



(19) 대한민국특허청(KR)
(12) 공개특허공보(A)

(11) 공개번호 10-2010-0075830
 (43) 공개일자 2010년07월05일

(51) Int. Cl.
C08G 61/12 (2006.01) *C09K 11/06* (2006.01)
C09D 11/00 (2006.01) *H01L 51/50* (2006.01)
 (21) 출원번호 10-2010-7004410
 (22) 출원일자(국제출원일자) 2008년07월25일
 심사청구일자 없음
 (85) 번역문제출일자 2010년02월26일
 (86) 국제출원번호 PCT/JP2008/063405
 (87) 국제공개번호 WO 2009/017056
 국제공개일자 2009년02월05일
 (30) 우선권주장
 JP-P-2007-198637 2007년07월31일 일본(JP)

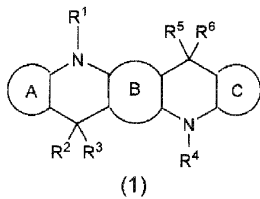
(71) 출원인
 스미토모 가가꾸 가부시키키가이샤
 일본국 도쿄도 주오구 신카와 2쵸메 27반 1고
 수메이션 컴퍼니 리미티드
 일본 도쿄도 104-8260 추오쿠 신카와 2-쵸메 27-1
 (72) 발명자
 고바야시, 사토시
 일본 3050025 이바라끼켄 츠쿠바시 하나무로
 1585-35
 (74) 대리인
 이석재, 장수길

전체 청구항 수 : 총 35 항

(54) 화합물 및 그의 제조 방법, 및 그것을 이용한 잉크 조성물, 박막, 유기 트랜지스터 및 유기 전계발광 소자

(57) 요약

하기 화학식 (1)로 표시되는 구조(하기 화학식 (1)로 표시되는 구조로부터 적어도 하나의 수소 원자를 제외한 잔기의 구조를 포함함)를 포함하는 화합물.

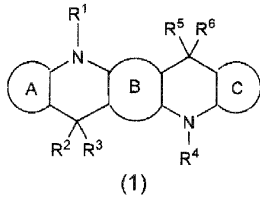


(화학식 (1) 중, A환, B환 및 C환은 각각 독립적으로 단환의 방향환 또는 축합한 방향환을 나타내고, R¹ 및 R⁴는 각각 독립적으로 1가의 기를 나타내고, R², R³, R⁵ 및 R⁶은 각각 독립적으로 수소 원자, 알킬기, 아릴기, 아릴알킬기, 알케닐기 또는 알키닐기를 나타냄)

특허청구의 범위

청구항 1

하기 화학식 (1)로 표시되는 구조(하기 화학식 (1)로 표시되는 구조로부터 적어도 하나의 수소 원자를 제외한 잔기의 구조를 포함함)를 포함하는 화합물.



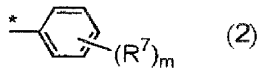
(화학식 (1) 중, A환, B환 및 C환은 각각 독립적으로 단환의 방향환 또는 축합한 방향환을 나타내고, R¹ 및 R⁴는 각각 독립적으로 1가의 기를 나타내고, R², R³, R⁵ 및 R⁶은 각각 독립적으로 수소 원자, 알킬기, 아릴기, 아릴알킬기, 알케닐기 또는 알키닐기를 나타냄)

청구항 2

제1항에 있어서, 상기 화학식 (1) 중의 R², R³, R⁵ 및 R⁶이 각각 독립적으로 수소 원자 또는 1가의 탄화수소기인 화합물.

청구항 3

제1항에 있어서, 상기 화학식 (1) 중의 R², R³, R⁵ 및 R⁶이 각각 독립적으로 하기 화학식 (2)로 표시되는 기인 화합물.



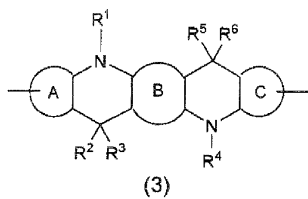
(화학식 (2) 중, *은 탄소 원자와의 결합손을 나타내고, R⁷은 할로젠 원자, 알킬기, 알콕시기, 알킬티오기, 아릴기, 아릴옥시기, 아릴티오기, 아릴알킬기, 아릴알킬옥시기, 아릴알킬티오기, 알케닐기, 알키닐기, 2치환 아미노기 또는 3치환 실릴기를 나타내고, m은 0 내지 5까지의 정수를 나타내며, m이 2 이상인 경우에는 R⁷은 동일하거나 상이할 수 있음)

청구항 4

제1항에 있어서, 폴리스티렌 환산의 수 평균 분자량이 2000 이상의 것인 화합물.

청구항 5

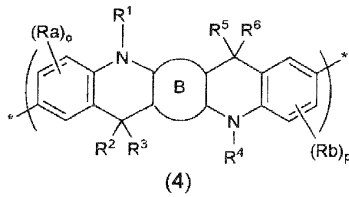
제1항에 있어서, 하기 화학식 (3)으로 표시되는 반복 단위를 포함하는 화합물.



(화학식 (3) 중, A환, B환 및 C환은 각각 독립적으로 단환의 방향환 또는 축합한 방향환을 나타내고, R¹ 및 R⁴는 각각 독립적으로 1가의 기를 나타내고, R², R³, R⁵ 및 R⁶은 각각 독립적으로 수소 원자, 알킬기, 아릴기, 아릴알킬기, 알케닐기 또는 알키닐기를 나타내고, A환 및 C환 상에 결합손을 갖는다.)

청구항 6

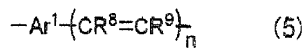
제5항에 있어서, 하기 화학식 (4)로 표시되는 반복 단위를 포함하는 화합물.



(화학식 (4) 중, *은 결합손을 나타내고, B환은 단환의 방향환 또는 축합한 방향환을 나타내고, R¹ 및 R⁴는 각각 독립적으로 1가의 기를 나타내고, R², R³, R⁵ 및 R⁶은 각각 독립적으로 수소 원자, 알킬기, 아릴기, 아릴알킬기, 알케닐기 또는 알킬닐기를 나타내고, Ra 및 Rb는 각각 독립적으로 알킬기, 알킬옥시기, 아릴기, 아릴옥시기, 아릴알킬기, 아릴알킬옥시기, 2치환 아미노기, 3치환 실릴기, 아실기, 아실옥시기, 치환 카르복실기, 1가의 복소환기 또는 헤테로아릴옥시기를 나타내고, o 및 p는 각각 독립적으로 0 내지 3의 정수를 나타내며, o가 2 또는 3인 경우, 복수인 Ra는 동일하거나 상이할 수 있고, p가 2 또는 3인 경우, 복수인 Rb는 동일하거나 상이할 수 있음)

청구항 7

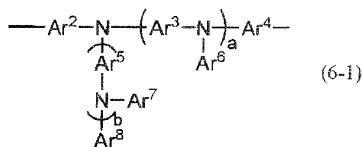
제1항에 있어서, 하기 화학식 (5)로 표시되는 반복 단위를 추가로 포함하는 화합물.



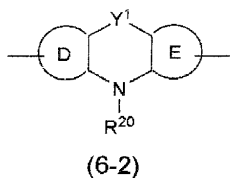
(화학식 (5) 중, Ar¹은 아릴렌기 또는 2가의 복소환기를 나타내고, R⁸ 및 R⁹는 각각 독립적으로 수소 원자, 알킬기, 아릴기, 1가의 복소환기 또는 시아노기를 나타내고, n은 0 또는 1을 나타냄)

청구항 8

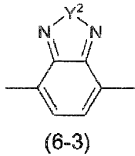
제7항에 있어서, 하기 화학식 (6-1), (6-2), (6-3)으로 표시되는 반복 단위로 이루어지는 군에서 선택되는 적어도 하나의 반복 단위를 추가로 포함하는 화합물.



(화학식 (6-1) 중, Ar², Ar³, Ar⁴ 및 Ar⁵는 각각 독립적으로 아릴렌기 또는 2가의 복소환기를 나타내고, Ar⁶, Ar⁷ 및 Ar⁸은 각각 독립적으로 아릴기 또는 1가의 복소환기를 나타내고, a 및 b는 각각 독립적으로 0 또는 양의 정수를 나타냄)



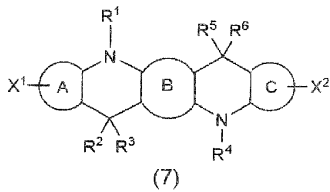
(화학식 (6-2) 중, D환 및 E환은 각각 독립적으로 환 상에 결합손을 갖는 방향환을 나타내고, Y¹은 -O-, -S- 또는 -C(=O)-를 나타내고, R²⁰은 1가의 기를 나타냄)



(화학식 (6-3) 중, Y^2 는 -O- 또는 -S-을 나타내고, 6원환 상에 2개의 결합손을 가짐)

청구항 9

하기 화학식 (7)로 표시되는 화합물을 원료로서 중합하는 공정을 포함하는, 제1항에 기재된 화합물의 제조 방법.



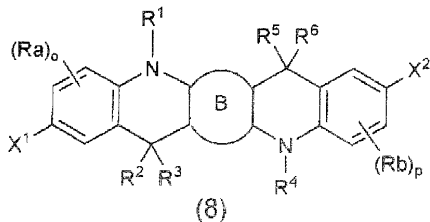
(화학식 (7) 중, A환, B환 및 C환은 각각 독립적으로 단환의 방향환 또는 축합한 방향환을 나타내고, R^1 및 R^4 는 각각 독립적으로 1가의 기를 나타내고, R^2 , R^3 , R^5 및 R^6 은 각각 독립적으로 수소 원자, 알킬기, 아릴기, 아릴알킬기, 알케닐기 또는 알키닐기를 나타내고, X^1 , X^2 는 각각 독립적으로 중합에 관여할 수 있는 치환기를 나타냄)

청구항 10

상기 화학식 (7)로 표시되는 화합물.

청구항 11

제10항에 있어서, 하기 화학식 (8)로 표시되는 화합물.



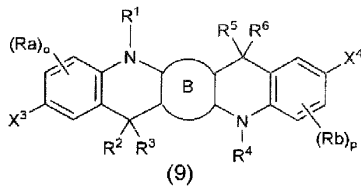
(화학식 (8) 중, B환은 단환의 방향환 또는 축합한 방향환을 나타내고, R^1 및 R^4 는 각각 독립적으로 1가의 기를 나타내고, R^2 , R^3 , R^5 및 R^6 은 각각 독립적으로 수소 원자, 알킬기, 아릴기, 아릴알킬기, 알케닐기 또는 알키닐기를 나타내고, X^1 , X^2 는 각각 독립적으로 중합에 관여할 수 있는 치환기를 나타내고, Ra 및 Rb는 각각 독립적으로 알킬기, 알킬옥시기, 아릴기, 아릴옥시기, 아릴알킬기, 아릴알킬옥시기, 2치환 아미노기, 3치환 실릴기, 아실기, 아실옥시기, 치환 카르복실기, 1가의 복소환기 또는 헤테로아릴옥시기를 나타내고, o 및 p는 각각 독립적으로 0 내지 3의 정수를 나타내며, o가 2 또는 3인 경우, 복수인 Ra는 동일하거나 상이할 수 있고, p가 2 또는 3인 경우, 복수인 Rb는 동일하거나 상이할 수 있음)

청구항 12

제10항 또는 제11항에 있어서, 상기 화학식 (7), (8) 중의 X^1 및 X^2 가 각각 독립적으로 $-B(OH)_2$, 봉산에스테르 잔기, 할로젠화마그네슘, 스타닐기, 할로젠 원자, 알킬술포네이트기, 아릴술포네이트기 및 아릴알킬술포네이트기로 이루어지는 군에서 선택되는 적어도 하나의 치환기인 화합물.

청구항 13

제10항에 있어서, 하기 화학식 (9)로 표시되는 화합물.



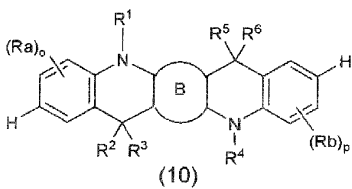
(화학식 (9) 중, B환은 단환의 방향환 또는 축합한 방향환을 나타내고, R¹ 및 R⁴는 각각 독립적으로 1가의 기를 나타내고, R², R³, R⁵ 및 R⁶은 각각 독립적으로 수소 원자, 알킬기, 아릴기, 아릴알킬기, 알케닐기 또는 알키닐기를 나타내고, X³, X⁴는 각각 독립적으로 염소 원자, 브롬 원자 또는 요오드 원자를 나타내고, Ra 및 Rb는 각각 독립적으로 알킬기, 알킬옥시기, 아릴기, 아릴옥시기, 아릴알킬기, 아릴알킬옥시기, 2치환 아미노기, 3치환 실릴기, 아실기, 아실옥시기, 치환 카르복실기, 1가의 복소환기 또는 헤테로아릴옥시기를 나타내고, o 및 p는 각각 독립적으로 0 내지 3의 정수를 나타내며, o가 2 또는 3인 경우, 복수인 Ra는 동일하거나 상이할 수 있고, p가 2 또는 3인 경우, 복수인 Rb는 동일하거나 상이할 수 있음)

청구항 14

상기 화학식 (9)로 표시되는 화합물로부터 X³ 및 X⁴를 관능기 변환함으로써 상기 화학식 (8)로 표시되는 화합물을 제조하는, 제11항에 기재된 화합물의 제조 방법.

청구항 15

할로겐화제의 존재하에서 하기 화학식 (10)으로 표시되는 화합물로부터 할로겐화 반응에 의해 상기 화학식 (9)로 표시되는 화합물을 제조하는, 제13항에 기재된 화합물의 제조 방법.



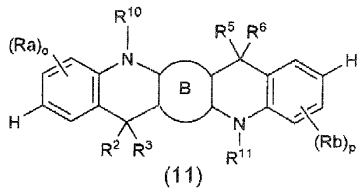
(화학식 (10) 중, B환은 단환의 방향환 또는 축합한 방향환을 나타내고, R¹ 및 R⁴는 각각 독립적으로 1가의 기를 나타내고, R², R³, R⁵ 및 R⁶은 각각 독립적으로 수소 원자, 알킬기, 아릴기, 아릴알킬기, 알케닐기 또는 알키닐기를 나타내고, Ra 및 Rb는 각각 독립적으로 알킬기, 알킬옥시기, 아릴기, 아릴옥시기, 아릴알킬기, 아릴알킬옥시기, 2치환 아미노기, 3치환 실릴기, 아실기, 아실옥시기, 치환 카르복실기, 1가의 복소환기 또는 헤테로아릴옥시기를 나타내고, o 및 p는 각각 독립적으로 0 내지 3의 정수를 나타내며, o가 2 또는 3인 경우, 복수인 Ra는 동일하거나 상이할 수 있고, p가 2 또는 3인 경우, 복수인 Rb는 동일하거나 상이할 수 있음)

청구항 16

상기 화학식 (10)으로 표시되는 화합물.

청구항 17

염기의 존재하에서 하기 화학식 (11)로 표시되는 화합물로부터 질소 원자 상의 치환 반응에 의해 상기 화학식 (10)으로 표시되는 화합물을 제조하는, 제16항에 기재된 화합물의 제조 방법.



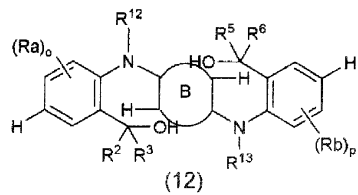
(화학식 (11) 중, B환은 단환의 방향환 또는 축합한 방향환을 나타내고, R^2 , R^3 , R^5 및 R^6 은 각각 독립적으로 수소 원자, 알킬기, 아릴기, 아릴알킬기, 알케닐기 또는 알키닐기를 나타내고, R^{10} 및 R^{11} 은 각각 독립적으로 수소 원자 또는 1가의 기를 나타내고, R^{10} 및 R^{11} 중의 적어도 한쪽은 수소 원자이고, Ra 및 Rb는 각각 독립적으로 알킬기, 알킬옥시기, 아릴기, 아릴옥시기, 아릴알킬기, 아릴알킬옥시기, 2치환 아미노기, 3치환 실릴기, 아실기, 아실옥시기, 치환 카르복실기, 1가의 복소환기 또는 헤테로아릴옥시기를 나타내고, o 및 p는 각각 독립적으로 0 내지 3의 정수를 나타내며, o가 2 또는 3인 경우, 복수인 Ra는 동일하거나 상이할 수 있고, p가 2 또는 3인 경우, 복수인 Rb는 동일하거나 상이할 수 있음)

청구항 18

상기 화학식 (11)로 표시되는 화합물.

청구항 19

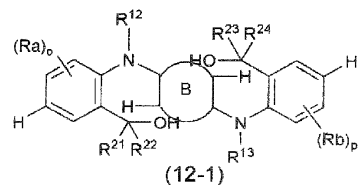
산의 존재하에서 하기 화학식 (12)로 표시되는 화합물로부터 상기 화학식 (10) 또는 (11)로 표시되는 화합물을 환화 반응에 의해 제조하는, 제16항 또는 제18항에 기재된 화합물의 제조 방법.



(화학식 (12) 중, B환은 단환의 방향환 또는 축합한 방향환을 나타내고, R^2 , R^3 , R^5 및 R^6 은 각각 독립적으로 수소 원자, 알킬기, 아릴기, 아릴알킬기, 알케닐기 또는 알키닐기를 나타내고, R^{12} 및 R^{13} 은 각각 독립적으로 수소 원자 또는 1가의 기를 나타내고, Ra 및 Rb는 각각 독립적으로 알킬기, 알킬옥시기, 아릴기, 아릴옥시기, 아릴알킬기, 아릴알킬옥시기, 2치환 아미노기, 3치환 실릴기, 아실기, 아실옥시기, 치환 카르복실기, 1가의 복소환기 또는 헤테로아릴옥시기를 나타내고, o 및 p는 각각 독립적으로 0 내지 3의 정수를 나타내며, o가 2 또는 3인 경우, 복수인 Ra는 동일하거나 상이할 수 있고, p가 2 또는 3인 경우, 복수인 Rb는 동일하거나 상이할 수 있음)

청구항 20

상기 화학식 (12)로 표시되는 화합물 중, 하기 화학식 (12-1)로 표시되는 화합물.



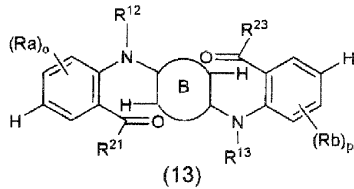
(화학식 (12-1) 중, B환은 단환의 방향환 또는 축합한 방향환을 나타내고, R^{12} 및 R^{13} 은 각각 독립적으로 수소 원자 또는 1가의 기를 나타내고, R^{21} , R^{22} , R^{23} 및 R^{24} 는 각각 독립적으로 수소 원자, 알킬기, 아릴기, 아릴알킬기, 알케닐기 또는 알키닐기를 나타내고, R^{21} , R^{22} , R^{23} 및 R^{24} 중의 적어도 하나는 아릴기를 나타내고, Ra 및 Rb는 각각 독립적으로 알킬기, 알킬옥시기, 아릴기, 아릴옥시기, 아릴알킬기, 아릴알킬옥시기, 2치환 아미노기, 3치환 실릴기, 아실기, 아실옥시기, 치환 카르복실기, 1가의 복소환기 또는 헤테로아릴옥시기를 나타내

고, o 및 p는 각각 독립적으로 0 내지 3의 정수를 나타내며, o가 2 또는 3인 경우, 복수인 Ra는 동일하거나 상이할 수 있고, p가 2 또는 3인 경우, 복수인 Rb는 동일하거나 상이할 수 있음)

청구항 21

화학식: R¹⁴-M

(화학식 중, R¹⁴는 알킬기, 아릴기, 아릴알킬기, 알케닐기 또는 알키닐기를 나타내고, M은 리튬 또는 할로젠화 마그네슘을 나타냄)으로 표시되는 화합물의 하기 화학식 (13)으로 표시되는 화합물로의 친핵 반응에 의해 상기 화학식 (12-1)로 표시되는 화합물을 제조하는, 제20항에 기재된 화합물의 제조 방법.

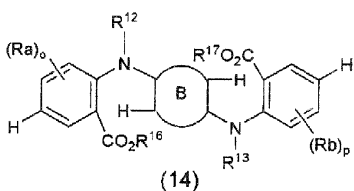


(화학식 (13) 중, B환은 단환의 방향환 또는 축합한 방향환을 나타내고, R²¹ 및 R²³은 각각 독립적으로 수소 원자, 알킬기, 아릴기, 아릴알킬기, 알케닐기 또는 알키닐기를 나타내고, R¹² 및 R¹³은 각각 독립적으로 수소 원자 또는 1가의 기를 나타내고, Ra 및 Rb는 각각 독립적으로 알킬기, 알킬옥시기, 아릴기, 아릴옥시기, 아릴알킬기, 아릴알킬옥시기, 2치환 아미노기, 3치환 실릴기, 아실기, 아실옥시기, 치환 카르복실기, 1가의 복소환기 또는 헤테로아릴옥시기를 나타내고, o 및 p는 각각 독립적으로 0 내지 3의 정수를 나타내며, o가 2 또는 3인 경우, 복수인 Ra는 동일하거나 상이할 수 있고, p가 2 또는 3인 경우, 복수인 Rb는 동일하거나 상이할 수 있고, R²¹, R²³ 및 R¹⁴ 중의 적어도 하나는 아릴기를 나타냄)

청구항 22

화학식: R¹⁵-M

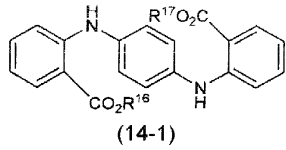
(화학식 중, R¹⁵는 알킬기, 아릴기, 아릴알킬기, 알케닐기 또는 알키닐기를 나타내고, M은 리튬 또는 할로젠화 마그네슘을 나타냄)으로 표시되는 화합물의 하기 화학식 (14)로 표시되는 화합물로의 친핵 반응에 의해 상기 화학식 (12-1)로 표시되는 화합물을 제조하는, 제20항에 기재된 화합물의 제조 방법.



(화학식 (14) 중, B환은 단환의 방향환 또는 축합한 방향환을 나타내고, R¹² 및 R¹³은 각각 독립적으로 수소 원자 또는 1가의 기를 나타내고, R¹⁶ 및 R¹⁷은 각각 독립적으로 알킬기, 아릴기 또는 아릴알킬기를 나타내고, Ra 및 Rb는 각각 독립적으로 알킬기, 알킬옥시기, 아릴기, 아릴옥시기, 아릴알킬기, 아릴알킬옥시기, 2치환 아미노기, 3치환 실릴기, 아실기, 아실옥시기, 치환 카르복실기, 1가의 복소환기 또는 헤테로아릴옥시기를 나타내고, o 및 p는 각각 독립적으로 0 내지 3의 정수를 나타내며, o가 2 또는 3인 경우, 복수인 Ra는 동일하거나 상이할 수 있고, p가 2 또는 3인 경우, 복수인 Rb는 동일하거나 상이할 수 있음)

청구항 23

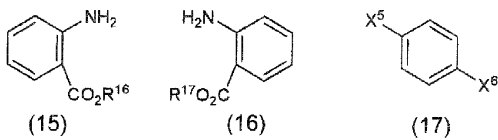
상기 화학식 (14)로 표시되는 화합물 중, 하기 화학식 (14-1)로 표시되는 화합물.



(화학식 (14-1) 중, R¹⁶ 및 R¹⁷은 각각 독립적으로 알킬기, 아릴기 또는 아릴알킬기를 나타냄)

청구항 24

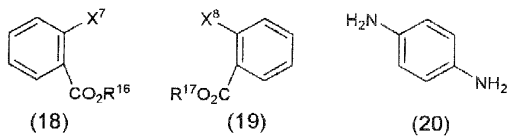
팔라듐, 니켈 및 구리로 이루어지는 군에서 선택되는 적어도 하나의 금속을 포함하는 촉매의 존재하에서, 하기 화학식 (15)로 표시되는 화합물, 하기 화학식 (16)으로 표시되는 화합물 및 하기 화학식 (17)로 표시되는 화합물로부터 축합 반응에 의해 상기 화학식 (14-1)로 표시되는 화합물을 제조하는, 제23항에 기재된 화합물의 제조 방법.



(화학식 (15) 내지 (17) 중, R¹⁶ 및 R¹⁷은 각각 독립적으로 알킬기, 아릴기 또는 아릴알킬기를 나타내고, X⁵ 및 X⁶은 각각 독립적으로 염소 원자, 브롬 원자, 요오드 원자, 알킬술포네이트기, 아릴술포네이트기 또는 아릴알킬술포네이트기를 나타냄)

청구항 25

팔라듐, 니켈 및 구리로 이루어지는 군에서 선택되는 적어도 하나의 금속을 포함하는 촉매의 존재하에서, 하기 화학식 (18)로 표시되는 화합물, 하기 화학식 (19)로 표시되는 화합물 및 하기 화학식 (20)으로 표시되는 화합물로부터 축합 반응에 의해 상기 화학식 (14-1)로 표시되는 화합물을 제조하는, 제23항에 기재된 화합물의 제조 방법.



(화학식 (18) 내지 (20) 중, R¹⁶ 및 R¹⁷은 각각 독립적으로 알킬기, 아릴기 또는 아릴알킬기를 나타내고, X⁷ 및 X⁸은 각각 독립적으로 염소 원자, 브롬 원자, 요오드 원자, 알킬술포네이트기, 아릴술포네이트기 또는 아릴알킬술포네이트기를 나타냄)

청구항 26

제1항에 기재된 화합물, 및 정공 수송 재료, 전자 수송 재료 및 발광 재료로 이루어지는 군에서 선택되는 적어도 1종의 재료를 함유하는 조성물.

청구항 27

제1항에 기재된 화합물 또는 제26항에 기재된 조성물을 함유하는 잉크 조성물.

청구항 28

제1항에 기재된 화합물 또는 제26항에 기재된 조성물을 함유하는 박막.

청구항 29

제28항에 기재된 박막을 갖는 유기 트랜지스터.

청구항 30

양극 및 음극을 포함하는 전극 사이에 제1항에 기재된 화합물 또는 제26항에 기재된 조성물을 포함하는 유기층을 갖는 유기 전계발광 소자.

청구항 31

제30항에 있어서, 상기 유기층이 발광층인 유기 전계발광 소자.

청구항 32

제30항에 있어서, 양극 및 음극을 포함하는 전극 사이에 발광층과 정공 수송층을 갖고, 상기 정공 수송층이 제1항에 기재된 화합물을 포함하는 유기 전계발광 소자.

청구항 33

제30항에 있어서, 양극 및 음극을 포함하는 전극 사이에 발광층과 정공 수송층을 갖고, 상기 발광층과 상기 정공 수송층 사이에 인터레이어층을 갖고, 상기 인터레이어층이 제1항에 기재된 화합물을 포함하는 유기 전계발광 소자.

청구항 34

제30항에 기재된 유기 전계발광 소자를 구비하는 면상 광원.

청구항 35

제30항에 기재된 유기 전계발광 소자를 구비하는 표시 장치.

명세서

기술분야

[0001] 본 발명은 신규 화합물의 제조 방법, 및 이들 신규 화합물의 합성 원료로서 이용되는 화합물, 및 이들 신규 화합물을 함유하는 잉크 조성물, 이들 신규 화합물을 함유하는 박막, 이들 신규 화합물을 함유하는 유기 트랜지스터, 이들 신규 화합물을 함유하는 유기 전계발광 소자 및 이러한 소자를 이용한 면상 광원 및 표시 재료에 관한 것이다.

배경기술

[0002] 발광 소자의 제조에 유용한 발광 재료나 전하 수송 재료가 다양하게 검토되고 있다. 예를 들면, 「Polymer preprints」, 2001년 발행, 42권(2호), 587페이지(문헌 1)에는 반복 단위로서, N,N'-디페닐-N,N'-디(p-부틸페닐)-1,4-디아미노벤젠의 구조를 갖는 화합물 등의 아민 화합물이 개시되어 있다.

발명의 내용

해결하려는 과제

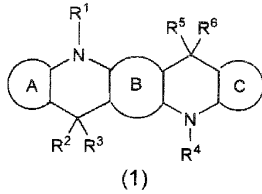
[0003] 그러나, 상기한 화합물은 유기 전계발광 소자의 청색 발광 재료로서 이용한 경우, 색도가 충분하지 않다는 문제가 있었다. 또한, 유기 전계발광 소자로 했을 때에 종래의 아민 화합물로서는 구동 전압이 높다는 문제가 있었다.

[0004] 본 발명은 상기 종래 기술이 갖는 과제를 감안하여 이루어진 것으로서, 유기 전계발광 소자의 청색 발광 재료로서 이용한 경우, 색도가 우수한 화합물을 제공하는 것, 및 유기 전계발광 소자로 했을 때의 구동 전압을 내리는 것을 목적으로 한다.

과제의 해결 수단

[0005] 본 발명자들은 상기 목적을 달성하기 위해 예의 연구를 거듭한 결과, N,N'-디페닐-N,N'-디(p-부틸페닐)-1,4-디아미노벤젠의 구조를 탄소 원자로 가교한 구조를 갖는 화합물에 있어서, 이 가교 탄소 상의 치환기를 적절하게 선택함으로써 상기 목적을 달성할 수 있는 것을 발견하여, 본 발명을 완성하기에 이르렀다.

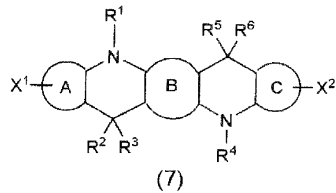
[0006] 즉, 본 발명의 화합물은 하기 화학식 (1)로 표시되는 구조(화학식 (1)로 표시되는 구조로부터 적어도 하나의 수소 원자를 제외한 잔기의 구조를 포함함)를 포함하는 것이다.



[0007]

[0008] (화학식 (1) 중, A환, B환 및 C환은 각각 독립적으로 단환의 방향환 또는 축합한 방향환을 나타내고, R¹ 및 R⁴는 각각 독립적으로 1가의 기를 나타내고, R², R³, R⁵ 및 R⁶은 각각 독립적으로 수소 원자, 알킬기, 아릴기, 아릴알킬기, 알케닐기 또는 알키닐기를 나타냄)

[0009] 또한, 본 발명의 화합물의 제조 방법은 하기 화학식 (7)로 표시되는 화합물을 원료로서 중합하는 공정을 포함하는 방법이다.



[0010]

[0011] (화학식 (7) 중, A환, B환 및 C환은 각각 독립적으로 단환의 방향환 또는 축합한 방향환을 나타내고, R¹ 및 R⁴는 각각 독립적으로 1가의 기를 나타내고, R², R³, R⁵ 및 R⁶은 각각 독립적으로 수소 원자, 알킬기, 아릴기, 아릴알킬기, 알케닐기 또는 알키닐기를 나타내고, X¹, X²는 각각 독립적으로 중합에 관여할 수 있는 치환기를 나타냄)

[0012] 또한, 본 발명의 화합물에 관한 합성 원료는 상기 화학식 (1)로 표시되는 구조를 포함하는 화합물을 얻기 위한 것이다.

[0013] 또한, 본 발명의 조성물은 상기 화합물, 및 정공 수송 재료, 전자 수송 재료 및 발광 재료로 이루어지는 군에서 선택되는 적어도 1종의 재료를 함유하는 것이다. 또한, 본 발명의 잉크 조성물은 상기 화합물 또는 상기 조성물을 함유하는 것이다. 또한, 본 발명의 박막은 상기 화합물 또는 상기 조성물을 함유하는 것이다.

[0014] 또한, 본 발명의 유기 트랜지스터는 상기 박막을 갖는 것이다. 또한, 본 발명의 유기 전계발광 소자는 양극 및 음극을 포함하는 전극 사이에 상기 화합물 또는 상기 조성물을 포함하는 유기층을 갖는 것이다.

[0015] 또한, 본 발명의 면상 광원은 상기 유기 전계발광 소자를 구비하는 것이다. 또한, 본 발명의 표시 장치는 상기 유기 전계발광 소자를 구비하는 것이다.

발명의 효과

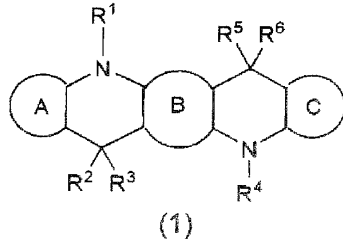
[0016] 본 발명에 따르면, 유기 전계발광 소자의 청색 발광 재료로서 이용한 경우, 색도가 우수한 화합물을 제공하는 것이 가능해진다. 그리고, 본 발명의 화합물을 이용한 유기 전계발광 소자는 저구동 전압이다. 본 발명의 화합물은, 통상 발광 재료나 전하 수송 재료로서 유용하고, 유기 전계발광 소자에 이용한 경우에는 발광 파장이 짧은 것이다. 또한, 본 발명의 화합물을 포함하는 청색의 발광부와 녹색이나 적색 등의 발광부를 공존시킨 경우, 녹색이나 적색, 백색의 발광부로서도 유용하게 사용할 수 있다.

[0017] 따라서, 본 발명의 화합물은 유기 트랜지스터나 유기 전계발광 소자에 유용하다. 또한, 본 발명의 유기 전계발광 소자는 면상 광원, 표시 장치(예를 들면, 세그먼트 표시 장치, 도트 매트릭스 표시 장치 등의 표시 장치, 액정 표시 장치의 백 라이트)에 유용하다.

