



(19) 대한민국특허청(KR)
(12) 등록특허공보(B1)

(45) 공고일자 2022년01월03일
(11) 등록번호 10-2345329
(24) 등록일자 2021년12월27일

(51) 국제특허분류(Int. Cl.)
C09K 11/06 (2006.01) H01L 51/00 (2006.01)
H01L 51/50 (2006.01)
(52) CPC특허분류
C09K 11/06 (2021.01)
H01L 51/0085 (2013.01)
(21) 출원번호 10-2020-7000602(분할)
(22) 출원일자(국제) 2017년01월24일
심사청구일자 2021년02월16일
(85) 번역문제출일자 2020년01월08일
(65) 공개번호 10-2020-0006627
(43) 공개일자 2020년01월20일
(62) 원출원 특허 10-2018-7024128
원출원일자(국제) 2017년01월24일
심사청구일자 2018년12월07일
(86) 국제출원번호 PCT/JP2017/002377
(87) 국제공개번호 WO 2017/130977
국제공개일자 2017년08월03일
(30) 우선권주장
JP-P-2016-015799 2016년01월29일 일본(JP)
(56) 선행기술조사문헌
JP2010056526 A*
JP2011216903 A*
*는 심사관에 의하여 인용된 문헌

(73) 특허권자
스미토모 가가꾸 가부시키키가이샤
일본국 도쿄도 츄오쿠 니혼바시 2쵸메 7반 1고
(72) 발명자
사사다, 도시아키
일본 3003294 이바라키켄 츠쿠바시 기타하라 6반
스미토모 가가꾸 가부시키키가이샤 내
아베, 다이치
일본 3003294 이바라키켄 츠쿠바시 기타하라 6반
스미토모 가가꾸 가부시키키가이샤 내
(뒷면에 계속)
(74) 대리인
양영준, 이석재, 오현식, 박병언

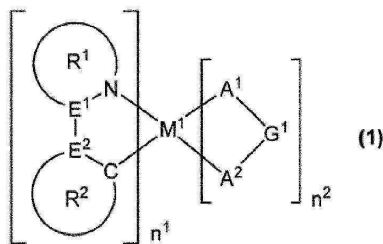
전체 청구항 수 : 총 9 항

심사관 : 송이화

(54) 발명의 명칭 조성물, 인광 발광성 화합물 및 발광 소자

(57) 요약

식 (1)로 표시되는 인광 발광성 화합물과 호스트 재료가 배합된 조성물이며, 인광 발광성 화합물에 불순물로서 포함되는 염소 원자의 양이, 조성물에 배합되는 고형분 전량에 대하여, 3.5질량ppm 이하인, 조성물이 개시된다.



[식 중, M¹은 이리듐 원자 등을 나타낸다. n¹은 1 이상의 정수를 나타내고, n²은 0 이상의 정수를 나타내고, n¹+n²은 2 또는 3이다. E¹ 및 E²는 탄소 원자 또는 질소 원자를 나타낸다. 환 R¹은 5원의 방향족 복소환을 나타내고, 환 R²는 방향족 탄화수소환 등을 나타낸다. A¹-G¹-A²는 음이온성의 2좌 배위자를 나타낸다. A¹ 및 A²는 질소 원자 등을 나타낸다. G¹은 단결합 등을 나타낸다.]

(52) CPC특허분류

H01L 51/0087 (2013.01)

H01L 51/5024 (2013.01)

C09K 2211/185 (2013.01)

(72) 발명자

요시다, 도모야스

일본 3003294 이바라키켄 츠쿠바시 기타하라 6반

스미토모 가가꾸 가부시카이사 내

사이토, 다카카즈

일본 3003294 이바라키켄 츠쿠바시 기타하라 6반

스미토모 가가꾸 가부시카이사 내

명세서

청구범위

청구항 1

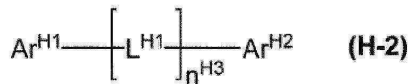
양극 및 음극으로 이루어지는 전극과, 해당 전극간에 설치된, 이리듐 원자를 갖는 인광 발광성 화합물이 배합되고, 또한 식 (i)의 조건을 만족하는 조성물을 포함하는 유기층을 갖는 발광 소자의 식 (H-2)로 표시되는 화합물의 제조 방법으로서,

상기 제조 방법은,

잔류 염소 농도 (C_2 (질량ppm))가 $C_2 \times 0.9 > 0.8$ 을 만족하는 식 (H-2)로 표시되는 화합물을 준비하는 제1 공정과,

상기 식 (H-2)로 표시되는 화합물의 잔류 염소 농도 (C_2 (질량ppm))를, $C_2 \times 0.9 \leq 0.8$ 를 만족하도록 저감하는 제2 공정

을 포함하는, 식 (H-2)로 표시되는 화합물의 제조 방법.



[식 중,

Ar^{H1} 및 Ar^{H2} 는 각각 독립적으로 카르바졸릴기를 나타내고, 이들 기는 치환기를 갖고 있어도 된다.

n^{H3} 은 0 또는 1을 나타낸다.

L^{H1} 은 디벤조푸란디일기 또는 디벤조티오펜디일기를 나타내고, 이들 기는 치환기를 갖고 있어도 된다.]

$$C_1 \times W_1 \leq 3.5 \quad (\text{i})$$

[식 중, C_1 (질량ppm)은 상기 인광 발광성 화합물의 잔류 염소 농도를 나타내고, W_1 은 상기 조성물에 배합되는 고형분 전량에 대한 상기 인광 발광성 화합물의 배합량의 질량비를 나타낸다.]

청구항 2

제1항에 있어서, 상기 조성물은 추가로 상기 식 (H-2)로 표시되는 화합물이 배합된 것이고,

상기 식 (i)의 조건을 만족하는 조성물이 식 (ii)의 조건을 만족하는 조성물인, 제조 방법.

$$C_1 \times W_1 + C_2 \times W_2 \leq 3.5 \quad (\text{ii})$$

[식 중, C_1 (질량ppm)은 상기 인광 발광성 화합물의 잔류 염소 농도를 나타내고, W_1 은 상기 조성물에 배합되는 고형분 전량에 대한 상기 인광 발광성 화합물의 배합량의 질량비를 나타내고, C_2 (질량ppm)은 상기 식 (H-2)로 표시되는 화합물의 잔류 염소 농도를 나타내고, W_2 는 상기 조성물에 배합되는 고형분 전량에 대한 상기 식 (H-2)로 표시되는 화합물의 배합량의 질량비를 나타낸다.]

청구항 3

제2항에 있어서, 상기 제2 공정이, 상기 식 (H-2)로 표시되는 화합물의 잔류 염소 농도 (C_2 (질량ppm))를, 상기 식 (ii)의 조건을 만족하고, 또한 $C_2 \times 0.9 \leq 0.8$ 를 만족하도록 저감하는 공정인, 제조 방법.

청구항 4

제1항 내지 제3항 중 어느 한 항에 있어서, 상기 식 (i)의 조건을 만족함으로써, 상기 발광 소자의 초기 열화가 억제되는, 제조 방법.

청구항 5

제1항 내지 제3항 중 어느 한 항에 있어서, 상기 유기층이 발광층인, 제조 방법.

청구항 6

제1항 내지 제3항 중 어느 한 항에 있어서, 상기 제2 공정이, 상기 식 (H-2)로 표시되는 화합물의 잔류 염소 농도를, 정제 및 탈할로겐화제에 의한 처리에서 선택되는 적어도 1종의 방법에 의해 저감하는 공정인, 제조 방법.

청구항 7

제1항 내지 제3항 중 어느 한 항에 있어서, 상기 제2 공정이, 상기 식 (H-2)로 표시되는 화합물의 잔류 염소 농도를, 정제 및 탈할로겐화제에 의한 처리에서 선택되는 적어도 1종의 방법에 의해, 자동 연소-이온크로마토그래피법에 의해 측정했을 때 검출 한계 이하로 저감하는 공정인, 제조 방법.

청구항 8

양극 및 음극으로 이루어지는 전극과, 해당 전극간에 설치된, 이리듐 원자를 갖는 인광 발광성 화합물 및 식 (H-2)로 표시되는 화합물이 배합되고, 또한 식 (ii)의 조건을 만족하는 조성물을 포함하는 유기층을 갖는 발광 소자의 제조 방법으로서,

제1항 내지 제3항 중 어느 한 항에 기재된 제조 방법에 의해 식 (H-2)로 표시되는 화합물을 제조하는 공정과,

상기 공정에서 제조된 식 (H-2)로 표시되는 화합물과 이리듐 원자를 갖는 인광 발광성 화합물을 혼합해서 조성물을 얻는 공정

을 포함하는, 조성물의 제조 방법.

$$C_1 \times W_1 + C_2 \times W_2 \leq 3.5 \quad (ii)$$

[식 중, C_1 (질량ppm)은 상기 인광 발광성 화합물의 잔류 염소 농도를 나타내고, W_1 은 상기 조성물에 배합되는 고휘분 전량에 대한 상기 인광 발광성 화합물의 배합량의 질량비를 나타내고, C_2 (질량ppm)은 상기 식 (H-2)로 표시되는 화합물의 잔류 염소 농도를 나타내고, W_2 는 상기 조성물에 배합되는 고휘분 전량에 대한 상기 식 (H-2)로 표시되는 화합물의 배합량의 질량비를 나타낸다.]

청구항 9

양극 및 음극으로 이루어지는 전극과, 해당 전극간에 설치된, 이리듐 원자를 갖는 인광 발광성 화합물 및 식 (H-2)로 표시되는 화합물이 배합되고, 또한 식 (ii)의 조건을 만족하는 조성물을 포함하는 유기층을 갖는 발광 소자의 제조 방법으로서,

제1항 내지 제3항 중 어느 한 항에 기재된 제조 방법에 의해 식 (H-2)로 표시되는 화합물을 제조하는 공정과,

상기 공정에서 제조된 식 (H-2)로 표시되는 화합물과 이리듐 원자를 갖는 인광 발광성 화합물이 배합된 조성물에 의해, 상기 유기층을 형성하는 공정

을 포함하는, 발광 소자의 제조 방법.

$$C_1 \times W_1 + C_2 \times W_2 \leq 3.5 \quad (ii)$$

[식 중, C_1 (질량ppm)은 상기 인광 발광성 화합물의 잔류 염소 농도를 나타내고, W_1 은 상기 조성물에 배합되는 고휘분 전량에 대한 상기 인광 발광성 화합물의 배합량의 질량비를 나타내고, C_2 (질량ppm)은 상기 식 (H-2)로 표시되는 화합물의 잔류 염소 농도를 나타내고, W_2 는 상기 조성물에 배합되는 고휘분 전량에 대한 상기 식 (H-2)로 표시되는 화합물의 배합량의 질량비를 나타낸다.]

청구항 10

삭제

청구항 11

삭제

청구항 12

삭제

청구항 13

삭제

청구항 14

삭제

청구항 15

삭제

청구항 16

삭제

청구항 17

삭제

청구항 18

삭제

청구항 19

삭제

발명의 설명

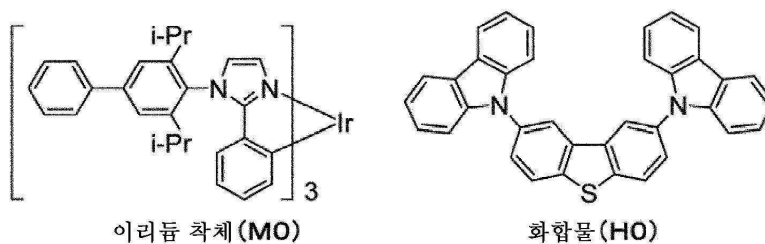
기술 분야

[0001] 본 발명은, 조성물, 인광 발광성 화합물 및 발광 소자에 관한 것이다.

배경 기술

[0002] 유기 일렉트로루미네센스 소자(이하, 「발광 소자」라고도 함)는, 디스플레이 및 조명의 용도에 적합하게 사용하는 것이 가능하며, 연구 개발이 활발히 행해지고 있다. 이 발광 소자는, 발광층, 전하 수송층 등의 유기층 등을 갖는다.

[0003] 특허문헌 1에는, 하기 식으로 표시되는 이리듐 착체(MO) 및 화합물(HO)을 함유하는 발광층을 갖는 발광 소자가 기재되어 있다.



[0004]

선행기술문헌

특허문헌

[0005] (특허문헌 0001) 미국특허출원공개 제2011/0057559호 명세서

발명의 내용

해결하려는 과제

[0006] 그러나, 상기 특허문헌 1에 기재된 발광 소자는, 초기 열화의 억제에 반드시 충분하지 않았다.

[0007] 그래서, 본 발명은, 초기 열화가 충분히 억제된 발광 소자의 제조에 유용한 조성물 및 인광 발광성 화합물을 제공하는 것을 목적으로 한다. 본 발명은 또한, 초기 열화가 충분히 억제된 발광 소자를 제공하는 것을 목적으로 한다.

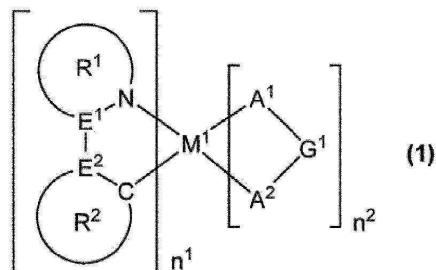
과제의 해결 수단

[0008] 본 발명자들은, 상기 과제를 해결하기 위해서 예의 검토를 행한 결과, 특정한 조성물을 포함하는 유기층 또는 특정한 인광 발광성 화합물이 배합된 유기층을 구비하는 발광 소자에 있어서, 염소 원자가 발광 소자의 초기 열화에 크게 영향을 미치는 것을 발견하고, 또한 염소 원자를 특정한 양으로 제어함으로써, 발광 소자의 초기 열화를 억제할 수 있는 것을 발견하여, 본 발명을 완성하기에 이르렀다. 또한, 특허문헌 1에는, 해당 발광층 중에 포함되는 염소 원자의 양이 초기 열화에 영향을 미친다는 기재는 없다.

[0009] 즉, 본 발명은, 이하의 [1] 내지 [19]를 제공하는 것이다.

[0010] [1] 식 (1)로 표시되는 인광 발광성 화합물과 호스트 재료가 배합된 조성물이며,

[0011] 상기 인광 발광성 화합물에 불순물로서 포함되는 염소 원자의 양이, 상기 조성물에 배합되는 고형분 전량에 대하여, 3.5질량ppm 이하인, 조성물.



[0012]

[0013] [식 중,

[0014] M^1 은 로튬 원자, 팔라듐 원자, 이리듐 원자 또는 백금 원자를 나타낸다.

[0015] n^1 은 1 이상의 정수를 나타내고, n^2 은 0 이상의 정수를 나타내고, $n^1 + n^2$ 은 2 또는 3이다. M^1 이 로튬 원자 또는 이리듐 원자인 경우, $n^1 + n^2$ 은 3이고, M^1 이 팔라듐 원자 또는 백금 원자인 경우, $n^1 + n^2$ 은 2이다.

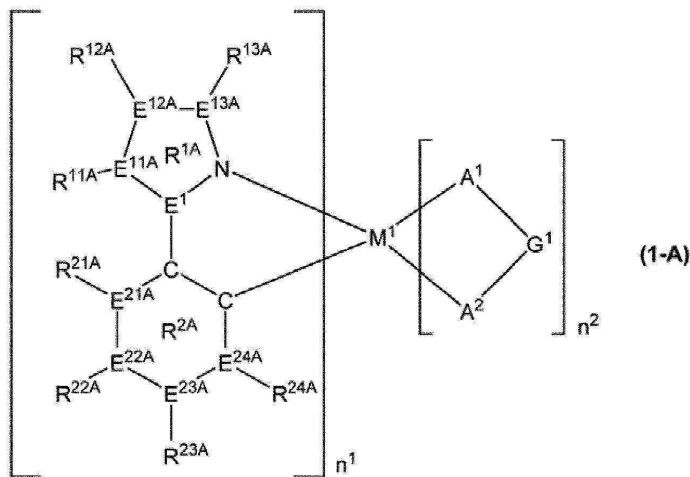
[0016] E^1 및 E^2 는 각각 독립적으로 탄소 원자 또는 질소 원자를 나타낸다. 단, E^1 및 E^2 중 적어도 한쪽은 탄소 원자이다.

[0017] 환 R^1 은 5원의 방향족 복소환을 나타내며, 이 환은 치환기를 갖고 있어도 된다. 해당 치환기가 복수 존재하는 경우, 그들은 동일해도 상이해도 되며, 서로 결합하여, 각각이 결합하는 원자와 함께 환을 형성하고 있어도 된다. 환 R^1 이 복수 존재하는 경우, 그들은 동일해도 상이해도 된다.

[0018] 환 R^2 은 방향족 탄화수소환 또는 방향족 복소환을 나타내며, 이들 환은 치환기를 갖고 있어도 된다. 해당 치환기가 복수 존재하는 경우, 그들은 동일해도 상이해도 되며, 서로 결합하여, 각각이 결합하는 원자와 함께 환을

형성하고 있어도 된다. 환 R^2 가 복수 존재하는 경우, 그들은 동일해도 상이해도 된다.

- [0019] 환 R^1 이 갖고 있어도 되는 치환기와 환 R^2 가 갖고 있어도 되는 치환기는, 서로 결합하여, 각각이 결합하는 원자와 함께 환을 형성하고 있어도 된다.
- [0020] $A^1-G^1-A^2$ 는 음이온성의 2차 배위자를 나타낸다. A^1 및 A^2 는 각각 독립적으로 탄소 원자, 산소 원자 또는 질소 원자를 나타내며, 이들 원자는 환을 구성하는 원자여도 된다. G^1 은 단결합, 또는 A^1 및 A^2 와 함께 2차 배위자를 구성하는 원자단을 나타낸다. $A^1-G^1-A^2$ 가 복수 존재하는 경우, 그들은 동일해도 상이해도 된다.]
- [0021] [2] 상기 인광 발광성 화합물에 불순물로서 포함되는 염소 원자 및 상기 호스트 재료에 불순물로서 포함되는 염소 원자의 총량이, 상기 조성물에 배합되는 고형분 전량에 대하여, 3.5질량ppm 이하인, [1]에 기재된 조성물.
- [0022] [3] 상기 염소 원자의 총량이, 상기 조성물에 배합되는 고형분 전량에 대하여, 0.8질량ppm 이하인, [2]에 기재된 조성물.
- [0023] [4] 상기 염소 원자의 총량이, 상기 조성물에 배합되는 고형분 전량에 대하여, 0.01질량ppm 이상 3.0질량ppm 이하인, [2]에 기재된 조성물.
- [0024] [5] 상기 염소 원자의 총량이, 상기 조성물에 배합되는 고형분 전량에 대하여, 0.1질량ppm 이상 0.8질량ppm 이하인, [2] 내지 [4] 중 어느 하나에 기재된 조성물.
- [0025] [6] 상기 인광 발광성 화합물이, 식 (1-A)로 표시되는 화합물인, [1] 내지 [5] 중 어느 하나에 기재된 조성물.



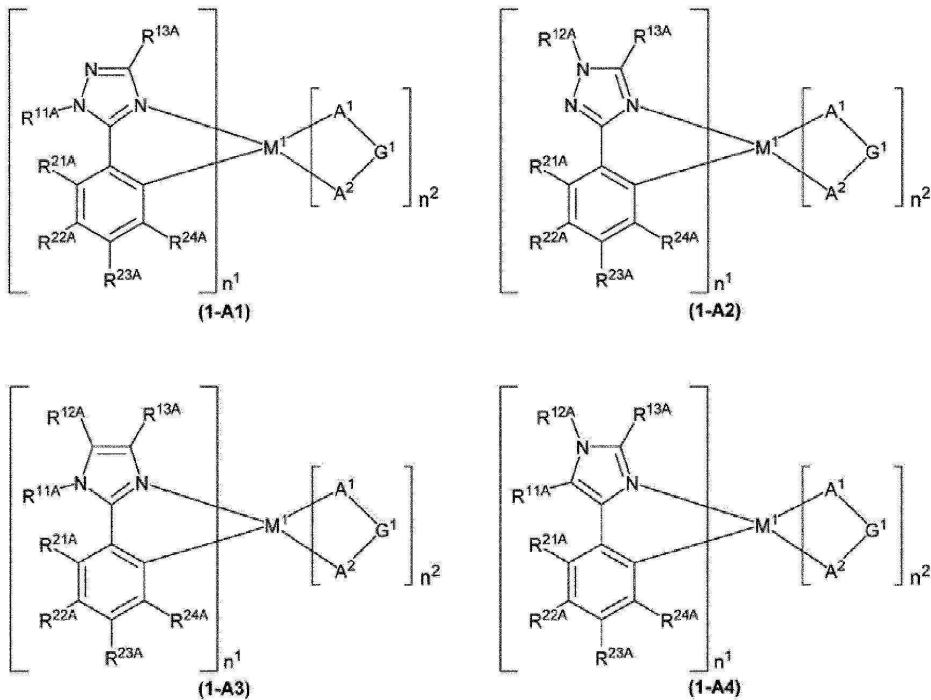
- [0026]
- [0027] [식 중,
- [0028] M^1 , n^1 , n^2 , E^1 및 $A^1-G^1-A^2$ 는 상기와 동일한 의미를 나타낸다.
- [0029] E^{11A} , E^{12A} , E^{13A} , E^{21A} , E^{22A} , E^{23A} 및 E^{24A} 는 각각 독립적으로 질소 원자 또는 탄소 원자를 나타낸다. E^{11A} , E^{12A} , E^{13A} , E^{21A} , E^{22A} , E^{23A} 및 E^{24A} 가 복수 존재하는 경우, 그들은 각각 동일해도 상이해도 된다. E^{11A} 가 질소 원자인 경우, R^{11A} 는 존재해도 존재하지 않아도 된다. E^{12A} 가 질소 원자인 경우, R^{12A} 는 존재해도 존재하지 않아도 된다. E^{13A} 가 질소 원자인 경우, R^{13A} 는 존재해도 존재하지 않아도 된다. E^{21A} 가 질소 원자인 경우, R^{21A} 는 존재하지 않는다. E^{22A} 가 질소 원자인 경우, R^{22A} 는 존재하지 않는다. E^{23A} 가 질소 원자인 경우, R^{23A} 는 존재하지 않는다. E^{24A} 가 질소 원자인 경우, R^{24A} 는 존재하지 않는다.
- [0030] R^{11A} , R^{12A} , R^{13A} , R^{21A} , R^{22A} , R^{23A} 및 R^{24A} 는 각각 독립적으로 수소 원자, 알킬기, 시클로알킬기, 알콕시기, 시클로알콕시기, 아릴기, 아릴옥시기, 1가의 복소환기, 치환 아미노기 또는 불소 원자를 나타내며, 이들 기는 치환기를 갖고 있어도 된다. R^{11A} , R^{12A} , R^{13A} , R^{21A} , R^{22A} , R^{23A} 및 R^{24A} 가 복수 존재하는 경우, 그들은 각각 동일해도 상

이해도 된다. R^{11A} 와 R^{12A} , R^{12A} 와 R^{13A} , R^{11A} 와 R^{21A} , R^{21A} 와 R^{22A} , R^{22A} 와 R^{23A} 및 R^{23A} 와 R^{24A} 는, 각각 결합하여, 각각 이 결합하는 원자와 함께 환을 형성하고 있어도 된다.

[0031] 환 R^{1A} 는 질소 원자, E^1 , E^{11A} , E^{12A} 및 E^{13A} 로 구성되는 트리아졸환 또는 디아졸환을 나타낸다.

[0032] 환 R^{2A} 는 2개의 탄소 원자, E^{21A} , E^{22A} , E^{23A} 및 E^{24A} 로 구성되는 벤젠환, 피리딘환 또는 피리미딘환을 나타낸다.]

[0033] [7] 상기 인광 발광성 화합물이, 식 (1-A1)로 표시되는 화합물, 식 (1-A2)로 표시되는 화합물, 식 (1-A3)으로 표시되는 화합물 또는 식 (1-A4)로 표시되는 화합물인, [6]에 기재된 조성물.



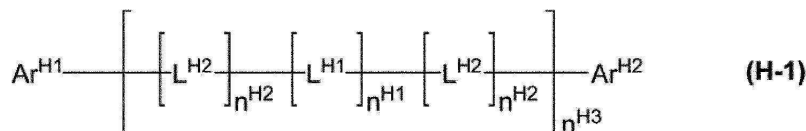
[0034]

[0035] [식 중, M^1 , n^1 , n^2 , R^{11A} , R^{12A} , R^{13A} , R^{21A} , R^{22A} , R^{23A} , R^{24A} 및 A^1 - G^1 - A^2 는 상기과 동일한 의미를 나타낸다.]

[0036] [8] 상기 인광 발광성 화합물이, 식 (1-A3)으로 표시되는 화합물이며,

[0037] 상기 R^{11A} 가 치환기를 갖고 있어도 되는 아릴기인, [7]에 기재된 조성물.

[0038] [9] 상기 호스트 재료가, 식 (H-1)로 표시되는 화합물인, [1] 내지 [8] 중 어느 하나에 기재된 조성물.



[0039]

[0040] [식 중,

[0041] Ar^{H1} 및 Ar^{H2} 는 각각 독립적으로 아릴기 또는 1가의 복소환기를 나타내며, 이들 기는 치환기를 갖고 있어도 된다.

[0042] n^{H1} 및 n^{H2} 는 각각 독립적으로 0 또는 1을 나타낸다. n^{H1} 이 복수 존재하는 경우, 그들은 동일해도 상이해도 된다. 복수 존재하는 n^{H2} 는, 동일해도 상이해도 된다.

[0043] n^{H3} 은 0 이상의 정수를 나타낸다.

[0044] L^{H1} 은 아릴렌기, 2가의 복소환기, 또는 $-[C(R^{H11})_2]_{n^{H11}}-$ 로 표시되는 기를 나타내며, 이들 기는 치환기를 갖고 있

어도 된다. L^{H1} 이 복수 존재하는 경우, 그들은 동일해도 상이해도 된다.

[0045] n^{H11} 은 1 이상 10 이하의 정수를 나타낸다. R^{H11} 은 수소 원자, 알킬기, 시클로알킬기, 알콕시기, 시클로알콕시기, 아릴기 또는 1가의 복소환기를 나타내며, 이들 기는 치환기를 갖고 있어도 된다. 복수 존재하는 R^{H11} 은 동일해도 상이해도 되며, 서로 결합하여, 각각이 결합하는 탄소 원자와 함께 환을 형성하고 있어도 된다.

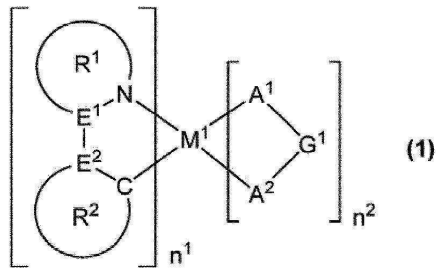
[0046] L^{H2} 는 $-N(-L^{H21}-R^{H21})-$ 로 표시되는 기를 나타낸다. L^{H2} 가 복수 존재하는 경우, 그들은 동일해도 상이해도 된다.

[0047] L^{H21} 은 단결합, 아릴렌기 또는 2가의 복소환기를 나타내며, 이들 기는 치환기를 갖고 있어도 된다. R^{H21} 은 수소 원자, 알킬기, 시클로알킬기, 아릴기 또는 1가의 복소환기를 나타내며, 이들 기는 치환기를 갖고 있어도 된다.]

[0048] [10] 정공 수송 재료, 정공 주입 재료, 전자 수송 재료, 전자 주입 재료, 발광 재료, 산화 방지제 및 용매로 이루어지는 군에서 선택되는 적어도 1종의 재료를 더 함유하는, [1] 내지 [8] 중 어느 하나에 기재된 조성물.

[0049] [11] 식 (1)로 표시되는 인광 발광성 화합물이며,

[0050] 불순물로서 포함되는 염소 원자의 양이, 상기 인광 발광성 화합물의 전량에 대하여, 15질량ppm 이하인, 인광 발광성 화합물.



[0051]

[0052] [식 중,

[0053] M^1 은 로듐 원자, 팔라듐 원자, 이리듐 원자 또는 백금 원자를 나타낸다.

[0054] n^1 은 1 이상의 정수를 나타내고, n^2 는 0 이상의 정수를 나타내고, n^1+n^2 는 2 또는 3이다. M^1 이 로듐 원자 또는 이리듐 원자인 경우, n^1+n^2 는 3이고, M^1 이 팔라듐 원자 또는 백금 원자인 경우, n^1+n^2 는 2이다.

[0055] E^1 및 E^2 는 각각 독립적으로 탄소 원자 또는 질소 원자를 나타낸다. 단, E^1 및 E^2 중 적어도 한쪽은 탄소 원자이다.

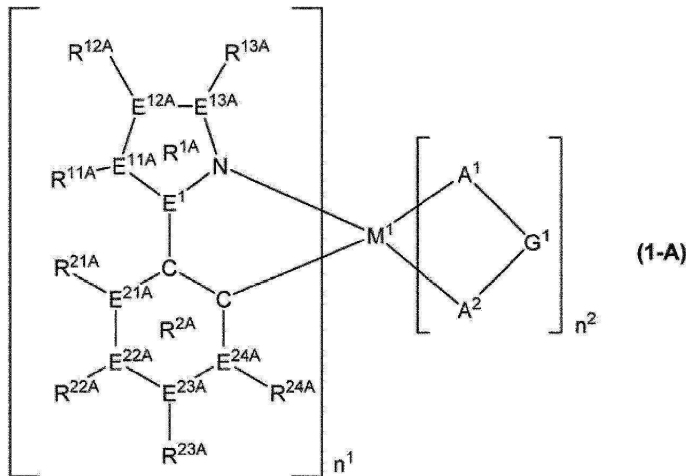
[0056] 환 R^1 은 5원의 방향족 복소환을 나타내며, 이 환은 치환기를 갖고 있어도 된다. 해당 치환기가 복수 존재하는 경우, 그들은 동일해도 상이해도 되며, 서로 결합하여, 각각이 결합하는 원자와 함께 환을 형성하고 있어도 된다. 환 R^1 이 복수 존재하는 경우, 그들은 동일해도 상이해도 된다.

[0057] 환 R^2 은 방향족 탄화수소환 또는 방향족 복소환을 나타내며, 이들 환은 치환기를 갖고 있어도 된다. 해당 치환기가 복수 존재하는 경우, 그들은 동일해도 상이해도 되며, 서로 결합하여, 각각이 결합하는 원자와 함께 환을 형성하고 있어도 된다. 환 R^2 가 복수 존재하는 경우, 그들은 동일해도 상이해도 된다.

[0058] 환 R^1 이 갖고 있어도 되는 치환기와 환 R^2 가 갖고 있어도 되는 치환기는, 서로 결합하여, 각각이 결합하는 원자와 함께 환을 형성하고 있어도 된다.

[0059] $A^1-G^1-A^2$ 는 음이온성의 2차 배위자를 나타낸다. A^1 및 A^2 는 각각 독립적으로 탄소 원자, 산소 원자 또는 질소 원자를 나타내며, 이들 원자는 환을 구성하는 원자여도 된다. G^1 은 단결합, 또는 A^1 및 A^2 와 함께 2차 배위자를 구성하는 원자단을 나타낸다. $A^1-G^1-A^2$ 가 복수 존재하는 경우, 그들은 동일해도 상이해도 된다.]

[0060] [12] 상기 식 (1)로 표시되는 인광 발광성 화합물이, 식 (1-A)로 표시되는 화합물인, [11]에 기재된 인광 발광성 화합물.



[0061]

[0062] [식 중,

[0063] M^1 , n^1 , n^2 , E^1 및 $A^1-G^1-A^2$ 는 상기와 동일한 의미를 나타낸다.

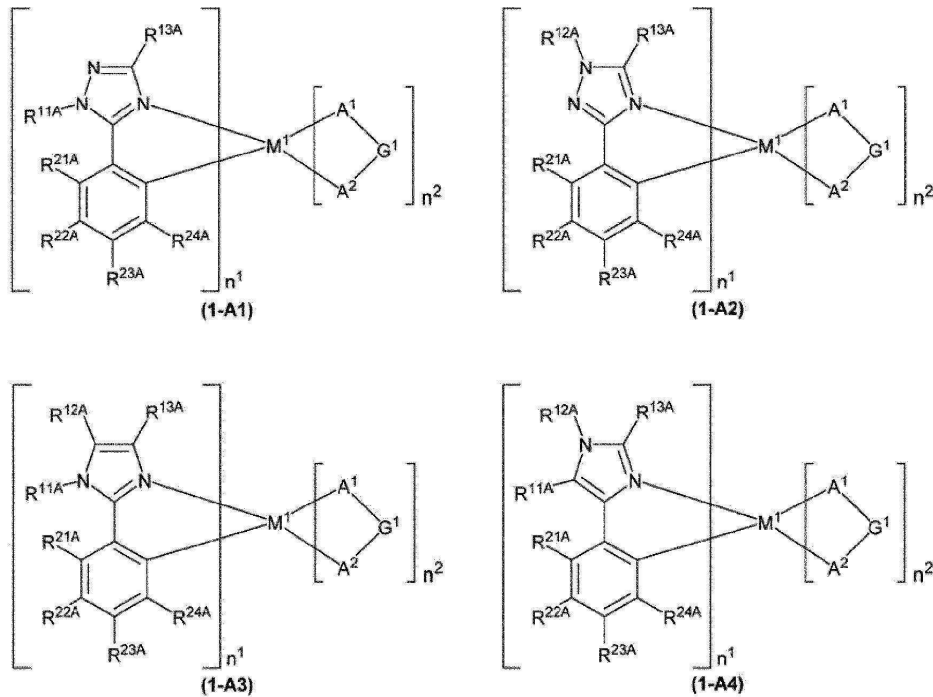
[0064] E^{11A} , E^{12A} , E^{13A} , E^{21A} , E^{22A} , E^{23A} 및 E^{24A} 는 각각 독립적으로 질소 원자 또는 탄소 원자를 나타낸다. E^{11A} , E^{12A} , E^{13A} , E^{21A} , E^{22A} , E^{23A} 및 E^{24A} 가 복수 존재하는 경우, 그들은 각각 동일해도 상이해도 된다. E^{11A} 가 질소 원자인 경우, R^{11A} 는 존재해도 존재하지 않아도 된다. E^{12A} 가 질소 원자인 경우, R^{12A} 는 존재해도 존재하지 않아도 된다. E^{13A} 가 질소 원자인 경우, R^{13A} 는 존재해도 존재하지 않아도 된다. E^{21A} 가 질소 원자인 경우, R^{21A} 는 존재하지 않는다. E^{22A} 가 질소 원자인 경우, R^{22A} 는 존재하지 않는다. E^{23A} 가 질소 원자인 경우, R^{23A} 는 존재하지 않는다. E^{24A} 가 질소 원자인 경우, R^{24A} 는 존재하지 않는다.

[0065] R^{11A} , R^{12A} , R^{13A} , R^{21A} , R^{22A} , R^{23A} 및 R^{24A} 는 각각 독립적으로 수소 원자, 알킬기, 시클로알킬기, 알콕시기, 시클로알콕시기, 아릴기, 아릴옥시기, 1가의 복소환기, 치환 아미노기 또는 불소 원자를 나타내며, 이들 기는 치환기를 갖고 있어도 된다. R^{11A} , R^{12A} , R^{13A} , R^{21A} , R^{22A} , R^{23A} 및 R^{24A} 가 복수 존재하는 경우, 그들은 각각 동일해도 상이해도 된다. R^{11A} 와 R^{12A} , R^{12A} 와 R^{13A} , R^{11A} 와 R^{21A} , R^{21A} 와 R^{22A} , R^{22A} 와 R^{23A} 및 R^{23A} 와 R^{24A} 는, 각각 결합하여, 각각이 결합하는 원자와 함께 환을 형성하고 있어도 된다.

[0066] 환 R^{1A} 는 질소 원자, E^1 , E^{11A} , E^{12A} 및 E^{13A} 로 구성되는 트리아졸환 또는 디아졸환을 나타낸다.

[0067] 환 R^{2A} 는 2개의 탄소 원자, E^{21A} , E^{22A} , E^{23A} 및 E^{24A} 로 구성되는 벤젠환, 피리딘환 또는 피리미딘환을 나타낸다.]

[0068] [13] 상기 인광 발광성 화합물이, 식 (1-A1)로 표시되는 화합물, 식 (1-A2)로 표시되는 화합물, 식 (1-A3)으로 표시되는 화합물 또는 식 (1-A4)로 표시되는 화합물인, [12]에 기재된 인광 발광성 화합물.



[0069]

[0070] [식 중, M^1 , n^1 , n^2 , R^{11A} , R^{12A} , R^{13A} , R^{21A} , R^{22A} , R^{23A} , R^{24A} 및 $A^1-G^1-A^2$ 는 상기와 동일한 의미를 나타낸다.]

[0071] [14] 상기 인광 발광성 화합물이, 식 (1-A3)으로 표시되는 화합물이며,

[0072] 상기 R^{11A} 가 치환기를 갖고 있어도 되는 아릴기인, [13]에 기재된 인광 발광성 화합물.

[0073] [15] 상기 불순물로서 포함되는 염소 원자의 양이, 0.9질량ppm 이하인, [11] 내지 [14] 중 어느 하나에 기재된 인광 발광성 화합물.

[0074] [16] 상기 불순물로서 포함되는 염소 원자의 양이, 0.01질량ppm 이상 12질량ppm 이하인, [11] 내지 [14] 중 어느 하나에 기재된 인광 발광성 화합물.

[0075] [17] 상기 불순물로서 포함되는 염소 원자의 양이, 0.1질량ppm 이상 0.9질량ppm 이하인, [15] 또는 [16]에 기재된 인광 발광성 화합물.

[0076] [18] [1] 내지 [10] 중 어느 하나에 기재된 조성물을 포함하는 유기층을 구비하는, 발광 소자.

[0077] [19] [11] 내지 [17] 중 어느 하나에 기재된 인광 발광성 화합물이 배합된 유기층을 구비하는, 발광 소자.

발명의 효과

[0078] 본 발명에 따르면, 초기 열화가 충분히 억제된 발광 소자의 제조에 유용한 조성물 및 인광 발광성 화합물을 제공할 수 있다. 또한, 본 발명에 따르면, 초기 열화가 충분히 억제된 발광 소자를 제공할 수 있다.

발명을 실시하기 위한 구체적인 내용

[0079] 이하, 본 발명의 적합한 실시 형태에 대해서 상세하게 설명한다.

[0080] <공통되는 용어의 설명>

[0081] 본 명세서에서 공통되게 사용되는 용어는, 특기하지 않는 한, 이하의 의미이다.

[0082] Me은 메틸기, Et는 에틸기, Bu는 부틸기, i-Pr은 이소프로필기, t-Bu는 tert-부틸기를 나타낸다.

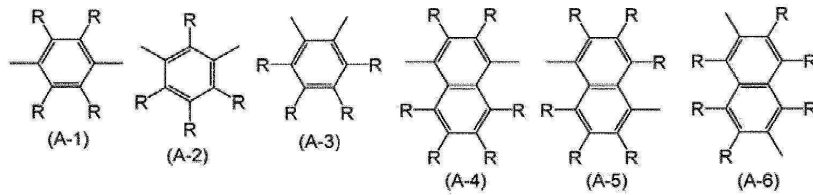
[0083] 수소 원자는, 중수소 원자여도 되고, 경수소 원자여도 된다.

[0084] 인광 발광성 화합물 및 금속 착체를 나타내는 식 중, 중심 금속과의 결합을 나타내는 실선은, 공유 결합 또는 배위 결합을 의미한다.

