

(19)대한민국특허청(KR)
(12) 공개특허공보(A)

(51) 。 Int. Cl.⁷
C09K 11/06
H05B 33/14

(11) 공개번호 10-2005-0100694
(43) 공개일자 2005년10월19일

(21) 출원번호 10-2005-7015231
(22) 출원일자 2005년08월18일
 번역문 제출일자 2005년08월18일
(86) 국제출원번호 PCT/JP2004/001796
 국제출원일자 2004년02월18일

(87) 국제공개번호 WO 2004/074399
 국제공개일자 2004년09월02일

(30) 우선권주장 JP-P-2003-00042625 2003년02월20일 일본(JP)
JP-P-2003-00387855 2003년11월18일 일본(JP)

(71) 출원인 이데미쓰 고산 가부시키가이샤
일본 도쿄도 지요다쿠 마루노우치 3초메 1반 1고

(72) 발명자 도미타 세이지
일본 299-0293 치바켄 소데가우라시 가미이즈미 1280반치
이와쿠마 도시히로
일본 299-0293 치바켄 소데가우라시 가미이즈미 1280반치
아라카네 다카시
일본 299-0293 치바켄 소데가우라시 가미이즈미 1280반치
야마미치 게이코
일본 299-0293 치바켄 소데가우라시 가미이즈미 1280반치
호소카와 치시오
일본 299-0293 치바켄 소데가우라시 가미이즈미 1280반치

(74) 대리인 김창세

심사청구 : 없음

(54) 유기 전기발광 소자용 재료 및 그를 이용한 유기 전기발광소자

요약

대칭성이 낮은 특정 구조의 화합물로 이루어진 유기 전기 발광소자용 재료, 및 음극과 양극 사이에 적어도 발광층을 갖는 1층 또는 복수층으로 이루어진 유기 박막층이 협지되어 있는 유기 전기발광 소자에 있어서, 상기 유기 박막층의 적어도 1층이 상기 유기 전기 발광소자용 재료를 함유하는 유기 전기발광 소자로서, 발광 효율이 높고, 화소 결함이 없고, 내열성이 우수한 유기 전기발광 소자를 제공 가능한 유기 전기 발광소자용 재료 및 그것을 이용한 유기 전기 발광소자를 제공한다.

명세서

기술분야

본 발명은, 유기 전기발광 소자용 재료 및 그것을 이용한 유기 전기발광 소자(유기 EL 소자)에 관한 것이고, 특히, 발광 효율이 높고, 화소 결함이 없으며, 내열성이 우수한 유기 EL 소자용 재료 및 유기 EL 소자에 관한 것이다.

배경기술

유기 EL 소자는, 전계를 인가하는 것에 의해, 양극으로부터 주입된 정공과 음극으로부터 주입된 전자의 재결합 에너지에 의해 형광성 물질이 발광하는 원리를 이용한 자발광 소자이다. 이스트만 코닥사의 탕(C. W. Tang) 등에 의해 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 열심히 실시되고 있다. 탕 등은, 트리스(8-하이드록시퀴놀린올알루미늄)을 발광층에, 트라이페닐다이아민 유도체를 정공 수송층에 이용하고 있다. 적층 구조의 이점으로서, 발광층에의 정공의 주입 효율을 높이는 것, 음극으로부터 주입된 전자를 블록하여 재결합에 의해 생성하는 여기자의 생성 효율을 높이는 것, 발광층내에서 생성한 여기자를 가두는 것 등을 들 수 있다. 이 예와 같은 유기 EL 소자의 소자구조로서는, 정공 수송(주입)층, 전자 수송발광층의 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.

유기 EL 소자의 발광 재료로서는 트리스(8-퀴놀린올라토)알루미늄 착체 등의 킬레이트 착체, 쿠마린 유도체, 테트라페닐부타다이엔 유도체, 다이스티릴아릴렌 유도체, 옥사다이아졸 유도체 등의 발광 재료가 알려져 있고, 그들로부터는 청색으로부터 적색까지의 가시 영역의 발광이 얻어지는 것이 보고되어 있어, 컬러 표시 소자의 실현이 기대되고 있다(예컨대, 일본 특허 공개 제 1996-239655호 공보, 일본 특허 공개 제 1995-138561호 공보, 일본 특허 공개 제 1991-200289호 공보 등 참조).

또한, 최근, 유기 EL 소자의 발광층에, 발광 재료 이외에 유기 인광 재료를 이용하는 것도 제안되어 있다(예컨대, D. F. O'Brien and M. A. Baldo et al "Improved energy transfer in electrophosphorescent devices" Applied Physics letters Vol. 74 No. 3, pp 442-444, January 18, 1999; M. A. Baldo et al "Very high-efficiency green organic light-emitting devices based on electrophosphorescence" Applied Physics letters Vol. 75 No. 1, pp 4-6, July 5, 1999 참조).

이와 같이 유기 EL 소자의 발광층에 있어서, 유기 인광 재료의 여기 상태의 1중항 상태와 3중항 상태를 이용함으로써 높은 발광 효율이 달성되고 있다. 유기 EL 소자 내에서 전자와 정공이 재결합하는 때는 스핀 다중도의 차이 때문에 1중항 여기자와 3중항 여기자가 3:1의 비율로 생성된다고 생각되기 때문에, 인광성의 발광 재료를 이용하면 형광만을 사용한 소자의 3 내지 4배의 발광 효율의 달성이 기대된다.

이러한 유기 EL 소자에 있어서는, 3중항의 여기 상태 또는 3중항의 여기자가 소광하지 않도록 순차적으로, 양극, 정공 수송층, 유기 발광층, 전자 수송층(정공 저지층), 전자 주입층, 음극과 같이 층을 적층하는 구성이 사용되고, 유기 발광층에 호스트 화합물과 인광 발광성의 화합물이 사용되어 왔다(예컨대, 미국 특허 제6,097,147호 명세서, 국제공개 WO 01/41512호 공보 참조). 이들 특허문헌에서는, 호스트 화합물로서 4,4-N,N-다이카바졸바이페닐이 사용되었지만, 이 화합물은 유리 전이 온도가 110℃ 이하이며, 또한 대칭성이 지나치게 좋기 때문에, 결정화하기 쉽고, 또한, 소자의 내열 시험을 행한 경우, 단락이나 화소 결함이 생긴다는 문제가 있었다.

또한, 증착시에, 이물질이나 전극의 돌기가 존재하는 개소 등에서 결정 성장이 생겨, 내열 시험전의 초기의 상태부터 결함이 생기는 것도 발견되었다. 또한, 3회(order 3) 대칭성을 보유하는 카바졸 유도체도 호스트로서 사용되고 있다. 그러나 대칭성이 좋기 때문에, 증착시에 이물질이나 전극의 돌기가 존재하는 개소 등에서 결정 성장이 생겨, 내열 시험전의 초기의 상태부터 결함이 생기는 것은 면하지 못했다.

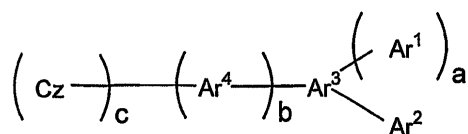
발명의 요약

본 발명은, 상기 과제를 해결하기 위해 이루어진 것으로, 발광 효율이 높고, 화소 결함이 없으며, 내열성이 우수한 유기 EL 소자용 재료 및 그것을 이용한 유기 EL 소자를 제공하는 것을 목적으로 한다.

본 발명자들은 상기 과제를 해결하기 위해 예의 검토한 결과, 대칭성이 낮은 화합물을 유기 EL 소자용 재료로서 이용하는 것에 의해, 상기 목적을 달성하는 것을 발견하여 본 발명을 해결하기에 이르렀다.

즉, 본 발명은, 하기 화학식 1로 표시되는 화합물로 이루어지는 유기 EL 소자용 재료를 제공하는 것이다.

화학식 1



(식 중, Cz는 카바졸릴기, 탄소수 18 내지 60의 아릴카바졸릴기, 아자카바졸릴기, 탄소수 18 내지 60의 아릴아자카바졸릴기, 아크리딘릴기, 페녹사진일기 또는 다이벤조아제핀릴기이며 치환될 수 있다. Ar¹ 및 Ar²는 각각 독립적으로 치환 또는 비치환의 탄소수 6 내지 60의 아릴기 또는 치환 또는 비치환의 탄소수 3 내지 60의 헤테로환기이다. Ar³은 탄소수 6 내지 60의 방향족 탄화수소기 또는 치환 또는 비치환의 탄소수 3 내지 60의 헤테로환기이다. Ar⁴는 치환 또는 비치환의 벤젠 잔기, 치환 또는 비치환의 티오펜 잔기, 치환 또는 비치환의 트리아졸 잔기, 치환 또는 비치환의 플루오렌 잔기 또는 치환 또는 비치환의 스파이로바이플루오렌 잔기이다.

a는 0 내지 1의 정수, b는 0 내지 4의 정수, c는 1 내지 3의 정수이며, Cz 및 Ar⁴는 복수일 경우 각각 서로 동일하거나 상이할 수 있다.

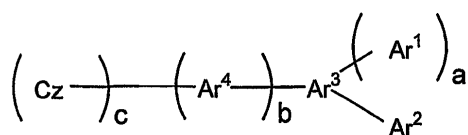
단, a= 0이고 c=1일 때는, Ar³ 및 Ar⁴가 벤젠 잔기이고 Ar²가 페닐카바졸릴기 또는 카바졸릴기인 경우를 제외한다. 또한, a=1, b= 0 및 c=1일 때는, Ar³이 벤젠 잔기이고 Ar¹ 및 Ar²가 페닐카바졸릴기인 경우를 제외한다. 또한, b= 0이고 c= 1일 때는, Ar³이 벤젠 잔기이고, Ar¹, Ar² 및 Cz가 카바졸릴기 또는 페닐카바졸릴기인 경우를 제외한다.)

또한, 본 발명은, 음극과 양극사이에 적어도 발광층을 갖는 1층 또는 복수층으로 이루어진 유기 박막층이 형성되어 있는 유기 EL 소자에 있어서, 상기 유기 박막층의 적어도 1층이 상기 화학식 1로 표시되는 화합물로 이루어진 유기 EL 소자용 재료를 함유하는 유기 EL 소자를 제공하는 것이다.

발명의 상세한 설명

본 발명의 유기 EL 소자용 재료는, 하기 화학식 1로 표시되는 화합물로 이루어진다.

화학식 1



화학식 1에 있어서, Cz는 카바졸릴기, 탄소수 18 내지 60 아릴카바졸릴기, 아자카바졸릴기, 탄소수 18 내지 60의 아릴아자카바졸릴기, 아크리딘릴기, 페녹사진일기 또는 다이벤조아제핀릴기이며 치환되어 있더라도 좋다.

상기 아릴카바졸릴기 및 아릴아자카바졸릴기에 있어서 아릴 부위로서는, 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-바이페닐릴기, 3-바이페닐릴기, 4-바이페닐릴기, 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-부틸페닐기, p-(2-페닐프로필)페닐기, 3-메틸-2-나프틸기, 4-메틸-1-나프틸기, 4-메틸-1-안트릴기, 4'-메틸바이페닐릴기, 4"-t-부틸-p-터페닐-4-일기 등을 들 수 있고, 페닐기, 바이페닐기, 톨릴기, 아이소프로필페닐기, t-부틸페닐기 등이 바람직하다.

화학식 1에 있어서, Ar^1 및 Ar^2 는 각각 독립적으로 치환 또는 비치환의 탄소수 6 내지 60의 아릴기 또는 치환 또는 비치환의 탄소수 3 내지 60의 헤테로환기이며, 치환 또는 비치환의 탄소수 6 내지 20의 아릴기 또는 치환 또는 비치환의 탄소수 3 내지 20의 헤테로환기가 바람직하고, 페닐기, 바이페닐기, 나프틸기, 페난트릴기, 피리딘기, 피리미딘기, 트리아진일기가 더 바람직하다.

상기 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-바이페닐릴기, 3-바이페닐릴기, 4-바이페닐릴기, 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-부틸페닐기, p-(2-페닐프로필)페닐기, 3-메틸-2-나프틸기, 4-메틸-1-나프틸기, 4-메틸-1-안트릴기, 4'-메틸바이페닐릴기, 4"-t-부틸-p-터페닐-4-일기 등을 들 수 있고, 페닐기, 나프틸기, 피렌일기, 바이페닐기, 터페닐기, 톨릴기, 아이소프로필페닐기 등이 바람직하다.

상기 헤테로환기로서는, 예컨대, 1-피롤릴기, 2-피롤릴기, 3-피롤릴기, 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, 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, 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-페노티아진일기, 2-페노티아진일기, 3-페노티아진일기, 4-페노티아진일기, 10-페노티아진일기, 1-페녹사진일기, 2-페녹사진일기, 3-페녹사진일기, 4-페녹사진일기, 10-페녹사진일기, 2-옥사졸릴기, 4-옥사졸릴기, 5-옥사졸릴기, 2-옥사다이아졸릴기, 5-옥사다이아졸릴기, 3-퓨라잔일기, 2-티엔일기, 3-티엔일기, 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-부틸피롤-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-부틸-1-인돌릴기, 4-t-부틸-1-인돌릴기, 2-t-부틸-3-인돌릴기, 4-t-부틸-3-인돌릴기, 아릴카바졸릴기, 아자카바졸릴기, 아릴아자카바졸릴기, 페녹사진일기, 다이벤조아제핀일기 등을 들 수 있고, 카바졸릴기, 아릴카바졸릴기, 아자카바졸릴기, 아릴아자카바졸릴기, 아크리딘일기, 페녹사진일기, 다이벤조아제핀일기, 벤조이미다졸기, 벤조티아졸기, 벤조-N-알릴이미다졸기 등이 바람직하다.

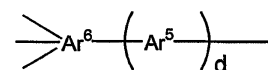
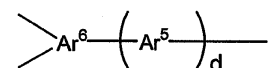
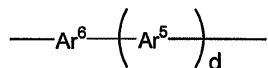
화학식 1에 있어서, Ar^3 은 탄소수 6 내지 60의 방향족 탄화수소기 또는 치환 또는 비치환의 탄소수 3 내지 60의 헤테로환기이며, 치환 또는 비치환의 탄소수 6 내지 20의 방향족 탄화수소기 또는 치환 또는 비치환의 탄소수 3 내지 20의 헤테로환기가 바람직하고, 벤젠, 바이페닐, 나프탈렌, 페난트렌, 피리딘, 피리미딘, 트리아진의 잔기가 더 바람직하고, 벤젠 잔기가 가장 바람직하다.

