



공개특허 10-2024-0094035

(19) 대한민국특허청(KR)
(12) 공개특허공보(A)(11) 공개번호 10-2024-0094035
(43) 공개일자 2024년06월24일

- (51) 국제특허분류(Int. Cl.)
C07D 409/10 (2006.01) *C07D 403/10* (2006.01)
C07D 405/10 (2006.01)
- (52) CPC특허분류
C07D 409/10 (2013.01)
C07D 403/10 (2013.01)
- (21) 출원번호 10-2024-7018576(분할)
- (22) 출원일자(국제) 2016년10월11일
심사청구일자 없음
- (62) 원출원 특허 10-2018-7013529
원출원일자(국제) 2016년10월11일
심사청구일자 2021년09월28일
- (85) 번역문제출일자 2024년06월03일
- (86) 국제출원번호 PCT/IB2016/056067
- (87) 국제공개번호 WO 2017/068457
국제공개일자 2017년04월27일
- (30) 우선권주장
JP-P-2015-209351 2015년10월23일 일본(JP)
- (71) 출원인
가부시키가이샤 한도오따이 에네루기 켄큐쇼
일본국 가나가와Kenkyujo
아쓰기시 하세 398
- (72) 발명자
카와카미 사치코
일본국 2430036 가나가와 아쓰기시 하세 398 가부
시키가이샤 한도오따이 에네루기 켄큐쇼 내
이시구로 요시미
일본국 2430036 가나가와 아쓰기시 하세 398 가부
시키가이샤 한도오따이 에네루기 켄큐쇼 내
(뒷면에 계속)
- (74) 대리인
황의만

전체 청구항 수 : 총 1 항

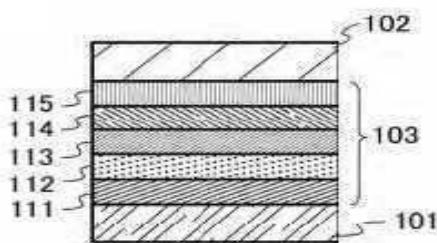
(54) 발명의 명칭 헤테로 고리 화합물, 발광 소자, 발광 장치, 전자 기기, 및 조명 장치

(57) 요 약

신규 헤�테로 고리 화합물을 제공한다. 특히, 발광 소자의 소자 특성을 향상시킬 수 있는 신규 헤�테로 고리 화합물을 제공한다. 발광 효율이 높으며 내열성이 높은 신규 발광 소자를 제공한다. 헤�테로 고리 화합물은 일반식 (G1)으로 나타내어진다. A는 다이벤조싸이오페닐기, 다이벤조퓨란일기, 및 카바졸릴기 중 어느 것을 나타낸다. DBq는 다이벤조[*f,h*]퀴녹살린일기를 나타낸다. 또한, n은 0 또는 1이다. Ar1 내지 Ar4는 각각 독립적으로 탄소 수 6 내지 10의 치환 또는 비치환의 아릴렌기를 나타낸다. Ar1 내지 Ar4에서, 인접한 아릴렌기들은 서로 결합하여 고리를 형성하여도 좋다. Ar1 내지 Ar4의 인접한 아릴렌기들이 플루오렌 골격을 형성하는 경우, 플루오렌 골격은 치환기를 가져도 좋다.

대 표 도

(A)



(52) CPC특허분류

C07D 405/10 (2013.01)

(72) 발명자

타카하시 타츠요시

일본국 2430036 가나가와 아쓰기시 하세 398 가부
시키가이샤 한도오따이 에네루기 켄큐쇼 내

하마다 타카오

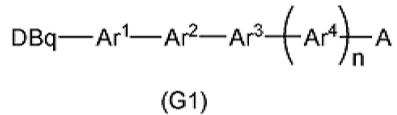
일본 933-0073 토야마켄 타카오카시 오기노 148-3

명세서

청구범위

청구항 1

일반식(G1)으로 나타내어지는 헤테로 고리 화합물로서,



A는 치환 또는 비치환의 다이벤조싸이오페닐기, 치환 또는 비치환의 다이벤조퓨란일기, 및 치환 또는 비치환의 카바졸릴기 중 어느 것을 나타내고,

DBq는 치환 또는 비치환의 다이벤조[*f,h*]퀴녹살린일기를 나타내고,

n은 0 또는 1이고,

Ar^1 내지 Ar^4 는 각각 독립적으로 탄소수 6 내지 10의 치환 또는 비치환의 아릴렌기를 나타내고,

Ar^1 내지 Ar^4 에서, 인접한 아릴렌기들은 서로 결합하여 고리를 형성하여도 좋고,

Ar^1 내지 Ar^4 의 상기 인접한 아릴렌기들이 플루오렌 골격을 형성하는 경우, 상기 플루오렌 골격은 치환기를 포함하여도 좋은, 헤테로 고리 화합물.

발명의 설명

기술분야

[0001]

본 발명의 일 형태는 물건, 방법, 및 제작 방법에 관한 것이다. 또한, 본 발명은 공정(process), 기계(machine), 제품(manufacture), 또는 조성물(composition of matter)에 관한 것이다. 특히, 본 발명의 일 형태는 반도체 장치, 발광 장치, 표시 장치, 조명 장치, 발광 소자, 또는 이들의 제작 방법에 관한 것이다. 또한, 본 발명의 일 형태는 헤테로 고리 화합물을 및 헤테로 고리 화합물의 신규 합성 방법에 관한 것이다. 또한, 본 발명의 일 형태는 상기 헤테로 고리 화합물을 포함하는 발광 소자, 발광 장치, 전자 기기, 및 조명 장치에 관한 것이다. 또한, 본 발명의 일 형태는 상술한 기술분야에 한정되지 않는다.

배경기술

[0002]

박형, 경량, 고속 응답, 및 저전압에서의 DC 구동 등의 특징을 갖는 유기 화합물을 발광체로서 사용하는 발광 소자는 차세대 평판 디스플레이에 적용될 것으로 기대되고 있다. 특히, 발광 소자들이 매트릭스로 배열된 표시 장치는 종래의 액정 표시 장치보다 시야각이 넓고 시인성(visibility)이 우수한 점에서 장점을 갖는 것으로 생각되고 있다.

[0003]

발광 소자의 발광 메커니즘은 다음과 같이 알려져 있다: 발광체를 포함하는 EL층을 개재(介在)한 한 쌍의 전극 사이에 전압이 인가되면, 음극으로부터 주입된 전자와 양극으로부터 주입된 정공이 EL층의 발광 중심에서 재결합되어 분자 여기자를 형성하고, 분자 여기자가 기저 상태로 완화될 때 에너지가 방출되어 광이 방출된다. 여기 상태로서는 단일향 여기 상태 및 삼중향 여기 상태가 알려져 있고, 여기 상태 중 어느 쪽을 통하여도 발광이 실현될 수 있다고 생각된다.

[0004]

이러한 발광 소자에서는 EL층에 주로 유기 화합물이 사용되고, 발광 소자의 특성 향상에 크게 영향을 미친다. 이러한 이유로, 다양한 신규 유기 화합물이 개발되고 있다(예를 들어, 특허문헌 1 참조).

선행기술문헌

특허문헌

[0005] (특허문헌 0001) 일본 공개특허공보 특개2007-189001호

발명의 내용

해결하려는 과제

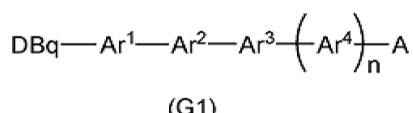
[0006] 특허문헌 1에서 보고되어 있는 다이벤조[*f,h*]퀴녹살린 고리를 갖는 화합물은 발광 소자에 사용되는 재료로서 유용하다. 그러나, 열 안정성이 더 높은 구조를 갖는 화합물이 요구되어 있다. 특히, 자동차용 발광 소자, 및 상기 발광 소자를 포함하는 발광 장치, 전자 기기, 및 조명 장치를 고려하는 경우, 발광 소자는 100°C 이상의 온도를 견디는 내열성을 갖는 것이 바람직하기 때문에, 발광 소자의 내열성을 높이는 것은 중요한 과제이다. 가능한 해결책은 분자량을 증가시킨 화합물을 사용하는 것이지만, 단순히 치환기 등을 변경하는 것에 의하여 분자량을 증가시킨 화합물은 굴절률도 증가된다. 발광 소자의 EL층에 이러한 화합물을 사용하는 경우, 광 추출 효율이 저하되어 발광 소자의 외부 양자 효율의 저하로 이어진다. 또한, 분자량의 증가에 의하여 내열성을 높이면 증착 또는 승화 정제에 의한 퇴적 시에 열분해가 일어나고 막 순도가 저하될 수 있다. 따라서, 화합물의 분자량을 단순히 증가시키는 것은, 화합물이 특허문헌 1에서 설명한 화합물보다 높은 안정성을 갖거나, 화합물을 포함하는 소자의 특성이 향상되는 것을 동시에 가능하게 하기 어려울 수도 있다.

[0007] 상술한 관점에서, 본 발명의 일 형태의 과제는 신규 혜테로 고리 화합물을 제공하는 것이다. 특히, 본 발명의 일 형태의 과제는 발광 소자의 소자 특성을 향상시킬 수 있는 신규 혜테로 고리 화합물을 제공하는 것이다. 본 발명의 일 형태의 과제는 발광 효율이 높으며 내열성이 높은 신규 발광 소자를 제공하는 것이다. 본 발명의 일 형태의 과제는 발광 소자에 사용할 수 있는 신규 혜테로 고리 화합물을 제공하는 것이다. 본 발명의 일 형태의 과제는 발광 소자의 EL층에 사용할 수 있는 신규 혜테로 고리 화합물을 제공하는 것이다. 본 발명의 일 형태의 과제는 신규 발광 소자를 제공하는 것이다. 본 발명의 일 형태의 과제는 신규 발광 장치, 신규 전자 기기, 또는 신규 조명 장치를 제공하는 것이다. 또한, 이들 과제의 기재는 다른 과제의 존재를 방해하지 않는다. 본 발명의 일 형태에서, 이들 과제 모두를 달성할 필요는 없다. 다른 과제는 명세서, 도면, 및 청구항 등의 기재로부터 명백해질 것이며 추출할 수 있는 것이다.

과제의 해결 수단

[0008] 본 발명의 일 형태는 일반식(G1)으로 나타내어지는 혜테로 고리 화합물이다.

[0009] [화학식 1]



[0010] 식에서, A는 치환 또는 비치환의 다이벤조사이오페닐기, 치환 또는 비치환의 다이벤조퓨란일기, 및 치환 또는 비치환의 카바졸릴기 중 어느 것을 나타낸다. DBq는 치환 또는 비치환의 다이벤조[*f,h*]퀴녹살린일기를 나타낸다. 또한, n은 0 또는 1이다. Ar¹ 내지 Ar⁴는 각각 독립적으로, 탄소수 6 내지 10의 치환 또는 비치환의 아릴렌기를 나타낸다. Ar¹ 내지 Ar⁴에서, 인접한 아릴렌기들은 서로 결합하여 고리를 형성하여도 좋다. Ar¹ 내지 Ar⁴의 인접한 아릴렌기들이 플루오렌 골격을 형성하는 경우, 플루오렌 골격은 치환기를 가져도 좋다.

[0011] 본 발명의 다른 일 형태는 일반식(G2-1)으로 나타내어지는 혜테로 고리 화합물이다.

[0013]

[화학식 2]



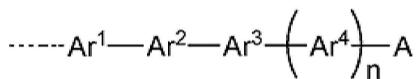
(G2-1)

[0014]

[0015] 식에서, R^{18} 내지 R^{20} 중 어느 하나는 일반식(G2-2)으로 나타내어지는 치환기를 나타낸다. R^{18} 내지 R^{20} 중 다른 2개 및 R^{11} 내지 R^{17} 은 각각 독립적으로 수소, 탄소수 1 내지 4의 알킬기, 또는 탄소수 6 내지 13의 치환 또는 비치환의 아릴기를 나타낸다.

[0016]

[화학식 3]



(G2-2)

[0017]

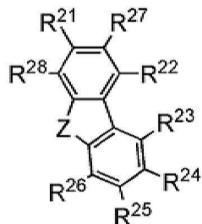
[0018] 식에서, A는 치환 또는 비치환의 다이벤조사이오페닐기, 치환 또는 비치환의 다이벤조퓨란일기, 및 치환 또는 비치환의 카바졸릴기 중 어느 것을 나타낸다. 또한, n은 0 또는 1이다. Ar^1 내지 Ar^4 는 각각 독립적으로 탄소수 6 내지 10의 치환 또는 비치환의 아릴렌기를 나타낸다. Ar^1 내지 Ar^4 에서, 인접한 아릴렌기들은 서로 결합하여 고리를 형성하여도 좋다. Ar^1 내지 Ar^4 의 인접한 아릴렌기들이 플루오렌 골격을 형성하는 경우, 플루오렌 골격은 치환기를 가져도 좋다.

[0019]

본 발명의 다른 일 형태는 일반식(G3-1)으로 나타내어지는 해태로 고리 화합물이다.

[0020]

[화학식 4]



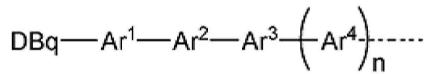
(G3-1)

[0021]

[0022] 식에서, R^{27} 및 R^{28} 중 어느 한쪽은 일반식(G3-2)으로 나타내어지는 치환기를 나타낸다. R^{27} 및 R^{28} 중 다른 쪽 및 R^{21} 내지 R^{26} 은 각각 독립적으로 수소, 탄소수 1 내지 4의 알킬기, 또는 탄소수 6 내지 13의 치환 또는 비치환의 아릴기를 나타낸다. Z는 산소, 황, 또는 질소를 나타낸다. Z가 질소를 나타내는 경우, 치환기가 Z위치에 결합되어도 좋고 결합되지 않아도 된다.

[0023]

[화학식 5]



(G3-2)

[0024]

식에서, DBq는 치환 또는 비치환의 다이벤조[*f,h*]퀴녹살린일기를 나타낸다. 또한, n은 0 또는 1이다. Ar^1 내지 Ar^4 는 각각 독립적으로 탄소수 6 내지 10의 치환 또는 비치환의 아릴렌기를 나타낸다. Ar^1 내지 Ar^4 에서, 인접한 아릴렌기들은 서로 결합하여 고리를 형성하여도 좋다. Ar^1 내지 Ar^4 의 인접한 아릴렌기들이 플루오렌 골격을 형성하는 경우, 플루오렌 골격은 치환기를 가져도 좋다.

[0026]

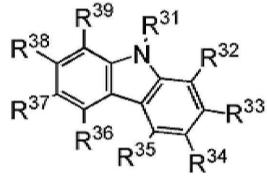
본 명세서에서, 일반식(G3-1)으로 나타내어지는 골격은, Z가 산소를 나타내는 경우에는 다이벤조퓨란 골격 또는 다이벤조퓨란일기라고 하고, Z가 황을 나타내는 경우에는 다이벤조싸이오페닐 골격 또는 다이벤조싸이오페닐기라고 하고, Z가 질소를 나타내는 경우에는 카바졸 골격 또는 카바졸릴기라고 한다.

[0027]

본 발명의 다른 일 형태는 일반식(G4-1)으로 나타내어지는 혼태로 고리 화합물이다.

[0028]

[화학식 6]



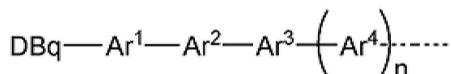
(G4-1)

[0029]

식에서, R^{31} , R^{33} , 및 R^{34} 중 어느 하나는 일반식(G4-2)으로 나타내어지는 치환기를 나타낸다. R^{31} , R^{33} , 및 R^{34} 중 일반식(G4-2)으로 나타내어지는 치환기가 결합되지 않는 다른 2개, R^{32} , 및 R^{35} 내지 R^{39} 는 각각 독립적으로 수소, 탄소수 1 내지 4의 알킬기, 또는 탄소수 6 내지 13의 치환 또는 비치환의 아릴기를 나타낸다.

[0031]

[화학식 7]



(G4-2)

[0032]

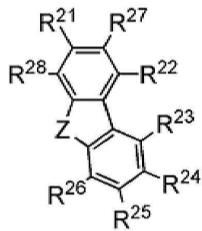
식에서, DBq는 치환 또는 비치환의 다이벤조[*f,h*]퀴녹살린일기를 나타낸다. 또한, n은 0 또는 1이다. Ar^1 내지 Ar^4 는 각각 독립적으로 탄소수 6 내지 10의 치환 또는 비치환의 아릴렌기를 나타낸다. Ar^1 내지 Ar^4 에서, 인접한 아릴렌기들은 서로 결합하여 고리를 형성하여도 좋다. Ar^1 내지 Ar^4 의 인접한 아릴렌기들이 플루오렌 골격을 형성하는 경우, 플루오렌 골격은 치환기를 가져도 좋다.

[0034]

본 발명의 다른 일 형태는 일반식(G5-1)으로 나타내어지는 혼태로 고리 화합물이다.

[0035]

[화학식 8]



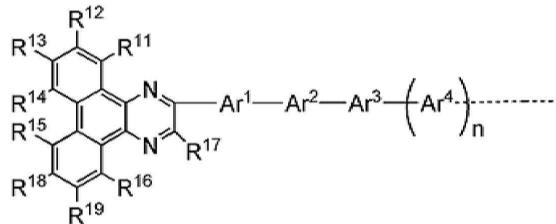
(G5-1)

[0036]

[0037] 식에서, R²⁷ 및 R²⁸ 중 어느 한쪽은 일반식(G5-2)으로 나타내어지는 치환기를 나타낸다. R²⁷ 및 R²⁸ 중 다른 쪽 및 R²¹ 내지 R²⁶은 각각 독립적으로 수소, 탄소수 1 내지 4의 알킬기, 또는 탄소수 6 내지 13의 치환 또는 비치환의 아릴기를 나타낸다. Z는 산소, 황, 또는 질소를 나타낸다. Z가 질소를 나타내는 경우, 치환기가 Z위치에 결합되어도 좋고 결합되지 않아도 된다.

[0038]

[화학식 9]



(G5-2)

[0039]

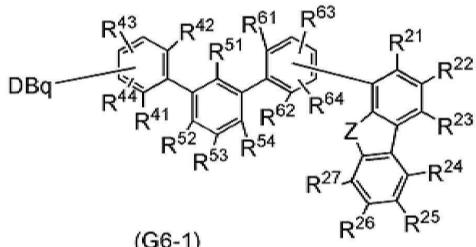
[0040] 식에서, R¹¹ 내지 R¹⁹은 각각 독립적으로 수소, 탄소수 1 내지 4의 알킬기, 또는 탄소수 6 내지 13의 치환 또는 비치환의 아릴기를 나타낸다. 또한, n은 0 또는 1이다. Ar¹, Ar², Ar³, 및 Ar⁴은 각각 독립적으로 탄소수 6 내지 10의 치환 또는 비치환의 아릴렌기를 나타낸다. Ar¹ 내지 Ar⁴에서, 인접한 아릴렌기들은 서로 결합하여 고리를 형성하여도 좋다. Ar¹ 내지 Ar⁴의 인접한 아릴렌기들이 플루오렌 골격을 형성하는 경우, 플루오렌 골격은 치환기를 가져도 좋다.

[0041]

본 발명의 다른 일 형태는 일반식(G6-1)으로 나타내어지는 헤테로 고리 화합물이다.

[0042]

[화학식 10]



(G6-1)

[0043]

[0044] 식에서, DBq는 치환 또는 비치환의 다이벤조[f,h]퀴녹살린일기를 나타낸다. Z는 산소 또는 황을 나타낸다. R²¹ 내지 R²⁷, R⁴¹ 내지 R⁴⁴, R⁵¹ 내지 R⁵⁴, 및 R⁶¹ 내지 R⁶⁴은 각각 독립적으로 수소, 탄소수 1 내지 4의 알킬기, 또는 탄소수 6 내지 13의 치환 또는 비치환의 아릴기를 나타낸다.

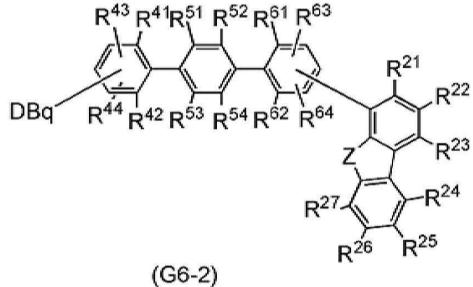
[0045]

본 발명의 다른 일 형태는 DBq의 치환 위치가 메타 위치인, 일반식(G6-1)으로 나타내어지는 헤테로 고리 화합물이다.

[0046] 본 발명의 다른 일 형태는, DBq의 치환 위치가 메타 위치이고 다이벤조싸이오페닐기 또는 다이벤조퓨란일기의 치환 위치가 파라 위치인, 일반식(G6-1)으로 나타내어지는 혼합로 고리 화합물이다.

[0047] 본 발명의 다른 일 형태는 일반식(G6-2)으로 나타내어지는 혼합로 고리 화합물이다.

[0048] [화학식 11]

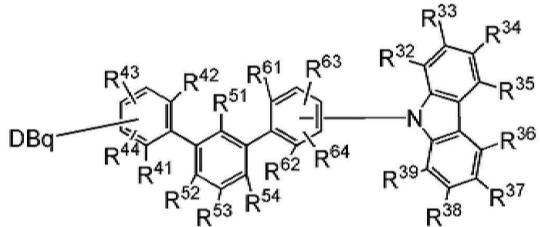


[0049]

[0050] 식에서, DBq는 치환 또는 비치환의 다이벤조[*f,h*]퀴녹살린일기를 나타낸다. Z는 산소 또는 황을 나타낸다. R²¹ 내지 R²⁷, R⁴¹ 내지 R⁴⁴, R⁵¹ 내지 R⁵⁴, 및 R⁶¹ 내지 R⁶⁴는 각각 독립적으로 수소, 탄소수 1 내지 4의 알킬기, 또는 탄소수 6 내지 13의 치환 또는 비치환의 아릴기를 나타낸다.

[0051] 본 발명의 다른 일 형태는 일반식(G6-3)으로 나타내어지는 혼합로 고리 화합물이다.

[0052] [화학식 12]



[0053]

[0054] 식에서, DBq는 치환 또는 비치환의 다이벤조[*f,h*]퀴녹살린일기를 나타낸다. R³² 내지 R³⁹, R⁴¹ 내지 R⁴⁴, R⁵¹ 내지 R⁵⁴, 및 R⁶¹ 내지 R⁶⁴는 각각 독립적으로 수소, 탄소수 1 내지 4의 알킬기, 또는 탄소수 6 내지 13의 치환 또는 비치환의 아릴기를 나타낸다.

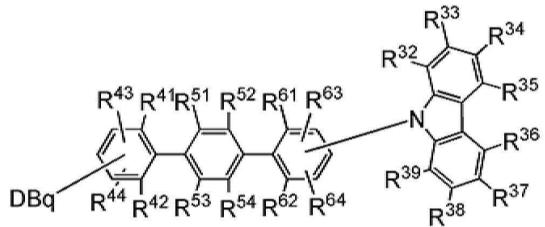
[0055] 본 발명의 다른 일 형태는 DBq의 치환 위치가 메타 위치인, 일반식(G6-3)으로 나타내어지는 혼합로 고리 화합물이다.

[0056] 본 발명의 다른 일 형태는, DBq의 치환 위치가 메타 위치이고 카바졸릴기의 치환 위치가 파라 위치인, 일반식(G6-3)으로 나타내어지는 혼합로 고리 화합물이다.

[0057] 본 발명의 다른 일 형태는 일반식(G6-4)으로 나타내어지는 혼합로 고리 화합물이다.

[0058]

[화학식 13]



(G6-4)

[0059]

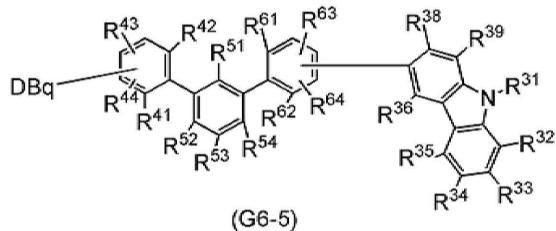
식에서, DBq는 치환 또는 비치환의 다이벤조[*f,h*]퀴녹살린일기를 나타낸다. R^{32} 내지 R^{39} , R^{41} 내지 R^{44} , R^{51} 내지 R^{54} , 및 R^{61} 내지 R^{64} 는 각각 독립적으로 수소, 탄소수 1 내지 4의 알킬기, 또는 탄소수 6 내지 13의 치환 또는 비치환의 아릴기를 나타낸다.

[0060]

본 발명의 다른 일 형태는 일반식(G6-5)으로 나타내어지는 혼합으로 고리 화합물이다.

[0061]

[화학식 14]



(G6-5)

[0062]

식에서, DBq는 치환 또는 비치환의 다이벤조[*f,h*]퀴녹살린일기를 나타낸다. R^{31} 은 탄소수 1 내지 4의 알킬기 또는 탄소수 6 내지 13의 치환 또는 비치환의 아릴기를 나타낸다. R^{32} 내지 R^{36} , R^{38} , R^{39} , R^{41} 내지 R^{44} , R^{51} 내지 R^{54} , 및 R^{61} 내지 R^{64} 는 각각 독립적으로 수소, 탄소수 1 내지 4의 알킬기, 또는 탄소수 6 내지 13의 치환 또는 비치환의 아릴기를 나타낸다.

[0063]

본 발명의 다른 일 형태는 DBq의 치환 위치가 메타 위치인, 일반식(G6-5)으로 나타내어지는 혼합으로 고리 화합물이다.

[0064]

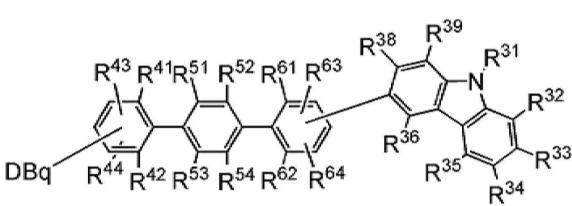
본 발명의 다른 일 형태는, DBq의 치환 위치가 메타 위치이고 카바졸릴기의 치환 위치가 파라 위치인, 일반식(G6-5)으로 나타내어지는 혼합으로 고리 화합물이다.

[0065]

본 발명의 다른 일 형태는 일반식(G6-6)으로 나타내어지는 혼합으로 고리 화합물이다.

[0066]

[화학식 15]



(G6-6)

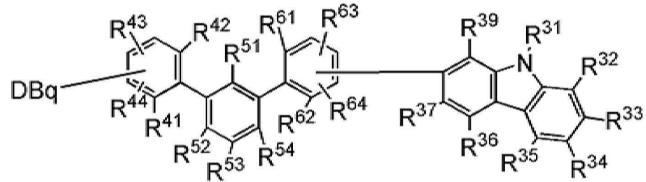
[0067]

식에서, DBq는 치환 또는 비치환의 다이벤조[*f,h*]퀴녹살린일기를 나타낸다. R^{31} 은 탄소수 1 내지 4의 알킬기 또는 탄소수 6 내지 13의 치환 또는 비치환의 아릴기를 나타낸다. R^{32} 내지 R^{36} , R^{38} , R^{39} , R^{41} 내지 R^{44} , R^{51} 내지 R^{54} , 및 R^{61} 내지 R^{64} 는 각각 독립적으로 수소, 탄소수 1 내지 4의 알킬기, 또는 탄소수 6 내지 13의 치환 또는

비치환의 아릴기를 나타낸다.

[0071] 본 발명의 다른 일 형태는 일반식(G6-7)으로 나타내어지는 혼합화합물이다.

[화학식 16]



(G6-7)

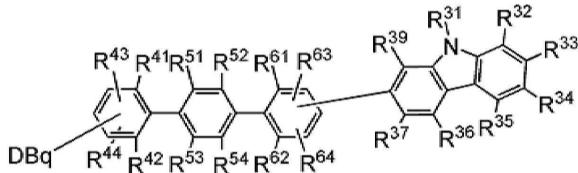
[0073] 식에서, DBq는 치환 또는 비치환의 다이벤조[*f,h*]퀴녹살린일기를 나타낸다. R^{31} 은 탄소수 1 내지 4의 알킬기 또는 탄소수 6 내지 13의 치환 또는 비치환의 아릴기를 나타낸다. R^{32} 내지 R^{37} , R^{39} , R^{41} 내지 R^{44} , R^{51} 내지 R^{54} , 및 R^{61} 내지 R^{64} 는 각각 독립적으로 수소, 탄소수 1 내지 4의 알킬기, 또는 탄소수 6 내지 13의 치환 또는 비치환의 아릴기를 나타낸다.

[0075] 본 발명의 다른 일 형태는 DBq의 치환 위치가 메타 위치인, 일반식(G6-7)으로 나타내어지는 혼합화합물이다.

[0076] 본 발명의 다른 일 형태는 DBq의 치환 위치가 메타 위치이고 카바졸릴기의 치환 위치가 파라 위치인, 일반식(G6-7)으로 나타내어지는 혼합화합물이다.

[0077] 본 발명의 다른 일 형태는 일반식(G6-8)으로 나타내어지는 혼합화합물이다.

[화학식 17]



(G6-8)

[0079]

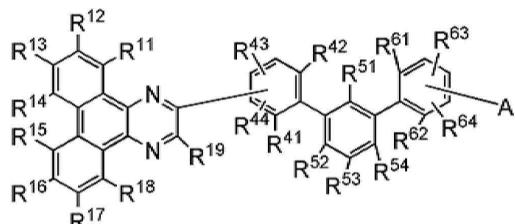
[0080] 식에서, DBq는 치환 또는 비치환의 다이벤조[*f,h*]퀴녹살린일기를 나타낸다. R^{31} 은 탄소수 1 내지 4의 알킬기 또는 탄소수 6 내지 13의 치환 또는 비치환의 아릴기를 나타낸다. R^{32} 내지 R^{37} , R^{39} , R^{41} 내지 R^{44} , R^{51} 내지 R^{54} , 및 R^{61} 내지 R^{64} 는 각각 독립적으로 수소, 탄소수 1 내지 4의 알킬기, 또는 탄소수 6 내지 13의 치환 또는 비치환의 아릴기를 나타낸다.

[0081]

본 발명의 다른 일 형태는 일반식(G7-1)으로 나타내어지는 혼합화합물이다.

[0082]

[화학식 18]



(G7-1)

[0083]

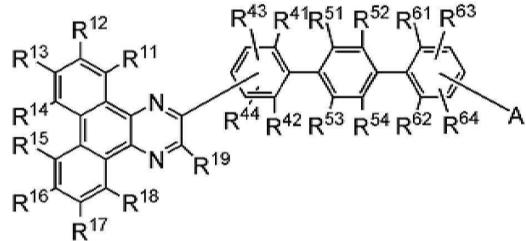
[0084] 식에서, A는 치환 또는 비치환의 다이벤조싸이오페닐기, 치환 또는 비치환의 다이벤조퓨란일기, 및 치환 또는 비치환의 카바졸릴기 중 어느 것을 나타낸다. R^{11} 내지 R^{19} , R^{41} 내지 R^{44} , R^{51} 내지 R^{54} , 및 R^{61} 내지 R^{64} 는 각각 독립적으로 수소, 탄소수 1 내지 4의 알킬기, 또는 탄소수 6 내지 13의 치환 또는 비치환의 아릴기를 나타낸다.

[0085] 본 발명의 다른 일 형태는 DBq의 치환 위치가 메타 위치인, 일반식(G7-1)으로 나타내어지는 혼합 고리 화합물이다.

[0086] 본 발명의 다른 일 형태는 DBq의 치환 위치가 메타 위치이고 A의 치환 위치가 파라 위치인, 일반식(G7-1)으로 나타내어지는 혼합 고리 화합물이다.

[0087] 본 발명의 다른 일 형태는 일반식(G7-2)으로 나타내어지는 혼합 고리 화합물이다.

[0088] [화학식 19]



(G7-2)

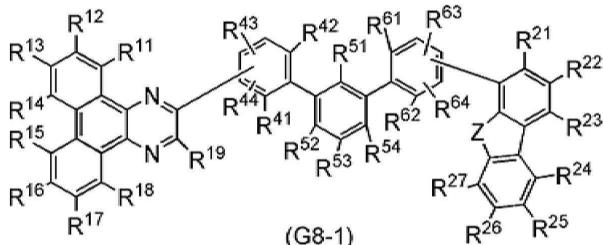
[0089]

[0090] 식에서, A는 치환 또는 비치환의 다이벤조싸이오페닐기, 치환 또는 비치환의 다이벤조퓨란일기, 및 치환 또는 비치환의 카바졸릴기 중 어느 것을 나타낸다. R^{11} 내지 R^{19} , R^{41} 내지 R^{44} , R^{51} 내지 R^{54} , 및 R^{61} 내지 R^{64} 는 각각 독립적으로 수소, 탄소수 1 내지 4의 알킬기, 또는 탄소수 6 내지 13의 치환 또는 비치환의 아릴기를 나타낸다.

[0091]

본 발명의 다른 일 형태는 일반식(G8-1)으로 나타내어지는 혼합 고리 화합물이다.

[0092] [화학식 20]



(G8-1)

[0093]

[0094] 식에서, Z는 산소 또는 황을 나타낸다. R^{11} 내지 R^{19} , R^{21} 내지 R^{27} , R^{41} 내지 R^{44} , R^{51} 내지 R^{54} , 및 R^{61} 내지 R^{64} 는 각각 독립적으로 수소, 탄소수 1 내지 4의 알킬기, 또는 탄소수 6 내지 13의 치환 또는 비치환의 아릴기를 나타낸다.

[0095]

본 발명의 다른 일 형태는 DBq의 치환 위치가 메타 위치인, 일반식(G8-1)으로 나타내어지는 혼합 고리 화합물이다.

[0096]

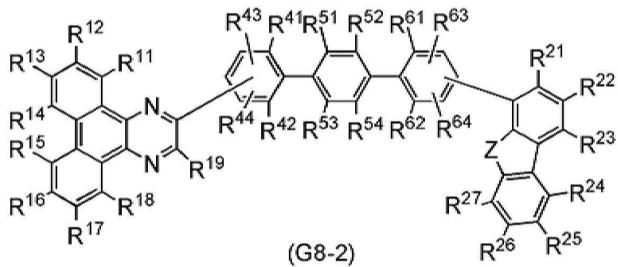
본 발명의 다른 일 형태는 DBq의 치환 위치가 메타 위치이고 다이벤조싸이오페닐기 또는 다이벤조퓨란일기의 치환 위치가 파라 위치인, 일반식(G8-1)으로 나타내어지는 혼합 고리 화합물이다.

[0097]

본 발명의 다른 일 형태는 일반식(G8-2)으로 나타내어지는 혼합 고리 화합물이다.

[0098]

[화학식 21]



[0099]

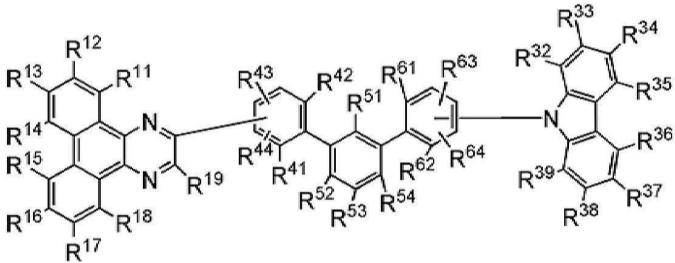
[0100] 식에서, Z는 산소 또는 황을 나타낸다. R^{11} 내지 R^{19} , R^{21} 내지 R^{27} , R^{41} 내지 R^{44} , R^{51} 내지 R^{54} , 및 R^{61} 내지 R^{64} 는 각각 독립적으로 수소, 탄소수 1 내지 4의 알킬기, 또는 탄소수 6 내지 13의 치환 또는 비치환의 아릴기를 나타낸다.

[0101]

본 발명의 다른 일 형태는 일반식(G8-3)으로 나타내어지는 헤테로 고리 화합물이다.

[0102]

[화학식 22]



[0103]

[0104] 식에서, R^{11} 내지 R^{19} , R^{32} 내지 R^{39} , R^{41} 내지 R^{44} , R^{51} 내지 R^{54} , 및 R^{61} 내지 R^{64} 는 각각 독립적으로 수소, 탄소수 1 내지 4의 알킬기, 또는 탄소수 6 내지 13의 치환 또는 비치환의 아릴기를 나타낸다.

[0105]

본 발명의 다른 일 형태는 DBq의 치환 위치가 메타 위치인, 일반식(G8-3)으로 나타내어지는 헤�테로 고리 화합물이다.

