

	(19) 대한민국특허청(KR) (12) 공개특허공보(A)	(11) 공개번호 10-2009-0016684 (43) 공개일자 2009년02월17일
(51) Int. Cl. <i>C09K 11/06</i> (2006.01) <i>H05B 33/14</i> (2006.01) <i>H01L 51/54</i> (2006.01)		(71) 출원인 이데미쓰 고산 가부시키가이샤 일본 도쿄도 지요다쿠 마루노우치 3초메 1반 1고
(21) 출원번호	10-2008-7029398	(72) 발명자
(22) 출원일자	2008년12월01일	이와쿠마 도시히로 일본 지바켄 소테가우라시 가미이즈미 1280반치
심사청구일자	없음	마츠우라 마사히데 일본 지바켄 소테가우라시 가미이즈미 1280반치
번역문제출일자	2008년12월01일	(뒷면에 계속)
(86) 국제출원번호	PCT/JP2007/060921	(74) 대리인
국제출원일자	2007년05월29일	김창세
(87) 국제공개번호	WO 2007/142083	
국제공개일자	2007년12월13일	
(30) 우선권주장		
JP-P-2006-154305	2006년06월02일	일본(JP)

전체 청구항 수 : 총 13 항

(54) 유기 전기발광 소자용 재료 및 그것을 이용한 유기 전기발광 소자

(57) 요약

특정 구조의 헤테로 원자를 함유하는 화합물로 이루어지는 유기 전기발광 소자, 및 양극과 음극 사이에 적어도 발광층을 포함하는 한층 또는 복수층으로 이루어지는 유기 박막층이 협지되어 있는 유기 전기발광 소자에 있어서, 상기 유기 박막층이 상기 유기 EL 소자용 재료를 함유하는 유기 전기발광 소자에 의해서, 발광 효율이 높고, 화소 결함이 없고, 내열성이 우수하며, 장수명인 유기 전기발광 소자 및 그것을 실현하는 유기 전기발광 소자용 재료를 제공한다.

(72) 발명자

나카노 유키

일본 지바켄 소테가우라시 가미이즈미 1280반치

이케다 히데츠구

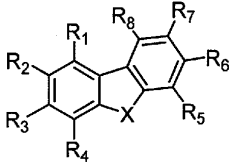
일본 지바켄 소테가우라시 가미이즈미 1280반치

특허청구의 범위

청구항 1

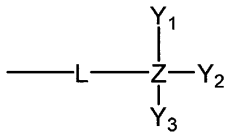
하기 화학식 1로 표시되는 화합물로 이루어지는 유기 전기발광 소자용 재료.

화학식 1



[화학식 1에서, R₁ 내지 R₈은 각각 독립적으로 수소 원자, 할로젠 원자, 치환기를 가져도 되는 탄소수 1 내지 40의 알킬기, 치환기를 가져도 되는 탄소수 3 내지 20의 헤테로환기, 치환기를 가져도 되는 탄소수 1 내지 40의 알콕시기, 치환기를 가져도 되는 탄소수 6 내지 40의 비축합 아릴기, 치환기를 가져도 되는 탄소수 6 내지 12의 축합 아릴기, 치환기를 가져도 되는 탄소수 6 내지 20의 아릴옥시기, 치환기를 가져도 되는 탄소수 7 내지 20의 아르알킬기, 치환기를 가져도 되는 탄소수 2 내지 40의 알켄일기, 치환기를 가져도 되는 탄소수 1 내지 40의 알킬아미노기, 치환기를 가져도 되는 탄소수 7 내지 60의 아르알킬아미노기, 치환기를 가져도 되는 탄소수 3 내지 20의 알킬실릴기, 치환기를 가져도 되는 탄소수 8 내지 40의 아릴실릴기, 치환기를 가져도 되는 탄소수 8 내지 40의 아르알킬실릴기, 치환기를 가져도 되는 탄소수 3 내지 20의 알킬저마늄기, 치환기를 가져도 되는 탄소수 8 내지 40의 아릴저마늄기, 치환기를 가져도 되는 탄소수 8 내지 40의 아르알킬저마늄기, 치환기를 가져도 되는 탄소수 7 내지 40의 케토아릴기, 치환기를 가져도 되는 탄소수 1 내지 40의 할로젠화 알킬기, 사이아노기 또는 하기 화학식 a로 표시되는 구조이며, R₁ 내지 R₈ 중 적어도 하나는 하기 화학식 a로 표시되는 구조이다.

화학식 a



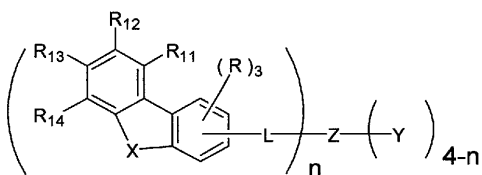
(화학식 a에서, L은 단일 결합 또는 치환기를 가져도 되는 탄소수 1 내지 10의 알킬렌기, 치환기를 가져도 되는 탄소수 6 내지 40의 비축합 아릴렌기, 치환기를 가져도 되는 탄소수 6 내지 12의 축합 아릴렌기, 치환기를 가져도 되는 2가의 탄소수 3 내지 40의 방향족 헤테로환기이며, Y₁ 내지 Y₃은 각각 독립적으로 치환기를 가져도 되는 탄소수 1 내지 10의 알킬기, 치환기를 가져도 되는 탄소수 6 내지 20의 아릴기, 치환기를 가져도 되는 탄소수 6 내지 30의 방향족 헤테로환기이며, Z는 규소 원자 또는 저마늄 원자이다.)

X는 황 원자, 산소 원자, SiR_aR_b로 표시되는 치환 규소 원자 또는 GeR_cR_d로 표시되는 치환 저마늄 원자이며, R_a, R_b, R_c 및 R_d는 각각 독립적으로 치환기를 가져도 되는 탄소수 1 내지 40의 알킬기 또는 치환기를 가져도 되는 탄소수 6 내지 20의 아릴기이다.]

청구항 2

하기 화학식 2로 표시되는 화합물로 이루어지는 유기 전기발광 소자용 재료.

화학식 2



[화학식 2에서, R₁₁ 내지 R₁₄ 및 R은 각각 독립적으로 수소 원자, 할로젠 원자, 치환기를 가져도 되는 탄소수 1 내지 40의 알킬기, 치환기를 가져도 되는 탄소수 3 내지 20의 헤테로환기, 치환기를 가져도 되는 탄소수 1 내지

40의 알콕시기, 치환기를 가져도 되는 탄소수 6 내지 40의 비축합 아릴기, 치환기를 가져도 되는 탄소수 6 내지 12의 축합 아릴기, 치환기를 가져도 되는 탄소수 6 내지 20의 아릴옥시기, 치환기를 가져도 되는 탄소수 7 내지 20의 아르알킬기, 치환기를 가져도 되는 탄소수 2 내지 40의 알켄일기, 치환기를 가져도 되는 탄소수 1 내지 40의 알킬아미노기, 치환기를 가져도 되는 탄소수 7 내지 60의 아르알킬아미노기, 치환기를 가져도 되는 탄소수 3 내지 20의 알킬실릴기, 치환기를 가져도 되는 탄소수 8 내지 40의 아릴실릴기, 치환기를 가져도 되는 탄소수 8 내지 40의 아르알킬실릴기, 치환기를 가져도 되는 탄소수 3 내지 20의 알킬저마늄기, 치환기를 가져도 되는 탄소수 8 내지 40의 아릴저마늄기, 치환기를 가져도 되는 탄소수 8 내지 40의 아르알킬저마늄기, 치환기를 가져도 되는 탄소수 7 내지 40의 케토아릴기, 치환기를 가져도 되는 탄소수 1 내지 40의 할로젠화 알킬기 또는 사이아노기이다.

X는 황 원자, 산소 원자, SiR_aR_b 로 표시되는 치환 규소 원자 또는 GeR_cR_d 로 표시되는 치환 저마늄 원자이며, R_a , R_b , R_c 및 R_d 는 각각 독립적으로 치환기를 가져도 되는 탄소수 1 내지 40의 알킬기 또는 치환기를 가져도 되는 탄소수 6 내지 20의 아릴기이다.

L은 단일 결합 또는 치환기를 가져도 되는 탄소수 1 내지 10의 알킬렌기, 치환기를 가져도 되는 탄소수 6 내지 40의 비축합 아릴렌기, 치환기를 가져도 되는 탄소수 6 내지 12의 축합 아릴렌기, 치환기를 가져도 되는 2가의 탄소수 3 내지 40의 방향족 헤테로환기이다.

Y는 치환기를 가져도 되는 탄소수 1 내지 10의 알킬기, 치환기를 가져도 되는 탄소수 6 내지 20의 아릴기, 치환기를 가져도 되는 탄소수 6 내지 30의 방향족 헤테로환기이며, Y가 복수인 경우는 동일해도 되고 상이해도 된다.

Z는 규소 원자 또는 저마늄 원자이다.

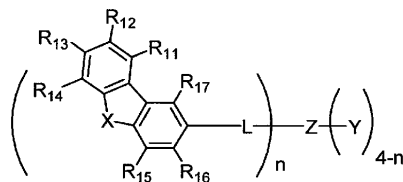
n은 1 내지 4의 정수이다.]

청구항 3

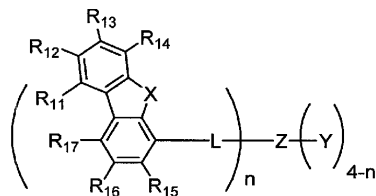
제 2 항에 있어서,

하기 화학식 3 또는 4로 표시되는 화합물로 이루어지는 유기 전기발광 소자용 재료.

화학식 3



화학식 4



[화학식 3 및 4에서, R_{11} 내지 R_{17} 은 상기 R_{11} 내지 R_{14} 및 R과 동일하며, L, X, Z, Y 및 n은 상기와 동일하다.]

청구항 4

음극과 양극 사이에 적어도 발광층을 갖는 한층 또는 복수층으로 이루어지는 유기 박막층이 형성되어 있는 유기 전기발광 소자에 있어서, 상기 유기 박막층의 적어도 한층이 제 1 항 내지 제 3 항 중 어느 한 항에 기재된 유기 전기발광 소자용 재료를 함유하는 유기 전기발광 소자.

청구항 5

제 4 항에 있어서,

상기 발광층이 상기 유기 전기발광 소자용 재료를 호스트 재료로서 함유하는 유기 전기발광 소자.

청구항 6

제 4 항에 있어서,

상기 발광층이 호스트 재료와 인광성의 발광 재료를 함유하고, 이 호스트 재료가 상기 유기 전기발광 소자용 재료인 유기 전기발광 소자.

청구항 7

제 4 항에 있어서,

상기 발광층이 호스트 재료와 인광성의 발광 재료를 함유하고, 이 인광성의 발광 재료가 이리듐(Ir), 오스뮴(Os) 또는 백금(Pt) 금속을 함유하는 화합물인 유기 전기발광 소자.

청구항 8

제 4 항에 있어서,

상기 발광층이 호스트 재료와 인광성의 발광 재료를 함유하고, 이 인광성의 발광 재료가 금속-카벤 탄소 결합을 갖는 발광 재료인 유기 전기발광 소자.

청구항 9

제 4 항에 있어서,

상기 발광층이, 최고 발광 휘도의 파장이 500nm 이하인 청색계 금속 착체를 함유하는 유기 전기발광 소자.

청구항 10

제 4 항에 있어서,

상기 발광층과 음극 사이에 전자 주입층을 갖고, 이 전자 주입층이 질소 함유 환 유도체를 주성분으로서 함유하는 유기 전기발광 소자.

청구항 11

제 4 항에 있어서,

상기 유기 전기발광 소자가 정공 수송층을 갖고, 이 정공 수송층이 상기 유기 전기발광 소자용 재료를 함유하는 유기 전기발광 소자.

청구항 12

제 4 항에 있어서,

상기 유기 전기발광 소자가 전자 수송층 및/또는 정공 장벽층을 갖고, 이 전자 수송층 및/또는 정공 장벽층이 상기 유기 전기발광 소자용 재료를 함유하는 유기 전기발광 소자.

청구항 13

제 4 항에 있어서,

음극과 유기 박막층의 계면 영역에 환원성 도펀트가 첨가되어 이루어지는 유기 전기발광 소자.

명세서

기술분야

<1> 본 발명은 유기 전기발광 소자용 재료 및 그것을 이용한 유기 전기발광 소자에 관한 것으로, 특히, 발광 효율이 높고, 화소 결함이 없고, 내열성이 우수하며, 장수명인 유기 전기발광 소자 및 그것을 실현하는 유기 전기발광 소자용 재료에 관한 것이다.

배경 기술

<2> 유기 전기발광 소자(이하, 전기발광을 EL로 약기하는 경우가 있음)는 전계를 인가함으로써 양극으로부터 주입된 정공과 음극으로부터 주입된 전자의 재결합 에너지에 의해 형광성 물질이 발광하는 원리를 이용한 자발광 소자이다. 이스트만 코닥사의 C. W. Tang 등에 의한 적층형 소자에 의한 저전압 구동 유기 EL 소자의 보고(C. W. Tang, S. A. Vanslyke, 어플라이드 피직스 레터즈(Applied Physics Letters), 51권, 913페이지, 1987년 등)가 이루어진 이래, 유기 재료를 구성 재료로 하는 유기 EL 소자에 관한 연구가 활발히 행해지고 있다. Tang 등은 트리스(8-퀴놀리놀라토)알루미늄을 발광층에, 트라이페닐다리아민 유도체를 정공 수송층에 이용하고 있다. 적층 구조의 이점으로서, 발광층으로의 정공의 주입 효율을 높이는 것, 음극으로부터 주입된 전자를 차단하여 재결합에 의해 생성되는 여기자의 생성 효율을 높이는 것, 발광층 내에서 생성된 여기자를 가두는 것 등을 들 수 있다. 이 예와 같이 유기 EL 소자의 소자 구조로서는, 정공 수송(주입)층, 전자 수송 발광층의 2층형, 또는 정공 수송(주입)층, 발광층, 전자 수송(주입)층의 3층형 등이 잘 알려져 있다. 이러한 적층형 구조 소자에서는 주입된 정공과 전자의 재결합 효율을 높이기 위해, 소자 구조나 형성 방법의 고안이 이루어지고 있다.

<3> 유기 EL 소자의 발광 재료로서는 트리스(8-퀴놀리놀라토)알루미늄 착체 등의 킬레이트 착체, 쿠마린 유도체, 테트라페닐뷰타다이엔 유도체, 다이스타이릴아릴렌 유도체, 옥사다리아졸 유도체 등의 발광 재료가 알려져 있고, 그것들로부터는 청색부터 적색까지의 가시 영역의 발광이 얻어지는 것이 보고되어 있어, 컬러 표시 소자의 실현이 기대되고 있다(예컨대, 특허문헌 1, 특허문헌 2, 특허문헌 3 등 참조).

<4> 또한, 최근, 유기 EL 소자의 발광층에 형광 재료 외에 인광 재료를 이용하는 것도 제안되어 있다(예컨대, 비특허문헌 1, 비특허문헌 2 참조). 이와 같이 유기 EL 소자의 발광층에 있어서 유기 인광 재료의 여기 상태의 1중항 상태와 3중항 상태를 이용하여 높은 발광 효율이 달성되고 있다. 유기 EL 소자 내에서 전자와 정공이 재결합할 때에는 스핀 다중도의 차이로부터 1중항 여기자와 3중항 여기자가 1:3의 비율로 생성된다고 생각되고 있기 때문에, 인광성의 발광 재료를 이용하면 형광만을 사용한 소자에 비해서 3 내지 4배의 발광 효율의 달성이 생각된다.

<5> 이러한 유기 EL 소자에 있어서는, 3중항의 여기 상태 또는 3중항의 여기자가 소광하지 않도록 순차적으로 양극, 정공 수송층, 유기 발광층, 전자 수송층(정공 저지층), 전자 수송층, 음극과 같이 층을 적층하는 구성이 이용되고, 유기 발광층에 호스트 화합물과 인광 발광성의 화합물이 이용되어 왔었다(예컨대, 특허문헌 4 내지 8). 여기에는 다이벤조퓨란, 다이벤조싸이오펜 골격을 갖는 호스트재가 기재되어 있다. 그러나, 다른 카바졸릴 골격과 비교하여 소자 성능에서 우위성이 나타나지 않고, 규소, 저마늄 원자와의 조합에 관해서도 하등 기재가 없다.

<6> 또한, 특허문헌 9 및 10에는, 아릴실릴기 등의 치환기를 갖는 화합물이 기재되어 있지만, 본 발명과 같은 화합물군의 기재는 없고, 3중항의 에너지 갭을 넓게 유지할 수 있는 것 등, 유기 EL 소자용 재료, 특히 청색계 인광 소자용 재료로서 유용한 효과도 기재되어 있지 않다.

<7> 또한, 특허문헌 11 내지 18에는, 아릴실레인, 아릴저만게 화합물이 기재되고, 청색계 인광 소자의 호스트 재료로서 실시예가 기재되어 있지만, 본 발명과 같은 화합물군에 관해서는 기재가 없고, 효과도 불분명하다.