발명을 실시하기 위한 구체적인 내용

[0018] 이하, 본 발명을 그의 바람직한 실시 형태에 의거하여 상세히 설명한다.

[0019] 본 발명의 화합물은 하기 화학식 (1)로 표시되는 구조(하기 화학식 (1)로 표시되는 구조로부터 적어도 하나의 수소 원자를 제외한 잔기의 구조를 포함함)를 포함하는 것이다.



[0020]

[0021] 화학식 (1)에 있어서, A환, B환 및 C환은 각각 독립적으로 단환의 방향환 또는 축합한 방향환을 나타낸다. 또한, A환, B환 및 C환은 각각 치환기를 가질 수도 있다.

[0022] 이러한 방향환으로서는, 예를 들면 벤젠환, 나프탈렌환, 안트라센환, 페난트렌환, 피렌환, 페릴렌환, 테트라센환, 펜타센환, 플루오렌환 등의 방향족 탄화수소환; 피리딘환, 피리미딘환, 피리다진환, 피라진환, 퀴놀린환, 이소퀴놀린환, 퀴녹살린환, 퀴나졸린환, 아크리딘환, 페난트롤린환, 티오펜환, 벤조티오펜환, 디벤조티오펜환, 티오펜옥사이드환, 벤조티오펜옥사이드환, 디벤조티오펜옥사이드환, 푸란환, 벤조푸란환, 피롤환, 인돌환, 디벤조피롤환, 실롤환, 벤조실롤환, 디벤조실롤환, 보롤환, 벤조보롤환, 디벤조보롤환 등의 복소 방향환을 들 수 있다. 이들 중에서도 내열성, 형광 강도, 소자 특성 등의 측면에서, 방향족 탄화수소환이 바람직하고, 벤젠환, 나프탈렌환, 안트라센환, 페난트렌환이 보다 바람직하고, 벤젠환이 특히 바람직하다.

[0023] 또한, A환, B환 및 C환이 가질 수도 있는 치환기로서는, 예를 들면 할로젠 원자, 알킬기, 알콕시기, 알킬티오기, 아릴기, 아릴옥시기, 아릴티오기, 아릴알킬기, 아릴알콕시기, 아릴알킬티오기, 알케닐기, 알키닐기, 2치환 아미노기, 3치환 실릴기, 아실기, 아실옥시기, 이민 잔기, 아미드기, 산 이미드기, 1가의 복소환기, 치환 카르복실기, 헤테로아릴옥시기, 헤테로아릴티오기를 들 수 있다.

[0024] 여기서, 할로젠 원자로서는 불소 원자, 염소 원자, 브롬 원자, 요오드 원자를 들 수 있다.

[0025] 알킬기는 직쇄, 분지 또는 환상의 어느 것일 수도 있다. 이러한 알킬기의 탄소수는 통상 1 내지 30 정도, 용매에 대한 용해성 측면에서 바람직하게는 3 내지 15 정도이다. 이러한 알킬기로서는, 예를 들면 메틸기, 에틸기, 프로필기, i-프로필기, 부틸기, i-부틸기, t-부틸기, 펜틸기, 이소아밀기, 헥실기, 시클로헥실기, 헵틸기, 옥틸기, 2-에틸헥실기, 노닐기, 데실기, 3,7-디메틸옥틸기, 라우릴기, 트리플루오로메틸기, 펜타플루오로메틸기, 퍼플루오로부틸기, 퍼플루오로헥실기, 퍼플루오로옥틸기를 들 수 있다. 이들 중에서도 유기 용매에 대한 용해성, 소자 특성, 합성의 행하기 쉬움 등과 내열성과의 균형이라는 관점에서, 펜틸기, 이소아밀기, 헥실기, 옥틸기, 2-에틸헥실기, 데실기, 3,7-디메틸옥틸기가 바람직하다.

[0026] 알콕시기는 직쇄, 분지 또는 환상의 어느 것일 수도 있다. 이러한 알콕시기의 탄소수는 통상 1 내지 30 정도, 용매에 대한 용해성 측면에서 바람직하게는 3 내지 15 정도이다. 이러한 알콕시기로서는, 예를 들면 메톡시기, 에톡시기, 프로필옥시기, i-프로필옥시기, 부톡시기, i-부톡시기, t-부톡시기, 펜틸옥시기, 헥실옥시기, 시클로헥실옥시기, 헵틸옥시기, 옥틸옥시기, 2-에틸헥실옥시기, 노닐옥시기, 데실옥시기, 3,7-디메틸옥틸옥시기, 라우릴옥시기, 트리플루오로메톡시기, 펜타플루오로메톡시기, 퍼플루오로부톡시기, 퍼플루오로헥실기, 퍼플루오로옥틸기, 메톡시메틸옥시기, 2-메톡시에틸옥시기를 들 수 있다. 이들 중에서도 유기 용매에 대한 용해성, 소자 특성, 합성의 행하기 쉬움 등과 내열성과의 균형이라는 관점에서, 펜틸옥시기, 헥실옥시기, 옥틸옥시기, 2-에틸헥실옥시기, 데실옥시기, 3,7-디메틸옥틸옥시기가 바람직하다.

[0027] 알킬티오기는 직쇄, 분지 또는 환상의 어느 것일 수도 있다. 이러한 알킬티오기의 탄소수는 통상 1 내지 30 정도, 용매에 대한 용해성 측면에서 바람직하게는 3 내지 15 정도이다. 이러한 알킬티오기로서는, 예를 들면 메틸티오기, 에틸티오기, 프로필티오기, i-프로필티오기, 부틸티오기, i-부틸티오기, t-부틸티오기, 펜틸티오기, 헥실티오기, 시클로헥실티오기, 헵틸티오기, 옥틸티오기, 2-에틸헥실티오기, 노닐티오기, 데실티오기, 3,7-디메틸옥틸티오기, 라우릴티오기, 트리플루오로메틸티오기를 들 수 있다. 이들 중에서도 유기 용매에 대한 용해성, 소자 특성, 합성의 행하기 쉬움 등과 내열성과의 균형이라는 관점에서, 펜틸티오기, 헥실티오기, 옥틸티오기,

2-에틸헥실티오기, 데실티오기, 3,7-디메틸옥틸티오기가 바람직하다.

[0028] 아릴기는 방향족 탄화수소로부터 수소 원자 1개를 제외한 원자단이고, 축합환을 갖는 것, 독립한 벤젠환 또는 축합환 2개 이상이 직접 또는 비닐렌 등의 기를 통해 결합한 것도 포함된다. 이러한 아릴기의 탄소수는 통상 6 내지 60 정도, 바람직하게는 6 내지 30 정도이다. 이러한 아릴기로서는, 예를 들면 페닐기, C₁ 내지 C₁₂ 알콕시페닐기(C₁ 내지 C₁₂는 C₁ 내지 C₁₂의 직후에 나타내는 유기기의 탄소수(여기서는 알콕시페닐기 중의 알콕시기 중의 탄소수)가 1 내지 12인 것을 나타내며, 이하도 동일함), C₁ 내지 C₁₂ 알킬페닐기, 1-나프틸기, 2-나프틸기, 1-안트라세닐기, 2-안트라세닐기, 9-안트라세닐기, 펜타플루오로페닐기를 들 수 있다. 이들 중에서도 유기 용매에 대한 용해성, 소자 특성, 합성의 행하기 쉬움 등의 측면에서, C₁ 내지 C₁₂ 알콕시페닐기, C₁ 내지 C₁₂ 알킬페닐기가 바람직하다. 또한, C₁ 내지 C₁₂ 알콕시페닐기로서는, 예를 들면 메톡시페닐기, 에톡시페닐기, 프로필옥시페닐기, i-프로필옥시페닐기, 부톡시페닐기, i-부톡시페닐기, t-부톡시페닐기, 펜틸옥시페닐기, 헥실옥시페닐기, 시클로헥실옥시페닐기, 헵틸옥시페닐기, 옥틸옥시페닐기, 2-에틸헥실옥시페닐기, 노닐옥시페닐기, 데실옥시페닐기, 3,7-디메틸옥틸옥시페닐기, 라우릴옥시페닐기를 들 수 있다. 또한, C₁ 내지 C₁₂ 알킬페닐기로서는, 예를 들면 메틸페닐기, 에틸페닐기, 디메틸페닐기, 프로필페닐기, 메시틸기, 메틸에틸페닐기, i-프로필페닐기, 부틸페닐기, i-부틸페닐기, t-부틸페닐기, 펜틸페닐기, 이소아밀페닐기, 헥실페닐기, 헵틸페닐기, 옥틸페닐기, 노닐페닐기, 데실페닐기, 도데실페닐기를 들 수 있다.

[0029] 아릴옥시기에 있어서는 탄소수가 통상 6 내지 60 정도이고, 바람직하게는 6 내지 30 정도이다. 이러한 아릴옥시기로서는, 예를 들면 페녹시기, C₁ 내지 C₁₂ 알콕시페녹시기, C₁ 내지 C₁₂ 알킬페녹시기, 1-나프틸옥시기, 2-나프틸옥시기, 펜타플루오로페닐옥시기를 들 수 있다. 이들 중에서도, 유기 용매에 대한 용해성, 소자 특성, 합성의 행하기 쉬움 등의 측면에서 C₁ 내지 C₁₂ 알콕시페녹시기, C₁ 내지 C₁₂ 알킬페녹시기가 바람직하다. 또한, C₁ 내지 C₁₂ 알콕시페녹시기로서는, 예를 들면 메톡시페녹시기, 에톡시페녹시기, 프로필옥시페녹시기, i-프로필옥시페녹시기, 부톡시페녹시기, i-부톡시페녹시기, t-부톡시페녹시기, 펜틸옥시페녹시기, 헥실옥시페녹시기, 시클로헥실옥시페녹시기, 헵틸옥시페녹시기, 옥틸옥시페녹시기, 2-에틸헥실옥시페녹시기, 노닐옥시페녹시기, 데실옥시페녹시기, 3,7-디메틸옥틸옥시페녹시기, 라우릴옥시페녹시기를 들 수 있다. 또한, C₁ 내지 C₁₂ 알킬페녹시기로서는, 예를 들면 메틸페녹시기, 에틸페녹시기, 디메틸페녹시기, 프로필페녹시기, 1,3,5-트리메틸페녹시기, 메틸에틸페녹시기, i-프로필페녹시기, 부틸페녹시기, i-부틸페녹시기, t-부틸페녹시기, 펜틸페녹시기, 이소아밀페녹시기, 헥실페녹시기, 헵틸페녹시기, 옥틸페녹시기, 노닐페녹시기, 데실페녹시기, 도데실페녹시기를 들 수 있다.

[0030] 아릴티오기에 있어서는 탄소수가 통상 6 내지 60 정도이고, 바람직하게는 6 내지 30 정도이다. 이러한 아릴티오기로서는, 예를 들면 페닐티오기, C₁ 내지 C₁₂ 알콕시페닐티오기, C₁ 내지 C₁₂ 알킬페닐티오기, 1-나프틸티오기, 2-나프틸티오기, 펜타플루오로페닐티오기를 들 수 있다. 이들 중에서도 유기 용매에 대한 용해성, 소자 특성, 합성의 행하기 쉬움 등의 측면에서 C₁ 내지 C₁₂ 알콕시페닐티오기, C₁ 내지 C₁₂ 알킬페닐티오기가 바람직하다.

[0031] 아릴알킬기에 있어서는 탄소수가 통상 7 내지 60 정도이고, 바람직하게는 7 내지 30 정도이다. 이러한 아릴알킬기로서는, 예를 들면 페닐-C₁ 내지 C₁₂ 알킬기, C₁ 내지 C₁₂ 알콕시페닐-C₁ 내지 C₁₂ 알킬기, C₁ 내지 C₁₂ 알킬페닐-C₁ 내지 C₁₂ 알킬기, 1-나프틸-C₁ 내지 C₁₂ 알킬기, 2-나프틸-C₁ 내지 C₁₂ 알킬기를 들 수 있다. 이들 중에서도 유기 용매에 대한 용해성, 소자 특성, 합성의 행하기 쉬움 등의 측면에서 C₁ 내지 C₁₂ 알콕시페닐-C₁ 내지 C₁₂ 알킬기, C₁ 내지 C₁₂ 알킬페닐-C₁ 내지 C₁₂ 알킬기가 바람직하다.

[0032] 아릴알콕시기에 있어서는 탄소수가 통상 7 내지 60 정도이고, 바람직하게는 7 내지 30 정도이다. 이러한 아릴알콕시기로서는, 예를 들면 페닐메톡시기, 페닐에톡시기, 페닐부톡시기, 페닐펜틸옥시기, 페닐헥실옥시기, 페닐헵틸옥시기, 페닐옥틸옥시기 등의 페닐-C₁ 내지 C₁₂ 알콕시기, C₁ 내지 C₁₂ 알콕시페닐-C₁ 내지 C₁₂ 알콕시기, C₁ 내지 C₁₂ 알킬페닐-C₁ 내지 C₁₂ 알콕시기, 1-나프틸-C₁ 내지 C₁₂ 알콕시기, 2-나프틸-C₁ 내지 C₁₂ 알콕시기를 들 수 있다. 이들 중에서도 유기 용매에 대한 용해성, 소자 특성, 합성의 행하기 쉬움 등의 측면에서 C₁ 내지 C₁₂ 알콕시페닐-C₁ 내지 C₁₂ 알콕시기, C₁ 내지 C₁₂ 알킬페닐-C₁ 내지 C₁₂ 알콕시기가 바람직하다.

[0033] 아릴알킬티오기에 있어서는 탄소수가 통상 7 내지 60 정도이고, 바람직하게는 7 내지 30 정도이다. 이러한 아

릴알킬티오기로서는, 예를 들면 페닐-C₁ 내지 C₁₂알킬티오기, C₁ 내지 C₁₂ 알콕시페닐-C₁ 내지 C₁₂ 알킬티오기, C₁ 내지 C₁₂ 알킬페닐-C₁ 내지 C₁₂ 알킬티오기, 1-나프틸-C₁ 내지 C₁₂ 알킬티오기, 2-나프틸-C₁ 내지 C₁₂ 알킬티오기를 들 수 있다. 이들 중에서도 유기 용매에 대한 용해성, 소자 특성, 합성의 행하기 쉬움 등의 측면에서 C₁ 내지 C₁₂ 알콕시페닐-C₁ 내지 C₁₂ 알킬티오기, C₁ 내지 C₁₂ 알킬페닐-C₁ 내지 C₁₂ 알킬티오기가 바람직하다.

[0034] 알케닐기에 있어서는 탄소수가 2 내지 30 정도이고, 바람직하게는 2 내지 15 정도이다. 이러한 알케닐기로서는, 예를 들면 비닐기, 1-프로피레닐기, 2-프로피레닐기, 부테닐기, 펜테닐기, 헥세닐기, 헵테닐기, 옥테닐기, 시클로헥세닐기를 들 수 있다. 또한, 이러한 알케닐기에는 1,3-부타디에닐기, 시클로헥사-1,3-디에닐기, 1,3,5-헥사트리에닐기 등의 디에닐기나 트리에닐기도 포함된다.

[0035] 알키닐기에 있어서는 탄소수가 2 내지 30 정도이고, 바람직하게는 2 내지 15 정도이다. 이러한 알키닐기로서는, 예를 들면 에틸닐기, 1-프로피닐기, 2-프로피레닐기, 부티닐기, 펜티닐기, 헥시닐기, 헵티닐기, 옥티닐기, 시클로헥실에틸닐기를 들 수 있다. 또한, 이러한 알키닐기에는 1,3-부타다이닐기 등의 다이닐기도 포함된다.

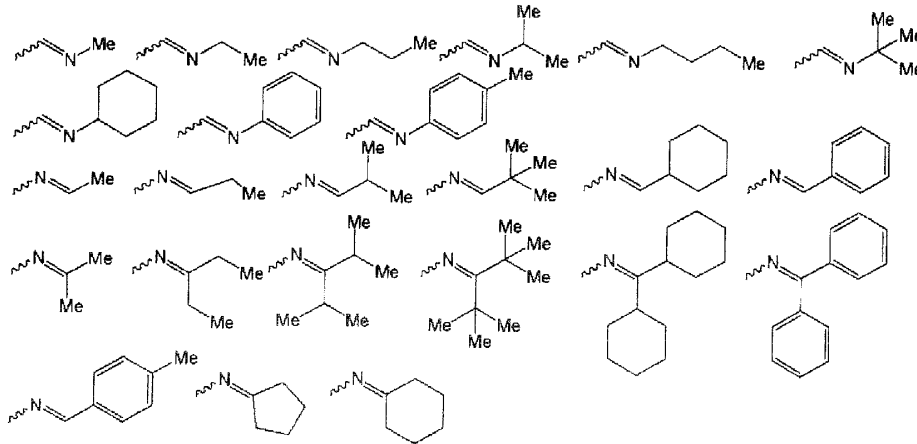
[0036] 2치환 아미노기로서는 알킬기, 아릴기, 아릴알킬기 및 1가의 복소환기로 이루어지는 군에서 선택되는 2개의 기로 치환된 아미노기를 들 수 있다. 이러한 2치환 아미노기에 있어서, 알킬기, 아릴기, 아릴알킬기 또는 1가의 복소환기는 각각 치환기를 가질 수도 있다. 또한, 이러한 2치환 아미노기의 탄소수는 알킬기 등이 갖는 치환기의 탄소수를 포함시키지 않고 통상 2 내지 60 정도, 바람직하게는 2 내지 30 정도이다. 이러한 2치환 아미노기로서는, 예를 들면 디메틸아미노기, 디에틸아미노기, 디프로필아미노기, 디이소프로필아미노기, 디부틸아미노기, 디이소부틸아미노기, 디-t-부틸아미노기, 디펜틸아미노기, 디헥실아미노기, 디시클로헥실아미노기, 디헵틸아미노기, 디옥틸아미노기, 디-2-에틸헥실아미노기, 디노닐아미노기, 디데실아미노기, 디-3,7-디메틸옥틸아미노기, 디라우틸아미노기, 디시클로펜틸아미노기, 디시클로헥실아미노기, 피롤리딜기, 피페리딜기, 디트리플루오로메틸아미노기페닐아미노기, 디페닐아미노기, 디(C₁ 내지 C₁₂ 알콕시페닐)아미노기, 디(C₁ 내지 C₁₂ 알킬페닐)아미노기, 디-1-나프틸아미노기, 디-2-나프틸아미노기, 디펜타플루오로페닐아미노기, 디피리딜아미노기, 디피리다지닐아미노기, 디피리미딜아미노기, 디피라질아미노기, 디트리아질아미노기, 디(페닐-C₁ 내지 C₁₂ 알킬)아미노기, 디(C₁ 내지 C₁₂ 알콕시페닐-C₁ 내지 C₁₂ 알킬)아미노기, 디(C₁ 내지 C₁₂ 알킬페닐-C₁ 내지 C₁₂ 알킬)아미노기를 들 수 있다.

[0037] 3치환 실릴기로서는 알킬기, 아릴기, 아릴알킬기 및 1가의 복소환기로 이루어지는 군에서 선택되는 3개의 기로 치환된 실릴기를 들 수 있다. 이러한 3치환 실릴기의 탄소수는 통상 3 내지 90 정도, 바람직하게는 3 내지 45 정도이다. 또한, 이러한 3치환 실릴기에 있어서, 알킬기, 아릴기, 아릴알킬기 또는 1가의 복소환기는 치환기를 가질 수도 있다. 이러한 3치환 실릴기로서는, 예를 들면 트리메틸실릴기, 트리에틸실릴기, 트리프로필실릴기, 트리-i-프로필실릴기, 디메틸-i-프로필실릴기, 디에틸-i-프로필실릴기, t-부틸실릴디메틸실릴기, 펜틸디메틸실릴기, 헥실디메틸실릴기, 헵틸디메틸실릴기, 옥틸디메틸실릴기, 2-에틸헥실-디메틸실릴기, 노닐디메틸실릴기, 데실디메틸실릴기, 3,7-디메틸옥틸-디메틸실릴기, 라우릴디메틸실릴기, 페닐-C₁ 내지 C₁₂ 알킬실릴기, C₁ 내지 C₁₂ 알콕시페닐-C₁ 내지 C₁₂ 알킬실릴기, C₁ 내지 C₁₂ 알킬페닐-C₁ 내지 C₁₂ 알킬실릴기, 1-나프틸-C₁ 내지 C₁₂ 알킬실릴기, 2-나프틸-C₁ 내지 C₁₂ 알킬실릴기, 페닐-C₁ 내지 C₁₂ 알킬디메틸실릴기, 트리페닐실릴기, 트리-p-크실릴실릴기, 트리벤질실릴기, 디페닐메틸실릴기, t-부틸디페닐실릴기, 디메틸페닐실릴기를 들 수 있다.

[0038] 아실기에 있어서는 탄소수가 통상 2 내지 30 정도이고, 바람직하게는 2 내지 15 정도이다. 이러한 아실기로서는, 예를 들면 아세틸기, 프로피오닐기, 부티릴기, 이소부티릴기, 피발로일기, 벤조일기, 트리플루오로아세틸기, 펜타플루오로벤조일기를 들 수 있다.

[0039] 아실옥시기에 있어서는 탄소수가 통상 2 내지 30 정도이고, 바람직하게는 2 내지 15 정도이다. 이러한 아실옥시기로서는, 예를 들면 아세트옥시, 프로피오닐옥시, 부티릴옥시, 이소부티릴옥시, 피발로일옥시, 벤조일옥시, 트리플루오로아세틸옥시, 펜타플루오로벤조일옥시를 들 수 있다.

[0040] 이민 잔기에 있어서는 탄소수가 2 내지 30 정도이고, 바람직하게는 2 내지 15 정도이다. 이러한 이민 잔기로서는, 예를 들면 이하에 나타내는 구조식으로 표시되는 기를 들 수 있다. 또한, 이하에 나타내는 구조식에 있어서, 파선은 syn 또는 anti를 나타내고, syn이거나 anti일 수도 있다.



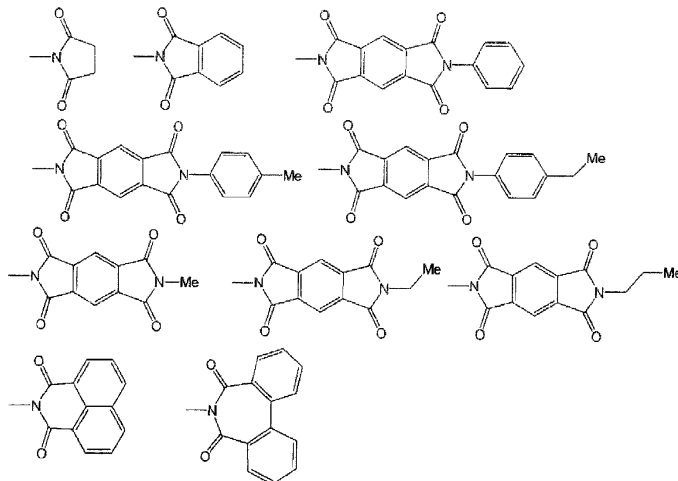
[0041]

[0042]

아미드기에 있어서는 탄소수가 통상 2 내지 30 정도이고, 바람직하게는 2 내지 15 정도이다. 이러한 아미드기로서는, 예를 들면 폼아미드기, 아세트아미드기, 프로피오아미드기, 부틸로아미드기, 벤즈아미드기, 트리플루오로아세트아미드기, 펜타플루오로벤즈아미드기, 디폼아미드기, 디아세트아미드기, 디프로피오아미드기, 디부틸로아미드기, 디벤즈아미드기, 디트리플루오로아세트아미드기, 디펜타플루오로벤즈아미드기를 들 수 있다.

[0043]

산 이미드기로서는 산 이미드로부터 그의 질소 원자에 결합한 수소 원자를 제외하여 얻어지는 잔기를 들 수 있다. 이러한 산 이미드기의 탄소수는 4 내지 30 정도, 바람직하게는 4 내지 15 정도이다. 이러한 산 이미드기로서는, 예를 들면 이하에 나타내는 구조식으로 표시되는 기를 들 수 있다.



[0044]

[0045]

1가의 복소환기란, 복소환식 화합물로부터 수소 원자 1개를 제외한 나머지 원자단을 말한다. 이러한 1가의 복소환기의 탄소수는 통상 2 내지 30 정도, 바람직하게는 2 내지 15 정도이다. 또한, 이러한 1가의 복소환기에 있어서, 복소환은 치환기를 가질 수도 있지만, 탄소수에는 복소환 상의 치환기의 탄소수는 포함되지 않는다. 또한, 여기서 복소환식 화합물이란, 환식 구조를 갖는 유기 화합물 중, 환을 구성하는 원소가 탄소 원자 뿐만 아니라 산소, 황, 질소, 인, 붕소 등의 헤테로 원자를 환 내에 포함하는 것을 말한다. 이러한 1가의 복소환기로서는, 예를 들면 티에닐기, C₁ 내지 C₁₂ 알킬티에닐기, 피롤릴기, 푸릴기, 피리딜기, C₁ 내지 C₁₂ 알킬피리딜기, 피페리딜기, 퀴놀릴기, 이소퀴놀릴기를 들 수 있다. 이들 중에서도, 1가의 방향족 복소환기가 바람직하고, 특히 티에닐기, C₁ 내지 C₁₂ 알킬티에닐기, 피리딜기, C₁ 내지 C₁₂ 알킬피리딜기가 바람직하다.

[0046]

치환 카르복실기로서는 알킬기, 아릴기, 아릴알킬기 또는 1가의 복소환기로 치환된 카르복실기를 들 수 있다. 이러한 치환 카르복실기의 탄소수는 통상 2 내지 30 정도, 바람직하게는 2 내지 15 정도이다. 이러한 치환 카르복실기로서는, 예를 들면 메톡시카르보닐기, 에톡시카르보닐기, 프로폭시카르보닐기, i-프로폭시카르보닐기, 부톡시카르보닐기, i-부톡시카르보닐기, t-부톡시카르보닐기, 펜틸옥시카르보닐기, 헥실옥시카르보닐기, 시클로헥실옥시카르보닐기, 헵틸옥시카르보닐기, 옥틸옥시카르보닐기, 2-에틸헥실옥시카르보닐기, 노닐옥시카르보닐기, 데실옥시카르보닐기, 3,7-디메틸옥틸옥시카르보닐기, 도데실옥시카르보닐기, 트리플루오로

메톡시카르보닐기, 펜타플루오로에톡시카르보닐기, 퍼플루오로부톡시카르보닐기, 퍼플루오로헥실옥시카르보닐기, 퍼플루오로옥틸옥시카르보닐기, 페녹시카르보닐기, 나프톡시카르보닐기, 피리딜옥시카르보닐기를 들 수 있다. 또한, 이러한 치환 카르복실기에 있어서, 알킬기, 아릴기, 아릴알킬기 또는 1가의 복소환기는 치환기를 가질 수도 있다. 또한, 치환 카르복실기의 탄소수에는 알킬기 등이 갖는 치환기의 탄소수는 포함되지 않는다.

[0047] 헤테로아릴옥시기(Q^1-O -로 표시되는 기, Q^1 은 1가의 복소환기를 나타냄)에 있어서는 탄소수가 통상 2 내지 30 정도이고, 바람직하게는 2 내지 15 정도이다. 또한, 이러한 헤테로아릴옥시기에 있어서, 1가의 복소환기는 치환기를 가질 수도 있지만, 헤테로아릴옥시기의 탄소수에는 1가의 복소환기 상의 치환기의 탄소수는 포함되지 않는다. 이러한 헤테로아릴옥시기로서는, 예를 들면 티에닐옥시기, C_1 내지 C_{12} 알킬티에닐옥시기, 피롤릴옥시기, 푸릴옥시기, 피리딜옥시기, C_1 내지 C_{12} 알킬피리딜옥시기, 이미다졸릴옥시기, 피라졸릴옥시기, 트리아졸릴옥시기, 옥사졸릴옥시기, 티아졸옥시기, 티아디아졸옥시기를 들 수 있다. 또한, Q^1 로서는 1가의 방향족 복소환기가 바람직하다.

[0048] 헤테로아릴티오기(Q^2-S -로 표시되는 기, Q^2 은 1가의 복소환기를 나타냄)에 있어서는 탄소수가 통상 2 내지 30 정도이고, 바람직하게는 2 내지 15 정도이다. 또한, 이러한 헤테로아릴티오기에 있어서, 1가의 복소환기는 치환기를 가질 수도 있지만, 헤테로아릴티오기의 탄소수에는 1가의 복소환기 상의 치환기의 탄소수는 포함되지 않는다. 이러한 헤테로아릴티오기로서는 티에닐머캡토기, C_1 내지 C_{12} 알킬티에닐머캡토기, 피롤릴머캡토기, 푸릴머캡토기, 피리딜머캡토기, C_1 내지 C_{12} 알킬피리딜머캡토기, 이미다졸릴머캡토기, 피라졸릴머캡토기, 트리아졸릴머캡토기, 옥사졸릴머캡토기, 티아졸머캡토기, 티아디아졸머캡토기를 들 수 있다. 또한, Q^2 로서는 1가의 방향족 복소환기가 바람직하다.

[0049] 상기 화학식 (1)에 있어서, R^1 및 R^4 는 각각 독립적으로 1가의 기를 나타낸다.

[0050] 본 명세서에 있어서, 1가의 기로서는 예를 들면 알킬기, 아릴기, 아릴알킬기, 알케닐기, 알키닐기, 3치환 실릴기, 아실기, 1가의 복소환기, 치환 카르복실기를 들 수 있다.

[0051] 이들 알킬기, 아릴기, 아릴알킬기, 알케닐기, 알키닐기, 3치환 실릴기, 아실기, 1가의 복소환기 및 치환 카르복실기로서는 A환, B환 및 C환이 가질 수도 있는 치환기로 예시한 기와 동일한 것을 들 수 있다.

[0052] 화합물의 안정성 측면에서, R^1 및 R^4 는 각각 독립적으로 알킬기, 아릴기, 아릴알킬기 또는 1가의 복소환기인 것이 바람직하고, 아릴기인 것이 보다 바람직하다.

[0053] 상기 화학식 (1)에 있어서, R^2 , R^3 , R^5 및 R^6 은 각각 독립적으로 수소 원자, 알킬기, 아릴기, 아릴알킬기, 알케닐기 또는 알키닐기를 나타낸다.

[0054] R^2 , R^3 , R^5 및 R^6 으로 표시되는 알킬기는 직쇄, 분지 또는 환상의 어느 것일 수도 있지만 치환기를 갖지 않는다. 이러한 알킬기의 탄소수는 통상 1 내지 30 정도, 용매에 대한 용해성 측면에서, 바람직하게는 3 내지 15 정도이다. 이러한 알킬기로서는, 예를 들면 메틸기, 에틸기, 프로필기, i-프로필기, 부틸기, i-부틸기, t-부틸기, 펜틸기, 이소아밀기, 헥실기, 시클로헥실기, 헵틸기, 옥틸기, 2-에틸헥실기, 노닐기, 데실기, 3,7-디메틸옥틸기, 라우릴기를 들 수 있다. 이들 중에서도 유기 용매에 대한 용해성, 소자 특성, 합성의 행하기 쉬움 등과 내열성과의 균형이라는 관점에서, 펜틸기, 이소아밀기, 헥실기, 옥틸기, 2-에틸헥실기, 데실기, 3,7-디메틸옥틸기가 바람직하다.

[0055] R^2 , R^3 , R^5 및 R^6 으로 표시되는 아릴기, 아릴알킬기, 알케닐기 및 알키닐기로서는 A환, B환 및 C환이 가질 수도 있는 치환기로 예시한 기와 동일한 것을 들 수 있다.

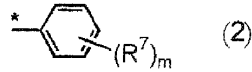
[0056] 화합물의 합성의 용이함 측면에서, R^2 , R^3 , R^5 및 R^6 은 각각 독립적으로 알킬기, 아릴기 또는 아릴알킬기인 것이 바람직하다.

[0057] 또한, 상기 화학식 (1)로 표시되는 구조의 합성의 용이함 측면에서, 상기 화학식 (1)로 표시되는 구조가 C2 대칭인 경우가 바람직하다.

[0058] 또한, 화합물의 발광이 보다 단과장이 되어 청색으로서의 순도가 높아진다는 관점에서, 상기 화학식 (1)에 있어

서의 R^2 , R^3 , R^5 및 R^6 이 각각 독립적으로 수소 원자 또는 1가의 탄화수소기인 것이 바람직하다. 또한, 통전했을 때의 안정성 측면에서, R^2 , R^3 , R^5 및 R^6 이 각각 독립적으로 1가의 탄화수소기인 것이 바람직하다. 여기서, 「1가의 탄화수소기」란, 탄소 원자 및 수소 원자만을 포함하는 기로서, 지방족의 기이거나 방향족의 기일 수도 있다.

[0059] 또한, 내열성, 제막성 측면에서, 상기 화학식 (1)에 있어서의 R^2 , R^3 , R^5 및 R^6 이 각각 독립적으로 하기 화학식 (2)로 표시되는 기인 것이 바람직하다.

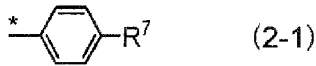


[0060] 화학식 (2)에 있어서, *는 탄소 원자와의 결합손을 나타낸다. 또한, R^7 은 할로젠 원자, 알킬기, 알콕시기, 알킬티오기, 아릴기, 아릴옥시기, 아릴티오기, 아릴알킬기, 아릴알킬옥시기, 아릴알킬티오기, 알케닐기, 알키닐기, 2치환 아미노기 또는 3치환 실릴기를 나타낸다. 또한, m은 0 내지 5까지의 정수를 나타낸다. 또한, m이 2 이상인 경우, R^7 은 동일하거나 상이할 수 있다.

