



(19) 대한민국특허청(KR)
(12) 등록특허공보(B1)

(45) 공고일자 2020년02월12일
(11) 등록번호 10-2076887
(24) 등록일자 2020년02월06일

(51) 국제특허분류(Int. Cl.)
C09K 11/06 (2006.01) C07C 255/58 (2006.01)
C07D 209/86 (2006.01) H01L 51/00 (2006.01)
H01L 51/50 (2006.01)
(52) CPC특허분류
C09K 11/06 (2013.01)
C07C 255/58 (2013.01)
(21) 출원번호 10-2016-7026574
(22) 출원일자(국제) 2015년02월25일
심사청구일자 2019년09월09일
(85) 번역문제출일자 2016년09월26일
(65) 공개번호 10-2016-0120784
(43) 공개일자 2016년10월18일
(86) 국제출원번호 PCT/JP2015/055314
(87) 국제공개번호 WO 2015/129715
국제공개일자 2015년09월03일
(30) 우선권주장
JP-P-2014-037719 2014년02월28일 일본(JP)
(56) 선행기술조사문헌
W02012143079 A1

(73) 특허권자
가부시키가이샤 큐릭스
일본 후쿠오카켄 후쿠오카시 니시쿠 규다이신마치 4-1
(72) 발명자
다네다 마사츠구
일본국 후쿠오카켄 후쿠오카시 히가시쿠 하코자키 6초메 10반 1고 고쿠리쓰다이가쿠호진 규슈다이가쿠 나이
시즈 가츠유키
일본국 후쿠오카켄 후쿠오카시 히가시쿠 하코자키 6초메 10반 1고 고쿠리쓰다이가쿠호진 규슈다이가쿠 나이
(뒷면에 계속)
(74) 대리인
특허법인코리아나

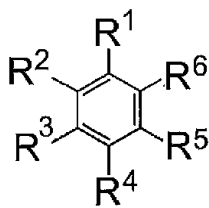
전체 청구항 수 : 총 12 항

심사관 : 송이화

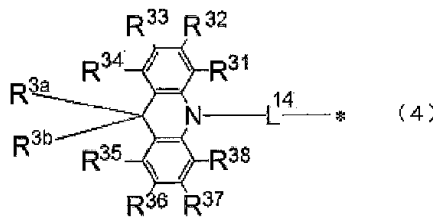
(54) 발명의 명칭 발광 재료, 유기 발광 소자 및 화합물

(57) 요약

일반식(1)로 나타내는 화합물은 발광 재료로서 유용하다. R¹, R³ 및 R⁵가 시아노기를 나타내거나, R¹, R², R⁴ 및 R⁵가 시아노기를 나타낸다. 나머지 R¹~R⁶은 하기 일반식(4) 등으로 나타내는 기를 나타낸다.

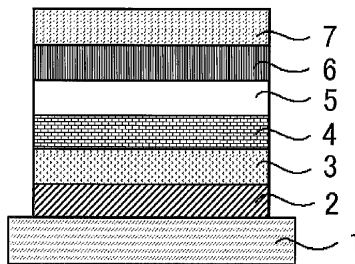


(1)



(4)

대표도 - 도1



(52) CPC특허분류

C07D 209/86 (2013.01)
H01L 51/0059 (2013.01)
H01L 51/0072 (2013.01)
H01L 51/5012 (2013.01)
C09K 2211/1014 (2013.01)
C09K 2211/1029 (2013.01)
C09K 2211/1033 (2013.01)
C09K 2211/1037 (2013.01)
C09K 2211/1044 (2013.01)

(72) 발명자

다나카 히로유키

일본국 후쿠오카켄 후쿠오카시 히가시쿠 하코자키
6초메 10반 1고 고쿠리쓰다이가쿠호진 규슈다이가
쿠 나이

노다 히로키

일본국 후쿠오카켄 후쿠오카시 히가시쿠 하코자키
6초메 10반 1고 고쿠리쓰다이가쿠호진 규슈다이가
쿠 나이

나카노타니 하지메

일본국 후쿠오카켄 후쿠오카시 히가시쿠 하코자키
6초메 10반 1고 고쿠리쓰다이가쿠호진 규슈다이가
쿠 나이

아다치 지하야

일본국 후쿠오카켄 후쿠오카시 히가시쿠 하코자키
6초메 10반 1고 고쿠리쓰다이가쿠호진 규슈다이가
쿠 나이

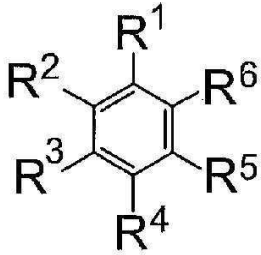
명세서

청구범위

청구항 1

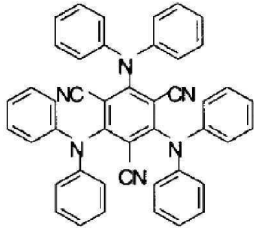
하기 일반식(1)로 나타내는 화합물로 이루어지는 발광 재료.

일반식 (1)

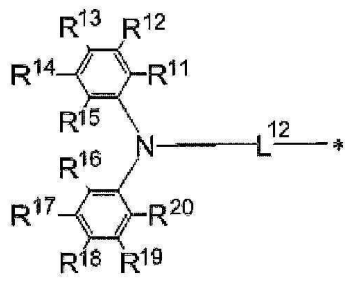


[일반식(1)에 있어서, R¹, R³ 및 R⁵가 시아노기를 나타내거나, R¹, R², R⁴ 및 R⁵가 시아노기를 나타내고, 나머지 R¹~R⁶이 각각 독립적으로 하기 일반식(2)~(8)중 어느 것으로 나타내는 기를 나타낸다. 단, 일반식(1)에는 하기 화합물 2는 포함되지 않는다.]

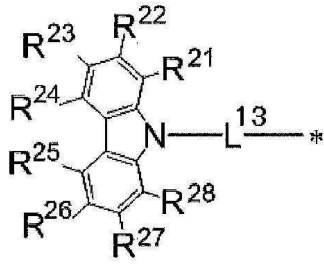
화합물 2



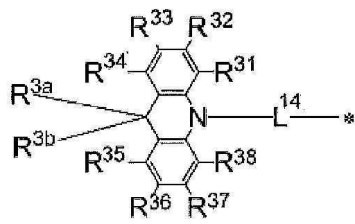
일반식 (2)



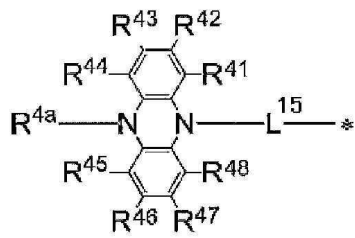
일반식 (3)



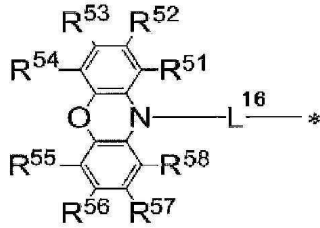
일반식 (4)



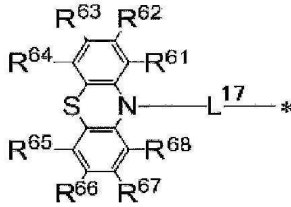
일반식 (5)



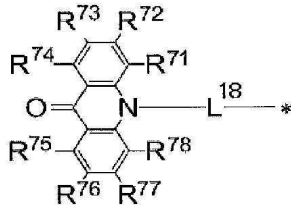
일반식 (6)



일반식 (7)



일반식 (8)



[일반식(2)~(8)에 있어서, L¹²~L¹⁸은 단결합, 또는 치환 혹은 무치환의 아틸렌기를 나타낸다. 단, R¹, R³ 및 R⁵가 시아노기일 때, L¹³은 치환 혹은 무치환의 아틸렌기이다. *는 일반식(1)에 있어서의 벤젠환에의 결합 부위를 나타낸다. R¹¹~R²⁰, R²¹~R²⁸, R³¹~R³⁸, R^{3a}, R^{3b}, R⁴¹~R⁴⁸, R^{4a}, R⁵¹~R⁵⁸, R⁶¹~R⁶⁸, R⁷¹~R⁷⁸은, 각각 독립적으로 수소 원자 또는 치환기를 나타낸다. R¹¹과 R¹², R¹²와 R¹³, R¹³과 R¹⁴, R¹⁴와 R¹⁵, R¹⁶과 R¹⁷, R¹⁷과 R¹⁸, R¹⁸과 R¹⁹, R¹⁹와 R²⁰, R²¹과 R²², R²²와 R²³, R²³과 R²⁴, R²⁴와 R²⁵, R²⁵와 R²⁶, R²⁶과 R²⁷, R²⁷과 R²⁸, R³¹과 R³², R³²와 R³³, R³³과 R³⁴, R³⁵와 R³⁶, R³⁶과 R³⁷, R³⁷과 R³⁸, R^{3a}와 R^{3b}, R⁴¹과 R⁴², R⁴²와 R⁴³, R⁴³과 R⁴⁴, R⁴⁵와 R⁴⁶, R⁴⁶과 R⁴⁷, R⁴⁷과 R⁴⁸, R⁵¹과 R⁵², R⁵²와 R⁵³, R⁵³과 R⁵⁴, R⁵⁵와 R⁵⁶, R⁵⁶과 R⁵⁷, R⁵⁷과 R⁵⁸, R⁶¹과 R⁶², R⁶²와 R⁶³, R⁶³과 R⁶⁴, R⁶⁵와 R⁶⁶, R⁶⁶과 R⁶⁷, R⁶⁷과 R⁶⁸, R⁷¹과 R⁷², R⁷²와 R⁷³, R⁷³과 R⁷⁴, R⁷⁵와 R⁷⁶, R⁷⁶과 R⁷⁷, R⁷⁷과 R⁷⁸은 각각 서로 결합해 환상 구조를 형성하고 있어도 된다.]

청구항 2

제 1 항에 있어서, 일반식(1)의 R¹, R³ 및 R⁵가 시아노기인 것을 특징으로 하는 발광 재료.

청구항 3

제 1 항에 있어서, 일반식(1)의 R¹, R², R⁴ 및 R⁵가 시아노기인 것을 특징으로 하는 발광 재료.

청구항 4

제 1 항 내지 제 3 항 중 어느 한 항에 있어서, 일반식(2)~(8)의 L¹²~L¹⁸이 치환 혹은 무치환의 페닐렌기인 것을 특징으로 하는 발광 재료.

청구항 5

제 1 항 내지 제 3 항 중 어느 한 항에 있어서, 일반식(1)의 상기 나머지 R¹~R⁶이, 모두 일반식(2)로 나타내는

기인 것을 특징으로 하는 발광 재료.

청구항 6

제 1 항 내지 제 3 항 중 어느 한 항에 있어서, 일반식(1)의 상기 나머지 R¹~R⁶이, 모두 일반식(3)으로 나타내는 기인 것을 특징으로 하는 발광 재료.

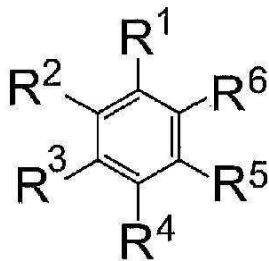
청구항 7

제 1 항 내지 제 3 항 중 어느 한 항에 있어서, 분자가 회전 대칭 구조를 갖고 있는 것을 특징으로 하는 발광 재료.

청구항 8

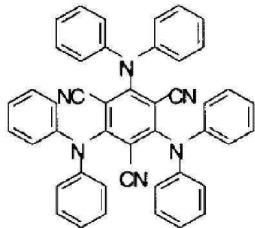
하기 일반식(1)로 나타내는 화합물로 이루어지는 지연 형광체.

일반식 (1)

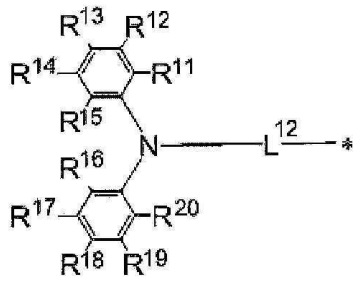


[일반식(1)에 있어서, R¹, R³ 및 R⁵ 가 시아노기를 나타내거나, R¹, R², R⁴ 및 R⁵ 가 시아노기를 나타내고, 나머지 R¹~R⁶ 이 각각 독립적으로 하기 일반식(2)~(8)중 어느 것으로 나타내는 기를 나타낸다. 단, 일반식(1)에는 하기 화합물 2는 포함되지 않는다.]

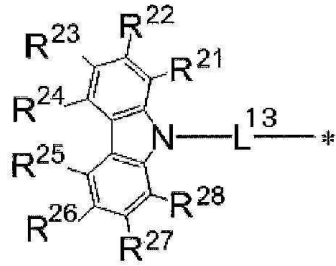
화합물 2



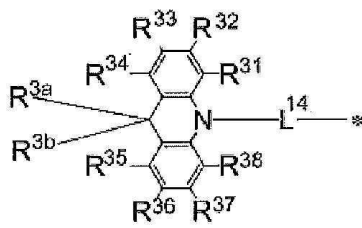
일반식 (2)



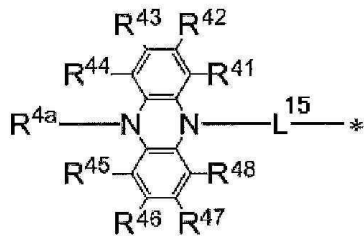
일반식 (3)



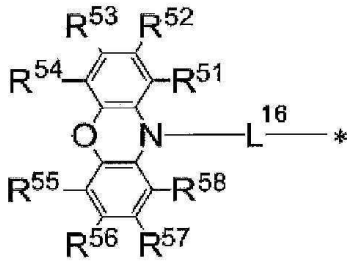
일반식 (4)



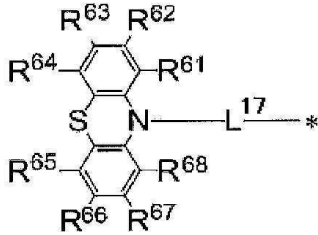
일반식 (5)



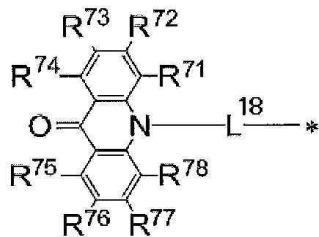
일반식 (6)



일반식 (7)



일반식 (8)



[일반식(2)~(8)에 있어서, L¹²~L¹⁸은 단결합, 또는 치환 혹은 무치환의 아릴렌기를 나타낸다. 단, R¹, R³ 및 R⁵가 시아노기일 때, L¹³은 치환 혹은 무치환의 아릴렌기이다. *는 일반식(1)에 있어서의 벤젠환에의 결합 부위를 나타낸다. R¹¹~R²⁰, R²¹~R²⁸, R³¹~R³⁸, R^{3a}, R^{3b}, R⁴¹~R⁴⁸, R^{4a}, R⁵¹~R⁵⁸, R⁶¹~R⁶⁸, R⁷¹~R⁷⁸은, 각각 독립적으로 수소 원자 또는 치환기를 나타낸다. R¹¹과 R¹², R¹²와 R¹³, R¹³과 R¹⁴, R¹⁴와 R¹⁵, R¹⁶과 R¹⁷, R¹⁷과 R¹⁸, R¹⁸과 R¹⁹, R¹⁹와 R²⁰, R²¹과 R²², R²²와 R²³, R²³과 R²⁴, R²⁴와 R²⁵, R²⁵와 R²⁶, R²⁶과 R²⁷, R²⁷과 R²⁸, R³¹과 R³², R³²와 R³³, R³³과 R³⁴, R³⁵와 R³⁶, R³⁶과 R³⁷, R³⁷과 R³⁸, R^{3a}와 R^{3b}, R⁴¹과 R⁴², R⁴²와 R⁴³, R⁴³과 R⁴⁴, R⁴⁵와 R⁴⁶, R⁴⁶과 R⁴⁷, R⁴⁷과 R⁴⁸, R⁵¹과 R⁵², R⁵²와 R⁵³, R⁵³과 R⁵⁴, R⁵⁵와 R⁵⁶, R⁵⁶과 R⁵⁷, R⁵⁷과 R⁵⁸, R⁶¹과 R⁶², R⁶²와 R⁶³, R⁶³과 R⁶⁴, R⁶⁵와 R⁶⁶, R⁶⁶과 R⁶⁷, R⁶⁷과 R⁶⁸, R⁷¹과 R⁷², R⁷²와 R⁷³, R⁷³과 R⁷⁴, R⁷⁵와 R⁷⁶, R⁷⁶과 R⁷⁷, R⁷⁷과 R⁷⁸은 각각 서로 결합해 환상 구조를 형성하고 있어도 된다.]

청구항 9

제 1 항 내지 제 3 항 중 어느 한 항에 기재된 발광 재료를 포함하는 것을 특징으로 하는 유기 발광 소자.

청구항 10

제 9 항에 있어서, 지연 형광을 방사하는 것을 특징으로 하는 유기 발광 소자.

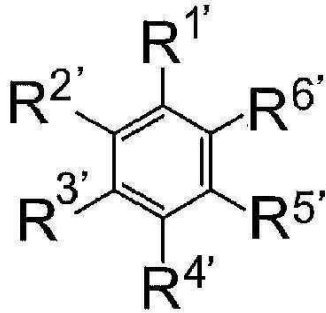
청구항 11

제 9 항에 있어서, 유기 일렉트로루미네선스 소자인 것을 특징으로 하는 유기 발광 소자.

청구항 12

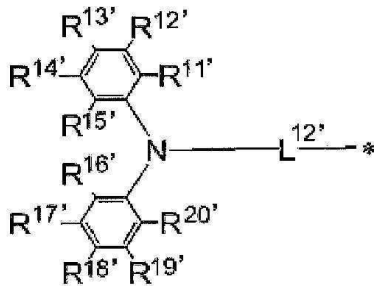
하기 일반식(1')로 나타내는 화합물.

일반식 (1')

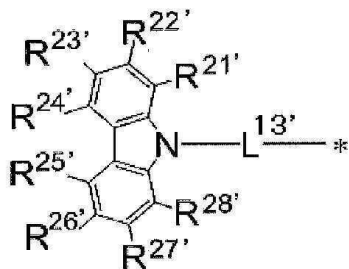


[일반식(1')에 있어서, R^{1'}, R^{3'} 및 R^{5'}가 시아노기를 나타내거나, R^{1'}, R^{2'}, R^{4'} 및 R^{5'}가 시아노기를 나타내고, 나머지 R^{1'}~R^{6'}가 각각 독립적으로 하기 일반식(2')~(8') 중 어느 것으로 나타내는 기를 나타낸다.]

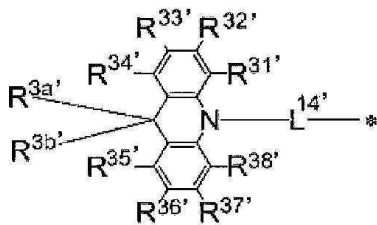
일반식 (2')



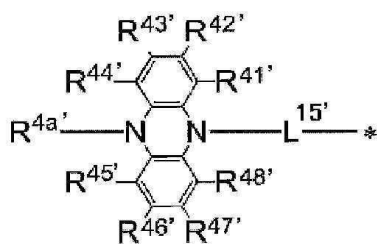
일반식 (3')



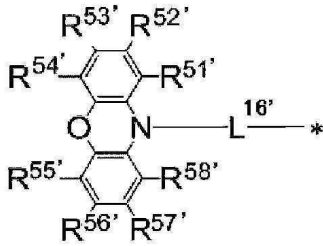
일반식 (4')



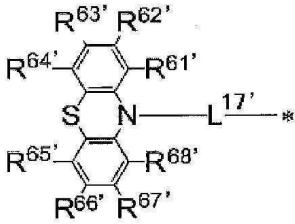
일반식 (5')



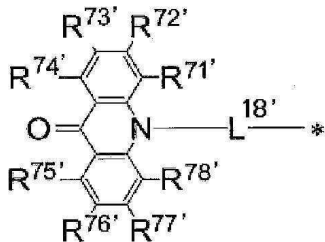
일반식 (6')



일반식 (7')



일반식 (8')



[일반식(2')~(8')에 있어서 L^{12'}~L^{18'}는, R^{1'}, R^{3'} 및 R^{5'}가 시아노기일 때에는, 치환 혹은 무치환의 아틸렌기를 나타낸다. 일반식(2')~(8')에 있어서 L^{12'}~L^{18'}는, R^{1'}, R^{2'}, R^{4'} 및 R^{5'}가 시아노기일 때에는, 단결합, 또는 치환 혹은 무치환의 아틸렌기를 나타낸다. *는 일반식(1)에 있어서의 벤젠환에의 결합 부위를 나타낸다. R^{11'}~R^{20'}, R^{21'}~R^{28'}, R^{31'}~R^{38'}, R^{3a'}, R^{3b'}, R^{41'}~R^{48'}, R^{4a'}, R^{51'}~R^{58'}, R^{61'}~R^{68'}, R^{71'}~R^{78'}는, 각각 독립적으로 수소 원자 또는 치환기를 나타낸다. R^{11'}와 R^{12'}, R^{12'}와 R^{13'}, R^{13'}와 R^{14'}, R^{14'}와 R^{15'}, R^{16'}와 R^{17'}, R^{17'}와 R^{18'}, R^{18'}와 R^{19'}, R^{19'}와 R^{20'}, R^{21'}와 R^{22'}, R^{22'}와 R^{23'}, R^{23'}와 R^{24'}, R^{24'}와 R^{25'}, R^{25'}와 R^{26'}, R^{26'}와 R^{27'}, R^{27'}와 R^{28'}, R^{31'}와 R^{32'}, R^{32'}와 R^{33'}, R^{33'}와 R^{34'}, R^{35'}와 R^{36'}, R^{36'}와 R^{37'}, R^{37'}와 R^{38'}, R^{3a'}와 R^{3b'}, R^{41'}와 R^{42'}, R^{42'}와 R^{43'}, R^{43'}와 R^{44'}, R^{45'}와 R^{46'}, R^{46'}와 R^{47'}, R^{47'}와 R^{48'}, R^{51'}와 R^{52'}, R^{52'}와 R^{53'}, R^{53'}와 R^{54'}, R^{55'}와 R^{56'}, R^{56'}와 R^{57'}, R^{57'}와 R^{58'}, R^{61'}와 R^{62'}, R^{62'}와 R^{63'}, R^{63'}와 R^{64'}, R^{65'}와 R^{66'}, R^{66'}와 R^{67'}, R^{67'}와 R^{68'}, R^{71'}와 R^{72'}, R^{72'}와 R^{73'}, R^{73'}와 R^{74'}, R^{75'}와 R^{76'}, R^{76'}와 R^{77'}, R^{77'}와 R^{78'}는 각각 서로 결합해 환상 구조를 형성하고 있어도 된다.]

발명의 설명

기술 분야

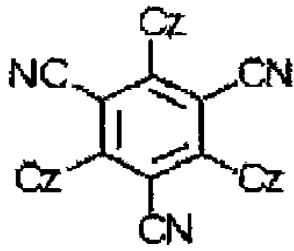
[0001] 본 발명은, 발광 재료로서 유용한 화합물과 그것을 사용한 유기 발광 소자에 관한 것이다.