<8> 특허문헌 1: 일본 특허공개 평8-239655호 공보

<9> 특허문헌 2: 일본 특허공개 평7-138561호 공보

<10> 특허문헌 3: 일본 특허공개 평3-200889호 공보

<11> 특허문헌 4: 국제 공개 WO 05/101912호 공보

<12> 특허문헌 5: 일본 특허공개 평5-109485호 공보

<13> 특허문헌 6: 일본 특허공개 2004-002351호 공보

<14> 특허문헌 7: 국제 공개 WO 04/096945호 공보

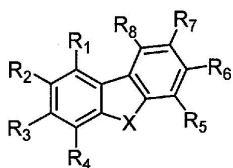
<15> 특허문헌 8: 일본 특허공개 2002-308837호 공보

- <16> 특허문헌 9: 일본 특허공개 2003-138251호 공보
- <17> 특허문헌 10: 일본 특허공개 2000-351966호 공보
- <18> 특허문헌 11: 국제 공개 WO 04/095598호 공보
- <19> 특허문헌 12: US 2004-209115호 공보
- <20> 특허문헌 13: 일본 특허공개 2004-103463호 공보
- <21> 특허문헌 14: 일본 특허공개 2005-183303호 공보
- <22> 특허문헌 15: 일본 특허공개 2005-317275호 공보
- <23> 특허문헌 16: 일본 특허공개 2004-200104호 공보
- <24> 특허문헌 17: 일본 특허공개 2005-310672호 공보
- <25> 특허문헌 18: 일본 특허공개 2005-306864호 공보
- <26> 비특허문헌 1: D. F. O'Brien and M. A. Baldo et al. "Improved energy transferring electrophosphorescent devices" Applied Physics letters Vol.74 No.3, pp442-444, January 18, 1999
- <27> 비특허문헌 2: M. A. Baldo et al. "Very high-efficiency green organic light-emitting devices based on electrophosphorescence" Applied Physics letters Vol.75 No.1, pp4-6, July 5, 1999

발명의 상세한 설명

- <28> 발명의 개시
- <29> 발명이 해결하고자 하는 과제
- <30> 본 발명은 상기 과제를 해결하기 위해서 이루어진 것으로, 발광 효율이 높고, 화소 결함이 없고, 내열성이 우수하며, 장수명인 유기 EL 소자 및 그것을 실현하는 유기 EL 소자용 재료를 제공하는 것을 목적으로 한다.
- <31> 과제를 해결하기 위한 수단
- <32> 본 발명자들은 상기 목적을 달성하기 위해서 예의 연구를 거듭한 결과, 하기 화학식 1 또는 2로 기재되는 화합물을 유기 EL 소자 재료로서 이용함으로써, 화소 결함이 없고, 고효율, 고내열이면서 장수명인 유기 EL 소자가 얻어지는 것을 발견하여, 본 발명을 완성하기에 이르렀다.
- <33> 즉, 본 발명은 하기 화학식 1 또는 2로 표시되는 화합물로 이루어지는 유기 EL 소자용 재료를 제공하는 것이다.

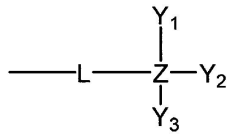
화학식 1



- <34>
- <35> [화학식 1에서, R₁ 내지 R₈은 각각 독립적으로 수소 원자, 할로젠 원자, 치환기를 가져도 되는 탄소수 1 내지 40의 알킬기, 치환기를 가져도 되는 탄소수 3 내지 20의 헤테로환기, 치환기를 가져도 되는 탄소수 1 내지 40의 알콕시기, 치환기를 가져도 되는 탄소수 6 내지 40의 비축합 아릴기, 치환기를 가져도 되는 탄소수 6 내지 12의 축합 아릴기, 치환기를 가져도 되는 탄소수 6 내지 20의 아릴옥시기, 치환기를 가져도 되는 탄소수 7 내지 20의 아르알킬기, 치환기를 가져도 되는 탄소수 2 내지 40의 알켄일기, 치환기를 가져도 되는 탄소수 1 내지 40의 알킬아미노기, 치환기를 가져도 되는 탄소수 7 내지 60의 아르알킬아미노기, 치환기를 가져도 되는 탄소수 3 내지 20의 알킬실릴기, 치환기를 가져도 되는 탄소수 8 내지 40의 아릴실릴기, 치환기를 가져도 되는 탄소수 8 내지 40의 아르알킬실릴기, 치환기를 가져도 되는 탄소수 3 내지 20의 알킬저마늄기, 치환기를 가져도 되는 탄소수 8 내지 40의 아릴저마늄기, 치환기를 가져도 되는 탄소수 8 내지 40의 아르알킬저마늄기, 치환기를 가져도 되는 탄소수 7 내지 40의 케토아릴기, 치환기를 가져도 되는 탄소수 1 내지 40의 할로젠화 알킬기, 사이아노기 또는

하기 화학식 a로 표시되는 구조이며, R₁ 내지 R₈ 중 적어도 하나는 하기 화학식 a로 표시되는 구조이다.

화학식 a

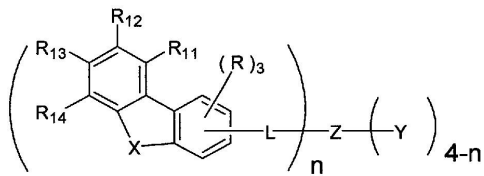


<36>

<37> (화학식 a에서, L은 단일 결합 또는 치환기를 가져도 되는 탄소수 1 내지 10의 알킬렌기, 치환기를 가져도 되는 탄소수 6 내지 40의 비축합 아릴렌기, 치환기를 가져도 되는 탄소수 6 내지 12의 축합 아릴렌기, 치환기를 가져도 되는 2가의 탄소수 3 내지 40의 방향족 헤테로환기이고, Y₁ 내지 Y₃은 각각 독립적으로 치환기를 가져도 되는 탄소수 1 내지 10의 알킬기, 치환기를 가져도 되는 탄소수 6 내지 20의 아릴기, 치환기를 가져도 되는 탄소수 6 내지 30의 방향족 헤테로환기이며, Z는 규소 원자 또는 저마늄 원자이다.)

<38> X는 황 원자, 산소 원자, SiR_aR_b로 표시되는 치환 규소 원자 또는 GeR_cR_d로 표시되는 치환 저마늄 원자이고, R_a, R_b, R_c 및 R_d는 각각 독립적으로 치환기를 가져도 되는 탄소수 1 내지 40의 알킬기 또는 치환기를 가져도 되는 탄소수 6 내지 20의 아릴기이다.]

화학식 2



<39>

<40> [화학식 2에서, R₁₁ 내지 R₁₄ 및 R은 각각 독립적으로 수소 원자, 할로젠 원자, 치환기를 가져도 되는 탄소수 1 내지 40의 알킬기, 치환기를 가져도 되는 탄소수 3 내지 20의 헤테로환기, 치환기를 가져도 되는 탄소수 1 내지 40의 알콕시기, 치환기를 가져도 되는 탄소수 6 내지 40의 비축합 아릴기, 치환기를 가져도 되는 탄소수 6 내지 12의 축합 아릴기, 치환기를 가져도 되는 탄소수 6 내지 20의 아릴옥시기, 치환기를 가져도 되는 탄소수 7 내지 20의 아르알킬기, 치환기를 가져도 되는 탄소수 2 내지 40의 알켄일기, 치환기를 가져도 되는 탄소수 1 내지 40의 알킬아미노기, 치환기를 가져도 되는 탄소수 7 내지 60의 아르알킬아미노기, 치환기를 가져도 되는 탄소수 3 내지 20의 알킬실릴기, 치환기를 가져도 되는 탄소수 8 내지 40의 아릴실릴기, 치환기를 가져도 되는 탄소수 8 내지 40의 아르알킬실릴기, 치환기를 가져도 되는 탄소수 3 내지 20의 알킬저마늄기, 치환기를 가져도 되는 탄소수 8 내지 40의 아릴저마늄기, 치환기를 가져도 되는 탄소수 8 내지 40의 아르알킬저마늄기, 치환기를 가져도 되는 탄소수 7 내지 40의 케토아릴기, 치환기를 가져도 되는 탄소수 1 내지 40의 할로젠화 알킬기 또는 사이아노기이다.

<41> X, L 및 Z는 화학식 1과 동일하고, Y는 화학식 1의 Y₁ 내지 Y₃과 동일하다. n은 1 내지 4의 정수이다.]

<42> 또한, 본 발명은 음극과 양극 사이에 적어도 발광층을 갖는 한층 또는 복수층으로 이루어지는 유기 박막층이 형성되어 있는 유기 EL 소자에 있어서, 상기 유기 박막층의 적어도 한층이 상기 유기 EL 소자용 재료를 함유하는 유기 EL 소자를 제공하는 것이다.

<43> 발명의 효과

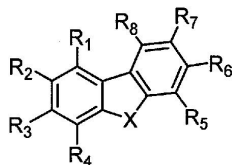
<44> 본 발명의 화학식 1 또는 2로 표시되는 화합물로 이루어지는 유기 EL 소자용 재료를 이용하면, 발광 효율이 높고, 화소 결합이 없고, 내열성이 우수하며, 또한 수명이 긴 유기 EL 소자를 얻을 수 있다.

<45> 발명을 실시하기 위한 최선의 형태

<46> 본 발명의 유기 EL 소자용 재료는 하기 화학식 1 또는 2로 표시되는 화합물로 이루어진다.

<47> 먼저, 화학식 1로 표시되는 화합물에 대해서 설명한다.

<48> 화학식 1



<49>

<50> 화학식 1에 있어서, R_1 내지 R_8 은 각각 독립적으로 수소 원자, 할로젠 원자, 치환기를 가져도 되는 탄소수 1 내지 40의 알킬기, 치환기를 가져도 되는 탄소수 3 내지 20의 헤테로환기, 치환기를 가져도 되는 탄소수 1 내지 40의 알콕시기, 치환기를 가져도 되는 탄소수 6 내지 40의 비축합 아릴기, 치환기를 가져도 되는 탄소수 6 내지 12의 축합 아릴기, 치환기를 가져도 되는 탄소수 6 내지 20의 아릴옥시기, 치환기를 가져도 되는 탄소수 7 내지 20의 아르알킬기, 치환기를 가져도 되는 탄소수 2 내지 40의 알켄일기, 치환기를 가져도 되는 탄소수 1 내지 40의 알킬아미노기, 치환기를 가져도 되는 탄소수 7 내지 60의 아르알킬아미노기, 치환기를 가져도 되는 탄소수 3 내지 20의 알킬실릴기, 치환기를 가져도 되는 탄소수 8 내지 40의 아릴실릴기, 치환기를 가져도 되는 탄소수 8 내지 40의 아르알킬실릴기, 치환기를 가져도 되는 탄소수 3 내지 20의 알킬저마늄기, 치환기를 가져도 되는 탄소수 8 내지 40의 아릴저마늄기, 치환기를 가져도 되는 탄소수 8 내지 40의 아르알킬저마늄기, 치환기를 가져도 되는 탄소수 7 내지 40의 케토아릴기, 치환기를 가져도 되는 탄소수 1 내지 40의 할로젠화 알킬기, 사이아노기 또는 하기 화학식 a로 표시되는 구조이며, R_1 내지 R_8 중 적어도 하나는 하기 화학식 a로 표시되는 구조이다.

<51> 상기 할로젠 원자로서는, 예컨대 불소, 염소, 브롬, 아이오딘 등을 들 수 있다.

<52> 상기 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, 아이오도메틸기, 1-아이오도에틸기, 2-아이오도에틸기, 2-아이오도아이소뷰틸기, 1,2-다이아이오도에틸기, 1,3-다이아이오도아이소프로필기, 2,3-다이아이오도-t-뷰틸기, 1,2,3-트라이아이오도프로필기, 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, 사이클로펜틸기, 사이클로헥실기, 사이클로옥틸기, 3,5-테트라메틸사이클로헥실기 등을 들 수 있다.

<53> 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, 1-뷰틸펜틸기, 1-헵틸옥틸기, 사이클로헥실기, 사이클로옥틸기, 3,5-테트라메틸사이클로헥실기이다.

<54> 상기 헤테로환기로서는, 예컨대 1-피롤릴기, 2-피롤릴기, 3-피롤릴기, 피라진일기, 2-피리딘일기, 1-이미다졸릴기, 2-이미다졸릴기, 1-피라졸릴기, 1-인돌리진일기, 2-인돌리진일기, 3-인돌리진일기, 5-인돌리진일기, 6-인돌리진일기, 7-인돌리진일기, 8-인돌리진일기, 2-이미다조피리딘일기, 3-이미다조피리딘일기, 5-이미다조피리딘일기, 6-이미다조피리딘일기, 7-이미다조피리딘일기, 8-이미다조피리딘일기, 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-아이소

벤조퓨란일기, 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, 9-카바졸릴기, β -카볼린-1-일, β -카볼린-3-일, β -카볼린-4-일, β -카볼린-5-일, β -카볼린-6-일, β -카볼린-7-일, β -카볼린-6-일, β -카볼린-9-일, 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-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, 1-다이벤조퓨란일기, 2-다이벤조퓨란일기, 3-다이벤조퓨란일기, 4-다이벤조퓨란일기, 1-다이벤조싸이오페닐기, 2-다이벤조싸이오페닐기, 3-다이벤조싸이오페닐기, 4-다이벤조싸이오페닐기, 1-실라플루오렌일기, 2-실라플루오렌일기, 3-실라플루오렌일기, 4-실라플루오렌일기, 1-저마플루오렌일기, 2-저마플루오렌일기, 3-저마플루오렌일기, 4-저마플루오렌일기 등을 들 수 있다.

<55> 이들 중에서도 바람직하게는, 2-피리딘일기, 1-인돌리진일기, 2-인돌리진일기, 3-인돌리진일기, 5-인돌리진일기, 6-인돌리진일기, 7-인돌리진일기, 8-인돌리진일기, 2-이미다조피리딘일기, 3-이미다조피리딘일기, 5-이미다조피리딘일기, 6-이미다조피리딘일기, 7-이미다조피리딘일기, 8-이미다조피리딘일기, 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, 1-카바졸릴기, 2-카바졸릴기, 3-카바졸릴기, 4-카바졸릴기, 9-카바졸릴기, 1-다이벤조퓨란일기, 2-다이벤조퓨란일기, 3-다이벤조퓨란일기, 4-다이벤조퓨란일기, 1-다이벤조싸이오페닐기, 2-다이벤조싸이오페닐기, 3-다이벤조싸이오페닐기, 4-다이벤조싸이오페닐기, 1-실라플루오렌일기, 2-실라플루오렌일기, 3-실라플루오렌일기, 4-실라플루오렌일기, 1-저마플루오렌일기, 2-저마플루오렌일기, 3-저마플루오렌일기, 4-저마플루오렌일기이다.

<56> 상기 알콕시기는 -OY로 표시되는 기이며, Y의 구체예로서는, 상기 알킬기에서 설명한 것과 마찬가지로의 것을 들 수 있고, 바람직한 예도 마찬가지로이다.

<57> 상기 비축합 아릴기로서는, 예컨대 페닐기, 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, 4'-메틸바이페닐일기, 4'-t-뷰틸-p-터페닐-4-일기, o-큐메닐기, m-큐메닐기, p-큐메닐기, 2,3-자일릴기, 3,4-자일릴기, 2,5-자일릴기, 메시틸기, m-쿼터페닐기 등을 들 수 있다.

<58> 이들 중에서도 바람직하게는, 페닐기, 2-바이페닐일기, 3-바이페닐일기, 4-바이페닐일기, m-터페닐-4-일기, m-터페닐-3-일기, m-터페닐-2-일기, p-톨릴기, 3,4-자일릴기, m-쿼터페닐-2-일기이다.

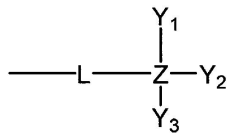
- <59> 상기 축합 아릴기의 예로서는, 1-나프틸기, 2-나프틸기를 들 수 있다.
- <60> 상기 아릴옥시기는 -OAr로 표시되는 기이며, Ar의 구체예로서는, 상기 비축합 아릴기에서 설명한 것과 마찬가지로의 것을 들 수 있고, 바람직한 예도 마찬가지이다.
- <61> 상기 아르알킬기로서는, 예컨대 벤질기, 1-페닐에틸기, 2-페닐에틸기, 1-페닐아이소프로필기, 2-페닐아이소프로필기, 페닐-t-뷰틸기, α-나프틸메틸기, 1-α-나프틸에틸기, 2-α-나프틸에틸기, 1-α-나프틸아이소프로필기, 2-α-나프틸아이소프로필기, β-나프틸메틸기, 1-β-나프틸에틸기, 2-β-나프틸에틸기, 1-β-나프틸아이소프로필기, 2-β-나프틸아이소프로필기, 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-아이오도벤질기, m-아이오도벤질기, o-아이오도벤질기, 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.
- <62> 이들 중에서도 바람직하게는, 벤질기, p-사이아노벤질기, m-사이아노벤질기, o-사이아노벤질기, 1-페닐에틸기, 2-페닐에틸기, 1-페닐아이소프로필기, 2-페닐아이소프로필기이다.
- <63> 상기 알켄일기로서는, 예컨대 바이닐기, 알릴기, 1-뷰텐일기, 2-뷰텐일기, 3-뷰텐일기, 1,3-뷰타다이엔일기, 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.
- <64> 상기 알킬아미노기, 및 치환기를 가져도 되는 탄소수 7 내지 60의 아르알킬아미노기는 -NQ₁Q₂로 표시되고, Q₁ 및 Q₂의 구체예로서는, 각각 독립적으로 상기 알킬기, 상기 아릴기, 상기 아르알킬기에서 설명한 것과 마찬가지로의 것을 들 수 있고, 바람직한 예도 마찬가지이다.
- <65> 상기 알킬실릴기로서는, 예컨대 트라이메틸실릴기, 트라이에틸실릴기, t-뷰틸다이메틸실릴기, 바이닐다이메틸실릴기, 프로필다이메틸실릴기 등을 들 수 있다.
- <66> 상기 아릴실릴기로서는, 예컨대 트라이페닐실릴기, 트라이바이페닐실릴기, 다이-터페닐-페닐실릴기, 페닐다이메틸실릴기, t-뷰틸다이페닐실릴기 등을 들 수 있다.
- <67> 상기 아르알킬실릴기로서는, 예컨대 트라이벤질실릴기, 벤질다이메틸실릴기, t-뷰틸다이벤질실릴기 등을 들 수 있다.
- <68> 상기 알킬저마늄기로서는, 예컨대 트라이메틸저마늄기, 트라이에틸저마늄기, t-뷰틸다이메틸저마늄기, 바이닐다이메틸저마늄기, 프로필다이메틸저마늄기 등을 들 수 있다.
- <69> 상기 아릴저마늄기로서는, 예컨대 트라이페닐저마늄기, 트라이바이페닐저마늄기, 다이-터페닐-페닐저마늄기, 페닐다이메틸저마늄기, t-뷰틸다이페닐저마늄기 등을 들 수 있다.
- <70> 상기 아르알킬저마늄기로서는, 예컨대 트라이벤질저마늄기, 벤질다이메틸저마늄기, t-뷰틸다이벤질저마늄기 등을 들 수 있다.
- <71> 상기 케토아릴기는 -COAr₂로 표시되고, Ar₂의 구체예로서는, 상기 아릴기에서 설명한 것과 마찬가지로의 것을 들 수 있고, 바람직한 예도 마찬가지이다.
- <72> 상기 할로젠화 알킬기로서는, 예컨대 상기 알킬기의 적어도 1개의 수소 원자를 할로젠 원자로 치환한 것을 들 수 있고, 바람직한 예도 마찬가지이다.
- <73> 화학식 1에 있어서, X는 황 원자, 산소 원자, SiR_aR_b로 표시되는 치환 규소 원자 또는 GeR_cR_d로 표시되는 치환 저마늄 원자이고, R_a, R_b, R_c 및 R_d는 각각 독립적으로 치환기를 가져도 되는 탄소수 1 내지 40의 알킬기 또는 치환기를 가져도 되는 탄소수 6 내지 20의 아릴기이다.
- <74> R_a, R_b, R_c 및 R_d의 알킬기로서는, 상기 R₁ 내지 R₈의 알킬기와 동일한 것을 들 수 있고, 바람직하게는 메틸기,

에틸기, 프로필기 및 뷰틸기이다.

