



(19) 대한민국특허청(KR)  
(12) 공개특허공보(A)

(11) 공개번호 10-2014-0108637  
(43) 공개일자 2014년09월12일

(51) 국제특허분류(Int. Cl.)  
C09K 11/06 (2006.01) C07D 209/82 (2006.01)  
H01L 51/50 (2006.01)  
(21) 출원번호 10-2014-7015282  
(22) 출원일자(국제) 2012년12월04일  
심사청구일자 없음  
(85) 번역문제출일자 2014년06월05일  
(86) 국제출원번호 PCT/JP2012/081375  
(87) 국제공개번호 WO 2013/084881  
국제공개일자 2013년06월13일  
(30) 우선권주장  
JP-P-2011-266238 2011년12월05일 일본(JP)  
JP-P-2012-083146 2012년03월30일 일본(JP)

(71) 출원인  
이데미쓰 고산 가부시키키가이샤  
일본 도쿄도 지요다쿠 마루노우치 3초메 1반 1고  
(72) 발명자  
미즈키 유미코  
일본 지바켄 소테가우라시 가미이즈미 1280반치  
이토 미츠노리  
일본 지바켄 소테가우라시 가미이즈미 1280반치  
(뒷면에 계속)  
(74) 대리인  
제일특허법인

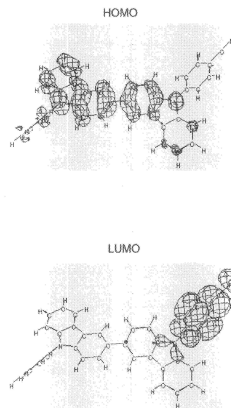
전체 청구항 수 : 총 18 항

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

(57) 요약

특정 구조의 중심 골격에, 사이아노기로 치환된 방향족 탄화수소기 또는 사이아노기로 치환된 헤테로환기가 특정 위치에서 결합된 유기 전기발광 소자용 재료, 및 양극과 음극 사이에 발광층을 함유하는 유기 박막층을 갖는 유기 전기발광 소자로서, 상기 유기 전기발광 소자용 재료를 함유하는 유기 박막층을 1층 이상 갖는 것을 특징으로 하는 유기 전기발광 소자에 의해, 양호한 발광 효율의 유기 전기발광 소자를 실현하는 유기 전기발광 소자용 재료를 제공한다.

대표도 - 도2



(72) 발명자

**이노우에 테츠야**

일본 지바켄 소데가우라시 가미이즈미 1280만치

**히비노 구미코**

일본 지바켄 소데가우라시 가미이즈미 1280만치

**니시무라 가즈키**

일본 지바켄 소데가우라시 가미이즈미 1280만치

**요시다 게이**

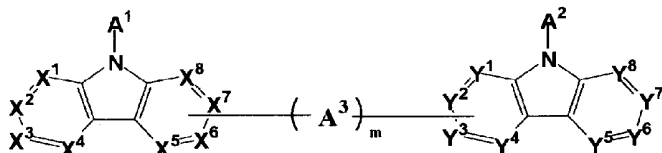
일본 지바켄 소데가우라시 가미이즈미 1280만치

## 특허청구의 범위

### 청구항 1

하기 화학식 I로 표시되는 유기 전기발광 소자용 재료.

[화학식 I]



[화학식 I 중,

$A^1$  및  $A^2$ 는 각각 독립적으로, 치환 또는 비치환된 환 형성 탄소수 6~30의 방향족 탄화수소기, 또는 치환 또는 비치환된 환 형성 원자수 5~30의 헤테로환기를 나타낸다.

$A^3$ 은 치환 또는 비치환된 환 형성 탄소수 6 이하의 단환(單環) 탄화수소기, 또는 치환 또는 비치환된 환 형성 원자수 6 이하의 단환 헤테로환기를 나타낸다.

m은 0~3의 정수를 나타낸다.

$X^1 \sim X^8$  및  $Y^1 \sim Y^8$ 은 각각 독립적으로, N 또는  $CR^a$ 를 나타낸다.

$R^a$ 는 각각 독립적으로, 수소 원자, 치환 또는 비치환된 환 형성 탄소수 6~30의 방향족 탄화수소기, 치환 또는 비치환된 환 형성 원자수 5~30의 헤테로환기, 치환 또는 비치환된 탄소수 1~30의 알킬기, 치환 또는 비치환된 실릴기 또는 할로젠 원자를 나타낸다. 단,  $X^5 \sim X^8$  중 1개와  $Y^1 \sim Y^4$  중 1개는,  $A^3$ 을 통해서 또는 직접 결합되어 있다.

또한, 화학식 I은, 하기 (i), (ii) 중 적어도 어느 하나를 만족한다.

(i)  $A^1$ ,  $A^2$  중 적어도 1개가, 사이아노기로 치환된 환 형성 탄소수 6~30의 방향족 탄화수소기, 또는 사이아노기로 치환된 환 형성 원자수 5~30의 헤테로환기이다.

(ii)  $X^1 \sim X^4$  및  $Y^5 \sim Y^8$  중 적어도 1개는  $CR^a$ 이며,  $X^1 \sim X^4$  및  $Y^5 \sim Y^8$ 에 있어서의  $R^a$  중 적어도 1개는 사이아노기로 치환된 환 형성 탄소수 6~30의 방향족 탄화수소기, 또는 사이아노기로 치환된 환 형성 원자수 5~30의 헤테로환기이다.

단,  $R^a$ 가 복수 존재하는 경우, 복수의  $R^a$ 는 각각 동일해도 상이해도 좋다.]

### 청구항 2

제 1 항에 있어서,

상기  $A^1$  및  $A^2$ 로 표시되는 환 형성 탄소수 6~30의 방향족 탄화수소기 또는 환 형성 원자수 5~30의 헤테로환기가 치환기를 갖는 경우, 해당 치환기가, 사이아노기, 할로젠 원자, 탄소수 1~20의 알킬기, 탄소수 3~20의 사이클로알킬기, 탄소수 1~20의 알콕시기, 탄소수 1~20의 할로알킬기, 탄소수 1~20의 할로알콕시기, 탄소수 1~10의 알킬실릴기, 환 형성 탄소수 6~30의 아릴기, 환 형성 탄소수 6~30의 아릴옥시기, 탄소수 6~30의 아르알킬기 및 환 형성 원자수 5~30의 헤테로아릴기로부터 선택되는 1종 이상인 유기 전기발광 소자용 재료.

### 청구항 3

제 1 항 또는 제 2 항에 있어서,

상기 (i)을 만족하고, 상기 (ii)를 만족하지 않는 유기 전기발광 소자용 재료.

#### 청구항 4

제 1 항 또는 제 2 항에 있어서,

상기 (ii)를 만족하고, 상기 (i)을 만족하지 않는 유기 전기발광 소자용 재료.

#### 청구항 5

제 1 항 또는 제 2 항에 있어서,

상기 (i) 및 상기 (ii)를 만족하는 유기 전기발광 소자용 재료.

#### 청구항 6

제 1 항 내지 제 3 항 및 제 5 항 중 어느 한 항에 있어서,

$A^1$  및  $A^2$  중 적어도 1개가, 사이아노기로 치환된 페닐기, 사이아노기로 치환된 나프틸기, 사이아노기로 치환된 페난트릴기, 사이아노기로 치환된 다이벤조퓨란일기, 사이아노기로 치환된 다이벤조싸이오페닐기, 사이아노기로 치환된 바이페닐기, 사이아노기로 치환된 터페닐기, 사이아노기로 치환된 9,9-다이페닐플루오렌일기, 사이아노기로 치환된 9,9'-스파이로바이[9H-플루오렌]-2-일기, 사이아노기로 치환된 9,9-다이메틸플루오렌일기, 또는 사이아노기로 치환된 트라이페닐렌일기인 유기 전기발광 소자용 재료.

#### 청구항 7

제 1 항 내지 제 3 항, 제 5 항 및 제 6 항 중 어느 한 항에 있어서,

$A^1$ 이 사이아노기로 치환되어 있고,  $A^2$ 가 사이아노기로 치환되어 있지 않은 유기 전기발광 소자용 재료.

#### 청구항 8

제 1 항, 제 4 항 및 제 5 항 중 어느 한 항에 있어서,

$X^1 \sim X^4$  및  $Y^5 \sim Y^8$  중 적어도 1개는  $CR^a$ 이며,  $X^1 \sim X^4$  및  $Y^5 \sim Y^8$ 에 있어서의  $R^a$  중 적어도 1개는 사이아노기로 치환된 페닐기, 사이아노기로 치환된 나프틸기, 사이아노기로 치환된 페난트릴기, 사이아노기로 치환된 다이벤조퓨란일기, 사이아노기로 치환된 다이벤조싸이오페닐기, 사이아노기로 치환된 바이페닐기, 사이아노기로 치환된 터페닐기, 사이아노기로 치환된 9,9-다이페닐플루오렌일기, 사이아노기로 치환된 9,9'-스파이로바이[9H-플루오렌]-2-일기, 사이아노기로 치환된 9,9-다이메틸플루오렌일기, 또는 사이아노기로 치환된 트라이페닐렌일기인 유기 전기발광 소자용 재료.

#### 청구항 9

제 1 항 내지 제 8 항 중 어느 한 항에 있어서,

$X^6$ 과  $Y^3$ 이,  $A^3$ 을 통해서 또는 직접 결합되어 있는 유기 전기발광 소자용 재료.

#### 청구항 10

제 1 항 내지 제 8 항 중 어느 한 항에 있어서,

$X^6$ 과  $Y^2$ 가,  $A^3$ 을 통해서 또는 직접 결합되어 있는 유기 전기발광 소자용 재료.

#### 청구항 11

제 1 항 내지 제 8 항 중 어느 한 항에 있어서,

$X^7$ 과  $Y^3$ 이,  $A^3$ 을 통해서 또는 직접 결합되어 있는 유기 전기발광 소자용 재료.

#### 청구항 12

제 1 항 내지 제 11 항 중 어느 한 항에 있어서,  
m이 0인 유기 전기발광 소자용 재료.

### 청구항 13

제 1 항 내지 제 11 항 중 어느 한 항에 있어서,  
m이 1인 유기 전기발광 소자용 재료.

### 청구항 14

음극과 양극 사이에 발광층을 포함하는 1층 이상의 유기 박막층을 갖고, 상기 유기 박막층 중 적어도 1층이, 제 1 항 내지 제 13 항 중 어느 한 항에 기재된 유기 전기발광 소자용 재료를 함유하는 유기 전기발광 소자.

### 청구항 15

제 14 항에 있어서,  
상기 발광층이 상기 유기 전기발광 소자용 재료를 함유하는 유기 전기발광 소자.

### 청구항 16

제 14 항 또는 제 15 항에 있어서,  
상기 발광층이 인광 발광 재료를 함유하고, 상기 인광 발광 재료가 이리듐(Ir), 오스뮴(Os), 백금(Pt)으로부터 선택되는 금속 원자의 오쏘메탈화 착체인 유기 전기발광 소자.

### 청구항 17

제 14 항 내지 제 16 항 중 어느 한 항에 있어서,  
상기 음극과 상기 발광층 사이에, 상기 발광층에 인접하는 층을 갖고, 상기 발광층에 인접하는 층이, 상기 유기 전기발광 소자용 재료를 함유하는 유기 전기발광 소자.

### 청구항 18

제 14 항 내지 제 16 항 중 어느 한 항에 있어서,  
상기 음극과 상기 발광층 사이에, 상기 발광층에 인접하는 장벽층을 갖고, 상기 장벽층이 제 1 항 내지 제 13 항 중 어느 한 항에 기재된 유기 전기발광 소자용 재료를 함유하는 유기 전기발광 소자.

## 명세서

### 기술 분야

[0001] 본 발명은 유기 전기발광 소자용 재료 및 그것을 이용한 유기 전기발광 소자에 관한 것이다.

### 배경 기술

[0002] 유기 전기발광 소자(이하, 유기 EL 소자라고도 한다)에 전압을 인가하면, 양극으로부터 정공이, 또한 음극으로부터 전자가 각각 발광층으로 주입된다. 그리고, 발광층에 있어서, 주입된 정공과 전자가 재결합하여 여기자가 형성된다. 이때, 전자 스핀의 통계칙에 의해, 1중항 여기자 및 3중항 여기자가 25%:75%의 비율로 생성된다. 발광 원리에 따라서 분류한 경우, 형광형에서는, 1중항 여기자에 의한 발광을 이용하기 때문에, 유기 EL 소자의 내부 양자 효율은 25%가 한계라고 말해지고 있다. 한편, 인광형에서는, 3중항 여기자에 의한 발광을 이용하기 때문에, 1중항 여기자로부터 항간 교차가 효율적으로 행해진 경우에는 내부 양자 효율이 100%까지 높아진다는 것이 알려져 있다.

[0003] 종래, 유기 EL 소자에 있어서는, 형광형 및 인광형의 발광 메커니즘에 따라, 최적의 소자 설계가 이루어져 왔다. 특히 인광형의 유기 EL 소자에 대해서는, 그의 발광 특성 때문에, 형광 소자 기술의 단순한 전용으로는 고성능 소자가 얻어지지 않는다는 것이 알려져 있다. 그 이유는, 일반적으로 이하와 같이 생각되고 있다.

- [0004] 우선, 인광 발광은 3중항 여기자를 이용한 발광이기 때문에, 발광층에 이용하는 화합물의 에너지 갭이 커야 한다. 왜냐하면, 어떤 화합물의 1중항 에너지(최저 여기 1중항 상태와 기저 상태의 에너지 차를 말한다)의 값은, 통상 그 화합물의 3중항 에너지(최저 여기 3중항 상태와 기저 상태의 에너지 차를 말한다)의 값보다도 크기 때문이다.
- [0005] 따라서, 인광 발광성 도펀트 재료의 3중항 에너지를 효율적으로 소자 내에 가두기 위해서는, 우선, 인광 발광성 도펀트 재료의 3중항 에너지보다도 큰 3중항 에너지를 갖는 호스트 재료를 발광층에 이용하여야 한다. 또, 발광층에 인접하는 전자 수송층 및 정공 수송층을 설치할 때에, 전자 수송층 및 정공 수송층에도 인광 발광성 도펀트 재료보다도 큰 3중항 에너지를 갖는 화합물을 이용하여야 한다. 이와 같이, 종래의 유기 EL 소자의 소자 설계 사상에 기초하는 경우, 형광형의 유기 EL 소자에 이용하는 화합물과 비교하여, 보다 큰 에너지 갭을 갖는 화합물을 인광형의 유기 EL 소자에 이용하는 것으로 연결되어, 유기 EL 소자 전체의 구동 전압이 상승한다.
- [0006] 또한, 형광 소자에서 유용했던 산화 내성이나 환원 내성이 높은 탄화수소계의 화합물은  $\pi$  전자운의 넓이가 크기 때문에, 에너지 갭이 작다. 그 때문에, 인광형의 유기 EL 소자에서는, 이와 같은 탄화수소계의 화합물이 선택되기 어려워, 산소나 질소 등의 헤테로 원자를 포함한 유기 화합물이 선택되고, 그 결과, 인광형의 유기 EL 소자는, 형광형의 유기 EL 소자와 비교하여 수명이 짧다고 하는 문제를 갖는다.
- [0007] 또, 인광 발광성 도펀트 재료의 3중항 여기자의 여기자 완화 속도가 1중항 여기자와 비교하여 매우 긴 것도 소자 성능에 큰 영향을 준다. 즉, 1중항 여기자로부터의 발광은, 발광에 연결되는 완화 속도가 빠르기 때문에, 발광층의 주변층(예컨대, 정공 수송층이나 전자 수송층)으로의 여기자의 확산이 일어나기 어려워, 효율적인 발광이 기대된다. 한편, 3중항 여기자로부터의 발광은, 스핀 금지(禁制)이며 완화 속도가 느리기 때문에, 주변층으로의 여기자의 확산이 일어나기 쉬워, 특정한 인광 발광성 화합물 이외로부터는 열적인 에너지 실향이 일어나 버린다. 즉, 형광형의 유기 EL 소자와 비교하여, 전자 및 정공의 재결합 영역의 컨트롤이 보다 중요해진다.
- [0008] 이상과 같은 이유로부터, 인광형의 유기 EL 소자의 고성능화에 있어서는, 형광형의 유기 EL 소자와 다른 재료 선택 및 소자 설계가 필요해진다.
- [0009] 이와 같은 유기 EL 재료로서, 종래부터, 높은 3중항 에너지를 나타내고, 또한 정공 수송성 재료의 주요 골격으로서 알려져 있는 카바졸 유도체는, 유용한 인광 호스트 재료로서 이용되고 있었다.
- [0010] 특허문헌 1에는, 2개의 카바졸이 연결된 비스카바졸 골격에 질소 함유 헤테로환기를 도입한 화합물을 유기 EL 소자용 재료로서 이용하는 것이 기재되어 있다. 특허문헌 1에 기재된 화합물은, 정공 수송성의 카바졸 골격에 대하여 전자 결핍성의 질소 함유 헤테로환기를 도입하는 것에 의해, 전하 수송의 밸런스를 잡은 분자 설계로 되어 있다. 또한, 특허문헌 2에는, 2개의 카바졸이 바이페닐기를 통해서 결합한 N,N-비스카바졸 화합물에 대하여, 2개의 카바졸 사이의 바이페닐기에 전자 흡인성 기를 도입하는 것에 의해, 전하의 주입성을 향상시키는 것이 기재되어 있다.
- [0011] 그러나, 여전히 유기 EL 소자의 발광 효율 향상이 요구되고 있어, 보다 높은 발광 효율을 실현 가능한 유기 EL 소자용 재료의 개발이 요망되고 있다.

## 선행기술문헌

### 특허문헌

- [0012] (특허문헌 0001) W02011/132684호 공보  
(특허문헌 0002) 일본 특허공개 2011-176258호 공보

## 발명의 내용

### 해결하려는 과제

- [0013] 본 발명은 발광 효율이 양호한 유기 전기발광 소자를 실현 가능한 유기 전기발광 소자용 재료, 및 유기 전기발광 소자를 제공하는 것을 목적으로 한다.

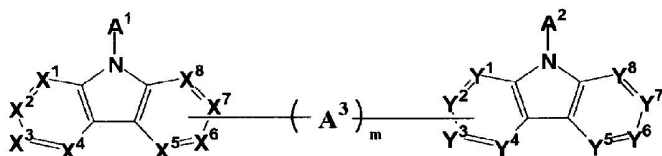
## 과제의 해결 수단

[0014] 본 발명자들이 상기 목적을 달성하기 위해 예의 연구를 거듭한 결과, 하기 화학식 I로 표시되는 중심 골격에, 사이아노기로 치환된 방향족 탄화수소기 또는 사이아노기로 치환된 헤테로환기가 특정 위치에서 결합된 구조의 화합물을 유기 EL 소자용 재료로서 이용하는 것에 의해, 우수한 발광 효율의 유기 EL 소자를 실현 가능하다는 것을 발견하여, 본 발명에 이르렀다.

[0015] 즉, 본 발명은 이하의 발명을 제공하는 것이다.

[0016] 1. 하기 화학식 I로 표시되는 유기 전기발광 소자용 재료.

[0017] [화학식 I]



[0018]

[0019] [화학식 I 중,

[0020]  $A^1$  및  $A^2$ 는 각각 독립적으로, 치환 또는 비치환된 환 형성 탄소수 6~30의 방향족 탄화수소기, 또는 치환 또는 비치환된 환 형성 원자수 5~30의 헤테로환기를 나타낸다.

[0021]  $A^3$ 은 치환 또는 비치환된 환 형성 탄소수 6 이하의 단환(單環) 탄화수소기, 또는 치환 또는 비치환된 환 형성 원자수 6 이하의 단환 헤테로환기를 나타낸다.

[0022] m은 0~3의 정수를 나타낸다.

[0023]  $X^1 \sim X^8$  및  $Y^1 \sim Y^8$ 은 각각 독립적으로, N 또는  $CR^a$ 를 나타낸다.

[0024]  $R^a$ 는 각각 독립적으로, 수소 원자, 치환 또는 비치환된 환 형성 탄소수 6~30의 방향족 탄화수소기, 치환 또는 비치환된 환 형성 원자수 5~30의 헤테로환기, 치환 또는 비치환된 탄소수 1~30의 알킬기, 치환 또는 비치환된 실릴기 또는 할로젠 원자를 나타낸다. 단,  $X^5 \sim X^8$  중 1개와  $Y^1 \sim Y^4$  중 1개는,  $A^3$ 을 통해서 또는 직접 결합되어 있다.

[0025] 또한, 화학식 I은, 하기 (i), (ii) 중 적어도 어느 하나를 만족한다.

[0026] (i)  $A^1$ ,  $A^2$  중 적어도 1개가, 사이아노기로 치환된 환 형성 탄소수 6~30의 방향족 탄화수소기, 또는 사이아노기로 치환된 환 형성 원자수 5~30의 헤테로환기이다.

[0027] (ii)  $X^1 \sim X^4$  및  $Y^5 \sim Y^8$  중 적어도 1개는  $CR^a$ 이며,  $X^1 \sim X^4$  및  $Y^5 \sim Y^8$ 에 있어서의  $R^a$  중 적어도 1개는 사이아노기로 치환된 환 형성 탄소수 6~30의 방향족 탄화수소기, 또는 사이아노기로 치환된 환 형성 원자수 5~30의 헤테로환기이다.

[0028] 단,  $R^a$ 가 복수 존재하는 경우, 복수의  $R^a$ 는 각각 동일해도 상이해도 좋다.]

[0029] 2. 상기  $A^1$  및  $A^2$ 로 표시되는 환 형성 탄소수 6~30의 방향족 탄화수소기 또는 환 형성 원자수 5~30의 헤테로환기가 치환기를 갖는 경우, 해당 치환기가, 사이아노기, 할로젠 원자, 탄소수 1~20의 알킬기, 탄소수 3~20의 사이클로알킬기, 탄소수 1~20의 알콕시기, 탄소수 1~20의 할로알킬기, 탄소수 1~20의 할로알콕시기, 탄소수 1~10의 알킬실릴기, 환 형성 탄소수 6~30의 아릴기, 환 형성 탄소수 6~30의 아릴옥시기, 탄소수 6~30의 아르알킬기 및 환 형성 원자수 5~30의 헤테로아릴기로부터 선택되는 1종 이상인 상기 1에 기재된 유기 전기발광 소자용 재료.

[0030] 3. 상기 (i)을 만족하고, 상기 (ii)를 만족하지 않는 상기 1 또는 2에 기재된 유기 전기발광 소자용 재료.

[0031] 4. 상기 (ii)를 만족하고, 상기 (i)을 만족하지 않는 상기 1 또는 2에 기재된 유기 전기발광 소자용 재료.

[0032] 5. 상기 (i) 및 상기 (ii)를 만족하는 상기 1 또는 2에 기재된 유기 전기발광 소자용 재료.

- [0033] 6.  $A^1$  및  $A^2$  중 적어도 1개가, 사이아노기로 치환된 페닐기, 사이아노기로 치환된 나프틸기, 사이아노기로 치환된 페난트릴기, 사이아노기로 치환된 다이벤조퓨란일기, 사이아노기로 치환된 다이벤조싸이오페닐기, 사이아노기로 치환된 바이페닐기, 사이아노기로 치환된 터페닐기, 사이아노기로 치환된 9,9-다이페닐플루오렌일기, 사이아노기로 치환된 9,9'-스파이로바이[9H-플루오렌]-2-일기, 사이아노기로 치환된 9,9-다이메틸플루오렌일기, 또는 사이아노기로 치환된 트라이페닐렌일기인 상기 1 내지 3 및 5 중 어느 하나에 기재된 유기 전기발광 소자용 재료.
- [0034] 7.  $A^1$ 이 사이아노기로 치환되어 있고,  $A^2$ 가 사이아노기로 치환되어 있지 않은 상기 1 내지 3, 5 및 6 중 어느 하나에 기재된 유기 전기발광 소자용 재료.
- [0035] 8.  $X^1 \sim X^4$  및  $Y^5 \sim Y^8$  중 적어도 1개는  $CR^a$ 이며,  $X^1 \sim X^4$  및  $Y^5 \sim Y^8$ 에 있어서의  $R^a$  중 적어도 1개는 사이아노기로 치환된 페닐기, 사이아노기로 치환된 나프틸기, 사이아노기로 치환된 페난트릴기, 사이아노기로 치환된 다이벤조퓨란일기, 사이아노기로 치환된 다이벤조싸이오페닐기, 사이아노기로 치환된 바이페닐기, 사이아노기로 치환된 터페닐기, 사이아노기로 치환된 9,9-다이페닐플루오렌일기, 사이아노기로 치환된 9,9'-스파이로바이[9H-플루오렌]-2-일기, 사이아노기로 치환된 9,9-다이메틸플루오렌일기, 또는 사이아노기로 치환된 트라이페닐렌일기인 상기 1, 4 및 5 중 어느 하나에 기재된 유기 전기발광 소자용 재료.
- [0036] 9.  $X^6$ 과  $Y^3$ 이,  $A^3$ 을 통해서 또는 직접 결합되어 있는 상기 1 내지 8 중 어느 하나에 기재된 유기 전기발광 소자용 재료.
- [0037] 10.  $X^6$ 과  $Y^2$ 가,  $A^3$ 을 통해서 또는 직접 결합되어 있는 상기 1 내지 8 중 어느 하나에 기재된 유기 전기발광 소자용 재료.
- [0038] 11.  $X^7$ 과  $Y^3$ 이,  $A^3$ 을 통해서 또는 직접 결합되어 있는 상기 1 내지 8 중 어느 하나에 기재된 유기 전기발광 소자용 재료.
- [0039] 12. m이 0인 상기 1 내지 11 중 어느 하나에 기재된 유기 전기발광 소자용 재료.
- [0040] 13. m이 1인 상기 1 내지 11 중 어느 하나에 기재된 유기 전기발광 소자용 재료.
- [0041] 14. 음극과 양극 사이에 발광층을 포함하는 1층 이상의 유기 박막층을 갖고, 상기 유기 박막층 중 적어도 1층이, 상기 1 내지 13 중 어느 하나에 기재된 유기 전기발광 소자용 재료를 함유하는 유기 전기발광 소자.
- [0042] 15. 상기 발광층이 상기 유기 전기발광 소자용 재료를 함유하는 상기 14에 기재된 유기 전기발광 소자.
- [0043] 16. 상기 발광층이 인광 발광 재료를 함유하고, 상기 인광 발광 재료가 이리듐(Ir), 오스뮴(Os), 백금(Pt)으로부터 선택되는 금속 원자의 오쏘메탈화 착체인 상기 14 또는 15에 기재된 유기 전기발광 소자.
- [0044] 17. 상기 음극과 상기 발광층 사이에, 상기 발광층에 인접하는 층을 갖고, 상기 발광층에 인접하는 층이, 상기 유기 전기발광 소자용 재료를 함유하는 상기 14 내지 16 중 어느 하나에 기재된 유기 전기발광 소자.
- [0045] 18. 상기 음극과 상기 발광층 사이에, 상기 발광층에 인접하는 장벽층을 갖고, 상기 장벽층이 상기 1 내지 13 중 어느 하나에 기재된 유기 전기발광 소자용 재료를 함유하는 상기 14 내지 16 중 어느 하나에 기재된 유기 전기발광 소자.

### 발명의 효과

- [0046] 본 발명에 의하면, 발광 효율이 양호한 유기 전기발광 소자 및 그것을 실현하는 유기 전기발광 소자용 재료를 제공할 수 있다.

### 도면의 간단한 설명

- [0047] 도 1은 본 발명의 유기 EL 소자의 일례를 나타내는 개략 단면도이다.
- 도 2는 본 발명의 유기 EL 소자용 재료에 따른 화합물 1의 HOMO 및 LUMO의 분자 궤도 계산 결과를 나타내는 도면이다.
- 도 3은 본 발명의 유기 EL 소자용 재료에 따른 화합물 2의 HOMO 및 LUMO의 분자 궤도 계산 결과를 나타내는 도

면이다.

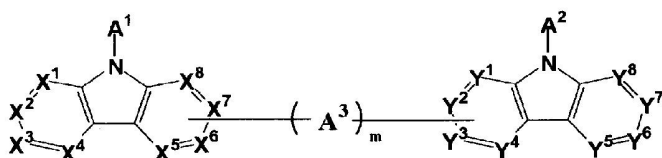
도 4는 특허문헌 2에 기재된 화합물 a의 HOMO 및 LUMO의 분자 궤도 계산 결과를 나타내는 도면이다.

### 발명을 실시하기 위한 구체적인 내용

[0048] (유기 전기발광 소자용 재료)

[0049] 본 발명의 유기 전기발광 소자용 재료(이하, 「유기 EL 소자용 재료」라고 약칭하는 경우가 있다)는, 하기 화학식 I로 표시되는 화합물이다.

[0050] [화학식 I]



[0052] [화학식 I 중,

[0053]  $A^1$  및  $A^2$ 는 각각 독립적으로, 치환 또는 비치환된 환 형성 탄소수 6~30의 방향족 탄화수소기, 또는 치환 또는 비치환된 환 형성 원자수 5~30의 헤테로환기를 나타낸다.

[0054]  $A^3$ 은 치환 또는 비치환된 환 형성 탄소수 6 이하의 단환 탄화수소기, 또는 치환 또는 비치환된 환 형성 원자수 6 이하의 단환 헤테로환기를 나타낸다.

[0055] m은 0~3의 정수를 나타낸다.

[0056]  $X^1 \sim X^8$  및  $Y^1 \sim Y^8$ 은 각각 독립적으로, N 또는  $CR^a$ 를 나타낸다.

[0057]  $R^a$ 는 각각 독립적으로, 수소 원자, 치환 또는 비치환된 환 형성 탄소수 6~30의 방향족 탄화수소기, 치환 또는 비치환된 환 형성 원자수 5~30의 헤테로환기, 치환 또는 비치환된 탄소수 1~30의 알킬기, 치환 또는 비치환된 실릴기 또는 할로젠 원자를 나타낸다. 단,  $X^5 \sim X^8$  중 1개와  $Y^1 \sim Y^4$  중 1개는,  $A^3$ 을 통해서 또는 직접 결합되어 있다.

[0058] 또한, 화학식 I은, 하기 (i), (ii) 중 적어도 어느 하나를 만족한다.

[0059] (i)  $A^1$ ,  $A^2$  중 적어도 1개가, 사이아노기로 치환된 환 형성 탄소수 6~30의 방향족 탄화수소기, 또는 사이아노기로 치환된 환 형성 원자수 5~30의 헤테로환기이다.

[0060] (ii)  $X^1 \sim X^4$  및  $Y^5 \sim Y^8$  중 적어도 1개는  $CR^a$ 이며,  $X^1 \sim X^4$  및  $Y^5 \sim Y^8$ 에 있어서의  $R^a$  중 적어도 1개는 사이아노기로 치환된 환 형성 탄소수 6~30의 방향족 탄화수소기, 또는 사이아노기로 치환된 환 형성 원자수 5~30의 헤테로환기이다.

[0061] 단,  $R^a$ 가 복수 존재하는 경우, 복수의  $R^a$ 는 각각 동일해도 상이해도 좋다.]

[0062] 한편, 화학식 I 중 사이아노기로 치환된 환 형성 탄소수 6~30의 방향족 탄화수소기, 사이아노기로 치환된 환 형성 원자수 5~30의 헤테로환기는, 추가로 사이아노기 이외의 치환기를 갖고 있어도 좋다.

[0063] 또한, 상기 m은 바람직하게는 0~2이고, 보다 바람직하게는 0 또는 1이다. m이 0인 경우,  $X^5 \sim X^8$  중 1개와  $Y^1 \sim Y^4$  중 1개는, 단일 결합을 통해서 결합한다.

[0064] 상기  $A^1$ ,  $A^2$  및  $R^a$ 가 나타내는 환 형성 탄소수 6~30의 방향족 탄화수소기로서는, 비축합 방향족 탄화수소기 및 축합 방향족 탄화수소기를 들 수 있고, 보다 구체적으로는, 페닐기, 나프틸기, 페난트릴기, 바이페닐기, 터페닐기, 쿼테페닐기, 플루오란테닐기, 트라이페닐렌일기, 페난트렌일기, 플루오렌일기, 스카이로플루오렌일기, 9,9-다이페닐플루오렌일기, 9,9'-스카이로바이[9H-플루오렌]-2-일기, 9,9-다이메틸플루오렌일기, 벤조[c]페난트렌일

기, 벤조[a]트라이페닐렌일기, 나프토[1,2-c]페난트렌일기, 나프토[1,2-a]트라이페닐렌일기, 다이벤조[a,c]트라이페닐렌일기, 벤조[b]플루오란텐일기 등을 들 수 있고, 페닐기, 나프틸기, 바이페닐기, 터페닐기, 페난트릴기, 트라이페닐렌일기, 플루오렌일기, 스파이로바이플루오렌일기, 플루오란텐일기가 바람직하고, 페닐기, 1-나프틸기, 2-나프틸기, 바이페닐-2-일기, 바이페닐-3-일기, 바이페닐-4-일기, 페난트렌-9-일기, 페난트렌-3-일기, 페난트렌-2-일기, 트라이페닐렌-2-일기, 9,9-다이메틸플루오렌-2-일기, 플루오란텐-3-일기가 더 바람직하다.

[0065] 상기  $A^1$ ,  $A^2$  및  $R^a$ 가 나타내는 환 형성 원자수 5~30의 헤테로환기로서는, 비축합 헤테로환기 및 축합 헤테로환기를 들 수 있고, 보다 구체적으로는, 피롤환, 아이소인돌환, 벤조퓨란환, 아이소벤조퓨란환, 다이벤조싸이오펜환, 아이소퀴놀린환, 퀴놀살린환, 페난트리딘환, 페난트롤린환, 피리딘환, 피라진환, 피리미딘환, 피리다진환, 트리아진환, 인돌환, 퀴놀린환, 아크리딘환, 피롤리딘환, 다이옥세인환, 피페리딘환, 모폴린환, 피페라진환, 카바졸환, 퓨란환, 싸이오펜환, 옥사졸환, 옥사다리아졸환, 벤즈옥사졸환, 싸이아졸환, 싸이아다리아졸환, 벤조싸이아졸환, 트리아아졸환, 이미다졸환, 벤즈이미다졸환, 피란환, 다이벤조퓨란환, 벤조[c]다이벤조퓨란환 및 이들의 유도체로부터 형성되는 기 등을 들 수 있고, 다이벤조퓨란환, 카바졸환, 다이벤조싸이오펜환 및 이들의 유도체로부터 형성되는 기가 바람직하고, 다이벤조퓨란-2-일기, 다이벤조퓨란-4-일기, 9-페닐카바졸-3-일기, 9-페닐카바졸-2-일기, 다이벤조싸이오펜-2-일기, 다이벤조싸이오펜-4-일기가 더 바람직하다.

[0066] 상기  $A^3$ 이 나타내는 환 형성 탄소수 6 이하의 단환 탄화수소기의 예로서는, 페닐렌기, 사이클로펜텐일렌기, 사이클로헥사다이엔일렌기, 사이클로헥실렌기, 사이클로펜틸렌기 등을 들 수 있고, 페닐렌기가 바람직하다.

