



(19) 대한민국특허청(KR)
(12) 공개특허공보(A)

(11) 공개번호 10-2019-0082752
(43) 공개일자 2019년07월10일

(51) 국제특허분류(Int. Cl.)
H01L 51/00 (2006.01) C07D 209/82 (2006.01)
C07D 487/04 (2006.01) C07D 487/22 (2006.01)
H01L 51/50 (2006.01)
(52) CPC특허분류
H01L 51/0072 (2013.01)
C07D 209/82 (2013.01)
(21) 출원번호 10-2019-7009797
(22) 출원일자(국제) 2018년12월05일
심사청구일자 2019년07월01일
(85) 번역문제출일자 2019년04월05일
(86) 국제출원번호 PCT/JP2018/044792
(87) 국제공개번호 WO 2019/111971
국제공개일자 2019년06월13일
(30) 우선권주장
JP-P-2017-234331 2017년12월06일 일본(JP)
(뒷면에 계속)

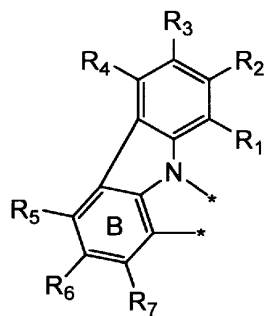
(71) 출원인
이데미쓰 고산 가부시키키가이샤
일본 도쿄도 지요다쿠 마루노우치 3초메 1반 1고
(72) 발명자
다카하시 료타
일본 2990293 치바켄 소테가우라시 가미이즈미
1280
이케다 히데츠구
일본 2990293 치바켄 소테가우라시 가미이즈미
1280
(뒷면에 계속)
(74) 대리인
김진희, 김태홍

전체 청구항 수 : 총 63 항

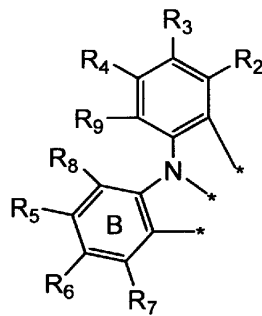
(54) 발명의 명칭 유기 일렉트로루미네센스 소자 및 신규 화합물

(57) 요약

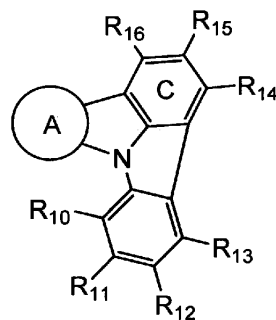
음극과, 양극과, 상기 음극과 상기 양극의 사이에 배치된 적어도 1층의 유기층을 가지고, 상기 적어도 1층의 유기층 중의 적어도 1층이, 하기 식(1-1) 및 식(1-3)으로 표시되는 화합물 또는 하기 식(1-2) 및 식(1-3)으로 표시되는 화합물을 포함하는 유기 일렉트로루미네센스 소자.



(1-1)



(1-2)



(1-3)

(52) CPC특허분류

C07D 487/04 (2013.01)

C07D 487/22 (2013.01)

H01L 51/0052 (2013.01)

H01L 51/5012 (2013.01)

(72) 발명자

세다 게이타

일본 2990293 치바켄 소데가우라시 가미이즈미
1280

나카노 유키

일본 2990293 치바켄 소데가우라시 가미이즈미
1280

(30) 우선권주장

JP-P-2018-114580 2018년06월15일 일본(JP)

16/043,074 2018년07월23일 미국(US)

16/201,984 2018년11월27일 미국(US)

명세서

청구범위

청구항 1

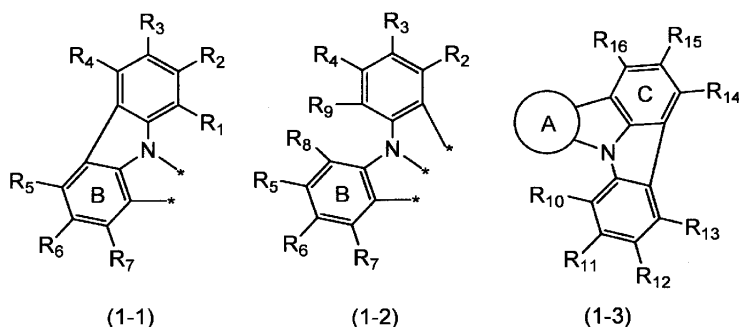
음극과,

양극과,

상기 음극과 상기 양극의 사이에 배치된 적어도 1층의 유기층을 가지고,

상기 적어도 1층의 유기층 중의 적어도 1층이,

하기 식(1-1) 및 식(1-3)으로 표시되는 화합물 또는 하기 식(1-2) 및 식(1-3)으로 표시되는 화합물을 포함하는 유기 일렉트로루미네센스 소자.



(상기 식(1-1), 상기 식(1-2) 및 상기 식(1-3) 중,

고리 A는, 치환 혹은 무치환의 고리 형성 탄소수 10~50의 축합 아릴환, 치환 혹은 무치환의 고리 형성 원자수 8~50의 축합 복소환, 또는 하기 식(2)으로 표시되는 벤젠환이다.

상기 식(1-1)의 2개의 결합수 *는, 각각, 상기 고리 A의 상기 축합 아릴환의 고리 형성 탄소 원자, 상기 축합 복소환의 고리 형성 원자, 또는 상기 식(2)으로 표시되는 벤젠환의 고리 형성 탄소 원자와 결합한다.

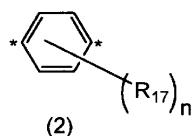
상기 식(1-2)의 3개의 결합수 *는, 각각, 상기 고리 A의 상기 축합 아릴환의 고리 형성 탄소 원자, 상기 축합 복소환의 고리 형성 원자, 또는 상기 식(2)으로 표시되는 벤젠환의 고리 형성 탄소 원자와 결합한다.

R₁~R₁₆ 중 인접하는 2개 이상의 1조 이상이, 치환 혹은 무치환의 포화 또는 불포화의 고리를 형성하여도 좋다.

상기 치환 혹은 무치환의 포화 또는 불포화의 고리를 형성하지 않는 R₁~R₁₆은, 각각 독립적으로, 수소 원자, 치환 혹은 무치환의 탄소수 1~50의 알킬기, 치환 혹은 무치환의 탄소수 1~50의 할로알킬기, 치환 혹은 무치환의 탄소수 2~50의 알케닐기, 치환 혹은 무치환의 탄소수 2~50의 알키닐기, 치환 혹은 무치환의 고리 형성 탄소수 3~50의 시클로알킬기, 치환 혹은 무치환의 탄소수 1~50의 알콕시기, 치환 혹은 무치환의 탄소수 1~50의 알킬티오기, 치환 혹은 무치환의 고리 형성 탄소수 6~50의 아릴옥시기, 치환 혹은 무치환의 고리 형성 탄소수 6~50의 아릴티오기, 치환 혹은 무치환의 탄소수 7~50의 아랄킬기, -Si(R₃₁)(R₃₂)(R₃₃), -C(=O)R₃₄, -COOR₃₅, -N(R₃₆)(R₃₇), 할로젠 원자, 시아노기, 니트로기, 치환 혹은 무치환의 고리 형성 탄소수 6~50의 아릴기, 또는 치환 혹은 무치환의 고리 형성 원자수 5~50의 1가의 복소환기이다.

R₃₁~R₃₇은, 각각 독립적으로, 수소 원자, 치환 혹은 무치환의 탄소수 1~50의 알킬기, 치환 혹은 무치환의 고리 형성 탄소수 3~50의 시클로알킬기, 치환 혹은 무치환의 고리 형성 탄소수 6~50의 아릴기, 또는 치환 혹은 무치환의 고리 형성 원자수 5~50의 1가의 복소환기이다.

R₃₁~R₃₇의 각각이 복수 존재하는 경우, 복수 존재하는 R₃₁~R₃₇의 각각은 동일하여도 좋고, 다르더라도 좋다.)



(상기 식(2) 중,

2개의 *의 고리 형성 탄소 원자의 한쪽에서, 상기 식(1-1) 또는 상기 식(1-2)의 벤젠환 B로부터 연장되는 결합수가 결합하고, 다른 쪽에서 상기 식(1-3)의 벤젠환 C로부터 연장되는 결합수가 결합한다.

R₁₇은, 수소 원자, 치환 혹은 무치환의 탄소수 1~50의 알킬기, 치환 혹은 무치환의 탄소수 1~50의 할로알킬기, 치환 혹은 무치환의 탄소수 2~50의 알케닐기, 치환 혹은 무치환의 탄소수 2~50의 알키닐기, 치환 혹은 무치환의 고리 형성 탄소수 3~50의 시클로알킬기, 치환 혹은 무치환의 탄소수 1~50의 알콕시기, 치환 혹은 무치환의 탄소수 1~50의 알킬티오기, 치환 혹은 무치환의 고리 형성 탄소수 6~50의 아릴옥시기, 치환 혹은 무치환의 고리 형성 탄소수 6~50의 아릴티오기, 치환 혹은 무치환의 탄소수 7~50의 아랄킬기, -Si(R₃₁)(R₃₂)(R₃₃), -C(=O)R₃₄, -COOR₃₅, -N(R₃₆)(R₃₇), 할로겐 원자, 시아노기, 니트로기, 치환 혹은 무치환의 고리 형성 탄소수 6~50의 아릴기, 또는 치환 혹은 무치환의 고리 형성 원자수 5~50의 1가의 복소환기이다.

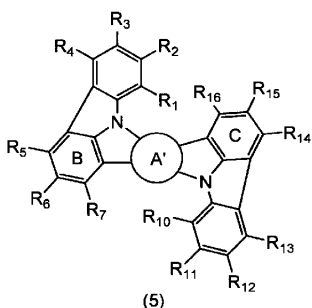
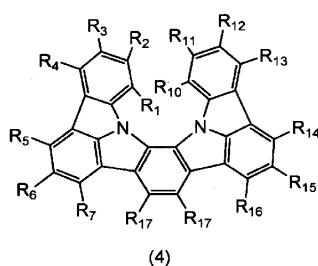
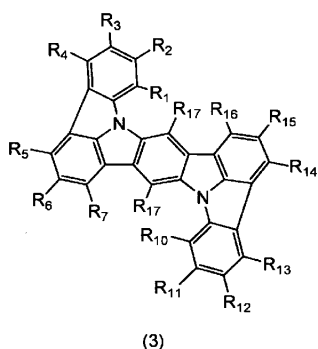
R₃₁~R₃₇은, 각각 독립적으로, 수소 원자, 치환 혹은 무치환의 탄소수 1~50의 알킬기, 치환 혹은 무치환의 고리 형성 탄소수 3~50의 시클로알킬기, 치환 혹은 무치환의 고리 형성 탄소수 6~50의 아릴기, 또는 치환 혹은 무치환의 고리 형성 원자수 5~50의 1가의 복소환기이다.

R₃₁~R₃₇의 각각이 복수 존재하는 경우, 복수 존재하는 R₃₁~R₃₇의 각각은 동일하여도 좋고, 다르더라도 좋다.

n은 1 또는 2의 정수이다. n이 2인 경우, 2개의 R₁₇은 동일하여도 좋고, 다르더라도 좋다.)

청구항 2

제1항에 있어서, 상기 식(1-1) 및 식(1-3)으로 표시되는 화합물 또는 상기 식(1-2) 및 식(1-3)으로 표시되는 화합물이, 하기 식(3), 식(4) 또는 식(5)으로 표시되는 화합물인 유기 일렉트로루미네센스 소자.



(상기 식(3), 상기 식(4) 및 상기 식(5) 중,

고리 A'는, 치환 혹은 무치환의 고리 형성 탄소수 10~50의 축합 아릴환, 또는 치환 혹은 무치환의 고리 형성 원자수 8~50의 축합 복소환이다.

R₁~R₇ 및 R₁₀~R₁₇는 상기 식(1-1), 상기 식(1-2), 상기 식(1-3) 및 상기 식(2)에서 정의한 것과 같다.)

청구항 3

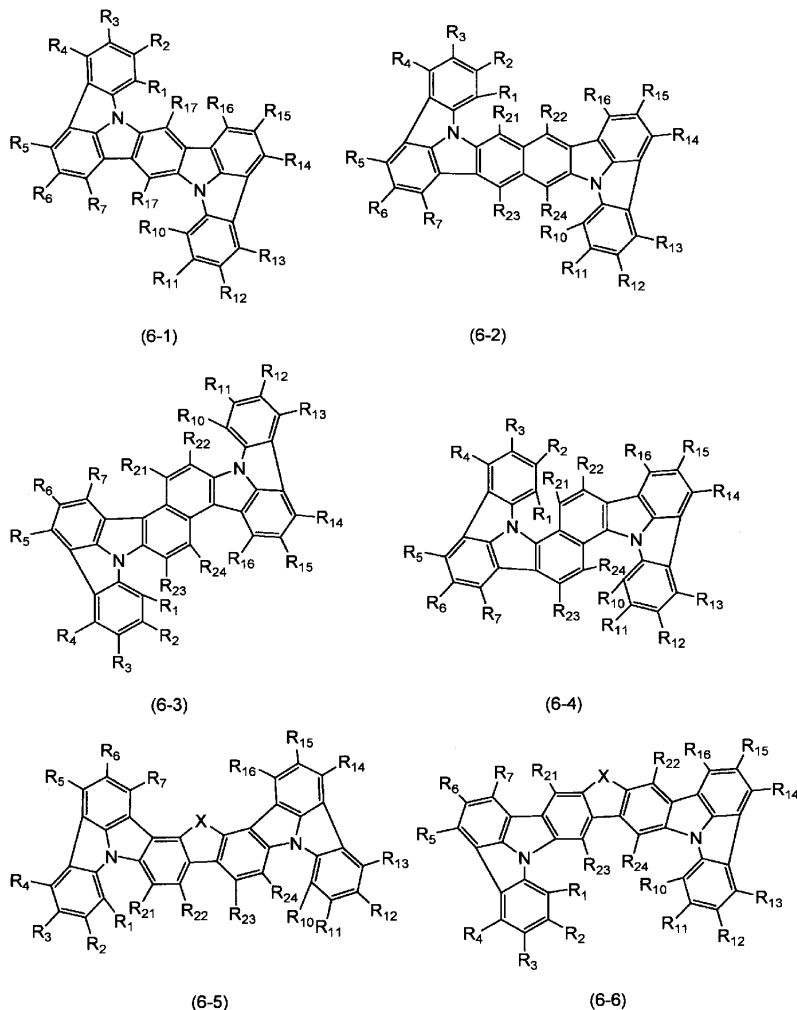
제1항 또는 제2항에 있어서, 상기 치환 혹은 무치환의 고리 형성 탄소수 10~50의 축합 아릴환이, 치환 혹은 무치환의 나프탈렌환, 치환 혹은 무치환의 안트라센환, 또는 치환 혹은 무치환의 플루오렌환이고, 상기 치환 혹은 무치환의 고리 형성 원자수 8~50의 축합 복소환이, 치환 혹은 무치환의 디벤조푸란환, 치환 혹은 무치환의 카르바졸환, 또는 치환 혹은 무치환의 디벤조티오펜환인 유기 일렉트로루미네센스 소자.

청구항 4

제1항 내지 제3항 중 어느 한 항에 있어서, 상기 치환 혹은 무치환의 고리 형성 탄소수 10~50의 축합 아릴환이, 치환 혹은 무치환의 나프탈렌환, 또는 치환 혹은 무치환의 플루오렌환이고, 상기 치환 혹은 무치환의 고리 형성 원자수 8~50의 축합 복소환이, 치환 혹은 무치환의 디벤조푸란환, 치환 혹은 무치환의 카르바졸환, 또는 치환 혹은 무치환의 디벤조티오펜환인 유기 일렉트로루미네센스 소자.

청구항 5

제1항 내지 제4항 중 어느 한 항에 있어서, 상기 식(1-1) 및 식(1-3)으로 표시되는 화합물 또는 상기 식(1-2) 및 식(1-3)으로 표시되는 화합물이, 하기 식(6-1)~식(6-6)으로 표시되는 화합물로 이루어지는 군에서 선택되는 유기 일렉트로루미네센스 소자.



(상기 식(6-1)~식(6-6) 중,

$R_1 \sim R_{17}$ 은 상기 식(1-1), 상기 식(1-2), 상기 식(1-3) 및 상기 식(2)에서 정의한 것과 같다.

X 는 0, NR_{25} 또는 $C(R_{26})(R_{27})$ 이다.

$R_{21} \sim R_{27}$ 중 인접하는 2개 이상의 1조 이상은, 치환 혹은 무치환의 포화 또는 불포화의 고리를 형성하여도 좋다.

상기 치환 혹은 무치환의 포화 또는 불포화의 고리를 형성하지 않는 $R_{21} \sim R_{27}$ 은, 각각 독립적으로, 수소 원자, 치환 혹은 무치환의 탄소수 1~50의 알킬기, 치환 혹은 무치환의 탄소수 1~50의 할로알킬기, 치환 혹은 무치환의 탄소수 2~50의 알케닐기, 치환 혹은 무치환의 탄소수 2~50의 알키닐기, 치환 혹은 무치환의 고리 형성 탄소수 3~50의 시클로알킬기, 치환 혹은 무치환의 탄소수 1~50의 알콕시기, 치환 혹은 무치환의 탄소수 1~50의 알킬티오기, 치환 혹은 무치환의 고리 형성 탄소수 6~50의 아릴옥시기, 치환 혹은 무치환의 고리 형성 탄소수 6~50의 아릴티오기, 치환 혹은 무치환의 탄소수 7~50의 아랄킬기, $-Si(R_{31})(R_{32})(R_{33})$, $-C(=O)R_{34}$, $-COOR_{35}$, $-N(R_{36})(R_{37})$, 할로젠 원자, 시아노기, 니트로기, 치환 혹은 무치환의 고리 형성 탄소수 6~50의 아릴기, 또는 치환 혹은 무치환의 고리 형성 원자수 5~50의 1가의 복소환기이다.

$R_{31} \sim R_{37}$ 은, 각각 독립적으로, 수소 원자, 치환 혹은 무치환의 탄소수 1~50의 알킬기, 치환 혹은 무치환의 고리 형성 탄소수 3~50의 시클로알킬기, 치환 혹은 무치환의 고리 형성 탄소수 6~50의 아릴기, 또는 치환 혹은 무치환의 고리 형성 원자수 5~50의 1가의 복소환기이다.

$R_{31} \sim R_{37}$ 의 각각이 복수 존재하는 경우, 복수 존재하는 $R_{31} \sim R_{37}$ 의 각각은 동일하여도 좋고, 다르더라도 좋다.)

청구항 6

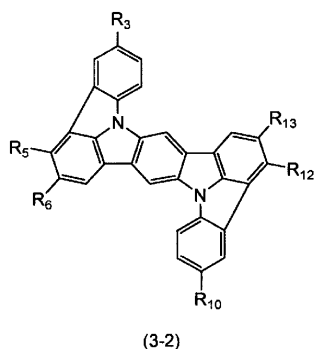
제1항 내지 제5항 중 어느 한 항에 있어서, $R_1 \sim R_{17}$ 이, 각각 독립적으로, 수소 원자, 치환 혹은 무치환의 고리 형성 탄소수 6~50의 아릴기, 및 치환 혹은 무치환의 고리 형성 원자수 5~50의 복소환기로 이루어지는 군에서 선택되는 유기 일렉트로루미네센스 소자.

청구항 7

제1항 내지 제6항 중 어느 한 항에 있어서, $R_1 \sim R_{17}$ 이, 각각 독립적으로, 수소 원자, 치환 혹은 무치환의 고리 형성 탄소수 6~18의 아릴기, 및 치환 혹은 무치환의 고리 형성 원자수 5~18의 복소환기로 이루어지는 군에서 선택되는 유기 일렉트로루미네센스 소자.

청구항 8

제1항 내지 제7항 중 어느 한 항에 있어서, 상기 식(1-1) 및 식(1-3)으로 표시되는 화합물 또는 상기 식(1-2) 및 식(1-3)으로 표시되는 화합물이, 하기 식(3-2)으로 표시되는 화합물인 유기 일렉트로루미네센스 소자.



(상기 식(3-2) 중, R_3 , R_5 , R_6 , R_{10} , R_{12} 및 R_{13} 은 상기 식(1-1) 및 상기 식(1-3)에서 정의한 것과 같다.)

청구항 9

제1항 내지 제8항 중 어느 한 항에 있어서, 「치환 혹은 무치환의」라고 하는 경우에 있어서의 치환기가, 탄소수 1~50의 알킬기, 탄소수 1~50의 할로알킬기, 탄소수 2~50의 알케닐기, 탄소수 2~50의 알키닐기, 고리 형

성 탄소수 3~50의 시클로알킬기, 탄소수 1~50의 알콕시기, 탄소수 1~50의 알킬티오기, 고리 형성 탄소수 6~50의 아릴옥시기, 고리 형성 탄소수 6~50의 아릴티오기, 탄소수 7~50의 아랄킬기, $-\text{Si}(\text{R}_{41})(\text{R}_{42})(\text{R}_{43})$, $-\text{C}(=\text{O})\text{R}_{44}$, $-\text{COOR}_{45}$, $-\text{S}(=\text{O})_2\text{R}_{46}$, $-\text{P}(=\text{O})(\text{R}_{47})(\text{R}_{48})$, $-\text{Ge}(\text{R}_{49})(\text{R}_{50})(\text{R}_{51})$, $-\text{N}(\text{R}_{52})(\text{R}_{53})$ (여기서, $\text{R}_{41}\sim\text{R}_{53}$ 은, 각각 독립적으로, 수소 원자, 탄소수 1~50의 알킬기, 고리 형성 탄소수 6~50의 아릴기, 또는 고리 형성 원자수 5~50의 1가의 복소환기이다. $\text{R}_{41}\sim\text{R}_{53}$ 이 2 이상 존재하는 경우, 2 이상의 $\text{R}_{41}\sim\text{R}_{53}$ 의 각각은 동일하여도 좋고, 다르더라도 좋다.), 히드록시기, 할로젠 원자, 시아노기, 니트로기, 고리 형성 탄소수 6~50의 아릴기, 및 고리 형성 원자수 5~50의 1가의 복소환기로 이루어지는 군에서 선택되는 유기 일렉트로루미네센스 소자.

청구항 10

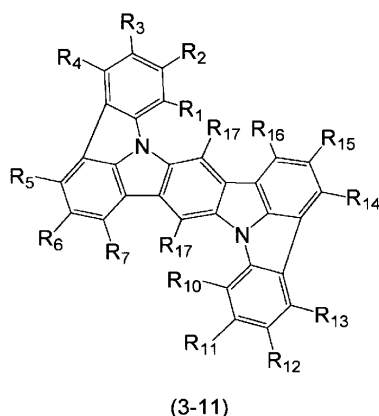
제1항 내지 제9항 중 어느 한 항에 있어서, 「치환 혹은 무치환의」라고 하는 경우에 있어서의 치환기가, 탄소수 1~50의 알킬기, 고리 형성 탄소수 6~50의 아릴기, 또는 고리 형성 원자수 5~50의 1가의 복소환기인 유기 일렉트로루미네센스 소자.

청구항 11

제1항 내지 제10항 중 어느 한 항에 있어서, 「치환 혹은 무치환의」라고 하는 경우에 있어서의 치환기가, 탄소수 1~18의 알킬기, 고리 형성 탄소수 6~18의 아릴기, 또는 고리 형성 원자수 5~18의 1가의 복소환기인 유기 일렉트로루미네센스 소자.

청구항 12

제1항에 있어서, 상기 식(1-1) 및 식(1-3)으로 표시되는 화합물 또는 상기 식(1-2) 및 식(1-3)으로 표시되는 화합물이, 하기 식(3-11)으로 표시되는 화합물인 유기 일렉트로루미네센스 소자.



(상기 식(3-11) 중,

$\text{R}_1\sim\text{R}_7$ 및 $\text{R}_{10}\sim\text{R}_{16}$ 중 인접하는 2개 이상의 1조 이상이, 치환 혹은 무치환의 포화 또는 불포화의 고리를 형성하여도 좋다.

상기 치환 혹은 무치환의 포화 또는 불포화의 고리를 형성하지 않는 $\text{R}_1\sim\text{R}_7$ 및 $\text{R}_{10}\sim\text{R}_{16}$ 은, 각각 독립적으로, 수소 원자, 치환 혹은 무치환의 탄소수 1~50의 알킬기, 치환 혹은 무치환의 탄소수 1~50의 할로알킬기, 치환 혹은 무치환의 탄소수 2~50의 알케닐기, 치환 혹은 무치환의 탄소수 2~50의 알키닐기, 치환 혹은 무치환의 고리 형성 탄소수 3~50의 시클로알킬기, 치환 혹은 무치환의 탄소수 1~50의 알콕시기, 치환 혹은 무치환의 탄소수 1~50의 알킬티오기, 치환 혹은 무치환의 고리 형성 탄소수 6~50의 아릴옥시기, 치환 혹은 무치환의 고리 형성 탄소수 6~50의 아릴티오기, 치환 혹은 무치환의 탄소수 7~50의 아랄킬기, $-\text{Si}(\text{R}_{31})(\text{R}_{32})(\text{R}_{33})$, $-\text{C}(=\text{O})\text{R}_{34}$, $-\text{COOR}_{35}$, $-\text{N}(\text{R}_{36})(\text{R}_{37})$, 할로젠 원자, 시아노기, 니트로기, 치환 혹은 무치환의 고리 형성 탄소수 6~50의 아릴기, 또는 치환 혹은 무치환의 고리 형성 원자수 5~50의 1가의 복소환기이다. 단, $\text{R}_1\sim\text{R}_7$ 및 $\text{R}_{10}\sim\text{R}_{16}$ 의 적어도 하나는 $-\text{N}(\text{R}_{36})(\text{R}_{37})$ 이다.

R_{17} 은, 수소 원자, 치환 혹은 무치환의 탄소수 1~50의 알킬기, 치환 혹은 무치환의 탄소수 1~50의 할로알킬기,

치환 혹은 무치환의 탄소수 2~50의 알케닐기, 치환 혹은 무치환의 탄소수 2~50의 알킬닐기, 치환 혹은 무치환의 고리 형성 탄소수 3~50의 시클로알킬기, 치환 혹은 무치환의 탄소수 1~50의 알콕시기, 치환 혹은 무치환의 탄소수 1~50의 알킬티오기, 치환 혹은 무치환의 고리 형성 탄소수 6~50의 아릴옥시기, 치환 혹은 무치환의 고리 형성 탄소수 6~50의 아릴티오기, 치환 혹은 무치환의 탄소수 7~50의 아랄킬기, $-\text{Si}(\text{R}_{31})(\text{R}_{32})(\text{R}_{33})$, $-\text{C}(=\text{O})\text{R}_{34}$, $-\text{COOR}_{35}$, $-\text{N}(\text{R}_{36})(\text{R}_{37})$, 할로젠 원자, 시아노기, 니트로기, 치환 혹은 무치환의 고리 형성 탄소수 6~50의 아릴기, 또는 치환 혹은 무치환의 고리 형성 원자수 5~50의 1가의 복소환기이다.

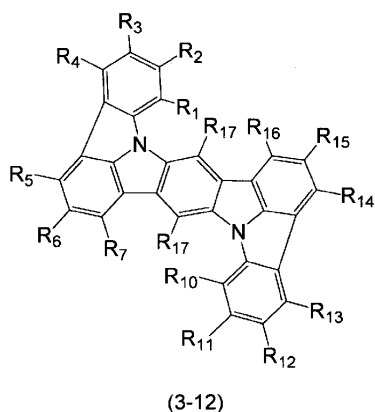
2개의 R_{17} 은 동일하여도 좋고, 다르더라도 좋다.

$\text{R}_{31} \sim \text{R}_{37}$ 은, 각각 독립적으로, 수소 원자, 치환 혹은 무치환의 탄소수 1~50의 알킬기, 치환 혹은 무치환의 고리 형성 탄소수 3~50의 시클로알킬기, 치환 혹은 무치환의 고리 형성 탄소수 6~50의 아릴기, 또는 치환 혹은 무치환의 고리 형성 원자수 5~50의 1가의 복소환기이다.

$\text{R}_{31} \sim \text{R}_{37}$ 의 각각이 복수 존재하는 경우, 복수 존재하는 $\text{R}_{31} \sim \text{R}_{37}$ 의 각각은 동일하여도 좋고, 다르더라도 좋다.)

청구항 13

제12항에 있어서, 상기 식(3-11)으로 표시되는 화합물이 하기 식(3-12)으로 표시되는 화합물인 유기 일렉트로루 미네센스 소자.



(상기 식(3-12) 중,

$\text{R}_1 \sim \text{R}_7$ 및 $\text{R}_{10} \sim \text{R}_{16}$ 중 인접하는 2개 이상의 1조 이상이, 치환 혹은 무치환의 포화 또는 불포화의 고리를 형성하여도 좋다.

상기 치환 혹은 무치환의 포화 또는 불포화의 고리를 형성하지 않는 $\text{R}_1 \sim \text{R}_7$ 및 $\text{R}_{10} \sim \text{R}_{16}$ 은, 각각 독립적으로, 수소 원자, 치환 혹은 무치환의 탄소수 1~50의 알킬기, 치환 혹은 무치환의 탄소수 1~50의 할로알킬기, 치환 혹은 무치환의 탄소수 2~50의 알케닐기, 치환 혹은 무치환의 탄소수 2~50의 알킬닐기, 치환 혹은 무치환의 고리 형성 탄소수 3~50의 시클로알킬기, 치환 혹은 무치환의 탄소수 1~50의 알콕시기, 치환 혹은 무치환의 탄소수 1~50의 알킬티오기, 치환 혹은 무치환의 고리 형성 탄소수 6~50의 아릴옥시기, 치환 혹은 무치환의 고리 형성 탄소수 6~50의 아릴티오기, 치환 혹은 무치환의 탄소수 7~50의 아랄킬기, $-\text{Si}(\text{R}_{31})(\text{R}_{32})(\text{R}_{33})$, $-\text{C}(=\text{O})\text{R}_{34}$, $-\text{COOR}_{35}$, $-\text{N}(\text{R}_{36})(\text{R}_{37})$, 할로젠 원자, 시아노기, 니트로기, 치환 혹은 무치환의 고리 형성 탄소수 6~50의 아릴기, 또는 치환 혹은 무치환의 고리 형성 원자수 5~50의 1가의 복소환기이다. 단, $\text{R}_1 \sim \text{R}_7$ 및 $\text{R}_{10} \sim \text{R}_{16}$ 의 어느 2개는 $-\text{N}(\text{R}_{36})(\text{R}_{37})$ 이다.

R_{17} 은, 수소 원자, 치환 혹은 무치환의 탄소수 1~50의 알킬기, 치환 혹은 무치환의 탄소수 1~50의 할로알킬기, 치환 혹은 무치환의 탄소수 2~50의 알케닐기, 치환 혹은 무치환의 탄소수 2~50의 알킬닐기, 치환 혹은 무치환의 고리 형성 탄소수 3~50의 시클로알킬기, 치환 혹은 무치환의 탄소수 1~50의 알콕시기, 치환 혹은 무치환의 탄소수 1~50의 알킬티오기, 치환 혹은 무치환의 고리 형성 탄소수 6~50의 아릴옥시기, 치환 혹은 무치환의 고리 형성 탄소수 6~50의 아릴티오기, 치환 혹은 무치환의 탄소수 7~50의 아랄킬기, $-\text{Si}(\text{R}_{31})(\text{R}_{32})(\text{R}_{33})$,

$-C(=O)R_{34}$, $-COOR_{35}$, $-N(R_{36})(R_{37})$, 할로젠 원자, 시아노기, 니트로기, 치환 혹은 무치환의 고리 형성 탄소수 6~50의 아릴기, 또는 치환 혹은 무치환의 고리 형성 원자수 5~50의 1가의 복소환기이다.

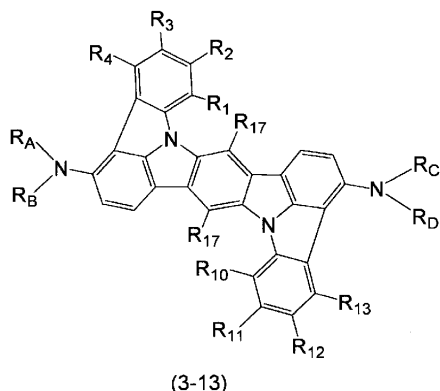
2개의 R_{17} 은 동일하여도 좋고, 다르더라도 좋다.

$R_{31} \sim R_{37}$ 은, 각각 독립적으로, 수소 원자, 치환 혹은 무치환의 탄소수 1~50의 알킬기, 치환 혹은 무치환의 고리 형성 탄소수 3~50의 시클로알킬기, 치환 혹은 무치환의 고리 형성 탄소수 6~50의 아릴기, 또는 치환 혹은 무치환의 고리 형성 원자수 5~50의 1가의 복소환기이다.

$R_{31} \sim R_{37}$ 의 각각이 복수 존재하는 경우, 복수 존재하는 $R_{31} \sim R_{37}$ 의 각각은 동일하여도 좋고, 다르더라도 좋다.)

청구항 14

제12항 또는 제13항에 있어서, 상기 식(3-11)으로 표시되는 화합물이 하기 식(3-13)으로 표시되는 화합물인 유기 일렉트로루미네센스 소자.



(상기 식(3-13) 중,

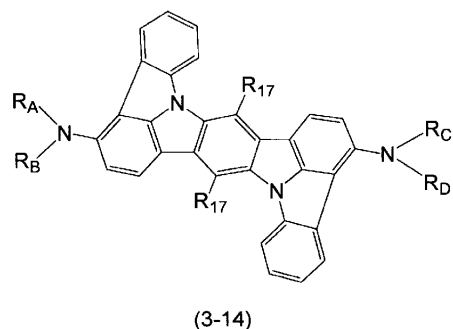
$R_1 \sim R_4$ 및 $R_{10} \sim R_{13}$ 중 인접하는 2개 이상의 1조 이상이, 치환 혹은 무치환의 포화 또는 불포화의 고리를 형성하여도 좋다.

상기 치환 혹은 무치환의 포화 또는 불포화의 고리를 형성하지 않는 $R_1 \sim R_4$ 및 $R_{10} \sim R_{13}$, 그리고 R_{17} 은, 각각 독립적으로, 수소 원자, 치환 혹은 무치환의 고리 형성 탄소수 6~18의 아릴기, 또는 치환 혹은 무치환의 고리 형성 원자수 5~18의 1가의 복소환기이다. 2개의 R_{17} 은 상호 동일하여도 좋고, 다르더라도 좋다.

R_A , R_B , R_C 및 R_D 는, 각각 독립적으로, 치환 혹은 무치환의 고리 형성 탄소수 6~18의 아릴기, 또는 치환 혹은 무치환의 고리 형성 원자수 5~18의 1가의 복소환기이다.)

청구항 15

제14항에 있어서, 상기 식(3-13)으로 표시되는 화합물이 하기 식(3-14)으로 표시되는 화합물인 유기 일렉트로루미네센스 소자.



(상기 식(3-14) 중, R_{17} , R_A , R_B , R_C 및 R_D 는 상기 식(3-13)에서 정의한 것과 같다.)

청구항 16

제14항 또는 제15항에 있어서, R_A , R_B , R_C 및 R_D 가 각각 독립적으로 치환 혹은 무치환의 고리 형성 탄소수 6~18의 아릴기인 유기 일렉트로루미네센스 소자.

청구항 17

제14항 내지 제16항 중 어느 한 항에 있어서, R_A , R_B , R_C 및 R_D 가 각각 독립적으로 치환 혹은 무치환의 페닐기인 유기 일렉트로루미네센스 소자.

청구항 18

제12항 내지 제17항 중 어느 한 항에 있어서, 상기 2개의 R_{17} 이 각각 수소 원자인 유기 일렉트로루미네센스 소자.

청구항 19

제12항 내지 제18항 중 어느 한 항에 있어서, 「치환 혹은 무치환의」라고 하는 경우에 있어서의 치환기가, 탄소수 1~18의 알킬기, 고리 형성 탄소수 6~18의 아릴기, 및 고리 형성 원자수 5~18의 1가의 복소환기로 이루어지는 군에서 선택되는 유기 일렉트로루미네센스 소자.

청구항 20

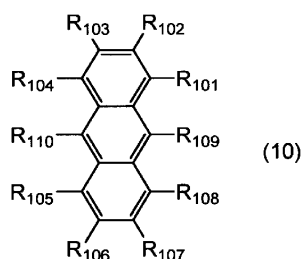
제12항 내지 제19항 중 어느 한 항에 있어서, 「치환 혹은 무치환의」라고 하는 경우에 있어서의 치환기가 탄소수 1~5의 알킬기인 유기 일렉트로루미네센스 소자.

청구항 21

제1항 내지 제20항 중 어느 한 항에 있어서, 상기 적어도 1층의 유기층 중의 적어도 1층이 발광층인 유기 일렉트로루미네센스 소자.

청구항 22

제21항에 있어서, 상기 발광층이 하기 식(10)으로 표시되는 화합물을 더 포함하는 유기 일렉트로루미네센스 소자.



[식(10) 중,

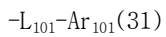
$R_{101} \sim R_{110}$ 중 인접하는 2개 이상의 1조 이상이, 치환 혹은 무치환의 포화 또는 불포화의 고리를 형성하여도 좋다.

상기 치환 혹은 무치환의 포화 또는 불포화의 고리를 형성하지 않는 $R_{101} \sim R_{110}$ 은, 각각 독립적으로, 수소 원자, 치환 혹은 무치환의 탄소수 1~50의 알킬기, 치환 혹은 무치환의 탄소수 1~50의 할로알킬기, 치환 혹은 무치환의 탄소수 2~50의 알케닐기, 치환 혹은 무치환의 탄소수 2~50의 알키닐기, 치환 혹은 무치환의 고리 형성 탄소수 3~50의 시클로알킬기, 치환 혹은 무치환의 탄소수 1~50의 알콕시기, 치환 혹은 무치환의 탄소수 1~50의 알킬티오기, 치환 혹은 무치환의 고리 형성 탄소수 6~50의 아릴옥시기, 치환 혹은 무치환의 고리 형성 탄소수

6~50의 아릴티오기, 치환 혹은 무치환의 탄소수 7~50의 아랄킬기, $-\text{Si}(\text{R}_{121})(\text{R}_{122})(\text{R}_{123})$, $-\text{C}(=\text{O})\text{R}_{124}$, $-\text{COOR}_{125}$, $-\text{N}(\text{R}_{126})(\text{R}_{127})$, 할로젠 원자, 시아노기, 니트로기, 치환 혹은 무치환의 고리 형성 탄소수 6~50의 아릴기, 치환 혹은 무치환의 고리 형성 원자수 5~50의 1가의 복소환기, 또는 하기 식(31)으로 표시되는 기이다.

$\text{R}_{121} \sim \text{R}_{127}$ 은, 각각 독립적으로, 수소 원자, 치환 혹은 무치환의 탄소수 1~50의 알킬기, 치환 혹은 무치환의 고리 형성 탄소수 3~50의 시클로알킬기, 치환 혹은 무치환의 고리 형성 탄소수 6~50의 아릴기, 또는 치환 혹은 무치환의 고리 형성 원자수 5~50의 1가의 복소환기이다. $\text{R}_{121} \sim \text{R}_{127}$ 이 2 이상 존재하는 경우, 2 이상의 $\text{R}_{121} \sim \text{R}_{127}$ 의 각각은 동일하여도 좋고, 다르더라도 좋다.

단, 상기 치환 혹은 무치환의 포화 또는 불포화의 고리를 형성하지 않는 $\text{R}_{101} \sim \text{R}_{110}$ 의 적어도 하나는 하기 식(31)으로 표시되는 기이다. 하기 식(31)이 2 이상 존재하는 경우, 2 이상의 하기 식(31)으로 표시되는 기의 각각은 동일하여도 좋고, 다르더라도 좋다.



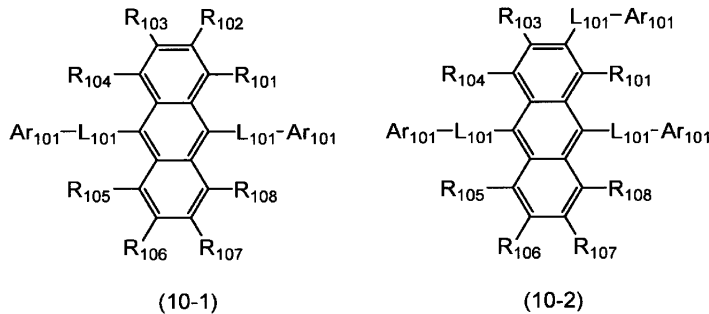
(식(31) 중,

L_{101} 은, 단결합, 치환 혹은 무치환의 고리 형성 탄소수 6~30의 아릴렌기, 또는 치환 혹은 무치환의 고리 형성 원자수 5~30의 2가의 복소환기이다.

Ar_{101} 은, 치환 혹은 무치환의 고리 형성 탄소수 6~50의 아릴기, 또는 치환 혹은 무치환의 고리 형성 원자수 5~50의 1가의 복소환기이다.)]

청구항 23

제22항에 있어서, 상기 식(10)으로 표시되는 화합물이 하기 식(10-1) 또는 식(10-2)으로 표시되는 유기 일렉트로루미네센스 소자.

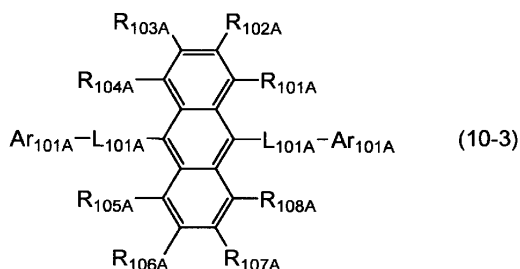


(식(10-1) 중, $\text{R}_{101} \sim \text{R}_{108}$, L_{101} 및 Ar_{101} 은 상기 식(10)에서 정의한 것과 같다.

식(10-2) 중, R_{101} , $\text{R}_{103} \sim \text{R}_{108}$, L_{101} 및 Ar_{101} 은 상기 식(10)에서 정의한 것과 같다.)

청구항 24

제22항 또는 제23항에 있어서, 상기 식(10)으로 표시되는 화합물이 하기 식(10-3)으로 표시되는 유기 일렉트로루미네센스 소자.



(식(10-3) 중,

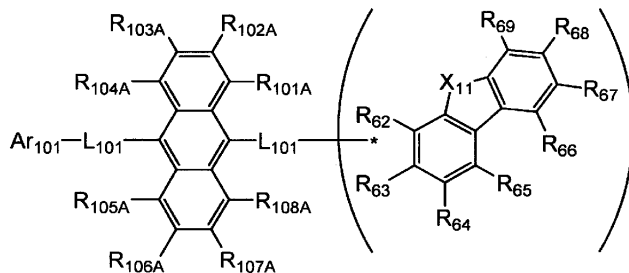
$R_{101A} \sim R_{108A}$ 는 각각 독립적으로, 수소 원자, 또는 치환 혹은 무치환의 고리 형성 탄소수 6~50의 아틸기이다.

L_{101A} 는 단결합, 또는 치환 혹은 무치환의 고리 형성 탄소수 6~30의 아틸렌기이다. 2개의 L_{101A} 는 동일하여도 좋고, 다르더라도 좋다.

Ar_{101A} 는 치환 혹은 무치환의 고리 형성 탄소수 6~50의 아틸기이다. 2개의 Ar_{101A} 는 동일하여도 좋고, 다르더라도 좋다.)

청구항 25

제22항 또는 제23항에 있어서, 상기 식(10)으로 표시되는 화합물이 하기 식(10-4)으로 표시되는 유기 일렉트로루미네센스 소자.



(10-4)

(식(10-4) 중,

L_{101} 및 Ar_{101} 은 상기 식(10)에서 정의한 것과 같다.

$R_{101A} \sim R_{108A}$ 는 각각 독립적으로, 수소 원자, 또는 치환 혹은 무치환의 고리 형성 탄소수 6~50의 아틸기이다.

X_{11} 은 O, S 또는 $N(R_{61})$ 이다.

R_{61} 은 수소 원자, 치환 혹은 무치환의 탄소수 1~50의 알킬기, 또는 치환 혹은 무치환의 고리 형성 탄소수 6~50의 아틸기이다.

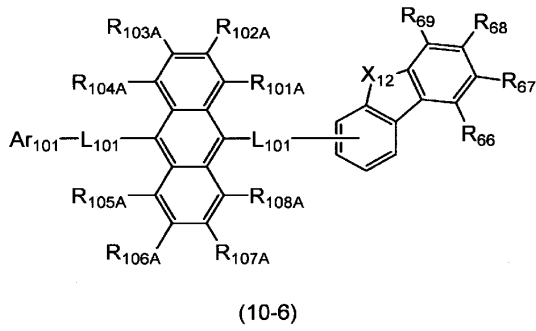
$R_{62} \sim R_{69}$ 의 하나는 L_{101} 과 결합하는 결합수이다.

L_{101} 과 결합하지 않는 $R_{62} \sim R_{69}$ 중 인접하는 2개 이상의 1조 이상은, 치환 혹은 무치환의 포화 또는 불포화의 고리를 형성하여도 좋다.

L_{101} 과 결합하지 않으며 또한 상기 치환 혹은 무치환의 포화 또는 불포화의 고리를 형성하지 않는 $R_{62} \sim R_{69}$ 는, 각각 독립적으로, 수소 원자, 치환 혹은 무치환의 탄소수 1~50의 알킬기, 또는 치환 혹은 무치환의 고리 형성 탄소수 6~50의 아틸기이다.)

청구항 26

제25항에 있어서, 상기 식(10)으로 표시되는 화합물이 하기 식(10-6)으로 표시되는 유기 일렉트로루미네센스 소자.



(식(10-6) 중,

L_{101} 및 Ar_{101} 은 상기 식(10)에서 정의한 것과 같다.

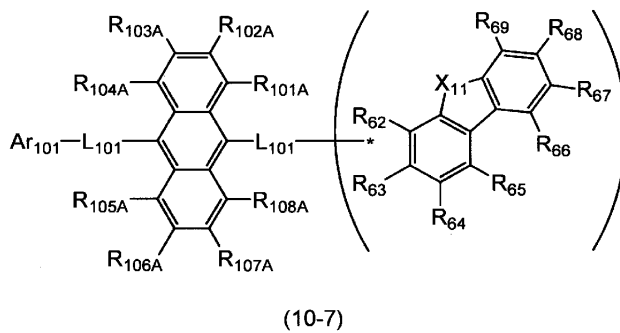
$R_{101A} \sim R_{108A}$ 는 상기 식(10-4)에서 정의한 것과 같다.

$R_{66} \sim R_{69}$ 는 상기 식(10-4)에서 정의한 것과 같다.

X_{12} 는 0 또는 S이다.)

청구항 27

제25항에 있어서, 상기 식(10)으로 표시되는 화합물이 하기 식(10-7)으로 표시되는 유기 일렉트로루미네센스 소자.



(식(10-7) 중,

L_{101} 및 Ar_{101} 은 식(10)에서 정의한 것과 같다.

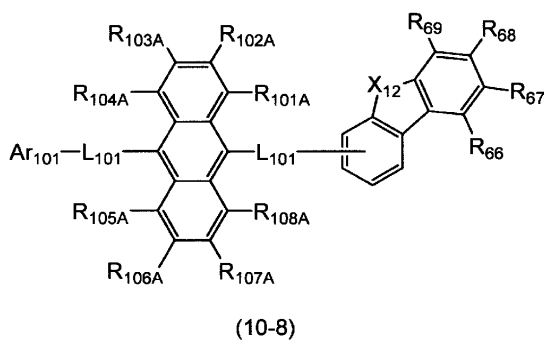
$R_{101A} \sim R_{108A}$ 는 상기 식(10-4)에서 정의한 것과 같다.

X_{11} 은 상기 식(10-4)에서 정의한 것과 같다.

$R_{62} \sim R_{69}$ 는 상기 식(10-4)에서 정의한 것과 같다. 단, R_{66} 및 R_{67} , R_{67} 및 R_{68} , 그리고 R_{68} 및 R_{69} 의 어느 1조는, 상호 결합하여, 치환 혹은 무치환의 포화 또는 불포화의 고리를 형성한다.)

청구항 28

제25항 내지 제27항 중 어느 한 항에 있어서, 상기 식(10)으로 표시되는 화합물이 하기 식(10-8)으로 표시되는 유기 일렉트로루미네센스 소자.



(식(10-8) 중,

L_{101} 및 Ar_{101} 은 식(10)에서 정의한 것과 같다.

$R_{101A} \sim R_{108A}$ 는 상기 식(10-4)에서 정의한 것과 같다.

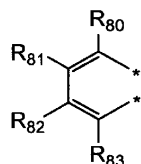
X_{12} 는 0 또는 S이다.

$R_{66} \sim R_{69}$ 는 상기 식(10-4)에서 정의한 것과 같다. 단, R_{66} 및 R_{67} , R_{67} 및 R_{68} , 또는 R_{68} 및 R_{69} 의 어느 1조는, 상호 결합하여, 치환 혹은 무치환의 포화 또는 불포화의 고리를 형성한다.)

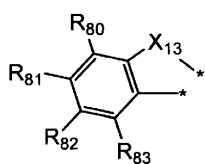
청구항 29

제27항 또는 제28항에 있어서, R_{66} 및 R_{67} , R_{67} 및 R_{68} 또는 R_{68} 및 R_{69} 의 어느 1조가, 상호 결합하여, 하기 식(10-8-1) 또는 식(10-8-2)으로 표시되는 고리를 형성하고,

상기 식(10-8-1) 또는 식(10-8-2)으로 표시되는 고리를 형성하지 않는 $R_{66} \sim R_{69}$ 는, 치환 혹은 무치환의 포화 또는 불포화의 고리를 형성하지 않는 유기 일렉트로루미네센스 소자.



(10-8-1)



(10-8-2)

(식(10-8-1) 및 식(10-8-2) 중,

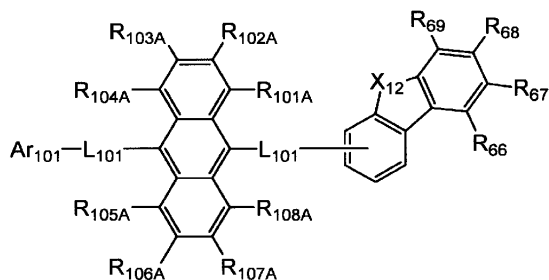
2개의 결합수 *는 각각 R_{66} 및 R_{67} , R_{67} 및 R_{68} 또는 R_{68} 및 R_{69} 의 1조와 결합한다.

$R_{80} \sim R_{83}$ 은 각각 독립적으로, 수소 원자, 치환 혹은 무치환의 탄소수 1~50의 알킬기, 또는 치환 혹은 무치환의 고리 형성 탄소수 6~50의 아릴기이다.

X_{13} 은 0 또는 S이다.)

청구항 30

제25항 또는 제26항에 있어서, 상기 식(10)으로 표시되는 화합물이 하기 식(10-9)으로 표시되는 유기 일렉트로루미네센스 소자.



(10-9)

(식(10-9) 중,

L_{101} 및 Ar_{101} 은 식(10)에서 정의한 것과 같다.

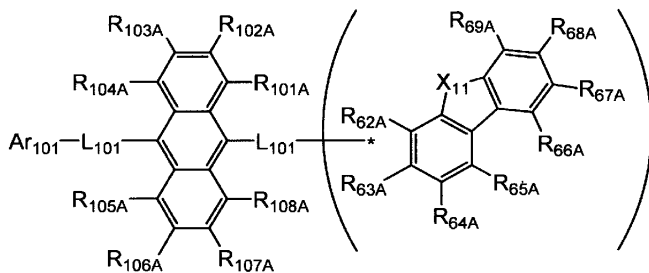
$R_{101A} \sim R_{108A}$ 는 상기 식(10-4)에서 정의한 것과 같다.

$R_{66} \sim R_{69}$ 은 상기 식(10-4)에서 정의한 것과 같다. 단, R_{66} 및 R_{67} , R_{67} 및 R_{68} , 그리고 R_{69} 및 R_{67} 은, 모두 상호 결합하지 않고, 치환 혹은 무치환의 포화 또는 불포화의 고리를 형성하지 않는다.

X_{12} 는 O 또는 S이다.)

청구항 31

제22항 또는 제23항에 있어서, 상기 식(10)으로 표시되는 화합물이 하기 식(10-4A)으로 표시되는 유기 일렉트로 루미네센스 소자.



(10-4A)

(식(10-4A) 중,

L_{101} 및 Ar_{101} 은 상기 식(10)에서 정의한 것과 같다.

$R_{101A} \sim R_{108A}$ 는 각각 독립적으로, 수소 원자, 또는 치환 혹은 무치환의 고리 형성 탄소수 6~50의 아릴기이다.

X_{11} 은 O, S 또는 $N(R_{61})$ 이다.

R_{61} 은 수소 원자, 치환 혹은 무치환의 탄소수 1~50의 알킬기, 또는 치환 혹은 무치환의 고리 형성 탄소수 6~50의 아릴기이다.

$R_{62A} \sim R_{69A}$ 중 인접하는 2개 이상의 1조 이상은 치환 혹은 무치환의 포화 또는 불포화의 고리를 형성하여도 좋고, $R_{62A} \sim R_{69A}$ 중 인접하는 2개는 하기 식(10-4A-1)으로 표시되는 고리를 형성한다.

치환 혹은 무치환의 포화 또는 불포화의 고리를 형성하지 않는 $R_{62A} \sim R_{69A}$ 는, 각각 독립적으로, 수소 원자, 치환 혹은 무치환의 탄소수 1~50의 알킬기, 또는 치환 혹은 무치환의 고리 형성 탄소수 6~50의 아릴기이다.)



(10-4A-1)

(식(10-4A-1) 중,

2개의 결합수 *의 각각은 $R_{62A} \sim R_{69A}$ 중 인접하는 2개와 결합한다.

$R_{70} \sim R_{73}$ 의 하나는 L_{101} 과 결합하는 결합수이다.

L_{101} 과 결합하지 않는 $R_{70} \sim R_{73}$ 은, 각각 독립적으로, 수소 원자, 치환 혹은 무치환의 탄소수 1~50의 알킬기, 또는 치환 혹은 무치환의 고리 형성 탄소수 6~50의 아릴기이다.)

청구항 32

제21항 내지 제31항 중 어느 한 항에 있어서, 상기 양극과 상기 발광층의 사이에 정공 수송층을 갖는 유기 일렉트로루미네센스 소자.

청구항 33

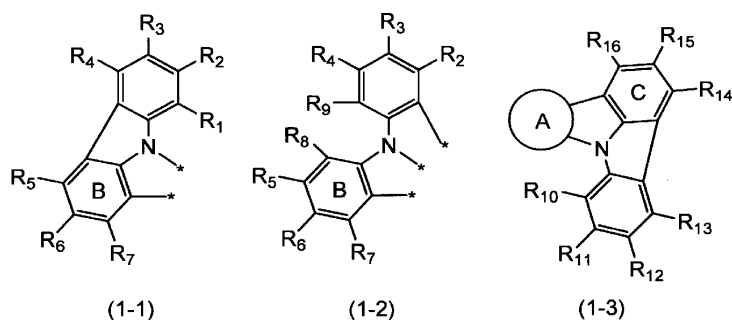
제21항 내지 제32항 중 어느 한 항에 있어서, 상기 음극과 상기 발광층의 사이에 전자 수송층을 갖는 유기 일렉트로루미네센스 소자.

청구항 34

제1항 내지 제33항 중 어느 한 항에 기재한 유기 일렉트로루미네센스 소자를 구비하는 전자기기.

청구항 35

하기 식(1-1) 및 식(1-3)으로 표시되는 화합물 또는 하기 식(1-2) 및 식(1-3)으로 표시되는 화합물.



(상기 식(1-1), 상기 식(1-2) 및 상기 식(1-3) 중,

고리 A는, 치환 혹은 무치환의 고리 형성 탄소수 10~50의 축합 아릴환, 치환 혹은 무치환의 고리 형성 원자수 8~50의 축합 복소환, 또는 하기 식(2)으로 표시되는 벤젠환이다.

상기 식(1-1)의 2개의 결합수 *는, 각각, 상기 고리 A의 상기 축합 아릴환의 고리 형성 탄소 원자, 상기 축합 복소환의 고리 형성 원자, 또는 상기 식(2)으로 표시되는 벤젠환의 고리 형성 탄소 원자와 결합한다.

상기 식(1-2)의 3개의 결합수 *는, 각각, 상기 고리 A의 상기 축합 아릴환의 고리 형성 탄소 원자, 상기 축합 복소환의 고리 형성 원자, 또는 상기 식(2)으로 표시되는 벤젠환의 고리 형성 탄소 원자와 결합한다.

$R_1 \sim R_{16}$ 중 인접하는 2개 이상의 1조 이상이, 치환 혹은 무치환의 포화 또는 불포화의 고리를 형성하여도 좋다.

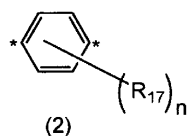
상기 치환 혹은 무치환의 포화 또는 불포화의 고리를 형성하지 않는 $R_1 \sim R_{16}$ 은, 각각 독립적으로, 수소 원자, 치

환 혹은 무치환의 탄소수 1~50의 알킬기, 치환 혹은 무치환의 탄소수 1~50의 할로알킬기, 치환 혹은 무치환의 탄소수 2~50의 알케닐기, 치환 혹은 무치환의 탄소수 2~50의 알키닐기, 치환 혹은 무치환의 고리 형성 탄소수 3~50의 시클로알킬기, 치환 혹은 무치환의 탄소수 1~50의 알콕시기, 치환 혹은 무치환의 탄소수 1~50의 알킬티오기, 치환 혹은 무치환의 고리 형성 탄소수 6~50의 아릴옥시기, 치환 혹은 무치환의 고리 형성 탄소수 6~50의 아릴티오기, 치환 혹은 무치환의 탄소수 7~50의 아랄킬기, $-\text{Si}(\text{R}_{31})(\text{R}_{32})(\text{R}_{33})$, $-\text{C}(=\text{O})\text{R}_{34}$, $-\text{COOR}_{35}$, $-\text{N}(\text{R}_{36})(\text{R}_{37})$, 할로젠 원자, 시아노기, 니트로기, 치환 혹은 무치환의 고리 형성 탄소수 6~50의 아릴기, 또는 치환 혹은 무치환의 고리 형성 원자수 5~50의 1가의 복소환기이다.

$\text{R}_{31} \sim \text{R}_{37}$ 은, 각각 독립적으로, 수소 원자, 치환 혹은 무치환의 탄소수 1~50의 알킬기, 치환 혹은 무치환의 고리 형성 탄소수 3~50의 시클로알킬기, 치환 혹은 무치환의 고리 형성 탄소수 6~50의 아릴기, 또는 치환 혹은 무치환의 고리 형성 원자수 5~50의 1가의 복소환기이다.

$\text{R}_{31} \sim \text{R}_{37}$ 의 각각이 복수 존재하는 경우, 복수 존재하는 $\text{R}_{31} \sim \text{R}_{37}$ 의 각각은 동일하여도 좋고, 다르더라도 좋다.

단, 상기 고리 A가 상기 식(2)으로 표시되는 벤젠환인 경우에는, $\text{R}_1 \sim \text{R}_{17}$ 중 적어도 하나는, 치환 혹은 무치환의 탄소수 1~50의 알킬기, 치환 혹은 무치환의 고리 형성 탄소수 3~50의 시클로알킬기, 치환 혹은 무치환의 고리 형성 탄소수 6~50의 아릴기, 또는 치환 혹은 무치환의 고리 형성 원자수 5~50의 1가의 복소환기이다; 또는 $\text{R}_1 \sim \text{R}_{16}$ 중 인접하는 2개 이상의 적어도 1조가, 치환 혹은 무치환의 포화 또는 불포화의 고리를 형성한다.)



(상기 식(2) 중,

2개의 *의 고리 형성 탄소 원자의 한쪽에서, 상기 식(1-1) 또는 상기 식(1-2)의 벤젠환 B로부터 연장되는 결합수가 결합하고, 다른 쪽에서 상기 식(1-3)의 벤젠환 C로부터 연장되는 결합수가 결합한다.

R_{17} 은, 수소 원자, 치환 혹은 무치환의 탄소수 1~50의 알킬기, 치환 혹은 무치환의 탄소수 1~50의 할로알킬기, 치환 혹은 무치환의 탄소수 2~50의 알케닐기, 치환 혹은 무치환의 탄소수 2~50의 알키닐기, 치환 혹은 무치환의 고리 형성 탄소수 3~50의 시클로알킬기, 치환 혹은 무치환의 탄소수 1~50의 알콕시기, 치환 혹은 무치환의 탄소수 1~50의 알킬티오기, 치환 혹은 무치환의 고리 형성 탄소수 6~50의 아릴옥시기, 치환 혹은 무치환의 고리 형성 탄소수 6~50의 아릴티오기, 치환 혹은 무치환의 탄소수 7~50의 아랄킬기, $-\text{Si}(\text{R}_{31})(\text{R}_{32})(\text{R}_{33})$, $-\text{C}(=\text{O})\text{R}_{34}$, $-\text{COOR}_{35}$, $-\text{N}(\text{R}_{36})(\text{R}_{37})$, 할로젠 원자, 시아노기, 니트로기, 치환 혹은 무치환의 고리 형성 탄소수 6~50의 아릴기, 또는 치환 혹은 무치환의 고리 형성 원자수 5~50의 1가의 복소환기이다.

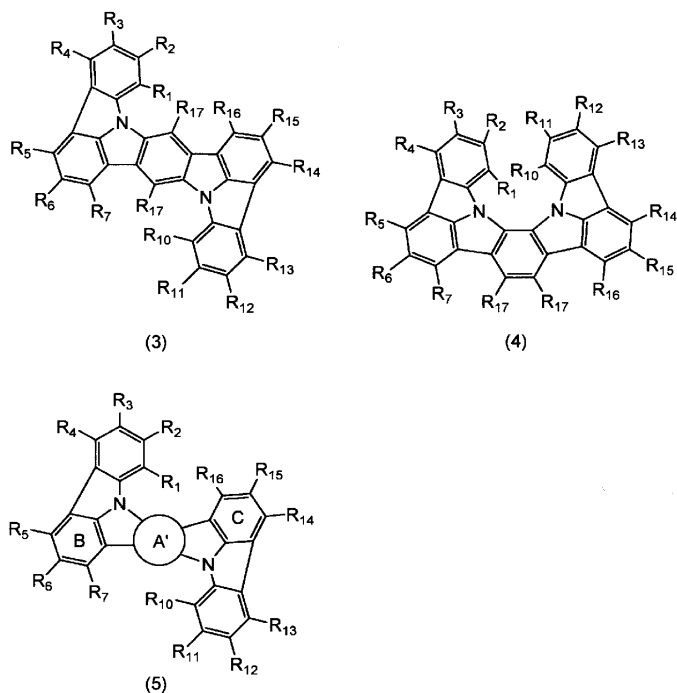
$\text{R}_{31} \sim \text{R}_{37}$ 은, 각각 독립적으로, 수소 원자, 치환 혹은 무치환의 탄소수 1~50의 알킬기, 치환 혹은 무치환의 고리 형성 탄소수 3~50의 시클로알킬기, 치환 혹은 무치환의 고리 형성 탄소수 6~50의 아릴기, 또는 치환 혹은 무치환의 고리 형성 원자수 5~50의 1가의 복소환기이다.

$\text{R}_{31} \sim \text{R}_{37}$ 의 각각이 복수 존재하는 경우, 복수 존재하는 $\text{R}_{31} \sim \text{R}_{37}$ 의 각각은 동일하여도 좋고, 다르더라도 좋다.

n 은 1 또는 2의 정수이다. n 이 2인 경우, 2개의 R_{17} 은 동일하여도 좋고, 다르더라도 좋다.)

청구항 36

제35항에 있어서, 하기 식(3), 식(4) 또는 식(5)으로 표시되는 화합물.



(상기 식(3), 상기 식(4) 및 상기 식(5) 중,

고리 A'는 치환 혹은 무치환의 고리 형성 탄소수 10~50의 축합 아릴환, 또는 치환 혹은 무치환의 고리 형성 원자수 8~50의 축합 복소환이다.

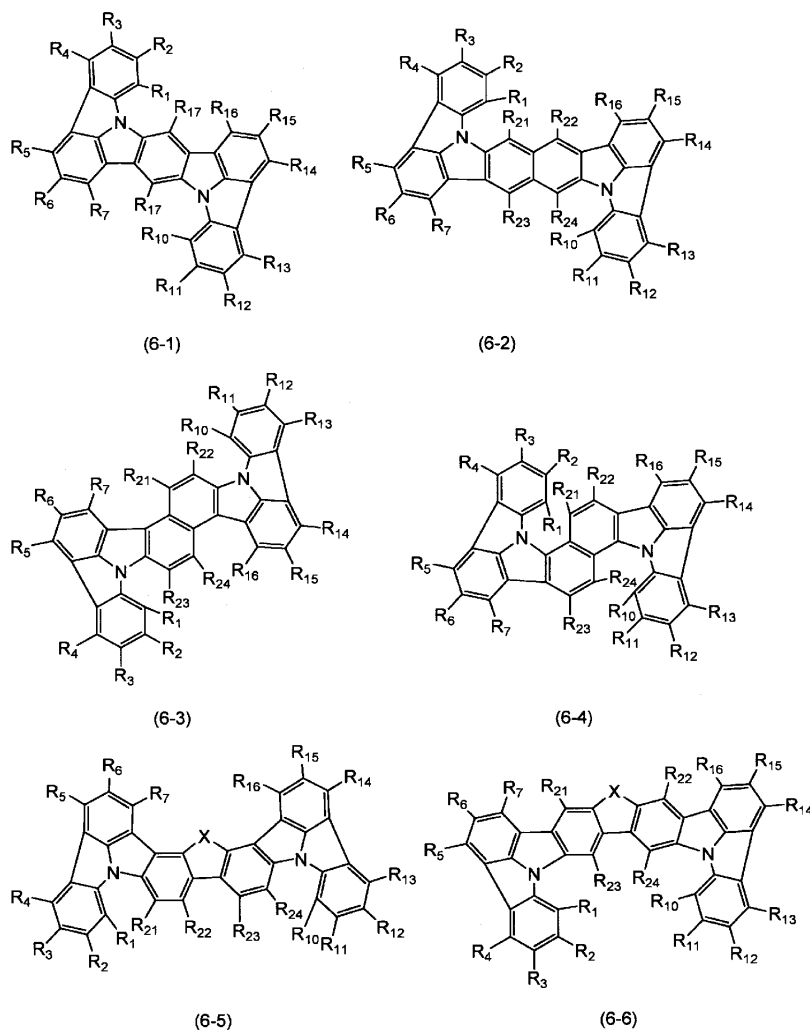
R₁~R₇ 및 R₁₀~R₁₇은 상기 식(1-1), 상기 식(1-2), 상기 식(1-3) 및 상기 식(2)에서 정의한 것과 같다.)

청구항 37

제35항 또는 제36항에 있어서, 상기 치환 혹은 무치환의 고리 형성 탄소수 10~50의 축합 아릴환이, 치환 혹은 무치환의 나프탈렌환 또는 치환 혹은 무치환의 플루오렌환이고, 상기 치환 혹은 무치환의 고리 형성 원자수 8~50의 축합 복소환이, 치환 혹은 무치환의 디벤조푸란환, 치환 혹은 무치환의 카르바졸환, 또는 치환 혹은 무치환의 디벤조티오펜환인 화합물.

청구항 38

제35항 내지 제37항 중 어느 한 항에 있어서, 하기 식(6-1)~식(6-6)으로 표시되는 화합물.



(상기 식(6-1)~식(6-6) 중,

$R_1 \sim R_{17}$ 은 상기 식(1-1), 상기 식(1-2), 상기 식(1-3) 및 상기 식(2)에서 정의한 것과 같다.

X 는 0, NR_{25} 또는 $C(R_{26})(R_{27})$ 이다.

$R_{21} \sim R_{27}$ 중 인접하는 2개 이상의 1조 이상은, 치환 혹은 무치환의 포화 또는 불포화의 고리를 형성하여도 좋다.

상기 치환 혹은 무치환의 포화 또는 불포화의 고리를 형성하지 않는 $R_{21} \sim R_{27}$ 은, 각각 독립적으로, 수소 원자, 치환 혹은 무치환의 탄소수 1~50의 알킬기, 치환 혹은 무치환의 탄소수 1~50의 할로알킬기, 치환 혹은 무치환의 탄소수 2~50의 알케닐기, 치환 혹은 무치환의 탄소수 2~50의 알키닐기, 치환 혹은 무치환의 고리 형성 탄소수 3~50의 시클로알킬기, 치환 혹은 무치환의 탄소수 1~50의 알콕시기, 치환 혹은 무치환의 탄소수 1~50의 알킬티오기, 치환 혹은 무치환의 고리 형성 탄소수 6~50의 아릴옥시기, 치환 혹은 무치환의 고리 형성 탄소수 6~50의 아릴티오기, 치환 혹은 무치환의 탄소수 7~50의 아랄킬기, $-Si(R_{31})(R_{32})(R_{33})$, $-C(=O)R_{34}$, $-COOR_{35}$, $-N(R_{36})(R_{37})$, 할로겐 원자, 시아노기, 니트로기, 치환 혹은 무치환의 고리 형성 탄소수 6~50의 아릴기, 또는 치환 혹은 무치환의 고리 형성 원자수 5~50의 1가의 복소환기이다.

$R_{31} \sim R_{37}$ 은, 각각 독립적으로, 수소 원자, 치환 혹은 무치환의 탄소수 1~50의 알킬기, 치환 혹은 무치환의 고리 형성 탄소수 3~50의 시클로알킬기, 치환 혹은 무치환의 고리 형성 탄소수 6~50의 아릴기, 또는 치환 혹은 무치환의 고리 형성 원자수 5~50의 1가의 복소환기이다.

$R_{31} \sim R_{37}$ 의 각각이 복수 존재하는 경우, 복수 존재하는 $R_{31} \sim R_{37}$ 의 각각은 동일하여도 좋고, 다르더라도 좋다.)

청구항 39

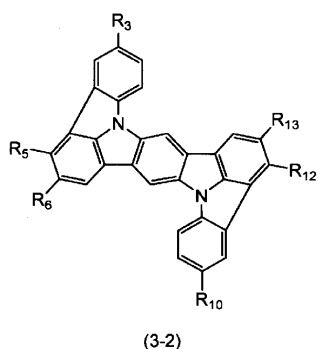
제35항 내지 제38항 중 어느 한 항에 있어서, $R_1 \sim R_{17}$ 이, 각각 독립적으로, 수소 원자, 치환 혹은 무치환의 고리 형성 탄소수 6~50의 아릴기, 및 치환 혹은 무치환의 고리 형성 원자수 5~50의 복소환기로 이루어지는 군에서 선택되는 화합물.

청구항 40

제35항 내지 제39항 중 어느 한 항에 있어서, $R_1 \sim R_{17}$ 이, 각각 독립적으로, 수소 원자, 치환 혹은 무치환의 고리 형성 탄소수 6~18의 아릴기, 및 치환 혹은 무치환의 고리 형성 원자수 5~18의 복소환기로 이루어지는 군에서 선택되는 화합물.

청구항 41

제35항 내지 제40항 중 어느 한 항에 있어서, 하기 식(3-2)으로 표시되는 화합물.



(상기 식(3-2) 중, R_3 , R_5 , R_6 , R_{10} , R_{12} 및 R_{13} 은 상기 식(1-1) 및 상기 식(1-3)에서 정의한 것과 같다.)

청구항 42

제35항 내지 제41항 중 어느 한 항에 있어서, 「치환 혹은 무치환의」라고 하는 경우에 있어서의 치환기가, 탄소수 1~50의 알킬기, 탄소수 1~50의 할로알킬기, 탄소수 2~50의 알케닐기, 탄소수 2~50의 알키닐기, 고리 형성 탄소수 3~50의 시클로알킬기, 탄소수 1~50의 알콕시기, 탄소수 1~50의 알킬티오기, 고리 형성 탄소수 6~50의 아릴옥시기, 고리 형성 탄소수 6~50의 아릴티오기, 탄소수 7~50의 아랄킬기, $-\text{Si}(R_{41})(R_{42})(R_{43})$, $-\text{C}(=\text{O})R_{44}$, $-\text{COOR}_{45}$, $-\text{S}(=\text{O})_2R_{46}$, $-\text{P}(=\text{O})(R_{47})(R_{48})$, $-\text{Ge}(R_{49})(R_{50})(R_{51})$, $-\text{N}(R_{52})(R_{53})$ (여기서, $R_{41} \sim R_{53}$ 은 각각 독립적으로, 수소 원자, 탄소수 1~50의 알킬기, 고리 형성 탄소수 6~50의 아릴기, 또는 고리 형성 원자수 5~50의 1가의 복소환기이다. $R_{41} \sim R_{53}$ 이 2 이상 존재하는 경우, 2 이상의 $R_{41} \sim R_{53}$ 의 각각은 동일하여도 좋고, 다르더라도 좋다.), 히드록시기, 할로젠 원자, 시아노기, 니트로기, 고리 형성 탄소수 6~50의 아릴기, 및 고리 형성 원자수 5~50의 1가의 복소환기로 이루어지는 군에서 선택되는 화합물.

청구항 43

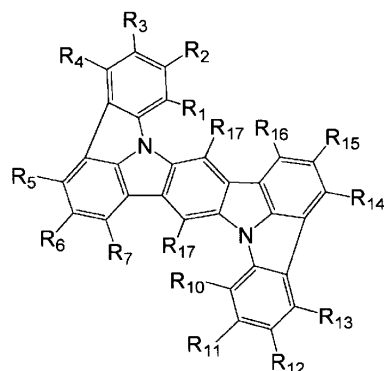
제35항 내지 제42항 중 어느 한 항에 있어서, 「치환 혹은 무치환의」라고 하는 경우에 있어서의 치환기가, 탄소수 1~50의 알킬기, 고리 형성 탄소수 6~50의 아릴기, 및 고리 형성 원자수 5~50의 1가의 복소환기로 이루어지는 군에서 선택되는 화합물.