방향족 탄화수소기의 구체예로서는, 상기 Ar^1 및 Ar^2 의 아릴기의 구체예로부터 수소를 제외하여 2가 또는 3가로 한 것들을 들 수 있고, 바람직한 예도 같다.

헤테로환기의 예로서는, 상기 Ar^1 및 Ar^2 의 헤테로환기의 구체예로부터 수소를 제외하여 2가 또는 3가로 한 것을 들 수 있고, 바람직한 예도 같다.

화학식 1에 있어서, Ar^4 는 치환 또는 비치환의 벤젠 잔기, 치환 또는 비치환의 티오펜 잔기, 치환 또는 비치환의 트리아아졸 잔기, 치환 또는 비치환의 플루오렌 잔기 또는 치환 또는 비치환의 스파이로바이플루오렌 잔기이다. 한편, 플루오렌 잔기, 티오펜 잔기, 스파이로바이플루오렌 잔기가 복수의 치환기를 갖는 경우에는, 그 치환기끼리가 결합하여 환구조를 형성하고 있더라도 좋다.

또한, $-(Ar^4)_b$ -로서는, 하기의 구조를 들 수 있다.



(식 중, Ar^5 및 Ar^6 은 각각 독립적으로 Ar^4 와 같으며, d는 0 내지 3의 정수이다. Ar^5 는 복수일 경우 서로 동일하거나 상이할 수 있다.)

화학식 1에 있어서, a는 0 내지 1의 정수, b는 0 내지 4의 정수, c는 1 내지 3의 정수이고, Cz 및 Ar^4 는 복수일 경우 각각 서로 동일하거나 상이할 수 있다.

단, 화학식 1에 있어서, a= 0이고 c=1일 때는, Ar^3 및 Ar^4 가 벤젠 잔기이고 Ar^2 가 페닐카바졸릴기 또는 카바졸릴기인 경우를 제외한다. 또한, a=1이고, b=0이고 c=1일 때는, Ar^3 이 벤젠 잔기이고 Ar^1 및 Ar^2 가 페닐카바졸릴기인 경우를 제외한다. 또한, b=0이고 c=1일 때는, Ar^3 이 벤젠 잔기이고 Ar^1 , Ar^2 및 Cz가 카바졸릴기 또는 페닐카바졸릴기인 경우를 제외한다.

화학식 1에 있어서, a= 0인 것이 바람직하고, a= 0이고 b= 0이거나, 또는 a= 0이고 b= 0이며, c= 2 내지 3의 정수인 것이 바람직하다.

상기 Cz 및 Ar^1 내지 Ar^6 의 치환기로서는, 각각 독립적으로, 할로젠 원자, 하이드록실기, 아미노기, 나이트로기, 사이아노기, 알킬기, 알켄일기, 사이클로알킬기, 알콕시기, 방향족 탄화수소기, 방향족 헤테로환기, 아르알킬기, 아릴옥시기, 알콕시카보닐기, 불소화 알킬기, 불소화 아릴기 또는 카복실기 등을 들 수 있다.

할로젠 원자로서는, 불소, 염소, 브롬, 요오드 등을 들 수 있다.

아미노기는 $-NX^1X^2$ 로 표시되고, X^1 , X^2 로서는, 각각 독립적으로, 예컨대, 수소 원자, 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-다이클로로-t-부틸기, 1,2,3-트라이클로로프로필기, 브로모메틸기, 1-브로모에틸기, 2-브로모에틸기, 2-브로모아이소부틸기, 1,2-다이브로모에틸기, 1,3-다이브로모아이소프로필기, 2,3-다이브로모-t-부틸기, 1,2,3-트라이브로모프로필기, 요오도메틸기, 1-요오도에틸기, 2-요오도에틸기, 2-요오도아이소부틸기, 1,2-다이요오도에틸기, 1,3-다이요오도아이소프로필기, 2,3-다이요오도-t-부틸기, 1,2,3-트라이요오도프로필기, 아미노메틸기, 1-아미노에틸기, 2-아미노에틸기, 2-아미노아이소부틸기, 1,2-다이아미노에틸기, 1,3-다이아미노아이소프로필기, 2,3-다이아미노-t-부틸기, 1,2,3-트라이아미노프로필기, 사이아노메틸기, 1-사이아노에틸기, 2-사이아노에틸기, 2-사이아노아이소부틸기, 1,2-다이사이아노에틸기,

1,3-다이사이아노아이소프로필기, 2,3-다이사이아노-t-부틸기, 1,2,3-트라이사이아노프로필기, 나이트로메틸기, 1-나이트로에틸기, 2-나이트로에틸기, 2-나이트로아이소부틸기, 1,2-다이나이트로에틸기, 1,3-다이나이트로아이소프로필기, 2,3-다이나이트로-t-부틸기, 1,2,3-트라이나이트로프로필기, 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, 4-스타이릴페닐기, 1-피렌일기, 2-피렌일기, 4-피렌일기, 2-바이페닐릴기, 3-바이페닐릴기, 4-바이페닐릴기, 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-부틸페닐기, p-(2-페닐프로필)페닐기, 3-메틸-2-나프틸기, 4-메틸-1-나프틸기, 4-메틸-1-안트릴기, 4'-메틸바이페닐릴기, 4"-t-부틸-p-터페닐-4-일기, 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-페노티아진일기, 2-페노티아진일기, 3-페노티아진일기, 4-페노티아진일기, 1-페녹사진일기, 2-페녹사진일기, 3-페녹사진일기, 4-페녹사진일기, 2-옥사졸릴기, 4-옥사졸릴기, 5-옥사졸릴기, 2-옥사다이하졸릴기, 5-옥사다이하졸릴기, 3-퓨라잔일기, 2-티엔일기, 3-티엔일기, 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-부틸피롤-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-부틸1-인돌릴기, 4-t-부틸1-인돌릴기, 2-t-부틸3-인돌릴기, 4-t-부틸3-인돌릴기 등을 들 수 있다.

알킬기로서는, 예컨대, 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-다이클로로-t-부틸기, 1,2,3-트라이클로로프로필기, 브로모메틸기, 1-브로모에틸기, 2-브로모에틸기, 2-브로모아이소부틸기, 1,2-다이브로모에틸기, 1,3-다이브로모아이소프로필기, 2,3-다이브로모-t-부틸기, 1,2,3-트라이브로모프로필기, 요오도메틸기, 1-요오도에틸기, 2-요오도에틸기, 2-요오도아이소부틸기, 1,2-다이요오도에틸기, 1,3-다이요오도아이소프로필기, 2,3-다이요오도-t-부틸기, 1,2,3-트라이요오도프로필기, 아미노메틸기, 1-아미노에틸기, 2-아미노에틸기, 2-아미노아이소부틸기, 1,2-다이아미노에틸기, 1,3-다이아미노아이소프로필기, 2,3-다이아미노-t-부틸기, 1,2,3-트라이아미노프로필기, 사이아노메틸기, 1-사이아노에틸기, 2-사이아노에틸기, 2-사이아노아이소부틸기, 1,2-다이사이아노에틸기, 1,3-다이사이아노아이소프로필기, 2,3-다이사이아노-t-부틸기, 1,2,3-트라이사이아노프로필기, 나이트로메틸기, 1-나이트로에틸기, 2-나이트로에틸기, 2-나이트로아이소부틸기, 1,2-다이나이트로에틸기, 1,3-다이나이트로아이소프로필기, 2,3-다이나이트로-t-부틸기, 1,2,3-트라이나이트로프로필기 등을 들 수 있다.

알켄일기로서는, 예컨대, 바이닐기, 알릴기, 1-부텐일기, 2-부텐일기, 3-부텐일기, 1,3-부탄다이엔일기, 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-부텐일기, 3-페닐-1-부텐일기 등을 들 수 있다.

사이클로알킬기로서는, 예컨대, 사이클로프로필기, 사이클로부틸기, 사이클로펜틸기, 사이클로헥실기, 4-메틸사이클로헥실기 등을 들 수 있다.

알콕시기는 -OY로 표시되는 기이며, Y로서는, 예컨대, 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-7-부틸기, 1,2,3-트라이하이드록시프로필기, 클로로메틸기, 1-클로로에틸기, 2-클로로에틸기, 2-클로로아이소부틸기, 1,2-다이클로로에틸기, 1,3-다이클로로아이소프로필기, 2,3-다이클로로-t-부틸기, 1,2,3-트라이클로로프로필기, 브로모메틸기, 1-브로모에틸기, 2-브로모에틸기, 2-브로모아이소부틸기, 1,2-다이브로모에틸기, 1,3-다이브로모아이소프로필기, 2,3-다이브로모-t-부틸기, 1,2,3-트라이브로모프로필기, 요오도메틸기, 1-요오도에틸기, 2-요오도에틸기, 2-요오도아이소부틸기, 1,2-다이요오도에틸기, 1,3-다이요오도아이소프로필기, 2,3-다이요오도-t-부틸기, 1,2,3-트라이요오도프로필기, 아미노메틸기, 1-아미노에틸기, 2-아미노에틸기, 2-아미노아이소부틸기, 1,2-다이아미노에틸기, 1,3-다이아미노아이소프로필기, 2,3-다이아미노-t-부틸기, 1,2,3-트라이아미노프로필기, 사이아노메틸기, 1-사이아노에틸기, 2-사이아노에틸기, 2-사이아노아이소부틸기, 1,2-다이사이아노에틸기, 1,3-다이사이아노아이소프로필기, 2,3-다이사이아노-t-부틸기, 1,2,3-트라이사이아노프로필기, 나이트로메틸기, 1-나이트로에틸기, 2-나이트로에틸기, 2-나이트로아이소부틸기, 1,2-다이나이트로에틸기, 1,3-다이나이트로아이소프로필기, 2,3-다이나이트로-t-부틸기, 1,2,3-트라이나이트로프로필기 등을 들 수 있다.

방향족 탄화수소기로서는, 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-바이페닐릴기, 3-바이페닐릴기, 4-바이페닐릴기, 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-부틸페닐기, p-(2-페닐프로필)페닐기, 3-메틸-2-나프틸기, 4-메틸-1-나프틸기, 4-메틸-1-안트릴기, 4'-메틸바이페닐릴기, 4"-t-부틸-p-터페닐-4-일기 등을 들 수 있다.

방향족 헤테로환기로서는, 예컨대, 1-피롤릴기, 2-피롤릴기, 3-피롤릴기, 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, 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, 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-페노티아진일기, 2-페노티아진일기, 3-페노티아진일기, 4-페노티아진일기, 10-페노티아진일기,

1-페녹사진일기, 2-페녹사진일기, 3-페녹사진일기, 4-페녹사진일기, 10-페녹사진일기, 2-옥사줄릴기, 4-옥사줄릴기, 5-옥사줄릴기, 2-옥사다이아줄릴기, 5-옥사다이아줄릴기, 3-퓨라잔일기, 2-티엔일기, 3-티엔일기, 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-부틸피롤-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-부틸-1-인돌릴기, 4-t-부틸-1-인돌릴기, 2-t-부틸-3-인돌릴기, 4-t-부틸-3-인돌릴기 등을 들 수 있다.

아르알킬기로서는, 예컨대, 벤질기, 1-페닐에틸기, 2-페닐에틸기, 1-페닐아이소프로필기, 2-페닐아이소프로필기, 페닐-t-부틸기, 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.

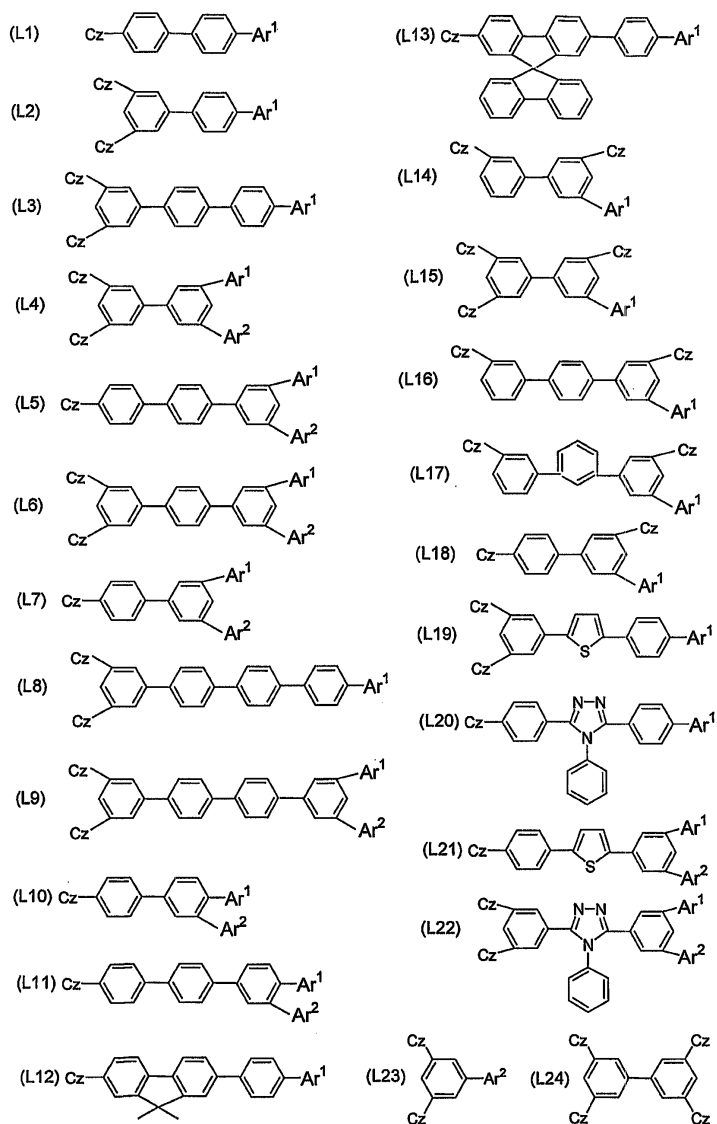
아릴옥시기는 -OZ로 표시되고, Z로서는, 예컨대, 페닐기, 1-나프틸기, 2-나프틸기, 1-안트릴기, 2-안트릴기, 9-안트릴기, 1-페난트릴기, 2-페난트릴기, 3-페난트릴기, 4-페난트릴기, 9-페난트릴기, 1-나프타센일기, 2-나프타센일기, 9-나프타센일기, 1-피렌일기, 2-피렌일기, 4-피렌일기, 2-바이페닐릴기, 3-바이페닐릴기, 4-바이페닐릴기, p-터페닐-4-일기, p-터페닐-3-일기, p-터페닐-2-일기, m-터페닐-4-일기, m-터페닐-3-일기, m-터페닐-2-일기, o-톨릴기, m-톨릴기, p-톨릴기, p-t-부틸페닐기, p-(2-페닐프로필)페닐기, 3-메틸-2-나프틸기, 4-메틸-1-나프틸기, 4-메틸-1-안트릴기, 4'-메틸바이페닐릴기, 4"-t-부틸-p-터페닐-4-일기, 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-카바줄릴기, 2-카바줄릴기, 3-카바줄릴기, 4-카바줄릴기, 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-페노티아진일기, 2-페노티아진일기, 3-페노티아진일기, 4-페노티아진일기, 1-페녹사진일기, 2-페녹사진일기, 3-페녹사진일기, 4-페녹사진일기, 2-옥사줄릴기, 4-옥사줄릴기, 5-옥사줄릴기, 2-옥사다이아줄릴기, 5-옥사다이아줄릴기, 3-퓨라잔일기, 2-티엔일기, 3-티엔일기, 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-부틸피롤-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-부틸-1-인돌릴기, 4-t-부틸-1-인돌릴기, 2-t-부틸-3-인돌릴기, 4-t-부틸-3-인돌릴기 등을 들 수 있다.