<75> R_a , R_b , R_c 및 R_d 의 탄소수 6 내지 20의 아릴기로서는, 상기 R_1 내지 R_8 의 비축합 아릴기와 동일한 것을 들 수 있고, 바람직하게는 페닐기, p-톨릴기, 4-바이페닐기이다.

<76> 또한, 화학식 a는 하기 구조이다.

<77> 화학식 a



<78>

<79> 화학식 a에 있어서, L은 단일 결합 또는 치환기를 가져도 되는 탄소수 1 내지 10의 알킬렌기, 치환기를 가져도 되는 탄소수 6 내지 40의 비축합 아릴렌기, 치환기를 가져도 되는 탄소수 6 내지 12의 축합 아릴렌기, 치환기를 가져도 되는 2가의 탄소수 3 내지 40의 방향족 헤테로환기이다.

<80> L의 알킬렌기로서는, 상기 R_1 내지 R_8 에서 설명한 알킬기의 예를 2가의 기로 한 것을 들 수 있고, 메틸렌기, 에틸렌기, 프로필렌기, 뷰틸렌기, 2가의 사이클로헥세인기, 2가의 아다만테인기, 2가의 노보넨기가 바람직하다.

<81> L의 비축합 아릴렌기로서는, 상기 R_1 내지 R_8 에서 설명한 비축합 아릴기의 예를 2가의 기로 한 것을 들 수 있고, 페닐렌기, 파라 바이페닐렌기, 메타 바이페닐렌기, 오쏘 바이페닐렌기, 오쏘 터페닐렌기, 메타 터페닐렌기, 파라 터페닐렌기의 2가의 기가 바람직하다.

<82> L의 축합 아릴렌기로서는, 나프탈렌 등의 2가의 잔기를 들 수 있다.

<83> L의 방향족 헤테로환기로서는, 피리딘, 피라진, 퀴놀린, 피리미딘, 트리아진, 싸이오펜, 시롤, 벤조퓨란, 벤조싸이오펜, 다이벤조퓨란, 다이벤조싸이오펜, 카바졸, 퀴놀린, 퓨란, 피롤, 이미다졸, 피라졸, 아이소싸이아졸, 아이속사졸, 아이소퀴놀린, 퀴나졸린, 퀴놀리딘, 퀴녹살린, 신놀린, 벤즈이미다졸, 이미다조피리딘, 나프티리딘, 1,2-벤즈아이속사졸, 벤즈옥사졸, 벤조싸이아졸, 옥사졸로피리딘, 아이소싸이아졸로피리딘, 벤조싸이엔일 골격을 모골격으로 하는 2가의 잔기를 들 수 있고, 피리딘, 피라진, 퀴놀린, 피리미딘, 싸이오펜, 시롤, 다이벤조퓨란, 다이벤조싸이오펜, 이미다조피리딘, 벤즈이미다졸 골격을 모골격으로 하는 2가의 기가 바람직하다.

<84> 화학식 a에 있어서, Y_1 내지 Y_3 은 각각 독립적으로 치환기를 가져도 되는 탄소수 1 내지 10의 알킬기, 치환기를 가져도 되는 탄소수 6 내지 20의 아릴기, 치환기를 가져도 되는 탄소수 6 내지 30의 방향족 헤테로환기이다.

<85> Y_1 내지 Y_3 의 알킬기로서는, 상기 R_1 내지 R_8 과 마찬가지로 예를 들 수 있다.

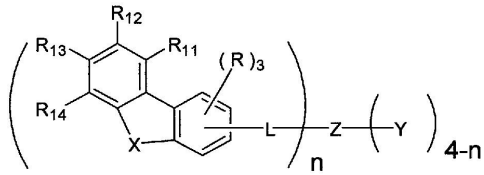
<86> Y_1 내지 Y_3 의 아릴기로서는, 상기 R_1 내지 R_8 의 비축합 아릴기 및 축합 아릴기와 마찬가지로 예를 들 수 있다.

<87> Y_1 내지 Y_3 의 방향족 헤테로환기로서는, 예컨대 퓨릴기, 싸이엔일기, 피롤릴기, 이미다졸릴기, 피라졸릴기, 아이소싸이아졸릴기, 아이속사졸릴기, 피리딜기, 피리미딘릴기, 퀴놀릴기, 아이소퀴놀릴기, 퀴나졸린릴기, 퀴놀리진릴기, 퀴녹살린릴기, 신놀린릴기, 벤즈이미다졸릴기, 이미다조피리딜기, 벤조퓨란릴기, 나프티리딘릴기, 1,2-벤즈아이속사졸릴기, 벤즈옥사졸릴기, 벤조싸이아졸릴기, 옥사졸로피리딜기, 아이소싸이아졸로피리딜기, 벤조싸이엔일기 등을 들 수 있다.

<88> 화학식 a에 있어서, Z는 규소 원자 또는 저마늄 원자이다.

<89> 다음에, 화학식 2로 표시되는 화합물에 대해서 설명한다.

<90> 화학식 2



<91>

<92> 화학식 2에 있어서, R₁₁ 내지 R₁₄ 및 R은 각각 독립적으로 수소 원자, 할로젠 원자, 치환기를 가져도 되는 탄소수 1 내지 40의 알킬기, 치환기를 가져도 되는 탄소수 3 내지 20의 헤테로환기, 치환기를 가져도 되는 탄소수 1 내지 40의 알콕시기, 치환기를 가져도 되는 탄소수 6 내지 40의 비축합 아릴기, 치환기를 가져도 되는 탄소수 6 내지 12의 축합 아릴기, 치환기를 가져도 되는 탄소수 6 내지 20의 아릴옥시기, 치환기를 가져도 되는 탄소수 7 내지 20의 아르알킬기, 치환기를 가져도 되는 탄소수 2 내지 40의 알켄일기, 치환기를 가져도 되는 탄소수 1 내지 40의 알킬아미노기, 치환기를 가져도 되는 탄소수 7 내지 60의 아르알킬아미노기, 치환기를 가져도 되는 탄소수 3 내지 20의 알킬실릴기, 치환기를 가져도 되는 탄소수 8 내지 40의 아릴실릴기, 치환기를 가져도 되는 탄소수 8 내지 40의 아르알킬실릴기, 치환기를 가져도 되는 탄소수 3 내지 20의 알킬저마늄기, 치환기를 가져도 되는 탄소수 8 내지 40의 아릴저마늄기, 치환기를 가져도 되는 탄소수 8 내지 40의 아르알킬저마늄기, 치환기를 가져도 되는 탄소수 7 내지 40의 케토아릴기, 치환기를 가져도 되는 탄소수 1 내지 40의 할로젠화 알킬기 또는 사이아노기이다.

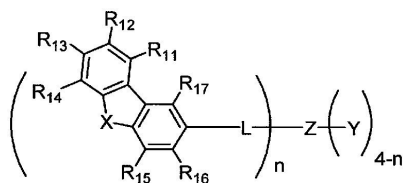
<93> 이들 각 기의 구체예로서는, 화학식 1의 R₁ 내지 R₈에서 설명한 것과 마찬가지로의 예를 들 수 있다.

<94> 화학식 2에 있어서, X, L 및 Z는 화학식 1과 동일하고, Y는 화학식 1의 Y₁ 내지 Y₃과 동일하며, 구체예 및 바람직한 예도 마찬가지이다.

<95> 화학식 2에 있어서, n은 1 내지 4의 정수이고, 2 내지 3이면 적당한 분자량으로 되어, 승화성, 열안정성의 양쪽을 충분히 만족시키기 때문에 바람직하다.

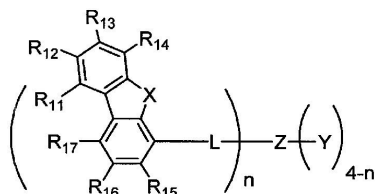
<96> 상기 화학식 2로 표시되는 화합물은, 하기 화학식 3 또는 4로 표시되는 화합물이면 제도가 용이해지기 때문에 바람직하다.

화학식 3



<97>

화학식 4



<98>

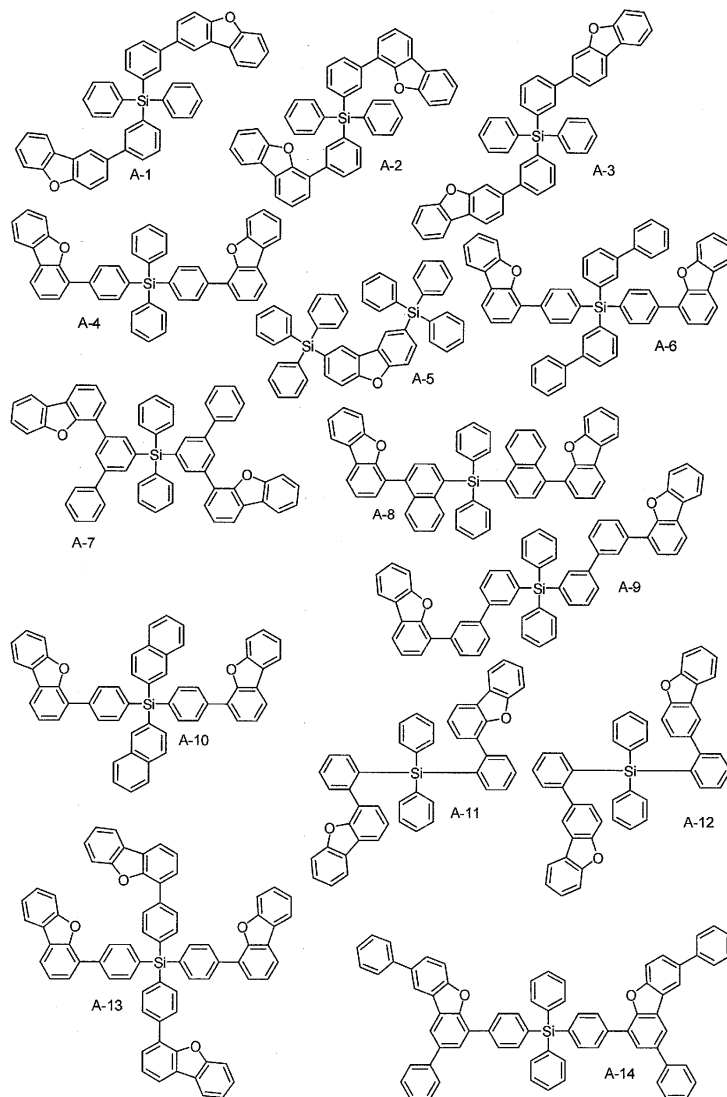
<99> 화학식 3 및 4에 있어서, R₁₁ 내지 R₁₇은 화학식 2의 R₁₁ 내지 R₁₄ 및 R과 동일하고, 구체예 및 바람직한 예도 마찬가지이다. 또한, L, X, Z, Y 및 n도 마찬가지이다.

<100> 화학식 1 내지 4가 나타내는 각 기의 치환기로서는, 예컨대 알킬기(메틸기, 에틸기, 프로필기, 아이소프로필기, n-부틸기, s-부틸기, 아이소부틸기, t-부틸기, n-펜틸기, n-헥실기, n-헵틸기, n-옥틸기, 하이드록시메틸기, 1-하이드록시에틸기, 2-하이드록시에틸기, 2-하이드록시아이소부틸기, 1,2-다이하이드록시에틸기, 1,3-다이하이드록시아이소프로필기, 2,3-다이하이드록시-t-부틸기, 1,2,3-트라이하이드록시프로필기, 클로로메틸기, 1-클로로에틸기, 2-클로로에틸기, 2-클로로아이소부틸기, 1,2-다이클로로에틸기, 1,3-다이클로로아이소프로필기, 2,3-다

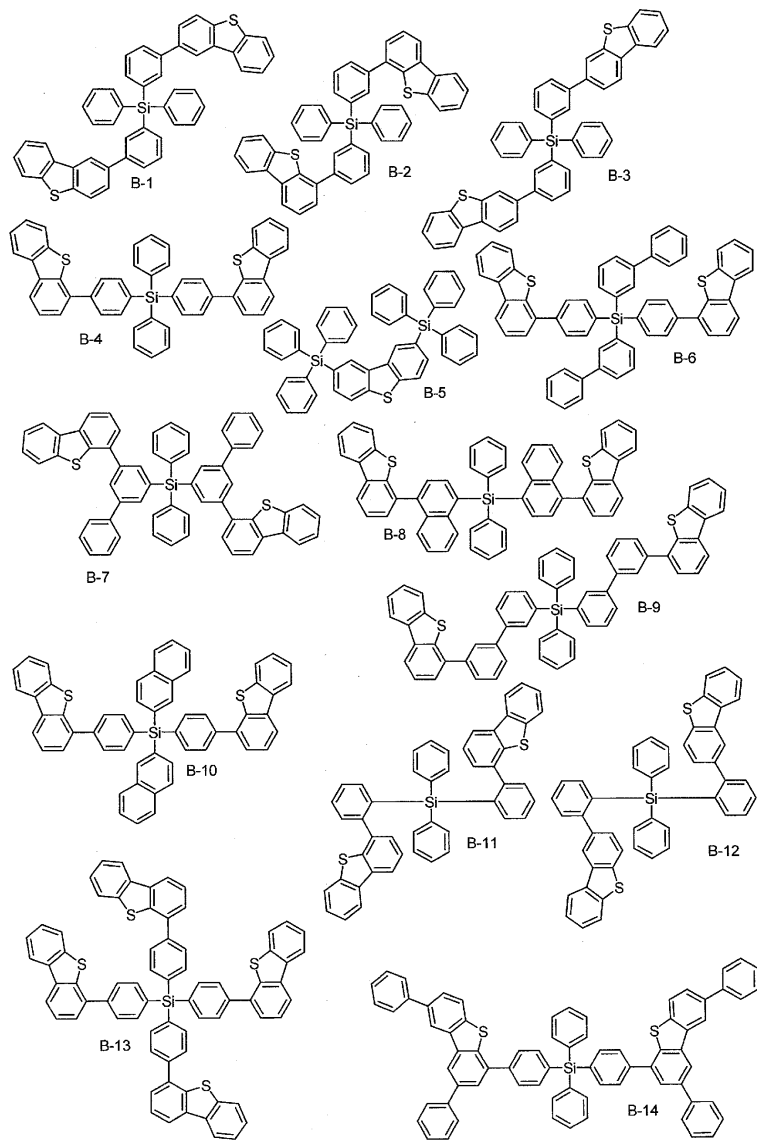
이클로로-*t*-뷰틸기, 1,2,3-트라이클로로프로필기, 브로모메틸기, 1-브로모에틸기, 2-브로모에틸기, 2-브로모아
이소뷰틸기, 1,2-다이브로모에틸기, 1,3-다이브로모아이소프로필기, 2,3-다이브로모-*t*-뷰틸기, 1,2,3-트라이브
로모프로필기, 아이오도메틸기, 1-아이오도에틸기, 2-아이오도에틸기, 2-아이오도아이소뷰틸기, 1,2-다이아이오
도에틸기, 1,3-다이아이오도아이소프로필기, 2,3-다이아이오도-*t*-뷰틸기, 1,2,3-트라이아이오도프로필기, 아미
노메틸기, 1-아미노에틸기, 2-아미노에틸기, 2-아미노아이소뷰틸기, 1,2-다이아미노에틸기, 1,3-다이아미노아
이소프로필기, 2,3-다이아미노-*t*-뷰틸기, 1,2,3-트라이아미노프로필기, 사이아노메틸기, 1-사이아노에틸기, 2-사
이아노에틸기, 2-사이아노아이소뷰틸기, 1,2-다이사이아노에틸기, 1,3-다이사이아노아이소프로필기, 2,3-다이사
이아노-*t*-뷰틸기, 1,2,3-트라이사이아노프로필기, 나이트로메틸기, 1-나이트로에틸기, 2-나이트로에틸기, 2-나
이트로아이소뷰틸기, 1,2-다이나이트로에틸기, 1,3-다이나이트로아이소프로필기, 2,3-다이나이트로-*t*-뷰틸기,
1,2,3-트라이나이트로프로필기, 사이클로프로필기, 사이클로뷰틸기, 사이클로펜틸기, 사이클로헥실기, 4-메틸사
이클로헥실기, 1-아다만틸기, 2-아다만틸기, 1-노보닐기, 2-노보닐기 등), 탄소수 1 내지 6의 알콕시기(에톡시
기, 메톡시기, *i*-프로폭시기, *n*-프로폭시기, *s*-뷰톡시기, *t*-뷰톡시기, 펜톡시기, 헥실옥시기,
사이클로펜톡시기, 사이클로헥실옥시기 등), 핵원자수 5 내지 40의 아릴기, 핵원자수 5 내지 40의 아릴기로 치
환된 아미노기, 핵원자수 5 내지 40의 아릴기를 갖는 에스터기, 탄소수 1 내지 6의 알킬기를 갖는 에스터기, 사
이아노기, 나이트로기, 할로젠 원자 등을 들 수 있다.

