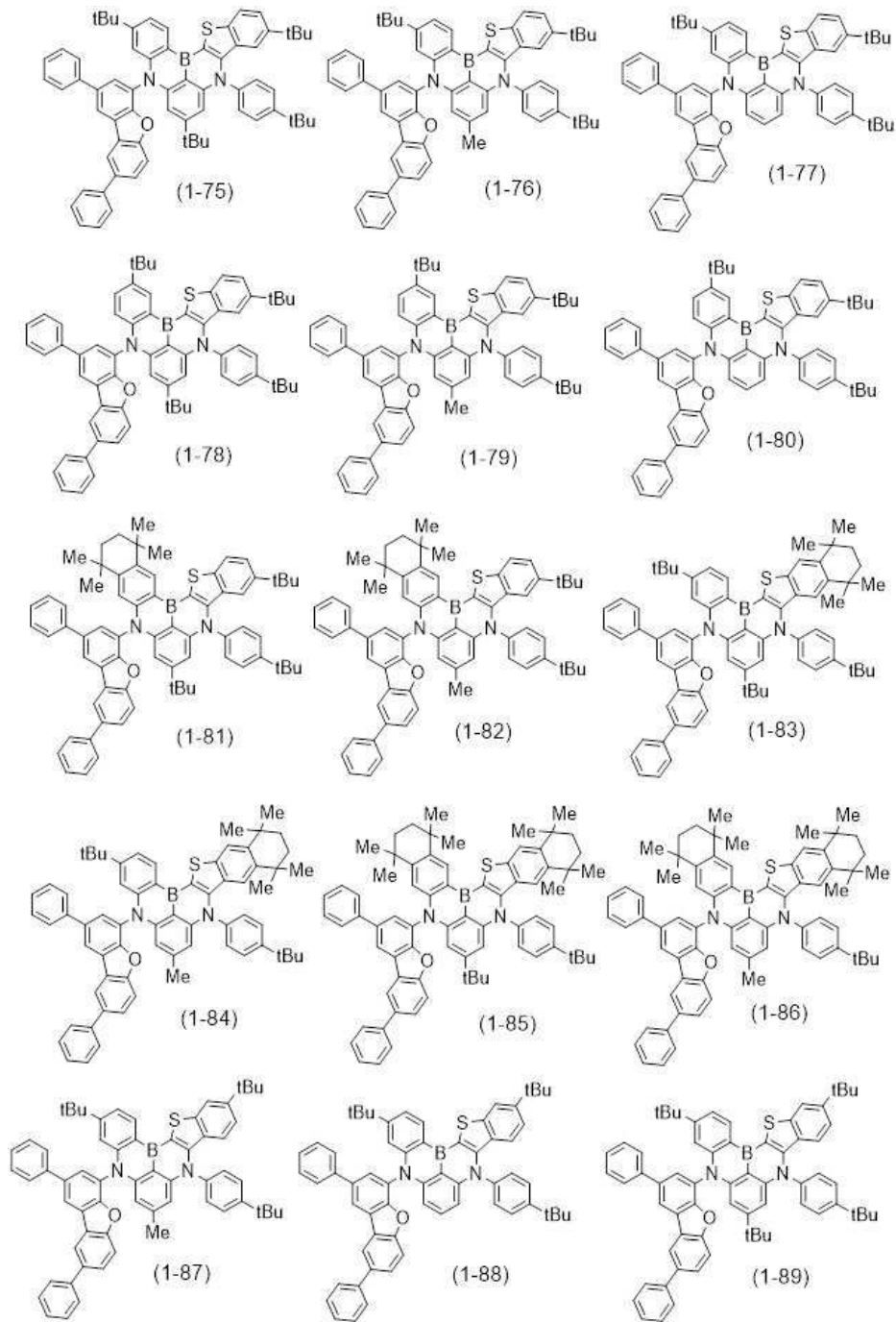
[0211]



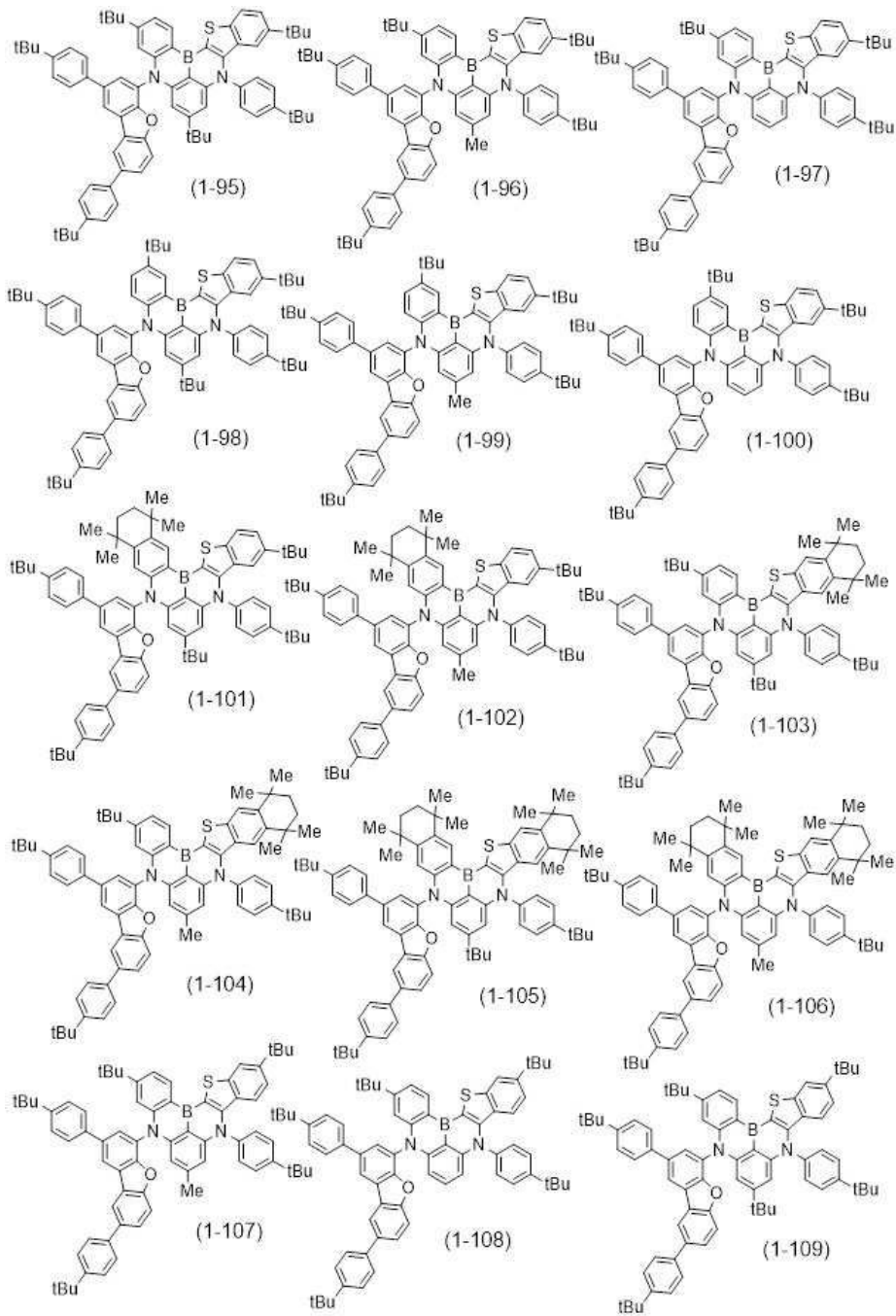
[0212]



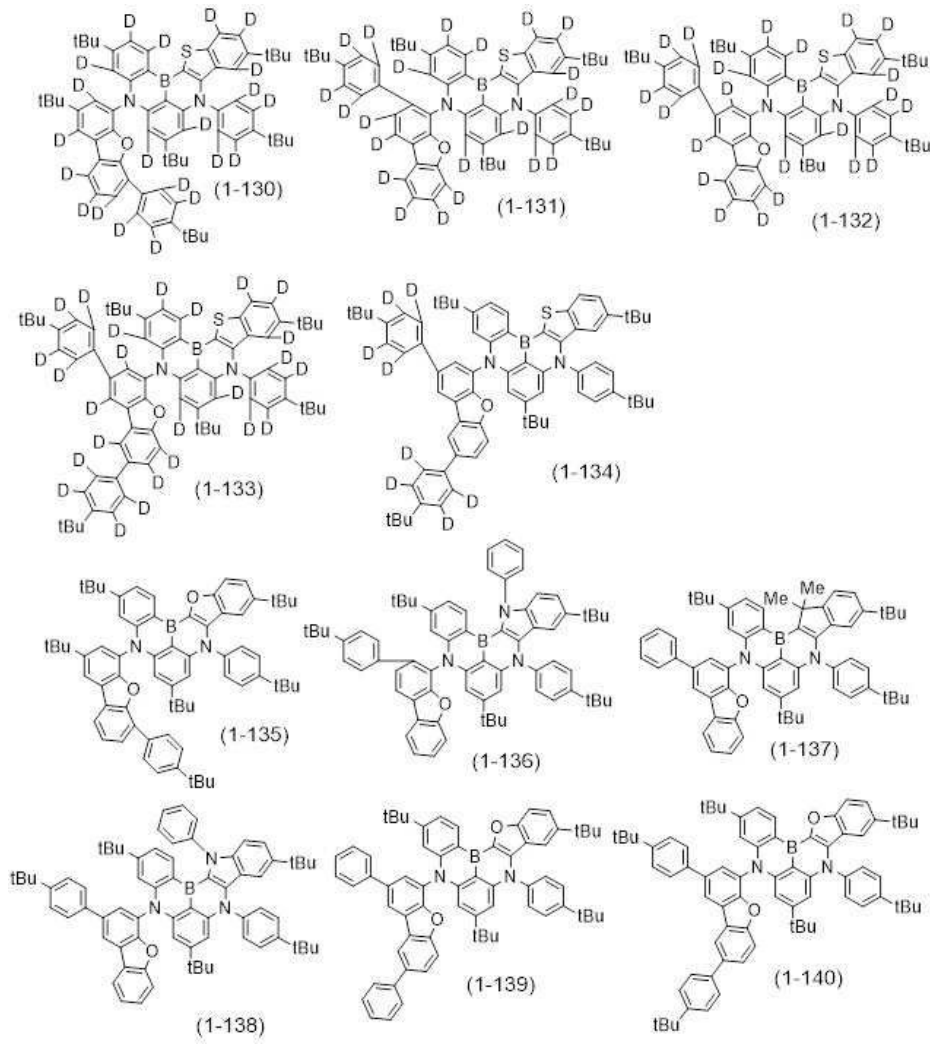
[0213]



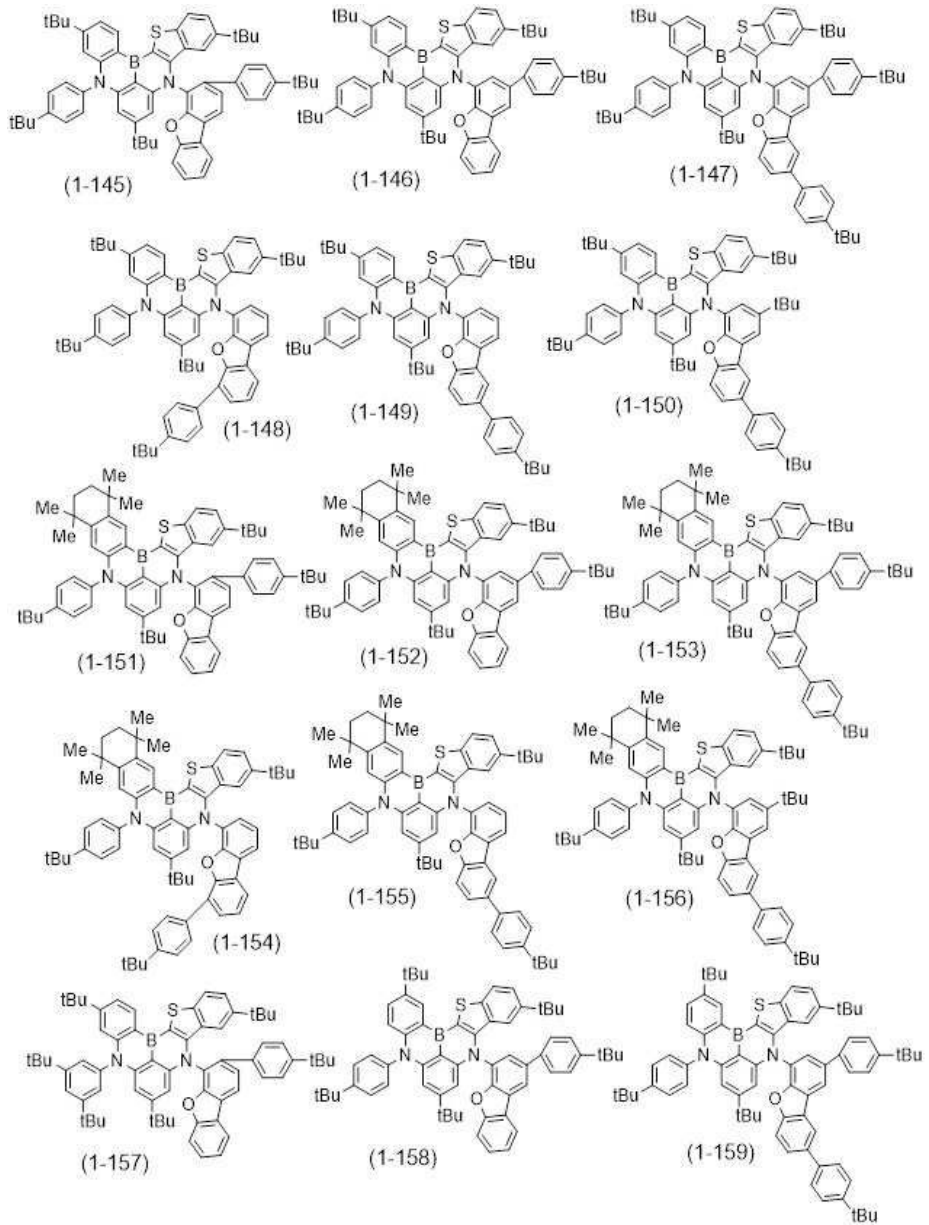
[0214]



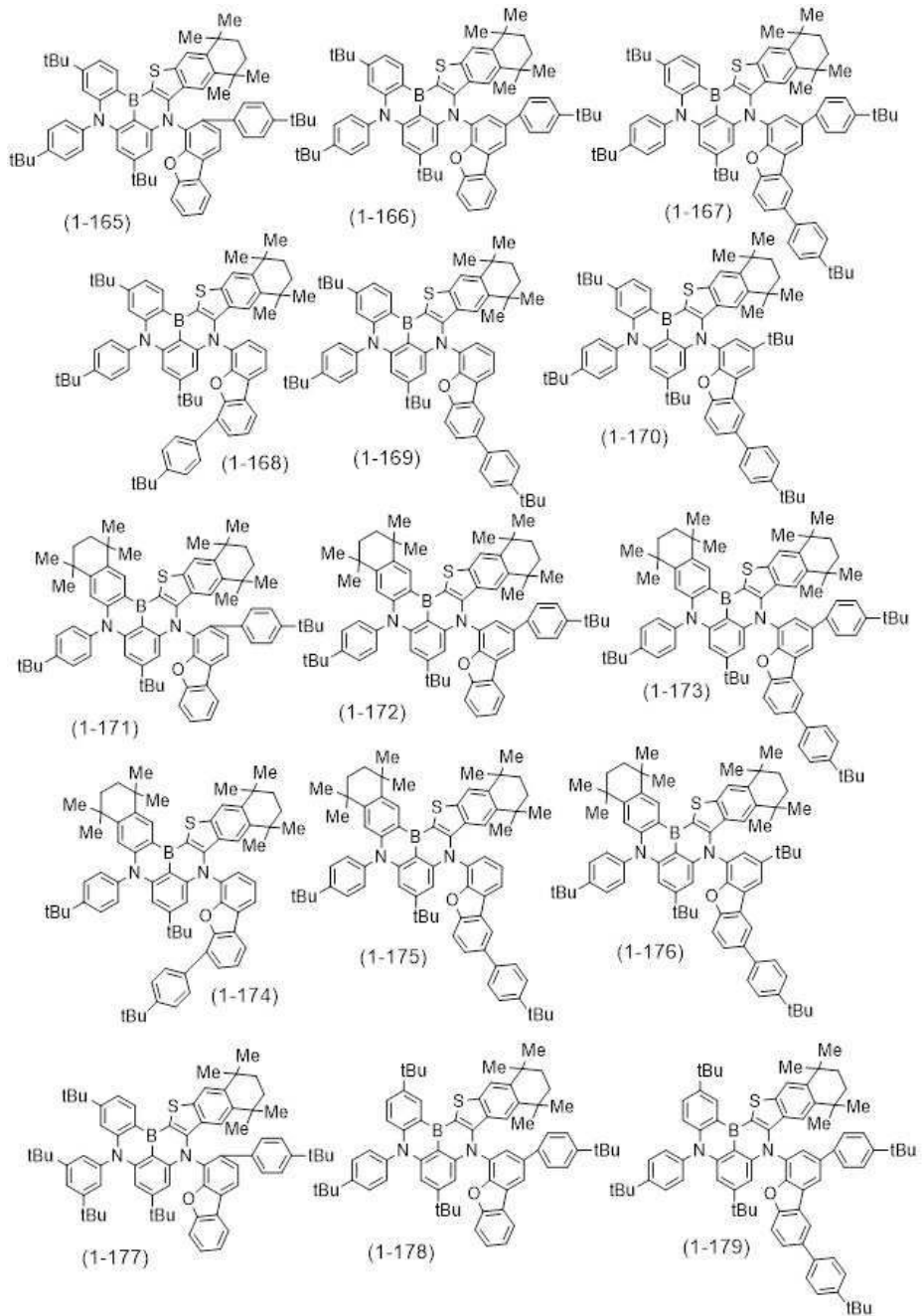
[0215]



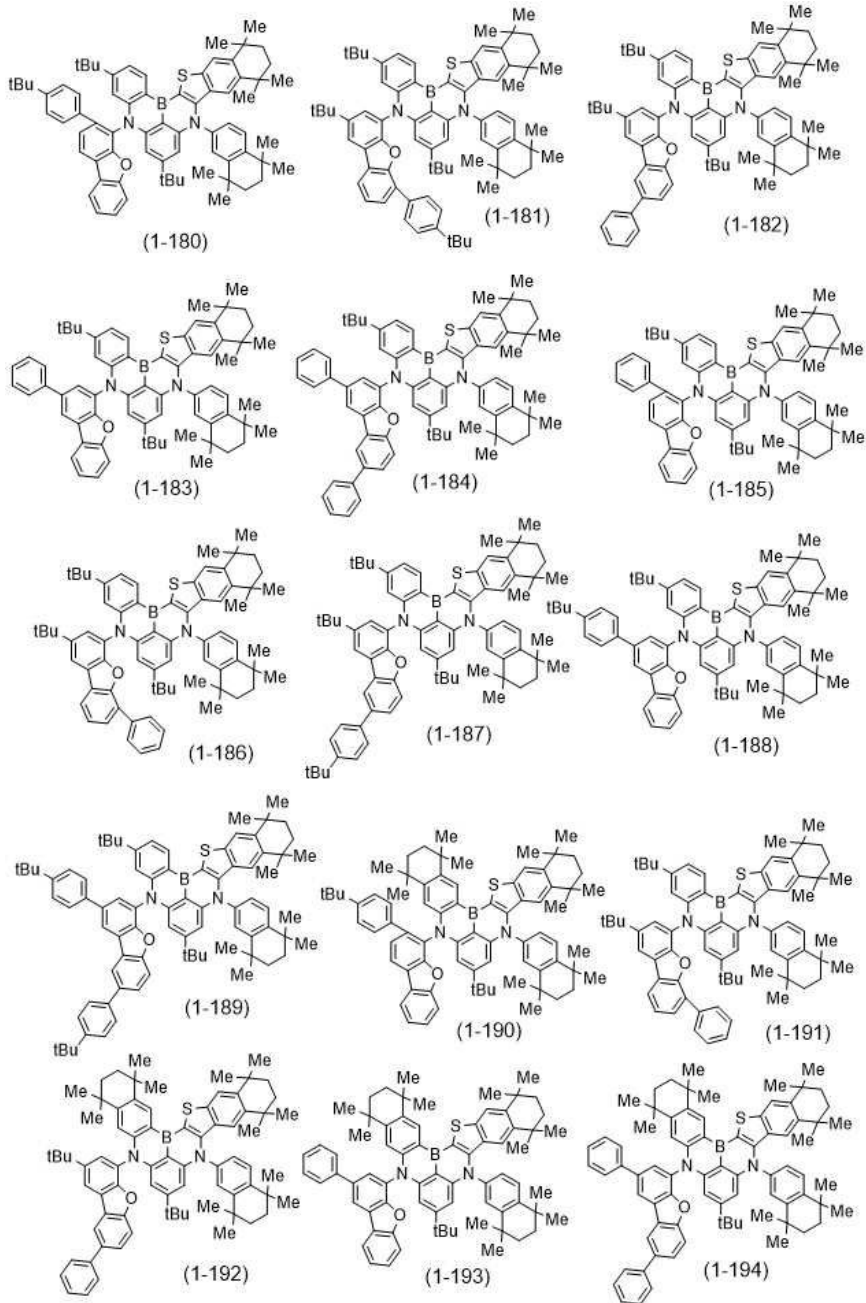
[0217]



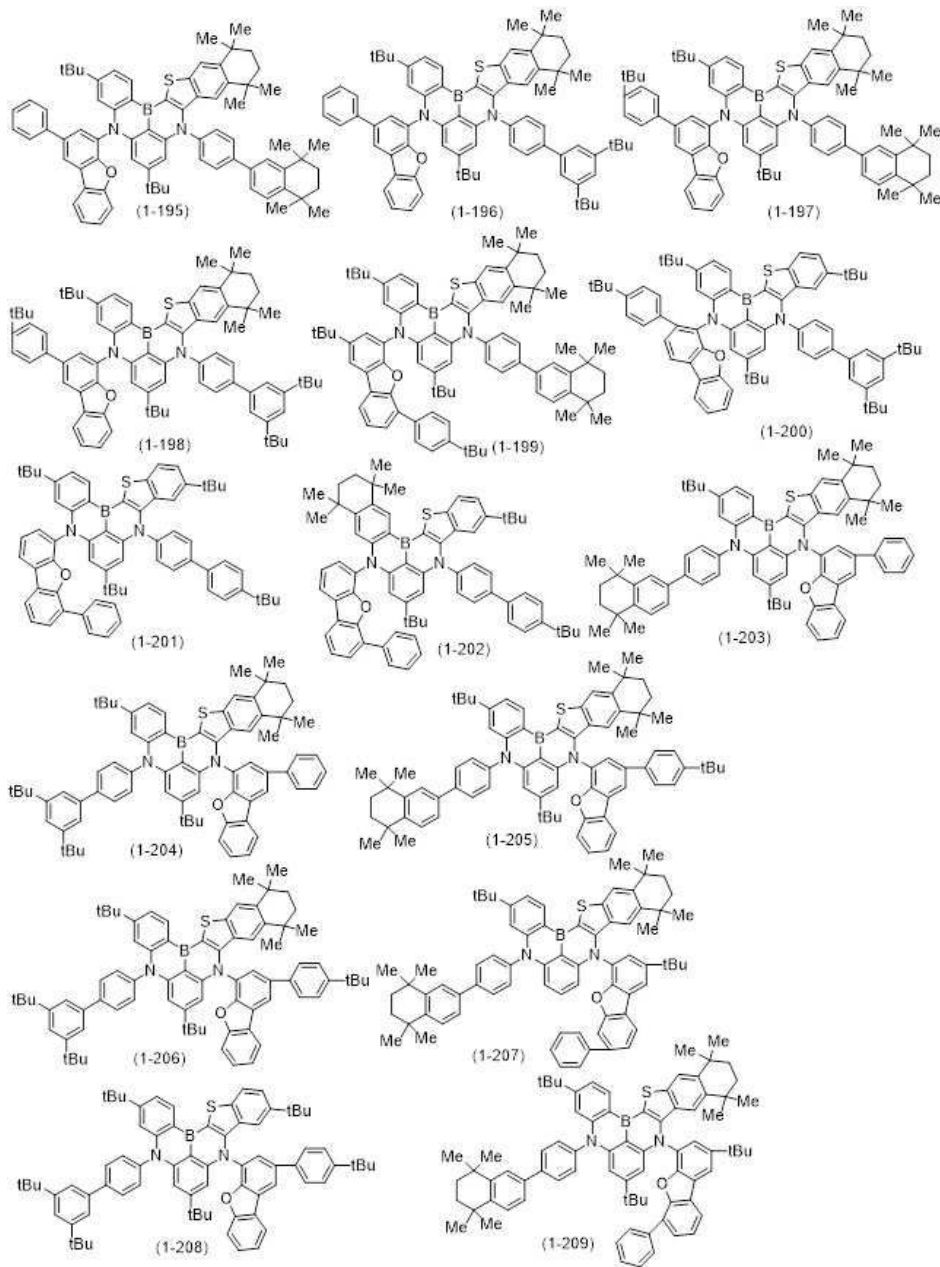
[0218]



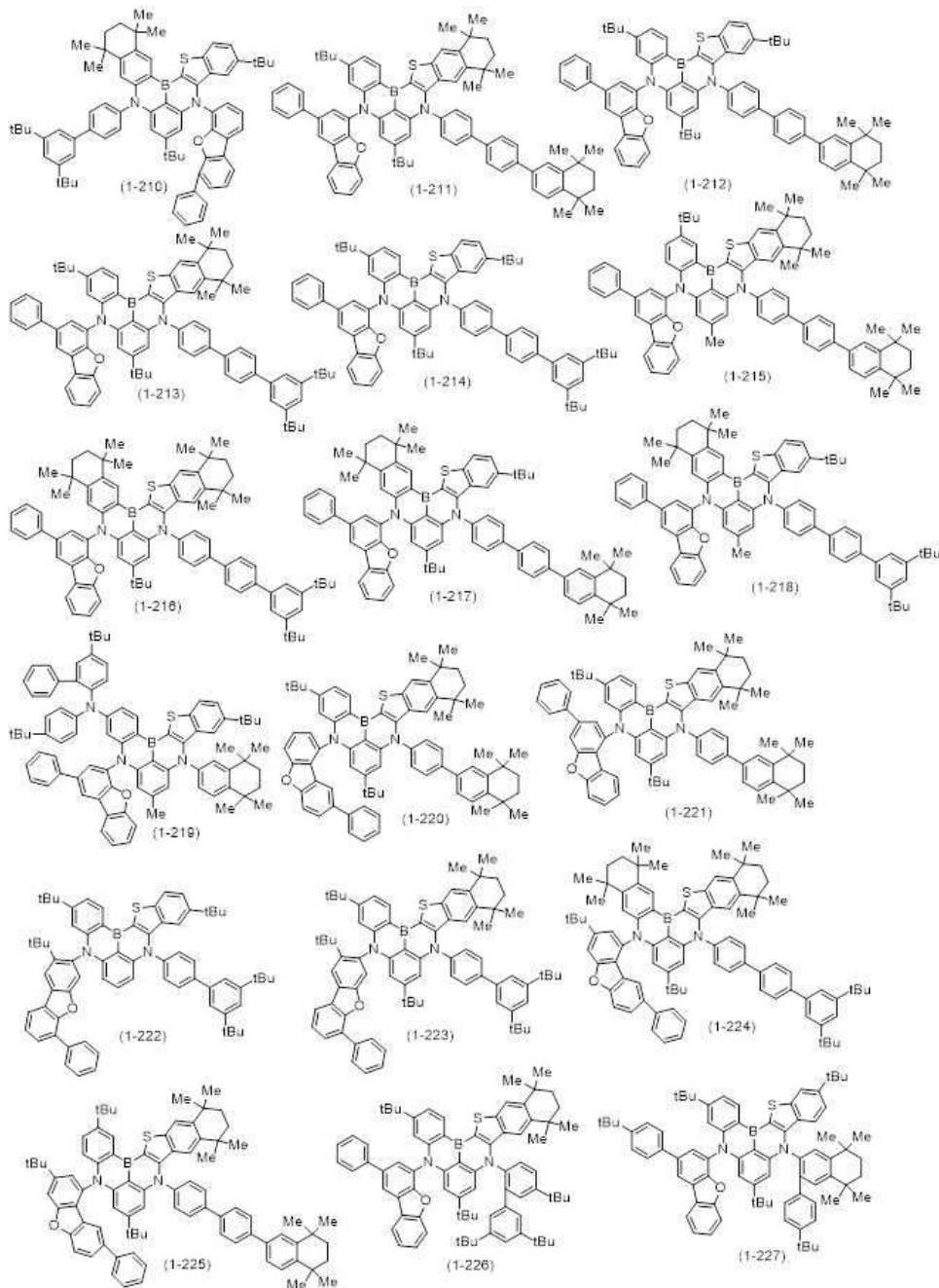
[0219]



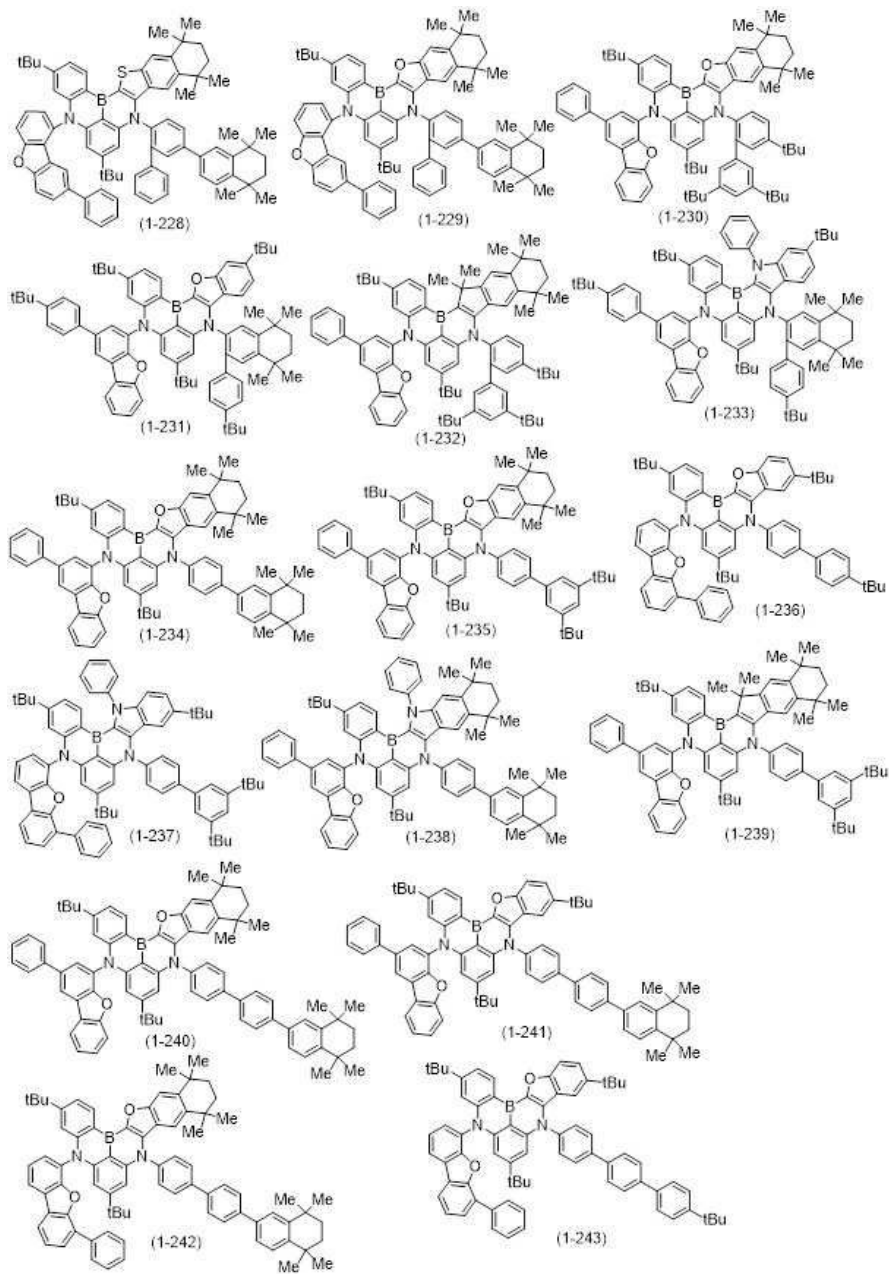
[0220]



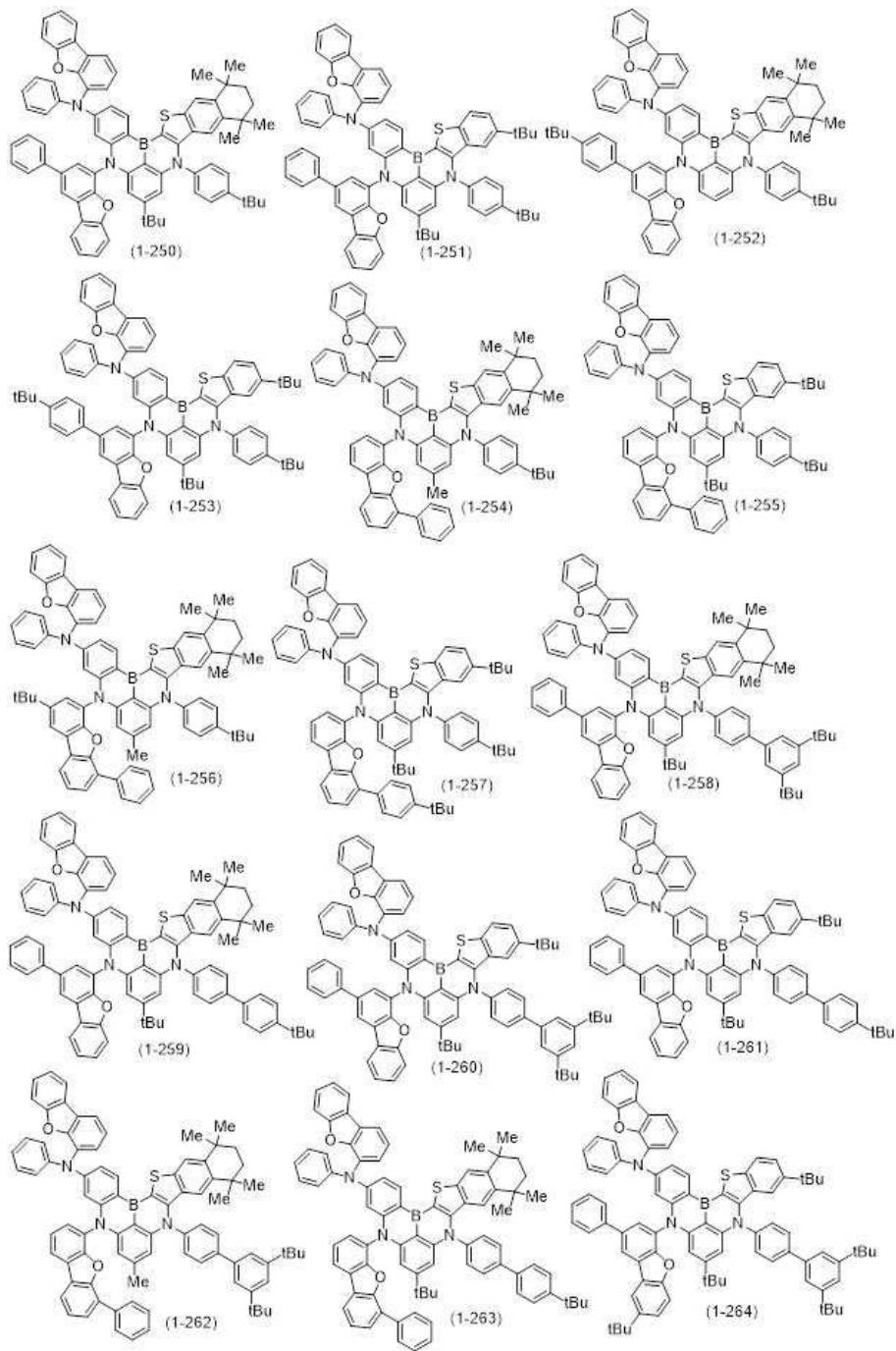
[0221]



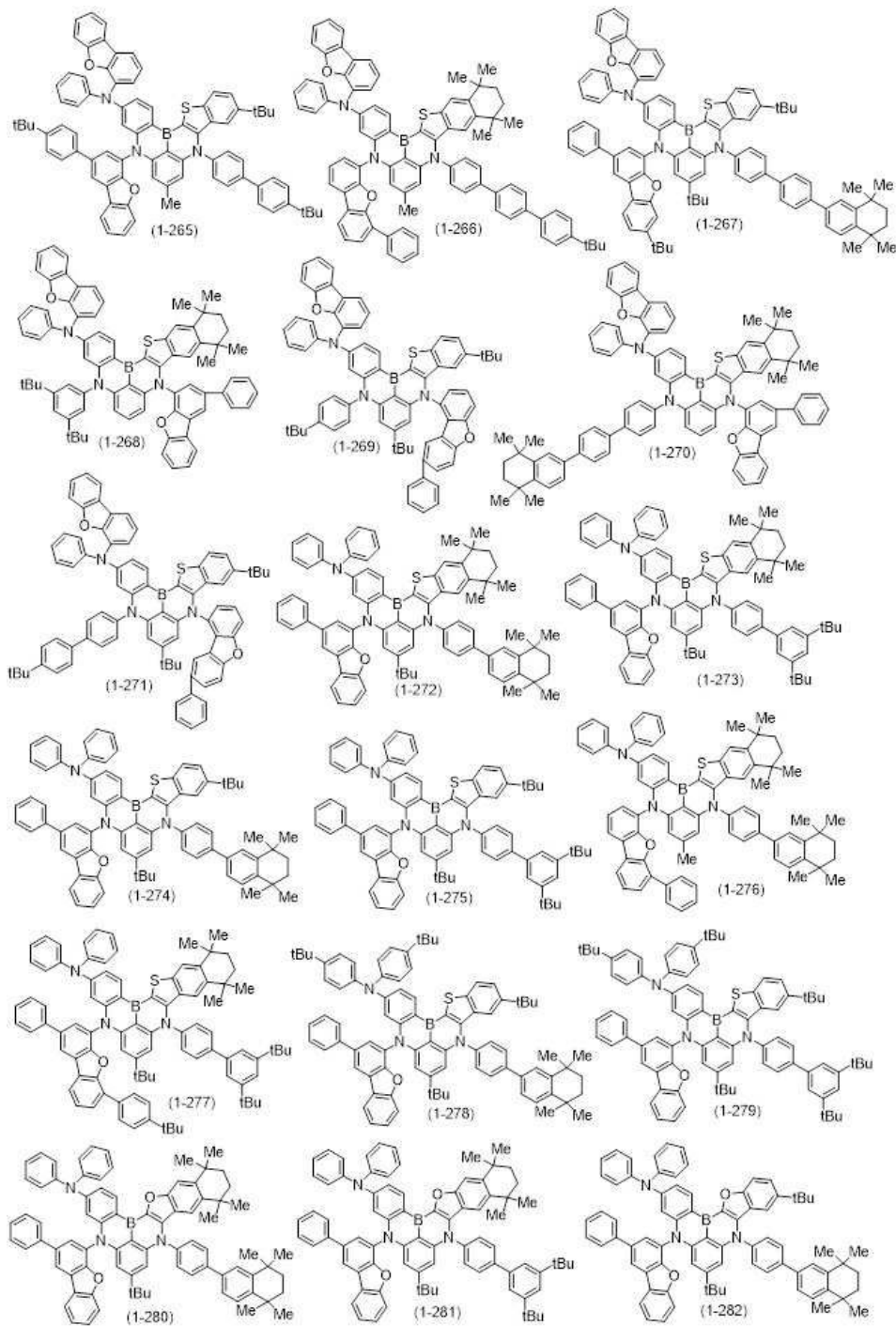
[0222]



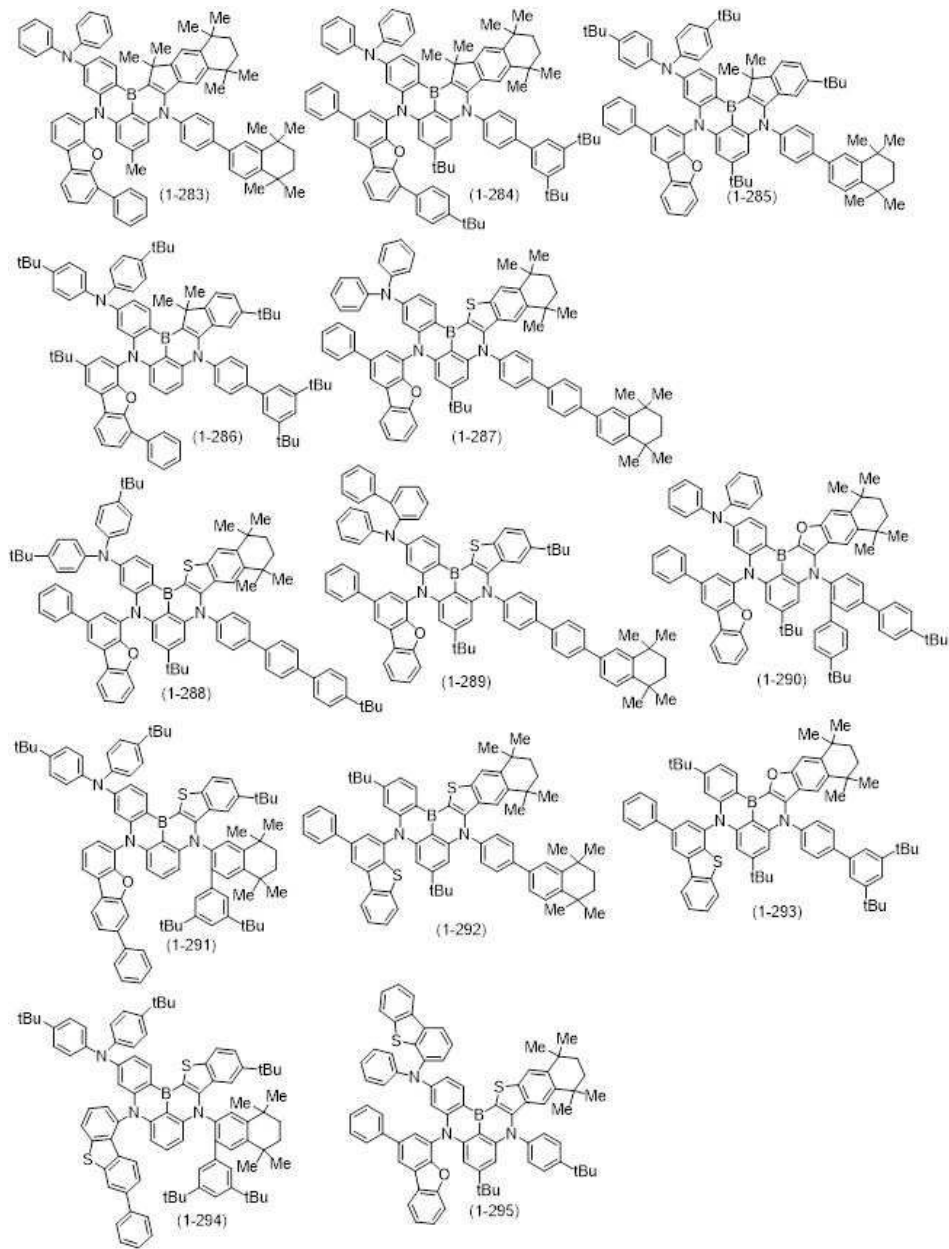
[0223]



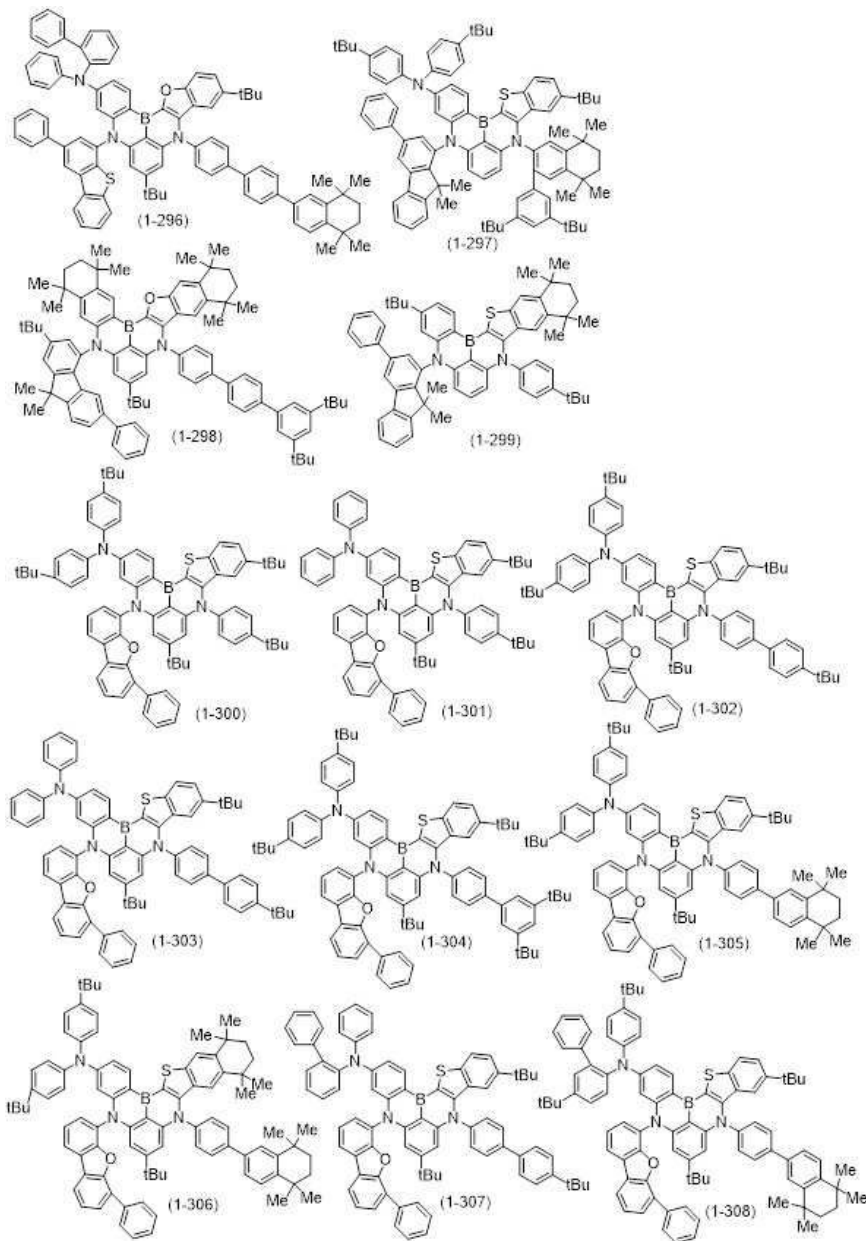
[0224]