[0062] 이와 같이 R^7 로 표시되는 할로젠 원자, 알킬기, 알콕시기, 알킬티오기, 아릴기, 아릴옥시기, 아릴티오기, 아릴알킬기, 아릴알킬옥시기, 아릴알킬티오기, 알케닐기, 알키닐기, 2치환 아미노기 또는 3치환 실릴기로서는, A환, B환 및 C환이 가질 수도 있는 치환기로서 예시한 기와 동일한 것을 들 수 있다. 이들 중에서도 화합물의 안정성 측면에서, 알킬기, 알콕시기, 아릴기, 아릴옥시기, 2치환 아미노기가 바람직하다.

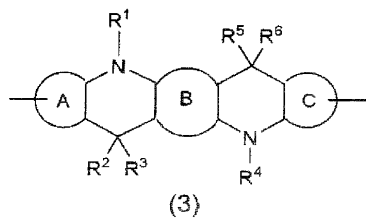
[0063] 또한, 화합물의 용해성 측면에서, R^7 은 탄소수 3 이상의 알킬기, 알콕시기, 알킬티오기, 알케닐기, 알키닐기, 2치환 아미노기인 것이 바람직하고, 그 중에서도 탄소수 3 이상의 알킬기가 바람직하다.

[0064] 상기 화학식 (2)로서 더욱 바람직하게는 하기 화학식 (2-1)로 표시되는 경우이다.



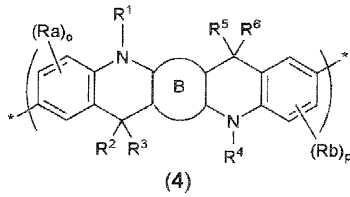
[0065] 화학식 (2-1)에 있어서, R^7 은 상기와 동일한 의미를 나타낸다.

[0067] 또한, 화합물의 도전성 측면에서, 공액이 연결된 결합 위치에서 중합하는 것이 바람직하다. 그 중에서도, 화합물 중의 상기 화학식 (1)로 표시되는 구조가 하기 화학식 (3)으로 표시되는 반복 단위인 경우가 바람직하다.



[0068] 화학식 (3)에 있어서, A환, B환 및 C환은 각각 독립적으로 단환의 방향환 또는 축합한 방향환을 나타내고, R^1 및 R^4 는 각각 독립적으로 1가의 기를 나타내고, R^2 , R^3 , R^5 및 R^6 은 각각 독립적으로 수소 원자, 알킬기, 아릴기, 아릴알킬기, 알케닐기 또는 알키닐기를 나타낸다. 또한, A환 및 C환 상에 결합손을 갖는다. 또한, A환, B환, C환, R^1 , R^2 , R^3 , R^4 , R^5 및 R^6 으로서는 각각 상술한 대로의 것을 들 수 있다.

[0070] 또한, 화합물 중의 상기 화학식 (1)로 표시되는 구조가 상기 화학식 (3)으로 표시되는 반복 단위인 경우에는 화합물의 합성의 용이함 측면에서, 상기 화학식 (3)에 있어서의 A환 및 C환이 벤젠환인 것이 바람직하고, 구체적으로는 반복 단위가 하기 화학식 (4)로 표시되는 반복 단위인 경우가 바람직하다.



[0071]

[0072]

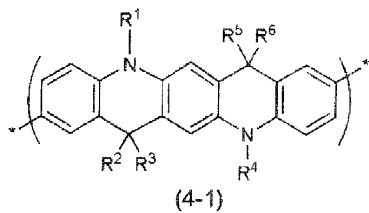
화학식 (4)에 있어서, *는 결합손을 나타내고, B환은 단환의 방향환 또는 축합한 방향환을 나타내고, R¹ 및 R⁴는 각각 독립적으로 1가의 기를 나타내고, R², R³, R⁵ 및 R⁶은 각각 독립적으로 수소 원자, 알킬기, 아릴기, 아릴알킬기, 알케닐기 또는 알킬닐기를 나타낸다. Ra 및 Rb는 각각 독립적으로 알킬기, 알킬옥시기, 아릴기, 아릴옥시기, 아릴알킬기, 아릴알킬옥시기, 2치환 아미노기, 3치환 실릴기, 아실기, 아실옥시기, 치환 카르복실기, 1가의 복소환기 또는 헤테로아릴옥시기를 나타낸다. o 및 p는 각각 독립적으로 0 내지 3의 정수를 나타낸다. o가 2 또는 3인 경우, 복수인 Ra는 동일하거나 상이할 수 있다. p가 2 또는 3인 경우, 복수인 Rb는 동일하거나 상이할 수 있다.

[0073]

또한, 상기 화학식 (4)에 있어서, R¹, R², R³, R⁴, R⁵ 및 R⁶으로서는 각각 상술한 대로의 것을 들 수 있다. 또한, B환으로서는 각각 상술한 대로의 것을 들 수 있다. 이들 B환 중에서도 내열성, 형광 강도, 소자 특성 등의 측면에서 방향족 탄화수소환이 바람직하고, 벤젠환, 나프탈렌환, 안트라센환, 페난트렌환이 보다 바람직하고, 벤젠환이 특히 바람직하다. Ra 및 Rb에서의 알킬기, 알킬옥시기, 아릴기, 아릴옥시기, 아릴알킬기, 아릴알킬옥시기, 2치환 아미노기, 3치환 실릴기, 아실기, 아실옥시기, 치환 카르복실기, 1가의 복소환기 및 헤테로아릴옥시기로서는, A환, B환 및 C환이 가질 수도 있는 치환기로 예시한 기와 동일한 것을 들 수 있다. 화합물의 합성하기 용이함 측면에서 o 및 p가 0인 경우가 바람직하다.

[0074]

상기 화학식 (4)로서 더욱 바람직하게는 하기 화학식 (4-1)로 표시되는 경우이다.



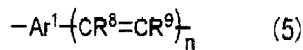
[0075]

[0076]

화학식 (4-1)에 있어서, R¹, R², R³, R⁴, R⁵ 및 R⁶은 상기와 동일 의미를 나타낸다.

[0077]

또한, 유기 전계발광 소자에 이용했을 때에 발광 효율이나 수명 등의 소자 특성이 우수하다는 관점에서, 상기 화학식 (1)로 표시되는 구조를 포함하는 화합물은 추가로 하기 화학식 (5)로 표시되는 반복 단위를 포함하는 것이 바람직하다.



[0078]

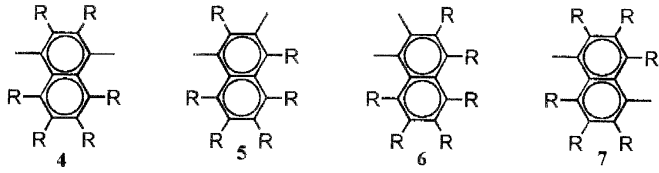
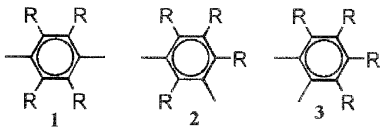
[0079]

화학식 (5)에 있어서, Ar¹은 아릴렌기 또는 2가의 복소환기를 나타낸다. 또한, R⁸ 및 R⁹는 각각 독립적으로 수소 원자, 알킬기, 아릴기, 1가의 복소환기 또는 시아노기를 나타낸다. n은 0 또는 1을 나타낸다. 또한, Ar¹이 2종 이상일 수도 있다.

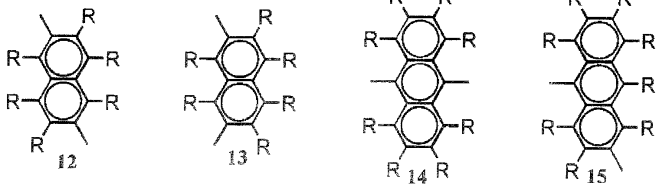
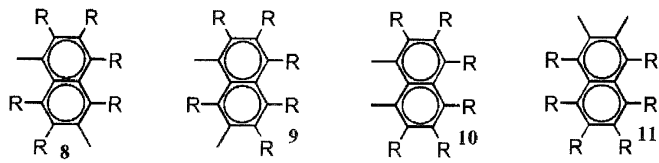
[0080]

이러한 Ar¹에 있어서의 아릴렌기에 있어서는 탄소수가 통상 6 내지 60이고, 바람직하게는 6 내지 20이다. 이러한 Ar¹에 있어서의 아릴렌기로서는, 예를 들면 페닐렌기(예를 들면, 이하에 나타내는 화학식 1 내지 3, 나프탈렌디일기(예를 들면, 이하에 나타내는 화학식 4 내지 13, 안트라세닐렌기(예를 들면, 이하에 나타내는 화학식 14 내지 19), 비페닐렌기(예를 들면, 이하에 나타내는 화학식 20 내지 25), 트리페닐렌기(예를 들면, 이하에 나타내는 화학식 26 내지 28), 축합환 화합물기(예를 들면, 이하에 나타내는 화학식 29 내지 38)를 들 수 있다. 또한, 이하에 나타내는 화학식 중, R은 각각 독립적으로 수소 원자, 할로젠 원자, 알킬기, 알콕시기, 알킬티오기, 아릴기, 아릴옥시기, 아릴티오기, 아릴알킬기, 아릴알킬옥시기, 아릴알킬티오기, 알케닐기, 알킬닐기, 헤테

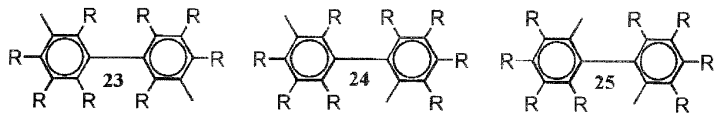
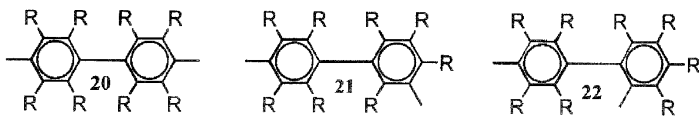
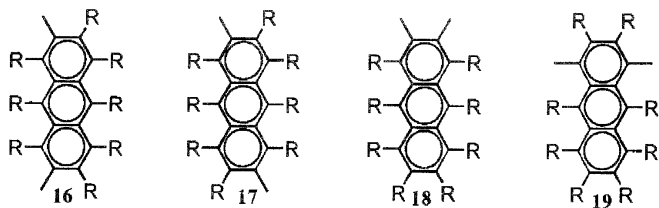
로아릴옥시기 또는 헤테로아릴티오기를 나타낸다. 또한, 아릴렌기의 탄소수에는 치환기 R의 탄소수는 포함되지 않는다.



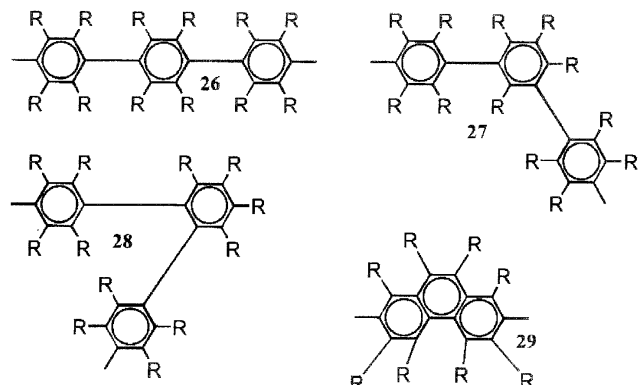
[0081]



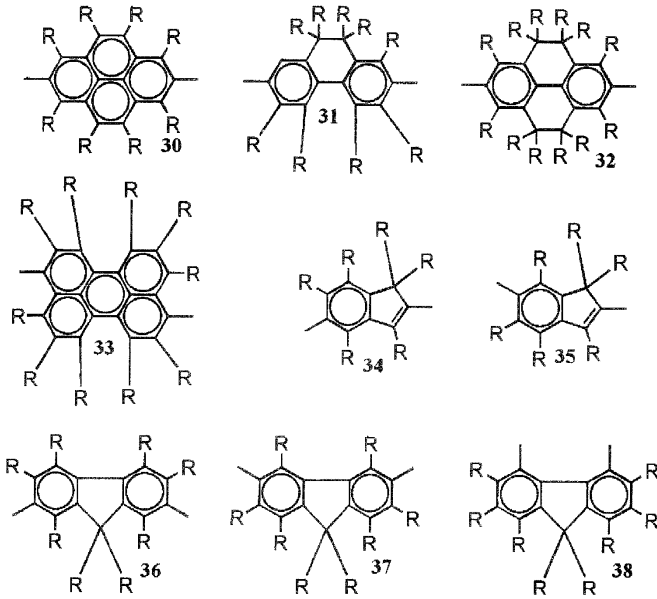
[0082]



[0083]



[0084]



[0085]

[0086]

또한, 본 발명에 있어서, 2가의 복소환기란, 복소환식 화합물로부터 수소 원자 2개를 제외한 나머지 원자단을 말한다. 이러한 2가의 복소환기의 탄소수는 통상 4 내지 60, 바람직하게는 4 내지 20이다. 또한, 여기서 복소환식 화합물이란, 환식 구조를 갖는 유기 화합물 중, 환을 구성하는 원소가 탄소 원자 뿐만 아니라 산소, 황, 질소, 인, 붕소 등의 헤테로 원자를 환 내에 포함하는 것을 말한다.

[0087]

이러한 2가의 복소환기로서는, 예를 들면 이하의 것을 들 수 있다. 또한, 이하에 나타내는 화학식 중, R은 각각 독립적으로 수소 원자, 할로젠 원자, 알킬기, 알콕시기, 알킬티오기, 아릴기, 아릴옥시기, 아릴티오기, 아릴알킬기, 아릴알킬옥시기, 아릴알킬티오기, 알케닐기, 알키닐기, 헤테로아릴옥시기 또는 헤테로아릴티오기를 나타낸다. 또한, 2가의 복소환기의 탄소수에는 치환기 R의 탄소수는 포함되지 않는다.

[0088]

헤테로 원자로서 질소를 포함하는 2가의 복소환기로서, 예를 들면 피리딘-디일기(예를 들면, 이하에 나타내는 화학식 39 내지 44), 디아자페닐렌기(예를 들면, 이하에 나타내는 화학식 45 내지 48), 퀴놀린디일기(예를 들면, 이하에 나타내는 화학식 49 내지 63), 퀴놀살린디일기(예를 들면, 이하에 나타내는 화학식 64 내지 68), 아크리딘디일기(예를 들면, 이하에 나타내는 화학식 69 내지 72), 비피리딘디일기(예를 들면, 이하에 나타내는 화학식 73 내지 75), 페난트롤린디일기(예를 들면, 이하에 나타내는 화학식 76 내지 78)를 들 수 있다.

[0089]

헤테로 원자로서 규소, 질소, 황, 셀레늄 등을 포함하여 플루오렌 구조를 갖는 기로서, 예를 들면 이하에 나타내는 화학식 79 내지 93으로 표시되는 기를 들 수 있다. 이들 중에서도, 질소 원자를 포함하는 화학식 82 내지 84로 표시되는 카르바졸이나 트리페닐아민디일기 등의 방향족 아민 단량체를 갖고 있는 것이 발광 효율 면에서 바람직하다.

[0090]

헤테로 원자로서 규소, 질소, 황, 셀레늄 등을 포함하는 5원환 복소환기로서, 예를 들면 이하에 나타내는 화학식 94 내지 98로 표시되는 기를 들 수 있다.

[0091]

헤테로 원자로서 규소, 질소, 황, 셀레늄 등을 포함하는 5원환 축합 복소환기로서, 예를 들면 이하에 나타내는 화학식 99 내지 109로 표시되는 기, 벤조티아디아졸-4,7-디일기, 벤조옥사디아졸-4,7-디일기를 들 수 있다.

[0092]

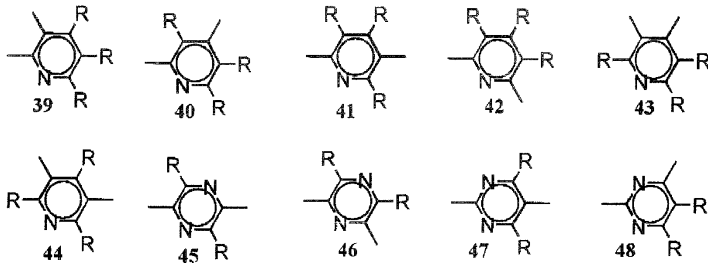
헤테로 원자로서 규소, 질소, 황, 셀레늄 등을 포함하는 5원환 복소환기로 그의 헤테로 원자의 α 위치에서 결합하여 이량체나 올리고머로 되어 있는 기로서, 예를 들면 이하에 나타내는 화학식 110 내지 111로 표시되는 기를 들 수 있다.

[0093]

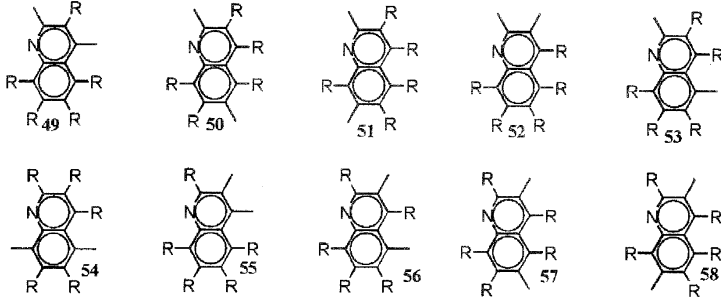
헤테로 원자로서 규소, 질소, 황, 셀레늄 등을 포함하는 5원환 복소환기로 그의 헤테로 원자의 α 위치에서 페닐기에 결합하고 있는 기로서, 예를 들면 이하에 나타내는 화학식 112 내지 118로 표시되는 기를 들 수 있다.

[0094]

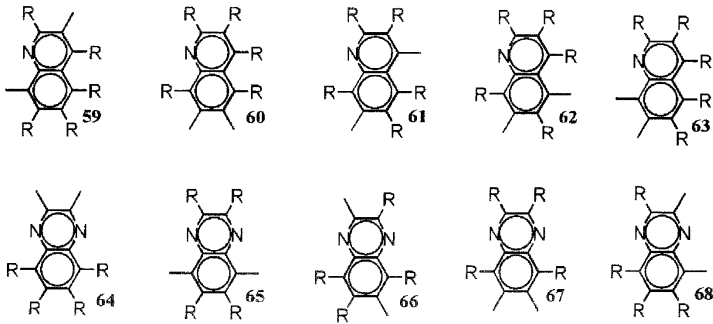
헤테로 원자로서 질소, 산소, 황 등을 포함하는 축합한 복소환기와 벤젠환 또는 단환성의 복소환기가 결합한 3 환성의 기로서, 예를 들면 이하에 나타내는 화학식 120 내지 125로 표시되는 기를 들 수 있다.



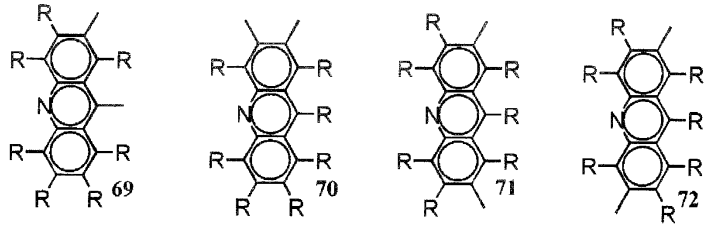
[0095]



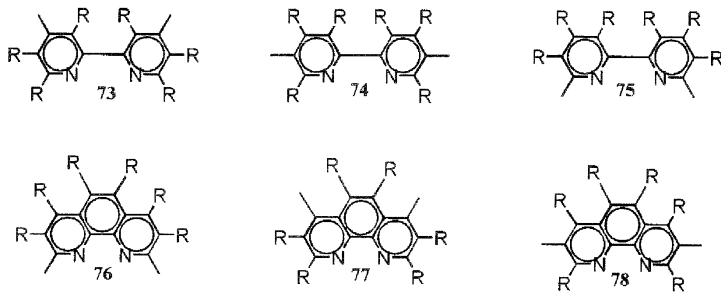
[0096]



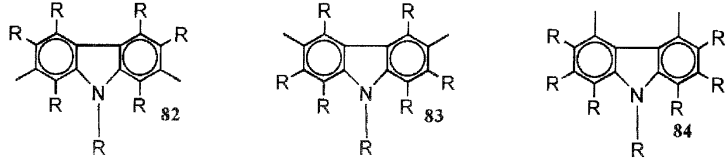
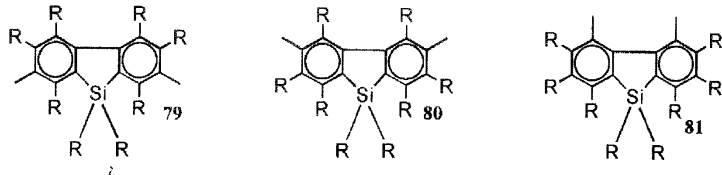
[0097]



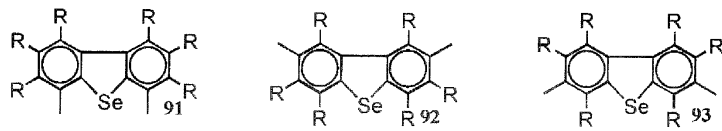
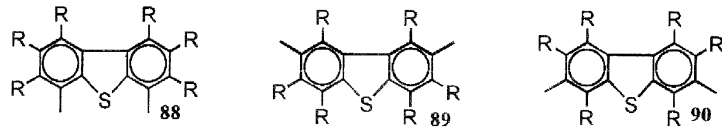
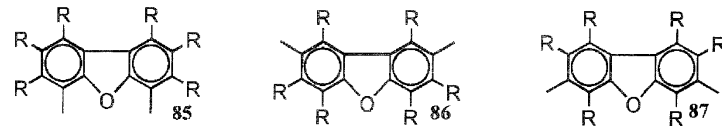
[0098]



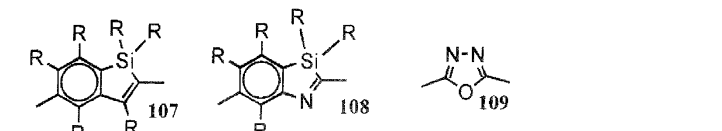
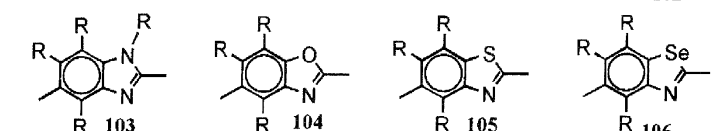
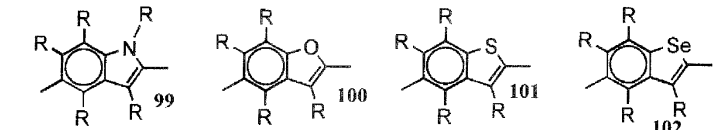
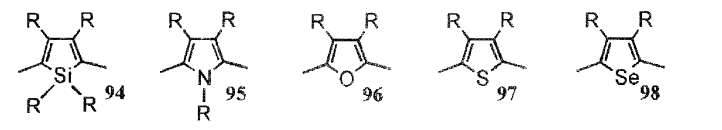
[0099]



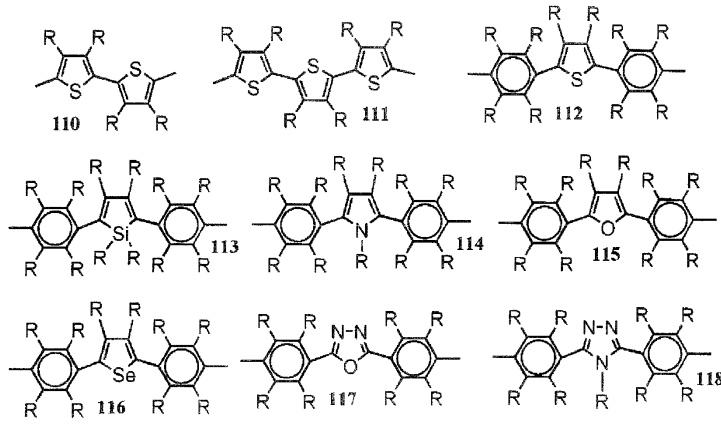
[0100]



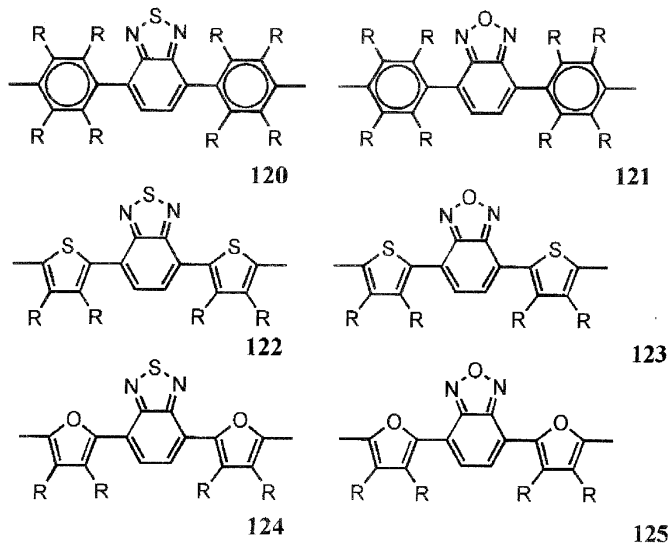
[0101]



[0102]



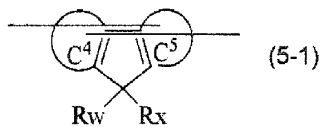
[0103]



[0104]

[0105] 상기 화학식 (5)로 표시되는 반복 단위로서는 n이 0의 경우가 바람직하고, 보다 바람직하게는 Ar¹이 아릴렌기인 경우이다.

[0106] 또한, 상기 화학식 (5)로 표시되는 반복 단위로서는 하기 화학식 (5-1)로 표시되는 구조가 더욱 바람직하다.



[0107]

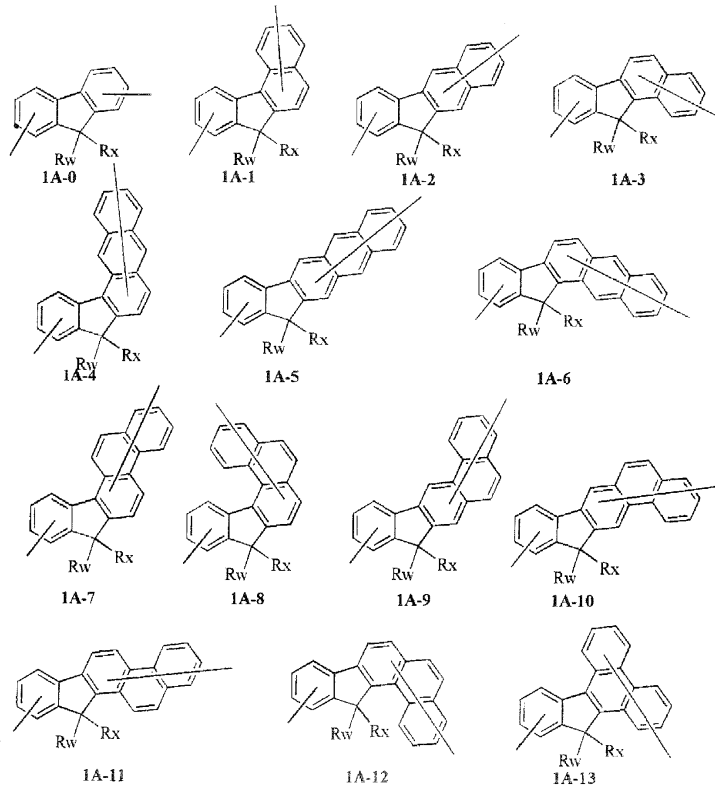
[0108] 화학식 (5-1)에 있어서, C⁴환 및 C⁵환은 각각 독립적으로 치환기를 가질 수도 있는 방향족 탄화수소환을 나타내고, 2개의 결합손은 각각 C⁴환 또는 C⁵환 상에 존재하고, Rw 및 Rx는 각각 독립적으로 수소 원자, 알킬기, 알콕시기, 알킬티오기, 아릴기, 아릴옥시기, 아릴티오기, 아릴알킬기, 아릴알콕시기, 아릴알킬티오기, 알케닐기, 알킬닐기, 2치환 아미노기, 3치환 실릴기, 아실기, 아실옥시기, 이민 잔기, 아미드기, 산 이미드기, 1가의 복소환기, 치환 카르복실기, 헤테로아릴옥시기 또는 헤테로아릴티오기를 나타낸다. Rw 및 Rx는 서로 결합하여 환을 형성할 수도 있다.

[0109] 방향족 탄화수소환이란, 벤젠환 또는 축합한 방향족 탄화수소환인 것을 말한다. 이러한 방향족 탄화수소환의 탄소수는 6 내지 30 정도, 바람직하게는 6 내지 15 정도이다. 또한, 방향족 탄화수소기의 탄소수에는 치환기의 탄소수는 포함되지 않는다. 이러한 방향족 탄화수소환으로서는, 예를 들면 벤젠환, 나프탈렌환, 안트라센환, 페난트렌환, 페달렌환, 나프타센환, 트리페닐렌환, 피렌환, 크리센환, 펜타센환, 페틸렌환, 펜탈렌환, 인덴환, 아줄렌환, 비페닐렌환, 플루오렌환, 아세나프틸렌환을 들 수 있다.

[0110] Rw 및 Rx에서의 알킬기, 알콕시기, 알킬티오기, 아릴기, 아릴옥시기, 아릴티오기, 아릴알킬기, 아릴알콕시기,

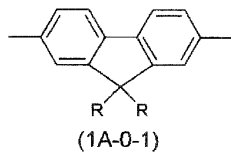
아릴알킬티오기, 알케닐기, 알킬닐기, 2치환 아미노기, 3치환 실릴기, 아실기, 아실옥시기, 이민 잔기, 아미드기, 산 이미드기, 1가의 복소환기, 치환 카르복실기, 헤테로아릴옥시기 또는 헤테로아릴티오기로서는 A환, B환 및 C환이 가질 수도 있는 치환기로서 예시한 기와 동일한 것을 들 수 있다.

[0111] 상기 화학식 (5-1)로 표시되는 반복 단위로서는 구체적으로는 이하에 나타내는 화학식으로 표시되는 반복 단위를 들 수 있다. 또한, 이러한 반복 단위는 알킬기, 알콕시기, 알킬티오기, 아릴기, 아릴옥시기, 아릴티오기, 아릴알킬기, 아릴알콕시기, 아릴알킬티오기, 알케닐기, 알킬닐기, 2치환 아미노기, 3치환 실릴기, 아실기, 아실옥시기, 이민 잔기, 아미드기, 산 이미드기, 1가의 복소환기, 치환 카르복실기, 헤테로아릴옥시기, 헤테로아릴티오기 및 할로겐 원자 등으로 이루어지는 군에서 선택되는 적어도 하나의 치환기를 가질 수도 있다. 또한, 이하에 나타내는 화학식에 있어서, 방향족 탄화수소에서의 결합손은 임의의 위치를 취할 수 있는 것을 나타낸다.



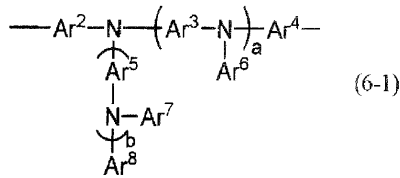
[0112] 이들 반복 단위의 중에서도, 1A-0, 1A-1, 1A-2 또는 1A-3으로 표시되는 반복 단위가 바람직하고, 1A-0으로 표시되는 반복 단위가 특히 바람직하다.

[0114] 더욱 바람직하게는 하기 화학식 (1A-0-1)로 표시되는 경우이다.



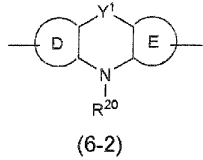
[0115] 화학식 (1A-0-1)에 있어서, R은 알킬기, 아릴기, 아릴알킬기 또는 1가의 복소환 화합물기이고, 2개의 R은 서로 동일하거나 상이할 수 있다. 또한, R은 서로 결합하여 환을 형성할 수도 있다.

[0117] 또한, 본 발명의 화합물은 내열성의 향상, 전하 수송성 개선, 발광색의 조정, 발광 효율을 높이는 등의 소자 특성을 개선한다는 관점에서, 상기 화학식 (5)로 표시되는 반복 단위 이외의 하기 화학식 (6-1), (6-2), (6-3)으로 표시되는 반복 단위로 이루어지는 군에서 선택되는 적어도 1종의 반복 단위를 추가로 포함하는 것이 바람직하고, 2종 이상의 반복 단위를 포함하는 것이 보다 바람직하다.



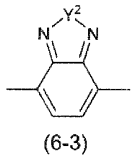
[0118]

[0119] 화학식 (6-1)에 있어서, Ar², Ar³, Ar⁴ 및 Ar⁵는 각각 독립적으로 아릴렌기 또는 2가의 복소환기를 나타낸다. 또한, Ar⁶, Ar⁷ 및 Ar⁸은 각각 독립적으로 아릴기 또는 1가의 복소환기를 나타낸다. 또한, a 및 b는 각각 독립적으로 0 또는 양의 정수를 나타낸다. 또한, Ar², Ar³, Ar⁴, Ar⁵, Ar⁶, Ar⁷ 및 Ar⁸은 치환기를 가질 수도 있다.