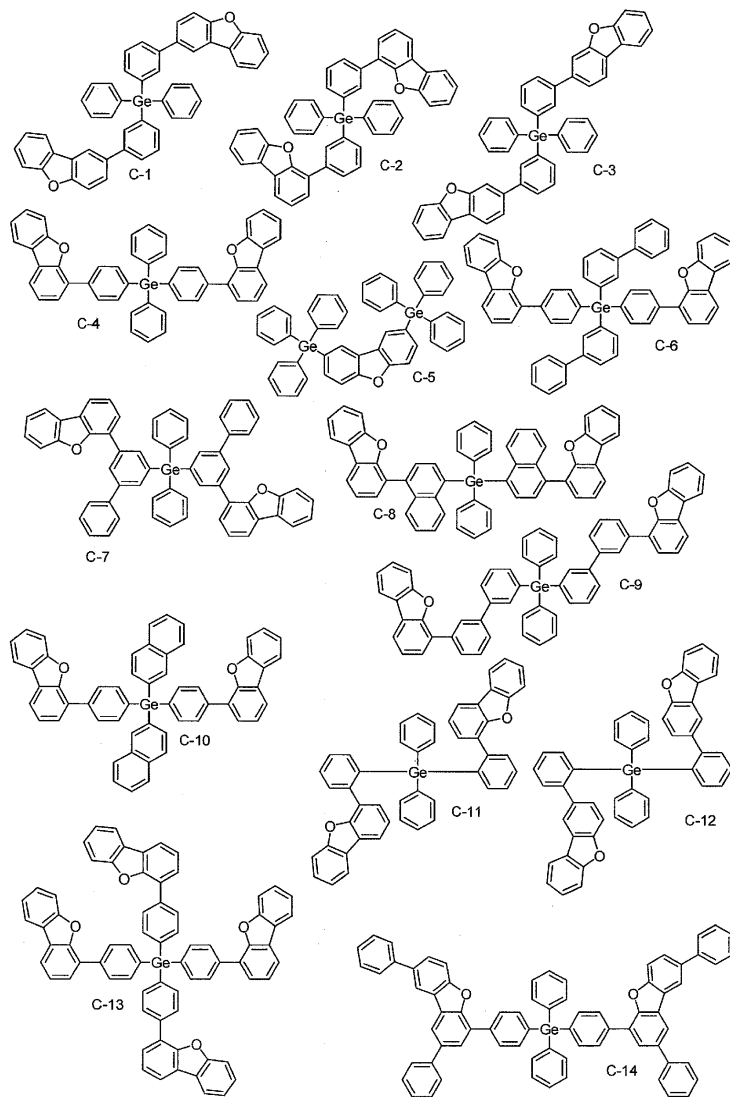
<101>

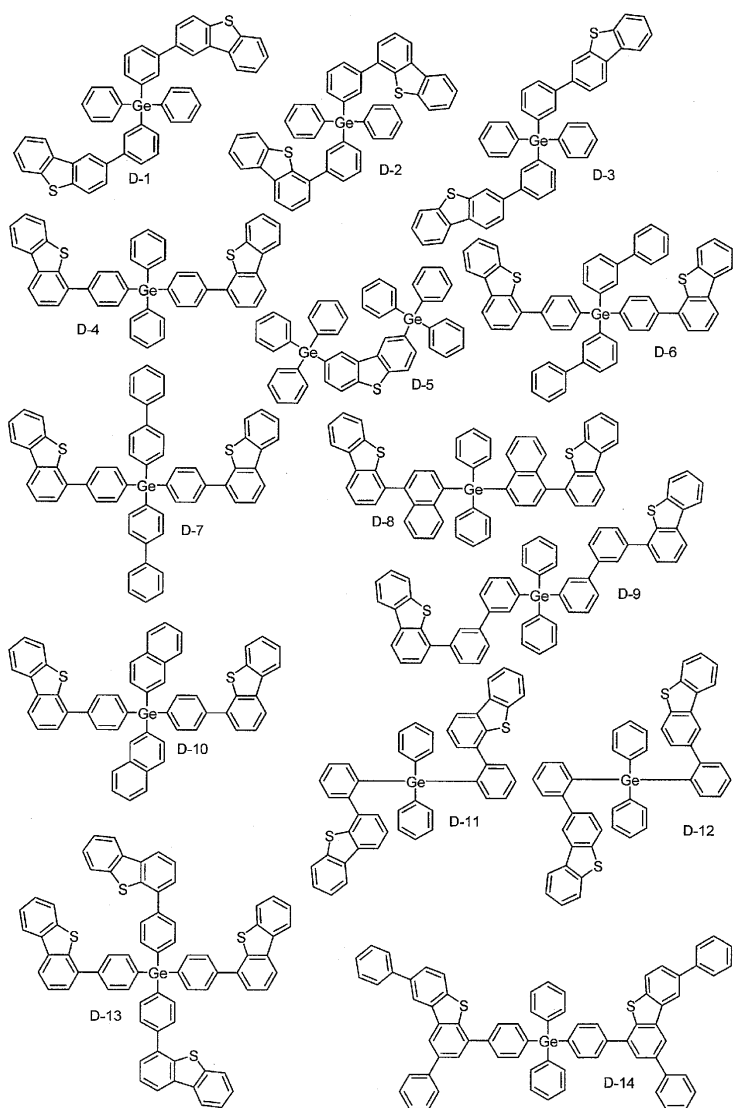
본 발명의 화학식 1 내지 4 중 어느 하나로 표시되는 화합물로 이루어지는 유기 EL 소자용 재료의 구체예를 이
하에 나타내지만, 이들 예시 화합물에 한정되는 것은 아니다.



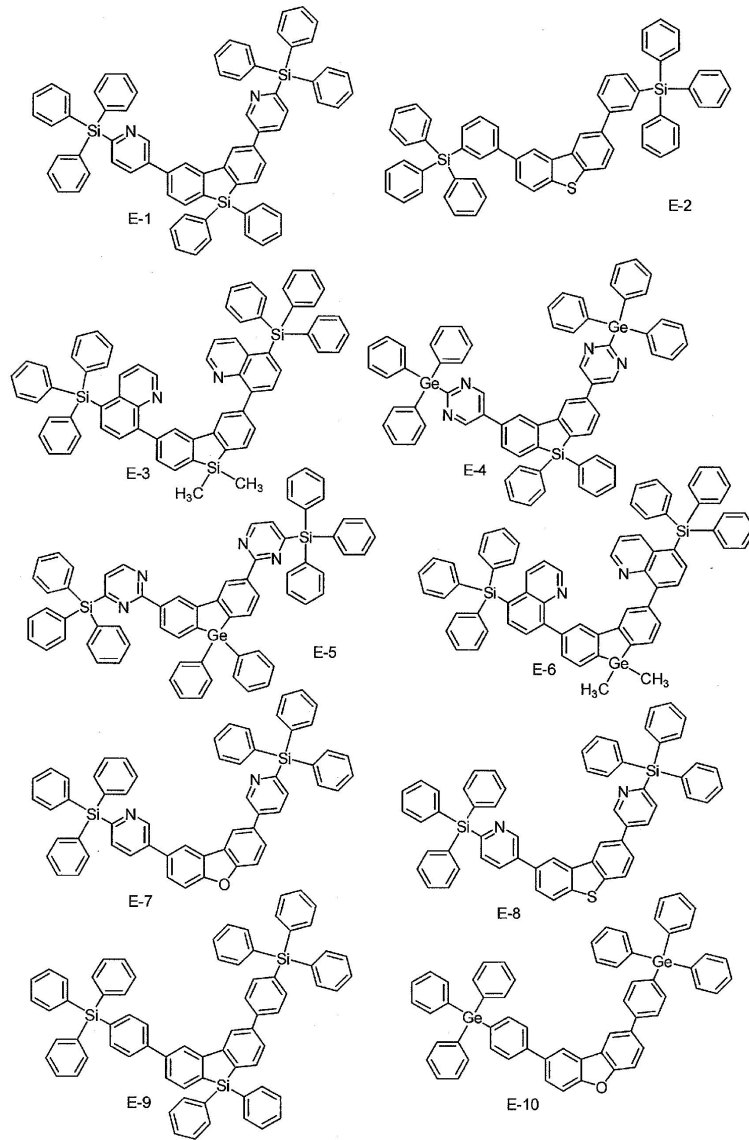
<102>







<105>



<106>

<107>

본 발명의 유기 EL 소자용 재료는 유기 EL 소자의 발광층에 포함되는 호스트 재료이면 바람직하다.

<108>

다음에, 본 발명의 유기 EL 소자에 대해서 설명한다.

<109>

본 발명의 유기 EL 소자는 음극과 양극 사이에 적어도 발광층을 갖는 한층 또는 복수층으로 이루어지는 유기 박막층이 형성되어 있는 유기 EL 소자에 있어서, 상기 유기 박막층의 적어도 한층이 본 발명의 유기 EL 소자용 재료를 함유한다.

<110>

다층형의 유기 EL 소자의 구조로서는, 예컨대 양극/정공 수송층(정공 주입층)/발광층/음극, 양극/발광층/전자 수송층(전자 주입층)/음극, 양극/정공 수송층(정공 주입층)/발광층/전자 수송층(전자 주입층)/음극, 양극/정공 수송층(정공 주입층)/발광층/정공 장벽층/전자 수송층(전자 주입층)/음극 등의 다층 구성으로 적층한 것을 들 수 있다.

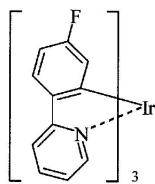
<111>

본 발명의 유기 EL 소자에 있어서, 상기 발광층이 본 발명의 유기 EL 소자용 재료를 호스트 재료로서 함유하면 바람직하다. 또한, 상기 발광층이 호스트 재료와 인광성의 발광 재료로 이루어지고, 이 호스트 재료가 상기 유기 EL 소자용 재료이면 바람직하다.

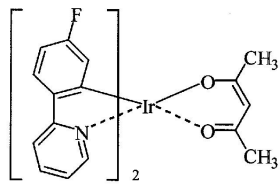
<112>

인광성의 발광 재료로서는, 인광 양자 수율이 높고, 발광 소자의 외부 양자 효율을 보다 향상시킬 수 있다는 점에서, 이리듐(Ir), 오스뮴(Os) 또는 백금(Pt) 금속을 함유하는 화합물이면 바람직하고, 이리듐 착체, 오스뮴 착체, 백금 착체 등의 금속 착체이면 더욱 바람직하며, 그 중에서도 이리듐 착체 및 백금 착체가 보다 바람직하고, 오쏘메탈화 이리듐 착체가 가장 바람직하다. 오쏘메탈화 금속 착체의 더욱 바람직한 형태로서는, 이하에 나타내는 이리듐 착체를 들 수 있다.

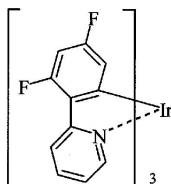
(K-1)



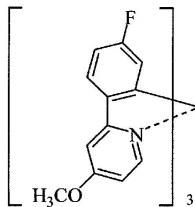
(K-2)



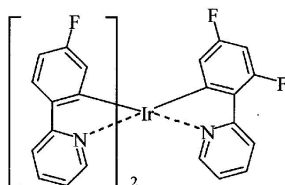
(K-3)



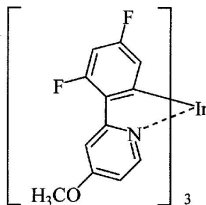
(K-4)



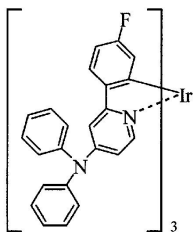
(K-5)



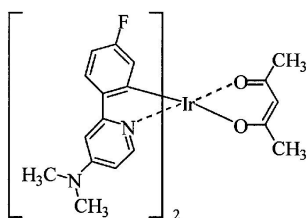
(K-6)



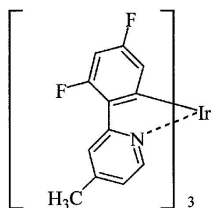
(K-7)

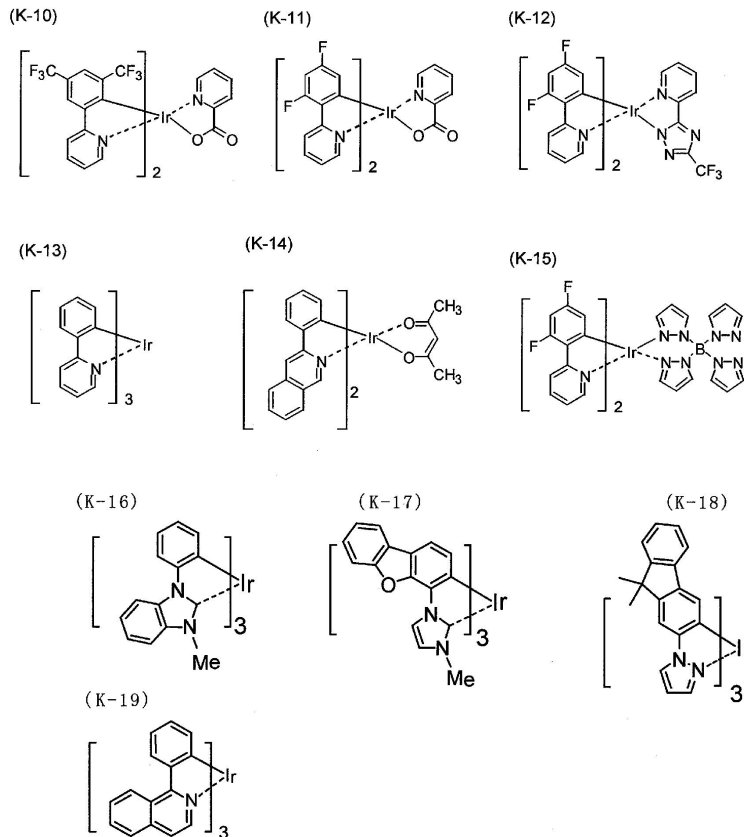


(K-8)



(K-9)





<114>

<115>

또한, 본 발명의 유기 EL 소자는 상기 발광층이 호스트 재료와 인광성의 발광 재료를 함유하고, 이 인광성의 발광 재료가 금속-카벤 탄소 결합을 갖는 발광 재료이더라도 바람직하다.

<116>

또한, 상기 발광층이, 최고 발광 휘도의 파장이 500nm 이하인 청색계 금속 착체를 함유하면 바람직하고, 이러한 청색계 금속 착체로서는, 예컨대 전술한 K-1, K-2, K-3, K-10, K-11, K-12, K-15, K-16 및 K-17 등을 들 수 있다.

<117>

본 발명의 유기 EL 소자는 정공 수송층(정공 주입층)을 갖고, 이 정공 수송층(정공 주입층)이 본 발명의 유기 EL 소자용 재료를 함유하더라도 바람직하며, 본 발명의 유기 EL 소자가 전자 수송층(전자 주입층) 및/또는 정공 장벽층을 갖고, 이 전자 수송층(전자 주입층) 및/또는 정공 장벽층이 본 발명의 유기 EL 소자용 재료를 함유하더라도 바람직하다.

<118>

정공 주입층은 양극으로부터 유기 EL 소자 내에 정공을 효율적으로 주입시키기 위해서 마련되는 층으로, 양극으로부터 정공을 원활하게 층 내에 주입함으로써 구동 전압을 강하시킬 수 있어, 구동에 의한 캐리어 밸런스의 변화를 억제할 수 있다. 정공 주입층에 사용되는 재료로서는, 일반적으로는 양극 금속의 일함수에 가까운 이온화 포텐셜 에너지를 갖는 화합물이 사용된다. 예컨대, 아릴아민 화합물, 구리, 이리듐 등의 여러 가지의 금속 착체, 혹은 헥사아자트라이페닐렌 유도체 등을 들 수 있다.

<119>

정공 수송층은 양극으로부터 주입된 정공을 수송하여 발광층에 도달시키는 기능을 갖는 층이다. 정공 수송층을 마련함으로써, 발광층에서 정공과 전자가 효율적으로 재결합하여 발광 효율을 높일 수 있다. 이 때문에, 정공 수송층에 사용되는 재료에는, 발광층에 효율적으로 정공을 전달시키는 기능이 요구된다. 일반적으로 정공 수송층에 사용되는 재료로서는 아릴아민계 재료가 사용되고 있다. 일반적으로 전계 강도의 2분의 1승의 값이 300 내지 $800(\text{V}/\text{cm})^{1/2}$ 의 범위에서 $10^{-5} \text{ cm}^2/\text{Vs}$ 이상을 갖는 정공 이동도가 얻어지는 재료가 바람직하다. 정공 주입층이나 정공 수송층에 본 발명의 유기 EL 소자용 재료를 함유하더라도 바람직하다.