[0106]

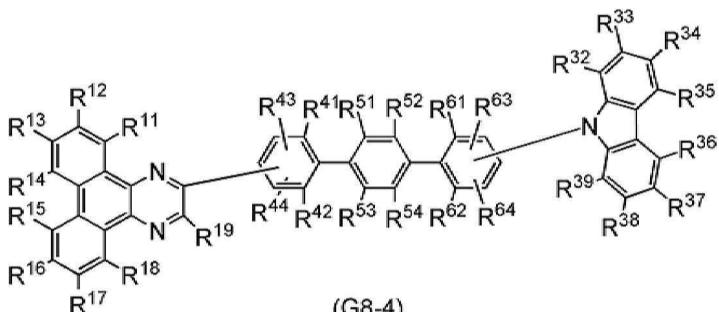
본 발명의 다른 일 형태는 DBq의 치환 위치가 메타 위치이고 카바졸릴기의 치환 위치가 파라 위치인, 일반식(G8-3)으로 나타내어지는 헤테로 고리 화합물이다.

[0107]

본 발명의 다른 일 형태는 일반식(G8-4)으로 나타내어지는 헤테로 고리 화합물이다.

[0108]

[화학식 23]



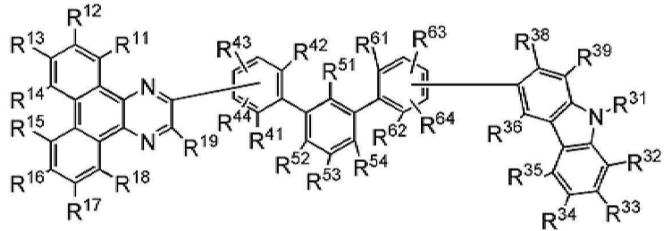
[0109]

[0110] 식에서, R^{11} 내지 R^{19} , R^{32} 내지 R^{39} , R^{41} 내지 R^{44} , R^{51} 내지 R^{54} , 및 R^{61} 내지 R^{64} 는 각각 독립적으로 수소, 탄소수

1 내지 4의 알킬기, 또는 탄소수 6 내지 13의 치환 또는 비치환의 아릴기를 나타낸다.

[0111] 본 발명의 다른 일 형태는 일반식(G8-5)으로 나타내어지는 혼합 고리 화합물이다.

[화학식 24]



(G8-5)

[0113]

[0114] 식에서, R^{11} 내지 R^{19} , R^{32} 내지 R^{36} , R^{38} , R^{39} , R^{41} 내지 R^{44} , R^{51} 내지 R^{54} , 및 R^{61} 내지 R^{64} 는 각각 독립적으로 수소, 탄소수 1 내지 4의 알킬기, 또는 탄소수 6 내지 13의 치환 또는 비치환의 아릴기를 나타낸다. R^{31} 은 탄소수 1 내지 4의 알킬기 또는 탄소수 6 내지 13의 치환 또는 비치환의 아릴기를 나타낸다.

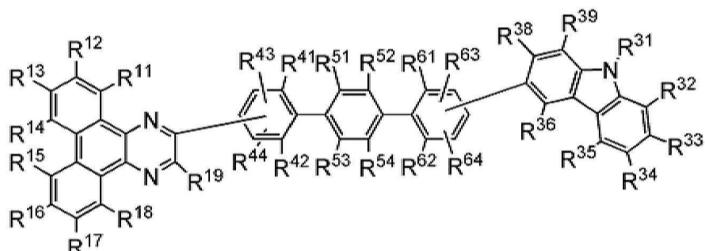
[0115]

본 발명의 다른 일 형태는 DBq의 치환 위치가 메타 위치인, 일반식(G8-5)으로 나타내어지는 혼합 고리 화합물이다.

[0116] 본 발명의 다른 일 형태는 DBq의 치환 위치가 메타 위치이고 카바졸릴기의 치환 위치가 파라 위치인, 일반식(G8-5)으로 나타내어지는 혼합 고리 화합물이다.

[0117] 본 발명의 다른 일 형태는 일반식(G8-6)으로 나타내어지는 혼합 고리 화합물이다.

[화학식 25]



(G8-6)

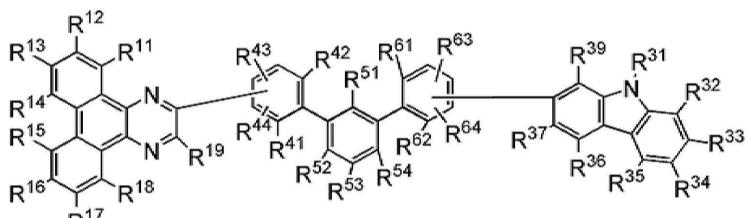
[0119]

[0120] 식에서, R^{11} 내지 R^{19} , R^{32} 내지 R^{36} , R^{38} , R^{39} , R^{41} 내지 R^{44} , R^{51} 내지 R^{54} , 및 R^{61} 내지 R^{64} 는 각각 독립적으로 수소, 탄소수 1 내지 4의 알킬기, 또는 탄소수 6 내지 13의 치환 또는 비치환의 아릴기를 나타낸다. R^{31} 은 탄소수 1 내지 4의 알킬기 또는 탄소수 6 내지 13의 치환 또는 비치환의 아릴기를 나타낸다.

[0121]

본 발명의 다른 일 형태는 일반식(G8-7)으로 나타내어지는 혼합 고리 화합물이다.

[화학식 26]



(G8-7)

[0123]

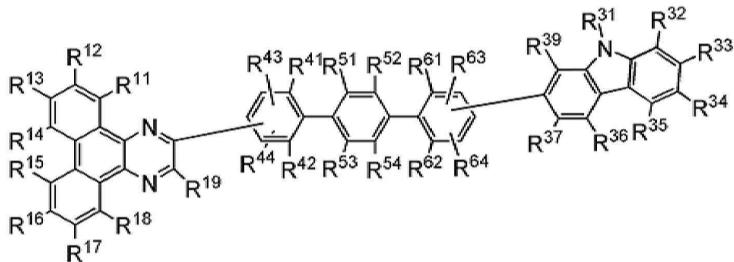
[0124] 식에서, R¹¹ 내지 R¹⁹, R³² 내지 R³⁷, R³⁹, R⁴¹ 내지 R⁴⁴, R⁵¹ 내지 R⁵⁴, 및 R⁶¹ 내지 R⁶⁴는 각각 독립적으로 수소, 탄소수 1 내지 4의 알킬기, 또는 탄소수 6 내지 13의 치환 또는 비치환의 아릴기를 나타낸다. R³¹은 탄소수 1 내지 4의 알킬기 또는 탄소수 6 내지 13의 치환 또는 비치환의 아릴기를 나타낸다.

[0125] 본 발명의 다른 일 형태는 DBq의 치환 위치가 메타 위치인, 일반식(G8-7)으로 나타내어지는 혼합로 고리 화합물이다.

[0126] 본 발명의 다른 일 형태는 DBq의 치환 위치가 메타 위치이고 카바졸릴기의 치환 위치가 파라 위치인, 일반식(G8-7)으로 나타내어지는 혼합로 고리 화합물이다.

[0127] 본 발명의 다른 일 형태는 일반식(G8-8)으로 나타내어지는 혼합로 고리 화합물이다.

[0128] [화학식 27]

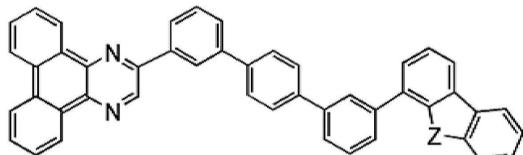


[0129]

[0130] 식에서, R¹¹ 내지 R¹⁹, R³² 내지 R³⁷, R³⁹, R⁴¹ 내지 R⁴⁴, R⁵¹ 내지 R⁵⁴, 및 R⁶¹ 내지 R⁶⁴는 각각 독립적으로 수소, 탄소수 1 내지 4의 알킬기, 또는 탄소수 6 내지 13의 치환 또는 비치환의 아릴기를 나타낸다. R³¹은 탄소수 1 내지 4의 알킬기 또는 탄소수 6 내지 13의 치환 또는 비치환의 아릴기를 나타낸다.

[0131] 본 발명의 다른 일 형태는 일반식(G9-1)으로 나타내어지는 혼합로 고리 화합물이다.

[0132] [화학식 28]



(G9-1)

[0133]

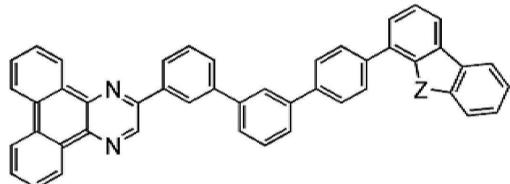
식에서, Z는 산소 또는 황을 나타낸다.

[0135]

본 발명의 다른 일 형태는 일반식(G9-2)으로 나타내어지는 혼합로 고리 화합물이다.

[0136]

[화학식 29]



(G9-2)

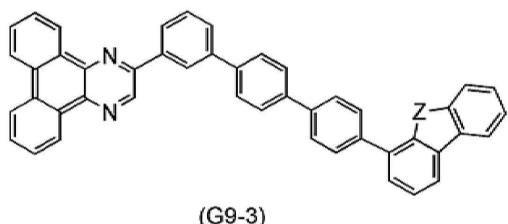
[0137]

식에서, Z는 산소 또는 황을 나타낸다.

[0139]

본 발명의 다른 일 형태는 일반식(G9-3)으로 나타내어지는 혼합로 고리 화합물이다.

[0140] [화학식 30]

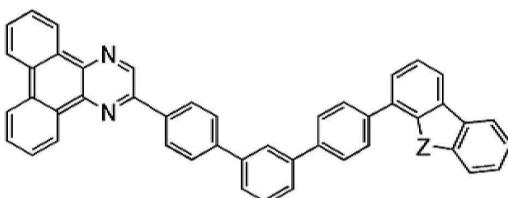


[0141]

[0142] 식에서, Z는 산소 또는 황을 나타낸다.

[0143] 본 발명의 다른 일 형태는 일반식(G9-4)으로 나타내어지는 혼테로 고리 화합물이다.

[0144] [화학식 31]



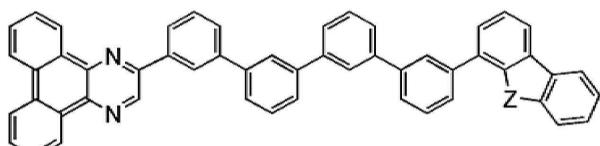
(G9-4)

[0145]

[0146] 식에서, Z는 산소 또는 황을 나타낸다.

[0147] 본 발명의 다른 일 형태는 일반식(G9-5)으로 나타내어지는 혼테로 고리 화합물이다.

[0148] [화학식 32]



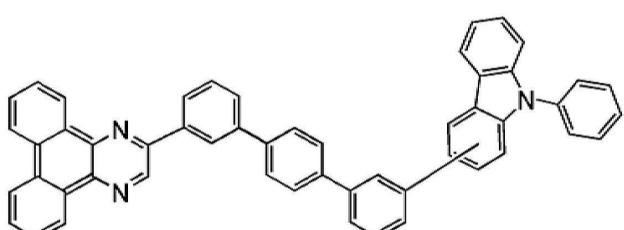
(G9-5)

[0149]

[0150] 식에서, Z는 산소 또는 황을 나타낸다.

[0151] 본 발명의 다른 일 형태는 일반식(G10-1)으로 나타내어지는 혼테로 고리 화합물이다.

[0152] [화학식 33]

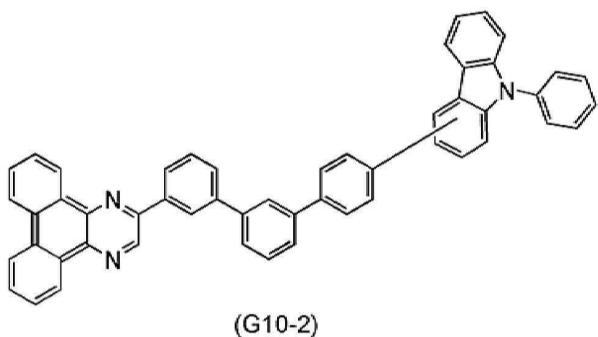


[0153]

[0154] 본 발명의 다른 일 형태는 일반식(G10-2)으로 나타내어지는 혼테로 고리 화합물이다.

[0155]

[화학식 34]



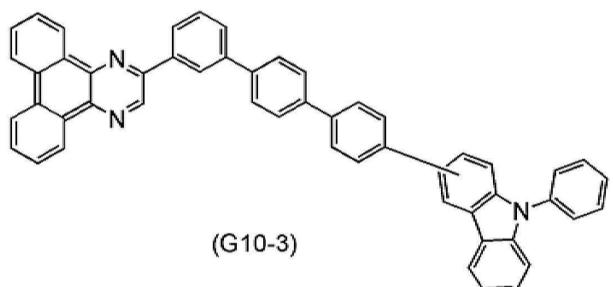
[0156]

[0157]

본 발명의 다른 일 형태는 일반식(G10-3)으로 나타내어지는 혼합 고리 화합물이다.

[0158]

[화학식 35]



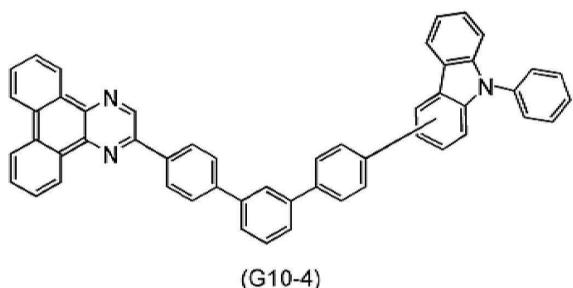
[0159]

[0160]

본 발명의 다른 일 형태는 일반식(G10-4)으로 나타내어지는 혼합 고리 화합물이다.

[0161]

[화학식 36]



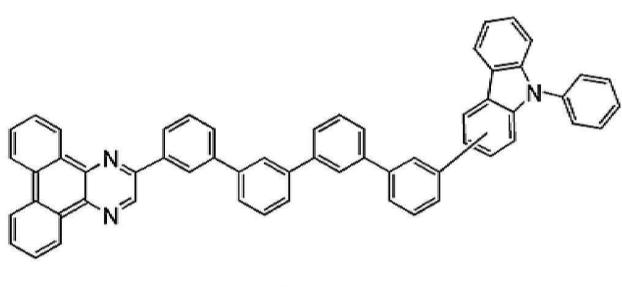
[0162]

[0163]

본 발명의 다른 일 형태는 일반식(G10-5)으로 나타내어지는 혼합 고리 화합물이다.

[0164]

[화학식 37]



[0165]

[0166]

본 발명의 다른 일 형태는 다이벤조[*f,h*]퀴노신 고리와 정공 수송 골격이 터페닐렌기를 통하여 결합되는 화합

물을 포함하는 발광 소자이다.

[0167] 본 발명의 다른 일 형태는 발광층에, 발광 재료, 및 다이벤조[*f,h*]퀴녹살린 고리와 정공 수송 골격이 터페닐렌 기를 통하여 결합되는 화합물을 포함하는 발광 소자이다.

[0168] 본 발명의 다른 일 형태의 발광 소자에서, 정공 수송 골격은 π 전자 과잉형 혜테로 방향족 고리를 포함하여도 좋다.

[0169] 본 발명의 다른 일 형태의 발광 소자에서, π 전자 과잉형 혜테로 방향족 고리는 카바졸 고리, 다이벤조퓨란 고리, 또는 다이벤조싸이오펜 고리이어도 좋다.

[0170] 본 발명의 다른 일 형태는 본 발명의 일 형태의 혜테로 고리 화합물, 및 전극을 포함하는 발광 소자이다.

[0171] 본 발명의 다른 일 형태는, 발광 물질 및 본 발명의 일 형태의 혜테로 고리 화합물을 발광층에 포함하는 발광 소자이다.

[0172] 본 발명의 다른 일 형태는 본 발명의 일 형태의 발광 소자를 포함하는 발광부, 및 기판을 포함하는 발광 장치이다.

[0173] 본 발명의 다른 일 형태는 본 발명의 일 형태의 발광 장치를 포함하는 표시부, 및 안테나, 배터리, 하우징, 스피커, 마이크로폰, 또는 조작 키를 포함하는 전자 기기이다.

[0174] 본 발명의 다른 일 형태는 본 발명의 일 형태의 발광 장치, 및 하우징, 접속 단자, 또는 보호 커버를 포함하는 조명 장치이다.

발명의 효과

[0175] 본 발명의 일 형태에 의하여, 신규 혜테로 고리 화합물을 제공할 수 있다. 특히, 발광 소자의 소자 특성을 향상시킬 수 있는 신규 혜테로 고리 화합물을 제공할 수 있다. 본 발명의 일 형태에 의하여, 발광 효율이 높으며 내열성이 높은 신규 발광 소자를 제공할 수 있다. 본 발명의 일 형태에 의하여, 발광 소자에 사용할 수 있는 신규 혜테로 고리 화합물을 제공할 수 있다. 본 발명의 일 형태에 의하여, 발광 소자의 EL층에 사용할 수 있는 신규 혜테로 고리 화합물을 제공할 수 있다. 본 발명의 일 형태에 의하여, 신규 발광 소자를 제공할 수 있다. 본 발명의 일 형태에 의하여, 신규 발광 장치, 신규 전자 기기, 또는 신규 조명 장치를 제공할 수 있다.

[0176] 또한, 이들 효과의 기재는 다른 효과의 존재를 방해하지 않는다. 본 발명의 일 형태에서 이들 효과 모두를 달성할 필요는 없다. 다른 효과는 명세서, 도면, 및 청구항 등의 기재로부터 명백해질 것이며 추출할 수 있는 것이다.

도면의 간단한 설명

[0177] 도 1의 (A) 및 (B)는 발광 소자의 개략도이다.

도 2의 (A) 및 (B)는 액티브 매트릭스 발광 장치의 개략도이다.

도 3의 (A) 및 (B)는 액티브 매트릭스 발광 장치들의 개략도이다.

도 4는 액티브 매트릭스 발광 장치의 개략도이다.

도 5의 (A) 및 (B)는 패시브 매트릭스 발광 장치의 개략도이다.

도 6의 (A) 내지 (D)는 전자 기기들을 도시한 것이다.

도 7은 광원 장치를 도시한 것이다.

도 8은 조명 장치를 도시한 것이다.

도 9는 조명 장치 및 전자 기기를 도시한 것이다.

도 10은 차량용 표시 장치 및 조명 장치를 도시한 것이다.

도 11의 (A) 및 (B)는 2mDBtTPDBq-II의 NMR 차트를 나타낸 것이다.

도 12는 2mDBtTPDBq-II의 용액의 흡수 스펙트럼을 나타낸 것이다.

- 도 13은 2mDBtTPDBq-II의 용액의 발광 스펙트럼을 나타낸 것이다.
- 도 14는 2mDBtTPDBq-II의 박막의 흡수 스펙트럼을 나타낸 것이다.
- 도 15는 2mDBtTPDBq-II의 박막의 발광 스펙트럼을 나타낸 것이다.
- 도 16은 2mDBtTPDBq-II의 인광 스펙트럼을 나타낸 것이다.
- 도 17의 (A) 및 (B)는 2DBtTPDBq의 NMR 차트를 나타낸 것이다.
- 도 18은 2DBtTPDBq의 용액의 흡수 스펙트럼을 나타낸 것이다.
- 도 19는 2DBtTPDBq의 용액의 발광 스펙트럼을 나타낸 것이다.
- 도 20은 2DBtTPDBq의 박막의 흡수 스펙트럼을 나타낸 것이다.
- 도 21은 2DBtTPDBq의 박막의 발광 스펙트럼을 나타낸 것이다.
- 도 22는 2DBtTPDBq의 인광 스펙트럼을 나타낸 것이다.
- 도 23의 (A) 및 (B)는 2DBtTPDBq-03의 NMR 차트를 나타낸 것이다.
- 도 24는 2DBtTPDBq-03의 용액의 흡수 스펙트럼을 나타낸 것이다.
- 도 25는 2DBtTPDBq-03의 용액의 발광 스펙트럼을 나타낸 것이다.
- 도 26은 2DBtTPDBq-03의 박막의 흡수 스펙트럼을 나타낸 것이다.
- 도 27은 2DBtTPDBq-03의 박막의 발광 스펙트럼을 나타낸 것이다.
- 도 28은 2DBtTPDBq-03의 인광 스펙트럼을 나타낸 것이다.
- 도 29의 (A) 및 (B)는 2DBtTPDBq-02의 NMR 차트를 나타낸 것이다.
- 도 30은 2DBtTPDBq-02의 용액의 흡수 스펙트럼을 나타낸 것이다.
- 도 31은 2DBtTPDBq-02의 용액의 발광 스펙트럼을 나타낸 것이다.
- 도 32는 2DBtTPDBq-02의 박막의 흡수 스펙트럼을 나타낸 것이다.
- 도 33은 2DBtTPDBq-02의 박막의 발광 스펙트럼을 나타낸 것이다.
- 도 34는 2DBtTPDBq-02의 인광 스펙트럼을 나타낸 것이다.
- 도 35의 (A) 및 (B)는 2DBtTPDBq-04의 NMR 차트를 나타낸 것이다.
- 도 36은 2DBtTPDBq-04의 용액의 흡수 스펙트럼을 나타낸 것이다.
- 도 37은 2DBtTPDBq-04의 용액의 발광 스펙트럼을 나타낸 것이다.
- 도 38은 2DBtTPDBq-04의 박막의 흡수 스펙트럼을 나타낸 것이다.
- 도 39는 2DBtTPDBq-04의 박막의 발광 스펙트럼을 나타낸 것이다.
- 도 40은 2DBtTPDBq-04의 인광 스펙트럼을 나타낸 것이다.
- 도 41의 (A) 및 (B)는 2mDBtQPDBq-II의 NMR 차트를 나타낸 것이다.
- 도 42는 2mDBtQPDBq-II의 박막의 흡수 스펙트럼을 나타낸 것이다.
- 도 43은 2mDBtQPDBq-II의 박막의 발광 스펙트럼을 나타낸 것이다.
- 도 44는 2mDBtQPDBq-II의 인광 스펙트럼을 나타낸 것이다.
- 도 45의 (A) 및 (B)는 3-(3'-클로로-1,1'-바이페닐-4-일)-9-페닐-9H-카바졸의 NMR 차트를 나타낸 것이다.
- 도 46의 (A) 및 (B)는 2mmpPCTPDBq의 NMR 차트를 나타낸 것이다.
- 도 47은 2mmpPCTPDBq의 용액의 흡수 스펙트럼을 나타낸 것이다.
- 도 48은 2mmpPCTPDBq의 용액의 발광 스펙트럼을 나타낸 것이다.

도 49는 2mmpPCTPDBq의 박막의 흡수 스펙트럼을 나타낸 것이다.

도 50은 2mmpPCTPDBq의 박막의 발광 스펙트럼을 나타낸 것이다.

도 51은 2mmpPCTPDBq의 인광 스펙트럼을 나타낸 것이다.

도 52의 (A) 및 (B)는 2mPCBPDBq의 NMR 차트를 나타낸 것이다.

도 53은 발광 소자 1 내지 6 및 비교 발광 소자 8에 대하여 수행된 신뢰성 시험 결과를 나타낸 것이다.

도 54는 발광 소자 9 및 비교 발광 소자 10에 대하여 수행된 신뢰성 시험 결과를 나타낸 것이다.

도 55는 발광 소자의 열물성의 평가 결과를 나타낸 것이다.

발명을 실시하기 위한 구체적인 내용

[0178]

본 발명의 실시형태에 대하여 아래에서 설명한다. 또한, 본 발명의 취지 및 범위에서 벗어나지 않고, 여기에 개시(開示)된 형태 및 상세한 사항을 다양하게 변경할 수 있다는 것은 통상의 기술자에 의하여 쉽게 이해된다. 따라서, 본 발명은 이하의 실시형태의 기재에 한정하여 해석되는 것은 아니다.

[0179]

또한, 본 명세서에서 설명하는 각 도면에 있어서, 양극, EL층, 중간층, 및 음극 등의 구성 요소의 크기 및 두께 등은, 명료화를 위하여 과장되어 있는 경우가 있다. 따라서, 구성 요소의 크기는 도면에서의 크기 및 구성 요소 간의 상대적인 크기에 한정되지 않는다.

[0180]

본 명세서 등에서 "제 1", "제 2", 및 "제 3" 등의 서수사는 편의상 사용되는 것이고, 공정 순서 또는 적층 순서를 나타내는 것은 아니다. 따라서, 예를 들어 "제 1"을 "제 2" 또는 "제 3"으로 적절히 치환하여도 설명할 수 있다. 또한, 본 명세서 등에서의 서수사는 본 발명의 일 형태를 특정하는 것과 반드시 같은 것일 필요는 없다.

[0181]

본 명세서 등에서 설명하는 본 발명의 구조에 있어서, 상이한 도면에서 같은 부분 또는 비슷한 기능을 갖는 부분은 같은 부호로 나타내어지고, 이러한 부분에 대한 설명은 반복하지 않는다. 또한, 비슷한 기능을 갖는 부분에는 같은 해치 패턴을 적용하고, 그 부분을 특별히 부호로 나타내지 않는 경우가 있다.

[0182]

본 명세서에서, 색은 색상(단색의 광의 파장에 상당함), 채도(선명도, 즉 백색과 다른 정도), 및 명암도(밝기, 즉 광의 강도)의 3개의 측면으로 규정된다. 본 명세서에서, 색은 상술한 3개의 측면 중 하나만으로 규정되거나, 또는 임의로 선택된 2개의 측면으로 규정되어도 좋다. 본 명세서에서, 2개의 광의 색들 간의 차이란, 상술한 3개의 측면 중 적어도 하나에 차이가 있다는 것을 의미하고, 2개의 광의 스펙트럼 형상 또는 스펙트럼에서의 피크들의 상대 강도의 분포에 차이가 있다는 것을 포함한다.

[0183]

또한, "막" 및 "층"이라는 용어는 경우 또는 상황에 따라 서로 바꿀 수 있다. 예를 들어, "도전층"이라는 용어를 "도전막"이라는 용어로 변경할 수 있는 경우가 있고, "절연막"이라는 용어를 "절연층"이라는 용어로 변경할 수 있는 경우가 있다.

[0184]

(실시형태 1)

[0185]

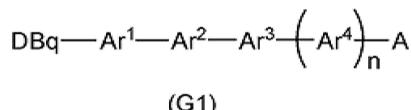
본 실시형태에서는, 본 발명의 일 형태의 해테로 고리 화합물에 대하여 설명한다.

[0186]

본 발명의 일 형태는 일반식(G1)으로 나타내어지는 해테로 고리 화합물이다.

[0187]

[화학식 38]



[0188]

식에서, A는 치환 또는 비치환의 다이벤조싸이오페닐기, 치환 또는 비치환의 다이벤조퓨란일기, 및 치환 또는 비치환의 카바졸릴기 중 어느 것을 나타낸다. DBq는 치환 또는 비치환의 다이벤조[f,h]퀴녹살린일기를 나타낸다. 또한, n은 0 또는 1이다. Ar^1 내지 Ar^4 는 각각 독립적으로 탄소수 6 내지 10의 치환 또는 비치환의 아릴렌 기를 나타낸다. Ar^1 내지 Ar^4 에서, 인접한 아릴렌기들은 서로 결합하여 고리를 형성하여도 좋다. Ar^1 내지 Ar^4 의 인접한 아릴렌기들이 플루오렌 골격을 형성하는 경우, 플루오렌 골격은 치환기를 가져도 좋다.

[0190] 본 발명의 다른 일 형태는 일반식(G2-1)으로 나타내어지는 혼합 고리 화합물이다. 혼합 고리 화합물은 합성의 용이성 및 합성 비용의 관점에서 유용하다.

[0191] [화학식 39]



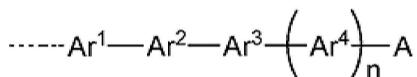
(G2-1)

[0192]

[0193] 식에서, R^{18} 내지 R^{20} 중 어느 하나는 일반식(G2-2)으로 나타내어지는 치환기를 나타낸다. R^{18} 내지 R^{20} 중 다른 2개 및 R^{11} 내지 R^{17} 은 각각 독립적으로 수소, 탄소수 1 내지 4의 알킬기, 또는 탄소수 6 내지 13의 치환 또는 비치환의 아릴기를 나타낸다.

[0194]

[화학식 40]



(G2-2)

[0195]

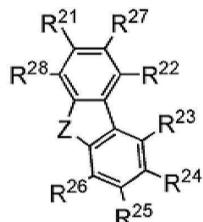
[0196] 식에서, A는 치환 또는 비치환의 다이벤조싸이오페닐기, 치환 또는 비치환의 다이벤조퓨란일기, 및 치환 또는 비치환의 카바졸릴기 중 어느 것을 나타낸다. 또한, n은 0 또는 1이다. Ar^1 내지 Ar^4 는 각각 독립적으로 탄소수 6 내지 10의 치환 또는 비치환의 아릴렌기를 나타낸다. Ar^1 내지 Ar^4 에서, 인접한 아릴렌기들은 서로 결합하여 고리를 형성하여도 좋다. Ar^1 내지 Ar^4 의 인접한 아릴렌기들이 플루오렌 골격을 형성하는 경우, 플루오렌 골격은 치환기를 가져도 좋다.

[0197]

본 발명의 다른 일 형태는 일반식(G3-1)으로 나타내어지는 혼합 고리 화합물이다.

[0198]

[화학식 41]



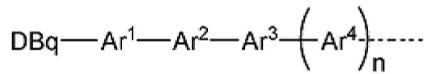
(G3-1)

[0199]

[0200] 식에서, R^{27} 및 R^{28} 중 어느 한쪽은 일반식(G3-2)으로 나타내어지는 치환기를 나타낸다. R^{27} 및 R^{28} 중 다른 쪽 및 R^{21} 내지 R^{26} 은 각각 독립적으로 수소, 탄소수 1 내지 4의 알킬기, 또는 탄소수 6 내지 13의 치환 또는 비치환의 아릴기를 나타낸다. Z는 산소, 황, 또는 질소를 나타낸다. Z가 질소를 나타내는 경우, 치환기가 Z위치에 결합되어도 좋고 결합되지 않아도 된다.

[0201]

[화학식 42]



[0202]

(G3-2)

[0203]

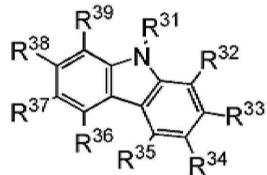
식에서, DBq는 치환 또는 비치환의 다이벤조[*f,h*]퀴녹살린일기를 나타낸다. 또한, n은 0 또는 1이다. Ar^1 내지 Ar^4 는 각각 독립적으로 탄소수 6 내지 10의 치환 또는 비치환의 아릴렌기를 나타낸다. Ar^1 내지 Ar^4 에서, 인접한 아릴렌기들은 서로 결합하여 고리를 형성하여도 좋다. Ar^1 내지 Ar^4 의 인접한 아릴렌기들이 플루오렌 골격을 형성하는 경우, 플루오렌 골격은 치환기를 가져도 좋다.

[0204]

본 발명의 다른 일 형태는 일반식(G4-1)으로 나타내어지는 헤테로 고리 화합물이다.

[0205]

[화학식 43]



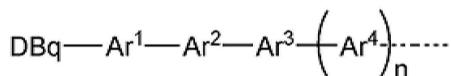
(G4-1)

[0206]

식에서, R^{31} , R^{33} , 및 R^{34} 중 어느 하나는 일반식(G4-2)으로 나타내어지는 치환기를 나타낸다. R^{31} , R^{33} , 및 R^{34} 중 일반식(G4-2)으로 나타내어지는 치환기가 결합되지 않는 다른 2개, R^{32} , 및 R^{35} 내지 R^{39} 는 각각 독립적으로 수소, 탄소수 1 내지 4의 알킬기, 또는 탄소수 6 내지 13의 치환 또는 비치환의 아릴기를 나타낸다.

[0208]

[화학식 44]



(G4-2)

[0209]

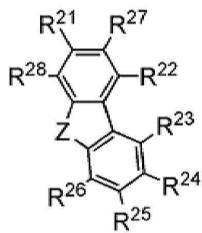
식에서, DBq는 치환 또는 비치환의 다이벤조[*f,h*]퀴녹살린일기를 나타낸다. 또한, n은 0 또는 1이다. Ar^1 내지 Ar^4 는 각각 독립적으로 탄소수 6 내지 10의 치환 또는 비치환의 아릴렌기를 나타낸다. Ar^1 내지 Ar^4 에서, 인접한 아릴렌기들은 서로 결합하여 고리를 형성하여도 좋다. Ar^1 내지 Ar^4 의 인접한 아릴렌기들이 플루오렌 골격을 형성하는 경우, 플루오렌 골격은 치환기를 가져도 좋다.

[0211]

본 발명의 다른 일 형태는 일반식(G5-1)으로 나타내어지는 헤테로 고리 화합물이다. 헤테로 고리 화합물은 합성의 용이성 및 합성 비용의 관점에서 유용하다.

[0212]

[화학식 45]



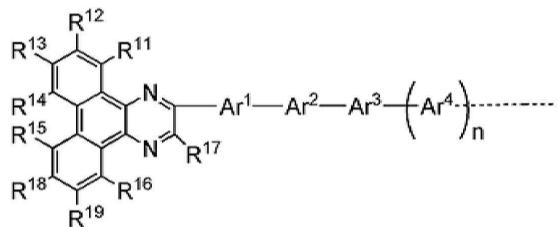
(G5-1)

[0213]

[0214] 식에서, R²⁷ 및 R²⁸ 중 어느 한쪽은 일반식(G5-2)으로 나타내어지는 치환기를 나타낸다. R²⁷ 및 R²⁸ 중 다른 쪽 및 R²¹ 내지 R²⁶은 각각 독립적으로 수소, 탄소수 1 내지 4의 알킬기, 또는 탄소수 6 내지 13의 치환 또는 비치환의 아릴기를 나타낸다. Z는 산소, 황, 또는 질소를 나타낸다. Z가 질소를 나타내는 경우, 치환기가 Z위치에 결합되어도 좋고 결합되지 않아도 된다.

[0215]

[화학식 46]



(G5-2)

[0216]

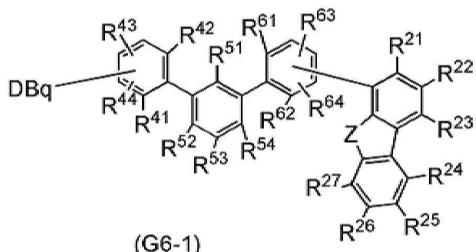
[0217] 식에서, R¹¹ 내지 R¹⁹은 각각 독립적으로 수소, 탄소수 1 내지 4의 알킬기, 또는 탄소수 6 내지 13의 치환 또는 비치환의 아릴기를 나타낸다. 또한, n은 0 또는 1이다. Ar¹ 내지 Ar⁴는 각각 독립적으로 탄소수 6 내지 10의 치환 또는 비치환의 아릴렌기를 나타낸다. Ar¹ 내지 Ar⁴에서, 인접한 아릴렌기들은 서로 결합하여 고리를 형성 하여도 좋다. Ar¹ 내지 Ar⁴의 인접한 아릴렌기들이 플루오렌 골격을 형성하는 경우, 플루오렌 골격은 치환기를 가져도 좋다.

[0218]

본 발명의 다른 일 형태는 일반식(G6-1)으로 나타내어지는 헤테로 고리 화합물이다. 헤테로 고리 화합물은 캐리어 수송성 및 신뢰성이 높다는 관점에서 유용하다.

[0219]

[화학식 47]



[0220]

[0221] 식에서, DBq는 치환 또는 비치환의 다이벤조[f,h]퀴녹살린일기를 나타낸다. Z는 산소 또는 황을 나타낸다. R²¹ 내지 R²⁷, R⁴¹ 내지 R⁴⁴, R⁵¹ 내지 R⁵⁴, 및 R⁶¹ 내지 R⁶⁴는 각각 독립적으로 수소, 탄소수 1 내지 4의 알킬기, 또는 탄소수 6 내지 13의 치환 또는 비치환의 아릴기를 나타낸다.