[0120]

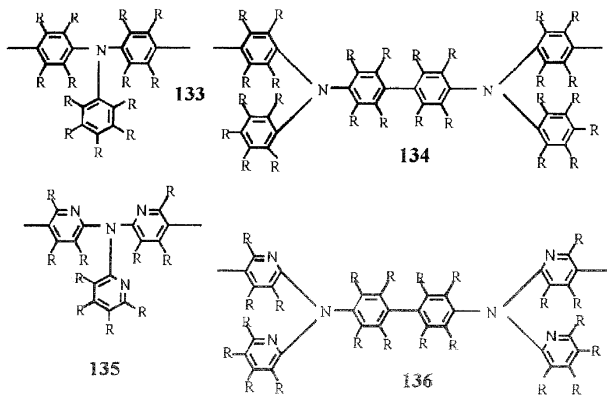
[0121] 화학식 (6-2)에 있어서, D환 및 E환은 각각 독립적으로 방향환을 나타낸다. 또한, Y¹은 -O-, -S- 또는 -C(=O)-를 나타낸다. 또한, R²⁰은 1가의 기를 나타낸다. 또한, D환 상, E환 상에 각각 결합손을 갖는다.



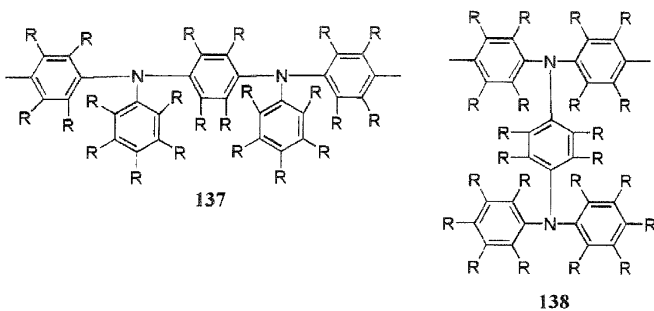
[0122]

[0123] 화학식 (6-3)에 있어서, Y²는 -O- 또는 -S-을 나타낸다. 또한, 6원환 상에 2개의 결합손을 갖는다.

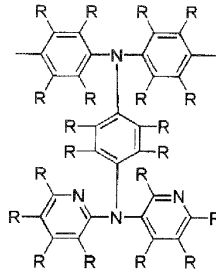
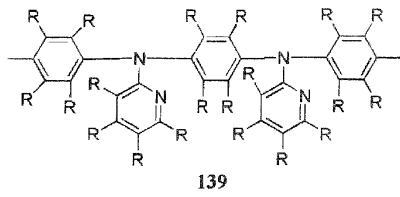
[0124] 상기 화학식 (6-1)로 표시되는 반복 단위의 구체예로서는 이하에 나타내는 화학식 133 내지 140으로 표시되는 것을 들 수 있다.



[0125]



[0126]



[0127]

[0128]

상기 화학식에 있어서, R은 각각 독립적으로 수소 원자, 알킬기, 알콕시기, 알킬티오기, 아릴기, 아릴옥시기, 아릴티오기, 아릴알킬기, 아릴알콕시기, 아릴알킬티오기, 아릴알케닐기, 아릴알키닐기, 아미노기, 치환 아미노기, 실릴기, 치환 실릴기, 할로겐 원자, 아실기, 아실옥시기, 이민 잔기, 아미드기, 산 이미드기, 1가의 복소환기, 카르복실기, 치환 카르복실기 또는 시아노기를 나타낸다.

[0129]

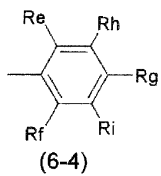
또한, 상기 화학식에 있어서의 R이 알킬기를 포함하는 치환기인 경우에 있어서는, 고분자 화합물의 유기 용매에 대한 용해성을 높이기 위해서, 탄소수가 3 이상의 알킬기가 포함되는 것이 바람직하다. 또한, 상기 화학식 133 내지 140으로 표시되는 구조 중에서도, 발광 파장을 조절한다는 관점에서 상기 화학식 133, 134 및 137로 표시되는 구조가 바람직하다.

[0130]

상기 화학식 (6-1)로 표시되는 반복 단위에 있어서, 발광 파장을 조절, 소자 수명 등의 소자 특성 측면에서 Ar², Ar³, Ar⁴ 및 Ar⁵가 각각 독립적으로 아릴렌기이고, Ar⁶, Ar⁷ 및 Ar⁸이 각각 독립적으로 아릴기인 것이 바람직하다. 또한, Ar², Ar³ 및 Ar⁴가 각각 독립적으로 비치환된 페닐렌기, 비치환된 비페닐렌기, 비치환된 나프틸렌기, 또는 비치환된 안트라센디일기인 것이 바람직하다. 또한, 유기 용매에 대한 용해성, 소자 특성 등의 측면에서 Ar⁶, Ar⁷ 및 Ar⁸이 각각 독립적으로 1개 이상의 치환기를 갖는 아릴기인 것이 바람직하고, 3개 이상의 치환기를 갖는 아릴기인 것이 보다 바람직하다. 또한, Ar⁶, Ar⁷ 및 Ar⁸이 3개 이상의 치환기를 갖는 페닐기, 3개 이상의 치환기를 갖는 나프틸기, 또는 3개 이상의 치환기를 갖는 안트라세닐기인 것이 보다 바람직하고, Ar⁶, Ar⁷ 및 Ar⁸이 3개 이상의 치환기를 갖는 페닐기인 것이 더욱 보다 바람직하다.

[0131]

이들 반복 단위 중에서도 Ar⁶, Ar⁷ 및 Ar⁸이 각각 독립적으로 하기 화학식 (6-4)로 표시되는 기이고, a+b≤3인 것이 바람직하고, a+b=1인 것이 보다 바람직하고, a=1, b=0인 것이 특히 바람직하다.



[0132]

[0133]

화학식 (6-4)에 있어서, Re, Rf 및 Rg는 각각 독립적으로 알킬기, 알콕시기, 알킬티오기, 아릴기, 아릴옥시기, 아릴티오기, 아릴알킬기, 아릴알콕시기, 아릴알킬티오기, 아릴알케닐기, 아릴알키닐기, 아미노기, 치환 아미노기, 실릴기, 치환 실릴기, 실릴옥시기, 치환 실릴옥시기, 1가의 복소환기 또는 할로겐 원자를 나타낸다. 또한, Re, Rf 및 Rg에 포함되는 수소 원자는 불소 원자로 치환될 수도 있다. 또한, Rh 및 Ri는 각각 독립적으로 수소 원자, 알킬기, 알콕시기, 알킬티오기, 아릴기, 아릴옥시기, 아릴티오기, 아릴알킬기, 아릴알콕시기, 아릴알킬티오기, 아릴알케닐기, 아릴알키닐기, 아미노기, 치환 아미노기, 실릴기, 치환 실릴기, 실릴옥시기, 치환 실릴옥시기, 1가의 복소환기 또는 할로겐 원자를 나타낸다. 또한, Rh 및 Ri에 포함되는 수소 원자는 불소 원자로 치환될 수도 있다.

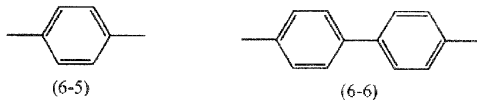
[0134]

또한, 상기 화학식 (6-4)에 있어서, Re 및 Rf가 각각 독립적으로 탄소수 3 이하의 알킬기, 탄소수 3 이하의 알콕시기, 탄소수 3 이하의 알킬티오기이고, Rg가 탄소수 1 내지 30의 알킬기, 탄소수 1 내지 30의 알콕시기, 탄소수 1 내지 30의 알킬티오기인 것이 바람직하다.

[0135]

상기 화학식 (6-1)로 표시되는 반복 단위에 있어서, Ar³이 하기 화학식 (6-5) 또는 (6-6)으로 표시되는 기인 것

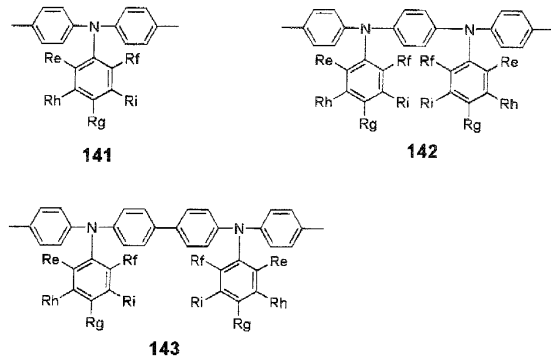
이 바람직하다.



[0136]

[0137] 화학식 (6-5) 및 (6-6)에 있어서, 구조 중에 포함되는 벤젠환은 비치환된 것이 바람직하지만, 각각 독립적으로 1개 이상 4개 이하의 치환기를 가질 수도 있다. 이들 치환기는 서로 동일하거나 상이할 수 있다. 또한, 이러한 벤젠환에 다른 방향족 탄화수소환 또는 복소환이 축합하고 있을 수도 있다.

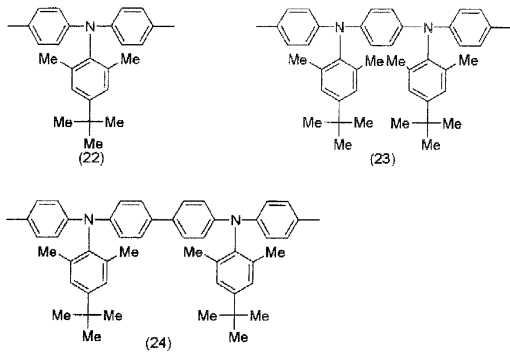
[0138] 또한, 상기 화학식 (6-1)로 표시되는 반복 단위로서, 보다 바람직한 구체예로서는 이하에 나타내는 화학식 141 내지 143으로 표시되는 것을 들 수 있다.



[0139]

[0140] 상기 화학식에 있어서, Re, Rf, Rg, Rh 및 Ri로서는 각각 상술한 대로인 것을 들 수 있다.

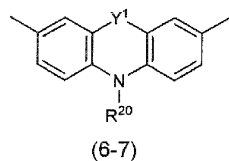
[0141] 또한, 상기 화학식 (6-1)로 표시되는 반복 단위로서, 특히 바람직한 구체예로서는 형광 강도, 발광 파장의 조정, 내열성 등의 소자 특성 측면에서, 하기 화학식 (22) 내지 (24)로 표시되는 것을 들 수 있다.



[0142]

[0143] 상기 화학식 (6-2)에 있어서, D환 및 E환은 각각 독립적으로 방향환을 나타낸다. 또한, D환 및 E환 상에는 치환기를 가질 수도 있다. 화합물의 안정성 측면에서, 바람직하게는 방향족 탄화수소환의 경우이고, 특히 바람직하게는 벤젠환의 경우이다.

[0144] 상기 화학식 (6-2)로 표시되는 반복 단위의 바람직한 구체예로서는 하기 화학식 (6-7)로 표시되는 것을 들 수 있다.



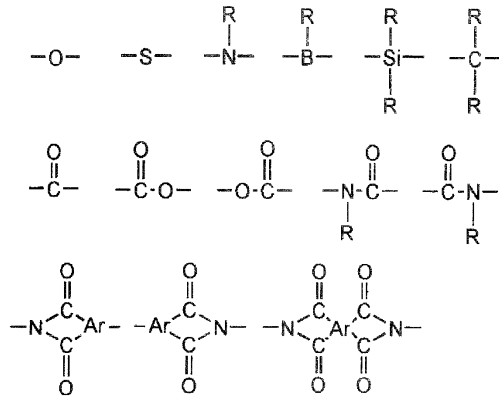
[0145]

[0146] 화학식 (6-7)에 있어서, Y¹ 및 R²⁰로서는 각각 상술한 대로인 것을 들 수 있다.

[0147] 본 발명의 화합물 중에서도, 박막으로 했을 때의 전하의 수송성, 유기 전계발광 소자에 이용했을 때에 발광 효

올이나 수명 등의 소자 특성 측면에서, 공액계 고분자인 것이 바람직하다. 여기서, 공액계 고분자란 중합체의 주쇄 골격에 따라서 비국재 π 전자쌍이 존재하고 있는 고분자를 의미한다. 이 비국재 전자로서는 2중 결합 대신에 홑 전자 또는 고립 전자쌍이 공명에 가해지는 경우도 있다.

[0148] 또한, 본 발명의 화합물에 있어서는 발광 특성이나 전하 수송 특성을 손상시키지 않는 범위에서, 비공액의 단위로 연결되어 있을 수도 있고, 반복 단위에 이들의 비공액 부분이 포함되어 있을 수도 있다. 비공액인 결합 구조로서는, 예를 들면 이하에 나타내는 화학식으로 표시되는 구조, 및 이하에 나타내는 화학식으로 표시되는 구조 중 2개 이상을 조합한 구조를 들 수 있다. 또한, 이하에 나타내는 화학식 중, R은 각각 독립적으로 수소 원자, 할로젠 원자, 알킬기, 알콕시기, 알킬티오기, 아릴기, 아릴옥시기, 아릴티오기, 아릴알킬기, 아릴알킬옥시기, 아릴알킬티오기, 알케닐기, 알키닐기, 헤테로아릴옥시기 또는 헤테로아릴티오기를 나타낸다. 또한, Ar은 방향족 탄화수소환 또는 복소환을 나타낸다.



[0149] 또한, 본 발명의 화합물은 교대, 랜덤, 블록 또는 그래프트 공중합체일 수도 있고, 이들의 중간적인 구조를 갖는 고분자, 예를 들면 블록성을 띤 랜덤 공중합체일 수도 있다. 형광 또는 인광의 양자 수율이 높은 고분자 발광체를 얻는다는 관점에서는 완전한 랜덤 공중합체보다 블록성을 띤 랜덤 공중합체나 블록 또는 그래프트 공중합체가 바람직하다. 또한, 본 발명의 화합물에는 주쇄에 분지가 있고, 말단부가 3개 이상 있는 것이나 덴드리머도 포함된다.

[0151] 또한, 본 발명의 화합물은 색도 측면에서 비공액인 주쇄인 경우, 보다 청색의 색도가 높고 바람직하다.

[0152] 또한, 본 발명의 화합물에 있어서는 유기 전계발광 소자에 이용했을 때에 발광 효율이나 수명 등의 소자 특성 측면에서, 상기 화학식 (1)로 표시되는 구조를 포함하는 구조 단위를 전 구조 단위에 대하여 0.1 몰% 이상 50 몰% 이하 포함하는 것이 바람직하고, 1 몰% 이상 20 몰% 이하 포함하는 것이 보다 바람직하다.

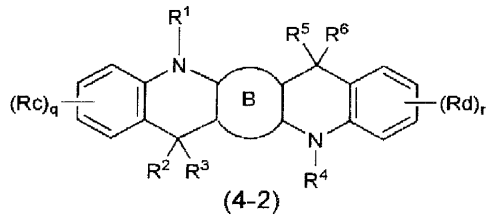
[0153] 또한, 전하의 수송 및 주입성 측면에서는 상기 화학식 (1)로 표시되는 구조를 포함하는 구조 단위를 전 구조 단위에 대하여 10 몰% 이상 100 몰% 이하 포함하는 것이 바람직하고, 30 몰% 이상 70 몰% 이하 포함하는 것이 보다 바람직하다.

[0154] 또한, 본 발명의 화합물에 있어서는 유기 전계발광 소자로 했을 때의 전하의 수송성이나 수명 등의 소자 특성 측면에서, 상기 화학식 (5)로 표시되는 반복 단위를 전 구조 단위에 대하여 1 몰% 이상 99 몰% 이하 포함하는 것이 바람직하고, 50 몰% 이상 97 몰% 이하 포함하는 것이 보다 바람직하다.

[0155] 또한, 본 발명의 화합물이 상기 화학식 (6-1)로 표시되는 반복 단위, 상기 화학식 (6-2)로 표시되는 반복 단위 또는 상기 화학식 (6-3)으로 표시되는 반복 단위 중 적어도 하나를 포함하는 경우에는, 유기 전계발광 소자로 했을 때의 전하의 수송성이나 발광색의 조정 등의 소자 특성 측면에서, 이러한 반복 단위를 전 구조 단위에 대하여 0.01 몰% 이상 50 몰% 이하 포함하는 것이 바람직하고, 0.1 몰% 이상 30 몰% 이하 포함하는 것이 보다 바람직하다.

[0156] 또한, 본 발명의 화합물은 유기 전계발광 소자에 이용했을 때에 발광 효율이나 수명 등의 소자 특성이나 제막성 측면에서, 폴리스티렌 환산의 수 평균 분자량이 2000 이상인 것이 바람직하고, 2×10^3 내지 10^8 인 것이 보다 바람직하고, 1×10^4 내지 10^6 인 것이 특히 바람직하다. 또한, 본 명세서에 있어서는, 경우에 따라서, 폴리스티렌 환산의 수 평균 분자량이 2000 이상의 화합물인 것을 고분자 화합물(이하, 본 발명의 화합물 중 폴리스티렌 환산의 수 평균 분자량이 2000 이상의 것을 「본 발명의 고분자 화합물」 이라는 경우가 있음)이라고 하고, 한편

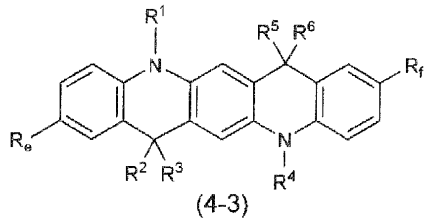
단일의 조성을 포함하는 것을 저분자 화합물(통상, 수 평균 분자량은 2000 미만)이라고 한다. 또한, 본 발명의 화합물은 덴드리머나 올리고머 등의 저분자 화합물과 고분자 화합물과의 중간적 구조인 것일 수도 있다. 본 발명의 화합물이 저분자 화합물인 경우에는, 합성의 용이함 측면에서, 본 발명의 화합물이 하기 화학식 (4-2)로 표시되는 화합물인 것이 바람직하다.



[0157]

[0158] 상기 화학식 (4-2)에 있어서, R^1 , R^2 , R^3 , R^4 , R^5 및 R^6 으로서는 각각 상술한 대로의 것을 들 수 있다. 또한, B 환으로서는 각각 상술한 대로의 것을 들 수 있다. Rc 및 Rd는 각각 독립적으로 할로겐 원자, 알킬기, 알콕시기, 알킬티오기, 아릴기, 아릴옥시기, 아릴티오기, 아릴알킬기, 아릴알콕시기, 아릴알킬티오기, 알케닐기, 알킬닐기, 2치환 아미노기, 3치환 실릴기, 아실기, 아실옥시기, 이민 잔기, 아미드기, 산 이미드기, 1가의 복소환기, 치환 카르복실기, 헤테로아릴옥시기 또는 헤테로아릴티오기를 나타낸다. q 및 r은 0 내지 4의 정수를 나타낸다. q가 2 이상의 경우, 복수인 Rc는 서로 동일하거나 상이할 수 있다. 화합물의 합성의 용이함의 측면에서 q 및 r이 0인 경우가 바람직하다. 이들 B환 중에서도 내열성, 형광 강도, 소자 특성 등의 측면에서 방향족 탄화수소환이 바람직하고, 벤젠환, 나프탈렌환, 안트라센환, 페난트렌환이 보다 바람직하고, 벤젠환이 특히 바람직하다.

[0159] 상기 화학식 (4-2)로 표시되는 화합물 중, 합성의 용이함 측면에서 하기 화학식 (4-3)으로 표시되는 화합물인 것이 바람직하다.

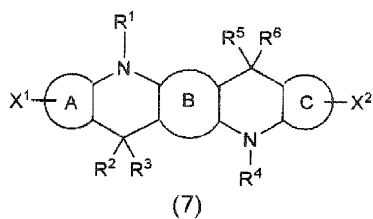


[0160]

[0161] 상기 화학식 (4-3)에 있어서, R^1 , R^2 , R^3 , R^4 , R^5 및 R^6 으로서는 각각 상술한 대로의 것을 들 수 있다. Re 및 Rf는 각각 독립적으로 수소 원자, 할로겐 원자, 알킬기, 알콕시기, 알킬티오기, 아릴기, 아릴옥시기, 아릴티오기, 아릴알킬기, 아릴알콕시기, 아릴알킬티오기, 알케닐기, 알킬닐기, 2치환 아미노기, 3치환 실릴기, 아실기, 아실옥시기, 이민 잔기, 아미드기, 산 이미드기, 1가의 복소환기, 치환 카르복실기, 헤테로아릴옥시기 또는 헤테로아릴티오기를 나타낸다.

[0162] 다음으로, 본 발명의 화합물의 제조 방법에 대해서 설명한다.

[0163] 본 발명의 화합물의 제조 방법은 하기 화학식 (7)로 표시되는 화합물을 원료로서 중합하는 공정을 포함하는 방법이다. 즉, 상기 화학식 (3)으로 표시되는 화합물은 하기 화학식 (7)로 표시되는 화합물을 원료로서 중합함으로써 제조할 수 있다.



[0164]

[0165] 화학식 (7)에 있어서, A환, B환 및 C환은 각각 독립적으로 단환의 방향환 또는 축합한 방향환을 나타내고, R^1

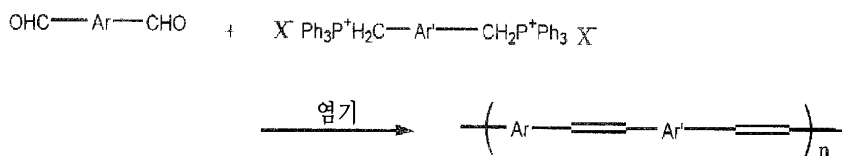
및 R⁴는 각각 독립적으로 1가의 기를 나타내고, R², R³, R⁵ 및 R⁶은 각각 독립적으로 수소 원자, 알킬기, 아릴기, 아릴알킬기, 알케닐기 또는 알키닐기를 나타내고, X¹, X²는 각각 독립적으로 중합에 관여할 수 있는 치환기를 나타낸다. 또한, A환, B환, C환, R¹, R², R³, R⁴, R⁵ 및 R⁶으로서는 각각 상술한 대로의 것을 들 수 있다.

[0166] 또한, 본 발명의 화합물(특히 고분자 화합물)이 상기 화학식 (3)으로 표시되는 반복 단위 이외의 반복 단위를 갖는 경우에는 상기 화학식 (3)으로 표시되는 반복 단위 이외의 반복 단위가 되는 단량체를 공존시킬 수 있다.

[0167] 본 발명의 고분자 화합물은 중합에 관여할 수 있는 치환기(중합 활성기)를 갖는 단량체를 원료로서 사용하여 중합함으로써 제조할 수 있다. 여기서 사용되는 중합 활성기로서는 중합 방법에 따라 다르지만, 예를 들면 포르밀기, 포스포늄기, 브롬, 요소, 염소 등의 할로젠 원자, 비닐기, 할로메틸기, 아세토니트릴기, 트리플루오로 메탄술폰닐옥시기 등의 알킬술폰닐옥시기, 툴루엔술폰닐옥시기 등의 아릴술폰닐옥시기를 들 수 있다. 분자량 제어, 공중합비 제어 등 측면에서 중합 활성기의 수는 2인 경우가 바람직하다.

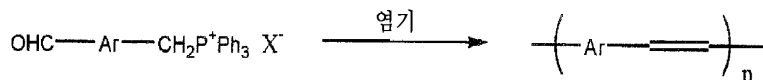
[0168] 본 발명의 고분자 화합물의 제조 방법으로서 주쇄에 비닐렌기를 갖는 경우에는 3중항 발광 착체로부터 유도된 중합 활성기를 갖는 단량체와, 필요에 따라서 그 밖의 단량체를 이용하여, 예를 들면 일본 특허 공개 (평)5-202355호 공보에 기재된 방법에 의해 제조할 수 있다. 즉, [1] 알데히드기를 갖는 화합물과 포스포늄기를 갖는 화합물과의 비티히(Wittig) 반응에 의한 중합, [2] 알데히드기와 포스포늄기를 갖는 화합물의 비티히 반응에 의한 중합, [3] 비닐기를 갖는 화합물과 할로젠 원자를 갖는 화합물과의 헥크(Heck) 반응에 의한 중합, [4] 비닐기와 할로젠 원자를 갖는 화합물의 헥크 반응에 의한 중합, [5] 알데히드기를 갖는 화합물과 알킬포스포네이트기를 갖는 화합물과의 호너-와즈워스-에몬스(Horner-Wadsworth-Emmons)법에 의한 중합, [6] 알데히드기와 알킬포스포네이트기를 갖는 화합물의 호너-와즈워스-에몬스법에 의한 중합, [7] 할로젠화메틸기를 2개 이상 갖는 화합물의 탈할로젠화 수소법에 의한 중축합, [8] 술폰늄염기를 2개 이상 갖는 화합물의 술폰늄염 분해법에 의한 중축합, [9] 알데히드기를 갖는 화합물과 아세토니트릴기를 갖는 화합물과의 크너베나겔(Knoevenagel) 반응에 의한 중합, [10] 알데히드기와 아세토니트릴기를 갖는 화합물의 크너베나겔 반응에 의한 중합 등의 방법, [11] 알데히드기를 2개 이상 갖는 화합물의 맥머리(McMurry) 반응에 의한 중합 등의 방법이 예시된다. 상기 [1] 내지 [11]의 중합 방법에 대해서 이하에 반응식으로 나타낸다.

[1]



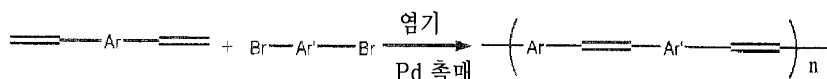
[0169]

[2]



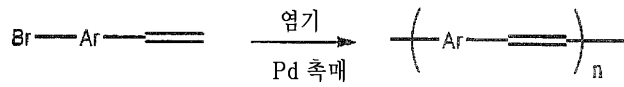
[0170]

[3]



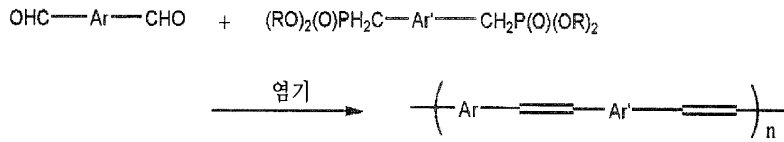
[0171]

[4]



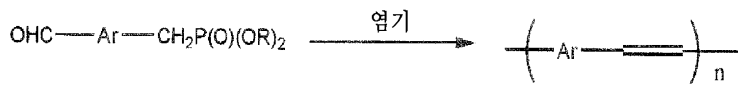
[0172]

[5]



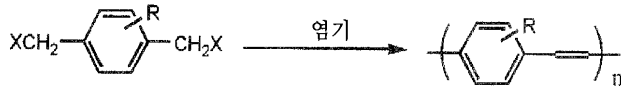
[0173]

[6]



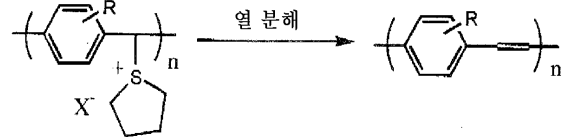
[0174]

[7]



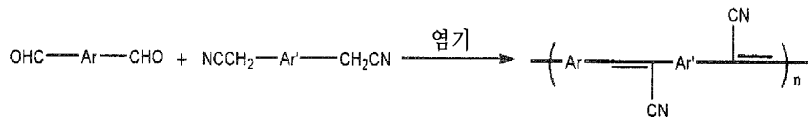
[0175]

[8]



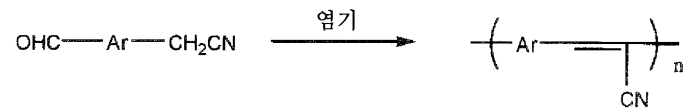
[0176]

[9]



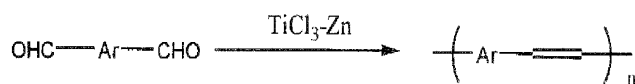
[0177]

[1 0]



[0178]

[1 1]

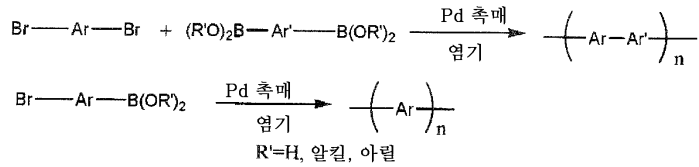


[0179]

[0180] 또한, 본 발명의 고분자 화합물의 제조 방법으로서 주쇄에 비닐렌기를 갖지 않는 경우에는 중합 활성기를 갖는 단량체와 필요에 따라서 그 밖의 단량체를 이용하여 중합함으로써 제조할 수 있다. 예를 들면, [12] 스즈

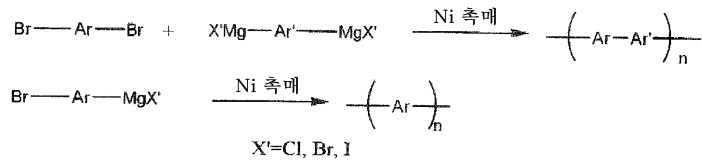
끼(Suzuki) 커플링 반응에 의해 중합하는 방법, [13] 그리냐르(Grignard) 반응에 의해 중합하는 방법, [14] 스틸(Stille) 커플링 반응에 의해 중합하는 방법, [15] Ni(0) 촉매에 의해 중합하는 방법, [16] FeCl₃ 등의 산화제에 의해 중합하는 방법/전기 화학적으로 산화 중합하는 방법, 또는 [17] 적당한 이탈기를 갖는 중간체 고분자의 분해에 의한 방법이 예시된다. 상기 [12] 내지 [17]의 중합 방법에 대해서 이하에 반응식으로 나타낸다.

[1 2]



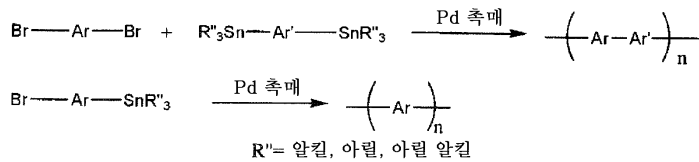
[0181]

[1 3]



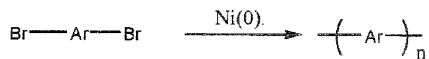
[0182]

[1 4]



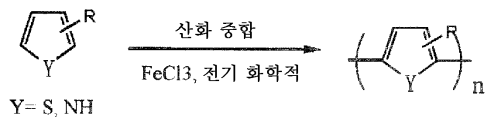
[0183]

[1 5]



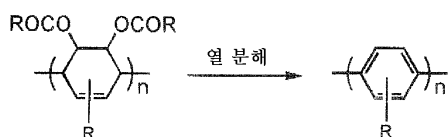
[0184]

[1 6]



[0185]

[1 7]



[0186]

[0187]

이들 중합 방법 중, 비티히 반응에 의한 중합, 헥크 반응에 의한 중합, 호너-와즈워스-에몬스법에 의한 중합,

크너베나겔 반응에 의한 중합, 및 스즈키 커플링 반응에 의해 중합하는 방법, 그리냐르 반응에 의해 중합하는 방법, 스틸 커플링을 이용하는 방법 및 Ni(0) 촉매에 의해 중합하는 방법이 구조 제어를 하기 쉽기 때문에 바람직하다. 또한, 스즈키 커플링 반응에 의해 중합하는 방법, 그리냐르 반응에 의해 중합하는 방법, Ni(0) 촉매에 의해 중합하는 방법이 원료의 입수하기 용이함과 중합 반응 조건의 간편함 때문에 바람직하다.