[0067] 상기  $A^3$ 이 나타내는 환 형성 원자수 6 이하의 단환 헤테로환기의 예로서는, 피롤릴렌기, 피라진일렌기, 피리딘일렌기, 퓨릴렌기, 싸이오페닐렌기 등을 들 수 있다.

[0068] 상기  $R^a$ 가 나타내는 탄소수 1~30의 알킬기의 예로서는, 메틸기, 에틸기, n-프로필기, 아이소프로필기, n-뷰틸기, s-뷰틸기, 아이소뷰틸기, t-뷰틸기, n-펜틸기, n-헥실기, n-헵틸기, n-옥틸기, n-노닐기, n-데실기, n-운데실기, n-도데실기, n-트라이데실기, n-테트라데실기, n-펜타데실기, n-헥사데실기, n-헵타데실기, n-옥타데실기, 네오펜틸기, 1-메틸펜틸기, 사이클로프로필기, 사이클로뷰틸기, 사이클로펜틸기, 사이클로헥실기, 사이클로옥틸기, 아다만틸기 등을 들 수 있고, 메틸기, 에틸기, n-프로필기, 아이소프로필기, n-뷰틸기, s-뷰틸기, 아이소뷰틸기, t-뷰틸기, 사이클로펜틸기, 사이클로헥실기가 바람직하다.

[0069] 상기  $R^a$ 가 나타내는 치환 또는 비치환된 실릴기의 예로서는, 트라이메틸실릴기, 트라이에틸실릴기, 트라이뷰틸실릴기, 다이메틸에틸실릴기, t-뷰틸다이메틸실릴기, 바이닐다이메틸실릴기, 프로필다이메틸실릴기, 다이메틸아이소프로필실릴기, 다이메틸프로필실릴기, 다이메틸뷰틸실릴기, 다이메틸터셔리-뷰틸실릴기, 다이에틸아이소프로필실릴기, 페닐다이메틸실릴기, 다이페닐메틸실릴기, 다이페닐터셔리-뷰틸실릴기, 트라이페닐실릴기 등을 들 수 있고, 트라이메틸실릴기, 트라이에틸실릴기, t-뷰틸다이메틸실릴기, 바이닐다이메틸실릴기, 프로필다이메틸실릴기가 바람직하다.

[0070] 상기  $R^a$ 가 나타내는 할로젠 원자로서는, 예컨대, 불소, 염소, 브롬, 요오드 등을 들 수 있고, 불소가 바람직하다.

[0071] 또한, 상기  $R^a$ 로서는, 수소 원자, 또는 치환 또는 비치환된 환 형성 탄소수 6~30의 방향족 탄화수소기도 바람직하다.

[0072] 상기 및 후술하는 「치환 또는 비치환」 및 「치환기를 갖고 있어도 좋다」라고 하는 경우의 임의의 치환기로서는, 할로젠 원자(불소, 염소, 브롬, 요오드), 사이아노기, 탄소수 1~20(바람직하게는 1~6)의 알킬기, 탄소수 3~20(바람직하게는 5~12)의 사이클로알킬기, 탄소수 1~20(바람직하게는 1~5)의 알콕시기, 탄소수 1~20(바람직하게는 1~5)의 할로알킬기, 탄소수 1~20(바람직하게는 1~5)의 할로알콕시기, 탄소수 1~10(바람직하게는 1~5)의 알킬실릴기, 환 형성 탄소수 6~30(바람직하게는 6~18)의 아릴기, 환 형성 탄소수 6~30(바람직하게는 6~18)의 아릴옥시기, 탄소수 6~30(바람직하게는 6~18)의 아릴실릴기, 탄소수 7~30(바람직하게는 7~20)의 아르알킬기, 및 환 형성 원자수 5~30의(바람직하게는 5~18) 헤테로아릴기를 들 수 있다.

[0073] 상기 임의의 치환기로서 이용되는 탄소수 1~20의 알킬기의 구체예로서는, 메틸기, 에틸기, n-프로필기, 아이소프로필기, n-뷰틸기, s-뷰틸기, 아이소뷰틸기, t-뷰틸기, n-펜틸기, n-헥실기, n-헵틸기, n-옥틸기, n-노닐기, n-데실기, n-운데실기, n-도데실기, n-트라이데실기, n-테트라데실기, n-펜타데실기, n-헥사데실기, n-헵타데실

기, n-옥타데실기, 네오펜틸기, 1-메틸펜틸기 등을 들 수 있다.

[0074] 상기 임의의 치환기로서 이용되는 탄소수 3~20의 사이클로알킬기의 구체예로서는, 사이클로프로필기, 사이클로뷰틸기, 사이클로펜틸기, 사이클로헥실기, 사이클로옥틸기, 아다만틸기 등을 들 수 있다.

[0075] 상기 임의의 치환기로서 이용되는 탄소수 1~20의 알콕시기의 구체예로서는, 알킬 부위가 상기 알킬기인 기를 들 수 있다.

[0076] 상기 임의의 치환기로서 이용되는 탄소수 1~20의 할로알킬기의 구체예로서는, 상기한 알킬기의 일부 또는 전부의 수소 원자가 할로젠 원자로 치환된 기를 들 수 있다.

[0077] 상기 임의의 치환기로서 이용되는 탄소수 1~20의 할로알콕시기의 구체예로서는, 상기한 알콕시기의 일부 또는 전부의 수소 원자가 할로젠 원자로 치환된 기를 들 수 있다.

[0078] 상기 임의의 치환기로서 이용되는 탄소수 1~10의 알킬실릴기의 구체예로서는, 트라이메틸실릴기, 트라이에틸실릴기, 트라이뷰틸실릴기, 다이메틸에틸실릴기, t-뷰틸다이메틸실릴기, 바이닐다이메틸실릴기, 프로필다이메틸실릴기, 다이메틸아이스프로필실릴기, 다이메틸프로필실릴기, 다이메틸뷰틸실릴기, 다이메틸터셔리-뷰틸실릴기, 다이에틸아이스프로필실릴기 등을 들 수 있다.

[0079] 상기 임의의 치환기로서 이용되는 환 형성 탄소수 6~30의 방향족 탄화수소기의 구체예로서는, 상기  $A^1$ ,  $A^2$  및  $R^a$ 가 나타내는 방향족 탄화수소기와 동일한 것을 들 수 있다.

[0080] 상기 임의의 치환기로서 이용되는 환 형성 탄소수 6~30의 아릴옥시기의 구체예로서는, 아릴 부위가 상기 방향족 탄화수소기인 기를 들 수 있다.

[0081] 상기 임의의 치환기로서 이용되는 탄소수 6~30의 아릴실릴기의 구체예로서는, 페닐다이메틸실릴기, 다이페닐메틸실릴기, 다이페닐터셔리-뷰틸실릴기, 트라이페닐실릴기 등을 들 수 있다.

[0082] 상기 임의의 치환기로서 이용되는 탄소수 7~30의 아르알킬기의 구체예로서는, 벤질기, 2-페닐프로페인-2-일기, 1-페닐에틸기, 2-페닐에틸기, 1-페닐아이스프로필기, 2-페닐아이스프로필기, 페닐-t-뷰틸기,  $\alpha$ -나프틸메틸기, 1- $\alpha$ -나프틸에틸기, 2- $\alpha$ -나프틸에틸기, 1- $\alpha$ -나프틸아이스프로필기, 2- $\alpha$ -나프틸아이스프로필기,  $\beta$ -나프틸메틸기, 1- $\beta$ -나프틸에틸기, 2- $\beta$ -나프틸에틸기, 1- $\beta$ -나프틸아이스프로필기, 2- $\beta$ -나프틸아이스프로필기, 1-피롤릴메틸기, 2-(1-피롤릴)에틸기, p-메틸벤질기, m-메틸벤질기, o-메틸벤질기, p-클로로벤질기, m-클로로벤질기, o-클로로벤질기, p-브로모벤질기, m-브로모벤질기, o-브로모벤질기, p-요오도벤질기, m-요오도벤질기, o-요오도벤질기, p-하이드록시벤질기, m-하이드록시벤질기, o-하이드록시벤질기, p-아미노벤질기, m-아미노벤질기, o-아미노벤질기, p-나이트로벤질기, m-나이트로벤질기, o-나이트로벤질기, p-사이아노벤질기, m-사이아노벤질기, o-사이아노벤질기, 1-하이드록시-2-페닐아이스프로필기, 1-클로로-2-페닐아이스프로필기 등을 들 수 있다.

[0083] 상기 임의의 치환기로서 이용되는 환 형성 원자수 5~30의 헤테로아릴기의 구체예로서는, 상기  $A^1$ ,  $A^2$  및  $R^a$ 가 나타내는 헤테로환기와 동일한 것을 들 수 있다.

[0084] 상기 임의의 치환기로서는, 불소 원자, 사이아노기, 탄소수 1~20의 알킬기, 환 형성 탄소수 6~30의 방향족 탄화수소기, 환 형성 원자수 5~30의 헤테로아릴기가 바람직하고, 불소 원자, 페닐기, 나프틸기, 바이페닐기, 터페닐기, 페난트릴기, 트라이페닐렌일기, 플루오렌일기, 스파이로바이플루오렌일기, 플루오란텐일기, 다이벤조퓨란환, 카바졸환, 다이벤조싸이오펜환 및 이들의 유도체로부터 형성되는 기, 메틸기, 에틸기, n-프로필기, 아이소프로필기, n-뷰틸기, s-뷰틸기, 아이소뷰틸기, t-뷰틸기, 사이클로펜틸기, 사이클로헥실기가 보다 바람직하다.

[0085] 상기 임의의 치환기는, 추가로 치환기를 갖고 있어도 좋고, 그의 구체예는 상기 임의의 치환기와 마찬가지로.

[0086] 상기 화학식 I에 있어서, 상기  $A^1$  및  $A^2$ 로 표시되는 환 형성 탄소수 6~30의 방향족 탄화수소기 또는 환 형성 원자수 5~30의 헤테로환기가 치환기를 갖는 경우, 해당 치환기가 사이아노기, 할로젠 원자, 탄소수 1~20의 알킬기, 탄소수 3~20의 사이클로알킬기, 탄소수 1~20의 알콕시기, 탄소수 1~20의 할로알킬기, 탄소수 1~20의 할로알콕시기, 탄소수 1~10의 알킬실릴기, 환 형성 탄소수 6~30의 아릴기, 환 형성 탄소수 6~30의 아릴옥시기, 탄소수 6~30의 아르알킬기 및 환 형성 원자수 5~30의 헤테로아릴기로부터 선택되는 1종 이상인 것이 바람직하다. 이들 상기  $A^1$  및  $A^2$ 로 표시되는 기에 있어서의 치환기의 구체예로서는, 상기 임의의 치환기로서 든 것과 동

일한 것을 들 수 있다.

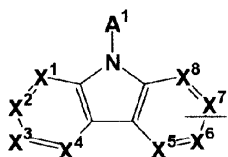
[0087] 상기 화학식 I에 있어서,  $A^1$  및  $A^2$  중 적어도 1개가, 사이아노기로 치환된 환 형성 탄소수 6~30의 방향족 탄화수소기, 또는 사이아노기로 치환된 환 형성 원자수 5~30의 헤테로환기인 것이 바람직하고, 또한  $X^1 \sim X^4$  및  $Y^5 \sim Y^8$  중 적어도 1개가  $CR^a$ 이며,  $X^1 \sim X^4$  및  $Y^5 \sim Y^8$ 에 있어서의  $R^a$  중 적어도 1개가, 사이아노기로 치환된 환 형성 탄소수 6~30의 방향족 탄화수소기, 또는 사이아노기로 치환된 환 형성 원자수 5~30의 헤테로환기인 것이 바람직하다.

[0088] 한편, 본 명세서에 있어서, 「치환 또는 비치환된 탄소수 a~b의 X기」라는 표현에 있어서의 「탄소수 a~b」는 X기가 비치환된 경우의 탄소수를 나타내는 것이며, X기가 치환되어 있는 경우의 치환기의 탄소수는 포함하지 않는다.

[0089] 본 발명에 있어서, 수소 원자란, 중성자수가 다른 동위체, 즉 경수소(프로튬(protium)), 중수소(듀테륨(deuterium)), 삼중수소(트라이튬(tritium))를 포함한다.

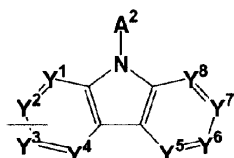
[0090] 본 발명의 유기 EL 소자용 재료는, 하기 화학식 a, b로 표시되는 기가  $-(A^3)_m$ -을 통해서 연결되어 있고, 그의 결합 위치는 상기  $X^5 \sim X^8$  중 어느 1개와 상기  $Y^1 \sim Y^4$  중 어느 1개이다. 구체적으로는,  $X^6-(A^3)_m-Y^3$ ,  $X^6-(A^3)_m-Y^2$ ,  $X^6-(A^3)_m-Y^4$ ,  $X^6-(A^3)_m-Y^1$ ,  $X^7-(A^3)_m-Y^3$ ,  $X^5-(A^3)_m-Y^3$ ,  $X^8-(A^3)_m-Y^3$ ,  $X^7-(A^3)_m-Y^2$ ,  $X^7-(A^3)_m-Y^4$ ,  $X^7-(A^3)_m-Y^1$ ,  $X^5-(A^3)_m-Y^2$ ,  $X^8-(A^3)_m-Y^2$ ,  $X^8-(A^3)_m-Y^4$ ,  $X^8-(A^3)_m-Y^1$ ,  $X^5-(A^3)_m-Y^1$ ,  $X^5-(A^3)_m-Y^4$ 를 들 수 있다.

[0091] [화학식 a]



[0092]

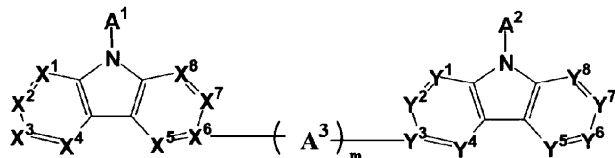
[0093] [화학식 b]



[0094]

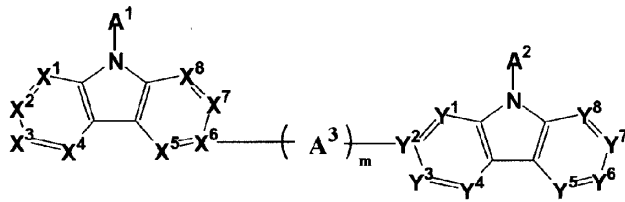
[0095] 본 발명의 유기 전기발광 소자용 재료는, 상기 화학식 a, b로 표시되는 기가,  $X^6-(A^3)_m-Y^3$ ,  $X^6-(A^3)_m-Y^2$ ,  $X^7-(A^3)_m-Y^3$  중 어느 하나의 결합 위치에서 결합되어 있는 것이 바람직하다. 즉, 하기 화학식 II, III, IV 중 어느 하나로 표시되는 화합물인 것이 보다 바람직하다.

[0096] [화학식 II]



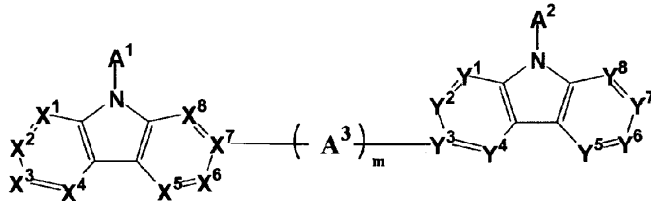
[0097]

[0098] [화학식 III]



[0099]

[0100] [화학식 IV]



[0101]

[0102] (화학식 II~IV 중,  $X^1 \sim X^8$ ,  $Y^1 \sim Y^8$ ,  $A^1 \sim A^3$  및  $m$ 은 각각 상기 화학식 I에 있어서의  $X^1 \sim X^8$ ,  $Y^1 \sim Y^8$ ,  $A^1 \sim A^3$  및  $m$ 과 동일하다. 또한, 화학식 II, III, IV는 상기 화학식 I에 있어서의 상기 (i) 또는 상기 (ii) 중 적어도 어느 하나의 조건을 만족한다.)

[0103] 상기 화학식 I~IV에 있어서의 상기  $A^3$ 은 단일 결합, 치환 또는 비치환된 환 형성 탄소수 6 이하의 단환 탄화수소기, 또는 치환 또는 비치환된 환 형성 원자수 6 이하의 단환 헤테로환기이다. 이에 의해, 상기 화학식 a, b로 표시되는 환(예컨대, 카바졸환)의 뒤틀림이 작아지고,  $\pi$  전자의 공액이 유지되기 쉽기 때문에, HOMO(최고 점유 분자 궤도)가 카바졸 골격 전체에 걸쳐 넓어져, 카바졸 골격의 정공 주입·수송성이 유지된다. 그 중에서도, 상기  $A^3$ 은 단일 결합, 또는 치환 또는 비치환된 페닐렌기인 것이 바람직하다.

[0104] 또한, 상기 화학식 I~IV에 있어서의 상기  $m$ 은 0 또는 1인 것이 바람직하다. 또한,  $m$ 이 1인 경우, 상기  $A^3$ 이 치환 또는 비치환된 페닐렌기인 것이 보다 바람직하다.

[0105] 본 발명의 유기 EL 소자용 재료는, 하기 (i) 및 하기 (ii) 중 적어도 어느 하나를 만족한다.

[0106] (i) 상기  $A^1$ , 상기  $A^2$  중 적어도 1개가 사이아노기로 치환되어 있다.

[0107] (ii)  $X^1 \sim X^4$  및  $Y^5 \sim Y^8$  중 적어도 1개는  $CR^a$ 이며,  $X^1 \sim X^4$  및  $Y^5 \sim Y^8$ 에 있어서의  $R^a$  중 적어도 1개는 사이아노기로 치환된 환 형성 탄소수 6~30의 방향족 탄화수소기, 또는 사이아노기로 치환된 환 형성 원자수 5~30의 헤테로환기이다.

[0108] 즉, 본 발명의 유기 EL 소자용 재료는 하기 (1)~(3) 중 어느 1개에 해당한다.

[0109] (1) 상기 (i)을 만족하고, 상기 (ii)를 만족하지 않는다.

[0110] (2) 상기 (ii)를 만족하고, 상기 (i)을 만족하지 않는다.

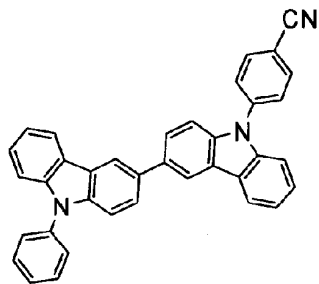
[0111] (3) 상기 (i) 및 상기 (ii)의 양쪽을 만족한다.

[0112] 본 발명의 유기 EL 소자용 재료는, 상기 화학식 a 및 b로 표시되는 기, 예컨대 상기 화학식 a 및 b가 카바졸릴기인 경우에 그들을 포함하는 중심 골격의 말단측에 사이아노기로 치환된 방향족 탄화수소기 또는 사이아노기로 치환된 헤테로환기를 도입하는 것에 의해, 정공 주입·수송성의 카바졸릴 골격과 전자 주입·수송성의 사이아노기를 갖는 기가, 서로의 특성을 상쇄함이 없이, 분자 내의 캐리어 밸런스가 양호해진다.

[0113] 또한, 전자 주입·수송성의 사이아노기로 치환된 방향족 탄화수소기 또는 사이아노기로 치환된 헤테로환기는, 특허문헌 1에 기재된 피리미딘환이나 트리아진환과 같은 질소 함유 헤테로환과 비교하여 정공 내성이 강한 경향이 있다. 그 때문에, 본 발명의 유기 EL 소자용 재료를 이용한 유기 EL 소자는, 특허문헌 1에 기재된 화합물과 비교하여 장수명화되는 효과도 나타낸다.

- [0114] 본 발명의 유기 EL 소자용 재료가, 상기 (i)의 조건을 만족하는 경우, 상기  $A^1$  및 상기  $A^2$  중 적어도 1개가, 사이아노기로 치환된 페닐기, 사이아노기로 치환된 나프틸기, 사이아노기로 치환된 페난트릴기, 사이아노기로 치환된 다이벤조퓨란일기, 사이아노기로 치환된 다이벤조싸이오페닐기, 사이아노기로 치환된 바이페닐기, 사이아노기로 치환된 터페닐기, 사이아노기로 치환된 9,9-다이페닐플루오렌일기, 사이아노기로 치환된 9,9'-스파이로바이[9H-플루오렌]-2-일기, 사이아노기로 치환된 9,9'-다이메틸플루오렌일기, 또는 사이아노기로 치환된 트라이페닐렌일기인 것이 바람직하고, 3'-사이아노바이페닐-2-일기, 3'-사이아노바이페닐-3-일기, 3'-사이아노바이페닐-4-일기, 4'-사이아노바이페닐-3-일기, 4'-사이아노바이페닐-4-일기, 4'-사이아노바이페닐-2-일기, 6-사이아노나프탈렌-2-일기, 4-사이아노나프탈렌-1-일기, 7-사이아노나프탈렌-2-일기, 8-사이아노다이벤조퓨란-2-일기, 6-사이아노다이벤조퓨란-4-일기, 8-사이아노다이벤조싸이오펜-2-일기, 6-사이아노다이벤조싸이오펜-4-일기, 7-사이아노-9-페닐카바졸-2-일기, 6-사이아노-9-페닐카바졸-3-일기, 7-사이아노-9,9-다이메틸플루오렌-2-일기, 7-사이아노트라이페닐렌-2-일기가 더 바람직하다.
- [0115] 또한, 본 발명의 유기 EL 소자용 재료는,  $A^1$ 이 사이아노기로 치환되어 있고,  $A^2$ 가 사이아노기로 치환되어 있지 않은 것이 바람직하다. 또, 이 경우, 본 발명의 유기 EL 소자용 재료가 상기 (ii)의 조건을 만족하지 않는 것이 보다 바람직하다.
- [0116] 또한, 본 발명의 유기 EL 소자용 재료가, 상기 (ii)의 조건을 만족하는 경우,  $X^1 \sim X^4$  및  $Y^5 \sim Y^8$  중 적어도 1개는  $CR^a$ 이며,  $X^1 \sim X^4$  및  $Y^5 \sim Y^8$ 에 있어서의  $R^a$  중 적어도 1개는, 사이아노기로 치환된 페닐기, 사이아노기로 치환된 나프틸기, 사이아노기로 치환된 페난트릴기, 사이아노기로 치환된 다이벤조퓨란일기, 사이아노기로 치환된 다이벤조싸이오페닐기, 사이아노기로 치환된 바이페닐기, 사이아노기로 치환된 터페닐기, 사이아노기로 치환된 9,9-다이페닐플루오렌일기, 사이아노기로 치환된 9,9'-스파이로바이[9H-플루오렌]-2-일기, 사이아노기로 치환된 9,9'-다이메틸플루오렌일기, 또는 사이아노기로 치환된 트라이페닐렌일기인 것이 바람직하고, 3'-사이아노바이페닐-2-일기, 3'-사이아노바이페닐-3-일기, 3'-사이아노바이페닐-4-일기, 4'-사이아노바이페닐-3-일기, 4'-사이아노바이페닐-4-일기, 4'-사이아노바이페닐-2-일기, 6-사이아노나프탈렌-2-일기, 4-사이아노나프탈렌-1-일기, 7-사이아노나프탈렌-2-일기, 8-사이아노다이벤조퓨란-2-일기, 6-사이아노다이벤조퓨란-4-일기, 8-사이아노다이벤조싸이오펜-2-일기, 6-사이아노다이벤조싸이오펜-4-일기, 7-사이아노-9-페닐카바졸-2-일기, 6-사이아노-9-페닐카바졸-3-일기, 7-사이아노-9,9-다이메틸플루오렌-2-일기, 7-사이아노트라이페닐렌-2-일기가 더 바람직하다.
- [0117] 또, 본 발명의 유기 EL 소자용 재료가 상기 (ii)의 조건을 만족하는 경우, 상기 (i)의 조건을 만족하지 않는 것이 보다 바람직하다.
- [0118] 상기 화학식 I~IV에 있어서, 상기  $A^1$ 과 상기  $A^2$ 는, 서로 다른 것이 바람직하다. 그 중에서도, 상기  $A^1$ 인 기가 사이아노기로 치환되어 있고, 또한 상기  $A^2$ 인 기가 사이아노기로 치환되어 있지 않은 것이 더 바람직하다. 즉, 본 발명의 유기 EL 소자용 재료는 비대칭인 구조인 것이 바람직하고, 이와 같은 구조인 것에 의해, 본 발명의 유기 EL 소자용 재료는 양호한 결정성, 비결정성을 갖는다. 그 때문에, 해당 유기 EL 소자용 재료를 이용한 유기 EL 소자는, 우수한 막질로 되기 때문에, 예컨대 전류 효율 등의 유기 EL 특성에 있어서 고성능을 달성할 수 있다.
- [0119] 본 발명의 유기 EL 소자용 재료는, 상기 화학식 a 및 b로 표시되는 기를 갖는 중심 골격에 대하여, 이 중심 골격의 말단측에 사이아노기를 갖는 방향족 탄화수소기 또는 사이아노기를 갖는 헤테로환기를 도입한 구조인 것을 특징으로 하고 있다.
- [0120] 상기 화학식 a 및 b로 표시되는 기를 갖는 중심 골격은, 정공 주입·수송성 유닛으로서 기능하고, 사이아노기를 갖는 방향족 탄화수소기 또는 사이아노기를 갖는 헤테로환기는, 전자 주입·수송성 유닛으로서 기능한다. 본 발명의 유기 EL 소자용 재료는, 중심 골격의 외측에 전자 주입·수송성 유닛으로서 기능하는 사이아노기를 갖는 기가 도입되어 있는 것에 의해, 상기 중심 골격의 HOMO(최고 점유 분자 궤도)의 전자운의 넓이를 유지하여 양호한 정공 주입·수송성을 유지하면서, 사이아노기를 갖는 기에 의한 전자 주입·수송성의 기능도 갖는다. 이에 의해, 본 발명의 유기 EL 소자용 재료는, 분자 내의 캐리어 밸런스가 양호해지기 때문에, 유기 EL 소자에 이용한 경우에, 우수한 발광 효율을 실현할 수 있다.
- [0121] 일례로서, 본 발명에 따른 하기 화합물 1의 분자 궤도 계산 결과를 도 2에 나타낸다. 도 2에 나타내는 바와 같이, 하기 화합물 1의 HOMO는 2개의 카바졸릴기를 갖는 중심 골격에 넓게 분포하고 있어, 양호한 정공 주입·수송성을 나타낸다. 또한, 하기 화합물 1의 LUMO(최저 공(空)분자 궤도)는, 사이아노기를 갖는 방향족 탄화수소

기(4-사이아노페닐기) 상에 주로 분포되어 있다. 이와 같이 HOMO와 LUMO의 전자 분포가 떨어져 있는 것에 의해, 하기 화합물 1은 분자 내에서의 정공 주입·수송성과 전자 주입·수송성의 캐리어 밸런스가 양호해져, 고 발광 효율의 유기 EL 소자를 실현 가능해진다.

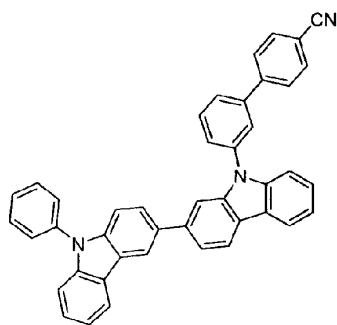


화합물 1

[0122]

[0123]

또한, 다른 예로서, 본 발명에 따른 하기 화합물 2의 분자 궤도 계산 결과를 도 3에 나타낸다. 도 3에 나타내는 바와 같이, 하기 화합물 2의 HOMO는 2개의 카바졸릴기를 갖는 중심 골격에 넓게 분포하고 있어, 양호한 정공 주입·수송성을 나타낸다. 또한, 하기 화합물 2의 LUMO는, 사이아노기를 갖는 방향족 탄화수소기(4-사이아노바 이페닐기) 상에 분포되어 있다. 이와 같이 HOMO와 LUMO의 전자 분포가 떨어져 있는 것에 의해, 하기 화합물 2는 분자 내에서의 정공 주입·수송성과 전자 주입·수송성의 캐리어 밸런스가 양호해져, 고 발광 효율의 유기 EL 소자를 실현 가능해진다.



화합물 2

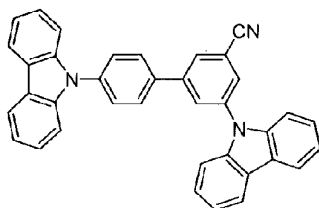
[0124]

[0125]

이에 비하여, 2개의 카바졸릴기 사이에 사이아노기가 도입된 특허문헌 2에 기재된 하기 화합물 a에서는, 도 4에 나타내는 바와 같이 HOMO가 한쪽의 카바졸릴기로 치우쳐 있어, HOMO의 전자운의 넓이가 좁아지는 것에 의해, 정공 주입·수송성이 크게 감소해 버린다고 생각된다. 또한, HOMO가 분포되어 있는 페닐렌기 상에 LUMO가 분포되어 있어, HOMO와 LUMO가 분리되어 있지 않아, 분자 내의 캐리어 밸런스는, 본 발명의 유기 EL 소자용 재료와 비교하여 나쁘다고 추찰된다.

[0126]

한편, 도 2~4에 나타내는 분자 궤도 분포는 TDDTF B3LYP/6-31G\* opt 레벨에서 Gaussian98을 이용하여 계산했지만, 이들의 계산 결과는 본 발명의 유기 EL 소자용 재료의 특성을 설명하기 위해서 나타낸 일례이며, 본 발명을 한정하는 것은 아니다.



화합물 a

[0127]

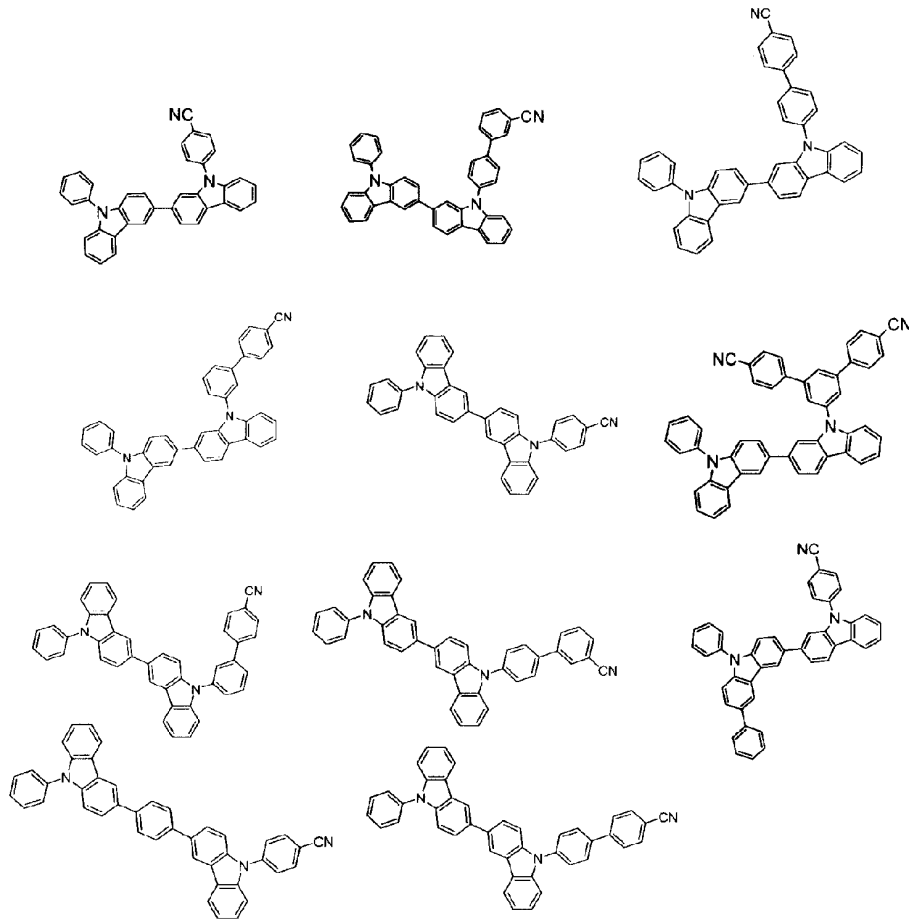
[0128]

상기 화학식 I로 표시되는 본 발명의 유기 EL 소자용 재료를, 유기 EL 소자의, 예컨대 인광 발광층에 호스트 재료로서 이용하면, 정공 주입·수송성 유닛인 화학식 I로 표시되는 화합물을 갖기 때문에 발광층 내의 정공량은,

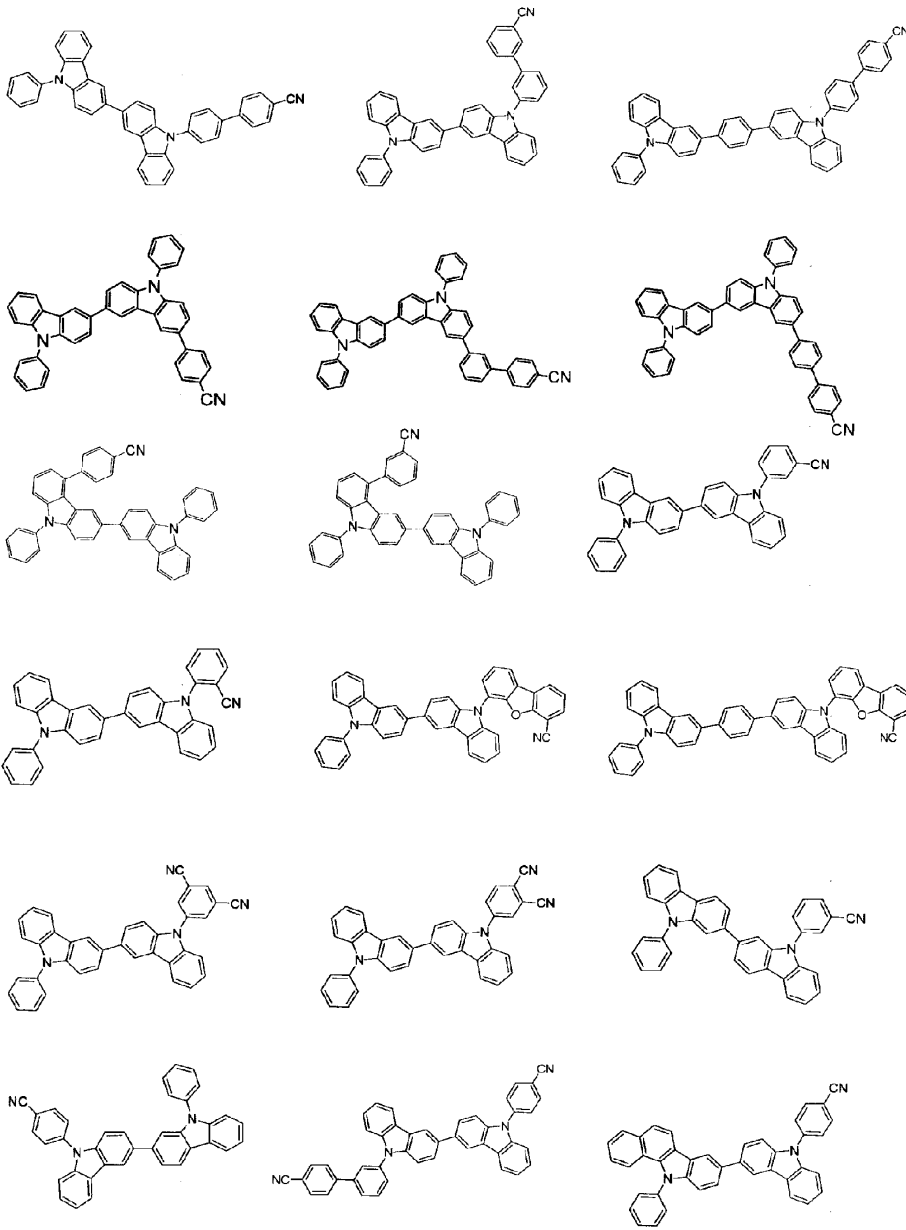
예컨대 특허문헌 2에 기재된 상기 화합물 a에 비하여 증가한다고 생각된다. 또한, 전자 주입·수송성 유닛의 사이아노기를 갖는 방향족 탄화수소기 또는 사이아노기를 갖는 헤테로환기는, 전자 주입·수송성 재료로서 알려진 피리미딘환이나 트리아진환과 같은 질소 함유 헤테로환과 비교하여 정공 내성이 강한 경향이 있기 때문에, 본 발명의 유기 EL 소자용 재료를 이용한 유기 EL 소자는 장수명화된다고 생각된다.