청구항 44

제35항 내지 제43항 중 어느 한 항에 있어서, 「치환 혹은 무치환의」라고 하는 경우에 있어서의 치환기가, 탄소수 1~18의 알킬기, 고리 형성 탄소수 6~18의 아릴기, 및 고리 형성 원자수 5~18의 1가의 복소환기로 이루어지는 군에서 선택되는 화합물.

청구항 45

제35항에 있어서, 하기 식(3-11)으로 표시되는 화합물.



(3-11)

(상기 식(3-11) 중,

$R_1 \sim R_7$ 및 $R_{10} \sim R_{16}$ 중 인접하는 2개 이상의 1조 이상이, 치환 혹은 무치환의 포화 또는 불포화의 고리를 형성하여도 좋다.

상기 치환 혹은 무치환의 포화 또는 불포화의 고리를 형성하지 않는 $R_1 \sim R_7$ 및 $R_{10} \sim R_{16}$ 은, 각각 독립적으로, 수소 원자, 치환 혹은 무치환의 탄소수 1~50의 알킬기, 치환 혹은 무치환의 탄소수 1~50의 할로알킬기, 치환 혹은 무치환의 탄소수 2~50의 알케닐기, 치환 혹은 무치환의 탄소수 2~50의 알키닐기, 치환 혹은 무치환의 고리 형성 탄소수 3~50의 시클로알킬기, 치환 혹은 무치환의 탄소수 1~50의 알콕시기, 치환 혹은 무치환의 탄소수 1~50의 알킬티오기, 치환 혹은 무치환의 고리 형성 탄소수 6~50의 아릴옥시기, 치환 혹은 무치환의 고리 형성 탄소수 6~50의 아릴티오기, 치환 혹은 무치환의 탄소수 7~50의 아랄킬기, $-\text{Si}(R_{31})(R_{32})(R_{33})$, $-\text{C}(=\text{O})R_{34}$, $-\text{COOR}_{35}$, $-\text{N}(R_{36})(R_{37})$, 할로젠 원자, 시아노기, 니트로기, 치환 혹은 무치환의 고리 형성 탄소수 6~50의 아릴기, 또는 치환 혹은 무치환의 고리 형성 원자수 5~50의 1가의 복소환기이다. 단, $R_1 \sim R_7$ 및 $R_{10} \sim R_{16}$ 의 적어도 하나는 $-\text{N}(R_{36})(R_{37})$ 이다.

R_{17} 은, 수소 원자, 치환 혹은 무치환의 탄소수 1~50의 알킬기, 치환 혹은 무치환의 탄소수 1~50의 할로알킬기, 치환 혹은 무치환의 탄소수 2~50의 알케닐기, 치환 혹은 무치환의 탄소수 2~50의 알키닐기, 치환 혹은 무치환의 고리 형성 탄소수 3~50의 시클로알킬기, 치환 혹은 무치환의 탄소수 1~50의 알콕시기, 치환 혹은 무치환의 탄소수 1~50의 알킬티오기, 치환 혹은 무치환의 고리 형성 탄소수 6~50의 아릴옥시기, 치환 혹은 무치환의 고리 형성 탄소수 6~50의 아릴티오기, 치환 혹은 무치환의 탄소수 7~50의 아랄킬기, $-\text{Si}(R_{31})(R_{32})(R_{33})$, $-\text{C}(=\text{O})R_{34}$, $-\text{COOR}_{35}$, $-\text{N}(R_{36})(R_{37})$, 할로젠 원자, 시아노기, 니트로기, 치환 혹은 무치환의 고리 형성 탄소수 6~50의 아릴기, 또는 치환 혹은 무치환의 고리 형성 원자수 5~50의 1가의 복소환기이다.

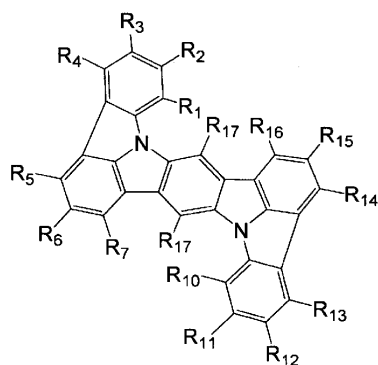
2개의 R_{17} 은 동일하여도 좋고, 다르더라도 좋다.

$R_{31} \sim R_{37}$ 은, 각각 독립적으로, 수소 원자, 치환 혹은 무치환의 탄소수 1~50의 알킬기, 치환 혹은 무치환의 고리 형성 탄소수 3~50의 시클로알킬기, 치환 혹은 무치환의 고리 형성 탄소수 6~50의 아릴기, 또는 치환 혹은 무치환의 고리 형성 원자수 5~50의 1가의 복소환기이다.

$R_{31} \sim R_{37}$ 의 각각이 복수 존재하는 경우, 복수 존재하는 $R_{31} \sim R_{37}$ 의 각각은 동일하여도 좋고, 다르더라도 좋다.)

청구항 46

제45항에 있어서, 하기 식(3-12)으로 표시되는 화합물.



(3-12)

(상기 식(3-12) 중,

$R_1 \sim R_7$ 및 $R_{10} \sim R_{16}$ 중 인접하는 2개 이상의 1조 이상, 치환 혹은 무치환의 포화 또는 불포화의 고리를 형성하여도 좋다.

상기 치환 혹은 무치환의 포화 또는 불포화의 고리를 형성하지 않는 $R_1 \sim R_7$ 및 $R_{10} \sim R_{16}$ 은, 각각 독립적으로, 수소 원자, 치환 혹은 무치환의 탄소수 1~50의 알킬기, 치환 혹은 무치환의 탄소수 1~50의 할로알킬기, 치환 혹은 무치환의 탄소수 2~50의 알케닐기, 치환 혹은 무치환의 탄소수 2~50의 알키닐기, 치환 혹은 무치환의 고리 형성 탄소수 3~50의 시클로알킬기, 치환 혹은 무치환의 탄소수 1~50의 알콕시기, 치환 혹은 무치환의 탄소수 1~50의 알킬티오기, 치환 혹은 무치환의 고리 형성 탄소수 6~50의 아릴옥시기, 치환 혹은 무치환의 고리 형성 탄소수 6~50의 아릴티오기, 치환 혹은 무치환의 탄소수 7~50의 아랄킬기, $-\text{Si}(R_{31})(R_{32})(R_{33})$, $-\text{C}(=\text{O})R_{34}$, $-\text{COOR}_{35}$, $-\text{N}(R_{36})(R_{37})$, 할로젠 원자, 시아노기, 니트로기, 치환 혹은 무치환의 고리 형성 탄소수 6~50의 아릴기, 또는 치환 혹은 무치환의 고리 형성 원자수 5~50의 1가의 복소환기이다. 단, $R_1 \sim R_7$ 및 $R_{10} \sim R_{16}$ 의 어느 2개는 $-\text{N}(R_{36})(R_{37})$ 이다.

R_{17} 은, 수소 원자, 치환 혹은 무치환의 탄소수 1~50의 알킬기, 치환 혹은 무치환의 탄소수 1~50의 할로알킬기, 치환 혹은 무치환의 탄소수 2~50의 알케닐기, 치환 혹은 무치환의 탄소수 2~50의 알키닐기, 치환 혹은 무치환의 고리 형성 탄소수 3~50의 시클로알킬기, 치환 혹은 무치환의 탄소수 1~50의 알콕시기, 치환 혹은 무치환의 탄소수 1~50의 알킬티오기, 치환 혹은 무치환의 고리 형성 탄소수 6~50의 아릴옥시기, 치환 혹은 무치환의 고리 형성 탄소수 6~50의 아릴티오기, 치환 혹은 무치환의 탄소수 7~50의 아랄킬기, $-\text{Si}(R_{31})(R_{32})(R_{33})$, $-\text{C}(=\text{O})R_{34}$, $-\text{COOR}_{35}$, $-\text{N}(R_{36})(R_{37})$, 할로젠 원자, 시아노기, 니트로기, 치환 혹은 무치환의 고리 형성 탄소수 6~50의 아릴기, 또는 치환 혹은 무치환의 고리 형성 원자수 5~50의 1가의 복소환기이다.

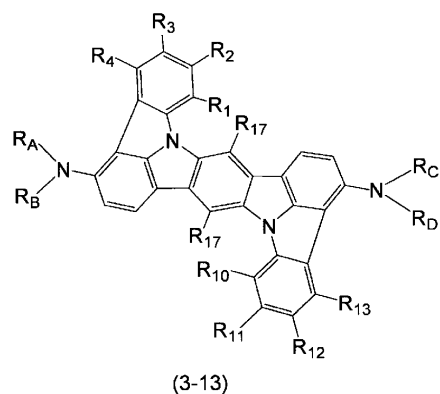
2개의 R_{17} 은 동일하여도 좋고, 다르더라도 좋다.

$R_{31} \sim R_{37}$ 은, 각각 독립적으로, 수소 원자, 치환 혹은 무치환의 탄소수 1~50의 알킬기, 치환 혹은 무치환의 고리 형성 탄소수 3~50의 시클로알킬기, 치환 혹은 무치환의 고리 형성 탄소수 6~50의 아릴기, 또는 치환 혹은 무치환의 고리 형성 원자수 5~50의 1가의 복소환기이다.

$R_{31} \sim R_{37}$ 의 각각이 복수 존재하는 경우, 복수 존재하는 $R_{31} \sim R_{37}$ 의 각각은 동일하여도 좋고, 다르더라도 좋다.)

청구항 47

제45항 또는 제46항에 있어서, 하기 식(3-13)으로 표시되는 화합물.



(상기 식(3-13) 중,

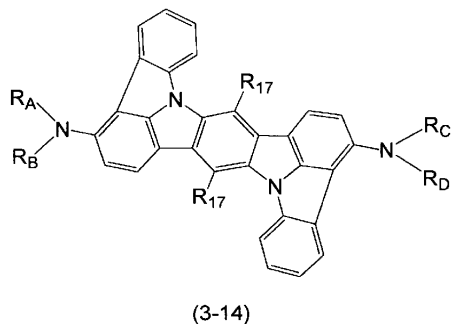
$R_1 \sim R_4$ 및 $R_{10} \sim R_{13}$ 중 인접하는 2개 이상의 1조 이상이, 치환 혹은 무치환의 포화 또는 불포화의 고리를 형성하여도 좋다.

상기 치환 혹은 무치환의 포화 또는 불포화의 고리를 형성하지 않는 $R_1 \sim R_4$ 및 $R_{10} \sim R_{13}$, 그리고 R_{17} 은, 각각 독립적으로, 수소 원자, 치환 혹은 무치환의 고리 형성 탄소수 6~18의 아릴기, 또는 치환 혹은 무치환의 고리 형성 원자수 5~18의 1가의 복소환기이다. 2개의 R_{17} 은 상호 동일하여도 좋고, 다르더라도 좋다.

R_A , R_B , R_C 및 R_D 는, 각각 독립적으로, 치환 혹은 무치환의 고리 형성 탄소수 6~18의 아릴기, 또는 치환 혹은 무치환의 고리 형성 원자수 5~18의 1가의 복소환기이다.)

청구항 48

제47항에 있어서, 하기 식(3-14)으로 표시되는 화합물.



(상기 식(3-14) 중, R_{17} , R_A , R_B , R_C 및 R_D 는 상기 식(3-13)에서 정의한 것과 같다.)

청구항 49

제47항 또는 제48항에 있어서, R_A , R_B , R_C 및 R_D 가 각각 독립적으로 치환 혹은 무치환의 고리 형성 탄소수 6~18의 아릴기인 화합물.

청구항 50

제47항 내지 제49항 중 어느 한 항에 있어서, R_A , R_B , R_C 및 R_D 가 각각 독립적으로 치환 혹은 무치환의 페닐기인 화합물.

청구항 51

제45항 내지 제50항 중 어느 한 항에 있어서, 상기 2개의 R_{17} 이 각각 수소 원자인 화합물.

청구항 52

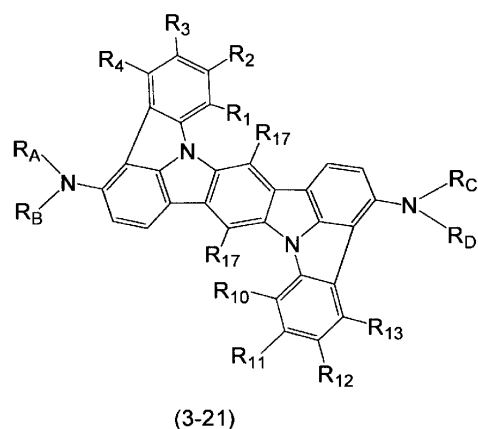
제45항 내지 제51항 중 어느 한 항에 있어서, 「치환 혹은 무치환의」라고 하는 경우에 있어서의 치환기가, 탄소수 1~18의 알킬기, 고리 형성 탄소수 6~18의 아릴기, 및 고리 형성 원자수 5~18의 1가의 복소환기로 이루어지는 군에서 선택되는 화합물.

청구항 53

제45항 내지 제52항 중 어느 한 항에 있어서, 「치환 혹은 무치환의」라고 하는 경우에 있어서의 치환기가 탄소수 1~5의 알킬기인 화합물.

청구항 54

제35항에 있어서, 하기 식(3-21)으로 표시되는 화합물.



(상기 식(3-21) 중,

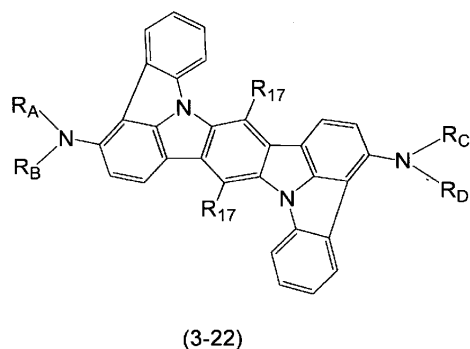
$R_1 \sim R_4$ 및 $R_{10} \sim R_{13}$ 중 인접하는 2개 이상의 1조 이상이, 치환 혹은 무치환의 포화 또는 불포화의 고리를 형성하여도 좋다.

상기 치환 혹은 무치환의 포화 또는 불포화의 고리를 형성하지 않는 $R_1 \sim R_4$ 및 $R_{10} \sim R_{13}$, 그리고 R_{17} 은, 각각 독립적으로, 수소 원자, 치환 혹은 무치환의 고리 형성 탄소수 6~20의 아릴기, 또는 치환 혹은 무치환의 고리 형성 원자수 5~20의 1가의 복소환기이다. 2개의 R_{17} 은 상호 동일하여도 좋고, 다르더라도 좋다.

R_A , R_B , R_C 및 R_D 는 각각 독립적으로 치환 혹은 무치환의 고리 형성 탄소수 6~20의 아릴기이다.)

청구항 55

제54항에 있어서, 하기 식(3-22)으로 표시되는 화합물.



(상기 식(3-22) 중, R_{17} , R_A , R_B , R_C 및 R_D 는 상기 식(3-21)에서 정의한 것과 같다.)

청구항 56

제54항 또는 제55항에 있어서, R_A , R_B , R_C 및 R_D 가 각각 독립적으로 치환 혹은 무치환의 페닐기인 화합물.

청구항 57

제54항 내지 제56항 중 어느 한 항에 있어서, 상기 2개의 R_{17} 이 각각 수소 원자인 화합물.

청구항 58

제54항 내지 제57항 중 어느 한 항에 있어서, 「치환 혹은 무치환의」라고 하는 경우에 있어서의 치환기가, 탄소수 1~20의 알킬기, 고리 형성 탄소수 6~20의 아릴기, 및 고리 형성 원자수 5~20의 1가의 복소환기로 이루어지는 군에서 선택되는 화합물.

청구항 59

제54항 내지 제58항 중 어느 한 항에 있어서, 「치환 혹은 무치환의」라고 하는 경우에 있어서의 치환기가 탄소수 1~5의 알킬기인 화합물.

청구항 60

제54항 내지 제59항 중 어느 한 항에 있어서, R_A , R_B , R_C 및 R_D 가 각각 독립적으로 치환 혹은 무치환의 페닐기이고,

상기 2개의 R_{17} 이 각각 수소 원자인 화합물.

청구항 61

제54항 내지 제60항 중 어느 한 항에 있어서, R_A , R_B , R_C 및 R_D 가 각각 독립적으로 치환 혹은 무치환의 페닐기이고,

상기 2개의 R_{17} 이 각각 수소 원자이고,

「치환 혹은 무치환의」라고 하는 경우에 있어서의 치환기가, 탄소수 1~20의 알킬기, 고리 형성 탄소수 6~20의 아릴기, 및 고리 형성 원자수 5~20의 1가의 복소환기로 이루어지는 군에서 선택되는 화합물.

청구항 62

제54항 내지 제61항 중 어느 한 항에 있어서, R_A , R_B , R_C 및 R_D 가 각각 독립적으로 치환 혹은 무치환의 페닐기이고,

상기 2개의 R_{17} 이 각각 수소 원자이고,

「치환 혹은 무치환의」라고 하는 경우에 있어서의 치환기가 탄소수 1~5의 알킬기인 화합물.

청구항 63

제35항 내지 제62항에 기재된 화합물을 포함하는 유기 일렉트로루미네센스 소자용 재료.

발명의 설명

기술 분야

[0001] 본 발명은 유기 일렉트로루미네센스 소자 및 신규 화합물에 관한 것이다.

배경 기술

[0002] 유기 일렉트로루미네센스 소자(이하, 유기 EL 소자라고 하는 경우가 있음)에 전압을 인가하면, 양극으로부터 정공이, 또한, 음극으로부터 전자가 각각 발광층에 주입된다. 그리고 발광층에 있어서, 주입된 정공과 전자가 재

결합하여 여기자가 형성된다.

[0003] 유기 EL 소자는 양극과 음극의 사이에 발광층을 포함한다. 또한, 정공 주입층, 정공 수송층, 전자 주입층, 전자 수송층 등의 유기층을 포함하는 적층 구조를 갖는 경우도 있다.

[0004] 특허문헌 1~3에는 유기 일렉트로루미네센스 소자용 재료로서 사용하는 화합물이 개시되어 있다.

선행기술문헌

특허문헌

[0005] (특허문헌 0001) 특허문헌 1: 국제공개 제2013/077344호

(특허문헌 0002) 특허문헌 2: 미국 특허 5843607호

(특허문헌 0003) 특허문헌 3: 국제공개 제2017/175690호

발명의 내용

해결하려는 과제

[0006] 본 발명의 목적은, 발광 효율이 높은 유기 일렉트로루미네센스 소자 및 발광 효율이 높은 유기 일렉트로루미네센스 소자용 재료로서 사용할 수 있는 신규 화합물을 제공하는 것이다.

과제의 해결 수단

[0007] 본 발명의 일 양태에 의하면,

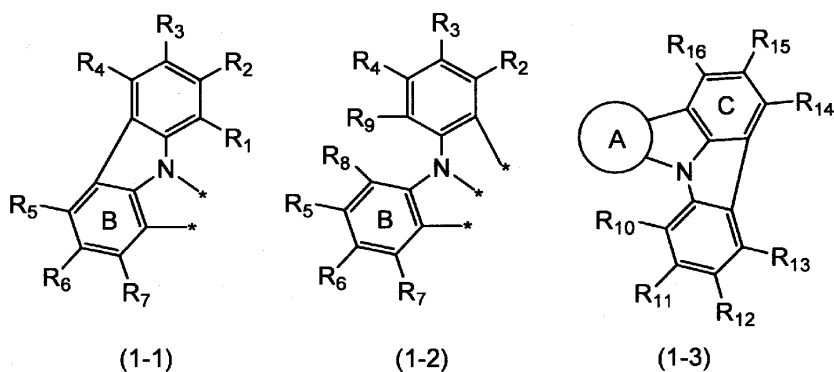
[0008] 음극과,

[0009] 양극과,

[0010] 상기 음극과 상기 양극의 사이에 배치된 적어도 1층의 유기층을 가지고,

[0011] 상기 적어도 1층의 유기층 중 적어도 1층이,

[0012] 하기 식(1-1) 및 식(1-3)으로 표시되는 화합물 또는 하기 식(1-2) 및 식(1-3)으로 표시되는 화합물을 포함하는 유기 일렉트로루미네센스 소자가 제공된다.



[0013]

[0014] (상기 식(1-1), 상기 식(1-2) 및 상기 식(1-3) 중,

[0015] 고리 A는, 치환 혹은 무치환의 고리 형성 탄소수 10~50의 축합 아릴환, 치환 혹은 무치환의 고리 형성 원자수 8~50의 축합 복소환, 또는 하기 식(2)으로 표시되는 벤젠환이다.

[0016] 상기 식(1-1)의 2개의 결합수 *는, 각각, 상기 고리 A의 상기 축합 아릴환의 고리 형성 탄소 원자, 상기 축합 복소환의 고리 형성 원자, 또는 상기 식(2)으로 표시되는 벤젠환의 고리 형성 탄소 원자와 결합한다.

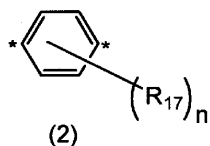
[0017] 상기 식(1-2)의 3개의 결합수 *는, 각각, 상기 고리 A의 상기 축합 아릴환의 고리 형성 탄소 원자, 상기 축합 복소환의 고리 형성 원자, 또는 상기 식(2)으로 표시되는 벤젠환의 고리 형성 탄소 원자와 결합한다.

[0018] $R_1 \sim R_{16}$ 중 인접하는 2개 이상의 1조 이상이, 치환 혹은 무치환의 포화 또는 불포화의 고리를 형성하여도 좋다.

[0019] 상기 치환 혹은 무치환의 포화 또는 불포화의 고리를 형성하지 않는 $R_1 \sim R_{16}$ 은, 각각 독립적으로, 수소 원자, 치환 혹은 무치환의 탄소수 1~50의 알킬기, 치환 혹은 무치환의 탄소수 1~50의 할로알킬기, 치환 혹은 무치환의 탄소수 2~50의 알케닐기, 치환 혹은 무치환의 탄소수 2~50의 알키닐기, 치환 혹은 무치환의 고리 형성 탄소수 3~50의 시클로알킬기, 치환 혹은 무치환의 탄소수 1~50의 알콕시기, 치환 혹은 무치환의 탄소수 1~50의 알킬티오기, 치환 혹은 무치환의 고리 형성 탄소수 6~50의 아릴옥시기, 치환 혹은 무치환의 고리 형성 탄소수 6~50의 아릴티오기, 치환 혹은 무치환의 탄소수 7~50의 아랄킬기, $-\text{Si}(R_{31})(R_{32})(R_{33})$, $-\text{C}(=\text{O})R_{34}$, $-\text{COOR}_{35}$, $-\text{N}(R_{36})(R_{37})$, 할로젠 원자, 시아노기, 니트로기, 치환 혹은 무치환의 고리 형성 탄소수 6~50의 아릴기, 또는 치환 혹은 무치환의 고리 형성 원자수 5~50의 1가의 복소환기이다.

[0020] $R_{31} \sim R_{37}$ 은, 각각 독립적으로, 수소 원자, 치환 혹은 무치환의 탄소수 1~50의 알킬기, 치환 혹은 무치환의 고리 형성 탄소수 3~50의 시클로알킬기, 치환 혹은 무치환의 고리 형성 탄소수 6~50의 아릴기, 또는 치환 혹은 무치환의 고리 형성 원자수 5~50의 1가의 복소환기이다.

[0021] $R_{31} \sim R_{37}$ 의 각각이 복수 존재하는 경우, 복수 존재하는 $R_{31} \sim R_{37}$ 의 각각은 동일하여도 좋고, 다르더라도 좋다.)



[0022] (상기 식(2) 중,
[0023]

[0024] 2개의 *의 고리 형성 탄소 원자의 한쪽에서, 상기 식(1-1) 또는 상기 식(1-2)의 벤젠환 B로부터 연장되는 결합수가 결합하고, 다른 쪽에서 상기 식(1-3)의 벤젠환 C로부터 연장되는 결합수가 결합한다.

[0025] R_{17} 은, 수소 원자, 치환 혹은 무치환의 탄소수 1~50의 알킬기, 치환 혹은 무치환의 탄소수 1~50의 할로알킬기, 치환 혹은 무치환의 탄소수 2~50의 알케닐기, 치환 혹은 무치환의 탄소수 2~50의 알키닐기, 치환 혹은 무치환의 고리 형성 탄소수 3~50의 시클로알킬기, 치환 혹은 무치환의 탄소수 1~50의 알콕시기, 치환 혹은 무치환의 탄소수 1~50의 알킬티오기, 치환 혹은 무치환의 고리 형성 탄소수 6~50의 아릴옥시기, 치환 혹은 무치환의 고리 형성 탄소수 6~50의 아릴티오기, 치환 혹은 무치환의 탄소수 7~50의 아랄킬기, $-\text{Si}(R_{31})(R_{32})(R_{33})$, $-\text{C}(=\text{O})R_{34}$, $-\text{COOR}_{35}$, $-\text{N}(R_{36})(R_{37})$, 할로젠 원자, 시아노기, 니트로기, 치환 혹은 무치환의 고리 형성 탄소수 6~50의 아릴기, 또는 치환 혹은 무치환의 고리 형성 원자수 5~50의 1가의 복소환기이다.

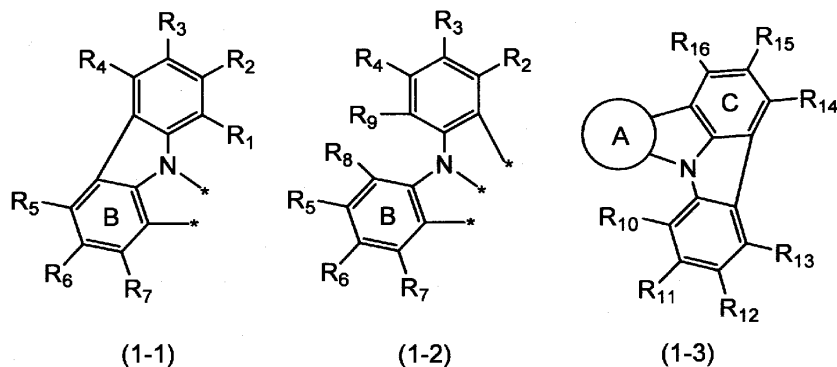
[0026] $R_{31} \sim R_{37}$ 은, 각각 독립적으로, 수소 원자, 치환 혹은 무치환의 탄소수 1~50의 알킬기, 치환 혹은 무치환의 고리 형성 탄소수 3~50의 시클로알킬기, 치환 혹은 무치환의 고리 형성 탄소수 6~50의 아릴기, 또는 치환 혹은 무치환의 고리 형성 원자수 5~50의 1가의 복소환기이다.

[0027] $R_{31} \sim R_{37}$ 의 각각이 복수 존재하는 경우, 복수 존재하는 $R_{31} \sim R_{37}$ 의 각각은 동일하여도 좋고, 다르더라도 좋다.

[0028] n 은 1 또는 2의 정수이다. n 이 2인 경우, 2개의 R_{17} 은 동일하여도 좋고, 다르더라도 좋다.)

[0029] 본 발명의 일 양태에 의하면, 상기 유기 일렉트로루미네센스 소자를 구비하는 전자기기가 제공된다.

[0030] 본 발명의 일 양태에 의하면, 하기 식(1-1) 및 식(1-3)으로 표시되는 화합물 또는 하기 식(1-2) 및 식(1-3)으로 표시되는 화합물이 제공된다.



[0031]

[0032]

(상기 식(1-1), 상기 식(1-2) 및 상기 식(1-3) 중,

[0033]

고리 A는, 치환 혹은 무치환의 고리 형성 탄소수 10~50의 축합 아릴환, 치환 혹은 무치환의 고리 형성 원자수 8~50의 축합 복소환, 또는 하기 식(2)으로 표시되는 벤젠환이다.

[0034]

상기 식(1-1)의 2개의 결합수 *는, 각각, 상기 고리 A의 상기 축합 아릴환의 고리 형성 탄소 원자, 상기 축합 복소환의 고리 형성 원자, 또는 상기 식(2)으로 표시되는 벤젠환의 고리 형성 탄소 원자와 결합한다.

[0035]

상기 식(1-2)의 3개의 결합수 *는, 각각, 상기 고리 A의 상기 축합 아릴환의 고리 형성 탄소 원자, 상기 축합 복소환의 고리 형성 원자, 또는 상기 식(2)으로 표시되는 벤젠환의 고리 형성 탄소 원자와 결합한다.

[0036]

R₁~R₁₆ 중 인접하는 2개 이상의 1조 이상이, 치환 혹은 무치환의 포화 또는 불포화의 고리를 형성하여도 좋다.

[0037]

상기 치환 혹은 무치환의 포화 또는 불포화의 고리를 형성하지 않는 R₁~R₁₆은, 각각 독립적으로, 수소 원자, 치환 혹은 무치환의 탄소수 1~50의 알킬기, 치환 혹은 무치환의 탄소수 1~50의 할로알킬기, 치환 혹은 무치환의 탄소수 2~50의 알케닐기, 치환 혹은 무치환의 탄소수 2~50의 알키닐기, 치환 혹은 무치환의 고리 형성 탄소수 3~50의 시클로알킬기, 치환 혹은 무치환의 탄소수 1~50의 알콕시기, 치환 혹은 무치환의 탄소수 1~50의 알킬 티오기, 치환 혹은 무치환의 고리 형성 탄소수 6~50의 아릴옥시기, 치환 혹은 무치환의 고리 형성 탄소수 6~50의 아릴티오기, 치환 혹은 무치환의 탄소수 7~50의 아릴킬기, -Si(R₃₁)(R₃₂)(R₃₃), -C(=O)R₃₄, -COOR₃₅, -N(R₃₆)(R₃₇), 할로젠 원자, 시아노기, 니트로기, 치환 혹은 무치환의 고리 형성 탄소수 6~50의 아릴기, 또는 치환 혹은 무치환의 고리 형성 원자수 5~50의 1가의 복소환기이다.

[0038]

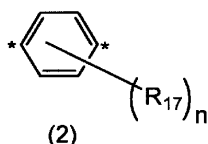
R₃₁~R₃₇은, 각각 독립적으로, 수소 원자, 치환 혹은 무치환의 탄소수 1~50의 알킬기, 치환 혹은 무치환의 고리 형성 탄소수 3~50의 시클로알킬기, 치환 혹은 무치환의 고리 형성 탄소수 6~50의 아릴기, 또는 치환 혹은 무치환의 고리 형성 원자수 5~50의 1가의 복소환기이다.

[0039]

R₃₁~R₃₇의 각각이 복수 존재하는 경우, 복수 존재하는 R₃₁~R₃₇의 각각은 동일하여도 좋고, 다르더라도 좋다.

[0040]

단, 상기 고리 A가 상기 식(2)으로 표시되는 벤젠환인 경우에는, R₁~R₁₇ 중 적어도 하나는, 치환 혹은 무치환의 탄소수 1~50의 알킬기, 치환 혹은 무치환의 고리 형성 탄소수 3~50의 시클로알킬기, 치환 혹은 무치환의 고리 형성 탄소수 6~50의 아릴기, 또는 치환 혹은 무치환의 고리 형성 원자수 5~50의 1가의 복소환기이다; 또는 R₁~R₁₆ 중 인접하는 2개 이상의 적어도 1조가, 치환 혹은 무치환의 포화 또는 불포화의 고리를 형성한다.)



[0041]

[0042]

(상기 식(2) 중,

[0043]

2개의 *의 고리 형성 탄소 원자의 한쪽에서, 상기 식(1-1) 또는 상기 식(1-2)의 벤젠환 B로부터 연장되는 결합수가 결합하고, 다른 쪽에서 상기 식(1-3)의 벤젠환 C로부터 연장되는 결합수가 결합한다.

[0044]

R₁₇은, 수소 원자, 치환 혹은 무치환의 탄소수 1~50의 알킬기, 치환 혹은 무치환의 탄소수 1~50의 할로알킬기,

치환 혹은 무치환의 탄소수 2~50의 알케닐기, 치환 혹은 무치환의 탄소수 2~50의 알킬닐기, 치환 혹은 무치환의 고리 형성 탄소수 3~50의 시클로알킬기, 치환 혹은 무치환의 탄소수 1~50의 알콕시기, 치환 혹은 무치환의 탄소수 1~50의 알킬티오기, 치환 혹은 무치환의 고리 형성 탄소수 6~50의 아릴옥시기, 치환 혹은 무치환의 고리 형성 탄소수 6~50의 아릴티오기, 치환 혹은 무치환의 탄소수 7~50의 아릴킬기, $-\text{Si}(\text{R}_{31})(\text{R}_{32})(\text{R}_{33})$, $-\text{C}(=\text{O})\text{R}_{34}$, $-\text{COOR}_{35}$, $-\text{N}(\text{R}_{36})(\text{R}_{37})$, 할로젠 원자, 시아노기, 니트로기, 치환 혹은 무치환의 고리 형성 탄소수 6~50의 아릴기, 또는 치환 혹은 무치환의 고리 형성 원자수 5~50의 1가의 복소환기이다.

[0045] $\text{R}_{31} \sim \text{R}_{37}$ 은, 각각 독립적으로, 수소 원자, 치환 혹은 무치환의 탄소수 1~50의 알킬기, 치환 혹은 무치환의 고리 형성 탄소수 3~50의 시클로알킬기, 치환 혹은 무치환의 고리 형성 탄소수 6~50의 아릴기, 또는 치환 혹은 무치환의 고리 형성 원자수 5~50의 1가의 복소환기이다.

[0046] $\text{R}_{31} \sim \text{R}_{37}$ 의 각각이 복수 존재하는 경우, 복수 존재하는 $\text{R}_{31} \sim \text{R}_{37}$ 의 각각은 동일하여도 좋고, 다르더라도 좋다.

[0047] n 은 1 또는 2의 정수이다. n 이 2인 경우, 2개의 R_{17} 은 동일하여도 좋고, 다르더라도 좋다.)

도면의 간단한 설명

[0048] 도 1은 본 발명의 유기 EL 소자의 일 실시형태의 개략 구성을 도시하는 도면이다.

도 2는 본 발명의 유기 EL 소자의 다른 실시형태의 개략 구성을 도시하는 도면이다.

발명을 실시하기 위한 구체적인 내용

[0049] 본 명세서에 있어서 수소 원자란, 중성자수가 다른 동위체, 즉 경수소(protium), 중수소(deuterium), 삼중수소(tritium)를 포함한다.

[0050] 본 명세서에 있어서, 고리 형성 탄소수란, 원자가 환상으로 결합한 구조의 화합물(예컨대, 단환 화합물, 축합환 화합물, 가교 화합물, 탄소환 화합물, 복소환 화합물)의 당해 고리 자체를 구성하는 원자 중 탄소 원자의 수를 나타낸다. 당해 고리가 치환기에 의해 치환되는 경우, 치환기에 포함되는 탄소는 고리 형성 탄소수에는 포함하지 않는다. 이하에 기재되는 「고리 형성 탄소수」에 관해서는, 특별히 기재하지 않는 한 같은 것으로 한다. 예컨대, 벤젠환은 고리 형성 탄소수가 6이고, 나프탈렌환은 고리 형성 탄소수가 10이고, 피리디닐기는 고리 형성 탄소수 5이고, 푸라닐기는 고리 형성 탄소수 4이다. 또한, 벤젠환이나 나프탈렌환에 치환기로서 예컨대, 알킬기가 치환되어 있는 경우, 당해 알킬기의 탄소수는 고리 형성 탄소수의 수에 포함시키지 않는다. 또한, 플루오렌환에 치환기로서 예컨대, 플루오렌환이 결합하고 있는 경우(스피로플루오렌환을 포함함), 치환기로서의 플루오렌환의 탄소수는 고리 형성 탄소수의 수에 포함시키지 않는다.

[0051] 본 명세서에 있어서, 고리 형성 원자수란, 원자가 환상으로 결합한 구조(예컨대, 단환, 축합환, 고리 집합)의 화합물(예컨대, 단환 화합물, 축합환 화합물, 가교 화합물, 탄소환 화합물, 복소환 화합물)의 당해 고리 자체를 구성하는 원자의 수를 나타낸다. 고리를 구성하지 않는 원자(예컨대, 고리를 구성하는 원자의 결합수를 종단하는 수소 원자)나, 당해 고리가 치환기에 의해 치환되는 경우의 치환기에 포함되는 원자는 고리 형성 원자수에는 포함하지 않는다. 이하에 기재되는 「고리 형성 원자수」에 관해서는, 특별히 기재하지 않는 한 같은 것으로 한다. 예컨대, 피리딘환의 고리 형성 원자수는 6이고, 퀴나졸린환은 고리 형성 원자수가 10이고, 푸란환의 고리 형성 원자수가 5이다. 피리딘환이나 퀴나졸린환의 탄소 원자에 각각 결합하고 있는 수소 원자나 치환기를 구성하는 원자에 관해서는 고리 형성 원자수의 수에 포함시키지 않는다. 또한, 플루오렌환에 치환기로서 예컨대, 플루오렌환이 결합하고 있는 경우(스피로플루오렌환을 포함함), 치환기로서의 플루오렌환의 원자수는 고리 형성 원자수의 수에 포함시키지 않는다.

[0052] 본 명세서에 있어서 「치환 혹은 무치환의 탄소수 XX~YY의 ZZ기」라고 하는 표현에 있어서의 「탄소수 XX~YY」는, ZZ기가 무치환인 경우의 탄소수를 나타내는 것이며, 치환되어 있는 경우의 치환기의 탄소수는 포함시키지 않는다. 여기서, 「YY」는 「XX」보다도 크고, 「XX」와 「YY」는 각각 1 이상의 정수를 의미한다.

[0053] 본 명세서에 있어서 「치환 혹은 무치환의 원자수 XX~YY의 ZZ기」라고 하는 표현에 있어서의 「원자수 XX~YY」는, ZZ기가 무치환인 경우의 원자수를 나타내는 것이며, 치환되어 있는 경우의 치환기의 원자수는 포함시키지 않는다. 여기서, 「YY」는 「XX」보다도 크고, 「XX」와 「YY」는 각각 1 이상의 정수를 의미한다.

[0054] 「치환 혹은 무치환의」라고 하는 경우에 있어서의 「무치환」이란, 상기 치환기로 치환되어 있지 않고, 수소

원자가 결합하고 있는 것을 의미한다.

- [0055] 본 명세서에 있어서의 각 치환기의 구체예로서는 이하의 것을 들 수 있다.
- [0056] 무치환의 탄소수 1~50(바람직하게는 1~30, 보다 바람직하게는 1~18, 더욱 바람직하게는 1~5)의 알킬기로서는, 예컨대, 메틸기, 에틸기, 프로필기, 이소프로필기, n-부틸기, s-부틸기, 이소부틸기, t-부틸기, n-펜틸기, n-헥실기, n-헵틸기, n-옥틸기 등을 들 수 있다.
- [0057] 치환된 탄소수 1~50(바람직하게는 1~30, 보다 바람직하게는 1~18, 더욱 바람직하게는 1~5)의 알킬기로서는, 예컨대, 히드록시메틸기, 1-히드록시에틸기, 2-히드록시에틸기, 2-히드록시이소부틸기, 1,2-디히드록시에틸기, 1,3-디히드록시이소프로필기, 2,3-디히드록시-t-부틸기, 1,2,3-트리히드록시프로필기, 클로로메틸기, 1-클로로에틸기, 2-클로로에틸기, 2-클로로이소부틸기, 1,2-디클로로에틸기, 1,3-디클로로이소프로필기, 2,3-디클로로-t-부틸기, 1,2,3-트리클로로프로필기, 브로모메틸기, 1-브로모에틸기, 2-브로모에틸기, 2-브로모이소부틸기, 1,2-디브로모에틸기, 1,3-디브로모이소프로필기, 2,3-디브로모-t-부틸기, 1,2,3-트리브로모프로필기, 요오드메틸기, 1-요오드에틸기, 2-요오드에틸기, 2-요오드이소부틸기, 1,2-디요오드에틸기, 1,3-디요오드이소프로필기, 2,3-디요오드-t-부틸기, 1,2,3-트리요오드프로필기, 시아노메틸기, 1-시아노에틸기, 2-시아노에틸기, 2-시아노이소부틸기, 1,2-디시아노에틸기, 1,3-디시아노이소프로필기, 2,3-디시아노-t-부틸기, 1,2,3-트리아시아노프로필기, 니트로메틸기, 1-니트로에틸기, 2-니트로에틸기, 2-니트로이소부틸기, 1,2-디니트로에틸기, 1,3-디니트로이소프로필기, 2,3-디니트로-t-부틸기, 1,2,3-트리아니트로프로필기, 1-피롤릴메틸기, 2-(1-피롤릴)에틸기, 1-히드록시-2-페닐이소프로필기, 1-클로로-2-페닐이소프로필기 등을 들 수 있다.
- [0058] 치환 혹은 무치환의 탄소수 1~50의 할로알킬기는, 상기 알킬기의 수소 원자의 하나 이상이 할로젠 원자로 치환된 기이다. 치환 혹은 무치환의 탄소수 1~50의 할로알킬기로서는, 상기 치환 혹은 무치환의 탄소수 1~50의 알킬기에 있어서, 하나 이상의 할로젠 원자가 치환한 기를 들 수 있다.
- [0059] 무치환의 탄소수 2~50(바람직하게는 2~30, 보다 바람직하게는 2~18)의 알케닐기로서는, 비닐기, 알릴기, 1-부테닐기, 2-부테닐기, 3-부테닐기, 1,3-부탄디에닐기, 1-메틸비닐기, 1-메틸알릴기, 1,1-디메틸알릴기, 2-메틸알릴기, 1,2-디메틸알릴기 등을 들 수 있다.
- [0060] 무치환의 탄소수 2~50(바람직하게는 2~30, 보다 바람직하게는 2~18)의 알키닐기로서는, 에티닐기 등을 들 수 있다.
- [0061] 무치환의 고리 형성 탄소수 3~50(바람직하게는 3~30, 보다 바람직하게는 3~18, 더욱 바람직하게는 3~6)의 시클로알킬기로서는, 시클로프로필기, 시클로부틸기, 시클로펜틸기, 시클로헥실기, 4-메틸시클로헥실기, 1-아다만틸기, 2-아다만틸기, 1-노르보르닐기, 2-노르보르닐기 등을 들 수 있다.
- [0062] 무치환의 탄소수 1~50(바람직하게는 1~30, 보다 바람직하게는 1~18)의 알콕시기는 -OX로 표시되고, X로서는 예컨대, 상기한 탄소수 1~50의 알킬기를 들 수 있다.
- [0063] 무치환의 탄소수 1~50(바람직하게는 1~30, 보다 바람직하게는 1~18)의 알킬티오기는 -SX로 표시되고, X로서는 예컨대, 상기한 탄소수 1~50의 알킬기를 들 수 있다.
- [0064] 무치환의 고리 형성 탄소수 6~50(바람직하게는 6~30, 보다 바람직하게는 6~18)의 아릴기로서는, 예컨대, 페닐기, 1-나프틸기, 2-나프틸기, 1-안트릴기, 2-안트릴기, 9-안트릴기, 1-페난트릴기, 2-페난트릴기, 3-페난트릴기, 4-페난트릴기, 9-페난트릴기, 1-나프타세닐기, 2-나프타세닐기, 9-나프타세닐기, 1-피레닐기, 2-피레닐기, 4-피레닐기, 2-비페닐일기, 3-비페닐일기, 4-비페닐일기, p-테르페닐4-일기, p-테르페닐3-일기, p-테르페닐2-일기, m-테르페닐4-일기, m-테르페닐3-일기, m-테르페닐2-일기, 플루오레닐기 등을 들 수 있다.
- [0065] 이들 중에서, 바람직하게는 페닐기, 나프틸기, 비페닐일기, 테르페닐기, 피레닐기, 페난트릴기 및 플루오레닐기이고, 보다 바람직하게는 페닐기, 나프틸기, 비페닐일기, 테르페닐기, 피레닐기 및 플루오레닐기이다.
- [0066] 치환된 고리 형성 탄소수 6~50(바람직하게는 6~30, 보다 바람직하게는 6~18)의 아릴기로서는, 예컨대, o-톨릴기, m-톨릴기, p-톨릴기, 파라-이소프로필페닐기, 메타-이소프로필페닐기, 오르토-이소프로필페닐기, p-t-부틸페닐기, 메타-t-부틸페닐기, 오르토-t-부틸페닐기, 3,4,5-트리메틸페닐기, 4-페녹시페닐기, 4-메톡시페닐기, 3,4-디메톡시페닐기, 3,4,5-트리메톡시페닐기, 4-(페닐술팜)페닐기, 4-(메틸술팜)페닐기, N',N'-디메틸-N-페닐기, 2,6-디메틸페닐기, (2-페닐프로필)페닐기, 3-메틸-2-나프틸기, 4-메틸-1-나프틸기, 4-메틸-1-안트릴기, 4'-메틸비페닐일기, 4"-t-부틸-p-테르페닐4-일기, 9,9-디메틸플루오레닐기, 9,9-디페닐플루오레닐기, 9,9'-스피로비플루오레닐기, 9,9-디(4-메틸페닐)플루오레닐기, 9,9-디(4-이소프로필페닐)플루오레닐기, 9,9-디(4-t부

틸페닐)플루오레닐기, 크리세닐기, 플루오란테닐기 등을 들 수 있다.

[0067] 무치환의 고리 형성 탄소수 6~50(바람직하게는 6~30, 보다 바람직하게는 6~18)의 아릴렌기로서는, 예컨대, 상기에 예시된 고리 형성 탄소수 6~50의 아릴기를 구성하는 방향족 탄화수소환으로부터 형성되는 2가의 기를 들 수 있다.

[0068] 무치환의 고리 형성 탄소수 6~50(바람직하게는 6~30, 보다 바람직하게는 6~18)의 아릴옥시기는 -OY로 표시되고, Y로서는 예컨대, 상기한 고리 형성 탄소수 6~50의 아릴기를 들 수 있다.

[0069] 무치환의 고리 형성 탄소수 6~50(바람직하게는 6~30, 보다 바람직하게는 6~18)의 아릴티오키기는 -SY로 표시되고, Y로서는 예컨대, 상기한 고리 형성 탄소수 6~50의 아릴기를 들 수 있다.

[0070] 무치환의 탄소수 7~50(바람직하게는 7~30, 보다 바람직하게는 7~18)의 아랄킬기로서는, 예컨대, 벤질기, 1-페닐에틸기, 2-페닐에틸기, 1-페닐이소프로필기, 2-페닐이소프로필기, 페닐-t-부틸기, α-나프틸메틸기, 1-α-나프틸에틸기, 2-α-나프틸에틸기, 1-α-나프틸이소프로필기, 2-α-나프틸이소프로필기, β-나프틸메틸기, 1-β-나프틸에틸기, 2-β-나프틸에틸기, 1-β-나프틸이소프로필기, 2-β-나프틸이소프로필기 등을 들 수 있다.

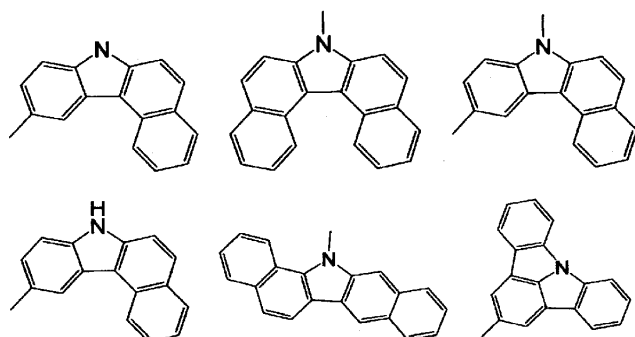
[0071] 치환된 탄소수 7~50(바람직하게는 7~30, 보다 바람직하게는 7~18)의 아랄킬기로서는, 예컨대, p-메틸벤질기, m-메틸벤질기, o-메틸벤질기, p-클로로벤질기, m-클로로벤질기, o-클로로벤질기, p-브로모벤질기, m-브로모벤질기, o-브로모벤질기, p-요오드벤질기, m-요오드벤질기, o-요오드벤질기, p-히드록시벤질기, m-히드록시벤질기, o-히드록시벤질기, p-니트로벤질기, m-니트로벤질기, o-니트로벤질기, p-시아노벤질기, m-시아노벤질기, o-시아노벤질기 등을 들 수 있다.

[0072] 무치환의 고리 형성 원자수 5~50(바람직하게는 5~30, 보다 바람직하게는 5~18)의 1가의 복소환기로서는, 피롤릴기, 피라지닐기, 피리디닐기, 인돌릴기, 이소인돌릴기, 푸릴기, 벤조푸라닐기, 이소벤조푸라닐기, 디벤조푸라닐기, 디벤조티오펜릴기, 퀴놀릴기, 이소퀴놀릴기, 퀴녹살리닐기, 카르바졸릴기, 페난트리디닐기, 아크리디닐기, 페난트롤리닐기 및 티에닐기 등, 그리고 피리딘환, 피라진환, 피리미딘환, 피리다진환, 트리아진환, 인돌환, 퀴놀린환, 아크리딘환, 피롤리딘환, 디옥산환, 피페리딘환, 모르폴린환, 피페라진환, 카르바졸환, 푸란환, 티오펜환, 옥사졸환, 옥사디아졸환, 벤조옥사졸환, 티아졸환, 티아디아졸환, 벤조티아졸환, 트리아졸환, 이미다졸환, 벤조이미다졸환, 피란환, 디벤조푸란환, 벤조[a]디벤조푸란환, 벤조[b]디벤조푸란환 및 벤조[c]디벤조푸란환, 1,3-벤조디옥솔환, 2,3-디히드로-1,4-벤조디옥신환, 페난트로[4,5-bcd]푸란환, 벤조페녹사진환 등으로 형성되는 1가의 기를 들 수 있다.

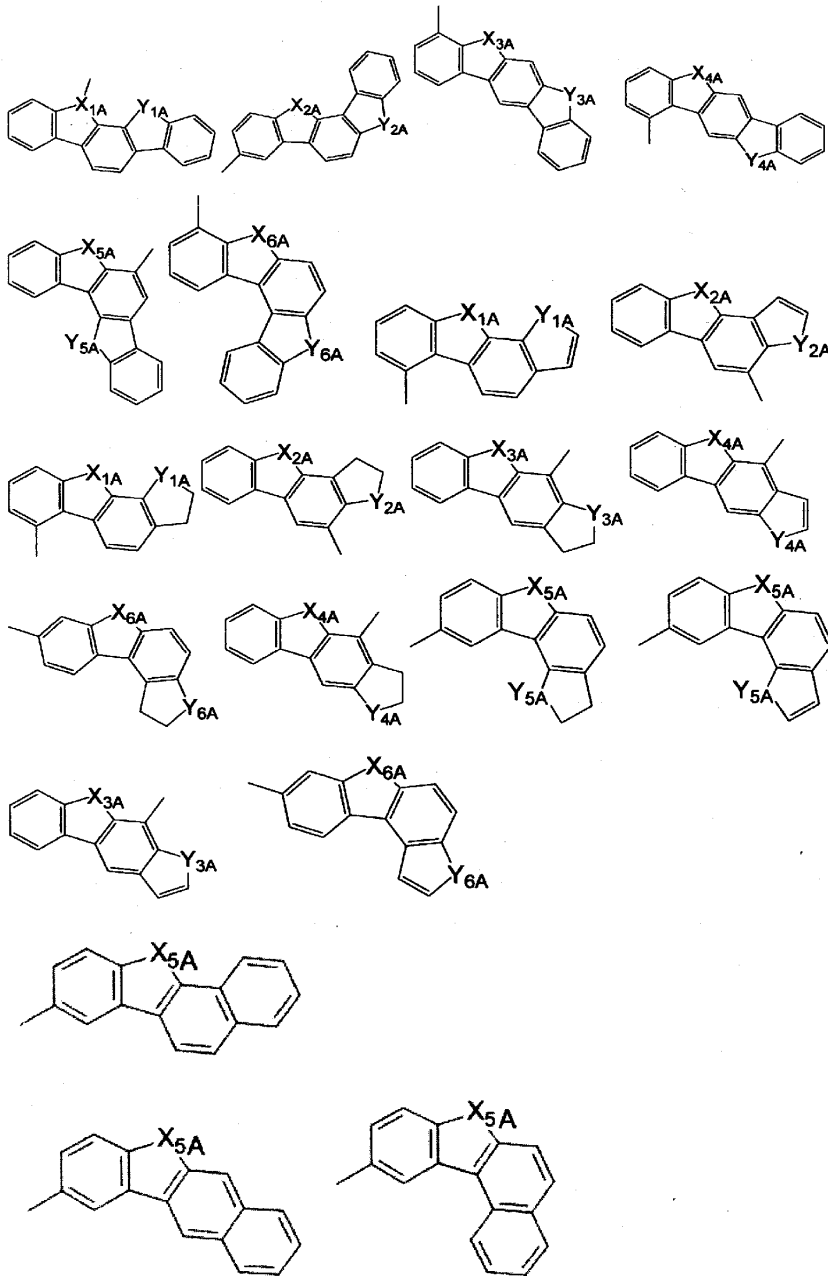
[0073] 또한, 복소환기를 구성하는 헤테로 원자로서는, S, O 및 N 등의 헤테로 원자 외에, Si, Ge 및 Se 등의 헤테로 원자도 들 수 있다.

[0074] 무치환의 고리 형성 원자수 5~50(바람직하게는 5~30, 보다 바람직하게는 5~18)의 2가의 복소환기로서는, 상기에 예시된 기 및 1가의 복소환 등으로 형성되는 2가의 기를 들 수 있다.

[0075] 치환 혹은 무치환의 고리 형성 원자수 5~50의 1가의 복소환기로서는 이하의 기도 포함된다. 또한, 고리 형성 원자수 5~50의 2가의 복소환기로서는 이하의 기를 2가의 기로 한 기도 포함된다.



[0076]



[0077]

[0078] (식 중, $X_{1A} \sim X_{6A}$, $Y_{1A} \sim Y_{6A}$ 는 각각 산소 원자, 황 원자, -NZ-기 또는 -NH-기이다. Z는 치환 혹은 무치환의 고리 형성 탄소수 6~50의 아릴기, 치환 혹은 무치환의 고리 형성 원자수 5~50의 1가의 복소환기, 또는 치환 혹은 무치환의 탄소수 1~50의 알킬기이다. Z가 2 이상 존재하는 경우, 2 이상의 Z는 동일하여도 좋고, 다르더라도 좋다.)

[0079]

할로젠 원자로서는 불소 원자, 염소 원자, 브롬 원자, 요오드 원자 등을 들 수 있다.

[0080]

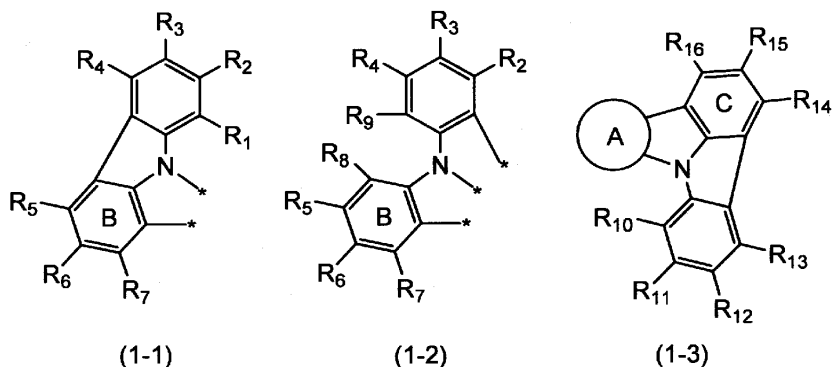
<유기 일렉트로루미네센스 소자>

[0081]

본 발명의 일 양태에 따른 유기 일렉트로루미네센스 소자는, 음극과, 양극과, 상기 음극과 상기 양극의 사이에 배치된 적어도 1층의 유기층을 갖는다.

[0082]

상기 적어도 1층의 유기층 중의 적어도 1층이, 하기 식(1-1) 및 식(1-3)으로 표시되는 화합물 또는 하기 식(1-2) 및 식(1-3)으로 표시되는 화합물을 포함한다.



(상기 식(1-1), 상기 식(1-2) 및 상기 식(1-3) 중,

고리 A는, 치환 혹은 무치환의 고리 형성 탄소수 10~50의 축합 아릴환, 치환 혹은 무치환의 고리 형성 원자수 8~50의 축합 복소환, 또는 하기 식(2)으로 표시되는 벤젠환이다.

상기 식(1-1)의 2개의 결합수 *는, 각각, 상기 고리 A의 상기 축합 아릴환의 고리 형성 탄소 원자, 상기 축합 복소환의 고리 형성 원자, 또는 상기 식(2)으로 표시되는 벤젠환의 고리 형성 탄소 원자와 결합한다.

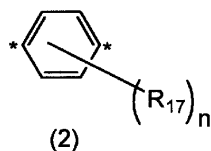
상기 식(1-2)의 3개의 결합수 *는, 각각, 상기 고리 A의 상기 축합 아릴환의 고리 형성 탄소 원자, 상기 축합 복소환의 고리 형성 원자, 또는 상기 식(2)으로 표시되는 벤젠환의 고리 형성 탄소 원자와 결합한다.

R₁~R₁₆ 중 인접하는 2개 이상의 1조 이상이, 치환 혹은 무치환의 포화 또는 불포화의 고리를 형성하여도 좋다.

상기 치환 혹은 무치환의 포화 또는 불포화의 고리를 형성하지 않는 R₁~R₁₆은, 각각 독립적으로, 수소 원자, 치환 혹은 무치환의 탄소수 1~50의 알킬기, 치환 혹은 무치환의 탄소수 1~50의 할로알킬기, 치환 혹은 무치환의 탄소수 2~50의 알케닐기, 치환 혹은 무치환의 탄소수 2~50의 알키닐기, 치환 혹은 무치환의 고리 형성 탄소수 3~50의 시클로알킬기, 치환 혹은 무치환의 탄소수 1~50의 알콕시기, 치환 혹은 무치환의 탄소수 1~50의 알킬티오기, 치환 혹은 무치환의 고리 형성 탄소수 6~50의 아릴옥시기, 치환 혹은 무치환의 고리 형성 탄소수 6~50의 아릴티오기, 치환 혹은 무치환의 탄소수 7~50의 아랄킬기, -Si(R₃₁)(R₃₂)(R₃₃), -C(=O)R₃₄, -COOR₃₅, -N(R₃₆)(R₃₇), 할로젠 원자, 시아노기, 니트로기, 치환 혹은 무치환의 고리 형성 탄소수 6~50의 아릴기, 또는 치환 혹은 무치환의 고리 형성 원자수 5~50의 1가의 복소환기이다.

R₃₁~R₃₇은, 각각 독립적으로, 수소 원자, 치환 혹은 무치환의 탄소수 1~50의 알킬기, 치환 혹은 무치환의 고리 형성 탄소수 3~50의 시클로알킬기, 치환 혹은 무치환의 고리 형성 탄소수 6~50의 아릴기, 또는 치환 혹은 무치환의 고리 형성 원자수 5~50의 1가의 복소환기이다.

R₃₁~R₃₇의 각각이 복수 존재하는 경우, 복수 존재하는 R₃₁~R₃₇의 각각은 동일하여도 좋고, 다르더라도 좋다.)



(상기 식(2) 중,

2개의 *의 고리 형성 탄소 원자의 한쪽에서, 상기 식(1-1) 또는 상기 식(1-2)의 벤젠환 B로부터 연장되는 결합수가 결합하고, 다른 쪽에서 상기 식(1-3)의 벤젠환 C로부터 연장되는 결합수가 결합한다.

R₁₇은, 수소 원자, 치환 혹은 무치환의 탄소수 1~50의 알킬기, 치환 혹은 무치환의 탄소수 1~50의 할로알킬기, 치환 혹은 무치환의 탄소수 2~50의 알케닐기, 치환 혹은 무치환의 탄소수 2~50의 알키닐기, 치환 혹은 무치환의 고리 형성 탄소수 3~50의 시클로알킬기, 치환 혹은 무치환의 탄소수 1~50의 알콕시기, 치환 혹은 무치환의 탄소수 1~50의 알킬티오기, 치환 혹은 무치환의 고리 형성 탄소수 6~50의 아릴옥시기, 치환 혹은 무치환의 고리 형성 탄소수 6~50의 아릴티오기, 치환 혹은 무치환의 탄소수 7~50의 아랄킬기, -Si(R₃₁)(R₃₂)(R₃₃),

$-C(=O)R_{34}$, $-COOR_{35}$, $-N(R_{36})(R_{37})$, 할로젠 원자, 시아노기, 니트로기, 치환 혹은 무치환의 고리 형성 탄소수 6~50의 아릴기, 또는 치환 혹은 무치환의 고리 형성 원자수 5~50의 1가의 복소환기이다.

[0096] $R_{31} \sim R_{37}$ 은, 각각 독립적으로, 수소 원자, 치환 혹은 무치환의 탄소수 1~50의 알킬기, 치환 혹은 무치환의 고리 형성 탄소수 3~50의 시클로알킬기, 치환 혹은 무치환의 고리 형성 탄소수 6~50의 아릴기, 또는 치환 혹은 무치환의 고리 형성 원자수 5~50의 1가의 복소환기이다.

[0097] $R_{31} \sim R_{37}$ 의 각각이 복수 존재하는 경우, 복수 존재하는 $R_{31} \sim R_{37}$ 의 각각은 동일하여도 좋고, 다르더라도 좋다.

[0098] n 은 1 또는 2의 정수이다. n 이 2인 경우, 2개의 R_{17} 은 동일하여도 좋고, 다르더라도 좋다.)

[0099] 식(1-1), 식(1-2) 및 식(1-3)에 있어서, 축합 아릴환이란, 복수의 방향족환이 축합한 고리이다. 따라서, 예컨대, 2개의 방향족환이 단결합으로 결합한 비페닐은 축합 아릴환에 포함되지 않는다.

[0100] 식(1-1), 식(1-2) 및 식(1-3)에 있어서, 축합 복소환이란, 복수의 복소환이 축합한 고리, 또는 복소환과 방향족환이 축합한 고리이다.

[0101] 「 $R_1 \sim R_{16}$ 중 인접하는 2개 이상의 1조 이상인, 치환 혹은 무치환의 포화 또는 불포화의 고리를 형성하여도 좋다」에 관해서 설명한다.

[0102] 「 $R_1 \sim R_{16}$ 중 인접하는 2개 이상의 1조」는, 예컨대, 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_1 과 R_2 와 R_3 등의 조합이다.

[0103] 상기 포화 또는 불포화의 고리에 대한 「치환 혹은 무치환의」의 「치환」일 때의 치환기는, 후술하는 「치환 혹은 무치환의」라고 하는 경우에 있어서의 치환기와 마찬가지로다.

[0104] 「포화 또는 불포화의 고리」란, 예컨대, R_1 과 R_2 로 고리를 형성하는 경우에는, R_1 이 결합하는 탄소 원자와, R_2 가 결합하는 탄소 원자와, 1 이상의 임의의 원소로 형성하는 고리를 의미한다. 구체적으로는, R_1 과 R_2 로 고리를 형성하는 경우에 있어서, R_1 이 결합하는 탄소 원자와, R_2 가 결합하는 탄소 원자와, 4개의 탄소 원자로 불포화의 고리를 형성하는 경우, R_1 과 R_2 로 형성하는 고리는 벤젠환이 된다.

[0105] 「임의의 원소」는 바람직하게는 C 원소, N 원소, O 원소, S 원소이다. 임의의 원소에 있어서(예컨대, C 원소 또는 N 원소의 경우), 고리를 형성하지 않는 결합수는 수소 원자 등으로 종단되어도 좋다.

[0106] 「1 이상의 임의의 원소」는, 바람직하게는 2개 이상 15개 이하, 보다 바람직하게는 3개 이상 12개 이하, 더욱 바람직하게는 3개 이상 5개 이하의 임의의 원소이다.

[0107] 이하, 「X~Y 중 인접하는 2개 이상의 1조 이상은, 치환 혹은 무치환의 포화 또는 불포화의 고리를 형성하여도 좋다」라고 하는 표현은, X를 상기 R_1 로, Y를 상기 R_{16} 으로 치환했을 때와 같은 의미이다.

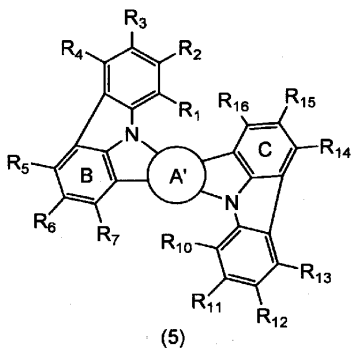
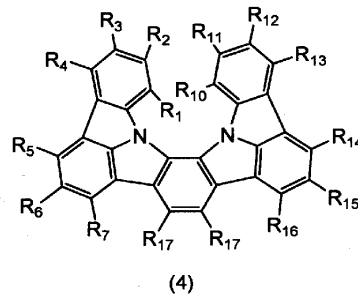
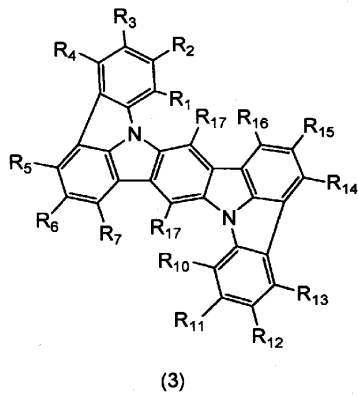
[0108] 이하, 식(1-1) 및 식(1-3)으로 표시되는 화합물 및 식(1-2) 및 식(1-3)으로 표시되는 화합물에 관해서 설명한다.

[0109] 식(1-1) 중의 「*」(asterisk)은 식(1-3)의 고리 A와 결합하는 결합수이다. 식(1-1)에는 2개의 「*」가 있는데, 2개의 「*」는, 각각 고리 A의 축합 아릴환의 고리 형성 탄소 원자, 축합 복소환의 고리 형성 원자, 또는 식(2)으로 표시되는 벤젠환의 고리 형성 탄소 원자와 결합하여, 화합물을 구성한다.

[0110] 식(1-2) 중의 「*」(asterisk)도 식(1-3)의 고리 A와 결합하는 결합수이다. 식(1-2)에는 3개의 「*」가 있는데, 3개의 「*」는, 각각 고리 A의 축합 아릴환의 고리 형성 탄소 원자, 축합 복소환의 고리 형성 원자, 또는 식(2)으로 표시되는 벤젠환의 고리 형성 탄소 원자와 결합하여, 화합물을 구성한다.

[0111] 식(2) 중의 「*」(asterisk)는 결합 위치를 나타낸다. 2개의 *의 고리 형성 탄소 원자의 한쪽에서, 식(1-1) 또는 식(1-2)의 벤젠환 B로부터 연장되는 결합수가 결합하고, 다른 쪽에서 식(1-3)의 벤젠환 C로부터 연장되는 결합수가 결합한다.

[0112] 일 실시형태에서는, 식(1-1) 및 식(1-3)으로 표시되는 화합물 또는 식(1-2) 및 식(1-3)으로 표시되는 화합물은 하기 식(3), 식(4) 또는 식(5)으로 표시되는 화합물이다.



(식(3), 식(4) 및 식(5) 중,

고리 A'는 치환 혹은 무치환의 고리 형성 탄소수 10~50의 축합 아릴환, 또는 치환 혹은 무치환의 고리 형성 원자수 8~50의 축합 복소환이다.

R₁~R₇ 및 R₁₀~R₁₇은 식(1-1), 식(1-2), 식(1-3) 및 식(2)에서 정의한 것과 같다.)

일 실시형태에서는, 식(1-3)의 고리 A 및 식(5)의 고리 A'의 치환 혹은 무치환의 고리 형성 탄소수 10~50의 축합 아릴환은, 치환 혹은 무치환의 나프탈렌환, 또는 치환 혹은 무치환의 플루오렌환이다.

일 실시형태에서는, 식(1-3)의 고리 A 및 식(5)의 고리 A'의 치환 혹은 무치환의 고리 형성 탄소수는, 예컨대, 10~30, 10~20 또는 10~14라도 좋고, 당해 축합 아릴환의 구체예로서는, 치환 혹은 무치환의 나프탈렌환, 치환 혹은 무치환의 안트라센환, 또는 치환 혹은 무치환의 플루오렌환을 들 수 있다.

일 실시형태에서는, 식(1-3)의 고리 A 및 식(5)의 고리 A'의 치환 혹은 무치환의 고리 형성 원자수 8~50의 축합 복소환은, 치환 혹은 무치환의 디벤조푸란환, 치환 혹은 무치환의 카르바졸환, 또는 치환 혹은 무치환의 디벤조티오펜환이다.

일 실시형태에서는, 식(1-3)의 고리 A 및 식(5)의 고리 A'의 치환 혹은 무치환의 고리 형성 원자수 8~50의 축합 복소환은, 치환 혹은 무치환의 디벤조푸란 골격 함유 구조(예컨대, 치환 혹은 무치환의 디벤조푸란, 치환 혹은 무치환의 나프토벤조푸란, 치환 혹은 무치환의 디나프토프란 등), 또는 치환 혹은 무치환의 디벤조티오펜 골격 함유 구조(예컨대, 치환 혹은 무치환의 디벤조티오펜, 치환 혹은 무치환의 나프토벤조티오펜, 치환 혹은 무치환의 디나프토티오펜 등)이다.

일 실시형태에서는, 식(1-3)의 고리 A 및 식(5)의 고리 A'의 치환 혹은 무치환의 고리 형성 원자수 8~50의 축합 복소환은, 치환 혹은 무치환의 디벤조푸란환, 또는 치환 혹은 무치환의 디벤조티오펜환이다.

일 실시형태에서는, 식(1-3)의 고리 A 및 식(5)의 고리 A'의 치환 혹은 무치환의 고리 형성 원자수 8~50의 축합 복소환은 치환의 카르바졸 골격 함유 구조(예컨대, 치환의 카르바졸환)이고, 치환기는 치환 혹은 무치환의 고리 형성 탄소수 6~50의 아릴기 또는 치환 혹은 무치환의 고리 형성 원자수 5~50의 1가의 복소환기이다. 상기 치환기의 아릴기 또는 1가의 복소환기는 상기 카르바졸환과 결합하지 않는다.

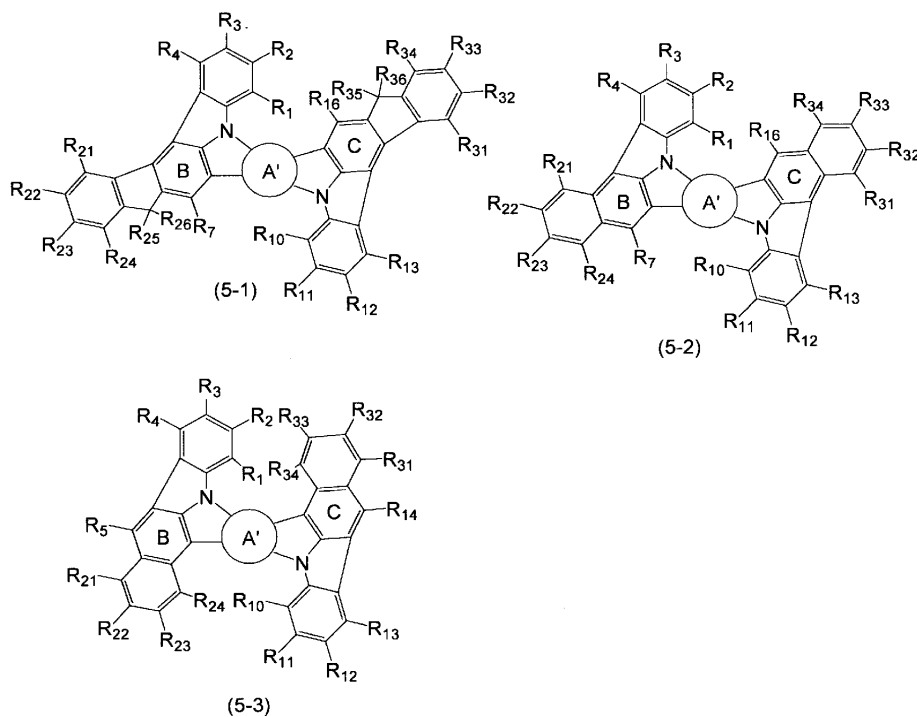
일 실시형태에서는, 식(1-3)의 고리 A 및 식(5)의 고리 A'의 치환 혹은 무치환의 고리 형성 원자수 8~50의 축

합 복소환은 치환의 카르바졸 골격 함유 구조(예컨대, 치환의 카르바졸환)이고, 당해 카르바졸 골격 함유 구조는 카르바졸환의 9 위치에 치환기를 갖고, 당해 치환기는 치환 혹은 무치환의 고리 형성 탄소수 6~50의 아틸기 또는 치환 혹은 무치환의 고리 형성 원자수 5~50의 1가의 복소환기이고, 당해 치환기가 무치환의 페닐기인 경우, 당해 무치환의 페닐기가 당해 카르바졸 골격 함유 구조와 결합하는 일은 없다.

[0124] 일 실시형태에서는, 식(5)으로 표시되는 화합물에 있어서, R_5 와 R_6 , R_6 과 R_7 , R_{14} 와 R_{15} 및 R_{15} 와 R_{16} 중 적어도 1개가 치환 혹은 무치환의 포화 또는 불포화의 고리를 형성한다. 당해 형성되는 고리 구조로서는, 고리 B 또는 고리 C를 일단으로 하는 치환 혹은 무치환의 플루오렌환 구조, 또는 고리 B 또는 고리 C를 일단으로 하는 치환 혹은 무치환의 나프탈렌환 구조 등을 들 수 있다.