- [0188] 본 발명의 고분자 화합물의 제조 방법에 있어서는, 단량체를 필요에 따라서 유기 용매에 용해하고, 예를 들면 알칼리나 적당한 촉매를 이용하여 유기 용매의 용점 이상 비점 이하에서 반응시킬 수 있다. 이러한 반응 방법 으로서는, 예를 들면 문헌["오르가닉 리액션즈(Organic Reactions)", 제14권, 270-490 페이지], 문헌[존 와일리 앤드 선즈(John Wiley&Sons, Inc.), 1965년], 문헌["오르가닉 리액션즈(Organic Reactions)", 제27권, 345-390 페이지], 문헌[존 와일리 앤드 선즈(John Wiley&Sons, Inc.), 1982년], 문헌["오르가닉 신세스(Organic Syntheses)", 문헌[콜렉티브 제6권(Collective Volume VI), 407-411 페이지], 문헌[존 와일리 앤드 선즈(John Wiley&Sons, Inc.), 1988년], 문헌[케미컬 리뷰(Chem.Rev.), 제95권, 2457 페이지(1995년)], 문헌[저널 오브 오르가노메탈릭 케미스트리(J. Organomet. Chem.), 제576권, 147 페이지(1999년)], 문헌[저널 오브 프랙티컬 케미스트리(J. Prakt. Chem.), 제336권, 247 페이지(1994년)], 문헌[매크로몰레큘러 케미스트리 매크로몰레큘러 심포지움(Makromol. Chem., Macromol. Symp.), 제12권, 229페이지(1987년)]에 기재된 공지된 방법을 사용할 수 있다.
- [0189] 유기 용매로서는 이용하는 화합물이나 반응에 따라서도 다르지만, 일반적으로 부반응을 억제하기 위해서, 이용하는 용매는 충분히 탈산소 처리를 실시하여 불활성 분위기화에서 반응을 진행시키는 것이 바람직하다. 또한, 동일하게 탈수 처리를 행하는 것이 바람직하다.(단, 스즈키 커플링 반응과 같은 물과의 2상계에서의 반응의 경우에는 이로 한정되는 것은 아님)
- [0190] 반응시키기 위해서 적절하게 알칼리나 적당한 촉매를 첨가한다. 이들은 이용하는 반응에 따라서 선택할 수 있다. 여기서, 알칼리 또는 촉매는 반응에 이용하는 용매에 충분히 용해하는 것이 바람직하다. 알칼리 또는 촉매를 혼합하는 방법 으로서는 반응액을 아르곤이나 질소 등의 불활성 분위기하에서 교반하면서 천천히 알칼리 또는 촉매의 용액을 첨가하거나, 반대로 알칼리 또는 촉매의 용액에 반응액을 천천히 첨가하는 방법이 예시된다.
- [0191] 본 발명의 고분자 화합물을 유기 전계발광 소자의 발광 재료로서 이용하는 경우, 그의 순도가 발광 특성에 영향을 주기 때문에, 중합 전의 단량체를 증류, 승화 정제, 재결정 등의 방법으로 정제한 후에 중합하는 것이 바람직하고, 또한 합성 후, 재침전 정제, 크로마토그래피에 의한 분별 등의 순화 처리를 하는 것이 바람직하다.
- [0192] 본 발명의 고분자 화합물의 제조 방법에 있어서, 각각의 단량체는 일괄 혼합하여 반응시킬 수도 있고, 필요에 따라서 분할하여 혼합할 수도 있다.
- [0193] 본 발명의 고분자 화합물의 제조 방법에 있어서, 반응 조건에 대해서 설명하면 비티히 반응, 호너 반응, 크너베나겔 반응 등의 경우에는 단량체의 관능기에 대하여 당량 이상, 바람직하게는 1 내지 3 당량의 알칼리를 이용하여 반응시킨다. 알칼리로서는 특별히 한정되지 않지만, 예를 들면 칼륨-t-부톡시드, 나트륨-t-부톡시드, 나트륨에틸레이트, 리튬메틸레이트 등의 금속 알코올레이트; 수소화나트륨 등의 하이드라이드 시약; 나트륨아미드 등의 아미드류를 사용할 수 있다. 용매로서는 N,N-디메틸포름아미드, 테트라히드로푸란, 디옥산, 톨루엔 등이 이용된다. 반응의 온도는 통상은 실온으로부터 150 ℃ 정도에서 반응을 진행시킬 수 있다. 반응 시간은, 예를 들면 5분간 내지 40시간이지만, 충분히 중합이 진행되는 시간이면 되고, 또한 반응이 종료한 후에 장시간 방치할 필요는 없기 때문에, 바람직하게는 10분간 내지 24시간이다. 반응할 때의 농도는 너무 열으면 반응의 효율이 나쁘고, 너무 진하면 반응의 제어가 어려워지기 때문에, 약 0.01 중량% 내지 용해하는 최대 농도의 범위에서 적절하게 선택할 수 있고, 통상적으로는 0.1 중량% 내지 20 중량%의 범위이다. 헥스 반응의 경우에는 팔라듐 촉매를 이용하여 트리에틸아민 등의 염기의 존재하에서 단량체를 반응시킨다. N,N-디메틸포름아미드나 N-메틸피롤리돈 등의 비교적 비점이 높은 용매를 이용하고, 반응 온도는 80 내지 160 ℃ 정도, 반응 시간은 1시간 내지 100시간 정도이다.
- [0194] 스즈키 커플링 반응의 경우에는 촉매로서, 예를 들면 팔라듐[테트라키스(트리페닐포스핀)], 팔라듐아세테이트류 등을 이용하여 탄산칼륨, 탄산나트륨, 수산화바륨 등의 무기 염기, 트리에틸아민 등의 유기 염기, 불화세슘 등의 무기염을 단량체에 대하여 당량 이상, 바람직하게는 1 내지 10 당량 가하여 반응시킨다. 무기 염을 수용액 으로서 2상계에서 반응시킬 수도 있다. 용매로서는 N,N-디메틸포름아미드, 톨루엔, 디메톡시에탄, 테트라히드로푸란 등을 들 수 있다. 용매에 따라 다르지만 50 내지 160 ℃ 정도의 온도가 바람직하게 이용된다. 용매의 비점 가까이까지 승온하여 환류시킬 수도 있다. 반응 시간은 1시간 내지 200시간 정도이다. 또한, -B(OH)₂ 및 불산 에스테르로 이루어지는 군에서 선택되는 기를 2개 갖는 단량체와 할로젠 원자, 알킬술포네이트기, 아릴술

포네이트기 및 아릴알킬술포네이트기로 이루어지는 군에서 선택되는 기를 2개 갖는 단량체를 중합하는 경우, 중합이 정지된 후 단량체를 첨가함으로써 분자량을 올릴 수 있어서 분자량의 제어가 용이하다. 분자량은 이하의 식으로부터 예측할 수 있고, 이 식으로부터 목적의 분자량으로 제조하기 위해서 가하는 단량체량을 구할 수 있다.

- [0195] $Mn = Fw * Pn$
- [0196] Mn: 수 평균 분자량
- [0197] Fw: 반복 단위의 평균 분자량
- [0198] Pn: 평균 중합도
- [0199] $Pn = 1 / (1 - p + a)$
- [0200] p: (반응한 손의 수) / (반응 전에 존재한 손의 총 수)
- [0201] a: 실험에 기초하는 보정값

[0202] 그리냐르 반응의 경우에는, 테트라히드로푸란, 디에틸에테르, 디메톡시에탄 등의 에테르계 용매 중에서 할로겐 화물과 금속 Mg를 반응시켜 그리냐르 시약 용액으로 하고, 이것과 별도로 준비한 단량체 용액을 혼합하여 니켈 촉매 또는 팔라듐 촉매를 과잉 반응에 주의하면서 첨가한 후에 승온하여 환류시키면서 반응시키는 방법이 예시된다. 그리냐르 시약은 단량체에 대하여 당량 이상, 바람직하게는 1 내지 1.5 당량, 보다 바람직하게는 1 내지 1.2 당량 이용한다. 이들 이외의 방법으로 중합하는 경우도 공지된 방법에 따라서 반응시킬 수 있다.

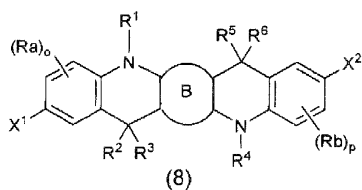
[0203] 니켈 촉매의 존재하 반응시키는 예로서는, 예를 들면 상술한 니켈(0) 촉매에 의해 중합하는 방법을 들 수 있다. 니켈 촉매로서는, 예를 들면 에틸렌비스(트리페닐포스핀)니켈 착체, 테트라키스(트리페닐포스핀)니켈 착체, 비스(시클로옥타디에닐)니켈 착체를 들 수 있다.

[0204] 팔라듐 촉매의 존재하 반응시키는 예로서는, 상기 스크키 커플링 반응을 들 수 있다. 팔라듐 촉매로서는, 예를 들면 아세트산팔라듐, 팔라듐[테트라키스(트리페닐포스핀)] 착체, 비스(트리시클로헥실포스핀)팔라듐 착체, 디클로로비스(트리페닐포스핀)팔라듐 착체 등을 들 수 있다.

[0205] 이상 설명한 바와 같은 화학식 (7)로 표시되는 화합물은 본 발명의 화합물(특히 고분자 화합물)을 중합하기 위한 원료로서 유용하다.

[0206] 본 발명은 유기 트랜지스터나 유기 전계발광 소자 등의 광전 재료나 이들의 광전 재료의 중간체로서 유용한 하기 화학식 (8) 내지 (10)으로 표시되는 화합물 및 그의 합성법을 제공하는 것이다.

[0207] 이러한 화학식 (7)로 표시되는 화합물 중에서도, 합성의 용이함 측면에서 하기 화학식 (8)로 표시되는 화합물이 바람직하다.

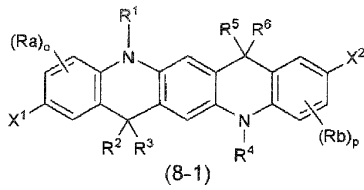


[0208]

[0209] 화학식 (8)에 있어서, B환은 단환의 방향환 또는 축합한 방향환을 나타내고, R¹ 및 R⁴는 각각 독립적으로 1가의 기를 나타내고, R², R³, R⁵ 및 R⁶은 각각 독립적으로 수소 원자, 알킬기, 아릴기, 아릴알킬기, 알케닐기 또는 알키닐기를 나타내고, X¹, X²는 각각 독립적으로 중합에 관여할 수 있는 치환기를 나타낸다. Ra 및 Rb는 각각 독립적으로 알킬기, 알킬옥시기, 아릴기, 아릴옥시기, 아릴알킬기, 아릴알킬옥시기, 2치환 아미노기, 3치환 실릴기, 아실기, 아실옥시기, 치환 카르복실기, 1가의 복소환기 또는 헤테로아릴옥시기를 나타낸다. o 및 p는 각각 독립적으로 0 내지 3의 정수를 나타낸다. o가 2 또는 3인 경우, 복수인 Ra는 동일하거나 상이할 수 있다. p가 2 또는 3인 경우, 복수인 Rb는 동일하거나 상이할 수 있다. 또한, B환, R¹, R², R³, R⁴, R⁵, R⁶, X¹ 및 X²로서는 각각 상술한 대로의 것을 들 수 있다. Ra 및 Rb에서의 알킬기, 알킬옥시기, 아릴기, 아릴옥시기, 아릴알킬기, 아릴알킬옥시기, 2치환 아미노기, 3치환 실릴기, 아실기, 아실옥시기, 치환 카르복실기, 1가의 복소환기 및 헤테로아릴옥시기, 2치환 아미노기, 3치환 실릴기, 아실기, 아실옥시기, 치환 카르복실기, 1가의 복소환기 및 헤테로아릴옥시기를 나타낸다.

테로아릴옥시기로서는, A환, B환 및 C환이 가질 수도 있는 치환기로 예시한 기와 동일한 것을 들 수 있다. 또한, 화합물의 합성의 용이함 측면에서 o 및 p가 0인 경우가 바람직하다.

[0210] 더욱 바람직하게는 하기 화학식 (8-1)로 표시되는 화합물이다.

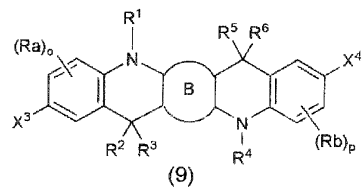


[0211]

[0212] 화학식 (8-1)에 있어서, R¹ 및 R⁴는 각각 독립적으로 1가의 기를 나타내고, R², R³, R⁵ 및 R⁶은 각각 독립적으로 수소 원자, 알킬기, 아릴기, 아릴알킬기, 알케닐기 또는 알키닐기를 나타내고, X¹, X²는 각각 독립적으로 중합에 관여할 수 있는 치환기를 나타낸다. Ra 및 Rb는 각각 독립적으로 알킬기, 알킬옥시기, 아릴기, 아릴옥시기, 아릴알킬기, 아릴알킬옥시기, 2치환 아미노기, 3치환 실릴기, 아실기, 아실옥시기, 치환 카르복실기, 1가의 복소환기 또는 헤테로아릴옥시기를 나타낸다. o 및 p는 각각 독립적으로 0 내지 3의 정수를 나타낸다. o가 2 또는 3인 경우, 복수인 Ra는 동일하거나 상이할 수 있다. p가 2 또는 3인 경우, 복수인 Rb는 동일하거나 상이할 수 있다. 또한, R¹, R², R³, R⁴, R⁵, R⁶, Ra, Rb, X¹, X², o 및 p로서는 각각 상술한 대로의 것을 들 수 있다.

[0213] 그 중에서도 (i) 팔라듐 촉매와 염기의 존재하, 봉산 잔기 또는 봉산 에스테르잔기와 할로젠 원자, 알킬술포네이트기, 아릴술포네이트기 또는 아릴알킬술포네이트기를 이용한 스즈끼 커플링을 이용하는 방법; (ii) 니켈(0) 촉매 존재하, 할로젠 원자, 알킬술포네이트기, 아릴술포네이트기 또는 아릴알킬술포네이트기를 커플링시키는 야마모토(Yamamoto) 중합을 이용하는 방법; (iii) 팔라듐 촉매의 존재하, 스타닐기와 할로젠 원자, 알킬술포네이트기, 아릴술포네이트기 또는 아릴알킬술포네이트기를 이용한 스틸 커플링을 이용하는 방법; 또는 (iv) 니켈 촉매의 존재하, 할로젠화마그네슘과 할로젠 원자, 알킬술포네이트기, 아릴술포네이트기 또는 아릴알킬술포네이트기를 커플링시키는 그리나르 커플링법은 반응 수율이 높기 때문에, 높은 분자량의 고분자 화합물을 얻는 것이 용이하고, 또한 공중합을 행한 경우, 단량체 투입비대로의 공중합체를 얻는 것이 가능한 것 등, 반응의 제어가능하다는 점에서 바람직하다. 이들 방법 중에서도 시약의 안전성 측면에서, 스즈끼 중합법 및 야마모토 중합법이 보다 바람직하다. 또한, 반응성 측면에서, 중합에 관여할 수 있는 치환기(중합 활성기)인 할로젠 원자, 알킬술포네이트기, 아릴술포네이트기 또는 아릴알킬술포네이트기 중에서도 염소 원자, 브롬 원자, 요오드 원자가 바람직하고, 브롬 원자가 특히 바람직하다.

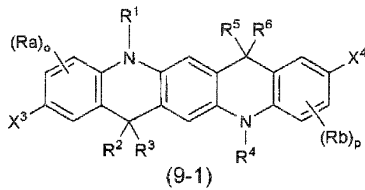
[0214] 상기 화학식 (8)로 표시되는 화합물은 하기 화학식 (9)로 표시되는 화합물로부터 X³ 및 X⁴를 관능기 변환함으로써 합성할 수 있다.



[0215]

[0216] 화학식 (9)에 있어서, B환은 단환의 방향환 또는 축합한 방향환을 나타내고, R¹ 및 R⁴는 각각 독립적으로 1가의 기를 나타내고, R², R³, R⁵ 및 R⁶은 각각 독립적으로 수소 원자, 알킬기, 아릴기, 아릴알킬기, 알케닐기 또는 알키닐기를 나타내고, X³, X⁴는 각각 독립적으로 염소 원자, 브롬 원자 또는 요오드 원자를 나타낸다. Ra 및 Rb는 각각 독립적으로 알킬기, 알킬옥시기, 아릴기, 아릴옥시기, 아릴알킬기, 아릴알킬옥시기, 2치환 아미노기, 3치환 실릴기, 아실기, 아실옥시기, 치환 카르복실기, 1가의 복소환기 또는 헤테로아릴옥시기를 나타낸다. o 및 p는 각각 독립적으로 0 내지 3의 정수를 나타낸다. o가 2 또는 3인 경우, 복수인 Ra는 동일하거나 상이할 수 있다. p가 2 또는 3인 경우, 복수인 Rb는 동일하거나 상이할 수 있다. 또한, B환, R¹, R², R³, R⁴, R⁵, R⁶, Ra 및 Rb로서는 각각 상술한 대로의 것을 들 수 있다. 또한, 화합물의 합성의 용이함 측면에서, o 및 p가 0인 경우가 바람직하다.

[0217] 더욱 바람직하게는 하기 화학식 (9-1)로 표시되는 화합물이다.



[0218]

[0219] 화학식 (9-1)에 있어서, R¹ 및 R⁴는 각각 독립적으로 1가의 기를 나타내고, R², R³, R⁵ 및 R⁶은 각각 독립적으로 수소 원자, 알킬기, 아릴기, 아릴알킬기, 알케닐기 또는 알키닐기를 나타내고, X³, X⁴는 각각 독립적으로 염소 원자, 브롬 원자 또는 요오드 원자를 나타낸다. Ra 및 Rb는 각각 독립적으로 알킬기, 알킬옥시기, 아릴기, 아릴옥시기, 아릴알킬기, 아릴알킬옥시기, 2치환 아미노기, 3치환 실릴기, 아실기, 아실옥시기, 치환 카르복실기, 1가의 복소환기 또는 헤테로아릴옥시기를 나타낸다. o 및 p는 각각 독립적으로 0 내지 3의 정수를 나타낸다. o가 2 또는 3인 경우, 복수인 Ra는 동일하거나 상이할 수 있다. p가 2 또는 3인 경우, 복수인 Rb는 동일하거나 상이할 수 있다. 또한, R¹, R², R³, R⁴, R⁵, R⁶, Ra, Rb, X³, X⁴, o 및 p로서는 각각 상술한 대로의 것을 들 수 있다.

[0220] 상기 화학식 (8)에 있어서의 X¹ 및/또는 X²가 봉산 에스테르 잔기인 것은 X³ 및/또는 X⁴를 그리냐르 시약 또는 리튬으로 대체한 후에 봉산 에스테르를 반응시킴으로써 합성할 수 있다. 이러한 봉산 에스테르로서는 트리메틸 봉산, 트리이소프로필봉산, 2-이소프로폭시-4,4,5,5-테트라메틸-1,3,2-디옥사보롤란 등을 들 수 있다. 또한, 문헌[J. Org. Chem., 60(23), 7508(1995)]에 기재된 바와 같이 팔라듐 촉매와 염기의 존재하, 디보레이트와 반응시킴으로써 합성할 수도 있다. 이 디보레이트로서는 비스(피나콜레이트)디보란, 비스(카테콜레이트)디보란, 비스(네오펜틸글리콜레이트)디보란, 비스(트리메틸렌글리콜레이트)디보란 등을 들 수 있다.

[0221] 또한, 상기 화학식 (8)에 있어서의 X¹ 및/또는 X²가 -B(OH)₂인 것은 상기 봉산에스테르를 산 또는 염기의 존재하에 가수분해하는 방법으로 합성할 수 있다.

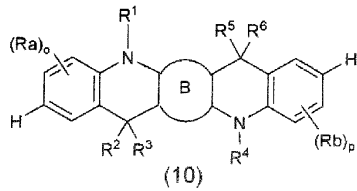
[0222] 또한, 상기 화학식 (8)에 있어서의 X¹ 및/또는 X²가 할로젠화마그네슘인 것은 마그네슘의 존재하에서 합성할 수 있다.

[0223] 또한, 상기 화학식 (8)에 있어서의 X¹ 및/또는 X²가 할로젠화마그네슘인 것은, X³ 및/또는 X⁴를 그리냐르 시약 또는 리튬으로 대체한 후에 트리알킬염화주석과 반응시킴으로써 합성할 수 있다. 이 트리알킬염화주석으로서는 트리메틸염화주석, 트리-n-부틸염화주석 등을 들 수 있다.

[0224] 또한, 상기 화학식 (8)에 있어서의 X¹ 및/또는 X²가 알킬술포네이트기, 아릴술포네이트기 또는 아릴알킬술포네이트기인 것은, X³ 및/또는 X⁴를 수산기로 변환한 후에 염기의 존재하, 대응하는 술포산 무수물 또는 염화술포닐을 반응시킴으로써 합성할 수 있다. 이 술포산 무수물로서는 메탄술포산 무수물, 트리플루오로메탄술포산 무수물, 벤젠술포산 무수물 등을 들 수 있다. 또한, 이 염화술포닐로서는 염화메탄술포닐, 염화트리플루오로메탄술포닐, 염화벤젠술포닐 등을 들 수 있다.

[0225] 또한, 상기 화학식 (9)에 있어서의 X³ 및/또는 X⁴를 수산기로 변환하는 방법으로서, 상기한 바와 같이 하여 얻어지는 X¹ 및/또는 X²가 -B(OH)₂인 화합물을 과산화물로 산화함으로써 합성할 수 있다. 이 과산화물로서는 과산화수소, m-클로로벤젠과벤조산, t-부틸히드로퍼옥사이드 등을 들 수 있다.

[0226] 상기 화학식 (9)로 표시되는 화합물은, 할로젠화제의 존재하에서 하기 화학식 (10)으로 표시되는 화합물로부터 할로젠화 반응에 의해 합성할 수 있다. 적당한 반응 조건을 선택함으로써 매우 선택성 좋게 상기 화학식 (9)로 표시되는 화합물을 합성할 수 있다.

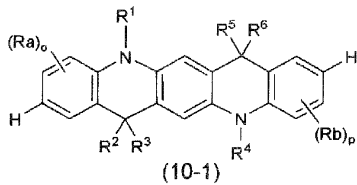


[0227]

[0228] 화학식 (10)에 있어서, B환은 단환의 방향환 또는 축합한 방향환을 나타내고, R¹ 및 R⁴는 각각 독립적으로 1가의 기를 나타내고, R², R³, R⁵ 및 R⁶은 각각 독립적으로 수소 원자, 알킬기, 아릴기, 아릴알킬기, 알케닐기 또는 알키닐기를 나타낸다. Ra 및 Rb는 각각 독립적으로 알킬기, 알킬옥시기, 아릴기, 아릴옥시기, 아릴알킬기, 아릴알킬옥시기, 2치환 아미노기, 3치환 실릴기, 아실기, 아실옥시기, 치환 카르복실기, 1가의 복소환기 또는 헤테로아릴옥시기를 나타낸다. o 및 p는 각각 독립적으로 0 내지 3의 정수를 나타낸다. o가 2 또는 3인 경우, 복수인 Ra는 동일하거나 상이할 수 있다. p가 2 또는 3인 경우, 복수인 Rb는 동일하거나 상이할 수 있다. 또한, B환, R¹, R², R³, R⁴, R⁵, R⁶, Ra 및 Rb로서는 각각 상술한 대로의 것을 들 수 있다. 또한, 화합물의 합성의 용이함 측면에서, o 및 p가 0의 경우가 바람직하다.

[0229]

더욱 바람직하게는 하기 화학식 (10-1)로 표시되는 화합물이다.



[0230]

[0231] 화학식 (10-1)에 있어서, R¹ 및 R⁴는 각각 독립적으로 1가의 기를 나타내고, R², R³, R⁵ 및 R⁶은 각각 독립적으로 수소 원자, 알킬기, 아릴기, 아릴알킬기, 알케닐기 또는 알키닐기를 나타내고, Ra 및 Rb는 각각 독립적으로 알킬기, 알킬옥시기, 아릴기, 아릴옥시기, 아릴알킬기, 아릴알킬옥시기, 2치환 아미노기, 3치환 실릴기, 아실기, 아실옥시기, 치환 카르복실기, 1가의 복소환기 또는 헤테로아릴옥시기를 나타낸다. o 및 p는 각각 독립적으로 0 내지 3의 정수를 나타낸다. o가 2 또는 3인 경우, 복수인 Ra는 동일하거나 상이할 수 있다. p가 2 또는 3인 경우, 복수인 Rb는 동일하거나 상이할 수 있다. 또한, R¹, R², R³, R⁴, R⁵, R⁶, Ra, Rb, o 및 p로서는 각각 상술한 대로의 것을 들 수 있다.

[0232]

여기서 할로겐화제로서는, 예를 들면 N-클로로숙신이미드, N-클로로프탈산이미드, N-클로로디에틸아민, N-클로로디부틸아민, N-클로로시클로로헥실아민, N-브로모숙신이미드, N-브로모프탈산이미드, N-브로모디트리플루오로메틸아민, N-요오드숙신이미드, N-요오드프탈산이미드 등의 N-할로게노 화합물; 불소, 염소, 브롬 등의 할로겐 원소; 벤질트리메틸암모늄트리브로마이드를 들 수 있다. 이들 중에서도, N-할로게노 화합물이 바람직하다.

[0233]

반응에 이용되는 용매로서는, 예를 들면 헥산, 헵탄, 옥탄, 시클로헥산 등의 포화 탄화수소; 벤젠, 톨루엔, 에틸벤젠, 크실렌 등의 불포화 탄화수소; 사염화탄소, 클로로포름, 디클로로메탄, 클로로부탄, 브로모부탄, 클로로펜탄, 브로모펜탄, 클로로헥산, 브로모헥산, 클로로시클로헥산, 브로모시클로헥산 등의 할로겐화포화 탄화수소; 클로로벤젠, 디클로로벤젠, 트리클로로벤젠 등의 할로겐화 불포화 탄화수소; 메탄올, 에탄올, 프로판올, 이소프로판올, 부탄올, t-부틸알코올 등의 알코올류; 포름산, 아세트산, 프로피온산 등의 카르복실산류; 디메틸에테르, 디에틸에테르, 메틸-t-부틸에테르, 테트라히드로푸란, 테트라히드로피란, 디옥산 등의 에테르류; 트리메틸아민, 트리에틸아민, N,N,N',N'-테트라메틸에틸렌디아민, 피리딘 등의 아민류; N,N-디메틸포름아미드, N,N-디메틸아세트아미드, N,N-디에틸아세트아미드, N-메틸모르폴린옥사이드, N-메틸-2-피롤리돈 등의 아미드류를 들 수 있다. 이들 용매는 1종을 단독으로 또는 2종 이상을 조합하여 사용할 수 있다.

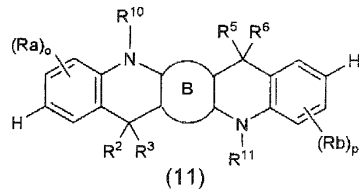
[0234]

반응의 온도는 -100 °C 내지 용매의 비점 정도이고, 바람직하게는 -20 °C 내지 50 °C이다.

[0235]

상기 화학식 (10)으로 표시되는 화합물은, 염기의 존재하에서 하기 화학식 (11)로 표시되는 화합물로부터 질소 원자 상의 치환 반응에 의해 제조할 수 있다. 예를 들면, R¹ 및/또는 R⁴가 알킬기의 경우, 염기의 존재하 할로겐화알킬로의 친핵 치환 반응에서 제조할 수 있다. 또한, R¹ 및/또는 R⁴가 방향족기(즉, 아릴기, 1가의 방향족

복소환기이며, 이하 동일함)의 경우, 구리 촉매와 염기의 존재하, 방향족 요오드화물과 반응시키는 울만(Ullmann) 커플링 조건으로 제조할 수 있다. 또한, 문헌[Angewandte Chemie, International Edition in English, (1995), 34(12), 1348] 기재와 같이 팔라듐 촉매와 염기와 할로젠화 방향족 화합물을 반응시킴으로써 제조할 수 있다.



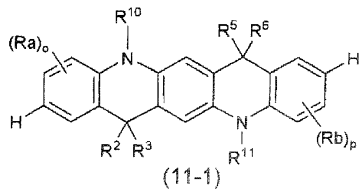
[0236]

[0237]

화학식 (11)에 있어서, B환은 단환의 방향환 또는 축합한 방향환을 나타내고, R^2 , R^3 , R^5 및 R^6 은 각각 독립적으로 수소 원자, 알킬기, 아릴기, 아릴알킬기, 알케닐기 또는 알키닐기를 나타내고, R^{10} 및 R^{11} 은 각각 독립적으로 수소 원자 또는 1가의 기를 나타낸다. 또한, R^{10} 및 R^{11} 중의 적어도 한쪽은 수소 원자이다. Ra 및 Rb는 각각 독립적으로 알킬기, 알킬옥시기, 아릴기, 아릴옥시기, 아릴알킬기, 아릴알킬옥시기, 2치환 아미노기, 3치환 실릴기, 아실기, 아실옥시기, 치환 카르복실기, 1가의 복소환기 또는 헤테로아릴옥시기를 나타낸다. o 및 p는 각각 독립적으로 0 내지 3의 정수를 나타낸다. o가 2 또는 3인 경우, 복수인 Ra는 동일하거나 상이할 수 있다. p가 2 또는 3인 경우, 복수인 Rb는 동일하거나 상이할 수 있다. 또한, R^2 , R^3 , R^5 , R^6 , Ra 및 Rb로서는 각각 상술한 대로의 것을 들 수 있다. 또한, 화합물의 합성의 용이함 측면에서, o 및 p가 0의 경우가 바람직하다.

[0238]

더욱 바람직하게는 하기 화학식 (11-1)로 표시되는 화합물이다.



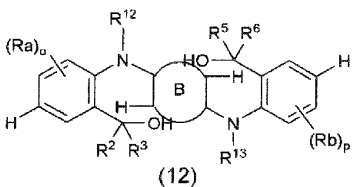
[0239]

[0240]

화학식 (11-1)에 있어서, R^2 , R^3 , R^5 및 R^6 은 각각 독립적으로 수소 원자, 알킬기, 아릴기, 아릴알킬기, 알케닐기 또는 알키닐기를 나타내고, R^{10} 및 R^{11} 은 각각 독립적으로 수소 원자 또는 1가의 기를 나타낸다. Ra 및 Rb는 각각 독립적으로 알킬기, 알킬옥시기, 아릴기, 아릴옥시기, 아릴알킬기, 아릴알킬옥시기, 2치환 아미노기, 3치환 실릴기, 아실기, 아실옥시기, 치환 카르복실기, 1가의 복소환기 또는 헤테로아릴옥시기를 나타낸다. o 및 p는 각각 독립적으로 0 내지 3의 정수를 나타낸다. o가 2 또는 3인 경우, 복수인 Ra는 동일하거나 상이할 수 있다. p가 2 또는 3인 경우, 복수인 Rb는 동일하거나 상이할 수 있다. 또한, R^2 , R^3 , R^5 , R^6 , R^{10} , R^{11} , Ra, Rb, o 및 p로서는 각각 상술한 대로의 것을 들 수 있다.

[0241]

상기 화학식 (10) 또는 (11)로 표시되는 화합물은, 산의 존재하에서 하기 화학식 (12)로 표시되는 화합물로부터 환화 반응에 의해 제조할 수 있다.



[0242]

[0243]

화학식 (12)에 있어서, B환은 단환의 방향환 또는 축합한 방향환을 나타내고, R^2 , R^3 , R^5 및 R^6 은 각각 독립적으로 수소 원자, 알킬기, 아릴기, 아릴알킬기, 알케닐기 또는 알키닐기를 나타내고, R^{12} 및 R^{13} 은 각각 독립적으로 수소 원자 또는 1가의 기를 나타낸다. Ra 및 Rb는 각각 독립적으로 알킬기, 알킬옥시기, 아릴기, 아릴옥시기, 아릴알킬기, 아릴알킬옥시기, 2치환 아미노기, 3치환 실릴기, 아실기, 아실옥시기, 치환 카르복실기, 1가의 복소환기 또는 헤테로아릴옥시기를 나타낸다. o 및 p는 각각 독립적으로 0 내지 3의 정수를 나타낸다. o가 2 또

는 3인 경우, 복수인 Ra는 동일하거나 상이할 수 있다. p가 2 또는 3인 경우, 복수인 Rb는 동일하거나 상이할 수 있다. 또한, B환, R², R³, R⁵, R⁶, Ra 및 Rb로서는 각각 상술한 대로의 것을 들 수 있다. 또한, 화합물의 합성의 용이함 측면에서, o 및 p가 0의 경우가 바람직하다.

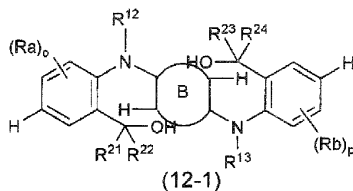
[0244] 이러한 산으로서의 양성자산일 수도 있고, 루이스산일 수도 있다. 양성자산으로서, 예를 들면 메탄술폰산, 트리플루오로메탄술폰산, p-톨루엔술폰산 등의 술폰산류, 포름산, 아세트산, 트리플루오로아세트산, 프로피온산 등의 카르복실산류; 황산, 염산, 질산, 인산 등의 무기산을 들 수 있다. 이들 양성자산 중에서도 염산, 황산, 질산 등의 강 무기산이 바람직하다. 또한, 루이스산으로서, 예를 들면 3브롬화붕소, 3염화붕소, 3불화붕소에 테르 착체 등 할로겐화 붕소화물; 염화알루미늄, 염화티탄, 염화망간, 염화철, 염화코발트, 염화구리, 염화아연, 브롬화알루미늄, 브롬화티탄, 브롬화망간, 브롬화철, 브롬화코발트, 브롬화구리, 브롬화아연 등의 할로겐화 금속을 들 수 있다. 이들 루이스산 중에서도, 트리페닐메틸테트라플루오로보레이트가 바람직하다. 이들 루이스산은 1종을 단독으로 또는 2종 이상을 조합하여 사용할 수 있다.

[0245] 반응의 매체로서는 상기한 산을 이용할 수도 있지만, 그것 이외의 용매를 사용할 수도 있다. 이용하는 용매로서는, 예를 들면 펜탄, 헥산, 헵탄, 옥탄, 시클로헥산 등의 포화 탄화수소; 사염화탄소, 클로로포름, 디클로로메탄, 클로로부탄, 브로모부탄, 클로로펜탄, 브로모펜탄, 클로로헥산, 브로모헥산, 클로로시클로헥산, 브로모시클로헥산 등의 할로겐화 포화 탄화수소; 클로로벤젠, 디클로로벤젠, 트리클로로벤젠 등의 할로겐화 불포화 탄화수소; 니트로메탄, 니트로벤젠 등의 니트로화 화합물을 들 수 있다. 이들 용매는 1종을 단독으로 또는 2종 이상을 조합하여 사용할 수 있다.

[0246] 반응 온도로서는 -50 °C 내지 용매의 비점 정도이고, 바람직하게는 0 내지 100 °C이다.

