

	(19) 대한민국특허청(KR) (12) 공개특허공보(A)	(11) 공개번호 10-2008-0080306 (43) 공개일자 2008년09월03일
(51) Int. Cl. <i>H01L 51/50</i> (2006.01) <i>C07D 307/91</i> (2006.01) <i>C07D 333/76</i> (2006.01) <i>C07D 405/10</i> (2006.01) (21) 출원번호 10-2008-7014171 (22) 출원일자 2008년06월12일 심사청구일자 없음 번역문제출일자 2008년06월12일 (86) 국제출원번호 PCT/JP2006/324682 국제출원일자 2006년12월11일 (87) 국제공개번호 WO 2007/069569 국제공개일자 2007년06월21일 (30) 우선권주장 JP-P-2005-00362481 2005년12월15일 일본(JP)		(71) 출원인 이데미쓰 고산 가부시키키가이샤 일본 도쿄도 지요다쿠 마루노우치 3초메 1반 1고 (72) 발명자 나카노 유키 일본 지바켄 소테가우라시 가미이즈미 1280반치 마츠우라 마사히데 일본 지바켄 소테가우라시 가미이즈미 1280반치 (뒷면에 계속) (74) 대리인 김창세

전체 청구항 수 : 총 20 항

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

(57) 요약

특정 구조의 화합물로 이루어지는 유기 전기발광 소자용 재료, 및 음극과 양극사이에 적어도 발광층을 갖는 1층 또는 복수층으로 이루어지는 유기 박막층이 형성되어 있는 유기 전기발광 소자에 있어서, 상기 유기 박막층의 적어도 1층이, 상기 유기 전기발광 소자용 재료를 함유함으로써, 발광 효율이 높고, 화소 결함이 없고, 내열성이 우수하며, 장수명인 유기 전기발광 소자용 재료 및 유기 전기발광 소자를 제공한다.

(72) 발명자

이케다 히데츠구

일본 지바켄 소테가우라시 가미이즈미 1280반치

이와쿠마 도시히로

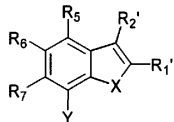
일본 지바켄 소테가우라시 가미이즈미 1280반치

특허청구의 범위

청구항 1

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

화학식 1



[식 중, R₁' , R₂' 및 R₅ 내지 R₇은 각각 독립적으로 수소 원자, 할로젠 원자, 치환기를 가질 수도 있는 탄소수 1 내지 40의 알킬기, 치환기를 가질 수도 있는 탄소수 3 내지 60의 벤조트라이아졸 골격을 갖지 않는 헤테로환기, 치환기를 가질 수도 있는 탄소수 1 내지 40의 알콕시기, 치환기를 가질 수도 있는 탄소수 6 내지 60의 아릴기, 치환기를 가질 수도 있는 탄소수 6 내지 60의 아릴옥시기, 치환기를 가질 수도 있는 탄소수 7 내지 60의 아르알킬기, 치환기를 가질 수도 있는 탄소수 2 내지 40의 알켄일기, 치환기를 가질 수도 있는 1 내지 40의 알킬아미노기, 치환기를 가질 수도 있는 탄소수 7 내지 60의 아르알킬아미노기, 치환기를 가질 수도 있는 탄소수 3 내지 20의 알킬실릴기, 치환기를 가질 수도 있는 탄소수 8 내지 40의 아릴실릴기, 치환기를 가질 수도 있는 탄소수 7 내지 40의 케토아릴기, 치환기를 가질 수도 있는 탄소수 1 내지 40의 할로젠화알킬기 또는 사이아노기이다.

R₁'과 R₂' , R₅와 R₆은, R₆과 R₇은 각각 서로 결합하여 포화 또는 불포화의 환상 구조를 형성하고 있을 수도 있다.

X는 황 원자, 산소 원자, 또는 SiRaRb로 표시되는 치환 규소 원자를 나타내고, Ra 및 Rb는 각각 독립적으로 탄소수 1 내지 40의 알킬기를 나타낸다.

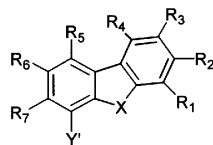
Y는 치환기를 가질 수도 있는 탄소수 1 내지 40의 알킬기, 치환기를 가질 수도 있는 탄소수 3 내지 60의 벤조트라이아졸 골격을 갖지 않는 헤테로환기, 치환기를 가질 수도 있는 탄소수 1 내지 40의 알콕시기, 치환기를 가질 수도 있는 탄소수 6 내지 60의 아릴기, 치환기를 가질 수도 있는 탄소수 6 내지 60의 아릴옥시기, 치환기를 가질 수도 있는 탄소수 7 내지 60의 아르알킬기, 치환기를 가질 수도 있는 탄소수 2 내지 40의 알켄일기, 치환기를 가질 수도 있는 1 내지 40의 알킬아미노기, 치환기를 가질 수도 있는 탄소수 7 내지 60의 아르알킬아미노기, 치환기를 가질 수도 있는 탄소수 3 내지 20의 알킬실릴기, 치환기를 가질 수도 있는 탄소수 8 내지 40의 아릴실릴기, 또는 치환기를 가질 수도 있는 탄소수 1 내지 40의 할로젠화알킬기이다.]

청구항 2

제 1 항에 있어서,

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

화학식 2



[식 중, R₁ 내지 R₇은 각각 독립적으로, 상기 화학식 1의 R₁' , R₂' 및 R₅ 내지 R₇과 같다. 단 R₁은 안트라센 골격이 아니고, R₁ 내지 R₇ 중 어느 하나가 아미노기인 경우는, R₁ 내지 R₇ 중 하나만이 아미노기이다.

R₁ 내지 R₄, R₅ 내지 R₇에서 인접하는 것 끼리 포화 또는 불포화의 환상 구조를 형성하고 있을 수도 있다.

X는 상기 화학식 1에서의 것과 같다.

Y'는 치환기를 가질 수도 있는 탄소수 1 내지 40의 알킬기, 치환기를 가질 수도 있는 탄소수 3 내지 60의 벤조트라이아졸 골격을 갖지 않는 헤테로환기, 치환기를 가질 수도 있는 탄소수 1 내지 40의 알콕시기, 치환기를 가질 수도 있는 탄소수 6 내지 60의 피렌 골격을 갖지 않는 아릴기, 치환기를 가질 수도 있는 탄소수 6 내지 60의

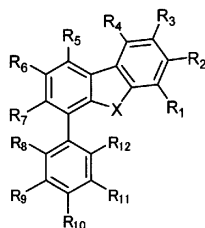
아릴옥시기, 치환기를 가질 수도 있는 탄소수 7 내지 60의 아르알킬기, 치환기를 가질 수도 있는 탄소수 2 내지 40의 알켄일기, 치환기를 가질 수도 있는 탄소수 3 내지 20의 알킬실릴기, 치환기를 가질 수도 있는 탄소수 8 내지 40의 아릴실릴기, 또는 치환기를 가질 수도 있는 탄소수 1 내지 40의 할로젠화알킬기이다.]

청구항 3

제 2 항에 있어서,

하기 화학식 3으로 표시되는 화합물로 이루어지는 유기 전기발광 소자용 재료.

화학식 3



[식 중, R₁ 내지 R₁₂는 각각 독립적으로 상기 화학식 2의 R₁ 내지 R₇과 같다. 단 R₈ 내지 R₁₂ 중 적어도 하나는 수소 원자이며, R₁ 내지 R₇ 중 어느 하나가 아미노기인 경우는, R₁ 내지 R₇ 중 하나만이 아미노기이다.

R₁ 내지 R₄, R₅ 내지 R₇, R₈ 내지 R₁₂에서 인접하는 것 끼리 또는 R₇과 R₈에서 포화 또는 불포화의 환상 구조를 형성하고 있을 수도 있다.

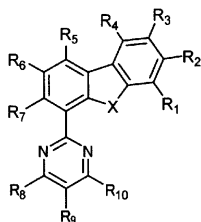
X는 상기 화학식 2에서의 것과 같다.]

청구항 4

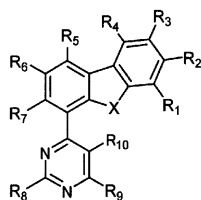
제 2 항에 있어서,

하기 화학식 4 내지 6으로 표시되는 화합물로 이루어지는 유기 전기발광 소자용 재료.

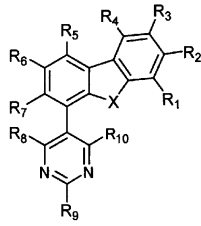
화학식 4



화학식 5



화학식 6



[식 중, R₁ 내지 R₁₀은 각각 독립적으로 상기 화학식 2의 R₁ 내지 R₇과 같고, R₁ 내지 R₇ 중 어느 하나가 아미노기인 경우는, R₁ 내지 R₇ 중 하나만이 아미노기이다.

화학식 4에서 R₁ 내지 R₄, R₅ 내지 R₇, R₈ 내지 R₁₀, 화학식 5에서 R₁ 내지 R₄, R₅ 내지 R₇, R₉ 내지 R₁₀, 또는 화학식 6에서 R₁ 내지 R₄, R₅ 내지 R₇에서 인접하는 것 끼리, 또는 R₇ 내지 R₈에서 포화 또는 불포화의 환상 구조를 형성하고 있을 수도 있다.

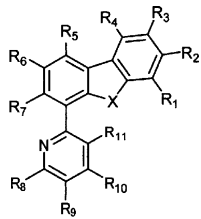
X는 상기 화학식 2에서의 것과 같다.]

청구항 5

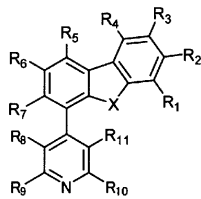
제 2 항에 있어서,

하기 화학식 7 내지 9 중 어느 하나로 표시되는 화합물로 이루어지는 유기 전기발광 소자용 재료.

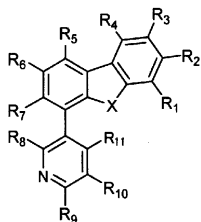
화학식 7



화학식 8



화학식 9



[식 중, R₁ 내지 R₁₁은 각각 독립적으로 상기 화학식 2의 R₁ 내지 R₇과 같고, R₁ 내지 R₇ 중 어느 하나가 아미노기인 경우는, R₁ 내지 R₇ 중 하나만이 아미노기이다.

화학식 7에서 R₁ 내지 R₄, R₅ 내지 R₇, R₈ 내지 R₁₁, 화학식 8에서 R₁ 내지 R₄, R₅ 내지 R₇, R₈ 내지 R₉, R₁₀ 내지 R₁₁에서 인접하는 것 끼리, 또는 R₇과 R₈, 화학식 9에서 R₁ 내지 R₄, R₅ 내지 R₇, R₉ 내지 R₁₁에서 인접하는 것 끼

리, 또는 R₇과 R₈에서 포화 또는 불포화의 환상 구조를 형성하고 있을 수도 있다.

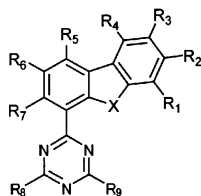
X는 상기 화학식 2에서의 것과 같다.]

청구항 6

제 2 항에 있어서,

상기 화학식 10으로 표시되는 화합물로 이루어지는 유기 전기발광 소자용 재료.

화학식 10



[식 중, R₁ 내지 R₉는 각각 독립적으로 상기 화학식 2의 R₁ 내지 R₇과 같다. R₁ 내지 R₇ 중 어느 하나가 아미노기인 경우는, R₁ 내지 R₇ 중 하나만이 아미노기이다.

R₁ 내지 R₄ 또는 R₅ 내지 R₇에서 인접하는 것 끼리 포화 또는 불포화의 환상 구조를 형성하고 있을 수도 있다.

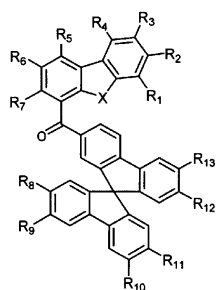
X는 상기 화학식 2에서의 것과 같다.]

청구항 7

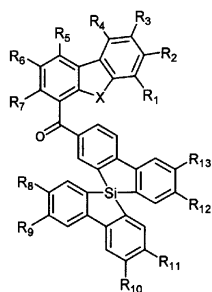
제 2 항에 있어서,

상기 화학식 11 또는 12로 표시되는 화합물로 이루어지는 유기 전기발광 소자용 재료.

화학식 11



화학식 12



[식 중, R₁ 내지 R₁₃는 각각 독립적으로 상기 화학식 2의 R₁ 내지 R₇과 같다. R₁ 내지 R₇ 중 어느 하나가 아미노기인 경우는, R₁ 내지 R₇ 중 하나만이 아미노기이다.

R₁ 내지 R₄, R₅ 내지 R₇, R₈ 내지 R₉, R₁₀ 내지 R₁₁, R₁₂ 내지 R₁₃에서 인접하는 것 끼리 포화 또는 불포화의 환상 구조를 형성하고 있을 수도 있다.

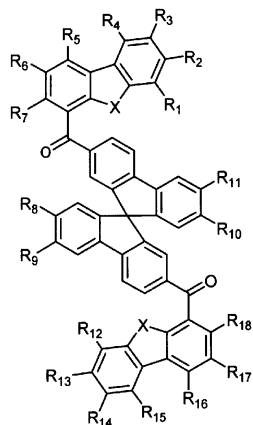
X는 상기 화학식 2에서의 것과 같다.]

청구항 8

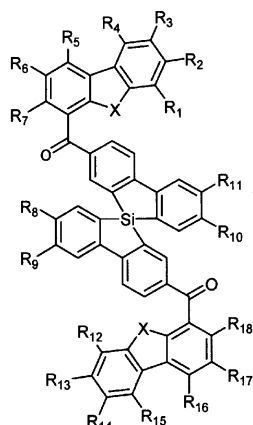
제 1 항에 있어서,

하기 화학식 13 또는 14로 표시되는 화합물로 이루어지는 유기 전기발광 소자용 재료.

화학식 13



화학식 14



[식 중, R₁ 내지 R₁₈은 각각 독립적으로 상기 화학식 2의 R₁ 내지 R₇과 같다. R₁ 내지 R₇ 중 어느 하나가 아미노기인 경우는, R₁ 내지 R₇ 중 하나만이 아미노기이다.

R₁ 내지 R₄, R₅ 내지 R₇, R₈ 내지 R₉, R₁₀ 내지 R₁₁, R₁₂ 내지 R₁₅ 또는 R₁₆ 내지 R₁₈에서 인접하는 것 끼리 포화 또는 불포화의 환상 구조를 형성하고 있을 수도 있다.

X는 상기 화학식 2에서의 것과 같다.]

청구항 9

음극과 양극사이에 적어도 발광층을 갖는 1층 또는 복수층으로 이루어지는 유기 박막층이 형성되어 있는 유기 전기발광 소자에 있어서, 상기 유기 박막층의 적어도 1층이 제 1 항 내지 제 8 항 중 어느 한 항에 기재된 유기 전기발광 소자용 재료를 함유하는 유기 전기발광 소자.

청구항 10

제 9 항에 있어서,

상기 발광층이 호스트 재료와 인광성의 발광 재료를 함유하고, 상기 호스트 재료가 제 1 항 내지 제 8 항 중 어느 한 항에 기재된 유기 전기발광 소자용 재료로 이루어지는 유기 전기발광 소자.

청구항 11

제 9 항에 있어서,

상기 발광층이 호스트 재료와 인광성의 발광 재료를 함유하고, 인광성의 발광 재료의 발광 파장이 500nm 이하의 발광 피크를 갖는 유기 전기발광 소자.

청구항 12

제 9 항에 있어서,

상기 발광층이 호스트 재료와 인광성의 발광 재료를 함유하고, 인광성의 발광 재료가 Ir, Os 또는 Pt 금속을 함유하는 화합물인 유기 전기발광 소자.

청구항 13

제 9 항에 있어서,

상기 발광층이 호스트 재료와 인광성의 발광 재료를 함유하고, 인광성의 발광 재료가 금속-칼벤 탄소결합을 갖는 발광 재료인 유기 전기발광 소자.

청구항 14

제 9 항에 있어서,

상기 발광층이 호스트 재료와 인광성의 발광 재료를 함유하고, 인광성의 발광 재료가 페닐이미다졸 골격을 갖는 발광 재료인 유기 전기발광 소자.

청구항 15

제 9 항에 있어서,

상기 발광층이 호스트 재료와 인광성의 발광 재료를 함유하고, 인광성의 발광 재료가 페닐피라졸 골격을 갖는 발광 재료인 유기 전기발광 소자.

청구항 16

제 9 항에 있어서,

상기 유기 전기발광 소자용 재료가, 유기 전기발광 소자의 발광층에 포함되는 호스트 재료인 유기 전기발광 소자.

청구항 17

제 9 항에 있어서,

상기 유기 전기발광 소자용 재료가, 유기 전기발광 소자의 정공 수송층에 포함되는 재료인 유기 전기발광 소자.

청구항 18

제 9 항에 있어서,

상기 유기 전기발광 소자용 재료가, 유기 전기발광 소자의 전자 수송층 또는 정공 장벽층에 포함되는 재료인 유기 전기발광 소자.

청구항 19

제 9 항에 있어서,

금극과 유기 박막층의 계면영역에 환원성 도펀트가 첨가되어 있는 유기 전기발광 소자.

청구항 20

제 9 항에 있어서,

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

명세서

기술분야

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

배경기술

- <2> 유기 전기발광 소자(이하 전기발광을 EL로 약기하는 경우가 있다)는 전계를 인가함으로써 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, Applied Physics Letters, 51권, 913페이지, 1987년 등)가 되어진 이래, 유기 재료를 구성 재료로 하는 유기 EL 소자에 관한 연구가 활발히 행해져 있다. 탕 등은, 트리스(8-퀴놀리놀라토)알루미늄을 발광층에 이용하고, 트라이페닐디아민 유도체를 정공 수송층에 이용하고 있다. 적층 구조의 이점으로서, 발광층으로의 정공의 주입 효율을 높이는 것, 음극으로부터 주입된 전자를 블로킹하여 재결합에 의해 생성되는 여기자의 생성 효율을 높이는 것, 발광층내에서 생성된 여기자를 가두는 것 등을 들 수 있다. 이러한 예의 유기 EL 소자의 소자 구조로서는 정공 수송(주입)층 및 전자 수송 발광층의 2층형, 또는 정공 수송(주입)층, 발광층 및 전자 수송(주입)층의 3층형 등이 잘 알려져 있다. 이러한 적층형 구조 소자에서는 주입된 정공과 전자의 재결합 효율을 높이기 위해, 소자 구조나 형성 방법의 연구가 이루어지고 있다.
- <3> 유기 EL 소자에 이용하는 발광 재료로서는, 트리스(8-퀴놀리놀라토)알루미늄 착체 등의 킬레이트 착체, 쿠마린 착체, 테트라페닐뷰타다이엔 유도체, 비스스타이릴아릴렌 유도체, 옥사다리아졸 유도체 등의 발광 재료가 알려져 있고, 그들은 청색으로부터 적색까지의 가시영역의 발광이 얻어지는 것이 보고되어 있고, 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 여기상태의 1중항 상태와 3중항 상태를 이용하여, 높은 발광 효율이 달성되어 있다. 유기 EL 소자내에서 전자와 정공이 재결합하는 때는 스핀 다중도의 차이로부터 1중항 여기자와 3중항 여기자가 1:3의 비율로 생성한다고 여겨지고 있기 때문에, 인광성의 발광 재료를 이용하면 형광만을 사용한 소자에 비해 3 내지 4배의 발광 효율의 달성이 여겨진다.
- <5> 이러한 유기 EL 소자에 있어서는, 3중항의 여기상태 또는 3중항의 여기자가 소광하지 않도록 순서대로, 양극, 정공 수송층, 유기 발광층, 전자 수송층(정공 저지층), 전자 수송층, 음극과 같은 층을 적층하는 구성이 사용되고, 유기 발광층에 호스트 화합물과 인광 발광성의 화합물이 사용되어왔다(예컨대, 특허문헌 4, 특허문헌 5 참조). 이들 특허문헌에서는 호스트 화합물로서 4,4-N,N-다이카바졸바이페닐이 사용되고 있지만, 이 화합물은 유리전이온도가 110℃ 이하이며, 더욱이 카바졸 분자 골격의 중심선 상에 있는 질소 원자에 바이페닐 골격이 결합하고 있기 때문에, 대칭성이 지나치게 좋기 때문에 결정화되기 쉽고, 또한 소자의 내열시험을 행한 경우, 단락이나, 화소 결함이 생긴다고 하는 문제가 있었다.
- <6> 또한, 그의 증착시에는, 이물질이나 전극의 돌기가 존재하는 개소 등에서 결정 성장이 생겨, 내열 시험전의 초기 상태보다, 결함이 생겨, 시간이 경과함에 따라 증가하는 것도 발견되었다. 또한, 3회 대칭성을 보유하는 카바졸 유도체도 호스트로서 사용되어 있다. 그러나, 이들도 카바졸 분자 골격의 중심선 상에 있는 질소 원자를 통해서 대칭성이 좋은 구조로 되어 있기 때문에, 증착시, 이물질이나 전극 돌기가 존재하는 개소 등에서 결정이 성장하여, 내열 시험전의 초기 상태보다 결함이 생겨, 시간이 경과함에 따라 증가하는 것은 면하고 있지 않다.
- <7> 또한, 형광성 벤조퓨란 화합물 및 다이벤조퓨란 화합물을 갖는 소자가 개시되어 있다(특허문헌 6). 그러나, 벤조퓨란의 7위치 및 다이벤조퓨란의 4위치 또는 6위치에 치환기를 갖는 화합물의 구체적 기재가 없고, 그 특이적인 성능 발현에 대한 기재도 없다.
- <8> 또한, 인광 소자용 호스트로서 벤조퓨란의 4위치에 4-바이페닐인돌 구조를 치환기로서 갖는 화합물이 예시되고,

청녹색의 인광 발광 재료인 이리듐 착체의 호스트로서 이용한 실시예가 나타내어져 있다(특허문헌 7). 그러나 벤조퓨란의 4위치에 치환되어 있는 벤젠환의 모두에 치환기가 존재하기 때문에, 입체장해가 커서 화합물로서 불안정하고, EL 소자로서의 단수명화할 우려가 있다. 또한 벤조싸이오펜에 관해서는 4위치의 결합 위치를 갖는 화합물은 명시되어 있지 않다.