[0125] 일 실시형태에서는, 식(5)으로 표시되는 화합물에 있어서, R_1 과 R_2 , R_2 와 R_3 , R_3 과 R_4 , R_{10} 과 R_{11} , R_{11} 과 R_{12} 및 R_{12} 와 R_{13} 중 적어도 1개가 치환 혹은 무치환의 포화 또는 불포화의 고리를 형성한다. 당해 형성되는 고리 구조로서는, $R_1 \sim R_4$ 가 결합하는 벤젠환 또는 $R_{10} \sim R_{13}$ 이 결합하는 벤젠환을 일단으로 하는 치환 혹은 무치환의 플루오렌환 구조, 또는 $R_1 \sim R_4$ 가 결합하는 벤젠환 또는 $R_{10} \sim R_{13}$ 이 결합하는 벤젠환을 일단으로 하는 치환 혹은 무치환의 나프탈렌환 구조 등을 들 수 있다.

[0126] 일 실시형태에서는, 식(5)으로 표시되는 화합물은 하기 식(5-1)~식(5-3)의 어느 것으로 표시되는 화합물이다.



[0127]

[0128] (식(5-1)~식(5-3) 중,

[0129] 고리 A'는 치환 혹은 무치환의 고리 형성 탄소수 10~50의 축합 아릴환, 또는 치환 혹은 무치환의 고리 형성 원자수 8~50의 축합 복소환이다.

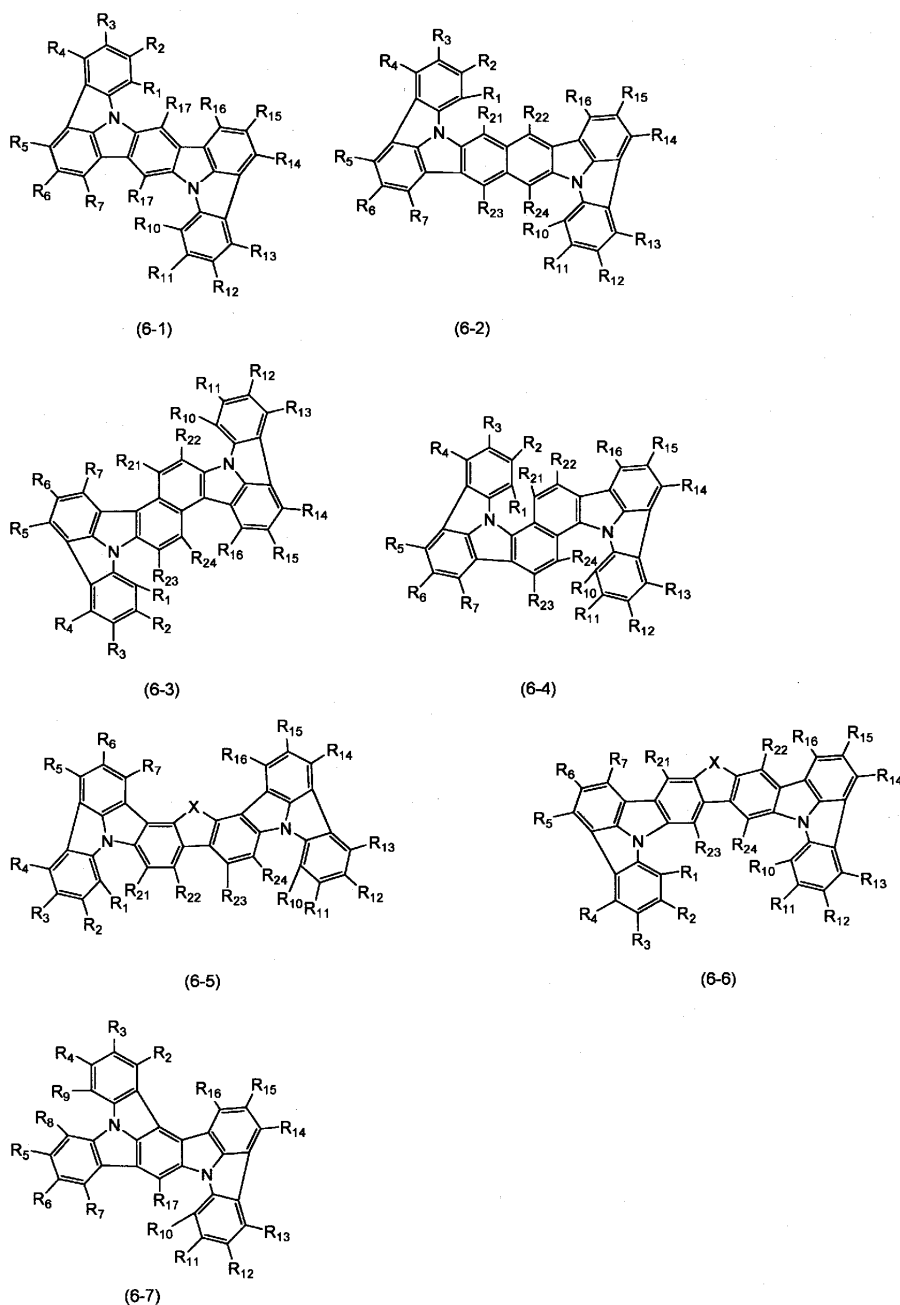
[0130] $R_1 \sim R_5$, R_7 , $R_{10} \sim R_{14}$, R_{16} 은 식(1-1), 식(1-2), 식(1-3) 및 식(2)에서 정의한 것과 같다.

[0131] $R_{21} \sim R_{26}$ 및 $R_{31} \sim R_{36}$ 은, 각각 독립적으로, 수소 원자, 치환 혹은 무치환의 탄소수 1~50의 알킬기, 치환 혹은 무치환의 탄소수 1~50의 할로알킬기, 치환 혹은 무치환의 탄소수 2~50의 알케닐기, 치환 혹은 무치환의 탄소수 2~50의 알키닐기, 치환 혹은 무치환의 고리 형성 탄소수 3~50의 시클로알킬기, 치환 혹은 무치환의 탄소수 1~50의 알콕시기, 치환 혹은 무치환의 탄소수 1~50의 알킬티오기, 치환 혹은 무치환의 고리 형성 탄소수 6~50의 아릴옥시기, 치환 혹은 무치환의 고리 형성 탄소수 6~50의 아릴티오기, 치환 혹은 무치환의 탄소수 7~50의 아랄킬기, $-\text{Si}(R_{31})(R_{32})(R_{33})$, $-\text{C}(=\text{O})R_{34}$, $-\text{COOR}_{35}$, $-\text{N}(R_{36})(R_{37})$, 할로젠 원자, 시아노기, 니트로기, 치환 혹은 무치환의 고리 형성 탄소수 6~50의 아틸기, 또는 치환 혹은 무치환의 고리 형성 원자수 5~50의 1가의 복소환

기이다.

[0132] $R_{31} \sim R_{37}$ 은 식(1-1), 식(1-2), 식(1-3) 및 식(2)에서 정의한 것과 같다.)

[0133] 일 실시형태에서는, 식(1-1) 및 식(1-3)으로 표시되는 화합물 또는 식(1-2) 및 식(1-3)으로 표시되는 화합물은 하기 식(6-1)~식(6-7)으로 표시되는 화합물로 이루어지는 군에서 선택된다.



[0134]

[0135] (식(6-1)~식(6-7) 중,

[0136] $R_1 \sim R_{17}$ 은 식(1-1), 식(1-2), 식(1-3) 및 식(2)에서 정의한 것과 같다.

[0137] X는 0, NR_{25} 또는 $C(R_{26})(R_{27})$ 이다.

[0138] $R_{21} \sim R_{27}$ 중 인접하는 2개 이상의 1조 이상은, 치환 혹은 무치환의 포화 또는 불포화의 고리를 형성하여도 좋다.

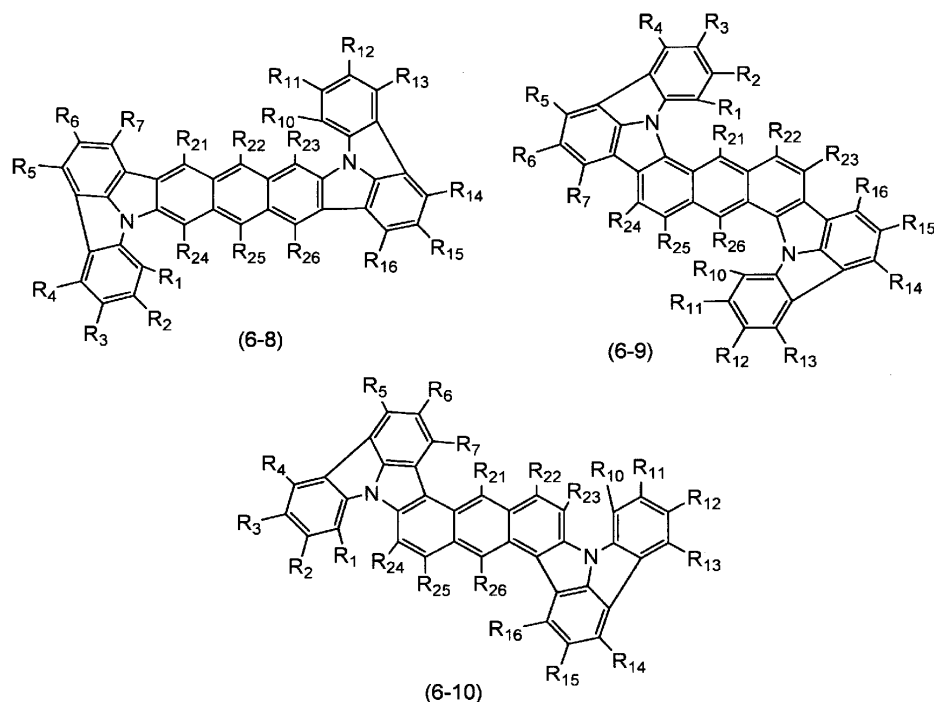
[0139] 상기 치환 혹은 무치환의 포화 또는 불포화의 고리를 형성하지 않는 $R_{21} \sim R_{27}$ 은, 각각 독립적으로, 수소 원자, 치환 혹은 무치환의 탄소수 1~50의 알킬기, 치환 혹은 무치환의 탄소수 1~50의 할로알킬기, 치환 혹은 무치환의 탄소수 2~50의 알케닐기, 치환 혹은 무치환의 탄소수 2~50의 알키닐기, 치환 혹은 무치환의 고리 형성 탄소수

3~50의 시클로알킬기, 치환 혹은 무치환의 탄소수 1~50의 알콕시기, 치환 혹은 무치환의 탄소수 1~50의 알킬티오기, 치환 혹은 무치환의 고리 형성 탄소수 6~50의 아릴옥시기, 치환 혹은 무치환의 고리 형성 탄소수 6~50의 아릴티오기, 치환 혹은 무치환의 탄소수 7~50의 아랄킬기, $-\text{Si}(\text{R}_{31})(\text{R}_{32})(\text{R}_{33})$, $-\text{C}(=\text{O})\text{R}_{34}$, $-\text{COOR}_{35}$, $-\text{N}(\text{R}_{36})(\text{R}_{37})$, 할로젠 원자, 시아노기, 니트로기, 치환 혹은 무치환의 고리 형성 탄소수 6~50의 아릴기, 또는 치환 혹은 무치환의 고리 형성 원자수 5~50의 1가의 복소환기이다.

[0140] $\text{R}_{31} \sim \text{R}_{37}$ 은, 각각 독립적으로, 수소 원자, 치환 혹은 무치환의 탄소수 1~50의 알킬기, 치환 혹은 무치환의 고리 형성 탄소수 3~50의 시클로알킬기, 치환 혹은 무치환의 고리 형성 탄소수 6~50의 아릴기, 또는 치환 혹은 무치환의 고리 형성 원자수 5~50의 1가의 복소환기이다.

[0141] $\text{R}_{31} \sim \text{R}_{37}$ 의 각각이 복수 존재하는 경우, 복수 존재하는 $\text{R}_{31} \sim \text{R}_{37}$ 의 각각은 동일하여도 좋고, 다르더라도 좋다.)

[0142] 일 실시형태에서는, 식(1-1) 및 식(1-3)으로 표시되는 화합물 또는 식(1-2) 및 식(1-3)으로 표시되는 화합물은 하기 식(6-8)~식(6-10)으로 표시되는 화합물로 이루어지는 군에서 선택된다.



[0143]

(식(6-8)~식(6-10) 중,

[0144]

$\text{R}_1 \sim \text{R}_7$ 및 $\text{R}_{10} \sim \text{R}_{16}$ 은 식(1-1), 식(1-2), 식(1-3) 및 식(2)에서 정의한 것과 같다.

[0145]

$\text{R}_{21} \sim \text{R}_{26}$ 중 인접하는 2개 이상의 1조 이상은, 치환 혹은 무치환의 포화 또는 불포화의 고리를 형성하여도 좋다.

[0146]

상기 치환 혹은 무치환의 포화 또는 불포화의 고리를 형성하지 않는 $\text{R}_{21} \sim \text{R}_{26}$ 은, 각각 독립적으로, 수소 원자, 치환 혹은 무치환의 탄소수 1~50의 알킬기, 치환 혹은 무치환의 탄소수 1~50의 할로알킬기, 치환 혹은 무치환의 탄소수 2~50의 알케닐기, 치환 혹은 무치환의 탄소수 2~50의 알키닐기, 치환 혹은 무치환의 고리 형성 탄소수 3~50의 시클로알킬기, 치환 혹은 무치환의 탄소수 1~50의 알콕시기, 치환 혹은 무치환의 탄소수 1~50의 알킬티오기, 치환 혹은 무치환의 고리 형성 탄소수 6~50의 아릴옥시기, 치환 혹은 무치환의 고리 형성 탄소수 6~50의 아릴티오기, 치환 혹은 무치환의 탄소수 7~50의 아랄킬기, $-\text{Si}(\text{R}_{31})(\text{R}_{32})(\text{R}_{33})$, $-\text{C}(=\text{O})\text{R}_{34}$, $-\text{COOR}_{35}$, $-\text{N}(\text{R}_{36})(\text{R}_{37})$, 할로젠 원자, 시아노기, 니트로기, 치환 혹은 무치환의 고리 형성 탄소수 6~50의 아릴기, 또는 치환 혹은 무치환의 고리 형성 원자수 5~50의 1가의 복소환기이다.

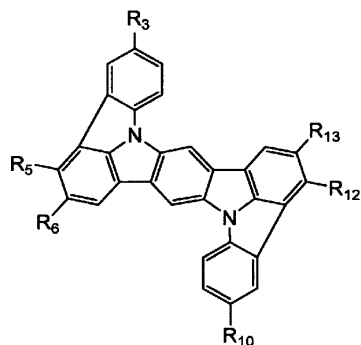
[0147]

$\text{R}_{31} \sim \text{R}_{37}$ 은, 각각 독립적으로, 수소 원자, 치환 혹은 무치환의 탄소수 1~50의 알킬기, 치환 혹은 무치환의 고리 형성 탄소수 3~50의 시클로알킬기, 치환 혹은 무치환의 고리 형성 탄소수 6~50의 아릴기, 또는 치환 혹은 무치환의 고리 형성 원자수 5~50의 1가의 복소환기이다.

[0148]

[0149] $R_{31} \sim R_{37}$ 의 각각이 복수 존재하는 경우, 복수 존재하는 $R_{31} \sim R_{37}$ 의 각각은 동일하여도 좋고, 다르더라도 좋다.)

[0150] 일 실시형태에서는, 식(1-1) 및 식(1-3)으로 표시되는 화합물 또는 식(1-2) 및 식(1-3)으로 표시되는 화합물은 하기 식(3-2)으로 표시되는 화합물이다.



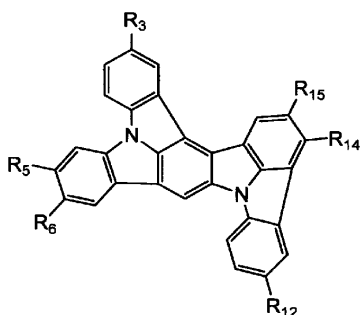
(3-2)

[0151]

[0152] (식(3-2) 중,

[0153] R_3 , R_5 , R_6 , R_{10} , R_{12} 및 R_{13} 는 식(1-1) 및 식(1-3)에서 정의한 것과 같다.)

[0154] 일 실시형태에서는, 식(1-1) 및 식(1-3)으로 표시되는 화합물 또는 식(1-2) 및 식(1-3)으로 표시되는 화합물은 하기 식(7)으로 표시되는 화합물이다.



(7)

[0155]

[0156] (식(7) 중,

[0157] R_3 , R_5 , R_6 , R_{12} , R_{14} 및 R_{15} 는 식(1-2) 및 식(1-3)에서 정의한 것과 같다.)

[0158] 일 실시형태에서는, $R_1 \sim R_{17}$ 은, 각각 독립적으로, 수소 원자, 치환 혹은 무치환의 고리 형성 탄소수 6~50의 아릴기, 및 치환 혹은 무치환의 고리 형성 원자수 5~50의 복소환기로 이루어지는 군에서 선택된다.

[0159] 일 실시형태에서는, $R_1 \sim R_{17}$ 은, 각각 독립적으로, 수소 원자, 치환 혹은 무치환의 고리 형성 탄소수 6~18의 아릴기, 및 치환 혹은 무치환의 고리 형성 원자수 5~18의 복소환기로 이루어지는 군에서 선택된다.

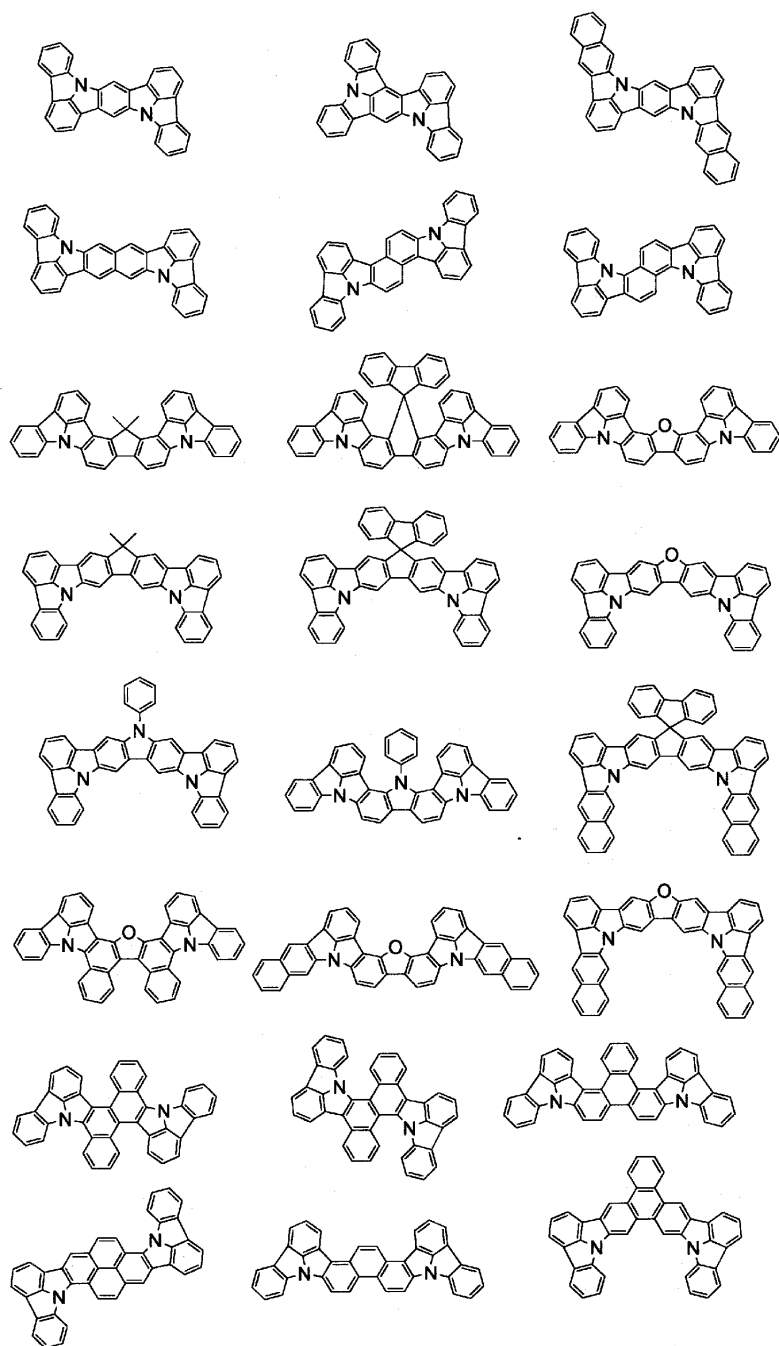
[0160] 식(1-1) 및 식(1-3)으로 표시되는 화합물, 그리고 식(1-2) 및 식(1-3)으로 표시되는 화합물에 있어서의, 「치환 혹은 무치환의」라고 하는 경우에 있어서의 치환기는, 탄소수 1~50의 알킬기, 탄소수 1~50의 할로알킬기, 탄소수 2~50의 알케닐기, 탄소수 2~50의 알키닐기, 고리 형성 탄소수 3~50의 시클로알킬기, 탄소수 1~50의 알콕시기, 탄소수 1~50의 알킬티오기, 고리 형성 탄소수 6~50의 아릴옥시기, 고리 형성 탄소수 6~50의 아릴티오기, 탄소수 7~50의 아랄킬기, $-\text{Si}(\text{R}_{41})(\text{R}_{42})(\text{R}_{43})$, $-\text{C}(=\text{O})\text{R}_{44}$, $-\text{COOR}_{45}$, $-\text{S}(=\text{O})_2\text{R}_{46}$, $-\text{P}(=\text{O})(\text{R}_{47})(\text{R}_{48})$, $-\text{Ge}(\text{R}_{49})(\text{R}_{50})(\text{R}_{51})$, $-\text{N}(\text{R}_{52})(\text{R}_{53})$ (여기서, $\text{R}_{41} \sim \text{R}_{53}$ 은, 각각 독립적으로, 수소 원자, 탄소수 1~50의 알킬기, 고리 형성 탄소수 6~50의 아릴기, 또는 고리 형성 원자수 5~50의 복소환기이다. $\text{R}_{41} \sim \text{R}_{53}$ 이 2 이상 존재하는 경우, 2 이상의 $\text{R}_{41} \sim \text{R}_{53}$ 의 각각은 동일하여도 좋고, 다르더라도 좋다.), 히드록시기, 할로젠 원자, 시아노기, 니트로기, 고리 형성 탄소수 6~50의 아릴기, 및 고리 형성 원자수 5~50의 1가의 복소환기로 이루어지는 군에서 선택된다.

[0161] 일 실시형태에서는, 식(1-1) 및 식(1-3)으로 표시되는 화합물, 그리고 식(1-2) 및 식(1-3)으로 표시되는 화합물에 있어서의 「치환 혹은 무치환의」라고 하는 경우의 치환기는, 탄소수 1~50의 알킬기, 고리 형성 탄소수 6~50의 아릴기, 및 고리 형성 원자수 5~50의 1가의 복소환기이다.

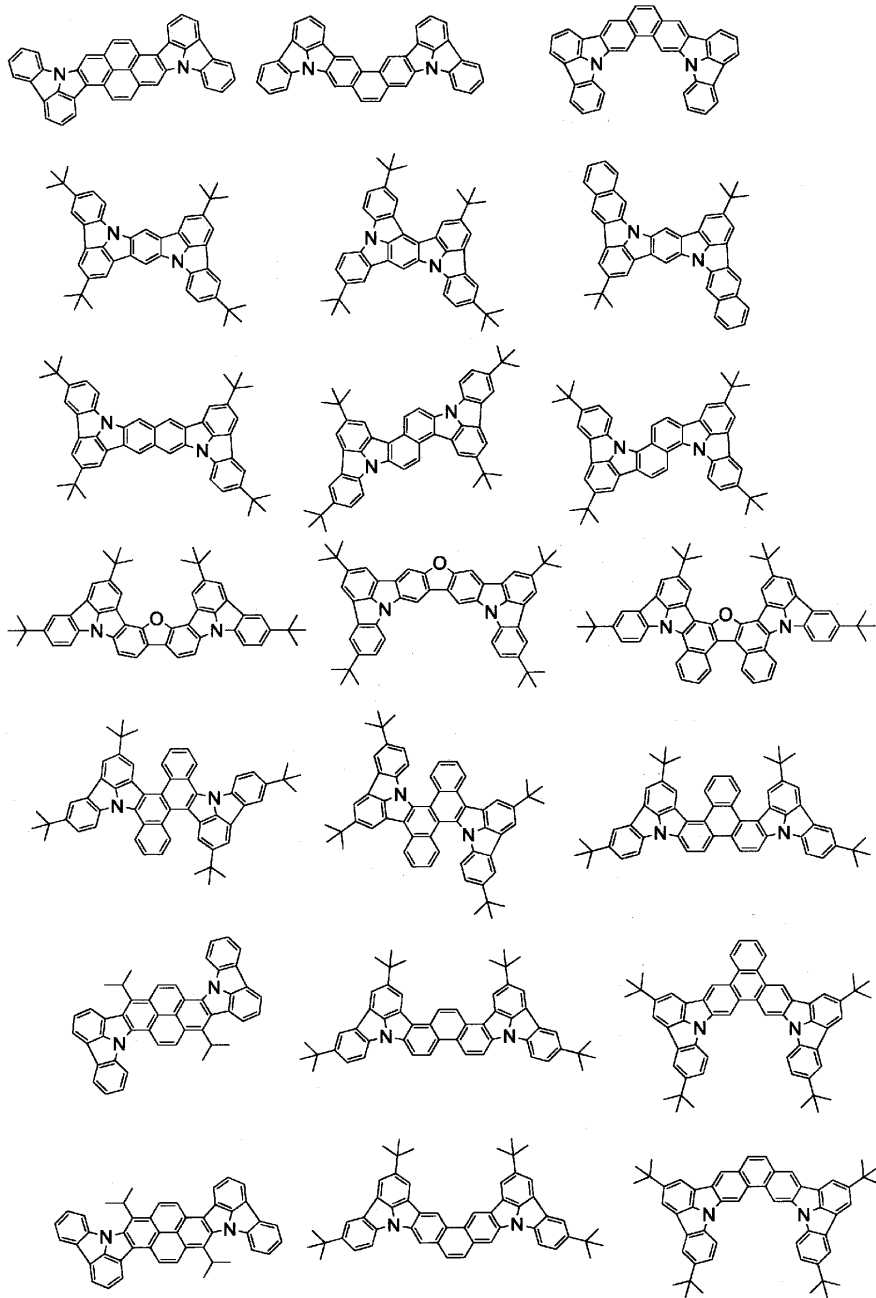
[0162] 일 실시형태에서는, 식(1-1) 및 식(1-3)으로 표시되는 화합물, 그리고 식(1-2) 및 식(1-3)으로 표시되는 화합물에 있어서의 「치환 혹은 무치환의」라고 하는 경우의 치환기는, 탄소수 1~18의 알킬기, 고리 형성 탄소수 6~18의 아릴기, 및 고리 형성 원자수 5~18의 1가의 복소환기로 이루어지는 군에서 선택된다.

[0163] 식(1-1) 및 식(1-3)으로 표시되는 화합물, 그리고 식(1-2) 및 식(1-3)으로 표시되는 화합물의 각 치환기, 「치환 혹은 무치환의」라고 하는 경우에 있어서의 치환기 및 할로젠 원자의 구체예는 각각 전술한 것과 같다.

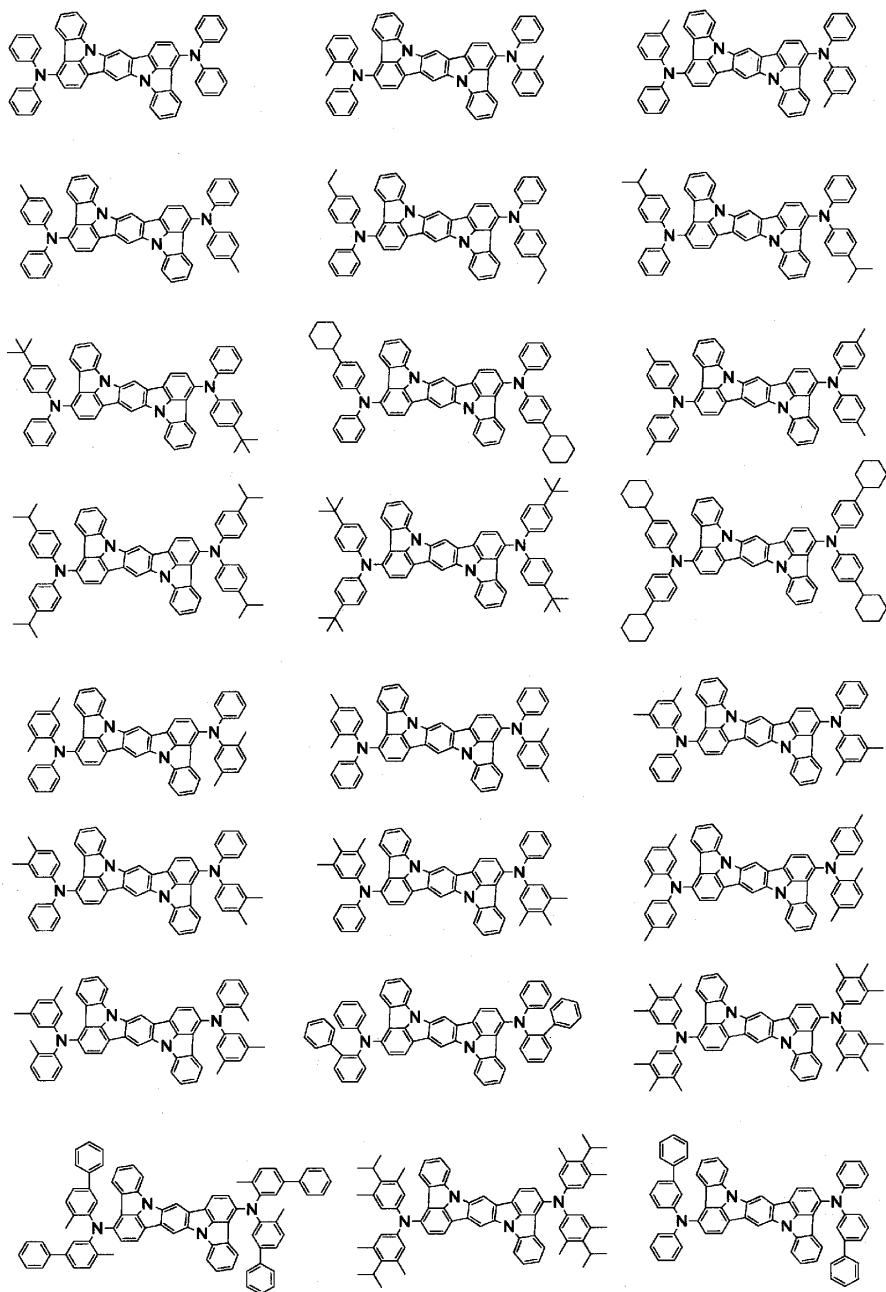
[0164] 식(1-1) 및 식(1-3)으로 표시되는 화합물, 그리고 식(1-2) 및 식(1-3)으로 표시되는 화합물의 구체예로서는 이하에 나타내는 화합물을 들 수 있다.



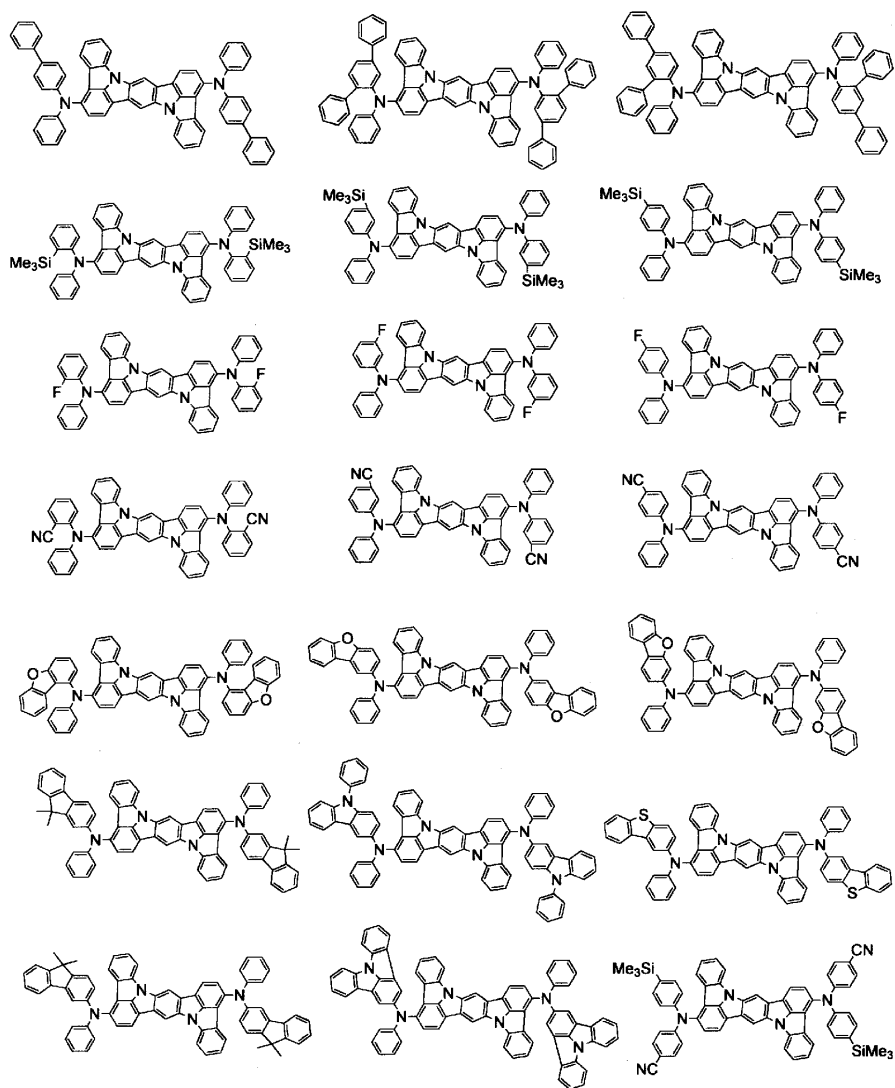
[0165]



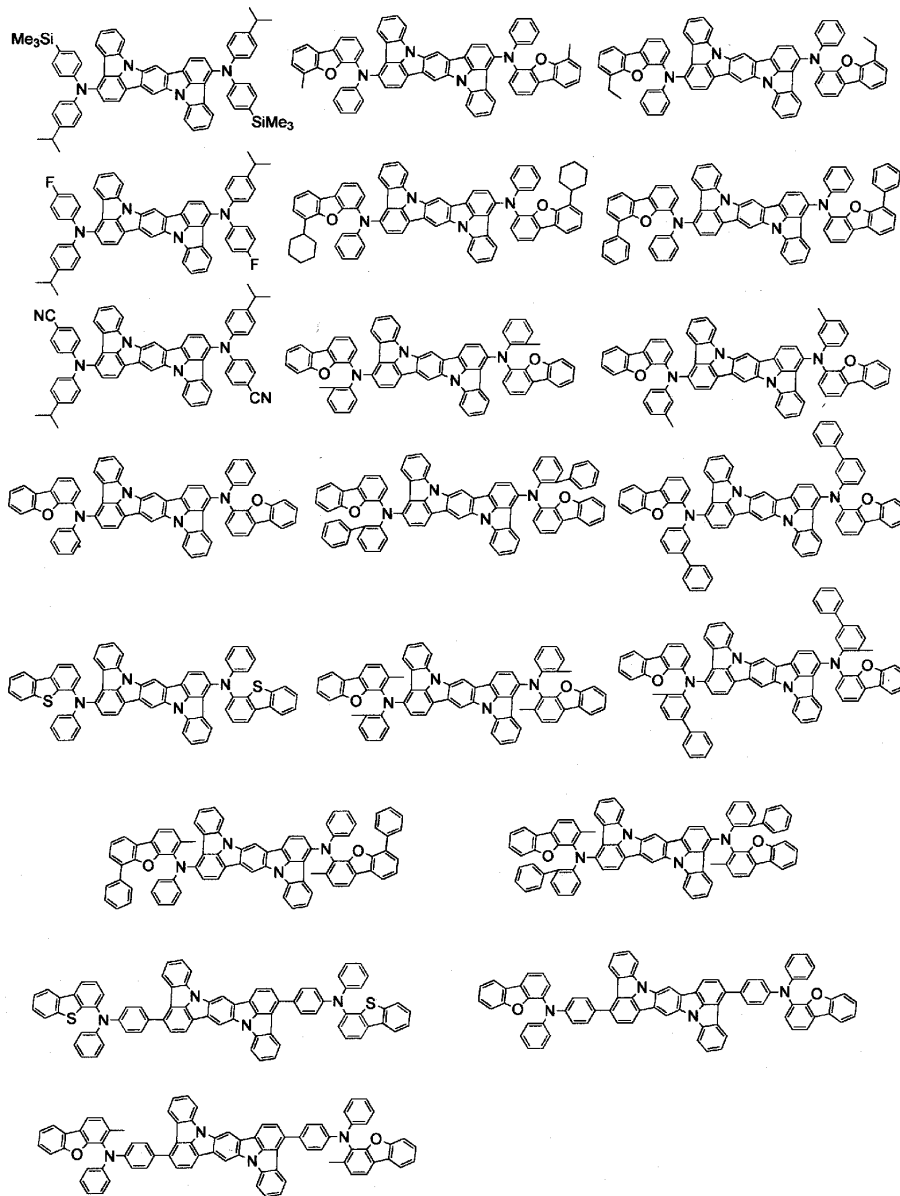
[0166]



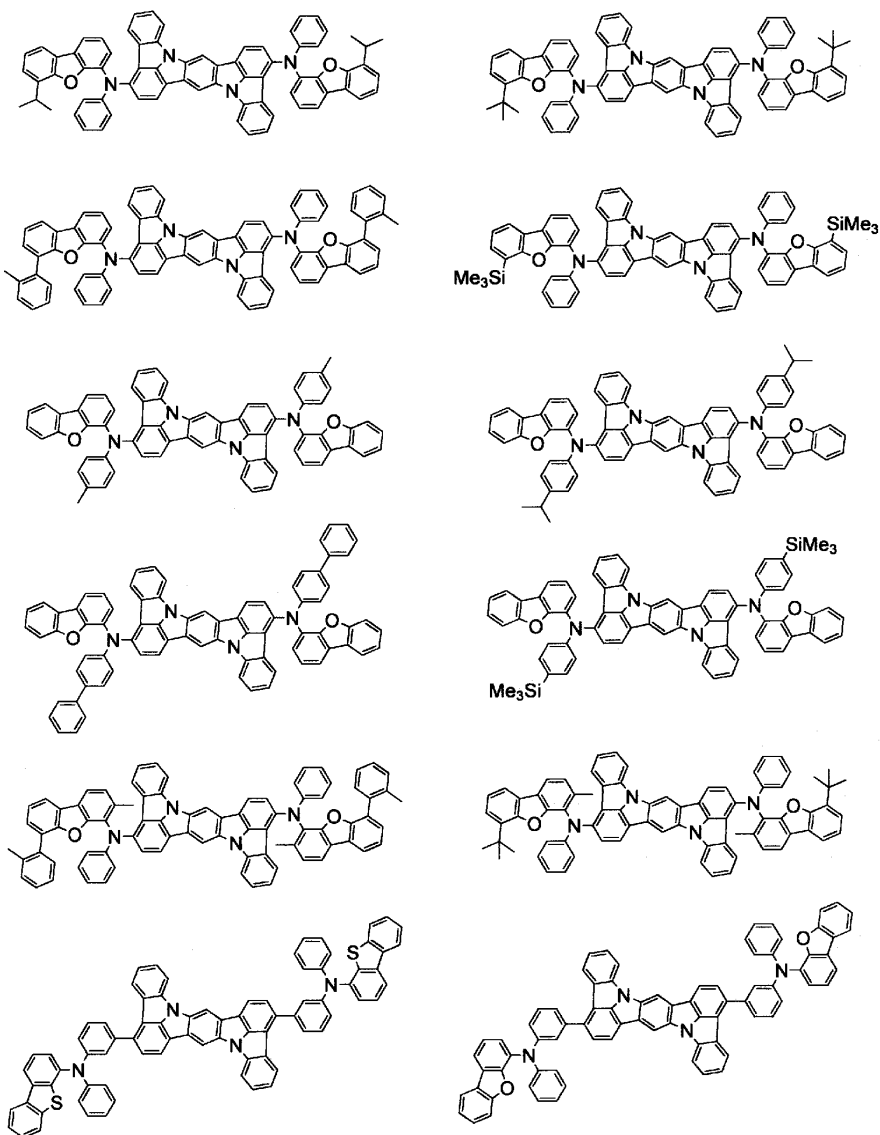
[0167]



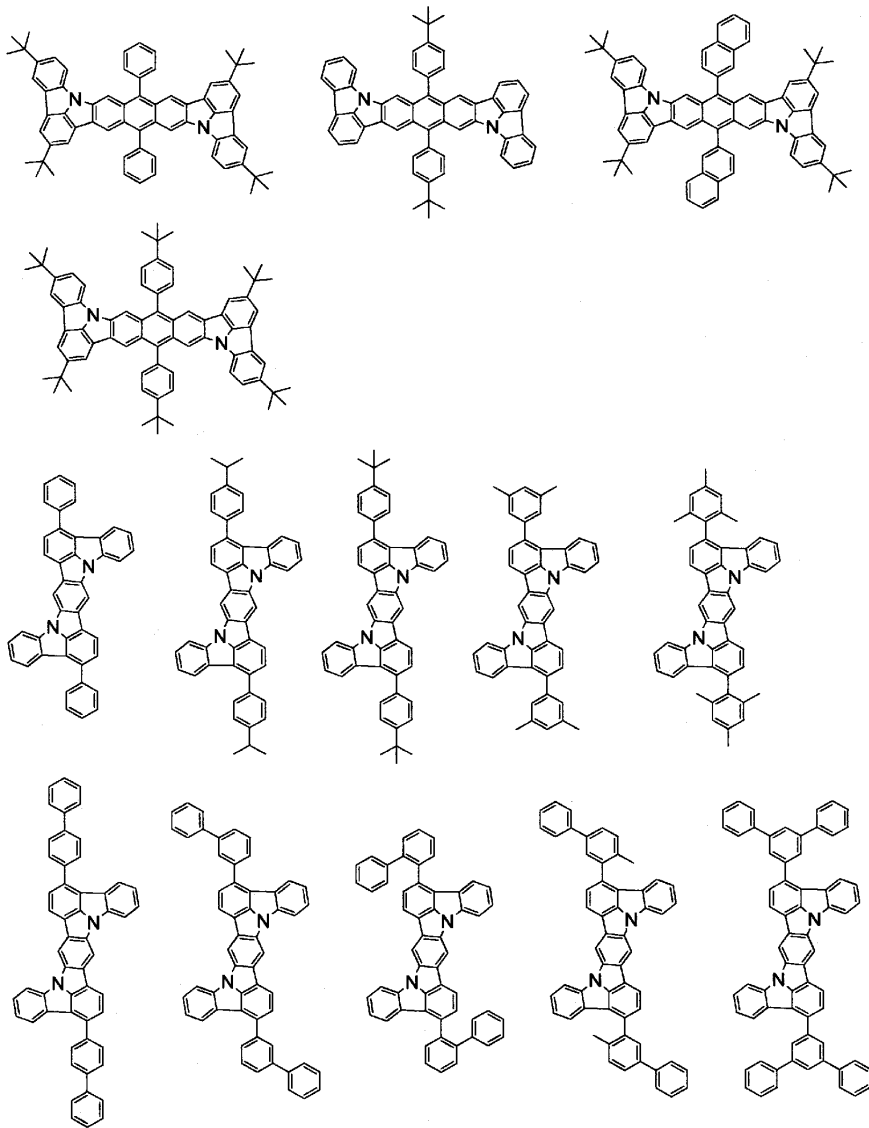
[0168]



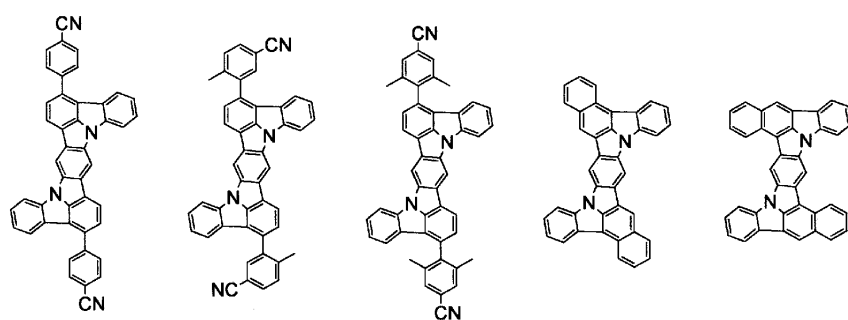
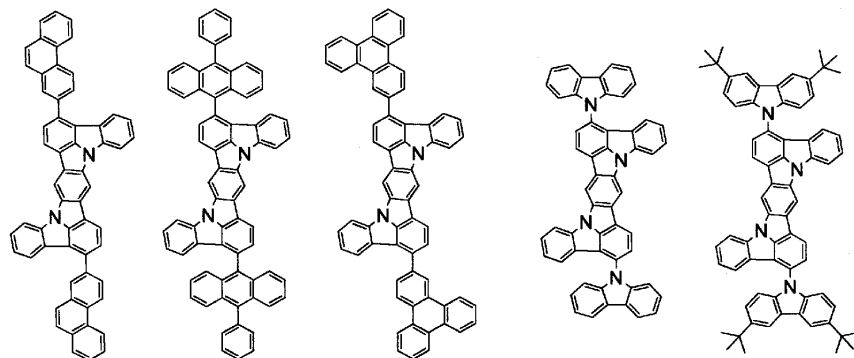
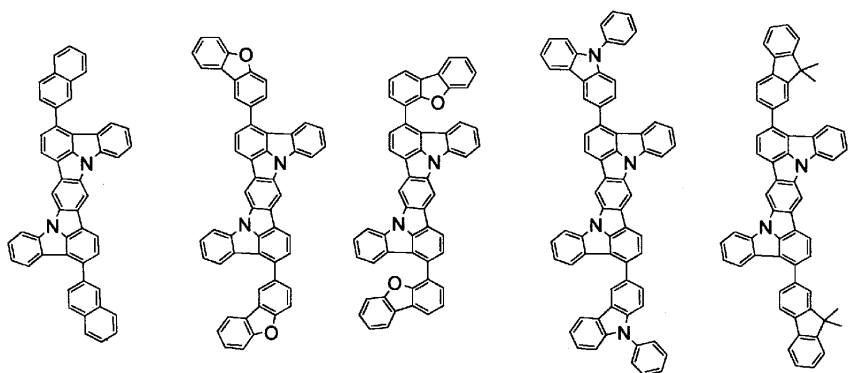
[0169]



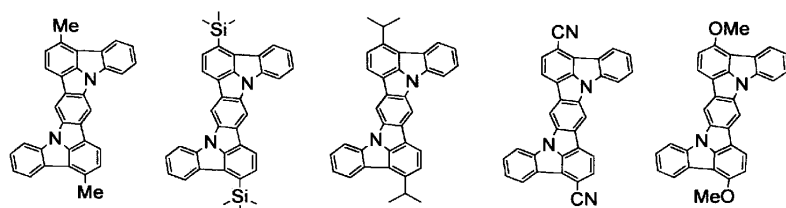
[0170]



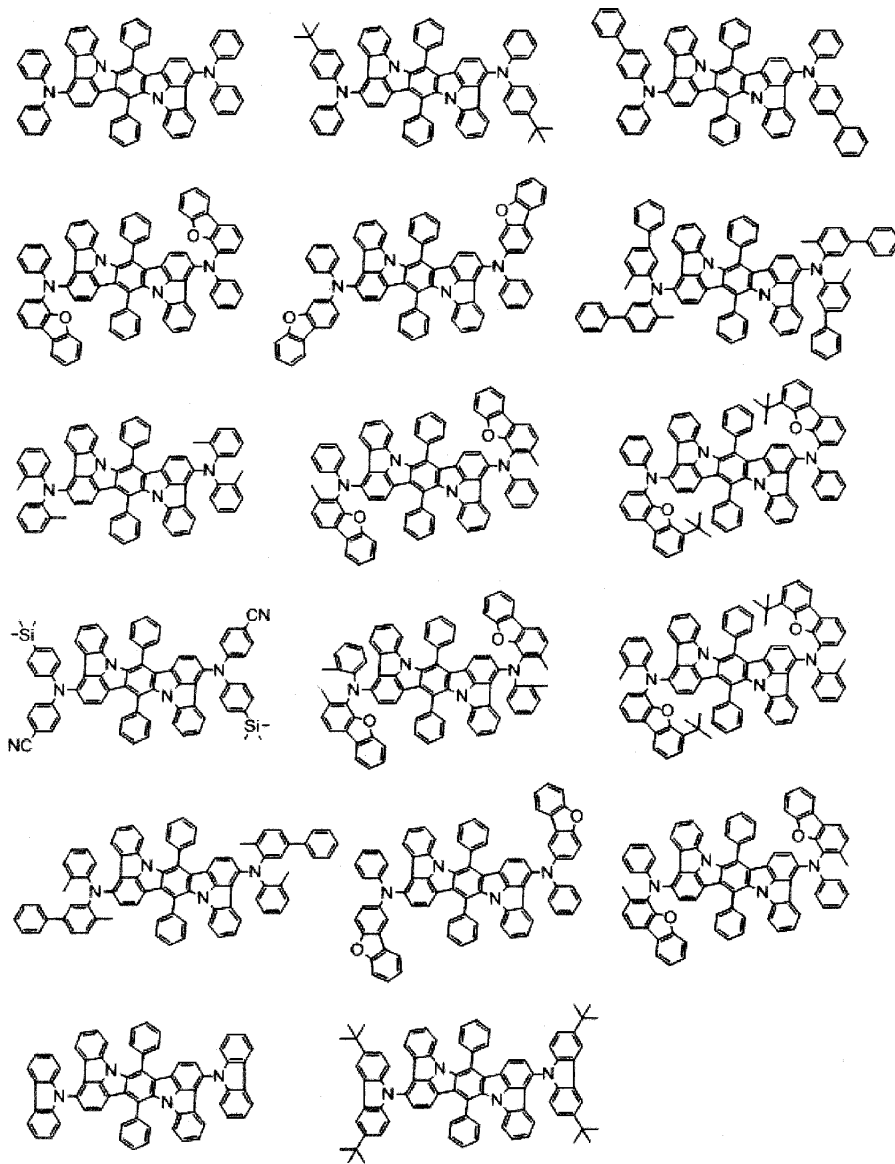
[0171]



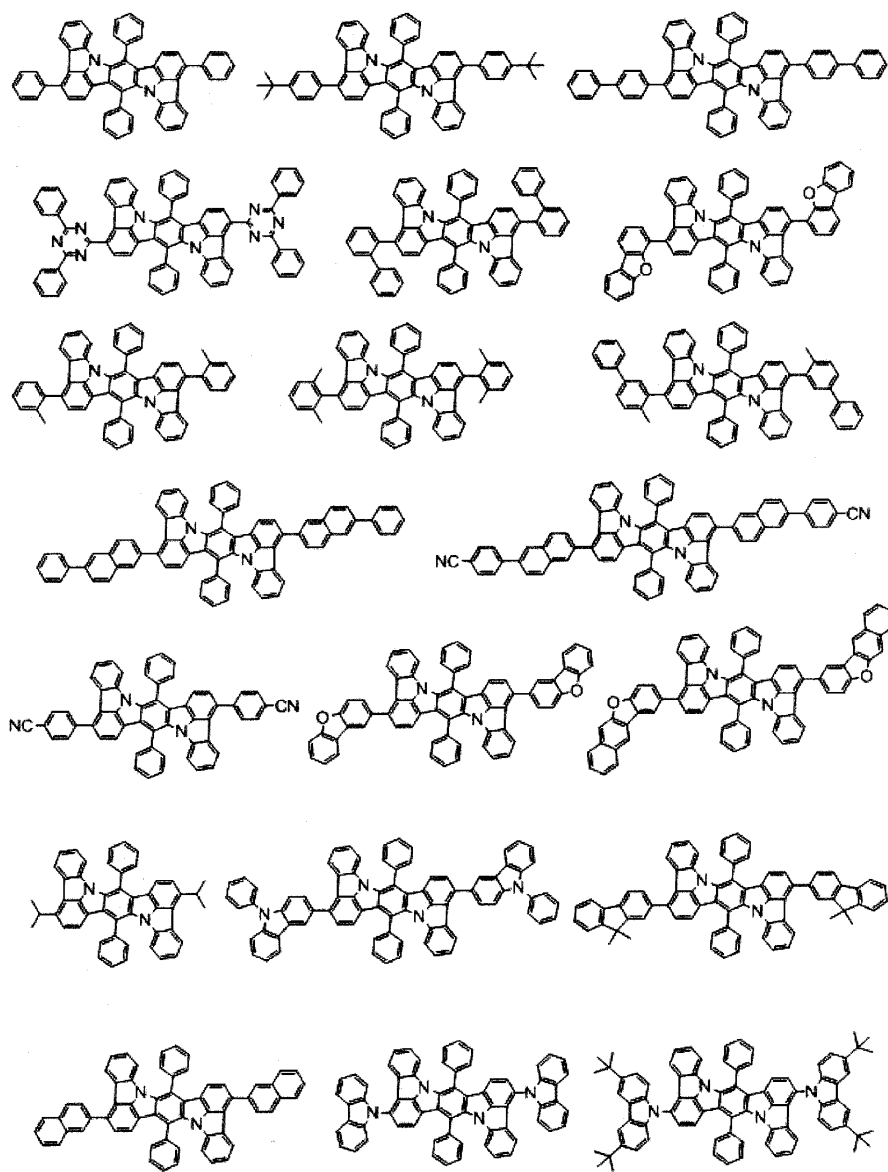
[0172]



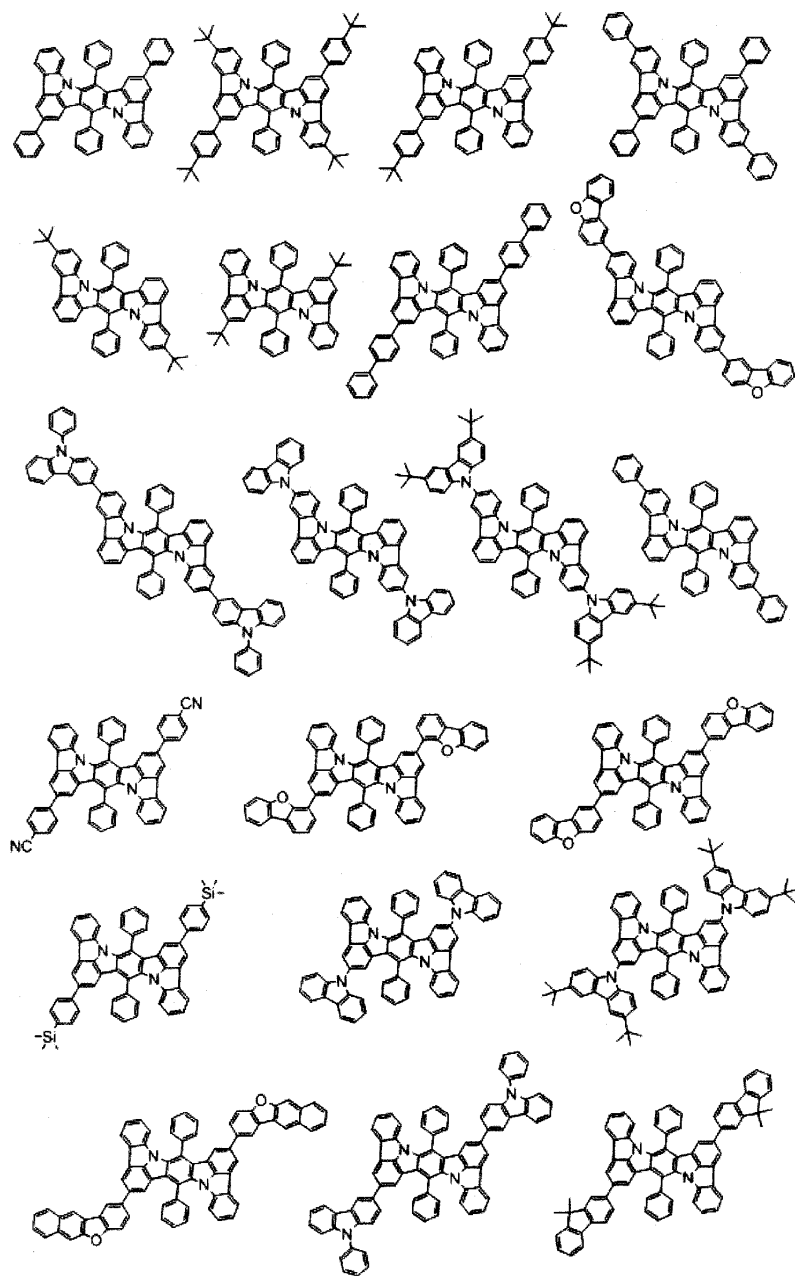
[0173]



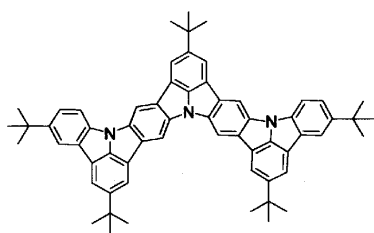
[0174]



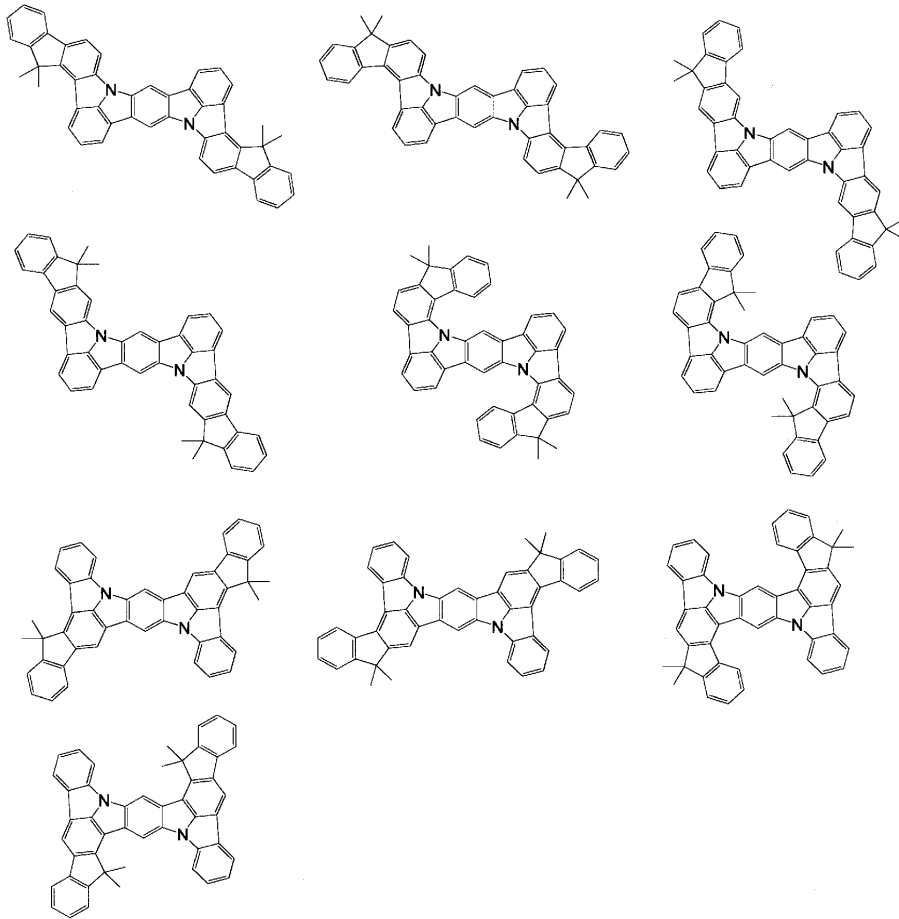
[0175]



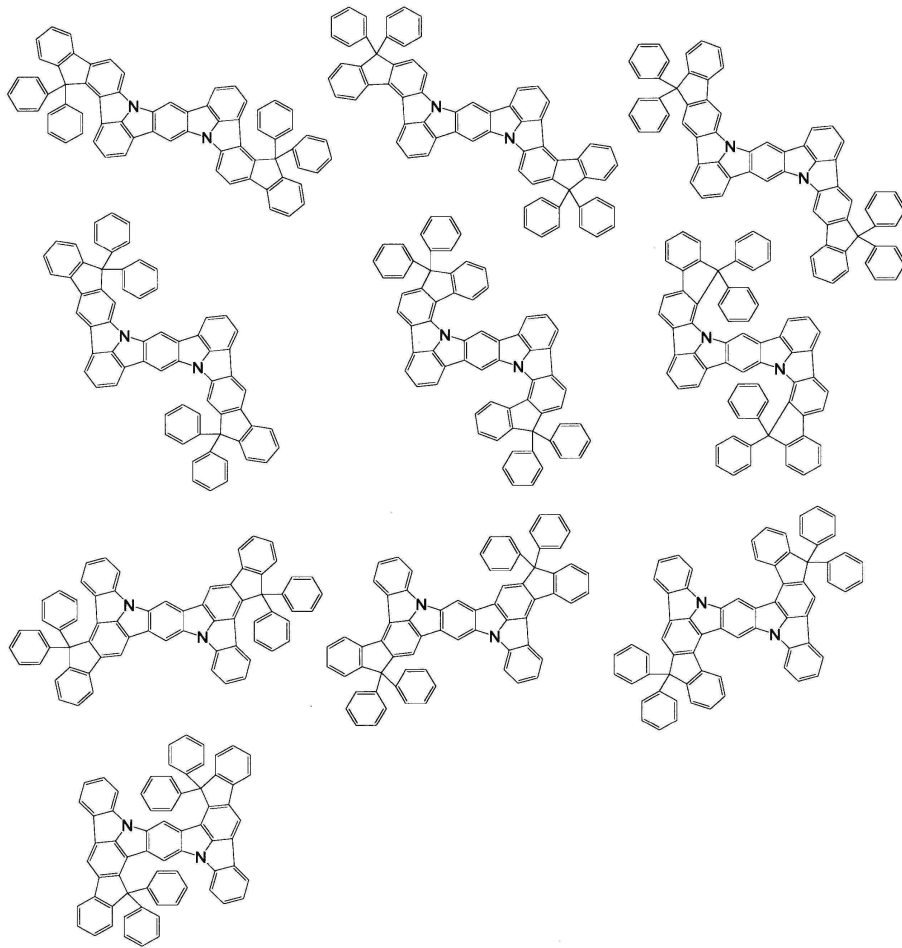
[0176]



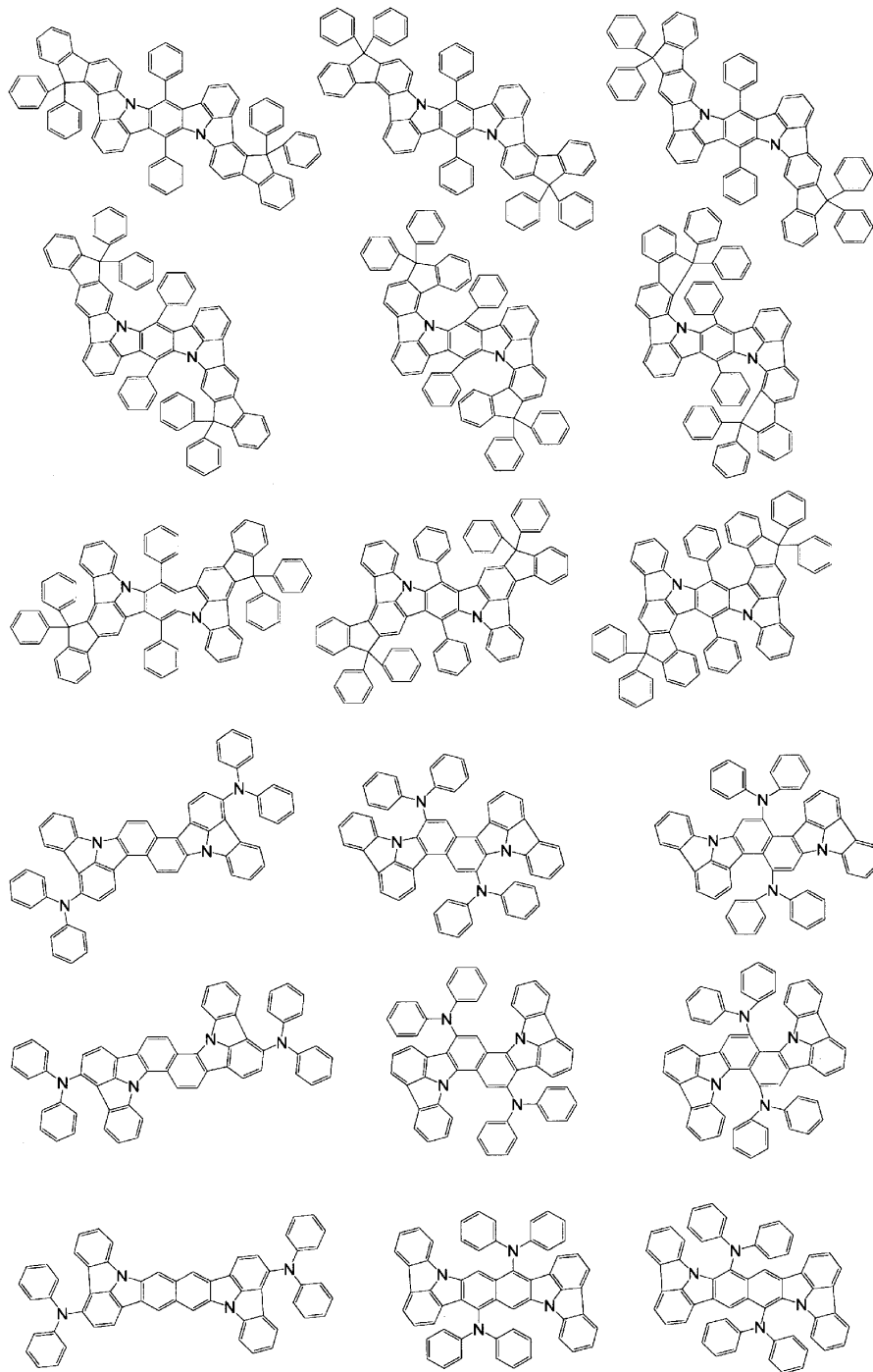
[0177]



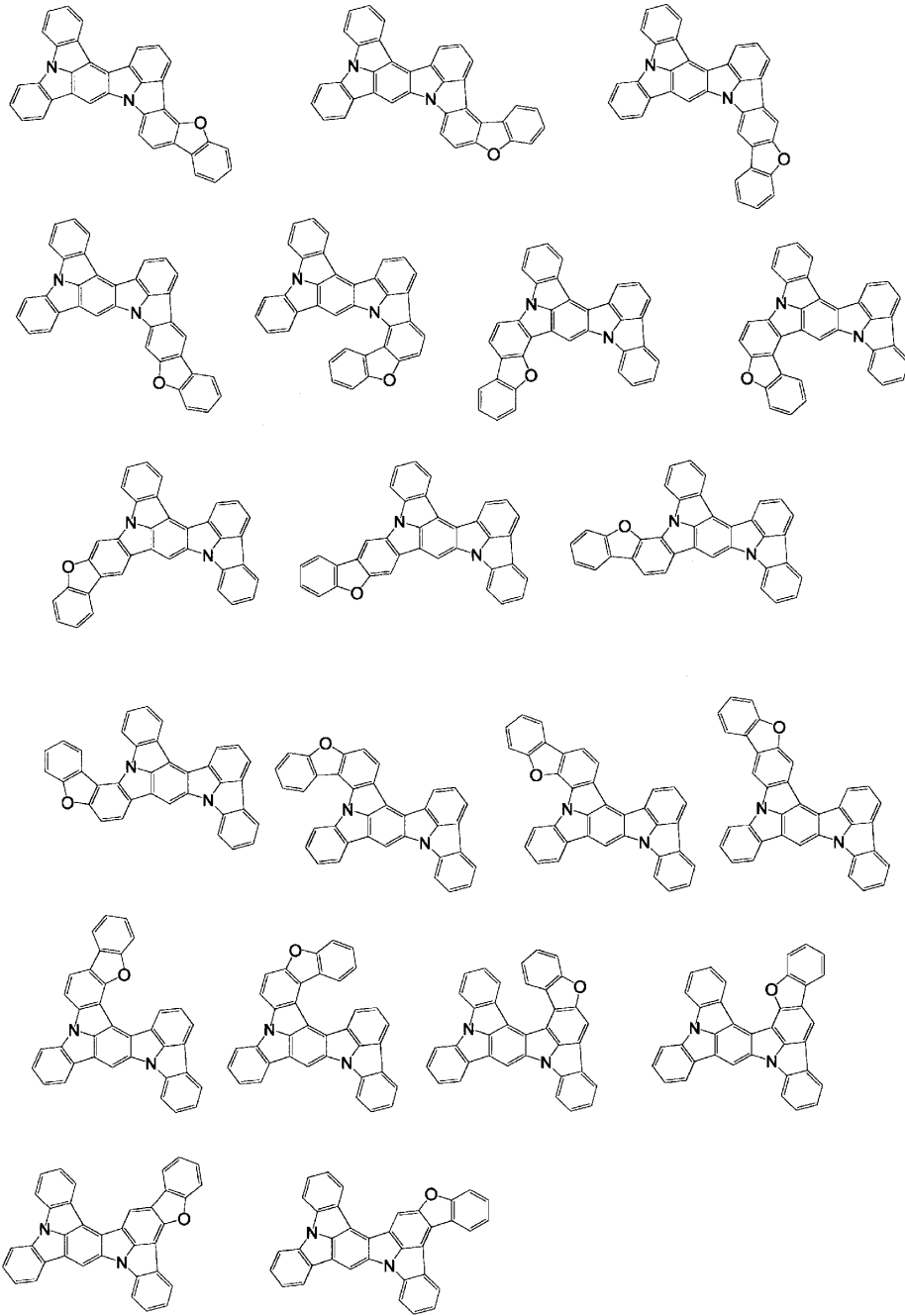
[0178]



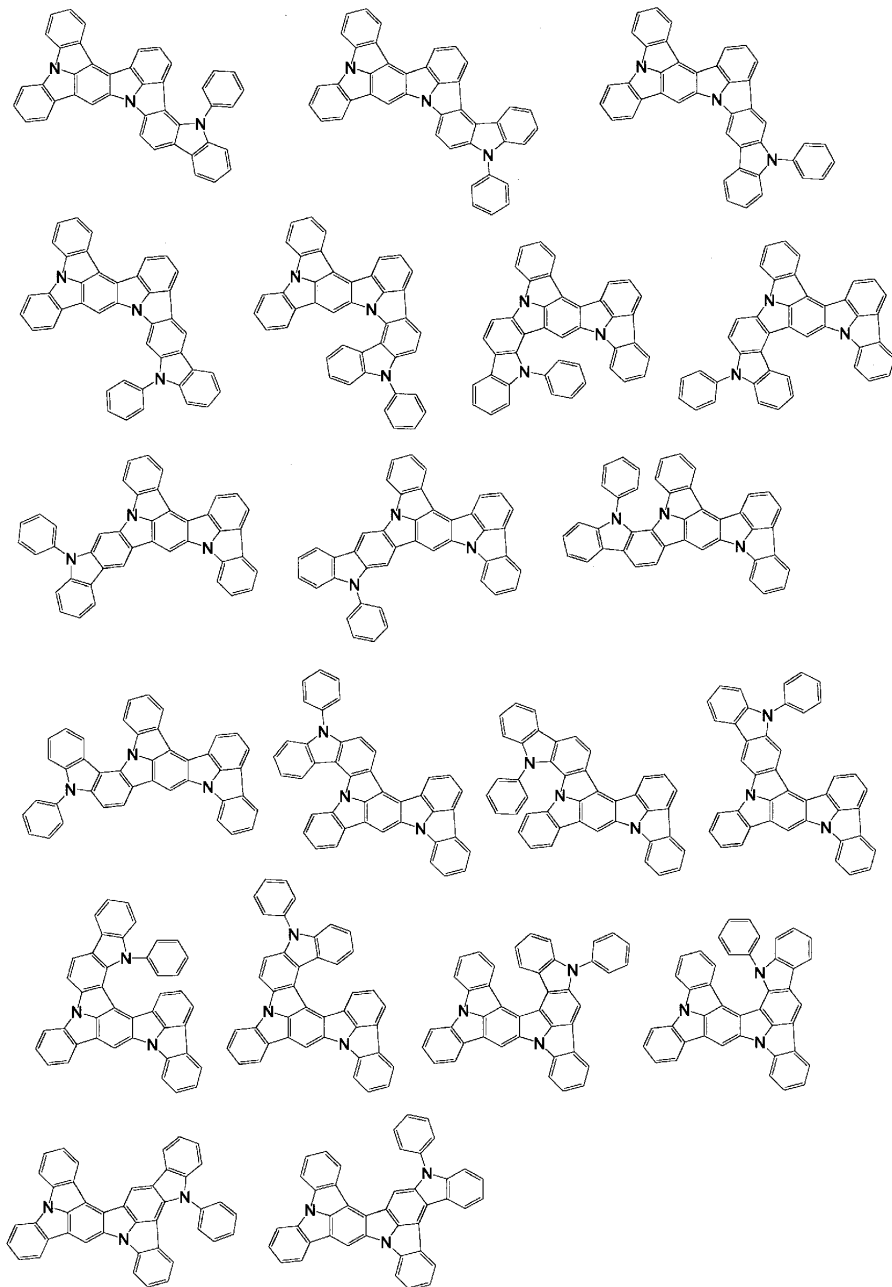
[0179]



