(19) 대한민국특허청(KR)
(12) 공개특허공보(A)

(11) 공개번호 10-2025-0065419
(43) 공개일자 2025년05월12일

(51) 국제특허분류(Int. Cl.)
C07D 307/91 (2006.01) *C07C 211/61* (2006.01)
C07D 333/76 (2006.01) *C07D 409/12* (2006.01)
H10K 50/15 (2023.01) *H10K 85/60* (2023.01)
(52) CPC특허분류
C07D 307/91 (2013.01)
C07C 211/61 (2013.01)
(21) 출원번호 10-2025-7013159(분할)
(22) 출원일자(국제) 2015년02월27일
심사청구일자 2025년04월22일
(62) 원출원 특허 10-2024-7017997
원출원일자(국제) 2015년02월27일
심사청구일자 2024년05월29일
(85) 번역문제출일자 2025년04월22일
(86) 국제출원번호 PCT/JP2015/055983
(87) 국제공개번호 WO 2015/129896
국제공개일자 2015년09월03일
(30) 우선권주장
JP-P-2014-039015 2014년02월28일 일본(JP)

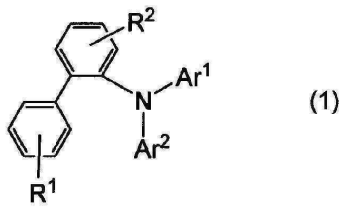
(71) 출원인
이데미쓰 고산 가부시키가이샤
일본 도쿄도 지요다쿠 오테마치 1쵸메 2방 1고
(72) 발명자
후나하시 마사카즈
일본 지바켄 소데가우라시 가미이즈미 1280반치
후지야마 다카히로
일본 지바켄 소데가우라시 나가우라 580-32
(74) 대리인
제일특허법인(유)

전체 청구항 수 : 총 16 항

(54) 발명의 명칭 **화합물, 유기 전기발광 소자용 재료, 유기 전기발광 소자 및 전자 기기**

(57) 요 약

하기 식(1)로 표시되는 화합물



(1)

(식 중, R^1, R^2, Ar^1, 및 Ar^2는 명세서 중에서 정의한 대로이다.)은, 저전압 구동이 가능하고 장수명이면서 고효율인 유기 전기발광 소자를 실현한다.

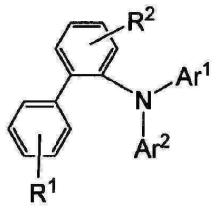
(52) CPC특허분류
C07D 333/76 (2013.01)
C07D 409/12 (2013.01)
H10K 50/156 (2023.02)
H10K 85/615 (2023.02)
H10K 85/624 (2023.02)
H10K 85/633 (2023.02)
H10K 85/636 (2023.02)
H10K 85/6574 (2023.02)
H10K 85/6576 (2023.02)

명 세 서

청구범위

청구항 1

하기 식(1)로 표시되는 화합물.



(1)

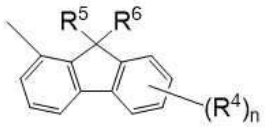
(식(1)에 있어서,

R^1은 치환 또는 비치환된 페닐기, 또는 치환 또는 비치환된 바이페닐릴기이고;

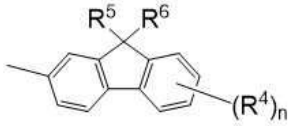
R^2는 수소 원자, 또는 치환 또는 비치환된 페닐기이고;

Ar^1은 하기 식(3-1) 또는 (3-2)로 표시되는 기를 나타내고;

Ar^2는 (i) 나프틸기, 바이페닐릴기 또는 환형성 탄소수 3~10의 사이클로알킬기로 치환된, 페닐기, 또는 (ii) 나프틸기, 바이페닐릴기 또는 환형성 탄소수 3~10의 사이클로알킬기로 치환된, 바이페닐릴기이다.



(3-1)



(3-2)

(식(3-1) 또는 (3-2)에 있어서,

R^5 및 R^6은 각각 독립적으로 수소 원자, 치환 또는 비치환된 탄소수 1~20의 알킬기, 또는 치환 또는 비치환된 환형성 탄소수 10~50의 아릴기를 나타내고;

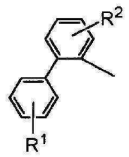
R^4는 치환 또는 비치환된 탄소수 1~20의 알킬기, 치환 또는 비치환된 환형성 탄소수 6~50의 아릴기, 또는 사이아노기를 나타내고;

n은 0~4의 정수를 나타내며, n이 2~4의 정수를 나타낼 때, 2~4개의 R^4는 동일해도 상이해도 되고, 또한 서로 결합하여 환을 형성해도 되며, n이 0일 때, $(R^4)_0$은 수소 원자를 나타낸다.))

청구항 2

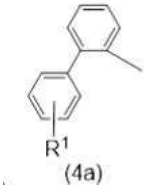
제 1 항에 있어서,

상기 식(1)의 하기 식(4)



(4)

로 표시되는 기가 하기 식(4a)로 표시되는, 화합물.



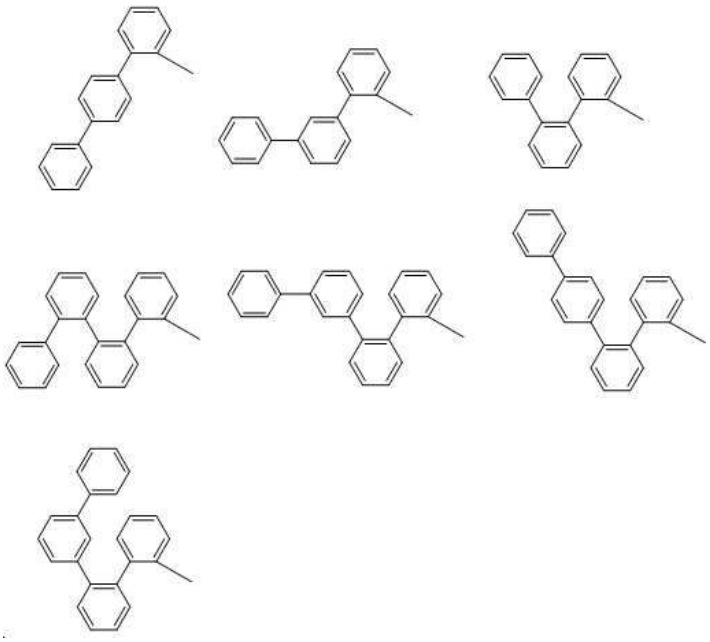
(4a)

(식(4a)에 있어서, R^1은 상기와 동일.)

청구항 3

제 2 항에 있어서,

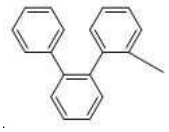
상기 식(4a)가 하기 식 중 어느 하나로 표시되는, 화합물.



청구항 4

제 2 항에 있어서,

상기 식(4a)가 하기 식으로 표시되는, 화합물.



청구항 5

제 1 항에 있어서,

상기 식(3-1)에 있어서, n이 0인, 화합물.

청구항 6

제 1 항에 있어서,

상기 식(3-2)에 있어서, n이 0인, 화합물.

청구항 7

제 1 항에 있어서,

Ar^2가, 나프틸기로 치환된 바이페닐릴기, 또는 나프틸기로 치환된 페닐기인, 화합물.

청구항 8

제 1 항에 있어서,

Ar^2가, 환형성 탄소수 3~10의 사이클로알킬기로 치환된 페닐기인, 화합물.

청구항 9

제 1 항에 있어서,

R^5 및 R^6은, 각각 독립적으로, 치환 또는 비치환된, 메틸기, 에틸기, n-프로필기, 아이소프로필기, n-뷰틸기, 아이소뷰틸기, s-뷰틸기 또는 t-뷰틸기인, 화합물.

청구항 10

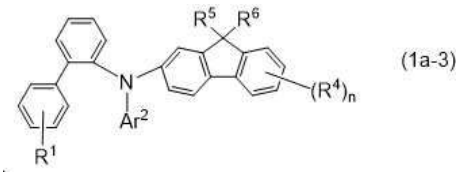
제 1 항에 있어서,

R^5 및 R^6이 비치환된 메틸기인, 화합물.

청구항 11

제 1 항에 있어서,

상기 식(1)이 하기 식(1a-3)으로 표시되는, 화합물.



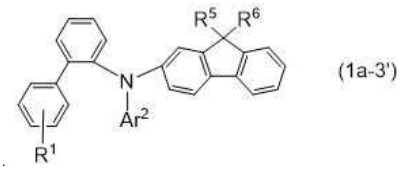
(1a-3)

(식 중, R^1, R^4, R^5, R^6, Ar^2, 및 n은 식(1)에서 정의한 대로이다.)

청구항 12

제 1 항에 있어서,

상기 식(1)이 하기 식(1a-3')으로 표시되는, 화합물.



(1a-3')

(식 중, R^1, R^5, R^6, 및 Ar^2는 식(1)에서 정의한 대로이다.)

청구항 13

제 1 항 내지 제 12 항 중 어느 한 항에 기재된 화합물로 이루어지는 유기 전기발광 소자용 재료.

청구항 14

양극, 음극, 및 해당 양극과 음극 사이에 1층 이상의 유기 박막층을 갖고, 해당 1층 이상의 유기 박막층이 발광층을 포함하는 유기 전기발광 소자로서, 해당 1층 이상의 유기 박막층의 적어도 1층이 제 1 항 내지 제 12 항 중 어느 한 항에 기재된 화합물을 함유하는 유기 전기발광 소자.

청구항 15

제 14 항에 있어서,

상기 양극과 상기 발광층 사이에 유기 박막층을 갖고, 해당 유기 박막층이 상기 화합물을 포함하는 유기 전기발광 소자.

청구항 16

제 14 항에 기재된 유기 전기발광 소자를 탑재한 전자 기기.

발명의 설명

기 술 분 야

[0001] 본 발명은 화합물, 해당 화합물로 이루어지는 유기 전기발광 소자용 재료, 해당 화합물을 이용한 유기 전기발광 소자, 및 해당 유기 전기발광 소자를 탑재한 전자 기기에 관한 것이다.

배 경 기 술

[0002] 일반적으로 유기 전기발광(EL) 소자는 양극, 음극, 및 양극과 음극에 끼워진 1층 이상의 유기 박막층으로 구성되어 있다. 양 전극 사이에 전압이 인가되면, 음극측으로부터 전자, 양극측으로부터 정공이 발광 영역에 주입되고, 주입된 전자와 정공은 발광 영역에서 재결합하여 여기 상태를 생성하고, 여기 상태가 기저 상태로 돌아올 때에 광을 방출한다. 따라서, 전자 또는 정공을 효율적으로 발광 영역으로 수송하고, 전자와 정공의 재결합을 용이하게 하는 화합물의 개발은 고효율 유기 EL 소자를 얻는 데 있어서 중요하다.

[0003] 또한, 보다 낮은 전압에서 유기 EL 소자를 구동하는 것은, 소비 전력의 저감에 효과적이며, 게다가 발광 효율과 소자 수명의 개선에도 효과적이다. 이 구동 전압의 저하에는, 전자 및/또는 정공에 대한 높은 이동도를 갖는 전하 수송 재료가 필요하다.

[0004] 특허문헌 1~4에는, 플루오렌 구조, 다이벤조퓨란 구조, 아릴기를 갖는 아민 화합물이 개시되어 있다. 그러나, 이들에 기재되어 있는 아민 화합물은 정공 이동도가 불충분하여, 보다 높은 정공 이동도를 갖는 화합물의 개발이 요구되고 있었다.

선행기술문헌

특허문헌

[0005] (특허문헌 0001) 국제 공개 제2010/044130호 팜플렛

(특허문헌 0002) 국제 공개 제2012/034627호 팜플렛

(특허문헌 0003) 국제 공개 제2013/087142호 팜플렛

(특허문헌 0004) 국제 공개 제2014/015938호 팜플렛

발명의 내용

해결하려는 과제

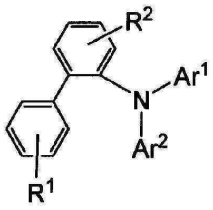
[0006] 본 발명은 상기의 과제를 해결하기 위해서 이루어진 것으로, 저전압 구동이 가능하고 장수명이면서 고발광효율인 유기 EL 소자 및 이것을 실현할 수 있는 유기 EL 소자용 재료를 제공하는 것을 목적으로 한다.

과제의 해결 수단

[0007] 본 발명자들은 상기 목적을 달성하기 위해서 예의 연구를 거듭한 결과, 화학식(1)로 표시되는 화합물이 높은 정공 이동도를 나타낸다는 것을 발견했다. 또한, 해당 화합물을 이용하는 것에 의해, 저전압 구동이 가능하고 장수명이면서 고발광효율인 유기 EL 소자가 얻어진다는 것을 발견했다.

[0008] 즉, 일 태양에 있어서, 본 발명은 하기 식(1)로 표시되는 화합물(이하, 「화합물(1)」이라고 칭하는 경우도 있

음)을 제공한다.



(1)

[0009]

[0010] (식(1)에 있어서,

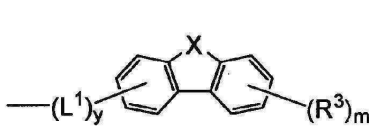
[0011] R^1과 R^2의 한쪽은 치환 또는 비치환된 환형성 탄소수 6~50의 아릴기를 나타내고, 다른 쪽은 수소 원자, 치환 또는 비치환된 탄소수 1~20의 알킬기, 치환 또는 비치환된 환형성 원자수 3~50의 헤테로아릴기, 할로겐 원자, 치환 또는 비치환된 탄소수 1~20의 플루오로알킬기, 치환 또는 비치환된 탄소수 1~20의 알콕시기, 치환 또는 비치환된 탄소수 1~20의 플루오로알콕시기, 치환 또는 비치환된 환형성 탄소수 6~50의 아릴옥시기, 또는 사이아노기를 나타내거나, 또는

[0012] R^1과 R^2의 양쪽이 각각 독립적으로 치환 또는 비치환된 환형성 탄소수 6~50의 아릴기를 나타내고;

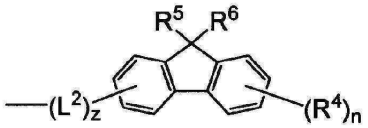
[0013] R^1과 R^2의 한쪽 또는 양쪽이 치환 또는 비치환된 환형성 탄소수 6~50의 아릴기를 나타내는 경우, 해당 아릴기와 R^1 또는 R^2가 결합하는 벤젠환은 서로 가교되어도 되고;

[0014] Ar^1은 하기 식(2) 또는 (3)으로 표시되는 기를 나타내고;

[0015] Ar^2는 하기 식(2)로 표시되는 기, 하기 식(3)으로 표시되는 기, 및 치환 또는 비치환된 환형성 탄소수 6~50의 아릴기로부터 선택되는 기를 나타낸다.



(2)



(3)

[0016]

[0017] (식(2)에 있어서,

[0018] X는 산소 원자 또는 황 원자를 나타내고;

[0019] L^1은 치환 또는 비치환된 환형성 탄소수 6~50의 아릴렌기를 나타내고;

[0020] y는 0 또는 1을 나타내며, y가 0일 때, $(L^1)_0$은 단일결합을 나타내고;

[0021] R^3은 치환 또는 비치환된 탄소수 1~20의 알킬기, 치환 또는 비치환된 환형성 탄소수 6~50의 아릴기, 치환 또는 비치환된 환형성 원자수 3~50의 헤테로아릴기, 할로겐 원자, 치환 또는 비치환된 탄소수 1~20의 플루오로알킬기, 치환 또는 비치환된 탄소수 1~20의 알콕시기, 치환 또는 비치환된 탄소수 1~20의 플루오로알콕시기, 치환 또는 비치환된 환형성 탄소수 6~50의 아릴옥시기, 또는 사이아노기를 나타내고;

[0022] m은 0~4의 정수를 나타내며, m이 2~4의 정수를 나타낼 때, 2~4개의 R^3은 동일해도 상이해도 되고, 또한 서로 결합하여 환을 형성해도 되며, m이 0일 때, $(R^3)_0$은 수소 원자를 나타낸다.

[0023] 식(3)에 있어서,

[0024] R^5 및 R^6은 각각 독립적으로 수소 원자, 치환 또는 비치환된 탄소수 1~20의 알킬기, 치환 또는 비치환된 환형성 탄소수 10~50의 아릴기, 치환 또는 비치환된 환형성 원자수 3~50의 헤테로아릴기, 할로겐 원자, 치환 또는 비치환된 탄소수 1~20의 플루오로알킬기, 치환 또는 비치환된 탄소수 1~20의 알콕시기, 치환 또는 비치환된 탄

소수 1~20의 플루오로알콕시기, 치환 또는 비치환된 환형성 탄소수 6~50의 아릴옥시기, 또는 사이아노기를 나타내고;

[0025] L^2는 치환 또는 비치환된 환형성 탄소수 6~50의 아릴렌기를 나타내고;

[0026] z는 0 또는 1을 나타내며, z가 0일 때, $(L^2)_0$은 단일결합을 나타내고;

[0027] R^4는 치환 또는 비치환된 탄소수 1~20의 알킬기, 치환 또는 비치환된 환형성 탄소수 6~50의 아릴기, 할로젠 원자, 치환 또는 비치환된 탄소수 1~20의 플루오로알킬기, 치환 또는 비치환된 탄소수 1~20의 알콕시기, 치환 또는 비치환된 탄소수 1~20의 플루오로알콕시기, 치환 또는 비치환된 환형성 탄소수 6~50의 아릴옥시기, 또는 사이아노기를 나타내고;

[0028] n은 0~4의 정수를 나타내며, n이 2~4의 정수를 나타낼 때, 2~4개의 R^4는 동일해도 상이해도 되고, 또한 서로 결합하여 환을 형성해도 되며, n이 0일 때, $(R^4)_0$은 수소 원자를 나타낸다.))

[0029] 다른 태양에 있어서, 본 발명은 상기 화합물(1)로 이루어지는 유기 EL 소자용 재료를 제공한다.

[0030] 또 다른 태양에 있어서, 본 발명은 양극, 음극, 및 해당 양극과 음극 사이에 1층 이상의 유기 박막층을 갖고, 해당 1층 이상의 유기 박막층이 발광층을 포함하는 유기 전기발광 소자로서, 해당 1층 이상의 유기 박막층의 적어도 1층이 상기 화합물(1)을 함유하는 유기 EL 소자를 제공한다.

[0031] 또 다른 태양에 있어서, 본 발명은 상기 유기 EL 소자를 탑재한 전자 기기를 제공한다.

발명의 효과

[0032] 상기 화합물(1)을 이용하는 것에 의해, 저전압 구동이 가능한 장수명, 고발광효율 유기 EL 소자가 얻어진다.

발명을 실시하기 위한 구체적인 내용

[0033] 본 명세서에 있어서, 「치환 또는 비치환된 탄소수 XX~YY의 ZZ기」라는 표현에 있어서의 「탄소수 XX~YY」는, ZZ기가 비치환인 경우의 탄소수를 나타내는 것이며, 치환되어 있는 경우의 치환기의 탄소수는 포함시키지 않는다. 여기에서, 「YY」는 「XX」보다도 크고, 「XX」와 「YY」는 각각 1 이상의 정수를 의미한다.

[0034] 본 명세서에 있어서, 「치환 또는 비치환된 원자수 XX~YY의 ZZ기」라는 표현에 있어서의 「원자수 XX~YY」는, ZZ기가 비치환인 경우의 원자수를 나타내는 것이며, 치환되어 있는 경우의 치환기의 원자수는 포함시키지 않는다. 여기에서, 「YY」는 「XX」보다도 크고, 「XX」와 「YY」는 각각 1 이상의 정수를 의미한다.

[0035] 본 명세서에 있어서, 「치환 또는 비치환된 ZZ기」라고 하는 경우에 있어서의 「비치환 ZZ기」란, ZZ기의 수소 원자가 치환기로 치환되어 있지 않는 것을 의미한다.

[0036] 본 명세서에 있어서, 「수소 원자」란, 중성자수가 상이한 동위체, 즉 경수소(protium), 중수소(deuterium) 및 삼중수소(tritium)를 포함한다.