- <9> 더욱이 안트라센 골격이 필수적인 벤조싸이오펜 골격을 갖는 화합물이 기재되어 있다(특허문헌 8). 그러나 인광소자에의 적용은 3중항 에너지 갭이 좁은 안트라센 골격을 포함하고 있기 때문에 적용이 어렵다고 여겨진다. 동일하게 안트라센 골격이 필수적인 퓨란계 화합물이 명시되어 있다(특허문헌 9). 그러나, 벤조퓨란의 7위치 및 다이벤조퓨란의 4위치 또는 6위치에 치환기를 갖는 화합물의 기재가 없고, 그 우위성도 발견되고 있지 않다. 또한 피렌 골격에 결합한 벤조퓨란 화합물도 나타내어져 있지만(특허문헌 10) 피렌 골격도 3중항 에너지 갭이 좁기 때문에, 인광형 유기 EL 소자에의 적용은 곤란하다고 생각되며, 그의 실시예도 기재되어 있지 않다.
- <10> 특허문헌 11에는 벤조트리아아졸 골격을 갖는 다이벤조퓨란 화합물이 기재되어 있지만 이 화합물도 3중항 에너지 갭이 좁기 때문에, 인광형 유기 EL 소자에의 적용은 곤란하다고 생각되며, 그의 실시예도 기재되어 있지 않다.
- <11> 아미노기를 2개 이상 갖는 다이벤조 화합물이 기재되어 있지만(특허문헌 12, 특허문헌 13), 호스트 재료로서의 실시예에 관한 기재가 없고, 그 효과도 불명확하다.
- <12> 특허문헌 1: 일본 특허공개 제1996-239655호 공보
- <13> 특허문헌 2: 일본 특허공개 제1995-138561호 공보
- <14> 특허문헌 3: 일본 특허공개 제1991-200289호 공보
- <15> 특허문헌 4: 미국특허 제6,097,147호 명세서
- <16> 특허문헌 5: 국제공개 W001/41512호 공보
- <17> 특허문헌 6: 일본 특허공개 제1993-109485호 공보
- <18> 특허문헌 7: 일본 특허공개 제2004-214050호 공보
- <19> 특허문헌 8: 일본 특허공개 제2004-002351호 공보
- <20> 특허문헌 9: 일본 특허공개 제2005-047868호 공보
- <21> 특허문헌 10: 국제공개 W004/096945호 공보
- <22> 특허문헌11: 국제공개 W005/054212호 공보
- <23> 특허문헌 12: 일본 특허공개 제1995-53950호 공보
- <24> 특허문헌 13: 일본 특허공개 제2001-43979호 공보
- <25> 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
- <26> 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

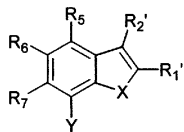
발명의 상세한 설명

- <27> 발명의 개시
- <28> 발명이 해결하고자 하는 과제
- <29> 본 발명은, 상기 과제를 해결하기 위해 이루어진 것으로, 발광 효율이 높고, 화소 결합이 없고, 내열성이 우수하며, 장수명인 유기 EL 소자용 재료 및 그것을 이용한 유기 EL 소자를 제공하는 것을 목적으로 한다.
- <30> 과제를 해결하기 위한 수단
- <31> 본 발명자들은, 상기 목적을 달성하기 위해 예의 연구를 거듭한 결과, 하기 화학식 1로 기재되는 화합물을 유기 EL 소자 재료에 이용함으로써, 고효율, 고내열이면서 장수명인 유기 EL 소자가 얻어지는 것을 발견하고, 본 발

명을 해결하기에 이르렀다.

- <32> 즉, 본 발명은, 하기 화학식 1 내지 14 중 어느 하나로 표시되는 화합물로 이루어지는 유기 EL 소자용 재료를 제공하는 것이다.

화학식 1



<33>

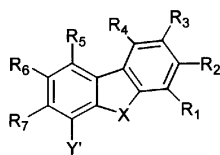
- <34> [식 중, R₁' , R₂' 및 R₅ 내지 R₇은 각각 독립적으로 수소 원자, 할로젠 원자, 치환기를 가질 수도 있는 탄소수 1 내지 40의 알킬기, 치환기를 가질 수도 있는 탄소수 3 내지 60의 벤조트라이아졸 골격을 갖지 않는 헤테로환기, 치환기를 가질 수도 있는 탄소수 1 내지 40의 알콕시기, 치환기를 가질 수도 있는 탄소수 6 내지 60의 아릴기, 치환기를 가질 수도 있는 탄소수 6 내지 60의 아릴옥시기, 치환기를 가질 수도 있는 탄소수 7 내지 60의 아르알킬기, 치환기를 가질 수도 있는 탄소수 2 내지 40의 알켄일기, 치환기를 가질 수도 있는 1 내지 40의 알킬아미노기, 치환기를 가질 수도 있는 탄소수 7 내지 60의 아르알킬아미노기, 치환기를 가질 수도 있는 탄소수 3 내지 20의 알킬실릴기, 치환기를 가질 수도 있는 탄소수 8 내지 40의 아릴실릴기, 치환기를 가질 수도 있는 탄소수 7 내지 40의 케토아릴기, 치환기를 가질 수도 있는 탄소수 1 내지 40의 할로젠화알킬기 또는 사이아노기이다.

- <35> R₁'과 R₂' , R₅와 R₆, R₆과 R₇은 각각 서로 결합하여 포화 또는 불포화의 환상 구조를 형성하고 있을 수도 있다.

- <36> X는 황 원자, 산소 원자, 또는 SiRaRb로 표시되는 치환 규소 원자를 나타내고, Ra 및 Rb는 각각 독립적으로 탄소수 1 내지 40의 알킬기를 나타낸다.

- <37> Y는 치환기를 가질 수도 있는 탄소수 1 내지 40의 알킬기, 치환기를 가질 수도 있는 탄소수 3 내지 60의 벤조트라이아졸 골격을 갖지 않는 헤테로환기, 치환기를 가질 수도 있는 탄소수 1 내지 40의 알콕시기, 치환기를 가질 수도 있는 탄소수 6 내지 60의 아릴기, 치환기를 가질 수도 있는 탄소수 6 내지 60의 아릴옥시기, 치환기를 가질 수도 있는 탄소수 7 내지 60의 아르알킬기, 치환기를 가질 수도 있는 탄소수 2 내지 40의 알켄일기, 치환기를 가질 수도 있는 1 내지 40의 알킬아미노기, 치환기를 가질 수도 있는 탄소수 7 내지 60의 아르알킬아미노기, 치환기를 가질 수도 있는 탄소수 3 내지 20의 알킬실릴기, 치환기를 가질 수도 있는 탄소수 8 내지 40의 아릴실릴기, 또는 치환기를 가질 수도 있는 탄소수 1 내지 40의 할로젠화알킬기이다.]

화학식 2



<38>

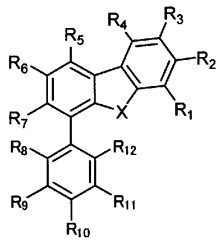
- <39> [식 중, R₁ 내지 R₇은 각각 독립적으로, 상기 화학식 1의 R₁' , R₂' 및 R₅ 내지 R₇과 같다. 단 R₁은 안트라센 골격이 아니고, R₁ 내지 R₇ 중 어느 하나가 아미노기인 경우는, R₁ 내지 R₇ 중 하나만이 아미노기이다.

- <40> R₁ 내지 R₄, R₅ 내지 R₇에서 인접하는 것 끼리 포화 또는 불포화의 환상 구조를 형성하고 있을 수도 있다.

- <41> X는 상기 화학식 1에서의 것과 같다.

- <42> Y'는 치환기를 가질 수도 있는 탄소수 1 내지 40의 알킬기, 치환기를 가질 수도 있는 탄소수 3 내지 60의 벤조트라이아졸 골격을 갖지 않는 헤테로환기, 치환기를 가질 수도 있는 탄소수 1 내지 40의 알콕시기, 치환기를 가질 수도 있는 탄소수 6 내지 60의 피렌 골격을 갖지 않는 아릴기, 치환기를 가질 수도 있는 탄소수 6 내지 60의 아릴옥시기, 치환기를 가질 수도 있는 탄소수 7 내지 60의 아르알킬기, 치환기를 가질 수도 있는 탄소수 2 내지 40의 알켄일기, 치환기를 가질 수도 있는 탄소수 3 내지 20의 알킬실릴기, 치환기를 가질 수도 있는 탄소수 8 내지 40의 아릴실릴기, 또는 치환기를 가질 수도 있는 탄소수 1 내지 40의 할로젠화알킬기이다.]

화학식 3



<43>

<44>

[식 중, R₁ 내지 R₁₂는 각각 독립적으로 상기 화학식 2의 R₁ 내지 R₇과 같다. 단 R₈ 내지 R₁₂ 중 적어도 하나는 수소 원자이며, R₁ 내지 R₇ 중 어느 하나가 아미노기인 경우는, R₁ 내지 R₇ 중 하나만이 아미노기이다.

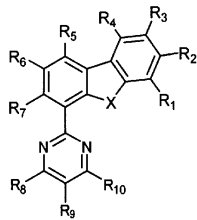
<45>

R₁ 내지 R₄, R₅ 내지 R₇, R₈ 내지 R₁₂에서 인접하는 것 끼리 또는 R₇과 R₈에서 포화 또는 불포화의 환상 구조를 형성하고 있을 수도 있다.

<46>

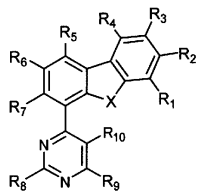
X는 상기 화학식 2에서의 것과 같다.]

화학식 4



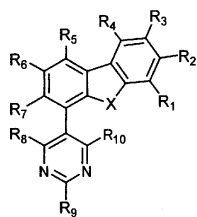
<47>

화학식 5



<48>

화학식 6



<49>

<50>

[식 중, R₁ 내지 R₁₀은 각각 독립적으로 상기 화학식 2의 R₁ 내지 R₇과 같고, R₁ 내지 R₇ 중 어느 하나가 아미노기인 경우는, R₁ 내지 R₇ 중 하나만이 아미노기이다.

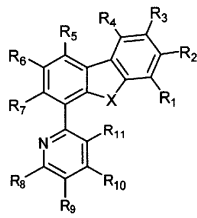
<51>

화학식 4에서 R₁ 내지 R₄, R₅ 내지 R₇, R₈ 내지 R₁₀, 화학식 5에서 R₁ 내지 R₄, R₅ 내지 R₇, R₉ 내지 R₁₀, 또는 화학식 6에서 R₁ 내지 R₄, R₅ 내지 R₇에서 인접하는 것 끼리, 또는 R₇ 내지 R₈에서 포화 또는 불포화의 환상 구조를 형성하고 있을 수도 있다.

<52>

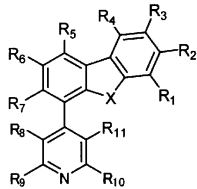
X는 상기 화학식 2에서의 것과 같다.]

화학식 7



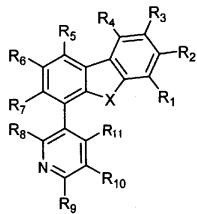
<53>

화학식 8



<54>

화학식 9



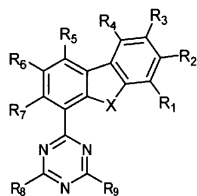
<55>

<56> [식 중, R₁ 내지 R₁₁은 각각 독립적으로 상기 화학식 2의 R₁ 내지 R₇과 같고, R₁ 내지 R₇ 중 어느 하나가 아미노기 인 경우는, R₁ 내지 R₇ 중 하나만이 아미노기이다.

<57> 화학식 7에서 R₁ 내지 R₄, R₅ 내지 R₇, R₈ 내지 R₁₁, 화학식 8에서 R₁ 내지 R₄, R₅ 내지 R₇, R₈ 내지 R₉, R₁₀ 내지 R₁₁에서 인접하는 것 끼리, 또는 R₇과 R₈, 화학식 9에서 R₁ 내지 R₄, R₅ 내지 R₇, R₉ 내지 R₁₁에서 인접하는 것 끼리, 또는 R₇과 R₈에서 포화 또는 불포화의 환상 구조를 형성하고 있을 수도 있다.

<58> X는 상기 화학식 2에서의 것과 같다.]

화학식 10



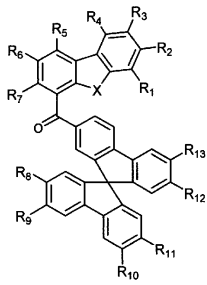
<59>

<60> [식 중, R₁ 내지 R₉는 각각 독립적으로 상기 화학식 2의 R₁ 내지 R₇과 같다. R₁ 내지 R₇ 중 어느 하나가 아미노기인 경우는, R₁ 내지 R₇ 중 하나만이 아미노기이다.

<61> R₁ 내지 R₄ 또는 R₅ 내지 R₇에서 인접하는 것 끼리 포화 또는 불포화의 환상 구조를 형성하고 있을 수도 있다.

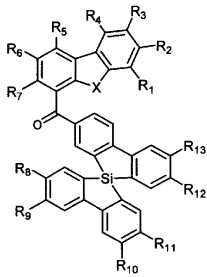
<62> X는 상기 화학식 2에서의 것과 같다.]

화학식 11



<63>

화학식 12



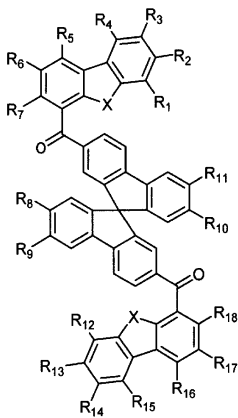
<64>

<65> [식 중, R₁ 내지 R₁₃은 각각 독립적으로 상기 화학식 2의 R₁ 내지 R₇과 같다. R₁ 내지 R₇ 중 어느 하나가 아미노기인 경우는, R₁ 내지 R₇ 중 하나만이 아미노기이다.

<66> R₁ 내지 R₄, R₅ 내지 R₇, R₈ 내지 R₉, R₁₀ 내지 R₁₁, R₁₂ 내지 R₁₃에서 인접하는 것 끼리 포화 또는 불포화의 환상 구조를 형성하고 있을 수도 있다.

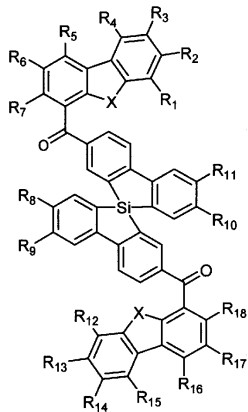
<67> X는 상기 화학식 2에서의 것과 같다.]

화학식 13



<68>

화학식 14



<69>

<70>

[식 중, R₁ 내지 R₁₈은 각각 독립적으로 상기 화학식 2의 R₁ 내지 R₇과 같다. R₁ 내지 R₇ 중 어느 하나가 아미노기인 경우는, R₁ 내지 R₇ 중 하나만이 아미노기이다.

<71>

R₁ 내지 R₄, R₅ 내지 R₇, R₈ 내지 R₉, R₁₀ 내지 R₁₁, R₁₂ 내지 R₁₅ 또는 R₁₆ 내지 R₁₈에서 인접하는 것 끼리 포화 또는 불포화의 환상 구조를 형성하고 있을 수도 있다.

<72>

X는 상기 화학식 2에서의 것과 같다.]

<73>

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

<74>

발명의 효과

<75>

본 발명의 화학식 1로 표시되는 화합물로 이루어지는 유기 EL 소자용 재료를 이용하면, 발광 효율이 높고, 화소 결함이 없고, 내열성이 우수하며, 또한 수명이 긴 유기 EL 소자가 얻어진다.

<76>

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

<77>

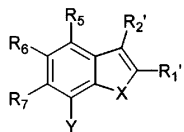
발명을 실시하기 위한 최선의 형태

<78>

본 발명의 유기 EL 소자용 재료는, 하기 화학식 1 내지 14로 표시되는 화합물로 이루어진다.

<79>

화학식 1



<80>

<81>

화학식 1에서, R₁' , R₂' 및 R₅ 내지 R₇은 각각 독립적으로 수소 원자, 할로젠 원자, 치환기를 가질 수도 있는 탄소수 1 내지 40의 알킬기, 치환기를 가질 수도 있는 탄소수 3 내지 60의 벤조트라이아졸 골격을 갖지 않는 헤테로환기, 치환기를 가질 수도 있는 탄소수 1 내지 40의 알콕시기, 치환기를 가질 수도 있는 탄소수 6 내지 60의 아릴기, 치환기를 가질 수도 있는 탄소수 6 내지 60의 아릴옥시기, 치환기를 가질 수도 있는 탄소수 7 내지 60의 아르알킬기, 치환기를 가질 수도 있는 탄소수 2 내지 40의 알켄일기, 치환기를 가질 수도 있는 1 내지 40의 알킬아미노기, 치환기를 가질 수도 있는 탄소수 7 내지 60의 아르알킬아미노기, 치환기를 가질 수도 있는 탄소수 3 내지 20의 알킬실릴기, 치환기를 가질 수도 있는 탄소수 8 내지 40의 아릴실릴기, 치환기를 가질 수도 있는 탄소수 7 내지 40의 케토아릴기, 치환기를 가질 수도 있는 탄소수 1 내지 40의 할로젠화알킬기 또는 사이아노기이다.

<82>

R₁' 과 R₂' , R₅와 R₆, R₆과 R₇은 각각 서로 결합하여 포화 또는 불포화의 환상 구조를 형성하고 있을 수도 있다.