<120>

정공 장벽층은 전자와 정공을 발광층 내에서 효율적으로 재결합시키기 위해 발광층과 음극 사이에 마련되는 층이다. 정공 장벽층에는 발광층 재료보다 제 1 산화 전위가 큰 물질을 이용할 수 있고, 이에 따라 전자 수송층으로의 정공의 주입을 막을 수 있다. 정공 장벽층에 이용하는 재료로서는, 예컨대 일본 특허 제2673261호 공보에 기재된 정공 저지층용 재료를 들 수 있다.

<121>

전자 수송층은 음극으로부터 주입된 전자를 수송하여 발광층에 도달시키는 기능을 담당하는 층이다. 전자 수송

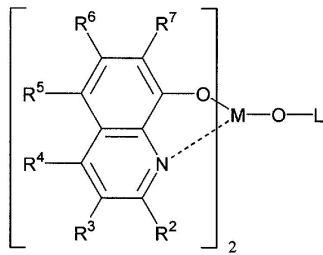
층을 마련함으로써, 발광층에서 정공과 전자가 효율적으로 재결합하여 발광 효율을 높일 수 있다. 효율적으로 EL 발광을 하기 위해서는, 발광층에 효율적으로 전자를 전달시킬 필요가 있다. 전자 수송층에 사용되는 재료로서는, 질소 함유계 방향족 화합물 재료나, 실물 화합물 등의 질소 이외의 헤테로 화합물, 혹은 알루미늄, 갈륨 등의 금속 착체나, 축합 방향족 탄화수소 등이 일반적으로 사용된다. 이러한 재료의 전자 이동도는, 일반적으로 전계 강도의 2분의 1승의 값이 300 내지 800(V/cm)^{1/2}의 범위에서 10⁻⁶ cm²/Vs 이상이다. 전자 수송 재료로서는, 후기하는 재료를 바람직하게 들 수 있다. 전자 수송층이나 정공 장벽층에 본 발명의 유기 EL 소자용 재료를 함유하더라도 바람직하다.

- <122> 전자 주입층은 음극으로부터 유기 EL 소자 내에 전자를 효율적으로 주입하기 위해서 마련되는 층이다. 전자 주입층을 마련함으로써, 음극으로부터 전자를 원활하게 주입할 수 있기 때문에 구동 전압을 강하시킬 수 있어, 구동에 의한 캐리어 밸런스의 변화를 억제할 수 있다. 전자 주입층을 구성하는 재료로서는, 후기하는 재료를 바람직하게 들 수 있다.
- <123> 본 발명의 유기 EL 소자는 음극과 유기 박막층의 계면 영역에 환원성 도펀트가 첨가되어 형성되면 바람직하다.
- <124> 상기 환원성 도펀트로서는, 알칼리 금속, 알칼리 금속 착체, 알칼리 금속 화합물, 알칼리토류 금속, 알칼리토류 금속 착체, 알칼리토류 금속 화합물, 희토류 금속, 희토류 금속 착체, 및 희토류 금속 화합물 등으로부터 선택된 적어도 1종류를 들 수 있다.
- <125> 상기 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, 더욱 바람직하게는 Rb 또는 Cs이며, 가장 바람직하게는 Cs이다.
- <126> 상기 알칼리토류 금속으로서, Ca(일함수: 2.9eV), Sr(일함수: 2.0 내지 2.5eV), Ba(일함수: 2.52eV) 등을 들 수 있고, 일함수가 2.9eV 이하인 것이 특히 바람직하다.
- <127> 상기 희토류 금속으로서, Sc, Y, Ce, Tb, Yb 등을 들 수 있고, 일함수가 2.9eV 이하인 것이 특히 바람직하다.
- <128> 이상의 금속 중 바람직한 금속은 특히 환원 능력이 높아, 전자 주입역으로의 비교적 소량의 첨가에 의해 유기 EL 소자에서의 발광 휘도의 향상이나 장수명화가 가능하다.
- <129> 상기 알칼리 금속 화합물로서는, Li₂O, Cs₂O, K₂O 등의 알칼리 산화물, LiF, NaF, CsF, KF 등의 알칼리 할로젠화물 등을 들 수 있고, LiF, Li₂O, NaF의 알칼리 산화물 또는 알칼리 불화물이 바람직하다.
- <130> 상기 알칼리토류 금속 화합물로서는, BaO, SrO, CaO 및 이들을 혼합한 Ba_xSr_{1-x}O(0<x<1)나, Ba_xCa_{1-x}O(0<x<1) 등을 들 수 있고, BaO, SrO, CaO가 바람직하다.
- <131> 상기 희토류 금속 화합물로서는, YbF₃, ScF₃, ScO₃, Y₂O₃, Ce₂O₃, GdF₃, TbF₃ 등을 들 수 있고, YbF₃, ScF₃, TbF₃이 바람직하다.
- <132> 상기 알칼리 금속 착체, 알칼리토류 금속 착체, 희토류 금속 착체로서는, 각각 금속 이온으로서 알칼리 금속 이온, 알칼리토류 금속 이온, 희토류 금속 이온 중 적어도 하나를 함유하는 것이면 특별히 한정은 없다. 또한, 리간드에는 퀴놀린올, 벤조퀴놀린올, 아크리딘올, 페난트리딘올, 하이드록시페닐옥사졸, 하이드록시페닐싸이아졸, 하이드록시디아아틸옥사디아아졸, 하이드록시디아아틸싸이아다아아졸, 하이드록시페닐피리딘, 하이드록시페닐벤즈이미다졸, 하이드록시벤조트라이아졸, 하이드록시폴보란, 바이피리딜, 페난트롤린, 프탈로사이아닌, 포피린, 사이클로펜타다이엔, β-다이케톤류, 아조메탄류, 및 그들의 유도체 등이 바람직하지만, 이들에 한정되는 것은 아니다.
- <133> 환원성 도펀트의 첨가 형태로서는, 상기 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 증착시켜서, 유기물 중에 환원성 도펀트를 분산시키는 방법이 바람직하다. 분산 농도로서는 몰비로 유기물:환원성 도펀트=100:1 내지 1:100, 바람직하게는 5:1 내지 1:5이다.
- <134> 환원성 도펀트를 층 형상으로 형성하는 경우는, 계면의 유기층인 발광 재료나 전자 주입 재료를 층 형상으로 형성한 후에, 환원성 도펀트를 단독으로 저항 가열 증착법에 의해 증착하여, 바람직하게는 층의 두께 0.1 내지

15nm로 형성한다.

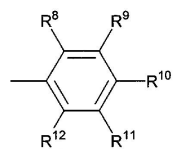
- <135> 환원성 도펀트를 섬 형상으로 형성하는 경우는, 계면의 유기층인 발광 재료나 전자 주입 재료를 섬 형상으로 형성한 후에, 환원성 도펀트를 단독으로 저항 가열 증착법에 의해 증착하여, 바람직하게는 섬의 두께 0.05 내지 1nm로 형성한다.
- <136> 또한, 본 발명의 유기 EL 소자에 있어서의, 주성분과 환원성 도펀트의 비율로서는, 몰비로 주성분:환원성 도펀트=5:1 내지 1:5이면 바람직하고, 2:1 내지 1:2이면 더욱 바람직하다.
- <137> 본 발명의 유기 EL 소자는 상기 발광층과 음극 사이에 전자 주입층을 갖고, 이 전자 주입층이 질소 함유 환 유도체를 주성분으로서 함유하면 음극과의 밀착성을 향상시키는 분자 골격이 많아지기 때문에 바람직하다.
- <138> 상기 전자 주입층에 이용하는 전자 수송 재료로서는, 분자 내에 헤테로 원자를 1개 이상 함유하는 방향족 헤테로환 화합물이 바람직하게 사용되고, 특히 질소 함유 환 유도체가 바람직하다.
- <139> 이 질소 함유 환 유도체로서는, 예컨대 화학식 A로 표시되는 것이 바람직하다.

화학식 A



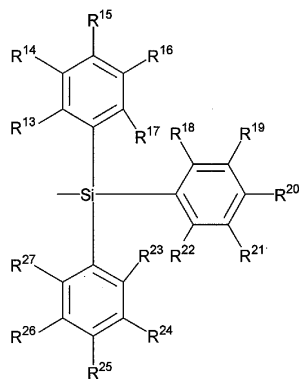
- <140> R^2 내지 R^7 은 각각 독립적으로 수소 원자, 할로젠 원자, 옥시기, 아미노기, 또는 탄소수 1 내지 40의 탄화수소기이며, 이들은 치환기를 갖고 있어도 된다.
- <142> 이 할로젠 원자의 예로서는, 상기와 마찬가지로의 것을 들 수 있다. 또한, 치환기를 갖는 아미노기의 예로서는, 상기 알킬아미노기, 아릴아미노기, 아르알킬아미노기와 마찬가지로의 것을 들 수 있다.
- <143> 탄소수 1 내지 40의 탄화수소기로서는, 치환 또는 무치환의 알킬기, 알켄일기, 사이클로알킬기, 알콕시기, 아릴기, 헤테로환기, 아르알킬기, 아릴옥시기, 알콕시카보닐기 등을 들 수 있다. 이 알킬기, 알켄일기, 사이클로알킬기, 알콕시기, 아릴기, 헤테로환기, 아르알킬기, 아릴옥시기의 예로서는, 상기와 마찬가지로의 것을 들 수 있고, 알콕시카보닐기는 $-COOY'$ 로 표시되고, Y' 의 예로서는 상기 알킬기와 마찬가지로의 것을 들 수 있다.
- <144> M은 알루미늄(Al), 갈륨(Ga) 또는 인듐(In)이며, In이면 바람직하다.
- <145> 화학식 A의 L은 하기 화학식 Aa 또는 Aaa로 표시되는 기이다.

화학식 Aa



<146>

화학식 Aaa



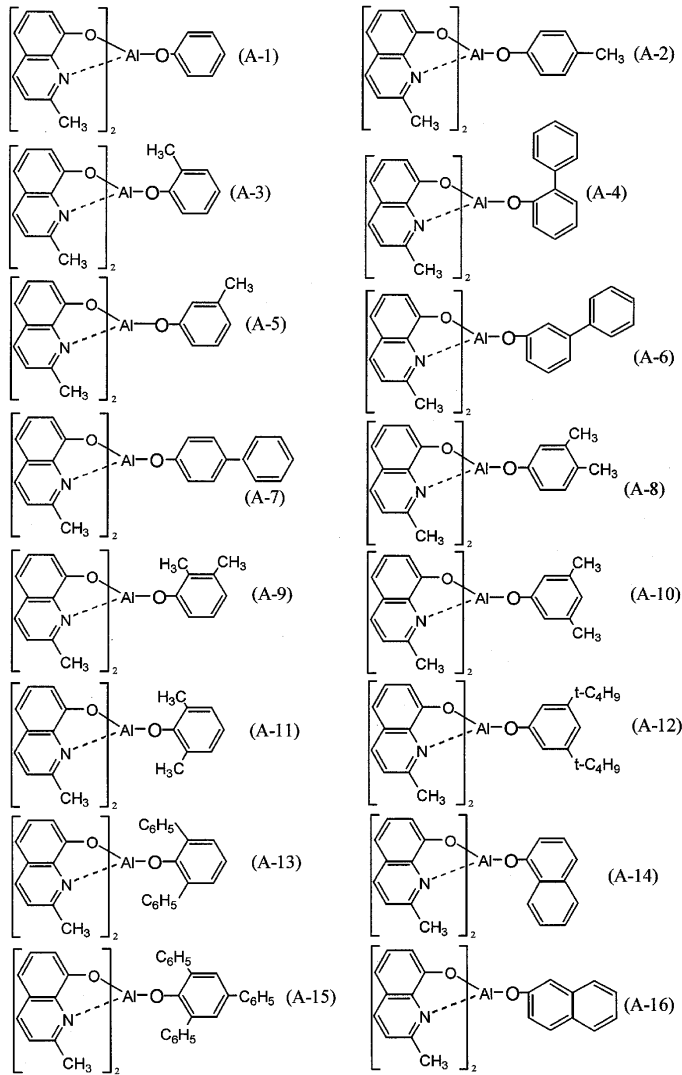
<147>

<148> (식 중, R^8 내지 R^{12} 는 각각 독립적으로 수소 원자 또는 치환 또는 무치환의 탄소수 1 내지 40의 탄화수소기이며, 서로 인접하는 기가 환상 구조를 형성하고 있어도 된다. 또한, R^{13} 내지 R^{27} 은 각각 독립적으로 수소 원자 또는 치환 또는 무치환의 탄소수 1 내지 40의 탄화수소기이며, 서로 인접하는 기가 환상 구조를 형성하고 있어도 된다.)

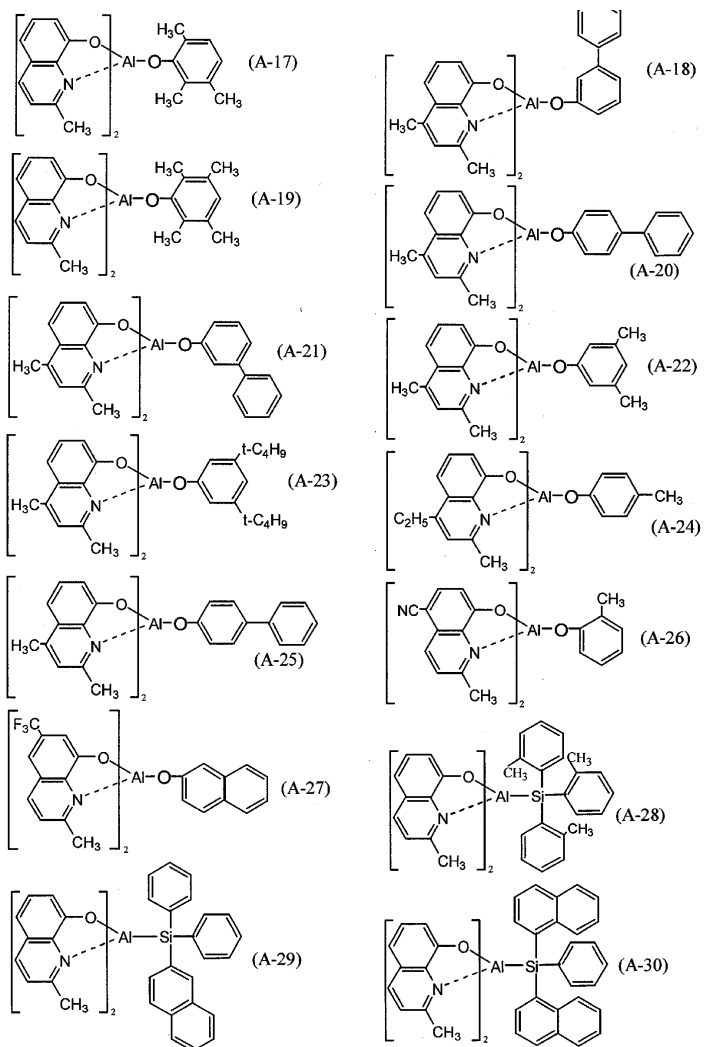
<149> 화학식 Aa 및 Aaa의 R^8 내지 R^{12} 및 R^{13} 내지 R^{27} 이 나타내는 탄소수 1 내지 40의 탄화수소기로서는, 상기 R^2 내지 R^7 의 구체예와 마찬가지로의 것을 들 수 있다.

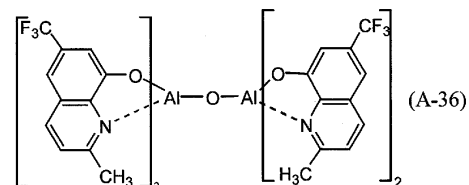
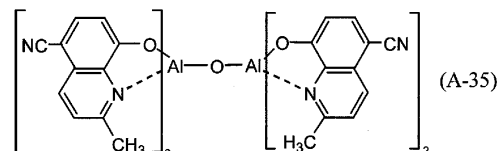
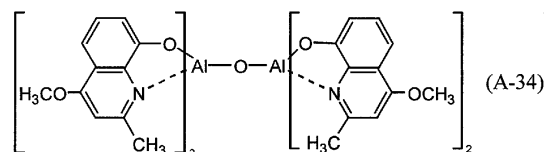
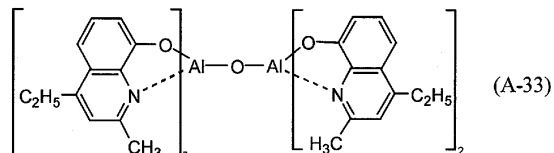
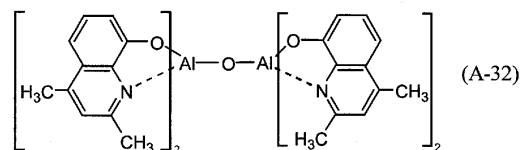
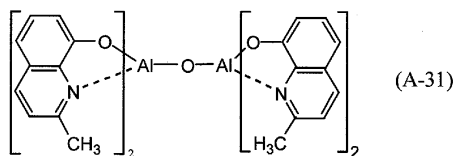
<150> 또한, 상기 R^8 내지 R^{12} 및 R^{13} 내지 R^{27} 의 서로 인접하는 기가 환상 구조를 형성한 경우의 2가의 기로서는, 테트라메틸렌기, 펜타메틸렌기, 헥사메틸렌기, 다이페닐메테인-2,2'-다이일기, 다이페닐에테인-3,3'-다이일기, 다이페닐프로페인-4,4'-다이일기 등을 들 수 있다.