[0037] 본 명세서에 있어서, 「환형성 탄소수」란, 원자가 환상으로 결합한 구조의 화합물(예를 들면 단환 화합물, 축합환 화합물, 가교 화합물, 탄소환 화합물, 헤테로환 화합물)의 당해 환 자체를 구성하는 원자 중의 탄소 원자의 수를 나타낸다. 당해 환이 치환기에 의해서 치환되는 경우, 치환기에 포함되는 탄소는 환형성 탄소에는 포함하지 않는다. 이하에서 기재되는 「환형성 탄소수」에 대해서는, 특필하지 않는 한 마찬가지로 한다. 예를 들면, 벤젠환은 환형성 탄소수가 6이고, 나프탈렌환은 환형성 탄소수가 10이고, 피리딘일기는 환형성 탄소수 5이며, 퓨란일기는 환형성 탄소수 4이다. 또한, 벤젠환이나 나프탈렌환에 치환기로서 예를 들면 알킬기가 치환되어 있는 경우, 당해 알킬기의 탄소수는 환형성 탄소수의 수에 포함시키지 않는다. 또한, 플루오렌환에 치환기로서 예를 들면 플루오렌환이 결합하고 있는 경우(스파이로플루오렌환을 포함함), 치환기로서의 플루오렌환의 탄소수는 환형성 탄소수에 포함시키지 않는다.

[0038] 본 명세서에 있어서, 「환형성 원자수」란, 원자가 환상으로 결합한 구조(예를 들면 단환, 축합환, 환집합)의 화합물(예를 들면 단환 화합물, 축합환 화합물, 가교 화합물, 탄소환 화합물, 헤테로환 화합물)의 당해 환 자체를 구성하는 원자의 수를 나타낸다. 환을 구성하지 않는 원자(예를 들면 환을 구성하는 원자의 결합손을 종단하는 수소 원자)나, 당해 환이 치환기에 의해서 치환되는 경우의 치환기에 포함되는 원자는 환형성 원자수에는

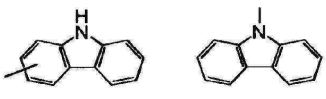
포함하지 않는다. 이하에서 기재되는 「환형성 원자수」에 대해서는, 특필하지 않는 한 마찬가지로 한다. 예를 들면, 피리딘환은 환형성 원자수는 6이고, 퀴나졸린환은 환형성 원자수가 10이며, 퓨란환의 환형성 원자수는 5이다. 피리딘환이나 퀴나졸린환의 환형성 탄소 원자에 각각 결합하고 있는 수소 원자나 치환기를 구성하는 원자는 환형성 원자수의 수에 포함시키지 않는다. 또한, 플루오렌환에 치환기로서 예를 들면 플루오렌환이 결합하고 있는 경우(스파이로플루오렌환을 포함함), 치환기로서의 플루오렌환의 원자수는 환형성 원자수의 수에 포함시키지 않는다.

[0039] 본 명세서에 있어서, 「치환 또는 비치환」이라고 할 때의 임의의 치환기는, 특별히 부정하지 않는 한, 탄소수 1~50(바람직하게는 1~18, 보다 바람직하게는 1~8)의 알킬기; 환형성 탄소수 3~50(바람직하게는 3~10, 보다 바람직하게는 3~8, 더 바람직하게는 5 또는 6)의 사이클로알킬기; 환형성 탄소수 6~50(바람직하게는 6~25, 보다 바람직하게는 6~18)의 아릴기; 환형성 탄소수 6~50(바람직하게는 6~25, 보다 바람직하게는 6~18)의 아릴기를 갖는 탄소수 7~51(바람직하게는 7~30, 보다 바람직하게는 7~20)의 아르알킬기; 아미노기; 탄소수 1~50(바람직하게는 1~18, 보다 바람직하게는 1~8)의 알킬기 및 환형성 탄소수 6~50(바람직하게는 6~25, 보다 바람직하게는 6~18)의 아릴기로부터 선택되는 치환기를 갖는 모노치환 또는 다이치환 아미노기; 탄소수 1~50(바람직하게는 1~18, 보다 바람직하게는 1~8)의 알킬기를 갖는 알콕시기; 환형성 탄소수 6~50(바람직하게는 6~25, 보다 바람직하게는 6~18)의 아릴기를 갖는 아릴옥시기; 탄소수 1~50(바람직하게는 1~18, 보다 바람직하게는 1~8)의 알킬기 및 환형성 탄소수 6~50(바람직하게는 6~25, 보다 바람직하게는 6~18)의 아릴기로부터 선택되는 치환기를 갖는 모노치환, 다이치환 또는 트라이치환 실릴기; 환형성 원자수 5~50(바람직하게는 5~24, 보다 바람직하게는 5~13)이며, 동일 또는 상이한 헤테로원자(질소 원자, 산소 원자, 황 원자)를 1~5개(바람직하게는 1~3개, 보다 바람직하게는 1~2개) 포함하는 헤테로아릴기; 탄소수 1~50(바람직하게는 1~18, 보다 바람직하게는 1~8)이며, 1개 이상(바람직하게는 1~15개, 보다 바람직하게는 1~7개)의 수소 원자 또는 모든 수소 원자가 동일 또는 상이한 할로젠 원자(불소 원자, 염소 원자, 브로민 원자, 아이오딘 원자)로 치환된 할로알킬기; 할로젠 원자(불소 원자, 염소 원자, 브로민 원자, 아이오딘 원자); 사이아노기; 나이트로기; 탄소수 1~50(바람직하게는 1~18, 보다 바람직하게는 1~8)의 알킬기 및 환형성 탄소수 6~50(바람직하게는 6~25, 보다 바람직하게는 6~18)의 아릴기로부터 선택되는 치환기를 갖는 설폰일기; 탄소수 1~50(바람직하게는 1~18, 보다 바람직하게는 1~8)의 알킬기 및 환형성 탄소수 6~50(바람직하게는 6~25, 보다 바람직하게는 6~18)의 아릴기로부터 선택되는 치환기를 갖는 다이치환 포스포릴기; 알킬설폰일옥시기; 아릴설폰일옥시기; 알킬카보닐옥시기; 아릴카보닐옥시기; 붕소 함유기; 아연 함유기; 주석 함유기; 규소 함유기; 마그네슘 함유기; 리튬 함유기; 하이드록시기; 알킬 치환 또는 아릴 치환 카보닐기; 카복실기; 바이닐기; (메트)아크릴로일기; 에폭시기; 및 옥세탄일기로 이루어지는 군으로부터 선택되는 적어도 1개가 바람직하다.

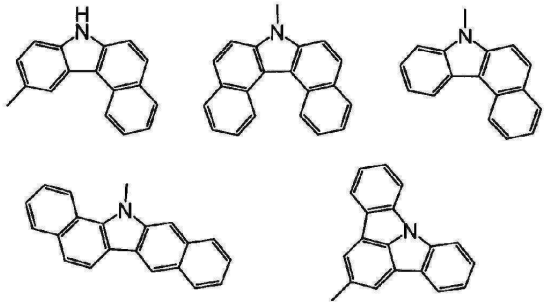
[0040] 상기 치환기 중에서도, 보다 바람직하게는, 치환 또는 비치환된 탄소수 1~50(바람직하게는 1~18, 보다 바람직하게는 1~8)의 알킬기; 치환 또는 비치환된 환형성 탄소수 3~50(바람직하게는 3~10, 보다 바람직하게는 3~8, 더 바람직하게는 5 또는 6)의 사이클로알킬기; 치환 또는 비치환된 환형성 탄소수 6~50(바람직하게는 6~25, 보다 바람직하게는 6~18)의 아릴기; 치환 또는 비치환된 탄소수 1~50(바람직하게는 1~18, 보다 바람직하게는 1~8)의 알킬기 및 치환 또는 비치환된 환형성 탄소수 6~50(바람직하게는 6~25, 보다 바람직하게는 6~18)의 아릴기로부터 선택되는 치환기를 갖는 모노치환 또는 다이치환 아미노기; 치환 또는 비치환된 환형성 원자수 5~50(바람직하게는 5~24, 보다 바람직하게는 5~13)의 헤테로아릴기; 할로젠 원자; 및 사이아노기이다

[0041] 상기 임의의 치환기는 전술한 임의의 치환기에 의해 더 치환되어 있어도 된다. 또한, 임의의 치환기끼리가 결합하여 환을 형성하고 있어도 된다.

[0042] 본 명세서에 있어서, 「치환 또는 비치환된 카바졸릴기」는, 하기의 카바졸릴기,

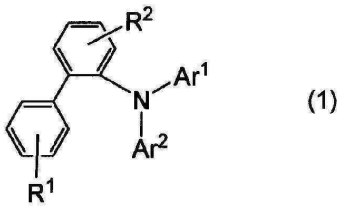
[0043] 

[0044] 및 상기한 임의의 치환기를 갖는 치환 카바졸릴기에 더하여, 예를 들면, 하기의 치환 카바졸릴기도 포함한다.



[0045]

[0046] 상기 화합물(1)은 하기 식(1)로 표시된다.



(1)

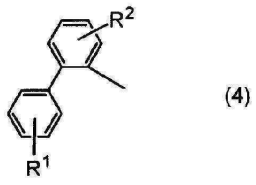
[0047]

[0048] 식(1)에 있어서, R^1과 R^2의 한쪽은 치환 또는 비치환된 환형성 탄소수 6~50, 바람직하게는 6~24, 보다 바람직하게는 6~12의 아릴기를 나타내고, 다른 쪽은 수소 원자, 치환 또는 비치환된 탄소수 1~20, 바람직하게는 1~5, 보다 바람직하게는 1~4의 알킬기, 치환 또는 비치환된 환형성 원자수 3~50, 바람직하게는 3~24, 보다 바람직하게는 3~12의 헤테로아릴기, 할로겐 원자, 치환 또는 비치환된 탄소수 1~20, 바람직하게는 1~5, 보다 바람직하게는 1~4의 플루오로알킬기, 치환 또는 비치환된 탄소수 1~20, 바람직하게는 1~5, 보다 바람직하게는 1~4의 알콕시기, 치환 또는 비치환된 탄소수 1~20, 바람직하게는 1~5, 보다 바람직하게는 1~4의 플루오로알콕시기, 치환 또는 비치환된 환형성 탄소수 6~50, 바람직하게는 6~24, 보다 바람직하게는 6~12의 아릴옥시기, 또는 사이아노기를 나타낸다. 또는, R^1과 R^2의 양쪽이 각각 독립적으로 치환 또는 비치환된 환형성 탄소수 6~50의 아릴기를 나타낸다.

[0049] 상기 R^1과 R^2의 다른 쪽은, 바람직하게는 수소 원자, 치환 또는 비치환된 탄소수 1~20의 알킬기, 치환 또는 비치환된 환형성 원자수 3~50의 헤테로아릴기, 할로겐 원자로부터 선택되며, 보다 바람직하게는 수소 원자, 또는 치환 또는 비치환된 탄소수 1~20의 알킬기이고, 더 바람직하게는 수소 원자이다.

[0050] 본 발명의 일 태양에 있어서, R^1은 치환 또는 비치환된 환형성 탄소수 6~50의 아릴기이고, R^2는 수소 원자, 치환 또는 비치환된 탄소수 1~20의 알킬기, 치환 또는 비치환된 환형성 원자수 3~50의 헤테로아릴기, 할로겐 원자로부터 선택되며, 바람직하게는 수소 원자, 또는 치환 또는 비치환된 탄소수 1~20의 알킬기이고, 보다 바람직하게는 수소 원자이다.

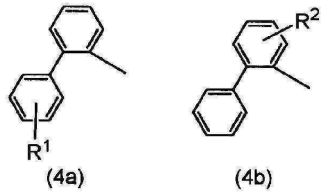
[0051] 본 발명의 일 태양에 있어서, 화학식(1)의 하기 식(4)



(4)

[0052]

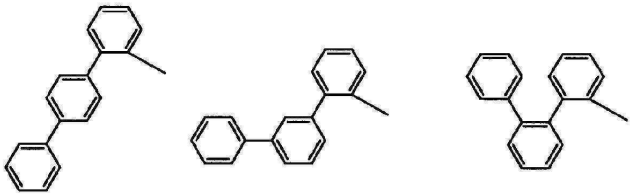
[0053] 로 표시되는 기는, 바람직하게는 하기 식(4a) 또는 (4b)

[0054] 

[0055] (식 중, R^1 및 R^2는 치환 또는 비치환된 환형성 탄소수 6~50의 아릴기를 나타낸다.)

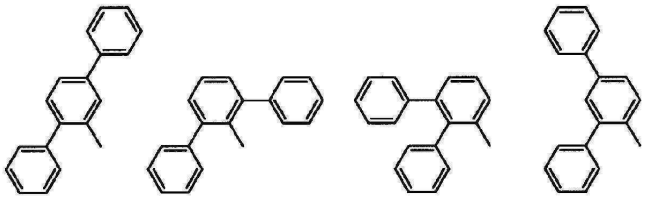
[0056] 로 표시되고, 보다 바람직하게는 식(4a)로 표시된다.

[0057] 식(4a)는, 바람직하게는

[0058] 

[0059] 로 표시된다.

[0060] 식(4b)는, 바람직하게는

[0061] 

[0062] 로 표시된다.

[0063] 상기 탄소수 1~20의 알킬기로서는, 예를 들면, 메틸기, 에틸기, n-프로필기, 아이소프로필기, n-뷰틸기, 아이소뷰틸기, s-뷰틸기, t-뷰틸기, 펜틸기(이성체기를 포함함), 헥실기(이성체기를 포함함), 헵틸기(이성체기를 포함함), 옥틸기(이성체기를 포함함), 노닐기(이성체기를 포함함), 데실기(이성체기를 포함함), 운데실기(이성체기를 포함함), 및 도데실기(이성체기를 포함함) 등을 들 수 있고, 메틸기, 에틸기, n-프로필기, 아이소프로필기, n-뷰틸기, 아이소뷰틸기, s-뷰틸기, t-뷰틸기, 및 펜틸기(이성체기를 포함함)가 바람직하며, 메틸기, 에틸기, n-프로필기, 아이소프로필기, n-뷰틸기, 아이소뷰틸기, s-뷰틸기, 및 t-뷰틸기가 보다 바람직하고, 메틸기 및 t-뷰틸기가 더 바람직하다.

[0064] 상기 치환 또는 비치환된 환형성 탄소수 6~50의 아릴기로서는, 예를 들면, 페닐기, 나프틸페닐기, 바이페닐릴기, 터페닐릴기, 바이페닐렌일기, 나프틸기, 페닐나프틸기, 아세나프틸렌일기, 안트릴기, 벤즈안트릴기, 아세안트릴기, 페난트릴기, 벤조페난트릴기, 페날렌일기, 플루오렌일기, 9,9-다이메틸플루오렌일기, 7-페닐-9,9-다이메틸플루오렌일기, 펜타센일기, 피센일기, 펜타페닐기, 피렌일기, 크라이센일기, 벤조크라이센일기, s-인다센일기, as-인다센일기, 플루오란텐일기, 및 페릴렌일기 등을 들 수 있고, 페닐기, 나프틸페닐기, 바이페닐릴기, 터페닐릴기, 나프틸기, 9,9-다이메틸플루오렌일기가 바람직하며, 페닐기, 바이페닐릴기, 나프틸기, 9,9-다이메틸플루오렌일기가 보다 바람직하고, 페닐기가 더 바람직하다.

[0065] 상기 환형성 원자수 3~50의 헤테로아릴기는, 적어도 1개, 바람직하게는 1~3개의 동일 또는 상이한 헤테로원자(예를 들면, 질소 원자, 황 원자 및 산소 원자)를 포함한다. 해당 헤테로아릴기로서는, 예를 들면, 피롤릴기, 퓨릴기, 싸이엔일기, 피리딜기, 피리다진일기, 피리미딘일기, 피라진일기, 트라이아진일기, 이미다졸릴기, 옥사졸릴기, 싸이아졸릴기, 피라졸릴기, 아이소옥사졸릴기, 아이소싸이아졸릴기, 옥사다이아졸릴기, 싸이아다이아졸릴기, 트라이아졸릴기, 인돌릴기, 아이소인돌릴기, 벤조퓨란일기, 아이소벤조퓨란일기, 벤조싸이오펜일기, 인돌리진일기, 퀴놀리진일기, 퀴놀릴기, 아이소퀴놀릴기, 신놀릴기, 프탈라진일기, 퀴나졸린일기, 퀴녹살린일기, 벤

즈이미다졸릴기, 벤즈옥사졸릴기, 벤조싸이아졸릴기, 인다졸릴기, 벤즈아이속사졸릴기, 벤즈아이소싸이아졸릴기, 다이벤조퓨란일기, 다이벤조싸이오펜일기, 페난트리딘일기, 아크리딘일기, 페난트롤린일기, 페나진일기, 페노싸이아진일기, 페녹사진일기, 및 잔텐일기 등을 들 수 있고, 퓨릴기, 싸이엔일기, 피리딜기, 피리다진일기, 피리미딘일기, 피라진일기, 트라이아진일기, 벤조퓨란일기, 벤조싸이오펜일기, 다이벤조퓨란일기, 다이벤조싸이오펜일기가 바람직하며, 벤조퓨란일기, 벤조싸이오펜일기, 다이벤조퓨란일기, 다이벤조싸이오펜일기가 보다 바람직하다.

[0066] 상기 할로젠 원자는 불소 원자, 염소 원자, 브로민 원자 및 아이오딘 원자이며, 불소 원자가 바람직하다.

[0067] 상기 탄소수 1~20의 플루오로알킬기로서는, 예를 들면, 상기의 탄소수 1~20의 알킬기의 적어도 1개의 수소 원자, 바람직하게는 1~7개의 수소 원자 또는 모든 수소 원자를 불소 원자로 치환하여 얻어지는 기를 들 수 있고, 헵타플루오로프로필기, 펜타플루오로에틸기, 2,2,2-트라이플루오로에틸기, 트라이플루오로메틸기가 바람직하며, 펜타플루오로에틸기, 2,2,2-트라이플루오로에틸기, 트라이플루오로메틸기가 보다 바람직하고, 트라이플루오로메틸기가 더 바람직하다.

[0068] 상기 탄소수 1~20의 알콕시기는 $-OR^{10}$으로 표시되고, R^{10}은 상기의 탄소수 1~20의 알킬기를 나타낸다. 해당 알콕시기로서는, t-뷰톡시기, 프로폭시기, 에톡시기, 메톡시기가 바람직하고, 에톡시기, 메톡시기가 보다 바람직하고, 메톡시기가 더 바람직하다.

[0069] 상기 탄소수 1~20의 플루오로알콕시기는 $-OR^{11}$로 표시되고, R^{11}은 상기의 탄소수 1~20의 플루오로알킬기를 나타낸다. 해당 플루오로알콕시기로서는, 헵타플루오로프로폭시기, 펜타플루오로에톡시기, 2,2,2-트라이플루오로에톡시기, 트라이플루오로메톡시기가 바람직하고, 펜타플루오로에톡시기, 2,2,2-트라이플루오로에톡시기, 트라이플루오로메톡시기가 보다 바람직하고, 트라이플루오로메톡시기가 더 바람직하다.

[0070] 상기 환형성 탄소수 6~50의 아릴옥시기는 $-OR^{12}$로 표시되고, R^{12}는 상기의 환형성 탄소수 6~50의 아릴기를 나타내며, 터페닐기, 바이페닐기, 페닐기가 바람직하고, 바이페닐기, 페닐기가 보다 바람직하고, 페닐기가 더 바람직하다.

[0071] R^1과 R^2의 한쪽 또는 양쪽이 치환 또는 비치환된 환형성 탄소수 6~50의 아릴기를 나타내는 경우, 해당 아릴기와 R^1 또는 R^2가 결합하는 벤젠환은 서로 가교되어도 된다. 가교기로서는, -O-, -S-, $-NR^a-$, $-CR^bR^c-$를 들 수 있다.

[0072] R^a, R^b 및 R^c는 수소 원자, 치환 또는 비치환된 탄소수 1~20의 알킬기, 치환 또는 비치환된 환형성 탄소수 6~50의 아릴기, 치환 또는 비치환된 환형성 원자수 3~50의 헤테로아릴기, 할로젠 원자, 치환 또는 비치환된 탄소수 1~20의 플루오로알킬기, 치환 또는 비치환된 탄소수 1~20의 알콕시기, 치환 또는 비치환된 탄소수 1~20의 플루오로알콕시기, 치환 또는 비치환된 환형성 탄소수 6~50의 아릴옥시기, 또는 사이아노기를 나타낸다. R^b 및 R^c는 동일해도 상이해도 되고, 서로 결합하여 환을 형성해도 된다.

