



(19) 대한민국특허청(KR)  
(12) 등록특허공보(B1)

(45) 공고일자 2013년08월14일  
(11) 등록번호 10-1296978  
(24) 등록일자 2013년08월08일

(51) 국제특허분류(Int. Cl.)  
C09K 11/06 (2006.01) H01L 51/54 (2006.01)  
(21) 출원번호 10-2011-7014618  
(22) 출원일자(국제) 2009년12월22일  
심사청구일자 2011년10월17일  
(85) 번역문제출일자 2011년06월24일  
(65) 공개번호 10-2011-0114545  
(43) 공개일자 2011년10월19일  
(86) 국제출원번호 PCT/JP2009/071337  
(87) 국제공개번호 WO 2010/074087  
국제공개일자 2010년07월01일  
(30) 우선권주장  
JP-P-2008-334961 2008년12월26일 일본(JP)  
PCT/JP2009/065613 2009년09월07일 세계지적재  
산권기구(WIPO)(WO)  
(56) 선행기술조사문헌  
JP2004043349 A\*  
\*는 심사관에 의하여 인용된 문헌

(73) 특허권자  
이데미쓰 고산 가부시키가이샤  
일본 도쿄도 지요다쿠 마루노우치 3초메 1반 1고  
(72) 발명자  
다카시마 요리유키  
일본 지바켄 소데가우라시 가미이즈미 1280반치  
이와쿠마 도시히로  
일본 지바켄 소데가우라시 가미이즈미 1280반치  
(뒷면에 계속)  
(74) 대리인  
제일특허법인

전체 청구항 수 : 총 23 항

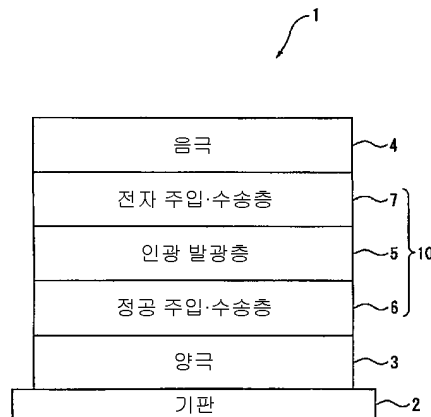
심사관 : 오세주

(54) 발명의 명칭 유기 전기발광 소자용 재료 및 유기 전기발광 소자

(57) 요약

음극과 양극 사이에, 1층 또는 복수층으로 이루어지는 유기 박막층을 구비하고, 상기 유기 박막층은 적어도 1개의 발광층을 갖고, 상기 발광층의 적어도 1개는, 인광 발광을 나타내는 인광 발광 재료의 적어도 1종과, 플루오렌, 다이벤조퓨란 또는 다이벤조싸이오펜 골격에 나프탈렌환을 결합한 구조를 필수로 하는 화합물인 호스트 재료를 포함하는 것을 특징으로 하는 유기 전기발광 소자에 의해, 고효율이고 또한 장수명인 인광 발광성 유기 전기발광 소자, 및 그것에 이용하는 유기 전기발광 소자용 재료를 제공한다.

대표도 - 도1



(72) 발명자

**오기와라 도시나리**

일본 지바켄 소데가우라시 가미이즈미 1280반치

**호소카와 지시오**

일본 지바켄 소데가우라시 가미이즈미 1280반치

---

**이토 미츠노리**

일본 지바켄 소데가우라시 가미이즈미 1280반치

## 특허청구의 범위

### 청구항 1

삭제

### 청구항 2

삭제

### 청구항 3

삭제

### 청구항 4

삭제

### 청구항 5

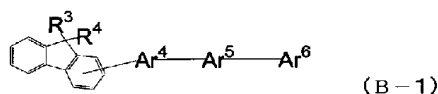
삭제

### 청구항 6

삭제

### 청구항 7

하기 화학식 (B-1)로 표시되는 유기 전기발광 소자용 재료.



(식 중,  $R^3$  및  $R^4$ 는 각각 독립적으로 수소 원자(중수소 원자를 포함함), 탄소수 1~10의 알킬기 또는 환 형성 탄소수 6~12의 아릴기를 나타내고,  $Ar^4$ 는 환 형성 탄소수 10~22의 축합 다환 방향족 탄화수소환 잔기이고,  $Ar^5$ 는 벤젠환 또는 환 형성 탄소수 10~22의 축합 다환 방향족 탄화수소환 잔기이고,  $Ar^6$ 은 수소 원자(중수소 원자를 포함함), 벤젠환 또는 환 형성 탄소수 10~22의 축합 다환 방향족 탄화수소환 잔기이다. 또한,  $R^3$ ,  $R^4$ ,  $Ar^4$ ,  $Ar^5$  및  $Ar^6$ 은 각각 독립적으로 치환기를 가져도 좋다.

단,  $Ar^4$ ,  $Ar^5$  및  $Ar^6$ 의 어느 것도 안트라센, 피렌, 페릴렌, 트라이페닐렌, 나프타센 또는 펜타센 골격을 갖지 않는다. 추가로 이하의 (1)~(6)의 경우를 전부 만족하는 것이다.

(1)  $Ar^4$ 가 나프탈렌환, 페난트렌환, 크라이센환, 벤즈안트라센환, 플루오란텐환 중 어느 하나이고, 또한  $Ar^5$ 가 플루오렌환인 경우를 제외한다.

(2)  $Ar^4$ 가 나프탈렌환이고,  $Ar^5$ 가 벤젠환이고, 또한  $Ar^6$ 이 벤젠환 또는 수소 원자인 경우를 제외한다.

(3) (i)  $Ar^4$ 가 나프탈렌-2,6-다이일기이고,  $Ar^5$ 가  $\beta$ -나프틸기이고, 또한  $Ar^6$ 이 수소 원자인 경우를 제외한다.

(ii)  $Ar^4$ 가 나프탈렌-2,6-다이일기이고,  $Ar^5$ 가 나프탈렌-2,6-다이일기이고, 또한  $Ar^6$ 이  $\beta$ -나프틸기인 경우를 제외한다.

(4)  $Ar^4$ 가 플루오렌환이고, 또한  $Ar^5$ 가 벤젠환, 플루오렌환 또는 플루오란텐환 중 어느 하나인 경우를 제외한다.

또한,  $Ar^4$ 가 플루오렌환이고, 또한  $Ar^6$ 이 수소 원자 또는  $\beta$ -나프틸기인 경우를 제외한다.

(5)  $Ar^4$ 가 페난트렌환 또는 플루오란텐환이고,  $Ar^5$ 가 벤젠환이고, 또한  $Ar^6$ 이 수소 원자인 경우를 제외한다.

(6)  $Ar^4$ 가 벤젠환, 바이페닐환, 나프탈렌환, 바이나프탈렌환, 플루오렌환 중 어느 하나이고, 또한  $Ar^5$ 가 플루오란텐환인 경우를 제외한다.)

## 청구항 8

제 7 항에 있어서,

$Ar^4$ 가 나프탈렌환이고,  $Ar^5$ 가 벤젠환이고, 또한  $Ar^6$ 이 환 형성 탄소수 10~22의 축합 다환 방향족 탄화수소환 잔기인 유기 전기발광 소자용 재료.

## 청구항 9

제 7 항에 있어서,

$Ar^4$ 가 나프탈렌환이고,  $Ar^5$ 가 나프탈렌환이고, 또한  $Ar^6$ 이 환 형성 탄소수 11~22의 축합 다환 방향족 탄화수소환 잔기인(단,  $Ar^4$ 가 나프탈렌-2,6-다이일기이고,  $Ar^5$ 가 나프탈렌-2,6-다이일기이고, 또한  $Ar^6$ 이  $\beta$ -나프틸기인 경우를 제외함) 유기 전기발광 소자용 재료.

## 청구항 10

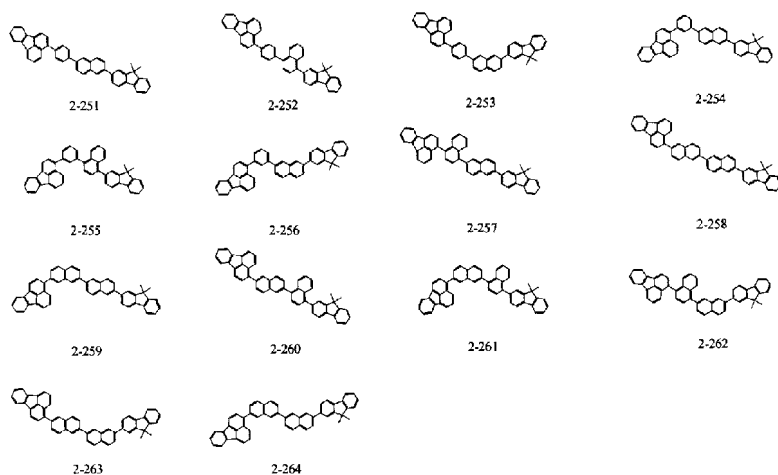
제 7 항에 있어서,

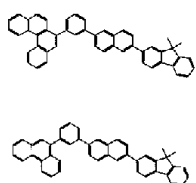
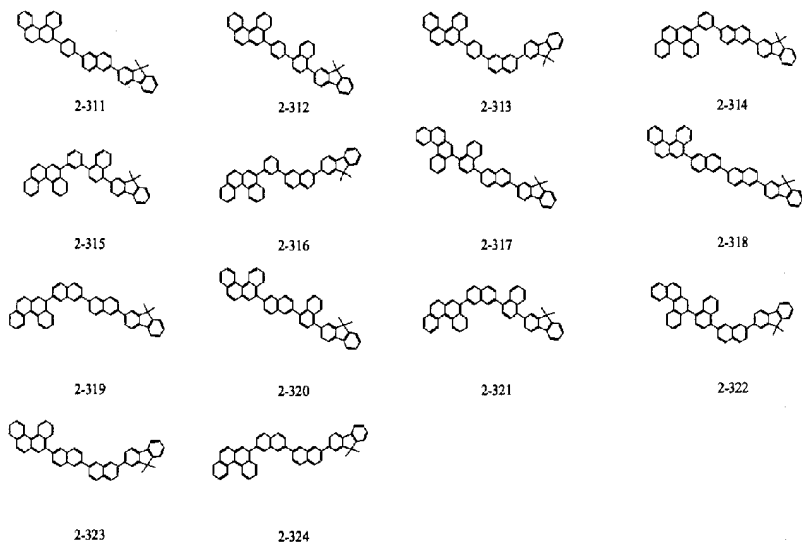
$Ar^4$ 가 나프탈렌환이고,  $Ar^5$ 가 환 형성 탄소수 11~22의 축합 다환 방향족 탄화수소환 잔기이고, 또한  $Ar^6$ 이 수소 원자(중수소 원자를 포함함)인(단, 이하의 (1)~(3) 중 어느 하나인 경우를 제외한다. (1)  $Ar^4$ 가 나프탈렌-2,6-다이일기이고,  $Ar^5$ 가  $\beta$ -나프틸기이고, 또한  $Ar^6$ 이 수소 원자인 경우, (2)  $Ar^4$ 가 나프탈렌-1,4-다이일기 또는 나프탈렌-1,5-다이일기이고,  $Ar^5$ 가 플루오란텐환이고, 또한  $Ar^6$ 이 수소 원자인 경우, 또는 (3)  $Ar^4$ 가 나프탈렌-1,4-다이일기, 나프탈렌-2,6-다이일기 또는 나프탈렌-2,8-다이일기 중 어느 하나이고,  $Ar^5$ 가 플루오렌환이고, 또한  $Ar^6$ 이 수소 원자인 경우) 유기 전기발광 소자용 재료.

## 청구항 11

제 7 항에 있어서,

이하에 나타내는 화합물을 제외하는 유기 전기발광 소자용 재료.

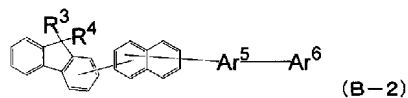




## 청구항 12

제 7 항에 있어서,

하기 화학식 (B-2)로 표시되는 유기 전기발광 소자용 재료.

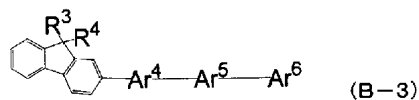


(식 중,  $R^3$ ,  $R^4$ ,  $Ar^5$  및  $Ar^6$ 은 상기와 동일하다.)

## 청구항 13

제 7 항에 있어서,

하기 화학식 (B-3)으로 표시되는 유기 전기발광 소자용 재료.

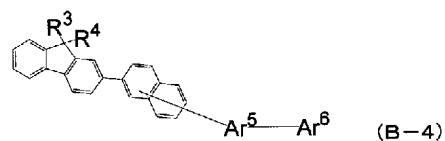


(식 중,  $R^3$ ,  $R^4$ ,  $Ar^4$ ,  $Ar^5$  및  $Ar^6$ 은 상기와 동일하다.)

## 청구항 14

제 7 항에 있어서,

하기 화학식 (B-4)로 표시되는 유기 전기발광 소자용 재료.



(식 중,  $R^3$ ,  $R^4$ ,  $Ar^5$  및  $Ar^6$ 은 상기와 동일하다.)

#### 청구항 15

제 7 항에 있어서,

상기 화학식 (B-1)의  $Ar^4 \sim Ar^6$ 에서의 환 형성 탄소수 10~22의 축합 다환 방향족 탄화수소환이 각각 독립적으로 나프탈렌환, 크라이센환, 페난트렌환, 벤조페난트렌환, 다이벤조페난트렌환, 벤조[a]트라이페닐렌환, 벤조크라이센환, 플루오란텐환, 벤조[b]플루오란텐환 및 피센환으로부터 선택되고,  $Ar^6$ 이 수소 원자(중수소 원자를 포함) 또는 상기 환 형성 탄소수 10~22의 축합 다환 방향족 탄화수소환 잔기를 나타내는 유기 전기발광 소자용 재료.

#### 청구항 16

제 14 항에 있어서,

상기 화학식 (B-4)의  $Ar^5$  및  $Ar^6$ 에서의 환 형성 탄소수 10~22의 축합 다환 방향족 탄화수소환이 각각 독립적으로 나프탈렌환, 크라이센환, 페난트렌환, 벤조페난트렌환, 다이벤조페난트렌환, 벤조[a]트라이페닐렌환, 벤조크라이센환, 플루오란텐환, 벤조[b]플루오란텐환 및 피센환으로부터 선택되고,  $Ar^6$ 이 수소 원자(중수소 원자를 포함) 또는 상기 환 형성 탄소수 10~22의 축합 다환 방향족 탄화수소환 잔기를 나타내는 유기 전기발광 소자용 재료.

#### 청구항 17

제 14 항에 있어서,

상기 화학식 (B-4)에서,  $R^3$  및  $R^4$ 가 각각 독립적으로 탄소수 1~10의 알킬기, 또는 페닐기를 나타내는 유기 전기발광 소자용 재료.

#### 청구항 18

제 7 항 내지 제 17 항 중 어느 한 항에 있어서,

$R^3$ ,  $R^4$ ,  $Ar^4$ ,  $Ar^5$  및  $Ar^6$  중 어느 하나가 1개 또는 복수의 치환기를 갖는 경우, 상기 치환기는 탄소수 1~20의 알킬기, 탄소수 1~20의 할로알킬기, 환 형성 탄소수 5~18의 사이클로알킬기, 탄소수 3~20의 실릴기, 사이아노기, 할로젠 원자 또는 환 형성 탄소수 6~22의 아릴기인 유기 전기발광 소자용 재료.

#### 청구항 19

삭제

#### 청구항 20

삭제

#### 청구항 21

삭제

#### 청구항 22

삭제

#### 청구항 23

삭제

#### 청구항 24

삭제

청구항 25

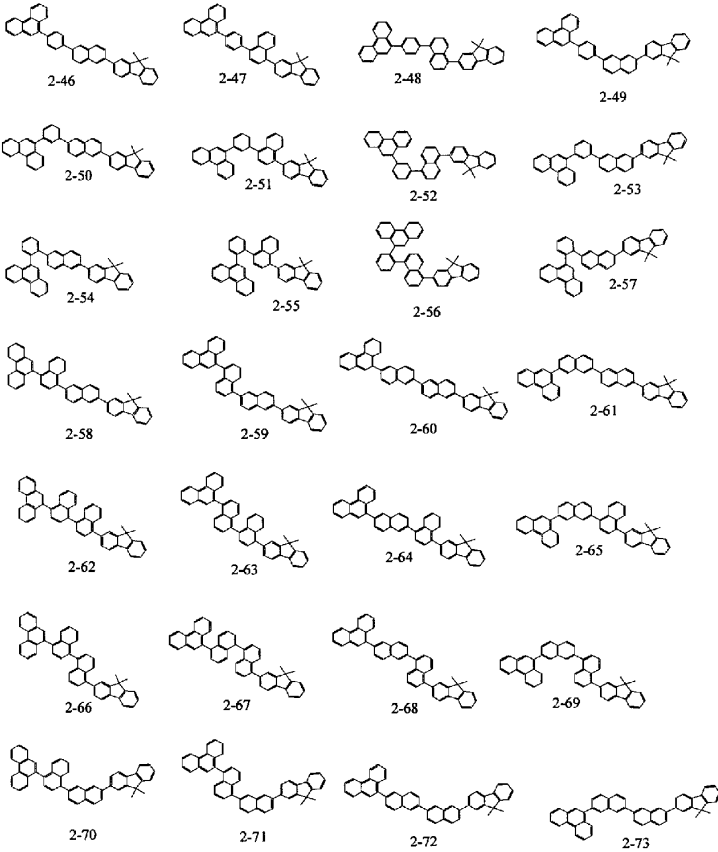
삭제

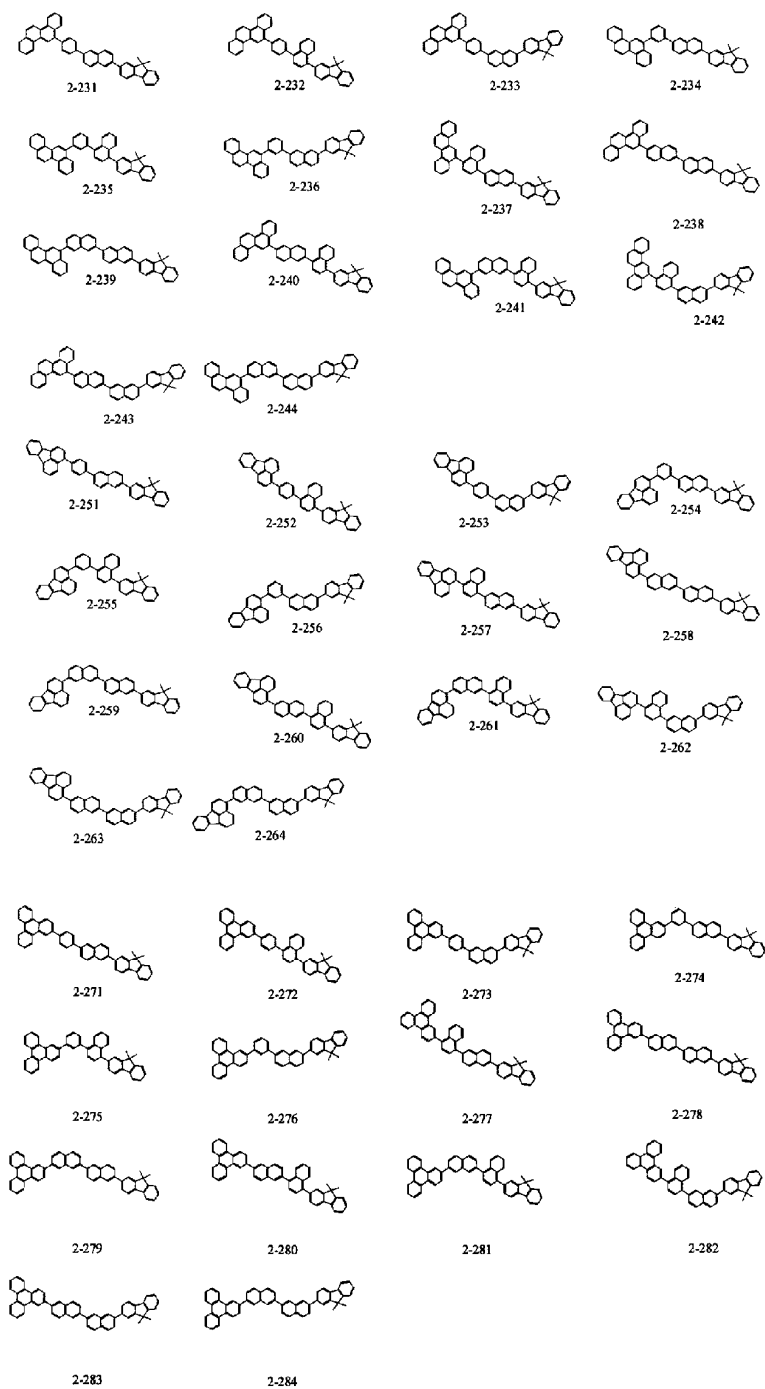
청구항 26

삭제

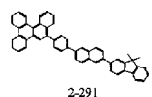
청구항 27

하기 화학식 중 어느 하나로 표시되는 유기 전기발광 소자용 재료.

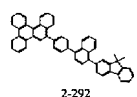




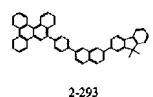




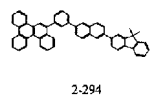
2-291



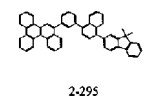
2-292



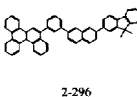
2-293



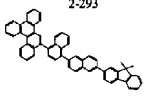
2-294



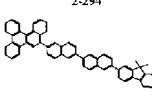
2-295



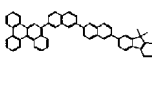
2-296



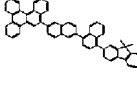
2-297



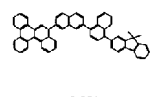
2-298



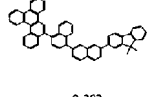
2-299



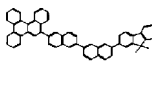
2-300



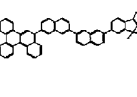
2-301



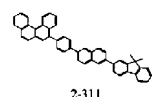
2-302



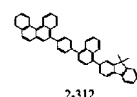
2-303



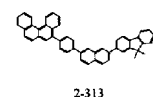
2-304



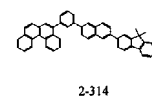
2-311



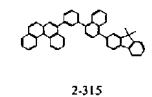
2-312



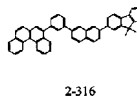
2-313



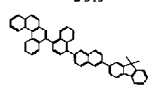
2-314



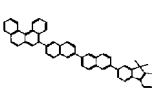
2-315



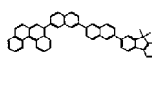
2-316



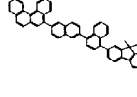
2-317



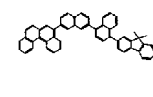
2-318



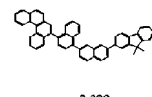
2-319



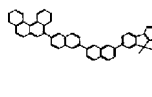
2-320



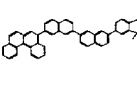
2-321



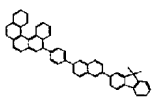
2-322



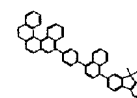
2-323



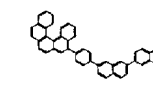
2-324



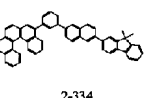
2-331



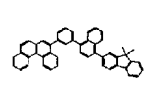
2-332



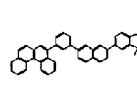
2-333



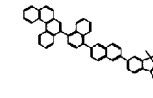
2-334



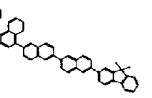
2-335



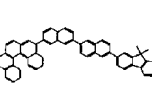
2-336



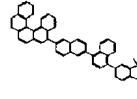
2-337



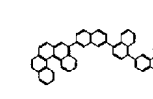
2-338



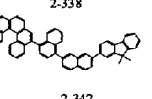
2-339



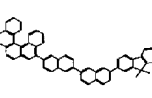
2-340



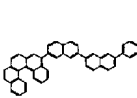
2-341



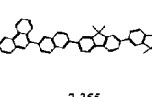
2-342



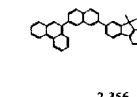
2-343



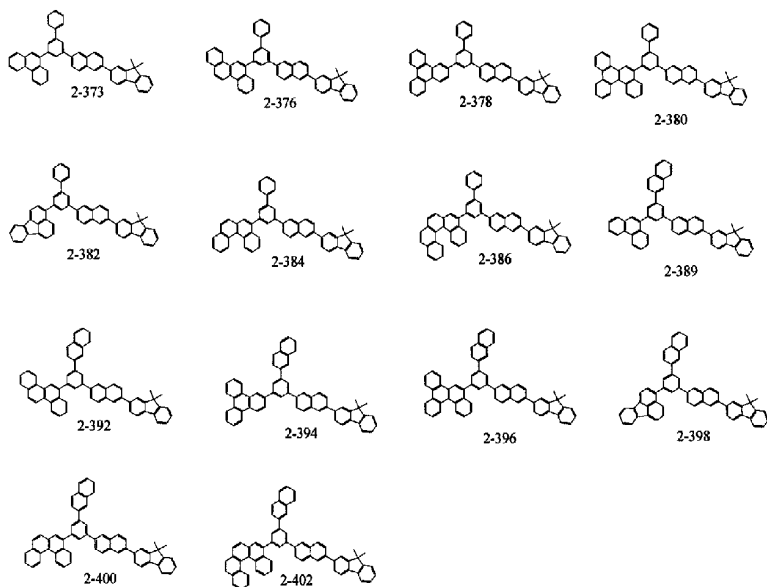
2-344



2-355



2-356



#### 청구항 28

삭제

#### 청구항 29

삭제

#### 청구항 30

삭제

#### 청구항 31

삭제

#### 청구항 32

음극과 양극 사이에, 1층 또는 복수층으로 이루어지는 유기 박막층을 구비하고, 상기 유기 박막층은 적어도 1개의 발광층을 갖고, 상기 유기 박막층의 적어도 1층이, 인광 발광 재료의 적어도 1종과, 제 7 항 내지 제 17 항 및 제 27 항 중 어느 한 항에 기재된 유기 전기발광 소자용 재료를 포함하는 유기 전기발광 소자.

#### 청구항 33

제 32 항에 있어서,

상기 발광층의 적어도 1개가 상기 유기 전기발광 소자용 재료와, 상기 인광 발광 재료의 적어도 1종을 포함하는 유기 전기발광 소자.

#### 청구항 34

제 32 항에 있어서,

상기 인광 발광 재료가 금속 착체를 함유하고, 상기 금속 착체가 Ir, Pt, Os, Au, Cu, Re 및 Ru로부터 선택되는 금속 원자와 배위자를 갖는 유기 전기발광 소자.

#### 청구항 35

제 34 항에 있어서,

상기 배위자가, 착체를 형성하는 금속 원자와 오쏘 메탈 결합을 갖는 유기 전기발광 소자.

### 청구항 36

제 32 항에 있어서,

상기 유기 전기발광 소자용 재료의 여기 3중항 에너지가 2.0eV 이상 2.8eV 이하인 유기 전기발광 소자.

### 청구항 37

제 32 항에 있어서,

상기 인광 발광 재료의 적어도 1종의 발광 파장 극대치가 520nm 이상 720nm 이하인 유기 전기발광 소자.

### 청구항 38

제 32 항에 있어서,

상기 유기 박막층이 상기 음극과 상기 발광층 사이에 전자 수송층을 갖고, 상기 전자 수송층이 상기 유기 전기 발광 소자용 재료를 포함하는 유기 전기발광 소자.

### 청구항 39

제 32 항에 있어서,

상기 유기 박막층이 상기 음극과 상기 발광층 사이에 전자 수송층 또는 전자 주입층을 갖고, 상기 전자 수송층 또는 상기 전자 주입층이, 질소 함유 6원환 또는 5원환 골격을 갖는 방향족환, 또는 질소 함유 6원환 또는 5원 환 골격을 갖는 축합 방향족환 화합물을 포함하는 유기 전기발광 소자.

### 청구항 40

제 32 항에 있어서,

상기 유기 박막층이 상기 음극과 상기 발광층 사이에 전자 수송층 또는 전자 주입층을 갖고, 상기 전자 수송층 또는 상기 전자 주입층이 상기 유기 전기발광 소자용 재료를 포함하는 유기 전기발광 소자.

### 청구항 41

제 32 항에 있어서,

상기 음극과 상기 유기 박막층의 계면 영역에 환원성 도펀트가 첨가되어 있는 유기 전기발광 소자.

## 명 세 서

### 기술 분야

[0001] 본 발명은 유기 전기발광 소자(이하, 유기 EL 소자로 약기하는 경우가 있다) 및 유기 전기발광 소자용 재료에 관한 것이다. 특히, 녹색으로 발광하는 발광층을 구비한 유기 전기발광 소자 및 이것에 이용하는 유기 전기발광 소자용 재료에 관한 것이다.

### 배 경 기 술

[0002] 양극과 음극 사이에 발광층을 포함하는 유기 박막층을 구비하고, 발광층에 주입된 정공과 전자의 재결합에 의해 생기는 여기자(엑시톤) 에너지로부터 발광을 얻는 유기 EL 소자가 알려져 있다.

[0003] 이러한 유기 EL 소자는 자발광형 소자로서의 이점을 살려 발광 효율, 화질, 소비 전력, 나아가서는 박형(薄型)의 디자인성이 우수한 발광 소자로서 기대되고 있다. 유기 EL 소자의 추가적인 개선점으로서, 예컨대 발광 효율을 들 수 있다.

[0004] 이러한 점에서, 내부 양자 효율을 높이기 위해, 3중항 여기자로부터의 발광이 얻어지는 발광 재료(인광 발광 재료)의 개발이 진행되고, 최근에는 인광 발광을 나타내는 유기 EL 소자가 보고되었다.

[0005] 이러한 인광 발광 재료를 이용하여 발광층(인광 발광층)을 구성함으로써 75% 이상, 이론상 100%에 가까운 값의 내부 양자 효율을 실현할 수 있어 고효율, 저소비 전력의 유기 EL 소자가 얻어진다. 또한, 발광층을 형성하는

데 있어서는, 호스트 재료에 도펀트로서 발광 재료를 도핑하는 도핑법이 알려져 있다.

- [0006] 도핑법으로 형성한 발광층에서는, 호스트 재료에 주입된 전하로부터 효율적으로 여기자를 생성할 수 있다. 그리고, 생성된 여기자의 여기자 에너지를 도펀트로 이동시켜 도펀트로부터 고효율의 발광을 얻을 수 있다.
- [0007] 여기서, 호스트 재료로부터 인광 발광성의 인광 도펀트로 분자간 에너지 이동을 행하기 위해서는, 호스트 재료의 여기 3중항 에너지  $E_g(T)$ 가 인광 도펀트의 여기 3중항 에너지  $E_g(S)$ 보다도 큰 것이 필요하다.
- [0008] 여기 3중항 에너지가 유효하게 큰 재료로서는, CBP(4,4'-bis(N-carbazolyl) biphenyl)가 대표적으로 알려져 있다(예컨대, 특허문헌 1 참조).
- [0009] 이 CBP를 호스트 재료로 하면, 소정의 발광 파장(예컨대, 녹색, 적색)을 나타내는 인광 도펀트의 에너지 이동이 가능하여 고효율의 유기 EL 소자를 얻을 수 있다.
- [0010] 그러나, CBP를 호스트 재료로서 사용하면, 인광 발광에 의해 발광 효율은 현격히 향상되는 반면, 수명은 매우 짧아 실용에 적합하지 않다는 문제가 있었다.
- [0011] 이는, CBP의 분자 구조상의 산화 안정성이 높지 않기 때문에 정공에 의한 분자의 열화가 심하기 때문이라고 생각된다.
- [0012] 또한, 특허문헌 2에는, 카바졸 등의 질소 함유 환을 함유하는 축합환 유도체를, 적색 인광을 나타내는 인광 발광층의 호스트 재료로서 이용한 기술이 개시되어 있다. 이 기술에 의해 발광 효율 및 수명에 대하여 개선되었지만, 실용화에는 충분하지 않은 경우도 있었다.
- [0013] 그 한편, 형광 발광을 나타내는 형광 도펀트용 호스트 재료(형광 호스트)는 여러 가지 알려져 있고, 형광 도펀트와의 조합으로 발광 효율, 수명이 우수한 형광 발광층을 형성할 수 있는 호스트 재료가 여러 가지 제안되어 있다.
- [0014] 그러나, 형광 호스트에서는, 여기 1중항 에너지  $E_g(S)$ 는 형광 도펀트보다도 크지만 여기 3중항 에너지  $E_g(T)$ 는 반드시 큰 것은 아니기 때문에, 단순하게는 인광 발광층의 호스트 재료(인광 호스트)로서 전용할 수 없다.
- [0015] 예컨대, 형광 호스트로서는 안트라센 유도체가 잘 알려져 있다.
- [0016] 그러나, 안트라센 유도체는 여기 3중항 에너지  $E_g(T)$ 가 1.9eV 정도로 비교적 작다. 이 때문에, 500nm 내지 720nm의 가시광 영역의 발광 파장을 갖는 인광 도펀트에 대한 에너지 이동을 확보할 수 없다. 또한, 여기된 3중항 에너지를 발광층 내에 가둘 수 없다.
- [0017] 따라서, 안트라센 유도체는 인광 호스트로서 부적절하다.
- [0018] 또한, 페틸렌 유도체, 피렌 유도체 및 나프타센 유도체 등도 마찬가지로의 이유로 인광 호스트로서 바람직하지 않다.
- [0019] 또한, 인광 호스트로서 방향족 탄화수소 화합물을 이용한 예가 알려져 있다(특허문헌 3). 여기서는, 벤젠 골격을 중심으로 하고 치환기로서 2개의 방향족기가 메타 위치에 결합한 화합물을 인광 호스트로서 이용하고 있다.
- [0020] 단, 특허문헌 3의 방향족 탄화수소 화합물은, 중심의 벤젠 골격에 대하여 좌우 대칭으로 분자를 신장시킨 5개의 방향족환을 갖는 대칭성이 좋은 강직한 분자 구조로 되어 있어, 발광층이 결정화되기 쉽다는 우려가 있다.
- [0021] 한편, 특허문헌 4~6에는 여러 가지의 방향족 탄화수소 화합물을 이용한 유기 EL 소자가 개시되고, 특허문헌 7~9에는 여러 가지의 플루오렌 화합물을 이용한 유기 EL 소자가 개시되어 있다. 그러나, 인광 호스트로서의 유효성에 관해서는 하등 언급되어 있지 않다.
- [0022] 또한, 특허문헌 10~15에는 여러 가지의 플루오렌 화합물을 이용한 인광 호스트 재료를 이용하는 소자가 기재되고, 특허문헌 11, 13, 15에는 플루오렌환의 양단에 직접 벤젠환이 결합하는 특징을 갖는 2가 플루오렌 화합물이 개시되고, 특허문헌 12에는 플루오렌의 9 위치가 아릴기인 화합물이 개시되어 있다. 그러나, 이들 화합물을 인광 호스트 재료로서 이용하여도 발광 효율, 소자 수명은 충분하지 않다.
- [0023] 또한, 특허문헌 8, 16에는 축합 다환식 방향족환과 플루오렌환이 직접 결합하고 있는 탄화수소 화합물이 개시되어 있다. 그러나, 인광 발광성 재료와 조합한 유기 전계발광 소자에 관하여 하등 유효성이 제시되어 있지 않은 뿐만 아니라, 축합 다환식 방향족환으로서, 3중항의 에너지 레벨이 작아 인광 소자의 발광층에 이용하는 것은 바람직하지 않은 페틸렌환이나 피렌환도 기재되어 있어, 인광 소자용 재료로서 유효한 재료의 선택이 이루어지

고 있지 않다.

[0024] 나아가, 특허문헌 17에는 2개 이상의 플루오렌환과 나프탈렌환이 필수인 인광 발광 소자에 이용하는 호스트 재료가 공개되어 있다. 나아가, 특허문헌 18에는 2가 플루오렌과, 치환기를 갖는 페난트렌환 및 벤젠환 또는 다른 축합 다환 방향족환이 결합한 재료가 공개되어 있다.

## 선행기술문헌

### 특허문헌

[0025] (특허문헌 0001) US 2002/182441호 공보  
 (특허문헌 0002) WO 2005/112519호 공보  
 (특허문헌 0003) 일본 특허공개 2003-142267호 공보  
 (특허문헌 0004) WO 2007/046658호 공보  
 (특허문헌 0005) 일본 특허공개 2005-197262호 공보  
 (특허문헌 0006) 일본 특허공개 2004-75567호 공보  
 (특허문헌 0007) 일본 특허공개 2007-314512호 공보  
 (특허문헌 0008) 일본 특허공개 2004-043349호 공보  
 (특허문헌 0009) 일본 특허공개 2007-314506호 공보  
 (특허문헌 0010) 일본 특허공개 2004-083481호 공보  
 (특허문헌 0011) 일본 특허공개 2006-124373호 공보  
 (특허문헌 0012) 일본 특허공개 2007-016237호 공보  
 (특허문헌 0013) 일본 특허공개 2007-302650호 공보  
 (특허문헌 0014) 일본 특허공개 2007-332127호 공보  
 (특허문헌 0015) 일본 특허공개 2008-222589호 공보  
 (특허문헌 0016) 일본 특허공개 2004-042485호 공보  
 (특허문헌 0017) 일본 특허공개 2009-108014호 공보  
 (특허문헌 0018) US 2008/100207호 공보

## 발명의 내용

### 해결하려는 과제

[0026] 상기와 같이, 효율적으로 인광 발광 재료로 에너지 이동을 행할 수 있고, 또한 수명이 실용적으로 긴 호스트 재료가 알려져 있지 않으며, 인광 발광 재료를 이용한 소자의 실용화가 진전되고 있지 않았다.

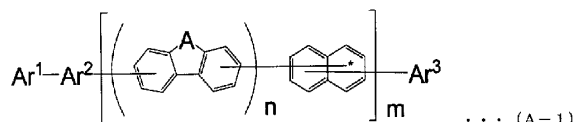
[0027] 그래서, 본 발명의 목적은 고효율이고 또한 장수명인 인광 발광성 유기 EL 소자, 및 그것에 이용하는 유기 EL 소자용 재료를 제공하는 것에 있다.

### 과제의 해결 수단

[0028] 본 발명자들은 상기 목적을 달성하기 위해 예의 연구를 거듭한 결과, 플루오렌, 다이벤조퓨란 또는 다이벤조싸이오펜 골격에 축합 다환 방향족환을 직렬로 2개 이상 결합시킴으로써, 또한 플루오렌, 다이벤조퓨란 또는 다이벤조싸이오펜 골격에 서로 다른 축합 다환 방향족환을 포함하는 기를 공액 길이가 신장되는 위치에서 결합시킴으로써, 상기 종래의 재료군보다도 저전압화 및 구동 수명을 개선하고, 비약적으로 소자 수명을 향상시키는 것에 성공하였다.

[0029] 즉, 본 발명은,

[0030] 1. 하기 화학식 (A-1)로 표시되는 유기 전기발광 소자용 재료,



[0031]

[0032] (식 중,  $\text{Ar}^1$  및  $\text{Ar}^3$ 은 각각 독립적으로 수소 원자(중수소 원자를 포함함), 치환 또는 비치환된 벤젠환 잔기, 또는 치환 또는 비치환된 나프탈렌환, 치환 또는 비치환된 크라이센환, 치환 또는 비치환된 페난트렌환, 치환 또는 비치환된 벤조페난트렌환, 치환 또는 비치환된 다이벤조페난트렌환, 치환 또는 비치환된 트라이페닐렌환, 치환 또는 비치환된 벤조[a]트라이페닐렌환, 치환 또는 비치환된 벤조크라이센환, 치환 또는 비치환된 플루오란텐환, 치환 또는 비치환된 벤조[b]플루오란텐환 및 치환 또는 비치환된 피센환으로부터 선택되는 치환 또는 비치환된 축합 방향족 탄화수소환 잔기를 나타낸다.

[0033]  $\text{Ar}^2$ 는 치환 또는 비치환된 벤젠환 잔기, 치환 또는 비치환된 나프탈렌환 잔기, 또는 치환 또는 비치환된 페난트렌환 잔기를 나타낸다.

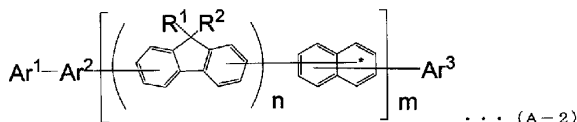
[0034] A는 O, S 또는  $\text{CR}^1\text{R}^2$ 를 나타낸다.  $\text{R}^1$  및  $\text{R}^2$ 는 각각 독립적으로 치환 또는 비치환된 탄소수 1~20의 알킬기, 치환 또는 비치환된 환 형성 탄소수 3~20의 사이클로알킬기, 치환 또는 비치환된 탄소수 7~24의 아르알킬기, 또는 치환 또는 비치환된 탄소수 3~20의 실릴기를 나타낸다.

[0035] n은 1~3의 정수를 나타낸다. m은 1 또는 2의 정수를 나타낸다. n이 2 이상인 경우, ( )<sub>n</sub> 내의 하기 화학식 (A-1-a)는 동일하여도 상이하여도 좋다.)



[0036]

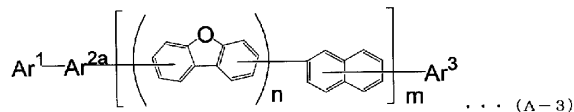
[0037] 2. 하기 화학식 (A-2)로 표시되는 상기 1에 기재된 유기 전기발광 소자용 재료:



[0038]

[0039] (식 중,  $\text{Ar}^1$ ,  $\text{Ar}^2$ ,  $\text{Ar}^3$ ,  $\text{R}^1$ ,  $\text{R}^2$ , n 및 m은 상기와 동일하다),

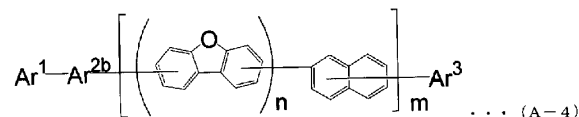
[0040] 3. 하기 화학식 (A-3)으로 표시되는 상기 1에 기재된 유기 전기발광 소자용 재료:



[0041]

[0042] (식 중,  $\text{Ar}^1$ ,  $\text{Ar}^3$ , n 및 m은 상기와 동일하고,  $\text{Ar}^{2a}$ 는 치환 또는 비치환된 벤젠환, 또는 치환 또는 비치환된 페난트렌환 잔기이다. 또한,  $\text{Ar}^3$ 은 다이벤조퓨란환 잔기에 결합하는 나프탈렌환 잔기의 6 위치 또는 7 위치에 결합한다.),

[0043] 4. 하기 화학식 (A-4)로 표시되는 상기 1에 기재된 유기 전기발광 소자용 재료:

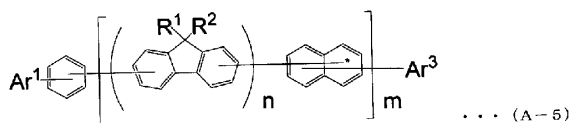


[0044]

[0045] (식 중,  $\text{Ar}^1$ ,  $\text{Ar}^3$ , n 및 m은 상기와 동일하고,  $\text{Ar}^{2b}$ 는 치환 또는 비치환된 나프탈렌환 잔기이다.  $\text{Ar}^{2b}$ 가 그의 2

위치에서 다이벤조퓨란환 잔기에 결합하는 경우는,  $Ar^1$  또는  $Ar^3$ 의 어느 한쪽은, 각각이 결합하는 나프탈렌환 잔기의 6 위치 또는 7 위치에서 결합한다.  $Ar^{2b}$ 가 그의 2 위치에서 다이벤조퓨란환 잔기에 결합하지 않는 경우는,  $Ar^3$ 은 나프탈렌환 잔기의 6 위치 또는 7 위치에 결합한다. 또한,  $Ar^1$ ,  $Ar^3$ 이 모두 수소인 경우를 제외한다.),

[0046] 5. 하기 화학식 (A-5)로 표시되는 상기 1에 기재된 유기 전기발광 소자용 재료:

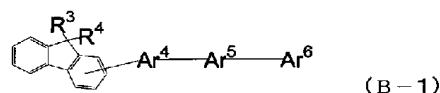


[0047]

[0048] (식 중,  $Ar^1$ ,  $Ar^3$ ,  $R^1$ ,  $R^2$ ,  $n$  및  $m$ 은 상기와 동일하다.),

[0049] 6. 상기 화학식 (A-1)~(A-5) 중,  $Ar^1$ ,  $Ar^2$ ,  $Ar^{2a}$ ,  $Ar^{2b}$ ,  $Ar^3$ ,  $R^1$  및/또는  $R^2$ 가 1개 또는 복수의 치환기를 갖는 경우, 상기 치환기는 탄소수 1~20의 알킬기, 탄소수 1~20의 할로알킬기, 환 형성 탄소수 5~18의 사이클로알킬기, 탄소수 3~20의 실릴기, 사이아노기, 할로젠 원자 또는 환 형성 탄소수 6~22의 아릴기인 상기 1~4 중 어느 하나에 기재된 유기 전기발광 소자용 재료,

[0050] 7. 하기 화학식 (B-1)로 표시되는 유기 전기발광 소자용 재료:



[0051]

[0052] (식 중,  $R^3$  및  $R^4$ 는 각각 독립적으로 수소 원자(중수소 원자를 포함함), 탄소수 1~10의 알킬기 또는 환 형성 탄소수 6~12의 아릴기를 나타내고,  $Ar^4$ 는 환 형성 탄소수 10~22의 축합 다환 방향족 탄화수소환 잔기이고,  $Ar^5$ 는 벤젠환 또는 환 형성 탄소수 10~22의 축합 다환 방향족 탄화수소환 잔기이고,  $Ar^6$ 은 수소 원자(중수소 원자를 포함함), 벤젠환 또는 환 형성 탄소수 10~22의 축합 다환 방향족 탄화수소환 잔기이다. 또한,  $R^3$ ,  $R^4$ ,  $Ar^4$ ,  $Ar^5$  및  $Ar^6$ 은 각각 독립적으로 치환기를 가져도 좋다.

[0053] 단,  $Ar^4$ ,  $Ar^5$  및  $Ar^6$ 의 어느 것도 안트라센, 피렌, 페릴렌, 트라이페닐렌, 나프타센 또는 펜타센 골격을 갖지 않는다. 추가로 이하의 (1)~(6)의 경우를 전부 만족하는 것이다.

[0054] (1)  $Ar^4$ 가 나프탈렌환, 페난트렌환, 크라이센환, 벤즈안트라센환, 플루오란텐환 중 어느 하나이고, 또한  $Ar^5$ 가 플루오렌환인 경우를 제외한다.

[0055] (2)  $Ar^4$ 가 나프탈렌환이고,  $Ar^5$ 가 벤젠환이고, 또한  $Ar^6$ 이 벤젠환 또는 수소 원자인 경우를 제외한다.

[0056] (3) (i)  $Ar^4$ 가 나프탈렌-2,6-다이일기이고,  $Ar^5$ 가  $\beta$ -나프틸기이고, 또한  $Ar^6$ 이 수소 원자인 경우를 제외한다.

[0057] (ii)  $Ar^4$ 가 나프탈렌-2,6-다이일기이고,  $Ar^5$ 가 나프탈렌-2,6-다이일기이고, 또한  $Ar^6$ 이  $\beta$ -나프틸기인 경우를 제외한다.

[0058] (4)  $Ar^4$ 가 플루오렌환이고, 또한  $Ar^5$ 가 벤젠환, 플루오렌환 또는 플루오란텐환 중 어느 하나인 경우를 제외한다.

[0059] 또한,  $Ar^4$ 가 플루오렌환이고, 또한  $Ar^6$ 이 수소 원자 또는  $\beta$ -나프틸기인 경우를 제외한다.

[0060] (5)  $Ar^4$ 가 페난트렌환 또는 플루오란텐환이고,  $Ar^5$ 가 벤젠환이고, 또한  $Ar^6$ 이 수소 원자인 경우를 제외한다.

[0061] (6)  $Ar^4$ 가 벤젠환, 바이페닐환, 나프탈렌환, 바이나프탈렌환, 플루오렌환 중 어느 하나이고, 또한  $Ar^5$ 가 플루오란텐환인 경우를 제외한다.),

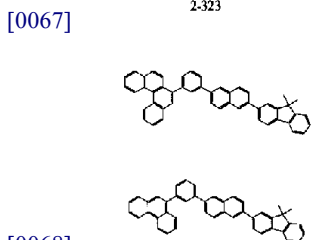
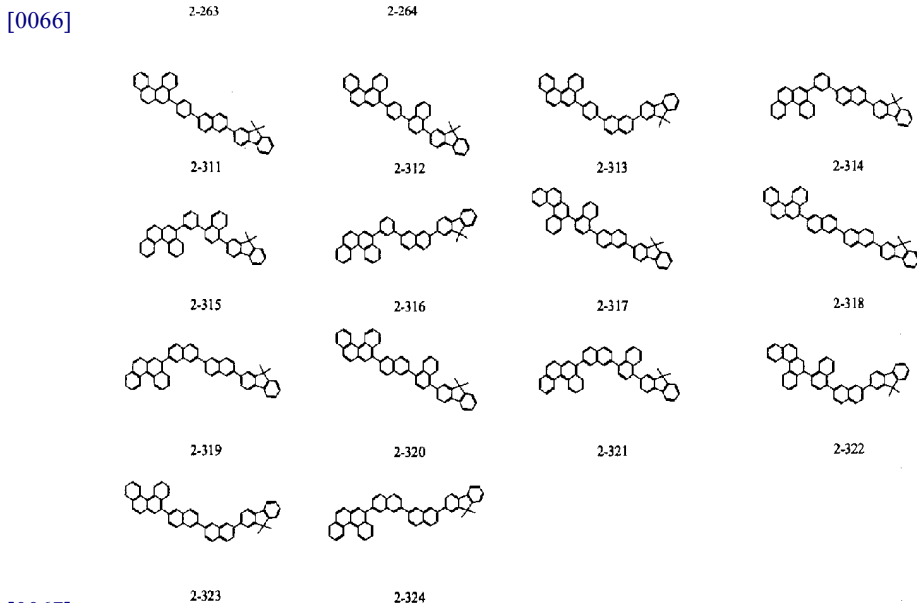
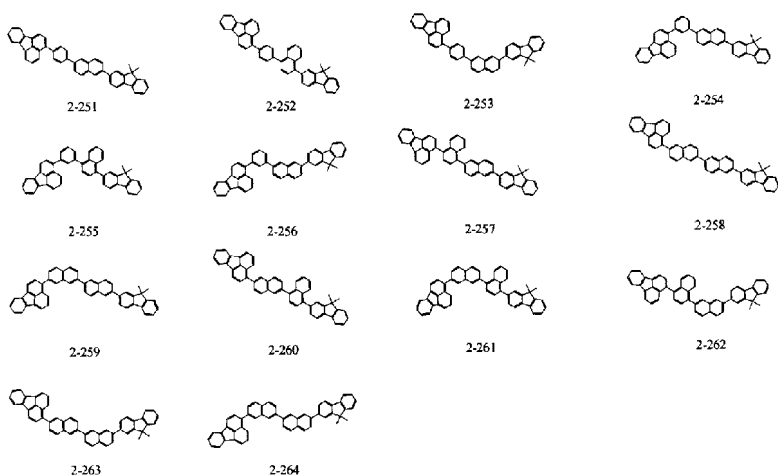
[0062] 8.  $Ar^4$ 가 나프탈렌환이고,  $Ar^5$ 가 벤젠환이고, 또한  $Ar^6$ 이 환 형성 탄소수 10~22의 축합 다환 방향족 탄화수소환

잔기인 상기 7에 기재된 유기 전기발광 소자용 재료,

[0063] 9.  $Ar^4$ 가 나프탈렌환이고,  $Ar^5$ 가 나프탈렌환이고, 또한  $Ar^6$ 이 환 형성 탄소수 11~22의 축합 다환 방향족 탄화수소환 잔기인(단,  $Ar^4$ 가 나프탈렌-2,6-다이일기이고,  $Ar^5$ 가 나프탈렌-2,6-다이일기이고, 또한  $Ar^6$ 이  $\beta$ -나프틸기인 경우를 제외함) 상기 7에 기재된 유기 전기발광 소자용 재료,

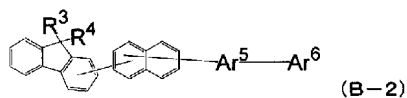
[0064] 10.  $Ar^4$ 가 나프탈렌환이고,  $Ar^5$ 가 환 형성 탄소수 11~22의 축합 다환 방향족 탄화수소환 잔기이고, 또한  $Ar^6$ 이 수소 원자(중수소 원자를 포함함)인(단, 이하의 (1)~(3) 중 어느 하나인 경우를 제외한다. (1)  $Ar^4$ 가 나프탈렌-2,6-다이일기이고,  $Ar^5$ 가  $\beta$ -나프틸기이고, 또한  $Ar^6$ 이 수소 원자인 경우, (2)  $Ar^4$ 가 나프탈렌-1,4-다이일기 또는 나프탈렌-1,5-다이일기이고,  $Ar^5$ 가 플루오란텐환이고, 또한  $Ar^6$ 이 수소 원자인 경우, 또는 (3)  $Ar^4$ 가 나프탈렌-1,4-다이일기, 나프탈렌-2,6-다이일기 또는 나프탈렌-2,8-다이일기 중 어느 하나이고,  $Ar^5$ 가 플루오렌환이고, 또한  $Ar^6$ 이 수소 원자인 경우) 상기 7에 기재된 유기 전기발광 소자용 재료,

[0065] 11. 이하에 나타내는 화합물을 제외하는 상기 7에 기재된 유기 전기발광 소자용 재료:





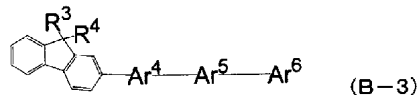
[0069] 12. 하기 화학식 (B-2)로 표시되는 상기 7에 기재된 유기 전기발광 소자용 재료:



[0070]

[0071] (식 중,  $R^3$ ,  $R^4$ ,  $Ar^5$  및  $Ar^6$ 은 상기와 동일하다.),

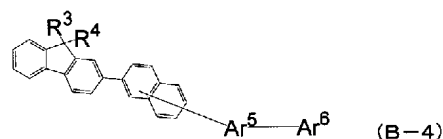
[0072] 13. 하기 화학식 (B-3)으로 표시되는 상기 7에 기재된 유기 전기발광 소자용 재료:



[0073]

[0074] (식 중,  $R^3$ ,  $R^4$ ,  $Ar^4$ ,  $Ar^5$  및  $Ar^6$ 은 상기와 동일하다.),

[0075] 14. 하기 화학식 (B-4)로 표시되는 상기 7에 기재된 유기 전기발광 소자용 재료:



[0076]

[0077] (식 중,  $R^3$ ,  $R^4$ ,  $Ar^5$  및  $Ar^6$ 은 상기와 동일하다.),

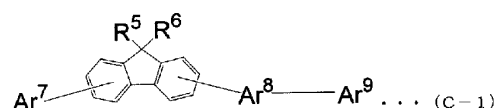
[0078] 15. 상기 화학식 (B-1)의  $Ar^4 \sim Ar^6$ 에서의 환 형성 탄소수 10~22의 축합 다환 방향족 탄화수소환이 각각 독립적으로 나프탈렌환, 크라이센환, 페난트렌환, 벤조페난트렌환, 다이벤조페난트렌환, 벤조[a]트라이페닐렌환, 벤조크라이센환, 플루오란텐환, 벤조[b]플루오란텐환 및 피센환으로부터 선택되고,  $Ar^6$ 이 수소 원자(중수소 원자를 포함함) 또는 상기 환 형성 탄소수 10~22의 축합 다환 방향족 탄화수소환 잔기를 나타내는 상기 7에 기재된 유기 전기발광 소자용 재료,

[0079] 16. 상기 화학식 (B-4)의  $Ar^5$  및  $Ar^6$ 에서의 환 형성 탄소수 10~22의 축합 다환 방향족 탄화수소환이 각각 독립적으로 나프탈렌환, 크라이센환, 페난트렌환, 벤조페난트렌환, 다이벤조페난트렌환, 벤조[a]트라이페닐렌환, 벤조크라이센환, 플루오란텐환, 벤조[b]플루오란텐환 및 피센환으로부터 선택되고,  $Ar^6$ 이 수소 원자(중수소 원자를 포함함) 또는 상기 환 형성 탄소수 10~22의 축합 다환 방향족 탄화수소환 잔기를 나타내는 상기 14에 기재된 유기 전기발광 소자용 재료,

[0080] 17. 상기 화학식 (B-4)에서,  $R^3$  및  $R^4$ 가 각각 독립적으로 탄소수 1~10의 알킬기, 또는 페닐기를 나타내는 상기 13에 기재된 유기 전기발광 소자용 재료,

[0081] 18. 상기 화학식 (B-1)~(B-4) 중,  $R^3$ ,  $R^4$ ,  $Ar^4$ ,  $Ar^5$  및/또는  $Ar^6$ 이 1개 또는 복수의 치환기를 갖는 경우, 상기 치환기는 탄소수 1~20의 알킬기, 탄소수 1~20의 할로알킬기, 환 형성 탄소수 5~18의 사이클로알킬기, 탄소수 3~20의 실릴기, 사이아노기, 할로젠 원자 또는 환 형성 탄소수 6~22의 아릴기인 상기 7~17 중 어느 하나에 기재된 유기 전기발광 소자용 재료,

[0082] 19. 하기 화학식 (C-1)로 표시되는 유기 전기발광 소자용 재료:



[0083]

[0084] (식 중,  $Ar^7 \sim Ar^9$ 는 각각 독립적으로 벤젠환, 또는 나프탈렌환, 크라이센환, 페난트렌환, 벤조페난트렌환, 다이벤조페난트렌환, 트라이페닐렌환, 벤조[a]트라이페닐렌환, 벤조크라이센환, 플루오란텐환, 벤조[b]플루오란텐환 및 피센환으로부터 선택되는 축합 방향족 탄화수소환 잔기를 나타낸다.  $Ar^9$ 는 수소 원자(중수소 원자를 포함

함)이어도 좋다.

[0085]  $R^5$  및  $R^6$ 은 각각 독립적으로 수소 원자(중수소 원자를 포함함), 탄소수 1~10의 알킬기 또는 환 형성 탄소수 6~12의 아릴기를 나타낸다.

[0086] 또한,  $R^5$ ,  $R^6$ ,  $Ar^7$ ,  $Ar^8$  및  $Ar^9$ 는 각각 독립적으로 치환기를 가져도 좋다.

[0087] 단, 이하의 (1)~(4)의 경우를 전부 만족하는 것이다.

[0088] (1)  $Ar^7$ 이 벤젠환이고, 또한  $Ar^8$ 이 벤젠환 또는 플루오렌환인 경우를 제외한다.

[0089] (2)  $Ar^9$ 가 수소 원자이고, 또한  $Ar^7$ 과  $Ar^8$ 이 동일한 축합 방향족 탄화수소환 잔기인 경우를 제외한다.

[0090] (3)  $Ar^7$ 과  $Ar^8-Ar^9$ 가 동일한 구조인 경우를 제외한다.