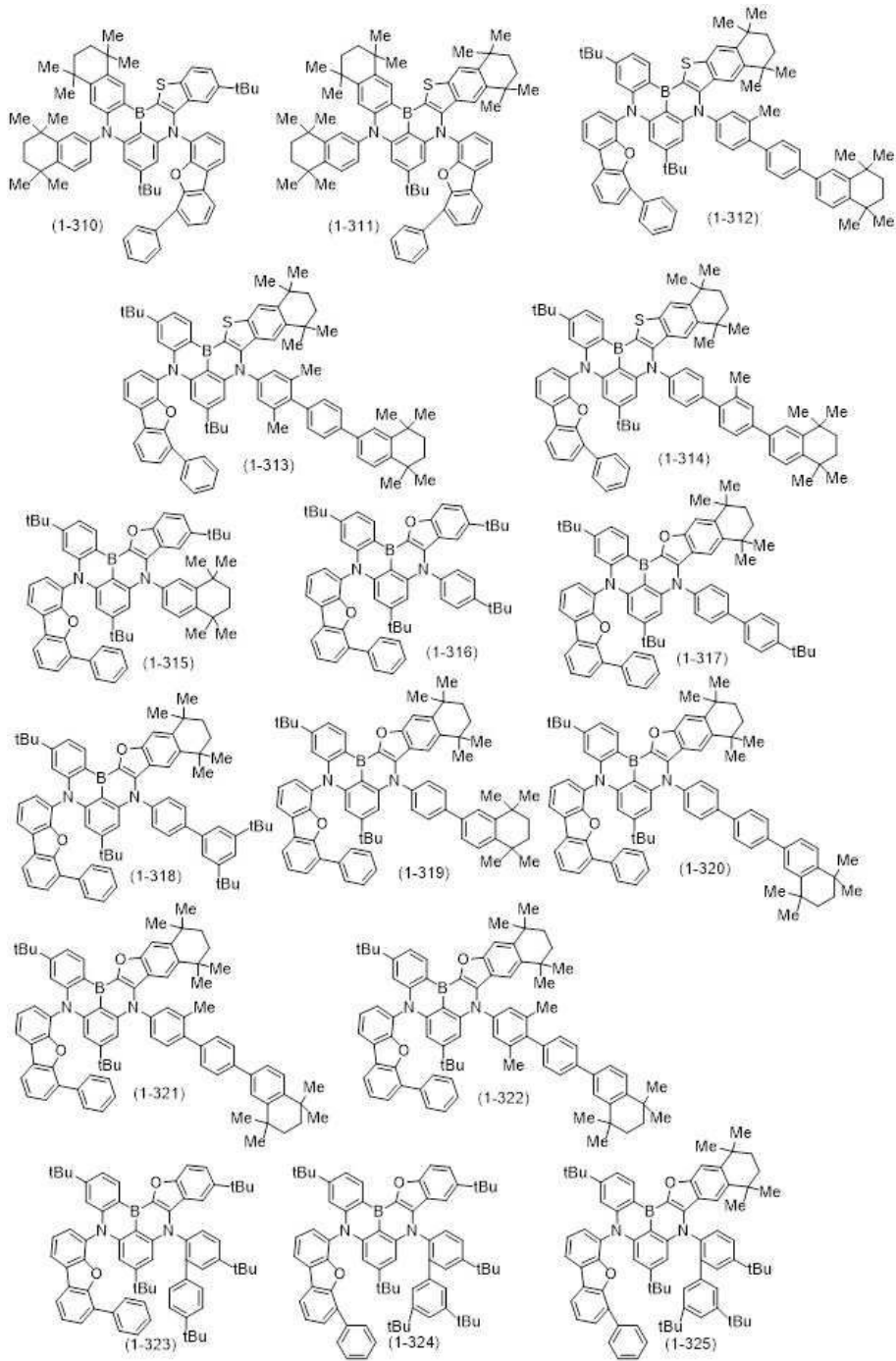
[0225]



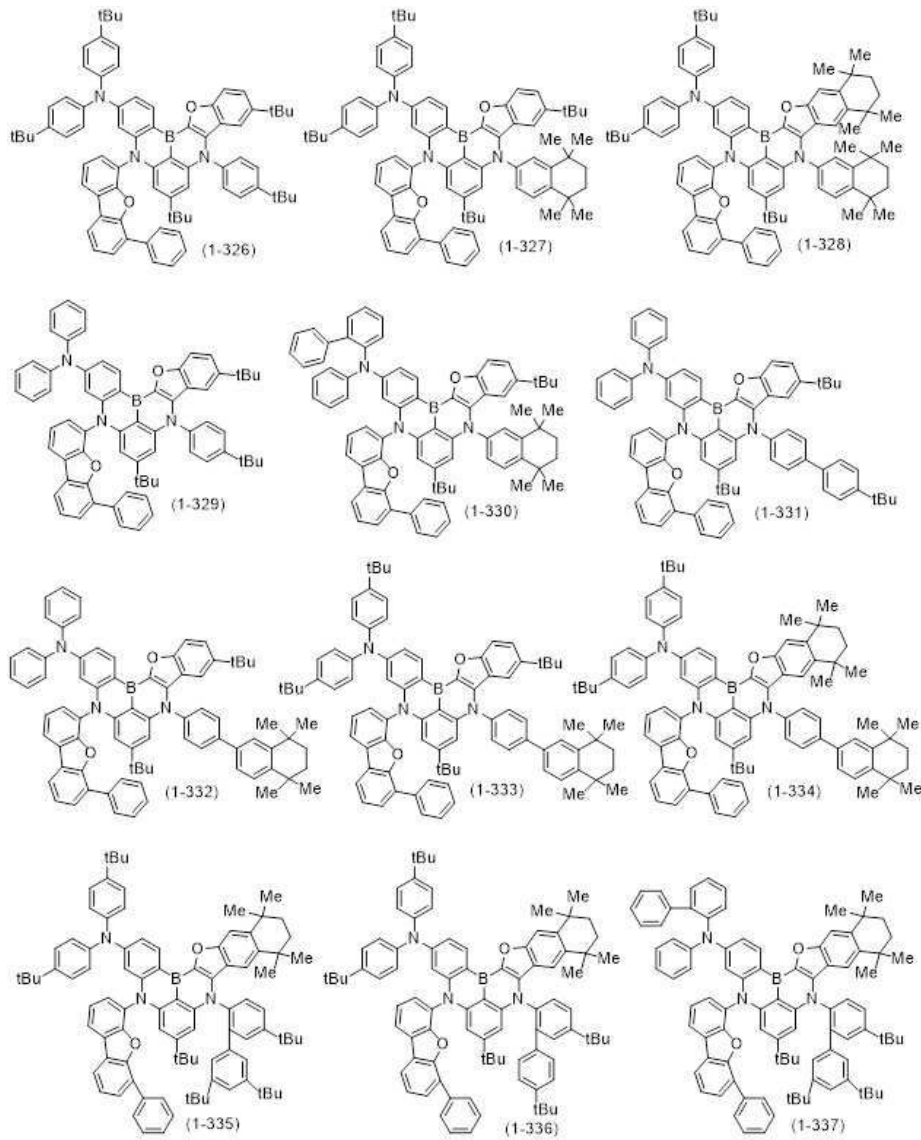
[0226]



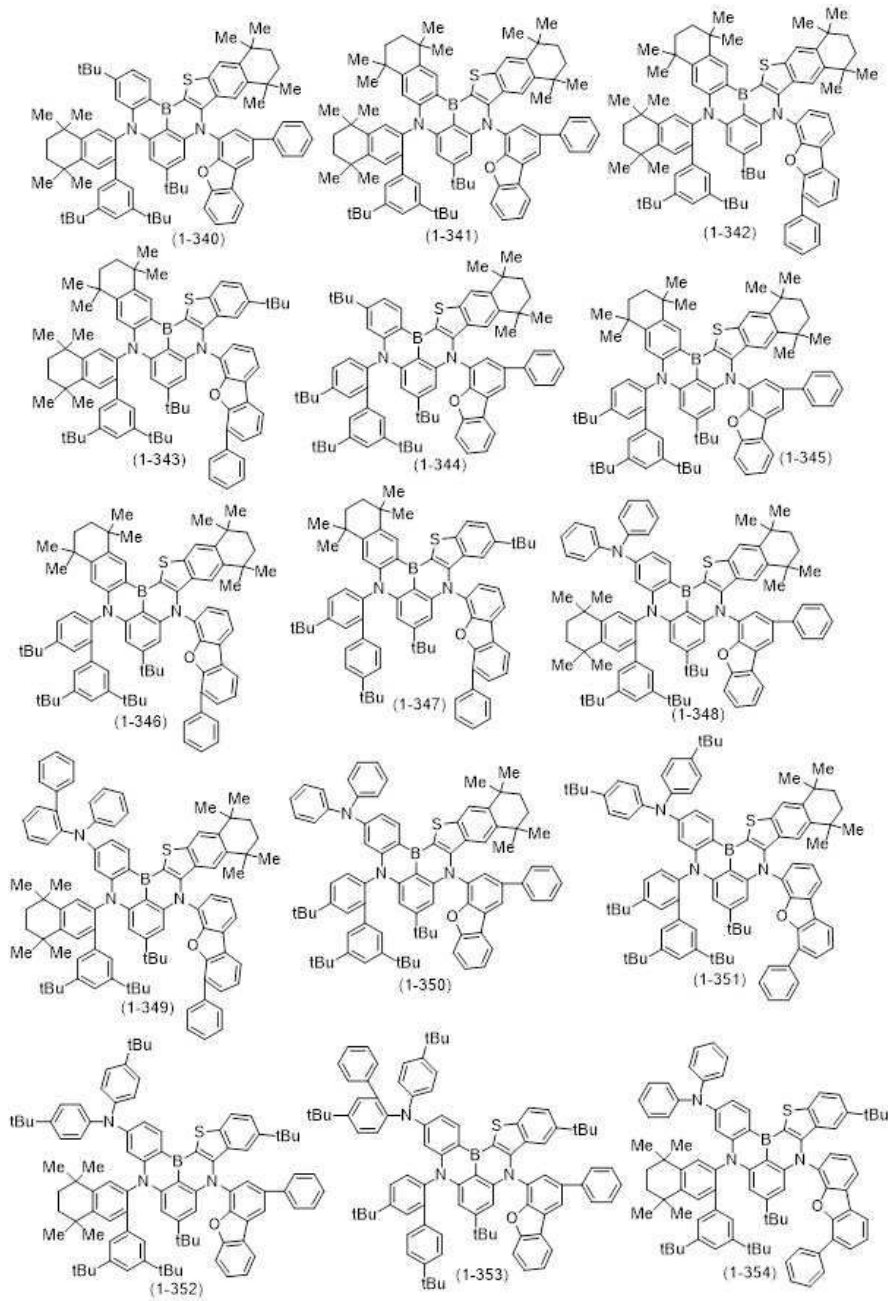
[0227]



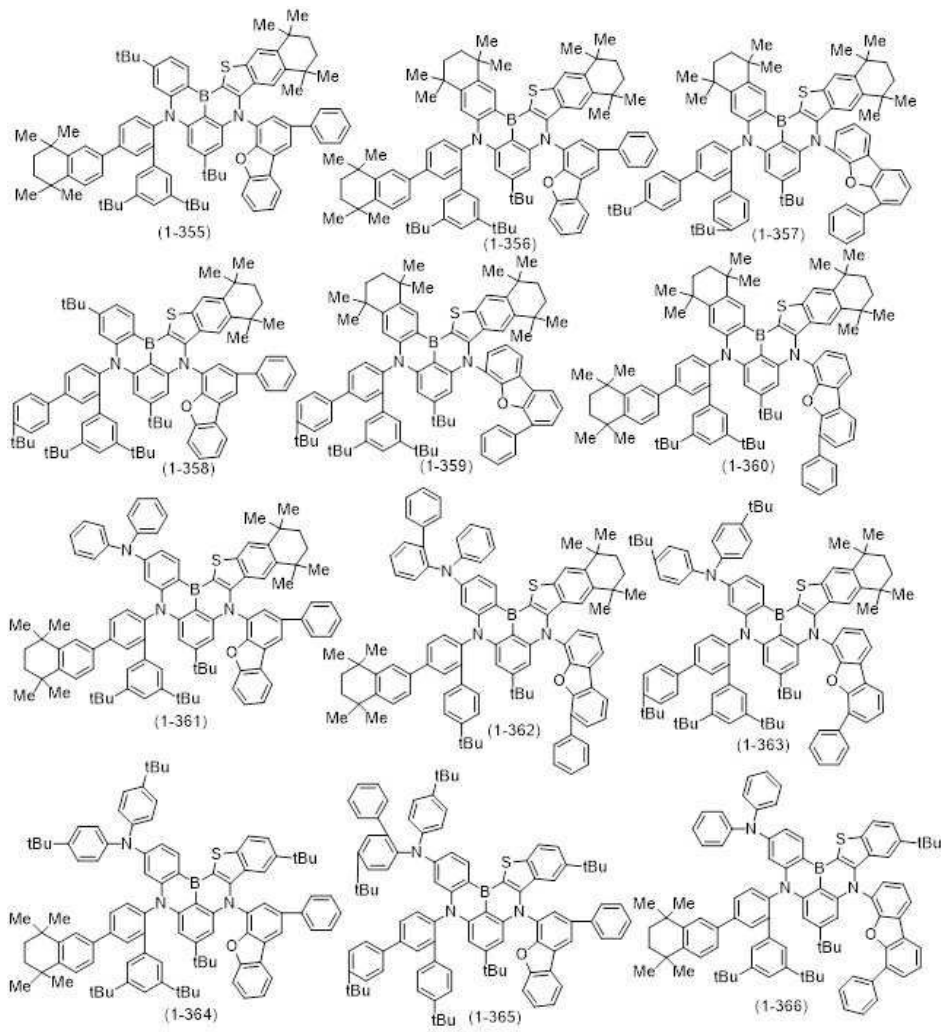
[0228]



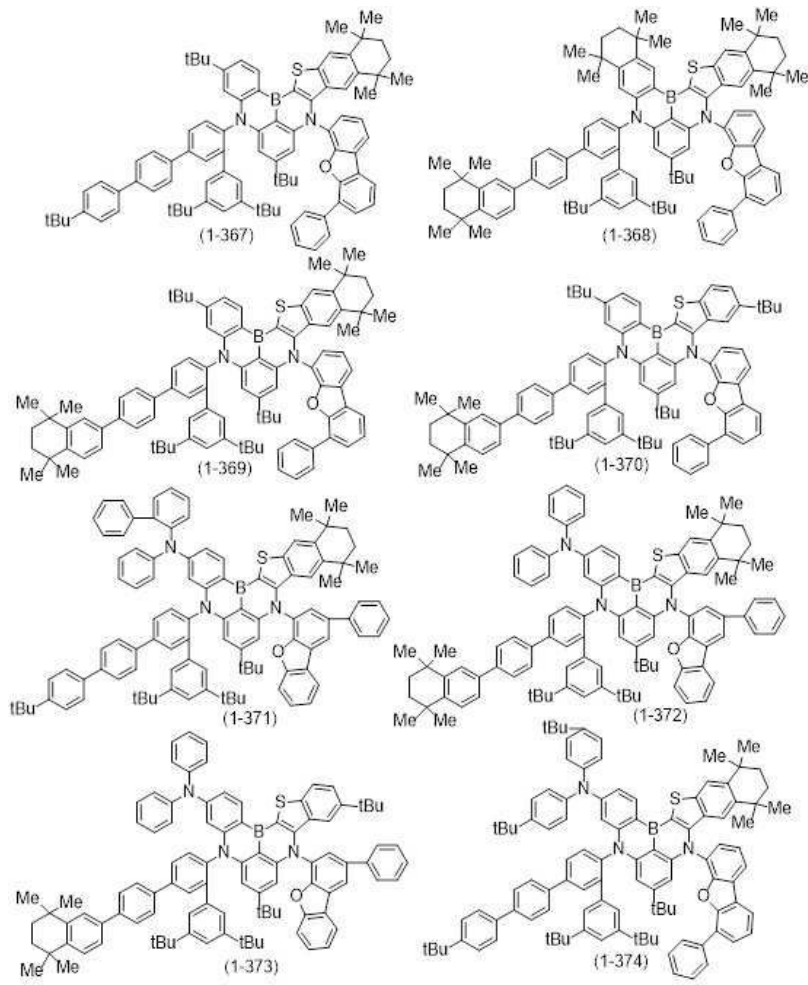
[0229]



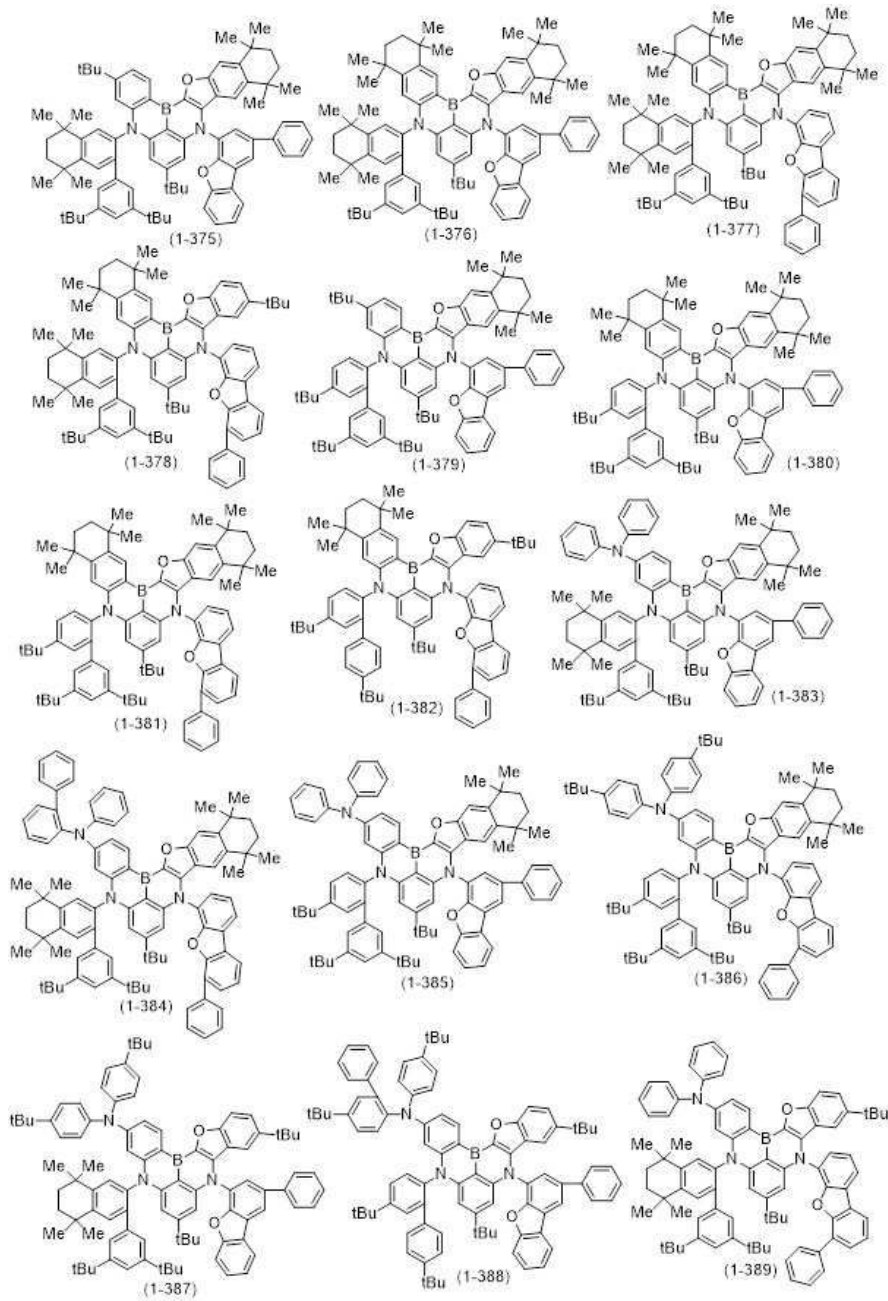
[0230]



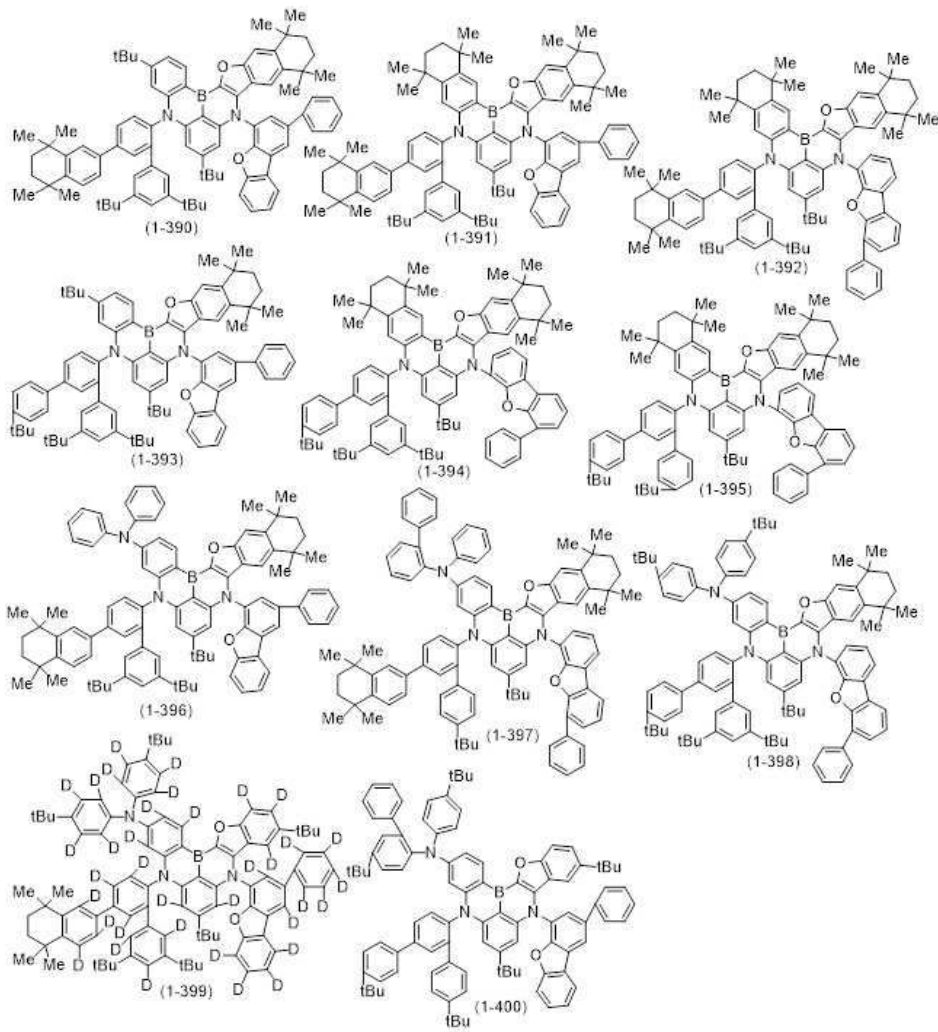
[0231]



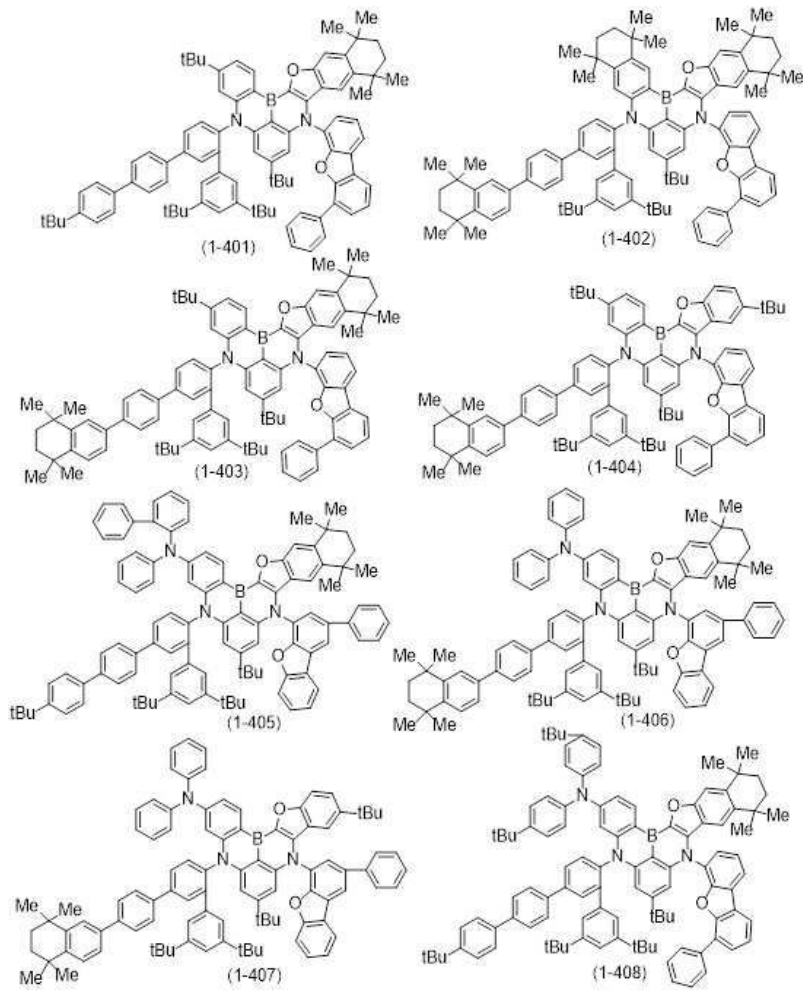
[0232]



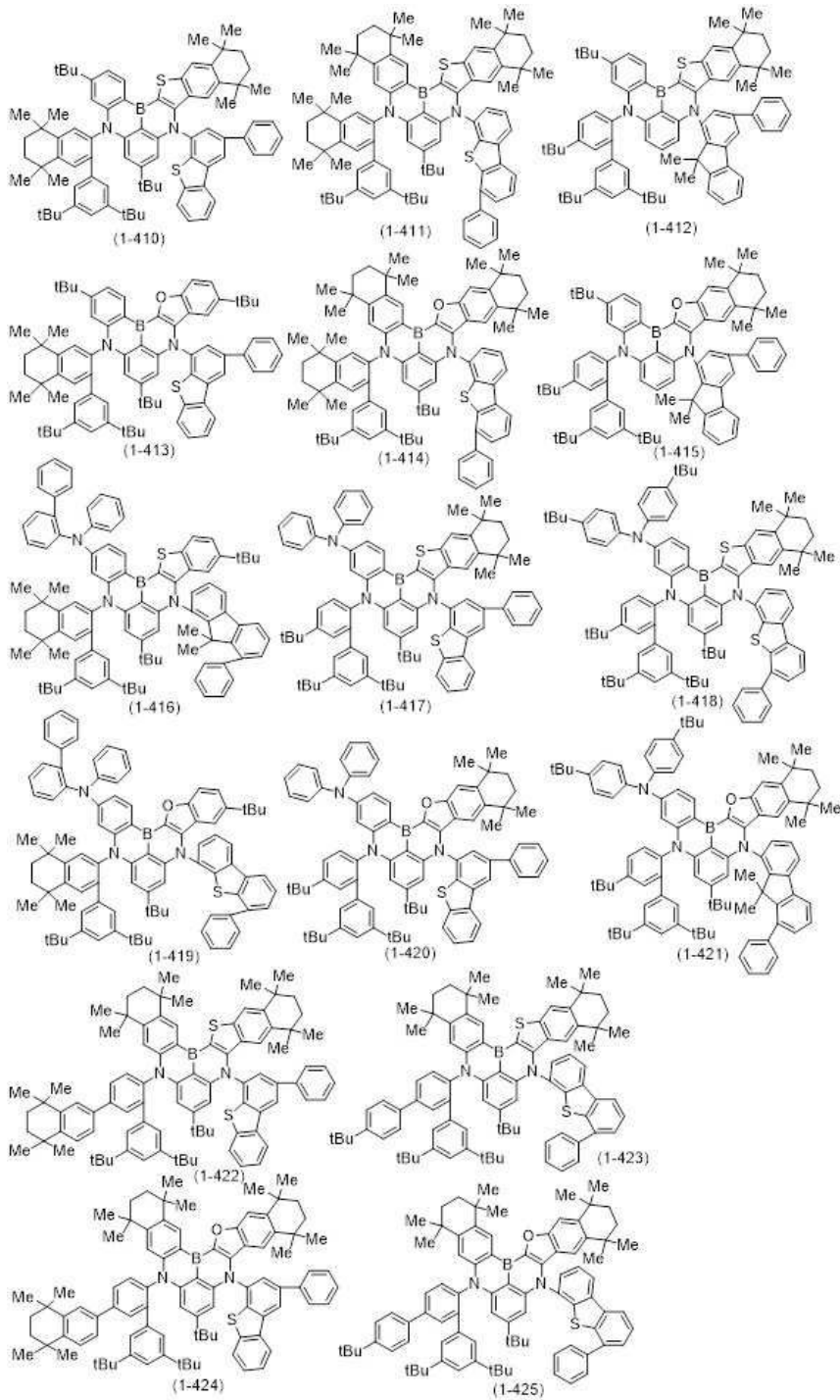
[0233]



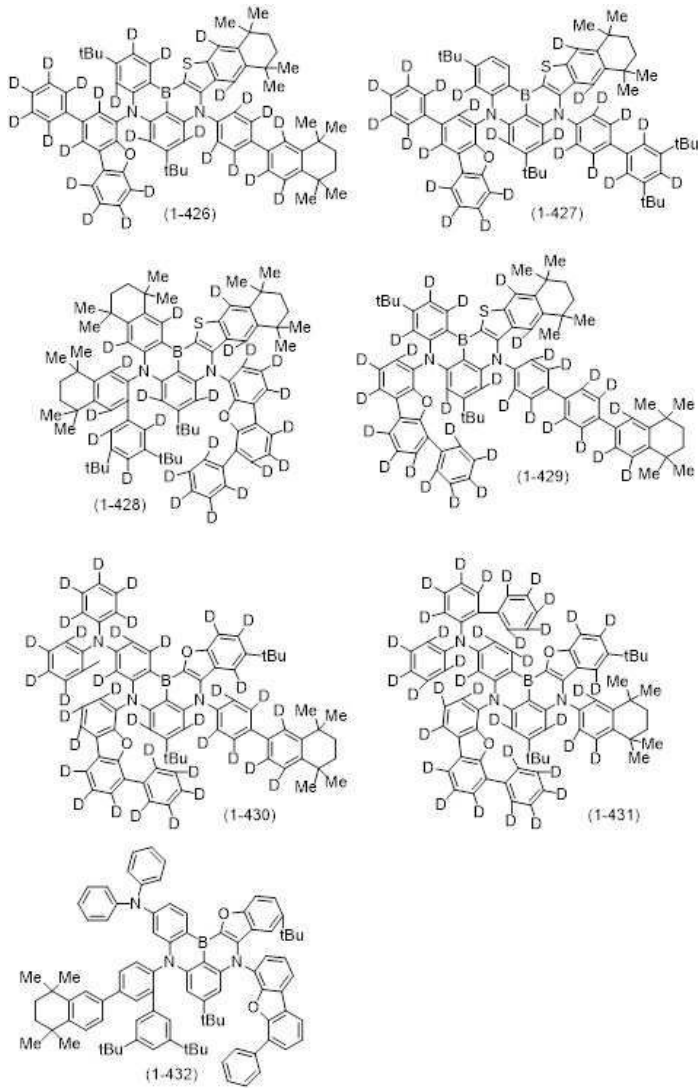
[0234]



[0235]



[0236]



[0237]

[0238]

[0239]

[0240]

[0241]

[0242]

[0243]

본 발명의 다환방향족 화합물은, 이하의 순서에서 제조할 수 있다.

<다환방향족 화합물의 제조방법>

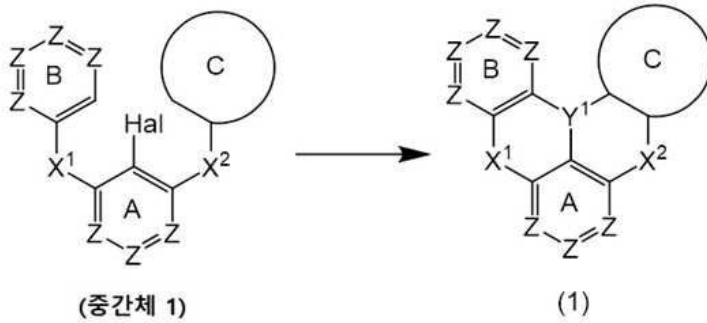
식(1)으로 표현되는 구조단위 1개 또는 2개 이상으로 이루어지는 구조를 가지는 본 발명의 다환방향족 화합물은, 기본적으로는, 먼저 A환(a환)과 B환(b환) 및 C환(c환)을 결합기(X1이나 X2을 포함하는 기)로 결합시킴으로써 중간체를 제조하고(제1반응), 그 후에, A환(a환), B환(b환) 및 C환(c환)을 결합기(Y1을 포함하는 기)로 결합시킴으로써 최종 생성물을 제조할 수 있다(제2반응). 제1반응에서는, 예를 들면 에테르화 반응이라면, 구핵 치환 반응, 울만 반응과 같은 일반적 반응을 사용할 수 있고, 아미노화 반응이라면 버치왈드-하트워 반응과 같은 일반적 반응을 사용할 수 있다. 또한, 제2반응에서는, 텐덤 헤테로 프리델 크래프츠 반응(연속적인 방향족 구전자 치환 반응, 이하 마찬가지로)을 사용할 수 있다. 반응 공정의 어디인가에서, 원하는 축합환을 가지는 원료를 사용하거나, 환을 축합하는 공정을 추가하거나 함으로써, A환, B환 및 C환으로 이루어지는 군으로부터 선택되는 적어도 하나의 환이 단환의 아릴환, 단환의 헤테로아릴환, 및 시클로펜타디엔환으로 이루어지는 군으로부터 선택되는 2개 이상의 환으로 구성되는 축합환을 가지는 화합물을 제조할 수 있다.

<중간체 1을 경유하는 제조방법>

본 발명의 다환방향족 화합물은 이하의 공정을 포함하는 제조방법으로 제조할 수 있다. 이하 각 공정에 대해서는, 국제공개 제2015/102118호의 기재를 참조할 수 있다.

유기 알칼리 화합물을 사용해서 하기 중간체 1에 있어서의 X1과 X2의 사이의 할로젠 원자(Hal)를 메탈화하는 반응 공정과, Y1의 할로젠화물, Y1의 아미노화 할로젠화물, Y1의 알콕시화물 및 Y1의 아릴옥시화물로 이루어지는 군으로부터 선택되는 시약을 사용해서 상기 메탈과 Y1을 교환하는 반응 공정과, 브린스टे드 염기를 사용해서 연속적인 방향족 구전자 치환 반응에 의해 상기 Y1로 B환과 C환을 결합하는 반응 공정을 포함하는 반응을 이하에

기재한다.



[0244]

[0245]

지금까지 설명한 스킴에 있어서의 할로젠-메탈 교환 반응에서 사용되는 메탈화 시약으로서는, 메틸 리튬, n-부틸리튬, sec-부틸리튬, t-부틸리튬 등의 알킬 리튬, 염화 이소프로필 마그네슘, 브롬화 이소프로필 마그네슘, 염화 페닐 마그네슘, 브롬화 페닐 마그네슘 및 터보 그리냐르 시약으로서 알려져 있는, 염화 이소프로필 마그네슘의 염화 리튬 착체 등을 들 수 있다.

[0246]

또한, 지금까지 설명한 스킴에 있어서의 오르토메탈 교환 반응에서 사용되는 메탈화 시약으로서는, 상기의 시약에 더해서, 리튬디이소프로필아미드, 리튬테트라메틸피페리디드, 리튬헥사메틸디실라지드, 칼륨헥사메틸디실라지드, 염화 리튬 테트라메틸피페리디닐마그네슘·염화 리튬 착체, 트리-n-부틸 마그네슘산 리튬 등의 유기 알칼리 화합물을 들 수 있다.

[0247]

나아가, 메탈화 시약으로서 알킬 리튬을 사용할 경우에 반응을 촉진시키는 첨가제로서는, N,N,N',N'-테트라메틸에틸렌디아민, 1,4-디아자비시클로[2.2.2]옥탄, N,N- 디메틸 프로필렌 요소 등을 들 수 있다.

[0248]

또한, 지금까지 설명한 스킴에서 사용되는 루이스 산으로서는, AlCl₃, AlBr₃, AlF₃, BF₃·OEt₂, BC1₃, BBr₃, GaCl₃, GaBr₃, InCl₃, InBr₃, In(OTf)₃, SnCl₄, SnBr₄, AgOTf, ScCl₃, Sc(OTf)₃, ZnCl₂, ZnBr₂, Zn(OTf)₂, MgCl₂, MgBr₂, Mg(OTf)₂, LiOTf, NaOTf, KOTf, Me₃SiOTf, Cu(OTf)₂, CuCl₂, YCl₃, Y(OTf)₃, TiCl₄, TiBr₄, ZrCl₄, ZrBr₄, FeCl₃, FeBr₃, CoCl₃, CoBr₃ 등을 들 수 있다. 또한, 이 루이스 산을 고체에 담지한 것도 마찬가지로 사용할 수 있다.

[0249]

또한, 지금까지 설명한 스킴에서 사용하는 브뢴스테드산으로서는, p-톨루엔 술폰산, 메탄 술폰산, 트리플루오로메탄술폰산, 플루오로술폰산, 카르보란산, 트리플루오로초산, (트리플루오로메탄술폰닐)이미드, 트리스(트리플루오로메탄술폰닐)메탄, 염화수소, 브롬화수소, 불화수소 등을 들 수 있다. 또한, 고체 브뢴스테드산으로서 엠버리스트(상품명:다우·케미칼), 나피온(상품명:듀폰), 제올라이트, 테이카큐어(상품명:테이카 주식회사) 등을 들 수 있다.

[0250]

또한, 지금까지 설명한 스킴에서 가해도 좋은 아민으로서는, 디이소프로필에틸아민, 트리에틸아민, 트리부틸아민, 1,4-디아자비시클로[2.2.2]옥탄, N,N-디메틸-p-톨루이딘, N,N-디메틸아닐린, 피리딘, 2,6-루티딘, 2,6-di-t-부틸아민 등을 들 수 있다.

[0251]

또한, 지금까지 설명한 스킴에서 사용하는 용매로서는, o-디클로로벤젠, 클로로벤젠, 톨루엔, 벤젠, 염화 메틸렌, 클로로포름, 디클로로에틸렌, 벤조트리플루오라이드, 데칼린, 시클로헥산, 헥산, 헵탄, 1,2,4-트리메틸 벤젠, 크실렌, 디페닐 에테르, 아니솔, 시클로펜틸 메틸 에테르, 테트라히드로푸란, 디옥산, 메틸-t-부틸 에테르 등을 들 수 있다.

[0252]

여기에서는, Y1이, B인 예를 기재했지만, 원료를 적당히 변경함으로써, Y1이, P, P=O, P=S, Al, Ga, As, Si-R 또는 Ge-R인 화합물도 합성할 수 있다.

[0253]

상기 스킴에서는, 탠덤 헤테로 프리델 크래프츠 반응의 촉진을 위해서 브뢴스테드 염기 또는 루이스 산을 사용해도 된다. 단, Y1의 삼불화물, Y1의 삼염화물, Y1의 삼브롬화물, Y1의 삼요오드화물 등의 Y1의 할로겐화물을 사용했을 경우는, 방향족 구전자 치환 반응의 진행과 함께, 불화수소, 염화수소, 브롬화수소, 요오드화수소와 같은 산이 생성되기 때문에, 산을 포착하는 브뢴스테드 염기의 사용이 효과적이다. 한편, Y1의 아미노화 할로겐화물, Y1의 알콕시화물을 사용했을 경우는, 방향족 구전자 치환 반응의 진행과 함께, 아민, 알코올이 생성되기 때문에, 많은 경우, 브뢴스테드 염기를 사용할 필요는 없지만, 아미노나 알콕시의 이탈 능력이 낮기 때문에, 그 이탈을 촉진하는 루이스 산의 사용이 효과적이다.

- [0254] 또한, 본 발명의 다환방향족 화합물에는, 적어도 일부의 수소원자가 중수소나 시아노에서 치환되고 있는 화합물이나 불소나 염소 등의 할로겐으로 치환되고 있는 화합물도 포함되는데, 이러한 화합물 등은 원하는 위치가 중수소화, 시아노화, 불소화 또는 염소화된 원료를 사용함으로써, 상기와 마찬가지로 합성할 수 있다.
- [0255] <2. 유기 디바이스>
- [0256] 본 발명에 따른 다환 방향족 화합물은, 유기 디바이스용 재료로서 이용할 수 있다. 유기 디바이스로서는, 예를 들면, 유기 전계 발광 소자, 유기 전계 효과 트랜지스터 또는 유기 박막 태양 전지 등을 들 수 있다.
- [0257] 본 발명에 관한 다환방향족 화합물 및 그 다량체는, 유기 디바이스용 재료로서 사용할 수 있다. 유기 디바이스로서는, 예를 들면, 유기 전계 발광 소자, 유기 전계효과 트랜지스터 또는 유기 박막태양전지 등을 들 수 있지만, 유기 전계 발광 소자인 것이 바람직하다. 본 발명에 관한 다환방향족 화합물 및 그 다량체는, 유기 전계 발광 소자재료인 것이 바람직하고, 발광층용 재료(발광재료)인 것이 보다 바람직하고, 발광층의 도펀트 재료인 것이 가장 바람직하다.
- [0258] <2-1. 유기 전계 발광 소자>
- [0259] <2-1-1. 유기 전계 발광 소자의 구조>
- [0260] 도 1은 유기 EL 소자의 일예를 나타내는 개략단면도이다.
- [0261] 도 1에 나타내어진 유기 EL 소자(100)는, 기판(101)과, 기판(101) 상에 설치된 양극(102)과, 양극(102) 위에 설치된 정공 주입층(103)과, 정공 주입층(103) 위에 설치된 정공 수송층(104)과, 정공 수송층(104) 위에 설치된 발광층(105)과, 발광층(105) 위에 설치된 전자 수송층(106)과, 전자 수송층(106) 위에 설치된 전자 주입층(107)과, 전자 주입층(107) 위에 설치된 음극(108)을 갖는다.
- [0262] 또한, 유기 EL 소자(100)는, 제작 순서를 반대로 하여, 예를 들면, 기판(101)과, 기판(101) 상에 설치된 음극(108)과, 음극(108) 위에 설치된 전자 주입층(107)과, 전자 주입층(107) 위에 설치된 전자 수송층(106)과, 전자 수송층(106) 위에 설치된 발광층(105)과, 발광층(105) 위에 설치된 정공 수송층(104)과, 정공 수송층(104) 위에 설치된 정공 주입층(103)과, 정공 주입층(103) 위에 설치된 양극(102)을 갖는 구성으로 해도 된다.
- [0263] 상기 각 층 모두가 없으면 안 되는 것은 아니고, 최소 구성 단위를 양극(102)과 발광층(105)과 음극(108)으로 이루어지는 구성으로 하고, 정공 주입층(103), 정공 수송층(104), 전자 수송층(106), 전자 주입층(107)은 임의로 설치되는 층이다. 또, 상기 각 층은, 각각 단일층으로 이루어져도 되고, 복수 층으로 이루어져도 된다.
- [0264] 유기 EL 소자를 구성하는 층의 양태로서는, 상술하는 「기판/양극/정공주입층/정공수송층/발광층/전자수송층/전자주입층/음극」의 구성 양태 외에, 「기판/양극/정공수송층/발광층/전자수송층/전자주입층/음극」, 「기판/양극/정공주입층/발광층/전자수송층/전자주입층/음극」, 「기판/양극/정공수송층/발광층/전자수송층/음극」, 「기판/양극/정공주입층/정공수송층/발광층/전자수송층/음극」, 「기판/양극/발광층/전자수송층/전자주입층/음극」, 「기판/양극/정공 수송층/발광층/전자주입층/음극」, 「기판/양극/정공수송층/발광층/전자 수송층/음극」, 「기판/양극/정공주입층/발광층/전자주입층/음극」, 「기판/양극/정공주입층/발광층/전자수송층/음극」, 「기판/양극/발광층/전자 수송층/음극」, 「기판/양극/발광층/전자 주입층/음극」의 구성 양태여도 된다.
- [0265] <2-1-2. 유기 전계 발광 소자에 있어서의 발광층>
- [0266] 본 발명의 다환방향족 화합물은, 유기전계발광소자에 있어서의, 임의의 1개이상의 유기층을 형성하는 재료로서 사용되는 것이 바람직하고, 발광층을 형성하는 재료로서 사용되는 것이 보다 바람직하다.
- [0267] 발광층(105)은, 전계가 부여된 전극 간에 있어서, 양극(102)으로부터 주입된 정공과, 음극(108)으로부터 주입된 전자를 재결합시킴으로써 발광하는 층이다. 발광층(105)을 형성하는 재료로서는, 정공과 전자의 재결합에 의해 여기되어 발광하는 화합물(발광성 화합물)이면 되고, 안정적인 박막 형상을 형성할 수 있고, 또한, 고체 상태에서 강한 발광(형광) 효율을 나타내는 화합물인 것이 바람직하다. 본 발명의 다환방향족 화합물은, 발광층용 재료로서 사용할 수 있고, 도펀트 재료로서 사용해도 되고, 호스트 재료로서 사용해도 되지만, 발광층용 재료로서 사용하는 것이 바람직하고, 도펀트 재료로서 사용하는 것이 보다 바람직하다.
- [0268] 한편, 도펀트로서는, 어시스팅 도펀트와 이미팅 도펀트를 병용해서 사용하는 예가 있지만, 본 명세서에 있어서, 단지, 「도펀트」라고 기재했을 경우에는, 단독으로 사용되는 발광 도펀트를 가리킨다.
- [0269] 발광층은 단일층이어도 되고 복수 층으로 이루어져도 되고 어느 쪽이어도 되고, 각각 발광층용 재료(호스트 재

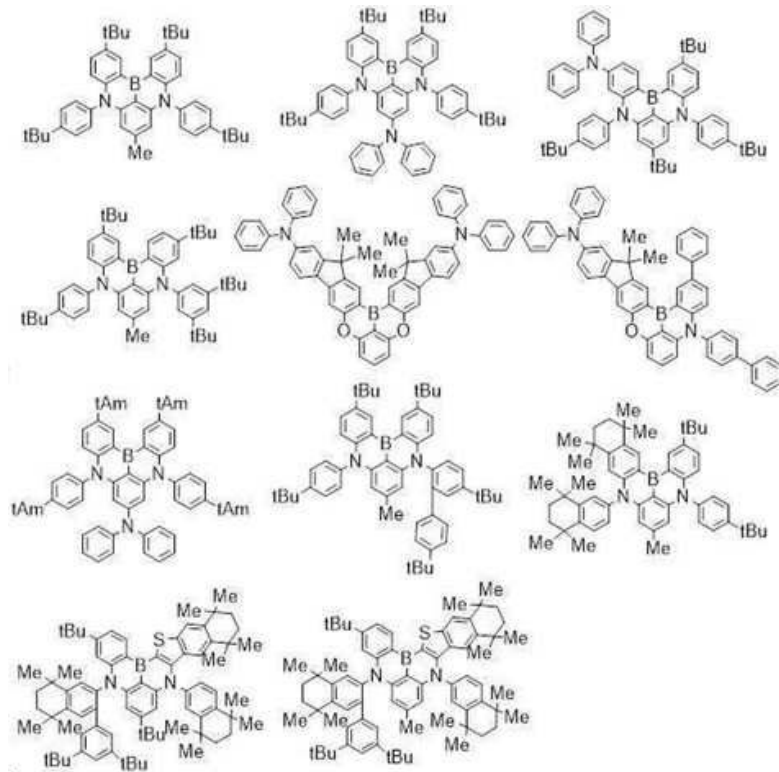
료, 도펀트 재료)에 의해 형성된다. 호스트 재료와 도펀트 재료는, 각각 1종류여도 되고, 복수의 조합이어도 되고, 어느 것이어도 된다. 도펀트 재료는 호스트 재료의 전체에 포함되어 있어도 되고, 부분적으로 포함되어 있어도 되고, 어느 것이어도 된다. 도핑 방법으로서, 호스트 재료와의 공증착법(共蒸着法)에 의해 형성할 수 있지만, 호스트 재료와 미리 혼합하고 나서 동시에 증착해도 된다.