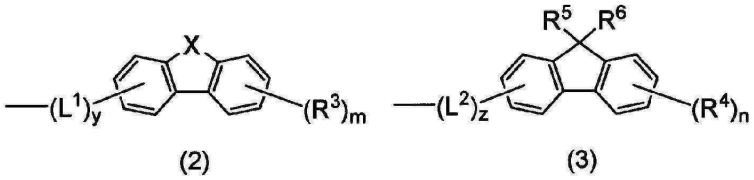
[0073] R^a는 바람직하게는 수소 원자, 치환 또는 비치환된 탄소수 1~20의 알킬기, 또는 치환 또는 비치환된 환형성 탄소수 6~50의 아릴기이다. R^b 및 R^c는 바람직하게는 치환 또는 비치환된 탄소수 1~20의 알킬기, 또는 치환 또는 비치환된 환형성 탄소수 6~50의 아릴기이고, 보다 바람직하게는 치환 또는 비치환된 탄소수 1~20의 알킬기이다.

[0074] 상기 탄소수 1~20의 알킬기, 상기 환형성 탄소수 6~50의 아릴기, 상기 환형성 원자수 3~50의 헤테로아릴기, 상기 할로젠 원자, 상기 탄소수 1~20의 플루오로알킬기, 상기 탄소수 1~20의 알콕시기, 상기 탄소수 1~20의 플루오로알콕시기, 및 상기 환형성 탄소수 6~50의 아릴옥시기, 그의 바람직한 예, 보다 바람직한 예, 및 더 바람직한 예는, R^1 및 R^2에 관해서 기재한 대응하는 기, 그의 바람직한 예, 보다 바람직한 예, 및 더 바람직한 예와 마찬가지이다.

[0075] 해당 아릴기와 R^1 또는 R^2가 결합하는 벤젠환이 서로 가교되어 형성하는 구조로서는, 예를 들면, 다이벤조퓨란 구조, 다이벤조싸이오펜 구조, 카바졸 구조, N-아릴카바졸 구조, N-알킬카바졸 구조, 플루오렌 구조, 9,9-다이알킬플루오렌 구조, 9,9-다이아릴플루오렌 구조를 들 수 있다. 카바졸 구조 및 플루오렌 구조의 「아릴」 및

「알킬」은 상기한 탄소수 1~20의 알킬기 및 환형성 탄소수 6~50의 아릴기로부터 선택된다.

[0076] 식(1)에 있어서, Ar^1은 하기 식(2) 또는 (3), 바람직하게는 하기 식(2)로 표시되는 기를 나타낸다. Ar^2는 하기 식(2), 하기 식(3), 및 치환 또는 비치환된 환형성 탄소수 6~50, 바람직하게는 6~24, 보다 바람직하게는 6~12의 아릴기로부터 선택되는 기를 나타내고, 바람직하게는 치환 또는 비치환된 환형성 탄소수 6~50이다.



(2) (3)

[0077]

[0078] 식(2)에 있어서, X는 산소 원자 또는 황 원자, 바람직하게는 산소 원자를 나타낸다.

[0079] L^1은 치환 또는 비치환된 환형성 탄소수 6~50, 바람직하게는 6~24, 보다 바람직하게는 6~12의 아릴렌기를 나타낸다.

[0080] 상기 환형성 탄소수 6~50의 아릴렌기는, R^1 및 R^2에 관해서 기재한 환형성 탄소수 6~50의 아릴기로부터 1개의 수소 원자를 제거하는 것에 의해 얻어지는 2가의 기이며, 터페닐다이일기(이성체기를 포함함), 바이페닐다이일기(이성체기를 포함함), 페닐렌기(이성체기를 포함함)가 바람직하고, 바이페닐다이일기(이성체기를 포함함), 페닐렌기(이성체기를 포함함)가 보다 바람직하고, o-페닐렌기, m-페닐렌기 및 p-페닐렌기가 더 바람직하다.

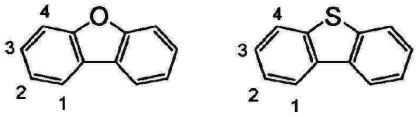
[0081] y는 0 또는 1, 바람직하게는 1을 나타낸다. y가 0일 때, $(L^1)_0$은 단일결합을 나타낸다.

[0082] R^3은 치환 또는 비치환된 탄소수 1~20, 바람직하게는 1~5, 보다 바람직하게는 1~4의 알킬기, 치환 또는 비치환된 환형성 탄소수 6~50, 바람직하게는 6~24, 보다 바람직하게는 6~12의 아릴기, 치환 또는 비치환된 환형성 원자수 3~50, 바람직하게는 3~24, 보다 바람직하게는 3~12의 헤테로아릴기, 할로젠 원자, 치환 또는 비치환된 탄소수 1~20, 바람직하게는 1~5, 보다 바람직하게는 1~4의 플루오로알킬기, 치환 또는 비치환된 탄소수 1~20, 바람직하게는 1~5, 보다 바람직하게는 1~4의 알콕시기, 치환 또는 비치환된 탄소수 1~20, 바람직하게는 1~5, 보다 바람직하게는 1~4의 플루오로알콕시기, 치환 또는 비치환된 환형성 탄소수 6~50, 바람직하게는 6~24, 보다 바람직하게는 6~12의 아릴옥시기, 및 사이아노기로부터 선택되고, 바람직하게는 상기 치환 또는 비치환된 알킬기, 상기 치환 또는 비치환된 아릴기, 상기 치환 또는 비치환된 헤테로아릴기로부터 선택되며, 보다 바람직하게는 상기 치환 또는 비치환된 알킬기 및 상기 치환 또는 비치환된 아릴기로부터 선택되고, 더 바람직하게는 상기 치환 또는 비치환된 아릴기이다.

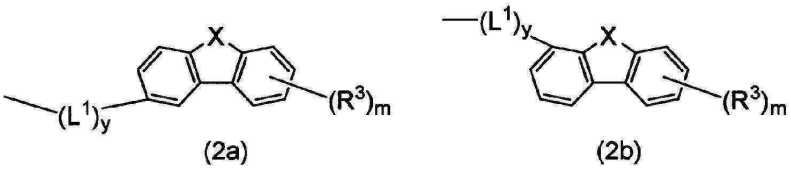
[0083] 상기 탄소수 1~20의 알킬기, 상기 환형성 탄소수 6~50의 아릴기, 상기 환형성 원자수 3~50의 헤테로아릴기, 상기 할로젠 원자, 상기 탄소수 1~20의 플루오로알킬기, 상기 탄소수 1~20의 알콕시기, 상기 탄소수 1~20의 플루오로알콕시기, 및 상기 환형성 탄소수 6~50의 아릴옥시기, 그의 바람직한 예, 보다 바람직한 예, 및 더 바람직한 예는, R^1 및 R^2에 관해서 기재한 대응하는 기, 그의 바람직한 예, 보다 바람직한 예, 및 더 바람직한 예와 마찬가지이다.

[0084] m은 0~4의 정수, 바람직하게는 0~2의 정수, 보다 바람직하게는 0 또는 1, 더 바람직하게는 0을 나타낸다. m이 2~4의 정수를 나타낼 때, 2~4개의 R^3은 동일해도 상이해도 되고, 2개의 R^3은 서로 결합하여 환을 형성해도 된다. m이 0일 때, $(R^3)_0$은 수소 원자를 나타낸다.

[0085] 식(2)에 있어서, L^1은 다이벤조퓨란 구조 및 다이벤조싸이오펜 구조의 1, 2, 3 또는 4위, 바람직하게는 2 또는 4위에 결합한다.

[0086] 

[0087] 본 발명의 일 태양에 있어서, 식(2)는 식(2a) 또는 (2b)로 표시된다.

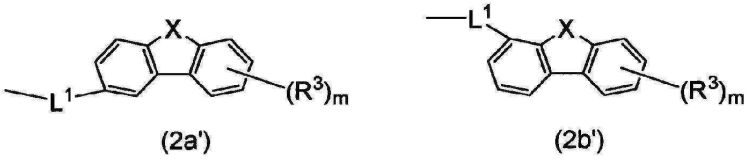


(2a) (2b)

[0088]

[0089] (식 중, L^1, y, X, R^3, 및 m은 상기와 동일.)

[0090] 본 발명의 일 태양에 있어서, 식(2)는 식(2a') 또는 (2b')로 표시된다.



(2a') (2b')

[0091]

[0092] (식 중, L^1, X, R^3, 및 m은 상기와 동일.)

[0093] 식(2a')는 바람직하게는 하기 식(2a"), 식(2b')는 바람직하게는 하기 식(2b")로 표시된다.

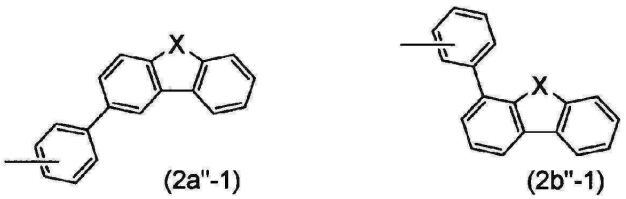


(2a") (2b")

[0094]

[0095] (식 중, L^1 및 X는 상기와 동일.)

[0096] 본 발명의 다른 태양에 있어서, 식(2)는 하기 식(2a"-1) 또는 (2b"-1)로 표시된다.

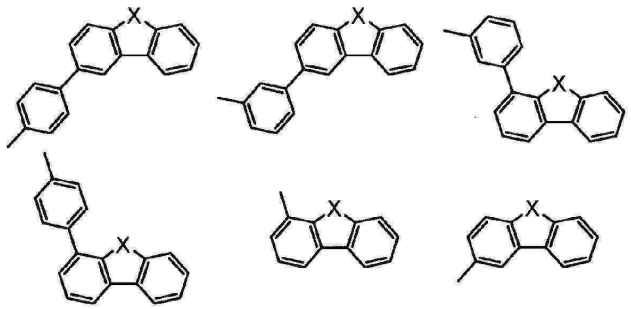


(2a"-1) (2b"-1)

[0097]

[0098] (식 중, X는 상기와 동일.)

[0099] 본 발명의 또 다른 태양에 있어서, 식(2)는 하기 식으로 표시된다.



[0100]

[0101] (식 중, X는 상기와 동일.)

[0102] 식(3)에 있어서, R^5 및 R^6은 각각 독립적으로 수소 원자, 치환 또는 비치환된 탄소수 1~20, 바람직하게는 1~5, 보다 바람직하게는 1~4의 알킬기, 치환 또는 비치환된 환형성 탄소수 10~50, 바람직하게는 10~24, 보다 바람직하게는 10~12의 아릴기, 치환 또는 비치환된 환형성 원자수 3~50, 바람직하게는 3~24, 보다 바람직하게는

3~12의 헤테로아릴기, 할로젠 원자, 치환 또는 비치환된 탄소수 1~20, 바람직하게는 1~5, 보다 바람직하게는 1~4의 플루오로알킬기, 치환 또는 비치환된 탄소수 1~20, 바람직하게는 1~5, 보다 바람직하게는 1~4의 알콕시기, 치환 또는 비치환된 탄소수 1~20, 바람직하게는 1~5, 보다 바람직하게는 1~4의 플루오로알콕시기, 치환 또는 비치환된 환형성 탄소수 6~50, 바람직하게는 6~24, 보다 바람직하게는 6~12의 아릴옥시기, 또는 사이아노기를 나타내고, 바람직하게는 상기 치환 또는 비치환된 알킬기 및 상기 치환 또는 비치환된 아릴기로부터 선택되며, 보다 바람직하게는 상기 치환 또는 비치환된 알킬기이다.

[0103] 상기 탄소수 1~20의 알킬기, 상기 환형성 원자수 3~50의 헤테로아릴기, 상기 할로젠 원자, 상기 탄소수 1~20의 플루오로알킬기, 상기 탄소수 1~20의 알콕시기, 상기 탄소수 1~20의 플루오로알콕시기, 및 상기 환형성 탄소수 6~50의 아릴옥시기, 그의 바람직한 예, 보다 바람직한 예, 및 더 바람직한 예는, R^1 및 R^2에 관해서 기재한 대응하는 기, 그의 바람직한 예, 보다 바람직한 예, 및 더 바람직한 예와 마찬가지이다.

[0104] 상기 치환 또는 비치환된 환형성 탄소수 10~50의 아릴기로서는, 예를 들면, 나프틸페닐기, 바이페닐릴기, 터페닐릴기, 바이페닐렌일기, 나프틸기, 페닐나프틸기, 아세나프틸렌일기, 안트릴기, 벤즈안트릴기, 아세안트릴기, 페난트릴기, 벤조페난트릴기, 페날렌일기, 플루오렌일기, 9,9-다이메틸플루오렌일기, 7-페닐-9,9-다이메틸플루오렌일기, 펜타센일기, 피센일기, 펜타페닐기, 피렌일기, 크라이센일기, 벤조크라이센일기, s-인다센일기, as-인다센일기, 플루오란텐일기, 및 페릴렌일기 등을 들 수 있고, 나프틸페닐기, 바이페닐릴기, 터페닐릴기, 나프틸기, 9,9-다이메틸플루오렌일기가 바람직하며, 바이페닐릴기, 나프틸기, 9,9-다이메틸플루오렌일기가 보다 바람직하고, 바이페닐릴기 및 나프틸기가 더 바람직하다.

[0105] 식(3)에 있어서, L^2는 치환 또는 비치환된 환형성 탄소수 6~50, 바람직하게는 6~24, 보다 바람직하게는 6~12의 아릴렌기를 나타낸다.

[0106] 상기 환형성 탄소수 6~50의 아릴렌기는, R^1 및 R^2에 관해서 기재한 환형성 탄소수 6~50의 아릴기로부터 1개의 수소 원자를 제거하는 것에 의해 얻어지는 2가의 기이며, 터페닐다이일기(이성체기를 포함함), 바이페닐다이일기(이성체기를 포함함), 페닐렌기(이성체기를 포함함)가 바람직하고, 바이페닐다이일기(이성체기를 포함함), 페닐렌기(이성체기를 포함함)가 보다 바람직하고, o-페닐렌기, m-페닐렌기 및 p-페닐렌기가 더 바람직하다.

[0107] z는 0 또는 1, 바람직하게는 0을 나타내며, z가 0일 때, $(L^2)_0$은 단일결합을 나타낸다.

[0108] R^4는 치환 또는 비치환된 탄소수 1~20, 바람직하게는 1~5, 보다 바람직하게는 1~4의 알킬기, 치환 또는 비치환된 환형성 탄소수 6~50, 바람직하게는 6~24, 보다 바람직하게는 6~12의 아릴기, 할로젠 원자, 치환 또는 비치환된 탄소수 1~20, 바람직하게는 1~5, 보다 바람직하게는 1~4의 플루오로알킬기, 치환 또는 비치환된 탄소수 1~20, 바람직하게는 1~5, 보다 바람직하게는 1~4의 알콕시기, 치환 또는 비치환된 탄소수 1~20, 바람직하게는 1~5, 보다 바람직하게는 1~4의 플루오로알콕시기, 치환 또는 비치환된 환형성 탄소수 6~50, 바람직하게는 6~24, 보다 바람직하게는 6~12의 아릴옥시기, 및 사이아노기로부터 선택되고, 바람직하게는 상기 치환 또는 비치환된 알킬기 및 상기 치환 또는 비치환된 아릴기로부터 선택되며, 보다 바람직하게는 상기 치환 또는 비치환된 아릴기이다.

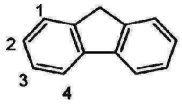
[0109] 상기 탄소수 1~20의 알킬기, 상기 환형성 탄소수 6~50의 아릴기, 상기 할로젠 원자, 상기 탄소수 1~20의 플루오로알킬기, 상기 탄소수 1~20의 알콕시기, 상기 탄소수 1~20의 플루오로알콕시기, 및 상기 환형성 탄소수 6~50의 아릴옥시기, 그의 바람직한 예, 보다 바람직한 예, 및 더 바람직한 예는, R^1 및 R^2에 관해서 기재한 대응하는 기, 그의 바람직한 예, 보다 바람직한 예, 및 더 바람직한 예와 마찬가지이다.

[0110] n은 0~4의 정수, 바람직하게는 0~2의 정수, 보다 바람직하게는 0 또는 1, 더 바람직하게는 0을 나타낸다. m이 2~4의 정수를 나타낼 때, 2~4개의 R^4는 동일해도 상이해도 되고, 2개의 R^4는 서로 결합하여 환을 형성해도 된다. n이 0일 때, $(R^4)_0$은 수소 원자를 나타낸다.

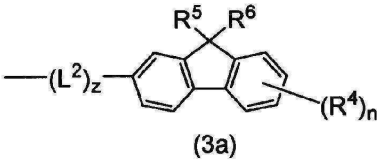
[0111] 본 발명의 일 태양에 있어서는, R^1과 R^2의 한쪽이 상기 치환 또는 비치환된 환형성 탄소수 6~50의 아릴기이고, 다른 쪽이 수소 원자이며, 또한 n이 0인 것이 바람직하다. 본 발명의 다른 태양에 있어서는, R^1과 R^2의 한쪽이 상기 치환 또는 비치환된 환형성 탄소수 6~50의 아릴기이고, 다른 쪽이 상기 치환 또는 비치환된 탄소수 1~20의 알킬기, 상기 치환 또는 비치환된 환형성 원자수 3~50의 헤테로아릴기, 상기 할로젠 원자, 상기 치환 또는

비치환된 탄소수 1~20의 플루오로알킬기, 상기 치환 또는 비치환된 탄소수 1~20의 알콕시기, 상기 치환 또는 비치환된 탄소수 1~20의 플루오로알콕시기, 상기 치환 또는 비치환된 환형성 탄소수 6~50의 아릴옥시기, 또는 사이아노기이며, 또한 n이 0~4의 정수인 것이 바람직하다.

[0112] 식(3)에 있어서, L^2는 플루오렌 구조의 1, 2, 3 또는 4위, 바람직하게는 2위에 결합한다.

[0113] 

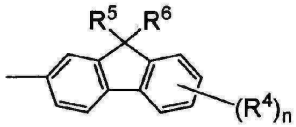
[0114] 본 발명의 일 태양에 있어서, 식(3)은 식(3a)로 표시된다.

[0115] 

(3a)

[0116] (식 중, L^2, z, R^4, R^5, R^6, 및 n은 상기와 동일.)

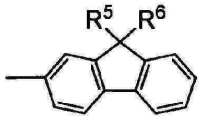
[0117] 본 발명의 다른 태양에 있어서, 식(3)은 하기 식(3a')로 표시된다.

[0118] 

(3a')

[0119] (식 중, R^4, R^5, R^6, 및 n은 상기와 동일.)

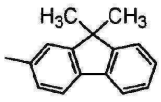
[0120] 식(3a')는 바람직하게는 하기 식(3a")로 표시된다.

[0121] 

(3a")

[0122] (식 중, R^5 및 R^6은 상기와 동일.)

[0123] 본 발명의 다른 태양에 있어서, 식(3)은 바람직하게는 하기 식으로 표시된다.

[0124] 

[0125] Ar^2가 나타내는 치환 또는 비치환된 환형성 탄소수 6~50의 아릴기에 있어서, 해당 아릴기는, 예를 들면, 페닐기, 바이페닐릴기, 터페닐릴기, 바이페닐렌일기, 나프틸기, 아세나프틸렌일기, 안트릴기, 벤즈안트릴기, 아세안트릴기, 페난트릴기, 트라이페닐렌일기, 벤조페난트릴기, 페날렌일기, 플루오렌일기, 펜타센일기, 피센일기, 펜타페닐기, 피렌일기, 크라이센일기, 벤조크라이센일기, s-인다센일기, as-인다센일기, 플루오란텐일기, 및 페릴렌일기 등을 들 수 있다.

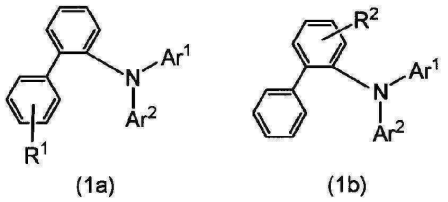
[0126] 치환 아릴기로서는, 상기 임의의 치환기를 갖는 아릴기에 더하여, 나프틸페닐기, 페닐나프틸기, 9,9-다이메틸플루오렌일기, 9,9-다이페닐플루오렌일기, 9,9-비스(p-메틸페닐)플루오렌일기, 7-페닐-9,9-다이페닐플루오렌일기, p-(9,9-다이페닐플루오렌일)페닐기, 7-페닐-9,9-다이메틸플루오렌일기, 9,9'-스파이로바이플루오렌일기, 스파이로[9H-플루오렌일-9,1'-사이클로펜테인]기, 스파이로[9H-플루오렌일-9,1'-사이클로헥세인]기 등을 들 수 있다.