[0222]

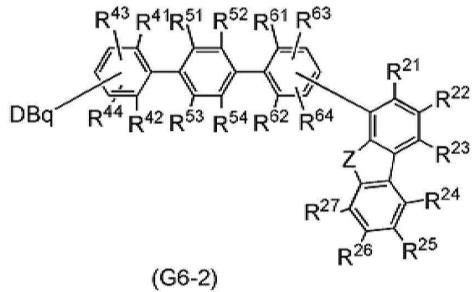
본 발명의 다른 일 형태는 DBq의 치환 위치가 메타 위치인, 일반식(G6-1)으로 나타내어지는 헤테로 고리 화합물

이다.

[0223] 본 발명의 다른 일 형태는 DBq의 치환 위치가 메타 위치이고 다이벤조싸이오페닐기 또는 다이벤조퓨란일기의 치환 위치가 파라 위치인, 일반식(G6-1)으로 나타내어지는 혼합화합물이다.

[0224] 본 발명의 다른 일 형태는 일반식(G6-2)으로 나타내어지는 혼합화합물이다. 혼합화합물은 캐리어 수송성 및 신뢰성이 높다는 관점에서 유용하다.

[0225] [화학식 48]



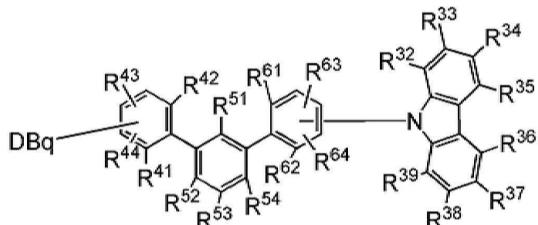
[0226]

[0227] 식에서, DBq는 치환 또는 비치환의 다이벤조[*f,h*]퀴녹살린일기를 나타낸다. Z는 산소 또는 황을 나타낸다. R^{21} 내지 R^{27} , R^{41} 내지 R^{44} , R^{51} 내지 R^{54} , 및 R^{61} 내지 R^{64} 는 각각 독립적으로 수소, 탄소수 1 내지 4의 알킬기, 또는 탄소수 6 내지 13의 치환 또는 비치환의 아릴기를 나타낸다.

[0228]

본 발명의 다른 일 형태는 일반식(G6-3)으로 나타내어지는 혼합화합물이다. 혼합화합물은 캐리어 수송성 및 신뢰성이 높다는 관점에서 유용하다.

[0229] [화학식 49]



[0230]

[0231] 식에서, DBq는 치환 또는 비치환의 다이벤조[*f,h*]퀴녹살린일기를 나타낸다. R^{32} 내지 R^{39} , R^{41} 내지 R^{44} , R^{51} 내지 R^{54} , 및 R^{61} 내지 R^{64} 는 각각 독립적으로 수소, 탄소수 1 내지 4의 알킬기, 또는 탄소수 6 내지 13의 치환 또는 비치환의 아릴기를 나타낸다.

[0232]

본 발명의 다른 일 형태는 DBq의 치환 위치가 메타 위치인, 일반식(G6-3)으로 나타내어지는 혼합화합물이다.

[0233]

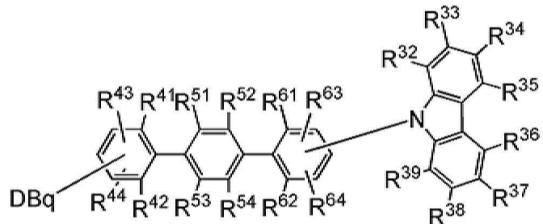
본 발명의 다른 일 형태는 DBq의 치환 위치가 메타 위치이고 카바졸릴기의 치환 위치가 파라 위치인, 일반식(G6-3)으로 나타내어지는 혼합화합물이다.

[0234]

본 발명의 다른 일 형태는 일반식(G6-4)으로 나타내어지는 혼합화합물이다. 혼합화합물은 캐리어 수송성 및 신뢰성이 높다는 관점에서 유용하다.

[0235]

[화학식 50]



(G6-4)

[0236]

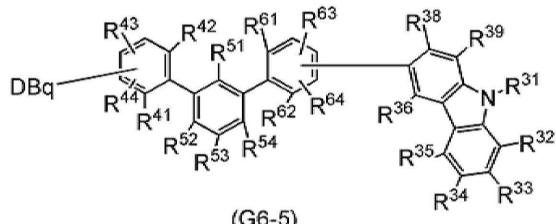
식에서, DBq는 치환 또는 비치환의 다이벤조[*f,h*]퀴녹살린일기를 나타낸다. R^{32} 내지 R^{39} , R^{41} 내지 R^{44} , R^{51} 내지 R^{54} , 및 R^{61} 내지 R^{64} 는 각각 독립적으로 수소, 탄소수 1 내지 4의 알킬기, 또는 탄소수 6 내지 13의 치환 또는 비치환의 아릴기를 나타낸다.

[0238]

본 발명의 다른 일 형태는 일반식(G6-5)으로 나타내어지는 혼테로 고리 화합물이다. 혼테로 고리 화합물은 캐리어 수송성 및 신뢰성이 높다는 관점에서 유용하다.

[0239]

[화학식 51]



(G6-5)

[0240]

식에서, DBq는 치환 또는 비치환의 다이벤조[*f,h*]퀴녹살린일기를 나타낸다. R^{31} 은 탄소수 1 내지 4의 알킬기 또는 탄소수 6 내지 13의 치환 또는 비치환의 아릴기를 나타낸다. R^{32} 내지 R^{36} , R^{38} , R^{39} , R^{41} 내지 R^{44} , R^{51} 내지 R^{54} , 및 R^{61} 내지 R^{64} 는 각각 독립적으로 수소, 탄소수 1 내지 4의 알킬기, 또는 탄소수 6 내지 13의 치환 또는 비치환의 아릴기를 나타낸다.

[0242]

본 발명의 다른 일 형태는 DBq의 치환 위치가 메타 위치인, 일반식(G6-5)으로 나타내어지는 혼테로 고리 화합물이다.

[0243]

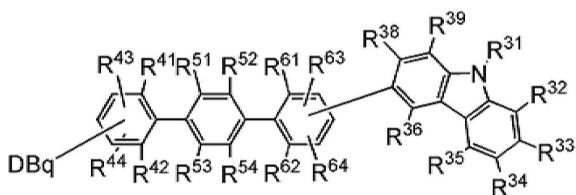
본 발명의 다른 일 형태는 DBq의 치환 위치가 메타 위치이고 카바졸릴기의 치환 위치가 파라 위치인, 일반식(G6-5)으로 나타내어지는 혼테로 고리 화합물이다.

[0244]

본 발명의 다른 일 형태는 일반식(G6-6)으로 나타내어지는 혼테로 고리 화합물이다. 혼테로 고리 화합물은 캐리어 수송성 및 신뢰성이 높다는 관점에서 유용하다.

[0245]

[화학식 52]



(G6-6)

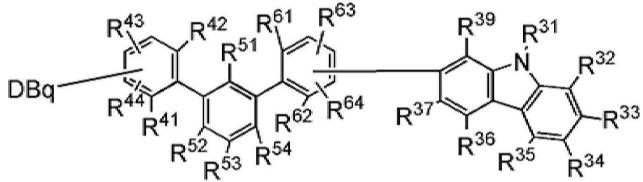
[0246]

식에서, DBq는 치환 또는 비치환의 다이벤조[*f,h*]퀴녹살린일기를 나타낸다. R^{31} 은 탄소수 1 내지 4의 알킬기 또

는 탄소수 6 내지 13의 치환 또는 비치환의 아릴기를 나타낸다. R^{32} 내지 R^{36} , R^{38} , R^{39} , R^{41} 내지 R^{44} , R^{51} 내지 R^{54} , 및 R^{61} 내지 R^{64} 는 각각 독립적으로 수소, 탄소수 1 내지 4의 알킬기, 또는 탄소수 6 내지 13의 치환 또는 비치환의 아릴기를 나타낸다.

[0248] 본 발명의 다른 일 형태는 일반식(G6-7)으로 나타내어지는 혼합로 고리 화합물이다. 혼합로 고리 화합물은 캐리어 수송성 및 신뢰성이 높다는 관점에서 유용하다.

[0249] [화학식 53]



(G6-7)

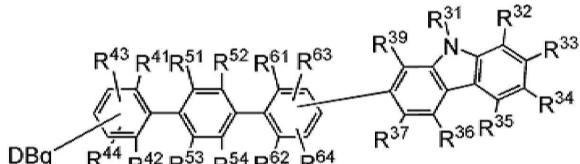
[0250] 식에서, DBq는 치환 또는 비치환의 다이벤조[*f,h*]퀴노살린일기를 나타낸다. R^{31} 은 탄소수 1 내지 4의 알킬기 또는 탄소수 6 내지 13의 치환 또는 비치환의 아릴기를 나타낸다. R^{32} 내지 R^{37} , R^{39} , R^{41} 내지 R^{44} , R^{51} 내지 R^{54} , 및 R^{61} 내지 R^{64} 는 각각 독립적으로 수소, 탄소수 1 내지 4의 알킬기, 또는 탄소수 6 내지 13의 치환 또는 비치환의 아릴기를 나타낸다.

[0251] 본 발명의 다른 일 형태는 DBq의 치환 위치가 메타 위치인, 일반식(G6-7)으로 나타내어지는 혼합로 고리 화합물이다.

[0252] 본 발명의 다른 일 형태는 DBq의 치환 위치가 메타 위치이고 카바졸릴기의 치환 위치가 파라 위치인, 일반식(G6-7)으로 나타내어지는 혼합로 고리 화합물이다.

[0253] 본 발명의 다른 일 형태는 일반식(G6-8)으로 나타내어지는 혼합로 고리 화합물이다. 혼합로 고리 화합물은 캐리어 수송성 및 신뢰성이 높다는 관점에서 유용하다.

[0254] [화학식 54]



(G6-8)

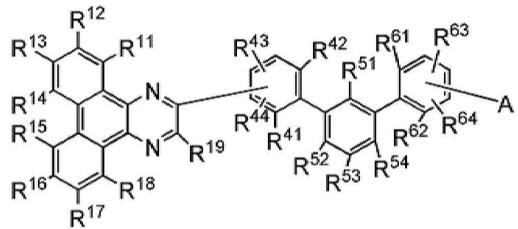
[0255]

[0256] 식에서, DBq는 치환 또는 비치환의 다이벤조[*f,h*]퀴노살린일기를 나타낸다. R^{31} 은 탄소수 1 내지 4의 알킬기 또는 탄소수 6 내지 13의 치환 또는 비치환의 아릴기를 나타낸다. R^{32} 내지 R^{37} , R^{39} , R^{41} 내지 R^{44} , R^{51} 내지 R^{54} , 및 R^{61} 내지 R^{64} 는 각각 독립적으로 수소, 탄소수 1 내지 4의 알킬기, 또는 탄소수 6 내지 13의 치환 또는 비치환의 아릴기를 나타낸다.

[0257] 본 발명의 다른 일 형태는 일반식(G7-1)으로 나타내어지는 혼합로 고리 화합물이다. 혼합로 고리 화합물은 캐리어 수송성 및 신뢰성이 높다는 관점에서 유용하다.

[0259]

[화학식 55]



(G7-1)

[0260]

식에서, A는 치환 또는 비치환의 다이벤조싸이오페닐기, 치환 또는 비치환의 다이벤조퓨란일기, 및 치환 또는 비치환의 카바졸릴기 중 어느 것을 나타낸다. R^{11} 내지 R^{19} , R^{41} 내지 R^{44} , R^{51} 내지 R^{54} , 및 R^{61} 내지 R^{64} 는 각각 독립적으로 수소, 탄소수 1 내지 4의 알킬기, 또는 탄소수 6 내지 13의 치환 또는 비치환의 아릴기를 나타낸다.

[0261]

본 발명의 다른 일 형태는 DBq의 치환 위치가 메타 위치인, 일반식(G7-1)으로 나타내어지는 혼합 고리 화합물이다.

[0262]

본 발명의 다른 일 형태는 DBq의 치환 위치가 메타 위치이고 A의 치환 위치가 파라 위치인, 일반식(G7-1)으로 나타내어지는 혼합 고리 화합물이다.

[0263]

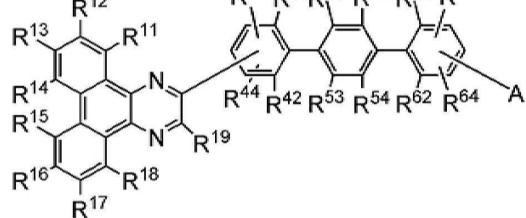
본 발명의 다른 일 형태는 DBq의 치환 위치가 메타 위치이고 A의 치환 위치가 파라 위치인, 일반식(G7-1)으로 나타내어지는 혼합 고리 화합물이다.

[0264]

본 발명의 다른 일 형태는 일반식(G7-2)으로 나타내어지는 혼합 고리 화합물이다. 혼합 고리 화합물은 캐리어 수송성 및 신뢰성이 높다는 관점에서 유용하다.

[0265]

[화학식 56]



(G7-2)

[0266]

식에서, A는 치환 또는 비치환의 다이벤조싸이오페닐기, 치환 또는 비치환의 다이벤조퓨란일기, 및 치환 또는 비치환의 카바졸릴기 중 어느 것을 나타낸다. R^{11} 내지 R^{19} , R^{41} 내지 R^{44} , R^{51} 내지 R^{54} , 및 R^{61} 내지 R^{64} 는 각각 독립적으로 수소, 탄소수 1 내지 4의 알킬기, 또는 탄소수 6 내지 13의 치환 또는 비치환의 아릴기를 나타낸다.

[0267]

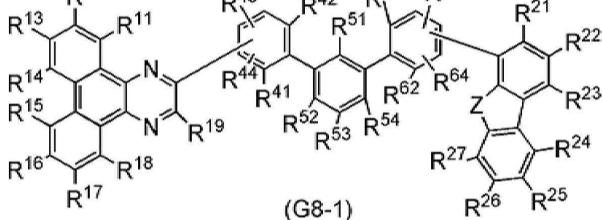
본 발명의 다른 일 형태는 일반식(G7-1)으로 나타내어지는 혼합 고리 화합물이다. 혼합 고리 화합물은 캐리어 수송성 및 신뢰성이 높다는 관점에서 유용하다.

[0268]

본 발명의 다른 일 형태는 일반식(G8-1)으로 나타내어지는 혼합 고리 화합물이다. 혼합 고리 화합물은 캐리어 수송성 및 신뢰성이 높다는 관점에서 유용하다.

[0269]

[화학식 57]



(G8-1)

[0270]

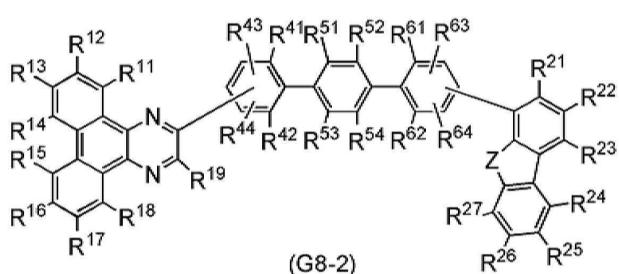
식에서, Z는 산소 또는 황을 나타낸다. R^{11} 내지 R^{19} , R^{21} 내지 R^{27} , R^{41} 내지 R^{44} , R^{51} 내지 R^{54} , 및 R^{61} 내지 R^{64} 는

[0271]

각각 독립적으로 수소, 탄소수 1 내지 4의 알킬기, 또는 탄소수 6 내지 13의 치환 또는 비치환의 아릴기를 나타낸다.

- [0272] 본 발명의 다른 일 형태는 DBq의 치환 위치가 메타 위치인, 일반식(G8-1)으로 나타내어지는 혼합 고리 화합물이다.
- [0273] 본 발명의 다른 일 형태는 DBq의 치환 위치가 메타 위치이고 다이벤조싸이오페닐기 또는 다이벤조퓨란일기의 치환 위치가 파라 위치인, 일반식(G8-1)으로 나타내어지는 혼합 고리 화합물이다.
- [0274] 본 발명의 다른 일 형태는 일반식(G8-2)으로 나타내어지는 혼합 고리 화합물이다. 혼합 고리 화합물은 캐리어 수송성 및 신뢰성이 높다는 관점에서 유용하다.

[화학식 58]

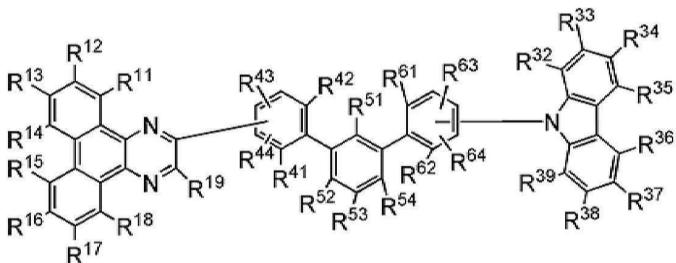


[0276]

[0277] 식에서, Z는 산소 또는 황을 나타낸다. R^{11} 내지 R^{19} , R^{21} 내지 R^{27} , R^{41} 내지 R^{44} , R^{51} 내지 R^{54} , 및 R^{61} 내지 R^{64} 는 각각 독립적으로 수소, 탄소수 1 내지 4의 알킬기, 또는 탄소수 6 내지 13의 치환 또는 비치환의 아릴기를 나타낸다.

- [0278] 본 발명의 다른 일 형태는 일반식(G8-3)으로 나타내어지는 혼합 고리 화합물이다. 혼합 고리 화합물은 캐리어 수송성 및 신뢰성이 높다는 관점에서 유용하다.

[화학식 59]



[0280]

[0281] 식에서, R^{11} 내지 R^{19} , R^{32} 내지 R^{39} , R^{41} 내지 R^{44} , R^{51} 내지 R^{54} , 및 R^{61} 내지 R^{64} 는 각각 독립적으로 수소, 탄소수 1 내지 4의 알킬기, 또는 탄소수 6 내지 13의 치환 또는 비치환의 아릴기를 나타낸다.

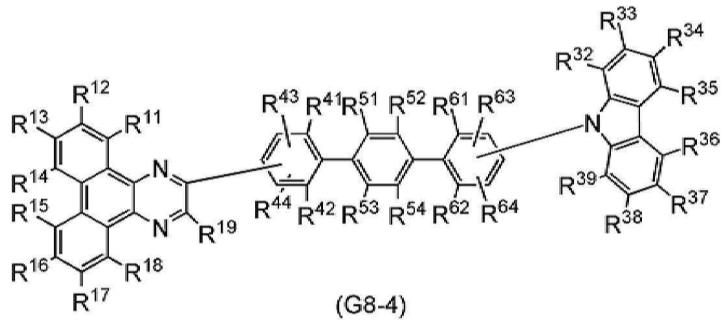
- [0282] 본 발명의 다른 일 형태는 DBq의 치환 위치가 메타 위치인, 일반식(G8-3)으로 나타내어지는 혼합 고리 화합물이다.

[0283] 본 발명의 다른 일 형태는 DBq의 치환 위치가 메타 위치이고 카바졸릴기의 치환 위치가 파라 위치인, 일반식(G8-3)으로 나타내어지는 혼합 고리 화합물이다.

- [0284] 본 발명의 다른 일 형태는 일반식(G8-4)으로 나타내어지는 혼합 고리 화합물이다. 혼합 고리 화합물은 캐리어 수송성 및 신뢰성이 높다는 관점에서 유용하다.

[0285]

[화학식 60]



[0286]

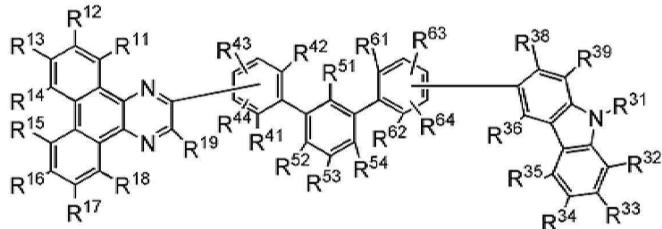
[0287] 식에서, R^{11} 내지 R^{19} , R^{32} 내지 R^{39} , R^{41} 내지 R^{44} , R^{51} 내지 R^{54} , 및 R^{61} 내지 R^{64} 는 각각 독립적으로 수소, 탄소수 1 내지 4의 알킬기, 또는 탄소수 6 내지 13의 치환 또는 비치환의 아릴기를 나타낸다.

[0288]

본 발명의 다른 일 형태는 일반식(G8-5)으로 나타내어지는 혜테로 고리 화합물이다. 혜테로 고리 화합물은 캐리어 수송성 및 신뢰성이 높다는 관점에서 유용하다.

[0289]

[화학식 61]



(G8-5)

[0290]

[0291] 식에서, R^{11} 내지 R^{19} , R^{32} 내지 R^{36} , R^{38} , R^{39} , R^{41} 내지 R^{44} , R^{51} 내지 R^{54} , 및 R^{61} 내지 R^{64} 는 각각 독립적으로 수소, 탄소수 1 내지 4의 알킬기, 또는 탄소수 6 내지 13의 치환 또는 비치환의 아릴기를 나타낸다. R^{31} 은 탄소수 1 내지 4의 알킬기 또는 탄소수 6 내지 13의 치환 또는 비치환의 아릴기를 나타낸다.

[0292]

본 발명의 다른 일 형태는 DBq의 치환 위치가 메타 위치인, 일반식(G8-5)으로 나타내어지는 혜테로 고리 화합물이다.

[0293]

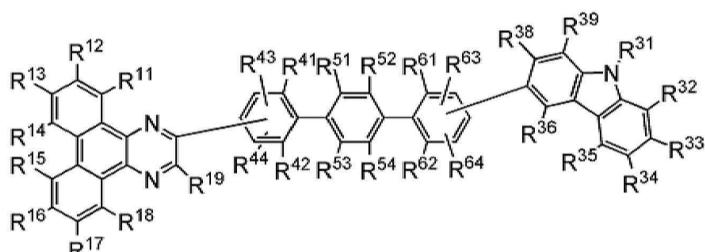
본 발명의 다른 일 형태는 DBq의 치환 위치가 메타 위치이고 카바졸릴기의 치환 위치가 파라 위치인, 일반식(G8-5)으로 나타내어지는 혜테로 고리 화합물이다.

[0294]

본 발명의 다른 일 형태는 일반식(G8-6)으로 나타내어지는 혜테로 고리 화합물이다. 혜테로 고리 화합물은 캐리어 수송성 및 신뢰성이 높다는 관점에서 유용하다.

[0295]

[화학식 62]



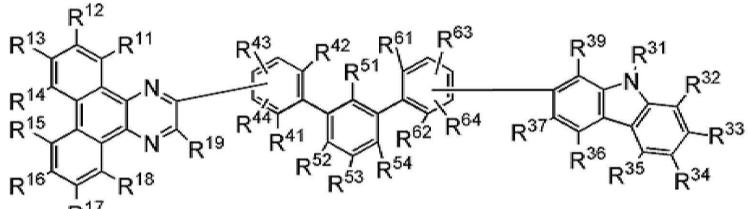
(G8-6)

[0296]

[0297] 식에서, R^{11} 내지 R^{19} , R^{32} 내지 R^{36} , R^{38} , R^{39} , R^{41} 내지 R^{44} , R^{51} 내지 R^{54} , 및 R^{61} 내지 R^{64} 는 각각 독립적으로 수소, 탄소수 1 내지 4의 알킬기, 또는 탄소수 6 내지 13의 치환 또는 비치환의 아릴기를 나타낸다. R^{31} 은 탄소수 1 내지 4의 알킬기 또는 탄소수 6 내지 13의 치환 또는 비치환의 아릴기를 나타낸다.

[0298] 본 발명의 다른 일 형태는 일반식(G8-7)으로 나타내어지는 혼합으로 고리 화합물이다. 혼합으로 고리 화합물은 캐리어 수송성 및 신뢰성이 높다는 관점에서 유용하다.

[0299] [화학식 63]



(G8-7)

[0300]

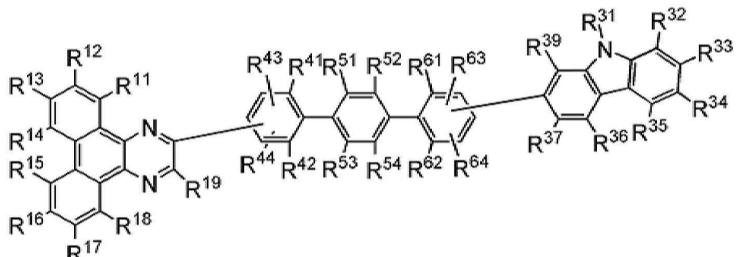
[0301] 식에서, R^{11} 내지 R^{19} , R^{32} 내지 R^{37} , R^{38} , R^{41} 내지 R^{44} , R^{51} 내지 R^{54} , 및 R^{61} 내지 R^{64} 는 각각 독립적으로 수소, 탄소수 1 내지 4의 알킬기, 또는 탄소수 6 내지 13의 치환 또는 비치환의 아릴기를 나타낸다. R^{31} 은 탄소수 1 내지 4의 알킬기 또는 탄소수 6 내지 13의 치환 또는 비치환의 아릴기를 나타낸다.

[0302] 본 발명의 다른 일 형태는 DBq의 치환 위치가 메타 위치인, 일반식(G8-7)으로 나타내어지는 혼합으로 고리 화합물이다.

[0303] 본 발명의 다른 일 형태는 DBq의 치환 위치가 메타 위치이고 카바졸릴기의 치환 위치가 파라 위치인, 일반식(G8-7)으로 나타내어지는 혼합으로 고리 화합물이다.

[0304] 본 발명의 다른 일 형태는 일반식(G8-8)으로 나타내어지는 혼합으로 고리 화합물이다. 혼합으로 고리 화합물은 캐리어 수송성 및 신뢰성이 높다는 관점에서 유용하다.

[0305] [화학식 64]



(G8-8)

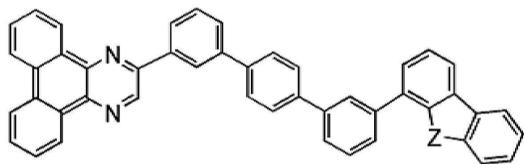
[0306]

[0307] 식에서, R^{11} 내지 R^{19} , R^{32} 내지 R^{37} , R^{38} , R^{41} 내지 R^{44} , R^{51} 내지 R^{54} , 및 R^{61} 내지 R^{64} 는 각각 독립적으로 수소, 탄소수 1 내지 4의 알킬기, 또는 탄소수 6 내지 13의 치환 또는 비치환의 아릴기를 나타낸다. R^{31} 은 탄소수 1 내지 4의 알킬기 또는 탄소수 6 내지 13의 치환 또는 비치환의 아릴기를 나타낸다.

[0308] 본 발명의 다른 일 형태는 일반식(G9-1)으로 나타내어지는 혼합으로 고리 화합물이다. 혼합으로 고리 화합물은 T1 준위, 캐리어 수송성, 내열성, 및 신뢰성이 높다는 관점에서 유용하다.

[0309]

[화학식 65]



(G9-1)

[0310]

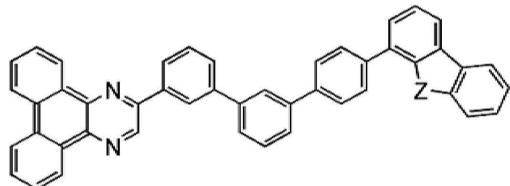
식에서, Z는 산소 또는 황을 나타낸다.

[0312]

본 발명의 다른 일 형태는 일반식(G9-2)으로 나타내어지는 혼테로 고리 화합물이다. 혼테로 고리 화합물은 T1 준위, 캐리어 수송성, 내열성, 및 신뢰성이 높다는 관점에서 유용하다.

[0313]

[화학식 66]



(G9-2)

[0314]

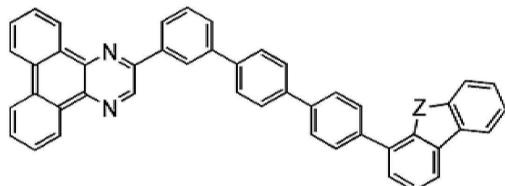
식에서, Z는 산소 또는 황을 나타낸다.

[0316]

본 발명의 다른 일 형태는 일반식(G9-3)으로 나타내어지는 혼테로 고리 화합물이다. 혼테로 고리 화합물은 T1 준위, 캐리어 수송성, 내열성, 및 신뢰성이 높다는 관점에서 유용하다.

[0317]

[화학식 67]



(G9-3)

[0318]

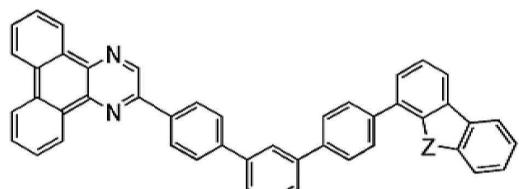
식에서, Z는 산소 또는 황을 나타낸다.

[0320]

본 발명의 다른 일 형태는 일반식(G9-4)으로 나타내어지는 혼테로 고리 화합물이다. 혼테로 고리 화합물은 T1 준위, 캐리어 수송성, 내열성, 및 신뢰성이 높다는 관점에서 유용하다.

[0321]

[화학식 68]



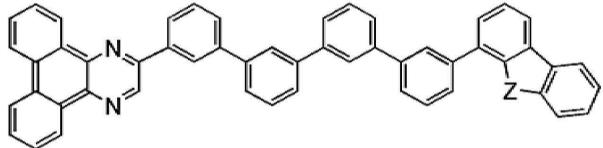
(G9-4)

[0322]

[0323] 식에서, Z는 산소 또는 황을 나타낸다.

[0324] 본 발명의 다른 일 형태는 일반식(G9-5)으로 나타내어지는 헤테로 고리 화합물이다. 헤테로 고리 화합물은 T1 준위, 캐리어 수송성, 내열성, 및 신뢰성이 높다는 관점에서 유용하다.

[0325] [화학식 69]



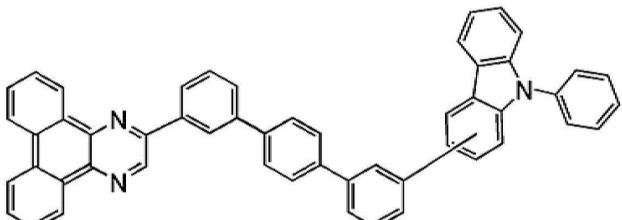
(G9-5)

[0326]

[0327] 식에서, Z는 산소 또는 황을 나타낸다.

[0328] 본 발명의 다른 일 형태는 일반식(G10-1)으로 나타내어지는 헤테로 고리 화합물이다. 헤테로 고리 화합물은 T1 준위, 캐리어 수송성, 내열성, 및 신뢰성이 높다는 관점에서 유용하다.

[0329] [화학식 70]

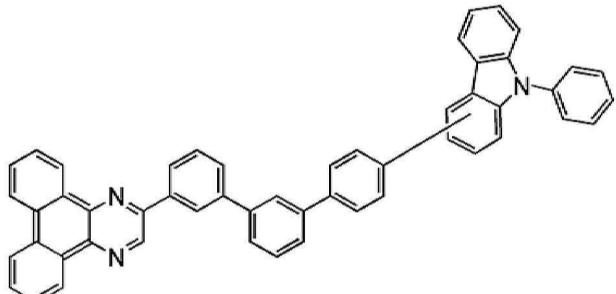


(G10-1)

[0330]

[0331] 본 발명의 다른 일 형태는 일반식(G10-2)으로 나타내어지는 헤테로 고리 화합물이다. 헤테로 고리 화합물은 T1 준위, 캐리어 수송성, 내열성, 및 신뢰성이 높다는 관점에서 유용하다.

[0332] [화학식 71]



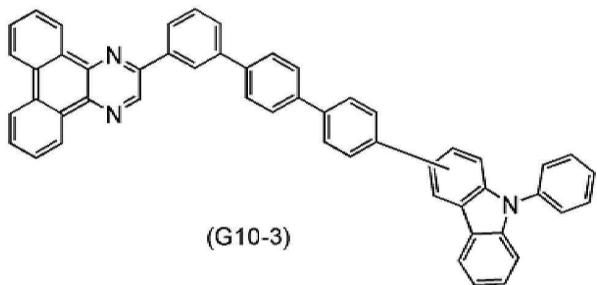
(G10-2)

[0333]

[0334] 본 발명의 다른 일 형태는 일반식(G10-3)으로 나타내어지는 헤테로 고리 화합물이다. 헤테로 고리 화합물은 T1 준위, 캐리어 수송성, 내열성, 및 신뢰성이 높다는 관점에서 유용하다.

[0335]

[화학식 72]

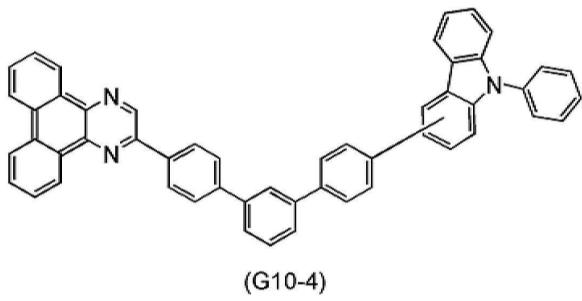


[0336]

[0337] 본 발명의 다른 일 형태는 일반식(G10-4)으로 나타내어지는 혼합 고리 화합물이다. 혼합 고리 화합물은 캐리어 수송성, 내열성, 및 신뢰성이 높다는 관점에서 유용하다.

[0338]

[화학식 73]

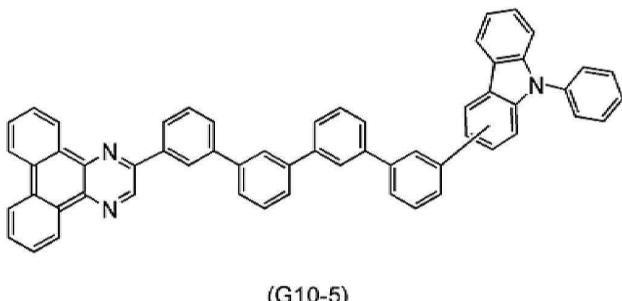


[0339]

[0340] 본 발명의 다른 일 형태는 일반식(G10-5)으로 나타내어지는 혼합 고리 화합물이다. 혼합 고리 화합물은 T1 준위, 캐리어 수송성, 내열성, 및 신뢰성이 높다는 관점에서 유용하다.

[0341]

[화학식 74]

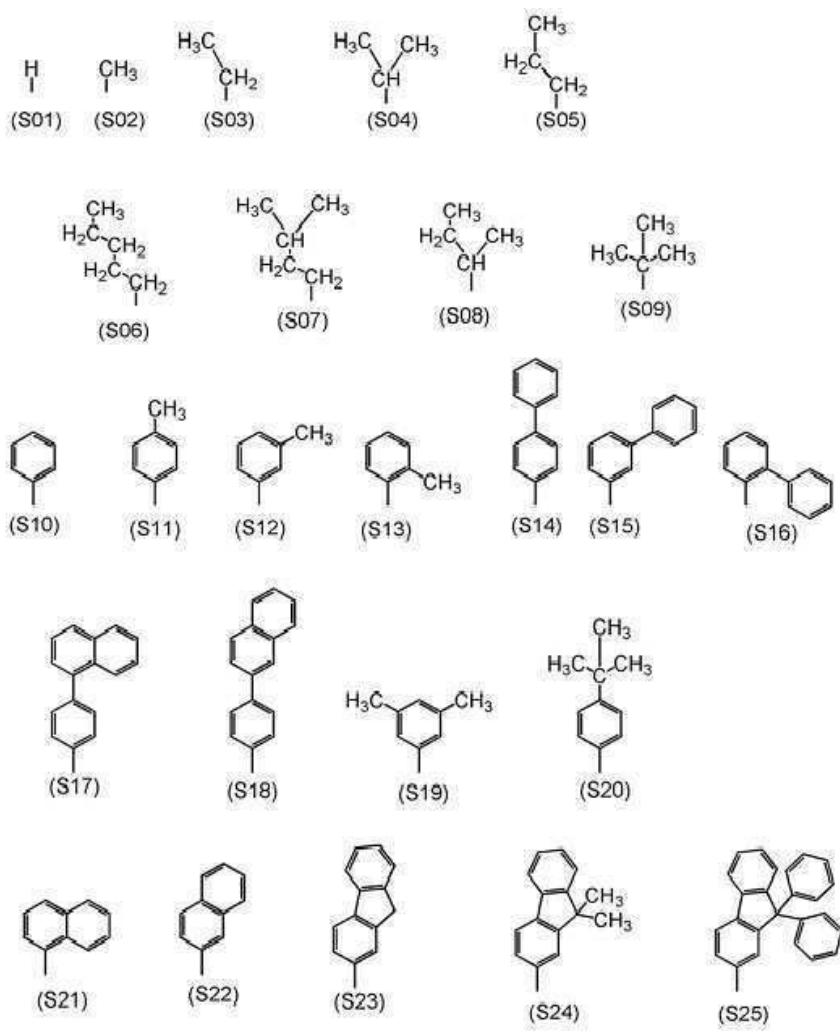


[0342]

[0343] 본 발명의 일 형태의 혼합 고리 화합물에 포함되는 치환기들의 예를 아래에 나타낸다. 식(S01) 내지 식(S25)은 R^{11} 내지 R^{19} , R^{21} 내지 R^{27} , R^{32} 내지 R^{39} , R^{41} 내지 R^{44} , R^{51} 내지 R^{54} , 및 R^{61} 내지 R^{64} 의 구체적인 예를 나타내고, 식(S02) 내지 식(S25)은 R^{31} 의 구체적인 예를 나타낸다. 식(S31) 내지 식(S46)은 Ar^1 내지 Ar^4 의 예를 나타낸다. 또한, 본 발명의 일 형태는 아래의 예에 한정되지 않는다.