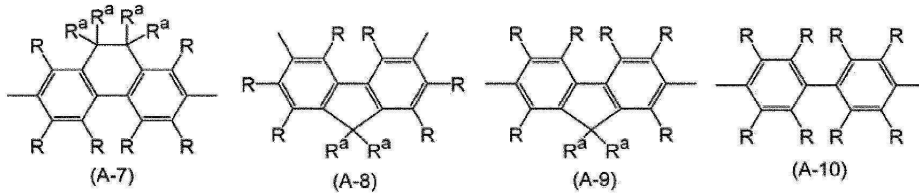
- [0085] 「고분자 화합물」이란, 분자량 분포를 가지며, 폴리스티렌환산의 수 평균 분자량이 1×10^3 내지 1×10^8 인 중합체를 의미한다.
- [0086] 고분자 화합물은, 블록 공중합체, 랜덤 공중합체, 교호 공중합체, 그래프트 공중합체 중 어느 것이어도 되고, 그 외의 양태여도 된다.
- [0087] 고분자 화합물의 말단기는, 중합 활성기가 그대로 남아있으면, 고분자 화합물을 발광 소자의 제작에 사용한 경우에 발광 특성 또는 휘도 수명이 저하될 가능성이 있으므로, 바람직하게는 안정된 기이다. 이 말단기로서는, 바람직하게는 주쇄와 공액 결합하고 있는 기이며, 예를 들어 탄소-탄소 결합을 통해 아릴기 또는 1가의 복소환기와 결합하고 있는 기를 들 수 있다.
- [0088] 「저분자 화합물」이란, 분자량 분포를 갖지 않으며, 분자량이 1×10^4 이하인 화합물을 의미한다.
- [0089] 「구성 단위」란, 고분자 화합물 중에 1개 이상 존재하는 단위를 의미한다.
- [0090] 「알킬기」는, 직쇄 및 분지 중 어느 것이어도 된다. 직쇄의 알킬기의 탄소 원자수는, 치환기의 탄소 원자수를 포함하지 않으며, 통상 1 내지 50이고, 바람직하게는, 3 내지 30이고, 보다 바람직하게는 4 내지 20이다. 분지의 알킬기 탄소 원자수는, 치환기의 탄소 원자수를 포함하지 않으며, 통상 3 내지 50이고, 바람직하게는, 3 내지 30이고, 보다 바람직하게는 4 내지 20이다.
- [0091] 알킬기는, 치환기를 갖고 있어도 되며, 예를 들어 메틸기, 에틸기, 프로필기, 이소프로필기, 부틸기, 2-부틸기, 이소부틸기, tert-부틸기, 펜틸기, 이소아밀기, 2-에틸부틸기, 헥실기, 헵틸기, 옥틸기, 2-에틸헥실기, 3-프로필헵틸기, 데실기, 3,7-디메틸옥틸기, 2-에틸옥틸기, 2-헥실데실기, 도데실기, 및 이들 기에서의 수소 원자가, 시클로알킬기, 알콕시기, 시클로알콕시기, 아릴기, 불소 원자 등으로 치환된 기를 들 수 있으며, 예를 들어 트리플루오로메틸기, 펜타플루오로에틸기, 퍼플루오로부틸기, 퍼플루오로헥실기, 퍼플루오로옥틸기, 3-페닐프로필기, 3-(4-메틸페닐)프로필기, 3-(3,5-디-헥실페닐)프로필기, 6-에틸옥시헥실기를 들 수 있다.
- [0092] 「시클로알킬기」의 탄소 원자수는, 치환기의 탄소 원자수를 포함하지 않으며, 통상 3 내지 50이고, 바람직하게는, 3 내지 30이고, 보다 바람직하게는 4 내지 20이다.
- [0093] 시클로알킬기는, 치환기를 갖고 있어도 되며, 예를 들어 시클로헥실기, 시클로헥실 메틸기, 시클로헥실 에틸기를 들 수 있다.
- [0094] 「아릴기」는, 방향족 탄화수소로 환을 구성하는 탄소 원자에 직접 결합하는 수소 원자 1개를 제거한 나머지의 원자단을 의미한다. 아릴기의 탄소 원자수는, 치환기의 탄소 원자수를 포함하지 않으며, 통상 6 내지 60이고, 바람직하게는, 6 내지 20이고, 보다 바람직하게는 6 내지 10이다.
- [0095] 아릴기는, 치환기를 갖고 있어도 되며, 예를 들어 페닐기, 1-나프틸기, 2-나프틸기, 1-안트라세닐기, 2-안트라세닐기, 9-안트라세닐기, 1-피레닐기, 2-피레닐기, 4-피레닐기, 2-플루오레닐기, 3-플루오레닐기, 4-플루오레닐기, 2-페닐페닐기, 3-페닐페닐기, 4-페닐페닐기, 및 이들 기에서의 수소 원자가, 알킬기, 시클로알킬기, 알콕시기, 시클로알콕시기, 아릴기, 불소 원자 등으로 치환된 기를 들 수 있다.
- [0096] 「알콕시기」는, 직쇄 및 분지 중 어느 것이어도 된다. 직쇄의 알콕시기 탄소 원자수는, 치환기의 탄소 원자수를 포함하지 않으며, 통상 1 내지 40이고, 바람직하게는, 4 내지 10이다. 분지의 알콕시기 탄소 원자수는, 치환기의 탄소 원자수를 포함하지 않으며, 통상 3 내지 40이고, 바람직하게는, 4 내지 10이다.
- [0097] 알콕시기는, 치환기를 갖고 있어도 되며, 예를 들어 메톡시기, 에톡시기, 프로필옥시기, 이소프로필옥시기, 부틸옥시기, 이소부틸옥시기, tert-부틸옥시기, 펜틸옥시기, 헥실옥시기, 헵틸옥시기, 옥틸옥시기, 2-에틸헥실옥시기, 노닐옥시기, 데실옥시기, 3,7-디메틸옥틸옥시기, 라우릴옥시기, 및 이들 기에서의 수소 원자가, 시클로알킬기, 알콕시기, 시클로알콕시기, 아릴기, 불소 원자 등으로 치환된 기를 들 수 있다.
- [0098] 「시클로알콕시기」의 탄소 원자수는, 치환기의 탄소 원자수를 포함하지 않으며, 통상 3 내지 40이고, 바람직하게는, 4 내지 10이다.
- [0099] 시클로알콕시기는, 치환기를 갖고 있어도 되며, 예를 들어 시클로헥실옥시기를 들 수 있다.
- [0100] 「아릴옥시기」의 탄소 원자수는, 치환기의 탄소 원자수를 포함하지 않으며, 통상 6 내지 60이고, 바람직하게는, 6 내지 48이다.

- [0101] 아릴옥시기는, 치환기를 갖고 있어도 되며, 예를 들어 페녹시기, 1-나프틸옥시기, 2-나프틸옥시기, 1-안트라세닐옥시기, 9-안트라세닐옥시기, 1-피레닐옥시기, 및 이들 기에서의 수소 원자가, 알킬기, 시클로알킬기, 알콕시기, 시클로알콕시기, 불소 원자 등으로 치환된 기를 들 수 있다.
- [0102] 「p개의 복소환기」(p는, 1 이상의 정수를 나타냄)란, 복소환식 화합물로부터, 환을 구성하는 탄소 원자 또는 헤테로 원자에 직접 결합하고 있는 수소 원자 중 p개의 수소 원자를 제거한 나머지의 원자단을 의미한다. p개의 복소환기 중에서도, 방향족 복소환식 화합물로, 환을 구성하는 탄소 원자 또는 헤테로 원자에 직접 결합하고 있는 수소 원자 중 p개의 수소 원자를 제거한 나머지의 원자단인 「p개의 방향족 복소환기」가 바람직하다.
- [0103] 「방향족 복소환식 화합물」은, 옥사디아졸, 티아디아졸, 티아졸, 옥사졸, 티오펜, 피롤, 포스폴, 푸란, 피리딘, 피라진, 피리미딘, 트리아진, 피리다진, 퀴놀린, 이소퀴놀린, 카르바졸, 디벤조포스폴 등의 복소환 자체가 방향족성을 나타내는 화합물, 및 페녹사진, 페노티아진, 디벤조보롤, 디벤조실롤, 벤조피란 등의 복소환 자체는 방향족성을 나타내지 않아도, 복소환에 방향환이 축환되어 있는 화합물을 의미한다.
- [0104] 1개의 복소환기의 탄소 원자수는, 치환기의 탄소 원자수를 포함하지 않으며, 통상 2 내지 60이고, 바람직하게는, 4 내지 20이다.
- [0105] 1개의 복소환기는, 치환기를 갖고 있어도 되며, 예를 들어 티에닐기, 피롤릴기, 푸릴기, 피리디닐기, 피페리디닐기, 퀴놀리닐기, 이소퀴놀리닐기, 피리미디닐기, 트리아지닐기, 및 이들 기에서의 수소 원자가, 알킬기, 시클로알킬기, 알콕시기, 시클로알콕시기 등으로 치환된 기를 들 수 있다.
- [0106] 「할로겐 원자」란, 불소 원자, 염소 원자, 브롬 원자 또는 요오드 원자를 나타낸다.
- [0107] 「아미노기」는, 치환기를 갖고 있어도 되고, 치환 아미노기가 바람직하다. 아미노기가 갖는 치환기로서는, 알킬기, 시클로알킬기, 아릴기 또는 1개의 복소환기가 바람직하다.
- [0108] 치환 아미노기로서는, 예를 들어 디알킬아미노기, 디시클로알킬아미노기 및 디아릴아미노기를 들 수 있다.
- [0109] 아미노기로서는, 예를 들어 디메틸아미노기, 디에틸아미노기, 디페닐아미노기, 비스(4-메틸페닐)아미노기, 비스(4-tert-부틸페닐)아미노기, 비스(3,5-디-tert-부틸페닐)아미노기를 들 수 있다.
- [0110] 「알케닐기」는, 직쇄 및 분지 중 어느 것이어도 된다. 직쇄의 알케닐기의 탄소 원자수는, 치환기의 탄소 원자수를 포함하지 않으며, 통상 2 내지 30이고, 바람직하게는, 3 내지 20이다. 분지의 알케닐기 탄소 원자수는, 치환기의 탄소 원자수를 포함하지 않으며, 통상 3 내지 30이고, 바람직하게는, 4 내지 20이다.
- [0111] 「시클로알케닐기」의 탄소 원자수는, 치환기의 탄소 원자수를 포함하지 않으며, 통상 3 내지 30이고, 바람직하게는, 4 내지 20이다.
- [0112] 알케닐기 및 시클로알케닐기는, 치환기를 갖고 있어도 되며, 예를 들어 비닐기, 1-프로페닐기, 2-프로페닐기, 2-부테닐기, 3-부테닐기, 3-펜테닐기, 4-펜테닐기, 1-헥세닐기, 5-헥세닐기, 7-옥테닐기, 및 이들 기가 치환기를 갖는 기를 들 수 있다.
- [0113] 「알키닐기」는, 직쇄 및 분지 중 어느 것이어도 된다. 알키닐기의 탄소 원자수는, 치환기의 탄소 원자를 포함하지 않으며, 통상 2 내지 20이고, 바람직하게는, 3 내지 20이다. 분지의 알키닐기 탄소 원자수는, 치환기의 탄소 원자를 포함하지 않으며, 통상 4 내지 30이고, 바람직하게는, 4 내지 20이다.
- [0114] 「시클로알키닐기」의 탄소 원자수는, 치환기의 탄소 원자를 포함하지 않으며, 통상 4 내지 30이고, 바람직하게는, 4 내지 20이다.
- [0115] 알키닐기 및 시클로알키닐기는, 치환기를 갖고 있어도 되며, 예를 들어 에티닐기, 1-프로피닐기, 2-프로피닐기, 2-부티닐기, 3-부티닐기, 3-펜티닐기, 4-펜티닐기, 1-헥시닐기, 5-헥시닐기, 및 이들 기가 치환기를 갖는 기를 들 수 있다.
- [0116] 「아릴렌기」는, 방향족 탄화수소로부터 환을 구성하는 탄소 원자에 직접 결합하는 수소 원자 2개를 제거한 나머지의 원자단을 의미한다. 아릴렌기의 탄소 원자수는, 치환기의 탄소 원자수를 포함하지 않으며, 통상 6 내지 60이고, 바람직하게는, 6 내지 30이고, 보다 바람직하게는 6 내지 18이다.
- [0117] 아릴렌기는, 치환기를 갖고 있어도 되며, 예를 들어 페닐렌기, 나프탈렌디일기, 안트라센디일기, 페난트렌디일기, 디히드로페난트렌디일기, 나프타센디일기, 플루오렌디일기, 피렌디일기, 페릴렌디일기, 크리센디일기, 및 이들 기가 치환기를 갖는 기를 들 수 있고, 바람직하게는, 식 (A-1) 내지 식 (A-20)으로 표시되는 기이다. 아

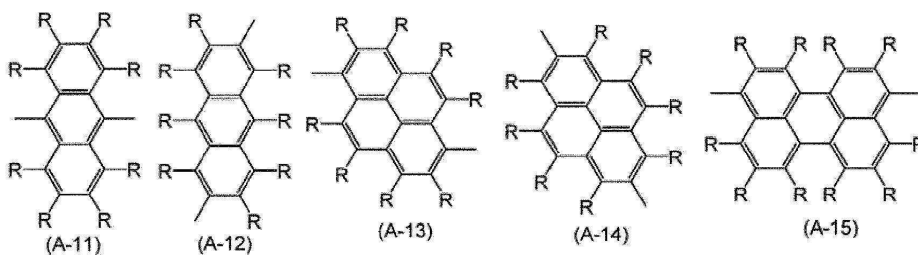
릴렌기는, 이들 기가 복수 결합한 기를 포함한다.



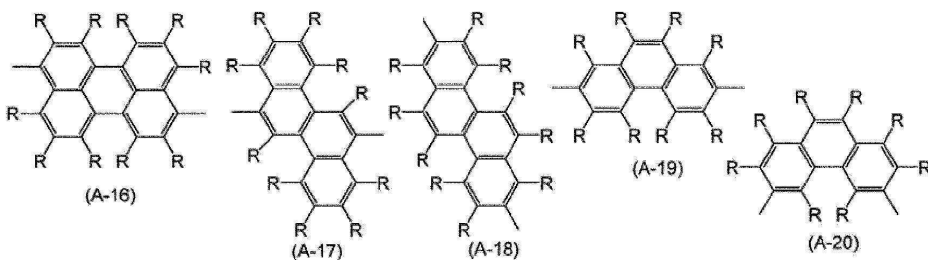
[0118]



[0119]



[0120]

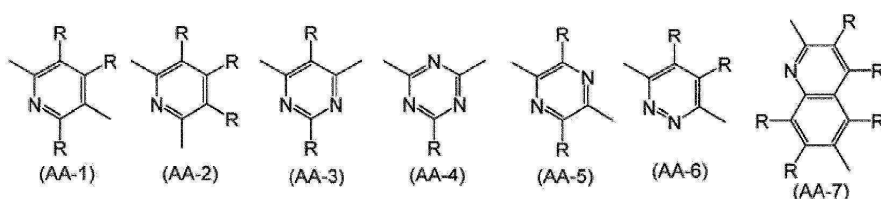


[0121]

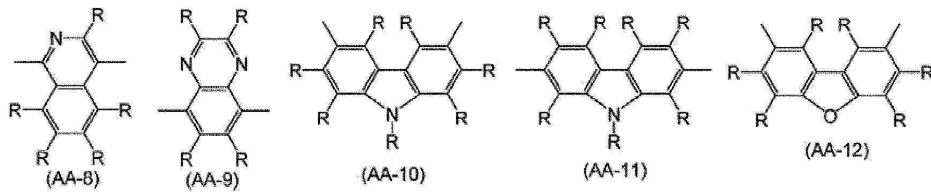
[0122] [식 중, R 및 R^a는 각각 독립적으로 수소 원자, 알킬기, 시클로알킬기, 아릴기 또는 1가의 복소환기를 나타낸다. 복수 존재하는 R 및 R^a는, 각각, 동일해도 상이해도 되며, R^a끼리는 서로 결합하여, 각각이 결합하는 원자와 함께 환을 형성하고 있어도 된다.]

[0123] 2가의 복소환기의 탄소 원자수는, 치환기의 탄소 원자수를 포함하지 않으며, 통상 2 내지 60이고, 바람직하게는, 3 내지 20이고, 보다 바람직하게는, 4 내지 15이다.

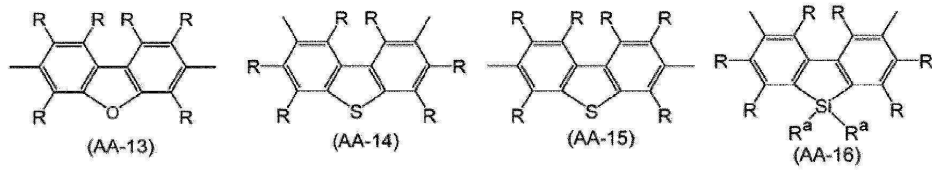
[0124] 2가의 복소환기는, 치환기를 갖고 있어도 되며, 예를 들어 피리딘, 디아자벤젠, 트리아진, 아자나프탈렌, 디아자나프탈렌, 카르바졸, 디벤조푸란, 디벤조티오펜, 디벤조실롤, 페녹사진, 페노티아진, 아크리딘, 디히드로아크리딘, 푸란, 티오펜, 아졸, 디아졸, 트리아졸로부터, 환을 구성하는 탄소 원자 또는 헤테로 원자에 직접 결합하고 있는 수소 원자 중 2개의 수소 원자를 제거한 2가의 기를 들 수 있고, 바람직하게는, 식 (AA-1) 내지 식 (AA-34)로 표시되는 기이다. 2가의 복소환기는, 이들 기가 복수 결합한 기를 포함한다.



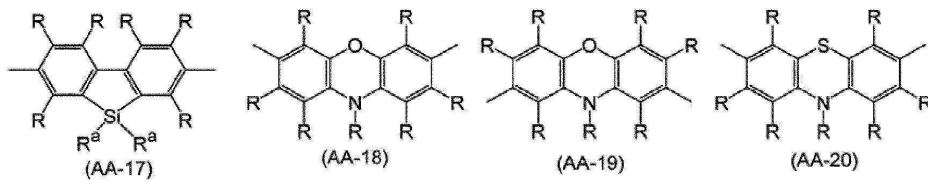
[0125]



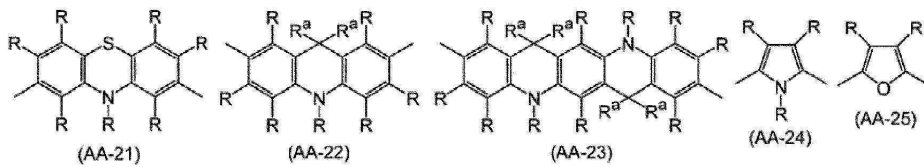
[0126]



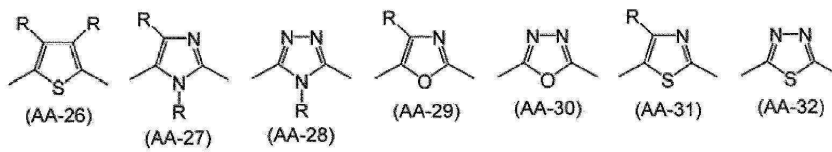
[0127]



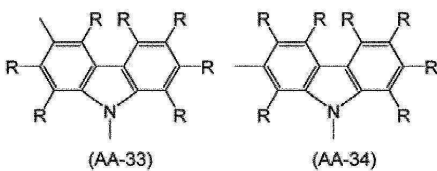
[0128]



[0129]



[0130]

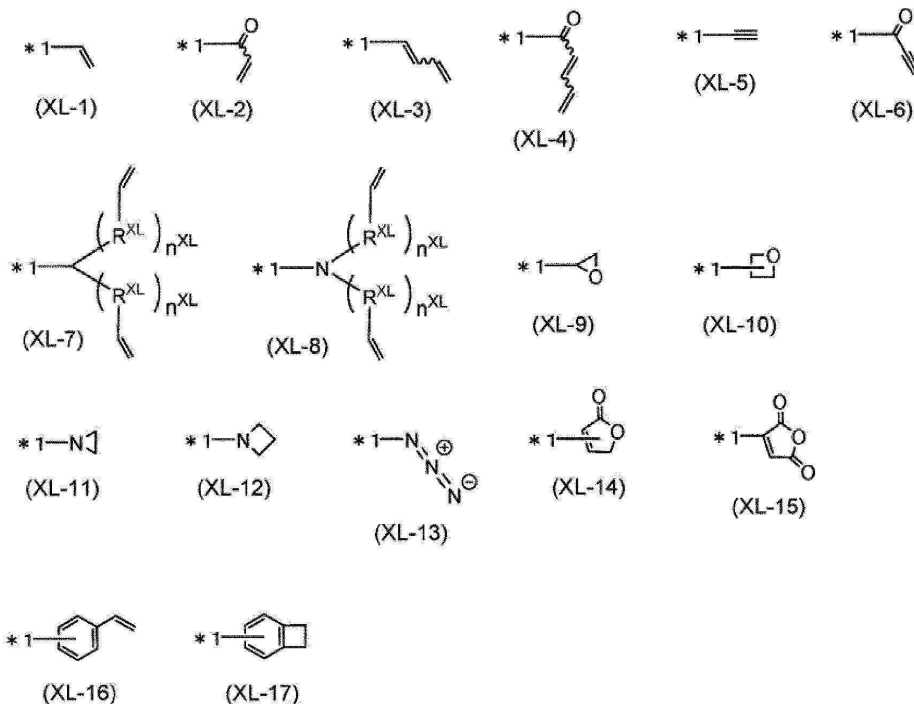


[0131]

[0132] [식 중, R 및 R^a는 상기와 동일한 의미를 나타낸다.]

[0133] 「가교기」란, 가열 처리, 자외선 조사 처리, 근자외선 조사 처리, 가시광 조사 처리, 적외선 조사 처리, 라디칼 반응 등에 제공함으로써, 새로운 결합을 생성하는 것이 가능한 기이고, 바람직하게는, 가교기 A군의 식 (XL-1) 내지 (XL-17)로 표시되는 가교기이다.

[0134] (가교기 A군)



[0135]

[0136] [식 중, R^{XL} 은 메틸렌기, 산소 원자 또는 황 원자를 나타내고, n^{XL} 은 0 내지 5의 정수를 나타낸다. R^{XL} 이 복수 존재하는 경우, 그들은 동일해도 상이해도 되고, n^{XL} 이 복수 존재하는 경우, 그들은 동일해도 상이해도 된다. *1은 결합 위치를 나타낸다. 이들 가교성기는 치환기를 갖고 있어도 된다.]

[0137] 「치환기」란, 불소 원자, 시아노기, 알킬기, 시클로알킬기, 아릴기, 1가의 복소환기, 알콕시기, 시클로알콕시기, 아릴옥시기, 아미노기, 치환 아미노기, 알케닐기, 시클로알케닐기, 알킬닐기 또는 시클로알킬닐기를 나타낸다. 치환기는 가교기여도 된다.

[0138] 「염소」란, 원자 번호 17의 원소를 의미한다. 「브롬」이란, 원자 번호 35의 원소를 의미한다.

[0139] [식 (1)로 표시되는 인광 발광성 화합물]

[0140] 먼저, 본 실시 형태에 따른 조성물에 배합되는 식 (1)로 표시되는 인광 발광성 화합물에 대해서 설명한다.

[0141] 식 (1)로 표시되는 인광 발광성 화합물은, 통상 실온(25℃)에서 인광 발광 성을 나타내는 화합물(금속 착체)이고, 바람직하게는, 실온(25℃)에서 삼중항 여기 상태로부터의 발광을 나타내는 화합물이다.

[0142] 식 (1)로 표시되는 인광 발광성 화합물은, 바람직하게는 발광 스펙트럼의 최대 피크 파장이 380nm 이상 495nm 미만인 화합물이고, 보다 바람직하게는, 발광 스펙트럼의 최대 피크 파장이 400nm 이상 490nm 미만인 화합물이고, 더욱 바람직하게는, 발광 스펙트럼의 최대 피크 파장이 420nm 이상 485nm 미만인 화합물이고, 특히 바람직하게는, 발광 스펙트럼의 최대 피크 파장이 440nm 이상 480nm 미만인 화합물이고, 그 중에서도 바람직하게는, 발광 스펙트럼의 최대 피크 파장이 460nm 이상 475nm 미만인 화합물이다.

[0143] 인광 발광성 화합물의 발광 스펙트럼의 최대 피크 파장은, 인광 발광성 화합물을, 크실렌, 톨루엔, 클로로포름, 테트라히드로푸란 등의 유기 용매에 용해시켜서, 희박 용액을 제조하여 (1×10^{-6} 내지 1×10^{-3} 질량%), 해당 희박 용액의 PL 스펙트럼을 실온에서 측정함으로써 평가할 수 있다. 인광 발광성 화합물을 용해시키는 유기 용매로서는, 크실렌이 바람직하다.

[0144] 식 (1)로 표시되는 인광 발광성 화합물은, 중심 금속인 M^1 과, 첨가 n^1 로 그 수를 규정하고 있는 배위자와, 첨가 n^2 로 그 수를 규정하고 있는 배위자로 구성되는 인광 발광성 화합물이다.

[0145] M^1 은 본 실시 형태에 따른 발광 소자의 초기 열화가 보다 억제되므로, 이리듐 원자 또는 백금 원자인 것이 바람

직하고, 이리듐 원자인 것이 보다 바람직하다.

[0146] M^1 이 로듐 원자 또는 이리듐 원자인 경우, n^1 은 2 또는 3인 것이 바람직하고, 3인 것이 보다 바람직하다.

[0147] M^1 이 팔라듐 원자 또는 백금 원자인 경우, n^1 은 2인 것이 바람직하다.

[0148] E^1 및 E^2 는 탄소 원자인 것이 바람직하다.

[0149] 환 R^1 은 2개 이상 4개 이하인 질소 원자를 구성 원자로서 갖는 5원의 방향족 복소환인 것이 바람직하고, 디아졸 환 또는 트리아졸환인 것이 보다 바람직하고, 디아졸환인 것이 더욱 바람직하며, 이들 환은 치환기를 갖고 있어도 된다.

[0150] 환 R^2 는 5원 혹은 6원의 방향족 탄화수소환, 또는 5원 혹은 6원의 방향족 복소환인 것이 바람직하고, 6원의 방향족 탄화수소환 또는 6원의 방향족 복소환인 것이 보다 바람직하고, 6원의 방향족 탄화수소환인 것이 더욱 바람직하며, 이들 환은 치환기를 갖고 있어도 된다. 단, 환 R^2 가 6원의 방향족 복소환인 경우, E^2 는 탄소 원자이다.

[0151] 환 R^2 로서는, 예를 들어 벤젠환, 나프탈렌환, 플루오렌환, 페난트렌환, 인덴환, 피리딘환, 디아자벤젠환 및 트리아진환을 들 수 있고, 벤젠환, 나프탈렌환, 플루오렌환, 피리딘환 또는 피리미딘환이 바람직하고, 벤젠환, 피리딘환 또는 피리미딘환이 보다 바람직하고, 벤젠환이 더욱 바람직하며, 이들 환은 치환기를 갖고 있어도 된다.

[0152] 환 R^1 및 환 R^2 가 갖고 있어도 되는 치환기로서는, 불소 원자, 알킬기, 시클로알킬기, 알콕시기, 시클로알콕시기, 아릴옥시기, 아릴기, 1가의 복소환기 또는 치환 아미노기가 바람직하고, 알킬기, 시클로알킬기, 알콕시기, 아릴기, 1가의 복소환기 또는 치환 아미노기가 보다 바람직하고, 알킬기, 시클로알킬기, 아릴기 또는 1가의 복소환기가 더욱 바람직하고, 아릴기가 특히 바람직하며, 이들 기는 치환기를 더 갖고 있어도 된다.

[0153] 환 R^1 및 환 R^2 가 갖고 있어도 되는 치환기에 있어서의 아릴기로서는, 페닐기, 나프틸기, 안트라세닐기, 페난트레닐기, 디히드로페난트레닐기, 플루오레닐기 또는 피레닐기가 바람직하고, 페닐기, 나프틸기 또는 플루오레닐기가 보다 바람직하고, 페닐기가 더욱 바람직하며, 이들 기는 치환기를 갖고 있어도 된다.

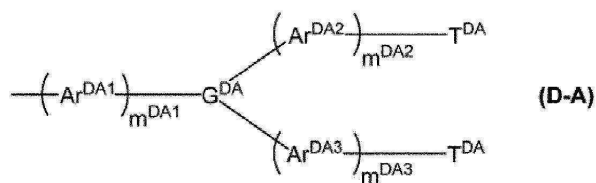
[0154] 환 R^1 및 환 R^2 가 갖고 있어도 되는 치환기에 있어서의 1가의 복소환기로서는, 피리딜기, 피리미디닐기, 트리아지닐기, 퀴놀리닐기, 이소퀴놀리닐기, 디벤조푸라닐기, 디벤조티에닐기, 카르바졸릴기, 아자카르바졸릴기, 디아자카르바졸릴기, 페녹사지닐기 또는 페노티아지닐기가 바람직하고, 피리딜기, 피리미디닐기, 트리아지닐기, 카르바졸릴기, 아자카르바졸릴기 또는 디아자카르바졸릴기가 보다 바람직하고, 피리딜기, 피리미디닐기 또는 트리아지닐기가 더욱 바람직하며, 이들 기는 치환기를 갖고 있어도 된다.

[0155] 환 R^1 및 환 R^2 가 갖고 있어도 되는 치환기에 있어서의 치환 아미노기에 있어서, 아미노기가 갖는 치환기로서는, 아릴기 또는 1가의 복소환기가 바람직하며, 이들 기는 치환기를 더 갖고 있어도 된다. 아미노기가 갖는 치환기에 있어서의 아릴기의 예 및 바람직한 범위는, 환 R^1 및 환 R^2 가 갖고 있어도 되는 치환기에 있어서의 아릴기의 예 및 바람직한 범위와 동일하다. 아미노기가 갖는 치환기에 있어서의 1가의 복소환기의 예 및 바람직한 범위는, 환 R^1 및 환 R^2 가 갖고 있어도 되는 치환기에 있어서의 1가의 복소환기의 예 및 바람직한 범위와 동일하다.

[0156] 환 R^1 및 환 R^2 가 갖고 있어도 되는 치환기가 더 갖고 있어도 되는 치환기로서는, 알킬기, 시클로알킬기, 아릴기, 1가의 복소환기, 알콕시기, 시클로알콕시기, 아릴옥시기 또는 치환 아미노기가 바람직하고, 알킬기, 시클로알킬기, 아릴기, 1가의 복소환기 또는 치환 아미노기가 보다 바람직하고, 알킬기, 시클로알킬기, 아릴기 또는 1가의 복소환기가 더욱 바람직하고, 알킬기, 시클로알킬기 또는 아릴기가 특히 바람직하며, 이들 기는 치환기를 더 갖고 있어도 된다.

[0157] 환 R^1 및 환 R^2 가 갖고 있어도 되는 치환기에 있어서의 아릴기, 1가의 복소환기 또는 치환 아미노기는, 본 실시 형태에 따른 발광 소자의 초기 열화가 보다 억제되므로, 바람직하게는, 식 (D-A), (D-B) 또는 (D-C)로 표시되는 기이고, 보다 바람직하게는, 식 (D-A) 또는 (D-C)로 표시되는 기이고, 특히 바람직하게는, 식 (D-C)로 표시되는

기이다.



[0158]

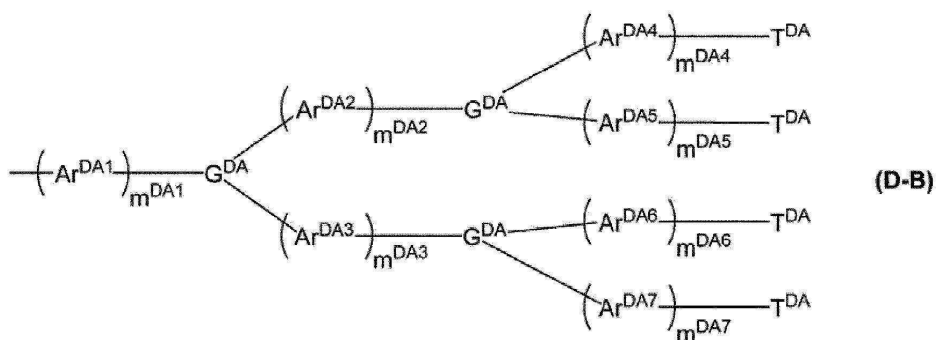
[0159] [식 중,

[0160] m^{DA1} , m^{DA2} 및 m^{DA3} 은 각각 독립적으로 0 이상의 정수를 나타낸다.

[0161] G^{DA} 는 질소 원자, 방향족 탄화수소기 또는 복소환기를 나타내며, 이들 기는 치환기를 갖고 있어도 된다.

[0162] Ar^{DA1} , Ar^{DA2} 및 Ar^{DA3} 은 각각 독립적으로 아릴렌기 또는 2가의 복소환기를 나타내며, 이들 기는 치환기를 갖고 있어도 된다. Ar^{DA1} , Ar^{DA2} 및 Ar^{DA3} 이 복수 있는 경우, 그들은 각각 동일해도 상이해도 된다.

[0163] T^{DA} 는 아릴기 또는 1가의 복소환기를 나타내며, 이들 기는 치환기를 갖고 있어도 된다. 복수 있는 T^{DA} 는 동일해도 상이해도 된다.]



[0164]

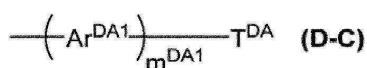
[0165] [식 중,

[0166] m^{DA1} , m^{DA2} , m^{DA3} , m^{DA4} , m^{DA5} , m^{DA6} 및 m^{DA7} 은 각각 독립적으로 0 이상의 정수를 나타낸다.

[0167] G^{DA} 는 질소 원자, 방향족 탄화수소기 또는 복소환기를 나타내며, 이들 기는 치환기를 갖고 있어도 된다. 복수 있는 G^{DA} 는 동일해도 상이해도 된다.

[0168] Ar^{DA1} , Ar^{DA2} , Ar^{DA3} , Ar^{DA4} , Ar^{DA5} , Ar^{DA6} 및 Ar^{DA7} 은 각각 독립적으로 아릴렌기 또는 2가의 복소환기를 나타내며, 이들 기는 치환기를 갖고 있어도 된다. Ar^{DA1} , Ar^{DA2} , Ar^{DA3} , Ar^{DA4} , Ar^{DA5} , Ar^{DA6} 및 Ar^{DA7} 이 복수 있는 경우, 그들은 각각 동일해도 상이해도 된다.

[0169] T^{DA} 는 아릴기 또는 1가의 복소환기를 나타내며, 이들 기는 치환기를 갖고 있어도 된다. 복수 있는 T^{DA} 는 동일해도 상이해도 된다.]



[0170]

[0171] [식 중,

[0172] m^{DA1} 은 0 이상의 정수를 나타낸다.

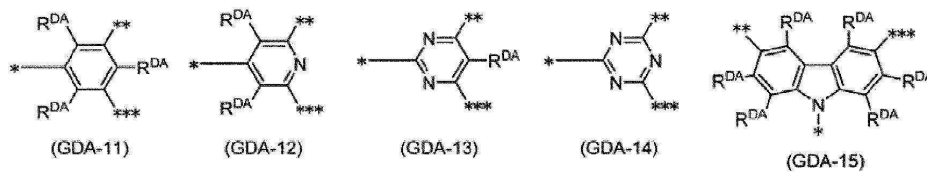
[0173] Ar^{DA1} 은 아릴렌기 또는 2가의 복소환기를 나타내며, 이들 기는 치환기를 갖고 있어도 된다. Ar^{DA1} 이 복수 있는

경우, 그들은 동일해도 상이해도 된다.

[0174] T^{DA} 는 아릴기 또는 1가의 복소환기를 나타내며, 이들 기는 치환기를 갖고 있어도 된다.]

[0175] m^{DA1} , m^{DA2} , m^{DA3} , m^{DA4} , m^{DA5} , m^{DA6} 및 m^{DA7} 은, 통상 10 이하의 정수이고, 바람직하게는, 5 이하의 정수이고, 보다 바람직하게는 2 이하의 정수이고, 더욱 바람직하게는 0 또는 1이다. m^{DA2} , m^{DA3} , m^{DA4} , m^{DA5} , m^{DA6} 및 m^{DA7} 은 동일한 정수인 것이 바람직하고, m^{DA1} , m^{DA2} , m^{DA3} , m^{DA4} , m^{DA5} , m^{DA6} 및 m^{DA7} 은 동일한 정수인 것이 보다 바람직하다.

[0176] G^{DA} 는 바람직하게는 식 (GDA-11) 내지 (GDA-15)로 표시되는 기이고, 보다 바람직하게는 식 (GDA-11) 내지 (GDA-14)로 표시되는 기이고, 더욱 바람직하게는 식 (GDA-11) 또는 (GDA-14)로 표시되는 기이고, 특히 바람직하게는 식 (GDA-11)로 표시되는 기이다.



[0177]

[0178] [식 중,

[0179] *은 식 (D-A)에 있어서의 Ar^{DA1} , 식 (D-B)에 있어서의 Ar^{DA1} , 식 (D-B)에 있어서의 Ar^{DA2} , 또는 식 (D-B)에 있어서의 Ar^{DA3} 과의 결합을 나타낸다.

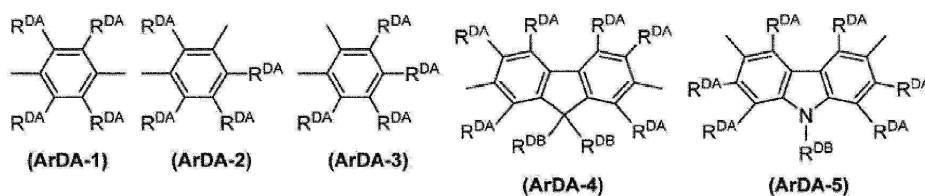
[0180] **은 식 (D-A)에 있어서의 Ar^{DA2} , 식 (D-B)에 있어서의 Ar^{DA2} , 식 (D-B)에 있어서의 Ar^{DA4} , 또는 식 (D-B)에 있어서의 Ar^{DA6} 과의 결합을 나타낸다.

[0181] ***은 식 (D-A)에 있어서의 Ar^{DA3} , 식 (D-B)에 있어서의 Ar^{DA3} , 식 (D-B)에 있어서의 Ar^{DA5} , 또는 식 (D-B)에 있어서의 Ar^{DA7} 과의 결합을 나타낸다.

[0182] R^{DA} 는 수소 원자, 알킬기, 시클로알킬기, 알콕시기, 시클로알콕시기, 아릴기 또는 1가의 복소환기를 나타내며, 이들 기는 치환기를 더 갖고 있어도 된다. R^{DA} 가 복수 있는 경우, 그들은 동일해도 상이해도 된다.]

[0183] R^{DA} 는 바람직하게는 수소 원자, 알킬기, 시클로알킬기, 알콕시기 또는 시클로알콕시기이고, 보다 바람직하게는 수소 원자, 알킬기 또는 시클로알킬기이며, 이들 기는 치환기를 갖고 있어도 된다.

[0184] Ar^{DA1} , Ar^{DA2} , Ar^{DA3} , Ar^{DA4} , Ar^{DA5} , Ar^{DA6} 및 Ar^{DA7} 은, 바람직하게는 페닐렌기, 플루오렌디일기 또는 카르바졸디일기이고, 보다 바람직하게는 식 (ArDA-1) 내지 (ArDA-3), (ArDA-4), (ArDA-5) 또는 (ArDA-34)로 표시되는 기이고, 더욱 바람직하게는 식 (ArDA-1) 내지 (ArDA-5)로 표시되는 기이고, 특히 바람직하게는 식 (ArDA-1) 내지 (ArDA-3)으로 표시되는 기이고, 그 중에서도 바람직하게는 식 (ArDA-1)로 표시되는 기이다.



[0185]

[0186] [식 중,

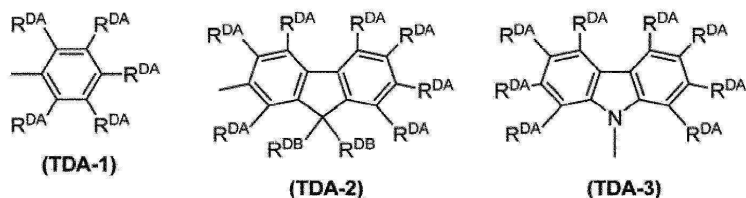
[0187] R^{DA} 는 상기와 동일한 의미를 나타낸다.