[0129] 본 발명의 유도체의 제조 방법은, 특별히 한정되지 않으며, 공지된 방법으로 제조하면 좋고, 예컨대 카바졸 유도체와 방향족 할로젠화 화합물에 대하여, 문헌[테트라헤드론 40(1984) 1435~1456]에 기재된 구리 촉매, 또는 문헌[저널 오브 아메리칸 케미컬 소사이어티 123(2001) 7727~7729]에 기재된 팔라듐 촉매를 이용한 커플링 반응으로 제조할 수 있다.

[0130] 이하에, 본 발명의 유기 EL 소자용 재료의 구체예를 기재하지만, 본 발명의 화합물은 하기 화합물에 한정되지 않는다.

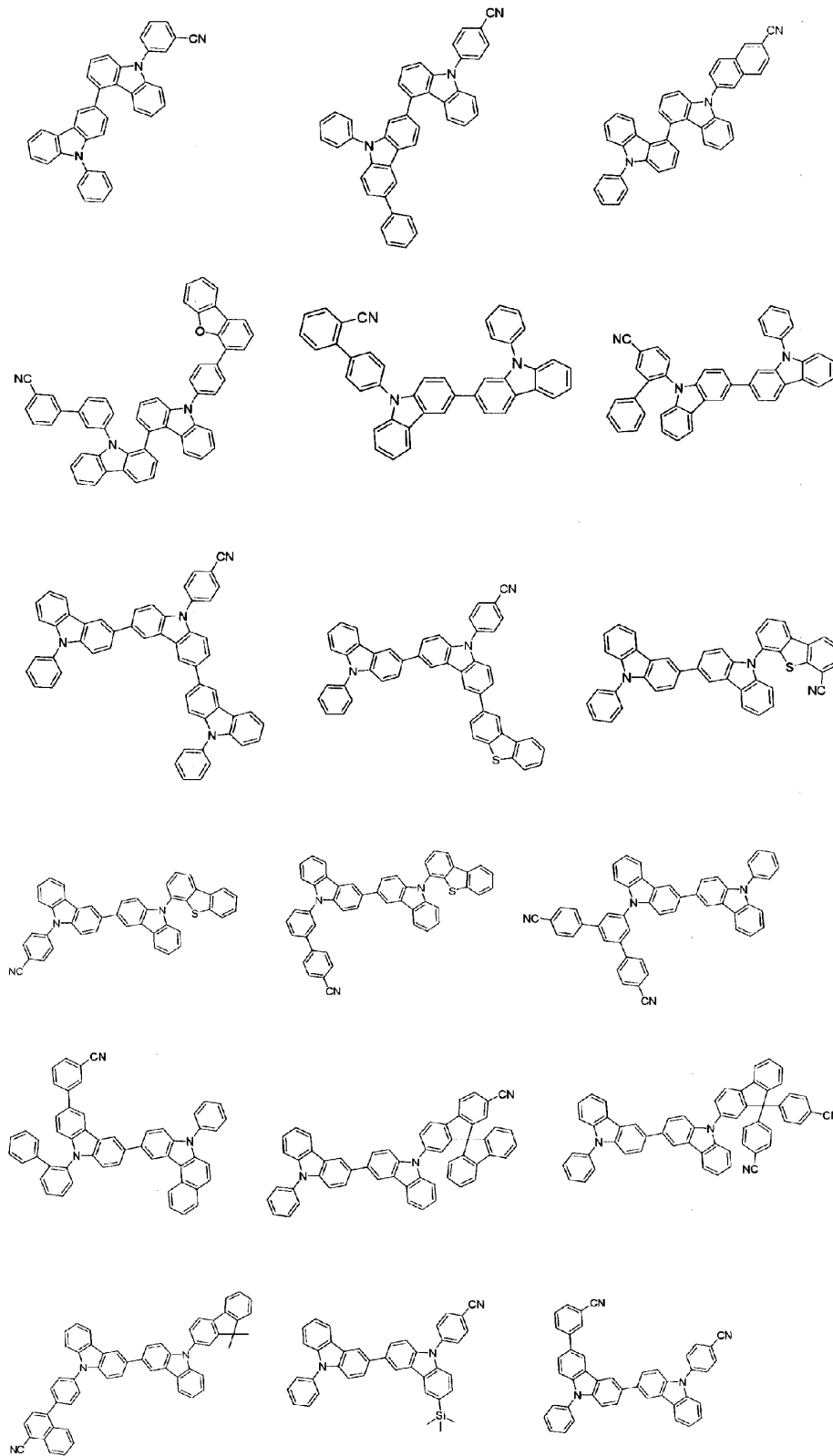


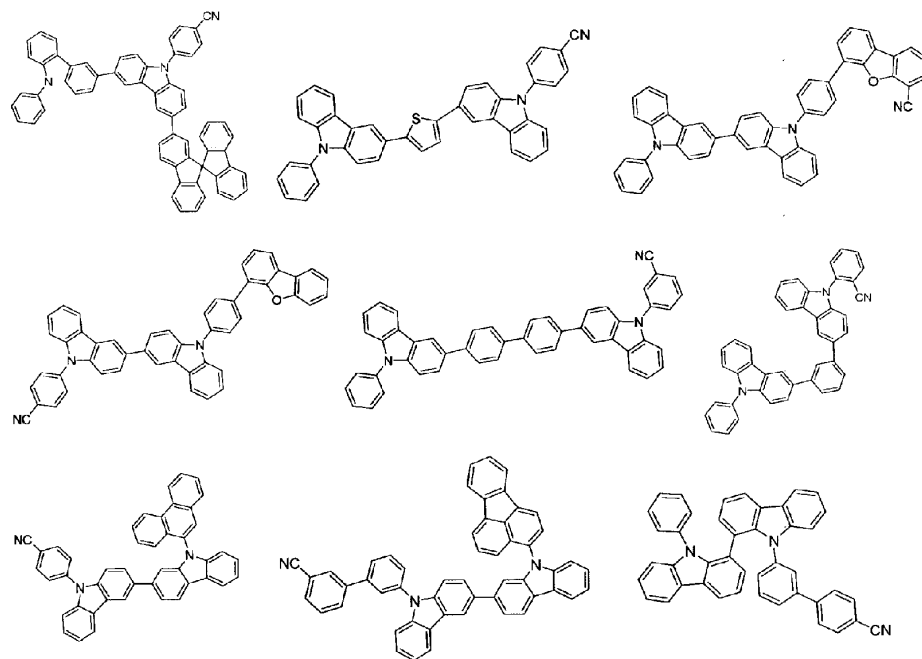
[0131]



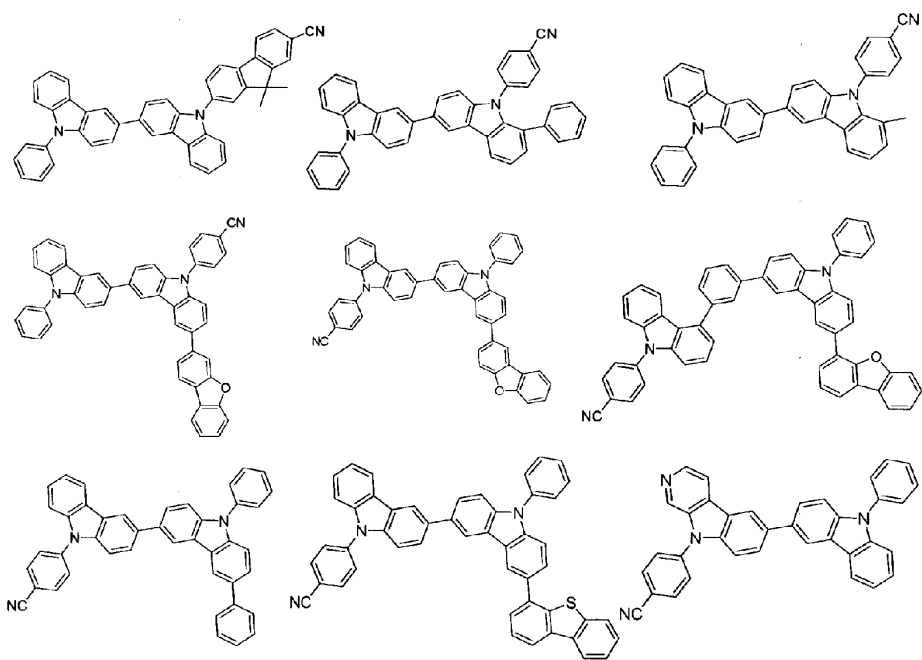
[0132]

[0133]

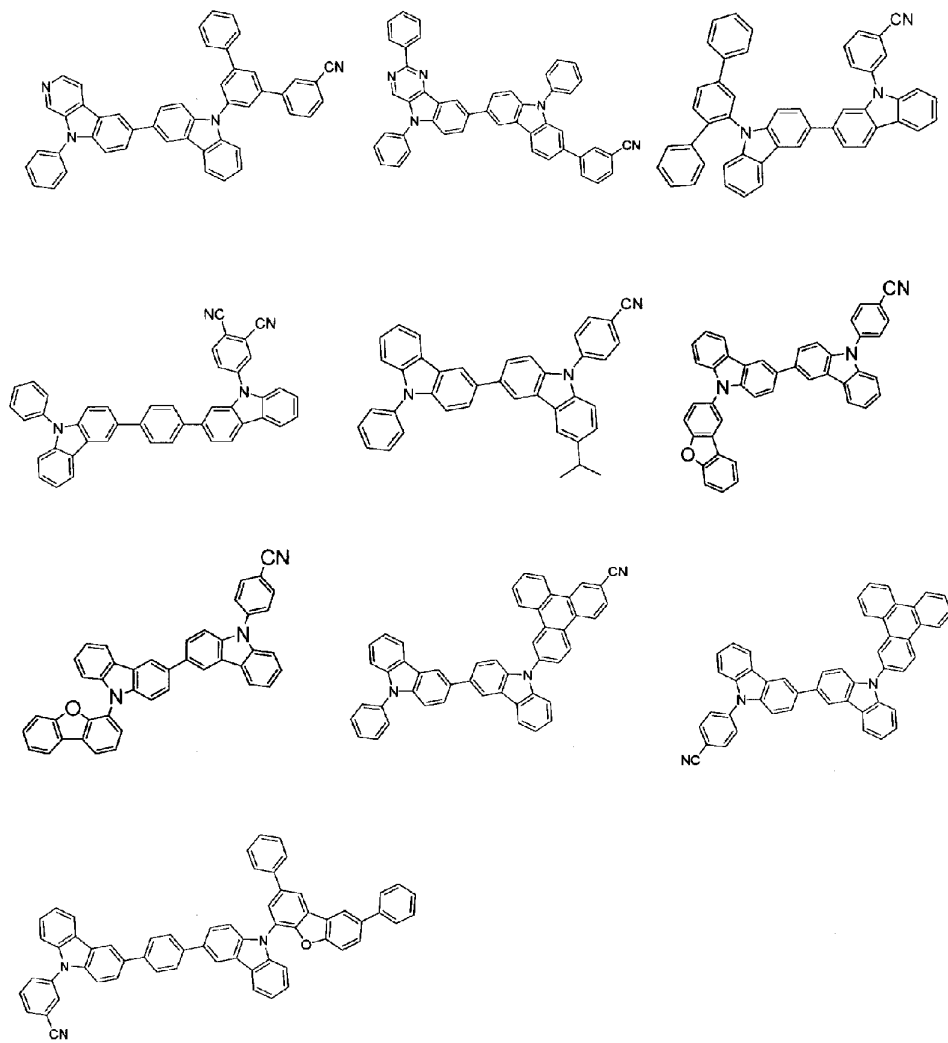




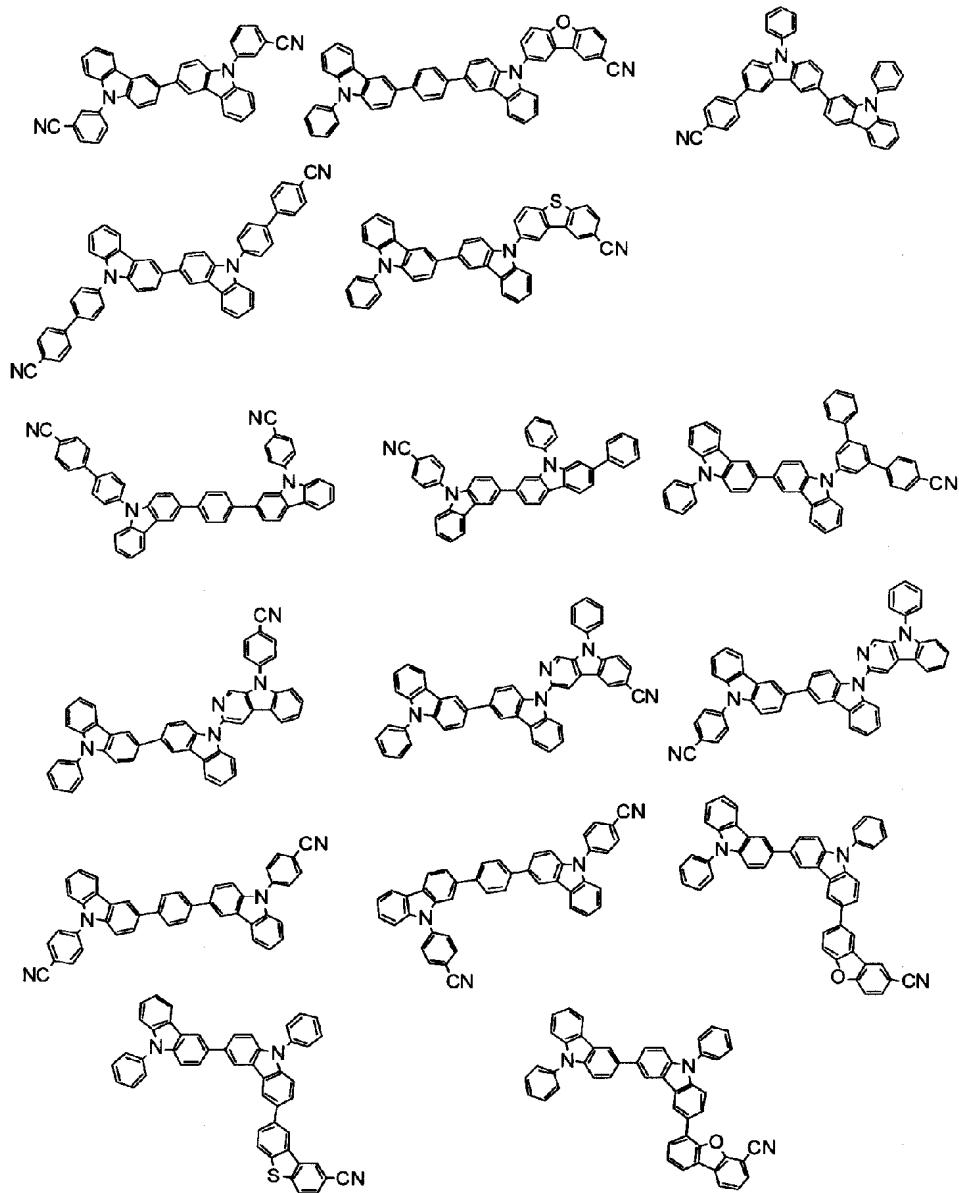
[0136]



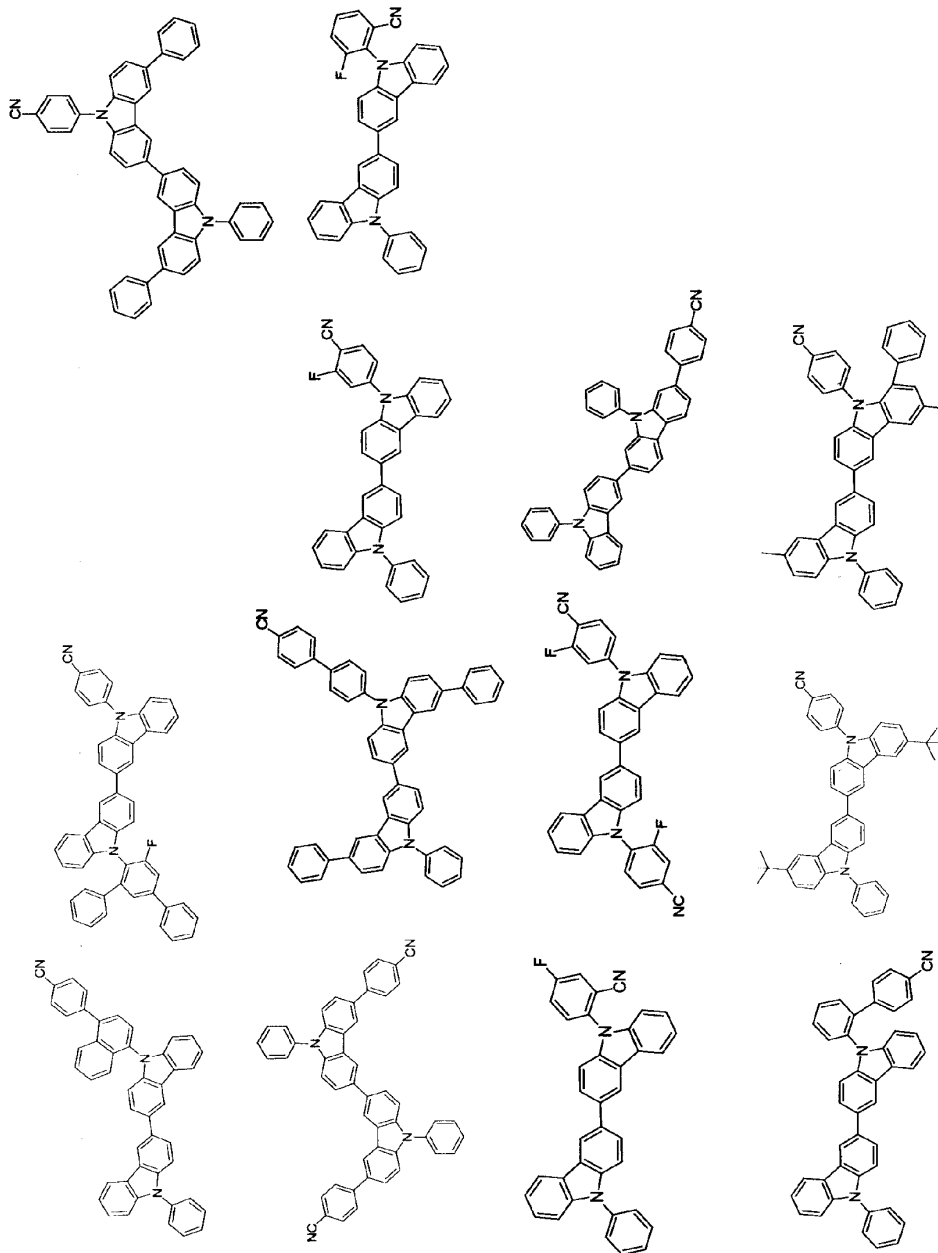
[0137]



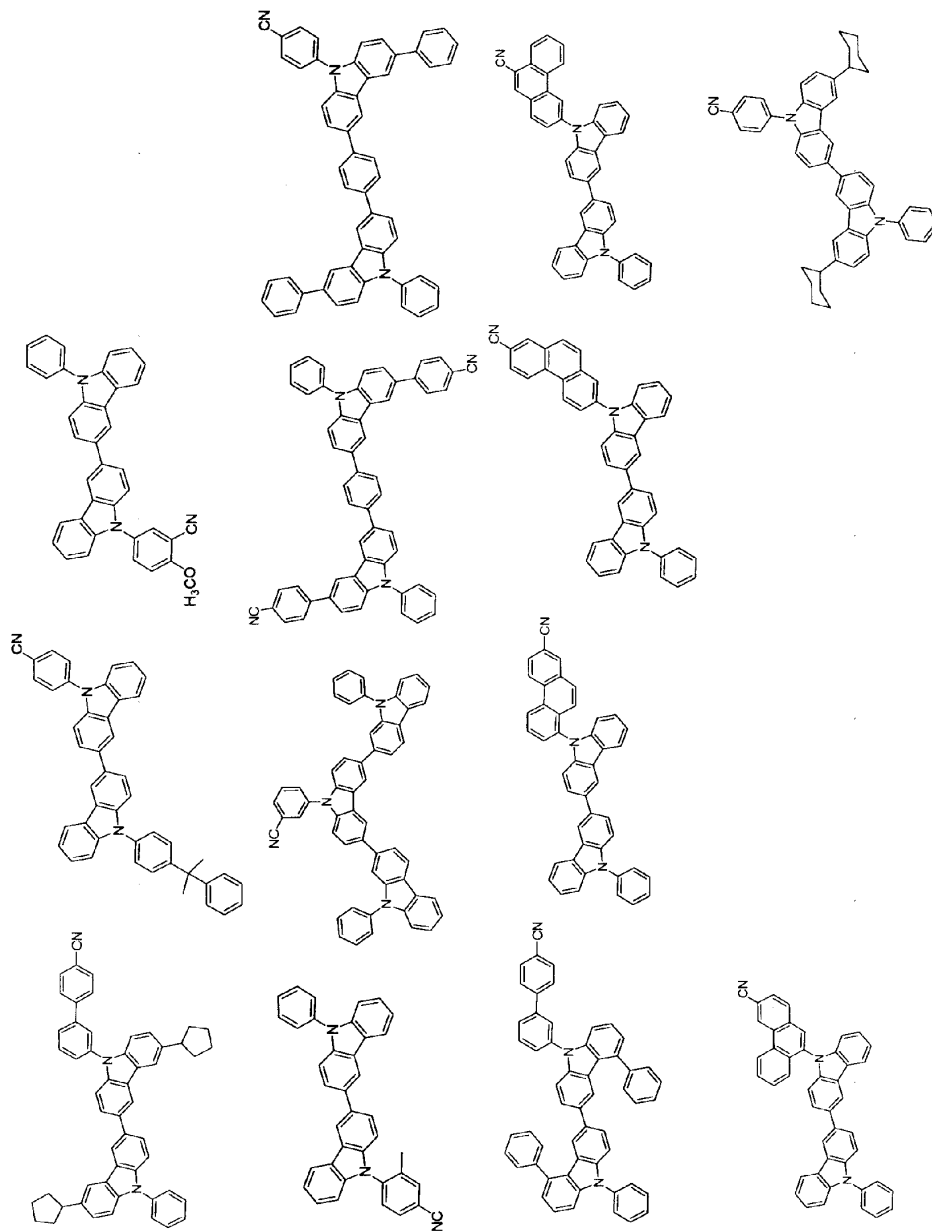
[0138]



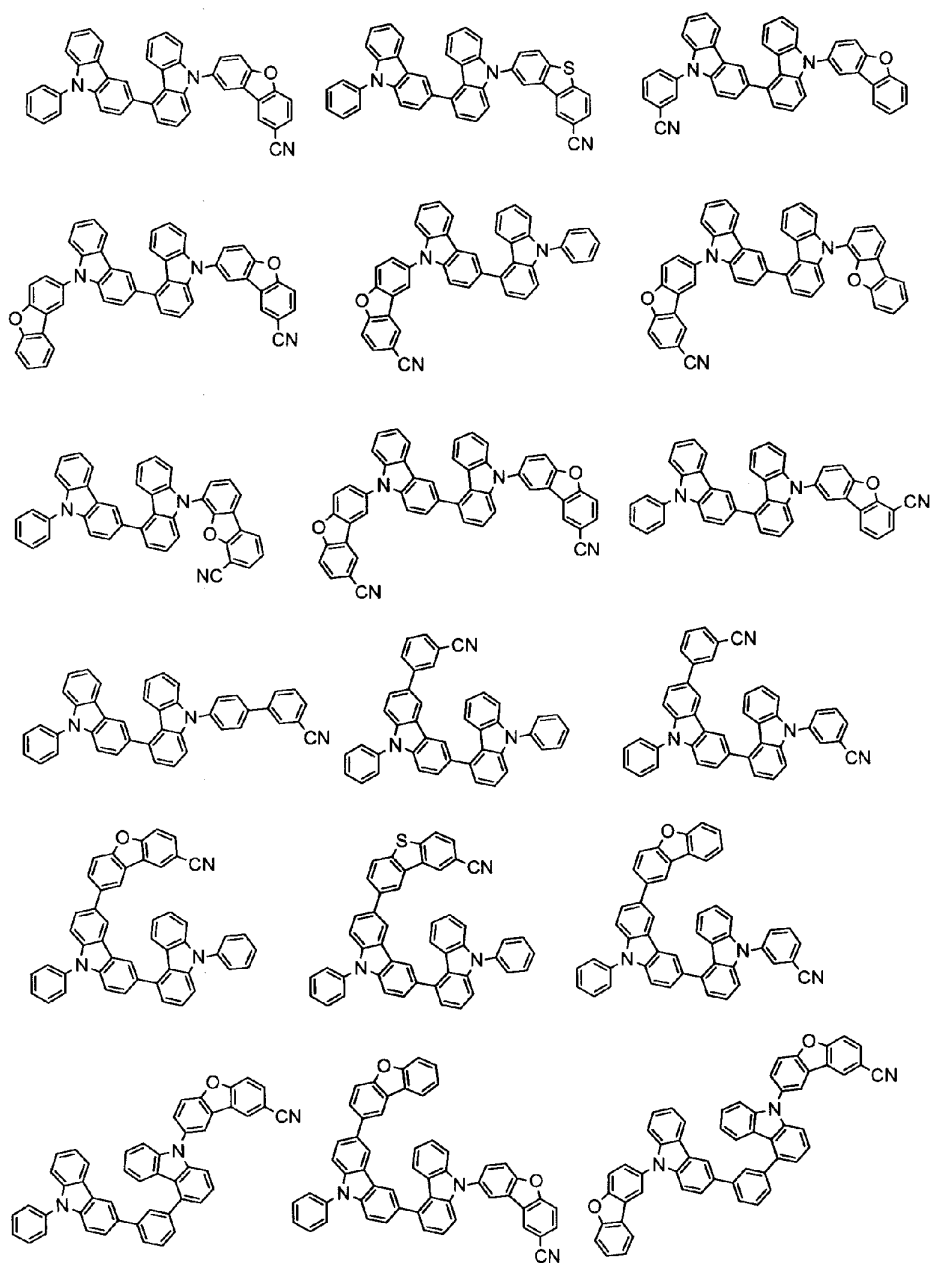
[0139]



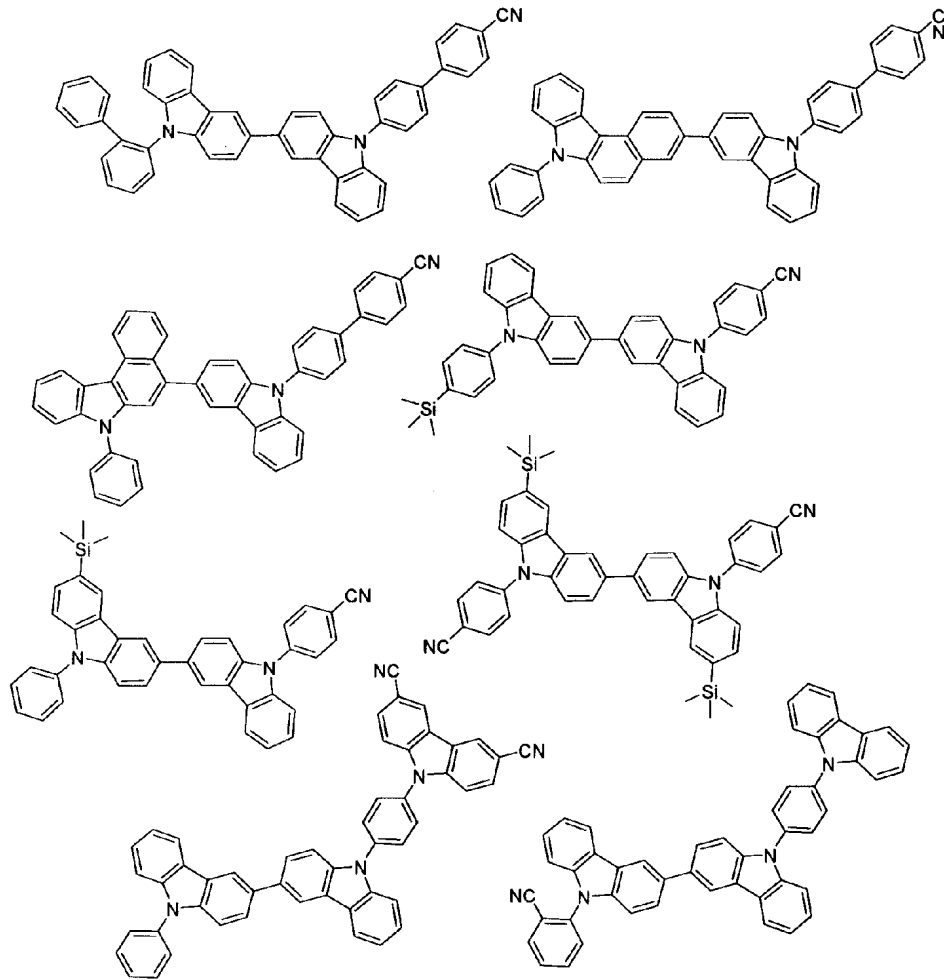
[0140]



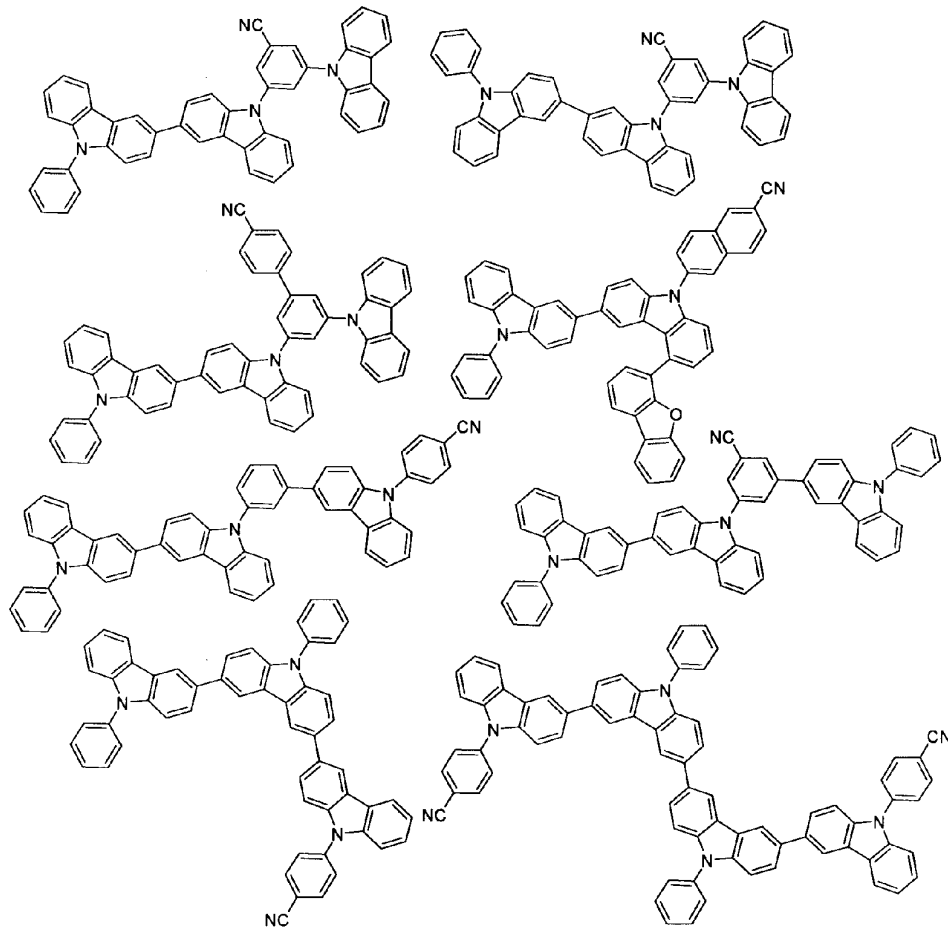
[0141]



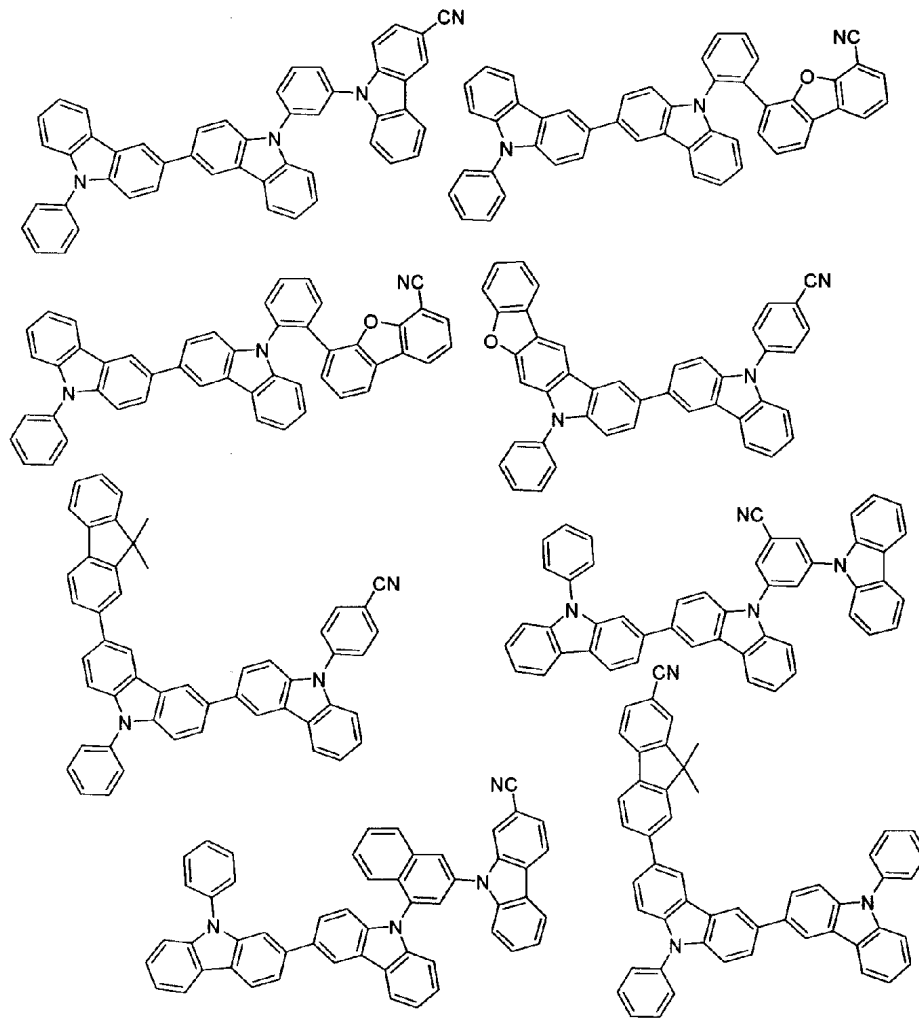
[0142]