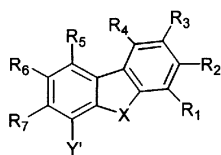
<83>

X는 황 원자, 산소 원자, 또는 SiRaRb로 표시되는 치환 규소 원자를 나타내고, Ra 및 Rb는 각각 독립적으로 탄

소수 1 내지 40의 알킬기를 나타낸다.

<84> Y는 치환기를 가질 수도 있는 탄소수 1 내지 40의 알킬기, 치환기를 가질 수도 있는 탄소수 3 내지 60의 벤조트라이아졸 골격을 갖지 않는 헤테로환기, 치환기를 가질 수도 있는 탄소수 1 내지 40의 알콕시기, 치환기를 가질 수도 있는 탄소수 6 내지 60의 아릴기, 치환기를 가질 수도 있는 탄소수 6 내지 60의 아릴옥시기, 치환기를 가질 수도 있는 탄소수 7 내지 60의 아르알킬기, 치환기를 가질 수도 있는 탄소수 2 내지 40의 알켄일기, 치환기를 가질 수도 있는 1 내지 40의 알킬아미노기, 치환기를 가질 수도 있는 탄소수 7 내지 60의 아르알킬아미노기, 치환기를 가질 수도 있는 탄소수 3 내지 20의 알킬실릴기, 치환기를 가질 수도 있는 탄소수 8 내지 40의 아릴실릴기, 또는 치환기를 가질 수도 있는 탄소수 1 내지 40의 할로젠화알킬기이다.

<85> 화학식 2



<86>

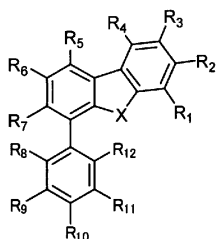
<87> 화학식 2에서, R₁ 내지 R₇은 각각 독립적으로, 상기 화학식 1의 R₁', R₂' 및 R₅ 내지 R₇과 같다. 단 R₁은 안트라센 골격이 아니고, R₁ 내지 R₇ 중 어느 하나가 아미노기인 경우는, R₁ 내지 R₇ 중 하나만이 아미노기이다.

<88> R₁ 내지 R₄, R₅ 내지 R₇에서 인접하는 것 끼리 포화 또는 불포화의 환상 구조를 형성하고 있을 수도 있다.

<89> X는 상기 화학식 1에서의 것과 같다.

<90> Y'는 치환기를 가질 수도 있는 탄소수 1 내지 40의 알킬기, 치환기를 가질 수도 있는 탄소수 3 내지 60의 벤조트라이아졸 골격을 갖지 않는 헤테로환기, 치환기를 가질 수도 있는 탄소수 1 내지 40의 알콕시기, 치환기를 가질 수도 있는 탄소수 6 내지 60의 피렌 골격을 갖지 않는 아릴기, 치환기를 가질 수도 있는 탄소수 6 내지 60의 아릴옥시기, 치환기를 가질 수도 있는 탄소수 7 내지 60의 아르알킬기, 치환기를 가질 수도 있는 탄소수 2 내지 40의 알켄일기, 치환기를 가질 수도 있는 탄소수 3 내지 20의 알킬실릴기, 치환기를 가질 수도 있는 탄소수 8 내지 40의 아릴실릴기, 또는 치환기를 가질 수도 있는 탄소수 1 내지 40의 할로젠화알킬기이다.

<91> 화학식 3



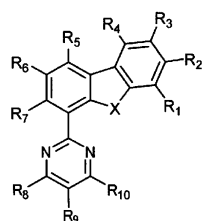
<92>

<93> 화학식 3에서, R₁ 내지 R₁₂는 각각 독립적으로 상기 화학식 2의 R₁ 내지 R₇과 같다. 단 R₈ 내지 R₁₂ 중 적어도 하나는 수소 원자이며, R₁ 내지 R₇ 중 어느 하나가 아미노기인 경우는, R₁ 내지 R₇ 중 하나만이 아미노기이다.

<94> R₁ 내지 R₄, R₅ 내지 R₇, R₈ 내지 R₁₂에서 인접하는 것 끼리 또는 R₇과 R₈에서 포화 또는 불포화의 환상 구조를 형성하고 있을 수도 있다.

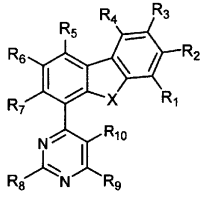
<95> X는 상기 화학식 2에서의 것과 같다.

<96> 화학식 4



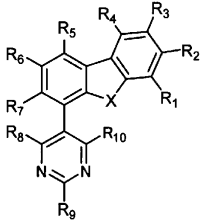
<97>

<98> 화학식 5



<99>

<100> 화학식 6



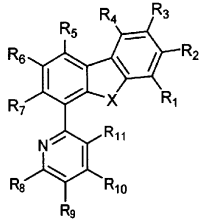
<101>

<102> 화학식 4 내지 6에서, R₁ 내지 R₁₀은 각각 독립적으로 상기 화학식 2의 R₁ 내지 R₇과 같고, R₁ 내지 R₇ 중 어느 하나가 아미노기인 경우는, R₁ 내지 R₇ 중 하나만이 아미노기이다.

<103> 화학식 4에서 R₁ 내지 R₄, R₅ 내지 R₇, R₈ 내지 R₁₀, 화학식 5에서 R₁ 내지 R₄, R₅ 내지 R₇, R₉ 내지 R₁₀, 또는 화학식 6에서 R₁ 내지 R₄, R₅ 내지 R₇에서 인접하는 것 끼리, 또는 R₇ 내지 R₈에서 포화 또는 불포화의 환상 구조를 형성하고 있을 수도 있다.

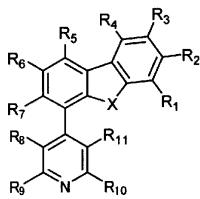
<104> X는 상기 화학식 2에서의 것과 같다.

<105> 화학식 7



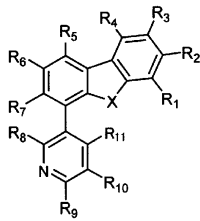
<106>

<107> 화학식 8



<108>

<109> 화학식 9



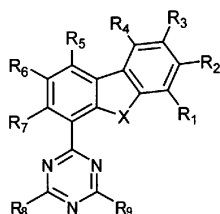
<110>

<111> 화학식 7 내지 9에서, R₁ 내지 R₁₁은 각각 독립적으로 상기 화학식 2의 R₁ 내지 R₇과 같고, R₁ 내지 R₇ 중 어느 하나가 아미노기인 경우는, R₁ 내지 R₇ 중 하나만이 아미노기이다.

<112> 화학식 7에서 R₁ 내지 R₄, R₅ 내지 R₇, R₈ 내지 R₁₁, 화학식 8에서 R₁ 내지 R₄, R₅ 내지 R₇, R₈ 내지 R₉, R₁₀ 내지 R₁₁에서 인접하는 것 끼리, 또는 R₇과 R₈, 화학식 9에서 R₁ 내지 R₄, R₅ 내지 R₇, R₉ 내지 R₁₁에서 인접하는 것 끼리, 또는 R₇과 R₈에서 포화 또는 불포화의 환상 구조를 형성하고 있을 수도 있다.

<113> X는 상기 화학식 2에서의 것과 같다.

<114> 화학식 10



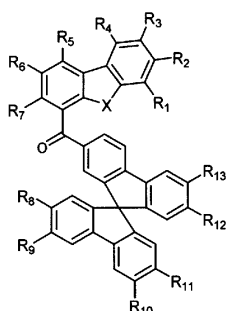
<115>

<116> 화학식 10에서, R₁ 내지 R₉는 각각 독립적으로 상기 화학식 2의 R₁ 내지 R₇과 같다. R₁ 내지 R₇ 중 어느 하나가 아미노기인 경우는, R₁ 내지 R₇ 중 하나만이 아미노기이다.

<117> R₁ 내지 R₄ 또는 R₅ 내지 R₇에서 인접하는 것 끼리 포화 또는 불포화의 환상 구조를 형성하고 있을 수도 있다.

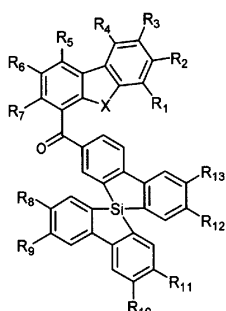
<118> X는 상기 화학식 2에서의 것과 같다.

<119> 화학식 11



<120>

<121> 화학식 12



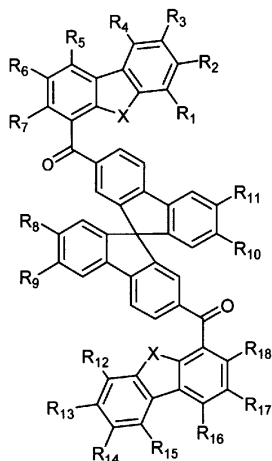
<122>

<123> 화학식 11 및 12에서, R₁ 내지 R₁₃은 각각 독립적으로 상기 화학식 2의 R₁ 내지 R₇과 같다. R₁ 내지 R₇ 중 어느 하나가 아미노기인 경우는, R₁ 내지 R₇ 중 하나만이 아미노기이다.

<124> R₁ 내지 R₄, R₅ 내지 R₇, R₈ 내지 R₉, R₁₀ 내지 R₁₁, R₁₂ 내지 R₁₃에서 인접하는 것 끼리 포화 또는 불포화의 환상 구조를 형성하고 있을 수도 있다.

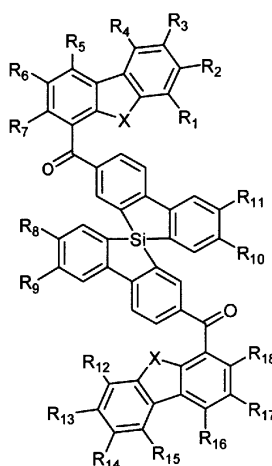
<125> X는 상기 화학식 2에서의 것과 같다.

<126> 화학식 13



<127>

<128> 화학식 14



<129>

<130> 화학식 13 및 14에서, R₁ 내지 R₁₈은 각각 독립적으로 상기 화학식 2의 R₁ 내지 R₇과 같다. R₁ 내지 R₇ 중 어느 하나가 아미노기인 경우는, R₁ 내지 R₇ 중 하나만이 아미노기이다.

<131> R₁ 내지 R₄, R₅ 내지 R₇, R₈ 내지 R₉, R₁₀ 내지 R₁₁, R₁₂ 내지 R₁₅ 또는 R₁₆ 내지 R₁₈에서 인접하는 것 끼리 포화 또는 불포화의 환상 구조를 형성하고 있을 수도 있다.

<132> X는 상기 화학식 2에서의 것과 같다.

<133> R₁', R₂' 및 R₁ 내지 R₁₈의 할로젠 원자로서는, 예컨대 불소, 염소, 브롬, 요오드 등을 들 수 있다.

<134> R₁', R₂', R₁ 내지 R₁₈, Y 및 Y'의 치환기를 가질 수도 있는 탄소수 1 내지 40의 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-하이드록시 아이소뷰틸기, 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-아미노 아이소뷰틸기, 1,2-다이아미노에틸기, 1,3-다이아미노아이소프로필기, 2,3-다이아미노-t-뷰틸기, 1,2,3-트라이

아미노프로필기, 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.

<135>

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-테트라메틸사이클로헥실기 등을 들 수 있다.

<136>

R_1' , R_2' , R_1 내지 R_{18} , Y 및 Y'의 치환기를 가질 수도 있는 탄소수 3 내지 60의 벤조트리아아졸 골격을 갖지 않는 헤테로환기로서는, 예컨대 1-피롤릴기, 2-피롤릴기, 3-피롤릴기, 피라진일기, 2-피리딘일기, 1-이미다졸릴기, 2-이미다졸릴기, 1-피라졸릴기, 1-인돌리지닐기, 2-인돌리지닐기, 3-인돌리지닐기, 5-인돌리지닐기, 6-인돌리지닐기, 7-인돌리지닐기, 8-인돌리지닐기, 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-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, 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-8-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-다이벤조실로일기, 2-다이벤조실로일기, 3-다이벤조실로일기, 4-다이벤조실로일기 등을 들 수 있다.

<137>

이들 중에서도 바람직하게는, 2-피리딘일기, 1-인돌리지닐기, 2-인돌리지닐기, 3-인돌리지닐기,

5-인돌리지닐기, 6-인돌리지닐기, 7-인돌리지닐기, 8-인돌리지닐기, 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-다이벤조실로일기, 2-다이벤조실로일기, 3-다이벤조실로일기, 4-다이벤조실로일기 등을 들 수 있다.

<138> R_1' , R_2' , R_1 내지 R_{18} , Y 및 Y'의 치환기를 가질 수도 있는 탄소수 1 내지 40의 알콕시기는 -OY로 표시되는 것이며, Y의 구체예로서는, 상기 알킬기에서 설명한 것과 마찬가지로의 것을 들 수 있고, 바람직한 예도 마찬가지이다.

<139> R_1' , R_2' , R_1 내지 R_{18} 및 Y의 치환기를 가질 수도 있는 탄소수 6 내지 60의 아릴기로서는, 예컨대 페닐기, 1-나프틸기, 2-나프틸기, 1-안트릴기, 2-안트릴기, 9-안트릴기, 1-페난트릴기, 2-페난트릴기, 3-페난트릴기, 4-페난트릴기, 9-페난트릴기, 1-나프타센일기, 2-나프타센일기, 9-나프타센일기, 1-피렌일기, 2-피렌일기, 4-피렌일기, 2-바이페닐일기, 3-바이페닐일기, 4-바이페닐일기, p-터페닐-4-일기, p-터페닐-3-일기, p-터페닐-2-일기, m-터페닐-4-일기, m-터페닐-3-일기, m-터페닐-2-일기, o-톨릴기, m-톨릴기, p-톨릴기, p-t-뷰틸페닐기, p-(2-페닐프로필)페닐기, 3-메틸-2-나프틸기, 4-메틸-1-나프틸기, 4-메틸-1-안트릴기, 4'-메틸바이페닐일기, 4"-t-뷰틸-p-터페닐-4-일기, o-큐멘일기, m-큐멘일기, p-큐멘일기, 2,3-자일릴기, 3,4-자일릴기, 2,5-자일릴기, 메시틸기 등을 들 수 있다.

<140> 이들 중에서도 바람직하게는, 페닐기, 1-나프틸기, 2-나프틸기, 9-페난트릴기, 2-바이페닐일기, 3-바이페닐일기, 4-바이페닐일기, p-톨릴기, 3,4-자일릴기 등을 들 수 있다.

<141> Y'의 치환기를 가질 수도 있는 탄소수 6 내지 60의 피렌 골격을 갖지 않는 아릴기의 예로서는, 상기 아릴기중 피렌 골격을 갖는 것 이외를 들 수 있다.

<142> R_1' , R_2' , R_1 내지 R_{18} , Y 및 Y'의 치환기를 가질 수도 있는 탄소수 6 내지 60의 아릴옥시기는 -OAr로 표시되는 기이며, Ar의 구체예로서는, 상기 아릴기에서 설명한 것과 마찬가지로의 것을 들 수 있고, 바람직한 예도 마찬가지이다.

<143> R_1' , R_2' , R_1 내지 R_{18} , Y 및 Y'의 치환기를 가질 수도 있는 탄소수 7 내지 60의 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.

<144> 이들 중에서도 바람직하게는, 벤질기, p-사이아노벤질기, m-사이아노벤질기, o-사이아노벤질기, 1-페닐에틸기, 2-페닐에틸기, 1-페닐아이소프로필기, 2-페닐아이소프로필기 등을 들 수 있다.

<145> R_1' , R_2' , R_1 내지 R_{18} , Y 및 Y'의 치환기를 가질 수도 있는 탄소수 2 내지 40의 알켄일기로서는, 예컨대 바이닐기, 알릴기, 1-뷰텐일기, 2-뷰텐일기, 3-뷰텐일기, 1,3-뷰테인다이엔일기, 1-메틸바이닐기, 스타이릴기, 2,2-다이페닐바이닐기, 1,2-다이페닐바이닐기, 1-메틸알릴기, 1,1-다이메틸알릴기, 2-메틸알릴기, 1-페닐알릴기, 2-페닐알릴기, 3-페닐알릴기, 3,3-다이페닐알릴기, 1,2-다이메틸알릴기, 1-페닐-1-뷰텐일기, 3-페닐-1-뷰텐일기 등을 들 수 있고, 바람직하게는, 스타이릴기, 2,2-다이페닐바이닐기, 1,2-다이페닐바이닐기 등을 들 수 있다.

<146> R_1' , R_2' , R_1 내지 R_{18} , Y 및 Y'의 치환기를 가질 수도 있는 1 내지 40의 알킬아미노기, 및 치환기를 가질 수도 있는 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.

<147> R_1' , R_2' , R_1 내지 R_{18} , Y 및 Y'의 치환기를 가질 수도 있는 탄소수 3 내지 20의 알킬실릴기로서는, 트라이메틸실릴기, 트라이에틸실릴기, t-뷰틸다이메틸실릴기, 바이닐다이메틸실릴기, 프로필다이메틸실릴기 등을 들 수 있다.

<148> R_1' , R_2' , R_1 내지 R_{18} , Y 및 Y'의 치환기를 가질 수도 있는 탄소수 8 내지 40의 아릴실릴기로서는, 트라이페닐실릴기, 페닐다이메틸실릴기, t-뷰틸다이페닐실릴기 등을 들 수 있다.

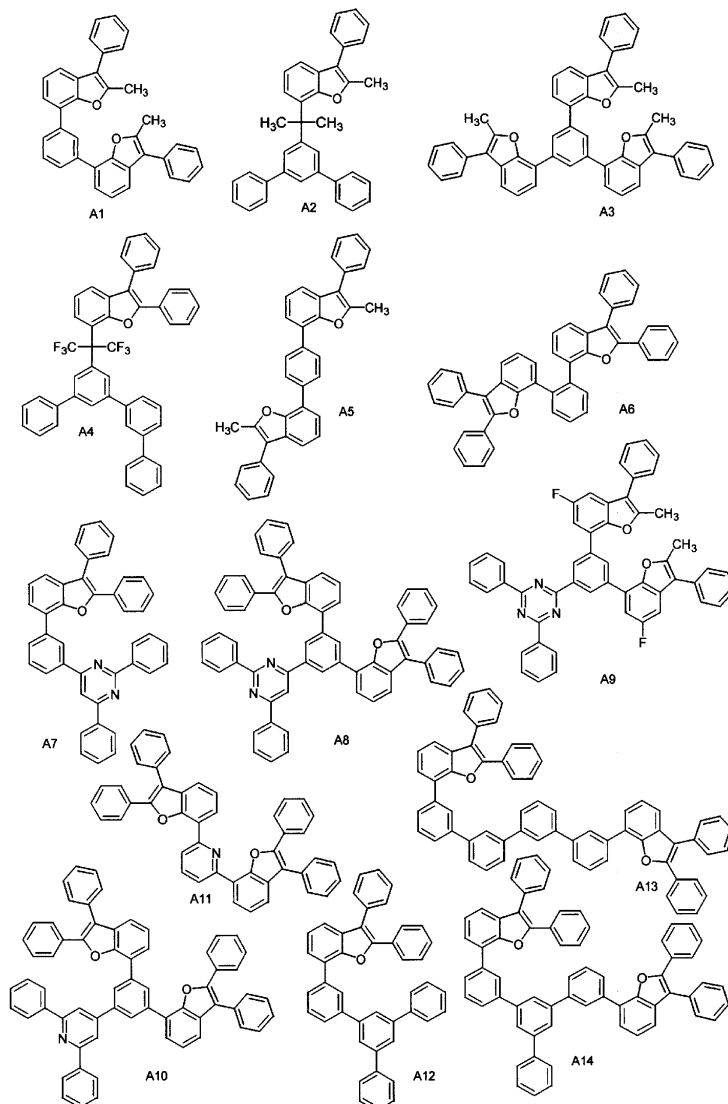
<149> R_1' , R_2' 및 R_1 내지 R_{18} 의 치환기를 가질 수도 있는 탄소수 7 내지 40의 케토아릴기는 $-COAr_2$ 로 표시되고, Ar_2 의 구체예로서는, 상기 아릴기에서 설명한 것과 마찬가지로의 것을 들 수 있고, 바람직한 예도 마찬가지이다.