[0344]

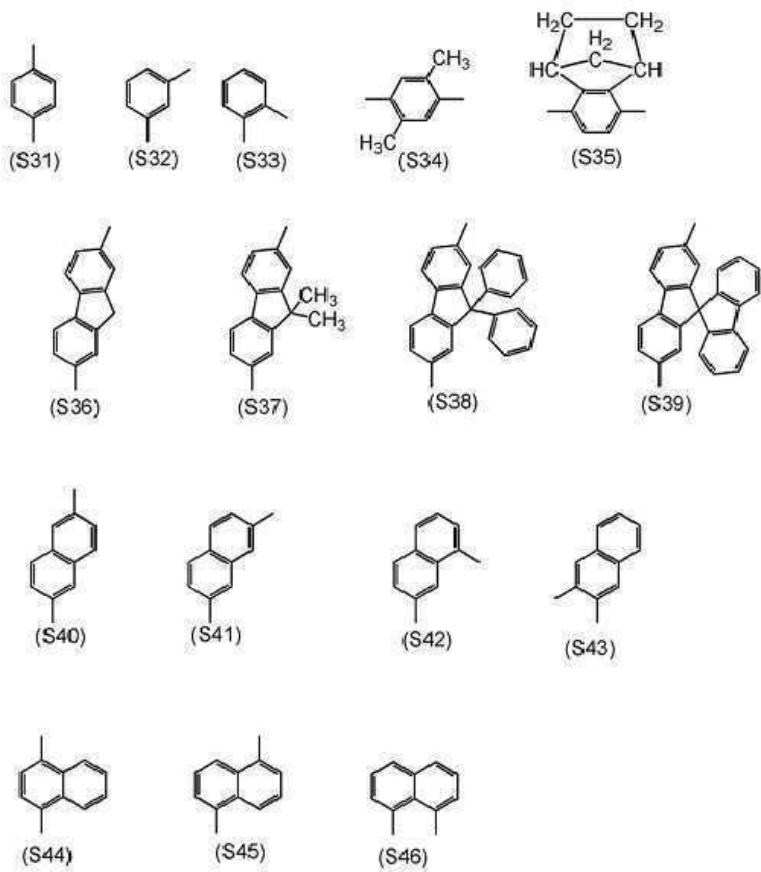
[화학식 75]



[0345]

[0346]

[화학식 76]



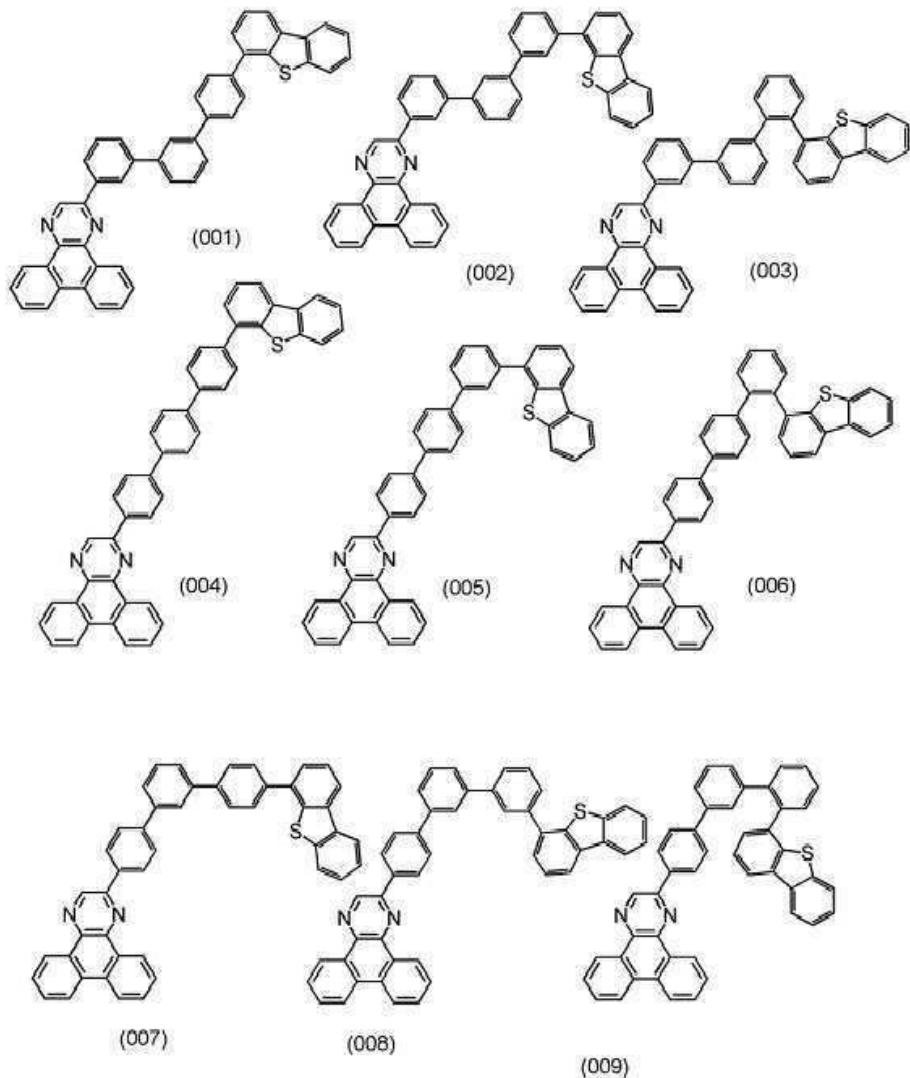
[0347]

[0348]

본 발명의 일 형태의 헤테로 고리 화합물의 구체적인 구조를 아래에 나타낸다. 또한, 본 발명의 일 형태의 헤테로 고리 화합물은 아래의 예에 한정되지 않는다.

[0349]

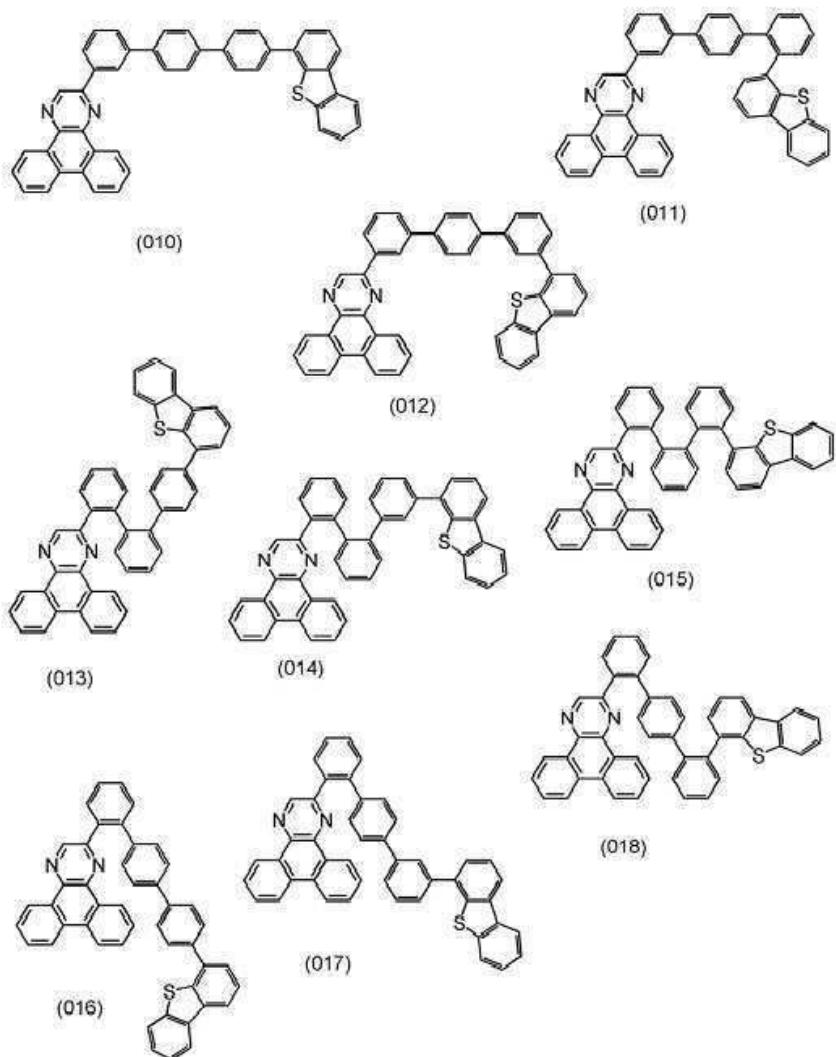
[화학식 77]



[0350]

[0351]

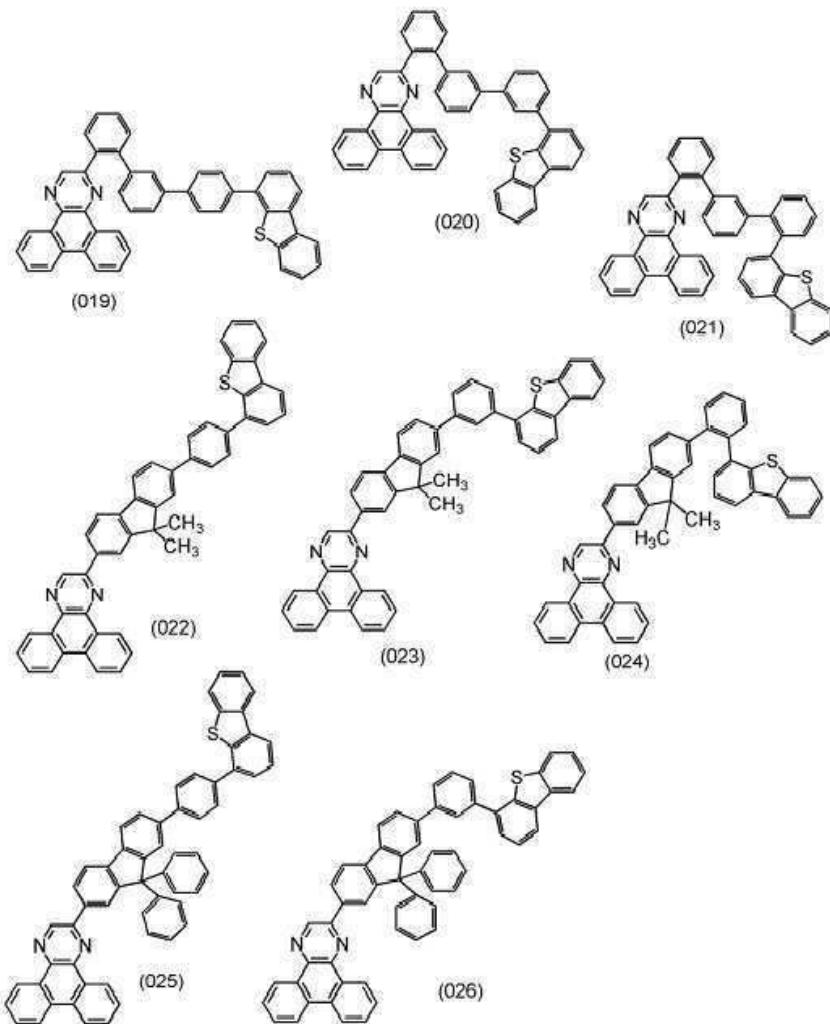
[화학식 78]



[0352]

[0353]

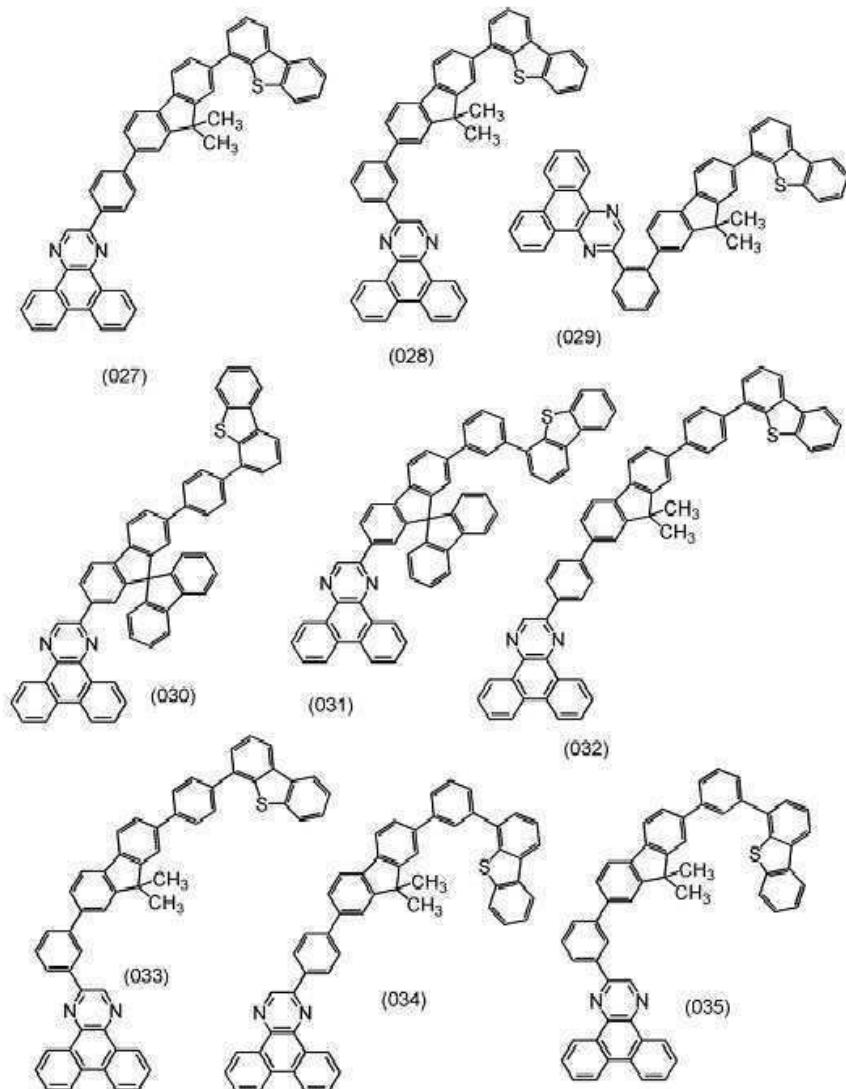
[화학식 79]



[0354]

[0355]

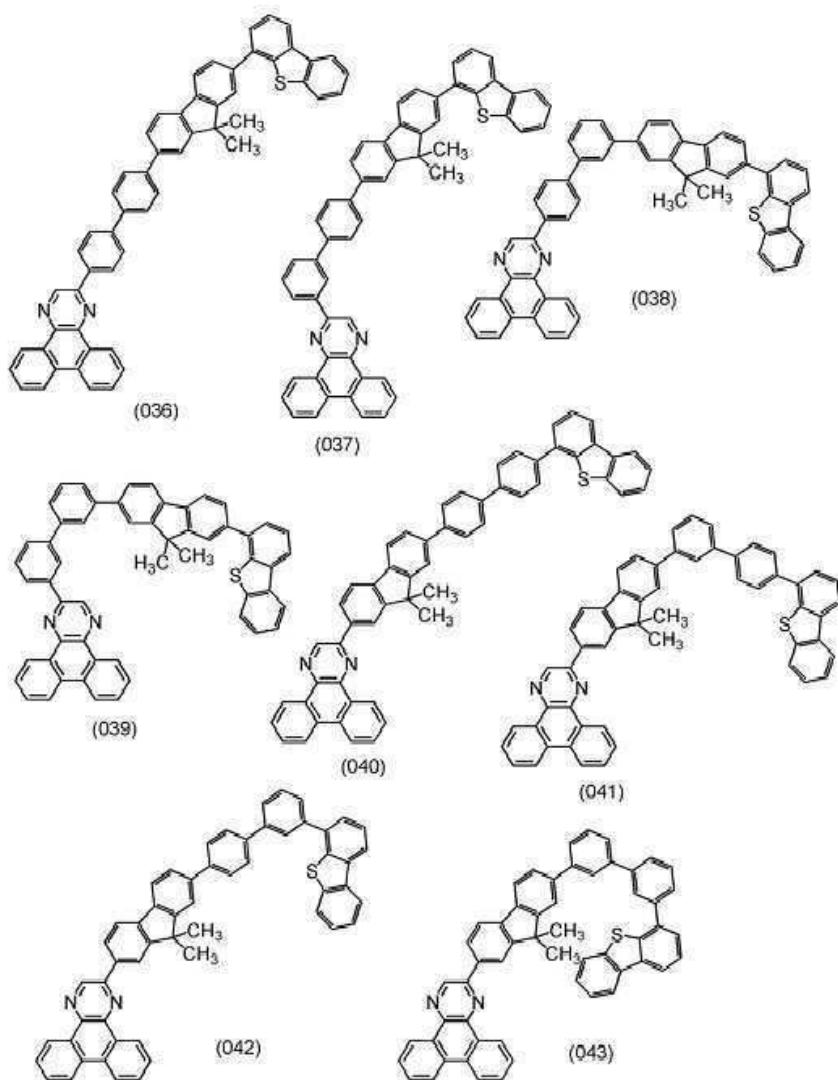
[화학식 80]



[0356]

[0357]

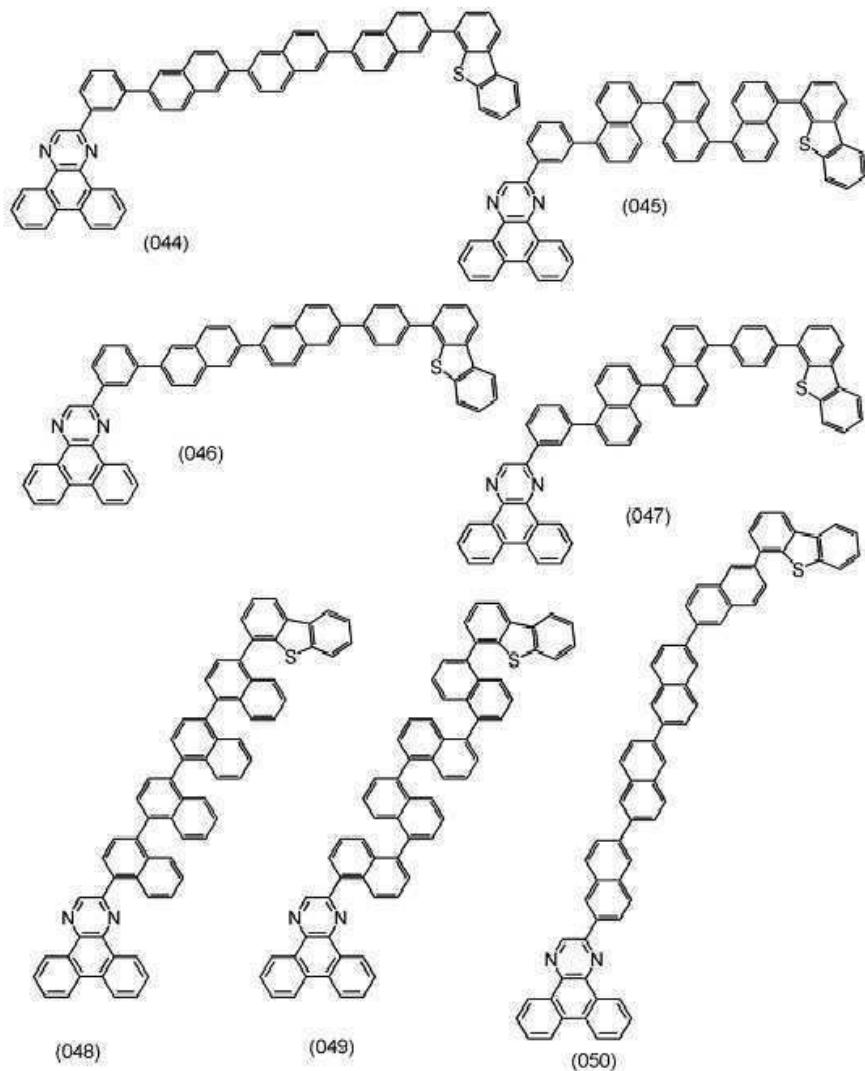
[화학식 81]



[0358]

[0359]

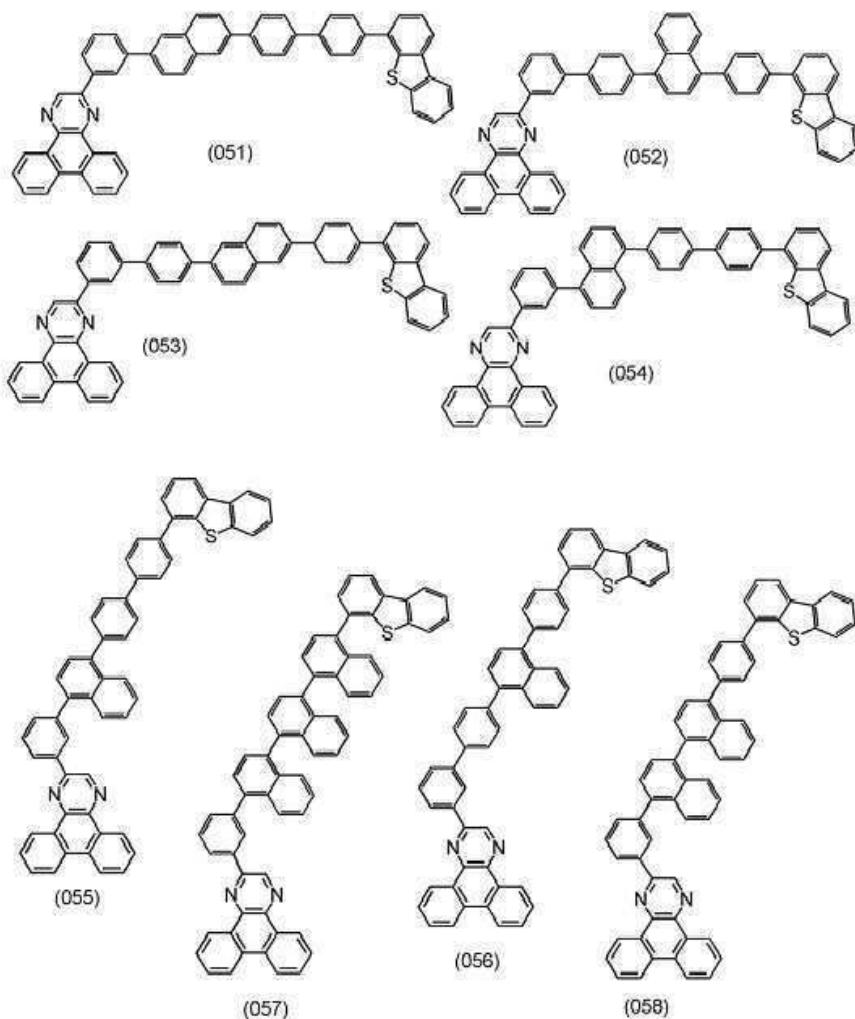
[화학식 82]



[0360]

[0361]

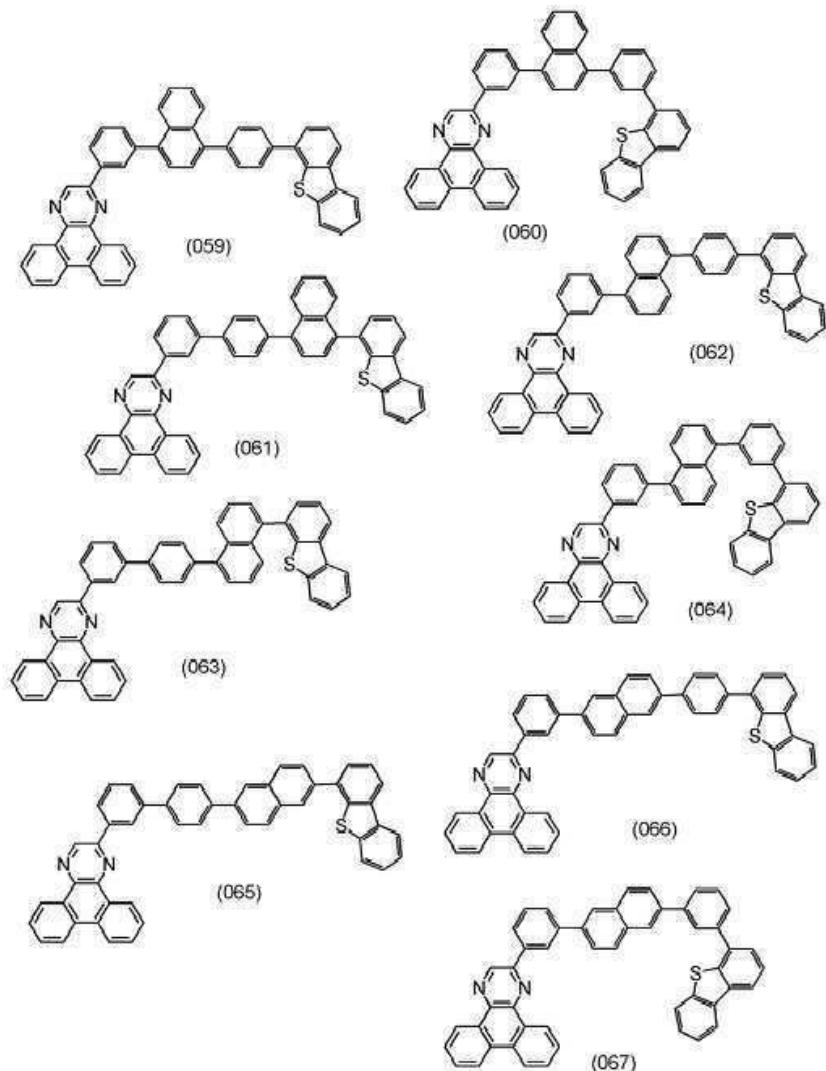
[화학식 83]



[0362]

[0363]

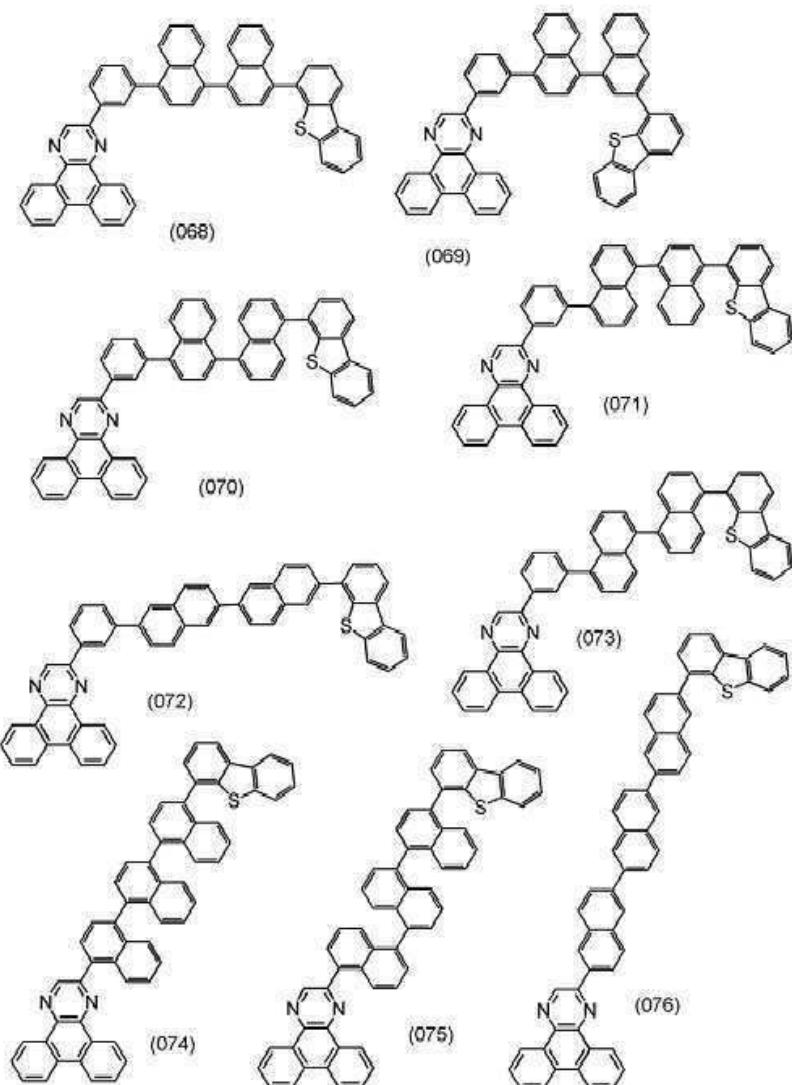
[화학식 84]



[0364]

[0365]

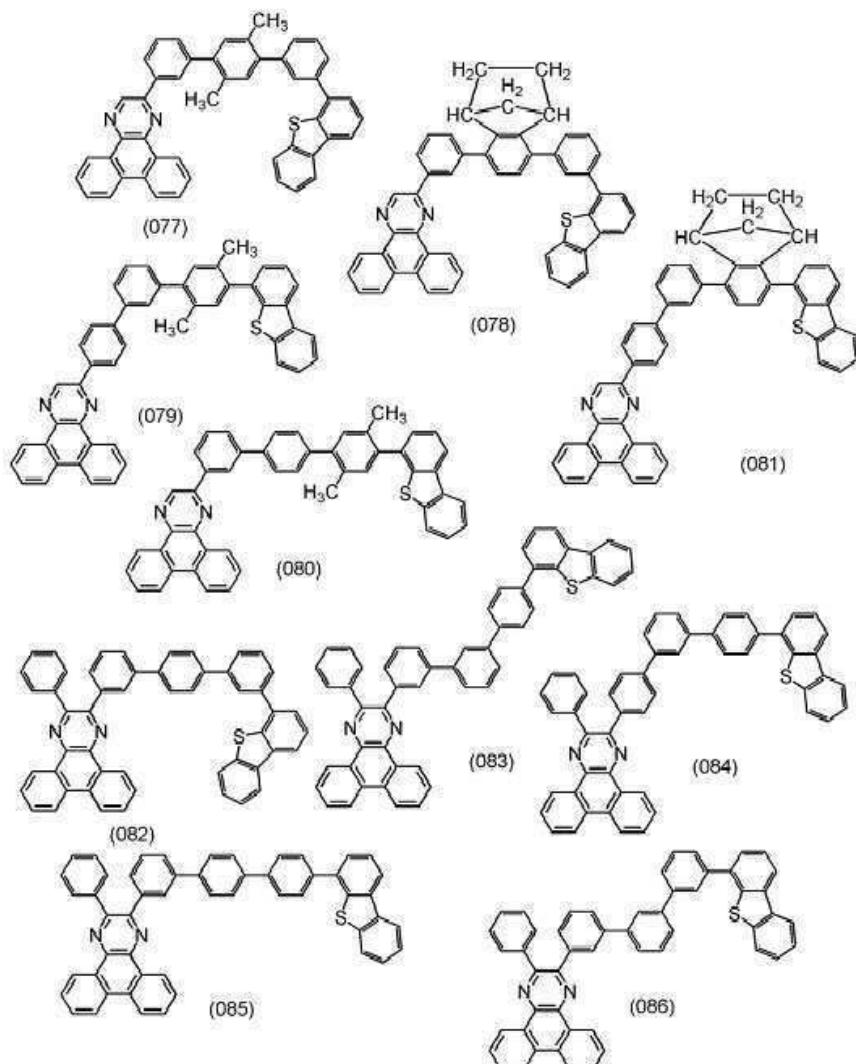
[화학식 85]



[0366]

[0367]

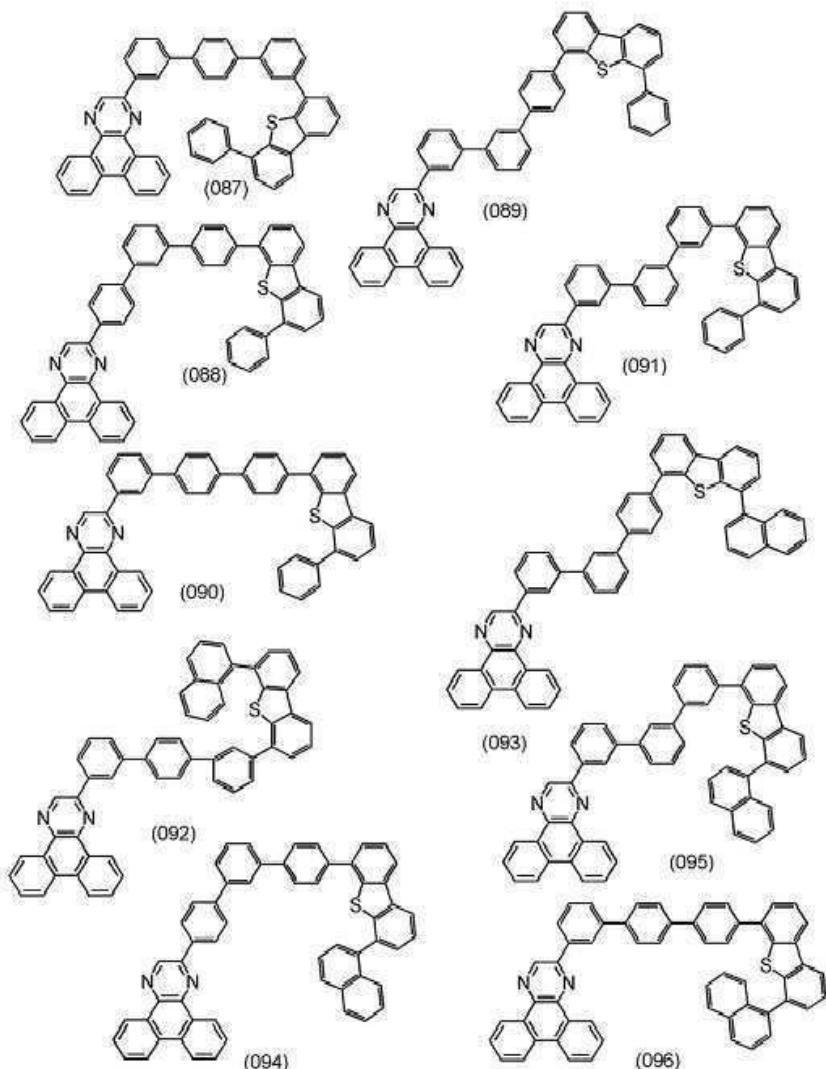
[화학식 86]



[0368]

[0369]