알콕시카보닐기는 -COOY로 표시되고, Y로서는, 예컨대, 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-클로로아

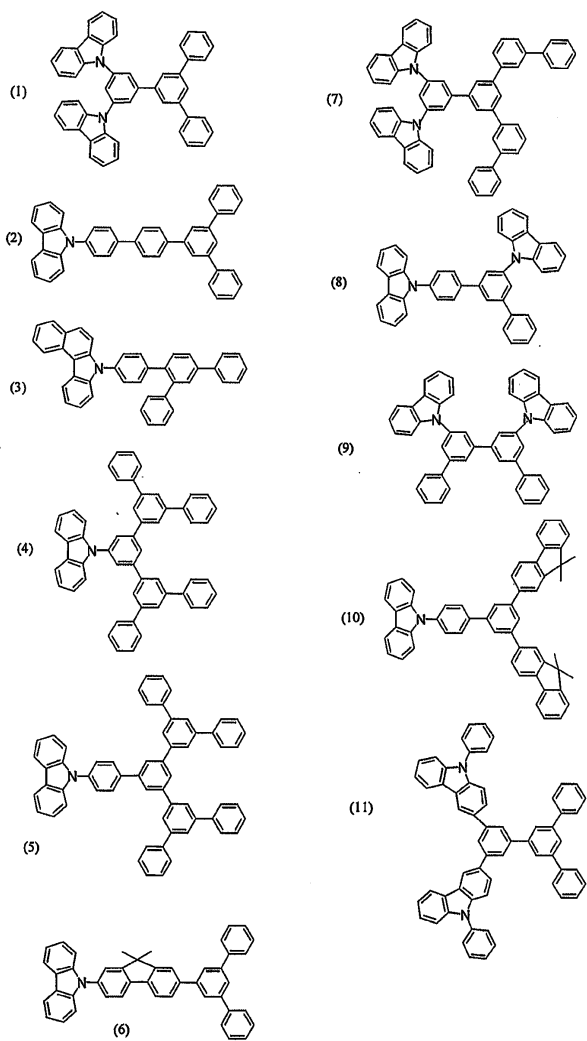
이소부틸기, 1,2-다이클로로에틸기, 1,3-다이클로로아이소프로필기, 2,3-다이클로로-t-부틸기, 1,2,3-트라이클로로프로필기, 브로모메틸기, 1-브로모에틸기, 2-브로모에틸기, 2-브로모아이소부틸기, 1,2-다이브로모에틸기, 1,3-다이브로모아이소프로필기, 2,3-다이브로모-t-부틸기, 1,2,3-트라이브로모프로필기, 요오도메틸기, 1-요오도에틸기, 2-요오도에틸기, 2-요오도아이소부틸기, 1,2-다이요오도에틸기, 1,3-다이요오도아이소프로필기, 2,3-다이요오도-t-부틸기, 1,2,3-트라이요오도프로필기, 아미노메틸기, 1-아미노에틸기, 2-아미노에틸기, 2-아미노아이소부틸기, 1,2-다이아미노에틸기, 1,3-다이아미노아이소프로필기, 2,3-다이아미노-t-부틸기, 1,2,3-트라이아미노프로필기, 사이아노메틸기, 1-사이아노에틸기, 2-사이아노에틸기, 2-사이아노아이소부틸기, 1,2-다이사이아노에틸기, 1,3-다이사이아노아이소프로필기, 2,3-다이사이아노-t-부틸기, 1,2,3-트라이사이아노프로필기, 나이트로메틸기, 1-나이트로에틸기, 2-나이트로에틸기, 2-나이트로아이소부틸기, 1,2-다이나이트로에틸기, 1,3-다이나이트로아이소프로필기, 2,3-다이나이트로-t-부틸기, 1,2,3-트라이나이트로프로필기 등을 들 수 있다.

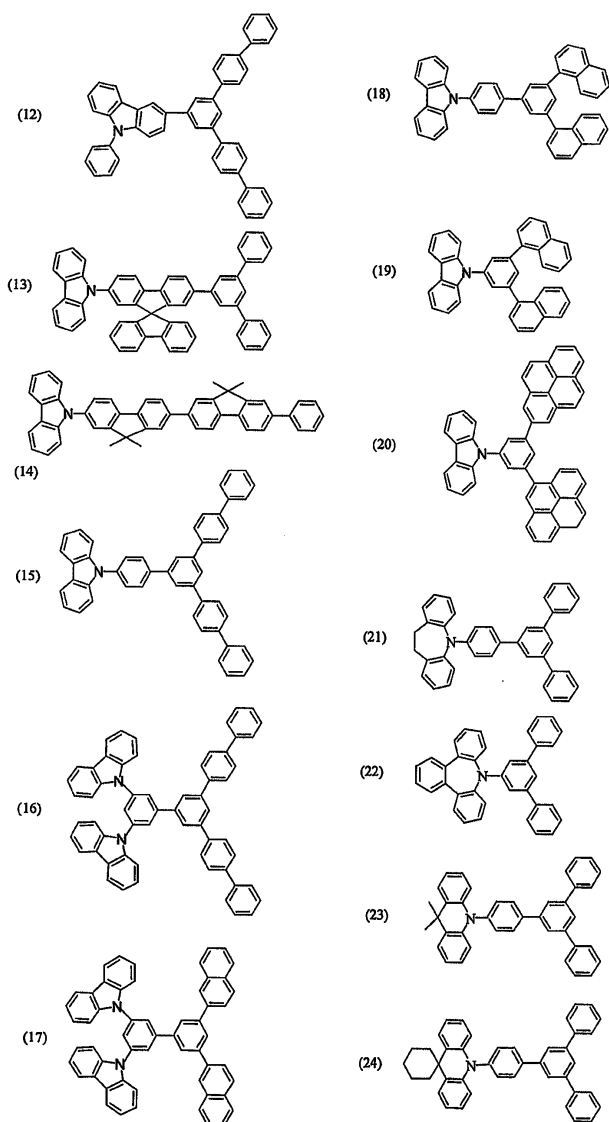
또한, 이상의 치환기는, 치환기끼리 결합하여 환을 형성하고 있더라도 좋고, 환을 형성하는 2가기의 예로서는, 테트라메틸렌기, 펜타메틸렌기, 헥사메틸렌기, 다이페닐메탄-2,2'-다이일기, 다이페닐에탄-3,3'-다이일기, 다이페닐프로판-4,4'-다이일기 등을 들 수 있다.

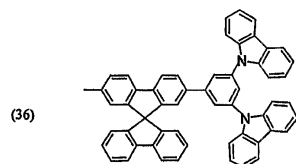
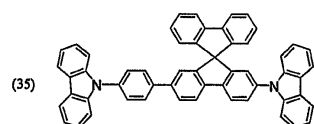
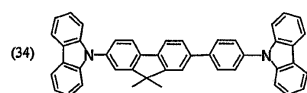
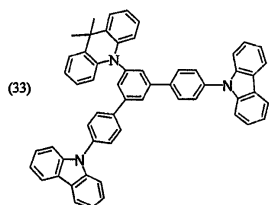
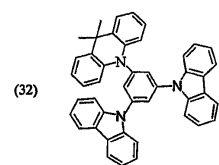
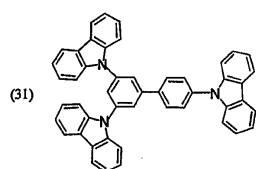
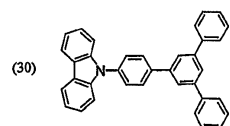
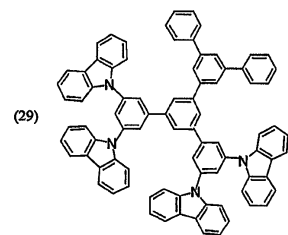
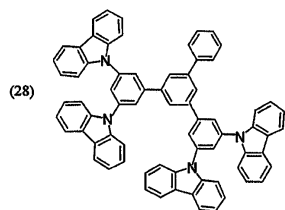
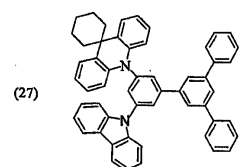
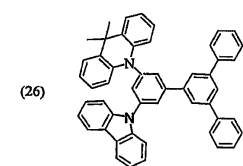
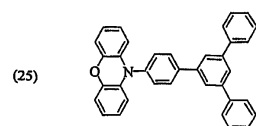
본 발명의 화학식 1로 표시되는 화합물로 이루어지는 유기 EL 소자의 구체적 구조로서는, 하기와 같은 구조를 들 수 있다. 한편, Ar^1 , Ar^2 에 해당하는 부위에 Cz가 있는 구조가 있지만, Ar^1 및 Ar^2 는 Cz를 포함하기 때문이다. 또한, 하기 구조에 있어서, 페닐 부위 및 티오펜 부위는, 알킬기 또는 탄소수 6 내지 10의 아릴기에 의해 치환되어 있는 것도 들 수 있다.

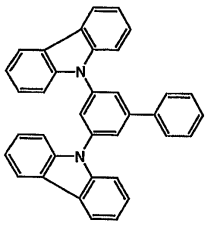


본 발명의 화학식 1로 표시되는 화합물로 이루어지는 유기 EL 소자용 재료의 구체예를 이하에 나타내지만, 이들 예시 화합물에 한정되는 것이 아니다.

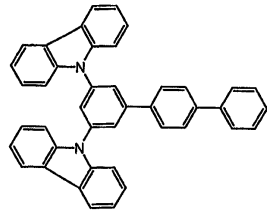




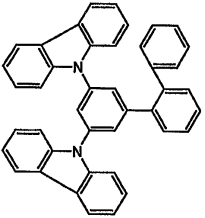




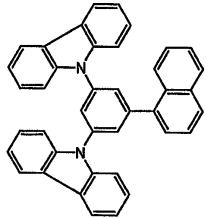
(37)



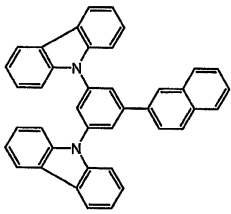
(38)



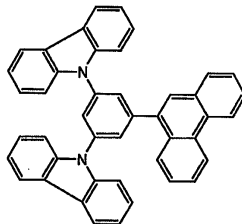
(39)



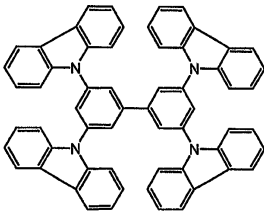
(40)



(41)



(42)



(43)

또한, 화학식 1로 표시되는 화합물은, 바람직하게는 유기 EL 소자의 호스트 재료이고, 전하를 수송하고, 유리 전이 온도가 110℃ 이상이다. 또한, 3중항 에너지가 2.76 eV 이상이면, 녹색, 적색 발광의 착체를 여기하는 능력을 보유하기 때문에 바람직하다. 또한, 상기 화합물은 유리 전이 온도가 110℃ 이상이며, 3중항 에너지가 2.82 eV 이상, 그 위에 2.85 eV 이상도 가능하기 때문에, 고온 보존에 우수하여, CBP에 비하여 녹색 발광 소자의 발광 효율도 향상할 수 있다. 한편, 녹색, 적색 발광하는 착체를 여기하기 위해서는, 3중항 에너지가 2.82 내지 2.92 eV가 특히 바람직하다. 2.92 eV를 초과하면, 발광 효율이 향상하지 않는 경우도 있기 때문이다.

다음으로 본 발명의 유기 EL 소자에 대하여 설명한다.

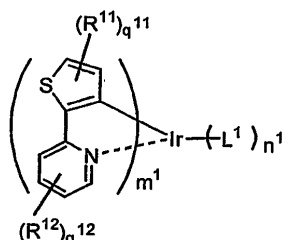
본 발명의 유기 EL 소자는, 음극과 양극 사이에 적어도 발광층을 갖는 1층 또는 복수층으로 이루어진 유기 박막층이 형성되어 있는 유기 EL 소자에 있어서, 상기 유기 박막층의 적어도 1층이 본 발명의 유기 EL 소자용 재료를 함유한다.

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.

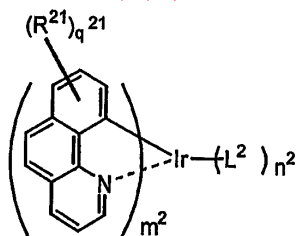
상기 발광층은 호스트 재료와 인광성의 발광 재료로 이루어지고, 상기 호스트 재료가 상기 유기 EL 소자용 재료로 이루어지면 바람직하다.