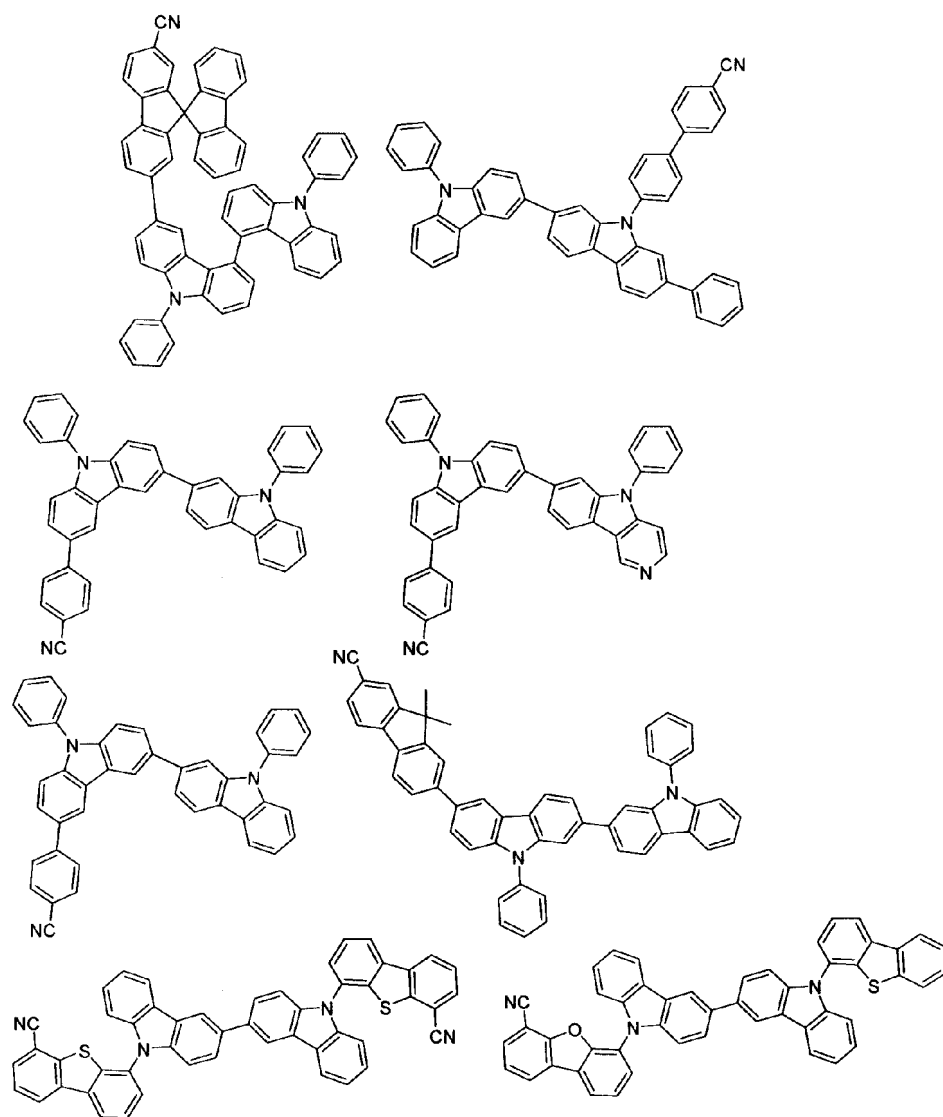
[0143]



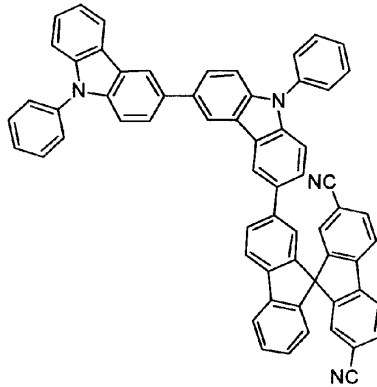
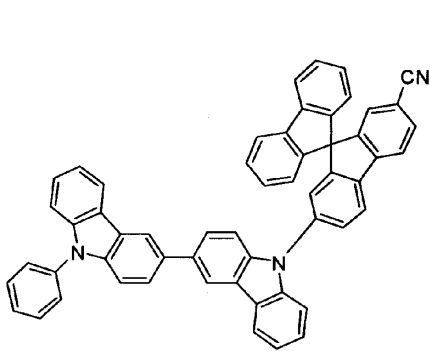
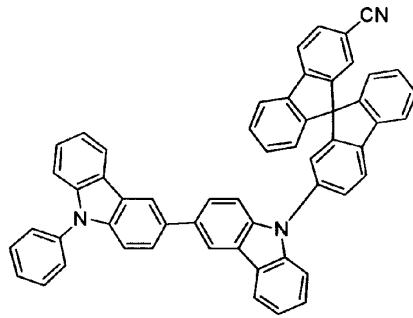
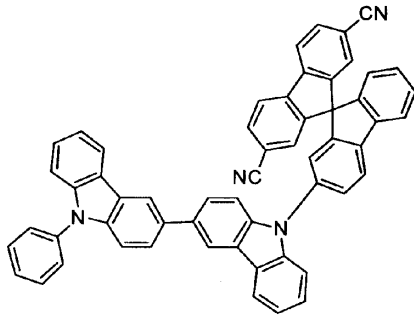
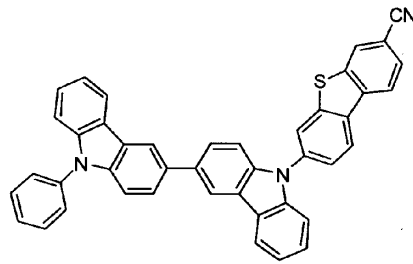
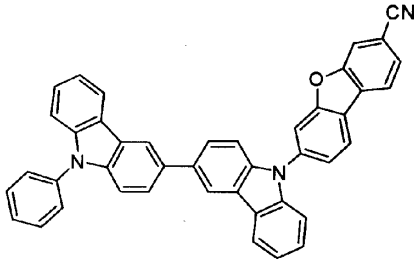
[0144]



[0145]



[0146]



[0147]

[0148] (유기 EL 소자)

[0149] 다음으로, 본 발명의 유기 EL 소자의 실시 형태에 대하여 설명한다.

[0150] 본 발명의 유기 EL 소자는, 음극과 양극 사이에 발광층을 함유하는 유기 박막층을 갖고, 이 유기 박막층 중의 적어도 1층이 전술한 본 발명의 유기 EL 소자용 재료를 포함하는 것을 특징으로 한다. 본 발명의 유기 EL 소자용 재료가, 본 발명의 유기 EL 소자의 유기 박막층 중의 적어도 1층에 함유됨으로써, 유기 EL 소자의 고발광 효율화가 기대될 수 있다.

[0151] 본 발명의 유기 EL 소자용 재료가 포함되는 유기 박막층의 예로서는, 정공 수송층, 발광층, 스페이스층, 전자 수송층 및 장벽층 등을 들 수 있으나, 이들에 한정되는 것은 아니지만, 본 발명의 유기 EL 소자용 재료는, 발광층에 포함되는 것이 바람직하고, 특히, 발광층의 호스트 재료로서 이용되는 것이 바람직하다. 또한, 발광층은 형광 발광 재료나 인광 발광 재료를 함유하는 것이 바람직하고, 특히 인광 발광 재료를 함유하는 것이 바람직하다. 나아가, 본 발명의 유기 EL 소자용 재료는, 발광층에 인접하는 장벽층이나 전자 수송층 등의 층에 포함되는 것도 바람직하다.

[0152] 본 발명의 유기 EL 소자는, 형광 또는 인광 발광형의 단색 발광 소자여도, 형광/인광 하이브리드형의 백색 발광 소자여도 좋고, 단독의 발광 유닛을 갖는 심플형이어도, 복수의 발광 유닛을 갖는 탠덤형이어도 좋고, 그 중에서, 인광 발광형인 것이 바람직하다. 여기서, 「발광 유닛」이란, 1층 이상의 유기층을 포함하고, 그 중의 1층이 발광층이며, 주입된 정공과 전자가 재결합하는 것에 의해 발광할 수 있는 최소 단위를 말한다.

[0153] 따라서, 심플형 유기 EL 소자의 대표적인 소자 구성으로서, 이하의 소자 구성을 들 수 있다.

[0154] (1) 양극/발광 유닛/음극

[0155] 또한, 상기 발광 유닛은, 인광 발광층이나 형광 발광층을 복수 갖는 적층형이어도 좋고, 그 경우, 각 발광층 사

이에, 인광 발광층에서 생성된 여기자가 형광 발광층으로 확산되는 것을 방지할 목적으로, 스페이스층을 갖고 있어도 좋다. 발광 유닛의 대표적인 층 구성을 이하에 나타낸다.

[0156] (a) 정공 수송층/발광층(/전자 수송층)

[0157] (b) 정공 수송층/제 1 인광 발광층/제 2 인광 발광층(/전자 수송층)

[0158] (c) 정공 수송층/인광 발광층/스페이스층/형광 발광층(/전자 수송층)

[0159] (d) 정공 수송층/제 1 인광 발광층/제 2 인광 발광층/스페이스층/형광 발광층(/전자 수송층)

[0160] (e) 정공 수송층/제 1 인광 발광층/스페이스층/제 2 인광 발광층/스페이스층/형광 발광층(/전자 수송층)

[0161] (f) 정공 수송층/인광 발광층/스페이스층/제 1 형광 발광층/제 2 형광 발광층(/전자 수송층)

[0162] (g) 정공 수송층/전자 장벽층/발광층(/전자 수송층)

[0163] (h) 정공 수송층/발광층/정공 장벽층(/전자 수송층)

[0164] (i) 정공 수송층/형광 발광층/트리플렛 장벽층(/전자 수송층)

[0165] 상기 각 인광 또는 형광 발광층은, 각각 서로 다른 발광색을 나타내는 것으로 할 수 있다. 구체적으로는, 상기 적층 발광층(d)에 있어서, 정공 수송층/제 1 인광 발광층(적색 발광)/제 2 인광 발광층(녹색 발광)/스페이스층/형광 발광층(청색 발광)/전자 수송층과 같은 층 구성 등을 들 수 있다.

[0166] 한편, 각 발광층과 정공 수송층 또는 스페이스층 사이에는, 적절히 전자 장벽층을 설치해도 좋다. 또한, 각 발광층과 전자 수송층 사이에는, 적절히 정공 장벽층을 설치해도 좋다. 전자 장벽층이나 정공 장벽층을 설치함으로써, 전자 또는 정공을 발광층 내에 가두고, 발광층에 있어서의 전하의 재결합 확률을 높여, 발광 효율을 향상시킬 수 있다.

[0167] 탠덤형 유기 EL 소자의 대표적인 소자 구성으로서는, 이하의 소자 구성을 들 수 있다.

[0168] (2) 양극/제 1 발광 유닛/중간층/제 2 발광 유닛/음극

[0169] 여기서, 상기 제 1 발광 유닛 및 제 2 발광 유닛으로서는, 예컨대 각각 독립적으로 전술한 발광 유닛과 마찬가지로의 것을 선택할 수 있다.

[0170] 상기 중간층은, 일반적으로, 중간 전극, 중간 도전층, 전하 발생층, 전자 인발(引拔)층, 접속층, 중간 절연층으로도 불리며, 제 1 발광 유닛에 전자를, 제 2 발광 유닛에 정공을 공급하는, 공지된 재료 구성을 이용할 수 있다.

[0171] 도 1에, 본 발명의 유기 EL 소자의 일례의 개략 구성을 나타낸다. 유기 EL 소자(1)는, 기관(2), 양극(3), 음극(4), 및 해당 양극(3)과 음극(4) 사이에 배치된 발광 유닛(10)을 갖는다. 발광 유닛(10)은, 인광 호스트 재료와 인광 도펀트를 포함하는 적어도 1개의 인광 발광층을 포함하는 발광층(5)을 갖는다. 발광층(5)과 양극(3) 사이에 정공 주입·수송층(6) 등, 발광층(5)과 음극(4) 사이에 전자 주입·수송층(7) 등을 형성해도 좋다. 또한, 발광층(5)의 양극(3)측에 전자 장벽층을, 발광층(5)의 음극(4)측에 정공 장벽층을 각각 설치해도 좋다. 이에 의해, 전자나 정공을 발광층(5)에 가두고, 발광층(5)에 있어서의 여기자의 생성 확률을 높일 수 있다.

[0172] 한편, 본 명세서에 있어서, 형광 도펀트와 조합된 호스트를 형광 호스트로 칭하고, 인광 도펀트와 조합된 호스트를 인광 호스트로 칭한다. 형광 호스트와 인광 호스트는 분자 구조에 의해서만 구분되는 것은 아니다. 즉, 인광 호스트란, 인광 도펀트를 함유하는 인광 발광층을 구성하는 재료를 의미하며, 형광 발광층을 구성하는 재료로서 이용할 수 없는 것을 의미하고 있는 것은 아니다. 형광 호스트에 대해서도 마찬가지이다.

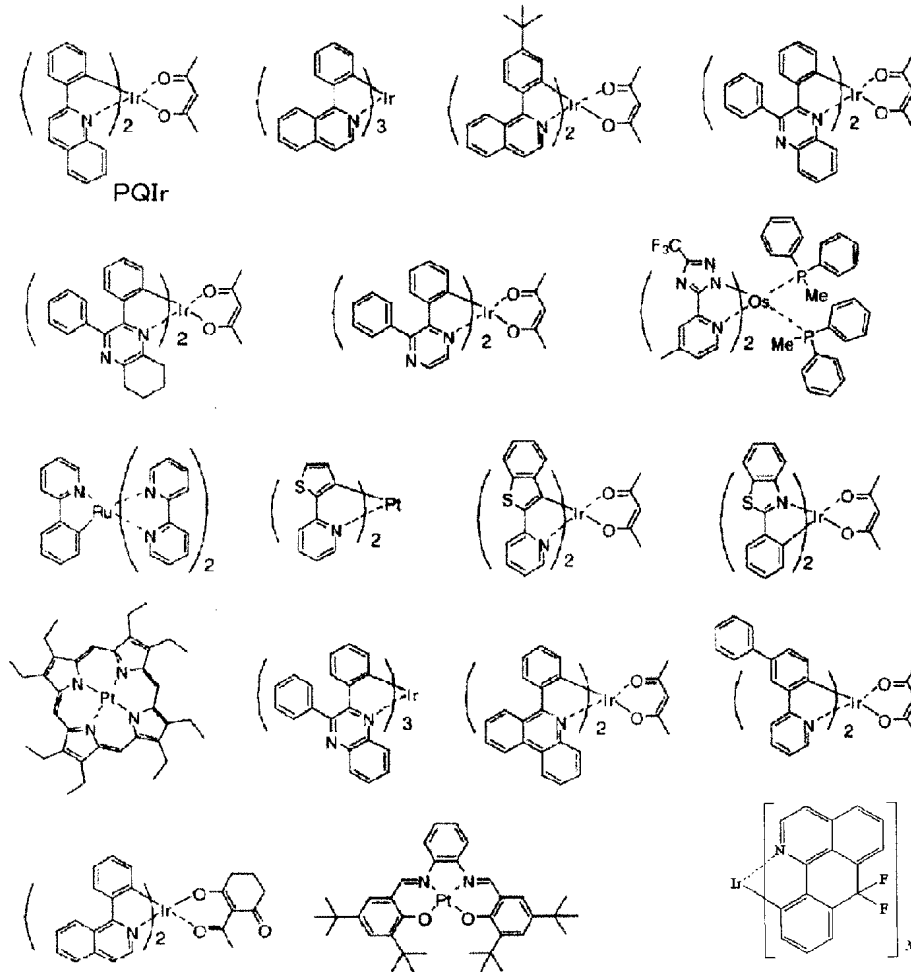
[0173] (기관)

[0174] 본 발명의 유기 EL 소자는 투광성 기관 상에 제작한다. 투광성 기관은 유기 EL 소자를 지지하는 기관이며, 400nm~700nm의 가시 영역의 광의 투과율이 50% 이상이고 평활한 기관이 바람직하다. 구체적으로는, 유리판, 폴리머판 등을 들 수 있다. 유리판으로서는, 특히 소다 석회 유리, 바륨·스트론튬 함유 유리, 납 유리, 알루미노규산 유리, 붕규산 유리, 바륨붕규산 유리, 석영 등을 원료로서 이용하여 이루어지는 것을 들 수 있다. 또한, 폴리머판으로서는, 폴리카보네이트, 아크릴, 폴리에틸렌테레프탈레이트, 폴리에테르설파이드, 폴리설폰 등을 원료로서 이용하여 이루어지는 것을 들 수 있다.

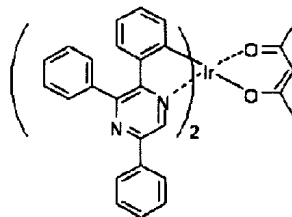
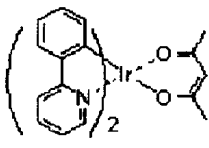
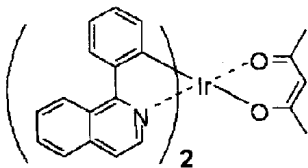
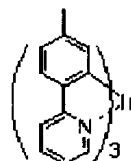
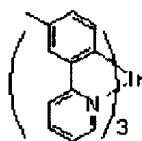
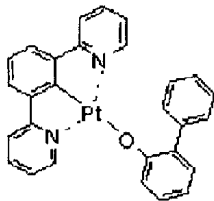
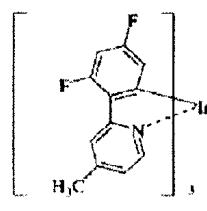
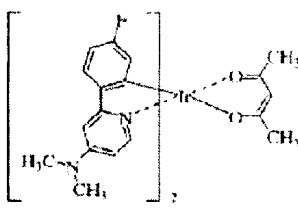
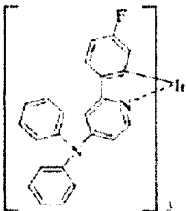
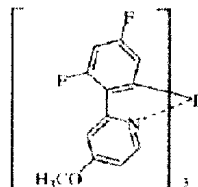
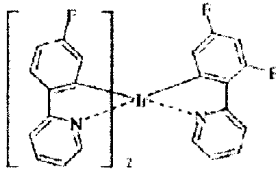
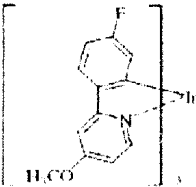
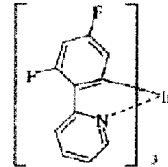
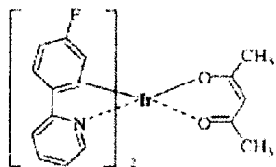
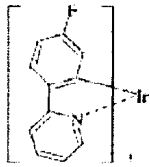
- [0175] (양극)
- [0176] 유기 EL 소자의 양극은 정공을 정공 수송층 또는 발광층으로 주입하는 역할을 담당하는 것이며, 4.5eV 이상의 일함수를 갖는 것을 이용하는 것이 효과적이다. 양극 재료의 구체예로서는, 산화인듐주석 합금(ITO), 산화주석(NESA), 산화인듐아연 산화물, 금, 은, 백금, 구리 등을 들 수 있다. 양극은 이들 전극 물질을 증착법이나 스퍼터링법 등의 방법으로 박막을 형성시키는 것에 의해 제작할 수 있다. 발광층으로부터의 발광을 양극으로부터 추출하는 경우, 양극의 가시 영역의 광의 투과율을 10%보다 크게 하는 것이 바람직하다. 또한, 양극의 시트 저항은, 수백Ω/□ 이하가 바람직하다. 양극의 막 두께는, 재료에도 의존하지만, 통상 10nm~1μm, 바람직하게는 10nm~200nm의 범위에서 선택된다.
- [0177] (음극)
- [0178] 음극은 전자 주입층, 전자 수송층 또는 발광층으로 전자를 주입하는 역할을 담당하는 것이며, 일함수가 작은 재료에 의해 형성되는 것이 바람직하다. 음극 재료는 특별히 한정되지 않지만, 구체적으로는 인듐, 알루미늄, 마그네슘, 마그네슘-인듐 합금, 마그네슘-알루미늄 합금, 알루미늄-리튬 합금, 알루미늄-스칸듐-리튬 합금, 마그네슘-은 합금 등이 사용될 수 있다. 음극도, 양극과 마찬가지로, 증착법이나 스퍼터링법 등의 방법으로 박막을 형성시키는 것에 의해 제작할 수 있다. 또한, 필요에 따라, 음극측으로부터 발광을 추출해도 좋다.
- [0179] (발광층)
- [0180] 발광 기능을 갖는 유기층으로서, 도핑 시스템을 채용하는 경우, 호스트 재료와 도펀트 재료를 포함하고 있다. 이때, 호스트 재료는, 주로 전자와 정공의 재결합을 촉진하고, 여기자를 발광층 내에 가두는 기능을 가지며, 도펀트 재료는, 재결합으로 얻어진 여기자를 효율적으로 발광시키는 기능을 갖는다.
- [0181] 인광 소자의 경우, 호스트 재료는 주로 도펀트에서 생성된 여기자를 발광층 내에 가두는 기능을 갖는다.
- [0182] 여기서, 상기 발광층은, 예컨대 전자 수송성의 호스트와 정공 수송성의 호스트를 조합하는 등 하여, 발광층 내의 캐리어 밸런스를 조정하는 더블 호스트(호스트·코호스트라고도 한다)를 채용해도 좋다.
- [0183] 또한, 양자 수율이 높은 도펀트 재료를 2종류 이상 넣는 것에 의해, 각각의 도펀트가 발광하는 더블 도펀트를 채용해도 좋다. 구체적으로는, 호스트, 적색 도펀트 및 녹색 도펀트를 공증착하는 것에 의해, 발광층을 공통화하여 황색 발광을 실현하는 태양을 들 수 있다.
- [0184] 상기 발광층은, 복수의 발광층을 적층한 적층체로 함으로써, 발광층 계면에 전자와 정공을 축적시키고, 재결합 영역을 발광층 계면에 집중시켜, 양자 효율을 향상시킬 수 있다.
- [0185] 발광층으로의 정공의 주입 용이함과 전자의 주입 용이함은 상이해도 좋고, 또한 발광층 중에서의 정공과 전자의 이동도로 표시되는 정공 수송능과 전자 수송능이 상이해도 좋다.
- [0186] 발광층은, 예컨대 증착법, 스핀 코팅법, LB법 등의 공지된 방법에 의해 형성할 수 있다. 또한, 수지 등의 결합제와 재료 화합물을 용제에 녹인 용액을 스핀 코팅법 등에 의해 박막화하는 것에 의해서도 발광층을 형성할 수 있다.
- [0187] 발광층은 분자 퇴적막인 것이 바람직하다. 분자 퇴적막이란, 기상 상태의 재료 화합물로부터 침착되어 형성된 박막이나, 용액 상태 또는 액상 상태의 재료 화합물로부터 고체화되어 형성된 막인 것이며, 통상 이 분자 퇴적막은, LB법에 의해 형성된 박막(분자 누적막)과는 응집 구조, 고차 구조의 차이나, 그것에 기인하는 기능적인 차이에 의해 구분할 수 있다.
- [0188] 발광층을 형성하는 인광 도펀트(인광 발광 재료)는 3중항 여기 상태에서부터 발광할 수 있는 화합물이며, 3중항 여기 상태에서부터 발광하는 한 특별히 한정되지 않지만, Ir, Pt, Os, Au, Cu, Re 및 Ru로부터 선택되는 적어도 1개의 금속과 배위자를 포함하는 유기 금속 착체인 것이 바람직하다. 상기 배위자는, 오쏘메탈 결합을 갖는 것이 바람직하다. 인광 양자 수율이 높고, 발광 소자의 외부 양자 효율을 보다 향상시킬 수 있다고 하는 점에서, Ir, Os 및 Pt로부터 선택되는 금속 원자를 함유하는 금속 착체가 바람직하고, 이리듐 착체, 오스뮴 착체, 백금 착체 등의 금속 착체가 보다 바람직하고, 이리듐 착체 및 백금 착체가 더 바람직하고, 오쏘메탈화 이리듐 착체가 특히 바람직하다.
- [0189] 인광 도펀트의 발광층에 있어서의 함유량은 특별히 제한은 없고 목적에 따라 적절히 선택할 수 있지만, 예컨대 0.1~70질량%가 바람직하고, 1~30질량%가 보다 바람직하다. 인광 도펀트의 함유량이 0.1질량% 이상이면 충분한

한 발광이 얻어지고, 70질량% 이하이면 농도 소광을 피할 수 있다.

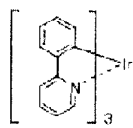
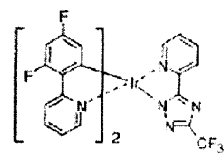
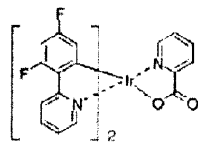
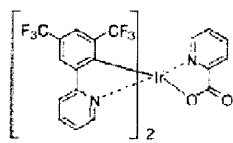
[0190] 인광 도펀트로서 바람직한 유기 금속 착체의 구체예를 이하에 나타낸다.



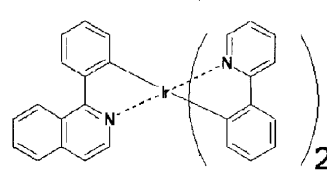
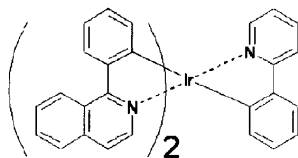
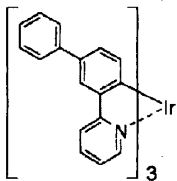
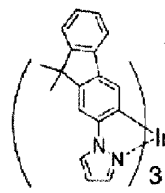
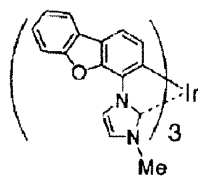
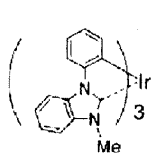
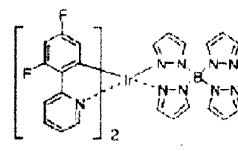
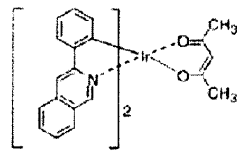
[0191]



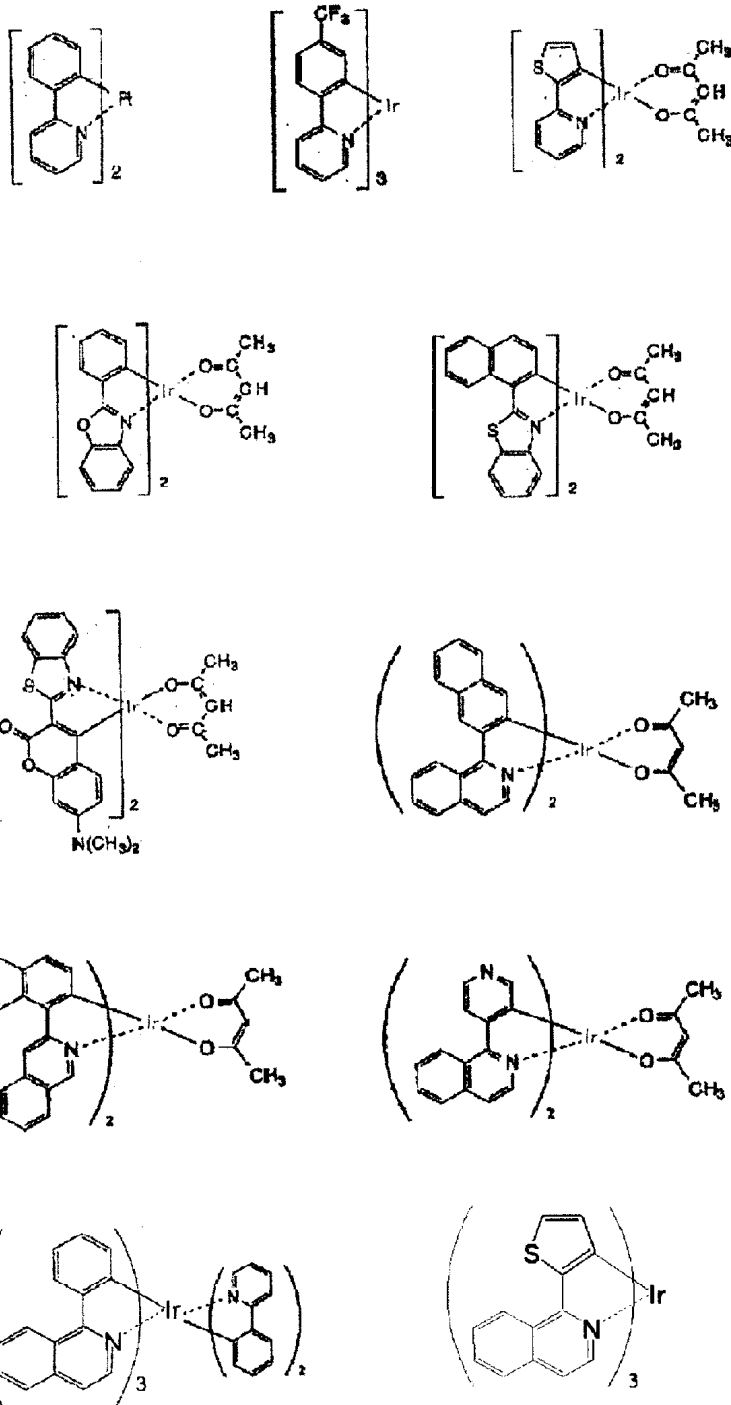
[0192]



**Ir(ppy)<sub>3</sub>**



[0193]



[0194]

[0195]

인광 호스트는, 인광 도펀트의 3중항 에너지를 효율적으로 발광층 내에 가두는 것에 의해, 인광 도펀트를 효율적으로 발광시키는 기능을 갖는 화합물이다. 본 발명의 유기 EL 소자용 재료는 인광 호스트로서 유용하지만, 본 발명의 유기 EL 소자용 재료 이외의 화합물도, 인광 호스트로서, 상기 목적에 따라서 적절히 선택할 수 있다.

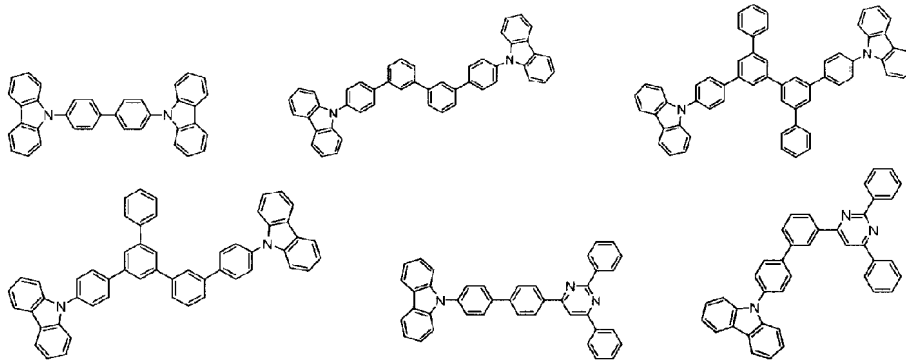
[0196]

본 발명의 유기 EL 소자용 재료와 그 이외의 화합물을 동일한 발광층 내의 인광 호스트 재료로서 병용해도 좋고, 복수의 발광층이 있는 경우에는, 그 중 1개의 발광층의 인광 호스트 재료로서 본 발명의 유기 EL 소자용 재료를 이용하고, 별도의 1개의 발광층의 인광 호스트 재료로서 본 발명의 유기 EL 소자용 재료 이외의 화합물을 이용해도 좋다. 또한, 본 발명의 유기 EL 소자용 재료는 발광층 이외의 유기층에도 사용할 수 있는 것이고, 그 경우에는 발광층의 인광 호스트로서, 본 발명의 유기 EL 소자용 재료 이외의 화합물을 이용해도 좋다.

[0197]

본 발명의 유기 EL 소자용 재료 이외의 화합물이고, 인광 호스트로서 적합한 화합물의 구체예로서는, 카바졸 유도체, 트리아아졸 유도체, 옥사졸 유도체, 옥사다리아졸 유도체, 이미다졸 유도체, 폴리아릴알케인 유도체, 피

라졸린 유도체, 피라졸론 유도체, 페닐렌다이아민 유도체, 아릴아민 유도체, 아미노 치환 칼콘 유도체, 스타이릴안트라센 유도체, 플루오렌온 유도체, 하이드라존 유도체, 스틸벤 유도체, 실라제인 유도체, 방향족 제 3 아민 화합물, 스타이릴아민 화합물, 방향족 다이메틸리텐계 화합물, 포피린계 화합물, 안트라퀴노다이메테인 유도체, 안트론 유도체, 다이페닐퀴논 유도체, 싸이오피란 다이옥사이드 유도체, 카보다이이미드 유도체, 플루오렌 일리덴메테인 유도체, 다이스타이릴피라진 유도체, 나프탈렌, 페릴렌 등의 헤테로환 테트라카복실산 무수물, 프탈로사이아닌 유도체, 8-퀴놀린을 유도체의 금속 착체나 메탈프탈로사이아닌, 벤즈옥사졸이나 벤조싸이아졸을 배위자로 하는 금속 착체로 대표되는 각종 금속 착체 폴리실레인계 화합물, 폴리(N-바이닐카바졸) 유도체, 아닐린계 공중합체, 싸이오펜 올리고머, 폴리싸이오펜 등의 도전성 고분자 올리고머, 폴리싸이오펜 유도체, 폴리페닐렌 유도체, 폴리페닐렌바이닐렌 유도체, 폴리플루오렌 유도체 등의 고분자 화합물 등을 들 수 있다. 인광 호스트는 단독으로 사용해도 좋고, 2종 이상을 병용해도 좋다. 구체예로서는, 이하와 같은 화합물을 들 수 있다.



[0198]

[0199]

발광층의 막 두께는, 바람직하게는 5~50nm, 보다 바람직하게는 7~50nm, 더 바람직하게는 10~50nm이다. 5nm 이상이면 발광층의 형성이 용이하고, 50nm 이하이면 구동 전압의 상승을 피할 수 있다.