[0188] R^{DB} 는 수소 원자, 알킬기, 시클로알킬기, 아릴기 또는 1가의 복소환기를 나타내며, 이들 기는 치환기를 갖고 있

어도 된다. R^{DB} 가 복수 있는 경우, 그들은 동일해도 상이해도 된다.]

[0189] R^{DB} 는 바람직하게는 알킬기, 시클로알킬기, 아릴기 또는 1가의 복소환기이고, 보다 바람직하게는 아릴기 또는 1가의 복소환기이고, 더욱 바람직하게는 아릴기이며, 이들 기는 치환기를 갖고 있어도 된다.

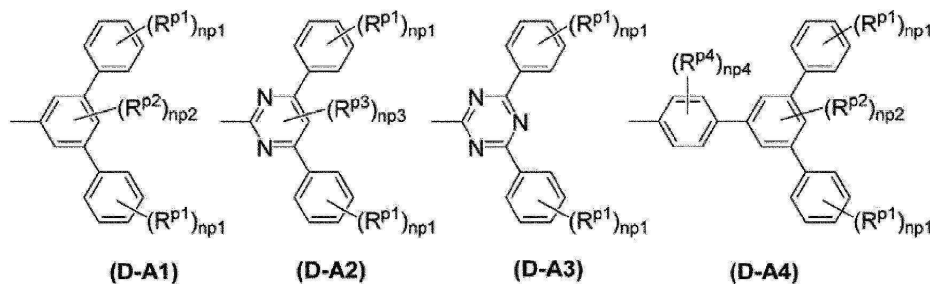
[0190] T^{DA} 는 바람직하게는 식 (TDA-1) 내지 (TDA-3)으로 표시되는 기이고, 보다 바람직하게는 식 (TDA-1)로 표시되는 기이다.



[0191]

[0192] [식 중, R^{DA} 및 R^{DB} 는 상기와 동일한 의미를 나타낸다.]

[0193] 식 (D-A)로 표시되는 기는, 바람직하게는 식 (D-A1) 내지 (D-A4)로 표시되는 기이고, 보다 바람직하게는 식 (D-A1) 또는 (D-A4)로 표시되는 기이다.



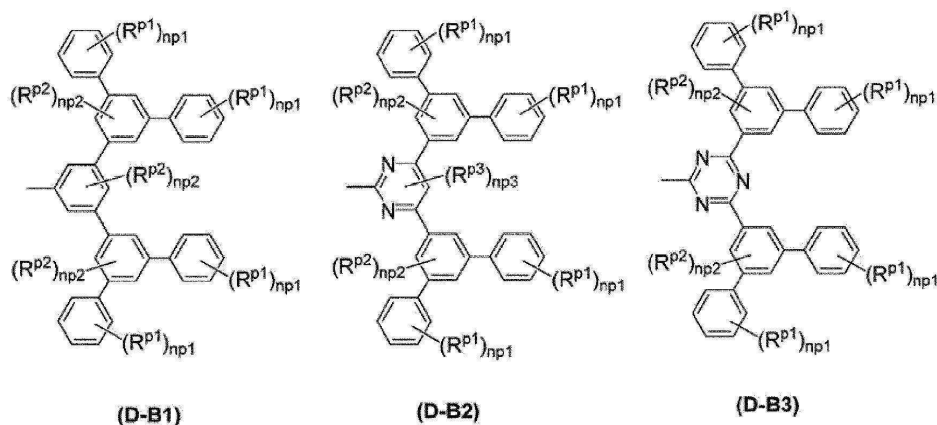
[0194]

[0195] [식 중,

[0196] R^{p1} , R^{p2} , R^{p3} 및 R^{p4} 는 각각 독립적으로 알킬기, 시클로알킬기, 알콕시기, 시클로알콕시기 또는 불소 원자를 나타낸다. R^{p1} , R^{p2} 및 R^{p4} 가 복수 있는 경우, 그들은 각각 동일해도 상이해도 된다.

[0197] np1은 0 내지 5의 정수를 나타내고, np2는 0 내지 3의 정수를 나타내고, np3은 0 또는 1을 나타내고, np4는 0 내지 4의 정수를 나타낸다. 복수 있는 np1은 동일해도 상이해도 된다.]

[0198] 식 (D-B)로 표시되는 기는, 바람직하게는 식 (D-B1) 내지 (D-B3)으로 표시되는 기이고, 보다 바람직하게는 식 (D-B1)로 표시되는 기이다.



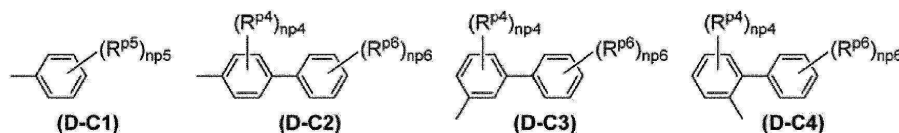
[0199]

[0200] [식 중,

[0201] R^{p1} , R^{p2} 및 R^{p3} 은 각각 독립적으로 알킬기, 시클로알킬기, 알콕시기, 시클로알콕시기 또는 불소 원자를 나타낸다. R^{p1} 및 R^{p2} 가 복수 있는 경우, 그들은 각각 동일해도 상이해도 된다.

[0202] np1은 0 내지 5의 정수를 나타내고, np2는 0 내지 3의 정수를 나타내고, np3은 0 또는 1을 나타낸다. np1 및 np2가 복수 있는 경우, 그들은 각각 동일해도 상이해도 된다.]

[0203] 식 (D-C)로 표시되는 기는, 바람직하게는 식 (D-C1) 내지 (D-C4)로 표시되는 기이고, 보다 바람직하게는 식 (D-C1) 내지 (D-C3)으로 표시되는 기이고, 더욱 바람직하게는 식 (D-C1) 또는 (D-C2)로 표시되는 기이고, 특히 바람직하게는 식 (D-C2)로 표시되는 기이다.



[0204]

[0205] [식 중,

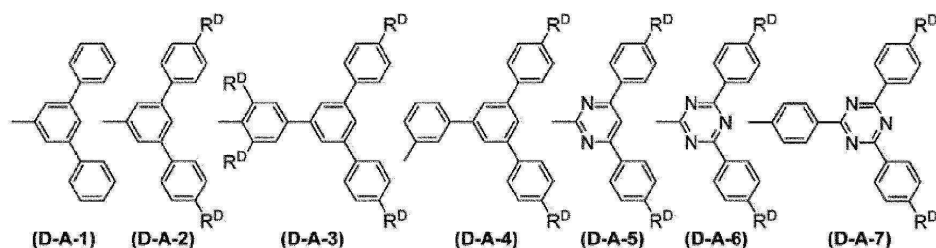
[0206] R^{p4} , R^{p5} 및 R^{p6} 은 각각 독립적으로 알킬기, 시클로알킬기, 알콕시기, 시클로알콕시기 또는 불소 원자를 나타낸다. R^{p4} , R^{p5} 및 R^{p6} 이 복수 있는 경우, 그들은 각각 동일해도 상이해도 된다.

[0207] np4는 0 내지 4의 정수를 나타내고, np5는 0 내지 5의 정수를 나타내고, np6은 0 내지 5의 정수를 나타낸다.]

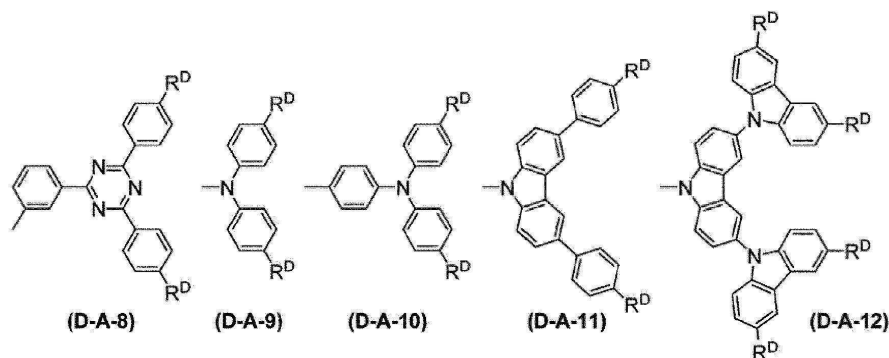
[0208] np1은 바람직하게는 0 또는 1이고, 보다 바람직하게는 1이다. np2는 바람직하게는 0 또는 1이고, 보다 바람직하게는 0이다. np3은 바람직하게는 0이다. np4는 바람직하게는 0 내지 2의 정수이다. np5는 바람직하게는 1 내지 3의 정수이다. np6은 바람직하게는 0 내지 2의 정수이다.

[0209] R^{p1} , R^{p2} , R^{p3} , R^{p4} , R^{p5} 및 R^{p6} 은 바람직하게는 알킬기 또는 시클로알킬기이고, 보다 바람직하게는 메틸기, 에틸기, 이소프로필기, tert-부틸기, 헥실기, 2-에틸헥실기, 시클로헥실기, 메톡시기, 2-에틸헥실옥시기, tert-옥틸기 또는 시클로헥실 옥시기이고, 더욱 바람직하게는 메틸기, 에틸기, 이소프로필기, tert-부틸기, 헥실기, 2-에틸헥실기 또는 tert-옥틸기이다.

[0210] 식 (D-A)로 표시되는 기로서는, 예를 들어 식 (D-A-1) 내지 (D-A-12)로 표시되는 기를 들 수 있다.



[0211]

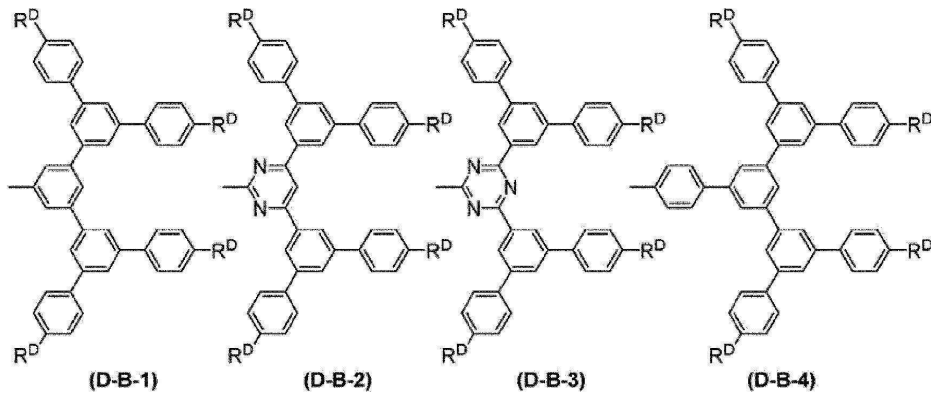


[0212]

[0213] [식 중, R^D 는 메틸기, 에틸기, 이소프로필기, tert-부틸기, 헥실기, 2-에틸헥실기, tert-옥틸기, 시클로헥실기,

메톡시기, 2-에틸헥실옥시기 또는 시클로헥실 옥시기를 나타낸다. R^D 가 복수 존재하는 경우, 그들은 동일해도 상이해도 된다.]

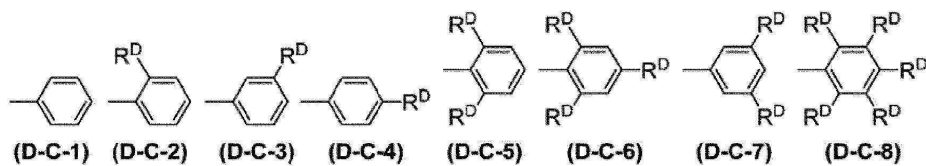
[0214] 식 (D-B)로 표시되는 기로서는, 예를 들어 식 (D-B-1) 내지 (D-B-4)로 표시되는 기를 들 수 있다.



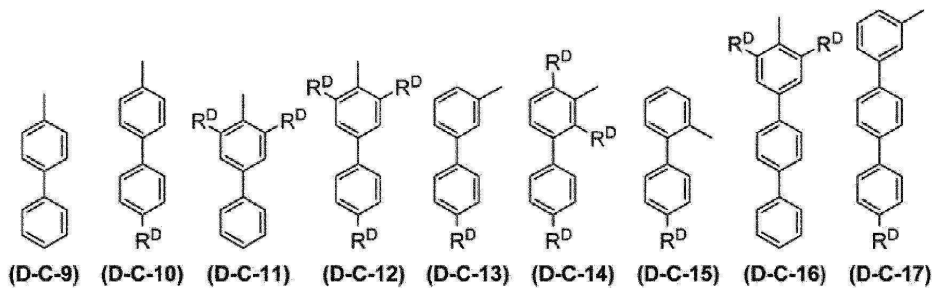
[0215]

[0216] [식 중, R^D 는 상기와 동일한 의미를 나타낸다.]

[0217] 식 (D-C)로 표시되는 기로서는, 예를 들어 식 (D-C-1) 내지 (D-C-17)로 표시되는 기를 들 수 있다.



[0218]



[0219]

[0220] [식 중, R^D 는 상기와 동일한 의미를 나타낸다.]

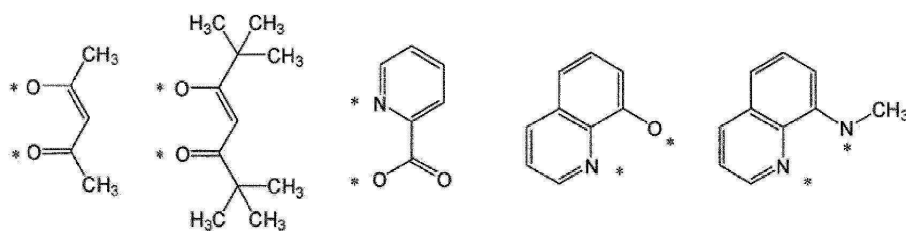
[0221] R^D 는 메틸기, 에틸기, 이소프로필기, tert-부틸기, 헥실기, 2-에틸헥실기 또는 tert-옥틸기인 것이 바람직하다.

[0222] 본 실시 형태에 따른 발광 소자의 초기 열화가 더욱 억제되므로, 환 R^1 및 환 R^2 로 이루어지는 군에서 선택되는 적어도 1개의 환이, 치환기를 갖는 것이 바람직하고, 환 R^1 이 치환기를 갖는 것이 보다 바람직하다.

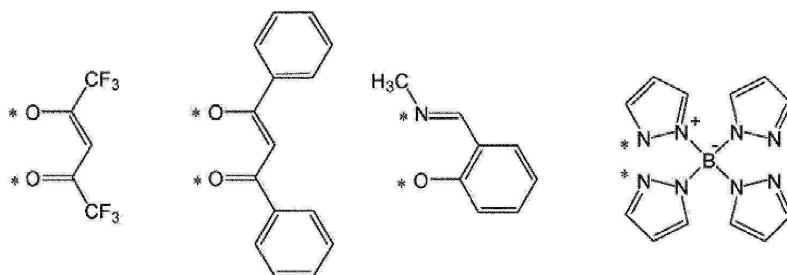
[0223] 환 R^1 및 환 R^2 로 이루어지는 군에서 선택되는 적어도 1개의 환이 갖는 치환기로서는, 바람직하게는 치환기를 갖고 있어도 되는 아릴기 또는 치환기를 갖고 있어도 되는 1가의 복소환기이고, 보다 바람직하게는 치환기를 갖고 있어도 되는 아릴기이고, 더욱 바람직하게는, 식 (D-A1), (D-A4), (D-B1) 또는 (D-C1) 내지 (D-C4)로 표시되는 기이고, 특히 바람직하게는, 식 (D-C1) 내지 (D-C3)으로 표시되는 기이고, 그 중에서도 바람직하게는, 식 (D-C2)로 표시되는 기이다.

[0224] [음이온성의 2좌 배위자]

[0225] $A^1-G^1-A^2$ 로 표시되는 음이온성의 2좌 배위자로서는, 예를 들어 하기 식으로 표시되는 배위자를 들 수 있다.



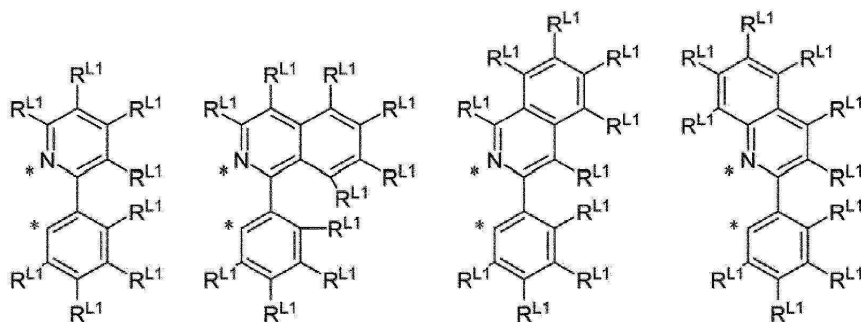
[0226]



[0227]

[식 중, *은 M^1 과 결합하는 부위를 나타낸다.]

[0229] $A^1-G^1-A^2$ 로 표시되는 음이온성의 2좌 배위자는, 하기 식으로 표시되는 배위자여도 된다.



[0230]

[식 중,

[0232] *은 M^1 과 결합하는 부위를 나타낸다.

[0233] R^{L1} 은 수소 원자, 알킬기, 시클로알킬기, 아릴기, 1가의 복소환기 또는 불소 원자를 나타내며, 이들 기는 치환기를 갖고 있어도 된다. 복수 존재하는 R^{L1} 은 동일해도 상이해도 된다.]

[0234] 식 (1)로 표시되는 인광 발광성 화합물은, 본 실시 형태에 따른 발광 소자의 초기 열화가 보다 억제되므로, 식 (1-A)로 표시되는 화합물인 것이 바람직하다.

[0235] [식 (1-A)로 표시되는 화합물]

[0236] 환 R^{1A} 가 디아졸환인 경우, E^{11A} 가 질소 원자인 이미다졸환, 또는 E^{12A} 가 질소 원자인 이미다졸환이 바람직하고, E^{11A} 가 질소 원자인 이미다졸환이 보다 바람직하다.

[0237] 환 R^{1A} 가 트리아졸환인 경우, E^{11A} 및 E^{12A} 가 질소 원자인 트리아졸환, 또는 E^{11A} 및 E^{13A} 가 질소 원자인 트리아졸환이 바람직하고, E^{11A} 및 E^{12A} 가 질소 원자인 트리아졸환이 보다 바람직하다.

[0238] 환 R^{1A} 는 디아졸환인 것이 바람직하다.

- [0239] R^{11A} , R^{12A} , R^{13A} , R^{21A} , R^{22A} , R^{23A} 및 R^{24A} 에 있어서의 아릴기, 1가의 복소환기 및 치환 아미노기의 예 및 바람직한 범위는, 각각, 환 R^1 및 환 R^2 가 갖고 있어도 되는 치환기에 있어서의 아릴기, 1가의 복소환기 및 치환 아미노기의 예 및 바람직한 범위와 동일하다.
- [0240] R^{11A} , R^{12A} , R^{13A} , R^{21A} , R^{22A} , R^{23A} 및 R^{24A} 가 갖고 있어도 되는 치환기의 예 및 바람직한 범위는, 환 R^1 및 환 R^2 가 갖고 있어도 되는 치환기가 더 갖고 있어도 되는 치환기의 예 및 바람직한 범위와 동일하다.
- [0241] E^{11A} 가 질소 원자이고, 또한 R^{11A} 가 존재하는 경우, R^{11A} 는 알킬기, 시클로알킬기, 아릴기 또는 1가의 복소환기인 것이 바람직하고, 아릴기 또는 1가의 복소환기인 것이 보다 바람직하고, 아릴기인 것이 더욱 바람직하고, 식 (D-A1), (D-A4), (D-B1) 또는 (D-C1) 내지 (D-C4)로 표시되는 기인 것이 특히 바람직하고, 식 (D-C1) 내지 (D-C3)으로 표시되는 기인 것이 그 중에서도 바람직하고, 식 (D-C2)로 표시되는 기인 것이 특별히 바람직하며, 이들 기는 치환기를 갖고 있어도 된다.
- [0242] E^{11A} 가 탄소 원자인 경우, R^{11A} 는 수소 원자, 알킬기, 시클로알킬기, 아릴기, 1가의 복소환기 또는 치환 아미노기인 것이 바람직하고, 수소 원자, 알킬기, 시클로알킬기 또는 아릴기인 것이 보다 바람직하고, 수소 원자, 알킬기 또는 시클로알킬기인 것이 더욱 바람직하고, 수소 원자가 특히 바람직하며, 이들 기는 치환기를 갖고 있어도 된다.
- [0243] E^{12A} 가 질소 원자이고, 또한 R^{12A} 가 존재하는 경우, R^{12A} 는 알킬기, 시클로알킬기, 아릴기 또는 1가의 복소환기인 것이 바람직하고, 아릴기 또는 1가의 복소환기인 것이 보다 바람직하고, 아릴기인 것이 더욱 바람직하고, 식 (D-A1), (D-A4), (D-B1) 또는 (D-C1) 내지 (D-C4)로 표시되는 기인 것이 특히 바람직하고, 식 (D-C1) 내지 (D-C3)으로 표시되는 기인 것이 그 중에서도 바람직하고, 식 (D-C2)로 표시되는 기인 것이 특별히 바람직하며, 이들 기는 치환기를 갖고 있어도 된다.
- [0244] E^{12A} 가 탄소 원자인 경우, R^{12A} 는 수소 원자, 알킬기, 시클로알킬기, 아릴기, 1가의 복소환기 또는 치환 아미노기인 것이 바람직하고, 수소 원자, 알킬기, 시클로알킬기 또는 아릴기인 것이 보다 바람직하고, 수소 원자, 알킬기 또는 시클로알킬기인 것이 더욱 바람직하고, 수소 원자가 특히 바람직하며, 이들 기는 치환기를 갖고 있어도 된다.
- [0245] E^{13A} 가 질소 원자이고, 또한 R^{13A} 가 존재하는 경우, R^{13A} 는 알킬기, 시클로알킬기, 아릴기 또는 1가의 복소환기인 것이 바람직하고, 아릴기 또는 1가의 복소환기인 것이 보다 바람직하고, 아릴기인 것이 더욱 바람직하고, 식 (D-A1), (D-A4), (D-B1) 또는 (D-C1) 내지 (D-C4)로 표시되는 기인 것이 특히 바람직하고, 식 (D-C1) 내지 (D-C3)으로 표시되는 기인 것이 그 중에서도 바람직하고, 식 (D-C2)로 표시되는 기인 것이 특별히 바람직하며, 이들 기는 치환기를 갖고 있어도 된다.
- [0246] E^{13A} 가 탄소 원자인 경우, R^{13A} 는 수소 원자, 알킬기, 시클로알킬기, 아릴기, 1가의 복소환기 또는 치환 아미노기인 것이 바람직하고, 수소 원자, 알킬기, 시클로알킬기 또는 아릴기인 것이 보다 바람직하고, 수소 원자, 알킬기 또는 시클로알킬기인 것이 더욱 바람직하고, 수소 원자가 특히 바람직하며, 이들 기는 치환기를 갖고 있어도 된다.
- [0247] 환 R^{2A} 가 피리딘환인 경우, E^{21A} 가 질소 원자인 피리딘환, E^{22A} 가 질소 원자인 피리딘환, 또는 E^{23A} 가 질소 원자인 피리딘환이 바람직하고, E^{22A} 가 질소 원자인 피리딘환이 보다 바람직하다.
- [0248] 환 R^{2A} 가 피리미딘환인 경우, E^{21A} 및 E^{23A} 가 질소 원자인 피리미딘환, 또는 E^{22A} 및 E^{24A} 가 질소 원자인 피리미딘환이 바람직하고, E^{22A} 및 E^{24A} 가 질소 원자인 피리미딘환이 보다 바람직하다.
- [0249] 환 R^{2A} 는 벤젠환인 것이 바람직하다.
- [0250] R^{21A} , R^{22A} , R^{23A} 및 R^{24A} 는 수소 원자, 알킬기, 시클로알킬기, 알콕시기, 시클로알콕시기, 불소 원자, 아릴기, 1가의 복소환기 또는 치환 아미노기인 것이 바람직하고, 수소 원자, 알킬기, 시클로알킬기, 아릴기, 1가의 복소환기 또는 치환 아미노기인 것이 보다 바람직하고, 수소 원자, 알킬기, 시클로알킬기 또는 아릴기인 것이 더욱 바람직하고, 수소 원자, 알킬기 또는 시클로알킬기인 것이 특히 바람직하고, 수소 원자인 것이 그 중에서도 바람

직하며, 이들 기는 치환기를 갖고 있어도 된다.

[0251] 본 실시 형태에 따른 발광 소자의 초기 열화가 보다 억제되므로, R^{11A} , R^{12A} , R^{13A} , R^{21A} , R^{22A} , R^{23A} 및 R^{24A} 로 이루어지는 군에서 선택되는 적어도 하나는, 치환기를 갖고 있어도 되는 아릴기 또는 치환기를 갖고 있어도 되는 1가의 복소환기인 것이 바람직하고, 치환기를 갖고 있어도 되는 아릴기인 것이 보다 바람직하고, 식 (D-A1), (D-A4), (D-B1) 또는 (D-C1) 내지 (D-C4)로 표시되는 기인 것이 더욱 바람직하고, 식 (D-C1) 내지 (D-C3)으로 표시되는 기인 것이 특히 바람직하고, 식 (D-C2)로 표시되는 기인 것이 그 중에서도 바람직하다.

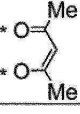
[0252] R^{11A} , R^{12A} , R^{13A} , R^{21A} , R^{22A} , R^{23A} 및 R^{24A} 로 이루어지는 군에서 선택되는 적어도 하나가, 치환기를 갖고 있어도 되는 아릴기 또는 치환기를 갖고 있어도 되는 1가의 복소환기인 경우, R^{11A} , R^{12A} 및 R^{13A} 로 이루어지는 군에서 선택되는 적어도 하나가 치환기를 갖고 있어도 되는 아릴기 또는 치환기를 갖고 있어도 되는 1가의 복소환기인 것이 바람직하고, R^{11A} 또는 R^{12A} 가 치환기를 갖고 있어도 되는 아릴기 또는 치환기를 갖고 있어도 되는 1가의 복소환기인 것이 보다 바람직하고, R^{11A} 가 치환기를 갖고 있어도 되는 아릴기 또는 치환기를 갖고 있어도 되는 1가의 복소환기인 것이 더욱 바람직하다.

[0253] R^{11A} 와 R^{12A} , R^{12A} 와 R^{13A} , R^{11A} 와 R^{21A} , R^{21A} 와 R^{22A} , R^{22A} 와 R^{23A} 및 R^{23A} 와 R^{24A} 는, 각각 결합하여, 각각이 결합하는 원자와 함께 환을 형성하고 있어도 되지만, 식 (1)로 표시되는 인광 발광성 화합물의 발광 스펙트럼의 최대 피크 파장이 단파장이 되기 때문에, R^{11A} 와 R^{12A} , 및 R^{12A} 와 R^{13A} 는, 환을 형성하지 않는 것이 바람직하다. 또한, 식 (1)로 표시되는 인광 발광성 화합물의 합성이 용이해지기 때문에, R^{11A} 와 R^{12A} , R^{12A} 와 R^{13A} , R^{21A} 와 R^{22A} , R^{22A} 와 R^{23A} 및 R^{23A} 와 R^{24A} 는, 환을 형성하지 않는 것이 바람직하고, R^{11A} 와 R^{12A} , R^{12A} 와 R^{13A} , R^{11A} 와 R^{21A} , R^{21A} 와 R^{22A} , R^{22A} 와 R^{23A} 및 R^{23A} 와 R^{24A} 는, 환을 형성하지 않는 것이 보다 바람직하다.

[0254] 식 (1-A)로 표시되는 화합물은, 본 실시 형태에 따른 발광 소자의 초기 열화가 더욱 억제되므로, 식 (1-A1)로 표시되는 화합물, 식 (1-A2)로 표시되는 화합물, 식 (1-A3)으로 표시되는 화합물 또는 식 (1-A4)로 표시되는 화합물인 것이 바람직하고, 식 (1-A1)로 표시되는 화합물 또는 식 (1-A3)으로 표시되는 화합물인 것이 보다 바람직하고, 식 (1-A3)으로 표시되는 화합물인 것이 더욱 바람직하다.

[0255] 식 (1-A1)로 표시되는 화합물로서는, 예를 들어 표 1에 나타내는 식 (1-A1-1) 내지 (1-A1-11)로 표시되는 화합물을 들 수 있고, 바람직하게는, 식 (1-A1-1) 내지 (1-A1-9)로 표시되는 화합물이고, 보다 바람직하게는 식 (1-A1-1) 내지 (1-A1-7)로 표시되는 화합물이다.

표 1


식	M ¹	n ¹	R ^{11A}	R ^{13A}	R ^{21A}	R ^{22A}	R ^{23A}	R ^{24A}	n ²	A ¹ -G ¹ -A ²
(1-A1-1)	Ir	3	식(D-C-11)	H	H	H	H	H	0	-
(1-A1-2)	Ir	3	식(D-C-5)	Me	H	식(D-A-1)	H	H	0	-
(1-A1-3)	Ir	3	식(D-A-3)	Me	H	H	H	H	0	-
(1-A1-4)	Ir	3	식(D-A-3)	Me	H	식(D-A-1)	H	H	0	-
(1-A1-5)	Ir	3	식(D-C-6)	Me	H	식(D-B-1)	H	H	0	-
(1-A1-6)	Ir	3	식(D-C-12)	Me	H	식(D-C-4)	H	H	0	-
(1-A1-7)	Ir	3	식(D-C-12)	H	H	H	Me	H	0	-
(1-A1-8)	Ir	3	Me	C ₃ H ₇	H	H	H	H	0	-
(1-A1-9)	Ir	3	Me	Me	H	식(D-A-4)	H	H	0	-
(1-A1-10)	Ir	2	식(D-C-11)	H	H	H	H	H	1	
(1-A1-11)	Pt	2	식(D-C-11)	H	H	H	H	H	0	-

[0256]

[0257] 식 (1-A2)로 표시되는 화합물로서는, 예를 들어 표 2에 나타내는 식 (1-A2-1) 내지 (1-A2-8)로 표시되는 화합물을 들 수 있고, 바람직하게는, 식 (1-A2-1) 내지 (1-A2-6)로 표시되는 화합물이고, 보다 바람직하게는 식 (1-

A2-1) 내지 (1-A2-4)로 표시되는 화합물이다.

표 2


식	M ¹	n ¹	R ^{12A}	R ^{13A}	R ^{21A}	R ^{22A}	R ^{23A}	R ^{24A}	n ²	A ¹ -G ¹ -A ²
(1-A2-1)	Ir	3	식(D-C-11)	H	H	H	H	H	0	-
(1-A2-2)	Ir	3	식(D-C-6)	Me	H	식(D-A-1)	H	H	0	-
(1-A2-3)	Ir	3	식(D-C-12)	Me	H	식(D-C-4)	H	H	0	-
(1-A2-4)	Ir	3	식(D-C-5)	C ₃ H ₇	H	H	식(D-C-4)	H	0	-
(1-A2-5)	Ir	3	Me	C ₃ H ₇	H	H	H	H	0	-
(1-A2-6)	Ir	3	Me	C ₃ H ₇	H	식(D-A-1)	H	H	0	-
(1-A2-7)	Ir	2	식(D-C-11)	H	H	H	H	H	1	
(1-A2-8)	Pt	2	식(D-C-11)	H	H	H	H	H	0	-

[0258]

[0259]

식 (1-A3)으로 표시되는 화합물로서는, 예를 들어 표 3에 나타내는 식 (1-A3-1) 내지 (1-A3-11)로 표시되는 화합물을 들 수 있고, 바람직하게는, 식 (1-A3-1) 내지 (1-A3-9)로 표시되는 화합물이고, 보다 바람직하게는 식 (1-A3-1) 내지 (1-A3-8)로 표시되는 화합물이다.

표 3


식	M ¹	n ¹	R ^{11A}	R ^{12A}	R ^{13A}	R ^{21A}	R ^{22A}	R ^{23A}	R ^{24A}	n ²	A ¹ -G ¹ -A ²
(1-A3-1)	Ir	3	식(D-C-6)	H	H	H	H	H	H	0	-
(1-A3-2)	Ir	3	식(D-C-11)	H	H	H	H	H	H	0	-
(1-A3-3)	Ir	3	식(D-A-3)	H	H	H	H	H	H	0	-
(1-A3-4)	Ir	3	식(D-C-5)	Me	C ₃ H ₇	H	H	H	H	0	-
(1-A3-5)	Ir	3	식(D-C-6)	H	식(D-C-3)	H	H	H	H	0	-
(1-A3-6)	Ir	3	식(D-C-5)	H	H	H	식(D-A-1)	H	H	0	-
(1-A3-7)	Ir	3	식(D-C-6)	H	H	H	식(D-A-4)	H	H	0	-
(1-A3-8)	Ir	3	식(D-C-14)	H	H	H	H	식(D-C-4)	H	0	-
(1-A3-9)	Ir	3	식(D-C-11)	H	H	F	H	CF ₃	H	0	-
(1-A3-10)	Ir	2	식(D-C-11)	H	H	H	H	H	H	1	
(1-A3-11)	Pt	2	식(D-C-11)	H	H	H	H	H	H	0	-

[0260]

[0261]

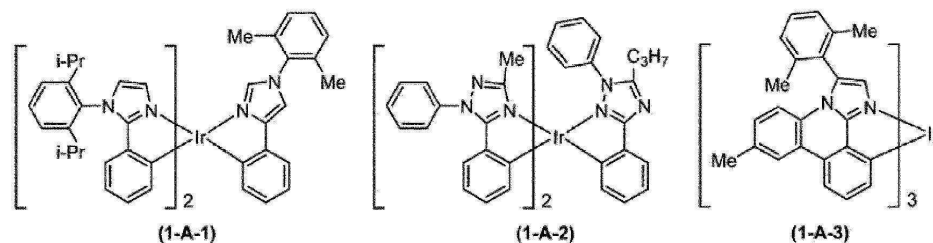
식 (1-A4)로 표시되는 화합물로서는, 예를 들어 표 4에 나타내는 식 (1-A4-1) 내지 (1-A4-8)로 표시되는 화합물을 들 수 있고, 바람직하게는, 식 (1-A4-1) 내지 (1-A4-6)로 표시되는 화합물이고, 보다 바람직하게는 식 (1-A4-1) 내지 (1-A4-5)로 표시되는 화합물이다.

표 4

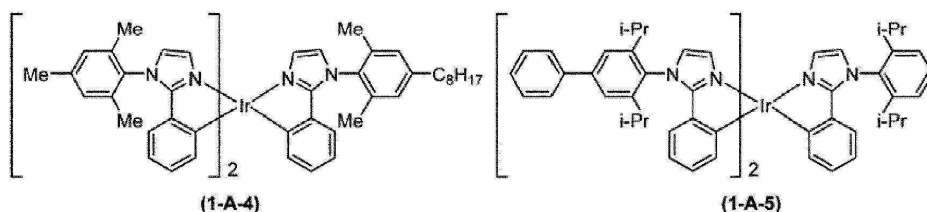
식	M ¹	n ¹	R ^{11A}	R ^{12A}	R ^{13A}	R ^{21A}	R ^{22A}	R ^{23A}	R ^{24A}	n ²	A ¹ -G ¹ -A ²
(1-A4-1)	Ir	3	H	식(D-C-11)	H	H	H	H	H	0	-
(1-A4-2)	Ir	3	H	식(D-C-5)	H	H	식(D-A-1)	H	H	0	-
(1-A4-3)	Ir	3	H	식(D-A-3)	H	H	H	H	H	0	-
(1-A4-4)	Ir	3	H	식(D-C-6)	H	H	H	식(D-C-4)	H	0	-
(1-A4-5)	Ir	3	Me	식(D-C-5)	Me	H	Me	H	H	0	-
(1-A4-6)	Ir	3	H	식(D-C-6)	H	F	H	CF ₃	H	0	-
(1-A4-7)	Ir	2	H	식(D-C-11)	H	H	H	H	H	1	
(1-A4-8)	Pt	2	H	식(D-C-11)	H	H	H	H	H	0	-

[0262]

[0263] 식 (1)로 표시되는 화합물로서는, 예를 들어 식 (1-A1-1) 내지 (1-A1-11), 식 (1-A2-1) 내지 (1-A2-8), 식 (1-A3-1) 내지 (1-A3-11), 식 (1-A4-1) 내지 (1-A4-8) 및 하기 식 (1-A-1) 내지 (1-A-5)로 표시되는 화합물을 들 수 있고, 바람직하게는, 식 (1-A1-1) 내지 (1-A1-9), 식 (1-A2-1) 내지 (1-A2-6), 식 (1-A3-1) 내지 (1-A3-9), 식 (1-A4-1) 내지 (1-A4-6) 또는 식 (1-A-1) 내지 (1-A-5)로 표시되는 화합물이고, 보다 바람직하게는 식 (1-A1-1) 내지 (1-A1-7), 식 (1-A2-1) 내지 (1-A2-4), 식 (1-A3-1) 내지 (1-A3-8), 식 (1-A4-1) 내지 (1-A4-5) 또는 식 (1-A-3) 내지 (1-A-5)로 표시되는 화합물이고, 더욱 바람직하게는, 식 (1-A1-1) 내지 (1-A1-7) 또는 식 (1-A3-1) 내지 (1-A3-8)로 표시되는 화합물이고, 특히 바람직하게는 식 (1-A3-1) 내지 (1-A3-8)로 표시되는 화합물이다.



[0264]



[0265]

[0266] [식 (1)로 표시되는 인광 발광성 화합물의 입수 방법]

[0267] 식 (1)로 표시되는 인광 발광성 화합물은, Aldrich, Luminescence Technology Corp., American Dye Source 등으로부터 입수 가능하다.

[0268] 또한, 상기 이외의 입수 방법으로서, 국제공개 제2006/121811호, 국제공개 제2007/097153호, 일본특허공개 제2013-048190호 공보, 국제공개 제2004/101707호, 일본특허공개 제2013-147449호 공보, 일본특허공개 제2013-147450호 공보, 일본특허공개 제2013-147551호 공보 등의 문헌에 기재된 공지된 방법에 의해 제조함으로써, 입수 가능하다.

[0269] [식 (1)로 표시되는 인광 발광성 화합물에 포함되는 염소 원자의 양(C^1)]

[0270] 본 실시 형태에 따른 조성물에 있어서, 식 (1)로 표시되는 인광 발광성 화합물에 불순물로서 포함되는 염소 원자의 양(C^1)은, 인광 발광성 화합물의 전량에 대하여 통상, 15질량ppm 이하이다. 본 실시 형태에 따른 인광 발광성 화합물에 있어서, 불순물로서 포함되는 염소 원자의 양은, 본 실시 형태에 따른 발광 소자의 초기 열화가 억제되므로, 바람직하게는 13질량ppm 이하이고, 보다 바람직하게는 9질량ppm 이하이고, 더욱 바람직하게는 5질량ppm 이하이고, 특히 바람직하게는 1질량ppm 이하이고, 그 중에서도 바람직하게는 0.9질량ppm 이하이고, 특별히 바람직하게는 0질량ppm이다.

[0271] 또한, 본 실시 형태에 따른 인광 발광성 화합물에 있어서, 불순물로서 포함되는 염소 원자의 양은, 본 실시 형태에 따른 발광 소자의 발광 효율이 우수하므로, 바람직하게는 0.01질량ppm 이상 12질량ppm 이하이고, 보다 바람직하게는 0.05질량ppm 이상 11질량ppm 이하이고, 더욱 바람직하게는 0.1질량ppm 이상 10질량ppm 이하이고, 특히 바람직하게는 0.5질량ppm 이상 9질량ppm 이하이고, 그 중에서도 바람직하게는 0.9질량ppm 이상 9질량ppm 이하이다.

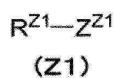
[0272] 또한, 본 실시 형태에 따른 인광 발광성 화합물에 있어서, 불순물로서 포함되는 염소 원자의 양은, 본 실시 형태에 따른 발광 소자의 초기 열화가 억제되고, 또한 본 실시 형태에 따른 발광 소자의 발광 효율이 우수하므로, 바람직하게는 0.01질량ppm 이상 5질량ppm 이하이고, 보다 바람직하게는 0.05질량ppm 이상 1질량ppm 이하이고, 더욱 바람직하게는 0.1질량ppm 이상 0.9질량ppm 이하이다.