배경 기술

[0002] 유기 일렉트로루미네선스 소자(유기 EL 소자) 등의 유기 발광 소자의 발광 효율을 높이는 연구가 활발히 행해지고 있다. 특히, 유기 일렉트로루미네선스 소자를 구성하는 전자 수송 재료, 정공 수송 재료, 발광 재료 등을 새롭게 개발해 조합함으로써, 발광 효율을 높이는 연구가 다양하게 이루어지고 있다. 예를 들어, 발광층의 재료로서는 카르바졸릴기나 디페닐아미노기 등의 치환 아미노기를 갖는 화합물이 알려져 있고, 그 중에는 시아노기를 갖는 것도 보인다. 예를 들어 특허문헌 1에는, 하기 식으로 나타내는 카르바졸릴기(Cz)와 시아노기를 갖는 화합

물이 발광층의 호스트 재료로서 사용할 수 있는 것이 기재되어 있다.

[0003] [화학식 1]



1-20

[0004]

선행기술문헌

특허문헌

[0005] (특허문헌 0001) 일본 특허공개 2009-94486호 공보

발명의 내용

해결하려는 과제

[0006] 특허문헌 1에서는, 여러 가지 화합물이 발광층의 호스트 재료로서 유용한 것이 구체적으로 증명되어 있지만, 그 이외의 용도에 대해서는 실증되어 있지 않다. 발광 재료(도펀트 재료)는, 호스트 재료와는 요구되는 성질이나 기능이 상이하므로, 특허문헌 1에 기재된 화합물의 발광 재료로서의 유용성에 대해 확증은 없다.

[0007] 그래서 본 발명자들은, 치환 아미노기와 시아노기를 갖는 화합물군에 대해 여러 가지 검토를 개시해, 다수의 유사한 화합물 중에서 발광 특성이 우수한 화합물을 찾아내는 것을 목표로 해 연구를 거듭했다. 그리고, 발광 재료로서 유용한 화합물의 일반식을 도출해, 발광 효율이 높은 유기 발광 소자의 구성을 일반화하는 것을 목적으로 해 예의 검토를 진행했다.

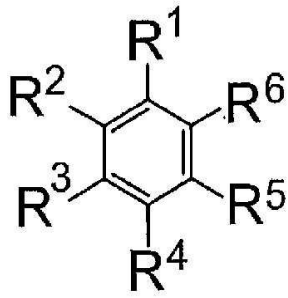
과제의 해결 수단

[0008] 예의 검토를 진행한 결과, 본 발명자들은 치환 아미노기와 시아노기를 갖는 화합물 중, 특정 구조를 갖는 것이 발광 재료로서 우수한 성질을 갖는 것을 알아냈다. 또, 그러한 화합물군 중에 지연 형광 재료로서 유용한 것이 있는 것을 알아내어, 발광 효율이 높은 유기 발광 소자를 염가로 제공할 수 있을 것을 명백히 하였다. 본 발명자들은, 이들 지견에 기초하여, 상기 과제를 해결하는 수단으로서 이하의 본 발명을 제공하기에 이르렀다.

[0009] [1] 하기 일반식(1)로 나타내는 화합물로 이루어지는 발광 재료.

[0010] [화학식 2]

일반식(1)



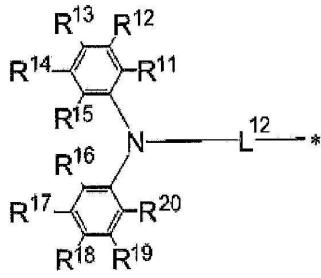
[0011]

[0012] [일반식(1)에 있어서, R¹, R³ 및 R⁵가 시아노기를 나타내거나, R¹, R², R⁴ 및 R⁵가 시아노기를 나타내고, 나머지 R¹~R⁶이 각각 독립적으로 하기 일반식(2)~(8) 중 어느 것으로 나타내는 기를 나타낸다]

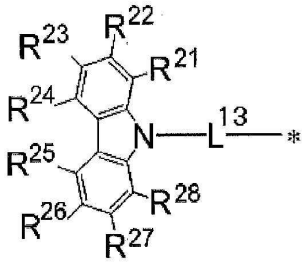
[0013]

[화학식 3-1]

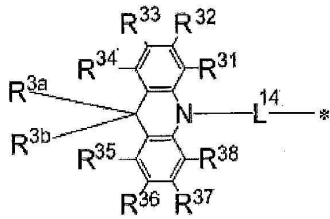
일반식 (2)



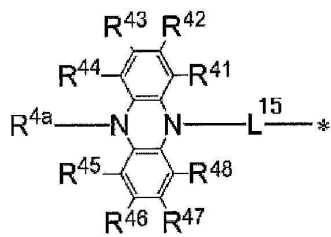
일반식 (3)



일반식 (4)



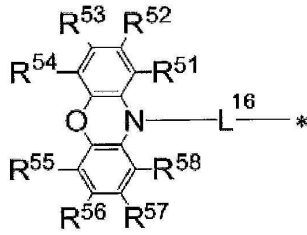
일반식 (5)



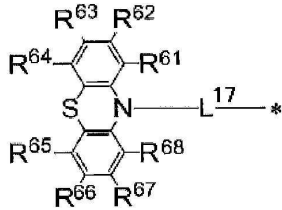
[0014]

[0015] [화학식 3-2]

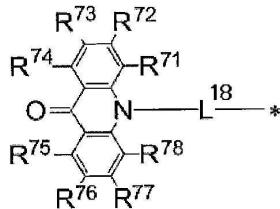
일반식 (6)



일반식 (7)



일반식 (8)



[0016]

[0017] [일반식(2)~(8)에 있어서, L¹²~L¹⁸은 단결합, 또는 치환 혹은 무치환의 아릴렌기를 나타내고, *는 일반식(1)에 있어서의 벤젠환에의 결합 부위를 나타낸다. R¹¹~R²⁰, R²¹~R²⁸, R³¹~R³⁸, R^{3a}, R^{3b}, R⁴¹~R⁴⁸, R^{4a}, R⁵¹~R⁵⁸, R⁶¹~R⁶⁸, R⁷¹~R⁷⁸은, 각각 독립적으로 수소 원자 또는 치환기를 나타낸다. R¹¹과 R¹², R¹²와 R¹³, R¹³과 R¹⁴, R¹⁴와 R¹⁵, R¹⁶과 R¹⁷, R¹⁷과 R¹⁸, R¹⁸과 R¹⁹, R¹⁹와 R²⁰, R²¹과 R²², R²²와 R²³, R²³과 R²⁴, R²⁴와 R²⁵, R²⁵와 R²⁶, R²⁶과 R²⁷, R²⁷과 R²⁸, R³¹과 R³², R³²와 R³³, R³³과 R³⁴, R³⁵와 R³⁶, R³⁶과 R³⁷, R³⁷과 R³⁸, R^{3a}와 R^{3b}, R⁴¹과 R⁴², R⁴²와 R⁴³, R⁴³과 R⁴⁴, R⁴⁵와 R⁴⁶, R⁴⁶과 R⁴⁷, R⁴⁷과 R⁴⁸, R⁵¹과 R⁵², R⁵²와 R⁵³, R⁵³과 R⁵⁴, R⁵⁵와 R⁵⁶, R⁵⁶과 R⁵⁷, R⁵⁷과 R⁵⁸, R⁶¹과 R⁶², R⁶²와 R⁶³, R⁶³과 R⁶⁴, R⁶⁵와 R⁶⁶, R⁶⁶과 R⁶⁷, R⁶⁷과 R⁶⁸, R⁷¹과 R⁷², R⁷²와 R⁷³, R⁷³과 R⁷⁴, R⁷⁵와 R⁷⁶, R⁷⁶와 R⁷⁷, R⁷⁷과 R⁷⁸은 각각 서로 결합해 환상 구조를 형성하고 있어도 된다.]

[0018] [2] 일반식(1)의 R¹, R³ 및 R⁵가 시아노기인 것을 특징으로 하는 [1]에 기재된 발광 재료.

[0019] [3] 일반식(1)의 R¹, R², R⁴ 및 R⁵가 시아노기인 것을 특징으로 하는 [1]에 기재된 발광 재료.

[0020] [4] 일반식(2)~(8)의 L¹²~L¹⁸이 치환 혹은 무치환의 페닐렌기인 것을 특징으로 하는 [1]~[3] 중 어느 한 항에 기재된 발광 재료.

[0021] [5] 일반식(1)의 상기 나머지 R¹~R⁶이, 모두 일반식(2)로 나타내는 기인 것을 특징으로 하는 [1]~[4] 중 어느 한 항에 기재된 발광 재료.

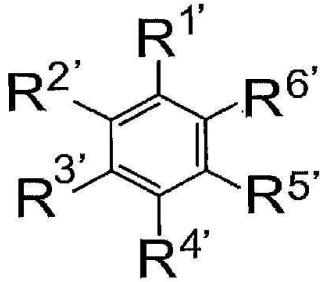
[0022] [6] 일반식(1)의 상기 나머지 R¹~R⁶이, 모두 일반식(3)으로 나타내는 기인 것을 특징으로 하는 [1]~[4] 중 어느 한 항에 기재된 발광 재료.

[0023] [7] 분자가 회전 대칭 구조를 가지고 있는 것을 특징으로 하는 [1]~[6] 중 어느 한 항에 기재된 발광 재료.

[0024] [8] 상기 일반식(1)로 나타내는 화합물로 이루어지는 지연 형광체.

- [0025] [9] [1]~[7] 중 어느 한 항에 기재된 발광 재료를 포함하는 것을 특징으로 하는 유기 발광 소자.
- [0026] [10] 지연 형광을 방사하는 것을 특징으로 하는 [9]에 기재된 유기 발광 소자.
- [0027] [11] 유기 일렉트로루미네선스 소자인 것을 특징으로 하는 [9] 또는 [10]에 기재된 유기 발광 소자.
- [0028] [12] 하기 일반식(1')로 나타내는 화합물.
- [0029] [화학식 4]

일반식(1')

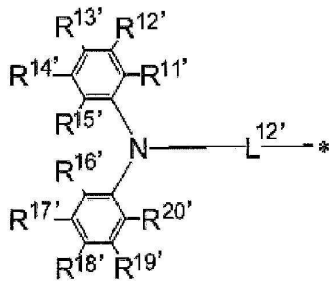


- [0030]
- [0031] [일반식(1')에 있어서, R^{1'}, R^{3'} 및 R^{5'}가 시아노기를 나타내거나, R^{1'}, R^{2'}, R^{4'} 및 R^{5'}가 시아노기를 나타내고, 나머지 R^{1'}~R^{6'}이 각각 독립적으로 하기 일반식(2')~(8') 중 어느 것으로 나타내는 기를 나타낸다]

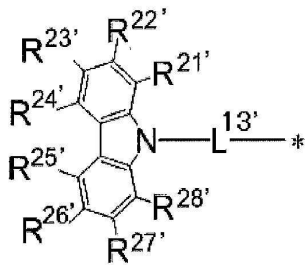
[0032]

[화학식 5-1]

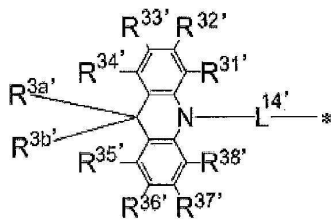
일반식 (2')



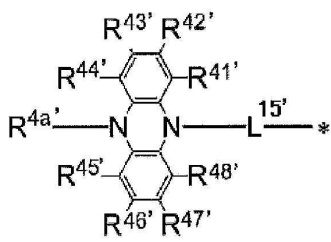
일반식 (3')



일반식 (4')



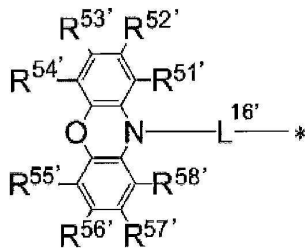
일반식 (5')



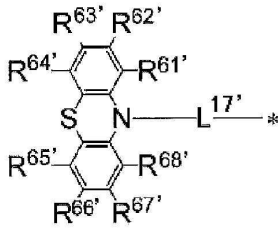
[0033]

[0034] [화학식 5-2]

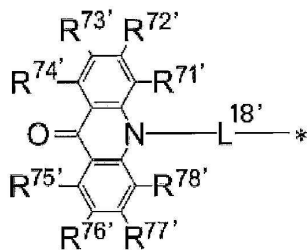
일반식 (6')



일반식 (7')



일반식 (8')



[0035]

[0036] [일반식(2')~(8')에 있어서, L^{12'}~L^{18'}는 단결합, 또는 치환 혹은 무치환의 아릴렌기를 나타내고, *는 일반식 (1)에 있어서의 벤젠환에의 결합 부위를 나타낸다. R^{11'}~R^{20'}, R^{21'}~R^{28'}, R^{31'}~R^{38'}, R^{3a'}, R^{3b'}, R^{41'}~R^{48'}, R^{4a'}, R^{51'}~R^{58'}, R^{61'}~R^{68'}, R^{71'}~R^{78'}는, 각각 독립적으로 수소 원자 또는 치환기를 나타낸다. R^{11'}와 R^{12'}, R^{12'}와 R^{13'}, R^{13'}와 R^{14'}, R^{14'}와 R^{15'}, R^{16'}와 R^{17'}, R^{17'}와 R^{18'}, R^{18'}와 R^{19'}, R^{19'}와 R^{20'}, R^{21'}와 R^{22'}, R^{22'}와 R^{23'}, R^{23'}와 R^{24'}, R^{24'}와 R^{25'}, R^{25'}와 R^{26'}, R^{26'}와 R^{27'}, R^{27'}와 R^{28'}, R^{31'}와 R^{32'}, R^{32'}와 R^{33'}, R^{33'}와 R^{34'}, R^{35'}와 R^{36'}, R^{36'}와 R^{37'}, R^{37'}와 R^{38'}, R^{3a'}와 R^{3b'}, R^{41'}와 R^{42'}, R^{42'}와 R^{43'}, R^{43'}와 R^{44'}, R^{45'}와 R^{46'}, R^{46'}와 R^{47'}, R^{47'}와 R^{48'}, R^{51'}와 R^{52'}, R^{52'}와 R^{53'}, R^{53'}와 R^{54'}, R^{55'}와 R^{56'}, R^{56'}와 R^{57'}, R^{57'}와 R^{58'}, R^{61'}와 R^{62'}, R^{62'}와 R^{63'}, R^{63'}와 R^{64'}, R^{65'}와 R^{66'}, R^{66'}와 R^{67'}, R^{67'}와 R^{68'}, R^{71'}와 R^{72'}, R^{72'}와 R^{73'}, R^{73'}와 R^{74'}, R^{75'}와 R^{76'}, R^{76'}와 R^{77'}, R^{77'}와 R^{78'}는 각각 서로 결합해 환상 구조를 형성하고 있어도 된다.]

[0037]

발명의 효과

본 발명의 화합물은, 발광 재료로서 유용하다. 또, 본 발명의 화합물 중에는 지연 형광을 방사하는 것이 포함되어 있다. 본 발명의 화합물을 발광 재료로서 사용한 유기 발광 소자는, 높은 발광 효율을 실현할 수 있다.

[0038]

도면의 간단한 설명

도 1은 유기 일렉트로루미네선스 소자의 층 구성예를 나타내는 개략 단면도이다.

도 2는 실시예 1의 화합물 1의 톨루엔 용액의 흡수 발광 스펙트럼이다.

도 3은 실시예 1의 화합물 1만의 박막을 갖는 유기 포토루미네선스 소자의 흡수 스펙트럼이다.

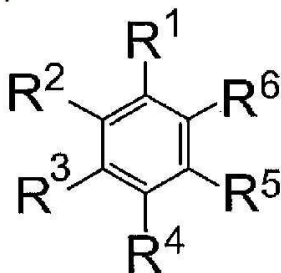
도 4는 실시예 1의 화합물 1의 박막형 유기 포토루미네선스 소자의 발광 스펙트럼이다.

- 도 5는 실시예 1의 화합물 1과 mCP의 박막형 유기 포토루미네선스 소자의 발광 스펙트럼이다.
- 도 6은 실시예 1의 화합물 1의 톨루엔 용액의 과도 감쇠 곡선이다.
- 도 7은 실시예 1의 화합물 1과 mCP의 박막형 유기 포토루미네선스 소자의 과도 감쇠 곡선이다.
- 도 8은 실시예 2의 화합물 2의 톨루엔 용액의 흡수 발광 스펙트럼이다.
- 도 9는 실시예 2의 화합물 2의 박막형 유기 포토루미네선스 소자의 흡수 스펙트럼이다.
- 도 10은 실시예 2의 화합물 2의 박막형 유기 포토루미네선스 소자의 발광 스펙트럼이다.
- 도 11은 실시예 2의 화합물 2와 mCP의 박막형 유기 포토루미네선스 소자의 발광 스펙트럼이다.
- 도 12는 실시예 2의 화합물 2와 mCP의 박막형 유기 포토루미네선스 소자의 과도 감쇠 곡선이다.
- 도 13은 실시예 3의 화합물 2를 사용한 유기 일렉트로루미네선스 소자의 발광 스펙트럼이다.
- 도 14는 실시예 3의 화합물 2를 사용한 유기 일렉트로루미네선스 소자의 전압-전류 밀도-휘도 특성을 나타내는 그래프이다.
- 도 15는 실시예 3의 화합물 2를 사용한 유기 일렉트로루미네선스 소자의 휘도-외부 양자 효율-전력 효율 특성을 나타내는 그래프이다.

발명을 실시하기 위한 구체적인 내용

- [0039] 이하에 있어서, 본 발명의 내용에 대해 상세하게 설명한다. 이하에 기재하는 구성 요건의 설명은, 본 발명의 대표적인 실시양태나 구체예에 기초하여 이루어지는 경우가 있지만, 본 발명은 그러한 실시양태나 구체예에 한정되는 것은 아니다. 또한, 본 명세서에 있어서 「~」를 사용하여 나타내는 수치 범위는, 「~」의 전후에 기재되는 수치를 하한값 및 상한값으로서 포함하는 범위를 의미한다. 또, 본 발명에 사용되는 화합물의 분자 내에 존재하는 수소 원자의 동위체중(同位體種)은 특별히 한정되지 않고, 예를 들어 분자 내의 수소 원자가 모두 ¹H여도 되고, 일부 또는 전부가 ²H(듀테륨 D)여도 된다.
- [0040] [일반식(1)로 나타내는 화합물]
- [0041] 본 발명의 발광 재료는, 하기 일반식(1)로 나타내는 화합물로 이루어지는 것을 특징으로 한다.
- [0042] [화학식 6]

일반식(1)



- [0043]
- [0044] 일반식(1)에 있어서, R¹, R³ 및 R⁵가 시아노기를 나타내거나, R¹, R², R⁴ 및 R⁵가 시아노기를 나타내고, 나머지 R¹~R⁶이 각각 독립적으로 하기 일반식(2)~(8) 중 어느 것으로 나타내는 기를 나타낸다. 즉, R¹, R³ 및 R⁵가 시아노기일 때, 나머지 R², R⁴ 및 R⁶은 각각 독립적으로 하기 일반식(2)~(8)로 나타내는 기 중 어느 것이다. 또, R¹, R², R⁴ 및 R⁵가 시아노기일 때, 나머지 R³, R⁶은 각각 독립적으로 하기 일반식(2)~(8)로 나타내는 기 중 어느 것이다.
- [0045] 나머지 R¹~R⁶은, 전부가 일반식(2)~(8) 중 어느 1개의 일반식으로 나타내는 것이어도 되고, 서로 상이한 일반

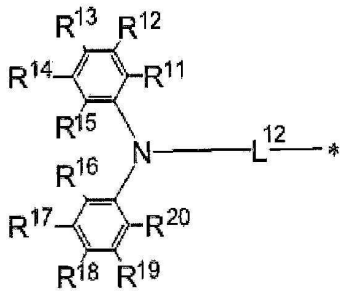
식으로 나타내는 것이어도 된다.

[0046] 나머지 $R^1 \sim R^6$ 의 전부가 일반식(2)~(8) 중 어느 1개의 일반식으로 나타내어지는 경우에는, 나머지 $R^1 \sim R^6$ 의 전부가 동일한 구조를 갖는 기인 것이 바람직하다. 나머지 $R^1 \sim R^6$ 의 전부가 동일한 구조를 갖는 기일 때, 일반식(1)로 나타내는 화합물은 회전 대칭 구조를 갖게 된다. 나머지 $R^1 \sim R^6$ 의 전부가 동일한 구조를 갖는 화합물은, 예를 들어 도펀트로서 사용하는 경우 등에 유용하다.

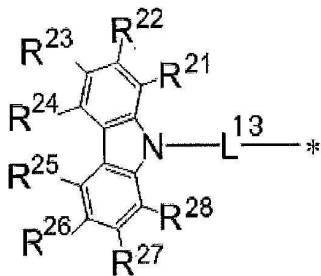
[0047] 한편, 나머지 $R^1 \sim R^6$ 의 일부 또는 전부가 상이한 구조인 화합물도 유용하다. 그러한 화합물은, 예를 들어 그 화합물만으로 이루어지는 층(니트막)을 형성해 발광층으로서 사용하는 경우 등에 유용하다.

[0048] [화학식 7-1]

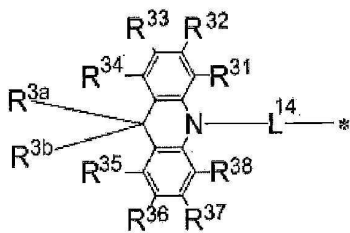
일반식 (2)



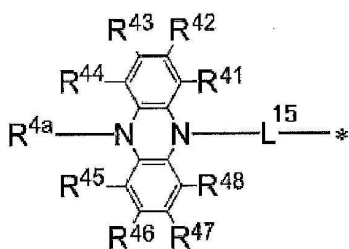
일반식 (3)



일반식 (4)



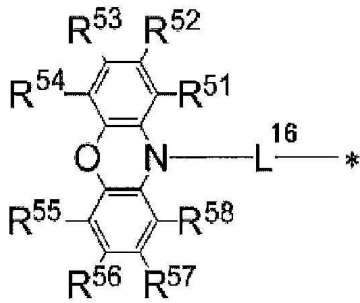
일반식 (5)



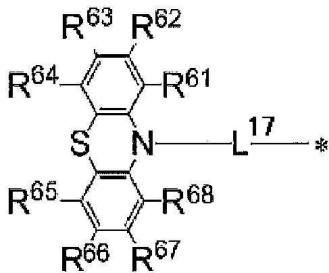
[0049]

[0050] [화학식 7-2]

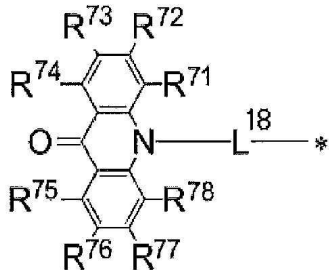
일반식 (6)



일반식 (7)



일반식 (8)



[0051]

[0052] 일반식(2)~(8)에 있어서, L¹²~L¹⁸은 단결합, 또는 치환 혹은 무치환의 아틸렌기를 나타내고, *는 일반식(1)에 있어서의 벤젠환에의 결합 부위를 나타낸다. L¹²~L¹⁸이 아틸렌기일 때, 아틸렌기로서는 탄소수 6~18의 아틸렌기인 것이 바람직하다. 탄소수 6~18의 아틸렌기로서는, 페닐렌기, 비페닐렌기, 플루오레닐렌기, 트리페닐렌기 등을 들 수 있고, 보다 바람직한 연결기는 페닐렌기이며, 더 바람직한 연결기는 1,4-페닐렌기이다. 아틸렌기가 치환기를 가질 때의 치환기의 설명과 바람직한 범위에 대해서는, 하기 R¹¹~R²⁰ 등이 취할 수 있는 치환기의 설명과 바람직한 범위를 참조할 수 있다. 또, L¹²~L¹⁸은 단결합인 것도 바람직하다.