[0200]

(전자 공여성 도펀트)

[0201]

본 발명의 유기 EL 소자는, 음극과 발광 유닛의 계면 영역에 전자 공여성 도펀트를 갖는 것도 바람직하다. 이와 같은 구성에 의하면, 유기 EL 소자에 있어서의 발광 휘도의 향상이나 장수명화가 도모된다. 여기서, 전자 공여성 도펀트란, 일함수 3.8eV 이하의 금속을 함유하는 것을 말하며, 그의 구체예로서는, 알칼리 금속, 알칼리 금속 착체, 알칼리 금속 화합물, 알칼리 토류 금속, 알칼리 토류 금속 착체, 알칼리 토류 금속 화합물, 희토류 금속, 희토류 금속 착체 및 희토류 금속 화합물 등으로부터 선택된 적어도 1종류를 들 수 있다.

[0202]

알칼리 금속으로서, Na(일함수: 2.36eV), K(일함수: 2.28eV), Rb(일함수: 2.16eV), Cs(일함수: 1.95eV) 등을 들 수 있고, 일함수가 2.9eV 이하인 것이 특히 바람직하다. 이들 중 바람직하게는 K, Rb, Cs, 더 바람직하게는 Rb 또는 Cs이며, 가장 바람직하게는 Cs이다. 알칼리 토류 금속으로서, Ca(일함수: 2.9eV), Sr(일함수: 2.0eV ~ 2.5eV), Ba(일함수: 2.52eV) 등을 들 수 있고, 일함수가 2.9eV 이하인 것이 특히 바람직하다. 희토류 금속로서, Sc, Y, Ce, Tb, Yb 등을 들 수 있고, 일함수가 2.9eV 이하인 것이 특히 바람직하다.

[0203]

알칼리 금속 화합물로서,  $\text{Li}_2\text{O}$ ,  $\text{Cs}_2\text{O}$ ,  $\text{K}_2\text{O}$  등의 알칼리 산화물, LiF, NaF, CsF, KF 등의 알칼리 할로젠화물 등을 들 수 있고, LiF,  $\text{Li}_2\text{O}$ , NaF가 바람직하다. 알칼리 토류 금속 화합물로서, BaO, SrO, CaO 및 이들을 혼합한  $\text{Ba}_x\text{Sr}_{1-x}\text{O}$  ( $0 < x < 1$ ),  $\text{Ba}_x\text{Ca}_{1-x}\text{O}$  ( $0 < x < 1$ ) 등을 들 수 있고, BaO, SrO, CaO가 바람직하다. 희토류 금속 화합물로서는,  $\text{YbF}_3$ ,  $\text{ScF}_3$ ,  $\text{ScO}_3$ ,  $\text{Y}_2\text{O}_3$ ,  $\text{Ce}_2\text{O}_3$ ,  $\text{GdF}_3$ ,  $\text{TbF}_3$  등을 들 수 있고,  $\text{YbF}_3$ ,  $\text{ScF}_3$ ,  $\text{TbF}_3$ 이 바람직하다.

[0204]

알칼리 금속 착체, 알칼리 토류 금속 착체, 희토류 금속 착체로서는, 각각 금속 이온으로서 알칼리 금속 이온, 알칼리 토류 금속 이온, 희토류 금속 이온 중 적어도 1개 함유하는 것이면 특별히 한정되는 것은 없다. 또한, 배위자에는 퀴놀린을, 벤조퀴놀린을, 아크리딘을, 페난트리딘을, 하이드록시페닐옥사졸, 하이드록시페닐싸이아졸, 하이드록시다이아릴옥사다이아졸, 하이드록시다이아릴싸이아다이아졸, 하이드록시페닐피리딘, 하이드록시페닐벤즈이미다졸, 하이드록시벤조트리아아졸, 하이드록시플로베인, 바이피리딜, 페난트론, 프탈로사이아닌, 포피린, 사이클로펜타다이엔,  $\beta$ -다이케톤류, 아조메타인류, 및 그들의 유도체 등이 바람직하지만, 이들에 한정되는 것은 아니다.

[0205]

전자 공여성 도펀트의 첨가 형태로서는, 계면 영역에 층상 또는 섬상으로 형성하면 바람직하다. 형성 방법로서는, 저항 가열 증착법에 의해 전자 공여성 도펀트를 증착하면서, 계면 영역을 형성하는 유기 화합물(발광 재

료나 전자 주입 재료)을 동시에 증착시켜, 유기 화합물에 전자 공여성 도펀트를 분산시키는 방법이 바람직하다. 분산 농도는 몰비로 유기 화합물:전자 공여성 도펀트 = 100:1~1:100, 바람직하게는 5:1~1:5이다.

[0206] 전자 공여성 도펀트를 층상으로 형성하는 경우는, 계면의 유기층인 발광 재료나 전자 주입 재료를 층상으로 형성한 후에, 환원 도펀트를 단독으로 저항 가열 증착법에 의해 증착하여, 바람직하게는 층의 두께 0.1nm~15nm로 형성한다. 전자 공여성 도펀트를 섬상으로 형성하는 경우는, 계면의 유기층인 발광 재료나 전자 주입 재료를 섬상으로 형성한 후에, 전자 공여성 도펀트를 단독으로 저항 가열 증착법에 의해 증착하여, 바람직하게는 섬의 두께 0.05nm~1nm로 형성한다.

[0207] 본 발명의 유기 EL 소자에 있어서의 주성분과 전자 공여성 도펀트의 비율은, 몰비로 주성분:전자 공여성 도펀트 = 5:1~1:5이면 바람직하고, 2:1~1:2이면 더 바람직하다.

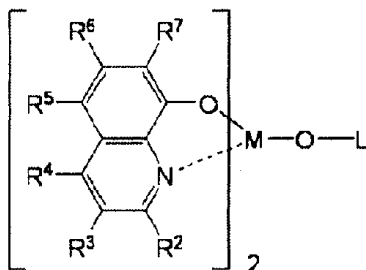
[0208] (전자 수송층)

[0209] 전자 수송층은, 발광층과 음극 사이에 형성되는 유기층으로서, 전자를 음극으로부터 발광층으로 수송하는 기능을 갖는다. 전자 수송층이 복수층으로 구성되는 경우, 음극에 가까운 유기층을 전자 주입층으로 정의하는 경우가 있다. 전자 주입층은, 음극으로부터 전자를 효율적으로 유기층 유닛으로 주입하는 기능을 갖는다. 본 발명의 유기 EL 소자용 재료는, 전자 수송층에 함유되는 전자 수송 재료로서 이용할 수도 있다.

[0210] 전자 수송층에 이용하는 전자 수송성 재료로서는, 분자 내에 헤테로 원자를 1개 이상 함유하는 방향족 헤테로환 화합물이 바람직하게 이용되고, 특히 질소 함유 환 유도체가 바람직하다. 또한, 질소 함유 환 유도체로서는, 질소 함유 6원환 또는 5원환 골격을 갖는 방향족 환, 또는 질소 함유 6원환 또는 5원환 골격을 갖는 축합 방향족 환 화합물이 바람직하다.

[0211] 이 질소 함유 환 유도체로서는, 예컨대 하기 화학식 A로 표시되는 질소 함유 환 금속 킬레이트 착체가 바람직하다.

[0212] [화학식 A]



[0213]

[0214] 화학식 A에 있어서의  $R^2 \sim R^7$ 은 각각 독립적으로, 수소 원자, 중수소 원자, 할로젠 원자, 하이드록실기, 아미노기, 탄소수 1~40의 탄화수소기, 탄소수 1~40의 알콕시기, 탄소수 6~50의 아릴옥시기, 알콕시카보닐기, 또는 환 형성 탄소수 5~50의 방향족 헤테로환기이며, 이들은 치환되어 있어도 좋다.

[0215] 할로젠 원자로서는, 예컨대 불소, 염소, 브롬, 요오드 등을 들 수 있다.

[0216] 치환되어 있어도 좋은 아미노기의 예로서는, 알킬아미노기, 아릴아미노기, 아르알킬아미노기를 들 수 있다.

[0217] 알킬아미노기 및 아르알킬아미노기는  $-N^1Q^2$ 로 표시된다.  $Q^1$  및  $Q^2$ 는 각각 독립적으로, 탄소수 1~20의 알킬기 또는 탄소수 1~20의 아르알킬기를 나타낸다.  $Q^1$  및  $Q^2$  중 한쪽은 수소 원자 또는 중수소 원자여도 좋다.

[0218] 아릴아미노기는  $-N^1Ar^2$ 로 표시되고,  $Ar^1$  및  $Ar^2$ 는 각각 독립적으로, 탄소수 6~50의 비축합 방향족 탄화수소기 또는 축합 방향족 탄화수소기를 나타낸다.  $Ar^1$  및  $Ar^2$  중 한쪽은 수소 원자 또는 중수소 원자여도 좋다.

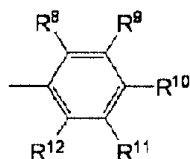
[0219] 탄소수 1~40의 탄화수소기는 알킬기, 알켄일기, 사이클로알킬기, 아릴기 및 아르알킬기를 포함한다.

[0220] 알콕시카보닐기는  $-COOY'$ 로 표시되고,  $Y'$ 는 탄소수 1~20의 알킬기를 나타낸다.

[0221] M은 알루미늄(Al), 갈륨(Ga) 또는 인듐(In)이며, In이면 바람직하다.

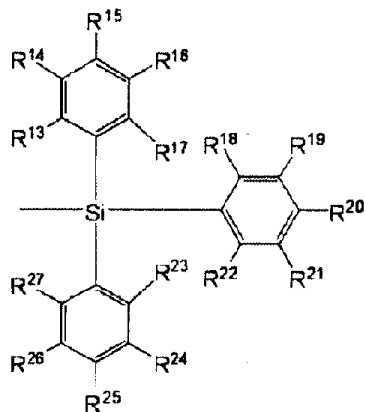
[0222] L은 하기 화학식 A' 또는 A"로 표시되는 기이다.

[0223] [화학식 A']



[0224]

[0225] [화학식 A"]

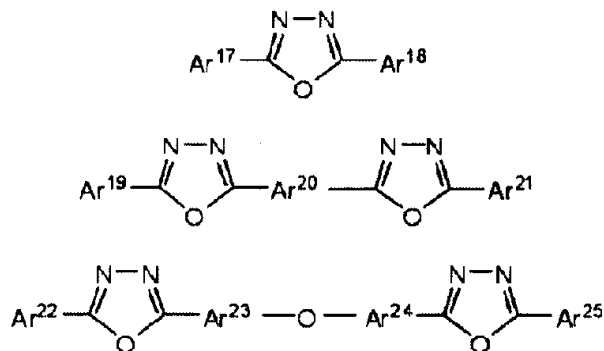


[0226]

[0227] 화학식 A' 중, R<sup>8</sup>~R<sup>12</sup>는 각각 독립적으로, 수소 원자, 중수소 원자, 또는 치환 또는 비치환된 탄소수 1~40의 탄화수소기이며, 서로 인접하는 기가 환상 구조를 형성하고 있어도 좋다. 또한, 상기 화학식 A" 중, R<sup>13</sup>~R<sup>27</sup>은 각각 독립적으로, 수소 원자, 중수소 원자, 또는 치환 또는 비치환된 탄소수 1~40의 탄화수소기이며, 서로 인접하는 기가 환상 구조를 형성하고 있어도 좋다.

[0228] 화학식 A' 및 화학식 A"의 R<sup>8</sup>~R<sup>12</sup> 및 R<sup>13</sup>~R<sup>27</sup>이 나타내는 탄소수 1~40의 탄화수소기는, 상기 화학식 A 중의 R<sup>2</sup>~R<sup>7</sup>이 나타내는 탄화수소기와 마찬가지로이다. 또한, R<sup>8</sup>~R<sup>12</sup> 및 R<sup>13</sup>~R<sup>27</sup> 중 서로 인접하는 기가 환상 구조를 형성한 경우의 2가 기로서는, 테트라메틸렌기, 펜타메틸렌기, 헥사메틸렌기, 다이페닐메테인-2,2'-다이일기, 다이페닐에테인-3,3'-다이일기, 다이페닐프로페인-4,4'-다이일기 등을 들 수 있다.

[0229] 전자 수송층에 이용되는 전자 전달성 화합물로서는, 8-하이드록시퀴놀린 또는 그의 유도체의 금속 착체, 옥사다리아졸 유도체, 질소 함유 헤테로환 유도체가 적합하다. 상기 8-하이드록시퀴놀린 또는 그의 유도체의 금속 착체의 구체예로서는, 옥신(일반적으로 8-퀴놀린을 또는 8-하이드록시퀴놀린)의 킬레이트를 포함하는 금속 킬레이트 옥시노이드 화합물, 예컨대 트리스(8-퀴놀린을)알루미늄을 이용할 수 있다. 그리고, 옥사다리아졸 유도체로서는, 하기의 것을 들 수 있다.



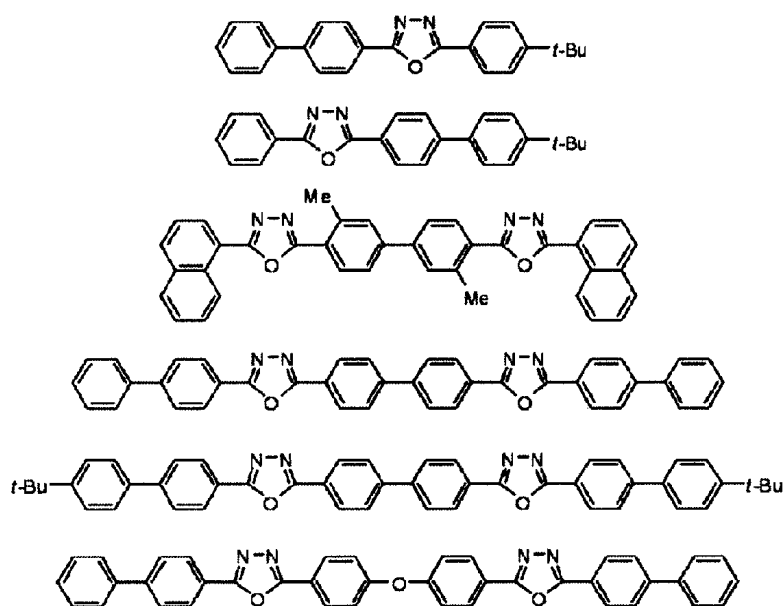
[0230]

[0231] 상기 화학식 중, Ar<sup>17</sup>, Ar<sup>18</sup>, Ar<sup>19</sup>, Ar<sup>21</sup>, Ar<sup>22</sup> 및 Ar<sup>25</sup>는 각각 치환 또는 비치환된 탄소수 6~50의 방향족 탄화수

소기 또는 축합 방향족 탄화수소기를 나타내고, Ar<sup>17</sup>과 Ar<sup>18</sup>, Ar<sup>19</sup>와 Ar<sup>21</sup>, Ar<sup>22</sup>와 Ar<sup>25</sup>는 서로 동일해도 상이해도 좋다. 방향족 탄화수소기 또는 축합 방향족 탄화수소기로서는, 페닐기, 나프틸기, 바이페닐기, 안트라닐기, 페틸렌일기, 피렌일기 등을 들 수 있다. 이들의 치환기로서는 탄소수 1~10의 알킬기, 탄소수 1~10의 알콕시기 또는 사이아노기 등을 들 수 있다.

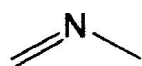
[0232] Ar<sup>20</sup>, Ar<sup>23</sup> 및 Ar<sup>24</sup>는 각각 치환 또는 비치환된 탄소수 6~50의 2가 방향족 탄화수소기 또는 축합 방향족 탄화수소기를 나타내고, Ar<sup>23</sup>과 Ar<sup>24</sup>는 서로 동일해도 상이해도 좋다. 2가 방향족 탄화수소기 또는 축합 방향족 탄화수소기로서는, 페닐렌기, 나프틸렌기, 바이페닐렌기, 안트라닐렌기, 페틸렌일렌기, 피렌일렌기 등을 들 수 있다. 이들의 치환기로서는 탄소수 1~10의 알킬기, 탄소수 1~10의 알콕시기 또는 사이아노기 등을 들 수 있다.

[0233] 이들 전자 전달성 화합물은, 박막 형성성이 양호한 것이 바람직하게 이용된다. 그리고, 이들 전자 전달성 화합물의 구체예로서는, 하기의 것을 들 수 있다.



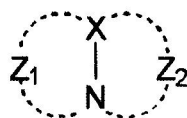
[0234] 전자 전달성 화합물로서의 질소 함유 헤테로환 유도체는, 이하의 화학식을 갖는 유기 화합물로 이루어지는 질소 함유 헤테로환 유도체로서, 금속 착체가 아닌 질소 함유 화합물을 들 수 있다. 예컨대, 하기 화학식 B에 나타내는 골격을 함유하는 5원환 또는 6원환이나, 하기 화학식 C에 나타내는 구조의 것을 들 수 있다.

[0236] [화학식 B]



[0237]

[0238] [화학식 C]

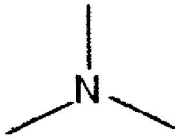


[0239] 상기 화학식 C 중, X는 탄소 원자 또는 질소 원자를 나타낸다. Z<sub>1</sub> 및 Z<sub>2</sub>는 각각 독립적으로 질소 함유 헤테로환을 형성할 수 있는 원자군을 나타낸다.

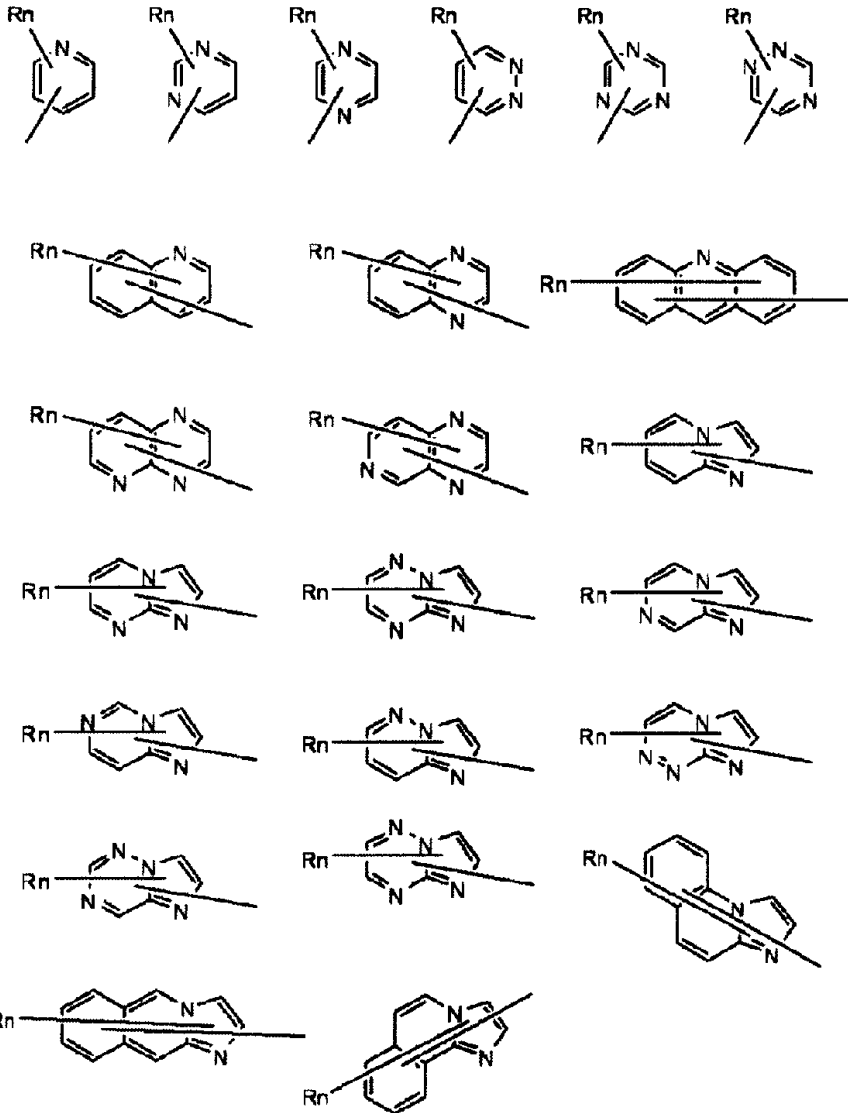
[0241] 질소 함유 헤테로환 유도체는, 더 바람직하게는 5원환 또는 6원환으로 이루어지는 질소 함유 방향 다환족을 갖는 유기 화합물이다. 또한, 이와 같은 복수 질소 원자를 갖는 질소 함유 방향 다환족의 경우는, 상기 화학식 B와 C 또는 상기 화학식 B와 하기 화학식 D를 조합한 골격을 갖는 질소 함유 방향 다환 유기 화합물이 바람직하

다.

[화학식 D]



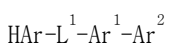
상기 질소 함유 방향 다환 유기 화합물의 질소 함유기는, 예컨대 이하의 화학식으로 표시되는 질소 함유 헤테로 환기로부터 선택된다.



상기 각 화학식 중, R은 탄소수 6~40의 방향족 탄화수소기 또는 축합 방향족 탄화수소기, 탄소수 3~40의 방향 족 헤테로환기 또는 축합 방향족 헤테로환기, 탄소수 1~20의 알킬기, 또는 탄소수 1~20의 알콕시기이고, n은 0~5의 정수이며, n이 2 이상의 정수일 때, 복수의 R은 서로 동일 또는 상이해도 좋다.

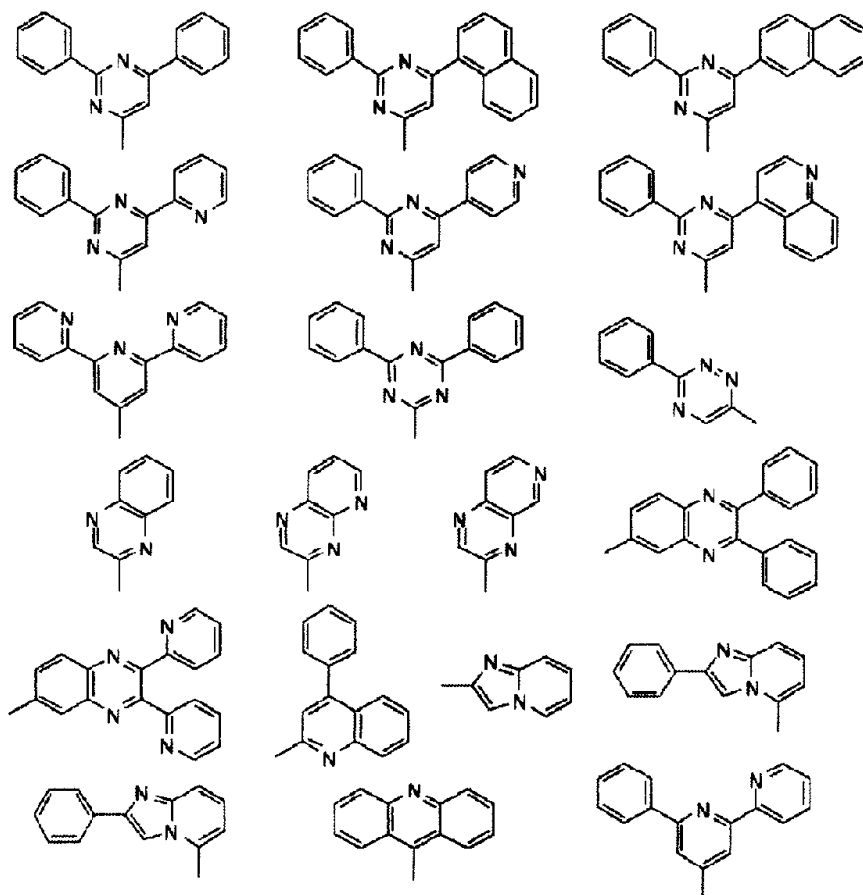
또한, 바람직한 구체적인 화합물로서, 하기 화학식 D1로 표시되는 질소 함유 헤테로환 유도체를 들 수 있다.

[화학식 D1]



[0250] 상기 화학식 D1 중, HAr은 치환 또는 비치환된 탄소수 3~40의 질소 함유 헤테로환기이며,  $L^1$ 은 단일 결합, 치환 또는 비치환된 탄소수 6~40의 방향족 탄화수소기 또는 축합 방향족 탄화수소기, 또는 치환 또는 비치환된 탄소수 3~40의 방향족 헤테로환기 또는 축합 방향족 헤테로환기이고,  $Ar^1$ 은 치환 또는 비치환된 탄소수 6~40의 2가 방향족 탄화수소기이고,  $Ar^2$ 는 치환 또는 비치환된 탄소수 6~40의 방향족 탄화수소기 또는 축합 방향족 탄화수소기, 또는 치환 또는 비치환된 탄소수 3~40의 방향족 헤테로환기 또는 축합 방향족 헤테로환기이다.

[0251] HAr은, 예컨대 하기의 군으로부터 선택된다.



[0252]

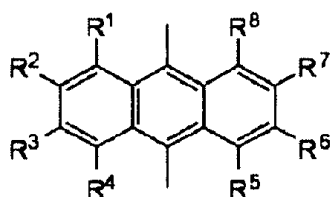
[0253]  $L^1$ 은, 예컨대 하기의 군으로부터 선택된다.



[0254]

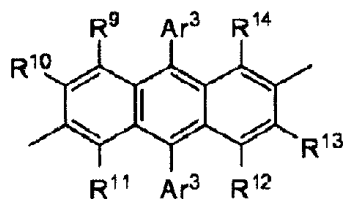
[0255]  $Ar^1$ 은, 예컨대 하기 화학식 D2, 화학식 D3의 아릴안트라닐기로부터 선택된다.

[0256] [화학식 D2]



[0257]

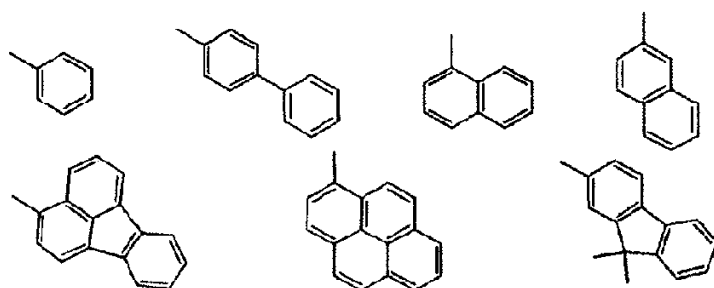
[0258] [화학식 D3]



[0259]

[0260] 상기 화학식 D2, 화학식 D3 중,  $R^1 \sim R^{14}$ 는 각각 독립적으로, 수소 원자, 중수소 원자, 할로젠 원자, 탄소수 1~20의 알킬기, 탄소수 1~20의 알콕시기, 탄소수 6~40의 아릴옥시기, 치환 또는 비치환된 탄소수 6~40의 방향족 탄화수소기 또는 축합 방향족 탄화수소기, 또는 치환 또는 비치환된 탄소수 3~40의 방향족 헤테로환기 또는 축합 방향족 헤테로환기이며,  $Ar^3$ 은 치환 또는 비치환된 탄소수 6~40의 방향족 탄화수소기 또는 축합 방향족 탄화수소기, 또는 치환 또는 비치환된 탄소수 3~40의 방향족 헤테로환기 또는 축합 방향족 헤테로환기이다. 또한,  $R^1 \sim R^8$ 은 모두 수소 원자 또는 중수소 원자인 질소 함유 헤테로환 유도체여도 좋다.

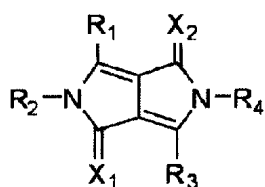
[0261]  $Ar^2$ 는, 예컨대 하기의 군으로부터 선택된다.



[0262]

[0263] 전자 전달성 화합물로서의 질소 함유 방향 다환 유기 화합물에는, 이밖에 하기의 화합물도 적합하게 이용된다.

[0264] [화학식 D4]

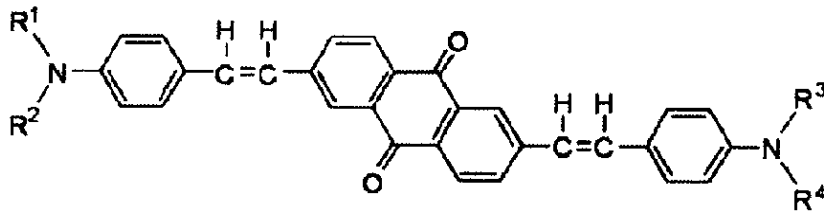


[0265]

[0266] 상기 화학식 D4 중,  $R_1 \sim R_4$ 는 각각 독립적으로, 수소 원자, 중수소 원자, 치환 또는 비치환된 탄소수 1~20의 지방족기, 치환 또는 비치환된 탄소수 3~20의 지방족식 환기, 치환 또는 비치환된 탄소수 6~50의 방향족 환기, 치환 또는 비치환된 탄소수 3~50의 헤테로환기를 나타내고,  $X_1, X_2$ 는 각각 독립적으로, 산소 원자, 황 원자 또는 다이사이아노메틸렌기를 나타낸다.

[0267] 또한, 전자 전달성 화합물로서, 하기의 화합물도 적합하게 이용된다.

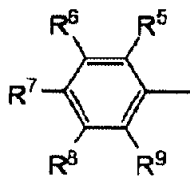
[0268] [화학식 D5]



[0269]

[0270] 상기 화학식 D5 중, R<sup>1</sup>, R<sup>2</sup>, R<sup>3</sup> 및 R<sup>4</sup>는 서로 동일 또는 상이한 기로서, 하기 화학식 D6으로 표시되는 방향족 탄화수소기 또는 축합 방향족 탄화수소기이다.

[0271] [화학식 D6]



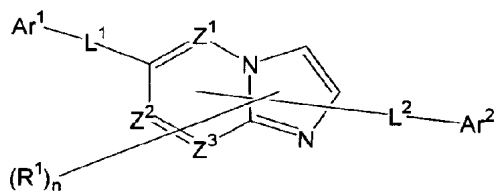
[0272]

[0273] 상기 화학식 D6 중, R<sup>5</sup>, R<sup>6</sup>, R<sup>7</sup>, R<sup>8</sup> 및 R<sup>9</sup>는 서로 동일 또는 상이한 기로서, 수소 원자, 중수소 원자, 포화 또는 불포화된 탄소수 1~20의 알킬기, 포화 또는 불포화된 탄소수 1~20의 알킬기, 아미노기, 또는 탄소수 1~20의 알킬아미노기이다. R<sup>5</sup>, R<sup>6</sup>, R<sup>7</sup>, R<sup>8</sup> 및 R<sup>9</sup> 중 적어도 1개는 수소 원자, 중수소 원자 이외의 기이다.

[0274] 또, 전자 전달성 화합물은, 해당 질소 함유 헤테로환기 또는 질소 함유 헤테로환 유도체를 포함하는 고분자 화합물이어도 좋다.

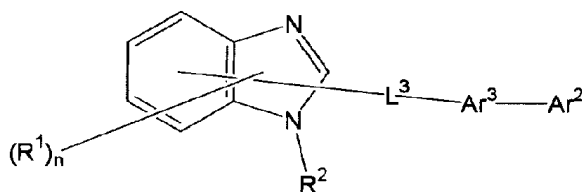
[0275] 본 발명의 유기 EL 소자의 전자 수송층은, 하기 화학식 E~G로 표시되는 질소 함유 헤테로환 유도체를 적어도 1종 포함하는 것이 특히 바람직하다.

[0276] [화학식 E]



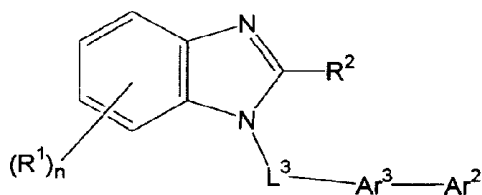
[0277]

[0278] [화학식 F]



[0279]

[0280] [화학식 G]



[0281]

[0282] (상기 화학식 E~G 중,  $Z^1$ ,  $Z^2$  및  $Z^3$ 은 각각 독립적으로, 질소 원자 또는 탄소 원자이다.

[0283]  $R^1$  및  $R^2$ 는 각각 독립적으로, 치환 또는 비치환된 환 형성 탄소수 6~50의 아릴기, 치환 또는 비치환된 환 형성 원자수 5~50의 헤테로아릴기, 치환 또는 비치환된 탄소수 1~20의 알킬기, 치환 또는 비치환된 탄소수 1~20의 할로알킬기, 또는 치환 또는 비치환된 탄소수 1~20의 알콕시기이다.

[0284]  $n$ 은 0~5의 정수이며,  $n$ 이 2 이상의 정수일 때, 복수의  $R^1$ 은 서로 동일해도 상이해도 좋다. 또한, 인접하는 2개의  $R^1$ 끼리가 서로 결합하여, 치환 또는 비치환된 탄화수소환을 형성하고 있어도 좋다.

[0285]  $Ar^1$ 은 치환 또는 비치환된 환 형성 탄소수 6~50의 아릴기, 또는 치환 또는 비치환된 환 형성 원자수 5~50의 헤테로아릴기이다.

[0286]  $Ar^2$ 는 수소 원자, 치환 또는 비치환된 탄소수 1~20의 알킬기, 치환 또는 비치환된 탄소수 1~20의 할로알킬기, 치환 또는 비치환된 탄소수 1~20의 알콕시기, 치환 또는 비치환된 환 형성 탄소수 6~50의 아릴기, 또는 치환 또는 비치환된 환 형성 원자수 5~50의 헤테로아릴기이다.

[0287] 단,  $Ar^1$ ,  $Ar^2$  중 어느 한쪽은, 치환 또는 비치환된 환 형성 탄소수 10~50의 축합 방향족 탄화수소환기, 또는 치환 또는 비치환된 환 형성 원자수 9~50의 축합 방향족 헤테로환기이다.

[0288]  $Ar^3$ 은 치환 또는 비치환된 환 형성 탄소수 6~50의 아릴렌기, 또는 치환 또는 비치환된 환 형성 원자수 5~50의 헤테로아릴렌기이다.

[0289]  $L^1$ ,  $L^2$  및  $L^3$ 은 각각 독립적으로, 단일 결합, 치환 또는 비치환된 환 형성 탄소수 6~50의 아릴렌기, 또는 치환 또는 비치환된 환 형성 원자수 9~50의 2가 축합 방향족 헤테로환기이다.)

[0290] 환 형성 탄소수 6~50의 아릴기로서는, 페닐기, 나프틸기, 안트릴기, 페난트릴기, 나프타센일기, 크라이센일기, 피렌일기, 바이페닐기, 터페닐기, 톨릴기, 플루오란텐일기, 플루오렌일기 등을 들 수 있다.

[0291] 환 형성 원자수 5~50의 헤테로아릴기로서는, 피롤릴기, 퓨릴기, 싸이엔일기, 실롤릴기, 피리딜기, 퀴놀릴기, 아이소퀴놀릴기, 벤조퓨릴기, 이미다졸릴기, 피리미딜기, 카바졸릴기, 셀레노페닐기, 옥사다이아졸릴기, 트라이아졸릴기, 피라진일기, 피리다진일기, 트리아진일기, 퀴녹살린일기, 아크리딘일기, 이미다조[1,2-a]피리딘일기, 이미다조[1,2-a]피리미딘일기 등을 들 수 있다.