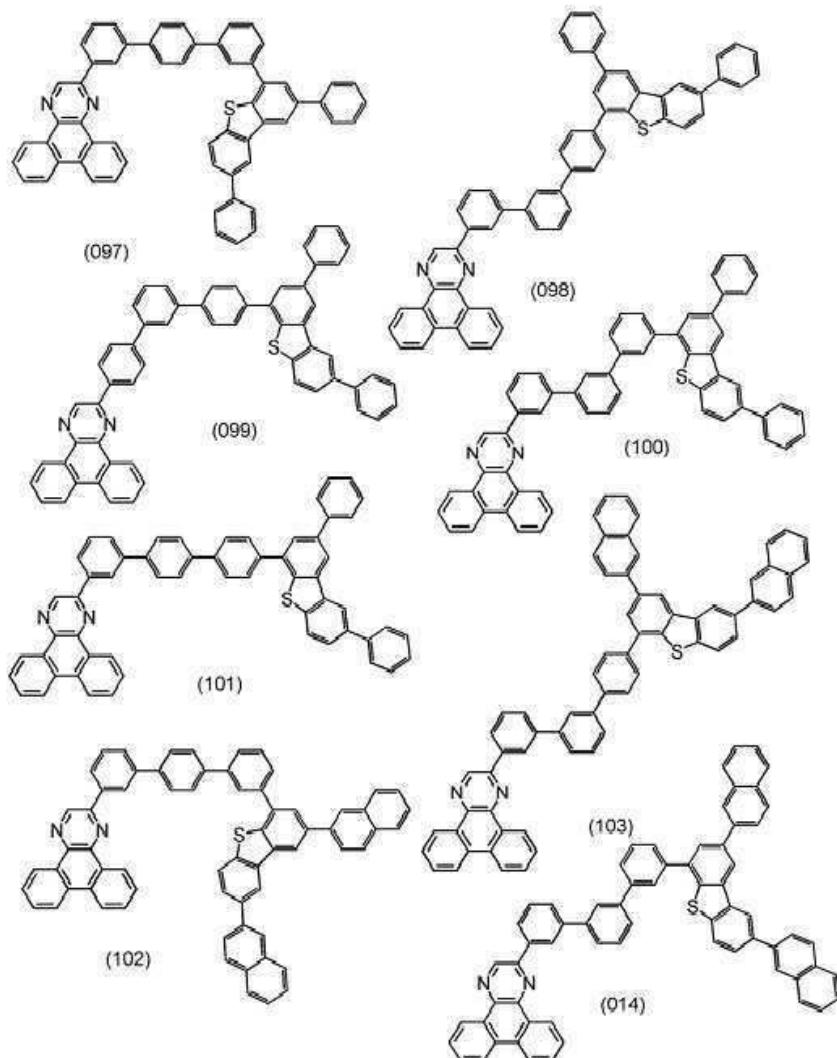
[화학식 87]



[0370]

[0371]

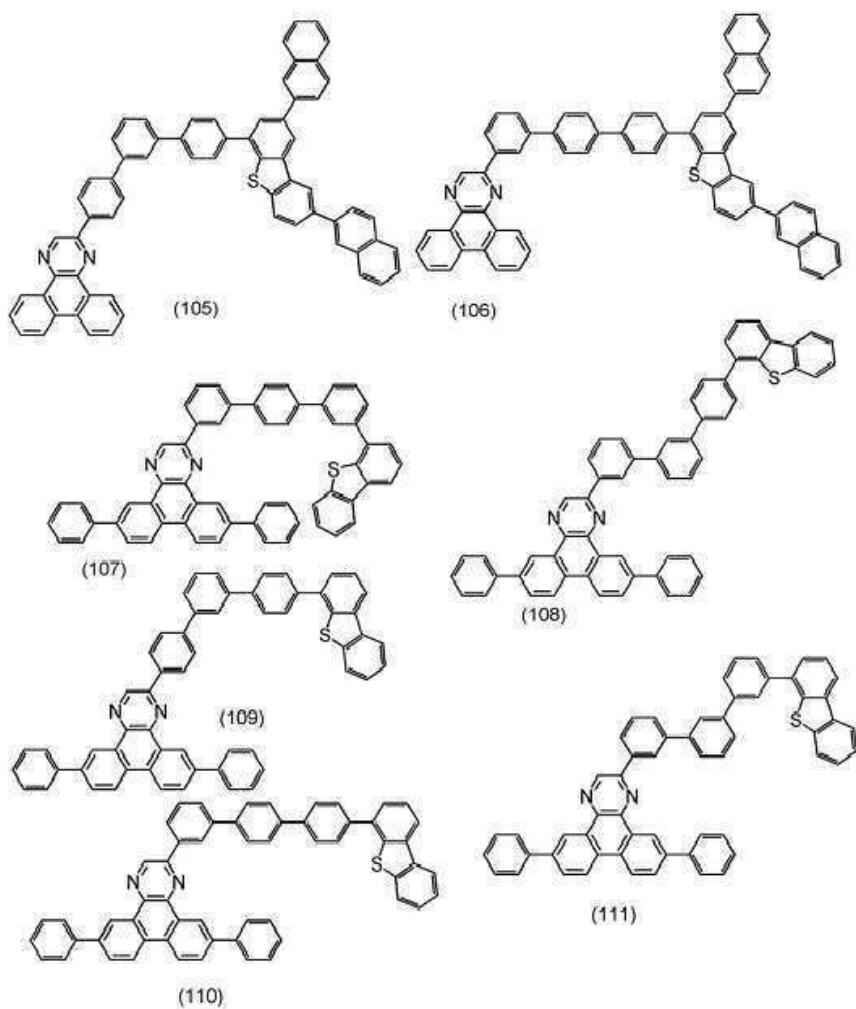
[화학식 88]



[0372]

[0373]

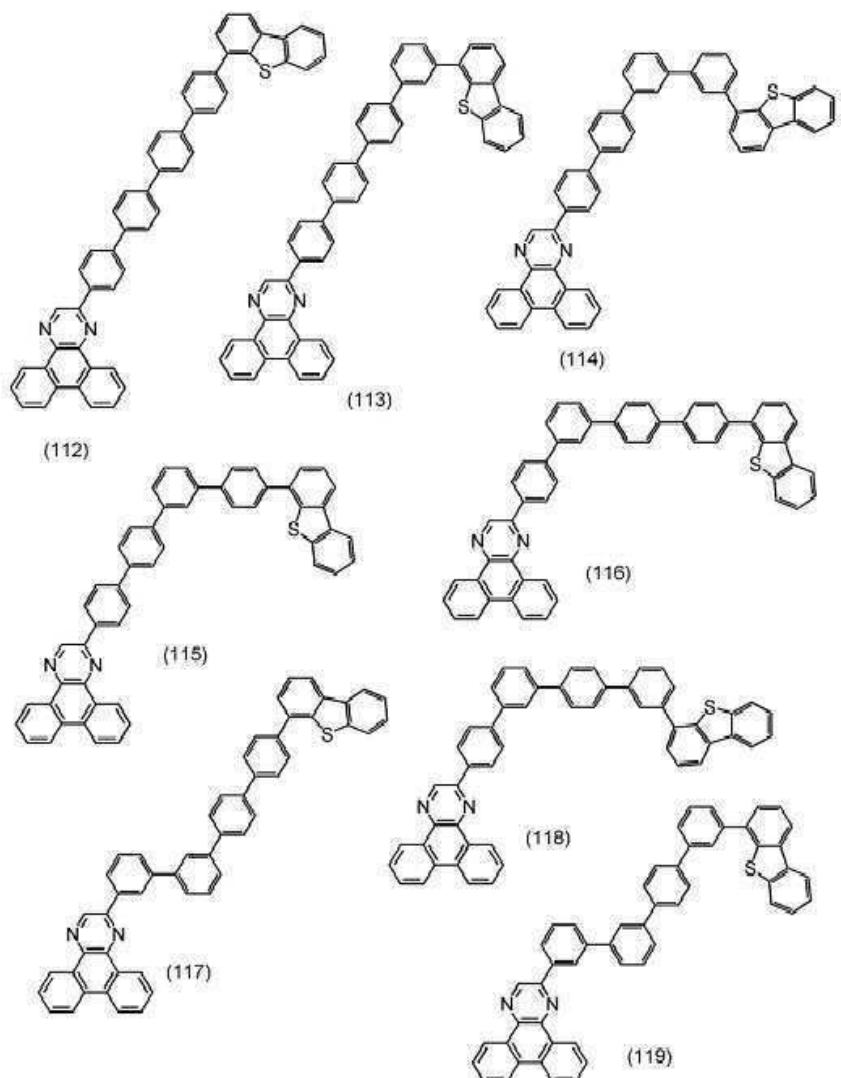
[화학식 89]



[0374]

[0375]

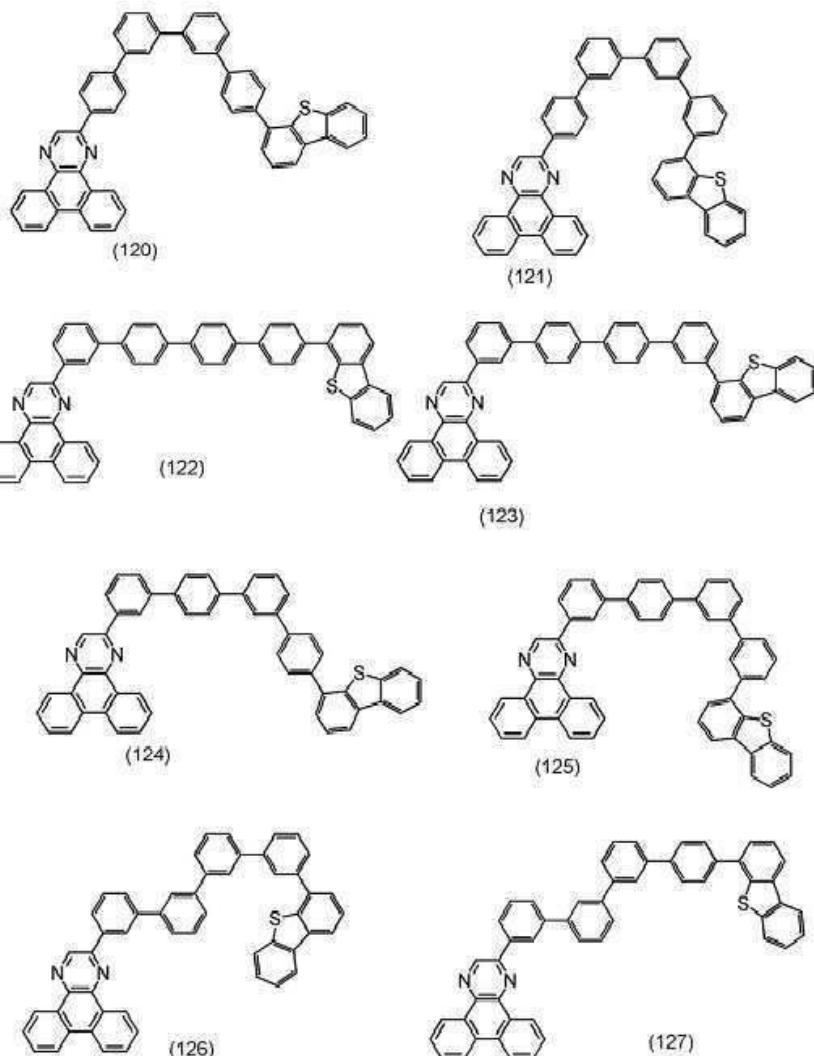
[화학식 90]



[0376]

[0377]

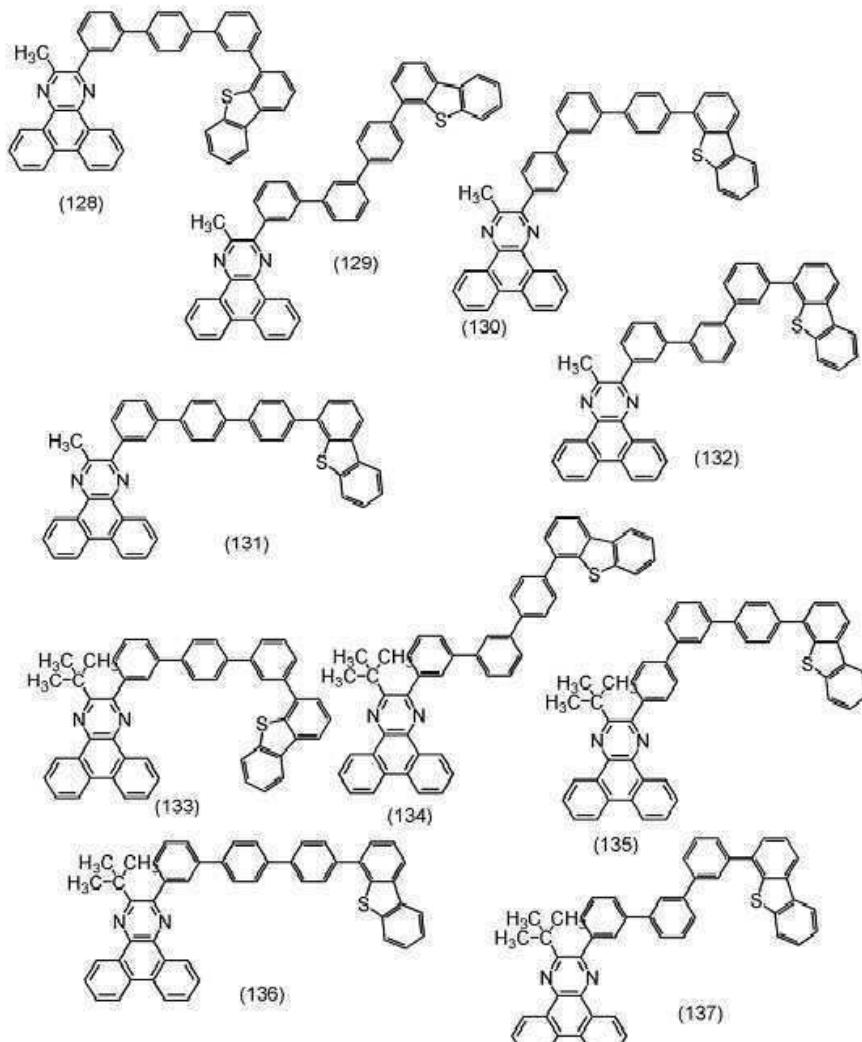
[화학식 91]



[0378]

[0379]

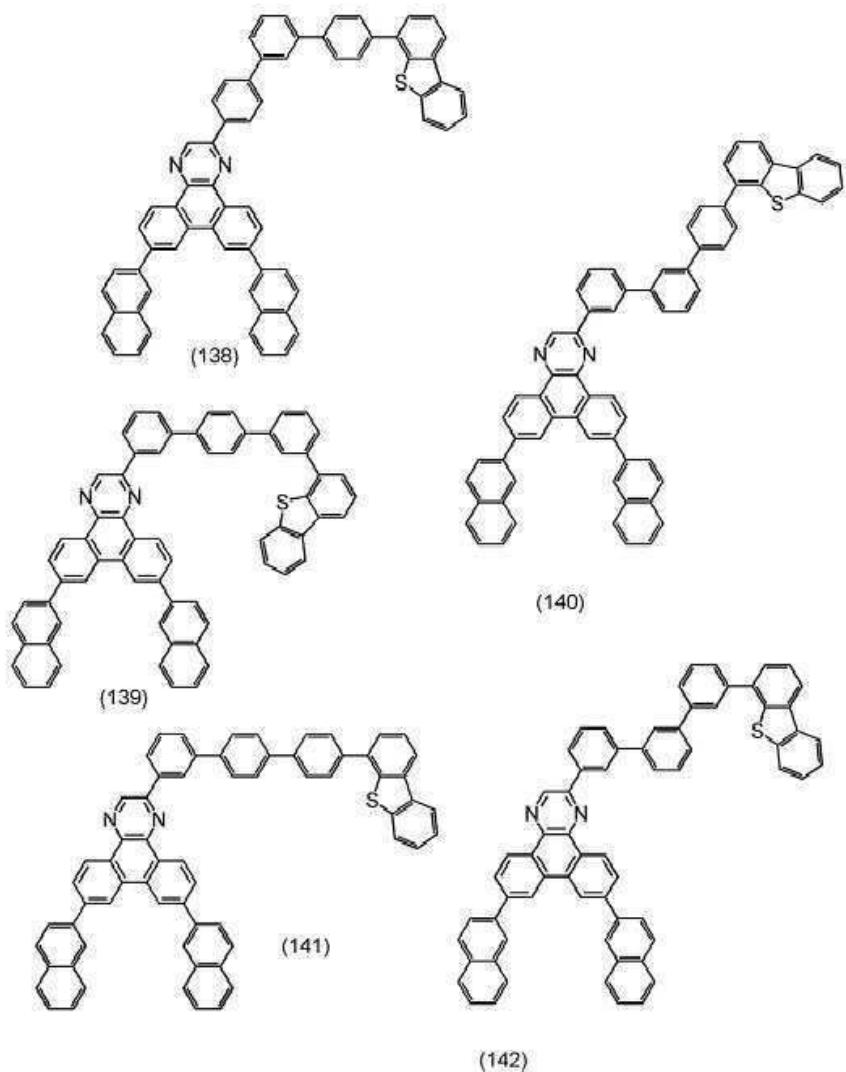
[화학식 92]



[0380]

[0381]

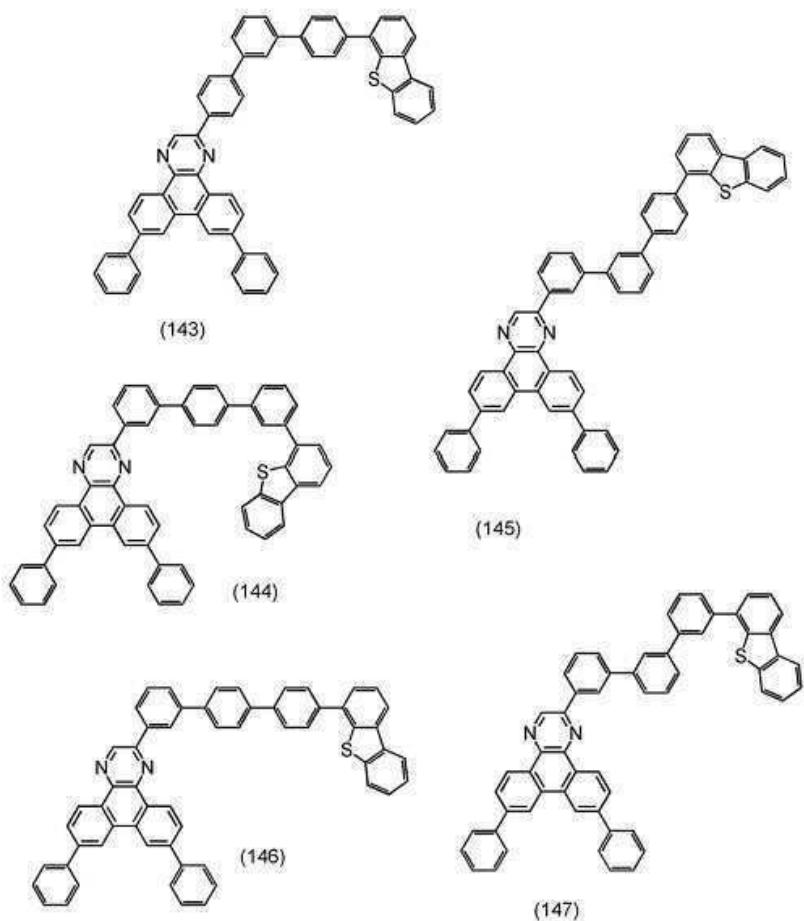
[화학식 93]



[0382]

[0383]

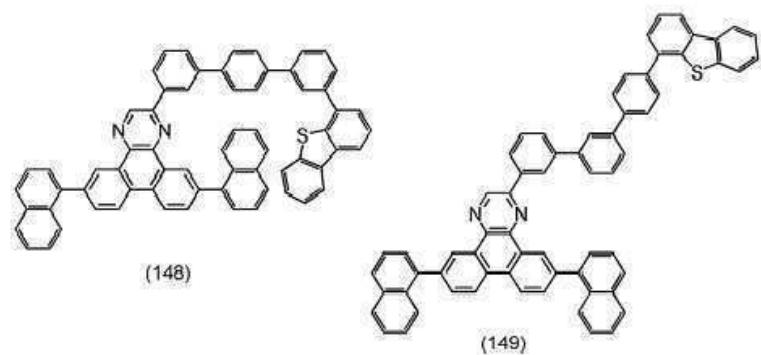
[화학식 94]



[0384]

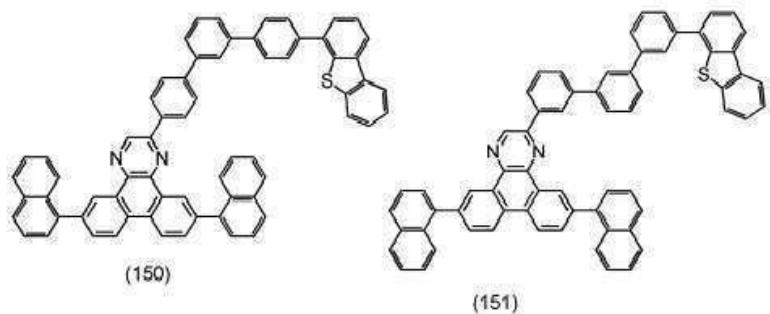
[0385]

[화학식 95]



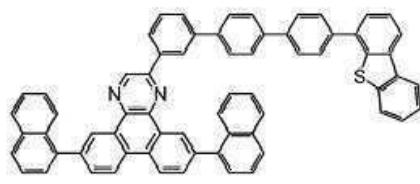
(148)

(149)



(150)

(151)

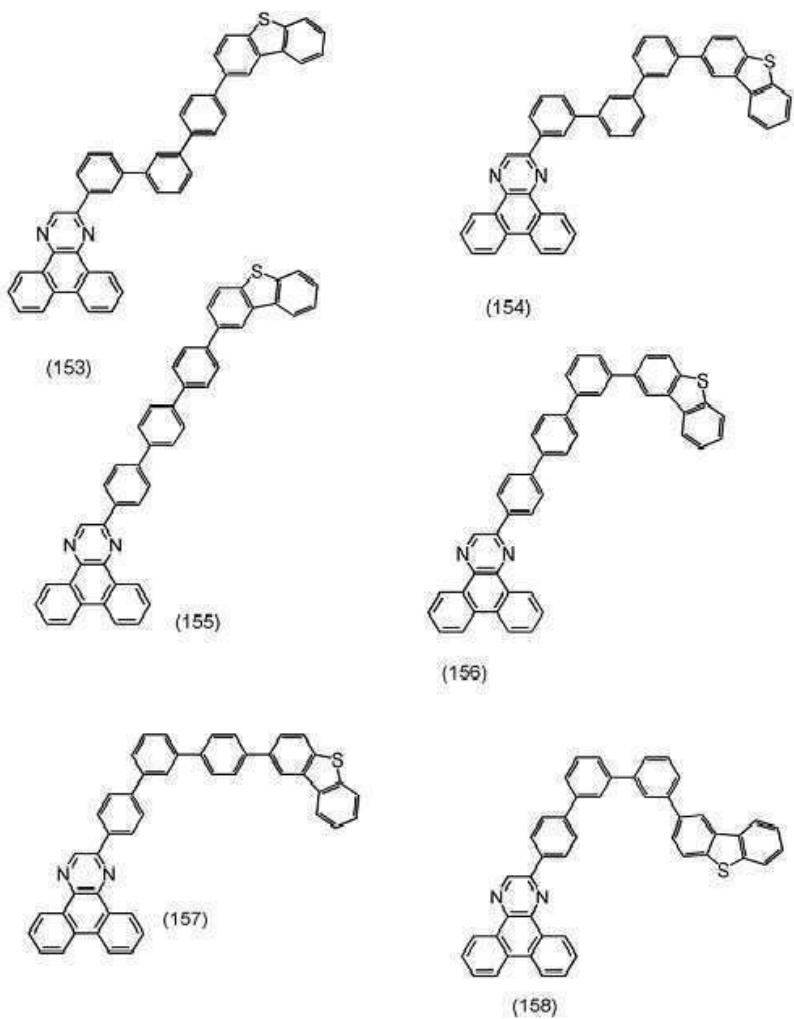


(152)

[0386]

[0387]

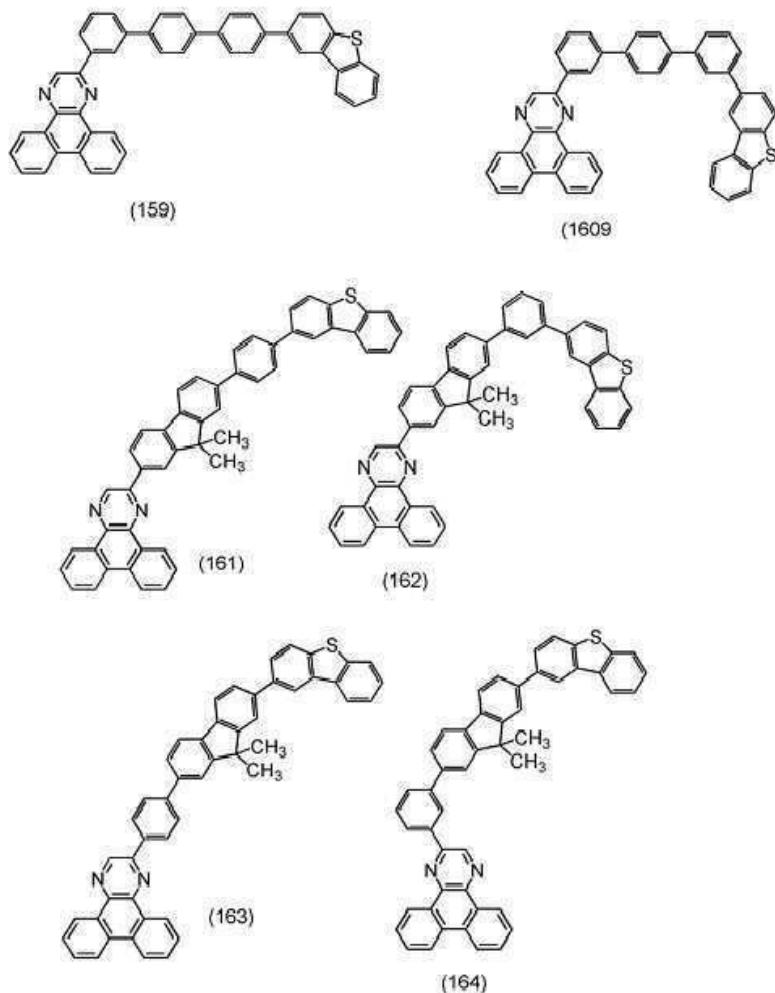
[화학식 96]



[0388]

[0389]

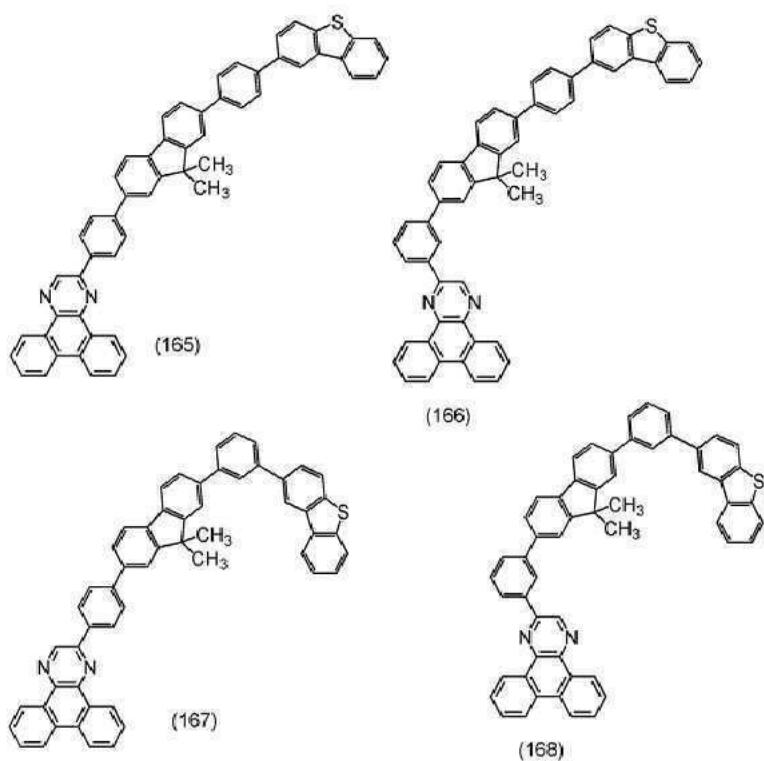
[화학식 97]



[0390]

[0391]

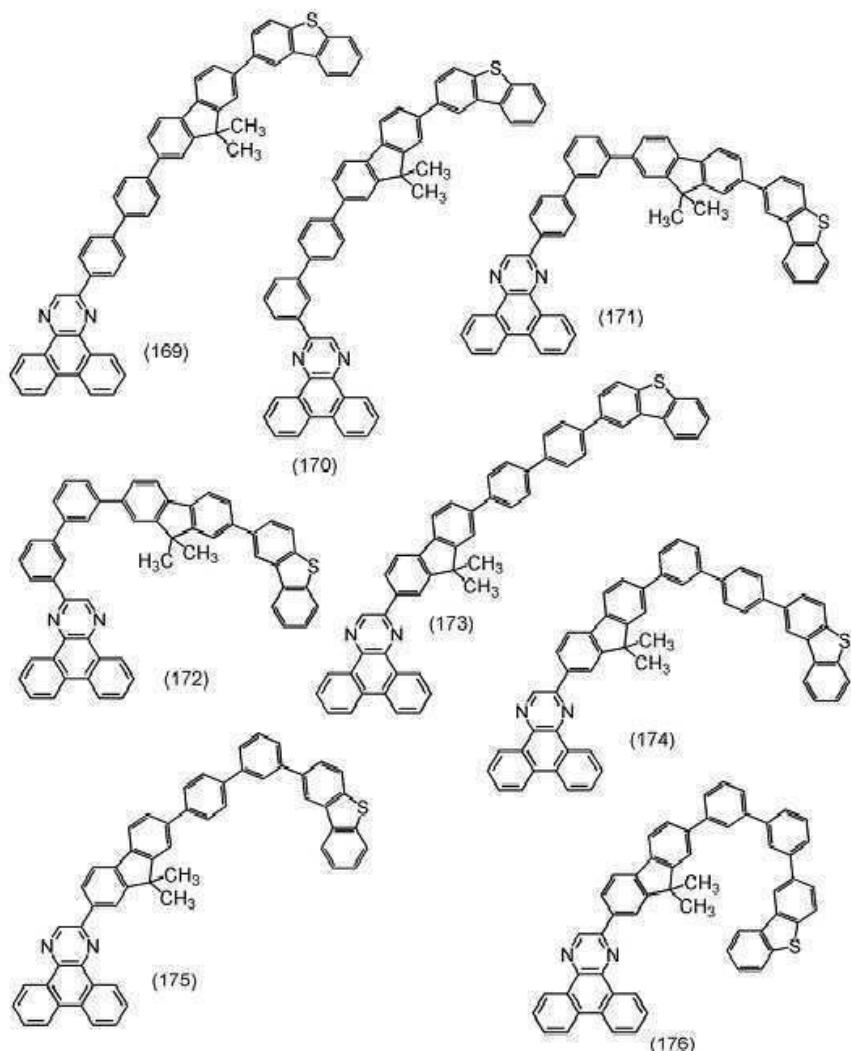
[화학식 98]



[0392]

[0393]

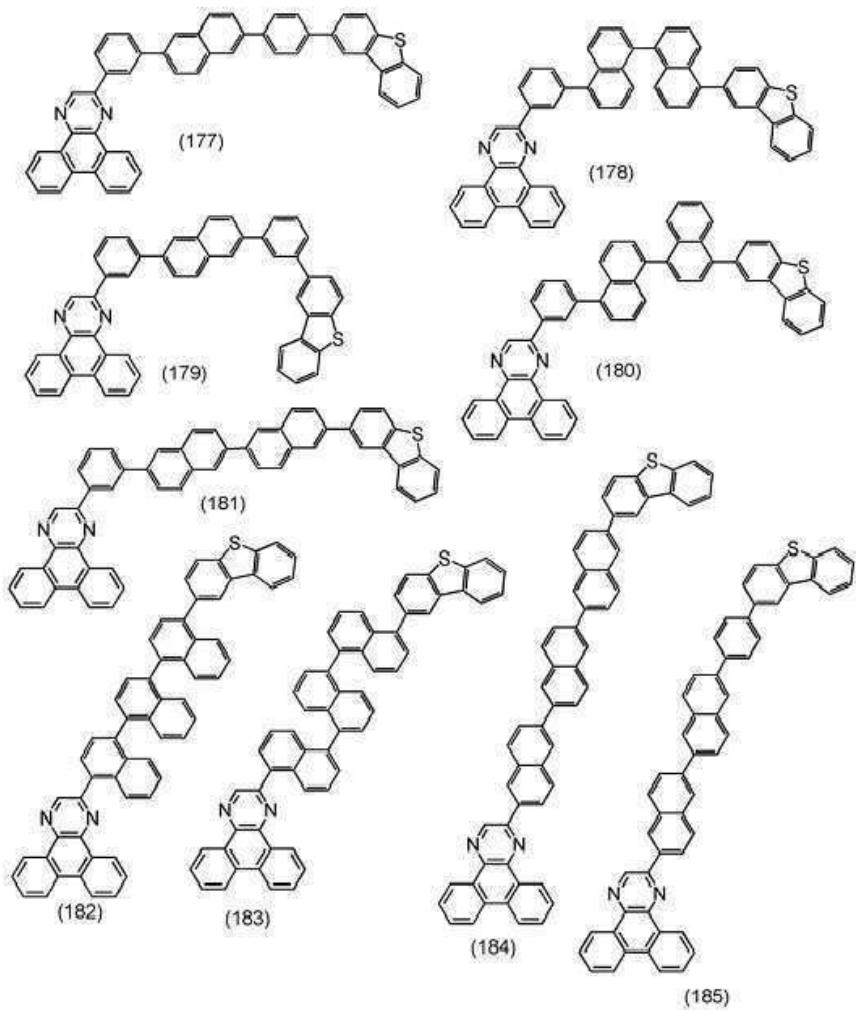
[화학식 99]



[0394]

[0395]

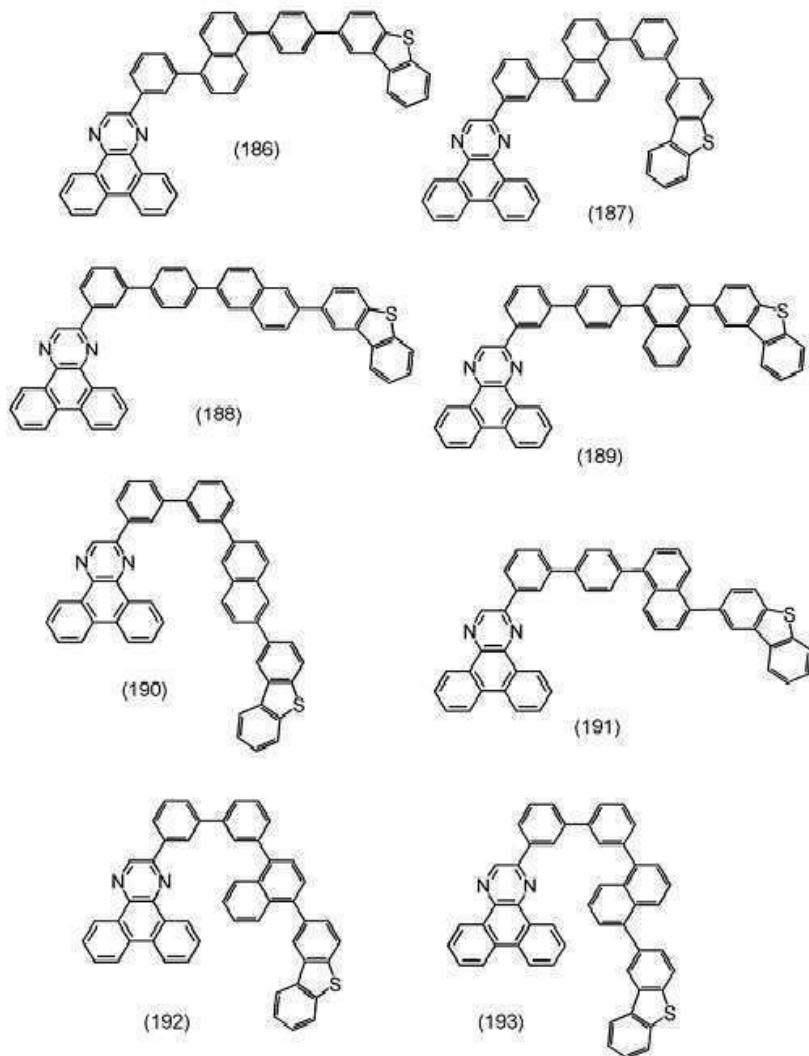
[화학식 100]



[0396]

[0397]