<151> 화학식 A로 표시되는 질소 함유 환의 금속 킬레이트 착체의 구체예를 이하에 나타내지만, 이들 예시 화합물에 한정되는 것은 아니다.



<152>



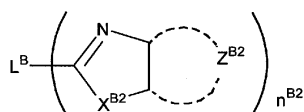


<154>

<155>

상기 질소 함유 환 유도체로서는, 질소 함유 5원환 유도체도 바람직하고, 질소 함유 5원환으로서, 이미다졸환, 트리아졸환, 테트라졸환, 옥사다리아졸환, 싸이아다리아졸환, 옥사트리아졸환, 싸이아트리아졸환 등을 들 수 있고, 질소 함유 5원환 유도체로서는, 벤즈이미다졸환, 벤조트리아졸환, 피리디노이미다졸환, 피리미디노이미다졸환, 피리다지노이미다졸환이며, 특히 바람직하게는, 하기 화학식 B로 표시되는 것이다.

화학식 B



<156>

<157>

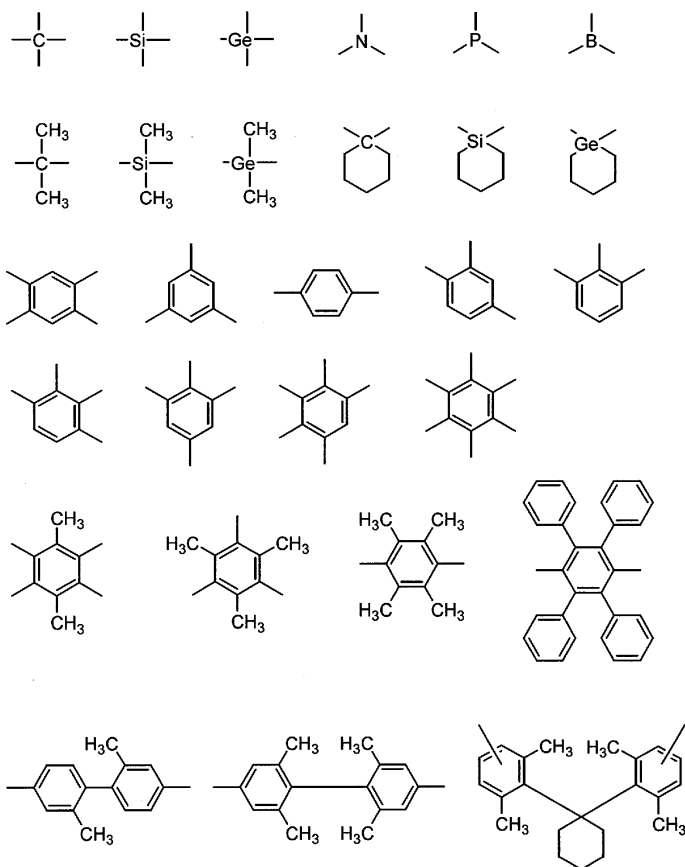
화학식 B 중, L^{B} 는 2가 이상의 연결기를 나타내고, 예컨대 탄소, 규소, 질소, 붕소, 산소, 황, 금속(예컨대, 바륨, 베릴륨), 방향족 탄화수소환, 방향족 헤테로환 등을 들 수 있고, 이들 중 탄소 원자, 질소 원자, 규소 원자, 붕소 원자, 산소 원자, 황 원자, 아릴기, 방향족 헤테로환기가 바람직하고, 탄소 원자, 규소 원자, 아릴기, 방향족 헤테로환기가 더욱 바람직하다.

<158>

L^{B} 의 아릴기 및 방향족 헤테로환기는 치환기를 갖고 있어도 되고, 치환기로서 바람직하게는 알킬기, 알켄일기, 알킨일기, 아릴기, 아미노기, 알콕시기, 아릴옥시기, 아실기, 알콕시카보닐기, 아릴옥시카보닐기, 아실옥시기, 아실아미노기, 알콕시카보닐아미노기, 아릴옥시카보닐아미노기, 설포닐아미노기, 설포오일기, 카밤오일기, 알킬 싸이오기, 아릴싸이오기, 설포닐기, 할로젠 원자, 사이아노기, 방향족 헤테로환기이며, 보다 바람직하게는 알킬기, 아릴기, 알콕시기, 아릴옥시기, 할로젠 원자, 사이아노기, 방향족 헤테로환기이고, 더욱 바람직하게는 알킬기, 아릴기, 알콕시기, 아릴옥시기, 방향족 헤테로환기이며, 특히 바람직하게는 알킬기, 아릴기, 알콕시기, 방

향족 헤테로화기이다.

<159> L^B 의 구체예로서는, 이하에 나타내는 것을 들 수 있다.



<160>

<161> 화학식 B에 있어서의 X^{B2} 는 -O-, -S- 또는 $=N-R^{B2}$ 를 나타낸다. R^{B2} 는 수소 원자, 지방족 탄화수소기, 아릴기 또는 헤테로화기를 나타낸다.

<162> R^{B2}의 지방족 탄화수소기는 직쇄, 분기 또는 환상의 알킬기(바람직하게는 탄소수 1 내지 20, 보다 바람직하게는 탄소수 1 내지 12, 특히 바람직하게는 탄소수 1 내지 8의 알킬기이며, 예컨대 메틸, 에틸, 아이소프로필, t-뷰틸, n-옥틸, n-데실, n-헥사데실, 사이클로프로필, 사이클로펜틸, 사이클로헥실 등을 들 수 있다), 알켄일기(바람직하게는 탄소수 2 내지 20, 보다 바람직하게는 탄소수 2 내지 12, 특히 바람직하게는 탄소수 2 내지 8의 알켄일기이며, 예컨대 바이닐, 알릴, 2-뷰텐일, 3-펜텐일 등을 들 수 있다), 알킨일기(바람직하게는 탄소수 2 내지 20, 보다 바람직하게는 탄소수 2 내지 12, 특히 바람직하게는 탄소수 2 내지 8의 알킨일기이며, 예컨대 프로파일, 3-펜타일 등을 들 수 있다)이며, 알킬기이면 바람직하다.

<163> R^{B2}의 아릴기는 단환 또는 축합환이고, 바람직하게는 탄소수 6 내지 30, 보다 바람직하게는 탄소수 6 내지 20, 더욱 바람직하게는 탄소수 6 내지 12의 아릴기이며, 예컨대 페닐, 2-메틸페닐, 3-메틸페닐, 4-메틸페닐, 2-메톡시페닐, 3-트라이플루오로메틸페닐, 펜타플루오로페닐, 1-나프틸, 2-나프틸 등을 들 수 있다.

<164> R^{B2}의 헤테로환기는 단환 또는 축합환이고, 바람직하게는 탄소수 1 내지 20, 보다 바람직하게는 탄소수 1 내지 12, 더욱 바람직하게는 탄소수 2 내지 10의 헤테로환기이며, 바람직하게는 질소 원자, 산소 원자, 황 원자, 셀레늄 원자 중 적어도 하나를 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, 테트라자인텐, 카바졸, 아제핀 등을 들 수 있고, 바람직하게는 퓨란, 싸이오펜, 피리딘, 피라진, 피리미딘, 피리다진, 트리아아진, 퀴놀린, 프탈라진, 나프티리딘, 퀴녹살린, 퀴나졸린이며, 보다 바람직하게는 퓨란, 싸이오펜,

피리딘, 퀴놀린이고, 더욱 바람직하게는 퀴놀린이다.

<165> R^{B2} 로 표시되는 지방족 탄화수소기, 아릴기 및 헤테로환기는 치환기를 갖고 있어도 되고, 치환기로서는 상기 L^B 로 표시되는 기의 치환기로서 든 것과 마찬가지로, 또한 바람직한 치환기도 마찬가지로이다.

<166> R^{B2} 로서 바람직하게는 지방족 탄화수소기, 아릴기 또는 헤테로환기이며, 보다 바람직하게는 지방족 탄화수소기 (바람직하게는 탄소수 6 내지 30, 보다 바람직하게는 탄소수 6 내지 20, 더욱 바람직하게는 탄소수 6 내지 12의 것) 또는 아릴기이고, 더욱 바람직하게는 지방족 탄화수소기(바람직하게는 탄소수 1 내지 20, 보다 바람직하게는 탄소수 1 내지 12, 더욱 바람직하게는 탄소수 2 내지 10의 것)이다.

<167> X^{B2} 로서 바람직하게는 $-O-$, $=N-R^{B2}$ 이고, 보다 바람직하게는 $=N-R^{B2}$ 이며, 특히 바람직하게는 $=N-R^{B2}$ 이다.

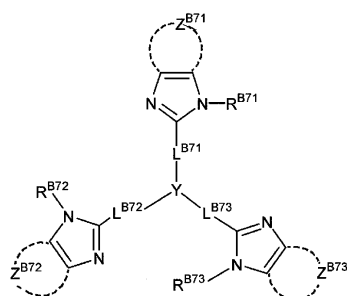
<168> Z^{B2} 는 방향족환을 형성하기 위해서 필요한 원자군을 나타낸다. Z^{B2} 로 형성되는 방향족환은 방향족 탄화수소환, 방향족 헤테로환 중 어떤 것이더라도 좋고, 구체예로서는, 예컨대 벤젠환, 피리딘환, 피라진환, 피리미딘환, 피리다진환, 트라이아진환, 피롤환, 푸란환, 싸이오펜환, 셀레노펜환, 텔루로펜환, 이미다졸환, 싸이아졸환, 셀레나졸환, 텔룰라졸환, 싸이아다리아졸환, 옥사다리아졸환, 피라졸환 등을 들 수 있고, 바람직하게는 벤젠환, 피리딘환, 피라진환, 피리미딘환, 피리다진환이며, 보다 바람직하게는 벤젠환, 피리딘환, 피라진환이고, 더욱 바람직하게는 벤젠환, 피리딘환이며, 특히 바람직하게는 피리딘환이다.

<169> Z^{B2} 로 형성되는 방향족환은 또한 다른 환과 축합환을 형성해도 되고, 치환기를 갖고 있어도 된다. 치환기로서는 상기 L^B 로 표시되는 기의 치환기로서 든 것과 마찬가지로, 바람직하게는 알킬기, 알켄일기, 알킨일기, 아릴기, 아미노기, 알콕시기, 아릴옥시기, 아실기, 알콕시카보닐기, 아릴옥시카보닐기, 아실옥시기, 아실아미노기, 알콕시카보닐아미노기, 아릴옥시카보닐아미노기, 설펜일아미노기, 설펜오일기, 카밤오일기, 알킬싸이오기, 아릴싸이오기, 설펜일기, 할로젠 원자, 사이아노기, 헤테로환기이며, 보다 바람직하게는 알킬기, 아릴기, 알콕시기, 아릴옥시기, 할로젠 원자, 사이아노기, 헤테로환기이고, 더욱 바람직하게는 알킬기, 아릴기, 알콕시기, 아릴옥시기, 방향족 헤테로환기이며, 특히 바람직하게는 알킬기, 아릴기, 알콕시기, 방향족 헤테로환기이다.

<170> n^{B2} 는 1 내지 4의 정수이고, 2 내지 3이면 바람직하다.

<171> 상기 화학식 B로 표시되는 질소 함유 5원환 유도체 중, 더욱 바람직하게는 하기 화학식 Ba로 표시되는 것이 바람직하다.

화학식 Ba



<172>

<173> 화학식 Ba 중, R^{B71} , R^{B72} 및 R^{B73} 은 각각 화학식 B에서의 R^{B2} 와 마찬가지로, 또한 바람직한 범위도 마찬가지이다.

<174> Z^{B71} , Z^{B72} 및 Z^{B73} 은 각각 화학식 B에서의 Z^{B2} 와 마찬가지로, 또한 바람직한 범위도 마찬가지이다.

<175> L^{B71} , L^{B72} 및 L^{B73} 은 각각 연결기를 나타내고, 화학식 B에서의 L^B 의 예를 2가로 한 것 및 단일 결합을 들 수 있고, 바람직하게는 단일 결합, 2가의 방향족 탄화수소환기, 2가의 방향족 헤테로환기, 및 이들의 조합으로 이루어지는 연결기이며, 보다 바람직하게는 단일 결합이다. L^{B71} , L^{B72} 및 L^{B73} 은 치환기를 갖고 있어도 되고, 치환기로서는 상기 화학식 B에서의 L^B 로 표시되는 기의 치환기로서 든 것과 마찬가지로, 또한 바람직한 치환기도

마찬가지이다.

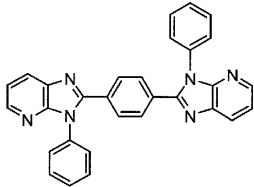
<176>

Y는 질소 원자, 1,3,5-벤젠트라이일기 또는 2,4,6-트라이아진트라이일기를 나타낸다. 1,3,5-벤젠트라이일기는 2,4,6-위치에 치환기를 갖고 있어도 되고, 치환기로서는, 예컨대 알킬기, 방향족 탄화수소환기, 할로젠 원자 등을 들 수 있다.

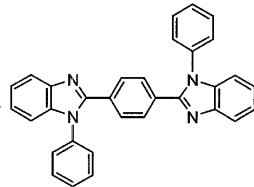
<177>

화학식 B 또는 Ba로 표시되는 질소 함유 5원환 유도체의 구체예를 이하에 나타내지만, 이들 예시 화합물에 한정되는 것은 아니다.

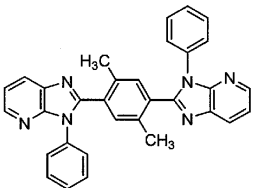
(B-1)



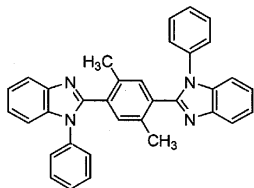
(B-5)



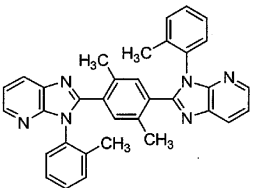
(B-2)



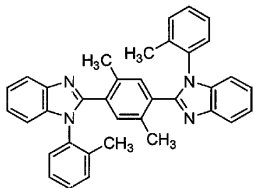
(B-6)



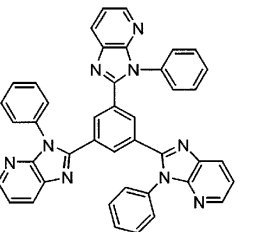
(B-3)



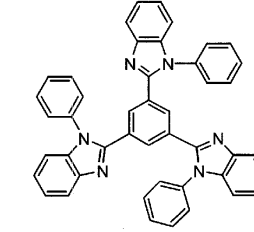
(B-7)



(B-4)

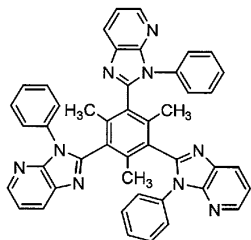


(B-8)

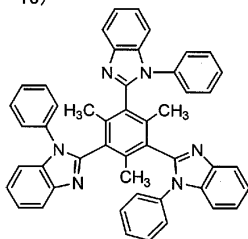


<178>

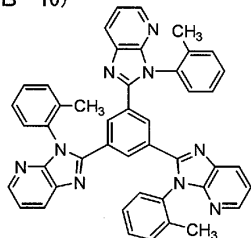
(B-9)



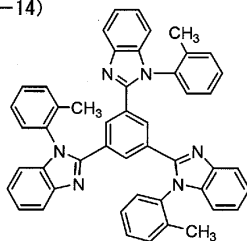
(B-13)



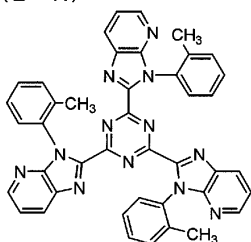
(B-10)



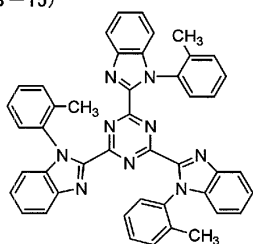
(B-14)



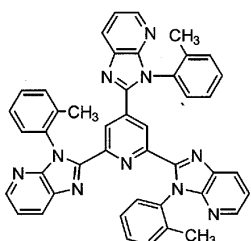
(B-11)



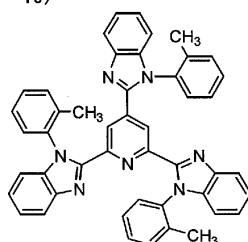
(B-15)



(B-12)

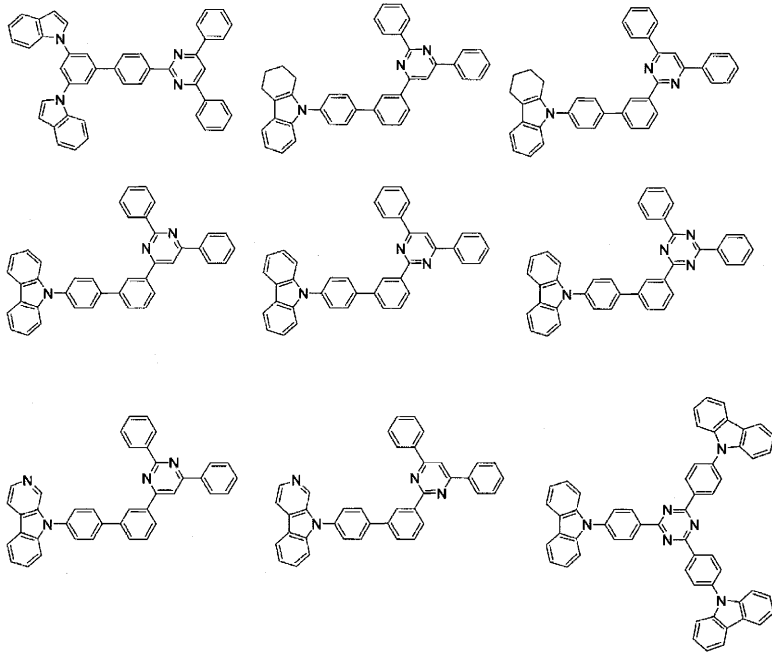


(B-16)