[0053] R¹¹~R²⁰, R²¹~R²⁸, R³¹~R³⁸, R^{3a}, R^{3b}, R⁴¹~R⁴⁸, R^{4a}, R⁵¹~R⁵⁸, R⁶¹~R⁶⁸, R⁷¹~R⁷⁸은, 각각 독립적으로 수소 원자 또는 치환기를 나타낸다. 치환기의 수는 특별히 제한되지 않고, R¹¹~R²⁰, R²¹~R²⁸, R³¹~R³⁸, R^{3a}, R^{3b}, R⁴¹~R⁴⁸, R^{4a}, R⁵¹~R⁵⁸, R⁶¹~R⁶⁸, R⁷¹~R⁷⁸의 전부가 무치환(즉 수소 원자)이어도 된다. 일반식(2)~(8)의 각각에 있어서, R¹¹~R²⁰, R²¹~R²⁸, R³¹~R³⁸, R^{3a}, R^{3b}, R⁴¹~R⁴⁸, R^{4a}, R⁵¹~R⁵⁸, R⁶¹~R⁶⁸, R⁷¹~R⁷⁸ 중 2개 이상이 치환기인 경우, 복수의 치환기는 서로 동일해도 되고 상이해도 된다.

[0054] R¹¹~R²⁰, R²¹~R²⁸, R³¹~R³⁸, R^{3a}, R^{3b}, R⁴¹~R⁴⁸, R^{4a}, R⁵¹~R⁵⁸, R⁶¹~R⁶⁸, R⁷¹~R⁷⁸이 취할 수 있는 치환기로서, 예를 들어 하이드록시기, 할로젠 원자, 시아노기, 탄소수 1~20의 알킬기, 탄소수 1~20의 알콕시기, 탄소수 1~20의 알킬티오기, 탄소수 1~20의 알킬 치환 아미노기, 탄소수 2~20의 아실기, 탄소수 6~40의 아릴기, 탄소수 3~40의 헤테로아릴기, 탄소수 2~10의 알케닐기, 탄소수 2~10의 알키닐기, 탄소수 2~10의 알콕시카르보닐기, 탄

소수 1~10의 알킬술폴닐기, 탄소수 1~10의 할로알킬기, 아미드기, 탄소수 2~10의 알킬아미드기, 탄소수 3~20의 트리알킬실릴기, 탄소수 4~20의 트리알킬실릴알킬기, 탄소수 5~20의 트리알킬실릴알케닐기, 탄소수 5~20의 트리알킬실릴알킬닐기 및 니트로기 등을 들 수 있다. 이들 구체예 중, 추가로 치환기에 의해 치환 가능한 것은 치환되어 있어도 된다. 보다 바람직한 치환기는, 할로겐 원자, 시아노기, 탄소수 1~20의 치환 혹은 무치환의 알킬기, 탄소수 1~20의 알콕시기, 탄소수 6~40의 치환 혹은 무치환의 아릴기, 탄소수 3~40의 치환 혹은 무치환의 헤테로아릴기, 탄소수 1~20의 디알킬 치환 아미노기이다. 더 바람직한 치환기는, 불소 원자, 염소 원자, 시아노기, 탄소수 1~10의 치환 혹은 무치환의 알킬기, 탄소수 1~10의 치환 혹은 무치환의 알콕시기, 탄소수 6~15의 치환 혹은 무치환의 아릴기, 탄소수 3~12의 치환 혹은 무치환의 헤테로아릴기이다.

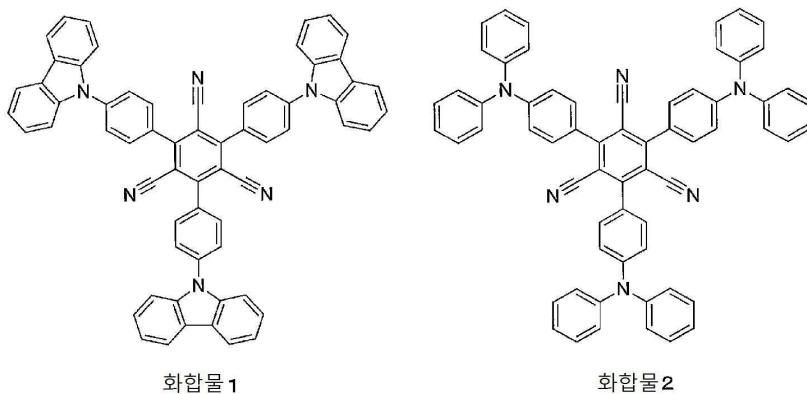
[0055] R^{11} 과 R^{12} , R^{12} 와 R^{13} , R^{13} 과 R^{14} , R^{14} 와 R^{15} , R^{16} 과 R^{17} , R^{17} 과 R^{18} , R^{18} 과 R^{19} , R^{19} 와 R^{20} , R^{21} 과 R^{22} , R^{22} 와 R^{23} , R^{23} 과 R^{24} , R^{24} 와 R^{25} , R^{25} 와 R^{26} , R^{26} 과 R^{27} , R^{27} 과 R^{28} , R^{31} 과 R^{32} , R^{32} 와 R^{33} , R^{33} 과 R^{34} , R^{35} 와 R^{36} , R^{36} 과 R^{37} , R^{37} 과 R^{38} , R^{3a} 와 R^{3b} , R^{41} 과 R^{42} , R^{42} 와 R^{43} , R^{43} 과 R^{44} , R^{45} 와 R^{46} , R^{46} 과 R^{47} , R^{47} 과 R^{48} , R^{51} 과 R^{52} , R^{52} 와 R^{53} , R^{53} 과 R^{54} , R^{55} 와 R^{56} , R^{56} 과 R^{57} , R^{57} 과 R^{58} , R^{61} 과 R^{62} , R^{62} 와 R^{63} , R^{63} 과 R^{64} , R^{65} 와 R^{66} , R^{66} 과 R^{67} , R^{67} 과 R^{68} , R^{71} 과 R^{72} , R^{72} 와 R^{73} , R^{73} 과 R^{74} , R^{75} 와 R^{76} , R^{76} 과 R^{77} , R^{77} 과 R^{78} 은 서로 결합해 환상 구조를 형성하고 있어도 된다. 환상 구조는 방향환이어도 되고 지방환이어도 되며, 또 헤테로 원자를 포함하는 것이어도 되고, 또한 환상 구조는 2환 이상의 축합환이어도 된다. 여기서 말하는 헤테로 원자로서는, 질소 원자, 산소 원자 및 황 원자로 이루어지는 군에서 선택되는 것이 바람직하다. 형성되는 환상 구조의 예로서 벤젠환, 나프탈렌환, 피리딘환, 피리다진환, 피리미딘환, 피라진환, 피롤환, 이미다졸환, 피라졸환, 트리아졸환, 이미다졸린환, 옥사졸환, 이소옥사졸환, 티아졸환, 이소티아졸환, 시클로헥사디엔환, 시클로헥센환, 시클로펜타엔환, 시클로헵타트리엔환, 시클로헵타디엔환, 시클로헵타엔환 등을 들 수 있다.

[0056] $R^{11} \sim R^{20}$, $R^{21} \sim R^{28}$, $R^{31} \sim R^{38}$, R^{3a} , R^{3b} , $R^{41} \sim R^{48}$, R^{4a} , $R^{51} \sim R^{58}$, $R^{61} \sim R^{68}$, $R^{71} \sim R^{78}$ 은, 각각 독립적으로 상기 일반식 (2)~(8) 중 어느 것으로 나타내는 기인 것도 바람직하다. 또, R^{3a} 및 R^{3b} 는 치환 혹은 무치환의 알킬기인 것이 바람직하고, 탄소수 1~6의 치환 혹은 무치환의 알킬기인 것이 보다 바람직하다. 일반식(2)~(8)에 치환기가 존재하고 있는 경우, 그 치환기는 일반식(2)이면 $R^{12} \sim R^{19}$ 중 어느 것인 것이 바람직하고, 일반식(3)이면 $R^{22} \sim R^{27}$ 중 어느 것인 것이 바람직하며, 일반식(4)이면 $R^{32} \sim R^{37}$, R^{3a} , R^{3b} 중 어느 것인 것이 바람직하고, R^{3a} 및 R^{3b} 중 적어도 어느 것인 것이 보다 바람직하다. 일반식(5)이면 $R^{42} \sim R^{47}$ 중 어느 것인 것이 바람직하고, 일반식(6)이면 $R^{52} \sim R^{57}$ 중 어느 것인 것이 바람직하며, 일반식(7)이면 $R^{62} \sim R^{67}$ 중 어느 것인 것이 바람직하고, 일반식(8)이면 $R^{72} \sim R^{77}$ 중 어느 것인 것이 바람직하다.

[0057] 일반식(1)로 나타내는 화합물의 바람직한 예로서 R^1 , R^3 및 R^5 가 시아노기이거나, R^1 , R^2 , R^4 및 R^5 가 시아노기이고, 나머지 $R^1 \sim R^6$ 의 전부가 일반식(2) 또는 (3)으로 나타내는 기인 화합물을 들 수 있다.

[0058] 이하에 있어서, 일반식(1)로 나타내는 화합물의 구체예를 예시한다. 단, 본 발명에 있어서 사용할 수 있는 일반식(1)로 나타내는 화합물은 이들 구체예에 의해 한정적으로 해석되어야 하는 것은 아니다.

[0059] [화학식 8]



[0060]

[0061] 일반식(1)로 나타내는 화합물의 분자량은, 예를 들어 일반식(1)로 나타내는 화합물을 포함하는 유기층을 증착법에 의해 제막해 이용하는 것을 의도하는 경우에는, 1500 이하인 것이 바람직하고, 1200 이하인 것이 보다 바람직하며, 1000 이하인 것이 더 바람직하고, 800 이하인 것이 더욱 더 바람직하다. 분자량의 하한값은, 일반식(1)로 나타내는 최소 화합물의 분자량이다.

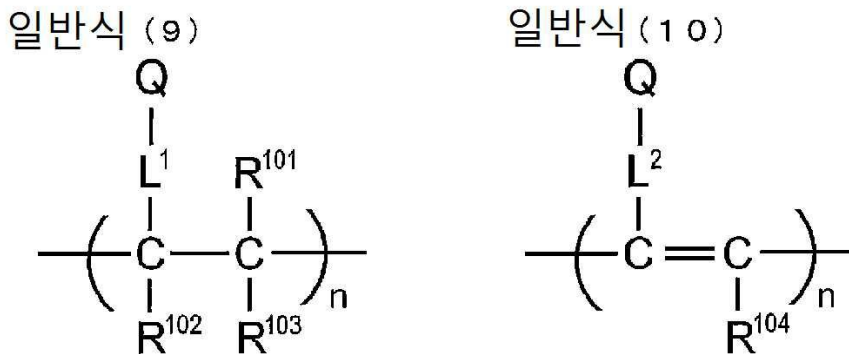
[0062] 일반식(1)로 나타내는 화합물은, 분자량에 관계없이 도포법으로 성막해도 된다. 도포법을 이용하면, 분자량이 비교적 큰 화합물이라도 성막할 수 있다.

[0063] 본 발명을 응용해, 분자 내에 일반식(1)로 나타내는 구조를 복수개 포함하는 화합물을, 발광 재료로서 사용하는 것도 생각된다.

[0064] 예를 들어, 일반식(1)로 나타내는 구조 중에 미리 중합성기를 존재시켜 두고, 그 중합성기를 중합시킴으로써 얻어지는 중합체를, 발광 재료로서 사용하는 것이 생각된다. 구체적으로는, 일반식(1)의 R², R³, R⁴, R⁶ 중 어느 것에 중합성 관능기를 포함하는 모노머를 준비하고, 이것을 단독으로 중합시키거나, 다른 모노머와 함께 공중합시킴으로써, 반복 단위를 갖는 중합체를 얻고, 그 중합체를 발광 재료로서 사용하는 것이 생각된다. 혹은, 일반식(1)로 나타내는 구조를 갖는 화합물끼리를 반응시킴으로써 2량체나 3량체를 얻고, 그것들을 발광 재료로서 사용하는 것도 생각된다.

[0065] 일반식(1)로 나타내는 구조를 포함하는 반복 단위를 갖는 중합체의 예로서, 하기 일반식(9) 또는 (10)으로 나타내는 구조를 포함하는 중합체를 들 수 있다.

[0066] [화학식 9]



[0067]

[0068] 일반식(9) 또는 (10)에 있어서, Q는 일반식(1)로 나타내는 구조를 포함하는 기를 나타내고, L¹ 및 L²는 연결기를 나타낸다. 연결기의 탄소수는, 바람직하게는 0~20이고, 보다 바람직하게는 1~15이며, 더 바람직하게는 2~10이다. 연결기는 -X¹¹-L¹¹-로 나타내는 구조를 갖는 것이 바람직하다. 여기서, X¹¹은 산소 원자 또는 황 원자를 나타내고, 산소 원자인 것이 바람직하다. L¹¹은 연결기를 나타내고, 치환 혹은 무치환의 알킬렌기, 또는 치환 혹은 무치환의 아릴렌기인 것이 바람직하고, 탄소수 1~10의 치환 혹은 무치환의 알킬렌기, 또는 치환 혹은 무치환의 페닐렌기인 것이 보다 바람직하다.

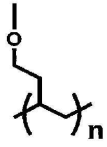
[0069] 일반식(9) 또는 (10)에 있어서, R¹⁰¹, R¹⁰², R¹⁰³ 및 R¹⁰⁴는, 각각 독립적으로 치환기를 나타낸다. 바람직하게는, 탄소수 1~6의 치환 혹은 무치환의 알킬기, 탄소수 1~6의 치환 혹은 무치환의 알콕시기, 할로젠 원자이고, 보다 바람직하게는 탄소수 1~3의 무치환의 알킬기, 탄소수 1~3의 무치환의 알콕시기, 불소 원자, 염소 원자이며, 더 바람직하게는 탄소수 1~3의 무치환의 알킬기, 탄소수 1~3의 무치환의 알콕시기이다.

[0070] L¹ 및 L²로 나타내는 연결기는, Q를 구성하는 일반식(1)의 구조의 R², R³, R⁴, R⁶ 중 어느 것, 일반식(2)의 구조의 R¹¹~R²⁰ 중 어느 것, 일반식(3)의 구조의 R²¹~R²⁸ 중 어느 것, 일반식(4)의 구조의 R³¹~R³⁸, R^{3a}, R^{3b} 중 어느 것, 일반식(5)의 구조의 R⁴¹~R⁴⁸, R^{4a} 중 어느 것, 일반식(6)의 구조의 R⁵¹~R⁵⁸ 중 어느 것, 일반식(7)의 구조의 R⁶¹~R⁶⁸ 중 어느 것, 일반식(8)의 구조의 R⁷¹~R⁷⁸ 중 어느 것에 결합할 수 있다. 1개의 Q에 대해 연결기가 2개 이상 연결되어 가교 구조나 망목 구조를 형성하고 있어도 된다.

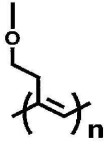
[0071] 반복 단위의 구체적인 구조예로서, 하기 식(11)~(14)로 나타내는 구조를 들 수 있다.

[0072] [화학식 10]

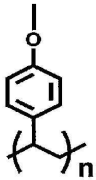
식(11)



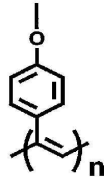
식(12)



식(13)



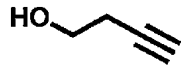
식(14)



[0073]

[0074] 이들 식(11)~(14)를 포함하는 반복 단위를 갖는 중합체는, 일반식(1)의 구조의 R², R³, R⁴, R⁶ 중 어느 것에 하이드록시기를 도입해 두고, 그것을 링커로 해서 하기 화합물을 반응시켜 중합성기를 도입하고, 그 중합성기를 중합시킴으로써 합성할 수 있다.

[0075] [화학식 11]



[0076]

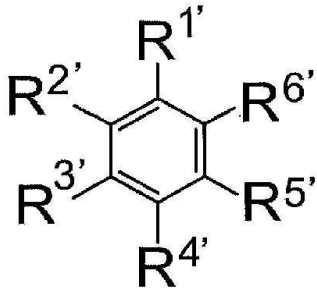
[0077] 분자 내에 일반식(1)로 나타내는 구조를 포함하는 중합체는, 일반식(1)로 나타내는 구조를 갖는 반복 단위만으로 이루어지는 중합체여도 되고, 그 이외의 구조를 갖는 반복 단위를 포함하는 중합체여도 된다. 또, 중합체 중에 포함되는 일반식(1)로 나타내는 구조를 갖는 반복 단위는, 단일종이어도 되고, 2종 이상이어도 된다. 일반식(1)로 나타내는 구조를 갖지 않는 반복 단위로서는, 통상적인 공중합에 사용되는 모노머로부터 유도되는 것들을 들 수 있다. 예를 들어, 에틸렌, 스티렌 등의 에틸렌성 불포화 결합을 갖는 모노머로부터 유도되는 반복 단위를 들 수 있다.

[0078] [일반식(1')로 나타내는 화합물]

[0079] 하기 일반식(1')로 나타내는 화합물은 신규 화합물이다.

[0080] [화학식 12]

일반식(1')

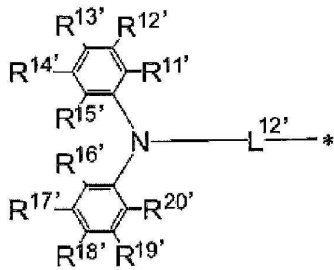


[0081]

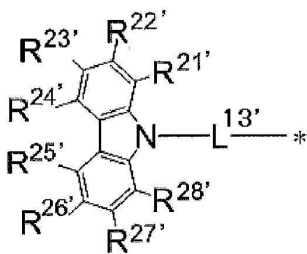
[0082] 일반식(1')에 있어서, R^{1'}, R^{3'} 및 R^{5'}가 시아노기를 나타내거나, R^{1'}, R^{2'}, R^{4'} 및 R^{5'}가 시아노기를 나타내고, 나머지 R^{1'}~R^{6'}가 각각 독립적으로 하기 일반식(2')~(8') 중 어느 것으로 나타내는 기를 나타낸다.

[0083] [화학식 13-1]

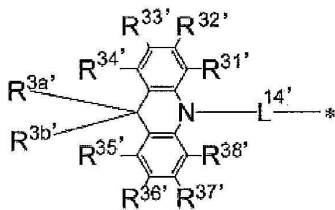
일반식(2')



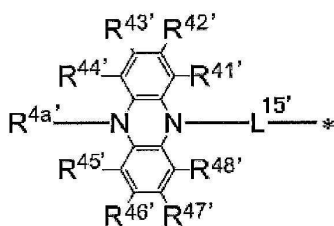
일반식(3')



일반식(4')



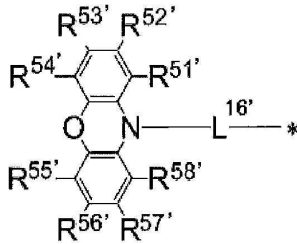
일반식(5')



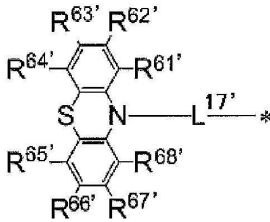
[0084]

[0085] [화학식 13-2]

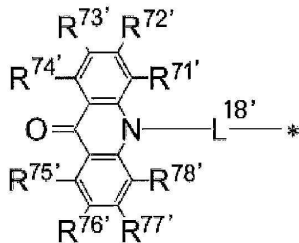
일반식 (6')



일반식 (7')



일반식 (8')



[0086]

[0087]

일반식(2')~(8')에 있어서, L^{12'}~L^{18'}는 단결합, 또는 치환 혹은 무치환의 아릴렌기를 나타내고, *는 일반식(1)에 있어서의 벤젠환에의 결합 부위를 나타낸다. R^{11'}~R^{20'}, R^{21'}~R^{28'}, R^{31'}~R^{38'}, R^{3a'}, R^{3b'}, R^{41'}~R^{48'}, R^{4a'}, R^{51'}~R^{58'}, R^{61'}~R^{68'}, R^{71'}~R^{78'}는, 각각 독립적으로 수소 원자 또는 치환기를 나타낸다. R^{11'}와 R^{12'}, R^{12'}와 R^{13'}, R^{13'}와 R^{14'}, R^{14'}와 R^{15'}, R^{16'}와 R^{17'}, R^{17'}와 R^{18'}, R^{18'}와 R^{19'}, R^{19'}와 R^{20'}, R^{21'}와 R^{22'}, R^{22'}와 R^{23'}, R^{23'}와 R^{24'}, R^{24'}와 R^{25'}, R^{25'}와 R^{26'}, R^{26'}와 R^{27'}, R^{27'}와 R^{28'}, R^{31'}와 R^{32'}, R^{32'}와 R^{33'}, R^{33'}와 R^{34'}, R^{35'}와 R^{36'}, R^{36'}와 R^{37'}, R^{37'}와 R^{38'}, R^{3a'}와 R^{3b'}, R^{41'}와 R^{42'}, R^{42'}와 R^{43'}, R^{43'}와 R^{44'}, R^{45'}와 R^{46'}, R^{46'}와 R^{47'}, R^{47'}와 R^{48'}, R^{51'}와 R^{52'}, R^{52'}와 R^{53'}, R^{53'}와 R^{54'}, R^{55'}와 R^{56'}, R^{56'}와 R^{57'}, R^{57'}와 R^{58'}, R^{61'}와 R^{62'}, R^{62'}와 R^{63'}, R^{63'}와 R^{64'}, R^{65'}와 R^{66'}, R^{66'}와 R^{67'}, R^{67'}와 R^{68'}, R^{71'}와 R^{72'}, R^{72'}와 R^{73'}, R^{73'}와 R^{74'}, R^{75'}와 R^{76'}, R^{76'}와 R^{77'}, R^{77'}와 R^{78'}는 각각 서로 결합해 환상 구조를 형성하고 있어도 된다.

[0088]

일반식(1')에 있어서의 R^{1'}~R^{6'}와, 일반식(2')~(8')에 있어서의 L^{12'}~L^{18'}, *, R^{11'}~R^{20'}, R^{21'}~R^{28'}, R^{31'}~R^{38'}, R^{3a'}, R^{3b'}, R^{41'}~R^{48'}, R^{4a'}, R^{51'}~R^{58'}, R^{61'}~R^{68'}, R^{71'}~R^{78'}의 설명과 바람직한 범위에 대해서는, 일반식(1)로 나타내는 화합물의 설명을 참조할 수 있다.

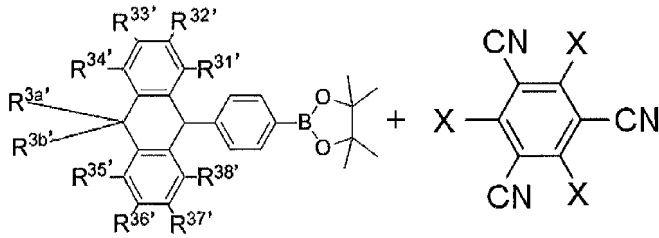
[0089]

[일반식(1')로 나타내는 화합물의 합성 방법]

[0090]

일반식(1')로 나타내는 화합물은, 이미 알려진 반응을 조합함으로써 합성할 수 있다. 예를 들어, 일반식(1')의 R^{1'}, R^{3'}, R^{5'}가 시아노기이고, R^{2'}, R^{4'}, R^{6'}가 일반식(4')로 나타내는 기이며, L^{16'}가 1,4-페닐렌기인 화합물은, 이하의 2개의 화합물을 반응시킴으로써 합성할 수 있다.