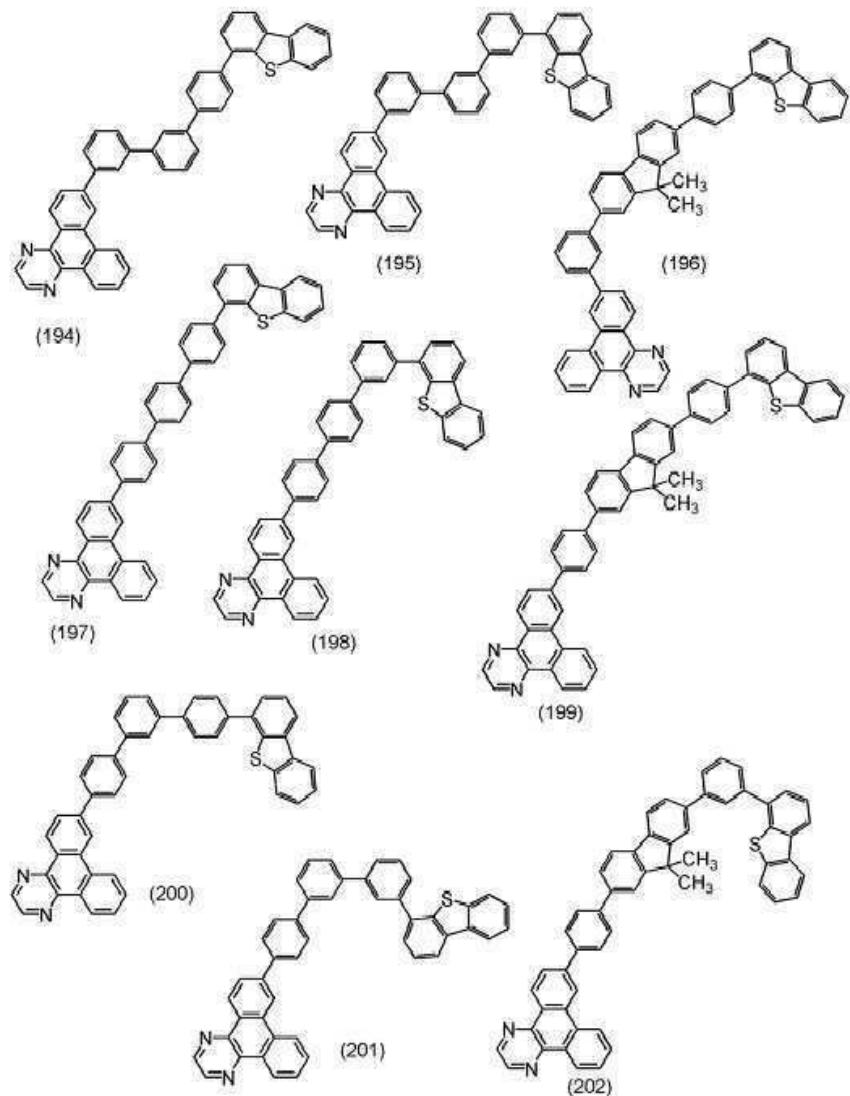
[화학식 101]



[0398]

[0399]

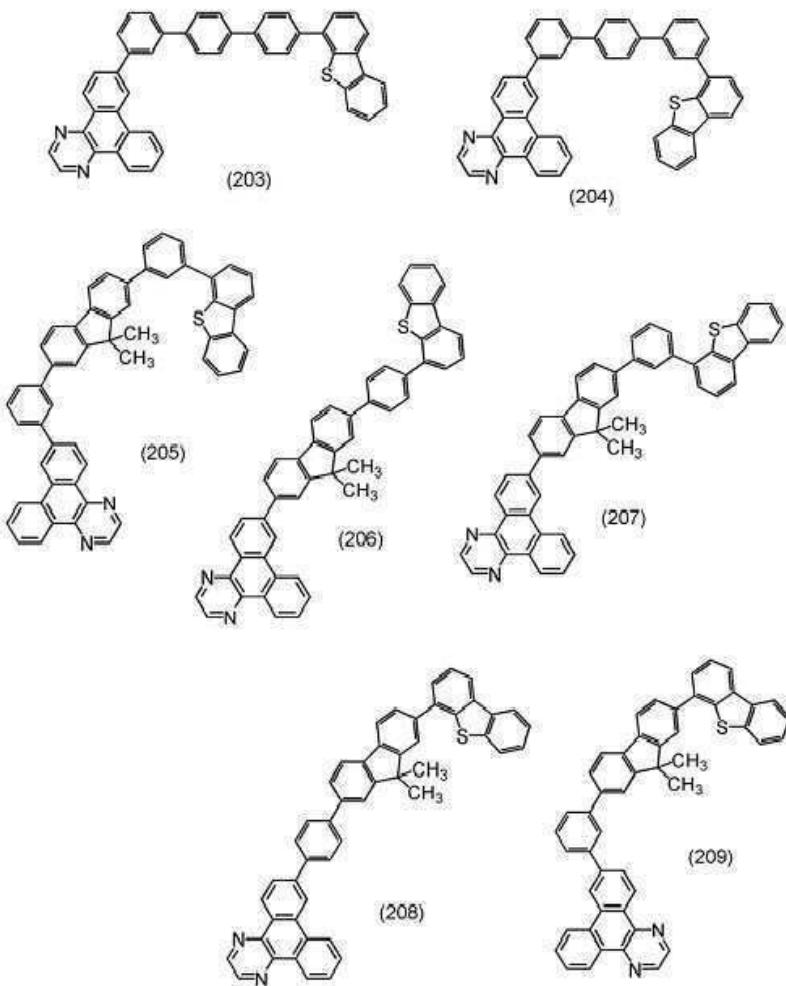
[화학식 102]



[0400]

[0401]

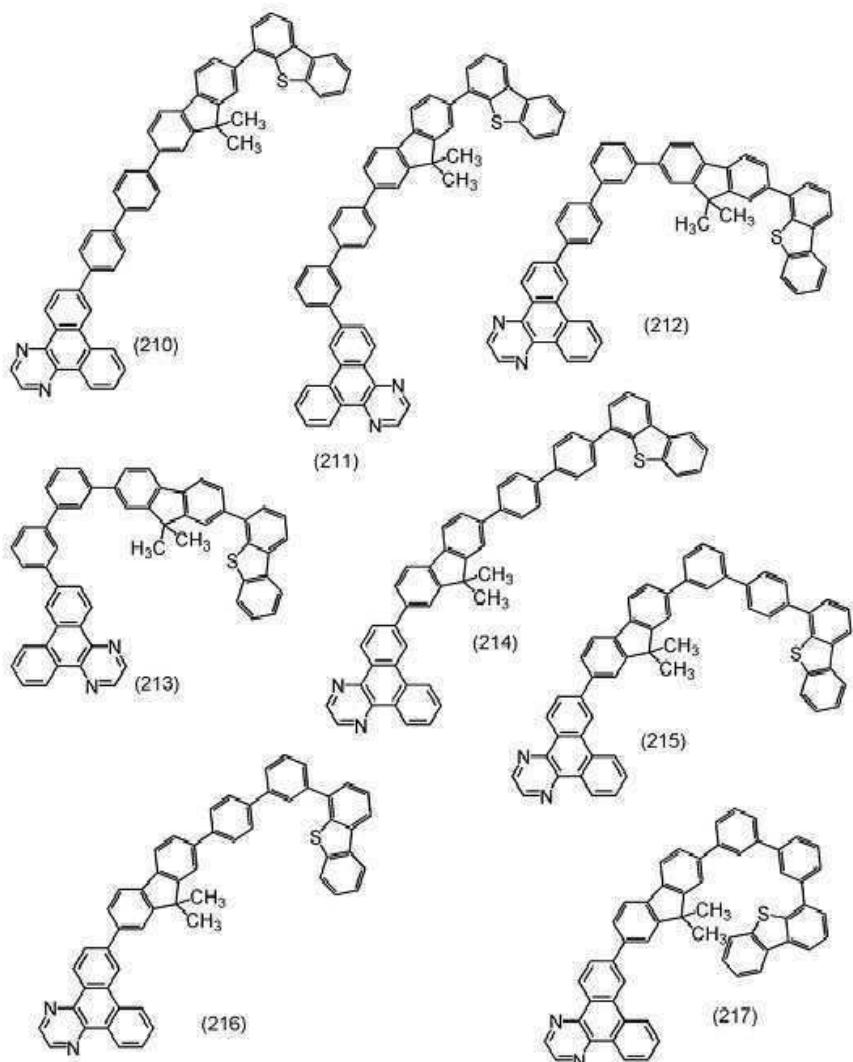
[화학식 103]



[0402]

[0403]

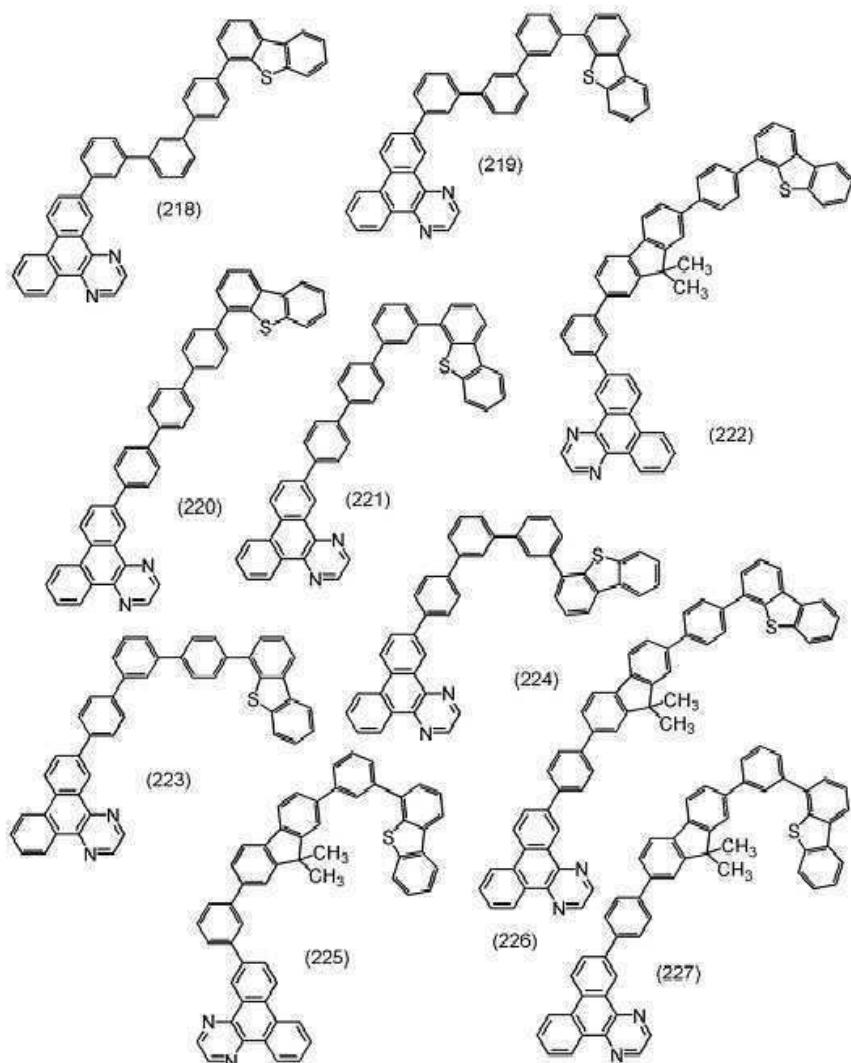
[화학식 104]



[0404]

[0405]

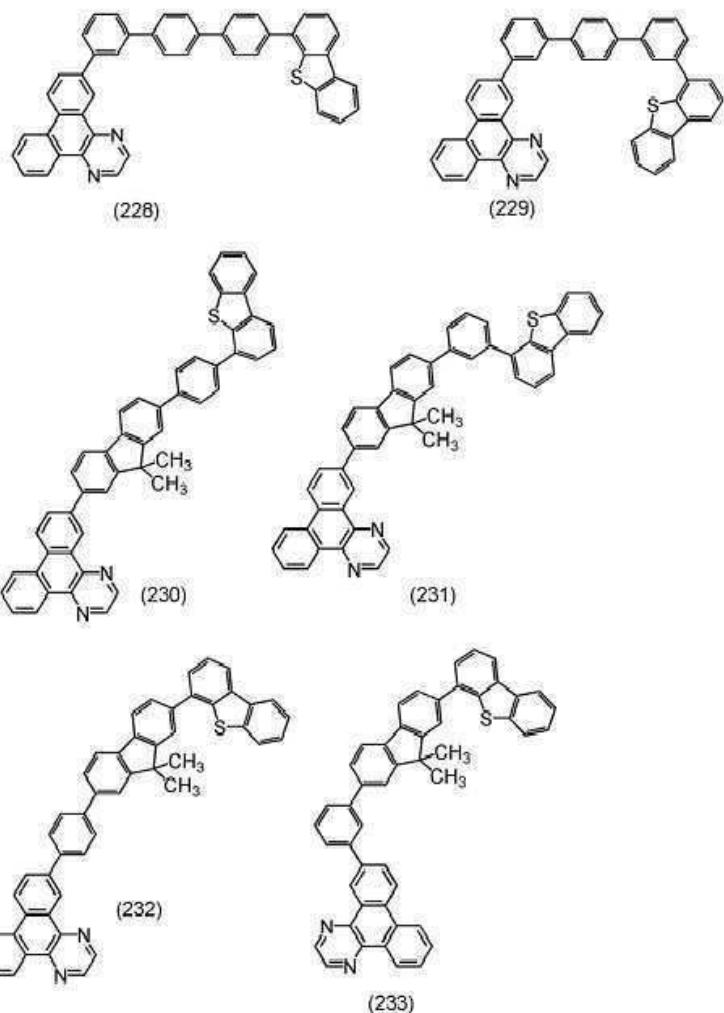
[화학식 105]



[0406]

[0407]

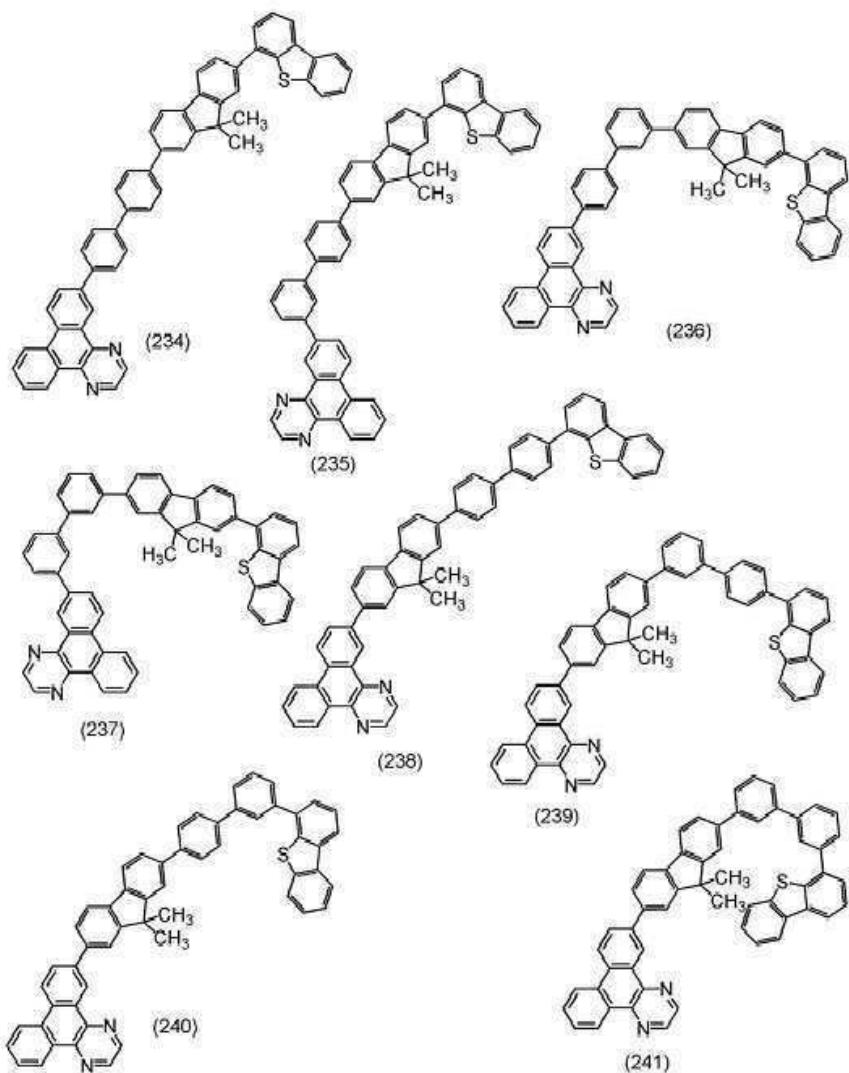
[화학식 106]



[0408]

[0409]

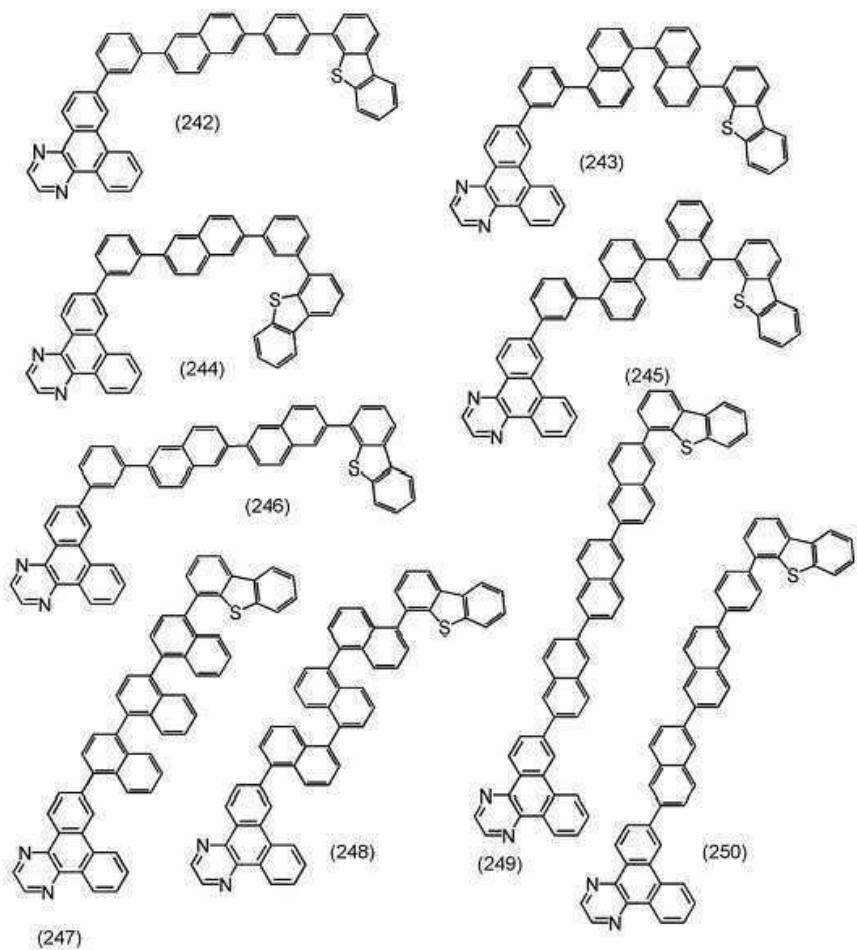
[화학식 107]



[0410]

[0411]

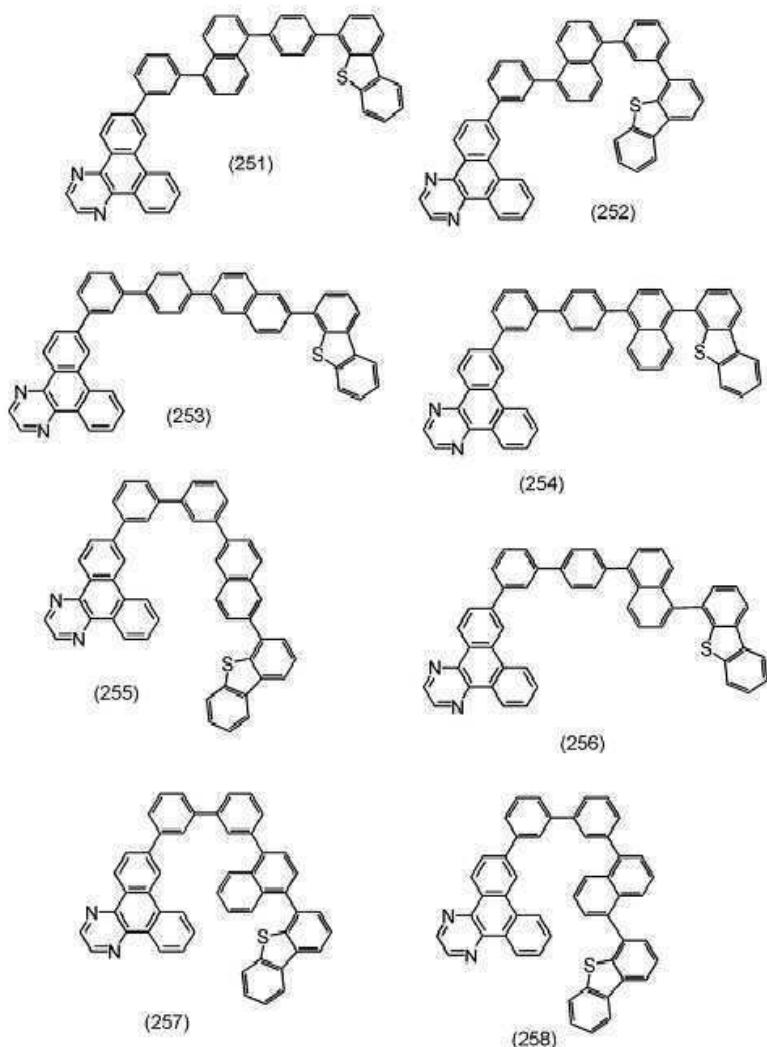
[화학식 108]



[0412]

[0413]

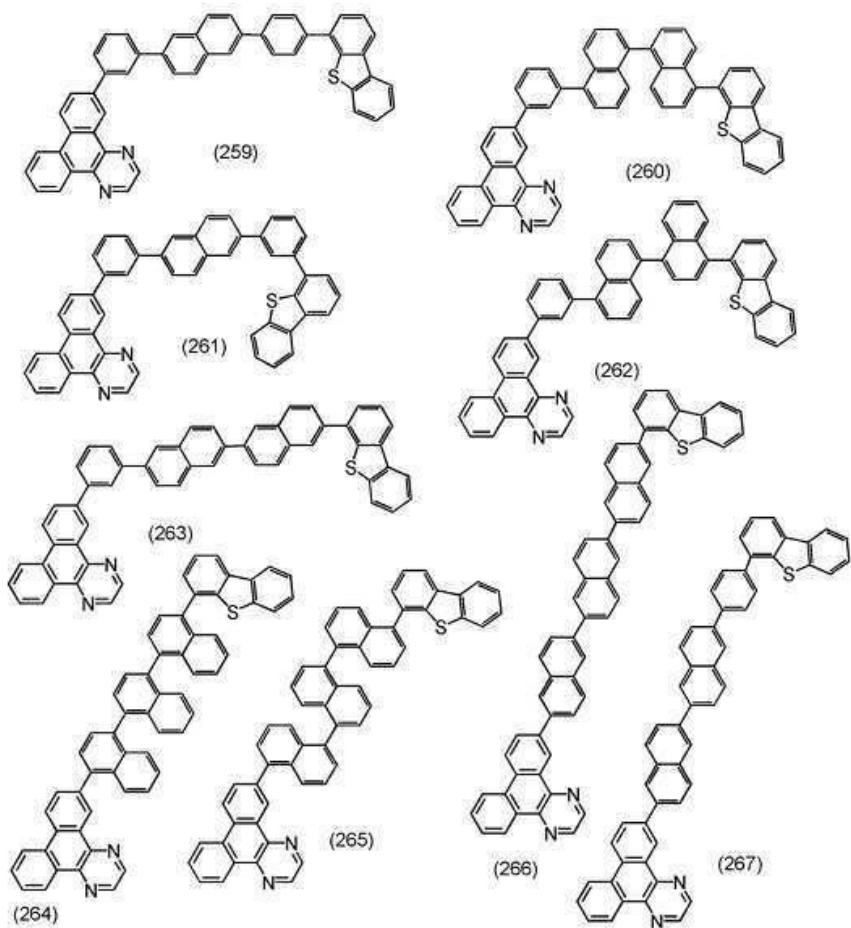
[화학식 109]



[0414]

[0415]

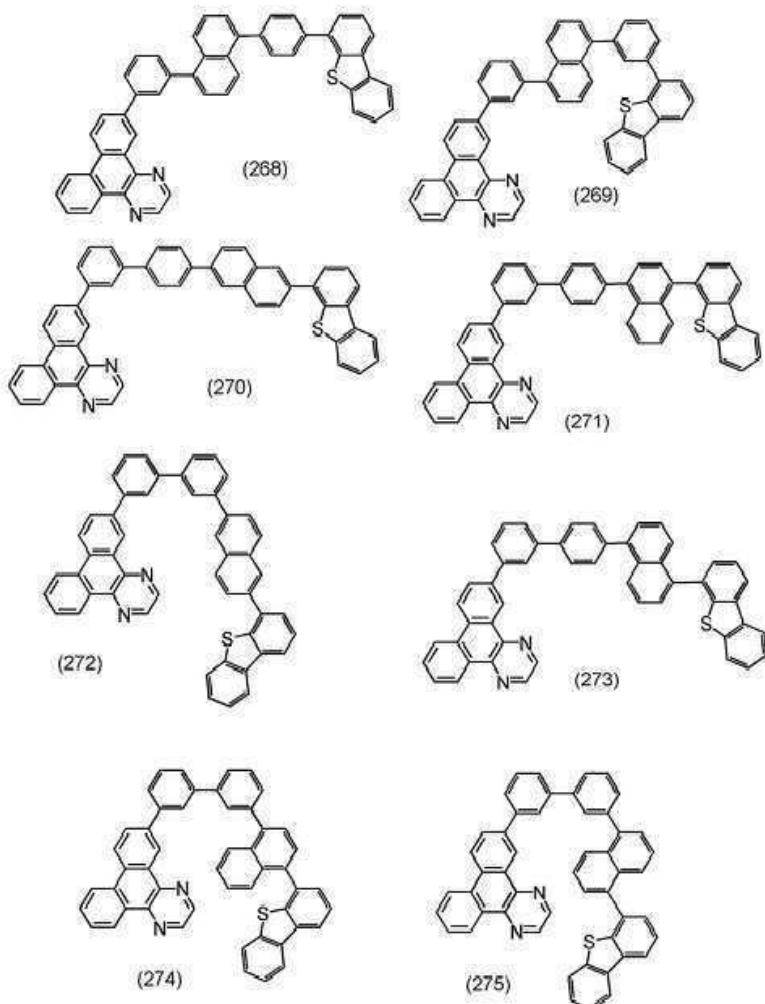
[화학식 110]



[0416]

[0417]

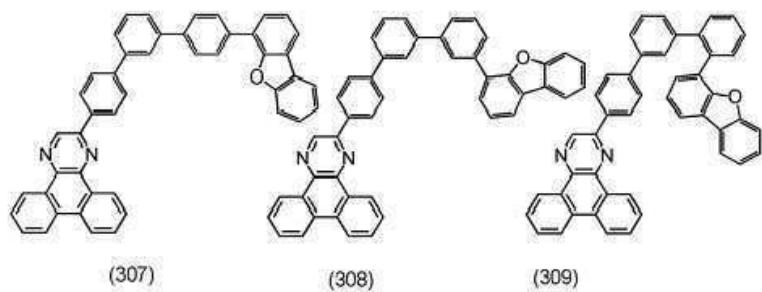
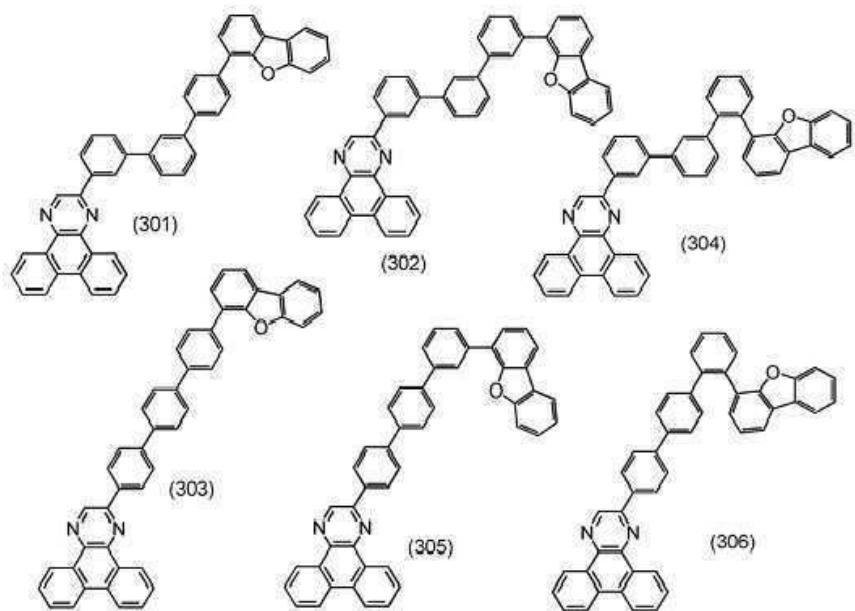
[화학식 111]



[0418]

[0419]

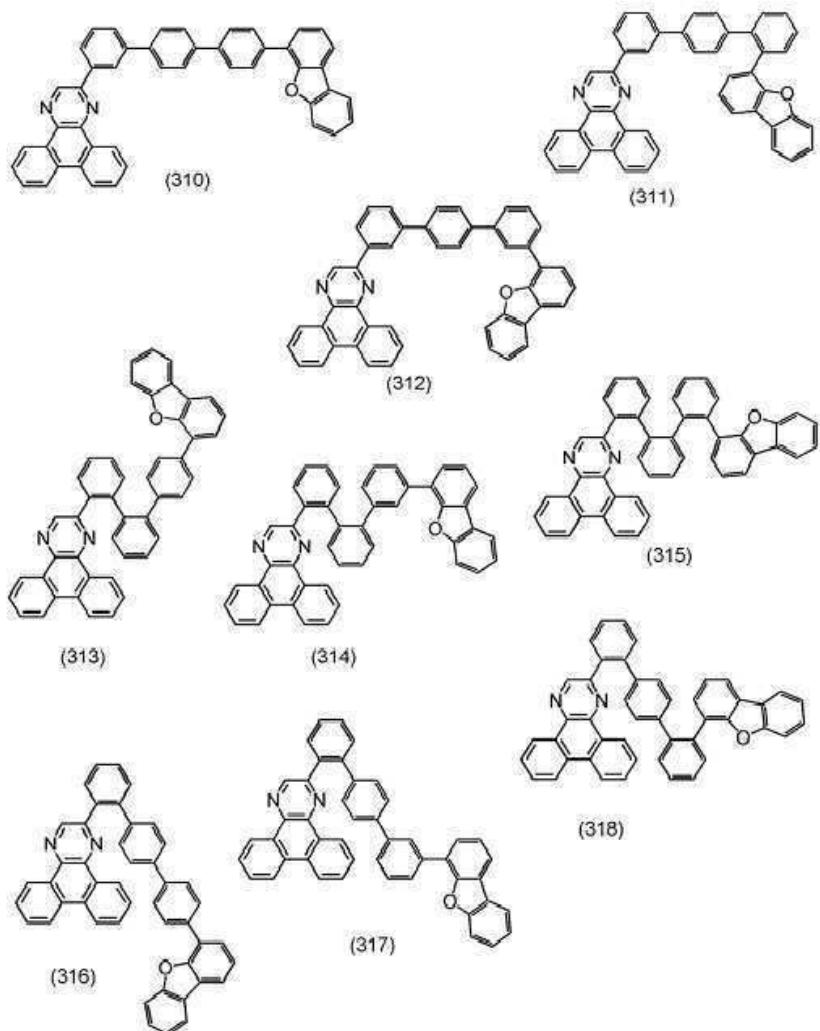
[화학식 112]



[0420]

[0421]

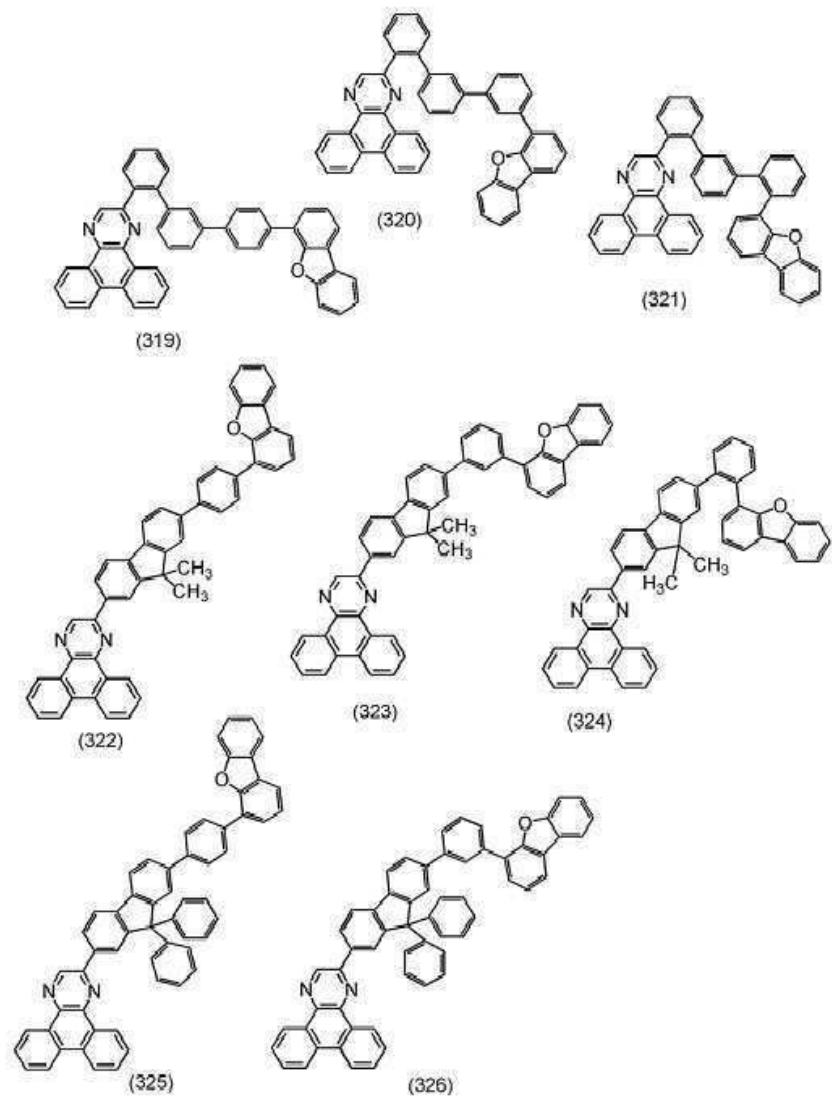
[화학식 113]



[0422]

[0423]

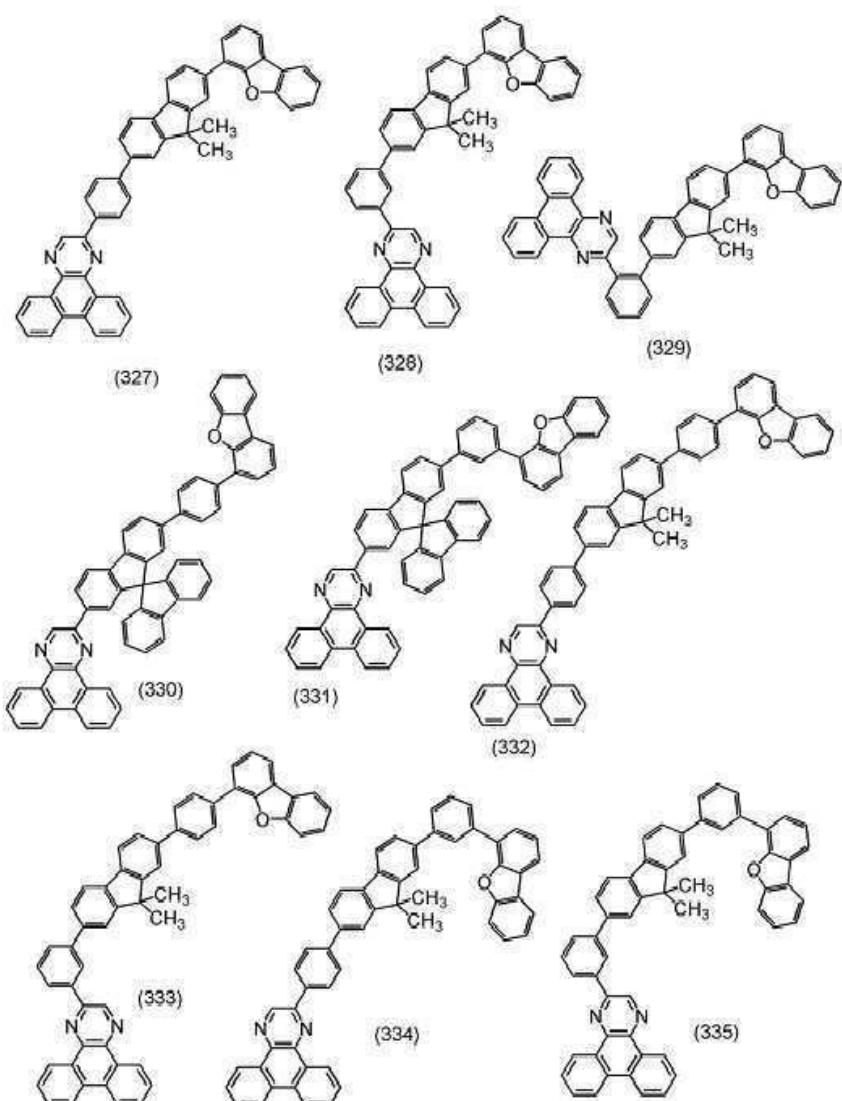
[화학식 114]