[0270] <도펀트 재료>

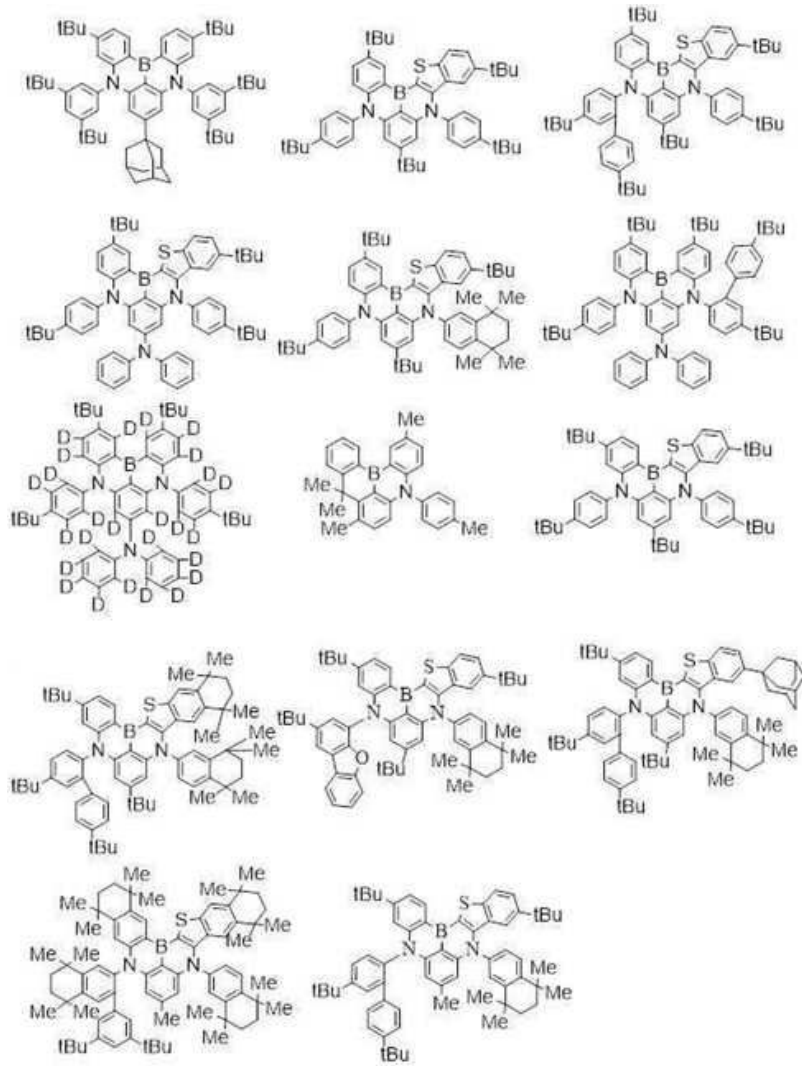
[0271] 본 발명의 다환방향족 화합물은, 도펀트 재료로서 바람직하게 사용할 수 있다.

[0272] 본 발명의 다환방향족 화합물 이외의 도펀트 재료의 예를 이하에 나타낸다. 이하의 도펀트 재료를 본 발명의 다환방향족 화합물과 조합시켜서 사용하는 것도 바람직하다.

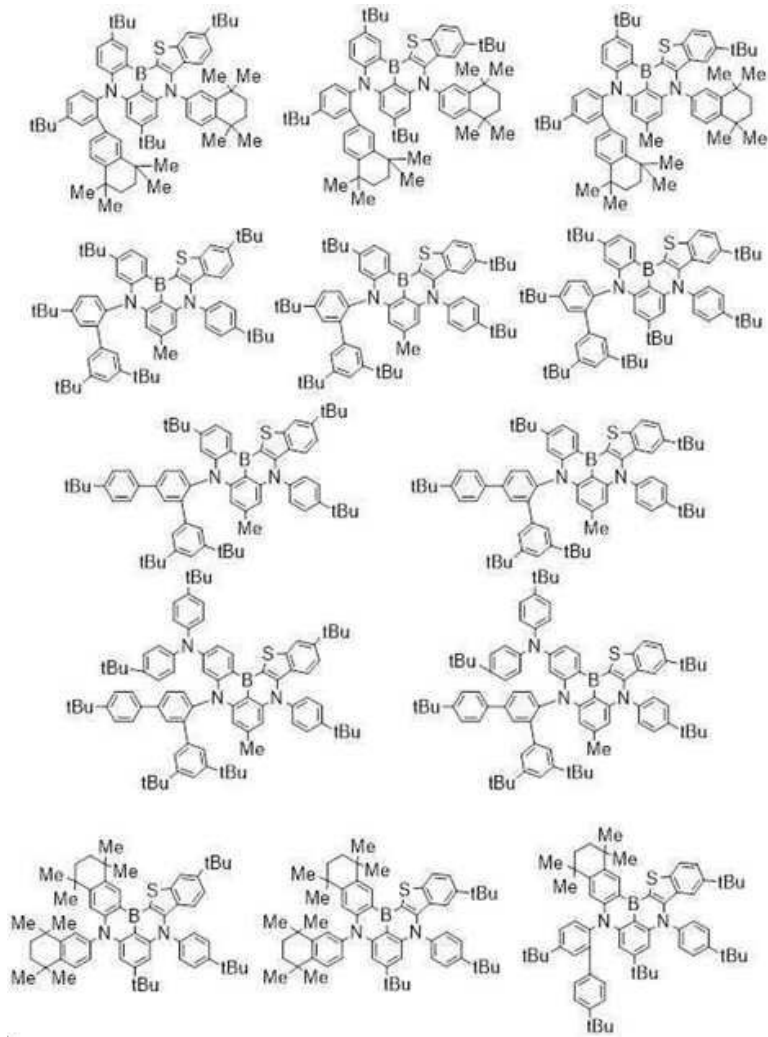
[0273] 하기 구조식에 있어서, 「Me」은 메틸, 「tBu」는 t-부틸, 「D」는 중수소를 나타낸다.



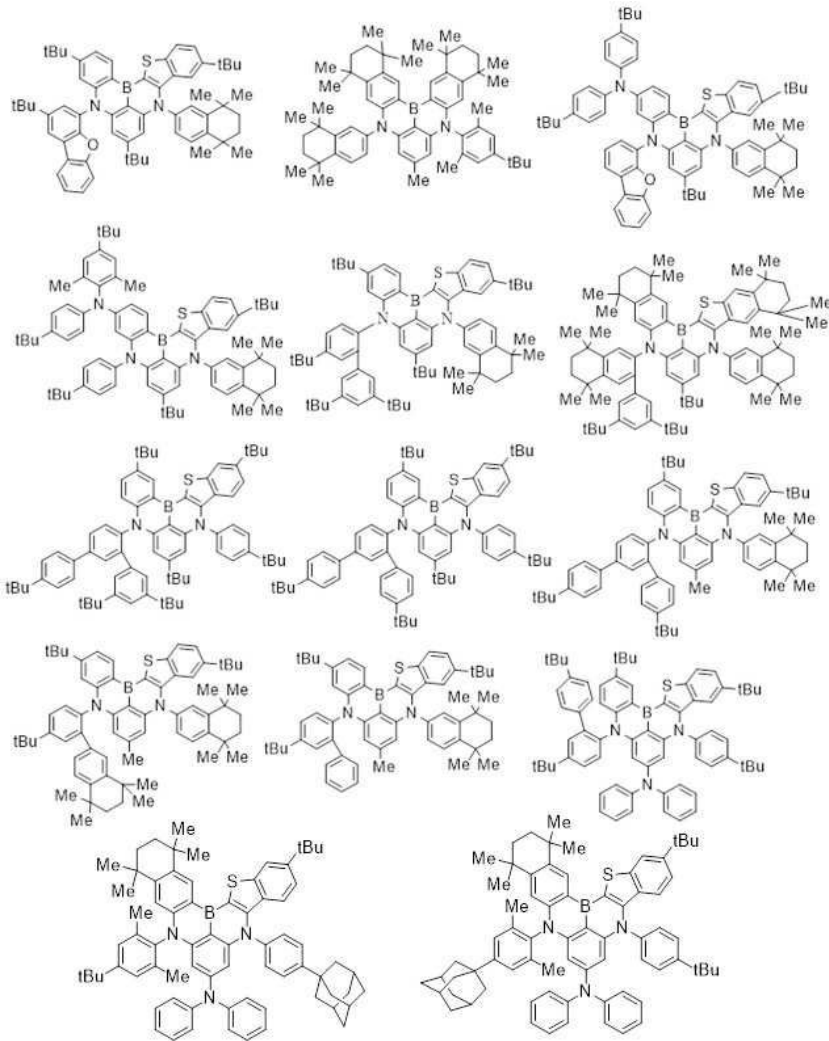
[0274]



[0275]



[0276]



[0277]

[0278]

호스트 재료의 사용량은 호스트 재료의 종류에 따라 상이하고, 그 호스트 재료의 특성에 맞춰 결정하면 된다. 호스트 재료의 사용량의 기준은, 바람직하게는 발광층용 재료 전체의 50~99.999중량%이고, 보다 바람직하게는 80~99.95중량%이고, 더욱 바람직하게는 90~99.9중량%이다.

[0279]

도펀트 재료의 사용량은 도펀트 재료의 종류에 따라 상이하고, 그 도펀트 재료의 특성에 맞춰 결정하면 된다. 도펀트의 사용량의 기준은, 바람직하게는 발광층용 재료 전체의 0.001~50중량%이고, 보다 바람직하게는 0.05~20중량%이고, 더욱 바람직하게는 0.1~10중량%이다. 상기의 범위이면, 예를 들면, 농도 소광 현상을 방지할 수 있다고 하는 점에서 바람직하다.

[0280]

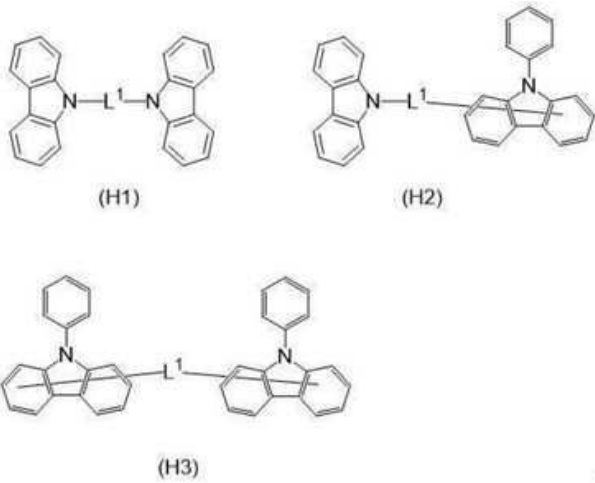
<호스트 재료>

[0281]

호스트 재료로서는, 이전부터 발광체로서 알려져 있었던 안트라센, 피렌, 디벤조크리센 또는 플루오렌 등의 축합환 유도체, 비스스티릴안트라센 유도체나 디스티릴벤젠 유도체 등의 비스스티릴 유도체, 테트라페닐부타디엔 유도체, 시클로펜타디엔 유도체 등을 들 수 있다.

[0282]

또한, 호스트 재료로서는, 예를 들면, 하기 식(H1), (H2) 및 (H3)중 어느 하나로 표시되는 화합물을 사용할 수 있다.



[0283]

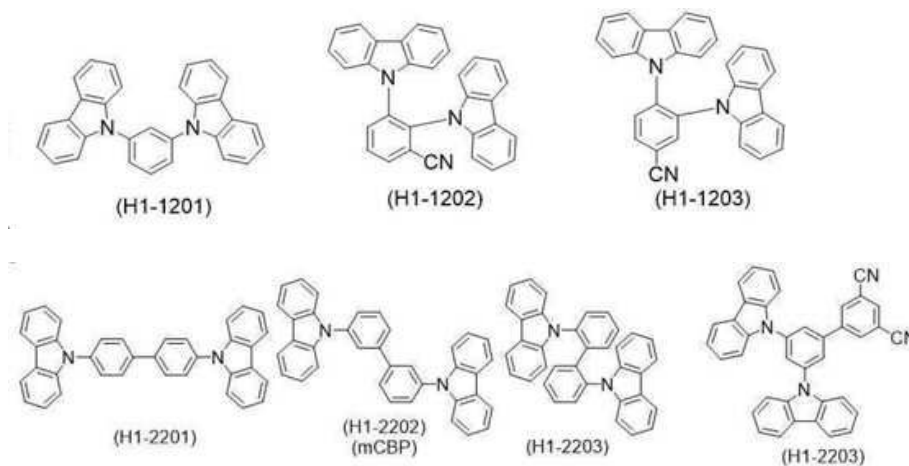
[0284]

식(H1), (H2) 및 (H3)중, L1은 탄소수 6~24의 아릴렌, 탄소수 2~24의 헤테로 아릴렌, 탄소수 6~24의 헤테로 아릴아릴렌 및 탄소수 6~24의 아릴렌헤테로아릴렌아릴렌이며, 탄소수 6~16의 아릴렌이 바람직하고, 탄소수 6~12의 아릴렌이 보다 바람직하고, 탄소수 6~10의 아릴렌이 특히 바람직하고, 구체적으로는, 벤젠환, 비페닐 환, 티페닐 환 및 플루오렌환 등의 2가의 기를 들 수 있다. 헤테로 아릴렌으로서, 탄소수 2~24의 헤테로 아릴렌이 바람직하고, 탄소수 2~20의 헤테로 아릴렌이 보다 바람직하고, 탄소수 2~15의 헤테로 아릴렌이 더욱 바람직하고, 탄소수 2~10의 헤테로 아릴렌이 특히 바람직하고, 구체적으로는, 피롤환, 옥사졸 환, 이소옥사졸 환, 티아졸 환, 이소티아졸 환, 이미다졸 환, 옥사디아졸 환, 티아디아졸 환, 트리아졸 환, 테트라졸 환, 피라 졸 환, 피리딘 환, 피리미딘 환, 피리다진 환, 피라진 환, 트리아진 환, 인돌환, 이소인돌환, 1H- 인다졸환, 벤 조이미다졸환, 벤조옥사졸환, 벤조티아졸환, 1H-벤조트리아졸환, 퀴놀린환, 이소퀴놀린환, 신놀린환, 퀴나졸린 환, 퀴놀살린환, 프탈라진환, 나프트리딘환, 퓨린환, 프테리딘환, 카르바졸환, 아크리딘환, 페녹사티인환, 페녹 사진환, 페노티아진환, 페나진환, 인돌리진환, 퓨란 환, 벤조퓨란환, 이소벤조퓨란환, 디벤조퓨란환, 티오펜환, 벤조티오펜환, 디벤조티오펜환, 퓨라잔환, 옥사디아졸환 및 티안트렌환 등의 2가의 기를 들 수 있다. 상기 각 식으로 표시되는 화합물에 있어서의 적어도 하나의 수소는, 탄소수 1~6의 알킬, 시아노, 할로겐 또는 중수소로 치환되어 있어도 된다.

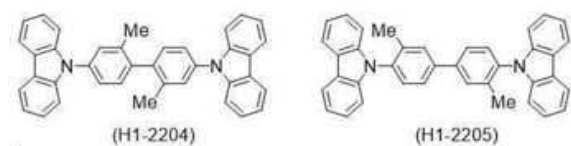
[0285]

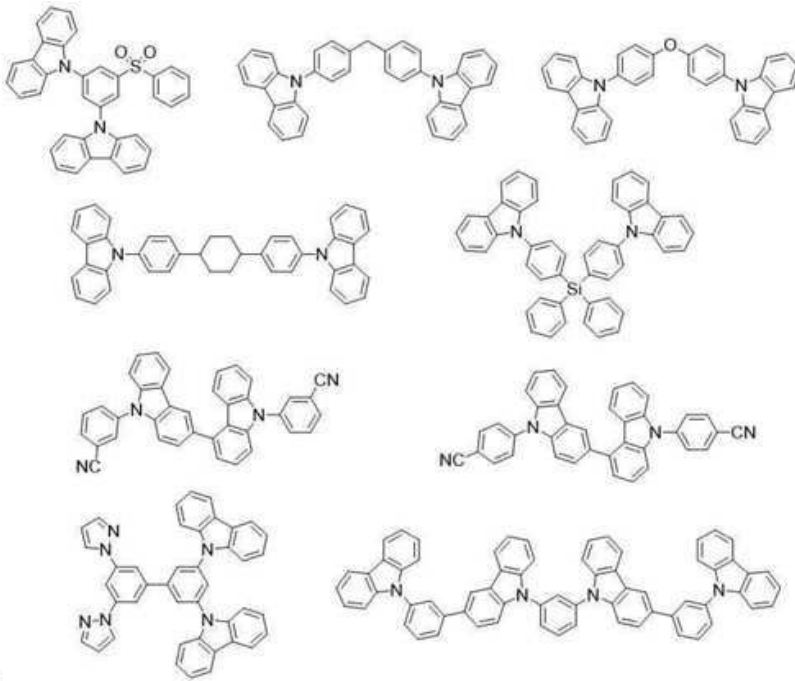
바람직한 구체예로서는, 이하에 열거한 어느 하나의 구조식으로 표시되는 화합물을 들 수 있다. 한편, 이하에 열거한 구조식에 있어서는, 적어도 하나의 수소가, 할로겐, 시아노, 탄소수 1~4의 알킬 (예를 들면 메틸이나 t-부틸), 페닐 또는 나프틸 등으로 치환되어 있어도 된다.

[0286]

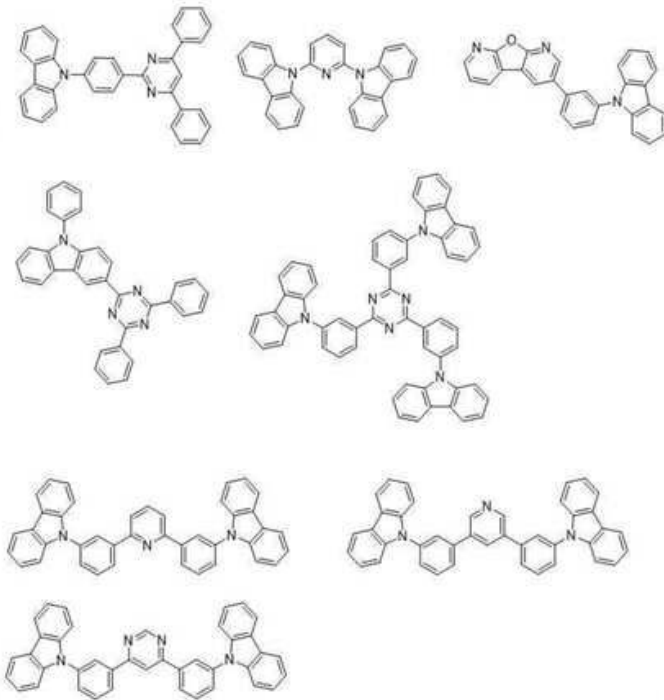


[0287]





[0288]

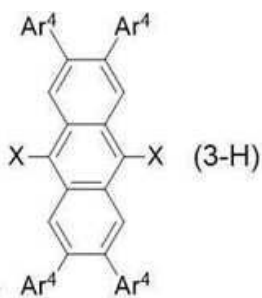


[0289]

[0290] <안트라센 화합물>

[0291] 호스트로서의 안트라센 화합물로서는, 예를 들면 식(3-H)으로 표현되는 화합물 및 식(3-H2)으로 표현되는 화합물을 들 수 있다.

[0292]



[0293] 식(3-H)중,

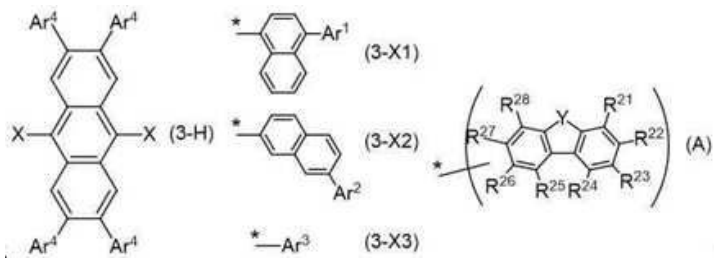
[0294] X 및 Ar⁴은, 각각 독립적으로, 수소, 치환 혹은 무치환의 아릴, 치환 혹은 무치환의 헤테로아릴, 치환 혹은 무치환의 디아릴아미노, 치환되어 있어도 되는 디헤테로아릴아미노, 치환 혹은 무치환의 아릴헤테로아릴아미노, 치환 혹은 무치환의 알킬, 치환되어 있어도 되는 시클로알킬, 치환 혹은 무치환의 알케닐, 치환 혹은 무치환의 알콕시, 치환 혹은 무치환의 아릴옥시, 치환 혹은 무치환의 아릴티오 또는 치환 실틸이며, 모든 X 및 Ar⁴가 동시에 수소가 되는 경우는 없다.

[0295] 식(3-H)으로 표현되는 화합물에 있어서의 적어도 하나의 수소는 할로겐, 시아노, 중수소 또는 치환되어 있어도 되는 헤테로아릴로 치환되어 있거나, 또는 치환되어 있지 않다.

[0296] 또한, 식(3-H)으로 표시되는 구조를 단위 구조로 하여 다량체(바람직하게는 이량체)를 형성해도 된다. 이 경우, 예를 들면 식(3-H)으로 표시되는 단위 구조끼리가 X를 통하여 결합하는 형태를 들 수 있고, 이 X로서는 단결합, 아틸렌(페닐렌, 비페닐렌 및 나프틸렌 등) 및 헤테로아틸렌(피리딘환, 디벤조퓨란환, 디벤조티오펜환, 카르바졸환, 벤조카르바졸환 및 페닐 치환 카르바졸환 등이 2가의 결합가를 갖는 기) 등을 들 수 있다.

[0297] 식(3-H)로 표시되는 화합물에 있어서의 각 기의 상세는, 상기 식(1)에 있어서의 설명을 인용할 수 있고, 나아가, 이하의 바람직한 양태의 란에서 설명한다.

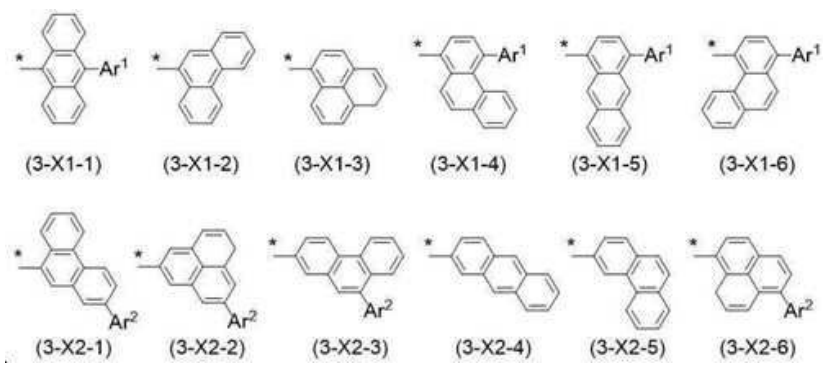
[0298] 상기 안트라센 화합물의 바람직한 양태를 이하에 설명한다. 하기 구조에 있어서의 부호의 정의는 상술한 정의와 동일하다.



[0299] 식(3-H)에서는, X는 각각 독립적으로 식(3-X1), 식(3-X2) 또는 식(3-X3)으로 표시되는 기이고, 식(3-X1), 식(3-X2) 또는 식(3-X3)으로 표시되는 기는 *에서 식(3-H)의 안트라센환과 결합한다. 바람직하게는, 2개의 X가 동시에 식(3-X3)으로 표시되는 기가 되는 경우는 없다. 보다 바람직하게는 2개의 X가 동시에 식(3-X2)로 표시되는 기가 되는 경우도 없다.

[0301] 또, 식(3-H)으로 표시되는 구조를 단위 구조로 하여 다량체(바람직하게는 이량체)를 형성해도 된다. 이 경우, 예를 들면 식(3-H)으로 표시되는 단위 구조끼리가 X를 통하여 결합하는 형태를 들 수 있고, 이 X로서는 단결합, 아틸렌(페닐렌, 비페닐렌 및 나프틸렌 등) 및 헤테로아틸렌(피리딘환, 디벤조퓨란환, 디벤조티오펜환, 카르바졸환, 벤조카르바졸환 및 페닐 치환 카르바졸환 등이 2가의 결합가를 갖는 기) 등을 들 수 있다.

[0302] 식(3-X1) 및 식(3-X2)에 있어서의 나프틸렌 부위는 1개의 벤젠환으로 축합되어 있어도 된다. 이와 같이 하여 축합한 구조는 이하와 같다.



[0303] Ar¹ 및 Ar²는, 각각 독립적으로, 수소, 페닐, 비페닐릴, 터페닐릴, 쿼터페닐릴, 나프틸, 페난트릴, 플루오레닐, 벤조플루오레닐, 크리세닐, 트리페닐레닐, 피레닐, 또는, 식(A)으로 표시되는 기(카르바졸릴기, 벤조카르바졸릴

기 및 페닐 치환 카르바졸릴기도 포함한다)이다. 또한, Ar¹ 또는 Ar²가 식(A)으로 표시되는 기인 경우는, 식(A)으로 표시되는 기는 그 *에 있어서 식(3-X1) 또는 식(3-X2) 중의 나프탈렌환과 결합한다.

[0305] Ar³은, 페닐, 비페닐릴, 터페닐릴, 쿼터페닐릴, 나프틸, 페난트릴, 플루오레닐, 벤조플루오레닐, 크리세닐, 트리페닐레닐, 피레닐, 또는, 식(A)로 표시되는 기(카르바졸릴기, 벤조카르바졸릴기 및 페닐 치환 카르바졸릴기도 포함한다)이다. 또한, Ar³이 식(A)로 표시되는 기인 경우는, 식(A)로 표시되는 기는 그 *에 있어서 식(3-X3) 중의 직선으로 표시되는 단결합과 결합한다. 즉, 식(3-H)의 안트라센환과 식(A)로 표시되는 기가 직접 결합한다.

[0306] 또, Ar³은 치환기를 갖고 있어도 되고, Ar³에 있어서의 적어도 1개의 수소는 추가로 탄소수 1~4의 알킬, 탄소수 5~10의 시클로알킬, 페닐, 비페닐릴, 터페닐릴, 나프틸, 페난트릴, 플루오레닐, 크리세닐, 트리페닐레닐, 피레닐, 또는, 식(A)로 표시되는 기(카르바졸릴기 및 페닐 치환 카르바졸릴기도 포함한다)로 치환되어 있어도 된다. 또한, Ar³이 갖는 치환기가 식(A)로 표시되는 기인 경우는, 식(A)로 표시되는 기는 그 *에 있어서 식(3-X3) 중의 Ar³과 결합한다.

[0307] Ar⁴는, 각각 독립적으로, 수소, 페닐, 비페닐릴, 터페닐릴, 나프틸, 탄소수 1~4의 알킬(메틸, 에틸, t-부틸 등) 및/또는 탄소수 5~10의 시클로알킬로 치환되어 있는 실릴이다.

[0308] 실릴에 치환되는 탄소수 1~4의 알킬은, 메틸, 에틸, 프로필, 이소프로필, 부틸, sec-부틸, t-부틸, 시클로부틸 등을 들 수 있고, 실릴에 있어서의 3개의 수소가, 각각 독립적으로, 이 알킬로 치환되어 있다.

[0309] 구체적인 「탄소수 1~4의 알킬로 치환되어 있는 실릴」로서는, 트리메틸실릴, 트리에틸실릴, 트리프로필실릴, 트리아이소프로필실릴, 트리부틸실릴, 트리sec-부틸실릴, 트리t-부틸실릴, 에틸디메틸실릴, 프로필디메틸실릴, 이소 프로필디메틸실릴, 부틸디메틸실릴, sec-부틸디메틸실릴, t-부틸디메틸실릴, 메틸디에틸실릴, 프로필디에틸실릴, 이소 프로필디에틸실릴, 부틸디에틸실릴, sec-부틸디에틸실릴, t-부틸디에틸실릴, 메틸디프로필실릴, 에틸디프로필실릴, 부틸디프로필실릴, sec-부틸디프로필실릴, t-부틸디프로필실릴, 메틸이소프로필실릴, 에틸다이소프로필실릴, 부틸다이소프로필실릴, sec-부틸다이소프로필실릴, t-부틸다이소프로필실릴 등을 들 수 있다.

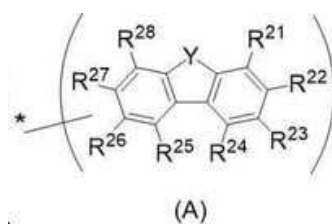
[0310] 실릴에 치환되는 탄소수 5~10의 시클로알킬은, 시클로펜틸, 시클로헥실, 시클로헵틸, 시클로옥틸, 시클로노닐, 시클로데실, 노보네닐, 비시클로[1.1.1]펜틸, 비시클로[2.1.0]펜틸, 비시클로[2.1.1]헥실, 비시클로[3.1.0]헥실, 비시클로[2.2.1]헵틸, 비시클로[2.2.2]옥틸, 아다만틸, 데카히드로나프타레닐, 데카히드로아즈레닐 등을 들 수 있고, 실릴에 있어서의 3개의 수소가, 각각 독립적으로, 이 시클로알킬로 치환되어 있다.

[0311] 구체적인 「탄소수 5~10의 시클로알킬로 치환되어 있는 실릴」로서는, 트리시클로펜틸실릴, 트리시클로헥실실릴 등을 들 수 있다.

[0312] 치환되어 있는 실릴로서는, 2개의 알킬과 1개의 시클로알킬이 치환된 디알킬시클로알킬실릴과, 1개의 알킬과 2개의 시클로알킬이 치환된 알킬디시클로알킬실릴도 있고, 치환되는 알킬 및 시클로알킬의 구체예로서는 상술한 기를 들 수 있다.

[0313] 또, 식(3-H)로 표시되는 안트라센 화합물의 화학 구조 중의 수소는 식(A)로 표시되는 기로 치환되어 있어도 된다. 식(A)로 표시되는 기로 치환되는 경우는, 식(A)로 표시되는 기는 그 *에 있어서 식(3-H)로 표시되는 화합물에 있어서의 적어도 1개의 수소와 치환한다.

[0314] 식(A)로 표시되는 기는, 식(3-H)으로 표시되는 안트라센계 화합물 및 후술하는 식(3-H2)로 표시되는 안트라센계 화합물이 가질 수 있는 치환기 중 1개이다.



[0315] .

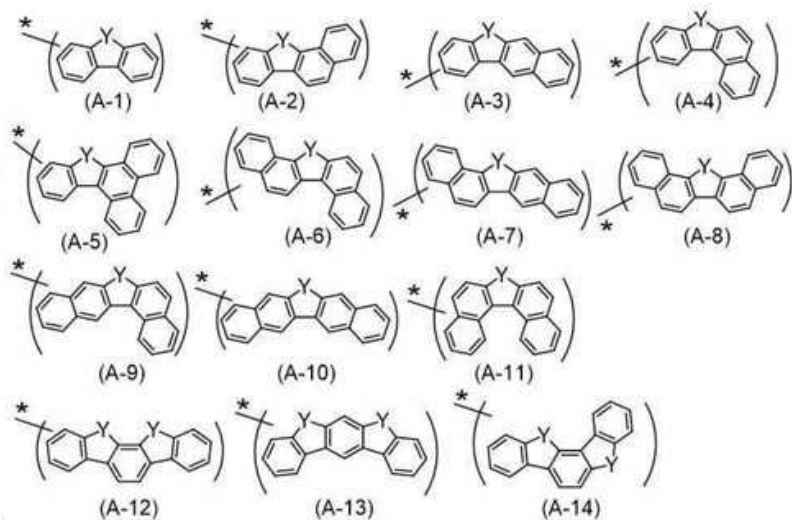
- [0316] 식(A) 중, Y는 -O-, -S- 또는 >N-R²⁹이고, R²¹~R²⁸은 각각 독립적으로 수소, 치환되어 있어도 되는 알킬, 치환되어 있어도 되는 시클로알킬, 치환되어 있어도 되는 아릴, 치환되어 있어도 되는 헤테로아릴, 치환되어 있어도 되는 알콕시, 치환되어 있어도 되는 아릴옥시, 치환되어 있어도 되는 아릴티오, 트리알킬실릴, 트리시클로알킬실릴, 디알킬시클로알킬실릴, 알킬디시클로알킬실릴, 치환되어 있어도 되는 아미노, 할로젠, 히드록시 또는 시아노이고, R²¹~R²⁸ 중 인접하는 기는 서로 결합하여 탄화수소환, 아릴환 또는 헤테로아릴환을 형성하고 있어도 되고, R²⁹는 수소 또는 치환되어 있어도 되는 아릴이다.
- [0317] 식(A)중의 Y는 -O-인 것이 바람직하다.
- [0318] R²¹~R²⁸에 있어서의 「치환되어 있어도 되는 알킬」의 「알킬」로서는, 직쇄 및 분기쇄 중 어느 것이어도 되고, 예를 들면, 탄소수 1~24의 직쇄 알킬 또는 탄소수 3~24의 분기쇄 알킬을 들 수 있다. 탄소수 1~18의 알킬(탄소수 3~18의 분기쇄 알킬)이 바람직하고, 탄소수 1~12의 알킬(탄소수 3~12의 분기쇄 알킬)이 보다 바람직하고, 탄소수 1~6의 알킬(탄소수 3~6의 분기쇄 알킬)이 더욱 바람직하고, 탄소수 1~4의 알킬(탄소수 3~4의 분기쇄 알킬)이 특히 바람직하다.
- [0319] 구체적인 「알킬」로서는, 메틸, 에틸, n-프로필, 이소프로필, n-부틸, 이소부틸, s-부틸, t-부틸, n-펜틸, 이소펜틸, 네오펜틸, t-펜틸, n-헥실, 1-메틸헥실, 4-메틸-2-펜틸, 3,3-디메틸부틸, 2-에틸부틸, n-헵틸, 1-메틸헥실, n-옥틸, t-옥틸, 1-메틸헵틸, 2-에틸헥실, 2-프로필헵틸, n-노닐, 2,2-디메틸헵틸, 2,6-디메틸-4-헵틸, 3,5,5-트리메틸헥실, n-데실, n-운데실, 1-메틸데실, n-도데실, n-트리데실, 1-헥실헵틸, n-테트라데실, n-펜타데실, n-헥사데실, n-헵타데실, n-옥타데실, n-에이코실 등을 들 수 있다.
- [0320] R²¹~R²⁸에 있어서의 「치환되어 있어도 되는 시클로알킬」의 「시클로알킬」로서는, 탄소수 3~24의 시클로알킬, 탄소수 3~20의 시클로알킬, 탄소수 3~16의 시클로알킬, 탄소수 3~14의 시클로알킬, 탄소수 5~10의 시클로알킬, 탄소수 5~8의 시클로알킬, 탄소수 5~6의 시클로알킬, 탄소수 5의 시클로알킬 등을 들 수 있다.
- [0321] 구체적인 「시클로알킬」로서는, 시클로프로필, 시클로부틸, 시클로펜틸, 시클로헥실, 시클로헵틸, 시클로옥틸, 시클로노닐, 시클로데실, 및 이들 탄소수 1~4의 알킬(특히 메틸)치환체나, 노보네닐, 비시클로[1.1.0]부틸, 비시클로[1.1.1]펜틸, 비시클로[2.1.0]헵틸, 비시클로[2.1.1]헥실, 비시클로[3.1.0]헥실, 비시클로[2.2.1]헵틸, 비시클로[2.2.2]옥틸, 아다만틸, 디아만틸, 데카히드로나프타레닐, 데카히드로아즈레닐 등을 들 수 있다.
- [0322] R²¹~R²⁸에 있어서의 「치환되어 있어도 되는 아릴」의 「아릴」로서는, 예를 들면, 탄소수 6~30의 아릴을 들 수 있고, 탄소수 6~16의 아릴이 바람직하고, 탄소수 6~12의 아릴이 보다 바람직하고, 탄소수 6~10의 아릴이 특히 바람직하다.
- [0323] 구체적인 「아릴」로서는, 단환계인 페닐, 2환계인 비페닐릴, 축합 2환계인 나프틸, 3환계인 터페닐릴(m-터페닐릴, o-터페닐릴, p-터페닐릴), 축합 3환계인, 아세나프틸레닐, 플루오레닐, 페날레닐, 페난트레닐, 축합 4환계인 트리페닐레닐, 피레닐, 나프타세닐, 축합 5환계인 페릴레닐, 펜타세닐 등을 들 수 있다.
- [0324] R²¹~R²⁸에 있어서의 「치환되어 있어도 되는 헤테로아릴」의 「헤테로아릴」로서는, 예를 들면, 탄소수 2~30의 헤테로아릴을 들 수 있고, 탄소수 2~25의 헤테로아릴이 바람직하고, 탄소수 2~20의 헤테로아릴이 보다 바람직하고, 탄소수 2~15의 헤테로아릴이 더욱 바람직하고, 탄소수 2~10의 헤테로아릴이 특히 바람직하다. 또, 헤테로아릴로서는, 예를 들면 환 구성 원자로서 탄소 이외에 산소, 황 및 질소로부터 선택되는 헤테로 원자를 1~5개 함유하는 복소환 등을 들 수 있다.
- [0325] 구체적인 「헤테로아릴」로서는, 예를 들면, 피롤릴, 옥사졸릴, 이소옥사졸릴, 티아졸릴, 이소티아졸릴, 이미다졸릴, 옥사디아졸릴, 티아디아졸릴, 트리아졸릴, 테트라졸릴, 피라졸릴, 피리디닐, 피리미디닐, 피리다지닐, 피라지닐, 트리아지닐, 인돌릴, 이소인돌릴, 1H-인다졸릴, 벤조이미다졸릴, 벤조옥사졸릴, 벤조티아졸릴, 1H-벤조트리아졸릴, 퀴놀릴, 이소퀴놀릴, 신놀릴, 퀴나졸릴, 퀴녹살리닐, 프탈라지닐, 나프티리디닐, 푸리닐, 프테리디닐, 카바졸릴, 아크리디닐, 페녹사티이닐, 페녹사지닐, 페노티아지닐, 페나지닐, 인돌리지닐, 푸릴, 벤조푸라닐, 이소벤조푸라닐, 디벤조푸라닐, 티에닐, 벤조[b]티에닐, 디벤조티에닐, 푸라자닐, 티안트레닐, 나프토벤조프라닐, 나프토벤조티에닐 등을 들 수 있다.
- [0326] R²¹~R²⁸에 있어서의 「치환되어 있어도 되는 알콕시」의 「알콕시」로서는, 예를 들면, 탄소수 1~24의 직쇄 또는 탄소수 3~24의 분기쇄의 알콕시를 들 수 있다. 탄소수 1~18의 알콕시(탄소수 3~18의 분기쇄의 알콕시)가 바람

직하고, 탄소수 1~12의 알콕시(탄소수 3~12의 분기쇄의 알콕시)가 보다 바람직하고, 탄소수 1~6의 알콕시(탄소수 3~6의 분기쇄의 알콕시)가 더욱 바람직하고, 탄소수 1~4의 알콕시(탄소수 3~4의 분기쇄의 알콕시)가 특히 바람직하다.

- [0327] 구체적인 「알콕시」로서는, 메톡시, 에톡시, 프로폭시, 이소프로폭시, 부톡시, 이소부톡시, s-부톡시, t-부톡시, 펜틸옥시, 헥실옥시, 헵틸옥시, 옥틸옥시 등을 들 수 있다.
- [0328] $R^{21}\sim R^{28}$ 에 있어서의 「치환되어 있어도 되는 아릴옥시」의 「아릴옥시」로서는, -OH기의 수소가 아릴로 치환된 기이고, 이 아릴은 상술한 $R^{21}\sim R^{28}$ 에 있어서의 「아릴」로서 설명한 기를 인용할 수 있다.
- [0329] $R^{21}\sim R^{28}$ 에 있어서의 「치환되어 있어도 되는 아릴티오」의 「아릴티오」로서는, -SH기의 수소가 아릴로 치환된 기이고, 이 아릴은 상술한 $R^{21}\sim R^{28}$ 에 있어서의 「아릴」로서 설명한 기를 인용할 수 있다.
- [0330] $R^{21}\sim R^{28}$ 에 있어서의 「트리알킬실릴」로서는, 실릴기에 있어서의 3개의 수소가 각각 독립적으로 알킬로 치환된 기를 들 수 있고, 이 알킬은 상술한 $R^{21}\sim R^{28}$ 에 있어서의 「알킬」로서 설명한 기를 인용할 수 있다. 치환하는 데에 바람직한 알킬은, 탄소수 1~4의 알킬이고, 구체적으로는 메틸, 에틸, 프로필, 이소프로필, 부틸, sec-부틸, t-부틸, 시클로부틸 등을 들 수 있다.
- [0331] 구체적인 「트리알킬실릴」로서는, 트리메틸실릴, 트리에틸실릴, 트리프로필실릴, 트리이소프로필실릴, 트리부틸실릴, 트리sec-부틸실릴, 트리t-부틸실릴, 에틸디메틸실릴, 프로필디메틸실릴, 이소프로필디메틸실릴, 부틸디메틸실릴, sec-부틸디메틸실릴, t-부틸디메틸실릴, 메틸디에틸실릴, 프로필디에틸실릴, 이소프로필디에틸실릴, 부틸디에틸실릴, sec-부틸디에틸실릴, t-부틸디에틸실릴, 메틸디프로필실릴, 에틸디프로필실릴, 부틸디프로필실릴, sec-부틸디프로필실릴, t-부틸디프로필실릴, 메틸디이소프로필실릴, 에틸디이소프로필실릴, 부틸디이소프로필실릴, sec-부틸디이소프로필실릴, t-부틸디이소프로필실릴 등을 들 수 있다.
- [0332] $R^{21}\sim R^{28}$ 에 있어서의 「트리스클로알킬실릴」로서는, 실릴기에 있어서의 3개의 수소가 각각 독립적으로 시클로알킬로 치환된 기를 들 수 있고, 이 시클로알킬은 상술한 $R^{21}\sim R^{28}$ 에 있어서의 「시클로알킬」로서 설명한 기를 인용할 수 있다. 치환하는 데에 바람직한 시클로알킬은, 탄소수 5~10의 시클로알킬이고, 구체적으로는 시클로펜틸, 시클로헥실, 시클로헵틸, 시클로옥틸, 시클로노닐, 시클로데실, 비시클로[1.1.1]펜틸, 비시클로[2.1.0]펜틸, 비시클로[2.1.1]헥실, 비시클로[3.1.0]헥실, 비시클로[2.2.1]헵틸, 비시클로[2.2.2]옥틸, 아다만틸, 데카히드로나프탈레닐, 데카히드로아줄레닐 등을 들 수 있다.
- [0333] 구체적인 「트리스클로알킬실릴」로서는, 트리스클로펜틸실릴, 트리스클로헥실실릴 등을 들 수 있다.
- [0334] 2개의 알킬과 1개의 시클로알킬이 치환된 디알킬시클로알킬실릴과, 1개의 알킬과 2개의 시클로알킬이 치환된 알킬디시클로알킬실릴의 구체예로서는, 상술한 구체적인 알킬 및 시클로알킬로부터 선택되는 기가 치환된 실릴을 들 수 있다.
- [0335] $R^{21}\sim R^{28}$ 에 있어서의 「치환되어 있어도 되는 아미노」의 「치환된 아미노」로서는, 예를 들면 2개의 수소가 아릴이나 헤테로아릴로 치환된 아미노기를 들 수 있다. 2개의 수소가 아릴로 치환된 아미노가 디아릴(2개의 아릴은 서로 결합하지 않거나, 연결기를 통해 결합하고 있어도 된다) 치환 아미노이고, 2개의 수소가 헤테로아릴로 치환된 아미노가 디헤테로아릴 치환 아미노이고, 2개의 수소가 아릴과 헤테로아릴로 치환된 아미노가 아릴헤테로아릴 치환 아미노이다. 이 아릴이나 헤테로아릴은 상술한 $R^{21}\sim R^{28}$ 에 있어서의 「아릴」이나 「헤테로아릴」로서 설명한 기를 인용할 수 있다.
- [0336] 구체적인 「치환된 아미노」로서는, 디페닐아미노, 디나프틸아미노, 페닐나프틸아미노, 디피리딜아미노, 페닐피리딜아미노, 나프틸피리딜아미노 등을 들 수 있다.
- [0337] $R^{21}\sim R^{28}$ 에 있어서의 「할로겐」으로서는, 불소, 염소, 브롬, 요오드를 들 수 있다.
- [0338] $R^{21}\sim R^{28}$ 로서 설명한 기 중, 몇 개는 상술하는 바와 같이 치환되어도 되고, 이 경우의 치환기로서는 알킬, 시클로알킬, 아릴 또는 헤테로아릴을 들 수 있다. 이 알킬, 시클로알킬, 아릴 또는 헤테로아릴은 상술한 $R^{21}\sim R^{28}$ 에 있어서의 「알킬」, 「시클로알킬」, 「아릴」 또는 「헤테로아릴」로서 설명한 기를 인용할 수 있다.

[0339] Y로서의 「>N-R²⁹」에 있어서의 R²⁹는 수소 또는 치환되어 있어도 되는 아릴이고, 이 아릴로서는 상술한 R²¹~R²⁸에 있어서의 「아릴」로서 설명한 기를 인용할 수 있고, 또 그 치환기로서는 R²¹~R²⁸에 대한 치환기로서 설명한 기를 인용할 수 있다.

[0340] R²¹~R²⁸ 중 인접하는 기는 서로 결합하여 탄화수소환, 아릴환 또는 헤테로아릴환을 형성하고 있어도 된다. 환을 형성하지 않은 경우가 하기 식(A-1)로 표시되는 기이고, 환을 형성한 경우로서는 예를 들면 하기 식(A-2)~식(A-14)로 표시되는 기를 들 수 있다. 식 중의 Y 및 *는 상기와 동일한 정의이다. 또한, 식(A-1)~식(A-14) 중 어느 하나로 표시되는 기에 있어서의 적어도 1개의 수소는 알킬, 시클로알킬, 아릴, 헤테로아릴, 알콕시, 아릴옥시, 아릴티오, 트리알킬실릴, 트리시클로알킬실릴, 디알킬시클로알킬실릴, 알킬디시클로알킬실릴, 디아릴(2개의 아릴은 서로 결합하지 않거나, 연결기를 통해 결합하고 있어도 된다) 치환 아미노, 디헤테로아릴 치환 아미노, 아릴헤테로아릴 치환 아미노, 할로겐, 히드록시 또는 시아노로 치환되어 있어도 된다.



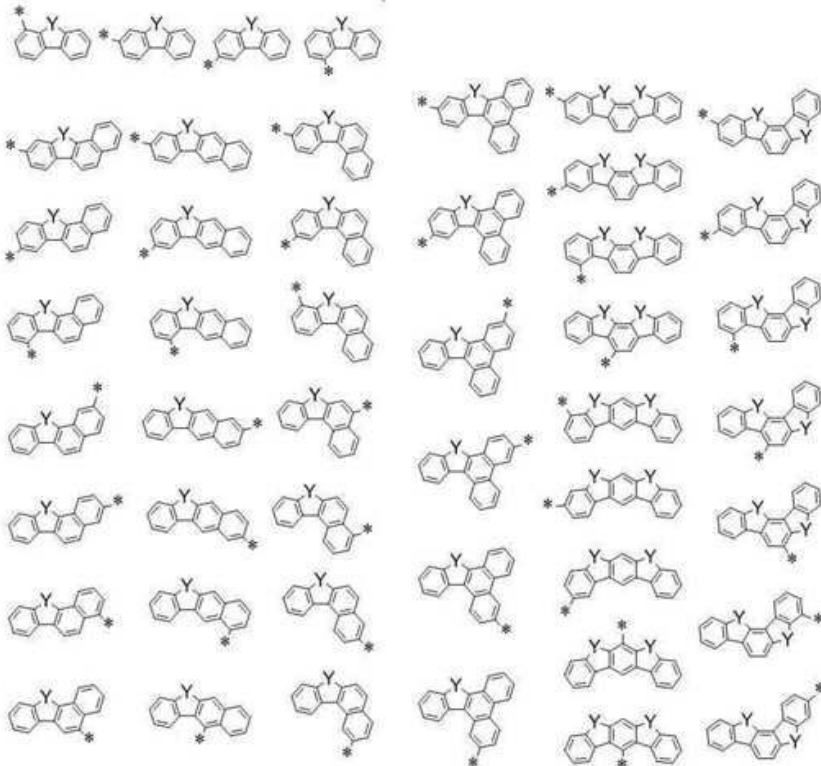
[0341]

[0342] 인접하는 기가 서로 결합하여 생성된 환으로서, 탄화수소환이면 예를 들면 시클로헥산환을 들 수 있고, 아릴 환이나 헤테로아릴환으로서 상술한 R²¹~R²⁸에 있어서의 「아릴」이나 「헤테로아릴」에서 설명한 환 구조를 들 수 있고, 이들 환은 식(A-1)에 있어서의 1개 또는 2개의 벤젠환과 축합하도록 형성된다.