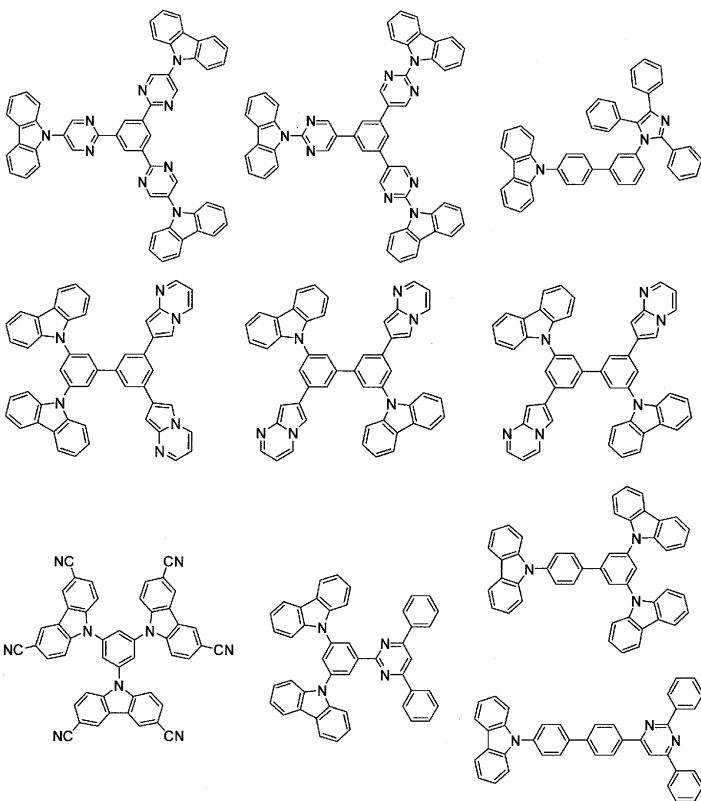


전자 주입층 및 전자 수송층을 구성하는 화합물로서는, 본 발명의 유기 EL 소자용 재료 외에, 전자 결핍성 질소 함유 5원환 또는 전자 결핍성 질소 함유 6원환 골격과, 치환 또는 무치환의 인돌 골격, 치환 또는 무치환의 카바졸 골격, 치환 또는 무치환의 아자카바졸 골격을 조합한 구조를 갖는 화합물 등도 들 수 있다. 또한, 바람직한 전자 결핍성 질소 함유 5원환 또는 전자 결핍성 질소 함유 6원환 골격으로서, 피리딘, 피리미딘, 피라진, 트리아진, 트리아졸, 옥사다리아졸, 피라졸, 이미다졸, 퀴놀살린, 피롤 골격 및, 그것들이 서로 축합한 벤즈이미다졸, 이미다조피리딘 등의 분자 골격을 들 수 있다. 이들 조합 중에서 바람직하게는 피리딘, 피리미딘, 피라진, 트리아진 골격과, 카바졸, 인돌, 아자카바졸, 퀴놀살린 골격을 들 수 있다. 전술한 골격은 치환되어 있더라도 무치환이더라도 좋다.

<181> 전자 수송성 화합물의 구체예를 이하에 나타낸다.



<182>



<183>

<184> 전자 주입층 및 전자 수송층은 상기 재료의 1종 또는 2종 이상으로 이루어지는 단층 구조이더라도 좋고, 동일 조성 또는 이종 조성의 복수층으로 이루어지는 다층 구조이더라도 좋다. 이들은 π 전자 결핍성 질소 함유 헤테로환기인 것이 바람직하다.

<185> 또한, 상기 전자 주입층의 구성 성분으로서, 상기 질소 함유 환 유도체 외에 무기 화합물로서 절연체 또는 반도체를 사용하는 것이 바람직하다. 전자 주입층이 절연체나 반도체로 구성되어 있으면, 전류의 리크를 유효하게 방지하여 전자 주입성을 향상시킬 수 있다.

<186> 이러한 절연체로서는, 알칼리 금속 칼코게나이드, 알칼리토류 금속 칼코게나이드, 알칼리 금속의 할로젠화물 및 알칼리토류 금속의 할로젠화물로 이루어지는 군으로부터 선택되는 적어도 하나의 금속 화합물을 사용하는 것이

바람직하다. 전자 주입층이 이들 알칼리 금속 칼코게나이드 등으로 구성되어 있으면, 전자 주입성을 더욱 향상시킬 수 있는 점에서 바람직하다. 구체적으로, 바람직한 알칼리 금속 칼코게나이드로서는, 예컨대 Li_2O , K_2O , Na_2S , Na_2Se 및 Na_2O 를 들 수 있고, 바람직한 알칼리토류 금속 칼코게나이드로서는, 예컨대 CaO , BaO , SrO , BeO , BaS 및 CaSe 를 들 수 있다. 또한, 바람직한 알칼리 금속의 할로젠화물로서는, 예컨대 LiF , NaF , KF , LiCl , KCl 및 NaCl 등을 들 수 있다. 또한, 바람직한 알칼리토류 금속의 할로젠화물로서는, 예컨대 CaF_2 , BaF_2 , SrF_2 , MgF_2 및 BeF_2 등의 불화물이나, 불화물 이외의 할로젠화물을 들 수 있다.

<187> 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 산화 질화물 등의 1종 단독 또는 2종 이상의 조합을 들 수 있다. 또한, 전자 주입층을 구성하는 무기 화합물이, 미결정 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. 또한, 이러한 무기 화합물로서는, 상기 알칼리 금속 칼코게나이드, 알칼리토류 금속 칼코게나이드, 알칼리 금속의 할로젠화물 및 알칼리토류 금속의 할로젠화물 등을 들 수 있다.

<188> 또한, 본 발명에 있어서의 전자 주입층은 전술한 환원성 도펀트를 함유하고 있어도 바람직하다.

<189> 본 발명에 있어서, 유기 EL 소자의 양극은 정공을 정공 수송층 또는 발광층에 주입하는 역할을 담당하는 것으로서, 4.5eV 이상의 일함수를 갖는 것이 효과적이다. 본 발명에 사용되는 양극 재료의 구체예로서는, 산화 인듐 주석 합금(ITO), 산화 주석(NESA), 금, 은, 백금, 구리 등을 적용할 수 있다. 또한, 음극으로서, 전자 주입층 또는 발광층에 전자를 주입할 목적으로, 일함수가 작은 재료가 바람직하다. 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.

<190> 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, 상기 화학식 1 또는 2로 표시되는 화합물을 함유하는 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.

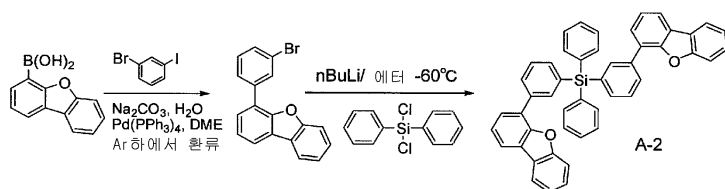
<191> 본 발명의 유기 EL 소자의 각 유기층의 막두께는 특별히 제한되지 않지만, 일반적으로 막두께가 지나치게 얇으면 핀홀 등의 결함이 생기기 쉽고, 반대로 지나치게 두꺼우면 높은 인가 전압이 필요하게 되어 효율이 나빠지기 때문에, 통상은 수 nm 내지 1 μm 의 범위가 바람직하다.

실시예

<192> 다음에, 실시예를 이용하여 본 발명을 더욱 상세하게 설명한다.

<193> 합성예 1: 화합물 A-2의 합성

<194> 하기의 합성 경로에 의해 화합물 A-2를 합성하였다.



중간체 A

<195>

<196> 4-다이벤조플란보론산 3.12g, 1-브로모-3-아이오도벤젠 4.07g, 테트라키스-트라이페닐포스핀팔라듐(0) 0.33g, 2M 탄산나트륨 수용액 25g, 다이메톡시에테인 70ml를 플라스크에 넣고, 아르곤 분위기하, 8시간 가열 환류하였다. 박층 크로마토그래프(TLC)로 반응 종료를 확인 후, 다이클로로메테인을 가하여, 물, 포화 식염수로 세정 후, 유기층을 분리하고, 황산마그네슘으로 유기층을 건조 후, 여과하고 농축하여 황색 오일상 물질을 얻었다. 컬럼 크로마토그래피로 정제 후, 4.13g의 백색 고체(수율 89%, 중간체 A)를 얻었다. 이것에 대해서, FD-MS(필드 디스orp션 매스 분석: Field Desorption Mass Spectrometry) 측정을 행한 결과를 이하에 나타낸다.

<197> FD-MS: calcd $\text{C}_{18}\text{H}_{11}\text{BrO}$ 323.18, found 323

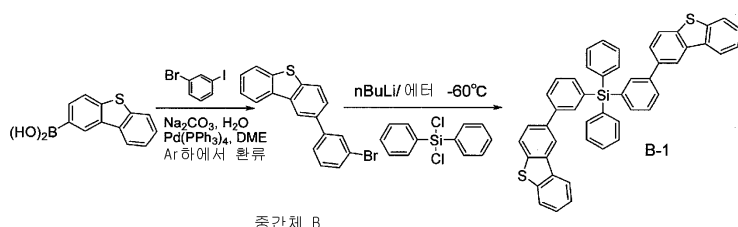
<198> 다음에, 중간체 A 전량을 플라스크에 넣고, 아르곤 분위기하, 탈수 디에틸에터 40ml, 탈수 테트라하이드로퓨란 30ml를 가하여 교반하면서 용해하고, MeOH-드라이아이스 욕조에서 -60℃로 냉각하고, 거기에 1.6M 노말 부틸리튬헥세인 용액 10ml를 시린지로 적하하였다. 15분 교반 후, 다이클로로다이페닐실레인 1.35ml를 탈수 테트라하이드로퓨란 10ml에 녹인 용액을 적하하였다. 5℃까지 승온 후 TLC로 반응 종료를 확인하고 포화 염화암모늄 수용액을 가하여 반응을 종료하였다. 다이클로로메테인을 가하여, 물, 포화 식염수로 세정 후, 유기층을 분리하고, 황산마그네슘으로 용액을 건조 후, 여과하고 농축하여 무색 오일상 물질을 얻었다. 컬럼 크로마토그래피로 정제 후, 백색 고체를 얻었다. 이것을 헥세인으로 재차 세정, 건조하여 화합물 A-2 2.42g(수율 56%)을 얻었다. 이것에 대해서, FD-MS 측정을 행한 결과를 이하에 나타낸다.

<199> FD-MS: calcd $C_{48}H_{32}O_2Si$ 668.85, found 668

<200> 얻어진 화합물 A-2는 320℃, 1.3×10^{-3} Torr에서 승화 정제하여 증착에 이용하였다. 고속 액체 크로마토그래피(HPLC) 순도는 99.5%이었다.

<201> 합성예 2: 화합물 B-1의 합성

<202> 하기의 합성 경로에 의해 화합물 B-1을 합성하였다.



<203>

<204> 2-다이벤조사이오펜보론산 3.3g, 1-브로모-3-아이오도벤젠 4.0g, 테트라키스트라이페닐포스핀팔라듐(0) 0.31g, 2M 탄산나트륨 수용액 25ml, 다이메톡시에테인 70ml를 플라스크에 넣고, 아르곤 분위기하, 9시간 가열 환류하였다. TLC로 반응 종료를 확인 후, 다이클로로메테인을 가하여, 물, 포화 식염수로 세정 후, 유기층을 분리하고, 황산마그네슘으로 유기층을 건조 후, 여과하고 농축하여 황색 오일상 물질을 얻었다. 컬럼 크로마토그래피로 정제 후, 3.96g의 백색 고체(수율 83%, 중간체 B)를 얻었다. 이것에 대해서, FD-MS 측정을 행한 결과를 이하에 나타낸다.

<205> FD-MS: calcd $C_{18}H_{11}BrS$ 339.25, found 339

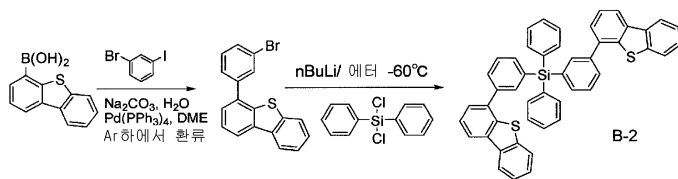
<206> 중간체 B 3.96g을 플라스크에 넣고, 아르곤 분위기하, 탈수 테트라하이드로퓨란 40ml를 가하여 교반하면서 용해하고, MeOH-드라이아이스 욕조에서 -70℃로 냉각하고, 거기에 1.6M 노말 부틸리튬헥세인 용액 8ml를 시린지로 적하하였다. 15분 교반 후, 다이클로로다이페닐실레인 1.35ml를 탈수 테트라하이드로퓨란 10ml에 녹인 용액을 적하하였다. 5℃까지 승온 후 TLC로 반응 종료를 확인하고 포화 염화암모늄 수용액을 가하여 반응을 종료하였다. 다이클로로메테인을 가하여, 물, 포화 식염수로 세정 후, 유기층을 분리하고, 황산마그네슘으로 용액을 건조 후, 여과하고 농축하여 무색 오일상 물질을 얻었다. 컬럼 크로마토그래피로 정제 후, 백색 고체를 얻었다. 이것을 헥세인으로 3회 세정, 건조하여 화합물 B-1 2.49g(수율 68%)을 얻었다. 이것에 대해서, FD-MS 측정을 행한 결과를 이하에 나타낸다.

<207> FD-MS: calcd $C_{48}H_{32}S_2Si$ 700.98, found 700

<208> 얻어진 화합물 B-1은 310℃, 5.0×10^{-6} Torr에서 승화 정제하여 증착에 이용하였다. HPLC 순도는 99.3%이었다.

<209> 합성예 3: 화합물 B-2의 합성

<210> 하기의 합성 경로에 의해 화합물 B-2를 합성하였다.



중간체 C

<211>

<212> 4-다이벤조싸이오오펜보론산 3.3g, 1-브로모-3-아이오도벤젠 4.0g, 테트라키스트라이페닐포스핀팔라듐(0) 0.31g, 2M 탄산나트륨 수용액 25ml, 다이메톡시에테인 70ml를 플라스크에 넣고, 아르곤 분위기 하, 9시간 가열 환류하였다. TLC로 반응 종료를 확인 후, 다이클로로메테인을 가하여, 물, 포화 식염수로 세정 후, 유기층을 분리하고, 황산마그네슘으로 유기층을 건조 후, 여과하고 농축하여 황색 오일상 물질을 얻었다. 컬럼 크로마토그래피로 정제 후, 4.2g의 백색 고체(수율 88%, 중간체 C)를 얻었다. 이것에 대해서, FD-MS 측정을 행한 결과를 이하에 나타낸다.

<213> FD-MS: calcd $C_{18}H_{11}BrS$ 339.25, found 339

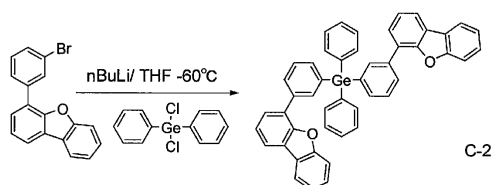
<214> 중간체 C 4.0g을 플라스크에 넣고, 아르곤 분위기하, 탈수 테트라하이드로퓨란 40ml를 가하여 교반하면서 용해하고, MeOH-드라이아이스 욕조에서 $-70^{\circ}C$ 로 냉각하고, 거기에 1.6M 노말 부틸리튬헥세인 용액 8ml를 시린지로 적하하였다. 15분 교반 후, 다이클로로다이페닐실레인 1.4ml를 탈수 테트라하이드로퓨란 10ml에 녹인 용액을 적하하였다. $5^{\circ}C$ 까지 승온 후 TLC로 반응 종료를 확인하고 포화 염화암모늄 수용액을 가하여 반응을 종료하였다. 다이클로로메테인을 가하여, 물, 포화 식염수로 세정 후, 유기층을 분리하고, 황산마그네슘으로 용액을 건조 후, 여과하고 농축하여 무색 오일상 물질을 얻었다. 컬럼 크로마토그래피로 정제 후, 백색 고체를 얻었다. 이것을 헥세인으로 3회 세정, 건조하여 화합물 B-2 2.52g(수율 69%)을 얻었다. 이것에 대해서, FD-MS 측정을 행한 결과를 이하에 나타낸다.

<215> FD-MS: calcd $C_{48}H_{32}S_2Si$ 700.98, found 700

<216> 얻어진 화합물 B-2는 $310^{\circ}C$, 5.5×10^{-6} Torr에서 승화 정제하여 증착에 이용하였다. HPLC 순도는 99.3%이었다.

<217> 합성예 4: C-2의 합성

<218> 하기의 합성 경로에 의해 화합물 C-2를 합성하였다.