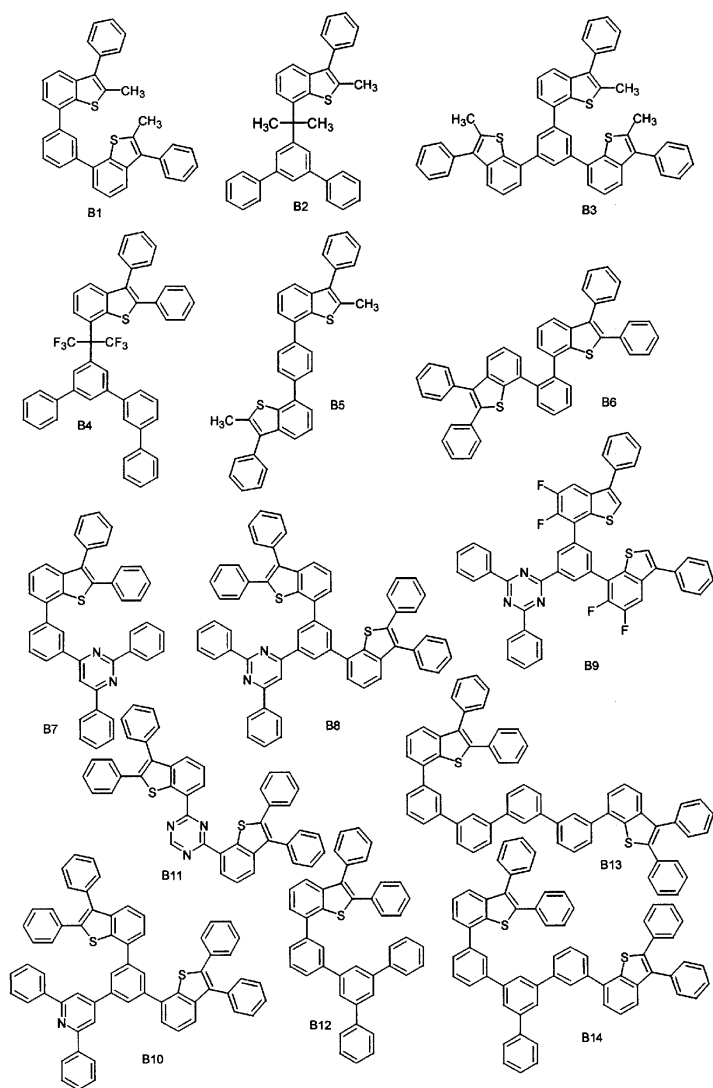
<150> R_1' , R_2' , R_1 내지 R_{18} , Y 및 Y'의 치환기를 가질 수도 있는 탄소수 1 내지 40의 할로젠화알킬기로서는, 예컨대 상기 알킬기의 적어도 한 개의 수소 원자를 할로젠 원자로 치환한 것을 들 수 있고, 바람직한 예도 마찬가지이다.

<151> 또한, R_1' , R_2' 및 R_1 내지 R_{18} 이 복수인 경우에 형성되는 환상 구조로서는, 벤젠환 등의 불포화 6원환 외에, 포화 또는 불포화의 5원환 또는 7원환 구조 등을 들 수 있다.

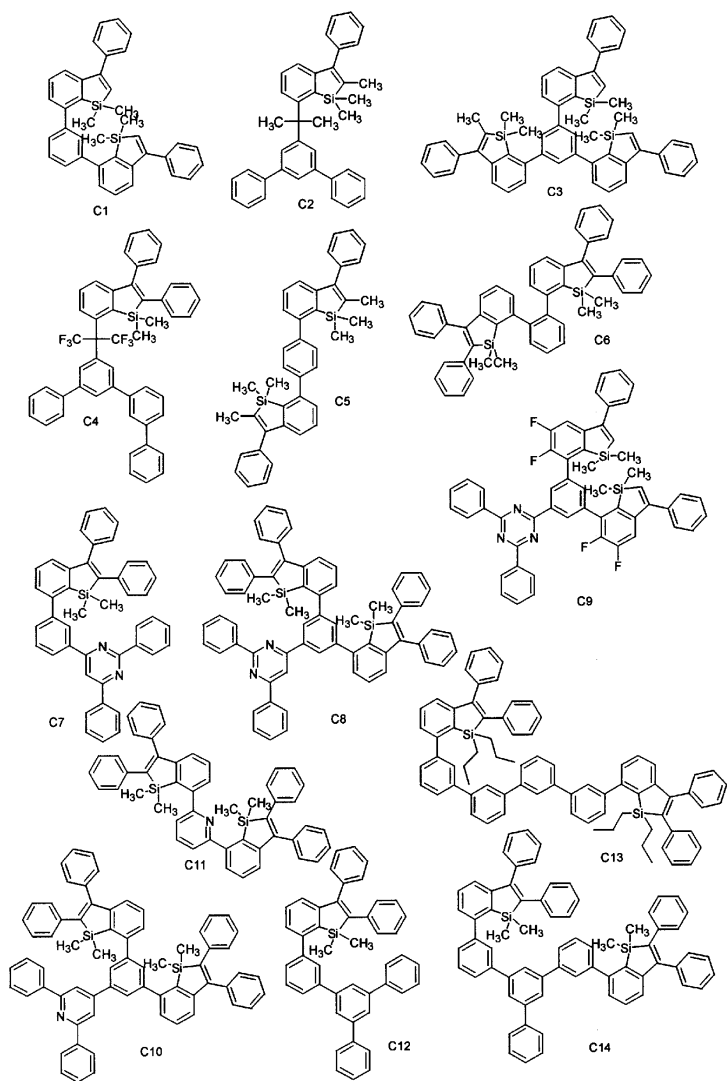
<152> Ra 및 Rb의 탄소수 1 내지 40의 알킬기의 예로서는, 상기 알킬기와 같은 것을 들 수 있고, 바람직하게는 메틸기, 에틸기, 프로필기 및 뷰틸기이다.

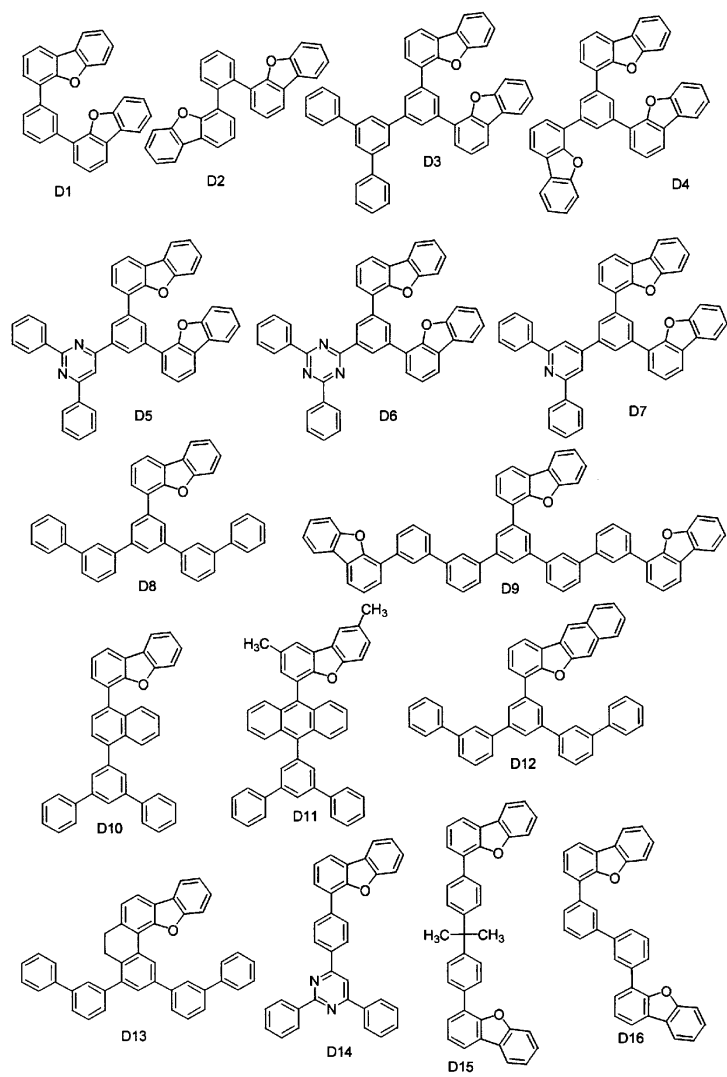
<153> 본 발명의 화학식 1 내지 14 중 어느 하나로 표시되는 화합물로 이루어지는 유기 EL 소자용 재료의 구체예를 이하에 나타내지만, 이들 예시 화합물에 한정되는 것은 아니다.