[0292] 탄소수 1~20의 알킬기로서는, 메틸기, 에틸기, 프로필기, 뷰틸기, 펜틸기, 헥실기 등을 들 수 있다.

[0293] 탄소수 1~20의 할로알킬기로서는, 상기 알킬기의 1 또는 2 이상의 수소 원자를 불소, 염소, 요오드 및 브롬으로부터 선택되는 적어도 1개의 할로젠 원자로 치환하여 얻어지는 기를 들 수 있다.

[0294] 탄소수 1~20의 알콕시기로서는, 상기 알킬기를 알킬 부위로서 갖는 기를 들 수 있다.

[0295] 환 형성 탄소수 6~50의 아릴렌기로서는, 상기 아릴기로부터 수소 원자 1개를 제거하여 얻어지는 기를 들 수 있다.

[0296] 환 형성 원자수 9~50의 2가 축합 방향족 헤테로환기로서는, 상기 헤테로아릴기로서 기재된 축합 방향족 헤테로환기로부터 수소 원자 1개를 제거하여 얻어지는 기를 들 수 있다.

[0297] 전자 수송층의 막 두께는, 특별히 한정되지 않지만, 바람직하게는 1nm~100nm이다.

[0298] 또한, 전자 수송층에 인접하여 설치할 수 있는 전자 주입층의 구성 성분으로서, 질소 함유 환 유도체 외에 무기 화합물로서, 절연체 또는 반도체를 사용하는 것이 바람직하다. 전자 주입층이 절연체나 반도체로 구성되어 있으면, 전류의 누출을 유효하게 방지하여, 전자 주입성을 향상시킬 수 있다.

[0299] 이와 같은 절연체로서는, 알칼리 금속 칼코게나이드, 알칼리 토류 금속 칼코게나이드, 알칼리 금속의 할로젠화물 및 알칼리 토류 금속의 할로젠화물로 이루어지는 군으로부터 선택되는 적어도 1개의 금속 화합물을 사용하는 것이 바람직하다. 전자 주입층이 이들 알칼리 금속 칼코게나이드 등으로 구성되어 있으면, 전자 주입성을 더 향상시킬 수 있다는 점에서 바람직하다. 구체적으로, 바람직한 알칼리 금속 칼코게나이드로서는, 예컨대  $\text{Li}_2\text{O}$ ,  $\text{K}_2\text{O}$ ,  $\text{Na}_2\text{S}$ ,  $\text{Na}_2\text{Se}$  및  $\text{Na}_2\text{O}$ 를 들 수 있고, 바람직한 알칼리 토류 금속 칼코게나이드로서는, 예컨대  $\text{CaO}$ ,  $\text{BaO}$ ,  $\text{SrO}$ ,  $\text{BeO}$ ,  $\text{BaS}$  및  $\text{CaSe}$ 를 들 수 있다. 또한, 바람직한 알칼리 금속의 할로젠화물로서는, 예컨대  $\text{LiF}$ ,  $\text{NaF}$ ,  $\text{KF}$ ,  $\text{LiCl}$ ,  $\text{KCl}$  및  $\text{NaCl}$  등을 들 수 있다. 또한, 바람직한 알칼리 토류 금속의 할로젠화물로서는, 예컨대  $\text{CaF}_2$ ,  $\text{BaF}_2$ ,  $\text{SrF}_2$ ,  $\text{MgF}_2$  및  $\text{BeF}_2$  등의 불화물이나, 불화물 이외의 할로젠화물을 들 수 있다.

[0300] 또한, 반도체로서는, Ba, Ca, Sr, Yb, Al, Ga, In, Li, Na, Cd, Mg, Si, Ta, Sb 및 Zn 중 적어도 1개의 원소를 포함하는 산화물, 질화물 또는 산화질화물 등의 1종 단독 또는 2종 이상의 조합을 들 수 있다. 또한, 전자 주입층을 구성하는 무기 화합물이 미(微)결정 또는 비정질의 절연성 박막인 것이 바람직하다. 전자 주입층이 이들 절연성 박막으로 구성되어 있으면, 보다 균질한 박막이 형성되기 때문에, 다크 스팟 등의 화소 결함을 감소시킬 수 있다. 한편, 이와 같은 무기 화합물로서는, 알칼리 금속 칼코게나이드, 알칼리 토류 금속 칼코게나이드, 알칼리 금속의 할로젠화물 및 알칼리 토류 금속의 할로젠화물 등을 들 수 있다.

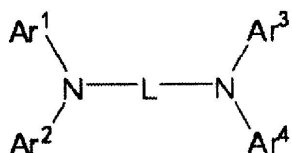
[0301] 이와 같은 절연체 또는 반도체를 사용하는 경우, 그 층의 바람직한 두께는 0.1nm~15nm 정도이다. 또한, 본 발명에 있어서의 전자 주입층은, 전술한 전자 공여성 도펀트를 함유하고 있어도 바람직하다.

[0302] (정공 수송층)

[0303] 발광층과 양극 사이에 형성되는 유기층으로서, 정공을 양극으로부터 발광층으로 수송하는 기능을 갖는다. 정공 수송층이 복수층으로 구성되는 경우, 양극에 가까운 유기층을 정공 주입층으로 정의하는 경우가 있다. 정공 주입층은, 양극으로부터 정공을 효율적으로 유기층 유닛으로 주입하는 기능을 갖는다.

[0304] 정공 수송층을 형성하는 다른 재료로서는, 방향족 아민 화합물, 예컨대 하기 화학식 H로 표시되는 방향족 아민 유도체가 적합하게 이용된다.

[0305] [화학식 H]

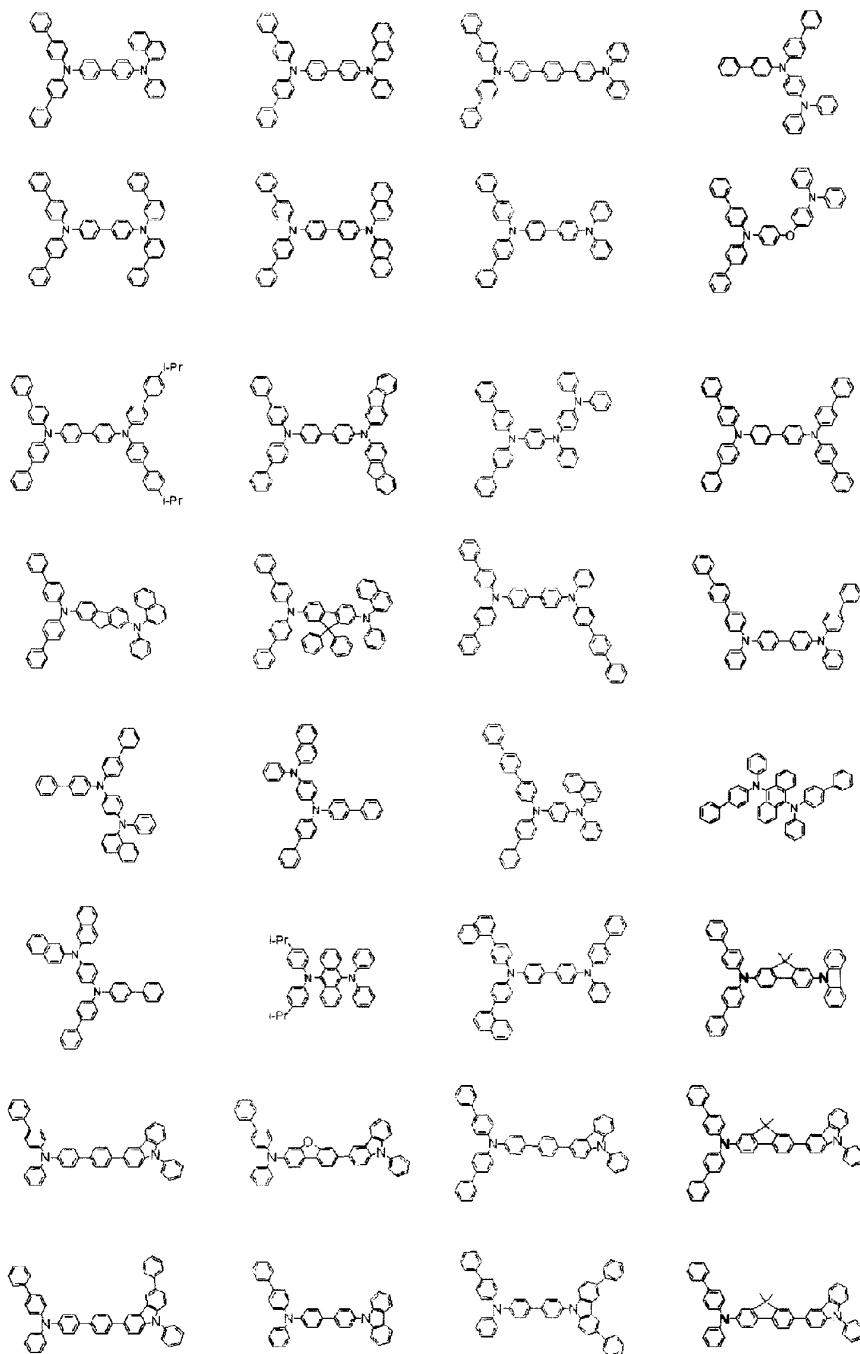


[0306]

[0307] 상기 화학식 H에 있어서,  $\text{Ar}^1 \sim \text{Ar}^4$ 는 치환 또는 비치환된 환 형성 탄소수 6~50의 방향족 탄화수소기 또는 축합 방향족 탄화수소기, 치환 또는 비치환된 환 형성 원자수 5~50의 방향족 헤테로환기 또는 축합 방향족 헤테로환기, 또는 그들 방향족 탄화수소기 또는 축합 방향족 탄화수소기와 방향족 헤테로환기 또는 축합 방향족 헤테로환기가 결합된 기를 나타낸다.

[0308] 또한, 상기 화학식 H에 있어서, L은 치환 또는 비치환된 환 형성 탄소수 6~50의 방향족 탄화수소기 또는 축합 방향족 탄화수소기, 또는 치환 또는 비치환된 환 형성 원자수 5~50의 방향족 헤테로환기 또는 축합 방향족 헤테로환기를 나타낸다.

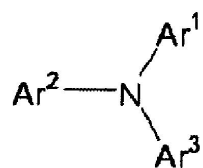
[0309] 화학식 H의 화합물의 구체예를 이하에 기재한다.



[0310]

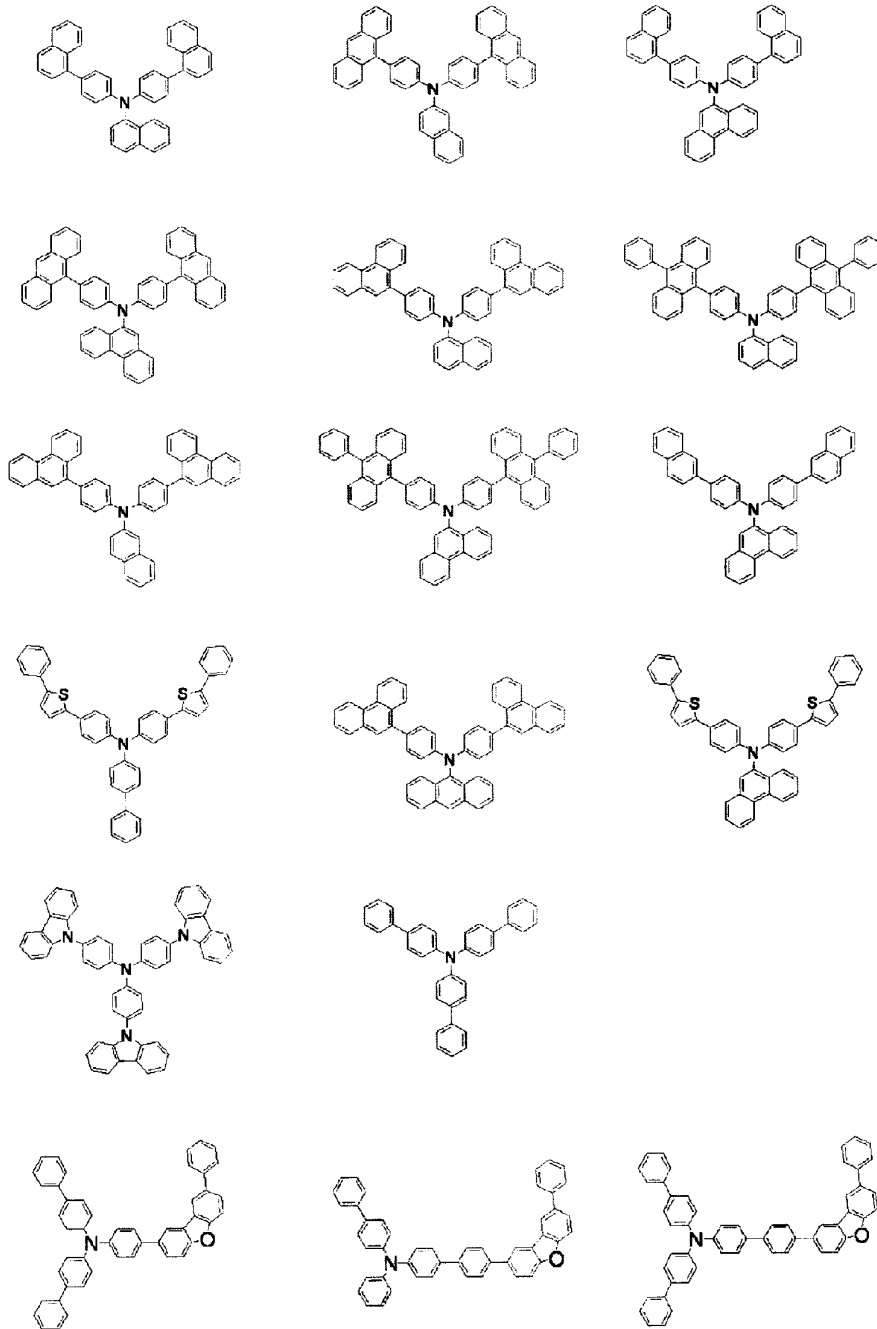
[0311] 또한, 하기 화학식 J의 방향족 아민도 정공 수송층의 형성에 적합하게 이용된다.

[0312] [화학식 J]



[0313]

[0314] 상기 화학식 J에 있어서,  $\text{Ar}^1 \sim \text{Ar}^3$ 의 정의는 상기 화학식 H의  $\text{Ar}^1 \sim \text{Ar}^4$ 의 정의와 마찬가지로이다. 이하에 화학식 J의 화합물의 구체예를 기재하지만 이들에 한정되는 것은 아니다.



[0315]

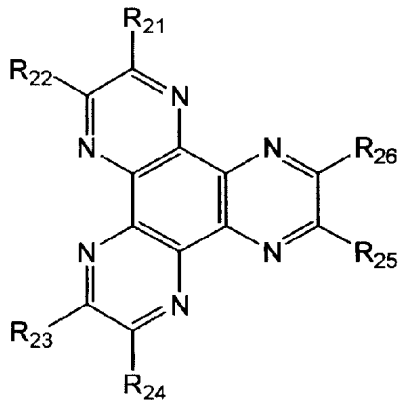
[0316] 본 발명의 유기 EL 소자의 정공 수송층은 제 1 정공 수송층(양극층)과 제 2 정공 수송층(음극층)의 2층 구조로 해도 좋다.

[0317] 정공 수송층의 막 두께는 특별히 한정되지 않지만, 10~200nm인 것이 바람직하다.

[0318] 본 발명의 유기 EL 소자에서는, 정공 수송층 또는 제 1 정공 수송층의 양극층에 억셉터(acceptor) 재료를 함유하는 층을 접합해도 좋다. 이에 의해 구동 전압의 저하 및 제조 비용의 저감이 기대된다.

[0319] 상기 억셉터 재료로서는 하기 화학식 K로 표시되는 화합물이 바람직하다.

[0320] [화학식 K]



[0321]

[0322] (상기 화학식 K 중,  $R_{21} \sim R_{26}$ 은 서로 동일해도 상이해도 좋고, 각각 독립적으로 사이아노기,  $-\text{CONH}_2$ , 카복실기 또는  $-\text{COOR}_{27}$  ( $R_{27}$ 은 탄소수 1~20의 알킬기 또는 탄소수 3~20의 사이클로알킬기를 나타낸다)을 나타낸다. 단,  $R_{21}$  및  $R_{22}$ ,  $R_{23}$  및  $R_{24}$ , 및  $R_{25}$  및  $R_{26}$ 의 1 또는 2 이상의 쌍이 함께 이루어져  $-\text{CO}-\text{O}-\text{CO}-$ 로 표시되는 기를 형성해도 좋다.)

[0323]  $R_{27}$ 로서는, 메틸기, 에틸기, n-프로필기, 아이소프로필기, n-뷰틸기, 아이소뷰틸기, t-뷰틸기, 사이클로펜틸기, 사이클로헥실기 등을 들 수 있다.

[0324] 엑셉터 재료를 함유하는 층의 막 두께는 특별히 한정되지는 않지만, 5~20nm인 것이 바람직하다.

[0325] (n/p 도핑)

[0326] 전술한 정공 수송층이나 전자 수송층에 있어서는, 일본 특허 제3695714호 명세서에 기재되어 있는 바와 같이, 도너(donor)성 재료의 도핑(n)이나 엑셉터성 재료의 도핑(p)에 의해 캐리어 주입능을 조정할 수 있다.

[0327] n 도핑의 대표예로서는, 전자 수송 재료에 Li나 Cs 등의 금속을 도핑하는 방법을 들 수 있고, p 도핑의 대표예로서는, 정공 수송 재료에  $\text{F}_4\text{TCNQ}$ (2,3,5,6-테트라플루오로-7,7,8,8-테트라사이아노퀴노다임테인) 등의 엑셉터 재료를 도핑하는 방법을 들 수 있다.

[0328] (스페이스층)

[0329] 상기 스페이스층이란, 예컨대 형광 발광층과 인광 발광층을 적층하는 경우에, 인광 발광층에서 생성되는 여기자를 형광 발광층으로 확산시키지 않거나, 또는 캐리어 밸런스를 조정할 목적으로, 형광 발광층과 인광 발광층 사이에 설치되는 층이다. 또한, 스페이스층은 복수의 인광 발광층 사이에 설치할 수도 있다.

[0330] 스페이스층은 발광층 사이에 설치되기 때문에, 전자 수송성과 정공 수송성을 겸비하는 재료인 것이 바람직하다. 또한, 인접하는 인광 발광층 내의 3중항 에너지의 확산을 방지하기 위해, 3중항 에너지가 2.6eV 이상인 것이 바람직하다. 스페이스층에 이용되는 재료로서는, 전술한 정공 수송층에 이용되는 것과 마찬가지로의 것을 들 수 있다.

[0331] (장벽층)

[0332] 본 발명의 유기 EL 소자는, 발광층에 인접하는 부분에, 전자 장벽층, 정공 장벽층, 트리플렛 장벽층과 같은 장벽층을 갖는 것이 바람직하다. 여기서, 전자 장벽층이란, 발광층으로부터 정공 수송층으로 전자가 새는 것을 방지하는 층이며, 정공 장벽층이란, 발광층으로부터 전자 수송층으로 정공이 새는 것을 방지하는 층이다. 정공 장벽층용 재료로서, 본 발명의 유기 EL 소자용 재료를 이용할 수도 있다.

[0333] 트리플렛 장벽층은, 발광층에서 생성되는 3중항 여기자가 주변의 층으로 확산되는 것을 방지하고, 3중항 여기자를 발광층 내에 가두는 것에 의해, 3중항 여기자의 발광 도펀트 이외의 전자 수송층의 분자 상에서의 에너지 실패를 억제하는 기능을 갖는다.

[0334] 트리플렛 장벽층을 설치하는 경우, 인광 소자에 있어서는, 발광층 중의 인광 발광성 도펀트의 3중항 에너지를

$E_d^T$ , 트리플렛 장벽층으로서 이용하는 화합물의 3중항 에너지를  $E_{TB}^T$ 로 하면,  $E_d^T < E_{TB}^T$ 의 에너지 대소 관계이면, 에너지 관계 상, 인광 발광성 도펀트의 3중항 여기자가 가두어지고(다른 분자로 이동할 수 없어지고), 해당 도펀트 상에서 발광하는 것 이외의 에너지 실패 경로가 단절되어, 고효율로 발광할 수 있다고 추측된다. 단,  $E_d^T < E_{TB}^T$ 의 관계가 성립하는 경우에서도 이 에너지 차  $\Delta E^T = E_{TB}^T - E_d^T$ 가 작은 경우에는, 실제의 소자 구동 환경인 실온 정도의 환경 하에서는, 주변의 열 에너지에 의해 흡열적으로 이 에너지 차  $\Delta E^T$ 를 극복하여 3중항 여기자가 다른 분자로 이동하는 것이 가능하다고 생각된다. 특히, 인광 발광의 경우는, 형광 발광에 비하여 여기자 수명이 길기 때문에, 상대적으로 흡열적 여기자 이동 과정의 영향이 나타나기 쉬워진다. 실온의 열 에너지에 대하여 이 에너지 차  $\Delta E^T$ 는 클수록 바람직하고, 0.1eV 이상이면 더 바람직하고, 0.2eV 이상이면 특히 바람직하다. 한편, 형광 소자에 있어서는, 국제공개 WO2010/134350 A1에 기재된 TTF 소자 구성의 트리플렛 장벽층용 재료로서, 본 발명의 유기 EL 소자용 재료를 이용할 수도 있다.

[0335] 또한, 트리플렛 장벽층을 구성하는 재료의 전자 이동도는, 전계 강도 0.04~0.5MV/cm의 범위에서,  $10^{-6} \text{ cm}^2/\text{Vs}$  이상인 것이 바람직하다. 유기 재료의 전자 이동도의 측정 방법으로는, 타임 오브 플라이트(Time of Flight)법 등 몇 가지 방법이 알려져 있지만, 여기서는 임피던스 분광법으로 결정되는 전자 이동도를 말한다.

[0336] 전자 주입층은, 전계 강도 0.04~0.5MV/cm의 범위에서,  $10^{-6} \text{ cm}^2/\text{Vs}$  이상인 것이 요망된다. 이에 의해 음극으로부터 전자 수송층으로의 전자 주입이 촉진되고, 나아가서는 인접하는 장벽층, 발광층으로의 전자 주입도 촉진되어, 보다 저전압에서의 구동을 가능하게 하기 때문이다.

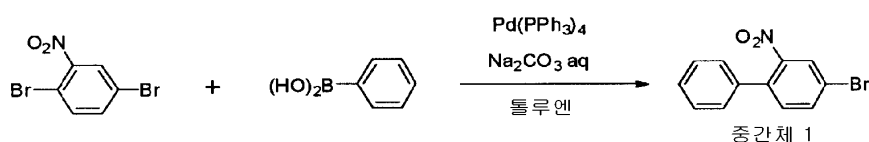
### [0337] 실시예

[0338] 다음으로, 실시예를 이용하여 본 발명을 더 상세하게 설명하지만, 본 발명은 하기 실시예에 한정되는 것은 아니다.

[0339] [유기 EL 소자용 재료의 합성]

[0340] 합성예 1(화합물 H1의 합성)

[0341] 합성예 (1-1): 중간체 1의 합성

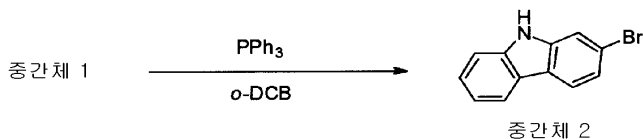


[0342]

[0343] 아르곤 기류 하에, 2-나이트로-1,4-다이브로모벤젠(11.2g, 40mmol), 페닐보론산(4.9g, 40mmol), 테트라키스(트라이페닐포스핀)팔라듐(1.39g, 1.2mmol), 톨루엔(120mL), 2M 탄산나트륨 수용액(60mL)을 순차적으로 가하여 8시간 가열 환류했다.

[0344] 실온까지 반응액을 냉각한 후, 유기층을 분리하여, 유기 용매를 감압 하 증류 제거했다. 얻어진 잔사를 실리카 겔 컬럼 크로마토그래피로 정제하여, 중간체 1(6.6g, 수율 59%)을 얻었다. FD-MS(field desorption mass spectrum)의 분석에 의해, 중간체 1로 동정되었다.

[0345] 합성예 (1-2): 중간체 2의 합성

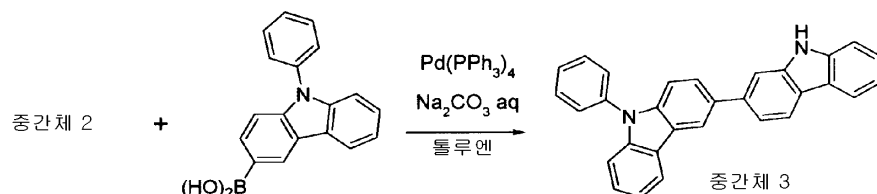


[0346]

[0347] 아르곤 기류 하에, 중간체 1(6.6g, 23.7mmol), 트라이페닐포스핀(15.6g, 59.3mmol), o-다이클로로벤젠(24mL)을 순차적으로 가하여 8시간 180℃에서 가열했다.

[0348] 실온까지 반응액을 냉각한 후, 실리카 겔 컬럼 크로마토그래피로 정제하여, 중간체 2(4g, 수율 68%)를 얻었다. FD-MS(field desorption mass spectrum)의 분석에 의해, 중간체 2로 동정되었다.

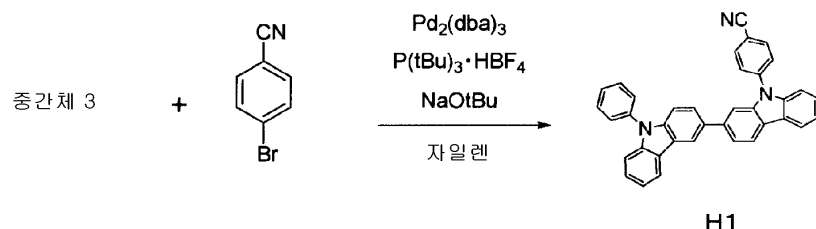
[0349] 합성예 (1-3): 중간체 3의 합성



[0350]

[0351] 중간체 1의 합성에 있어서, 2-나이트로-1,4-다이브로모벤젠 대신에 중간체 2를 이용하고, 페닐보론산 대신에 9-페닐카바졸-3-일보론산을 이용하여 마찬가지로 합성했다. FD-MS(field desorption mass spectrum)의 분석에 의해, 중간체 3으로 동정되었다.

[0352] 합성예 (1-4): 화합물 H1의 합성



[0353]

[0354] 아르곤 기류 하에, 중간체 3(1.6g, 3.9mmol), 4-브로모벤조나이트릴(0.71g, 3.9mmol), 트리스(다이벤질리튬아세톤)다이팔라듐(0.071g, 0.078mmol), 트라이-*t*-부틸포스포늄테트라플루오로보산염(0.091g, 0.31mmol), *t*-부톡시나트륨(0.53g, 5.5mmol), 무수 톨루엔(20mL)을 순차적으로 가하여 8시간 가열 환류했다.

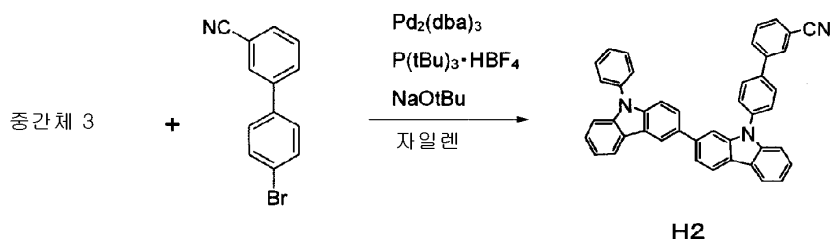
[0355] 실온까지 반응액을 냉각한 후, 유기층을 분리하여, 유기 용매를 감압 하 증류 제거했다. 얻어진 잔사를 실리카 겔 컬럼 크로마토그래피로 정제하여, 0.79g의 백색 고체(H1)를 얻었다.

[0356] 얻어진 화합물에 대하여, FD-MS(field desorption mass spectrum), 톨루엔 용액 중의 자외선 흡수 극대 파장 UV(PhMe);  $\lambda_{\max}$ , 및 형광 발광 극대 파장 FL(PhMe,  $\lambda_{\text{ex}}=300\text{nm}$ );  $\lambda_{\max}$ 를 이하에 나타낸다.

[0357] FDMS, calcd for  $\text{C}_{37}\text{H}_{23}\text{N}_3=509$ , found  $m/z=509$  ( $\text{M}^+$ )

[0358] UV(PhMe);  $\lambda_{\max}$ , 324nm, FL(PhMe,  $\lambda_{\text{ex}}=300\text{nm}$ );  $\lambda_{\max}$ , 376nm

[0359] 합성예 2(화합물 H2의 합성)



[0360]

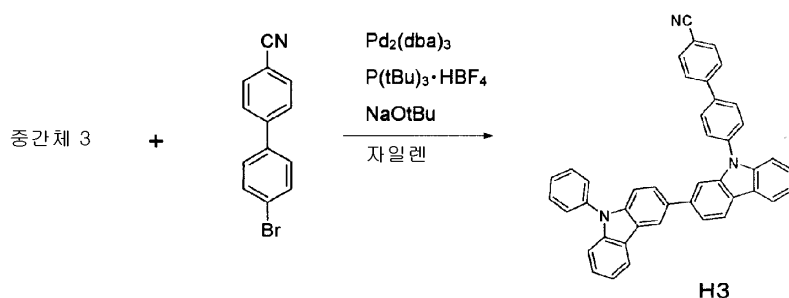
[0361] 화합물 H1의 합성에 있어서, 4-브로모벤조나이트릴 대신에 4'-브로모바이페닐-3-카보나이트릴을 이용하여 마찬가지로 합성했다.

[0362] 얻어진 화합물에 대하여, FD-MS(field desorption mass spectrum), 톨루엔 용액 중의 자외선 흡수 극대 파장 UV(PhMe);  $\lambda_{\max}$ , 및 형광 발광 극대 파장 FL(PhMe,  $\lambda_{\text{ex}}=300\text{nm}$ );  $\lambda_{\max}$ 를 이하에 나타낸다.

[0363] FDMS, calcd for  $\text{C}_{43}\text{H}_{27}\text{N}_3=585$ , found  $m/z=585$  ( $\text{M}^+$ )

[0364] UV(PhMe);  $\lambda_{\max}$ , 322nm, FL(PhMe,  $\lambda_{\text{ex}}$ =300nm);  $\lambda_{\max}$ , 375nm

[0365] 합성예 3(화합물 H3의 합성)



[0366]

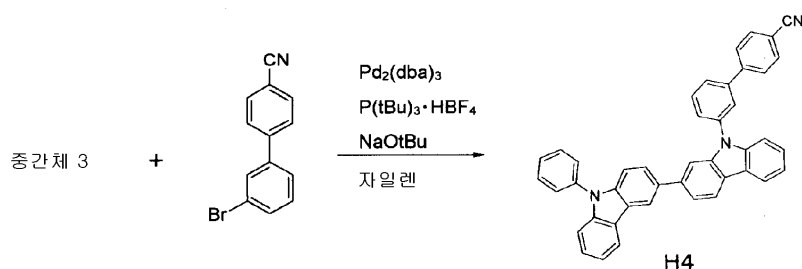
[0367] 화합물 H1의 합성에 있어서, 4-브로모벤조나이트릴 대신에 4'-브로모바이페닐-4-카보나이트릴을 이용하여 마찬가지로 합성했다.

[0368] 얻어진 화합물에 대하여, FD-MS(field desorption mass spectrum), 톨루엔 용액 중의 자외선 흡수 극대 파장 UV(PhMe);  $\lambda_{\max}$ , 및 형광 발광 극대 파장 FL(PhMe);  $\lambda_{\max}$ 를 이하에 나타낸다.

[0369] FDMS, calcd for  $\text{C}_{43}\text{H}_{27}\text{N}_3$ =585, found  $m/z$ =585 ( $\text{M}^+$ )

[0370] UV(PhMe);  $\lambda_{\max}$ , 324nm, FL(PhMe,  $\lambda_{\text{ex}}$ =300nm);  $\lambda_{\max}$ , 393nm

[0371] 합성예 4(화합물 H4의 합성)



[0372]

[0373] 화합물 H1의 합성에 있어서, 4-브로모벤조나이트릴 대신에 3'-브로모바이페닐-4-카보나이트릴을 이용하여 마찬가지로 합성했다.

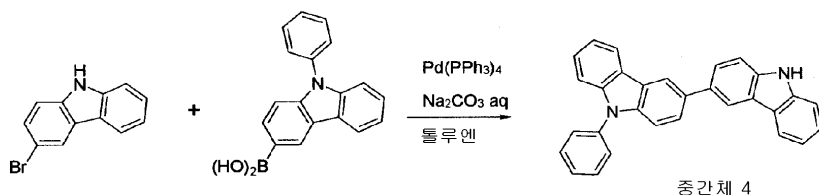
[0374] 얻어진 화합물에 대하여, FD-MS(field desorption mass spectrum), 톨루엔 용액 중의 자외선 흡수 극대 파장 UV(PhMe);  $\lambda_{\max}$ , 및 형광 발광 극대 파장 FL(PhMe,  $\lambda_{\text{ex}}$ =300nm);  $\lambda_{\max}$ 를 이하에 나타낸다.

[0375] FDMS, calcd for  $\text{C}_{43}\text{H}_{27}\text{N}_3$ =585, found  $m/z$ =585 ( $\text{M}^+$ )

[0376] UV(PhMe);  $\lambda_{\max}$ , 322nm, FL(PhMe,  $\lambda_{\text{ex}}$ =300nm);  $\lambda_{\max}$ , 376nm

[0377] 합성예 5(화합물 H5의 합성)

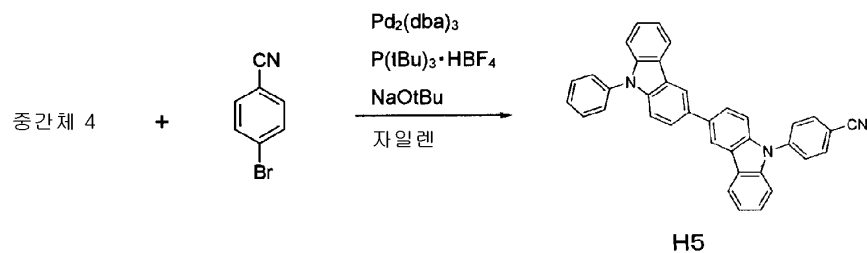
[0378] 합성예 (5-1): 중간체 4의 합성



[0379]

[0380] 중간체 1의 합성에 있어서, 2-나이트로-1,4-다이브로모벤젠 대신에 3-브로모카바졸을 이용하고, 페닐보론산 대신에 9-페닐카바졸-3-일보론산을 이용하여 마찬가지로 합성했다. FD-MS(field desorption mass spectrum)의 분석에 의해, 중간체 4로 동정되었다.