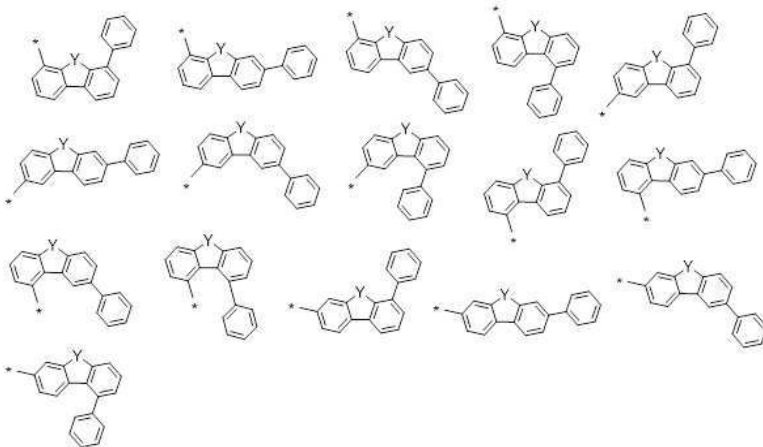
[0343] 식(A)로 표시되는 기는, 식(A)의 어느 하나의 위치에 1개의 수소를 제외하여 얻어지는 기이며, *가 해당 위치를 나타낸다. 즉, 식(A)로 표시되는 기는 어느 하나의 위치를 결합 위치로 하고 있어도 된다. 예를 들면, 식(A)의 구조중의 2개의 벤젠환상의 어느 하나의 탄소원자, 식(A)의 구조중의 R²¹~R²⁸ 중 인접하는 기가 서로 결합해서 형성된 어느 하나의 환상의 원자, 또는 식(A)의 구조중의 Y로서의 「>N-R₂₉」에 있어서의 R²⁹중의 어느 하나의 위치, 또는 「>N-R²⁹」에 있어서의 N(R²⁹)이 결합 순이 된다)과 직접 결합하는 기가 될 수 있다. 식(A-1)~식(A-14)중 어느 하나로 표시되는 기에 있어서도 마찬가지다.

[0344] 식(A)로 표시되는 기로서는, 예를 들면 식(A-1) ~ 식(A-14) 중 어느 하나로 표시되는 기를 들 수 있고, 식(A-1) ~ 식(A-5) 및 식(A-12) ~ 식(A-14) 중 어느 하나로 표시되는 기가 바람직하고, 식(A-1)~식(A-4) 중 어느 하나로 표시되는 기가 보다 바람직하고, 식(A-1), 식(A-3) 및 식(A-4) 중 어느 하나로 표시되는 기가 더욱 바람직하고, 식(A-1)로 표시되는 기가 특히 바람직하다.

[0345] 식(A)로 표시되는 기로서는, 예를 들면 이하의 기를 들 수 있다. 식 중의 Y 및 *는 상기와 동일한 정의이다.



[0346]

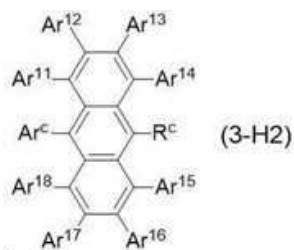


[0347]

[0348] 식(3-H)으로 표현되는 화합물에 있어서는, 식(A)으로 표현되는 기는, 식(3-X1) 또는 식(3-X2) 중의 나프탈렌환, 식(3-X3) 중의 단결합 및 식(3-X3) 중의 Ar3중 어느 하나와 결합한 형태가 바람직하다.

[0349] 또한, 식(3-H)으로 표현되는 안트라센 화합물의 화학구조중의 수소는, 그 모두 또는 일부가 중수소 이어도 된다.

[0350] 호스트로서의 안트라센 화합물은, 예를 들면 하기 식(3-H2)으로 표현되는 화합물 이어도 된다.



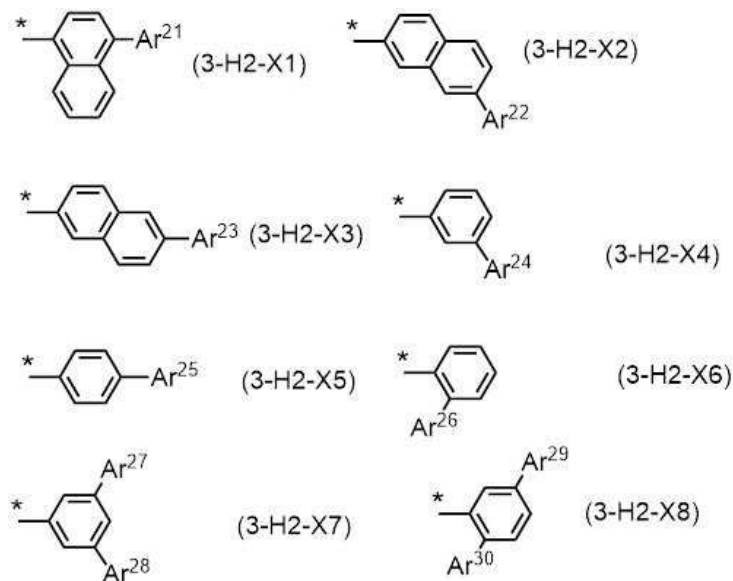
[0351]

[0352] 식(3-H2) 중, Ar^c는, 치환되어 있어도 되는 아릴 또는 치환되어 있어도 되는 헤테로아릴이며, R^c는, 수소, 알킬,

또는 시클로알킬이며, Ar¹¹, Ar¹², Ar¹³, Ar¹⁴, Ar¹⁵, Ar¹⁶, Ar¹⁷, 및 Ar¹⁸은, 각각 독립적으로, 수소, 치환되어 있어도 되는 아릴, 치환되어 있어도 되는 헤테로아릴, 치환되어 있어도 되는 디아릴아미노, 치환되어 있어도 되는 디헤테로아릴아미노, 치환되어 있어도 되는 아릴헤테로아릴아미노, 치환되어 있어도 되는 알킬, 치환되어 있어도 되는 시클로알킬, 치환되어 있어도 되는 알케닐, 치환되어 있어도 되는 알콕시, 치환되어 있어도 되는 아릴옥시, 치환되어 있어도 되는 아릴티오, 또는 치환되어 있어도 되는 실릴이며, 식(3-H2)로 표시되는 화합물에 있어서의 적어도 하나의 수소는 할로젠, 시아노, 또는 중수소에서 치환되어 있어도 된다.

[0353] 식(3-H2) 중, 「치환되어 있어도 되는 아릴」, 「치환되어 있어도 되는 헤테로아릴」, 「치환되어 있어도 되는 디아릴아미노」, 「치환되어 있어도 되는 디헤테로아릴아미노」, 「치환되어 있어도 되는 아릴헤테로아릴아미노」, 「치환되어 있어도 되는 알킬」, 「치환되어 있어도 되는 시클로알킬」, 「치환되어 있어도 되는 알케닐」, 「치환되어 있어도 되는 알콕시」, 「치환되어 있어도 되는 아릴옥시」, 「치환되어 있어도 되는 아릴티오」, 또는 「치환되어 있어도 되는 실릴」의 정의는 상기 식(3-H)에서 된 것과 마찬가지로, 식(1)에 있어서의 설명을 인용할 수 있다.

[0354] 「치환되어 있어도 되는 아릴」로서는, 하기 식(3-H2-X1)~식(3-H2-X8)중 어느 하나로 표시되는 기인 것도 바람직하다.



[0355] 식(3-H2-X1)~식(3-H2-X8)에 있어서, *은 결합 위치를 나타낸다.

[0357] 식(3-H2-X1)~식(3-H2-X3)에 있어서, Ar²¹, Ar²², 및 Ar²³은, 각각 독립적으로, 수소, 페닐, 비페닐릴, 터페닐릴, 쿼터페닐릴, 나프틸, 페난트릴, 플루오레닐, 벤조 플루오레닐, 크리세닐, 트리페닐레닐, 피레닐, 안트라세닐, 또는 식(A)로 표시되는 기이다. 한편, 식(3-H2)의 설명에 있어서, 식(A)로 표시되는 기는, 식(3-H)로 표시되는 안트라센 화합물에 있어서 설명한 것과 같다.

[0358] 식(3-H2-X4)~식(3-H2-X8)에 있어서, Ar²⁴, Ar²⁵, Ar²⁶, Ar²⁷, Ar²⁸, Ar²⁹, 및 Ar³⁰은 각각 독립적으로, 수소, 페닐, 비페닐릴, 터페닐릴, 나프틸, 페난트릴, 플루오레닐, 크리세닐, 트리페닐레닐, 피레닐, 또는 식(A)으로 표시되는 기이다. 또한, 식(3-H2-X1)~식(3-H2-X8)로 표시되는 기의 각각에 있어서의 어느 1개 또는 2개 이상의 수소는, 탄소수 1~6의 알킬(바람직하게는 메틸 또는 t-부틸)로 치환되어 있어도 된다.

[0359] 나아가, 「치환되어 있어도 되는 아릴」의 바람직한 예로서는, 페닐, 비페닐릴, 터페닐릴, 나프틸, 페난트릴, 플루오레닐, 크리세닐, 트리페닐레닐, 피레닐, 및 식(A)로 표시되는 기로 이루어지는 군으로부터 선택되는 1개 이상의 치환기로 치환되어 있어도 되는, 터페닐릴 (특히, m-터페닐-5'-일)을 들 수 있다.

[0360] 「치환되어 있어도 되는 헤테로아릴」로서는, 식(A)로 표시되는 기도 들 수 있다. 그 밖에, 「치환되어 있어도 되는 아릴」 및 「치환되어 있어도 되는 헤테로아릴」의 구체예로서는, 디벤조푸릴, 나프토벤조푸릴, 페닐 치환 디벤조푸릴 등을 들 수 있다.

[0361] 식(3-H2)로 표시되는 화합물에 있어서의 적어도 하나의 수소는 할로젠, 시아노, 또는 중수소로 치환되어 있어도

된다. 이 경우의 「할로젠」으로서, 불소, 염소, 브롬, 및 요오드를 들 수 있다. 특히, 식(3-H2)로 표시되는 화합물에 있어서의 모든 수소가 중수소로 치환된 화합물이 바람직하다.

[0362] 식(3-H2) 중, R^c는 수소, 알킬, 또는 시클로알킬이며, 수소, 메틸, 또는 t-부틸인 것이 바람직하고, 수소인 것이 보다 바람직하다.

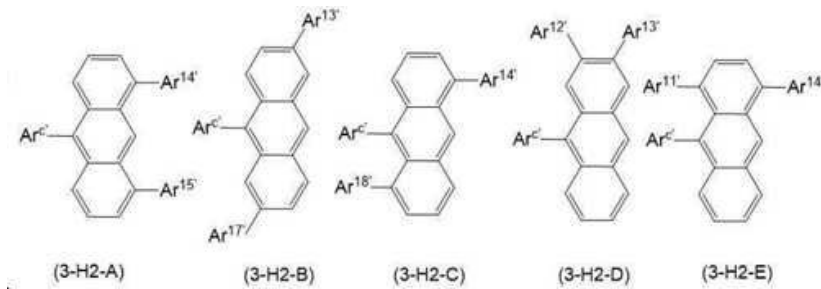
[0363] 식(3-H2) 중, Ar¹¹~Ar¹⁸의 적어도 2개가 치환되어 있어도 되는 아릴 또는 치환되어 있어도 되는 헤테로아릴인 것이 바람직하다. 즉, 식(3-H2)로 표시되는 안트라센 화합물은, 안트라센 환에, 치환되어 있어도 되는 아릴 및 치환되어 있어도 되는 헤테로아릴로 이루어지는 군으로부터 선택되는 치환기가 적어도 3개 결합한 구조를 가지는 것이 바람직하다.

[0364] 식(3-H2)로 표시되는 안트라센 화합물은, Ar¹¹~Ar¹⁸ 중 2개가 치환되어 있어도 되는 아릴 또는 치환되어 있어도 되는 헤테로아릴이며, 다른 6개가 수소, 치환되어 있어도 되는 알킬, 치환되어 있어도 되는 시클로알킬, 치환되어 있어도 되는 알케닐, 또는 치환되어 있어도 되는 알콕시인 것이 보다 바람직하다. 즉, 식(3-H2)로 표시되는 안트라센 화합물은, 치환되어 있어도 되는 아릴 및 치환되어 있어도 되는 헤테로아릴로 이루어지는 군으로부터 선택되는 치환기가, 안트라센 환에 3개 결합한 구조를 가지는 것이 보다 바람직하다.

[0365] 식(3-H2)로 표시되는 안트라센 화합물은, Ar¹¹~Ar¹⁸ 중 어느 2개가 치환되어 있어도 되는 아릴 또는 치환되어 있어도 되는 헤테로아릴이며, 다른 6개가 수소, 메틸, 또는 t-부틸인 것이 보다 바람직하다.

[0366] 나아가, 식(3-H2) 중, R^c가 수소이며, 또한 Ar¹¹~Ar¹⁸ 중 어느 6개가 수소인 것이 바람직하다.

[0367] 식(3-H2)로 표시되는 안트라센 화합물은 하기 식(3-H2-A), (3-H2-B), (3-H2-C), (3-H2-D), 또는 (3-H2-E)로 표시되는 안트라센 화합물인 것이 바람직하다.



[0368]

[0369] 식(3-H2-A), (3-H2-B), (3-H2-C), (3-H2-D) 또는 (3-H2-E)중, Ar^{c'}, Ar^{11'}, Ar^{12'}, Ar^{13'}, Ar^{14'}, Ar^{15'}, Ar^{17'}, 및 Ar^{18'}은 각각 독립적으로 페닐, 비페닐릴, 터페닐릴, 쿼터페닐릴, 나프틸, 페난트릴, 플루오레닐, 벤조 플루오레닐, 크리세닐, 트리페닐레닐, 피레닐, 또는, 식(A)로 표시되는 기이며, 이 기에 있어서의 적어도 하나의 수소는, 페닐, 비페닐릴, 터페닐릴, 쿼터페닐릴, 나프틸, 페난트릴, 플루오레닐, 벤조 플루오레닐, 크리세닐, 트리페닐레닐, 피레닐, 또는, 식(A)로 표시되는 기로 치환되어 있어도 된다. 여기에서, 플루오레닐 및 벤조 플루오레닐에 있어서의 메틸렌의 수소가 모두 페닐로 치환되어 있을 때는, 이 페닐은 서로 단결합으로 결합하고 있어도 된다. Ar^{c'}, Ar^{11'}, Ar^{12'}, Ar^{13'}, Ar^{14'}, Ar^{15'}, Ar^{17'}, 및 Ar^{18'}이 결합하지 않고 있는 안트라센 환의 탄소원 자에는 수소의 대신 메틸 또는 t-부틸이 결합하고 있어도 된다.

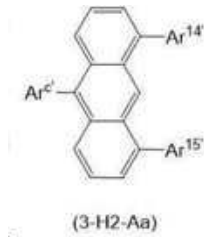
[0370] Ar^{c'}, Ar^{11'}, Ar^{12'}, Ar^{13'}, Ar^{14'}, Ar^{15'}, Ar^{17'}, 및 Ar^{18'}이, 각각 치환 혹은 무치환의 페닐 또는 치환 혹은 무치환의 나프틸일 때는, 상기의 식(3-H2-X1)~식(3-H2-X7)중 어느 하나로 표시되는 기인 것이 바람직하다.

[0371] Ar^{c'}, Ar^{11'}, Ar^{12'}, Ar^{13'}, Ar^{14'}, Ar^{15'}, Ar^{17'}, 및 Ar^{18'}은 각각 독립적으로 페닐, 비페닐릴 (특히, 비페닐-2-일 또는 비페닐-4-일), 터페닐릴 (특히, m-터페닐-5'-일), 나프틸, 페난트릴, 플루오레닐, 또는, 상기의 식(A-1)~식(A-4)중 어느 하나로 표시되는 기인 것이 보다 바람직하고, 이 때, 이 기에 있어서의 적어도 하나의 수소는, 페닐, 비페닐릴, 나프틸, 페난트릴, 플루오레닐, 또는, 상기의 식(A-1)~식(A-4)중 어느 하나로 표시되는 기로 치환되어 있어도 된다.

[0372] 또한, 식(3-H2-A), (3-H2-B), (3-H2-C), (3-H2-D), 또는 (3-H2-E)로 표시되는 화합물에 있어서의 적어도 하나의 수소는 할로젠, 시아노, 또는 중수소 치환되어 있어도 된다. 또한, 중수소화된 형태가 바람직하고, 안트라센

환이 모두 중수소화된 형태, 혹은 모든 수소원자가 중수소화된 형태가 바람직하다.

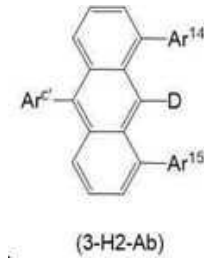
[0373] 특히, 바람직한 식(3-H2)으로 표현되는 안트라센 화합물로서, 하기 식(3-H2-Aa)으로 표현되는 안트라센 화합물을 들 수 있다.



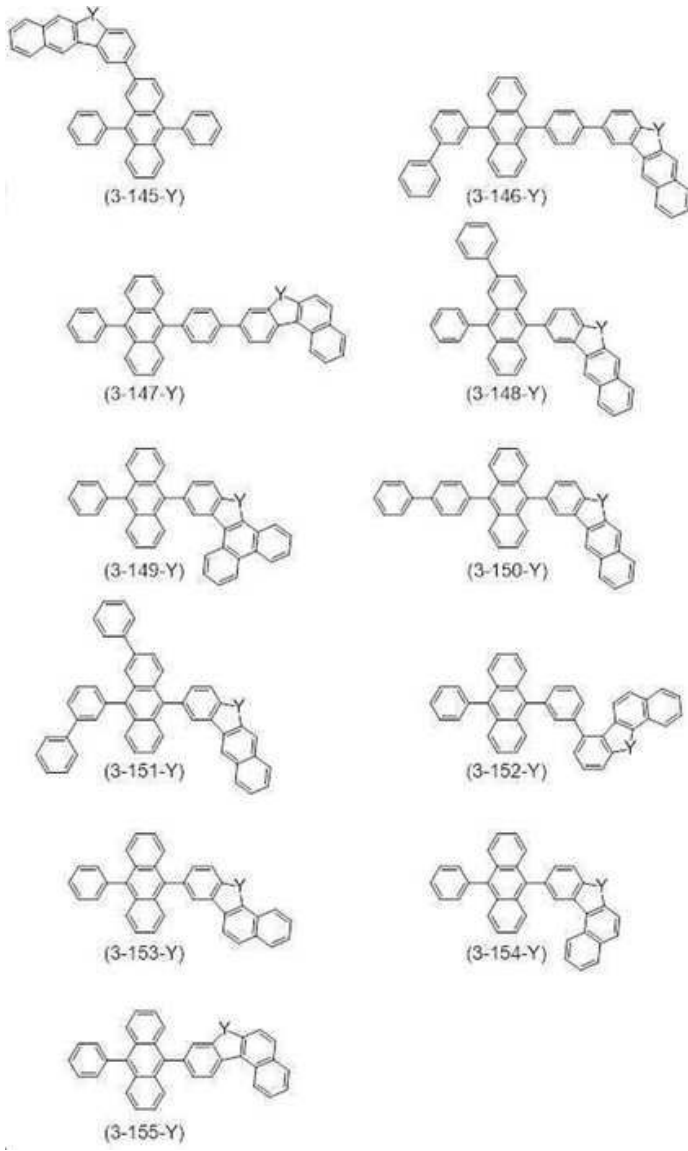
[0374] 식(3-H2-Aa) 중, Ar^{c'}, Ar^{14'}, 및 Ar^{15'}은 각각 독립적으로, 페닐, 비페닐릴, 터페닐릴, 나프틸, 페난트릴, 플루오레닐, 벤조 플루오레닐, 크리세닐, 트리페닐레닐, 피레닐, 또는 상기 식(A-1)~식(A-11)중 어느 하나로 표시되는 기이며, 이 기에 있어서의 적어도 하나의 수소는, 페닐, 비페닐릴, 터페닐릴, 나프틸, 페난트릴, 플루오레닐, 벤조 플루오레닐, 크리세닐, 트리페닐레닐, 피레닐, 또는 식(A-1)~식(A-11) 중 어느 하나로 표시되는 되는 기로 치환되어 있어도 된다. 여기에서, 플루오레닐 및 벤조 플루오레닐에 있어서의 메틸렌의 수소가 모두 페닐로 치환되어 있을 때는, 이 페닐은 서로 단결합으로 결합하고 있어도 된다. 또한, Ar^{c'}, Ar^{14'}, 및 Ar^{15'}이 결합하지 않고 있는 안트라센 환상의 탄소원자에는 수소의 대신 메틸 또는 t-부틸이 치환되어 있어도 된다. 식(3-H2-Aa)로 표시되는 화합물에 있어서의 적어도 하나의 수소는 할로젠 또는 시아노로 치환되어 있어도 되고, 또한 식(3-H2-Aa)로 표시되는 화합물에 있어서의 적어도 하나의 수소는 중수소로 치환되어 있다.

[0376] 식(3-H2-Aa) 중, Ar^{c'}, Ar^{14'}, 및 Ar^{15'}은 각각 독립적으로 페닐, 비페닐릴, 터페닐릴, 나프틸, 페난트릴, 플루오레닐, 또는 상기 식(A-1)~식(A-4)중 어느 하나로 표시되는 기인 것이 바람직하고, 이 기에 있어서의 적어도 하나의 수소는, 페닐, 나프틸, 페난트릴, 플루오레닐, 또는 식(A-1)~식(A-4)중 어느 하나로 표시되는 기로 치환되어 있어도 된다.

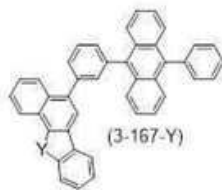
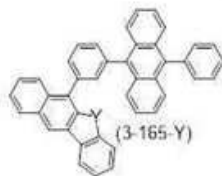
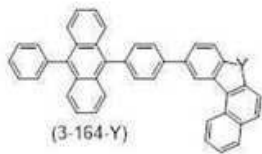
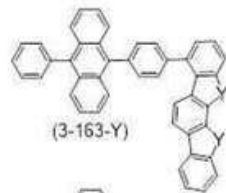
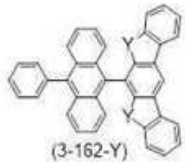
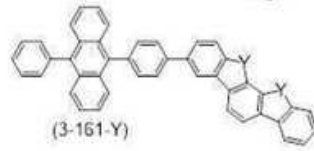
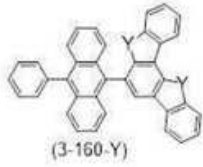
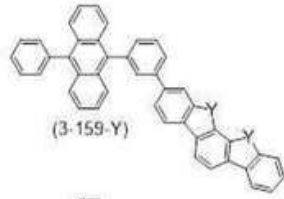
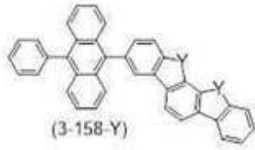
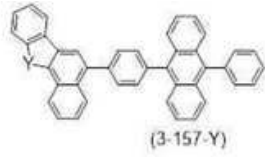
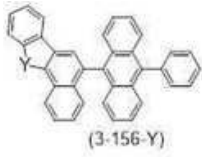
[0377] 식(3-H2-Aa)로 표시되는 화합물에 있어서, 적어도, 안트라센 환에 10위치의 탄소(Ar^{c'}이 결합하는 탄소를 9위치로 한다)에 결합하는 수소가 중수소로 치환되어 있는 것이 바람직하다. 즉, 식(3-H2-Aa)로 표시되는 화합물은, 하기 식(3-H2-Ab)로 표시되는 화합물인 것이 바람직하다. 한편, 식(3-H2-Ab) 중, D는 중수소이며, Ar^{c'}, Ar^{14'}, 및 Ar^{15'}은 식(3-H2-Aa) 중의 정의와 동일하다. 식(3-H2-Ab)에 있어서의 D는 적어도 이 위치가 중수소인 것을 나타내고, 식(3-H2-Ab)에 있어서의 기타 중 어느 하나 이상의 수소가 동시에 중수소이어도 되고, 식(3-H2-Ab)에 있어서의 수소가 모두 중수소인 것도 바람직하다.



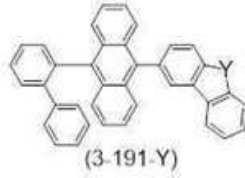
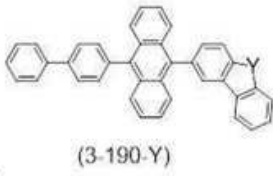
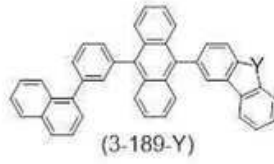
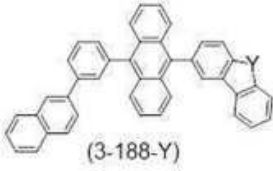
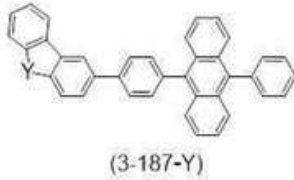
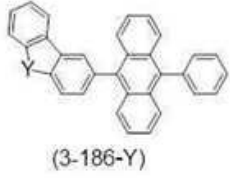
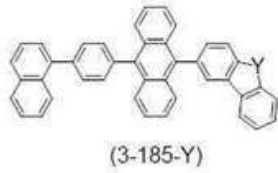
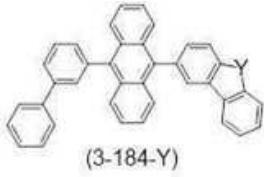
[0378] 또한, 안트라센 화합물의 구체적인 예로서는, 예를 들면, 식(3-131-Y)~식(3-182-Y)으로 표현되는 화합물, 식(3-183-N), 식(3-184-Y)~식(3-284-Y), 및 식(3-500)~식(3-557), 및 식(3-600)~식(3-605), 및 식(3-606-Y)~식(3-626-Y)으로 표현되는 화합물을 들 수 있다. 이들 식 중의 수소원자는 부분적으로, 또는 모두 중수소로 치환되어 있어도 되지만, 특히 바람직한 중수소치환의 형태에 관해서는 개별로 열거하고 있다. 식 중의 Y는 -O-, -S-, >N-R²⁹(R²⁹은 상기와 같은 정의) 또는 >C(-R³⁰)₂(R³⁰은 연결되어 있어도 되는 아틸, 또는 알킬)의 어느 것이라도 되고, R²⁹은 예를 들면 페닐, R³⁰은 예를 들면 메틸이다. 식번호는, 예를 들면 Y가 0의 경우는, 식(3-131-Y)은 식(3-131-0)이라고 하고, Y가 -S- 또는 >N-R²⁹의 경우는 각각 식(3-131-S) 또는 식(3-131-N)으로 한다.



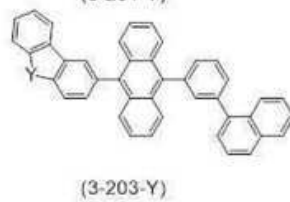
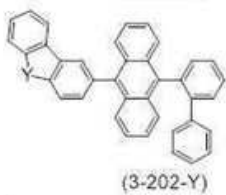
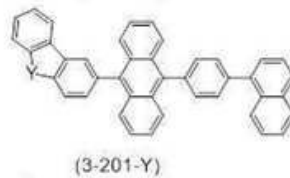
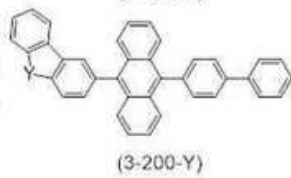
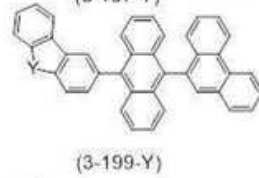
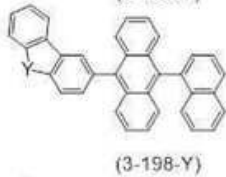
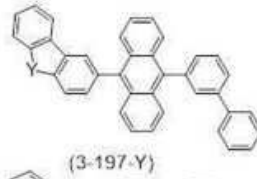
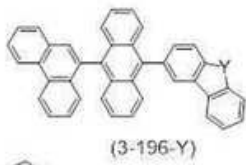
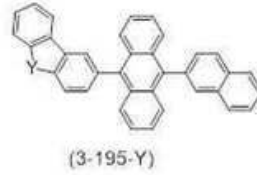
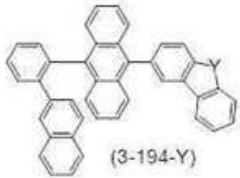
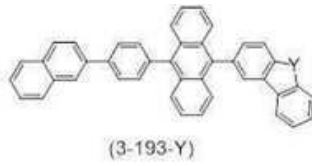
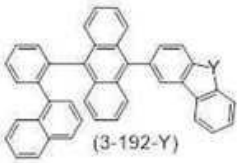
[0381]



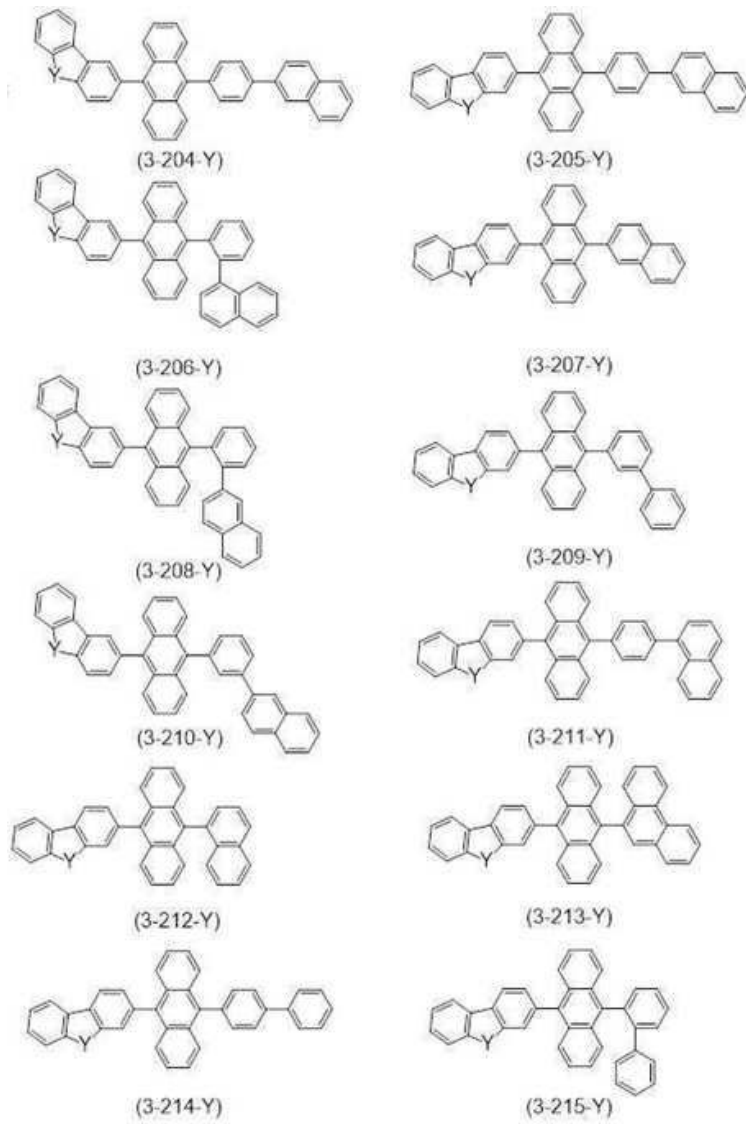
[0382]



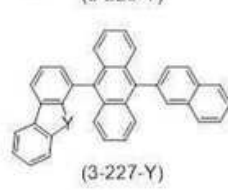
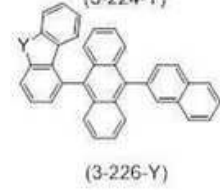
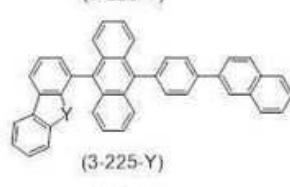
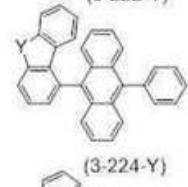
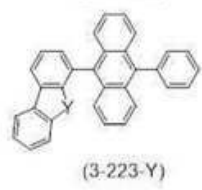
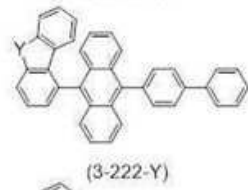
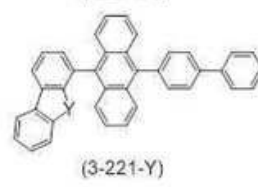
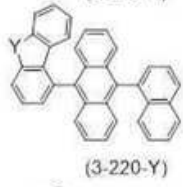
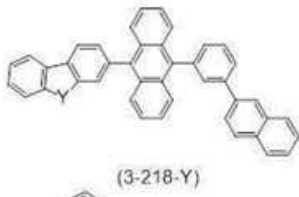
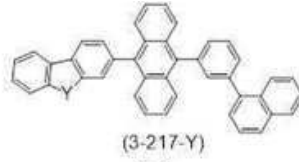
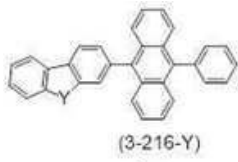
[0385]



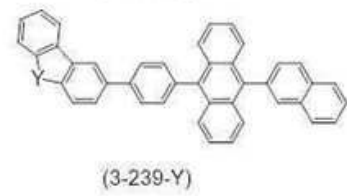
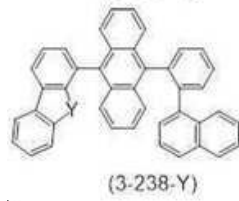
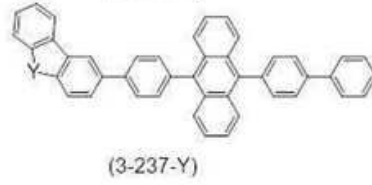
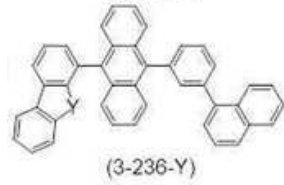
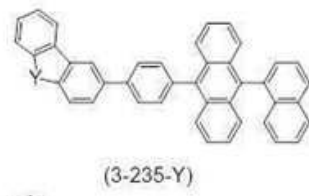
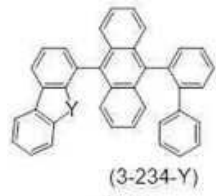
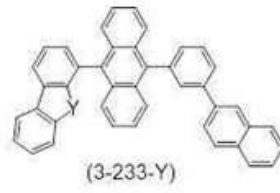
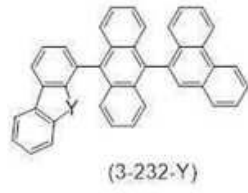
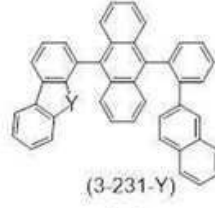
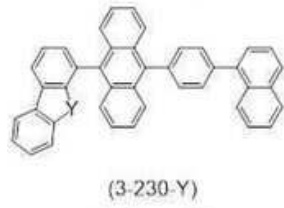
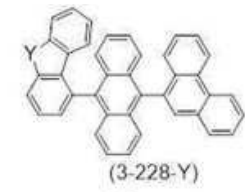
[0386]



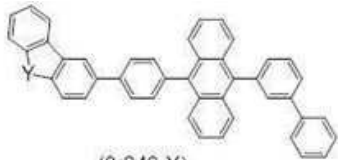
[0387]



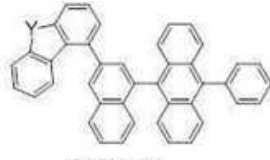
[0388]



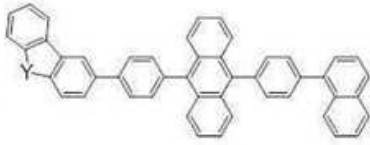
[0389]



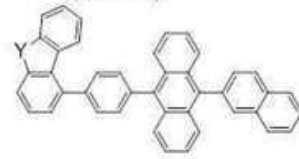
(3-240-Y)



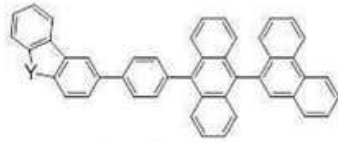
(3-241-Y)



(3-242-Y)



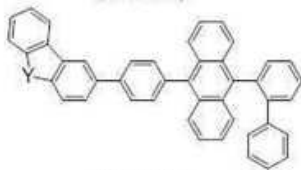
(3-243-Y)



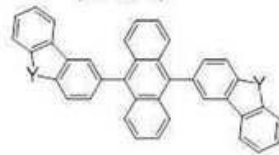
(3-244-Y)



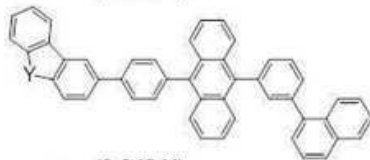
(3-245-Y)



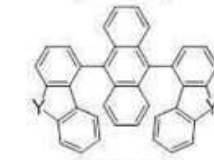
(3-246-Y)



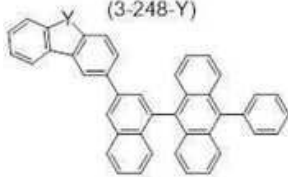
(3-247-Y)



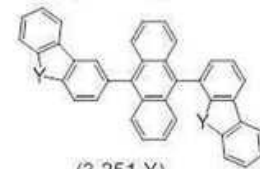
(3-248-Y)



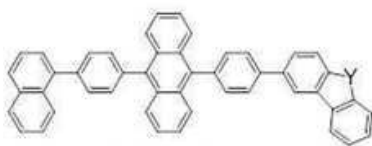
(3-249-Y)



(3-250-Y)



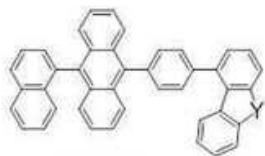
(3-251-Y)



(3-252-Y)



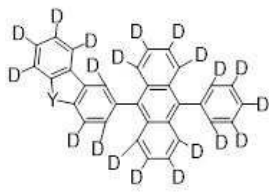
(3-253-Y)



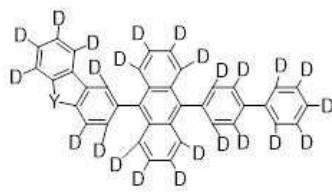
(3-254-Y)

[0390]

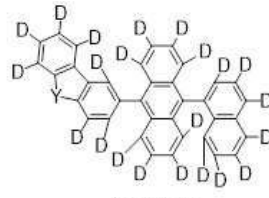
[0391]



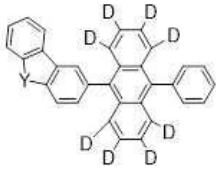
(3-270-Y)



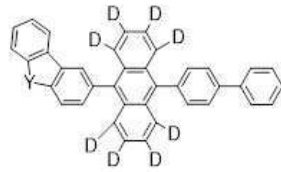
(3-271-Y)



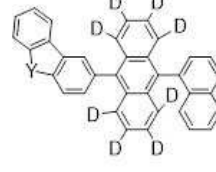
(3-272-Y)



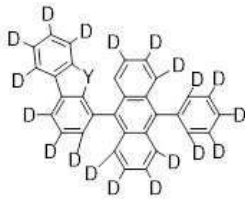
(3-273-Y)



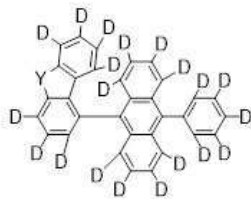
(3-274-Y)



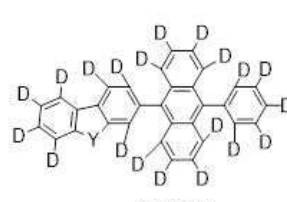
(3-275-Y)



(3-276-Y)



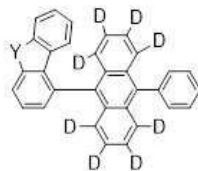
(3-277-Y)



(3-278-Y)



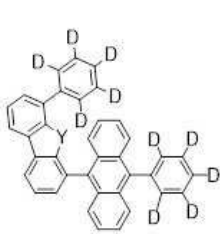
(3-279-Y)



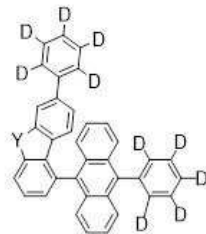
(3-280-Y)



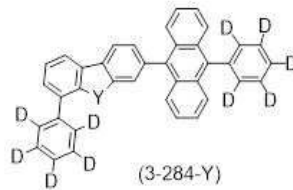
(3-281-Y)



(3-282-Y)

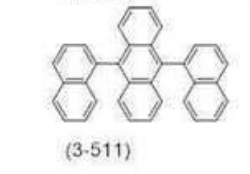
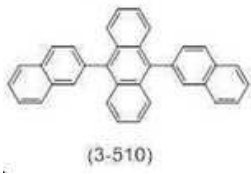
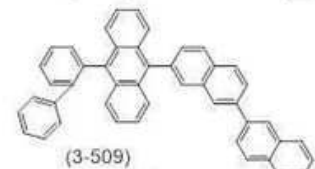
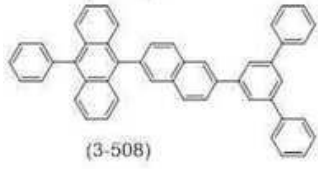
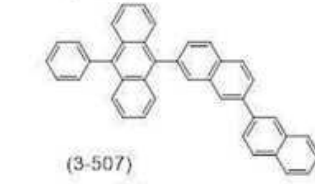
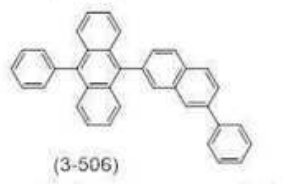
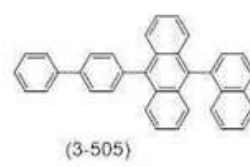
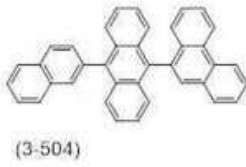
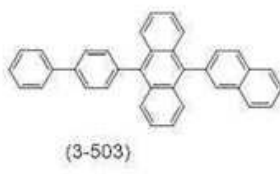
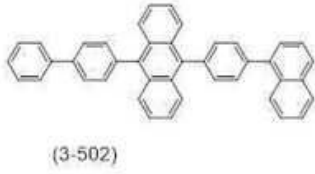
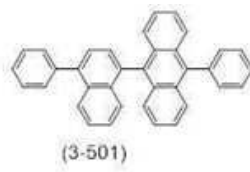
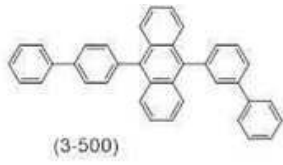


(3-283-Y)

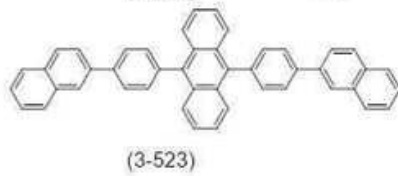
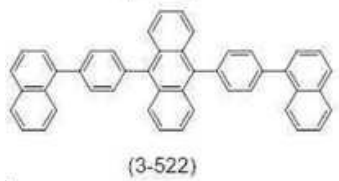
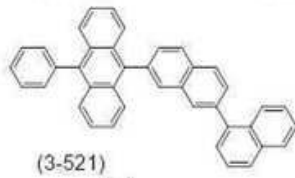
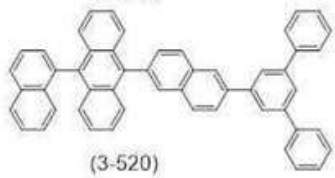
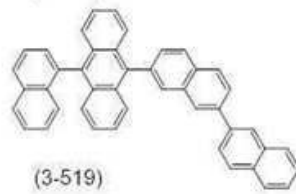
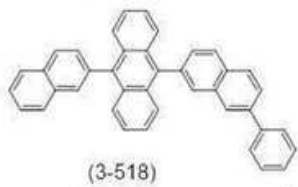
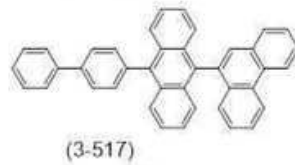
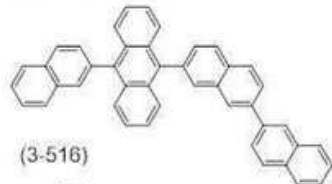
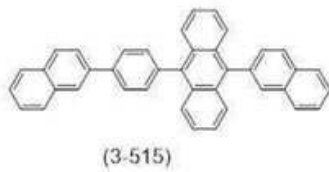
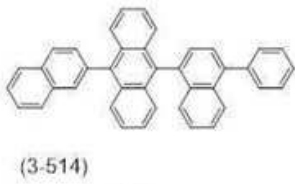
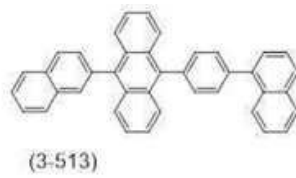
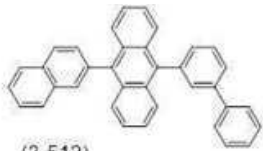


(3-284-Y)

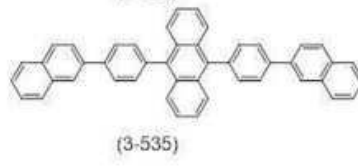
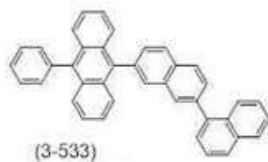
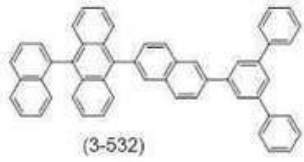
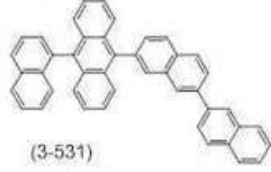
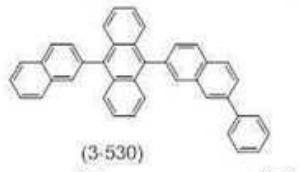
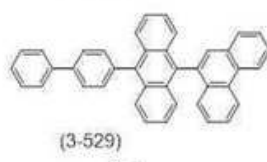
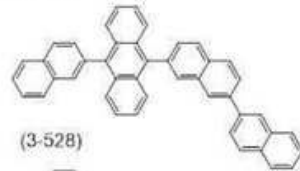
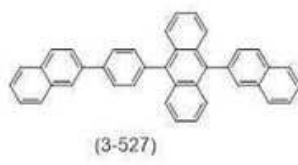
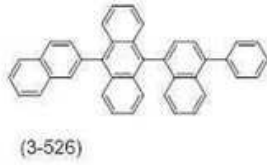
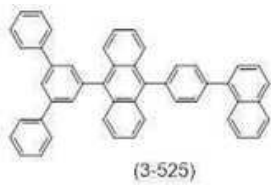
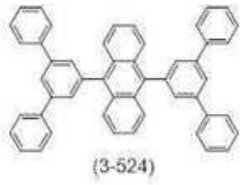
[0393]



[0394]



[0395]



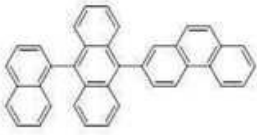
[0396]



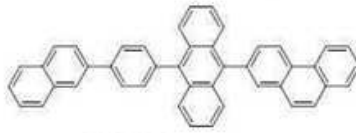
(3-536)



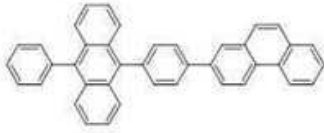
(3-537)



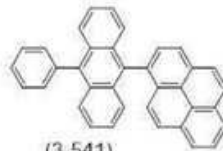
(3-538)



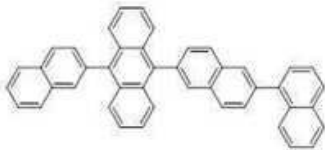
(3-539)



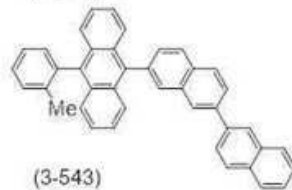
(3-540)



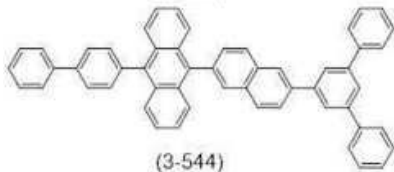
(3-541)



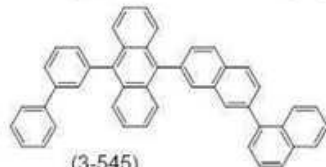
(3-542)