[0273] 본 명세서에 있어서, 「염소 원자의 양」은, 자동 연소-이온크로마토그래피법에 의해 측정할 수 있다. 즉, 「

염소 원자의 양」이란, 자동 연소-이온크로마토그래피법에 의해 측정했을 때의 염소 질량 농도를 의미한다. 또한, 「염소 원자의 양」이 「0질량ppm」이란, 자동 연소-이온크로마토그래피법에 의해 측정했을 때, 염소의 질량 농도가 검출 한계 이하인 것을 의미한다.

- [0274] C^1 의 구체적인 산출 방법을 후술하는 실시예 D1 및 실시예 D2를 사용하여, 설명한다.
- [0275] 먼저, 실시예 D1에서는, 자동 연소-이온크로마토그래피법에 의해 측정된 인광 발광성 화합물 MC3의 염소 원자의 양은 검출 한계 이하이기 때문에, C^1 은 0질량ppm이다.
- [0276] 이어서, 실시예 D2에서는, 자동 연소-이온크로마토그래피법에 의해 측정된 인광 발광성 화합물 MC3 및 인광 발광성 화합물 MC2의 염소 원자의 양은, 각각 검출 한계 이하(즉, 0질량ppm) 및 9질량ppm이다. 또한, 인광 발광성 화합물 MC3과 인광 발광성 화합물 MC2의 질량비는, 인광 발광성 화합물 MC3:인광 발광성 화합물 MC2=22.5:2.5이다.
- [0277] 따라서, C^1 은 각 인광 발광성 화합물에 포함되는 염소 원자의 양 및 그의 투입의 양으로부터 구할 수 있고, 이하와 같이 구해진다.
- [0278] $C^1=\{0 \times 22.5 / (22.5 + 2.5)\} + \{9 \times 2.5 / (22.5 + 2.5)\} = 0.9 \text{ 질량ppm}$
- [0279] 전술한 실시예 D2에 있어서의 C^1 의 구체적인 산출 방법과 마찬가지로 하여, 실시예 D3에 있어서의, C^1 은 이하와 같이 구해진다.
- [0280] $C^1=\{0 \times 12.5 / (12.5 + 12.5)\} + \{9 \times 12.5 / (12.5 + 12.5)\} = 4.5 \text{ 질량ppm}$
- [0281] 전술한 실시예 D1에 있어서의 C^1 의 구체적인 산출 방법과 마찬가지로 하여, 실시예 D4에 있어서의 C^1 은 9질량ppm이다.
- [0282] 전술한 실시예 D2에 있어서의 C^1 의 구체적인 산출 방법과 마찬가지로 하여, 실시예 D5에 있어서의, C^1 은 이하와 같이 구해진다.
- [0283] $C^1=\{9 \times 12.5 / (12.5 + 12.5)\} + \{16 \times 12.5 / (12.5 + 12.5)\} = 12.5 \text{ 질량ppm}$
- [0284] 전술한 실시예 D1에 있어서의 C^1 의 구체적인 산출 방법과 마찬가지로 하여, 비교예 CD1에 있어서의, C^1 은 16질량ppm이다.
- [0285] [C^1 의 저감 방법]
- [0286] C^1 의 저감 방법으로서, 예를 들어 정제 및 탈할로겐화제에 의한 처리에서 선택되는 적어도 1종의 방법을 들 수 있다.
- [0287] [정제]
- [0288] 정제로서는, 제4판 실험 화학 강좌(1993년, 마루젠), 제5판 실험 화학 강좌(2007년, 마루젠), 신실험 화학 강좌(1975년, 마루젠), 유기 화학 실험의 안내(1988년, 가가꾸 도진) 등에 기재된 공지된 정제 방법을 들 수 있다.
- [0289] 정제로서는, 승화, 추출, 재침전, 재결정, 크로마토그래피, 또는 흡착 등을 들 수 있다.
- [0290] 정제에 있어서, 정제를 2회 이상 행하는 경우, 그들의 방법은, 동일해도 상이해도 된다.
- [0291] 승화에 있어서, 진공도 및 승화 온도는, 승화하는 재료에 따라, 적절히, 설정하면 된다. 진공도는, 바람직하게는 1×10^{-10} 내지 $1 \times 10^5 \text{ Pa}$ 이고, 보다 바람직하게는 1×10^{-7} 내지 $1 \times 10^2 \text{ Pa}$ 이고, 더욱 바람직하게는 1×10^{-5} 내지 1 Pa 이고, 특히 바람직하게는 1×10^{-4} 내지 $1 \times 10^{-2} \text{ Pa}$ 이다. 또한, 승화 온도는, 바람직하게는 -100°C 내지 1000°C 이고, 보다 바람직하게는 0°C 내지 700°C 이고, 더욱 바람직하게는 100°C 내지 500°C 이고, 특히 바람직하게는 200°C 내지 350°C 이다.

- [0292] 추출로서는, 바람직하게는 분액, 또는 속슬렛 추출기에 의한 고액 추출이고, 보다 바람직하게는, 분액이다.
- [0293] 추출에 사용하는 용매의 예는, 후술하는 탈할로젠화제에 의한 처리에 있어서의 반응에 사용하는 용매의 예와 같다.
- [0294] 크로마토그래피로서는, 바람직하게는 칼럼 크로마토그래피이다.
- [0295] 칼럼 크로마토그래피에 사용하는 충전제로서는, 실리카겔 또는 알루미나가 바람직하다.
- [0296] 크로마토그래피에 사용하는 용매의 예는, 후술하는 탈할로젠화제에 의한 처리에 있어서의 반응에 사용하는 용매의 예와 같다.
- [0297] 재침전에 사용하는 용매의 예는, 후술하는 탈할로젠화제에 의한 처리에 있어서의 반응에 사용하는 용매의 예와 같다.
- [0298] 재결정에 사용하는 용매의 예는, 후술하는 탈할로젠화제에 의한 처리에 있어서의 반응에 사용하는 용매의 예와 같다.
- [0299] 흡착으로서는, 흡착제에 의한 처리가 바람직하다. 또한, 흡착제로서는, 바람직하게는 활성탄, 실리카겔, 알루미나 또는 셀라이트다.
- [0300] 흡착제에 의한 처리는, 통상 용매 중에서 행한다. 흡착제에 의한 처리에 사용하는 용매의 예는, 후술하는 탈할로젠화제에 의한 처리에 있어서의 반응에 사용하는 용매의 예와 같다.
- [0301] [탈할로젠화제에 의한 처리]
- [0302] 탈할로젠화제에 의한 처리로서는, 국제공개 제2006/037458호, 일본특허공개 제2007-220772호 공보, 일본특허공개 제2007-077078호 공보, 국제공개 제2005/084083호 등의 문헌에 기재된 공지된 방법을 들 수 있다.
- [0303] 탈할로젠화제에 의한 처리로서는, 예를 들어 히드ريد 환원제에서 환원하는 방법 및 금속 또는 유기 금속 화합물을 반응시키는 방법 등을 들 수 있다.
- [0304] 히드ريد 환원제로서는, 수소화나트륨, 수소화리튬, 수소화칼슘 및 수소화마그네슘 등의 알칼리 금속 수소화물 및 알칼리 토금속 수소화물; 수소화알루미늄리튬(LAH), 수소화디이소부틸알루미늄(DIBAL) 및 수소화비스(2-메톡시에톡시)알루미늄 나트륨(Red-Al) 등의 수소화알루미늄 화합물; 디보란(B₂H₆), 수소화붕소나트륨(NaBH₄) 및 수소화트리에틸붕소리튬(Super-Hydride) 등의 수소화붕소 화합물; 실란(SiH₄) 및 트리에틸실란(Et₃SiH) 등의 수소화규소 화합물; 및 스탠난(SnH₄) 및 수소화트리부틸 주석(TBT) 등의 수소화주석 화합물을 들 수 있다.
- [0305] 금속을 반응시키는 방법에서, 금속으로서, 리튬, 나트륨, 마그네슘 및 아연 등을 들 수 있다.
- [0306] 유기 금속 화합물을 반응시키는 방법에서, 유기 금속 화합물로서는, 부틸리튬 및 페닐리튬 등의 유기 리튬 화합물; 그리냐르 시약 등의 유기 마그네슘 화합물; 및 디에틸아연 등의 유기 아연 화합물을 들 수 있다.
- [0307] 탈할로젠화제에 의한 처리는, C¹을 보다 저감할 수 있으므로, 바람직하게는 식 (Z1)로 표시되는 화합물을 반응시키는 방법이다.



- [0308]
- [0309] [식 중,
- [0310] R^{Z1}은 알킬기, 시클로알킬기, 아릴기 또는 1가의 복소환기를 나타내며, 이들 기는 치환기를 갖고 있어도 된다.
- [0311] Z^{Z1}은 치환기 Z군으로 이루어지는 군에서 선택되는 기를 나타낸다.]
- [0312] <치환기 Z군>
- [0313] -B(OR^{C2})₂(식 중, R^{C2}는 수소 원자, 알킬기, 시클로알킬기 또는 아릴기를 나타내며, 이들 기는 치환기를 갖고 있어도 된다. 복수 존재하는 R^{C2}는 동일해도 상이해도 되며, 서로 연결하여, 각각이 결합하는 산소 원자와 함께

환 구조를 형성하고 있어도 된다.)로 표시되는 기;

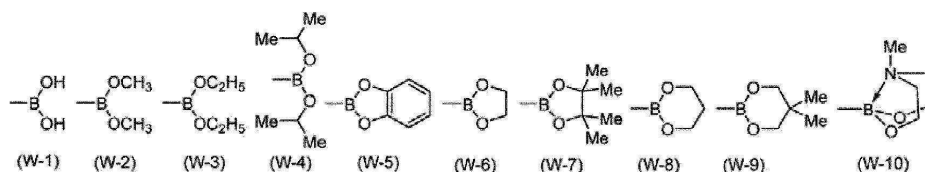
[0314] $-BF_3Q'$ (식 중, Q' 는 Li, Na, K, Rb또는 Cs를 나타냄)로 표시되는 기;

[0315] $-MgY'$ (식 중, Y' 는 염소 원자, 브롬 원자 또는 요오드 원자를 나타냄)로 표시되는 기;

[0316] $-ZnY''$ (식 중, Y'' 는 염소 원자, 브롬 원자 또는 요오드 원자를 나타냄)로 표시되는 기; 및

[0317] $-Sn(R^{C3})_3$ (식 중, R^{C3} 은 수소 원자, 알킬기, 시클로알킬기 또는 아릴기를 나타내며, 이들 기는 치환기를 갖고 있어도 된다. 복수 존재하는 R^{C3} 은 동일해도 상이해도 되며, 서로 연결하여, 각각이 결합하는 주석 원자와 함께 환 구조를 형성하고 있어도 된다.)로 표시되는 기.

[0318] $-B(OR^{C2})_2$ 로 표시되는 기로서는, 하기 식 (W-1)-(W-10)으로 표시되는 기가 예시된다.



[0319]

[0320] R^{Z1} 은 바람직하게는 아릴기 또는 1가의 복소환기이고, 보다 바람직하게는 아릴기이고, 더욱 바람직하게는 페닐기이며, 이들 기는 치환기를 갖고 있어도 된다.

[0321] R^{Z1} 이 갖고 있어도 되는 치환기로서는, 바람직하게는 불소 원자, 알킬기, 시클로알킬기, 아릴기, 1가의 복소환기, 알콕시기, 시클로알콕시기, 아릴옥시기 또는 치환 아미노기이고, 보다 바람직하게는 알킬기, 시클로알킬기, 알콕시기, 아릴기 또는 1가의 복소환기이고, 더욱 바람직하게는 알킬기, 시클로알킬기 또는 알콕시기이고, 특히 바람직하게는 알킬기 또는 시클로알킬기이며, 이들 기는 치환기를 더 갖고 있어도 된다.

[0322] 치환기 Z군에서 선택되는 기는, 바람직하게는 $-B(OR^{C2})_2$ 로 표시되는 기이고, 보다 바람직하게는, 식 (W-7)로 표시되는 기이다.

[0323] 탈할로겐화제에 의한 처리는, 통상 용매 중에서 행한다. 반응에 사용하는 용매로서는, 예를 들어 메탄올, 에탄올, 프로판올, 에틸렌글리콜, 글리세린, 2-메톡시에탄올, 2-에톡시에탄올 등의 알코올계 용매; 디에틸에테르, 테트라히드로푸란(THF), 디옥산, 시클로펜틸메틸에테르, 디글라임 등의 에테르계 용매; 염화메틸렌, 클로로포름 등의 할로겐계 용매; 아세토니트릴, 벤조니트릴 등의 니트릴계 용매; 헥산, 데칼린, 톨루엔, 크실렌, 메시틸렌 등의 탄화수소계 용매; N,N-디메틸포름아미드, N,N-디메틸아세트아미드 등의 아미드계 용매; 아세톤, 디메틸술폰, 물을 들 수 있다. 용매는, 1종 단독으로 사용해도 2종 이상을 병용해도 된다.

[0324] 용매의 사용량은, 통상 식 (1)로 표시되는 인광 발광성 화합물의 합계 100질량부에 대하여, 10 내지 100000질량부이다.

[0325] 탈할로겐화제에 의한 처리에 있어서, 반응 시간은, 통상 30분 내지 150시간이고, 반응 온도는, 통상 반응계에 존재하는 용매의 융점에서 비점 사이이다.

[0326] 탈할로겐화제에 의한 처리에 있어서, 반응을 촉진하기 위해서, 팔라듐 촉매 및 니켈 촉매 등의 촉매를 사용해도 된다. 팔라듐 촉매로서는, 예를 들어 아세트산팔라듐, 비스(트리페닐포스핀)팔라듐(II)디클로라이드, 테트라키스(트리페닐포스핀)팔라듐(0), [1,1'-비스(디페닐포스피노)페로센]디클로로팔라듐(II), 트리스(디벤질리덴아세트)이팔라듐(0)을 들 수 있다. 니켈 촉매로서는, 예를 들어 테트라키스(트리페닐포스핀)니켈(0), [1,3-비스(디페닐포스피노)프로판]니켈(II)디클로라이드, 비스(1,4-시클로옥타디엔)니켈(0)을 들 수 있다. 촉매는, 1종 단독으로 사용해도 2종 이상을 병용해도 된다.

[0327] 촉매의 사용량은, 식 (1)로 표시되는 인광 발광성 화합물의 몰수 합계에 대한 전이 금속의 양으로서, 통상 0.00001 내지 3몰 당량이다.

[0328] 팔라듐 촉매 또는 니켈 촉매는, 트리페닐포스핀, 트리(o-톨릴)포스핀, 트리(tert-부틸)포스핀, 트리스클로헥실포스핀, 1,1'-비스(디페닐포스피노)페로센 등의 인 화합물과 병용해도 된다. 인 화합물은, 1종 단독으로 사용

해도 2종 이상을 병용해도 된다.

- [0329] 탈할로겐화제에 의한 처리에 있어서, 반응을 촉진하기 위해서, 염기 및 상간 이동 촉매를 사용해도 된다. 또한, 필요에 따라, 촉매와 염기 및/또는 상간 이동 촉매를 병용해도 된다.
- [0330] 염기 및 상간 이동 촉매로서는, 예를 들어 탄산나트륨, 탄산칼륨, 탄산세슘, 불화칼륨, 불화세슘, 인산삼칼륨 등의 무기 염기; 불화테트라부틸암모늄, 수산화테트라에틸암모늄, 수산화테트라부틸암모늄 등의 유기 염기; 염화테트라부틸암모늄, 브롬화테트라부틸암모늄 등의 상간 이동 촉매를 들 수 있다. 염기 및 상간 이동 촉매는, 각각, 1종 단독으로 사용해도 2종 이상을 병용해도 된다.
- [0331] 염기 및 상간 이동 촉매의 사용량은, 각각, 식 (1)로 표시되는 인광 발광성 화합물의 합계 몰수에 대하여, 통상 0.001 내지 100몰 당량이다.
- [0332] 탈할로겐화제에 의한 처리에 있어서, 반응을 2회 이상 행하는 경우, 그들은 동일한 조건에서 반응시켜도 되고, 상이한 조건에서 반응시켜도 된다.
- [0333] C^1 의 저감 방법으로서, C^1 을 보다 저감할 수 있기 때문에, 탈할로겐화제에 의한 처리를 행하는 것이 바람직하고, 정제 및 탈할로겐화제에 의한 처리의 양쪽을 행하는 것이 보다 바람직하고, 승화 및/또는 재결정, 및 탈할로겐화제에 의한 처리의 양쪽을 행하는 것이 더욱 바람직하고, 재결정 및 탈할로겐화제에 의한 처리의 양쪽을 행하는 것이 특히 바람직하다.
- [0334] [호스트 재료]
- [0335] 이어서, 본 실시 형태에 따른 조성물에 배합되는 호스트 재료에 대해서 설명한다.
- [0336] 호스트 재료는 염소 원자를 제외한 전형 원소로 구성되는 화합물이다.
- [0337] 호스트 재료는 발광성, 정공 주입성, 정공 수송성, 전자 주입성 및 전자 수송성으로 이루어지는 군에서 선택되는 적어도 하나의 기능을 갖는 것이 바람직하고, 정공 주입성, 정공 수송성, 전자 주입성 및 전자 수송성으로 이루어지는 군에서 선택되는 적어도 하나의 기능을 갖는 것이 보다 바람직하다.
- [0338] 호스트 재료가 갖는 최저 여기 삼중항 상태(T_1)는, 본 실시 형태에 따른 발광 소자의 외부 양자 효율이 우수하므로, 식 (1)로 표시되는 인광 발광성 화합물이 갖는 T_1 과 동등한 에너지 준위, 또는 더 높은 에너지 준위인 것이 바람직하다.
- [0339] 호스트 재료로서는, 수소 원자, 탄소 원자, 제13족 원소, 제14족 원소(단, 탄소 원자는 제외함), 제15족 원소, 제16족 원소 및 불소 원자에서 선택되는 1종 이상의 원자로 구성되는 화합물을 들 수 있고, 바람직하게는, 수소 원자와 탄소 원자로 구성되는 화합물, 또는 수소 원자와, 탄소 원자와, 붕소 원자, 규소 원자, 질소 원자, 인 원자, 산소 원자, 황 원자, 셀레늄 원자 및 불소 원자에서 선택되는 1종 이상의 원자로 구성되는 화합물이고, 보다 바람직하게는, 수소 원자와 탄소 원자로 구성되는 화합물, 또는 수소 원자와, 탄소 원자와, 질소 원자, 산소 원자 및 황 원자에서 선택되는 1종 이상의 원자로 구성되는 화합물이고, 더욱 바람직하게는, 수소 원자와, 탄소 원자와, 질소 원자, 산소 원자 및 황 원자에서 선택되는 1종 이상의 원자로 구성되는 화합물이고, 특히 바람직하게는, 수소 원자와, 탄소 원자와, 질소 원자 및 황 원자에서 선택되는 1종 이상의 원자로 구성되는 화합물이고, 그 중에서도 바람직하게는, 수소 원자와, 탄소 원자와, 질소 원자와, 황 원자로 구성되는 화합물이다.
- [0340] 호스트 재료는, 저분자 화합물(이하, 「저분자 호스트 재료」라고도 함)과 고분자 화합물(이하, 「고분자 호스트 재료」라고도 함)로 분류되고 바람직하게는, 저분자 화합물이다.
- [0341] [고분자 호스트 재료]
- [0342] 고분자 호스트 재료로서는, 예를 들어 후술하는 정공 수송 재료인 고분자 화합물, 후술하는 전자 수송 재료인 고분자 화합물을 들 수 있다.
- [0343] [저분자 호스트 재료]
- [0344] 저분자 호스트 재료로서는, 예를 들어 수소 원자와 탄소 원자로 구성되는 방향족 탄화수소를 갖는 화합물 및 전형 원소로 구성되는 복소환식 화합물을 들 수 있고, 전형 원소로 구성되는 복소환식 화합물이 바람직하다.
- [0345] 저분자 호스트 재료에 있어서의 복소환식 화합물로서는, 바람직하게는 수소 원자와, 탄소 원자와, 제13족 원소, 제14족 원소, 제15족 원소, 제16족 원소 및 불소 원자에서 선택되는 1종 이상의 원자로 구성되는 복소환식 화합

물이고, 보다 바람직하게는, 수소 원자와, 탄소 원자와, 붕소 원자, 규소 원자, 질소 원자, 인 원자, 산소 원자, 황 원자, 셀레늄 원자 및 불소 원자로 이루어지는 군으로 이루어지는 군에서 선택되는 1종 이상의 원자로 구성되는 복소환식 화합물이고, 더욱 바람직하게는, 수소 원자와, 탄소 원자와, 질소 원자, 산소 원자 및 황 원자로 이루어지는 군으로 이루어지는 군에서 선택되는 1종 이상의 원자로 구성되는 복소환식 화합물이고, 특히 바람직하게는, 수소 원자와, 탄소 원자와, 질소 원자 및 황 원자로 이루어지는 군으로 이루어지는 군에서 선택되는 1종 이상의 원자로 구성되는 복소환식 화합물로 구성되는 복소환식 화합물이다.

[0346] 저분자 호스트 재료에 있어서, 방향족 탄화수소환 및 복소환이 갖고 있어도 되는 치환기로서는, 바람직하게는 불소 원자, 알킬기, 시클로알킬기, 알콕시기, 시클로알콕시기, 아릴옥시기, 아릴기, 1가의 복소환기 또는 치환 아미노기이고, 보다 바람직하게는, 알킬기, 시클로알킬기, 알콕시기, 아릴기, 1가의 복소환기 또는 치환 아미노기이고, 더욱 바람직하게는, 알킬기, 시클로알킬기, 아릴기, 1가의 복소환기 또는 치환 아미노기이고, 특히 바람직하게는, 알킬기, 아릴기 또는 1가의 복소환기이고, 그 중에서도 바람직하게는, 1가의 복소환기이며, 이들은 치환기를 더 갖고 있어도 된다.

[0347] 저분자 호스트 재료에 있어서, 복소환식 화합물은, 치환기를 갖고 있어도 되는 방향족 복소환을 갖는 저분자 화합물(즉, 방향족 복소환식 화합물)인 것이 바람직하다.

[0348] 저분자 호스트 재료에 있어서, 방향족 복소환을 구성하는 원자가 바람직한 범위는, 전술한 저분자 호스트 재료에 있어서의 복소환을 구성하는 원자가 바람직한 범위와 동일하다.

[0349] 저분자 호스트 재료에 있어서, 방향족 복소환이 갖고 있어도 되는 치환기가 바람직한 범위는, 전술한 저분자 호스트 재료에 있어서의 복소환이 갖고 있어도 되는 치환기가 바람직한 범위와 동일하다.

[0350] 저분자 호스트 재료에 있어서의 방향족 탄화수소환으로서, 예를 들어 벤젠환, 나프탈렌환, 안트라센환, 플루오렌환, 스피로비플루오렌환, 페난트렌환, 디히드로페난트렌환, 피렌환, 크리센환 및 트리페닐렌환을 들 수 있고, 바람직하게는, 벤젠환, 나프탈렌환, 플루오렌환, 스피로비플루오렌환, 페난트렌환, 디히드로페난트렌환, 크리센환 또는 트리페닐렌환이고, 보다 바람직하게는, 벤젠환, 플루오렌환 또는 스피로비플루오렌환이고, 더욱 바람직하게는 벤젠환이고, 이들 환은 치환기를 갖고 있어도 된다.

[0351] 저분자 호스트 재료에 있어서의 복소환으로서, 예를 들어 피롤환, 푸란환, 티오펜환, 옥사디아졸환, 티아디아졸환, 티아졸환, 옥사졸환, 피리딘환, 디아자벤젠환, 트리아진환, 퀴놀린환, 이소퀴놀린환, 퀴나졸린환, 퀴녹살린환, 페난트롤린환, 디벤조푸란환, 디벤조티오펜환, 디벤조실롤환, 디벤조포스폴환, 카르바졸환, 아자카르바졸환, 디아자카르바졸환, 페녹사진환 및 페노티아진환을 들 수 있고, 바람직하게는, 피리딘환, 디아자벤젠환, 트리아진환, 퀴놀린환, 이소퀴놀린환, 퀴나졸린환, 퀴녹살린환, 페난트롤린환, 디벤조푸란환, 디벤조티오펜환, 카르바졸환, 아자카르바졸환 또는 디아자카르바졸환이고, 보다 바람직하게는, 피리딘환, 피리미딘환, 트리아진환, 퀴놀린환, 이소퀴놀린환, 퀴나졸린환, 디벤조푸란환, 디벤조티오펜환 또는 카르바졸환이고, 더욱 바람직하게는, 피리딘환, 피리미딘환, 트리아진환, 디벤조푸란환, 디벤조티오펜환 또는 카르바졸환이고, 특히 바람직하게는, 디벤조푸란환, 디벤조티오펜환 또는 카르바졸환이고, 그 중에서도 바람직하게는, 디벤조티오펜환 또는 카르바졸환이고, 이들 환은 치환기를 갖고 있어도 된다.

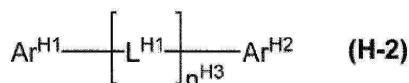
[0352] [식 (H-1)로 표시되는 화합물]

[0353] 저분자 호스트 재료는, 바람직하게는 식 (H-1)로 표시되는 화합물이다.

[0354] Ar^{H1} 및 Ar^{H2} 는 페닐기, 플루오레닐기, 스피로비플루오레닐기, 피리딜기, 피리미디닐기, 트리아지닐기, 퀴놀리닐기, 이소퀴놀리닐기, 티에닐기, 벤조티에닐기, 디벤조티에닐기, 푸릴기, 벤조푸릴기, 디벤조푸릴기, 피롤릴기, 인돌릴기, 아자인돌릴기, 카르바졸릴기, 아자카르바졸릴기, 디아자카르바졸릴기, 페녹사지닐기 또는 페노티아지닐기인 것이 바람직하고, 페닐기, 스피로비플루오레닐기, 피리딜기, 피리미디닐기, 트리아지닐기, 디벤조티에닐기, 디벤조푸릴기, 카르바졸릴기 또는 아자카르바졸릴기인 것이 보다 바람직하고, 페닐기, 피리딜기, 카르바졸릴기 또는 아자카르바졸릴기인 것이 더욱 바람직하고, 상기 식 (TDA-1) 또는 (TDA-3)으로 표시되는 기인 것이 특히 바람직하고, 상기 식 (TDA-3)으로 표시되는 기인 것이 그 중에서도 바람직하며, 이들 기는 치환기를 갖고 있어도 된다.

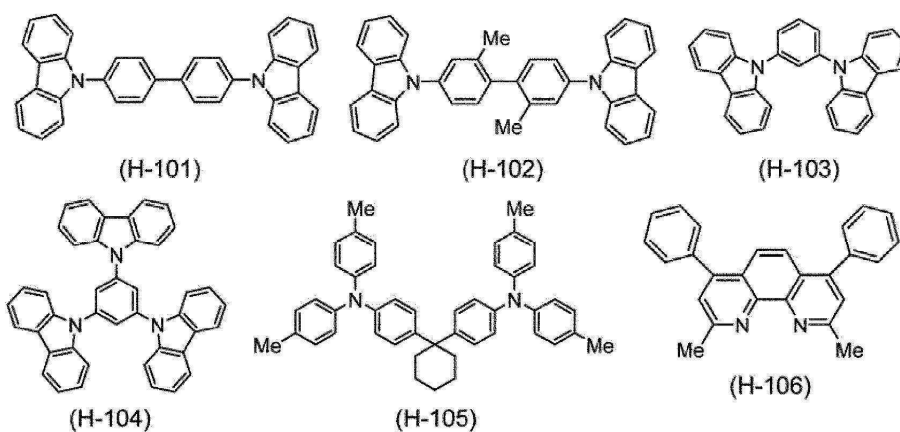
[0355] Ar^{H1} 및 Ar^{H2} 가 갖고 있어도 되는 치환기로서는, 불소 원자, 알킬기, 시클로알킬기, 알콕시기, 시클로알콕시기, 아릴기 또는 1가의 복소환기가 바람직하고, 알킬기, 시클로알킬기, 알콕시기 또는 시클로알콕시기가 보다 바람직하고, 알킬기 또는 시클로알콕시기가 더욱 바람직하며, 이들 기는 치환기를 더 갖고 있어도 된다.

- [0356] n^{H1} 은 바람직하게는 1이다. n^{H2} 는 바람직하게는 0이다.
- [0357] n^{H3} 은, 통상 0 이상 10 이하의 정수이고, 바람직하게는, 0 이상 5 이하의 정수이고, 더욱 바람직하게는 1 이상 3 이하의 정수이고, 특히 바람직하게는 1이다.
- [0358] n^{H11} 은 바람직하게는 1 이상 5 이하의 정수이고, 보다 바람직하게는 1 이상 3 이하의 정수이고, 더욱 바람직하게는 1이다.
- [0359] R^{H11} 은 수소 원자, 알킬기, 시클로알킬기, 아릴기 또는 1가의 복소환기인 것이 바람직하고, 수소 원자, 알킬기 또는 시클로알킬기인 것이 보다 바람직하고, 수소 원자 또는 알킬기인 것이 더욱 바람직하며, 이들 기는 치환기를 갖고 있어도 된다.
- [0360] L^{H1} 은 아틸렌기 또는 2가의 복소환기인 것이 바람직하다.
- [0361] L^{H1} 은 식 (A-1) 내지 (A-3), 식 (A-8) 내지 (A-10), 식 (AA-1) 내지 (AA-6), 식 (AA-10) 내지 (AA-21) 또는 식 (AA-24) 내지 (AA-34)로 표시되는 기인 것이 바람직하고, 식 (A-1), 식 (A-2), 식 (A-8), 식 (A-9), 식 (AA-1) 내지 (AA-4), 식 (AA-10) 내지 (AA-15) 또는 식 (AA-29) 내지 (AA-34)로 표시되는 기인 것이 보다 바람직하고, 식 (A-1), 식 (A-2), 식 (A-8), 식 (A-9), 식 (AA-2), 식 (AA-4), 식 (AA-10) 내지 (AA-15)로 표시되는 기인 것이 더욱 바람직하고, 식 (A-1), 식 (A-2), 식 (A-8), 식 (AA-2), 식 (AA-4), 식 (AA-10), 식 (AA-12) 또는 식 (AA-14)로 표시되는 기인 것이 특히 바람직하고, 식 (A-1), 식 (A-2), 식 (AA-2), 식 (AA-4), 식 (AA-10), 식 (AA-12) 또는 식 (AA-14)로 표시되는 기인 것이 그 중에서도 바람직하고, 식 (AA-10), 식 (AA-12) 또는 식 (AA-14)로 표시되는 기가 특별히 바람직하고, 식 (AA-14)로 표시되는 기가 가장 바람직하다.
- [0362] L^{H1} 이 갖고 있어도 되는 치환기로서는, 불소 원자, 알킬기, 시클로알킬기, 알콕시기, 시클로알콕시기, 아릴기 또는 1가의 복소환기가 바람직하고, 알킬기, 알콕시기, 아릴기 또는 1가의 복소환기가 보다 바람직하고, 알킬기, 아릴기 또는 1가의 복소환기가 더욱 바람직하며, 이들 기는 치환기를 더 갖고 있어도 된다.
- [0363] L^{H21} 은 단결합 또는 아틸렌기인 것이 바람직하고, 단결합인 것이 보다 바람직하고, 이 아틸렌기는 치환기를 갖고 있어도 된다.
- [0364] L^{H21} 로 표시되는 아틸렌기 또는 2가의 복소환기의 정의 및 예는, L^{H1} 로 표시되는 아틸렌기 또는 2가의 복소환기의 정의 및 예와 마찬가지로이다.
- [0365] R^{H21} 은 아릴기 또는 1가의 복소환기인 것이 바람직하며, 이들 기는 치환기를 갖고 있어도 된다.
- [0366] R^{H21} 로 표시되는 아릴기 및 1가의 복소환기의 정의 및 예는, Ar^{H1} 및 Ar^{H2} 로 표시되는 아릴기 및 1가의 복소환기의 정의 및 예와 마찬가지로이다.
- [0367] R^{H21} 이 갖고 있어도 되는 치환기의 정의 및 예는, Ar^{H1} 및 Ar^{H2} 가 갖고 있어도 되는 치환기의 정의 및 예와 마찬가지로이다.
- [0368] 식 (H-1)로 표시되는 화합물은, 식 (H-2)로 표시되는 화합물인 것이 바람직하다.

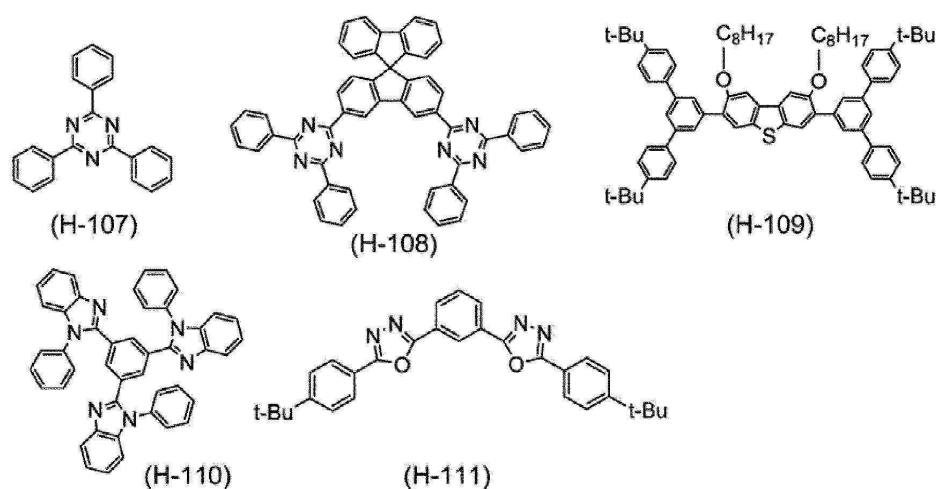


- [0369]
- [0370] [식 중, Ar^{H1} , Ar^{H2} , n^{H3} 및 L^{H1} 은 상기와 동일한 의미를 나타낸다.]

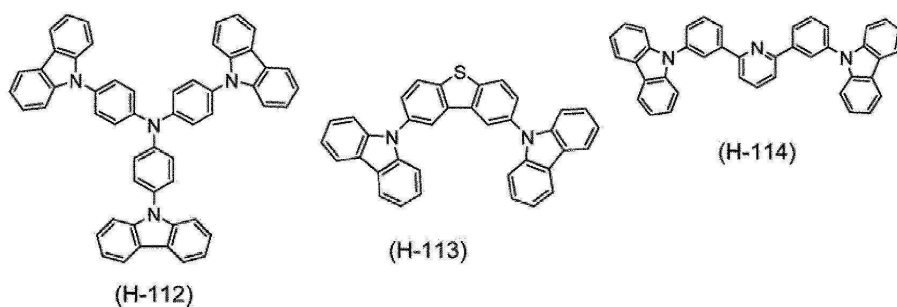
[0371] 저분자 호스트 재료로서는, 하기 식 (H-101) 내지 (H-118)로 표시되는 화합물이 예시된다.



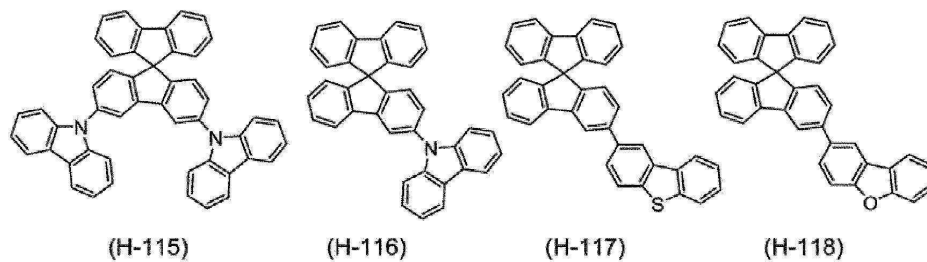
[0372]



[0373]



[0374]



[0375]

[0376] [저분자 호스트 재료의 입수 방법]

[0377] 저분자 호스트 재료는, Aldrich, Luminescence Technology Corp. 등으로부터 입수 가능하다.

[0378] 또한, 상기 이외의 입수 방법으로서, 국제공개 제2006/121811호, 국제공개 제2007/097153호, 국제공개 제

2009/086028호, 국제공개 제2009/096202호, 일본특허공개 제2009-46408호 공보, 일본특허공개 제2009-267255호 공보 등의 문헌에 기재된 공지된 방법에 의해 제조함으로써, 입수 가능하다.

- [0379] [저분자 호스트 재료에 포함되는 염소 원자의 양(C^H)의 저감 방법]
- [0380] 저분자 호스트 재료에 불순물로서 포함되는 염소 원자의 양의 저감 방법으로서, 예를 들어, 정제 및 탈할로겐 화제에 의한 처리에서 선택되는 적어도 1종의 방법을 들 수 있고, 저분자 호스트 재료에 포함되는 염소 원자의 양을 보다 저감할 수 있기 때문에, 정제가 바람직하고, 승화 및/또는 재결정이 보다 바람직하고, 승화가 더욱 바람직하다.
- [0381] 저분자 호스트 재료에 포함되는 염소 원자의 양의 저감 방법에 있어서의 정제 및 탈할로겐화제에 의한 처리의 예, 정의 및 바람직한 범위는, 전술한 C^I 의 저감 방법에 있어서의 정제 및 탈할로겐화제에 의한 처리의 예, 정의 및 바람직한 범위와 동일하다.
- [0382] 저분자 호스트 재료에 포함되는 염소 원자의 양의 저감 방법에 있어서의 탈할로겐화제에 의한 처리에 있어서, 용매의 사용량은, 통상 저분자 호스트 재료의 합계 100질량부에 대하여, 10 내지 100000질량부이다.
- [0383] 저분자 호스트 재료에 포함되는 염소 원자의 양의 저감 방법에 있어서의 탈할로겐화제에 의한 처리에 있어서, 촉매의 사용량은, 저분자 호스트 재료의 몰수 합계에 대한 전이 금속의 양에 대하여 통상, 0.00001 내지 3몰 당량이다.
- [0384] 저분자 호스트 재료에 포함되는 염소 원자의 양의 저감 방법에 있어서의 탈할로겐화제에 의한 처리에 있어서, 염기 및 상간 이동 촉매의 사용량은 각각, 저분자 호스트 재료의 합계 몰수에 대하여, 통상 0.001 내지 100몰 당량이다.
- [0385] 호스트 재료에 불순물로서 포함되는 염소 원자의 양(C^H)은, 특별히 한정되지 않지만 통상, 호스트 재료의 전량에 대하여, 50질량ppm 미만이고, 본 실시 형태에 따른 발광 소자의 초기 열화가 억제되므로, 바람직하게는 30질량ppm 미만이고, 보다 바람직하게는 9질량ppm 이하이고, 더욱 바람직하게는 5질량ppm 이하이고, 특히 바람직하게는 1질량ppm 이하이고, 그 중에서도 바람직하게는 0질량ppm이다.
- [0386] C^H 의 구체적인 산출 방법은, 전술한 C^I 의 구체적인 산출 방법과 마찬가지로 하여 구할 수 있다.
- [0387] 예를 들어, 전술한 실시예 D1에 있어서의 C^I 의 구체적인 산출 방법과 마찬가지로 하여, 실시예 D1에 있어서의, C^H 는 0질량ppm이다.
- [0388] <조성물>
- [0389] 본 실시 형태에 따른 조성물은, 식 (1)로 표시되는 인광 발광성 화합물과 호스트 재료가 배합된 조성물이며, 인광 발광성 화합물에 불순물로서 포함되는 염소 원자의 양이, 조성물에 배합되는 고형분 전량에 대하여, 3.5질량ppm 이하이다.
- [0390] 본 실시 형태에 따른 조성물에 있어서, 식 (1)로 표시되는 인광 발광성 화합물은, 1종 단독으로 배합되어 있거나, 2종 이상 배합되어 있어도 된다. 또한, 본 실시 형태에 따른 조성물에 있어서, 호스트 재료는, 1종 단독으로 배합되어 있거나, 2종 이상 배합되어 있어도 된다.
- [0391] 본 실시 형태에 따른 조성물은, 인광 발광성 화합물에 불순물로서 포함되는 염소 원자 및 호스트 재료에 불순물로서 포함되는 염소 원자의 총량이, 조성물에 배합되는 고형분 전량에 대하여, 본 실시 형태에 따른 발광 소자의 초기 열화가 억제되므로, 바람직하게는 3.5질량ppm 이하이고, 보다 바람직하게는 3.1질량ppm 이하이고, 더욱 바람직하게는 2.7질량ppm 이하이고, 특히 바람직하게는 2.3질량ppm 이하이고, 그 중에서도 바람직하게는 1.8질량ppm 이하이고, 특별히 바람직하게는 1.2질량ppm이고, 특별히 보다 바람직하게는 0.8질량ppm 이하이고, 특별히 더욱 바람직하게는 0.3질량ppm 이하이고, 특별히 특히 바람직하게는 0질량ppm이다.
- [0392] 또한, 본 실시 형태에 따른 조성물은, 인광 발광성 화합물에 불순물로서 포함되는 염소 원자 및 호스트 재료에 불순물로서 포함되는 염소 원자의 총량이, 조성물에 배합되는 고형분 전량에 대하여, 본 실시 형태에 따른 발광 소자의 발광 효율이 우수하므로, 바람직하게는 0.01질량ppm 이상 3.0질량ppm 이하이고, 보다 바람직하게는 0.02질량ppm 이상 2.7질량ppm 이하이고, 더욱 바람직하게는 0.05질량ppm 이상 2.5질량ppm 이하이고, 특히 바람직하게

게는 0.1질량ppm 이상 2.3질량ppm 이하이고, 그 중에서도 바람직하게는 0.2질량ppm 이상 2.3질량ppm 이하이다.