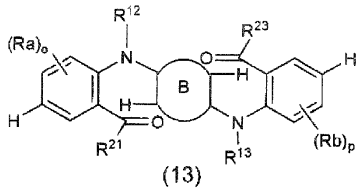
[0247] 또한, 상기 화학식 (10)에서 R¹² 및 R¹³ 중 적어도 한쪽이 방향족기인 경우, 부반응에서 수율이 나빠지기 때문에, R¹² 및/또는 R¹³이 수소 원자의 화합물을 이용하여 상기 화학식 (11)로 표시되는 화합물을 제조하고, 그 후에 질소 원자 상을 방향족기로 변환하는 방법이 바람직하다.

[0248] 상기 화학식 (12)로 표시되는 화합물 중, 합성의 용이함 측면에서 하기 화학식 (12-1)로 표시되는 경우가 바람직하다.



[0249] 화학식 (12-1)에 있어서, B환은 단환의 방향환 또는 축합한 방향환을 나타내고, R¹² 및 R¹³은 각각 독립적으로 수소 원자 또는 1가의 기를 나타낸다. R²¹, R²², R²³ 및 R²⁴는 각각 독립적으로 수소 원자, 알킬기, 아릴기, 아릴알킬기, 알케닐기 또는 알키닐기를 나타내고, R²¹, R²², R²³ 및 R²⁴ 중의 적어도 하나는 아릴기를 나타낸다. Ra 및 Rb는 각각 독립적으로 알킬기, 알킬옥시기, 아릴기, 아릴옥시기, 아릴알킬기, 아릴알킬옥시기, 2치환 아미노기, 3치환 실릴기, 아실기, 아실옥시기, 치환 카르복실기, 1가의 복소환기 또는 헤테로아릴옥시기를 나타낸다. o 및 p는 각각 독립적으로 0 내지 3의 정수를 나타낸다. o가 2 또는 3인 경우, 복수인 Ra는 동일하거나 상이할 수 있다. p가 2 또는 3인 경우, 복수인 Rb는 동일하거나 상이할 수 있다. 또한, B환, R¹², R¹³, Ra, Rb, o 및 p로서는 각각 상술한 대로의 것을 들 수 있다. R²¹, R²², R²³ 및 R²⁴에 있어서의 알킬기, 아릴기, 아릴알킬기, 알케닐기 또는 알키닐기로서는, R², R³, R⁵ 및 R⁶에 예시된 기와 동일한 것을 들 수 있다.

[0251] 상기 화학식 (12-1)로 표시되는 화합물은 화학식: R¹⁴-M(식 중, R¹⁴는 알킬기, 아릴기, 아릴알킬기, 알케닐기 또는 알키닐기를 나타내고, M은 리튬 또는 할로겐화마그네슘을 나타냄)으로 표시되는 화합물의 하기 화학식 (13)으로 표시되는 화합물로의 친핵 반응에 의해 제조할 수 있다.



[0252]

[0253]

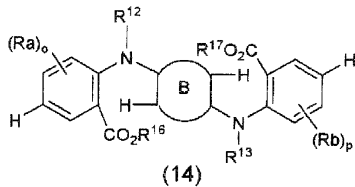
화학식 (13)에 있어서, B환은 단환의 방향환 또는 축합한 방향환을 나타내고, R²¹ 및 R²³은 각각 독립적으로 수소 원자, 알킬기, 아릴기, 아릴알킬기, 알케닐기 또는 알키닐기를 나타내고, R¹² 및 R¹³은 각각 독립적으로 수소 원자 또는 1가의 기를 나타낸다. Ra 및 Rb는 각각 독립적으로 알킬기, 알킬옥시기, 아릴기, 아릴옥시기, 아릴알킬기, 아릴알킬옥시기, 2치환 아미노기, 3치환 실릴기, 아실기, 아실옥시기, 치환 카르복실기, 1가의 복소환기 또는 헤테로아릴옥시기를 나타낸다. o 및 p는 각각 독립적으로 0 내지 3의 정수를 나타낸다. R²¹, R²³ 및 R¹⁴ 중의 적어도 하나는 아릴기를 나타낸다. o가 2 또는 3인 경우, 복수인 Ra는 동일하거나 상이할 수 있다. p가 2 또는 3인 경우, 복수인 Rb는 동일하거나 상이할 수 있다. 또한, B환, R¹², R¹³, Ra 및 Rb로서는 각각 상술한 대로의 것을 들 수 있다. 또한, R¹⁴로 표시되는 알킬기로서는 R², R³, R⁵ 및 R⁶으로 표시되는 기로서 예시한 기와 동일한 것을 들 수 있다. R¹⁴로 표시되는 아릴기, 아릴알킬기, 알케닐기 또는 알키닐기로서는 A환, B환 및 C환이 가질 수도 있는 치환기로 예시한 기와 동일한 것을 들 수 있다. 또한, 화합물의 합성의 용이함 측면에서, o 및 p가 0의 경우가 바람직하다.

[0254]

이용하는 화학식: R¹⁴-M으로 표시되는 화합물의 당량은, 상기 화학식 (13)에 있어서의 R¹² 및 R¹³이 모두 수소 원자의 경우 4당량 이상인 것이 바람직하다. 또한, R¹², R¹³ 중의 어느 한쪽이 수소 원자의 경우, 3당량 이상인 것이 바람직하다. 또한, R¹² 및 R¹³이 모두 수소 원자가 아닌 경우, 2당량 이상인 것이 바람직하다.

[0255]

또한, 상기 화학식 (12-1)로 표시되는 화합물은, 화학식: R¹⁵-M(식 중, R¹⁵는 알킬기, 아릴기, 아릴알킬기, 알케닐기 또는 알키닐기를 나타내고, M은 리튬 또는 할로젠화마그네슘을 나타냄)으로 표시되는 화합물의 하기 화학식 (14)로 표시되는 화합물로의 친핵 반응에 의해 제조할 수 있다.



[0256]

[0257]

화학식 (14)에 있어서, B환은 단환의 방향환 또는 축합한 방향환을 나타내고, R¹² 및 R¹³은 각각 독립적으로 수소 원자 또는 1가의 기를 나타내고, R¹⁶ 및 R¹⁷은 각각 독립적으로 알킬기, 아릴기 또는 아릴알킬기를 나타낸다. Ra 및 Rb는 각각 독립적으로 알킬기, 알킬옥시기, 아릴기, 아릴옥시기, 아릴알킬기, 아릴알킬옥시기, 2치환 아미노기, 3치환 실릴기, 아실기, 아실옥시기, 치환 카르복실기, 1가의 복소환기 또는 헤테로아릴옥시기를 나타낸다. o 및 p는 각각 독립적으로 0 내지 3의 정수를 나타낸다. o가 2 또는 3인 경우, 복수인 Ra는 동일하거나 상이할 수 있다. p가 2 또는 3인 경우, 복수인 Rb는 동일하거나 상이할 수 있다. 또한, B환, R¹², R¹³와 Ra 및 Rb로서는 각각 상술한 대로의 것을 들 수 있다. 또한, R¹⁶ 및 R¹⁷로 표시되는 알킬기, 아릴기 또는 아릴알킬기로서는 A환, B환 및 C환이 가질 수도 있는 치환기로 예시한 기와 동일한 것을 들 수 있다. 또한, 화합물의 합성의 용이함 측면에서, o 및 p가 0의 경우가 바람직하다.

[0258]

이용하는 화학식: R¹⁵-M으로 표시되는 화합물의 당량은, R¹² 및 R¹³이 모두 수소 원자의 경우 6당량 이상인 것이 바람직하다. 또한, R¹², R¹³ 중의 어느 한쪽이 수소 원자의 경우, 5당량 이상인 것이 바람직하다. R¹² 및 R¹³이 모두 수소 원자가 아닌 경우, 4당량 이상인 것이 바람직하다.

[0259]

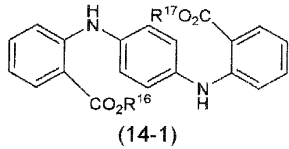
상기 화학식 (13)으로 표시되는 화합물로부터 상기 화학식 (12-1)로 표시되는 화합물을 제조하는 반응, 및 상기

화학식 (14)로 표시되는 화합물로부터 상기 화학식 (12-1)로 표시되는 화합물을 제조하는 반응은, 모두 아르곤이나 질소 등의 불활성 가스의 분위기하에서 행하는 것이 바람직하다.

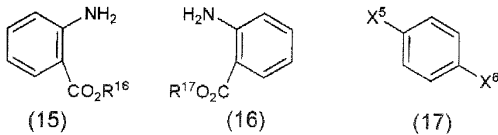
[0260] 반응에 이용되는 용매로서는, 예를 들면 펜탄, 헥산, 헵탄, 옥탄, 시클로헥산 등의 포화 탄화수소; 벤젠, 톨루엔, 에틸벤젠, 크실렌 등의 불포화 탄화수소; 디메틸에테르, 디에틸에테르, 메틸-*t*-부틸에테르, 테트라히드로푸란, 테트라히드로피란, 디옥산 등의 에테르류를 들 수 있다. 이들 용매는 1종을 단독으로 또는 2종 이상을 조합하여 사용할 수 있다.

[0261] 반응의 온도로서는 -100 °C 내지 용매의 비점 정도이고, -80 °C 내지 실온이 바람직하다.

[0262] 다음으로, 상기 화학식 (14)로 표시되는 화합물 중에서도, 화합물의 합성의 용이함 측면에서 바람직하게 사용할 수 있는 하기 화학식 (14-1)로 표시되는 화합물의 제조 방법에 대해서 설명한다.



[0263] 화학식 (14-1)에 있어서, R¹⁶ 및 R¹⁷은 각각 독립적으로 알킬기, 아릴기 또는 아릴알킬기를 나타낸다. 상기 화학식 (14-1)로 표시되는 화합물은, 팔라듐, 니켈 및 구리로 이루어지는 군에서 선택되는 적어도 하나의 금속을 포함하는 촉매의 존재하에서, 하기 화학식 (15)로 표시되는 화합물, 하기 화학식 (16)으로 표시되는 화합물 및 하기 화학식 (17)로 표시되는 화합물로부터 축합 반응에 의해 제조할 수 있다.

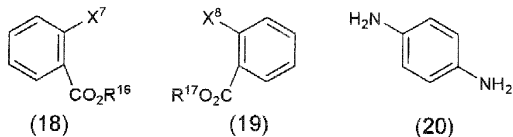


[0265] 화학식 (15) 내지 (17)에 있어서, R¹⁶ 및 R¹⁷은 각각 독립적으로 알킬기, 아릴기 또는 아릴알킬기를 나타내고, X⁵ 및 X⁶은 각각 독립적으로 염소 원자, 브롬 원자, 요오드 원자, 알킬술포네이트기, 아릴술포네이트기 또는 아릴알킬술포네이트기를 나타낸다. 또한, R¹⁶ 및 R¹⁷로서는 각각 상술한 대로의 것을 들 수 있다.

[0267] 반응의 조건으로서는 구리 촉매와 염기의 존재하, 방향족 요오드화물과 반응시키는 올만 커플링 조건으로 제조할 수 있다. 또한, 문헌[*Angewandte Chemie, International Edition in English*, (1995), 34(12), 1348] 기재와 같이 팔라듐 촉매와 염기와 할로겐화 방향족 화합물을 반응시킴으로써도 제조할 수 있다.

[0268] 합성의 용이함 측면에서, 상기 화학식 (15)로 표시되는 화합물 및 상기 화학식 (16)으로 표시되는 화합물은 동일한 경우가 바람직하다.

[0269] 또한, 상기 화학식 (14-1)로 표시되는 화합물은, 팔라듐, 니켈 및 구리로 이루어지는 군에서 선택되는 적어도 하나의 금속을 포함하는 촉매의 존재하에서, 하기 화학식 (18)로 표시되는 화합물, 하기 화학식 (19)로 표시되는 화합물 및 하기 화학식 (20)으로 표시되는 화합물로부터 축합 반응에 의해 제조할 수도 있다.



[0271] 화학식 (18) 내지 (20)에 있어서, R¹⁶ 및 R¹⁷은 각각 독립적으로 알킬기, 아릴기 또는 아릴알킬기를 나타내고, X⁷ 및 X⁸은 각각 독립적으로 염소 원자, 브롬 원자, 요오드 원자, 알킬술포네이트기, 아릴술포네이트기 또는 아릴알킬술포네이트기를 나타낸다. 또한, R¹⁶ 및 R¹⁷로서는 각각 상술한 대로의 것을 들 수 있다.

[0272] 반응의 조건으로서는, 구리 촉매와 염기의 존재하 방향족 요오드화물과 반응시키는 올만 커플링 조건으로 제조할 수 있다. 또한, 문헌[*Angewandte Chemie, International Edition in English*, (1995), 34(12), 1348] 기

재와 같이 팔라듐 촉매와 염기와 할로젠화 방향족 화합물을 반응시킴으로써도 제조할 수 있다.

- [0273] 합성의 용이함 측면에서, 상기 화학식 (18)로 표시되는 화합물 및 상기 화학식 (19)로 표시되는 화합물은 동일한 경우가 바람직하다.
- [0274] 다음으로, 본 발명의 화합물을 포함하는 조성물에 대해서 설명한다. 정공 수송 재료, 전자 수송 재료 및 발광 재료로 이루어지는 군에서 선택되는 적어도 1종의 재료와 본 발명의 화합물을 함유하는 조성물은, 발광 재료나 전하 수송 재료로서 사용할 수 있다.
- [0275] 본 발명의 조성물에 있어서, 정공 수송 재료, 전자 수송 재료 및 발광 재료로 이루어지는 군에서 선택되는 적어도 1종의 재료와 본 발명의 화합물의 함유 비율은 용도에 따라서 결정할 수 있다. 또한, 본 발명의 화합물을 2종 이상 혼합하여 조성물로서 이용할 수도 있다.
- [0276] 또한, 본 발명의 조성물을 이용하여 유기 전계발광 소자의 발광층을 형성할 수 있다. 이러한 발광층의 막 두께로서는 이용하는 재료에 따라서 최적값이 다르고, 구동 전압과 발광 효율이 적절한 값이 되도록 선택할 수 있지만, 예를 들면 1 nm 내지 1 μm이고, 바람직하게는 2 nm 내지 500 nm이고, 더욱 바람직하게는 5 nm 내지 200 nm이다.
- [0277] 이러한 발광층의 형성 방법으로서의 용액으로부터의 성막에 의한 방법이 예시된다. 용액으로부터의 성막 방법으로서 스핀 코팅법, 캐스팅법, 마이크로 그라비아 코팅법, 그라비아 코팅법, 바 코팅법, 롤 코팅법, 와이어 바 코팅법, 침지 코팅법, 분무 코팅법, 스크린 인쇄법, 플렉소 인쇄법, 오프셋 인쇄법, 잉크젯 인쇄법 등의 도포 방법을 사용할 수 있다. 패턴 형성이나 다색의 도분이 용이하다는 점에서 스크린 인쇄법, 플렉소 인쇄법, 오프셋 인쇄법, 잉크젯 인쇄법 등의 인쇄법이 바람직하다.
- [0278] 인쇄법 등에서 이용하는 잉크 조성물(용액)로서는 적어도 1종의 본 발명의 화합물이 함유되어 있을 수 있고, 또한 본 발명의 화합물 이외에 정공 수송 재료, 전자 수송 재료, 발광 재료, 용매, 안정제 등의 첨가제를 포함하고 있을 수 있다.
- [0279] 이러한 잉크 조성물 중에 있어서의 본 발명의 화합물의 비율은, 용매를 제외한 조성물의 전 중량에 대하여 통상은 20 중량% 내지 100 중량%이고, 바람직하게는 40 중량% 내지 100 중량%이다. 또한, 이러한 잉크 조성물 중에 용매가 포함되는 경우의 용매의 비율은 조성물의 전 중량에 대하여 1 중량% 내지 99.9 중량%이고, 바람직하게는 60 중량% 내지 99.5 중량%이고, 더욱 바람직하게는 80 중량% 내지 99.0 중량%이다. 또한, 잉크 조성물의 점도는 인쇄법에 따라서 다르지만, 잉크젯 인쇄법 등 잉크 조성물 중이 토출 장치를 경유하는 것의 경우에는 토출시의 클로깅이나 비행 굴곡을 방지하기 위해서 점도가 25 ℃에서 1 내지 20 mPa·s의 범위인 것이 바람직하다.
- [0280] 본 발명의 잉크 조성물(용액)은, 본 발명의 화합물 이외에 점도 및/또는 표면 장력을 조절하기 위한 첨가제를 함유하고 있을 수도 있다. 이러한 첨가제로서는 점도를 높이기 위한 고분자량의 고분자 화합물(증점제)이나 빈용매, 점도를 낮추기 위한 저분자량의 화합물, 표면 장력을 낮추기 위한 계면활성제 등을 적절하게 조합하여 사용할 수 있다.
- [0281] 이와 같이 점도를 높이기 위한 고분자량의 고분자 화합물로서는 본 발명의 화합물과 동일 용매에 가용성이고, 발광이나 전하 수송을 저해하지 않는 것일 수 있다. 예를 들면, 고분자량의 폴리스티렌, 폴리메틸메타크릴레이트, 또는 본 발명의 화합물 중 분자량이 큰 것 등을 사용할 수 있다. 또한, 폴리스티렌 환산의 중량 평균 분자량은 50만 이상의 것이 바람직하고, 100만 이상의 것이 보다 바람직하다.
- [0282] 또한, 빈용매를 증점제로서 이용할 수도 있다. 즉, 용액 중의 고형분에 대한 빈용매를 소량 첨가함으로써 점도를 높일 수 있다. 이 목적으로 빈용매를 첨가하는 경우, 용액 중의 고형분이 석출하지 않는 범위에서 용매의 종류와 첨가량을 선택할 수 있다. 보존시의 안정성도 고려하면, 빈용매의 양은 용액 전체에 대하여 50 중량% 이하인 것이 바람직하고, 30 중량% 이하인 것이 보다 바람직하다.
- [0283] 또한, 본 발명의 잉크 조성물(용액)은, 보존 안정성을 개선하기 위해서 본 발명의 화합물 이외에 산화 방지제를 함유하고 있을 수도 있다. 산화 방지제로서는 본 발명의 화합물과 동일 용매에 가용성이고, 발광이나 전하 수송을 저해하지 않는 것이면 되고, 페놀계 산화 방지제, 인계 산화 방지제 등을 들 수 있다.
- [0284] 또한, 이러한 용액을 잉크 조성물로서 이용하는 경우, 이용하는 용매로서는 특별히 제한은 없지만, 이 잉크 조성물을 구성하는 용매 이외의 재료를 용해 또는 균일하게 분산할 수 있는 것이 바람직하다. 이러한 용매로서는, 예를 들면 클로로포름, 염화메틸렌, 1,2-디클로로에탄, 1,1,2-트리클로로에탄, 클로로벤젠, o-디클

로로벤젠 등의 염소계 용매; 테트라히드로푸란, 디옥산, 아니솔 등의 에테르계 용매, 톨루엔, 크실렌 등의 방향족 탄화수소계 용매; 시클로헥산, 메틸시클로헥산, n-펜탄, n-헥산, n-헵탄, n-옥탄, n-노난, n-데칸 등의 지방족 탄화수소계 용매; 아세톤, 메틸에틸케톤, 시클로헥사논, 벤조페논, 아세토페논 등의 케톤계 용매; 아세트산에틸, 아세트산부틸, 에틸셀로솔브아세테이트, 벤조산메틸, 아세트산페닐 등의 에스테르계 용매; 에틸렌글리콜, 에틸렌글리콜모노부틸에테르, 에틸렌글리콜모노에틸에테르, 에틸렌글리콜모노메틸에테르, 디메톡시에탄, 프로필렌글리콜, 디에톡시메탄, 트리에틸렌글리콜모노에틸에테르, 글리세린, 1,2-헥산디올 등의 다가 알코올 및 그의 유도체; 메탄올, 에탄올, 프로판올, 이소프로판올, 시클로헥산올 등의 알코올계 용매; 디메틸술폰 등 술폰계 용매; N-메틸-2-피롤리돈, N,N-디메틸포름아미드 등의 아미드계 용매를 들 수 있다. 또한, 이들 용매는 1종을 단독으로 또는 2종 이상을 조합하여 사용할 수 있다. 이들 용매 중에서도 고분자 화합물 등의 용해성, 성막시의 균일성, 점도 특성 등의 측면에서 방향족 탄화수소계 용매, 지방족 탄화수소계 용매, 에스테르계 용매, 케톤계 용매가 바람직하고, 톨루엔, 크실렌, 에틸벤젠, 디에틸벤젠, 트리메틸벤젠, n-프로필벤젠, i-프로필벤젠, n-부틸벤젠, i-부틸벤젠, s-부틸벤젠, 아니솔, 에톡시벤젠, 1-메틸나프탈렌, 시클로헥산, 시클로헥사논, 시클로헥실벤젠, 비시클로헥실, 시클로헥세닐시클로헥사논, n-헵틸시클로헥산, n-헥실시클로헥산, 2-프로필시클로헥사논, 2-헵타논, 3-헵타논, 4-헵타논, 2-옥타논, 2-노나논, 2-데카논, 디시클로헥실케톤, 아세토페논, 벤조페논이 보다 바람직하다. 또한, 용액 중의 용매의 종류는, 성막성 측면이나 소자 특성 등의 측면에서 2종 이상인 것이 바람직하고, 2 내지 3종인 것이 보다 바람직하고, 2종인 것이 특히 바람직하다.

[0285] 또한, 용액 중에 2종의 용매가 포함되는 경우, 그 중 1종의 용매는 25 °C에서 고체 상태일 수 있다. 성막성의 측면에서, 1종의 용매는 비점이 180 °C 이상의 용매인 것이 바람직하고, 200 °C 이상의 용매인 것이 보다 바람직하다. 또한, 점도 측면에서 2종의 용매와 함께 60 °C에서 1 중량% 이상의 본 발명의 화합물이 용해되는 것이 바람직하고, 2종의 용매 중의 1종의 용매에는 25 °C에서 1 중량% 이상의 본 발명의 화합물이 용해되는 것이 바람직하다.

[0286] 또한, 용액 중에 2종 이상의 용매가 포함되는 경우, 점도 및 성막성의 측면에서, 가장 비점이 높은 용매가 용액 중의 전 용매의 중량의 40 내지 90 중량%인 것이 바람직하고, 50 내지 90 중량%인 것이 보다 바람직하고, 65 내지 85 중량%인 것이 특히 바람직하다.

[0287] 이러한 용액 중에 포함되는 본 발명의 화합물은 1종이거나 2종 이상일 수 있고, 소자 특성 등을 손상시키지 않는 범위에서 본 발명의 화합물 이외의 화합물을 포함하고 있을 수 있다.

[0288] 본 발명의 잉크 조성물(용액)에는 물, 금속 및 그의 염을 1 내지 1000 ppm(중량 기준)의 범위에서 포함하고 있을 수 있다. 금속으로서, 예를 들면 리튬, 나트륨, 칼슘, 칼륨, 철, 구리, 니켈, 알루미늄, 아연, 크롬, 망간, 코발트, 백금, 이리듐을 들 수 있다. 또한, 본 발명의 잉크 조성물(용액)은 규소, 인, 붕소, 염소, 브롬을 1 내지 1000 ppm(중량 기준)의 범위에서 포함하고 있을 수 있다.

[0289] 본 발명의 잉크 조성물(용액)을 이용하여 스핀 코팅법, 캐스팅법, 마이크로 그라비아 코팅법, 그라비아 코팅법, 바 코팅법, 롤 코팅법, 와이어 바 코팅법, 침지 코팅법, 분무 코팅법, 스크린 인쇄법, 플렉소 인쇄법, 오프셋 인쇄법, 잉크젯 인쇄법 등의 도포 방법에 의해 본 발명의 박막을 제작할 수 있다. 이들 도포 방법 중에서도, 본 발명의 잉크 조성물(용액)을 스크린 인쇄법, 플렉소 인쇄법, 오프셋 인쇄법, 잉크젯 인쇄법에 의해 성막하는 용도에 이용하는 것이 바람직하고, 잉크젯법으로 성막하는 용도에 이용하는 것이 보다 바람직하다.

[0290] 본 발명의 화합물을 포함하는 박막은 상기한 바와 같이 본 발명의 잉크 조성물(용액)을 이용하여 제작할 수 있다. 이러한 박막으로서, 예를 들면 발광성 박막, 도전성 박막, 유기 반도체 박막을 들 수 있다.

[0291] 본 발명의 도전성 박막은 표면 저항이 1 KΩ/□ 이하인 것이 바람직하다. 또한, 이러한 박막에 루이스산, 이온성 화합물 등을 도핑함으로써 전기 전도도를 높일 수 있다. 또한, 표면 저항이 100 Ω/□ 이하인 것이 보다 바람직하고, 10 Ω/□인 것이 특히 바람직하다.

[0292] 본 발명의 유기 반도체 박막은 전자 이동도 또는 정공 이동도 중 큰 쪽이 10⁻⁵ cm²/V·초 이상인 것이 바람직하고, 10⁻³ cm²/V·초 이상인 것이 보다 바람직하고, 10⁻¹ cm²/V·초 이상인 것이 특히 바람직하다.

[0293] 또한, SiO₂ 등의 절연막과 게이트 전극을 형성한 Si 기판 상에 본 발명의 유기 반도체 박막을 형성하고, Au 등으로 소스 전극과 드레인 전극을 형성함으로써 유기 트랜지스터로 할 수 있다.

[0294] 또한, 본 발명의 유기 전계발광 소자로서는 음극과 발광층 사이에 전자 수송층을 설치한 유기 전계발광 소자, 양극과 발광층 사이에 정공 수송층을 설치한 유기 전계발광 소자, 음극과 발광층 사이에 전자 수송층을 설치하

고, 양극과 발광층 사이에 정공 수송층을 설치한 유기 전계발광 소자, 및 이들 소자에 추가로 양극과 발광층 사이에 인터레이어층을 설치한 유기 전계 발광 소자 등을 들 수 있다.

- [0295] 이러한 유기 전계발광 소자의 구조로서는 이하의 a) 내지 d)의 구조가 예시된다.
- [0296] a) 양극/발광층/음극
- [0297] b) 양극/정공 수송층/발광층/음극
- [0298] c) 양극/발광층/전자 수송층/음극
- [0299] d) 양극/정공 수송층/발광층/전자 수송층/음극
- [0300] (여기서, /는 각 층이 인접하여 적층되어 있는 것을 나타내며, 이하 동일함)
- [0301] 또한, 이들 구조에 있어서, 발광층과 양극 사이에 발광층에 인접하여 인터레이어층을 설치하는 구조도 예시된다. 즉,
- [0302] a') 양극/인터레이어층/발광층/음극
- [0303] b') 양극/정공 수송층/인터레이어층/발광층/음극
- [0304] c') 양극/인터레이어층/발광층/전자 수송층/음극
- [0305] d') 양극/정공 수송층/인터레이어층/발광층/전자 수송층/음극.
- [0306] 인터레이어층은 정공 주입, 정공 수송 및 전자 블록 중 어느 1개 이상의 기능을 갖는 것도 있다.
- [0307] 본 발명의 화합물은 유기 전계발광 소자의 전체 또는 일부의 층에 단독 또는 혼합물로서 사용할 수 있다. 본 발명의 화합물을 일부의 층에 이용하는 경우 및 혼합물로서 이용하는 경우에는, 하기에 나타내는 바와 같은 일반적인 재료를 사용할 수 있다.
- [0308] 본 발명의 유기 전계발광 소자의 발광층으로서, 고분자 재료로서 폴리플루오렌 유도체, 폴리파라페닐렌비닐렌 유도체, 폴리페닐렌 유도체, 폴리파라페닐렌 유도체, 폴리티오펜 유도체, 폴리디알킬플루오렌, 폴리플루오렌벤조티아디아졸, 폴리알킬티오펜 또는 본 발명의 고분자 화합물 등의 공액계 고분자 화합물을 이용하여 이루어지는 것을 들 수 있다.
- [0309] 또한, 이들 고분자 재료를 이용하여 이루어지는 발광층은 페릴렌계 색소, 쿠마린계 색소, 로다민계 색소 등의 고분자계 색소 화합물이나, 루브렌, 페릴렌, 9,10-디페닐안트라센, 테트라페닐부타디엔, 나일레드, 쿠마린 6, 퀴나크리돈 등의 저분자 색소 화합물을 함유할 수도 있다. 또한, 나프탈렌 유도체, 안트라센 또는 그의 유도체, 페릴렌 또는 그의 유도체, 폴리메틴계, 크산텐계, 쿠마린계, 시아닌계 등의 색소류, 8-히드록시퀴놀린 또는 그의 유도체의 금속 착체, 방향족 아민, 테트라페닐시클로펜타디엔 또는 그의 유도체, 또는 테트라페닐부타디엔 또는 그의 유도체, 트리스(2-페닐피리딘)이리듐 등의 인광을 발광하는 금속 착체를 함유할 수도 있다.
- [0310] 또한, 본 발명의 발광 소자가 갖는 발광층은 비공액계 고분자 화합물[예를 들면, 폴리비닐카르바졸, 폴리염화비닐, 폴리카보네이트, 폴리스티렌, 폴리메틸메타크릴레이트, 폴리부틸메타크릴레이트, 폴리에스테르, 폴리술폰, 폴리페닐렌옥사이드, 폴리부타디엔, 폴리(N-비닐카르바졸), 탄화수소 수지, 케톤 수지, 페녹시 수지, 폴리아미드, 에틸셀룰로오스, 아세트산비닐, ABS 수지, 폴리우레탄, 멜라민 수지, 불포화 폴리에스테르 수지, 알키드 수지, 에폭시 수지, 실리콘 수지나 카르바졸 유도체, 트리아졸 유도체, 옥사졸 유도체, 옥사디아졸 유도체, 이미다졸 유도체, 폴리아릴알칸 유도체, 피라졸린 유도체, 피라졸론 유도체, 페닐렌디아민 유도체, 아릴아민 유도체, 아미노 치환 칼콘 유도체, 스티릴안트라센 유도체, 플루오레논 유도체, 히드라존 유도체, 스티벤 유도체, 실라잔 유도체, 방향족 제3급 아민 화합물, 스티릴아민 화합물, 방향족 디메틸리덴계 화합물, 포르피린계 화합물, 폴리실란계 화합물, 폴리(N-비닐카르바졸) 유도체, 유기 실란 유도체를 포함하는 중합체]과 상기 유기 색소나 금속 착체 등의 발광성 유기 화합물과의 혼합 조성물로 구성될 수도 있다.
- [0311] 이러한 고분자 화합물의 구체예로서는 W097/09394호 공보, W098/27136호 공보, W099/54385호 공보, W000/22027호 공보, W001/19834호 공보, GB2340304A호 공보, GB2348316호 공보, US573636호 공보, US5741921호 공보, US5777070호 공보, EP0707020호 공보, 일본 특허 공개 (평)9-111233호 공보, 일본 특허 공개 (평)10-324870호 공보, 일본 특허 공개 (평)2000-80167호 공보, 일본 특허 공개 제2001-123156호 공보, 일본 특허 공개 제2004-168999호 공보, 일본 특허 공개 제2007-162009호 공보, 유기 EL 소자의 개발과 구성 재료(씨엠씨 출판, 2006년 발행) 등에 개시되어 있는 폴리플루오렌, 그의 유도체 및 공중합체, 폴리아릴렌, 그의 유도체 및 공중합체, 폴

리아릴렌비닐렌, 그의 유도체 및 공중합체, 방향족 아민 및 그의 유도체의 (공)중합체가 예시된다.