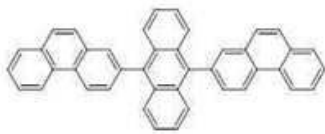
(3-543)



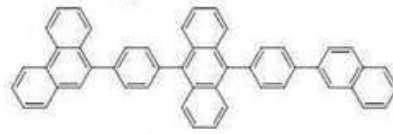
(3-544)



(3-545)

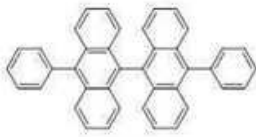


(3-546)

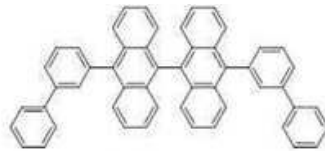


(3-547)

[0397]



(3-548)



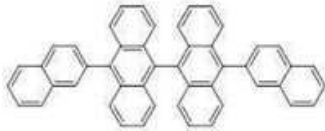
(3-549)



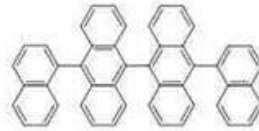
(3-55)



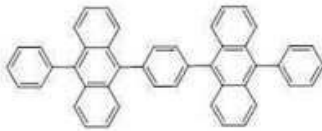
(3-551)



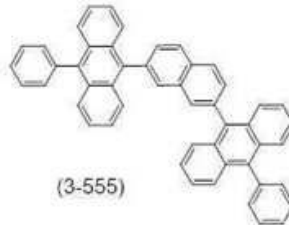
(3-552)



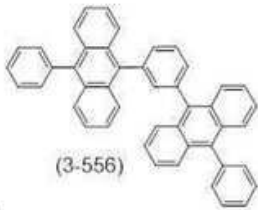
(3-553)



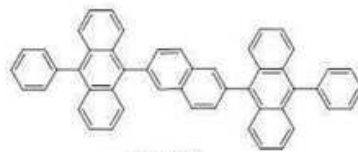
(3-554)



(3-555)

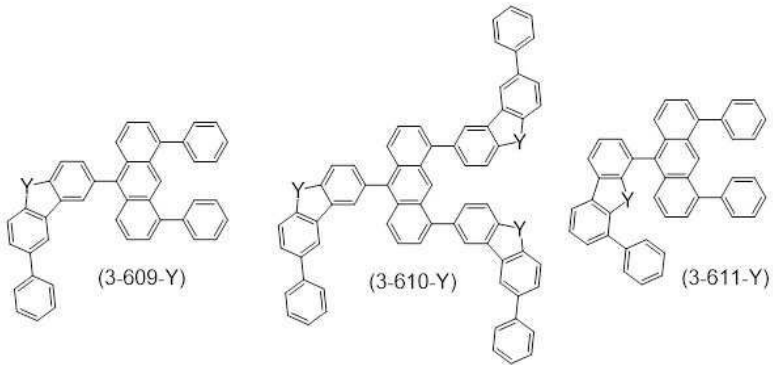
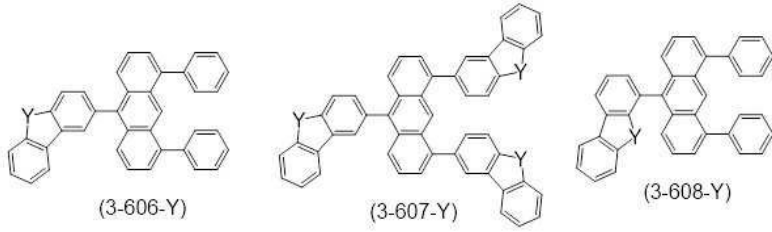
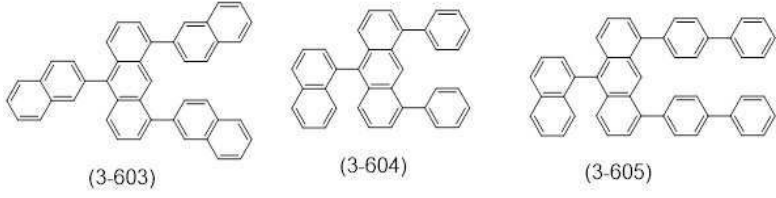
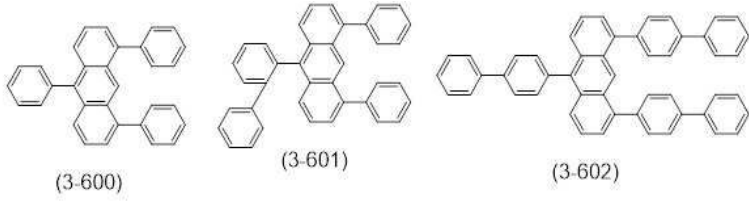


(3-556)

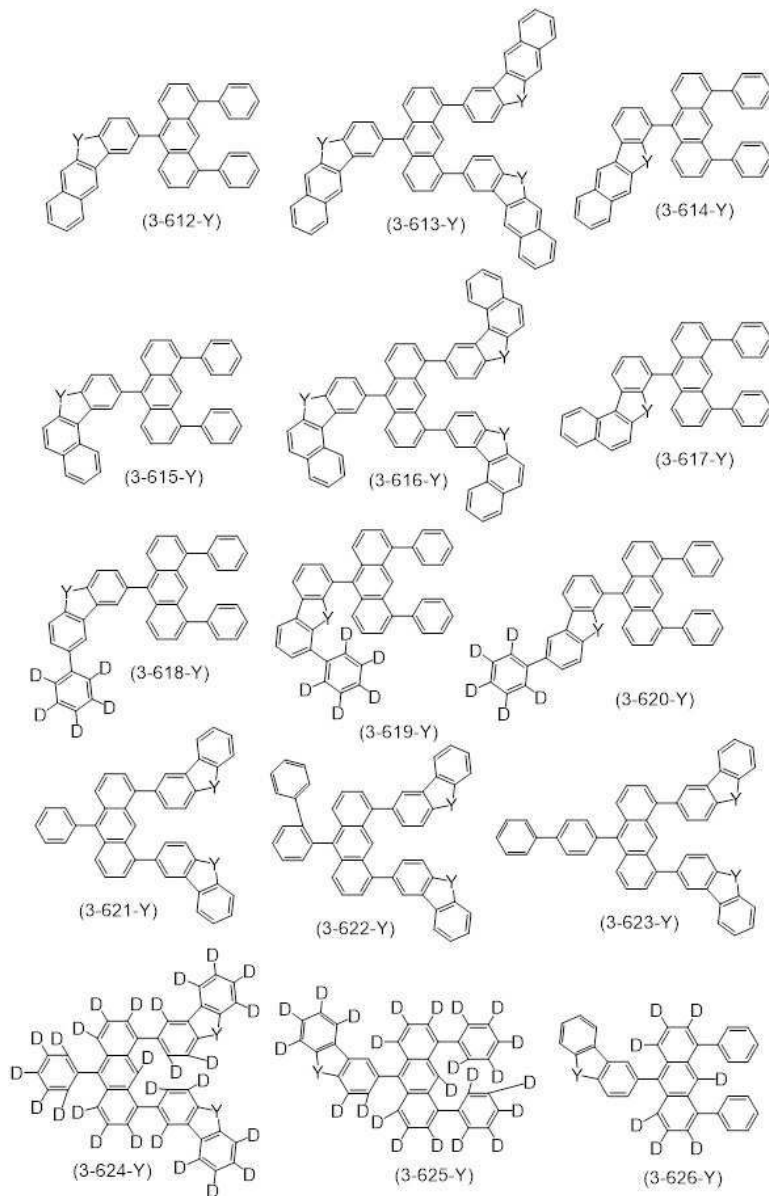


(3-557)

[0398]



[0399]



[0400]

[0401]

상기 식 중, D는 중수소이다.

[0402]

이 화합물 중에서도, 식(3-131-Y)~식(3-134-Y), 식(3-138-Y), 식(3-140-Y)~식(3-143-Y), 식(3-150-Y), 식(3-153-Y)~식(3-156-Y), 식(3-166-Y), 식(3-168-Y), 식(3-173-Y), 식(3-177-Y), 식(3-180-Y)~식(3-183-N), 식(3-185-Y), 식(3-190-Y), 식(3-223-Y), 식(3-241-Y), 식(3-250-Y), 식(3-252-Y)~식(3-254-Y), 식(3-270-Y)~식(3-284-Y), 식(3-501), 식(3-507), 식(3-508), 식(3-509), 식(3-513), 식(3-514), 식(3-519), 식(3-521), 식(3-538)~식(3-547) 혹은 식(3-600)~식(3-605), 및 식(3-606-Y)~식(3-626-Y)으로 표현되는 화합물이 바람직하다. 또한, Y는, -O- 또는 $>N-R^{29}$ 이 바람직하고, -O-인 것이 보다 바람직하다. 또한, 중수소치환의 형태도 바람직하다.

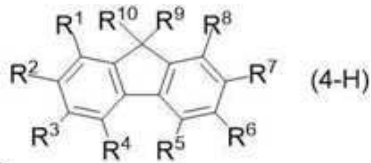
[0403]

상기의 안트라센 화합물은, 안트라센 골격의 원하는 위치에 반응성기를 갖는 화합물과, 식(3-II)로 나타내어지는 안트라센 화합물이라면, X, Ar⁴ 및 식(A)의 구조 등의 부분 구조에 반응성기를 갖는 화합물을 출발 원료로 하여, 스즈키 커플링, 네기시 커플링, 그 외의 공지의 커플링 반응을 응용하여 제조할 수 있다. 이들 반응성 화합물의 반응성기로서는, 할로젠이나 보론산 등을 들 수 있다. 구체적인 제조 방법으로서, 예를 들면 국제 공개 제2014/141725호 공보의 단락 [0089]~[0175]에 있어서의 합성법을 참고로 할 수 있다.

[0404]

<플루오렌 화합물>

[0405] 식(4-H)으로 표현되는 화합물은 기본적으로는 호스트로서 기능한다.



[0406]

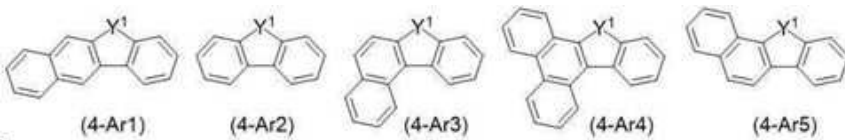
[0407] 식(4-H)중,

[0408] R^1 내지 R^{10} 은, 각각 독립적으로, 수소, 아틸, 헤테로아틸(당해 헤테로아틸은 연결기를 통하여 식(4-H)에 있어서의 플루오렌 골격과 결합하고 있어도 된다), 디아릴아미노, 디헤테로아릴아미노, 아틸헤테로아릴아미노, 알킬, 시클로알킬, 알케닐, 알콕시 또는 아틸옥시이고, 이들에 있어서의 적어도 1개의 수소는 아틸, 헤테로아틸, 알킬 또는 시클로알킬로 치환되어 있어도 되고, 또, R^1 과 R^2 , R^2 와 R^3 , R^3 과 R^4 , R^5 와 R^6 , R^6 과 R^7 , R^7 과 R^8 또는 R^9 와 R^{10} 이 각각 독립적으로 결합하여 축합환 또는 스피로환을 형성하고 있어도 되고, 형성된 환에 있어서의 적어도 1개의 수소는 아틸, 헤테로아틸(당해 헤테로아틸은 연결기를 통하여 당해 형성된 환과 결합하고 있어도 된다), 디아릴아미노, 디헤테로아릴아미노, 아틸헤테로아릴아미노, 알킬, 시클로알킬, 알케닐, 알콕시 또는 아틸옥시로 치환되어 있어도 되고, 이들에 있어서의 적어도 1개의 수소는 아틸, 헤테로아틸, 알킬 또는 시클로알킬로 치환되어 있어도 되고, 식(4-H)으로 표현되는 화합물에 있어서의 적어도 하나의 수소가 할로젠, 시아노 또는 중수소로 치환되어 있어도 된다.

[0409] 식(4-H)의 정의에 있어서의 각기의 상세한 것은, 상술한, 식(1)의 다환방향족 화합물에 있어서의 설명을 인용할 수 있다.

[0410] R^1 내지 R^{10} 에 있어서의 알케닐로서는, 예를 들면, 탄소수 2~30의 알케닐을 들 수 있고, 탄소수 2~20의 알케닐이 바람직하고, 탄소수 2~10의 알케닐이 보다 바람직하고, 탄소수 2~6의 알케닐이 더욱 바람직하고, 탄소수 2~4의 알케닐이 특히 바람직하다. 바람직한 알케닐은, 비닐, 1-프로페닐, 2-프로페닐, 1-부테닐, 2-부테닐, 3-부테닐, 1-펜테닐, 2-펜테닐, 3-펜테닐, 4-펜테닐, 1-헥세닐, 2-헥세닐, 3-헥세닐, 4-헥세닐, 또는 5-헥세닐이다.

[0411] 또한, 헤테로아틸의 구체예로서, 하기 식(4-Ar1), 식(4-Ar2), 식(4-Ar3), 식(4-Ar4) 또는 식(4-Ar5)의 화합물로부터 임의의 1개의 수소 원자를 제거하여 나타내어지는 1가의 기도 들 수 있다.



[0412]

[0413] 식(4-Ar1) 내지 식(4-Ar5) 중, Y^1 은, 각각 독립적으로, O, S 또는 N-R이고, R은 페닐, 비페닐릴, 나프틸, 안트라세닐 또는 수소이고,

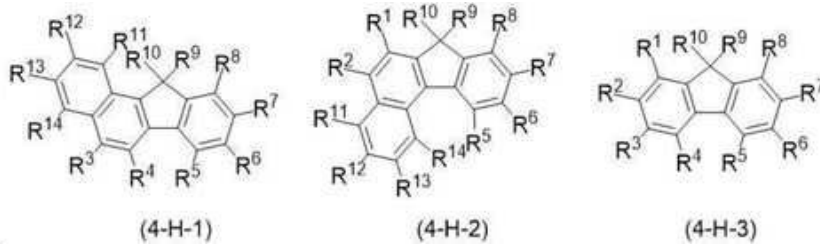
[0414] 상기 식(4-Ar1) 내지 식(4-Ar5)의 구조에 있어서의 적어도 1개의 수소는 페닐, 비페닐릴, 나프틸, 안트라세닐, 페난트레닐, 메틸, 에틸, 프로필, 또는, 부틸로 치환되어 있어도 된다.

[0415] 이들 헤테로아틸은, 연결기를 통하여, 상기 식(4-H)에 있어서의 플루오렌 골격과 결합하고 있어도 된다. 즉, 식(4-H)에 있어서의 플루오렌 골격과 상기 헤테로아틸이 직접 결합할 뿐만 아니라, 그들 사이에 연결기를 통하여 결합해도 된다. 이 연결기로서는, 페닐렌, 비페닐렌, 나프틸렌, 안트라세닐렌, 메틸렌, 에틸렌, $-OCH_2CH_2-$, $-CH_2CH_2O-$, 또는, $-OCH_2CH_2O-$ 등을 들 수 있다.

[0416] 또, 식(4-H) 중의 R^1 과 R^2 , R^2 와 R^3 , R^3 과 R^4 , R^5 와 R^6 , R^6 과 R^7 또는 R^7 과 R^8 이 각각 독립적으로 결합하여 축합환을, R^9 와 R^{10} 이 결합하여 스피로환을 형성하고 있어도 된다. R^1 내지 R^8 에 의해 형성된 축합환은, 식(4-H)에 있어서의 벤젠환에 축합하는 환이고, 지방족환 또는 방향족환이다. 바람직하게는 방향족환이고, 식(4-H)에 있어서의 벤젠환을 포함시킨 구조로서는 나프탈렌환이나 페난트렌환 등을 들 수 있다. R^9 와 R^{10} 에 의해 형성된 스피로환은, 식(4-H)에 있어서의 5원환에 스피로 결합하는 환이고, 지방족환 또는 방향족환이다. 바람직하게는 방

향족환이고, 플루오렌환 등을 들 수 있다.

[0417] 식(4-H)로 표시되는 화합물은, 바람직하게는, 하기 식(4-H-1), 식(4-H-2) 또는 식(4-H-3)으로 표시되는 화합물이고, 각각, 식(4-H)에 있어서 R^1 과 R^2 가 결합하여 형성된 벤젠환이 축합한 화합물, 식(4-H)에 있어서 R^3 과 R^4 가 결합하여 형성된 벤젠환이 축합한 화합물, 식(4-H)에 있어서 R^1 내지 R^8 의 모두가 결합하고 있지 않은 화합물이다.



[0418]

[0419] 식(4-H-1), 식(4-H-2) 및 식(4-H-3)에 있어서의 R^1 내지 R^{10} 의 정의는 식(4-H)에 있어서 대응하는 R^1 내지 R^{10} 과 동일하고, 식(4-H-1) 및 식(4-H-2)에 있어서의 R^{11} 내지 R^{14} 의 정의도 식(4-H)에 있어서의 R^1 내지 R^{10} 과 동일하다.

[0420] 식(4-H)로 표시되는 화합물은, 더욱 바람직하게는, 하기 식(4-H-1A), 식(4-H-2A) 또는 식(4-H-3A)로 표시되는 화합물이고, 각각, 식(4-H-1), 식(4-H-2) 또는 식(4-H-3)에 있어서 R^9 와 R^{10} 이 결합하여 스피로-플루오렌환이 형성된 화합물이다.

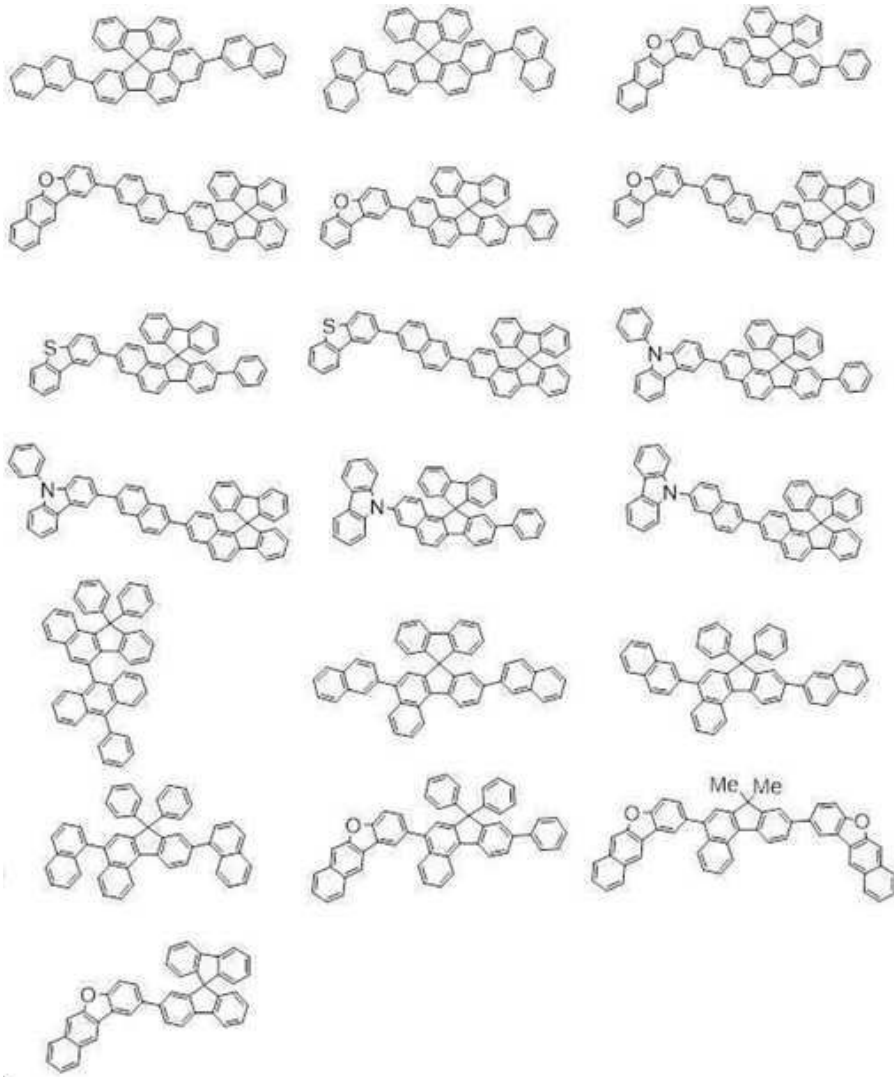


[0421]

[0422] 식(4-H-1A), 식(4-H-2A) 및 식(4-H-3A)에 있어서의 R^2 내지 R^7 의 정의는 식(4-1), 식(4-2) 및 식(4-3)에 있어서 대응하는 R^2 내지 R^7 과 동일하고, 식(4-H-1A) 및 식(4-H-2A)에 있어서의 R^{11} 내지 R^{14} 의 정의도 식(4-1) 및 식(4-2)에 있어서의 R^{11} 내지 R^{14} 과 동일하다.

[0423] 또한, 식(4-H)으로 표현되는 화합물에 있어서의 수소는, 그 모두 또는 일부가 할로젠, 시아노 또는 중수소로 치환되어 있어도 된다.

[0424] 본 발명의 호스트로서의 플루오렌 화합물의 더욱 구체적인 예로서는, 이하의 구조식으로 표현되는 화합물을 들 수 있다. 한편, 「Me」은 메틸을 나타낸다.

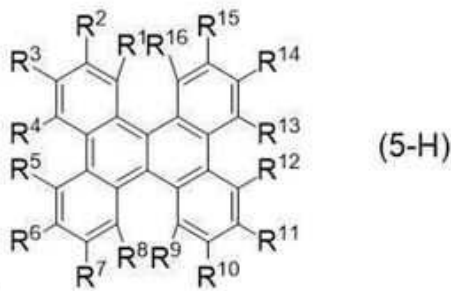


[0425]

[0426] <디벤조크리센 화합물>

[0427] 호스트로서의 디벤조크리센 화합물은, 예를 들면 하기 식(5-H)으로 표현되는 화합물이다.

[0428]



[0429]

식(5-H) 중,

[0430]

R^1 내지 R^{16} 은, 각각 독립적으로, 수소, 아릴, 헤테로아릴(당해 헤테로아릴은 연결기를 통하여 식(5-H)에 있어서의 디벤조크리센 골격과 결합하고 있어도 된다), 디아릴아미노, 디헤테로아릴아미노, 아릴헤테로아릴아미노, 알킬, 시클로알킬, 알케닐, 알콕시 또는 아릴옥시이고, 이들에 있어서의 적어도 1개의 수소는 아릴, 헤테로아릴, 알킬 또는 시클로알킬로 치환되어 있어도 되고,

[0431]

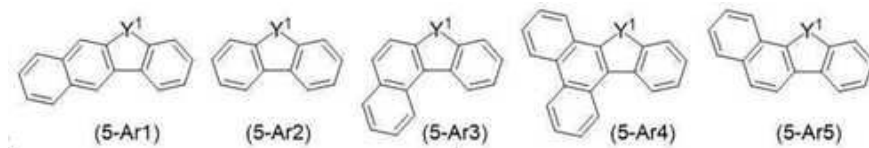
또, R^1 내지 R^{16} 중 인접하는 기끼리가 결합하여 축합환을 형성하고 있어도 되고, 형성된 환에 있어서의 적어도 1개의 수소는 아릴, 헤테로아릴(당해 헤테로아릴은 연결기를 통하여 당해 형성된 환과 결합하고 있어도 된다), 디아릴아미노, 디헤테로아릴아미노, 아릴헤테로아릴아미노, 알킬, 시클로알킬알케닐, 알콕시 또는 아릴옥시로

치환되어 있어도 되고, 이들에 있어서의 적어도 1개의 수소는 아릴, 헤테로아릴, 알킬 또는 시클로알킬로 치환되어 있어도 되고, 식(5-H)으로 표현되는 화합물에 있어서의 적어도 하나의 수소가 할로겐, 시아노 또는 중수소로 치환되어 있어도 된다.

[0432] 식(5-H)의 정의에 있어서의 각 기의 상세는, 상술한, 식(1)의 다환 방향족 화합물에 있어서의 설명을 인용할 수 있다.

[0433] 상기 식(5-H)의 정의에 있어서의 알케닐로서는, 예를 들면, 탄소수 2~30의 알케닐을 들 수 있고, 탄소수 2~20의 알케닐이 바람직하고, 탄소수 2~10의 알케닐이 보다 바람직하고, 탄소수 2~6의 알케닐이 더욱 바람직하고, 탄소수 2~4의 알케닐이 특히 바람직하다. 바람직한 알케닐은, 비닐, 1-프로페닐, 2-프로페닐, 1-부테닐, 2-부테닐, 3-부테닐, 1-펜테닐, 2-펜테닐, 3-펜테닐, 4-펜테닐, 1-헥세닐, 2-헥세닐, 3-헥세닐, 4-헥세닐, 또는 5-헥세닐이다.

[0434] 또한, 헤테로아릴의 구체예로서, 하기 식(5-Ar1), 식(5-Ar2), 식(5-Ar3), 식(5-Ar4) 또는 식(5-Ar5)의 화합물로부터 임의의 1개의 수소 원자를 제거하여 나타내어지는 1개의 기도 들 수 있다.



[0435] 식(5-Ar1) 내지 식(5-Ar5) 중, Y¹은, 각각 독립적으로, H, S 또는 N-R이고, R은 페닐, 비페닐릴, 나프틸, 안트라세닐 또는 수소이고,

[0437] 상기 식(5-Ar1) 내지 식(5-Ar5)의 구조에 있어서의 적어도 1개의 수소는 페닐, 비페닐릴, 나프틸, 안트라세닐, 페난트레닐, 메틸, 에틸, 프로필, 또는 부틸로 치환되어 있어도 된다.

[0438] 이들 헤테로아릴은, 연결기를 통하여, 식(5-H)에 있어서의 디벤조크리센 골격과 결합하고 있어도 된다. 즉, 식(5-H)에 있어서의 디벤조크리센 골격과 상기 헤테로아릴이 직접 결합할 뿐만 아니라, 그들 사이에 연결기를 통하여 결합해도 된다. 이 연결기로서는, 페닐렌, 비페닐렌, 나프틸렌, 안트라세닐렌, 메틸렌, 에틸렌, -OCH₂CH₂-, -CH₂CH₂O-, 또는, -OCH₂CH₂O- 등을 들 수 있다.

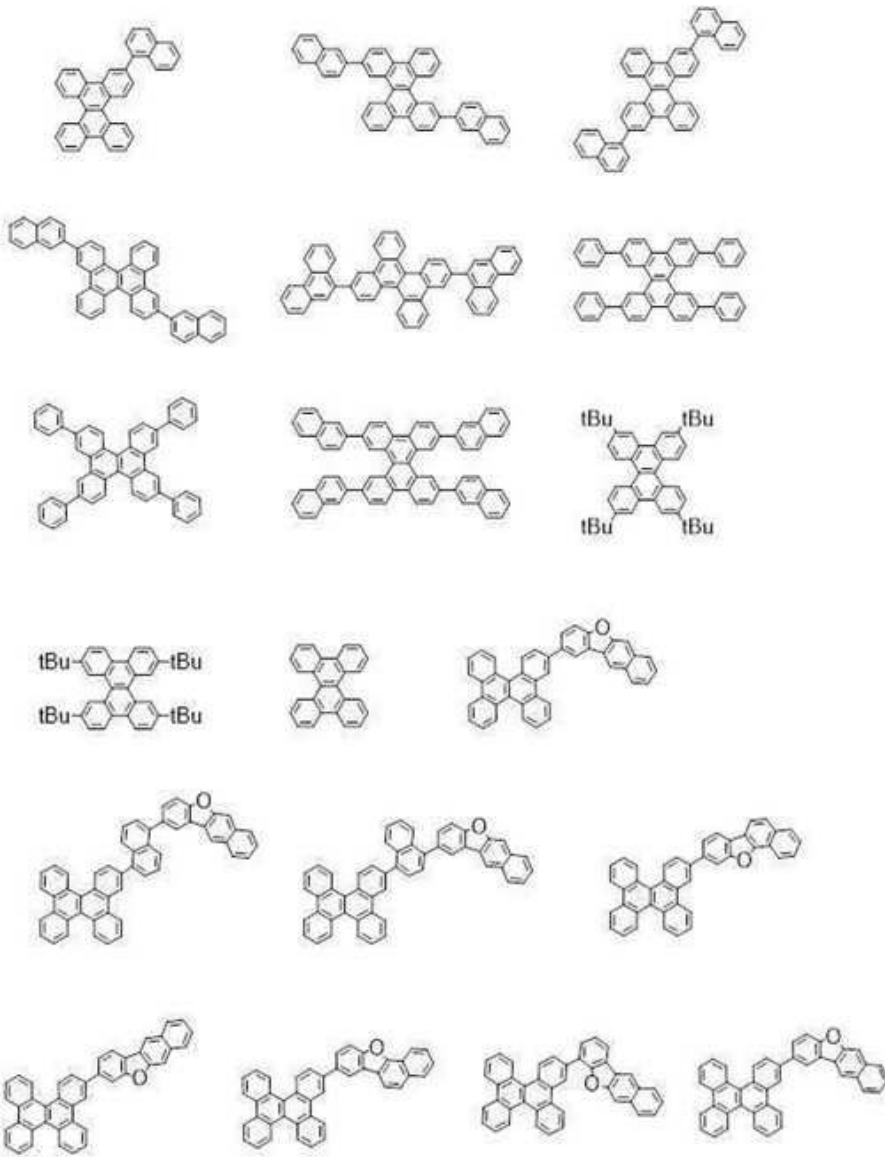
[0439] 식(5-H)로 표시되는 화합물은, 바람직하게는, R¹, R⁴, R⁵, R⁸, R⁹, R¹², R¹³ 및 R¹⁶은 수소이다. 이 경우, 식(5-H) 중의 R², R³, R⁶, R⁷, R¹⁰, R¹¹, R¹⁴ 및 R¹⁵는, 각각 독립적으로, 수소, 페닐, 비페닐릴, 나프틸, 안트라세닐, 페난트레닐, 식(5-Ar1), 식(5-Ar2), 식(5-Ar3), 식(5-Ar4) 혹은 식(5-Ar5)의 구조를 갖는 1개의 기(당해 구조를 갖는 1개의 기는, 페닐렌, 비페닐렌, 나프틸렌, 안트라세닐렌, 메틸렌, 에틸렌, -OCH₂CH₂-, -CH₂CH₂O-, 또는, -OCH₂CH₂O-를 통하여, 상기 식(5-H)에 있어서의 디벤조크리센 골격과 결합하고 있어도 된다), 메틸, 에틸, 프로필, 또는, 부틸인 것이 바람직하다.

[0440] 식(5-H)로 표시되는 화합물은, 보다 바람직하게는, R¹, R², R⁴, R⁵, R⁷, R⁸, R⁹, R¹⁰, R¹², R¹³, R¹⁵ 및 R¹⁶은 수소이다. 이 경우, 식(5-H) 중의 R³, R⁶, R¹¹ 및 R¹⁴ 중 적어도 1개(바람직하게는 1개 또는 2개, 보다 바람직하게는 1개)는, 단결합, 페닐렌, 비페닐렌, 나프틸렌, 안트라세닐렌, 메틸렌, 에틸렌, -OCH₂CH₂-, -CH₂CH₂O-, 또는, -OCH₂CH₂O-를 통한, 상기 식(5-Ar1), 식(5-Ar2), 식(5-Ar3), 식(5-Ar4) 또는 식(5-Ar5)의 구조를 갖는 1개의 기이고,

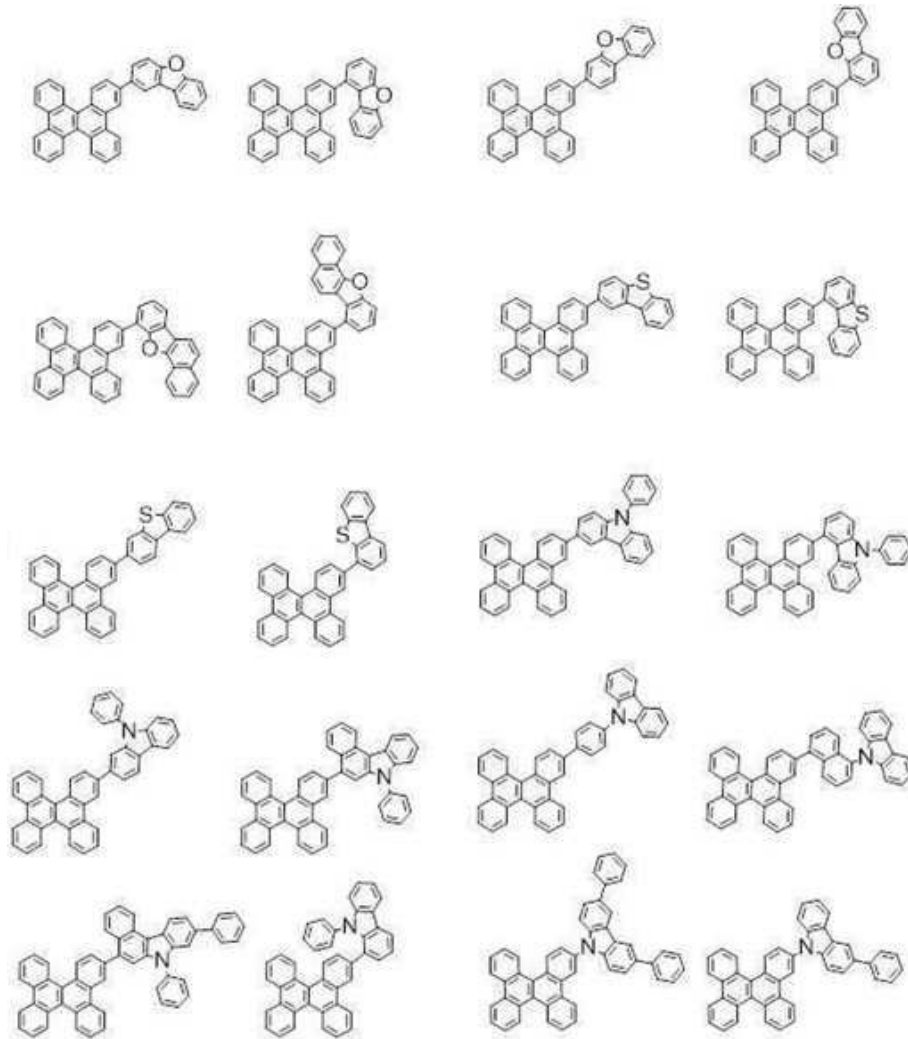
[0441] 상기 적어도 1개 이외(즉, 상기 구조를 갖는 1개의 기가 치환된 위치 이외)는 수소, 페닐, 비페닐릴, 나프틸, 안트라세닐, 메틸, 에틸, 프로필, 또는, 부틸이고, 이들에 있어서의 적어도 1개의 수소는, 페닐, 비페닐릴, 나프틸, 안트라세닐, 메틸, 에틸, 프로필, 혹은, 부틸로 치환되어 있어도 된다.

[0442] 또, 식(5-H) 중의 R², R³, R⁶, R⁷, R¹⁰, R¹¹, R¹⁴ 및 R¹⁵로서, 상기 식(5-Ar1) 내지 식(5-Ar5)로 표시되는 구조를 갖는 1개의 기가 선택된 경우에는, 당해 구조에 있어서의 적어도 1개의 수소는 식(5-H) 중의 R¹ 내지 R¹⁶ 중 어느 하나와 결합하여 단결합을 형성하고 있어도 된다.

[0443] 호스트로서의 디벤조크리센 화합물의 더 구체적인 예로서는, 이하의 구조식으로 표시되는 화합물을 들 수 있다. 한편, 「tBu」는 t-부틸을 나타낸다.



[0444]



[0445]

[0446]

상술한 발광층용 재료(호스트 재료 및 도펀트 재료)는, 이들에 반응성 치환기가 치환한 반응성 화합물을 모노머로서 고분자화시킨 고분자 화합물, 혹은 그 고분자 가교체, 또는, 주사슬형 고분자와 상기 반응성 화합물을 반응시킨 펜던트형 고분자 화합물, 혹은 그 펜던트형 고분자 가교체로서도, 발광층용 재료에 사용할 수 있다. 이 경우의 반응성 치환기로서는, 식(1)으로 표현되는 다환방향족 화합물에서의 설명을 인용할 수 있다.

[0447]

<어시스팅 도펀트와 이미팅 도펀트를 포함하는 발광층>

[0448]

유기 전계 발광 소자에 있어서의 발광층은, 제1성분으로서의 호스트 화합물, 제2성분으로서의 어시스팅 도펀트(화합물), 및 제3성분으로서의 이미팅 도펀트(화합물)를 포함하는 것이어도 된다. 본 발명의 다환방향족 화합물은 이미팅 도펀트로서 사용하는 것도 바람직하다. 어시스팅 도펀트(화합물)로서는 열활성형 지연 형광체를 사용할 수 있다.

[0449]

이하의 설명에서는, 열활성형 지연 형광체를 어시스팅 도펀트로서 사용하는 유기 전계 발광 소자를, 「TAF소자」(TADF Assisting Fluorescence 소자)이라 할 경우가 있다. TAF소자에 있어서의 「호스트 화합물」이란, 형광 스펙트럼의 피크 단파장측의 어깨로부터 구해지는 최저 여기 일중항 에너지 준위가, 제2성분으로서의 열활성형 지연 형광체, 및, 제3성분으로서의 이미팅 도펀트보다도 높은 화합물을 의미한다.

[0450]

「열활성형 지연 형광체」란, 열 에너지를 흡수해서 최저 여기 삼중항 상태에서부터 최저 여기 일중항 상태로의 역항간 교차를 일으키고, 그 최저 여기 일중항 상태에서부터 방사 실향하여 지연 형광을 방사할 수 있는 화합물을 의미한다. 단, 「열활성형 지연 형광」이란, 최저 여기 삼중항 상태에서부터 최저 여기 일중항 상태로의 여기 과정에서 고차 삼중항을 경과하는 것도 포함한다. 예를 들면, Durham 대학 Monkman들에 의한 논문(NATURE COMMUNICATIONS, 7:13680, DOI:10.1038/ncomms13680), 산업기술종합연구소 호소가이들에 의한 논문(Hosokai et al., Sci. Adv. 2017;3: e1603282), 교토대학 사토들에 의한 논문(Scientific Reports, 7:4820, DOI:10.1038/s41598-017-05007-7) 및, 마찬가지로 교토대학 사토들에 의한 학회발표(일본화학회 제98차 연회, 발표 번호:2I4-15, DABNA를 발광분자로서 사용한 유기전계발광에 있어서의 고효율발광의 기구, 교토대학 대학원

공학 연구과)등을 들 수 있다. 본 발명에서는, 대상화합물을 포함하는 샘플에 대해서, 300K로 형광수명을 측정했을 때, 느린 형광성분이 관측된 것을 가지고 해당 대상화합물이 「열활성형 지연 형광체」라고 판정하는 것으로 한다. 여기에서, 느린 형광성분이란, 형광수명이 0.1 μ sec이상의 것을 말한다. 형광수명의 측정은, 예를 들면 형광수명측정 장치(하마마쯔포토닉스사제, C11367-01)을 사용해서 행할 수 있다.

[0451] 본 발명의 다환방향족 화합물은, 이미팅 도펀트로서 기능시킬 수 있고, 「열활성형 지연 형광체」는, 본 발명의 다환방향족 화합물 발광을 어시스트하는 어시스팅 도펀트로서 기능시킬 수 있다.

[0452] 도 2에 일반적인 형광도펀트를 이미팅 도펀트(ED)에 사용한 TAF 소자의 발광층의 에너지 준위도를 나타낸다. 도면 중, 호스트의 기저 상태의 에너지 준위를 E(1, G), 호스트의 형광 스펙트럼의 단파장 측의 어깨로부터 구해지는 최저 여기 일중항 에너지 준위를 E(1, S, Sh), 호스트의 인광 스펙트럼의 단파장 측의 어깨로부터 구해지는 최저 여기 삼중항 에너지 준위를 E(1, T, Sh), 제2 성분인 어시스팅 도펀트의 기저 상태의 에너지 준위를 E(2, G), 제2 성분인 어시스팅 도펀트의 형광 스펙트럼의 단파장 측의 어깨로부터 구해지는 최저 여기 일중항 에너지 준위를 E(2, S, Sh), 제2 성분인 어시스팅 도펀트의 인광 스펙트럼의 단파장 측의 어깨로부터 구해지는 최저 여기 삼중항 에너지 준위를 E(2, T, Sh), 제3 성분인 이미팅 도펀트의 기저 상태의 에너지 준위를 E(3, G), 제3 성분인 이미팅 도펀트의 형광 스펙트럼의 단파장 측의 어깨로부터 구해지는 최저 여기 일중항 에너지 준위를 E(3, S, Sh), 제3 성분인 이미팅 도펀트의 인광 스펙트럼의 단파장 측의 어깨로부터 구해지는 최저 여기 삼중항 에너지 준위를 E(3, T, Sh), 정공을 ht, 전자를 e-, 형광 공명 에너지 이동을 FRET(Fluorescence Resonance Energy Transfer)로 한다. TAF 소자에 있어서, 일반적인 형광 도펀트를 이미팅 도펀트(ED)로서 사용한 경우, 어시스팅 도펀트에서 업컨버전된 에너지는 이미팅 도펀트의 최저 여기 일중항 에너지 준위 E(3, S, Sh)로 이동하여 발광한다. 그러나, 어시스팅 도펀트 상의 일부의 최저 여기 삼중항 에너지 준위 E(2, T, Sh)가 이미팅 도펀트의 최저 여기 삼중항 에너지 준위 E(3, T, Sh)로 이동하거나, 이미팅 도펀트 상에서 최저 여기 일중항 에너지 준위 E(3, S, Sh)로부터 최저 여기 삼중항 에너지 준위 E(3, T, Sh)로의 향간 교차가 일어나고, 계속하여 기저 상태 E(3, G)로 열적(熱的)으로 실활한다. 이 경로에 의해 일부 에너지는 발광에 이용되지 않아, 에너지 낭비가 생긴다.

[0453] 이에 대하여, 본 양태의 유기 전계 발광 소자에서는, 어시스팅 도펀트로부터 이미팅 도펀트로 이동한 에너지를 효율적으로 발광에 이용할 수 있고, 이에 따라 높은 발광효율을 실현할 수 있다. 이는, 이하의 발광 메커니즘에 의한 것으로 추측된다.

[0454] 본 양태의 유기 전계 발광 소자에서의 바람직한 에너지 관계를 도 3에 나타낸다. 본 양태의 유기 전계 발광 소자에 있어서는, 이미팅 도펀트로서의, 붕소 원자를 가지는 화합물이 높은 최저 여기 삼중항 에너지 준위 E(3, T, Sh)를 가진다. 이 때문에, 어시스팅 도펀트에서 업컨버전된 최저 여기 일중항 에너지가, 비록, 이미팅 도펀트에서 최저 여기 삼중항 에너지 준위 E(3, T, Sh)로 향간 교차한 경우에도, 이미팅 도펀트 상에서 업컨버전되거나, 어시스팅 도펀트(열활성화형 지연 형광체) 상의 최저 여기 삼중항 에너지 준위 E(2, T, Sh)로 회수된다. 따라서, 생성된 여기 에너지를 낭비없이 발광에 사용할 수 있다. 또한, 업컨버전 및 발광의 기능을 각각이 양호하게 할 수 있는 2종의 분자로 나누는 것에 의해, 높은 에너지의 체류 시간이 감소하고, 화합물체의 부담이 감소하는 것으로 예상된다.

[0455] 본 양태에 있어서, 호스트 화합물로서는, 공지의 것을 사용할 수 있고, 예를 들면 카르바졸환 및 퓨란 환의 적어도 일방을 가지는 화합물을 들 수 있고, 그 중에서도, 퓨라닐 및 카르바졸릴의 적어도 일방과, 아릴렌 및 헥테로 아릴렌의 적어도 일방이 결합한 화합물을 사용하는 것이 바람직하다. 구체예로서, mCP나 mCBP 등을 들 수 있다.

[0456] 호스트 화합물의 인광 스펙트럼의 피크 단파장측의 어깨로부터 구해지는 최저 여기 삼중항 에너지 준위 E(1, T, Sh)는, 발광층내에서의 TADF의 발생을 저해하지 않고 촉진시키는 관점에서, 발광층내에 있어서 가장 높은 최저 여기 삼중항 에너지 준위를 가지는 이미팅 도펀트 또는 어시스팅 도펀트의 최저 여기 삼중항 에너지 준위 E(2, T, Sh), E(3, T, Sh)에 비교해서 높은 쪽이 바람직하고, 구체적으로는, 호스트 화합물의 최저 여기 삼중항 에너지 준위 E(1, T, Sh)는, E(2, T, Sh), E(3, T, Sh)에 비해, 0.01eV 이상이 바람직하고, 0.03eV 이상이 보다 바람직하고, 0.1eV 이상이 더욱 바람직하다. 또한, 호스트 화합물에 TADF활성인 화합물을 사용해도 좋다.

[0457] 호스트 화합물에는, 예를 들면, 상기 식(H1), (H2) 및 (H3)중 어느 하나로 표시되는 화합물을 사용할 수 있다.

[0458] <열활성형 지연 형광체(어시스팅 도펀트)>

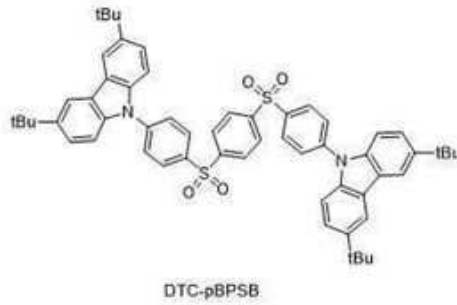
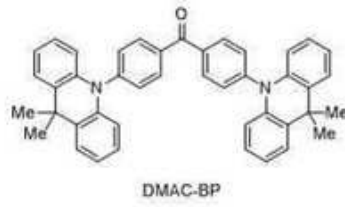
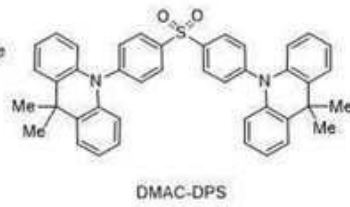
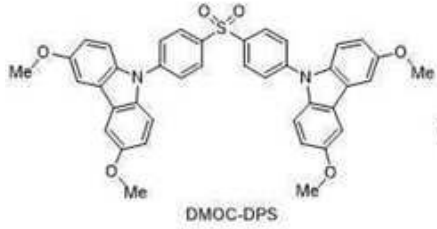
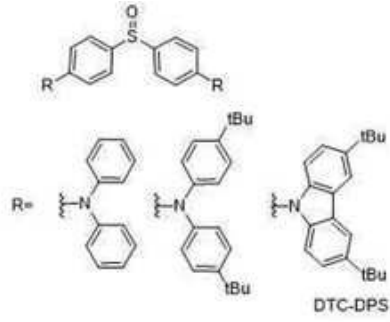
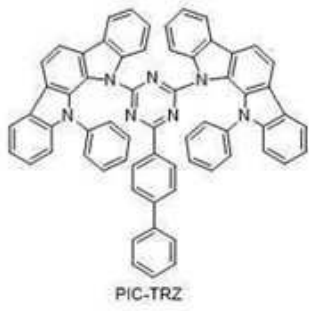
[0459] TAF소자에서 사용되는 열활성화형 지연 형광체(TADF 화합물)는, 도너로 불리우는 전자 공여성의 치환기와 역셉

터로 불리우는 전자 수용성의 치환기를 사용하여 분자 내의 HOMO(Highest Occupied Molecular Orbital)와 LUMO(Lowest Unoccupied Molecular Orbital)를 국재화(局在化)시켜서, 효율적인 역항간 교차(reverse intersystem crossing)가 일어나게 디자인된, 도너-억셉터형 열활성화형 지연 형광체(D-A형 TADF 화합물)인 것이 바람직하다. 여기서, 본 명세서 중에 있어서 「전자 공여성의 치환기」(도너)란, 열활성화형 지연 형광체 분자 중에서 LUMO레도가 국재하는 치환기 및 부분 구조를 의미하고, 「전자 수용성의 치환기」(억셉터)는, 열활성화형 지연 형광체 분자 중에서 HOMO레도가 국재하는 치환기 및 부분 구조를 의미하는 것으로 한다.