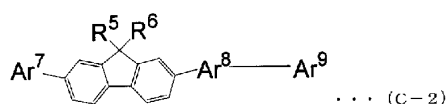
[0091] (4)  $Ar^7$ 이  $\beta$ -나프틸기 또는 나프탈렌-2,6-다이일기이고,  $Ar^8$ 이 나프탈렌-2,6-다이일기이고, 또한  $Ar^9$ 가  $\beta$ -나프틸기인 경우를 제외한다.),

[0092] 20.  $Ar^7$ 이 나프탈렌환이고,  $Ar^8$ 이 벤젠환이고, 또한  $Ar^9$ 가 나프탈렌환, 크라이센환, 페난트렌환, 벤조페난트렌환, 다이벤조페난트렌환, 트라이페닐렌환, 벤조[a]트라이페닐렌환, 벤조크라이센환, 플루오란텐환, 벤조[b]플루오란텐환 및 피센환으로부터 선택되는 축합 방향족 탄화수소환 잔기인 상기 19에 기재된 유기 전기 발광 소자용 재료,

[0093] 21.  $Ar^7$ 이 나프탈렌환이고,  $Ar^8$ 이 나프탈렌환이고, 또한  $Ar^9$ 가 나프탈렌환, 크라이센환, 페난트렌환, 벤조페난트렌환, 다이벤조페난트렌환, 트라이페닐렌환, 벤조[a]트라이페닐렌환, 벤조크라이센환, 플루오란텐환, 벤조[b]플루오란텐환 및 피센환으로부터 선택되는 축합 방향족 탄화수소환 잔기인(단,  $Ar^7$ 이  $\beta$ -나프틸기이고,  $Ar^8$ 이 나프탈렌-2,6-다이일기이고, 또한  $Ar^9$ 가  $\beta$ -나프틸기인 경우를 제외함) 상기 19에 기재된 유기 전기발광 소자용 재료,

[0094] 22.  $Ar^7$  및  $Ar^8$ 이 각각 독립적으로 나프탈렌환, 크라이센환, 페난트렌환, 벤조페난트렌환, 다이벤조페난트렌환, 트라이페닐렌환, 벤조[a]트라이페닐렌환, 벤조크라이센환, 플루오란텐환, 벤조[b]플루오란텐환 및 피센환으로부터 선택되는 축합 방향족 탄화수소환 잔기이고, 또한  $Ar^9$ 가 수소 원자(중수소 원자를 포함함)인 상기 19에 기재된 유기 전기발광 소자용 재료,

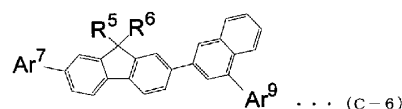
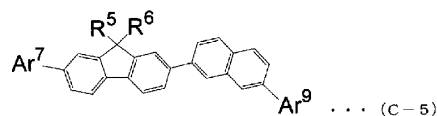
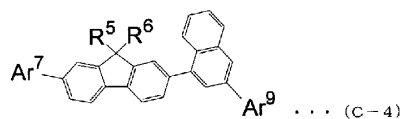
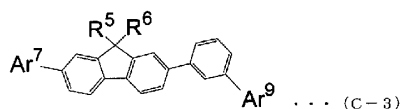
[0095] 23. 하기 화학식 (C-2)로 표시되는 상기 19에 기재된 유기 전기발광 소자용 재료:



[0097] (식 중,  $Ar^7$ ,  $Ar^8$ ,  $Ar^9$ ,  $R^5$  및  $R^6$ 은 상기와 동일하다.),

[0098] 24. 상기 화학식 (C-1), (C-2)에서의  $R^5$ ,  $R^6$ ,  $Ar^7$ ,  $Ar^8$  및/또는  $Ar^9$ 가 1개 또는 복수의 치환기를 갖는 경우, 상기 치환기는 탄소수 1~20의 알킬기, 탄소수 1~20의 할로알킬기, 환 형성 탄소수 5~18의 사이클로알킬기, 탄소수 3~20의 실릴기, 사이아노기, 할로젠 원자 또는 환 형성 탄소수 6~22의 아릴기인 상기 19~23 중 어느 하나에 기재된 유기 전기발광 소자용 재료,

[0099] 25. 하기 화학식 (C-3)~(C-6) 중 어느 하나로 표시되는 상기 23에 기재된 유기 전기발광 소자용 재료:

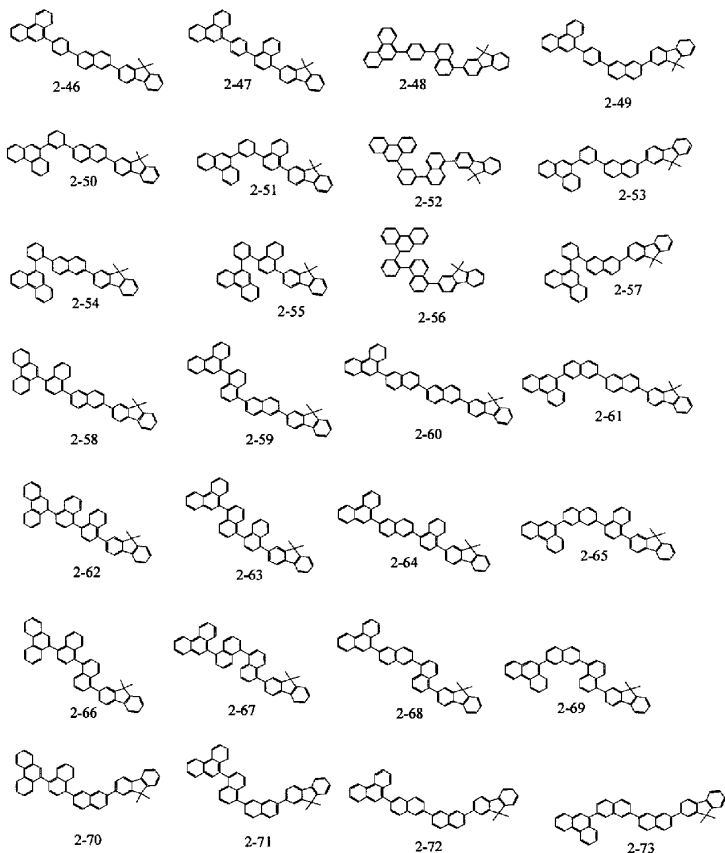


[0100]

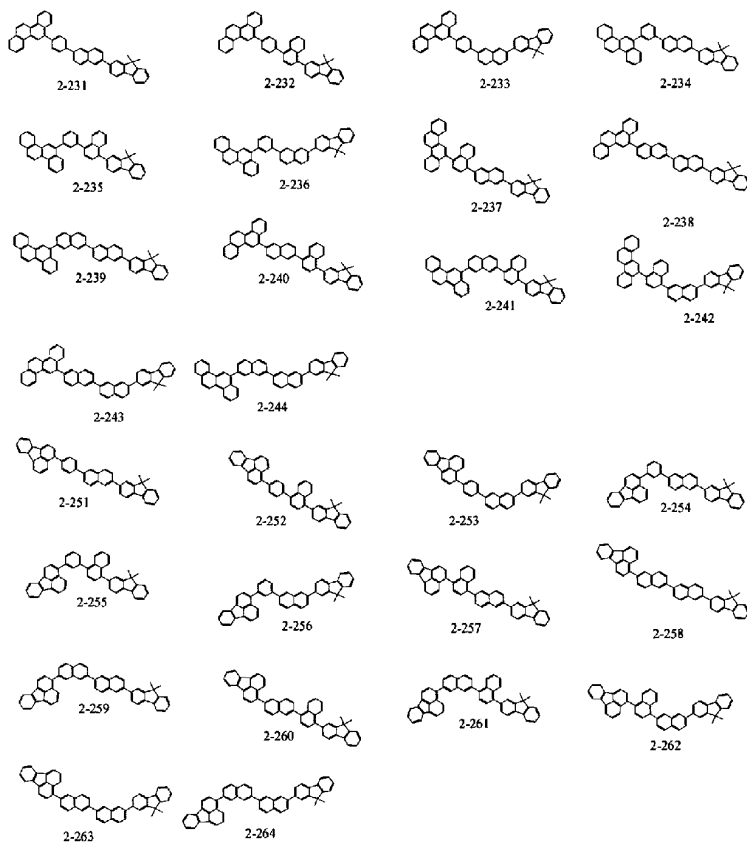
[0101] ( $Ar^7$ ,  $Ar^9$ ,  $R^5$  및  $R^6$ 은 상기와 동일하다.),

[0102] 26. 상기 화학식 (C-3)~(C-6) 중,  $R^5$ ,  $R^6$ ,  $Ar^7$  및/또는  $Ar^9$ 가 1개 또는 복수의 치환기를 갖는 경우, 상기 치환기는 탄소수 1~20의 알킬기, 탄소수 1~20의 할로알킬기, 환 형성 탄소수 5~18의 사이클로알킬기, 탄소수 3~20의 실릴기, 사이아노기, 할로젠 원자 또는 환 형성 탄소수 6~22의 아릴기인 상기 25에 기재된 유기 전기발광 소자용 재료,

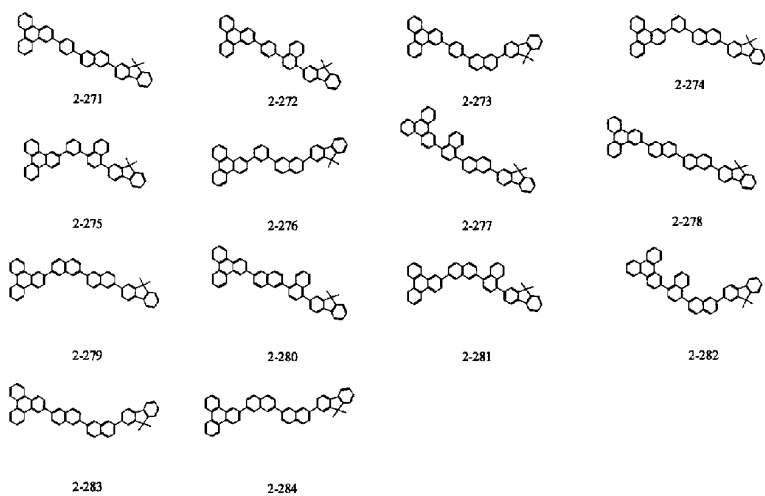
[0103] 27. 하기 화학식 중 어느 하나로 표시되는 유기 전기발광 소자용 재료:



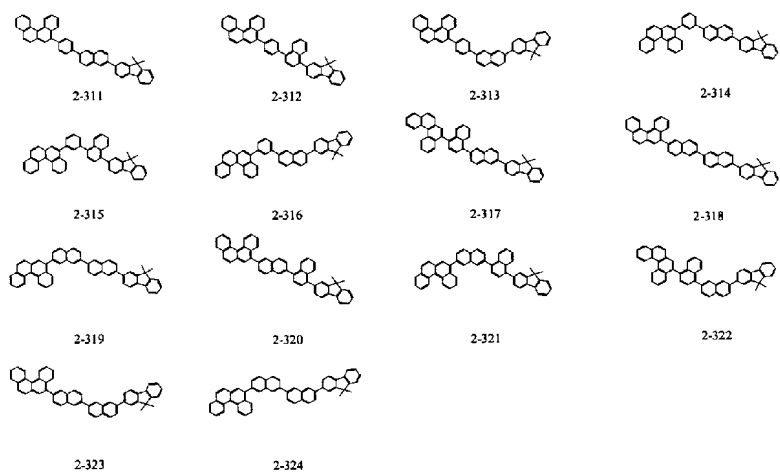
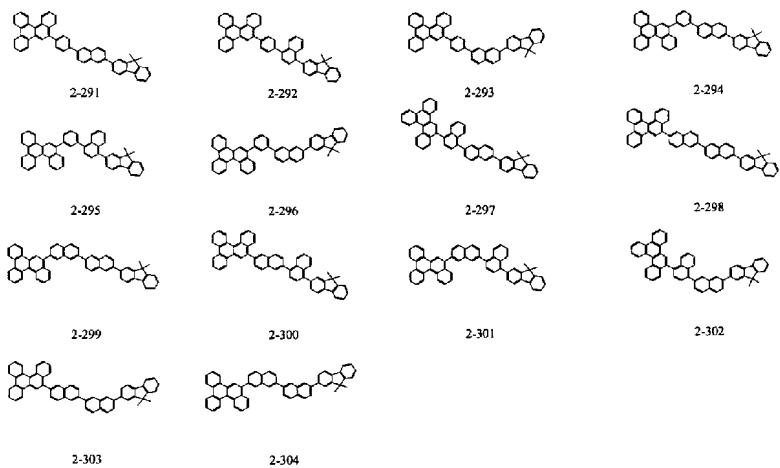
[0104]



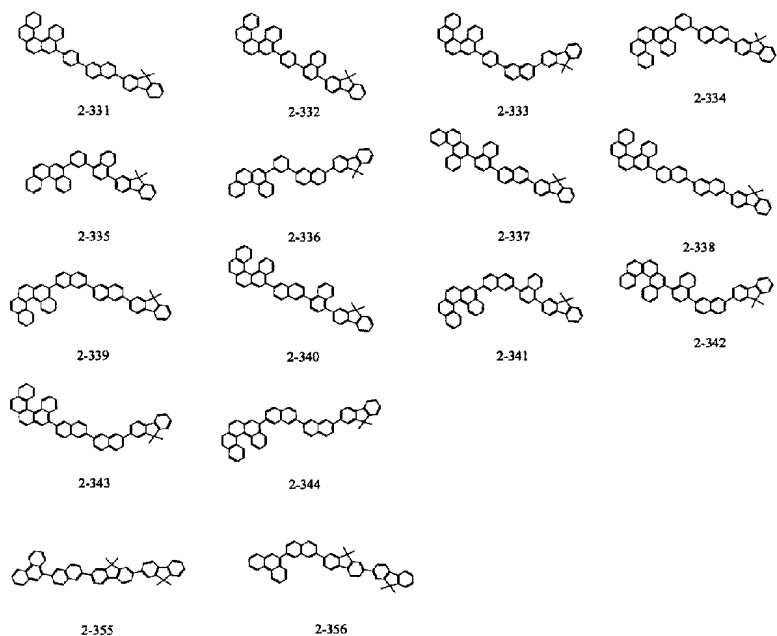
[0105]



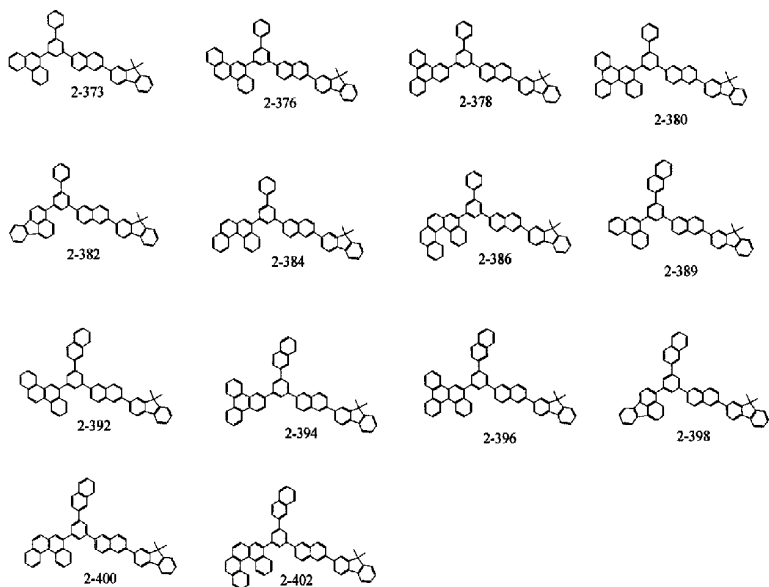
[0106]



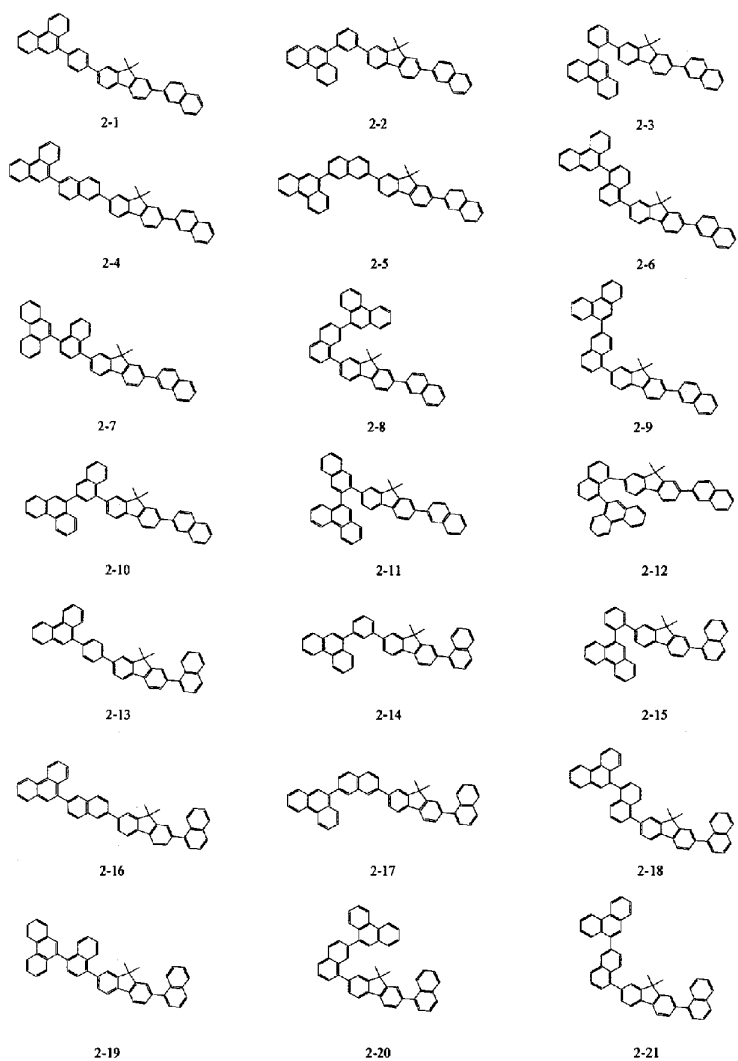
[0107]



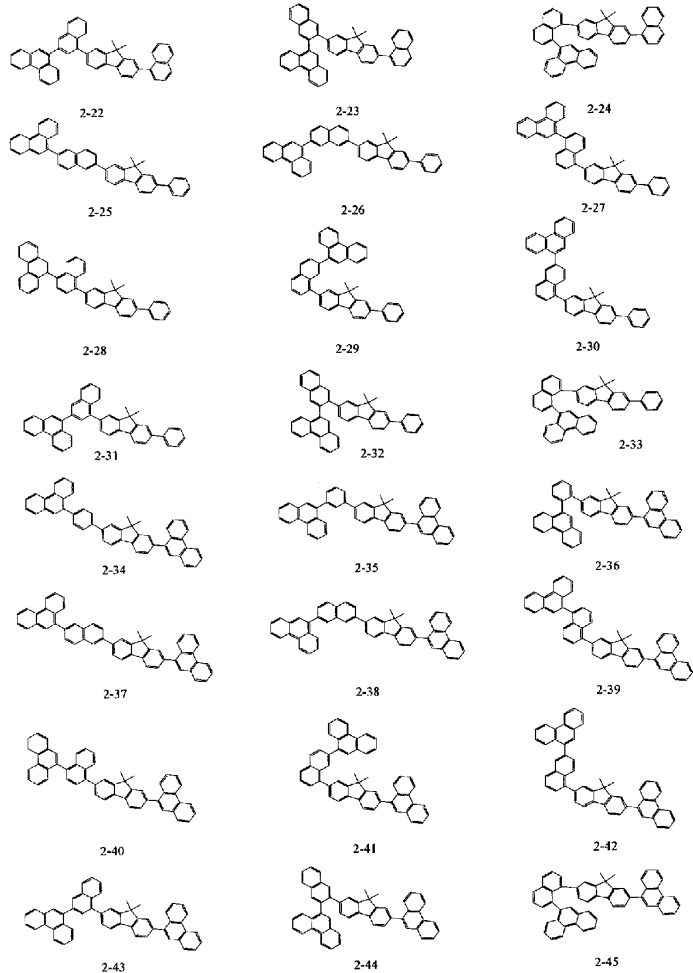
[0108]



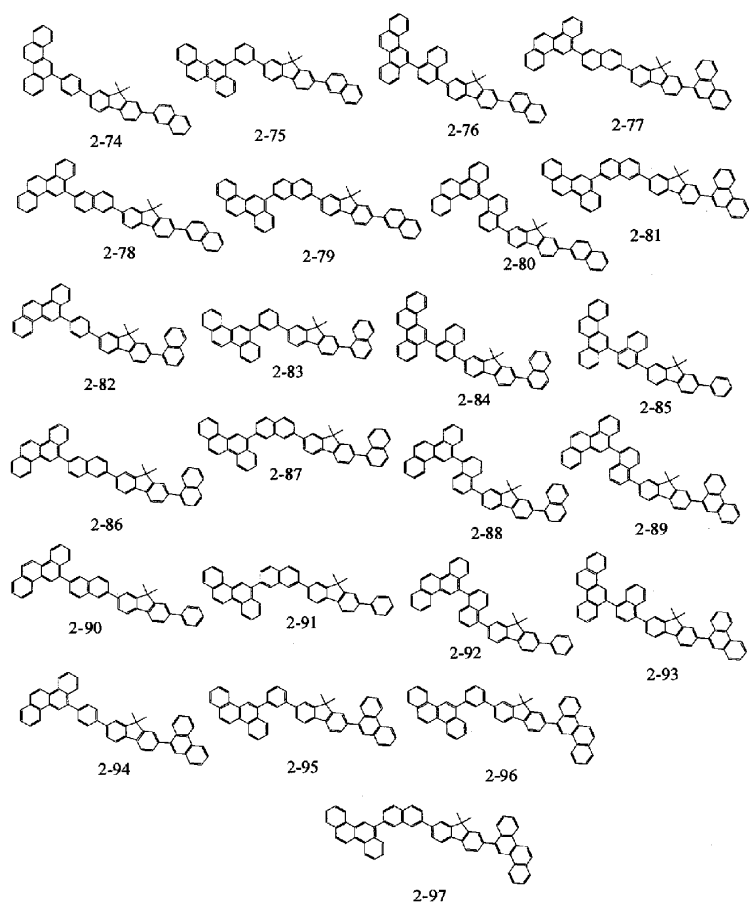
[0109]



[0110]

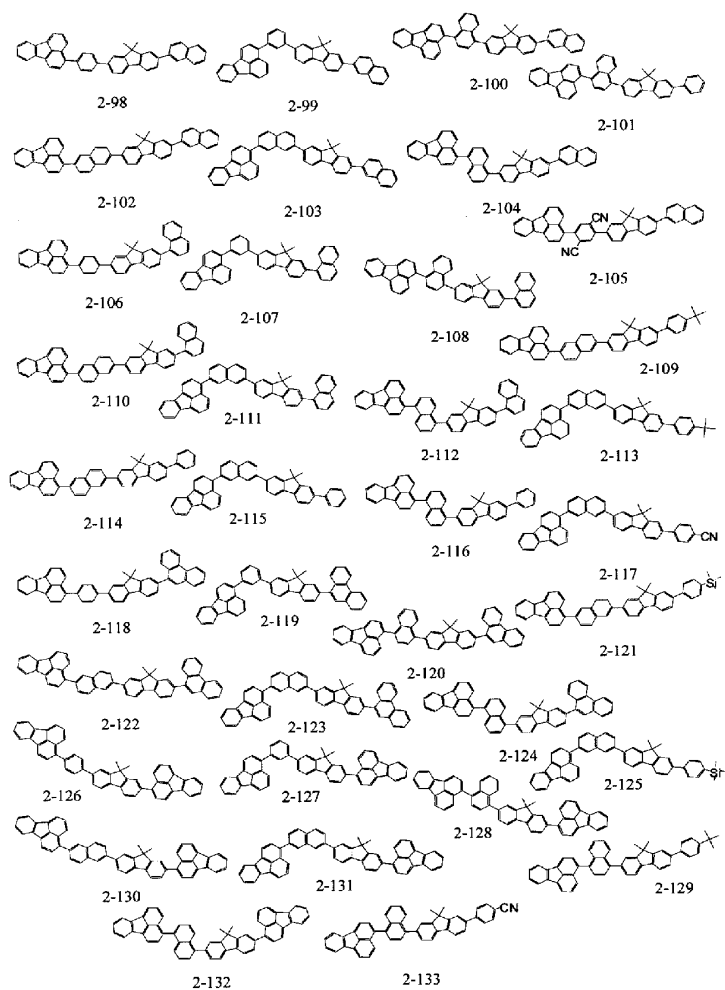


[0111]

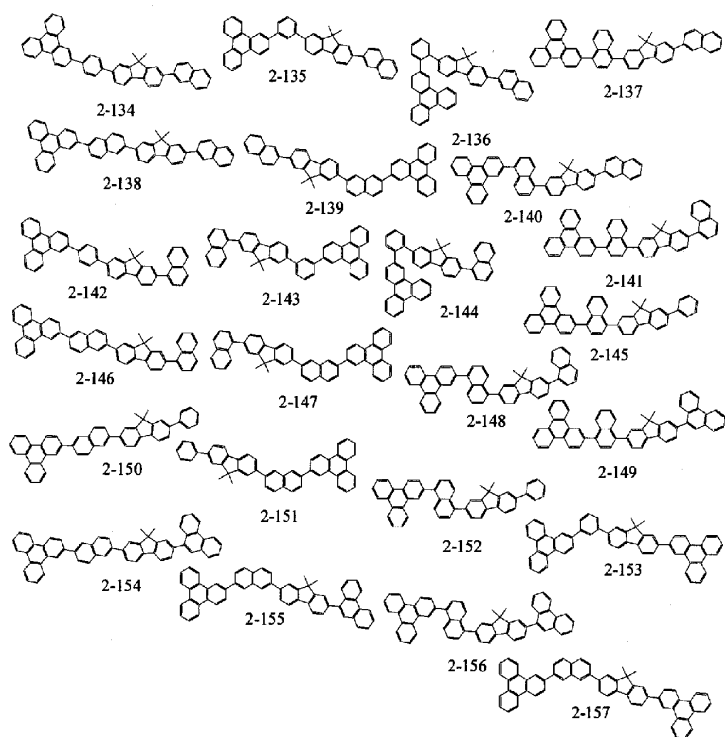


[0112]

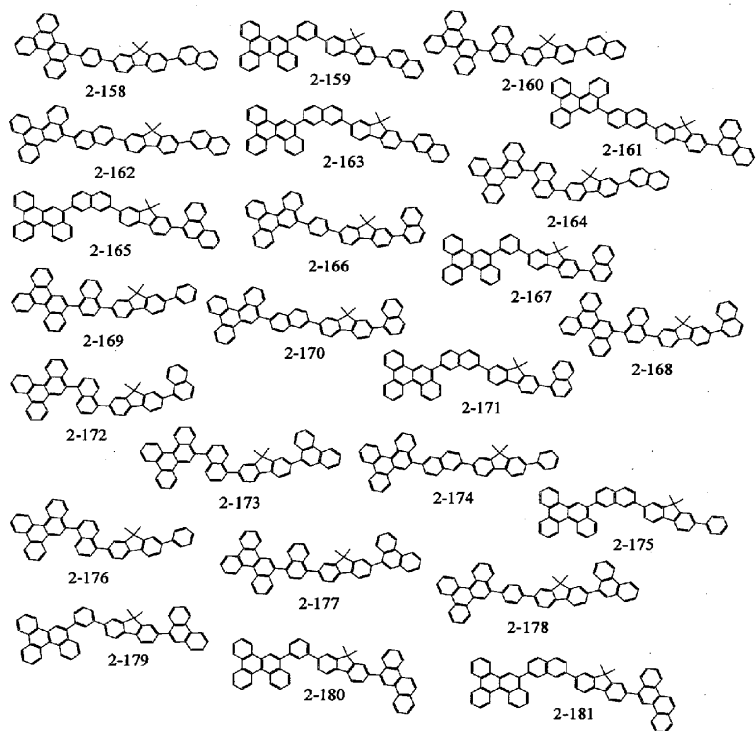




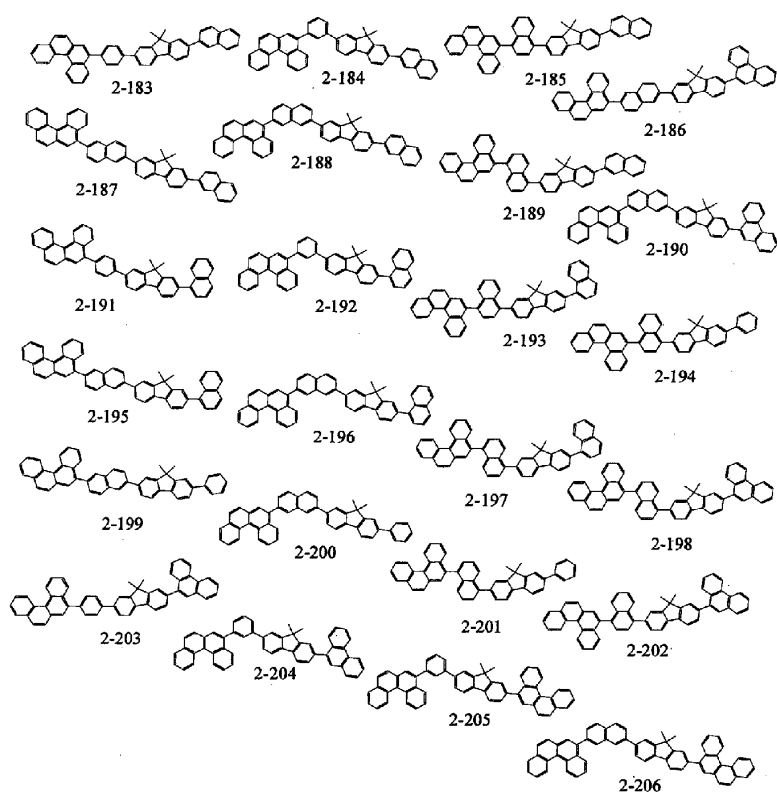
[0113]



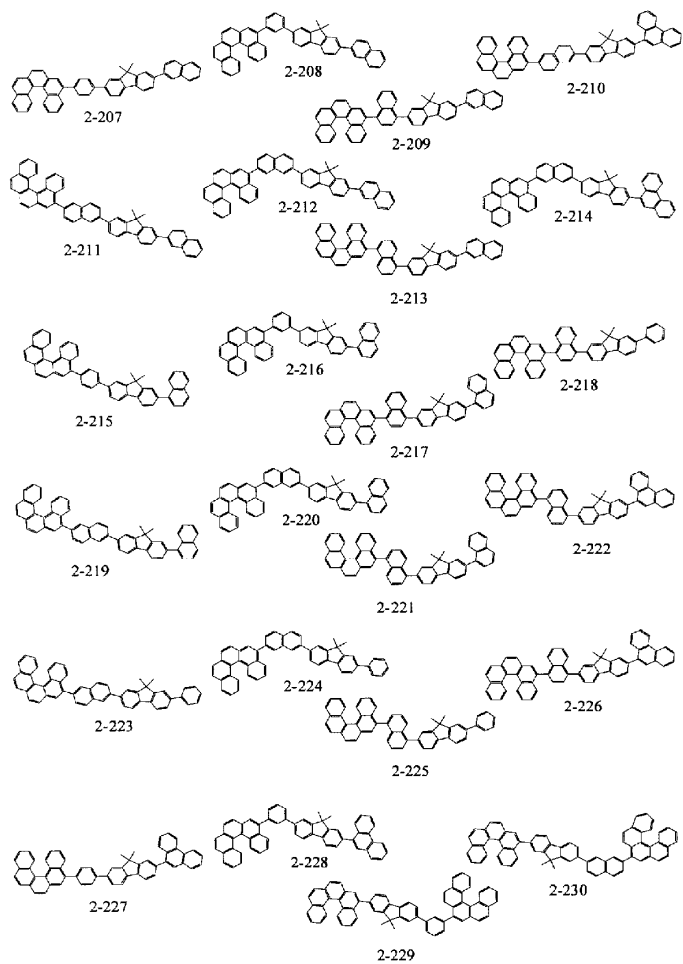
[0114]



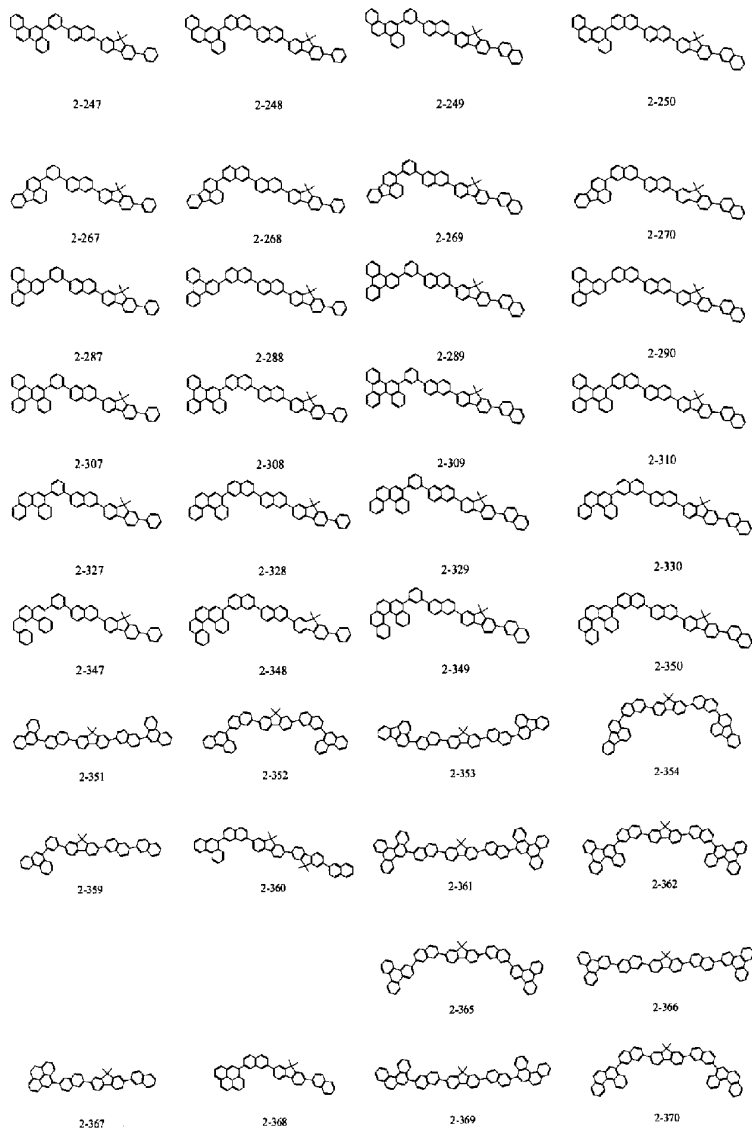
[0115]



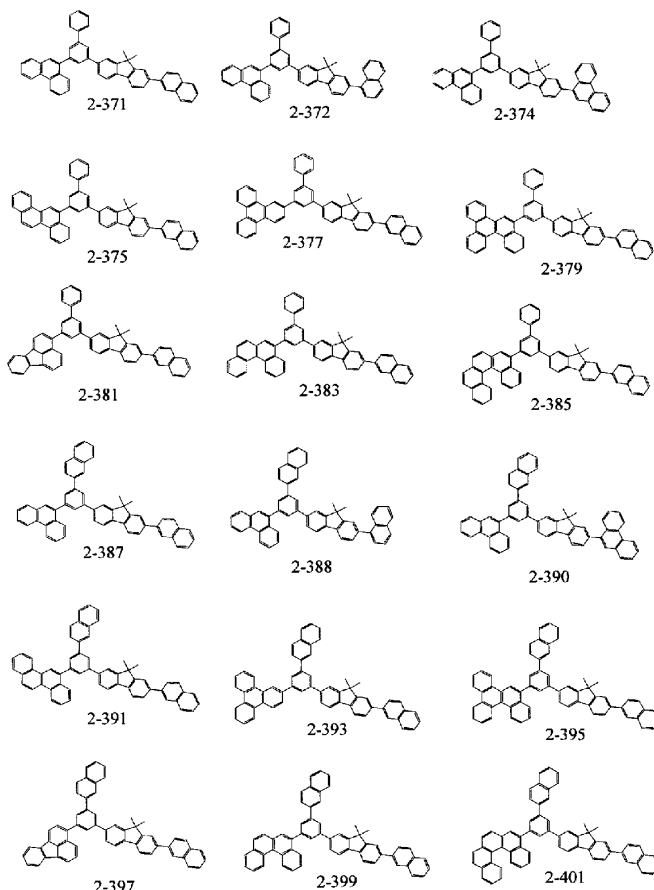
[0116]



[0117]



[0118]



[0119]

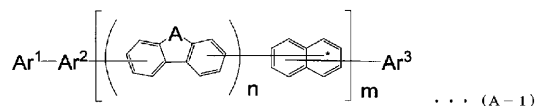
[0120] 28. 음극과 양극 사이에, 1층 또는 복수층으로 이루어지는 유기 박막층을 구비하고,

[0121] 상기 유기 박막층은 적어도 1개의 발광층을 갖고,

[0122] 상기 발광층의 적어도 1개는,

[0123] 인광 발광을 나타내는 인광 발광 재료의 적어도 1종과,

[0124] 하기 화학식 (A-1)로 표시되는 호스트 재료를 포함하는 것을 특징으로 하는 유기 전기발광 소자:



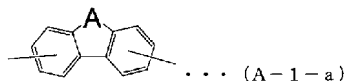
[0125]

[0126] (식 중,  $\text{Ar}^1$  및  $\text{Ar}^3$ 은 각각 독립적으로 수소 원자(중수소 원자를 포함함), 치환 또는 비치환된 벤젠환 잔기, 또는 치환 또는 비치환된 나프탈렌환, 치환 또는 비치환된 크라이센환, 치환 또는 비치환된 페난트렌환, 치환 또는 비치환된 벤조페난트렌환, 치환 또는 비치환된 다이벤조페난트렌환, 치환 또는 비치환된 트라이페닐렌환, 치환 또는 비치환된 벤조[a]트라이페닐렌환, 치환 또는 비치환된 벤조크라이센환, 치환 또는 비치환된 플루오란텐환, 치환 또는 비치환된 벤조[b]플루오란텐환 및 치환 또는 비치환된 피센환으로부터 선택되는 축합 방향족 탄화수소환 잔기를 나타낸다.

[0127]  $\text{Ar}^2$ 는 치환 또는 비치환된 벤젠환 잔기, 치환 또는 비치환된 나프탈렌환 잔기, 또는 치환 또는 비치환된 페난트렌환 잔기를 나타낸다.

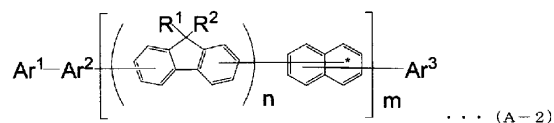
[0128] A는 O, S 또는  $\text{CR}^1\text{R}^2$ 를 나타낸다.  $\text{R}^1$  및  $\text{R}^2$ 는 각각 독립적으로 탄소수 1~20의 알킬기, 치환 또는 비치환된 환형 탄소수 3~20의 사이클로알킬기, 탄소수 7~24의 아르알킬기, 또는 탄소수 3~20의 실릴기를 나타낸다.

[0129] n은 1~3의 정수를 나타낸다. m은 1 또는 2의 정수를 나타낸다. n이 2 이상인 경우,  $( )_n$  내의 하기 화학식 (A-1-a)는 동일하여도 상이하여도 좋다.)



[0130]

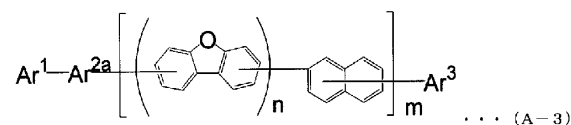
[0131] 29. 상기 28에 기재된 유기 전기발광 소자로서, 화학식 (A-1)이 하기 화학식 (A-2)로 표시되는 것을 특징으로 하는 유기 전기발광 소자:



[0132]

[0133] ( $Ar^1$ ,  $Ar^2$ ,  $Ar^3$ ,  $R^1$ ,  $R^2$ ,  $n$  및  $m$ 은 상기와 동일하다.),

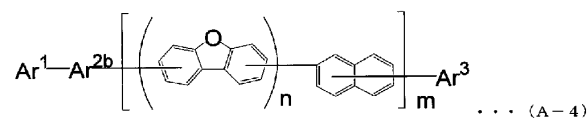
[0134] 30. 상기 28에 기재된 유기 전기발광 소자로서, 화학식 (A-1)이 하기 화학식 (A-3)으로 표시되는 것을 특징으로 하는 유기 전기발광 소자:



[0135]

[0136] (식 중,  $Ar^1$ ,  $Ar^3$ ,  $n$  및  $m$ 은 상기와 동일하고,  $Ar^{2a}$ 는 치환 또는 비치환된 벤젠환, 또는 치환 또는 비치환된 페난트렌환이다. 이 경우,  $Ar^3$ 은 다이벤조퓨란환 잔기에 결합하는 나프탈렌환 잔기의 6 위치 또는 7 위치에 결합한다.),

[0137] 31. 상기 28에 기재된 유기 전기발광 소자로서, 화학식 (A-1)이 하기 화학식 (A-4)로 표시되는 것을 특징으로 하는 유기 전기발광 소자:



[0138]

[0139] (식 중,  $Ar^1$ ,  $Ar^3$ ,  $n$  및  $m$ 은 상기와 동일하고,  $Ar^{2b}$ 는 치환 또는 비치환된 나프탈렌환 잔기이다.  $Ar^{2b}$ 가 그의 2 위치에서 다이벤조퓨란환 잔기에 결합하는 경우는,  $Ar^1$  또는  $Ar^3$ 의 어느 한쪽은, 각각이 결합하는 나프탈렌환 잔기의 6 위치 또는 7 위치에서 결합한다.  $Ar^{2b}$ 가 그의 2 위치에서 다이벤조퓨란환 잔기에 결합하지 않는 경우는,  $Ar^3$ 은 나프탈렌환 잔기의 6 위치 또는 7 위치에 결합한다. 또한,  $Ar^1$ ,  $Ar^3$ 이 모두 수소인 경우를 제외한다.),

[0140] 32. 음극과 양극 사이에, 1층 또는 복수층으로 이루어지는 유기 박막층을 구비하고, 상기 유기 박막층은 적어도 1개의 발광층을 갖고, 상기 유기 박막층의 적어도 1층이, 인광 발광 재료의 적어도 1종과, 상기 1~23 및 25~27 중 어느 하나에 기재된 유기 전기발광 소자용 재료를 포함하는 유기 전기발광 소자,

[0141] 33. 상기 발광층의 적어도 1개가 상기 유기 전기발광 소자용 재료와, 상기 인광 발광 재료의 적어도 1종을 포함하는 상기 32에 기재된 유기 전기발광 소자,

[0142] 34. 상기 인광 발광 재료가 금속 착체를 함유하고, 상기 금속 착체가 Ir, Pt, Os, Au, Cu, Re 및 Ru로부터 선택되는 금속 원자와 배위자를 갖는 상기 32에 기재된 유기 전기발광 소자,

[0143] 35. 상기 배위자가, 착체를 형성하는 금속 원자와 오쏘 메탈 결합을 갖는 상기 32에 기재된 유기 전기발광 소자,

[0144] 36. 상기 유기 전기발광 소자용 재료의 여기 3중항 에너지가 2.0eV 이상 2.8eV 이하인 상기 32에 기재된 유기 전기발광 소자,

[0145] 37. 상기 인광 발광 재료의 적어도 1종의 발광 파장 극대치가 520nm 이상 720nm 이하인 상기 32에 기재된 유기 전기발광 소자,

- [0146] 38. 상기 유기 박막층이 상기 음극과 상기 발광층 사이에 전자 수송층을 갖고, 상기 전자 수송층이 상기 유기 전기발광 소자용 재료를 포함하는 상기 32에 기재된 유기 전기발광 소자,
- [0147] 39. 상기 유기 박막층이 상기 음극과 상기 발광층 사이에 전자 수송층 또는 전자 주입층을 갖고, 상기 전자 수송층 또는 상기 전자 주입층이, 질소 함유 6원환 또는 5원환 골격을 갖는 방향족환, 또는 질소 함유 6원환 또는 5원환 골격을 갖는 축합 방향족환 화합물을 포함하는 상기 32에 기재된 유기 전기발광 소자,
- [0148] 40. 상기 유기 박막층이 상기 음극과 상기 발광층 사이에 전자 수송층 또는 전자 주입층을 갖고, 상기 전자 수송층 또는 상기 전자 주입층이 상기 유기 전기발광 소자용 재료를 포함하는 상기 32에 기재된 유기 전기발광 소자, 및
- [0149] 41. 상기 음극과 상기 유기 박막층의 계면 영역에 환원성 도펀트가 첨가되어 있는 상기 32에 기재된 유기 전기발광 소자
- [0150] 를 제공하는 것이다.

### 발명의 효과

- [0151] 본 발명에 의하면, 상기 화학식 (A-1)~(A-5), (B-1)~(B-4), (C-1)~(C-6) 등으로 표시되는 유기 전기발광 소자용 재료를 호스트 재료, 특히 인광 호스트로서 이용함으로써, 고효율이고 또한 장수명인 인광 발광성 유기 EL 소자를 제공할 수 있다.

### 도면의 간단한 설명

- [0152] 도 1은 본 발명의 실시형태에서의 유기 EL 소자의 일례의 개략 구성을 나타내는 도면이다.

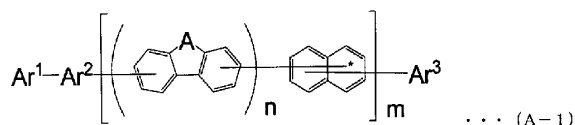
### 발명을 실시하기 위한 구체적인 내용

- [0153] 이하, 본 발명의 실시형태에 관하여 설명한다.
- [0154] (유기 EL 소자의 구성)
- [0155] 우선, 유기 EL 소자의 소자 구성에 관하여 설명한다.
- [0156] 유기 EL 소자의 대표적인 소자 구성으로서는,
- [0157] (1) 양극/발광층/음극
- [0158] (2) 양극/정공 주입층/발광층/음극
- [0159] (3) 양극/발광층/전자 주입 · 수송층/음극
- [0160] (4) 양극/정공 주입층/발광층/전자 주입 · 수송층/음극
- [0161] (5) 양극/유기 반도체층/발광층/음극
- [0162] (6) 양극/유기 반도체층/전자 장벽층/발광층/음극
- [0163] (7) 양극/유기 반도체층/발광층/부착 개선층/음극
- [0164] (8) 양극/정공 주입 · 수송층/발광층/전자 주입 · 수송층/음극
- [0165] (9) 양극/절연층/발광층/절연층/음극
- [0166] (10) 양극/무기 반도체층/절연층/발광층/절연층/음극
- [0167] (11) 양극/유기 반도체층/절연층/발광층/절연층/음극
- [0168] (12) 양극/절연층/정공 주입 · 수송층/발광층/절연층/음극
- [0169] (13) 양극/절연층/정공 주입 · 수송층/발광층/전자 주입 · 수송층/음극
- [0170] 등의 구조를 들 수 있다.
- [0171] 상기 중에서 (8)의 구성이 바람직하게 이용되지만, 물론 이들에 한정되는 것은 아니다.

- [0172] 도 1에 본 발명의 실시형태에서의 유기 EL 소자의 일례의 개략 구성을 나타낸다.
- [0173] 유기 EL 소자(1)는 투명한 기관(2), 양극(3), 음극(4), 및 양극(3)과 음극(4) 사이에 배치된 유기 박막층(10)을 갖는다.
- [0174] 유기 박막층(10)은 호스트 재료로서의 인광 호스트 및 인광 발광 재료로서의 인광 도펀트를 포함하는 인광 발광층(5)을 갖지만, 인광 발광층(5)과 양극(3) 사이에 정공 주입·수송층(6) 등, 인광 발광층(5)과 음극(4) 사이에 전자 주입·수송층(7) 등을 구비하고 있어도 좋다.
- [0175] 또한, 인광 발광층(5)의 양극(3)측에 전자 장벽층을, 인광 발광층(5)의 음극(4)측에 정공 장벽층을 각각 설치하여도 좋다.
- [0176] 이에 의해, 전자나 정공을 인광 발광층(5)에 가둬 인광 발광층(5)에서의 여기자 생성 확률을 높일 수 있다.
- [0177] 한편, 본 명세서에서 형광 호스트 및 인광 호스트라는 용어는, 형광 도펀트와 조합되었을 때에는 형광 호스트라고 칭하고, 인광 도펀트와 조합되었을 때에는 인광 호스트라고 칭하는 것이며, 분자 구조만으로 일의적으로 형광 호스트나 인광 호스트로 한정적으로 구분되는 것은 아니다.
- [0178] 바꿔 말하면, 본 명세서에서 형광 호스트란, 형광 도펀트를 함유하는 형광 발광층을 구성하는 재료를 의미하며, 형광 재료의 호스트로밖에 이용할 수 없는 것을 의미하고 있는 것은 아니다.
- [0179] 마찬가지로 인광 호스트란, 인광 도펀트를 함유하는 인광 발광층을 구성하는 재료를 의미하며, 인광 발광 재료의 호스트로밖에 이용할 수 없는 것을 의미하고 있는 것은 아니다.
- [0180] 또한, 본 명세서 중에서 「정공 주입·수송층」은 「정공 주입층 및 정공 수송층 중의 적어도 어느 한쪽」을 의미하고, 「전자 주입·수송층」은 「전자 주입층 및 전자 수송층 중의 적어도 어느 한쪽」을 의미한다.
- [0181] (투광성 기관)
- [0182] 유기 EL 소자는 투광성 기관 상에 제작한다. 여기서 말하는 투광성 기관은 유기 EL 소자를 지지하는 기관이고, 400~700nm의 가시 영역의 광의 투과율이 50% 이상이며 평활한 기관이 바람직하다.
- [0183] 구체적으로는, 유리판, 폴리머판 등을 들 수 있다.
- [0184] 유리판으로서는, 특히 소다석회 유리, 바륨·스트론튬 함유 유리, 납 유리, 알루미늄노규산 유리, 붕규산 유리, 바륨붕규산 유리, 석영 등을 들 수 있다.
- [0185] 또한 폴리머판으로서는, 폴리카보네이트, 아크릴, 폴리에틸렌 테레프탈레이트, 폴리에터 설파이드, 폴리설폰 등을 들 수 있다.
- [0186] (양극 및 음극)
- [0187] 유기 EL 소자의 양극은 정공을 정공 주입층, 정공 수송층 또는 발광층에 주입하는 역할을 하는 것이고, 4.5eV 이상의 일함수를 갖는 것이 효과적이다.
- [0188] 양극 재료의 구체예로서는, 산화인듐주석 합금(ITO), 산화주석(NESA), 산화인듐아연 산화물, 금, 은, 백금, 구리 등을 들 수 있다.
- [0189] 양극은 이들 전극 물질을 증착법이나 스퍼터링법 등의 방법으로 박막을 형성시킴으로써 제작할 수 있다.
- [0190] 본 실시형태와 같이, 발광층으로부터의 발광을 양극으로부터 추출하는 경우, 양극의 가시 영역의 광의 투과율을 10%보다 크게 하는 것이 바람직하다. 또한, 양극의 시트 저항은 수백  $\Omega/\square$  이하가 바람직하다. 양극의 막 두께는 재료에도 따르지만, 통상 10nm~1 $\mu$ m, 바람직하게는 10~200nm의 범위에서 선택된다.
- [0191] 음극으로서는, 전자 주입층, 전자 수송층 또는 발광층에 전자를 주입하는 목적에서 일함수가 작은 재료가 바람직하다.
- [0192] 음극 재료는 특별히 한정되지 않지만, 구체적으로는 인듐, 알루미늄, 마그네슘, 마그네슘-인듐 합금, 마그네슘-알루미늄 합금, 알루미늄-리튬 합금, 알루미늄-스칸듐-리튬 합금, 마그네슘-은 합금 등을 사용할 수 있다.
- [0193] 음극도 양극과 마찬가지로 증착법이나 스퍼터링법 등의 방법으로 박막을 형성시킴으로써 제작할 수 있다. 또한, 음극측으로부터 발광을 추출하는 태양을 채용할 수도 있다.



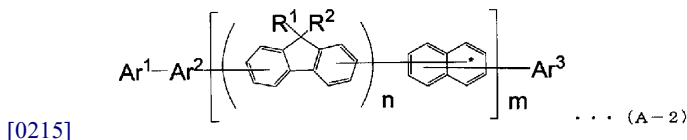
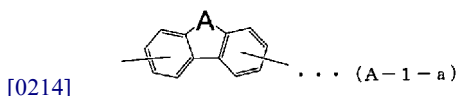
- [0194] (발광층)
- [0195] 유기 EL 소자의 발광층은 이하의 기능을 함께 가지는 것이다.
- [0196] 즉,
- [0197] (1) 주입 기능: 전계 인가시에 양극 또는 정공 주입층으로부터 정공을 주입할 수 있고, 음극 또는 전자 주입층으로부터 전자를 주입할 수 있는 기능,
- [0198] (2) 수송 기능: 주입한 전하(전자와 정공)를 전계의 힘으로 이동시키는 기능,
- [0199] (3) 발광 기능: 전자와 정공의 재결합 장소를 제공하고, 이를 발광으로 연결시키는 기능
- [0200] 이 있다.
- [0201] 단, 정공이 주입되기 쉬움과 전자가 주입되기 쉬움에 차이가 있어도 좋고, 또한 정공과 전자의 이동도로 표시되는 수송능에 대소가 있어도 좋다.
- [0202] 이 발광층을 형성하는 방법으로서, 예컨대 증착법, 스핀 코팅법, LB법 등의 공지된 방법을 적용할 수 있다.
- [0203] 발광층은 분자 퇴적막인 것이 바람직하다.
- [0204] 여기서 분자 퇴적막이란, 기상 상태의 재료 화합물로부터 침착되어 형성된 박막이나 용액 상태 또는 액상 상태의 재료 화합물로부터 고체화되어 형성된 막이며, 통상 이 분자 퇴적막은 LB법에 의해 형성된 박막(분자 누적막)과는 응집 구조, 고차 구조의 차이나 그에 기인하는 기능적인 차이에 의해 구분할 수 있다. 또한, 일본 특허공개 소57-51781호 공보에 개시되어 있는 바와 같이, 수지 등의 결합제와 재료 화합물을 용제에 녹여 용액으로 한 후, 이를 스핀 코팅법 등에 의해 박막화하는 것에 의해서도 발광층을 형성할 수 있다.
- [0205] 나아가, 발광층의 막 두께는 바람직하게는 5~50nm, 보다 바람직하게는 7~50nm, 가장 바람직하게는 10~50nm이다. 5nm 미만에서는 발광층 형성이 곤란해져 색도 조절이 곤란해질 우려가 있고, 50nm를 초과하면 구동 전압이 상승할 우려가 있다.
- [0206] 본 발명의 유기 EL 소자는 음극과 양극 사이에, 1층 또는 복수층으로 이루어지는 유기 박막층을 구비하고, 상기 유기 박막층은 적어도 1개의 발광층을 갖고, 상기 유기 박막층의 적어도 1층이, 인광 발광 재료의 적어도 1종과, 후술하는 본 발명의 유기 전기발광 소자용 재료 A~C로부터 선택되는 적어도 1종을 포함한다. 또한, 발광층의 적어도 1개가 본 발명의 유기 전기발광 소자용 재료와, 인광 발광 재료의 적어도 1종을 포함하는 것이 바람직하다.
- [0207] (유기 전기발광 소자용 재료 A)
- [0208] 본 발명의 유기 전기발광 소자용 재료 A는 하기 화학식 (A-1)로 표시되고, 하기 화학식 (A-2)~(A-5)로 표시되는 것이 바람직하다.



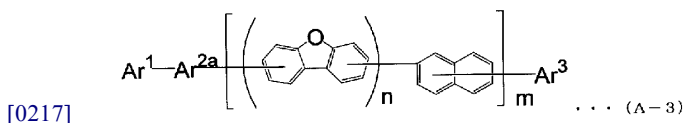
- [0209]
- [0210] (식 중,  $\text{Ar}^1$  및  $\text{Ar}^3$ 은 각각 독립적으로 수소 원자(중수소 원자를 포함함), 치환 또는 비치환된 벤젠환 잔기, 또는 치환 또는 비치환된 나프탈렌환, 치환 또는 비치환된 크라이센환, 치환 또는 비치환된 페난트렌환, 치환 또는 비치환된 벤조페난트렌환, 치환 또는 비치환된 다이벤조페난트렌환, 치환 또는 비치환된 트라이페닐렌환, 치환 또는 비치환된 벤조[a]트라이페닐렌환, 치환 또는 비치환된 벤조크라이센환, 치환 또는 비치환된 플루오란텐환, 치환 또는 비치환된 벤조[b]플루오란텐환 및 치환 또는 비치환된 피센환으로부터 선택되는 치환 또는 비치환된 축합 방향족 탄화수소환 잔기를 나타낸다.
- [0211]  $\text{Ar}^2$ 는 치환 또는 비치환된 벤젠환, 치환 또는 비치환된 나프탈렌환, 또는 치환 또는 비치환된 페난트렌환 잔기를 나타낸다.
- [0212] A는 O, S 또는  $\text{CR}^1\text{R}^2$ 를 나타낸다.  $\text{R}^1$  및  $\text{R}^2$ 는 각각 독립적으로 치환 또는 비치환된 탄소수 1~20의 알킬기, 치환 또는 비치환된 환 형성 탄소수 3~20의 사이클로알킬기, 치환 또는 비치환된 탄소수 7~24의 아르알킬기, 또

는 치환 또는 비치환된 탄소수 3~20의 실릴기를 나타낸다.

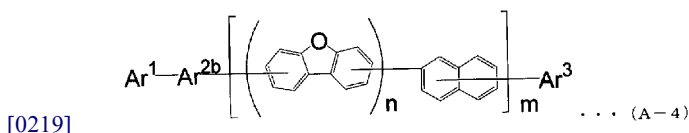
[0213]  $n$ 은 1~3의 정수를 나타낸다.  $m$ 은 1 또는 2의 정수를 나타낸다.  $n$ 이 2 이상인 경우, ( ) <sub>$n$</sub>  내의 하기 화학식 (A-1-a)는 동일하여도 상이하여도 좋다.)



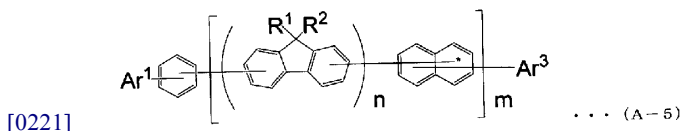
[0216] (식 중,  $Ar^1$ ,  $Ar^2$ ,  $Ar^3$ ,  $R^1$ ,  $R^2$ ,  $n$  및  $m$ 은 상기와 동일하다.)



[0218] (식 중,  $Ar^1$ ,  $Ar^3$ ,  $n$  및  $m$ 은 상기와 동일하고,  $Ar^{2a}$ 는 치환 또는 비치환된 벤젠환, 또는 치환 또는 비치환된 페난트렌환 잔기이다. 또한,  $Ar^3$ 은 다이벤조퓨란환 잔기에 결합하는 나프탈렌환 잔기의 6 위치 또는 7 위치에 결합한다.)



[0220] (식 중,  $Ar^1$ ,  $Ar^3$ ,  $n$  및  $m$ 은 상기와 동일하고,  $Ar^{2b}$ 는 치환 또는 비치환된 나프탈렌환 잔기이다.  $Ar^{2b}$ 가 그의 2 위치에서 다이벤조퓨란환 잔기에 결합하는 경우는,  $Ar^1$  또는  $Ar^3$ 의 어느 한쪽은, 각각이 결합하는 나프탈렌환 잔기의 6 위치 또는 7 위치에서 결합한다.  $Ar^{2b}$ 가 그의 2 위치에서 다이벤조퓨란환 잔기에 결합하지 않는 경우는,  $Ar^3$ 은 나프탈렌환 잔기의 6 위치 또는 7 위치에 결합한다.)

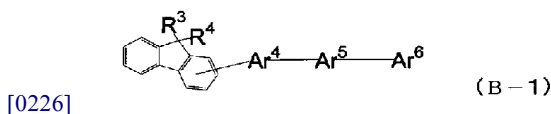


[0222] (식 중,  $Ar^1$ ,  $Ar^3$ ,  $R^1$ ,  $R^2$ ,  $n$  및  $m$ 은 상기와 동일하다.)

[0223] 상기 화학식 (A-1)~(A-5) 중,  $Ar^1$ ,  $Ar^2$ ,  $Ar^{2a}$ ,  $Ar^3$ ,  $R^1$  및/또는  $R^2$ 가 1개 또는 복수의 치환기를 갖는 경우, 상기 치환기는 탄소수 1~20의 알킬기, 탄소수 1~20의 할로알킬기, 환 형성 탄소수 5~18의 사이클로알킬기, 탄소수 3~20의 실릴기, 사이아노기, 할로젠 원자 또는 환 형성 탄소수 6~22의 아릴기인 것이 바람직하다.

[0224] (유기 전기발광 소자용 재료 B)

[0225] 본 발명의 유기 전기발광 소자용 재료 B는 하기 화학식 (B-1)로 표시되고, 하기 화학식 (B-2)~(B-4)로 표시되는 것이 바람직하다.



[0227] (식 중,  $R^3$  및  $R^4$ 는 각각 독립적으로 수소 원자(중수소 원자를 포함함), 탄소수 1~10의 알킬기 또는 환 형성 탄

소수 6~12의 아릴기를 나타내고,  $Ar^4$ 는 환 형성 탄소수 10~22의 축합 다환 방향족 탄화수소환 잔기이고,  $Ar^5$ 는 벤젠환 또는 환 형성 탄소수 10~22의 축합 다환 방향족 탄화수소환 잔기이고,  $Ar^6$ 은 수소 원자(중수소 원자를 포함함), 벤젠환 또는 환 형성 탄소수 10~22의 축합 다환 방향족 탄화수소환 잔기이다. 또한,  $R^3$ ,  $R^3$ ,  $Ar^4$ ,  $Ar^5$  및  $Ar^6$ 은 각각 독립적으로 치환기를 가져도 좋다.

[0228] 단,  $Ar^4$ ,  $Ar^5$  및  $Ar^6$ 의 어느 것도 안트라센, 피렌, 페릴렌, 트라이페닐렌, 나프타센 또는 펜타센 골격을 갖지 않는다. 추가로 이하의 (1)~(6)의 경우를 전부 만족하는 것이다.

[0229] (1)  $Ar^4$ 가 나프탈렌환, 페난트렌환, 크라이센환, 벤즈안트라센환, 플루오란텐환 중 어느 하나이고, 또한  $Ar^5$ 가 플루오렌환인 경우를 제외한다.

[0230] (2)  $Ar^4$ 가 나프탈렌환이고,  $Ar^5$ 가 벤젠환이고, 또한  $Ar^6$ 이 벤젠환 또는 수소 원자인 경우를 제외한다.

[0231] (3) (i)  $Ar^4$ 가 나프탈렌-2,6-다이일기이고,  $Ar^5$ 가  $\beta$ -나프틸기이고, 또한  $Ar^6$ 이 수소 원자인 경우를 제외한다.

[0232] (ii)  $Ar^4$ 가 나프탈렌-2,6-다이일기이고,  $Ar^5$ 가 나프탈렌-2,6-다이일기이고, 또한  $Ar^6$ 이  $\beta$ -나프틸기인 경우를 제외한다.

[0233] (4)  $Ar^4$ 가 플루오렌환이고, 또한  $Ar^5$ 가 벤젠환, 플루오렌환 또는 플루오란텐환 중 어느 하나인 경우를 제외한다.