[0127] 해당 치환 또는 비치환된 아릴기로서는, 페닐기, 바이페닐릴기, 터페닐릴기, 나프틸기, 나프틸페닐기, 9,9-다이

메틸플루오렌-2-일기, 9,9-다이페닐플루오렌-2-일기, 9,9-비스(p-메틸페닐)플루오렌-2-일기, 7-페닐-9,9-다이페닐플루오렌-2-일기, p-(9,9-다이페닐플루오렌-2-일)페닐기, 9,9'-스파이로바이플루오렌-2-일기가 바람직하고, 페닐기, 바이페닐릴기, 터페닐릴기, 나프틸기, 나프틸페닐기, 9,9-다이메틸플루오렌-2-일기, 9,9-다이페닐플루오렌-2-일기, 9,9-비스(p-메틸페닐)플루오렌-2-일기, 7-페닐-9,9-다이페닐플루오렌-2-일기, p-(9,9-다이페닐플루오렌-2-일)페닐기가 보다 바람직하고, 페닐기, 바이페닐릴기, 나프틸기, 9,9-다이메틸플루오렌-2-일기, 9,9-다이페닐플루오렌-2-일기가 더 바람직하다.

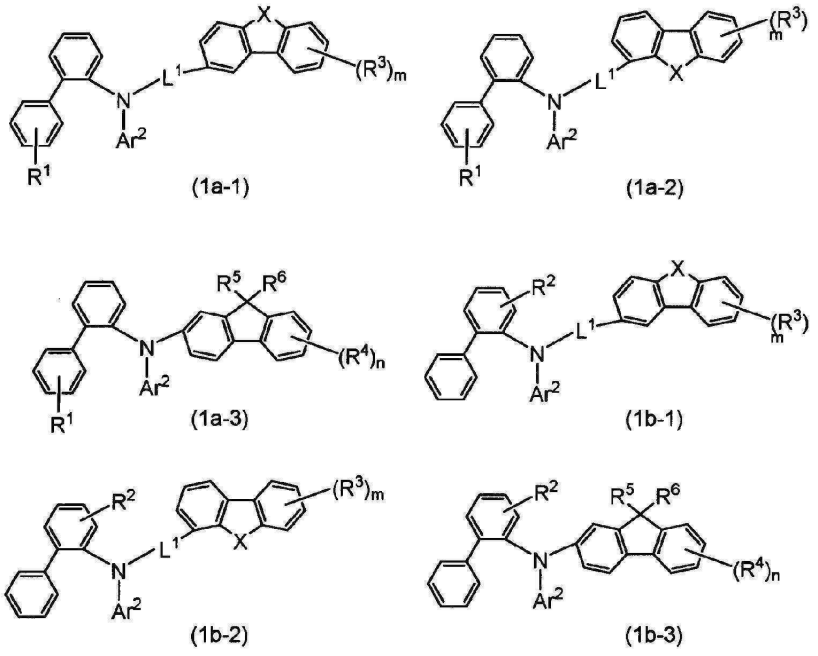
[0128] 본 발명의 일 태양에 있어서, 해당 치환 또는 비치환된 아릴기로서는, 터페닐릴기, 페닐 치환 터페닐릴기, 나프틸기, 나프틸페닐기, 9,9-다이메틸플루오렌-2-일기, 9,9-다이페닐플루오렌-2-일기, 9,9-비스(p-메틸페닐)플루오렌-2-일기, 7-페닐-9,9-다이페닐플루오렌-2-일기, p-(9,9-다이페닐플루오렌-2-일)페닐기, 9,9'-스파이로바이플루오렌-2-일기가 바람직하고, 터페닐릴기, 페닐 치환 터페닐릴기, 나프틸기, 나프틸페닐기, 9,9-다이메틸플루오렌-2-일기, 9,9-다이페닐플루오렌-2-일기, 9,9-비스(p-메틸페닐)플루오렌-2-일기, 7-페닐-9,9-다이페닐플루오렌-2-일기, p-(9,9-다이페닐플루오렌-2-일)페닐기가 보다 바람직하고, 터페닐릴기, 페닐 치환 터페닐릴기, 나프틸기, 9,9-다이메틸플루오렌-2-일기, 9,9-다이페닐플루오렌-2-일기가 더 바람직하다. 특히, Ar^1이 식(3)으로 표시되고, 또한 R^5와 R^6이 각각 비치환된 탄소수 1~20의 알킬기인 경우는, Ar^2가 나타내는 해당 치환 또는 비치환된 아릴기는 상기 아릴기로부터 선택되는 것이 바람직하다.

[0129] 상기 화합물(1)은 바람직하게는 하기 식(1a) 또는 (1b)로 표시된다.

[0130] 

[0131] (식 중, R^1 및 R^2는 치환 또는 비치환된 환형성 탄소수 6~50의 아릴기를 나타내고, Ar^1 및 Ar^2는 식(1)에 있어서 정의한 대로이다.)

[0132] 상기 화합물(1)은 바람직하게는 하기 식(1a-1)~(1a-3) 및 (1b-1)~(1b-3) 중 어느 것으로 표시된다.

[0133] 

[0134] 식(1a-1)~(1a-3) 및 (1b-1)~(1b-3)에 있어서, R^1 및 R^2는 치환 또는 비치환된 환형성 탄소수 6~50의 아릴기를 나타낸다.

[0135] R^5 및 R^6은 식(1)에 있어서 정의한 대로이며, 바람직하게는 치환 또는 비치환된 탄소수 1~20의 알킬기를 나타낸

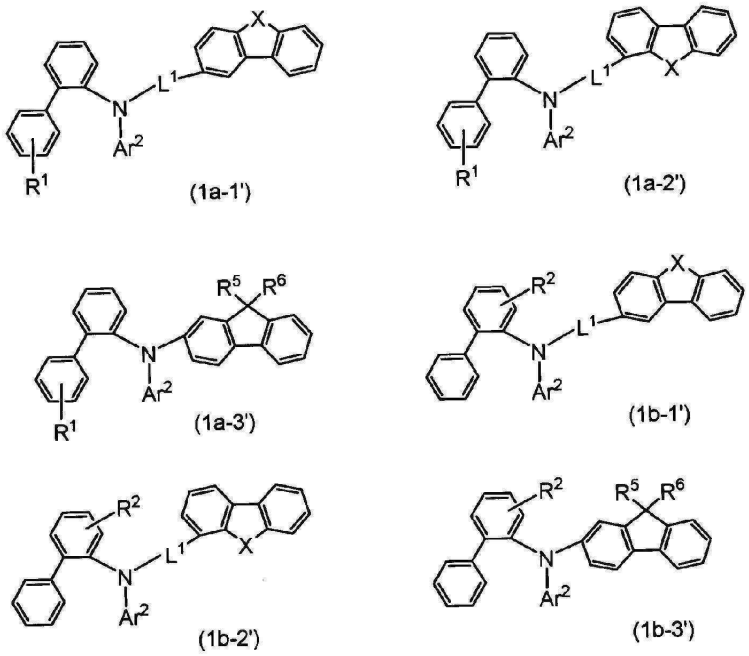
다.

[0136] Ar^2는 식(1)에 있어서 정의한 대로이며, 바람직하게는 치환 또는 비치환된 환형성 탄소수 6~50의 아릴기이다.

[0137] L^1, X, R^3, R^4, m, 및 n은 식(1)에 있어서 정의한 대로이다.

[0138] 상기 화합물(1)은 보다 바람직하게는 하기 식(1a-1')~(1a-3') 및 (1b-1')~(1b-3') 중 어느 것으로 표시된다.

[0139]



[0140] 식(1a-1')~(1a-3') 및 (1b-1')~(1b-3')에 있어서, R^1 및 R^2는 치환 또는 비치환된 환형성 탄소수 6~50의 아릴기를 나타낸다.

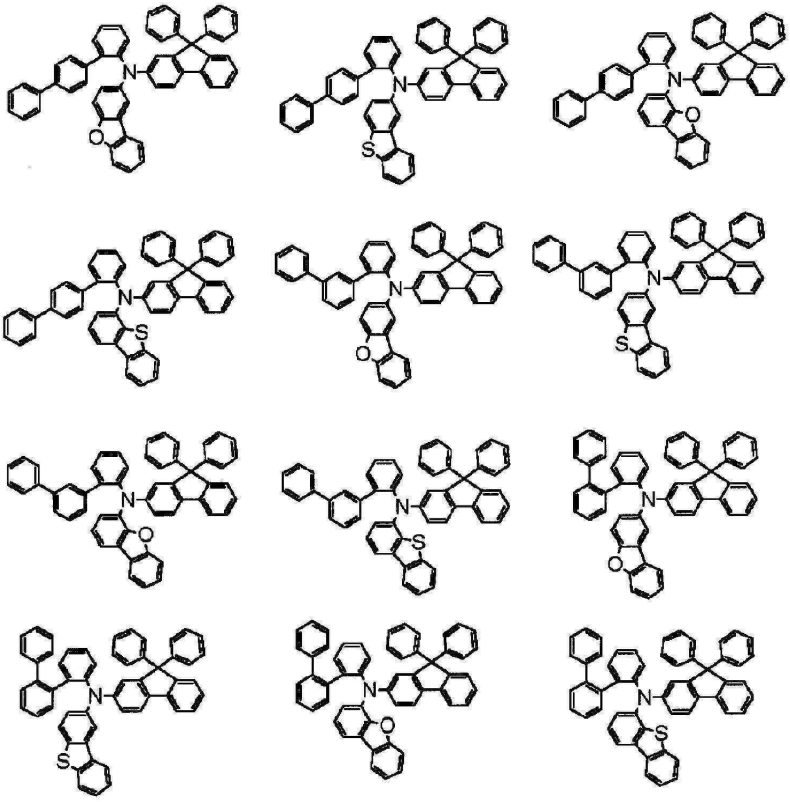
[0141] R^5 및 R^6은 식(1)에 있어서 정의한 대로이며, 바람직하게는 치환 또는 비치환된 탄소수 1~20의 알킬기를 나타낸다.

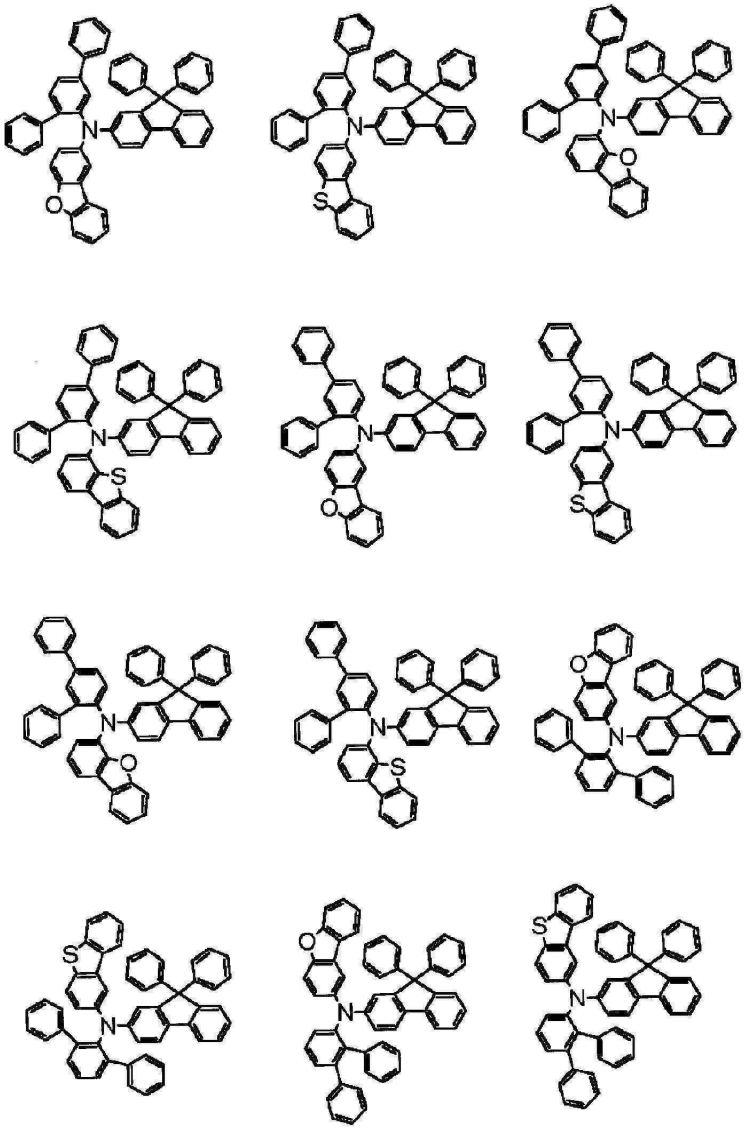
[0142] Ar^2는 식(1)에 있어서 정의한 대로이며, 바람직하게는 치환 또는 비치환된 환형성 탄소수 6~50의 아릴기이다.

[0143] L^1 및 X는 식(1)에 있어서 정의한 대로이다.

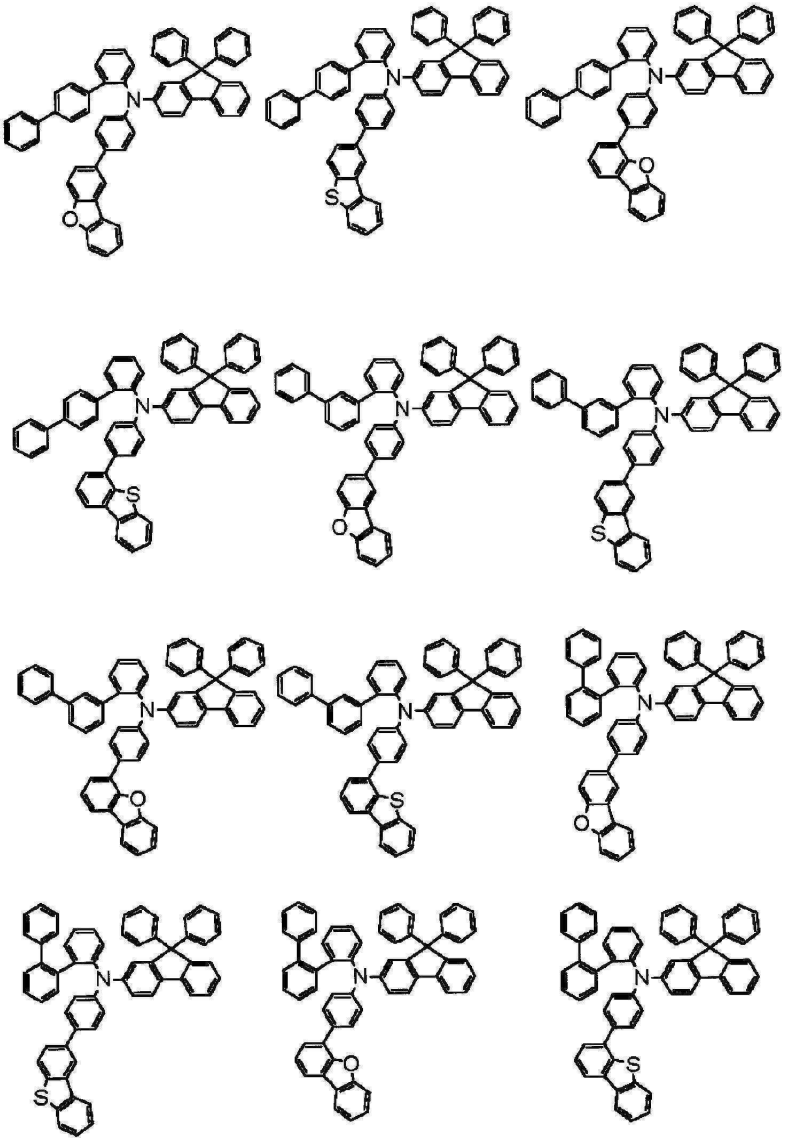
[0144] 이하에 식(1)로 표시되는 화합물의 구체예를 나타내지만, 하기 화합물로 한정되는 것은 아니다.

[0145]

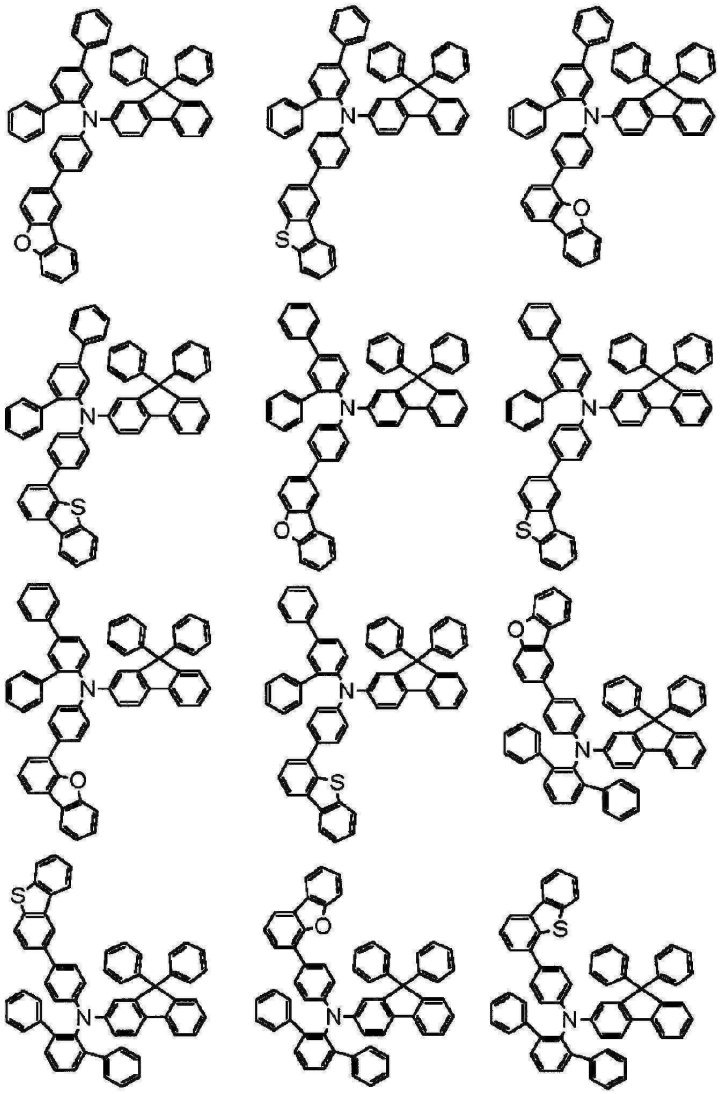




[0146]

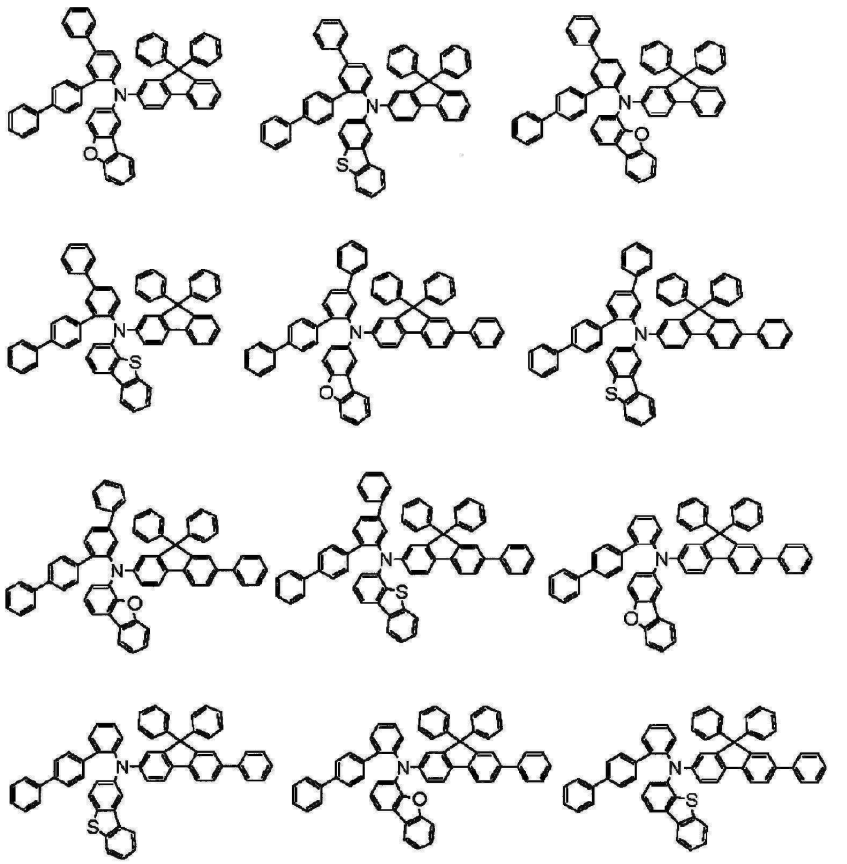


[0147]