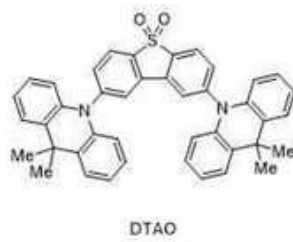
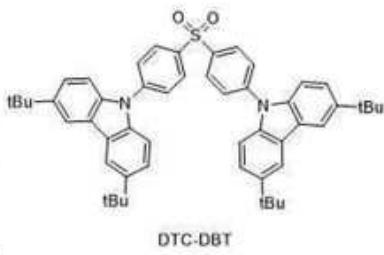
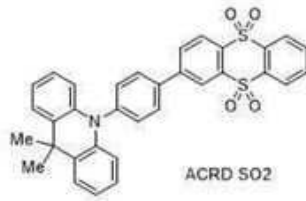
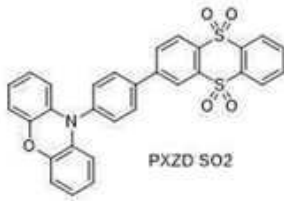
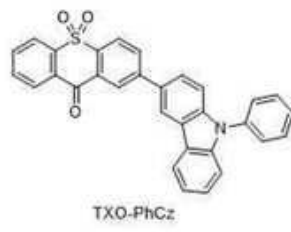
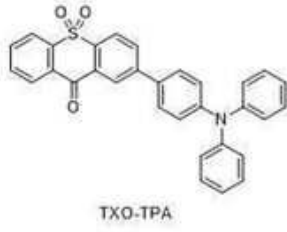
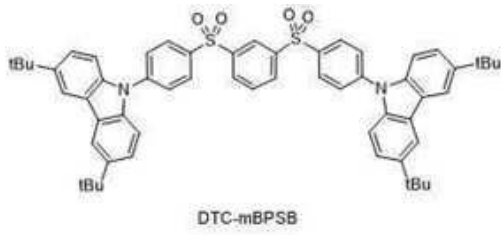
[0460] 일반적으로, 도너나 억셉터를 사용한 열활성화형 지연 형광체는, 구조에 기인하여 스핀 궤도 결합(SOC: Spin Orbit Coupling)이 크고, 또한, HOMO와 LUMO의 교환 상호 작용이 작고 $\Delta E(ST)$ 가 작으므로, 매우 빠른 역항간 교차 속도가 얻어진다. 한편, 도너나 억셉터를 사용한 열활성화형 지연 형광체는, 여기 상태에서의 구조 완화가 커지고(어떤 분자에 있어서는, 기저 상태와 여기 상태에서는 안정 구조가 상이하므로, 외부자극에 의해 기저 상태에서부터 여기 상태로의 변환이 일어나면, 그 후, 여기 상태에서의 안정 구조에 구조가 변화된다), 폭이 넓은 발광 스펙트럼을 제공하므로, 발광 재료로서 사용하면 색순도를 저하시킬 가능성이 있다.

[0461] TAF소자의 열활성화형 지연 형광체로서, 예를 들면, 도너 및 억셉터가 직접 또는 스페이서를 통하여 결합되어 있는 화합물을 사용할 수 있다. 본 발명의 열활성화형 지연 형광체에 사용되는 전자 공여성기(도너성 구조) 및 전자 수용성기(억셉터성의 구조)로서는, 예를 들면, Chemistry of Materials, 2017, 29, 1946-1963에 기재된 구조를 사용할 수 있다. 도너성의 구조로서는, 카르바졸, 디메틸카르바졸, 디-tert-부틸카르바졸, 디메톡시카르바졸, 테트라메틸카르바졸, 벤조플루오로카르바졸, 벤조티에노카르바졸, 페닐디하이드로인돌로카르바졸, 페닐비카르바졸, 비카르바졸, 다카르바졸, 디페닐카르바졸릴아민, 테트라페닐카르바졸릴디아민, 페녹사진, 디하이드로페나진, 페노티아진, 디메틸디하이드로아크리딘, 디페닐아민, 비스(tert-부틸페닐)아민, N1-(4-(디페닐 아미노)페닐)-N4,N4-디페닐벤젠-1,4-디아민, 디메틸테트라페닐디하이드로아크리딘디아민, 테트라메틸-디하이드로인덴노아크리딘 및 디페닐디하이드로디벤조아자실린 등을 예로 들 수 있다. 억셉터성의 구조로서는, 술폰닐디벤젠, 벤조페논, 페닐렌비스(페닐메탄논), 벤조니트릴, 이소니코티노니트릴, 프탈로니트릴, 이소프탈로니트릴, 파라프탈로니트릴, 벤젠트리카르보니트릴, 트리아졸, 옥사졸, 티아디아졸, 벤조티아졸, 벤조비스(티아졸), 벤즈옥사졸, 벤조비스(옥사졸), 퀴놀린, 벤즈이미다졸, 디벤조퀴놀살린, 헵타아자페날렌, 티옥산톤디옥시드, 디메틸안트라세논, 안트라센디온, 5H-시클로펜타[1,2-b:5,4-b']디피리딘, 플루오렌디카르보니트릴, 트리스 페닐트리아진, 피라진디카르보니트릴, 피리미딘, 페닐피리미딘, 메틸피리미딘, 피리딘디카르보니트릴, 디벤조퀴놀살린디카르보니트릴, 비스(페닐술폰)벤젠, 디메틸티옥산텐디옥시드, 티안트렌테트라옥시드 및 트리스(디메틸페닐)보란을 예로 들 수 있다. 특히, TAF소자에 있어서의 열활성화형 지연 형광을 가지는 화합물은, 부분 구조로서, 카르바졸, 페녹사진, 아크리딘, 트리아진, 피리미딘, 피라진, 티옥산텐, 벤조니트릴, 프탈로니트릴, 이소프탈로니트릴, 디페닐술폰, 트리아졸, 옥사디아졸, 티아디아졸 및 벤조페논으로부터 선택되는 적어도 하나를 가지는 화합물인 것이 바람직하다.

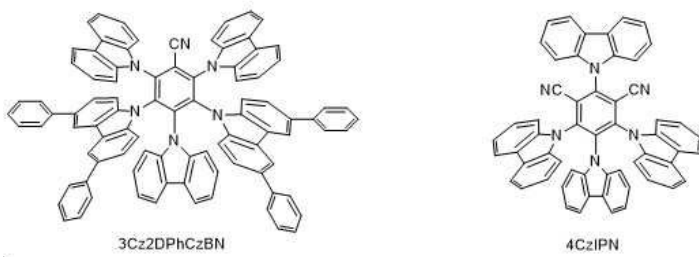
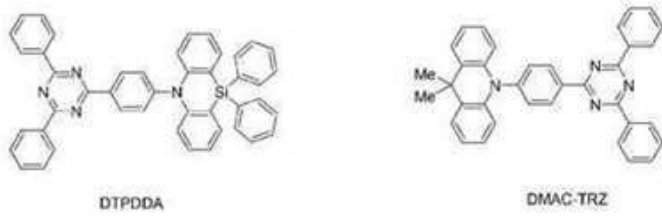
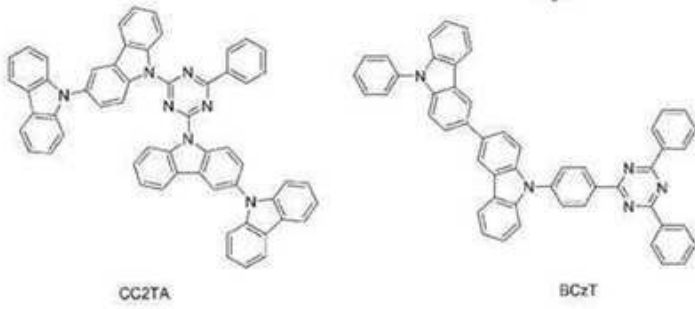
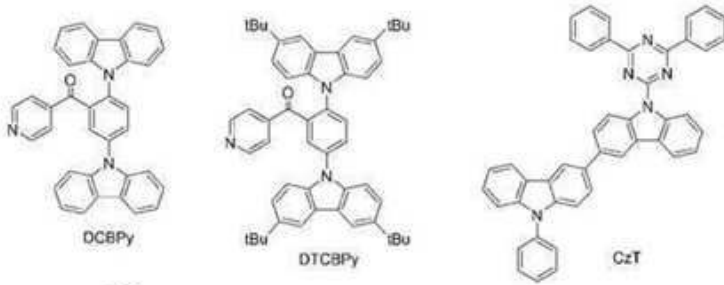
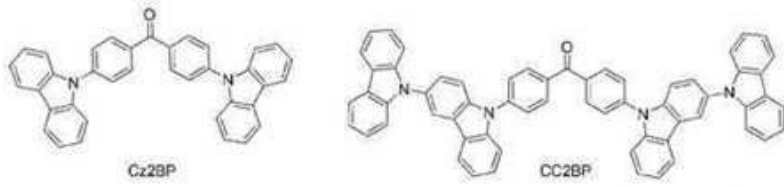
[0462] TAF소자에 있어서의 발광층의 제2 성분으로서 사용하는 화합물은, 열활성화형 지연 형광체로서, 그 발광 스펙트럼이 이미팅 도펀트의 흡수 피크와 적어도 일부 중첩되는 화합물인 것이 바람직하다. 이하에 있어서, TAF소자에 있어서의 발광층의 제2 성분(열활성화형 지연 형광체)으로서 사용할 수 있는 화합물을 예시한다. 다만, TAF 소자에 있어서 열활성화형 지연 형광체로서 사용할 수 있는 화합물은, 이하의 예시 화합물에 의해 한정적으로 해석되지 않는다. 하기 식에 있어서, Me는 메틸을 나타내고, t-Bu는 tert-부틸을 나타내고, 파선은 결합 위치를 나타낸다.



[0463]

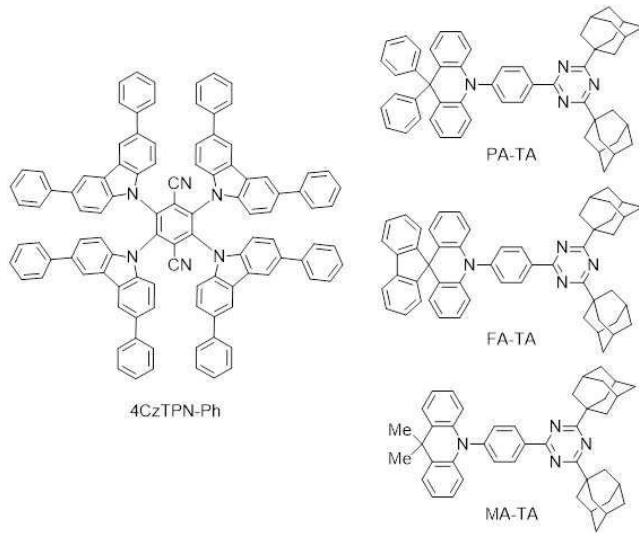


[0464]



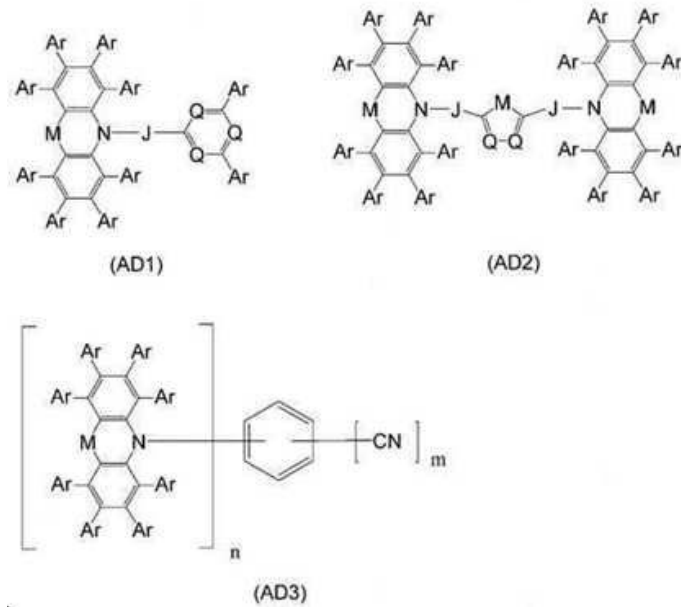
[0465]

[0466]



[0467]

[0468] 나아가, 열활성형 지연 형광체로서, 하기 식(AD1), (AD2) 및(AD3)중 어느 하나 으로 표현되는 화합물도 사용할 수 있다.



[0469]

[0470] 상기 식(AD1), 식(AD2) 및 식(AD3) 중,

[0471]

M은, 각각 독립적으로, 단결합, -O-, >N-Ar 또는 >CAr₂이며, 형성하는 부분 구조의 HOMO의 깊이 및 최저 여기 일중항 에너지 준위 및 최저 여기 삼중항 에너지 준위의 높이의 관점에서, 바람직하게는, 단결합, -O- 또는 >N-Ar이다. J는 도너성의 부분 구조와 억셉터성의 부분 구조를 나누는 스페이서 구조이며, 각각 독립적으로, 탄소 수 6~18의 아릴렌이며, 도너성의 부분 구조와 억셉터성의 부분 구조로부터 스며나오는 공역의 크기의 관점에서, 탄소수 6~12의 아릴렌이 바람직하다. 보다 구체적으로는, 페닐렌, 메틸페닐렌 및 디메틸페닐렌을 예로 들 수 있다. Q는, 각각 독립적으로, =C(-H)- 또는 =N-이며, 형성하는 부분 구조의 LUMO의 얇기 및 최저 여기 일중항 에너지 준위 및 최저 여기 삼중항 에너지 준위의 높이의 관점에서, 바람직하게는, =N-이다. Ar은, 각각 독립적으로, 수소, 탄소수 6~24의 아릴, 탄소수 2~24의 헤테로아릴, 탄소수 1~12의 알킬 또는 탄소수 3~18의 시클로알킬이며, 형성하는 부분 구조의 HOMO의 깊이 및 최저 여기 일중항 에너지 준위 및 최저 여기 삼중항 에너지 준위의 높이의 관점에서, 바람직하게는, 수소, 탄소수 6~12의 아릴, 탄소수 2~14의 헤테로아릴, 탄소수 1~4의 알킬 또는 탄소수 6~10의 시클로알킬이며, 보다 바람직하게는, 수소, 페닐, 톨릴, 크실릴, 메실릴, 비페닐, 피리딜, 비피리딜, 트리아질, 카르바졸릴, 디메틸카르바졸릴, 디-tert-부틸카르바졸릴, 벤즈이미다졸 또는 페닐벤즈이미다졸이며, 더욱 바람직하게는, 수소, 페닐 또는 카르바졸릴이다. m은, 1 또는 2이다. n은, (6-m)이하의 정수이며, 입체 장애의 관점에서, 바람직하게는, 4~(6-m)의 정수이다. 또한, 상기 각 식으로 표시

되는 화합물에서의 적어도 1개의 수소는, 할로젠 또는 중수소로 치환되어 있어도 된다.

[0472] 본 양태의 발광층의 제2 성분으로서 사용하는 화합물은, 보다 구체적으로 언급하면, 4CzBN, 4CzBN-Ph, 5CzBN, 3Cz2DPhCzBN, 4CzIPN, 2PXZ-TAZ, Cz-TRZ3, BDPC-TPA, MA-TA, PA-TA, FA-TA, PXZ-TRZ, DMAC-TRZ, BCzT, DCzTrz, DDCzTRz, spiroAC-TRZ, Ac-HPM, Ac-PPM, Ac-MPM, TCzTrz, TmCzTrz 및 DCzmCzTrz인 것이 바람직하다.

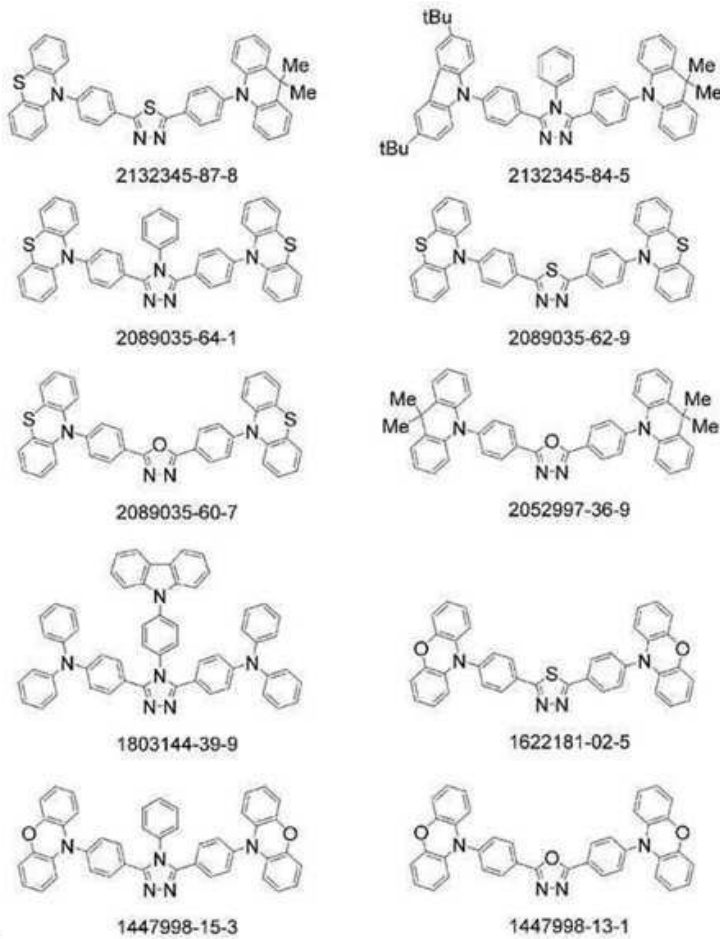
[0473] 본 양태의 발광층의 제2 성분으로서 사용하는 화합물은, 1개의 도너 D와 1개의 억셉터 A가 직접 결합 또는 연결기를 통하여 결합되어 있는 D-A로 표시되는 도너 억셉터형 TADF 화합물이라도 되지만, 1개의 억셉터 A에 복수의 도너 D가 직접 결합 또는 연결기를 통하여 결합되어 있는 하기 식(DAD1)으로 표시되는 구조를 가지는 것이, 유기전계 발광소자의 특성이 보다 우수하게 되므로 바람직하다.

[0474] $(D^1-L^1)_n-A^1$ (DAD1)

[0475] 식(DAD1)에는, 하기 식(DAD2)으로 표시되는 화합물이 포함된다.

[0476] $D^2-L^2-A^2-L^3-D^3$ (DAD2)

[0477] 식(DAD1) 및 식(DAD2)에 있어서, D^1 , D^2 및 D^3 는 각각 독립적으로 도너성 기를 나타낸다. 도너성 기로서는, 상기한 도너성의 구조를 채용할 수 있다. A^1 및 A^2 는 각각 독립적으로 억셉터성 기를 나타낸다. 억셉터성 기로서는, 상기한 억셉터성의 구조를 채용할 수 있다. L^1 , L^2 및 L^3 는 각각 독립적으로 단결합 또는 공역연결기를 나타낸다. 공역연결기는 도너성 기와 억셉터성 기를 나누는 스페이서 구조이며, 탄소수 6~18의 아릴렌인 것이 바람직하고, 탄소수 6~12의 아릴렌이 보다 바람직하다. L^1 , L^2 및 L^3 은, 각각 독립적으로 페닐렌, 메틸페닐렌 또는 디메틸페닐렌인 것이 더욱 바람직하다. 식(DAD1)에서의 n은 2 이상이며, A^1 이 치환할 수 있는 최대수이하의 정수를 나타낸다. n은, 예를 들면, 2~10의 범위 내에서 선택하거나, 2~6의 범위 내에서 선택해도 된다. n이 2일 때, 식(DAD2)으로 표시되는 화합물이 된다. n개의 D^1 은 동일해도 되고 상이해도 되며, n개의 L^1 은 동일해도 되고 상이해도 된다. 식(DAD1) 및 식(DAD2)으로 표시되는 화합물의 바람직한 구체예로서, 2PXZ-TAZ나 하기 화합물을 들 수 있지만, 본 발명에서 사용할 수 있는 제2 성분은 이들 화합물로 한정되지 않는다.



[0478]

[0479]

본 양태에 있어서, 발광층은 단일층이라도 되고 복수층으로 이루어져 있어도 어느 쪽이라도 된다. 또한, 호스트 화합물, 열활성화형 지연 형광체 및 붕소 원자를 가지는 화합물은, 동일 층 내에 포함되어 있어도 되고, 복수 층에 적어도 1성분씩 포함되어 있어도 된다. 발광층이 포함하는 호스트 화합물, 열활성화형 지연 형광체 및 본 발명의 다환방향족 화합물은, 각각 1종류라도 되고, 복수의 조합이라도, 어느 것이라도 된다. 어시스팅 도펀트 및 이미팅 도펀트는, 매트릭스로서의 호스트 화합물 중에, 전체적으로 포함되어 있어도 되고, 부분적으로 포함되어 있어도 된다. 어시스팅 도펀트 및 이미팅 도펀트가 도프된 발광층은, 호스트 화합물과 어시스팅 도펀트와 이미팅 도펀트를 3원공중착법에 의해 성막하는 방법, 호스트 화합물과 어시스팅 도펀트와 이미팅 도펀트를 미리 혼합하고 나서 동시에 증착하는 방법, 호스트 화합물과 어시스팅 도펀트와 이미팅 도펀트를 유기용매에 용해하여 조제한 발광층형성용 조성물(도료)을 도포하는, 습식성막법 등에 의해 형성할 수 있다.

[0480]

호스트 화합물의 사용량은 호스트 화합물의 종류에 따라 상이하며, 그 호스트 화합물의 특성에 맞추어서 정하면 된다. 호스트 화합물의 사용량의 기준은, 바람직하게는 발광층용 재료 전체의 40~99.999 질량%이며, 보다 바람직하게는 50~99.99 질량%이며, 더욱 바람직하게는 60~99.9 질량%이다. 상기한 범위이면, 예를 들면, 효율적인 전하의 수송과, 도펀트로의 효율적인 에너지의 이동의 점에서 바람직하다.

[0481]

어시스팅 도펀트(열활성화형 지연 형광체)의 사용량은 어시스팅 도펀트의 종류에 따라 상이하며, 그 어시스팅 도펀트의 특성에 맞추어서 정하면 된다. 어시스팅 도펀트의 사용량의 기준은, 바람직하게는 발광층용 재료 전체의 1~60 질량%이며, 보다 바람직하게는 2~50 질량%이며, 더욱 바람직하게는 5~30 질량%이다. 상기한 범위이면, 예를 들면, 효율적으로 에너지를 이미팅 도펀트에 이동시키는 점에서 바람직하다.

[0482]

이미팅 도펀트(붕소 원자를 가지는 화합물)의 사용량은 이미팅 도펀트의 종류에 따라 상이하며, 그 이미팅 도펀트의 특성에 맞추어서 정하면 된다. 이미팅 도펀트의 사용량의 기준은, 바람직하게는 발광층용 재료 전체의 0.001~30 질량%이며, 보다 바람직하게는 0.01~20 질량%이며, 더욱 바람직하게는 0.1~10 질량%이다. 상기한 범위이면, 예를 들면, 농도소광현상을 방지할 수 있는 점에서 바람직하다.

[0483]

이미팅 도펀트의 사용량은 저농도인 것이 농도소광현상을 방지할 수 있는 점에서 바람직하다. 어시스팅 도펀트의 사용량이 고농도인 것이 열활성화형 지연 형광기구의 효율의 점에서는 바람직하다. 또한, 어시스팅 도펀트의

열활성화형 지연 형광기구의 효율의 점에서는, 어시스팅 도펀트의 사용량에 비교하여 이미팅 도펀트의 사용량이 저농도인 것이 바람직하다.

- [0484] <2-1-3. 유기 전계 발광 소자에 있어서의 기관>
- [0485] 기관(101)은 유기 전계 발광 소자(100)의 지지체이며, 통상, 석영, 유리, 금속, 플라스틱 등이 사용된다. 기관(101)은 목적에 따라 판상, 필름상, 또는 시트상으로 형성되고, 예를 들면, 유리판, 금속판, 금속박, 플라스틱 필름, 플라스틱 시트 등이 사용된다. 그 중에서도 유리판 및 폴리에스테르, 폴리메타크릴레이트, 폴리카보네이트, 폴리설폰 등의 투명한 합성 수지제의 판이 바람직하다. 유리 기관인 경우에는, 소다 석회 유리나 무알칼리 유리 등이 사용되며, 또한 두께도 기계적 강도를 유지하는 데에 충분한 두께가 있으면 되므로, 예를 들면, 0.2mm 이상이면 된다. 두께의 상한값으로서는, 예를 들면, 2mm 이하, 바람직하게는 1mm 이하이다. 유리의 재질에 대해서는, 유리로부터의 용출 이온이 적은 것이 좋으므로 무알칼리 유리가 바람직하지만, SiO₂ 등의 배리어 코트를 실시한 소다 석회 유리도 시판되고 있으므로 이를 사용할 수 있다. 또한, 기관(101)에는 가스 배리어성을 높이기 위해, 적어도 편면(片面)에 치밀한 실리콘 산화막 등의 가스 배리어막을 형성해도 되고, 특히 가스 배리어성이 낮은 합성 수지제의 판, 필름 또는 시트를 기관(101)으로 사용할 경우에는 가스 배리어막을 형성하는 것이 바람직하다.
- [0486] <2-1-4. 유기 전계 발광 소자에 있어서의 양극>
- [0487] 양극(102)은 발광층(105)에 정공을 주입하는 역할을 한다. 한편, 양극(102)과 발광층(105) 사이에 정공 주입층(103) 및 정공 수송층(104) 중 적어도 하나가 설치되어 있는 경우에는, 이들을 통해 발광층(105)에 정공을 주입하게 된다.
- [0488] 양극(102)을 형성하는 재료로서는, 무기 화합물 및 유기 화합물을 들 수 있다. 무기 화합물로서는, 예를 들면, 금속(알루미늄, 금, 은, 니켈, 팔라듐, 크롬 등), 금속 산화물(인듐의 산화물, 주석의 산화물, 인듐-주석 산화물(ITO), 인듐-아연 산화물(IZO) 등), 할로젠화 금속(요오드화구리 등), 황화구리, 카본블랙, ITO 유리나 네사 유리 등을 들 수 있다. 유기 화합물로서는, 예를 들면, 폴리(3-메틸티오펜) 등의 폴리티오펜, 폴리피롤, 폴리아닐린 등의 도전성 폴리머 등을 들 수 있다. 그 밖에, 유기 전계 발광 소자의 양극으로서 사용되고 있는 물질 중에서 적절히 선택하여 사용할 수 있다.
- [0489] 투명 전극의 저항은 발광 소자의 발광에 충분한 전류를 공급할 수 있으면 되므로 한정되지 않지만, 발광 소자의 소비 전력의 관점에서는 저저항인 것이 바람직하다. 예를 들면, 300Ω/□ 이하의 ITO 기관이면 소자 전극으로서 기능하지만, 현재는 10Ω/□ 정도의 기관의 공급도 가능하게 되어 있으므로, 예를 들면 100~5Ω/□, 바람직하게는 50~5Ω/□의 저저항품을 사용하는 것이 특히 바람직하다. ITO의 두께는 저항값에 맞춰서 임의로 선택할 수 있지만, 통상 50~300nm의 사이에서 사용되는 경우가 많다.
- [0490] <2-1-5. 유기 전계 발광 소자에 있어서의 정공주입층, 정공수송층>
- [0491] 정공 주입층(103)은 양극(102)으로부터 이동해오는 정공을, 효율적으로 발광층(105) 내 또는 정공 수송층(104) 내로 주입하는 역할을 한다. 정공 수송층(104)은 양극(102)으로부터 주입된 정공 또는 양극(102)으로부터 정공 주입층(103)을 통해 주입된 정공을, 효율적으로 발광층(105)으로 수송하는 역할을 한다. 정공 주입층(103) 및 정공 수송층(104)은, 각각 정공 주입·수송 재료의 1종 또는 2종 이상을 적층, 혼합하거나 정공 주입·수송 재료와 고분자 결합체의 혼합물에 의해 형성된다. 또한, 정공 주입·수송 재료에 염화철(III)과 같은 무기염을 첨가하여 층을 형성해도 된다.
- [0492] 정공 주입·수송성 물질로서는 전계가 가해진 전극 사이에서 정극(正極)으로부터의 정공을 효율적으로 주입·수송하는 것이 필요하여, 정공 주입 효율이 높고, 주입된 정공을 효율적으로 수송하는 것이 바람직하다. 이를 위해서는 이온화 포텐셜이 작고, 또한 정공 이동도가 크고, 나아가 안정성이 우수하며, 트랩이 되는 불순물이 제조 및 사용시에 발생하기 어려운 물질인 것이 바람직하다.
- [0493] 정공 주입층(103) 및 정공 수송층(104)을 형성하는 재료로서는, 광도전 재료에 있어서, 정공의 전하 수송 재료로서 종래부터 관용되고 있는 화합물, p형 반도체, 유기 전계 발광 소자의 정공 주입층 및 정공 수송층에 사용되고 있는 공지의 화합물 중에서 임의의 화합물을 선택하여 사용할 수 있다. 이들의 구체에는, 카르바졸 유도체(N-페닐카르바졸, 폴리비닐카르바졸 등), 비스(N-아릴카르바졸) 또는 비스(N-알킬카르바졸) 등의 비스카르바졸 유도체, 트리아릴아민 유도체(방향족 제3급 아미노를 주쇄 또는 측쇄에 갖는 폴리머, 1,1-비스(4-디-p-톨릴아미노페닐)시클로헥산, N,N'-디페닐-N,N'-디(3-메틸페닐)-4,4'-디아미노비페닐, N,N'-디페닐-N,N'-디나프틸-

4,4'-디아미노비페닐, N,N'-디페닐-N,N'-디(3-메틸페닐)-4,4'-디페닐-1,1'-디아민, N,N'-디나프틸-N,N'-디페닐-4,4'-디페닐-1,1'-디아민, N4, N4'-디페닐-N4, N4'-비스(9-페닐-9H-카르바졸-3-일)-[1,1'-비페닐]-4,4'-디아민, N4,N4',N4',N4'-테트라[1,1'-비페닐]-4-일)-[1,1'-비페닐]-4,4'-디아민, 4,4',4'-트리스(3-메틸페닐(페닐)아미노)트리페닐아민 등의 트리페닐아민 유도체, 스타버스트 아민 유도체 등), 스틸벤 유도체, 프탈로시아닌 유도체(무금속, 구리프탈로시아닌 등), 피라졸린 유도체, 히드라존계 화합물, 벤조푸란 유도체나 티오펜 유도체, 옥사디아졸 유도체, 퀴놀살린 유도체(예를 들면, 1,4,5,8,9,12-헥사아자트리페닐렌-2,3,6,7,10,11-헥사카르보니트릴 등), 포르피린 유도체 등의 복소환 화합물, 폴리실란 등이다. 폴리머계에서는 상기 단량체를 측쇄에 갖는 폴리카보네이트나 스티렌 유도체, 폴리비닐카르바졸 및 폴리실란 등이 바람직하지만, 발광 소자의 제작에 필요한 박막을 형성하고, 양극으로부터 정공을 주입할 수 있으며, 또한 정공을 수송할 수 있는 화합물이면 특별히 한정되지 않는다.

[0494] 또한, 유기 반도체의 도전성은, 그 도핑에 의해 강한 영향을 받는 것도 알려져 있다. 이러한 유기 반도체 매트릭스 물질은 전자 공여성이 양호한 화합물 또는 전자 수용성이 양호한 화합물로 구성되어 있다. 전자 공여 물질의 도핑을 위해, 테트라시아노퀴논디메탄(TCNQ) 또는 2,3,5,6-테트라플루오로테트라시아노-1,4-벤조퀴논디메탄(F4TCNQ) 등의 강한 전자 수용체가 알려져 있다(예를 들면, 문헌 「M.Pfeiffer, A.Beyer, T.Fritz, K.Leo, Appl.Phys.Lett., 73(22), 3202-3204(1998)」 및 문헌 「J.Blochitz, M.Pheiffer, T.Fritz, K.Leo, Appl.Phys.Lett., 73(6), 729-731(1998)」을 참조). 이들은 전자 공여형 베이스 물질(정공 수송 물질)에 있어서의 전자 이동 프로세스에 의해, 이른바 정공을 생성한다. 정공의 수 및 이동도에 따라, 베이스 물질의 전도성이 상당히 크게 변화한다. 정공 수송 특성을 갖는 매트릭스 물질로서는, 예를 들면 벤지딘 유도체(TPD 등) 또는 스타버스트 아민 유도체(TDATA 등), 또는 특정 금속 프탈로시아닌(특히, 아연 프탈로시아닌(ZnPc) 등)이 알려져 있다(일본특허공개 제2005-167175호 공보). 본 발명의 다환방향족 화합물은 정공 주입층 형성용 재료 또는 정공수송층 형성용 재료로서 사용해도 된다.

[0495] <2-1-6. 유기 전계 발광 소자에 있어서의 전자저지층>

[0496] 정공주입·수송층과 발광층과의 사이에는 발광층으로부터의 전자의 확산을 막는 전자저지층을 형성해도 된다. 전자저지층의 형성에는, 상술한 식(H1), (H2) 및 (H3)중 어느 하나로 표시되는 화합물을 사용할 수 있다. 본 발명의 다환방향족 화합물은 전자저지층 형성용 재료로서 사용해도 된다.

[0497] <2-1-7. 유기 전계 발광 소자에 있어서의 전자주입층, 전자수송층>

[0498] 전자 주입층(107)은 음극(108)으로부터 이동해오는 전자를, 효율적으로 발광층(105) 내 또는 전자 수송층(106) 내로 주입하는 역할을 한다. 전자 수송층(106)은 음극(108)으로부터 주입된 전자 또는 음극(108)으로부터 전자 주입층(107)을 통해 주입된 전자를, 효율적으로 발광층(105)으로 수송하는 역할을 한다. 전자 수송층(106) 및 전자 주입층(107)은, 각각 전자 수송·주입 재료의 1종 또는 2종 이상을 적층, 혼합에 의해 형성된다.

[0499] 전자 주입·수송층이란, 음극으로부터 전자가 주입되고, 또한 전자를 수송하는 것을 담당하는 층이며, 전자 주입 효율이 높고, 주입된 전자를 효율적으로 수송하는 것이 바람직하다. 이를 위해서는 전자 친화력이 크고, 또한 전자 이동도가 크며, 나아가 안정성이 우수하고, 트랩이 되는 불순물이 제조 및 사용시에 발생하기 어려운 물질인 것이 바람직하다. 그러나, 정공과 전자의 수송 밸런스를 고려한 경우, 양극으로부터의 정공이 재결합하지 않고 음극 측으로 흐르는 것을 효율적으로 저지할 수 있는 역할을 주로 하는 경우에는 전자 수송 능력이 그다지 높지 않더라도 발광 효율을 향상시키는 효과는 전자 수송 능력이 높은 재료와 동등하게 갖는다. 따라서, 본 실시형태에서의 전자 주입·수송층은 정공의 이동을 효율적으로 저지할 수 있는 층의 기능도 포함되어도 된다.

[0500] 전자 수송층(106) 또는 전자 주입층(107)을 형성하는 재료(전자 수송 재료)로서는, 광도전 재료에 있어서 전자 전달 화합물로서 종래부터 관용되고 있는 화합물, 유기 EL 소자의 전자 주입층 및 전자 수송층에 사용되고 있는 공지의 화합물 중에서 임의로 선택하여 사용할 수 있다.

[0501] 전자 수송층 또는 전자 주입층에 사용되는 재료로서는, 탄소, 수소, 산소, 황, 규소 및 인 중에서 선택되는 1종 이상의 원자로 구성되는 방향족환 또는 복소 방향족환으로 이루어지는 화합물, 피롤 유도체 및 그 축합환 유도체 및 전자 수용성 질소를 갖는 금속 착체 중에서 선택되는 적어도 1종을 함유하는 것이 바람직하다. 구체적으로는, 나프탈렌, 안트라센 등의 축합환계 방향족환 유도체, 4,4'-비스(디페닐에테닐)비페닐로 대표되는 스티릴계 방향족환 유도체, 페리는 유도체, 쿠마린 유도체, 나프탈이미드 유도체, 안트라퀴논이나 디페노퀴논 등의 퀴논 유도체, 포스핀옥사이드 유도체, 카르바졸 유도체 및 인돌 유도체 등을 들 수 있다. 전자 수용성 질소를 갖

는 금속 착체로서는, 예를 들면, 히드록시페닐옥사졸 착체 등의 히드록시아졸 착체, 아조메틴 착체, 트로폴론 금속 착체, 플라보놀 금속 착체 및 벤조퀴놀린 금속 착체 등을 들 수 있다. 이들 재료는 단독으로도 사용되지 만, 다른 재료와 혼합하여 사용해도 상관없다.

[0502] 또한, 다른 전자 전달 화합물의 구체예로서, 피리딘 유도체, 나프탈렌 유도체, 플루오란텐 유도체, B0계 유도체, 페난트롤린 유도체, 페리논 유도체, 쿠마린 유도체, 나프탈이미드 유도체, 안트라퀴논 유도체, 디페노 퀴논 유도체, 디페닐퀴논 유도체, 페틸렌 유도체, 옥사디아졸 유도체(1,3-비스[(4-t-부틸페닐)1,3,4-옥사디아졸 릴]페닐렌 등), 티오펜 유도체, 트리아졸 유도체(N-나프틸-2,5-디페닐-1,3,4-트리아졸 등), 티아디아졸 유도체, 옥신 유도체의 금속 착체, 퀴놀리놀계 금속 착체, 퀴녹살린 유도체, 퀴녹살린 유도체의 폴리머, 벤자졸류 화합 물, 갈륨 착체, 피라졸 유도체, 퍼플루오로화 페닐렌 유도체, 트리아진 유도체, 피라진 유도체, 벤조퀴놀린 유 도체(2,2'-비스(벤조[h]퀴놀린-2-일)-9,9'-스피로비플루오렌 등), 이미다조피리딘 유도체, 보란 유도체, 벤조이 미다졸 유도체(트리스(N-페닐벤조이미다졸-2-일)벤젠 등), 벤조옥사졸 유도체, 티아졸 유도체, 벤조티아졸 유도 체, 퀴놀린 유도체, 테르피리딘 등의 올리고피리딘 유도체, 비피리딘 유도체, 테르피리딘 유도체(1,3-비스 (2,2':6'2"-테르피리딘-4'-일)벤젠 등), 나프티리딘 유도체(비스(1-나프틸)-4-(1,8-나프티리딘-2-일)페닐포스핀 옥사이드 등), 알다진 유도체, 피리미딘 유도체, 아릴니트릴 유도체, 인돌 유도체, 포스핀옥사이드 유도체, 비 스티틸 유도체, 시롤 유도체 및 아졸린 유도체 등을 들 수 있다.

[0503] 또한, 전자 수용성 질소를 갖는 금속 착체를 사용할 수도 있고, 예를 들면, 퀴놀리놀계 금속 착체나 히드록시페 니록사졸 착체 등의 히드록시아졸 착체, 아조메틴 착체, 트로폴론 금속 착체, 플라보놀 금속 착체 및 벤조퀴놀 린 금속 착체 등을 들 수 있다.

[0504] 상술한 재료는 단독으로도 사용되지만, 다른 재료와 혼합하여 사용해도 상관없다.

[0505] 상술한 재료 중에서도, 보란 유도체, 피리딘 유도체, 플루오란텐 유도체, B0계 유도체, 안트라센 유도체, 벤조 플루오렌 유도체, 포스핀옥사이드 유도체, 피리미딘 유도체, 아릴니트릴 유도체, 트리아진 유도체, 벤조이미다 졸 유도체, 페난트롤린 유도체, 및 퀴놀리놀계 금속 착체, 티아졸 유도체, 벤조티아졸 유도체, 시롤 유도체 및 아졸린 유도체가 바람직하다.

[0506] 본 발명의 다환방향족 화합물은 전자 주입층 형성용 재료 또는 전자 수송층 형성용 재료로서 사용해도 된다.

[0507] 전자수송층 또는 전자주입층에는, 전자수송층 또는 전자주입층을 형성하는 재료를 환원할 수 있는 물질을 더 포 함해도 된다. 이 환원성 물질은, 일정한 환원성을 가지는 것이면, 다양한 것이 사용되고, 예를 들면, 알칼리 금 속, 알칼리 토류 금속, 희토류 금속, 알칼리 금속의 산화물, 알칼리 금속의 할로겐화물, 알칼리 토류 금속의 산 화물, 알칼리 토류 금속의 할로겐화물, 희토류 금속의 산화물, 희토류 금속의 할로겐화물, 알칼리 금속의 유기 착체, 알칼리 토류 금속의 유기착체 및 희토류 금속의 유기착체로 이루어지는 군으로부터 선택되는 적어도 1개 를 바람직하게 사용할 수 있다.

[0508] 바람직한 환원성 물질로서는, Na(일함수 2.36eV), K(일함수 2.28eV), Rb(일함수 2.16eV) 또는 Cs(일함수 1.95eV) 등의 알칼리 금속이나, Ca(일함수 2.9eV), Sr(일함수 2.0~2.5eV) 또는 Ba(일함수 2.52eV) 등의 알칼 리 토류 금속을 예로 들 수 있고, 일함수가 2.9eV 이하인 것이 특히 바람직하다. 이들 중, 보다 바람직한 환원 성 물질은, K, Rb 또는 Cs의 알칼리 금속이며, 더욱 바람직하게는 Rb 또는 Cs이며, 가장 바람직한 것은 Cs이다. 이들 알칼리 금속은, 특히 환원능이 높고, 전자수송층 또는 전자주입층을 형성하는 재료로의 비교적 소량의 첨 가에 의해, 유기전계 발광소자에서의 발광휘도의 향상이나 장수명화가 도모된다. 또한, 일함수가 2.9eV 이하인 환원성 물질로서, 이들 2종 이상의 알칼리 금속의 조합도 바람직하고, 특히, Cs를 포함한 조합, 예를 들면, Cs 와 Na, Cs와 K, Cs와 Rb, 또는 Cs와 Na와 K의 조합이 바람직하다. Cs를 포함함으로써, 환원능을 효율적으로 발 휘할 수 있고, 전자수송층 또는 전자주입층을 형성하는 재료로의 첨가에 의해, 유기 EL 소자에서의 발광휘도의 향상이나 장수명화가 도모된다.

[0509] <2-1-8. 유기 전계 발광 소자에 있어서의 음극>

[0510] 음극(108)은, 전자주입층(107) 및 전자수송층(106)을 통하여, 발광층(105)에 전자를 주입하는 역할을 한다.

[0511] 음극(108)을 형성하는 재료로서는, 전자를 유기층에 효율적으로 주입할 수 있는 물질이라면 특별히 한정되지 않 지만, 양극(102)을 형성하는 재료와 동일한 물질을 사용할 수 있다. 그 중에서도, 주석, 인듐, 칼슘, 알루미늄, 은, 구리, 니켈, 크롬, 금, 백금, 철, 아연, 리튬, 나트륨, 칼륨, 세슘 및 마그네슘 등의 금속 또는 이들의 합 금(마그네슘-은 합금, 마그네슘-인듐 합금, 불화 리튬/알루미늄 등의 알루미늄-리튬 합금 등) 등이 바람직하다. 전자주입효율을 높여서 소자특성을 향상시키기 위해서는, 리튬, 나트륨, 칼륨, 세슘, 칼슘, 마그네슘 또는 이들

저일함수 금속을 포함하는 합금이 유효하다. 그러나, 이 저일함수 금속은 일반적으로 대기 중에서 불안정한 경우가 많다. 이 점을 개선하기 위하여, 예를 들면, 유기층에 미량의 리튬, 세슘이나 마그네슘을 도핑하여, 안정성이 높은 전극을 사용하는 방법이 알려져 있다. 그 외의 도펀트로서는, 불화 리튬, 불화 세슘, 산화 리튬 및 산화 세슘과 같은 무기염도 사용할 수 있다. 다만, 이들로 한정되지 않는다.

[0512] 또한, 전극 보호를 위해 백금, 금, 은, 구리, 철, 주석, 알루미늄 및 인듐 등의 금속, 또는 이들 금속을 사용한 합금, 그리고, 실리카, 티타니아 및 질화 규소 등의 무기물, 폴리비닐알코올, 염화 비닐, 탄화 수소계 고분자 화합물 등을 적층하는 것이, 바람직한 예로서 들 수 있다. 이들 전극의 제작법도, 저항가열, 전자 빔 증착, 스퍼터링, 이온 플레이팅 및 코팅 등, 도통(導通)할 수 있으면 특별히 한정되지 않는다.

[0513] <2-1-9. 각 층에서 사용해도 되는 결합제>

[0514] 이상의 정공 주입층, 정공 수송층, 발광층, 전자 수송층 및 전자 주입층에 사용되는 재료는 단독으로 각 층을 형성할 수 있지만, 고분자 결합제로서 폴리염화비닐, 폴리카보네이트, 폴리스티렌, 폴리(N-비닐카르바졸), 폴리메틸메타크릴레이트, 폴리부틸메타크릴레이트, 폴리에스테르, 폴리술폰, 폴리페닐렌옥사이드, 폴리부타디엔, 탄화수소 수지, 케톤 수지, 페녹시 수지, 폴리아미드, 에틸셀룰로오스, 아세트산비닐 수지, ABS 수지, 폴리우레탄 수지 등의 용제 가용성 수지나, 페놀 수지, 자일렌 수지, 석유 수지, 요소 수지, 멜라민 수지, 불포화 폴리에스테르 수지, 알키드 수지, 에폭시 수지, 실리콘 수지 등의 경화성 수지 등으로 분산시켜 사용하는 것도 가능하다.

[0515] <2-1-10. 유기 전계 발광 소자의 제작 방법>

[0516] 유기 EL 소자를 구성하는 각 층은, 각 층을 구성해야 하는 재료를 증착법, 저항 가열 증착, 전자빔 증착, 스퍼터링, 분자 적층법, 인쇄법, 잉크젯법, 스핀 코팅법 또는 캐스트법, 코팅법 등의 방법으로 박막으로 함으로써 형성할 수 있다. 이렇게 해서 형성된 각 층의 막 두께에 대해서는 특별히 한정은 없고, 재료의 성질에 따라 적절하게 설정할 수 있지만, 통상 2nm~5000nm의 범위이다. 막 두께는 통상, 수정 발진식 막 두께 측정 장치 등으로 측정할 수 있다. 증착법을 이용해서 박막화할 경우, 그 증착 조건은, 재료의 종류, 막의 목적으로 하는 결정 구조 및 회합 구조 등에 따라 다르다. 증착 조건은 일반적으로 보트 가열 온도 +50~+400℃ 진공도 10^{-6} ~ 10^{-3} Pa, 증착 속도 0.01~50nm/초, 기판 온도 -150~+300℃ 막 두께 2nm~5 μ m의 범위에서 적절하게 설정하는 것이 바람직하다.

[0517] 다음으로, 유기 EL 소자를 제작하는 방법의 일례로서, 양극/정공 주입층/정공 수송층/호스트 재료와 도펀트 재료로 이루어지는 발광층/전자 수송층/전자 주입층/음극으로 이루어지는 유기 EL 소자의 제작법에 대해서 설명한다. 적당한 기판 상에, 양극 재료의 박막을 증착법 등에 의해 형성시켜 양극을 제작한 후, 이 양극 상에 정공 주입층 및 정공 수송층의 박막을 형성시킨다. 이 위에 호스트 재료와 도펀트 재료를 공증착(codeposition)하고 박막을 형성시켜 발광층으로 하고, 이 발광층 위에 전자 수송층, 전자 주입층을 형성시키고, 또한 음극용 물질로 이루어지는 박막을 증착법 등에 의해 형성시켜 음극으로 함으로써, 원하는 유기 EL 소자가 얻어진다. 또한, 상술한 유기 EL 소자의 제작에 있어서는, 제작 순서를 반대로 해서, 음극, 전자 주입층, 전자 수송층, 발광층, 정공 수송층, 정공 주입층, 양극의 순으로 제작하는 것도 가능하다.