[0234] 또한,  $Ar^4$ 가 플루오렌환이고, 또한  $Ar^6$ 이 수소 원자 또는  $\beta$ -나프틸기인 경우를 제외한다.

[0235] (5)  $Ar^4$ 가 페난트렌환 또는 플루오란텐환이고,  $Ar^5$ 가 벤젠환이고, 또한  $Ar^6$ 이 수소 원자인 경우를 제외한다.

[0236] (6)  $Ar^4$ 가 벤젠환, 바이페닐환, 나프탈렌환, 바이나프탈렌환, 플루오렌환 중 어느 하나이고, 또한  $Ar^5$ 가 플루오란텐환인 경우를 제외한다.)

[0237]  $Ar^4$ 가 나프탈렌환이고,  $Ar^5$ 가 벤젠환이고, 또한  $Ar^6$ 이 환 형성 탄소수 10~22의 축합 다환 방향족 탄화수소환 잔기인 경우가 바람직하다. 또한, 이 경우,  $Ar^6$ 이 페난트릴기, 벤조페난트릴기, 다이벤조페난트릴기, 크라이센일기, 플루오란텐일기, 트라이페닐렌기, 벤조트라이페닐렌기인 것이 바람직하다.

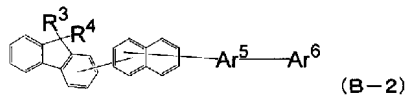
[0238]  $Ar^4$ 가 나프탈렌환이고,  $Ar^5$ 가 나프탈렌환이고, 또한  $Ar^6$ 이 환 형성 탄소수 10~22의 축합 다환 방향족 탄화수소환 잔기인 경우가 바람직하다.

[0239] 단, 이 경우,  $Ar^4$ 가 나프탈렌-2,6-다이일기이고,  $Ar^5$ 가 나프탈렌-2,6-다이일기이고, 또한  $Ar^6$ 이  $\beta$ -나프틸기인 경우는 제외된다. 또한, 이 경우,  $Ar^6$ 이 페난트릴기, 벤조페난트릴기, 다이벤조페난트릴기, 크라이센일기, 플루오란텐일기, 트라이페닐렌기, 벤조트라이페닐렌기인 것이 바람직하다.

[0240]  $Ar^4$ 가 나프탈렌환이고,  $Ar^5$ 가 환 형성 탄소수 11~22의 축합 다환 방향족 탄화수소환 잔기이고, 또한  $Ar^6$ 이 수소 원자(중수소 원자를 포함함)인 경우가 바람직하다. 단, 이하의 (1)~(3) 중 어느 하나인 경우는 제외된다.

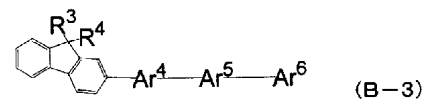
(1)  $Ar^4$ 가 나프탈렌-2,6-다이일기이고,  $Ar^5$ 가  $\beta$ -나프틸기이고, 또한  $Ar^6$ 이 수소 원자인 경우, (2)  $Ar^4$ 가 나프탈렌-1,4-다이일기 또는 나프탈렌-1,5-다이일기이고,  $Ar^5$ 가 플루오란텐환이고, 또한  $Ar^6$ 이 수소 원자인 경우, 또는 (3)  $Ar^4$ 가 나프탈렌-1,4-다이일기, 나프탈렌-2,6-다이일기 또는 나프탈렌-2,8-다이일기 중 어느 하나이고,  $Ar^5$ 가 플루오렌환이고, 또한  $Ar^6$ 이 수소 원자인 경우이다. 또한, 이 경우,  $Ar^5$ 가 페난트렌환, 벤조페난트렌환, 다이벤조페난트렌환, 크라이센환, 플루오란텐환, 트라이페닐렌환, 벤조트라이페닐렌환인 것이 바람직하다.

[0241] 나아가서는,  $Ar^4$ 가 플루오란텐환, 페난트렌환, 크라이센환이고,  $Ar^5$ 가 환 형성 탄소수 10~22의 축합 다환 방향족 탄화수소환이고, 또한  $Ar^6$ 이 수소 원자(중수소 원자를 포함함)인 경우가 바람직하다. 또한, 이 경우,  $Ar^5$ 가 나프탈렌환, 페난트렌환, 벤조페난트렌환, 다이벤조페난트렌환, 크라이센환, 플루오란텐환, 트라이페닐렌환, 벤조트라이페닐렌환인 것이 바람직하다.



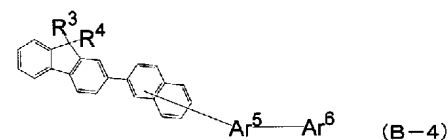
[0242]

[0243] (식 중,  $R^3$ ,  $R^4$ ,  $Ar^5$  및  $Ar^6$ 은 상기와 동일하다.)



[0244]

[0245] (식 중,  $R^3$ ,  $R^4$ ,  $Ar^4$ ,  $Ar^5$  및  $Ar^6$ 은 상기와 동일하다.)



[0246]

[0247] (식 중,  $R^3$ ,  $R^4$ ,  $Ar^5$  및  $Ar^6$ 은 상기와 동일하다.)

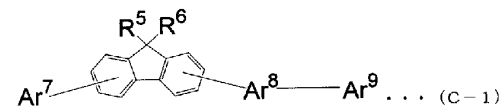
[0248] 상기 화학식 (B-1)의  $Ar^4 \sim Ar^5$ 에서의 환 형성 탄소수 10~22의 축합 다환 방향족 탄화수소환은 각각 독립적으로 나프탈렌환, 크라이센환, 페난트렌환, 벤조페난트렌환, 다이벤조페난트렌환, 벤조[a]트라이페닐렌환, 벤조크라이센환, 플루오란텐환, 벤조[b]플루오란텐환 및 피센환으로부터 선택되는 것이 바람직하고,  $Ar^6$ 은 수소 원자(중수소 원자를 포함함) 또는 상기 환 형성 탄소수 10~22의 축합 다환 방향족 탄화수소환 잔기를 나타내는 것이 바람직하다.

[0249] 상기 화학식 (B-4)의  $Ar^5$  및  $Ar^6$ 에서의 환 형성 탄소수 10~22의 축합 다환 방향족 탄화수소환은 각각 독립적으로 나프탈렌환, 크라이센환, 페난트렌환, 벤조페난트렌환, 다이벤조페난트렌환, 벤조[a]트라이페닐렌환, 벤조크라이센환, 플루오란텐환, 벤조[b]플루오란텐환 및 피센환으로부터 선택되는 것이 바람직하고,  $Ar^6$ 은 수소 원자(중수소 원자를 포함함) 또는 상기 환 형성 탄소수 10~22의 축합 다환 방향족 탄화수소환 잔기를 나타내는 것이 바람직하다.

[0250] 상기 화학식 (B-4)에서,  $R^3$  및  $R^4$ 는 각각 독립적으로 탄소수 1~10의 알킬기, 또는 페닐기를 나타내는 것이 바람직하다.

[0251] (유기 전기발광 소자용 재료 C)

[0252] 본 발명의 유기 전기발광 소자용 재료 C는 하기 화학식 (C-1)로 표시되고, 하기 화학식 (C-2)~(C-6)으로 표시되는 것이 바람직하다. 이 화학식 (C-1)~(C-6)은 좌우 대칭이 되는 구조를 포함하지 않는 것이다.



[0253]

[0254] (식 중,  $Ar^7 \sim Ar^9$ 는 각각 독립적으로 벤젠환, 또는 나프탈렌환, 크라이센환, 페난트렌환, 벤조페난트렌환, 다이벤조페난트렌환, 트라이페닐렌환, 벤조[a]트라이페닐렌환, 벤조크라이센환, 플루오란텐환, 벤조[b]플루오란텐환 및 피센환으로부터 선택되는 축합 방향족 탄화수소환 잔기를 나타낸다.  $Ar^9$ 는 수소 원자(중수소 원자를 포함함)이어도 좋다.

[0255]  $R^5$  및  $R^6$ 은 각각 독립적으로 수소 원자(중수소 원자를 포함함), 탄소수 1~10의 알킬기 또는 환 형성 탄소수 6~12의 아릴기를 나타낸다.

[0256] 또한,  $R^5$ ,  $R^6$ ,  $Ar^7$ ,  $Ar^8$  및  $Ar^9$ 는 각각 독립적으로 치환기를 가져도 좋다.

[0257] 단, 이하의 (1)~(4)의 경우를 전부 만족하는 것이다.

[0258] (1)  $Ar^7$ 이 벤젠환이고, 또한  $Ar^8$ 이 벤젠환 또는 플루오렌환인 경우를 제외한다.

[0259] (2)  $Ar^9$ 가 수소 원자이고, 또한  $Ar^7$ 과  $Ar^8$ 이 동일한 축합 방향족 탄화수소환 잔기인 경우를 제외한다.

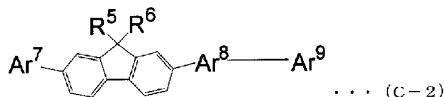
[0260] (3)  $Ar^7$ 과  $Ar^8-Ar^9$ 가 동일한 구조인 경우를 제외한다.

[0261] (4)  $Ar^7$ 이  $\beta$ -나프틸기 또는 나프탈렌-2,6-다이일기이고,  $Ar^8$ 이 나프탈렌-2,6-다이일기이고, 또한  $Ar^9$ 가  $\beta$ -나프틸기인 경우를 제외한다.)

[0262]  $Ar^7$ 이 나프탈렌환이고,  $Ar^8$ 이 벤젠환이고, 또한  $Ar^9$ 가 나프탈렌환, 크라이센환, 페난트렌환, 벤조페난트렌환, 다이벤조페난트렌환, 트라이페닐렌환, 벤조[a]트라이페닐렌환, 벤조크라이센환, 플루오란텐환, 벤조[b]플루오란텐환 및 피센환으로부터 선택되는 축합 방향족 탄화수소환 잔기인 경우가 바람직하다. 특히  $Ar^9$ 가 크라이센환, 페난트렌환, 벤조페난트렌환, 다이벤조페난트렌환, 트라이페닐렌환, 벤조[a]트라이페닐렌환, 벤조크라이센환, 플루오란텐환인 경우가 바람직하다.

[0263]  $Ar^7$ 이 나프탈렌환이고,  $Ar^8$ 이 나프탈렌환이고, 또한  $Ar^9$ 가 나프탈렌환, 크라이센환, 페난트렌환, 벤조페난트렌환, 다이벤조페난트렌환, 트라이페닐렌환, 벤조[a]트라이페닐렌환, 벤조크라이센환, 플루오란텐환, 벤조[b]플루오란텐환 및 피센환으로부터 선택되는 축합 방향족 탄화수소환 잔기인 경우가 바람직하다. 단  $Ar^7$ 이  $\beta$ -나프틸기이고,  $Ar^8$ 이 나프탈렌-2,6-다이일기이고, 또한  $Ar^9$ 가  $\beta$ -나프틸기인 경우는 제외된다. 특히  $Ar^9$ 가 페난트렌환인 경우가 바람직하다.

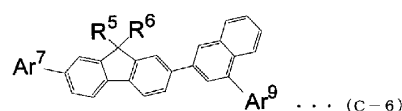
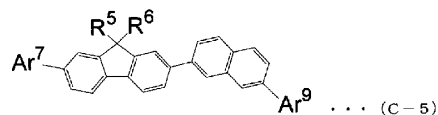
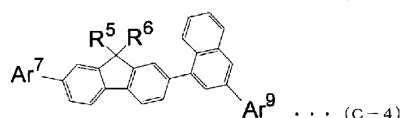
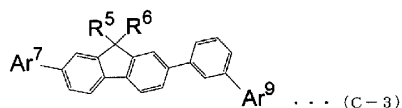
[0264]  $Ar^7$  및  $Ar^8$ 이 독립적으로 나프탈렌환, 크라이센환, 페난트렌환, 벤조페난트렌환, 다이벤조페난트렌환, 트라이페닐렌환, 벤조[a]트라이페닐렌환, 벤조크라이센환, 플루오란텐환, 벤조[b]플루오란텐환 및 피센환으로부터 선택되는 축합 방향족 탄화수소환 잔기이고, 또한  $Ar^9$ 가 수소인 경우가 바람직하다. 특히  $Ar^7$  및  $Ar^8$ 이 독립적으로 벤조페난트렌환, 벤조[a]트라이페닐렌환, 플루오란텐환인 경우가 바람직하다.



[0265]

[0266] (식 중,  $Ar^7$ ,  $Ar^8$ ,  $Ar^9$ ,  $R^5$  및  $R^6$ 은 상기와 동일하다.)

[0267] 상기 화학식 (C-1), (C-2)에서의  $R^5$ ,  $R^6$ ,  $Ar^7$ ,  $Ar^8$  및/또는  $Ar^9$ 가 1개 또는 복수의 치환기를 갖는 경우, 상기 치환기는 탄소수 1~20의 알킬기, 탄소수 1~20의 할로알킬기, 환 형성 탄소수 5~18의 사이클로알킬기, 탄소수 3~20의 실릴기, 사이아노기, 할로젠 원자 또는 환 형성 탄소수 6~22의 아릴기인 것이 바람직하다.



[0268]

[0269] ( $Ar^7$ ,  $Ar^9$ ,  $R^5$  및  $R^6$ 은 상기와 동일하다.)

[0270] 상기 화학식 (C-1)~(C-6) 중,  $R^5$ ,  $R^6$ ,  $Ar^7$  및/또는  $Ar^9$ 가 1개 또는 복수의 치환기를 갖는 경우, 상기 치환기는 탄소수 1~20의 알킬기, 탄소수 1~20의 할로알킬기, 환 형성 탄소수 5~18의 사이클로알킬기, 탄소수 3~20의 실릴기, 사이아노기, 할로젠 원자 또는 환 형성 탄소수 6~22의 아릴기인 것이 바람직하다.

[0271] 본 발명의 유기 전기발광 소자용 재료 A~C는 3중항 에너지 갭(여기 3중항 에너지)이 크기 때문에, 인광 도펀트에 대하여 에너지 이동시켜 인광 발광시킬 수 있다.

[0272] 또한, 형광 호스트로서 잘 알려진 안트라센 유도체에서는 적색 발광의 인광 도펀트에도 호스트로서 부적당하지만, 본 발명의 호스트에서는 3중항 에너지 갭이 크기 때문에 유효하게 녹색 발광을 나타내는 인광 도펀트를 발광시킬 수 있다.

[0273] 단, 종래 잘 알려진 인광 호스트인 CBP에서는 녹색보다도 더 단파장인 인광 도펀트에 대해서도 호스트로서 기능하지만, 본 발명의 호스트 재료에서는 녹색 발광을 나타내는 인광 도펀트까지밖에 발광시킬 수 없다.

[0274] 또한, 본 발명에서는, 호스트 재료의 골격을, 질소 원자를 포함하지 않는 다환식 축합환을 부분 구조로 가짐으로써, 분자의 안정성을 높게 하여 소자 수명을 길게 할 수 있다.

[0275] 이 때, 골격부의 핵 원자수가 지나치게 적으면 분자의 안정성이 충분히 높아지지 않는다. 한편, 호스트 재료를 구성하는 다환식 축합환의 축합하는 환수가 지나치게 많아지면 HOMO-LUMO 갭이 좁아져 3중항 에너지 갭이 유용한 발광 파장에 못미치게 된다. 이러한 점에서, 본 발명의 유기 전기발광 소자용 재료로 이루어지는 호스트 재료는 적절한 핵 원자수를 갖기 때문에 유용한 발광 파장을 나타내고 안정성도 높은 인광 발광층의 인광 호스트로서 적합하게 이용할 수 있다.

[0276] 종래에는, 녹색부터 적색까지의 폭넓은 파장 영역에서 인광 도펀트에 널리 적용할 수 있는 인광 도펀트에 대응하는 호스트 재료를 선정하고 있었기 때문에, 3중항 에너지 갭이 넓은 CBP 등을 호스트 재료로 하고 있었다.

[0277] 그러나, CBP에서는 확실히 3중항 에너지 갭  $E_g(T)$ 는 넓지만 수명이 짧다는 문제가 있었다.

[0278] 이러한 점에서, 본 발명에서는, 청색만큼 넓은 갭인 인광 도펀트의 호스트에는 적용할 수 없지만, 적색 또는 녹색의 인광 도펀트에 대해서는 호스트로서 기능한다. 나아가서는, CBP와 같이 3중항 에너지 갭이 지나치게 넓으면, 녹색 인광 도펀트에 대해서는 에너지 갭 차이가 지나치게 커서 분자간 에너지 이동이 효율적으로 행해지지 않는다는 문제가 있지만, 본 발명의 호스트 재료에 의하면, 녹색 인광 도펀트에 대해서는 에너지 갭이 적합화되어 있기 때문에 효율적으로 호스트의 여기자로부터 인광 도펀트로 에너지 이동시킬 수 있어, 매우 고효율의 인광 발광층을 구성할 수 있다.

[0279] 이와 같이, 본 발명에 의하면, 고효율이고 또한 장수명인 인광 발광층을 구성할 수 있다.

[0280] 여기서, 유기 EL 소자를 구성하는 재료의 3중항 에너지 갭  $E_g(T)$ 은, 인광 발광 스펙트럼에 근거하여 규정하는 것을 예로서 들 수 있고, 예컨대 본 발명에 있어서는 이하와 같이 규정하는 것을 예로서 들 수 있다.



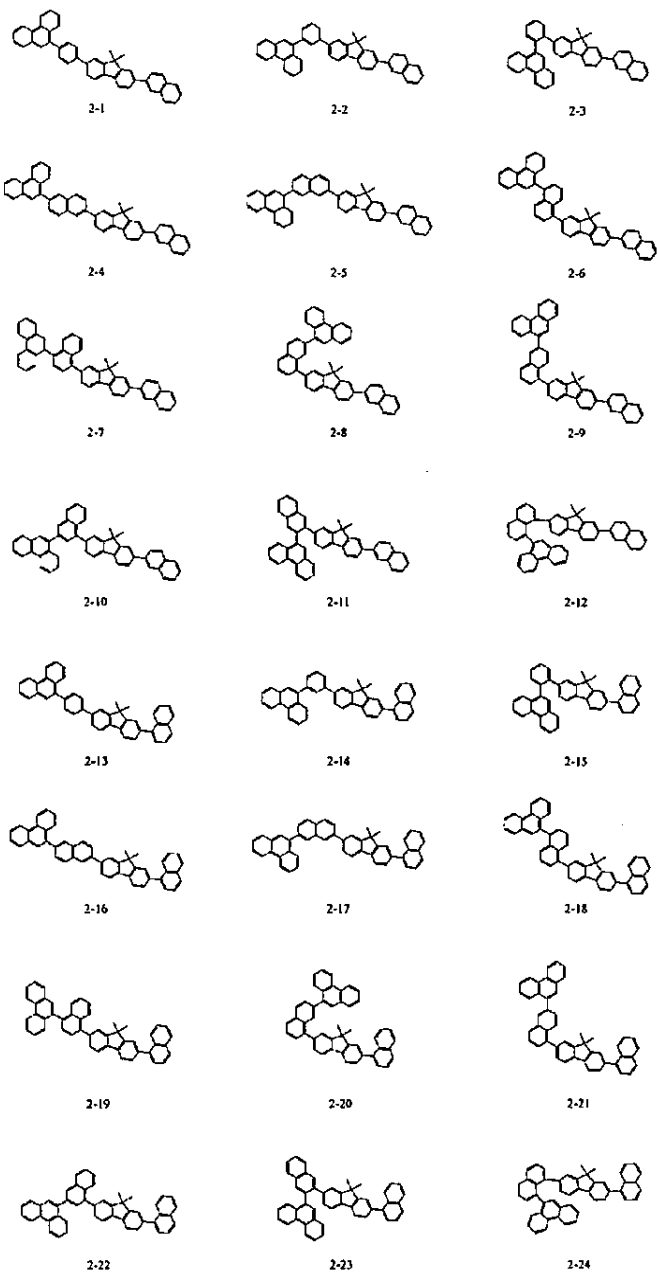
- [0281] 즉, 각 재료를 EPA 용매(용적비로 디에틸 에터:아이소펜테인:에탄올=5:5:2)에 10 $\mu$ mol/L로 용해시켜 인광 측정용 시료로 한다.
- [0282] 그리고, 인광 측정용 시료를 석영 셀에 넣고, 77K로 냉각하고, 여기광을 조사하여, 방사되는 인광의 파장을 측정한다.
- [0283] 얻어진 인광 스펙트럼의 단파장측의 상승점에 대하여 접선을 긋고, 이 접선과 기준선(baseline)의 교점의 파장값을 에너지로 환산한 값을 3중항 에너지 갭 Eg(T)로 한다.
- [0284] 한편, 측정에는, 예컨대 시판되는 측정 장치 F-4500(히타치제작소제)을 이용할 수 있다.
- [0285] 단, 이러한 규정에 의하지 않고, 본 발명의 취지를 일탈하지 않는 범위에서 3중항 에너지 갭으로서 정의할 수 있는 값이면 좋다.
- [0286] 상기 화학식 (A-1)~(A-5), (B-1)~(B-4) 및 (C-1)~(C-6)에서의 Ar<sup>1</sup>~Ar<sup>9</sup> 및/또는 R<sup>1</sup>~R<sup>6</sup>이 1개 또는 복수의 치환기를 갖는 경우, 상기 치환기는 탄소수 1~20의 알킬기, 탄소수 1~20의 할로알킬기, 환 형성 탄소수 5~18의 사이클로알킬기, 탄소수 3~20의 실릴기, 사이아노기, 할로젠 원자 또는 환 형성 탄소수 6~22의 아릴기인 것이 바람직하다. 또한, 상기 화학식 (A-1)~(A-5), (B-1)~(B-4) 및 (C-1)~(C-6)에서의 플루오렌환은 탄소수 1~20의 알킬기, 탄소수 1~20의 할로알킬기, 환 형성 탄소수 5~18의 사이클로알킬기, 탄소수 3~20의 실릴기, 사이아노기, 할로젠 원자 또는 환 형성 탄소수 6~22의 아릴기를 치환기로서 갖고 있어도 좋다.
- [0287] 치환기가 질소 원자를 갖지 않기 때문에, 더 한층 호스트 재료의 안정성을 높게 하여 소자 수명을 길게 할 수 있다.
- [0288] 한편, Ar<sup>1</sup>~Ar<sup>9</sup> 및/또는 R<sup>1</sup>~R<sup>6</sup>이 치환기로서 갖는 아릴기의 수는, Ar<sup>1</sup>~Ar<sup>9</sup> 및/또는 R<sup>1</sup>~R<sup>6</sup> 각각에 대하여, 바람직하게는 2개 이하이고, 1개 이하가 보다 바람직하다.
- [0289] 상기 탄소수 1~20의 알킬기로서는, 예컨대 메틸기, 에틸기, 프로필기, 아이소프로필기, n-뷰틸기, s-뷰틸기, 아이소뷰틸기, t-뷰틸기, n-펜틸기, n-헥실기, n-헵틸기, n-옥틸기, n-노닐기, n-데실기, n-운데실기, n-도데실기, n-트라이데실기, n-테트라데실기, n-펜타데실기, n-헥사데실기, n-헵타데실기, n-옥타데실기, 네오펜틸기, 1-메틸펜틸기, 2-메틸펜틸기, 1-펜틸헥실기, 1-뷰틸펜틸기, 1-헵틸옥틸기, 3-메틸펜틸기 등을 들 수 있다.
- [0290] 상기 탄소수 1~20의 할로알킬기로서는, 예컨대 클로로메틸기, 1-클로로에틸기, 2-클로로에틸기, 2-클로로아이소뷰틸기, 1,2-다이클로로에틸기, 1,3-다이클로로아이소프로필기, 2,3-다이클로로-t-뷰틸기, 1,2,3-트라이클로로프로필기, 브로모메틸기, 1-브로모에틸기, 2-브로모에틸기, 2-브로모아이소뷰틸기, 1,2-다이브로모에틸기, 1,3-다이브로모아이소프로필기, 2,3-다이브로모-t-뷰틸기, 1,2,3-트라이브로모프로필기, 요오도메틸기, 1-요오도에틸기, 2-요오도에틸기, 2-요오도아이소뷰틸기, 1,2-다ियो오도에틸기, 1,3-다ियो오도아이소프로필기, 2,3-다ियो오도-t-뷰틸기, 1,2,3-트라이요오도프로필기 등을 들 수 있다.
- [0291] 상기 환 형성 탄소수 5~18의 사이클로알킬기로서는, 예컨대 사이클로펜틸기, 사이클로헥실기, 사이클로옥틸기, 3,5-테트라메틸사이클로헥실기 등을 들 수 있고, 사이클로헥실기, 사이클로옥틸기, 3,5-테트라메틸사이클로헥실기 등을 들 수 있다.
- [0292] 상기 탄소수 3~20의 실릴기로서는, 예컨대 알킬실릴기, 아릴실릴기 또는 아르알킬실릴기가 바람직하고, 예로서는 트라이메틸실릴기, 트라이에틸실릴기, 트라이뷰틸실릴기, 트라이옥틸실릴기, 트라이아이소뷰틸실릴기, 다이메틸에틸실릴기, 다이메틸아이프로필실릴기, 다이메틸프로필실릴기, 다이메틸뷰틸실릴기, 다이메틸터셔리뷰틸실릴기, 다이에틸아이소프로필실릴기, 페닐다이메틸실릴기, 다이페닐메틸실릴기, 다이페닐터셔리뷰틸실릴기, 트라이페닐실릴기 등을 들 수 있다.
- [0293] 할로젠 원자로서는, 불소 원자, 염소 원자, 브롬 원자, 요오드 원자를 들 수 있다.
- [0294] 상기 환 형성 탄소수 6~22의 아릴기로서는, 예컨대 페닐기, 바이페닐기, 터페닐기, 나프틸기, 플루오란텐일기, 9,10-다이알킬플루오렌일기, 9,10-다이아릴플루오렌일기, 트라이페닐렌일기, 페난트렌일기, 다이벤조퓨란일기가 바람직하고, 보다 바람직하게는 환 형성 탄소수 6~18의 페닐기, 바이페닐기, 터페닐기, 나프틸기, 9,10-다이메틸플루오렌일기, 트라이페닐렌일기, 페난트렌일기, 다이벤조퓨란일기이며, 보다 더 바람직하게는 환 형성 탄소수 6~14의 페닐기, 바이페닐기, 나프틸기, 페난트렌일기, 다이벤조퓨란일기이다.
- [0295] 본 발명에 있어서, 상기 유기 전기발광 소자용 재료의 여기 3중항 에너지는 2.0eV 이상 2.8eV 이하인 것이 바람

직하다.

[0296] 여기 3중항 에너지가 2.0eV 이상이면, 500nm 이상 720nm 이하에서 발광하는 인광 발광 재료로의 에너지 이동이 가능하다. 2.8eV 이하이면, 적색 인광 도펀트에 대하여 에너지 갭 차이가 지나치게 커서 발광이 효율적으로 행해지지 않는다는 문제를 회피할 수 있다.

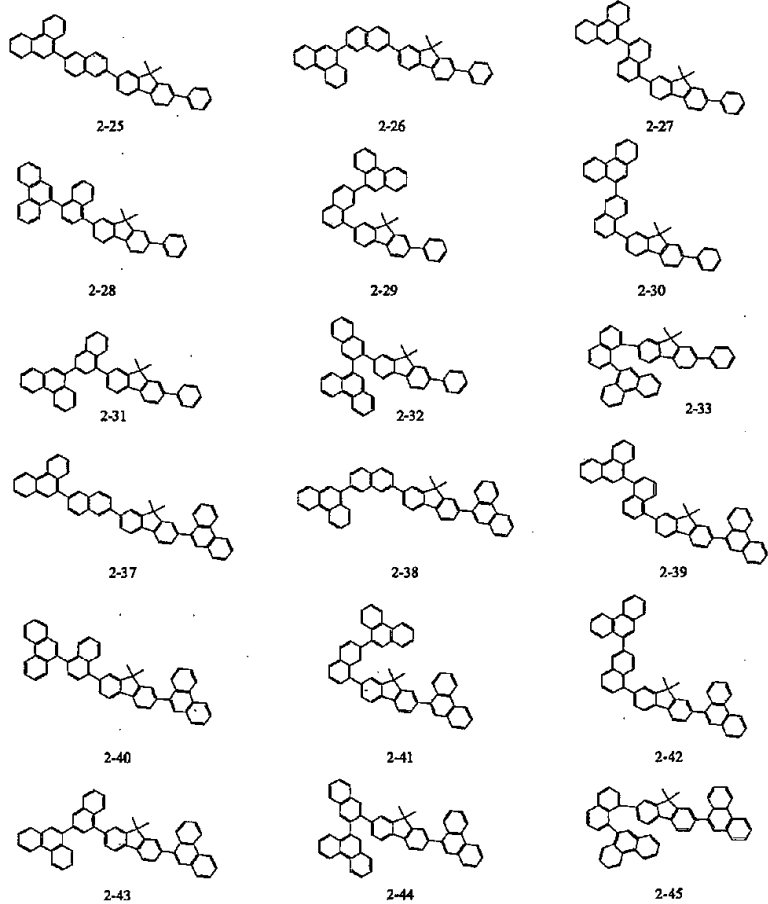
[0297] 한편, 유기 전기발광 소자용 재료의 여기 3중항 에너지는 2.1eV 이상 2.7eV 이하인 것이 보다 바람직하다.

[0298] 상기 화학식 (A-1)~(A-5)로 표시되는 본 발명의 유기 전기발광 소자용 재료로서는, 예컨대 다음 화합물을 구체예로서 들 수 있다.

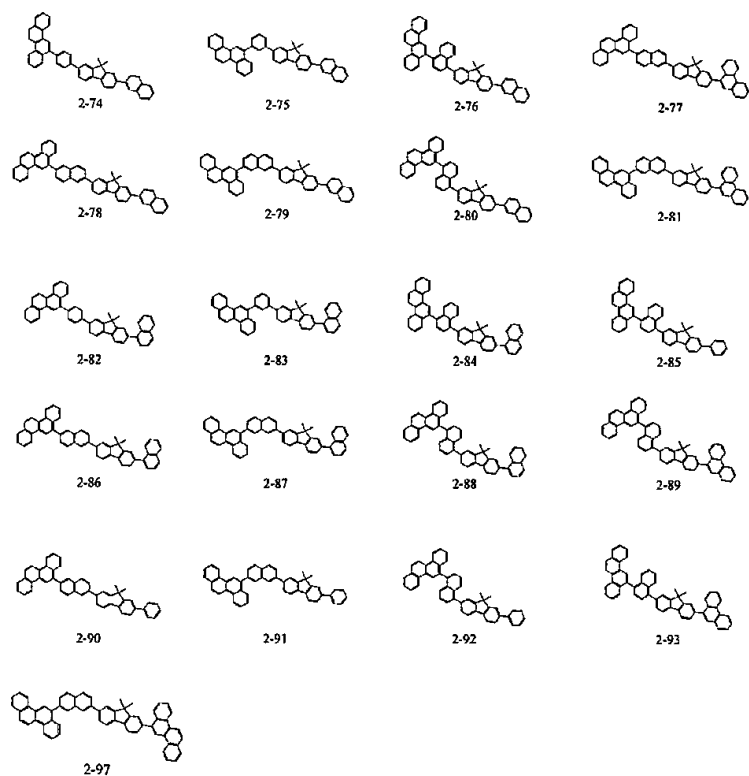


[0299]

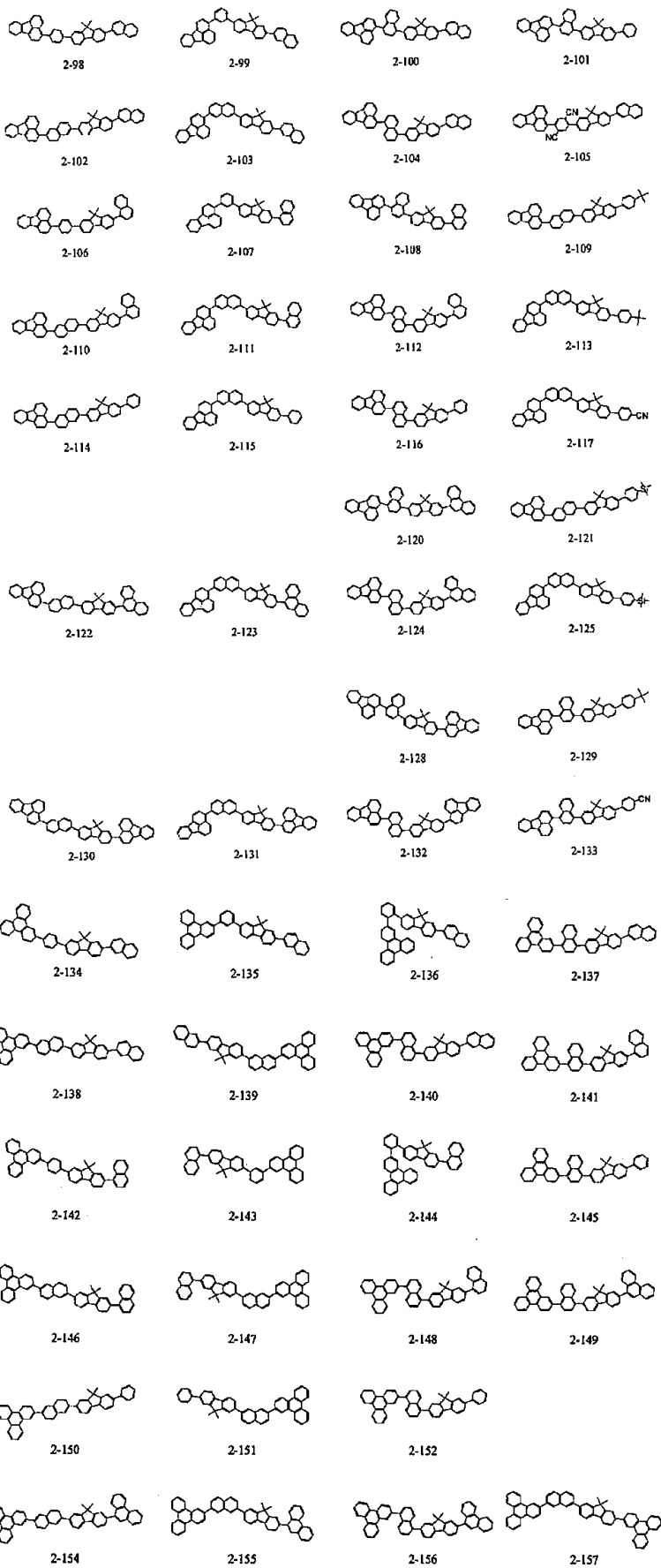




[0300]

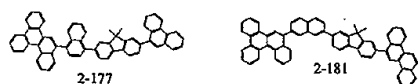
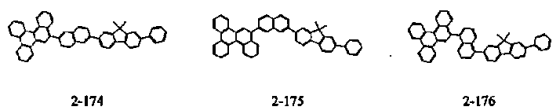
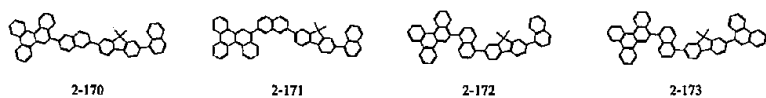
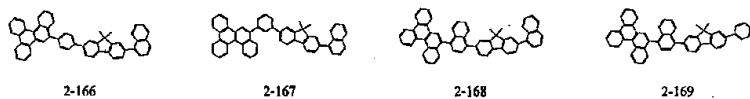
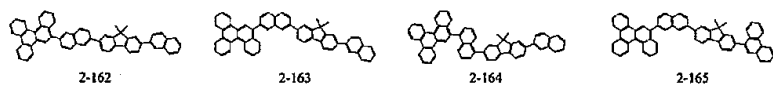
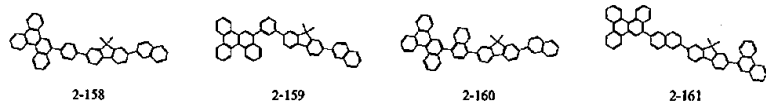


[0301]

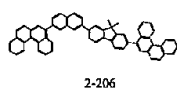
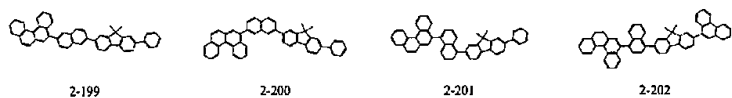
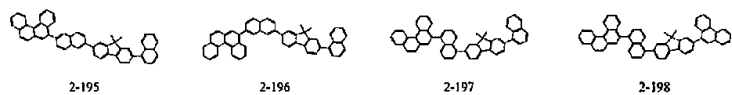
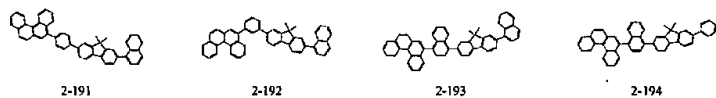
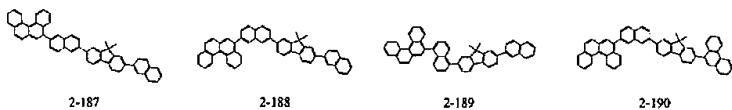
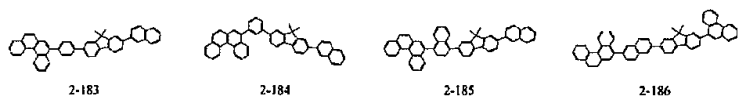


[0302]

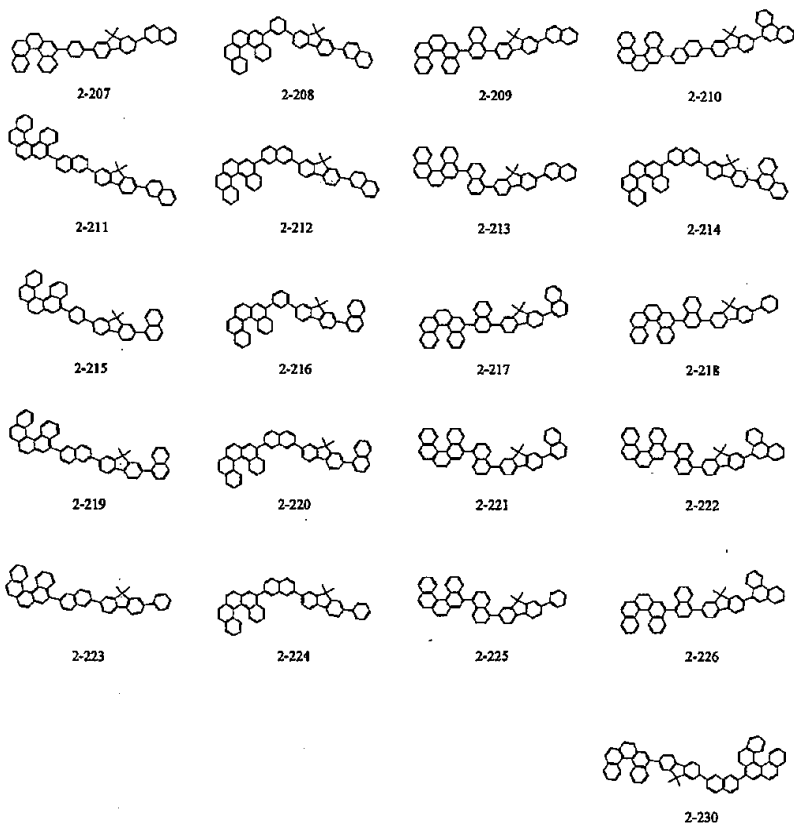
[0303]



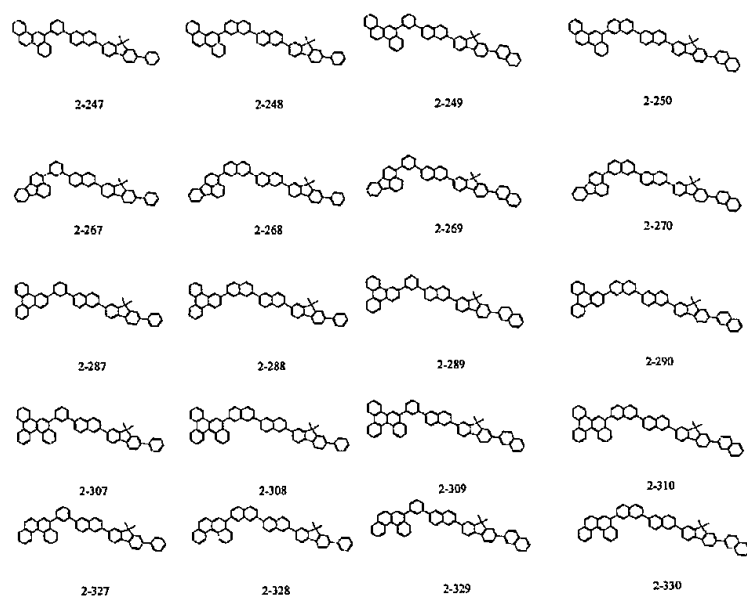
[0304]



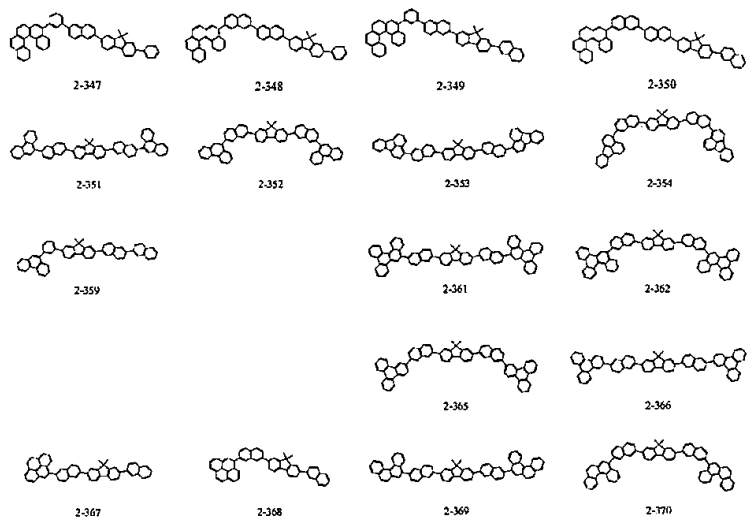
[0305]



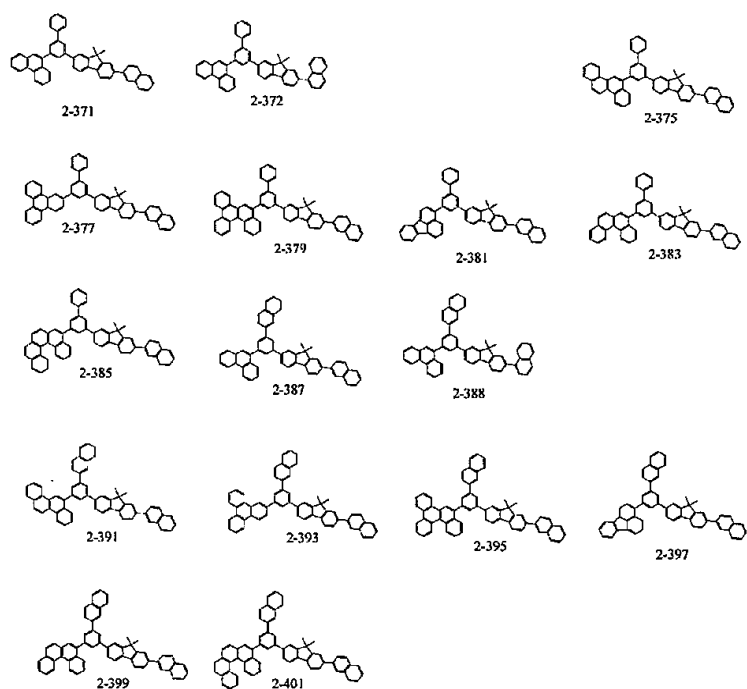
[0306]



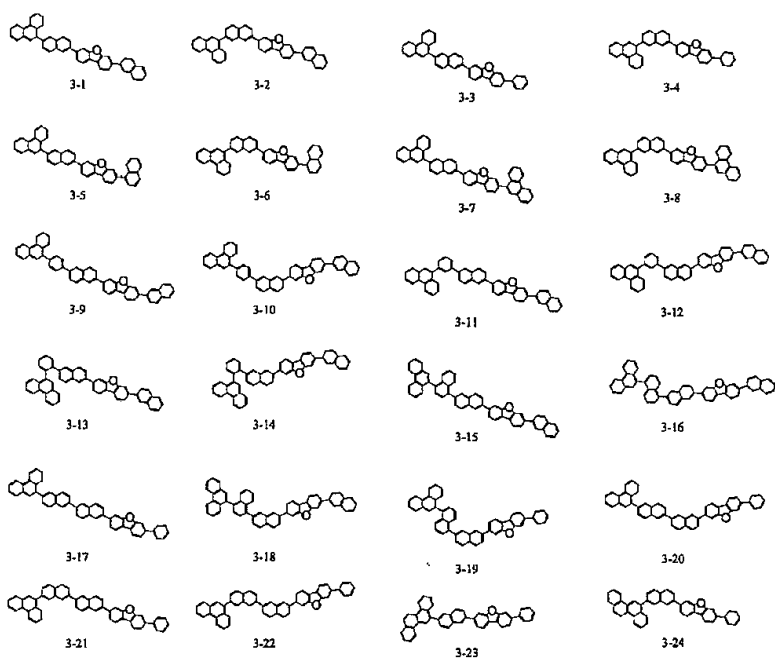
[0307]



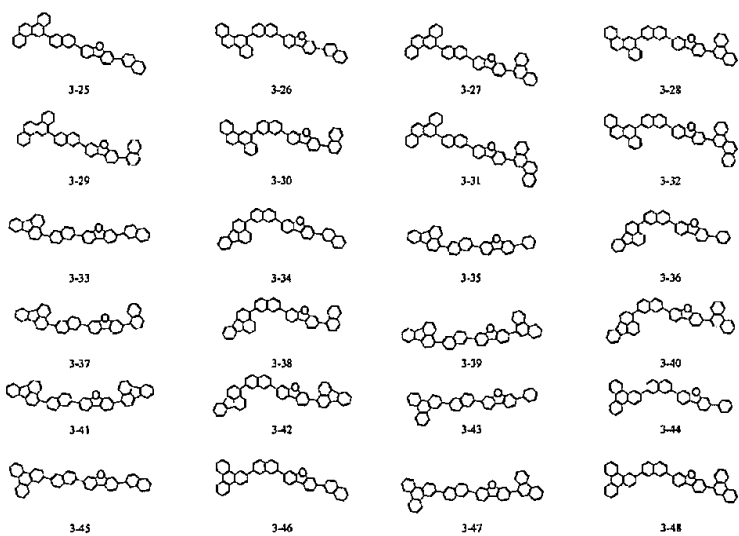
[0308]



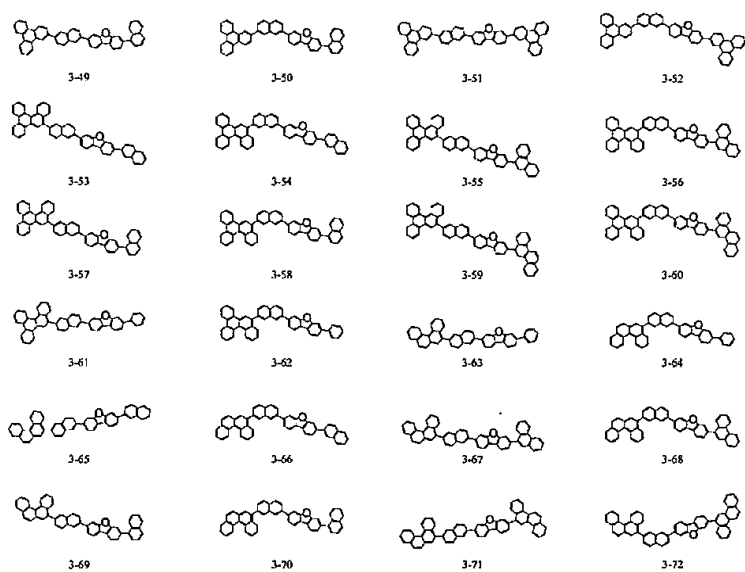
[0309]



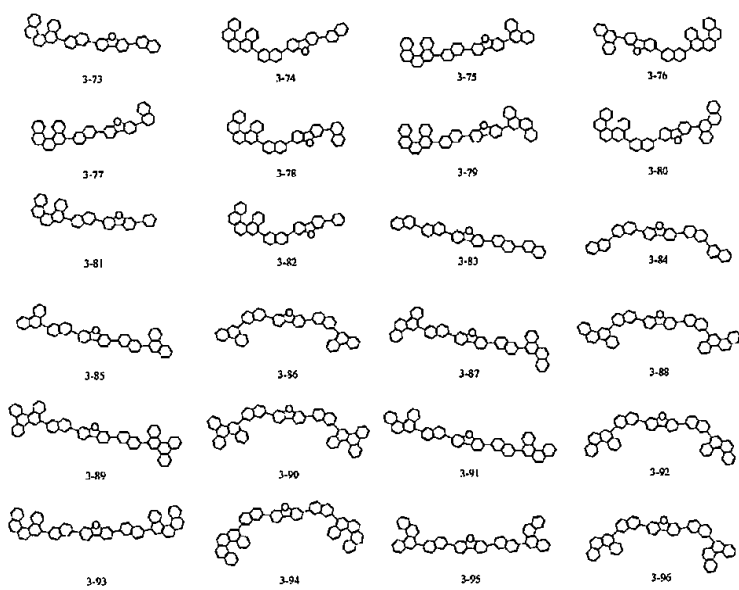
[0310]



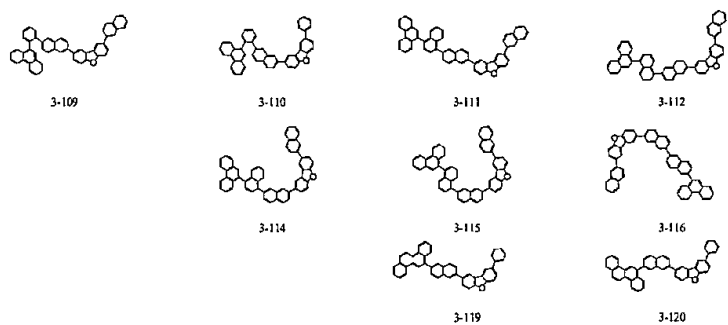
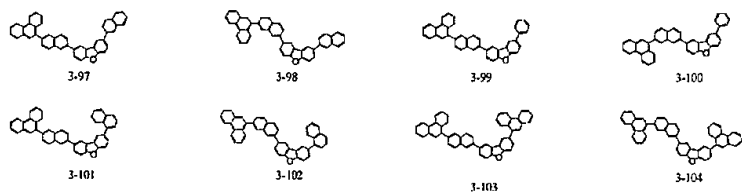
[0311]



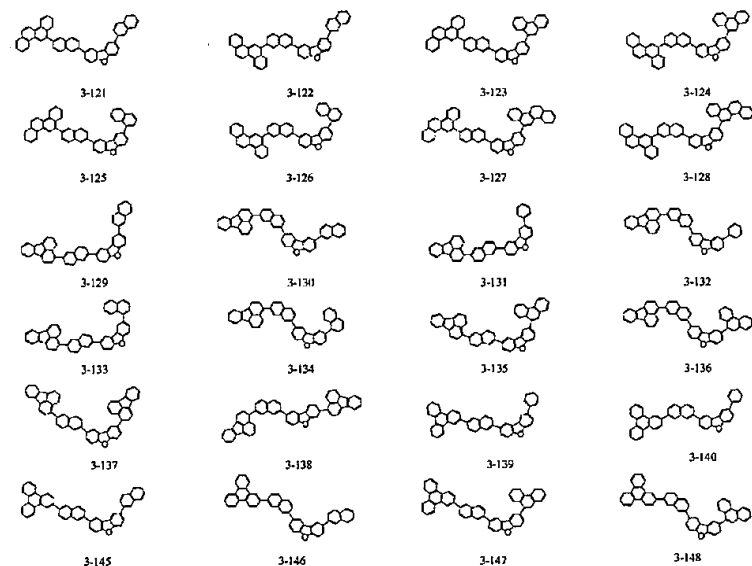
[0312]



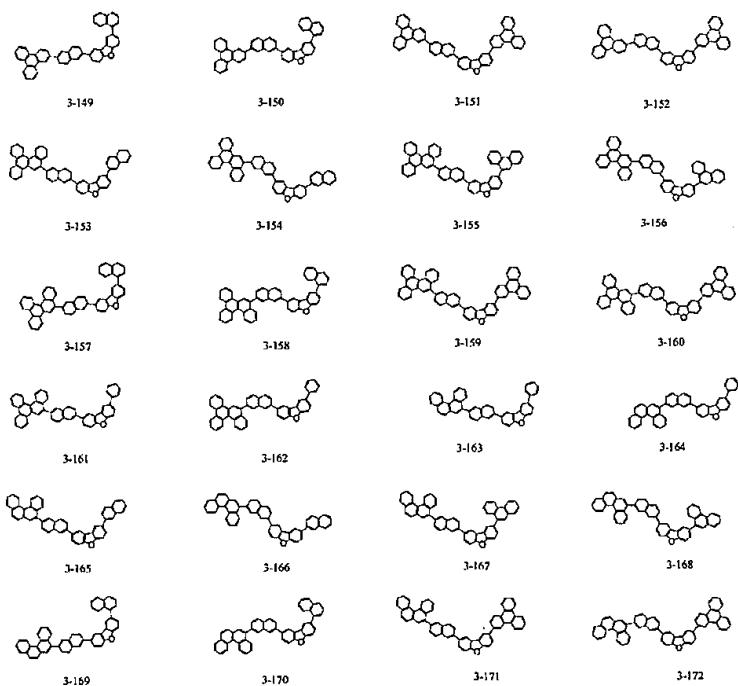
[0313]



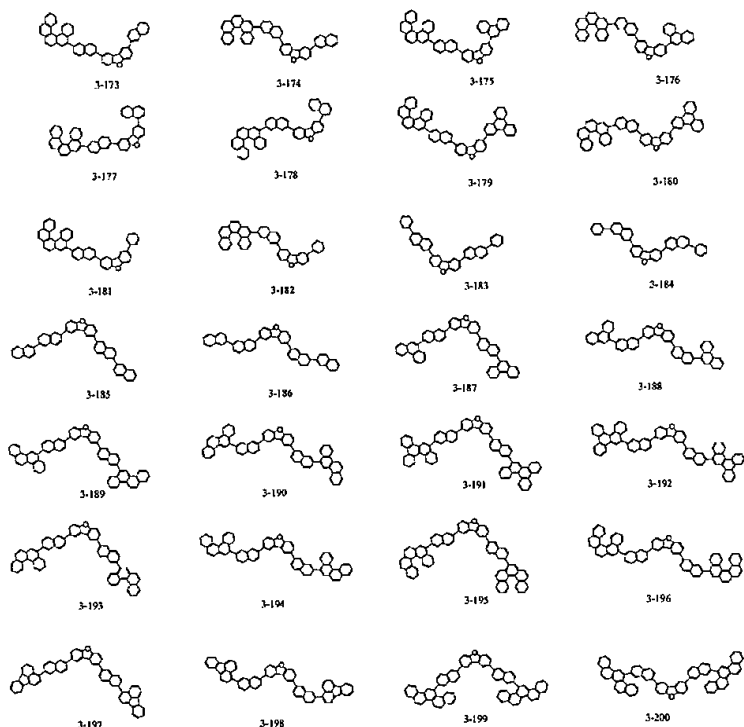
[0314]



[0315]



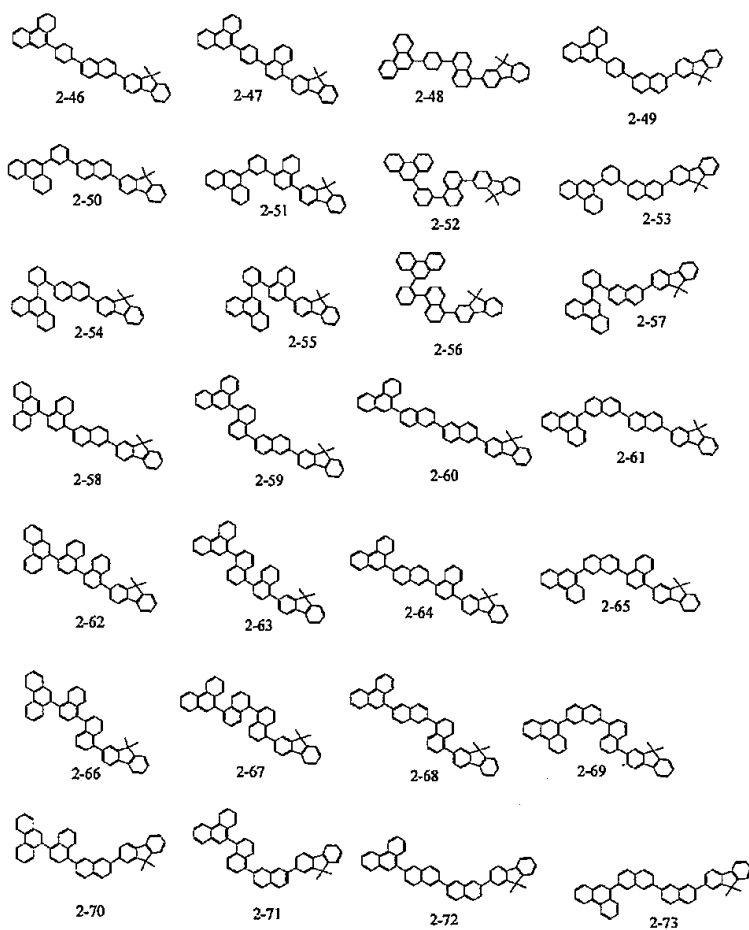
[0316]



[0317]

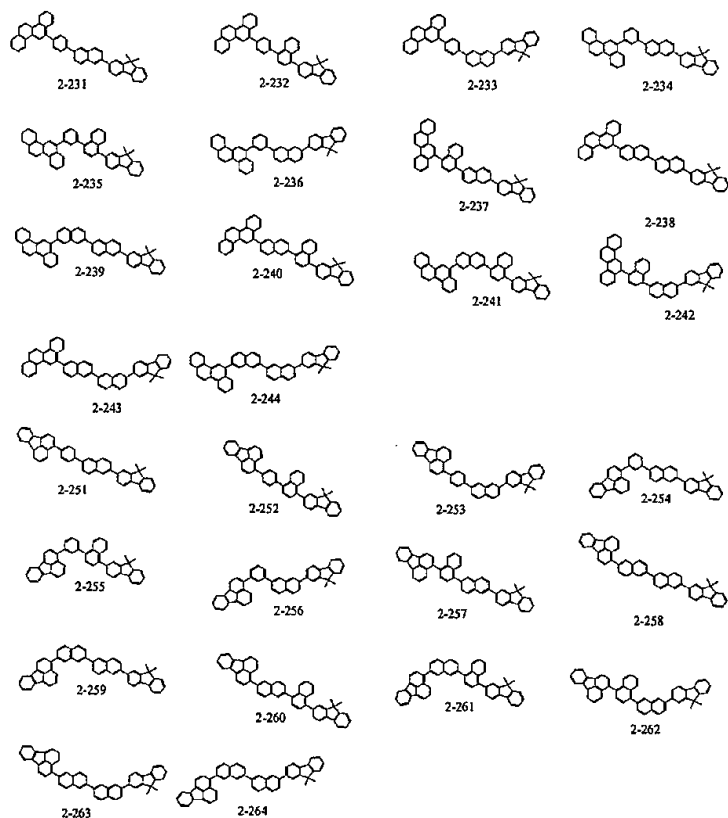
[0318]

상기 화학식 (B-1)~(B-4)로 표시되는 본 발명의 유기 전기발광 소자용 재료로서는, 예컨대 다음 화합물을 구체 예로서 들 수 있다.