[0393] 또한, 본 실시 형태에 따른 조성물은, 인광 발광성 화합물에 불순물로서 포함되는 염소 원자 및 호스트 재료에 불순물로서 포함되는 염소 원자의 총량이, 조성물에 배합되는 고형분 전량에 대하여, 본 실시 형태에 따른 발광 소자의 초기 열화가 억제되고, 또한 본 실시 형태에 따른 발광 소자의 발광 효율이 우수하므로, 바람직하게는 0.01질량ppm 이상 2.3질량ppm 이하이고, 보다 바람직하게는 0.02질량ppm 이상 1.8질량ppm 이하이고, 더욱 바람직하게는 0.05질량ppm 이상 1.2질량ppm 이하이고, 특히 바람직하게는 0.1질량ppm 이상 0.8질량ppm 이하이다.

[0394] 예를 들어, 본 실시 형태에 따른 조성물에 배합되는 고형분이 인광 발광성 화합물 및 호스트 재료만일 때, 인광 발광성 화합물에 불순물로서 포함되는 염소 원자 및 호스트 재료에 불순물로서 포함되는 염소 원자의 총량(질량 ppm)은, 식 (1)로 표시되는 인광 발광성 화합물과 호스트 재료와의 합계 질량에 대한, 식 (1)로 표시되는 인광 발광성 화합물의 질량 비를 W^1 , 식 (1)로 표시되는 인광 발광성 화합물과 호스트 재료와의 합계 질량에 대한, 호스트 재료의 합계 질량의 비를 W^H 로 했을 때, $C^1W^1+C^HW^H$ 로 표시된다.

[0395] W^1 은, 통상 0.0001 내지 0.90이고, 본 실시 형태에 따른 발광 소자의 초기 열화가 보다 억제되므로, 0.01 내지 0.60인 것이 바람직하고, 0.10 내지 0.40인 것이 보다 바람직하다.

[0396] W^1 의 구체적인 산출 방법을 후술하는 실시예 D1 및 실시예 D2를 사용하여, 설명한다.

[0397] 먼저, 실시예 D1에서는, 화합물 HM-1(호스트 재료)과 인광 발광성 화합물 MC3과의 질량비는, 화합물 HM-1:인광 발광성 화합물 MC3=75:25이다.

[0398] 따라서, W^1 은 투입의 양으로부터 구할 수 있고, 이하와 같이 구해진다.

[0399] $W^1=25/(75+25)=0.25$

[0400] 실시예 D2에서는, 화합물 HM-1과 인광 발광성 화합물 MC3과 인광 발광성 화합물 MC2와의 질량비는, 화합물 HM-1:인광 발광성 화합물 MC3:인광 발광성 화합물 MC2=75:22.5:2.5이다.

[0401] 따라서, W^1 은 투입의 양으로부터 구할 수 있고, 이하와 같이 구해진다.

[0402] $W^1=(22.5+2.5)/(75+22.5+2.5)=0.25$

[0403] 마찬가지로 하여, 실시예 D3에 있어서의, W^1 은, 이하와 같이 구해진다.

[0404] $W^1=(12.5+12.5)/(75+12.5+12.5)=0.25$

[0405] 마찬가지로 하여, 실시예 D4에 있어서의, W^1 은, 이하와 같이 구해진다.

[0406] $W^1=25/(75+25)=0.25$

[0407] 마찬가지로 하여, 실시예 D5에 있어서의, W^1 은, 이하와 같이 구해진다.

[0408] $W^1=(12.5+12.5)/(75+12.5+12.5)=0.25$

[0409] 마찬가지로 하여, 비교예 CD1에 있어서의, W^1 은, 이하와 같이 구해진다.

[0410] $W^1=25/(75+25)=0.25$

[0411] W^H 는, 통상 0.1 내지 0.9999이고, 본 실시 형태에 따른 발광 소자의 초기 열화가 보다 억제되므로, 0.40 내지 0.99인 것이 바람직하고, 0.60 내지 0.90인 것이 보다 바람직하다.

[0412] W^H 의 구체적인 산출 방법은, W^1 의 구체적인 산출 방법과 마찬가지로 하여 구할 수 있다.

[0413] 예를 들어, 전술한 실시예 D1에 있어서의 W^1 의 구체적인 산출 방법과 마찬가지로 하여, 실시예 D1에 있어서의,

W^H 는, 이하와 같이 구해진다.

[0414] $W^H = 75 / (75 + 25) = 0.75$

[0415] 상술한 바와 같이, C^1 , C^H , W^1 및 W^H 를 산출함으로써, $C^1W^1 + C^HW^H$ 를 산출할 수 있다.

[0416] 예를 들어, 실시예 D1에 있어서의 $C^1W^1 + C^HW^H$ 는, 이하와 같이 구해진다.

[0417] $C^1W^1 + C^HW^H = (0 \times 0.25) + (0 \times 0.75) = 0$ 질량ppm

[0418] 실시예 D2에 있어서의 $C^1W^1 + C^HW^H$ 는, 이하와 같이 구해진다.

[0419] $C^1W^1 + C^HW^H = (0.9 \times 0.25) + (0 \times 0.75) = 0.23$ 질량ppm

[0420] 실시예 D3에 있어서의 $C^1W^1 + C^HW^H$ 는, 이하와 같이 구해진다.

[0421] $C^1W^1 + C^HW^H = (4.5 \times 0.25) + (0 \times 0.75) = 1.13$ 질량ppm

[0422] 실시예 D4에 있어서의 $C^1W^1 + C^HW^H$ 는, 이하와 같이 구해진다.

[0423] $C^1W^1 + C^HW^H = (9 \times 0.25) + (0 \times 0.75) = 2.25$ 질량ppm

[0425] 실시예 D5에 있어서의 $C^1W^1 + C^HW^H$ 는, 이하와 같이 구해진다.

[0426] $C^1W^1 + C^HW^H = (12.5 \times 0.25) + (0 \times 0.75) = 3.13$ 질량ppm

[0427] 비교예 CD1에 있어서의 $C^1W^1 + C^HW^H$ 는, 이하와 같이 구해진다.

[0428] $C^1W^1 + C^HW^H = (16 \times 0.25) + (0 \times 0.75) = 4.00$ 질량ppm

[0429] $C^1W^1 + C^HW^H$ 는 3.5질량ppm 이하이고, 본 실시 형태에 따른 발광 소자의 초기 열화가 억제되므로, 바람직하게는 3.1 질량ppm 이하이고, 보다 바람직하게는 2.7질량ppm 이하이고, 더욱 바람직하게는 2.3질량ppm 이하이고, 특히 바람직하게는 1.8질량ppm 이하이고, 그 중에서도 바람직하게는 1.2질량ppm이고, 특별히 바람직하게는 0.8질량ppm 이하이고, 특별히 보다 바람직하게는 0.3질량ppm 이하이고, 가장 바람직하게는 0질량ppm이다.

[0430] 또한, $C^1W^1 + C^HW^H$ 는, 본 실시 형태에 따른 발광 소자의 발광 효율이 우수하므로, 바람직하게는 0.01질량ppm 이상 3.0질량ppm 이하이고, 보다 바람직하게는 0.02질량ppm 이상 2.7질량ppm 이하이고, 더욱 바람직하게는 0.05질량ppm 이상 2.5질량ppm 이하이고, 특히 바람직하게는 0.1질량ppm 이상 2.3질량ppm 이하이고, 그 중에서도 바람직하게는 0.2질량ppm 이상 2.3질량ppm 이하이다.

[0431] 또한, $C^1W^1 + C^HW^H$ 는, 본 실시 형태에 따른 발광 소자의 초기 열화가 억제되고, 또한 본 실시 형태에 따른 발광 소자의 발광 효율이 우수하므로, 바람직하게는 0.01질량ppm 이상 2.3질량ppm 이하이고, 보다 바람직하게는 0.02질량ppm 이상 1.8질량ppm 이하이고, 더욱 바람직하게는 0.05질량ppm 이상 1.2질량ppm 이하이고, 특히 바람직하게는 0.1질량ppm 이상 0.8질량ppm 이하이다.

[0432] 본 실시 형태에 따른 조성물은, 또한 식 (2')를 만족시키는 것이 바람직하다.

[0433] $C^H \leq C^1 \leq 15$ 질량ppm (2')

[0434] [식 중, C^1 및 C^H 는 상기와 동일한 의미를 나타낸다.]

[0435] 식 (2')는, 바람직하게는 식 (2'-1)이고, 보다 바람직하게는 식 (2'-2)이고, 더욱 바람직하게는 식 (2'-3)이고, 특히 바람직하게는 식 (2'-4)이고, 그 중에서도 바람직하게는 식 (2'-5)이다.

[0436] $C^H \leq C^1 \leq 13$ 질량ppm (2'-1)

- [0437] $C^H \leq C^1 \leq 9$ 질량ppm (2'-2)
- [0438] $C^H \leq C^1 \leq 5$ 질량ppm (2'-3)
- [0439] $C^H \leq C^1 \leq 1$ 질량ppm (2'-4)
- [0440] $C^H = C^1 = 0$ 질량ppm (2'-5)
- [0441] [식 중, C^1 및 C^H 는 상기와 동일한 의미를 나타낸다.]
- [0442] 본 실시 형태에 따른 조성물에 있어서의 식 (1)로 표시되는 인광 발광성 화합물의 배합량은, 특별히 제한되지 않지만, 조성물에 배합되는 고형분 전량 기준으로, 0.01 내지 90질량%이면 되고, 1 내지 60질량%인 것이 바람직하고, 10 내지 40질량%인 것이 보다 바람직하다.
- [0443] 본 실시 형태에 따른 조성물에 있어서의 호스트 재료의 배합량은, 특별히 제한되지 않지만, 조성물에 배합되는 고형분 전량 기준으로, 10 내지 99.99질량%이면 되고, 40 내지 99질량%인 것이 바람직하고, 60 내지 90질량%인 것이 보다 바람직하다.
- [0444] [그 밖의 성분]
- [0445] 본 실시 형태에 따른 조성물은, 정공 수송 재료, 정공 주입 재료, 전자 수송 재료, 전자 주입 재료, 발광 재료 (식 (1)로 표시되는 인광 발광성 화합물 및 호스트 재료와는 상이함), 산화 방지제 및 용매로 이루어지는 군에서 선택되는 적어도 1종의 재료를 더 함유하고 있어도 된다. 단, 정공 수송 재료, 정공 주입 재료, 전자 수송 재료 및 전자 주입 재료는, 호스트 재료와는 상이하다.
- [0446] 본 실시 형태에 따른 조성물이, 정공 수송 재료, 정공 주입 재료, 전자 수송 재료, 전자 주입 재료, 발광 재료 및 산화 방지제로 이루어지는 군에서 선택되는 적어도 1종의 재료를 더 함유하는 경우, 이들 재료에 포함되는 염소 원자의 양을, 전술한 정제 및 전술의 탈할로겐화제에 의한 처리에서 선택되는 적어도 1종의 방법에 의해, 저감해 두는 것이 바람직하다.
- [0447] [정공 수송 재료]
- [0448] 정공 수송 재료는, 저분자 화합물과 고분자 화합물로 분류되고 바람직하게는, 고분자 화합물이다. 정공 수송 재료는, 가교기를 갖고 있어도 된다.
- [0449] 고분자 화합물로서는, 예를 들어 폴리비닐카르바졸 및 그의 유도체; 측쇄 또는 주쇄에 방향족 아민 구조를 갖는 폴리아릴렌 및 그의 유도체를 들 수 있다. 고분자 화합물은, 전자 수용성 부위가 결합된 화합물이어도 된다. 전자 수용성 부위로서는, 예를 들어 플러렌, 테트라플루오로 테트라시아노퀴노디메탄, 테트라시아노 에틸렌, 트리니트로플루오레논 등을 들 수 있고, 바람직하게는, 플러렌이다.
- [0450] 본 실시 형태에 따른 조성물에 있어서, 정공 수송 재료의 배합량은, 식 (1)로 표시되는 인광 발광성 화합물과 호스트 재료와의 합계를 100질량부로 한 경우 통상, 1 내지 400질량부이고, 바람직하게는, 5 내지 150질량부이다.
- [0451] 정공 수송 재료는, 1종 단독으로 사용해도 2종 이상을 병용해도 된다.
- [0452] [전자 수송 재료]
- [0453] 전자 수송 재료는, 저분자 화합물과 고분자 화합물로 분류된다. 전자 수송 재료는, 가교기를 갖고 있어도 된다.
- [0454] 저분자 화합물로서는, 예를 들어 8-히드록시퀴놀린을 배위자로 하는 금속 착체, 옥사디아졸, 안트라퀴노디메탄, 벤조퀴논, 나프토퀴논, 안트라퀴논, 테트라시아노안트라퀴노디메탄, 플루오레논, 디페닐디시아노에틸렌 및 디페노퀴논, 및 이들의 유도체를 들 수 있다.
- [0455] 고분자 화합물로서는, 예를 들어 폴리페닐렌, 폴리플루오렌 및 이들 유도체를 들 수 있다. 고분자 화합물은, 금속으로 도핑되어 있어도 된다.
- [0456] 본 실시 형태에 따른 조성물에 있어서, 전자 수송 재료의 배합량은, 식 (1)로 표시되는 인광 발광성 화합물과 호스트 재료와의 합계를 100질량부로 한 경우 통상, 1 내지 400질량부이고, 바람직하게는, 5 내지 150질량부이

다.

[0457] 전자 수송 재료는, 1종 단독으로 사용해도 2종 이상을 병용해도 된다.

[0458] [정공 주입 재료 및 전자 주입 재료]

[0459] 정공 주입 재료 및 전자 주입 재료는, 각각, 저분자 화합물과 고분자 화합물로 분류된다. 정공 주입 재료 및 전자 주입 재료는, 가교기를 갖고 있어도 된다.

[0460] 저분자 화합물로서는, 예를 들어 구리 프탈로시아닌 등의 금속 프탈로시아닌; 카본; 폴리브덴, 텅스텐 등의 금속 산화물; 불화 리튬, 불화나트륨, 불화 세슘, 불화칼륨 등의 금속 불화물을 들 수 있다.

[0461] 고분자 화합물로서는, 예를 들어 폴리아닐린, 폴리티오펜, 폴리피롤, 폴리페닐렌비닐렌, 폴리티에닐렌비닐렌, 폴리퀴놀린 및 폴리퀴녹살린, 및 이들의 유도체; 방향족 아민 구조를 주쇄 또는 측쇄에 포함하는 중합체 등의 도전성 고분자를 들 수 있다.

[0462] 본 실시 형태에 따른 조성물에 있어서, 정공 주입 재료 및 전자 주입 재료의 배합량은 각각, 식 (1)로 표시되는 인광 발광성 화합물과 호스트 재료와의 합계를 100질량부로 한 경우 통상, 1 내지 400질량부이고, 바람직하게는, 5 내지 150질량부이다.

[0463] 전자 주입 재료 및 정공 주입 재료는, 각각, 1종 단독으로 사용해도 2종 이상을 병용해도 된다.

[0464] [이온 도프]

[0465] 정공 주입 재료 또는 전자 주입 재료가 도전성 고분자를 포함하는 경우, 도전성 고분자의 전기 전도도는, 바람직하게는 1×10^{-5} S/cm 내지 1×10^3 S/cm이다. 도전성 고분자의 전기 전도도를 이러한 범위로 하기 때문에, 도전성 고분자에 적량의 이온을 도프할 수 있다.

[0466] 도프하는 이온의 종류는, 정공 주입 재료이면 음이온, 전자 주입 재료이면 양이온이다. 음이온으로서, 예를 들어 폴리스티렌술포산 이온, 알킬 벤젠술포산 이온, 캄포 술포산 이온을 들 수 있다. 양이온으로서, 예를 들어 리튬 이온, 나트륨 이온, 칼륨 이온, 테트라부틸암모늄 이온을 들 수 있다.

[0467] 도프하는 이온은, 1종 단독으로 사용해도 2종 이상을 병용해도 된다.

[0468] [발광 재료]

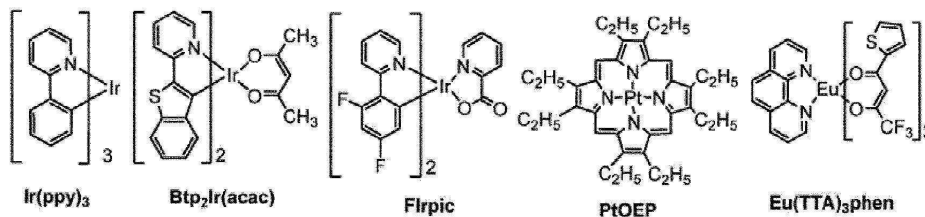
[0469] 발광 재료(식 (1)로 표시되는 인광 발광성 화합물 및 호스트 재료와는 상이함)는, 저분자 화합물과 고분자 화합물로 분류된다. 발광 재료는, 가교기를 갖고 있어도 된다.

[0470] 저분자 화합물로서는, 예를 들어 나프탈렌 및 그의 유도체, 안트라센 및 그의 유도체, 및 페릴렌 및 그의 유도체를 들 수 있다.

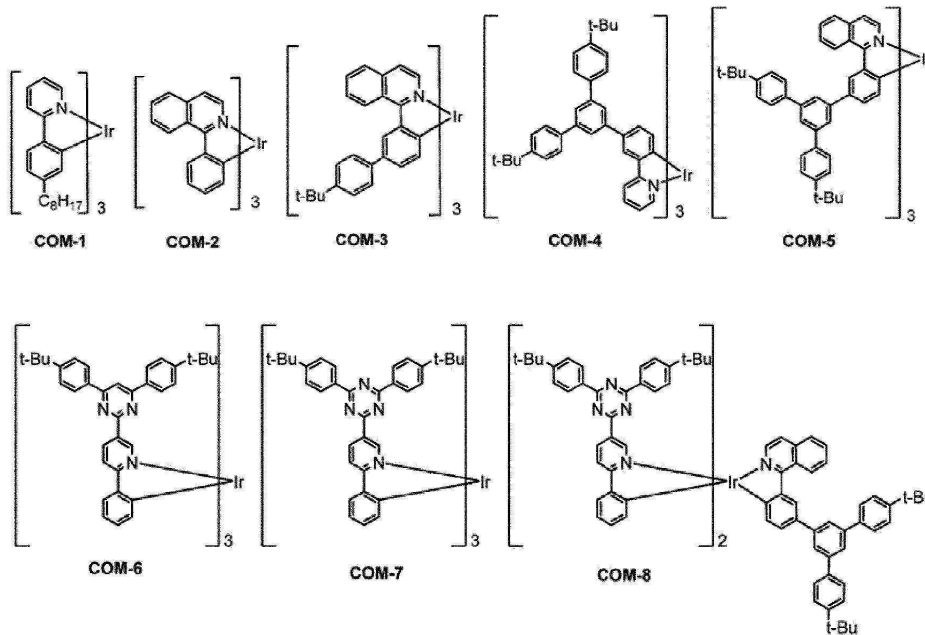
[0471] 고분자 화합물로서는, 예를 들어 페닐렌기, 나프탈렌디일기, 안트라센디일기, 플루오렌디일기, 페난트렌디일기, 디히드로페난트렌디일기, 식 (X)로 표시되는 기, 카르바졸디일기, 페녹사진 디일기, 페노티아진 디일기, 피렌디일기 등을 포함하는 고분자 화합물을 들 수 있다.

[0472] 발광 재료는, 바람직하게는 삼중항 발광 착체 및 고분자 화합물을 포함한다.

[0473] 삼중항 발광 착체로서는, 예를 들어 이하에 나타내는 금속 착체를 들 수 있다.



[0474]



[0475]

[0476]

[0477] 본 실시 형태에 따른 조성물에 있어서, 발광 재료의 배합량은, 식 (1)로 표시되는 인광 발광성 화합물과 호스트 재료와의 합계를 100질량부로 한 경우 통상, 0.1 내지 400질량부이고, 바람직하게는, 1 내지 150질량부이다.

[0478]

발광 재료는, 1종 단독으로 사용해도 2종 이상을 병용해도 된다.

[0479]

[산화 방지제]

[0480]

산화 방지제는, 식 (1)로 표시되는 인광 발광성 화합물 및 호스트 재료와 같은 용매에 가용이고, 발광 및 전하 수송을 저해하지 않는 화합물이면 되고, 예를 들어 페놀계 산화 방지제, 인계 산화 방지제를 들 수 있다.

[0481]

본 실시 형태에 따른 조성물에 있어서, 산화 방지제의 배합량은, 식 (1)로 표시되는 인광 발광성 화합물과 호스트 재료와의 합계를 100질량부로 한 경우 통상, 0.001 내지 10질량부이다.

[0482]

산화 방지제는, 1종 단독으로 사용해도 2종 이상을 병용해도 된다.

[0483]

[잉크]

[0484]

식 (1)로 표시되는 인광 발광성 화합물과, 호스트 재료와, 용매를 함유하는 조성물(이하, 「잉크」라고도 함)는, 스핀 코트법, 캐스팅법, 마이크로 그라비아 코트법, 그라비아 코트법, 바 코트법, 롤 코트법, 와이어 바 코트법, 딥 코트법, 스프레이 코트법, 스크린 인쇄법, 플렉소 인쇄법, 오프셋 인쇄법, 잉크젯 인쇄법, 모세관-코트법, 노즐 코트법 등의 도포법에 적합하게 사용할 수 있다.

[0485]

잉크의 점도는, 도포법의 종류에 따라 조정하면 되지만, 잉크젯 인쇄법 등의 용액이 토출 장치를 경유하는 인쇄 법에 적용하는 경우에는, 토출 시의 눈막힘 및 비행 굴곡이 일어나기 어려우므로, 바람직하게는 25℃에서 1 내지 20mPa · s이다.

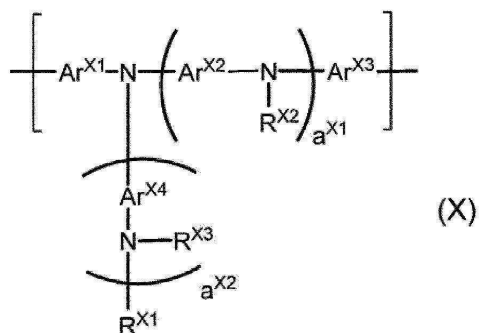
[0486]

잉크에 함유되는 용매는, 바람직하게는 잉크 중의 고형분을 용해 또는 균일하게 분산할 수 있는 용매이다. 용매로서는, 예를 들어 1,2-디클로로에탄, 1,1,2-트리클로로에탄, 클로로벤젠, o-디클로로벤젠 등의 염소계 용매; THF, 디옥산, 아니솔, 4-메틸아니솔 등의 에테르계 용매; 톨루엔, 크실렌, 메시틸렌, 에틸벤젠, n-헥실벤젠, 시클로헥실벤젠 등의 방향족 탄화수소계 용매; 시클로헥산, 메틸시클로헥산, n-펜탄, n-헥산, n-헵탄, n-옥탄, n-노난, n-데칸, n-도데칸, 비시클로헥실 등의 지방족 탄화수소계 용매; 아세톤, 메틸에틸케톤, 시클로헥사논, 아세토펜 등의 케톤계 용매; 아세트산에틸, 아세트산 부틸, 에틸셀로솔브아세테이트, 벤조산메틸, 아세트산 페닐 등의 에스테르계 용매; 에틸렌글리콜, 글리세린, 1,2-헥산디올 등의 다가 알코올계 용매; 이소프로필알코올, 시클로헥산올 등의 알코올계 용매; 디메틸술폰 등의 술폰계 용매; N-메틸-2-피롤리돈, N,N-디메틸포름아미드 등의 아미드계 용매를 들 수 있다. 용매는, 1종 단독으로 사용해도 2종 이상을 병용해도 된다.

[0487]

잉크에 있어서, 용매의 배합량은, 식 (1)로 표시되는 인광 발광성 화합물과 호스트 재료와의 합계를 100질량부로 한 경우 통상, 1000 내지 100000질량부이고, 바람직하게는, 2000 내지 20000질량부이다.

- [0488] <발광 소자>
- [0489] 본 실시 형태에 따른 발광 소자는, 본 실시 형태에 따른 조성물을 포함하는 유기층을 구비하는 발광 소자 또는 본 실시 형태에 따른 인광 발광성 화합물이 배합된 유기층을 구비한 발광 소자이다.
- [0490] 본 실시 형태에 따른 발광 소자의 구성으로서는, 예를 들어 양극 및 음극으로 이루어지는 전극과, 해당 전극간에 설치된 본 실시 형태에 따른 조성물을 포함하는 유기층 또는 본 실시 형태에 따른 인광 발광성 화합물이 배합된 유기층을 갖고 있어도 된다.
- [0491] [층 구성]
- [0492] 본 실시 형태에 따른 조성물을 포함하는 유기층 및 본 실시 형태에 따른 인광 발광성 화합물이 배합된 유기층은, 통상 발광층, 정공 수송층, 정공 주입층, 전자 수송층 및 전자 주입 층으로 이루어지는 군에서 선택되는 1종 이상의 층이고, 발광층인 것이 바람직하다. 이들의 층은 각각, 발광 재료, 정공 수송 재료, 정공 주입 재료, 전자 수송 재료, 전자 주입 재료를 함유한다. 이들의 층은 각각, 발광 재료, 정공 수송 재료, 정공 주입 재료, 전자 수송 재료, 전자 주입 재료를, 상술한 용매에 용해시킴으로써 제조한 잉크를 사용하여, 상술한 막의 제작과 동일한 방법을 사용해서 형성할 수 있다.
- [0493] 발광 소자는, 양극과 음극 사이에 발광층을 갖는다. 본 실시 형태에 따른 발광 소자는, 정공 주입성 및 정공 수송성의 관점에서는, 양극과 발광층 사이에, 정공 주입층 및 정공 수송층의 적어도 1층을 갖는 것이 바람직하고, 전자 주입성 및 전자 수송성의 관점에서는, 음극과 발광층 사이에, 전자 주입층 및 전자 수송층의 적어도 1층을 갖는 것이 바람직하다.
- [0494] 정공 수송층, 전자 수송층, 발광층, 정공 주입층 및 전자 주입층의 재료로서는, 본 실시 형태에 따른 조성물 및 본 실시 형태에 따른 인광 발광성 화합물 외에 각각, 상술한 정공 수송 재료, 전자 수송 재료, 발광 재료, 정공 주입 재료 및 전자 주입 재료 등을 들 수 있다.
- [0495] 본 실시 형태에 따른 발광 소자가 정공 수송층을 갖는 경우, 정공 수송층의 형성에 사용되는 정공 수송 재료로서는, 하기 식 (X)로 표시되는 구성 단위와, 식 (3)으로 표시되는 구성 단위 및 식 (4)로 표시되는 구성 단위로 이루어지는 군에서 선택되는 적어도 1종의 구성 단위를 포함하는 고분자 화합물(이하, 「정공 수송층의 고분자 화합물」이라고도 함)이 바람직하다. 정공 수송층의 고분자 화합물은, 하기 식 (Y)로 표시되는 구성 단위를 더 포함하고 있어도 된다.



- [0496]
- [0497] [식 중,
- [0498] a^{X1} 및 a^{X2} 는 각각 독립적으로 0 이상의 정수를 나타낸다.
- [0499] Ar^{X1} 및 Ar^{X3} 은 각각 독립적으로 아릴렌기 또는 2가의 복소환기를 나타내며, 이들 기는 치환기를 갖고 있어도 된다.
- [0500] Ar^{X2} 및 Ar^{X4} 는 각각 독립적으로 아릴렌기, 2가의 복소환기, 또는 적어도 1종의 아릴렌기와 적어도 1종의 2가의 복소환기가 직접 결합한 2가의 기를 나타내며, 이들 기는 치환기를 갖고 있어도 된다. Ar^{X2} 및 Ar^{X4} 가 복수 존재하는 경우, 그들은 동일해도 상이해도 된다.
- [0501] R^{X1} , R^{X2} 및 R^{X3} 은 각각 독립적으로 수소 원자, 알킬기, 시클로알킬기, 아릴기 또는 1가의 복소환기를 나타내며,

이들 기는 치환기를 갖고 있어도 된다.

[0502] R^{X2} 및 R^{X3} 이 복수 존재하는 경우, 그들은 동일해도 상이해도 된다.]

[0503] a^{X1} 은, 본 실시 형태에 따른 발광 소자의 초기 열화가 보다 억제되므로, 바람직하게는 2 이하이고, 보다 바람직하게는 1이다.

[0504] a^{X2} 는, 본 실시 형태에 따른 발광 소자의 초기 열화가 보다 억제되므로, 바람직하게는 2 이하이고, 보다 바람직하게는 0이다.

[0505] R^{X1} , R^{X2} 및 R^{X3} 은, 바람직하게는 알킬기, 시클로알킬기, 아릴기 또는 1가의 복소환기이고, 보다 바람직하게는 아릴기이며, 이들 기는 치환기를 갖고 있어도 된다.

[0506] Ar^{X1} 및 Ar^{X3} 으로 표시되는 아릴렌기는, 보다 바람직하게는 식 (A-1) 또는 식 (A-9)로 표시되는 기이고, 더욱 바람직하게는 식 (A-1)로 표시되는 기이며, 이들 기는 치환기를 갖고 있어도 된다.

[0507] Ar^{X1} 및 Ar^{X3} 으로 표시되는 2가의 복소환기는, 보다 바람직하게는 식 (AA-1), 식 (AA-2) 또는 식 (AA-7)-(AA-26)로 표시되는 기이며, 이들 기는 치환기를 갖고 있어도 된다.

[0508] Ar^{X1} 및 Ar^{X3} 은, 바람직하게는 치환기를 갖고 있어도 되는 아릴렌기이다.

[0509] Ar^{X2} 및 Ar^{X4} 로 표시되는 아릴렌기로서는, 보다 바람직하게는 식 (A-1), 식 (A-6), 식 (A-7), 식 (A-9)-(A-11) 또는 식 (A-19)로 표시되는 기이며, 이들 기는 치환기를 갖고 있어도 된다.

[0510] Ar^{X2} 및 Ar^{X4} 로 표시되는 2가의 복소환기의 보다 바람직한 범위는, Ar^{X1} 및 Ar^{X3} 으로 표시되는 2가의 복소환기의 보다 바람직한 범위와 동일하다.

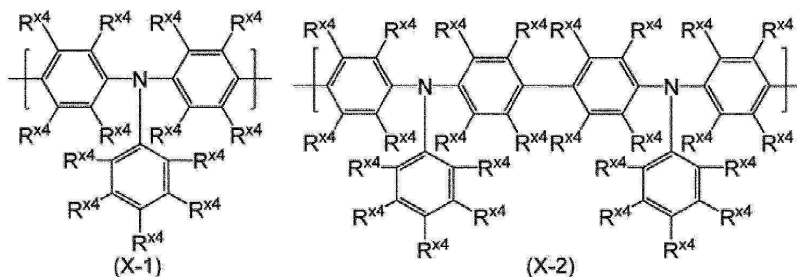
[0511] Ar^{X2} 및 Ar^{X4} 로 표시되는 적어도 1종의 아릴렌기와 적어도 1종의 2가의 복소환기가 직접 결합한 2가의 기에 있어서, 아릴렌기 및 2가의 복소환기의 보다 바람직한 범위, 더욱 바람직한 범위는, 각각, Ar^{X1} 및 Ar^{X3} 으로 표시되는 아릴렌기 및 2가의 복소환기의 보다 바람직한 범위, 더욱 바람직한 범위와 마찬가지로이다.

[0512] Ar^{X2} 및 Ar^{X4} 로 표시되는 적어도 1종의 아릴렌기와 적어도 1종의 2가의 복소환기가 직접 결합한 2가의 기로서는, 식 (Y)의 Ar^{Y1} 로 표시되는 적어도 1종의 아릴렌기와 적어도 1종의 2가의 복소환기가 직접 결합한 2가의 기와 마찬가지로의 것을 들 수 있다.

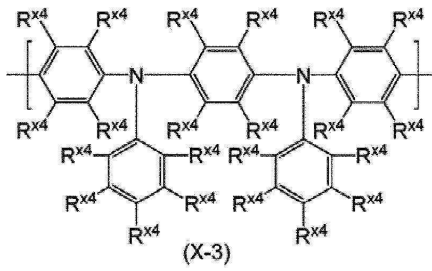
[0513] Ar^{X2} 및 Ar^{X4} 는, 바람직하게는 치환기를 갖고 있어도 되는 아릴렌기이다.

[0514] Ar^{X1} 내지 Ar^{X4} 및 R^{X1} 내지 R^{X3} 으로 표시되는 기가 가져도 되는 치환기로서는, 바람직하게는 알킬기, 시클로알킬기 또는 아릴기이며, 이들 기는 치환기를 더 갖고 있어도 된다.

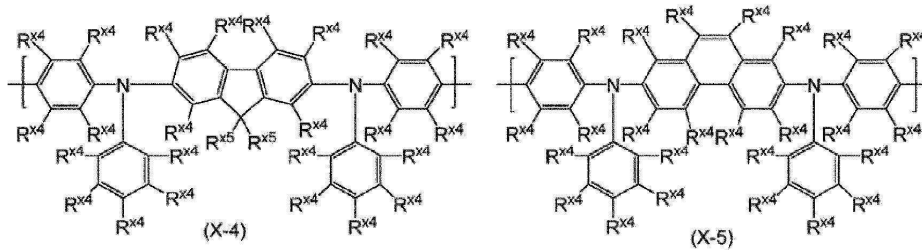
[0515] 식 (X)로 표시되는 구성 단위는, 바람직하게는 식 (X-1)-(X-7)로 표시되는 구성 단위이고, 보다 바람직하게는 식 (X-1)-(X-6)로 표시되는 구성 단위이고, 더욱 바람직하게는 식 (X-3)-(X-6)로 표시되는 구성 단위이다.



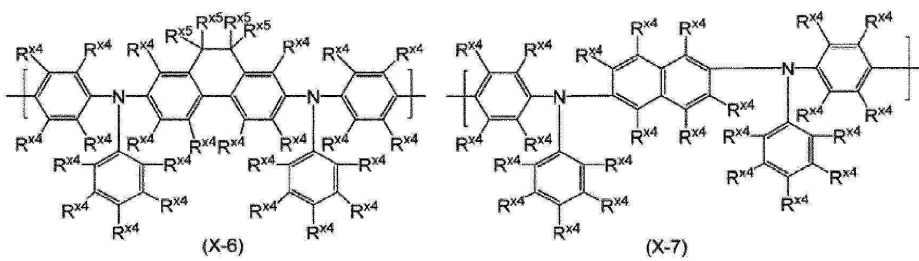
[0516]



[0517]



[0518]



[0519]

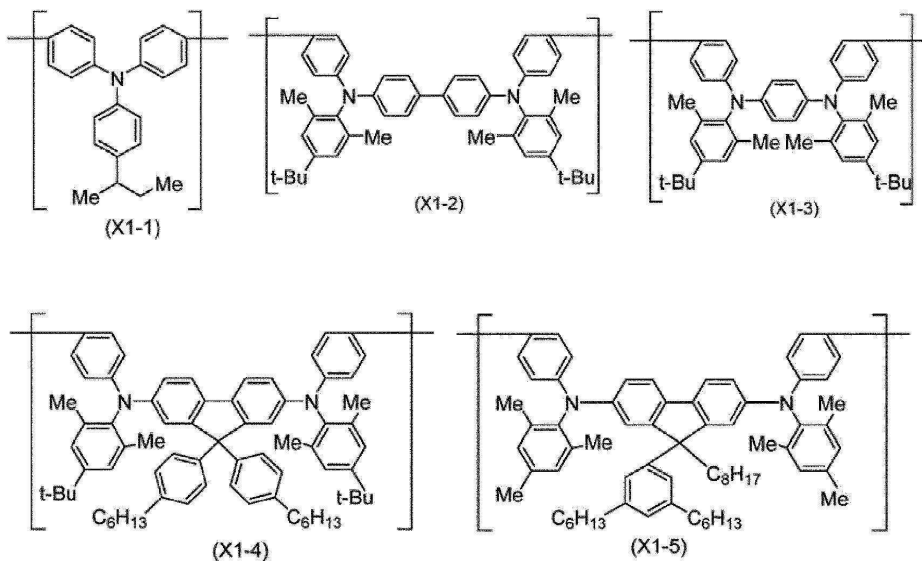
[0520]

[식 중, R^{x4} 및 R^{x5} 는 각각 독립적으로 수소 원자, 알킬기, 시클로알킬기, 알콕시기, 시클로알콕시기, 아릴기, 아릴옥시기, 불소 원자, 1가의 복소환기 또는 시아노기를 나타내며, 이들 기는 치환기를 갖고 있어도 된다. 복수 존재하는 R^{x4} 는, 동일해도 상이해도 된다. 복수 존재하는 R^{x5} 는, 동일해도 상이해도 되고, 인접하는 R^{x5} 끼리는 서로 결합하여, 각각이 결합하는 탄소 원자와 함께 환을 형성하고 있어도 된다.]

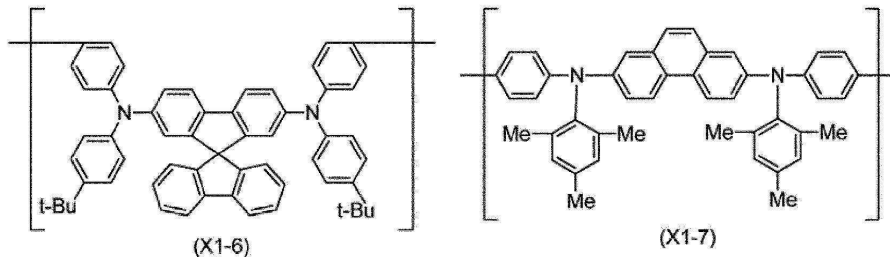
[0521]

식 (X)로 표시되는 구성 단위로서는, 예를 들어 식 (X1-1)~(X1-11)로 표시되는 구성 단위를 들 수 있고, 바람직 하게는, 식 (X1-3)~(X1-10)으로 표시되는 구성 단위이다.