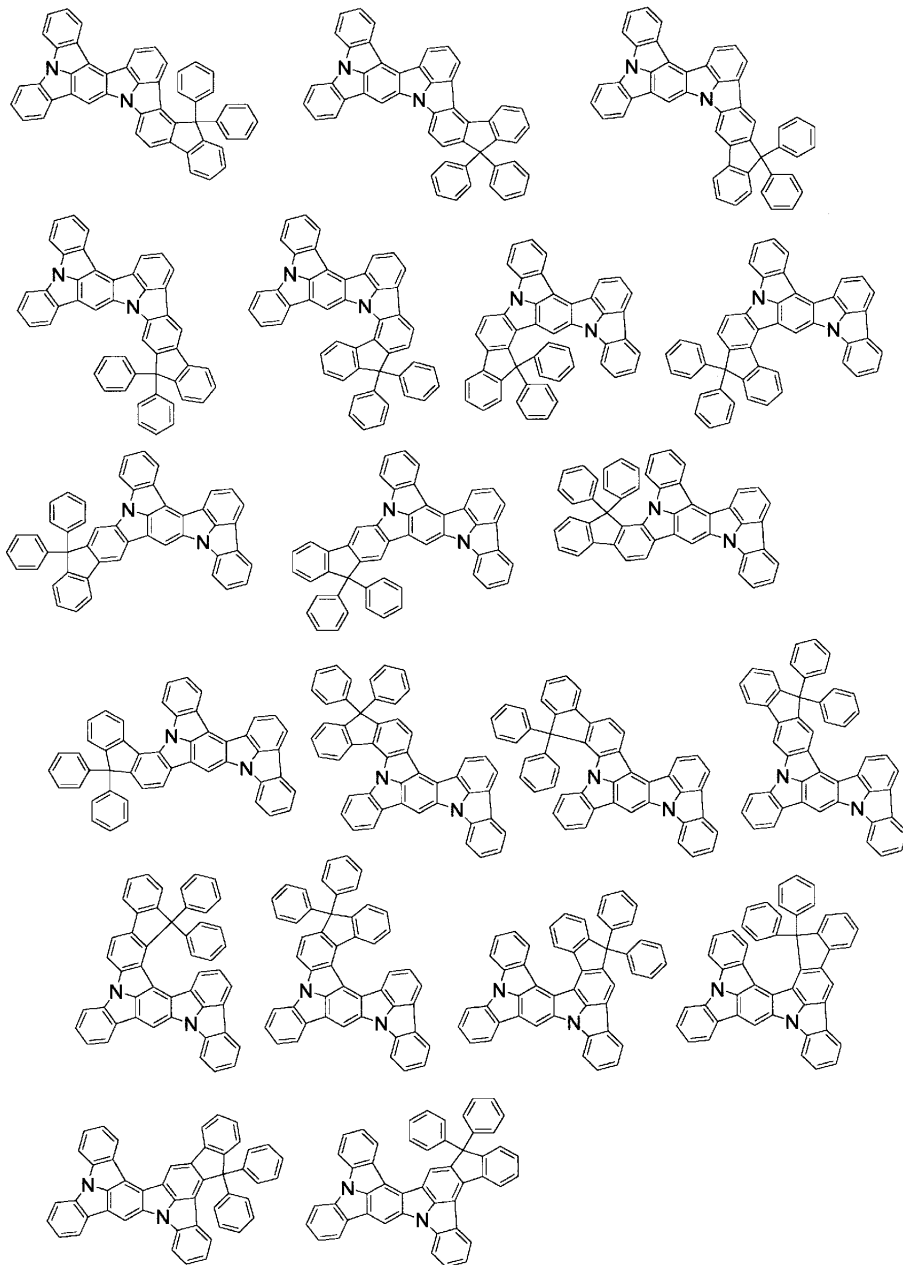
[0180]



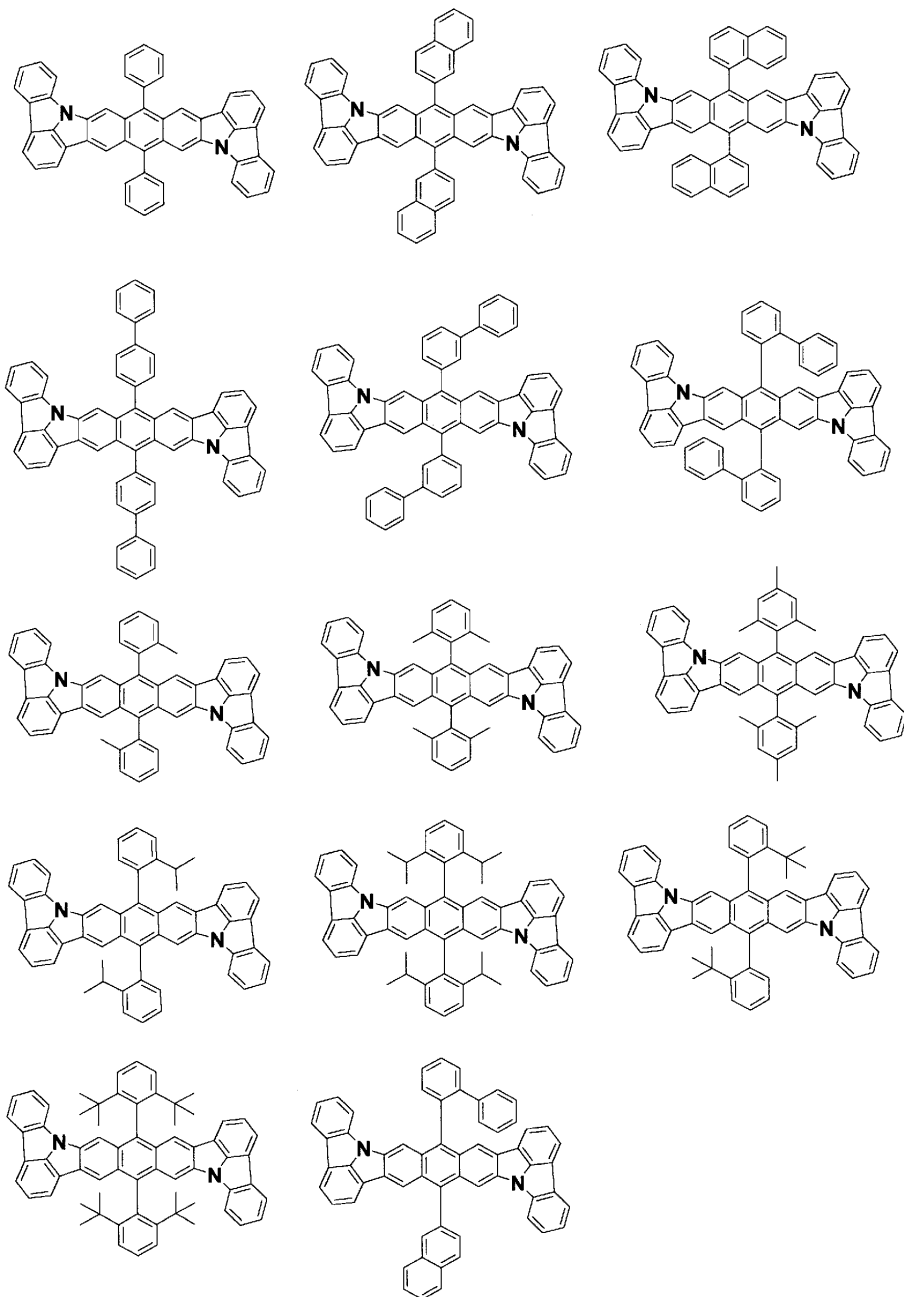
[0181]



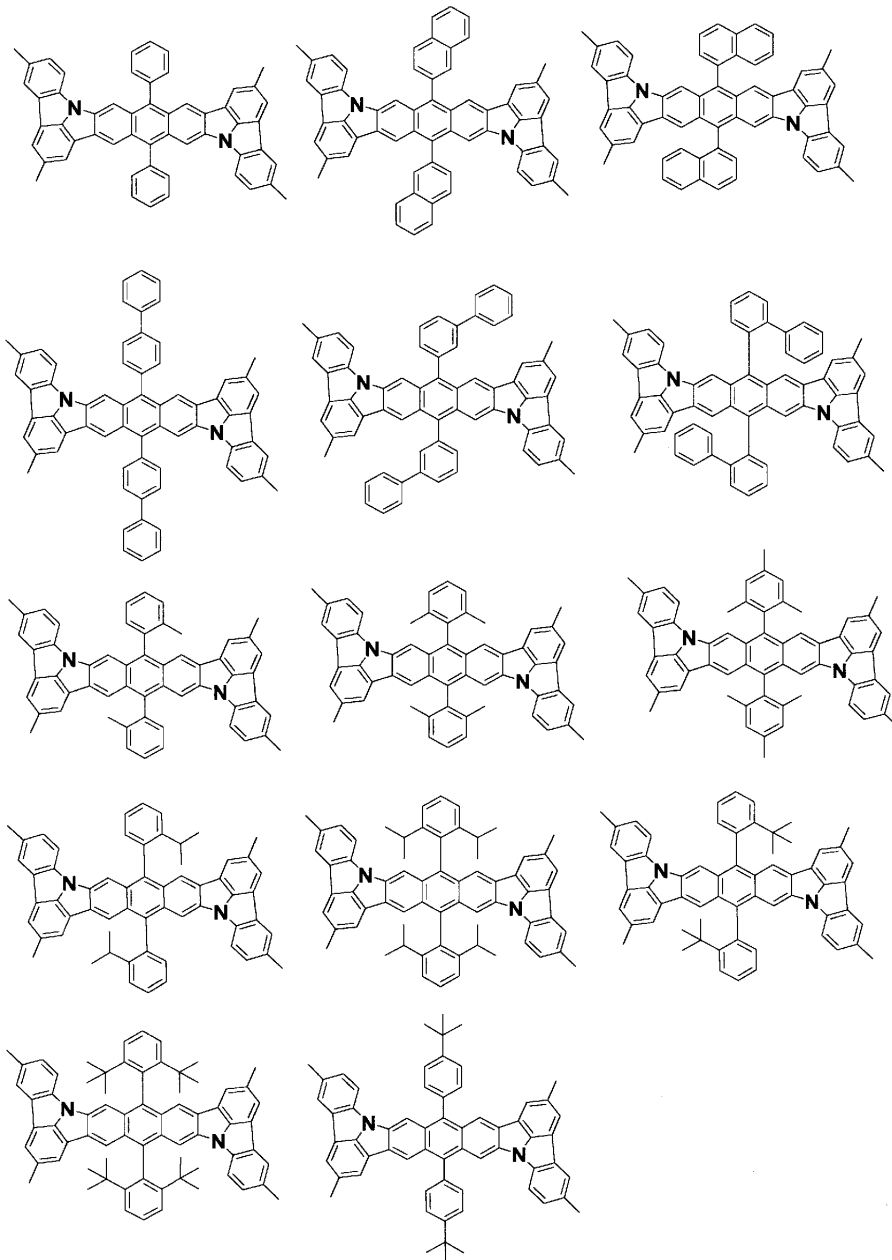
[0182]



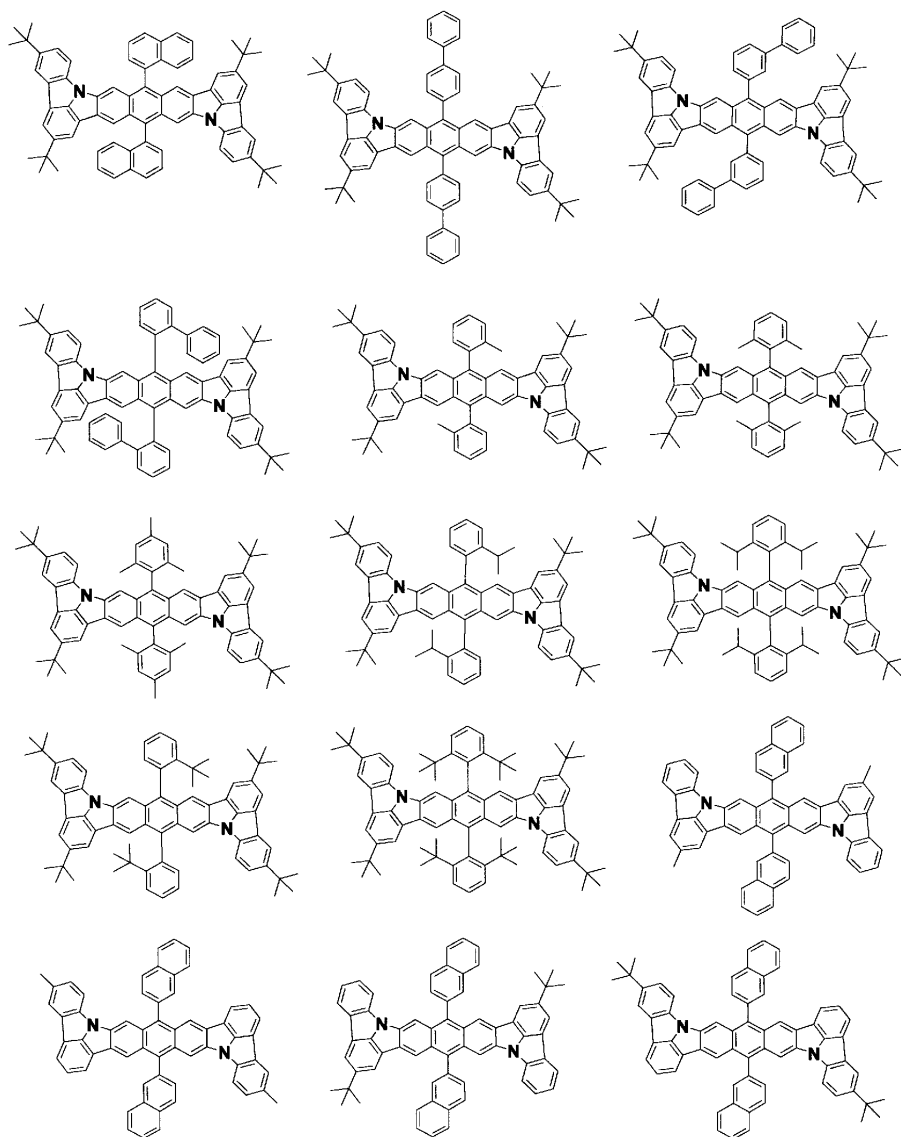
[0183]



[0184]



[0185]



[0186]

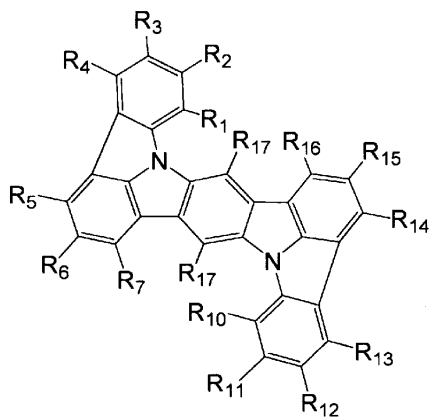
[0187]

식(1-1) 및 식(1-3)으로 표시되는 화합물, 그리고 식(1-2) 및 식(1-3)으로 표시되는 화합물은, 예컨대, 후술하는 실시예의 반응에 따라, 목적물에 맞춘 기지의 대체 반응이나 원료를 이용하여 합성할 수 있다.

[0188]

본 발명의 다른 일 양태에 따른 유기 일렉트로루미네센스 소자는, 음극과, 양극과, 상기 음극과 상기 양극의 사이에 배치된 적어도 1층의 유기층을 갖는다.

[0189] 상기 적어도 1층의 유기층 중의 적어도 1층이, 하기 식(3-11)으로 표시되는 화합물을 포함한다.



(3-11)

[0190]

[0191] (상기 식(3-11) 중,

[0192] $R_1 \sim R_7$ 및 $R_{10} \sim R_{16}$ 중 인접하는 2개 이상의 1조 이상이, 치환 혹은 무치환의 포화 또는 불포화의 고리를 형성하여도 좋다.

[0193] 상기 치환 혹은 무치환의 포화 또는 불포화의 고리를 형성하지 않는 $R_1 \sim R_7$ 및 $R_{10} \sim R_{16}$ 은, 각각 독립적으로, 수소 원자, 치환 혹은 무치환의 탄소수 1~50의 알킬기, 치환 혹은 무치환의 탄소수 1~50의 할로알킬기, 치환 혹은 무치환의 탄소수 2~50의 알케닐기, 치환 혹은 무치환의 탄소수 2~50의 알키닐기, 치환 혹은 무치환의 고리 형성 탄소수 3~50의 시클로알킬기, 치환 혹은 무치환의 탄소수 1~50의 알콕시기, 치환 혹은 무치환의 탄소수 1~50의 알킬티오기, 치환 혹은 무치환의 고리 형성 탄소수 6~50의 아릴옥시기, 치환 혹은 무치환의 고리 형성 탄소수 6~50의 아릴티오기, 치환 혹은 무치환의 탄소수 7~50의 아랄킬기, $-\text{Si}(R_{31})(R_{32})(R_{33})$, $-\text{C}(=\text{O})R_{34}$, $-\text{COOR}_{35}$, $-\text{N}(R_{36})(R_{37})$, 할로겐 원자, 시아노기, 니트로기, 치환 혹은 무치환의 고리 형성 탄소수 6~50의 아릴기, 또는 치환 혹은 무치환의 고리 형성 원자수 5~50의 1가의 복소환기이다. 단, $R_1 \sim R_7$ 및 $R_{10} \sim R_{16}$ 의 적어도 하나는 $-\text{N}(R_{36})(R_{37})$ 이다.

[0194] R_{17} 은, 수소 원자, 치환 혹은 무치환의 탄소수 1~50의 알킬기, 치환 혹은 무치환의 탄소수 1~50의 할로알킬기, 치환 혹은 무치환의 탄소수 2~50의 알케닐기, 치환 혹은 무치환의 탄소수 2~50의 알키닐기, 치환 혹은 무치환의 고리 형성 탄소수 3~50의 시클로알킬기, 치환 혹은 무치환의 탄소수 1~50의 알콕시기, 치환 혹은 무치환의 탄소수 1~50의 알킬티오기, 치환 혹은 무치환의 고리 형성 탄소수 6~50의 아릴옥시기, 치환 혹은 무치환의 고리 형성 탄소수 6~50의 아릴티오기, 치환 혹은 무치환의 탄소수 7~50의 아랄킬기, $-\text{Si}(R_{31})(R_{32})(R_{33})$, $-\text{C}(=\text{O})R_{34}$, $-\text{COOR}_{35}$, $-\text{N}(R_{36})(R_{37})$, 할로겐 원자, 시아노기, 니트로기, 치환 혹은 무치환의 고리 형성 탄소수 6~50의 아릴기, 또는 치환 혹은 무치환의 고리 형성 원자수 5~50의 1가의 복소환기이다.

[0195] 2개의 R_{17} 은 동일하여도 좋고, 다르더라도 좋다.

[0196] $R_{31} \sim R_{37}$ 은, 각각 독립적으로, 수소 원자, 치환 혹은 무치환의 탄소수 1~50의 알킬기, 치환 혹은 무치환의 고리 형성 탄소수 3~50의 시클로알킬기, 치환 혹은 무치환의 고리 형성 탄소수 6~50의 아릴기, 또는 치환 혹은 무치환의 고리 형성 원자수 5~50의 1가의 복소환기이다.

[0197] $R_{31} \sim R_{37}$ 의 각각이 복수 존재하는 경우, 복수 존재하는 $R_{31} \sim R_{37}$ 의 각각은 동일하여도 좋고, 다르더라도 좋다.)

[0198] 「 $R_1 \sim R_7$ 및 $R_{10} \sim R_{16}$ 중 인접하는 2개 이상의 1조 이상이, 치환 혹은 무치환의 포화 또는 불포화의 고리를 형성하여도 좋다」에 관해서 설명한다.

[0199] 「 $R_1 \sim R_7$ 및 $R_{10} \sim R_{16}$ 중 인접하는 2개 이상의 1조」는, 예컨대, 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_1 과 R_2 와 R_3 등의 조합이다.

[0200] 상기 포화 또는 불포화의 고리에 대한 「치환 혹은 무치환의」의 「치환」일 때의 치환기는, 후술하는 「치환 혹은 무치환의」라고 하는 경우에 있어서의 치환기와 마찬가지로다.

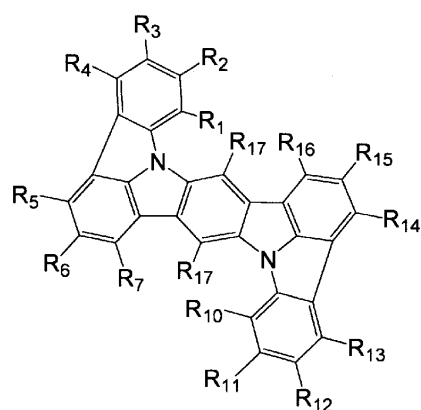
[0201] 「포화 또는 불포화의 고리」란, 예컨대, R_1 과 R_2 로 고리를 형성하는 경우에는, R_1 이 결합하는 탄소 원자와, R_2 가 결합하는 탄소 원자와, 1 이상의 임의의 원소로 형성하는 고리를 의미한다. 구체적으로는, R_1 과 R_2 로 고리를 형성하는 경우에 있어서, R_1 이 결합하는 탄소 원자와, R_2 가 결합하는 탄소 원자와, 4개의 탄소 원자로 불포화의 고리를 형성하는 경우, R_1 과 R_2 로 형성하는 고리는 벤젠환이 된다.

[0202] 「임의의 원소」는, 바람직하게는 C 원소, N 원소, O 원소, S 원소이다. 임의의 원소에 있어서(예컨대, C 원소 또는 N 원소의 경우), 고리를 형성하지 않는 결합수는 수소 원자 등으로 종단되어도 좋다.

[0203] 「1 이상의 임의의 원소」는, 바람직하게는 2개 이상 15개 이하, 보다 바람직하게는 3개 이상 12개 이하, 더욱 바람직하게는 3개 이상 5개 이하의 임의의 원소이다.

[0204] 이하, 「X~Y 중 인접하는 2개 이상의 1조 이상은, 치환 혹은 무치환의 포화 또는 불포화의 고리를 형성하여도 좋다」고 하는 표현은, X를 상기 R_1 로, Y를 상기 R_{16} 으로 치환했을 때와 같은 의미이다.

[0205] 일 실시형태에서는, 식(3-11)으로 표시되는 화합물은 하기 식(3-12)으로 표시되는 화합물이다.



(3-12)

[0206]

[0207] (상기 식(3-12) 중, $R_1 \sim R_7$ 및 $R_{10} \sim R_{16}$ 은 식(3-12)에서 정의한 것과 같다. 단, $R_1 \sim R_7$ 및 $R_{10} \sim R_{16}$ 의 어느 2개는 $-N(R_{36})(R_{37})$ 이다.)

[0208] 일 실시형태에서는, $R_1 \sim R_7$ 및 $R_{10} \sim R_{16}$ 은, 각각 독립적으로, 수소 원자, 치환 혹은 무치환의 고리 형성 탄소수 6~50의 아릴기, 및 치환 혹은 무치환의 고리 형성 원자수 5~50의 복소환기로 이루어지는 군에서 선택된다.

[0209] 일 실시형태에서는, $R_1 \sim R_7$ 및 $R_{10} \sim R_{16}$ 은, 각각 독립적으로, 수소 원자, 치환 혹은 무치환의 고리 형성 탄소수 6~18의 아릴기, 및 치환 혹은 무치환의 고리 형성 원자수 5~18의 복소환기로 이루어지는 군에서 선택된다.

[0210] 식(3-11)으로 표시되는 화합물에 있어서의, 「치환 혹은 무치환의」라고 하는 경우에 있어서의 치환기는, 탄소수 1~50의 알킬기, 탄소수 1~50의 할로알킬기, 탄소수 2~50의 알케닐기, 탄소수 2~50의 알키닐기, 고리 형성 탄소수 3~50의 시클로알킬기, 탄소수 1~50의 알콕시기, 탄소수 1~50의 알킬티오기, 고리 형성 탄소수 6~50의 아릴옥시기, 고리 형성 탄소수 6~50의 아릴티오기, 탄소수 7~50의 아랄킬기, $-\text{Si}(R_{41})(R_{42})(R_{43})$, $-\text{C}(=\text{O})R_{44}$, $-\text{COOR}_{45}$, $-\text{S}(=\text{O})_2R_{46}$, $-\text{P}(=\text{O})(R_{47})(R_{48})$, $-\text{Ge}(R_{49})(R_{50})(R_{51})$, $-\text{N}(R_{52})(R_{53})$ (여기서, $R_{41} \sim R_{53}$ 은, 각각 독립적으로, 수소 원자, 탄소수 1~50의 알킬기, 고리 형성 탄소수 6~50의 아릴기, 또는 고리 형성 원자수 5~50의 복소환기이다. $R_{41} \sim R_{53}$ 이 2 이상 존재하는 경우, 2 이상의 $R_{41} \sim R_{53}$ 의 각각은 동일하여도 좋고, 다르더라도 좋다.), 히드록시기, 할로겐 원자, 시아노기, 니트로기, 고리 형성 탄소수 6~50의 아릴기, 및 고리 형성 원자수 5~50의 1가의 복소환기로 이루어지는 군에서 선택된다.

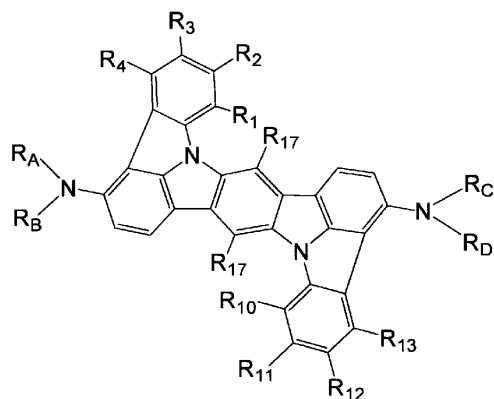
[0211] 일 실시형태에서는, 식(3-11)으로 표시되는 화합물에 있어서의 「치환 혹은 무치환의」라고 하는 경우의 치환기는, 탄소수 1~50의 알킬기, 고리 형성 탄소수 6~50의 아릴기, 및 고리 형성 원자수 5~50의 1가의 복소환기이

다.

[0212] 일 실시형태에서는, 식(3-11)으로 표시되는 화합물에 있어서의 「치환 혹은 무치환의」라고 하는 경우의 치환기는, 탄소수 1~18의 알킬기, 고리 형성 탄소수 6~18의 아릴기, 및 고리 형성 원자수 5~18의 1가의 복소환기로 이루어지는 군에서 선택된다.

[0213] 식(3-11)으로 표시되는 화합물의 각 치환기, 「치환 혹은 무치환의」라고 하는 경우에 있어서의 치환기 및 할로겐 원자의 구체에는 각각 전술한 것과 마찬가지이다.

[0214] 일 실시형태에서는, 식(3-11)으로 표시되는 화합물은 하기 식(3-13)으로 표시되는 화합물이다.



(3-13)

[0215]

(상기 식(3-13) 중,

[0216]

[0217] $R_1 \sim R_4$ 및 $R_{10} \sim R_{13}$ 중 인접하는 2개 이상의 1조 이상이, 치환 혹은 무치환의 포화 또는 불포화의 고리를 형성하여도 좋다.

[0218] 상기 치환 혹은 무치환의 포화 또는 불포화의 고리를 형성하지 않는 $R_1 \sim R_4$ 및 $R_{10} \sim R_{13}$, 그리고 R_{17} 은, 각각 독립적으로, 수소 원자, 치환 혹은 무치환의 고리 형성 탄소수 6~18의 아릴기, 또는 치환 혹은 무치환의 고리 형성 원자수 6~18의 1가의 복소환기이다. 2개의 R_{17} 은 상호 동일하여도 좋고, 다르더라도 좋다.

[0219] R_A , R_B , R_C 및 R_D 는, 각각 독립적으로 치환 혹은 무치환의 고리 형성 탄소수 6~18의 아릴기, 또는 치환 혹은 무치환의 고리 형성 원자수 6~18의 1가의 복소환기이다.)

[0220] 「 $R_1 \sim R_4$ 및 $R_{10} \sim R_{13}$ 중 인접하는 2개 이상의 1조 이상이, 치환 혹은 무치환의 포화 또는 불포화의 고리를 형성하여도 좋다」에 관해서 설명한다.

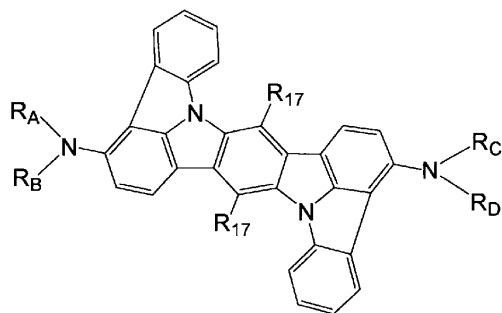
[0221] 「 $R_1 \sim R_4$ 및 $R_{10} \sim R_{13}$ 중 인접하는 2개 이상의 1조」는, 예컨대, R_1 과 R_2 , R_2 와 R_3 , R_3 과 R_4 , R_1 과 R_2 와 R_3 등의 조합이다.

[0222] 상기 포화 또는 불포화의 고리에 대한 「치환 혹은 무치환의」의 「치환」일 때의 치환기는, 후술하는 「치환 혹은 무치환의」라고 하는 경우에 있어서의 치환기와 마찬가지이다.

[0223] 「포화 또는 불포화의 고리」는 상기 식(3-11)에서 설명한 것과 같다.

[0224] 식(3-13)으로 표시되는 화합물로서는, $R_1 \sim R_4$, $R_{10} \sim R_{13}$ 및 R_{17} 중 인접하는 2개 이상의 1조 이상이, 치환 혹은 무치환의 포화 또는 불포화의 고리를 형성하여도 좋고, 치환 혹은 무치환의 포화 또는 불포화의 고리를 형성하지 않더라도 좋다. 식(3-13)으로 표시되는 화합물에서는, $R_1 \sim R_4$, $R_{10} \sim R_{13}$ 및 R_{17} 중 인접하는 2개 이상의 1조 이상 이, 치환 혹은 무치환의 포화 또는 불포화의 고리를 형성하지 않으면 바람직하다.

[0225] 일 실시형태에서는, 식(3-13)으로 표시되는 화합물은 하기 식(3-14)으로 표시되는 화합물이다.



(3-14)

[0226]

[0227] (상기 식(3-14) 중, R₁₇, R_A, R_B, R_C 및 R_D는 상기 식(3-13)에서 정의한 것과 같다.)

[0228] 일 실시형태에서는, 식(3-13)으로 표시되는 화합물 및 식(3-14)으로 표시되는 화합물의 R_A, R_B, R_C 및 R_D는 각각 독립적으로 치환 혹은 무치환의 고리 형성 탄소수 6~18의 아릴기이다.

[0229] 일 실시형태에서는, 식(3-13)으로 표시되는 화합물 및 식(3-14)으로 표시되는 화합물의 R_A, R_B, R_C 및 R_D는, 각각 독립적으로 치환 혹은 무치환의 페닐기이다.

[0230] 일 실시형태에서는, 식(3-13)으로 표시되는 화합물 및 식(3-14)으로 표시되는 화합물의 2개의 R₁₇은 각각 수소 원자이다.

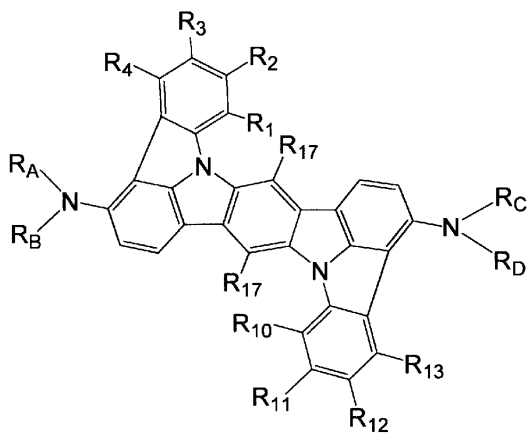
[0231] 식(3-13)으로 표시되는 화합물 및 식(3-14)으로 표시되는 화합물에 있어서의, 「치환 혹은 무치환의」라고 하는 경우에 있어서의 치환기는, 탄소수 1~18의 알킬기, 고리 형성 탄소수 6~18의 아릴기, 및 고리 형성 원자수 5~18의 1가의 복소환기로 이루어지는 군에서 선택된다.

[0232] 일 실시형태에서는, 식(3-13)으로 표시되는 화합물 및 식(3-14)으로 표시되는 화합물에 있어서의, 「치환 혹은 무치환의」라고 하는 경우에 있어서의 치환기는 탄소수 1~5의 알킬기이다.

[0233] 식(3-13)으로 표시되는 화합물 및 식(3-14)으로 표시되는 화합물의 각 치환기 및 「치환 혹은 무치환의」라고 하는 경우에 있어서의 치환기의 구체에는 각각 전술한 것과 마찬가지이다.

[0234] 본 발명의 다른 일 양태에 따른 유기 일렉트로루미네센스 소자는, 음극과, 양극과, 상기 음극과 상기 양극의 사이에 배치된 적어도 1층의 유기층을 갖는다.

[0235] 상기 적어도 1층의 유기층 중의 적어도 1층이, 하기 식(3-21)으로 표시되는 화합물을 포함한다.



(3-21)

[0236]

[0237] (상기 식(3-21) 중,

[0238] R₁~R₄ 및 R₁₀~R₁₃ 중 인접하는 2개 이상의 1조 이상이, 치환 혹은 무치환의 포화 또는 불포화의 고리를 형성하

여도 좋다.

[0239] 상기 치환 혹은 무치환의 포화 또는 불포화의 고리를 형성하지 않는 $R_1 \sim R_4$ 및 $R_{10} \sim R_{13}$, 그리고 R_{17} 은, 각각 독립적으로, 수소 원자, 치환 혹은 무치환의 고리 형성 탄소수 6~20의 아릴기, 또는 치환 혹은 무치환의 고리 형성 원자수 5~20의 1가의 복소환기이다. 2개의 R_{17} 은 상호 동일하여도 좋고, 다르더라도 좋다.

[0240] R_A , R_B , R_C 및 R_D 는 각각 독립적으로 치환 혹은 무치환의 고리 형성 탄소수 6~20의 아릴기이다.)

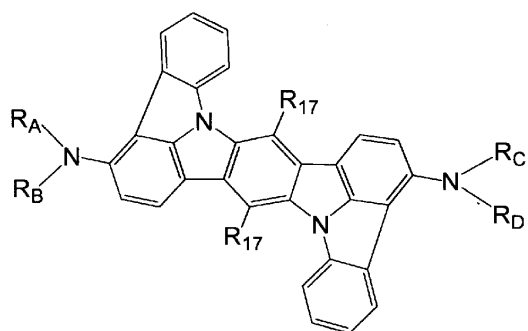
[0241] 「 $R_1 \sim R_4$ 및 $R_{10} \sim R_{13}$ 중 인접하는 2개 이상의 1조 이상이, 치환 혹은 무치환의 포화 또는 불포화의 고리를 형성하여도 좋다」에 관해서는 상기 식(3-13)에서 설명한 것과 같다.

[0242] 상기 포화 또는 불포화의 고리에 대한 「치환 혹은 무치환의」의 「치환」일 때의 치환기는, 후술하는 「치환 혹은 무치환의」라고 하는 경우에 있어서의 치환기와 마찬가지로다.

[0243] 「포화 또는 불포화의 고리」는 상기 식(3-11)에서 설명한 것과 같다.

[0244] 식(3-21)으로 표시되는 화합물에서는, $R_1 \sim R_4$, $R_{10} \sim R_{13}$ 및 R_{17} 중 인접하는 2개 이상의 1조 이상이, 치환 혹은 무치환의 포화 또는 불포화의 고리를 형성하여도 좋고, 치환 혹은 무치환의 포화 또는 불포화의 고리를 형성하지 않더라도 좋다. 식(3-21)으로 표시되는 화합물에서는, $R_1 \sim R_4$, $R_{10} \sim R_{13}$ 및 R_{17} 중 인접하는 2개 이상의 1조 이상 이, 치환 혹은 무치환의 포화 또는 불포화의 고리를 형성하지 않으면 바람직하다.

[0245] 일 실시형태에서는, 식(3-21)으로 표시되는 화합물은 하기 식(3-22)으로 표시되는 화합물이다.



(3-22)

[0246] (상기 식(3-22) 중, R_{17} , R_A , R_B , R_C 및 R_D 는 상기 식(3-21)에서 정의한 것과 같다.)

[0248] 일 실시형태에서는, 식(3-21) 및 식(3-22)으로 표시되는 화합물에 있어서, R_A , R_B , R_C 및 R_D 는 각각 독립적으로 치환 혹은 무치환의 페닐기이다.

[0249] 일 실시형태에서는, 식(3-21) 및 식(3-22)으로 표시되는 화합물에 있어서, 2개의 R_{17} 이 각각 수소 원자이다.

[0250] 일 실시형태에서는, 식(3-21) 및 식(3-22)으로 표시되는 화합물에 있어서, 「치환 혹은 무치환의」라고 하는 경우에 있어서의 치환기가, 탄소수 1~20의 알킬기, 고리 형성 탄소수 6~20의 아릴기, 및 고리 형성 원자수 5~20의 1가의 복소환기로 이루어지는 군에서 선택된다.

[0251] 일 실시형태에서는, 식(3-21) 및 식(3-22)으로 표시되는 화합물에 있어서, 「치환 혹은 무치환의」라고 하는 경우에 있어서의 치환기가 탄소수 1~5의 알킬기이다.

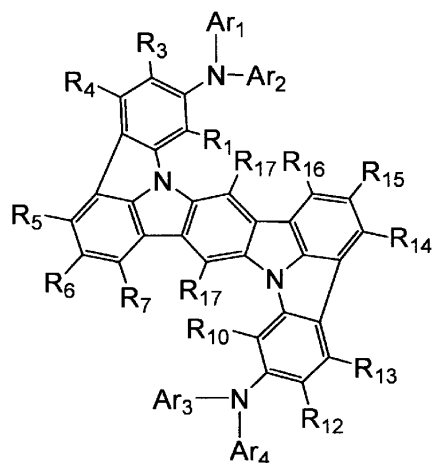
[0252] 일 실시형태에서는, 식(3-21) 및 식(3-22)으로 표시되는 화합물에 있어서, R_A , R_B , R_C 및 R_D 가 각각 독립적으로 치환 혹은 무치환의 페닐기이며, 2개의 R_{17} 이 각각 수소 원자이다.

[0253] 일 실시형태에서는, 식(3-21) 및 식(3-22)으로 표시되는 화합물에 있어서, R_A , R_B , R_C 및 R_D 가 각각 독립적으로 치환 혹은 무치환의 페닐기이며, 2개의 R_{17} 이 각각 수소 원자이고, 「치환 혹은 무치환의」라고 하는 경우에 있어서의 치환기가, 탄소수 1~20의 알킬기, 고리 형성 탄소수 6~20의 아릴기, 및 고리 형성 원자수 5~20의 1가의 복소환기로 이루어지는 군에서 선택된다.

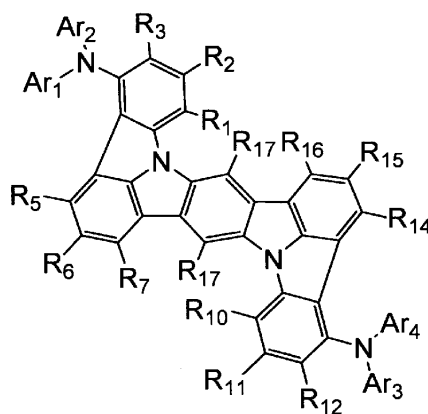
[0254] 일 실시형태에서는, 식(3-21) 및 식(3-22)으로 표시되는 화합물에 있어서, R_A , R_B , R_C 및 R_D 가 각각 독립적으로 치환 혹은 무치환의 페닐기이며, 상기 2개의 R_{17} 이 각각 수소 원자이고, 「치환 혹은 무치환의」라고 하는 경우에 있어서의 치환기가 탄소수 1~5의 알킬기이다.

[0255] 본 발명의 다른 일 양태에 따른 유기 일렉트로루미네센스 소자는, 음극과, 양극과, 상기 음극과 상기 양극의 사이에 배치된 적어도 1층의 유기층을 갖는다.

[0256] 상기 적어도 1층의 유기층 중의 적어도 1층이, 하기 식(3-31) 또는 식(3-32)으로 표시되는 화합물을 포함한다.



(3-31)



(3-32)

[0257]

[0258] (식(3-31) 및 식(3-32) 중,

[0259] $R_1 \sim R_7$ 및 $R_{10} \sim R_{16}$ 중 인접하는 2개 이상의 1조 이상이, 치환 혹은 무치환의 포화 또는 불포화의 고리를 형성하여도 좋다.

[0260] R_{17} , 그리고 상기 치환 혹은 무치환의 포화 또는 불포화의 고리를 형성하지 않는 $R_1 \sim R_7$ 및 $R_{10} \sim R_{16}$ 은, 각각 독립적으로, 수소 원자, 치환 혹은 무치환의 고리 형성 탄소수 6~20의 아릴기, 또는 치환 혹은 무치환의 고리 형성 원자수 5~20의 1가의 복소환기이다.

[0261] 2개의 R_{17} 은 동일하여도 좋고, 다르더라도 좋다.

[0262] $Ar_1 \sim Ar_4$ 는 각각 독립적으로 치환 혹은 무치환의 고리 형성 탄소수 6~20의 아릴기이다.)

[0263] 「 $R_1 \sim R_7$ 및 $R_{10} \sim R_{16}$ 중 인접하는 2개 이상의 1조 이상이, 치환 혹은 무치환의 포화 또는 불포화의 고리를 형성하여도 좋다」에 관해서 설명한다.

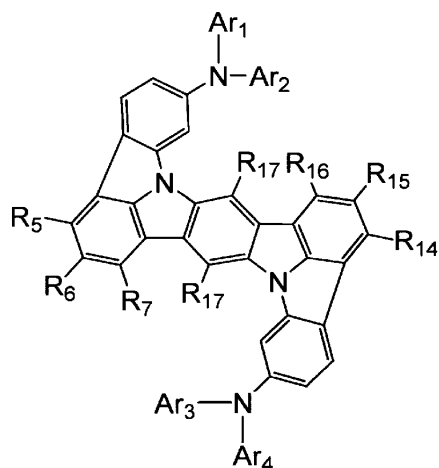
[0264] 「 $R_1 \sim R_7$ 및 $R_{10} \sim R_{16}$ 중 인접하는 2개 이상의 1조」는, 식(3-31)에서는 예컨대, R_3 과 R_4 , R_5 와 R_6 , R_6 과 R_7 , R_5 와 R_6 과 R_7 등의 조합이며, 식(3-32)에서는 예컨대, R_1 과 R_2 , R_2 와 R_3 , R_5 와 R_6 , R_6 과 R_7 , R_1 과 R_2 와 R_3 등의 조합이다.

[0265] 상기 포화 또는 불포화의 고리에 대한 「치환 혹은 무치환의」의 「치환」일 때의 치환기는, 후술하는 「치환 혹은 무치환의」라고 하는 경우에 있어서의 치환기와 마찬가지로다.

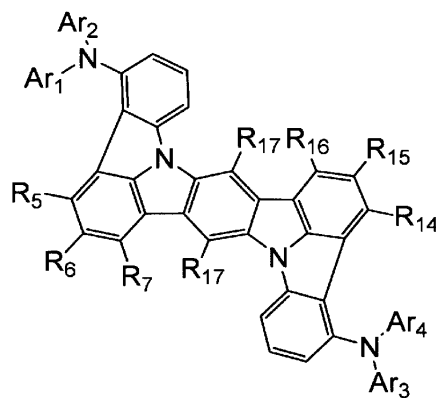
[0266] 「포화 또는 불포화의 고리」는 상기 식(3-11)에서 설명한 것과 같다.

[0267] 식(3-31) 또는 식(3-32)으로 표시되는 화합물은, $R_1 \sim R_7$ 및 $R_{10} \sim R_{16}$ 중 인접하는 2개 이상의 1조 이상이, 치환 혹은 무치환의 포화 또는 불포화의 고리를 형성하지 않더라도 좋다.

[0268] 일 실시형태에서는, 식(3-31) 또는 식(3-32)으로 표시되는 화합물은 하기 식(3-33) 또는 식(3-34)으로 표시된다.



(3-33)



(3-34)

[0269]

[0270] (식(3-33) 및 식(3-34) 중, R₅~R₇, R₁₄~R₁₇ 및 Ar₁~Ar₄는 상기 식(3-31) 및 식(3-32)에서 정의한 것과 같다.)

[0271] 일 실시형태에서는, 식(3-31)~식(3-34)으로 표시되는 화합물에 있어서, Ar₁~Ar₄가 각각 독립적으로 치환 혹은 무치환의 페닐기이다.

[0272] 일 실시형태에서는, 식(3-31)~식(3-34)으로 표시되는 화합물에 있어서, 2개의 R₁₇이 각각 독립적으로 치환 혹은 무치환의 고리 형성 탄소수 6~20의 아릴기이다.

[0273] 일 실시형태에서는, 식(3-31)~식(3-34)으로 표시되는 화합물에 있어서, 2개의 R₁₇이 각각 독립적으로 치환 혹은 무치환의 페닐기이다.

[0274] 일 실시형태에서는, 식(3-31)~식(3-34)으로 표시되는 화합물에 있어서, 2개의 R₁₇이 수소 원자이다.

[0275] 일 실시형태에서는, 식(3-31)~식(3-34)으로 표시되는 화합물에 있어서, R₅~R₇ 및 R₁₄~R₁₆이 수소 원자이다.

[0276] 일 실시형태에서는, 식(3-31)~식(3-34)으로 표시되는 화합물에 있어서, 「치환 혹은 무치환의」라고 하는 경우에 있어서의 치환기가, 탄소수 1~20의 알킬기, 고리 형성 탄소수 6~20의 아릴기, 및 고리 형성 원자수 5~20의 1가의 복소환기로 이루어지는 군에서 선택된다.

[0277] 일 실시형태에서는, 식(3-31)~식(3-34)으로 표시되는 화합물에 있어서, 「치환 혹은 무치환의」라고 하는 경우에 있어서의 치환기가 탄소수 1~5의 알킬기이다.

[0278] 일 실시형태에서는, 식(3-31)~식(3-34)으로 표시되는 화합물에 있어서, Ar₁~Ar₄가 각각 독립적으로 치환 혹은 무치환의 페닐기이며, 2개의 R₁₇이 수소 원자이다.

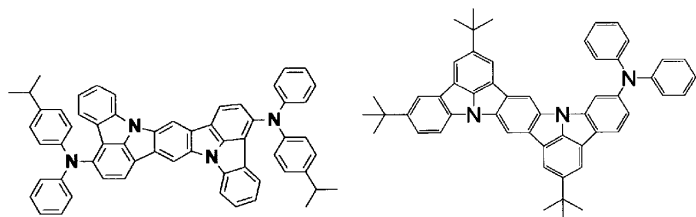
[0279] 일 실시형태에서는, 식(3-31)~식(3-34)으로 표시되는 화합물에 있어서, Ar₁~Ar₄가 각각 독립적으로 치환 혹은 무치환의 페닐기이며, 2개의 R₁₇이 각각 독립적으로 치환 혹은 무치환의 고리 형성 탄소수 6~20의 아릴기이고, R₅~R₇ 및 R₁₄~R₁₆이 수소 원자이며, 「치환 혹은 무치환의」라고 하는 경우에 있어서의 치환기가, 탄소수 1~20의 알킬기, 고리 형성 탄소수 6~20의 아릴기, 및 고리 형성 원자수 5~20의 1가의 복소환기로 이루어지는 군에서 선택된다.

[0280] 일 실시형태에서는, 식(3-31)~식(3-34)으로 표시되는 화합물에 있어서, Ar₁~Ar₄가 각각 독립적으로 치환 혹은 무치환의 페닐기이며, 2개의 R₁₇이 각각 독립적으로 치환 혹은 무치환의 페닐기이고, R₅~R₇ 및 R₁₄~R₁₆이 수소 원자이며, 「치환 혹은 무치환의」라고 하는 경우에 있어서의 치환기가 탄소수 1~5의 알킬기이다.

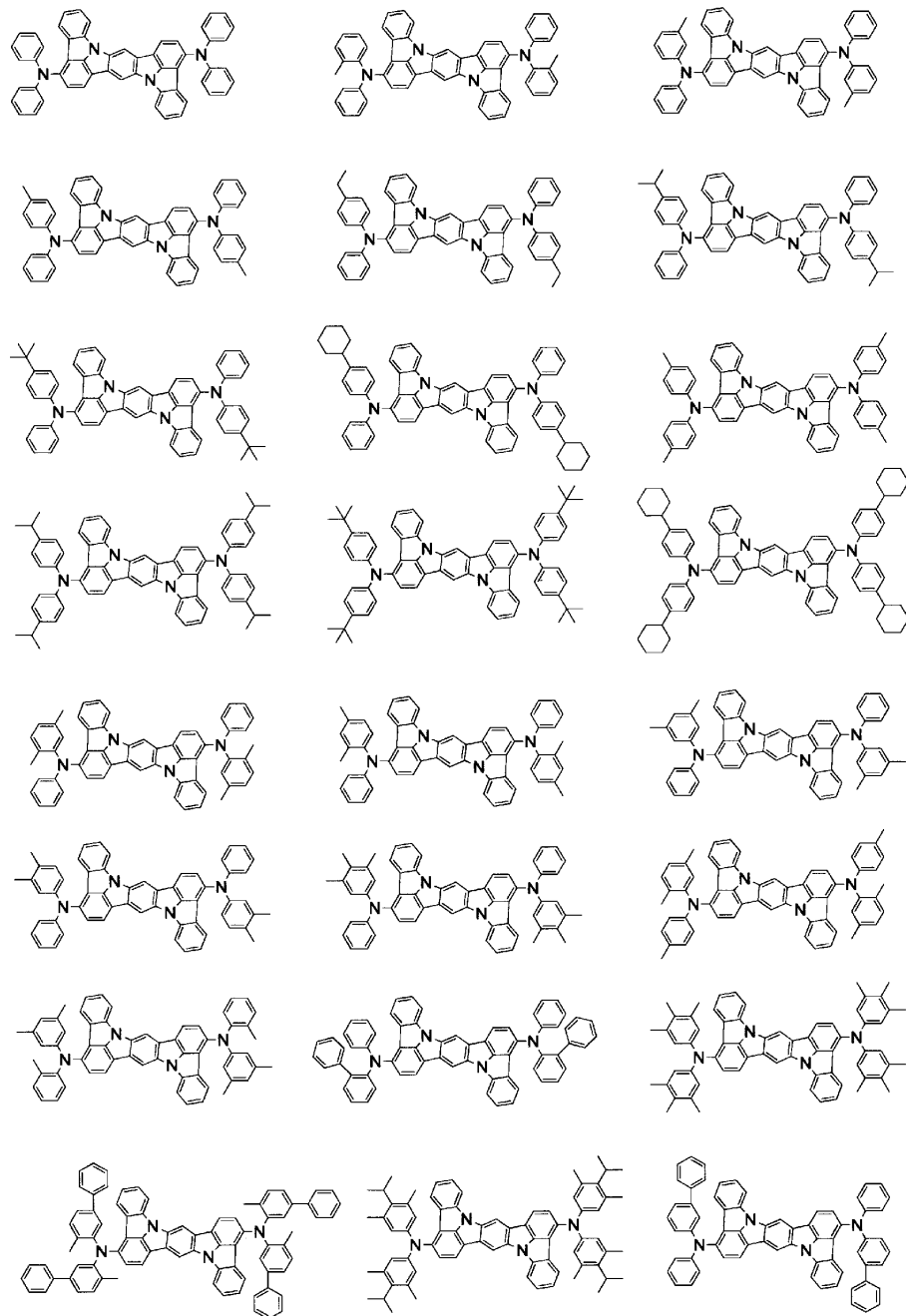
[0281] 식(3-31)~식(3-34)으로 표시되는 화합물의 각 치환기 및 「치환 혹은 무치환의」라고 하는 경우에 있어서의 치환기의 구체에는 각각 전술한 것과 마찬가지로다.

[0282] 식(3-11)~식(3-14), 식(3-21), 식(3-22), 식(3-31)~식(3-34)으로 표시되는 화합물의 구체예로서는 예컨대,

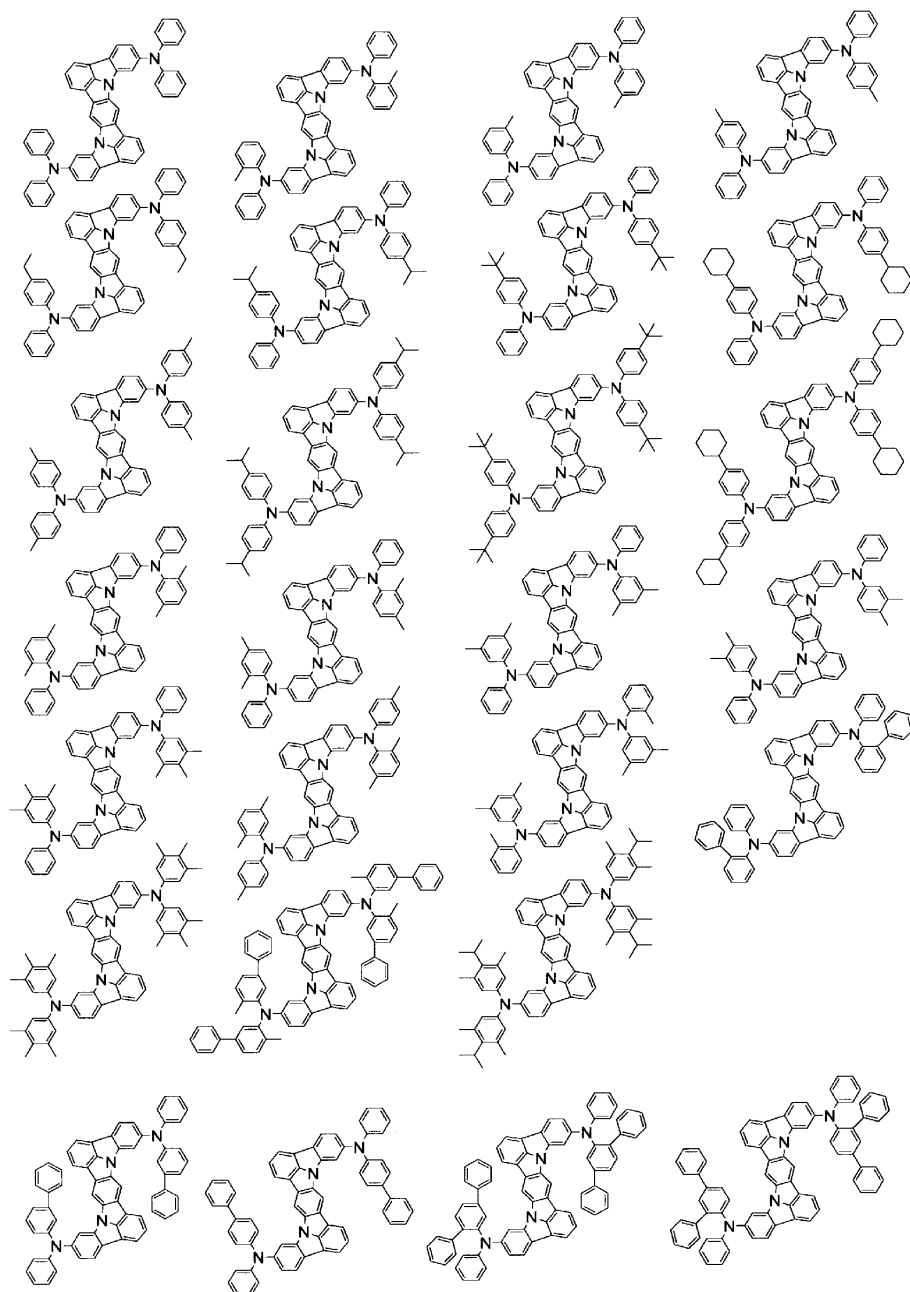
이하에 나타내는 화합물을 들 수 있다.



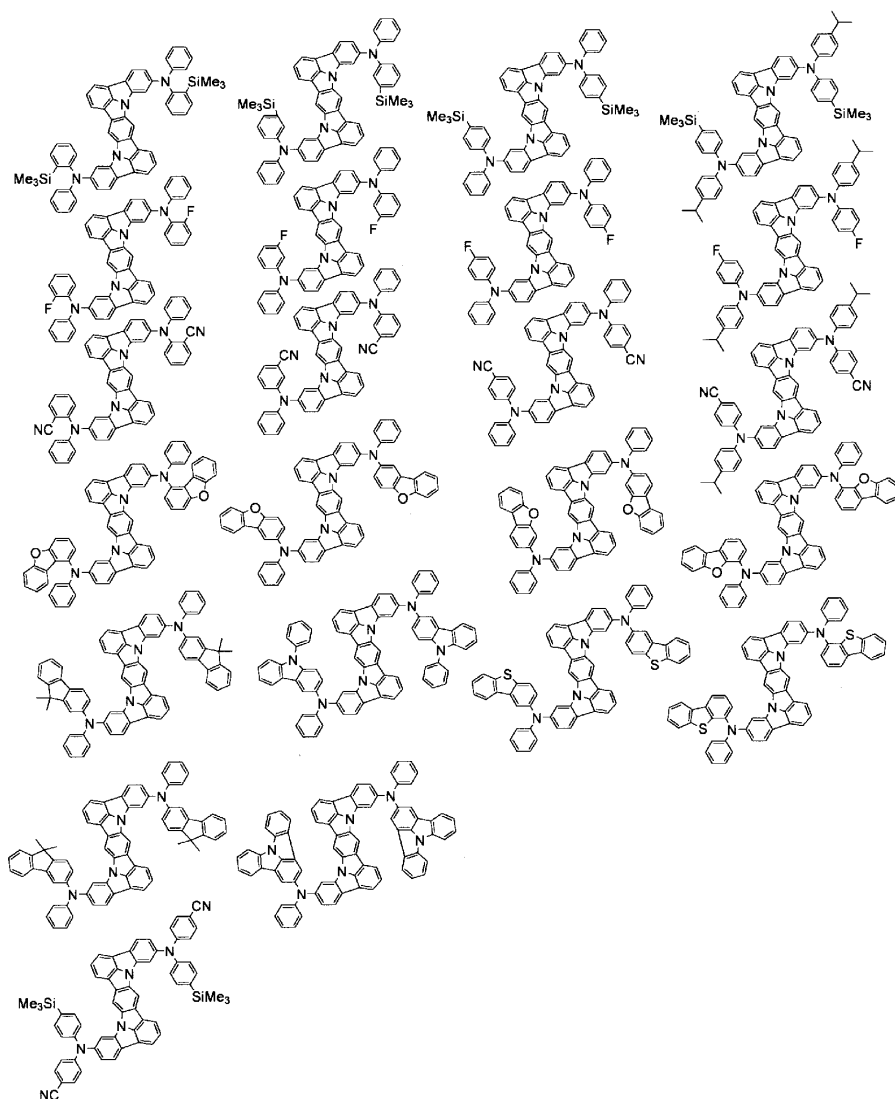
[0283]



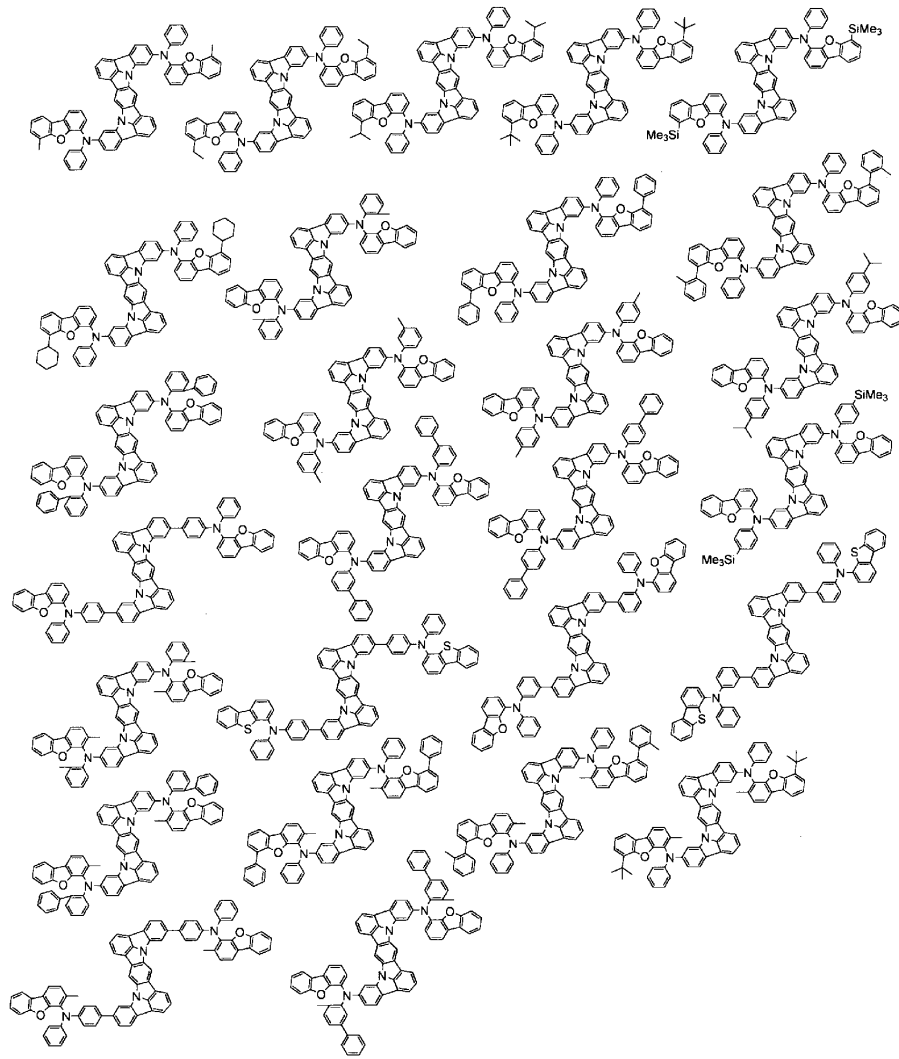
[0284]



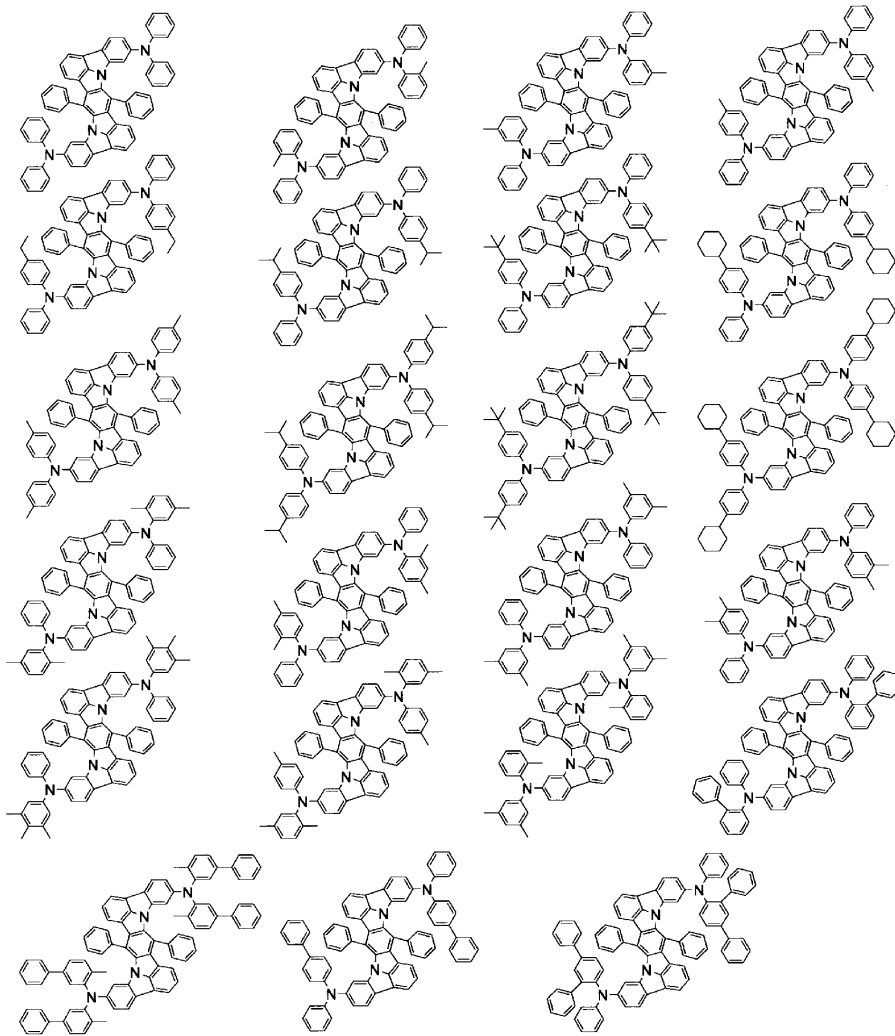
[0285]



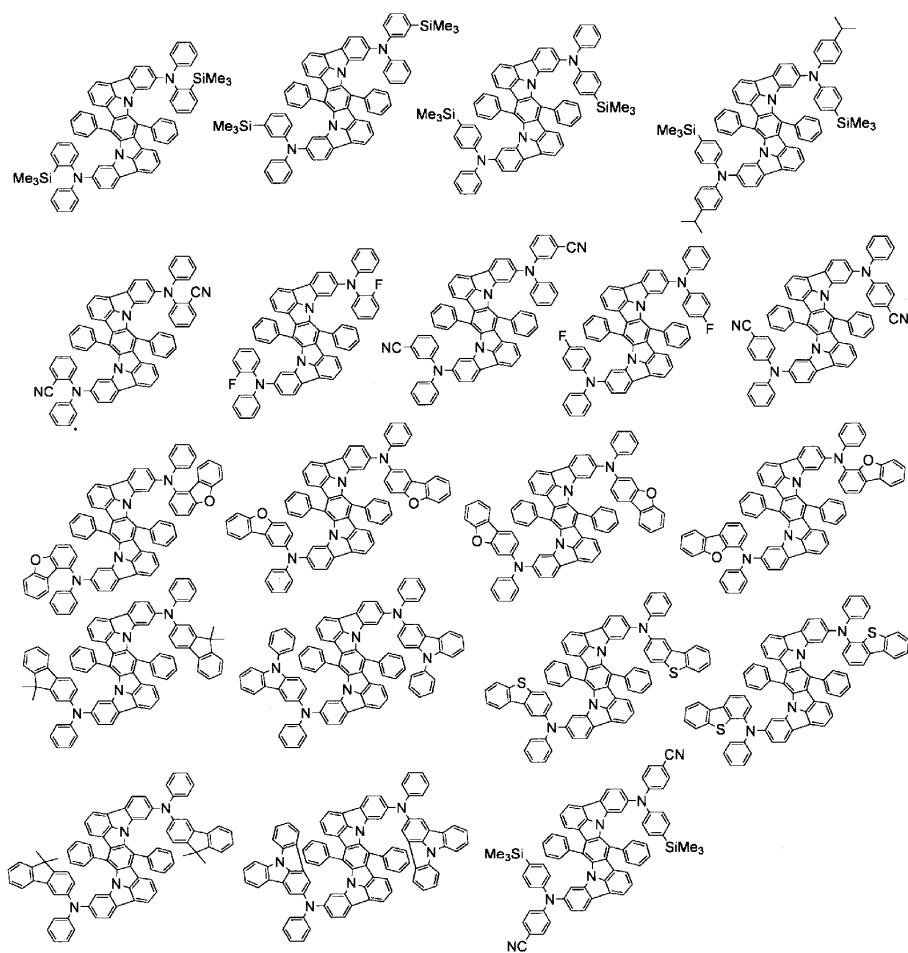
[0286]



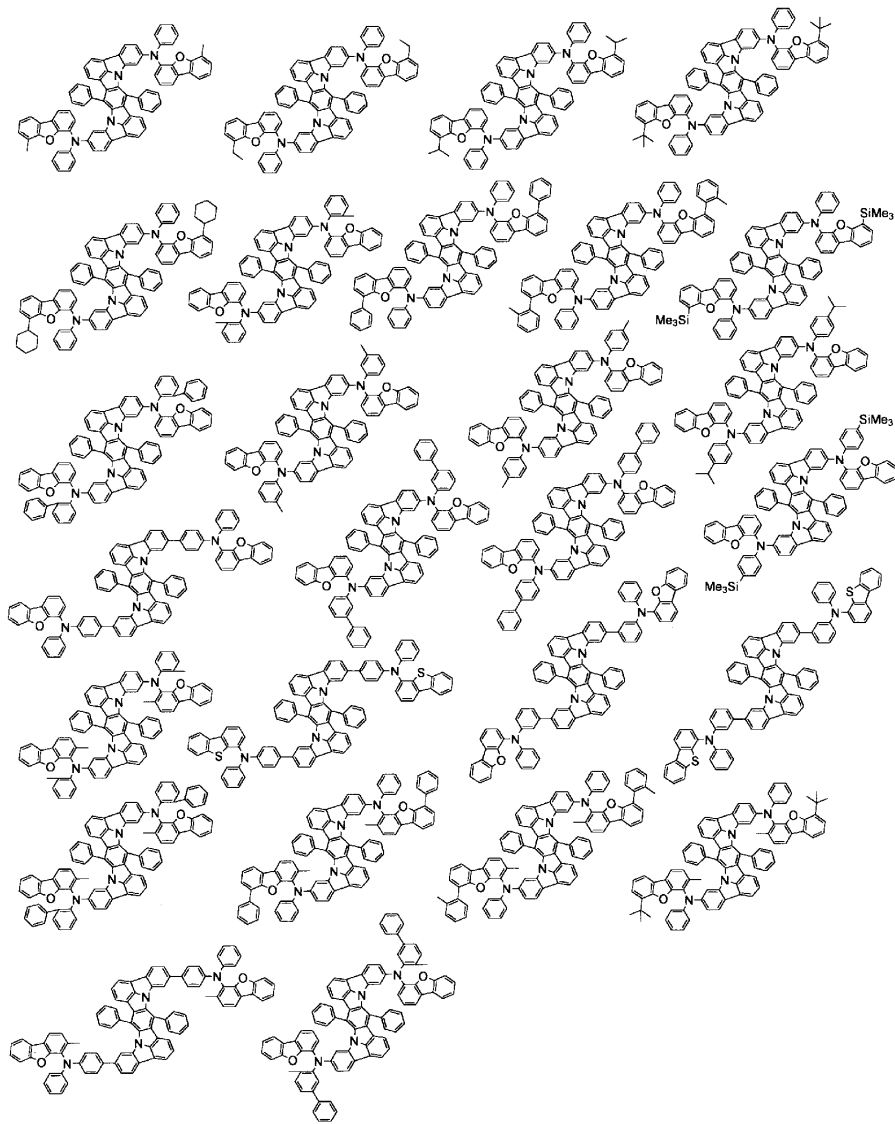
[0287]



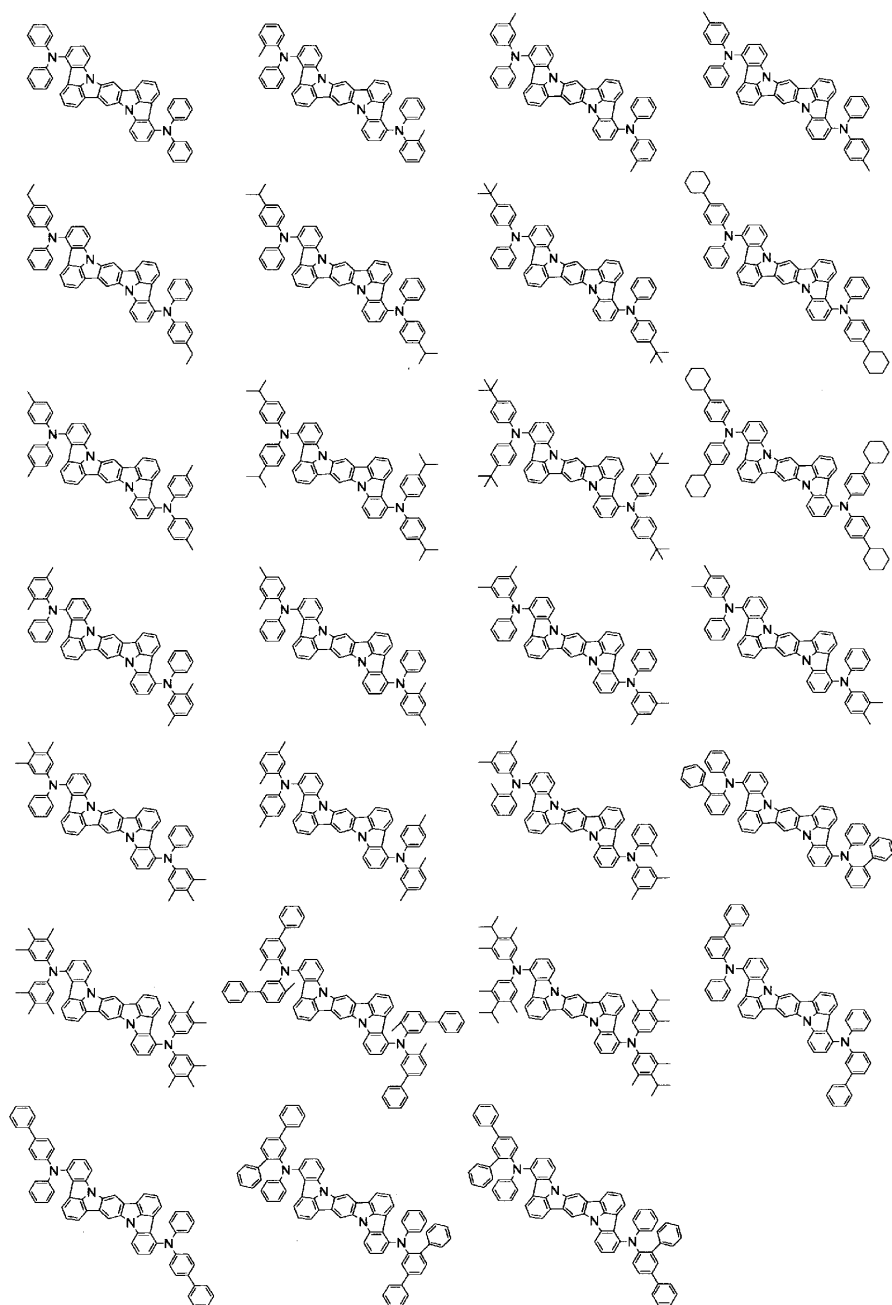
[0288]