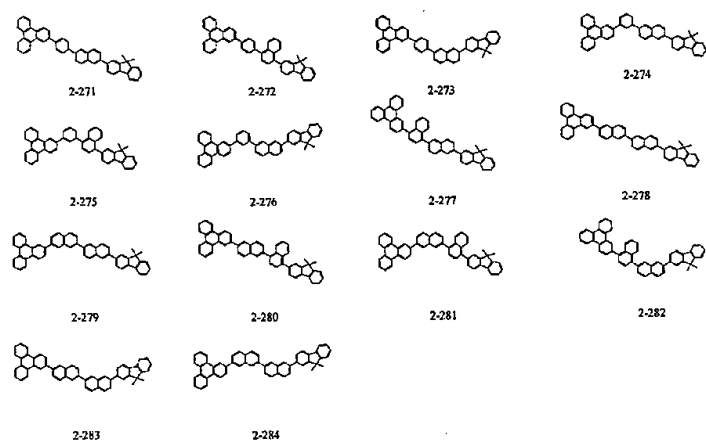


[0319]

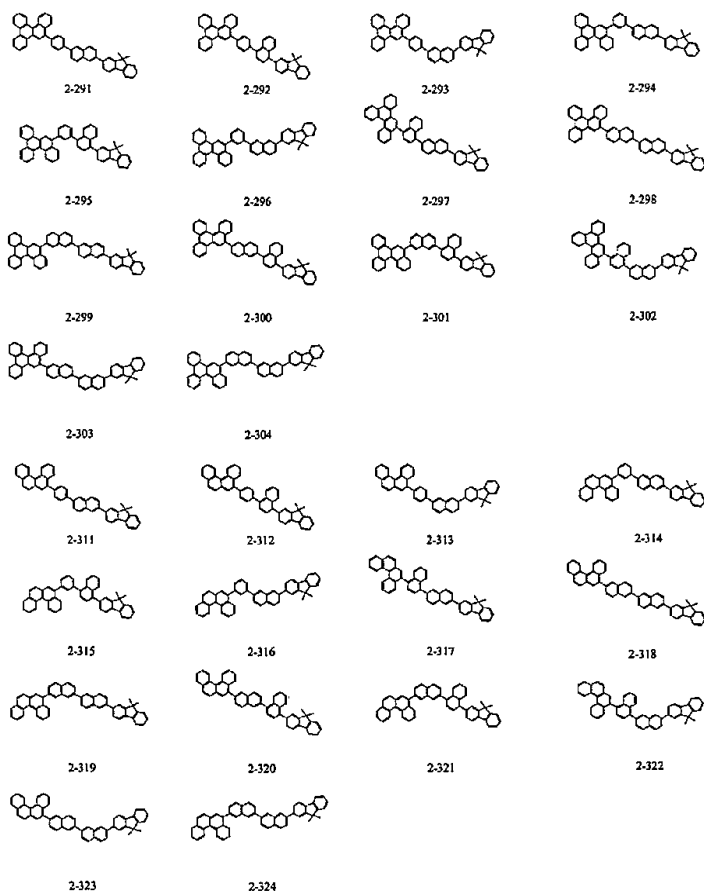




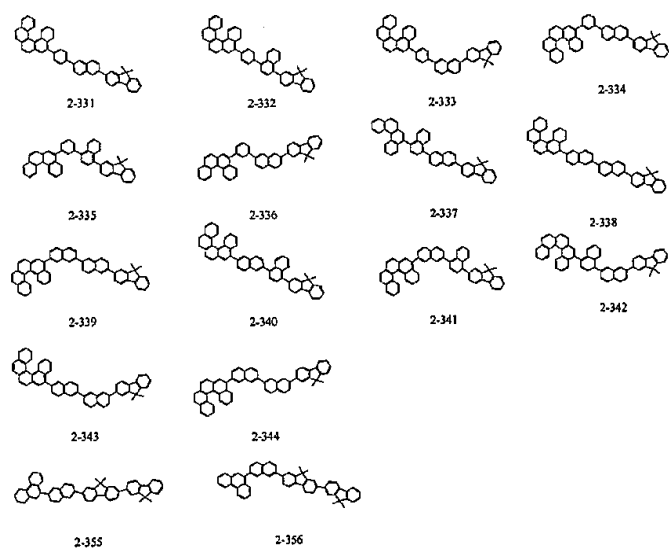
[0320]



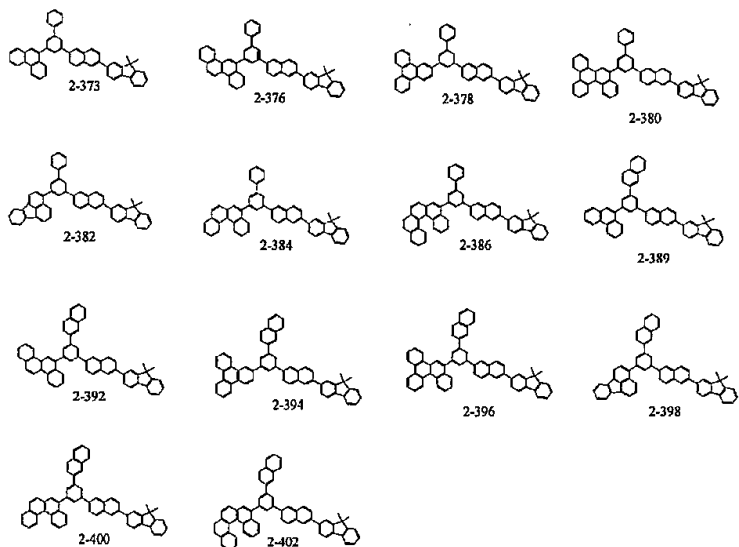
[0321]



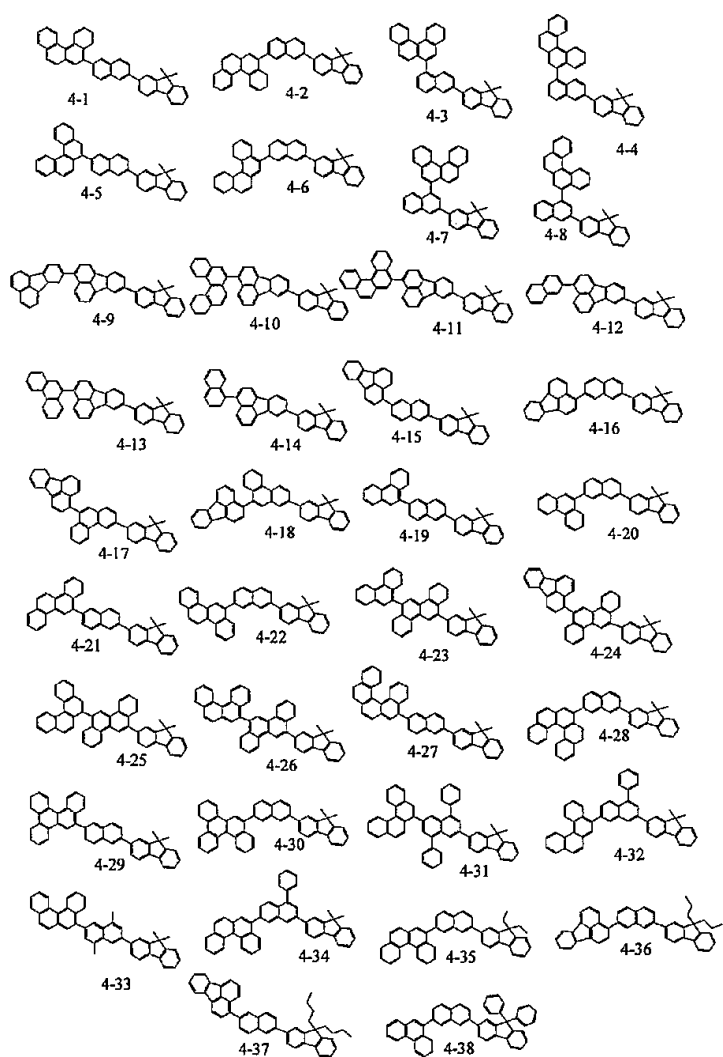
[0322]



[0323]



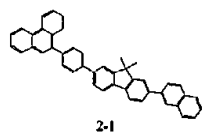
[0324]



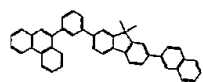
[0325]

[0326]

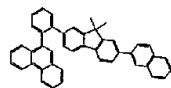
상기 화학식 (C-1)~(C-6)으로 표시되는 본 발명의 유기 전기발광 소자용 재료로서는, 예컨대 다음 화합물을 구체예로서 들 수 있다.



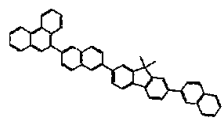
2-1



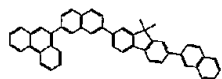
2-2



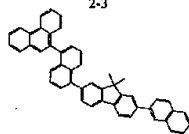
2-3



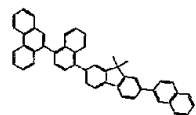
2-4



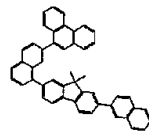
2-5



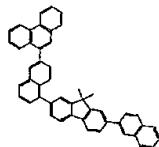
2-6



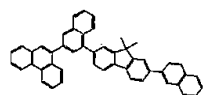
2-7



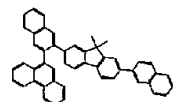
2-8



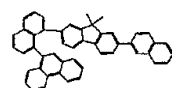
2-9



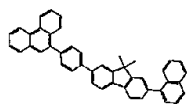
2-10



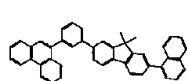
2-11



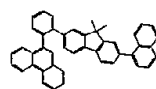
2-12



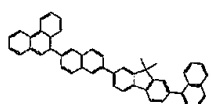
2-13



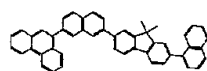
2-14



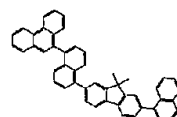
2-15



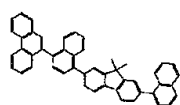
2-16



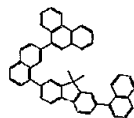
2-17



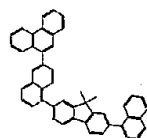
2-18



2-19

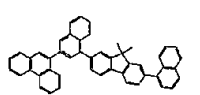


2-20

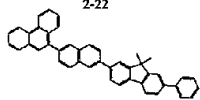


2-21

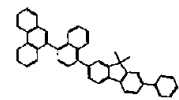
[0327]



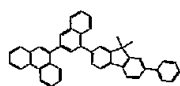
2-22



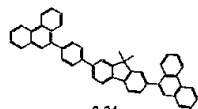
2-25



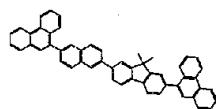
2-28



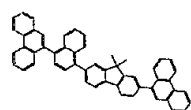
2-31



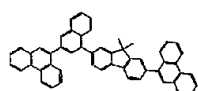
2-34



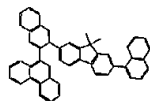
2-37



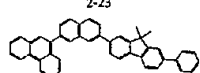
2-40



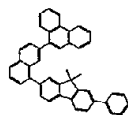
2-43



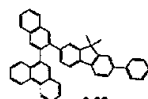
2-23



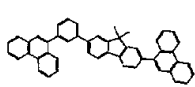
2-26



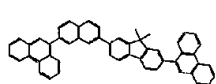
2-29



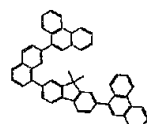
2-32



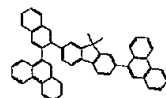
2-35



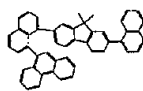
2-38



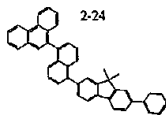
2-41



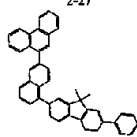
2-44



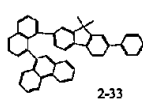
2-24



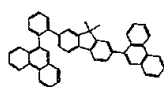
2-27



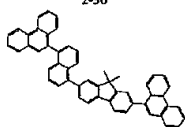
2-30



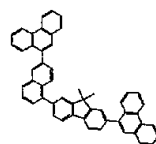
2-33



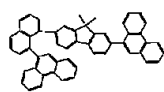
2-36



2-39

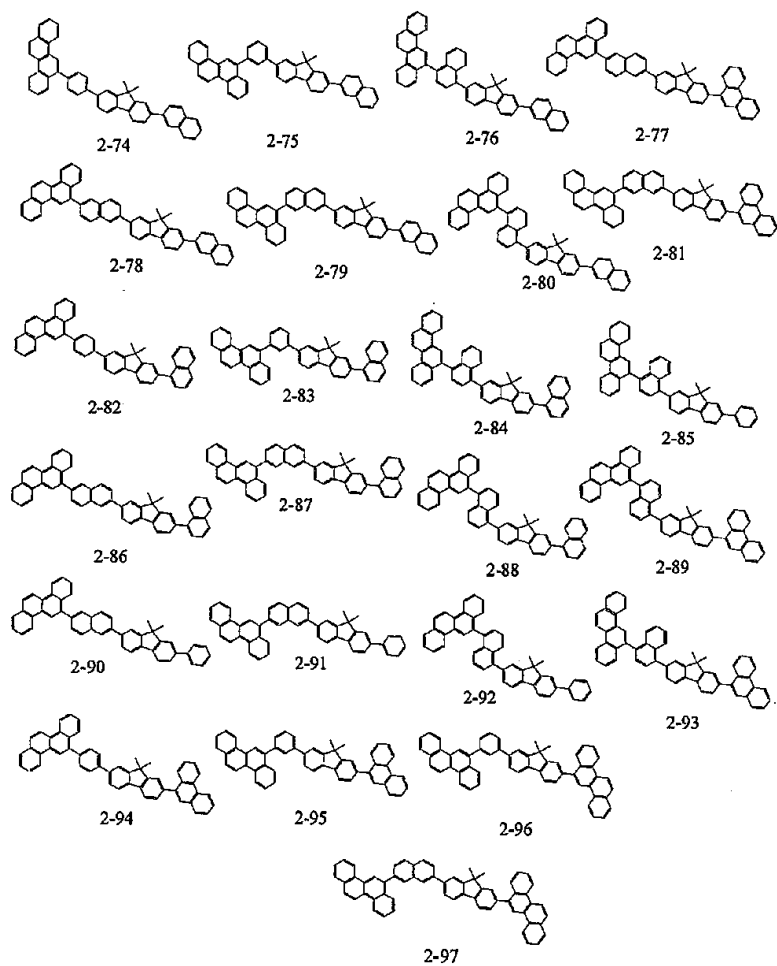


2-42

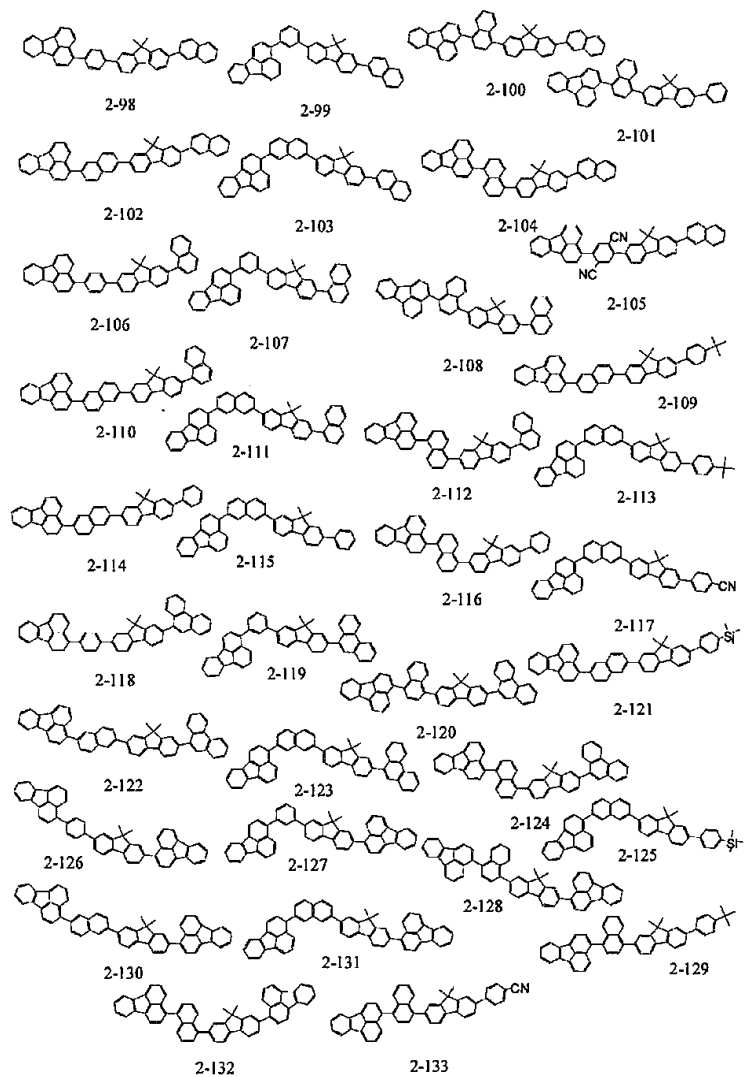


2-45

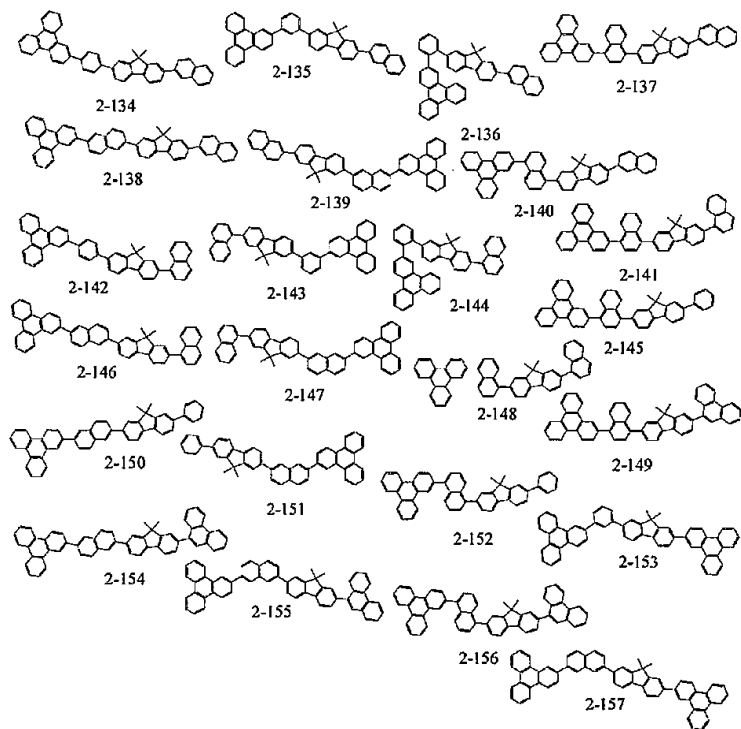
[0328]



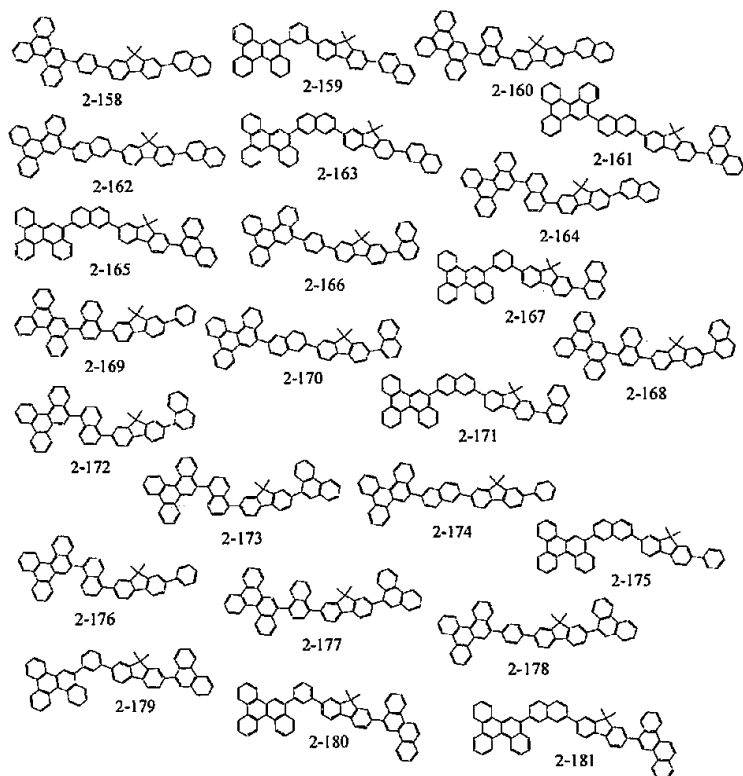
[0329]



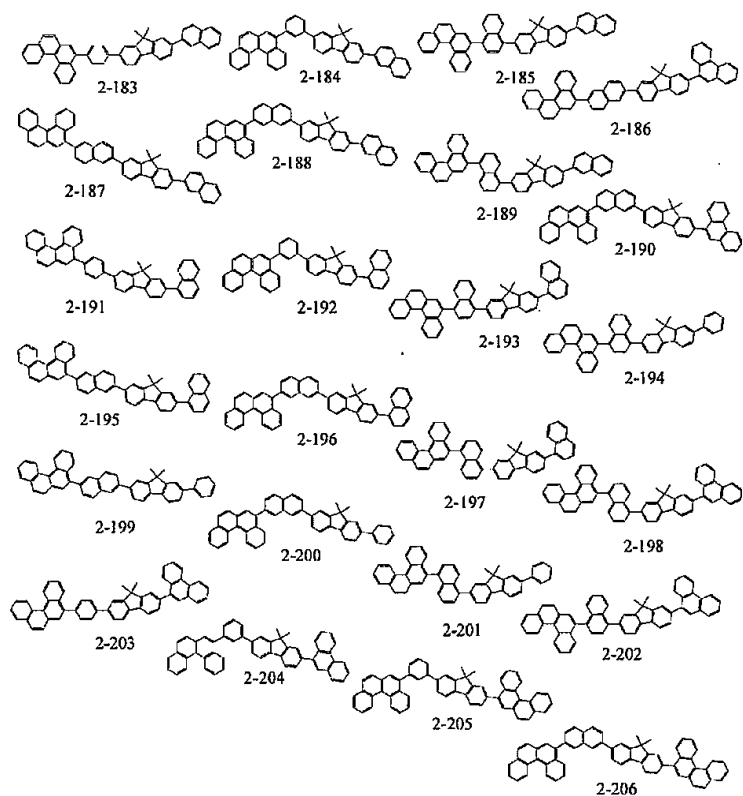
[0330]



[0331]

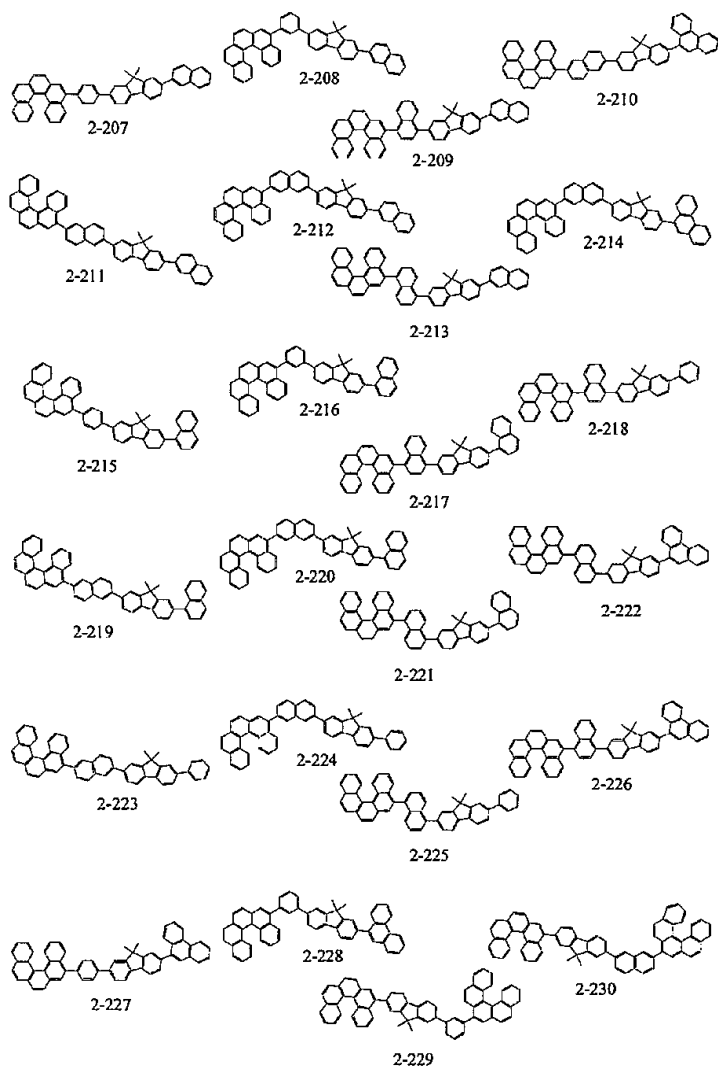


[0332]

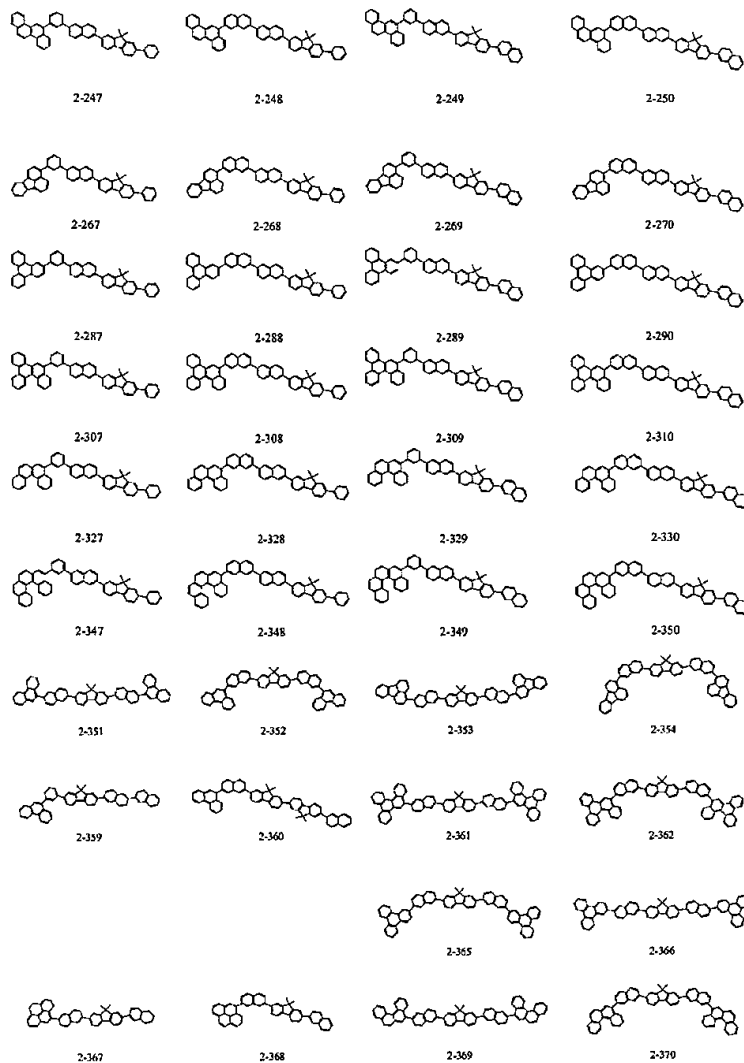


[0333]

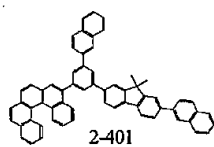
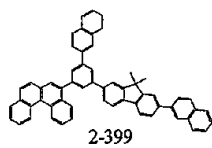
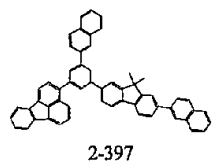
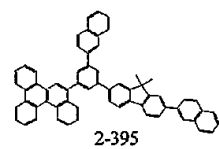
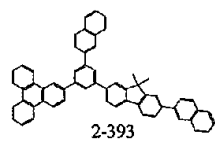
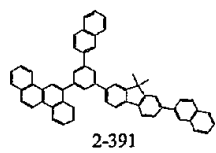
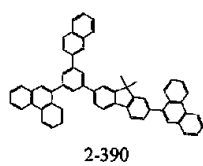
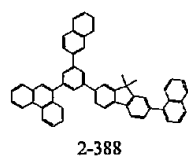
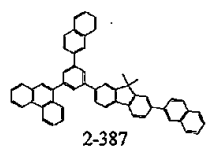
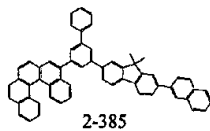
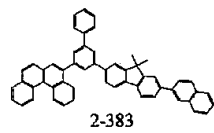
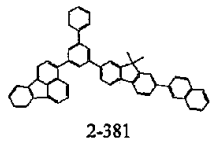
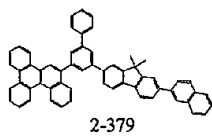
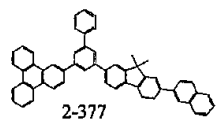
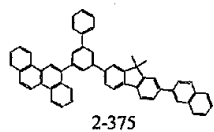
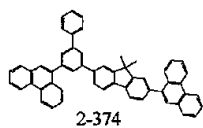
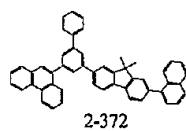
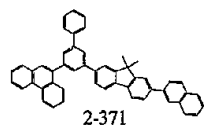




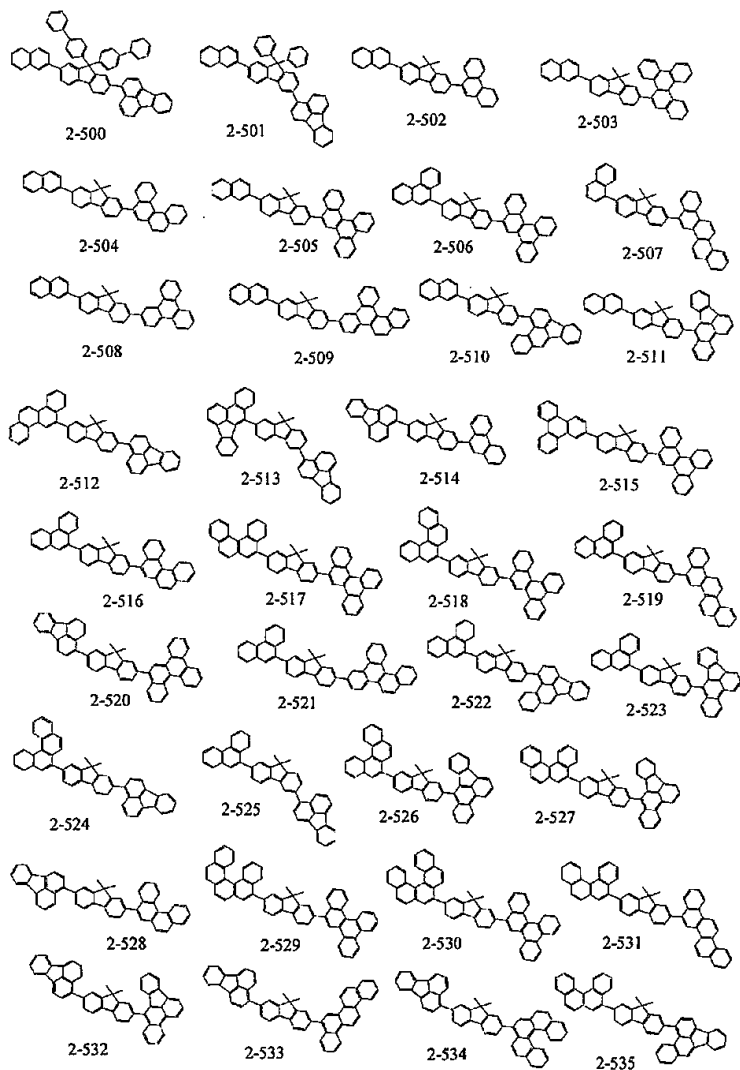
[0334]



[0335]



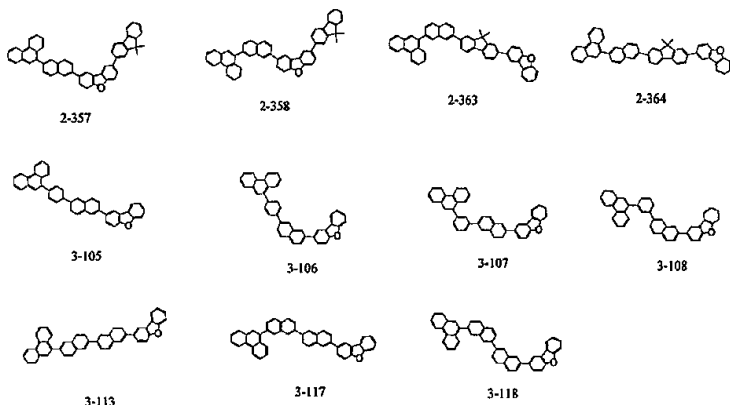
[0336]



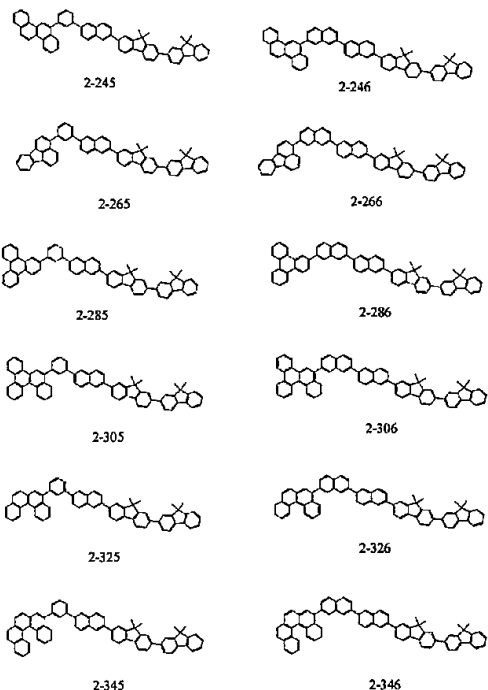
[0337]

[0338]

상기 화학식 (A-1)~(A-5), (B-1)~(B-4) 및 (C-1)~(C-6)으로 표시되는 것 이외에, 하기 화학식으로 표시되는 화합물도 또한 유기 전기발광 소자용 재료로서 이용할 수 있다.



[0339]

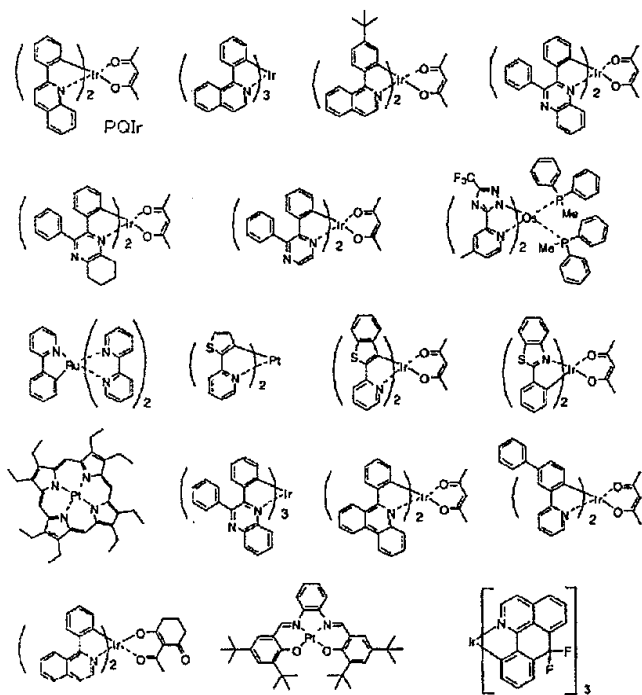


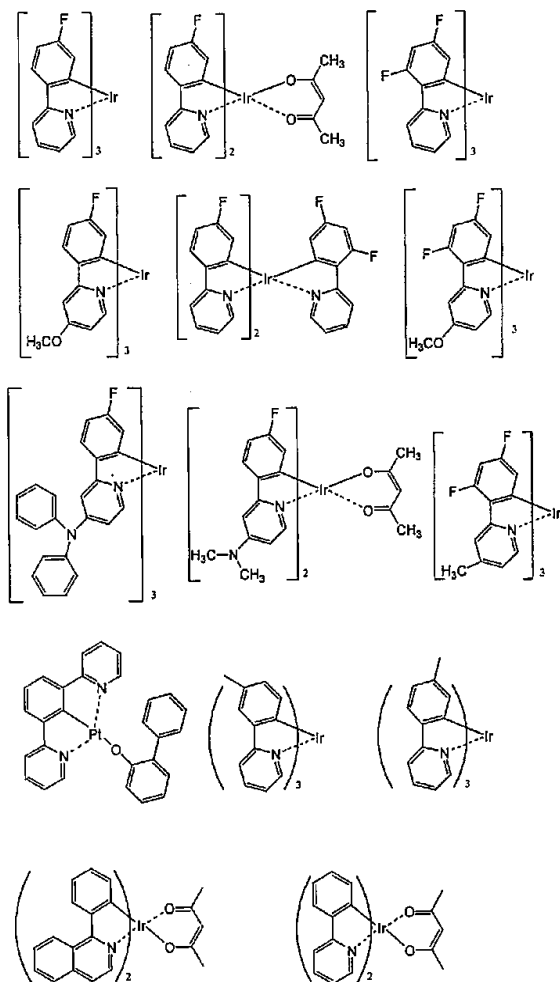
[0340]

[0341] 본 발명에 있어서, 상기 인광 발광 재료는 금속 착체를 함유하고, 상기 금속 착체는 Ir, Pt, Os, Au, Cu, Re 및 Ru로부터 선택되는 금속 원자와 배위자를 갖는 것이 바람직하다. 특히, 상기 배위자는 오쏘 메탈 결합을 갖는 것이 바람직하다.

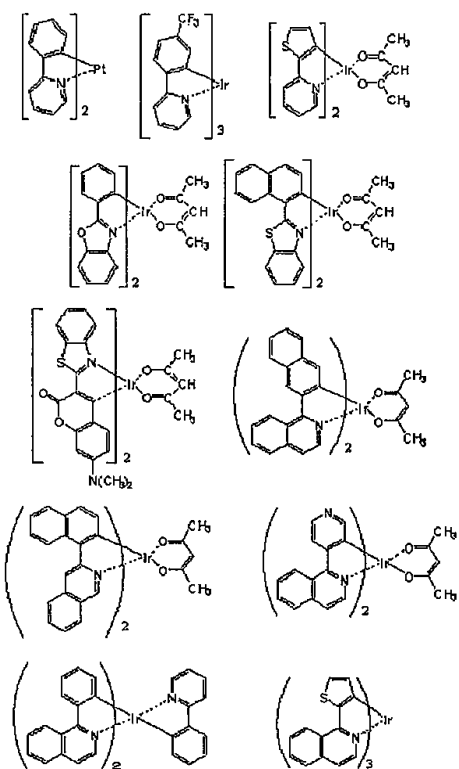
[0342] 인광 양자 수율이 높고 발광 소자의 외부 양자 효율을 보다 향상시킬 수 있다는 점에서, 이리듐(Ir), 오스뮴(Os) 및 백금(Pt)으로부터 선택되는 금속을 함유하는 화합물이면 바람직하고, 이리듐 착체, 오스뮴 착체, 백금 착체 등의 금속 착체이면 더 바람직하며, 그 중에서도 이리듐 착체 및 백금 착체가 보다 바람직하고, 오쏘 메탈 화 이리듐 착체가 가장 바람직하다.

[0343] 바람직한 금속 착체의 구체예를 이하에 나타낸다.

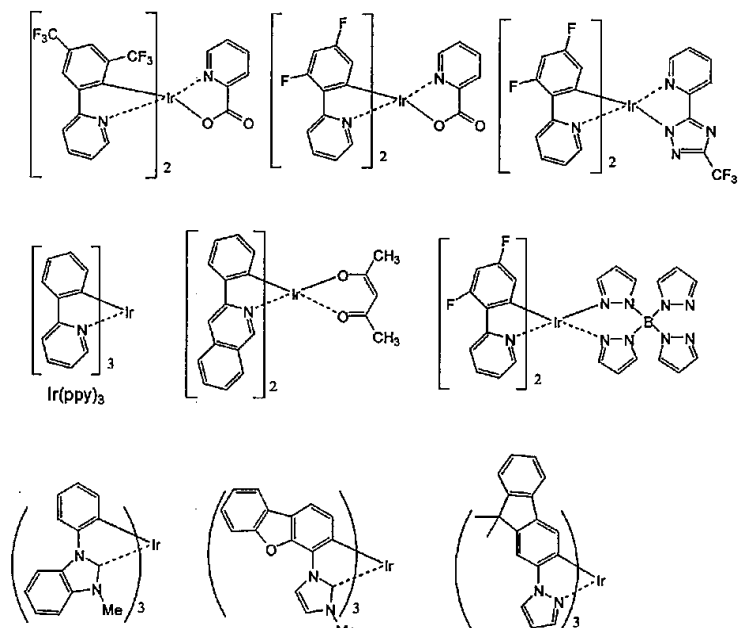




[0345]



[0346]



[0347]

[0348]

본 발명에서는, 상기 발광층에 포함되는 상기 인광 발광 재료의 적어도 1종은 발광 파장 극대치가 500nm 이상 720nm 이하인 것이 바람직하다.

[0349]

이러한 발광 파장의 인광 발광 재료(인광 도펀트)를, 본 발명에서 이용하는 특정 호스트 재료에 도핑하여 발광층을 구성함으로써, 고효율인 유기 EL 소자로 할 수 있다.

[0350]

본 발명의 유기 EL 소자는 정공 수송층(정공 주입층)을 갖고, 상기 정공 수송층(정공 주입층)이 본 발명의 유기 EL 소자용 재료를 함유하여도 바람직하며, 본 발명의 유기 EL 소자가 전자 수송층 및 정공 장벽층 중 적어도 어느 한쪽을 갖고, 상기 전자 수송층 및 정공 장벽층 중 적어도 어느 한쪽이 본 발명의 유기 EL 소자용 재료를 함유하여도 바람직하다.

[0351]

본 발명의 유기 EL 소자는 음극과 유기 박막층의 계면 영역에 환원성 도펀트를 갖는 것도 바람직하다.

[0352]

이러한 구성에 의하면, 유기 EL 소자에서의 발광 휘도 향상이나 장수명화가 기대된다.

[0353]

환원성 도펀트로서는, 알칼리 금속, 알칼리 금속 착체, 알칼리 금속 화합물, 알칼리 토류 금속, 알칼리 토류 금속 착체, 알칼리 토류 금속 화합물, 희토류 금속, 희토류 금속 착체 및 희토류 금속 화합물 등으로부터 선택된 적어도 1종류를 들 수 있다.

[0354]

알칼리 금속으로서, Na(일함수: 2.36eV), K(일함수: 2.28eV), Rb(일함수: 2.16eV), Cs(일함수: 1.95eV) 등을 들 수 있고, 일함수가 2.9eV 이하인 것이 특히 바람직하다. 이들 중 바람직하게는 K, Rb, Cs, 더 바람직하게는 Rb 또는 Cs이고, 가장 바람직하게는 Cs이다.

[0355]

알칼리 토류 금속으로서, Ca(일함수: 2.9eV), Sr(일함수: 2.0~2.5eV), Ba(일함수: 2.52eV) 등을 들 수 있고, 일함수가 2.9eV 이하인 것이 특히 바람직하다.

[0356]

희토류 금속으로서, Sc, Y, Ce, Tb, Yb 등을 들 수 있고, 일함수가 2.9eV 이하인 것이 특히 바람직하다.

[0357]

이상의 금속 중 바람직한 금속은 특히 환원 능력이 높아, 전자 주입역으로의 비교적 소량의 첨가에 의해 유기 EL 소자에서의 발광 휘도 향상이나 장수명화가 가능하다.

[0358]

알칼리 금속 화합물로서는,  $\text{Li}_2\text{O}$ ,  $\text{Cs}_2\text{O}$ ,  $\text{K}_2\text{O}$  등의 알칼리 산화물, LiF, NaF, CsF, KF 등의 알칼리 할로젠화물 등을 들 수 있고, LiF,  $\text{Li}_2\text{O}$ , NaF가 바람직하다.

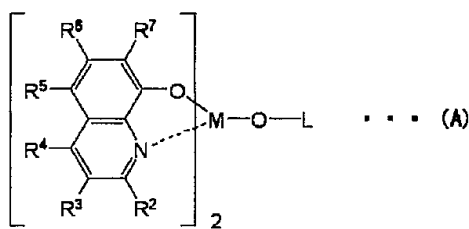
[0359]

알칼리 토류 금속 화합물로서는, BaO, SrO, CaO 및 이들을 혼합한  $\text{Ba}_x\text{Sr}_{1-x}\text{O}$  ( $0 < x < 1$ ),  $\text{Ba}_x\text{Ca}_{1-x}\text{O}$  ( $0 < x < 1$ ) 등을 들 수 있고, BaO, SrO, CaO가 바람직하다.

[0360]

희토류 금속 화합물로서는,  $\text{YbF}_3$ ,  $\text{ScF}_3$ ,  $\text{ScO}_3$ ,  $\text{Y}_2\text{O}_3$ ,  $\text{Ce}_2\text{O}_3$ ,  $\text{GdF}_3$ ,  $\text{TbF}_3$  등을 들 수 있고,  $\text{YbF}_3$ ,  $\text{ScF}_3$ ,  $\text{TbF}_3$ 가 바람직하다.

- [0361] 알칼리 금속 착체, 알칼리 토류 금속 착체, 희토류 금속 착체로서는, 각각 금속 이온으로서 알칼리 금속 이온, 알칼리 토류 금속 이온, 희토류 금속 이온 중 적어도 하나를 함유하는 것이면 특별히 한정은 없다. 또한, 배위자에는 퀴놀린을, 벤조퀴놀린을, 아크리딘을, 페난트리딘을, 하이드록시페닐옥사졸, 하이드록시페닐싸이아졸, 하이드록시디아아릴옥사디아아졸, 하이드록시디아아릴싸이아디아아졸, 하이드록시페닐피리딘, 하이드록시페닐벤즈이미다졸, 하이드록시벤조트라이아졸, 하이드록시플루보레인, 바이피리딜, 페난트론, 프탈로사이아닌, 포르피린, 사이클로펜타다이엔,  $\beta$ -다이케톤류, 아조메타인류 및 그들의 유도체 등이 바람직하지만, 이들에 한정되는 것은 아니다.
- [0362] 환원성 도펀트의 첨가 형태로서는, 계면 영역에 층 형상 또는 섬 형상으로 형성하면 바람직하다. 형성 방법으로서, 저항 가열 증착법에 의해 환원성 도펀트를 증착하면서, 계면 영역을 형성하는 발광 재료나 전자 주입 재료인 유기물을 동시에 증착시켜 유기물 중에 환원 도펀트를 분산시키는 방법이 바람직하다. 분산농도는 몰비로 유기물:환원성 도펀트 = 100:1~1:100, 바람직하게는 5:1~1:5이다.
- [0363] 환원성 도펀트를 층 형상으로 형성하는 경우는, 계면의 유기층인 발광 재료나 전자 주입 재료를 층 형상으로 형성한 후에, 환원 도펀트를 단독으로 저항 가열 증착법에 의해 증착하여, 바람직하게는 층의 두께 0.1~15nm로 형성한다.
- [0364] 환원성 도펀트를 섬 형상으로 형성하는 경우는, 계면의 유기층인 발광 재료나 전자 주입 재료를 섬 형상으로 형성한 후에, 환원 도펀트를 단독으로 저항 가열 증착법에 의해 증착하여, 바람직하게는 섬의 두께 0.05~1nm로 형성한다.
- [0365] 또한, 본 발명의 유기 EL 소자에 있어서의 주성분과 환원성 도펀트의 비율로서는, 몰비로 주성분:환원성 도펀트 = 5:1~1:5이면 바람직하고, 2:1~1:2이면 더 바람직하다.
- [0366] 본 발명의 유기 EL 소자는 발광층과 음극 사이에 전자 주입층을 갖고, 상기 전자 주입층은 질소 함유 환 유도체를 주성분으로서 함유하는 것이 바람직하다. 여기서, 전자 주입층은 전자 수송층으로서 기능하는 층이어도 좋다.
- [0367] 한편, 「주성분으로서」란, 전자 주입층이 50질량% 이상의 질소 함유 환 유도체를 함유하고 있는 것을 의미한다.
- [0368] 전자 주입층 또는 전자 수송층은 발광층으로의 전자의 주입을 돕는 층이고, 전자 이동도가 크다. 전자 주입층은 에너지 레벨의 급격한 변화를 완화시키는 등 에너지 레벨을 조정하기 위해 설치한다.
- [0369] 전자 주입층에 이용하는 전자 수송성 재료로서는, 분자 내에 헤테로원자를 1개 이상 함유하는 방향족 헤테로환 화합물이 바람직하게 이용되고, 특히 질소 함유 환 유도체가 바람직하다. 또한, 질소 함유 환 유도체로서는, 질소 함유 6원환 또는 5원환 골격을 갖는 방향족환, 또는 질소 함유 6원환 또는 5원환 골격을 갖는 축합 방향족 환 화합물이 바람직하다.
- [0370] 이 질소 함유 환 유도체로서는, 예컨대 하기 화학식 (A)로 표시되는 질소 함유 환 금속 킬레이트 착체가 바람직하다.



- [0371]
- [0372]  $R^2 \sim R^7$ 은 각각 독립적으로 수소 원자(중수소 원자를 포함함), 할로젠 원자, 옥시기, 아미노기, 탄소수 1~40의 탄화수소기, 알콕시기, 아릴옥시기, 알콕시카보닐기, 또는 헤테로환기이고, 이들은 치환되어 있어도 좋다.
- [0373] 할로젠 원자로서는, 예컨대 불소, 염소, 브롬, 요오드 등을 들 수 있다. 또한, 치환되어 있어도 좋은 아미노기의 예로서는, 알킬아미노기, 아릴아미노기, 아르알킬아미노기를 들 수 있다.
- [0374] 탄소수 1~40의 탄화수소기로서는, 치환 또는 비치환된 알킬기, 알켄일기, 사이클로알킬기, 아릴기, 아르알킬기 등을 들 수 있다.



- [0375] 알킬기로서는, 예컨대 메틸기, 에틸기, 프로필기, 아이소프로필기, n-뷰틸기, s-뷰틸기, 아이소뷰틸기, t-뷰틸기, n-펜틸기, n-헥실기, n-헵틸기, n-옥틸기, n-노닐기, n-데실기, n-운데실기, n-도데실기, n-트라이데실기, n-테트라데실기, n-펜타데실기, n-헥사데실기, n-헵타데실기, n-옥타데실기, 네오펜틸기, 1-메틸펜틸기, 2-메틸펜틸기, 1-펜틸헥실기, 1-뷰틸펜틸기, 1-헵틸옥틸기, 3-메틸펜틸기, 하이드록시메틸기, 1-하이드록시에틸기, 2-하이드록시에틸기, 2-하이드록시아이소뷰틸기, 1,2-다이하이드록시에틸기, 1,3-다이하이드록시아이소프로필기, 2,3-다이하이드록시-t-뷰틸기, 1,2,3-트라이하이드록시프로필기, 클로로메틸기, 1-클로로에틸기, 2-클로로에틸기, 2-클로로아이소뷰틸기, 1,2-다이클로로에틸기, 1,3-다이클로로아이소프로필기, 2,3-다이클로로-t-뷰틸기, 1,2,3-트라이클로로프로필기, 브로모메틸기, 1-브로모에틸기, 2-브로모에틸기, 2-브로모아이소뷰틸기, 1,2-다이브로모에틸기, 1,3-다이브로모아이소프로필기, 2,3-다이브로모-t-뷰틸기, 1,2,3-트라이브로모프로필기, 요오도메틸기, 1-요오도에틸기, 2-요오도에틸기, 2-요오도아이소뷰틸기, 1,2-다이요오도에틸기, 1,3-다이요오도아이소프로필기, 2,3-다이요오도-t-뷰틸기, 1,2,3-트라이요오도프로필기, 아미노메틸기, 1-아미노에틸기, 2-아미노에틸기, 2-아미노아이소뷰틸기, 1,2-다이아미노에틸기, 1,3-다이아미노아이소프로필기, 2,3-다이아미노-t-뷰틸기, 1,2,3-트라이아미노프로필기, 사이아노메틸기, 1-사이아노에틸기, 2-사이아노에틸기, 2-사이아노아이소뷰틸기, 1,2-다이사이아노에틸기, 1,3-다이사이아노아이소프로필기, 2,3-다이사이아노-t-뷰틸기, 1,2,3-트라이사이아노프로필기, 나이트로메틸기, 1-나이트로에틸기, 2-나이트로에틸기, 1,2-다이나이트로에틸기, 2,3-다이나이트로-t-뷰틸기, 1,2,3-트라이나이트로프로필기 등을 들 수 있다.
- [0376] 이들 중에서도 바람직하게는 메틸기, 에틸기, 프로필기, 아이소프로필기, n-뷰틸기, s-뷰틸기, 아이소뷰틸기, t-뷰틸기, n-펜틸기, n-헥실기, n-헵틸기, n-옥틸기, n-노닐기, n-데실기, n-운데실기, n-도데실기, n-트라이데실기, n-테트라데실기, n-펜타데실기, n-헥사데실기, n-헵타데실기, n-옥타데실기, 네오펜틸기, 1-메틸펜틸기, 1-펜틸헥실기, 또는 1-뷰틸펜틸기, 1-헵틸옥틸기이다.
- [0377] 알켄일기로서는, 예컨대 바이닐기, 알릴기, 1-뷰텐일기, 2-뷰텐일기, 3-뷰텐일기, 1,3-뷰테인다이엔일기, 1-메틸바이닐기, 스타이릴기, 2,2-다이페닐바이닐기, 1,2-다이페닐바이닐기, 1-메틸알릴기, 1,1-다이메틸알릴기, 2-메틸알릴기, 1-페닐알릴기, 2-페닐알릴기, 3-페닐알릴기, 3,3-다이페닐알릴기, 1,2-다이메틸알릴기, 1-페닐-1-뷰텐일기, 3-페닐-1-뷰텐일기 등을 들 수 있고, 바람직하게는 스타이릴기, 2,2-다이페닐바이닐기, 1,2-다이페닐바이닐기 등을 들 수 있다.
- [0378] 사이클로알킬기로서는, 예컨대 사이클로펜틸기, 사이클로헥실기, 사이클로옥틸기, 3,5-테트라메틸사이클로헥실기 등을 들 수 있고, 사이클로헥실기, 사이클로옥틸기 및 3,5-테트라메틸사이클로헥실기가 바람직하다.
- [0379] 알콕시기는 -OY로 표시되는 기이다. Y의 구체예로서는, 상기 알킬기에서 설명한 것과 동일한 것을 들 수 있고, 바람직한 예도 동일하다.
- [0380] 비축합 아릴기로서는, 예컨대 페닐기, 바이페닐-2-일기, 바이페닐-3-일기, 바이페닐-4-일기, p-터페닐-4-일기, p-터페닐-3-일기, p-터페닐-2-일기, m-터페닐-4-일기, m-터페닐-3-일기, m-터페닐-2-일기, o-톨릴기, m-톨릴기, p-톨릴기, p-t-뷰틸페닐기, p-(2-페닐프로필)페닐기, 4'-메틸바이페닐일기, 4"-t-뷰틸-p-터페닐-4-일기, o-큐멘일기, m-큐멘일기, p-큐멘일기, 2,3-자일릴기, 3,4-자일릴기, 2,5-자일릴기, 메시틸기 및 m-쿼터페닐기 등을 들 수 있다.
- [0381] 이들 중에서도 바람직하게는 페닐기, 바이페닐-2-일기, 바이페닐-3-일기, 바이페닐-4-일기, m-터페닐-4-일기, m-터페닐-3-일기, m-터페닐-2-일기, p-톨릴기, 3,4-자일릴기, m-쿼터페닐-2-일기이다.
- [0382] 축합 아릴기로서는, 예컨대 1-나프틸기, 2-나프틸기를 들 수 있다.
- [0383] 헤테로환기는 단환 또는 축합환이고, 바람직하게는 환 형성 탄소수 1~20, 보다 바람직하게는 환 형성 탄소수 1~12, 더 바람직하게는 환 형성 탄소수 2~10의 헤테로환기이며, 질소 원자, 산소 원자, 황 원자, 셀레늄 원자 중 적어도 하나의 헤테로원자를 포함하는 방향족 헤테로환기이다. 이 헤테로환기의 예로서는, 예컨대 피롤리딘, 피페리딘, 피페라진, 모폴린, 싸이오펜, 셀레노펜, 퓨란, 피롤, 이미다졸, 피라졸, 피리딘, 피라진, 피리다진, 피리미딘, 트리아아졸, 트리아아진, 인돌, 인다졸, 퓨린, 싸이아졸린, 싸이아졸, 싸이아다리아졸, 옥사졸린, 옥사졸, 옥사다리아졸, 퀴놀린, 아이소퀴놀린, 프탈라진, 나프티리딘, 퀴녹살린, 퀴나졸린, 신놀린, 프테리딘, 아크리딘, 페난트롤린, 페나진, 테트라졸, 벤즈이미다졸, 벤즈옥사졸, 벤조싸이아졸, 벤조트리아아졸, 테트라아자인텐, 카바졸, 아제핀 등으로부터 유도되는 기를 들 수 있고, 바람직하게는 퓨란, 싸이오펜, 피리딘, 피라진, 피리미딘, 피리다진, 트리아아진, 퀴놀린, 프탈라진, 나프티리딘, 퀴녹살린, 퀴나졸린이고, 보다 바람직하게는 퓨란, 싸이오펜, 피리딘 및 퀴놀린으로부터 유도되는 기이며, 더 바람직하게는 퀴놀린일기이다.

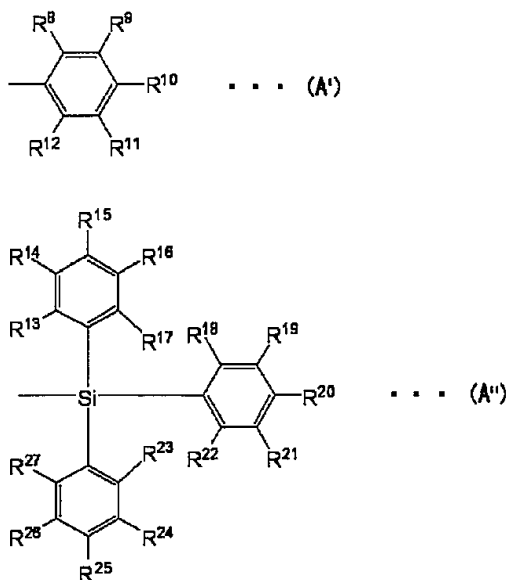
- [0384] 아르알킬기로서는, 예컨대 벤질기, 1-페닐에틸기, 2-페닐에틸기, 1-페닐아이소프로필기, 2-페닐아이소프로필기, 페닐-t-뷰틸기, α-나프틸메틸기, 1-α-나프틸에틸기, 2-α-나프틸에틸기, 1-α-나프틸아이소프로필기, 2-α-나프틸아이소프로필기, β-나프틸메틸기, 1-β-나프틸에틸기, 2-β-나프틸에틸기, 1-β-나프틸아이소프로필기, 2-β-나프틸아이소프로필기, p-메틸벤질기, m-메틸벤질기, o-메틸벤질기, p-클로로벤질기, m-클로로벤질기, o-클로로벤질기, p-브로모벤질기, m-브로모벤질기, o-브로모벤질기, p-요오도벤질기, m-요오도벤질기, o-요오도벤질기, p-하이드록시벤질기, m-하이드록시벤질기, o-하이드록시벤질기, p-아미노벤질기, m-아미노벤질기, o-아미노벤질기, p-나이트로벤질기, m-나이트로벤질기, o-나이트로벤질기, p-사이아노벤질기, m-사이아노벤질기, o-사이아노벤질기, 1-하이드록시-2-페닐아이소프로필기, 1-클로로-2-페닐아이소프로필기 등을 들 수 있다.
- [0385] 이들 중에서도 바람직하게는 벤질기, p-사이아노벤질기, m-사이아노벤질기, o-사이아노벤질기, 1-페닐에틸기, 2-페닐에틸기, 1-페닐아이소프로필기, 2-페닐아이소프로필기이다.
- [0386] 아릴옥시기는 -OY'로 표시되고, Y'의 예로서는 페닐기, 1-나프틸기, 2-나프틸기, 1-안트릴기, 2-안트릴기, 9-안트릴기, 1-페난트릴기, 2-페난트릴기, 3-페난트릴기, 4-페난트릴기, 9-페난트릴기, 1-나프타센일기, 2-나프타센일기, 9-나프타센일기, 1-피렌일기, 2-피렌일기, 4-피렌일기, 2-바이페닐일기, 3-바이페닐일기, 4-바이페닐일기, p-터페닐-4-일기, p-터페닐-3-일기, p-터페닐-2-일기, m-터페닐-4-일기, m-터페닐-3-일기, m-터페닐-2-일기, o-톨릴기, m-톨릴기, p-톨릴기, p-t-뷰틸페닐기, p-(2-페닐프로필)페닐기, 3-메틸-2-나프틸기, 4-메틸-1-나프틸기, 4-메틸-1-안트릴기, 4'-메틸바이페닐일기, 4"-t-뷰틸-p-터페닐-4-일기 등을 들 수 있다.
- [0387] 아릴옥시기 중 헤테로아릴옥시기는 -OZ'로 표시되고, Z'의 예로서는 2-피롤일기, 3-피롤일기, 피라진일기, 2-피리딘일기, 3-피리딘일기, 4-피리딘일기, 2-인돌릴기, 3-인돌릴기, 4-인돌릴기, 5-인돌릴기, 6-인돌릴기, 7-인돌릴기, 1-아이소인돌릴기, 3-아이소인돌릴기, 4-아이소인돌릴기, 5-아이소인돌릴기, 6-아이소인돌릴기, 7-아이소인돌릴기, 2-퓨릴기, 3-퓨릴기, 2-벤조퓨란일기, 3-벤조퓨란일기, 4-벤조퓨란일기, 5-벤조퓨란일기, 6-벤조퓨란일기, 7-벤조퓨란일기, 1-아이소벤조퓨란일기, 3-아이소벤조퓨란일기, 4-아이소벤조퓨란일기, 5-아이소벤조퓨란일기, 6-아이소벤조퓨란일기, 7-아이소벤조퓨란일기, 2-퀴놀릴기, 3-퀴놀릴기, 4-퀴놀릴기, 5-퀴놀릴기, 6-퀴놀릴기, 7-퀴놀릴기, 8-퀴놀릴기, 1-아이소퀴놀릴기, 3-아이소퀴놀릴기, 4-아이소퀴놀릴기, 5-아이소퀴놀릴기, 6-아이소퀴놀릴기, 7-아이소퀴놀릴기, 8-아이소퀴놀릴기, 2-퀴녹살린일기, 5-퀴녹살린일기, 6-퀴녹살린일기, 1-카바졸릴기, 2-카바졸릴기, 3-카바졸릴기, 4-카바졸릴기, 1-페난트리딘일기, 2-페난트리딘일기, 3-페난트리딘일기, 4-페난트리딘일기, 6-페난트리딘일기, 7-페난트리딘일기, 8-페난트리딘일기, 9-페난트리딘일기, 10-페난트리딘일기, 1-아크리딘일기, 2-아크리딘일기, 3-아크리딘일기, 4-아크리딘일기, 9-아크리딘일기, 1,7-페난트롤린-2-일기, 1,7-페난트롤린-3-일기, 1,7-페난트롤린-4-일기, 1,7-페난트롤린-5-일기, 1,7-페난트롤린-6-일기, 1,7-페난트롤린-8-일기, 1,7-페난트롤린-9-일기, 1,7-페난트롤린-10-일기, 1,8-페난트롤린-2-일기, 1,8-페난트롤린-3-일기, 1,8-페난트롤린-4-일기, 1,8-페난트롤린-5-일기, 1,8-페난트롤린-6-일기, 1,8-페난트롤린-7-일기, 1,8-페난트롤린-9-일기, 1,8-페난트롤린-10-일기, 1,9-페난트롤린-2-일기, 1,9-페난트롤린-3-일기, 1,9-페난트롤린-4-일기, 1,9-페난트롤린-5-일기, 1,9-페난트롤린-6-일기, 1,9-페난트롤린-7-일기, 1,9-페난트롤린-8-일기, 1,9-페난트롤린-10-일기, 1,10-페난트롤린-2-일기, 1,10-페난트롤린-3-일기, 1,10-페난트롤린-4-일기, 1,10-페난트롤린-5-일기, 2,9-페난트롤린-1-일기, 2,9-페난트롤린-3-일기, 2,9-페난트롤린-4-일기, 2,9-페난트롤린-5-일기, 2,9-페난트롤린-6-일기, 2,9-페난트롤린-7-일기, 2,9-페난트롤린-8-일기, 2,9-페난트롤린-10-일기, 2,8-페난트롤린-1-일기, 2,8-페난트롤린-3-일기, 2,8-페난트롤린-4-일기, 2,8-페난트롤린-5-일기, 2,8-페난트롤린-6-일기, 2,8-페난트롤린-7-일기, 2,8-페난트롤린-9-일기, 2,8-페난트롤린-10-일기, 2,7-페난트롤린-1-일기, 2,7-페난트롤린-3-일기, 2,7-페난트롤린-4-일기, 2,7-페난트롤린-5-일기, 2,7-페난트롤린-6-일기, 2,7-페난트롤린-8-일기, 2,7-페난트롤린-9-일기, 2,7-페난트롤린-10-일기, 1-페나진일기, 2-페나진일기, 1-페노싸이아진일기, 2-페노싸이아진일기, 3-페노싸이아진일기, 4-페노싸이아진일기, 1-페녹사진일기, 2-페녹사진일기, 3-페녹사진일기, 4-페녹사진일기, 2-옥사졸릴기, 4-옥사졸릴기, 5-옥사졸릴기, 2-옥사다이하졸릴기, 5-옥사다이하졸릴기, 3-퓨라잔일기, 2-싸이엔일기, 3-싸이엔일기, 2-메틸피롤-1-일기, 2-메틸피롤-3-일기, 2-메틸피롤-4-일기, 2-메틸피롤-5-일기, 3-메틸피롤-1-일기, 3-메틸피롤-2-일기, 3-메틸피롤-4-일기, 3-메틸피롤-5-일기, 2-t-뷰틸피롤-4-일기, 3-(2-페닐프로필)피롤-1-일기, 2-메틸-1-인돌릴기, 4-메틸-1-인돌릴기, 2-메틸-3-인돌릴기, 4-메틸-3-인돌릴기, 2-t-뷰틸-1-인돌릴기, 4-t-뷰틸-1-인돌릴기, 2-t-뷰틸-3-인돌릴기, 4-t-뷰틸-3-인돌릴기 등을 들 수 있다.
- [0388] 알콕시카보닐기는 -COOY'로 표시되고, Y'의 예로서는 상기 알킬기와 동일한 것을 들 수 있다. 알킬아미노기 및 아르알킬아미노기는 -NQ<sup>1</sup>Q<sup>2</sup>로 표시된다. Q<sup>1</sup> 및 Q<sup>2</sup>의 구체예로서는 각각 독립적으로 상기 알킬기, 상기 아르알킬

기에서 설명한 것과 동일한 것을 들 수 있고, 바람직한 예도 동일하다.  $Q^1$  및  $Q^2$  중 한쪽은 수소 원자(중수소 원자를 포함함)이어도 좋다.