[0424]

[0425]

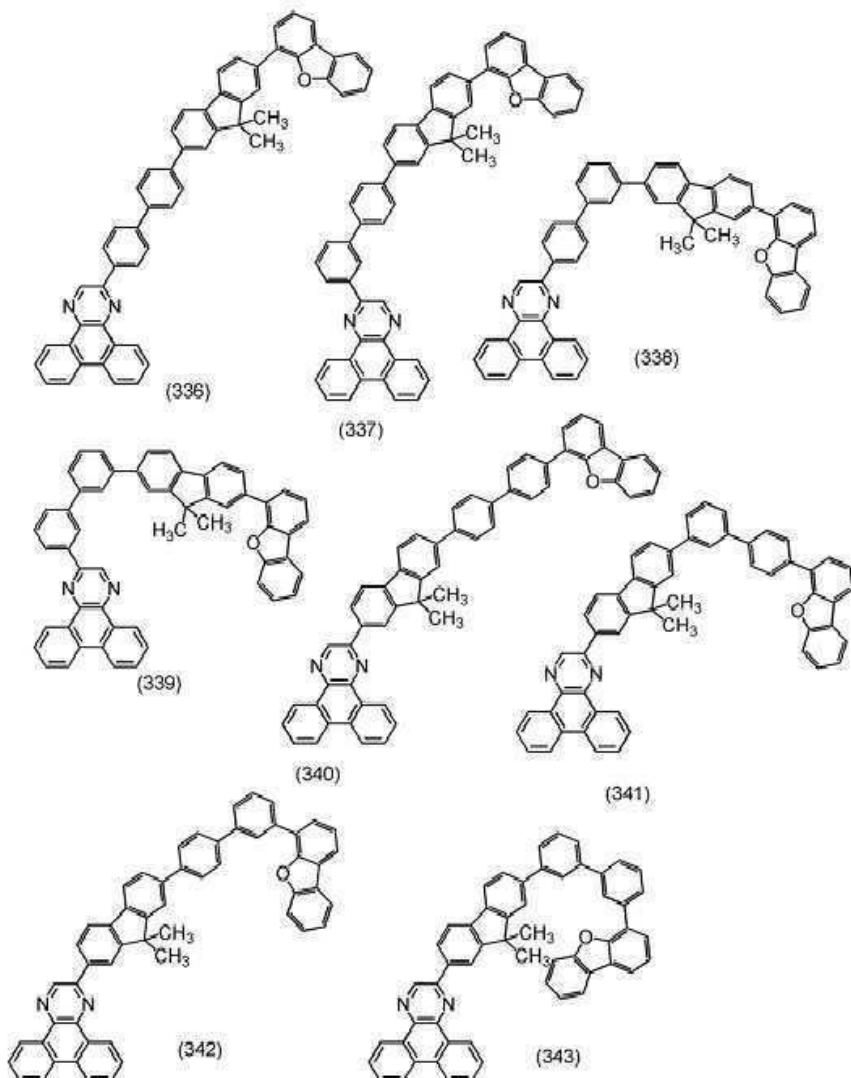
[화학식 115]



[0426]

[0427]

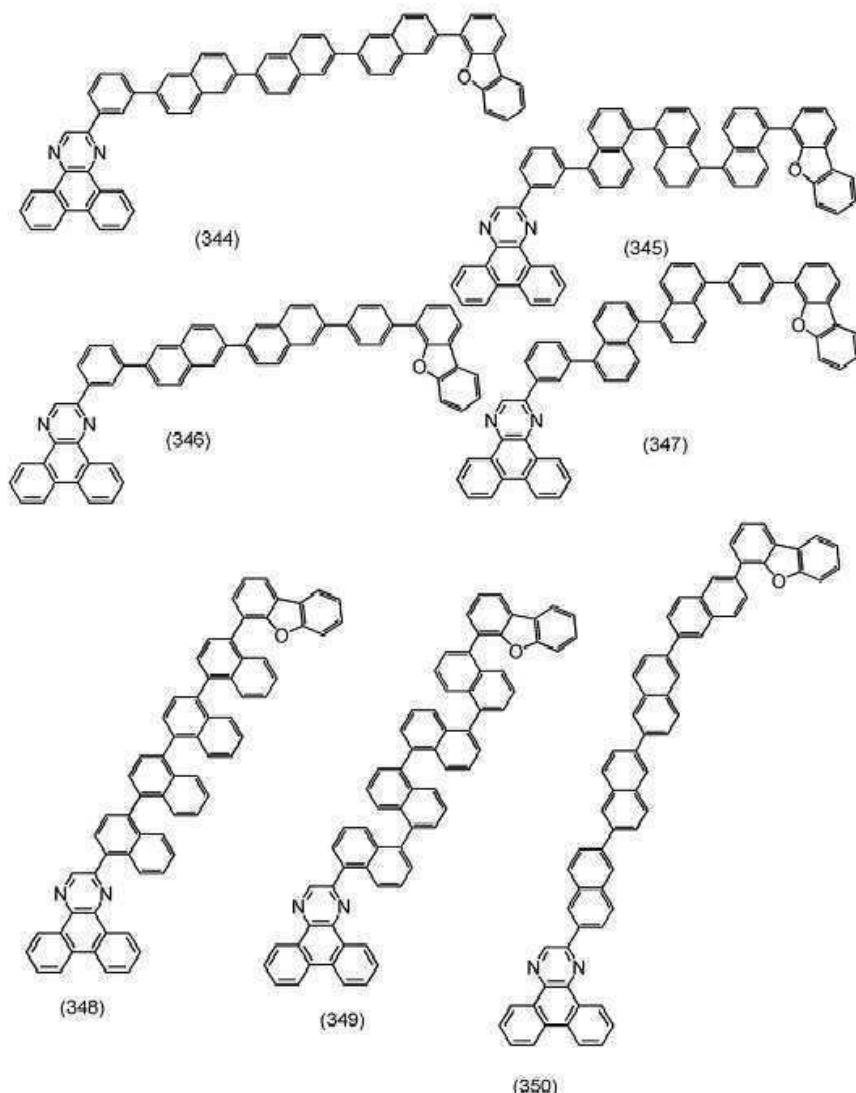
[화학식 116]



[0428]

[0429]

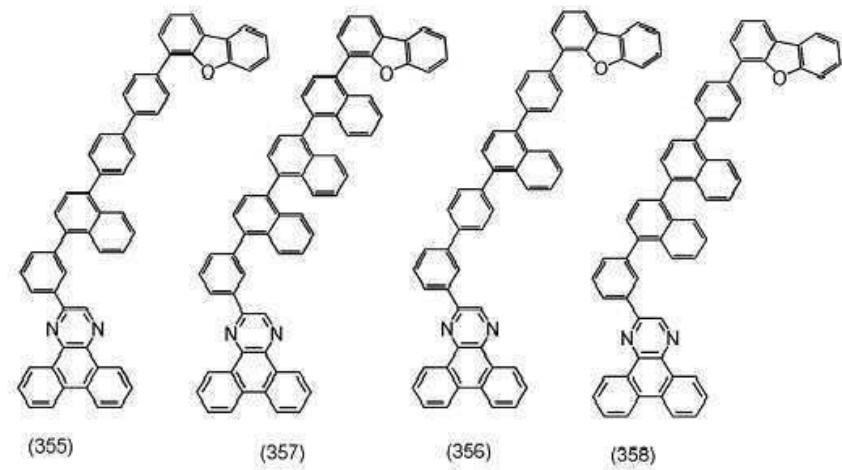
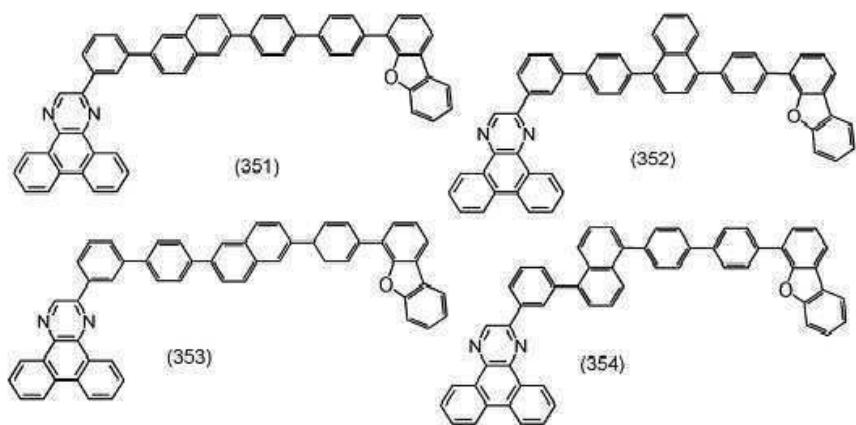
[화학식 117]



[0430]

[0431]

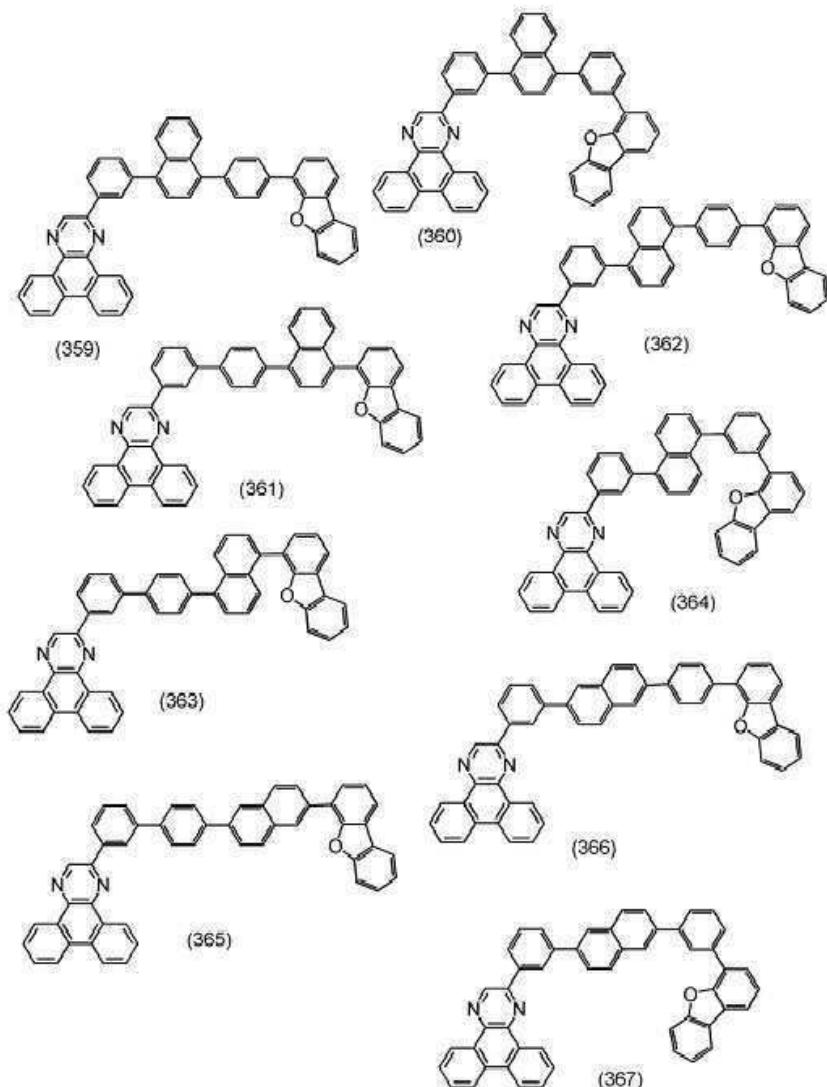
[화학식 118]



[0432]

[0433]

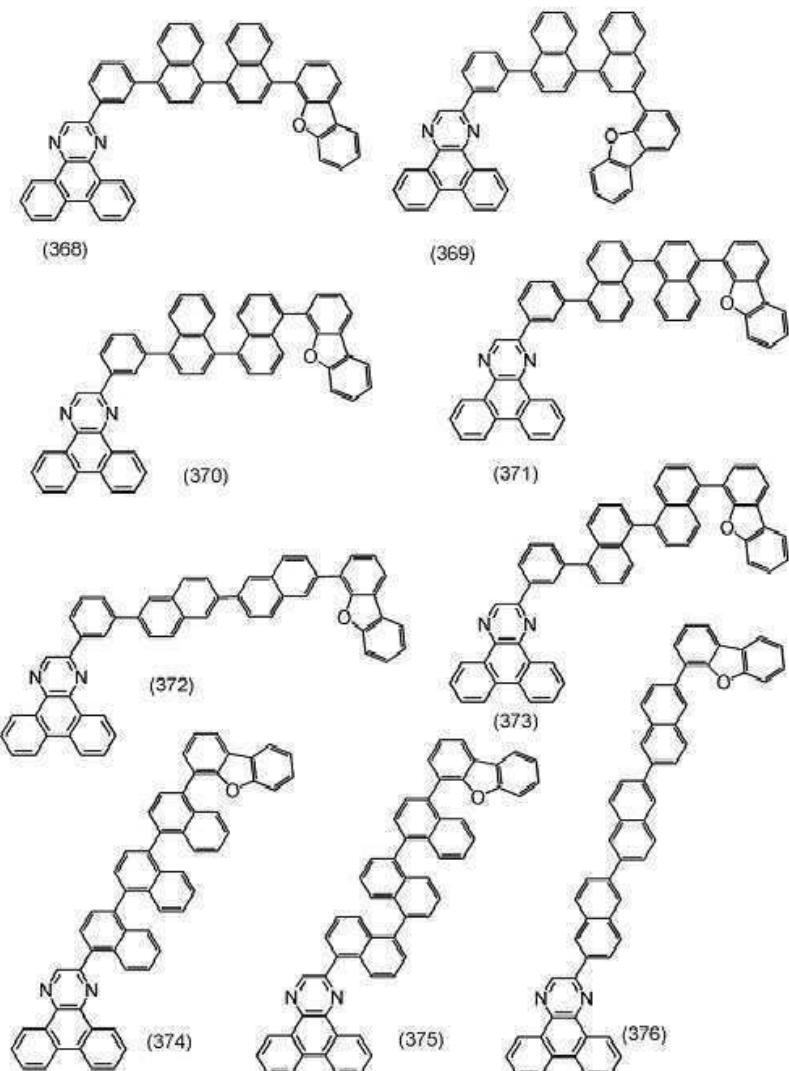
[화학식 119]



[0434]

[0435]

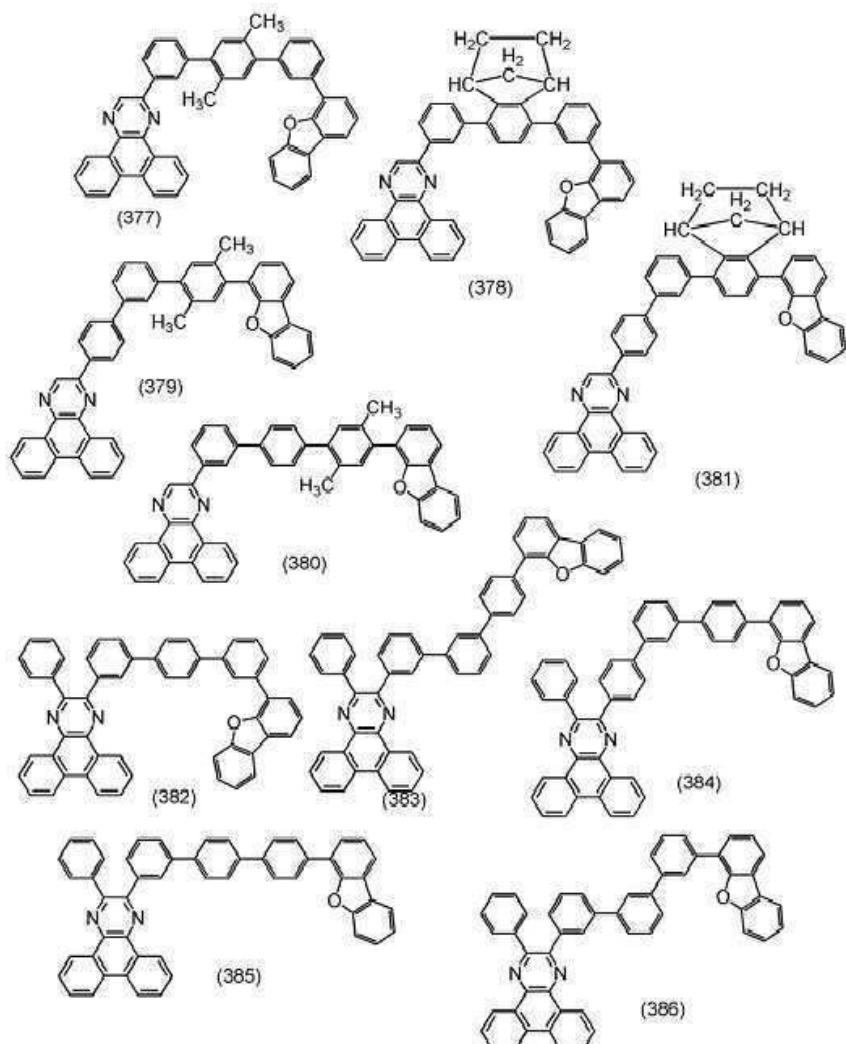
[화학식 120]



[0436]

[0437]

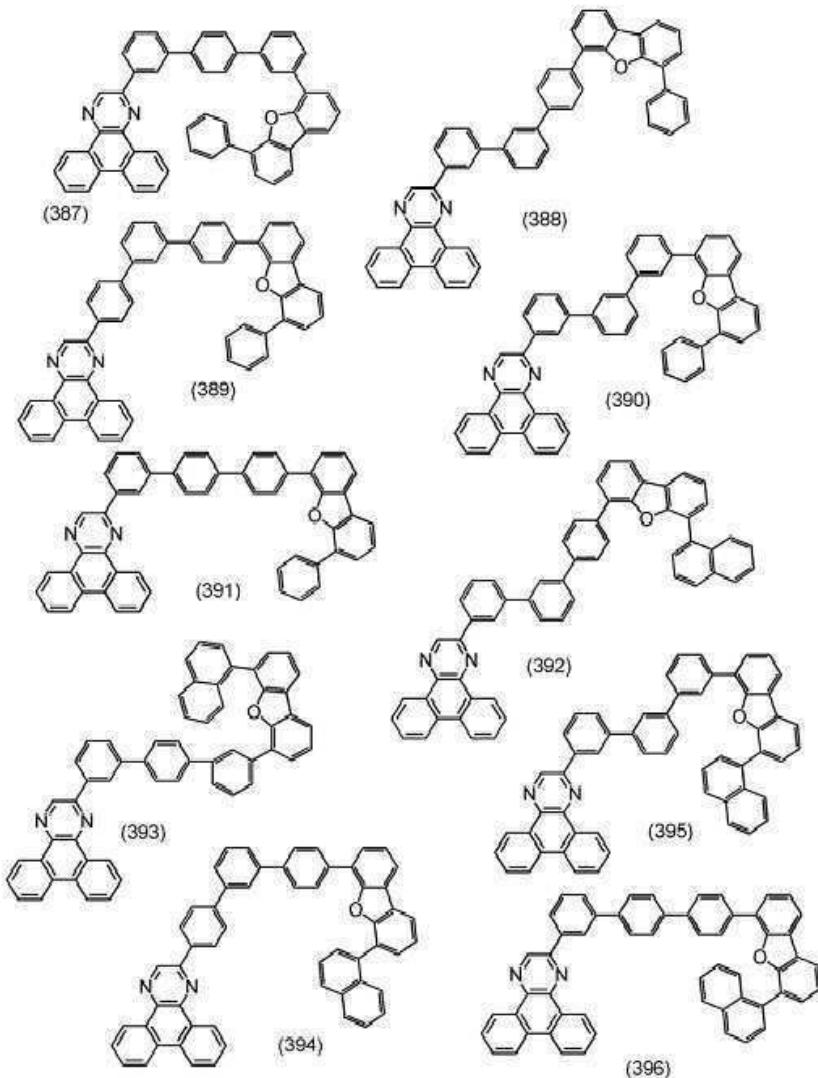
[화학식 121]



[0438]

[0439]

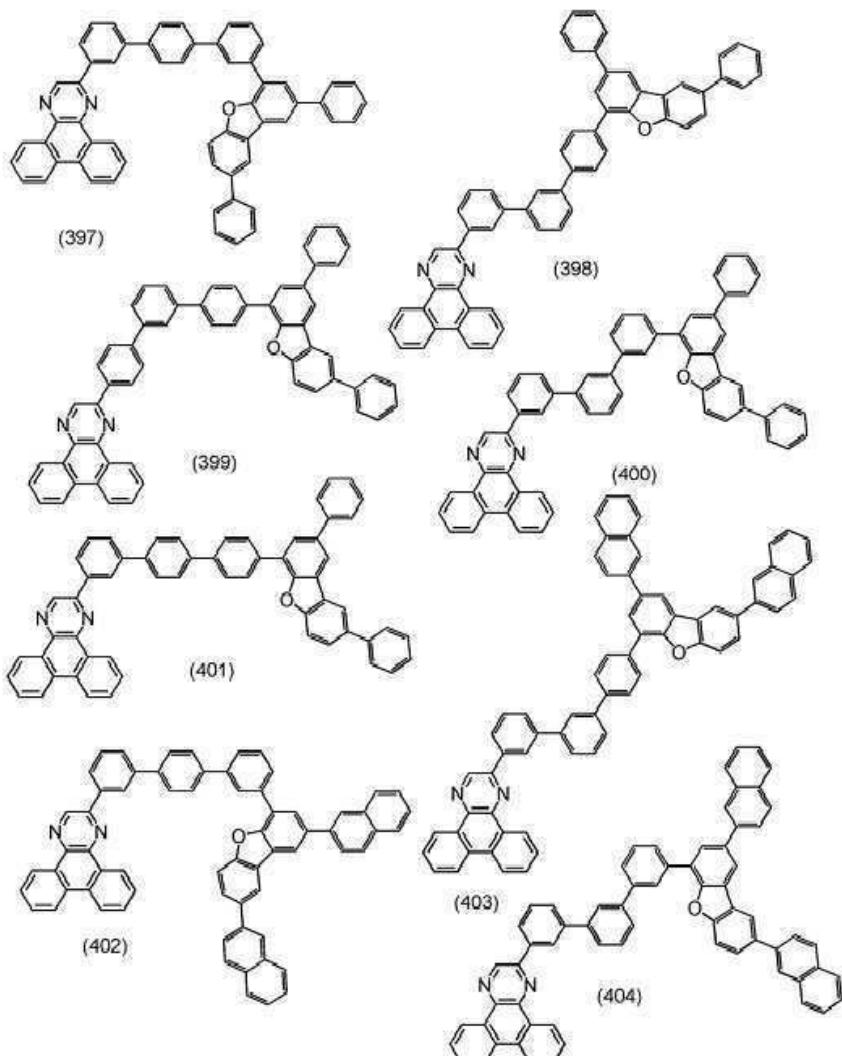
[화학식 122]



[0440]

[0441]

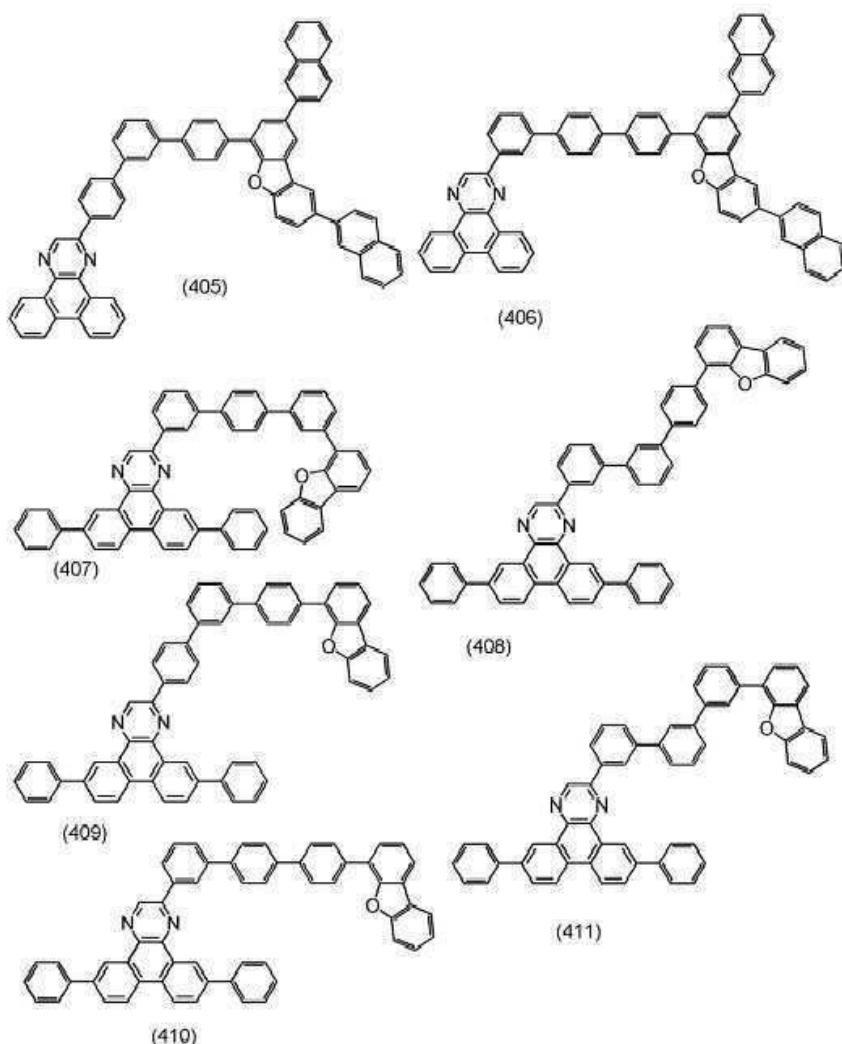
[화학식 123]



[0442]

[0443]

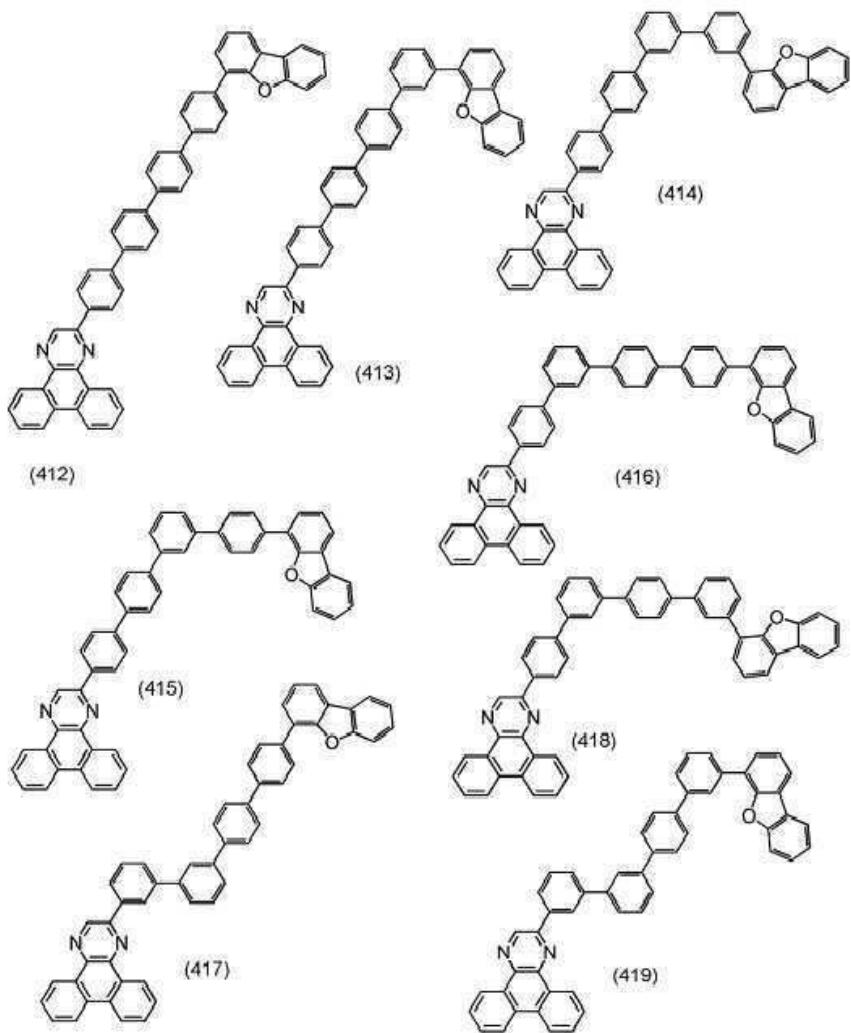
[화학식 124]



[0444]

[0445]

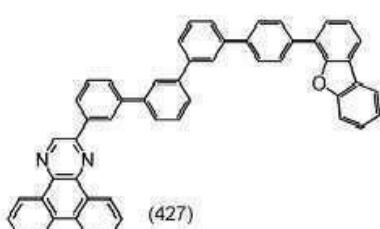
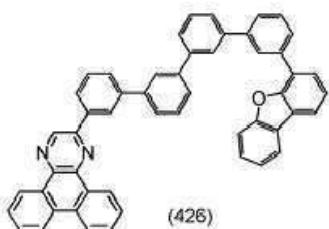
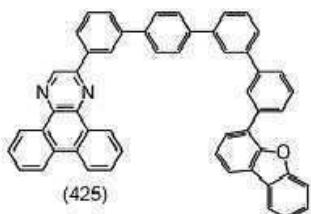
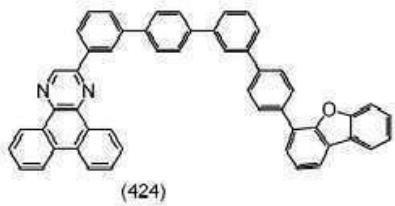
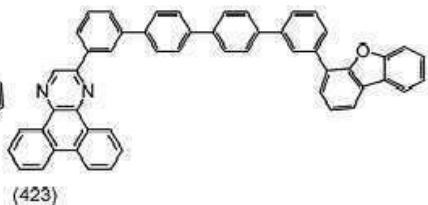
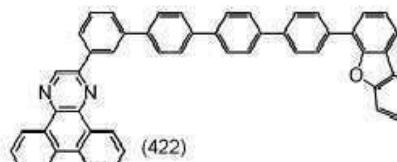
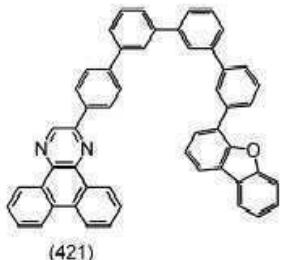
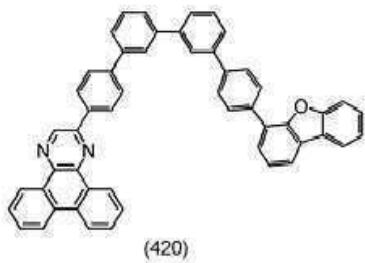
[화학식 125]



[0446]

[0447]

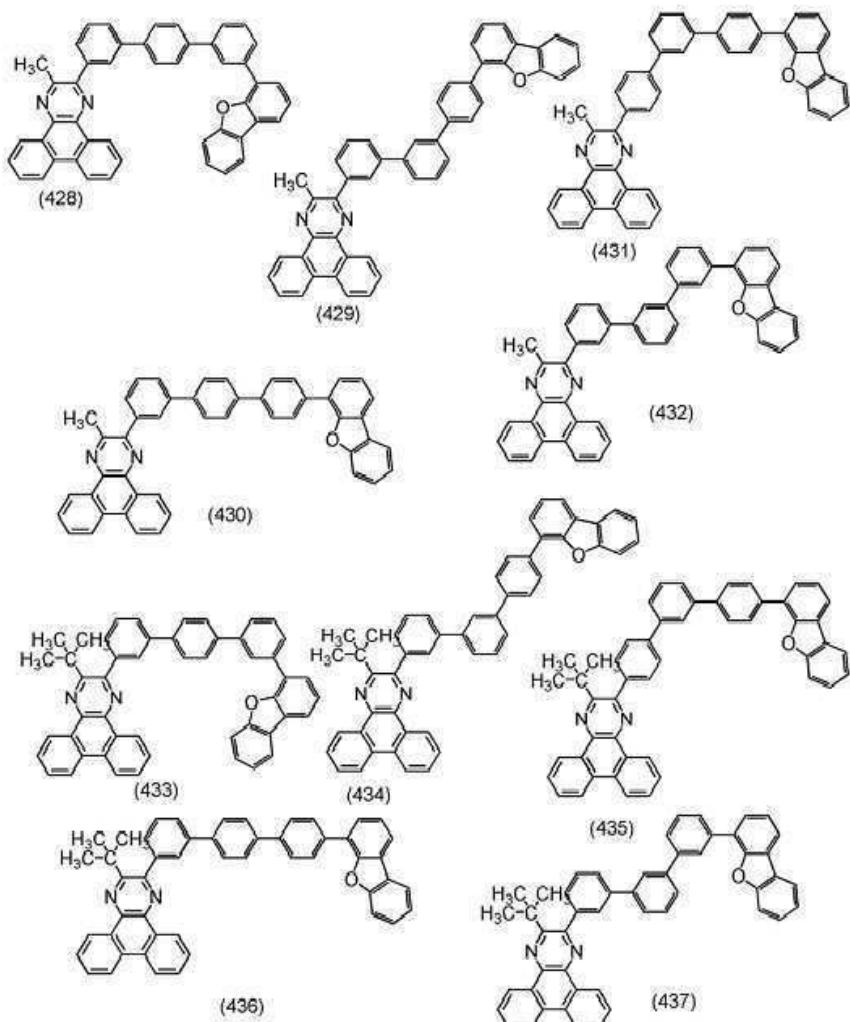
[화학식 126]



[0448]

[0449]

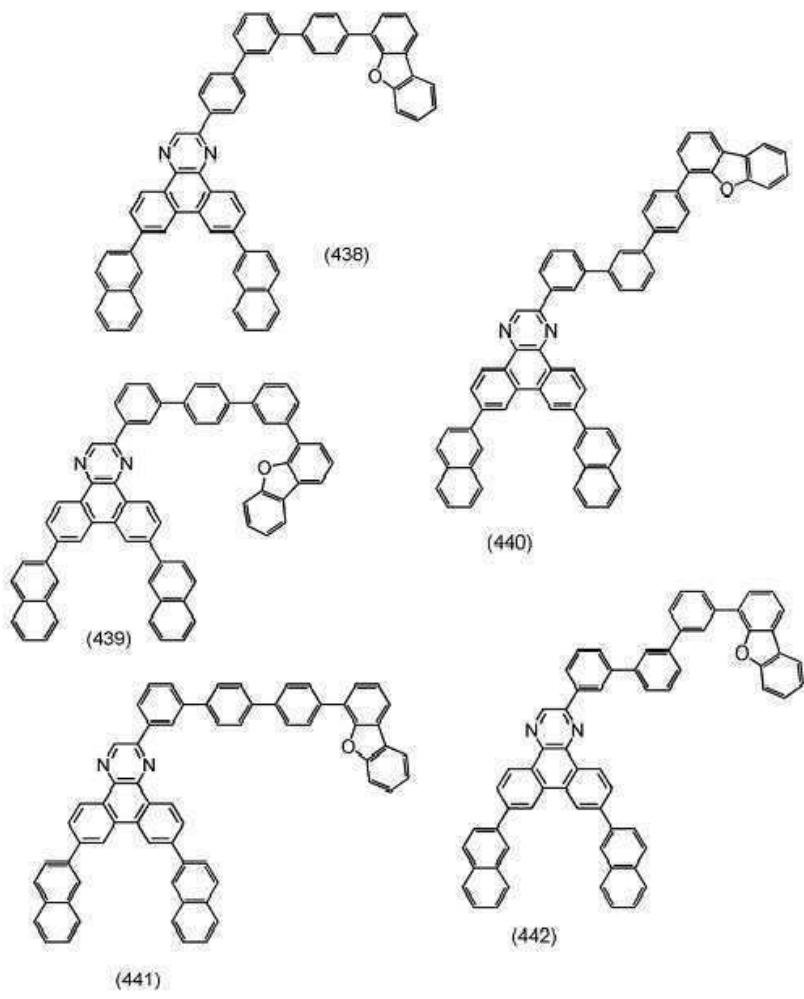
[화학식 127]