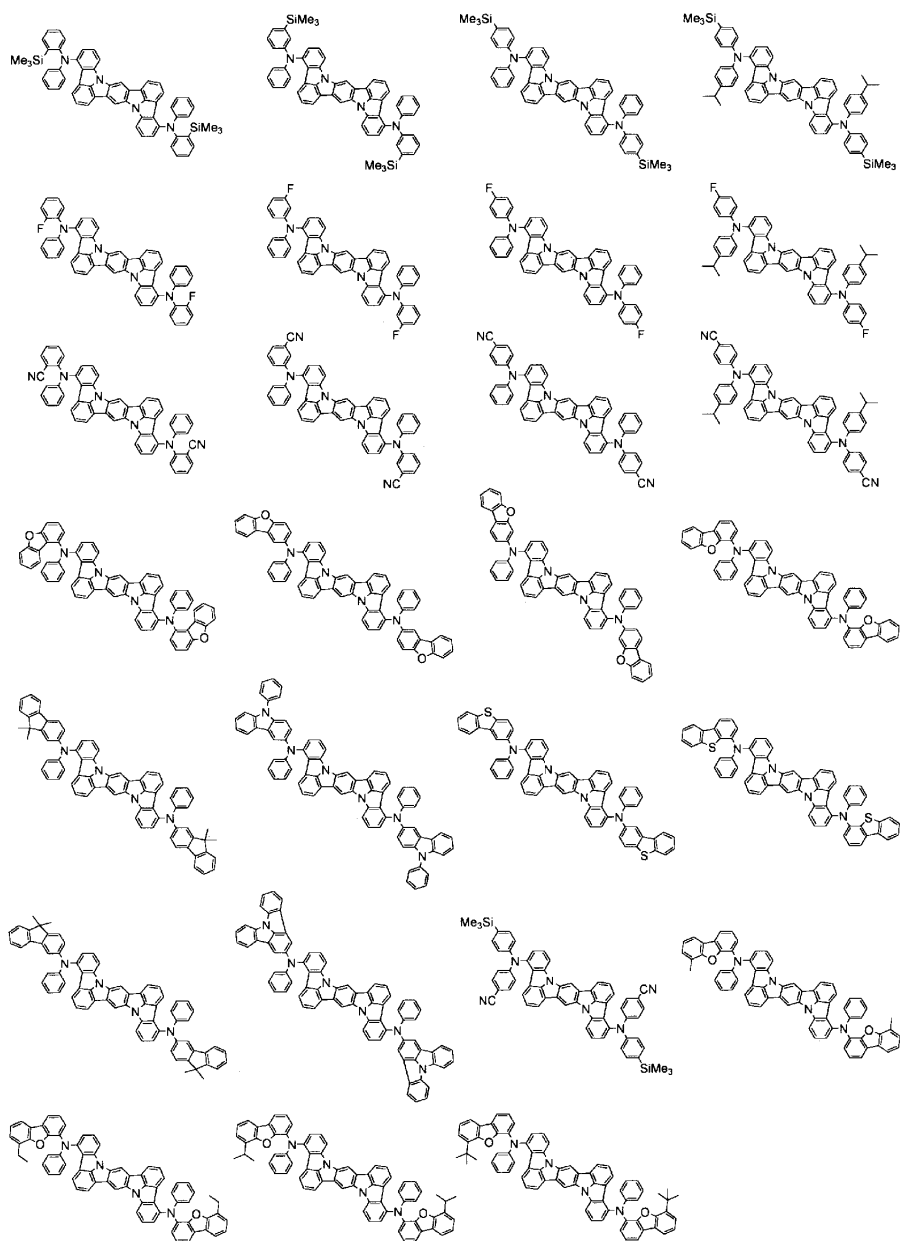
[0289]



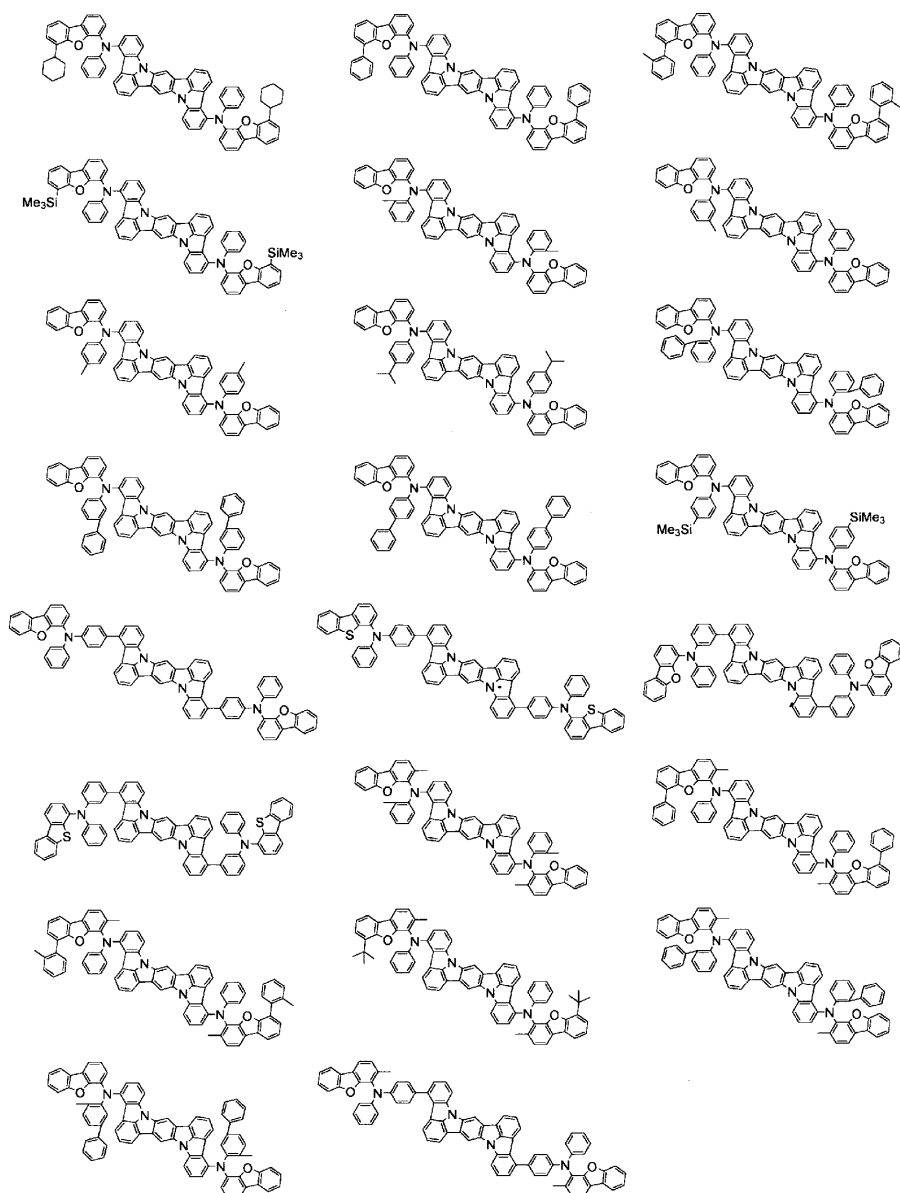
[0290]



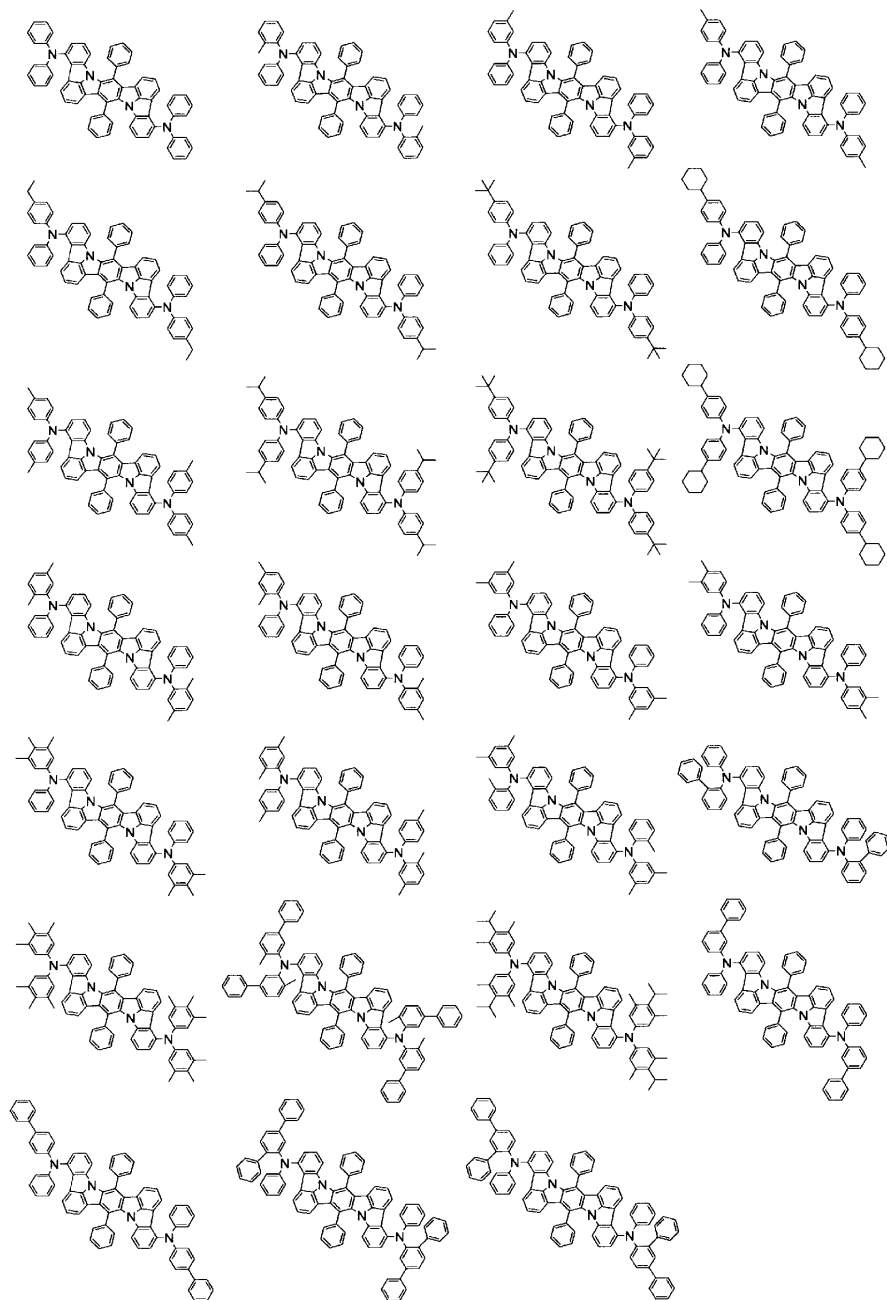
[0291]



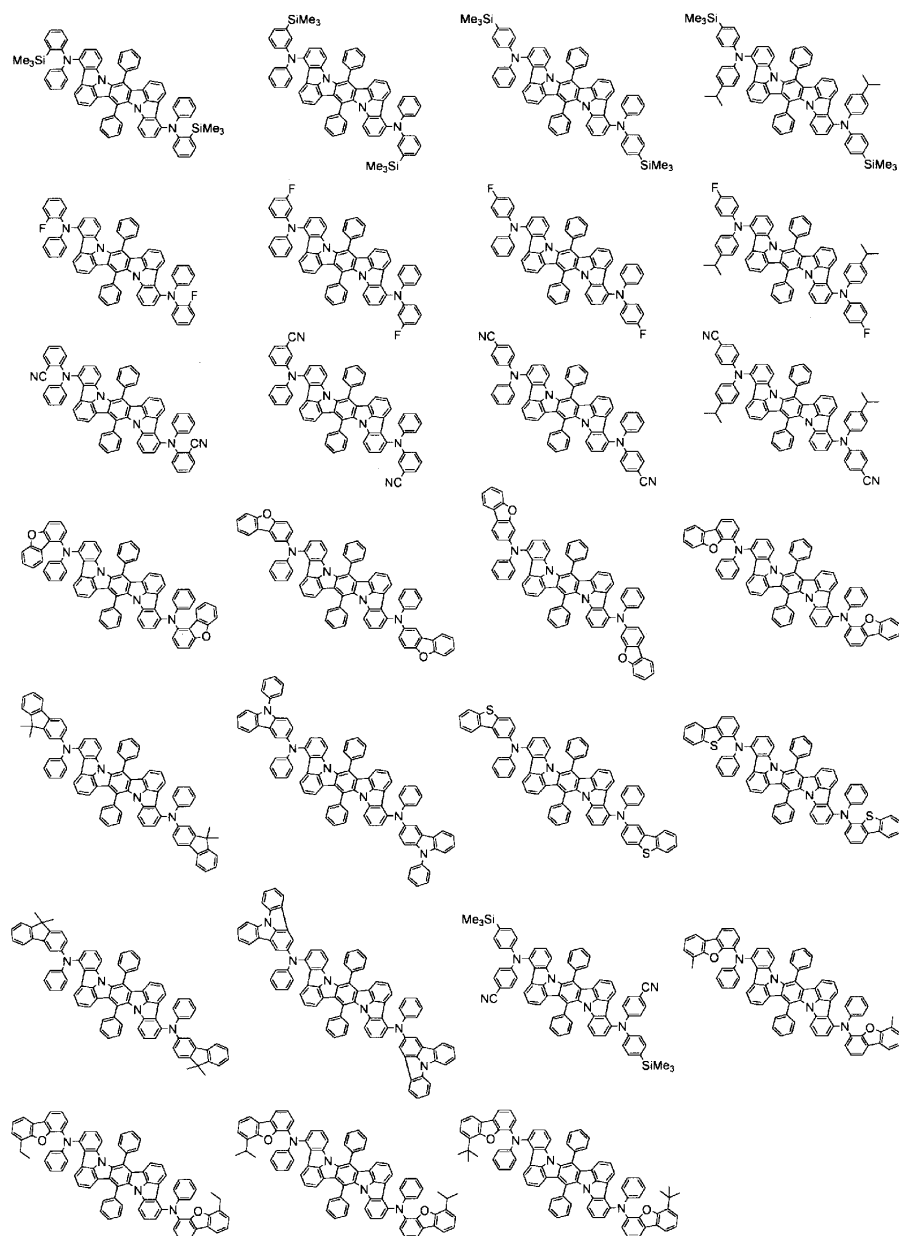
[0292]



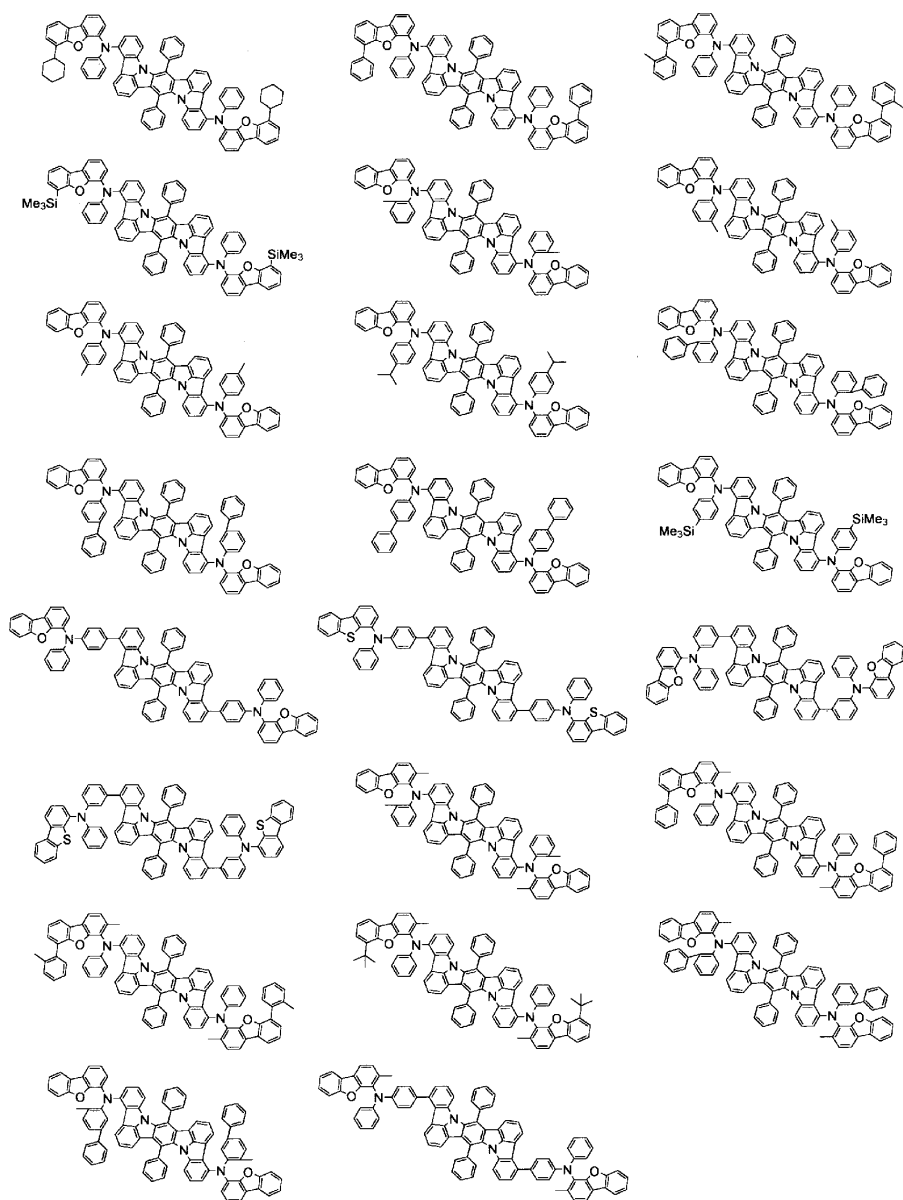
[0293]



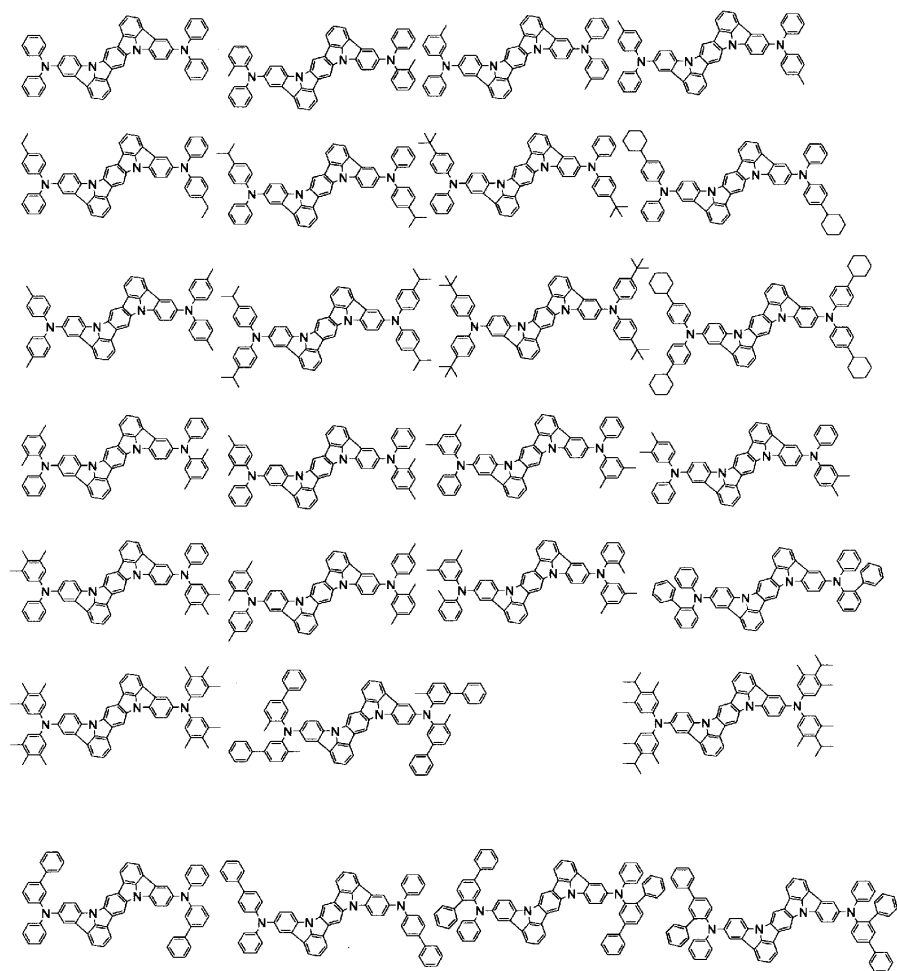
[0294]



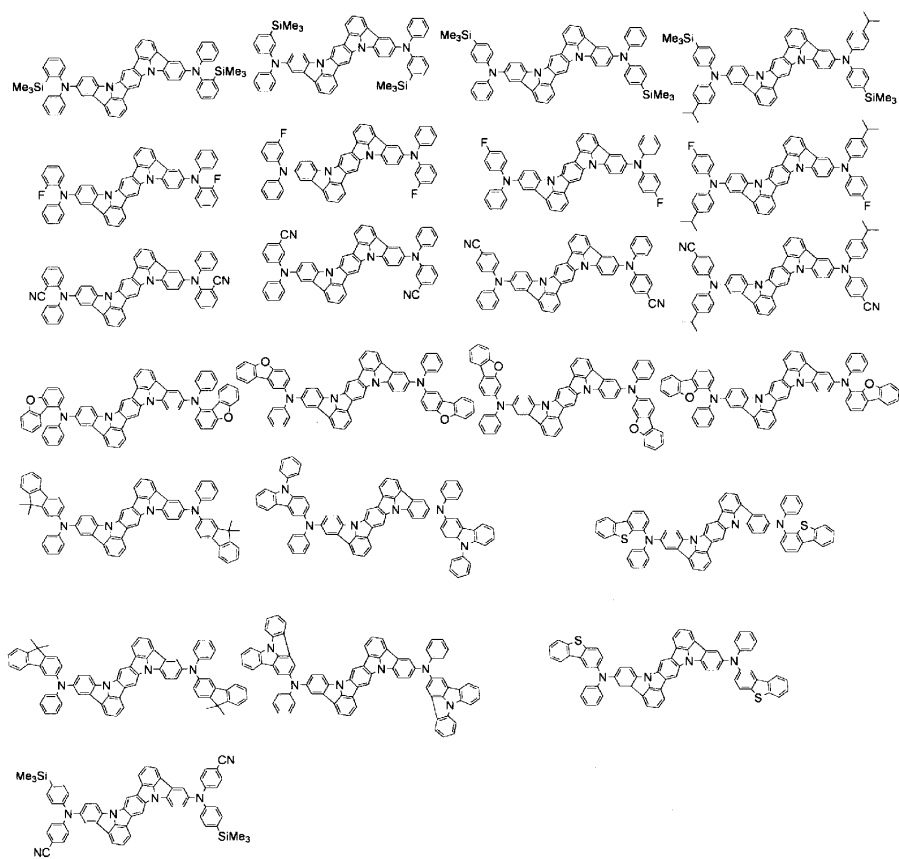
[0295]



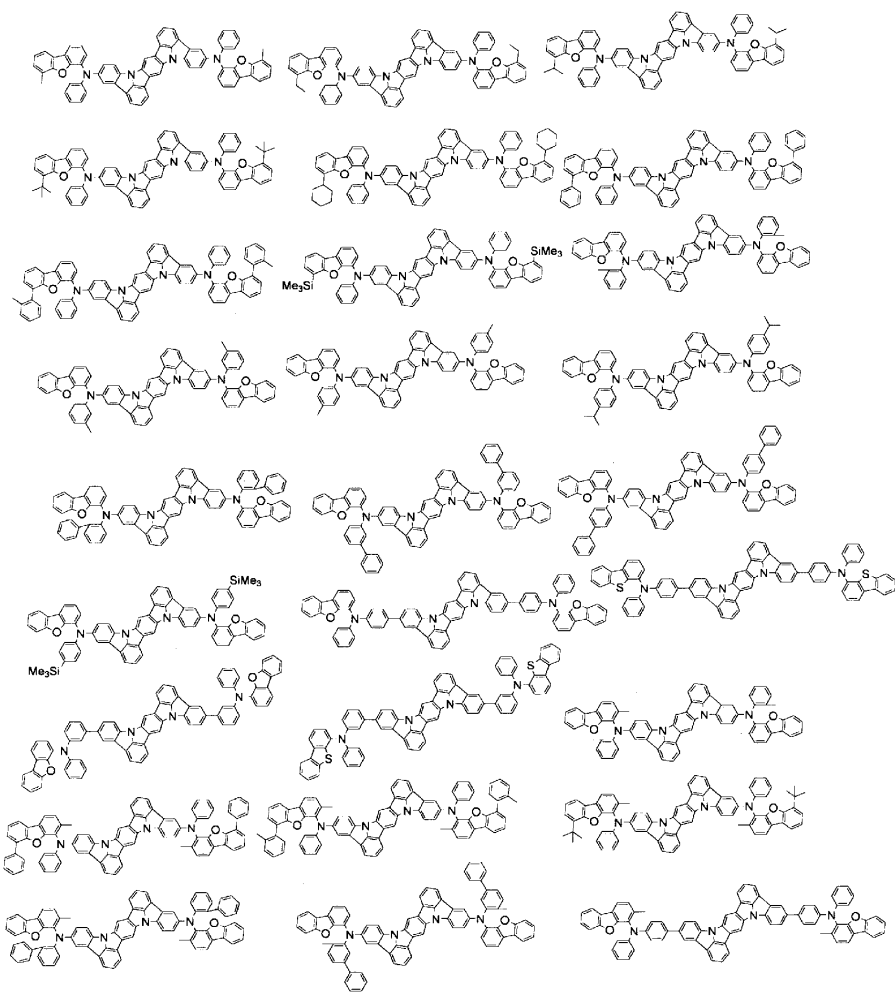
[0296]



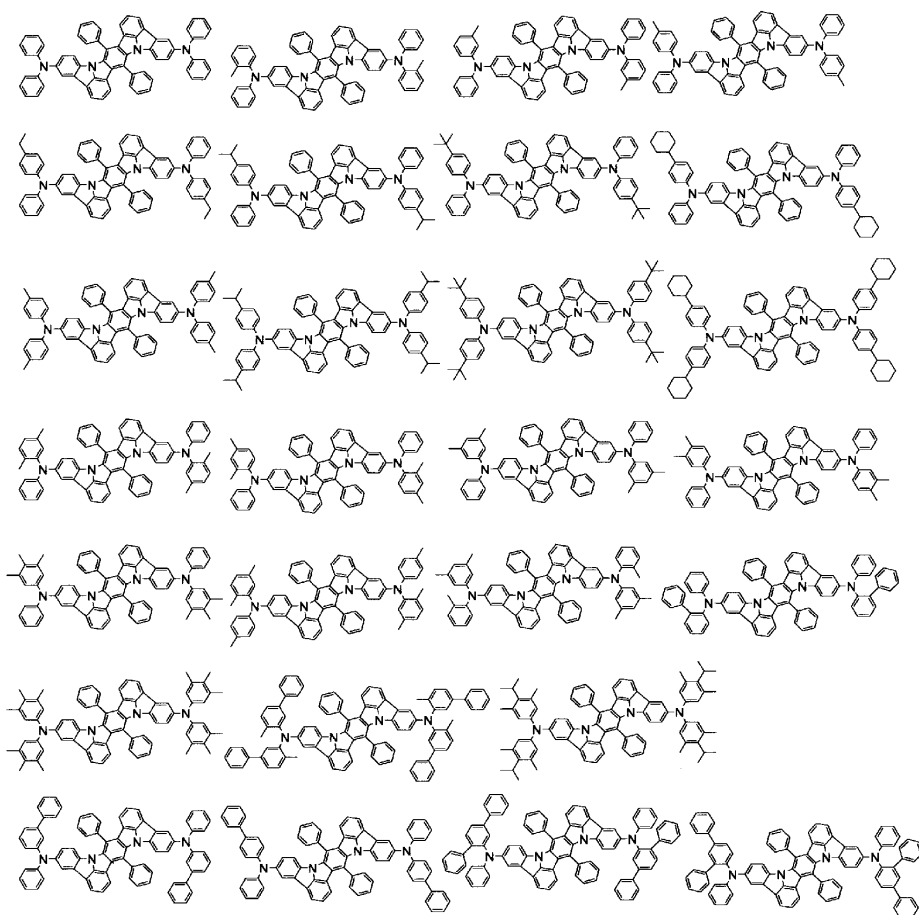
[0297]



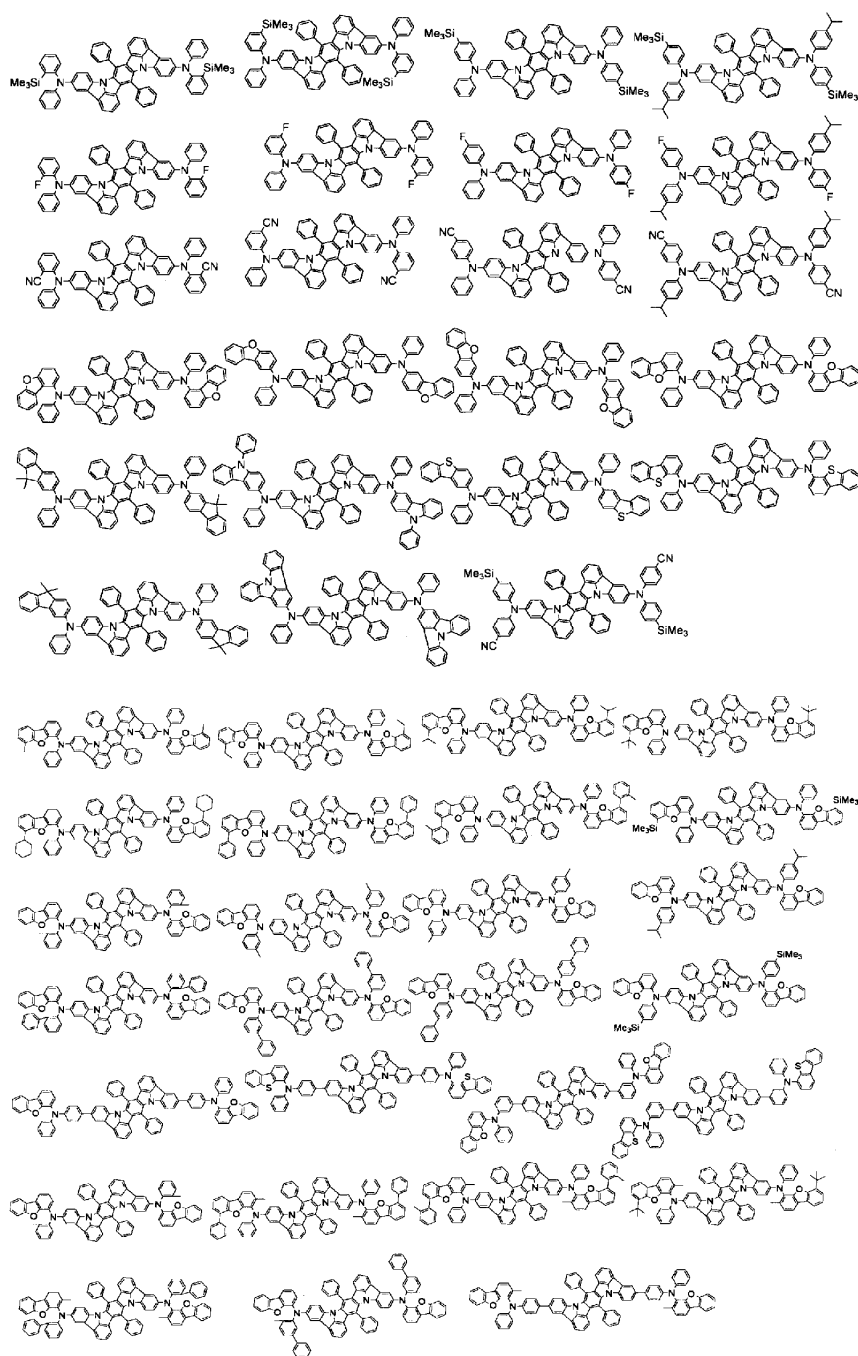
[0298]



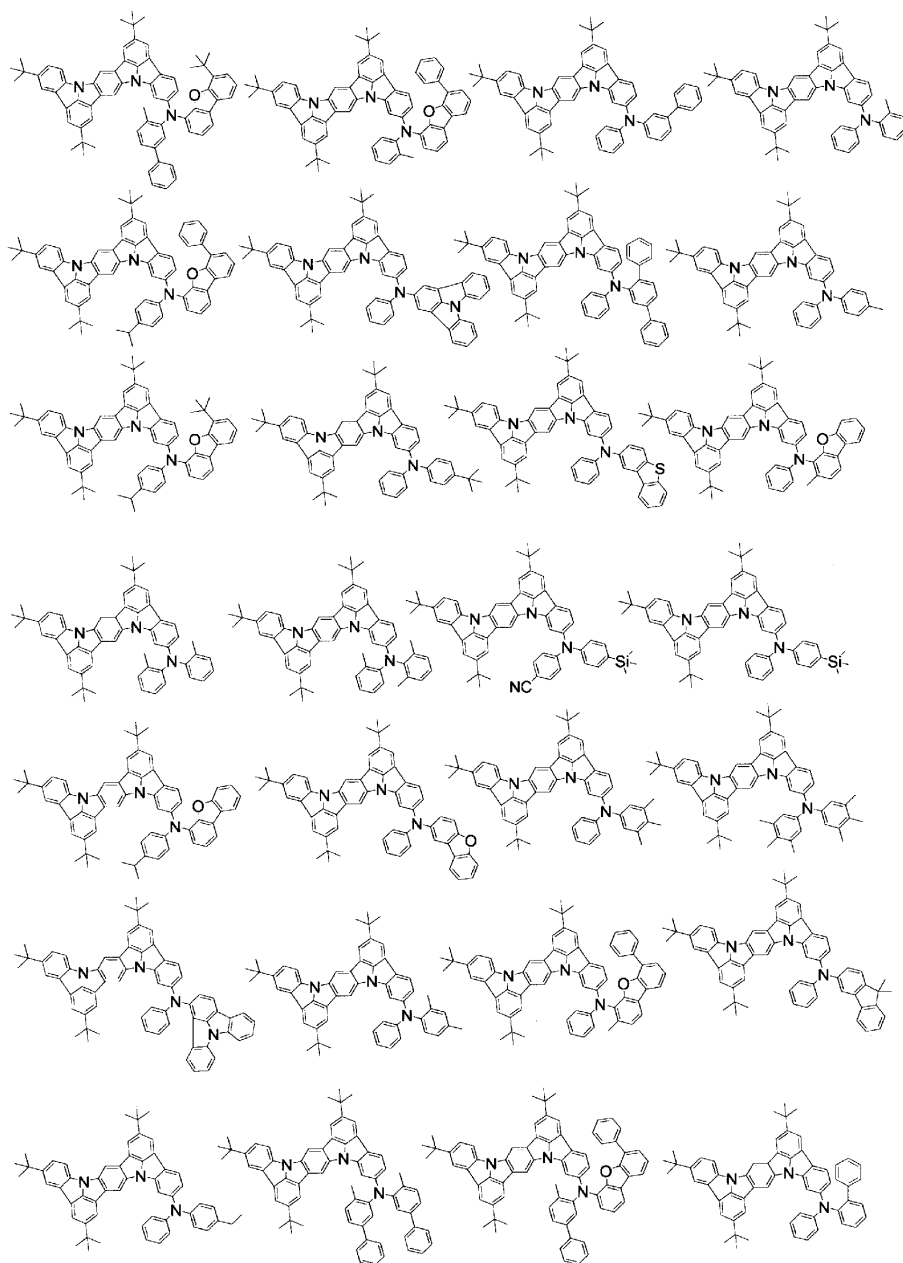
[0299]



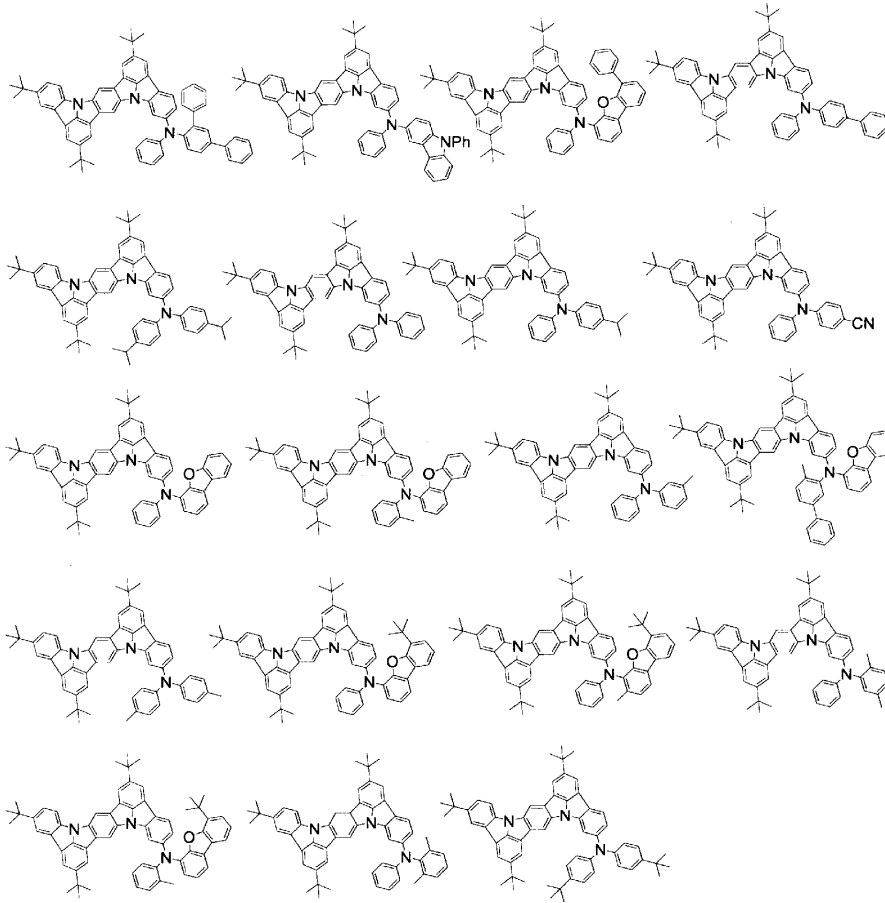
[0300]



[0301]



[0302]



[0303]

[0304]

본 명세서에 있어서 「음극과 양극의 사이에 배치된 적어도 1층의 유기층」이란, 음극과 양극의 사이에 1층의 유기층이 존재하는 경우에는 그 층을 가리키고, 복수의 유기층이 존재하는 경우에는 그 중 적어도 1층을 가리킨다.

[0305]

또한, 「적어도 1층의 유기층이 발광층을 포함한다」란, 음극과 양극의 사이에 1층의 유기층이 존재하는 경우에는 그 층이 발광층이며, 복수의 유기층이 존재하는 경우에는 그 중 적어도 하나가 발광층인 것을 의미한다.

[0306]

일 실시형태에서는, 유기 EL 소자는 상기 양극과 상기 발광층의 사이에 정공 수송층을 갖는다.

[0307]

일 실시형태에서는, 유기 EL 소자는 상기 음극과 상기 발광층의 사이에 전자 수송층을 갖는다.

[0308]

본 명세서에 있어서 「발광층과 양극의 사이에 있는 적어도 1층」은, 발광층과 양극의 사이에 1층의 유기층이 존재하는 경우에는 그 층을 가리키고, 복수의 유기층이 존재하는 경우에는 그 중 적어도 1층을 가리킨다. 예컨대, 발광층과 양극의 사이에 2개 이상의 유기층이 존재하는 경우, 발광층에 가까운 층의 유기층을 「정공 수송층」이라고 부르고, 양극에 가까운 층의 유기층을 「정공 주입층」이라고 부른다. 「정공 수송층」 및 「정공 주입층」은 각각 1층이라도 좋고, 각각 2층 이상이라도 좋으며, 한쪽이 1층이고, 다른 쪽이 2층 이상이라도 좋다.

[0309]

마찬가지로 「발광층과 음극의 사이에 있는 적어도 1층」은, 발광층과 음극의 사이에 1층의 유기층이 존재하는 경우에는 그 층을 가리키고, 복수의 유기층이 존재하는 경우에는 그 중 적어도 1층을 가리킨다. 예컨대, 발광층과 음극의 사이에 2개 이상의 유기층이 존재하는 경우, 발광층에 가까운 층의 유기층을 「전자 수송층」이라고 부르고, 음극에 가까운 층의 유기층을 「전자 주입층」이라고 부른다. 「전자 수송층」 및 「전자 주입층」은 각각 1층이라도 좋고, 각각 2층 이상이라도 좋으며, 한쪽이 1층이고, 다른 쪽이 2층 이상이라도 좋다.

[0310]

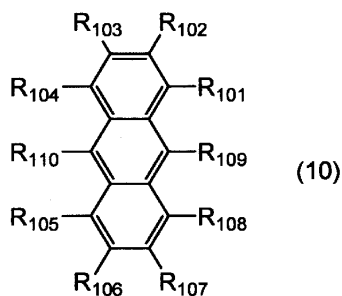
일 실시형태에서는, 상기 「적어도 1층의 유기층」이 발광층을 포함하고, 당해 발광층이, 식(1-1) 및 식(1-3)으로 표시되는 화합물 또는 식(1-2) 및 식(1-3)으로 표시되는 화합물을 포함한다. 식(1-1) 및 식(1-3)으로 표시되는 화합물 또는 식(1-2) 및 식(1-3)으로 표시되는 화합물은 형광 발광 재료로서 기능할 수 있어, 유기 EL 소자의 발광 효율을 높일 수 있다.

[0311]

일 실시형태에서는, 상기 「적어도 1층의 유기층」이 발광층을 포함하고, 당해 발광층이 식(3-11)으로 표시되는

화합물을 포함한다. 식(3-11)으로 표시되는 화합물은 형광 발광 재료로서 기능할 수 있어, 유기 EL 소자의 발광 효율을 높일 수 있다.

- [0312] 일 실시형태에서는, 상기 「적어도 1층의 유기층」이 발광층을 포함하고, 당해 발광층이 식(3-21)으로 표시되는 화합물을 포함한다. 식(3-21)으로 표시되는 화합물은 형광 발광 재료로서 기능할 수 있어, 유기 EL 소자의 발광 효율을 높일 수 있다.
- [0313] 일 실시형태에서는, 상기 「적어도 1층의 유기층」이 발광층을 포함하고, 당해 발광층이 식(3-31) 또는 식(3-32)으로 표시되는 화합물을 포함한다. 식(3-31) 또는 식(3-32)으로 표시되는 화합물은 형광 발광 재료로서 기능할 수 있어, 유기 EL 소자의 발광 효율을 높일 수 있다.
- [0314] 일 실시형태에서는, 상기 「적어도 1층의 유기층」이, 식(1-1) 및 식(1-3)으로 표시되는 화합물 또는 식(1-2) 및 식(1-3)으로 표시되는 화합물을 포함한다. 식(1-1) 및 식(1-3)으로 표시되는 화합물 또는 식(1-2) 및 식(1-3)으로 표시되는 화합물은 발광 재료로서 포함되어, 유기 EL 소자의 발광 효율을 높일 수 있다.
- [0315] 일 실시형태에서는, 상기 「적어도 1층의 유기층」이 식(3-11)으로 표시되는 화합물을 포함한다. 식(3-11)으로 표시되는 화합물은 발광 재료로서 포함되어, 유기 EL 소자의 발광 효율을 높일 수 있다.
- [0316] 일 실시형태에서는, 상기 「적어도 1층의 유기층」이 식(3-21)으로 표시되는 화합물을 포함한다. 식(3-21)으로 표시되는 화합물은 발광 재료로서 포함되어, 유기 EL 소자의 발광 효율을 높일 수 있다.
- [0317] 일 실시형태에서는, 상기 「적어도 1층의 유기층」이 식(3-31) 또는 식(3-32)으로 표시되는 화합물을 포함한다. 식(3-31) 또는 식(3-32)으로 표시되는 화합물은 발광 재료로서 포함되어, 유기 EL 소자의 발광 효율을 높일 수 있다.
- [0318] 일 실시형태에서는, 상기 발광층이, 하기 식(10)으로 표시되는 화합물(이하, 화합물(10)이라고 하는 경우가 있음)을 더 포함한다.



- [0319]
- [0320] [식(10) 중,
- [0321] $R_{101} \sim R_{110}$ 중 인접하는 2개 이상의 1조 이상이, 치환 혹은 무치환의 포화 또는 불포화의 고리를 형성하여도 좋다.
- [0322] 상기 치환 혹은 무치환의 포화 또는 불포화의 고리를 형성하지 않는 $R_{101} \sim R_{110}$ 은, 각각 독립적으로, 수소 원자, 치환 혹은 무치환의 탄소수 1~50의 알킬기, 치환 혹은 무치환의 탄소수 1~50의 할로알킬기, 치환 혹은 무치환의 탄소수 2~50의 알케닐기, 치환 혹은 무치환의 탄소수 2~50의 알키닐기, 치환 혹은 무치환의 고리 형성 탄소수 3~50의 시클로알킬기, 치환 혹은 무치환의 탄소수 1~50의 알콕시기, 치환 혹은 무치환의 탄소수 1~50의 알킬티오기, 치환 혹은 무치환의 고리 형성 탄소수 6~50의 아릴옥시기, 치환 혹은 무치환의 고리 형성 탄소수 6~50의 아릴티오기, 치환 혹은 무치환의 탄소수 7~50의 아탈킬기, $-\text{Si}(R_{121})(R_{122})(R_{123})$, $-\text{C}(=\text{O})R_{124}$, $-\text{COOR}_{125}$, $-\text{N}(R_{126})(R_{127})$, 할로젠 원자, 시아노기, 니트로기, 치환 혹은 무치환의 고리 형성 탄소수 6~50의 아릴기, 치환 혹은 무치환의 고리 형성 원자수 5~50의 1가의 복소환기, 또는 하기 식(31)으로 표시되는 기이다.
- [0323] $R_{121} \sim R_{127}$ 은, 각각 독립적으로, 수소 원자, 치환 혹은 무치환의 탄소수 1~50의 알킬기, 치환 혹은 무치환의 고리 형성 탄소수 3~50의 시클로알킬기, 치환 혹은 무치환의 고리 형성 탄소수 6~50의 아릴기, 또는 치환 혹은 무치환의 고리 형성 원자수 5~50의 1가의 복소환기이다. $R_{121} \sim R_{127}$ 이 2 이상 존재하는 경우, 2 이상의 $R_{121} \sim R_{127}$ 의 각각은 동일하여도 좋고, 다르더라도 좋다.

[0324] 단, 상기 치환 혹은 무치환의 포화 또는 불포화의 고리를 형성하지 않는 $R_{101} \sim R_{110}$ 의 적어도 하나는 하기 식(31)으로 표시되는 기이다. 하기 식(31)이 2 이상 존재하는 경우, 2 이상의 하기 식(31)으로 표시되는 기의 각각은 동일하여도 좋고, 다르더라도 좋다.

[0325] $-L_{101}-Ar_{101}(31)$

[0326] (식(31) 중,

[0327] L_{101} 은, 단결합, 치환 혹은 무치환의 고리 형성 탄소수 6~30의 아릴렌기, 또는 치환 혹은 무치환의 고리 형성 원자수 5~30의 2가의 복소환기이다.

[0328] Ar_{101} 은, 치환 혹은 무치환의 고리 형성 탄소수 6~50의 아릴기, 또는 치환 혹은 무치환의 고리 형성 원자수 5~50의 1가의 복소환기이다.)]

[0329] 화합물(10)의 각 치환기, 「치환 혹은 무치환의」라고 하는 경우에 있어서의 치환기 및 할로젠 원자의 구체예는 각각 전술한 것과 마찬가지다.

[0330] 이하, 「 $R_{101} \sim R_{110}$ 중 인접하는 2개 이상의 1조 이상」이, 치환 혹은 무치환의 포화 또는 불포화의 고리를 형성하여도 좋다」에 관해서 설명한다.

[0331] 「 $R_{101} \sim R_{110}$ 중 인접하는 2개 이상의 1조」는, 예컨대, R_{101} 과 R_{102} , R_{102} 와 R_{103} , R_{103} 과 R_{104} , R_{105} 와 R_{106} , R_{106} 과 R_{107} , R_{107} 과 R_{108} , R_{108} 과 R_{109} , R_{101} 과 R_{102} 와 R_{103} 등의 조합이다.

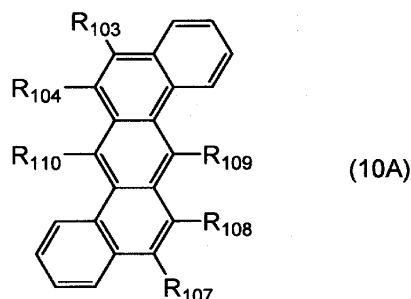
[0332] 상기 포화 또는 불포화의 고리에 대한 「치환 혹은 무치환의」의 「치환」일 때의 치환기는, 식(10)에 있어서의 상기 「치환 혹은 무치환의」라고 하는 경우에 있어서의 치환기와 마찬가지다.

[0333] 「포화 또는 불포화의 고리」란, 예컨대, R_{101} 과 R_{102} 로 고리를 형성하는 경우에는, R_{101} 이 결합하는 탄소 원자와, R_{102} 가 결합하는 탄소 원자와, 1 이상의 임의의 원소로 형성하는 고리를 의미한다. 구체적으로는, R_{101} 과 R_{102} 로 고리를 형성하는 경우에 있어서, R_{101} 이 결합하는 탄소 원자와, R_{102} 가 결합하는 탄소 원자와, 4개의 탄소 원자로 불포화의 고리를 형성하는 경우, R_{101} 과 R_{102} 로 형성하는 고리는 벤젠환이 된다.

[0334] 「임의의 원소」는 바람직하게는 C 원소, N 원소, O 원소, S 원소이다. 임의의 원소에 있어서(예컨대, C 원소 또는 N 원소의 경우), 고리를 형성하지 않는 결합수는 수소 원자 등으로 종단되어도 좋다.

[0335] 「1 이상의 임의의 원소」는, 바람직하게는 2개 이상 15개 이하, 보다 바람직하게는 3개 이상 12개 이하, 더욱 바람직하게는 3개 이상 5개 이하의 임의의 원소이다.

[0336] 예컨대, R_{101} 과 R_{102} 가 고리를 형성하고, 동시에 R_{105} 와 R_{106} 이 고리를 형성하여도 좋다. 그 경우, 식(10)으로 표시되는 화합물은 예컨대, 하기 식(10A)으로 표시되는 화합물이 된다.



[0337]

[0338] 일 실시형태에서는, $R_{101} \sim R_{110}$ 은, 각각 독립적으로, 수소 원자, 치환 혹은 무치환의 탄소수 1~50의 알킬기, 치환 혹은 무치환의 고리 형성 탄소수 6~50의 아릴기, 치환 혹은 무치환의 고리 형성 원자수 5~50의 복소환기, 또는 식(31)으로 표시되는 기이다.

[0339] 일 실시형태에서는, $R_{101} \sim R_{110}$ 은, 각각 독립적으로, 수소 원자, 치환 혹은 무치환의 고리 형성 탄소수 6~50의

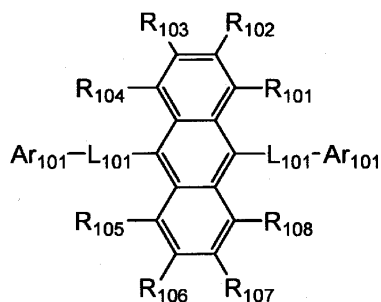
아릴기, 치환 혹은 무치환의 고리 형성 원자수 5~50의 복소환기, 또는 식(31)으로 표시되는 기이다.

[0340] 일 실시형태에서는, $R_{101} \sim R_{110}$ 은, 각각 독립적으로, 수소 원자, 치환 혹은 무치환의 고리 형성 탄소수 6~18의 아릴기, 치환 혹은 무치환의 고리 형성 원자수 5~18의 복소환기, 또는 식(31)으로 표시되는 기이다.

[0341] 일 실시형태에 있어서, R_{109} 및 R_{110} 의 적어도 하나는 식(31)으로 표시되는 기이다.

[0342] 일 실시형태에 있어서, R_{109} 및 R_{110} 은 각각 독립적으로 식(31)으로 표시되는 기이다.

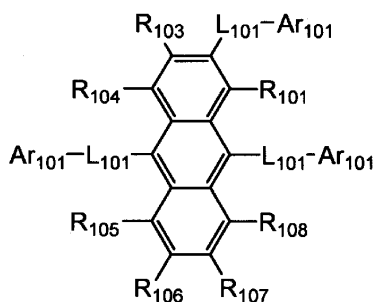
[0343] 일 실시형태에서는, 화합물(10)은 하기 식(10-1)으로 표시되는 화합물이다.



(10-1)

[0344] 식(10-1) 중, $R_{101} \sim R_{108}$, L_{101} 및 Ar_{101} 은 식(10)에서 정의한 것과 같다.

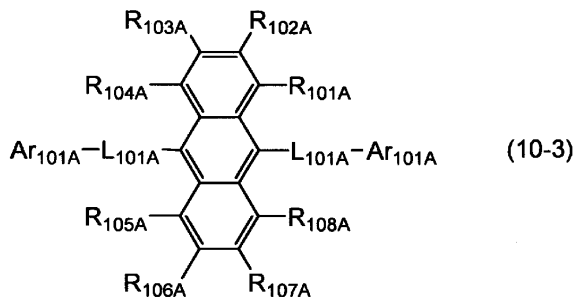
[0346] 일 실시형태에서는, 화합물(10)은 하기 식(10-2)으로 표시되는 화합물이다.



(10-2)

[0347] 식(10-2) 중, R_{101} , $R_{103} \sim R_{108}$, L_{101} 및 Ar_{101} 은 식(10)에서 정의한 것과 같다.

[0349] 일 실시형태에서는, 화합물(10)은 하기 식(10-3)으로 표시되는 화합물이다.

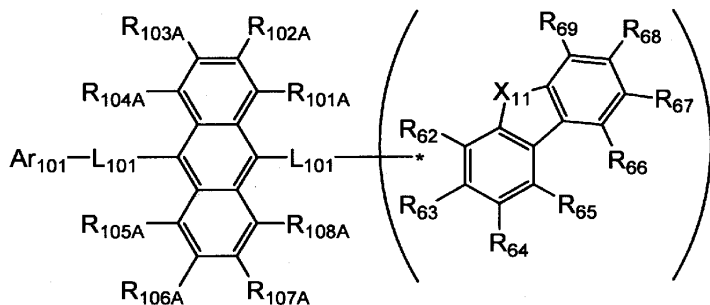


(10-3)

[0350] 식(10-3) 중,
 [0352] $R_{101A} \sim R_{108A}$ 는, 각각 독립적으로, 수소 원자, 또는 치환 혹은 무치환의 고리 형성 탄소수 6~50의 아릴기이다.
 [0353] L_{101A} 는, 단결합, 또는 치환 혹은 무치환의 고리 형성 탄소수 6~30의 아릴렌기이다. 2개의 Ar_{101A} 는 동일하여도 좋고, 다르더라도 좋다.

[0354] Ar_{101A} 는 치환 혹은 무치환의 고리 형성 탄소수 6~50의 아릴기이다. 2개의 Ar_{101A} 는 동일하여도 좋고, 다르더라도 좋다.

[0355] 일 실시형태에서는, 화합물(10)은 하기 식(10-4)으로 표시되는 화합물이다.



(10-4)

[0356]

[0357] 식(10-4) 중,

[0358] L_{101} 및 Ar_{101} 은 상기 식(10)에서 정의한 것과 같다.

[0359] $R_{101A} \sim R_{108A}$ 는 각각 독립적으로, 수소 원자, 또는 치환 혹은 무치환의 고리 형성 탄소수 6~50의 아릴기이다.

[0360] X_{11} 은 O, S 또는 $N(R_{61})$ 이다.

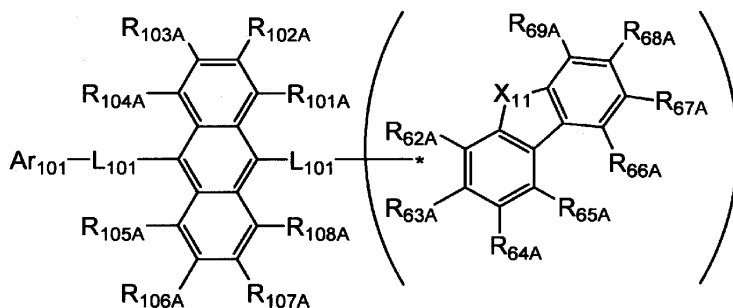
[0361] R_{61} 은 수소 원자, 치환 혹은 무치환의 탄소수 1~50의 알킬기, 또는 치환 혹은 무치환의 고리 형성 탄소수 6~50의 아릴기이다.

[0362] $R_{62} \sim R_{69}$ 의 하나는 L_{101} 과 결합하는 결합수이다.

[0363] L_{101} 과 결합하지 않는 $R_{62} \sim R_{69}$ 중 인접하는 1조 이상은, 상호 결합하여, 치환 혹은 무치환의 포화 또는 불포화의 고리를 형성하여도 좋다.

[0364] L_{101} 과 결합하지 않으며 또한 상기 치환 혹은 무치환의 포화 또는 불포화의 고리를 형성하지 않는 $R_{62} \sim R_{69}$ 는, 각각 독립적으로, 수소 원자, 치환 혹은 무치환의 탄소수 1~50의 알킬기, 또는 치환 혹은 무치환의 고리 형성 탄소수 6~50의 아릴기이다.

[0365] 일 실시형태에서는, 화합물(10)은 하기 식(10-4A)으로 표시되는 화합물이다.



(10-4A)

[0366]

[0367] 식(10-4A) 중,

[0368] L_{101} 및 Ar_{101} 은 상기 식(10)에서 정의한 것과 같다.

[0369] $R_{101A} \sim R_{108A}$ 는 각각 독립적으로, 수소 원자, 또는 치환 혹은 무치환의 고리 형성 탄소수 6~50의 아릴기이다.

[0370] X_{11} 은 0, S 또는 $N(R_{61})$ 이다.

[0371] R_{61} 은 수소 원자, 치환 혹은 무치환의 탄소수 1~50의 알킬기, 또는 치환 혹은 무치환의 고리 형성 탄소수 6~50의 아릴기이다.

[0372] $R_{62A} \sim R_{69A}$ 중 인접하는 2개 이상의 1조 이상은, 치환 혹은 무치환의 포화 또는 불포화의 고리를 형성하여도 좋고, $R_{62A} \sim R_{69A}$ 중 인접하는 2개는 하기 식(10-4A-1)으로 표시되는 고리를 형성한다.

[0373] 치환 혹은 무치환의 포화 또는 불포화의 고리를 형성하지 않는 $R_{62A} \sim R_{69A}$ 는, 각각 독립적으로, 수소 원자, 치환 혹은 무치환의 탄소수 1~50의 알킬기, 또는 치환 혹은 무치환의 고리 형성 탄소수 6~50의 아릴기이다.



(10-4A-1)

[0374]

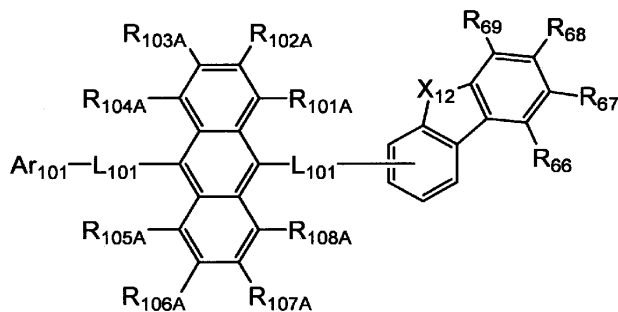
[0375] (식(10-4A-1) 중,

[0376] 2개의 결합수 *의 각각은 $R_{62A} \sim R_{69A}$ 중 인접하는 2개와 결합한다.

[0377] $R_{70} \sim R_{73}$ 의 하나는 L_{101} 과 결합하는 결합수이다.

[0378] L_{101} 과 결합하지 않는 $R_{70} \sim R_{73}$ 은, 각각 독립적으로, 수소 원자, 치환 혹은 무치환의 탄소수 1~50의 알킬기, 또는 치환 혹은 무치환의 고리 형성 탄소수 6~50의 아릴기이다.)

[0379] 일 실시형태에서는, 화합물(10)은 하기 식(10-6)으로 표시되는 화합물이다.



(10-6)

[0380]

[0381] 식(10-6) 중,

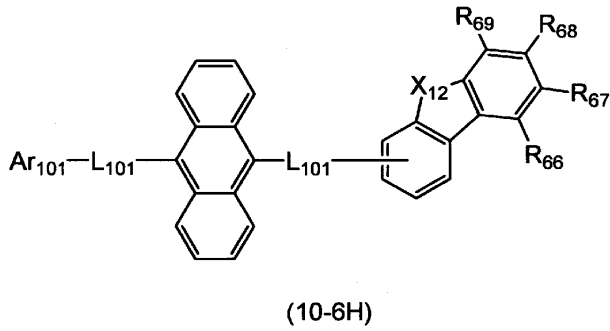
[0382] L_{101} 및 Ar_{101} 은 상기 식(10)에서 정의한 것과 같다.

[0383] $R_{101A} \sim R_{108A}$ 는 상기 식(10-4)에서 정의한 것과 같다.

[0384] $R_{66} \sim R_{69}$ 는 상기 식(10-4)에서 정의한 것과 같다.

[0385] X_{12} 는 0 또는 S이다.

[0386] 일 실시형태에서는, 상기 식(10-6)으로 표시되는 화합물은 하기 식(10-6H)으로 표시되는 화합물이다.



[0387]

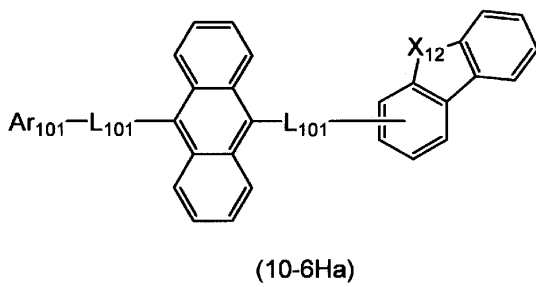
[0388] 식(10-6H) 중,

[0389] L_{101} 및 Ar_{101} 은 상기 식(10)에서 정의한 것과 같다.

[0390] $R_{66} \sim R_{69}$ 는 상기 식(10-4)에서 정의한 것과 같다.

[0391] X_{12} 는 0 또는 S이다.

[0392] 일 실시형태에서는, 상기 식(10-6) 및 식(10-6H)으로 표시되는 화합물은 하기 식(10-6Ha)으로 표시되는 화합물이다.



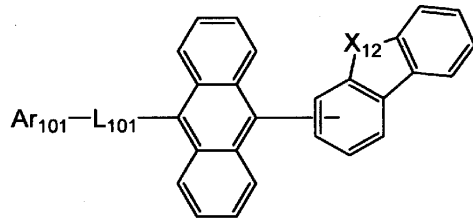
[0393]

[0394] 식(10-6Ha) 중,

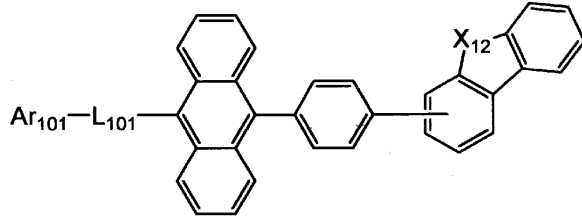
[0395] L_{101} 및 Ar_{101} 은 상기 식(10)에서 정의한 것과 같다.

[0396] X_{12} 는 0 또는 S이다.

[0397] 일 실시형태에서는, 상기 식(10-6), 식(10-6H) 및 식(10-6Ha)으로 표시되는 화합물은 하기 식(10-6Ha-1) 또는 식(10-6Ha-2)으로 표시되는 화합물이다.



(10-6Ha-1)



(10-6Ha-2)

[0398]

[0399]

식(10-6Ha-1) 및 식(10-6Ha-2) 중,

[0400]

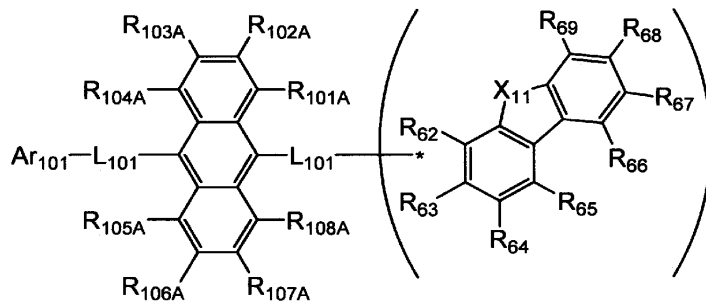
L_{101} 및 Ar_{101} 은 상기 식(10)에서 정의한 것과 같다.

[0401]

X_{12} 는 O 또는 S이다.

[0402]

일 실시형태에서는, 화합물(10)은 하기 식(10-7)으로 표시되는 화합물이다.



(10-7)

[0403]

[0404]

식(10-7) 중,

[0405]

L_{101} 및 Ar_{101} 은 식(10)에서 정의한 것과 같다.

[0406]

$R_{101A} \sim R_{108A}$ 는 상기 식(10-4)에서 정의한 것과 같다.

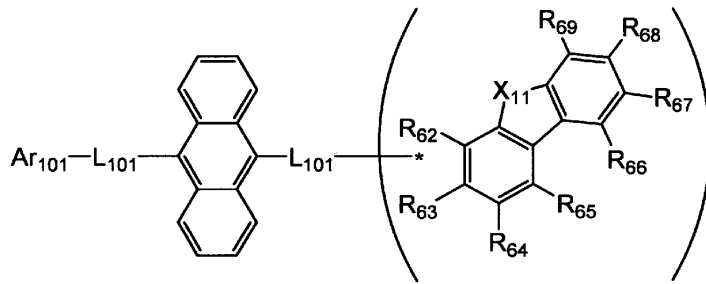
[0407]

X_{11} 은 상기 식(10-4)에서 정의한 것과 같다.

[0408]

$R_{62} \sim R_{69}$ 는 상기 식(10-4)에서 정의한 것과 같다. 단, R_{66} 및 R_{67} , R_{67} 및 R_{68} , 그리고 R_{68} 및 R_{69} 의 어느 1조는, 상호 결합하여, 치환 혹은 무치환의 포화 또는 불포화의 고리를 형성한다.

[0409] 일 실시형태에서는, 화합물(10)은 하기 식(10-7H)으로 표시되는 화합물이다.



(10-7H)

[0410]

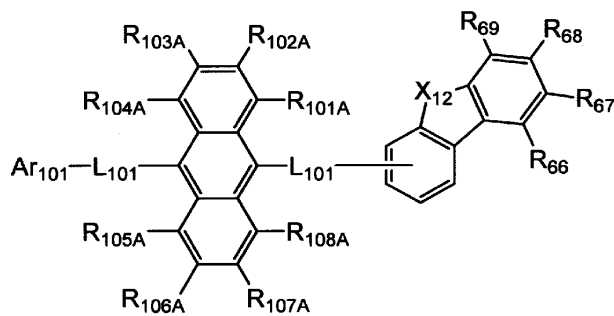
[0411] 식(10-7H) 중,

[0412] L_{101} 및 Ar_{101} 은 식(10)에서 정의한 것과 같다.

[0413] X_{11} 은 상기 식(10-4)에서 정의한 것과 같다.

[0414] $R_{62} \sim R_{69}$ 는 상기 식(10-4)에서 정의한 것과 같다. 단, R_{66} 및 R_{67} , R_{67} 및 R_{68} , 그리고 R_{68} 및 R_{69} 의 어느 1조는, 상호 결합하여, 치환 혹은 무치환의 포화 또는 불포화의 고리를 형성한다.

[0415] 일 실시형태에서는, 화합물(10)은 하기 식(10-8)으로 표시되는 화합물이다.



(10-8)

[0416]

[0417] 식(10-8) 중,

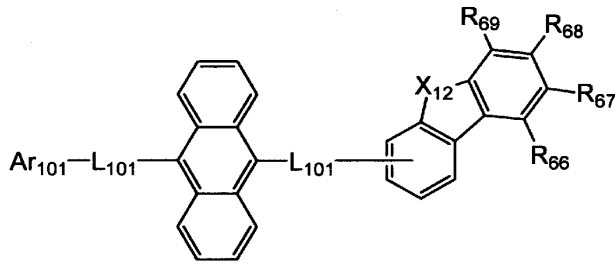
[0418] L_{101} 및 Ar_{101} 은 식(10)에서 정의한 것과 같다.

[0419] $R_{101A} \sim R_{108A}$ 는 상기 식(10-4)에서 정의한 것과 같다.

[0420] X_{12} 는 0 또는 S이다.

[0421] $R_{66} \sim R_{69}$ 는 상기 식(10-4)에서 정의한 것과 같다. 단, R_{66} 및 R_{67} , R_{67} 및 R_{68} , 그리고 R_{68} 및 R_{69} 의 어느 1조는, 상호 결합하여, 치환 혹은 무치환의 포화 또는 불포화의 고리를 형성한다.

[0422] 일 실시형태에서는, 화합물(10-8)로 표시되는 화합물은 하기 식(10-8H)으로 표시되는 화합물이다.



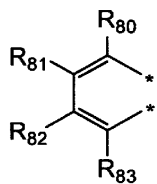
(10-8H)

[0423]
[0424] 식(10-8H) 중, L_{101} 및 Ar_{101} 은 식(10)에서 정의한 것과 같다.

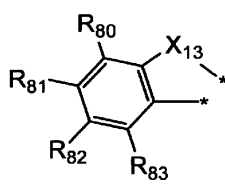
[0425] $R_{66} \sim R_{69}$ 는 상기 식(10-4)에서 정의한 것과 같다. 단, R_{66} 및 R_{67} , R_{67} 및 R_{68} , 그리고 R_{68} 및 R_{69} 중 어느 1조는, 상호 결합하여, 치환 혹은 무치환의 포화 또는 불포화의 고리를 형성한다. R_{66} 및 R_{67} , R_{67} 및 R_{68} , 그리고 R_{68} 및 R_{69} 중 어느 1조는, 상호 결합하여, 무치환의 벤젠환을 형성하는 것이 바람직하다.

[0426] X_{12} 는 0 또는 S이다.

[0427] 일 실시형태에 있어서, 상기 식(10-7), 식(10-8) 또는 식(10-8H)으로 표시되는 화합물은, R_{66} 및 R_{67} , R_{67} 및 R_{68} , 그리고 R_{68} 및 R_{69} 의 어느 1조가, 상호 결합하여, 하기 식(10-8-1) 또는 식(10-8-2)으로 표시되는 고리를 형성하고, 상기 식(10-8-1) 또는 식(10-8-2)으로 표시되는 고리를 형성하지 않는 $R_{66} \sim R_{69}$ 는, 치환 혹은 무치환의 포화 또는 불포화의 고리를 형성하지 않는다.



(10-8-1)



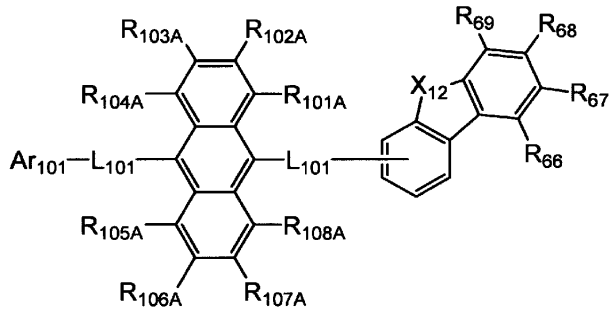
(10-8-2)

[0428]
[0429] (식(10-8-1) 및 식(10-8-2) 중,
[0430] 2개의 결합수 *는 각각 R_{66} 및 R_{67} , R_{67} 및 R_{68} 또는 R_{68} 및 R_{69} 의 1조와 결합한다.

[0431] $R_{80} \sim R_{83}$ 은 각각 독립적으로, 수소 원자, 치환 혹은 무치환의 탄소수 1~50의 알킬기, 또는 치환 혹은 무치환의 고리 형성 탄소수 6~50의 아릴기이다.

[0432] X_{13} 은 0 또는 S이다.)

[0433] 일 실시형태에서는, 화합물(10)은 하기 식(10-9)으로 표시되는 화합물이다.