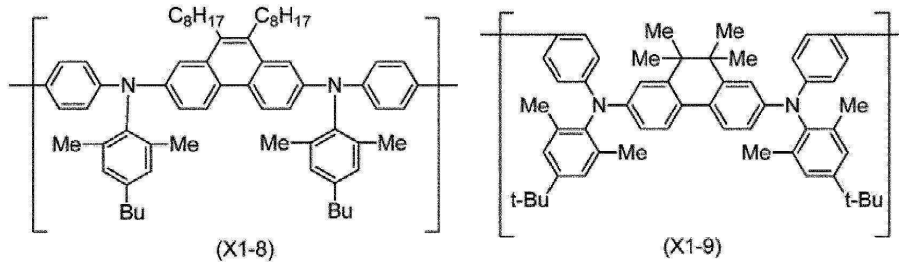
[0522]



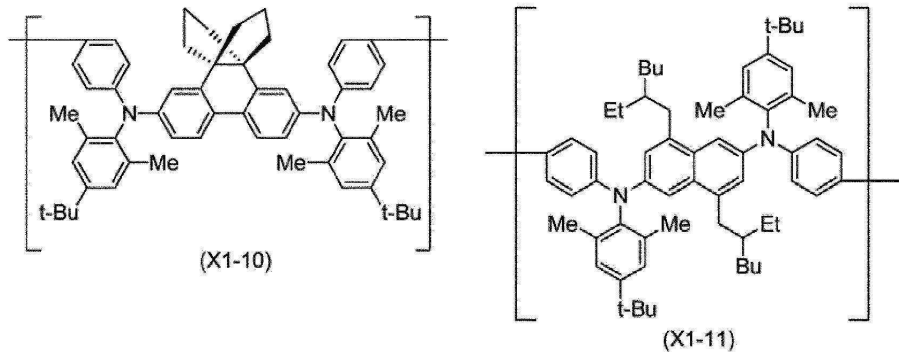
[0523]



[0524]



[0525]



[0526]

[0527]

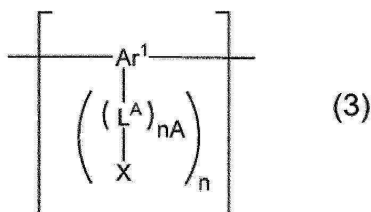
정공 수송층의 고분자 화합물에 있어서, 식 (X)로 표시되는 구성 단위는, 1종만 포함되어 있어도, 2종 이상 포함되어 있어도 된다.

[0528]

본 실시 형태에 따른 발광 소자가 정공 수송층의 고분자 화합물을 사용해서 얻어지는 정공 수송층을 갖는 경우, 해당 정공 수송층은, 정공 수송층의 고분자 화합물을 그대로 함유하는 층이어도 되고, 정공 수송층의 고분자 화합물이 분자 내 혹은 분자간, 또는 분자 내 및 분자간에서 가교된 것(가교체)을 함유하는 층이어도 되지만, 정공 수송층의 고분자 화합물의 가교체를 함유하는 층인 것이 바람직하다. 정공 수송층의 고분자 화합물의 가교체는, 정공 수송층의 고분자 화합물과, 다른 재료가, 분자간에서 가교된 것이어도 된다.

[0529]

상기 식 (X)로 표시되는 구성 단위는, 정공 수송층의 고분자 화합물의 정공 수송성이 우수하므로, 정공 수송층의 고분자 화합물에 포함되는 구성 단위의 합계량에 대하여 바람직하게는, 1 내지 99몰%이고, 보다 바람직하게는 10 내지 80몰%이고, 더욱 바람직하게는 20 내지 70몰%이다.



[0530]

[0531]

[식 중,

[0532]

nA는 0 내지 5의 정수를 나타내고, n은 1 내지 4의 정수를 나타낸다.

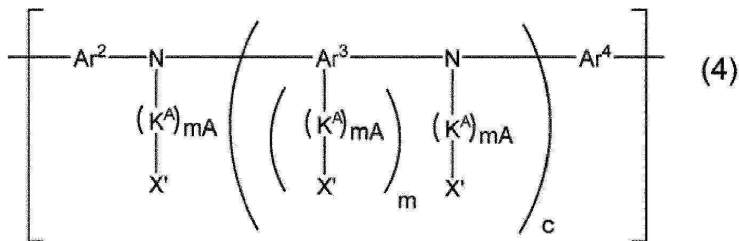
- [0533] Ar^1 은 방향족 탄화수소기 또는 복소환기를 나타내며, 이들 기는 치환기를 갖고 있어도 된다.
- [0535] L^A 는 알킬렌기, 시클로알킬렌기, 아릴렌기, 2가의 복소환기, $-NR'$ -로 표시되는 기, 산소 원자 또는 황 원자를 나타내며, 이들 기는 치환기를 갖고 있어도 된다. R' 는 수소 원자, 알킬기, 시클로알킬기, 아릴기 또는 1가의 복소환기를 나타내며, 이들 기는 치환기를 갖고 있어도 된다. L^A 가 복수 존재하는 경우, 그들은 동일해도 상이해도 된다.
- [0536] X 는 상기 식 (XL-1) 내지 (XL-17)의 어느 하나로 표시되는 가교기를 나타낸다. X 가 복수 존재하는 경우, 그들은 동일해도 상이해도 된다.]
- [0537] nA 는, 본 실시 형태에 따른 발광 소자의 발광 효율이 우수하기 때문에 바람직하게는, 0 내지 3의 정수이고, 보다 바람직하게는 0 내지 2의 정수이다.
- [0538] n 은, 본 실시 형태에 따른 발광 소자의 발광 효율이 우수하므로, 바람직하게는 1 또는 2이고, 보다 바람직하게는 2이다.
- [0539] Ar^1 은, 본 실시 형태에 따른 발광 소자의 발광 효율이 우수하므로, 바람직하게는 치환기를 갖고 있어도 되는 방향족 탄화수소기이다.
- [0540] Ar^1 로 표시되는 방향족 탄화수소기의 탄소 원자수는, 치환기의 탄소 원자수를 포함하지 않으며, 통상 6 내지 60이고, 바람직하게는, 6 내지 30이고, 보다 바람직하게는 6 내지 18이다.
- [0541] Ar^1 로 표시되는 방향족 탄화수소기의 n 개의 치환기를 제거한 아릴렌기 부분으로서는, 바람직하게는 식 (A-1) 내지 식 (A-20)으로 표시되는 기이고, 보다 바람직하게는, 식 (A-1), 식 (A-2), 식 (A-6) 내지 식 (A-10), 식 (A-19) 또는 식 (A-20)으로 표시되는 기이고, 더욱 바람직하게는, 식 (A-1), 식 (A-2), 식 (A-7), 식 (A-9) 또는 식 (A-19)로 표시되는 기이다.
- [0542] Ar^1 로 표시되는 복소환기의 탄소 원자수는, 치환기의 탄소 원자수를 포함하지 않으며, 통상 2 내지 60이고, 바람직하게는, 3 내지 30이고, 보다 바람직하게는 4 내지 18이다.
- [0543] Ar^1 로 표시되는 복소환기의 n 개의 치환기를 제거한 2가의 복소환기 부분으로서는, 바람직하게는 식 (AA-1) 내지 (AA-34)로 표시되는 기이다.
- [0544] Ar^1 로 표시되는 방향족 탄화수소기 및 복소환기는 치환기를 갖고 있어도 된다. 방향족 탄화수소기 및 복소환기가 갖고 있어도 되는 치환기로서는, 예를 들어 알킬기, 시클로알킬기, 알콕시기, 시클로알콕시기, 아릴기, 아릴옥시기, 불소 원자, 1가의 복소환기 및 시아노기를 들 수 있다.
- [0545] L^A 로 표시되는 알킬렌기는, 치환기의 탄소 원자수를 포함하지 않으며, 통상 1 내지 20이고, 바람직하게는, 1 내지 15이고, 보다 바람직하게는 1 내지 10이다. L^A 로 표시되는 시클로알킬렌기는, 치환기의 탄소 원자수를 포함하지 않으며, 통상 3 내지 20이다.
- [0546] 알킬렌기 및 시클로알킬렌기는, 치환기를 갖고 있어도 되며, 예를 들어 메틸렌기, 에틸렌기, 프로필렌기, 부틸렌기, 헥실렌기, 시클로헥실렌기, 옥틸렌기를 들 수 있다.
- [0547] L^A 로 표시되는 알킬렌기 및 시클로알킬렌기는, 치환기를 갖고 있어도 된다.
- [0548] 알킬렌기 및 시클로알킬렌기가 갖고 있어도 되는 치환기로서는, 예를 들어 알킬기, 시클로알킬기, 알콕시기, 시클로알콕시기, 불소 원자 및 시아노기를 들 수 있다.
- [0549] L^A 로 표시되는 아릴렌기는, 치환기를 갖고 있어도 된다. 아릴렌기로서는, 페닐렌기 또는 플루오렌디일기가 바람직하고, m -페닐렌기, p -페닐렌기, 플루오렌-2,7-디일기, 플루오렌-9,9-디일기가 보다 바람직하다. 아릴렌기가 가져도 되는 치환기로서는, 예를 들어 알킬기, 시클로알킬기, 알콕시기, 시클로알콕시기, 아릴기, 아릴옥시기, 1가의 복소환기, 불소 원자, 시아노기 및 가교기 A군에서 선택되는 가교기를 들 수 있다.
- [0550] L^A 로 표시되는 2가의 복소환기로서는, 바람직하게는 식 (AA-1) 내지 (AA-34)로 표시되는 기이다.

[0551] L^A 는 정공 수송층의 고분자 화합물의 합성이 용이해지기 때문에 바람직하게는, 아릴렌기 또는 알킬렌기이고, 보다 바람직하게는, 페닐렌기, 플루오렌디일기 또는 알킬렌기이며, 이들 기는 치환기를 갖고 있어도 된다.

[0552] X로 표시되는 가교기로서는, 정공 수송층의 고분자 화합물의 가교성이 우수하므로, 바람직하게는 식 (XL-1), (XL-3), (XL-7) 내지 (XL-10), (XL-16) 또는 (XL-17)로 표시되는 가교기이고, 보다 바람직하게는, 식 (XL-1), (XL-3), (XL-9), (XL-16) 또는 (XL-17)로 표시되는 가교기이고, 더욱 바람직하게는, 식 (XL-1), (XL-16) 또는 (XL-17)로 표시되는 가교기이고, 특히 바람직하게는, 식 (XL-1) 또는 (XL-17)로 표시되는 가교기이다.

[0553] 식 (3)으로 표시되는 구성 단위는, 정공 수송층의 고분자 화합물의 가교성이 우수하므로, 정공 수송층의 고분자 화합물에 포함되는 구성 단위의 합계량에 대하여 바람직하게는, 1 내지 90몰%이고, 보다 바람직하게는 3 내지 75몰%이고, 더욱 바람직하게는 5 내지 60몰%이다.

[0554] 식 (3)으로 표시되는 구성 단위는, 정공 수송층의 고분자 화합물 중에, 1종만 포함되어 있어도 되고, 2종 이상 포함되어 있어도 된다.



[0555]

[0556] [식 중,

[0557] mA 는 0 내지 5의 정수를 나타내고, m 은 1 내지 4의 정수를 나타내고, c 는 0 또는 1을 나타낸다. mA 가 복수 존재하는 경우, 그들은 동일해도 상이해도 된다.

[0558] Ar^3 은, 방향족 탄화수소기, 복소환기, 또는 적어도 1종의 방향족 탄화수소환과 적어도 1종의 복소환이 직접 결합한 기를 나타내며, 이들 기는 치환기를 갖고 있어도 된다.

[0559] Ar^2 및 Ar^4 는 각각 독립적으로 아릴렌기 또는 2가의 복소환기를 나타내며, 이들 기는 치환기를 갖고 있어도 된다.

[0560] Ar^2 , Ar^3 및 Ar^4 는, 각각, 당해 기가 결합하고 있는 질소 원자에 결합하고 있는 당해 기 이외의 기와, 직접 또는 산소 원자 혹은 황 원자를 개재해서 결합하여, 환을 형성하고 있어도 된다.

[0561] K^A 는 알킬렌기, 시클로알킬렌기, 아릴렌기, 2가의 복소환기, $-\text{NR}-$ 로 표시되는 기, 산소 원자 또는 황 원자를 나타내며, 이들 기는 치환기를 갖고 있어도 된다. R 는 수소 원자, 알킬기, 시클로알킬기, 아릴기 또는 1가의 복소환기를 나타내며, 이들 기는 치환기를 갖고 있어도 된다. K^A 가 복수 존재하는 경우, 그들은 동일해도 상이해도 된다.

[0562] X' 는 상기 식 (XL-1) 내지 (XL-17)의 어느 하나로 표시되는 가교기, 수소 원자, 알킬기, 시클로알킬기, 아릴기 또는 1가의 복소환기를 나타내며, 이들 기는 치환기를 갖고 있어도 된다. 단, 적어도 하나의 X' 는 상기 식 (XL-1) 내지 (XL-17)의 어느 하나로 표시되는 가교기이다.]

[0563] mA 는, 본 실시 형태에 따른 발광 소자의 발광 효율이 우수하므로, 바람직하게는 0 내지 2이고, 보다 바람직하게는 0 또는 1이고, 더욱 바람직하게는 0이다.

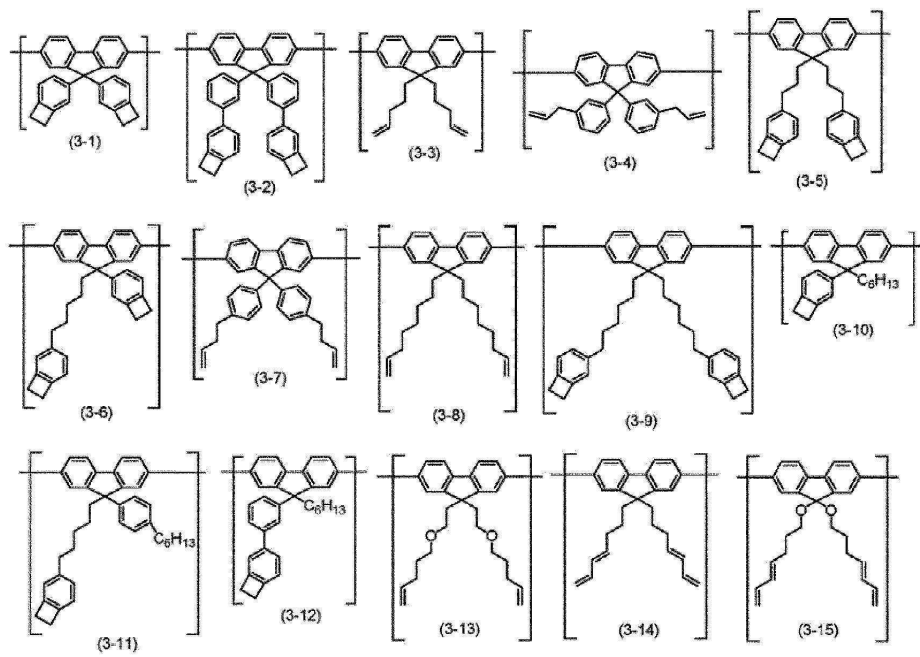
[0564] m 은, 본 실시 형태에 따른 발광 소자의 발광 효율이 우수하므로, 바람직하게는 1 또는 2이고, 보다 바람직하게는 2이다.

[0565] c 는 정공 수송층의 고분자 화합물의 합성이 용이하게 되고, 또한 본 실시 형태에 따른 발광 소자의 발광 효율이 우수하기 때문에 바람직하게는, 0이다.

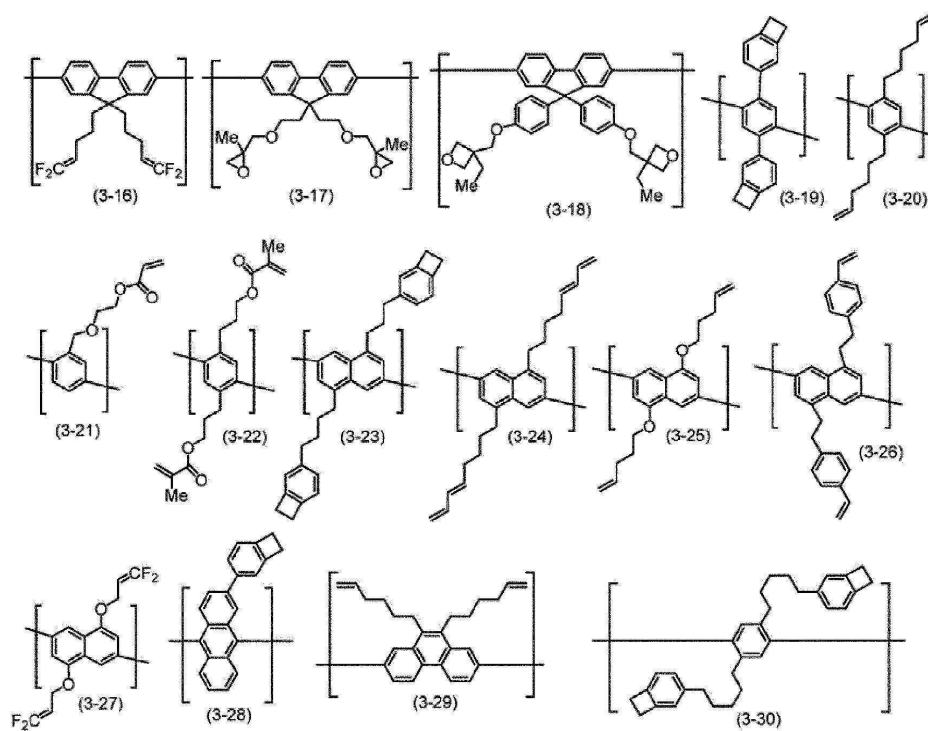
[0566] Ar^3 은, 본 실시 형태에 따른 발광 소자의 발광 효율이 우수하므로, 바람직하게는 치환기를 갖고 있어도 되는 방

향족 탄화수소기이다.

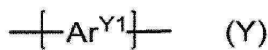
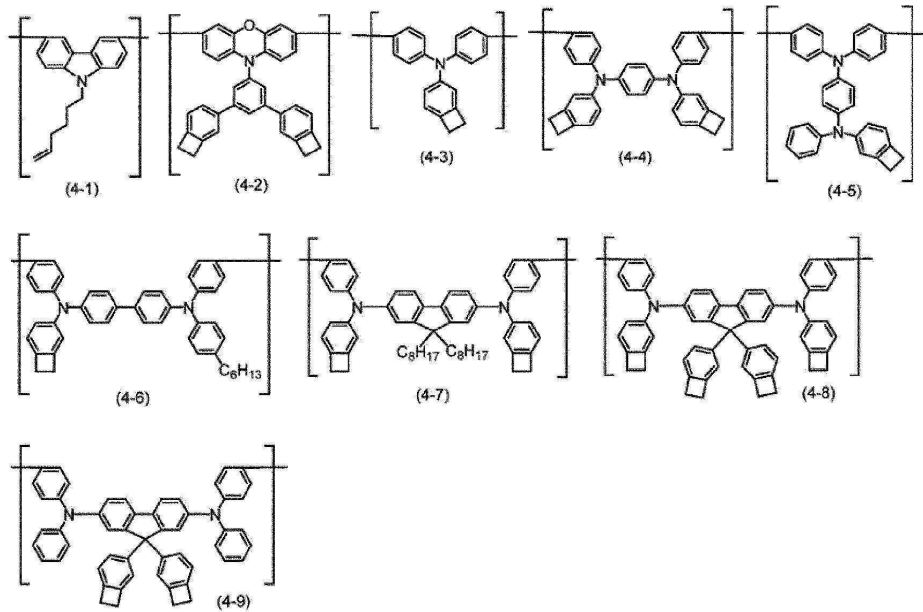
- [0567] Ar^3 으로 표시되는 방향족 탄화수소기의 m개의 치환기를 제거한 아릴렌기 부분의 정의 및 예는, 전술한 식 (X)에 있어서의 Ar^{X2} 로 표시되는 아릴렌기의 정의 및 예와 동일하다.
- [0568] Ar^3 으로 표시되는 복소환기의 m개의 치환기를 제거한 2가의 복소환기 부분의 정의 및 예는, 전술한 식 (X)에 있어서의 Ar^{X2} 로 표시되는 2가의 복소환기 부분의 정의 및 예와 동일하다.
- [0569] Ar^3 으로 표시되는 적어도 1종의 방향족 탄화수소환과 적어도 1종의 복소환이 직접 결합한 기의 m개의 치환기를 제거한 2가의 기 정의 및 예는, 전술한 식 (X)에 있어서의 Ar^{X2} 로 표시되는 적어도 1종의 아릴렌기와 적어도 1종의 2가의 복소환기가 직접 결합한 2가의 기 정의 및 예와 동일하다.
- [0570] Ar^2 및 Ar^4 는, 본 실시 형태에 따른 발광 소자의 초기 열화가 억제되므로, 바람직하게는 치환기를 갖고 있어도 되는 아릴렌기이다.
- [0571] Ar^2 및 Ar^4 로 표시되는 아릴렌기의 정의 및 예는, 전술한 식 (X)에 있어서의 Ar^{X1} 및 Ar^{X3} 으로 표시되는 아릴렌기의 정의 및 예와 동일하다.
- [0572] Ar^2 및 Ar^4 로 표시되는 2가의 복소환기의 정의 및 예는, 전술한 식 (X)에 있어서의 Ar^{X1} 및 Ar^{X3} 으로 표시되는 2가의 복소환기의 정의 및 예와 동일하다.
- [0573] Ar^2 , Ar^3 및 Ar^4 로 표시되는 기는 치환기를 갖고 있어도 되고, 치환기로서는, 알킬기, 시클로알킬기, 알콕시기, 시클로알콕시기, 아릴기, 아릴옥시기, 불소 원자, 1가의 복소환기 및 시아노기를 들 수 있다.
- [0574] K^A 로 표시되는 알킬렌기, 시클로알킬렌기, 아릴렌기, 2가의 복소환기의 정의 및 예는, 각각, L^A 로 표시되는 알킬렌기, 시클로알킬렌기, 아릴렌기, 2가의 복소환기의 정의 및 예와 동일하다.
- [0575] K^A 는 정공 수송층의 고분자 화합물의 합성이 용이해지기 때문에 바람직하게는, 페닐렌기 또는 알킬렌기이며, 이들 기는 치환기를 갖고 있어도 된다.
- [0576] X' 로 표시되는 가교기의 정의 및 예는, 전술한 X로 표시되는 가교기의 정의 및 예와 동일하다.
- [0577] 식 (4)로 표시되는 구성 단위는, 정공 수송층의 고분자 화합물의 가교성이 우수하므로, 정공 수송층의 고분자 화합물에 포함되는 구성 단위의 함계량에 대하여 바람직하게는, 1 내지 90몰%이고, 보다 바람직하게는 3 내지 50몰%이고, 더욱 바람직하게는 5 내지 20몰%이다.
- [0578] 식 (4)로 표시되는 구성 단위는, 정공 수송층의 고분자 화합물 중에, 1종만 포함되어 있어도 되고, 2종 이상 포함되어 있어도 된다.
- [0579] 식 (3)으로 표시되는 구성 단위로서는, 예를 들어 식 (3-1) 내지 식 (3-30)으로 표시되는 구성 단위를 들 수 있고, 식 (4)로 표시되는 구성 단위로서는, 예를 들어 식 (4-1) 내지 식 (4-9)로 표시되는 구성 단위를 들 수 있다. 이들 중에서도, 정공 수송층의 고분자 화합물의 가교성이 우수하기 때문에 바람직하게는, 식 (3-1) 내지 식 (3-30)으로 표시되는 구성 단위이고, 보다 바람직하게는, 식 (3-1) 내지 식 (3-15), 식 (3-19), 식 (3-20), 식 (3-23), 식 (3-25) 또는 식 (3-30)으로 표시되는 구성 단위이고, 더욱 바람직하게는, 식 (3-1) 내지 식 (3-13) 또는 식 (3-30)으로 표시되는 구성 단위이고, 특히 바람직하게는, 식 (3-1) 내지 식 (3-9) 또는 식 (3-30)으로 표시되는 구성 단위이다.



[0580]



[0581]



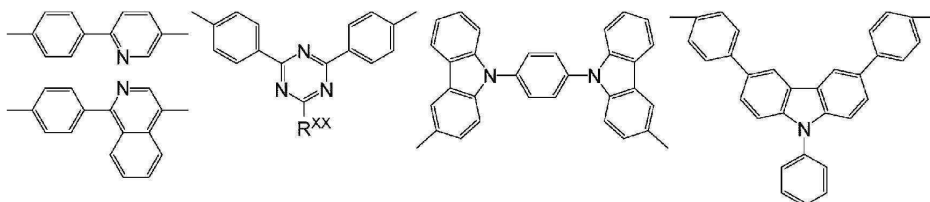
[식 중, Ar^{Y1} 은 아릴렌기, 2가의 복소환기, 또는 적어도 1종의 아릴렌기와 적어도 1종의 2가의 복소환기가 직접 결합한 2가의 기를 나타내며, 이들 기는 치환기를 갖고 있어도 된다.]

Ar^{Y1} 로 표시되는 아릴렌기는, 보다 바람직하게는, 식 (A-1), 식 (A-2), 식 (A-6)-(A-10), 식 (A-19) 또는 식 (A-20)으로 표시되는 기이고, 더욱 바람직하게는, 식 (A-1), 식 (A-2), 식 (A-7), 식 (A-9) 또는 식 (A-19)로 표시되는 기이며, 이들 기는 치환기를 갖고 있어도 된다.

Ar^{Y1} 로 표시되는 2가의 복소환기는, 보다 바람직하게는, 식 (AA-1)-(AA-4), 식 (AA-10)-(AA-15), 식 (AA-18)-(AA-21), 식 (AA-33) 또는 식 (AA-34)로 표시되는 기이고, 더욱 바람직하게는, 식 (AA-4), 식 (AA-10), 식 (AA-12), 식 (AA-14) 또는 식 (AA-33)으로 표시되는 기이며, 이들 기는 치환기를 갖고 있어도 된다.

Ar^{Y1} 로 표시되는 적어도 1종의 아릴렌기와 적어도 1종의 2가의 복소환기가 직접 결합한 2가의 기에 있어서의, 아릴렌기 및 2가의 복소환기의 보다 바람직한 범위, 더욱 바람직한 범위는, 각각, 전술한 Ar^{Y1} 로 표시되는 아릴렌기 및 2가의 복소환기의 보다 바람직한 범위, 더욱 바람직한 범위와 마찬가지로이다.

「적어도 1종의 아릴렌기와 적어도 1종의 2가의 복소환기가 직접 결합한 2가의 기」라고서는, 예를 들어 하기 식으로 표시되는 기를 들 수 있고, 이들은 치환기를 갖고 있어도 된다.



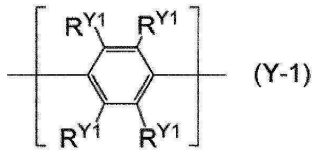
[식 중, R^{XX} 는 수소 원자, 알킬기, 시클로알킬기, 아릴기 또는 1가의 복소환기를 나타내며, 이들 기는 치환기를 갖고 있어도 된다.]

R^{XX} 는, 바람직하게는 알킬기, 시클로알킬기 또는 아릴기이며, 이들 기는 치환기를 갖고 있어도 된다.

Ar^{Y1} 로 표시되는 기가 가져도 되는 치환기는, 바람직하게는 알킬기, 시클로알킬기 또는 아릴기이며, 이들 기는

치환기를 더 갖고 있어도 된다.

[0593] 식 (Y)로 표시되는 구성 단위로서는, 예를 들어 식 (Y-1)-(Y-10)으로 표시되는 구성 단위를 들 수 있고, 본 실시 형태에 따른 발광 소자의 초기 열화의 관점에서는, 바람직하게는 식 (Y-1)-(Y-3)으로 표시되는 구성 단위이며, 정공 수송성의 관점에서는, 바람직하게는 식 (Y-8)-(Y-10)으로 표시되는 구성 단위이다.

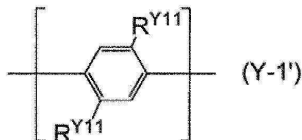


[0594]

[0595] [식 중, $\text{R}^{\text{Y}1}$ 은 수소 원자, 알킬기, 시클로알킬기, 알콕시기, 시클로알콕시기, 아릴기 또는 1가의 복소환기를 나타내며, 이들 기는 치환기를 갖고 있어도 된다. 복수 존재하는 $\text{R}^{\text{Y}1}$ 은 동일해도 상이해도 되고, 인접하는 $\text{R}^{\text{Y}1}$ 끼리는 서로 결합하여, 각각이 결합하는 탄소 원자와 함께 환을 형성하고 있어도 된다.]

[0596] $\text{R}^{\text{Y}1}$ 은, 바람직하게는 수소 원자, 알킬기, 시클로알킬기 또는 아릴기이며, 이들 기는 치환기를 갖고 있어도 된다.

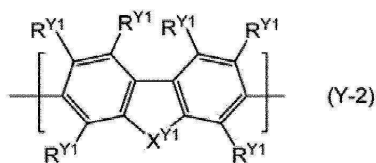
[0597] 식 (Y-1)로 표시되는 구성 단위는, 바람직하게는 식 (Y-1')로 표시되는 구성 단위이다.



[0598]

[0599] [식 중, $\text{R}^{\text{Y}11}$ 은 알킬기, 시클로알킬기, 알콕시기, 시클로알콕시기, 아릴기 또는 1가의 복소환기를 나타내며, 이들 기는 치환기를 갖고 있어도 된다. 복수 존재하는 $\text{R}^{\text{Y}11}$ 은 동일해도 상이해도 된다.]

[0600] $\text{R}^{\text{Y}11}$ 은, 바람직하게는 알킬기, 시클로알킬기 또는 아릴기이고, 보다 바람직하게는, 알킬기 또는 시클로알킬기이며, 이들 기는 치환기를 갖고 있어도 된다.



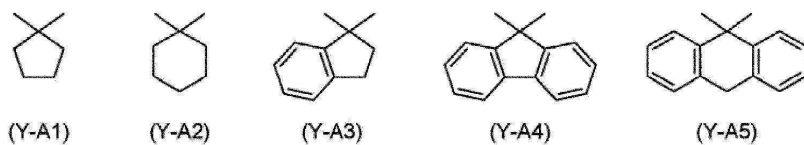
[0601]

[0602] [식 중, $\text{R}^{\text{Y}1}$ 은 상기과 동일한 의미를 나타낸다. $\text{X}^{\text{Y}1}$ 은 $-\text{C}(\text{R}^{\text{Y}2})_2-$, $-\text{C}(\text{R}^{\text{Y}2})=\text{C}(\text{R}^{\text{Y}2})-$ 또는 $-\text{C}(\text{R}^{\text{Y}2})_2-\text{C}(\text{R}^{\text{Y}2})_2-$ 로 표시되는 기를 나타낸다. $\text{R}^{\text{Y}2}$ 는, 수소 원자, 알킬기, 시클로알킬기, 알콕시기, 시클로알콕시기, 아릴기 또는 1가의 복소환기를 나타내며, 이들 기는 치환기를 갖고 있어도 된다. 복수 존재하는 $\text{R}^{\text{Y}2}$ 는, 동일해도 상이해도 되고, $\text{R}^{\text{Y}2}$ 끼리는 서로 결합하여, 각각이 결합하는 탄소 원자와 함께 환을 형성하고 있어도 된다.]

[0603] $\text{R}^{\text{Y}2}$ 는, 바람직하게는 알킬기, 시클로알킬기, 아릴기 또는 1가의 복소환기이고, 보다 바람직하게는, 알킬기, 시클로알킬기 또는 아릴기이며, 이들 기는 치환기를 갖고 있어도 된다.

[0604] $\text{X}^{\text{Y}1}$ 에 있어서, $-\text{C}(\text{R}^{\text{Y}2})_2-$ 로 표시되는 기 중의 2개의 $\text{R}^{\text{Y}2}$ 의 조합은, 바람직하게는 양쪽이 알킬기 혹은 시클로알킬기, 양쪽이 아릴기, 양쪽이 1가의 복소환기, 또는 한쪽이 알킬기 혹은 시클로알킬기이고 다른 쪽이 아릴기 혹은 1가의 복소환기이고, 보다 바람직하게는 한쪽이 알킬기 혹은 시클로알킬기이고 다른 쪽이 아릴기이며, 이들 기는 치환기를 갖고 있어도 된다. 2개 존재하는 $\text{R}^{\text{Y}2}$ 는 서로 결합하여, 각각이 결합하는 원자와 함께 환을 형성하고 있어도 되고, $\text{R}^{\text{Y}2}$ 가 환을 형성하는 경우, $-\text{C}(\text{R}^{\text{Y}2})_2-$ 로 표시되는 기로서는, 바람직하게는 식 (Y-

A1)-(Y-A5)로 표시되는 기이고, 보다 바람직하게는 식 (Y-A4)로 표시되는 기이며, 이들 기는 치환기를 갖고 있어도 된다.



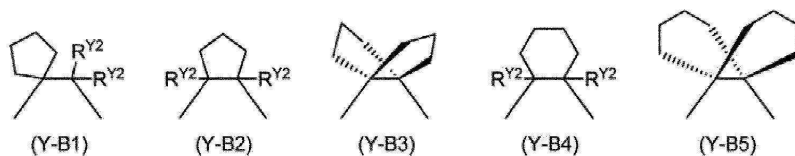
[0605]

X^{Y1} 에 있어서, $-C(R^{Y2})=C(R^{Y2})-$ 로 표시되는 기 중의 2개의 R^{Y2} 의 조합은, 바람직하게는 양쪽이 알킬기 혹은 시클로알킬기, 또는 한쪽이 알킬기 혹은 시클로알킬기이고 다른 쪽이 아릴기이며, 이들 기는 치환기를 갖고 있어도 된다.

[0606]

X^{Y1} 에 있어서, $-C(R^{Y2})_2-C(R^{Y2})_2-$ 로 표시되는 기 중 4개의 R^{Y2} 는, 바람직하게는 치환기를 갖고 있어도 되는 알킬기 또는 시클로알킬기이다. 복수 있는 R^{Y2} 는 서로 결합하여, 각각이 결합하는 원자와 함께 환을 형성하고 있어도 되고, R^{Y2} 가 환을 형성하는 경우, $-C(R^{Y2})_2-C(R^{Y2})_2-$ 로 표시되는 기는, 바람직하게는 식 (Y-B1)-(Y-B5)로 표시되는 기이고, 보다 바람직하게는 식 (Y-B3)으로 표시되는 기이며, 이들 기는 치환기를 갖고 있어도 된다.

[0607]



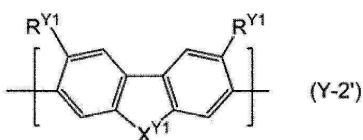
[0608]

[식 중, R^{Y2} 는 상기와 동일한 의미를 나타낸다.]

[0609]

식 (Y-2)로 표시되는 구성 단위는, 식 (Y-2')로 표시되는 구성 단위인 것이 바람직하다.

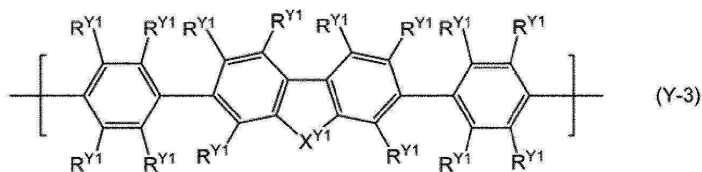
[0610]



[0611]

[식 중, R^{Y1} 및 X^{Y1} 은 상기와 동일한 의미를 나타낸다.]

[0612]



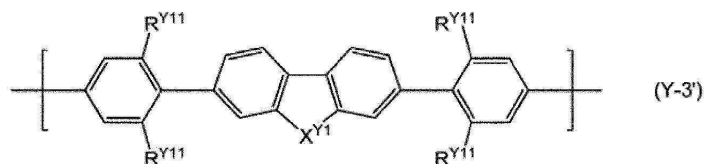
[0613]

[식 중, R^{Y1} 및 X^{Y1} 은 상기와 동일한 의미를 나타낸다.]

[0614]

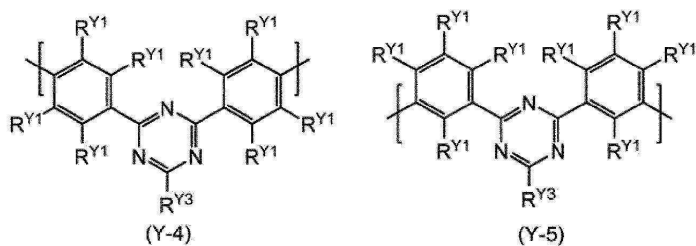
식 (Y-3)으로 표시되는 구성 단위는, 식 (Y-3')로 표시되는 구성 단위인 것이 바람직하다.

[0615]

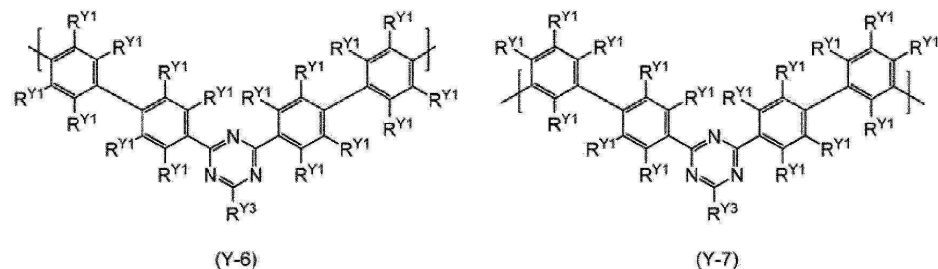


[0616]

[0617] [식 중, R^{Y1} 및 X^{Y1} 은 상기와 동일한 의미를 나타낸다.]



[0618]

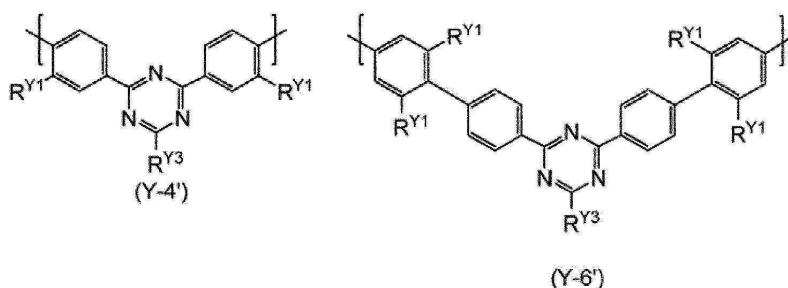


[0619]

[0620] [식 중, R^{Y1} 은 상기와 동일한 의미를 나타낸다. R^{Y3} 은 수소 원자, 알킬기, 시클로알킬기, 알콕시기, 시클로알콕시기, 아릴기 또는 1가의 복소환기를 나타내며, 이들 기는 치환기를 갖고 있어도 된다.]

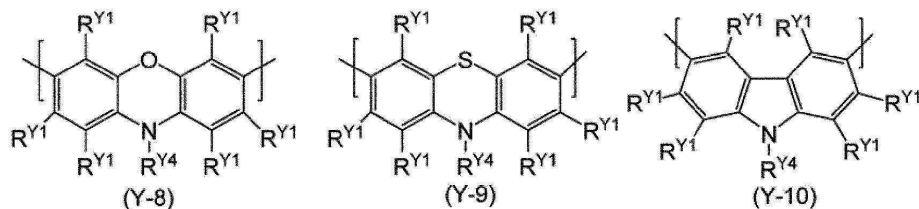
[0621] R^{Y3} 은, 바람직하게는 알킬기, 시클로알킬기, 알콕시기, 시클로알콕시기, 아릴기 또는 1가의 복소환기이고, 보다 바람직하게는 아릴기이며, 이들 기는 치환기를 갖고 있어도 된다.

[0622] 식 (Y-4)로 표시되는 구성 단위는, 식 (Y-4')로 표시되는 구성 단위인 것이 바람직하고, 식 (Y-6)로 표시되는 구성 단위는, 식 (Y-6')로 표시되는 구성 단위인 것이 바람직하다.



[0623]

[0624] [식 중, R^{Y1} 및 R^{Y3} 은 상기와 동일한 의미를 나타낸다.]