C-2

중간체 A

<219>

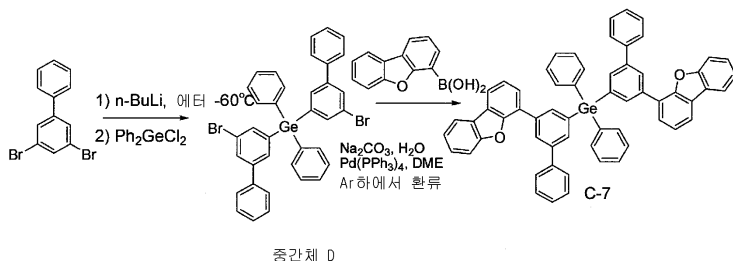
<220> 중간체 A 2.48g을 플라스크에 넣고, 아르곤 분위기하, 탈수 테트라하이드로퓨란 30ml를 가하여 교반하면서 용해하고, MeOH-드라이아이스 욕조에서 $-60^{\circ}C$ 로 냉각하고, 거기에 1.6M 노말 부틸리튬헥세인 용액 5ml를 시린지로 적하하였다. 15분 교반 후, 다이페닐다이클로로저만 1.0g을 탈수 테트라하이드로퓨란 13ml에 녹인 용액을 적하하였다. $5^{\circ}C$ 까지 승온 후 TLC로 반응 종료를 확인하고 포화 염화암모늄 수용액을 가하여 반응을 종료하였다. 다이클로로메테인을 가하여, 물, 포화 식염수로 세정 후, 유기층을 분리하고, 황산마그네슘으로 용액을 건조 후, 여과하고 농축하여 무색 오일상 물질을 얻었다. 컬럼 크로마토그래피로 정제 후, 백색 고체를 얻었다. 이것을 헥세인으로 재차 세정, 건조하여 화합물 C-2 1.61g(수율 67%)을 얻었다. 이것에 대해서, FD-MS 측정을 행한 결과를 이하에 나타낸다.

<221> FD-MS: calcd $C_{48}H_{32}O_2Ge$ 713.41, found 713

<222> 얻어진 화합물 C-2는 $340^{\circ}C$, 1.9×10^{-3} Torr에서 승화 정제하여 증착에 이용하였다. HPLC 순도는 99.7%이었다.

합성예 5: 화합물 C-7의 합성

하기의 합성 경로에 의해 화합물 C-7을 합성하였다.



3,5-다이브로모바이페닐 3.08g을 플라스크에 넣고, 아르곤 분위기하, 탈수 다이에틸에터 40ml를 가하여 교반하면서 용해하고, MeOH-드라이아이스 욕조에서 -60℃로 냉각하고, 거기에 1.6M 노말 부틸리튬헥세인 용액 6.2ml를 시린지로 적하하였다. -10℃까지 승온한 후, -40℃로 냉각하여 다이페닐다이클로로저만 1.36g을 탈수 다이에틸에터 10ml에 녹인 용액을 적하하였다. -10℃까지 승온 후 TLC로 반응 종료를 확인하고 포화 염화암모늄 수용액을 가하여 반응을 종료하였다. 다이클로로메테인을 가하여, 물로 세정 후, 유기층을 분리하고, 황산마그네슘으로 용액을 건조 후, 여과하고 농축하여 황색 오일상 물질을 얻었다. 컬럼 크로마토그래피로 정제 후, 백색 고체를 얻었다. 이것을 헥세인으로 재차 세정, 건조하여 중간체 D 2.85g(수율 90%)을 얻었다. 이것에 대해서, FD-MS 측정을 행한 결과를 이하에 나타낸다.

FD-MS: calcd $C_{36}H_{26}Br_2Ge$ 691.01, found 691

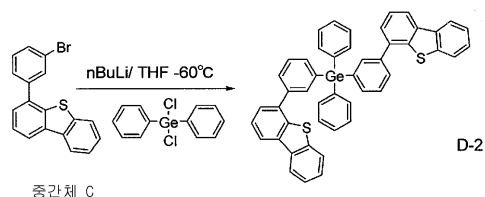
중간체 D 전량 2.85g, 4-다이벤조퓨란보론산 1.85g, 테트라키스-트라이페닐포스핀팔라듐(0) 0.19g, 2M 탄산나트륨 수용액 19g, 다이메톡시에테인 50ml를 플라스크에 넣고, 아르곤 분위기하, 9시간 가열 환류하였다. TLC로 반응 종료를 확인 후, 다이클로로메테인을 가하여, 물, 포화 식염수로 세정 후, 유기층을 분리하고, 황산마그네슘으로 유기층을 건조 후, 여과하고 농축하여 주황색 오일상 물질을 얻었다. 컬럼 크로마토그래피로 정제 후, 2.86g의 백색 고체로서 화합물 C-7(수율 80%)을 얻었다. 이것에 대해서, FD-MS 측정을 행한 결과를 이하에 나타낸다.

FD-MS: calcd $C_{60}H_{40}GeO_2$ 865.60, found 865

얻어진 화합물 C-7은 360℃, 3.7×10^{-6} Torr에서 승화 정제하여 증착에 이용하였다. HPLC 순도는 99.1%이었다.

합성예 6: 화합물 D-2의 합성

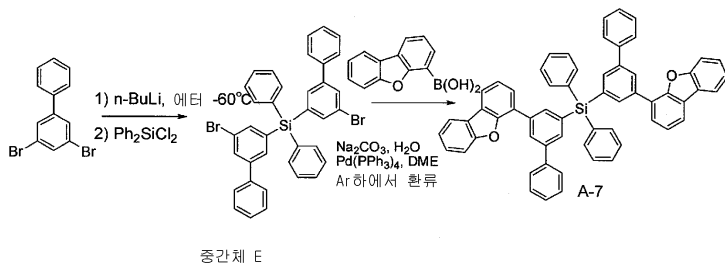
하기의 합성 경로에 의해 화합물 D-2를 합성하였다.



중간체 C 2.57g을 플라스크에 넣고, 아르곤 분위기하, 탈수 테트라하이드로퓨란 30ml를 가하여 교반하면서 용해하고, MeOH-드라이아이스 욕조에서 -70℃로 냉각하고, 거기에 1.6M 노말부틸리튬헥세인산액 5ml를 시린지로 적하하였다. 15분 교반 후, 다이클로로다이페닐저만 1.0g을 탈수 테트라하이드로퓨란 15ml에 녹인 용액을 적하하였다. -12℃까지 승온 후 TLC로 반응 종료를 확인하고 포화 염화암모늄 수용액을 가하여 반응을 종료하였다. 다이클로로메테인을 가하여, 물로 세정후, 유기층을 분리하고, 황산마그네슘으로 용액을 건조 후, 여과하고 농축하여 담황색 오일상 물질을 얻었다. 컬럼 크로마토그래피로 정제 후, 백색 고체를 얻었다. 이것을 헥세인으로 2회 세정, 건조하여 화합물 D-2 1.97g(수율 79%)을 얻었다. 이것에 대해서, FD-MS 측정을 행한 결과를 이하에 나타낸다.

FD-MS: calcd $C_{48}H_{32}S_2Ge$ 745.54, found 745

- <236> 얻어진 화합물 D-2는 320℃, 7.7×10^{-6} Torr에서 승화 정제하여 증착에 이용하였다. HPLC 순도는 99.8%이었다.
- <237> 합성에 7: 화합물 A-7의 합성
- <238> 하기의 합성 경로에 의해 화합물 A-7을 합성하였다.



- <239>
- <240> 3,5-다이브로모바이페닐 3.0g을 플라스크에 넣고, 아르곤 분위기하, 탈수 다이에틸에터 40ml를 가하여 교반하면서 용해하고, MeOH-드라이아이스 욕조에서 -70℃로 냉각하고, 거기에 1.6M 노말 부틸리튬헥세인 용액 6.0ml를 시린지로 적하하였다. -10℃까지 승온한 후, -40℃로 냉각하여 바이페닐다이클로로실레인 0.92g을 탈수 다이에틸에터 10ml에 녹인 용액을 적하하였다. 0℃까지 승온 후 TLC로 반응 종료를 확인하고 포화 염화암모늄 수용액을 가하여 반응을 종료하였다. 다이클로로메테인을 가하여, 물로 세정 후, 유기층을 분리하고, 황산마그네슘으로 용액을 건조 후, 여과하고 농축하여 황색 오일상 물질을 얻었다. 컬럼 크로마토그래피로 정제 후, 백색 고체를 얻었다. 이것을 헥세인으로 재차 세정, 건조하여 중간체 E 1.64g(수율 58%)을 얻었다. 이것에 대해서, FD-MS 측정을 행한 결과를 이하에 나타낸다.

<241> FD-MS: calcd $C_{36}H_{26}Br_2Si$ 646.46, found 646

- <242> 중간체 E 전량 1.64g, 4-다이벤조퓨란보론산 1.07g, 테트라키스-트라이페닐포스핀팔라듐(0) 0.12g, 2M 탄산나트륨 수용액 10g, 다이메톡시에테인 40ml를 플라스크에 넣고, 아르곤 분위기하, 8시간 가열 환류하였다. TLC로 반응 종료를 확인 후, 다이클로로메테인을 가하여, 물, 포화 식염수로 세정 후, 유기층을 분리하고, 황산마그네슘으로 유기층을 건조 후, 여과하고 농축하여 황색 오일상 물질을 얻었다. 컬럼 크로마토그래피로 정제 후, 1.87g의 백색 고체 A-7(수율 90%)을 얻었다. 이것에 대해서, FD-MS 측정을 행한 결과를 이하에 나타낸다.

<243> FD-MS: calcd $C_{60}H_{40}SiO_2$ 821.04, found 821

- <244> 화합물 A-7은 350℃, 6.1×10^{-6} Torr에서 승화 정제하여 증착에 이용하였다. HPLC 순도는 99.3%이었다.

<245> 또한, 합성 실시예 1 내지 7에 있어서 FD-MS의 측정에 이용한 장치 및 측정 조건을 이하에 나타낸다.

<246> <FD-MS 측정>

<247> 장치: HX110(일본전자사 제품)

<248> 조건: 가속 전압 8kV

<249> 스캔 범위 m/z=50 내지 1500

<250> 에미터 종류: 카본

<251> 에미터 전류: 0mA→2mA/분→40mA(10분 유지)

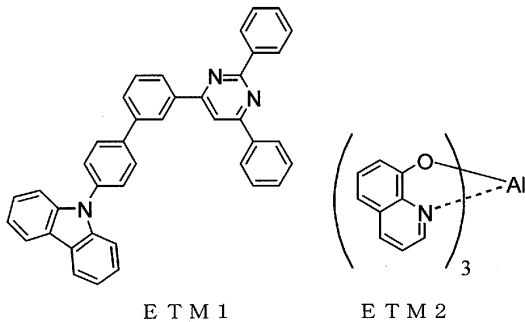
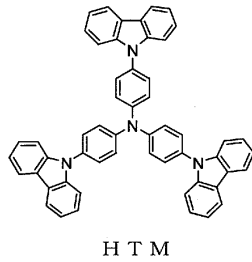
<252> 실시예 1(유기 EL 소자의 제작)

<253> 25mm×75mm×1.1mm 두께의 ITO 투명 전극 부착 유리 기판(지오마텍사 제품)을 아이소프로필알코올 내에서 초음파 세정을 5분간 행한 후, UV 오존 세정을 30분간 행하였다. 세정 후의 투명 전극 라인 부착 유리 기판을 진공 증착 장치의 기판 홀더에 장착하고, 먼저 투명 전극 라인이 형성되어 있는 측의 면 위에, 상기 투명 전극을 덮도록 하여 막두께 95nm의 하기 재료 HTM을 성막하였다. 이 HTM막은 정공 주입 수송층으로서 기능한다. 또한, 정공 주입 수송층 위에 막두께 30nm로, 호스트 재료로서 합성에 1에서 얻어진 화합물 A-2와 상기 착체 K-1을 저항 가열에 의해 공증착 성막하였다. 착체 K-1의 농도는 7중량%이었다. 이 막은 발광층으로서 기능한다. 이 발광층 위에 계속해서, 하기 재료 ETM1을 막두께 25nm로, 또한 이 ETM1의 위에 하기 재료 ETM2를 막두께 5nm로

적층 성막하였다. 이 ETM1층, ETM2층은 각각 전자 수송층, 전자 주입층으로서 기능한다. 이 후, LiF를 전자 주입성 전극(음극)으로서 성막 속도 1Å/min으로 막두께 1nm로 형성하였다. 이 LiF층 위에 금속 Al을 증착시켜, 금속 음극을 막두께 150nm로 형성하여 유기 EL 소자를 제작하였다.

<254> (유기 EL 소자의 발광 성능 평가)

<255> 이상과 같이 제작한 유기 EL 소자를 직류 전류 구동에 의해 발광시켜서 통전 시험을 행하고, 발광 파장(λ), 휘도(L), 전류 밀도(J)를 측정하여, 전류 효율(L/J)을 구하였다. 그 결과를 표 1에 나타낸다. 또한, 수명에 대해서, 초기 휘도 1500cd/m^2 가 반감하는 시간을 측정하고, 비교예 1을 100으로 한 상대값으로 표 1에 나타낸다.



<256> 실시예 2 내지 7

<258> 실시예 1에 있어서, 호스트 재료로서 화합물 A-2 대신에 표 1에 기재한 합성예 2 내지 7에서 얻어진 호스트 재료를 이용한 것 이외는 마찬가지로 하여 유기 EL 소자를 제작하였다. 얻어진 각각의 유기 EL 소자에 대해서, 실시예 1과 마찬가지로 하여 통전 시험 및 수명 측정을 행하였다. 그들의 결과를 표 1에 나타낸다.

<259> 비교예 1 내지 4

<260> 실시예 1에 있어서, 호스트 재료로서 화합물 A-2 대신에, 국제 공개 WO 2004/095598호 공보, 일본 특허공개 2005-310672호 공보, 일본 특허공개 2005-306864호 공보 및 일본 특허공개 2005-317275호 공보에 각각 기재되어 있는 하기 비교 화합물 1 내지 4를 이용한 것 이외는 마찬가지로 하여 유기 EL 소자를 제작하였다. 얻어진 각각의 유기 EL 소자에 대해서, 실시예 1과 마찬가지로 하여 통전 시험 및 수명 측정을 행하였다. 그들의 결과를 표 1에 나타낸다.

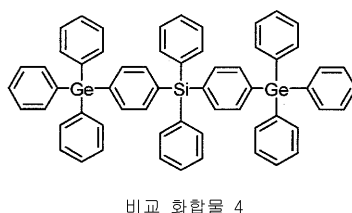
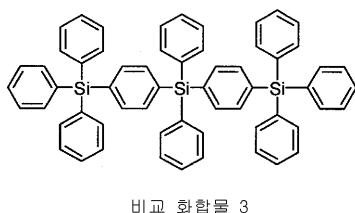
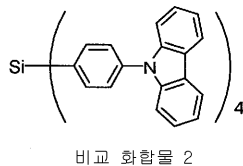
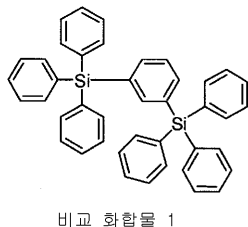


표 1

실시예	호스트 재료	휘도(cd/m ²)	전압(V)	전류 효율(cd/A)	발광 파장(nm)	수명
실시예 1	A-2	112	6.4	28	483	261
실시예 2	B-1	100	6.0	32	484	268
실시예 3	B-2	102	5.8	29	483	327
실시예 4	C-2	108	6.0	35	484	251
실시예 5	C-7	110	6.4	38	483	330
실시예 6	D-2	102	6.2	35	484	292
실시예 7	A-7	110	6.4	32	484	284
비교예 1	비교 화합물 1	98	7.0	20	484	100
비교예 2	비교 화합물 2	102	6.4	24	484	147
비교예 3	비교 화합물 3	104	6.9	22	484	94
비교예 4	비교 화합물 4	100	7.0	21	484	67

표 1에 나타난 바와 같이, 실시예에서 이용한 호스트 재료에 비해서 비교예에서 이용한 호스트 재료 모두 전류 효율이 낮은 값을 나타내고 있고, 전압도 높고, 수명도 짧았다.

산업상 이용 가능성

이상 상세하게 설명한 바와 같이, 본 발명의 화학식 1 또는 2로 표시되는 화합물로 이루어지는 유기 EL 소자용 재료를 이용하면, 발광 효율이 높고, 화소 결함이 없고, 내열성이 우수하며, 또한 수명이 긴 유기 EL 소자를 얻을 수 있다.

이 때문에, 본 발명의 유기 EL 소자는 각종 전자 기기의 광원 등으로서 매우 유용하다.

专利名称(译)	有机电致发光器件材料和使用其的有机电致发光器件		
公开(公告)号	KR1020090016684A	公开(公告)日	2009-02-17
申请号	KR1020087029398	申请日	2007-05-29
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	IWAKUMA TOSHIHIRO 이와쿠마도시히로 MATSUURA MASAHIDE 마츠우라마사히데 NAKANO YUKI 나카노유키 IKEDA HIDETSUGU 이케다히데츠구		
发明人	이와쿠마도시히로 마츠우라마사히데 나카노유키 이케다히데츠구		
IPC分类号	C09K11/06 H05B33/14 H01L51/54		
CPC分类号	C07F7/0812 H01L51/5012 C09K2211/1029 H01L51/0061 H01L51/0072 H01L51/0077 C07F7/30 C09K11/06 C09K2211/185 H01L51/0085 C09K2211/1007 H05B33/14 H01L51/0074 H01L51/0073 H01L51/5036 H01L51/0094 H01L2251/308 C09K2211/1044 H01L51/0081		
优先权	2006154305 2006-06-02 JP		
外部链接	Espacenet		

摘要(译)

有机电致发光器件的材料实现至少具有其中没有像素缺陷的耐热性的有机电致发光器件的发光层高，在由该化合物组成的有机电致发光器件之间提供优异的寿命。含有具有特定结构的杂原子的阳极和阴极。