(10-9)

[0434]

[0435] 식(10-9) 중,

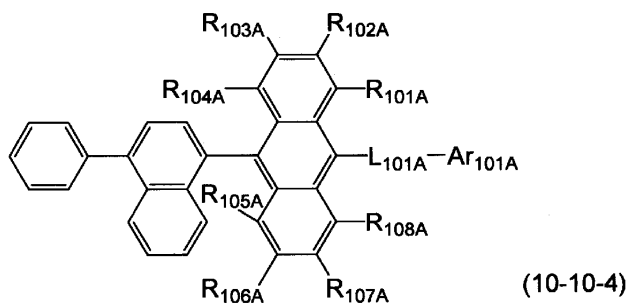
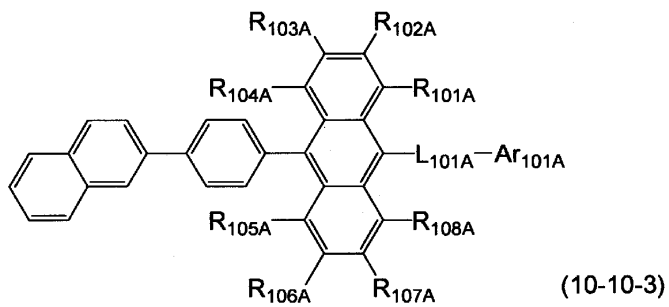
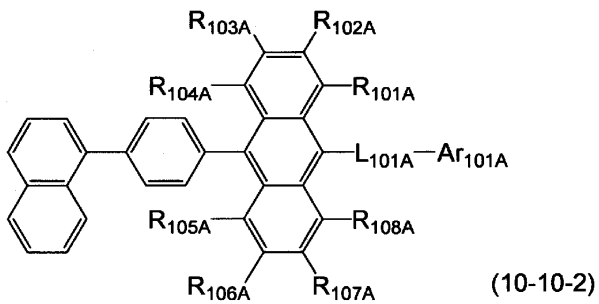
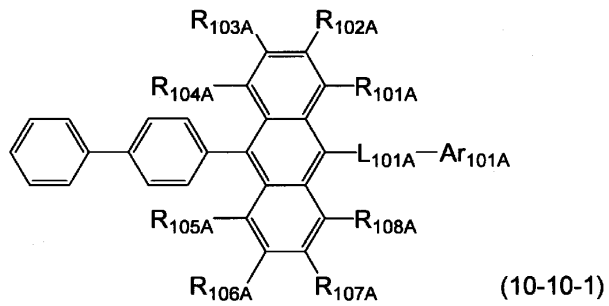
[0436] L_{101} 및 Ar_{101} 은 식(10)에서 정의한 것과 같다.

[0437] $R_{101A} \sim R_{108A}$ 는 상기 식(10-4)에서 정의한 것과 같다.

[0438] $R_{66} \sim R_{69}$ 는 상기 식(10-4)에서 정의한 것과 같다. 단, R_{66} 및 R_{67} , R_{67} 및 R_{68} , 그리고 R_{68} 및 R_{69} 는, 모두 상호 결합하지 않고, 치환 혹은 무치환의 포화 또는 불포화의 고리를 형성하지 않는다.

[0439] X_{12} 는 O 또는 S이다.

[0440] 일 실시형태에서는, 화합물(10)은 하기 식(10-10-1)~식(10-10-4)으로 표시되는 화합물로 이루어지는 군에서 선택된다.



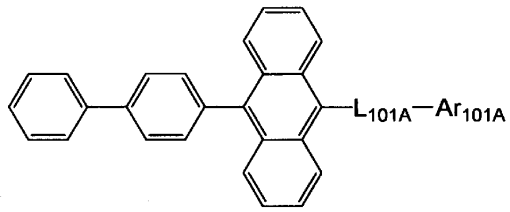
[0441]

[0442]

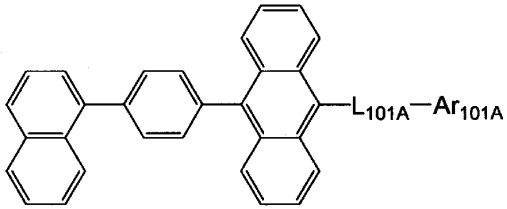
식(10-10-1)~식(10-10-4) 중, L_{101A} , Ar_{101A} 및 $R_{101A} \sim R_{108A}$ 는 상기 식(10-3)에서 정의한 것과 같다.

[0443]

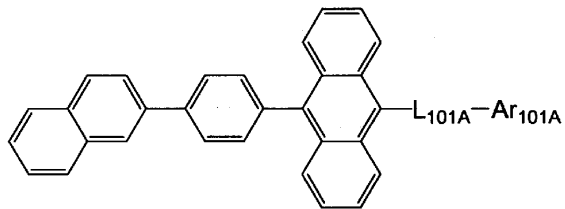
일 실시형태에서는, 상기 식(10-10-1)~식(10-10-4)으로 표시되는 화합물은 하기 식(10-10-1H)~식(10-10-4H)으로 표시되는 화합물이다.



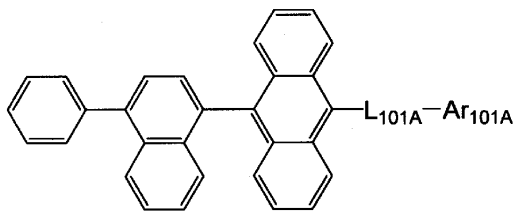
(10-10-1H)



(10-10-2H)



(10-10-3H)

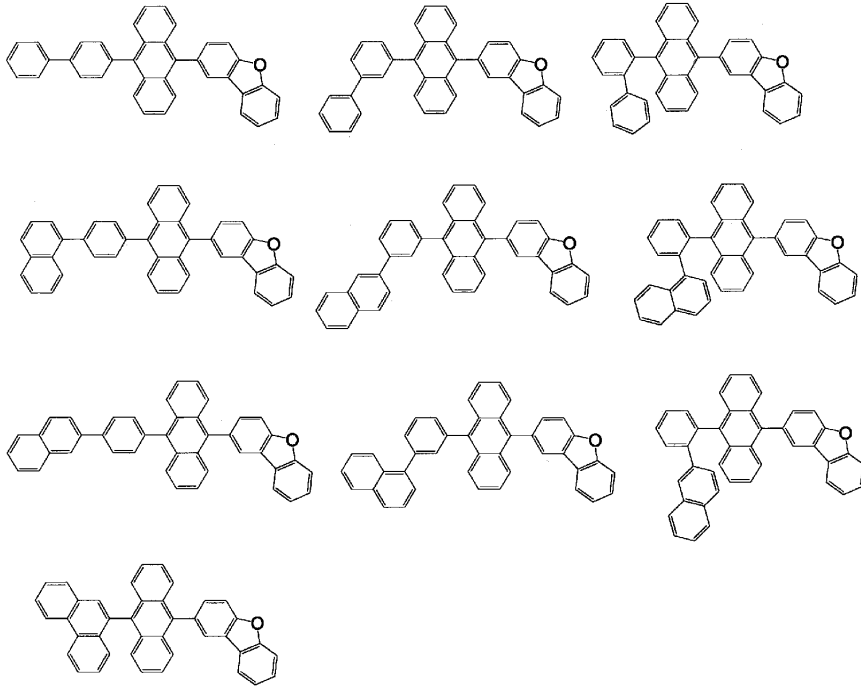


(10-10-4H)

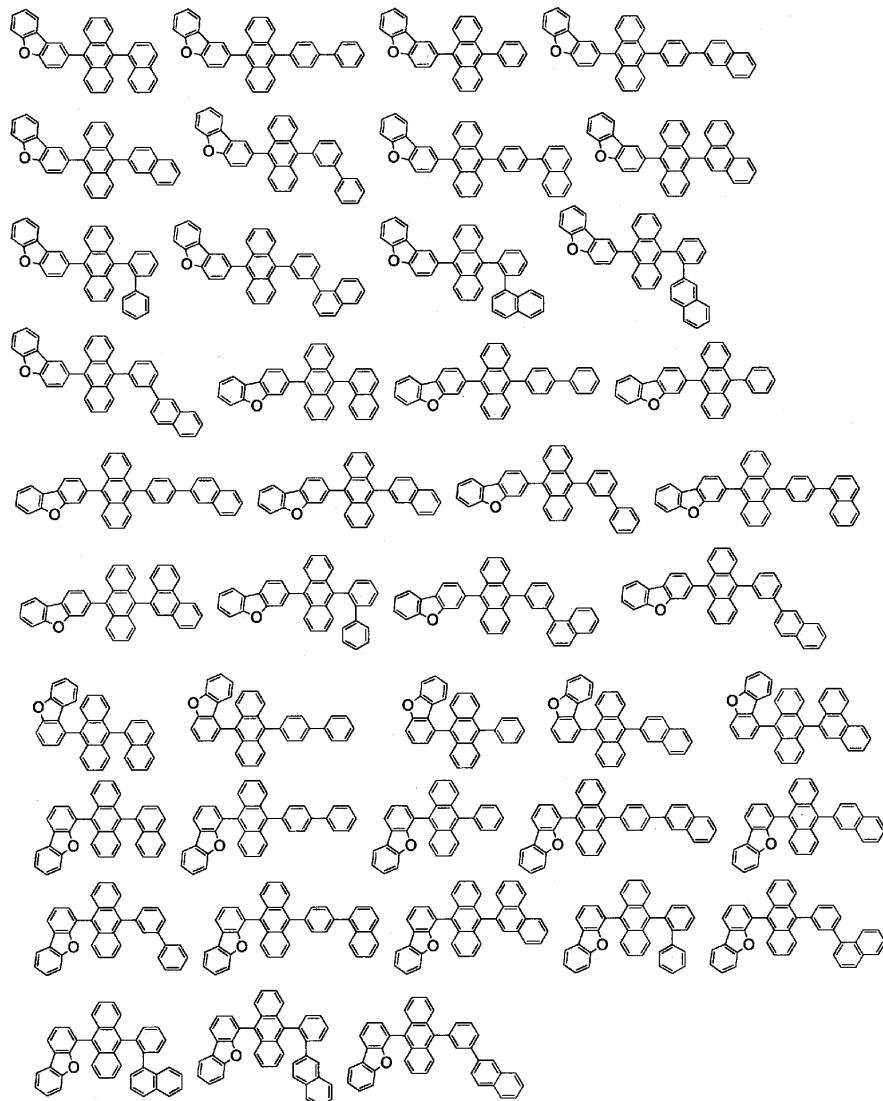
[0444]

[0445] 식(10-10-1H)~식(10-10-4H) 중, L_{101A} 및 Ar_{101A} 는 상기 식(10-3)에서 정의한 것과 같다.

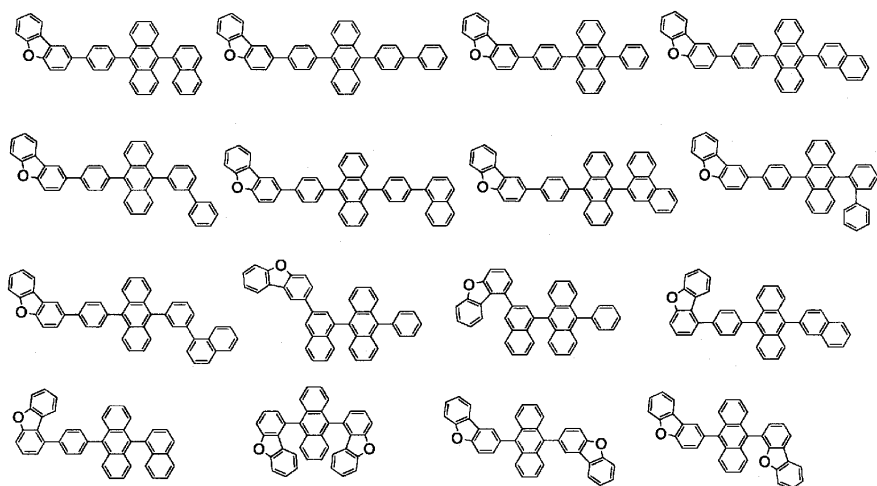
[0446] 식(10)으로 표시되는 화합물은, 예컨대, 이하에 나타내는 화합물을 구체예로서 들 수 있다.



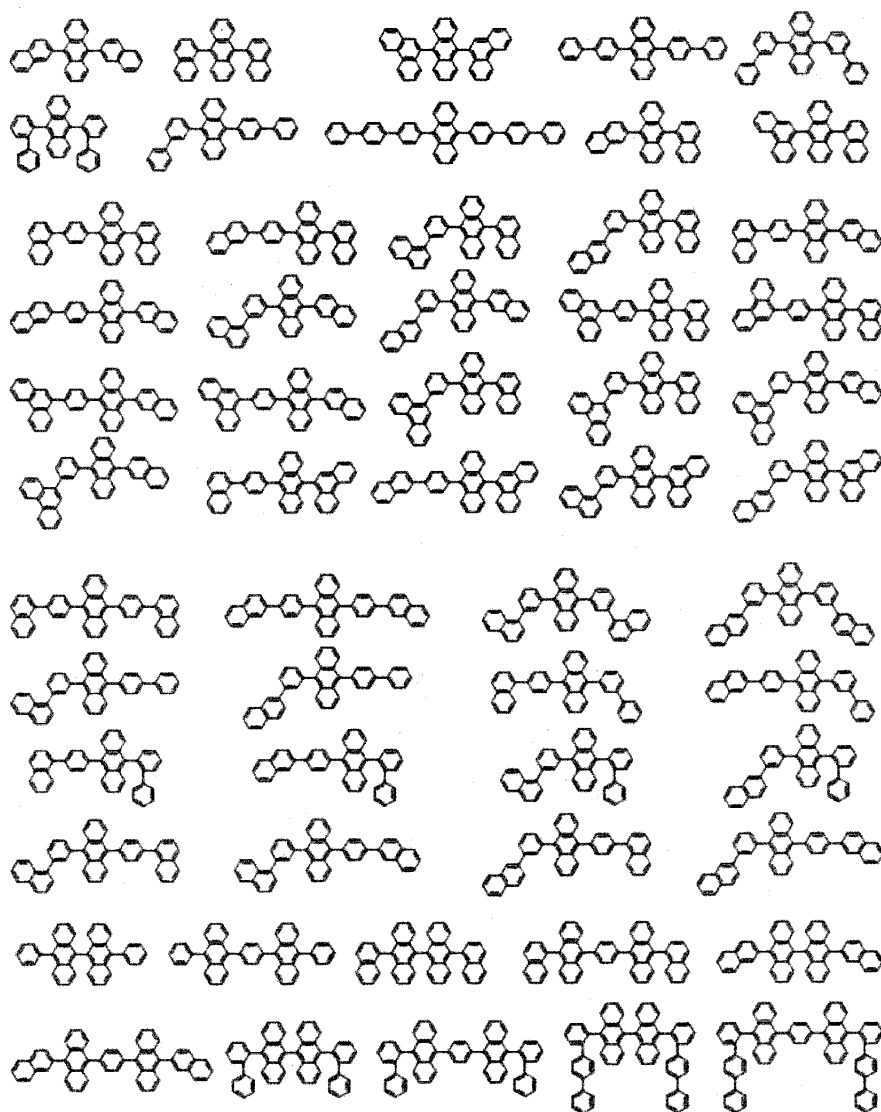
[0447]



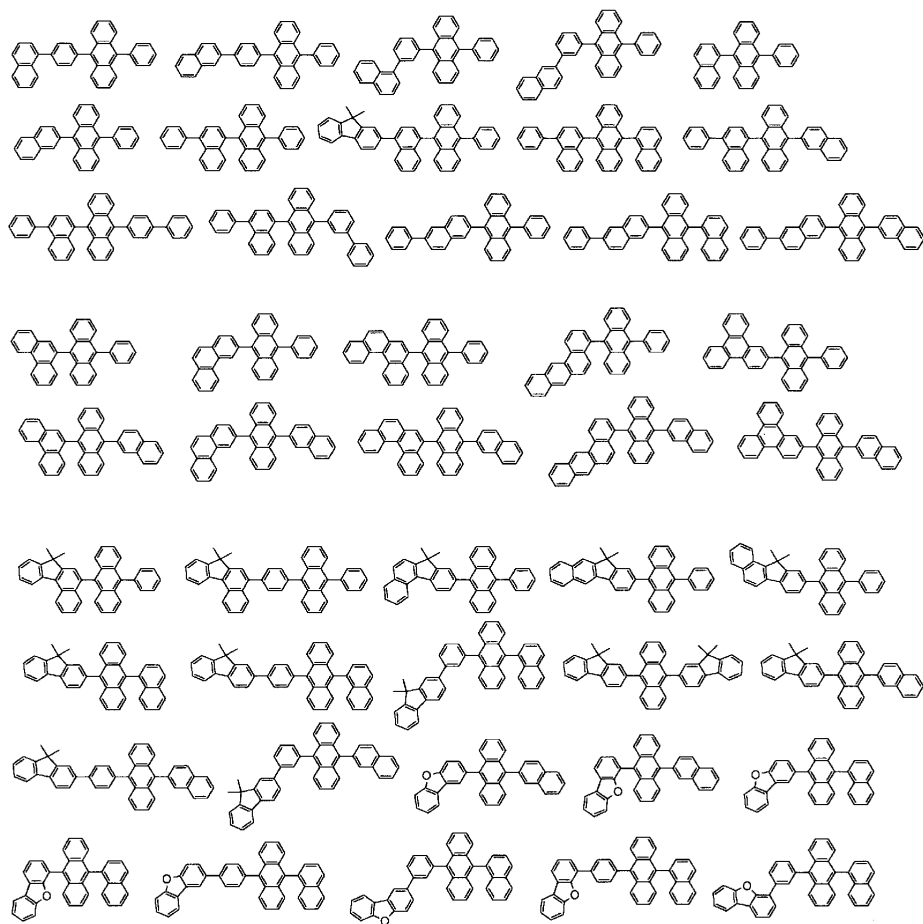
[0448]



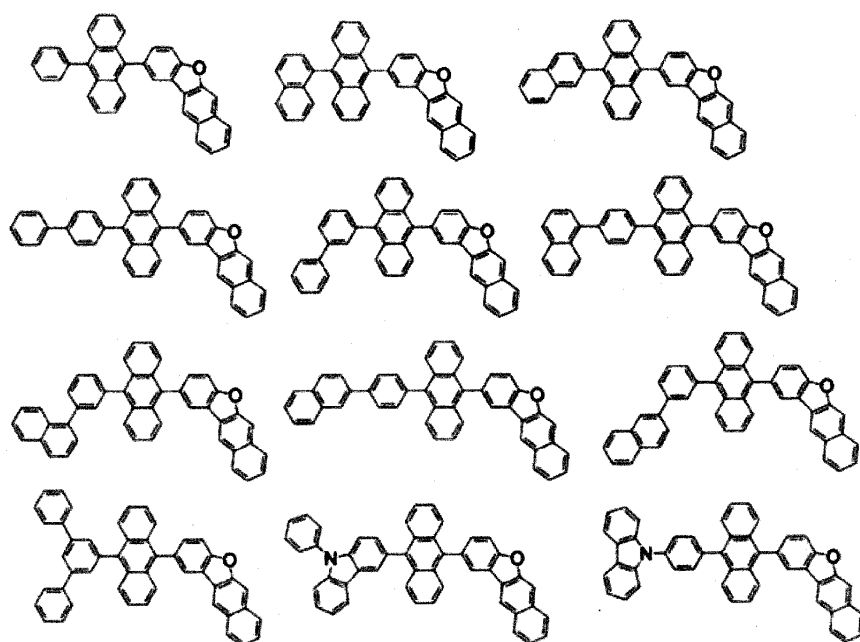
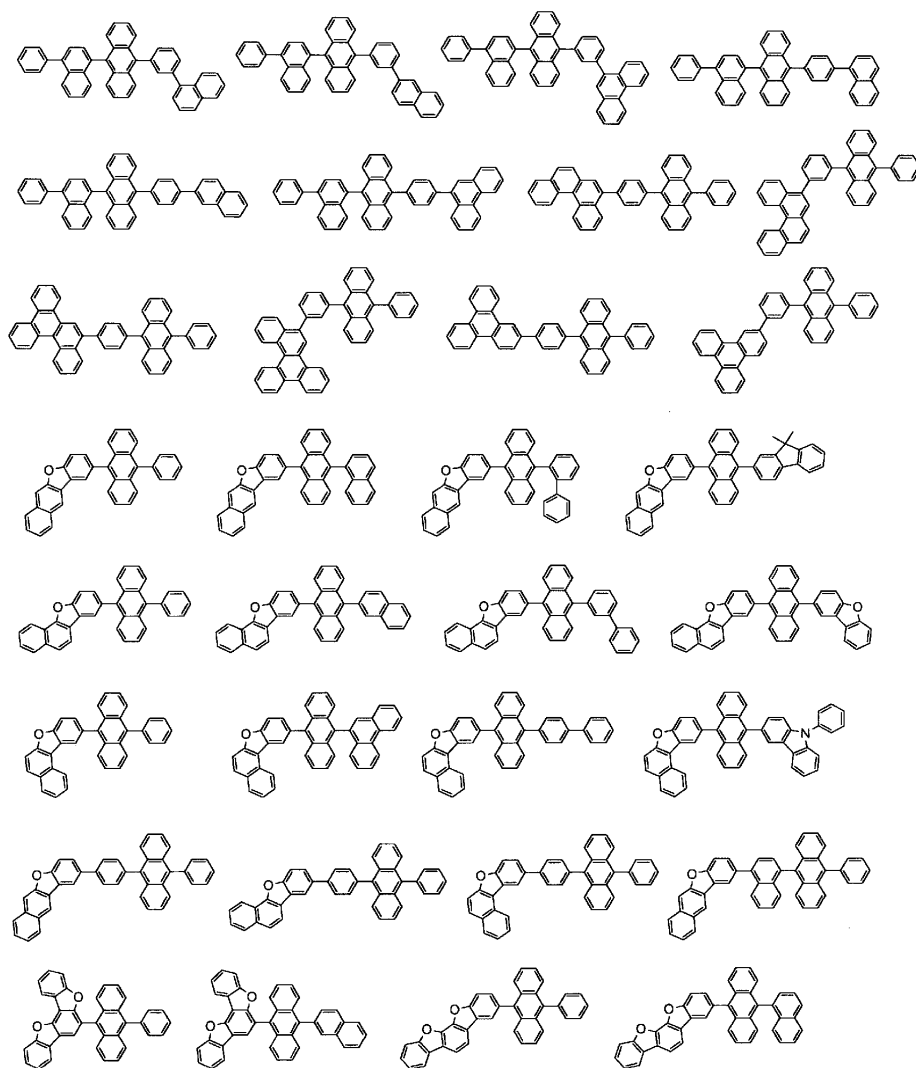
[0449]

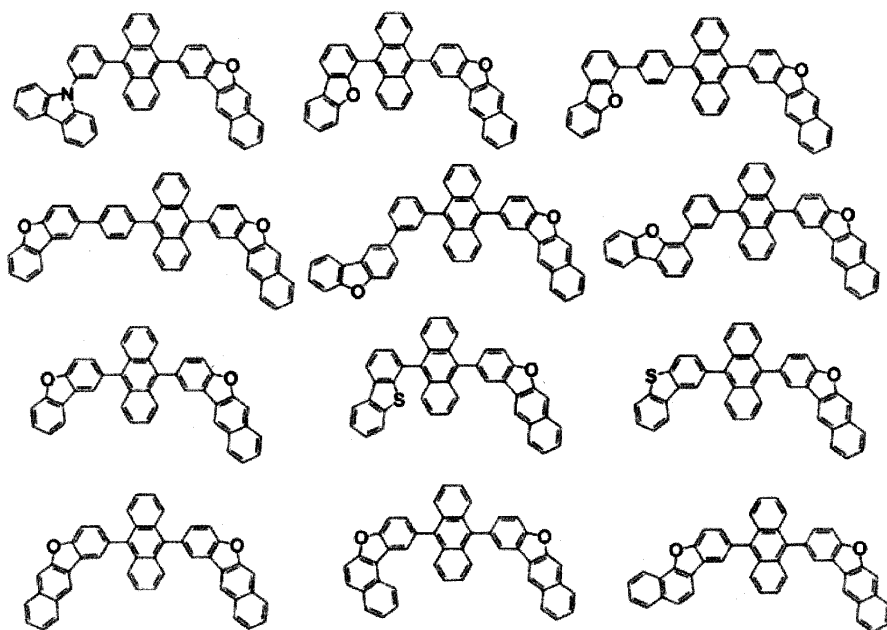


[0450]

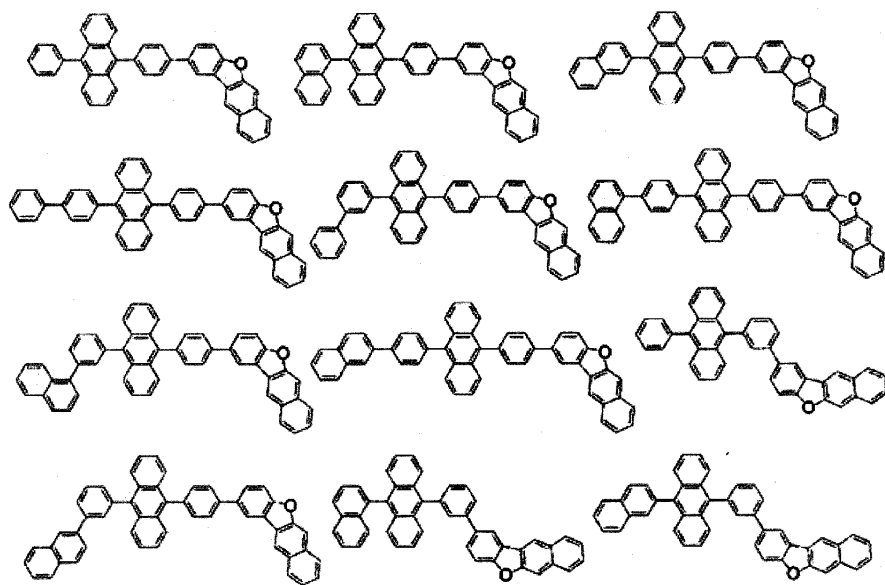


[0451]

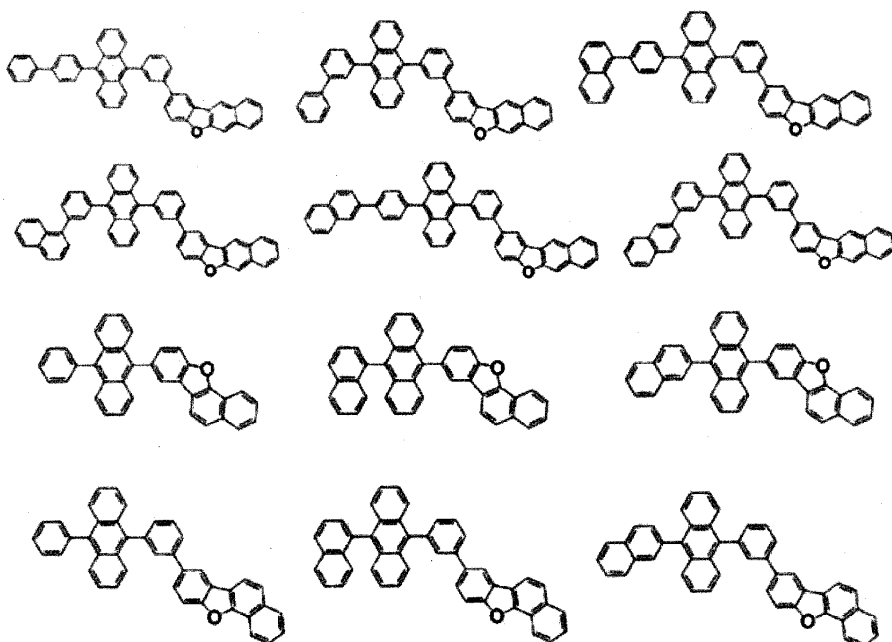




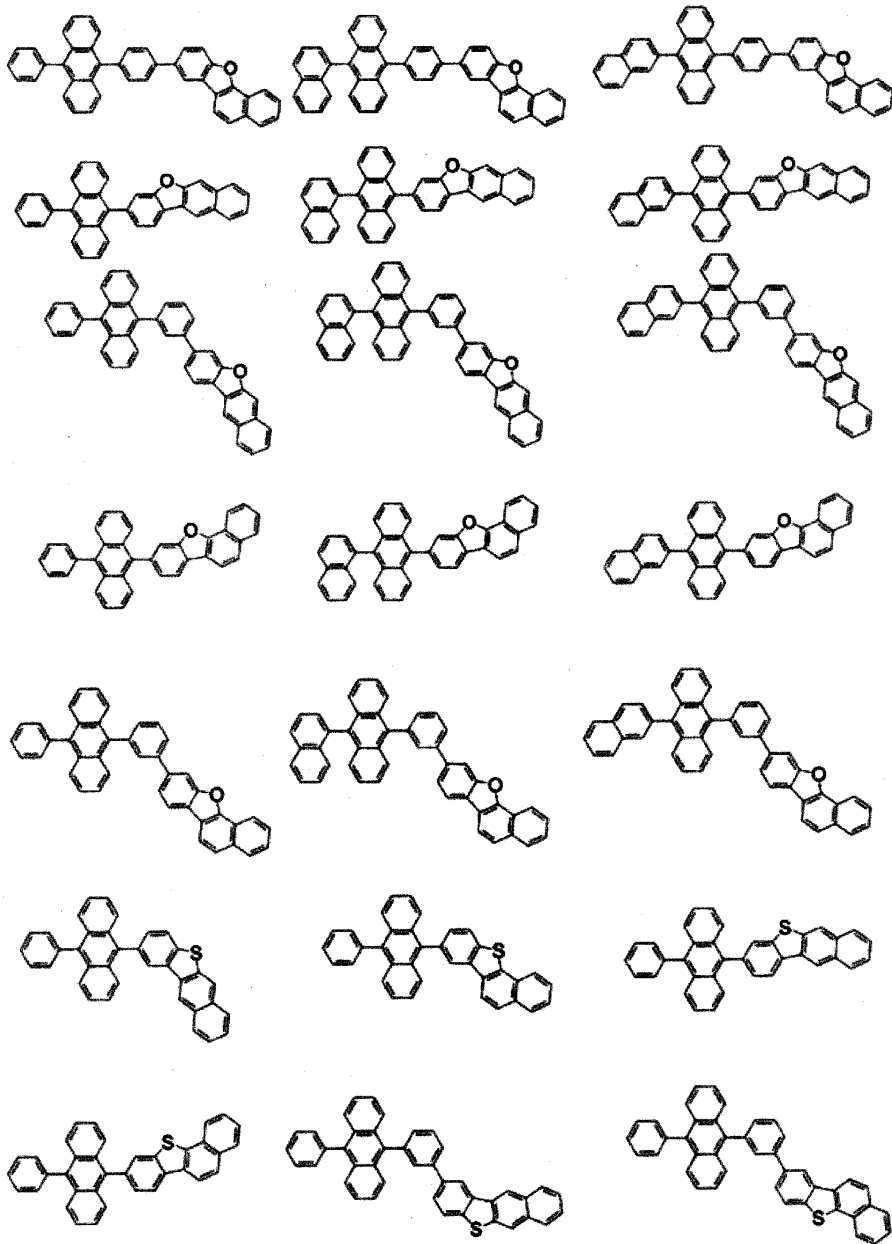
[0454]



[0455]

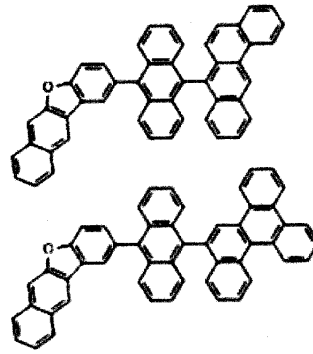
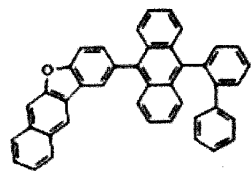
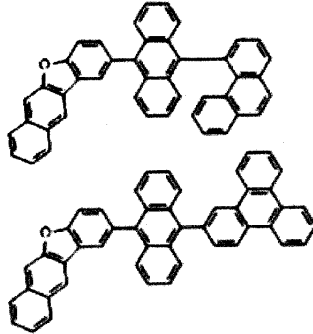
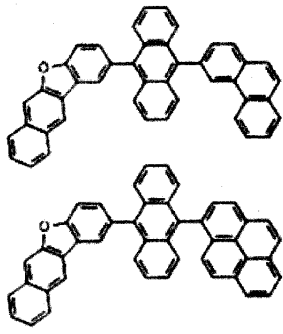


[0456]

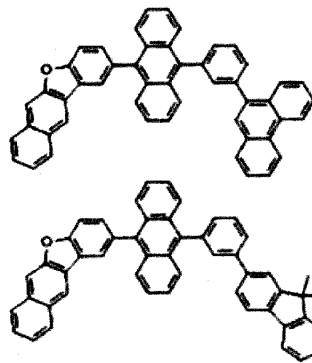
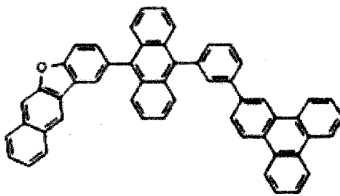
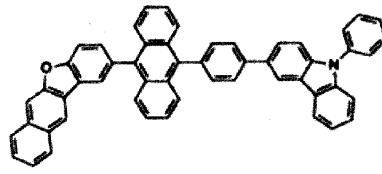
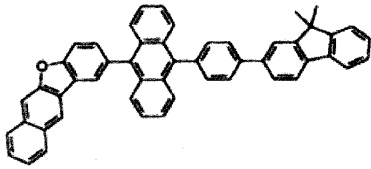
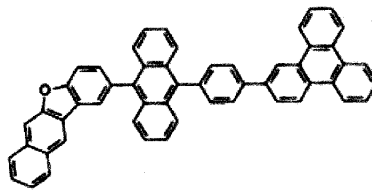
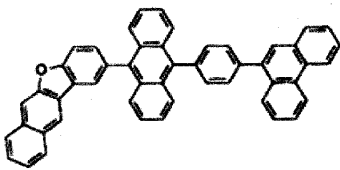


[0457]

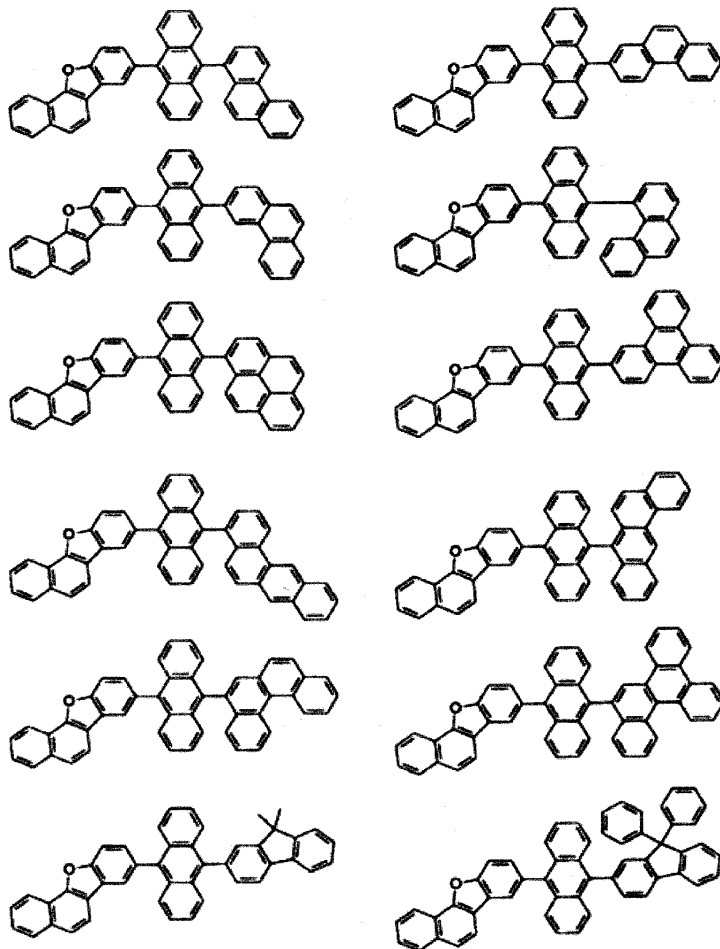
[0458]



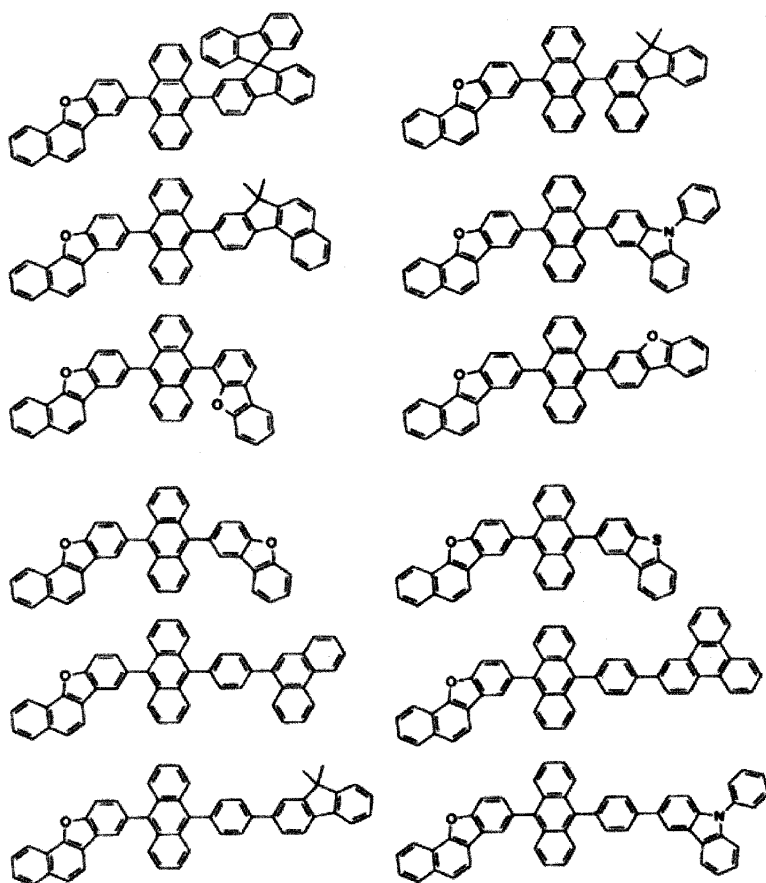
[0459]



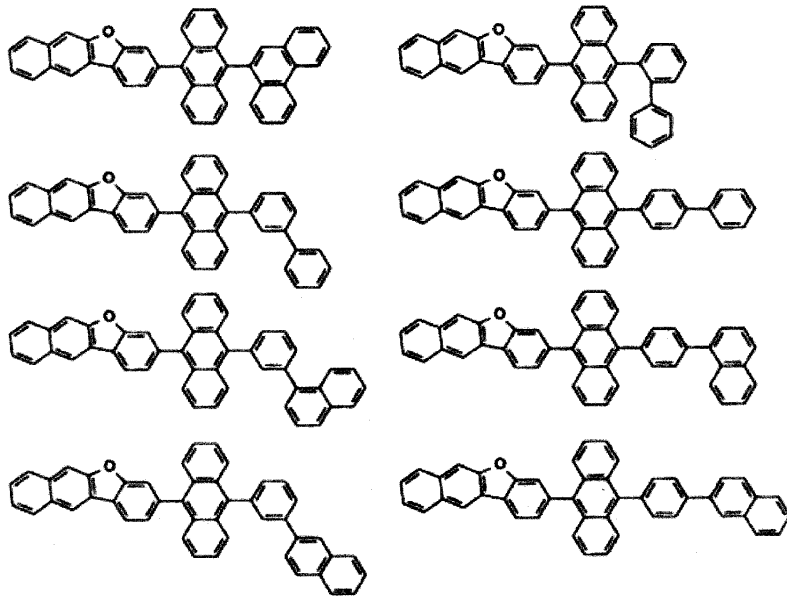
[0460]



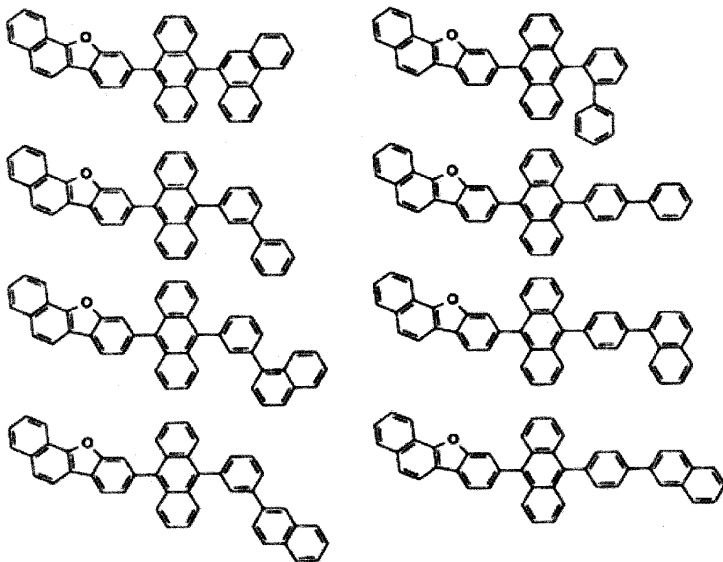
[0461]



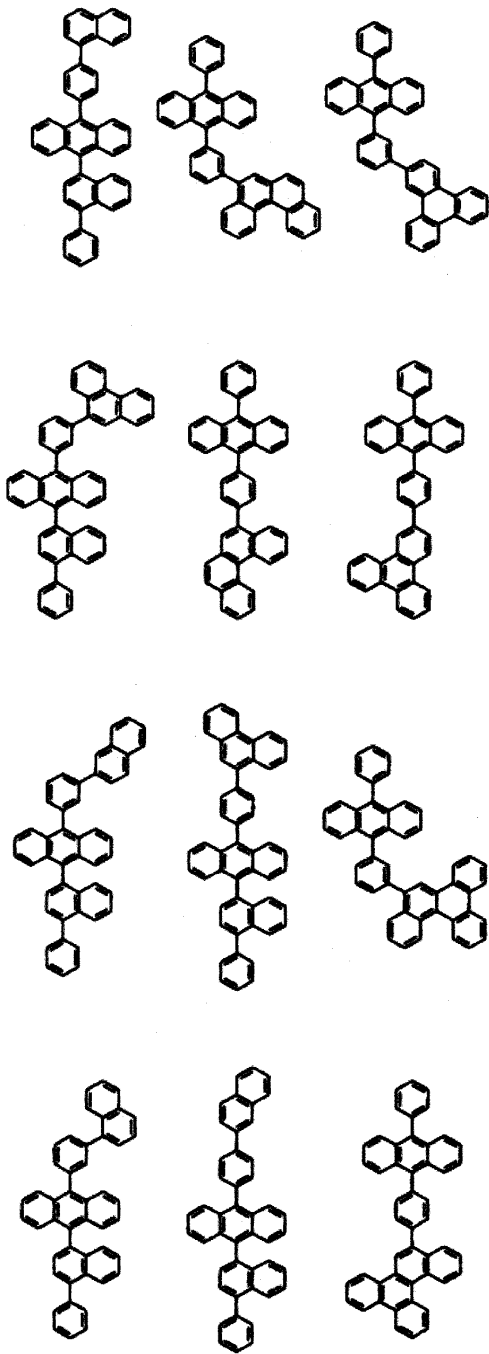
[0462]



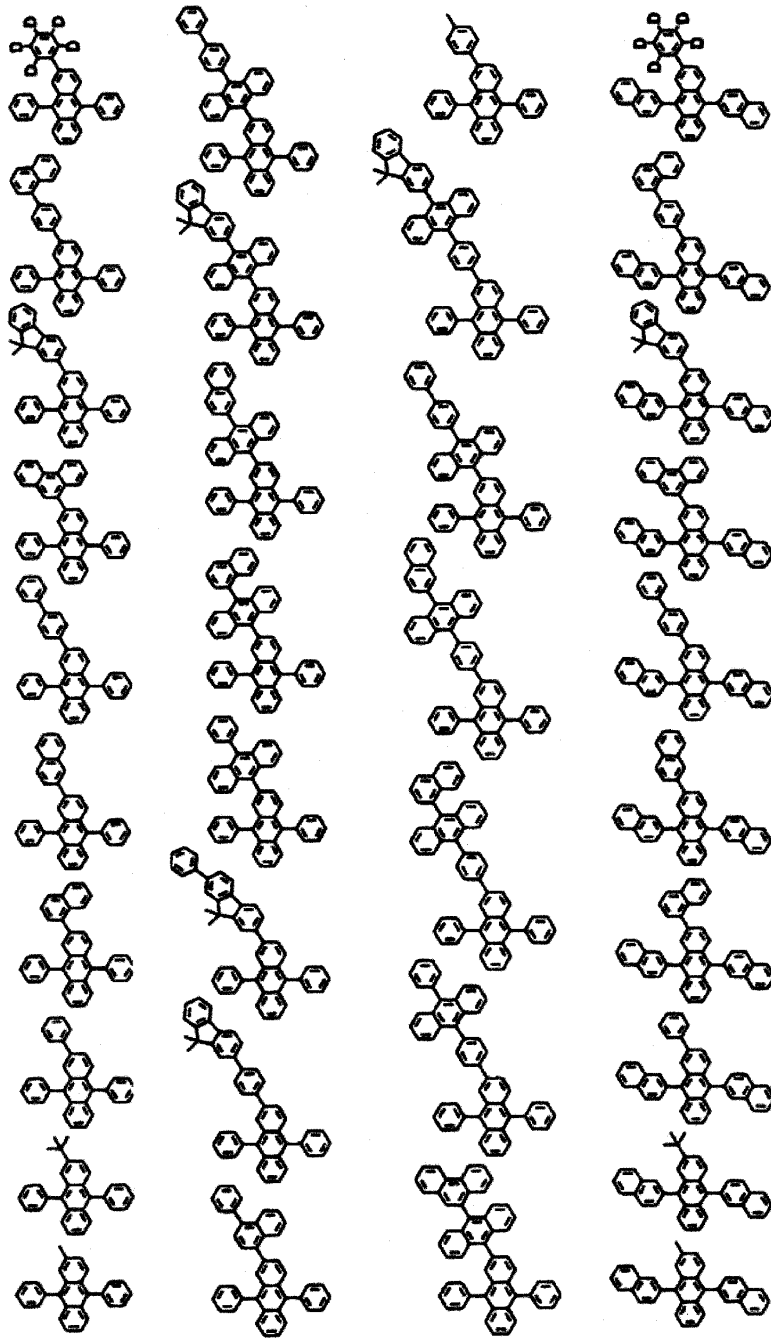
[0463]



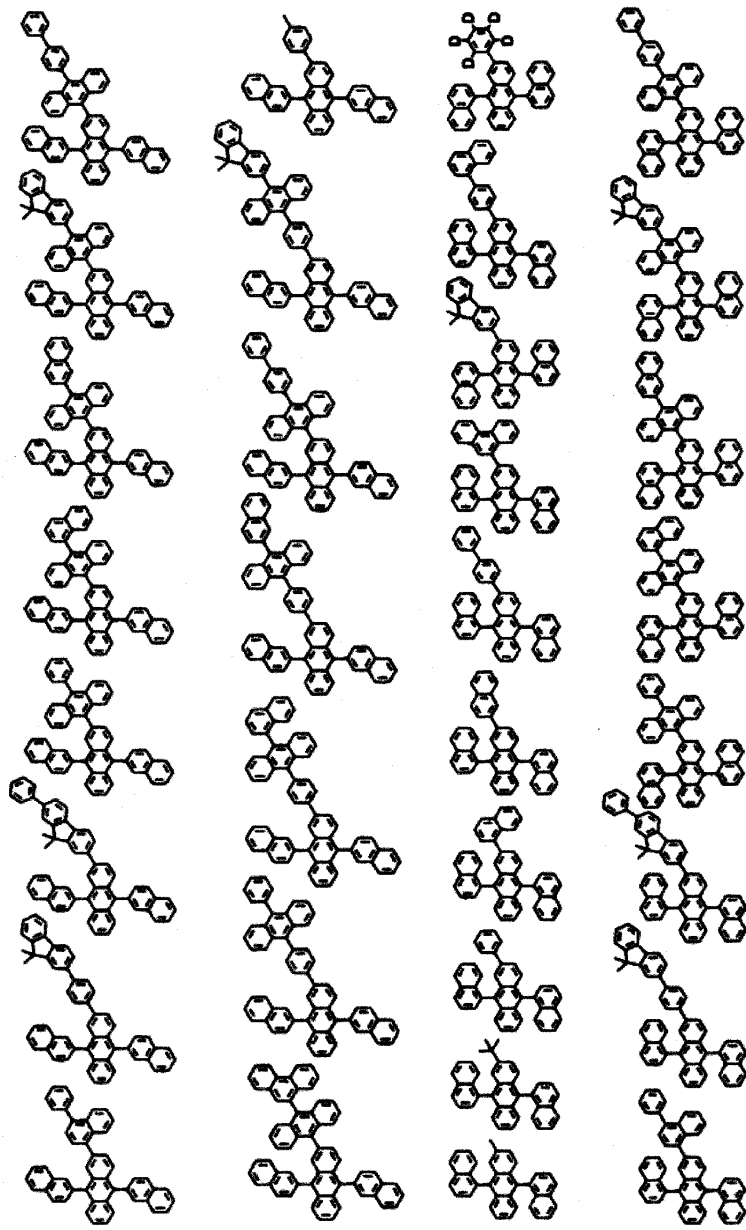
[0464]



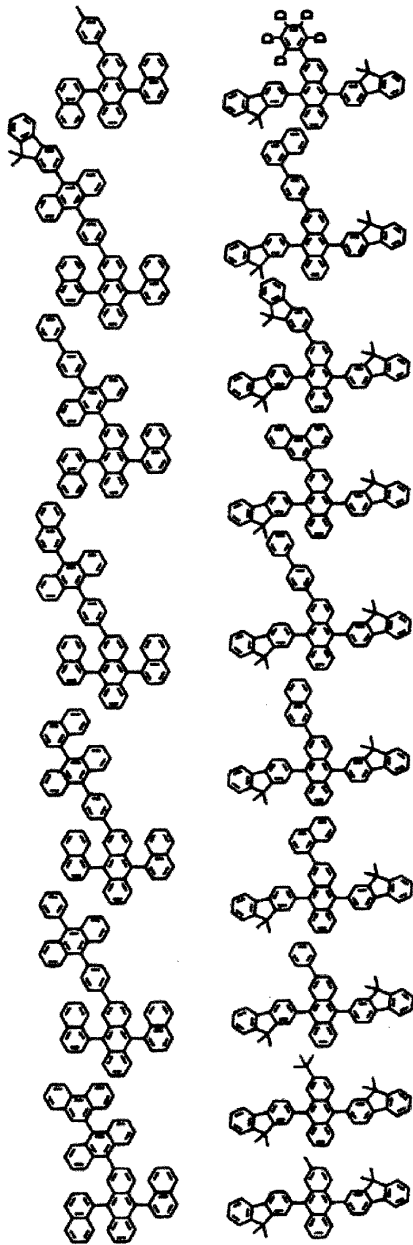
[0465]



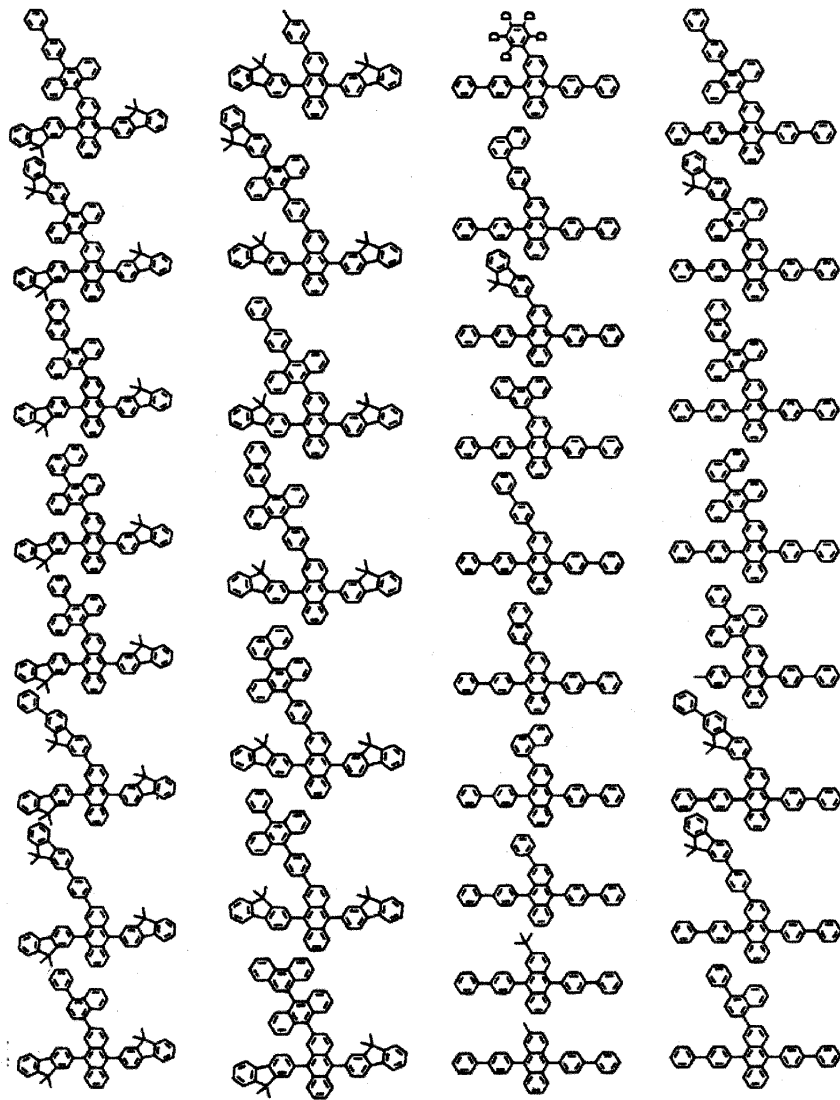
[0466]



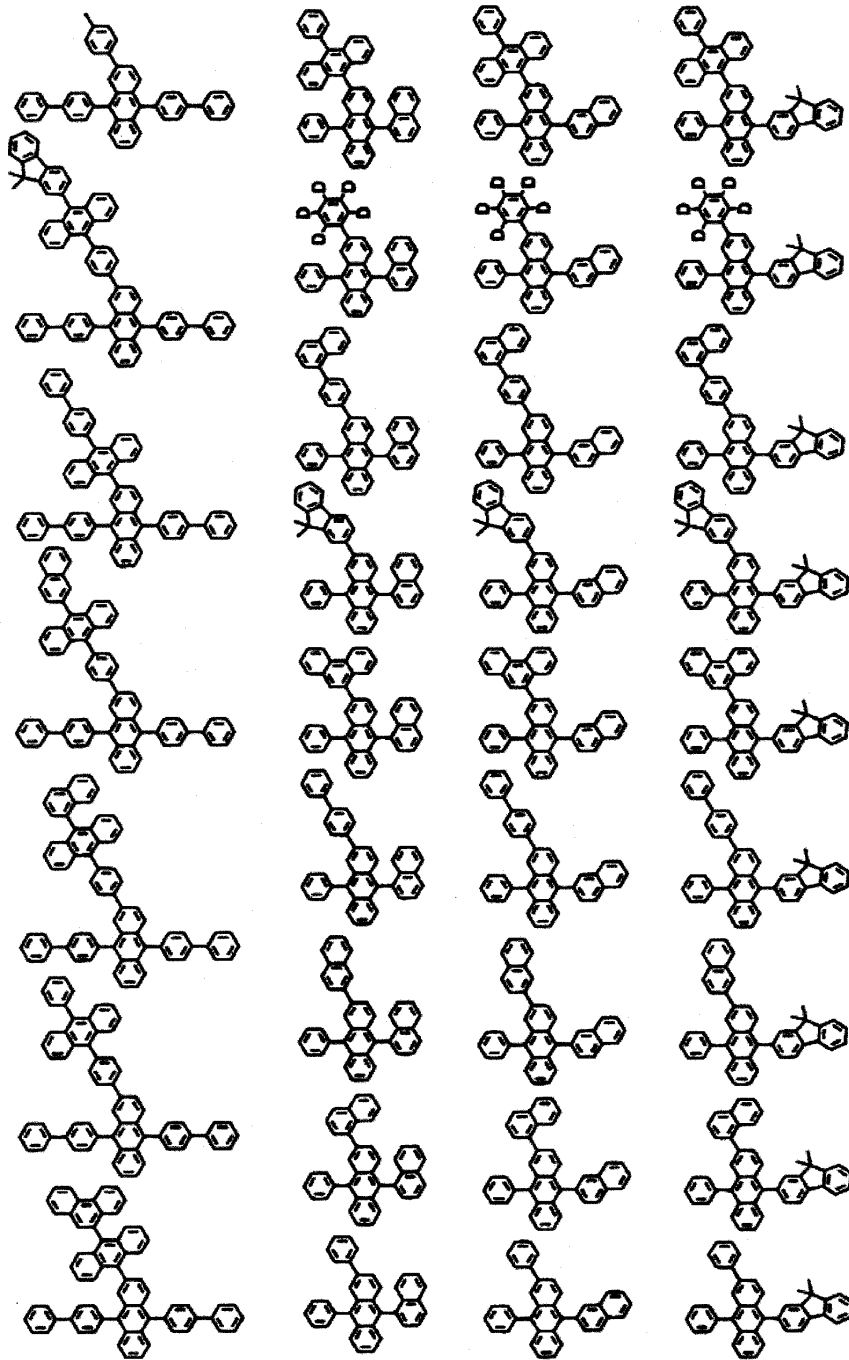
[0467]



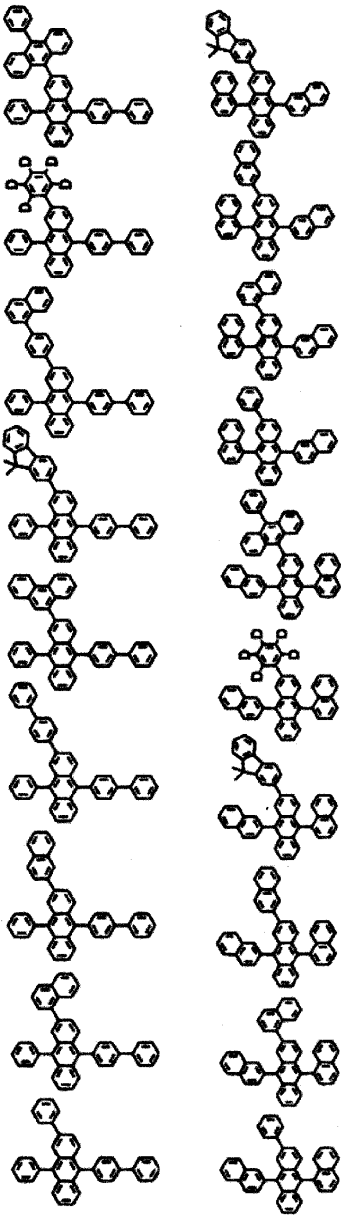
[0468]



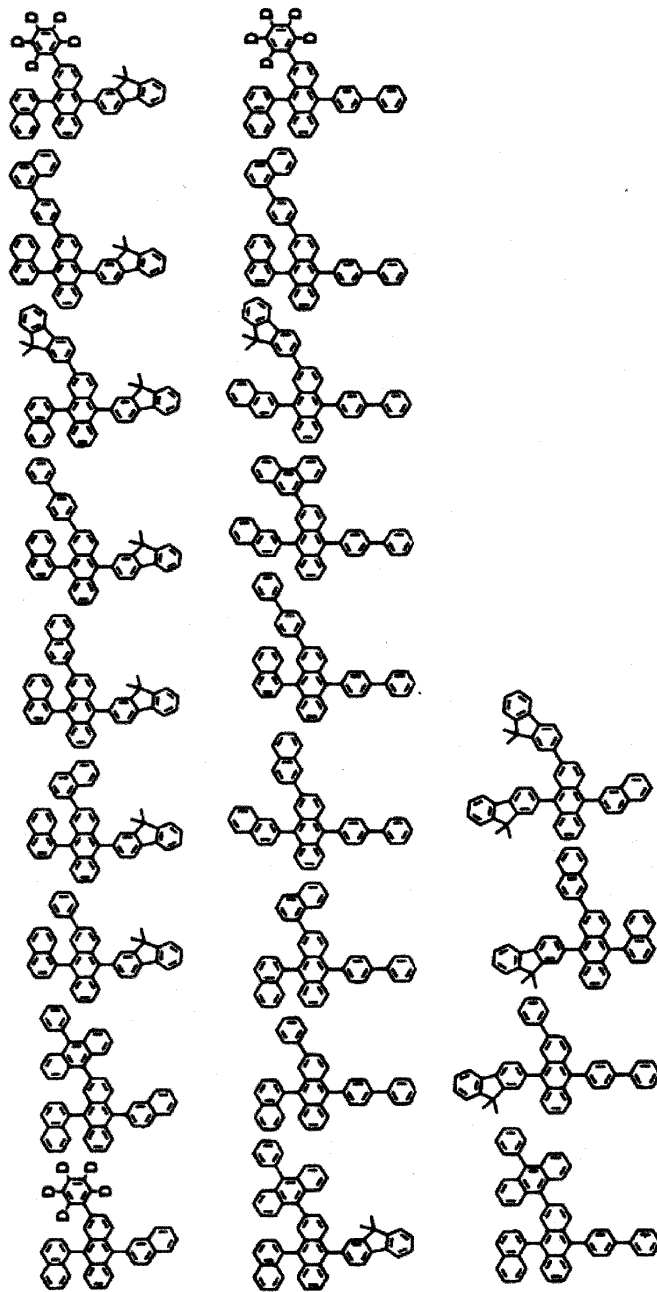
[0469]



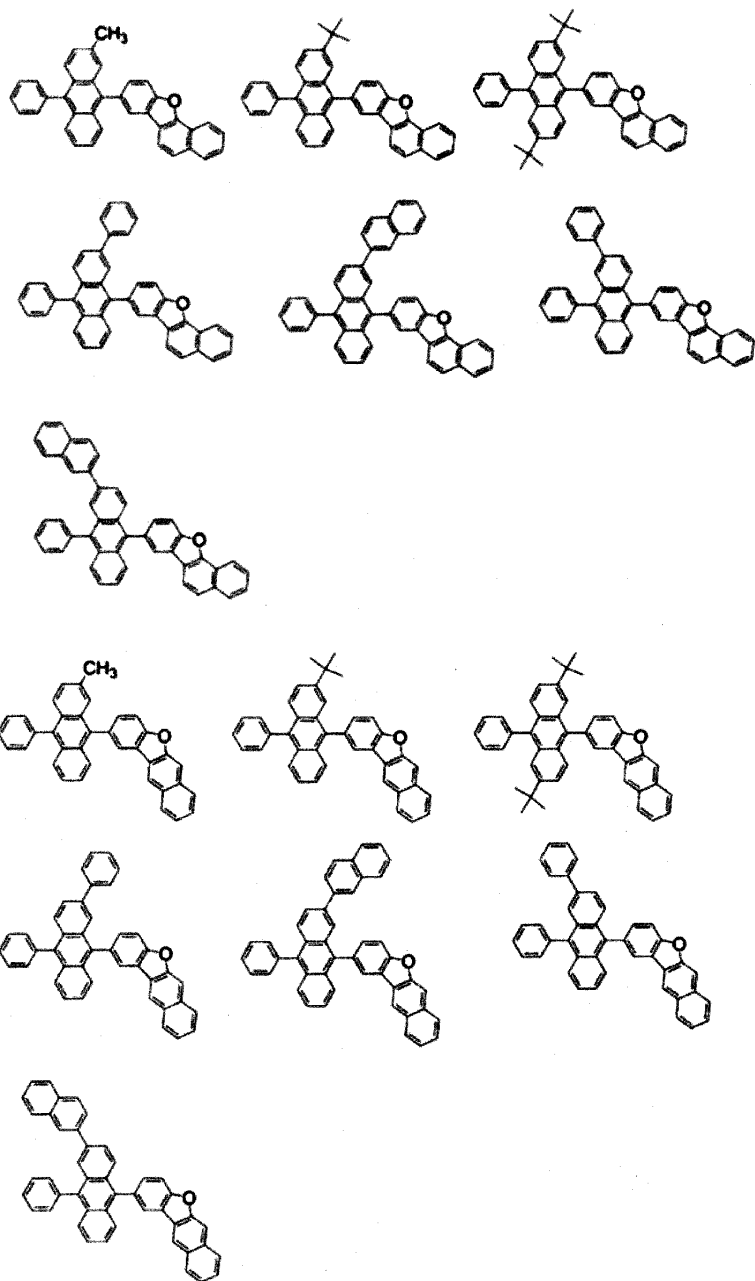
[0470]



[0471]



[0472]



[0473]

[0474]

일 실시형태에서는, 발광층이 식(1-1) 및 식(1-3)으로 표시되는 화합물 또는 식(1-2) 및 식(1-3)으로 표시되는 화합물과 식(10)으로 표시되는 화합물을 포함하는 경우, 식(1-1) 및 식(1-3)으로 표시되는 화합물 또는 하기 식(1-2) 및 식(1-3)으로 표시되는 화합물의 함유량은, 발광층 전체에 대하여, 1 질량% 이상 20 질량% 이하가 바람직하다.

[0475]

또한, 일 실시형태에서는, 발광층이 식(1-1) 및 식(1-3)으로 표시되는 화합물 또는 식(1-2) 및 식(1-3)으로 표시되는 화합물과 식(10)으로 표시되는 화합물을 포함하는 경우, 식(10)으로 표시되는 화합물의 함유량은, 발광층 전체에 대하여, 80 질량% 이상 99 질량% 이하가 바람직하다.

[0476]

일 실시형태에서는, 발광층이 식(3-11)으로 표시되는 화합물과 식(10)으로 표시되는 화합물을 포함하는 경우, 식(3-11)으로 표시되는 화합물의 함유량은, 발광층 전체에 대하여, 1 질량% 이상 20 질량% 이하가 바람직하다.

[0477]

또한, 일 실시형태에서는, 발광층이 식(3-11)으로 표시되는 화합물과 식(10)으로 표시되는 화합물을 포함하는 경우, 식(10)으로 표시되는 화합물의 함유량은, 발광층 전체에 대하여, 80 질량% 이상 99 질량% 이하가 바람직하다.

[0478]

일 실시형태에서는, 발광층이 식(3-21)으로 표시되는 화합물과 식(10)으로 표시되는 화합물을 포함하는 경우, 식(3-21)으로 표시되는 화합물의 함유량은, 발광층 전체에 대하여, 1 질량% 이상 20 질량% 이하가 바람직하다.

- [0479] 또한, 일 실시형태에서는, 발광층이 식(3-21)으로 표시되는 화합물과 식(10)으로 표시되는 화합물을 포함하는 경우, 식(10)으로 표시되는 화합물의 함유량은, 발광층 전체에 대하여, 80 질량% 이상 99 질량% 이하가 바람직하다.
- [0480] 일 실시형태에서는, 발광층이 식(3-31) 또는 식(3-32)으로 표시되는 화합물과 식(10)으로 표시되는 화합물을 포함하는 경우, 식(3-31) 또는 식(3-32)으로 표시되는 화합물의 함유량은, 발광층 전체에 대하여, 1 질량% 이상 20 질량% 이하가 바람직하다.
- [0481] 또한, 일 실시형태에서는, 발광층이 식(3-31) 또는 식(3-32)으로 표시되는 화합물과 식(10)으로 표시되는 화합물을 포함하는 경우, 식(10)으로 표시되는 화합물의 함유량은, 발광층 전체에 대하여, 80 질량% 이상 99 질량% 이하가 바람직하다.
- [0482] 이하, 본 발명의 일 양태에 따른 유기 EL 소자의 층 구성에 관해서 설명한다.
- [0483] 본 발명의 일 양태에 따른 유기 EL 소자는, 음극 및 양극으로 이루어지는 한 쌍의 전극 사이에 유기층을 구비하고 있다. 유기층은 유기 화합물로 구성되는 층을 적어도 1층 포함한다. 혹은 또한, 유기층은 유기 화합물로 구성되는 복수의 층이 적층되어 이루어진다. 유기층은 유기 화합물에 더하여 무기 화합물을 추가로 포함하고 있어도 좋다.
- [0484] 일 실시형태에서는, 유기층 중의 적어도 1층이 발광층이다. 유기층은, 예컨대, 1층의 발광층으로서 구성되어 있어도 좋고, 또한 유기 EL 소자의 층 구성에서 채용될 수 있는 다른 층을 포함하고 있어도 좋다. 유기 EL 소자의 층 구성에서 채용될 수 있는 층으로서, 특별히 한정되는 것은 아니지만, 예컨대, 양극과 발광층의 사이에 마련되는 정공수송 대역(정공 수송층, 정공 주입층, 전자 저지층, 여기자 저지층 등), 발광층, 스페이스층, 음극과 발광층의 사이에 마련되는 전자 수송 대역(전자 수송층, 전자 주입층, 정공 저지층 등) 등을 들 수 있다.
- [0485] 본 발명의 일 양태에 따른 유기 EL 소자는, 예컨대, 형광 또는 인광 발광형의 단색 발광 소자라도 좋고, 형광/인광 하이브리드형의 백색 발광 소자라도 좋다. 또한, 단독의 발광 유닛을 갖는 심플형이라도 좋고, 복수의 발광 유닛을 갖는 탠덤형이라도 좋다.
- [0486] 또한, 본 명세서에 기재된 「발광 유닛」이란, 유기층을 포함하고, 이 유기층 중 적어도 1층이 발광층이며, 주입된 정공과 전자가 재결합함으로써 발광하는 최소 단위를 말한다.
- [0487] 또한, 본 명세서에 기재된 「발광층」이란 발광 기능을 갖는 유기층이다. 발광층은 예컨대, 인광 발광층, 형광 발광층 등이며, 또한 1층이라도 복수의 층이라도 좋다.
- [0488] 발광 유닛은, 인광 발광층이나 형광 발광층을 복수 갖는 적층형이라도 좋으며, 이 경우, 예컨대, 인광 발광층에서 생성된 여기자가 형광 발광층으로 확산하는 것을 막기 위한 스페이스층을 각 발광층 사이에 갖고 있어도 좋다.
- [0489] 심플형 유기 EL 소자로서는 예컨대, 양극/발광 유닛/음극과 같은 소자 구성을 들 수 있다.
- [0490] 발광 유닛의 대표적인 층 구성을 이하에 나타낸다. 괄호 안의 층은 임의이다.
- [0491] (a) (정공 주입층/)정공 수송층/형광 발광층(/전자 수송층/전자 주입층)
- [0492] (b) (정공 주입층/)정공 수송층/인광 발광층(/전자 수송층/전자 주입층)
- [0493] (c) (정공 주입층/)정공 수송층/제1 형광 발광층/제2 형광 발광층(/전자 수송층/전자 주입층)
- [0494] (d) (정공 주입층/)정공 수송층/제1 인광 발광층/제2 인광 발광층(/전자 수송층/전자 주입층)
- [0495] (e) (정공 주입층/)정공 수송층/인광 발광층/스페이스층/형광 발광층(/전자 수송층/전자 주입층)
- [0496] (f) (정공 주입층/)정공 수송층/제1 인광 발광층/제2 인광 발광층/스페이스층/형광 발광층(/전자 수송층/전자 주입층)
- [0497] (g) (정공 주입층/)정공 수송층/제1 인광 발광층/스페이스층/제2 인광 발광층/스페이스층/형광 발광층(/전자 수송층/전자 주입층)
- [0498] (h) (정공 주입층/)정공 수송층/인광 발광층/스페이스층/제1 형광 발광층/제2 형광 발광층(/전자 수송층/전자 주입층)

- [0499] (i) (정공 주입층/정공 수송층/전자 저지층/형광 발광층(/전자 수송층/전자 주입층)
- [0500] (j) (정공 주입층/정공 수송층/전자 저지층/인광 발광층(/전자 수송층/전자 주입층)
- [0501] (k) (정공 주입층/정공 수송층/여기자 저지층/형광 발광층(/전자 수송층/전자 주입층)
- [0502] (l) (정공 주입층/정공 수송층/여기자 저지층/인광 발광층(/전자 수송층/전자 주입층)
- [0503] (m) (정공 주입층/제1 정공 수송층/제2 정공 수송층/형광 발광층(/전자 수송층/전자 주입층)
- [0504] (n) (정공 주입층/제1 정공 수송층/제2 정공 수송층/형광 발광층(/제1 전자 수송층/제2 전자 수송층/전자 주입층)
- [0505] (o) (정공 주입층/제1 정공 수송층/제2 정공 수송층/인광 발광층(/전자 수송층/전자 주입층)
- [0506] (p) (정공 주입층/제1 정공 수송층/제2 정공 수송층/인광 발광층(/제1 전자 수송층/제2 전자 수송층/전자 주입층)
- [0507] (q) (정공 주입층/정공 수송층/형광 발광층/정공 저지층(/전자 수송층/전자 주입층)
- [0508] (r) (정공 주입층/정공 수송층/인광 발광층/정공 저지층(/전자 수송층/전자 주입층)
- [0509] (s) (정공 주입층/정공 수송층/형광 발광층/여기자 저지층(/전자 수송층/전자 주입층)
- [0510] (t) (정공 주입층/정공 수송층/인광 발광층/여기자 저지층(/전자 수송층/전자 주입층)
- [0511] 단, 본 발명의 일 양태에 따른 유기 EL 소자의 층 구성은 이들에 한정되는 것이 아니다. 예컨대, 유기 EL 소자가 정공 주입층 및 정공 수송층을 갖는 경우에는, 정공 수송층과 양극의 사이에 정공 주입층이 마련되어 있는 것이 바람직하다. 또한, 유기 EL 소자가 전자 주입층 및 전자 수송층을 갖는 경우에는, 전자 수송층과 음극의 사이에 전자 주입층이 마련되어 있는 것이 바람직하다. 또한, 정공 주입층, 정공 수송층, 전자 수송층 및 전자 주입층 각각은, 1층으로 구성되어 있어도 좋고, 복수의 층으로 구성되어 있어도 좋다.
- [0512] 복수의 인광 발광층 및 인광 발광층과 형광 발광층은 각각 서로 다른 색의 발광층이라도 좋다. 예컨대, 상기 발광 유닛(f)은, 정공 수송층/제1 인광 발광층(적색 발광)/제2 인광 발광층(녹색 발광)/스페이스층/형광 발광층(청색 발광)/전자 수송층으로 할 수도 있다.
- [0513] 또한, 각 발광층과 정공 수송층 또는 스페이스층의 사이에 전자 저지층을 두어도 좋다. 또한, 각 발광층과 전자 수송층의 사이에 정공 저지층을 두어도 좋다. 전자 저지층이나 정공 저지층을 마련함으로써, 전자 또는 정공을 발광층 내에 가둬, 발광층에 있어서의 전하의 재결합 확률을 높여, 발광 효율을 향상시킬 수 있다.
- [0514] 탠덤형 유기 EL 소자의 대표적인 소자 구성으로서는, 예컨대, 양극/제1 발광 유닛/중간층/제2 발광 유닛/음극과 같은 소자 구성을 들 수 있다.
- [0515] 제1 발광 유닛 및 제2 발광 유닛은, 예컨대, 각각 독립적으로 상술한 발광 유닛에서 선택할 수 있다.
- [0516] 중간층은, 일반적으로 중간 전극, 중간 도전층, 전하 발생층, 전자 인발층, 접속층, 커넥터층 또는 중간 절연층이라고도 불린다. 중간층은, 제1 발광 유닛에 전자를, 제2 발광 유닛에 정공을 공급하는 층이며, 공지된 재료에 의해 형성할 수 있다.
- [0517] 도 1에 유기 EL 소자의 층 구성의 일례의 개략을 도시한다. 유기 EL 소자(1)는, 기판(2), 양극(3), 음극(4) 및 이 양극(3)과 음극(4)의 사이에 배치된 발광 유닛(유기층)(10)을 갖는다. 발광 유닛(10)은 적어도 하나의 발광층(5)을 갖는다.
- [0518] 발광층(5)과 양극(3)의 사이에 정공 수송 대역(정공 주입층, 정공 수송층 등)(6), 발광층(5)과 음극(4)의 사이에 전자 수송 대역(전자 주입층, 전자 수송층 등)(7)을 형성하여도 좋다. 또한, 발광층(5)의 양극(3) 측에 전자 저지층(도시하지 않음)을, 발광층(5)의 음극(4) 측에 정공 저지층(도시하지 않음)을 각각 마련하여도 좋다. 이에 의해, 전자나 정공을 발광층(5)에 가둬, 발광층(5)에 있어서의 여기자의 생성 효율을 더욱 높일 수 있다.
- [0519] 도 2에 유기 EL 소자의 층 구성의 다른 일례의 개략을 도시한다. 도 2에 도시하는 유기 EL 소자(11)에서는, 발광 유닛(20)에 있어서, 도 1의 유기 EL 소자(1)의 발광 유닛(10)의 정공 수송 대역(6)의 정공 수송층 및 전자 수송 대역(7)의 전자 수송층을, 각각 2층 구조로 하고 있다. 정공 수송 대역(6)은, 양극측의 제1 정공 수송층(6a) 및 음극측의 제2 정공 수송층(6b)을 갖고 있다. 전자 수송 대역(7)은, 양극측의 제1 전자 수송층(7a) 및

음극층의 제2 정공 수송층(7b)을 갖고 있다. 또한, 그 밖의 부호에 관해서는 도 1과 동일하기 때문에 설명을 생략한다.