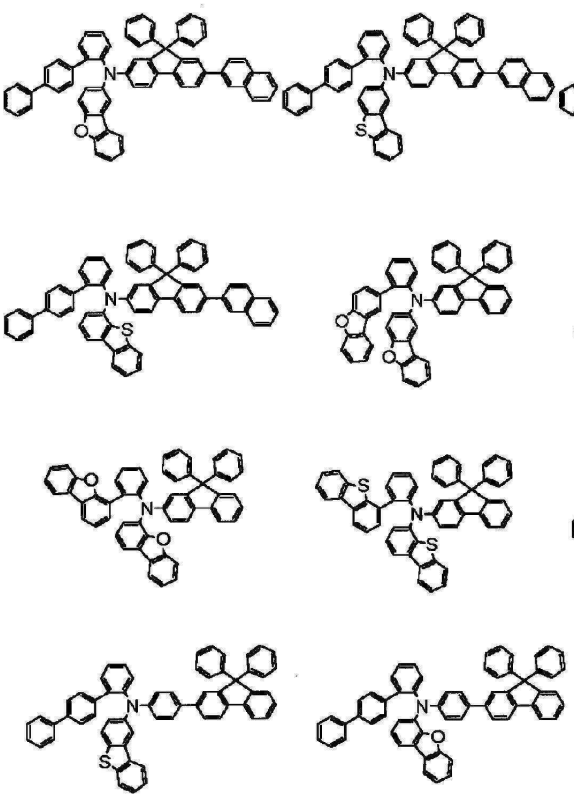


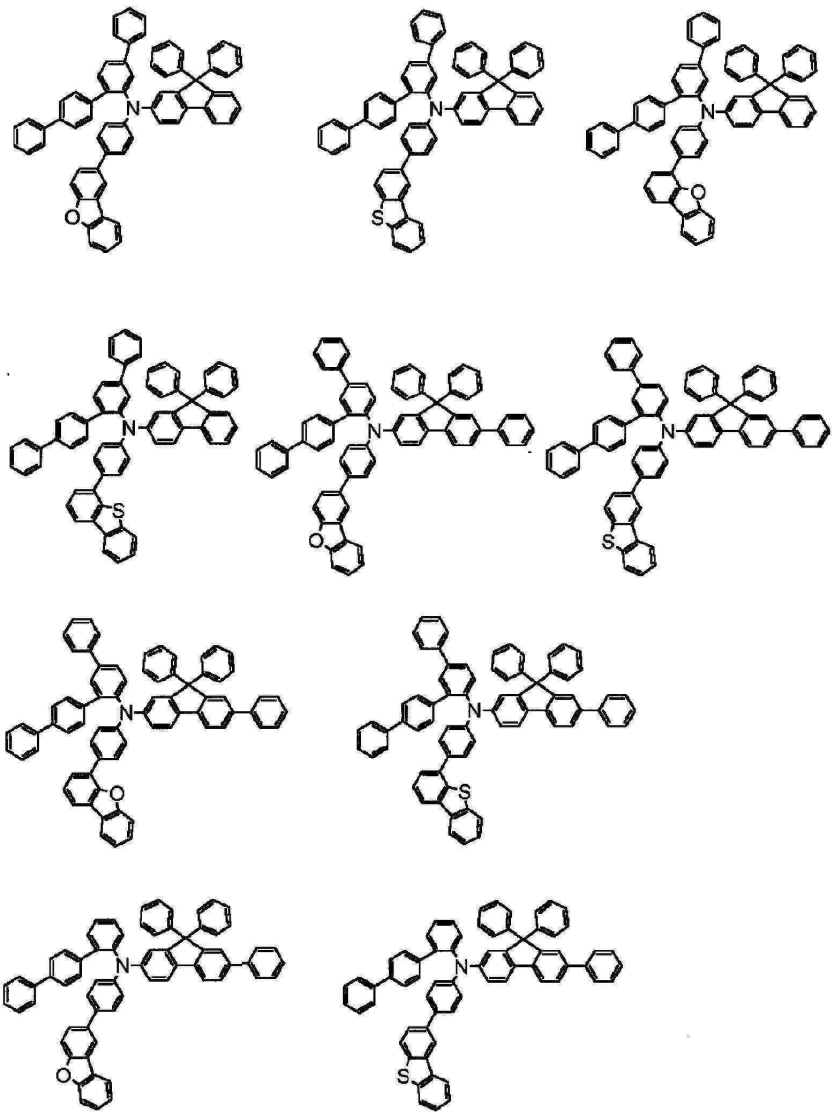
[0148]

[0149]

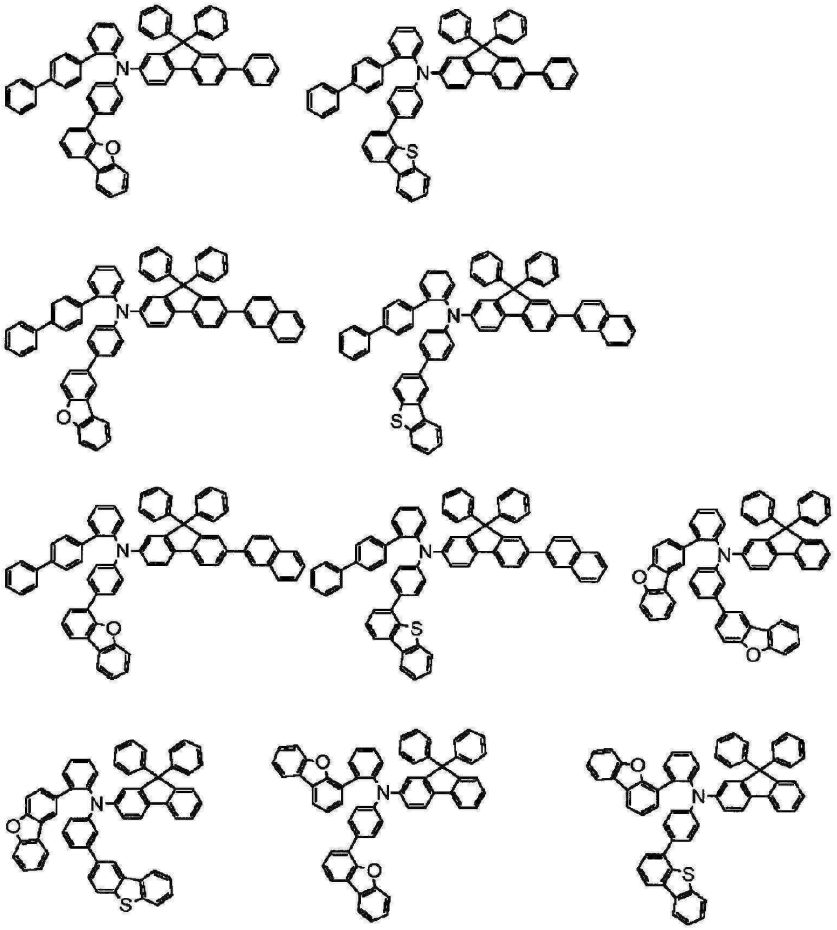


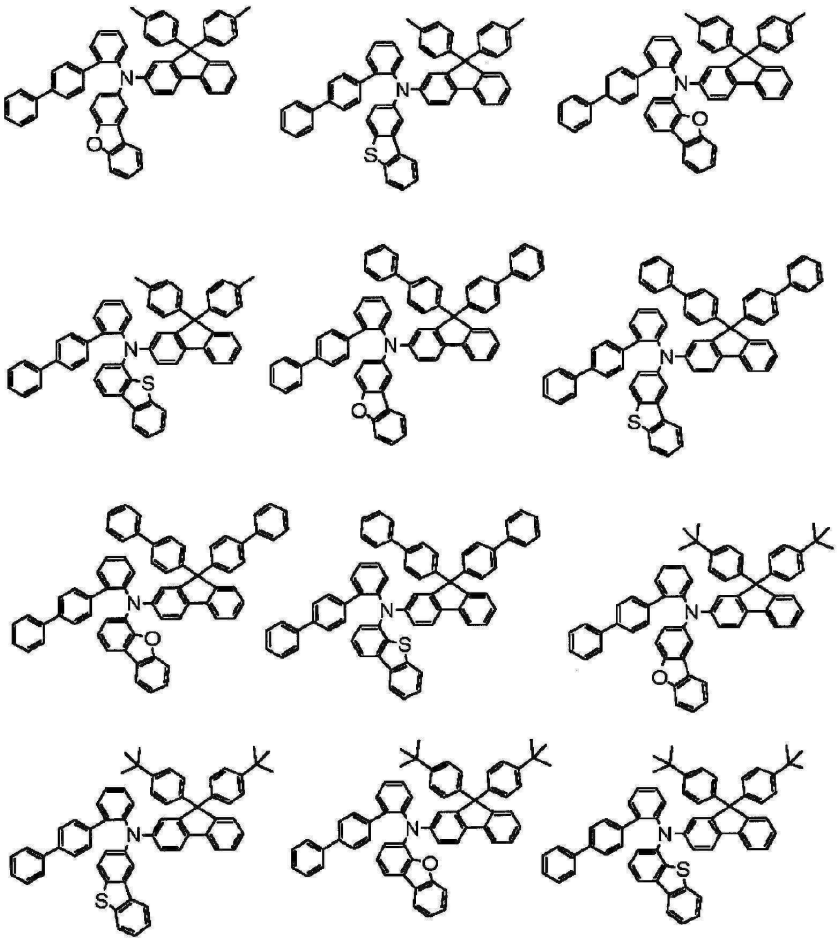
[0150]

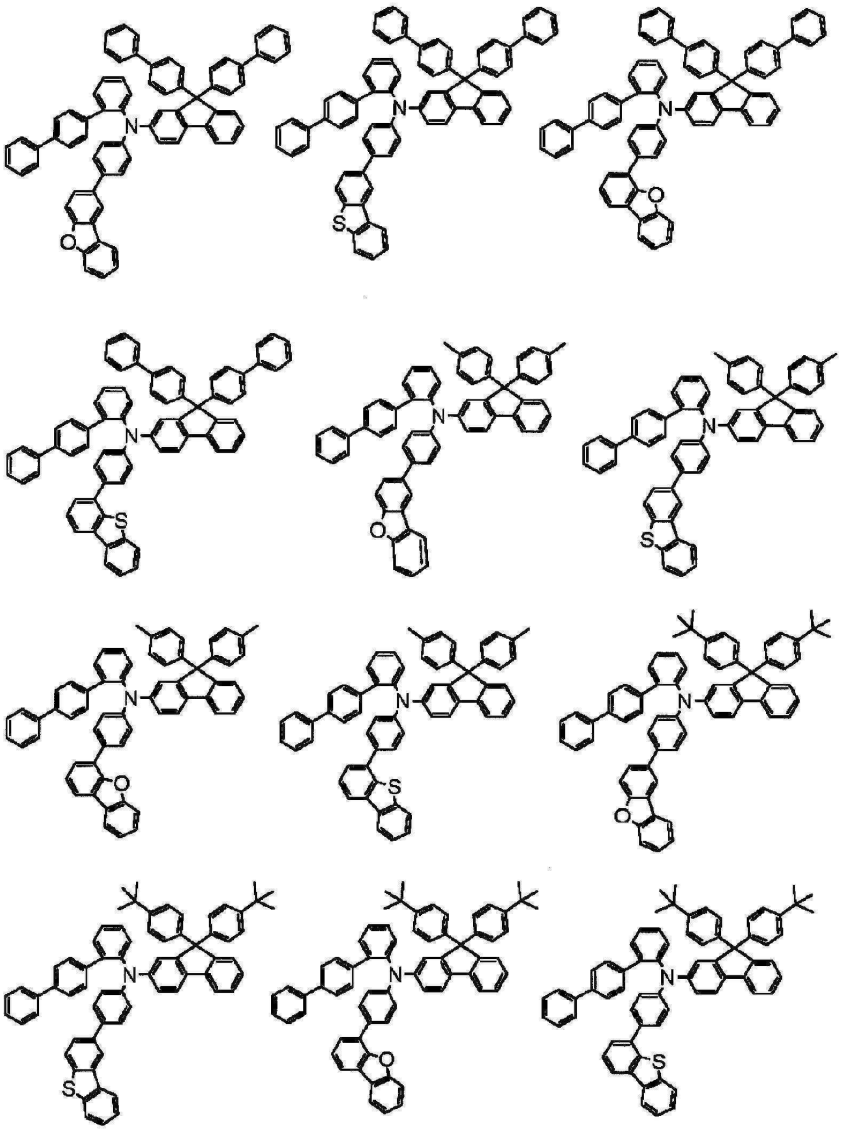


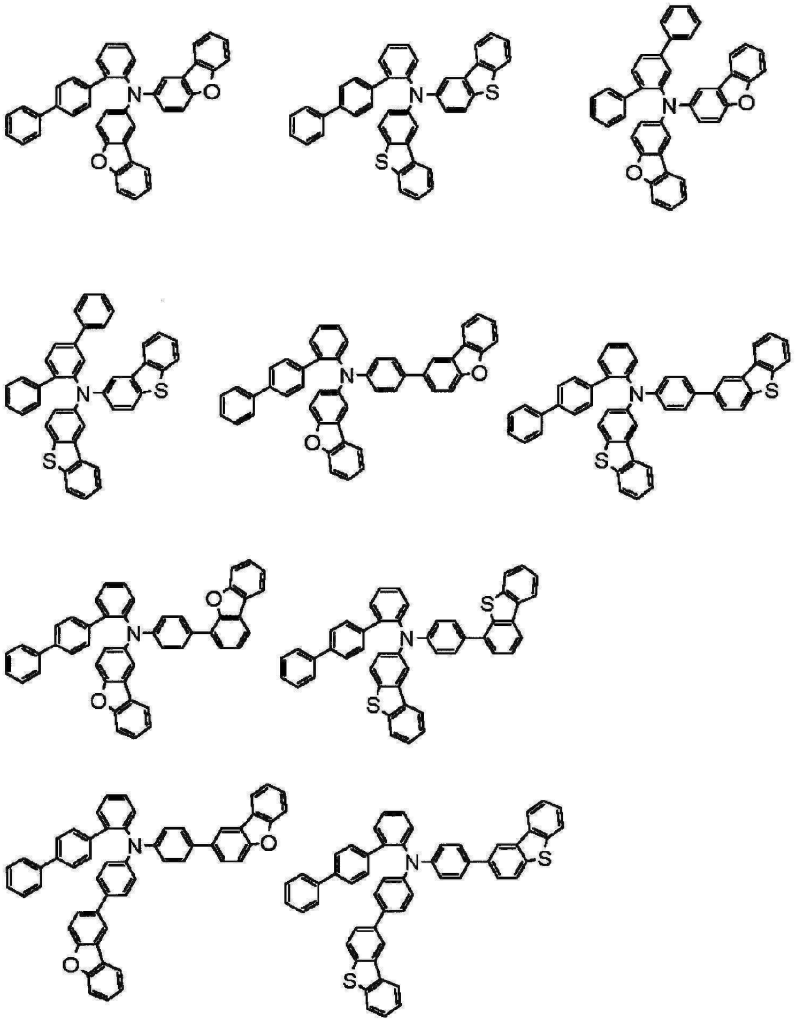


[0151]

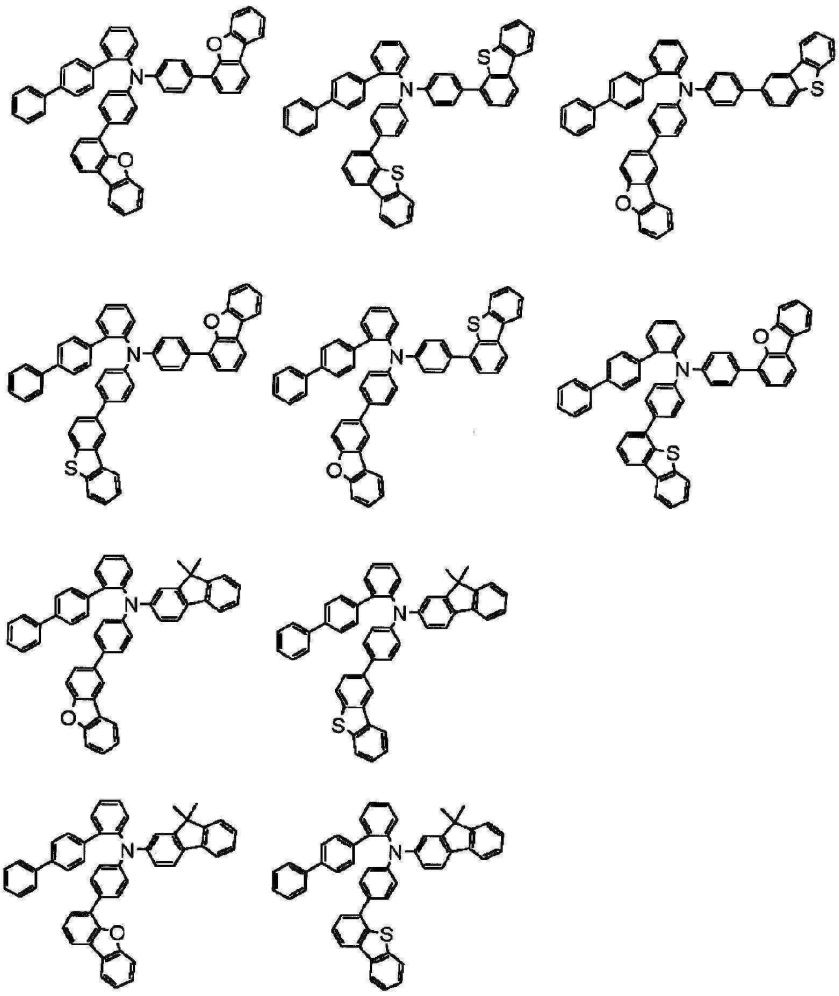
[0152] 

[0153] 

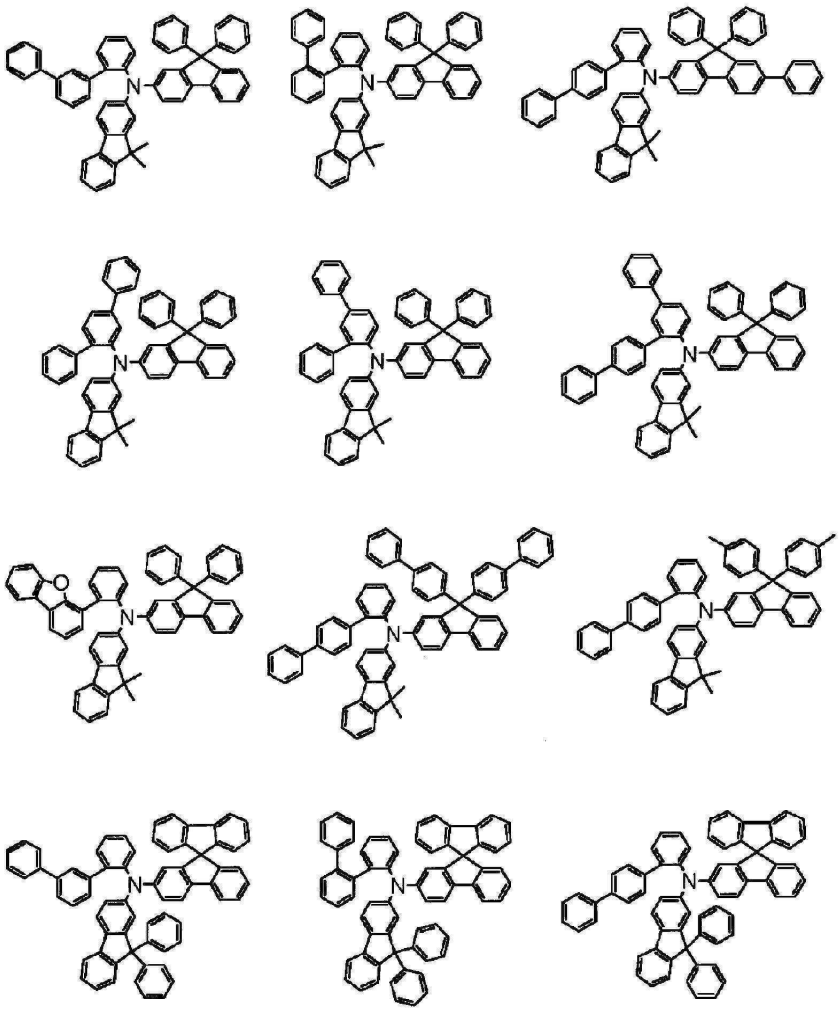
[0154] 