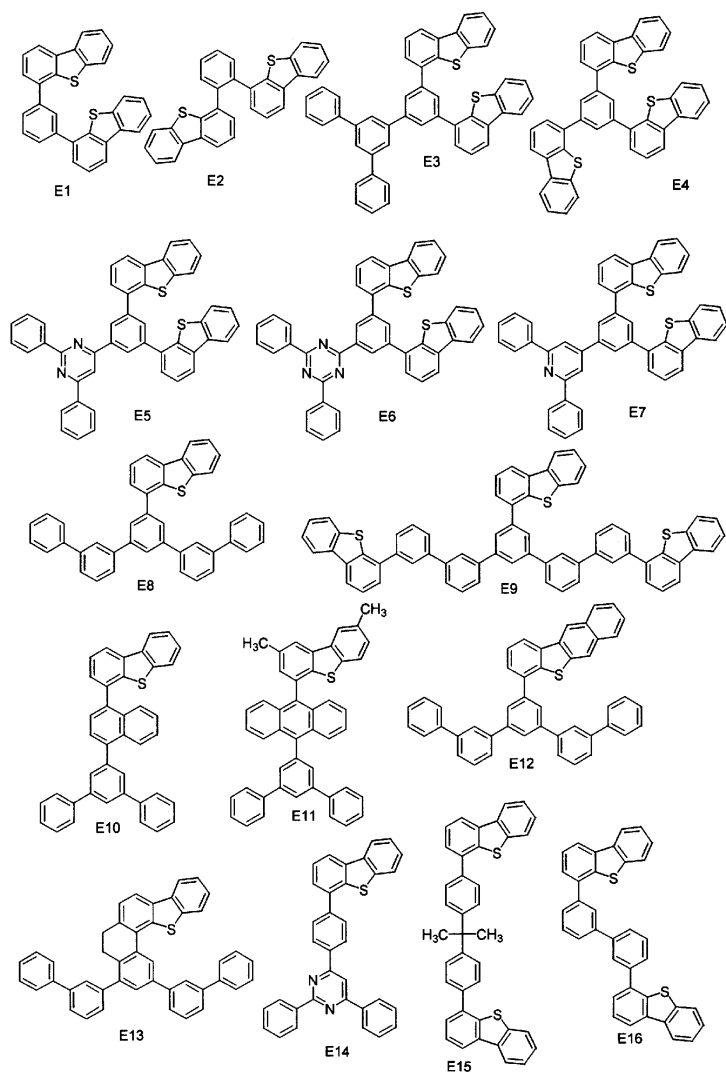


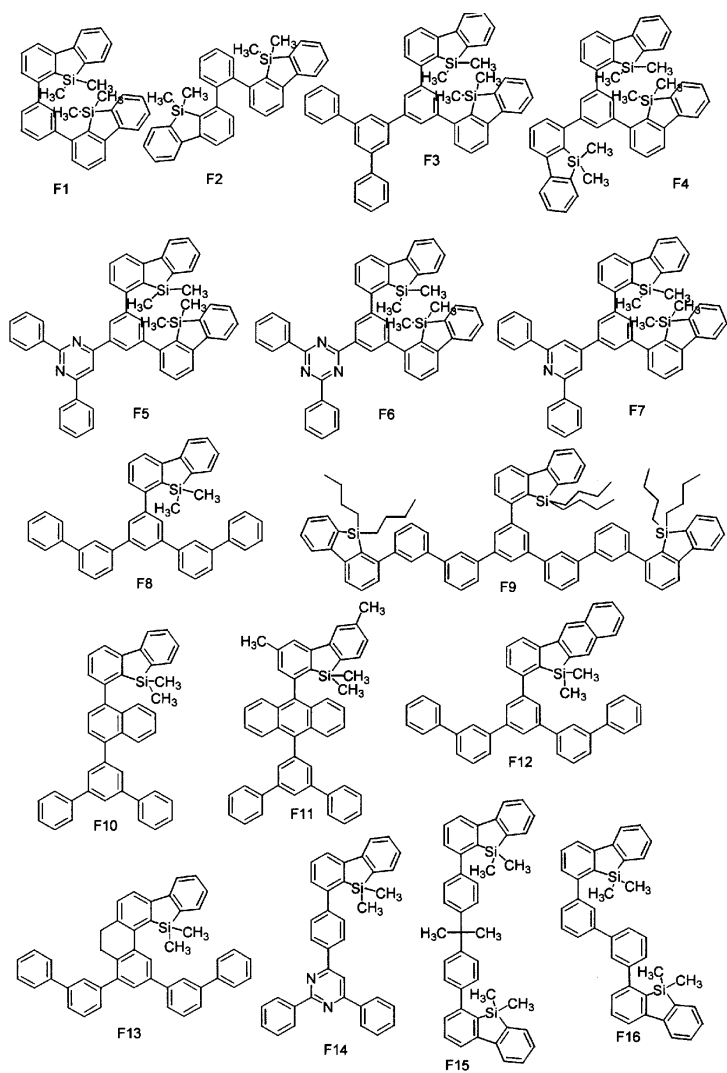
<155>

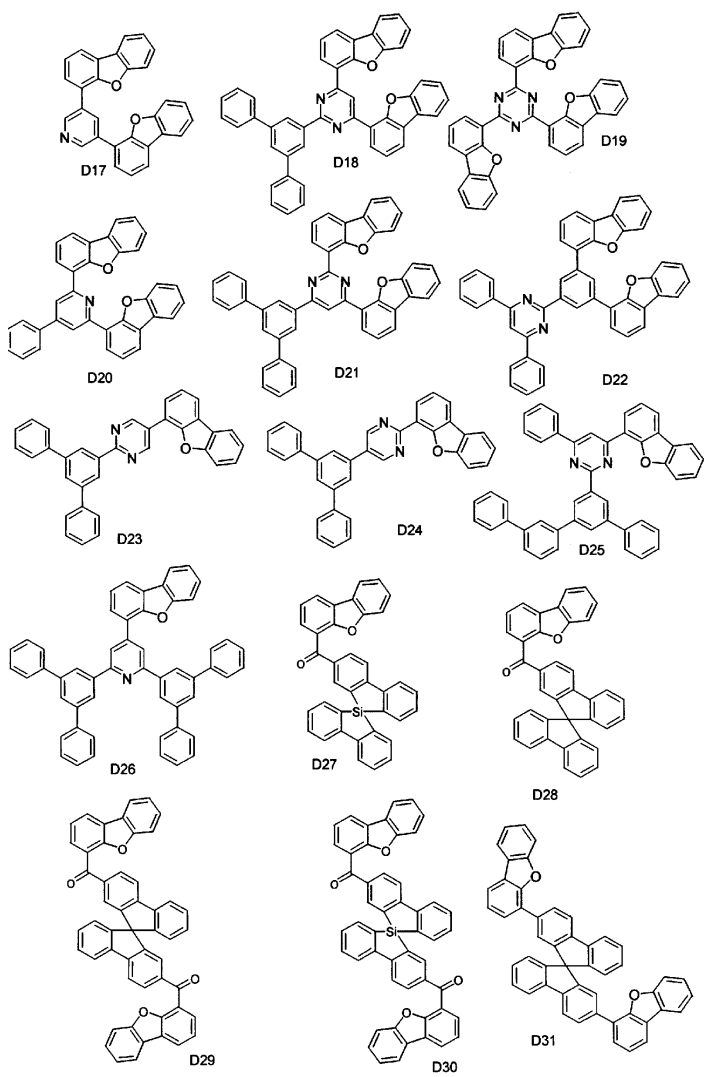


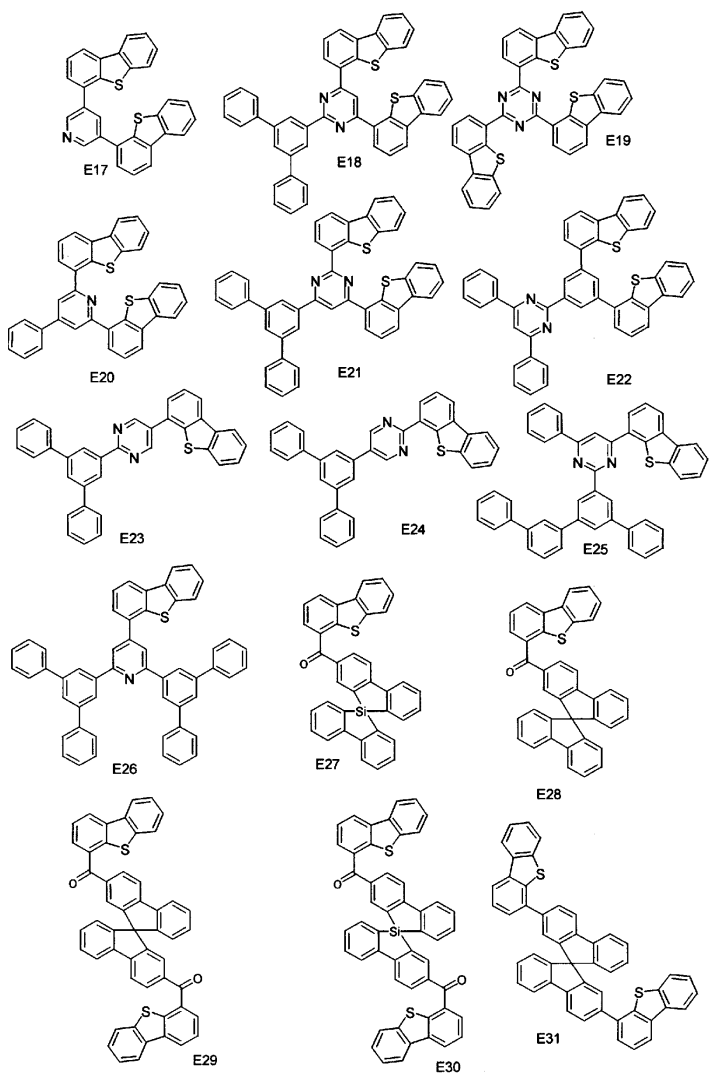


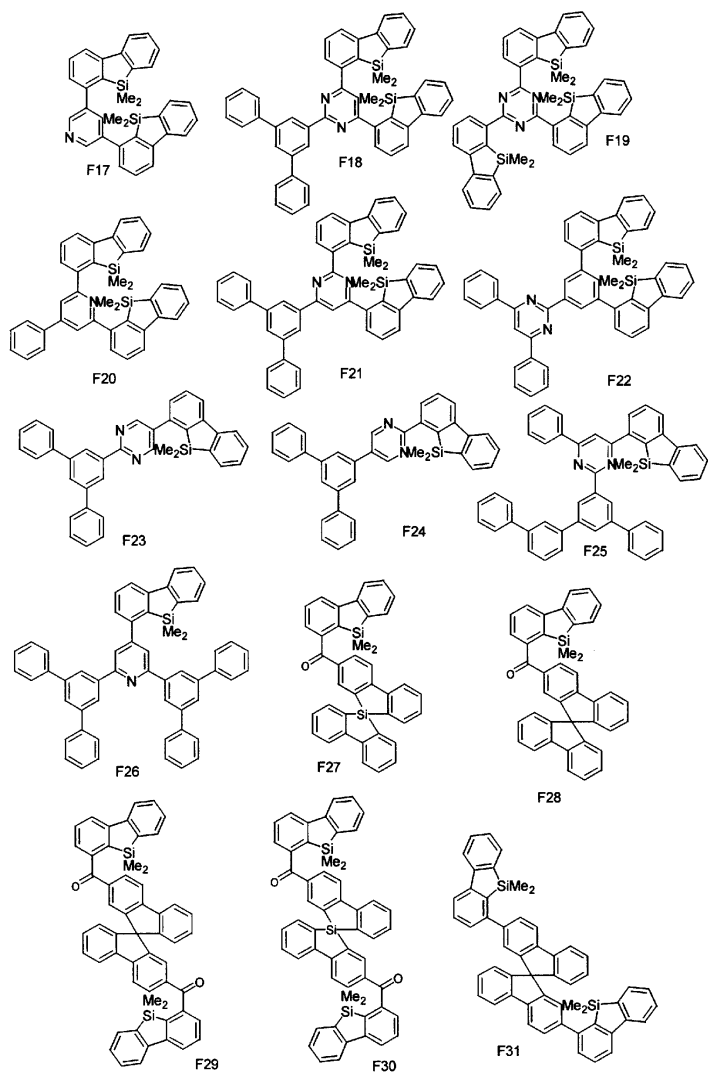
<157>

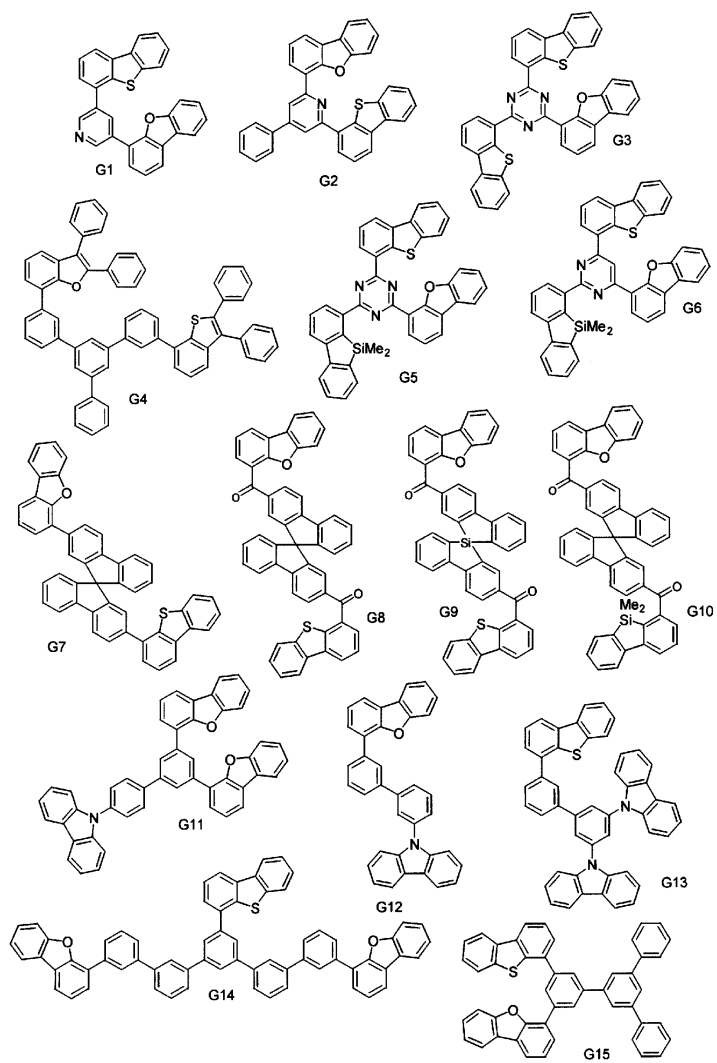




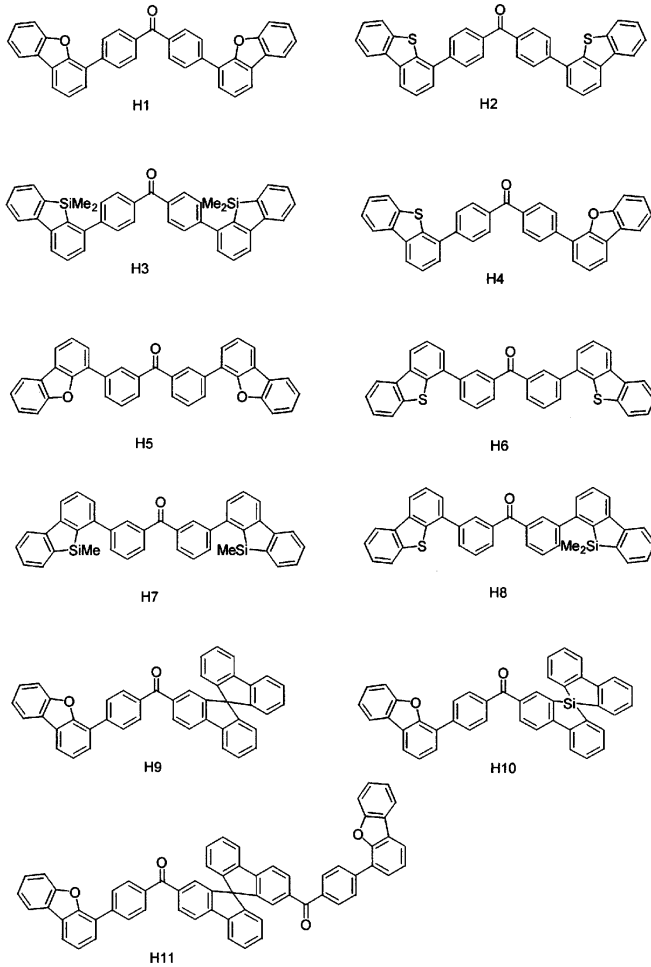








<163>



<164>

<165>

<166>

<167>

<168>

<169>

<170>

<171>

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

다음으로, 본 발명의 유기 EL 소자에 대하여 설명한다.

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

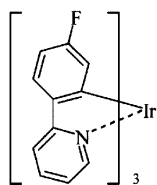
다층형의 유기 EL 소자의 구조로서는, 예컨대 양극/정공 수송층(정공 주입층)/발광층/음극, 양극/발광층/전자 수송층(전자 주입층)/음극, 양극/정공 수송층(정공 주입층)/발광층/전자 수송층(전자 주입층)/음극, 양극/정공 수송층(정공 주입층)/발광층/정공 장벽층/전자 수송층(전자 주입층)/음극, 등의 다층 구성으로 적층한 것을 들 수 있다.

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

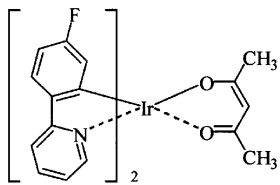
또한, 상기 발광층이 호스트 재료와 인광성의 발광 재료를 함유하고, 인광성의 발광 재료의 발광 파장이 500nm 이하의 발광 피크를 갖는 상기 유기 EL 소자.

인광성의 발광 재료로서는, 인광 양자 수율이 높고, 발광 소자의 외부 양자 효율을 보다 향상시킬 수 있다고 하는 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, 이하에 나타내는 이리듐 착체가 바람직하다.

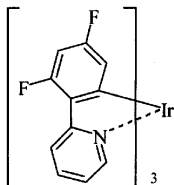
(K-1)



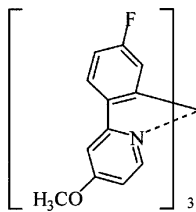
(K-2)



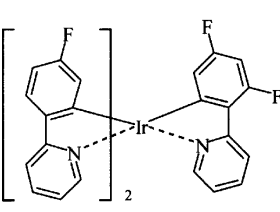
(K-3)



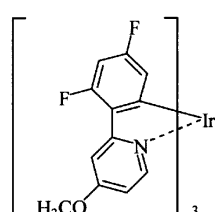
(K-4)



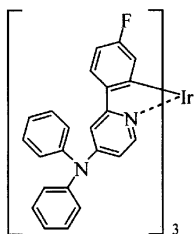
(K-5)



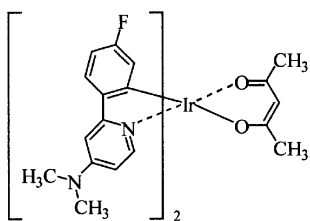
(K-6)



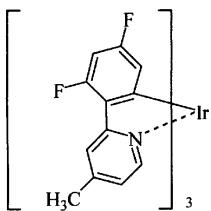
(K-7)

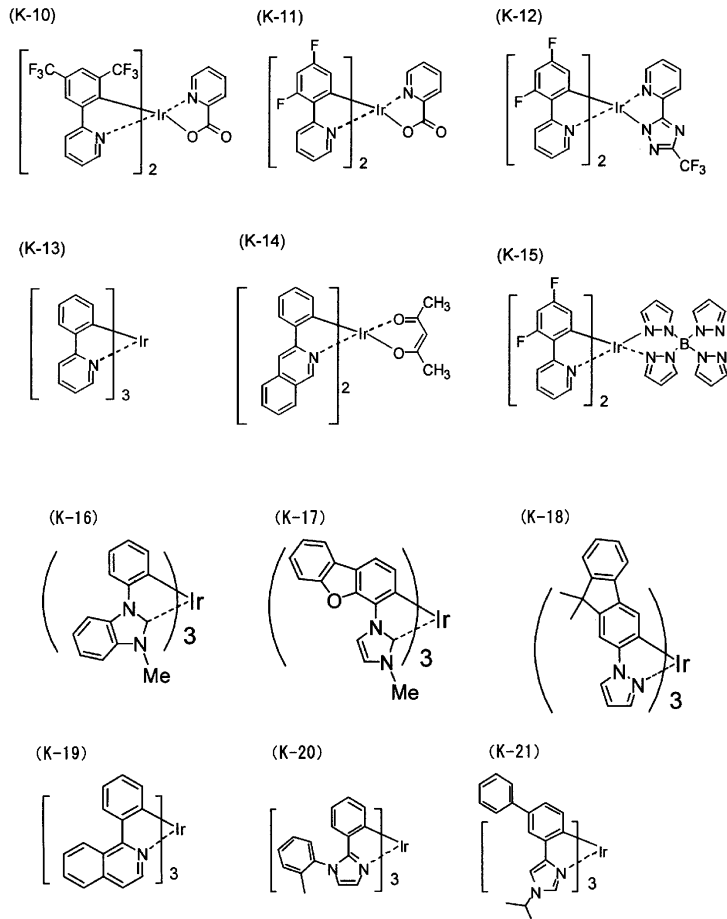


(K-8)



(K-9)





<173>

<174>

본 발명의 유기 EL 소자는, 상기 발광층이 호스트 재료와 인광성의 발광 재료를 함유하고, 인광성의 발광 재료가 금속-칼벤(carbene) 탄소결합을 갖는 발광 재료이면 바람직하다.

<175>

본 발명의 유기 EL 소자는, 상기 발광층이 호스트 재료와 인광성의 발광 재료를 함유하고, 인광성의 발광 재료가 페닐이미다졸 골격을 갖는 발광 재료이면 바람직하다.

<176>

본 발명의 유기 EL 소자는, 상기 발광층이 호스트 재료와 인광성의 발광 재료를 함유하고, 인광성의 발광 재료가 페닐피라졸 골격을 갖는 발광 재료이면 바람직하다.

<177>

본 발명의 유기 EL 소자는, 상기 유기 전기발광 소자용 재료가, 유기 전기발광 소자의 발광층에 포함되는 호스트 재료이면 바람직하다.

<178>

본 발명의 유기 EL 소자는, 상기 유기 전기발광 소자용 재료가, 유기 EL 소자의 정공 수송층에 포함되는 재료이면 바람직하다.

<179>

본 발명의 유기 EL 소자는, 상기 유기 전기발광 소자용 재료가, 유기 EL 소자의 전자 수송층 또는 정공 장벽층에 포함되는 재료이면 바람직하다.

<180>

본 발명의 유기 EL 소자는, 음극과 유기 박막층의 계면 영역에 환원성 도펀트가 첨가되어 있으면 바람직하다.

<181>

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

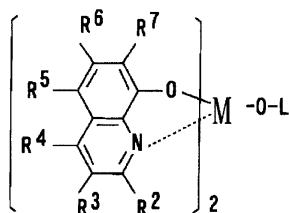
<182>

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.

<183>

상기 알칼리 토류 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.

- <184> 상기 희토류 금속으로서, Sc, Y, Ce, Tb, Yb 등을 들 수 있고, 일함수가 2.9eV 이하인 것이 특히 바람직하다.
- <185> 이상의 금속 중 바람직한 금속은, 특히 환원 능력이 높고, 전자 주입역에의 비교적 소량의 첨가에 의해, 유기 EL 소자에 있어서의 발광 휘도의 향상이나 장수명화가 가능한 것이다.
- <186> 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.
- <187> 상기 알칼리 토류 금속 화합물로서는, BaO, SrO, CaO 및 이들을 혼합한 $\text{Ba}_x\text{Sr}_{1-x}\text{O}$ ($0 < x < 1$)나, $\text{Ba}_x\text{Ca}_{1-x}\text{O}$ ($0 < x < 1$) 등을 들 수 있고, BaO, SrO, CaO가 바람직하다.
- <188> 상기 희토류 금속 화합물로서는, YbF_3 , ScF_3 , ScO_3 , Y_2O_3 , Ce_2O_3 , GdF_3 , TbF_3 등을 들 수 있고, YbF_3 , ScF_3 , TbF_3 가 바람직하다.
- <189> 상기 알칼리 금속 착체, 알칼리 토류 금속 착체, 희토류 금속 착체로서는, 각각 금속 이온으로서 알칼리 금속 이온, 알칼리 토류 금속 이온, 희토류 금속 이온 중 적어도 하나를 함유하는 것이면 특별히 한정은 없다. 또한, 리간드에는 퀴놀린을, 벤조퀴놀린을, 아크리딘을, 페난트리딘을, 하이드록시페닐옥사졸, 하이드록시페닐싸이아졸, 하이드록시다이아릴옥사다이아졸, 하이드록시다이아릴싸이아다이아졸, 하이드록시페닐피리딘, 하이드록시페닐벤조이미다졸, 하이드록시벤조트라이아졸, 하이드록시플루오로보레인, 바이피리딘, 페난트롤린, 프탈로시아닌, 포르피린, 사이클로펜타다이엔, β -다이케톤류, 아조메타인류, 및 그들의 유도체 등이 바람직하지만, 이들에 한정되는 것은 아니다.
- <190> 환원성 도펀트의 첨가 형태로서는, 상기 계면 영역에 층상 또는 섬상으로 형성하면 바람직하다. 형성방법으로서, 저항 가열 증착법에 의해 환원성 도펀트를 증착하면서, 계면 영역을 형성하는 발광 재료나 전자 주입 재료인 유기물을 동시에 증착시켜, 유기물 중에 환원 도펀트를 분산하는 방법이 바람직하다. 분산 농도로서는 몰비로 유기물:환원성 도펀트= 100:1 내지 1:100, 바람직하게는 5:1 내지 1:5이다.
- <191> 환원성 도펀트를 층상으로 형성하는 경우는, 계면의 유기층인 발광 재료나 전자 주입 재료를 층상으로 형성한 후에, 환원 도펀트를 단독으로 저항 가열 증착법에 의해 증착하고, 바람직하게는 층의 두께 0.1 내지 15nm로 형성한다.
- <192> 환원성 도펀트를 섬상으로 형성하는 경우는, 계면의 유기층인 발광 재료나 전자 주입 재료를 섬상으로 형성한 후에, 환원 도펀트를 단독으로 저항 가열 증착법에 의해 증착하고, 바람직하게는 섬의 두께 0.05 내지 1nm로 형성한다.
- <193> 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.
- <194> 본 발명의 유기 EL 소자는, 상기 발광층과 음극사이에 전자 주입층을 갖고, 상기 전자 주입층이 질소 함유 환유도체를 주성분으로서 함유하면 바람직하다.
- <195> 상기 전자 주입층에 이용되는 전자 수송 재료로서는, 분자내에 헤테로 원자를 1개 이상 함유하는 방향족 헤테로 환 화합물이 바람직하게 사용되고, 특히 질소 함유 환 유도체가 바람직하다.
- <196> 이 질소 함유 환 유도체로서는, 예컨대 화학식 (A)로 표시되는 것이 바람직하다.



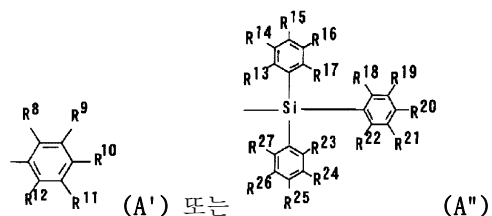
(A)

- <197>
- <198> R^2 내지 R^7 은, 각각 독립적으로, 수소 원자, 할로젠 원자, 옥시기, 아미노기, 또는 탄소수 1 내지 40의 탄화수소기이며, 이들은 치환되어 있을 수도 있다.
- <199> 이 할로젠 원자의 예로서는, 상기와 마찬가지로의 것을 들 수 있다. 또한, 치환되어 있을 수도 있는 아미노기의 예로서는, 상기 알킬아미노기, 아릴아미노기, 아르알킬아미노기와 마찬가지로의 것을 들 수 있다.

<200> 탄소수 1 내지 40의 탄화수소기로서는, 치환 또는 비치환의 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.

<201> M은, 알루미늄(Al), 갈륨(Ga) 또는 인듐(In)이며, In이면 바람직하다.

<202> 화학식 (A)의 L은, 하기 화학식 (A') 또는 (A'')로 표시되는 기이다.

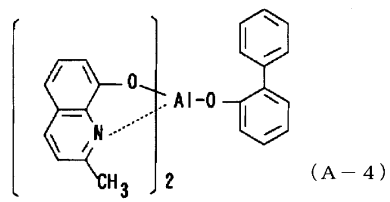
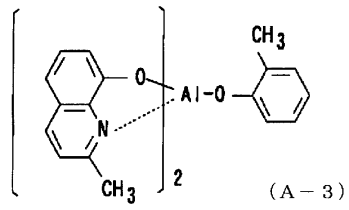
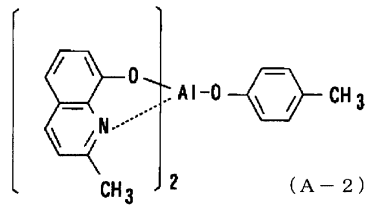
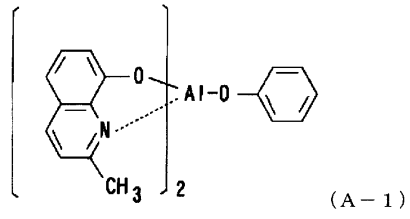


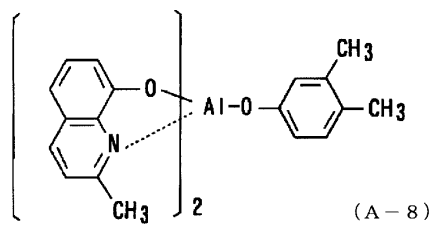
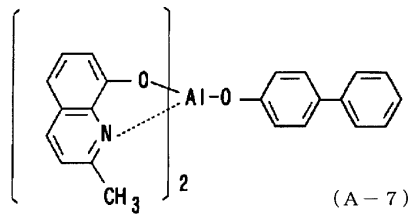
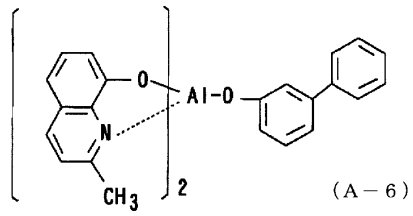
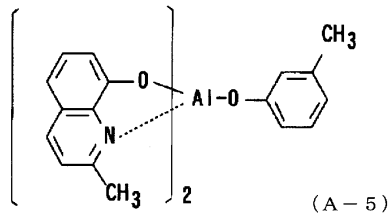
<203> (식 중, R^8 내지 R^{12} 는, 각각 독립적으로, 수소 원자 또는 치환 또는 비치환의 탄소수 1 내지 40의 탄화수소기이며, 서로 인접하는 기가 환상 구조를 형성하고 있을 수도 있다. 또한, R^{13} 내지 R^{27} 은, 각각 독립적으로, 수소 원자 또는 치환 또는 비치환의 탄소수 1 내지 40의 탄화수소기이며, 서로 인접하는 기가 환상 구조를 형성하고 있을 수도 있다.)