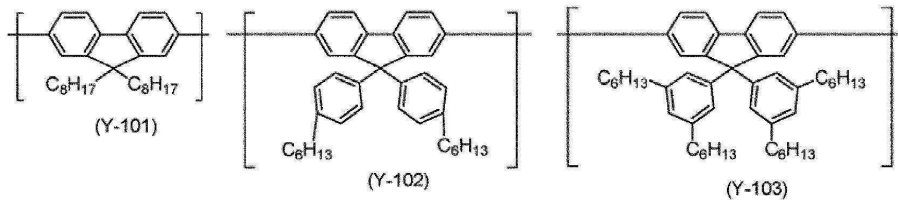


[0625]

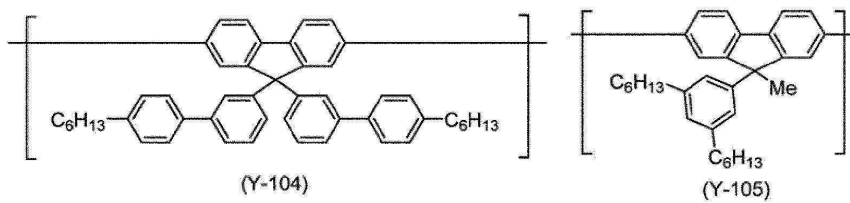
[0626] [식 중, R^{Y1} 은 상기를 같은 의미를 나타낸다. R^{Y4} 은 수소 원자, 알킬기, 시클로알킬기, 알콕시기, 시클로알콕시기, 아릴기 또는 1가의 복소환기를 나타내며, 이들 기는 치환기를 갖고 있어도 된다.]

[0627] R^{Y4} 은, 바람직하게는 알킬기, 시클로알킬기, 알콕시기, 시클로알콕시기, 아릴기 또는 1가의 복소환기이고, 보다 바람직하게는 아릴기이며, 이들 기는 치환기를 갖고 있어도 된다.

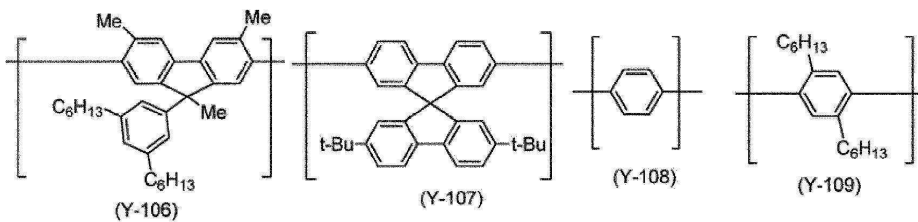
[0628] 식 (Y)로 표시되는 구성 단위로서는, 예를 들어 식 (Y-101) 내지 식 (Y-121)로 표시되는 아릴렌기로 이루어지는 구성 단위, 식 (Y-201) 내지 식 (Y-206)으로 표시되는 2가의 복소환기로 이루어지는 구성 단위, 식 (Y-300) 내지 식 (Y-304)로 표시되는 적어도 1종의 아릴렌기와 적어도 1종의 2가의 복소환기가 직접 결합한 2가의 기로 이루어지는 구성 단위를 들 수 있고, 바람직하게는, 식 (Y-101) 내지 식 (Y-121)로 표시되는 아릴렌기로 이루어지는 구성 단위, 식 (Y-201) 내지 식 (Y-206)으로 표시되는 2가의 복소환기로 이루어지는 구성 단위, 식 (Y-301) 내지 식 (Y-304)로 표시되는 적어도 1종의 아릴렌기와 적어도 1종의 2가의 복소환기가 직접 결합한 2가의 기로 이루어지는 구성 단위이다.



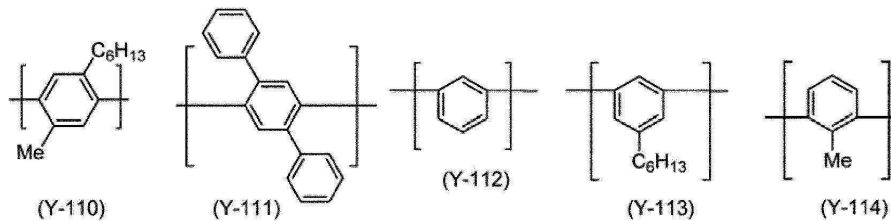
[0629]



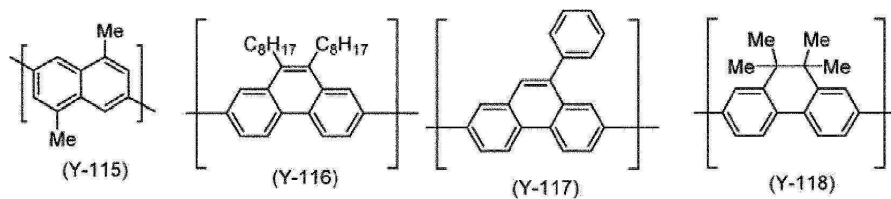
[0630]



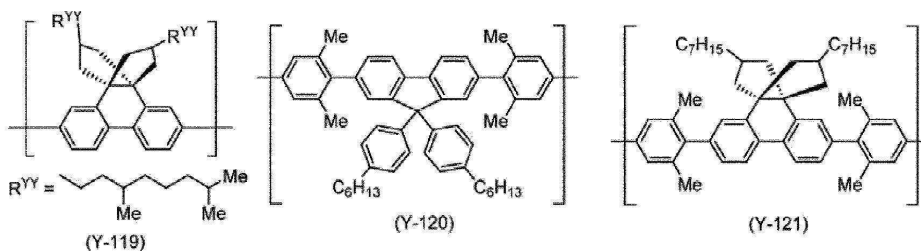
[0631]



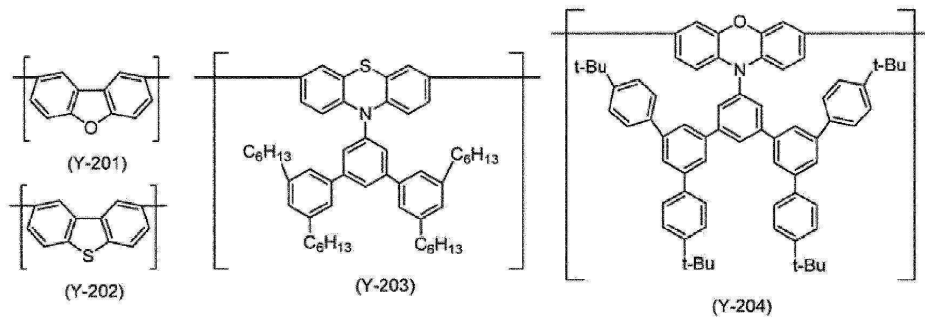
[0632]



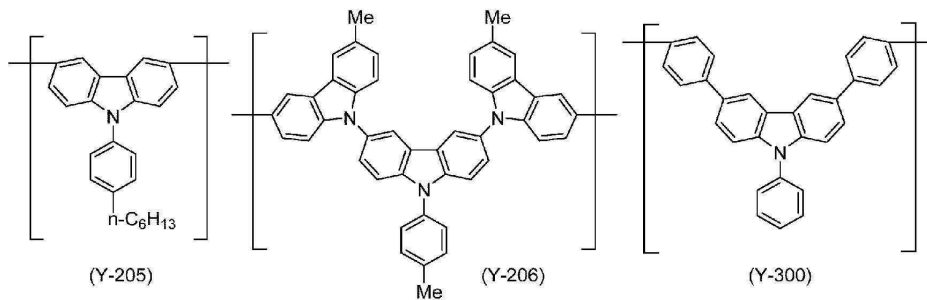
[0633]



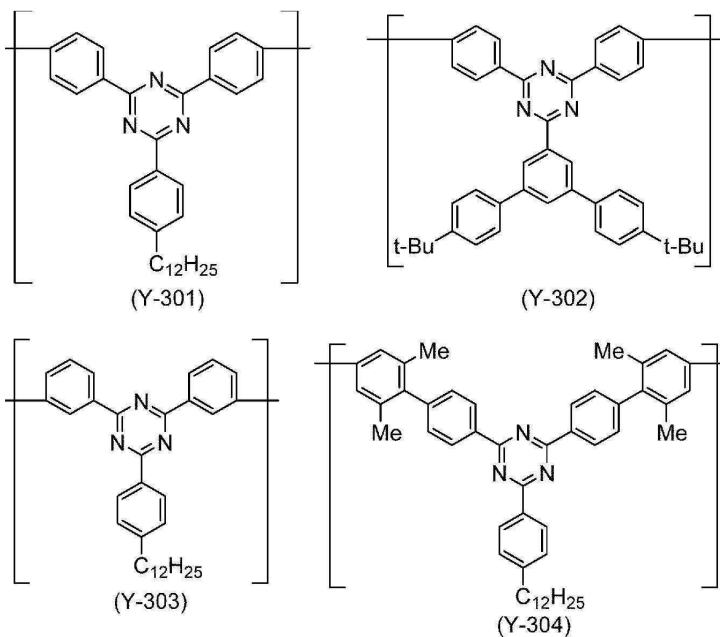
[0634]



[0635]



[0636]



[0637]

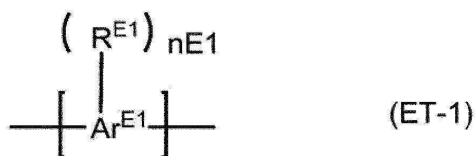
[0638] 식 (Y)로 표시되는 구성 단위이며, Ar^{Y1}이 아릴렌기인 구성 단위는, 본 실시 형태에 따른 발광 소자의 초기 열화가 보다 억제되므로, 정공 수송층의 고분자 화합물에 포함되는 구성 단위의 함계량에 대하여 바람직하게는, 0.5 내지 90몰%이고, 보다 바람직하게는 30 내지 80몰%이다.

[0639] 식 (Y)로 표시되는 구성 단위이며, Ar^{Y1}이 2가의 복소환기, 또는 적어도 1종의 아릴렌기와 적어도 1종의 2가의 복소환기가 직접 결합한 2가의 기인 구성 단위는, 정공 수송층의 고분자 화합물의 정공 수송성이 우수하므로, 정공 수송층의 고분자 화합물에 포함되는 구성 단위의 함계량에 대하여 바람직하게는, 0.5 내지 40몰%이고, 보다 바람직하게는 3 내지 30몰%이다.

[0640] 식 (Y)로 표시되는 구성 단위는, 정공 수송층의 고분자 화합물 중에, 1종만 포함되어 있어도 되고, 2종 이상 포함되어 있어도 된다.

[0641] 본 실시 형태에 따른 발광 소자가 전자 수송층을 갖는 경우, 전자 수송층에 함유되는 전자 수송 재료로서는, 식 (ET-1)로 표시되는 구성 단위 및 식 (ET-2)로 표시되는 구성 단위로 이루어지는 군에서 선택되는 적어도 1종의

구성 단위를 포함하는 고분자 화합물(이하, 「전자 수송층의 고분자 화합물」이라고도 함)이 바람직하다.



[0642]

[식 중,

[0643]

$nE1$ 은 1 이상의 정수를 나타낸다.

[0644]

Ar^{E1} 은 방향족 탄화수소기 또는 복소환기를 나타내며, 이들 기는 R^{E1} 이외의 치환기를 갖고 있어도 된다.

[0645]

R^{E1} 은 식 (ES-1)로 표시되는 기를 나타낸다. R^{E1} 이 복수 존재하는 경우, 그들은 동일해도 상이해도 된다.]

[0646]

$-R^{E3} - \{(Q^{E1})_{nE3} - Y^{E1} (M^{E1})_{aE1} (Z^{E1})_{bE1}\}_{mE1}$ (ES-1)

[0647]

[식 중,

[0648]

$nE3$ 은 0 이상의 정수를 나타내고, $aE1$ 은 1 이상의 정수를 나타내고, $bE1$ 은 0 이상의 정수를 나타내고, $mE1$ 은 1 이상의 정수를 나타낸다. $nE3$, $aE1$ 및 $bE1$ 이 복수 존재하는 경우, 그들은 각각 동일해도 상이해도 된다. 단, R^{E3} 이 단결합인 경우, $mE1$ 은 1이다. 또한, $aE1$ 및 $bE1$ 은, 식 (ES-1)로 표시되는 기의 전하가 0이 되도록 선택된다.

[0649]

R^{E3} 은 단결합, 탄화수소기, 복소환기 또는 $-O-R^{E3}$ 을 나타내고(R^{E3} 은 탄화수소기 또는 복소환기를 나타냄), 이들 기는 치환기를 갖고 있어도 된다.

[0650]

Q^{E1} 은, 알킬렌기, 시클로알킬렌기, 아릴렌기, 산소 원자 또는 황 원자를 나타내며, 이들 기는 치환기를 갖고 있어도 된다. Q^{E1} 이 복수 존재하는 경우, 그들은 동일해도 상이해도 된다.

[0651]

Y^{E1} 은 $-CO_2^-$, $-SO_3^-$, $-SO_2^-$ 또는 $-PO_3^{2-}$ 를 나타낸다. Y^{E1} 이 복수 존재하는 경우, 그들은 동일해도 상이해도 된다.

[0652]

M^{E1} 은 알칼리 금속 양이온, 알칼리 토금속 양이온 또는 암모늄 양이온을 나타내고, 이 암모늄 양이온은 치환기를 갖고 있어도 된다. M^{E1} 이 복수 존재하는 경우, 그들은 동일해도 상이해도 된다.

[0653]

Z^{E1} 은 F^- , OH^- , $B(R^{E4})_4^-$, $R^{E4}SO_3^-$, $R^{E4}COO^-$, NO_3^- , SO_4^{2-} , HSO_4^- , PO_4^{3-} , HPO_4^{2-} , $H_2PO_4^-$, BF_4^- 또는 PF_6^- 를 나타낸다. R^{E4} 는 알킬기, 시클로알킬기 또는 아릴기를 나타내며, 이들 기는 치환기를 갖고 있어도 된다. Z^{E1} 이 복수 존재하는 경우, 그들은 동일해도 상이해도 된다.]

[0654]

$nE1$ 은 통상 1 내지 4의 정수이고, 바람직하게는, 1 또는 2이다.

[0655]

Ar^{E1} 로 표시되는 방향족 탄화수소기 또는 복소환기로서는, 1,4-페닐렌기, 1,3-페닐렌기, 1,2-페닐렌기, 2,6-나프탈렌디일기, 1,4-나프탈렌디일기, 2,7-플루오렌디일기, 3,6-플루오렌디일기, 2,7-페난트렌디일기 또는 2,7-카르바졸디일기로부터, 환을 구성하는 원자에 직접 결합하는 수소 원자 $nE1$ 개를 제거한 기가 바람직하고, RE^1 이외의 치환기를 갖고 있어도 된다.

[0656]

Ar^{E1} 이 갖고 있어도 되는 R^{E1} 이외의 치환기로서는, 불소 원자, 시아노기, 알킬기, 시클로알킬기, 아릴기, 1가의 복소환기, 알콕시기, 시클로알콕시기, 아릴옥시기, 아미노기, 치환 아미노기, 알케닐기, 시클로알케닐기, 알킬닐기, 시클로알킬닐기, 카르복실기 및 식 (ES-3)으로 표시되는 기를 들 수 있다.

[0657]

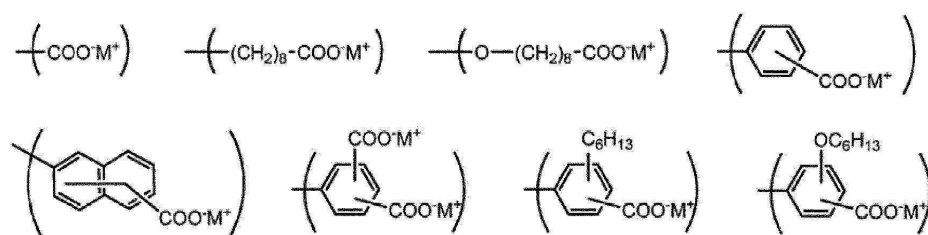
$-O-(C_nH_{2n}O)_{nx}-C_mH_{2m'+1}$ (ES-3)

[0658]

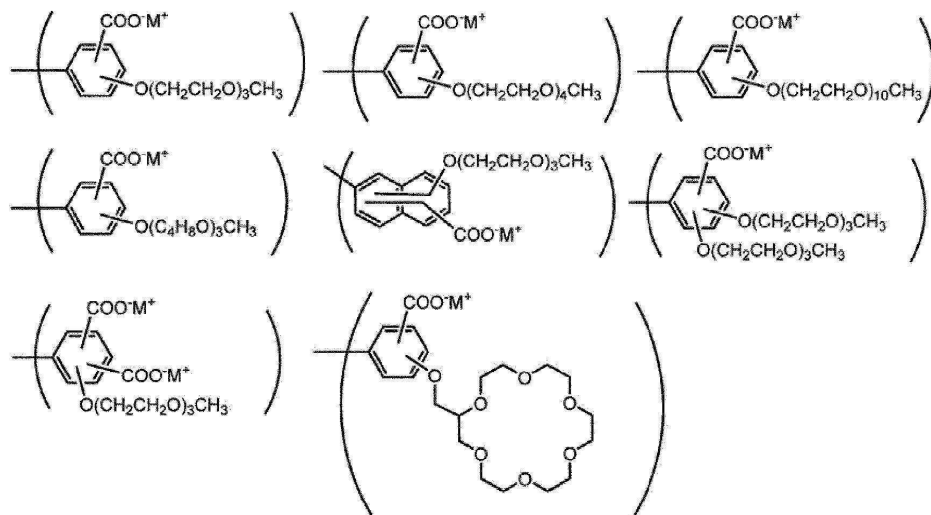
[식 중, n' , m' 및 nx 는 각각 독립적으로 1 이상의 정수를 나타낸다.]

[0659]

- [0660] nE3은 통상 0 내지 10의 정수이고, 바람직하게는, 0 내지 8의 정수이고, 보다 바람직하게는 0 내지 2의 정수이다.
- [0661] aE1은 통상 1 내지 10의 정수이고, 바람직하게는, 1 내지 5의 정수이고, 보다 바람직하게는 1 또는 2이다.
- [0662] bE1은 통상 0 내지 10의 정수이고, 바람직하게는, 0 내지 4의 정수이고, 보다 바람직하게는 0 또는 1이다.
- [0663] mE1은 통상 1 내지 5의 정수이고, 바람직하게는, 1 또는 2이고, 보다 바람직하게는 1이다.
- [0664] R^{E3} 이 $-O-R^{E3}$ 인 경우, 식 (ES-1)로 표시되는 기는, 하기 식으로 표시되는 기이다.
- [0665] $-O-R^{E3}-\{(Q^{E1})_{nE3}-Y^{E1}(M^{E1})_{aE1}(Z^{E1})_{bE1}\}_{mE1}$
- [0666] R^{E3} 으로서, 탄화수소기 또는 복소환기가 바람직하고, 방향족 탄화수소기 또는 방향족 복소환기가 보다 바람직하고, 방향족 탄화수소기가 더욱 바람직하다.
- [0667] R^{E3} 이 갖고 있어도 되는 치환기로서는, 알킬기, 시클로알킬기, 아릴기, 1가의 복소환기 및 식 (ES-3)으로 표시되는 기를 들 수 있고, 식 (ES-3)으로 표시되는 기가 바람직하다.
- [0668] Q^{E1} 로서는, 알킬렌기, 아릴렌기 또는 산소 원자가 바람직하고, 알킬렌기 또는 산소 원자가 보다 바람직하다.
- [0669] Y^{E1} 로서는, $-CO_2^-$, $-SO_2^-$ 또는 PO_3^{2-} 가 바람직하고, $-CO_2^-$ 가 보다 바람직하다.
- [0670] M^{E1} 로 표시되는 알칼리 금속 양이온으로서, 예를 들어 Li^+ , Na^+ , K^+ , Rb^+ , Cs^+ 를 들 수 있고, K^+ , Rb^+ 또는 Cs^+ 가 바람직하고, Cs^+ 가 보다 바람직하다.
- [0671] M^{E1} 로 표시되는 알칼리 토금속 양이온으로서, 예를 들어 Be^{2+} , Mg^{2+} , Ca^{2+} , Sr^{2+} , Ba^{2+} 를 들 수 있고, Mg^{2+} , Ca^{2+} , Sr^{2+} 또는 Ba^{2+} 가 바람직하고, Ba^{2+} 가 보다 바람직하다.
- [0672] M^{E1} 로서는, 알칼리 금속 양이온 또는 알칼리 토금속 양이온이 바람직하고, 알칼리 금속 양이온이 보다 바람직하다.
- [0673] Z^{E1} 로서는, F^- , OH^- , $B(R^{E4})_4^-$, $R^{E4}SO_3^-$, $R^{E4}COO^-$ 또는 NO_3^- 가 바람직하고, F^- , OH^- , $R^{E4}SO_3^-$ 또는 $R^{E4}COO^-$ 가 바람직하다. R^{E4} 로서는, 알킬기가 바람직하다.
- [0674] 식 (ES-1)로 표시되는 기로서는, 예를 들어 하기 식으로 표시되는 기를 들 수 있다.

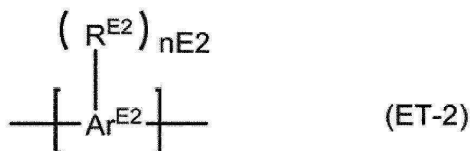


[0675]



[0676]

[0677] [식 중, M^+ 는 Li^+ , Na^+ , K^+ , Cs^+ 또는 $N(CH_3)_4^+$ 를 나타낸다. M^+ 가 복수 존재하는 경우, 그들은 동일해도 상이해도 된다.]



[0678]

[0679] [식 중,

[0680] $nE2$ 는 1 이상의 정수를 나타낸다.

[0681] Ar^{E2} 는 방향족 탄화수소기 또는 복소환기를 나타내며, 이들 기는 R^{E2} 이외의 치환기를 갖고 있어도 된다.

[0682] R^{E2} 는 식 (ES-2)로 표시되는 기를 나타낸다. R^{E2} 가 복수 존재하는 경우, 그들은 동일해도 상이해도 된다.]

[0683] $-R^{E5}-\{(Q^{E2})_{nE4}-Y^{E2}(M^{E2})_{aE2}(Z^{E2})_{bE2}\}_{mE2}$ (ES-2)

[0684] [식 중,

[0685] $nE4$ 는 0 이상의 정수를 나타내고, $aE2$ 는 1 이상의 정수를 나타내고, $bE2$ 는 0 이상의 정수를 나타내고, $mE2$ 는 1 이상의 정수를 나타낸다. $nE4$, $aE2$ 및 $bE2$ 가 복수 존재하는 경우, 그들은 각각 동일해도 상이해도 된다. 단, R^{E5} 가 단결합인 경우, $mE2$ 는 1이다. 또한, $aE2$ 및 $bE2$ 는, 식 (ES-2)로 표시되는 기의 전하가 0이 되도록 선택된다.

[0686] R^{E5} 는 단결합, 탄화수소기, 복소환기 또는 $-OR^{E5}$ 를 나타내고(R^{E5} 는 탄화수소기 또는 복소환기를 나타냄), 이들 기는 치환기를 갖고 있어도 된다.

[0687] Q^{E2} 는 알킬렌기, 시클로알킬렌기, 아릴렌기, 산소 원자 또는 황 원자를 나타내며, 이들 기는 치환기를 갖고 있어도 된다. Q^{E2} 가 복수 존재하는 경우, 그들은 동일해도 상이해도 된다.

[0688] Y^{E2} 는 $-CR_2^{E6}$, $-NR_3^{E6}$, $-PR_3^{E6}$, $-SR_2^{E6}$ 또는 $-IR_2^{E6}$ 를 나타낸다. R^{E6} 은 수소 원자, 알킬기, 시클로알킬기 또는 아릴기를 나타내며, 이들 기는 치환기를 갖고 있어도 된다. 복수 존재하는 R^{E6} 은 동일해도 상이해도 된다. Y^{E2} 가 복수 존재하는 경우, 그들은 동일해도 상이해도 된다.

[0689] M^{E2} 는 F^- , OH^- , $B(R^{E7})_4^-$, $R^{E7}SO_3^-$, $R^{E7}COO^-$, BF_4^- , 또는 SbF_6^- 를 나타낸다. R^{E7} 은 알킬기, 시클로알킬기 또는 아릴기

를 나타내며, 이들 기는 치환기를 갖고 있어도 된다. M^{E2} 가 복수 존재하는 경우, 그들은 동일해도 상이해도 된다.

[0690] Z^{E2} 는 알칼리 금속 양이온 또는 알칼리 토금속 양이온을 나타낸다. Z^{E2} 가 복수 존재하는 경우, 그들은 동일해도 상이해도 된다.]

[0691] $nE2$ 는, 통상 1 내지 4의 정수이고, 바람직하게는 1 또는 2이다.

[0692] Ar^{E2} 로 표시되는 방향족 탄화수소기 또는 복소환기로서는, 1,4-페닐렌기, 1,3-페닐렌기, 1,2-페닐렌기, 2,6-나프탈렌디일기, 1,4-나프탈렌디일기, 2,7-플루오렌디일기, 3,6-플루오렌디일기, 2,7-페난트렌디일기 또는 2,7-카르바졸디일기로부터, 환을 구성하는 원자에 직접 결합하는 수소 원자 $nE2$ 개를 제거한 기가 바람직하고, R^{E2} 이외의 치환기를 갖고 있어도 된다.

[0693] Ar^{E2} 가 갖고 있어도 되는 R^{E2} 이외의 치환기로서는, Ar^{E1} 이 갖고 있어도 되는 R^{E1} 이외의 치환기와 마찬가지로이다.

[0694] $nE4$ 는 통상 0 내지 10의 정수이고, 바람직하게는, 0 내지 8의 정수이고, 보다 바람직하게는 0 내지 2의 정수이다.

[0695] $aE2$ 는 통상 1 내지 10의 정수이고, 바람직하게는, 1 내지 5의 정수이고, 보다 바람직하게는 1 또는 2이다.

[0696] $bE2$ 는 통상 0 내지 10의 정수이고, 바람직하게는, 0 내지 4의 정수이고, 보다 바람직하게는 0 또는 1이다.

[0697] $mE2$ 는 통상 1 내지 5의 정수이고, 바람직하게는, 1 또는 2이고, 보다 바람직하게는 1이다.

[0698] R^{E5} 가 $-O-R^{E5}$ 인 경우, 식 (ES-2)로 표시되는 기는, 하기 식으로 표시되는 기이다.

[0699] $-O-R^{E5}-\{(Q^{E1})_{nE3}-Y^{E1}(M^{E1})_{aE1}(Z^{E1})_{bE1}\}_{mE1}$

[0700] R^{E5} 로서는, 탄화수소기 또는 복소환기가 바람직하고, 방향족 탄화수소기 또는 방향족 복소환기가 보다 바람직하고, 방향족 탄화수소기가 더욱 바람직하다.

[0701] R^{E5} 가 갖고 있어도 되는 치환기로서는, 알킬기, 시클로알킬기, 아릴기, 1가의 복소환기 및 식 (ES-3)으로 표시되는 기를 들 수 있고, 식 (ES-3)으로 표시되는 기가 바람직하다.

[0702] Q^{E2} 로서는, 알킬렌기, 아릴렌기 또는 산소 원자가 바람직하고, 알킬렌기 또는 산소 원자가 보다 바람직하다.

[0703] Y^{E2} 로서는, $-C^+R^{E6}_2$, $-N^+R^{E6}_3$, $-P^+R^{E6}_3$ 또는 $-S^+R^{E6}_2$ 가 바람직하고, $-N^+R^{E6}_3$ 이 보다 바람직하다. R^{E6} 으로서는, 수소 원자, 알킬기 또는 아릴기가 바람직하고, 수소 원자 또는 알킬기가 보다 바람직하다.

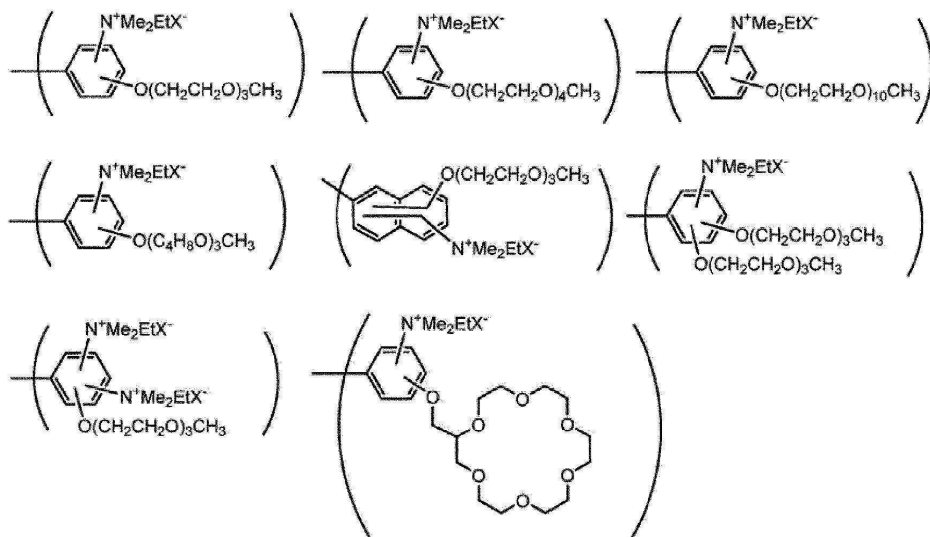
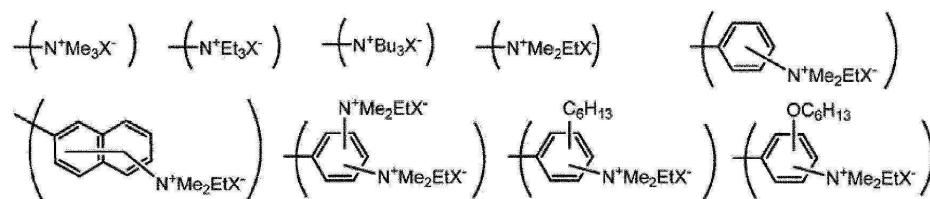
[0704] M^{E2} 로서는, F^- , $B(R^{E7})_4^-$, $R^{E7}SO_3^-$, $R^{E7}COO^-$, BF_4^- 또는 SbF_6^- 이 바람직하고, $B(R^{E7})_4^-$, $R^{E7}COO^-$ 또는 SbF_6^- 가 보다 바람직하다. R^{E7} 로서는, 알킬기가 바람직하다.

[0705] Z^{E2} 로 표시되는 알칼리 금속 양이온으로서, 예를 들어 Li^+ , Na^+ , K^+ , Rb^+ , Cs^+ 를 들 수 있고, Li^+ , Na^+ 또는 K^+ 가 바람직하다.

[0706] Z^{E2} 로 표시되는 알칼리 토금속 양이온으로서, 예를 들어 Be^{2+} , Mg^{2+} , Ca^{2+} , Sr^{2+} , Ba^{2+} 를 들 수 있고, Mg^{2+} 또는 Ca^{2+} 가 바람직하다.

[0707] Z^{E2} 로서는, 알칼리 금속 양이온이 바람직하다.

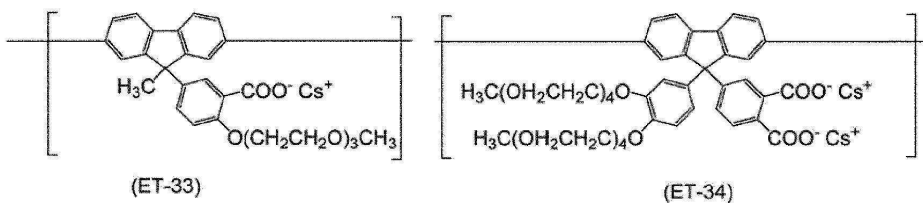
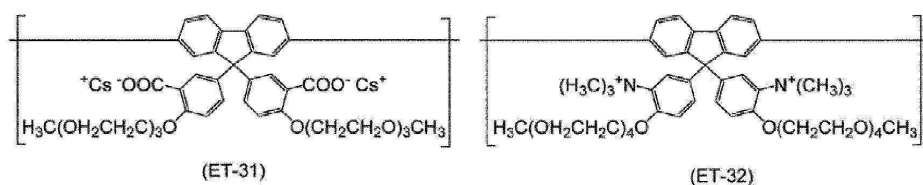
[0708] 식 (ES-2)로 표시되는 기로서는, 예를 들어 하기 식으로 표시되는 기를 들 수 있다.

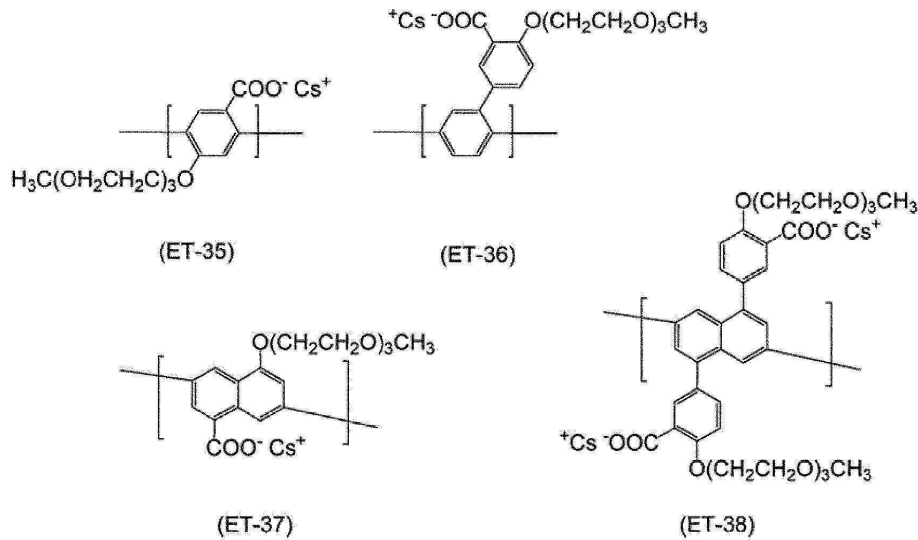


[0710]

[0711] [식 중, X^- 는 F^- , $B(C_6H_5)_4^-$, CH_3COO^- 또는 $CF_3SO_3^-$ 를 나타낸다. X^- 가 복수 존재하는 경우, 그들은 동일해도 상이해도 된다.]

[0712] 식 (ET-1) 및 식 (ET-2)로 표시되는 구성 단위로서는, 예를 들어 하기 식 (ET-31) 내지 식 (ET-38)로 표시되는 구성 단위를 들 수 있다.





[0715]

[0716] 전자 수송층의 고분자 화합물은, 예를 들어 일본특허공개 제2009-239279호 공보, 일본특허공개 제2012-033845호 공보, 일본특허공개 제2012-216821호 공보, 일본특허공개 제2012-216822호 공보, 일본특허공개 제2012-216815호 공보에 기재된 방법에 따라서 합성할 수 있다.

[0717] 정공 수송층의 재료, 전자 수송층의 재료 및 발광층의 재료는, 발광 소자의 제작에 있어서, 각각 정공 수송층, 전자 수송층 및 발광층에 인접하는 층의 형성 시에 사용되는 용매에 용해하는 경우, 해당 용매에 해당 재료가 용해하는 것을 회피하기 위해서, 해당 재료가 가교기를 갖는 것이 바람직하다. 가교기를 갖는 재료를 사용해서 각 층을 형성한 후, 해당 가교기를 가교시킴으로써, 해당 층을 불용화시킬 수 있다.

[0718] 본 실시 형태에 따른 발광 소자에 있어서, 발광층, 정공 수송층, 전자 수송층, 정공 주입층, 전자 주입층 등의 각 층의 형성 방법으로서, 저분자 화합물을 사용하는 경우, 예를 들어 분말로부터의 진공 증착법, 용액 또는 용융 상태에서부터의 성막에 의한 방법을 들 수 있고, 고분자 화합물을 사용하는 경우, 예를 들어 용액 또는 용융 상태에서부터의 성막에 의한 방법을 들 수 있다.

[0719] 적층하는 층의 순서, 수 및 두께는, 외부 양자 효율 및 휘도 수명을 감안해서 조정한다.

[0720] [기관/전극]

[0721] 발광 소자에 있어서의 기관은, 전극을 형성할 수 있고, 또한 유기층을 형성할 때 화학적으로 변화하지 않는 기관이면 되고, 예를 들어 유리, 플라스틱, 실리콘 등의 재료를 포함하는 기관이다. 불투명한 기관인 경우에는, 기관으로부터 가장 멀리 있는 전극이 투명 또는 반투명한 것이 바람직하다.

[0722] 양극의 재료로서는, 예를 들어 도전성의 금속 산화물, 반투명의 금속을 들 수 있고, 바람직하게는, 산화인듐, 산화아연, 산화주석; 인듐·주석·옥사이드(ITO), 인듐·아연·옥사이드 등의 도전성 화합물; 은과 팔라듐과 구리의 복합체(APC); NESA, 금, 백금, 은, 구리이다.

[0723] 음극의 재료로서는, 예를 들어 리튬, 나트륨, 칼륨, 루비듐, 세슘, 베릴륨, 마그네슘, 칼슘, 스트론튬, 바륨, 알루미늄, 아연, 인듐 등의 금속; 그들 중 2종 이상의 합금; 그들 중 1종 이상과, 은, 구리, 망간, 티타늄, 코발트, 니켈, 텅스텐, 주석 중 1종 이상의 합금; 및 그래파이트 및 그래파이트 층간 화합물을 들 수 있다. 합금으로서, 예를 들어 마그네슘-은 합금, 마그네슘-인듐 합금, 마그네슘-알루미늄 합금, 인듐-은 합금, 리튬-알루미늄 합금, 리튬-마그네슘 합금, 리튬-인듐 합금, 칼슘-알루미늄 합금을 들 수 있다.

[0724] 양극 및 음극은 각각, 2층 이상의 적층 구조와 해도 된다.

[0725] [용도]

[0726] 발광 소자를 사용해서 면상의 발광을 얻기 위해서는, 면상의 양극과 음극이 중첩되도록 배치하면 된다. 패턴 형상의 발광을 얻기 위해서는, 면상의 발광 소자의 표면에 패턴 형상의 창을 설치한 마스크를 설치하는 방법, 비발광부로 하고자 하는 층을 극단적으로 두껍게 형성하여 실질적으로 비발광으로 하는 방법, 양극 혹은 음극, 또는 양쪽 전극을 패턴 형상으로 형성하는 방법이 있다. 이들 중 어느 하나의 방법으로 패턴을 형성하고, 및

개의 전극을 독립적으로 ON/OFF할 수 있도록 배치함으로써, 숫자, 문자 등을 표시할 수 있는 세그먼트 타입의 표시 장치가 얻어진다. 도트 매트릭스 표시 장치로 하기 위해서는, 양극과 음극을 모두 스트라이프상으로 형성하여 직교하도록 배치하면 된다. 복수 종류의 발광색이 다른 고분자 화합물을 구분 도포하는 방법, 컬러 필터 또는 형광 변환 필터를 사용하는 방법에 의해, 부분 컬러 표시, 멀티 컬러 표시가 가능하게 된다. 도트 매트릭스 표시 장치는 패시브 구동도 가능하고, TFT 등과 조합하여 액티브 구동도 가능하다. 이들 표시 장치는, 컴퓨터, 텔레비전, 휴대 단말기 등의 디스플레이에 사용할 수 있다. 면상의 발광 소자는, 액정 표시 장치의 백라이트용의 면상 광원, 또는 면상의 조명용 광원으로서 적합하게 사용할 수 있다. 플렉시블 기판을 사용하면, 곡면상의 광원 및 표시 장치로서도 사용할 수 있다.

[0727] 이상, 본 발명의 적합한 일 실시 형태에 대해서 설명했지만, 본 발명은 상기의 실시 형태에 한정되지 않는다.

[0728] 예를 들어, 본 발명의 일 측면은, 잔류 염소 농도가 15질량ppm 이하인 식 (1)로 표시되는 인광 발광성 화합물과, 호스트 재료가 배합된 조성물에 관한 것이어도 된다. 또한, 인광 발광성 화합물의 잔류 염소 농도는, 식 (1)로 표시되는 인광 발광성 화합물에 포함되는 염소 원자의 양(C_1)과 동의이다.

[0729] 일 실시 형태에 있어서, 인광 발광성 화합물의 잔류 염소 농도를 C_1 (ppm), 조성물에 배합되는 고형분 전량에 대한, 상기 인광 발광성 화합물의 배합량의 비(질량비)를 W_1 로 했을 때, 조성물은 하기 식 (i)을 만족하는 것이어도 된다.