인광성의 발광 재료로서는, 인광 양자 수율이 높고, 발광 소자의 외부 양자 효율을 보다 향상시킬 수 있다는 점에서, 이리듐 착체, 오스뮴 착체, 백금 착체 등의 금속 착체가 바람직하고, 이리듐 착체 및 백금 착체가 보다 바람직하고, 오쏘메탈화 이리듐 착체가 가장 바람직하다. 오쏘메탈화 금속 착체의 더욱 바람직한 형태로서는, 하기 화학식 2 내지 4로 표시되는 화합물이며, 화학식 2 또는 3로 표시되는 화합물이 특히 바람직하다.

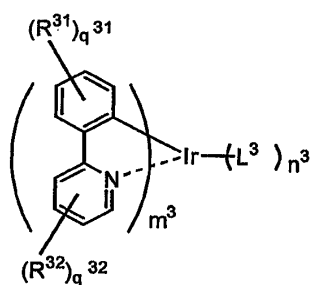
화학식 2



화학식 3



화학식 4



화학식 2에 있어서, R^{11} , R^{12} 는 알킬기, 아릴기, 불소화 알킬기, 불소화 아릴기이며, 알킬기, 불소화 알킬기, 아릴기가 바람직하고, 알킬기, 불소화 알킬기가 보다 바람직하다. q^{11} 은 0 내지 2의 정수를 나타내고, 0, 1이 바람직하고, 0이 보다 바람직하다. q^{12} 는 0 내지 4의 정수를 나타내고, 0, 1이 바람직하고, 0이 보다 바람직하다. q^{11} , q^{12} 가 2 이상인 경우, 복수개의 R^{11} , R^{12} 는 각각 동일하거나 상이할 수 있고, 연결되어 축환을 형성할 수도 있다.

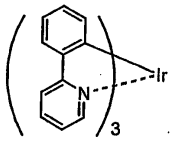
L^1 은 리간드를 나타낸다. 리간드로서는 상기 오쏘메탈화 이리듐 착체를 형성하는 것에 필요한 리간드 등을 들 수 있고, 오쏘메탈화 이리듐 착체를 형성하는 것에 필요한 리간드 및 함질소 헤테로환 리간드, 다이케톤 리간드, 할로젠 리간드, 바이피리딜 리간드가 바람직하고, 보다 바람직하게는 오쏘메탈화 이리듐 착체를 형성하는 것에 필요한 리간드, 바이피리딜 리간드이다. n^1 은 0 내지 5의 정수를 나타내고, 0이 바람직하다. m^1 은 1, 2 또는 3을 나타내고, 바람직하게는 3이다. n^1 , m^1 의 수의 조합은, 화학식 2로 표시되는 금속 착체가 중성 착체로 되는 수의 조합이 바람직하다.

화학식 3에 있어서, R^{21} , n^2 , m^2 , L^2 는 각각 상기 R^1 , n^1 , m^1 , L^1 과 마찬가지로다. q^{21} 은 0 내지 8의 정수를 나타내고, 0이 바람직하다. q^{21} 이 2 이상인 경우는, 서로 동일하거나 상이할 수 있고, 연결되어 축합환을 형성할 수도 있다.

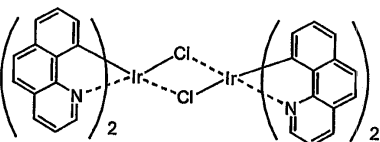
화학식 4에 있어서, R^{31} , R^{32} , q^{31} , q^{32} , n^3 , m^3 , L^3 은 각각 상기 R^{11} , R^{12} , q^{11} , q^{12} , n^1 , m^1 , L^1 과 마찬가지로다.

상기 인광성의 발광 재료로서는, 이하에 나타내는 이리듐 착체가 바람직하다.

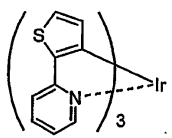
(I-1)



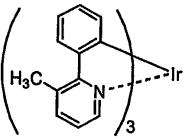
(I-2)



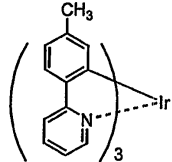
(I-3)



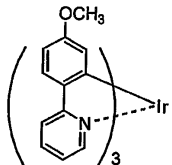
(I-4)



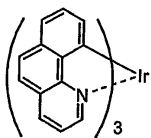
(I-5)



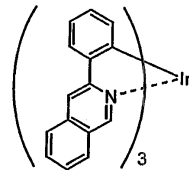
(I-6)



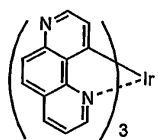
(I-7)



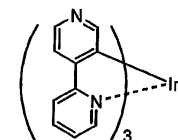
(I-8)



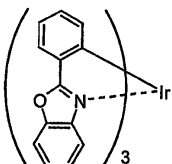
(I-9)



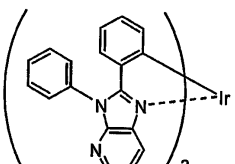
(I-10)



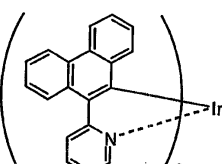
(I-11)



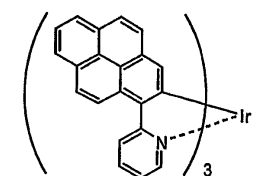
(I-12)



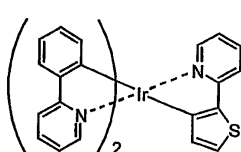
(I-13)



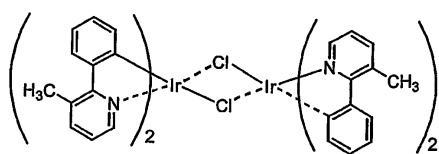
(I-14)



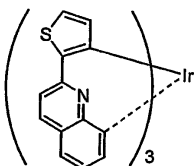
(I-15)



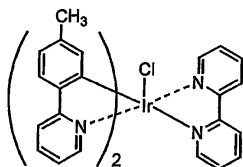
(I -16)



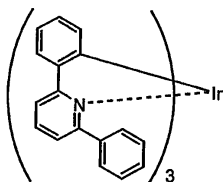
(I -17)



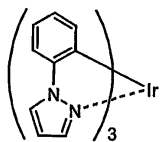
(I -18)



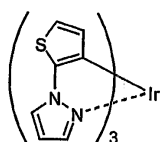
(I -19)



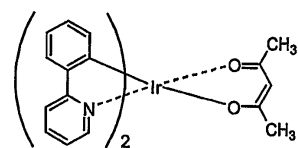
(I -20)



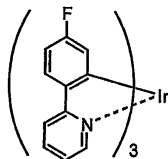
(I -21)

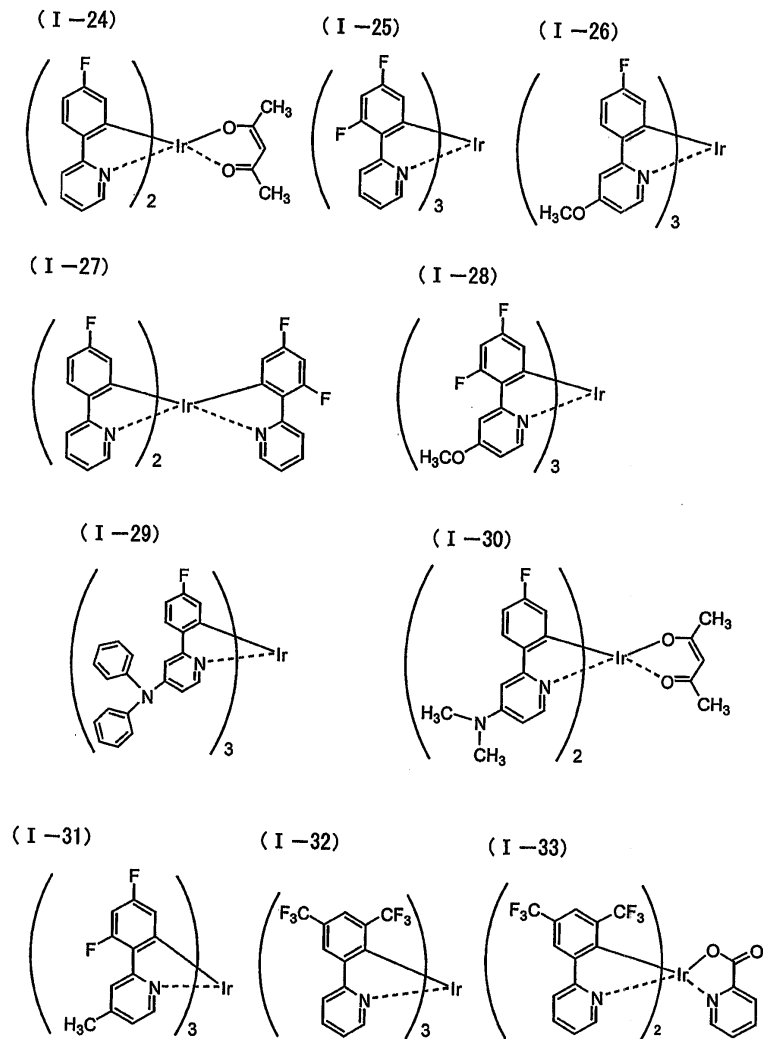


(I -22)



(I -23)





본 발명의 유기 EL 소자는, 음극과 유기 박막층의 계면 영역에 환원성 도판트가 첨가되어 이루어지면 바람직하다.

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

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

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

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

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

상기 알칼리 금속 화합물로서는, Li_2O , Cs_2O , K_2O 등의 알칼리 산화물, LiF, NaF, CsF, KF 등의 알칼리 할로젠화물 등을 들 수 있고, LiF, Li_2O , NaF의 알칼리 산화물 또는 알칼리 불화물이 바람직하다.

상기 알칼리 토금속 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.

상기 희토류 금속 화합물로서는, YbF₃, ScF₃, ScO₃, Y₂O₃, Ce₂O₃, GdF₃, TbF₃ 등을 들 수 있고, YbF₃, ScF₃, TbF₃이 바람직하다.

상기 알칼리 금속 착체, 알칼리 토금속 착체, 희토류 금속 착체로서는, 각각 금속 이온으로서 알칼리 금속 이온, 알칼리 토금속 이온, 희토류 금속 이온을 적어도 하나 함유하는 것이면 특별히 한정은 없다. 또한, 리간드로는 퀴놀린올, 벤조퀴놀린올, 아크리딘올, 페난트리딘올, 하이드록시페닐옥사졸, 하이드록시페닐티아졸, 하이드록시다이아릴옥사다이아졸, 하이드록시다이아릴티아다이아졸, 하이드록시페닐피리딘, 하이드록시페닐벤조이미다졸, 하이드록시벤조트리아아졸, 하이드록시폴로렌, 바이피리딜, 페난트롤린, 프탈로사이아닌, 포피린, 사이클로펜타다이엔, β-다이케톤류, 아조메타인류 및 그들의 유도체 등이 바람직하지만, 이들에 한정되는 것이 아니다.

환원성 도판트의 첨가 형태로서는, 상기 계면 영역에 층상 또는 섬형상으로 형성하면 바람직하다. 형성 방법으로서, 저항 가열 증착법에 의해 환원성 도판트를 증착하면서, 계면 영역을 형성하는 발광 재료나 전자 주입 재료인 유기물을 동시에 증착시켜 유기물 중에 환원 도판트를 분산시키는 방법이 바람직하다. 분산 농도로서는 몰비로 유기물: 환원성 도판트= 100:1 내지 1:100, 바람직하게는 5:1 내지 1:5이다.

환원성 도판트를 층상으로 형성하는 경우는, 계면의 유기층인 발광 재료나 전자 주입 재료를 층상으로 형성한 후에, 환원 도판트를 단독으로 저항 가열 증착법에 의해 증착하고, 바람직하게는 층의 두께 0.1 내지 15 nm로 형성한다.

환원성 도판트를 섬형상으로 형성하는 경우는, 계면의 유기층인 발광 재료나 전자 주입 재료를 섬형상으로 형성한 후에, 환원 도판트를 단독으로 저항 가열 증착법에 의해 증착하고, 바람직하게는 섬의 두께 0.05 내지 1 nm로 형성한다.

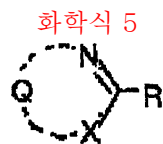
또한, 본 발명의 유기 EL 소자에 있어서의, 주성분과 환원성 도판트의 비율로서는, 몰비로 주성분: 환원성 도판트= 5:1 내지 1:5이면 바람직하고, 2:1 내지 1:2이면 더 바람직하다.

본 발명의 유기 EL 소자는, 상기 발광층과 음극 사이에 전자 주입층을 갖고, 상기 전자 주입층이 함질소환 유도체를 주성분으로서 함유하면 바람직하다.

상기 전자 주입층에 이용하는 전자 수송 재료로서는, 분자 내에 헤테로원자를 1개 이상 함유하는 방향족 헤테로환 화합물이 바람직하게 사용되고, 특히 함질소환 유도체가 바람직하다. 함질소환 유도체의 구체적인 화합물로서는, 5원환인 아졸 골격을 갖는 것이 바람직하다. 방향족 헤테로환 화합물은 탄소 원자, 수소 원자 이외의 원자를 기본 골격내에 2개 이상 갖는 화합물이며, 단환 또는 축합환이더라도 좋다. 함질소환 유도체로서는, 하나의 질소 원자 이외에, 질소, 산소, 황 원자로부터 선택되는 원자를 하나 이상 갖는 것이 바람직하고, 더 바람직하게는 질소 원자를 골격내에 2개 이상 갖는 방향족 헤테로환이다. 헤테로원자는 축합 위치에 있더라도, 비축합 위치에 있더라도 좋다. 헤테로원자를 2개 이상 포함하는 헤테로환 골격으로서, 예컨대 피라졸, 이미다졸, 피라진, 피리미딘, 인다졸, 퓨린, 프탈라진, 나프티리딘, 퀴놀살린, 퀴나졸린, 신놀린, 프테리딘, 페리미딘, 페난트롤린, 피롤로이미다졸, 피롤로 트리아아졸, 피라졸로이미다졸, 피라졸로트리아아졸, 피라졸로피리미딘, 피라졸로트리아아진, 이미다조이미다졸, 이미다조피리다진, 이미다조피리딘, 이미다조피라진, 트리아아졸로피리딘, 벤즈이미다졸, 나프토이미다졸, 벤즈옥사졸, 나프트옥사졸, 벤조티아졸, 나프트티아졸, 벤조트리아아졸, 테트라자인텐, 트리아아진 등을 바람직하게 들 수 있다.