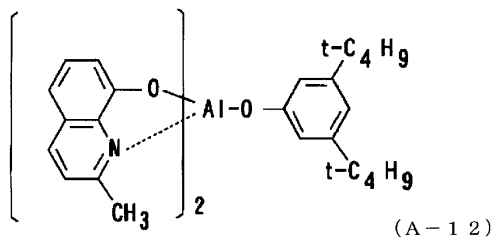
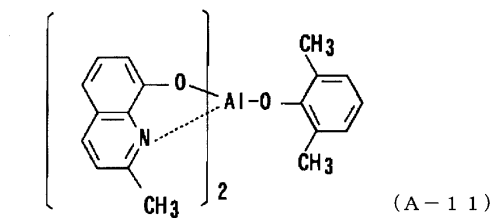
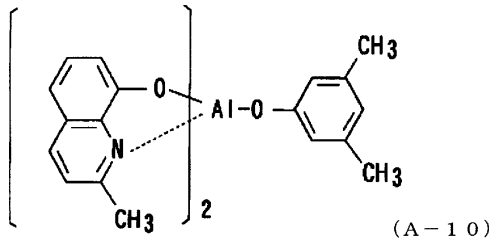
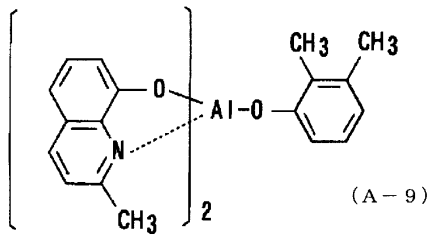
<205> 화학식 (A') 및 (A'')의 R^8 내지 R^{12} 및 R^{13} 내지 R^{27} 이 나타내는 탄소수 1 내지 40의 탄화수소기로서는, 상기 R^2 내지 R^7 의 구체예와 마찬가지로의 것을 들 수 있다.

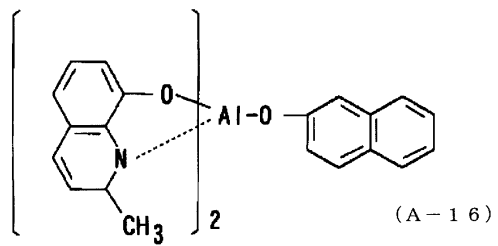
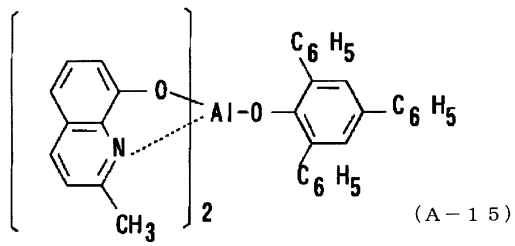
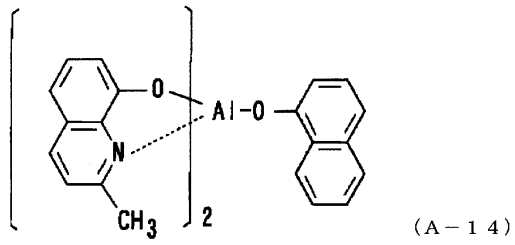
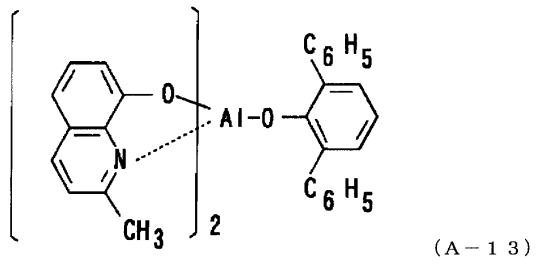
<206> 또한, 상기 R^8 내지 R^{12} 및 R^{13} 내지 R^{27} 의 서로 인접하는 기가 환상 구조를 형성한 경우의 2가의 기로서는, 테트라메틸렌기, 펜타메틸렌기, 헥사메틸렌기, 다이페닐메테인-2,2'-다이일기, 다이페닐에탄-3,3'-다이일기, 다이페닐프로페인-4,4'-다이일기 등을 들 수 있다.

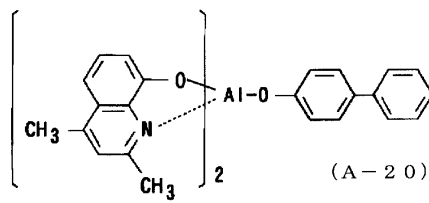
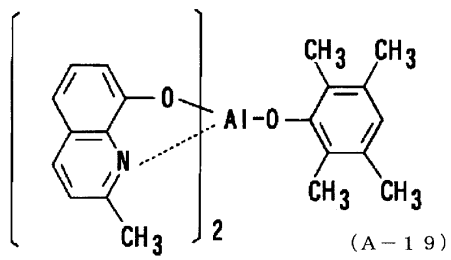
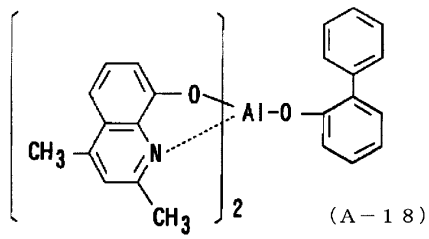
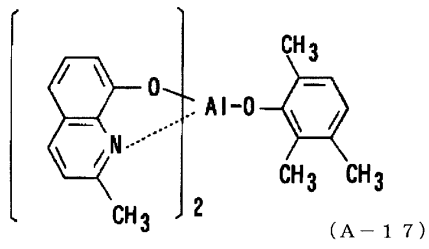
<207> 화학식 (A)로 표시되는 질소 함유 환의 금속 킬레이트 착체의 구체예를 이하에 나타내지만, 이들 예시 화합물에 한정되는 것은 아니다.



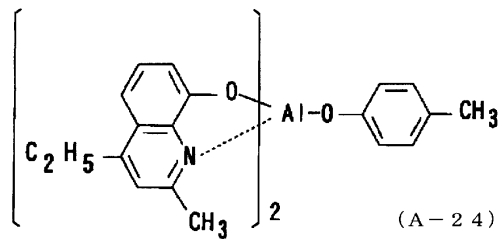
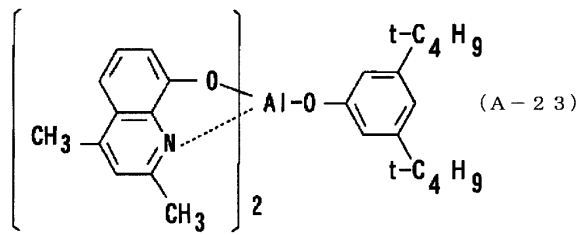
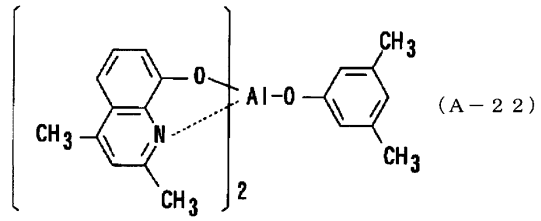
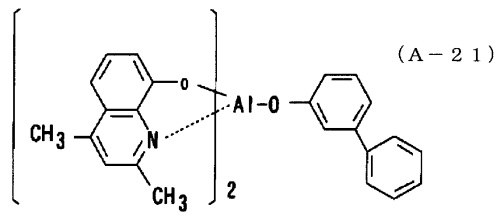




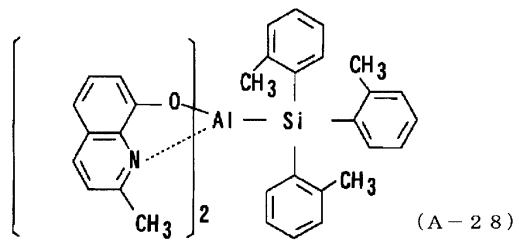
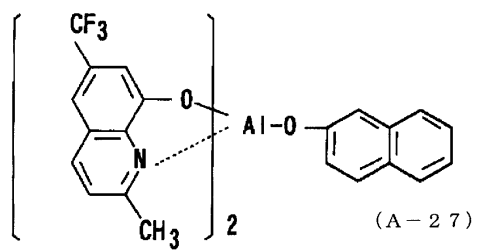
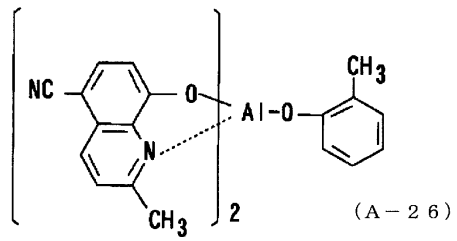
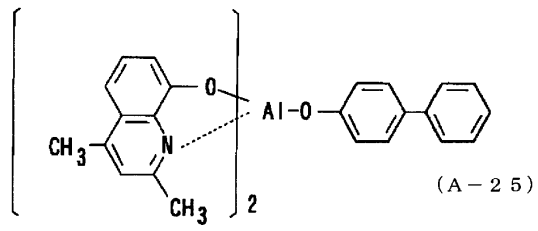


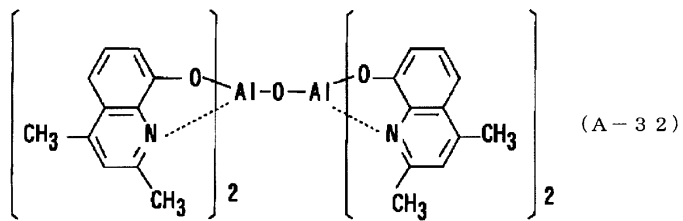
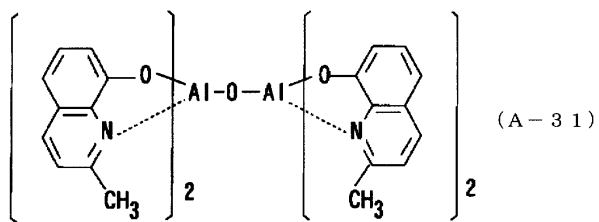
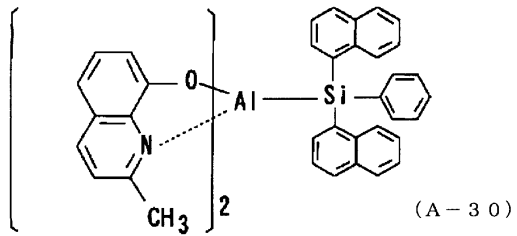
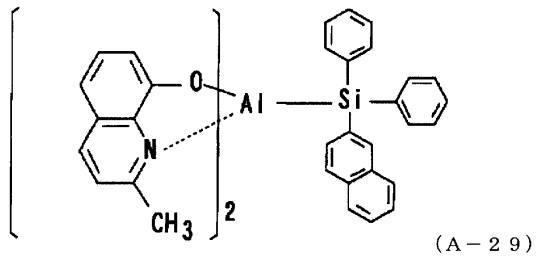


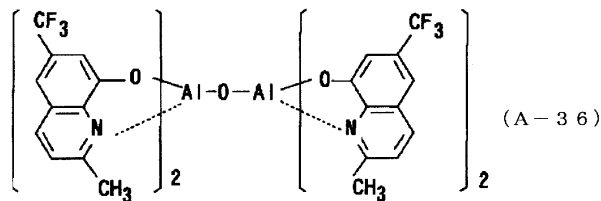
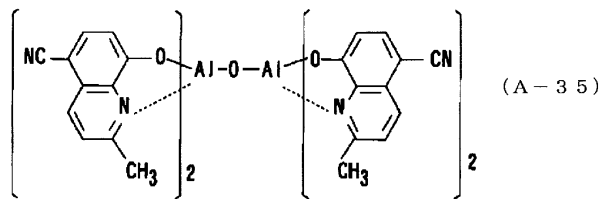
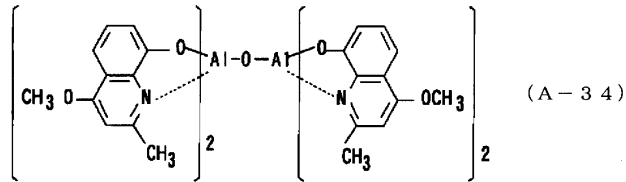
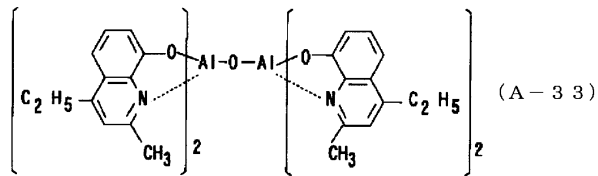
<212>



<213>



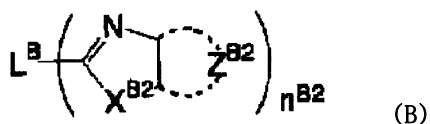




<216>

<217>

상기 전자 주입층의 주성분인 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, 벤조이미다졸환, 벤조트리아졸환, 피리지노이미다졸환, 피리미디노이미다졸환, 피리다지노이미다졸환이며, 특히 바람직하게는, 하기 화학식 (B)로 표시되는 것이다.



<218>

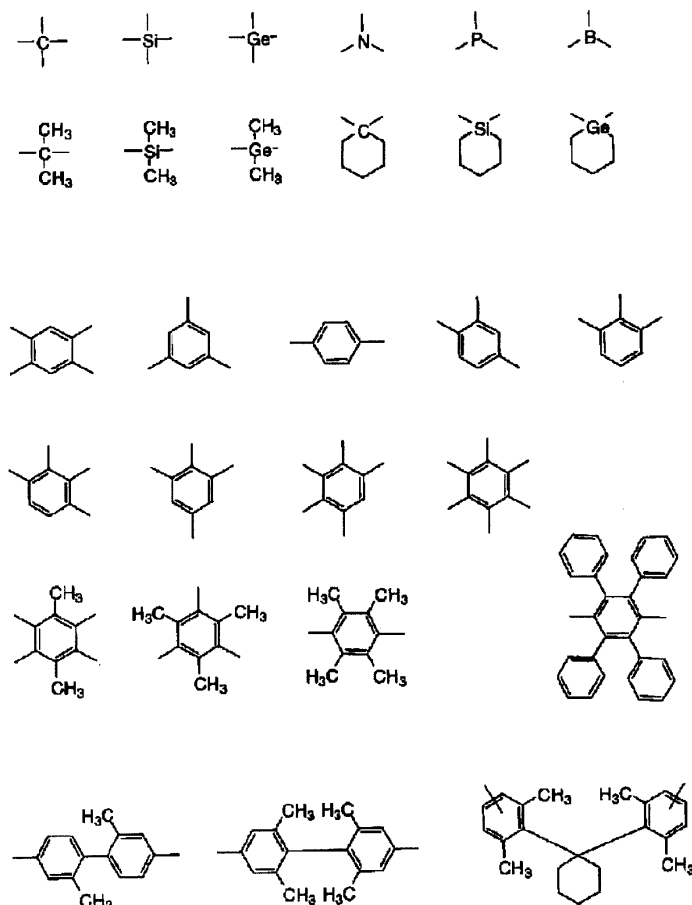
<219>

화학식 (B) 중, L^{B} 는 2가 이상의 연결기를 나타내고, 예컨대 탄소, 규소, 질소, 붕소, 산소, 황, 금속(예컨대, 바륨, 벨리륨), 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.

<220>

L^{B} 의 아릴기 및 방향족 헤테로환기는 치환기를 갖고 있을 수도 있고, 치환기로서 바람직하게는 알킬기, 알켄일기, 알킨일기, 아릴기, 아미노기, 알콕시기, 아릴옥시기, 아실기, 알콕시카보닐기, 아릴옥시카보닐기, 아실옥시기, 아실아미노기, 알콕시카보닐아미노기, 아릴옥시카보닐아미노기, 설포닐아미노기, 설파오일기, 카밤오일기, 알킬싸이오기, 아릴싸이오기, 설포닐기, 할로젠 원자, 사이아노기, 방향족 헤테로환기이며, 보다 바람직하게는 알킬기, 아릴기, 알콕시기, 아릴옥시기, 할로젠 원자, 사이아노기, 방향족 헤테로환기이며, 더욱 바람직하게는 알킬기, 아릴기, 알콕시기, 아릴옥시기, 방향족 헤테로환기이며, 특히 바람직하게는 알킬기, 아릴기, 알콕시기, 방향족 헤테로환기이다.

<221> L^B 의 구체예로서는, 이하에 나타내는 것을 들 수 있다.



<222>

<223> 화학식 (B)에서의 X^{B2} 는, -O-, -S- 또는 $=N-R^{B2}$ 를 나타낸다. R^{B2} 는, 수소 원자, 지방족 탄화수소기, 아릴기 또는 헤테로환기를 나타낸다.

<224> R^{B2} 의 지방족 탄화수소기는, 직쇄, 분지 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-부틸, 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 프로파질, 3-펜틴일 등을 들 수 있다.)이며, 알킬기이면 바람직하다.

<225> R^{B2} 의 아릴기는, 단환 또는 축합환이며, 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.

<226> R^{B2} 의 헤테로환기는, 단환 또는 축합환이며, 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, 모르폴린, 싸이오펜, 셀레노펜, 퓨란, 피롤, 이미다졸, 피라졸, 피리딘, 피라진, 피리다진, 피리미딘, 트리아자졸, 트리아진, 인돌, 인다졸, 퓨린, 싸이아졸린, 싸이아졸, 싸이아다리아졸, 옥사졸린, 옥사졸, 옥사다리아졸, 퀴놀린, 아이소퀴놀린, 프탈라진, 나프티리딘, 퀴녹살린, 퀴나졸린, 신노린, 퓨테리딘, 아크리딘, 페난트롤린, 페나진, 테트라졸, 벤조이미다졸, 벤조옥사졸, 벤조싸이아졸, 벤조트리아자졸, 테트라자인덴, 카바졸, 아제핀 등을 들 수 있고, 바람직하게는, 퓨란, 싸이오펜, 피리딘, 피라진, 피리미딘, 피리다진, 트리아자진, 퀴놀린, 프탈라진, 나프티리딘, 퀴녹살린, 퀴나졸린이며, 보다 바람직하게는 퓨란, 싸이오

벤, 피리딘, 퀴놀린이며, 더욱 바람직하게는 퀴놀린이다.

<227> R^{B2} 로 표시되는 지방족 탄화수소기, 아릴기 및 헤테로환기는 치환기를 갖고 있을 수도 있고, 치환기로서는 상기 L^B 로 표시되는 기의 치환기로서 열거한 것과 마찬가지로이고, 또한 바람직한 치환기도 마찬가지이다.

<228> 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 아릴기이며, 더욱 바람직하게는 지방족 탄화수소기(바람직하게는 탄소수 1 내지 20, 보다 바람직하게는 탄소수 1 내지 12, 더욱 바람직하게는 탄소수 2 내지 10의 것)이다.

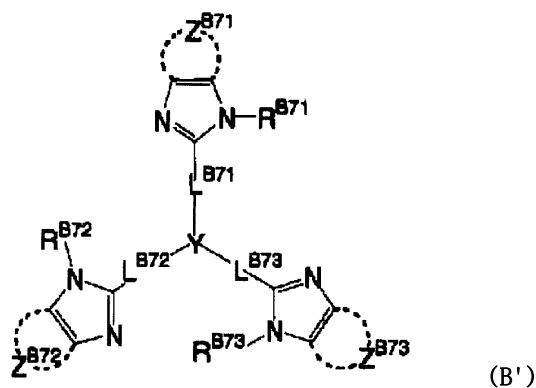
<229> X^{B2} 로서 바람직하게는 $-O-$, $=N-R^{B2}$ 이며, 보다 바람직하게는 $=N-R^{B2}$ 이며, 특히 바람직하게는 $=N-R^{B2}$ 이다.