- [0312] 또한, 저분자 화합물의 구체예로서는, 예를 들면 일본 특허 공개 (소)57-51781호 공보, 유기 박막 일함수 데이터집[제2판](씨엠씨 출판, 2006년 발행), 유기 EL 소자의 개발과 구성 재료(씨엠씨 출판, 2006년 발행) 등에 기재되어 있는 화합물이 예시된다.
- [0313] 상기 재료는 단 성분이거나 또는 복수의 성분을 포함하는 조성물일 수도 있다. 또한, 상기 발광층은 상기 재료의 1종 또는 2종 이상으로 이루어지는 다층 구조일 수도 있고, 동일 조성 또는 이종 조성의 복수층을 포함하는 다층 구조일 수도 있다.
- [0314] 발광층의 성막 방법에 제한은 없고, 정공 주입층의 성막과 동일한 방법을 들 수 있다. 용액으로부터의 성막 방법으로는 스핀 코팅법, 캐스팅법, 바 코팅법, 슬릿 코팅법, 분무 코팅법, 노즐 코팅법, 그라비아 인쇄법, 스크린 인쇄법, 플렉소 인쇄법, 잉크젯 인쇄법 등의 상기 도포법 및 인쇄법을 들 수 있고, 승화성 화합물 재료를 이용하는 경우에는 진공 증착법, 전사법 등을 들 수 있다. 또한, 용액으로부터의 성막 방법에 이용하는 용매의 예로서는 정공 주입층의 성막 방법에서 열기한 용매를 들 수 있다.
- [0315] 발광층에 계속해서, 전자 수송층 등의 유기 화합물층을 도포법으로 형성할 때에, 하층이 뒤에서 도포하는 층의 용액에 포함되는 용매에 용해하는 경우에는 정공 주입층의 성막 방법에서의 예시와 동일한 방법으로 하층을 용매 불용으로 할 수 있다.
- [0316] 발광층의 막 두께로서는 이용하는 재료에 따라서 최적값이 다르고, 구동 전압과 발광 효율이 적절한 값이 되도록 선택할 수 있지만, 적어도 편홀이 발생하지 않는 두께가 필요하고, 너무 두꺼우면 소자의 구동 전압이 높아져서 바람직하지 않다. 따라서, 발광층의 막 두께로서는, 예를 들면 5 nm 내지 1 μm 이고, 바람직하게는 10 nm 내지 500 nm이고, 더욱 바람직하게는 30 nm 내지 200 nm이다.
- [0317] 본 발명의 유기 전계발광 소자가 정공 수송층을 갖는 경우, 사용되는 정공 수송성 재료로서는, 예를 들면 폴리비닐카르바졸 및 그의 유도체, 폴리실란 및 그의 유도체, 측쇄 또는 주쇄에 방향족 아민을 갖는 폴리실록산 유도체, 피라졸린 유도체, 아릴아민 유도체, 스틸벤 유도체, 트리페닐디아민 유도체, 폴리아닐린 및 그의 유도체, 폴리티오펜 및 그의 유도체, 폴리피롤 및 그의 유도체, 폴리(p-페닐렌비닐렌) 및 그의 유도체, 폴리(2,5-티에닐렌비닐렌) 및 그의 유도체를 들 수 있다.
- [0318] 또한, 이러한 정공 수송성 재료로서는, 예를 들면 일본 특허 공개 (소)63-70257호 공보, 동 63-175860호 공보, 일본 특허 공개 (평)2-135359호 공보, 동 2-135361호 공보, 동 2-209988호 공보, 동 3-37992호 공보, 동 3-152184호 공보에 기재되어 있는 것을 들 수 있다.
- [0319] 이들 중에서도, 정공 수송층에 이용하는 정공 수송성 재료로서는 폴리비닐카르바졸 및 그의 유도체, 폴리실란 및 그의 유도체, 측쇄 또는 주쇄에 방향족 아민 화합물기를 갖는 폴리실록산 유도체, 폴리아닐린 및 그의 유도체, 폴리티오펜 및 그의 유도체, 폴리(p-페닐렌비닐렌) 및 그의 유도체, 폴리(2,5-티에닐렌비닐렌) 및 그의 유도체 등의 고분자 정공 수송성 재료가 바람직하고, 폴리비닐카르바졸 및 그의 유도체, 폴리실란 및 그의 유도체, 측쇄 또는 주쇄에 방향족 아민을 갖는 폴리실록산 유도체가 보다 바람직하다.
- [0320] 또한, 저분자 화합물의 정공 수송성 재료로서는 피라졸린 유도체, 아릴아민 유도체, 스틸벤 유도체, 트리페닐디아민 유도체가 예시된다. 또한, 저분자 화합물의 정공 수송성 재료의 경우에는 고분자 결합체에 분산시켜 이용하는 것이 바람직하다.
- [0321] 이와 같이 저분자 화합물을 혼합하기 위한 고분자 결합체로서는 전하 수송을 극도로 저해하지 않는 것이 바람직하고, 또한 가시광에 대한 흡수가 강하지 않은 것이 바람직하게 이용된다. 이러한 고분자 결합체로서는, 예를 들면 폴리(N-비닐카르바졸), 폴리아닐린 및 그의 유도체, 폴리티오펜 및 그의 유도체, 폴리(p-페닐렌비닐렌) 및 그의 유도체, 폴리(2,5-티에닐렌비닐렌) 및 그의 유도체, 폴리카보네이트, 폴리아크릴레이트, 폴리메틸아크릴레이트, 폴리메틸메타크릴레이트, 폴리스티렌, 폴리염화비닐, 폴리실록산을 들 수 있다.
- [0322] 폴리비닐카르바졸 및 그의 유도체는, 예를 들면 비닐 단량체로부터 양이온 중합 또는 라디칼 중합에 의해서 얻어진다.
- [0323] 또한, 폴리실란 및 그의 유도체로서는 문헌[케미컬·리뷰(Chem.Rev.) 제89권, 1359페이지(1989년)], 영국 특허 GB2300196호 공개 명세서에 기재된 화합물 등이 예시된다. 합성 방법도 이들에 기재된 방법을 사용할 수 있지만, 특히 킵핑법이 바람직하게 이용된다.

- [0324] 또한, 폴리실록산 및 그의 유도체는 실록산 골격 구조에는 정공 수송성이 거의 없기 때문에, 측쇄 또는 주쇄에 상기 저분자 정공 수송성 재료의 구조를 갖는 것이 바람직하게 이용된다. 특히 정공 수송성의 방향족 아민을 측쇄 또는 주쇄에 갖는 것이 예시된다.
- [0325] 정공 수송층의 성막의 방법에 제한은 없지만, 저분자 정공 수송성 재료로서는 고분자 결합제와의 혼합 용액으로부터의 성막에 의한 방법이 예시된다. 또한, 고분자 정공 수송성 재료로서는 용액으로부터의 성막에 의한 방법이 예시된다.
- [0326] 이와 같이 용액으로부터의 성막에 이용하는 용매로서는 정공 수송성 재료를 용해 또는 균일하게 분산할 수 있는 것이 바람직하다. 이러한 용매로서는, 예를 들면 클로로포름, 염화메틸렌, 1,2-디클로로에탄, 1,1,2-트리클로로에탄, 클로로벤젠, o-디클로로벤젠 등의 염소계 용매; 테트라히드로푸란, 디옥산 등의 에테르계 용매; 톨루엔, 크실렌 등의 방향족 탄화수소계 용매; 시클로헥산, 메틸시클로헥산, n-펜탄, n-헥산, n-헵탄, n-옥탄, n-노난, n-데칸 등의 지방족 탄화수소계 용매; 아세톤, 메틸에틸케톤, 시클로헥사논 등의 케톤계 용매; 아세트산에틸, 아세트산부틸, 에틸셀로솔브아세테이트 등의 에스테르계 용매; 에틸렌글리콜, 에틸렌글리콜모노부틸에테르, 에틸렌글리콜모노에틸에테르, 에틸렌글리콜모노메틸에테르, 디메톡시에탄, 프로필렌글리콜, 디에톡시메탄, 트리에틸렌글리콜모노에틸에테르, 글리세린, 1,2-헥산디올 등의 다가 알코올 및 그의 유도체; 메탄올, 에탄올, 프로판올, 이소프로판올, 시클로헥산올 등의 알코올계 용매; 디메틸술폰 등의 술폰계 용매; N-메틸-2-피롤리돈, N,N-디메틸포름아미드 등의 아미드계 용매를 들 수 있다. 또한, 이들 용매는 1종을 단독으로 또는 2종 이상을 조합하여 사용할 수 있다.
- [0327] 용액으로부터의 성막 방법으로서 용액으로부터의 스핀 코팅법, 캐스팅법, 마이크로 그라비아 코팅법, 그라비아 코팅법, 바 코팅법, 롤 코팅법, 와이어 바 코팅법, 침지 코팅법, 분무 코팅법, 스크린 인쇄법, 플렉소 인쇄법, 오프셋 인쇄법, 잉크젯 인쇄법 등의 도포 방법을 사용할 수 있다.
- [0328] 정공 수송층의 막 두께로서는 이용하는 재료에 따라서 최적값이 다르고, 구동 전압과 발광 효율이 적절한 값이 되도록 선택할 수 있지만, 적어도 핀홀이 발생하지 않는 두께가 필요하고, 너무 두꺼우면 소자의 구동 전압이 높아져서 바람직하지 않다. 이러한 정공 수송층의 막 두께로서는, 예를 들면 1 nm 내지 1 μm이고, 바람직하게는 2 nm 내지 500 nm이고, 더욱 바람직하게는 5 nm 내지 200 nm이다.
- [0329] 본 발명의 유기 전계발광 소자가 전자 수송층을 갖는 경우, 사용되는 전자 수송성 재료로서는 공지된 것을 사용할 수 있고, 예를 들면 옥사디아졸 유도체, 안트라퀴노디메탄 및 그의 유도체, 벤조퀴논 및 그의 유도체, 나프토퀴논 및 그의 유도체, 안트라퀴논 및 그의 유도체, 테트라시아노안트라퀴노디메탄 및 그의 유도체, 플루오레논 유도체, 디페닐디시아노에틸렌 및 그의 유도체, 디페노퀴논 유도체, 8-히드록시퀴놀린 및 그의 유도체의 금속 착체, 폴리퀴놀린 및 그의 유도체, 폴리퀴녹살린 및 그의 유도체, 폴리플루오렌 및 그의 유도체를 들 수 있다.
- [0330] 또한, 이러한 전자 수송성 재료로서는, 예를 들면 일본 특허 공개 (소)63-70257호 공보, 동 63-175860호 공보, 일본 특허 공개 (평)2-135359호 공보, 동 2-135361호 공보, 동 2-209988호 공보, 동 3-37992호 공보, 동 3-152184호 공보에 기재되어 있는 것을 들 수 있다.
- [0331] 이들 중에서도 옥사디아졸 유도체, 벤조퀴논 및 그의 유도체, 안트라퀴논 및 그의 유도체, 8-히드록시퀴놀린 및 그의 유도체의 금속 착체, 폴리퀴놀린 및 그의 유도체, 폴리퀴녹살린 및 그의 유도체, 폴리플루오렌 및 그의 유도체가 바람직하고, 2-(4-비페닐)-5-(4-t-부틸페닐)-1,3,4-옥사디아졸, 벤조퀴논, 안트라퀴논, 트리스(8-퀴놀리놀)알루미늄, 폴리퀴놀린이 보다 바람직하다.
- [0332] 전자 수송층의 성막법으로서 특별히 제한은 없지만, 저분자 전자 수송성 재료로서는 분말로부터의 진공 증착법, 또는 용액 또는 용융 상태에서부터의 성막에 의한 방법이, 고분자 전자 수송 재료로서는 용액 또는 용융 상태에서부터의 성막에 의한 방법이 각각 예시된다. 용액 또는 용융 상태에서부터의 성막시에는 상기한 고분자 결합제를 병용할 수도 있다.
- [0333] 이와 같이 용액으로부터의 성막에 이용하는 용매로서는 전자 수송 재료 및/또는 고분자 결합제를 용해 또는 균일하게 분산할 수 있는 것이 바람직하다. 이러한 용매로서는, 예를 들면 클로로포름, 염화메틸렌, 1,2-디클로로에탄, 1,1,2-트리클로로에탄, 클로로벤젠, o-디클로로벤젠 등의 염소계 용매; 테트라히드로푸란, 디옥산 등의 에테르계 용매; 톨루엔, 크실렌 등의 방향족 탄화수소계 용매; 시클로헥산, 메틸시클로헥산, n-펜탄, n-헥산, n-헵탄, n-옥탄, n-노난, n-데칸 등의 지방족 탄화수소계 용매; 아세톤, 메틸에틸케톤, 시클로헥사논 등의 케톤계 용매; 아세트산에틸, 아세트산부틸, 에틸셀로솔브아세테이트 등의 에스테르계 용매; 에틸렌글리콜, 에틸렌글

리콜모노부틸에테르, 에틸렌글리콜모노에틸에테르, 에틸렌글리콜모노메틸에테르, 디메톡시에탄, 프로필렌글리콜, 디에톡시메탄, 트리에틸렌글리콜모노에틸에테르, 글리세린, 1,2-헥산디올 등의 다가 알코올 및 그의 유도체; 메탄올, 에탄올, 프로판올, 이소프로판올, 시클로헥산올 등의 알코올계 용매; 디메틸술폰옥시드 등의 술폰옥시드계 용매; N-메틸-2-피롤리돈, N,N-디메틸포름아미드 등의 아미드계 용매를 들 수 있다. 또한, 이들 용매는 1종을 단독으로 또는 2종 이상을 조합하여 사용할 수 있다.

[0334] 용액 또는 용융 상태에서부터의 성막 방법으로는 스핀 코팅법, 캐스팅법, 마이크로 그라비아 코팅법, 그라비아 코팅법, 바 코팅법, 롤 코팅법, 와이어 바 코팅법, 침지 코팅법, 분무 코팅법, 스크린 인쇄법, 플렉소 인쇄법, 오프셋 인쇄법, 잉크젯 인쇄법 등의 도포 방법을 사용할 수 있다.

[0335] 전자 수송층의 막 두께로서는 이용하는 재료에 따라서 최적값이 다르고, 구동 전압과 발광 효율이 적절한 값이 되도록 선택할 수 있지만, 적어도 핀홀이 발생하지 않는 두께가 필요하고, 너무 두꺼우면 소자의 구동 전압이 높아져서 바람직하지 않다. 이러한 전자 수송층의 막 두께로서는, 예를 들면 1 nm 내지 1 μm이고, 바람직하게는 2 nm 내지 500 nm이고, 더욱 바람직하게는 5 nm 내지 200 nm이다.

[0336] 인터레이어층에 이용하는 재료로서 폴리비닐카르바졸 및 그의 유도체, 측쇄 또는 주쇄에 방향족 아민을 갖는 폴리아릴렌 유도체, 아릴아민 유도체, 페닐렌디아민 유도체 등, 방향족 아민을 포함하는 중합체가 예시된다.

[0337] 이러한 인터레이어층의 성막 방법에 제한은 없지만, 예를 들면 고분자 재료를 이용하는 경우에 있어서는 용액으로부터의 성막에 의한 방법이 예시된다.

[0338] 이와 같이 용액으로부터의 성막 방법에 이용하는 용매로서는 정공 수송성 재료를 용해 또는 균일하게 분산할 수 있는 것이 바람직하다. 이러한 용매로서는, 예를 들면 클로로포름, 염화메틸렌, 1,2-디클로로에탄, 1,1,2-트리클로로에탄, 클로로벤젠, o-디클로로벤젠 등의 염소계 용매; 테트라히드로푸란, 디옥산 등의 에테르계 용매; 톨루엔, 크실렌 등의 방향족 탄화수소계 용매; 시클로헥산, 메틸시클로헥산, n-펜탄, n-헥산, n-헵탄, n-옥탄, n-노난, n-데칸 등의 지방족 탄화수소계 용매; 아세톤, 메틸에틸케톤, 시클로헥사논 등의 케톤계 용매; 아세트산 에틸, 아세트산부틸, 에틸셀로솔브아세테이트 등의 에스테르계 용매; 에틸렌글리콜, 에틸렌글리콜모노부틸에테르, 에틸렌글리콜모노에틸에테르, 에틸렌글리콜모노메틸에테르, 디메톡시에탄, 프로필렌글리콜, 디에톡시메탄, 트리에틸렌글리콜모노에틸에테르, 글리세린, 1,2-헥산디올 등의 다가 알코올 및 그의 유도체; 메탄올, 에탄올, 프로판올, 이소프로판올, 시클로헥산올 등의 알코올계 용매; 디메틸술폰옥시드 등의 술폰옥시드계 용매; N-메틸-2-피롤리돈, N,N-디메틸포름아미드 등의 아미드계 용매를 들 수 있다. 또한, 이들 용매는 1종을 단독으로 또는 2종 이상을 조합하여 사용할 수 있다.

[0339] 용액으로부터의 성막 방법으로는 용액으로부터의 스핀 코팅법, 캐스팅법, 마이크로 그라비아 코팅법, 그라비아 코팅법, 바 코팅법, 롤 코팅법, 와이어 바 코팅법, 침지 코팅법, 분무 코팅법, 스크린 인쇄법, 플렉소 인쇄법, 오프셋 인쇄법, 잉크젯 인쇄법 등의 도포 방법을 사용할 수 있다.

[0340] 인터레이어층의 막 두께로서는 이용하는 재료에 따라서 최적값이 다르고, 구동 전압과 발광 효율이 적절한 값이 되도록 선택할 수 있다. 인터레이어층의 막 두께는, 예를 들면 1 nm 내지 1 μm이고, 바람직하게는 2 nm 내지 500 nm이고, 더욱 바람직하게는 5 nm 내지 200 nm이다.

[0341] 이러한 인터레이어층을 발광층에 인접하여 설치하는 경우, 특히 양쪽의 층을 상기 도포 방법에 의해 형성하는 경우에는, 2개의 층의 재료가 혼합하여 소자의 특성 등에 대하여 바람직하지 않은 영향을 주는 경우가 있다. 인터레이어층을 상기 도포 방법으로 형성한 후, 발광층을 상기 도포 방법으로 형성하는 경우, 2개의 층의 재료의 혼합을 적게 하는 방법으로서 (i) 인터레이어층을 상기 도포 방법으로 형성한 후, 이 인터레이어층을 가열, 광 조사 등의 처리로 유기 용매에 대하여 불용화한 후, 발광층을 형성하는 방법이나, (ii) 발광층을 도포할 때에 이용하는 용매를 인터레이어층의 용해성이 낮은 용매를 이용하는 방법 등을 들 수 있다. 인터레이어층을 가열에 의해 불용화하는 경우, 가열의 온도는 통상 150 °C 내지 300 °C 정도이고, 시간은 통상 1분 내지 1시간 정도이다. 이러한 경우, 가열에 의해 용매 불용화하지 않은 성분을 제거하기 위해서, 가열한 후 발광층을 형성하기 전에 이 인터레이어층을 발광층 형성에 이용하는 용매로 린스함으로써 제거하는 것이 바람직하다. 가열에 의한 용매 불용화가 충분히 행해진 경우에는 용매에 의한 린스를 생략할 수도 있다. 가열에 의한 용매 불용화가 충분히 행해지기 위해서는 인터레이어층에 이용하는 고분자 화합물로서 분자 내에 적어도 1개의 중합 가능한 기를 포함하는 것을 이용하는 것이 바람직하다. 또한, 중합 가능한 기의 수가 분자 내의 반복 단위의 수에 대하여 5% 이상인 것이 보다 바람직하다. 중합 가능한 기로서는 이중 결합을 갖는 기, 환상 에테르기 등을 들 수 있다. 이중 결합을 갖는 기로서는 비닐기, 1,3-부테디에닐기, 아크릴레이트기, 메타크릴레이트기 등을

들 수 있다. 환상 에테르기로서는 에폭시기, 옥세탄기 등을 들 수 있다.

- [0342] 또한, 전극에 인접하여 설치한 전하 수송층 중, 전극으로부터의 전하 주입 효율을 개선하는 기능을 갖고, 소자의 구동 전압을 내리는 효과를 갖는 것은 특히 전하 주입층(정공 주입층, 전자 주입층)이라고 일반적으로 불리는 경우가 있다.
- [0343] 또한, 전극과의 밀착성 향상이나 전극으로부터의 전하 주입의 개선을 위해, 전극에 인접하여 상기 전하 주입층 또는 절연층을 설치할 수도 있고, 또한 계면의 밀착성 향상이나 혼합의 방지 등을 위해 전하 수송층이나 발광층의 계면에 얇은 버퍼층을 삽입할 수도 있다. 또한, 적층하는 층의 순서나 수, 및 각 층의 두께에 대해서는 발광 효율이나 소자 수명을 감안하여 적절하게 사용할 수 있다.
- [0344] 본 발명에 있어서, 전하 주입층(전자 주입층, 정공 주입층)을 설치한 유기 전계발광 소자로서는, 예를 들면 음극에 인접하여 전하 주입층을 설치한 유기 전계발광 소자, 양극에 인접하여 전하 주입층을 설치한 유기 전계발광 소자를 들 수 있다.
- [0345] 이러한 유기 전계발광 소자의 구조로서는, 예를 들면 이하의 e) 내지 p)의 구조를 들 수 있다.
- [0346] e) 양극/전하 주입층/발광층/음극
- [0347] f) 양극/발광층/전하 주입층/음극
- [0348] g) 양극/전하 주입층/발광층/전하 주입층/음극
- [0349] h) 양극/전하 주입층/정공 수송층/발광층/음극
- [0350] i) 양극/정공 수송층/발광층/전하 주입층/음극
- [0351] j) 양극/전하 주입층/정공 수송층/발광층/전하 주입층/음극
- [0352] k) 양극/전하 주입층/발광층/전자 수송층/음극
- [0353] l) 양극/발광층/전자 수송층/전하 주입층/음극
- [0354] m) 양극/전하 주입층/발광층/전자 수송층/전하 주입층/음극
- [0355] n) 양극/전하 주입층/정공 수송층/발광층/전자 수송층/음극
- [0356] o) 양극/정공 수송층/발광층/전자 수송층/전하 주입층/음극
- [0357] p) 양극/전하 주입층/정공 수송층/발광층/전자 수송층/전하 주입층/음극
- [0358] 또한, 이들 구조에 있어서, 발광층과 양극 사이에 발광층에 인접하여 인터레이어층을 설치하는 구조도 예시된다.
- [0359] 전하 주입층으로서, 도전성 고분자를 포함하는 층, 양극과 정공 수송층 사이에 설치되며, 양극 재료와 정공 수송층에 포함되는 정공 수송성 재료와의 중간 값의 이온화 포텐셜을 갖는 재료를 포함하는 층, 음극과 전자 수송층 사이에 설치되며, 음극 재료와 전자 수송층에 포함되는 전자 수송성 재료와의 중간 값의 전자 친화력을 갖는 재료를 포함하는 층 등이 예시된다.
- [0360] 이러한 전하 주입층이 도전성 고분자를 포함하는 층의 경우, 이 도전성 고분자의 전기 전도도는 10^{-5} S/cm 이상 10^3 S/cm 이하인 것이 바람직하고, 발광 화소 사이의 누설 전류를 작게 하기 위해서는 10^{-5} S/cm 이상 10^2 S/cm 이하인 것이 보다 바람직하고, 10^{-5} S/cm 이상 10^1 S/cm 이하인 것이 특히 바람직하다. 또한, 통상은 이 도전성 고분자의 전기 전도도를 10^{-5} S/cm 이상 10^3 S/cm 이하로 하기 위해서 이 도전성 고분자에 적량의 이온을 도핑한다.
- [0361] 도핑하는 이온의 종류는 정공 주입층이면 음이온, 전자 주입층이면 양이온이다. 음이온의 예로서는 폴리스티렌 술폰산 이온, 알킬벤젠술폰산 이온, 캄포술폰산 이온 등이 예시되고, 양이온의 예로서는 리튬 이온, 나트륨 이온, 칼륨 이온, 테트라부틸암모늄 이온 등이 예시된다.
- [0362] 이러한 전하 주입층의 막 두께로서는, 예를 들면 1 nm 내지 100 nm이고, 바람직하게는 2 nm 내지 50 nm이다.
- [0363] 전하 주입층에 이용하는 재료로서는 전극이나 인접하는 층의 재료와의 관계에서 적절하게 선택할 수 있지만, 예

를 들면 폴리아닐린 및 그의 유도체, 폴리티오펜 및 그의 유도체, 폴리피롤 및 그의 유도체, 폴리페닐렌비닐렌 및 그의 유도체, 폴리티에닐렌비닐렌 및 그의 유도체, 폴리퀴놀린 및 그의 유도체, 폴리퀴놀살린 및 그의 유도체, 방향족 아민 구조를 주쇄 또는 측쇄에 포함하는 중합체 등의 도전성 고분자, 금속 프탈로시아닌(구리 프탈로시아닌 등), 카본을 들 수 있다.

[0364] 또한, 본 발명의 유기 전계발광 소자에 있어서는, 전하 주입을 용이하게 하기 위해서 절연층을 추가로 설치할 수도 있다. 이러한 절연층의 막 두께는 통상 2 nm 이하이다. 이러한 절연층의 재료로서는 금속 불화물, 금속 산화물, 유기 절연 재료 등을 들 수 있다. 이러한 절연층을 설치한 유기 전계발광 소자로서는, 예를 들면 음극에 인접하여 절연층을 설치한 유기 전계발광 소자, 양극에 인접하여 절연층을 설치한 유기 전계발광 소자를 들 수 있다.

[0365] 이러한 유기 전계발광 소자의 구조로서는, 예를 들면 이하의 q) 내지 ab)의 구조를 들 수 있다.

[0366] q) 양극/ 절연층/발광층/음극

[0367] r) 양극/발광층/ 절연층/음극

[0368] s) 양극/절연층/발광층/절연층/음극

[0369] t) 양극/절연층/정공 수송층/발광층/음극

[0370] u) 양극/정공 수송층/발광층/절연층/음극

[0371] v) 양극/절연층/정공 수송층/발광층/절연층/음극

[0372] w) 양극/절연층/발광층/전자 수송층/음극

[0373] x) 양극/발광층/전자 수송층/절연층/음극

[0374] y) 양극/절연층/발광층/전자 수송층/절연층/음극

[0375] z) 양극/절연층/정공 수송층/발광층/전자 수송층/음극

[0376] aa) 양극/정공 수송층/발광층/전자 수송층/절연층/음극

[0377] ab) 양극/절연층/정공 수송층/발광층/전자 수송층/절연층/음극

[0378] 또한, 이들 구조에 있어서, 발광층과 양극 사이에 발광층에 인접하여 인터레이어층을 설치하는 구조도 예시된다.

[0379] 본 발명의 유기 전계발광 소자를 형성하는 기관은 전극을 형성하고, 유기물의 층을 형성할 때에 변화하지 않는 것일 수 있다. 이러한 기관으로서, 예를 들면 유리, 플라스틱, 고분자 필름, 실리콘 등의 기관을 들 수 있다. 불투명한 기관의 경우에는 반대의 전극이 투명 또는 반투명한 것이 바람직하다.

[0380] 또한, 통상 본 발명의 유기 전계발광 소자가 갖는 양극 및 음극 중의 적어도 한쪽이 투명 또는 반투명하다. 양극측이 투명 또는 반투명한 것이 바람직하다.

[0381] 이러한 양극의 재료로서는 도전성의 금속 산화물막, 반투명의 금속 박막 등이 이용된다. 이러한 양극의 재료로서, 구체적으로는 산화인듐, 산화아연, 산화주석, 및 이들의 복합체인 인듐·주석·옥사이드(ITO), 인듐·아연·옥사이드 등을 포함하는 도전성 유리를 이용하여 제조된 막(NESA 등)이나, 금, 백금, 은, 구리 등이 이용되고, ITO, 인듐·아연·옥사이드, 산화주석이 바람직하다. 제작 방법으로는 진공 증착법, 스퍼터링법, 이온 플레이팅법, 도금법 등을 들 수 있다. 또한, 이러한 양극으로서, 폴리아닐린 또는 그의 유도체, 폴리티오펜 또는 그의 유도체 등의 유기 투명한 도전막을 이용할 수도 있다.

[0382] 양극의 막 두께는 광의 투과성과 전기 전도도를 고려하여 적절하게 선택할 수 있지만, 예를 들면 10 nm 내지 10 μm이고, 바람직하게는 20 nm 내지 1 μm이고, 더욱 바람직하게는 50 nm 내지 500 nm이다.

[0383] 또한, 양극 상에 전하 주입을 용이하게 하기 위해서, 프탈로시아닌 유도체, 도전성 고분자, 카본 등으로 이루어지는 층, 또는 금속 산화물이나 금속 불화물, 유기 절연 재료 등으로 이루어지는 평균 막 두께 2 nm 이하의 층을 설치할 수도 있다.

[0384] 본 발명의 유기 전계발광 소자에서 이용하는 음극의 재료로서는 일함수가 작은 재료가 바람직하다. 이러한 음극의 재료로서, 예를 들면 리튬, 나트륨, 칼륨, 루비듐, 세슘, 베릴륨, 마그네슘, 칼슘, 스트론튬, 바륨, 알루미늄

미늄, 스칸듐, 바나듐, 아연, 이트륨, 인듐, 세륨, 사마륨, 유로퓸, 테르븀, 이테르븀 등의 금속, 및 이들 중 2 개 이상의 합금, 또는 이들 중 1개 이상과 금, 은, 백금, 구리, 망간, 티탄, 코발트, 니켈, 텅스텐, 주석 중 1 개 이상과의 합금, 흑연 또는 흑연 층간 화합물이 이용된다. 합금의 예로서는 마그네슘-은 합금, 마그네슘-인듐 합금, 마그네슘-알루미늄 합금, 인듐-은 합금, 리튬-알루미늄 합금, 리튬-마그네슘 합금, 리튬-인듐 합금, 칼슘-알루미늄 합금 등을 들 수 있다. 음극을 2층 이상의 적층 구조로 할 수도 있다.

[0385] 음극의 막 두께는 전기 전도도나 내구성을 고려하여 적절하게 선택할 수 있지만, 예를 들면 10 nm 내지 10 μm 이고, 바람직하게는 20 nm 내지 1 μm이고, 더욱 바람직하게는 50 nm 내지 500 nm이다.

[0386] 음극의 제작 방법으로는 진공 증착법, 스퍼터링법, 또한 금속 박막을 열압착하는 라미네이트법 등이 이용된다. 또한, 음극과 유기물층 사이에 도전성 고분자를 포함하는 층, 또는 금속 산화물이나 금속 불화물, 유기 절연 재료 등을 포함하는 평균 막 두께 2 nm 이하의 층을 설치할 수도 있고, 음극 제작 후, 본 발명의 유기 전계발광 소자를 보호하는 보호층을 장착하고 있을 수도 있다. 또한, 본 발명의 유기 전계발광 소자를 장기간 안정적으로 이용하기 위해서는 소자를 외부로부터 보호하기 위해서, 보호층 및/또는 보호 커버를 장착하는 것이 바람직하다.

[0387] 이러한 보호층으로서 고분자 화합물, 금속 산화물, 금속 불화물, 금속 붕화물 등을 사용할 수 있다. 또한, 보호 커버로서는 유리판, 표면에 저투수율 처리를 실시한 플라스틱판 등을 사용할 수 있고, 이 커버를 열 효과 수지나 광 경화 수지로 소자 기판과 접합시켜 밀폐하는 방법이 바람직하게 이용된다. 스페이서를 이용하여 공간을 유지하면, 소자의 흡집이 생기는 것을 막는 것이 용이하다. 또한, 이 공간에 질소나 아르곤과 같은 불활성인 가스를 봉입하면, 음극의 산화를 방지할 수 있고, 또한 산화바륨 등의 건조제를 이 공간 내에 설치함으로써 제조 공정에서 흡착한 수분이 소자에 손상을 제공하는 것을 억제하는 것이 용이해진다. 이들 중에서, 어느 하나 이상의 방법을 취하는 것이 바람직하다.

[0388] 본 발명의 유기 전계발광 소자는 면상 광원, 세그먼트 표시 장치, 도트 매트릭스 표시 장치 등의 표시 장치, 액정 표시 장치의 백 라이트로서 사용할 수 있다.

[0389] 본 발명의 유기 전계발광 소자를 이용하여 면상의 발광을 얻기 위해서는 면상의 양극과 음극이 중첩되도록 배치할 수 있다. 또한, 패턴상의 발광을 얻기 위해서는 상기 면상의 발광 소자의 표면에 패턴상의 장을 설치한 마스크를 설치하는 방법, 비발광부의 유기물층을 극단적으로 두껍게 형성하여 실질적으로 비발광으로 하는 방법, 양극 또는 음극 중 어느 한쪽 또는 양쪽의 전극을 패턴상으로 형성하는 방법이 있다. 이들 어느 하나의 방법으로 패턴을 형성하여, 몇개의 전극을 독립적으로 On/OFF 할 수 있도록 배치함으로써, 숫자나 문자, 간단한 기호 등을 표시할 수 있는 세그먼트 타입의 표시 소자가 얻어진다. 또한, 도트 매트릭스 소자로 하기 위해서는 양극과 음극을 함께 스트라이프상으로 형성하여 직교하도록 배치할 수 있다. 복수의 종류의 발광색이 다른 고분자 형광체를 분할 도포하는 방법이나, 컬러 필터 또는 형광 변환 필터를 이용하는 방법에 의해 부분 컬러 표시, 멀티 컬러 표시가 가능해진다. 도트 매트릭스 소자는 패시브 구동도 가능하고, TFT 등과 조합하여 액티브 구동할 수도 있다. 이들 표시 소자는 컴퓨터, 텔레비전, 휴대 단말, 휴대 전화, 차 내비게이션, 비디오 카메라의 뷰파인더 등의 표시 장치로서 사용할 수 있다.

[0390] 또한, 상기 면상의 발광 소자는 자발 광박형이고, 액정 표시 장치의 백 라이트용의 면상 광원, 또는 면상의 조명용 광원으로서 바람직하게 사용할 수 있다. 또한, 연성 기판을 이용하면, 곡면상의 광원이나 표시 장치로서도 사용할 수 있다.

[0391] [실시에]

[0392] 이하, 실시예 및 비교예에 기초하여 본 발명을 보다 구체적으로 설명하지만, 본 발명은 이하의 실시예로 한정되는 것은 아니다. 또한, 수 평균 분자량, 중량 평균 분자량 및 형광 스펙트럼은 각각 이하의 방법에 의해 측정하였다.

[0393] (i) 수 평균 분자량 및 중량 평균 분자량

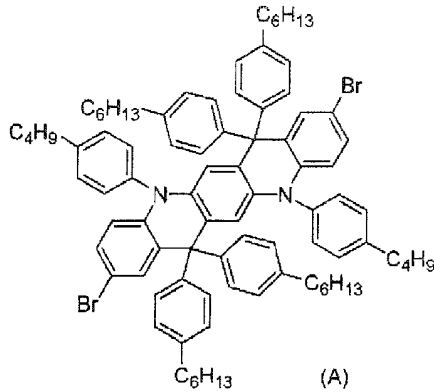
[0394] 수 평균 분자량 및 중량 평균 분자량에 대해서는 GPC(시마즈 세이사꾸쇼 제조: LC-10Avp)에 의해 폴리스티렌 환산의 수 평균 분자량 및 중량 평균 분자량을 구하였다. 측정하는 중합체는 약 0.5 중량%의 농도가 되도록 테트라히드로푸란에 용해시켜, GPC에 50 μL 주입하였다. GPC의 이동상은 테트라히드로푸란을 이용하여, 0.6 mL/분의 유속으로 흘렸다. 칼럼은 TSKgel SuperHM-H(도소사 제조) 2개와 TSKgel SuperH2000(도소 제조) 1개를 직렬로 연결하였다. 검출기에는 시차 굴절률 검출기(시마즈 세이사꾸쇼 제조: RID-10A)를 이용하였다.