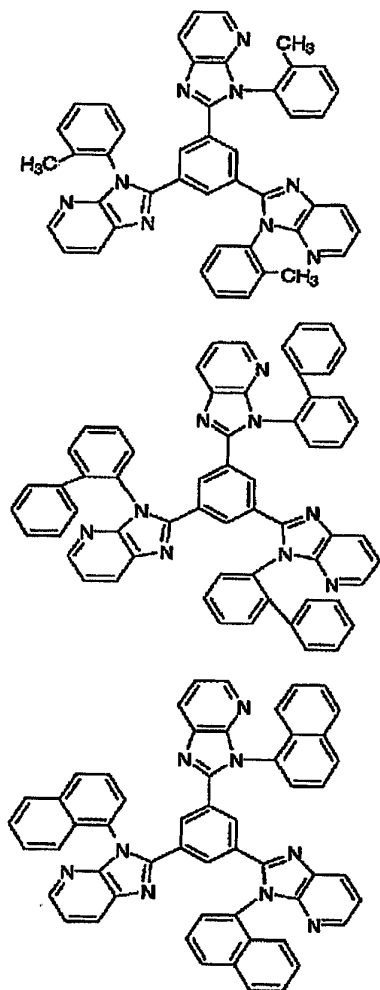
상기 중에서도, 상기 전자 수송성 호스트재로서, 이미다조피리다진, 이미다조피리딘, 이미다조피라진, 벤즈이미다졸, 나프티이미다졸 등의 축합 아졸 골격을 갖는 화합물 또는 트리아아진 골격을 갖는 화합물이 바람직하고, 축합 이미다조피리딘이 더 바람직하다.

아졸 골격을 갖는 화합물로서 바람직하게는 하기 화학식 5로 표시되는 화합물이다.



(식 중, R은 방향족기를 나타낸다. X는 O, S 또는 N-Ra(Ra는 수소 원자, 지방족 탄화수소기, 아릴기 또는 헤테로환기를 나타낸다. Q는 N 및 X와 결합하여 헤테로환을 형성하는 데 필요한 원자군을 나타낸다. 또한, R과 X, R과 Q는 가능한 경우에는 결합하여 환을 형성할 수도 있다.)

상기 합질소환 유도체로서는, 이하에 나타내는 화합물이 바람직하다.



또한, 상기 전자 주입층의 구성 성분으로서, 상기 합질소환 유도체 이외에 무기 화합물로서 절연체 또는 반도체를 사용하는 것이 바람직하다. 전자 주입층이 절연체나 반도체로 구성되어 있으면, 전류의 누출을 유효하게 방지하여, 전자 주입성을 향상시킬 수 있다.

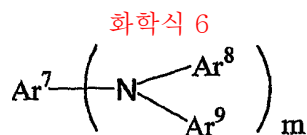
이러한 절연체로서는, 알칼리 금속 칼코게나이드, 알칼리 토금속 칼코게나이드, 알칼리 금속의 할로겐화물 및 알칼리 토금속의 할로겐화물로 이루어지는 군으로부터 선택되는 하나 이상의 금속 화합물을 사용하는 것이 바람직하다. 전자 주입층이 이들 알칼리 금속 칼코게나이드 등으로 구성되어 있으면, 전자 주입성을 더욱 향상시킬 수 있는 점에서 바람직하다. 구체적으로, 바람직한 알칼리 금속 칼코게나이드로서는, 예컨대 Li_2O , LiO , Na_2S , Na_2Se 및 NaO 를 들 수 있고, 바람직한 알칼리 토금속 칼코게나이드로서는, 예컨대 CaO , BaO , SrO , BeO , BaS 및 CaSe 를 들 수 있다. 또한, 바람직한 알칼리 금속의 할로겐화물로서는, 예컨대, LiF , NaF , KF , LiCl , KCl 및 NaCl 등을 들 수 있다. 또한, 바람직한 알칼리 토금속의 할로겐화물로서는, 예컨대, CaF_2 , BaF_2 , SrF_2 , MgF_2 및 BeF_2 등의 불화물이나, 불화물 이외의 할로겐화물을 들 수 있다.

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 조합물을 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, 상기 알칼리 금속 칼코게나이드, 알칼리 토금속 칼코게나이드, 알칼리 금속의 할로젠화물 및 알칼리 토금속의 할로젠화물 등을 들 수 있다.

또한, 본 발명의 전자 주입층은 전술한 환원성 도판트를 함유하여도 바람직하다.

본 발명의 유기 EL 소자는, 상기 발광층과 양극 사이에 정공 수송층을 갖고, 상기 정공 수송층이 아릴아민 유도체를 주성분으로서 함유하면 바람직하다. 또한, 정공 수송층에 함유되는 정공 수송 재료로서는, 3중항 에너지가 2.52 내지 3.7 eV이면 바람직하고, 2.8 내지 3.7 eV이면 더 바람직하다. 이러한 범위의 정공 수송 재료를 이용함으로써 발광층의 여기 에너지가 실활하는 것을 막을 수 있다.

상기 정공 수송 재료로서는, 하기 화학식 6 및 7로 표시되는 것이 바람직하다.



(식 중, Ar⁷은 탄소수 6 내지 40의 방향족기이고, Ar⁸ 및 Ar⁹는 각각 수소 원자 또는 탄소수 6 내지 40의 방향족기이고, m은 1 내지 6의 정수이다.)

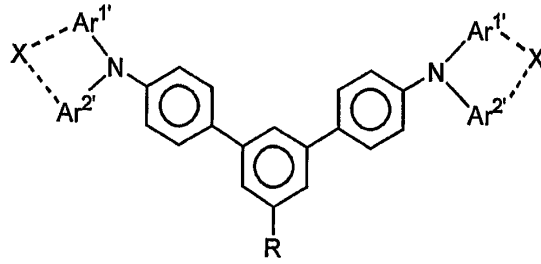


(식 중, Ar¹⁰ 및 Ar¹⁶은 탄소수 6 내지 40의 방향족기이고, Ar¹¹ 내지 Ar¹⁵는 각각 수소 원자 또는 탄소수 6 내지 40의 방향족기이고, 축합수 p, q, r, s는 각각 0 또는 1이다.)

상기 화학식 7 및 8에 있어서, 탄소수 6 내지 40의 방향족기 중, 바람직한 핵원자수 5 내지 40의 아릴기로서는 페닐, 나프틸, 안트라닐, 페난트릴, 피렌일, 코로닐, 바이페닐, 터페닐, 피롤릴, 플란일, 티오펜일, 벤조티오펜일, 옥사다이하졸릴, 다이페닐안트라닐, 인돌릴, 카바졸릴, 피리딜, 벤조퀴놀릴, 플루오란테닐, 아세나프토플루오란테닐 등을 들 수 있다. 또한, 바람직한 핵원자수 5 내지 40의 아릴렌기로서는, 페닐렌, 나프틸렌, 안트라닐렌, 페난트릴렌, 피렌일렌, 코로닐렌, 바이페닐렌, 터페닐렌, 피롤릴렌, 프라닐렌, 티오펜일렌, 벤조티오펜일렌, 옥사다이하졸릴렌, 다이페닐안트라닐렌, 인돌릴렌, 카바졸릴렌, 피리딜렌, 벤조퀴놀릴렌, 플루오란테닐렌, 아세나프토플루오란테닐렌 등을 들 수 있다. 한편, 탄소수 6 내지 40의 방향족기는 추가로 치환기에 의해 치환되어 있더라도 좋고, 바람직한 치환기로서, 탄소수 1 내지 6의 알킬기(에틸기, 메틸기, i-프로필기, n-프로필기, s-부틸기, t-부틸기, 펜틸기, 헥실기, 사이클로펜틸기, 사이클로헥실기 등), 탄소수 1 내지 6의 알콕시기(에톡시기, 메톡시기, i-프로폭시기, n-프로폭시기, s-부톡시기, t-부톡시기, 펜톡시기, 헥실옥시기, 사이클로펜톡시기, 사이클로헥실옥시기 등), 핵원자수 5 내지 40의 아릴기, 핵원자수 5 내지 40의 아릴기로 치환된 아미노기, 핵원자수 5 내지 40의 아릴기를 갖는 에스터기, 탄소수 1 내지 6의 알킬기를 갖는 에스터기, 사이아노기, 나이트로기, 할로젠 원자를 들 수 있다.

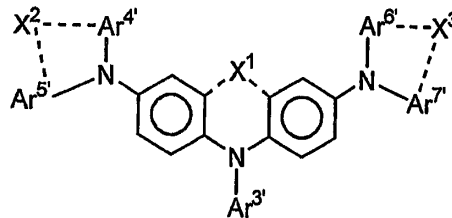
또한, 3중항 에너지가 2.8 eV 이상인 정공 수송 재료로서는, 하기 화학식 8 및 10으로 표시되는 것이 바람직하다.

화학식 8



(식 중, $Ar^{1'}$, $Ar^{2'}$ 은 탄소수 1 내지 6의 알킬기, 알콕시기 또는 페닐기에 의해 치환될 수 있는 헥탄소수 6 내지 18의 아릴기이고, R는 탄소수 4 내지 6의 알킬기 또는 알콕시기 또는 헥탄소수 6 내지 18의 아릴기이다. X는 단일 결합, -O- 또는 -S-로 표시되는 연결기를 나타내고, X는 존재하거나 존재하지 않을 수 있다.)

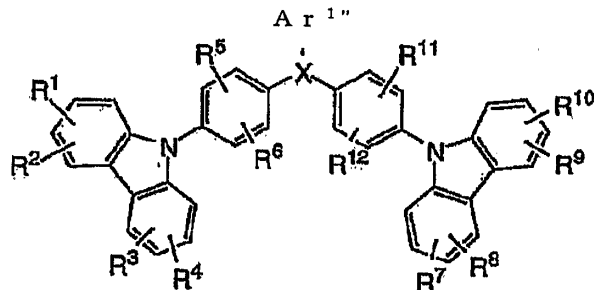
화학식 9



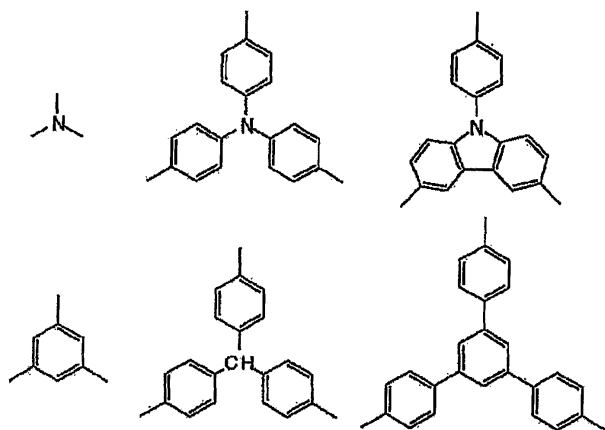
(식 중, $Ar^{3'}$ 은 치환기를 갖거나 갖지 않는 헥탄소수 6 내지 18의 아릴기, $Ar^{4'}$ 내지 $Ar^{7'}$ 은 각각 치환기를 갖거나 갖지 않는 헥탄소수 6 내지 18의 아릴렌기를 나타내고, X^1 은 단일 결합, -O-, -S-, $-(CH_2)_n$ -(n은 1 내지 6의 정수) 또는 $-C(CH_3)_2$ -인 연결기를 나타내고, 이들 연결기는 존재하거나 존재하지 않을 수 있고, X^2 및 X^3 은 각각 단일 결합, -O-, -S-, $-(CH_2)_n$ -(n은 1 내지 6의 정수) 또는 $-C(CH_3)_2$ -인 연결기를 나타내고, 그들은 동일하거나 상이할 수 있다.)

화학식 8 및 9에 있어서의 Ar^1 내지 $Ar^{7'}$, R, X 및 X^1 내지 X^3 이 나타내는 각 기 및 치환기의 구체예로서는, 상기 Cz 및 Ar^1 내지 Ar^6 에서 든 것과 같은 것을 들 수 있다.

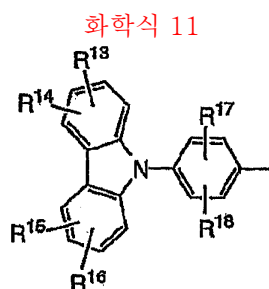
화학식 10



[식 중, R^1 내지 R^{12} 는 각각 독립적으로 수소 원자, 할로젠 원자, 알킬기, 아르알킬기, 알켄일기, 사이아노기, 아미노기, 아실기, 알콕시카보닐기, 카복실기, 알콕시기, 알킬아미노기, 아르알킬아미노기, 할로알킬기, 하이드록실기, 아릴옥시기, 치환기를 가질 수 있는 방향족 탄화수소환기 또는 방향족 헤테로환기를 나타내고, R^1 과 R^2 , R^3 과 R^4 , R^5 와 R^6 , R^7 과 R^8 , R^9 와 R^{10} , R^{11} 과 R^{12} 는 각각 인접하는 치환기끼리 환을 형성할 수도 있다. X는 이하에 나타내는 3개의 연결기를 나타내고,



Ar^{1'}은 치환기를 가질 수 있는 방향족 탄화수소환기, 방향족 헤테로환기 또는 이하에 나타내는 화학식 11 중 어느 것인가로 표시된다.



(식 중, R¹³ 내지 R¹⁸은 각각 독립적으로 수소 원자, 할로젠 원자, 알킬기, 아르알킬기, 알켄일기, 사이아노기, 치환기를 가질 수 있는 아미노기, 아실기, 알콕시카보닐기, 카복실기, 알콕시기, 알킬아미노기, 아르알킬아미노기, 할로알킬기, 하이드록실기, 아릴옥시기, 치환기를 가질 수 있는 방향족 탄화수소기 또는 방향족 헤테로환기를 나타내고, R¹³과 R¹⁴, R¹⁵와 R¹⁶, R¹⁷과 R¹⁸은 각각 인접하는 치환기끼리 환을 형성할 수도 있다.)]