[0091] [화학식 14]



[0092]

[0093]

상기 반응식에 있어서의 R^{31'}~R^{38'}, R^{3a}, R^{3b}의 설명에 대해서는, 일반식(1')에 있어서의 대응하는 기재를 참조할 수 있다. X는 할로겐 원자를 나타내고, 불소 원자, 염소 원자, 브롬 원자, 요오드 원자를 예시할 수 있고, 염소 원자, 브롬 원자, 요오드 원자가 바람직하고, 브롬 원자가 더 바람직하다.

[0094]

상기 반응은, 공지된 반응을 응용한 것이고, 공지된 반응 조건을 적절히 선택해 사용할 수 있다. 상기 반응의 상세한 것에 대하여는, 후술의 합성예를 참고로 할 수 있다. 또, 일반식(1')로 나타내는 화합물은, 기타 공지된 합성 반응을 조합함으로써도 합성할 수 있다.

[0095]

[유기 발광 소자]

[0096]

본 발명의 일반식(1)로 나타내는 화합물은 유기 발광 소자의 발광 재료로서 유용하다. 이 때문에, 본 발명의 일반식(1)로 나타내는 화합물은, 유기 발광 소자의 발광층에 발광 재료로서 효과적으로 사용할 수 있다. 일반식(1)로 나타내는 화합물 중에는, 지연 형광을 방사하는 지연 형광 재료(지연 형광체)가 함유되어 있다. 즉 본 발명은, 일반식(1)로 나타내는 구조를 갖는 지연 형광체의 발명과, 일반식(1)로 나타내는 화합물을 지연 형광체로서 사용하는 발명과, 일반식(1)로 나타내는 화합물을 이용하여 지연 형광을 발광시키는 방법의 발명도 제공한다. 그러한 화합물을 발광 재료로서 사용한 유기 발광 소자는, 지연 형광을 방사하여, 발광 효율이 높은 특징을 갖는다. 그 원리를, 유기 일렉트로루미네선스 소자를 예로 들어 설명하면 이하와 같이 된다.

[0097]

유기 일렉트로루미네선스 소자에 있어서는, 정부(正負)의 양 전극으로부터 발광 재료에 캐리어를 주입하여, 여기 상태의 발광 재료를 생성하고, 발광시킨다. 통상, 캐리어 주입형 유기 일렉트로루미네선스 소자의 경우, 생성된 여기자 중, 여기 일중항 상태로 여기되는 것은 25%이고, 나머지 75%는 여기 삼중항 상태로 여기된다. 따라서, 여기 삼중항 상태에서부터의 발광인 인광을 이용하는 편이 에너지의 이용 효율이 높다. 그러나, 여기 삼중항 상태는 수명이 길기 때문에, 여기 상태의 포화나 여기 삼중항 상태의 여기자와의 상호 작용에 의한 에너지의 실활이 일어나, 일반적으로 인광의 양자 수율이 높지 않은 경우가 많다. 한편, 지연 형광 재료는, 항간 교차 등에 의해 여기 삼중항 상태로 에너지가 천이된 후, 삼중항-삼중항 소멸 혹은 열 에너지의 흡수에 의해, 여기 일중항 상태로 역항간 교차되고 형광을 방사한다. 유기 일렉트로루미네선스 소자에 있어서는, 그 중에서도 열 에너지의 흡수에 의한 열 활성화형의 지연 형광 재료가 특히 유용하다고 생각된다. 유기 일렉트로루미네선스 소자에 지연 형광 재료를 이용한 경우, 여기 일중항 상태의 여기자는 통상대로 형광을 방사한다. 한편, 여기 삼중항 상태의 여기자는, 디바이스가 발하는 열을 흡수하여 여기 일중항으로 항간 교차되고 형광을 방사한다. 이때, 여기 일중항으로부터의 발광이기 때문에 형광과 동일 파장에서의 발광이면서, 여기 삼중항 상태에서부터 여기 일중항 상태로의 역항간 교차에 의해, 생성되는 광의 수명(발광 수명)은 통상적인 형광이나 인광보다 길어지기 때문에, 이들보다 지연된 형광으로서 관찰된다. 이것을 지연 형광으로서 정의할 수 있다. 이와 같은 열 활성화형의 여기자 이동 기구를 사용하면, 캐리어 주입 후에 열 에너지의 흡수를 거침으로써, 통상은 25%밖에 생성되지 않던 여기 일중항 상태의 화합물의 비율을 25% 이상으로 끌어올릴 수 있게 된다. 100℃ 미만의 낮은 온도에서도 강한 형광 및 지연 형광을 발하는 화합물을 이용하면, 디바이스의 열에 의해 충분히 여기 삼중항 상태에서부터 여기 일중항 상태로의 항간 교차가 발생하여 지연 형광을 방사하기 때문에, 발광 효율을 비약적으로 향상시킬 수 있다.

[0098]

또, 본 발명의 일반식(1)로 나타내는 화합물은, 발광층으로서 성막했을 때, 그 막 형성면에 대해 양호한 배향성을 나타내는 경향이 있다. 화합물의 막 형성면에 대한 배향성이 우수하면, 화합물이 발한 광의 진행 방향이 일치되어, 발광층으로부터의 광 인출 효율을 향상시키기 쉽다는 이점이 있다.

[0099]

본 발명의 일반식(1)로 나타내는 화합물을 발광층의 발광 재료로서 사용함으로써, 유기 포토루미네선스 소자(유기 PL 소자)나 유기 일렉트로루미네선스 소자(유기 EL 소자) 등의 우수한 유기 발광 소자를 제공할 수 있다. 이

때, 본 발명의 일반식(1)로 나타내는 화합물은, 이른바 어시스트 도펀트로서, 발광층에 포함되는 다른 발광 재료의 발광을 어시스트하는 기능을 갖는 것이어도 된다. 즉, 발광층에 포함되는 본 발명의 일반식(1)로 나타내는 화합물은, 발광층에 포함되는 호스트 재료의 최저 여기 일중항 에너지 준위와 발광층에 포함되는 다른 발광 재료의 최저 여기 일중항 에너지 준위 사이의 최저 여기 일중항 에너지를 갖는 것이어도 된다.

[0100] 유기 포토루미네선스 소자는, 기관 상에 적어도 발광층을 형성한 구조를 갖는다. 또, 유기 일렉트로루미네선스 소자는, 적어도 양극, 음극 및 양극과 음극 사이에 유기층을 형성한 구조를 갖는다. 유기층은 적어도 발광층을 포함하는 것으로, 발광층만으로 이루어지는 것이어도 되고, 발광층 외에 1층 이상의 유기층을 갖는 것이어도 된다. 그러한 다른 유기층으로서, 정공 수송층, 정공 주입층, 전자 저지층, 정공 저지층, 전자 주입층, 전자 수송층, 여기자 저지층 등을 들 수 있다. 정공 수송층은 정공 주입 기능을 가진 정공 주입 수송층이어도 되고, 전자 수송층은 전자 주입 기능을 가진 전자 주입 수송층이어도 된다. 구체적인 유기 일렉트로루미네선스 소자의 구조 예를 도 1에 나타낸다. 도 1에 있어서, 1은 기관, 2는 양극, 3은 정공 주입층, 4는 정공 수송층, 5는 발광층, 6은 전자 수송층, 7은 음극을 나타낸다.

[0101] 이하에 있어서, 유기 일렉트로루미네선스 소자의 각 부재 및 각 층에 대해서 설명한다. 또한, 기관과 발광층의 설명은 유기 포토루미네선스 소자의 기관과 발광층에도 해당된다.

[0102] (기관)

[0103] 본 발명의 유기 일렉트로루미네선스 소자는, 기관에 지지되어 있는 것이 바람직하다. 이 기관에 대해서는 특별히 제한은 없으며, 종래부터 유기 일렉트로루미네선스 소자에 관용되고 있는 것이면 되고, 예를 들어 유리, 투명 플라스틱, 석영, 실리콘(silicon) 등으로 이루어지는 것을 사용할 수 있다.

[0104] (양극)

[0105] 유기 일렉트로루미네선스 소자에 있어서의 양극으로는, 일함수가 큰(4eV 이상) 금속, 합금, 전기 전도성 화합물 및 이들의 혼합물을 전극 재료로 하는 것이 바람직하게 사용된다. 이와 같은 전극 재료의 구체예로는 Au 등의 금속, CuI, 인듐틴옥사이드(ITO), SnO₂, ZnO 등의 도전성 투명 재료를 들 수 있다. 또, IDIXO(In₂O₃-ZnO) 등 비정질이고 투명 도전막을 제작 가능한 재료를 사용해도 된다. 양극은 이들 전극 재료를 증착이나 스퍼터링 등의 방법에 의해 박막을 형성시키고, 포토리소그래피법으로 원하는 형상의 패턴을 형성해도 되고, 혹은 패턴 정밀도를 그다지 필요로 하지 않는 경우에는 (100 μ m 이상 정도), 상기 전극 재료의 증착이나 스퍼터링 시에 원하는 형상의 마스크를 통해서 패턴을 형성해도 된다. 혹은, 유기 도전성 화합물과 같이 도포 가능한 재료를 사용하는 경우에는, 인쇄 방식, 코팅 방식 등 습식 성막법을 사용할 수도 있다. 이 양극으로부터 발광을 인출하는 경우에는, 투과율을 10% 보다 크게 하는 것이 바람직하고, 또 양극으로서의 시트 저항은 수백 Ω/\square 이하가 바람직하다. 또한 막두께는 재료에 따라 다르지만, 통상 10~1000nm, 바람직하게는 10~200nm의 범위에서 선택된다.

[0106] (음극)

[0107] 한편, 음극으로서는 일함수가 작은(4eV 이하) 금속(전자 주입성 금속이라고 칭한다), 합금, 전기 전도성 화합물 및 이들의 혼합물을 전극 재료로 하는 것이 사용된다. 이와 같은 전극 재료의 구체예로는, 나트륨, 나트륨-칼륨 합금, 마그네슘, 리튬, 마그네슘/구리 혼합물, 마그네슘/은 혼합물, 마그네슘/알루미늄 혼합물, 마그네슘/인듐 혼합물, 알루미늄/산화알루미늄(Al₂O₃) 혼합물, 인듐, 리튬/알루미늄 혼합물, 희토류 금속 등을 들 수 있다. 이들 중에서, 전자 주입성 및 산화 등에 대한 내구성의 점에서, 전자 주입성 금속과 이것보다 일함수의 값이 크게 안정적인 금속인 제 2 금속의 혼합물, 예를 들어 마그네슘/은 혼합물, 마그네슘/알루미늄 혼합물, 마그네슘/인듐 혼합물, 알루미늄/산화알루미늄(Al₂O₃) 혼합물, 리튬/알루미늄 혼합물 등이 바람직하다. 음극은 이들 전극 재료를 증착이나 스퍼터링 등의 방법에 의해 박막을 형성시킴으로써 제작할 수 있다. 또, 음극으로서의 시트 저항은 수백 Ω/\square 이하가 바람직하고, 막두께는 통상 10nm ~ 5 μ m, 바람직하게는 50~200nm의 범위에서 선택된다. 또한, 발광한 광을 투과시키기 위해, 유기 일렉트로루미네선스 소자의 양극 또는 음극 중 어느 일방이 투명 또는 반투명이면 발광 휘도가 향상되어 바람직하다.

[0108] 또, 양극의 설명에서 예시한 도전성 투명 재료를 음극에 사용함으로써, 투명 또는 반투명한 음극을 제작할 수 있고, 이것을 응용함으로써 양극과 음극 양방이 투과성을 갖는 소자를 제작할 수 있다.

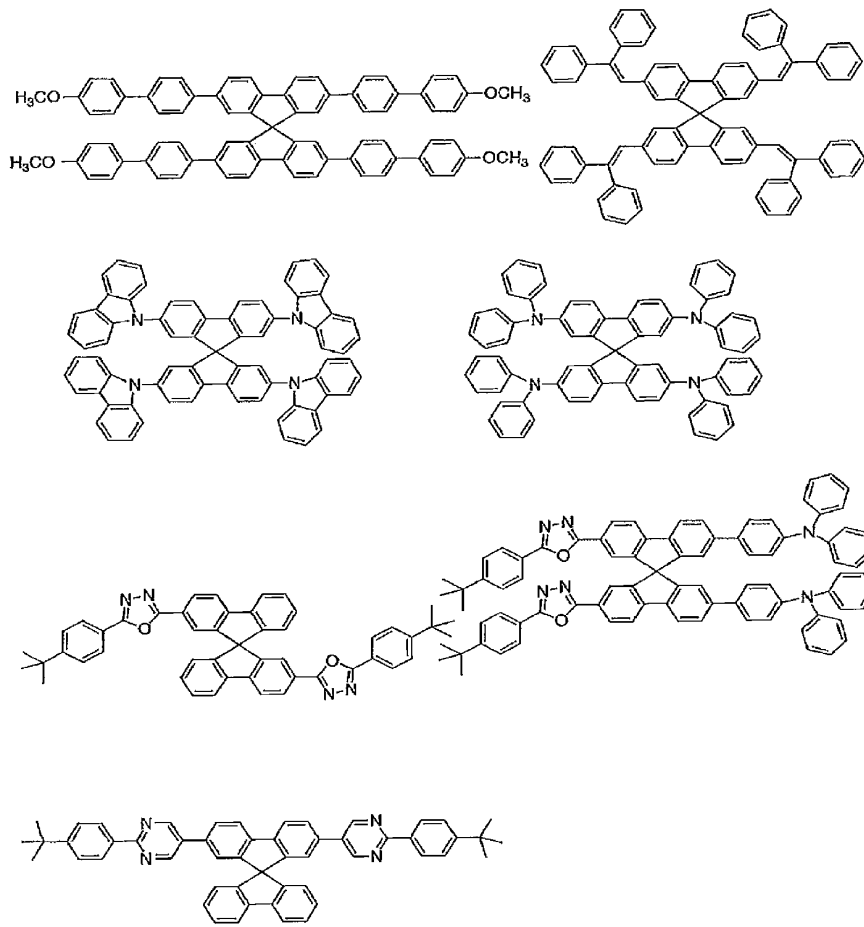
[0109] (발광층)

- [0110] 발광층은, 양극 및 음극의 각각으로부터 주입된 정공 및 전자가 재결합함으로써 여기자가 생성된 후, 발광하는 층으로, 발광 재료를 단독으로 발광층에 사용해도 되지만, 바람직하게는 발광 재료와 호스트 재료를 포함한다. 발광 재료로는, 일반식(1)로 나타내는 본 발명의 화합물군에서 선택되는 1종 또는 2종 이상을 사용할 수 있다. 본 발명의 유기 일렉트로루미네선스 소자 및 유기 포토루미네선스 소자가 높은 발광 효율을 발현하기 위해서는, 발광 재료에 생성한 일중항 여기자 및 삼중항 여기자를 발광 재료 중에 가두어 두는 것이 중요하다. 따라서, 발광층 중에 발광 재료에 추가하여 호스트 재료를 사용하는 것이 바람직하다. 호스트 재료로는, 여기 일중항 에너지, 여기 삼중항 에너지 중 적어도 어느 일방이 본 발명의 발광 재료보다 높은 값을 갖는 유기 화합물을 사용할 수 있다. 그 결과, 본 발명의 발광 재료에 생성한 일중항 여기자 및 삼중항 여기자를 본 발명의 발광 재료의 분자 중에 가두어 두는 것이 가능해지고, 그 발광 효율을 충분히 이끌어내는 것이 가능해진다. 무엇보다, 일중항 여기자 및 삼중항 여기자를 충분히 가둘 수 없더라도 높은 발광 효율을 얻는 것이 가능한 경우도 있기 때문에, 높은 발광 효율을 실현할 수 있는 호스트 재료이면 특별히 제약없이 본 발명에 사용할 수 있다. 본 발명의 유기 발광 소자 또는 유기 일렉트로루미네선스 소자에 있어서, 발광은 발광층에 포함되는 본 발명의 발광 재료로부터 발생한다. 이 발광은 형광 발광 및 지연 형광 발광 양방을 포함한다. 단, 발광의 일부 혹은 부분적으로 호스트 재료로부터의 발광이 있어도 상관없다.
- [0111] 호스트 재료를 사용하는 경우, 발광 재료인 본 발명의 화합물이 발광층 중에 함유되는 양은 0.1중량% 이상인 것이 바람직하고, 1중량% 이상인 것이 보다 바람직하며, 또 50중량% 이하인 것이 바람직하고, 20중량% 이하인 것이 보다 바람직하며, 10중량% 이하인 것이 더 바람직하다.
- [0112] 발광층에 있어서의 호스트 재료로는, 정공 수송능, 전자 수송능을 가지면서, 또한 발광의 장파장화를 막고, 그 위에 높은 유리 전이 온도를 갖는 유기 화합물인 것이 바람직하다.
- [0113] (주입층)
- [0114] 주입층이란, 구동 전압 저하나 발광 휘도 향상을 위해서 전극과 유기층 사이에 형성되는 층을 말하며, 정공 주입층과 전자 주입층이 있고, 양극과 발광층 또는 정공 수송층 사이, 및 음극과 발광층 또는 전자 수송층 사이에 존재시켜도 된다. 주입층은 필요에 따라서 형성할 수 있다.
- [0115] (저지층)
- [0116] 저지층은, 발광층 중에 존재하는 전하(전자 혹은 정공) 및/또는 여기자의 발광층 밖으로의 확산을 저지할 수 있는 층이다. 전자 저지층은 발광층 및 정공 수송층 사이에 배치될 수 있고, 전자가 정공 수송층쪽을 향해 발광층을 통과하는 것을 저지한다. 마찬가지로, 정공 저지층은 발광층 및 전자 수송층 사이에 배치될 수 있고, 정공이 전자 수송층쪽을 향해 발광층을 통과하는 것을 저지한다. 저지층은 또한, 여기자가 발광층의 외측으로 확산되는 것을 저지하기 위해서 사용할 수 있다. 즉 전자 저지층, 정공 저지층은 각각 여기자 저지층으로서의 기능도 겸비할 수 있다. 본 명세서에서 말하는 전자 저지층 또는 여기자 저지층은, 하나의 층에 전자 저지층 및 여기자 저지층의 기능을 갖는 층을 포함하는 의미로 사용된다.
- [0117] (정공 저지층)
- [0118] 정공 저지층이란 넓은 의미에서는 전자 수송층의 기능을 갖는다. 정공 저지층은 전자를 수송하면서, 정공이 전자 수송층에 도달하는 것을 저지하는 역할이 있고, 이로써 발광층 중에서의 전자와 정공의 재결합 확률을 향상시킬 수 있다. 정공 저지층의 재료로는, 후술하는 전자 수송층의 재료를 필요에 따라 사용할 수 있다.
- [0119] (전자 저지층)
- [0120] 전자 저지층이란, 넓은 의미에서는 정공을 수송하는 기능을 갖는다. 전자 저지층은 정공을 수송하면서, 전자가 정공 수송층에 도달하는 것을 저지하는 역할이 있고, 이로써 발광층 중에서의 전자와 정공이 재결합할 확률을 향상시킬 수 있다.
- [0121] (여기자 저지층)
- [0122] 여기자 저지층이란, 발광층 내에서 정공과 전자가 재결합함으로써 생긴 여기자가 전하 수송층으로 확산되는 것을 저지하기 위한 층으로, 본 층의 삽입에 의해 여기자를 효율적으로 발광층 내에 가두어 둘 수 있게 되어, 소자의 발광 효율을 향상시킬 수 있다. 여기자 저지층은 발광층에 인접하여 양극측, 음극측 중 어디에도 삽입할 수 있으며, 양방 동시에 삽입할 수도 있다. 즉, 여기자 저지층을 양극측에 갖는 경우, 정공 수송층과 발광층 사이에, 발광층에 인접하여 그 층을 삽입할 수 있고, 음극측에 삽입하는 경우, 발광층과 음극 사이에, 발광층에 인접하여 그 층을 삽입할 수 있다. 또, 양극과, 발광층의 양극측에 인접하는 여기자 저지층과의 사이에는 정공

주입층이나 전자 저지층 등을 가질 수 있고, 음극과, 발광층의 음극층에 인접하는 여기자 저지층과의 사이에는 전자 주입층, 전자 수송층, 정공 저지층 등을 가질 수 있다. 저지층을 배치하는 경우, 저지층으로서 사용하는 재료의 여기 일중항 에너지 및 여기 삼중항 에너지 중 적어도 어느 일방은, 발광 재료의 여기 일중항 에너지 및 여기 삼중항 에너지보다 높은 것이 바람직하다.