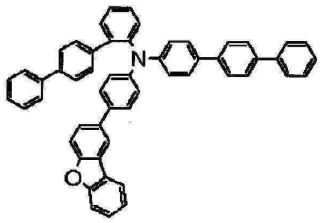
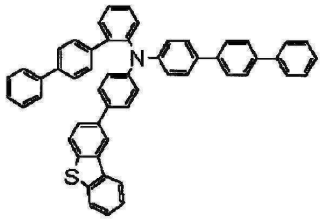
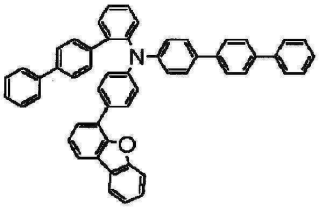
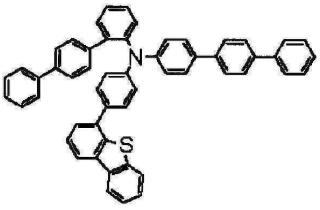
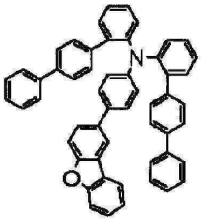
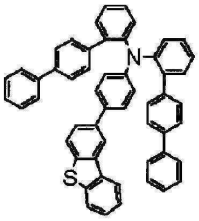
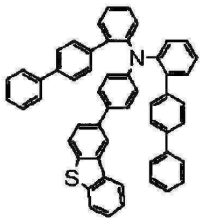
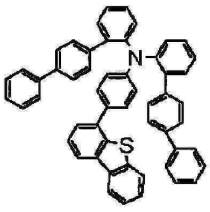
[0155]



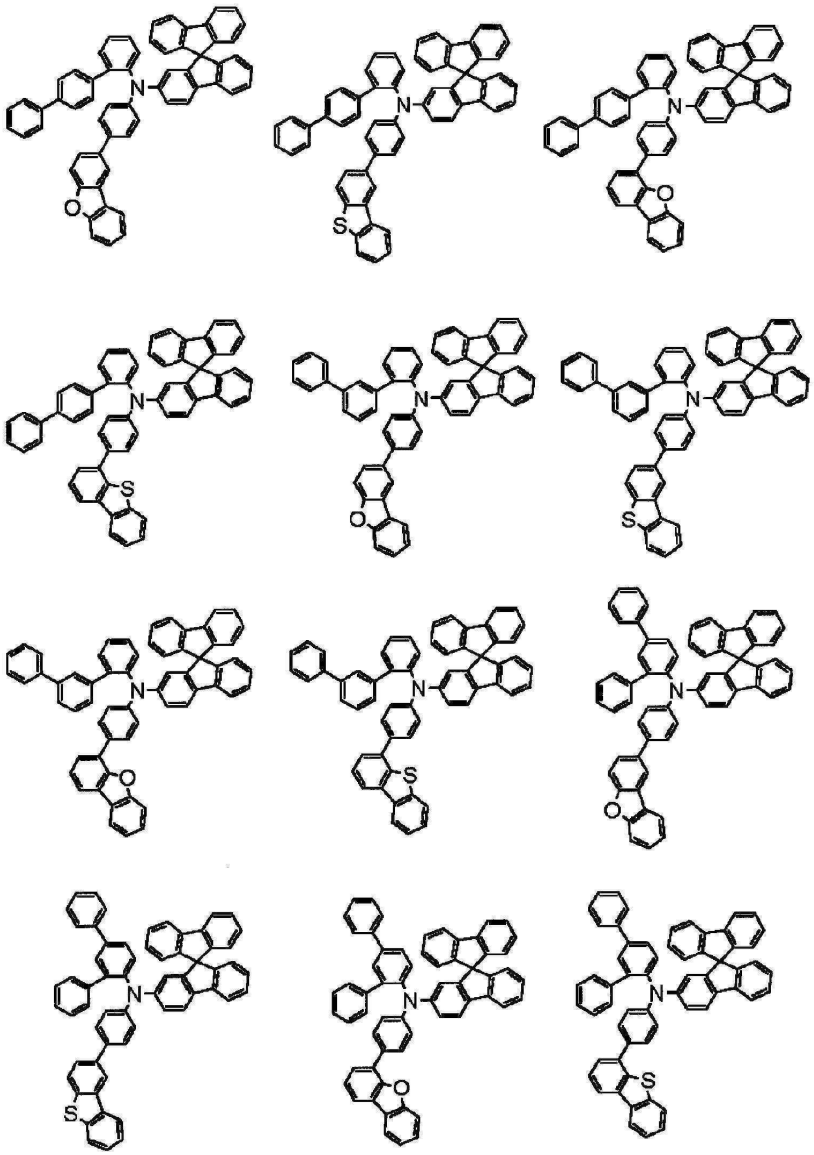
[0156]



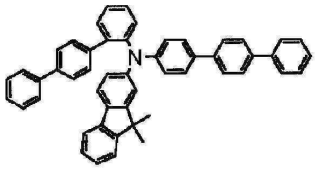
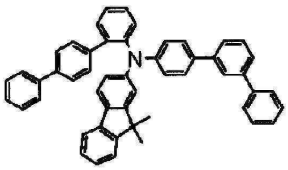
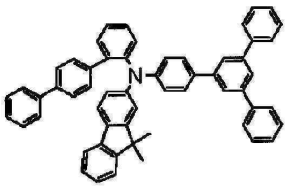
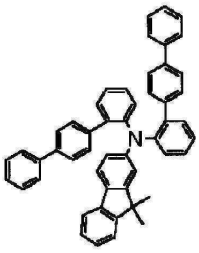
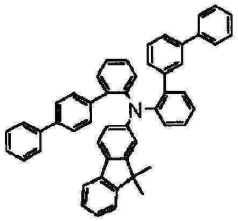
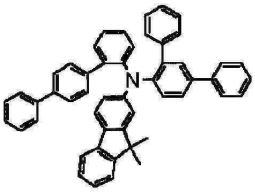
[0157]

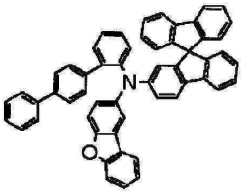
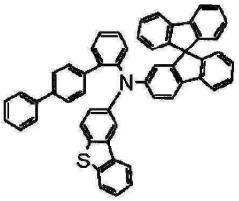
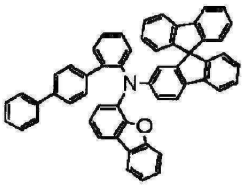
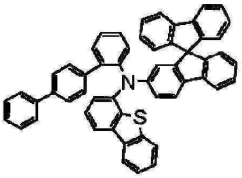
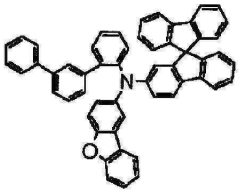
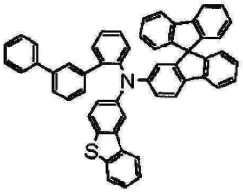
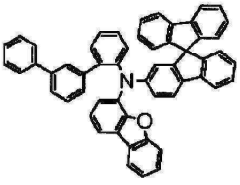
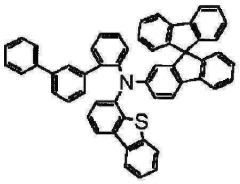
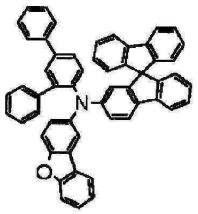
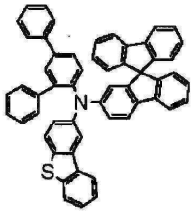
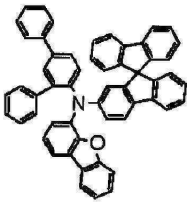
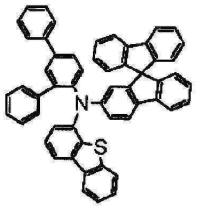
[0158]



[0159]

[0160]

[0161]

[0162] 상기 화합물(1)은 높은 정공 이동도를 나타낸다.

[0163] 상기 화합물(1)은 유기 EL 소자용 재료, 정공 수송 재료, 양극과 발광층 사이에 설치된 유기 박막층, 예를 들면, 정공 주입층 및 정공 수송층의 재료로서 유용하다. 해당 화합물(1)의 제조 방법은 특별히 제한되지 않고, 당업자라면 본 명세서의 실시예를 참조하면서 공지의 합성 반응을 이용 및 변경하여 용이하게 제조할 수 있다.

[0164] 이하, 유기 EL 소자 구성에 대해 설명한다.

[0165] 유기 EL 소자의 대표적인 소자 구성으로서는, 이하의 (1)~(13)을 들 수 있지만, 특별히 이들로 한정되는 것은 아니다. 한편, (8)의 소자 구성이 바람직하게 이용된다.

[0166] (1) 양극/발광층/음극

[0167] (2) 양극/정공 주입층/발광층/음극

[0168] (3) 양극/발광층/전자 주입층/음극

[0169] (4) 양극/정공 주입층/발광층/전자 주입층/음극

[0170] (5) 양극/유기 반도체층/발광층/음극

[0171] (6) 양극/유기 반도체층/전자 장벽층/발광층/음극

[0172] (7) 양극/유기 반도체층/발광층/부착 개선층/음극

[0173] (8) 양극/정공 주입층/정공 수송층/발광층/(전자 수송층/)전자 주입층/음극

[0174] (9) 양극/절연층/발광층/절연층/음극

[0175] (10) 양극/무기 반도체층/절연층/발광층/절연층/음극

[0176] (11) 양극/유기 반도체층/절연층/발광층/절연층/음극

[0177] (12) 양극/절연층/정공 주입층/정공 수송층/발광층/절연층/음극

[0178] (13) 양극/절연층/정공 주입층/정공 수송층/발광층/(전자 수송층/)전자 주입층/음극

[0179] 상기 화합물(1)은 유기 EL 소자의 어느 유기 박막층에 이용해도 되지만, 보다 저전압에서의 구동의 관점에서, 정공 주입층 또는 정공 수송층에 이용하는 것이 바람직하고, 정공 수송층에 이용하는 것이 보다 바람직하다.

[0180] 상기 화합물(1)의 유기 박막층, 바람직하게는 정공 주입층 또는 정공 수송층 중의 함유량은, 그 유기 박막층의 성분의 전체 몰량에 대하여, 바람직하게는 30~100몰%, 보다 바람직하게는 50~100몰%, 더 바람직하게는 80~100몰%이며, 특히 바람직하게는 실질적으로 100몰%이다.

[0181] 이하, 상기 화합물(1)을 정공 수송층에 사용한 유기 EL 소자를 예로 하여 각 층에 대해 설명한다.

[0182] 기판

[0183] 기판은 유기 EL 소자의 지지체로서 이용된다. 기판으로서는, 예를 들면, 유리, 석영, 플라스틱 등의 판을 이용할 수 있다. 또한, 가요성 기판을 이용해도 된다. 가요성 기판이란, 절곡(折曲)할 수 있는(플렉시블) 기판이며, 예를 들면, 폴리카보네이트, 폴리아릴레이트, 폴리에터설폰, 폴리프로필렌, 폴리에스터, 폴리불화바이닐, 폴리염화바이닐로 이루어지는 플라스틱 기판 등을 들 수 있다. 또한, 무기 증착 필름을 이용할 수도 있다.

[0184] 양극

[0185] 기판 상에 형성되는 양극에는, 일함수가 큰(구체적으로는 4.0eV 이상) 금속, 합금, 전기전도성 화합물, 및 이들의 혼합물 등을 이용하는 것이 바람직하다. 구체적으로는, 예를 들면, 산화인듐-산화주석(ITO: Indium Tin Oxide), 규소 또는 산화규소를 함유한 산화인듐-산화주석, 산화인듐-산화아연, 산화텅스텐, 및 산화아연을 함유한 산화인듐, 그라펜 등을 들 수 있다. 이 밖에, 금(Au), 백금(Pt), 니켈(Ni), 텅스텐(W), 크로뮴(Cr), 몰리브데넘(Mo), 철(Fe), 코발트(Co), 구리(Cu), 팔라듐(Pd), 타이타늄(Ti), 또는 상기 금속의 질화물(예를 들면, 질화타이타늄) 등을 들 수 있다.

[0186] 이들 재료는, 통상, 스퍼터링법에 의해 성막된다. 예를 들면, 산화인듐-산화아연은 산화인듐에 대하여 1~10wt%의 산화아연을 가한 타겟을, 산화텅스텐 및 산화아연을 함유한 산화인듐은 산화인듐에 대하여 산화텅스텐

을 0.5~5wt%, 산화아연을 0.1~1wt% 함유한 타겟을 이용하는 것에 의해, 스퍼터링법으로 형성할 수 있다. 그 밖에, 진공 증착법, 도포법, 잉크젯법, 스핀 코팅법 등에 의해 제작해도 된다.

[0187] 양극에 접하여 형성되는 정공 주입층은, 양극의 일함수에 관계없이 정공 주입이 용이한 재료를 이용하여 형성되기 때문에, 전극 재료로서 일반적으로 사용되는 재료(예를 들면, 금속, 합금, 전기전도성 화합물, 및 이들의 혼합물, 원소 주기율표의 제1족 또는 제2족에 속하는 원소)를 이용할 수 있다.

[0188] 일함수가 작은 재료인, 원소 주기율표의 제1족 또는 제2족에 속하는 원소, 즉 리튬(Li)이나 세슘(Cs) 등의 알칼리 금속, 및 마그네슘(Mg), 칼슘(Ca), 스트론튬(Sr) 등의 알칼리 토류 금속, 및 이들을 포함하는 합금(예를 들면, MgAg, AlLi), 유로퓸(Eu), 이터븀(Yb) 등의 희토류 금속 및 이들을 포함하는 합금 등을 이용할 수도 있다. 한편, 알칼리 금속, 알칼리 토류 금속, 및 이들을 포함하는 합금을 이용하여 양극을 형성하는 경우에는, 진공 증착법이나 스퍼터링법을 이용할 수 있다. 또, 은 페이스트 등을 이용하는 경우에는, 도포법이나 잉크젯법 등을 이용할 수 있다.

[0189] 정공 주입층

[0190] 정공 주입층은 정공 주입성이 높은 재료를 포함하는 층이다. 상기 화합물(1)을 단독으로 또는 하기 화합물과 조합하여 정공 주입층에 이용해도 된다.

[0191] 정공 주입성이 높은 물질로서는, 몰리브데넘 산화물, 타이타늄 산화물, 바나듐 산화물, 레늄 산화물, 루테늄 산화물, 크로뮴 산화물, 지르코늄 산화물, 하프늄 산화물, 탄탈럼 산화물, 은 산화물, 텅스텐 산화물, 망간 산화물 등을 이용할 수 있다.

[0192] 저분자의 유기 화합물인 4,4',4''-트리스(N,N-다이페닐아미노)트라이페닐아민(약칭: TDATA), 4,4',4''-트리스[N-(3-메틸페닐)-N-페닐아미노]트라이페닐아민(약칭: MTDATA), 4,4'-비스[N-(4-다이페닐아미노페닐)-N-페닐아미노]바이페닐(약칭: DPAB), 4,4'-비스(N-{4-[N'-(3-메틸페닐)-N'-페닐아미노]페닐}-N-페닐아미노)바이페닐(약칭: DNTPD), 1,3,5-트리스[N-(4-다이페닐아미노페닐)-N-페닐아미노]벤젠(약칭: DPA3B), 3-[N-(9-페닐카바졸-3-일)-N-페닐아미노]-9-페닐카바졸(약칭: PCzPCA1), 3,6-비스[N-(9-페닐카바졸-3-일)-N-페닐아미노]-9-페닐카바졸(약칭: PCzPCA2), 3-[N-(1-나프틸)-N-(9-페닐카바졸-3-일)아미노]-9-페닐카바졸(약칭: PCzPCN1) 등의 방향족 아민 화합물 등도 정공 주입층 재료로서 들 수 있다.

[0193] 고분자 화합물(올리고머, 덴드리머, 폴리머 등)을 이용할 수도 있다. 예를 들면, 폴리(N-바이닐카바졸)(약칭: PVK), 폴리(4-바이닐트라이페닐아민)(약칭: PVTPA), 폴리[N-(4-{N'-[4-(4-다이페닐아미노)페닐]페닐-N'-페닐아미노}페닐)메타크릴아마이드](약칭: PTPDMA), 폴리[N,N'-비스(4-뷰틸페닐)-N,N'-비스(페닐)벤지딘](약칭: Poly-TPD) 등의 고분자 화합물을 들 수 있다. 또한, 폴리(3,4-에틸렌다이옥시싸이오펜)/폴리(스타이렌설폰산)(PEDOT/PSS), 폴리아닐린/폴리(스타이렌설폰산)(PAni/PSS) 등의 산을 첨가한 고분자 화합물을 이용할 수도 있다.

[0194] 정공 수송층

[0195] 정공 수송층은 정공 수송성이 높은 재료를 포함하는 층이다. 상기 화합물(1)을 단독으로 또는 하기의 화합물과 조합하여 정공 수송층에 이용해도 된다.

[0196] 정공 수송층에는, 방향족 아민 화합물, 카바졸 유도체, 안트라센 유도체 등을 사용할 수 있다. 구체적으로는, 4,4'-비스[N-(1-나프틸)-N-페닐아미노]바이페닐(약칭: NPB)이나 N,N'-비스(3-메틸페닐)-N,N'-다이페닐-[1,1'-바이페닐]-4,4'-다이아민(약칭: TPD), 4-페닐-4'-(9-페닐플루오렌-9-일)트라이페닐아민(약칭: BAFLP), 4,4'-비스[N-(9,9-다이메틸플루오렌-2-일)-N-페닐아미노]바이페닐(약칭: DFLDPBi), 4,4',4''-트리스(N,N-다이페닐아미노)트라이페닐아민(약칭: TDATA), 4,4',4''-트리스[N-(3-메틸페닐)-N-페닐아미노]트라이페닐아민(약칭: MTDATA), 4,4'-비스[N-(스파이로-9,9'-바이플루오렌-2-일)-N-페닐아미노]바이페닐(약칭: BSPB) 등의 방향족 아민 화합물 등을 이용할 수 있다. 여기에서 기술한 물질은, 주로 $10^{-6}cm^2/Vs$ 이상의 정공 이동도를 갖는 물질이다.

[0197] 정공 수송층에는, CBP, CzPA, PCzPA와 같은 카바졸 유도체나, t-BuDNA, DNA, DPAnth와 같은 안트라센 유도체를 이용해도 된다. 폴리(N-바이닐카바졸)(약칭: PVK)이나 폴리(4-바이닐트라이페닐아민)(약칭: PVTPA) 등의 고분자 화합물을 이용할 수도 있다.

[0198] 단, 전자보다 정공의 수송성이 높은 재료이면, 이들 이외의 것을 이용해도 된다. 한편, 정공 수송성이 높은 재

료를 포함하는 층은, 단층의 것뿐만 아니라, 상기 물질로 이루어지는 층이 2층 이상 적층된 것으로 해도 된다. 예를 들면, 정공 수송층은 제 1 정공 수송층(양극측)과 제 2 정공 수송층(음극측)의 2층 구조로 해도 된다. 이 경우, 상기 화합물(1)은 제 1 정공 수송층과 제 2 정공 수송층의 어느 것에 포함되어 있어도 된다.

[0199] 발광층의 게스트 재료

[0200] 발광층은 발광성이 높은 물질(게스트 재료)을 포함하는 층이며, 여러 가지의 재료를 이용할 수 있다. 예를 들면, 게스트 재료로서는, 형광성 화합물이나 인광성 화합물을 이용할 수 있다. 형광성 화합물은 일중항 여기 상태로부터 발광 가능한 화합물이며, 인광성 화합물은 삼중항 여기 상태로부터 발광 가능한 화합물이다.

[0201] 발광층에 이용할 수 있는 청색계의 형광 발광 재료로서, 피렌 유도체, 스타이릴아민 유도체, 크라이센 유도체, 플루오란텐 유도체, 플루오렌 유도체, 다이아민 유도체, 트라이아릴아민 유도체 등을 사용할 수 있다. 구체적으로는, N,N'-비스[4-(9H-카바졸-9-일)페닐]-N,N'-다이페닐스틸벤-4,4'-다이아민(약칭: YGA2S), 4-(9H-카바졸-9-일)-4'-(10-페닐-9-안트릴)트라이페닐아민(약칭: YGAPA), 4-(10-페닐-9-안트릴)-4'-(9-페닐-9H-카바졸-3-일)트라이페닐아민(약칭: PCBAPA) 등을 들 수 있다.