[0389] 아릴아미노기는  $-NAr^1Ar^2$ 로 표시되고,  $Ar^1$  및  $Ar^2$ 의 구체예는 각각 독립적으로 상기 비축합 아릴기 및 축합 아릴에서 설명한 기와 동일하다.  $Ar^1$  및  $Ar^2$  중 한쪽은 수소 원자(중수소 원자를 포함함)이어도 좋다.

[0390] M은 알루미늄(Al), 갈륨(Ga) 또는 인듐(In)이고, In이면 바람직하다.

[0391] 상기 화학식 (A)의 L은 하기 화학식 (A') 또는 (A'')로 표시되는 기이다.



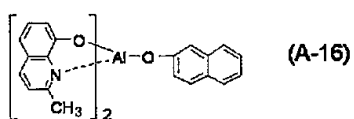
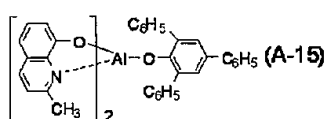
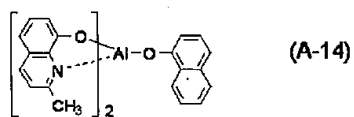
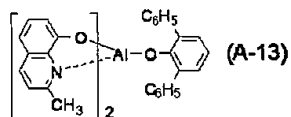
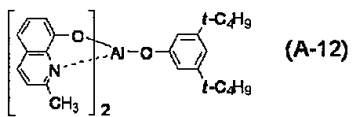
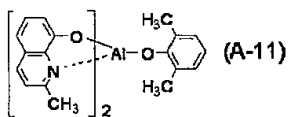
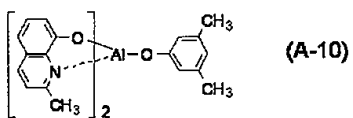
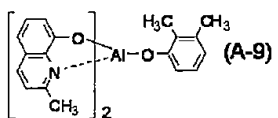
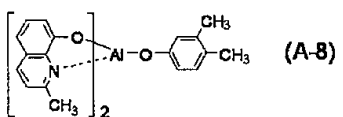
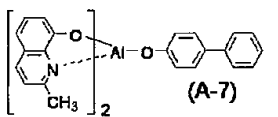
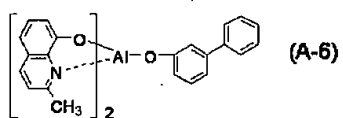
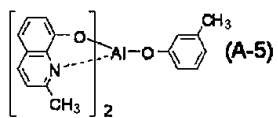
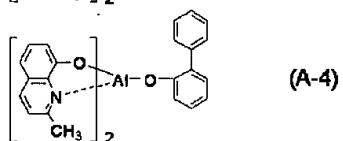
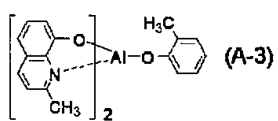
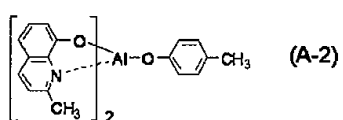
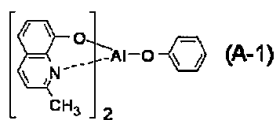
[0392]

[0393] 상기 화학식에서,  $R^8 \sim R^{12}$ 는 각각 독립적으로 수소 원자(중수소 원자를 포함함), 또는 치환 또는 비치환된 탄소수 1~40의 탄화수소기이고, 서로 인접하는 기가 환상 구조를 형성하고 있어도 좋다. 또한,  $R^{13} \sim R^{27}$ 은 각각 독립적으로 수소 원자(중수소 원자를 포함함), 또는 치환 또는 비치환된 탄소수 1~40의 탄화수소기이고, 서로 인접하는 기가 환상 구조를 형성하고 있어도 좋다.

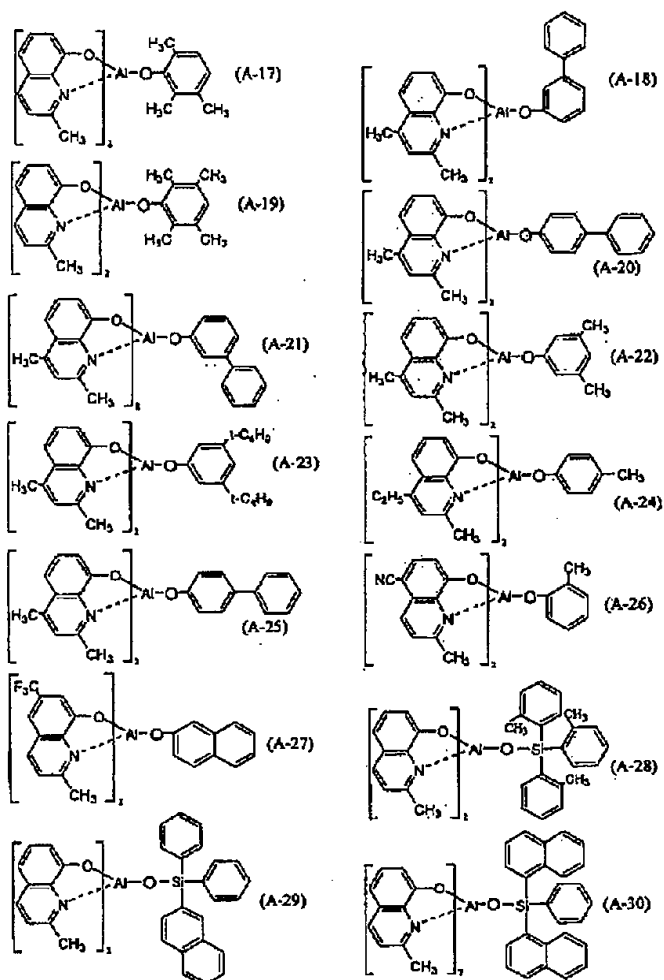
[0394] 상기 화학식 (A') 및 화학식 (A'')의  $R^8 \sim R^{12}$  및  $R^{13} \sim R^{27}$ 이 나타내는 탄소수 1~40의 탄화수소기로서는,  $R^2 \sim R^7$ 의 구체예와 동일한 것을 들 수 있다.

[0395] 또한,  $R^8 \sim R^{12}$  및  $R^{13} \sim R^{27}$ 의 서로 인접하는 기가 환상 구조를 형성한 경우의 2가 기로서는, 테트라메틸렌기, 펜타메틸렌기, 헥사메틸렌기, 다이페닐메테인-2,2'-다이일기, 다이페닐에테인-3,3'-다이일기, 다이페닐프로페인-4,4'-다이일기 등을 들 수 있다.

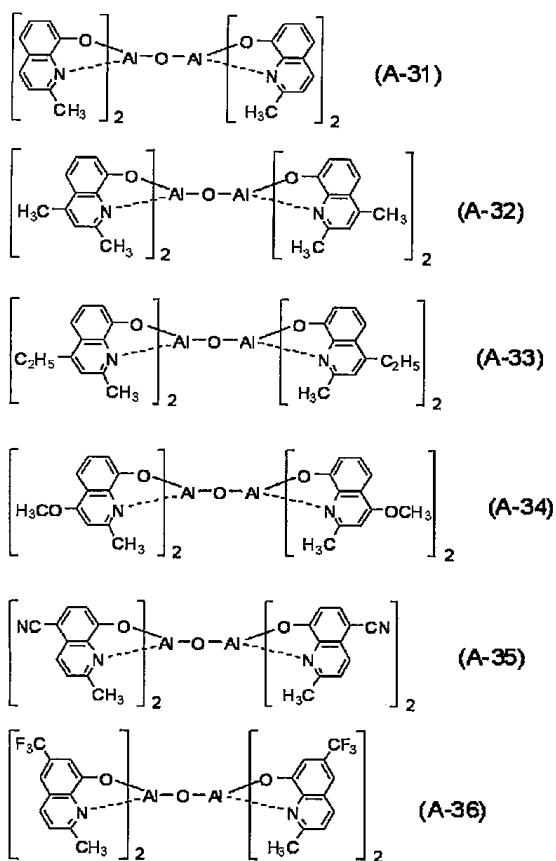
[0396] 상기 화학식 (A)로 표시되는 질소 함유 환 금속 킬레이트 착체의 구체예를 이하에 나타내지만, 이들 예시 화합물에 한정되는 것은 아니다.



[0397]



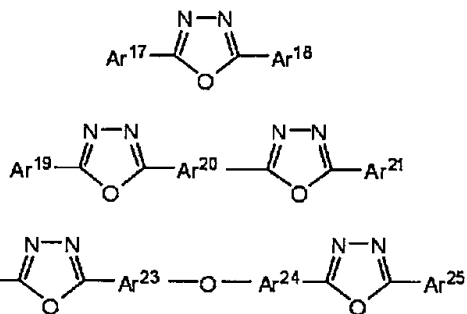
[0398]



[0399]

[0400] 본 발명에서는, 전자 주입층이나 전자 수송층은 질소 함유 헤테로환 유도체를 포함하는 것이 바람직하다.

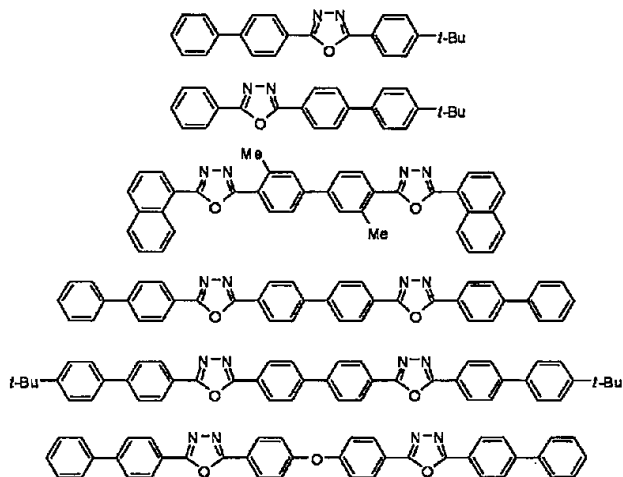
[0401] 전자 주입층 또는 전자 수송층은 발광층으로의 전자의 주입을 돕는 층이고, 전자 이동도가 크다. 전자 주입층은 에너지 레벨의 급준한 변화를 완화시키는 등 에너지 레벨을 조정하기 위해 설치한다. 전자 주입층 또는 전자 수송층에 이용되는 재료로서는, 8-하이드록시퀴놀린 또는 그의 유도체의 금속 착체, 옥사다리아졸 유도체, 질소 함유 헤테로환 유도체가 적합하다. 상기 8-하이드록시퀴놀린 또는 그의 유도체의 금속 착체의 구체예로서는, 옥신(일반적으로 8-퀴놀린을 또는 8-하이드록시퀴놀린)의 킬레이트를 포함하는 금속 킬레이트 옥시노이드 화합물, 예컨대 트리스(8-퀴놀린)알루미늄을 이용할 수 있다. 그리고, 옥사다리아졸 유도체로서는 하기의 것을 들 수 있다.



[0402]

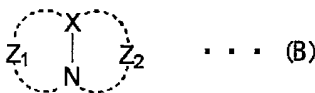
[0403] 상기 식 중, Ar<sup>17</sup>, Ar<sup>18</sup>, Ar<sup>19</sup>, Ar<sup>21</sup>, Ar<sup>22</sup> 및 Ar<sup>25</sup>는 각각 치환기를 갖거나 갖지 않는 아릴기를 나타내고, Ar<sup>17</sup>과 Ar<sup>18</sup>, Ar<sup>19</sup>와 Ar<sup>21</sup>, Ar<sup>22</sup>와 Ar<sup>25</sup>는 서로 동일하여도 상이하여도 좋다. Ar<sup>20</sup>, Ar<sup>23</sup> 및 Ar<sup>24</sup>는 각각 치환기를 갖거나 갖지 않는 아릴렌기를 나타내고, Ar<sup>23</sup>과 Ar<sup>24</sup>는 서로 동일하여도 상이하여도 좋다.

[0404] 또한, 아릴렌기로서는, 페닐렌기, 나프틸렌기, 바이페닐렌기, 안트라닐렌기, 페릴렌일렌기, 피렌일렌기 등을 들 수 있다. 그리고, 이들에 대한 치환기로서는 탄소수 1~10의 알킬기, 탄소수 1~10의 알콕시기 또는 사이아노기 등을 들 수 있다. 이 전자 전달 화합물은 박막 형성성이 양호한 것이 바람직하게 이용된다. 그리고, 이들 전자 전달성 화합물의 구체예로서는 하기의 것을 들 수 있다.



[0405]

[0406] 질소 함유 헤테로환 유도체로서는, 이하의 화학식을 갖는 유기 화합물로 이루어지는 질소 함유 헤테로환 유도체이고 금속 착체가 아닌 질소 함유 화합물을 들 수 있다. 예컨대, (A)에 나타내는 골격을 함유하는 5원환 또는 6원환이나 (B)에 나타내는 구조의 것을 들 수 있다.



[0407]

[0408] 상기 (B) 중, X는 탄소 원자 또는 질소 원자를 나타낸다. Z<sub>1</sub> 및 Z<sub>2</sub>는 각각 독립적으로 질소 함유 헤테로환을 형

성할 수 있는 원자군을 나타낸다.



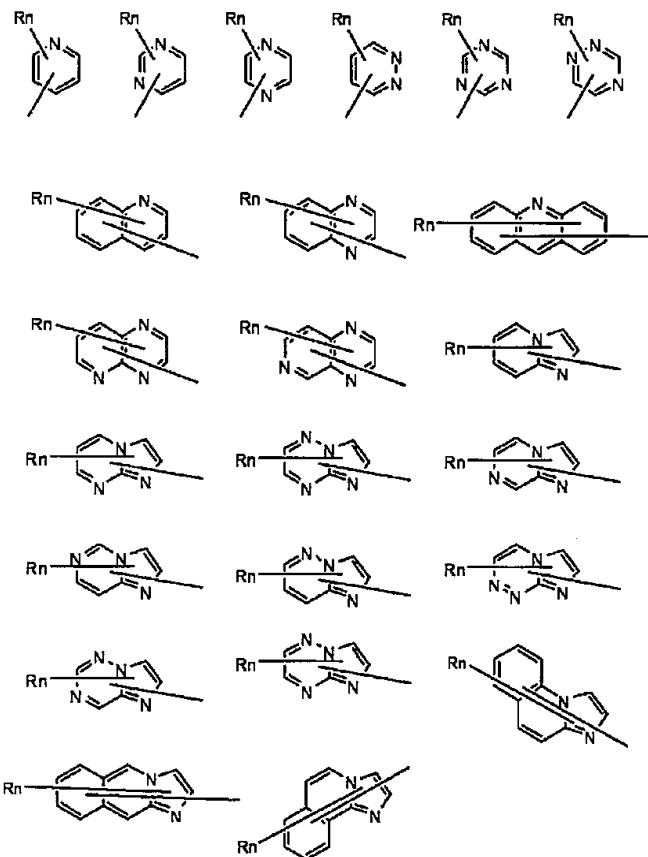
[0409]

[0410]

바람직하게는, 5원환 또는 6원환으로 이루어지는 질소 함유 방향 다환족을 갖는 유기 화합물. 나아가서는 이러한 복수 질소 원자를 갖는 질소 함유 방향 다환족의 경우는, 상기 (A)와 (B) 또는 (A)와 (C)를 조합한 골격을 갖는 질소 함유 방향 다환 유기 화합물.

[0411]

질소 함유 유기 화합물의 질소 함유 기는, 예컨대 이하의 화학식으로 표시되는 질소 함유 헤테로환기로부터 선택된다.



[0412]

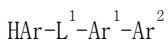
[0413]

상기 각 식 중, R은 탄소수 6~40의 아릴기, 탄소수 3~40의 헤테로아릴기, 탄소수 1~20의 알킬기 또는 탄소수 1~20의 알콕시기이고, n은 0~5의 정수이고, n이 2 이상의 정수일 때, 복수의 R은 서로 동일하거나 상이하여도 좋다.

[0414]

나아가, 바람직한 구체적인 화합물로서, 다음 화학식으로 표시되는 질소 함유 헤테로환 유도체를 들 수 있다.

[0415]



[0416]

상기 식 중, HAr은 치환기를 갖고 있어도 좋은 탄소수 3~40의 질소 함유 헤테로환이고,  $\text{L}^1$ 은 단일 결합, 치환기를 갖고 있어도 좋은 탄소수 6~40의 아릴렌기 또는 치환기를 갖고 있어도 좋은 탄소수 3~40의 헤테로아릴렌기이고,  $\text{Ar}^1$ 은 치환기를 갖고 있어도 좋은 탄소수 6~40의 2가 방향족 탄화수소기이고,  $\text{Ar}^2$ 는 치환기를 갖고 있어도 좋은 탄소수 6~40의 아릴기 또는 치환기를 갖고 있어도 좋은 탄소수 3~40의 헤테로아릴기이다.

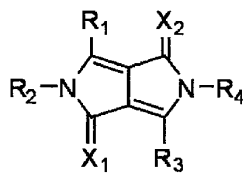




소수 3~40의 헤테로아릴기이다.

[0426] 또한, 상기 화학식으로 표시되는  $Ar^1$ 에서  $R^1 \sim R^8$ 은 어느 것이나 수소 원자(중수소 원자를 포함함)인 질소 함유 헤테로환 유도체.

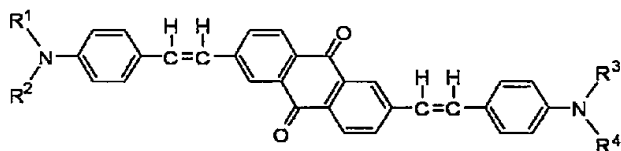
[0427] 이 밖에, 하기 화합물(일본 특허공개 평9-3448호 공보 참조)도 적합하게 이용된다.



[0428]

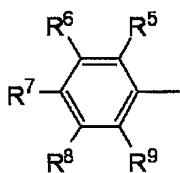
[0429] 상기 식 중,  $R^1 \sim R^4$ 는 각각 독립적으로 수소 원자(중수소 원자를 포함함), 치환 또는 비치환된 지방족기, 치환 또는 비치환된 지방족식환기, 치환 또는 비치환된 탄소환식 방향족환기, 치환 또는 비치환된 헤테로환기를 나타내고,  $X^1, X^2$ 는 각각 독립적으로 산소 원자, 황 원자 또는 다이사이아노메틸렌기를 나타낸다.

[0430] 또한, 하기 화합물(일본 특허공개 2000-173774호 공보 참조)도 적합하게 이용된다.



[0431]

[0432] 상기 식 중,  $R^1, R^2, R^3$  및  $R^4$ 는 서로 동일하거나 상이한 기이고, 다음 화학식으로 표시되는 아릴기이다.

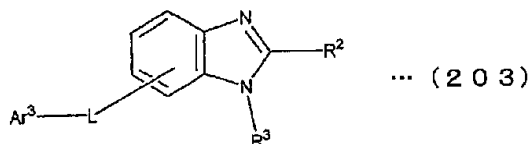
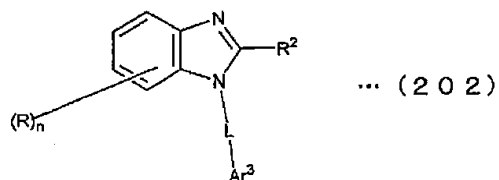
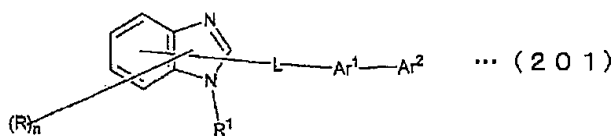


[0433]

[0434] 상기 식 중,  $R^5, R^6, R^7, R^8$  및  $R^9$ 는 서로 동일하거나 상이한 기이고, 수소 원자(중수소 원자를 포함함)이거나 그들의 적어도 하나가 포화 또는 불포화 알콕실기, 알킬기, 아미노기 또는 알킬아미노기이다.

[0435] 나아가, 상기 질소 함유 헤테로환기 또는 질소 함유 헤테로환 유도체를 포함하는 고분자 화합물이어도 좋다.

[0436] 또한, 전자 수송층은 하기 화학식 (201)~(203)으로 표시되는 질소 함유 헤테로환 유도체의 적어도 어느 하나를 함유하는 것이 바람직하다.



[0437]

- [0438] 상기 화학식 (201)~(203) 중, R은 수소 원자(중수소 원자를 포함함), 치환기를 갖고 있어도 좋은 탄소수 6~60의 아틸기, 치환기를 갖고 있어도 좋은 피리딜기, 치환기를 갖고 있어도 좋은 퀴놀릴기, 치환기를 갖고 있어도 좋은 탄소수 1~20의 알킬기 또는 치환기를 갖고 있어도 좋은 탄소수 1~20의 알콕시기이고, n은 0~4의 정수이고, R<sup>1</sup>은 치환기를 갖고 있어도 좋은 탄소수 6~60의 아틸기, 치환기를 갖고 있어도 좋은 피리딜기, 치환기를 갖고 있어도 좋은 퀴놀릴기, 치환기를 갖고 있어도 좋은 탄소수 1~20의 알킬기 또는 탄소수 1~20의 알콕시기이고, R<sup>2</sup> 및 R<sup>3</sup>은 각각 독립적으로 수소 원자(중수소 원자를 포함함), 치환기를 갖고 있어도 좋은 탄소수 6~60의 아틸기, 치환기를 갖고 있어도 좋은 피리딜기, 치환기를 갖고 있어도 좋은 퀴놀릴기, 치환기를 갖고 있어도 좋은 탄소수 1~20의 알킬기 또는 치환기를 갖고 있어도 좋은 탄소수 6~60의 아틸렌기, 치환기를 갖고 있어도 좋은 피리딘일렌기, 치환기를 갖고 있어도 좋은 퀴놀린일렌기 또는 치환기를 갖고 있어도 좋은 플루오렌일렌기이고, Ar<sup>1</sup>은 치환기를 갖고 있어도 좋은 탄소수 6~60의 아틸렌기, 치환기를 갖고 있어도 좋은 피리딘일렌기 또는 치환기를 갖고 있어도 좋은 퀴놀린일렌기이고, Ar<sup>2</sup>는 치환기를 갖고 있어도 좋은 탄소수 6~60의 아틸기, 치환기를 갖고 있어도 좋은 피리딜기, 치환기를 갖고 있어도 좋은 퀴놀릴기, 치환기를 갖고 있어도 좋은 탄소수 1~20의 알킬기 또는 치환기를 갖고 있어도 좋은 탄소수 1~20의 알콕시기이다.
- [0439] Ar<sup>3</sup>은 치환기를 갖고 있어도 좋은 탄소수 6~60의 아틸기, 치환기를 갖고 있어도 좋은 피리딜기, 치환기를 갖고 있어도 좋은 퀴놀릴기, 치환기를 갖고 있어도 좋은 탄소수 1~20의 알킬기, 치환기를 갖고 있어도 좋은 탄소수 1~20의 알콕시기, 또는 -Ar<sup>1</sup>-Ar<sup>2</sup>로 표시되는 기(Ar<sup>1</sup> 및 Ar<sup>2</sup>는 각각 상기와 동일함)이다.
- [0440] 한편, 상기 화학식 (201)~(203)에서, R은 수소 원자(중수소 원자를 포함함), 치환기를 갖고 있어도 좋은 탄소수 6~60의 아틸기, 치환기를 갖고 있어도 좋은 피리딜기, 치환기를 갖고 있어도 좋은 퀴놀릴기, 치환기를 갖고 있어도 좋은 탄소수 1~20의 알킬기 또는 치환기를 갖고 있어도 좋은 탄소수 1~20의 알콕시기이다.
- [0441] 상기 탄소수 6~60의 아틸기로서는 탄소수 6~40의 아틸기가 바람직하고, 탄소수 6~20의 아틸기가 더 바람직하며, 구체적으로는 페닐기, 나프틸기, 안트릴기, 페난트릴기, 나프타센일기, 크라이센일기, 피렌일기, 바이페닐기, 터페닐기, 톨릴기, t-뷰틸페닐기, (2-페닐프로필)페닐기, 플루오란텐일기, 플루오렌일기, 스피로바이플루오렌으로 이루어지는 1가 기, 퍼플루오로페닐기, 퍼플루오로나프틸기, 퍼플루오로안트릴기, 퍼플루오로바이페닐기, 9-페닐안트라센으로 이루어지는 1가 기, 9-(1'-나프틸)안트라센으로 이루어지는 1가 기, 9-(2'-나프틸)안트라센으로 이루어지는 1가 기, 6-페닐크라이센으로 이루어지는 1가 기, 9-[4-(다이페닐아미노)페닐]안트라센으로 이루어지는 1가 기 등을 들 수 있고, 페닐기, 나프틸기, 바이페닐기, 터페닐기, 9-(10-페닐)안트릴기, 9-[10-(1'-나프틸)]안트릴기, 9-[10-(2'-나프틸)]안트릴기 등이 바람직하다.
- [0442] 탄소수 1~20의 알킬기로서는 탄소수 1~6의 알킬기가 바람직하고, 구체적으로는 메틸기, 에틸기, 프로필기, 뷰틸기, 펜틸기, 헥실기 등 외에, 트라이플루오로메틸기 등의 할로알킬기를 들 수 있으며, 탄소수가 3 이상인 것은 직쇄상, 환상 또는 분기를 갖는 것이어도 좋다.
- [0443] 탄소수 1~20의 알콕시기로서는 탄소수 1~6의 알콕시기가 바람직하고, 구체적으로는 메톡시기, 에톡시기, 프로폭시기, 뷰톡시기, 헵틸옥시기, 헥실옥시기 등을 들 수 있으며, 탄소수가 3 이상인 것은 직쇄상, 환상 또는 분기를 갖는 것이어도 좋다.
- [0444] R이 나타내는 각 기의 치환기로서는, 할로젠 원자, 치환기를 갖고 있어도 좋은 탄소수 1~20의 알킬기, 치환기를 갖고 있어도 좋은 탄소수 1~20의 알콕시기, 치환기를 갖고 있어도 좋은 탄소수 6~40의 아틸옥시기, 치환기를 갖고 있어도 좋은 탄소수 6~40의 아틸기 또는 치환기를 갖고 있어도 좋은 탄소수 3~40의 헤테로아틸기 등을 들 수 있다.
- [0445] 할로젠 원자로서는, 불소, 염소, 브롬, 요오드 등을 들 수 있다.
- [0446] 탄소수 1~20의 알킬기, 탄소수 1~20의 알콕시기, 탄소수 6~40의 아틸기로서는, 상기와 동일한 것을 들 수 있다.
- [0447] 탄소수 6~40의 아틸옥시기로서는, 예컨대 페녹시기, 바이페닐옥시기 등을 들 수 있다.
- [0448] 탄소수 3~40의 헤테로아틸기로서는, 예컨대 피롤일기, 퓨릴기, 싸이엔일기, 실릴기, 피리딜기, 퀴놀릴기, 아이소퀴놀릴기, 벤조퓨릴기, 이미다졸릴기, 피리미딜기, 카바졸릴기, 셀레노페닐기, 옥사다이아졸릴기, 트리아졸

릴기 등을 들 수 있다.

[0449] n은 0~4의 정수이고, 0~2이면 바람직하다.

[0450] 상기 화학식 (201)에서,  $R^1$ 은 치환기를 갖고 있어도 좋은 탄소수 6~60의 아릴기, 치환기를 갖고 있어도 좋은 피리딜기, 치환기를 갖고 있어도 좋은 퀴놀릴기, 치환기를 갖고 있어도 좋은 탄소수 1~20의 알킬기 또는 탄소수 1~20의 알콕시기이다.

[0451] 이들 각 기의 구체예, 바람직한 탄소수 및 치환기로서는, 상기 R에 관하여 설명한 것과 동일하다.

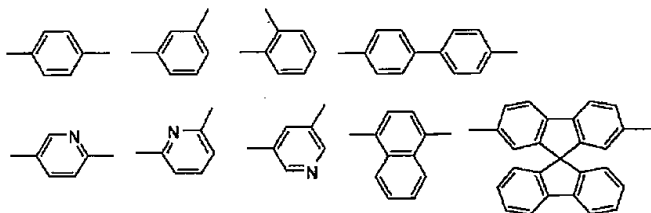
[0452] 상기 화학식 (202) 및 (203)에서,  $R^2$  및  $R^3$ 은 각각 독립적으로 수소 원자(중수소 원자를 포함함), 치환기를 갖고 있어도 좋은 탄소수 6~60의 아릴기, 치환기를 갖고 있어도 좋은 피리딜기, 치환기를 갖고 있어도 좋은 퀴놀릴기, 치환기를 갖고 있어도 좋은 탄소수 1~20의 알킬기 또는 치환기를 갖고 있어도 좋은 탄소수 1~20의 알콕시기이다.

[0453] 이들 각 기의 구체예, 바람직한 탄소수 및 치환기는 상기 R에 관하여 설명한 것과 동일하다.

[0454] 상기 화학식 (201)~(203)에서, L은 치환기를 갖고 있어도 좋은 탄소수 6~60의 아틸렌기, 치환기를 갖고 있어도 좋은 피리딘일렌기, 치환기를 갖고 있어도 좋은 퀴놀린일렌기 또는 치환기를 갖고 있어도 좋은 플루오렌일렌기이다.

[0455] 탄소수 6~60의 아틸렌기로서는 탄소수 6~40의 아틸렌기가 바람직하고, 탄소수 6~20의 아틸렌기가 더 바람직하며, 구체적으로는 상기 R에 관하여 설명한 아틸기로부터 수소 원자(중수소 원자를 포함함) 1개를 제거하여 형성되는 2가 기를 들 수 있다. L이 나타내는 각 기의 치환기는 상기 R에 관하여 설명한 것과 동일하다.

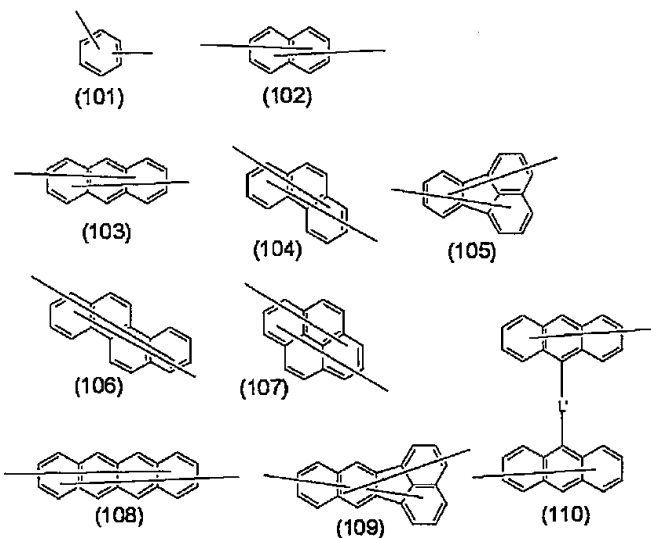
[0456] 또한, L은 하기로 이루어진 군으로부터 선택되는 기이면 바람직하다.



[0457]

[0458] 상기 화학식 (201)에서,  $Ar^1$ 은 치환기를 갖고 있어도 좋은 탄소수 6~60의 아틸렌기, 치환기를 갖고 있어도 좋은 피리딘일렌기 또는 치환기를 갖고 있어도 좋은 퀴놀린일렌기이다.  $Ar^1$  및  $Ar^3$ 이 나타내는 각 기의 치환기는 각각 상기 R에 관하여 설명한 것과 동일하다.

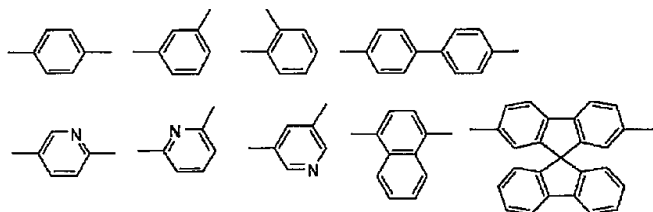
[0459] 또한,  $Ar^1$ 은 하기 화학식 (101)~(110)으로 표시되는 축합환기로부터 선택되는 어느 하나의 기이면 바람직하다.



[0460]

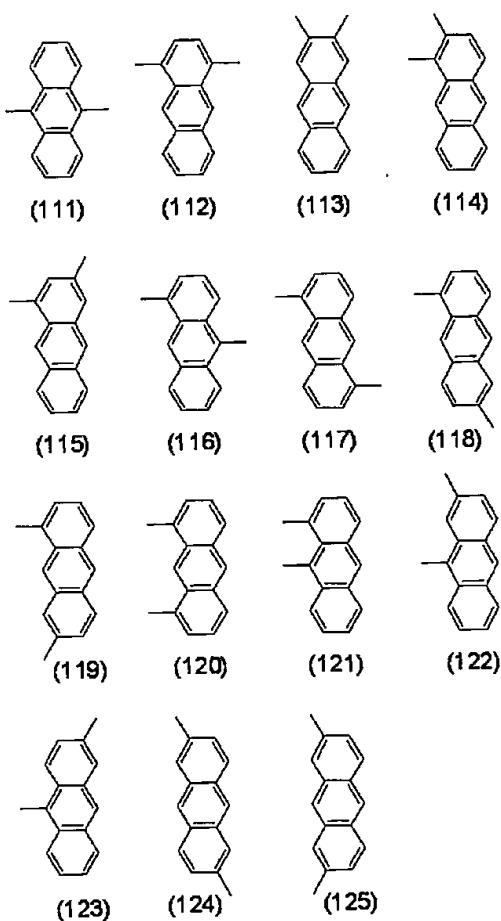
[0461] 상기 화학식 (101)~(110) 중, 각각의 축합환은 할로젠 원자, 치환기를 갖고 있어도 좋은 탄소수 1~20의 알킬기, 치환기를 갖고 있어도 좋은 탄소수 1~20의 알콕시기, 치환기를 갖고 있어도 좋은 탄소수 6~40의 아릴옥시기, 치환기를 갖고 있어도 좋은 탄소수 6~40의 아릴기 또는 치환기를 갖고 있어도 좋은 탄소수 3~40의 헤테로아릴기로 이루어지는 결합기가 결합하고 있어도 좋고, 상기 결합기가 복수 있는 경우는 상기 결합기는 서로 동일하여도 상이하여도 좋다. 이들 각 기의 구체예로서는 상기와 동일한 것을 들 수 있다.

[0462] 상기 화학식 (110)에서, L'는 단일 결합, 또는 하기로 이루어진 군으로부터 선택되는 기이다.



[0463]

[0464] Ar<sup>1</sup>이 나타내는 상기 화학식 (103)이 하기 화학식 (111)~(125)로 표시되는 축합환기이면 바람직하다.



[0465]

[0466] 상기 화학식 (111)~(125) 중, 각각의 축합환은 할로젠 원자, 치환기를 갖고 있어도 좋은 탄소수 1~20의 알킬기, 치환기를 갖고 있어도 좋은 탄소수 1~20의 알콕시기, 치환기를 갖고 있어도 좋은 탄소수 6~40의 아릴옥시기, 치환기를 갖고 있어도 좋은 탄소수 6~40의 아릴기 또는 치환기를 갖고 있어도 좋은 탄소수 3~40의 헤테로아릴기로 이루어지는 결합기가 결합하고 있어도 좋고, 상기 결합기가 복수 있는 경우는 상기 결합기는 서로 동일하여도 상이하여도 좋다. 이들 각 기의 구체예로서는 상기와 동일한 것을 들 수 있다.

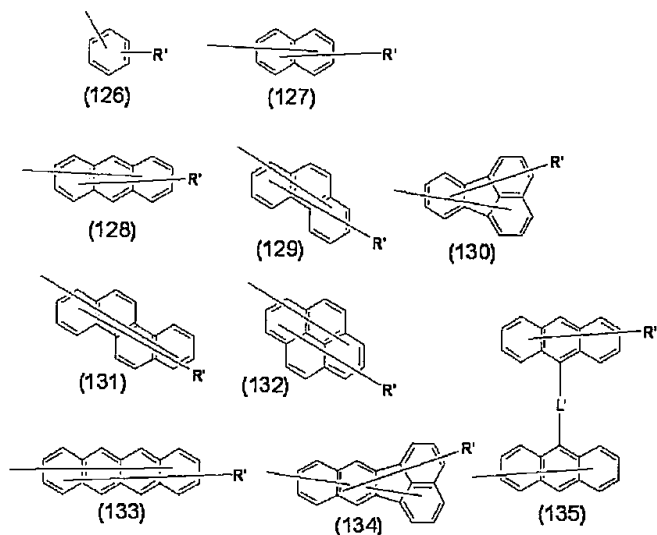
[0467] 상기 화학식 (201)에서, Ar<sup>2</sup>는 치환기를 갖고 있어도 좋은 탄소수 6~60의 아릴기, 치환기를 갖고 있어도 좋은 피리딜기, 치환기를 갖고 있어도 좋은 퀴놀릴기, 치환기를 갖고 있어도 좋은 탄소수 1~20의 알킬기 또는 치환기를 갖고 있어도 좋은 탄소수 1~20의 알콕시기이다.

[0468] 이들 각 기의 구체예, 바람직한 탄소수 및 치환기는 상기 R에 관하여 설명한 것과 동일하다.

[0469] 상기 화학식 (202) 및 (203)에서,  $Ar^3$ 은 치환기를 갖고 있어도 좋은 탄소수 6~60의 아릴기, 치환기를 갖고 있어도 좋은 피리딜기, 치환기를 갖고 있어도 좋은 퀴놀릴기, 치환기를 갖고 있어도 좋은 탄소수 1~20의 알킬기, 치환기를 갖고 있어도 좋은 탄소수 1~20의 알콕시기, 또는  $-Ar^1-Ar^2$ 로 표시되는 기( $Ar^1$  및  $Ar^2$ 는 각각 상기와 동일함)이다.

[0470] 이들 각 기의 구체예, 바람직한 탄소수 및 치환기는 상기 R에 관하여 설명한 것과 동일하다.

[0471] 또한,  $Ar^3$ 은 하기 화학식 (126)~(135)로 표시되는 축합환기로부터 선택되는 어느 하나의 기이면 바람직하다.



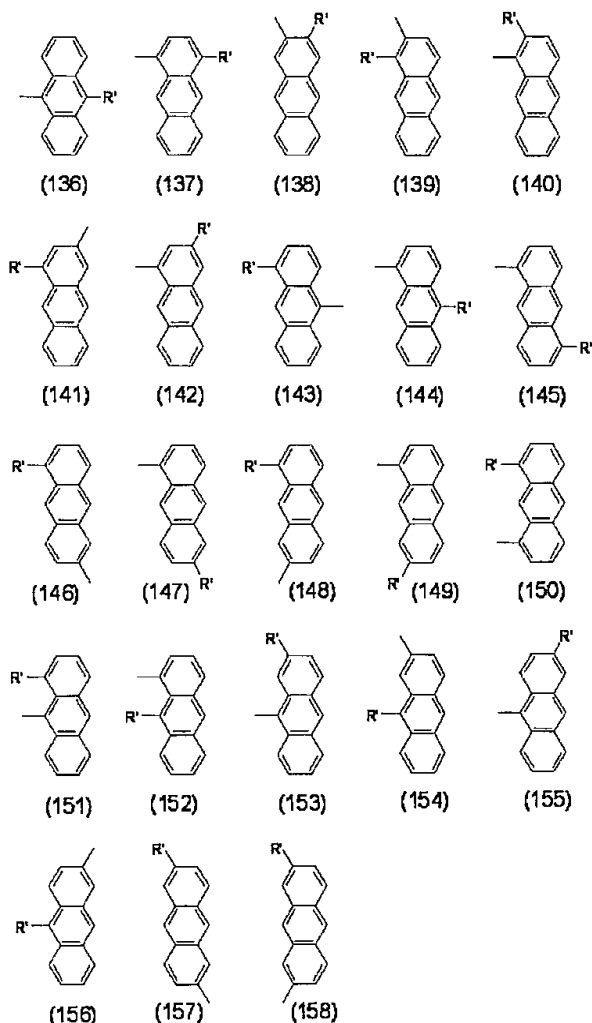
[0472]

[0473] 상기 화학식 (126)~(135) 중, 각각의 축합환은 할로젠 원자, 치환기를 갖고 있어도 좋은 탄소수 1~20의 알킬기, 치환기를 갖고 있어도 좋은 탄소수 1~20의 알콕시기, 치환기를 갖고 있어도 좋은 탄소수 6~40의 아릴옥시기, 치환기를 갖고 있어도 좋은 탄소수 6~40의 아릴기 또는 치환기를 갖고 있어도 좋은 탄소수 3~40의 헤테로아릴기로 이루어지는 결합기가 결합하고 있어도 좋고, 상기 결합기가 복수 있는 경우는 상기 결합기는 서로 동일하여도 상이하여도 좋다. 이들 각 기의 구체예로서는 상기와 동일한 것을 들 수 있다.

[0474] 상기 화학식 (135)에서, L'는 상기와 동일하다.

[0475] 상기 화학식 (126)~(135)에서, R'는 수소 원자(중수소 원자를 포함함), 치환기를 갖고 있어도 좋은 탄소수 1~20의 알킬기, 치환기를 갖고 있어도 좋은 탄소수 6~40의 아릴기 또는 치환기를 갖고 있어도 좋은 탄소수 3~40의 헤테로아릴기이다. 이들 각 기의 구체예로서는 상기와 동일한 것을 들 수 있다.

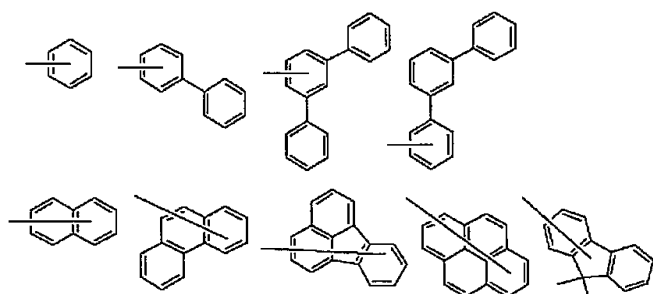
[0476]  $Ar^3$ 이 나타내는 화학식 (128)이 하기 화학식 (136)~(158)로 표시되는 축합환기이면 바람직하다.



[0477]

[0478] 상기 화학식 (136)~(158) 중, 각각의 축합환은 할로젠 원자, 치환기를 갖고 있어도 좋은 탄소수 1~20의 알킬기, 치환기를 갖고 있어도 좋은 탄소수 1~20의 알콕시기, 치환기를 갖고 있어도 좋은 탄소수 6~40의 아릴옥시기, 치환기를 갖고 있어도 좋은 탄소수 6~40의 아릴기 또는 치환기를 갖고 있어도 좋은 탄소수 3~40의 헤테로아릴기로 이루어지는 결합기가 결합하고 있어도 좋고, 상기 결합기가 복수 있는 경우는 상기 결합기는 서로 동일하여도 상이하여도 좋다. 이들 각 기의 구체예로서는 상기와 동일한 것을 들 수 있다.  $R'$ 는 상기와 동일하다.

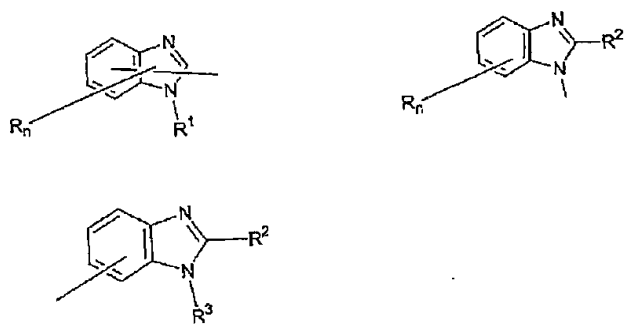
[0479] 또한,  $Ar^2$  및  $Ar^3$ 은 각각 독립적으로 하기로 이루어진 군으로부터 선택되는 기이면 바람직하다.



[0480]

[0481] 본 발명의 상기 화학식 (201)~(203)으로 표시되는 질소 함유 헤테로환 유도체의 구체예를 하기에 나타내지만, 본 발명은 이들 예시 화합물에 한정되는 것은 아니다.

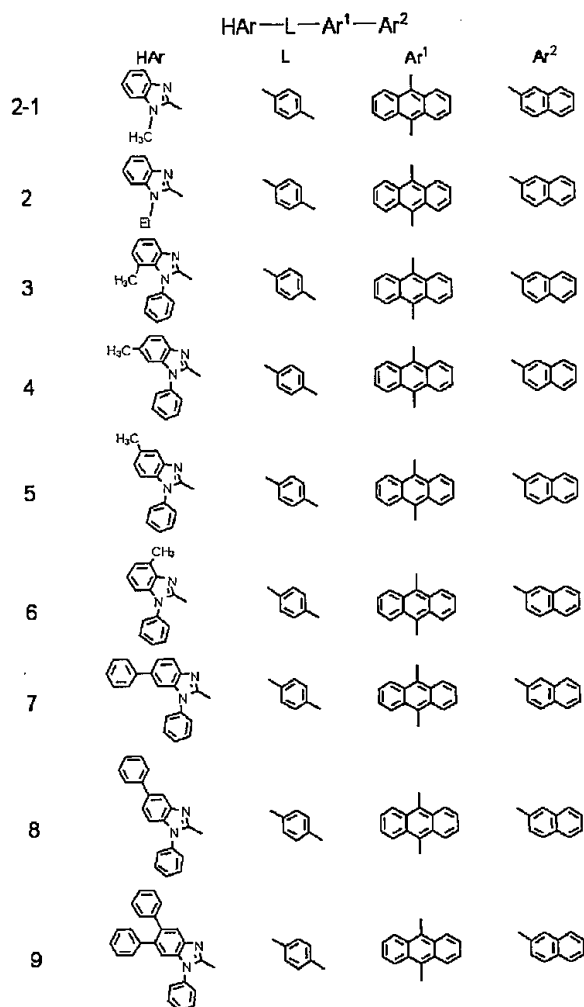
[0482] 한편, 하기 표에서, HAr은 상기 화학식 (201)~(203)에서의 하기 구조를 나타낸다.



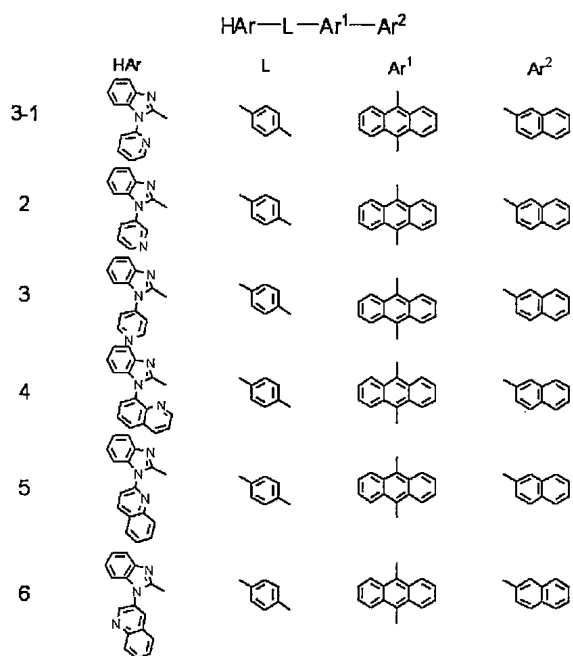
[0483]

|     | HAr | $\text{HAr}-\text{L}-\text{Ar}^1-\text{Ar}^2$ | $\text{Ar}^2$ |
|-----|-----|---|---------------|
| 1-1 |     |   |               |
| 2   |     |   |               |
| 3   |     |   |               |
| 4   |     |   |               |
| 5   |     |   |               |
| 6   |     |   |               |
| 7   |     |   |               |
| 8   |     |   |               |
| 9   |     |   |               |
| 10  |     |   |               |
| 11  |     |   |               |
| 12  |     |   |               |
| 13  |     |   |               |
| 14  |     |   |               |

[0484]

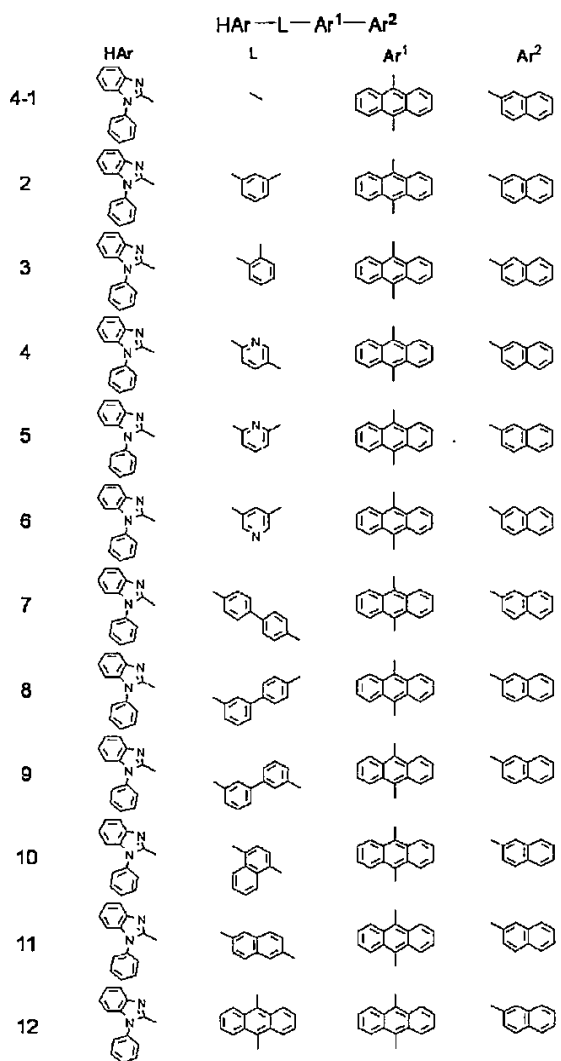


[0485]

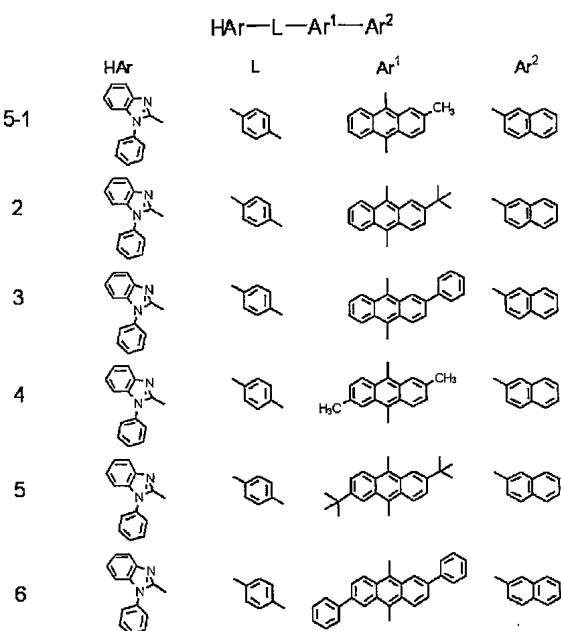


[0486]



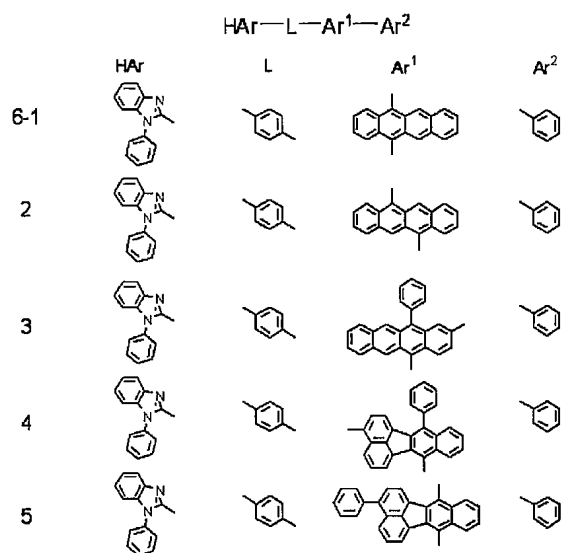


[0487]

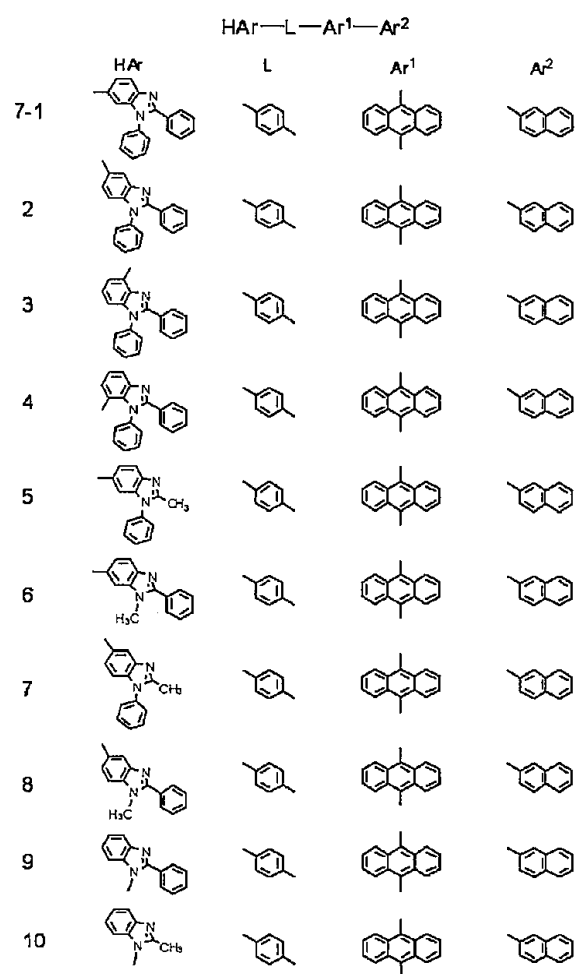


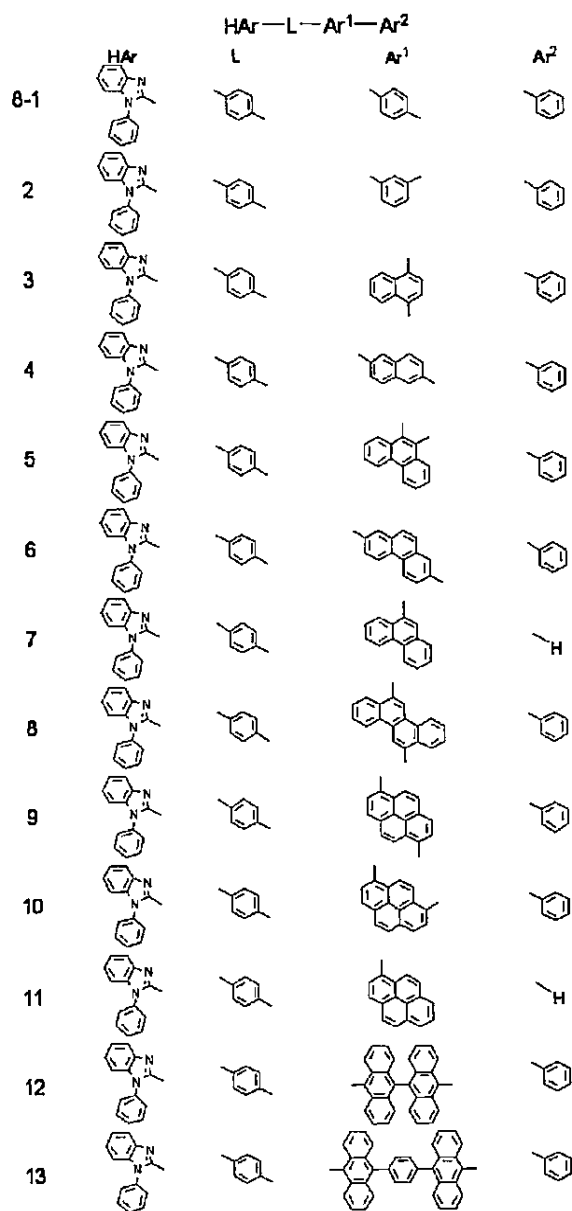
[0488]

[0489]

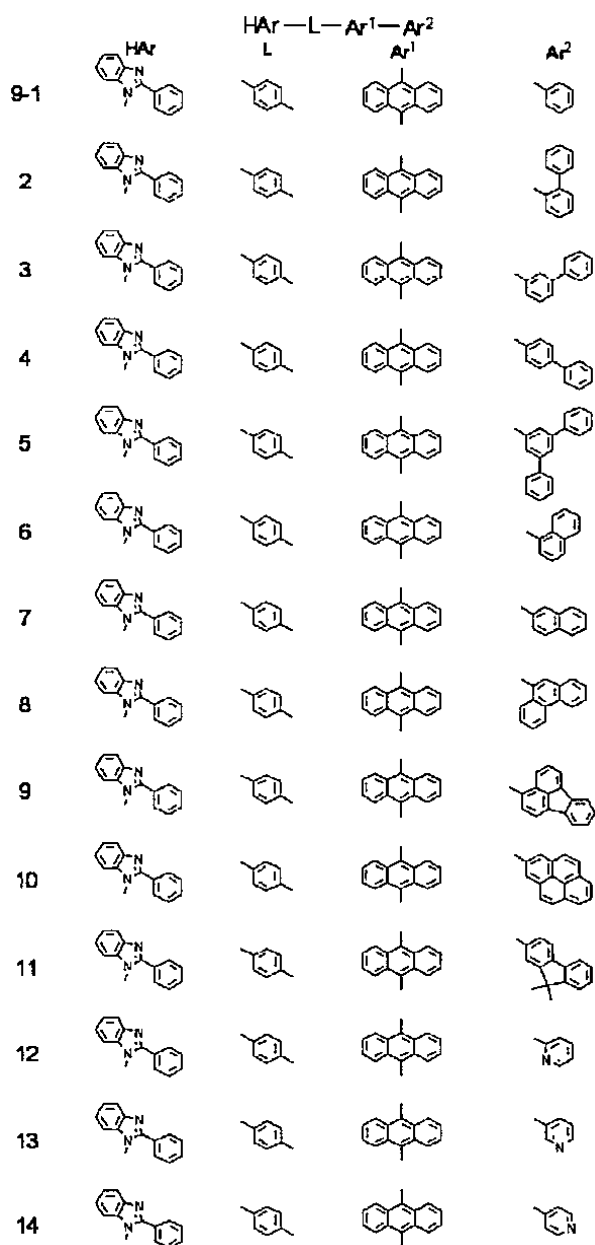


[0490]