[0518] 이렇게 해서 얻어진 유기 EL 소자에 직류 전압을 인가할 경우에는, 양극을 +, 음극을 -의 극성으로 해서 인가하면 되고, 전압 2~40V 정도를 인가하면, 투명 또는 반투명의 전극층(양극 또는 음극 및 양방)으로부터 발광을 관측할 수 있다. 또한, 이 유기 EL 소자는, 펄스 전류나 교류 전류를 인가한 경우에도 발광한다. 또한, 인가하는 교류의 파형은 임의여도 된다.

[0519] <2-1-11. 유기 전계 발광 소자의 응용예>

[0520] 유기 EL 소자는 표시 장치 또는 조명 장치 등에도 응용할 수 있다.

[0521] 유기 EL 소자를 구비한 표시 장치 또는 조명 장치는, 유기 EL 소자와 공지의 구동 장치를 접속하는 등 공지의 방법에 의해 제조할 수 있고, 직류 구동, 펄스 구동, 교류 구동 등 공지의 구동 방법을 적절하게 이용해서 구동할 수 있다.

[0522] 표시 장치로서는, 예를 들면, 컬러 플랫 패널 디스플레이 등의 패널 디스플레이, 플렉시블 컬러 유기 전계 발광(EL) 디스플레이 등의 플렉시블 디스플레이 등을 들 수 있다(예를 들면, 일본 특허공개 평 10-335066호 공보, 일본 특허공개 2003-321546호 공보, 일본 특허공개 2004-281086호 공보 등 참조). 또한, 디스플레이의 표시 방식으로서는, 예를 들면, 매트릭스 및 세그먼트 방식 중 어느 하나 등을 들 수 있다. 또한, 매트릭스 표시와 세

그먼트 표시는 동일한 패널 안에 공존하고 있어도 된다.

[0523] 매트릭스에서는, 표시를 위한 화소가 격자상이나 모자이크상 등 2차원적으로 배치되어 있고, 화소의 집합으로 문자나 화상을 표시한다. 화소의 형상이나 사이즈는 용도에 따라 결정된다. 예를 들면, PC, 모니터, 텔레비전의 화상 및 문자 표시에는, 통상 한 변이 300 μ m 이하의 사각형의 화소가 사용되며, 또한 표시 패널과 같은 대형 디스플레이의 경우에는, 한 변이 mm 오더의 화소를 사용하게 된다. 모노크롬 표시의 경우에는, 같은 색의 화소를 배열하면 되지만, 컬러 표시의 경우에는, 빨간색, 녹색, 파란색의 화소를 나열해서 표시시킨다. 이 경우, 전형적으로는 델타 타입과 스트라이프 타입이 있다. 그리고, 이 매트릭스의 구동 방법으로서, 선순차(線順次) 구동 방법이나 액티브 매트릭스 중 어느 것이나 된다. 선순차 구동이 구조가 간단하다는 이점이 있지만, 동작 특성을 고려한 경우, 액티브 매트릭스가 우수한 경우가 있으므로, 이것도 용도에 따라 달리 사용하는 것이 필요하다.

[0524] 세그먼트 방식(타입)에서는, 미리 정해진 정보를 표시하도록 패턴을 형성하고, 정해진 영역을 발광시키게 된다. 예를 들면, 디지털 시계나 온도계에 있어서의 시각이나 온도 표시, 오디오 기기나 전자 조리기 등의 동작 상태 표시 및 자동차의 패널 표시 등을 들 수 있다.

[0525] 조명 장치로서는, 예를 들면, 실내 조명 등의 조명 장치, 액정 표시 장치의 백라이트 등을 들 수 있다(예를 들면, 일본 특허공개 2003-257621호 공보, 일본 특허공개 2003-277741호 공보, 일본 특허공개 2004-119211호 공보 등 참조). 백라이트는, 주로 자발광하지 않는 표시 장치의 시인성을 향상시킬 목적으로 사용되며, 액정 표시 장치, 시계, 오디오 장치, 자동차 패널, 표시판 및 표지 등에 사용된다. 특히, 액정 표시 장치, 그 중에서도 박형화가 과제로 되고 있는 PC 용도의 백라이트로서는, 종래 방식이 형광등이나 도광판으로 이루어져 있기 때문에 박형화가 곤란한 것을 고려하면, 유기 EL 소자를 사용한 백라이트는 박형이고, 경량인 것이 특징이 된다.

[0526] <2-2. 기타의 유기 디바이스>

[0527] 본 발명에 관한 다환방향족 화합물은, 상술한 유기 전계 발광 소자의 이외에, 유기 전계 효과 트랜지스터 또는 유기 박막 태양 전지 등의 제작에 사용할 수 있다.

[0528] 유기 전계 효과 트랜지스터는, 전압 입력에 의해 발생시킨 전계에 의해 전류를 제어하는 트랜지스터이며, 소스 전극과 드레인 전극의 이외에 게이트 전극이 설치되고 있다. 게이트 전극에 전압을 인가하면 전계가 생기고, 소스 전극과 드레인 전극간을 흐르는 전자 (혹은 홀)의 흐름을 임의로 막아 전류를 제어할 수 있는 트랜지스터다. 전계효과 트랜지스터는, 단순한 트랜지스터(바이폴라 트랜지스터)에 비해 소형화가 용이해서, 집적 회로 등을 구성하는 소자로서 자주 사용되고 있다.

[0529] 유기 전계 효과 트랜지스터의 구조는, 통상, 본 발명에 관한 다환방향족 화합물을 사용해서 형성되는 유기반도체 활성층에 접하게 소스 전극 및 드레인 전극이 설치되고, 나아가 유기반도체 활성층에 접한 절연층(유전체층)을 사이에 두고 게이트 전극이 설치되면 된다. 그 소자구조로서는, 예를 들면 이하의 구조를 들 수 있다.

[0530] (1)기관/게이트 전극/절연체층/소스 전극·드레인 전극/유기반도체활성층

[0531] (2)기관/게이트 전극/절연체층/유기반도체활성층/소스 전극·드레인 전극

[0532] (3)기관/유기반도체활성층/소스 전극·드레인 전극/절연체층/게이트 전극

[0533] (4)기관/소스 전극·드레인 전극/유기반도체활성층/절연체층/게이트 전극

[0534] 이렇게 구성된 유기 전계 효과 트랜지스터는, 액티브 매트릭스 구동 방식의 액정 모니터나 유기 발광 소자 디스플레이의 화소 구동 스위칭 소자 등으로서 적용할 수 있다.

[0535] 유기 박막 태양 전지는, 글래스 등의 투명 기판위에 ITO등의 양극, 홀 수송층, 광전변환층, 전자수송층, 음극이 적층된 구조를 가진다. 광전변환층은 양극측에 p형 반도체층을 가지고, 음극측에 n형 반도체층을 가지고 있다. 본 발명에 관한 다환방향족 화합물은, 그 물성에 따라, 홀 수송층, p형 반도체층, n형 반도체층, 전자수송층의 재료로서 사용하는 것이 가능하다. 본 발명에 관한 다환방향족 화합물은, 유기 박막 태양전지에 있어서 홀 수송 재료나 전자수송 재료로서 기능할 수 있다. 유기 박막 태양 전지는, 상기의 이외에 홀 블록층, 전자 블록층, 전자주입층, 홀 주입층, 평활화층 등을 적절하게 구비하고 있어도 된다. 유기 박막 태양 전지에는, 유기 박막 태양 전지에 사용되는 공지의 재료를 적절하게 선택해서 조합시켜서 사용할 수 있다.

[0536] <3. 파장변환 재료 >

[0537] 본 발명의 다환방향족 화합물은, 파장변환 재료로 해서 사용할 수 있다.

[0538] 현재, 색변환방식에 의한 멀티컬러화기술을, 액정 모니터나 유기EL 디스플레이, 조명 등에 응용하는 것이 왕성하게 검토되고 있다. 색변환이란, 발광체로부터의 발광을 보다 장파장의 광으로 파장 변환하는 것이며, 예를 들면, 자외광이나 청색광을 녹색광이나 적색발광으로 변환하는 것을 나타낸다. 이 색변환 기능을 가지는 파장 변환 재료를 필름화하고, 예를 들면 청색 광원과 조합함으로써, 청색 광원으로부터, 청, 녹, 적색의 3원색을 추출하는 것, 즉 백색광을 추출하는 것이 가능해진다. 이러한 청색 광원과 색변환기능을 가지는 파장변환 필름을 조합시킨 백색광원을 광원 유닛으로 하여 액정구동 부분과, 칼라 필터와 조합함으로써, 풀 컬러 디스플레이의 제작이 가능해진다. 또한, 액정구동 부분이 없으면, 그대로 백색광원으로서 사용할 수 있고, 예를 들면 LED조명 등의 백색광원으로서 응용할 수 있다. 또한, 청색 유기 EL 소자를 광원으로서, 청색광을 녹색광 및 적색광으로 변환하는 파장변환 필름과 조합하여 사용함으로써 메탈 마스크를 사용하지 않는 풀 컬러 유기EL 디스플레이의 제작이 가능해진다. 나아가, 청색 마이크로LED를 광원으로 하여, 청색광을 녹색광 및 적색광으로 변환하는 파장변환 필름과 조합시켜 사용함으로써 저비용의 풀 컬러 마이크로LED디스플레이의 제작이 가능해진다.

[0539] 본 발명의 다환방향족 화합물은, 이 파장변환 재료로서 사용할 수 있다. 본 발명의 다환방향족 화합물을 포함하는 파장변환 재료를 사용하고, 자외광이나 보다 단파장의 청색광을 생성하는 광원이나 발광소자로부터의 광을, 표시장치(유기 EL 소자를 이용한 표시장치나 액정표시장치)에서의 이용에 적합한 색순도가 높은 청색광이나 녹색광으로 변환할 수 있다. 변환되는 색의 조정은, 본 발명의 다환방향족 화합물의 치환기, 후술하는 파장변환용 조성물에서 사용하는 바인더 수지 등을 적절하게 선택하는 것에 의해 행할 수 있다. 파장변환 재료는 본 발명의 다환방향족 화합물을 포함하는 파장변환용 조성물로서 조제할 수 있다. 또한, 이 파장변환용 조성물을 사용해서 파장변환 필름을 형성해도 된다.

[0540] 파장변환용 조성물은, 본 발명의 다환방향족 화합물외에, 바인더 수지, 기타의 첨가제, 및 용매를 포함하고 있어도 된다. 바인더 수지로서는, 예를 들면 국제공개 2016/190283호의 단락 0173~0176에 기재된 것을 사용할 수 있다. 기타의 첨가제로서는, 국제공개 2016/190283호의 단락 0177~0181에 기재된 화합물을 사용할 수 있다. 용매로서는, 상기의 발광층 형성용 조성물에 포함되는 용매의 기체를 참조할 수 있다.

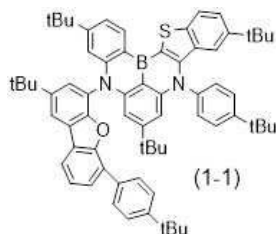
[0541] 파장변환 필름은 파장변환용 조성물의 경화에 의해 형성되는 파장변환층을 포함한다. 파장변환용 조성물로부터의 파장변환층의 제작 방법으로서의 공지의 필름 형성 방법을 참조할 수 있다. 파장변환 필름은 본 발명의 다환방향족 화합물을 포함하는 조성물로부터 형성되는 파장변환층만으로 이루어져 있어도 되고, 다른 파장변환층(예를 들면, 청색광을 녹색광이나 적색광으로 변환하는 파장변환층, 청색광이나 녹색광을 적색광으로 변환하는 파장변환층)을 포함하고 있어도 된다. 나아가 파장변환 필름은 기재층이나, 색변환층의 산소, 수분, 또는 열에 의한 열화를 막기 위한 배리어층을 포함하고 있어도 된다.

[0542] [실시예]

[0543] 이하, 실시예에 따른 본 발명을 더욱 구체적으로 설명하지만, 본 발명은 이들에 한정되는 것이 아니다. 한편, 실시예에 있어서, Me는 메틸, Et는 에틸, iPr은 이소프로필, tBu는 t-부틸이다.

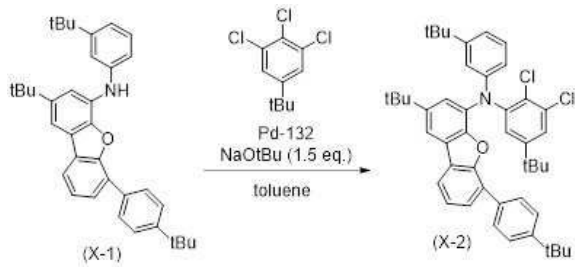
[0544] 합성예(1):

[0545] 화합물(1-1)의 합성



[0546]

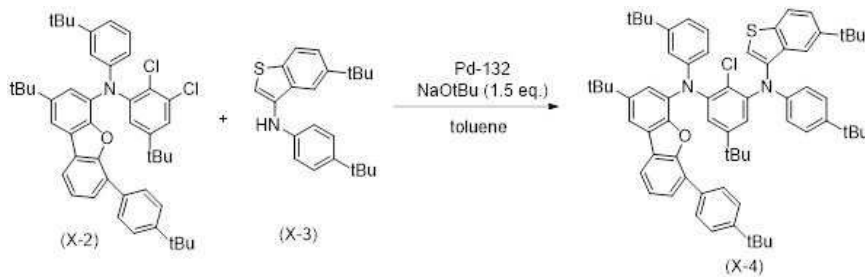
[0547] 질소분위기가, 중간체(X-1)(50.4g), 1-t-부틸-3,4,5-트리클로로벤젠(23.8g), 팔라듐 촉매로서 디클로로비스[디-t-부틸(4-디메틸아미노페닐)포스포노]팔라듐 (II)(Pd-132)(0.909g), 나트륨-t-부톡사이드(NaOtBu, 14.4g) 및 톨루엔(500ml)을 플라스크에 넣고, 120℃에서 5시간 가열했다. 반응 종료후, 반응액에 물과 초산 에틸을 가해 교반한 후, 유기층을 분리해서 물세정하였다. 그 후, 유기층을 농축하여 얻어진 조생성물을 실리카겔소프스펙트럼(용리액:헵탄)으로 정제함으로써, 중간체(X-2)를 69.0g 얻었다.



[0548]

[0549]

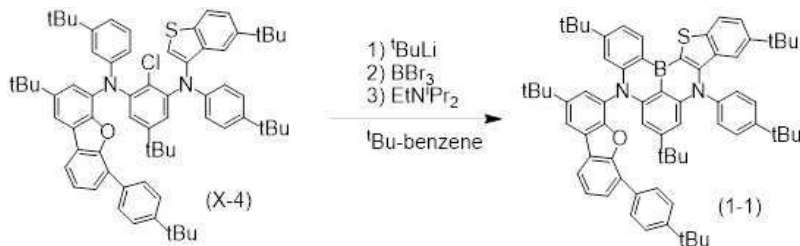
질소분위기하, 중간체(X-2)(35.2g), 중간체(X-3)(16.9g), 팔라듐 촉매로서 Pd-132(0.719g), NaOtBu(7.21g) 및 톨루엔(300ml)을 플라스크에 넣고, 120℃에서 3시간 가열했다. 반응 종료후, 반응액에 물과 초산 에틸을 가해 교반한 후, 유기층을 분리해서 물세정했다. 그 후, 유기층을 농축하여 얻어진 조생성물을 실리카겔쇼트패스컬럼(용리액: 톨루엔/헵탄=1/9(용량비))으로 정제함으로써, 중간체(X-4)를 42.2g 얻었다.



[0550]

[0551]

중간체(X-4)(10.1g) 및 tert-부틸벤젠(tBu-benzene, 100ml)이 들어간 플라스크에, 질소분위기하, 0℃에서, 1.60M의 tert-부틸리튬 용액(tBuLi, 12.5ml)을 더했다. 적하 종료후, 70℃까지 승온해서 0.5시간 교반한 후, tert-부틸벤젠보다 저비점의 성분을 감압 증류 제거하였다. -50℃까지 냉각해서 삼브롬화붕소(2.06g)를 가하고, 실온까지 승온해서 0.5시간 교반했다. 그 후, 다시 0℃까지 냉각해서 N,N-디이소프로필에틸아민(EtNiPr₂, 1.30g)을 가하고, 발열이 수습될 때까지 실온에서 교반한 후, 100℃까지 승온해서 1시간 가열 교반했다. 반응액을 실온까지 냉각하고, 얼음욕으로 차게 한 초산 나트륨 수용액, 뒤이어서 초산 에틸을 가해서 분액했다. 유기층을 농축후에, 실리카겔쇼트패스컬럼(용리액: 클로로벤젠)으로 정제했다. 얻어진 조생성물을 톨루엔으로부터 재결정시킴으로써, 화합물(1-1)을 6.90g 얻었다.



[0552]

[0553]

MS에 의해 m/z(M+H)=979.57의 목적물인 화합물(1-1)을 확인했다.

[0554]

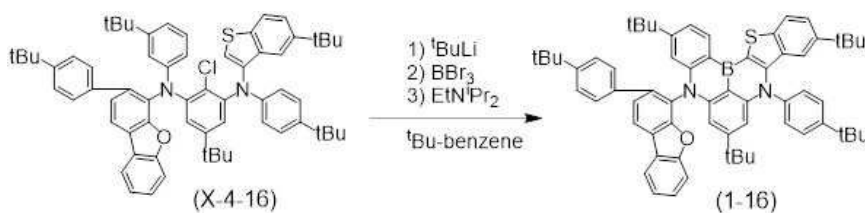
합성예(2): 화합물(1-16)의 합성

[0555]

화합물(X-4)을 화합물(X-4-16)로 변경한 것 이외에는 합성예 1과 마찬가지로 공정으로 화합물(1-16)을 얻었다.

[0556]

MS에 의해 m/z(M+H)=923.55의 목적물인 화합물(1-16)을 확인했다.



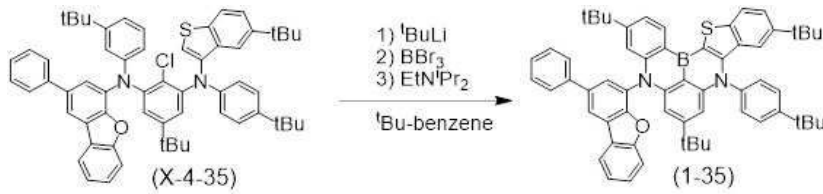
[0557]

[0558]

합성예(3): 화합물(1-35)의 합성

[0559] 화합물(X-4)을 화합물(X-4-35)로 변경한 것 이외에는 합성예 1과 마찬가지로 공정으로 화합물(1-35)을 얻었다.

[0560] MS에 의해 $m/z(M+H)=867.47$ 의 목적물인 화합물(1-35)을 확인했다.

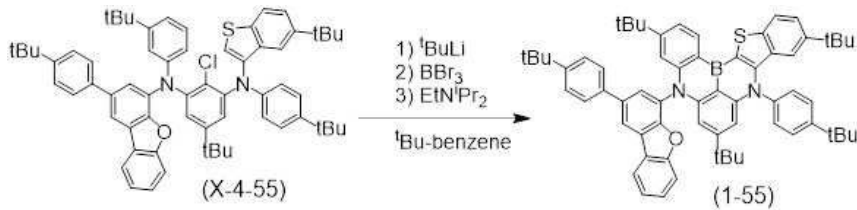


[0561]

합성예(4): 화합물(1-55)의 합성

[0563] 화합물(X-4)을 화합물(X-4-55)로 변경한 것 이외에는 합성예 1과 마찬가지로 공정으로 화합물(1-55)을 얻었다.

[0564] MS에 의해 $m/z(M+H)=923.52$ 의 목적물인 화합물(1-55)을 확인했다.

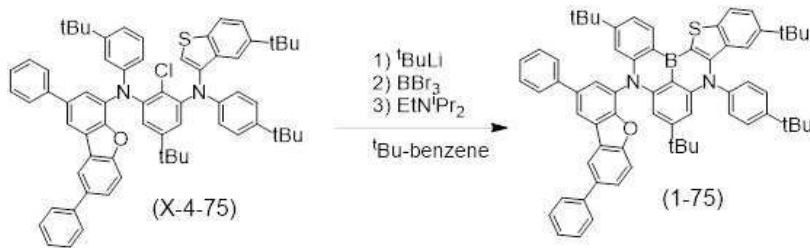


[0565]

합성예(5): 화합물(1-75)의 합성

[0567] 화합물(X-4)을 화합물(X-4-75)로 변경한 것 이외에는 합성예 1과 마찬가지로 공정으로 화합물(1-75)을 얻었다.

[0568] MS에 의해 $m/z(M+H)=943.48$ 의 목적물인 화합물(1-75)을 확인했다.

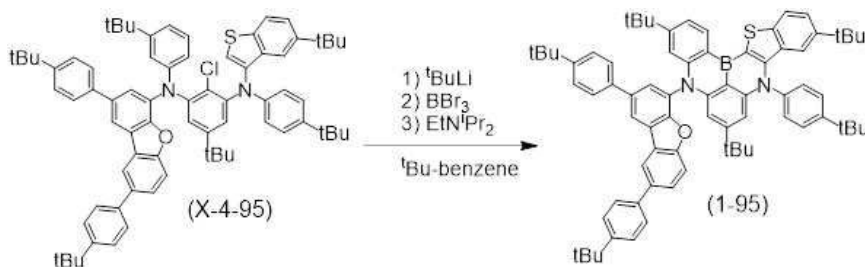


[0569]

합성예(6): 화합물(1-95)의 합성

[0571] 화합물(X-4)을 화합물(X-4-95)로 변경한 것 이외에는 합성예 1과 마찬가지로 공정으로 화합물(1-95)을 얻었다.

[0572] MS에 의해 $m/z(M+H)=1055.61$ 의 목적물인 화합물(1-95)을 확인했다.

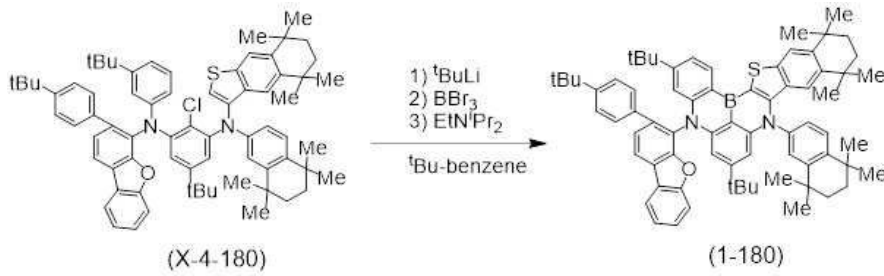


[0573]

합성예(7): 화합물(1-180)의 합성

[0575] 화합물(X-4)을 화합물(X-4-180)로 변경한 것 이외에는 합성예 1과 마찬가지로 공정으로 화합물(1-180)을 얻었다.

[0576] MS에 의해 $m/z(M+H)=1031.61$ 의 목적물인 화합물(1-180)을 확인했다.

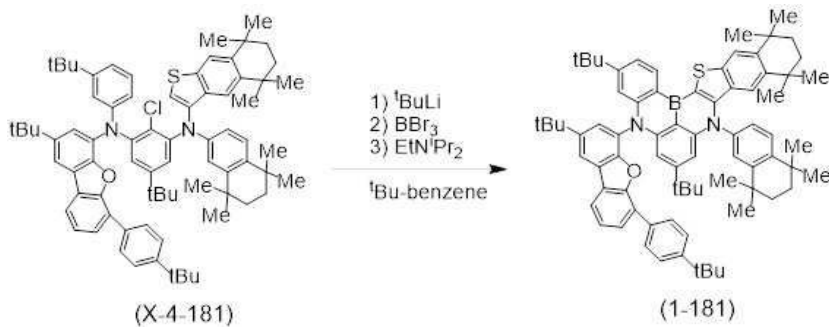


[0577]

[0578] 합성예(8): 화합물(1-181)의 합성

[0579] 화합물(X-4)을 화합물(X-4-181)로 변경한 것 이외에는 합성예 1과 마찬가지로 공정으로 화합물(1-181)을 얻었다.

[0580] MS에 의해 $m/z(M+H)=1087.67$ 의 목적물인 화합물(1-181)을 확인했다.

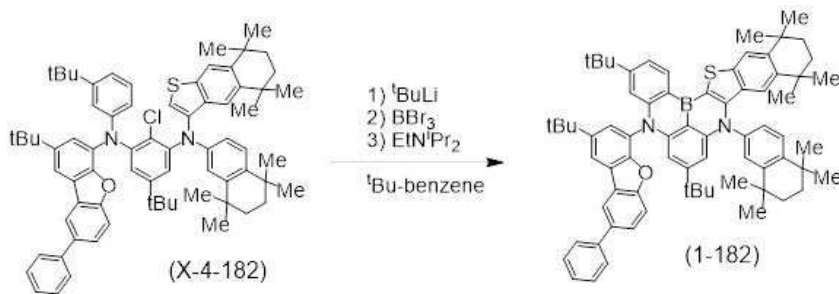


[0581]

[0582] 합성예(9): 화합물(1-182)의 합성

[0583] 화합물(X-4)을 화합물(X-4-182)로 변경한 것 이외에는 합성예 1과 마찬가지로 공정으로 화합물(1-182)을 얻었다.

[0584] MS에 의해 $m/z(M+H)=1031.61$ 의 목적물인 화합물(1-182)을 확인했다.

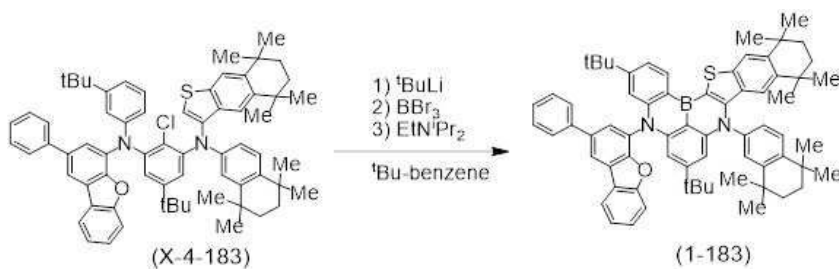


[0585]

[0586] 합성예(10): 화합물(1-183)의 합성

[0587] 화합물(X-4)을 화합물(X-4-183)로 변경한 것 이외에는 합성예 1과 마찬가지로 공정으로 화합물(1-183)을 얻었다.

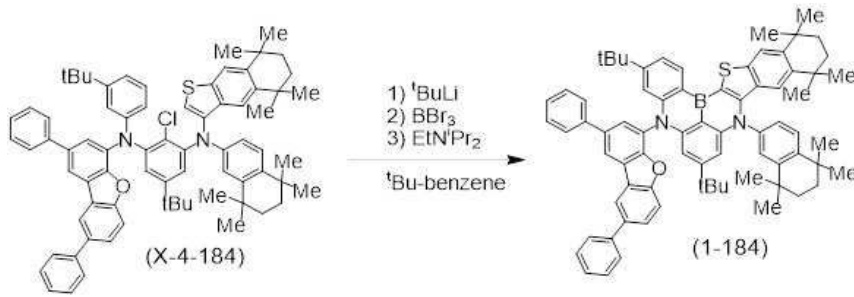
[0588] MS에 의해 $m/z(M+H)=975.55$ 의 목적물인 화합물(1-183)을 확인했다.



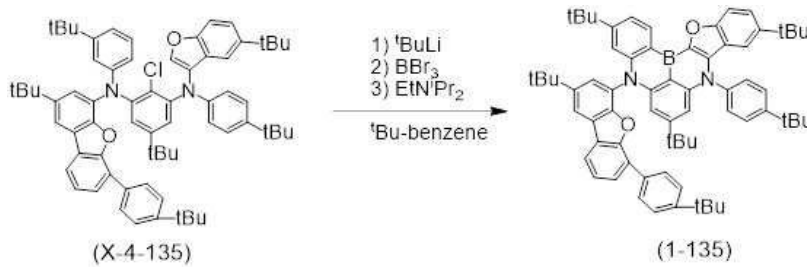
[0589]

[0590] 합성예(11): 화합물(1-184)의 합성

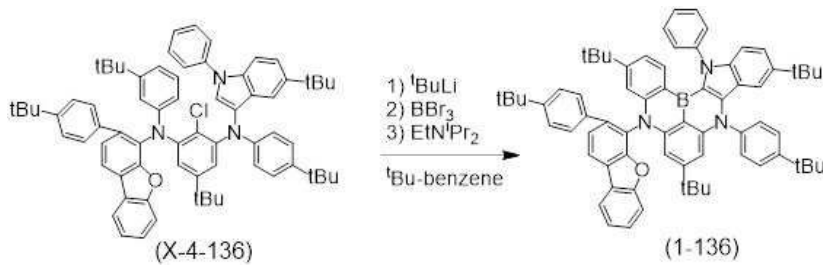
[0591] 화합물(X-4)을 화합물(X-4-184)로 변경한 것 이외에는 합성에 1과 마찬가지로 공정으로 화합물(1-184)을 얻었다.
 [0592] MS에 의해 $m/z(M+H)=1051.58$ 의 목적물인 화합물(1-184)을 확인했다.



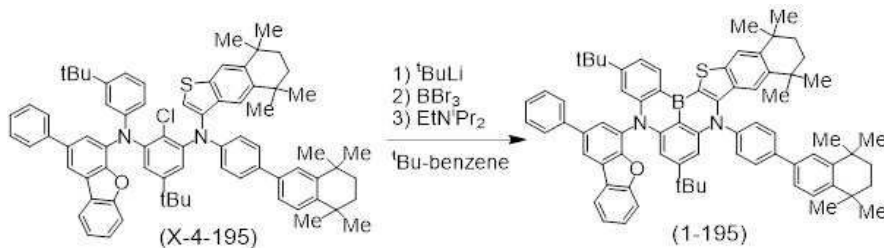
[0593] 합성예(12): 화합물(1-135)의 합성
 [0594] 화합물(X-4)을 화합물(X-4-135)로 변경한 것 이외에는 합성에 1과 마찬가지로 공정으로 화합물(1-135)을 얻었다.
 [0595] MS에 의해 $m/z(M+H)=963.60$ 의 목적물인 화합물(1-135)을 확인했다.



[0597] 합성예(13): 화합물(1-136)의 합성
 [0598] 화합물(X-4)을 화합물(X-4-136)로 변경한 것 이외에는 합성에 1과 마찬가지로 공정으로 화합물(1-136)을 얻었다.
 [0600] MS에 의해 $m/z(M+H)=982.59$ 의 목적물인 화합물(1-136)을 확인했다.



[0601] 합성예(14): 화합물(1-195)의 합성
 [0602] 화합물(X-4)을 화합물(X-4-195)로 변경한 것 이외에는 합성에 1과 마찬가지로 공정으로 화합물(1-195)을 얻었다.
 [0603] MS에 의해 $m/z(M+H)=1051.58$ 의 목적물인 화합물(1-195)을 확인했다.



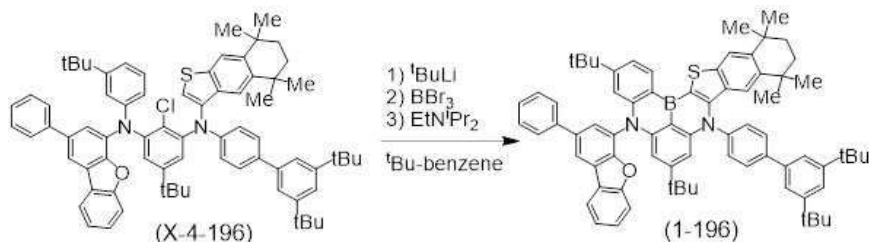
[0605] NMR측정에 의해 얻어진 화합물의 구조를 확인했다.
 [0606] $^1\text{H-NMR}(500\text{MHz}, \text{CDCl}_3)$: $\delta=0.91-0.99(\text{m}, 15\text{H}), 1.12(\text{s}, 9\text{H}), 1.34-1.39(\text{m}, 12\text{H}), 1.41(\text{s}, 6\text{H}), 1.59-1.70(\text{m},$

4H), 1.78(s, 4H), 6.36(s, 1H), 6.47(s, 1H), 6.51(s, 1H), 6.77(d, 1H), 7.33-7.55(m, 9H), 7.63(d, 2H), 7.67(d, 1H), 7.72-7.76(m, 2H), 7.83(d, 1H), 7.91(s, 1H), 7.94(d, 2H), 8.09-8.13(m, 1H), 8.40(d, 1H), 8.74(d, 1H).

[0608] 합성예(15): 화합물(1-196)의 합성

[0609] 화합물(X-4)을 화합물(X-4-196)로 변경한 것 이외에는 합성예 1과 마찬가지로 공정으로 화합물(1-196)을 얻었다.

[0610] MS에 의해 m/z(M+H)=1053.59의 목적물인 화합물(1-196)을 확인했다.



[0611]

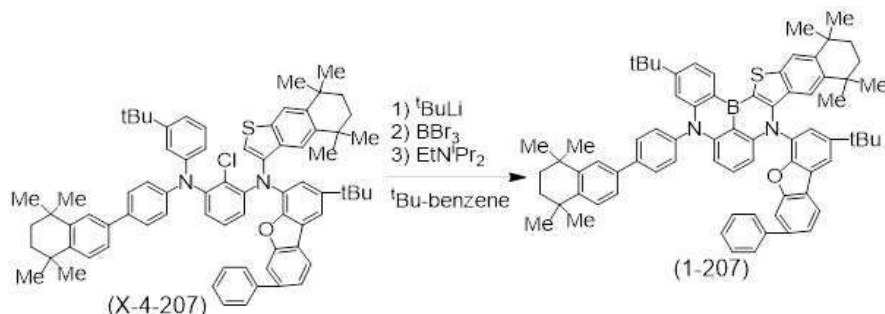
[0612] NMR측정에 의해 얻어진 화합물의 구조를 확인했다.

[0613] ¹H-NMR(500MHz, CDCl₃): δ=0.93-1.00(m, 15H), 1.11(s, 9H), 1.34-1.38(m, 6H), 1.45(s, 18H), 1.59-1.70(m, 4H), 6.37(s, 1H), 6.44(s, 1H), 6.54(s, 1H), 6.77(s, 1H), 7.33-7.52(m, 7H), 7.54(t, 1H), 7.57(d, 2H), 7.65(d, 2H), 7.72-7.77(m, 2H), 7.83(d, 1H), 7.91(s, 1H), 7.96(d, 2H), 8.09-8.14(m, 1H), 8.41(d, 1H), 8.74(d, 1H).

[0614] 합성예(16): 화합물(1-207)의 합성

[0615] 화합물(X-4)을 화합물(X-4-207)로 변경한 것 이외에는 합성예 1과 마찬가지로 공정으로 화합물(1-207)을 얻었다.

[0616] MS에 의해 m/z(M+H)=1051.58의 목적물인 화합물(1-207)을 확인했다.

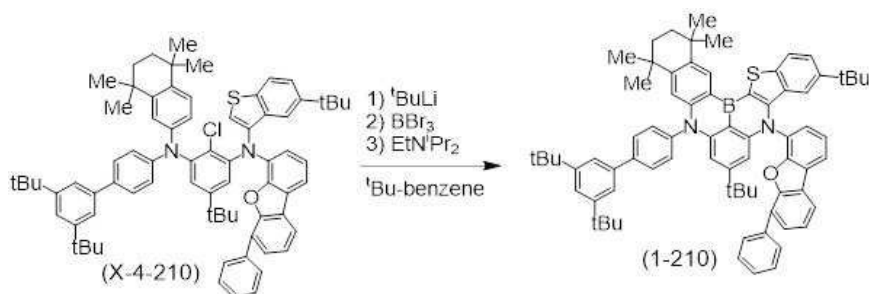


[0617]

[0618] 합성예(17): 화합물(1-210)의 합성

[0619] 화합물(X-4)을 화합물(X-4-210)로 변경한 것 이외에는 합성예 1과 마찬가지로 공정으로 화합물(1-210)을 얻었다.

[0620] MS에 의해 m/z(M+H)=1053.59의 목적물인 화합물(1-210)을 확인했다.

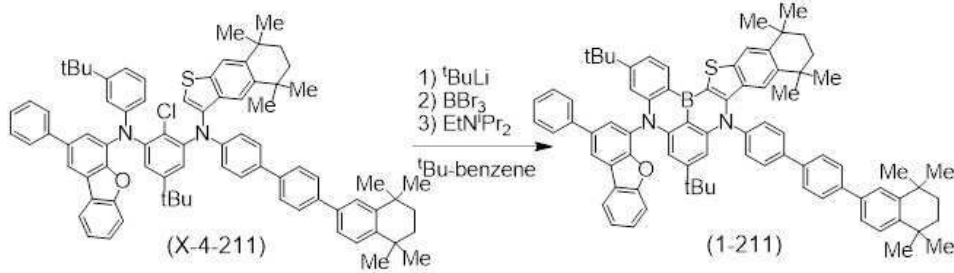


[0621]

[0622] 합성예(18): 화합물(1-211)의 합성

[0623] 화합물(X-4)을 화합물(X-4-211)로 변경한 것 이외에는 합성예 1과 마찬가지로 공정으로 화합물(1-211)을 얻었다.

[0624] MS에 의해 $m/z(M+H)=1127.61$ 의 목적물인 화합물(1-211)을 확인했다.

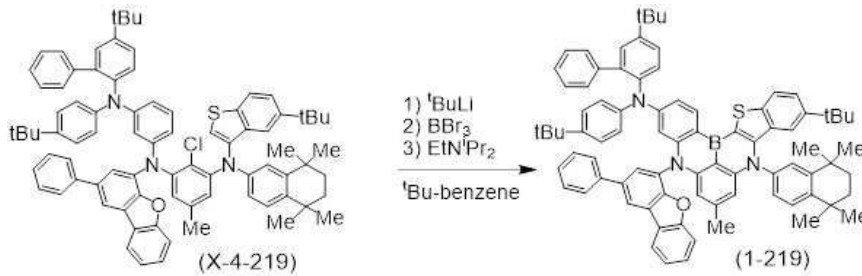


[0625]

[0626] 합성예(19): 화합물(1-219)의 합성

[0627] 화합물(X-4)을 화합물(X-4-219)로 변경한 것 이외에는 합성예 1과 마찬가지로 공정으로 화합물(1-219)을 얻었다.

[0628] MS에 의해 $m/z(M+H)=1178.62$ 의 목적물인 화합물(1-219)을 확인했다.

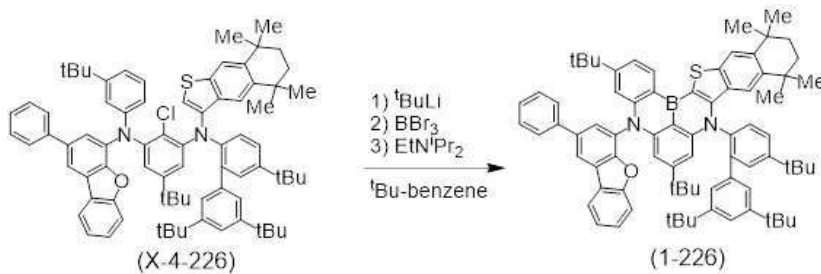


[0629]

[0630] 합성예(20): 화합물(1-226)의 합성

[0631] 화합물(X-4)을 화합물(X-4-226)로 변경한 것 이외에는 합성예 1과 마찬가지로 공정으로 화합물(1-226)을 얻었다.

[0632] MS에 의해 $m/z(M+H)=1109.66$ 의 목적물인 화합물(1-226)을 확인했다.

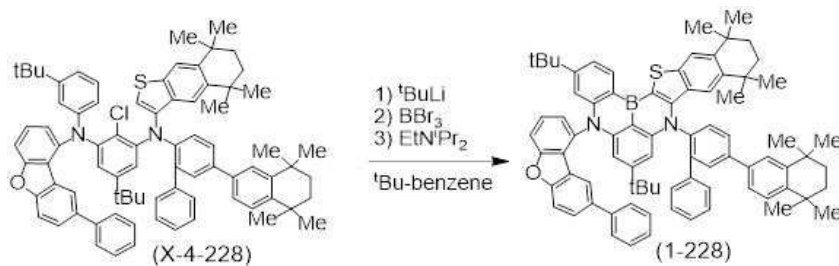


[0633]

[0634] 합성예(21): 화합물(1-228)의 합성

[0635] 화합물(X-4)을 화합물(X-4-228)로 변경한 것 이외에는 합성예 1과 마찬가지로 공정으로 화합물(1-228)을 얻었다.

[0636] MS에 의해 $m/z(M+H)=1127.61$ 의 목적물인 화합물(1-228)을 확인했다.

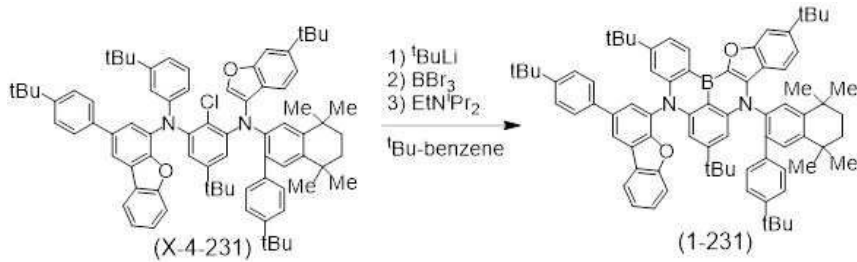


[0637]

[0638] 합성예(22): 화합물(1-231)의 합성

[0639] 화합물(X-4)을 화합물(X-4-231)로 변경한 것 이외에는 합성예 1과 마찬가지로 공정으로 화합물(1-231)을 얻었다.

[0640] MS에 의해 $m/z(M+H)=1093.68$ 의 목적물인 화합물(1-231)을 확인했다.

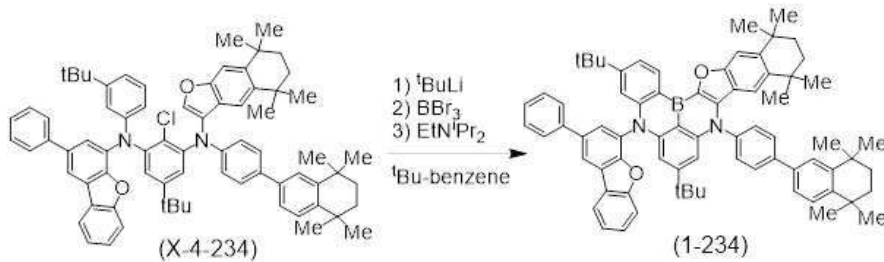


[0641]

[0642] 합성예(23): 화합물(1-234)의 합성

[0643] 화합물(X-4)을 화합물(X-4-234)로 변경한 것 이외에는 합성예 1과 마찬가지로 공정으로 화합물(1-234)을 얻었다.

[0644] MS에 의해 $m/z(M+H)=1035.60$ 의 목적물인 화합물(1-234)을 확인했다.

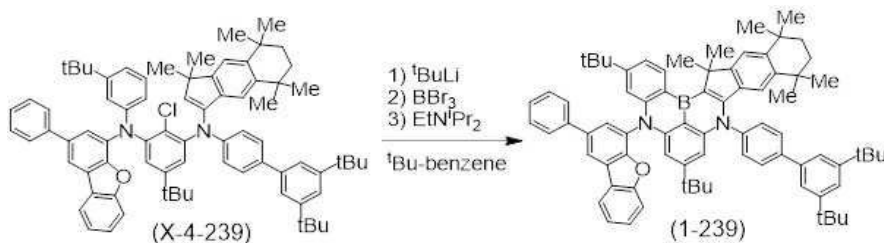


[0645]

[0646] 합성예(24): 화합물(1-239)의 합성

[0647] 화합물(X-4)을 화합물(X-4-239)로 변경한 것 이외에는 합성예 1과 마찬가지로 공정으로 화합물(1-239)을 얻었다.

[0648] MS에 의해 $m/z(M+H)=1063.67$ 의 목적물인 화합물(1-239)을 확인했다.

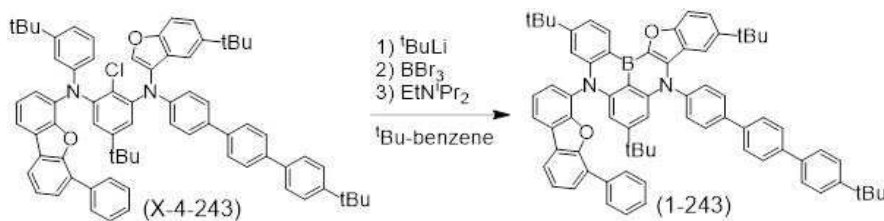


[0649]

[0650] 합성예(25): 화합물(1-243)의 합성

[0651] 화합물(X-4)을 화합물(X-4-243)로 변경한 것 이외에는 합성예 1과 마찬가지로 공정으로 화합물(1-243)을 얻었다.

[0652] MS에 의해 $m/z(M+H)=1003.54$ 의 목적물인 화합물(1-243)을 확인했다.

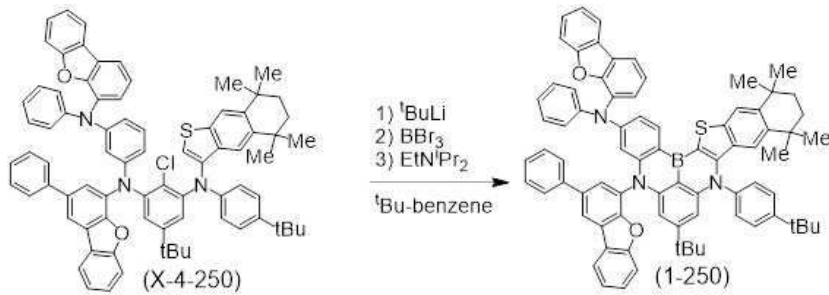


[0653]

[0654] 합성예(26): 화합물(1-250)의 합성

[0655] 화합물(X-4)을 화합물(X-4-250)로 변경한 것 이외에는 합성예 1과 마찬가지로 공정으로 화합물(1-250)을 얻었다.

[0656] MS에 의해 $m/z(M+H)=1122.52$ 의 목적물인 화합물(1-250)을 확인했다.

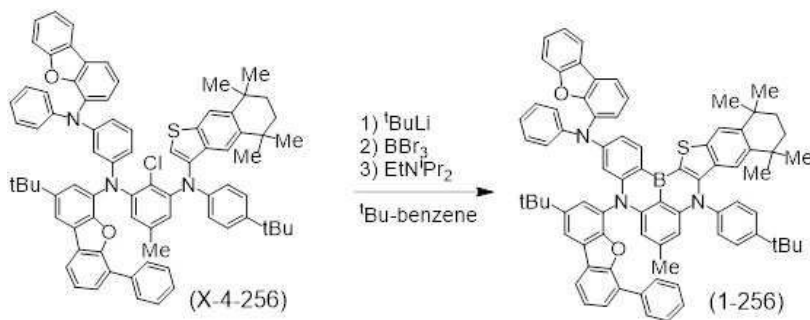


[0657]

[0658] 합성예(27): 화합물(1-256)의 합성

[0659] 화합물(X-4)을 화합물(X-4-256)로 변경한 것 이외에는 합성예 1과 마찬가지로 공정으로 화합물(1-256)을 얻었다.

[0660] MS에 의해 $m/z(M+H)=1136.54$ 의 목적물인 화합물(1-256)을 확인했다.

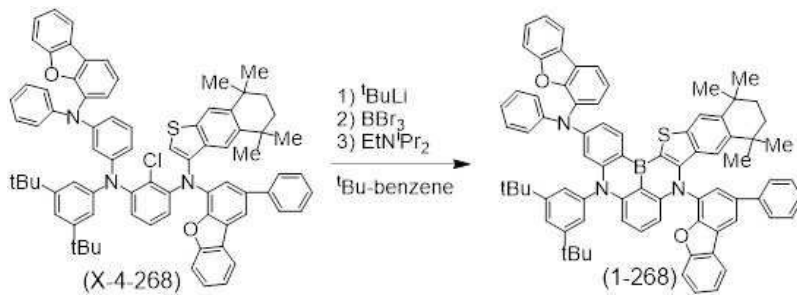


[0661]

[0662] 합성예(28): 화합물(1-268)의 합성

[0663] 화합물(X-4)을 화합물(X-4-268)로 변경한 것 이외에는 합성예 1과 마찬가지로 공정으로 화합물(1-268)을 얻었다.

[0664] MS에 의해 $m/z(M+H)=1122.52$ 의 목적물인 화합물(1-268)을 확인했다.