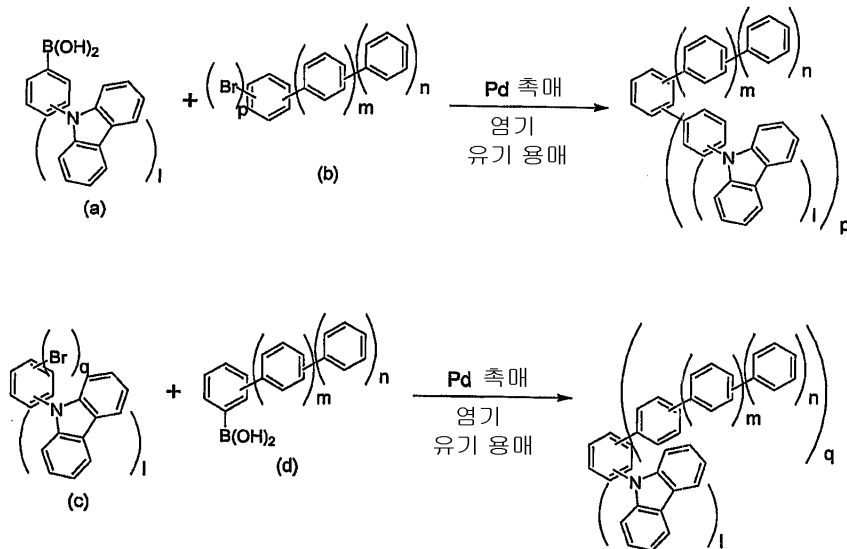
화학식 10에 있어서의 Ar^{1'}, R¹ 내지 R¹⁸이 나타내는 각 기 및 치환기의 구체예로서는, 상기 Cz 및 Ar¹ 내지 Ar⁶에서 든 것과 같은 것을 들 수 있다.

본 발명에 있어서, 유기 EL 소자의 양극은 정공을 정공 수송층 또는 발광층에 주입하는 구실을 하는 것이고, 4.5 eV 이상의 일함수를 갖는 것이 효과적이다. 본 발명에 사용되는 양극 재료의 구체예로서는, 산화인듐주석 합금(ITO), 산화주석(NESA), 금, 은, 백금, 구리 등이 적용될 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 등이 사용될 수 있다.

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 1로 표시되는 화합물을 함유하는 유기 박막층은, 진공 증착법, 분자선 증착법(molecular beam epitaxy process; MBE법) 또는 용매에 녹인 용액의 디핑법, 스핀 코팅법, 캐스팅법, 바코팅법, 롤 코팅법 등의 도포법에 의한 공지된 방법으로 형성할 수 있다.

본 발명의 유기 EL 소자의 각 유기층의 막 두께는 특별히 제한되지 않지만, 막 두께가 지나치게 얇음으로 인해 핀홀(pin-hole) 등의 결함이 생기는 것을 방지하고, 지나치게 두꺼움으로 인해 높은 인가 전압이 필요하게 되어 효율이 나빠지는 것을 막기 위해, 보통은 수 nm에서 1 μm의 범위가 바람직하다.

한편, 본 발명의 화학식 1로 표시되는 화합물의 합성 방법으로서, 화학식(a)로 표시되는 화합물과 화학식(b)로 표시되는 화합물을 유기 용매 중에서 염기 존재 하에 팔라듐 촉매를 이용하여 반응시키는 방법, 화학식(c)로 표시되는 화합물과 화학식(d)로 표시되는 화합물을 유기 용매 중에서 염기 존재 하에 팔라듐 촉매를 이용하여 반응시키는 방법 등을 들 수 있다. 하기 화학식(a) 내지 (d)에 있어서의, l, m, n, p 및 q는 화학식 1을 만족시키도록 적절히 선택되는 정수이다.



이 반응에서 이용하는 유기 용매로서는 반응에 관여하지 않는 용매이면 좋고, 예컨대, 벤젠, 톨루엔, 자일렌 등의 방향족계 탄화수소계 용매, 1,2-다이메톡시에탄, 테트라하이드로퓨란 등의 에터계 용매를 들 수 있다.

이 반응에서 이용하는 염기로서는, 예컨대, 탄산나트륨, 탄산칼륨, 탄산수소나트륨, 탄산수소칼륨, 수산화나트륨, 수산화칼륨 등의 무기 염기, 트라이에틸아민, 피리딘 등의 유기 염기를 들 수 있다. 바람직하게는 탄산나트륨을 들 수 있다. 또한, 무기 염기를 용해하기 위해서 물을 공존시킬 수도 있다.

여기서 이용하는 팔라듐 촉매로서는, 예컨대, 테트라키스(트라이페닐포스핀)팔라듐, 다이클로로비스(트라이페닐포스핀)팔라듐, 아세트산팔라듐-트라이페닐포스핀 등을 들 수 있다. 바람직하게는 테트라키스(트라이페닐포스핀)팔라듐을 들 수 있다.

다음으로 합성에 및 실시예를 이용하여 본 발명을 더욱 자세히 설명하지만, 본 발명은 이들에 한정되는 것이 아니다.

실시예

한편, 화합물의 3중항 에너지 갭 및 1중항 에너지 갭은, 아래와 같이 하여 측정했다.

(1) 3중항 에너지 갭의 측정

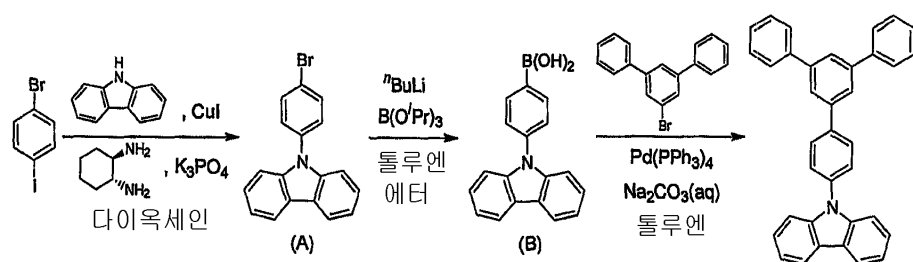
최저 여기 3중항 에너지 준위 T1을 측정했다. 즉, 시료의 인광 스펙트럼을 측정하여(10 μ mol/리터 EPA(다이에틸에터: 아이소펜테인: 아이소프로필알코올= 5:5:2 용적비) 용액, 77K, 석영셀, SPEX 사 FLUOROLOG II), 인광 스펙트럼의 단파장측의 증가 선에 대하여 접선을 그어 그 접선과 횡축의 교점인 파장(발광단)을 구했다. 이 파장을 에너지값으로 환산했다.

(2) 1중항 에너지 갭의 측정

여기 1중항 에너지 갭의 값을 측정했다. 즉, 시료의 톨루엔 용액(10⁻⁵몰/리터)을 이용하여 히타치사(HITACHI Co. Ltd.) 제 자외가시흡광계를 이용하여 흡수 스펙트럼을 측정했다. 스펙트럼의 장파장측의 증가 선에 대하여 접선을 그어 그 접선과 횡축의 교점인 파장(흡수단)을 구했다. 이 파장을 에너지값으로 환산했다.

합성에 1(화합물(30)의 합성)

화합물(30)의 합성 경로를 이하에 나타낸다.



(1) 합성 중간체(A)의 합성

4-브로모요오도벤젠 25.4 g(90 mmol), 카바졸 10.0 g(60 mmol), 요오드화 구리 0.1 g(0.5 mmol), 인산칼륨 26.7 g(126 mmol)을 1,4-다이옥세인 70밀리리터에 현탁하고, 트랜스-1,2-사이클로헥산다이아민 0.7밀리리터(6 mmol)를 가하여 아르곤 분위기하에서 15시간 가열 환류시켰다. 반응 용액을 실온까지 냉각하고, 염화메틸렌, 물을 가하고, 2층 분리한 후, 유기층을 5% 염산 수용액, 물로 순차적으로 세정하여, 무수 황산나트륨으로 건조시켰다. 유기 용매를 감압 증류 제거한 후, 에탄올 50밀리리터를 가하고, 석출한 결정을 여과하고 에탄올, 노말헥산으로 순차적으로 세정하여, 합성 중간체(A) 17.8 g(수율 92%)을 수득했다.

(2) 합성 중간체(B)의 합성

합성 중간체(A) 8.0 g(25 mmol)을 톨루엔 50밀리리터, 에터 50밀리리터에 용해하고, 아르곤 분위기하 -40℃에서 노말부틸리튬 헥산 용액(1.6 M) 21밀리리터(32 mmol)를 가하여, -40℃로부터 0℃까지 1시간 교반했다. 다음으로 반응 용액을 -70℃까지 냉각하여, 붕산트라이아이소프로필 17밀리리터(74 mmol)를 에터 25밀리리터에 희석한 용액을 적하하여, -70℃에서 1시간 교반한 후, 실온까지 승온시켜 6시간 교반했다. 또한 반응 용액에 5% 염산 70밀리리터를 적하한 후, 실온에서 45분간 교반했다. 반응 용액을 2층 분리한 후, 유기층을 포화 식염수로 세정하여 무수 황산나트륨으로 건조시켰다. 유기 용매를 5분의 1 정도까지 감압 증류 제거후, 석출한 결정을 여과하고, 톨루엔-노말 헥산 혼합 용매, 노말 헥산으로 순차적으로 세정하여 합성 중간체(B) 4.0 g(수율 56%)을 수득했다.

(3) 목적 화합물(30)의 합성

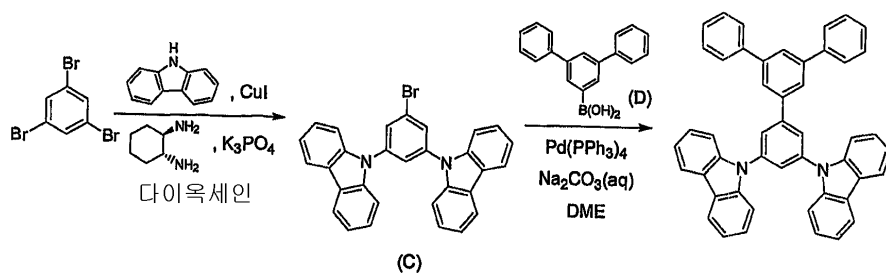
합성 중간체(B) 2.0 g(7.0 mmol), 브로모-3,5-다이페닐벤젠 2.2 g(7.0 mmol), 테트라키스(트라이페닐포스핀)팔라듐 0.16 g(0.14 mmol)을 톨루엔 21밀리리터에 현탁하고, 탄산나트륨 2.2 g(21 mmol)을 물 11밀리리터에 용해한 용액을 가하여 아르곤 분위기하에서 9시간 가열 환류시켰다. 반응 용액을 2층 분리한 후, 유기층을 포화 식염수로 세정하여, 무수 황산나트륨으로 건조시켰다. 유기 용매를 감압 증류 제거후, 아세트산 에틸 12밀리리터를 가하고, 석출한 결정을 여과하고, 아세트산 에틸로 세정하여 결정 2.6 g(수율 78%)을 수득했다.

수득된 결정은, 90 MHz $^1\text{H-NMR}$, FD-MS(필드 디스orption 매스 분석(Field Desorption Mass Spectrometry))에 의해 목적물인 것을 확인했다. 또한, FD-MS의 측정 결과를 이하에 나타낸다.

FDMS, $\text{C}_{36}\text{H}_{25}\text{N}$ 에 대한 계산치=471, 실측치, $m/z=471(\text{M}^+, 100)$

합성예 2 (화합물(1)의 합성)

화합물(1)의 합성 경로를 이하에 나타낸다.



(1) 합성 중간체(C)의 합성

1,3,5-트라이브로모벤젠 5.0 g(16 mmol), 카바졸 8.8 g(52 mmol), 요오드화 구리 0.3 g(1.6 mmol), 인산칼륨 13.8 g(65 mmol)을 1,4-다이옥세인 50밀리리터에 현탁하고, 트랜스-1,2-사이클로헥산 다이아민 1.9밀리리터(16 mmol)를 가하여 아르곤 분위기하에서 19시간 가열 환류시켰다. 반응 용액을 실온까지 냉각하고, 염화메틸렌, 물을 가하여 2층 분리한 후, 물로 세정하고 무수 황산나트륨으로 건조시켰다. 유기 용매를 5분의 1 정도까지 감압 증류 제거후, 석출한 결정을 여과하고, 아세트산 에틸로 세정하고, 여액을 실리카겔 컬럼 크로마토그래피로 정제하여 합성 중간체(C) 1.8 g(수율 23%)을 수득했다.

(2) 합성 중간체(D)의 합성

브로모-3,5-다이페닐벤젠 10.0 g(32 mmol)을 톨루엔 50밀리리터, 에터 50밀리리터에 용해하고, 아르곤 분위기하에서 -16 내지 -42℃에서 노말부틸리튬 헥산 용액(1.6 M) 27밀리리터(42 mmol)를 가하고, -42℃로부터 0℃에서 1시간 교반했다. 다음으로 반응 용액을 -70℃까지 냉각하고, 붕산트라이아이소프로필 22밀리리터(97 mmol)를 에터 25밀리리터에 희석한 용액을 적하하고, -70℃에서 1시간 교반한 후, 실온까지 승온시켜 6시간 교반했다. 또한 반응 용액에 5% 염산 70밀리리터를 적하한 후, 실온에서 45분간 교반했다. 반응 용액을 2층 분리한 후, 유기층을 3% 염산, 포화 식염수로 순차적으로 세정하여, 무수 황산나트륨으로 건조시켰다. 유기용매를 5분의 1 정도까지 감압 증류 제거후, 노말 헥산 10밀리리터를 가하고, 석출한 결정을 여과하고, 톨루엔-노말 헥산 혼합 용매, 노말 헥산으로 순차적으로 세정하여 합성 중간체(D) 7.0 g(수율 78%)을 수득했다.