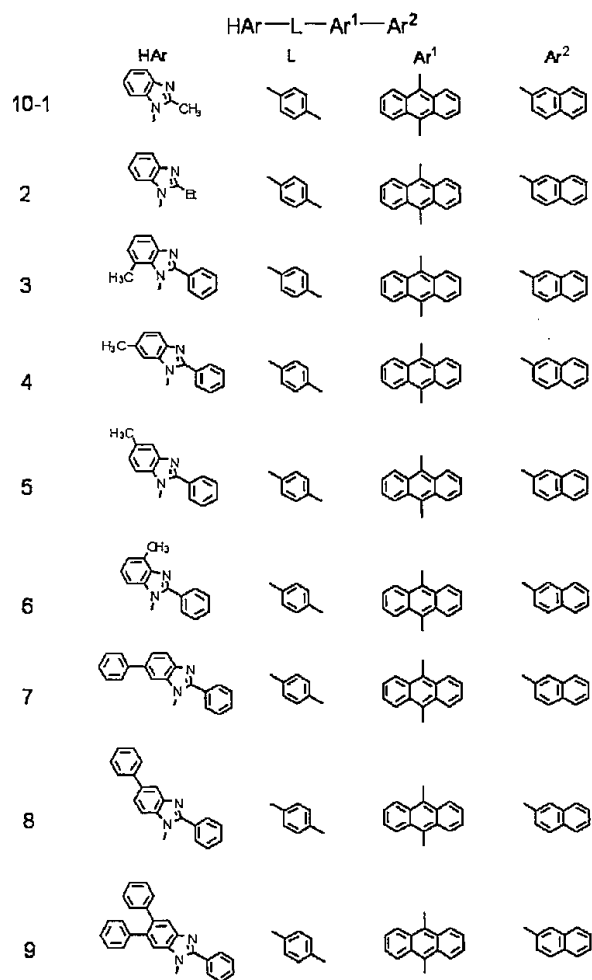




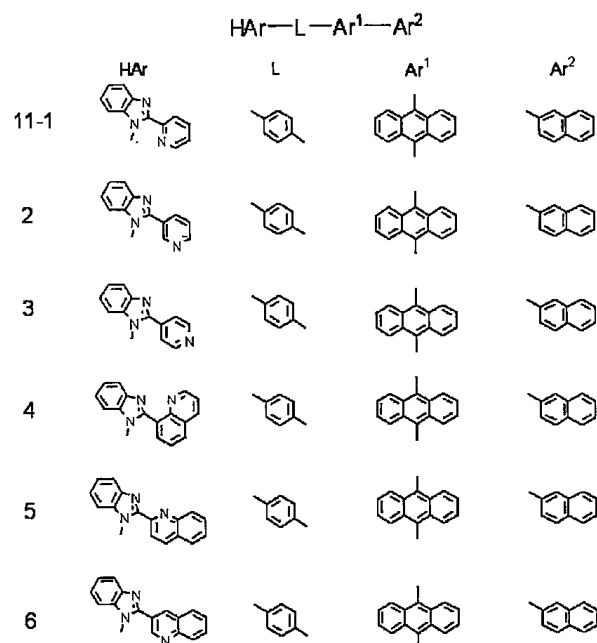
[0491]



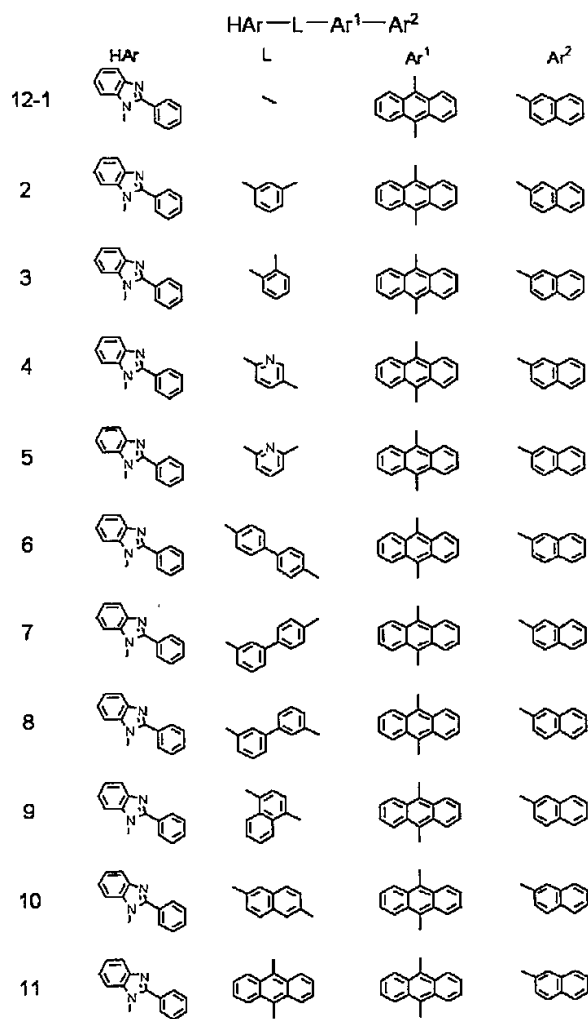
[0492]



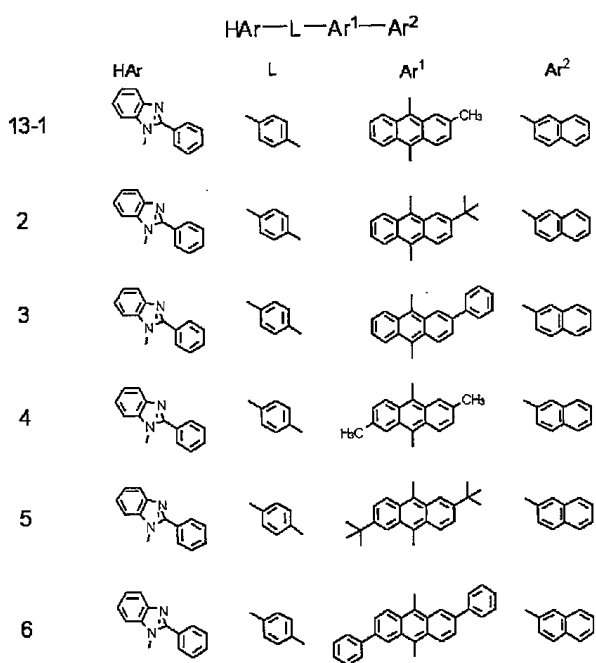
[0493]



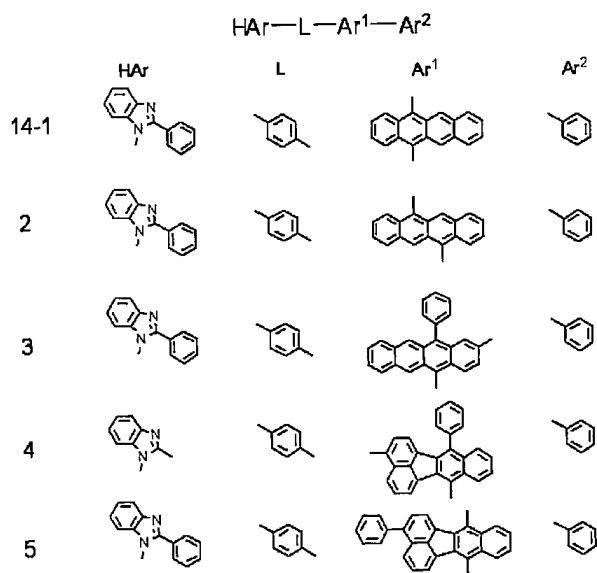
[0494]



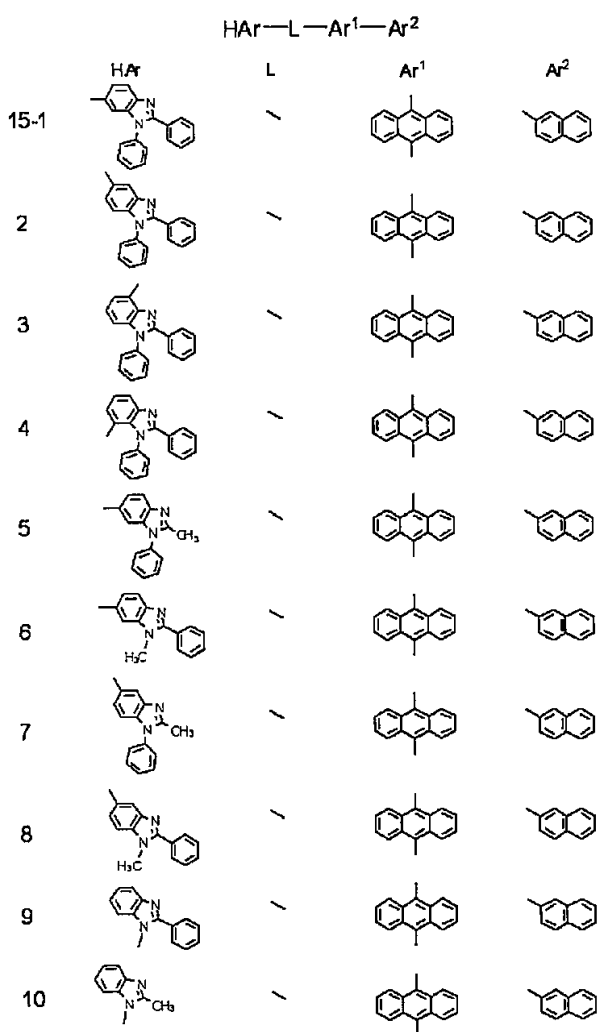
[0495]



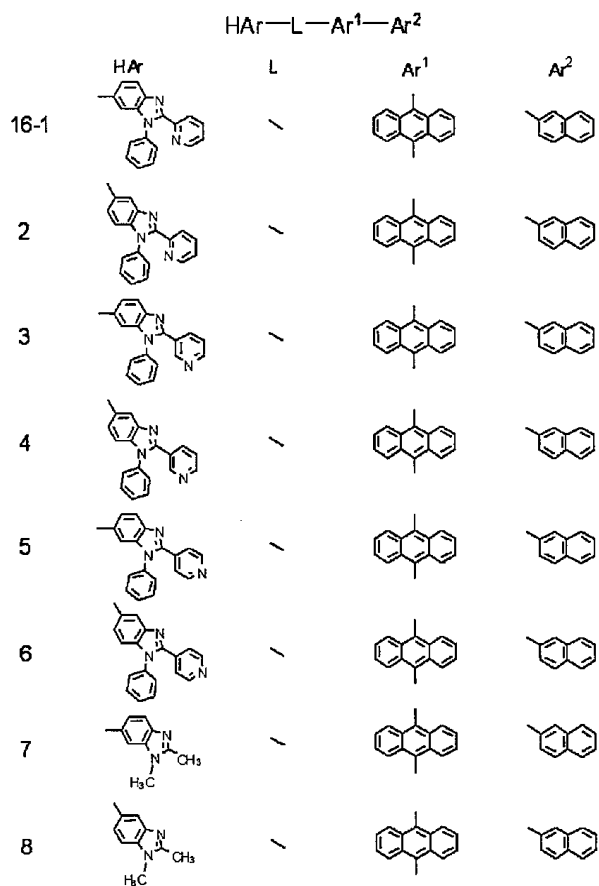
[0496]



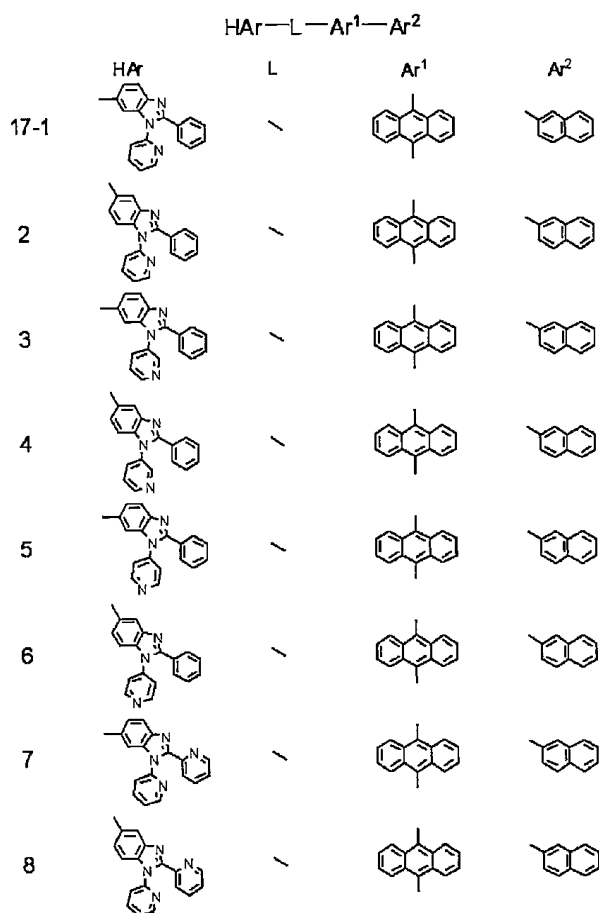
[0497]



[0498]



[0499]



[0500]

[0501] 이상의 구체예 중, 특히, (1-1), (1-5), (1-7), (2-1), (3-1), (4-2), (4-6), (7-2), (7-7), (7-8), (7-9),



(9-1), (9-7)이 바람직하다.

[0502] 한편, 전자 주입층 또는 전자 수송층의 막 두께는 특별히 한정되지 않지만, 바람직하게는 1~100nm이다.

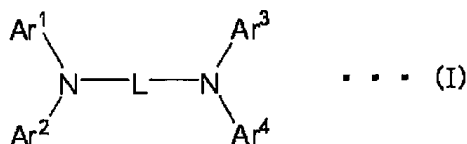
[0503] 또한, 전자 주입층의 구성 성분으로서, 질소 함유 환 유도체 외에 무기 화합물로서 절연체 또는 반도체를 사용하는 것이 바람직하다. 전자 주입층이 절연체나 반도체로 구성되어 있으면, 전류의 누출을 유효하게 방지하여 전자 주입성을 향상시킬 수 있다.

[0504] 이러한 절연체로서는, 알칼리 금속 칼코게나이드, 알칼리 토류 금속 칼코게나이드, 알칼리 금속의 할로젠화물 및 알칼리 토류 금속의 할로젠화물로 이루어진 군으로부터 선택되는 적어도 하나의 금속 화합물을 사용하는 것이 바람직하다. 전자 주입층이 이들 알칼리 금속 칼코게나이드 등으로 구성되어 있으면, 전자 주입성을 더욱 향상시킬 수 있다는 점에서 바람직하다. 구체적으로, 바람직한 알칼리 금속 칼코게나이드로서는 예컨대  $\text{Li}_2\text{O}$ ,  $\text{K}_2\text{O}$ ,  $\text{Na}_2\text{S}$ ,  $\text{Na}_2\text{Se}$  및  $\text{Na}_2\text{O}$ 를 들 수 있고, 바람직한 알칼리 토류 금속 칼코게나이드로서는 예컨대  $\text{CaO}$ ,  $\text{BaO}$ ,  $\text{SrO}$ ,  $\text{BeO}$ ,  $\text{BaS}$  및  $\text{CaSe}$ 를 들 수 있다. 또한, 바람직한 알칼리 금속의 할로젠화물로서는 예컨대  $\text{LiF}$ ,  $\text{NaF}$ ,  $\text{KF}$ ,  $\text{LiCl}$ ,  $\text{KCl}$  및  $\text{NaCl}$  등을 들 수 있다. 또한, 바람직한 알칼리 토류 금속의 할로젠화물로서는 예컨대  $\text{CaF}_2$ ,  $\text{BaF}_2$ ,  $\text{SrF}_2$ ,  $\text{MgF}_2$  및  $\text{BeF}_2$  등의 불화물이나, 불화물 이외의 할로젠화물을 들 수 있다.

[0505] 또한, 반도체로서는, Ba, Ca, Sr, Yb, Al, Ga, In, Li, Na, Cd, Mg, Si, Ta, Sb 및 Zn 중 적어도 하나의 원소를 포함하는 산화물, 질화물 또는 산화질화물 등의 1종 단독 또는 2종 이상의 조합을 들 수 있다. 또한, 전자 주입층을 구성하는 무기 화합물이 미세결정 또는 비정질의 절연성 박막인 것이 바람직하다. 전자 주입층이 이들 절연성 박막으로 구성되어 있으면, 보다 균질한 박막이 형성되기 때문에 다크 스팟 등의 화소 결함을 감소시킬 수 있다. 한편, 이러한 무기 화합물로서는, 알칼리 금속 칼코게나이드, 알칼리 토류 금속 칼코게나이드, 알칼리 금속의 할로젠화물 및 알칼리 토류 금속의 할로젠화물 등을 들 수 있다.

[0506] 이러한 절연체 또는 반도체를 사용하는 경우, 그 층의 바람직한 두께는 0.1nm~15nm 정도이다. 또한, 본 발명에 있어서의 전자 주입층은 전술한 환원성 도펀트를 함유하고 있어도 바람직하다.

[0507] 정공 주입층 또는 정공 수송층(정공 주입 수송층도 포함함)에는 방향족 아민 화합물, 예컨대 하기 화학식 (I)로 표시되는 방향족 아민 유도체가 적합하게 이용된다.



[0508]

[0509] 상기 화학식 (I)에서,  $\text{Ar}^1 \sim \text{Ar}^4$ 는 치환 또는 비치환된 환 형성 탄소수 6~50의 아릴기, 치환 또는 비치환된 핵 원자수 5~50의 헤테로아릴기, 또는 이들 아릴기와 헤테로아릴기를 결합시킨 기를 나타낸다.

[0510] 치환 또는 비치환된 환 형성 탄소수 6~50의 아릴기로서는, 예컨대 페닐기, 1-나프틸기, 2-나프틸기, 1-안트릴기, 2-안트릴기, 9-안트릴기, 1-페난트릴기, 2-페난트릴기, 3-페난트릴기, 4-페난트릴기, 9-페난트릴기, 1-나프타센일기, 2-나프타센일기, 9-나프타센일기, 1-피렌일기, 2-피렌일기, 4-피렌일기, 2-바이페닐일기, 3-바이페닐일기, 4-바이페닐일기, p-터페닐-4-일기, p-터페닐-3-일기, p-터페닐-2-일기, m-터페닐-4-일기, m-터페닐-3-일기, m-터페닐-2-일기, o-톨릴기, m-톨릴기, p-톨릴기, p-t-뷰틸페닐기, p-(2-페닐프로필)페닐기, 3-메틸-2-나프틸기, 4-메틸-1-나프틸기, 4-메틸-1-안트릴기, 4'-메틸바이페닐일기, 4"-t-뷰틸-p-터페닐-4-일기, 플루오렌일기 등을 들 수 있다.

[0511] 치환 또는 비치환된 핵 원자수 5~50의 헤테로아릴기로서는, 예컨대 1-피롤일기, 2-피롤일기, 3-피롤일기, 피라진일기, 2-피리딘일기, 3-피리딘일기, 4-피리딘일기, 1-인돌일기, 2-인돌일기, 3-인돌일기, 4-인돌일기, 5-인돌일기, 6-인돌일기, 7-인돌일기, 1-아이소인돌일기, 2-아이소인돌일기, 3-아이소인돌일기, 4-아이소인돌일기, 5-아이소인돌일기, 6-아이소인돌일기, 7-아이소인돌일기, 2-퓨릴기, 3-퓨릴기, 2-벤조퓨란일기, 3-벤조퓨란일기, 4-벤조퓨란일기, 5-벤조퓨란일기, 6-벤조퓨란일기, 7-벤조퓨란일기, 1-아이소벤조퓨란일기, 3-아이소벤조퓨란일기, 4-아이소벤조퓨란일기, 5-아이소벤조퓨란일기, 6-아이소벤조퓨란일기, 7-아이소벤조퓨란일기, 퀴놀릴기, 3-퀴놀릴기, 4-퀴놀릴기, 5-퀴놀릴기, 6-퀴놀릴기, 7-퀴놀릴기, 8-퀴놀릴기, 1-아이소퀴놀릴기, 3-아이소퀴놀릴기, 4-아이소퀴놀릴기, 5-아이소퀴놀릴기, 6-아이소퀴놀릴기, 7-아이소퀴놀릴기, 8-아이소퀴놀릴기, 2-퀴녹살린일기, 5-퀴녹살린일기, 6-퀴녹살린일기, 1-카바졸릴기, 2-카바졸릴기, 3-카바졸릴기, 4-카바졸릴기

기, 9-카바졸릴기, 1-페난트리딘릴기, 2-페난트리딘릴기, 3-페난트리딘릴기, 4-페난트리딘릴기, 6-페난트리딘릴기, 7-페난트리딘릴기, 8-페난트리딘릴기, 9-페난트리딘릴기, 10-페난트리딘릴기, 1-아크리딘릴기, 2-아크리딘릴기, 3-아크리딘릴기, 4-아크리딘릴기, 9-아크리딘릴기, 1,7-페난트롤린-2-일기, 1,7-페난트롤린-3-일기, 1,7-페난트롤린-4-일기, 1,7-페난트롤린-5-일기, 1,7-페난트롤린-6-일기, 1,7-페난트롤린-8-일기, 1,7-페난트롤린-9-일기, 1,7-페난트롤린-10-일기, 1,8-페난트롤린-2-일기, 1,8-페난트롤린-3-일기, 1,8-페난트롤린-4-일기, 1,8-페난트롤린-5-일기, 1,8-페난트롤린-6-일기, 1,8-페난트롤린-7-일기, 1,8-페난트롤린-9-일기, 1,8-페난트롤린-10-일기, 1,9-페난트롤린-2-일기, 1,9-페난트롤린-3-일기, 1,9-페난트롤린-4-일기, 1,9-페난트롤린-5-일기, 1,9-페난트롤린-6-일기, 1,9-페난트롤린-7-일기, 1,9-페난트롤린-8-일기, 1,9-페난트롤린-10-일기, 1,10-페난트롤린-2-일기, 1,10-페난트롤린-3-일기, 1,10-페난트롤린-4-일기, 1,10-페난트롤린-5-일기, 2,9-페난트롤린-1-일기, 2,9-페난트롤린-3-일기, 2,9-페난트롤린-4-일기, 2,9-페난트롤린-5-일기, 2,9-페난트롤린-6-일기, 2,9-페난트롤린-7-일기, 2,9-페난트롤린-8-일기, 2,9-페난트롤린-10-일기, 2,8-페난트롤린-1-일기, 2,8-페난트롤린-3-일기, 2,8-페난트롤린-4-일기, 2,8-페난트롤린-5-일기, 2,8-페난트롤린-6-일기, 2,8-페난트롤린-7-일기, 2,8-페난트롤린-9-일기, 2,8-페난트롤린-10-일기, 2,7-페난트롤린-1-일기, 2,7-페난트롤린-3-일기, 2,7-페난트롤린-4-일기, 2,7-페난트롤린-5-일기, 2,7-페난트롤린-6-일기, 2,7-페난트롤린-8-일기, 2,7-페난트롤린-9-일기, 2,7-페난트롤린-10-일기, 1-페나진일기, 2-페나진일기, 1-페노싸이아진일기, 2-페노싸이아진일기, 3-페노싸이아진일기, 4-페노싸이아진일기, 10-페노싸이아진일기, 1-페녹사진일기, 2-페녹사진일기, 3-페녹사진일기, 4-페녹사진일기, 10-페녹사진일기, 2-옥사졸릴기, 4-옥사졸릴기, 5-옥사졸릴기, 2-옥사다이하졸릴기, 5-옥사다이하졸릴기, 3-퓨라잔일기, 2-싸이엔일기, 3-싸이엔일기, 2-메틸피롤-1-일기, 2-메틸피롤-3-일기, 2-메틸피롤-4-일기, 2-메틸피롤-5-일기, 3-메틸피롤-1-일기, 3-메틸피롤-2-일기, 3-메틸피롤-4-일기, 3-메틸피롤-5-일기, 2-t-뷰틸피롤-4-일기, 3-(2-페닐프로필)피롤-1-일기, 2-메틸-1-인돌릴기, 4-메틸-1-인돌릴기, 2-메틸-3-인돌릴기, 4-메틸-3-인돌릴기, 2-t-뷰틸-1-인돌릴기, 4-t-뷰틸-1-인돌릴기, 2-t-뷰틸-3-인돌릴기, 4-t-뷰틸-3-인돌릴기 등을 들 수 있다. 바람직하게는 페닐기, 나프틸기, 바이페닐기, 안트라닐기, 페난트릴기, 피렌일기, 크라이센일기, 플루오란텐일기, 플루오렌일기 등을 들 수 있다.

[0512] L은 연결기이다. 구체적으로는, 치환 또는 비치환된 환 형성 탄소수 6~50의 아릴렌기, 치환 또는 비치환된 핵 원자수 5~50의 헤테로아릴렌기, 또는 2개 이상의 아릴렌기 또는 헤테로아릴렌기를 단일 결합, 에터 결합, 싸이오에터 결합, 탄소수 1~20의 알킬렌기, 탄소수 2~20의 알켄일렌기, 아미노기로 결합하여 얻어지는 2가 기이다. 환 형성 탄소수 6~50의 아릴렌기로서는, 예컨대 1,4-페닐렌기, 1,2-페닐렌기, 1,3-페닐렌기, 1,4-나프틸렌기, 2,6-나프틸렌기, 1,5-나프틸렌기, 9,10-안트라닐렌기, 9,10-페난트렌일렌기, 3,6-페난트렌일렌기, 1,6-피렌일렌기, 2,7-피렌일렌기, 6,12-크라이센일렌기, 4,4'-바이페닐렌기, 3,3'-바이페닐렌기, 2,2'-바이페닐렌기, 2,7-플루오렌일렌기 등을 들 수 있다. 핵 원자수 5~50의 아릴렌기로서는, 예컨대 2,5-싸이오페닐렌기, 2,5-실릴렌기, 2,5-옥사다이하졸릴렌기 등을 들 수 있다. 바람직하게는 1,4-페닐렌기, 1,2-페닐렌기, 1,3-페닐렌기, 1,4-나프틸렌기, 9,10-안트라닐렌기, 6,12-크라이센일렌기, 4,4'-바이페닐렌기, 3,3'-바이페닐렌기, 2,2'-바이페닐렌기, 2,7-플루오렌일렌기이다.

[0513] L이 2개 이상의 아릴렌기 또는 헤테로아릴렌기로 이루어지는 연결기인 경우, 이웃하는 아릴렌기 또는 헤테로아릴렌기는 2가 기를 통해 서로 결합하여 새로운 환을 형성하여도 좋다. 환을 형성하는 2가 기의 예로서는, 테트라메틸렌기, 펜타메틸렌기, 헥사메틸렌기, 다이페닐메테인-2,2'-다이일기, 다이페닐에테인-3,3'-다이일기, 다이페닐프로페인-4,4'-다이일기 등을 들 수 있다.

[0514]  $Ar^1 \sim Ar^4$  및 L의 치환기로서는, 치환 또는 비치환된 환 형성 탄소수 6~50의 아릴기, 치환 또는 비치환된 핵 원자수 5~50의 헤테로아릴기, 치환 또는 비치환된 탄소수 1~50의 알킬기, 치환 또는 비치환된 환 형성 탄소수 3~50의 사이클로알킬기, 치환 또는 비치환된 탄소수 1~50의 알콕시기, 치환 또는 비치환된 탄소수 7~50의 아르알킬기, 치환 또는 비치환된 환 형성 탄소수 6~50의 아릴옥시기, 치환 또는 비치환된 핵 원자수 5~50의 헤테로아릴옥시기, 치환 또는 비치환된 환 형성 탄소수 6~50의 아릴싸이오기, 치환 또는 비치환된 핵 원자수 5~50의 헤테로아릴싸이오기, 치환 또는 비치환된 탄소수 2~50의 알콕시카보닐기, 치환 또는 비치환된 환 형성 탄소수 6~50의 아릴기 또는 치환 또는 비치환된 핵 원자수 5~50의 헤테로아릴기로 치환된 아미노기, 할로젠기, 사이아노기, 나이트로기, 하이드록실기 등을 들 수 있다.

[0515] 치환 또는 비치환된 환 형성 탄소수 6~50의 아릴기의 예로서는, 페닐기, 1-나프틸기, 2-나프틸기, 1-안트릴기, 2-안트릴기, 9-안트릴기, 1-페난트릴기, 2-페난트릴기, 3-페난트릴기, 4-페난트릴기, 9-페난트릴기, 1-나프타센일기, 2-나프타센일기, 9-나프타센일기, 1-피렌일기, 2-피렌일기, 4-피렌일기, 2-바이페닐일기, 3-바이페닐일기, 4-바이페닐일기, p-터페닐-4-일기, p-터페닐-3-일기, p-터페닐-2-일기, m-터페닐-4-일기, m-터

페닐-3-일기, m-터페닐-2-일기, o-톨릴기, m-톨릴기, p-톨릴기, p-t-뷰틸페닐기, p-(2-페닐프로필)페닐기, 3-메틸-2-나프틸기, 4-메틸-1-나프틸기, 4-메틸-1-안트릴기, 4'-메틸바이페닐일기, 4"-t-뷰틸-p-터페닐-4-일기, 플루오란틸기, 플루오렌일기 등을 들 수 있다.

[0516] 치환 또는 비치환된 핵 원자수 5~50의 헤테로아릴기의 예로서는, 1-피롤일기, 2-피롤일기, 3-피롤일기, 피라진일기, 2-피리딘일기, 3-피리딘일기, 4-피리딘일기, 1-인돌릴기, 2-인돌릴기, 3-인돌릴기, 4-인돌릴기, 5-인돌릴기, 6-인돌릴기, 7-인돌릴기, 1-아이소인돌릴기, 2-아이소인돌릴기, 3-아이소인돌릴기, 4-아이소인돌릴기, 5-아이소인돌릴기, 6-아이소인돌릴기, 7-아이소인돌릴기, 2-퓨릴기, 3-퓨릴기, 2-벤조퓨란일기, 3-벤조퓨란일기, 4-벤조퓨란일기, 5-벤조퓨란일기, 6-벤조퓨란일기, 7-벤조퓨란일기, 1-아이소벤조퓨란일기, 3-아이소벤조퓨란일기, 4-아이소벤조퓨란일기, 5-아이소벤조퓨란일기, 6-아이소벤조퓨란일기, 7-아이소벤조퓨란일기, 퀴놀릴기, 3-퀴놀릴기, 4-퀴놀릴기, 5-퀴놀릴기, 6-퀴놀릴기, 7-퀴놀릴기, 8-퀴놀릴기, 1-아이소퀴놀릴기, 3-아이소퀴놀릴기, 4-아이소퀴놀릴기, 5-아이소퀴놀릴기, 6-아이소퀴놀릴기, 7-아이소퀴놀릴기, 8-아이소퀴놀릴기, 2-퀴녹살린일기, 5-퀴녹살린일기, 6-퀴녹살린일기, 1-카바졸릴기, 2-카바졸릴기, 3-카바졸릴기, 4-카바졸릴기, 9-카바졸릴기, 1-페난트리딘일기, 2-페난트리딘일기, 3-페난트리딘일기, 4-페난트리딘일기, 6-페난트리딘일기, 7-페난트리딘일기, 8-페난트리딘일기, 9-페난트리딘일기, 10-페난트리딘일기, 1-아크리딘일기, 2-아크리딘일기, 3-아크리딘일기, 4-아크리딘일기, 9-아크리딘일기, 1,7-페난트롤린-2-일기, 1,7-페난트롤린-3-일기, 1,7-페난트롤린-4-일기, 1,7-페난트롤린-5-일기, 1,7-페난트롤린-6-일기, 1,7-페난트롤린-8-일기, 1,7-페난트롤린-9-일기, 1,7-페난트롤린-10-일기, 1,8-페난트롤린-2-일기, 1,8-페난트롤린-3-일기, 1,8-페난트롤린-4-일기, 1,8-페난트롤린-5-일기, 1,8-페난트롤린-6-일기, 1,8-페난트롤린-7-일기, 1,8-페난트롤린-9-일기, 1,8-페난트롤린-10-일기, 1,9-페난트롤린-2-일기, 1,9-페난트롤린-3-일기, 1,9-페난트롤린-4-일기, 1,9-페난트롤린-5-일기, 1,9-페난트롤린-6-일기, 1,9-페난트롤린-7-일기, 1,9-페난트롤린-8-일기, 1,9-페난트롤린-10-일기, 1,10-페난트롤린-2-일기, 1,10-페난트롤린-3-일기, 1,10-페난트롤린-4-일기, 1,10-페난트롤린-5-일기, 2,9-페난트롤린-1-일기, 2,9-페난트롤린-3-일기, 2,9-페난트롤린-4-일기, 2,9-페난트롤린-5-일기, 2,9-페난트롤린-6-일기, 2,9-페난트롤린-7-일기, 2,9-페난트롤린-8-일기, 2,9-페난트롤린-10-일기, 2,8-페난트롤린-1-일기, 2,8-페난트롤린-3-일기, 2,8-페난트롤린-4-일기, 2,8-페난트롤린-5-일기, 2,8-페난트롤린-6-일기, 2,8-페난트롤린-7-일기, 2,8-페난트롤린-9-일기, 2,8-페난트롤린-10-일기, 2,7-페난트롤린-1-일기, 2,7-페난트롤린-3-일기, 2,7-페난트롤린-4-일기, 2,7-페난트롤린-5-일기, 2,7-페난트롤린-6-일기, 2,7-페난트롤린-8-일기, 2,7-페난트롤린-9-일기, 2,7-페난트롤린-10-일기, 1-페나진일기, 2-페나진일기, 1-페노싸이아진일기, 2-페노싸이아진일기, 3-페노싸이아진일기, 4-페노싸이아진일기, 10-페노싸이아진일기, 1-페녹사진일기, 2-페녹사진일기, 3-페녹사진일기, 4-페녹사진일기, 10-페녹사진일기, 2-옥사졸릴기, 4-옥사졸릴기, 5-옥사졸릴기, 2-옥사다이하졸릴기, 5-옥사다이하졸릴기, 3-푸라잔일기, 2-싸이엔일기, 3-싸이엔일기, 2-메틸피롤-1-일기, 2-메틸피롤-3-일기, 2-메틸피롤-4-일기, 2-메틸피롤-5-일기, 3-메틸피롤-1-일기, 3-메틸피롤-2-일기, 3-메틸피롤-4-일기, 3-메틸피롤-5-일기, 2-t-뷰틸피롤-4-일기, 3-(2-페닐프로필)피롤-1-일기, 2-메틸-1-인돌릴기, 4-메틸-1-인돌릴기, 2-메틸-3-인돌릴기, 4-메틸-3-인돌릴기, 2-t-뷰틸-1-인돌릴기, 4-t-뷰틸-1-인돌릴기, 2-t-뷰틸-3-인돌릴기, 4-t-뷰틸-3-인돌릴기 등을 들 수 있다.

[0517] 치환 또는 비치환된 탄소수 1~50의 알킬기의 예로서는, 메틸기, 에틸기, 프로필기, 아이소프로필기, n-뷰틸기, s-뷰틸기, 아이소뷰틸기, t-뷰틸기, n-펜틸기, n-헥실기, n-헵틸기, n-옥틸기, 하이드록시메틸기, 1-하이드록시에틸기, 2-하이드록시에틸기, 2-하이드록시아이소뷰틸기, 1,2-다이하이드록시에틸기, 1,3-다이하이드록시아이소프로필기, 2,3-다이하이드록시-t-뷰틸기, 1,2,3-트라이하이드록시프로필기, 클로로메틸기, 1-클로로에틸기, 2-클로로에틸기, 2-클로로아이소뷰틸기, 1,2-다이클로로에틸기, 1,3-다이클로로아이소프로필기, 2,3-다이클로로-t-뷰틸기, 1,2,3-트라이클로로프로필기, 브로모메틸기, 1-브로모에틸기, 2-브로모에틸기, 2-브로모아이소뷰틸기, 1,2-다이브로모에틸기, 1,3-다이브로모아이소프로필기, 2,3-다이브로모-t-뷰틸기, 1,2,3-트라이브로모프로필기, 요오도메틸기, 1-요오도에틸기, 2-요오도에틸기, 2-요오도아이소뷰틸기, 1,2-다이요오도에틸기, 1,3-다이요오도아이소프로필기, 2,3-다이요오도-t-뷰틸기, 1,2,3-트라이요오도프로필기, 아미노메틸기, 1-아미노에틸기, 2-아미노에틸기, 2-아미노아이소뷰틸기, 1,2-다이아미노에틸기, 1,3-다이아미노아이소프로필기, 2,3-다이아미노-t-뷰틸기, 1,2,3-트라이아미노프로필기, 사이아노메틸기, 1-사이아노에틸기, 2-사이아노에틸기, 2-사이아노아이소뷰틸기, 1,2-다이사이아노에틸기, 1,3-다이사이아노아이소프로필기, 2,3-다이사이아노-t-뷰틸기, 1,2,3-트라이사이아노프로필기, 나이트로메틸기, 1-나이트로에틸기, 2-나이트로에틸기, 2-나이트로아이소뷰틸기, 1,2-다이나이트로에틸기, 1,3-다이나이트로아이소프로필기, 2,3-다이나이트로-t-뷰틸기, 1,2,3-트라이나이트로프로필기 등을 들 수 있다.

[0518] 치환 또는 비치환된 환 형성 탄소수 3~50의 사이클로알킬기의 예로서는, 사이클로프로필기, 사이클로뷰틸기,

사이클로펜틸기, 사이클로헥실기, 4-메틸사이클로헥실기, 1-아다만틸기, 2-아다만틸기, 1-노보닐기, 2-노보닐기 등을 들 수 있다.

[0519] 치환 또는 비치환된 탄소수 1~50의 알콕시기는 -OY로 표시되는 기이다. Y의 예로서는, 메틸기, 에틸기, 프로필기, 아이소프로필기, n-뷰틸기, s-뷰틸기, 아이소뷰틸기, t-뷰틸기, n-펜틸기, n-헥실기, n-헵틸기, n-옥틸기, 하이드록시메틸기, 1-하이드록시에틸기, 2-하이드록시에틸기, 2-하이드록시아이소뷰틸기, 1,2-다이하이드록시에틸기, 1,3-다이하이드록시아이소프로필기, 2,3-다이하이드록시-t-뷰틸기, 1,2,3-트라이하이드록시프로필기, 1-클로로메틸기, 1-클로로에틸기, 2-클로로에틸기, 2-클로로아이소뷰틸기, 1,2-다이클로로에틸기, 1,3-다이클로로아이소프로필기, 2,3-다이클로로-t-뷰틸기, 1,2,3-트라이클로로프로필기, 브로모메틸기, 1-브로모에틸기, 2-브로모에틸기, 2-브로모아이소뷰틸기, 1,2-다이브로모에틸기, 1,3-다이브로모아이소프로필기, 2,3-다이브로모-t-뷰틸기, 1,2,3-트라이브로모프로필기, 요오도메틸기, 1-요오도에틸기, 2-요오도에틸기, 2-요오도아이소뷰틸기, 1,2-다ियो오도에틸기, 1,3-다ियो오도아이소프로필기, 2,3-다ियो오도-t-뷰틸기, 1,2,3-트라이요오도프로필기, 아미노메틸기, 1-아미노에틸기, 2-아미노에틸기, 2-아미노아이소뷰틸기, 1,2-다이아미노에틸기, 1,3-다이아미노아이소프로필기, 2,3-다이아미노-t-뷰틸기, 1,2,3-트라이아미노프로필기, 사이아노메틸기, 1-사이아노에틸기, 2-사이아노에틸기, 2-사이아노아이소뷰틸기, 1,2-다이사이아노에틸기, 1,3-다이사이아노아이소프로필기, 2,3-다이사이아노-t-뷰틸기, 1,2,3-트라이사이아노프로필기, 나이트로메틸기, 1-나이트로에틸기, 2-나이트로에틸기, 2-나이트로아이소뷰틸기, 1,2-다이나이트로에틸기, 1,3-다이나이트로아이소프로필기, 2,3-다이나이트로-t-뷰틸기, 1,2,3-트라이나이트로프로필기 등을 들 수 있다.

[0520] 치환 또는 비치환된 탄소수 7~50의 아르알킬기의 예로서는, 벤질기, 1-페닐에틸기, 2-페닐에틸기, 1-페닐아이소프로필기, 2-페닐아이소프로필기, 페닐-t-뷰틸기, α-나프틸메틸기, 1-α-나프틸에틸기, 2-α-나프틸에틸기, 1-α-나프틸아이소프로필기, 2-α-나프틸아이소프로필기, β-나프틸메틸기, 1-β-나프틸에틸기, 2-β-나프틸에틸기, 1-β-나프틸아이소프로필기, 2-β-나프틸아이소프로필기, 1-피롤릴메틸기, 2-(1-피롤릴)에틸기, p-메틸벤질기, m-메틸벤질기, o-메틸벤질기, p-클로로벤질기, m-클로로벤질기, o-클로로벤질기, p-브로모벤질기, m-브로모벤질기, o-브로모벤질기, p-요오도벤질기, m-요오도벤질기, o-요오도벤질기, p-하이드록시벤질기, m-하이드록시벤질기, o-하이드록시벤질기, p-아미노벤질기, m-아미노벤질기, o-아미노벤질기, p-나이트로벤질기, m-나이트로벤질기, o-나이트로벤질기, p-사이아노벤질기, m-사이아노벤질기, o-사이아노벤질기, 1-하이드록시-2-페닐아이소프로필기, 1-클로로-2-페닐아이소프로필기 등을 들 수 있다.

[0521] 치환 또는 비치환된 환 형성 탄소수 6~50의 아릴옥시기는 -OY'로 표시되고, Y'의 예로서는 페닐기, 1-나프틸기, 2-나프틸기, 1-안트릴기, 2-안트릴기, 9-안트릴기, 1-페난트릴기, 2-페난트릴기, 3-페난트릴기, 4-페난트릴기, 9-페난트릴기, 1-나프타센일기, 2-나프타센일기, 9-나프타센일기, 1-피렌일기, 2-피렌일기, 4-피렌일기, 2-바이페닐일기, 3-바이페닐일기, 4-바이페닐일기, p-터페닐-4-일기, p-터페닐-3-일기, p-터페닐-2-일기, m-터페닐-4-일기, m-터페닐-3-일기, m-터페닐-2-일기, o-톨릴기, m-톨릴기, p-톨릴기, p-t-뷰틸페닐기, p-(2-페닐프로필)페닐기, 3-메틸-2-나프틸기, 4-메틸-1-나프틸기, 4-메틸-1-안트릴기, 4'-메틸바이페닐일기, 4"-t-뷰틸-p-터페닐-4-일기 등을 들 수 있다.

[0522] 치환 또는 비치환된 핵 원자수 5~50의 헤테로아릴옥시기는 -OZ'로 표시되고, Z'의 예로서는 2-피롤릴기, 3-피롤릴기, 피라진일기, 2-피리딘일기, 3-피리딘일기, 4-피리딘일기, 2-인돌릴기, 3-인돌릴기, 4-인돌릴기, 5-인돌릴기, 6-인돌릴기, 7-인돌릴기, 1-아이소인돌릴기, 3-아이소인돌릴기, 4-아이소인돌릴기, 5-아이소인돌릴기, 6-아이소인돌릴기, 7-아이소인돌릴기, 2-퓨릴기, 3-퓨릴기, 2-벤조퓨란일기, 3-벤조퓨란일기, 4-벤조퓨란일기, 5-벤조퓨란일기, 6-벤조퓨란일기, 7-벤조퓨란일기, 1-아이소벤조퓨란일기, 3-아이소벤조퓨란일기, 4-아이소벤조퓨란일기, 5-아이소벤조퓨란일기, 6-아이소벤조퓨란일기, 7-아이소벤조퓨란일기, 2-퀴놀릴기, 3-퀴놀릴기, 4-퀴놀릴기, 5-퀴놀릴기, 6-퀴놀릴기, 7-퀴놀릴기, 8-퀴놀릴기, 1-아이소퀴놀릴기, 3-아이소퀴놀릴기, 4-아이소퀴놀릴기, 5-아이소퀴놀릴기, 6-아이소퀴놀릴기, 7-아이소퀴놀릴기, 8-아이소퀴놀릴기, 2-퀴녹살린일기, 5-퀴녹살린일기, 6-퀴녹살린일기, 1-카바졸릴기, 2-카바졸릴기, 3-카바졸릴기, 4-카바졸릴기, 1-페난트리딘일기, 2-페난트리딘일기, 3-페난트리딘일기, 4-페난트리딘일기, 6-페난트리딘일기, 7-페난트리딘일기, 8-페난트리딘일기, 9-페난트리딘일기, 10-페난트리딘일기, 1-아크리딘일기, 2-아크리딘일기, 3-아크리딘일기, 4-아크리딘일기, 9-아크리딘일기, 1,7-페난트롤린-2-일기, 1,7-페난트롤린-3-일기, 1,7-페난트롤린-4-일기, 1,7-페난트롤린-5-일기, 1,7-페난트롤린-6-일기, 1,7-페난트롤린-8-일기, 1,7-페난트롤린-9-일기, 1,7-페난트롤린-10-일기, 1,8-페난트롤린-2-일기, 1,8-페난트롤린-3-일기, 1,8-페난트롤린-4-일기, 1,8-페난트롤린-5-일기, 1,8-페난트롤린-6-일기, 1,8-페난트롤린-7-일기, 1,8-페난트롤린-9-일기, 1,8-페난트롤린-10-일기, 1,9-페난트롤린-2-일기, 1,9-페난트롤린-3-일기, 1,9-페난트롤린-4-일기, 1,9-페난트롤린-5-일기, 1,9-페난트롤린-6-일기, 1,9-페난트롤린-7-일기, 1,9-

페난트롤린-8-일기, 1,9-페난트롤린-10-일기, 1,10-페난트롤린-2-일기, 1,10-페난트롤린-3-일기, 1,10-페난트롤린-4-일기, 1,10-페난트롤린-5-일기, 2,9-페난트롤린-1-일기, 2,9-페난트롤린-3-일기, 2,9-페난트롤린-4-일기, 2,9-페난트롤린-5-일기, 2,9-페난트롤린-6-일기, 2,9-페난트롤린-7-일기, 2,9-페난트롤린-8-일기, 2,9-페난트롤린-10-일기, 2,8-페난트롤린-1-일기, 2,8-페난트롤린-3-일기, 2,8-페난트롤린-4-일기, 2,8-페난트롤린-5-일기, 2,8-페난트롤린-6-일기, 2,8-페난트롤린-7-일기, 2,8-페난트롤린-9-일기, 2,8-페난트롤린-10-일기, 2,7-페난트롤린-1-일기, 2,7-페난트롤린-3-일기, 2,7-페난트롤린-4-일기, 2,7-페난트롤린-5-일기, 2,7-페난트롤린-6-일기, 2,7-페난트롤린-8-일기, 2,7-페난트롤린-9-일기, 2,7-페난트롤린-10-일기, 1-페나진일기, 2-페나진일기, 1-페노싸이아진일기, 2-페노싸이아진일기, 3-페노싸이아진일기, 4-페노싸이아진일기, 1-페녹사진일기, 2-페녹사진일기, 3-페녹사진일기, 4-페녹사진일기, 2-옥사졸릴기, 4-옥사졸릴기, 5-옥사졸릴기, 2-옥사다이하졸릴기, 5-옥사다이하졸릴기, 3-푸라잔일기, 2-싸이엔일기, 3-싸이엔일기, 2-메틸피롤-1-일기, 2-메틸피롤-3-일기, 2-메틸피롤-4-일기, 2-메틸피롤-5-일기, 3-메틸피롤-1-일기, 3-메틸피롤-2-일기, 3-메틸피롤-4-일기, 3-메틸피롤-5-일기, 2-t-뷰틸피롤-4-일기, 3-(2-페닐프로필)피롤-1-일기, 2-메틸-1-인돌릴기, 4-메틸-1-인돌릴기, 2-메틸-3-인돌릴기, 4-메틸-3-인돌릴기, 2-t-뷰틸-1-인돌릴기, 4-t-뷰틸-1-인돌릴기, 2-t-뷰틸-3-인돌릴기, 4-t-뷰틸-3-인돌릴기 등을 들 수 있다.

[0523] 치환 또는 비치환된 환 형성 탄소수 6~50의 아릴싸이오기는 -SY"로 표시되고, Y"의 예로서는 페닐기, 1-나프틸기, 2-나프틸기, 1-안트릴기, 2-안트릴기, 9-안트릴기, 1-페난트릴기, 2-페난트릴기, 3-페난트릴기, 4-페난트릴기, 9-페난트릴기, 1-나프타센일기, 2-나프타센일기, 9-나프타센일기, 1-피렌일기, 2-피렌일기, 4-피렌일기, 2-바이페닐일기, 3-바이페닐일기, 4-바이페닐일기, p-터페닐-4-일기, p-터페닐-3-일기, p-터페닐-2-일기, m-터페닐-4-일기, m-터페닐-3-일기, m-터페닐-2-일기, o-톨릴기, m-톨릴기, p-톨릴기, p-t-뷰틸페닐기, p-(2-페닐프로필)페닐기, 3-메틸-2-나프틸기, 4-메틸-1-나프틸기, 4-메틸-1-안트릴기, 4'-메틸바이페닐일기, 4"-t-뷰틸-p-터페닐-4-일기 등을 들 수 있다.

[0524] 치환 또는 비치환된 핵 원자수 5~50의 헤테로아릴싸이오기는 -SZ"로 표시되고, Z"의 예로서는 2-피롤일기, 3-피롤일기, 피라진일기, 2-피리딘일기, 3-피리딘일기, 4-피리딘일기, 2-인돌릴기, 3-인돌릴기, 4-인돌릴기, 5-인돌릴기, 6-인돌릴기, 7-인돌릴기, 1-아이소인돌릴기, 3-아이소인돌릴기, 4-아이소인돌릴기, 5-아이소인돌릴기, 6-아이소인돌릴기, 7-아이소인돌릴기, 2-퓨릴기, 3-퓨릴기, 2-벤조퓨란일기, 3-벤조퓨란일기, 4-벤조퓨란일기, 5-벤조퓨란일기, 6-벤조퓨란일기, 7-벤조퓨란일기, 1-아이소벤조퓨란일기, 3-아이소벤조퓨란일기, 4-아이소벤조퓨란일기, 5-아이소벤조퓨란일기, 6-아이소벤조퓨란일기, 7-아이소벤조퓨란일기, 2-퀴놀릴기, 3-퀴놀릴기, 4-퀴놀릴기, 5-퀴놀릴기, 6-퀴놀릴기, 7-퀴놀릴기, 8-퀴놀릴기, 1-아이소퀴놀릴기, 3-아이소퀴놀릴기, 4-아이소퀴놀릴기, 5-아이소퀴놀릴기, 6-아이소퀴놀릴기, 7-아이소퀴놀릴기, 8-아이소퀴놀릴기, 2-퀴녹살린일기, 5-퀴녹살린일기, 6-퀴녹살린일기, 1-카바졸릴기, 2-카바졸릴기, 3-카바졸릴기, 4-카바졸릴기, 1-페난트리딘일기, 2-페난트리딘일기, 3-페난트리딘일기, 4-페난트리딘일기, 6-페난트리딘일기, 7-페난트리딘일기, 8-페난트리딘일기, 9-페난트리딘일기, 10-페난트리딘일기, 1-아크리딘일기, 2-아크리딘일기, 3-아크리딘일기, 4-아크리딘일기, 9-아크리딘일기, 1,7-페난트롤린-2-일기, 1,7-페난트롤린-3-일기, 1,7-페난트롤린-4-일기, 1,7-페난트롤린-5-일기, 1,7-페난트롤린-6-일기, 1,7-페난트롤린-8-일기, 1,7-페난트롤린-9-일기, 1,7-페난트롤린-10-일기, 1,8-페난트롤린-2-일기, 1,8-페난트롤린-3-일기, 1,8-페난트롤린-4-일기, 1,8-페난트롤린-5-일기, 1,8-페난트롤린-6-일기, 1,8-페난트롤린-7-일기, 1,8-페난트롤린-9-일기, 1,8-페난트롤린-10-일기, 1,9-페난트롤린-2-일기, 1,9-페난트롤린-3-일기, 1,9-페난트롤린-4-일기, 1,9-페난트롤린-5-일기, 1,9-페난트롤린-6-일기, 1,9-페난트롤린-7-일기, 1,9-페난트롤린-8-일기, 1,9-페난트롤린-10-일기, 1,10-페난트롤린-2-일기, 1,10-페난트롤린-3-일기, 1,10-페난트롤린-4-일기, 1,10-페난트롤린-5-일기, 2,9-페난트롤린-1-일기, 2,9-페난트롤린-3-일기, 2,9-페난트롤린-4-일기, 2,9-페난트롤린-5-일기, 2,9-페난트롤린-6-일기, 2,9-페난트롤린-7-일기, 2,9-페난트롤린-8-일기, 2,9-페난트롤린-10-일기, 2,8-페난트롤린-1-일기, 2,8-페난트롤린-3-일기, 2,8-페난트롤린-4-일기, 2,8-페난트롤린-5-일기, 2,8-페난트롤린-6-일기, 2,8-페난트롤린-7-일기, 2,8-페난트롤린-9-일기, 2,8-페난트롤린-10-일기, 2,7-페난트롤린-1-일기, 2,7-페난트롤린-3-일기, 2,7-페난트롤린-4-일기, 2,7-페난트롤린-5-일기, 2,7-페난트롤린-6-일기, 2,7-페난트롤린-8-일기, 2,7-페난트롤린-9-일기, 2,7-페난트롤린-10-일기, 1-페나진일기, 2-페나진일기, 1-페노싸이아진일기, 2-페노싸이아진일기, 3-페노싸이아진일기, 4-페노싸이아진일기, 1-페녹사진일기, 2-페녹사진일기, 3-페녹사진일기, 4-페녹사진일기, 2-옥사졸릴기, 4-옥사졸릴기, 5-옥사졸릴기, 2-옥사다이하졸릴기, 5-옥사다이하졸릴기, 3-푸라잔일기, 2-싸이엔일기, 3-싸이엔일기, 2-메틸피롤-1-일기, 2-메틸피롤-3-일기, 2-메틸피롤-4-일기, 2-메틸피롤-5-일기, 3-메틸피롤-1-일기, 3-메틸피롤-2-일기, 3-메틸피롤-4-일기, 3-메틸피롤-5-일기, 2-t-뷰틸피롤-4-일기, 3-(2-페닐프로필)피롤-1-일기, 2-메틸-1-인돌릴기, 4-메틸-1-인돌릴기, 2-메틸-3-인돌릴기, 4-메틸-3-인돌릴기, 2-t-뷰틸-1-인돌릴기, 4-t-뷰틸-1-인돌릴기, 2-t-뷰틸-3-인돌릴기,



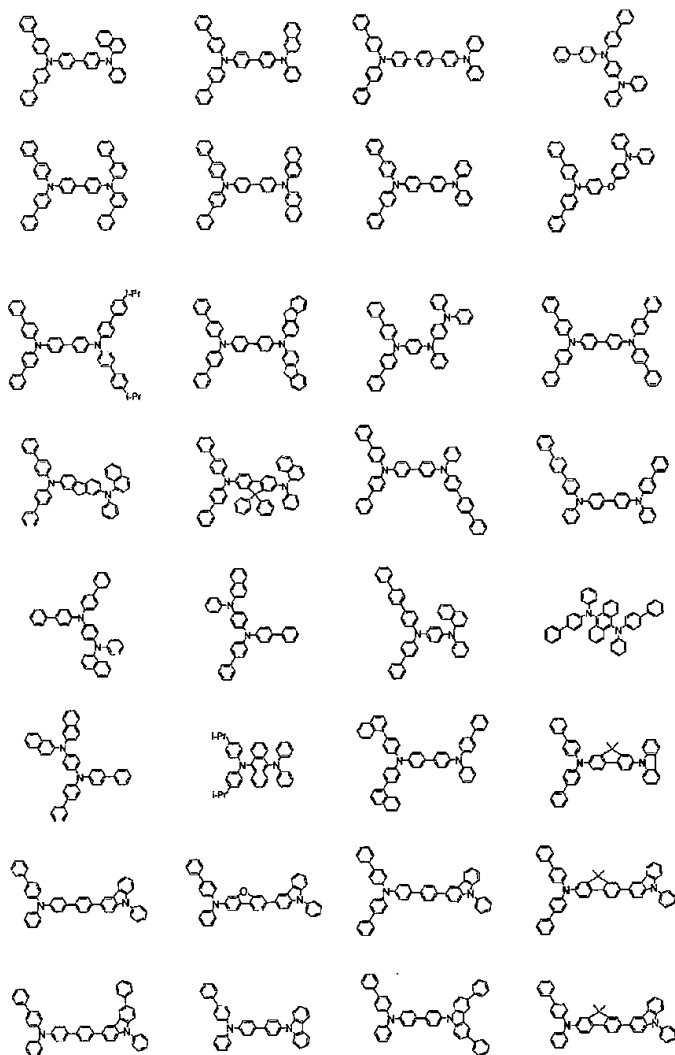
4-t-뷰틸-3-인돌틸기 등을 들 수 있다.

[0525] 치환 또는 비치환된 탄소수 2~50의 알콕시카보닐기는 -COOZ로 표시되고, Z의 예로서는 메틸기, 에틸기, 프로필기, 아이소프로필기, n-뷰틸기, s-뷰틸기, 아이소뷰틸기, t-뷰틸기, n-펜틸기, n-헥실기, n-헵틸기, n-옥틸기, 하이드록시메틸기, 1-하이드록시에틸기, 2-하이드록시에틸기, 2-하이드록시아이소뷰틸기, 1,2-다이하이드록시에틸기, 1,3-다이하이드록시아이소프로필기, 2,3-다이하이드록시-t-뷰틸기, 1,2,3-트라이하이드록시프로필기, 클로로메틸기, 1-클로로에틸기, 2-클로로에틸기, 2-클로로아이소뷰틸기, 1,2-다이클로로에틸기, 1,3-다이클로로아이소프로필기, 2,3-다이클로로-t-뷰틸기, 1,2,3-트라이클로로프로필기, 브로모메틸기, 1-브로모에틸기, 2-브로모에틸기, 2-브로모아이소뷰틸기, 1,2-다ibro모에틸기, 1,3-다ibro모아이소프로필기, 2,3-다ibro모-t-뷰틸기, 1,2,3-트라이브로모프로필기, 요오도메틸기, 1-요오도에틸기, 2-요오도에틸기, 2-요오도아이소뷰틸기, 1,2-다ियो오도에틸기, 1,3-다ियो오도아이소프로필기, 2,3-다ियो오도-t-뷰틸기, 1,2,3-트라이요오도프로필기, 아미노메틸기, 1-아미노에틸기, 2-아미노에틸기, 2-아미노아이소뷰틸기, 1,2-다이아미노에틸기, 1,3-다이아미노아이소프로필기, 2,3-다이아미노-t-뷰틸기, 1,2,3-트라이아미노프로필기, 사이아노메틸기, 1-사이아노에틸기, 2-사이아노에틸기, 2-사이아노아이소뷰틸기, 1,2-다이사이아노에틸기, 1,3-다이사이아노아이소프로필기, 2,3-다이사이아노-t-뷰틸기, 1,2,3-트라이사이아노프로필기, 나이트로메틸기, 1-나이트로에틸기, 2-나이트로에틸기, 2-나이트로아이소뷰틸기, 1,2-다이나이트로에틸기, 1,3-다이나이트로아이소프로필기, 2,3-다이나이트로-t-뷰틸기, 1,2,3-트라이나이트로프로필기 등을 들 수 있다.