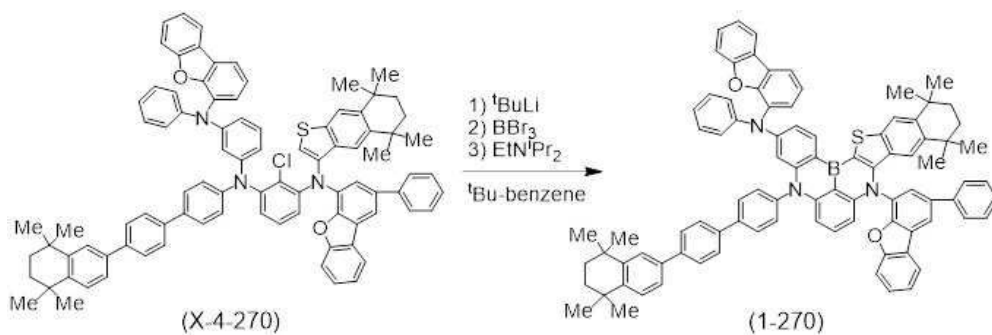


[0665]

[0666] 합성예(29): 화합물(1-270)의 합성

[0667] 화합물(X-4)을 화합물(X-4-270)로 변경한 것 이외에는 합성예 1과 마찬가지로 공정으로 화합물(1-270)을 얻었다.

[0668] MS에 의해 $m/z(M+H)=1272.57$ 의 목적물인 화합물(1-270)을 확인했다.

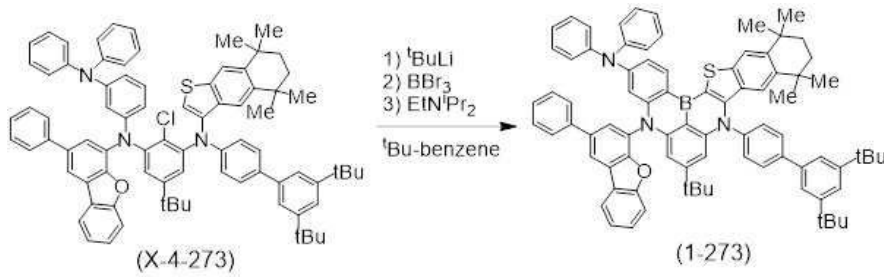


[0669]

[0670] 합성예(30): 화합물(1-273)의 합성

[0671] 화합물(X-4)을 화합물(X-4-273)로 변경한 것 이외에는 합성예 1과 마찬가지로 공정으로 화합물(1-273)을 얻었다.

[0672] MS에 의해 $m/z(M+H)=1164.61$ 의 목적물인 화합물(1-273)을 확인했다.

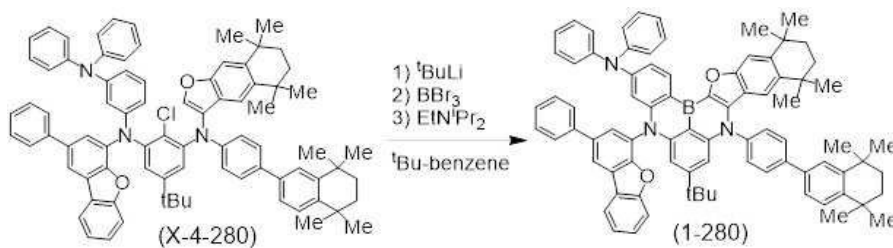


[0673]

[0674] 합성예(31): 화합물(1-280)의 합성

[0675] 화합물(X-4)을 화합물(X-4-280)로 변경한 것 이외에는 합성예 1과 마찬가지로 공정으로 화합물(1-280)을 얻었다.

[0676] MS에 의해 $m/z(M+H)=1146.61$ 의 목적물인 화합물(1-280)을 확인했다.

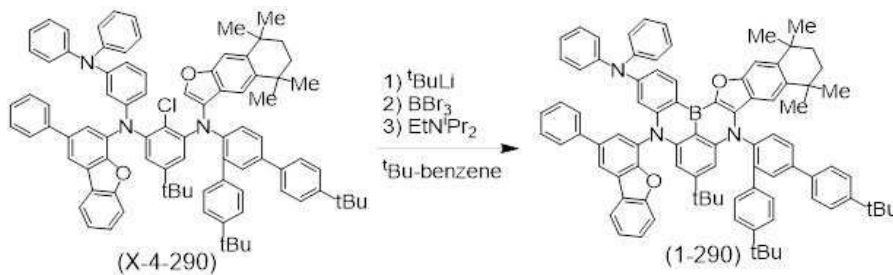


[0677]

[0678] 합성예(32): 화합물(1-290)의 합성

[0679] 화합물(X-4)을 화합물(X-4-290)로 변경한 것 이외에는 합성예 1과 마찬가지로 공정으로 화합물(1-290)을 얻었다.

[0680] MS에 의해 $m/z(M+H)=1224.66$ 의 목적물인 화합물(1-290)을 확인했다.

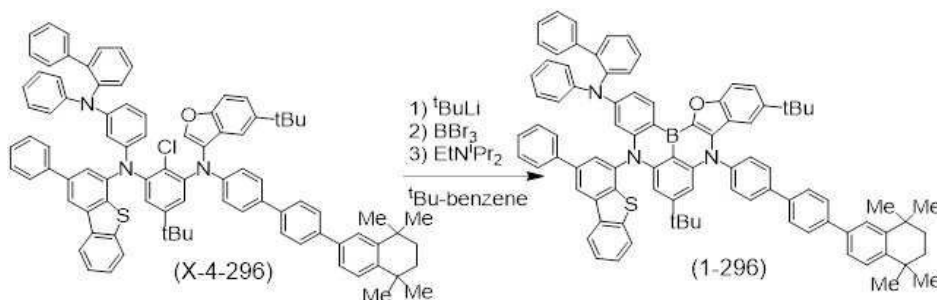


[0681]

[0682] 합성예(33): 화합물(1-296)의 합성

[0683] 화합물(X-4)을 화합물(X-4-296)로 변경한 것 이외에는 합성예 1과 마찬가지로 공정으로 화합물(1-296)을 얻었다.

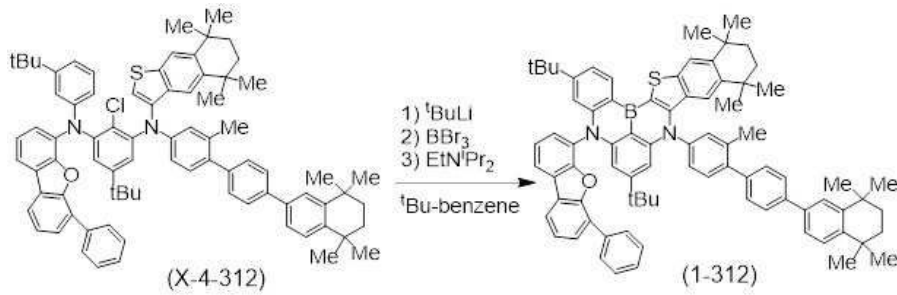
[0684] MS에 의해 $m/z(M+H)=1260.61$ 의 목적물인 화합물(1-296)을 확인했다.



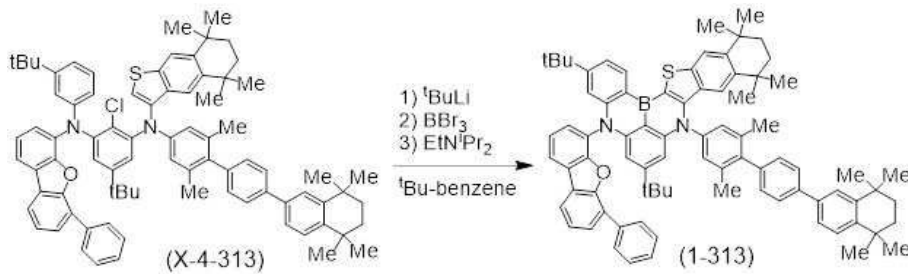
[0685]

[0686] 합성예(34): 화합물(1-312)의 합성

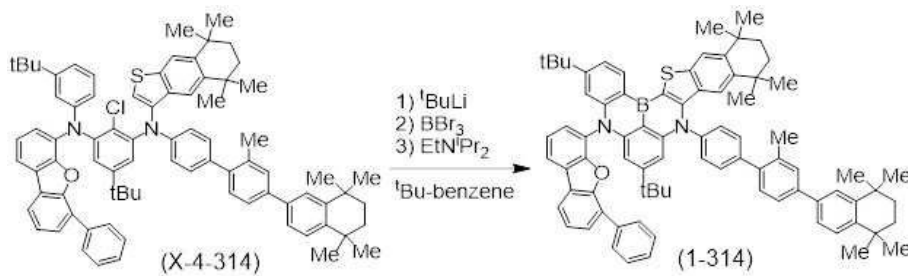
[0687] 화합물(X-4)을 화합물(X-4-312)로 변경한 것 이외에는 합성에 1과 마찬가지로 공정으로 화합물(1-312)을 얻었다.
 [0688] MS에 의해 $m/z(M+H)=1141.63$ 의 목적물인 화합물(1-312)을 확인했다.



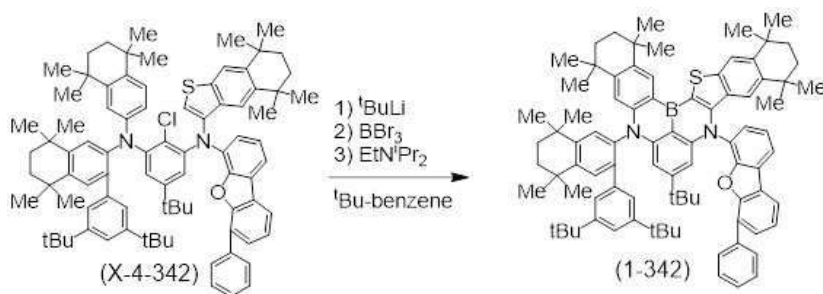
[0689] 합성예(35): 화합물(1-313)의 합성
 [0691] 화합물(X-4)을 화합물(X-4-313)로 변경한 것 이외에는 합성에 1과 마찬가지로 공정으로 화합물(1-313)을 얻었다.
 [0692] MS에 의해 $m/z(M+H)=1155.64$ 의 목적물인 화합물(1-313)을 확인했다.



[0693] 합성예(36) 화합물(1-314)의 합성
 [0695] 화합물(X-4)을 화합물(X-4-314)로 변경한 것 이외에는 합성에 1과 마찬가지로 공정으로 화합물(1-314)을 얻었다.
 [0696] MS에 의해 $m/z(M+H)=1141.63$ 의 목적물인 화합물(1-314)을 확인했다.



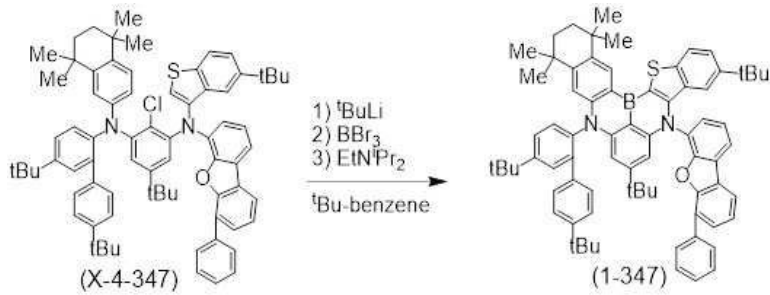
[0697] 합성예(37) 화합물(1-342)의 합성
 [0699] 화합물(X-4)을 화합물(X-4-342)로 변경한 것 이외에는 합성에 1과 마찬가지로 공정으로 화합물(1-342)을 얻었다.
 [0700] MS에 의해 $m/z(M+H)=1217.75$ 의 목적물인 화합물(1-342)을 확인했다.



[0701]
 [0702] 합성예(38) 화합물(1-347)의 합성

[0703] 화합물(X-4)을 화합물(X-4-347)로 변경한 것 이외에는 합성에 1과 마찬가지로 공정으로 화합물(1-347)을 얻었다.

[0704] MS에 의해 $m/z(M+H)=1053.59$ 의 목적물인 화합물(1-347)을 확인했다.

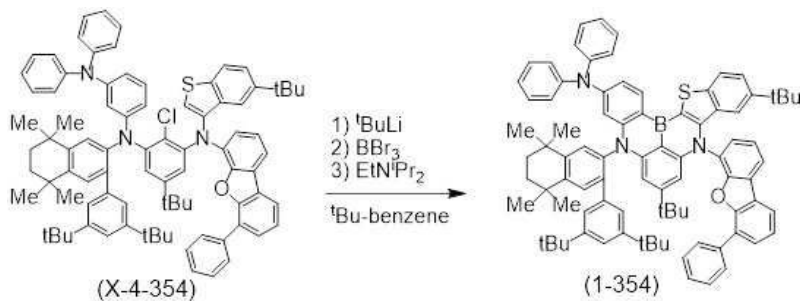


[0705]

[0706] 합성예(39) 화합물(1-354)의 합성

[0707] 화합물(X-4)을 화합물(X-4-354)로 변경한 것 이외에는 합성에 1과 마찬가지로 공정으로 화합물(1-354)을 얻었다.

[0708] MS에 의해 $m/z(M+H)=1220.67$ 의 목적물인 화합물(1-354)을 확인했다.

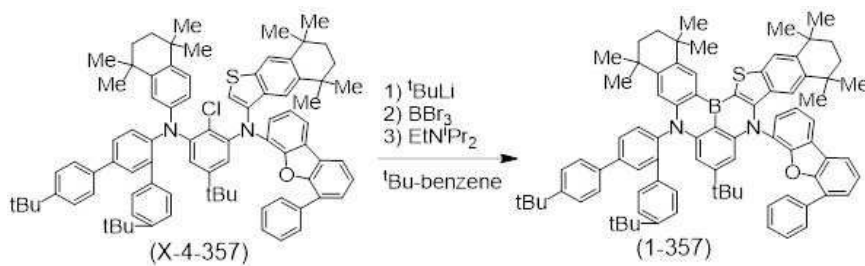


[0709]

[0710] 합성예(40) 화합물(1-357)의 합성

[0711] 화합물(X-4)을 화합물(X-4-357)로 변경한 것 이외에는 합성에 1과 마찬가지로 공정으로 화합물(1-357)을 얻었다.

[0712] MS에 의해 $m/z(M+H)=1183.67$ 의 목적물인 화합물(1-357)을 확인했다.

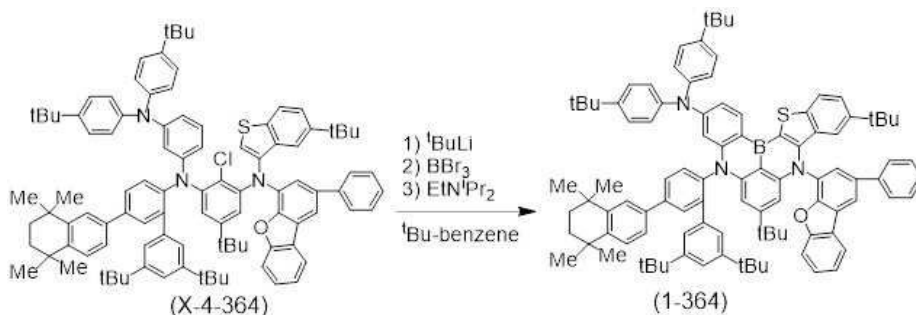


[0713]

[0714] 합성예(41) 화합물(1-364)의 합성

[0715] 화합물(X-4)을 화합물(X-4-364)로 변경한 것 이외에는 합성에 1과 마찬가지로 공정으로 화합물(1-364)을 얻었다.

[0716] MS에 의해 $m/z(M+H)=1408.82$ 의 목적물인 화합물(1-364)을 확인했다.

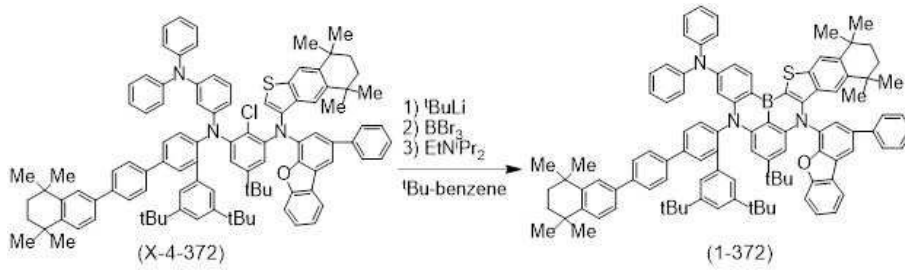


[0717]

[0718] 합성예(42)화합물(1-372)의 합성

[0719] 화합물(X-4)을 화합물(X-4-372)로 변경한 것 이외에는 합성예 1과 마찬가지로 공정으로 화합물(1-372)을 얻었다.

[0720] MS에 의해 $m/z(M+H)=1426.78$ 의 목적물인 화합물(1-372)을 확인했다.

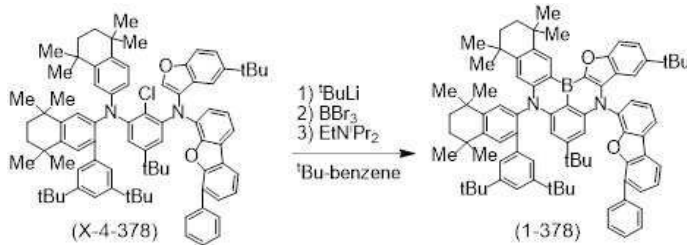


[0721]

[0722] 합성예(43)화합물(1-378)의 합성

[0723] 화합물(X-4)을 화합물(X-4-378)로 변경한 것 이외에는 합성예 1과 마찬가지로 공정으로 화합물(1-378)을 얻었다.

[0724] MS에 의해 $m/z(M+H)=1147.73$ 의 목적물인 화합물(1-378)을 확인했다.

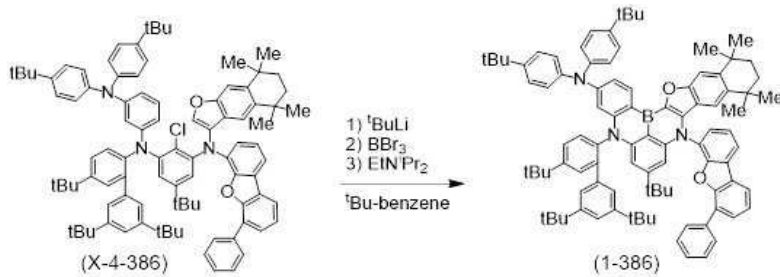


[0725]

[0726] 합성예(44)화합물(1-386)의 합성

[0727] 화합물(X-4)을 화합물(X-4-386)로 변경한 것 이외에는 합성예 1과 마찬가지로 공정으로 화합물(1-386)을 얻었다.

[0728] MS에 의해 $m/z(M+H)=1316.82$ 의 목적물인 화합물(1-386)을 확인했다.

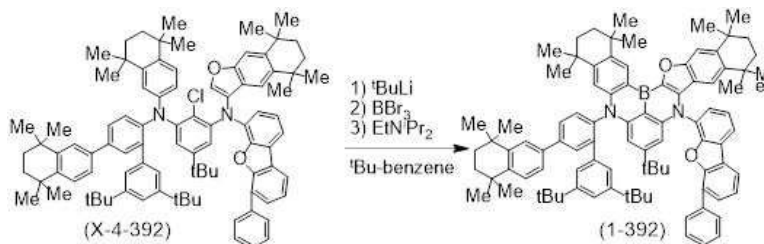


[0729]

[0730] 합성예(45)화합물(1-392)의 합성

[0731] 화합물(X-4)을 화합물(X-4-392)로 변경한 것 이외에는 합성예 1과 마찬가지로 공정으로 화합물(1-392)을 얻었다.

[0732] MS에 의해 $m/z(M+H)=1277.81$ 의 목적물인 화합물(1-392)을 확인했다.

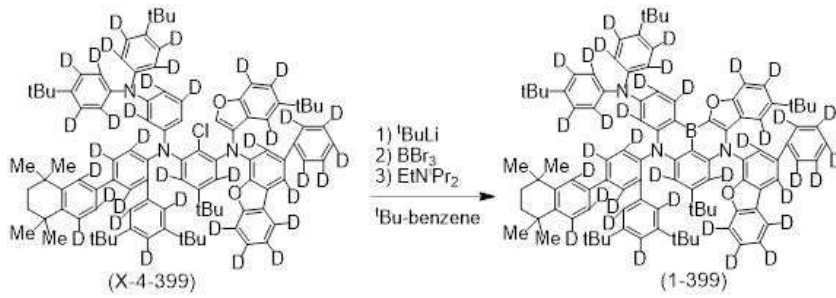


[0733]

[0734] 합성예(46)화합물(1-399)의 합성

[0735] 화합물(X-4)을 화합물(X-4-399)로 변경한 것 이외에는 합성예 1과 마찬가지로 공정으로 화합물(1-399)을 얻었다.

[0736] MS에 의해 $m/z(M+H)=$ 의 1429.07목적물인 화합물(1-399)을 확인했다.

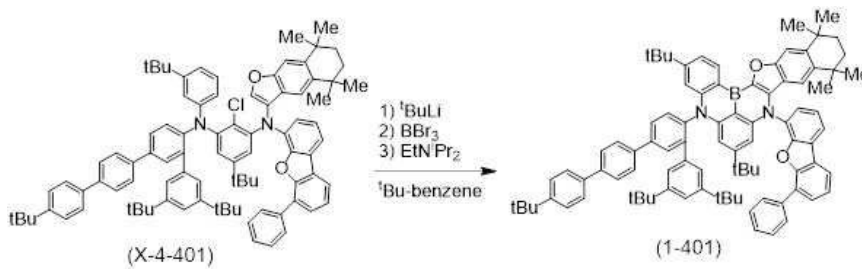


[0737]

[0738] 합성예(47)화합물(1-401)의 합성

[0739] 화합물(X-4)을 화합물(X-4-401)로 변경한 것 이외에는 합성예 1과 마찬가지로 공정으로 화합물(1-401)을 얻었다.

[0740] MS에 의해 $m/z(M+H)=1245.74$ 의 목적물인 화합물(1-401)을 확인했다.

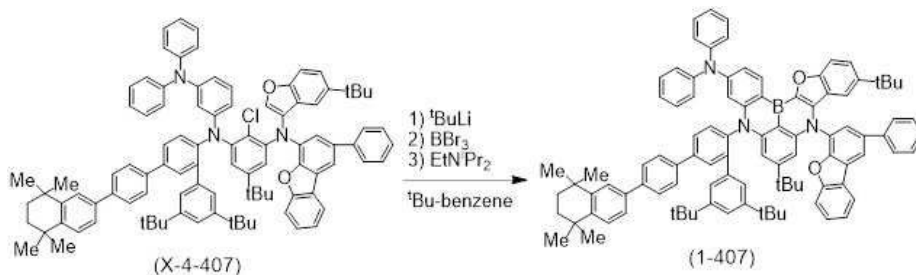


[0741]

[0742] 합성예(48)화합물(1-407)의 합성

[0743] 화합물(X-4)을 화합물(X-4-407)로 변경한 것 이외에는 합성예 1과 마찬가지로 공정으로 화합물(1-407)을 얻었다.

[0744] MS에 의해 $m/z(M+H)=1356.75$ 의 목적물인 화합물(1-407)을 확인했다.

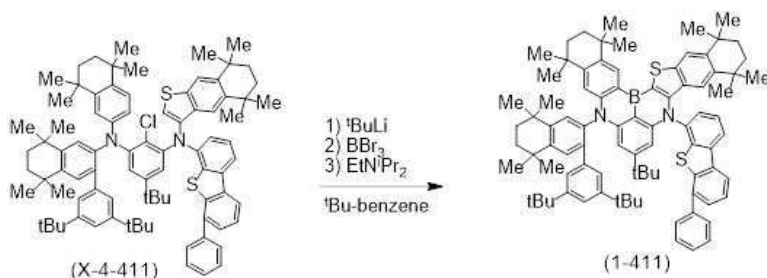


[0745]

[0746] 합성예(49)화합물(1-411)의 합성

[0747] 화합물(X-4)을 화합물(X-4-411)로 변경한 것 이외에는 합성예 1과 마찬가지로 공정으로 화합물(1-411)을 얻었다.

[0748] MS에 의해 $m/z(M+H)=1233.73$ 의 목적물인 화합물(1-411)을 확인했다.

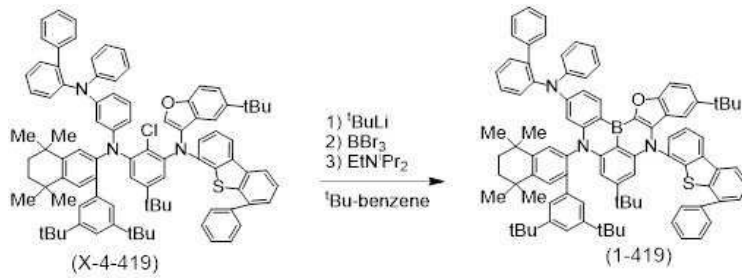


[0749]

[0750] 합성예(50)화합물(1-419)의 합성

[0751] 화합물(X-4)을 화합물(X-4-419)로 변경한 것 이외에는 합성예 1과 마찬가지로 공정으로 화합물(1-419)을 얻었다.

[0752] MS에 의해 $m/z(M+H)=1296.70$ 의 목적물인 화합물(1-419)을 확인했다.

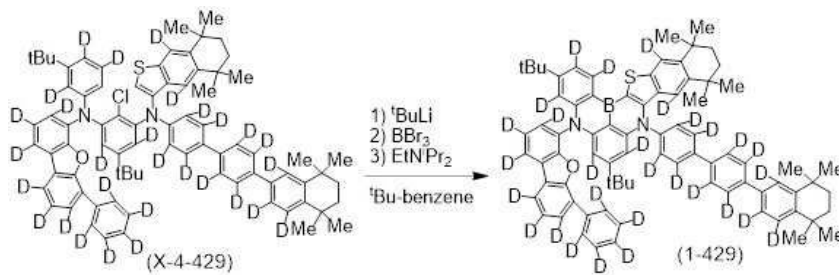


[0753]

[0754] 합성예(51) 화합물(1-429)의 합성

[0755] 화합물(X-4)을 화합물(X-4-429)로 변경한 것 이외에는 합성예 1과 마찬가지로 공정으로 화합물(1-429)을 얻었다.

[0756] MS에 의해 $m/z(M+H)=1156.79$ 의 목적물인 화합물(1-429)을 확인했다.



[0757]

[0758] 원료 화합물을 적당히 변경함으로써, 상술한 합성예에 준한 방법으로, 본 발명의 다른 화합물을 합성할 수 있다.

[0759] <<화합물의 기초물성의 평가 방법>>

[0760] <샘플의 준비>

[0761] 평가 대상 화합물의 흡수 특성과 발광특성(형광과 인광)을 평가할 경우, 평가 대상 화합물을 용매에 용해해서 용매중에서 평가할 경우와 박막상태로 평가할 경우가 있다. 나아가, 박막상태로 평가할 경우는, 평가 대상의 화합물 유기 EL 소자에 있어서의 사용 양태에 따라, 평가 대상의 화합물만을 박막화해 평가할 경우와 평가 대상의 화합물을 적절한 매트릭스 재료중에 분산시켜 박막화해서 평가할 경우가 있다. 여기에서는, 평가 대상 화합물만을 증착하여 얻어진 박막을 「단독막」이라고 하고, 평가 대상 화합물과 매트릭스 재료를 포함하는 도공액을 도포, 건조하여 얻어진 박막을 「도막」이라고 한다.

[0762] 매트릭스 재료로서는, 시판하고 있는 PMMA(폴리메틸메타크릴레이트) 등을 사용할 수 있다. 본실시예에서는, PMMA와 평가 대상 화합물을 톨루엔중에서 용해시킨 후, 스핀 코팅법에 의해 석영제의 투명지지 기판(10mm×10mm)위에 박막을 형성해서 샘플을 제작한다.

[0763] 또한, 매트릭스 재료가 호스트 화합물일 경우의 박막 샘플은, 다음과 같이 해서 제작한다. 석영제의 투명지지 기판(10mm×10mm×1.0mm)을 시판하고 있는 증착 장치(조슈산업(주)제작)의 기판 홀더에 고정하고, 호스트 화합물을 넣은 폴리브넨제 증착용 보트, 도펀트 재료를 넣은 폴리브넨제 증착용 보트를 장착한 후, 진공조를 5×10^{-4} Pa까지 감압한다. 다음으로, 호스트 화합물이 든 증착용 보트와 도펀트 재료가 들어간 증착용 보트를 동시에 가열하고, 호스트 화합물과 도펀트 재료를 적절한 막두께가 되도록 모두 증착해서 호스트 화합물과 도펀트 재료의 혼합 박막(샘플)을 형성했다. 여기에서, 호스트 화합물과 도펀트 재료의 설정 질량비에 따라 증착 속도를 제어한다.

[0764] <흡수 특성과 발광특성의 평가>

[0765] 샘플의 흡수 스펙트럼 측정은, 자외가시근적외선분광광도계((주)시마즈제작소, UV-2600)을 사용해서 행한다. 또한, 샘플의 형광 스펙트럼 또는 인광 스펙트럼의 측정은, 분광형광광도계(히다치하이테크(주)제작, F-7000)을 사용해서 행한다.

- [0766] 형광 스펙트럼의 측정에 대하여는, 실온에서 적절한 여기 파장으로 여기하여 포토루미네선스를 측정한다. 인광 스펙트럼의 측정에 대하여는, 부속의 냉각 유닛을 사용하여, 상기 샘플을 액체질소에 담긴 상태(온도77K)에서 측정한다. 인광 스펙트럼을 관측하기 위해서, 광학 초퍼를 사용해서 여기광 조사로부터 측정 시작까지의 지연 시간을 조정했다. 샘플은 적절한 여기 파장으로 여기하여 포토루미네선스를 측정한다.
- [0767] 또한, 절대 PL양자수율측정 장치(하마마츠포토닉스(주)제작, C9920-02G)을 사용해서 형광양자수율(PLQY)을 측정한다.
- [0768] <형광수명(지연 형광)의 평가>
- [0769] 형광수명측정 장치(하마마츠포토닉스(주)제작, C11367-01)을 사용해서 300K에서 형광수명을 측정했다. 구체적으로는, 적절한 여기 파장으로 측정되는 극대발광파장에 있어서 형광수명이 빠른 발광성분과 느린 발광성분을 관측했다. 형광을 발광하는 일반적인 유기 EL 재료의 실온에 있어서의 형광수명측정에서는, 열에 의한 3중항 성분의 실활에 의해, 인광에 유래하는 3중항 성분이 관여하는 느린 발광성분이 관측되는 경우는 거의 없다. 평가 대상의 화합물에 있어서 느린 발광성분이 관측되었을 경우는, 여기 수명이 긴 3중항 에너지가 열활성화에 의해 1중항 에너지로 이동해서 지연 형광으로서 관측된 것을 나타내게 된다.
- [0770] <에너지갭(Eg)의 산출>
- [0771] 전술의 방법으로 얻어진 흡수 스펙트럼의 장파장 말단A(nm)로부터 $E_g=1240/A$ 로 산출한다.
- [0772] <이온화 포텐셜(Ip)의 측정>
- [0773] ITO(인듐·주석 산화물)이 증착된 투명지지 기판(28mm×26mm×0.7mm)을 시판하고 있는 증착 장치(조슈산업(주) 제작)의 기판 홀더에 고정하고, 대상화합물을 넣은 몰리브덴계 증착용 보트를 장착한 후, 진공조를 5×10^{-4} Pa까지 감압한다. 다음으로, 증착용 보트를 가열해서 대상화합물을 증발시켜, 대상화합물의 단독막(Neat 막)을 형성한다.
- [0774] 얻어진 단독막을 샘플로 하여 광전자분광계(스미토모중기계공업주식회사 PYS-201)을 사용해서 대상화합물의 이온화 포텐셜을 측정한다.
- [0775] <전자친화력(Ea)의 산출>
- [0776] 전술한 방법으로 측정한 이온화 포텐셜과 전술한 방법으로 산출한 에너지갭과의 차이로부터, 전자친화력을 측정할 수 있다.
- [0777] <최저 여기 일중항 에너지 준위E(S,Sh), 최저 여기 삼중항 에너지 준위E(T,Sh)의 측정>
- [0778] 유리기판위에 형성한 대상화합물의 단독막에 대해서, 77K에서, 흡수 스펙트럼의 장파장측으로부터 2번째의 흡수 피크를 여기광에 형광 스펙트럼을 관측하고, 그 형광 스펙트럼의 피크 단파장측의 어깨로부터 최저 여기 일중항 에너지 준위E(S,Sh)를 구한다. 또한, 유리기판위에 형성한 대상화합물의 단독막에, 77K에서, 흡수 스펙트럼의 장파장측으로부터 2번째의 흡수 피크를 여기광에 인광 스펙트럼을 관측하고, 그 인광 스펙트럼의 피크 단파장측의 어깨로부터 최저 여기 삼중항 에너지 준위E(T,Sh)를 구한다.
- [0779] <<유기 EL 소자의 제작 및 평가>>
- [0780] 다음으로, 본 발명의 다환방향족 화합물을 사용한 유기 EL 소자의 제작과 평가에 대해서 기재한다.
- [0781] 본 발명의 화합물은, 적절한 에너지갭(Eg), 높은 최저 여기 삼중항 에너지(ET) 및 작은 ΔEST를 특징으로서 가지고 있기 때문에, 예를 들면 발광층 및 전하수송층에의 적용을 기대할 수 있고, 특히 발광층에의 적용을 기대할 수 있다.
- [0782] <유기 EL 소자의 구성>
- [0783] 본 발명의 다환방향족 화합물을 사용해서 유기 EL 소자를 제조했다.
- [0784] [소자구성A]

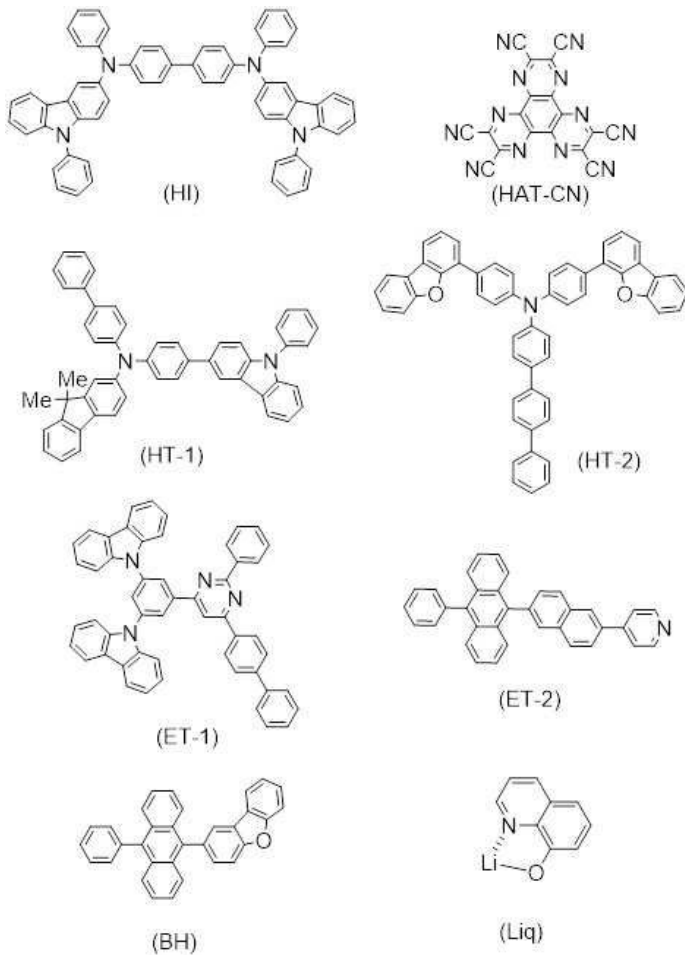
[0785] 실시예 1의 유기 EL 소자에 있어서의 각층의 재료구성을 하기 표1에 나타낸다.

[표1]

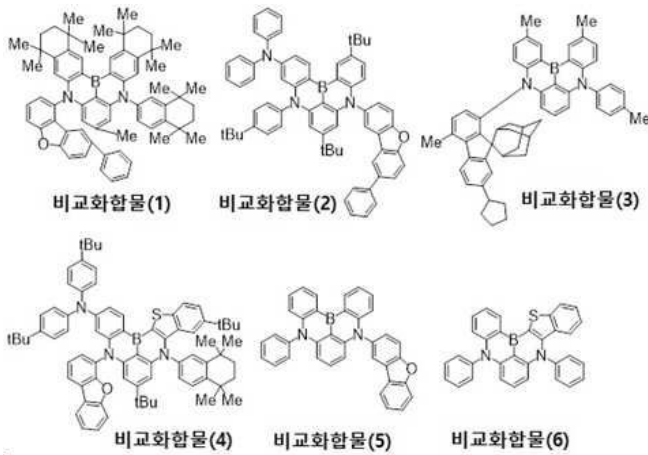
음극 1nm/100nm	LiF/Al
전자수송층 2 (25nm)	ET-2+Liq
전자수송층 1 (5nm)	ET-1
발광층 (25nm)	호스트 : BH, 도펀트 : 표2에 기재한 화합물 (9 : 7 : 3)
정공수송층 2 (10nm)	HT-2
정공수송층 1 (45nm)	HT-1
정공주입층 2 (5nm)	HAT-CN
정공주입층 1 (40nm)	HI

[0786]

[0787] 표1 및 표2에 있어서의, 「HI」, 「HAT-CN」, 「HT-1」, 「HT-2」, 「BH」, 「ET-1」, 「ET-2」, 「Liq」, 국제공개 제2021-020946호에 기재된 「비교 화합물1」, 특허공개 2021-014446호 공보에 기재된 「비교 화합물2」, 국제공개 제2020-080872호에 기재된 「비교 화합물3」, 국제공개 제2020-251049호에 기재된 「비교 화합물4」, 국제공개 제2019-132028호에 기재된 「비교 화합물5」, 및 국제공개 제2020-111830호에 기재된 「비교 화합물6」의 화학구조를 하기에 나타낸다.



[0788]



[0789]

[0790]

[0791]

[0792]

[0793]

[0794]

[0795]

[0796]

[0797]

[0798]

(실시예1)

스퍼터링에 의해 180nm의 두께로 성막한 ITO를 150nm까지 연마한, 26mm×28mm×0.7mm의 유리기관((주) 옵토사이언스제)을 투명지지 기관으로 한다. 이 투명지지 기관을 시판하고 있는 증착 장치(쇼와진공(주)제작)의 기관 홀더에 고정하고, HI, HAT-CN, HT-1, HT-2, BH, 화합물(1-1), ET-1 및 ET-2을 각각 넣은 폴리브텐계 증착용 보트, Liq, LiF 및 알루미늄을 각각 넣은 질화 알루미늄계 증착용 보트를 장착했다.

투명지지 기관의 ITO막 위에 순차적으로 하기 각 층을 형성한다. 진공조를 5×10^{-4} Pa까지 감압하고, 먼저, HI를 가열해서 막두께 40nm이 되도록 증착하고, 다음으로, HAT-CN을 가열해서 막두께 5nm이 되도록 증착하고, 다음으로, HT-1을 가열해서 막두께 45nm이 되도록 증착하고, 다음으로, HT-2을 가열해서 막두께 10nm이 되도록 증착하여, 4층으로 이루어지는 정공층을 형성했다. 다음으로, BH와 화합물(1-1)을 동시에 가열해서 막두께 25nm이 되도록 증착해서 발광층을 형성했다. BH와 화합물(1-1)의 질량비가 약 97대3이 되도록 증착 속도를 조절했다. 나아가, ET-1을 가열해서 막두께 5nm이 되도록 증착하고, 다음으로, ET-2과 Liq를 동시에 가열해서 막두께 25nm이 되도록 증착하여, 2층으로 이루어지는 전자층을 형성했다. ET-2과 Liq의 질량비가 약 50대50이 되도록 증착 속도를 조절했다. 각 층의 증착 속도는 0.01~1nm/초이었다. 그 후, LiF를 가열해서 막두께 1nm이 되도록 0.01~0.1nm/초의 증착 속도로 증착하고, 이어서, 알루미늄을 가열해서 막두께 100nm이 되도록 증착해서 음극을 형성하여, 유기 EL 소자를 얻었다.

(실시예 2~51, 비교예 1~6)

화합물(1-1)의 대신, 표2에 기재된 각 화합물을 도펀트로서 사용한 것 이외에는 실시예 1과 마찬가지로 하여, 실시예 2~51 및 비교예 1~6의 유기 EL 소자를 얻었다.

<평가 항목 및 평가 방법>

평가 항목으로서는, 구동 전압(V), 발광파장(nm), CIE색도(x, y), 외부양자효율(%), 발광 스펙트럼의 최대파장(nm) 및 반치폭(nm)등이 있다. 이 평가 항목은, 예를 들면 1000cd/m²발광시의 값을 사용할 수 있다.

발광소자의 양자효율에는, 내부양자효율과 외부양자효율이 있는데, 내부양자효율은, 발광소자의 발광층에 전자(또는 정공)로서 주입되는 외부 에너지가 순수하게 광자로 변환되는 비율을 나타낸다. 한편, 외부양자효율은, 이 광자가 발광소자의 외부에까지 방출된 양에 기초하여 산출되며, 발광층에 있어서 발생한 광자는, 그 일부가 발광소자의 내부에서 흡수되거나 혹은 계속 반사되거나 해서, 발광소자의 외부로 방출되지 않기 때문에, 외부양자효율은 내부양자효율보다도 낮아진다.

분광 방사 휘도(발광 스펙트럼)과 외부양자효율의 측정 방법은 다음과 같다. 어드밴티스트사제 전압/전류발생기 R6144를 사용하여, 소자의 휘도가 1000cd/m²이 되는 전압을 인가해서 소자를 발광시킨다. TOPCON사제 분광 방사 휘도계 SR-3AR을 사용하여, 발광면에 대하여 수직방향에서 가시광영역의 분광 방사 휘도를 측정한다. 발광면이 완전 확산면이라고 가정하고, 측정된 각 파장성분의 분광 방사 휘도의 값을 파장 에너지로 나누어 π 을 곱한 수치가 각파장에 있어서의 광자수이다. 그 다음에, 관측한 전 파장영역에서 광자수를 적산하고, 소자로부터 방출된 전 광자수로 한다. 인가 전류값을 기본전하로 나눈 수치를 소자에 주입한 캐리어수로 하여, 소자로부터 방출된 전 광자수를 소자에 주입한 캐리어수로 나눈 수치가 외부양자효율이다. 또한, 발광 스펙트럼의 반치폭은, 극

대발광과장을 중심으로 하고, 그 강도가 50%이 되는 상하의 파장간의 폭으로서 구해진다.

[0799] 실시예 1~51, 비교예 1~6의 유기 EL 소자에 대해서, ITO전극을 양극, LiF/알루미늄 전극을 음극으로서 직류 전압을 인가하고, 1000cd/m²발광시의 특성을 측정했다.

[0800] 결과를 표2에 나타낸다.

[표2]

	도펀트	전압	외부양자효율
		(V)	(%)
실시예 1	화합물 (1-1)	3.68	7.3
실시예 2	화합물 (1-16)	3.91	7.3
실시예 3	화합물 (1-35)	3.77	7.1
실시예 4	화합물 (1-55)	3.93	7.1
실시예 5	화합물 (1-75)	4.06	7.2
실시예 6	화합물 (1-95)	3.91	7.2
실시예 7	화합물 (1-180)	3.76	7.9
실시예 8	화합물 (1-181)	3.91	7.8
실시예 9	화합물 (1-182)	3.86	8.1
실시예 1 0	화합물 (1-183)	3.81	8.3
실시예 1 1	화합물 (1-184)	3.96	8.1
실시예 1 2	화합물(1-135)	3.69	7.4
실시예 1 3	화합물(1-136)	3.88	7.3
실시예 1 4	화합물(1-195)	3.72	7.4
실시예 1 5	화합물(1-196)	3.96	7.5
실시예 1 6	화합물(1-207)	4.01	7.7
실시예 1 7	화합물(1-210)	3.81	7.3
실시예 1 8	화합물(1-211)	3.62	7.5

[0801]

실시예 1 9	화합물(1-219)	3.73	7.4
실시예 2 0	화합물(1-226)	3.81	8.2
실시예 2 1	화합물(1-228)	3.69	8.1
실시예 2 2	화합물(1-231)	3.96	8.1
실시예 2 3	화합물(1-234)	3.68	7.3
실시예 2 4	화합물(1-239)	3.91	7.3
실시예 2 5	화합물(1-243)	3.77	7.1
실시예 2 6	화합물(1-250)	3.93	7.1
실시예 2 7	화합물(1-256)	4.06	7.2
실시예 2 8	화합물(1-268)	3.91	7.2
실시예 2 9	화합물(1-270)	3.76	7.9
실시예 3 0	화합물(1-273)	3.91	7.8
실시예 3 1	화합물(1-280)	3.86	8.1
실시예 3 2	화합물(1-290)	3.81	8.3
실시예 3 3	화합물(1-296)	3.96	8.1
실시예 3 4	화합물(1-312)	3.68	7.3
실시예 3 5	화합물(1-313)	3.91	7.3
실시예 3 6	화합물(1-314)	3.77	7.1
실시예 3 7	화합물(1-342)	3.93	7.1
실시예 3 8	화합물(1-347)	4.06	7.2

[0802]

실시예 3 9	화합물(1-354)	3.91	7.2
실시예 4 0	화합물(1-357)	3.76	7.9
실시예 4 1	화합물(1-364)	3.91	7.8
실시예 4 2	화합물(1-372)	3.86	8.1
실시예 4 3	화합물(1-378)	3.81	8.3
실시예 4 4	화합물(1-386)	3.96	7.9
실시예 4 5	화합물(1-392)	3.88	7.5
실시예 4 6	화합물(1-399)	3.77	7.3
실시예 4 7	화합물(1-401)	3.61	7.2
실시예 4 8	화합물(1-407)	3.98	7.1
실시예 4 9	화합물(1-411)	4.05	6.9
실시예 5 0	화합물(1-419)	3.92	7.2
실시예 5 1	화합물(1-429)	3.78	7.9
비교예 1	비교화합물 (1)	4.55	5.8
비교예 2	비교화합물 (2)	4.62	5.7
비교예 3	비교화합물 (3)	4.69	5.3
비교예 4	비교화합물 (4)	4.53	5.2
비교예 5	비교화합물 (5)	4.49	5.0
비교예 6	비교화합물 (6)	4.39	5.0

[0803]

산업상 이용가능성

[0804]

본 발명의 다환방향족 화합물은 유기 디바이스용 재료, 특히 유기 전계 발광 소자의 발광층 형성을 위한 발광층용 재료로서 유용하다. 본 발명의 다환방향족 화합물을 발광층용 도펀트로서 사용함으로써, 저전압, 고효율발광의 유기 전계 발광 소자가 얻어진다.

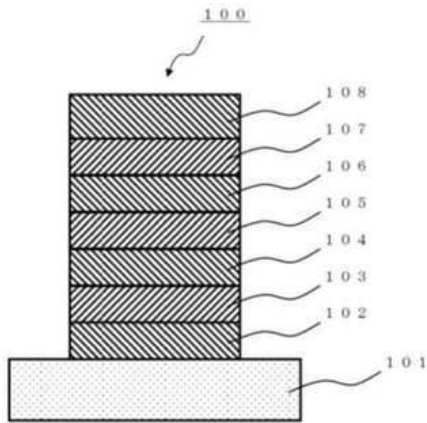
부호의 설명

[0805]

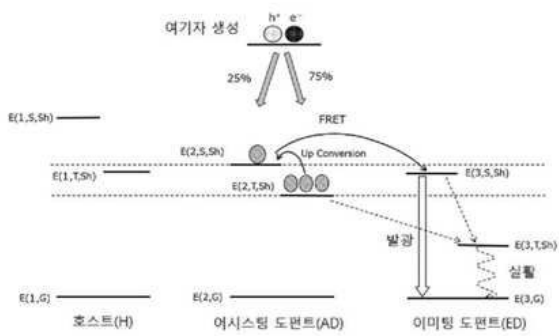
- 100 유기 전계 발광 소자
- 101 기관
- 102 양극
- 103 정공주입층
- 104 정공수송층
- 105 발광층
- 106 전자수송층
- 107 전자주입층
- 108 음극

도면

도면1



도면2



도면3