[0730]
$$C_1 \times W_1 \leq 3.5 \quad (i)$$

[0731] 또한, 일 실시 형태에 있어서, 호스트 재료의 잔류 염소 농도를 C_2 (질량ppm), 조성물에 배합되는 고형분 전량에 대한, 호스트 재료의 배합량의 비(질량비)를 W_2 로 했을 때, 조성물은 하기 식 (ii)를 만족하는 것이어도 된다.

[0732]
$$C_1 \times W_1 + C_2 \times W_2 \leq 3.5 \quad (ii)$$

[0733] 또한, 본 발명의 일측면은, 잔류 염소 농도가 15질량ppm을 초과하는 식 (1)로 표시되는 인광 발광성 화합물의 조정제물을 준비하는 공정과, 조정제물로부터, 잔류 염소 농도가 15질량ppm 이하인 인광 발광성 화합물의 정제물을 얻는 공정과, 정제물과 호스트 재료를 배합한 조성물을 얻는 공정을 구비하는, 조성물의 정제 방법에 관한 것이어도 된다.

[0734] 실시예

[0735] 이하, 실시예에 의해 본 발명을 더욱 상세하게 설명하지만, 본 발명은 이들 실시예에 한정되는 것은 아니다.

[0736] 실시예에 있어서, 고분자 화합물의 폴리스티렌환산의 수 평균 분자량(M_n) 및 폴리스티렌환산의 중량 평균 분자량(M_w)은, 이동상에 테트라히드로푸란을 사용하여, 하기의 크기 배제 크로마토 그래피(SEC)에 의해 구하였다. 또한, SEC의 측정 조건은, 다음과 같다.

[0737] 측정하는 고분자 화합물을 약 0.05질량%의 농도로 테트라히드로푸란에 용해시켜서, SEC에 10 μ L 주입했다. 이동상은, 2.0mL/분의 유량으로 흘렀다. 칼럼으로서, PLgel MIXED-B(폴리머 래버러토리즈 제조)를 사용했다. 검출기에는 UV-VIS 검출기(시마즈 세이사쿠쇼 제조, 상품명: SPD-10Avp)를 사용했다.

[0738] LC-MS는 하기의 방법으로 측정했다.

[0739] 측정 시료를 약 2mg/mL의 농도가 되도록 클로로포름 또는 테트라히드로푸란에 용해시켜서, LC-MS(Agilent 제조, 상품명: 1100LCMSD)에 약 1 μ L 주입했다. LC-MS의 이동상에는, 아세토니트릴 및 테트라히드로푸란의 비율을 변화시키면서 사용하여, 0.2mL/분의 유량으로 흘렀다. 칼럼은, L-column 2 ODS(3 μ m)(가가쿠 붓시츠 효카 겐큐 기코 제조, 내경: 2.1mm, 길이: 100mm, 입경 3 μ m)를 사용했다.

[0740] TLC-MS는 하기의 방법으로 측정했다.

[0741] 측정 시료를 톨루엔, 테트라히드로푸란 또는 클로로포름의 어느 것의 용매에 임의의 농도로 용해시켜서, DART용 TLC플레이트(테크노 어플리케이션즈사 제조, 상품명: YSK5-100) 상에 도포하고, TLC-MS(니혼 덴시사 제조, 상품명: JMS-T100TD(The AccuTOF TLC))를 사용하여 측정했다. 측정 시의 헬륨 가스 온도는, 200 내지 400 $^{\circ}$ C의 범위에서 조절했다.

[0742] NMR은 하기 방법으로 측정했다.

[0743] 5 내지 10mg의 측정 시료를 약 0.5mL의 중클로로포름(CDC13), 중테트라히드로푸란, 중디메틸설폭시드, 중아세톤, 중N,N-디메틸포름아미드, 중톨루엔, 중메탄올, 중에탄올, 중2-프로판올 또는 중염화메틸렌에 용해시켜서, NMR 장치(Agilent 제조, 상품명: INOVA300 또는 MERCURY 400VX)를 사용하여 측정했다.

[0744] 화합물의 순도 지표로서, 고속 액체 크로마토그래피(HPLC) 면적 백분율의 값을 사용했다. 이 값은, 특별한 기제가 없는 한, HPLC(시마즈 세이사쿠쇼 제조, 상품명: LC-20A)에서의 UV=254nm에 있어서의 값으로 한다. 이때, 측정하는 화합물은, 0.01 내지 0.2질량%의 농도가 되도록 테트라히드로푸란 또는 클로로포름에 용해시켜서, 농도에 따라서 HPLC에 1 내지 10 μ L 주입했다. HPLC의 이동상에는, 아세토니트릴/테트라히드로푸란의 비율을 100/0 내지 0/100(용적비)까지 변화시키면서 사용하여, 1.0mL/분의 유량으로 흘렸다. 칼럼은, Kaseisorb LC ODS 2000(도쿄 가세이 고교 제조) 또는 동등한 성능을 갖는 ODS 칼럼을 사용했다. 검출기에는, 포토다이오드어레이검출기(시마즈 세이사쿠쇼 제조, 상품명: SPD-M20A)를 사용했다.

[0745] 본 실시예에 있어서, 인광 발광성 화합물의 발광 스펙트럼의 최대 피크 파장은, 분광 광도계(니혼분코 가부시키가이샤 제조, FP-6500)에 의해 실온에서 측정했다. 인광 발광성 화합물을 크실렌에, 약 0.8×10^{-4} 질량%의 농도로 용해시킨 크실렌 용액을 시료로 해서 사용했다. 여기광으로서, 파장 325nm의 UV 광을 사용했다.

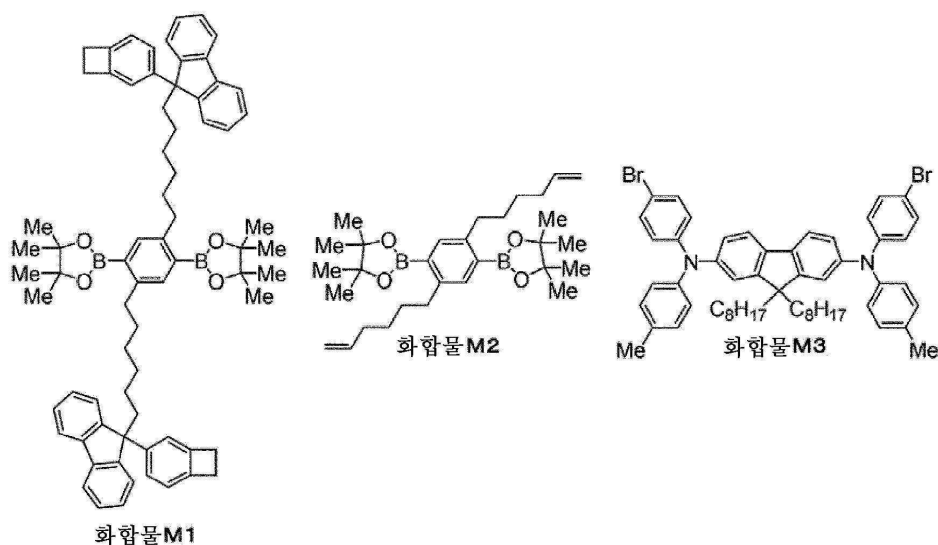
[0746] 인광 발광성 화합물 및 호스트 재료에 포함되는 브롬 원자의 양 및 염소 원자의 양은, 자동 연소-이온크로마토그래피법에 의해 측정했다. 본 측정으로는, 연소 분해를 미쯔비시 가가꾸 아날리텍사제 자동 시료 연소장치 AQF-2100H형을 사용해서 행하고, 그 후의 이온 크로마토그래피를 서모 피셔 사이언티픽사 제조 이온크로마토그래피 시스템 ICS-2100을 사용하여 행하였다.

[0747] <합성에 1> 화합물 M1, 화합물 M2 및 화합물 M3의 합성

[0748] 화합물 M1은 국제공개 제2015/145871호에 기재된 방법에 따라서 합성했다.

[0749] 화합물 M2는 국제공개 제2013/146806호에 기재된 방법에 따라서 합성했다.

[0750] 화합물 M3은 국제공개 제2005/049546호에 기재된 방법에 따라서 합성했다.



[0751]

[0752] <합성에 2> 고분자 화합물 HTL-1의 합성

[0753] (공정 1) 반응 용기 내를 불활성 가스 분위기로 한 후, 화합물 M1(0.923g), 화합물 M2(0.0496g), 화합물 M3(0.917g), 디클로로비스(트리스-*o*-메톡시페닐포스핀)팔라듐(1.76mg) 및 톨루엔(34mL)을 첨가하고, 105℃로 가열했다.

[0754] (공정 2) 반응액에, 20질량% 수산화 테트라에틸암모늄 수용액(6.7mL)을 적하하고, 6시간 환류시켰다.

[0755] (공정 3) 반응 후, 거기에, 페닐보론산(48.8mg) 및 디클로로비스(트리스-*o*-메톡시페닐포스핀)팔라듐(0.88mg)을 첨가하고, 14.5시간 환류시켰다.

[0756] (공정 4) 그 후, 거기에, 디에틸디티아카르바산나트륨 수용액을 첨가하고, 80℃에서 2시간 교반했다. 냉각 후, 얻어진 반응액을, 물로 2회, 3질량% 아세트산 수용액으로 2회, 물로 2회 세정하고, 얻어진 용액을 메탄올에 적

하한바, 침전이 발생했다. 얻어진 침전물을 톨루엔에 용해시켜서, 알루미나 칼럼, 실리카겔 칼럼의 순서로 통과시킴으로써 정제했다. 얻어진 용액을 메탄올에 적하하고, 교반한 후, 얻어진 침전물을 여과취출하고, 건조시킴으로써, 고분자 화합물 HTL-1을 1.23g 얻었다.

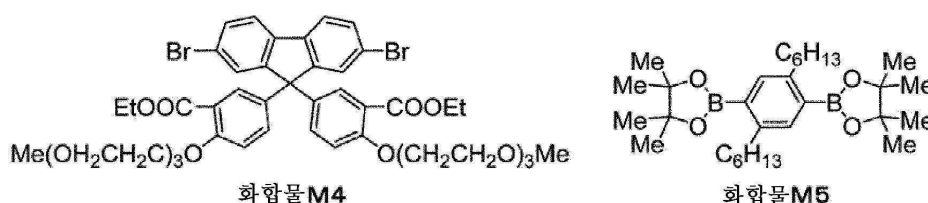
[0757] 고분자 화합물 HTL-1의 폴리스티렌환산의 수 평균 분자량은 2.3×10^4 이고, 폴리스티렌환산의 중량 평균 분자량은 1.2×10^5 였다.

[0758] 고분자 화합물 HTL-1은, 투입 원료의 양으로부터 구한 이론값으로는, 화합물 M1로부터 유도되는 구성 단위와, 화합물 M2로부터 유도되는 구성 단위와, 화합물 M3으로부터 유도되는 구성 단위가, 45:5:50의 몰비로 구성되어 이루어지는 공중합체이다.

[0759] <합성에 3> 화합물 M4 및 화합물 M5의 합성

[0760] 화합물 M4는 일본특허공개 제2012-33845호 공보에 기재된 방법에 따라서 합성했다.

[0761] 화합물 M5는 일본특허공개 제2010-189630호 공보에 기재된 방법에 따라서 합성했다.



[0762]

[0763] <합성에 4> 고분자 화합물 ET1의 합성

[0764] (공정 1) 반응 용기 내를 불활성 가스 분위기로 한 후, 화합물 M4(9.23g), 화합물 M5(4.58g), 디클로로비스(트리스-*o*-메톡시페닐포스핀)팔라듐(8.6mg), 메틸트리옥틸암모늄클로라이드(시그마 알드리치사 제조, 상품명 Aliquat336(등록상표))(0.098g) 및 톨루엔(175mL)을 첨가하고, 105℃로 가열했다.

[0765] (공정 2) 그 후, 거기에, 12질량% 탄산나트륨 수용액(40.3mL)을 적하하고, 29시간 환류시켰다.

[0766] (공정 3) 그 후, 거기에, 페닐보론산(0.47g) 및 디클로로비스(트리스-*o*-메톡시페닐포스핀)팔라듐(8.7mg)을 첨가하고, 14시간 환류시켰다.

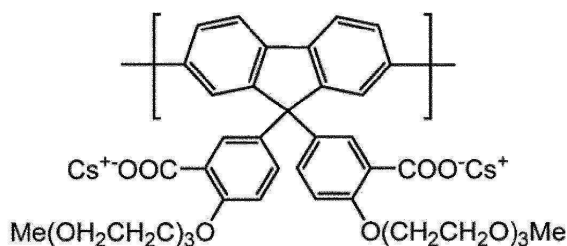
[0767] (공정 4) 그 후, 거기에, 디에틸디티아카르바산나트륨 수용액을 첨가하고, 80℃에서 2시간 교반했다. 얻어진 반응액을 냉각 후, 메탄올에 적하한바, 침전이 발생했다. 침전물을 여과취출하고, 메탄올, 물로 세정 후, 건조시킴으로써 얻은 고체를 클로로포름에 용해시켜서, 미리 클로로포름을 통액한 알루미나 칼럼 및 실리카겔 칼럼에 차례로 통과시킴으로써 정제했다. 얻어진 정제 액을 메탄올에 적하하고, 교반한바, 침전이 발생했다. 침전물을 여과취출하고, 건조시킴으로써, 고분자 화합물 ET1a(7.15g)를 얻었다. 고분자 화합물 ET1a의 Mn은 3.2×10^4 , Mw는 6.0×10^4 였다.

[0768] 고분자 화합물 ET1a는, 투입 원료의 양으로부터 구한 이론값으로는, 화합물 M4로부터 유도되는 구성 단위와, 화합물 M5로부터 유도되는 구성 단위가, 50:50의 몰비로 구성되어 이루어지는 공중합체이다.

[0769] (공정 5) 반응 용기 내를 아르곤 가스 분위기 하로 한 후, 고분자 화합물 ET1a(3.1g), 테트라히드로푸란(130mL), 메탄올(66mL), 수산화세슘 1수화물(2.1g) 및 물(12.5mL)을 첨가하고, 60℃에서 3시간 교반했다.

[0770] (공정 6) 그 후, 거기에, 메탄올(220mL)을 첨가하고, 2시간 교반했다. 얻어진 반응 혼합물을 농축한 후, 이소프로필알코올에 적하하고, 교반한바, 침전이 발생했다. 침전물을 여과취출하고, 건조시킴으로써, 고분자 화합물 ET1(3.5g)을 얻었다. 고분자 화합물 ET1에 $^1\text{H-NMR}$ 해석에 의해, 고분자 화합물 ET1 중의 에틸에스테르 부위의 시그널이 소실되어, 반응이 완결된 것을 확인했다.

[0771] 고분자 화합물 ET1은, 고분자 화합물 ET1a의 투입 원료의 양으로부터 구한 이론값으로는, 하기 식으로 표시되는 구성 단위와, 화합물 M5로부터 유도되는 구성 단위가, 50:50의 몰비로 구성되어 이루어지는 공중합체이다.



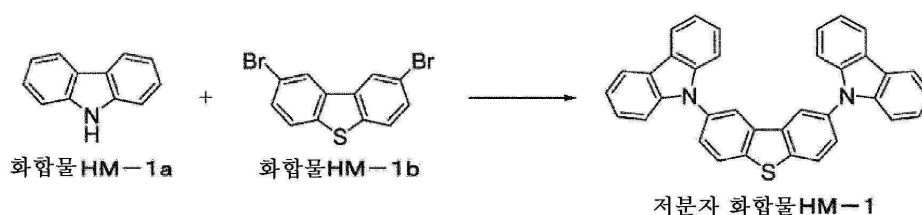
[0772]

[0773]

고분자 화합물 ET1의 원소 분석값은, C, 54.1질량%; H, 5.6질량%; N, <0.3질량%; Cs, 22.7질량%(이론값: C, 57.29질량%; H, 5.70질량%; Cs, 21.49질량%; O, 15.52질량%)였다.

[0774]

<합성에 5> 화합물 HM-1의 합성



[0775]

[0776]

반응 용기 내를 질소 가스 분위기로 한 후, 화합물 HM-1a(324g), 화합물 HM-1b(300g), 크실렌(12L), 아세트산팔라듐(II)(11.5g), 트리-tert-부틸포스포늄테트라플루오로보레이트(29.8g) 및 나트륨 tert-부톡시드(555g)를 첨가하고, 가열 환류 하에서 40시간 교반했다. 그 후, 얻어진 반응액을 실리카겔 및 셀라이트를 칸 여과기로 여과하고, 또한 실리카겔 및 셀라이트를 칸 여과기를 톨루엔(10L)으로 세정했다. 얻어진 여과액을 이온 교환수(4L)로 5회 세정한 후, 얻어진 유기층을 무수황산나트륨으로 건조시키고, 여과했다. 얻어진 여과액을 감압 농축함으로써, 고체를 얻었다. 얻어진 고체를 톨루엔에서 재결정한 후, 50℃에서 감압 건조시킴으로써, 조정제물 HM-1(361g)을 얻었다. 또한, 조정제물 HM-1의 HPLC 면적 백분율값은 99.5% 이상이었다.

[0777]

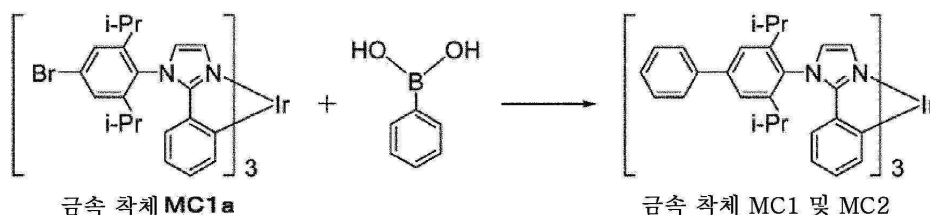
얻어진 조정제물 HM-1(86g)을, 5회 승화 정제함으로써, 화합물 HM-1(21g)을 얻었다. 또한, 승화 정제 시에는, 진공도를 5×10^{-3} Pa로 하고, 승화 온도를 290℃로 했다.

[0778]

화합물 HM-1의 HPLC 면적 백분율값은 99.5% 이상이었다. 또한, 화합물 HM-1에 포함되는 염소 원자의 양(C^H)은 검출 한계 이하(0질량ppm)였다. 또한, 화합물 HM-1에 포함되는 브롬 원자의 양은 검출 한계 이하(0질량ppm)였다. 화합물 HM-1을 호스트 재료로서 사용했다.

[0779]

<비교예 1 및 실시예 1> 인광 발광성 화합물 MC1 및 MC2의 합성



[0780]

[0781]

차광한 반응 용기 내를 아르곤 가스 분위기로 한 후, 인광 발광성 화합물 MC1a(210g), 페닐보론산(63.1g), 디클로로비스(트리스-o-메톡시페닐포스핀)팔라듐(II)(0.69g) 및 톨루엔(2.1kg)을 첨가하고, 70℃로 가열했다. 거기에, 20질량% 수산화 테트라에틸암모늄 수용액(1.39kg)을 첨가한 후, 90℃에서 19시간 교반했다. 그 후, 반응액을 실온까지 냉각한 후, 10질량% 식염수를 첨가하고, 셀라이트를 칸 여과기로 여과했다. 얻어진 여과액을 톨루엔 및 10질량% 식염수로 추출하고, 유기층을 얻었다. 얻어진 유기층을 무수 황산마그네슘으로 건조시킨 후, 아미노실리카겔을 칸 여과기로 여과했다. 얻어진 여과액을 감압 농축함으로써 고체를 얻었다. 얻어진 고체를 톨루엔 및 아세토니트릴의 혼합 용매로 재결정한 후, 여과함으로써, 여과액 MC1'와 잔사 MC2'를 얻었다. 얻어진 여과액 MC1'를 감압 농축함으로써, 고체 MC1'를 얻었다. 얻어진 고체 MC1'를 50℃에서 감압 건조시킴으로써, 비교예 1의 인광 발광성 화합물 MC1(81.8g)을 얻었다. 또한, 얻어진 잔사 MC2'를 50℃에서 감압 건조시킴으로써,

써, 실시예 1의 인광 발광성 화합물 MC2(125g)를 얻었다.

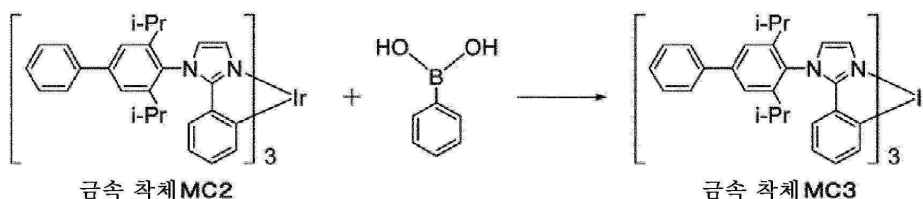
[0782] 인광 발광성 화합물 MC1의 HPLC 면적 백분율값은 99.2%였다. 인광 발광성 화합물 MC2의 HPLC 면적 백분율값은 99.5% 이상이였다.

[0783] 인광 발광성 화합물 MC1에 포함되는 염소 원자의 양(C^1)은 16질량ppm이었다. 인광 발광성 화합물 MC2에 포함되는 염소 원자의 양(C^1)은 9질량ppm이었다.

[0784] 인광 발광성 화합물 MC1에 포함되는 브롬 원자의 양은 2질량ppm이었다. 인광 발광성 화합물 MC2에 포함되는 브롬 원자의 양은 검출 한계 이하(0질량ppm)였다.

[0785] 인광 발광성 화합물 MC1 및 MC2의 발광 스펙트럼의 최대 피크 파장은 471nm였다.

[0786] <실시예 2> 인광 발광성 화합물 MC3의 합성



[0787]

[0788] 인광 발광성 화합물 MC2의 탈할로겐화를 행하였다. 구체적으로는, 차광한 반응 용기 내를 아르곤 가스 분위기로 한 후, 인광 발광성 화합물 MC2(40.0g), 페닐보론산(3.67g), (di-tert-부틸(4-디메틸아미노페닐)포스핀)디클로로팔라듐(II)(0.64g) 및 톨루엔(210mL)을 첨가하고, 90℃로 가열했다. 거기에, 40질량% 테트라부틸암모늄히드록시드 수용액(97mL)을 첨가한 후, 90℃에서 120시간 교반했다. 그 후, 반응액을 실온까지 냉각한 후, 수층을 제거하여 유기층을 얻었다. 얻어진 유기층을 이온 교환수(100mL)로 2회 세정하고, 무수 황산마그네슘으로 건조시킨 후, 여과하고, 톨루엔(250mL)으로 잔사를 세정했다. 얻어진 여과액을 감압 농축함으로써 고체를 얻었다. 얻어진 고체를 실리카겔 칼럼 크로마토그래피(헥산 및 디클로로메탄의 혼합 용매)로 정제한 후, 톨루엔 및 아세트니트릴의 혼합 용매로 재결정했다. 얻어진 고체를 50℃에서 감압 건조시킴으로써, 인광 발광성 화합물 MC3(34.2g)을 황색 고체로서 얻었다.

[0789] 인광 발광성 화합물 MC3의 HPLC 면적 백분율값은 99.5% 이상이였다. 또한, 인광 발광성 화합물 MC3에 포함되는 염소 원자의 양(C^1)은 검출 한계 이하(0질량ppm)였다. 인광 발광성 화합물 MC3에 포함되는 브롬 원자의 양은 검출 한계 이하 (0질량ppm)였다.

[0790] 인광 발광성 화합물 MC3에 1H -NMR 및 LC-MS는 하기와 같다.

[0791] 1H -NMR(300MHz, $CD_2Cl_2-d_2$) δ (ppm)=7.83-7.85(m, 6H), 7.67-7.54(m, 12H), 7.52-7.43(m, 3H), 6.94(d, 6H), 6.80(d, 3H), 6.67(t, 3H), 6.52(t, 3H), 6.44-6.36(m, 3H), 2.94-2.74(m, 3H), 2.55-2.36(m, 3H), 1.35(d, 9H), 1.19-1.09(m, 18H), 1.06(d, 9H).

[0792] LC-MS(APCI, positive): $m/z=1331.6[M+H]^+$

[0793] 인광 발광성 화합물 MC3의 발광 스펙트럼의 최대 피크 파장은 471nm였다.

[0794] <실시예 D1> 발광 소자 D1의 제작 및 평가

[0795] (발광 소자 D1의 제작)

[0796] (양극 및 정공 주입층의 형성)

[0797] 유리 기판에 스퍼터법에 의해 45nm의 두께로 ITO막을 부착함으로써 양극을 형성했다. 해당 양극 상에 정공 주입 재료인 ND-3202(닛산 가가꾸 고교 제조)를 스프인 코트법에 의해 35nm의 두께로 성막했다. 대기 분위기 하에서, 핫 플레이트 상에서 50℃, 3분간 가열하고, 추가로 230℃, 15분간 가열함으로써 정공 주입층을 형성했다.

[0798] (정공 수송층의 형성)

- [0799] 크실렌에 고분자 화합물 HTL-1을 0.7질량%의 농도로 용해시켰다. 얻어진 크실렌 용액을 사용하여, 정공 주입층 위에 스핀 코팅법에 의해 20nm의 두께로 성막하고, 질소 가스 분위기 하에서, 핫 플레이트 상에서 180℃, 60분간 가열시킴으로써 정공 수송층을 형성했다.
- [0800] (발광층의 형성 D1)
- [0801] 톨루엔(간토 가가꾸사 제조: 전자 공업용(EL 그레이트))에, 화합물 HM-1 및 인광 발광성 화합물 MC3(화합물 HM-1/인광 발광성 화합물 MC3=75질량%/25질량%)을 2.0질량%의 농도로 용해시켰다. 얻어진 톨루엔 용액을 사용하여, 정공 수송층 위에 스핀 코팅법에 의해 75nm의 두께로 성막하고, 질소 가스 분위기 하에서, 130℃, 10분간 가열시킴으로써 발광층을 형성했다.
- [0802] 또한, 투입의 양으로부터 구한 이론값으로는, C^I 은 0질량ppm이고, C^H 는 0질량ppm이고, W^I 은 0.25이고, W^H 는 0.75이고, $C^I W^I + C^H W^H$ 는 0질량ppm이다.
- [0803] (전자 수송층의 형성)
- [0804] 2,2,3,3,4,4,5,5-옥타플루오로-1-펜탄올에, 고분자 화합물 ETL-1을 0.25질량%의 농도로 용해시켰다. 얻어진 2,2,3,3,4,4,5,5-옥타플루오로-1-펜탄올 용액을 사용하여, 발광층 위에 스핀 코팅법에 의해 10nm의 두께로 성막하고, 질소 가스 분위기 하에서, 130℃, 10분간 가열시킴으로써 전자 수송층을 형성했다.
- [0805] (음극의 형성)
- [0806] 전자 수송층을 형성한 기판을 증착기 내에서, 1.0×10^{-4} Pa이하로까지 감압한 후, 음극으로서, 전자 수송층 위에 불화나트륨을 약 4nm, 이어서, 불화나트륨층 위에 알루미늄을 약 80nm 증착했다. 증착 후, 유리 기판을 사용해서 밀봉함으로써, 발광 소자 D1을 제작했다.
- [0807] (발광 소자의 평가)
- [0808] 발광 소자 D1에 전압을 인가함으로써 EL 발광이 관측되었다. 100cd/m²에서의 발광 효율은 4.98[lm/W], CIE 색도 좌표(x,y)는 (0.19,0.42)였다. 1000cd/m²에서의 CIE 색도 좌표(x,y)는 (0.20,0.44)였다. 5000cd/m²에서의 CIE 색도 좌표(x,y)는 (0.19,0.42)였다. 초기 휘도가 1000cd/m²가 되도록 전류값을 설정한 후, 정전류로 구동시켜서, 휘도가 초기 휘도의 95%가 될 때까지의 시간(이하, 「LT95」이라고도 함)를 측정하되, 229시간이었다. 초기 휘도가 5000cd/m²가 되도록 전류값을 설정한 후, 정전류로 구동시켜서, 휘도가 초기 휘도의 50%가 될 때까지의 시간(이하, 「LT50」이라고도 함)를 측정하되, 25.3시간이었다. 결과를 표 5에 나타낸다.
- [0809] <실시에 D2> 발광 소자 D2의 제작 및 평가
- [0810] (발광 소자 D2의 제작)
- [0811] 실시예 D1에 있어서의 (발광층의 형성 D1)을, 하기 (발광층의 형성 D2)로 변경한 것 이외에는, 실시예 D1과 마찬가지로 하여, 발광 소자 D2를 제작했다.
- [0812] (발광층의 형성 D2)
- [0813] 톨루엔(간토 가가꾸사 제조: 전자 공업용(EL 그레이트))에, 화합물 HM-1, 인광 발광성 화합물 MC3 및 인광 발광성 화합물 MC2(화합물 HM-1/인광 발광성 화합물 MC3/인광 발광성 화합물 MC2=75질량%/22.5질량%/2.5질량%)를 2.0질량%의 농도로 용해시켰다. 얻어진 톨루엔 용액을 사용하여, 정공 수송층 위에 스핀 코팅법에 의해 75nm의 두께로 성막하고, 질소 가스 분위기 하에서, 130℃, 10분간 가열시킴으로써 발광층을 형성했다.
- [0814] 또한, 투입의 양으로부터 구한 이론값으로는, C^I 은 0.90질량ppm이고, C^H 는 0질량ppm이고, W^I 은 0.25이고, W^H 는 0.75이고, $C^I W^I + C^H W^H$ 는 0.23질량ppm이다.
- [0815] (발광 소자의 평가)
- [0816] 발광 소자 D2에 전압을 인가함으로써 EL 발광이 관측되었다. 100cd/m²에서의 발광 효율은 7.60[lm/W], CIE 색도 좌표(x,y)는 (0.20,0.44)였다. 1000cd/m²에서의 CIE 색도 좌표(x,y)는 (0.20,0.44)였다. 5000cd/m²에서의 CIE 색도 좌표(x,y)는 (0.19,0.42)였다. 초기 휘도가 1000cd/m²가 되도록 전류값을 설정한 후, 정전류로 구동시켜서, 휘도가 초기 휘도의 95%가 될 때까지의 시간을 측정하되, 124시간이었다. 초기 휘도가 5000cd/m²가 되도록 전류값을 설정한 후, 정전류로 구동시켜서, 휘도가 초기 휘도의 50%가 될 때까지의 시간을 측정하되, 24.5

시간이었다. 결과를 표 5에 나타낸다.

[0817] <실시에 D3> 발광 소자 D3의 제작 및 평가

[0818] (발광 소자 D3의 제작)

[0819] 실시예 D1에 있어서의 (발광층의 형성 D1)을, 하기 (발광층의 형성 D3)으로 변경한 것 이외에는, 실시예 D1과 마찬가지로 하여, 발광 소자 D3을 제작했다.

[0820] (발광층의 형성 D3)

[0821] 톨루엔(간또 가가꾸사 제조: 전자 공업용(EL 그레이드))에, 화합물 HM-1, 인광 발광성 화합물 MC3 및 인광 발광성 화합물 MC2(화합물 HM-1/인광 발광성 화합물 MC3/인광 발광성 화합물 MC2=75질량%/12.5질량%/12.5질량%)를 2.0질량%의 농도로 용해시켰다. 얻어진 톨루엔 용액을 사용하여, 정공 수송층 위에 스핀 코트법에 의해 75nm의 두께로 성막하고, 질소 가스 분위기 하에서, 130℃, 10분간 가열시킴으로써 발광층을 형성했다.

[0822] 또한, 투입의 양으로부터 구한 이론값으로는, C^I 은 4.50질량ppm이고, C^H 는 0질량ppm이고, W^I 은 0.25이고, W^H 는 0.75이고, $C^I W^I + C^H W^H$ 는 1.13질량ppm이다.

[0823] (발광 소자의 평가)

[0824] 발광 소자 D3에 전압을 인가함으로써 EL 발광이 관측되었다. 100cd/m²에서의 발광 효율은 8.07[lm/W], CIE 색도 좌표(x,y)는 (0.19,0.43)이었다. 1000cd/m²에서의 CIE 색도 좌표(x,y)는 (0.19,0.43)이었다. 5000cd/m²에서의 CIE 색도 좌표(x,y)는 (0.19,0.42)였다. 초기 휘도가 1000cd/m²가 되도록 전류값을 설정한 후, 정전류로 구동시켜서, 휘도가 초기 휘도의 95%가 될 때까지의 시간을 측정하면, 41시간이었다. 초기 휘도가 5000cd/m²가 되도록 전류값을 설정한 후, 정전류로 구동시켜서, 휘도가 초기 휘도의 50%가 될 때까지의 시간을 측정하면, 24.8시간이었다. 결과를 표 5에 나타낸다.

[0825] <실시에 D4> 발광 소자 D4의 제작 및 평가

[0826] (발광 소자 D4의 제작)

[0827] 실시예 D1에 있어서의 (발광층의 형성 D1)을, 하기 (발광층의 형성 D4)로 변경한 것 이외에는, 실시예 D1과 마찬가지로 하여, 발광 소자 D4를 제작했다.

[0828] (발광층의 형성 D4)

[0829] 톨루엔(간또 가가꾸사 제조: 전자 공업용(EL 그레이드))에, 화합물 HM-1 및 인광 발광성 화합물 MC2(화합물 HM-1/인광 발광성 화합물 MC2=75질량%/25질량%)를 2.0질량%의 농도로 용해시켰다. 얻어진 톨루엔 용액을 사용하여, 정공 수송층 위에 스핀 코트법에 의해 75nm의 두께로 성막하고, 질소 가스 분위기 하에서, 130℃, 10분간 가열시킴으로써 발광층을 형성했다.

[0830] 또한, 투입의 양으로부터 구한 이론값으로는, C^I 은 9.00질량ppm이고, C^H 는 0질량ppm이고, W^I 은 0.25이고, W^H 는 0.75이고, $C^I W^I + C^H W^H$ 는 2.25질량ppm이다.

[0831] (발광 소자의 평가)

[0832] 발광 소자 D4에 전압을 인가함으로써 EL 발광이 관측되었다. 100cd/m²에서의 발광 효율은 8.48[lm/W], CIE 색도 좌표(x,y)는 (0.20,0.44)였다. 1000cd/m²에서의 CIE 색도 좌표(x,y)는 (0.20,0.44)였다. 5000cd/m²에서의 CIE 색도 좌표(x,y)는 (0.19,0.41)이었다. 초기 휘도가 1000cd/m²가 되도록 전류값을 설정한 후, 정전류로 구동시켜서, 휘도가 초기 휘도의 95%가 될 때까지의 시간을 측정하면, 18시간이었다. 초기 휘도가 5000cd/m²가 되도록 전류값을 설정한 후, 정전류로 구동시켜서, 휘도가 초기 휘도의 50%가 될 때까지의 시간을 측정하면, 24.4시간이었다. 결과를 표 5에 나타낸다.

[0833] <실시에 D5> 발광 소자 D5의 제작 및 평가

[0834] (발광 소자 D5의 제작)

[0835] 실시예 D1에 있어서의 (발광층의 형성 D1)을, 하기 (발광층의 형성 D5)로 변경한 것 이외에는, 실시예 D1과 마찬가지로 하여, 발광 소자 D5를 제작했다.

[0836] (발광층의 형성 D5)

[0837] 톨루엔(간도 가가꾸사 제조: 전자 공업용(EL 그레이트))에, 화합물 HM-1, 인광 발광성 화합물 MC2 및 인광 발광성 화합물 MC1(화합물 HM-1/인광 발광성 화합물 MC2/인광 발광성 화합물 MC1=75질량%/12.5질량%/12.5질량%)을 2.0질량%의 농도로 용해시켰다. 얻어진 톨루엔 용액을 사용하여, 정공 수송층 위에 스핀 코팅법에 의해 75nm의 두께로 성막하고, 질소 가스 분위기 하에서, 130℃, 10분간 가열시킴으로써 발광층을 형성했다.

[0838] 또한, 투입의 양으로부터 구한 이론값으로는, C^I 는 12.5질량ppm이고, C^H 는 0질량ppm이고, W^I 는 0.25이고, W^H 는 0.75이고, $C^I W^I + C^H W^H$ 는 3.13질량ppm이다.

[0839] (발광 소자의 평가)

[0840] 발광 소자 D5에 전압을 인가함으로써 EL 발광이 관측되었다. 100cd/m²에서의 발광 효율은 6.34[lm/W], CIE 색도 좌표(x,y)는 (0.19,0.42)였다. 1000cd/m²에서의 CIE 색도 좌표(x,y)는 (0.19,0.43)이었다. 5000cd/m²에서의 CIE 색도 좌표(x,y)는 (0.19,0.41)이었다. 초기 휘도가 1000cd/m²가 되도록 전류값을 설정한 후, 정전류로 구동시켜서, 휘도가 초기 휘도의 95%가 될 때까지의 시간을 측정한바, 8.3시간이었다. 초기 휘도가 5000cd/m²가 되도록 전류값을 설정한 후, 정전류로 구동시켜서, 휘도가 초기 휘도의 50%가 될 때까지의 시간을 측정한바, 24.0시간이었다. 결과를 표 5에 나타낸다.

[0841] <비교예 CD1> 발광 소자 CD1의 제작 및 평가

[0842] (발광 소자 CD1의 제작)

[0843] 실시예 D1에 있어서의 (발광층의 형성 D1)을, 하기 (발광층의 형성 CD1)로 변경한 것 이외에는, 실시예 D1과 마찬가지로 하여, 발광 소자 CD1을 제작했다.

[0844] (발광층의 형성 CD1)

[0845] 톨루엔(간도 가가꾸사 제조: 전자 공업용(EL 그레이트))에, 화합물 HM-1 및 인광 발광성 화합물 MC1(화합물 HM-1/인광 발광성 화합물 MC1=75질량%/25질량%)을 2.0질량%의 농도로 용해시켰다. 얻어진 톨루엔 용액을 사용하여, 정공 수송층 위에 스핀 코팅법에 의해 75nm의 두께로 성막하고, 질소 가스 분위기 하에서, 130℃, 10분간 가열시킴으로써 발광층을 형성했다.

[0846] 또한, 투입의 양으로부터 구한 이론값으로는, C^I 는 16.0질량ppm이고, C^H 는 0질량ppm이고, W^I 는 0.25이고, W^H 는 0.75이고, $C^I W^I + C^H W^H$ 는 4.00질량ppm이다.

[0847] (발광 소자의 평가)

[0848] 발광 소자 CD1에 전압을 인가함으로써 EL 발광이 관측되었다. 100cd/m²에서의 발광 효율은 6.33[lm/W], CIE 색도 좌표(x,y)는 (0.19,0.41)이었다. 1000cd/m²에서의 CIE 색도 좌표(x,y)는 (0.20,0.43)이었다. 5000cd/m²에서의 CIE 색도 좌표(x,y)는 (0.19,0.41)이었다. 초기 휘도가 1000cd/m²가 되도록 전류값을 설정한 후, 정전류로 구동시켜서, 휘도가 초기 휘도의 95%가 될 때까지의 시간을 측정한바, 5.3시간이었다. 초기 휘도가 5000cd/m²가 되도록 전류값을 설정한 후, 정전류로 구동시켜서, 휘도가 초기 휘도의 50%가 될 때까지의 시간을 측정한바, 26.3시간이었다. 결과를 표 5에 나타낸다.

표 5

	발광 소자	발광층				LT95 (시간)	LT50 (시간)	발광 효율 [lm/W]
		재료	재료비 (중량%)	C^I (ppm)	$C^I W^I + C^H W^H$ (ppm)			
실시예 D1	D1	HM-1/MC3	75/25	0	0	229	25.3	4.98
실시예 D2	D2	HM-1/MC3/MC2	75/22.5/2.5	0.90	0.23	124	24.5	7.60
실시예 D3	D3	HM-1/MC3/MC2	75/12.5/12.5	4.50	1.13	41	24.8	8.07
실시예 D4	D4	HM-1/MC2	75/25	9.00	2.25	18	24.4	8.48
실시예 D5	D5	HM-1/MC2/MC1	75/12.5/12.5	12.5	3.13	8.3	24.0	6.34
비교예 CD1	CD1	HM-1/MC1	75/25	16.0	4.00	5.3	26.3	6.33

[0849]