[0202] 발광층에 이용할 수 있는 녹색계의 형광 발광 재료로서, 방향족 아민 유도체 등을 사용할 수 있다. 구체적으로는, N-(9,10-다이페닐-2-안트릴)-N,9-다이페닐-9H-카바졸-3-아민(약칭: 2PCAPA), N-[9,10-비스(1,1'-바이페닐-2-일)-2-안트릴]-N,9-다이페닐-9H-카바졸-3-아민(약칭: 2PCABPhA), N-(9,10-다이페닐-2-안트릴)-N,N',N'-트라이페닐-1,4-페닐렌다이아민(약칭: 2DPAPA), N-[9,10-비스(1,1'-바이페닐-2-일)-2-안트릴]-N,N',N'-트라이페닐-1,4-페닐렌다이아민(약칭: 2DPABPhA), N-[9,10-비스(1,1'-바이페닐-2-일)]-N-[4-(9H-카바졸-9-일)페닐]-N-페닐안트라센-2-아민(약칭: 2YGABPhA), N,N,9-트리페닐안트라센-9-아민(약칭: DPhAPhA) 등을 들 수 있다.

[0203] 발광층에 이용할 수 있는 적색계의 형광 발광 재료로서, 테트라센 유도체, 다이아민 유도체 등을 사용할 수 있다. 구체적으로는, N,N,N',N'-테트라키스(4-메틸페닐)테트라센-5,11-다이아민(약칭: p-mPhTD), 7,14-다이페닐-N,N,N',N'-테트라키스(4-메틸페닐)아세나프토[1,2-a]플루오란텐-3,10-다이아민(약칭: p-mPhAFD) 등을 들 수 있다.

[0204] 발광층에 이용할 수 있는 청색계의 인광 발광 재료로서, 이리듐 착체, 오스뮴 착체, 백금 착체 등의 금속 착체가 사용된다. 구체적으로는, 비스[2-(4',6'-다이플루오로페닐)피리디네이토-N,C2']이리듐(III) 테트라키스(1-피라졸릴)보레이트(약칭: FIr6), 비스[2-(4',6'-다이플루오로페닐)피리디네이토-N,C2']이리듐(III) 피콜리네이트(약칭: FIrpic), 비스[2-(3',5'-비스트라이플루오로메틸페닐)피리디네이토-N,C2']이리듐(III) 피콜리네이트(약칭: Ir(CF3ppy)2(pic)), 비스[2-(4',6'-다이플루오로페닐)피리디네이토-N,C2']이리듐(III) 아세틸아세토네이트(약칭: FIracac) 등을 들 수 있다.

[0205] 발광층에 이용할 수 있는 녹색계의 인광 발광 재료로서, 이리듐 착체 등이 사용된다. 트리스(2-페닐피리디네이토-N,C2')이리듐(III)(약칭: Ir(ppy)3), 비스(2-페닐피리디네이토-N,C2')이리듐(III) 아세틸아세토네이트(약칭: Ir(ppy)2(acac)), 비스(1,2-다이페닐-1H-벤즈이미다졸레이토)이리듐(III) 아세틸아세토네이트(약칭: Ir(pbi)2(acac)), 비스(벤조[h]퀴놀리네이토)이리듐(III) 아세틸아세토네이트(약칭: Ir(bzq)2(acac)) 등을 들 수 있다.

[0206] 발광층에 이용할 수 있는 적색계의 인광 발광 재료로서, 이리듐 착체, 백금 착체, 터븀 착체, 유로퓸 착체 등의 금속 착체가 사용된다. 구체적으로는, 비스[2-(2'-벤조[4,5-α]싸이엔일)피리디네이토-N,C3']이리듐(III) 아세틸아세토네이트(약칭: Ir(btp)2(acac)), 비스(1-페닐아이소퀴놀리네이토-N,C2')이리듐(III) 아세틸아세토네이트(약칭: Ir(piq)2(acac)), (아세틸아세토네이토)비스[2,3-비스(4-플루오로페닐)퀴녹살리네이토]이리듐(III)(약칭: Ir(Fdpq)2(acac)), 2,3,7,8,12,13,17,18-옥타에틸-21H,23H-포르피린 백금(II)(약칭: PtOEP) 등의 유기 금속 착체를 들 수 있다.

[0207] 또한, 트리스(아세틸아세토네이토)(모노페난트롤린)터븀(III)(약칭: Tb(acac)3(Phen)), 트리스(1,3-다이페닐-1,3-프로페인다이오네이토)(모노페난트롤린)유로퓸(III)(약칭: Eu(DBM)3(Phen)), 트리스[1-(2-테노일)-3,3,3-트라이플루오로아세토네이토](모노페난트롤린)유로퓸(III)(약칭: Eu(TTA)3(Phen)) 등의 희토류 금속 착체는, 희토류 금속 이온으로부터의 발광(상이한 다중도 간의 전자 전이)이기 때문에, 인광성 화합물로서 이용할 수 있다.

[0208] 발광층의 호스트 재료

[0209] 발광층으로서는, 전술한 게스트 재료를 다른 물질(호스트 재료)에 분산시킨 구성으로 해도 된다. 호스트 재료

로서는, 각종의 것을 이용할 수 있으며, 게스트 재료보다도 최저 빈 궤도 준위(LUMO 준위)가 높고, 최고 점유 궤도 준위(HOMO 준위)가 낮은 물질을 이용하는 것이 바람직하다.

[0210] 호스트 재료로서는,

[0211] (1) 알루미늄 착체, 베릴륨 착체 또는 아연 착체 등의 금속 착체,

[0212] (2) 옥사다이아졸 유도체, 벤즈이미다졸 유도체 또는 페난트롤린 유도체 등의 헤테로환 화합물,

[0213] (3) 카바졸 유도체, 안트라센 유도체, 페난트렌 유도체, 피렌 유도체 또는 크라이센 유도체 등의 축합 방향족 화합물,

[0214] (4) 트라이아릴아민 유도체 또는 축합 다환 방향족 아민 유도체 등의 방향족 아민 화합물이 사용된다.

[0215] 구체적으로는, 트리스(8-퀴놀리놀레이토)알루미늄(III)(약칭: Alq), 트리스(4-메틸-8-퀴놀리놀레이토)알루미늄(III)(약칭: Almq3), 비스(10-하이드록시벤조[h]퀴놀리네이토)베릴륨(II)(약칭: BeBq2), 비스(2-메틸-8-퀴놀리놀레이토)(4-페닐페놀레이토)알루미늄(III)(약칭: BAlq), 비스(8-퀴놀리놀레이토)아연(II)(약칭: Znq), 비스[2-(2-벤즈옥사졸릴)페놀레이토]아연(II)(약칭: ZnPBO), 비스[2-(2-벤조싸이아졸릴)페놀레이토]아연(II)(약칭: ZnBTZ) 등의 금속 착체, 2-(4-바이페닐릴)-5-(4-tert-뷰틸페닐)-1,3,4-옥사다이아졸(약칭: PBD), 1,3-비스[5-(p-tert-뷰틸페닐)-1,3,4-옥사다이아졸-2-일]벤젠(약칭: OXD-7), 3-(4-바이페닐릴)-4-페닐-5-(4-tert-뷰틸페닐)-1,2,4-트라이아졸(약칭: TAZ), 2,2',2''-(1,3,5-벤젠트라이일)트리스(1-페닐-1H-벤즈이미다졸)(약칭: TPBI), 바소페난트롤린(약칭: BPhen), 바소큐프로인(약칭: BCP) 등의 헤테로환 화합물, 9-[4-(10-페닐-9-안트릴)페닐]-9H-카바졸(약칭: CzPA), 3,6-다이페닐-9-[4-(10-페닐-9-안트릴)페닐]-9H-카바졸(약칭: DPCzPA), 9,10-비스(3,5-다이페닐페닐)안트라센(약칭: DPPA), 9,10-다이(2-나프틸)안트라센(약칭: DNA), 2-tert-뷰틸-9,10-다이(2-나프틸)안트라센(약칭: t-BuDNA), 9,9'-바이안트릴(약칭: BANT), 9,9'-(스틸벤-3,3'-다이일)다이페난트렌(약칭: DPNS), 9,9'-(스틸벤-4,4'-다이일)다이페난트렌(약칭: DPNS2), 3,3',3''-(벤젠-1,3,5-트라이일)트라이피렌(약칭: TPB3), 9,10-다이페닐안트라센(약칭: DPAnth), 6,12-다이메톡시-5,11-다이페닐크라이센 등의 축합 방향족 화합물, N,N-다이페닐-9-[4-(10-페닐-9-안트릴)페닐]-9H-카바졸-3-아민(약칭: CzA1PA), 4-(10-페닐-9-안트릴)트라이페닐아민(약칭: DPhPA), N,9-다이페닐-N-[4-(10-페닐-9-안트릴)페닐-3]-9H-카바졸-3-아민(약칭: PCAPA), N,9-다이페닐-N-{4-[4-(10-페닐-9-안트릴)페닐]페닐}-9H-카바졸-3-아민(약칭: PCAPBA), N-(9,10-다이페닐-2-안트릴)-N,9-다이페닐-9H-카바졸-3-아민(약칭: 2PCAPA), NPB(또는 α-NPD), TPD, DFLDPBi, BSPB 등의 방향족 아민 화합물 등을 이용할 수 있다. 또한, 호스트 재료는 복수종 이용할 수 있다.

[0216] 전자 수송층

[0217] 전자 수송층은 전자 수송성이 높은 물질을 포함하는 층이다. 전자 수송층에는,

[0218] (1) 알루미늄 착체, 베릴륨 착체, 아연 착체 등의 금속 착체,

[0219] (2) 이미다졸 유도체, 벤즈이미다졸 유도체, 아진 유도체, 카바졸 유도체, 페난트롤린 유도체 등의 헤테로방향족 화합물,

[0220] (3) 고분자 화합물을 사용할 수 있다.

[0221] 구체적으로는 저분자의 유기 화합물로서, Alq, 트리스(4-메틸-8-퀴놀리놀레이토)알루미늄(약칭: Almq3), 비스(10-하이드록시벤조[h]퀴놀리네이토)베릴륨(약칭: $BeBq_2$), BAlq, Znq, ZnPBO, ZnBTZ 등의 금속 착체 등을 이용할 수 있다. 또한, 금속 착체 이외에도, 2-(4-바이페닐릴)-5-(4-tert-뷰틸페닐)-1,3,4-옥사다이아졸(약칭: PBD), 1,3-비스[5-(p-tert-뷰틸페닐)-1,3,4-옥사다이아졸-2-일]벤젠(약칭: OXD-7), 3-(4-tert-뷰틸페닐)-4-페닐-5-(4-바이페닐릴)-1,2,4-트라이아졸(약칭: TAZ), 3-(4-tert-뷰틸페닐)-4-(4-에틸페닐)-5-(4-바이페닐릴)-1,2,4-트라이아졸(약칭: p-EtTAZ), 바소페난트롤린(약칭: BPhen), 바소큐프로인(약칭: BCP), 4,4'-비스(5-메틸벤즈옥사졸-2-일)스틸벤(약칭: BzOs) 등의 헤테로방향족 화합물도 이용할 수 있다. 상기 재료는, 주로 10^{-6} cm^2/Vs 이상의 전자 이동도를 갖는 재료이다. 한편, 정공 수송성보다도 전자 수송성이 높은 재료이면, 상기 이외의 재료를 전자 수송층으로서 이용해도 된다. 또한, 전자 수송층은, 단층의 것뿐만 아니라, 상기 재료로 이루어지는 층이 2층 이상 적층된 것으로 해도 된다.

[0222] 또한, 전자 수송층에는, 고분자 화합물을 이용할 수도 있다. 예를 들면, 폴리[(9,9-다이헥실플루오렌-2,7-다이

일)-co-(피리딘-3,5-다이일)](약칭: PF-Py), 폴리[(9,9-다이옥틸플루오렌-2,7-다이일)-co-(2,2'-바이피리딘-6,6'-다이일)](약칭: PF-BPy) 등을 이용할 수 있다.

[0223] 전자 주입층

[0224] 전자 주입층은 전자 주입성이 높은 재료를 포함하는 층이다. 전자 주입층에는, 리튬(Li), 세슘(Cs), 칼슘(Ca), 불화리튬(LiF), 불화세슘(CsF), 불화칼슘(CaF_2), 리튬 산화물(LiO_x) 등의 알칼리 금속, 알칼리 토류 금속, 또는 그들의 화합물을 이용할 수 있다. 그 밖에, 전자 수송성을 갖는 재료에 알칼리 금속, 알칼리 토류 금속, 또는 그들의 화합물을 함유시킨 것, 구체적으로는 Alq 중에 마그네슘(Mg)을 함유시킨 것 등을 이용해도 된다. 한편, 이 경우에는, 음극으로부터의 전자 주입을 보다 효율 좋게 행할 수 있다.

[0225] 또는, 전자 주입층에, 유기 화합물과 전자 공여체(도너)를 혼합하여 이루어지는 복합 재료를 이용해도 된다. 이와 같은 복합 재료는, 유기 화합물이 전자 공여체로부터 전자를 수취하기 때문에, 전자 주입성 및 전자 수송성이 우수하다. 이 경우, 유기 화합물로서는, 수취한 전자의 수송이 우수한 재료인 것이 바람직하고, 구체적으로는, 예를 들면 전술한 전자 수송층을 구성하는 재료(금속 착체나 헤테로방향족 화합물 등)를 이용할 수 있다. 전자 공여체로서는, 유기 화합물에 대해 전자 공여성을 나타내는 재료이면 된다. 구체적으로는, 알칼리 금속, 알칼리 토류 금속 및 희토류 금속이 바람직하고, 리튬, 세슘, 마그네슘, 칼슘, 에르븀, 이터븀 등을 들 수 있다. 또한, 알칼리 금속 산화물이나 알칼리 토류 금속 산화물이 바람직하고, 리튬 산화물, 칼슘 산화물, 바륨 산화물 등을 들 수 있다. 또한, 산화마그네슘과 같은 루이스 염기를 이용할 수도 있다. 또한, 테트라싸이아풀발렌(약칭: TTF) 등의 유기 화합물을 이용할 수도 있다.

[0226] 음극

[0227] 음극에는, 일함수가 작은(구체적으로는 3.8eV 이하) 금속, 합금, 전기전도성 화합물, 및 이들의 혼합물 등을 이용하는 것이 바람직하다. 이와 같은 음극 재료의 구체예로서는, 원소 주기율표의 제1족 또는 제2족에 속하는 원소, 즉 리튬(Li)이나 세슘(Cs) 등의 알칼리 금속, 및 마그네슘(Mg), 칼슘(Ca), 스트론튬(Sr) 등의 알칼리 토류 금속, 및 이들을 포함하는 합금(예를 들면, MgAg, AlLi), 유로퓸(Eu), 이터븀(Yb) 등의 희토류 금속 및 이들을 포함하는 합금 등을 들 수 있다.

[0228] 한편, 알칼리 금속, 알칼리 토류 금속, 이들을 포함하는 합금을 이용하여 음극을 형성하는 경우에는, 진공 증착법이나 스퍼터링법을 이용할 수 있다. 또한, 은 페이스트 등을 이용하는 경우에는, 도포법이나 잉크젯법 등을 이용할 수 있다.

[0229] 한편, 전자 주입층을 설치하는 것에 의해, 일함수의 대소에 관계없이, Al, Ag, ITO, 그라펜, 규소 또는 산화규소를 함유한 산화인듐-산화주석 등 다양한 도전성 재료를 이용하여 음극을 형성할 수 있다. 이들 도전성 재료는 스퍼터링법이나 잉크젯법, 스핀 코팅법 등을 이용하여 성막할 수 있다.

[0230] 절연층

[0231] 유기 EL 소자는, 초박막에 전계를 인가하기 때문에, 누설이나 단락에 의한 화소 결함이 생기기 쉽다. 이를 방지하기 위해서, 한 쌍의 전극 사이에 절연성의 박막층으로 이루어지는 절연층을 삽입해도 된다.

[0232] 절연층에 이용되는 재료로서는, 예를 들면, 산화알루미늄, 불화리튬, 산화리튬, 불화세슘, 산화세슘, 산화마그네슘, 불화마그네슘, 산화칼슘, 불화칼슘, 질화알루미늄, 산화타이타늄, 산화규소, 산화저마늄, 질화규소, 질화붕소, 산화몰리브데넘, 산화루테늄, 산화바나듐 등을 들 수 있다. 한편, 이들의 혼합물이나 적층물을 이용해도 된다.

[0233] 또한, 유기 EL 소자의, 온도, 습도, 분위기 등에 대한 안정성의 향상의 관점에서, 유기 EL 소자의 표면에 보호층을 설치해도 되고, 실리콘 오일, 수지 등에 의해 유기 EL 소자 전체를 보호해도 된다.

[0234] 유기 EL 소자의 각 층의 형성에는, 진공 증착, 스퍼터링, 플라즈마, 이온 플레이팅 등의 건식 성막법이나 스핀 코팅, 디핑, 플로 코팅 등의 습식 성막법의 어느 방법을 이용할 수 있다.

[0235] 습식 성막법의 경우, 각 층을 형성하는 재료를, 에탄올, 클로로폼, 테트라하이드로퓨란, 다이옥세인 등의 적절한 용매에 용해 또는 분산시킨 용액 또는 분산액을 이용하여 박막을 형성한다. 또한, 해당 용액 또는 분산액은 성막성 향상, 막의 핀홀 방지 등을 위해서 수지나 첨가제를 포함하고 있어도 된다. 해당 수지로서는, 폴리스타이렌, 폴리카보네이트, 폴리아릴레이트, 폴리에스터, 폴리아마이드, 폴리우레테인, 폴리설폰, 폴리메틸메타크릴레이트, 폴리메틸아크릴레이트, 셀룰로스 등의 절연성 수지 및 그들의 공중합체, 폴리-N-바이닐카바졸, 폴리실

레인 등의 광도전성 수지, 폴리싸이오펜, 폴리피롤 등의 도전성 수지를 들 수 있다. 또한, 첨가제로서는, 산화 방지제, 자외선 흡수제, 가소제 등을 들 수 있다.

[0236] 각 층의 막 두께는 특별히 한정되는 것은 아니고, 양호한 소자 성능이 얻어지도록 선택하면 된다. 막 두께가 지나치게 두꺼우면, 일정한 광출력을 얻기 위해서 큰 인가 전압이 필요하게 되어 효율이 나빠진다. 막 두께가 지나치게 얇으면 핀홀 등이 발생하여, 전계를 인가하더라도 충분한 발광 휘도가 얻어지지 않는다. 막 두께는 통상 5nm～10μm이며, 10nm～0.2μm가 보다 바람직하다.

[0237] 상기 화합물(1)을 이용하여 얻어지는 유기 EL 소자는 유기 EL 패널 모듈 등의 표시 부품; 텔레비전, 휴대 전화, 퍼스널 컴퓨터 등의 표시 장치; 조명, 차량용 등구의 발광 장치 등의 전자 기기에 사용할 수 있다.

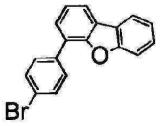
[0238] **실시예**

[0239] 이하, 본 발명을 실시예에 의해 구체적으로 설명하지만, 본 발명은 이들에 의해 전혀 한정되는 것은 아니다.

[0240] 중간체 합성예 1-1(중간체 1-1의 합성)

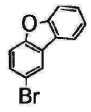
[0241] 아르곤 분위기 하, 4-아이오도브로모벤젠 28.3g(100.0mmol), 다이벤조퓨란-4-보론산 22.3g(105.0mmol), $Pd[PPh_3]_4$ 2.31g(2.00mmol)에 톨루엔 150ml, 다이메톡시에테인 150ml, 2M Na_2CO_3 수용액 150ml(300.0mmol)를 가하고, 10시간 가열 환류 교반했다.