[0395] (ii) 형광 스펙트럼

[0396] 형광 스펙트럼의 측정은 이하의 방법으로 행하였다. 즉, 측정하는 고분자 화합물의 0.8 중량% 톨루엔 용액을 석영 상에 스핀 코팅하여 이 고분자 화합물의 박막을 제작하였다. 이 박막을 350 nm의 파장으로 여기하고, 형광 분광 광도계(호리바 세이사쿠쇼사 제조, 상품명 「플루오로로그(Fluorolog)」)를 이용하여, 이 고분자 화합물의 형광 스펙트럼을 측정하였다. 박막에서의 상대적인 형광 강도를 얻기 위해서, 물의 라만선의 강도를 표준으로, 파수 플롯한 형광 스펙트럼을 스펙트럼 측정 범위로 적분하고, 분광 광도계(바리안(Varian)사 제조, 상품명 「Cary5E」)를 이용하여 측정된 「여기 파장에서의 흡광도」로 할당한 값을 구하였다.

[0397] (실시에 1 내지 5)

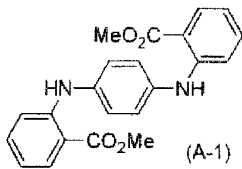
[0398] 하기 구조식 (A)로 표시되는 화합물 A를 이하에 나타낸 바와 같이 하여 합성하였다.



[0399]

[0400] <실시에 1: 화합물 A-1의 합성>

[0401] 우선, 하기 구조식 (A-1)로 표시되는 화합물을 합성하였다.



[0402]

[0403] 즉, 300 ml의 4구 플라스크에 1,4-디브로모벤젠 5.00 g, 안트라닐산메틸 7.05 g을 취하고, 탈수 톨루엔 100 ml를 가하여 1시간 질소 버블링하였다. 그 후, 트리스(디벤질리덴아세톤)디팔라듐 0.19 g, 트리(t-부틸)포스핀테트라플루오로보레이트 0.24 g, 탄산세슘 10.36 g을 가하고, 70 °C에서 5시간 가열한 후에 20시간 환류하였다. 셀라이트 20 g을 깔은 글라스 필터로 열시 여과하여, 아세트산에틸로 세정하였다. 다음으로, 용매를 증류 제거하고, 포화 탄산수소나트륨 수용액, 탈 이온수, 포화 식염수로 세정하여 황산나트륨으로 건조하였다. 그리고, 용매를 증류 제거하여, 5.49 g의 조 생성물을 얻었다. 또한, 수상을 100 ml의 클로로포름으로 3회 추출하고, 물, 포화 식염수로 세정하여 황산나트륨으로 건조하였다. 그리고, 용매를 증류 제거하여, 추가로 4.00 g의 조 생성물을 얻었다. 얻어진 조 생성물을 합하여, 톨루엔 30 ml로 재결정하고 6.28 g의 화합물 A-1을 얻었다.

[0404] <분석 데이터>

[0405] *LC-MS

[0406] APPI-MS, 포지티브 377([M+H]⁺, 정확한 질량=376)

* ¹H-NMR(300MHz, CDCl₃)

δ 3.91(6H, s), 6.72(2H,

t), 7.17-7.26(6H, m), 7.31(2H, t), 7.96(2H, d), 9.42(2H, s)

* ¹³C-NMR(300MHz, CDCl₃)

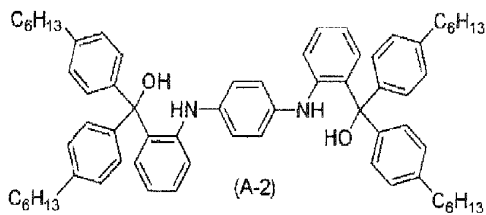
δ 52.1, 111.8, 114.1, 117.1, 124.4, 131.9, 134.5,

136.9, 148.7, 169.3.

[0407]

[0408] <실시예 2: 화합물 A-2의 합성>

[0409] 다음으로, 하기 구조식 (A-2)로 표시되는 화합물을 합성하였다.



[0410]

[0411] 즉, 300 ml의 4구 플라스크에 1-브로모-4-n-헥실벤젠 8.98 g을 취하여 질소 치환하였다. 그 후, 90 ml의 탈수 THF에 용해하고 -78 °C로 냉각한 후, 10분에 n-부틸리튬(1.6M 헥산 용액)을 적하하였다. 다음으로, 2시간 보온한 후, 2.00 g의 화합물 A-1을 20 ml의 탈수 THF에 용해시켜 적하하였다. 그 후, 서서히 실온까지 승온하여 5시간 교반한 후에, 0 °C에서 100 ml의 물을 적하하였다. 이어서, 분액하고, 수상을 100 ml의 아세트산에틸로 추출하였다. 또한, 유상을 물, 포화 식염수로 세정한 후, 용매를 증류 제거한 바, 8.86 g의 조 생성물을 얻었다(적색 오렌지색 고체). 얻어진 조 생성물을 헥산 50 ml로 재결정하여, 4.14 g의 화합물 A-2를 얻었다.

[0412] <분석 데이터>

[0413] *LC-MS

[0414] ESI, 포지티브 999([M+K]⁺, 정확한 질량=960)

* ¹H-NMR(300MHz, CDCl₃)

δ 0.88(12H, t), 1.30(24H, m), 1.60(8H, m), 2.60(8H, t), 4.74(2H,

brs), 5.68 (2H, brs), 6.55-6.63(6H, m), 6.75(2H, m), 7.03-7.26(20H, m)

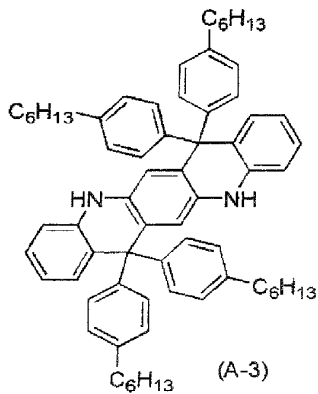
* ¹³C-NMR(300MHz, CDCl₃)

δ 14.4, 22.9, 29.3, 31.6, 32.0, 35.8, 82.4,

[0415] 118.8, 120.2, 122.0, 127.9, 128.4, 130.3, 136.1, 137.7, 142.3, 143.3, 144.0.

[0416] <실시예 3: 화합물 A-3의 합성>

[0417] 다음으로, 하기 구조식 (A-3)으로 표시되는 화합물을 합성하였다.



[0418]

[0419] 즉, 300 ml의 가지형 플라스크에 화합물 A-2를 8.00 g 취하여 질소 치환하였다. 그 후, 80 ml의 아세트산에 용해시키고, 0 °C로 냉각하였다. 2.8 ml의 진한 염산을 적하한 후, 실온으로 승온하여 5시간 교반한 후, 재차 0 °C로 냉각하여 여과, 수세하였다. 다음으로, 톨루엔 250 ml에 용해시키고, 수산화나트륨 수용액으로 염기성으로 하고, 포화 탄산수소나트륨 수용액, 물, 포화 식염수로 세정하여 황산나트륨으로 건조하였다. 그 후, 용매를 증류 제거한 바 13.75 g의 조 생성물을 얻었다. 얻어진 조 생성물을 톨루엔 50 ml에서 재결정하여, 6.78 g의 화합물 A-3을 얻었다.

[0420] <분석 데이터>

[0421] *LC-MS

[0422] ESI, 포지티브 963([M+K]⁺, 정확한 질량=924)

*¹H-NMR(300MHz, THF-d₈)

δ 0.90(12H, t), 1.34(24H, m), 1.55-1.62(8H, m), 2.56(8H, t), 6.37(2H, s), 6.63-6.70(6H, m), 6.87(8H, d), 6.98-7.01(10H, m), 7.87(2H, s)

*¹³C-NMR(300MHz, THF-d₈)

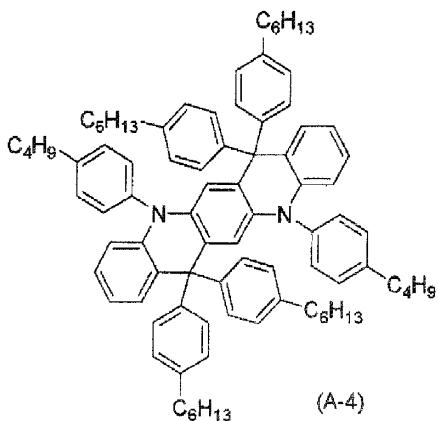
δ 13.7, 22.8, 29.5, 31.8, 32.0, 35.7, 56.2, 113.5,

115.2, 118.2, 126.8, 127.1, 127.3, 130.1, 130.4, 134.5, 140.4, 141.8, 144.6.

[0423]

[0424] <실시예 4: 화합물 A-4의 합성>

[0425] 다음으로, 하기 구조식 (A-4)로 표시되는 화합물을 합성하였다.



[0426]

[0427] 즉, 300 ml의 4구 플라스크를 질소 치환하고, 화합물 A-3을 9.90 g, 및 1-브로모-4-n-부틸벤젠을 4.94 g 취하여

탈수 톨루엔 150 ml에 용해시켰다. 20분간 질소 버블링한 후, 트리스(디벤질리덴아세톤)디팔라듐 0.05 g, 트리(t-부틸)포스핀테트라플루오로보레이트 0.03 g, 나트륨-t-부톡시드 0.30 g을 가하여, 10시간 환류하였다. 그 후, 0 °C까지 냉각 후, 물 100 ml를 가하고, 분액하여 수상을 100 ml의 톨루엔으로 2회 추출하였다. 그리고, 유상을 합하여 물, 포화 식염수로 세정하고, 실리카 겔 60 g을 깔은 글라스 필터로 여과하였다. 그 후, 톨루엔으로 세정한 후, 용매를 증류 제거하여, 16.52 g의 조 생성물을 얻었다. 얻어진 조 생성물에 헥산 50 ml를 가하여 결정화하고, 메탄올 50 ml를 가하여 여과하였다. 얻어진 개체를 50 ml의 헥산으로부터 재결정하여, 10.09 g의 화합물 A-4를 얻었다.

[0428] <분석 데이터>

[0429] *LC-MS

[0430] ESI, 포지티브 1218([M+H]⁺, 정확한 질량=1217)

*¹H-NMR(300MHz, THF-d₈)

δ 0.62(12H, t), 0.69(6H, t), 1.00-1.34--17(28H, m), 1.27-1.37(12H, m), 2.26-2.35(12H, m), 5.67(2H, s), 5.93(2H, d), 6.38-6.47(8H, d), 6.56-6.61(10H, m), 6.64(8H, d), 6.79(6H, d)

*¹³C-NMR(300MHz, THF-d₈)

δ 15.5, 15.6, 24.6, 24.7, 31.3, 33.7, 33.9, 35.8, 37.6, 58.3, 116.0, 117.8, 121.2, 128.0, 129.1, 130.8, 138.5, 140.9, 142.2, 144.1, 145.0, 146.0.

[0431]

[0432] <실시예 5: 화합물 A의 합성>

[0433] 이어서, 화합물 A를 합성하였다. 즉, 300 ml의 가지형 플라스크에 화합물 A-4를 10.09 g 취하여 질소 치환하였다. 그 후, 100 ml의 클로로포름에 용해시키고, 0 °C로 냉각하였다. 다음으로, 2.87 g의 NBS를 6 ml의 DMF에 용해시킨 용액을 20분으로 적하하였다. 그 후, 냉욕을 제거하고, 7시간 교반 후, 0 °C로 냉각하고 0.29 g의 NBS를 0.5 ml의 DMF에 용해하여 적하하였다. 추가로, 2.5시간 교반 후, 물 100 ml를 적하하고, 분액하여 수상을 클로로포름으로 추출하였다. 또한, 유상을 물, 포화 식염수로 세정한 후, 실리카겔 50 g을 깔은 글라스 필터를 통해서 여과하고, 톨루엔 세정하였다. 그 후, 용매를 증류 제거한 바, 12.48 g의 조 생성물을 얻었다. 수상 및 유상으로부터 얻어진 조 생성물을 헥산 180 ml, 200 ml 각각으로부터 재결정하여, 9.55 g의 화합물 A를 얻었다.

[0434] <분석 데이터>

[0435] *LC-MS

[0436] APCI, 포지티브 1346([M+H]⁺, 정확한 질량=1345)

*¹H-NMR(300MHz, THF-d₈)

δ 0.90(12H, t), 0.97(6H, t), 1.30-1.45(28H, m), 1.57-1.69(12H, m), 2.56-2.61(12H, m), 5.95(2H, s), 6.16(2H, brs), 6.70(4H, d), 6.76(8H, d), 7.01(8H, d), 7.02(2H, m), 7.05(2H, m), 7.12(4H, d),

*¹³C-NMR(300MHz, THF-d₈)

δ 15.5, 15.6, 24.6, 24.7, 31.3, 33.6, 33.9, 35.7, 37.4, 37.6, 117.7, 129.4, 130.3, 132.0, 138.5, 142.7, 144.5.

[0437]

[0438] (실시예 6: 고분자 화합물 1의 합성)

[0439] 질소 분위기하, 화합물 A 1.01 g 및 2,7-비스(1,3,2-디옥사보롤란-2-일)-9,9-디-n-옥틸플루오렌 0.40 g, 디클로로비스(트리페닐포스핀)팔라듐 0.5 mg, 트리옥틸메틸암모늄클로라이드(알드리치사 제조, 상품명 「알리콰트 (Aliquat) 336」) 0.10 g, 톨루엔 15 ml를 혼합하고, 90 °C로 가열하였다. 이 반응 용액에 17.5 중량%의 탄산나트륨 수용액 4.1 ml를 적하하고, 2시간 환류시켰다. 반응 후, 페닐붕산 10 mg을 가하고, 추가로 4.5시간 환류시켰다. 이어서, 디에틸디티아카르바산나트륨 수용액을 가하여 80 °C에서 3시간 교반하였다. 냉각 후, 물 10 ml로 2회, 3 중량% 아세트산 수용액 10 ml로 2회, 물 10 ml로 2회 세정하여, 얻어진 용액을 메탄올 120 ml에 적하하고, 여과 취득함으로써 침전물을 얻었다. 이 침전물을 톨루엔 25 ml에 용해시켜, 실리카 겔 상에 활성 알루미늄을 깔은 칼럼을 통과시킴으로써 정제하였다. 얻어진 톨루엔 용액을 메탄올 120 ml에 적하하여, 교반한 후, 얻어진 침전물을 여과 취득하고 건조시켜, 고분자 화합물 1을 얻었다. 얻어진 고분자 화합물 1의 수량은 0.89 g이었다. 또한, 얻어진 고분자 화합물 1의 폴리스티렌 환산의 수 평균 분자량은 1.0×10^5 이고, 폴리스티렌 환산의 중량 평균 분자량은 3.0×10^5 였다.

[0440] (합성에 1: 고분자 화합물 2의 합성)

[0441] N,N'-디(p-브로모페닐)-N,N'-디(p-부틸페닐)-1,4-페닐렌디아민을 단량체로서 중합시킨 고분자 화합물 2를 이하와 같이 하여 합성하였다. 또한, N,N'-디(p-브로모페닐)-N,N'-디(p-부틸페닐)-1,4-페닐렌디아민은 문헌 [Polymer Preprints 2001, 42(2), 587]에 기재된 방법에 따라서 합성할 수 있다.

[0442] 즉, 질소 분위기하 N,N'-디(p-브로모페닐)-N,N'-디(p-부틸페닐)-1,4-페닐렌디아민 2.73 g 및 2,7-비스(1,3,2-디옥사보롤란-2-일)-9,9-디-n-옥틸플루오렌 2.11 g, 아세트산팔라듐 1.8 mg, 트리(o-톨릴)포스핀 11.3 mg, 트리옥틸메틸암모늄클로라이드(알드리치사 제조, 상품명 「알리콰트 336」) 0.52 g, 톨루엔 15 ml를 혼합하여, 90 °C로 가열하였다. 이 반응 용액에 17.5 중량%의 탄산나트륨 수용액 10.9 ml를 적하하여, 6시간 환류시켰다. 반응 후, 페닐붕산 49 mg을 가하고, 추가로 2시간 환류시켰다. 이어서, 디에틸디티아카르바산나트륨 수용액을 가하여 80 °C에서 2시간 교반하였다. 냉각 후, 물 50 ml로 2회, 3 중량% 아세트산 수용액 50 ml로 2회, 물 50 ml로 2회 세정하여, 얻어진 용액을 메탄올 620 ml에 적하하고, 여과 취득함으로써 침전물을 얻었다. 이 침전물을 톨루엔 120 ml에 용해시켜, 실리카 겔 상에 활성 알루미늄을 깔은 칼럼을 통과시킴으로써 정제하였다. 얻어진 톨루엔 용액을 메탄올 620 ml에 적하하고, 교반한 후, 얻어진 침전물을 여과 취득하고 건조시켜, 고분자 화합물 2를 얻었다. 얻어진 고분자 화합물 2의 수량은 3.19 g이었다. 또한, 고분자 화합물 2의 폴리스티렌 환산의 수 평균 분자량은 4.2×10^4 이고, 폴리스티렌 환산의 중량 평균 분자량은 1.7×10^5 였다.

[0443] <고분자 화합물의 형광 스펙트럼 및 색도의 평가>

[0444] 실시예 6 및 합성에 1에서 얻어진 고분자 화합물의 형광 피크 파장 및 CIE 색도 좌표를 각각 표 1에 나타내었다.

표 1

	중합체 조성	형광 피크 파장(nm)	CIE 색도 좌표
실시예 6	고분자 화합물 1	443	(0.15,0.10)
합성에 1	고분자 화합물 2	452	(0.15,0.14)

[0445]

[0446] 표 1에 기재한 결과에서도 알 수 있는 바와 같이, 본 발명의 고분자 화합물(실시예 6)쪽이 보다 단파장으로 보다 색도가 우수한 청색의 형광 피크를 제공하는 것이 확인되었다.

[0447] (실시예 7: 고분자 화합물 3의 합성)

[0448] 질소 분위기하, 2,7-비스(1,3,2-디옥사보롤란-2-일)-9,9-디-n-옥틸플루오렌 2.13 g, 화합물 A 4.31 g 및 3,7-디브로모-10-(4-부틸페닐)-10H-페녹사진(일본 특허 공개 제2004-35221호 공보에 기재된 방법에 따라서 합성) 0.38 g, 디클로로비스(트리페닐포스핀)팔라듐 2.7 mg, 트리옥틸메틸암모늄클로라이드(알드리치사 제조, 상품명 「알리콰트 336」) 0.52 g, 톨루엔 40 ml를 혼합하고, 90 °C로 가열하였다. 이 반응 용액에 17.5 중량%의 탄산나트륨 수용액 20 ml를 적하하여, 7시간 환류시켰다. 반응 후, 페닐붕산 50 mg을 가하고, 추가로 12시간 환

류시켰다. 이어서, 디에틸디티아카르밤산나트륨 수용액을 가하여 85 °C에서 3시간 교반하였다. 냉각 후, 물 50 ml로 2회, 3 중량% 아세트산 수용액 50 ml로 2회, 물 50 ml로 2회 세정하여, 얻어진 용액을 메탄올 600 ml에 적하하고, 여과 취득함으로써 침전물을 얻었다. 이 침전물을 톨루엔 120 ml에 용해시켜, 실리카 겔 상에 활성 알루미늄을 깔은 칼럼을 통과시킴으로써 정제하였다. 얻어진 톨루엔 용액을 메탄올 600 ml에 적하하여, 교반한 후, 얻어진 침전물을 여과 취득하고 건조시켜, 고분자 화합물 3을 얻었다. 얻어진 고분자 화합물 3의 수량은 4.76 g이었다. 또한, 얻어진 고분자 화합물 3의 폴리스티렌 환산의 수 평균 분자량은 7.2×10^4 이고, 폴리스티렌 환산의 중량 평균 분자량은 1.7×10^5 였다.

[0449] (합성예 2: 고분자 화합물 4의 합성)

[0450] 질소 분위기하, 2,7-비스(1,3,2-디옥사보롤란-2-일)-9,9-디(n-옥틸)플루오렌 4.87 g, 2,7-디브로모-9,9-디(n-옥틸)플루오렌 2.96 g 및 2,7-디브로모-9,9-디(3-메틸부틸)플루오렌 1.67 g, 아세트산팔라듐 6 mg, 트리(2-메톡시페닐)포스핀 38 mg, 트리옥틸메틸암모늄클로라이드(알드리치사 제조, 상품명 「알리퀴트 336」) 0.5 g, 톨루엔 40 ml를 혼합하여, 45 °C로 가열하였다. 이 반응 용액에 2M 탄산나트륨 수용액 15 ml를 적하한 후, 환류 온도까지 승온하여 8시간 환류시켰다. 그 후, 브로모벤젠 1.55 g을 가하여 4시간 환류하고, 또한 페닐붕산 1.21 g을 가하고, 추가로 4시간 환류시켰다. 이어서, 디에틸디티아카르밤산나트륨 수용액을 가하여 65 °C에서 4시간 교반하였다. 냉각 후, 분액하고, 물 200 ml로 6회 세정하였다. 톨루엔 5 L에 희석하고, 셀라이트 545 200 g을 깔은 글라스 필터를 통해서 여과하여, 얻어진 여액을 150 ml까지 반농축하였다. 이 용액을 메탄올 1.6 L 중에 적하하고, 여과 취득함으로써 침전물을 얻었다. 이 침전물을 톨루엔 150 ml에 용해시키고, 메탄올 1.6 L 중에 적하, 교반한 후, 얻어진 침전물을 여과 취득하고 건조시켜, 고분자 화합물 4를 얻었다. 얻어진 고분자 화합물 4의 수량은 5.92 g이었다. 또한, 얻어진 고분자 화합물 4의 폴리스티렌 환산의 수 평균 분자량은 8.4×10^4 이고, 폴리스티렌 환산의 중량 평균 분자량은 2.1×10^5 였다.

[0451] (합성예 3: 고분자 화합물 5의 합성)

[0452] 질소 분위기하, 2,7-비스(1,3,2-디옥사보롤란-2-일)-9,9-디-n-옥틸플루오렌 10.4954 g 및 3,7-디브로모-10-(4-부틸페닐)-10H-페녹사진(일본 특허 공개 제2004-35221호 공보에 따라서 합성) 9.3364 g 트리옥틸메틸암모늄클로라이드(알드리치사 제조, 상품명 「알리퀴트 336」) 1.867 g, 톨루엔 120 g에 용해시켜 90 °C로 승온하였다. 아세트산팔라듐 4.4 mg, 트리(2-메틸페닐)포스핀 42.0 mg을 6.5 g의 톨루엔에 용해시킨 용액을 가한 후, 17.5 중량% 탄산나트륨 수용액 38.2 g을 적하하였다. 4시간 환류한 후, 분자량을 측정하자 폴리스티렌 환산의 수 평균 분자량은 3.4×10^4 이고, 폴리스티렌 환산의 중량 평균 분자량은 1.0×10^5 였다. 2,7-비스(1,3,2-디옥사보롤란-2-일)-9,9-디-n-옥틸플루오렌 0.1381 g을 가하고, 추가로 4시간 환류한 바, 폴리스티렌 환산의 수 평균 분자량은 5.5×10^4 , 폴리스티렌 환산의 중량 평균 분자량은 2.9×10^5 가 되었다. 페닐붕산 0.24 g을 가하고, 추가로 14시간 환류시켰다. 이어서, 디에틸디티아카르밤산나트륨 수용액을 가하여 85 °C에서 3시간 교반하였다. 냉각 후, 물 100 ml로 2회, 3 중량% 아세트산 수용액 100 ml로 2회, 물 100 ml로 2회 세정하여, 얻어진 용액을 메탄올 1.2 L에 적하하고, 여과 취득함으로써 침전물을 얻었다. 이 침전물을 톨루엔 250 ml에 용해시켜, 실리카 겔 상에 활성 알루미늄을 깔은 칼럼을 통과시킴으로써 정제하였다. 얻어진 톨루엔 용액을 메탄올 1.2 L에 적하하여 교반한 후, 얻어진 침전물을 여과 취득하고 건조시켜, 고분자 화합물 5를 얻었다. 얻어진 고분자 화합물 5의 수량은 12.2 g이었다. 또한, 얻어진 고분자 화합물 5의 폴리스티렌 환산의 수 평균 분자량은 5.5×10^4 이고, 폴리스티렌 환산의 중량 평균 분자량은 2.4×10^5 였다.

[0453] (실시에 8 내지 10, 비교예 1 및 2: 유기 전계발광 소자 1 내지 5의 제작)

[0454] <실시에 8: 유기 전계발광 소자 1의 제작>

[0455] 스퍼터링법에 의해 150 nm의 두께로 ITO막을 붙인 유리 기판에 폴리(에틸렌디옥시티오펜)/폴리스티렌술폰산의 용액(바이엘사 제조, 상품명 「AI4083」)을 이용하여 스핀 코팅에 의해 65 nm의 두께로 성막하고, 핫 플레이트 상에 200 °C에서 10분간 건조하였다.

[0456] 다음으로 발광층으로서, 크실렌 용매 중에 1.5 중량%의 농도로 용해시킨 고분자 화합물의 혼합물[고분자 화합물 1과 고분자 화합물 4의 몰비(고분자 화합물 1:고분자 화합물 4)가 1:1]을 스핀 코팅에 의해 3000 rpm의 회전 속도로 성막하였다. 막 두께는 약 80 nm였다. 이것을 질소 가스 분위기하 130 °C에서 10분간 건조한 후, 음극으로서 바륨을 약 5 nm, 이어서 알루미늄을 약 80 nm 증착하여 유기 전계발광 소자를 제작하였다. 또한, 진공

도가 1×10^{-4} Pa 이하에 도달한 후에 금속의 증착을 개시하였다.

[0457] <실시예 9, 비교예 1: 유기 전계발광 소자 2 및 3의 제작>

[0458] 발광층을 성막하기 위한 고분자 화합물로서 표 2에 기재된 것을 이용한 것 이외에는 실시예 8과 동일하게 하여 유기 전계발광 소자를 제작하였다.

[0459] <유기 전계발광 소자의 발광색, 구동 전압 및 휘도 반감 수명의 측정>

[0460] 실시예 8 및 9, 비교예 1에서 얻어진 유기 전계발광 소자의 발광색(CIE 색도 좌표), 구동 전압 및 휘도 반감 수명을 측정하였다. CIE 색도 좌표, 구동 전압, 구동 전류는 도쿄 시스템 카이하쯔 가부시끼가이샤 제조의 유기 EL 테스트 시스템(ST-P 시리즈)으로 측정하였다. 휘도 반감 수명은 EHC사 제조의 PEL-100T 시리즈로 측정하였다. 얻어진 결과를 각각 표 2에 나타내었다. 또한, 구동 전압은 휘도 1000 cd/m²의 조건으로 유기 전계발광 소자를 구동시킨 경우의 구동 전압을 측정하였다. 또한, 휘도 반감 수명은 구동 전류 3 mA의 조건으로 유기 전계발광 소자를 구동시킨 경우에 있어서, 휘도가 초기의 휘도의 반이 되는 시간을 측정하여, 비교예 1의 값을 1로 했을 때의 상대값으로 나타내었다.

표 2

	발광층 [고분자 화합물의 혼합물의 조성(몰비)]	CIE 색도 좌표 (x, y)	1000cd/m ² 에서의 구동 전압 (V)	휘도 반감 수명 (상대값)
실시예 8	고분자 화합물1 : 고분자 화합물4 = 1 : 1	(0.15, 0.11)	5.8	5.1
실시예 9	고분자 화합물3 : 고분자 화합물4 = 1 : 1	(0.14, 0.13)	6.1	26.0
비교예 1	고분자 화합물5 : 고분자 화합물4 = 1 : 1	(0.14, 0.17)	6.5	1.0

[0461]

[0462] <실시예 10: 유기 전계발광 소자 4의 제작>

[0463] 스퍼터링법에 의해 150 nm의 두께로 ITO막을 붙인 유리 기판에 폴리(에틸렌디옥시티오펜)/폴리스티렌술포산의 용액(바이엘사 제조, 상품명 「AI4083」)을 이용하여 스핀 코팅에 의해 65 nm의 두께로 성막하고, 핫 플레이트 상에 200 °C에서 10분간 건조하였다.

[0464] 다음으로, 실시예 6에서 얻어진 고분자 화합물 1을 0.8 중량%의 크실렌 용액의 상태로 스핀 코팅하여, 약 20 nm의 두께로 성막하였다. 그 후 질소 가스 분위기하 180 °C에서 핫 플레이트 상에서 180 °C, 60분간 건조하여 인터레이어층을 형성하였다.

[0465] 다음으로, 크실렌 용매 중에 1.2 중량%의 농도로 용해시킨 고분자 화합물(서메이션 가부시끼가이샤 제조, 상품명 「루메이션(Lumation) BP105」)을 스핀 코팅에 의해 2000 rpm의 회전 속도로 성막하여, 발광층을 형성하였다. 막 두께는 약 60 nm였다. 이것을 질소 가스 분위기하 130 °C에서 10분간 건조한 후, 음극으로서 바륨을 약 5 nm, 이어서 알루미늄을 약 80 nm 증착하여, 유기 전계발광 소자를 제작하였다. 또한, 진공도가 1×10^{-4} Pa 이하에 도달한 후에 금속의 증착을 개시하였다.

[0466] <비교예 2: 유기 전계발광 소자 5의 제작>

[0467] 인터레이어층을 성막하기 위한 고분자 화합물로서 합성예 1에서 얻어진 고분자 화합물 2를 이용한 것 이외에는 실시예 10과 동일하게 하여 유기 전계발광 소자를 제작하였다.

[0468] <유기 전계발광 소자의 발광색, 구동 전압 및 휘도 반감 수명의 측정>

[0469] 실시예 10 및 비교예 2에서 얻어진 유기 전계발광 소자의 발광색(CIE 색도 좌표), 구동 전압 및 휘도 반감 수명을 측정하였다. 얻어진 결과를 각각 표 3에 나타내었다. 또한, 구동 전압은 휘도 1000 cd/m²의 조건으로 유기

전계발광 소자를 구동시킨 경우의 구동 전압을 측정하였다. 또한, 휘도 반감 수명은 각각 초기 휘도 2400 cd/m²로 발광시켜, 그 때의 전류량을 일정하게 하여 구동하고, 초기의 휘도의 반이 되는 시간을 측정하여, 비교예 2의 값을 1로 했을 때의 상대값으로 나타내었다.

표 3

	인터레이어층	발광층	CIE 색도 좌표 (x, y)	1000cd/m ² 에서의 구동 전압 (V)	휘도 반감 수명 (상대값)
실시예 10	고분자 화합물 1	고분자 화합물 (루메이션 BP105)	(0.14, 0.17)	5.0	1.5
비교예 2	고분자 화합물 2	고분자 화합물 (루메이션 BP105)	(0.15, 0.19)	6.5	1.0

[0470]

산업상 이용가능성

[0471]

이상 설명한 바와 같이, 본 발명에 따르면, 유기 전계발광 소자의 청색 발광 재료로서 이용한 경우, 색도가 우수한 화합물을 제공하는 것이 가능해진다. 또한, 본 발명의 화합물을 이용함으로써 유기 전계발광 소자로 했을 때의 구동 전압을 낮추는 것이 가능해진다.

专利名称(译)	用于制备相同的化合物和方法，以及使用该化合物的油墨组合物		
公开(公告)号	KR1020100075830A	公开(公告)日	2010-07-05
申请号	KR1020107004410	申请日	2008-07-25
[标]申请(专利权)人(译)	住友化学有限公司 另一位家长住友化学有限公司是分租		
申请(专利权)人(译)	住友化学(株)制		
当前申请(专利权)人(译)	住友化学(株)制		
[标]发明人	KOBAYASHI SATOSHI		
发明人	KOBAYASHI, SATOSHI		
IPC分类号	C09K11/06 C08G61/12 C09D C09K C09D11/00 C08G H01L H01L51/50 C07D471/04 C08G61/00 C09D11/322 H01L51/05 H01L51/30		
CPC分类号	C09K2211/1011 C07D471/04 H01L51/50 H01L51/0054 C08G2261/3142 H01L51/0055 C08G2261/5222 C09D11/32 C09K11/06 H01L51/0072 C07C215/68 H01L51/0059 C09K2211/1029 C07C229/58 C09D5/24 C08G2261/124 C08G61/12 C08G2261/411 C09D11/36 C08G2261/3162 H01L51/0052 H01L51/0094 H01L51/0504 C08G2261/344 C08G2261/3241 C08G61/122 C09D11/52 H01L2251/30		
代理人(译)	LEE, SEOK JAE CHANG, SOO KIL		
优先权	2007198637 2007-07-31 JP		
外部链接	Espacenet		

摘要(译)

包含由下列化学式(1)表示的结构(除了至少一个氢原子以外的残基的结构由下列化学式(1)表示的结构)的化合物。图像(特殊参考)(化学式(1))，环，B环和C环的存在分别表示单辐射的方向环或方向环凝聚。R¹和R⁴分别表示R²，R³和R⁵和R⁶分别表示氢原子，烷基，芳基，芳烷基，链烯基或炔基)。