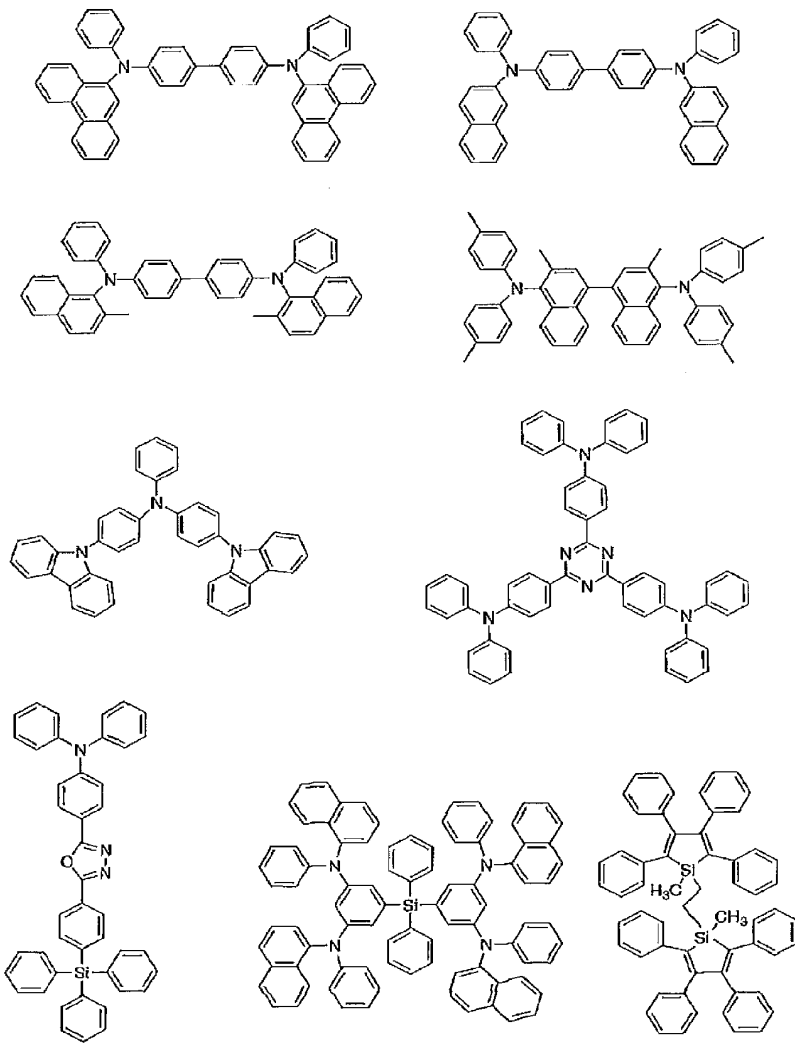
- [0123] (정공 수송층)
- [0124] 정공 수송층이란 정공을 수송하는 기능을 갖는 정공 수송 재료로 이루어지고, 정공 수송층은 단층 또는 복수층 형성할 수 있다.
- [0125] 정공 수송 재료로는, 정공의 주입 또는 수송, 전자의 장벽성 중 어느 것을 갖는 것으로, 유기물, 무기물 중 어느 것이어도 된다. 사용할 수 있는 공지된 정공 수송 재료로는 예를 들어, 트리아졸 유도체, 옥사디아졸 유도체, 이미다졸 유도체, 카르바졸 유도체, 인돌로카르바졸 유도체, 폴리아릴알칸 유도체, 피라졸린 유도체 및 피라졸론 유도체, 페닐렌디아민 유도체, 아릴아민 유도체, 아미노 치환 칼콘 유도체, 옥사졸 유도체, 스티릴안트라센 유도체, 플루오레논 유도체, 하이드라존 유도체, 스티벤 유도체, 실라잔 유도체, 아닐린계 공중합체, 또 도전성 고분자 올리고머, 특히 티오펜 올리고머 등을 들 수 있지만, 포르피린 화합물, 방향족 제3급 아민 화합물 및 스티릴아민 화합물을 사용하는 것이 바람직하고, 방향족 제3급 아민 화합물을 사용하는 것이 보다 바람직하다.
- [0126] (전자 수송층)
- [0127] 전자 수송층이란 전자를 수송하는 기능을 갖는 재료로 이루어지고, 전자 수송층은 단층 또는 복수층 형성할 수 있다.
- [0128] 전자 수송 재료(정공 저지 재료를 겸하는 경우도 있다)로는, 음극으로부터 주입된 전자를 발광층에 전달하는 기능을 가지고 있으면 된다. 사용할 수 있는 전자 수송층으로는 예를 들어, 니트로 치환 플루오렌 유도체, 디페닐퀴논 유도체, 티오피란디옥사이드 유도체, 카르보디이미드, 플루오레닐리덴메탄 유도체, 안트라퀴노디메탄 및 안트론 유도체, 옥사디아졸 유도체 등을 들 수 있다. 또한, 상기 옥사디아졸 유도체에 있어서, 옥사디아졸환의 산소 원자를 황 원자로 치환한 티아디아졸 유도체, 전자 흡인기로서 알려져 있는 퀴녹살린환을 갖는 퀴녹살린 유도체도 전자 수송 재료로서 사용할 수 있다. 그리고 이들 재료를 고분자쇄에 도입하거나, 또는 이들 재료를 고분자의 주쇄로 한 고분자 재료를 사용할 수도 있다.
- [0129] 유기 일렉트로루미네선스 소자를 제작할 때에는, 일반식(1)로 나타내는 화합물을 발광층에 사용할 뿐만 아니라, 발광층 이외의 층에도 사용해도 된다. 그때, 발광층에 사용하는 일반식(1)로 나타내는 화합물과, 발광층 이외의 층에 사용하는 일반식(1)로 나타내는 화합물은 동일해도 되고 상이해도 된다. 예를 들어, 상기 주입층, 저지층, 정공 저지층, 전자 저지층, 여기자 저지층, 정공 수송층, 전자 수송층 등에도 일반식(1)로 나타내는 화합물을 사용해도 된다. 이들 층의 제작 방법은 특별히 한정되지 않으며, 드라이 프로세스, 웨트 프로세스 중 어느 쪽으로 제작해도 된다.
- [0130] 이하에, 유기 일렉트로루미네선스 소자에 사용할 수 있는 바람직한 재료를 구체적으로 예시한다. 단, 본 발명에 있어서 사용할 수 있는 재료는, 이하의 예시 화합물에 의해 한정적으로 해석되는 경우는 없다. 또, 특정 기능을 갖는 재료로서 예시한 화합물이라도, 그 밖의 기능을 갖는 재료로서 전용할 수도 있다. 또한, 이하의 예시 화합물의 구조식에 있어서의 R, R₁~R₁₀은 각각 독립적으로 수소 원자 또는 치환기를 나타낸다. n은 3~5의 정수를 나타낸다.
- [0131] 먼저, 발광층의 호스트 재료로서도 사용할 수 있는 바람직한 화합물을 든다.

[0132] [화학식 15]

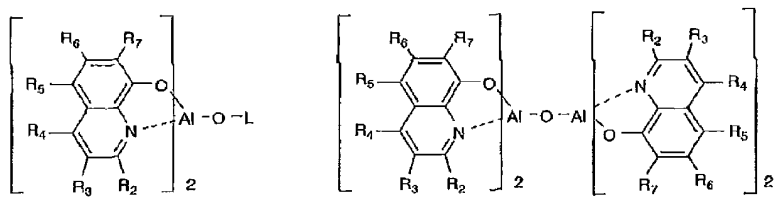


[0133]

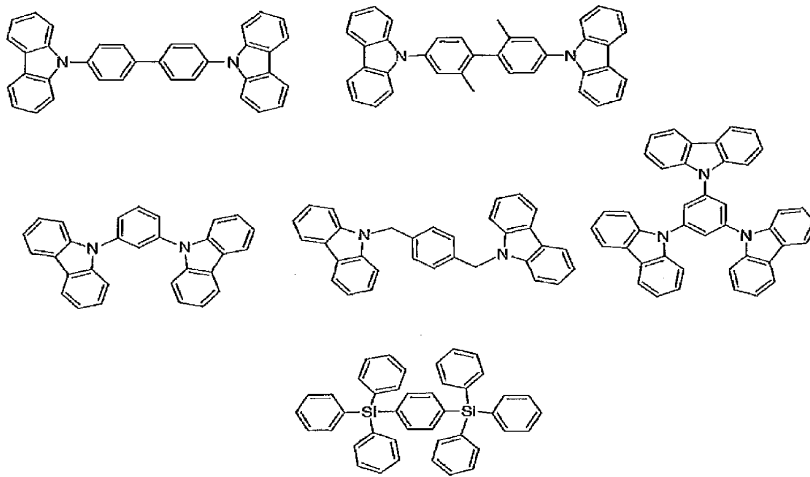
[0134] [화학식 16]



[0135]

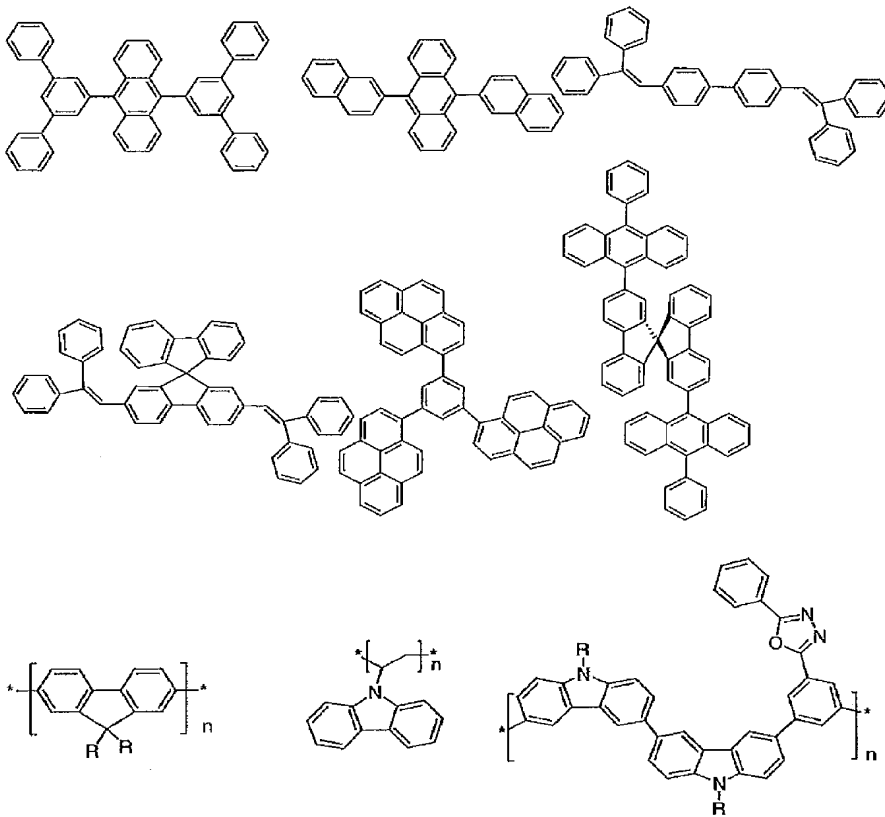


[0136] [화학식 17]



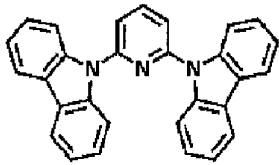
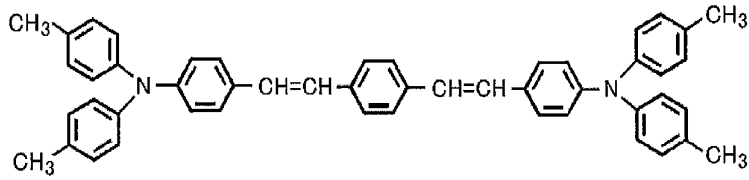
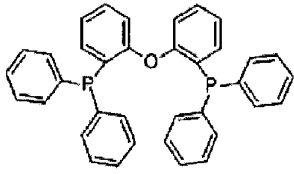
[0137]

[0138] [화학식 18]



[0139]

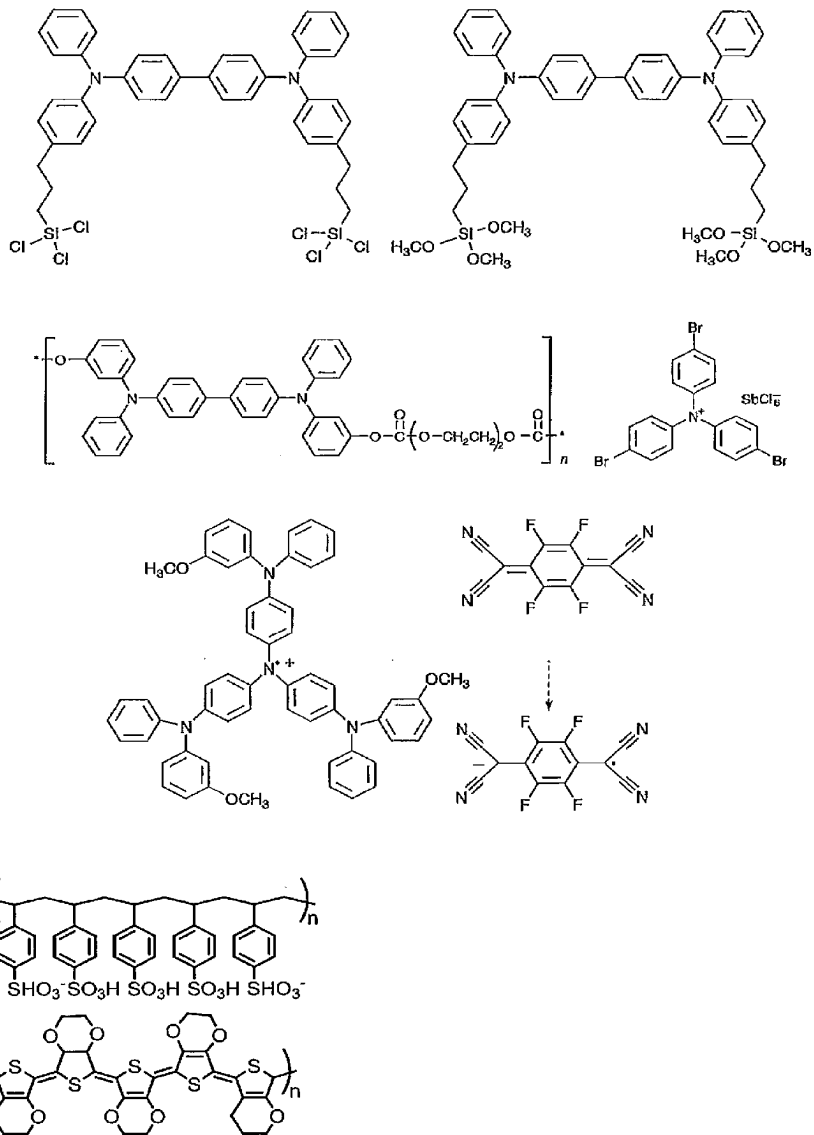
[0140] [화학식 19]



[0141]

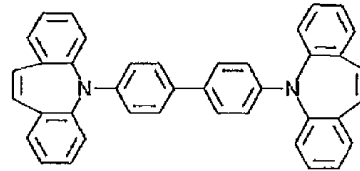
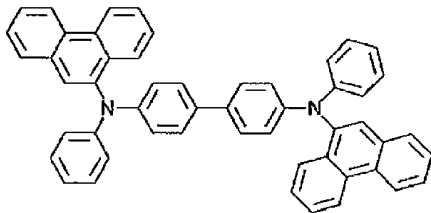
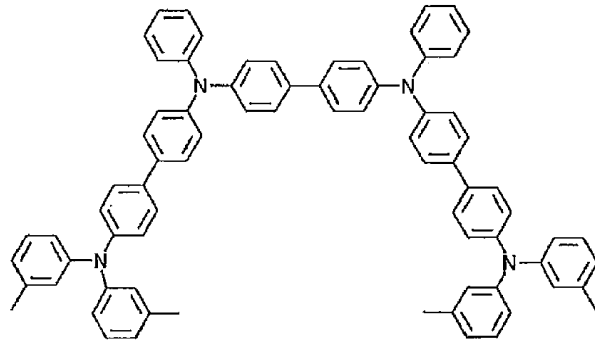
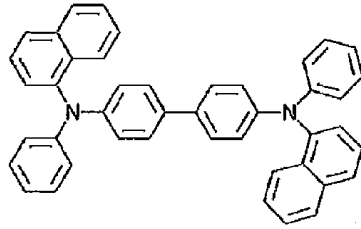
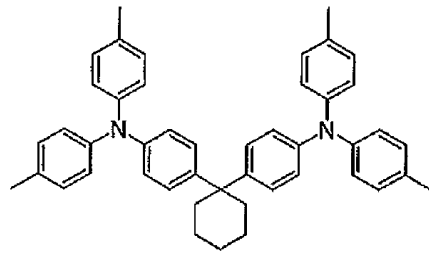
[0142] 다음으로, 정공 주입 재료로서 사용할 수 있는 바람직한 화합물예를 든다.

[0143] [화학식 20]



[0144]
 [0145] 다음으로, 정공 수송 재료로서 사용할 수 있는 바람직한 화합물예를 든다.

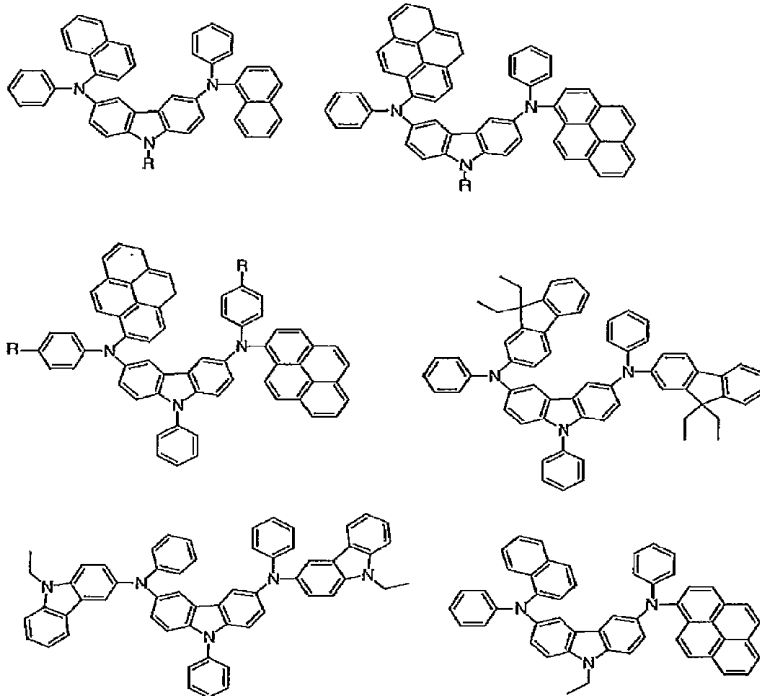
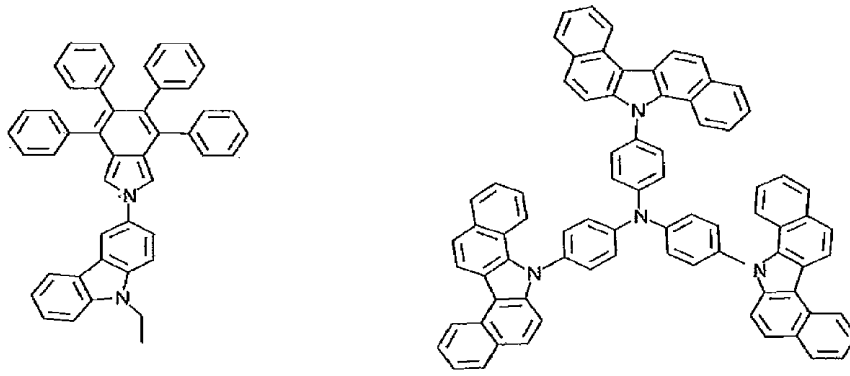
[0146] [화학식 21]



[0147]

[0148]

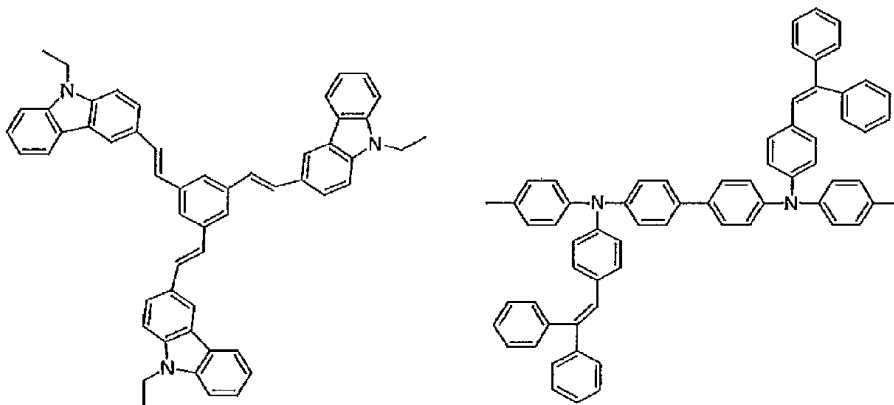
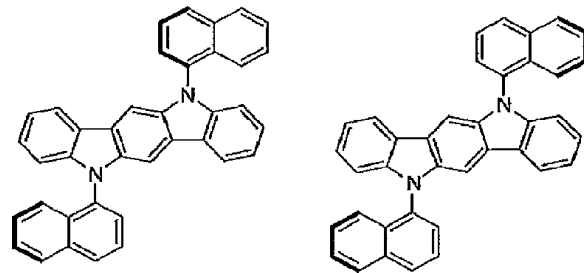
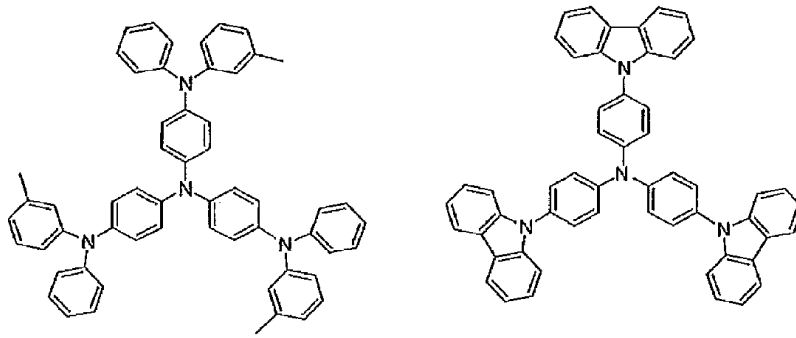
[화학식 22]



[0149]

[0150]

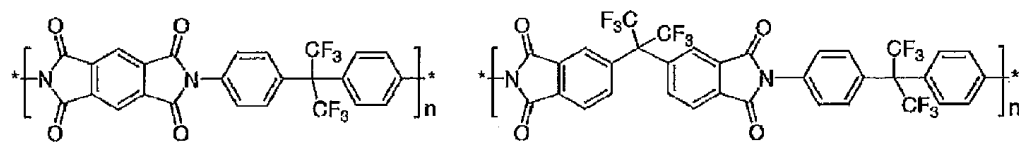
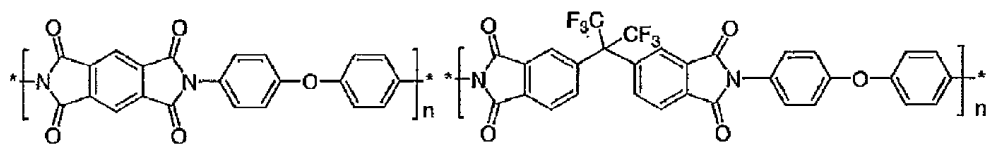
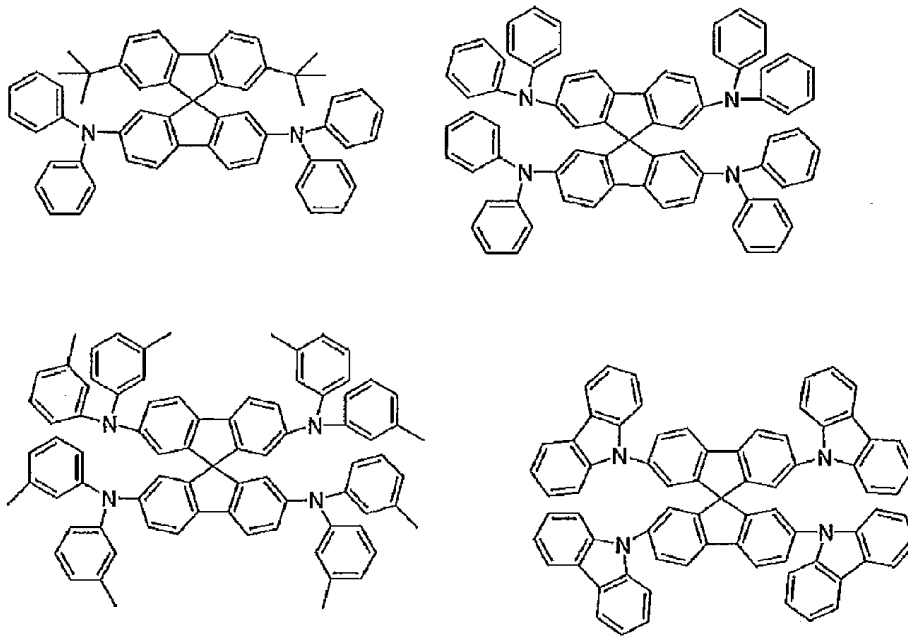
[화학식 23]



[0151]