<230> Z^{B2} 는, 방향족환을 형성하기 위해 필요한 원자군을 나타낸다. Z^{B2} 로 형성되는 방향족환은 방향족 탄화수소환, 방향족 헤테로환의 어느 것이라도 좋고, 구체적으로는, 예컨대 벤젠환, 피리딘환, 피라진환, 피리미딘환, 피리다진환, 트라이아진환, 피롤환, 퓨란환, 싸이오펜환, 셀레노펜환, 텔루로펜환, 이미다졸환, 싸이아졸환, 셀레나졸환, 텔라졸환, 싸이아다리아졸환, 옥사다리아졸환, 피라졸환 등을 들 수 있고, 바람직하게는 벤젠환, 피리딘환, 피라진환, 피리미딘환, 피리다진환이며, 보다 바람직하게는 벤젠환, 피리딘환, 피라진환이며, 더욱 바람직하게는 벤젠환, 피리딘환이며, 특히 바람직하게는 피리딘환이다.

<231> Z^{B2} 로 형성되는 방향족환은, 더욱이 다른 환과 축합환을 형성할 수도 있고, 치환기를 갖고 있을 수도 있다. 치환기로서는 상기 L^B 로 표시되는 기의 치환기로서 열거한 것과 마찬가지로이고, 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, 헤테로환기이며, 더욱 바람직하게는 알킬기, 아릴기, 알콕시기, 아릴옥시기, 방향족 헤테로환기이며, 특히 바람직하게는 알킬기, 아릴기, 알콕시기, 방향족 헤테로환기이다.

<232> n^{B2} 는, 1 내지 4의 정수이며, 2 내지 3이면 바람직하다.

<233> 상기 화학식 (B)로 표시되는 질소 함유 5원환 유도체 중, 더욱 바람직하게는 하기 화학식 (B')로 표시되는 것이 바람직하다.



<235> 화학식 (B') 중, R^{B71} , R^{B72} 및 R^{B73} 은, 각각 화학식 (B)에서의 R^{B2} 와 마찬가지이고, 또한 바람직한 범위도 마찬가지이다.

<236> Z^{B71} , Z^{B72} 및 Z^{B73} 은, 각각 화학식 (B)에서의 Z^{B2} 와 마찬가지이고, 또한 바람직한 범위도 마찬가지이다.

<237> L^{B71} , L^{B72} 및 L^{B73} 은, 각각 연결기를 나타내고, 화학식 (B)에서의 L^B 의 예를 2개로 한 것을 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 있을 수도 있고, 치환기로서는

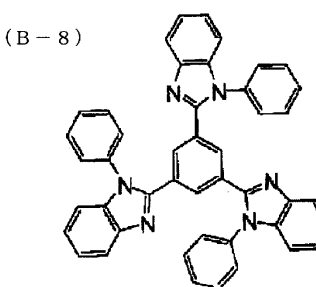
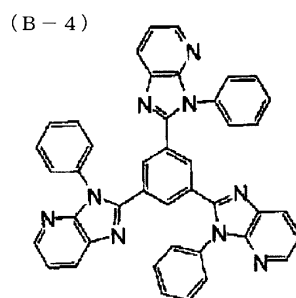
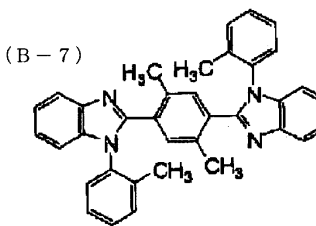
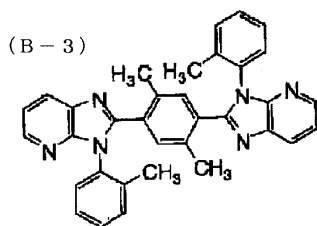
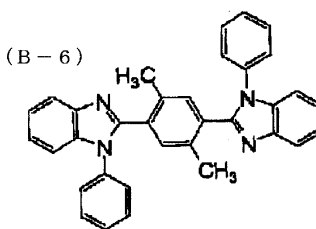
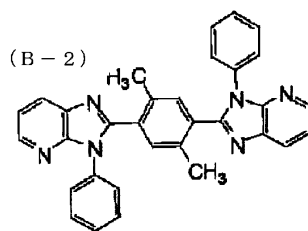
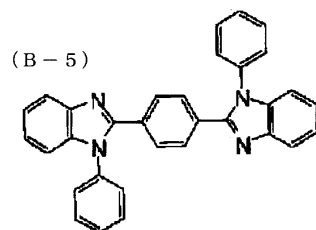
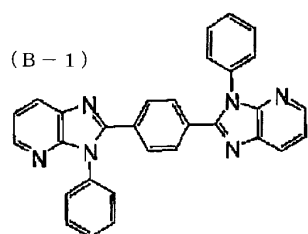
상기 화학식 (B)에서의 L^B 로 표시되는 기의 치환기로서 열거한 것과 마찬가지로, 또한 바람직한 치환기도 마찬가지로이다.

<238>

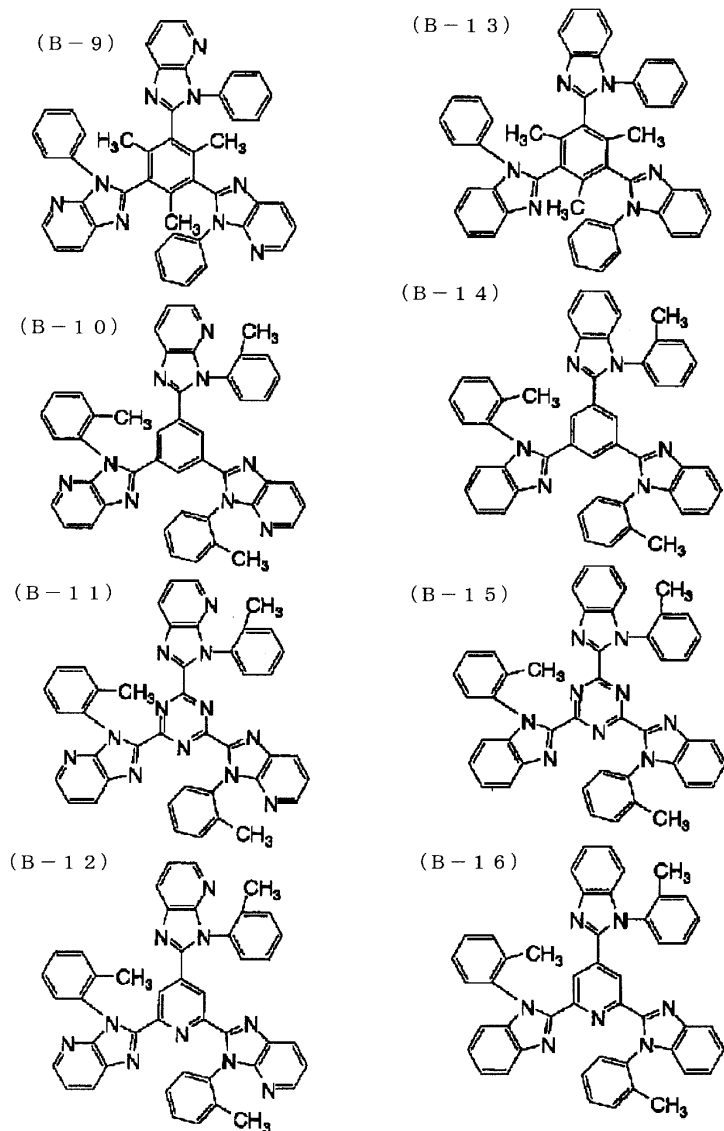
Y는, 질소 원자, 1,3,5-벤젠트라이일기 또는 2,4,6-트리아진트라이일기를 나타낸다. 1,3,5-벤젠트라이일기는 2,4,6-위치에 치환기를 갖고 있을 수도 있고, 치환기로서는, 예컨대 알킬기, 방향족 탄화수소환기, 할로젠 원자 등을 들 수 있다.

<239>

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



<240>



<241>

<242>

또한, 상기 전자 주입층의 구성 성분으로서, 상기 질소 함유 환 유도체 외에 무기화합물로서, 절연체 또는 반도체를 사용하는 것이 바람직하다. 전자 주입층이 절연체나 반도체로 구성되어 있으면, 전류 누출을 유효하게 방지하여, 전자 주입성을 향상시킬 수 있다.

<243>

이러한 절연체로서는, 알칼리 금속 칼코게나이드, 알칼리 토류 금속 칼코게나이드, 알칼리 금속의 할로젠화물 및 알칼리 토류 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 알칼리 토류 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 알칼리 토류 금속의 할로젠화물로서는, 예컨대 CaF_2 , BaF_2 , SrF_2 , MgF_2 및 BeF_2 등의 불화물이나, 불화물 이외의 할로젠화물을 들 수 있다.

<244>

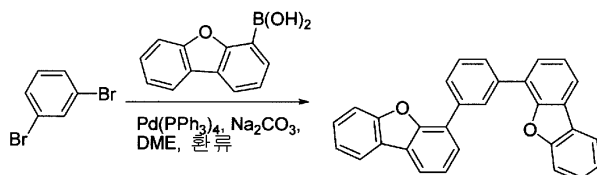
또한, 반도체로서는, Ba, Ca, Sr, Yb, Al, Ga, In, Li, Na, Cd, Mg, Si, Ta, Sb 및 Zn 중 적어도 하나의 원소를 포함하는 산화물, 질화물 또는 산화질화물 등의 1종 단독 또는 2종 이상의 조합을 들 수 있다. 또한, 전자 주입층을 구성하는 무기화합물이, 미결정 또는 비정질의 절연성 박막인 것이 바람직하다. 전자 주입층이 이들 절연성 박막으로 구성되어 있으면, 보다 균질한 박막이 형성되기 때문에, 다크 스팟 등의 화소결함을 감소시킬 수 있다. 한편, 이러한 무기화합물로서는, 상기 알칼리 금속 칼코게나이드,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

- <245> 또한, 본 발명에 있어서의 전자 주입층은, 전술한 환원성 도펀트를 함유하고 있을 수도 있다.
- <246> 본 발명에 있어서, 유기 EL 소자의 양극은, 정공을 정공 수송층 또는 발광층에 주입하는 역할을 담당하는 것이고, 4.5eV 이상의 일함수를 갖는 것이 효과적이다. 본 발명에 사용되는 양극 재료의 구체예로서는, 산화인듐주석합금(ITO), 산화주석(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.
- <247> 본 발명의 유기 EL 소자의 각 층의 형성방법은 특별히 한정되지 않는다. 종래 공지된 진공 증착법, 스퍼코팅법에 의한 형성방법을 이용할 수 있다. 본 발명의 유기 EL 소자에 이용하는, 상기 화학식 1 내지 3 중 어느 하나로 표시되는 화합물을 함유하는 유기 박막층은, 진공 증착법, 분자선 증착법(MBE법) 또는 용매에 녹인 용액의 디핑법, 스퍼코팅법, 캐스팅법, 바코팅법, 롤코팅법 등의 도포법에 의한 공지된 방법으로 형성할 수 있다.
- <248> 본 발명의 유기 EL 소자의 각 유기층의 막 두께는 특별히 제한되지 않지만, 일반적으로 막 두께가 지나치게 얇으면 편광 등의 결함이 생기기 쉽고, 반대로 지나치게 두꺼우면 높은 인가전압이 필요하여 효율이 나빠지기 때문에, 통상은 수nm 내지 1μm의 범위가 바람직하다.

실시예

- <249> 다음으로, 실시예를 이용하여 본 발명을 더욱 구체적으로 설명한다.

- <250> 합성실시예 1(D1의 합성)



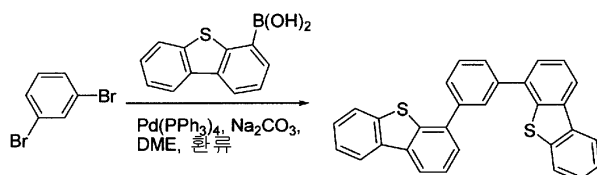
- <251>

- <252> 아르곤 분위기하, 300밀리리터의 3구 플라스크에 4-다이벤조플란보론산 3.75g(17.7mmol), 테트라키스(트라이페닐포스핀)팔라듐 1.02g(0.885mmol)을 넣고, 아르곤 치환했다. 이것에, 1,2-디메톡시에테인 53.1밀리리터, 1,4-다이브로모벤젠 0.810밀리리터(6.73mmol), 2.0M 탄산나트륨 수용액 26.6밀리리터(53.1mmol)를 가하고, 아르곤 분위기하, 8시간 가열 환류했다. 반응액을 여과한 후, 수득된 고체를 물, 메탄올, 염화메틸렌으로 세정함으로써, 화합물1 2.72g(6.63mmol, 수율 98%)을 수득했다. 90MHz ¹H-NMR 및 FD-MS(필드 이온화 질량 분석)의 측정에 의해 목적물인 것을 확인했다. FD-MS의 측정 결과를 이하에 나타낸다.

- <253> FD-MS, calcd for C₃₀H₁₈O₂= 410, found, m/z= 410(M⁺, 100)

- <254> 또한, 본 화합물을 190℃에서 승화 정제를 했다. 승화 정제에 의해 수득된 순도는 99.8%였다.

- <255> 합성실시예 2(E1의 합성)



- <256>

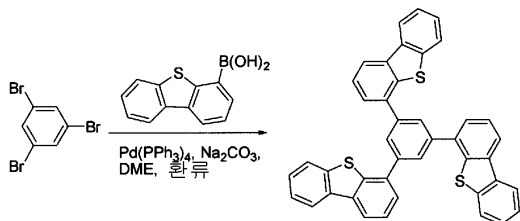
- <257> 아르곤 분위기하, 300밀리리터의 3구 플라스크에 4-다이벤조싸이오펜보론산 3.42g(15.0mmol), 테트라키스(트라이페닐포스핀)팔라듐 0.867g(0.750mmol)을 넣고, 아르곤 치환했다. 이것에, 1,2-디메톡시에테인 45.0밀리리터, 1,4-다이브로모벤젠 0.688밀리리터(5.70mmol), 2.0M 탄산나트륨 수용액 22.5밀리리터(45.0mmol)를 가하고, 아르곤 분위기하, 8시간 가열 환류했다. 반응액을 여과한 후, 석출한 고체를 물, 메탄올, 염화메틸렌에 의해 세정함으로써, 화합물2 1.64g(3.71mmol, 수율 54%)을 수득했다. 90MHz ¹H-NMR 및 FD-MS(필드 이온화 질량 분석)의 측정에 의해 목적물인 것을 확인했다. FD-MS의 측정결과를 이하에 나타낸다.

<258> FD-MS, calcd for $C_{30}H_{18}S_2 = 442$, found, $m/z = 442(M^+, 100)$

<259> 또한, 본 화합물을 230℃에서 승화 정제를 했다. 승화 정제에 의해 수득된 화합물2의 순도는 99.7%였다.

<260> 합성실시에 3(화합물 E4의 합성)

<261> 화합물 E4의 합성경로를 이하에 나타낸다.



<262>

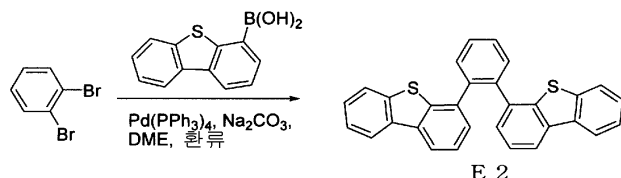
<263> 아르곤 분위기하, 300밀리리터의 3구 플라스크에 4-다이벤조싸이오펜보론산 6.04g(26.5mmol), 1,3,5-트라이브로모벤젠 2.25g(7.14mmol), 테트라키스(트라이페닐포스핀)팔라듐 2.30g(1.99mmol)을 넣고, 아르곤 치환했다. 이것에, 1,2-다이메톡시에테인 79.5밀리리터, 2.0M 탄산나트륨 수용액 39.8밀리리터(79.5mmol)를 가하고, 아르곤 분위기하, 16시간 가열 환류했다. 반응액을 여과한 후, 수득된 고체를 물, 메탄올, 염화메틸렌에 의해 세정함으로써, 화합물4 1.78g(2.85mmol, 수율 40%)을 수득했다. 90MHz 1H -NMR 및 FD-MS(필드 디스펜션 매스 분석)의 측정에 의해 목적물인 것을 확인했다. FD-MS의 측정결과를 이하에 나타낸다.

<264> FD-MS, calcd for $C_{42}H_{24}S_3 = 624$, found, $m/z = 624(M^+, 100)$

<265> 또한, 본 화합물을 260℃에서 승화 정제를 했다. 승화 정제에 의해 수득된 순도는 99.4%였다.

<266> 합성실시에 4(화합물 E2의 합성)

<267> 화합물 E2의 합성경로를 이하에 나타낸다.



<268>

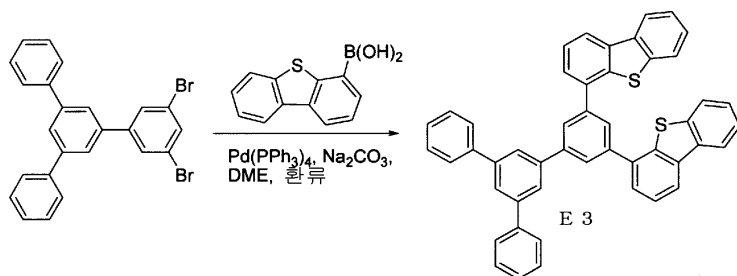
<269> 아르곤 분위기하, 300밀리리터의 3구 플라스크에 4-다이벤조싸이오펜보론산 4.04g(17.7mmol), 테트라키스(트라이페닐포스핀)팔라듐 1.02g(0.885mmol)을 넣고, 아르곤 치환했다. 이것에, 1,2-다이메톡시에테인 53.1밀리리터, 1,2-다이브로모벤젠 0.800밀리리터(6.73mmol), 2.0M 탄산나트륨 수용액 26.6밀리리터(53.1mmol)를 가하고, 아르곤 분위기하, 8시간 가열 환류했다. 반응액을 여과한 후, 수득된 고체를 실리카겔 컬럼 크로마토그래피(용출용매: 염화메틸렌/헥세인= 1/3)로 정제하고, 화합물3 1.92g(4.34mmol, 수율 64%)을 수득했다. 90MHz 1H -NMR 및 FD-MS(필드 디스펜션 매스 분석)의 측정에 의해 목적물인 것을 확인했다. FD-MS의 측정결과를 이하에 나타낸다.

<270> FD-MS, calcd for $C_{30}H_{18}S_2 = 442$, found, $m/z = 442(M^+, 100)$

<271> 또한, 본 화합물을 210℃에서 승화 정제를 했다. 승화 정제에 의해 수득된 순도는 99.4%였다.

<272> 합성실시에 5(화합물 E3의 합성)

<273> 화합물 E3의 합성경로를 이하에 나타낸다.



<274>

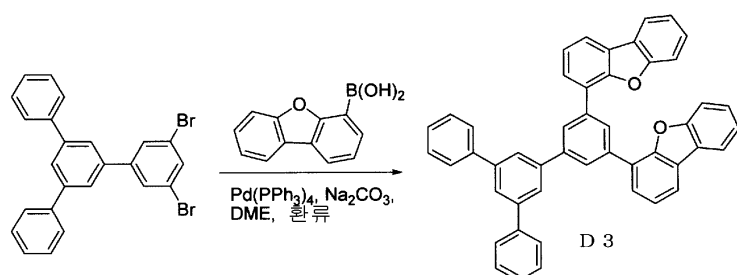
<275> 아르곤 분위기하, 300밀리리터의 3구 플라스크에 4-다이벤조싸이오펜보론산 1.41g(6.17mmol), 다이브로마이드 1.20g(2.59mmol), 테트라키스(트라이페닐포스핀)팔라듐 0.356g(0.309mmol)을 넣고, 아르곤 치환했다. 이것에, 1,2-다이메톡시에테인 18.5밀리리터, 2.0M 탄산나트륨 수용액 9.25밀리리터(18.5mmol)를 가하고, 아르곤 분위기하, 8시간 가열 환류했다. 반응액에 물 100밀리리터, 염화메틸렌 100밀리리터를 가하여, 유기층을 분리하고, 무수황산마그네슘으로 건조했다. 증발기로 감압 농축한 후, 수득된 고체를 실리카겔 컬럼 크로마토그래피(용출 용매: 염화메틸렌/헥세인= 1/3)로 정제하고, 화합물 E3 1.30g(1.94mmol, 수율 75%)을 수득했다. 90MHz ¹H-NMR 및 FD-MS(필드 디스펜션 매스 분석)의 측정에 의해 목적물인 것을 확인했다. FD-MS의 측정결과를 이하에 나타낸다.