[0381] 합성예 (5-2): 화합물 H5의 합성



[0382]

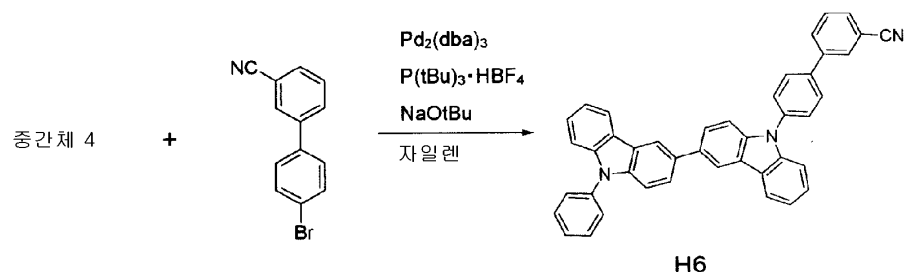
[0383] 화합물 H1의 합성에 있어서, 중간체 3 대신에 중간체 4를 이용하여 마찬가지로 합성했다.

[0384] 얻어진 화합물에 대하여, FD-MS(field desorption mass spectrum), 톨루엔 용액 중의 자외선 흡수 극대 파장 UV(PhMe);  $\lambda_{\text{max}}$ , 및 형광 발광 극대 파장 FL(PhMe,  $\lambda_{\text{ex}}=300\text{nm}$ );  $\lambda_{\text{max}}$ 를 이하에 나타낸다.

[0385] FDMS, calcd for  $\text{C}_{37}\text{H}_{23}\text{N}_3=509$ , found  $m/z=509$  ( $\text{M}^+$ )

[0386] UV(PhMe);  $\lambda_{\text{max}}$ , 339nm, FL(PhMe,  $\lambda_{\text{ex}}=300\text{nm}$ );  $\lambda_{\text{max}}$ , 404nm

[0387] 합성예 6(화합물 H6의 합성)



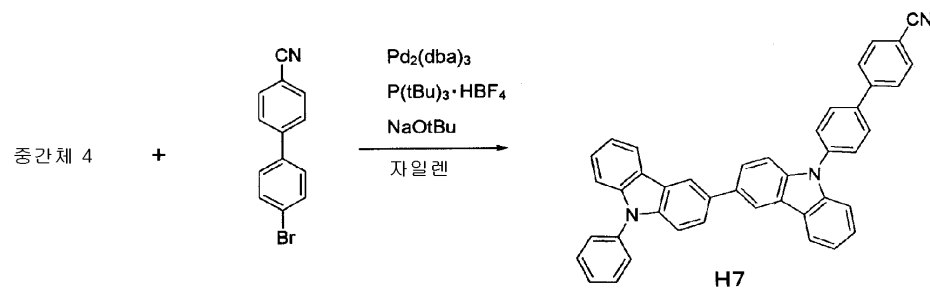
[0388]

[0389] 화합물 H1의 합성에 있어서, 4-브로모벤조나이트릴 대신에 4'-브로모바이페닐-3-카보나이트릴을 이용하고, 중간체 3 대신에 중간체 4를 이용하여 마찬가지로 합성했다.

[0390] 얻어진 화합물에 대하여, FD-MS(field desorption mass spectrum)를 이하에 나타낸다.

[0391] FDMS, calcd for  $\text{C}_{43}\text{H}_{27}\text{N}_3=585$ , found  $m/z=585$  ( $\text{M}^+$ )

[0392] 합성예 7(화합물 H7의 합성)



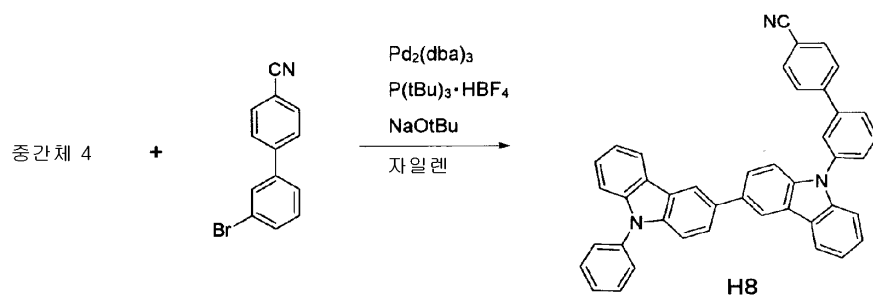
[0393]

[0394] 화합물 H1의 합성에 있어서, 4-브로모벤조나이트릴 대신에 4'-브로모바이페닐-4-카보나이트릴을 이용하고, 중간체 3 대신에 중간체 4를 이용하여 마찬가지로 합성했다.

[0395] 얻어진 화합물에 대하여, FD-MS(field desorption mass spectrum)를 이하에 나타낸다.

[0396] FDMS, calcd for  $\text{C}_{43}\text{H}_{27}\text{N}_3=585$ , found  $m/z=585$  ( $\text{M}^+$ )

[0397] 합성예 8(화합물 H8의 합성)



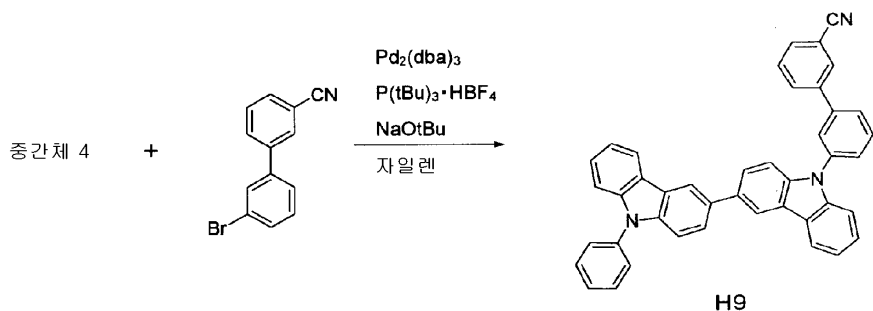
[0398]

[0399] 화합물 H1의 합성에 있어서, 4-브로모벤조나이트릴 대신에 3'-브로모바이페닐-4-카보나이트릴을 이용하고, 중간체 3 대신에 중간체 4를 이용하여 마찬가지로 방법으로 합성했다.

[0400] 얻어진 화합물에 대하여, FD-MS(field desorption mass spectrum)를 이하에 나타낸다.

[0401] FDMS, calcd for  $\text{C}_{43}\text{H}_{27}\text{N}_3=585$ , found  $m/z=585$  ( $\text{M}^+$ )

[0402] 합성예 9(화합물 H9의 합성)



[0403]

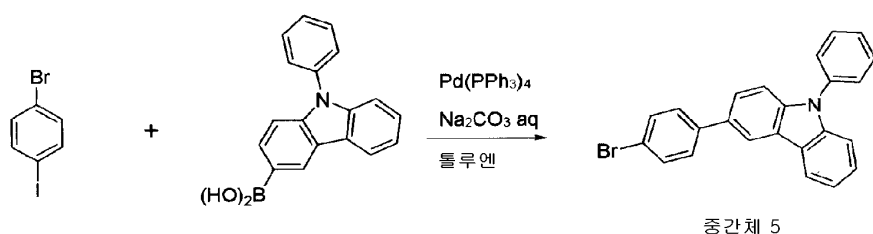
[0404] 화합물 H1의 합성에 있어서, 4-브로모벤조나이트릴 대신에 3'-브로모바이페닐-3-카보나이트릴을 이용하고, 중간체 3 대신에 중간체 4를 이용하여 마찬가지로 방법으로 합성했다.

[0405] 얻어진 화합물에 대하여, FD-MS(field desorption mass spectrum)를 이하에 나타낸다.

[0406] FDMS, calcd for  $\text{C}_{43}\text{H}_{27}\text{N}_3=585$ , found  $m/z=585$  ( $\text{M}^+$ )

[0407] 합성예 10(화합물 H10의 합성)

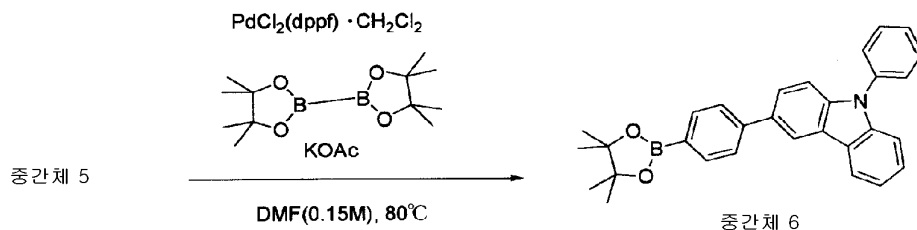
[0408] 합성예 (10-1): 중간체 5의 합성



[0409]

[0410] 중간체 1의 합성에 있어서, 2-나이트로-1,4-다이브로모벤젠 대신에 1-브로모-4-요오도벤젠을 이용하고, 페닐보론산 대신에 9-페닐카바졸-3-일보론산을 이용하여 마찬가지로 방법으로 합성했다. FD-MS(field desorption mass spectrum)의 분석에 의해, 중간체 5로 동정되었다.

[0411] 합성예 (10-2): 중간체 6의 합성

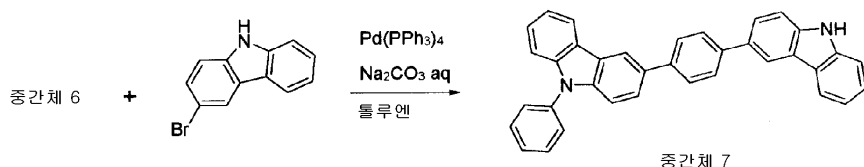


[0412]

[0413] 아르곤 기류 하에, 중간체 5(10g, 25mmol), 비스(피나콜레이토)다이보론(8.3g, 33mmol), [1,1'-비스(다이페닐포스피노)페로센]팔라듐(II) 다이클로라이드 다이클로로메테인 부가물(0.62g, 0.75mmol), 아세트산칼륨(7.4g, 75mmol), N,N-다이메틸폼아마이드(170mL)를 순차적으로 가하여 8시간 가열 환류했다.

[0414] 실온까지 반응액을 냉각한 후, 유기층을 분리하여, 유기 용매를 감압 하 증류 제거했다. 얻어진 잔사를 실리카겔 컬럼 크로마토그래피로 정제하여, 중간체 6(10g, 수율 91%)을 얻었다. FD-MS(field desorption mass spectrum)의 분석에 의해, 중간체 6으로 동정되었다.

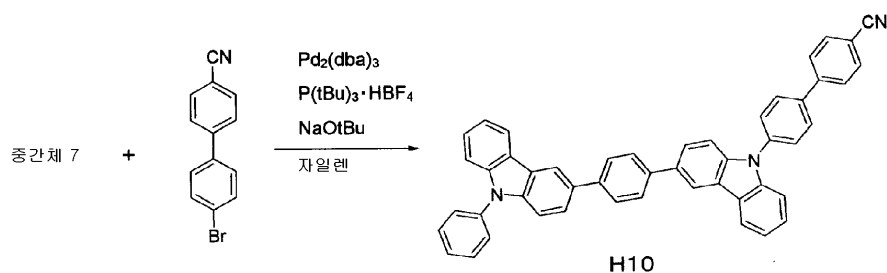
[0415] 합성예 (10-3): 중간체 7의 합성



[0416]

[0417] 중간체 1의 합성에 있어서, 2-나이트로-1,4-다이브로모벤젠 대신에 3-브로모카바졸을 이용하고, 페닐보론산 대신에 중간체 6을 이용하여 마찬가지로 합성했다. FD-MS(field desorption mass spectrum)의 분석에 의해, 중간체 7로 동정되었다.

[0418] 합성예 (10-4): H10의 합성



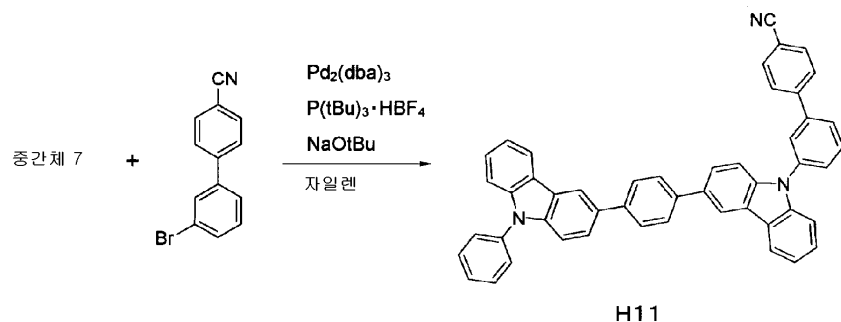
[0419]

[0420] 화합물 H1의 합성에 있어서, 4-브로모벤조나이트릴 대신에 4'-브로모바이페닐-4-카보나이트릴을 이용하고, 중간체 3 대신에 중간체 7을 이용하여 마찬가지로 합성했다.

[0421] 얻어진 화합물에 대하여, FD-MS(field desorption mass spectrum)를 이하에 나타낸다.

[0422] FDMS, calcd for  $\text{C}_{49}\text{H}_{31}\text{N}_3=661$ , found  $m/z=661$  ( $\text{M}^+$ )

[0423] 합성예 11(화합물 H11의 합성)



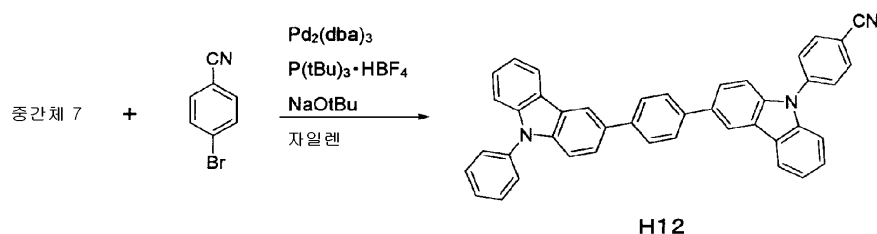
[0424]

[0425] 화합물 H1의 합성에 있어서, 4-브로모벤조나이트릴 대신에 3'-브로모바이페닐-4-카보나이트릴을 이용하고, 중간체 3 대신에 중간체 7을 이용하여 마찬가지로 합성했다.

[0426] 얻어진 화합물에 대하여, FD-MS(field desorption mass spectrum)를 이하에 나타낸다.

[0427] FDMS, calcd for  $C_{49}H_{31}N_3=661$ , found  $m/z=661$  ( $M^+$ )

[0428] 합성예 12(화합물 H12의 합성)



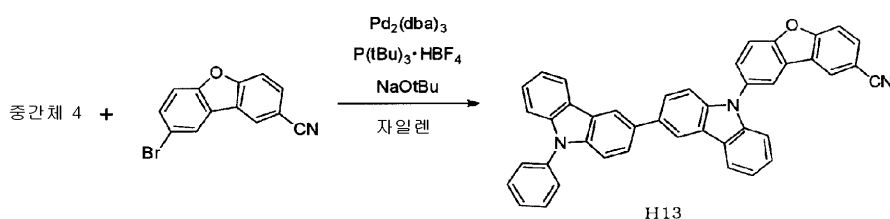
[0429]

[0430] 화합물 H1의 합성에 있어서, 중간체 3 대신에 중간체 7을 이용하여 마찬가지로 합성했다.

[0431] 얻어진 화합물에 대하여, FD-MS(field desorption mass spectrum)를 이하에 나타낸다.

[0432] FDMS, calcd for  $C_{43}H_{27}N_3=585$ , found  $m/z=585$  ( $M^+$ )

[0433] 합성예 13(화합물 H13의 합성)



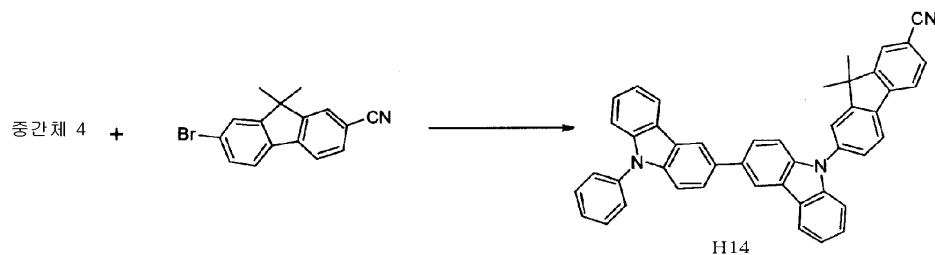
[0434]

[0435] 화합물 H1의 합성에 있어서, 4-브로모벤조나이트릴 대신에 2-브로모-8-사이아노다이벤조퓨란을 이용하고, 중간체 3 대신에 중간체 4를 이용하여 마찬가지로 합성했다.

[0436] 얻어진 화합물에 대하여, FD-MS(field desorption mass spectrum)를 이하에 나타낸다.

[0437] FDMS, calcd for  $C_{43}H_{25}N_3=599$ , found  $m/z=599$  ( $M^+$ )

[0438] 합성예 14(화합물 H14의 합성)



[0439]

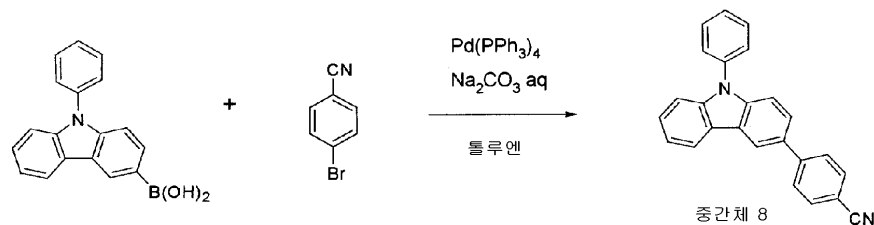
[0440] 화합물 H1의 합성에 있어서, 4-브로모벤조나이트릴 대신에 2-브로모-7-사이아노-9,9-다이메틸플루오렌을 이용하고, 중간체 3 대신에 중간체 4를 이용하여 마찬가지로 방법으로 합성했다.

[0441] 얻어진 화합물에 대하여, FD-MS(field desorption mass spectrum)를 이하에 나타낸다.

[0442] FDMS, calcd for  $C_{46}H_{31}N_3=625$ , found  $m/z=625$  ( $M^+$ )

[0443] 합성예 15(화합물 H15의 합성)

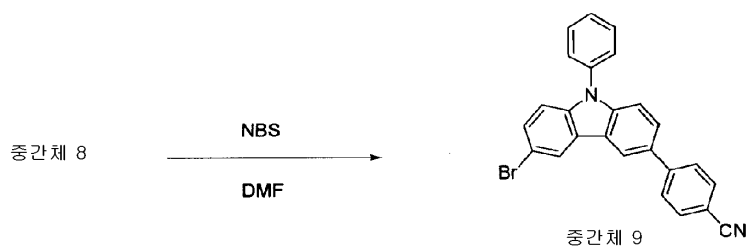
[0444] 합성예 (15-1): 중간체 8의 합성



[0445]

[0446] 중간체 1의 합성에 있어서, 2-나이트로-1,4-다이브로모벤젠 대신에 4-브로모벤조나이트릴을 이용하고, 페닐보론산 대신에 9-페닐카바졸-3-일보론산을 이용하여 마찬가지로 방법으로 합성했다. FD-MS(field desorption mass spectrum)의 분석에 의해, 중간체 8로 동정되었다.

[0447] 합성예 (15-2): 중간체 9의 합성

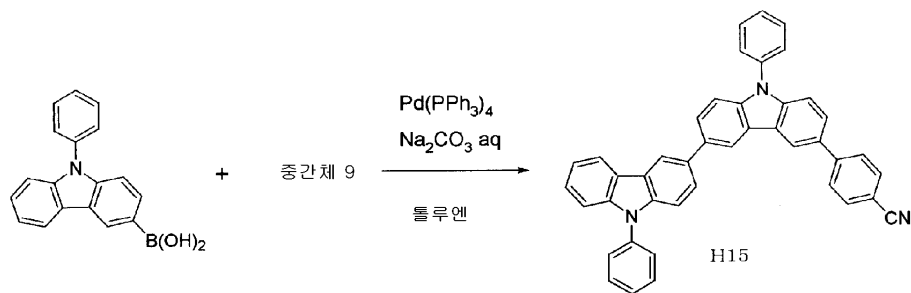


[0448]

[0449] 아르곤 기류 하에, N,N-다이메틸폼아마이드(80mL), 중간체 8(5.6g, 16.3mmol), N-브로모석신이미드(3.5g, 19.5mmol)를 순차적으로 가하여, 0℃에서 8시간 교반했다.

[0450] 반응액을 실온으로 되돌리고, 정수를 가하여 여과를 하고, 얻어진 고체를 실리카 겔 컬럼 크로마토그래피로 정제하여, 중간체 8(6.2g, 수율 90%)을 얻었다. FD-MS(field desorption mass spectrum)의 분석에 의해, 중간체 9로 동정되었다.

[0451] 합성예 (15-3): 화합물 H15의 합성



[0452]

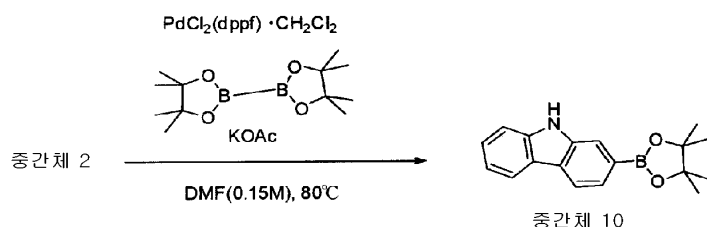
[0453] 중간체 1의 합성에 있어서, 2-나이트로-1,4-다이브로모벤젠 대신에 중간체 9를 이용하고, 페닐보론산 대신에 9-페닐카바졸-3-일보론산을 이용하여 마찬가지로 합성했다.

[0454] 얻어진 화합물에 대하여, FD-MS(field desorption mass spectrum)를 이하에 나타낸다.

[0455] FDMS, calcd for  $\text{C}_{43}\text{H}_{27}\text{N}_3=585$ , found  $m/z=585$  ( $\text{M}^+$ )

[0456] 합성예 16(화합물 H16의 합성)

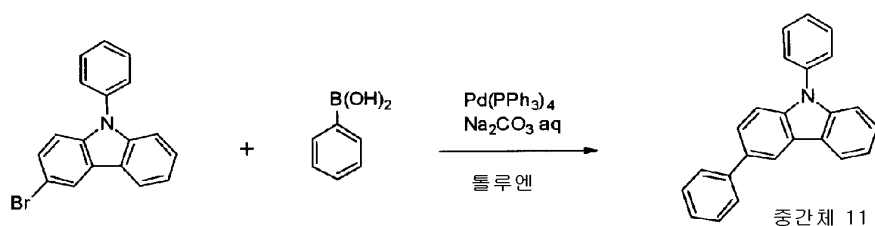
[0457] 합성예 (16-1): 중간체 10의 합성



[0458]

[0459] 중간체 6의 합성에 있어서, 중간체 5 대신에 중간체 2를 이용하여 마찬가지로 합성했다. FD-MS(field desorption mass spectrum)의 분석에 의해, 중간체 10으로 동정되었다.

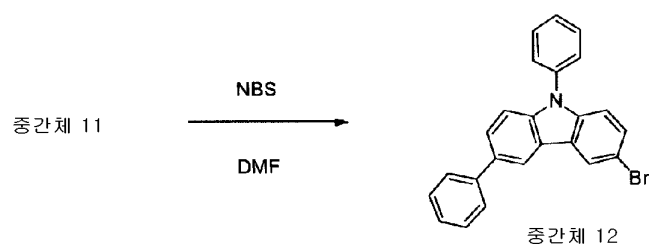
[0460] 합성예 (16-2): 중간체 11의 합성



[0461]

[0462] 중간체 1의 합성에 있어서, 2-나이트로-1,4-다이브로모벤젠 대신에 3-브로모-9-페닐카바졸을 이용하여 마찬가지로 합성했다. FD-MS(field desorption mass spectrum)의 분석에 의해, 중간체 11로 동정되었다.

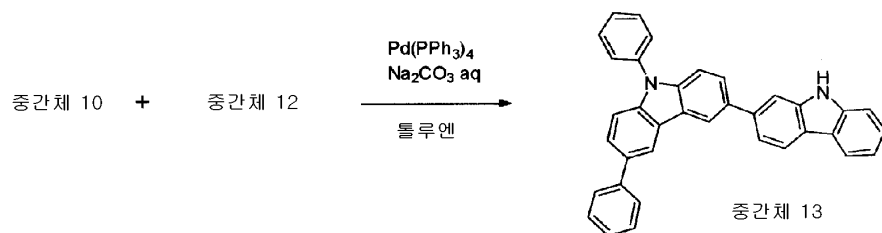
[0463] 합성예 (16-3): 중간체 12의 합성



[0464]

[0465] 중간체 9의 합성에 있어서, 중간체 8 대신에 중간체 11을 이용하여 마찬가지로 합성했다. FD-MS(field desorption mass spectrum)의 분석에 의해, 중간체 12로 동정되었다.

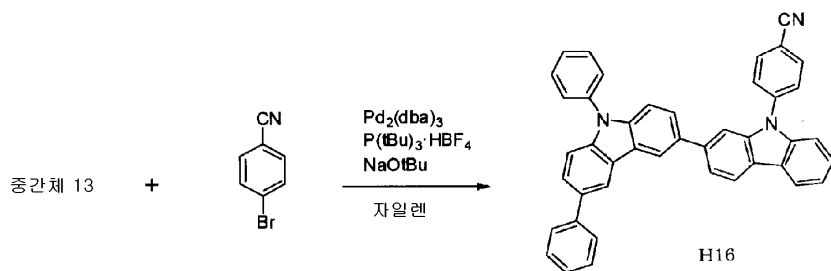
[0466] 합성예 (16-4): 중간체 13의 합성



[0467]

[0468] 중간체 1의 합성에 있어서, 2-나이트로-1,4-다이브로모벤젠 대신에 중간체 12를 이용하고, 페닐보론산 대신에 중간체 10을 이용하여 마찬가지로 합성했다. FD-MS(field desorption mass spectrum)의 분석에 의해, 중간체 13으로 동정되었다.

[0469] 합성예 (16-5): 화합물 H16의 합성



[0470]

[0471] 화합물 H1의 합성에 있어서, 중간체 3 대신에 중간체 13을 이용하여 마찬가지로 합성했다.

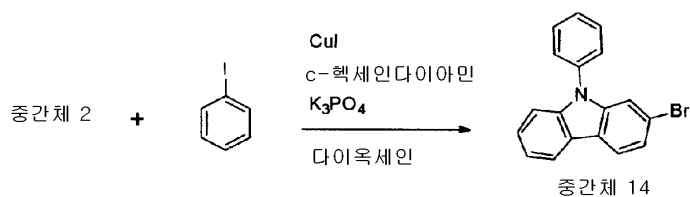
[0472] 얻어진 화합물에 대하여, FD-MS(field desorption mass spectrum), 톨루엔 용액 중의 자외선 흡수 극대 파장  $\lambda_{\text{max}}$ , 및 형광 발광 극대 파장을 이하에 나타낸다.

[0473] FDMS, calcd for  $\text{C}_{43}\text{H}_{27}\text{N}_3=585$ , found  $m/z=585$  ( $\text{M}^+$ )

[0474] UV(PhMe);  $\lambda_{\text{max}}$ , 310nm, FL(PhMe,  $\lambda_{\text{ex}}=300\text{nm}$ );  $\lambda_{\text{max}}$ , 379nm

[0475] 합성예 17(화합물 H17의 합성)

[0476] 합성예 (17-1): 중간체 14의 합성

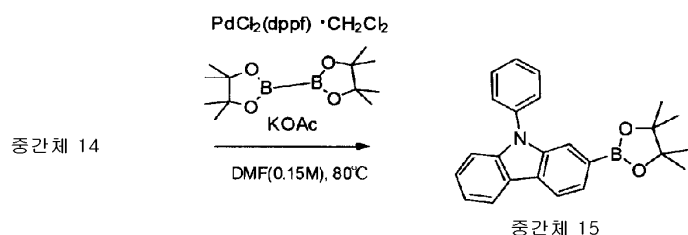


[0477]

[0478] 아르곤 기류 하에, 중간체 2(20g, 81mmol), 요오도벤젠(18.1g, 89mmol), 요오드화구리(1.5g, 8mmol), 인산삼칼륨(34.5g, 163mmol), 무수 다이옥세인(100mL), 사이클로헥세인디아민(1.8g, 16mmol)을 가하여, 80℃에서 8시간 교반했다.

[0479] 실온까지 반응액을 냉각한 후, 유기층을 분리하여, 유기 용매를 감압 하 증류 제거했다. 얻어진 잔사를 실리카 겔 컬럼 크로마토그래피로 정제하여, 중간체 14(18.3g, 수율 70%)를 얻었다. FD-MS(field desorption mass spectrum)의 분석에 의해, 중간체 14로 동정되었다.

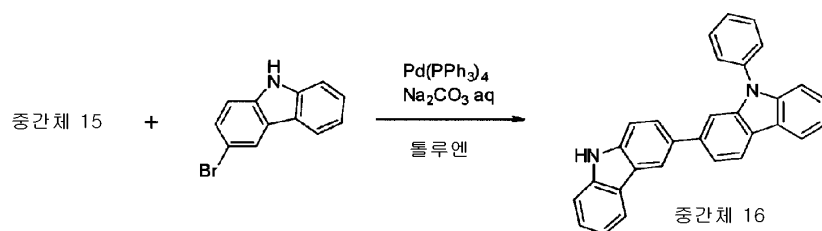
[0480] 합성예 (17-2): 중간체 15의 합성



[0481]

[0482] 중간체 6의 합성에 있어서, 중간체 5 대신에 중간체 14를 이용하여 마찬가지로 합성했다. FD-MS(field desorption mass spectrum)의 분석에 의해, 중간체 15로 동정되었다.

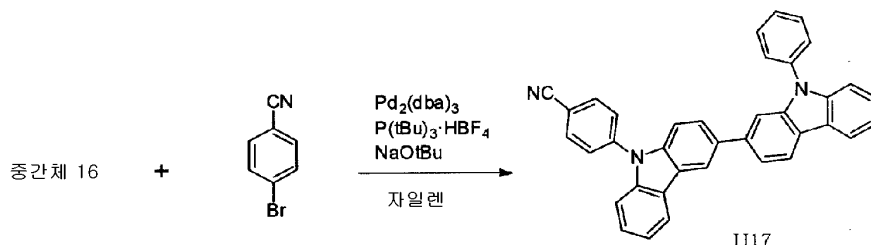
[0483] 합성예 (17-3): 중간체 16의 합성



[0484]

[0485] 중간체 1의 합성에 있어서, 2-나이트로-1,4-다이브로모벤젠 대신에 3-브로모카바졸을 이용하고, 페닐보론산 대신에 중간체 15를 이용하여 마찬가지로 합성했다. FD-MS(field desorption mass spectrum)의 분석에 의해, 중간체 16으로 동정되었다.

[0486] 합성예 (17-4): 화합물 H17의 합성



[0487]

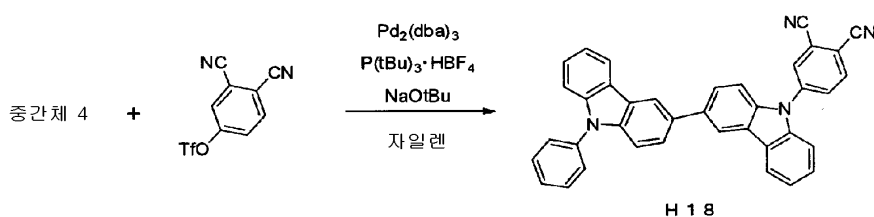
[0488] 화합물 H1의 합성에 있어서, 중간체 3 대신에 중간체 16을 이용하여 마찬가지로 합성했다.

[0489] 얻어진 화합물에 대하여, FD-MS(field desorption mass spectrum), 톨루엔 용액 중의 자외선 흡수 극대 파장  $\lambda_{\text{max}}$ , 및 형광 발광 극대 파장을 이하에 나타낸다.

[0490] FDMS, calcd for  $\text{C}_{37}\text{H}_{23}\text{N}_3=509$ , found  $m/z=509$  ( $\text{M}^+$ )

[0491] UV(PhMe);  $\lambda_{\text{max}}$ , 324nm, FL(PhMe,  $\lambda_{\text{ex}}=300\text{nm}$ );  $\lambda_{\text{max}}$ , 376nm

[0492] 합성예 18(화합물 H18의 합성)



[0493]

[0494] 화합물 H1의 합성에 있어서, 중간체 3 대신에 중간체 4를 이용하고, 4-브로모벤조나이트릴 대신에 트라이플루오로메테인설폰산 3,4-다이사이아노페닐을 이용하여 마찬가지로 합성했다.

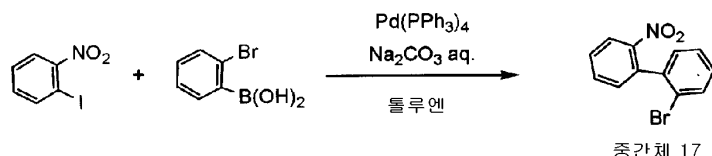
[0495] 얻어진 화합물에 대하여, FD-MS(field desorption mass spectrum), 톨루엔 용액 중의 자외선 흡수 극대 파장  $\lambda_{\max}$ , 및 형광 발광 극대 파장을 이하에 나타낸다.

[0496] FDMS, calcd for  $C_{38}H_{22}N_4=534$ , found  $m/z=534$  ( $M^+$ )

[0497] UV(PhMe);  $\lambda_{\max}$ , 377nm, FL(PhMe,  $\lambda_{\text{ex}}=350\text{nm}$ );  $\lambda_{\max}$ , 488nm

[0498] 합성예 19(화합물 H19의 합성)

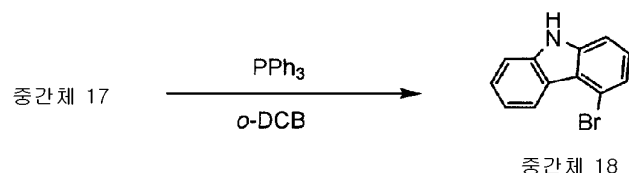
[0499] 합성예 (19-1): 중간체 17의 합성



[0500]

[0501] 중간체 1의 합성에 있어서, 2-나이트로-1,4-다이브로모벤젠 대신에 2-요오도나이트로벤젠을 이용하고, 페닐보론산 대신에 2-브로모페닐보론산을 이용하여 마찬가지로 방법으로 합성했다. FD-MS(field desorption mass spectrum)의 분석에 의해, 중간체 17로 동정되었다.

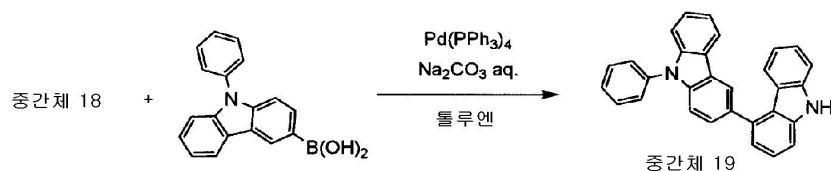
[0502] 합성예 (19-2): 중간체 18의 합성



[0503]

[0504] 중간체 2의 합성에 있어서, 중간체 1 대신에 중간체 17을 이용하여 마찬가지로 방법으로 합성했다. FD-MS(field desorption mass spectrum)의 분석에 의해, 중간체 18로 동정되었다.