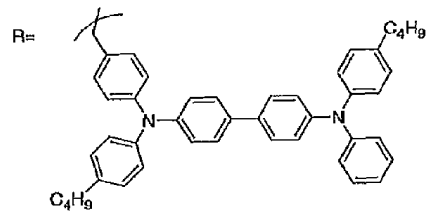
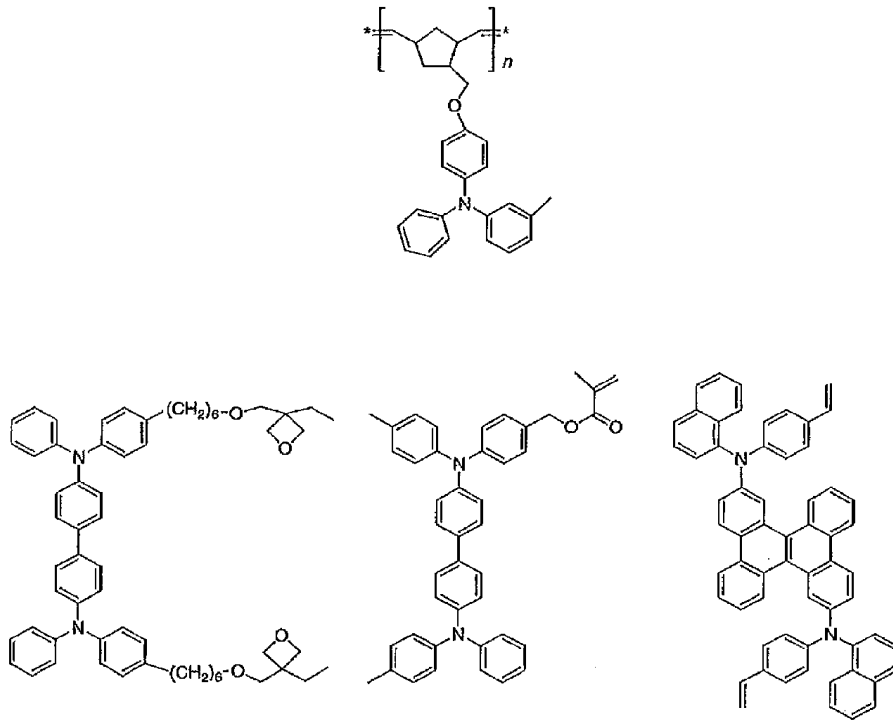
[0152]

[화학식 24]



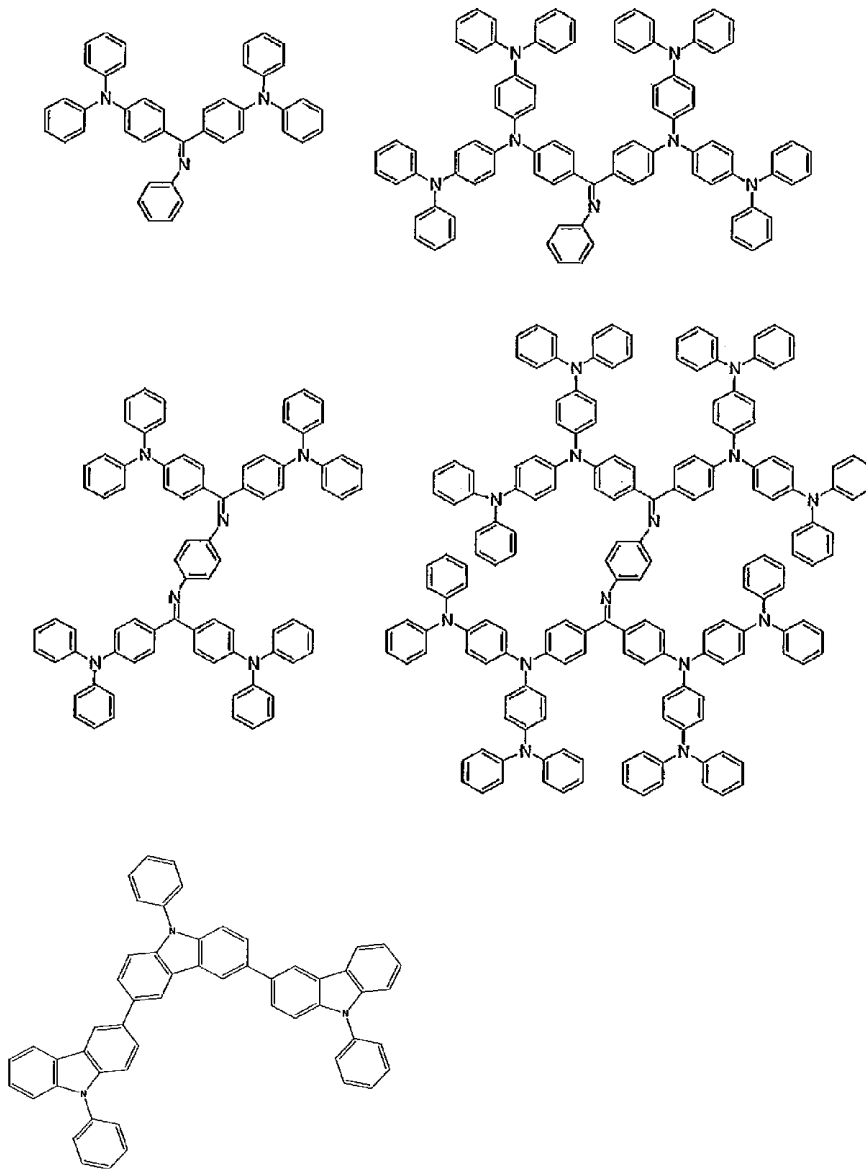
[0153]

[0154] [화학식 25]



[0155]

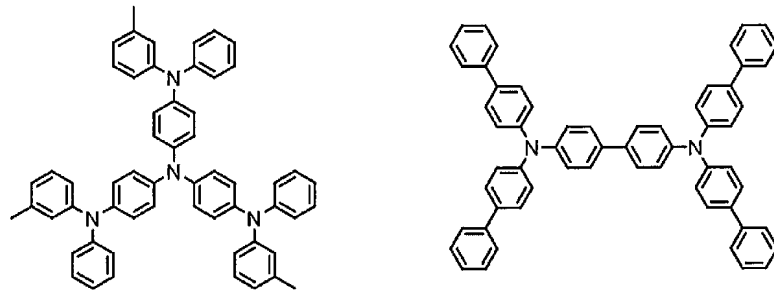
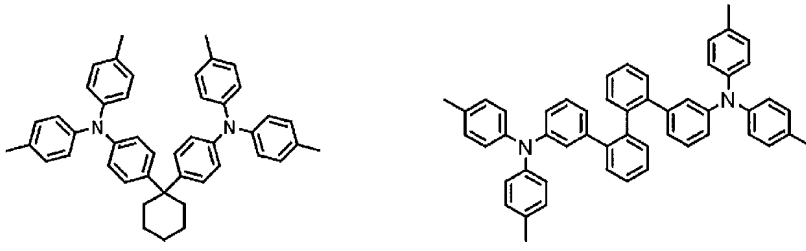
[0156] [화학식 26]



[0157]

[0158] 다음으로, 전자 저지 재료로서 사용할 수 있는 바람직한 화합물예를 든다.

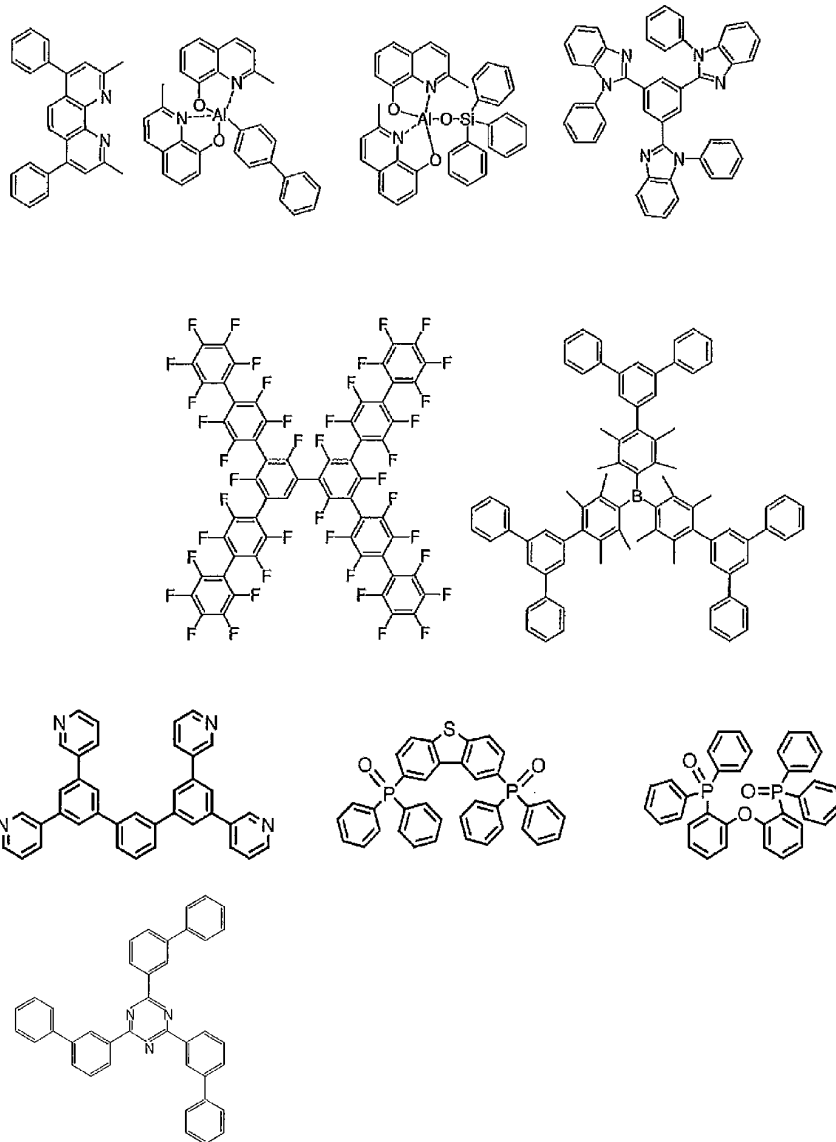
[0159] [화학식 27]



[0160]

[0161] 다음으로, 정공 저지 재료로서 사용할 수 있는 바람직한 화합물예를 든다.

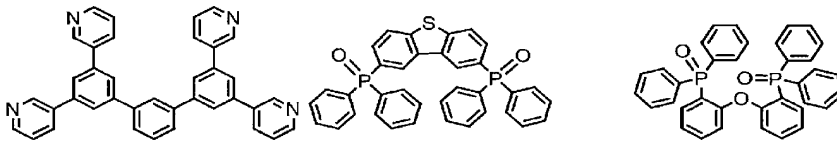
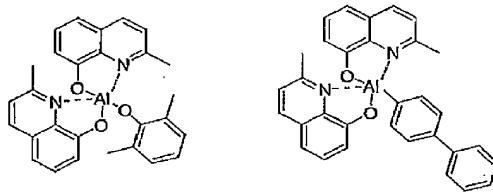
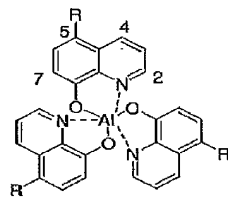
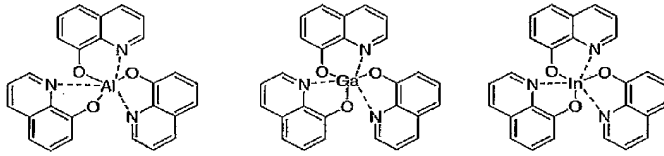
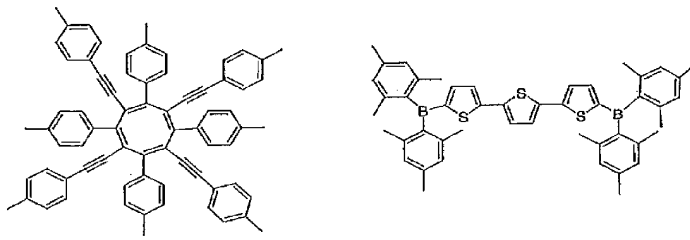
[0162] [화학식 28]



[0163]

[0164] 다음으로, 전자 수송 재료로서 사용할 수 있는 바람직한 화합물예를 든다.

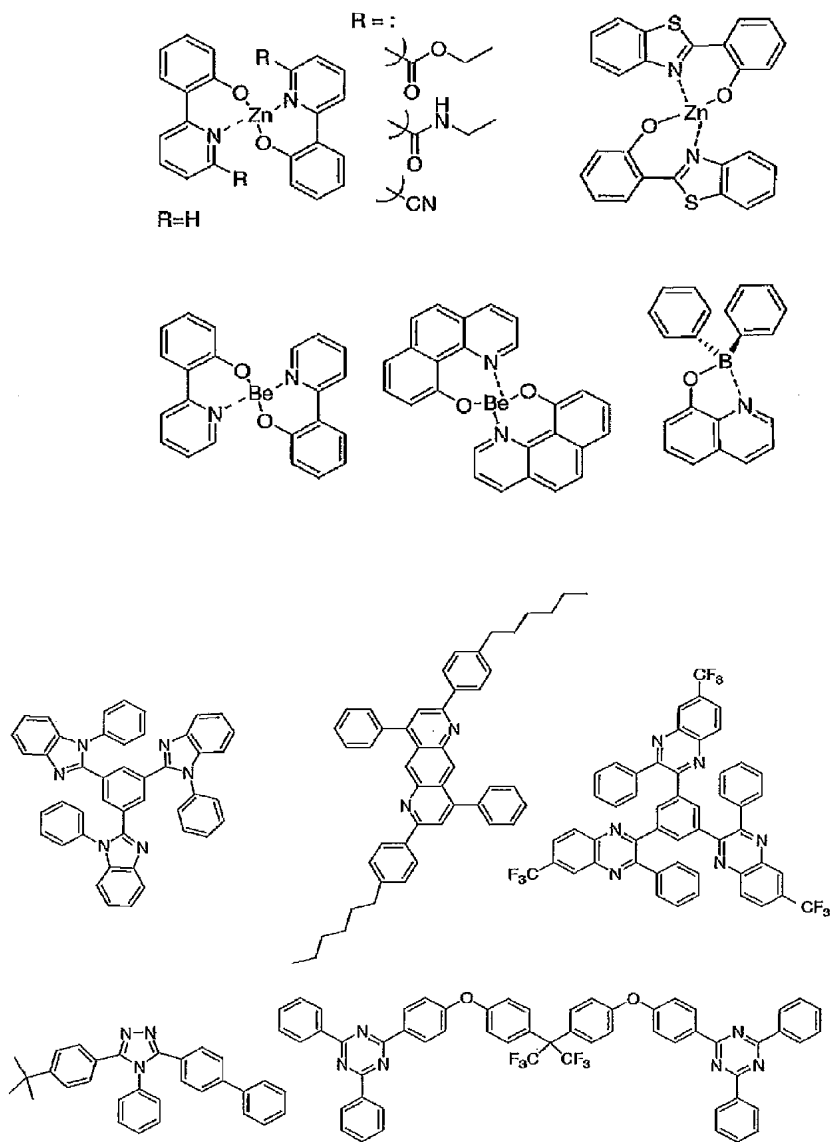
[0165] [화학식 29]



[0166]

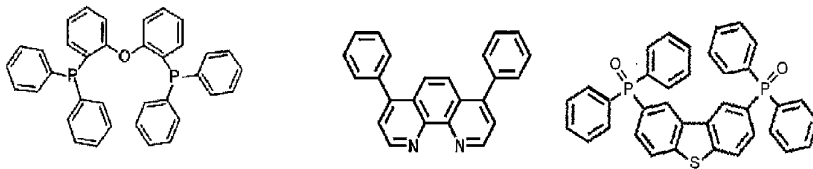
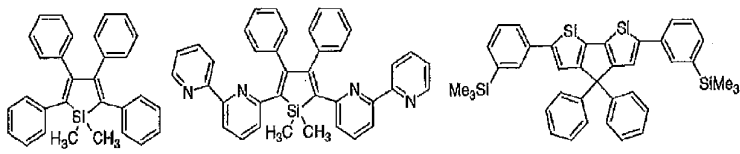
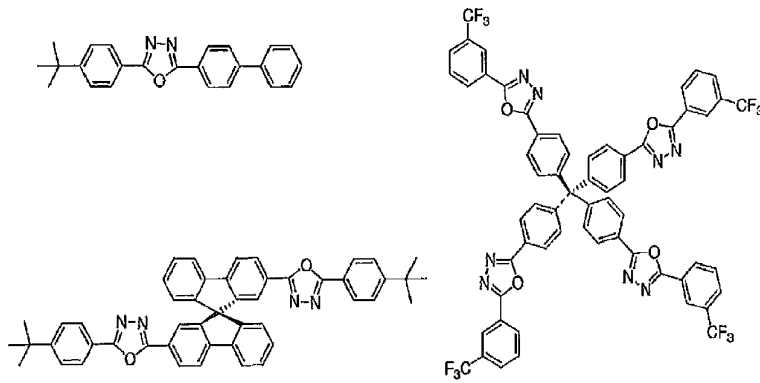
[0167]

[화학식 30]



[0168]

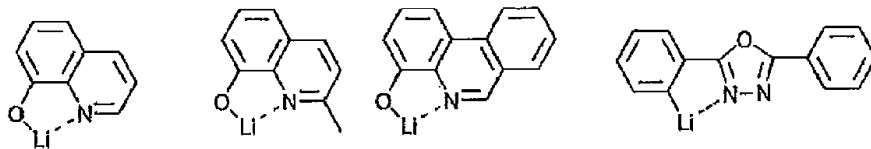
[0169] [화학식 31]



[0170]

[0171] 다음으로, 전자 주입 재료로서 사용할 수 있는 바람직한 화합물예를 든다.

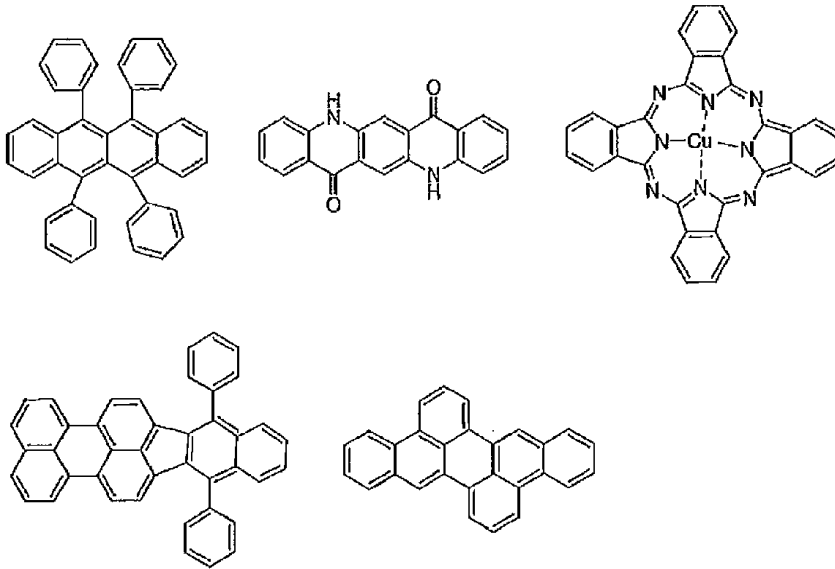
[0172] [화학식 32]



[0173]

[0174] 추가로 첨가 가능한 재료로서 바람직한 화합물예를 든다. 예를 들어, 안정화 재료로서 첨가하는 것 등이 생각된다.

[0175] [화학식 33]



[0176]

[0177] 상기 서술한 방법에 의해 제작된 유기 일렉트로루미네선스 소자는, 얻어진 소자의 양극과 음극 사이에 전계를 인가함으로써 발광한다. 이때, 여기 일중항 에너지에 의한 발광이라면, 그 에너지 레벨에 따른 파장의 광이 형광 발광 및 지연 형광 발광으로서 확인된다. 또, 여기 삼중항 에너지에 의한 발광이라면, 그 에너지 레벨에 따른 파장이 인광으로서 확인된다. 통상적인 형광은 지연 형광 발광보다 형광 수명이 짧기 때문에, 발광 수명은 형광과 지연 형광으로 구별할 수 있다.

[0178] 한편, 인광에 대해서는, 본 발명의 화합물과 같은 통상적인 유기 화합물에서는, 여기 삼중항 에너지는 불안정하여 열 등으로 변환되고, 수명이 짧아 즉시 실패되기 때문에, 실온에서는 거의 관측할 수 없다. 통상적인 유기 화합물의 여기 삼중항 에너지를 측정하기 위해서는, 극저온의 조건에서의 발광을 관측함으로써 측정할 수 있다.

[0179] 본 발명의 유기 일렉트로루미네선스 소자는, 단일 소자, 어레이상으로 배치된 구조로 이루어지는 소자, 양극과 음극이 X-Y 매트릭스상으로 배치된 구조의 어느 것에 있어서도 적용할 수 있다. 본 발명에 의하면, 발광층에 일반식(1)로 나타내는 화합물을 함유시킴으로써, 발광 효율이 크게 개선된 유기 발광 소자가 얻어진다. 본 발명의 유기 일렉트로루미네선스 소자 등의 유기 발광 소자는, 나아가 다양한 용도로 응용할 수 있다. 예를 들어, 본 발명의 유기 일렉트로루미네선스 소자를 사용하여 유기 일렉트로루미네선스 표시 장치를 제조할 수 있고, 상세에 대해서는 토키토 시즈오, 아다치 치하야, 무라타 히데유키 공저 「유기 EL 디스플레이」(옵사)를 참조할 수 있다. 또, 특히 본 발명의 유기 일렉트로루미네선스 소자는, 수요가 큰 유기 일렉트로루미네선스 조명이나 백라이트에 응용할 수도 있다.

[0180] 실시예

[0181] 이하에 합성에 및 실시예를 들어 본 발명의 특징을 더 구체적으로 설명한다. 이하에 나타내는 재료, 처리 내용, 처리 순서 등은, 본 발명의 취지를 이탈하지 않는 한 적절히 변경할 수 있다. 따라서, 본 발명의 범위는 이하에 나타내는 구체예에 의해 한정적으로 해석되어야 하는 것은 아니다. 또한, 발광 특성의 평가는, 하이퍼포먼스 자외 가시 근적외 분광 광도계(피킨엘머사 제조 : Lambda950), 형광 분광 광도계(호리마 제작소사 제조 : FluoroMax-4), 절대 PL 양자 수율 측정 장치(하마마츠포토닉스사 제조 : C11347), 소스 미터(키슬리사 제조 : 2400 시리즈), 반도체 파라미터 애널라이저(애질런트 테크놀로지스사 제조 : E5273A), 광 파워 미터 측정 장치(뉴포트사 제조 : 1930C), 광학 분광기(오션옵틱스사 제조 : USB2000), 분광 방사계(탐콘사 제조 : SR-3) 및 스트리크 카메라(하마마츠포토닉스(주) 제조 C4334형)를 사용하여 행했다. 또, 분자 배향의 측정은, 엘립소미터(J. A. 울람사 제조 M-2000)를 사용하여 행했다. 광학 모델의 구축, 광학 모델과 실측값의 평균 제곱 오차를 최소로 하기 위한 피팅 등은, 엘립소미터 데이터 해석용 소프트웨어인 WASE32(J. A. 울람사 제조)를 사용하여 행했다. 배향성의 정도를 평가하기 위한 오더 파라미터 S는, 다음 식으로 정의했다.