[0526] 상기 치환 또는 비치환된 환 형성 탄소수 6~50의 아릴기 또는 치환 또는 비치환된 핵 원자수 5~50의 헤테로아릴기로 치환된 아미노기는 -NPQR로 표시되고, P, Q의 예로서는, 페닐기, 1-나프틸기, 2-나프틸기, 1-안트릴기, 2-안트릴기, 9-안트릴기, 1-페난트릴기, 2-페난트릴기, 3-페난트릴기, 4-페난트릴기, 9-페난트릴기, 1-나프타센일기, 2-나프타센일기, 9-나프타센일기, 1-피렌일기, 2-피렌일기, 4-피렌일기, 2-바이페닐일기, 3-바이페닐일기, 4-바이페닐일기, p-터페닐-4-일기, p-터페닐-3-일기, p-터페닐-2-일기, m-터페닐-4-일기, m-터페닐-3-일기, m-터페닐-2-일기, o-톨릴기, m-톨릴기, p-톨릴기, p-t-뷰틸페닐기, p-(2-페닐프로필)페닐기, 3-메틸-2-나프틸기, 4-메틸-1-나프틸기, 4-메틸-1-안트릴기, 4'-메틸바이페닐일기, 4"-t-뷰틸-p-터페닐-4-일기, 2-피롤일기, 3-피롤일기, 피라진일기, 2-피리딘일기, 3-피리딘일기, 4-피리딘일기, 2-인돌틸기, 3-인돌틸기, 4-인돌틸기, 5-인돌틸기, 6-인돌틸기, 7-인돌틸기, 1-아이소인돌틸기, 3-아이소인돌틸기, 4-아이소인돌틸기, 5-아이소인돌틸기, 6-아이소인돌틸기, 7-아이소인돌틸기, 2-퓨릴기, 3-퓨릴기, 2-벤조퓨란일기, 3-벤조퓨란일기, 4-벤조퓨란일기, 5-벤조퓨란일기, 6-벤조퓨란일기, 7-벤조퓨란일기, 1-아이소벤조퓨란일기, 3-아이소벤조퓨란일기, 4-아이소벤조퓨란일기, 5-아이소벤조퓨란일기, 6-아이소벤조퓨란일기, 7-아이소벤조퓨란일기, 2-퀴놀틸기, 3-퀴놀틸기, 4-퀴놀틸기, 5-퀴놀틸기, 6-퀴놀틸기, 7-퀴놀틸기, 8-퀴놀틸기, 1-아이소퀴놀틸기, 3-아이소퀴놀틸기, 4-아이소퀴놀틸기, 5-아이소퀴놀틸기, 6-아이소퀴놀틸기, 7-아이소퀴놀틸기, 8-아이소퀴놀틸기, 2-퀴녹살린일기, 5-퀴녹살린일기, 6-퀴녹살린일기, 1-카바졸틸기, 2-카바졸틸기, 3-카바졸틸기, 4-카바졸틸기, 1-페난트리딘일기, 2-페난트리딘일기, 3-페난트리딘일기, 4-페난트리딘일기, 6-페난트리딘일기, 7-페난트리딘일기, 8-페난트리딘일기, 9-페난트리딘일기, 10-페난트리딘일기, 1-아크리딘일기, 2-아크리딘일기, 3-아크리딘일기, 4-아크리딘일기, 9-아크리딘일기, 1,7-페난트롤린-2-일기, 1,7-페난트롤린-3-일기, 1,7-페난트롤린-4-일기, 1,7-페난트롤린-5-일기, 1,7-페난트롤린-6-일기, 1,7-페난트롤린-8-일기, 1,7-페난트롤린-9-일기, 1,7-페난트롤린-10-일기, 1,8-페난트롤린-2-일기, 1,8-페난트롤린-3-일기, 1,8-페난트롤린-4-일기, 1,8-페난트롤린-5-일기, 1,8-페난트롤린-6-일기, 1,8-페난트롤린-7-일기, 1,8-페난트롤린-9-일기, 1,8-페난트롤린-10-일기, 1,9-페난트롤린-2-일기, 1,9-페난트롤린-3-일기, 1,9-페난트롤린-4-일기, 1,9-페난트롤린-5-일기, 1,9-페난트롤린-6-일기, 1,9-페난트롤린-7-일기, 1,9-페난트롤린-8-일기, 1,9-페난트롤린-10-일기, 1,10-페난트롤린-2-일기, 1,10-페난트롤린-3-일기, 1,10-페난트롤린-4-일기, 1,10-페난트롤린-5-일기, 2,9-페난트롤린-1-일기, 2,9-페난트롤린-3-일기, 2,9-페난트롤린-4-일기, 2,9-페난트롤린-5-일기, 2,9-페난트롤린-6-일기, 2,9-페난트롤린-7-일기, 2,9-페난트롤린-8-일기, 2,9-페난트롤린-10-일기, 2,8-페난트롤린-1-일기, 2,8-페난트롤린-3-일기, 2,8-페난트롤린-4-일기, 2,8-페난트롤린-5-일기, 2,8-페난트롤린-6-일기, 2,8-페난트롤린-7-일기, 2,8-페난트롤린-9-일기, 2,8-페난트롤린-10-일기, 2,7-페난트롤린-1-일기, 2,7-페난트롤린-3-일기, 2,7-페난트롤린-4-일기, 2,7-페난트롤린-5-일기, 2,7-페난트롤린-6-일기, 2,7-페난트롤린-8-일기, 2,7-페난트롤린-9-일기, 2,7-페난트롤린-10-일기, 1-페나진일기, 2-페나진일기, 1-페노싸이아진일기, 2-페노싸이아진일기, 3-페노싸이아진일기, 4-페노싸이아진일기, 1-페녹사진일기, 2-페녹사진일기, 3-페녹사진일기, 4-페녹사진일기, 2-옥사졸릴기, 4-옥사졸릴기, 5-옥사졸릴기, 2-옥사다이하졸릴기, 5-옥사다이하졸릴기, 3-푸라잔일기, 2-싸이엔일기, 3-싸이엔일기, 2-메틸피롤-1-일기, 2-메틸피롤-3-일기, 2-메틸피롤-4-일기, 2-메틸피롤-5-일기, 3-메틸피롤-1-일기, 3-메틸피롤-2-일기, 3-메틸피롤-4-일기, 3-메틸피롤-5-일기, 2-t-뷰틸피롤-4-일기, 3-(2-페닐프로필)피롤-1-일기, 2-메

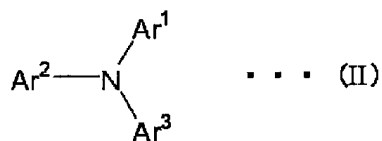
틸-1-인돌릴기, 4-메틸-1-인돌릴기, 2-메틸-3-인돌릴기, 4-메틸-3-인돌릴기, 2-t-뷰틸-1-인돌릴기, 4-t-뷰틸-1-인돌릴기, 2-t-뷰틸-3-인돌릴기, 4-t-뷰틸-3-인돌릴기 등을 들 수 있다.

[0527] 상기 화학식 (I)의 화합물의 구체예를 이하에 기술하지만, 이들에 한정되는 것은 아니다.



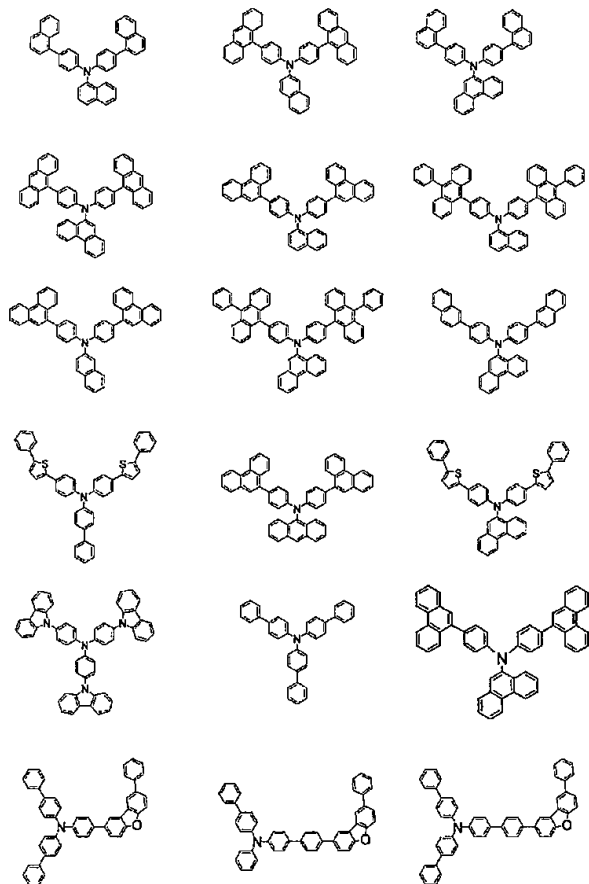
[0528]

[0529] 또한, 하기 화학식 (II)의 방향족 아민도 정공 주입층 또는 정공 수송층의 형성에 적합하게 이용된다.



[0530]

[0531] 상기 화학식 (II)에서,  $\text{Ar}^1 \sim \text{Ar}^3$ 의 정의는 상기 화학식 (I)의  $\text{Ar}^1 \sim \text{Ar}^4$ 의 정의와 동일하다. 이하에 화학식 (I)의 화합물의 구체예를 기술하지만 이들에 한정되는 것은 아니다.



[0532]

[0533] 한편, 본 발명은 상기 설명에 한정되는 것은 아니고, 본 발명의 취지를 일탈하지 않는 범위에서의 변경은 본 발명에 포함된다.

[0534] 예컨대 다음과 같은 변경도 본 발명의 적합한 변형예이다.

[0535] 본 발명에서는, 상기 발광층이 전하 주입 보조제를 함유하고 있는 것도 바람직하다.

[0536] 에너지 갭이 넓은 호스트 재료를 이용하여 발광층을 형성한 경우, 호스트 재료의 이온화 포텐셜(Ip)과 정공 주입·수송층 등의 Ip의 차이가 커져 발광층으로의 정공의 주입이 곤란해져, 충분한 휘도를 얻기 위한 구동 전압이 상승할 우려가 있다.

[0537] 이러한 경우, 발광층에 정공 주입·수송성의 전하 주입 보조제를 함유시킴으로써, 발광층으로의 정공 주입을 용이하게 하여 구동 전압을 저하시킬 수 있다.

[0538] 전하 주입 보조제로서는, 예컨대 일반적인 정공 주입·수송 재료 등을 이용할 수 있다.

[0539] 구체예로서는, 트리아졸 유도체(미국 특허 제3,112,197호 명세서 등 참조), 옥사다리아졸 유도체(미국 특허 제3,189,447호 명세서 등 참조), 이미다졸 유도체(일본 특허공개 소37-16096호 공보 등 참조), 폴리아릴알케인 유도체(미국 특허 제3,615,402호 명세서, 동 제3,820,989호 명세서, 동 제3,542,544호 명세서, 일본 특허공개 소45-555호 공보, 동 51-10983호 공보, 일본 특허공개 소51-93224호 공보, 동 55-17105호 공보, 동 56-4148호 공보, 동 55-108667호 공보, 동 55-156953호 공보, 동 56-36656호 공보 등 참조), 피라졸린 유도체 및 피라졸론 유도체(미국 특허 제3,180,729호 명세서, 동 제4,278,746호 명세서, 일본 특허공개 소55-88064호 공보, 동 55-88065호 공보, 동 49-105537호 공보, 동 55-51086호 공보, 동 56-80051호 공보, 동 56-88141호 공보, 동 57-45545호 공보, 동 54-112637호 공보, 동 55-74546호 공보 등 참조), 페닐렌디아민 유도체(미국 특허 제3,615,404호 명세서, 일본 특허공개 소51-10105호 공보, 동 46-3712호 공보, 동 47-25336호 공보, 일본 특허공개 소54-53435호 공보, 동 54-110536호 공보, 동 54-119925호 공보 등 참조), 아릴아민 유도체(미국 특허 제3,567,450호 명세서, 동 제3,180,703호 명세서, 동 제3,240,597호 명세서, 동 제3,658,520호 명세서, 동 제4,232,103호 명세서, 동 제4,175,961호 명세서, 동 제4,012,376호 명세서, 일본 특허공개 소49-35702호 공보, 동 39-27577호 공보, 일본 특허공개 소55-144250호 공보, 동 56-119132호 공보, 동 56-22437호 공보, 서독 특허 제1,110,518호 명세서 등 참조), 아미노 치환 칼콘 유도체(미국 특허 제3,526,501호 명세서 등 참조), 옥사



줄 유도체(미국 특허 제3,257,203호 명세서 등에 개시된 것), 스타이릴안트라센 유도체(일본 특허공개 소56-46234호 공보 등 참조), 플루오렌온 유도체(일본 특허공개 소54-110837호 공보 등 참조), 하이드라존 유도체(미국 특허 제3,717,462호 명세서, 일본 특허공개 소54-59143호 공보, 동 55-52063호 공보, 동 55-52064호 공보, 동 55-46760호 공보, 동 55-85495호 공보, 동 57-11350호 공보, 동 57-148749호 공보, 일본 특허공개 평2-311591호 공보 등 참조), 스틸벤 유도체(일본 특허공개 소61-210363호 공보, 동 제61-228451호 공보, 동 61-14642호 공보, 동 61-72255호 공보, 동 62-47646호 공보, 동 62-36674호 공보, 동 62-10652호 공보, 동 62-30255호 공보, 동 60-93455호 공보, 동 60-94462호 공보, 동 60-174749호 공보, 동 60-175052호 공보 등 참조), 실라잔 유도체(미국 특허 제4,950,950호 명세서), 폴리실레인계(일본 특허공개 평2-204996호 공보), 아닐린계 공중합체(일본 특허공개 평2-282263호 공보), 일본 특허공개 평1-211399호 공보에 개시되어 있는 도전성 고분자 올리고머(특히 싸이오펜 올리고머) 등을 들 수 있다.

[0540] 정공 주입성 재료로서는 상기의 것을 들 수 있지만, 포르피린 화합물(일본 특허공개 소63-295695호 공보 등에 개시된 것), 방향족 제3급 아민 화합물 및 스타이릴아민 화합물(미국 특허 제4,127,412호 명세서, 일본 특허공개 소53-27033호 공보, 동 54-58445호 공보, 동 54-149634호 공보, 동 54-64299호 공보, 동 55-79450호 공보, 동 55-144250호 공보, 동 56-119132호 공보, 동 61-295558호 공보, 동 61-98353호 공보, 동 63-295695호 공보 등 참조), 특히 방향족 제3급 아민 화합물이 바람직하다.

[0541] 또한, 미국 특허 제5,061,569호에 기재되어 있는 2개의 축합 방향족환을 분자 내에 갖는, 예컨대 4,4'-비스(N-(1-나프틸)-N-페닐아미노)바이페닐(이하 NPD로 약기함), 또한 일본 특허공개 평4-308688호 공보에 기재되어 있는 트라이페닐아민유닛 3개가 스타 버스트형으로 연결된 4,4',4"-트리스(N-(3-메틸페닐)-N-페닐아미노)트라이페닐아민(이하 MTDATA로 약기함) 등을 들 수 있다.

[0542] 또한, 일본 특허 공보 제3614405호, 3571977호 또는 미국 특허 제4,780,536호에 기재되어 있는 헥사아자트라이페닐렌 유도체 등도 정공 주입성 재료로서 적합하게 이용할 수 있다.

[0543] 또한, p형 Si, p형 SiC 등의 무기 화합물도 정공 주입 재료로서 사용할 수 있다.

[0544] 본 발명의 유기 EL 소자의 각 층의 형성 방법은 특별히 한정되지 않는다. 종래 공지된 진공 증착법, 스핀 코팅법 등에 의한 형성 방법을 이용할 수 있다. 본 발명의 유기 EL 소자에 이용하는 유기 박막층은 진공 증착법, 분자선 증착법(MBE법) 또는 용매에 녹인 용액의 디핑법, 스핀 코팅법, 캐스팅법, 바 코팅법, 롤 코팅법 등의 도포법에 의한 공지된 방법으로 형성할 수 있다.

[0545] 본 발명의 유기 EL 소자의 각 유기층의 막 두께는 특별히 제한되지 않지만, 일반적으로 막 두께가 지나치게 얇으면 핀 홀 등의 결함이 생기기 쉽고, 반대로 지나치게 두꺼우면 높은 인가 전압이 필요하게 되어 효율이 나빠지기 때문에, 통상은 수 nm 내지 1 $\mu$ m의 범위가 바람직하다.

[0546] 본 발명의 화합물군에 있어서는, 스즈키-미야우라(Suzuki-Miyaura) 크로스 커플링 반응 등을 이용하여 합성할 수 있다. 예컨대, 이하의 화학 반응식에 나타내는 바와 같이 합성된다. 한편, 화학식 (1)~(4)를 Ar<sup>1</sup>-Ar<sup>2</sup>-[ ]<sub>m</sub>-Ar<sup>3</sup>으로 생략한다.

[0547]  $(Ar^1-Ar^2-Br) + ((OH)_2B-[ ]_m-Ar^3)$

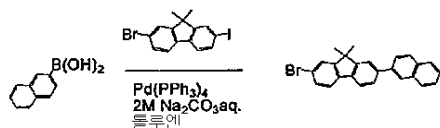
[0548]  $\rightarrow (Ar^1-Ar^2-[ ]_m-Ar^3)$

[0549]  $(Ar^1-B(OH)_2) + (I-Ar^2-Br) \rightarrow (Ar^1-Ar^2-Br)$

[0550] **실시예**

[0551] 다음에, 합성 실시예를 이용하여 본 발명의 재료의 제조 방법을 설명하지만, 본 발명은 이들 내용에 하등 한정되는 것은 아니다.

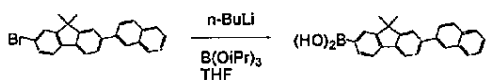
[0552] (합성 참고예 1-1) 2-브로모-9,9-다이메틸-7-(나프탈렌-2-일)-9H-플루오렌의 합성



[0553]

[0554] 아르곤 분위기 하에, 2-나프탈렌보론산 13.91g(80.9mmol), 2-브로모-7-요오도-9,9-다이메틸플루오렌 30.0g(80.9mmol), 테트라키스(트라이페닐포스핀)팔라듐(0) 4.67g(4.0mmol), 톨루엔 200ml, 다이메톡시에테인 200ml, 2M 탄산나트륨 수용액 122.36g을 가하고, 가열 환류 하에 8시간 교반하고, 하룻밤 방치하였다. 반응 혼합물에 물을 가하고, 실온에서 1시간 교반하였다. 여과 후, 톨루엔으로 추출하고, 유기상을 물로 세정하고, 이어서 포화 식염수로 세정하였다. 황산나트륨으로 건조시킨 후, 톨루엔을 감압 하에 증류 제거하였다. 잔사를 실리카 겔 컬럼 크로마토그래피에 의해 정제하여 2-브로모-9,9-다이메틸-7-(나프탈렌-2-일)-9H-플루오렌 21.3g(수율 76.1%)을 얻었다.

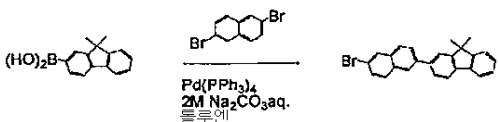
[0555] (합성 참고예 1-2) 9,9-다이메틸-7-(나프탈렌-2-일)-9H-플루오렌-2-일보론산의 합성



[0556]

[0557] 아르곤 분위기 하에, 2-브로모-9,9-다이메틸-7-(나프탈렌-2-일)-9H-플루오렌 6.00g(15.0mmol), 탈수 THF 150ml의 혼합액을 -60℃로 냉각하고, 교반하면서 1.55M n-부틸리튬의 헥세인 용액 11.6ml(18.0mmol)를 적하하였다. 추가로, 반응 혼합물을 -70℃에서 2시간 교반하였다. 반응 용액을 다시 -70℃로 냉각하고, 붕산트라이아이소프로필 8.48g(45.1mmol)을 적하하였다. 반응 혼합물을 실온으로 승온시켜 1시간 교반하고, 하룻밤 방치하였다. 반응 혼합물을 얼음 욕 상에서 냉각하고, 6N-염산 수용액을 가하고, 실온에서 1시간 교반하였다. 반응 혼합물에 다이클로로메테인을 가하여 분액(分液)하고, 유기상을 수세하고, 황산나트륨으로 건조시켰다. 용매를 감압 하에 증류 제거하고, 잔사를 실리카 겔 컬럼 크로마토그래피에 의해 정제하여 9,9-다이메틸-7-(나프탈렌-2-일)-9H-플루오렌-2-일보론산 3.50g(수율 64%)을 얻었다.

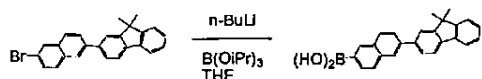
[0558] (합성 참고예 2-1) 2-(6-브로모나프탈렌-2-일)-9,9-다이메틸-9H-플루오렌의 합성



[0559]

[0560] 아르곤 분위기 하에, 9,9-다이메틸-9H-플루오렌-2-일보론산 16.65g(69.9mmol), 2,6-다이브로모나프탈렌 20.00g(69.9mmol), 테트라키스(트라이페닐포스핀)팔라듐(0) 4.04g(3.50mmol), 톨루엔 200ml, 다이메톡시에테인 200ml, 2M 탄산나트륨 수용액 106g을 가하고, 85℃에서 8시간 교반을 행하고, 하룻밤 방치하였다. 반응 혼합물에 물을 가하고, 실온에서 1시간 교반하였다. 여과 후, 톨루엔으로 추출하고, 유기상을 물로 세정하고, 이어서 포화 식염수로 세정하였다. 황산나트륨으로 건조시킨 후, 톨루엔을 감압 하에 증류 제거하였다. 얻어진 갈색의 오일상 물질을 실리카 겔 컬럼 크로마토그래피에 의해 정제하여 2-(6-브로모나프탈렌-2-일)-9,9-다이메틸-9H-플루오렌 11.84g(수율 42.4%)을 얻었다.

[0561] (합성 참고예 2-2) 6-(9,9-다이메틸-9H-플루오렌-2-일)나프탈렌-2-일보론산의 합성

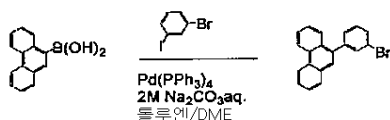


[0562]

[0563] 아르곤 분위기 하에, 2-(6-브로모나프탈렌-2-일)-9,9-다이메틸-9H-플루오렌 12.00g(30.1mmol), 탈수 THF 120ml의 혼합액을 -70℃로 냉각하고, 교반하면서 1.55M n-부틸리튬의 헥세인 용액 23.3ml(36.0mmol)를 적하하였다. 추가로, 반응 혼합물을 -70℃에서 2시간 교반하였다. 반응 용액을 다시 -70℃로 냉각하고, 붕산트라이아이소프로필 17.0g(90.2 mmol)을 적하하였다. 반응 혼합물을 실온으로 승온시켜 1시간 교반하고, 하룻밤 방치하였다. 반응 혼합물을 얼음 욕 상에서 냉각하고, 6N-염산 수용액을 가하고, 실온에서 1시간 교반하였다. 반응 혼합물에 다이클로로메테인을 가하여 분액하고, 유기상을 수세하고, 황산나트륨으로 건조시켰다. 용매를 감압 하에 증류 제거하고, 잔사를 실리카 겔 컬럼 크로마토그래피에 의해 정제하여 6-(9,9-다이메틸-9H-플루오렌-2-일)나

프탈렌-2-일보론산 6.25g(수율 57%)을 얻었다.

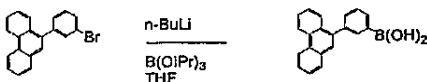
[0564] (합성 참고예 3-1) 9-(3-브로모페닐)페난트렌의 합성



[0565]

[0566] 아르곤 분위기 하에, 9-페난트렌보론산 31.4g(141mmol), 3-브로모요오도벤젠 40.0g(141mmol), 테트라키스(트라이페닐포스핀)팔라듐(0) 3.30g(2.83mmol), 톨루엔 200ml, 다이메톡시에테인 50ml, 2M 탄산나트륨 수용액 212ml를 가하고, 가열 환류하에 4시간 교반하였다. 반응 종료 후, 반응 혼합물에 톨루엔을 가하고, 수세하였다. 유기상을 황산나트륨으로 건조시킨 후, 톨루엔을 감압 하에 증류 제거하였다. 잔사를 실리카 겔 컬럼 크로마토그래피에 의해 정제하여 9-(3-브로모페닐)페난트렌 34.7g(수율 74%)을 얻었다.

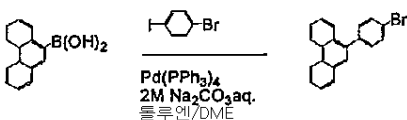
[0567] (합성 참고예 3-2) 3-(9-페난트렌일)페닐보론산의 합성



[0568]

[0569] 아르곤 분위기 하에, 9-(3-브로모페닐)페난트렌 15.45g(46.4mmol), 탈수 THF 150ml의 혼합액을 -60℃로 냉각하고, 교반하면서 1.55M n-부틸리튬의 헥세인 용액 35.9ml(55.6mmol)를 적하하였다. 추가로, 반응 혼합물을 -60℃에서 2시간 교반하였다. 반응 용액을 다시 -60℃로 냉각하고, 붕산트라이아이소프로필 26.2g(139 mmol)을 적하하였다. 반응 혼합물을 실온으로 승온시켜 1시간 교반하고, 하룻밤 방치하였다. 감압 하에 용매를 증류 제거하고, 반응 혼합물을 농축하였다. 0℃로 냉각하고, 염산 수용액을 가하고, 실온에서 1시간 교반하였다. 반응 후, 반응 혼합물에 다이클로로메테인을 가하고, 수상을 제거하였다. 유기상을 황산나트륨으로 건조시킨 후, 용매를 감압 하에 증류 제거하였다. 잔사를 실리카 겔 컬럼 크로마토그래피에 의해 정제함으로써 3-(9-페난트렌일)페닐보론산 13.4g(수율 67%)을 얻었다.

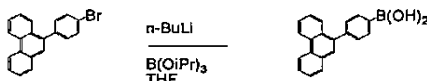
[0570] (합성 참고예 4-1) 9-(4-브로모페닐)페난트렌의 합성



[0571]

[0572] 아르곤 분위기 하에, 9-페난트렌보론산 39.25g(177mmol), 4-브로모요오도벤젠 50.0g(177mmol), 테트라키스(트라이페닐포스핀)팔라듐(0) 4.10g(3.54mmol), 톨루엔 400ml, 2M 탄산나트륨 수용액 265ml를 가하고, 가열 환류 하에 24시간 교반하였다. 반응 종료 후, 여과하고, 수상을 제거하였다. 유기상을 물로 세정하고, 황산마그네슘으로 건조시킨 후, 톨루엔을 감압 하에 증류 제거하였다. 잔사를 실리카 겔 컬럼 크로마토그래피에 의해 정제하여 9-(4-브로모페닐)페난트렌 42.6g(수율 72%)을 얻었다.

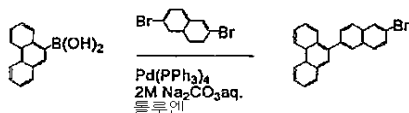
[0573] (합성 참고예 4-2) 4-(9-페난트렌일)페닐보론산의 합성



[0574]

[0575] 아르곤 분위기 하에, 9-(4-브로모페닐)페난트렌 21.3g(63.9mmol), 탈수 THF 200ml의 혼합액을 -60℃로 냉각하고, 교반하면서 1.56M n-부틸리튬의 헥세인 용액 49.2ml(76.7mmol)를 적하하였다. 추가로, 반응 혼합물을 -60℃에서 2시간 교반하였다. 반응 용액을 다시 -60℃로 냉각하고, 붕산트라이아이소프로필 36.1g(192 mmol)을 적하하였다. 반응 혼합물을 실온으로 승온시키고, 17시간 교반하였다. 반응 혼합물을 0℃로 냉각하고, 염산 수용액을 가하고, 실온에서 1시간 교반하였다. 반응 후, 반응 혼합물에 톨루엔을 가하고, 수상을 제거하였다. 유기상을 황산마그네슘으로 건조시킨 후, 용매를 감압 하에 증류 제거하였다. 잔사를 톨루엔, 헥세인에 의해 재결정화함으로써 4-(9-페난트렌일)페닐보론산 13.8g(수율 72%)을 얻었다.

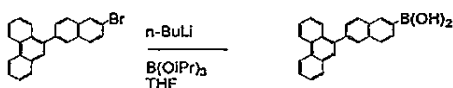
[0576] (합성 참고예 5-1) 6-브로모-2-(9-페난트렌일)나프탈렌의 합성



[0577]

[0578] 아르곤 분위기 하에, 9-페난트렌보론산 15.53g(69.9mmol), 2,6-다이브로모나프탈렌 20.00g(69.9mmol), 테트라키스(트라이페닐포스핀)팔라듐(0) 1.62g(1.40mmol), 다이메톡시에테인 150ml, 톨루엔 150ml, 2M-탄산나트륨 수용액 106g을 가하고, 욕 온도 85℃에서 7시간 교반하였다. 반응 혼합물에 물을 가하고, 톨루엔으로 추출하였다. 여과액을 수세하고, 유기상을 황산마그네슘으로 건조시킨 후, 톨루엔을 감압 하에 증류 제거하였다. 잔사를 실리카 겔 컬럼 크로마토그래피에 의해 정제하여 6-브로모-2-(9-페난트렌일)나프탈렌 11.6g(수율 43%)을 얻었다.

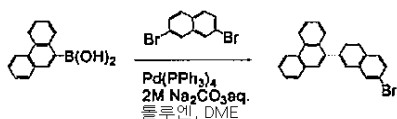
[0579] (합성 참고예 5-2) 2-(9-페난트렌일)나프탈렌-6-보론산의 합성



[0580]

[0581] 아르곤 분위기 하에, 6-브로모-2-(9-페난트렌일)나프탈렌 9.80g(25.6mmol), 탈수 톨루엔 100ml, 탈수 다이에틸 에터 100ml의 혼합액을 -10℃로 냉각하고, 교반하면서 1.56M n-부틸리튬의 헥세인 용액 19.7ml(30.7mmol)를 적하하였다. 추가로, 반응 혼합물을 -10℃에서 4시간 교반하였다. 반응 혼합물을 -60℃로 냉각하고, 붕산트라이아이소프로필 14.4g(76.7mmol)을 적하하였다. 반응 혼합물을 승온시켜 실온에서 16시간 교반하였다. 반응 혼합물에 염산 수용액을 가하고, 실온에서 하룻밤 교반하였다. 반응 후, 반응 혼합물을 분액하고, 유기상을 수세하고, 슬러리 형상으로 될 때까지 용매를 감압 하에 증류 제거하였다. 잔사에 헥세인을 가하고, 고체를 여과하여 취하고, THF, 헥세인으로 재결정화함으로써 2-(9-페난트렌일)나프탈렌-6-보론산 5.20g(수율 58%)을 얻었다.

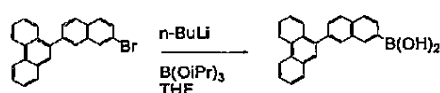
[0582] (합성 참고예 6-1) 7-브로모-2-(9-페난트렌일)나프탈렌의 합성



[0583]

[0584] 아르곤 분위기 하에, 9-페난트렌보론산 18.64g(83.9mmol), 2,7-다이브로모나프탈렌 30.00g(104.9mmol), 테트라키스(트라이페닐포스핀)팔라듐(0) 4.85g(4.2mmol), 다이메톡시에테인 200ml, 톨루엔 200ml, 2M-탄산나트륨 수용액 106g을 가하고, 욕 온도 85℃에서 7시간 교반하였다. 반응 혼합물에 물을 가하고, 톨루엔으로 추출하였다. 여과액을 수세하고, 유기상을 황산마그네슘으로 건조시킨 후, 톨루엔을 감압 하에 증류 제거하였다. 잔사를 실리카 겔 컬럼 크로마토그래피에 의해 정제하여 7-브로모-2-(9-페난트렌일)나프탈렌 12.46g(수율 31.0%)을 얻었다.

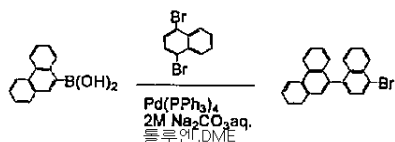
[0585] (합성 참고예 6-2) 2-(9-페난트렌일)나프탈렌-7-보론산의 합성



[0586]

[0587] 아르곤 분위기 하에, 7-브로모-2-(9-페난트렌일)나프탈렌 12.27g(32.01mmol), 탈수 THF 130ml의 혼합액을 -70℃로 냉각하고, 교반하면서 1.56M n-부틸리튬의 헥세인 용액 24.8ml(38.4mmol)를 적하하였다. 추가로, 반응 혼합물을 -70℃에서 4시간 교반하였다. 반응 혼합물에 -60℃ 이하를 유지하면서 붕산트라이아이소프로필 18.06g(96.04mmol)을 적하하고, 1시간 교반하였다. 반응 혼합물을 승온시켜 실온에서 3시간 교반하고, 하룻밤 방치하였다. 반응 혼합물을 얼음 욕 상에서 냉각하고, 20℃ 이하로 유지하도록 6N-염산 수용액 100ml를 가하고, 실온에서 30분 교반하였다. 다이클로로메테인을 가하여 분액한 후, 유기상을 수세하고, 무수 황산나트륨으로 건조시켰다. 용매를 증류 제거하여 2-(9-페난트렌일)나프탈렌-7-보론산 9.50g(수율 85%)을 얻었다.

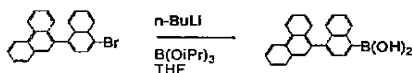
[0588] (합성 참고예 7-1) 4-브로모-2-(9-페난트렌일)나프탈렌의 합성



[0589]

[0590] 아르곤 분위기 하에, 9-페난트렌보론산 19.41g(87.4mmol), 1,4-다이브로모나프탈렌 25.00g(87.4mmol), 테트라키스(트라이페닐포스핀)팔라듐(0) 2.02g(1.70mmol), 다이메톡시에테인 50ml, 톨루엔 200ml, 2M-탄산나트륨 수용액 132g을 가하고, 욕 온도 85℃에서 6시간 교반하였다. 반응 혼합물에 물을 가하고, 톨루엔으로 추출하고, 수세 후, 유기상을 황산마그네슘으로 건조시키고, 용매를 감압 하에 증류 제거하였다. 잔사를 실리카 겔 컬럼 크로마토그래피에 의해 정제하여 4-브로모-2-(9-페난트렌일)나프탈렌 16.02g(수율 55.0%)을 얻었다.

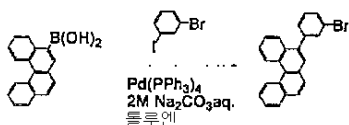
[0591] (합성 참고예 7-2) 2-(9-페난트렌일)나프탈렌-4-보론산의 합성



[0592]

[0593] 아르곤 분위기 하에, 4-브로모-2-(9-페난트렌일)나프탈렌 16.00g(41.74mmol), 탈수 THF 160ml의 혼합액을 -70℃로 냉각하고, 교반하면서 1.56M n-부틸리튬의 헥세인 용액 32.2ml(38.4mmol)를 적하하였다. 추가로, 반응 혼합물을 -70℃에서 3시간 교반하였다. 반응 혼합물에 -60℃ 이하를 유지하면서 붕산트라이아이소프로필 18.06g(96.04mmol)을 적하하고, 1시간 교반하였다. 반응 혼합물을 승온시켜 실온에서 3시간 교반하고, 하룻밤 방치하였다. 반응 혼합물을 얼음 욕 상에서 냉각하고, 20℃ 이하로 유지하도록 진한 염산 수용액 50ml를 가하고, 실온에서 1시간 교반하였다. 반응 혼합물에 다이클로로메테인을 가하여 분액한 후, 유기상을 수세하고, 무수 황산나트륨으로 건조시켰다. 용매를 증류 제거하고, 톨루엔을 가하고, 재결정화하여 2-(9-페난트렌일)나프탈렌-4-보론산 5.40g(수율 37%)을 얻었다.

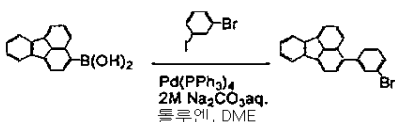
[0594] (합성 참고예 8-1) 5-(3-브로모페닐)벤조[c]페난트렌의 합성



[0595]

[0596] 아르곤 분위기 하에, 5-벤조[c]페난트렌보론산 6.32g(22.3mmol), 3-브로모요오도벤젠 5.07g(18.6mmol), 테트라키스(트라이페닐포스핀)팔라듐(0) 1.29g(1.12mmol), 톨루엔 80ml, 다이메톡시에테인 80ml, 2M 탄산나트륨 수용액 33.8g을 가하고, 가열 환류 하에 8시간 교반하였다. 반응 종료 후, 반응 혼합물에 물을 가하고, 톨루엔으로 추출하고, 수세하였다. 유기상을 황산나트륨으로 건조시킨 후, 톨루엔을 감압 하에 증류 제거하였다. 잔사를 실리카 겔 컬럼 크로마토그래피에 의해 정제하여 5-(3-브로모페닐)벤조[c]페난트렌 4.53g(수율 56.8%)을 얻었다.

[0597] (합성 참고예 9-1) 3-(3-브로모페닐)플루오란텐의 합성

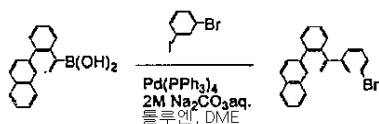


[0598]

[0599] 아르곤 분위기 하에, 3-플루오란텐보론산 18.18g(81.3mmol), 3-브로모요오도벤젠 22.99g(81.3mmol), 테트라키스(트라이페닐포스핀)팔라듐(0) 4.70g(4.10mmol), 톨루엔 80ml, 다이메톡시에테인 80ml, 2M 탄산나트륨 수용액 123g을 가하고, 가열 환류 하에 8시간 교반하였다. 반응 종료 후, 반응 혼합물에 물을 가하고, 실온에서 1시간 교반하고, 메탄올을 가하였다. 고체를 여과하여 취하고, 실리카 겔 컬럼 크로마토그래피에 의해 정제하여 3-(3-브로모페닐)플루오란텐 20.43g(수율 70.4%)을 얻었다.



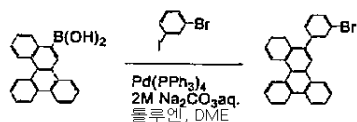
[0600] (합성 참고예 10-1) 6-(3-브로모페닐)크라이센의 합성



[0601]

[0602] 아르곤 분위기 하에, 6-크라이센보론산 5.00g(18.37mmol), 3-브로모요오도벤젠 5.20g(18.37mmol), 테트라키스(트라이페닐포스핀)팔라듐(0) 1.06g(0.92mmol), 톨루엔 30ml, 다이메톡시에테인 30ml, 2M 탄산나트륨 수용액 27.6g을 가하고, 가열 환류 하에 8시간 교반하고, 하룻밤 방치하였다. 반응 혼합물에 물을 가하고, 실온에서 1시간 교반하고, 메탄올을 가하였다. 고체를 여과하여 취하고, 실리카 겔 컬럼 크로마토그래피에 의해 정제하여 6-(3-브로모페닐)크라이센 2.00g(수율 28.4%)을 얻었다.

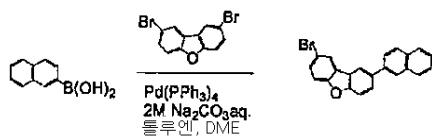
[0603] (합성 참고예 11-1)10-(3-브로모페닐)벤조[g]크라이센의 합성



[0604]

[0605] 아르곤 분위기 하에, 10-벤조[g]크라이센보론산 5.00g(15.52mmol), 3-브로모요오도벤젠 4.39g(15.52mmol), 테트라키스(트라이페닐포스핀)팔라듐(0) 0.90g(0.78mmol), 톨루엔 30ml, 다이메톡시에테인 30ml, 2M 탄산나트륨 수용액 23.28g을 가하고, 가열 환류 하에 8시간 교반하고, 하룻밤 방치하였다. 반응 혼합물에 물을 가하고, 실온에서 1시간 교반하고, 메탄올을 가하였다. 고체를 여과하여 취하고, 실리카 겔 컬럼 크로마토그래피에 의해 정제하여 10-(3-브로모페닐)벤조[g]크라이센 2.30g(수율 34.2%)을 얻었다.

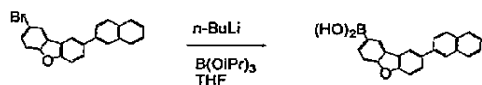
[0606] (합성 참고예 12-1) 2-브로모-8-(나프탈렌-2-일)다이벤조퓨란의 합성



[0607]

[0608] 아르곤 분위기 하에, 2-나프탈렌보론산 13.19g(76.7mmol), 2,8-다이브로모다이벤조퓨란 25.00g(76.7mmol), 테트라키스(트라이페닐포스핀)팔라듐(0) 4.43g(3.80mmol), 다이메톡시에테인 300ml, 2M-탄산나트륨 수용액 116g을 가하고, 욕 온도 85℃에서 7시간 교반하였다. 반응 혼합물에 물을 가하고, 톨루엔으로 추출하였다. 여과액을 수세하고, 유기상을 황산마그네슘으로 건조시킨 후, 용매를 감압 하에 증류 제거하였다. 잔사를 실리카 겔 컬럼 크로마토그래피에 의해 정제하여 2-브로모-8-(나프탈렌-2-일)다이벤조퓨란 13.50g(수율 44%)을 얻었다.

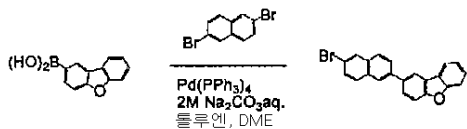
[0609] (합성 참고예 12-2) 8-(나프탈렌-2-일)다이벤조퓨란-2-일보론산의 합성



[0610]

[0611] 아르곤 분위기 하에, 2-브로모-8-(나프탈렌-2-일)다이벤조퓨란 7.47g(20.0mmol), 탈수 THF 75ml의 혼합액을 -60℃로 냉각하고, 교반하면서 1.55M n-부틸리튬의 헥세인 용액 15.5ml(24.0mmol)를 적하하였다. 추가로, 반응 혼합물을 -70℃에서 2시간 교반하였다. 반응 용액을 다시 -70℃로 냉각하고, 붕산트라이아이소프로필 11.29g(60.0 mol)을 적하하였다. 반응 혼합물을 실온으로 승온시켜 1시간 교반하고, 하룻밤 방치하였다. 반응 혼합물을 얼음 욕 상에서 냉각하고, 6N-염산 수용액을 가하고, 실온에서 1시간 교반하였다. 반응 혼합물에 다이클로로메테인을 가하여 분액하고, 유기상을 수세하고, 황산나트륨으로 건조시켰다. 용매를 감압 하에 증류 제거하고, 잔사를 실리카 겔 컬럼 크로마토그래피에 의해 정제하여 8-(나프탈렌-2-일)다이벤조퓨란-2-일보론산 3.65g(수율 54%)을 얻었다.

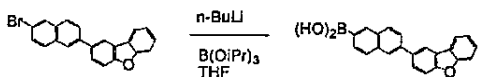
[0612] (합성 참고예 13-1) 2-(6-브로모나프탈렌-2-일)다이벤조퓨란의 합성



[0613]

[0614] 아르곤 분위기 하에, 2-다이벤조퓨란보론산 18.53g(87.4mmol), 2,6-다이브로모나프탈렌 25.00g(87.4mmol), 테트라키스(트라이페닐포스핀)팔라듐(0) 5.05g(4.40mmol), 다이메톡시에테인 300ml, 2M-탄산나트륨 수용액 132g을 가하고, 욕 온도 85℃에서 7시간 교반하였다. 반응 혼합물에 물을 가하고, 톨루엔으로 추출하였다. 여과액을 수세하고, 유기상을 황산마그네슘으로 건조시킨 후, 용매를 감압 하에 증류 제거하였다. 잔사를 실리카 겔 컬럼 크로마토그래피에 의해 정제하여 2-(6-브로모나프탈렌-2-일)다이벤조퓨란 13.20g(수율 38%)을 얻었다.

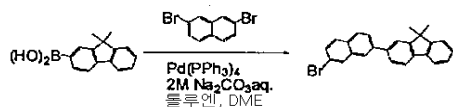
[0615] (합성 참고예 13-2) 6-(다이벤조퓨란-2-일)나프탈렌-2-일보론산의 합성



[0616]

[0617] 아르곤 분위기 하에, 2-(6-브로모나프탈렌-2-일)다이벤조퓨란 7.47g(20.0mmol), 탈수 THF 75ml의 혼합액을 -60℃로 냉각하고, 교반하면서 1.55M n-부틸리튬의 헥세인 용액 15.5ml(24.0mmol)를 적하하였다. 추가로, 반응 혼합물을 -70℃에서 2시간 교반하였다. 반응 용액을 다시 -70℃로 냉각하고, 붕산트라이아이소프로필 11.29g(60.0 mol)을 적하하였다. 반응 혼합물을 실온으로 승온시켜 1시간 교반하고, 하룻밤 방치하였다. 반응 혼합물을 얼음 욕 상에서 냉각하고, 6N-염산 수용액을 가하고, 실온에서 1시간 교반하였다. 반응 혼합물에 다이클로로메테인을 가하여 분액하고, 유기상을 수세하고, 황산나트륨으로 건조시켰다. 용매를 감압 하에 증류 제거하고, 잔사를 실리카 겔 컬럼 크로마토그래피에 의해 정제하여 6-(다이벤조퓨란-2-일)나프탈렌-2-일보론산 4.20g(수율 62%)을 얻었다.

[0618] (합성 참고예 14-1) 2-(7-브로모나프탈렌-2-일)-9,9-다이메틸-9H-플루오렌의 합성

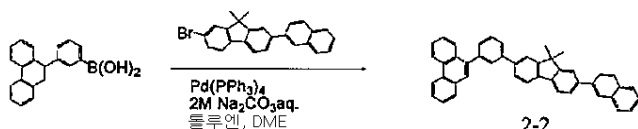


[0619]

[0620] 아르곤 분위기 하에, 9,9-다이메틸-9H-플루오렌-2-일보론산 16.65g(69.9mmol), 2,7-다이브로모나프탈렌 20.00g(69.9mmol), 테트라키스(트라이페닐포스핀)팔라듐(0) 4.04g(3.50mmol), 톨루엔 200ml, 다이메톡시에테인 200ml, 2M 탄산나트륨 수용액 106g을 가하고, 85℃에서 9시간 교반을 행하고, 하룻밤 방치하였다. 반응 혼합물에 물을 가하고, 실온에서 1시간 교반하였다. 여과 후, 톨루엔으로 추출하고, 유기상을 물로 세정하고, 이어서 포화 식염수로 세정하였다. 황산나트륨으로 건조시킨 후, 톨루엔을 감압 하에 증류 제거하였다. 얻어진 갈색의 오일상 물질을 실리카 겔 컬럼 크로마토그래피에 의해 정제하여 2-(7-브로모나프탈렌-2-일)-9,9-다이메틸-9H-플루오렌 13.4g(수율 48%)을 얻었다.

[0621] <발명 A>

[0622] (합성 실시예 A-1) 화합물 2-2의 합성



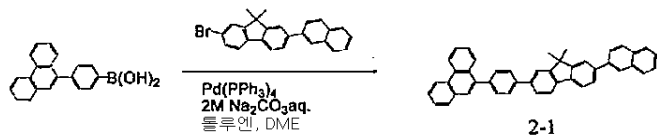
[0623]

[0624] 아르곤 분위기 하에, 2-브로모-9,9-다이메틸-7-(나프탈렌-2-일)-9H-플루오렌 3.30g(8.26mmol), 3-(페난트렌-9-일)페닐보론산 2.46g(8.26mmol), 테트라키스(트라이페닐포스핀)팔라듐(0) 0.38g(0.33mmol), 톨루엔 90ml, 다이메톡시에테인 30ml, 2M 탄산나트륨 수용액 12.5g을 가하고, 85℃에서 8시간 교반하였다. 반응 혼합물을 실온으로 되돌리고, 물을 가하여 1시간 교반하고, 하룻밤 방치하였다. 반응 혼합물에 물을 가하고, 실온에서 1시간 교반하였다. 여과 후, 톨루엔으로 추출하고, 유기상을 물로 세정하고, 이어서 포화 식염수로 세정하였다. 황산나트륨으로 건조시킨 후, 톨루엔을 감압 하에 증류 제거하였다. 얻어진 오일상 물질을 실리카 겔 컬럼 크로

마토그래피에 의해 정제하여 화합물 2-2를 3.40g(수율 72%) 얻었다.

[0625] 질량 스펙트럼 분석 결과, 분자량 572.25에 대하여  $m/e=572$ 였다.

[0626] (합성 실시예 A-2) 화합물 2-1의 합성

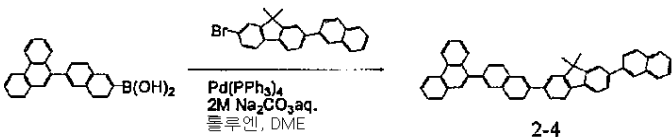


[0627]

[0628] 화합물 2-2의 합성에 있어서, 3-(페난트렌-9-일)페닐보론산 대신에 4-(페난트렌-9-일)페닐보론산을 이용하여 마찬가지로 합성하였다.

[0629] 질량 스펙트럼 분석 결과, 분자량 572.25에 대하여  $m/e=572$ 였다.

[0630] (합성 실시예 A-3) 화합물 2-4의 합성

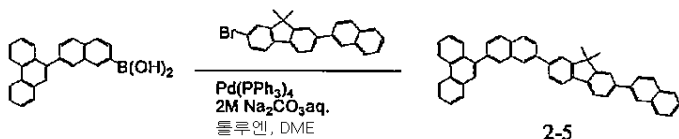


[0631]

[0632] 화합물 2-2의 합성에 있어서, 3-(페난트렌-9-일)페닐보론산 대신에 6-(페난트렌-9-일)나프탈렌-2-일보론산을 이용하여 마찬가지로 합성하였다.

[0633] 질량 스펙트럼 분석 결과, 분자량 622.27에 대하여  $m/e=622$ 였다.

[0634] (합성 실시예 A-4) 화합물 2-5의 합성

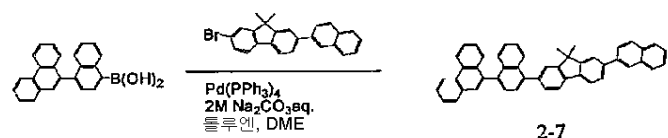


[0635]

[0636] 화합물 2-2의 합성에 있어서, 3-(페난트렌-9-일)페닐보론산 대신에 7-(페난트렌-9-일)나프탈렌-2-일보론산을 이용하여 마찬가지로 합성하였다.

[0637] 질량 스펙트럼 분석 결과, 분자량 622.27에 대하여  $m/e=622$ 였다.

[0638] (합성 실시예 A-5) 화합물 2-7의 합성

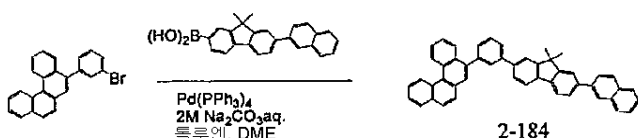


[0639]

[0640] 화합물 2-2의 합성에 있어서, 3-(페난트렌-9-일)페닐보론산 대신에 4-(페난트렌-9-일)나프탈렌-1-일보론산을 이용하여 마찬가지로 합성하였다.

[0641] 질량 스펙트럼 분석 결과, 분자량 622.27에 대하여  $m/e=622$ 였다.

[0642] (합성 실시예 A-6) 화합물 2-184의 합성



[0643]

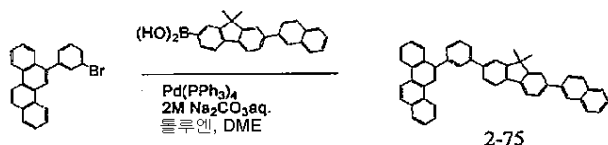
[0644] 화합물 2-2의 합성에 있어서, 3-(페난트렌-9-일)페닐보론산 대신에 9,9-다이메틸-7-(나프탈렌-2-일)-9H-플루오렌-2-일보론산을 이용하고, 2-브로모-9,9-다이메틸-7-(나프탈렌-2-일)-9H-플루오렌 대신에 5-(3-브로모페닐)벤



조[c]페난트렌을 이용하여 마찬가지로 합성하였다.

[0645] 질량 스펙트럼 분석 결과, 분자량 622.27에 대하여  $m/e=622$ 였다.

[0646] (합성 실시예 A-7) 화합물 2-75의 합성

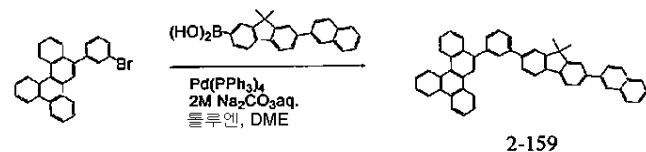


[0647]

[0648] 화합물 2-2의 합성에 있어서, 3-(페난트렌-9-일)페닐보론산 대신에 9,9-다이메틸-7-(나프탈렌-2-일)-9H-플루오렌-2-일보론산을 이용하고, 2-브로모-9,9-다이메틸-7-(나프탈렌-2-일)-9H-플루오렌 대신에 6-(3-브로모페닐)크라이센을 이용하여 마찬가지로 합성하였다.

[0649] 질량 스펙트럼 분석 결과, 분자량 622.27에 대하여  $m/e=622$ 였다.

[0650] (합성 실시예 A-8) 화합물 2-159의 합성

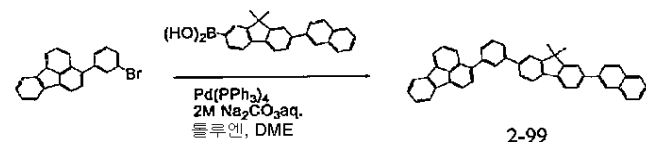


[0651]

[0652] 화합물 2-2의 합성에 있어서, 3-(페난트렌-9-일)페닐보론산 대신에 9,9-다이메틸-7-(나프탈렌-2-일)-9H-플루오렌-2-일보론산을 이용하고, 2-브로모-9,9-다이메틸-7-(나프탈렌-2-일)-9H-플루오렌 대신에 10-(3-브로모페닐)벤조크라이센을 이용하여 마찬가지로 합성하였다.

[0653] 질량 스펙트럼 분석 결과, 분자량 672.28에 대하여  $m/e=672$ 였다.

[0654] (합성 실시예 A-9) 화합물 2-99의 합성

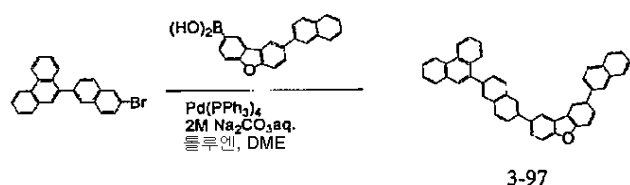


[0655]

[0656] 화합물 2-2의 합성에 있어서, 3-(페난트렌-9-일)페닐보론산 대신에 9,9-다이메틸-7-(나프탈렌-2-일)-9H-플루오렌-2-일보론산을 이용하고, 2-브로모-9,9-다이메틸-7-(나프탈렌-2-일)-9H-플루오렌 대신에 3-(3-브로모페닐)플루오란텐을 이용하여 마찬가지로 합성하였다.

[0657] 질량 스펙트럼 분석 결과, 분자량 596.25에 대하여  $m/e=596$ 이었다.

[0658] (합성 실시예 A-10) 화합물 3-97의 합성



[0659]

[0660] 화합물 2-2의 합성에 있어서, 3-(페난트렌-9-일)페닐보론산 대신에 8-(나프탈렌-2-일)다이벤조퓨란-2-일보론산을 이용하고, 2-브로모-9,9-다이메틸-7-(나프탈렌-2-일)-9H-플루오렌 대신에 6-브로모-2-(9-페난트렌일)나프탈렌을 이용하여 마찬가지로 합성하였다.

[0661] 질량 스펙트럼 분석 결과, 분자량 596.21에 대하여  $m/e=596$ 이었다.

[0662] 한편, 상기 합성예에서 질량 스펙트럼 분석은 FD-MS(필드 이온화 질량 분석)에 의해 행하였다. FD-MS(필드 이온화 질량 분석)의 측정에 이용한 장치 및 측정 조건을 이하에 나타낸다.

[0663] 장치: JSM-700(일본전자사제)

[0664] 조건: 가속 전압 8kV

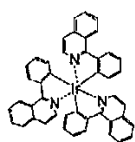
[0665] 스캔 범위  $m/z=50\sim3000$

[0666] 이미터 중: 카본

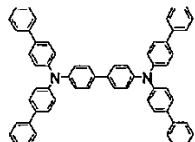
[0667] 이미터 전류:  $0mA\rightarrow2mA/\text{분}\rightarrow40mA(10\text{분 유지})$

[0668] 다음에, 실시예를 이용하여 본 발명을 더욱 상세하게 설명하지만, 본 발명은 이들 실시예의 기재 내용에 하등 제한되는 것은 아니다.

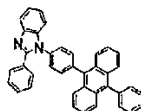
[0669] 상기 합성 실시예에서 얻어진 화합물 외에, 실시예 및 비교예에서 사용한 화합물의 구조를 이하에 나타낸다.



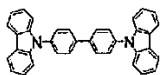
Ir(plq)<sub>3</sub>



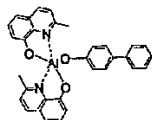
HT1



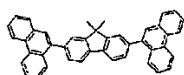
ET1



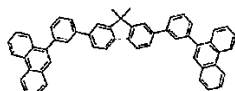
CBP



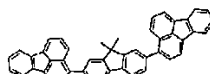
BAiq



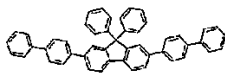
A-A



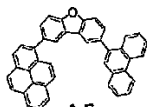
A-B



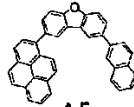
A-C



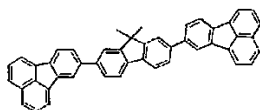
A-D



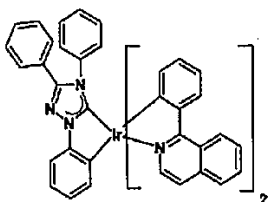
A-E



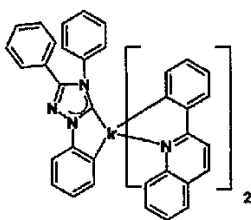
A-F



A-G



Complex A



Complex B

[0670]

[0671] [실시예 A-1]

[0672] (유기 EL 소자의 제작)

[0673] 25mm×75mm×0.7mm 두께의 ITO 투명 전극 부착 유리 기판(아사히가라스제)을 아이소프로필 알코올 중에서 초음파 세정을 5분간 행한 후, UV 오존 세정을 30분간 행하였다. 세정 후의 투명 전극 라인 부착 유리 기판을 진공 증착 장치의 기판 홀더에 장착하고, 우선 투명 전극 라인이 형성되어 있는 측의 면 상에, 상기 투명 전극을 덮도록 하여 막 두께 50nm의 HT1을 성막하였다. 이 HT1 막은 정공 주입 수송층으로서 기능한다. 추가로, 이 정공 주입 수송층의 성막에 계속하여 이 막상에 막 두께 40nm의 신규 호스트 화합물 2-2, 및 인광 발광성 도펀트

로서  $\text{Ir}(\text{piq})_3$ 을 10질량%가 되도록 저항 가열에 의해 공증착막으로 성막하였다. 이 막은 발광층(인광 발광층)으로서 기능한다. 이 발광층 성막에 계속하여 막 두께 40nm로 ET1을 성막하였다. 이 막은 전자 수송층으로서 기능한다. 그 후, LiF를 전자 주입성 전극(음극)으로서 성막 속도 1Å/min에서 막 두께 0.5nm로 형성하였다. 이 LiF 층 상에 금속 Al을 증착시켜 금속 음극을 막 두께 150nm로 형성하여 유기 EL 소자를 형성하였다.

- [0674] [실시예 A-2~A-10, 비교예 A-1~A-9]
- [0675] 실시예 A-1의 신규 호스트 화합물 2-2 대신에 하기 표 1에 나타내는 호스트 화합물을 이용한 것 이외에는 실시예 A-1과 마찬가지로 하여 유기 EL 소자를 형성하였다.
- [0676] [실시예 A-11]
- [0677] 도펀트인 착체를 Complex A로 교체한 것 이외에는 실시예 A-6와 동일한 제작 방법으로 유기 EL 소자를 제작하였다.
- [0678] [실시예 A-12]
- [0679] Complex A를 Complex B로 교체한 것 이외에는 실시예 A-11과 동일한 제작 방법으로 유기 EL 소자를 제작하였다.
- [0680] [비교예 A-10]
- [0681] 호스트 화합물을 2-184로부터 CBP로 교체한 것 이외에는 실시예 A-11과 동일한 제작 방법으로 유기 EL 소자를 제작하였다.
- [0682] [비교예 A-11]
- [0683] 호스트 화합물을 2-184로부터 BAlq로 교체한 것 이외에는 실시예 A-12와 동일한 제작 방법으로 유기 EL 소자를 제작하였다.
- [0684] [유기 EL 소자의 발광 성능 평가]
- [0685] 상기 실시예 A-1~A-12, 비교예 A-1~A-11에서 제작한 유기 EL 소자를 직류 전류 구동에 의해 발광시키고, 전류 밀도  $10\text{mA}/\text{cm}^2$ 에서의 전압, 발광 효율 및 휘도 반감 수명(초기 휘도  $5000\text{cd}/\text{m}^2$ )을 측정하였다. 이들의 평가 결과를 표 1에 나타낸다.