<276> FD-MS, calcd for C₄₈H₃₀S₂= 670, found, m/z= 670(M⁺, 100)

<277> 또한, 본 화합물을 210℃에서 승화 정제를 했다. 승화 정제에 의해 수득된 화합물 E3의 순도는 99.5%였다.

<278> 합성실시예 6(화합물 D3의 합성)

<279> 화합물 D3의 합성경로를 이하에 나타낸다.



<280>

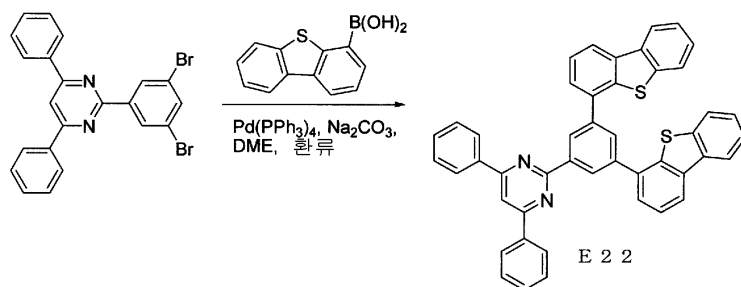
<281> 아르곤 분위기하, 300밀리리터의 3구 플라스크에 4-다이벤조퓨란보론산 2.31g(10.9mmol), 다이브로마이드 2.12g(4.57mmol), 테트라키스(트라이페닐포스핀)팔라듐 0.630g(0.545mmol)을 넣고, 아르곤 치환했다. 이것에, 1,2-다이메톡시에테인 32.7밀리리터, 2.0M 탄산나트륨 수용액 16.4밀리리터(32.7mmol)를 가하고, 아르곤 분위기하, 8시간 가열 환류했다. 반응액에 물 100밀리리터, 염화메틸렌 100밀리리터를 가하여, 유기층을 분리하고, 무수황산마그네슘으로 건조했다. 증발기로 감압 농축한 후, 수득된 고체를 실리카겔 컬럼 크로마토그래피(용출 용매: 염화메틸렌/헥세인= 1/3)로 정제하고, 화합물(D3) 1.90g(2.97mmol, 수율 65%)을 수득했다. 90MHz ¹H-NMR 및 FD-MS(필드 디스펜션 매스 분석)의 측정에 의해 목적물인 것을 확인했다. FD-MS의 측정결과를 이하에 나타낸다.

<282> FD-MS, calcd for C₄₈H₃₀O₂= 638, found, m/z= 638(M⁺, 100)

<283> 또한, 본 화합물을 200℃에서 승화 정제를 했다. 승화 정제에 의해 수득된 화합물 D3의 순도는 99.7%였다.

<284> 합성실시예 7(화합물 E22의 합성)

<285> 화합물 E22의 합성경로를 이하에 나타낸다.



<286>

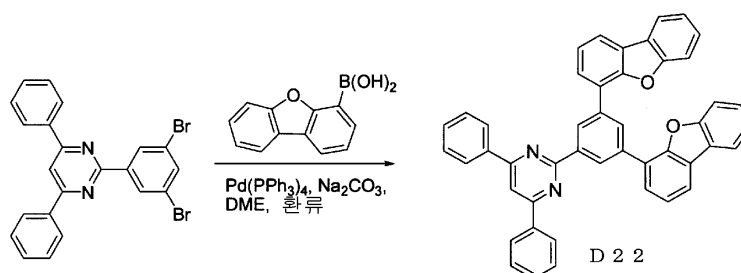
<287> 아르곤 분위기하, 300밀리리터의 3구 플라스크에 4-다이벤조싸이오벤보론산 4.33g(19.0mmol), 아틸브로마이드 3.73g(8.00mmol), 테트라키스(트라이페닐포스핀)팔라듐 1.10g(0.950mmol)을 넣고, 아르곤 치환했다. 이것에, 1,2-다이메톡시에테인 57.0밀리리터, 2.0M 탄산나트륨 수용액 28.5밀리리터(57.0mmol)를 가하고, 아르곤 분위기하, 16시간 가열 환류했다. 반응액을 여과한 후, 수득된 고체를 물, 메탄올, 염화메틸렌에 의해 세정함으로써, 화합물 E22 1.70g(2.53mmol, 수율 32%)을 수득했다. 90MHz ¹H-NMR 및 FD-MS(필드 디스펜션 매스 분석)의 측정에 의해 목적물인 것을 확인했다. FD-MS의 측정결과를 이하에 나타낸다.

<288> FD-MS, calcd for C₄₆H₂₈N₂S₂= 672, found, m/z= 672(M⁺, 100)

<289> 또한, 본 화합물을 350℃에서 승화 정제를 했다. 승화 정제에 의해 수득된 화합물 E22의 순도는 99.3%였다.

<290> 합성실시에 8(화합물 D22의 합성)

<291> 화합물 D22의 합성경로를 이하에 나타낸다.



<292>

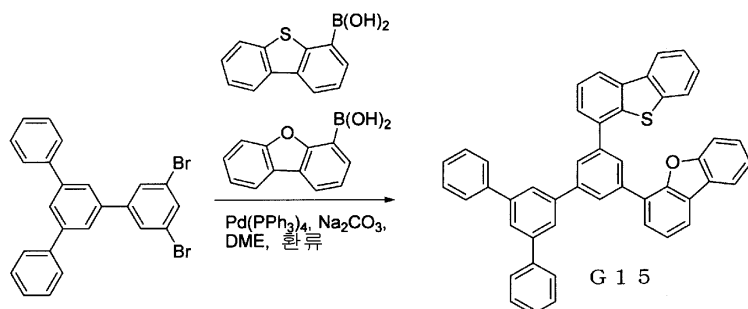
<293> 아르곤 분위기하, 300밀리리터의 3구 플라스크에 4-다이벤조퓨란보론산 4.87g(22.9mmol), 다이브로마이드 4.50g(9.65mmol), 테트라키스(트라이페닐포스핀)팔라듐 1.32g(1.15mmol)을 넣고, 아르곤 치환했다. 이것에, 1,2-다이메톡시에테인 68.7밀리리터, 2.0M 탄산나트륨 수용액 34.4밀리리터(68.7mmol)를 가하고, 아르곤 분위기하, 16시간 가열 환류했다. 반응액을 여과한 후, 수득된 고체를 물, 메탄올, 염화메틸렌에 의해 세정함으로써, 화합물 D22 2.78g(4.34mmol, 수율 45%)을 수득했다. 90MHz ¹H-NMR 및 FD-MS(필드 디스펜션 매스 분석)의 측정에 의해 목적물인 것을 확인했다. FD-MS의 측정결과를 이하에 나타낸다.

<294> FD-MS, calcd for C₄₆H₂₈N₂S₂= 640, found, m/z= 640(M⁺, 100)

<295> 또한, 본 화합물을 330℃에서 승화 정제를 했다. 승화 정제에 의해 수득된 화합물 D22의 순도는 99.5%였다.

<296> 합성실시에 9(화합물 G15의 합성)

<297> 화합물 G15의 합성경로를 이하에 나타낸다.



<298>

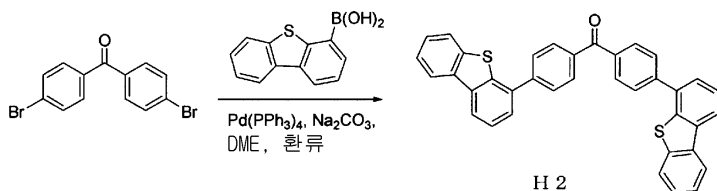
<299> 아르곤 분위기하, 300밀리리터의 3구 플라스크에 4-다이벤조퓨란보론산 2.31g(10.9mmol), 4-다이벤조싸이오펜보론산 2.48g(10.9mmol), 다이브로마이드 4.21g(9.07mmol), 테트라키스(트라이페닐포스핀)팔라듐 1.26g(1.09mmol)을 넣고, 아르곤 치환했다. 이것에, 1,2-다이메톡시에테인 65.4밀리리터, 2.0M 탄산나트륨 수용액 32.7밀리리터(65.4mmol)를 가하고, 아르곤 분위기하, 16시간 가열 환류했다. 반응액에 물 100밀리리터, 염화메틸렌 100밀리리터를 가하여, 유기층을 분리하고, 무수황산마그네슘으로 건조했다. 증발기로 감압 농축한 후, 수득된 고체를 실리카겔 컬럼 크로마토그래피(용출용매: 염화메틸렌/헥세인= 1/3)로 정제하고, 화합물 G15 1.49g(2.27mmol, 수율 25%)을 수득했다. 90MHz ¹H-NMR 및 FD-MS(필드 이온화 질량 분석)의 측정 결과에 의해 목적물인 것을 확인했다. FD-MS의 측정결과를 이하에 나타낸다.

<300> FD-MS, calcd for C₄₈H₃₀OS= 654, found, m/z= 654(M⁺, 100)

<301> 또한, 본 화합물을 200℃에서 승화 정제를 했다. 승화 정제에 의해 수득된 화합물 G15의 순도는 99.2%였다.

<302> 합성실시에 10(화합물 H2의 합성)

<303> 화합물 H2의 합성경로를 이하에 나타낸다.



<304>

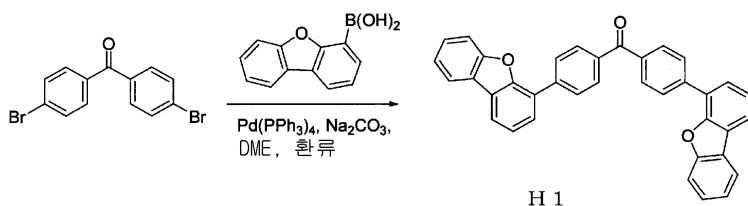
<305> 아르곤 분위기하, 300밀리리터의 3구 플라스크에 4-다이벤조싸이오펜보론산 4.44g(19.5mmol), 4,4'-다이브로모벤조페논 2.78g(8.18mmol), 테트라키스(트라이페닐포스핀)팔라듐 1.13g(0.975mmol)을 넣고, 아르곤 치환했다. 이것에, 1,2-다이메톡시에테인 58.5밀리리터, 2.0M 탄산나트륨 수용액 29.3밀리리터(58.5mmol)를 가하고, 아르곤 분위기하, 8시간 가열 환류했다. 반응액을 여과한 후, 수득된 고체를 물, 메탄올, 톨루엔에 의해 세정함으로써, 화합물 H2 3.31g(6.05mmol, 수율 74%)을 수득했다. 90MHz ¹H-NMR 및 FD-MS(필드 이온화 질량 분석)의 측정 결과에 의해 목적물인 것을 확인했다. FD-MS의 측정결과를 이하에 나타낸다.

<306> FD-MS, calcd for C₃₇H₂₂OS₂= 546, found, m/z= 546(M⁺, 100)

<307> 또한, 본 화합물을 320℃에서 승화 정제를 했다. 승화 정제에 의해 수득된 화합물 H2의 순도는 99.0%였다.

<308> 합성실시에 11(화합물 H1의 합성)

<309> 화합물 H1의 합성경로를 이하에 나타낸다.



<310>

<311> 아르곤 분위기하, 300밀리리터의 3구 플라스크에 4-다이벤조퓨란보론산 4.59g(21.6mmol), 4,4'-다이브로모벤조페논 3.09g(9.09mmol), 테트라키스(트라이페닐포스핀)팔라듐 1.25g(1.08mmol)을 넣고, 아르곤 치환했다. 이것에, 1,2-다이메톡시에테인 64.8밀리리터, 2.0M 탄산나트륨 수용액 32.4밀리리터(64.8mmol)를 가하고, 아르곤 분위기하, 8시간 가열 환류했다. 반응액을 여과한 후, 수득된 고체를 물, 메탄올, 톨루엔에 의해 세정함으로써, 화합물(H1) 2.67g(5.18mmol, 수율 57%)을 수득했다. 90MHz ¹H-NMR 및 FD-MS(필드 디스펜션 매스 분석)의 측정에 의해 목적물인 것을 확인했다. FD-MS의 측정결과를 이하에 나타낸다.

<312> FD-MS, calcd for C₃₇H₂₂O₃= 514, found, m/z= 514(M⁺, 100)

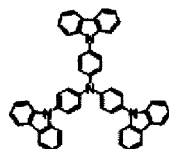
<313> 또한, 본 화합물을 315℃에서 승화 정제를 했다. 승화 정제에 의해 수득된 화합물 H1의 순도는 99.2%였다.

<314> 실시예 1(유기 EL 소자 제작)

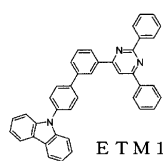
<315> 25mm×75mm×1.1mm 두께의 ITO 투명전극 부착 유리기판(지오마텍사 제품)을 아이소프로필알코올 중에서 초음파 세정을 5분간 행한 후, UV 오존 세정을 30분간 행했다. 세정후의 투명전극 라인부착 유리기판을 진공증착장치의 기관홀더에 장착하고, 우선 투명전극라인이 형성되어 있는 측의 면 상에, 상기 투명전극을 덮도록 하여 막 두께 100nm의 HTM(하기 구조식 참조)을 성막했다. 상기 HTM 막은 정공 주입 수송층으로서 기능한다. 또한, 상기 정공 주입 수송층의 성막에 계속하여, 이 막 상에 막 두께 30nm에서, 호스트 화합물로서 D1과 하기 구조식의 착체 P를 저하가열에 의해 공증착 성막했다. 착체 P의 농도는 7wt%였다. 이 호스트 화합물:D1막은, 발광층으로서 기능한다. 그리고, 상기 발광층 성막에 계속하여, 하기 재료 ETM1을 막 두께 25nm, 더욱이 상기 ETM1의 위에 하기 재료 ETM2를 5nm 적층 성막했다. 상기 ETM1층 및 ETM2층은 전자 수송층, 전자 주입층으로서 기능한다. 그리고, 이후 LiF를 전자 주입성 전극(음극)으로서 성막 속도 1Å/min에서 막 두께 0.1nm 형성했다. 이 LiF 층 상에 금속 Al을 증착시켜, 금속 음극을 막 두께 150nm 형성하여 유기 EL 발광 소자를 형성했다.

<316> (유기 EL 소자의 발광성능 평가)

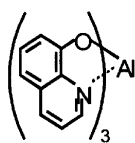
<317> 이상과 같이 제작한 유기 EL 소자를 직류전류 구동(전류밀도 J= 1mA/cm²)에 의해 발광시켜, 휘도(L)를 측정하여, 발광 효율(L/J)을 구하고, 그 결과를 하기 표 1에 나타낸다.



H T M



E T M 1



E T M 2

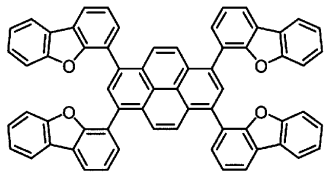
<318>

<319> 실시예 2 내지 9

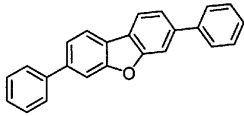
<320> 실시예 1에 있어서, 호스트 화합물 D1 대신에 표 1의 호스트 화합물란에 기재한 각 화합물을 이용한 것 외에는 마찬가지로 하여 유기 EL 소자를 제작했다. 수득된 각각의 유기 EL 소자에 대하여, 실시예 1과 마찬가지로 하여 발광 효율을 측정하고, 결과를 표 1에 나타낸다.

<321> 비교예 1 내지 3

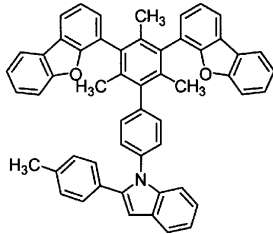
<322> 실시예 1에 있어서, 호스트 화합물 D1 대신에, 국제공개 W02004/096945, 일본 특허공개 제1993-109485호 및 일본 특허공개 제2004-214050호에 각각 기재되어 있는 하기 비교화합물 1 내지 3을 이용한 것 외에는 마찬가지로 하여 유기 EL 소자를 제작했다. 수득된 각각의 유기 EL 소자에 대하여, 실시예 1과 마찬가지로 하여 발광 효율을 측정하고, 결과를 표 1에 나타낸다.



비교 화합물 1



비교 화합물 2



비교 화합물 3

표 1

	호스트 화합물	도펀트 화합물	L/J(cd/A)
실시예 1	D1	착체 K-1	40
실시예 2	E1	착체 K-1	28
실시예 3	E4	착체 K-1	31
실시예 4	E2	착체 K-1	30
실시예 5	E3	착체 K-1	46
실시예 6	D3	착체 K-1	48
실시예 7	D22	착체 K-1	41
실시예 8	E22	착체 K-1	33
실시예 9	G15	착체 K-1	36
실시예 10	H1	착체 K-1	33
실시예 11	H2	착체 K-1	44
실시예 12	D1	착체 K-17	7.2
실시예 13	E5	착체 K-20	35
비교예 1	비교화합물 1	착체 K-1	2.0
비교예 2	비교화합물 2	착체 K-1	3.2
비교예 3	비교화합물 3	착체 K-1	14
비교예 4	비교화합물 1	착체 K-17	착체로부터의 발광이 관측되지 않음
비교예 5	비교화합물 3	착체 K-20	22

이 표로부터, 본 발명에 의한 화합물을 발광층에 이용한 유기 EL 소자는 발광 효율이 높았다. 본 결과에 의해, 본 발명에 있어서의 화합물은 유기 EL 용도로서 유효하다.

산업상 이용 가능성

이상 구체적으로 설명한 바와 같이, 본 발명의 화학식 1 내지 14 중 어느 하나로 표시되는 화합물로 이루어지는 유기 전기발광 소자용 재료를 이용하면, 발광 효율이 높고, 화소 결함이 없고, 내열성이 우수하며, 장수명인 유기 전기발광 소자가 얻어진다. 이 때문에, 본 발명의 유기 전기발광 소자는, 각종 전자기기의 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	KR1020080080306A	公开(公告)日	2008-09-03
申请号	KR1020087014171	申请日	2006-12-11
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	NAKANO YUKI 나카노유키 MATSUURA MASAHIDE 마츠우라마사히데 IKEDA HIDE TSUGU 이케다히데츠클루 IWAKUMA TOSHIHIRO 이와쿠마도시히로		
发明人	나카노유키 마츠우라마사히데 이케다히데츠클루 이와쿠마도시히로		
IPC分类号	H01L51/50 C07D307/91 C07D333/76 C07D405/10		
CPC分类号	C09K2211/1011 H01L51/5012 H01L51/0067 C09K2211/1029 C09K2211/1092 H01L51/0061 C07D405/10 H01L51/0072 H01L51/0073 C09K2211/185 C07D333/76 C07D307/91 C09K2211/1007 H05B33/14 C09K11/06 H01L51/0074 C09K2211/1088 C09K2211/1044 H01L51/0081 C07D409/10 H01L51/0059		
优先权	2005362481 2005-12-15 JP		
外部链接	Espacenet		

摘要(译)

关于有机电致发光器件，其中由在有机电致发光器件材料和阴极之间至少具有发光层的第一层和阳极或多层组成的有机薄膜层被夹在具有特定结构的化合物中，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，其中耐热性没有像素缺陷，它是长寿的优良和有机电致发光器件。