수학식 1

$$S = \frac{1}{2} \langle 3\cos^2\theta - 1 \rangle = \frac{k_e - k_o}{k_e + 2k_o}$$

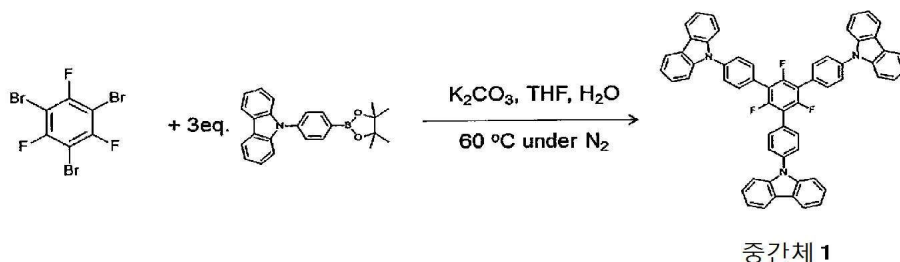
[0182]

[0183] θ 는 기관의 법선 방향과 분자가 이루는 각도의 평균값, k_o , k_e 는 각각 기관에 대해 수평 방향 및 법선 방향으로 천이 쌍극자를 갖는 분자의 소외 계수이다.

[0184] [합성예 1] 화합물 1의 합성

[0185] (1-1) 중간체 1의 합성 공정

[0186] [화학식 34]



[0187]

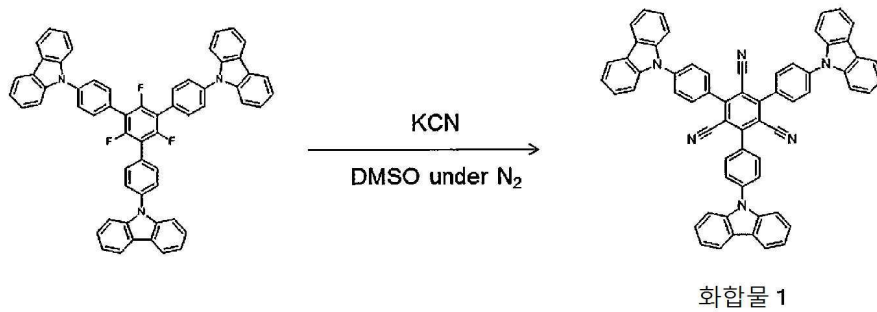
[0188] 1,3,5-트리브로모-2,4,6-트리플루오로벤젠(0.738g, 2mmol), 2-(4-(9H-카르바졸릴-9-일)페닐-1-일)-4,4,5,5-테트라메틸-1,3,2-디옥사보롤란(0.52g, 1.4mmol), 테트라하이드로푸란(55ml), 테트라키스(트리페닐포스핀)팔라듐 (Pd(PPh₃)₄ : 0.30g, 0.26mmol), 및 2M의 K₂CO₃aq(15ml)를 200ml 3구 플라스크에 넣어 탈기했다. 탈기한 용액을, 질소 기류하에서 66℃로 승온시키고, 또한 1,4-(4-(9H-카르바졸릴-9-일)페닐-1-일)-4,4,5,5-테트라메틸-1,3,2-디옥사보롤란(1.70g, 4.6mmol)을 테트라하이드로푸란 20ml에 녹인 용액을 12시간에 걸쳐 적하하고, 온도를 66℃로 유지하면서 6일간 교반했다. 이 반응 용액을 실온으로 되돌린 후, 이베퍼레이터를 사용하여 반응 용액으로부터 테트라하이드로푸란을 제거해, 침전물을 얻었다. 이 침전물을 여과 채취한 후, 물로 세정하고, 진공 건조했다. 얻어진 고체물을, 가열한 디클로로메탄 200ml에 첨가해 용액으로 하고, 이 용액을 여과한 후 농축했다. 얻어진 농축물에 n-헥산을 첨가해 백색 분말을 석출시키고, 석출된 백색 분말(중간체 1)을 여과 채취했다. 이상의 공정에 의해, 중간체 1의 1,3,5-(4-(9H-카르바졸릴-9-일)페닐-1-일)-2,4,6-트리플루오로벤젠을 수량 683mg(0.80mmol), 수율 40%로 얻었다.

¹H-NMR (500MHz, CDCl₃) : δ = 7.33 (t, J = 7.4 Hz, 6H; ArH), 7.46 (dt, J_{ortho} = 7.6 Hz, J_{meta} = 1.0 Hz, 6H; ArH), 7.55 (d, J = 8.2 Hz, 6H; ArH), 7.76 (d, J = 8.4 Hz, 6H; ArH), 7.84 (d, J = 8.2 Hz, 6H; ArH), 8.17 (d, J = 7.8 Hz, 6H; ArH).¹⁹
¹⁹F-NMR (500MHz, CDCl₃) : δ = -115.32.

[0189]

[0190] (1-2) 화합물 1의 합성 공정

[0191] [화학식 35]



[0192]

[0193] 질소 기류하, 중간체 1[(1,3,5-(4-(9H-카르바졸릴-9-일)페닐-1-일)-2,4,6-트리플루오로벤젠](0.86g, 1.0mmol), 시안화칼륨(0.85g, 13mmol)을 200ml 3구 플라스크에 넣고, 디메틸술폰 70ml를 첨가해 160℃에서 1시간 가열 교반했다. 방랭한 반응 용액에, 디클로로메탄 450ml와 물 800ml를 첨가하고, 분액했다. 이 중 물층에 디클로로메탄 450ml를 첨가해 추출을 실시하고, 얻어진 유기층을 앞서의 분액에서 얻어진 유기층에 합쳤다. 이 유기층을, 물 500ml와 포화 식염수 500ml로 세정한 후, 무수 황산마그네슘으로 건조시키고, 이배퍼레이터를 사용하여 용매를 제거했다. 얻어진 잔사를 디클로로메탄/n-헥산의 혼합 용매로 재결정시켜, 등색의 고체(화합물 1)로서 1,3,5-(4-(9H-카르바졸릴-9-일)페닐-1-일)-2,4,6-트리시아노벤젠을 수량 719mg(0.82mmol), 수율 82%로 얻었다.

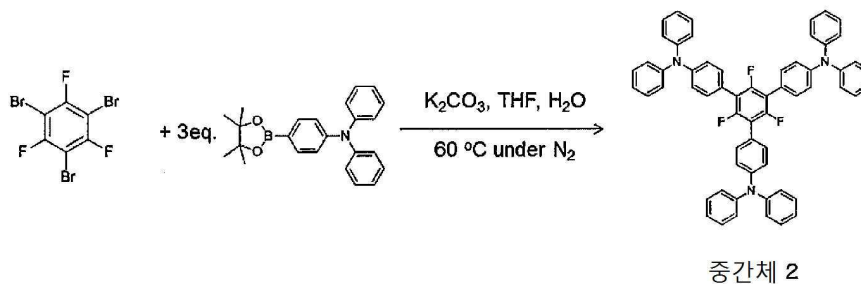
$^1\text{H-NMR}$ (500MHz, CDCl_3) : δ = 7.35 (dt, $J_{\text{ortho}} = 6.8\text{ Hz}$, $J_{\text{meta}} = 0.7\text{ Hz}$, 6H; ArH), 7.48 (dt, $J_{\text{ortho}} = 7.7\text{ Hz}$, $J_{\text{meta}} = 1.2\text{ Hz}$, 6H; ArH), 7.60 (d, $J = 8.3\text{ Hz}$, 6H; ArH), 7.91-7.97 (m, 12H; ArH), 8.17 (d, $J = 7.8\text{ Hz}$, 6H; ArH). Anal. Calcd for $\text{C}_{42}\text{H}_{24}\text{F}_4\text{N}_2$: C, 86.28; H, 4.14; N, 9.58%. Found : C, 86.35; H, 4.11; N, 9.29%.

[0194]

[0195] (합성예 2) 화합물 2의 합성

[0196] (2-1) 중간체 2의 합성 공정

[0197] [화학식 36]



[0198]

[0199] 1,3,5-트리브로모-2,4,6-트리플루오로벤젠(0.738g, 2mmol), 2-{4-(디페닐아미노)페닐-1-일}-4,4,5,5-테트라메틸-1,3,2-디옥사보롤란(0.25g, 0.7mmol), 테트라하이드로푸란(55ml), $\text{Pd}(\text{PPh}_3)_4$ (0.30g, 0.26mmol), 2M의 $\text{K}_2\text{CO}_3\text{aq}$ (15ml)를 200ml 3구 플라스크에 넣어 탈기했다. 탈기한 용액을, 질소 기류하에서 66℃로 승온시키고, 또한 1,4-{4-(디페닐아미노)페닐-1-일}-4,4,5,5-테트라메틸-1,3,2-디옥사보롤란(2.0g, 5.4mmol)을 20ml의 테트라하이드로푸란에 녹인 용액을 12시간에 걸쳐 적하하고, 온도를 66℃로 유지하면서 4일간 교반했다. 이 반응 용액을 실온으로 되돌린 후, 이배퍼레이터를 사용하여 반응 용액으로부터 테트라하이드로푸란을 제거해, 침전물을 얻었다. 이 침전물을 여과 채취한 후, 물로 세정하고, 진공 건조했다. 얻어진 고체물을, 가열한 디클로로메탄 25ml에 첨가해 용액으로 하고, 이 용액을 여과한 후 농축했다. 얻어진 농축물에 n-헥산을 첨가해 백색 분말을 석출시키고, 석

출된 백색 분말(중간체 2)을 여과 채취하고, 메탄올로 세정했다. 이상의 공정에 의해, 중간체 2의 1,3,5-(4-(디페닐아미노)페닐-1-일)-2,4,6-트리플루오로벤젠을 수량 577mg(0.67mmol), 수율 34%로 얻었다.

$^1\text{H-NMR}$ (500MHz, CDCl_3) : $\delta = 7.05$ (t, $J = 7.3$ Hz, 6H; ArH), 7.13 (dd, $J_{ortho} = 8.8$ Hz, $J_{meta} = 2.0$ Hz, 6H; ArH), 7.15 (td, $J_{ortho} = 7.5$ Hz, $J_{meta} = 1.1$ Hz, 12H; ArH), 7.28 (dt, $J_{ortho} = 7.0$ Hz, $J_{meta} = 1.5$ Hz, 12H; ArH), 7.34 (d, $J = 8.5$ Hz, 6H; ArH).
 $^{19}\text{F-NMR}$ (500MHz, CDCl_3) : $\delta = -117.09$.

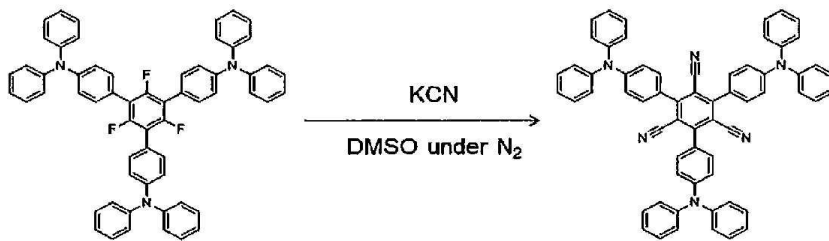
[0200]

[0201]

[0202]

(2-2) 화합물 2의 합성 공정

[화학식 37]



화합물 2

[0203]

[0204]

질소 기류하, 1,3,5-(4-(디페닐아미노)페닐-1-일)-2,4,6-트리플루오로벤젠(0.86g, 1.0mmol), 시안화칼륨(1.02g, 16mmol)을 200ml 3구 플라스크에 넣고, 디메틸술폰 60ml 첨가해 160°C에서 80분간 가열 교반했다. 방랭한 반응 용액에, 디클로로메탄 450ml와 물 450ml를 첨가하고, 분액했다. 이 중 유기층을, 물 500ml와 포화 식염수 500ml로 세정한 후, 무수 황산마그네슘으로 건조시키고, 이배퍼레이트를 사용하여 용매를 제거했다. 얻어진 잔사를 디클로로메탄/n-헥산의 혼합 용매로 재결정시켜, 등색의 고체(화합물 2)로서 1,3,5-(4-(디페닐아미노)페닐-1-일)-2,4,6-트리아자노벤젠을 수량 875mg(0.99mmol), 수율 99%로 얻었다.

$^1\text{H-NMR}$ (500MHz, CDCl_3) : $\delta = 7.11 - 7.14$ (m, 12H; ArH), 7.21 (d, $J = 7.6$ Hz, 12H; ArH), 7.32 (t, $J = 7.9$ Hz, 12H; ArH), 7.41 (d, $J = 8.7$ Hz, 6H; ArH). Anal. Calcd for $\text{C}_{63}\text{H}_{42}\text{N}_6$: C, 85.69; H, 4.79; N, 9.52%. Found: C, 85.44; H, 4.74; N, 9.42%.

[0205]

[0206]

(비교 합성에 1) 비교 화합물 1의 합성

[0207]

합성에 1의 합성법에 따라 얻어진 중간체 1을 비교 화합물 1로 했다.

[0208]

(비교 합성에 2) 비교 화합물 2의 합성

[0209]

합성에 2의 합성법에 따라 얻어진 중간체 2를 비교 화합물 2로 했다.

[0210]

(실시에 1) 화합물 1을 사용한 유기 포토루미네선스 소자의 제작과 평가

[0211]

Ar 분위기의 글로브 박스 중에서 화합물 1의 톨루엔 용액을 조제했다.

[0212]

또, 석영 기관 상에 진공 증착법으로, 진공도 4×10^{-4} Pa 이하의 조건에서 화합물 1의 박막을 50nm의 두께로 형성해 유기 포토루미네선스 소자로 했다.

[0213]

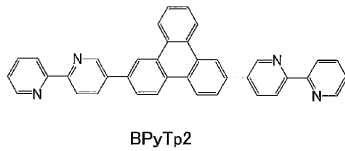
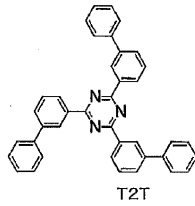
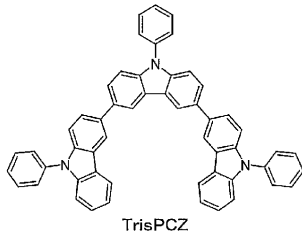
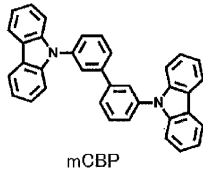
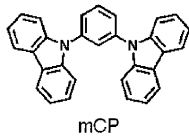
이것과는 별도로, 석영 기관 상에 진공 증착법으로, 진공도 4×10^{-4} Pa 이하의 조건으로 화합물 1과 mCP를 상이한

증착원으로부터 증착해, 화합물 1의 농도가 6.0중량%인 박막을 50nm의 두께로 형성해 유기 포토루미네선스 소자로 했다.

- [0214] 화합물 1만의 박막을 갖는 유기 포토루미네선스 소자에 대해 엘립소메트리 분광법에 의해 배향성을 측정한 바, 화합물 1의 막 형성면에 대한 분자의 배향각은 16.8° 였다.
- [0215] 또, 이들 화합물 1을 사용한 샘플에 대해, 337nm 여기광에 의한 발광 스펙트럼을 측정했다. 톨루엔 용액의 흡수 발광 스펙트럼을 도 2에 나타낸다. 화합물 1만의 박막을 갖는 유기 포토루미네선스 소자의 흡수 스펙트럼을 도 3에 나타내고, 발광 스펙트럼을 도 4에 나타낸다. 또, 화합물 1과 mCP의 박막을 갖는 유기 포토루미네선스 소자의 발광 스펙트럼을 도 5에 나타낸다.
- [0216] 톨루엔 용액에서는, 최대 발광 파장이 487nm, 포토루미네선스 양자 효율이, 공기 중에서 67.0%, 탈기 후에 89.3%였다. 화합물 1만의 박막을 갖는 유기 포토루미네선스 소자에서는, 최대 발광 파장이 519nm, 포토루미네선스 양자 효율이 85%였다. 화합물 1과 mCP의 박막을 갖는 유기 포토루미네선스 소자에서는, 최대 발광 파장이 493nm, 포토루미네선스 양자 효율이 90%였다.
- [0217] 또, 화합물 1의 톨루엔 용액에 대해 과도 감쇠 곡선을 측정한 결과를 도 6에 나타낸다. 이 과도 감쇠 곡선은, 화합물에 여기광을 쏘아 발광 강도가 실패되어 가는 과정을 측정한 발광 수명 측정 결과를 나타내는 것이다. 통상적인 1성분의 발광(형광 혹은 인광)에서는 발광 강도는 단일 지수 함수적으로 감쇠한다. 이것은, 그래프의 세로축이 세미log인 경우에는, 직선적으로 감쇠하는 것을 의미하고 있다. 도 6에 나타내는 화합물 1의 과도 감쇠 곡선에서는, 관측 초기에 이와 같은 직선적 성분(형광)이 관측되고 있지만, 수 μ 초 이후에는 직선성으로부터 벗어나는 성분이 나타나고 있다. 이것은 자연 성분의 발광이고, 초기 성분과 가산되는 신호는, 장시간측으로 꼬리를 끄는 완만한 곡선이 된다. 이와 같이 발광 수명을 측정함으로써, 화합물 1은 형광 성분 외에 자연 성분을 포함하는 발광체인 것이 확인되었다. 공기 중에서의 톨루엔 용액의 발광 수명 τ 는 7.53ns였다. 또, 탈기 후의 톨루엔 용액의 과도 감쇠 곡선에서는 2종류의 형광(즉시 형광, 자연 형광)을 관측할 수 있고, 즉시 형광의 발광 수명 τ_1 이 13.7ns, 자연 형광의 발광 수명 τ_2 가 7.72 μ s였다.
- [0218] 또한, 화합물 1과 mCP의 박막을 갖는 유기 포토루미네선스 소자에 대해, 300K, 200K, 100K, 5K의 각 온도에서 과도 감쇠 곡선을 측정했다. 그 결과를 도 7에 나타낸다. 도 7로부터, 온도 상승에 수반해 자연 형광 성분이 증가하는 열 활성화형의 자연 형광인 것이 확인되었다.
- [0219] (실시에 2) 화합물 2를 사용한 유기 포토루미네선스 소자의 제작과 평가
- [0220] 화합물 1 대신에 화합물 2를 사용한 점을 변경해, 화합물 2의 톨루엔 용액, 화합물 1만의 박막을 갖는 유기 포토루미네선스 소자, 화합물 2와 mCP의 박막을 갖는 유기 포토루미네선스 소자를 제작했다.
- [0221] 화합물 2만의 박막을 갖는 유기 포토루미네선스 소자에 대해 엘립소메트리 분광법에 의해 배향성을 측정한 바, 화합물 2의 막 형성면에 대한 분자의 배향각은 20.4° 였다.
- [0222] 또, 이들 화합물 2를 사용한 샘플에 대해, 337nm 여기광에 의한 발광 스펙트럼을 측정했다. 톨루엔 용액의 흡수 발광 스펙트럼을 도 8에 나타낸다. 화합물 2만의 박막을 갖는 유기 포토루미네선스 소자의 흡수 스펙트럼을 도 9에 나타내고, 발광 스펙트럼을 도 10에 나타낸다. 또, 화합물 2와 mCP의 박막을 갖는 유기 포토루미네선스 소자의 발광 스펙트럼을 도 11에 나타낸다.
- [0223] 톨루엔 용액에서는, 최대 발광 파장이 506nm, 포토루미네선스 양자 효율이, 공기 중에서 76.5%, 탈기 후에 81.5%였다. 화합물 2만의 박막을 갖는 유기 포토루미네선스 소자에서는, 최대 발광 파장이 626nm, 포토루미네선스 양자 효율이 49%였다. 또, 화합물 2와 mCP의 박막을 갖는 유기 포토루미네선스 소자의 포토루미네선스 양자 효율은 100%였다.
- [0224] 또, 화합물 2의 톨루엔 용액에 대해 과도 감쇠 곡선을 측정한 바, 공기 중에서의 발광 수명 τ 는 4.175ns, 탈기 후의 발광 수명 τ_1 은 5.412ns였다.
- [0225] 또한, 화합물 2와 mCP의 박막을 갖는 유기 포토루미네선스 소자의 각각에 대해, 300K, 200K, 100K, 5K의 각 온도에서 과도 감쇠 곡선을 측정했다. 그 결과를 도 12에 나타낸다. 도 12로부터, 온도 상승에 수반해 자연 형광 성분이 증가하는 열 활성화형의 자연 형광인 것이 확인되었다.
- [0226] (비교예 1) 비교 화합물 1을 사용한 유기 포토루미네선스 소자의 제작과 평가

- [0227] 화합물 1 대신에 비교 화합물 1을 사용한 점을 변경해, 비교 화합물 1의 디클로로메탄 용액, 비교 화합물 1만의 박막을 갖는 유기 포토루미네선스 소자를 제작했다.
- [0228] 탈기한 디클로로메탄 용액의 발광 파장 피크는 363nm이고, 발광 양자 수율은 48%였다. 발광 수명 τ 는 4.795ns이고, 지연 성분은 관측되지 않았다. 니트 박막의 발광 파장 피크는 381nm이고, 발광 양자 수율은 30%였다. 발광 수명은 4.993ns이고, 지연 성분은 관측되지 않았다.
- [0229] (비교예 2) 비교 화합물 2를 사용한 유기 포토루미네선스 소자의 제작과 평가
- [0230] 화합물 1 대신에 비교 화합물 2를 사용한 점을 변경해, 비교 화합물 2의 톨루엔 용액, 비교 화합물 2만의 박막을 갖는 유기 포토루미네선스 소자를 제작했다.
- [0231] 탈기한 톨루엔 용액의 발광 파장 피크는 395nm이고, 발광 양자 수율은 41%였다. 발광 수명 τ 는, 0.91ns이고, 지연 성분은 관측되지 않았다. 니트 박막의 발광 파장 피크는 393nm이고, 발광 양자 수율은 25%였다. 발광 수명은 0.807ns이고, 지연 성분은 관측되지 않았다.
- [0232] (실시예 3) 화합물 2를 사용한 유기 일렉트로루미네선스 소자의 제작과 평가
- [0233] 막두께 100nm의 인듐·주석 산화물(ITO)로 이루어지는 양극이 형성된 유리 기판 상에, 각 박막을 진공 증착법으로, 진공도 4×10^{-4} Pa로 적층했다. 먼저, ITO 상에 HATCN을 10nm의 두께로 형성하고, 이 위에 TrisPCZ를 30nm의 두께로 형성했다. 다음으로, 화합물 2와 mCBP를 상이한 증착원으로부터 공증착해, 30nm 두께의 층을 형성해 발광층으로 했다. 이때, 화합물 2의 농도는 6중량%로 했다. 다음으로, T2T를 10nm의 두께로 형성하고, 이 위에 BPyTP2를 30nm, 40nm 또는 50nm의 두께로 형성했다. 또한 불화리튬(LiF)을 0.8nm 진공 증착하고, 이어서 알루미늄(Al)을 100nm의 두께로 증착함으로써 음극을 형성했다. 이상의 공정에 의해, BPyTP2의 두께가 상이한 3종류의 유기 일렉트로루미네선스 소자를 제작했다.
- [0234] 제작한 유기 일렉트로루미네선스 소자의 발광 스펙트럼을 도 13에 나타내고, 전압-전류 밀도-휘도 특성을 도 14에 나타내고, 휘도-외부 양자 효율-전력 효율 특성을 도 15에 나타낸다. 화합물 2를 발광 재료로서 사용한 유기 일렉트로루미네선스 소자는 14.6%의 높은 외부 양자 효율을 달성했다. 만일 발광 양자 효율이 100%인 형광 재료를 사용하여 밸런스가 잡힌 이상적인 유기 일렉트로루미네선스 소자를 시험 제작했다고 하면, 광 인출 효율이 20~30%이면, 형광 발광의 외부 양자 효율은 5~7.5%가 된다. 이 값이 일반적으로, 형광 재료를 사용한 유기 일렉트로루미네선스 소자의 외부 양자 효율의 이론 한계값으로 되어 있다. 화합물 2를 사용한 본 발명의 유기 일렉트로루미네선스 소자는, 이론 한계값을 초과하는 높은 외부 양자 효율을 실현하고 있는 점에서 매우 우수하다.