표 1

| 실시예      | 도펀트                  | 호스트 화합물 | 전압 (V) | 발광 효율 (cd/A) | 실온 휘도 반감 수명 (시간) |
|----------|----------------------|---------|--------|--------------|------------------|
| 실시예 A-1  | Ir(piq) <sub>3</sub> | 2-2     | 4.7    | 8.2          | 4,800            |
| 실시예 A-2  | Ir(piq) <sub>3</sub> | 2-1     | 4.7    | 8.2          | 4,500            |
| 실시예 A-3  | Ir(piq) <sub>3</sub> | 2-4     | 4.6    | 8.1          | 4,000            |
| 실시예 A-4  | Ir(piq) <sub>3</sub> | 2-5     | 4.5    | 7.8          | 3,800            |
| 실시예 A-5  | Ir(piq) <sub>3</sub> | 2-7     | 4.4    | 8.0          | 3,400            |
| 실시예 A-6  | Ir(piq) <sub>3</sub> | 2-184   | 4.6    | 8.0          | 4,000            |
| 실시예 A-7  | Ir(piq) <sub>3</sub> | 2-75    | 4.4    | 7.8          | 3,800            |
| 실시예 A-8  | Ir(piq) <sub>3</sub> | 2-159   | 4.3    | 8.0          | 3,700            |
| 실시예 A-9  | Ir(piq) <sub>3</sub> | 2-99    | 4.8    | 7.6          | 4,200            |
| 실시예 A-10 | Ir(piq) <sub>3</sub> | 3-97    | 4.1    | 7.5          | 3,500            |
| 비교예 A-1  | Ir(piq) <sub>3</sub> | CBP     | 5.4    | 6.3          | 500              |
| 비교예 A-2  | Ir(piq) <sub>3</sub> | BAIq    | 5.3    | 7.0          | 1,000            |
| 비교예 A-3  | Ir(piq) <sub>3</sub> | 화합물 A-A | 4.8    | 7.0          | 450              |
| 비교예 A-4  | Ir(piq) <sub>3</sub> | 화합물 A-B | 5.2    | 7.1          | 1,200            |
| 비교예 A-5  | Ir(piq) <sub>3</sub> | 화합물 A-C | 4.8    | 7.2          | 200              |
| 비교예 A-6  | Ir(piq) <sub>3</sub> | 화합물 A-D | 5.2    | 7.1          | 380              |
| 비교예 A-7  | Ir(piq) <sub>3</sub> | 화합물 A-E | 5.4    | 3.8          | 40               |
| 비교예 A-8  | Ir(piq) <sub>3</sub> | 화합물 A-F | 5.5    | 3.8          | 20               |
| 비교예 A-9  | Ir(piq) <sub>3</sub> | 화합물 A-G | 5.1    | 6.5          | 310              |
| 실시예 A-11 | Complex A            | 2-184   | 4.5    | 8.2          | 3100             |
| 실시예 A-12 | Complex B            | 2-184   | 4.7    | 7.8          | 2800             |
| 비교예 A-10 | Complex A            | CBP     | 5.8    | 4.2          | 800              |
| 비교예 A-11 | Complex B            | BAIq    | 5.1    | 5.0          | 1300             |

[0686]

[0687]

표 1로부터 분명한 바와 같이, 발광 효율에 대하여, 본 발명의 호스트 재료를 이용하여 구성한 실시예 A-1~실시예 A-10의 유기 EL 소자는 발광 효율이 높고 수명이 현저히 긴 것으로 나타났다. 한편, 비교예 A-1~2에서는 전압이 높고 수명이 짧다. 비교예 A-3, A-5에서는 전압은 동등하지만 수명은 현저히 짧다. 비교예 A-4, A-6, A-9에서는 전압이 높고 수명이 짧다. 비교예 A-7~8에서는 전압이 높고 효율과 수명이 현저히 짧다. 실시예 A-11, 12는 비교예 A-10, 11과 비교하여 전압이 낮고 효율이 높고 수명이 길다.

[0688]

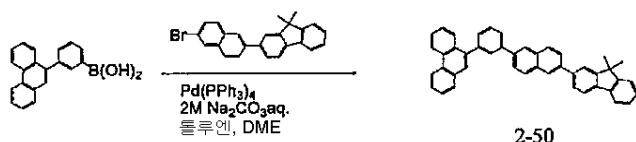
본 발명의 조합의 특징은, 호스트 재료의 3중항 에너지 갭과 도펀트의 3중항 에너지 갭이 적절하기 때문에 발광 효율이 향상되는 것과, 플루오렌환 잔기에 나프탈렌환 잔기를 결합시키되 공액계가 신장하는 위치에서 결합시켜 보다 저전압화한 것과, 호스트 재료에 질소 함유 환, 질소 원자 등이 치환되어 있지 않기 때문에 발광 재료가 정공, 전자에 대하여 높은 내성을 가지고 있고, 이에 의해 종래 알려져 있었던 조합보다도 장수명화하는 것이다.

[0689]

<발명 B>

[0690]

(합성 실시예 B-1) 화합물 2-50의 합성



[0691]

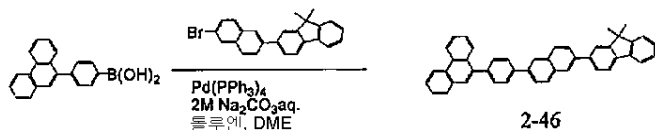
[0692]

아르곤 분위기 하에, 2-(6-브로모나프탈렌-2-일)-9,9-다이메틸-9H-플루오렌 3.30g(8.26mmol), 3-(페난트렌-9-일)페닐보론산 2.46g(8.26mmol), 테트라키스(트라이페닐포스핀)팔라듐(0) 0.38g(0.33mmol), 톨루엔 90ml, 다이메톡시에테인 30ml, 2M 탄산나트륨 수용액 12.5g을 가하고, 85℃에서 8시간 교반하였다. 반응 혼합물을 실온

으로 되돌리고, 물을 가하여 1시간 교반하였다. 여과 후, 톨루엔으로 추출하고, 유기상을 물로 세정하고, 이어서 포화 식염수로 세정하였다. 황산나트륨으로 건조시킨 후, 톨루엔을 감압 하에 증류 제거하였다. 잔사를 톨루엔, 헥세인으로 결정 식출화하여 화합물 2-50을 3.86g(수율 82%) 얻었다.

[0693] 질량 스펙트럼 분석 결과, 분자량 572.25에 대하여  $m/e=572$ 였다.

[0694] (합성 실시예 B-2) 화합물 2-46의 합성

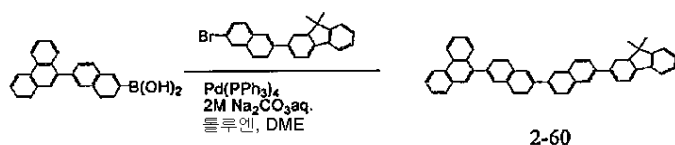


[0695]

[0696] 화합물 2-50의 합성에 있어서, 3-(페난트렌-9-일)페닐보론산 대신에 4-(페난트렌-9-일)페닐보론산을 이용하여 마찬가지로 합성하였다.

[0697] 질량 스펙트럼 분석 결과, 분자량 572.25에 대하여  $m/e=572$ 였다.

[0698] (합성 실시예 B-3) 화합물 2-60의 합성

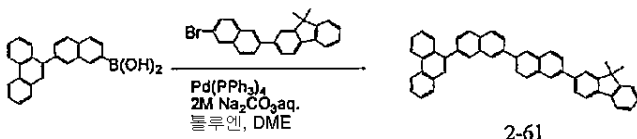


[0699]

[0700] 화합물 2-50의 합성에 있어서, 3-(페난트렌-9-일)페닐보론산 대신에 6-(페난트렌-9-일)나프탈렌-2-일보론산을 이용하여 마찬가지로 합성하였다.

[0701] 질량 스펙트럼 분석 결과, 분자량 622.27에 대하여  $m/e=622$ 였다.

[0702] (합성 실시예 B-4) 화합물 2-61의 합성

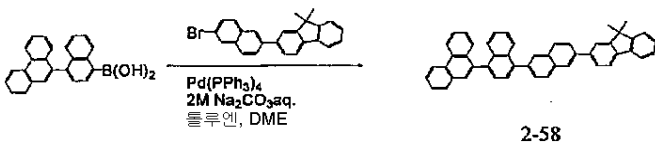


[0703]

[0704] 화합물 2-50의 합성에 있어서, 3-(페난트렌-9-일)페닐보론산 대신에 7-(페난트렌-9-일)나프탈렌-2-일보론산을 이용하여 마찬가지로 합성하였다.

[0705] 질량 스펙트럼 분석 결과, 분자량 622.27에 대하여  $m/e=622$ 였다.

[0706] (합성 실시예 B-5) 화합물 2-58의 합성

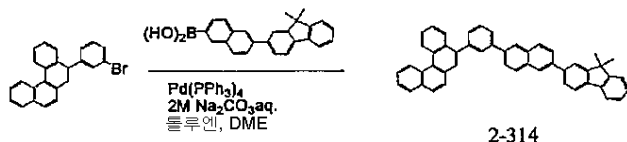


[0707]

[0708] 화합물 2-50의 합성에 있어서, 3-(페난트렌-9-일)페닐보론산 대신에 4-(페난트렌-9-일)나프탈렌-1-일보론산을 이용하여 마찬가지로 합성하였다.

[0709] 질량 스펙트럼 분석 결과, 분자량 622.27에 대하여  $m/e=622$ 였다.

[0710] (합성 실시예 B-6) 화합물 2-314의 합성

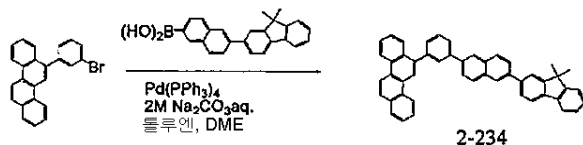


[0711]

[0712] 화합물 2-50의 합성에 있어서, 3-(페난트렌-9-일)페닐보론산 대신에 6-(9,9-다이메틸-9H-플루오렌-2-일)나프탈렌-2-일보론산을 이용하고, 2-브로모-9,9-다이메틸-7-(나프탈렌-2-일)-9H-플루오렌 대신에 5-(3-브로모페닐)벤조[c]페난트렌을 이용하여 마찬가지로 방법으로 합성하였다.

[0713] 질량 스펙트럼 분석 결과, 분자량 622.27에 대하여  $m/e=622$ 였다.

[0714] (합성 실시예 B-7) 화합물 2-234의 합성

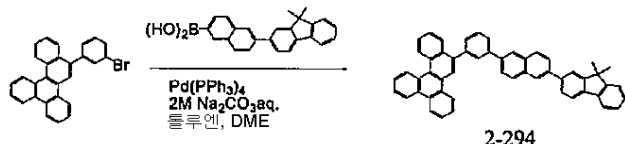


[0715]

[0716] 화합물 2-50의 합성에 있어서, 3-(페난트렌-9-일)페닐보론산 대신에 6-(9,9-다이메틸-9H-플루오렌-2-일)나프탈렌-2-일보론산을 이용하고, 2-브로모-9,9-다이메틸-7-(나프탈렌-2-일)-9H-플루오렌 대신에 6-(3-브로모페닐)크라이센을 이용하여 같은 방법으로 합성하였다.

[0717] 질량 스펙트럼 분석 결과, 분자량 622.27에 대하여  $m/e=622$ 였다.

[0718] (합성 실시예 B-8) 화합물 2-294의 합성

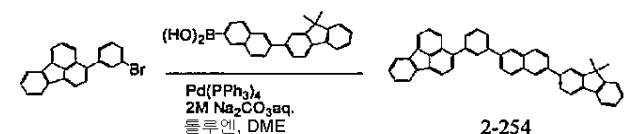


[0719]

[0720] 화합물 2-2의 합성에 있어서, 3-(페난트렌-9-일)페닐보론산 대신에 6-(9,9-다이메틸-9H-플루오렌-2-일)나프탈렌-2-일보론산을 이용하고, 2-브로모-9,9-다이메틸-7-(나프탈렌-2-일)-9H-플루오렌 대신에 10-(3-브로모페닐)벤조[g]크라이센을 이용하여 마찬가지로 방법으로 합성하였다.

[0721] 질량 스펙트럼 분석 결과, 분자량 672.28에 대하여  $m/e=672$ 였다.

[0722] (합성 실시예 B-9) 화합물 2-254의 합성

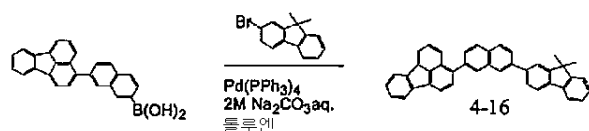


[0723]

[0724] 화합물 2-2의 합성에 있어서, 3-(페난트렌-9-일)페닐보론산 대신에 6-(9,9-다이메틸-9H-플루오렌-2-일)나프탈렌-2-일보론산을 이용하고, 2-브로모-9,9-다이메틸-7-(나프탈렌-2-일)-9H-플루오렌 대신에 3-(3-브로모페닐)플루오란텐을 이용하여 같은 방법으로 합성하였다.

[0725] 질량 스펙트럼 분석 결과, 분자량 596.25에 대하여  $m/e=596$ 이었다.

[0726] (합성 실시예 B-10) 화합물 4-16의 합성

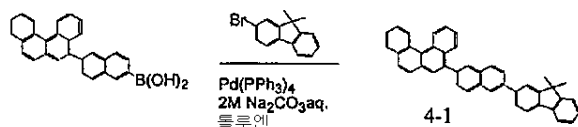


[0727]

[0728] 아르곤 분위기 하에, 2-브로모-9,9-다이메틸-9H-플루오렌 2.26g(8.26mmol), 7-(플루오란텐-3-일)나프탈렌-2-일보론산 3.07g(8.26mmol), 테트라키스(트라이페닐포스핀)팔라듐(0) 0.38g(0.33mmol), 톨루엔 90ml, 다이메톡시에테인 30ml, 2M 탄산나트륨 수용액 12.5g을 가하고, 85℃에서 10시간 교반하였다. 반응 혼합물을 실온으로 되돌리고, 물을 가하여 1시간 교반하였다. 여과 후, 톨루엔으로 추출하고, 유기상을 물로 세정하고, 이어서 포화 식염수로 세정하였다. 황산나트륨으로 건조시킨 후, 톨루엔을 감압 하에 증류 제거하였다. 잔사를 톨루엔, 헥세인으로 결정 석출화하여 화합물 2-16을 2.42g(수율 56%) 얻었다.

[0729] 질량 스펙트럼 분석 결과, 분자량 520.66에 대하여  $m/e=520$ 이었다.

[0730] (합성 실시예 B-11) 화합물 4-1의 합성

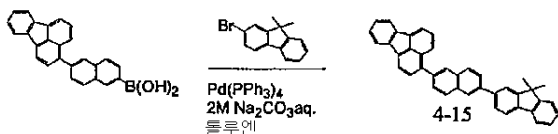


[0731]

[0732] 화합물 4-16의 합성에 있어서, 7-(플루오란텐-3-일)나프탈렌-2-일보론산 대신에 6-(벤조[c]페난트렌-5-일)나프탈렌-2-일보론산을 이용한 것 이외에는 마찬가지로의 방법 및 마찬가지로의 몰수로 시약을 첨가하여 반응시키고, 마찬가지로의 정제를 거쳐 화합물 4-1을 3.24g(수율 71%) 얻었다.

[0733] 질량 스펙트럼 분석 결과, 분자량 546.70에 대하여  $m/e=546$ 이었다.

[0734] (합성 실시예 B-12) 화합물 4-15의 합성



[0735]

[0736] 화합물 4-16의 합성에 있어서, 7-(플루오란텐-3-일)나프탈렌-2-일보론산 대신에 6-(플루오란텐-3-일)나프탈렌-2-일보론산을 이용한 것 이외에는 마찬가지로의 방법 및 마찬가지로의 몰수로 시약을 첨가하여 반응시키고, 마찬가지로의 정제를 거쳐 화합물 4-15를 2.88g(수율 67%) 얻었다.

[0737] 질량 스펙트럼 분석 결과, 분자량 520.66에 대하여  $m/e=520$ 이었다.

[0738] 한편, 상기 합성예에서 질량 스펙트럼 분석은 FD-MS(필드 디스플레이 질량 분석)에 의해 행하였다. FD-MS(필드 디스플레이 질량 분석)의 측정에 이용한 장치 및 측정 조건을 이하에 나타낸다.

[0739] 장치: JSM-700(일본전자사제)

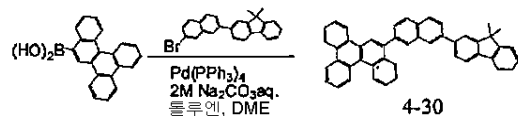
[0740] 조건: 가속 전압 8kV

[0741] 스캔 범위  $m/z=50\sim 3000$

[0742] 이미터 종: 카본

[0743] 이미터 전류:  $0mA\rightarrow 2mA/분\rightarrow 40mA(10분 유지)$

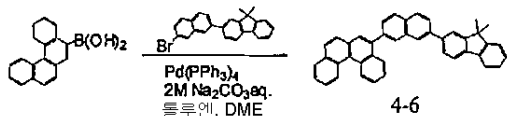
[0744] (합성 실시예 B-13) 화합물 4-30의 합성



[0745]

[0746] 아르곤 분위기 하에, 2-(7-브로모나프탈렌-2-일)-9,9-다이메틸-9H-플루오렌 3.6g(9.0mmol), 10-벤조[g]크라이센보론산 2.9g(9.0mmol), 테트라키스(트라이페닐포스핀)팔라듐(0) 526mg(0.45mmol), 톨루엔 40ml, 다이메톡시에테인 40ml, 2M 탄산나트륨 수용액 13.5g을 가하고, 가열 환류 하에 8시간 교반하였다. 반응 종료 후, 반응 혼합물에 물을 가하고, 톨루엔으로 추출하고, 수세하였다. 유기상을 황산나트륨으로 건조시킨 후, 톨루엔을 감압 하에 증류 제거하였다. 잔사를 실리카 겔 컬럼 크로마토그래피에 의해 정제하고, 재결정 후, 화합물 4-30을 2.2g(수율 40%) 얻었다.

[0747] (합성 실시예 B-14) 화합물 4-6의 합성

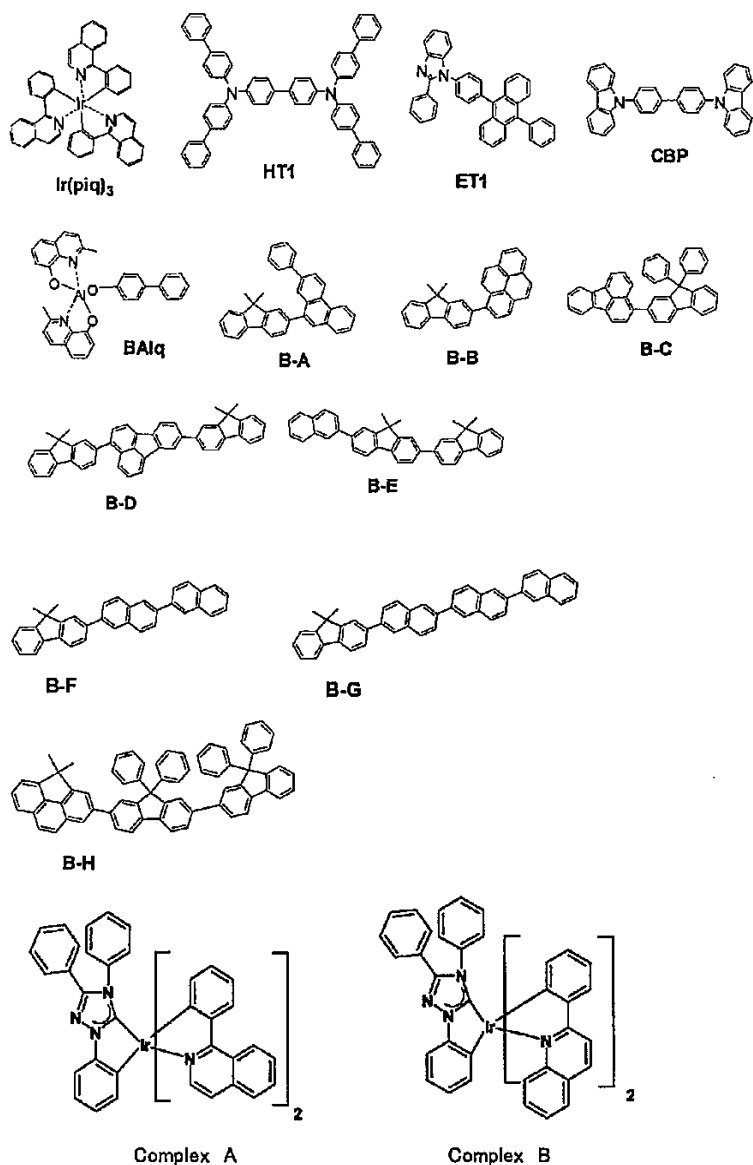


[0748]

[0749] 아르곤 분위기 하에, 2-(7-브로모나프탈렌-2-일)-9,9-다이메틸-9H-플루오렌 3.6g(9.0mmol), 5-벤조[c]페난트렌 보론산2.55g(9.0mmol), 테트라키스(트라이페닐포스핀)팔라듐(0) 526mg(0.45mmol), 톨루엔 40ml, 다이메톡시에테인 40ml, 2M 탄산나트륨 수용액 13.5g을 가하고, 가열 환류 하에 8시간 교반하였다. 반응 종료 후, 반응 혼합물에 물을 가하고, 톨루엔으로 추출하고, 수세하였다. 유기상을 황산나트륨으로 건조시킨 후, 톨루엔을 감압 하에 증류 제거하였다. 잔사를 실리카 겔 컬럼 크로마토그래피에 의해 정제하고, 재결정 후, 화합물 4-6을 2.8g(수율 57%) 얻었다.

[0750] 다음에, 실시예를 이용하여 본 발명을 더욱 상세하게 설명하지만, 본 발명은 이들 실시예의 기재 내용에 하등 제한되는 것은 아니다.

[0751] 상기 합성 실시예에서 얻어진 화합물 외에, 실시예 및 비교예에서 사용한 화합물의 구조를 이하에 나타낸다.



[0752]

[실시예 B-1]

[유기 EL 소자의 제작]

[0755] 25mm×75mm×0.7mm 두께의 ITO 투명 전극 부착 유리 기판(아사히가라스제)을 아이소프로필 알코올 중에서 초음파 세정을 5분간 행한 후, UV 오존 세정을 30분간 행하였다. 세정 후의 투명 전극 라인 부착 유리 기판을 진공 증착 장치의 기판 홀더에 장착하고, 우선 투명 전극 라인이 형성되어 있는 측의 면 상에, 상기 투명 전극을 덮도록 하여 막 두께 50nm의 HT1을 성막하였다. 이 HT1 막은 정공 주입 수송층으로서 기능한다. 추가로, 이 정공 주입 수송층의 성막에 계속하여 이 막상에 막 두께 40nm의 신규 호스트 화합물 2-2, 및 인광 발광성 도펀트로서 Ir(piq)<sub>3</sub>을 10질량%가 되도록 저항 가열에 의해 공증착막으로 성막하였다. 이 막은 발광층(인광 발광층)



으로서 기능한다. 이 발광층 성막에 계속하여 막 두께 40nm로 ET1을 성막하였다. 이 막은 전자 수송층으로서 기능한다. 그 후, LiF를 전자 주입성 전극(음극)으로서 성막 속도 1Å/min에서 막 두께 0.5nm로 형성하였다. 이 LiF 층 상에 금속 Al을 증착시켜 금속 음극을 막 두께 150nm로 형성하여 유기 EL 소자를 형성하였다.

- [0756] [실시예 B-2~B-14, 비교예 B-1~B-10]
- [0757] 실시예 B-1의 신규 호스트 화합물 2-2 대신에 하기 표 2에 나타내는 호스트 화합물을 이용한 것 이외에는 실시예 B-1과 마찬가지로 하여 유기 EL 소자를 형성하였다.
- [0758] [실시예 B-15]
- [0759] 도펀트인 착체를 Complex A로 교체한 것 이외에는 실시예 B-13과 동일한 제작 방법으로 유기 EL 소자를 제작하였다.
- [0760] [실시예 B-16]
- [0761] Complex A를 Complex B로 교체한 것 이외에는 실시예 B-13과 동일한 제작 방법으로 유기 EL 소자를 제작하였다.
- [0762] [비교예 B-11]
- [0763] 호스트 화합물을 4-30으로부터 CBP로 교체한 것 이외에는 실시예 B-15와 동일한 제작 방법으로 유기 EL 소자를 제작하였다.
- [0764] [비교예 B-12]
- [0765] 호스트 화합물을 4-30으로부터 BA1q로 교체한 것 이외에는 실시예 B-16와 동일한 제작 방법으로 유기 EL 소자를 제작하였다.
- [0766] [유기 EL 소자의 발광 성능 평가]
- [0767] 상기 실시예 B-1~B-16, 비교예 B-1~B-12에서 제작한 유기 EL 소자를 직류 전류 구동에 의해 발광시키고, 전류 밀도 10mA/cm<sup>2</sup>에서의 전압, 발광 효율 및 휘도 반감 수명(초기 휘도 5000cd/m<sup>2</sup>)을 측정하였다. 이들의 평가 결과를 표 2에 나타낸다.

표 2

| 실시에      | 도펀트                  | 호스트<br>화합물 | 전압<br>(V) | 발광<br>효율<br>(cd/A) | 실온 휘도<br>반감 수명<br>(시간) |
|----------|----------------------|------------|-----------|--------------------|------------------------|
| 실시에 B-1  | Ir(piq) <sub>3</sub> | 2-50       | 4.8       | 8.0                | 4,700                  |
| 실시에 B-2  | Ir(piq) <sub>3</sub> | 2-46       | 4.8       | 7.6                | 4,200                  |
| 실시에 B-3  | Ir(piq) <sub>3</sub> | 2-60       | 4.3       | 7.4                | 3,400                  |
| 실시에 B-4  | Ir(piq) <sub>3</sub> | 2-61       | 4.5       | 8.1                | 4,100                  |
| 실시에 B-5  | Ir(piq) <sub>3</sub> | 2-58       | 4.4       | 7.4                | 3,700                  |
| 실시에 B-6  | Ir(piq) <sub>3</sub> | 2-314      | 4.7       | 8.2                | 4,500                  |
| 실시에 B-7  | Ir(piq) <sub>3</sub> | 2-234      | 4.3       | 7.5                | 3,400                  |
| 실시에 B-8  | Ir(piq) <sub>3</sub> | 2-294      | 4.3       | 7.5                | 4,000                  |
| 실시에 B-9  | Ir(piq) <sub>3</sub> | 2-254      | 4.3       | 8.3                | 4,700                  |
| 실시에 B-10 | Ir(piq) <sub>3</sub> | 4-16       | 4.4       | 8.3                | 4,200                  |
| 실시에 B-11 | Ir(piq) <sub>3</sub> | 4-1        | 4.3       | 8.6                | 4,800                  |
| 실시에 B-12 | Ir(piq) <sub>3</sub> | 4-15       | 4.3       | 7.7                | 3,900                  |
| 실시에 B-13 | Ir(piq) <sub>3</sub> | 4-30       | 4.4       | 7.9                | 3,900                  |
| 실시에 B-14 | Ir(piq) <sub>3</sub> | 4-6        | 4.4       | 8.1                | 4,300                  |
| 비교예 B-1  | Ir(piq) <sub>3</sub> | CBP        | 5.4       | 6.3                | 500                    |
| 비교예 B-2  | Ir(piq) <sub>3</sub> | BAIq       | 5.3       | 7.0                | 1,000                  |
| 비교예 B-3  | Ir(piq) <sub>3</sub> | 화합물 B-A    | 5.0       | 7.0                | 1,200                  |
| 비교예 B-4  | Ir(piq) <sub>3</sub> | 화합물 B-B    | 5.4       | 1.3                | 측정 불능                  |
| 비교예 B-5  | Ir(piq) <sub>3</sub> | 화합물 B-C    | 5.1       | 7.2                | 1,900                  |
| 비교예 B-6  | Ir(piq) <sub>3</sub> | 화합물 B-D    | 4.8       | 6.8                | 1400                   |
| 비교예 B-7  | Ir(piq) <sub>3</sub> | 화합물 B-E    | 4.8       | 4.9                | 400                    |
| 비교예 B-8  | Ir(piq) <sub>3</sub> | 화합물 B-F    | 4.6       | 7.0                | 170                    |
| 비교예 B-9  | Ir(piq) <sub>3</sub> | 화합물 B-G    | 4.6       | 7.2                | 280                    |
| 비교예 B-10 | Ir(piq) <sub>3</sub> | 화합물 B-H    | 4.9       | 4.1                | 250                    |
| 실시에 B-15 | Complex A            | 4-30       | 4.3       | 7.4                | 2700                   |
| 실시에 B-16 | Complex B            | 4-30       | 4.4       | 7.6                | 2900                   |
| 비교예 B-11 | Complex A            | CBP        | 5.8       | 4.2                | 800                    |
| 비교예 B-12 | Complex B            | BAIq       | 5.1       | 5.0                | 1300                   |

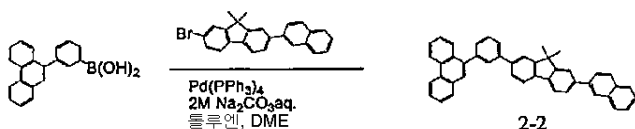
[0768]

[0769] 표 2로부터 분명한 바와 같이, 발광 효율에 대하여, 본 발명의 호스트 재료를 이용하여 구성한 실시예 B-1~실시에 B-14의 유기 EL 소자는 발광 효율이 높고 수명이 현저히 긴 것으로 나타났다. 한편, 비교예 B-1~B-3에서는 전압이 높고 수명이 짧다. 비교예 B-4는 효율이 낮고 수명이 극단적으로 짧다. B-5는 전압이 높고 수명이 짧다. B-6에서는 전압은 저하되고 있지만 실시예와 비교하여 수명이 짧다. 또한, 비교예 B-7에서는 발광 효율이 낮고 수명도 현저히 짧다. 비교예 8~10에서는 수명이 현저히 짧다. 실시예 B-15, 16은 비교예 B-11, 12와 비교하여 전압이 낮고 효율이 높고 수명이 길다.

[0770] 본 발명의 조합의 특징은, 호스트 재료의 3중항 에너지 갭과 도펀트의 3중항 에너지 갭이 적절하기 때문에 발광 효율이 향상되는 것과, 플루오렌한 잔기에 특성의 축합 다환 방향족 잔기를 결합시킴으로써 소자가 보다 저전압화된 것과, 호스트 재료에 질소 함유 환, 질소 원자 등이 치환되어 있지 않기 때문에 발광 재료가 정공, 전자에 대하여 높은 내성을 가지고 있고, 이에 의해 종래 알려져 있었던 조합보다도 장수명화하는 것이다.

[0771] <발명 C>

[0772] (합성 실시예 C-1) 화합물 2-2의 합성



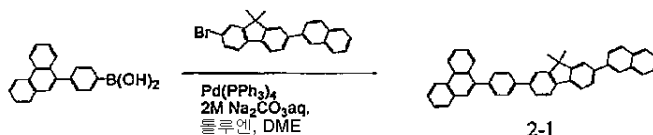
[0773]

[0774] 아르곤 분위기 하에, 2-브로모-9,9-다이메틸-7-(나프탈렌-2-일)-9H-플루오렌 3.30g(8.26mmol), 3-(페난트렌-9-

일)페닐보론산 2.46g(8.26mmol), 테트라키스(트라이페닐포스핀)팔라듐(0) 0.38g(0.33mmol), 톨루엔 90ml, 다이메톡시에테인 30ml, 2M 탄산나트륨 수용액 12.5g을 가하고, 85℃에서 8시간 교반하였다. 반응 혼합물을 실온으로 되돌리고, 물을 가하여 1시간 교반하고, 하룻밤 방치하였다. 반응 혼합물에 물을 가하고, 실온에서 1시간 교반하였다. 여과 후, 톨루엔으로 추출하고, 유기상을 물로 세정하고, 이어서 포화 식염수로 세정하였다. 황산나트륨으로 건조시킨 후, 톨루엔을 감압 하에 증류 제거하였다. 얻어진 오일상 물질을 실리카 겔 컬럼 크로마토그래피에 의해 정제하여 화합물 2-2를 3.40g(수율 72%) 얻었다.

[0775] 질량 스펙트럼 분석 결과, 분자량 572.25에 대하여  $m/e=572$ 였다.

[0776] (합성 실시예 C-2) 화합물 2-1의 합성

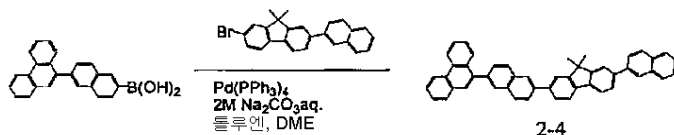


[0777]

[0778] 화합물 2-2의 합성에 있어서, 3-(페난트렌-9-일)페닐보론산 대신에 4-(페난트렌-9-일)페닐보론산을 이용하여 마찬가지로 합성하였다.

[0779] 질량 스펙트럼 분석 결과, 분자량 572.25에 대하여  $m/e=572$ 였다.

[0780] (합성 실시예 C-3) 화합물 2-4의 합성

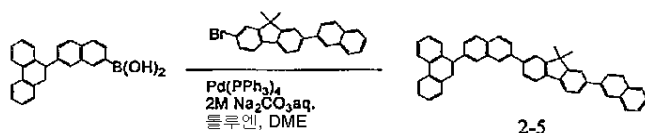


[0781]

[0782] 화합물 2-2의 합성에 있어서, 3-(페난트렌-9-일)페닐보론산 대신에 6-(페난트렌-9-일)나프탈렌-2-일보론산을 이용하여 마찬가지로 합성하였다.

[0783] 질량 스펙트럼 분석 결과, 분자량 622.27에 대하여  $m/e=622$ 였다.

[0784] (합성 실시예 C-4) 화합물 2-5의 합성

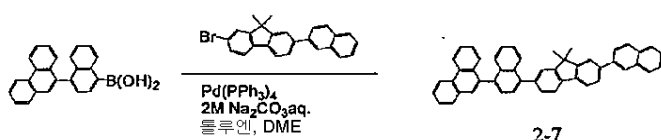


[0785]

[0786] 화합물 2-2의 합성에 있어서, 3-(페난트렌-9-일)페닐보론산 대신에 7-(페난트렌-9-일)나프탈렌-2-일보론산을 이용하여 마찬가지로 합성하였다.

[0787] 질량 스펙트럼 분석 결과, 분자량 622.27에 대하여  $m/e=622$ 였다.

[0788] (합성 실시예 C-5) 화합물 2-7의 합성

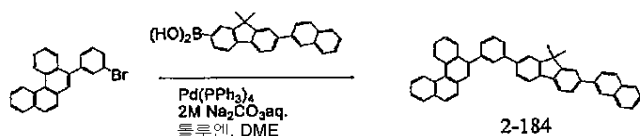


[0789]

[0790] 화합물 2-2의 합성에 있어서, 3-(페난트렌-9-일)페닐보론산 대신에 4-(페난트렌-9-일)나프탈렌-1-일보론산을 이용하여 마찬가지로 합성하였다.

[0791] 질량 스펙트럼 분석 결과, 분자량 622.27에 대하여  $m/e=622$ 였다.

[0792] (합성 실시예 C-6) 화합물 2-184의 합성

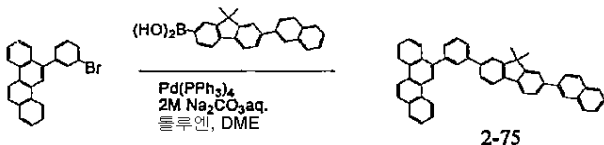


[0793]

[0794] 화합물 2-2의 합성에 있어서, 3-(페난트렌-9-일)페닐보론산 대신에 9,9-다이메틸-7-(나프탈렌-2-일)-9H-플루오렌-2-일보론산을 이용하고, 2-브로모-9,9-다이메틸-7-(나프탈렌-2-일)-9H-플루오렌 대신에 5-(3-브로모페닐)벤조[c]페난트렌을 이용하여 마찬가지로 합성하였다.

[0795] 질량 스펙트럼 분석 결과, 분자량 622.27에 대하여  $m/e=622$ 였다.

[0796] (합성 실시예 C-7) 화합물 2-75의 합성

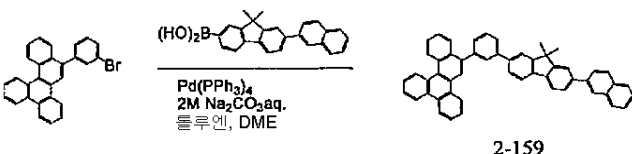


[0797]

[0798] 화합물 2-2의 합성에 있어서, 3-(페난트렌-9-일)페닐보론산 대신에 9,9-다이메틸-7-(나프탈렌-2-일)-9H-플루오렌-2-일보론산을 이용하고, 2-브로모-9,9-다이메틸-7-(나프탈렌-2-일)-9H-플루오렌 대신에 6-(3-브로모페닐)크라이센을 이용하여 마찬가지로 합성하였다.

[0799] 질량 스펙트럼 분석 결과, 분자량 622.27에 대하여  $m/e=622$ 였다.

[0800] (합성 실시예 C-8) 화합물 2-159의 합성

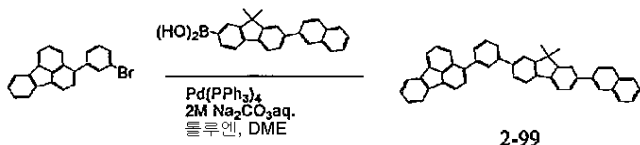


[0801]

[0802] 화합물 2-2의 합성에 있어서, 3-(페난트렌-9-일)페닐보론산 대신에 9,9-다이메틸-7-(나프탈렌-2-일)-9H-플루오렌-2-일보론산을 이용하고, 2-브로모-9,9-다이메틸-7-(나프탈렌-2-일)-9H-플루오렌 대신에 10-(3-브로모페닐)벤조[g]크라이센을 이용하여 마찬가지로 합성하였다.

[0803] 질량 스펙트럼 분석 결과, 분자량 672.28에 대하여  $m/e=672$ 였다.

[0804] (합성 실시예 C-9) 화합물 2-99의 합성

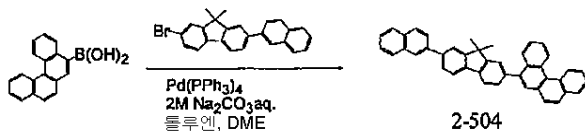


[0805]

[0806] 화합물 2-2의 합성에 있어서, 3-(페난트렌-9-일)페닐보론산 대신에 9,9-다이메틸-7-(나프탈렌-2-일)-9H-플루오렌-2-일보론산을 이용하고, 2-브로모-9,9-다이메틸-7-(나프탈렌-2-일)-9H-플루오렌 대신에 3-(3-브로모페닐)플루오란텐을 이용하여 마찬가지로 합성하였다.

[0807] 질량 스펙트럼 분석 결과, 분자량 596.25에 대하여  $m/e=596$ 이었다.

[0808] (합성 실시예 C-10) 화합물 2-504의 합성

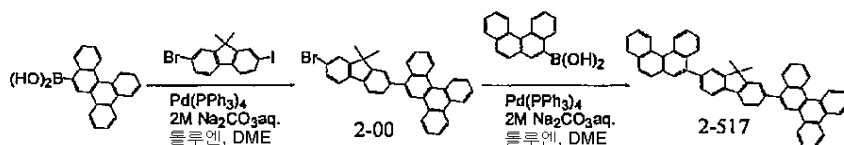


[0809]

[0810] 아르곤 분위기 하에, 2-브로모-9,9-다이메틸-7-(나프탈렌-2-일)-9H-플루오렌 3.30g(8.26mmol), 5-벤조[c]페난트렌보론산 2.25g(8.26mmol), 테트라키스(트라이페닐포스핀)팔라듐(0) 0.38g(0.33mmol), 톨루엔 90ml, 다이메톡시에테인 30ml, 2M 탄산나트륨 수용액 12.5g을 가하고, 85℃에서 9시간 교반하였다. 반응 혼합물을 실온으로 되돌리고, 물을 가하여 1시간 교반하고, 하룻밤 방치하였다. 반응 혼합물에 물을 가하고, 실온에서 1시간 교반하였다. 여과 후, 톨루엔으로 추출하고, 유기상을 물로 세정하고, 이어서 포화 식염수로 세정하였다. 황산나트륨으로 건조시킨 후, 톨루엔을 감압 하에 증류 제거하였다. 얻어진 오일상 물질을 실리카 겔 컬럼 크로마토그래피에 의해 정제하여 화합물 2-504를 3.11g(수율 69%) 얻었다.

[0811] 질량 스펙트럼 분석 결과, 분자량 546.7에 대하여 m/e=546이었다.

[0812] (합성 실시예 C-11) 화합물 2-517의 합성



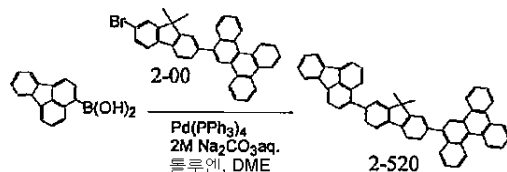
[0813]

[0814] 아르곤 분위기 하에, 10-벤조[g]클라이세보론산 5.00g(15.52mmol), 2-브로모-7-요오도-9,9-다이메틸플루오렌 5.76g(15.52mmol), 테트라키스(트라이페닐포스핀)팔라듐(0) 0.90g(0.768mmol), 톨루엔 40ml, 다이메톡시에테인 40ml, 2M 탄산나트륨 수용액 23.5g을 가하고, 가열 환류 하에 10시간 교반하고, 하룻밤 방치하였다. 반응 혼합물에 물을 가하고, 실온에서 1시간 교반하였다. 여과 후, 톨루엔으로 추출하고, 유기상을 물로 세정하고, 이어서 포화 식염수로 세정하였다. 황산나트륨으로 건조시킨 후, 톨루엔을 감압 하에 증류 제거하였다. 잔사를 실리카 겔 컬럼 크로마토그래피에 의해 정제하여 중간체 2-00을 6.23g(수율 73%)을 얻었다

[0815] 이어서, 아르곤 분위기 하에, 중간체 2-00 3.0g(5.46mmol), 5-벤조[c]페난트렌보론산 1.49g(5.46mmol), 테트라키스(트라이페닐포스핀)팔라듐(0) 0.25g(0.22mmol), 톨루엔 50ml, 다이메톡시에테인 20ml, 2M 탄산나트륨 수용액 8.3g을 가하고, 85℃에서 9시간 교반하였다. 반응 혼합물을 실온으로 되돌리고, 물을 가하여 1시간 교반하고, 하룻밤 방치하였다. 반응 혼합물에 물을 가하고, 실온에서 1시간 교반하였다. 여과 후, 톨루엔으로 추출하고, 유기상을 물로 세정하고, 이어서 포화 식염수로 세정하였다. 황산나트륨으로 건조시킨 후, 톨루엔을 감압 하에 증류 제거하였다. 얻어진 오일상 물질을 실리카 겔 컬럼 크로마토그래피에 의해 정제하여 화합물 2-517을 2.02g(수율 53%) 얻었다.

[0816] 질량 스펙트럼 분석 결과, 분자량 696.87에 대하여 m/e=696이었다.

[0817] (합성 실시예 C-12) 화합물 2-520의 합성



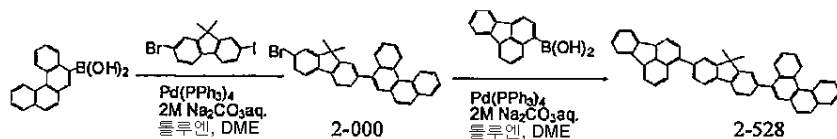
[0818]

[0819] 아르곤 분위기 하에, 상기 중간체 2-00 3.0g(5.46mmol), 3-플루오란테닐보론산 1.34g(5.46mmol), 테트라키스(트라이페닐포스핀)팔라듐(0) 0.25g(0.22mmol), 톨루엔 50ml, 다이메톡시에테인 20ml, 2M 탄산나트륨 수용액 8.3g을 가하고, 85℃에서 9시간 교반하였다. 반응 혼합물을 실온으로 되돌리고, 물을 가하여 1시간 교반하고, 하룻밤 방치하였다. 반응 혼합물에 물을 가하고, 실온에서 1시간 교반하였다. 여과 후, 톨루엔으로 추출하고, 유기상을 물로 세정하고, 이어서 포화 식염수로 세정하였다. 황산나트륨으로 건조시킨 후, 톨루엔을 감압 하에 증류 제거하였다. 얻어진 오일상 물질을 실리카 겔 컬럼 크로마토그래피에 의해 정제하여 화합물 2-520을

1.83g(수율 50%) 얻었다.

[0820] 질량 스펙트럼 분석 결과, 분자량 670.84에 대하여  $m/e=670$ 이었다.

[0821] (합성 실시예 C-13) 화합물 2-528의 합성



[0822]

[0823] 아르곤 분위기 하에, 5-벤조[c]페난트렌보론산 2.11g(7.76mmol), 2-브로모-7-요오도-9,9-다이메틸플루오렌 2.88g(7.76mmol), 테트라키스(트라이페닐포스핀)팔라듐(0) 0.45g(0.39mmol), 톨루엔 20ml, 다이메톡시에테인 20ml, 2M 탄산나트륨 수용액 12.0g을 가하고, 가열 환류 하에 10시간 교반하고, 하룻밤 방치하였다. 반응 혼합물에 물을 가하고, 실온에서 1시간 교반하였다. 여과 후, 톨루엔으로 추출하고, 유기상을 물로 세정하고, 이어서 포화 식염수로 세정하였다. 황산나트륨으로 건조시킨 후, 톨루엔을 감압 하에 증류 제거하였다. 잔사를 실리카 겔 컬럼 크로마토그래피에 의해 정제하여 중간체 2-000을 2.65g(수율 68%)을 얻었다.

[0824] 이어서, 아르곤 분위기 하에, 중간체 2-000 2.50g(5.00mmol), 5-벤조[c]페난트렌보론산 1.36g(5.00mmol), 테트라키스(트라이페닐포스핀)팔라듐(0) 0.23g(0.20mmol), 톨루엔 50ml, 다이메톡시에테인 20ml, 2M 탄산나트륨 수용액 8.0g을 가하고, 85℃에서 10시간 교반하였다. 반응 혼합물을 실온으로 되돌리고, 물을 가하여 1시간 교반하고, 하룻밤 방치하였다. 반응 혼합물에 물을 가하고, 실온에서 1시간 교반하였다. 여과 후, 톨루엔으로 추출하고, 유기상을 물로 세정하고, 이어서 포화 식염수로 세정하였다. 황산나트륨으로 건조시킨 후, 톨루엔을 감압 하에 증류 제거하였다. 얻어진 오일상 물질을 실리카 겔 컬럼 크로마토그래피에 의해 정제하여 화합물 2-528을 2.11g(수율 68%) 얻었다.

[0825] 질량 스펙트럼 분석 결과, 분자량 620.78에 대하여  $m/e=620$ 이었다.

[0826] 한편, 상기 합성예에서 질량 스펙트럼 분석은 FD-MS(필드 이온화 질량 분석)에 의해 행하였다. FD-MS(필드 이온화 질량 분석)의 측정에 이용한 장치 및 측정 조건을 이하에 나타낸다.

[0827] 장치: JSM-700(일본전자사제)

[0828] 조건: 가속 전압 8kV

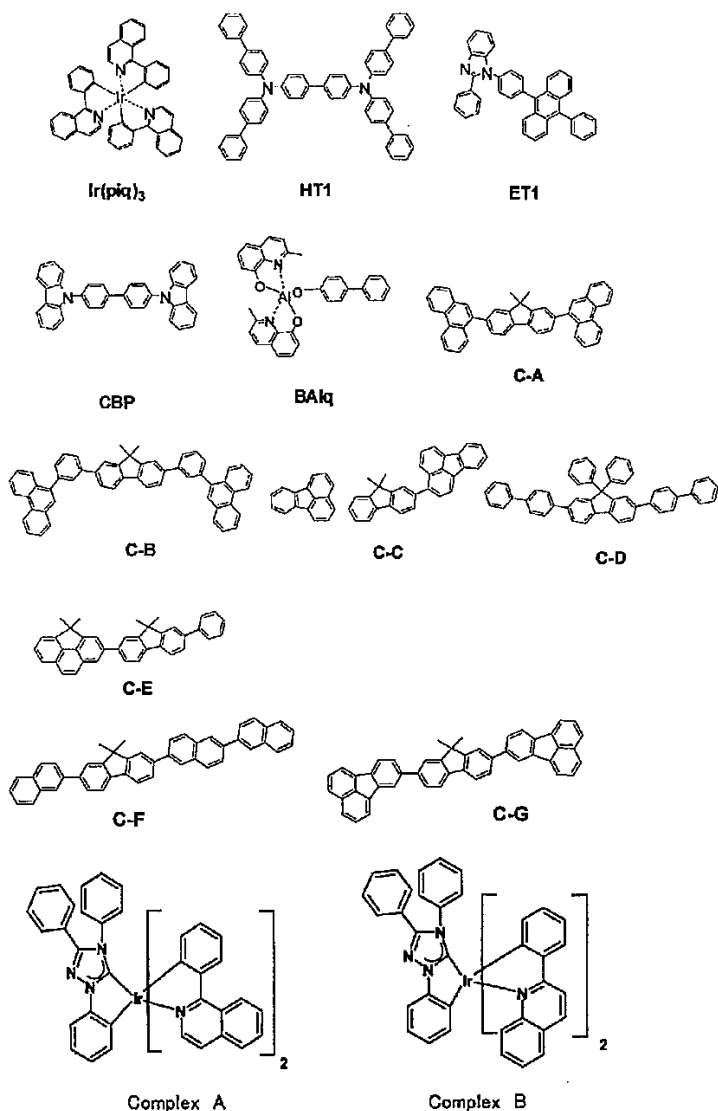
[0829] 스캔 범위  $m/z=50\sim 3000$

[0830] 이미터 종: 카본

[0831] 이미터 전류: 0mA→2mA/분→40mA(10분 유지)

[0832] 다음에, 실시예를 이용하여 본 발명을 더욱 상세하게 설명하지만, 본 발명은 이들 실시예의 기재 내용에 하등 제한되는 것은 아니다.

[0833] 상기 합성 실시예에서 얻어진 화합물 외에, 실시예 및 비교예에서 사용한 화합물의 구조를 이하에 나타낸다.



[0834]

[실시예 C-1]

[유기 EL 소자의 제작]

[0837] 25mm×75mm×0.7mm 두께의 ITO 투명 전극 부착 유리 기판(아사히가라스제)을 아이소프로필 알코올 중에서 초음파 세정을 5분간 행한 후, UV 오존 세정을 30분간 행하였다. 세정 후의 투명 전극 라인 부착 유리 기판을 진공 증착 장치의 기판 홀더에 장착하고, 우선 투명 전극 라인이 형성되어 있는 측의 면 상에, 상기 투명 전극을 덮도록 하여 막 두께 50nm의 HT1을 성막하였다. 이 HT1 막은 정공 주입 수송층으로서 기능한다. 추가로, 이 정공 주입 수송층의 성막에 계속하여 이 막 상에 막 두께 40nm의 신규 호스트 화합물 2-2, 및 인광 발광성 도펀트로서 Ir(piq)<sub>3</sub>을 10질량%가 되도록 저항 가열에 의해 공증착막으로 성막하였다. 이 막은 발광층(인광 발광층)으로서 기능한다. 이 발광층 성막에 계속하여 막 두께 40nm로 ET1을 성막하였다. 이 막은 전자 수송층으로서 기능한다. 그 후, LiF를 전자 주입성 전극(음극)으로서 성막 속도 1Å/min에서 막 두께 0.5nm로 형성하였다. 이 LiF 층 상에 금속 Al을 증착시켜 금속 음극을 막 두께 150nm로 형성하여 유기 EL 소자를 형성하였다.

[실시예 C-2~C-13, 비교예 C-1~C-9]

[0839] 실시예 1의 신규 호스트 화합물 2-2 대신에 하기 표 3에 나타내는 호스트 화합물을 이용한 것 이외에는 실시예 C-1과 마찬가지로 하여 유기 EL 소자를 형성하였다.

[실시예 C-14]

[0841] 도펀트인 착체를 Complex A로 교체한 것 이외에는 실시예 C-8과 동일한 제작 방법으로 유기 EL 소자를 제작하였



다.

[실시예 C-15]

Complex A를 Complex B로 교체한 것 이외에는 실시예 C-14와 동일한 제작 방법으로 유기 EL 소자를 제작하였다.

[비교예 C-10]

호스트 화합물을 2-159로부터 CBP로 교체한 것 이외에는 실시예 C-14와 동일한 제작 방법으로 유기 EL 소자를 제작하였다.

[비교예 C-11]

호스트 화합물을 2-159로부터 BAlq로 교체한 것 이외에는 실시예 C-15와 동일한 제작 방법으로 유기 EL 소자를 제작하였다.

[유기 EL 소자의 발광 성능 평가]

상기 실시예 C-1~C-15, 비교예 C-1~C-11에서 제작한 유기 EL 소자를 직류 전류 구동에 의해 발광시키고, 전류 밀도  $10\text{mA}/\text{cm}^2$ 에서의 전압, 발광 효율 및 휘도 반감 수명(초기 휘도  $5000\text{cd}/\text{m}^2$ )을 측정하였다. 이들의 평가 결과를 표 3에 나타낸다.

표 3

| 실시예      | 도펀트                       | 호스트 화합물 | 전압 (V) | 발광 효율 ( $\text{cd}/\text{A}$ ) | 실온 휘도 반감 수명 (시간) |
|----------|---------------------------|---------|--------|--------------------------------|------------------|
| 실시예 C-1  | $\text{Ir}(\text{piq})_3$ | 2-2     | 4.7    | 8.2                            | 4,800            |
| 실시예 C-2  | $\text{Ir}(\text{piq})_3$ | 2-1     | 4.7    | 8.2                            | 4,500            |
| 실시예 C-3  | $\text{Ir}(\text{piq})_3$ | 2-4     | 4.6    | 8.1                            | 4,000            |
| 실시예 C-4  | $\text{Ir}(\text{piq})_3$ | 2-5     | 4.5    | 7.8                            | 3,800            |
| 실시예 C-5  | $\text{Ir}(\text{piq})_3$ | 2-7     | 4.4    | 8.0                            | 3,400            |
| 실시예 C-6  | $\text{Ir}(\text{piq})_3$ | 2-184   | 4.6    | 8.0                            | 4,000            |
| 실시예 C-7  | $\text{Ir}(\text{piq})_3$ | 2-75    | 4.4    | 7.8                            | 3,800            |
| 실시예 C-8  | $\text{Ir}(\text{piq})_3$ | 2-159   | 4.3    | 8.0                            | 3,700            |
| 실시예 C-9  | $\text{Ir}(\text{piq})_3$ | 2-99    | 4.8    | 7.6                            | 4,200            |
| 실시예 C-10 | $\text{Ir}(\text{piq})_3$ | 2-504   | 4.5    | 7.9                            | 3,300            |
| 실시예 C-11 | $\text{Ir}(\text{piq})_3$ | 2-517   | 4.4    | 8.5                            | 3,800            |
| 실시예 C-12 | $\text{Ir}(\text{piq})_3$ | 2-520   | 4.3    | 8.3                            | 4,000            |
| 실시예 C-13 | $\text{Ir}(\text{piq})_3$ | 2-528   | 4.3    | 8.3                            | 4,100            |
| 비교예 C-1  | $\text{Ir}(\text{piq})_3$ | CBP     | 5.4    | 6.3                            | 500              |
| 비교예 C-2  | $\text{Ir}(\text{piq})_3$ | BAlq    | 5.3    | 7.0                            | 1,000            |
| 비교예 C-3  | $\text{Ir}(\text{piq})_3$ | 화합물 C-A | 4.8    | 7.0                            | 450              |
| 비교예 C-4  | $\text{Ir}(\text{piq})_3$ | 화합물 C-B | 5.2    | 7.1                            | 1,200            |
| 비교예 C-5  | $\text{Ir}(\text{piq})_3$ | 화합물 C-C | 4.8    | 7.2                            | 200              |
| 비교예 C-6  | $\text{Ir}(\text{piq})_3$ | 화합물 C-D | 5.2    | 7.1                            | 380              |
| 비교예 C-7  | $\text{Ir}(\text{piq})_3$ | 화합물 C-E | 5.1    | 5.9                            | 800              |
| 비교예 C-8  | $\text{Ir}(\text{piq})_3$ | 화합물 C-F | 4.8    | 7.4                            | 170              |
| 비교예 C-9  | $\text{Ir}(\text{piq})_3$ | 화합물 C-G | 5.1    | 6.5                            | 310              |
| 실시예 C-14 | Complex A                 | 2-159   | 4.4    | 7.7                            | 2500             |
| 실시예 C-15 | Complex B                 | 2-159   | 4.4    | 7.5                            | 2900             |
| 비교예 C-10 | Complex A                 | CBP     | 5.8    | 4.2                            | 800              |
| 비교예 C-11 | Complex B                 | BAlq    | 5.1    | 5.0                            | 1300             |

표 3으로부터 분명한 바와 같이, 발광 효율에 대하여, 본 발명의 호스트 재료를 이용하여 구성한 실시예 C-1~실시예 C-13의 유기 EL 소자는 발광 효율이 높고 수명이 현저히 긴 것으로 나타났다. 한편, 비교예 C-1~2에서는 전압이 높고 수명이 짧다. 비교예 C-3, C-5, C-8에서는 전압은 동등하지만 수명은 현저히 짧다. 비교예 C-4, C-7에서는 전압이 높고 수명이 짧다. 비교예 C-6, C-9에서는 전압이 높고 수명이 현저히 짧다. 실시예 C-



14, 15는 비교예 C-10, 11과 비교하여 전압이 낮고 효율이 높고 수명이 길다.

[0852] 본 발명의 조합의 특징은, 호스트 재료의 3중항 에너지 갭과 도펀트의 3중항 에너지 갭이 적절하기 때문에 발광 효율이 향상되는 것과, 2가 플루오렌환 잔기에 특정의 축합 다환 방향족기를 결합시킴으로써 보다 저전압화한 것과, 호스트 재료에 질소 함유 환, 질소 원자 등이 치환되어 있지 않기 때문에 발광 재료가 정공, 전자에 대하여 높은 내성을 가지고 있고, 이에 의해 종래 알려져 있었던 조합보다도 장수명화하는 것이다.

### 산업상 이용가능성

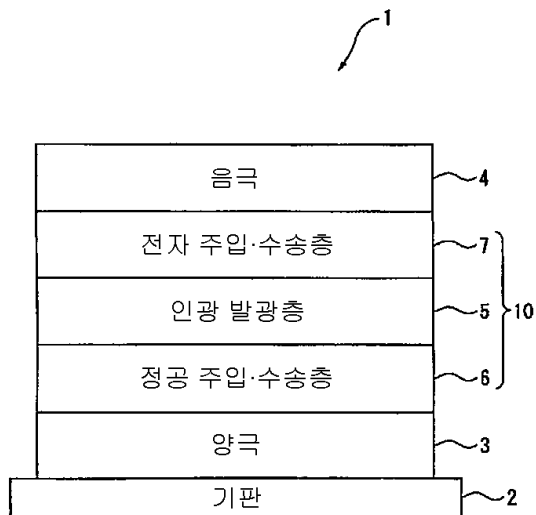
[0853] 본 발명은 고효율이고 또한 장수명인 인광 발광성 유기 EL 소자, 및 고효율이고 또한 장수명인 인광 발광성 유기 EL 소자를 제공하는 유기 EL 소자용 재료를 제공한다.

### 부호의 설명

- [0854] 1: 유기 EL 소자  
2: 기판  
3: 양극  
4: 음극  
5: 인광 발광층  
6: 정공 주입·수송층  
7: 전자 주입·수송층  
10: 유기 박막층

### 도면

#### 도면1



|               |  |         |            |
|---------------|--|---------|------------|
| 专利名称(译)       | 有机电致发光器件材料和有机电致发光器件  |         |            |
| 公开(公告)号       | <a href="#">KR101296978B1</a>  | 公开(公告)日 | 2013-08-14 |
| 申请号           | KR1020117014618  | 申请日     | 2009-12-22 |
| 申请(专利权)人(译)   | 高山出光株式会社   |         |            |
| 当前申请(专利权)人(译) | 高山出光株式会社   |         |            |
| [标]发明人        | TAKASHIMA YORIYUKI<br>다카시마요리유키<br>IWAKUMA TOSHIHIRO<br>이와쿠마도시히로<br>OGIWARA TOSHINARI<br>오기와라도시나리<br>HOSOKAWA CHISHIO<br>호소카와지시오<br>ITO MITSUNORI<br>이토미츠노리   |         |            |
| 发明人           | 다카시마요리유키<br>이와쿠마도시히로<br>오기와라도시나리<br>호소카와지시오<br>이토미츠노리  |         |            |
| IPC分类号        | C09K11/06 H01L51/54  |         |            |
| CPC分类号        | C07D307/91 C09K11/06 C09K2211/1029 C09K2211/1059 C09K2211/185 H01L51/0052 H01L51/0054 H01L51/0055 H01L51/0059 H01L51/006 H01L51/0071 H01L51/0079 H01L51/0085 H01L51/0087 H01L51/5016 H05B33/14 H05B33/20 Y10S428/917 |         |            |
| 优先权           | 2008334961 2008-12-26 JP<br>PCT/JP2009/065613 2009-09-07 WO  |         |            |
| 其他公开文献        | KR1020110114545A   |         |            |
| 外部链接          | <a href="#">Espacenet</a>  |         |            |

#### 摘要(译)

由第一层或多层构成的有机薄膜层包含在阴极和阳极之间，有机薄膜层具有至少一个发光层，并且它是高效率和高磷光发光度的有机电致发光器件和此外，用于有机电致发光器件的材料还提供有机电致发光器件，该有机电致发光器件包括主体材料，该主体材料是将蔡环与至少一种磷光发光材料结合的化合物救援。至少1个发光层显示磷光发光和芴，以及二苯并呋喃或二苯并噻吩骨架的必要性。