[0242] 반응 종료 후, 실온으로 냉각하고, 반응 혼합물을 분액 깔때기로 옮겨 다이클로로메테인으로 추출했다. 유기층을 $MgSO_4$로 건조 후, 여과, 농축했다. 농축 잔사를 실리카 겔 컬럼 크로마토그래피로 정제하여, 26.2g의 백색 고체를 얻었다. FD-MS 분석(전계 탈리 질량 분석)에 의해, 하기 중간체 1-1로 동정했다. (수율 81%)

[0243] 
중간체 1-1

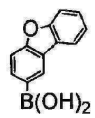
[0244] 중간체 합성예 1-2(중간체 1-2의 합성)

[0245] 질소 분위기 하, 다이벤조퓨란 150g(0.89mol)에 아세트산 1000ml를 가하고 가열 용해시켰다. 추가로, 브롬 188g(1.18mol)을 적하하여 가한 후, 실온에서 20시간 교반했다. 석출된 결정을 여과로 취하여, 아세트산, 물로 순차로 세정했다. 조생성물을 메탄올에 의해 수회 재결정을 반복하여, 66.8g의 백색 결정을 얻었다. FD-MS 분석에 의해, 하기 중간체 1-2로 동정했다. (수율 30%)

[0246] 
중간체 1-2

[0247] 중간체 합성예 1-3(중간체 1-3의 합성)

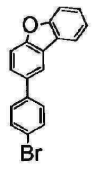
[0248] 아르곤 분위기 하, 중간체 1-2 24.7g(100.0mmol)에 탈수 테트라하이드로퓨란 400ml를 가하고, -40℃로 냉각했다. 추가로, 1.6M 농도의 n-뷰틸리튬의 헥세인 용액 63ml(100.0mmol)를 서서히 가했다. 반응 용액을 0℃까지 가온하면서 1시간 교반한 후, 반응 용액을 다시 -78℃까지 냉각하고, 붕산트라이메틸 26.0g(250.0mmol)의 50ml 탈수 테트라하이드로퓨란 용액을 적하하여 가했다. 적하 후, 반응 용액을 실온에서 5시간 교반했다. 1N 염산 200ml를 가하고, 1시간 교반 후, 수층을 제거했다. 유기층을 $MgSO_4$로 건조하고, 용매를 감압 증류 제거했다. 얻어진 고체를 톨루엔으로 세정하여, 15.2g의 백색 결정을 얻었다. FD-MS 분석에 의해, 하기 중간체 1-3으로 동정했다. (수율 72%)

[0249] 
중간체 1-3

[0250] 중간체 합성예 1-4(중간체 1-4의 합성)

[0251] 아르곤 분위기 하, 4-아이오도브로모벤젠 28.3g(100.0mmol), 중간체 1-3 22.3g(105.0mmol), $Pd[PPh_3]_4$ 2.31g(2.00mmol)에 톨루엔 150ml, 다이메톡시에테인 150ml, 2M Na_2CO_3 수용액 150ml(300.0mmol)를 가하고, 10시간 가열 환류 교반했다.

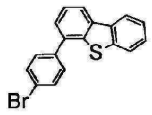
[0252] 반응 종료 후, 반응 혼합물을 분액 깔때기로 옮겨 다이클로로메테인으로 추출했다. 유기층을 $MgSO_4$로 건조 후, 여과, 농축했다. 농축 잔사를 실리카 겔 컬럼 크로마토그래피로 정제하여, 24.2g의 백색 고체를 얻었다. FD-MS 분석에 의해, 하기 중간체 1-4로 동정했다. (수율 75%)

[0253] 
중간체 **1-4**

[0254] 중간체 합성예 1-5(중간체 1-5의 합성)

[0255] 아르곤 분위기 하, 4-아이오도브로모벤젠 28.3g(100.0mmol), 다이벤조싸이오펜-4-보론산 23.9g(105.0mmol), $Pd[PPh_3]_4$ 2.31g(2.00mmol)에 톨루엔 150ml, 다이메톡시에테인 150ml, 2M Na_2CO_3 수용액 150ml(300.0mmol)를 가하고, 10시간 가열 환류 교반했다.

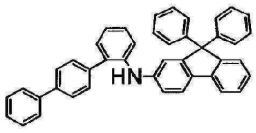
[0256] 반응 종료 후, 실온으로 냉각하고, 반응 혼합물을 분액 깔때기로 옮겨 다이클로로메테인으로 추출했다. 유기층을 $MgSO_4$로 건조 후, 여과, 농축했다. 농축 잔사를 실리카 겔 컬럼 크로마토그래피로 정제하여, 27.1g의 백색 고체를 얻었다. FD-MS 분석에 의해, 하기 중간체 1-5로 동정했다. (수율 80%)

[0257] 
중간체 **1-5**

[0258] 중간체 합성예 2-1(중간체 2-1의 합성)

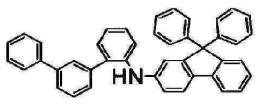
[0259] 아르곤 분위기 하, 2-브로모-9,9'-다이페닐플루오렌 19.9g(50.0mmol), [1,1':4',1"]터페닐-2-일-아민 12.3g(50.0mmol), t-뷰톡시나트륨 9.6g(100.0mmol)에 탈수 톨루엔 250ml를 가하고, 교반했다. 아세트산팔라듐 225mg(1.0mmol), 트라이-t-뷰틸포스핀 202mg(1.0mmol)을 가하고, 80℃에서 8시간 반응시켰다.

[0260] 냉각 후, 반응 혼합물을 셀라이트/실리카 겔을 통해 여과하고, 여과액을 감압 하에서 농축했다. 얻어진 잔사를 톨루엔으로 재결정하고, 그것을 여과로 취한 후, 건조하여, 19.7g의 백색 고체를 얻었다. FD-MS 분석에 의해, 하기 중간체 2-1로 동정했다. (수율 70%)

[0261] 
중간체 **2-1**

[0262] 중간체 합성예 2-2(중간체 2-2의 합성)

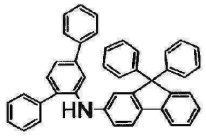
[0263] 중간체 합성예 2-1에 있어서, [1,1':4',1"]터페닐-2-일-아민 대신에 [1, 1':3', 1"]터페닐-2-일-아민을 이용한 것 이외에는 마찬가지로 반응을 행한 바, 21.1g의 백색 고체를 얻었다. FD-MS 분석에 의해, 하기 중간체 2-2로 동정했다. (수율 75%)

[0264] 
중간체 **2-2**

[0265] 중간체 합성예 2-3(중간체 2-3의 합성)

[0266] 중간체 합성예 2-1에 있어서, [1,1':4',1"]터페닐-2-일-아민 대신에 [1,1':4',1"]터페닐-3'-일-아민을 이용한

것 이외에는 마찬가지로 반응을 행한 바, 19.7g의 백색 고체를 얻었다. FD-MS 분석에 의해, 하기 중간체 2-3으로 동정했다. (수율 70%)

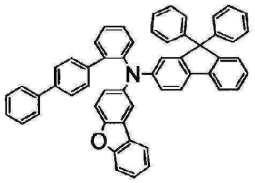
[0267] 

중간체 **2-3**

[0268] 합성 실시예 1(화합물(H1)의 제조)

[0269] 아르곤 분위기 하, 중간체 1-2 2.5g(10.0mmol), 중간체 2-1 5.6g(10.0mmol), $Pd_2(dba)_3$ 0.14g(0.15mmol), $P(tBu)_3HBF_4$ 0.087g(0.3mmol), t-뷰톡시나트륨 1.9g(20.0mmol)에, 무수 자일렌 50ml를 가하여 8시간 가열 환류했다.

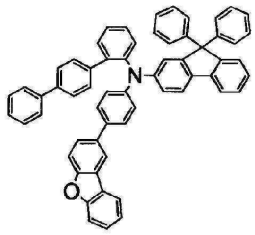
[0270] 반응 종료 후, 반응액을 50℃로 냉각하고, 셀라이트/실리카 겔을 통해 여과를 행하고, 여과액을 농축했다. 얻어진 농축 잔사를 실리카 겔 컬럼 크로마토그래피로 정제하여 백색 고체를 얻었다. 조생성물을 톨루엔으로 재결정하여, 3.6g의 백색 결정을 얻었다. FD-MS 분석에 의해, 하기 화합물(H1)로 동정했다. (수율 50%)

[0271] 

화합물 **(H1)**

[0272] 합성 실시예 2(화합물(H2)의 제조)

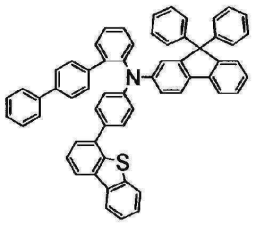
[0273] 합성 실시예 1에 있어서, 중간체 1-2 대신에 중간체 1-4를 3.2g 이용한 것 이외에는 마찬가지로 반응을 행한 바, 5.1g의 백색 결정을 얻었다. FD-MS의 분석에 의해, 하기 화합물(H2)로 동정했다. (수율 63%)

[0274] 

화합물 **(H2)**

[0275] 합성 실시예 3(화합물(H3)의 제조)

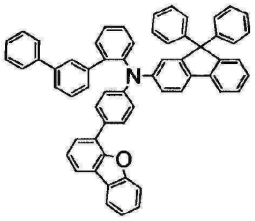
[0276] 합성 실시예 1에 있어서, 중간체 1-2 대신에 중간체 1-5를 3.4g 이용한 것 이외에는 마찬가지로 반응을 행한 바, 4.1g의 백색 결정을 얻었다. FD-MS의 분석에 의해, 하기 화합물(H3)으로 동정했다. (수율 50%)

[0277] 

화합물 **(H3)**

[0278] 합성 실시예 4(화합물(H4)의 제조))

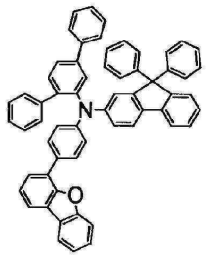
[0279] 합성 실시예 1에 있어서, 중간체 1-2 대신에 중간체 1-1을 3.2g 이용하고, 중간체 2-1 대신에 중간체 2-2를 5.6g 이용한 것 이외에는 마찬가지로 반응을 행한 바, 4.4g의 백색 결정을 얻었다. FD-MS의 분석에 의해, 하기 화합물(H4)로 동정했다. (수율 55%)

[0280] 

화합물 (H4)

[0281] 합성 실시예 5(화합물(H5)의 제조))

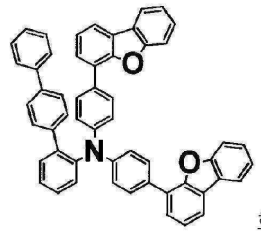
[0282] 합성 실시예 1에 있어서, 중간체 1-2 대신에 중간체 1-1을 3.2g 이용하고, 중간체 2-1 대신에 중간체 2-3을 5.6g 이용한 것 이외에는 마찬가지로 반응을 행한 바, 4.4g의 백색 결정을 얻었다. FD-MS의 분석에 의해, 하기 화합물(H5)로 동정했다. (수율 55%)

[0283] 

화합물 (H5)

[0284] 합성 실시예 6(화합물(H6)의 제조))

[0285] 합성 실시예 1에 있어서, 중간체 1-2 대신에 중간체 1-1을 3.2g, 중간체 2-1 대신에 [1,1':4',1"]터페닐-2-일-아민을 1.2g 이용한 것 이외에는 마찬가지로 반응을 행한 바, 1.8g의 백색 결정을 얻었다. FD-MS의 분석에 의해, 하기 화합물(H6)으로 동정했다. (수율 50%)

[0286] 

화합물 (H6)

[0287] 실시예 1-1(유기 EL 소자의 제작)

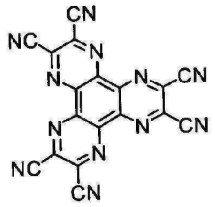
[0288] 25㎜×75㎜×1.1㎜의 ITO 투명 전극 라인 부착 유리 기판(지오마텍사제)을 아이소프로필 알코올 중에서 5분간 초음파 세정하고, 추가로 30분간 UV(Ultraviolet) 오존 세정했다.

[0289] 세정 후의 투명 전극 라인 부착 유리 기판을 진공 증착 장치의 기판 홀더에 장착하고, 우선 투명 전극 라인이 형성되어 있는 면 상에 상기 투명 전극을 덮도록 해서 하기 억셉터 재료(A)를 증착하여, 막 두께 5㎚의 억셉터층을 성막했다.

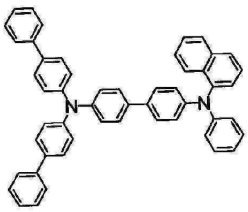
[0290] 이 억셉터층 상에, 제 1 정공 수송 재료로서 하기 방향족 아민 화합물(HT1)을 증착하여, 막 두께 160㎚의 제 1 정공 수송층을 성막했다. 제 1 정공 수송층의 성막에 이어서, 제 2 정공 수송 재료로서 상기 화합물(H1)을 증착하여, 막 두께 10㎚의 제 2 정공 수송층을 성막했다.

[0291] 이 제 2 정공 수송층 상에, 형광 발광 재료로서 하기 호스트 재료와 하기 도펀트를 공증착하여, 두께 25㎚의 형광 발광층을 얻었다. 한편, 형광 발광층 중의 도펀트의 농도는 4질량%였다.

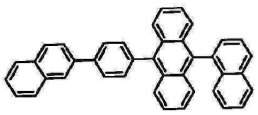
[0292] 계속해서, 이 형광 발광층 상에, 두께 20㎚로 하기 화합물 ET1, 계속해서 두께 10㎚로 하기 화합물 ET2, 및 Li를 두께 25㎚로 공증착하여, 전자 수송/주입층을 성막했다. Li의 농도는 4중량%였다. 추가로, 금속 Al을 두께 80㎚로 적층해서 음극을 형성하여, 유기 EL 소자를 제조했다.



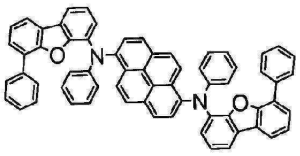
억셉터 재료(A)



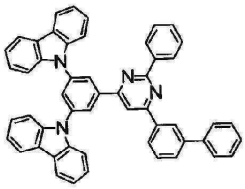
제 1 정공 수송 재료(HT1)



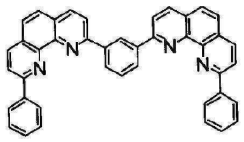
호스트 재료



도펀트



전자 수송 재료(ET1)



전자 수송 재료(ET2)

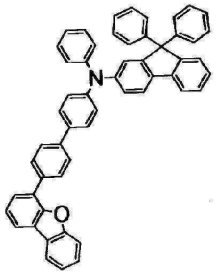
[0293]

[0294] 실시예 1-2～1-6

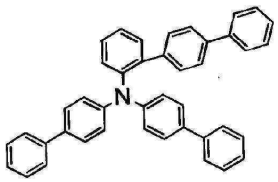
[0295] 표 1에 기재된 화합물을 제 2 정공 수송 재료로서 이용하여 제 2 정공 수송층을 형성한 것 이외에는 실시예 1-1과 마찬가지로 하여, 실시예 1-2～1-6의 각 유기 EL 소자를 제작했다.

[0296] 비교예 1～2

[0297] 하기 비교 화합물 1(비교예 1) 및 비교 화합물 2(비교예 2)를 제 2 정공 수송 재료로서 이용하여 제 2 정공 수송층을 형성한 것 이외에는 실시예 1-1과 마찬가지로 하여, 비교예 1, 비교예 2의 각 유기 EL 소자를 제작했다.



비교 화합물 1



비교 화합물 2

[0298]

[0299] 유기 EL 소자의 발광 성능 평가

[0300] 이상과 같이 하여 제작한 유기 EL 소자를 직류 전류 구동에 의해 발광시켜, 휘도(L), 전류 밀도를 측정하고, 측정 결과로부터 전류 밀도 10mA/cm^2에서의 발광 효율(cd/A), 구동 전압(V)을 구했다. 여기에서 80% 수명이란, 정전류 구동 시에 있어서 휘도가 초기 휘도의 80%로 감쇠할 때까지의 시간을 말한다. 결과를 표 1에 나타낸다.

표 1

[0301]

	제 2 정공 수송층	cd/A	V	80% 수명 (hr)
실시예 1-1	H1	6.4	4.3	200
실시예 1-2	H2	7.2	4.1	210
실시예 1-3	H3	6.9	4.2	240
실시예 1-4	H4	6.8	4.2	230
실시예 1-5	H5	6.8	4.3	200
실시예 1-6	H6	6.9	4.0	220
비교예 1	비교 화합물 1	5.5	4.2	120
비교예 2	비교 화합물 2	1.5	5.0	80

[0302] 표 1의 결과로부터, 상기 식(1)에 포함되는 화합물(H1)~(H6)을 이용하는 것에 의해, 저전압에서 구동해도 고효율이며, 또한 장수명인 유기 EL 소자가 얻어짐을 알 수 있다.

[0303] 실시예 2-1(유기 EL 소자의 제작)

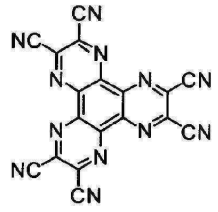
[0304] 25mm×75mm×1.1mm의 ITO 투명 전극 라인 부착 유리 기판(지오마텍사제)을 아이소프로필 알코올 중에서 5분간 초음파 세정하고, 추가로 30분간 UV(Ultraviolet) 오존 세정했다.

[0305] 세정 후의 투명 전극 라인 부착 유리 기판을 진공 증착 장치의 기판 홀더에 장착하고, 우선 투명 전극 라인이 형성되어 있는 면 상에 상기 투명 전극을 덮도록 해서 하기 억셉터 재료(A)를 증착하여, 막 두께 5nm의 억셉터층을 성막했다.

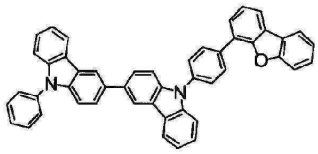
[0306] 이 억셉터층 상에, 제 1 정공 수송 재료로서 화합물(H2)를 증착하여, 막 두께 160nm의 제 1 정공 수송층을 성막했다. 제 1 정공 수송층의 성막에 이어서, 제 2 정공 수송 재료로서 하기 방향족 아민 유도체(Y1)을 증착하여, 막 두께 10nm의 제 2 정공 수송층을 성막했다.

[0307] 이 제 2 정공 수송층 상에, 형광 발광 재료로서 하기 호스트 재료와 하기 도펀트를 공증착하여, 두께 25nm의 형광 발광층을 얻었다. 한편, 형광 발광층 중의 도펀트의 농도는 4질량%였다.

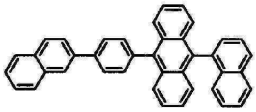
[0308] 계속해서, 이 형광 발광층 상에, 두께 20nm로 하기 화합물 ET1, 계속해서 두께 10nm로 하기 화합물 ET2, 및 Li를 두께 25nm로 공증착하여, 전자 수송/주입층을 성막했다. Li의 농도는 4중량%였다. 추가로, 금속 Al을 두께 80nm로 적층해서 음극을 형성하여, 유기 EL 소자를 제조했다.



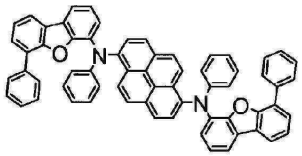
억셉터 재료(A)



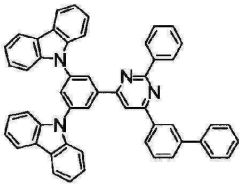
제 2 정공 수송 재료(Y1)



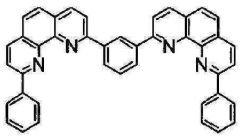
호스트 재료



도펀트



전자 수송 재료(ET1)



전자 수송 재료(ET2)

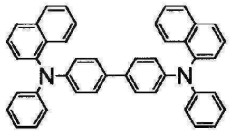
[0309]

[0310] 실시예 2-2～2-3

[0311] 표 2에 기재된 화합물을 제 1 정공 수송 재료로서 이용하여 제 1 정공 수송층을 형성한 것 이외에는 실시예 2-1과 마찬가지로 하여, 실시예 2-2～2-3의 유기 EL 소자를 제작했다.

[0312] 비교예 3

[0313] 하기 비교 화합물 3을 제 1 정공 수송 재료로서 이용하여 제 1 정공 수송층을 형성한 것 이외에는 실시예 2-1과 마찬가지로 하여, 비교예 3의 유기 EL 소자를 제작했다.



[0314] 비교 화합물 3

[0315] 유기 EL 소자의 발광 성능 평가

[0316] 이상과 같이 하여 제작한 유기 EL 소자의 전류 밀도 10mA/cm^{2}에서의 발광 효율(cd/A), 구동 전압(V), 및 80% 수명을 상기와 마찬가지로 하여 구했다. 결과를 표 2에 나타낸다.

표 2

[0317]

	제 1 정공 수송층	cd/A	V	80% 수명 (hr)
실시예 2-1	H2	8.5	4.0	180
실시예 2-2	H3	8.3	4.0	200
실시예 2-3	H6	8.5	4.0	240
비교예 3	비교 화합물 3	7.2	4.0	110

[0318] 표 2의 결과로부터, 상기 식(1)에 포함되는 화합물(H2), (H3), 및 (H6)을 이용하는 것에 의해, 저전압에서 구동해도 고효율이며, 또한 장수명인 유기 EL 소자가 얻어짐을 알 수 있다.