(3) 목적 화합물(1)의 합성

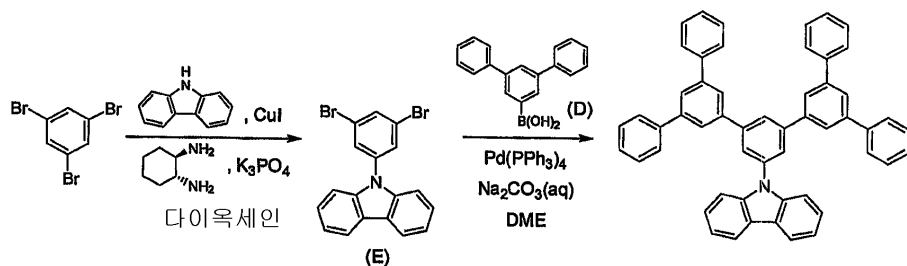
합성 중간체(C) 1.8 g(3.6 mmol), 합성 중간체(D) 0.99 g(3.6 mmol), 테트라키스(트라이페닐포스핀)팔라듐 0.08 g(0.07 mmol)을 1,2-다이메톡시에탄 22밀리리터에 현탁하고, 탄산나트륨 1.1 g(11 mmol)을 물 5밀리리터에 용해한 용액을 가하여, 아르곤 분위기하에서 9시간 가열 환류시켰다. 반응 용액을 실온까지 냉각후, 석출한 결정을 여과하고, 물, 메탄올, 아세트산 에틸로 순차적으로 세정하여 조결정 1.9 g을 수득했다. 수득된 결정을 감압하에 승화 정제하여 정제 결정 1.6 g(수율 68%)을 수득했다.

수득된 결정은, 90 MHz ¹H-NMR, FD-MS에 의해 목적물인 것을 확인했다. 또한, FD-MS의 측정결과를 이하에 나타낸다.

FDMS, C₄₈H₃₂N₂에 대한 계산치=636, 실측치, m/z= 636(M⁺, 100)

합성예 3(화합물(4)의 합성)

화합물(4)의 합성 경로를 이하에 나타낸다.



(1) 합성 중간체(E)의 합성

1,3,5-트라이브로모벤젠 5.0 g(16 mmol), 카바졸 5.3 g(32 mmol), 요오드화 구리 0.3 g(1.6 mmol), 인산칼륨 13.8 g(65 mmol)을 1,4-다이옥세인 50밀리리터에 현탁하고, 트랜스-1,2-사이클로헥산다이아민 1.9밀리리터(16 mmol)를 가하고, 아르곤 분위기하에서 9시간 가열 환류시켰다. 반응 용액을 실온까지 냉각하고, 염화메틸렌, 물을 가하고 2층 분리한 후, 물로 세정하고, 무수 황산나트륨으로 건조시켰다. 유기 용매를 5분의 1 정도까지 감압 증류 제거후, 석출한 결정을 여과하고, 아세트산 에틸로 세정하고, 여액을 실리카겔 컬럼 크로마토그래피로 정제하여 합성 중간체(E) 2.0 g(수율 31%)을 수득했다.

(2) 목적 화합물(4)의 합성

합성 중간체(E) 1.8 g(4.5 mmol), 합성 중간체(D) 2.5 g(9.0 mmol), 테트라키스(트라이페닐포스핀)팔라듐 0.16 g(0.13 mmol)을 1,2-다이메톡시에탄 27밀리리터에 현탁하고, 탄산나트륨 2.9 g(11 mmol)을 물 14밀리리터에 용해한 용액을 가하고, 아르곤 분위기하에서 18시간 가열 환류시켰다. 반응 용액을 실온까지 냉각후, 석출한 결정을 여과하고, 물, 메탄올, 아세트산 에틸로 순차적으로 세정하여 조결정 3.3 g을 수득했다. 수득된 결정을 감압하에 승화 정제하여 정제 결정 2.9 g(수율 92%)을 수득했다.

수득된 결정은 90 MHz ¹H-NMR, FD-MS에 의해 목적물인 것을 확인했다. 또한, FD-MS의 측정 결과를 이하에 나타낸다.

FDMS, C₅₄H₃₇N에 대한 계산치=699, 실측치, m/z= 699(M⁺, 100)

합성에 4(화합물(37)의 합성)

(1) 합성 중간체(C)의 합성

3리터의 플라스크에 아르곤 기류하에 1,3,5-트라이브로모벤젠 118 g(도쿄가세이사(TOKYO KASEI Co. Ltd.) 제품), 카바졸 125 g(시그마 알드리치사(Sigma-Aldrich Corporation) 제품), 요오드화 구리 7 g(와코순야쿠사(WAKO Pure Chemical Industries, Ltd.) 제품), 인산삼칼륨 317 g(와코순야쿠사 제품), 트랜스-1,2-사이클로헥산 다이아민 43 g(도쿄가세이사제), 1,4-다이옥세인 1.2리터(와코순야쿠사 제품)를 넣고, 104℃에서 15시간 교반했다.

반응후 실온까지 방냉하고, 물 1리터를 가하고, 염화메틸렌 3리터를 가하여 추출을 했다. 무수 황산마그네슘으로 건조후 감압 농축하여 수득된 잔사를 감압 여과하고, 모액을 실리카겔 컬럼 크로마토그래피로 정제한 바, 3,5-비스(카바졸릴-9-II)-1-브로모벤젠(중간체(C)) 92 g을 수득했다.

(2) 목적 화합물(37)의 합성

500밀리리터의 플라스크에 아르곤 기류하에 상기 (1)에서 수득된 합성 중간체(C) 10 g, 페닐보론산 2.8 g(알드리치사 제품), 테트라키스트라이페닐포스핀팔라듐(0) 0.5 g(N.E.CHEMCAT사 제품), 다이메톡시에탄 130밀리리터(와코순야쿠사 제품), 탄산나트륨 6.5 g(와코순야쿠사 제품)를 물 30밀리리터에 용해한 수용액을 넣고, 78℃에서 26시간 교반했다.

반응후, 실온까지 방냉하여 석출 결정을 여과하여 취했다. 이것을 톨루엔에 가열 용해하고, 열 여과를 하고, 모액을 농축하여, 석출 결정을 여과하여 취했다. 이것을 추가로 톨루엔으로 재결정화하여 4.7 g(수율 47%)의 백색 분말을 수득했다.

수득된 분말에 대하여, FD-MS를 측정 한 바, $C_{36}H_{24}N_2 = 484$ 에 대하여, $m/z = 484$ 의 주피크가 얻어졌기 때문에, 이것을 목적 화합물(37)로 동정했다.

합성예 5(화합물(38)의 합성)

500밀리리터의 플라스크에 아르곤 기류하에 합성예 4의 (1)에서 수득된 합성 중간체(C) 8.7 g, 4-바이페닐보론산 3.9 g(알드리치사 제품), 테트라키스트라이페닐포스핀팔라듐(0) 0.4 g(N.E.CHEMCAT사 제품), 다이메톡시에탄 110밀리리터(와코준야쿠사 제품), 탄산나트륨 5.7 g(와코준야쿠사 제품)을 물 27밀리리터에 용해한 수용액을 넣고, 78℃에서 15시간 교반했다.

반응후, 실온까지 방냉하여 석출 결정을 여과하여 취했다. 이것을 톨루엔에 가열 용해하고, 열 여과를 하고, 모액을 농축하고, 석출 결정을 여과하여 취했다. 이것을 추가로 톨루엔으로 재결정화하여 6.3 g(수율 63%)의 백색 분말을 수득했다.

수득된 분말에 대하여 FD-MS를 측정 한 바, $C_{42}H_{28}N_2 = 560$ 에 대하여, $m/z = 560$ 의 주피크가 얻어졌기 때문에, 이것을 목적 화합물(38)로 동정했다.

합성예 6(화합물(39)의 합성)

500 밀리리터의 플라스크에 아르곤 기류하에 합성예 4의 (1)에서 수득된 합성 중간체(C) 8.7 g, 2-바이페닐보론산 3.9 g(알드리치사 제품), 테트라키스트라이페닐포스핀팔라듐(0) 0.4 g(N.E.CHEMCAT사 제품), 다이메톡시에탄 110밀리리터(와코준야쿠사 제품), 탄산나트륨 5.7 g(와코준야쿠사 제품)을 물 27밀리리터에 용해한 수용액을 넣고, 78℃에서 14시간 교반했다.

반응후, 실온까지 방냉하여 석출 결정을 여과하여 취했다. 이것을 톨루엔에 가열 용해하고, 열 여과를 하고, 모액을 농축하고, 석출 결정을 여과하여 취했다. 이것을 추가로 톨루엔으로 재결정화하여 5.6 g(수율 56%)의 백색 분말을 수득했다.

수득된 분말에 대하여 FD-MS를 측정 한 바, $C_{42}H_{28}N_2 = 560$ 에 대하여 $m/z = 560$ 의 주피크가 얻어졌기 때문에, 이것을 목적 화합물(39)로 동정했다.

합성예 7(화합물(40)의 합성)

500 밀리리터의 플라스크에 아르곤 기류하에 합성예 4의 (1)에서 수득된 합성 중간체(C) 9.1 g, 1-나프탈렌보론산 3.5 g(알드리치사 제품), 테트라키스트라이페닐포스핀팔라듐(0) 0.4 g(N.E.CHEMCAT사 제품), 다이메톡시에탄 120밀리리터(와코준야쿠사 제품), 탄산나트륨 6.0 g(와코준야쿠사 제품)을 물 27밀리리터에 용해한 수용액을 넣고, 78℃에서 14시간 교반했다.

반응후, 실온까지 방냉하여 석출 결정을 여과하여 취했다. 이것을 톨루엔에 가열 용해하고, 열 여과를 하고, 모액을 농축하고, 석출 결정을 여과하여 취했다. 이것을 추가로 톨루엔으로 재결정화하여 6.3 g(수율63%)의 백색 분말을 수득했다.

수득된 분말에 대하여 FD-MS를 측정 한 바, $C_{40}H_{26}N_2 = 534$ 에 대하여, $m/z = 534$ 의 주피크가 얻어졌기 때문에, 이것을 목적 화합물(40)로 동정했다.

합성예 8(화합물(41)의 합성)

500밀리리터의 플라스크에 아르곤 기류하에 합성예 4의 (1)에서 수득된 합성 중간체(C) 9.1g, 2-나프탈렌보론산 3.5 g(알드리치사 제품), 테트라키스트라이페닐포스핀팔라듐(0) 0.4 g(N.E.CHEMCAT사 제품), 다이메톡시에탄 120밀리리터(와코준야쿠사 제품), 탄산나트륨 6.0 g(와코준야쿠사 제품)을 물 27밀리리터에 용해한 수용액을 넣고, 78℃에서 15시간 교반했다.

반응후, 실온까지 방냉하여 석출 결정을 여과하여 취했다. 이것을 톨루엔에 가열 용해하고, 열 여과를 하고, 모액을 농축하고, 석출 결정을 여과하여 취했다. 이것을 추가로 톨루엔으로 재결정화하여 5.3 g(수율 53%)의 백색 분말을 수득했다.

수득된 분말에 대하여 FD-MS를 측정 한 바, $C_{40}H_{26}N_2 = 534$ 에 대하여 $m/z = 534$ 의 주피크가 얻어졌기 때문에, 이것을 목적 화합물(41)로 동정했다.

합성예 9(화합물(42)의 합성)

500밀리리터의 플라스크에 아르곤 기류하에 합성예 4의 (1)에서 수득된 합성 중간체(C) 9.1 g, 9-페난트렌보론산 4.2 g(알드리치사 제품), 테트라키스트라이페닐포스핀팔라듐(0) 0.4 g(N.E.CHEMCAT사 제품), 다이메톡시에탄 110밀리리터(와코준야쿠사 제품), 탄산나트륨 5.5 g(와코준야쿠사 제품)을 물 26밀리리터에 용해한 수용액을 넣고, 78℃에서 14시간 교반했다.

반응후, 실온까지 방냉하고 석출 결정을 여과하여 취했다. 이것을 톨루엔에 가열 용해하고, 열 여과를 하고, 모액을 농축하고, 석출 결정을 여과하여 취했다. 이것을 추가로 톨루엔으로 재결정화하여 6.8 g(수율68%)의 백색 분말을 수득했다.

얻어진 분말에 대하여 FD-MS를 측정 한 바, $C_{44}H_{28}N_2 = 584$ 에 대하여 $m/z = 584$ 의 주피크가 얻어졌기 때문에, 이것을 목적 화합물(42)과 동정했다.

합성예 10(화합물(43)의 합성)

(1) 합성 중간체(F)의 합성

300밀리리터의 플라스크에 아르곤 기류하에 합성예 4의 (1)에서 수득된 합성 중간체(C) 9.0 g, 탈수 톨루엔 100밀리리터(와코준야쿠사 제품), 탈수 에터 100밀리리터(와코준야쿠사 제품)를 넣고, -10℃에서 빙냉하고, 1.6M-부틸리튬 14.8 밀리리터(간토화학사 제품)를 적하하고, 2시간 교반했다.

이것에 보론산 트라이아이소프로필 에스터 10.4 g(도쿄가세이사 제품)을 가하고, 실온으로 되돌려 12시간 교반했다.

그 후, 빙냉하고, 10℃ 이하에서 진한 염산 14밀리리터를 물 100밀리리터에 가한 묽은 염산을 가하고, 유기층을 분액하고, 무수 황산마그네슘으로 건조후, 감압 농축했다. 수득된 점성물을 테트라하이드로퓨란(THF) 30밀리리터에 용해하고, 이것에 헥산을 가하여 결정을 석출시켰다.

이것을 여과하여 취한 바, 3,5-비스(카바졸릴-9-일)벤젠보론산(중간체(F)) 5.9 g를 수득했다.

(2) 목적 화합물(43)의 합성

500밀리리터의 플라스크에 아르곤 기류하에 합성예 4의 (1)에서 수득된 합성 중간체(C) 5.6 g, 상기 (1)에서 수득된 중간체(F) 5.7 g, 테트라키스트라이페닐포스핀팔라듐(0) 0.3 g(N.E.CHEMCAT사 제품), 다이메톡시에탄 110밀리리터(와코준야쿠사 제품), 탄산나트륨 3.6 g(와코준야쿠사 제품)을 물 17밀리리터에 용해한 수용액을 넣고, 78℃에서 15시간 교반했다.

반응후 실온까지 방냉하여 석출 결정을 여과하여 취했다. 이것을 톨루엔에 가열 용해하고, 열 여과를 하고, 모액을 농축하고, 석출 결정을 여과하여 취했다. 이것을 추가로 톨루엔으로 재결정화하여 4.5 g(수율48%)의 백색 분말을 수득했다.

수득된 분말에 대하여 FD-MS를 측정 한 바, $C_{60}H_{38}N_4 = 815$ 에 대하여 $m/z = 815$ 의 주피크가 얻어졌기 때문에 이것을 목적 화합물(43)로 동정했다.