[0235] [화학식 38]



[0236]

[0237] 산업상 이용 가능성

[0238] 본 발명의 화합물은 발광 재료로서 유용하다. 이 때문에 본 발명의 화합물은, 유기 일렉트로루미네선스 소자 등의 유기 발광 소자용 발광 재료로서 효과적으로 사용된다. 본 발명의 화합물 중에는, 지연 형광을 방사하는 것도 포함되어 있기 때문에, 발광 효율이 높은 유기 발광 소자를 제공하는 것도 가능하다. 이 때문에, 본 발명은 산업상 이용 가능성이 높다.

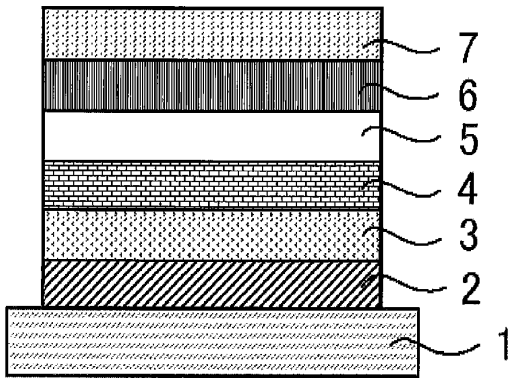
부호의 설명

[0239]

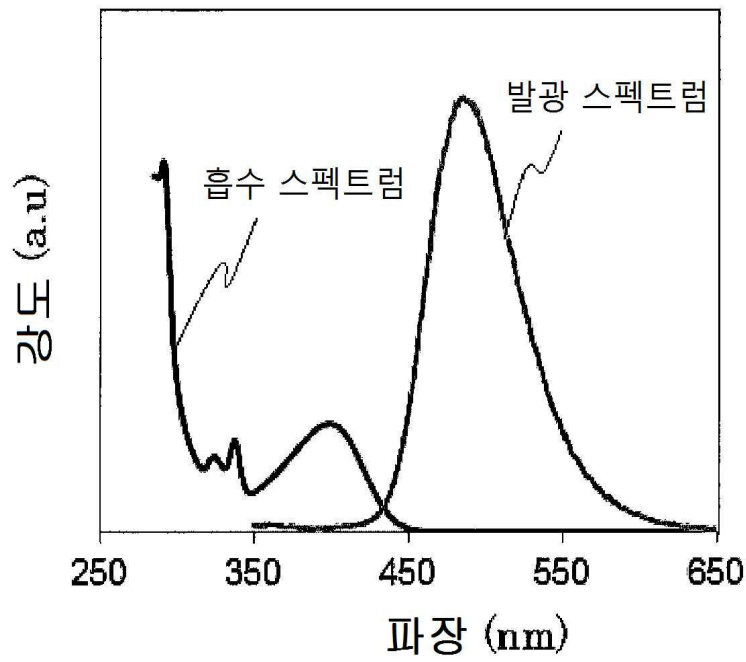
- 1 : 기판
- 2 : 양극
- 3 : 정공 주입층
- 4 : 정공 수송층
- 5 : 발광층
- 6 : 전자 수송층
- 7 : 음극

도면

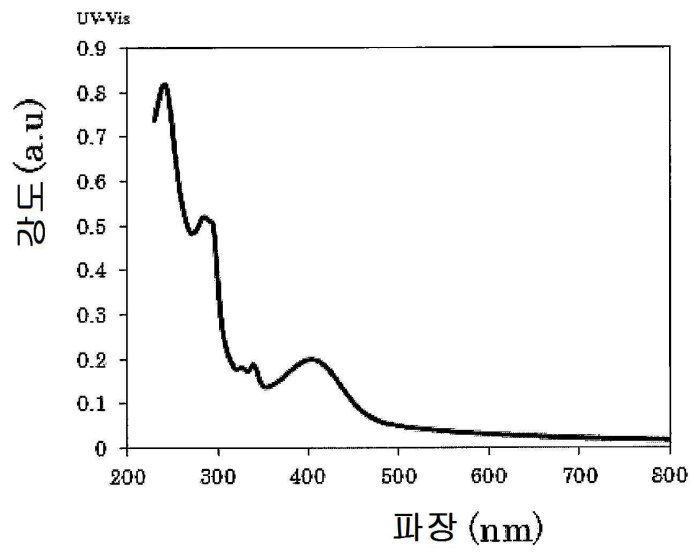
도면1



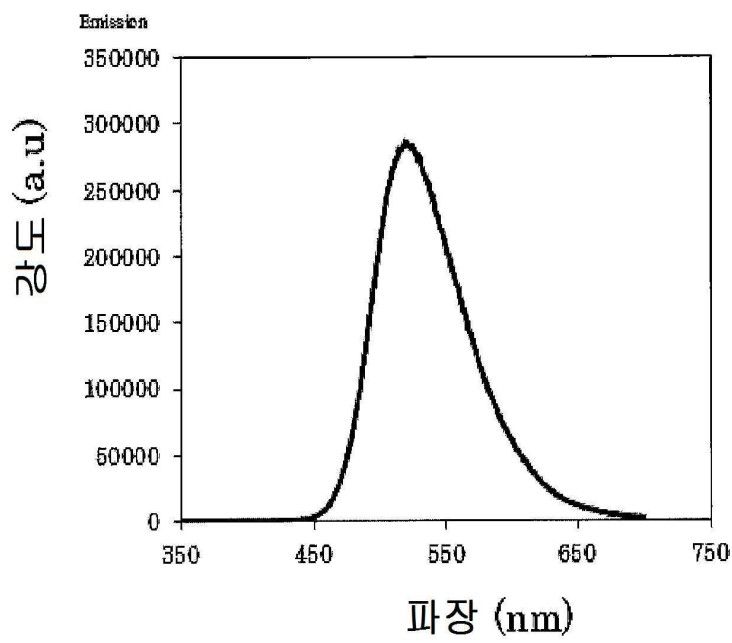
도면2



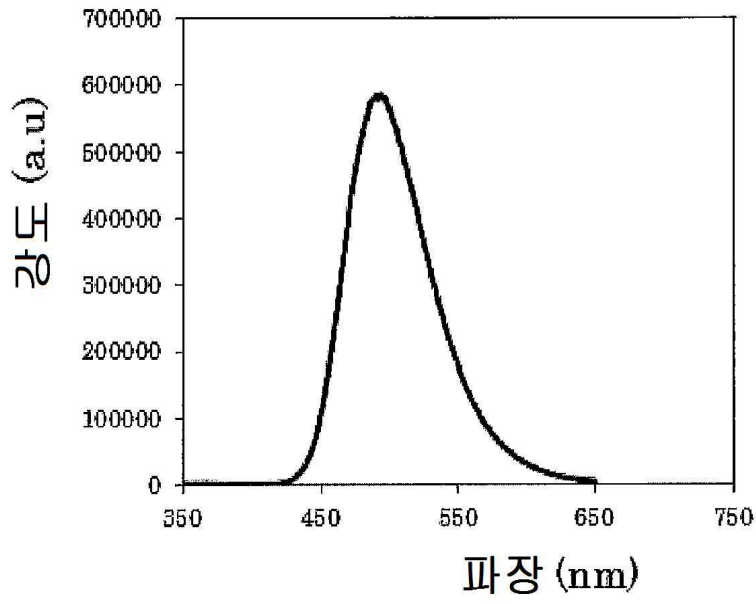
도면3



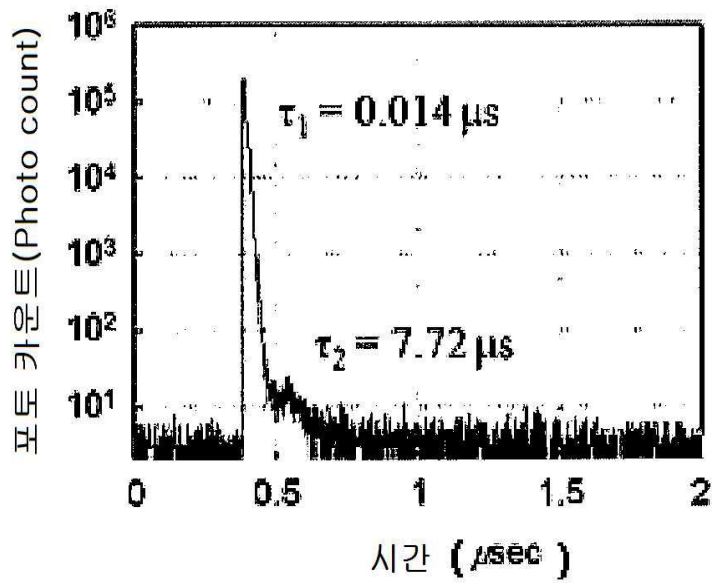
도면4



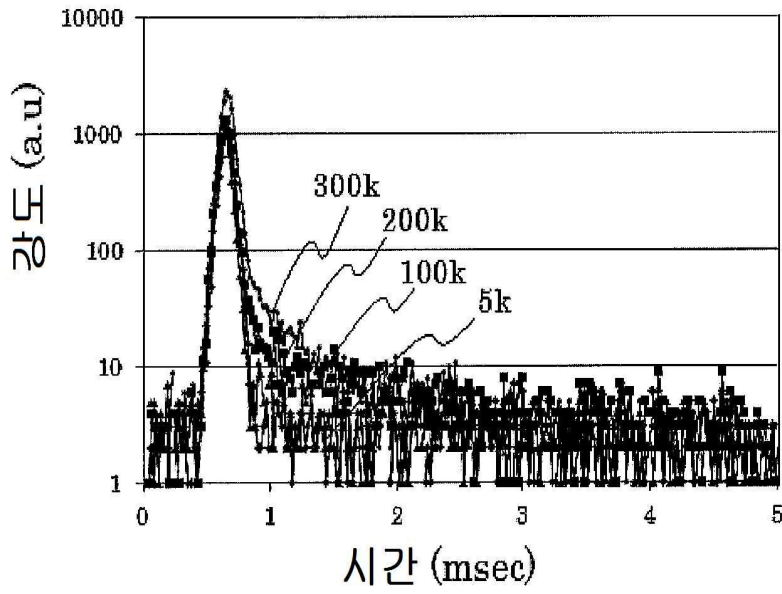
도면5



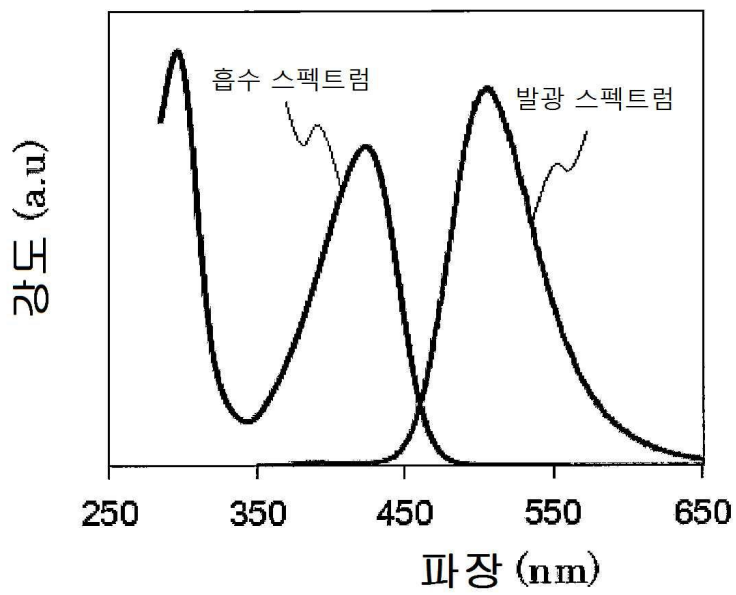
도면6



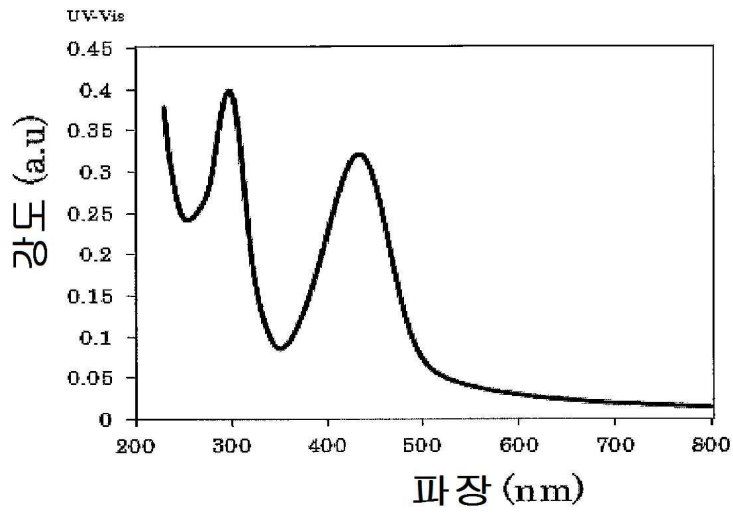
도면7



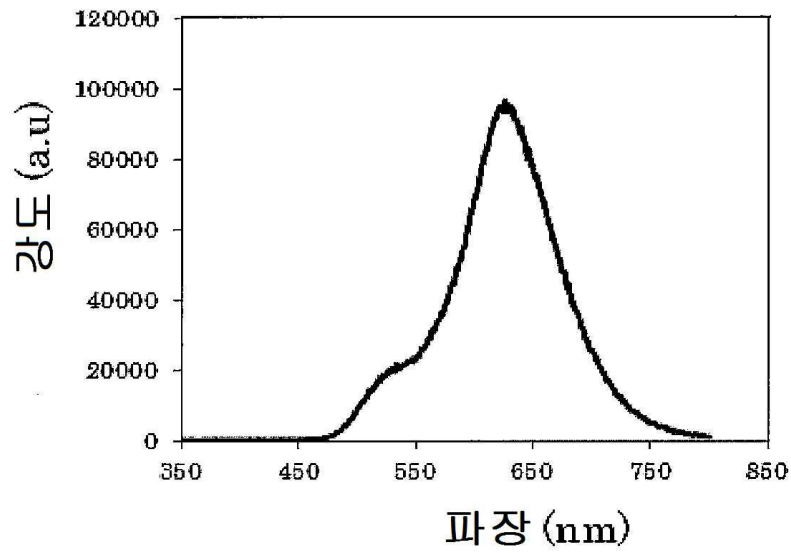
도면8



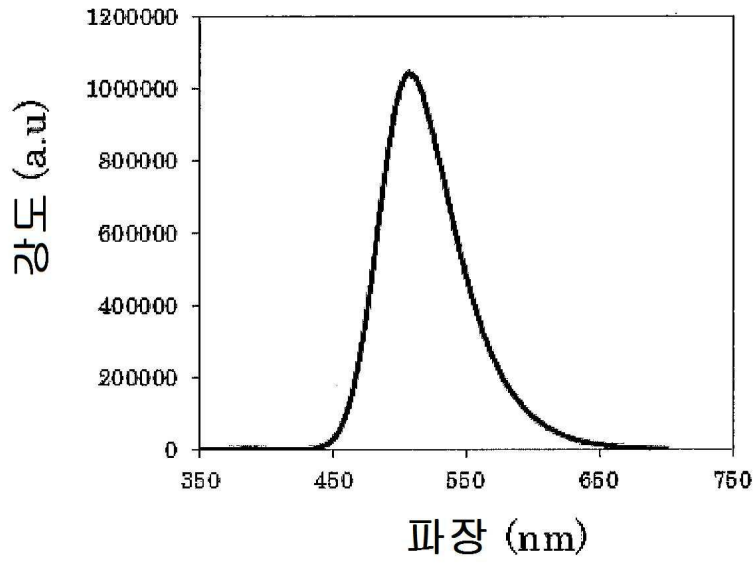
도면9



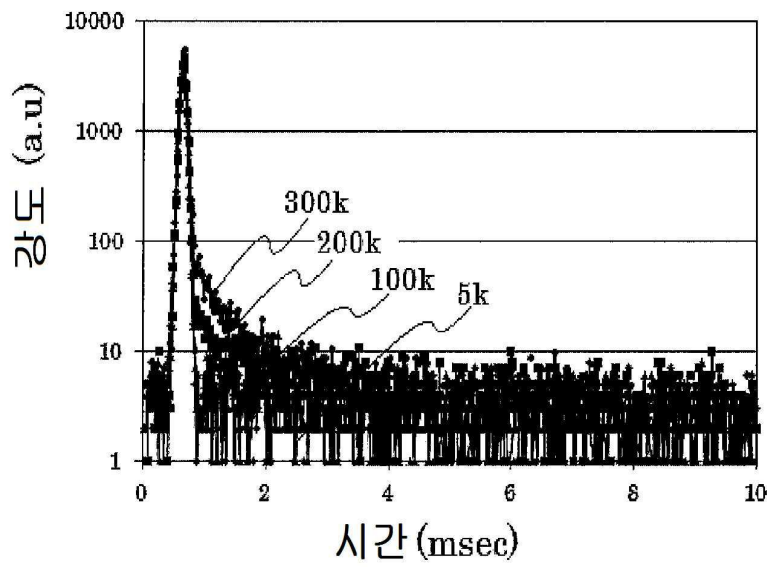
도면10



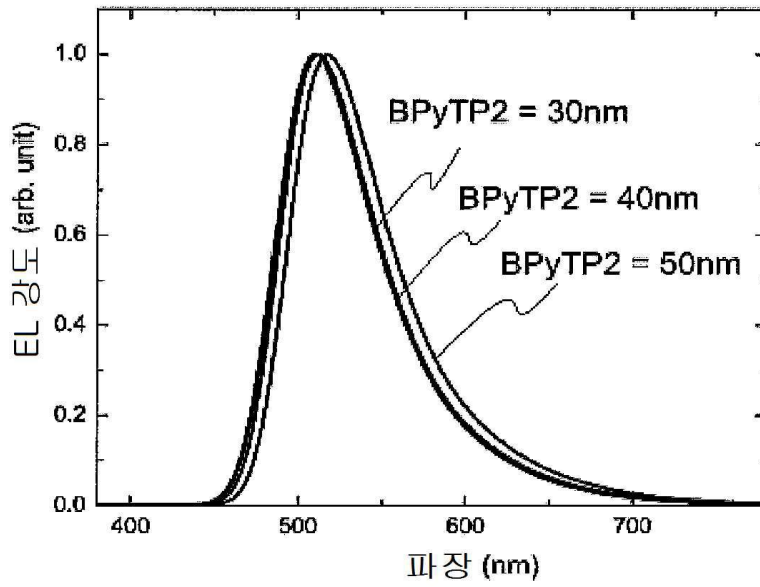
도면11



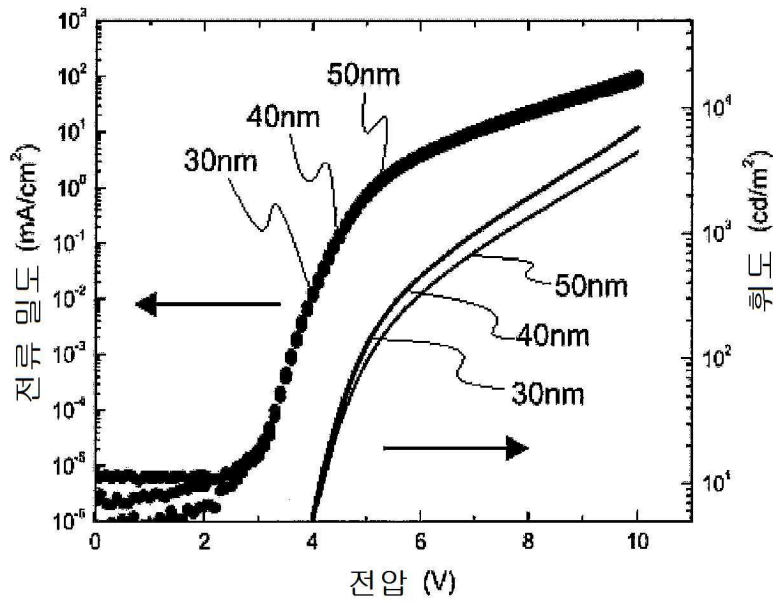
도면12



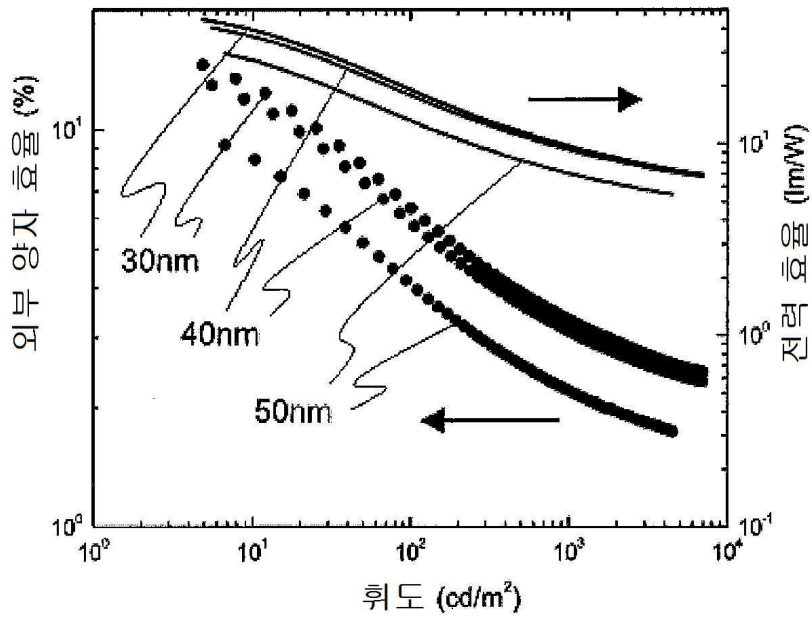
도면13



도면14



도면15



专利名称(译)	发光材料，有机发光元件和化合物		
公开(公告)号	KR102076887B1	公开(公告)日	2020-02-12
申请号	KR1020167026574	申请日	2015-02-25
申请(专利权)人(译)	가부시킴가이샤큐릭스		
当前申请(专利权)人(译)	가부시킴가이샤큐릭스		
[标]发明人	다나카히로유키		
发明人	다네다 마사츠크 시즈 가츠크 다나카 히로유키 노다 히로키 나카노타니 하지메 아다치 지하야		
IPC分类号	C09K11/06 C07C255/58 C07D209/86 H01L51/00 H01L51/50		
CPC分类号	C09K11/06 C07C255/58 C07D209/86 H01L51/0059 H01L51/0072 H01L51/5012 C09K2211/1014 C09K2211/1029 C09K2211/1033 C09K2211/1037 C09K2211/1044 C09K2211/1007		
审查员(译)	周二集群		
优先权	2014037719 2014-02-28 JP		
其他公开文献	KR1020160120784A		
外部链接	Espacenet		

摘要(译)

通式(1)表示的化合物可用作发光材料。R1, R3和R5各自表示氟基, 或者R1, R2, R4和R5各自表示氰基。R1~R6的其他分别表示由下述通式(4)中的任一表示的基团等。