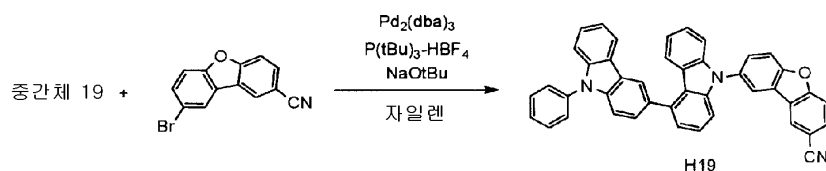
[0505] 합성예 (19-3): 중간체 19의 합성



[0506]

[0507] 중간체 3의 합성에 있어서, 중간체 2 대신에 중간체 18을 이용하여 마찬가지로 방법으로 합성했다. FD-MS(field desorption mass spectrum)의 분석에 의해, 중간체 19로 동정되었다.

[0508] 합성예 (19-4): 화합물 H19의 합성

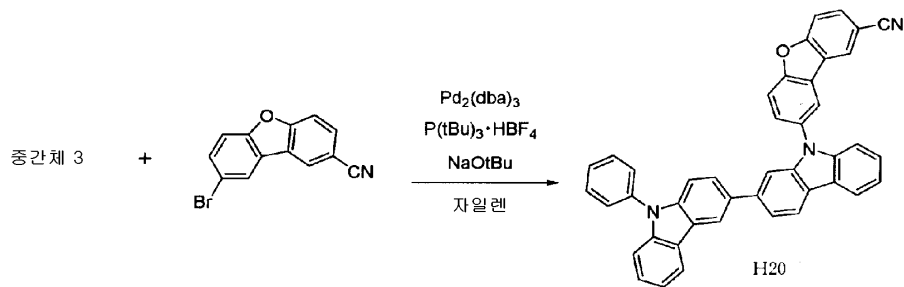


[0509]

[0510] 화합물 H13의 합성에 있어서, 중간체 4 대신에 중간체 19를 이용하여 마찬가지로 방법으로 합성했다. FD-MS(field desorption mass spectrum)의 분석에 의해, 화합물 H19로 동정되었다.

[0511] FDMS, calcd for  $C_{43}H_{25}N_3=599$ , found  $m/z=599$  ( $M^+$ )

[0512] 합성예 20: 화합물 H20의 합성

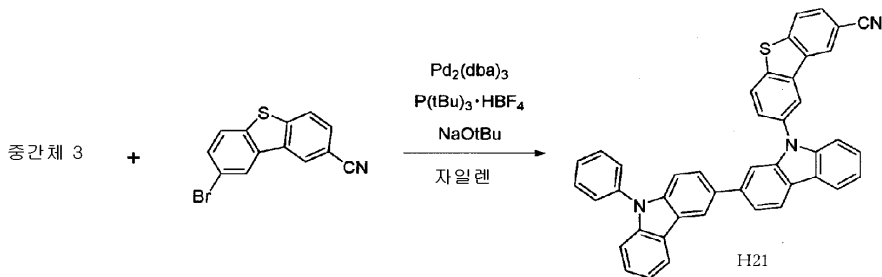


[0513]

[0514] 화합물 H1의 합성에 있어서, 4-브로모벤조나이트릴 대신에 2-브로모-8-사이아노다이벤조퓨란을 이용하여 마찬가지로 합성했다. 얻어진 화합물에 대하여, FD-MS(field desorption mass spectrum)를 이하에 나타낸다.

[0515] FDMS, calcd for  $\text{C}_{43}\text{H}_{25}\text{N}_3\text{O}=599$ , found  $m/z=599$  ( $\text{M}^+$ )

[0516] 합성예 21: 화합물 H21의 합성

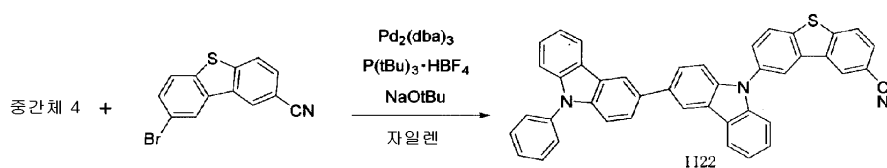


[0517]

[0518] 화합물 H1의 합성에 있어서, 4-브로모벤조나이트릴 대신에 2-브로모-8-사이아노다이벤조싸이오펜을 이용하여 마찬가지로 합성했다. 얻어진 화합물에 대하여, FD-MS(field desorption mass spectrum)를 이하에 나타낸다.

[0519] FDMS, calcd for  $\text{C}_{43}\text{H}_{25}\text{N}_3\text{S}=615$ , found  $m/z=615$  ( $\text{M}^+$ )

[0520] 합성예 22: 화합물 H22의 합성



[0521]

[0522] 화합물 H1의 합성에 있어서, 4-브로모벤조나이트릴 대신에 2-브로모-8-사이아노다이벤조싸이오펜을 이용하고, 중간체 3 대신에 중간체 4를 이용하여 마찬가지로 합성했다. 얻어진 화합물에 대하여, FD-MS(field desorption mass spectrum)를 이하에 나타낸다.

[0523] FDMS, calcd for  $\text{C}_{43}\text{H}_{25}\text{N}_3\text{S}=615$ , found  $m/z=615$  ( $\text{M}^+$ )

[0524] [유기 EL 소자의 제작 및 발광 성능 평가]

[0525] 실시예 1

[0526] (유기 EL 소자의 제조)

[0527] 25mm×75mm×두께 1.1mm의 ITO 투명 전극 부착 유리 기판(지오마테크주식회사제)을 아이소프로필 알코올 중에서 초음파 세정을 5분간 행한 후, UV 오존 세정을 30분간 행했다.

[0528] 세정 후의 투명 전극 라인 부착 유리 기판을 진공 증착 장치의 기판 홀더에 장착하고, 우선 투명 전극 라인이

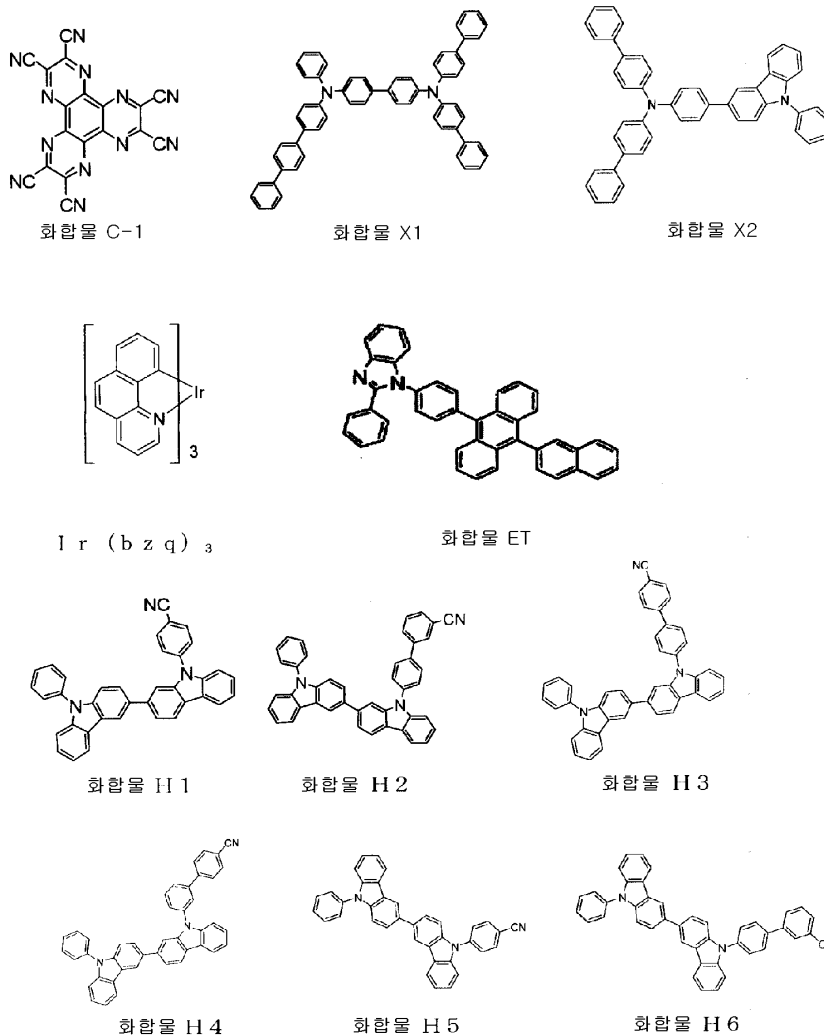
형성되어 있는 측의 면 상에 상기 투명 전극을 덮도록 해서 하기 전자 수송성(억셉터) 화합물 C-1을 증착하여, 막 두께 5nm의 화합물 C-1 막을 성막했다. 이 화합물 C-1 막 상에, 제 1 정공 수송 재료로서 하기 방향족 아민 유도체(화합물 X1)를 증착하여, 막 두께 65nm의 제 1 정공 수송층을 성막했다. 제 1 정공 수송층의 성막에 이어서, 제 2 정공 수송 재료로서 하기 방향족 아민 유도체(화합물 X2)를 증착하여, 막 두께 10nm의 제 2 정공 수송층을 성막했다.

[0529] 추가로, 이 제 2 정공 수송층 상에, 호스트 재료로서 상기 합성 실시예 1에서 얻은 화합물 H1과, 인광 발광 재료로서 하기 화합물 Ir(bzq)<sub>3</sub>을 공증착하여, 막 두께 25nm의 인광 발광층을 성막했다. 발광층 내에서의 화합물 Ir(bzq)<sub>3</sub>의 농도는 10.0질량%였다. 이 공증착막은 발광층으로서 기능한다.

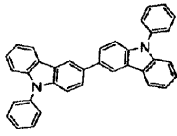
[0530] 그리고, 이 발광층 성막에 이어서 하기 화합물 ET를 막 두께 35nm로 성막했다. 이 화합물 ET 막은 전자 수송층으로서 기능한다.

[0531] 다음으로, LiF를 전자 주입성 전극(음극)으로서 성막 속도 0.1Å/min으로 증착하여 막 두께를 1nm로 했다. 이 LiF 막 상에 금속 Al을 증착시켜, 금속 음극을 막 두께 80nm로 형성하여 유기 EL 소자를 제작했다.

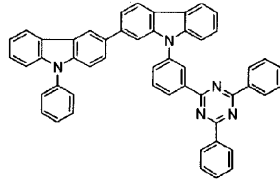
[0532] 이하에, 실시예 및 비교예에서 사용한 화합물을 나타낸다.



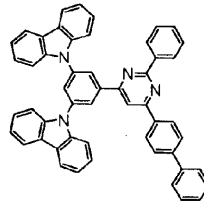
[0533]



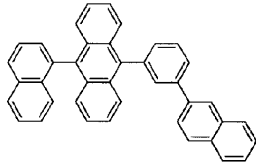
화합물 F 1



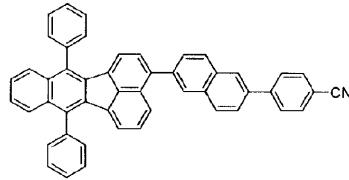
화합물 F 2



화합물 F 3



화합물 BH 1



화합물 BD 1

[0534]

[0535]

(유기 EL 소자의 발광 특성 평가)

[0536]

얻어진 유기 EL 소자의 실온 및 DC 정전류 구동(전류 밀도  $1\text{mA}/\text{cm}^2$ )에서의 발광 효율을 측정한 결과를 표 1에 나타낸다.

[0537]

실시예 2~6 및 비교예 1

[0538]

실시예 1에 있어서, 발광층의 호스트 화합물 H1을 이용하는 대신에 표 1에 기재된 화합물을 이용하여 발광층을 형성한 것 이외는 실시예 1과 마찬가지로 하여 유기 EL 소자를 제작했다. 발광 효율의 측정 결과를 표 1에 나타낸다.

표 1

|       | 발광층<br>호스트 재료 | 발광 효율<br>(cd/A) |
|-------|---------------|-----------------|
| 실시예 1 | 화합물 H1        | 59              |
| 실시예 2 | 화합물 H2        | 59              |
| 실시예 3 | 화합물 H3        | 61              |
| 실시예 4 | 화합물 H4        | 62              |
| 실시예 5 | 화합물 H5        | 58              |
| 실시예 6 | 화합물 H6        | 45              |
| 비교예 1 | 화합물 F1        | 10              |

[0539]

[0540]

표 1로부터, 카바졸 유도체로 이루어지는 중심 골격의 말단에 사이아노기로 치환된 기를 갖는 화합물 H1~H5를 발광층의 호스트 재료로서 이용한 실시예 1~6의 유기 EL 소자는, 마찬가지로의 중심 골격이지만 말단이 사이아노기로 치환되어 있지 않은 화합물 F1을 이용한 비교예 1의 유기 EL 소자에 비하여 발광 효율이 높다.

[0541]

실시예 7~11 및 비교예 2

[0542]

발광층의 호스트 재료로서 화합물 H1을 이용하는 대신에, 표 2에 기재된 호스트 재료 1과 호스트 재료 2를 이용하여 발광층을 형성한 것 이외는, 실시예 1과 마찬가지로 하여 유기 EL 소자를 제작했다. 발광층 내에서의 화합물  $\text{Ir}(\text{bq})_3$ 의 농도는 10.0질량%, 호스트 재료 1의 농도는 45.0질량%, 호스트 재료 2의 농도는 45.0질량%였다.

[0543]

얻어진 유기 EL 소자의 실온 및 DC 정전류 구동(전류 밀도  $1\text{mA}/\text{cm}^2$ )에서의 발광 효율을 측정했다. 또, 초기 휘도  $10,000\text{cd}/\text{m}^2$ 에서의 80% 수명(저전류 구동으로, 휘도가 초기 휘도의 80%까지 저하될 때까지의 시간)을 구했다. 결과를 표 2에 나타낸다.

표 2

|        | 발광층<br>호스트 재료 1 | 발광층<br>호스트 재료 2 | 발광 효율<br>(cd/A) | 80% 수명<br>(시간) |
|--------|-----------------|-----------------|-----------------|----------------|
| 실시예 7  | 화합물 H1          | 화합물 F2          | 68              | 1040           |
| 실시예 8  | 화합물 H1          | 화합물 F3          | 68              | 800            |
| 실시예 9  | 화합물 H3          | 화합물 F2          | 66              | 800            |
| 실시예 10 | 화합물 H4          | 화합물 F2          | 70              | 1120           |
| 실시예 11 | 화합물 H5          | 화합물 F2          | 60              | 1040           |
| 비교예 2  | 화합물 F1          | 화합물 F3          | 50              | 480            |

[0544]

[0545]

표 2로부터, 카바졸 유도체로 이루어지는 중심 골격의 말단에 사이아노기로 치환된 기를 갖는 화합물 H1 및 H3~H5와, 화합물 F2 또는 F3을 조합하여 발광층의 호스트 재료(코호스트)로서 이용한 실시예 7~11의 유기 EL 소자는, 발광 효율이 양호했다. 또, 실시예 7~11의 유기 EL 소자는, 마찬가지로의 중심 골격이지만 말단이 사이아노기 치환되어 있지 않은 화합물 F1과 화합물 F3을 코호스트로서 이용한 비교예 2의 유기 EL 소자에 비하여 장수명화되어 있었다.

[0546]

실시예 12

[0547]

이하에 나타내는 소자 구성의 유기 EL 소자를 제작했다.

[0548]

ITO(130nm)/C-1(5nm)/X1(80nm)/X2(15nm)/BH1:BD1(25nm, 5질량%)/H3(5nm)/ET(20nm)/LiF(1nm)/Al(80nm)

[0549]

이 소자 구성에 있어서, ( ) 안의 숫자는, 막 두께, 및 복수 성분이 포함되는 발광층에 대해서는 도펀트 재료의 함유율(질량%)을 나타내고 있다.

[0550]

실시예 12의 유기 EL 소자는, 구체적으로는, 다음과 같이 하여 제작했다.

[0551]

25mm×75mm×0.7mm 두께의 ITO 투명 전극(양극) 부착 유리 기판(지오마테크사제)을 아이소프로필 알코올 중에서 초음파 세정을 5분간 행한 후, UV 오존 세정을 30분간 행했다.

[0552]

세정 후의 투명 전극 라인 부착 유리 기판을 진공 증착 장치의 기판 홀더에 장착하고, 우선 투명 전극 라인이 형성되어 있는 측의 면 상에 투명 전극을 덮도록 해서 화합물 C-1을 증착하여, 막 두께 5nm의 화합물 C-1 막을 형성했다. 이 화합물 C-1 막은 정공 주입층으로서 기능한다.

[0553]

이 화합물 C-1 막의 성막에 이어서, 화합물 X1을 증착하여, 화합물 C-1 막 상에 막 두께 80nm의 화합물 X1 막을 성막했다. 이 화합물 X1 막은 제 1 정공 수송층으로서 기능한다.

[0554]

이 화합물 X1 막의 성막에 이어서, 화합물 X2를 증착하여, 화합물 X1 막 상에 막 두께 15nm의 화합물 X2 막을 성막했다. 이 화합물 X2 막은 제 2 정공 수송층으로서 기능한다.

[0555]

이 화합물 X2 막 상에 화합물 BH1(호스트 재료) 및 화합물 BD1(도펀트 재료)을 20:1의 질량비로 공증착하여, 막 두께 25nm의 발광층을 성막했다.

[0556]

이 발광층 상에 화합물 H3을 증착하여, 막 두께 5nm의 장벽층을 형성했다.

[0557]

이 장벽층 상에 전자 수송 재료인 화합물 ET를 증착하여, 막 두께 20nm의 전자 주입층을 형성했다.

[0558]

이 전자 주입층 상에 LiF를 증착하여, 막 두께 1nm의 LiF 막을 형성했다.

[0559]

이 LiF 막 상에 금속 알루미늄(Al)을 증착하여, 막 두께 80nm의 금속 음극을 형성했다.

[0560]

이와 같이 하여, 실시예 12의 유기 EL 소자를 제작했다.

[0561]

얻어진 유기 EL 소자의 실온 및 DC 정전류 구동(전류 밀도 1mA/cm<sup>2</sup>)에서의 EL 발광의 분광 방사 휘도 스펙트럼을, 분광 방사 휘도계(코니카미놀타사제 CS-1000)를 이용하여 측정했다. 얻어진 분광 방사 휘도 스펙트럼으로부터, 색도(CIE<sub>x</sub>, CIE<sub>y</sub>), 발광 효율(외부 양자 효율), 주피크 파장을 구했다. 결과를 표 3에 나타낸다.

## 표 3

|        | CIE <sub>x</sub> | CIE <sub>y</sub> | 외부 양자 수율(%) | 주피크 파장 (nm) |
|--------|------------------|------------------|-------------|-------------|
| 실시예 12 | 0.141            | 0.130            | 8.60        | 453         |

[0562]

[0563] 표 3으로부터, 본 발명의 유기 EL 소자용 재료인 화합물 H3을 형광 소자의 장벽층으로서 이용하는 것에 의해, 외부 양자 수율이 8.60%라는 양호한 발광 효율을 나타내었다.

[0564] 실시예 13~20

[0565] 실시예 1에 있어서, 발광층의 호스트 화합물 H1을 이용하는 대신에 표 4에 기재된 화합물을 이용하여 발광층을 형성한 것 이외는 실시예 1과 마찬가지로 하여 유기 EL 소자를 제작했다. 발광 효율의 측정 결과를 표 4에 나타낸다.

## 표 4

|        | 발광층<br>호스트 재료 | 발광 효율<br>(cd/A) |
|--------|---------------|-----------------|
| 실시예 13 | 화합물 H7        | 68              |
| 실시예 14 | 화합물 H10       | 67              |
| 실시예 15 | 화합물 H12       | 56              |
| 실시예 16 | 화합물 H13       | 55              |
| 실시예 17 | 화합물 H14       | 55              |
| 실시예 18 | 화합물 H15       | 55              |
| 실시예 19 | 화합물 H16       | 56              |
| 실시예 20 | 화합물 H18       | 45              |

[0566]

[0567] 표 4로부터, 카바졸 유도체로 이루어지는 중심 골격의 말단에 사이아노기로 치환된 기를 갖는 화합물 H7, H10, H12~H16, H18을 발광층의 호스트 재료로서 이용한 실시예 13~20의 유기 EL 소자는, 마찬가지로의 중심 골격이지만 말단이 사이아노기 치환되어 있지 않은 화합물 F1을 이용한 상기 비교예 1의 유기 EL 소자에 비하여 발광 효율이 높다.

[0568] 실시예 21

[0569] 25mm×75mm×두께 1.1mm의 ITO 투명 전극 부착 유리 기판(지오마테크주식회사제)을 아이소프로필 알코올 중에서 초음파 세정을 5분간 행한 후, UV 오존 세정을 30분간 행했다.

[0570] 세정 후의 투명 전극 라인 부착 유리 기판을 진공 증착 장치의 기판 홀더에 장착하고, 우선 투명 전극 라인이 형성되어 있는 측의 면 상에 상기 투명 전극을 덮도록 해서 하기 화합물 C-2를 증착하여, 막 두께 20nm의 화합물 C-2 막을 성막했다. 이 화합물 C-2 막 상에, 상기 방향족 아민 유도체(화합물 X1)를 증착하여, 막 두께 60nm의 정공 수송층을 성막했다.

[0571] 추가로, 이 정공 수송층 상에, 호스트 재료로서 하기 화합물 F4와 인광 발광 재료로서 하기 화합물 BD2를 공증착하여, 막 두께 50nm의 인광 발광층을 성막했다. 인광 발광층 내에서의 화합물 F4의 농도는 80질량%, 화합물 BD2의 농도는 20질량%였다. 이 공증착막은 발광층으로서 기능한다.

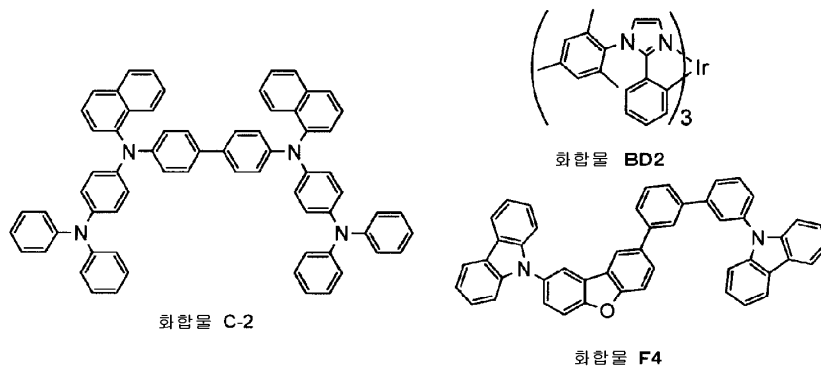
[0572] 그리고, 이 발광층 성막에 이어서, 상기 합성에 13에서 얻은 화합물 H13을 막 두께 10nm로 성막했다. 이 화합물 H13 막은 제 1 전자 수송층으로서 기능한다. 추가로, 상기 화합물 ET를 막 두께 10nm로 성막했다. 이 화합물 ET 막은 제 2 전자 수송층으로서 기능한다.

[0573] 다음으로, LiF를 전자 주입성 전극(음극)으로서 성막 속도 0.1Å/min으로 증착하여 막 두께를 1nm로 했다. 이 LiF 막 상에 금속 Al을 증착시켜, 금속 음극을 막 두께 80nm로 형성하여 유기 EL 소자를 제작했다.

[0574] 실시예 22 및 비교예 3

[0575] 실시예 21에 있어서, 제 1 전자 수송층의 화합물 H13을 이용하는 대신에 표 5에 기재된 화합물을 이용하여 제 1 전자 수송층을 형성한 것 이외는 실시예 21과 마찬가지로 하여 유기 EL 소자를 제작했다.

[0576] 이하에, 실시예 21, 실시예 22 및 비교예 3에서 사용한 화합물을 나타낸다.



[0577]

[0578] 얻어진 유기 EL 소자의 실온 및 DC 정전류 구동(전류 밀도  $1\text{mA}/\text{cm}^2$ )에서의 전압 및 발광 효율(외부 양자 수율)을 측정한 결과를 표 5에 나타낸다.

표 5

|         | 제 1 전자 수송층 재료 | 전압 (V) | 외부 양자 수율 (%) |
|---------|---------------|--------|--------------|
| 실시예 2 1 | 화합물 H 1 3     | 4.0    | 18.4         |
| 실시예 2 2 | 화합물 H 1 9     | 3.7    | 19.8         |
| 비교예 3   | 화합물 F 4       | 5.1    | 17.5         |

[0579]

[0580] 표 5로부터, 카바졸 유도체로 이루어지는 중심 골격의 말단에 사이아노기로 치환된 기를 갖는 화합물 H13, H19를 발광층에 인접하는 전자 수송층에 이용한 실시예 21 및 실시예 22의 유기 EL 소자는, 마찬가지로 카바졸 골격을 갖지만 사이아노기 치환되어 있지 않은 화합물 F4를 이용한 상기 비교예 3의 유기 EL 소자에 비하여 발광 효율이 향상되어 있고, 게다가 구동 전압이 낮다.

### 산업상 이용가능성

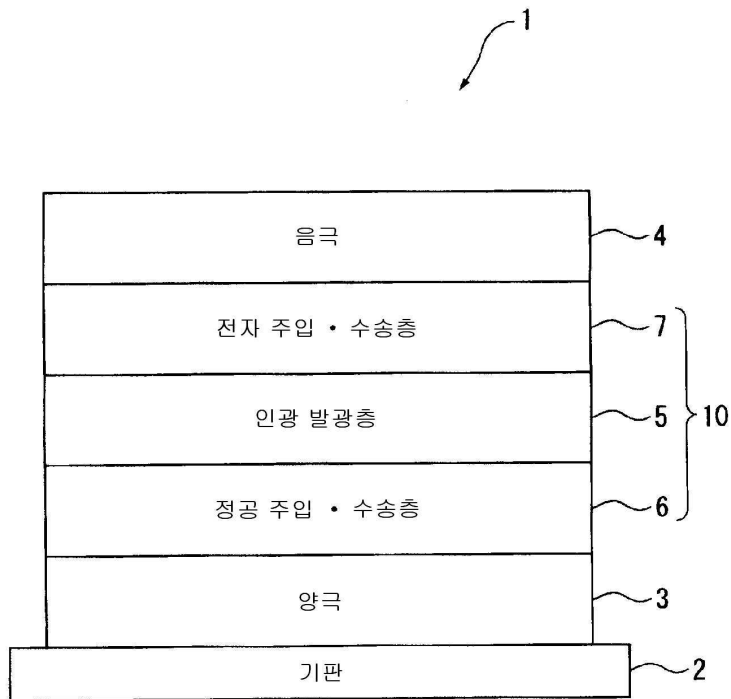
[0581] 이상 상세하게 설명한 바와 같이, 본 발명의 유기 EL 소자용 재료는, 양호한 발광 효율에서의 구동이 가능한 유기 EL 소자를 실현하는 재료로서 유용하다.

### 부호의 설명

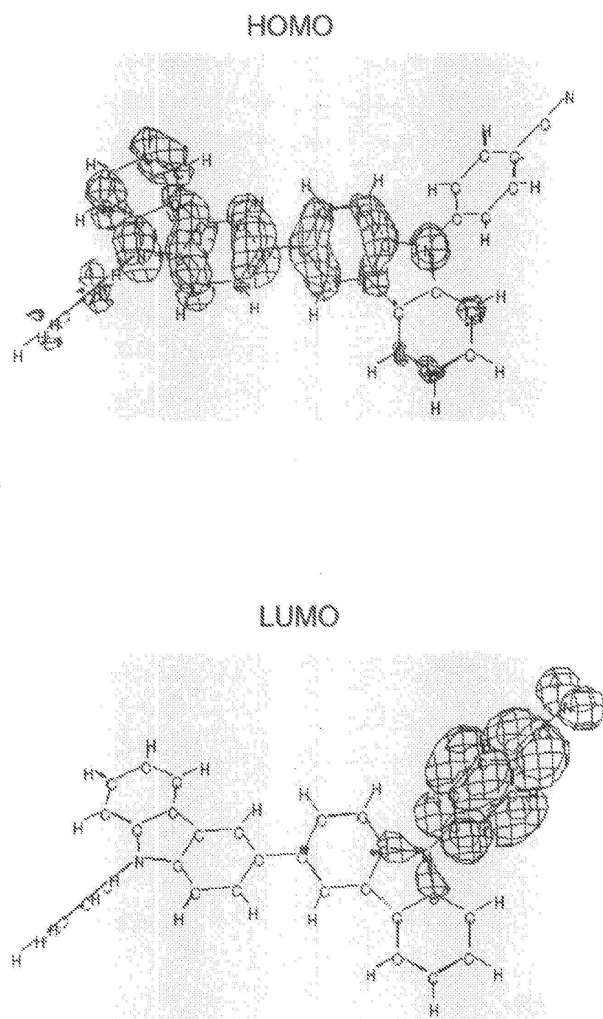
- [0582]
- 1: 유기 전기발광 소자
  - 2: 기판
  - 3: 양극
  - 4: 음극
  - 5: 인광 발광층
  - 6: 정공 주입 · 수송층
  - 7: 전자 주입 · 수송층
  - 10: 유기 박막층

도면

도면1

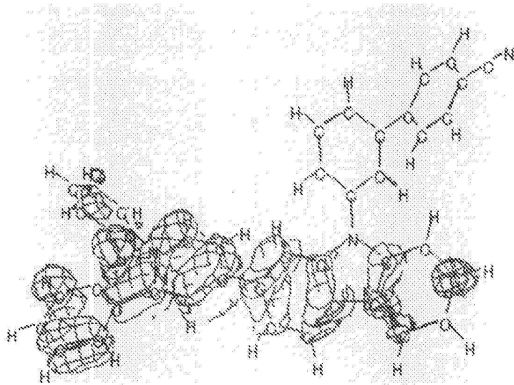


도면2

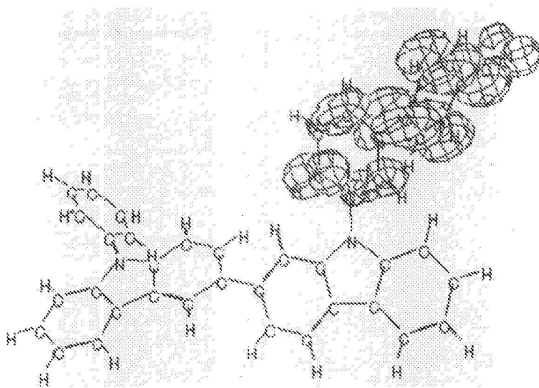


도면3

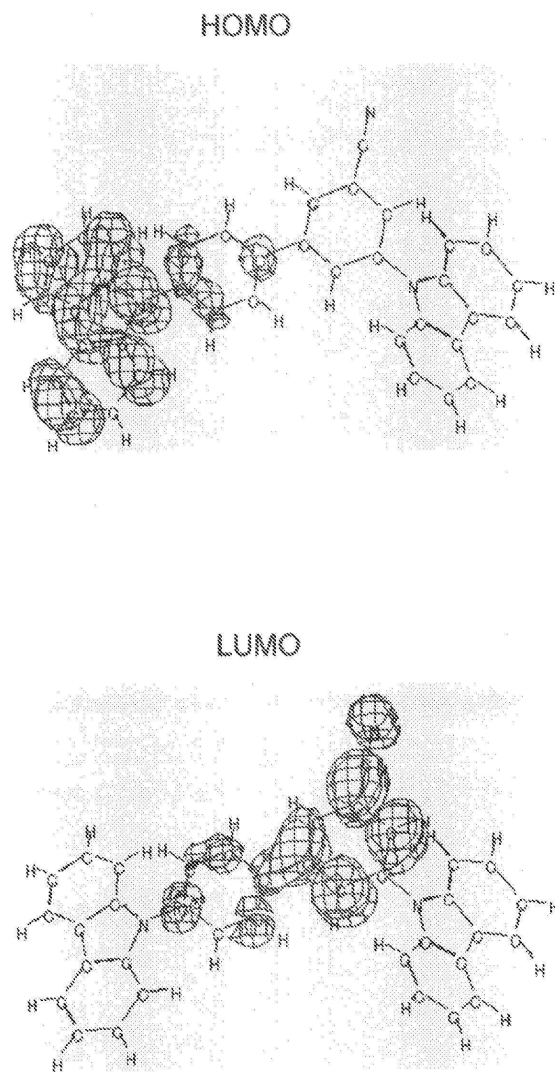
HOMO



LUMO



도면4

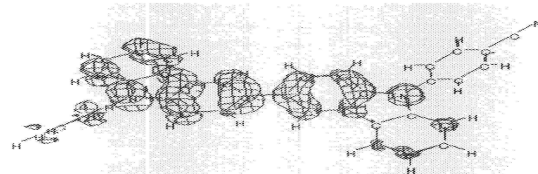


|               |                                                                                                                                                                                          |         |            |
|---------------|------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------|---------|------------|
| 专利名称(译)       | 有机电致发光器件材料和有机电致发光器件                                                                                                                                                                      |         |            |
| 公开(公告)号       | <a href="#">KR1020140108637A</a>                                                                                                                                                         | 公开(公告)日 | 2014-09-12 |
| 申请号           | KR1020147015282                                                                                                                                                                          | 申请日     | 2012-12-04 |
| 申请(专利权)人(译)   | 高山出光株式会社                                                                                                                                                                                 |         |            |
| 当前申请(专利权)人(译) | 高山出光株式会社                                                                                                                                                                                 |         |            |
| [标]发明人        | MIZUKI YUMIKO<br>미즈키유미코<br>ITO MITSUNORI<br>이토미츠노리<br>INOUE TETSUYA<br>이노우에데츠야<br>HIBINO KUMIKO<br>히비노구미코<br>NISHIMURA KAZUKI<br>니시무라가즈키<br>YOSHIDA KEI<br>요시다게이                         |         |            |
| 发明人           | 미즈키유미코<br>이토미츠노리<br>이노우에데츠야<br>히비노구미코<br>니시무라가즈키<br>요시다게이                                                                                                                                |         |            |
| IPC分类号        | C09K11/06 C07D209/82 H01L51/50                                                                                                                                                           |         |            |
| CPC分类号        | C07D209/80 C07D209/86 C07D405/14 C07D409/14 C09K11/06 C09K2211/1007 C09K2211/1011<br>C09K2211/1029 C09K2211/1088 C09K2211/1092 H01L51/0072 H01L51/5072 H05B33/10 H01L51/0052 H01L51/0071 |         |            |
| 优先权           | 2011266238 2011-12-05 JP<br>2012083146 2012-03-30 JP                                                                                                                                     |         |            |
| 其他公开文献        | KR101704150B1                                                                                                                                                                            |         |            |
| 外部链接          | <a href="#">Espacenet</a>                                                                                                                                                                |         |            |

#### 摘要(译)

用于有机电致发光器件的材料，其中被氰基取代的芳族烃基或被氰基取代的杂环基团在特定位置键合到特定结构的中心骨架，并且有机电致发光器件具有在阳极和阴极之间包含发光层的有机薄膜层一种有机电致发光器件，包括至少一个含有有机电致发光器件材料的有机薄膜层，其特征在于，所述有机电致发光器件用于实现具有良好发光效率的有机电致发光器件它提供了材料。

HOMO



LUMO