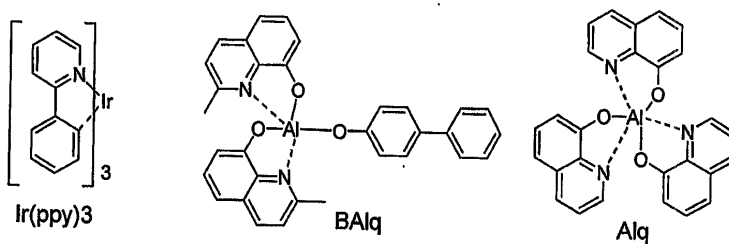
실시에 1(유기 EL 소자의 제조)

25 mm× 75 mm× 0.7 mm 두께의 ITO 투명 전극 부착 유리 기판을 아이소프로필알코올 중에서 초음파 세정을 5분간 실시한 후, UV 오존 세정을 30분간 실시했다. 세정후의 투명 전극 부착 유리 기판을 진공 증착 장치의 기판 홀더에 장착하고, 우선 투명 전극이 형성되어 있는 측의 면상에 상기 투명 전극을 덮도록 하여 막 두께 10nm의 구리프탈로시아닌막(CuPc막)을 성막했다. 이 CuPc막은 정공 주입층으로서 기능한다. 이 CuPc막 상에, 막 두께 30 nm의 4,4'-비스[N-(4-바이페닐)-N-(4-바이페닐)아미노]바이페닐막(TBAB 막)을 성막했다. 이 TBAB막은 정공 수송층으로서 기능한다. 또한,

TBAB막 상에 막 두께 40 nm의 화합물(1)을 호스트 재료로서 발광층을 성막하고, 동시에 인광 발광성의 Ir 금속 착체 도판트로서 상기 트리스(2-페닐피리딘)Ir(I-1)을 첨가하여 증착했다. 이 막은 발광층으로서 기능한다. 발광층 중에서의 (I-1)의 농도는 5중량%로 했다. 이 막 상에 막 두께 10 nm의 하기 (1,1'-비스페닐)-4-올레이트비스(2-메틸-8-퀴놀린올라토)알루미늄(BAlq막)을 성막했다. 이 BAlq막은 정공장벽층으로서 기능한다. 또한 이 막 상에 막 두께 20 nm의 하기 8-하이드록시퀴놀린의 알루미늄 착체(Alq막)를 성막했다. 이 Alq막은 전자 주입층으로서 기능한다. 이 다음 할로젠화 알칼리 금속인 LiF를 0.2 nm의 두께로 증착하고, 이어서, 알루미늄을 150 nm의 두께로 증착했다. 이 Al/LiF는 음극으로서 기능한다. 이렇게 하여 유기 EL 소자를 제작했다.

발광층의 호스트 재료의 3중항 에너지 갭, 1중항 에너지 갭 및 유리 전이 온도를 측정한 결과를 표 1에 나타낸다.

또한, 이 소자에 대하여 통전 시험을 실시한 바, 전압 5.2 V, 전류 밀도 0.24 mA/cm²로써, 104 cd/m²의 녹색 발광이 얻어지고, 색도 좌표는 (0.32,0.61), 효율은 42.6 cd/A였다. 또한, 105℃에서 500시간 보존 후의 발광 효율은 41.6 cd/A 이고, 발광면은 균일하며 결함은 생기지 않고, 정류비(순방향 전류/역방향 전류)가 1×10⁵ 이상이였다. 이상의 결과를 표 2에 나타낸다.



실시예 2 내지 5

실시예 1에 있어서, 발광층의 호스트 재료로서 화합물(1) 대신에 표 1에 기재된 화합물을 사용하는 이외에는 같은 방법으로 유기 EL 소자를 제작했다. 수득된 소자에 대하여, 실시예 1과 같이, 3중항 에너지 갭, 1중항 에너지 갭, 유리 전이 온도, 전압, 전류 밀도, 발광 휘도, 발광 효율, 색도를 측정하여 표 1 및 표 2에 나타내었다. 또한, 실시예 2 내지 5 모두의 유기 EL 소자에 대하여 105℃에서 500시간 보존후에도 발광면은 균일하고 결함은 생기지 않고, 정류비(순방향 전류/역방향 전류)가 1×10⁵ 이상이였다.

비교예 1

실시예 1에 있어서, 발광층의 호스트 재료로서 화합물(1) 대신에 CBP(4,4-N,N-다이카바졸릴바이페닐)을 사용하는 이외에는 같은 방법으로 유기 EL 소자를 제작했다. 수득된 소자에 대하여, 동일하게 3중항 에너지 갭, 1중항 에너지 갭, 유리 전이 온도, 전압, 전류 밀도, 발광 휘도, 발광 효율, 색도를 측정하여 표 1 및 표 2에 나타내었다. 또한, 이 소자를 10소자 제작했지만, 모두 초기부터 발광면에 결함이 생겨 쉽게 단락적인 증상을 나타내는 누출 전류가 많아 정류비(순방향 전류/역방향 전류)가 1×10⁴ 이하였다. 또한, 105℃에서 500시간 저장한 바, 발광면에 결함이 생겨 정류비는 1×10³ 이하로 되었다. 또한, 발광 휘도는 수 cd/m²밖에 안되어 현저히 저하되었다.

표 1.

	발광층의 호스트 재료	3중항 에너지 갭 (eV)	1중항 에너지 갭 (eV)	유리 전이 온도 (℃)
실시예 1	(1)	2.9	3.7	128
실시예 2	(4)	2.9	3.7	125
실시예 3	(38)	2.7	3.57	123.4
실시예 4	(42)	2.64	3.57	130.5
실시예 5	(43)	2.88	3.57	181.9
비교예 1	CBP	2.81	3.6	105

표 2.

	발광층의 호스트 재료	전압	전류 밀도	발광 휘도	발광 효율	105℃, 500시간 보존후의 발광 효율	색도 좌표	발광 색
		(V)	(mA/cm ²)	(cd/m ²)	(cd/A)	(cd/A)	(x,y)	
실시예 1	(1)	5.2	0.24	104	42.6	41.6	(0.32,0.61)	녹
실시예 2	(4)	5.8	0.27	99	36.1	35.4	(0.32,0.61)	녹
실시예 3	(38)	5.5	0.3	99.1	39.7	39.6	(0.32,0.61)	녹
실시예 4	(42)	6.1	0.3	102.5	32.4	32.4	(0.32,0.61)	녹
실시예 5	(43)	5.9	0.3	105.8	38.5	38.5	(0.32,0.61)	녹
비교예 1	CBP	6	0.28	103	32.1	15.7	(0.32,0.61)	녹

표 2에 나타난 바와 같이, 본 발명의 유기 EL 소자용 재료를 이용한 유기 EL 소자는 고온 보존후에도 고효율의 녹색 발광이 얻어진다. 또한, 본 발명의 유기 EL 소자용 재료는, 유리 전이 온도가 높고 또한 대칭성이 떨어져 있기 때문에, 고온 보존에 의한 효율의 저하가 거의 없고, 고온 보존후라도 정류비는 1×10^5 이상으로 매우 높았다. 또한, 비교예 1과 같이, CBP와 같은 강직한 카바졸릴기를 양호한 대칭성으로 배치한 화합물에서는 발광면에 결함이 생기기 쉬워, 고온 유지후는 발광 효율이 저하되었다. 따라서, 본 발명과 같이 대칭성을 떨어뜨려 m-터페닐 구조를 보유시키는 것에 의해, 발광면의 결함을 억제하는 점에서 효과적인 것이 밝혀졌다.

산업상 이용 가능성

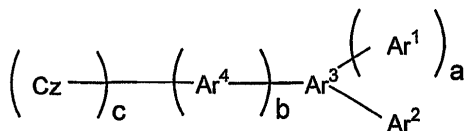
이상 구체적으로 설명한 바와 같이, 본 발명의 화학식 1로 표시되는 화합물로 이루어진 유기 전기발광 소자용 재료를 이용하면, 발광 효율이 높고, 화소 결함이 없고, 내열성이 우수한 유기 전기발광 소자가 얻어진다. 이 때문에, 본 발명의 유기 전기발광 소자는 각종 전자기기의 광원 등으로서 매우 유용하다.

(57) 청구의 범위

청구항 1.

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

화학식 1



(식 중, Cz는, 카바졸릴기, 탄소수 18 내지 60 아릴카바졸릴기, 아자카바졸릴기, 탄소수 18 내지 60의 아릴아자카바졸릴기, 아크리딘일기, 페녹사진일기 또는 다이벤조아제핀일기이며 치환되어 있더라도 좋다. Ar¹ 및 Ar²는 각각 독립적으로 치환 또는 비치환의 탄소수 6 내지 60의 아릴기 또는 치환 또는 비치환의 탄소수 3 내지 60의 헤테로환기이다. Ar³은 탄소수 6 내지 60의 방향족 탄화수소기 또는 치환 또는 비치환의 탄소수 3 내지 60의 헤테로환기이다. Ar⁴는 치환 또는 비치환의 벤젠 잔기, 치환 또는 비치환의 티오펜 잔기, 치환 또는 비치환의 트리아졸 잔기, 치환 또는 비치환의 플루오렌 잔기 또는 치환 또는 비치환의 스퀴아로바이플루오렌 잔기이다.

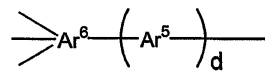
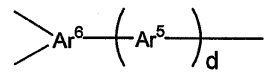
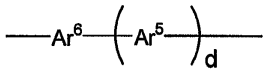
a는 0 내지 1의 정수, b는 0 내지 4의 정수, c는 1 내지 3의 정수이며, Cz 및 Ar⁴는 복수일 경우 각각 서로 동일하거나 상이할 수 있다.

단, $a=0$ 이고 $c=1$ 일 경우, Ar^3 및 Ar^4 가 벤젠 잔기이고 Ar^2 가 페닐카바졸릴기 또는 카바졸릴기인 경우를 제외한다. 또한, $a=1$, $b=0$ 이고 $c=1$ 일 경우, Ar^3 이 벤젠 잔기이고 Ar^1 및 Ar^2 가 페닐카바졸릴기인 경우를 제외한다. 또한, $b=0$ 이고 $c=1$ 일 경우, Ar^3 이 벤젠 잔기이고 Ar^1 , Ar^2 및 Cz 가 카바졸릴기 또는 페닐카바졸릴기인 경우를 제외한다.)

청구항 2.

제 1 항에 있어서,

화학식 1에서 Ar^4 가 다음 화학식으로 표시되는 유기 전기발광 소자용 재료.



(식 중, Ar^5 및 Ar^6 은 각각 독립적으로 Ar^4 와 동일하고,

d 는 0 내지 3의 정수이다. Ar^5 는 복수일 경우 서로 동일하거나 상이할 수 있다.)

청구항 3.

제 1 항에 있어서,

화학식 1에서 $a=0$ 인 유기 전기발광 소자용 재료.

청구항 4.

제 1 항에 있어서,

화학식 1에서 $a=0$ 이고 $b=0$ 인 유기 전기발광 소자용 재료.

청구항 5.

제 1 항에 있어서,

화학식 1에서 $a=0$ 이고 $b=0$ 이며, $c=2$ 내지 3의 정수인 유기 전기발광 소자용 재료.

청구항 6.

제 1 항에 있어서,

상기 화학식 1로 표시되는 화합물이, 유기 전기발광 소자의 호스트 재료인 유기 전기발광 소자용 재료.

청구항 7.

음극과 양극사이에 적어도 발광층을 갖는 1층 또는 복수층으로 이루어진 유기 박막층이 형성되어 있는 유기 전기발광 소자에 있어서, 상기 유기 박막층의 적어도 1층이 제 1 항에 따른 화학식 1로 표시되는 화합물로 이루어진 유기 전기발광 소자용 재료를 함유하는 유기 전기발광 소자.

청구항 8.

제 7 항에 있어서,

화학식 1에서 $a=0$ 인 유기 전기발광 소자.

청구항 9.

제 7 항에 있어서,

화학식 1에서 $a=0$ 이고 $b=0$ 인 유기 전기발광 소자.

청구항 10.

제 7 항에 있어서,

화학식 1에서 $a=0$ 이고 $b=0$ 이며, $c=2$ 내지 3의 정수인 유기 전기발광 소자.

청구항 11.

제 7 항에 있어서,

상기 발광층이 호스트 재료와 인광성의 발광 재료로 이루어지고, 상기 호스트 재료가 제 1 항에 따른 유기 전기발광 소자용 재료로 이루어진 유기 전기발광 소자.

청구항 12.

제 7 항에 있어서,

음극과 유기 박막층의 계면 영역에 환원성 도판트가 첨가되어 이루어진 유기 전기발광 소자.

청구항 13.

제 7 항에 있어서,

상기 발광층과 음극 사이에 전자 주입층을 갖고, 상기 전자주입층이 함질소환 유도체를 주성분으로서 함유하는 유기 전기발광 소자.

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	KR1020050100694A	公开(公告)日	2005-10-19
申请号	KR1020057015231	申请日	2004-02-18
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	TOMITA SEIJI 도미타세이지 IWAKUMA TOSHIHIRO 이와쿠마도시히로 ARAKANE TAKASHI 아라카네다카시 YAMAMICHI KEIKO 야마미치게이코 HOSOKAWA CHISHIO 호소카와치시오		
发明人	도미타세이지 이와쿠마도시히로 아라카네다카시 야마미치게이코 호소카와치시오		
IPC分类号	H01L51/00 H05B33/14 H01L51/50 H01L51/30 C09K11/06		
CPC分类号	H01L51/5012 H01L51/0072 H01L51/0067 C09K11/06 H01L51/0085 H05B33/14 H01L2251/308 H01L51/0059 H01L51/0058 H01L51/0081		
优先权	2003042625 2003-02-20 JP 2003387855 2003-11-18 JP		
外部链接	Espacenet		

摘要(译)

关于有机电致发光器件，其中由第一层构成的有机薄膜层至少具有发光层，所述发光层位于由所述化合物和阴极构成的有机电致发光器件的材料和阳极或具有特定方案的多层之间。低对称性被夹持，至少有机薄膜层的第一层提供用于有机电致发光器件的材料，能够提供和使用相同的有机电致发光器件的有机电致发光器件具有优异的耐热性，没有像素缺陷它是包含用于有机电致发光器件的材料的有机电致发光器件和发光效率高。