[0520] 이하, 본 명세서에 기재한 유기 EL 소자의 각 층의 기능이나 재료 등에 관해서 설명한다.

[0521] (기관)

[0522] 기관은 유기 EL 소자의 지지체로서 이용된다. 기관은, 파장 400~700 nm의 가시광 영역의 빛의 투과율이 50% 이상인 것이 바람직하고, 또한 평활한 기관이 바람직하다. 기관 재료로서는, 예컨대, 소다 라임 유리, 알루미늄실리케이트 유리, 석영 유리, 플라스틱 등을 들 수 있다. 또한, 기관으로서 가요성 기관을 이용할 수 있다. 가요성 기관이란, 절곡될 수 있는(플렉시블한) 기관을 가리키며, 예컨대, 플라스틱 기관 등을 들 수 있다. 플라스틱 기관을 형성하는 재료의 구체예로서는, 폴리카보네이트, 폴리아릴레이트, 폴리에테르술폰, 폴리프로필렌, 폴리에스테르, 폴리불화비닐, 폴리염화비닐, 폴리이미드, 폴리에틸렌나프탈레이트 등을 들 수 있다. 또한, 무기 증착 필름을 이용할 수도 있다.

[0523] (양극)

[0524] 양극으로서는, 예컨대, 금속, 합금, 도전성 화합물 및 이들의 혼합물 등이며, 일함수가 큰(구체적으로는, 4.0 eV 이상) 것을 이용하는 것이 바람직하다. 양극 재료의 구체예로서는, 산화인듐-산화주석(ITO: Indium Tin Oxide), 규소 혹은 산화규소를 함유하는 산화인듐-산화주석, 산화인듐-산화아연, 산화텅스텐, 산화아연을 함유하는 산화인듐, 그래핀 등을 들 수 있다. 또한, 금, 은, 백금, 니켈, 텅스텐, 크롬, 몰리브덴, 철, 코발트, 구리, 팔라듐, 티탄 및 이들 금속의 질화물(예컨대, 질화티탄) 등을 들 수 있다.

[0525] 양극은 통상 이들 재료를 스퍼터링법에 의해 기관 상에 성막함으로써 형성된다. 예컨대, 산화인듐-산화아연은, 산화인듐에 대하여 1~10 질량%의 산화아연을 첨가한 타겟을 이용하여, 스퍼터링법에 의해 형성할 수 있다. 또한, 예컨대, 산화텅스텐, 또는 산화아연을 함유하는 산화인듐은, 산화인듐에 대하여 산화텅스텐을 0.5~5 질량%, 또는 산화아연을 0.1~1 질량% 첨가한 타겟을 이용하여, 스퍼터링법에 의해 형성할 수 있다.

[0526] 양극의 다른 형성 방법으로서, 예컨대, 진공증착법, 도포법, 잉크젯법, 스핀코트법 등을 들 수 있다. 예컨대, 은 페이스트 등을 이용하는 경우는, 도포법이나 잉크젯법 등을 이용할 수 있다.

[0527] 또한, 양극에 접하여 형성되는 정공 주입층은, 양극의 일함수와 관계없이 정공 주입이 용이한 재료를 이용하여 형성된다. 이 때문에, 양극에는 일반적인 전극 재료, 예컨대, 금속, 합금, 도전성 화합물, 이들의 혼합물을 이용할 수 있다. 구체적으로는, 리튬, 세슘 등의 알칼리 금속; 마그네슘; 칼슘, 스트론튬 등의 알칼리 토류 금속; 이들 금속을 포함하는 합금(예컨대, 마그네슘-은, 알루미늄-리튬); 유로피움, 이테르븀 등의 희토류 금속; 희토류 금속을 포함하는 합금 등의 일함수가 작은 재료를 양극에 이용할 수도 있다.

[0528] (정공 주입층)

[0529] 정공 주입층은, 정공 주입성이 높은 물질을 포함하는 층이며, 양극으로부터 유기층으로 정공을 주입하는 기능을 갖는다. 정공 주입성이 높은 물질로서는, 예컨대, 몰리브덴 산화물, 티탄 산화물, 바나듐 산화물, 레늄 산화물, 루테튬 산화물, 크롬 산화물, 지르코늄 산화물, 하프늄 산화물, 탄탈 산화물, 은 산화물, 텅스텐 산화물, 망간 산화물, 방향족 아민 화합물, 전자 흡인성(억셉터성) 화합물, 고분자 화합물(올리고머, 덴드리머, 폴리머 등) 등을 들 수 있다. 이들 중에서도 방향족 아민 화합물, 억셉터성 화합물이 바람직하고, 보다 바람직하게는 억셉터성 화합물이다.

[0530] 방향족 아민 화합물의 구체예로서는, 4,4',4"-트리스(N,N-디페닐아미노)트리페닐아민(약칭: TDATA), 4,4',4"-트리스[N-(3-메틸페닐)-N-페닐아미노]트리페닐아민(약칭: MTDATA), 4,4'-비스[N-(4-디페닐아미노페닐)-N-페닐아미노]비페닐(약칭: DPAB), 4,4'-비스(N-{4-[N'-(3-메틸페닐)-N'-페닐아미노]페닐}-N-페닐아미노)비페닐(약칭: DNTPD), 1,3,5-트리스[N-(4-디페닐아미노페닐)-N-페닐아미노]벤젠(약칭: DPA3B), 3-[N-(9-페닐카르바졸-3-일)-N-페닐아미노]-9-페닐카르바졸(약칭: PCzPCA1), 3,6-비스[N-(9-페닐카르바졸-3-일)-N-페닐아미노]-9-페닐카르바졸(약칭: PCzPCA2), 3-[N-(1-나프틸)-N-(9-페닐카르바졸-3-일)아미노]-9-페닐카르바졸(약칭: PCzPCN1) 등을 들 수 있다.

[0531] 억셉터성 화합물로서는, 예컨대, 전자 흡인기를 갖는 복소환 유도체, 전자 흡인기를 갖는 퀴논 유도체, 아릴보란 유도체, 헤테로아릴보란 유도체 등이 바람직하고, 구체예로서는 헥사시아노헥사아자트리페닐렌, 2,3,5,6-테트라플루오로-7,7,8,8-테트라시아노퀴노디메탄(약칭: F4TCNQ), 1,2,3-트리스[(시아노)(4-시아노-2,3,5,6-테트라

플루오로페닐)메틸렌]시클로프로판 등을 들 수 있다.

- [0532] 엑셉터성 화합물을 이용하는 경우, 정공 주입층은 추가로 매트릭스 재료를 포함하는 것이 바람직하다. 매트릭스 재료로서는, 유기 EL 소자용의 재료로서 공지된 재료를 이용할 수 있으며, 예컨대, 전자 공여성(도너성) 화합물을 이용하는 것이 바람직하고, 보다 바람직하게는 상술한 방향족 아민 화합물이 이용된다.
- [0533] (정공 수송층)
- [0534] 정공 수송층은, 정공 수송성이 높은 물질을 포함하는 층이며, 양극으로부터 유기층으로 정공을 수송하는 기능을 갖는다.
- [0535] 정공 수송성이 높은 물질로서는, $10^{-6} \text{ cm}^2/(\text{V} \cdot \text{s})$ 이상의 정공 이동도를 갖는 물질인 것이 바람직하며, 예컨대, 방향족 아민 화합물, 카르바졸 유도체, 안트라센 유도체, 고분자 화합물 등을 들 수 있다.
- [0536] 방향족 아민 화합물의 구체예로서는, 4,4'-비스[N-(1-나프틸)-N-페닐아미노]비페닐(약칭: NPB), N,N'-비스(3-메틸페닐)-N,N'-디페닐-[1,1'-비페닐]-4,4'-디아민(약칭: TPD), 4-페닐-4'-(9-페닐플루오렌-9-일)트리페닐아민(약칭: BAFLP), 4,4'-비스[N-(9,9-디메틸플루오렌-2-일)-N-페닐아미노]비페닐(약칭: DFLDPBi), 4,4',4"-트리스(N,N-디페닐아미노)트리페닐아민(약칭: TDATA), 4,4',4"-트리스[N-(3-메틸페닐)-N-페닐아미노]트리페닐아민(약칭: MTDATA), 4,4'-비스[N-(스피로-9,9'-비플루오렌-2-일)-N-페닐아미노]비페닐(약칭: BSPB) 등을 들 수 있다.
- [0537] 카르바졸 유도체의 구체예로서는, 4,4'-디(9-카르바졸릴)비페닐(약칭: CBP), 9-[4-(9-카르바졸릴)페닐]-10-페닐안트라센(약칭: CzPA), 9-페닐-3-[4-(10-페닐-9-안트릴)페닐]-9H-카르바졸(약칭: PCzPA) 등을 들 수 있다.
- [0538] 안트라센 유도체의 구체예로서는, 2-t-부틸-9,10-디(2-나프틸)안트라센(약칭: t-BuDNA), 9,10-디(2-나프틸)안트라센(약칭: DNA), 9,10-디페닐안트라센(약칭: DPAnth) 등을 들 수 있다.
- [0539] 고분자 화합물의 구체예로서는, 폴리(N-비닐카르바졸)(약칭: PVK) 및 폴리(4-비닐트리페닐아민)(약칭: PVTPA) 등을 들 수 있다.
- [0540] 전자 수송성보다도 정공 수송성 쪽이 높은 화합물이면, 정공 수송층에, 이들 이외의 물질을 이용하여도 좋다.
- [0541] 정공 수송층은 단층이라도 좋고, 2층 이상이 적층되어 있어도 좋다. 이 경우, 발광층에 가까운 측에, 정공 수송성이 높은 물질 중, 에너지 갭이 보다 큰 물질을 포함하는 층을 배치하는 것이 바람직하다.
- [0542] (발광층)
- [0543] 발광층은 발광성이 높은 물질(도펀트 재료)을 포함하는 층이다. 도펀트 재료로서는 다양한 재료를 이용할 수 있으며, 예컨대, 형광 발광성 화합물(형광 도펀트), 인광 발광성 화합물(인광 도펀트) 등을 이용할 수 있다. 형광 발광성 화합물이란, 일중항 여기 상태에서부터 발광 가능한 화합물이며, 이것을 포함하는 발광층은 형광 발광층이라고 불린다. 또한, 인광 발광성 화합물이란, 삼중항 여기 상태에서부터 발광 가능한 화합물이며, 이것을 포함하는 발광층은 인광 발광층이라고 불린다.
- [0544] 발광층은, 통상 도펀트 재료 및 이것을 효율적으로 발광시키기 위한 호스트 재료를 함유한다. 또한, 도펀트 재료는 문헌에 따라서는 게스트 재료, 에미터 또는 발광 재료라고 부르는 경우도 있다. 또한, 호스트 재료는 문헌에 따라서는 매트릭스 재료라고 부르는 경우도 있다.
- [0545] 하나의 발광층에 복수의 도펀트 재료 및 복수의 호스트 재료를 포함하여도 좋다. 또한, 발광층이 복수라도 좋다.
- [0546] 본 명세서에서는, 형광 도펀트와 조합된 호스트 재료를 「형광 호스트」라고 칭하고, 인광 도펀트와 조합된 호스트 재료를 「인광 호스트」라고 칭한다. 또한, 형광 호스트와 인광 호스트는 분자 구조만으로 구분되는 것은 아니다. 인광 호스트란 인광 도펀트를 함유하는 인광 발광층을 형성하는 재료이지만, 형광 발광층을 형성하는 재료로서 이용할 수 없다는 것을 의미하는 것은 아니다. 형광 호스트에 관해서도 마찬가지다.
- [0547] 일 실시형태에 있어서, 발광층에는, 식(1-1) 및 식(1-3)으로 표시되는 화합물 또는 식(1-2) 및 식(1-3)으로 표시되는 화합물(이하, 이들 화합물을 「화합물(1)」이라고 하는 경우가 있음)이 포함되어 있는 것이 바람직하고, 보다 바람직하게는 도펀트 재료로서 포함된다. 또한, 화합물(1)은 형광 도펀트로서 발광층에 포함되는 것이 바람직하다.
- [0548] 일 실시형태에 있어서, 도펀트 재료로서의 발광층에 있어서의 화합물(1)의 함유량은, 특별히 한정되는 것이 아

하지만, 충분한 발광 및 농도 소광의 관점에서, 예컨대, 0.1~70 질량%인 것이 바람직하고, 보다 바람직하게는 0.1~30 질량%, 더욱 바람직하게는 1~30 질량%, 보다 더욱 바람직하게는 1~20 질량%, 특히 바람직하게는 1~10 질량%이다.

[0549] 일 실시형태에 있어서, 발광층에는 식(3-11)으로 표시되는 화합물이 포함되어 있는 것이 바람직하며, 보다 바람직하게는 도펀트 재료로서 포함된다. 또한, 식(3-11)으로 표시되는 화합물은 형광 도펀트로서 발광층에 포함되는 것이 바람직하다.

[0550] 일 실시형태에 있어서, 도펀트 재료로서의 발광층에 있어서의 식(3-11)으로 표시되는 화합물의 함유량은, 특별히 한정되는 것이 아니지만, 충분한 발광 및 농도 소광의 관점에서, 예컨대, 0.1~70 질량%인 것이 바람직하고, 보다 바람직하게는 0.1~30 질량%, 더욱 바람직하게는 1~30 질량%, 보다 더욱 바람직하게는 1~20 질량%, 특히 바람직하게는 1~10 질량%이다.

[0551] 일 실시형태에 있어서, 발광층에는 식(3-21)으로 표시되는 화합물이 포함되어 있는 것이 바람직하며, 보다 바람직하게는 도펀트 재료로서 포함된다. 또한, 식(3-21)으로 표시되는 화합물은 형광 도펀트로서 발광층에 포함되는 것이 바람직하다.

[0552] 일 실시형태에 있어서, 도펀트 재료로서의 발광층에 있어서의 식(3-21)으로 표시되는 화합물의 함유량은, 특별히 한정되는 것은 아니지만, 충분한 발광 및 농도 소광의 관점에서, 예컨대, 0.1~70 질량%인 것이 바람직하고, 보다 바람직하게는 0.1~30 질량%, 더욱 바람직하게는 1~30 질량%, 보다 더욱 바람직하게는 1~20 질량%, 특히 바람직하게는 1~10 질량%이다.

[0553] 일 실시형태에 있어서, 발광층에는 식(3-31) 또는 식(3-32)으로 표시되는 화합물이 포함되어 있는 것이 바람직하며, 보다 바람직하게는 도펀트 재료로서 포함된다. 또한, 식(3-31) 또는 식(3-32)으로 표시되는 화합물은 형광 도펀트로서 발광층에 포함되는 것이 바람직하다.

[0554] 일 실시형태에 있어서, 도펀트 재료로서의 발광층에 있어서의 식(3-31) 또는 식(3-32)으로 표시되는 화합물의 함유량은, 특별히 한정되는 것은 아니지만, 충분한 발광 및 농도 소광의 관점에서, 예컨대, 0.1~70 질량%인 것이 바람직하고, 보다 바람직하게는 0.1~30 질량%, 더욱 바람직하게는 1~30 질량%, 보다 더욱 바람직하게는 1~20 질량%, 특히 바람직하게는 1~10 질량%이다.

[0555] (형광 도펀트)

[0556] 화합물(1), 식(3-11)으로 표시되는 화합물, 식(3-21)으로 표시되는 화합물 및 식(3-31) 또는 식(3-32)으로 표시되는 화합물 이외의 형광 도펀트로서는, 예컨대, 축합 다환 방향족 유도체, 스티릴아민 유도체, 축합환 아민 유도체, 붕소 함유 화합물, 피롤 유도체, 인돌 유도체, 카르바졸 유도체 등을 들 수 있다. 이들 중에서도 축합환 아민 유도체, 붕소 함유 화합물, 카르바졸 유도체가 바람직하다.

[0557] 축합환 아민 유도체로서는, 예컨대, 디아미노피렌 유도체, 디아미노크리센 유도체, 디아미노안트라센 유도체, 디아미노플루오렌 유도체, 벤조푸로 골격이 하나 이상 축합한 디아미노플루오렌 유도체 등을 들 수 있다.

[0558] 붕소 함유 화합물로서는, 예컨대, 피로메텐 유도체, 트리페닐보란 유도체 등을 들 수 있다.

[0559] 청색계의 형광 도펀트로서는, 예컨대, 피렌 유도체, 스티릴아민 유도체, 크리센 유도체, 플루오란텐 유도체, 플루오렌 유도체, 디아민 유도체, 트리아릴아민 유도체 등을 들 수 있다. 구체적으로는, N,N'-비스[4-(9H-카르바졸-9-일)페닐]-N,N'-디페닐스티렌-4,4'-디아민(약칭: YGA2S), 4-(9H-카르바졸-9-일)-4'-(10-페닐-9-안트릴)트리페닐아민(약칭: YGAPA), 4-(10-페닐-9-안트릴)-4'-(9-페닐-9H-카르바졸-3-일)트리페닐아민(약칭: PCBAPA) 등을 들 수 있다.

[0560] 녹색계의 형광 도펀트로서는 예컨대, 방향족 아민 유도체 등을 들 수 있다. 구체적으로는, N-(9,10-디페닐-2-안트릴)-N,9-디페닐-9H-카르바졸-3-아민(약칭: 2PCAPA), N-[9,10-비스(1,1'-비페닐-2-일)-2-안트릴]-N,9-디페닐-9H-카르바졸-3-아민(약칭: 2PCABPhA), N-(9,10-디페닐-2-안트릴)-N,N',N'-트리페닐-1,4-페닐렌디아민(약칭: 2DPAPA), N-[9,10-비스(1,1'-비페닐-2-일)-2-안트릴]-N,N',N'-트리페닐-1,4-페닐렌디아민(약칭: 2DPABPhA), N-[9,10-비스(1,1'-비페닐-2-일)]-N-[4-(9H-카르바졸-9-일)페닐]-N-페닐안트라센-2-아민(약칭: 2YGABPhA), N,N,9-트리페닐안트라센-9-아민(약칭: DPhAPhA) 등을 들 수 있다.

[0561] 적색계의 형광 도펀트로서는 테트라센 유도체, 디아민 유도체 등을 들 수 있다. 구체적으로는, N,N,N',N'-테트라키스(4-메틸페닐)테트라센-5,11-디아민(약칭: p-mPhTD), 7,14-디페닐-N,N,N',N'-테트라키스(4-메틸페닐)아세

나프토[1,2-a]플루오란텐-3,10-디아민(약칭: p-mPhAFD) 등을 들 수 있다.

[0562] (인광 도펀트)

[0563] 인광 도펀트로서는, 예컨대, 인광 발광성의 중금속 착체, 인광 발광성의 희토류 금속 착체를 들 수 있다.

[0564] 중금속 착체로서는, 예컨대, 이리듐 착체, 오스뮴 착체, 백금 착체 등을 들 수 있다. 중금속 착체는, 이리듐, 오스뮴 및 백금에서 선택되는 금속의 오르토메탈화 착체가 바람직하다.

[0565] 희토류 금속 착체로서는 예컨대, 테르븀 착체, 유로피움 착체 등을 들 수 있다. 구체적으로는, 트리스(아세틸아세토네이트)(모노페난트롤린)테르븀(III)(약칭: Tb(acac)₃(Phen)), 트리스(1,3-디페닐-1,3-프로판디오나토)(모노페난트롤린)유로피움(III)(약칭: Eu(DBM)₃(Phen)), 트리스[1-(2-테노일)-3,3,3-트리플루오로아세토나토](모노페난트롤린)유로피움(III)(약칭: Eu(TTA)₃(Phen)) 등을 들 수 있다. 이들 희토류 금속 착체는, 다른 다중도 사이의 전자 천이에 의해 희토류 금속 이온이 발광하기 때문에, 인광 도펀트로서 바람직하다.

[0566] 청색계의 인광 도펀트로서는 예컨대, 이리듐 착체, 오스뮴 착체, 백금 착체 등을 들 수 있다. 구체적으로는, 비스[2-(4',6'-디플루오로페닐)피리디나토-N,C2']이리듐(III)테트라키스(1-피라졸릴)보레이트(약칭: FIr6), 비스[2-(4',6'-디플루오로페닐)피리디나토-N,C2']이리듐(III)피콜리네이트(약칭: FIrpil), 비스[2-(3',5'-비스트리플루오로메틸페닐)피리디나토-N,C2']이리듐(III)피콜리네이트(약칭: Ir(CF₃ppy)₂(pic)), 비스[2-(4',6'-디플루오로페닐)피리디나토-N,C2']이리듐(III)아세틸아세토네이트(약칭: FIracac) 등을 들 수 있다.

[0567] 녹색계의 인광 도펀트로서는 예컨대, 이리듐 착체 등을 들 수 있다. 구체적으로는, 트리스(2-페닐피리디나토-N,C2')이리듐(III)(약칭: Ir(ppy)₃), 비스(2-페닐피리디나토-N,C2')이리듐(III)아세틸아세토네이트(약칭: Ir(ppy)₂(acac)), 비스(1,2-디페닐-1H-벤조이미다졸라토)이리듐(III)아세틸아세토네이트(약칭: Ir(pbi)₂(acac)), 비스(벤조[h]퀴놀리나토)이리듐(III)아세틸아세토네이트(약칭: Ir(bzq)₂(acac)) 등을 들 수 있다.

[0568] 적색계의 인광 도펀트로서는 예컨대, 이리듐 착체, 백금 착체, 테르븀 착체, 유로피움 착체 등을 들 수 있다. 구체적으로는, 비스[2-(2'-벤조[4,5-a]티에닐)피리디나토-N,C3']이리듐(III)아세틸아세토네이트(약칭: Ir(btp)₂(acac)), 비스(1-페닐이소퀴놀리나토-N,C2')이리듐(III)아세틸아세토네이트(약칭: Ir(piq)₂(acac)), (아세틸아세토네이트)비스[2,3-비스(4-플루오로페닐)퀴놀살리나토]이리듐(III)(약칭: Ir(Fdpq)₂(acac)), 2,3,7,8,12,13,17,18-옥타에틸-21H,23H-포르피린백금(II)(약칭: PtOEP) 등을 들 수 있다.

[0569] (호스트 재료)

[0570] 호스트 재료로서는, 예컨대, 알루미늄 착체, 베릴륨 착체, 아연 착체 등의 금속 착체; 인돌 유도체, 피리딘 유도체, 피리미딘 유도체, 트리아진 유도체, 퀴놀린 유도체, 이소퀴놀린 유도체, 퀴나졸린 유도체, 디벤조푸란 유도체, 디벤조티오펜 유도체, 옥사디아졸 유도체, 벤조이미다졸 유도체, 페난트롤린 유도체 등의 복소환 화합물; 나프탈렌 유도체, 트리페닐렌 유도체, 카르바졸 유도체, 안트라센 유도체, 페난트렌 유도체, 피렌 유도체, 크리센 유도체, 나프타센 유도체, 플루오란텐 유도체 등의 축합 방향족 화합물; 트리알릴아민 유도체, 축합 다환 방향족 아민 유도체 등의 방향족 아민 화합물 등을 들 수 있다. 호스트 재료는 복수 종류를 병용하여도 좋다.

[0571] 금속 착체의 구체예로서는, 트리스(8-퀴놀리놀라토)알루미늄(III)(약칭: Alq), 트리스(4-메틸-8-퀴놀리놀라토)알루미늄(III)(약칭: Almq3), 비스(10-히드록시벤조[h]퀴놀리나토)베릴륨(II)(약칭: BeBq2), 비스(2-메틸-8-퀴놀리놀라토)(4-페닐페놀라토)알루미늄(III)(약칭: BA1q), 비스(8-퀴놀리놀라토)아연(II)(약칭: Znq), 비스[2-(2-벤조옥사졸릴)페놀라토]아연(II)(약칭: ZnPB0), 비스[2-(2-벤조티아졸릴)페놀라토]아연(II)(약칭: ZnBTZ) 등을 들 수 있다.

[0572] 복소환 화합물의 구체예로서는, 2-(4-비페닐릴)-5-(4-tert-부틸페닐)-1,3,4-옥사디아졸(약칭: PBD), 1,3-비스[5-(p-tert-부틸페닐)-1,3,4-옥사디아졸-2-일]벤젠(약칭: OXD-7), 3-(4-비페닐릴)-4-페닐-5-(4-tert-부틸페닐)-1,2,4-트리아졸(약칭: TAZ), 2,2',2''-(1,3,5-벤젠트리일)트리스(1-페닐-1H-벤조이미다졸)(약칭: TPBI), 바소페난트롤린(약칭: BPhen), 바소큐프로인(약칭: BCP) 등을 들 수 있다.

[0573] 축합 방향족 화합물의 구체예로서는, 9-[4-(10-페닐-9-안트릴)페닐]-9H-카르바졸(약칭: CzPA), 3,6-디페닐-9-[4-(10-페닐-9-안트릴)페닐]-9H-카르바졸(약칭: DPCzPA), 9,10-비스(3,5-디페닐페닐)안트라센(약칭: DPPA),

9,10-디(2-나프틸)안트라센(약칭: DNA), 2-tert-부틸-9,10-디(2-나프틸)안트라센(약칭: t-BuDNA), 9,9'-비안트릴(약칭: BANT), 9,9'-(스틸벤-3,3'-디일)디페난트렌(약칭: DPNS), 9,9'-(스틸벤-4,4'-디일)디페난트렌(약칭: DPNS2), 3,3',3'-(벤젠-1,3,5-트리일)트리피렌(약칭: TPB3), 9,10-디페닐안트라센(약칭: DPAnth), 6,12-디메톡시-5,11-디페닐크리센 등을 들 수 있다.

[0574] 방향족 아민 화합물의 구체예로서는, N,N-디페닐-9-[4-(10-페닐-9-안트릴)페닐]-9H-카르바졸-3-아민(약칭: CzA1PA), 4-(10-페닐-9-안트릴)트리페닐아민(약칭: DPhPA), N,9-디페닐-N-[4-(10-페닐-9-안트릴)페닐]-9H-카르바졸-3-아민(약칭: PCAPA), N,9-디페닐-N-{4-[4-(10-페닐-9-안트릴)페닐]페닐}-9H-카르바졸-3-아민(약칭: PCAPBA), N-(9,10-디페닐-2-안트릴)-N,9-디페닐-9H-카르바졸-3-아민(약칭: 2PCAPA), 4,4'-비스[N-(1-나프틸)-N-페닐아미노]비페닐(약칭: NPB 또는 α -NPD), N,N'-비스(3-메틸페닐)-N,N'-디페닐-[1,1'-비페닐]-4,4'-디아민(약칭: TPD), 4,4'-비스[N-(9,9-디메틸플루오렌-2-일)-N-페닐아미노]비페닐(약칭: DFDPBi), 4,4'-비스[N-(스피로-9,9'-비플루오렌-2-일)-N-페닐아미노]비페닐(약칭: BSPB) 등을 들 수 있다.

[0575] 형광 호스트로서는, 형광 도펀트보다도 높은 일중항 준위를 갖는 화합물이 바람직하며, 예컨대, 복소환 화합물, 축합 방향족 화합물 등을 들 수 있다. 축합 방향족 화합물로서는, 예컨대, 안트라센 유도체, 피렌 유도체, 크리센 유도체, 나프타센 유도체 등이 바람직하다.

[0576] 인광 호스트로서는, 인광 도펀트보다도 높은 삼중항 준위를 갖는 화합물이 바람직하며, 예컨대, 금속 착체, 복소환 화합물, 축합 방향족 화합물 등을 들 수 있다. 이들 중에서도, 예컨대, 인돌 유도체, 카르바졸 유도체, 피리딘 유도체, 피리미딘 유도체, 트리아진 유도체, 퀴놀린 유도체, 이소퀴놀린 유도체, 퀴나졸린 유도체, 디벤조푸란 유도체, 디벤조티오펜 유도체, 나프탈렌 유도체, 트리페닐렌 유도체, 페난트렌 유도체, 플루오란텐 유도체 등이 바람직하다.

[0577] (전자 수송층)

[0578] 전자 수송층은 전자 수송성이 높은 물질을 포함하는 층이다. 전자 수송성이 높은 물질로서는, $10^{-6} \text{ cm}^2/\text{Vs}$ 이상의 전자 이동도를 갖는 물질인 것이 바람직하며, 예컨대, 금속 착체, 방향족 복소환 화합물, 방향족 탄화수소 화합물, 고분자 화합물 등을 들 수 있다.

[0579] 금속 착체로서는, 예컨대, 알루미늄 착체, 베릴륨 착체, 아연 착체 등을 들 수 있다. 구체적으로는, 트리스(8-퀴놀리놀라토)알루미늄(III)(약칭: Alq), 트리스(4-메틸-8-퀴놀리놀라토)알루미늄(약칭: Almq3), 비스(10-히드록시벤조[h]퀴놀리나토)베릴륨(약칭: BeBq2), 비스(2-메틸-8-퀴놀리놀라토)(4-페닐페놀라토)알루미늄(III)(약칭: BA1q), 비스(8-퀴놀리놀라토)아연(II)(약칭: Znq), 비스[2-(2-벤조옥사졸릴)페놀라토]아연(II)(약칭: ZnPBO), 비스[2-(2-벤조티아졸릴)페놀라토]아연(II)(약칭: ZnBTZ) 등을 들 수 있다.

[0580] 방향족 복소환 화합물로서는, 예컨대, 벤즈이미다졸 유도체, 이미다조피리딘 유도체, 벤즈이미다조페난트리딘 유도체 등의 이미다졸 유도체; 피리미딘 유도체, 트리아진 유도체 등의 아진 유도체; 퀴놀린 유도체, 이소퀴놀린 유도체, 페난트롤린 유도체 등의 합질소 6원환 구조를 포함하는 화합물(복소환에 포스포옥사이드계의 치환기를 갖는 것도 포함함) 등을 들 수 있다. 구체적으로는, 2-(4-비페닐릴)-5-(4-tert-부틸페닐)-1,3,4-옥사디아졸(약칭: PBD), 1,3-비스[5-(p-tert-부틸페닐)-1,3,4-옥사디아졸-2-일]벤젠(약칭: OXD-7), 3-(4-tert-부틸페닐)-4-페닐-5-(4-비페닐릴)-1,2,4-트리아졸(약칭: TAZ), 3-(4-tert-부틸페닐)-4-(4-에틸페닐)-5-(4-비페닐릴)-1,2,4-트리아졸(약칭: p-EtTAZ), 바소페난트롤린(약칭: BPhen), 바소큐프로인(약칭: BCP), 4,4'-비스(5-메틸벤조옥사졸-2-일)스틸벤(약칭: BNOs) 등을 들 수 있다.

[0581] 방향족 탄화수소 화합물로서는 예컨대, 안트라센 유도체, 플루오란텐 유도체 등을 들 수 있다.

[0582] 고분자 화합물의 구체예로서는, 폴리[(9,9-디헥실플루오렌-2,7-디일)-co-(피리딘-3,5-디일)](약칭: PF-Py), 폴리[(9,9-디옥틸플루오렌-2,7-디일)-co-(2,2'-비피리딘-6,6'-디일)](약칭: PF-BPy) 등을 들 수 있다.

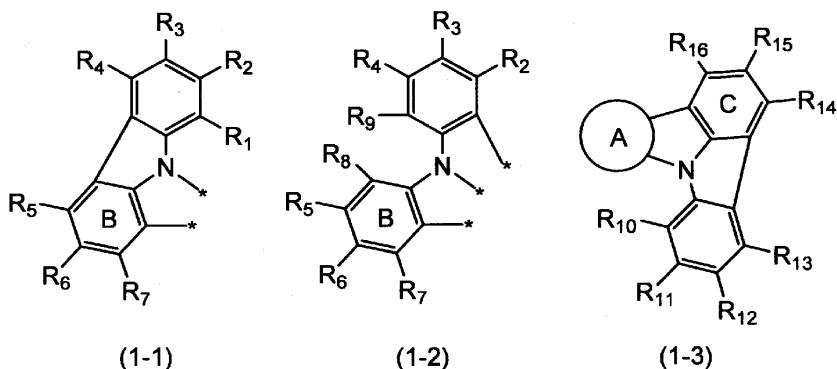
[0583] 정공 수송성보다도 전자 수송성 쪽이 높은 화합물이라면, 전자 수송층에, 이들 이외의 물질을 이용하여도 좋다.

[0584] 전자 수송층은 단층이라도 좋고, 2층 이상이 적층되어 있어도 좋다. 이 경우, 발광층에 가까운 측에, 전자 수송성이 높은 물질 중, 에너지 갭이 보다 큰 물질을 포함하는 층을 배치하는 것이 바람직하다.

[0585] 예컨대, 도 2에 도시하는 것과 같이, 양극층의 제1 전자 수송층(7a) 및 음극층의 제2 전자 수송층(7b)을 포함하는 구성이라도 좋다.

- [0586] 전자 수송층에는, 예컨대, 알칼리 금속, 마그네슘, 알칼리 토류 금속, 이들 중 2 이상의 금속을 포함하는 합금 등의 금속; 8-퀴놀리놀라토리튬(약칭: Liq) 등의 알칼리 금속 화합물, 알칼리 토류 금속 화합물 등의 금속 화합물이 포함되어 있어도 좋다. 알칼리 금속, 마그네슘, 알칼리 토류 금속 또는 이들 중의 2 이상의 금속을 포함하는 합금 등의 금속이 전자 수송층에 포함되는 경우, 그 함유량은 특별히 한정되는 것은 아니지만, 0.1~50 질량%인 것이 바람직하고, 보다 바람직하게는 0.1~20 질량%, 더욱 바람직하게는 1~10 질량%이다.
- [0587] 알칼리 금속 화합물 또는 알칼리 토류 금속 화합물 등의 금속 화합물의 금속 화합물이 전자 수송층에 포함되는 경우, 그 함유량은 1~99 질량%인 것이 바람직하고, 보다 바람직하게는 10~90 질량%이다. 또한, 전자 수송층이 복수 층인 경우의 발광층 측에 있는 층은, 이들 금속 화합물만으로 형성할 수도 있다.
- [0588] (전자 주입층)
- [0589] 전자 주입층은, 전자 주입성이 높은 물질을 포함하는 층이며, 음극으로부터 발광층으로 효율적으로 전자 주입하는 기능을 갖는다. 전자 주입성이 높은 물질로서는, 예컨대, 알칼리 금속, 마그네슘, 알칼리 토류 금속, 이들의 화합물 등을 들 수 있다. 구체적으로는, 리튬, 세슘, 칼슘, 불화리튬, 불화세슘, 불화칼슘, 리튬 산화물 등을 들 수 있다. 그 밖에, 전자 수송성을 갖는 물질에, 알칼리 금속, 마그네슘, 알칼리 토류 금속, 또는 이들의 화합물을 함유시킨 것, 예컨대, Alq에 마그네슘을 함유시킨 것 등을 이용할 수도 있다.
- [0590] 또한 전자 주입층에는, 유기 화합물 및 도너성의 화합물을 포함하는 복합 재료를 이용할 수도 있다. 유기 화합물이 도너성 화합물로부터 전자를 받기 때문에, 이러한 복합 재료는 전자 주입성 및 전자 수송성이 우수하다.
- [0591] 유기 화합물로서는, 받은 전자의 수송성이 우수한 물질이 바람직하며, 예컨대, 상술한 전자 수송성이 높은 물질인 금속 착체나 방향족 복소환 화합물 등을 이용할 수 있다.
- [0592] 도너성의 화합물로서는, 유기 화합물에 전자를 공여할 수 있는 물질이면 되며, 예컨대, 알칼리 금속, 마그네슘, 알칼리 토류 금속, 희토류 금속 등을 들 수 있다. 구체적으로는, 리튬, 세슘, 마그네슘, 칼슘, 에르븀, 이테르븀 등을 들 수 있다. 또한, 알칼리 금속 산화물이나 알칼리 토류 금속 산화물이 바람직하고, 구체적으로는, 리튬 산화물, 칼슘 산화물, 바륨 산화물 등을 들 수 있다. 또한, 산화마그네슘과 같은 루이스 염기를 이용할 수도 있다. 또한, 테트라티아폴발렌(약칭: TTF) 등의 유기 화합물을 이용할 수도 있다.
- [0593] (음극)
- [0594] 음극은 금속, 합금, 도전성 화합물 및 이들의 혼합물 등이며, 일함수가 작은(구체적으로는, 3.8 eV 이하) 것을 이용하는 것이 바람직하다. 음극의 재료로서는, 예컨대, 리튬, 세슘 등의 알칼리 금속; 마그네슘; 칼슘, 스트론튬 등의 알칼리 토류 금속; 이들 금속을 포함하는 합금(예컨대, 마그네슘-은, 알루미늄-리튬); 유로피움, 이테르븀 등의 희토류 금속; 희토류 금속을 포함하는 합금 등을 들 수 있다.
- [0595] 음극은 통상 진공증착법이나 스퍼터링법으로 형성된다. 또한, 은 페이스트 등을 이용하는 경우는, 도포법이나 잉크젯법 등을 이용할 수 있다.
- [0596] 또한, 전자 주입층이 형성되는 경우, 일함수의 대소에 상관없이, 알루미늄, 은, ITO, 그래핀, 규소 혹은 산화규소를 함유하는 산화인듐-산화주석 등, 다양한 도전성 재료를 이용하여 음극을 형성할 수 있다. 이들 도전성 재료는 스퍼터링법이나 잉크젯법, 스핀코트법 등을 이용하여 성막할 수 있다.
- [0597] (절연층)
- [0598] 유기 EL 소자는, 박막에 전계를 인가하기 때문에, 누설이나 쇼트에 의한 화소 결함이 생기기 쉽다. 이것을 방지하기 위해서, 한 쌍의 전극 사이에 박막 절연층을 삽입하여도 좋다.
- [0599] 절연층에 이용되는 물질의 구체예로서는, 산화알루미늄, 불화리튬, 산화리튬, 불화세슘, 산화세슘, 산화마그네슘, 불화마그네슘, 산화칼슘, 불화칼슘, 질화알루미늄, 산화티탄, 산화규소, 산화게르마늄, 질화규소, 질화붕소, 산화몰리브덴, 산화루테튬, 산화바나듐 등을 들 수 있다. 절연층에는, 이들의 혼합물을 이용할 수도 있고, 또한 이들 물질을 포함하는 복수의 층의 적층체로 할 수도 있다.
- [0600] (스페이스층)
- [0601] 스페이스층은, 예컨대, 형광 발광층과 인광 발광층을 적층하는 경우에, 인광 발광층에서 생성되는 여기자의 형광 발광층으로의 확산 방지나 캐리어 밸런스의 조절을 위해서, 양 층 사이에 마련된다. 스페이스층은 복수의 인광 발광층 사이 등에 마련할 수도 있다.

- [0602] 스페이스층은, 복수의 발광층 사이에 마련되기 때문에, 전자 수송성 및 정공 수송성을 겸비한 물질로 형성하는 것이 바람직하다. 또한, 인접하는 인광 발광층 내의 삼중항 에너지의 확산을 방지한다는 관점에서, 삼중항 에너지가 2.6 eV 이상인 것이 바람직하다.
- [0603] 스페이스층에 이용되는 물질로서는 상술한 정공 수송층에 이용되는 물질과 같은 것을 들 수 있다.
- [0604] (전자 저지층, 정공 저지층, 여기자 저지층)
- [0605] 발광층에 인접하여, 전자 저지층, 정공 저지층, 여기자(트리플렛) 저지층 등을 두어도 좋다.
- [0606] 전자 저지층이란, 발광층으로부터 정공 수송층으로 전자가 누출되는 것을 저지하는 기능을 갖는 층이다. 정공 저지층이란, 발광층으로부터 전자 수송층으로 정공이 누출되는 것을 저지하는 기능을 갖는 층이다. 여기자 저지층은, 발광층에서 생성된 여기자가 인접하는 층으로 확산하는 것을 저지하고, 여기자를 발광층 내에 가두는 기능을 갖는 층이다.
- [0607] (층 형성 방법)
- [0608] 유기 EL 소자의 각 층의 형성 방법은, 별도의 기재가 없는 한, 특별히 한정되는 것은 아니다. 형성 방법으로는 건식 성막법, 습식 성막법 등의 공지된 방법을 이용할 수 있다. 건식 성막법의 구체예로서는, 진공증착법, 스퍼터링법, 플라즈마법, 이온플레이팅법 등을 들 수 있다. 습식 성막법의 구체예로서는, 스핀코팅법, 디핑법, 플로우코팅법, 잉크젯법 등의 각종 도포법을 들 수 있다.
- [0609] (막 두께)
- [0610] 유기 EL 소자의 각 층의 막 두께는, 별도의 기재가 없는 한, 특별히 한정되는 것은 아니다. 막 두께가 지나치게 작으면, 핀홀 등의 결함이 생기기 쉽고, 충분한 발광 휘도를 얻을 수 없다. 한편, 막 두께가 지나치게 크면, 높은 구동 전압이 필요하게 되어, 효율이 떨어진다. 이러한 관점에서, 막 두께는 통상 5 nm~10 μm 가 바람직하고, 보다 바람직하게는 10 nm~0.2 μm 이다.
- [0611] [전자기기]
- [0612] 본 발명의 일 양태에 따른 전자기기는, 상술한 본 발명의 일 양태에 따른 유기 EL 소자를 구비하고 있다. 전자기기의 구체예로서는, 유기 EL 패널 모듈 등의 표시 부품; 텔레비전, 휴대전화, 스마트폰, 퍼스널 컴퓨터 등의 표시 장치; 조명, 차량용 등기구의 발광 장치 등을 들 수 있다.
- [0613] [신규 화합물]
- [0614] 본 발명의 일 양태에 의한 신규 화합물은, 하기 식(1-1) 및 식(1-3)으로 표시되는 화합물 또는 하기 식(1-2) 및 식(1-3)으로 표시되는 화합물이다.



- [0615]
- [0616] (상기 식(1-1), 상기 식(1-2) 및 상기 식(1-3) 중,
- [0617] 고리 A는, 치환 혹은 무치환의 고리 형성 탄소수 10~50의 축합 아릴환, 치환 혹은 무치환의 고리 형성 원자수 8~50의 축합 복소환, 또는 하기 식(2)으로 표시되는 벤젠환이다.
- [0618] 상기 식(1-1)의 2개의 결합수 *는, 각각, 상기 고리 A의 상기 축합 아릴환의 고리 형성 탄소 원자, 상기 축합 복소환의 고리 형성 원자, 또는 상기 식(2)으로 표시되는 벤젠환의 고리 형성 탄소 원자와 결합한다.
- [0619] 상기 식(1-2)의 3개의 결합수 *는, 각각, 상기 고리 A의 상기 축합 아릴환의 고리 형성 탄소 원자, 상기 축합

복소환의 고리 형성 원자, 또는 상기 식(2)으로 표시되는 벤젠환의 고리 형성 탄소 원자와 결합한다.

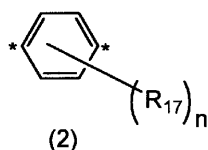
[0620] $R_1 \sim R_{16}$ 중 인접하는 2개 이상의 1조 이상이, 치환 혹은 무치환의 포화 또는 불포화의 고리를 형성하여도 좋다.

[0621] 상기 치환 혹은 무치환의 포화 또는 불포화의 고리를 형성하지 않는 $R_1 \sim R_{16}$ 은, 각각 독립적으로, 수소 원자, 치환 혹은 무치환의 탄소수 1~50의 알킬기, 치환 혹은 무치환의 탄소수 1~50의 할로알킬기, 치환 혹은 무치환의 탄소수 2~50의 알케닐기, 치환 혹은 무치환의 탄소수 2~50의 알키닐기, 치환 혹은 무치환의 고리 형성 탄소수 3~50의 시클로알킬기, 치환 혹은 무치환의 탄소수 1~50의 알콕시기, 치환 혹은 무치환의 탄소수 1~50의 알킬티오기, 치환 혹은 무치환의 고리 형성 탄소수 6~50의 아릴옥시기, 치환 혹은 무치환의 고리 형성 탄소수 6~50의 아릴티오기, 치환 혹은 무치환의 탄소수 7~50의 아랄킬기, $-\text{Si}(R_{31})(R_{32})(R_{33})$, $-\text{C}(=\text{O})R_{34}$, $-\text{COOR}_{35}$, $-\text{N}(R_{36})(R_{37})$, 할로젠 원자, 시아노기, 니트로기, 치환 혹은 무치환의 고리 형성 탄소수 6~50의 아릴기, 치환 혹은 무치환의 고리 형성 원자수 5~50의 1가의 복소환기이다.

[0622] $R_{31} \sim R_{37}$ 은, 각각 독립적으로, 수소 원자, 치환 혹은 무치환의 탄소수 1~50의 알킬기, 치환 혹은 무치환의 고리 형성 탄소수 3~50의 시클로알킬기, 치환 혹은 무치환의 고리 형성 탄소수 6~50의 아릴기, 치환 혹은 무치환의 고리 형성 원자수 5~50의 1가의 복소환기이다.

[0623] $R_{31} \sim R_{37}$ 의 각각이 복수 존재하는 경우, 복수 존재하는 $R_{31} \sim R_{37}$ 의 각각은 동일하여도 좋고, 다르더라도 좋다.

[0624] 단, 상기 고리 A가 상기 식(2)으로 표시되는 벤젠환인 경우에는, $R_1 \sim R_{17}$ 중 적어도 하나는, 치환 혹은 무치환의 탄소수 1~50의 알킬기, 치환 혹은 무치환의 고리 형성 탄소수 3~50의 시클로알킬기, 치환 혹은 무치환의 고리 형성 탄소수 6~50의 아릴기, 또는 치환 혹은 무치환의 고리 형성 원자수 5~50의 1가의 복소환기이다; 또는 $R_1 \sim R_{16}$ 중 인접하는 2개 이상의 적어도 1조가, 치환 혹은 무치환의 포화 또는 불포화의 고리를 형성한다.)



[0625]

[0626] (상기 식(2) 중,

[0627] 2개의 *의 고리 형성 탄소 원자의 한쪽에서, 상기 식(1-1) 또는 상기 식(1-2)의 벤젠환 B로부터 연장되는 결합수가 결합하고, 다른 쪽에서 상기 식(1-3)의 벤젠환 C로부터 연장되는 결합수가 결합한다.

[0628] R_{17} 은, 수소 원자, 치환 혹은 무치환의 탄소수 1~50의 알킬기, 치환 혹은 무치환의 탄소수 1~50의 할로알킬기, 치환 혹은 무치환의 탄소수 2~50의 알케닐기, 치환 혹은 무치환의 탄소수 2~50의 알키닐기, 치환 혹은 무치환의 고리 형성 탄소수 3~50의 시클로알킬기, 치환 혹은 무치환의 탄소수 1~50의 알콕시기, 치환 혹은 무치환의 탄소수 1~50의 알킬티오기, 치환 혹은 무치환의 고리 형성 탄소수 6~50의 아릴옥시기, 치환 혹은 무치환의 고리 형성 탄소수 6~50의 아릴티오기, 치환 혹은 무치환의 탄소수 7~50의 아랄킬기, $-\text{Si}(R_{31})(R_{32})(R_{33})$, $-\text{C}(=\text{O})R_{34}$, $-\text{COOR}_{35}$, $-\text{N}(R_{36})(R_{37})$, 할로젠 원자, 시아노기, 니트로기, 치환 혹은 무치환의 고리 형성 탄소수 6~50의 아릴기, 또는 치환 혹은 무치환의 고리 형성 원자수 5~50의 1가의 복소환기이다.

[0629] $R_{31} \sim R_{37}$ 은, 각각 독립적으로, 수소 원자, 치환 혹은 무치환의 탄소수 1~50의 알킬기, 치환 혹은 무치환의 고리 형성 탄소수 3~50의 시클로알킬기, 치환 혹은 무치환의 고리 형성 탄소수 6~50의 아릴기, 또는 치환 혹은 무치환의 고리 형성 원자수 5~50의 1가의 복소환기이다.

[0630] $R_{31} \sim R_{37}$ 의 각각이 복수 존재하는 경우, 복수 존재하는 $R_{31} \sim R_{37}$ 의 각각은 동일하여도 좋고, 다르더라도 좋다.

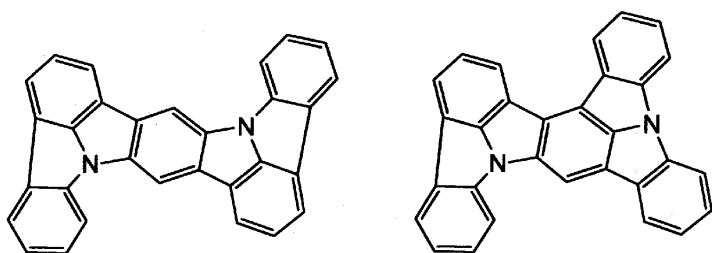
[0631] n 은 1 또는 2의 정수이다. n 이 2인 경우, 2개의 R_{17} 은 동일하여도 좋고, 다르더라도 좋다.)

[0632] 상기 신규 화합물에서는, 고리 A가 식(2)으로 표시되는 벤젠환인 경우에는, $R_1 \sim R_{17}$ 중 적어도 하나는, 치환 혹은 무치환의 탄소수 1~50의 알킬기, 치환 혹은 무치환의 고리 형성 탄소수 3~50의 시클로알킬기, 치환 혹은 무치환의 고리 형성 탄소수 6~50의 아릴기, 또는 치환 혹은 무치환의 고리 형성 원자수 5~50의 1가의 복소환

기이다; 또는 $R_1 \sim R_{16}$ 중 인접하는 2개 이상의 적어도 1조가, 치환 혹은 무치환의 포화 또는 불포화의 고리를 형성한다.

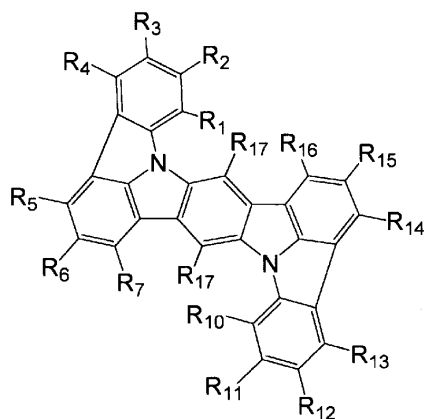
[0633] 이 점에서, 본 양태에 따른 신규 화합물은, 상술한 본 발명의 일 양태에 따른 유기 일렉트로루미네센스 소자의 유기층이 포함하는, 식(1-1) 및 식(1-3)으로 표시되는 화합물, 그리고 식(1-2) 및 식(1-3)으로 표시되는 화합물과는 다르다. 한편, 이 점 이외에는 동일하다.

[0634] 따라서, 본 양태에 따른 신규 화합물의, 다른 실시형태에 따른 구조, 각 치환기, 제조 방법은, 본 발명의 일 양태에 따른 유기 일렉트로루미네센스 소자의 유기층이 포함하는, 식(1-1) 및 식(1-3)으로 표시되는 화합물, 그리고 식(1-2) 및 식(1-3)으로 표시되는 화합물과 같다. 또한, 구체예에 관해서도 하기 화합물을 제외하고 같다.



[0635]

[0636] 본 발명의 다른 일 양태에 따른 신규 화합물은 하기 식(3-11)으로 표시되는 화합물이다.



(3-11)

[0637]

[0638] (상기 식(3-11) 중,

[0639] $R_1 \sim R_7$ 및 $R_{10} \sim R_{16}$ 중 인접하는 2개 이상의 1조 이상이, 치환 혹은 무치환의 포화 또는 불포화의 고리를 형성하여도 좋다.

[0640] 상기 치환 혹은 무치환의 포화 또는 불포화의 고리를 형성하지 않는 $R_1 \sim R_7$ 및 $R_{10} \sim R_{16}$ 은, 각각 독립적으로, 수소 원자, 치환 혹은 무치환의 탄소수 1~50의 알킬기, 치환 혹은 무치환의 탄소수 1~50의 할로알킬기, 치환 혹은 무치환의 탄소수 2~50의 알케닐기, 치환 혹은 무치환의 탄소수 2~50의 알키닐기, 치환 혹은 무치환의 고리 형성 탄소수 3~50의 시클로알킬기, 치환 혹은 무치환의 탄소수 1~50의 알콕시기, 치환 혹은 무치환의 탄소수 1~50의 알킬티오기, 치환 혹은 무치환의 고리 형성 탄소수 6~50의 아릴옥시기, 치환 혹은 무치환의 고리 형성 탄소수 6~50의 아릴티오기, 치환 혹은 무치환의 탄소수 7~50의 아랄킬기, $-\text{Si}(\text{R}_{31})(\text{R}_{32})(\text{R}_{33})$, $-\text{C}(=\text{O})\text{R}_{34}$, $-\text{COOR}_{35}$, $-\text{N}(\text{R}_{36})(\text{R}_{37})$, 할로겐 원자, 시아노기, 니트로기, 치환 혹은 무치환의 고리 형성 탄소수 6~50의 아릴기, 또는 치환 혹은 무치환의 고리 형성 원자수 5~50의 1가의 복소환기이다. 단, $R_1 \sim R_7$ 및 $R_{10} \sim R_{16}$ 의 적어도 하나는 $-\text{N}(\text{R}_{36})(\text{R}_{37})$ 이다.

[0641] R_{17} 은 수소 원자, 치환 혹은 무치환의 탄소수 1~50의 알킬기, 치환 혹은 무치환의 탄소수 1~50의 할로알킬기, 치환 혹은 무치환의 탄소수 2~50의 알케닐기, 치환 혹은 무치환의 탄소수 2~50의 알키닐기, 치환 혹은 무치환의 고리 형성 탄소수 3~50의 시클로알킬기, 치환 혹은 무치환의 탄소수 1~50의 알콕시기, 치환 혹은 무치환의 탄소수 1~50의 알킬티오기, 치환 혹은 무치환의 고리 형성 탄소수 6~50의 아릴옥시기, 치환 혹은 무치환의 고

리 형성 탄소수 6~50의 아릴티오기, 치환 혹은 무치환의 탄소수 7~50의 아릴킬기, $-\text{Si}(\text{R}_{31})(\text{R}_{32})(\text{R}_{33})$, $-\text{C}(=\text{O})\text{R}_{34}$, $-\text{COOR}_{35}$, $-\text{N}(\text{R}_{36})(\text{R}_{37})$, 할로젠 원자, 시아노기, 니트로기, 치환 혹은 무치환의 고리 형성 탄소수 6~50의 아릴기, 또는 치환 혹은 무치환의 고리 형성 원자수 5~50의 1가의 복소환기이다.

[0642] 2개의 R_{17} 은 동일하여도 좋고, 다르더라도 좋다.

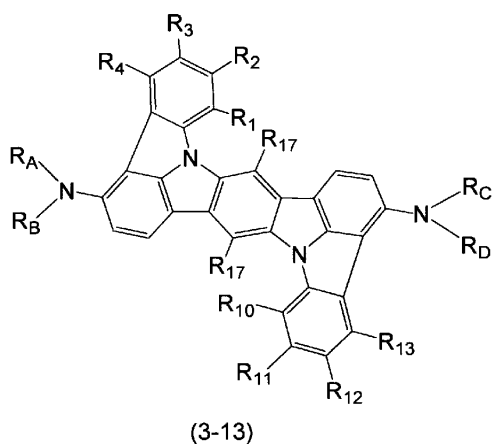
[0643] $\text{R}_{31}\sim\text{R}_{37}$ 은, 각각 독립적으로, 수소 원자, 치환 혹은 무치환의 탄소수 1~50의 알킬기, 치환 혹은 무치환의 고리 형성 탄소수 3~50의 시클로알킬기, 치환 혹은 무치환의 고리 형성 탄소수 6~50의 아릴기, 또는 치환 혹은 무치환의 고리 형성 원자수 5~50의 1가의 복소환기이다.

[0644] $\text{R}_{31}\sim\text{R}_{37}$ 의 각각이 복수 존재하는 경우, 복수 존재하는 $\text{R}_{31}\sim\text{R}_{37}$ 의 각각은 동일하여도 좋고, 다르더라도 좋다.)

[0645] 상기 신규 화합물은, 상술한 본 발명의 일 양태에 따른 유기 일렉트로루미네센스 소자의 유기층이 포함하는 식(3-11)으로 표시되는 화합물과 같다.

[0646] 따라서, 본 양태에 따른 신규 화합물의, 다른 실시형태에 따른 구조, 각 치환기, 제조 방법은, 본 발명의 일 양태에 따른 유기 일렉트로루미네센스 소자의 유기층이 포함하는, 식(3-11)으로 표시되는 화합물과 같다. 또한, 식(3-11)으로 표시되는 화합물의 구체예에 관해서도 같다.

[0647] 일 실시형태에서는, 식(3-11)으로 표시되는 화합물은 하기 식(3-13)으로 표시되는 화합물이다.



[0648]

(상기 식(3-13) 중,

[0649]

[0650] $\text{R}_1\sim\text{R}_4$ 및 $\text{R}_{10}\sim\text{R}_{13}$ 중 인접하는 2개 이상의 1조 이상이, 치환 혹은 무치환의 포화 또는 불포화의 고리를 형성하여도 좋다.

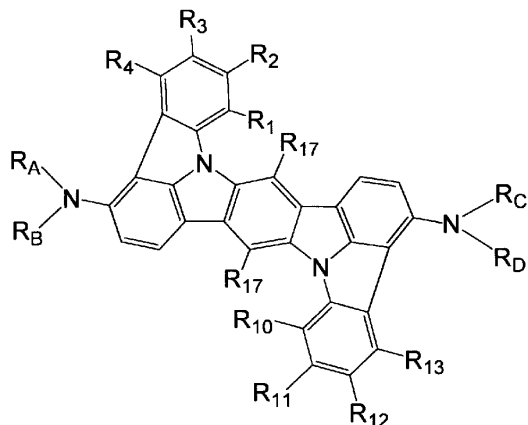
[0651] 상기 치환 혹은 무치환의 포화 또는 불포화의 고리를 형성하지 않는 $\text{R}_1\sim\text{R}_4$ 및 $\text{R}_{10}\sim\text{R}_{13}$, 그리고 R_{17} 은, 각각 독립적으로, 수소 원자, 치환 혹은 무치환의 고리 형성 탄소수 6~18의 아릴기, 또는 치환 혹은 무치환의 고리 형성 원자수 5~18의 1가의 복소환기이다. 2개의 R_{17} 은 상호 동일하여도 좋고, 다르더라도 좋다.

[0652] R_A , R_B , R_C 및 R_D 는, 각각 독립적으로 치환 혹은 무치환의 고리 형성 탄소수 6~18의 아릴기, 또는 치환 혹은 무치환의 고리 형성 원자수 5~18의 1가의 복소환기이다.)

[0653] 상기 신규 화합물은, 상술한 본 발명의 일 양태에 따른 유기 일렉트로루미네센스 소자의 유기층이 포함하는 식(3-13)으로 표시되는 화합물과 같다.

[0654] 따라서, 본 양태에 따른 신규 화합물의, 다른 실시형태에 따른 구조, 각 치환기, 제조 방법은, 본 발명의 일 양태에 따른 유기 일렉트로루미네센스 소자의 유기층이 포함하는, 식(3-13)으로 표시되는 화합물과 같다. 또한, 식(3-13)으로 표시되는 화합물의 구체예에 관해서도 같다.

[0655] 본 발명의 다른 일 양태에 의한 신규 화합물은 하기 식(3-21)으로 표시되는 화합물이다.



(3-21)

[0656]

[0657] (상기 식(3-21) 중,

[0658] $R_1 \sim R_4$ 및 $R_{10} \sim R_{13}$ 중 인접하는 2개 이상의 1조 이상이, 치환 혹은 무치환의 포화 또는 불포화의 고리를 형성하여도 좋다.

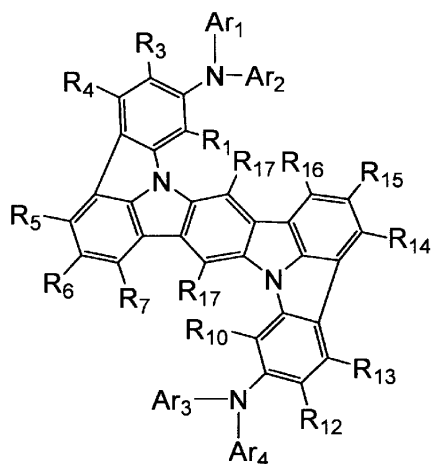
[0659] 상기 치환 혹은 무치환의 포화 또는 불포화의 고리를 형성하지 않는 $R_1 \sim R_4$ 및 $R_{10} \sim R_{13}$, 그리고 R_{17} 은, 각각 독립적으로, 수소 원자, 치환 혹은 무치환의 고리 형성 탄소수 6~20의 아릴기, 또는 치환 혹은 무치환의 고리 형성 원자수 5~20의 1가의 복소환기이다. 2개의 R_{17} 은 상호 동일하여도 좋고, 다르더라도 좋다.

[0660] R_A , R_B , R_C 및 R_D 는 각각 독립적으로 치환 혹은 무치환의 고리 형성 탄소수 6~20의 아릴기이다.)

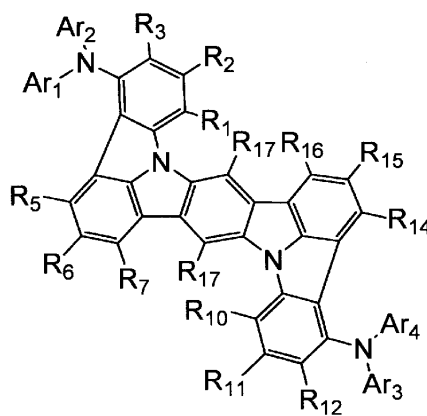
[0661] 상기 신규 화합물은, 상술한 본 발명의 일 양태에 따른 유기 일렉트로루미네센스 소자의 유기층이 포함하는 식(3-21)으로 표시되는 화합물과 같다.

[0662] 따라서, 본 양태에 따른 신규 화합물의, 다른 실시형태에 따른 구조, 각 치환기, 제조 방법은, 본 발명의 일 양태에 따른 유기 일렉트로루미네센스 소자의 유기층이 포함하는, 식(3-21)으로 표시되는 화합물과 같다. 또한, 식(3-21)으로 표시되는 화합물의 구체예에 관해서도 같다.

[0663] 본 발명의 다른 일 양태에 의한 신규 화합물은 하기 식(3-31) 또는 식(3-32)으로 표시되는 화합물이다.



(3-31)



(3-32)

[0664]

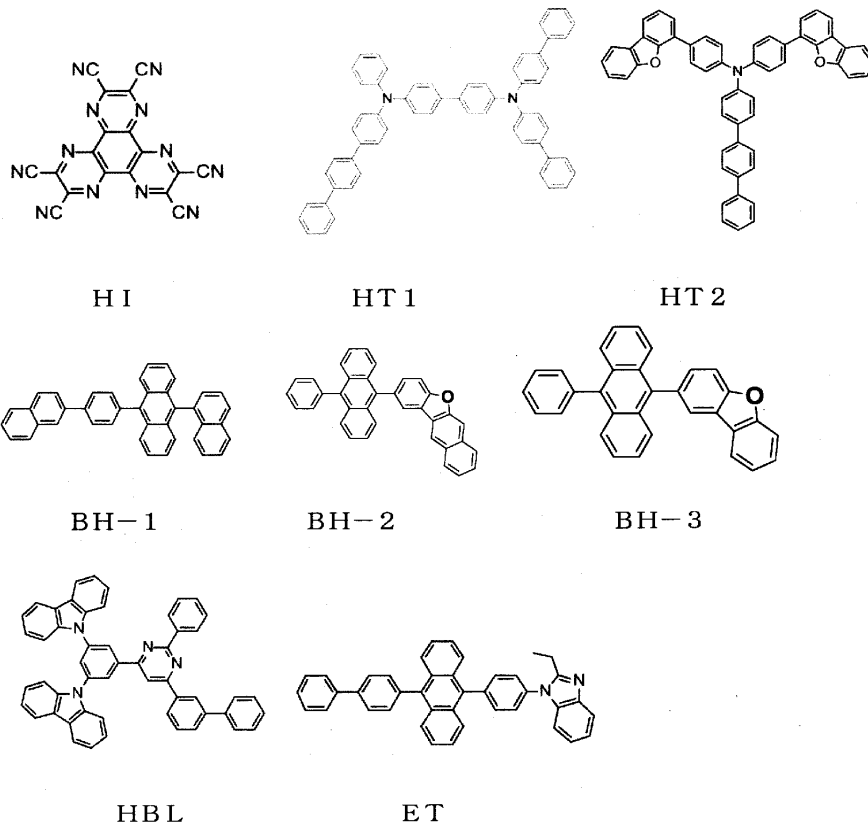
[0665] (식(3-31) 및 식(3-32) 중,

[0666] $R_1 \sim R_7$ 및 $R_{10} \sim R_{16}$ 중 인접하는 2개 이상의 1조 이상이, 치환 혹은 무치환의 포화 또는 불포화의 고리를 형성하

여도 좋다.

- [0667] R_{17} , 그리고 상기 치환 혹은 무치환의 포화 또는 불포화의 고리를 형성하지 않는 $R_1 \sim R_7$ 및 $R_{10} \sim R_{16}$ 은, 각각 독립적으로, 수소 원자, 치환 혹은 무치환의 고리 형성 탄소수 6~20의 아릴기, 또는 치환 혹은 무치환의 고리 형성 원자수 5~20의 1가의 복소환기이다.
- [0668] 2개의 R_{17} 은 동일하여도 좋고, 다르더라도 좋다.
- [0669] $Ar_1 \sim Ar_4$ 는 각각 독립적으로 치환 혹은 무치환의 고리 형성 탄소수 6~20의 아릴기이다.)
- [0670] 상기 신규 화합물은, 상술한 본 발명의 일 양태에 따른 유기 일렉트로루미네센스 소자의 유기층이 포함하는 식(3-31) 및 식(3-32)으로 표시되는 화합물과 같다.
- [0671] 따라서, 본 양태에 따른 신규 화합물의, 다른 실시형태에 따른 구조, 각 치환기, 제조 방법은, 본 발명의 일 양태에 따른 유기 일렉트로루미네센스 소자의 유기층이 포함하는, 식(3-31) 및 식(3-32)으로 표시되는 화합물과 같다. 또한, 식(3-31) 및 식(3-32)으로 표시되는 화합물의 구체예에 관해서도 같다.
- [0672] 상기한 각 양태에 따른 신규 화합물은, 유기 일렉트로루미네센스 소자용 재료로서 유용하다. 상기한 각 양태에 따른 신규 화합물은, 유기 일렉트로루미네센스 소자의 발광층의 재료로서 유용하며, 특히 발광층의 형광 발광 재료(형광 도펀트라고도 함)로서 유용하다. 상기한 각 양태에 따른 신규 화합물은 유기 EL 소자의 발광 효율을 높일 수 있다.
- [0673] **실시예**
- [0674] 이어서, 합성예, 실시예 및 비교예를 들어 본 발명을 더욱 자세히 설명하지만, 본 발명은 이들 실시예의 기재 내용에 하등 제한되지 않는다.
- [0675] 실시예 1-1
- [0676] (유기 EL 소자의 제작)
- [0677] 25 mm×75mm×1.1 mm 두께의 ITO 투명 전극(양극)을 가진 유리 기판(지오마텍가부시키가이샤 제조)을 이소프로필알코올 중에서 초음파 세정을 5분간 행한 후, UV 오존 세정을 30분간 행했다. ITO의 막 두께는 130 nm로 했다.
- [0678] 세정 후의 투명 전극을 가진 유리 기판을 진공 증착 장치의 기판 홀더에 장착하고, 우선 투명 전극이 형성되어 있는 측의 면 위에 투명 전극을 덮도록 하여 화합물 HI를 증착하여, 막 두께 5 nm의 화합물 HI막을 형성했다. 이 HI막은 정공 주입층으로서 기능한다.
- [0679] 이 HI막의 성막에 이어서 화합물 HT1을 증착하여, HI막 상에 막 두께 80 nm의 HT1막을 성막했다. 이 HT1막은 제1 정공 수송층으로서 기능한다.
- [0680] HT1막의 성막에 이어서 화합물 HT2를 증착하여, HT1막 상에 막 두께 10 nm의 HT2막을 성막했다. 이 HT2막은 제2 정공 수송층으로서 기능한다.
- [0681] HT2막 상에 BH-1(호스트 재료) 및 BD-1(도펀트 재료)을 화합물 BD-1의 비율(중량비)이 4%가 되도록 공증착하여, 막 두께 25 nm의 발광층을 성막했다.
- [0682] 이 발광층 상에 화합물 HBL을 증착하여, 막 두께 10 nm의 전자 수송층을 형성했다. 이 전자 수송층 상에 전자 주입 재료인 화합물 ET를 증착하여, 막 두께 15 nm의 전자 주입층을 형성했다. 이 전자 주입층 상에 LiF를 증착하여, 막 두께 1 nm의 LiF막을 형성했다. 이 LiF막 상에 금속 Al을 증착하여, 막 두께 80 nm의 금속 음극을 형성했다.

[0683] 이상과 같이 하여 유기 EL 소자를 제작했다. 이용한 화합물을 이하에 나타낸다.



[0684]

[0685] (유기 EL 소자의 평가)

[0686] 얻어진 유기 EL 소자의 초기 특성을, 실온 하, DC(직류) 정전류 10 mA/cm² 구동으로 측정했다. 전압의 측정 결과를 표 1에 나타낸다.

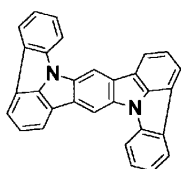
[0687] 또한, 전류 밀도가 10 mA/cm²가 되도록 유기 EL 소자에 전압을 인가하고, EL 발광 스펙트럼을 분광 방사 휘도계 CS-1000(코니카미놀타가부시킴이샤 제조)으로 계측했다. 얻어진 분광 방사 휘도 스펙트럼으로부터 외부 양자 효율 EQE(%)를 산출했다. 결과를 표 1에 나타낸다. 또한, 표 1 중의 수치는 비교예 1-1, 1-2 및 1-3을 각각 100%로 한 경우의 상대치이다.

[0688] 또한 전류 밀도가 50 mA/cm²가 되도록 유기 EL 소자에 전압을 인가하고, 초기 휘도에 대하여 휘도가 95%가 될 때까지의 시간을 측정한 수명 LT95의 결과를 표 1에 나타낸다.

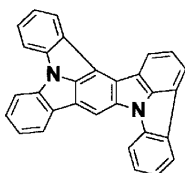
[0689] 실시예 1-2~1-22 및 비교예 1-1~1-3

[0690] 표 1에 나타내는 도펀트 재료와 호스트 재료의 조합으로 실시예 1-1과 같은 식으로 유기 EL 소자를 제작하여 평가했다. 결과를 표 1에 나타낸다.

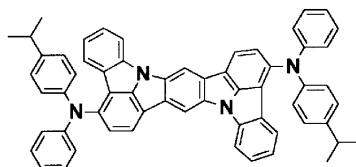
[0691] 이용한 화합물을 이하에 나타낸다. 또한, 화합물 BD-1 및 화합물 BD-2는 Dibenzo[2,3:5,6]pyrrolizino[1,7-bc]indolo[1,2,3-lm] carbazole: a new electron donor, New J. Chem., 2010, 34, 1243-1246에 기재된 합성 방법을 따라 합성했다. 화합물 BD-4, BD-9 및 BD-11~BD-14의 합성은 후술하는 방법으로 합성했다.



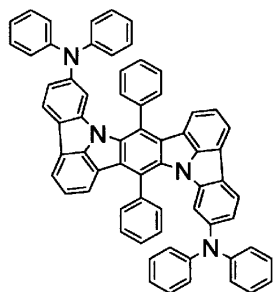
BD-1



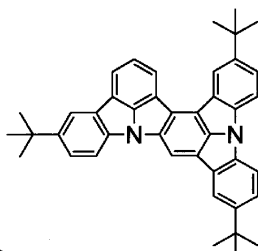
BD-2



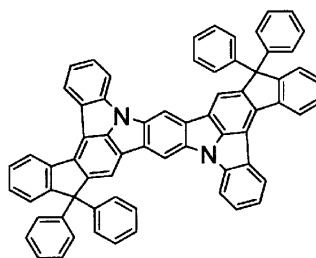
BD-4



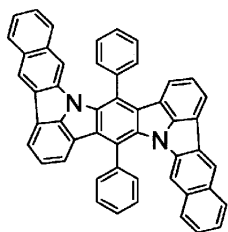
BD-9



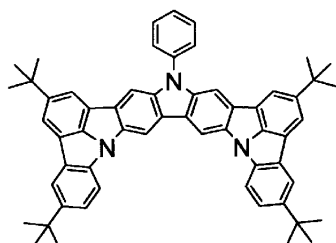
BD-11



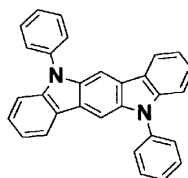
BD-12



BD-13



BD-14



BD-COM

[0692]

표 1

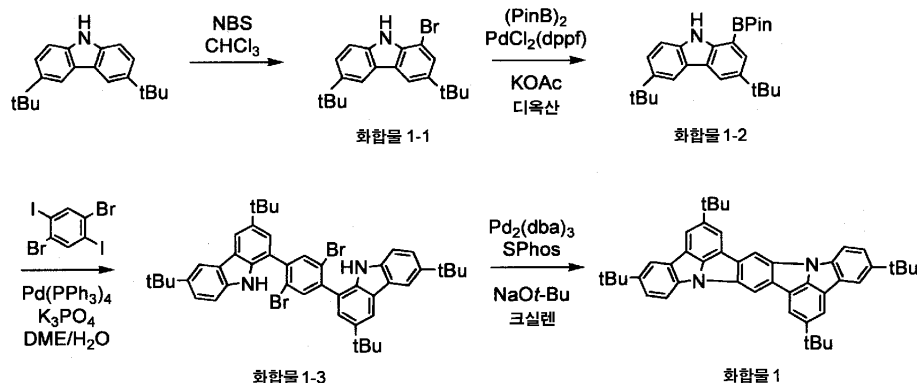
	호스트	도펀트	구동 전압 (V)	EQE (%)	LT95 (hr)
실시예 1-1	BH-1	BD-1	3.7	135	92
실시예 1-2		BD-2	3.7	133	81
실시예 1-3		BD-4	3.6	146	87
실시예 1-4		BD-9	3.7	140	108
실시예 1-5		BD-11	3.7	131	95
실시예 1-6		BD-12	3.7	140	80
실시예 1-7		BD-13	3.7	129	94
실시예 1-8		BD-14	3.6	125	130
비교예 1-1		BD-COM	3.7	100	66
실시예 1-9	BH-2	BD-1	3.3	144	105
실시예 1-10		BD-2	3.3	144	94
실시예 1-11		BD-4	3.3	150	85
실시예 1-12		BD-9	3.3	147	102
실시예 1-13		BD-11	3.3	145	93
실시예 1-14		BD-12	3.3	154	90
실시예 1-15		BD-13	3.3	140	99
실시예 1-16		BD-14	3.3	141	105
비교예 1-2		BD-COM	3.3	100	75
실시예 1-17	BH-3	BD-4	3.7	143	95
실시예 1-18		BD-9	3.7	132	122
실시예 1-19		BD-11	3.7	127	100
실시예 1-20		BD-12	3.7	129	103
실시예 1-21		BD-13	3.7	124	105
실시예 1-22		BD-14	3.6	119	139
비교예 1-3		BD-COM	3.7	100	70

[0693]

[0694] 표 1의 결과로부터, BD-1, BD-2, BD-4, BD-9 및 BD-11~BD-14는, 축환함으로써, 화합물의 열 진동에 의한 여기자의 실활이 억제됨과 더불어 화합물의 안정성도 높아졌기 때문에, BD-COM보다 고효율이면서 또한 수명이 길어졌다고 말할 수 있다.

[0695] 실시예 2-1

[0696] 하기 합성 경로로 화합물 1을 합성했다.



[0697]

[0698] 화합물 1-1의 합성

[0699] 아르곤 분위기 하, 3,6-디-tert-부틸카르바졸(11.2 g, 40 mmol)을 클로로포름(200 ml)에 용해시키고, N-브로모숙신이미드(7.12 g)를 가하여, 실온에서 5시간 교반했다. 반응 종료 후, 용매를 농축하고, 잔사를 컬럼 크로마토그래피로 정제하여 아모르퍼스형 고체(14.4 g)를 얻었다. 얻어진 고체는 목적물인 화합물 1-1이며, 매스 스펙트럼 분석 결과, 분자량 358에 대하여 m/e=358이었다.

[0700] 화합물 1-2의 합성

[0701] 아르곤 분위기 하, 화합물 1-1(14.4 g), 비스(피나콜라토)디보론(15.2 g, 60 mmol, 1.5 eq.), PdCl₂(dppf)(1.46 g, 2.0 mmol, 5% Pd), 아세트산칼륨(7.85 g, 80 mmol)을 디옥산(200 mL)에 현탁시키고, 7시간 환류했다. 반응 종료 후, 숏패스 실리카겔 컬럼 크로마토그래피를 통과시켜, 용매를 농축했다. 얻어진 고체를 헥산/아세트산에틸(9:1)로 재결정하여 백색 고체(12.1 g, 수율 75%)를 얻었다. 얻어진 고체는 목적물인 화합물 1-2이며, 매스 스펙트럼 분석 결과, 분자량 405에 대하여 m/e=405였다.

[0702] 화합물 1-3의 합성

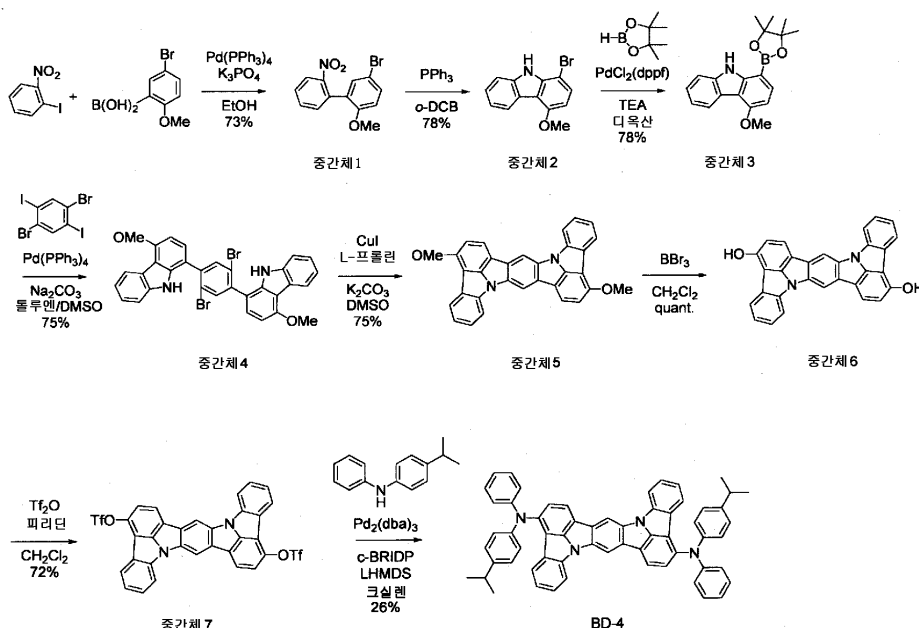
[0703] 아르곤 분위기 하, 디브로모디요오도벤젠(4.00 g, 8.20 mmol), 화합물 1-2(6.81 g, 16.8 mmol, 1.05 eq.), Pd(PPh₃)₄(474 mg, 0.41 mmol, 5% Pd)를 1,2-디메톡시에탄(800 mL)에 용해하고, 이것에 K₃PO₄(10.4 g, 49.2 mmol)를 용해한 물(200 mL)을 가하여 50℃에서 24시간 가열 교반했다. 반응 종료 후, 아세트산에틸을 이용하여 추출하고, 용매를 농축했다. 얻어진 고체를 컬럼 크로마토그래피로 정제하여 백색 고체(5.0 g, 수율 77%)를 얻었다. 얻어진 고체는 목적물인 화합물 1-3이며, 매스 스펙트럼 분석 결과, 분자량 790에 대하여 m/e=790이었다.

[0704] 화합물 1의 합성

[0705] 아르곤 분위기 하, 화합물 1-3(2.00 g), Pd₂(dba)₃(232 mg), SPhos(415 mg), NaOt-Bu(973 mg)을 크실렌(200 mL)에 현탁하여, 8시간 환류했다. 반응 종료 후, 실리카겔 컬럼 크로마토그래피로 정제하여, 황색 고체(450 mg, 수율 28%)를 얻었다. 얻어진 고체는 목적물인 화합물 1이며, 매스 스펙트럼 분석 결과, 분자량 628에 대하여 m/e=628이었다.

[0706] 실시예 2-2

[0707] 하기 합성 경로로 BD-4를 합성했다.



[0708]

[0709] 중간체 1의 합성

[0710] 아르곤 분위기 하, 2-요오드니트로벤젠(9.7 g, 39 mmol), 5-브로모-2-메톡시페닐보론산(9.2 g, 40 mmol), 테트라키스(트리페닐포스핀)팔라듐(0)(Pd(PPh₃)₄, 1.1 g, 0.975 mmol), K₃PO₄(21 g, 97 mmol)를 에탄올(95 mL)에 용해시키고, 8시간 환류했다. 반응 종료 후, 용매를 농축하고, 잔사를 컬럼 크로마토그래피로 정제하여 황색 고체(8.8 g, 수율 73%)를 얻었다. 얻어진 고체는 목적물인 중간체 1이며, 매스 스펙트럼 분석 결과, 분자량 308에 대하여 m/e=308이었다.

[0711] 중간체 2의 합성

[0712] 중간체 1(7.00 g, 22.7 mmol)을 o-디클로로벤젠(80 mL)에 용해시키고, 트리페닐포스핀(14.9 g, 56.8 mmol)을 가하여, 12시간 환류했다. 반응 종료 후, 용매를 농축하고, 잔사를 컬럼 크로마토그래피로 정제하여 백색 고체(5.7 g, 수율 78%)를 얻었다. 얻어진 고체는 목적물인 중간체 2이며, 매스 스펙트럼 분석 결과, 분자량 276에 대하여 m/e=276이었다.

[0713] 중간체 3의 합성

[0714] 아르곤 분위기 하, 중간체 2(5.7 g, 21 mmol), 피나콜보란(7.9 g, 62 mmol), 디클로로[1,1'-비스(디페닐포스피노)페로센]팔라듐(PdCl₂(dppf), 1.5 g, 2.0 mmol)을 디옥산(250 mL)에 용해시키고, 트리에틸아민(11.5 mL, 83 mmol)을 가하고, 5시간 환류했다. 반응 종료 후, 용매를 농축하고, 잔사를 컬럼 크로마토그래피로 정제하여 황색 고체(5.0 g, 수율 75%)를 얻었다. 얻어진 고체는 목적물인 중간체 3이며, 매스 스펙트럼 분석 결과, 분자량 323에 대하여 m/e=323이었다.

[0715] 중간체 4의 합성

[0716] 아르곤 분위기 하, 디브로모디요오도벤젠(2.5 g, 5.1 mmol), 중간체 3(4.97 g, 15.4 mmol), Pd(PPh₃)₄(237 mg, 0.205 mmol)를 톨루엔(250 mL)과 디메틸설폭시드(DMSO, 50 mL)에 용해하고, 이것에 2M Na₂CO₃ 수용액(13 mL)을 가하여 90℃에서 24시간 가열 교반했다. 반응 종료 후, 감압 하에 톨루엔을 제거하고, 침전된 고체를 여과 분별했다. 이 고체를 메탄올과 아세트산에틸로 세정하여 백색 고체(2.5 g, 수율 75%)를 얻었다. 얻어진 고체는 목적물인 중간체 4이며, 매스 스펙트럼 분석 결과, 분자량 626에 대하여 m/e=626이었다.

[0717] 중간체 5의 합성

[0718] 아르곤 분위기 하, 중간체 4(2.5 g, 3.99 mmol), CuI(76 mg, 0.40 mmol), L-프롤린(92 mg, 0.80 mmol), K₂CO₃(1.38 g, 10 mmol)를 DMSO(80 mL)에 현탁하고, 150℃에서 6시간 가열 교반했다. 반응 종료 후, 침전된 고

체를 여과 분별했다. 이 고체를 메탄올과 아세트산에틸로 세정하여 갈색 고체(1.4 g, 수율 75%)를 얻었다. 얻어진 고체는 목적물인 화합물 5이며, 매스 스펙트럼 분석 결과, 분자량 464에 대하여 $m/e=464$ 였다.

[0719] 중간체 6의 합성

[0720] 중간체 5(1.4 g, 3.0 mmol)를 디클로로메탄(150 mL)에 용해시키고, 1M의 BBr_3 의 디클로로메탄 용액(15 mL, 15 mmol)을 가하여, 8시간 환류했다. 반응 종료 후, 얼음물(50 mL)을 가하고, 침전을 여과 분별했다. 이 고체를 메탄올로 세정하여 백색 고체(1.4 g)를 얻었다. 얻어진 고체는 목적물인 중간체 6이며, 매스 스펙트럼 분석 결과, 분자량 436에 대하여 $m/e=436$ 이었다.

[0721] 중간체 7의 합성

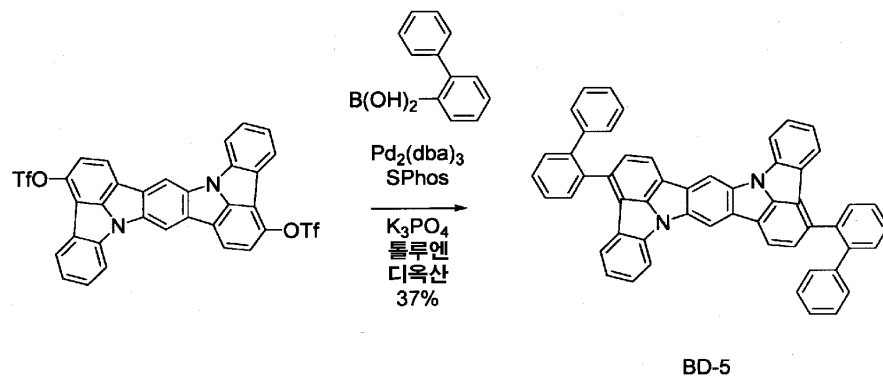
[0722] 중간체 6(1.4 g, 3.2 mmol)을 디클로로메탄(75 mL)과 피리딘(75 mL)에 현탁시키고, 무수트리플레이트(3.8 mL, 22.5 mmol)를 가하여 실온에서 8시간 교반했다. 반응 종료 후, 물(50 mL)을 가하고, 침전을 여과 분별했다. 이 고체를 메탄올과 아세트산에틸로 세정하여 백색 고체(1.8 g, 수율 72%)를 얻었다. 얻어진 고체는 목적물인 중간체 7이며, 매스 스펙트럼 분석 결과, 분자량 700에 대하여 $m/e=700$ 이었다.

[0723] BD-4의 합성

[0724] 아르곤 분위기 하, 중간체 7(1.00 g, 1.43 mmol), 4-*i*Pr-N-페닐아닐린(754 mg, 3.57 mmol), 트리스(디벤질리덴 아세톤)디팔라듐(0)($Pd_2(dba)_3$, 26 mg, 0.029 mmol), 디-*tert*-부틸(1-메틸-2,2-디페닐시클로프로필)포스핀(40 mg, 0.11 mmol)을 크실렌(120 mL)에 용해하고, 1M의 리튬비스(트리메틸실릴)아미드의 테트라히드로푸란 용액(3.6 mL, 3.6 mmol)을 가하여, 8시간 환류했다. 반응 종료 후 셀라이트 여과하고, 용매를 유거(留去)하여 얻어진 고체를 컬럼 크로마토그래피로 정제하여 황색 고체(300 mg, 수율 26%)를 얻었다. 얻어진 고체는 목적물인 BD-4이며, 매스 스펙트럼 분석 결과, 분자량 823에 대하여 $m/e=823$ 이었다.

[0725] 실시예 2-3

[0726] 하기 합성 경로로 BD-5를 합성했다.



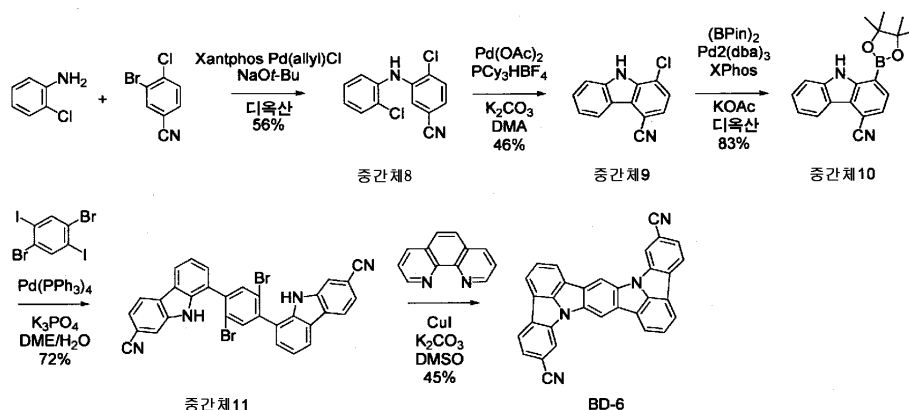
[0727]

[0728] BD-5의 합성

[0729] 아르곤 분위기 하, 중간체 7(50 mg, 0.071 mmol), 2-비페닐보론산(113 mg, 0.571 mmol), $Pd_2(dba)_3$ (2.6 mg, 0.0028 mmol), 2-디시클로헥실포스포노-2',6'-디메톡시비페닐(SPhos, 4.7 mg, 0.011 mmol), K_3PO_4 (151 mg, 0.714 mmol)를 톨루엔(3 mL)과 디옥산(3 mL)에 용해하고, 90°C에서 6시간 가열 교반했다. 반응 종료 후, 가열한 클로로벤젠을 가하여 셀라이트 여과했다. 용매를 유거하여 얻어진 고체를 디메톡시에탄으로 세정하여 황색 고체(18.5 mg, 수율 37%)를 얻었다. 얻어진 고체는 목적물인 BD-5이며, 매스 스펙트럼 분석 결과, 분자량 708에 대하여 $m/e=708$ 이었다.

[0730] 실시예 2-4

[0731] 하기 합성 경로로 BD-6을 합성했다.



[0732]

[0733] 중간체 8의 합성

[0734] 아르곤 분위기 하, 2-클로로아닐린(10.0 g, 46.2 mmol), 3-브로모-4-클로로벤조니트릴(5.89 g, 46.2 mmol), (4,5-비스(디페닐포스포노)-9,9-디메틸크산텐(알릴)팔라듐클로라이드(352 mg, 0.462 mmol), 나트륨tert-부톡시드(4.44 g, 46.2 mmol)를 디옥산(250 mL)에 현탁시키고, 100℃에서 8시간 가열 교반했다. 반응 종료 후, 셀라이트 여과하여 용매를 유거했다. 얻어진 잔사를 컬럼 크로마토그래피로 정제하여, 백색 고체(6.8 g, 수율 56%)를 얻었다. 얻어진 고체는 목적물인 중간체 8이며, 매스 스펙트럼 분석 결과, 분자량 263에 대하여 m/e=263이었다.

[0735] 중간체 9의 합성

[0736] 아르곤 분위기 하, 중간체 8(6.50 g, 24.7 mmol), 아세트산팔라듐(277 mg, 1.24 mmol), 트리시클로헥실포스포늄테트라플루오로보레이트(910 mg, 2.47 mmol), 탄산칼륨(K₂CO₃, 6.83 g, 49.4 mmol)을 N,N-디메틸아세트아미드(DMA, 250 mL)에 현탁시키고, 140℃에서 5시간 가열 교반했다. 반응 종료 후, 셀라이트 여과하여 용매를 유거했다. 얻어진 잔사를 컬럼 크로마토그래피로 정제하여 백색 고체(2.5 g, 수율 45%)를 얻었다. 얻어진 고체는 목적물인 중간체 9이며, 매스 스펙트럼 분석 결과, 분자량 226에 대하여 m/e=226이었다.

[0737] 중간체 10의 합성

[0738] 아르곤 분위기 하, 중간체 9(1.30 g, 5.74 mmol), 비스(피나콜라토)디보론(2.91 g, 11.5 mmol), Pd₂(dba)₃(105 mg, 0.115 mmol), 2-디시클로헥실포스포노-2',4',6'-트리이소프로필비페닐(XPhos, 0.219 g, 0.459 mmol), 아세트산칼륨(1.69 g, 17.2 mmol)을 디옥산(250 mL)에 용해시키고, 100℃에서 5시간 가열 교반했다. 반응 종료 후, 숏패스 컬럼 크로마토그래피를 통과시키고, 용매를 유거하여 얻어진 잔사를 헥산으로 재결정하여 백색 고체(1.52 g, 수율 83%)를 얻었다. 얻어진 고체는 목적물인 중간체 10이며, 매스 스펙트럼 분석 결과, 분자량 318에 대하여 m/e=318이었다.

[0739] 중간체 11의 합성

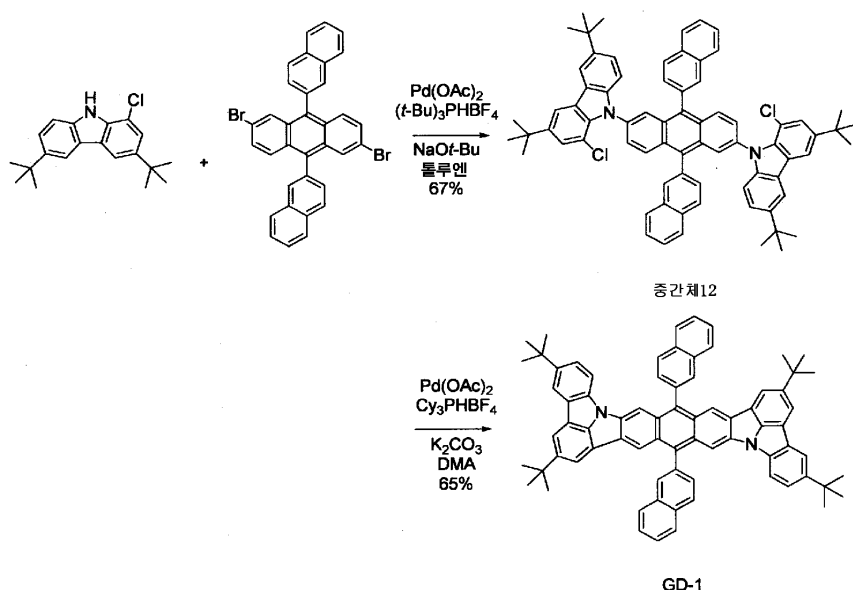
[0740] 아르곤 분위기 하, 디브로모디요오도벤젠(400 mg, 0.820 mmol), 중간체 10(535 mg, 1.68 mmol), Pd(PPh₃)₄(47 mg, 0.041 mmol), 인산칼륨(1.05 g, 4.92 mmol)을 디메톡시에탄(80 mL)과 물(20 mL)에 용해하고, 50℃에서 24시간 가열 교반했다. 반응 종료 후, 침전을 여과 분별했다. 이 고체를 물과 메탄올로 세정하여, 백색 고체(365 mg, 수율 72%)를 얻었다. 얻어진 고체는 목적물인 중간체 11이며, 매스 스펙트럼 분석 결과, 분자량 616에 대하여 m/e=616이었다.

[0741] BD-6의 합성

[0742] 아르곤 분위기 하, 중간체 11(150 mg, 0.243 mmol), CuI(9 mg, 0.05 mmol), 1,10-페난트롤린1수화물(48 mg, 0.24 mmol), K₂CO₃(135 mg, 0.974 mmol)을 디메틸술포(20 mL)에 현탁하고, 150℃에서 8시간 가열 교반했다. 반응 종료 후, 침전된 고체를 여과 분별했다. 이 고체를 메탄올과 아세트산에틸로 세정하여 황색 고체(50 mg, 수율 45%)를 얻었다. 얻어진 고체는 목적물인 BD-6이며, 매스 스펙트럼 분석 결과, 분자량 454에 대하여 m/e=454였다.

[0743] 실시예 2-5

[0744] 하기 합성 경로로 GD-1을 합성했다.



[0745]

[0746] 중간체 12의 합성

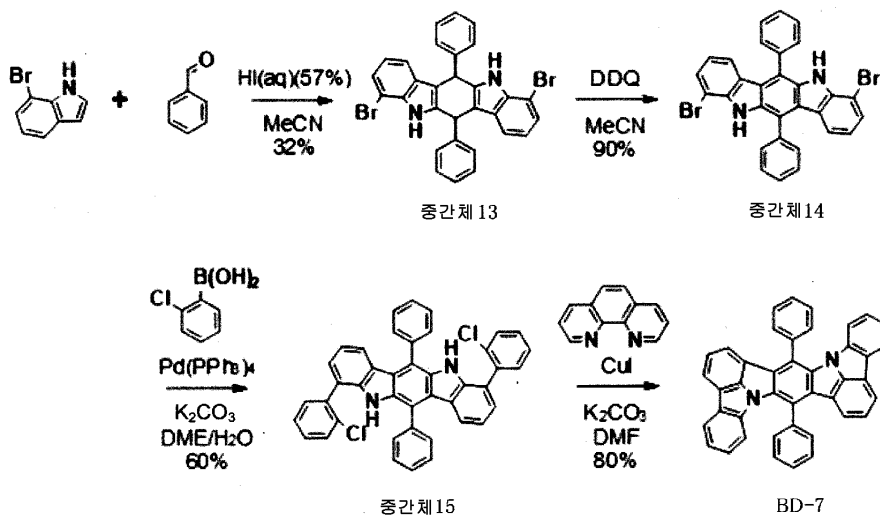
[0747] 아르곤 분위기 하, 2,6-디브로모-9,10-비스(2-나프틸)안트라센(3.30 g, 5.61 mmol), 3,6-디-tert-부틸-1-클로로-9H-카르바졸(3.70 g, 11.8 mmol), 아세트산팔라듐(63 mg, 0.28 mmol), 트리-tert-부틸포스포늄테트라플루오로보레이트(163 mg, 0.561 mmol), 나트륨 tert-부톡사이드(2.16 g, 22.4 mmol)를 톨루엔(80 mL)에 현탁시켜, 100 °C에서 8시간 가열 교반했다. 반응 종료 후, 셀라이트 여과하여 용매를 유거했다. 얻어진 잔사를 컬럼 크로마토그래피로 정제하여 황색 고체(3.95 g, 수율 67%)를 얻었다. 얻어진 고체는 목적물인 중간체 12이며, 매스 스펙트럼 분석 결과, 분자량 1054에 대하여 m/e=1054였다.

[0748] GD-1의 합성

[0749] 아르곤 분위기 하, 중간체 12(3.50 g, 3.32 mmol), 아세트산팔라듐(37 mg, 0.166 mmol), 트리시클로헥실포스포늄테트라플루오로보레이트(122 mg, 0.332 mmol), 탄산칼륨(1.84 g, 13.3 mmol)을 N,N-디메틸아세트아미드(170 mL)에 현탁시켜, 140 °C에서 8시간 가열 교반했다. 반응 종료 후, 침전을 여과 분별했다. 이 고체를 가열한 클로로벤젠으로 세정하여 오렌지색 고체(2.1 g, 수율 65%)를 얻었다. 얻어진 고체는 목적물인 GD-1이며, 매스 스펙트럼 분석 결과, 분자량 981에 대하여 m/e=981이었다.

[0750] 실시예 2-6

[0751] 하기 합성 경로로 BD-7을 합성했다.



[0752]

[0753] 중간체 13의 합성

[0754] 7-브로모-1H-인돌(10.0 g, 51.0 mmol), 벤즈알데히드(5.41 g, 51.0 mmol)를 아세토니트릴(200 mL)에 용해시키고, 교반하면서 57% 요오드화수소산(2 mL)을 적하하여, 80℃에서 8시간 가열 교반했다. 반응 종료 후, 석출된 고체를 여과 분별하고, 아세토니트릴로 세정하여 담황색 고체(4.60 g, 수율 32%)를 얻었다. 얻어진 고체는 목적물인 중간체 13이며, 매스 스펙트럼 분석 결과, 분자량 568에 대하여 $m/e=568$ 이었다.

[0755] 중간체 14의 합성

[0756] 중간체 13(4.50 g, 7.92 mmol)을 아세토니트릴에 현탁시키고, 교반하면서 2,3-디클로로-5,6-디시아노-p-벤조퀴논(DDQ, 4.49 g, 19.8 mmol)을 가한 후, 80℃에서 6시간 가열 교반했다. 반응 종료 후, 침전을 여과 분별했다. 이 고체를 아세토니트릴로 세정하여 황색 고체(4.02 g, 수율 90%)를 얻었다. 얻어진 고체는 목적물인 중간체 14이며, 매스 스펙트럼 분석 결과, 분자량 566에 대하여 $m/e=566$ 이었다.

[0757] 중간체 15의 합성

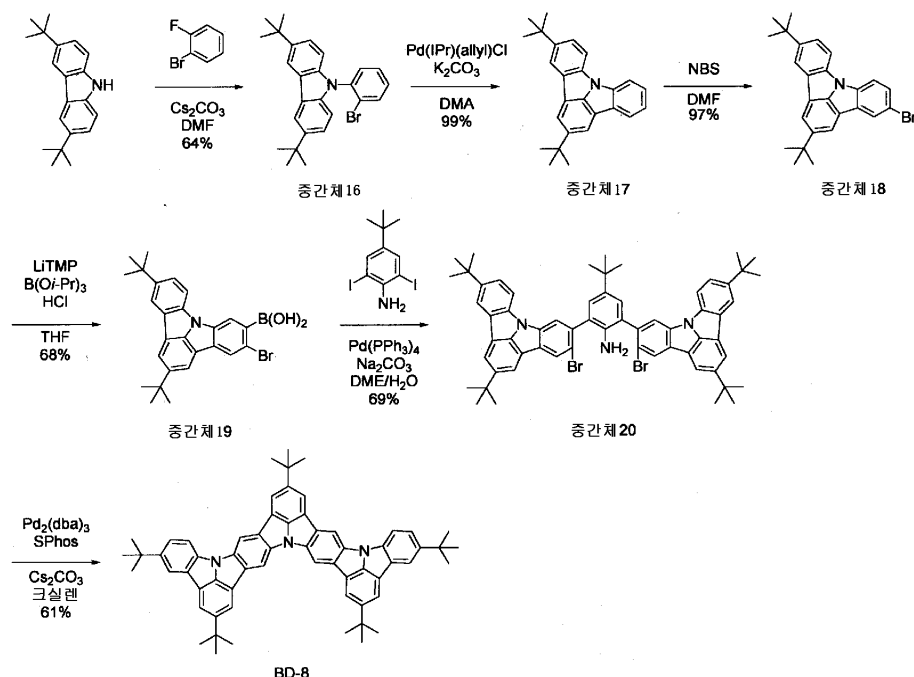
[0758] 아르곤 분위기 하, 중간체 14(1.50 g, 2.65 mmol), 2-클로로페닐보론산(1.24 g, 7.95 mmol), $Pd(PPh_3)_4$ (153 mg, 0.132 mmol), 탄산칼륨(2.20 g, 15.9 mmol)을 디메톡시에탄(20 mL)과 물(5 mL)에 용해하고, 80℃에서 8시간 가열 교반했다. 반응 종료 후, 침전을 여과 분별했다. 이 고체를 톨루엔으로 가열 현탁하여 담황색 고체(1.00 g, 수율 60%)를 얻었다. 얻어진 고체는 목적물인 중간체 15이며, 매스 스펙트럼 분석 결과, 분자량 629에 대하여 $m/e=629$ 었다.

[0759] BD-7의 합성

[0760] 아르곤 분위기 하, 중간체 15(900 mg, 1.43 mmol), CuI(136 mg, 0.715 mmol), 1,10-페난트롤린1수화물(142 mg, 0.715 mmol), K_2CO_3 (790 mg, 5.72 mmol)를 N,N-디메틸포름아미드(30 mL)에 현탁하고, 150℃에서 8시간 가열 교반했다. 반응 종료 후, 숏패스 컬럼 크로마토그래피를 통과시켰다. 용매를 유거한 후, 얻어진 고체를 시클로헥사논으로 재결정하여 황색 고체(505 mg, 수율 63%)를 얻었다. 얻어진 고체는 목적물인 BD-7이며, 매스 스펙트럼 분석 결과, 분자량 556에 대하여 $m/e=556$ 이었다.

[0761] 실시예 2-7

[0762] 하기 합성 경로로 BD-8을 합성했다.



[0763]

[0764] 중간체 16의 합성

[0765] 3,6-디-tert-부틸-9H-카르바졸(15.0 g, 53.7 mmol), 1-브로모-2-플루오로벤젠(18.8 mmol, 107 mmol), 탄산세슘

(35.0 g, 107 mmol)을 N,N-디메틸포름아미드(190 mL)에 현탁하고, 150℃에서 22시간 가열 교반했다. 반응 종료 후, 물을 가하고 침전을 여과 분별했다. 이 고체를 컬럼 크로마토그래피로 정제하여 백색 고체(21.7 g, 수율 93%)를 얻었다. 얻어진 고체는 목적물인 중간체 16이며, 매스 스펙트럼 분석 결과, 분자량 434에 대하여 $m/e=434$ 였다.

[0766] 중간체 17의 합성

[0767] 아르곤 분위기 하, 중간체 16(21.7 g, 50.0 mmol), 알릴클로로[1,3-비스(2,6-디이소프로필페닐)이미다졸-2-일리덴]팔라듐(570 mg, 0.996 mmol), 탄산칼륨(13.8 g, 100 mmol)을 N,N-디메틸아세트아미드(250 mL)에 현탁시키고, 130℃에서 11시간 가열 교반했다. 반응 종료 후, 물을 가하고 침전을 여과 분별했다. 이 고체를 컬럼 크로마토그래피로 정제하여 백색 고체(15.5 g, 수율 88%)를 얻었다. 얻어진 고체는 목적물인 중간체 17이며, 매스 스펙트럼 분석 결과, 분자량 353에 대하여 $m/e=353$ 이었다.

[0768] 중간체 18의 합성

[0769] 중간체 17(4.10 g, 11.6 mmol)을 N,N-디메틸포름아미드에 용해시키고, 교반하면서 N-브로모숙신이미드(NBS, 2.20 g, 12.36 mmol)를 가한 후, 실온에서 10시간 교반했다. 반응 종료 후, 침전을 여과 분별했다. 이 고체를 컬럼 크로마토그래피로 정제하여 백색 고체(4.87 g, 수율 97%)를 얻었다. 얻어진 고체는 목적물인 중간체 18이며, 매스 스펙트럼 분석 결과, 분자량 432에 대하여 $m/e=432$ 였다.

[0770] 중간체 19의 합성

[0771] 2,2,6,6-테트라메틸피페리딘(3.20 g, 22.7 mmol)을 테트라히드로푸란에 용해시키고, -50℃에서 교반하면서 n-부틸리튬헥산 용액(1.55 M, 14.6 mL)을 가하여, 리튬테트라메틸피페리디드(LiTMP)로 했다. 동 온도에서 20분 교반한 후, -73℃로 냉각하고, 붕산트리이소프로필(8.00 mL, 34.7 mmol)을 가했다. 이 용액을 5분 교반한 후, 중간체 18(4.83 g, 11.2 mmol)의 테트라히드로푸란(30 mL) 용액을 적하했다. 실온까지 서서히 승온하면서 10시간 교반한 후, 10% 염산(100 mL)을 가하여 30분 교반했다. 반응 종료 후, 아세트산에틸을 가하여 추출하고, 유기층을 모아 용매를 유거했다. 얻어진 잔사를 컬럼 크로마토그래피로 정제하여 황색 고체(3.62 g, 수율 68%)를 얻었다. 얻어진 고체는 목적물인 중간체 19이며, 매스 스펙트럼 분석 결과, 분자량 476에 대하여 $m/e=476$ 이었다.

[0772] 중간체 20의 합성

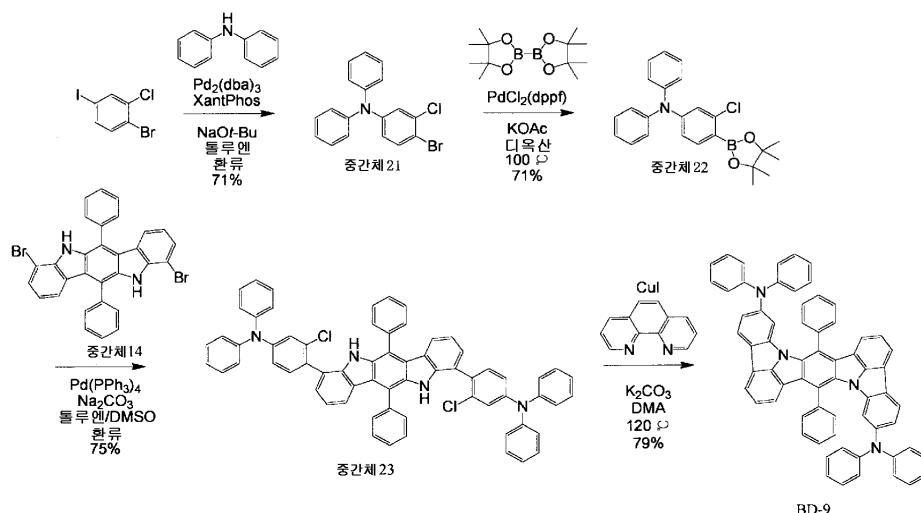
[0773] 아르곤 분위기 하, 4-tert-부틸-2,6-디오오도아닐린(1.39 g, 3.47 mmol), 중간체 19(3.62 g, 7.60 mmol), $Pd(PPh_3)_4$ (400 mg, 0.346 mmol), 탄산수소나트륨(2.30 g, 27.4 mmol)을 디메톡시에탄(50 mL)과 물(25 mL)에 용해하고, 80℃에서 10시간 가열 교반했다. 반응 종료 후, 염화메틸렌으로 추출하여, 유기층을 황산마그네슘으로 건조시켰다. 고체를 여과로 제거하고, 용매를 유거하여 얻어진 잔사를 컬럼 크로마토그래피로 정제하여, 황색 고체(2.41 g, 수율 69%)를 얻었다. 얻어진 고체는 목적물인 중간체 20이며, 매스 스펙트럼 분석 결과, 분자량 1010에 대하여 $m/e=1010$ 이었다.

[0774] BD-8의 합성

[0775] 아르곤 분위기 하, 중간체 20(2.41 g, 2.39 mmol), $Pd_2(dba)_3$ (90 mg, 0.098 mmol), SPhos(16 mg, 0.39 mmol), 탄산세슘(4.7 g, 14.4 mmol)을 크실렌(240 mL)에 현탁하고, 140℃에서 10시간 가열 교반했다. 반응 종료 후, 석출 고체를 여과 분별하고, 물과 메탄올로 세정했다. 이 고체를 컬럼 크로마토그래피로 정제하여 황색 고체(1.24 g, 수율 61%)를 얻었다. 얻어진 고체는 목적물인 BD-8이며, 매스 스펙트럼 분석 결과, 분자량 848에 대하여 $m/e=848$ 이었다.

[0776] 실시예 2-8

[0777] 하기 합성 경로로 BD-9를 합성했다.



[0778]

[0779] 중간체 21의 합성

[0780] 아르곤 분위기 하, 1-브로모-2-클로로-4-요오도벤젠(17.0 g, 53.6 mmol), 디페닐아민(9.07 g, 53.6 mmol), $\text{Pd}_2(\text{dba})_3$ (981 mg, 1.07 mmol), 4,5'-비스(디페닐포스포노)-9,9'-디메틸산텐(XantPhos, 1.24 g, 2.14 mmol), NaOt-Bu(5.15 g, 53.6 mmol)을 톨루엔(500 mL) 중에서 8시간 환류했다. 반응 종료 후, 셀라이트 여과하고, 농축하여 얻어진 잔사를 실리카겔 컬럼 크로마토그래피로 정제하여 백색 고체(13.6 g, 수율 71%)를 얻었다. 얻어진 고체는 목적물인 중간체 21이며, 매스 스펙트럼 분석 결과, 분자량 358.6에 대하여 $m/e=359$ 였다.

[0781] 중간체 22의 합성

[0782] 아르곤 분위기 하, 중간체 21(13.6 g, 38.0 mmol), 비스(피나콜라토)디보론(19.3 g, 76.0 mmol), $\text{PdCl}_2(\text{dppf})$ (621 mg, 0.761 mmol), 아세트산칼륨(7.46 g, 76 mmol)을 디옥산(400 mL)에 현탁시켜, 7시간 환류했다. 반응 종료 후, 숯패스 실리카겔 컬럼 크로마토그래피를 통과시켜, 용매를 농축했다. 얻어진 고체를 메탄올로 세정하여 백색 고체(18.5 g, 수율 71%)를 얻었다. 얻어진 고체는 목적물인 중간체 22이며, 매스 스펙트럼 분석 결과, 분자량 405.7에 대하여 $m/e=406$ 이었다.

[0783] 중간체 23의 합성

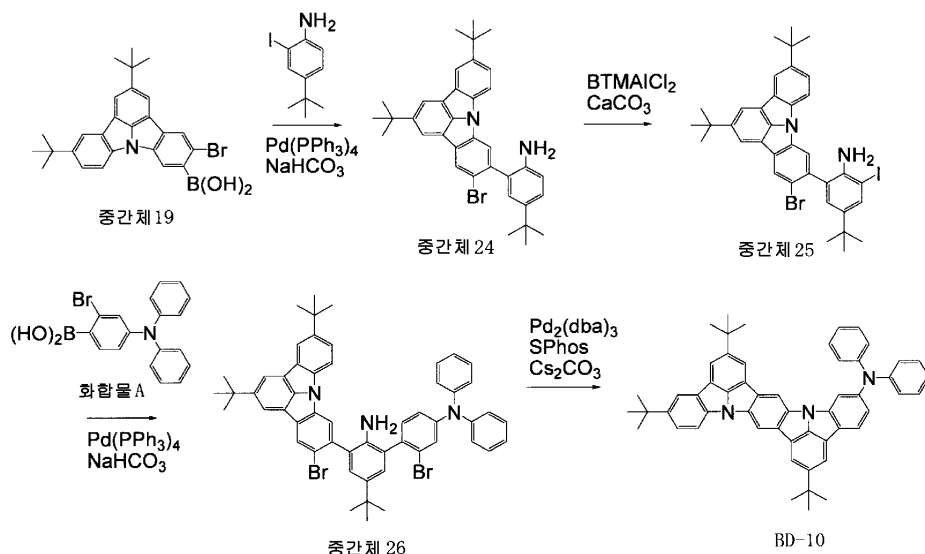
[0784] 아르곤 분위기 하, 디브로모체(중간체 14)(5.00 g, 8.83 mmol), 보론산에스테르(중간체 22)(10.8 g, 26.5 mmol), $\text{Pd}(\text{PPh}_3)_4$ (1.02 g, 0.883 mmol)를 톨루엔(250 mL)과 디메틸술폭시드(500 mL)에 용해하고, 이것에 2M의 Na_2CO_3 (130 mL)를 가하여 100 °C에서 6시간 가열 교반했다. 반응 종료 후, 숯패스 실리카겔 컬럼 크로마토그래피를 통과시켜, 용매를 농축했다. 얻어진 잔사를 아세트산에틸과 톨루엔으로 세정하여 황색 고체(6.39 g, 수율 75%)를 얻었다. 얻어진 고체는 목적물인 중간체 23이며, 매스 스펙트럼 분석 결과, 분자량 964.0에 대하여 $m/e=965$ 였다.

[0785] BD-9의 합성

[0786] 아르곤 분위기 하, 중간체 23(6.24 g, 6.47 mmol), 요오드화구리(I)(1.48 g, 7.77 mmol), 1,10-페난트롤린(1.40 g, 7.77 mmol), 탄산칼륨(7.16 g, 51.8 mmol)을 N,N-디메틸아세트아미드(1.2 L)에 현탁하여, 15시간 120 °C에서 가열 교반했다. 반응 종료 후, 숯패스 실리카겔 컬럼 크로마토그래피를 통과시켜, 용매를 농축했다. 얻어진 잔사를 클로로벤젠으로 재결정하고, 톨루엔과 메탄올로 세정하여 황색 고체(4.54 g, 수율 79%)를 얻었다. 얻어진 고체는 목적물인 BD-9이며, 매스 스펙트럼 분석 결과, 분자량 891.1에 대하여 $m/e=892$ 였다.

[0787] 실시예 2-9

[0788] 하기 합성 경로로 BD-10을 합성했다.



[0789]

[0790] 중간체 24의 합성

[0791] 아르곤 분위기 하, 4-tert-부틸-2-요오도아닐린(2.00 g, 7.27 mmol), 중간체 19(3.00 g, 6.30 mmol), Pd(PPh₃)₄(420 mg, 0.364 mmol), 탄산수소나트륨(1.90 g, 22.6 mmol)을 디메톡시에탄(40 mL)과 물(20 mL)에 용해하고, 80℃에서 10시간 가열 교반했다. 반응 종료 후, 염화메틸렌으로 추출하고, 유기상을 황산마그네슘으로 건조시켰다. 고체를 여과로 제거하고, 용매를 유거하여 얻어진 잔사를 컬럼 크로마토그래피로 정제하여, 백색 고체(2.95 g, 수율 81%)를 얻었다. 얻어진 고체는 목적물인 중간체 24이며, 매스 스펙트럼 분석 결과, 분자량 579.6에 대하여 m/e=580이었다.

[0792] 중간체 25의 합성

[0793] 중간체 24(2.95 g, 5.09 mmol)를 염화메틸렌(50 mL)과 메탄올(20 mL)에 용해시키고, 교반하면서 탄산칼슘(0.80 g, 8.0 mmol)과 벤질트리메틸암모늄디클로로요오디드(1.80 g, 5.17 mmol)를 가하여, 실온에서 10시간 교반했다. 반응 종료 후, 포화 티오황산나트륨 수용액을 가하여, 조금 교반한 후, 염화메틸렌으로 추출했다. 유기상을 농축하여 얻어진 고체를 컬럼 크로마토그래피로 정제하여 백색 고체(3.16 g, 수율 88%)를 얻었다. 얻어진 고체는 목적물인 중간체 25이며, 매스 스펙트럼 분석 결과, 분자량 705.5에 대하여 m/e=706이었다.

[0794] 중간체 26의 합성

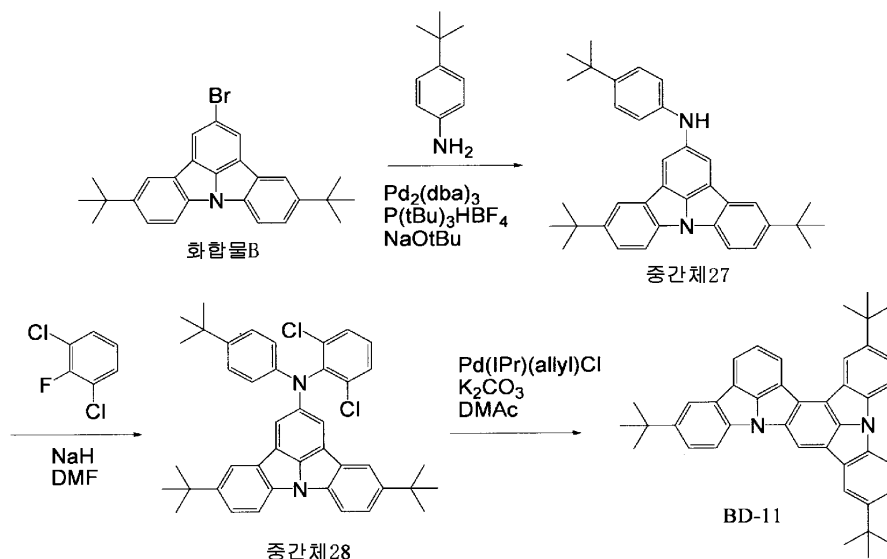
[0795] 아르곤 분위기 하, 요오드 중간체(중간체 25)(3.16 g, 4.48 mmol), 보론산 화합물 A(2.00 g, 5.43 mmol), Pd(PPh₃)₄(260 mg, 0.225 mmol), 탄산수소나트륨(1.60 g, 19.1 mmol)을 디메톡시에탄(40 mL)과 물(20 mL)에 용해하고, 80℃에서 10시간 가열 교반했다. 반응 종료 후, 염화메틸렌으로 추출하고, 유기상을 황산마그네슘으로 건조시켰다. 고체를 여과로 제거하고, 용매를 유거하여 얻어진 잔사를 컬럼 크로마토그래피로 정제하여 황색 고체(3.93 g, 수율 97%)를 얻었다. 얻어진 고체는 목적물인 중간체 26이며, 매스 스펙트럼 분석 결과, 분자량 901.8에 대하여 m/e=902였다.

[0796] BD-10의 합성

[0797] 아르곤 분위기 하, 중간체 26(3.93 g, 2.39 mmol), Pd₂(dba)₃(160 mg, 0.175 mmol), SPhos(290 mg, 0.706 mmol), 탄산세슘(8.4 g, 26 mmol)을 크실렌(360 mL)에 현탁하고, 140℃에서 10시간 가열 교반했다. 반응 종료 후, 식출 고체를 여과 분별하고, 물과 메탄올로 세정했다. 이 고체를 컬럼 크로마토그래피로 정제하여 황색 고체(1.35 g, 수율 42%)를 얻었다. 얻어진 고체는 목적물인 BD-10이며, 매스 스펙트럼 분석 결과, 분자량 740.0에 대하여 m/e=741이었다.

[0798] 실시예 2-10

[0799] 하기 합성 경로로 BD-11을 합성했다.



[0800]

[0801] 중간체 27의 합성

[0802] 아르곤 분위기 하, 화합물 B(3.00 g, 6.94 mmol), 4-tert-부틸-아닐린(1.20 g, 8.04 mmol), $\text{Pd}_2(\text{dba})_3$ (60 mg, 0.066 mmol), 트리-tert-부틸포스포늄테트라플루오로보레이트(80 mg, 0.276 mmol), 나트륨tert-부톡사이드(0.94 g, 9.8 mmol)를 톨루엔(25 mL)에 현탁시키고, 100℃에서 10시간 가열 교반했다. 반응 종료 후, 셀라이트 여과하여 용매를 유거했다. 얻어진 잔사를 컬럼 크로마토그래피로 정제하여 황색 고체(3.20 g, 수율 92%)를 얻었다. 얻어진 고체는 목적물인 중간체 27이며, 매스 스펙트럼 분석 결과, 분자량 500.7에 대하여 $m/e=508$ 이었다.

[0803] 중간체 28의 합성

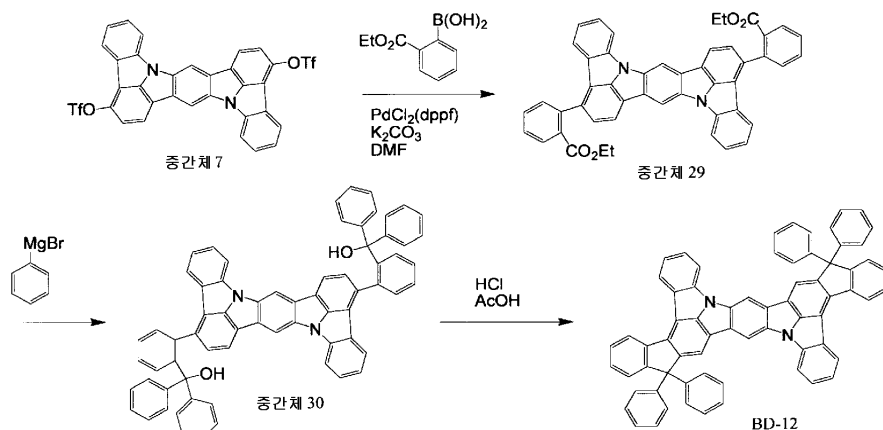
[0804] 중간체 27(3.20 g, 6.39 mmol)을 N,N-디메틸포름아미드(20 mL)에 녹이고, 유동 파라핀에 분산한 약 60% 수소화 나트륨(0.77 g, 19 mmol)을 가하여 20분 교반했다. 이 용액에 1,3-디클로로-2-플루오로벤젠(1.6 g, 9.7 mmol)을 가하여 50℃에서 10시간 가열 교반했다. 반응 종료 후, 석출한 고체를 여과 분별하고 메탄올로 세정했다. 얻어진 고체를 컬럼 크로마토그래피로 정제하여 황색 고체(3.44 g, 수율 79%)를 얻었다. 얻어진 고체는 목적물인 중간체 28이며, 매스 스펙트럼 분석 결과, 분자량 645.7에 대하여 $m/e=646$ 이었다.

[0805] BD-11의 합성

[0806] 아르곤 분위기 하, 중간체 28(3.44 g, 5.33 mmol), 알릴[1,3-비스(2,6-디이소프로필페닐)이미다졸-2-일리덴]클로로팔라듐(120 mg, 0.210 mmol), 탄산칼륨(2.94 g, 21.5 mmol)을 N,N-디메틸아세트아미드(30 mL)에 현탁시키고, 150℃에서 10시간 가열 교반했다. 반응 종료 후, 물을 가하여 고체를 여과 분별했다. 얻어진 고체를 컬럼 크로마토그래피와 재결정으로 정제하여 황색 고체(1.87 g, 수율 61%)를 얻었다. 얻어진 고체는 목적물인 BD-11이며, 매스 스펙트럼 분석 결과, 분자량 572.8에 대하여 $m/e=573$ 이었다.

[0807] 실시예 2-11

[0808] 하기 합성 경로로 BD-12를 합성했다.



[0809]

[0810] 중간체 29의 합성

[0811] 아르곤 분위기 하, 중간체 7(3.00 g, 4.28 mmol), 2-(에톡시카르보닐)페닐보론산(2.50 g, 12.9 mmol), [1,1'-비스(디페닐포스피노)페로센]디클로로팔라듐(157 mg, 0.214 mmol), 탄산칼륨(2.37 g, 17.1 mmol)을 N,N-디메틸포름아미드(200 mL)에 현탁하고, 130℃에서 8시간 가열 교반했다. 반응 종료 후, 물을 가하여 침전을 여과 분별하고, 메탄올로 세정했다. 얻어진 고체를 컬럼 크로마토그래피로 정제하여 황색 고체(2.40 g, 수율 80%)를 얻었다. 얻어진 고체는 목적물인 중간체 29이며, 매스 스펙트럼 분석 결과, 분자량 700.8에 대하여 $m/e=701$ 이었다.

[0812]

중간체 30의 합성

[0813]

아르곤 분위기 하, 중간체 29(2.35 g, 3.35 mmol)를 테트라히드로푸란(300 mL)에 용해하고, 0℃에서 1M 페닐마그네슘브로마이드/THF 용액(30 mL, 30 mmol)을 적하했다. 적하 종료 후, 실온까지 승온하고 5시간 교반했다. 반응 종료 후, 물을 가하여 아세트산에틸로 추출했다. 유기층을 농축하고, 얻어진 고체를 컬럼 크로마토그래피로 정제하여 황색 고체(2.10 g, 수율 68%)를 얻었다. 얻어진 고체는 목적물인 중간체 30이며, 매스 스펙트럼 분석 결과, 분자량 921.1에 대하여 $m/e=922$ 였다.

[0814]

BD-12의 합성

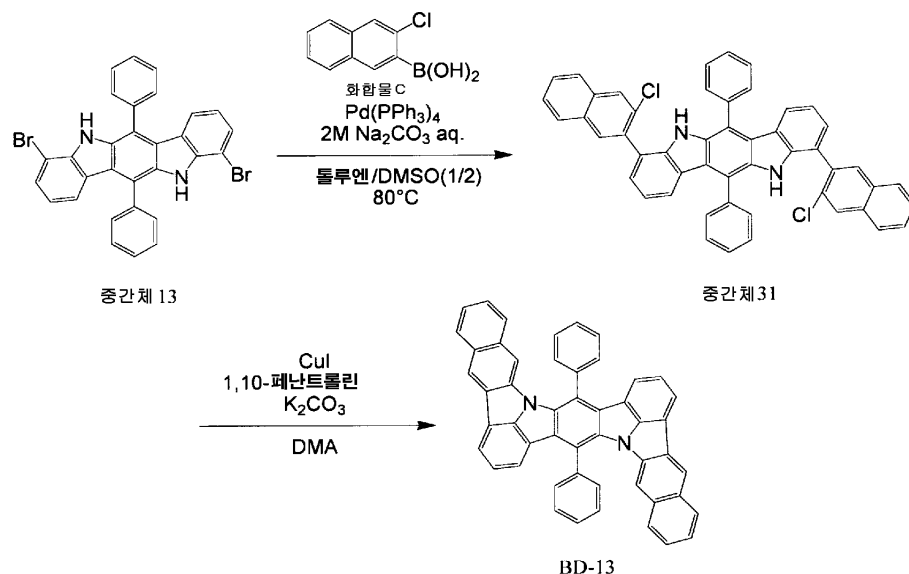
[0815]

중간체 30(2.00 g, 2.17 mmol)에 아세트산(50 mL)과 농염산(3 mL)을 가하여 100℃에서 6시간 가열 교반했다. 반응 종료 후, 물을 가하고 고체를 여과 분별했다. 얻어진 고체를 컬럼 크로마토그래피로 정제하여 황색 고체(0.82 g, 수율 43%)를 얻었다. 얻어진 고체는 목적물인 BD-12이며, 매스 스펙트럼 분석 결과, 분자량 885.1에 대하여 $m/e=886$ 이었다.

[0816]

실시예 2-12

[0817] 하기 합성 경로로 BD-13을 합성했다.



[0818]

[0819] 중간체 31의 합성

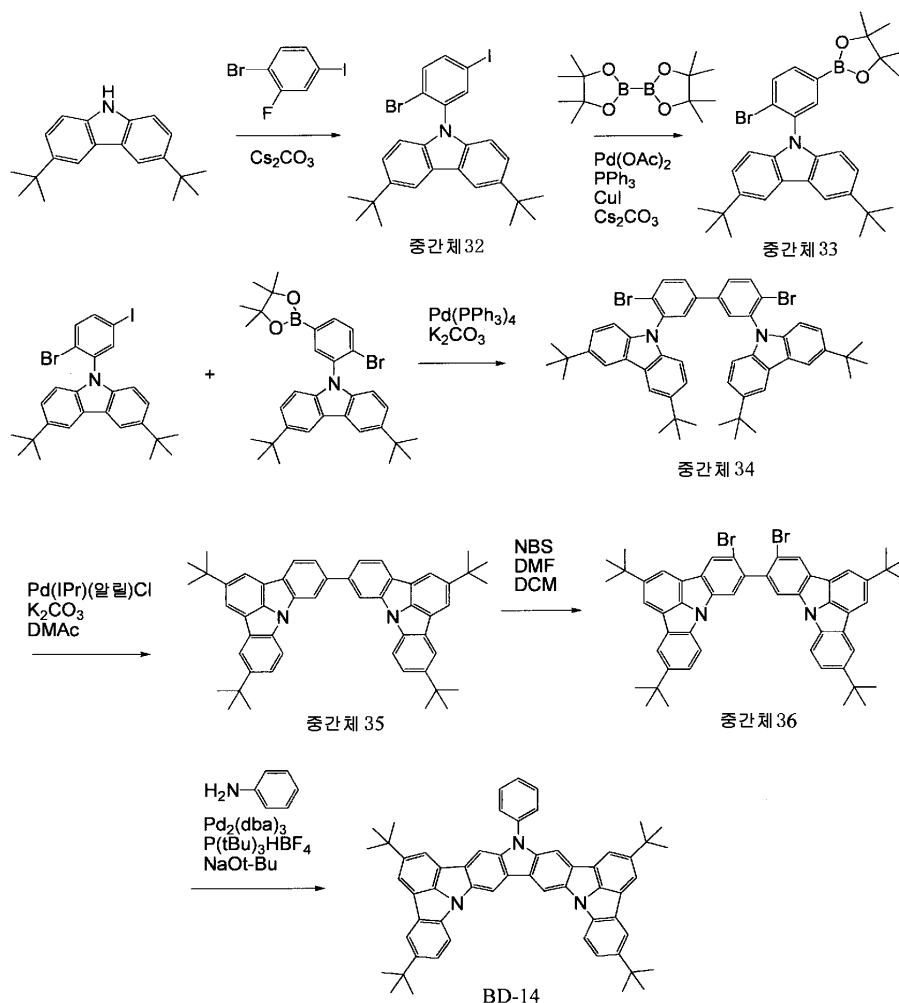
[0820] 아르곤 분위기 하, 디브로모체 중간체 13(500 mg, 0.88 mmol), 보론산 화합물 C(380 mg, 1.85 mmol), $\text{Pd(PPh}_3)_4$ (40 mg, 0.035 mmol)를 톨루엔(5 mL)과 디메틸설폭시드(10 mL)에 용해하고, 이것에 2M의 Na_2CO_3 (2 mL)을 가하여 80°C 에서 6시간 가열 교반했다. 반응 종료 후, 숏패스 실리카겔 컬럼 크로마토그래피를 통과시켜, 용매를 농축했다. 얻어진 잔사를 아세트산에틸과 톨루엔으로 세정하여 황색 고체(320 mg, 수율 50%)를 얻었다. 얻어진 고체는 목적물인 중간체 31이며, 매스 스펙트럼 분석 결과, 분자량 729.7에 대하여 $m/e=730$ 이었다.

[0821] BD-13의 합성

[0822] 아르곤 분위기 하, 중간체 31(300 mg, 0.411 mmol), 요오드화구리(I)(94 mg, 0.49 mmol), 1,10-페난트롤린(89 mg, 0.49 mmol), 탄산칼륨(450 mg, 3.29 mmol)을 N,N-디메틸아세트아미드(20 mL)에 현탁하고, 15시간 120°C 에서 가열 교반했다. 반응 종료 후, 숏패스 실리카겔 컬럼 크로마토그래피를 통과시켜, 용매를 농축했다. 얻어진 잔사를 톨루엔과 메탄올로 세정하고, 컬럼 크로마토그래피로 정제하여 황색 고체(148 mg, 수율 55%)를 얻었다. 얻어진 고체는 목적물인 BD-13이며, 매스 스펙트럼 분석 결과, 분자량 656.8에 대하여 $m/e=657$ 이었다.

[0823] 실시예 2-13

[0824] 하기 합성 경로로 BD-14를 합성했다.



[0825]

[0826] 중간체 32의 합성

[0827] 3,6-디-tert-부틸-9H-카르바졸(11.6 g, 41.5 mmol)과 1-브로모-2-플루오로-4-요오도벤젠(25 g, 83 mmol)과 탄산세슘(27 g, 83 mmol)을 N,N-디메틸포름아미드(145 mL)에 현탁시키고, 150℃에서 22시간 가열 교반했다. 반응 종료 후, 물을 가하고, 고체를 여과 분별했다. 이 고체를 컬럼 크로마토그래피로 정제하여 백색 고체(21.5 g, 수율 92%)를 얻었다. 얻어진 고체는 목적물인 중간체 32이며, 매스 스펙트럼 분석 결과, 분자량 560.3에 대하여 m/e=561이었다.

[0828] 중간체 33의 합성

[0829] 아르곤 분위기 하, 중간체 32(5.00 g, 8.92 mmol), 비스(피나콜라토)디보론(3.40 g, 13.4 mmol), 아세트산팔라듐(40 mg, 0.18 mmol), 트리페닐포스핀(50 mg, 0.19 mmol), 요오드화구리(0.34 g, 1.79 mmol), 탄산세슘(4.4 g, 13.5 mmol)을 아세토니트릴(50 mL)에 현탁시키고, 실온에서 20시간 교반했다. 반응 종료 후, 셀라이트 여과하여, 용매를 농축했다. 얻어진 고체를 컬럼 크로마토그래피로 정제하여 백색 고체(3.84 g, 수율 77%)를 얻었다. 얻어진 고체는 목적물인 중간체 33이며, 매스 스펙트럼 분석 결과, 분자량 560.4에 대하여 m/e=561이었다.

[0830] 중간체 34의 합성

[0831] 아르곤 분위기 하, 요오드 중간체 32(3.49 g, 6.23 mmol), 보론산 중간체 33(3.84 g, 6.85 mmol), Pd(PPh₃)₄(360 mg, 0.312 mmol), 탄산칼륨(2.60 g, 18.8 mmol)을 테트라히드로푸란(90 mL)과 물(20 mL)에 용해하고, 80℃에서 10시간 가열 교반했다. 반응 종료 후, 염화메틸렌으로 추출하고, 유기층을 황산마그네슘으로 건조시켰다. 고체를 여과로 제거하고, 용매를 유기하여 얻어진 잔사를 컬럼 크로마토그래피로 정제하여 백색 고체(5.33 g, 수율 99%)를 얻었다. 얻어진 고체는 목적물인 중간체 34이며, 매스 스펙트럼 분석 결과, 분자량 866.8

에 대하여 $m/e=867$ 이었다.

[0832] 중간체 35의 합성

[0833] 아르곤 분위기 하, 중간체 34(5.33 g, 6.15 mmol), 알릴[1,3-비스(2,6-디이소프로필페닐)이미다졸-2-일리덴]클로로팔라듐(140 mg, 0.245 mmol), 탄산칼륨(3.40 g, 24.6 mmol)을 N,N-디메틸아세트아미드(30 mL)에 현탁시키고, 130℃에서 11시간 가열 교반했다. 반응 종료 후, 물을 가하고 고체를 여과 분별했다. 얻어진 고체를 컬럼 크로마토그래피로 정제하여 황색 고체(3.0 g, 수율 69%)를 얻었다. 얻어진 고체는 목적물인 중간체 35이며, 매스 스펙트럼 분석 결과, 분자량 705.0에 대하여 $m/e=706$ 이었다.

[0834] 중간체 36의 합성

[0835] 중간체 35(3.00 g, 4.26 mmol)를 N,N-디메틸포름아미드(50 mL)와 염화메틸렌(150 mL)에 용해시키고, 교반하면서 N-브로모숙신이미드(1.67 g, 9.38 mmol)를 가하여, 실온에서 11시간 교반했다. 반응 종료 후, 염화메틸렌을 유거하고, 남은 유기층에 물을 가하고, 침전을 여과 분별했다. 이 고체를 컬럼 크로마토그래피로 정제하여 백색 고체(3.51 g, 수율 95%)를 얻었다. 얻어진 고체는 목적물인 중간체 36이며, 매스 스펙트럼 분석 결과, 분자량 862.8에 대하여 $m/e=863$ 이었다.

[0836] BD-14의 합성

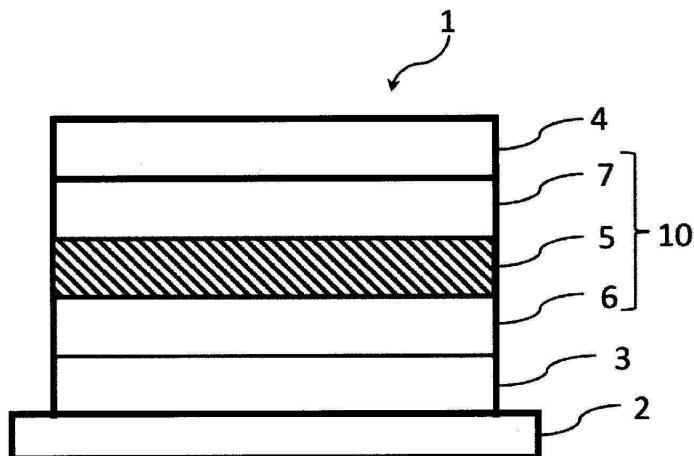
[0837] 아르곤 분위기 하, 중간체 36(3.50 g, 4.06 mmol), $Pd_2(dba)_3$ (190 mg, 0.207 mmol), 트리-tert-부틸포스포늄 테트라플루오로보레이트(240 mg, 0.828 mmol), 나트륨tert-부톡사이드(1.56 g, 16.3 mmol)를 톨루엔(40 mL)에 현탁시키고, 아닐린(0.37 mL, 4.1 mmol)을 가했다. 80℃에서 22시간 가열 교반했다. 반응 종료 후, 석출된 고체를 여과하고, 톨루엔, 메탄올로 세정한 결과, 황색 고체(2.46 g, 수율 76%)를 얻었다. 얻어진 고체는 목적물인 BD-14이며, 매스 스펙트럼 분석 결과, 분자량 794.1에 대하여 $m/e=795$ 였다.

[0838] 상기에 본 발명의 실시형태 및/또는 실시예를 몇 가지 상세하게 설명했지만, 당업자는, 본 발명의 신규의 교시 및 효과로부터 실질적으로 벗어나는 일 없이 이들 예시인 실시형태 및/또는 실시예에 많은 변경을 용이하게 가할 수 있다. 따라서, 이들 많은 변경은 본 발명의 범위에 포함된다.

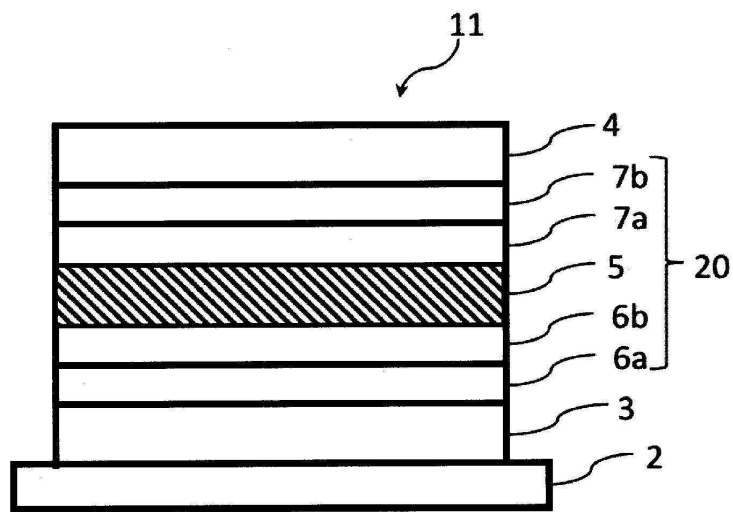
[0839] 이 명세서에 기재된 문헌 및 본원의 파리지약에 의한 우선권의 기초가 되는 출원의 내용을 전부 원용한다.

도면

도면1



도면2



专利名称(译)	有机电致发光器件和新型化合物		
公开(公告)号	KR1020190082752A	公开(公告)日	2019-07-10
申请号	KR1020197009797	申请日	2018-12-05
申请(专利权)人(译)	高山出光株式会社		
[标]发明人	나카노유키		
发明人	다카하시 료타 이케다 히데츠구 세다 게이타 나카노 유키		
IPC分类号	H01L51/00 C07D209/82 C07D487/04 C07D487/22 H01L51/50		
CPC分类号	H01L51/0072 C07D209/82 C07D487/04 C07D487/22 H01L51/0052 H01L51/5012 C07D491/22 C09K11/06 H01L51/0061 C09K2211/1007 C09K2211/1018 H01L51/001 H01L51/0058 H01L51/006 H01L51/0073 H01L51/0074 H01L51/5016 H01L51/5056 H01L51/5072 H01L51/5088 H01L51/5092 H01L51/5206 H01L51/5221 H01L51/56 H01L2251/301 H01L2251/308 H01L2251/558		
代理人(译)	Gimjinhoe Gimtaehong		
优先权	2017234331 2017-12-06 JP 2018114580 2018-06-15 JP 16/043074 2018-07-23 US 16/201984 2018-11-27 US		
外部链接	Espacenet		

摘要(译)

该有机电致发光元件具有负极，正极和设置在负极与正极之间的至少一个有机层，其中至少一个有机层中的至少一个包含由式 (1-1) 表示的化合物。(1-3) 或式 (1-2) 和 (1-3) 表示的化合物。