[0450]

[0451]

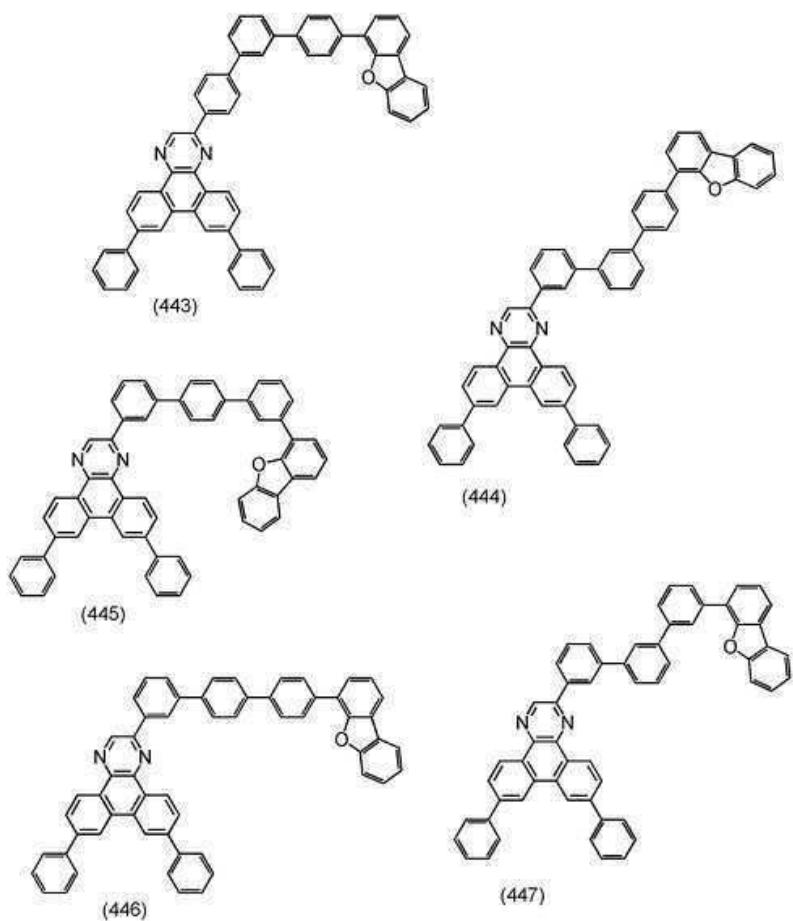
[화학식 128]



[0452]

[0453]

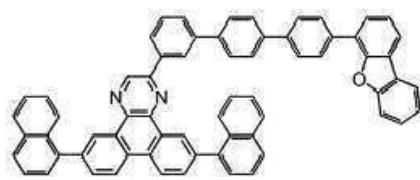
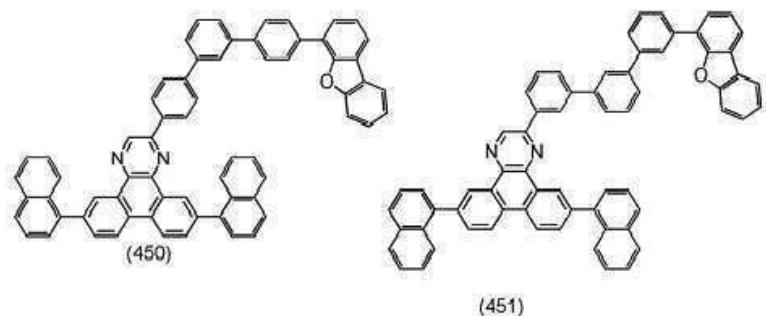
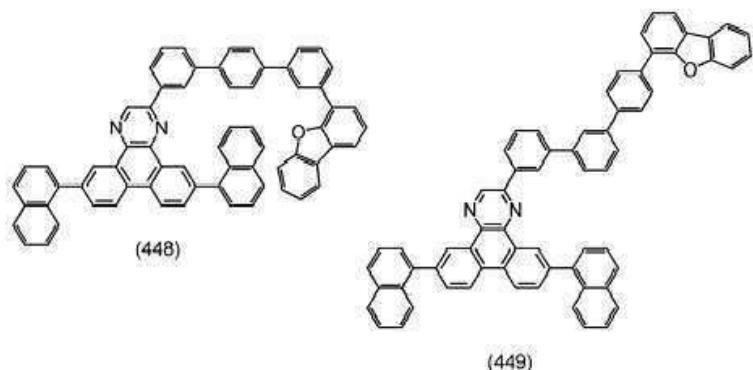
[화학식 129]



[0454]

[0455]

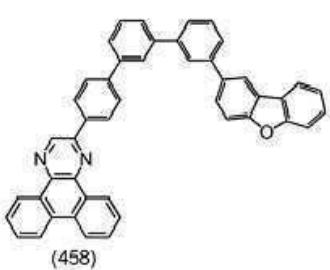
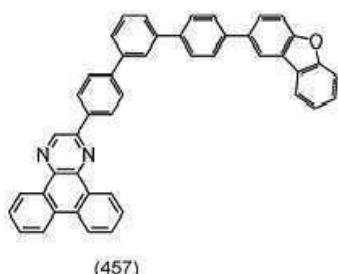
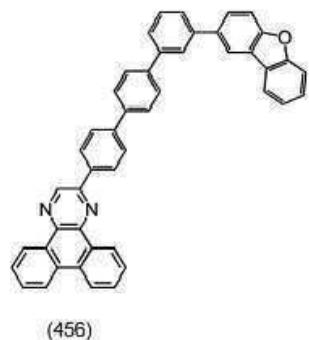
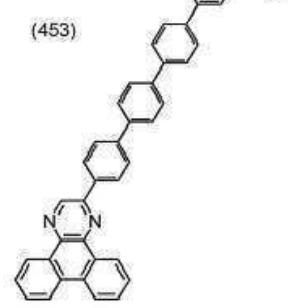
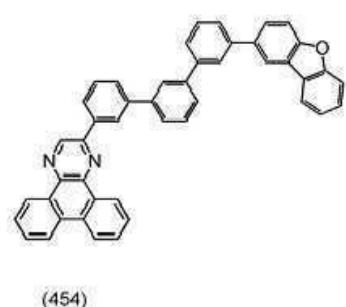
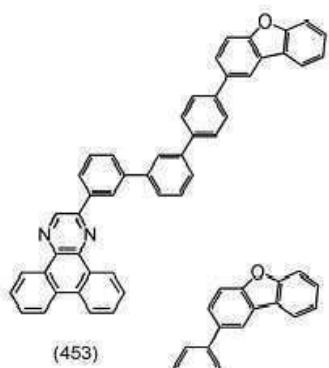
[화학식 130]



[0456]

[0457]

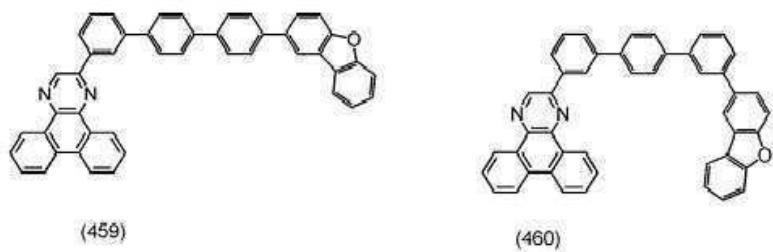
[화학식 131]



[0458]

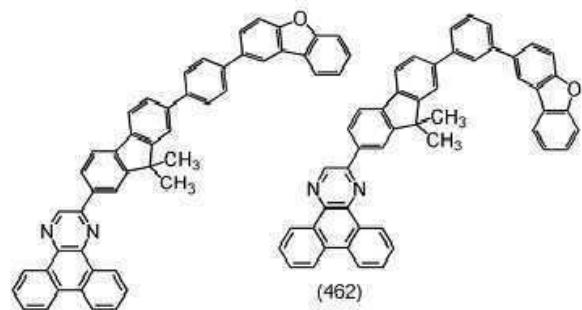
[0459]

[화학식 132]



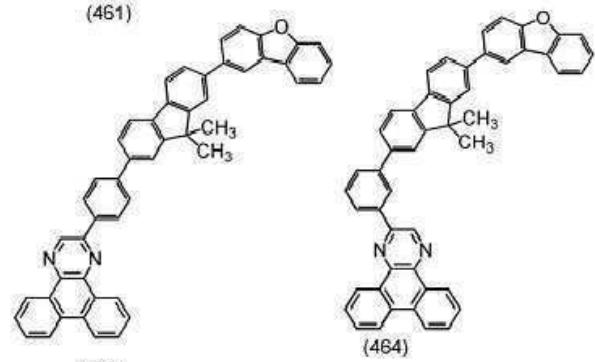
(459)

(460)



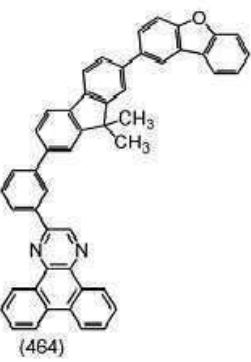
(462)

(461)



(461)

(463)

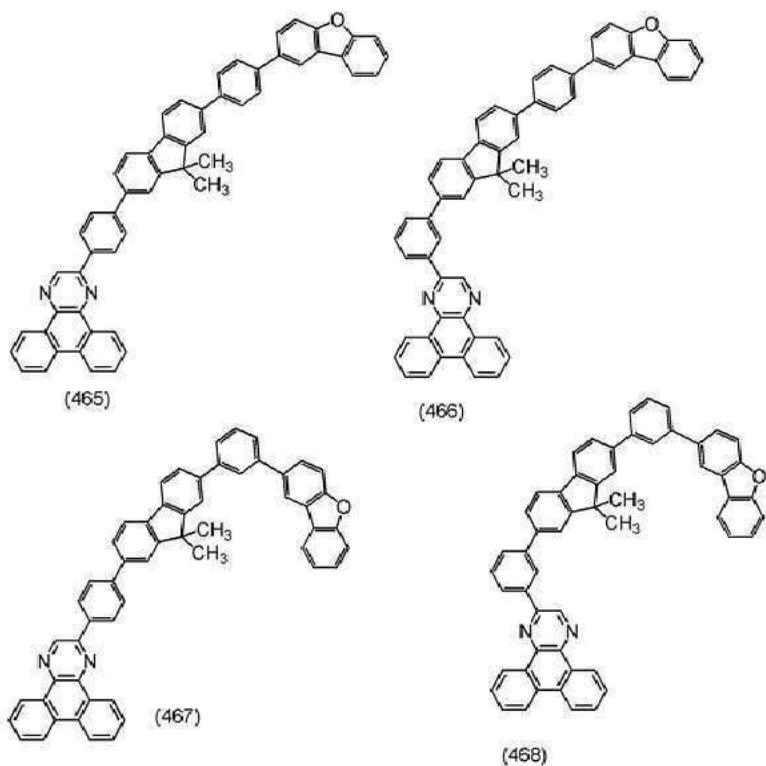


(464)

[0460]

[0461]

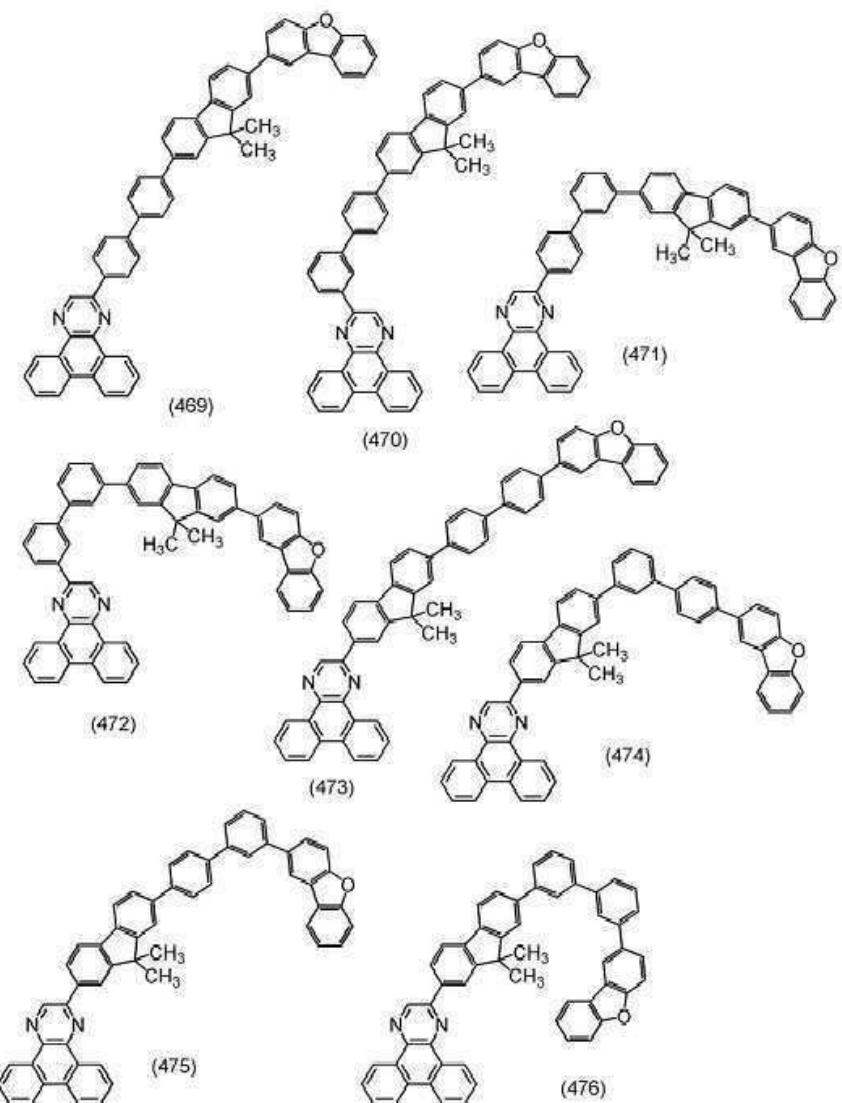
[화학식 133]



[0462]

[0463]

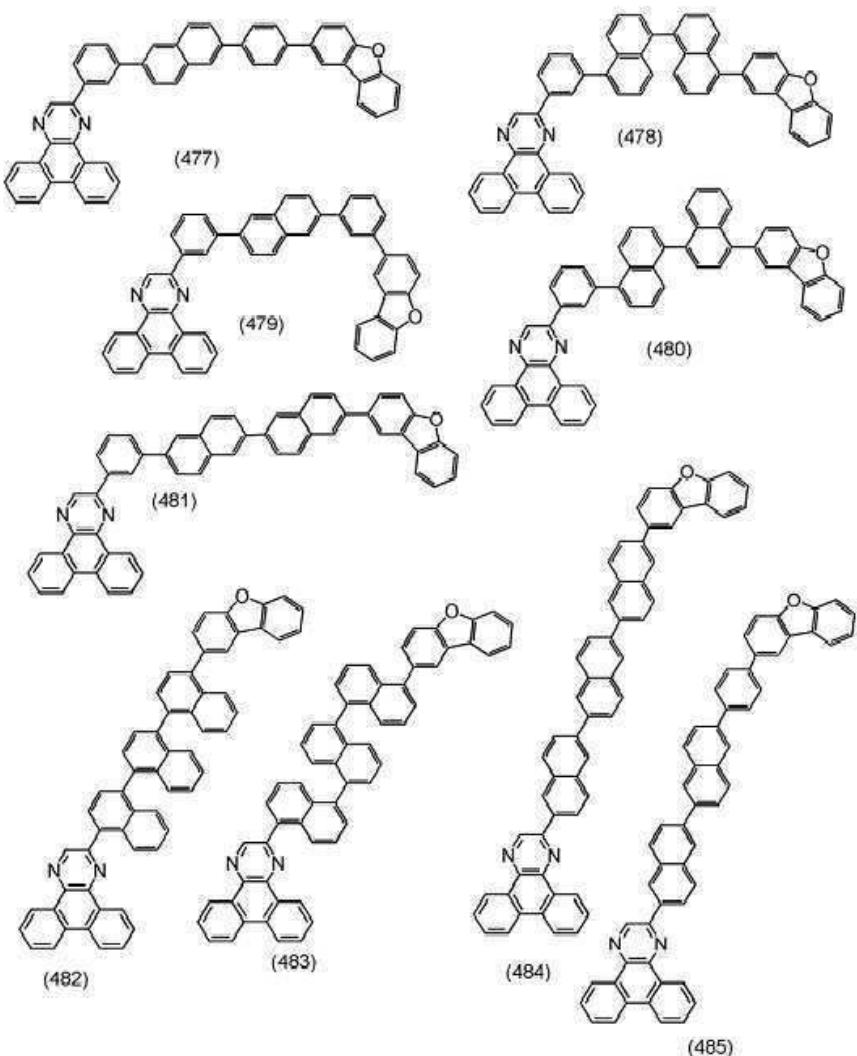
[화학식 134]



[0464]

[0465]

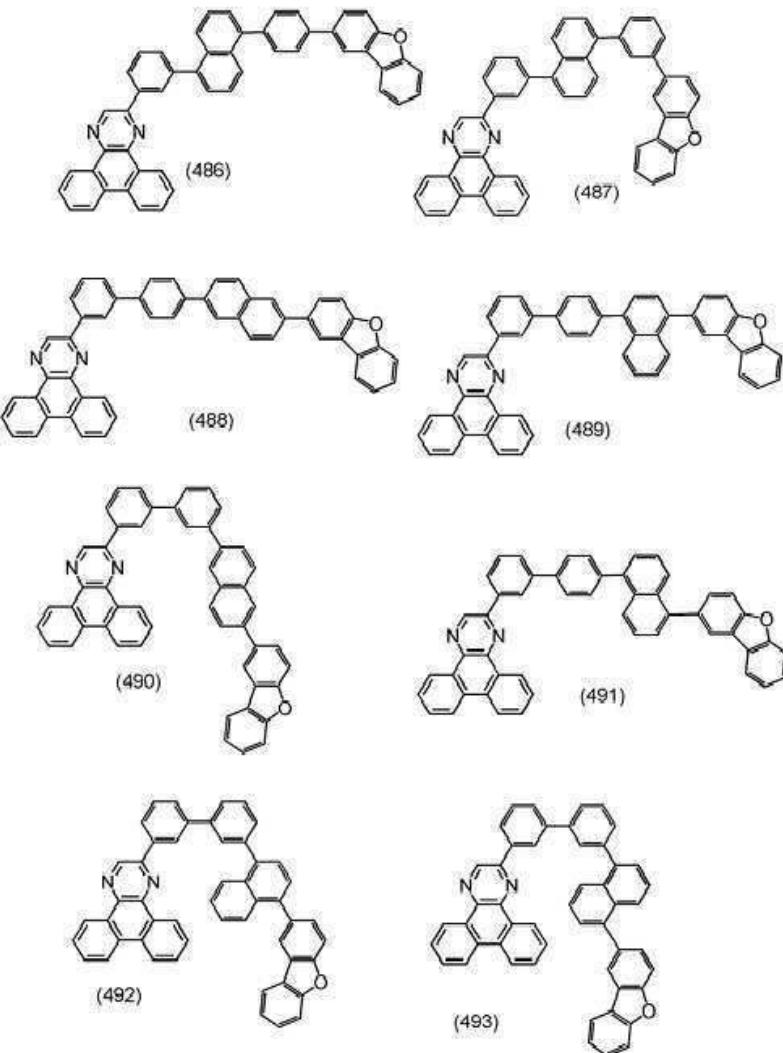
[화학식 135]



[0466]

[0467]

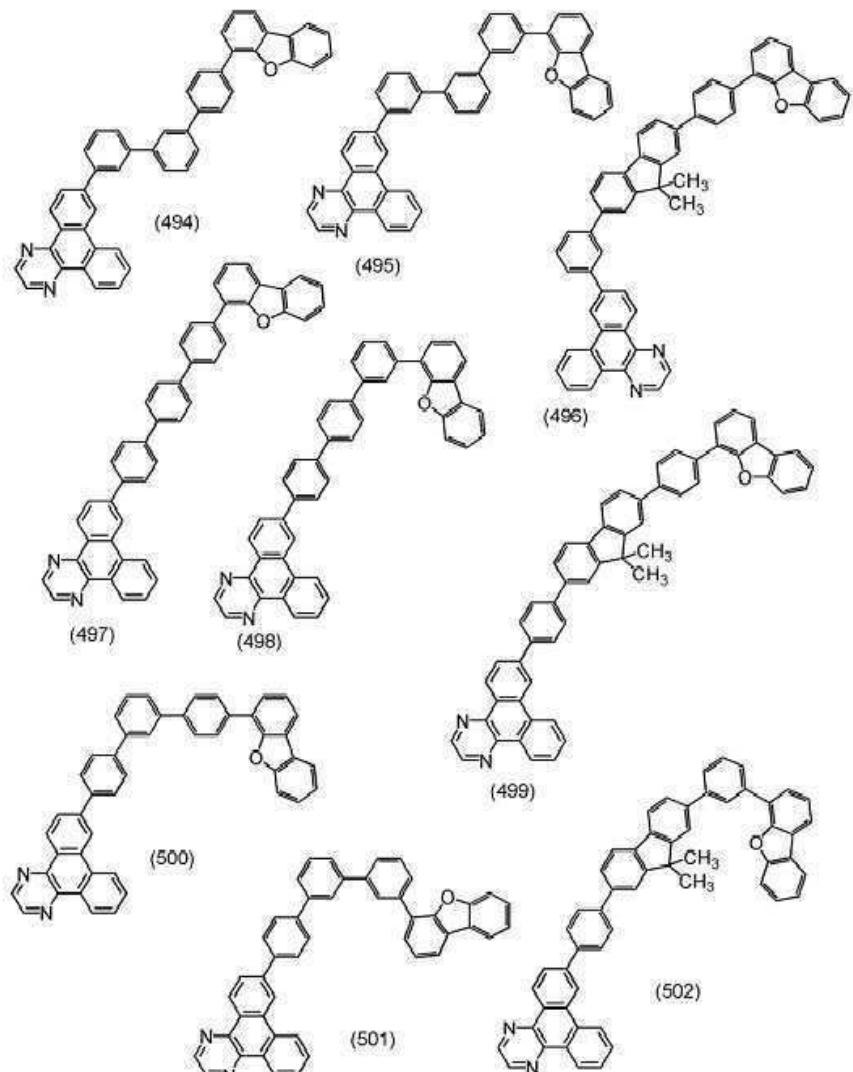
[화학식 136]



[0468]

[0469]

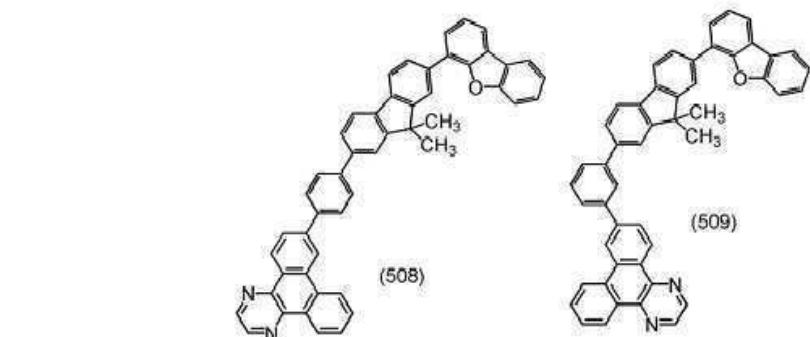
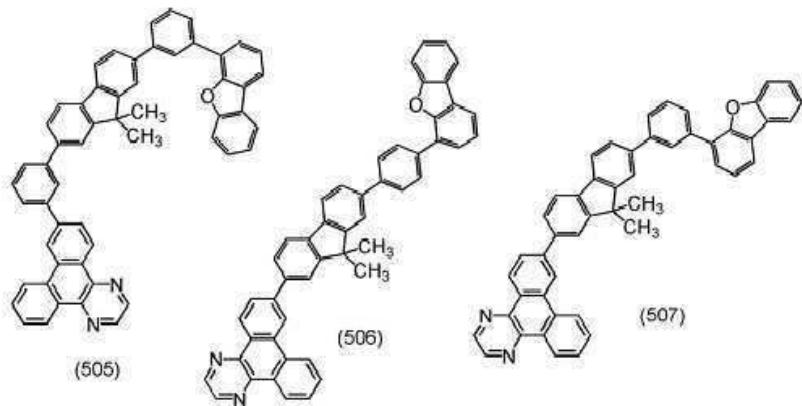
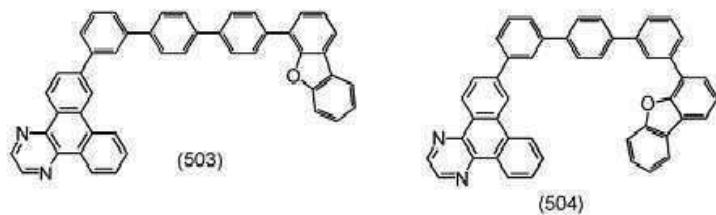
[화학식 137]



[0470]

[0471]

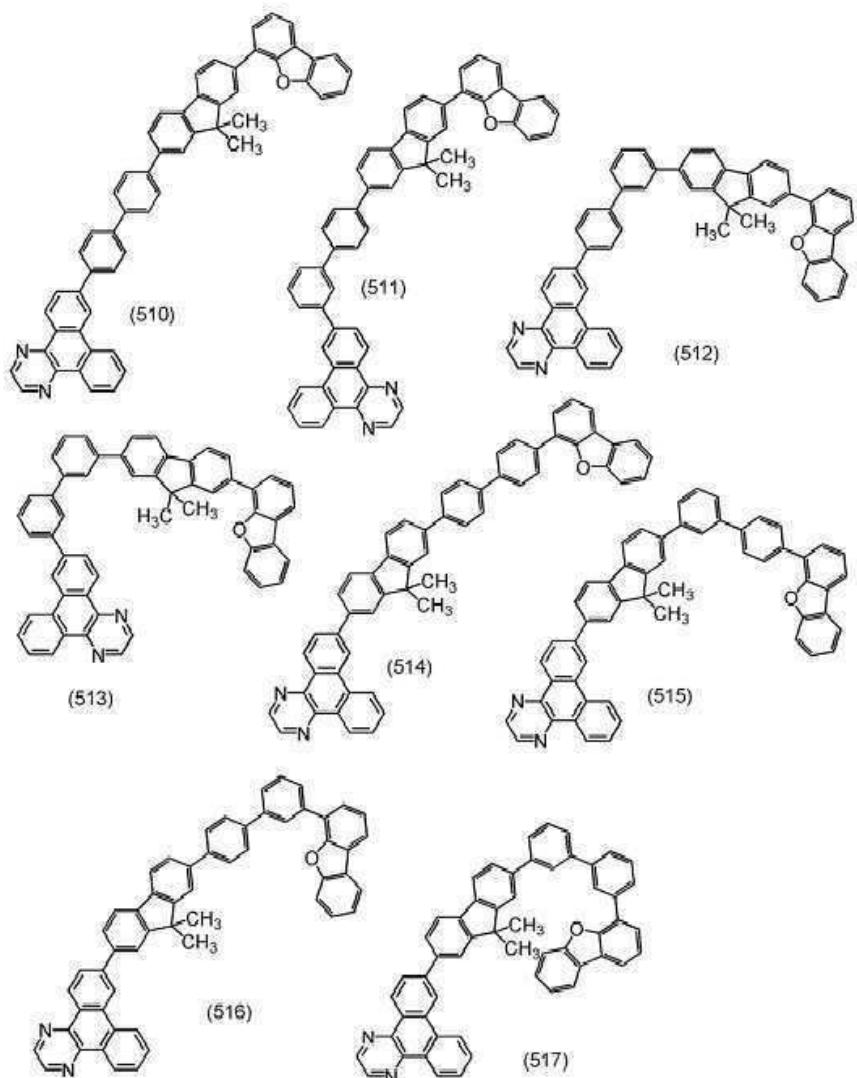
[화학식 138]



[0472]

[0473]

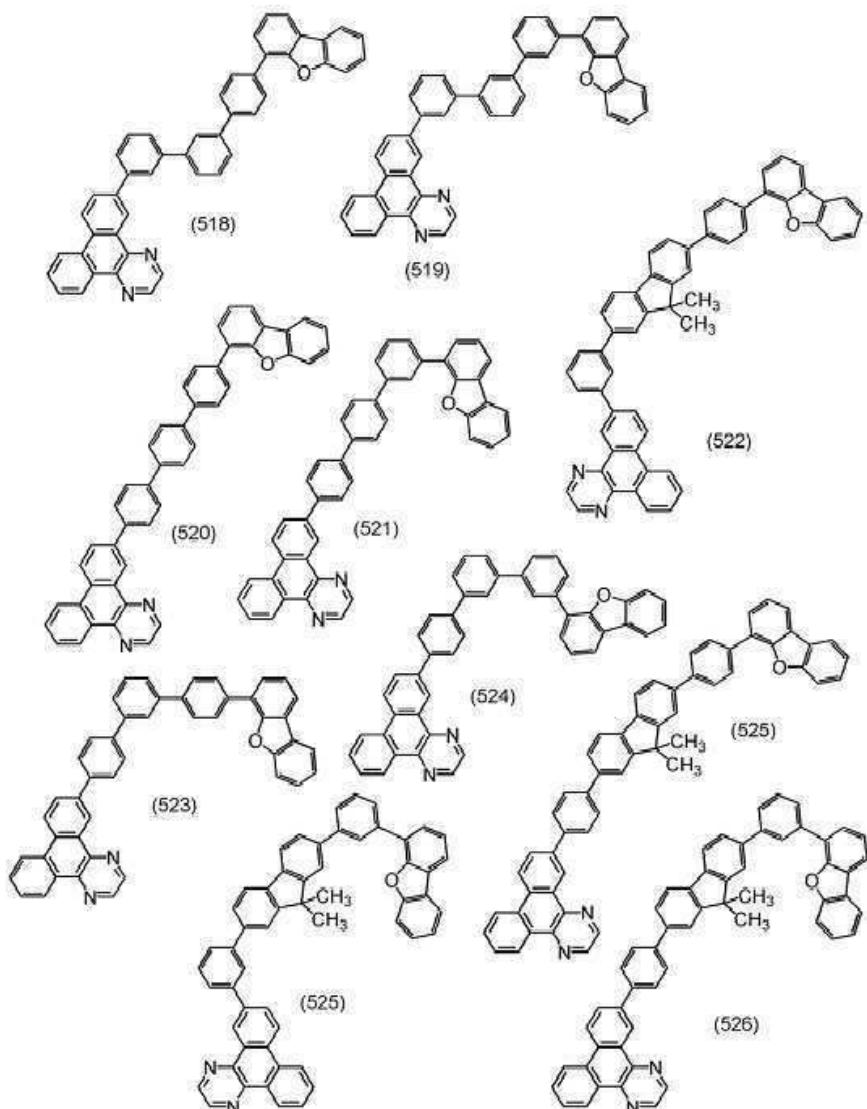
[화학식 139]



[0474]

[0475]

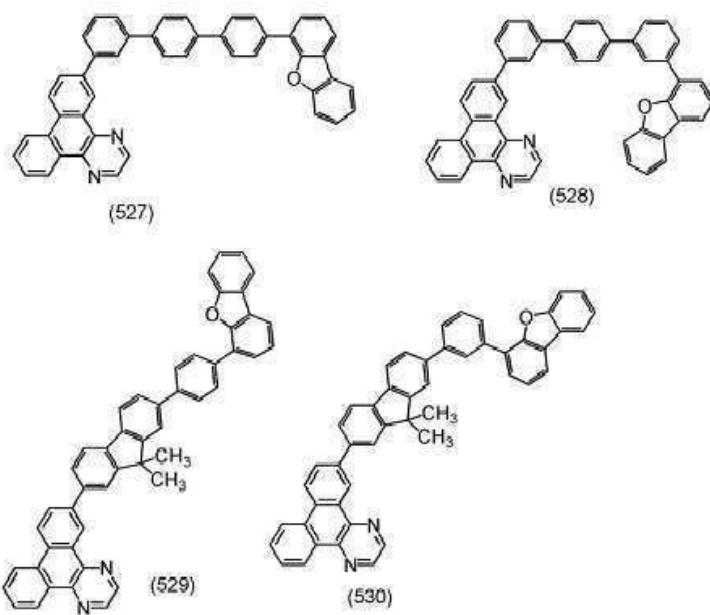
[화학식 140]



[0476]

[0477]

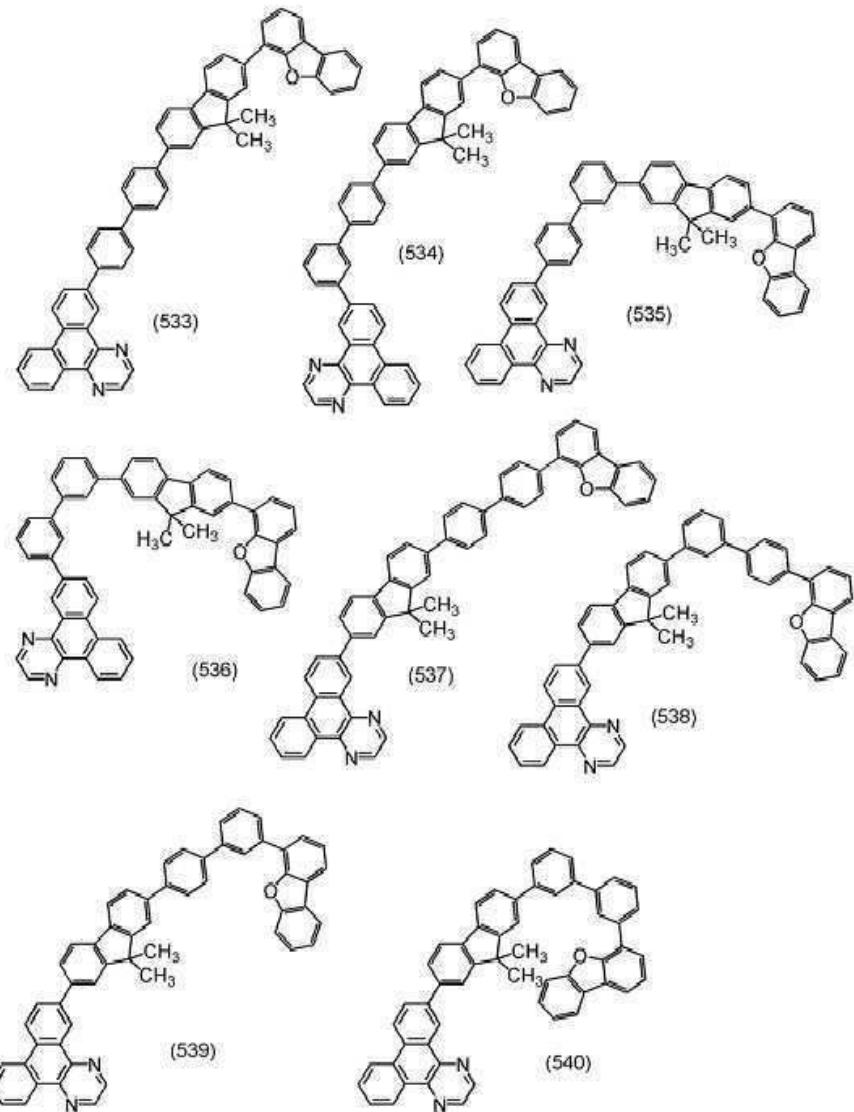
[화학식 141]



[0478]

[0479]

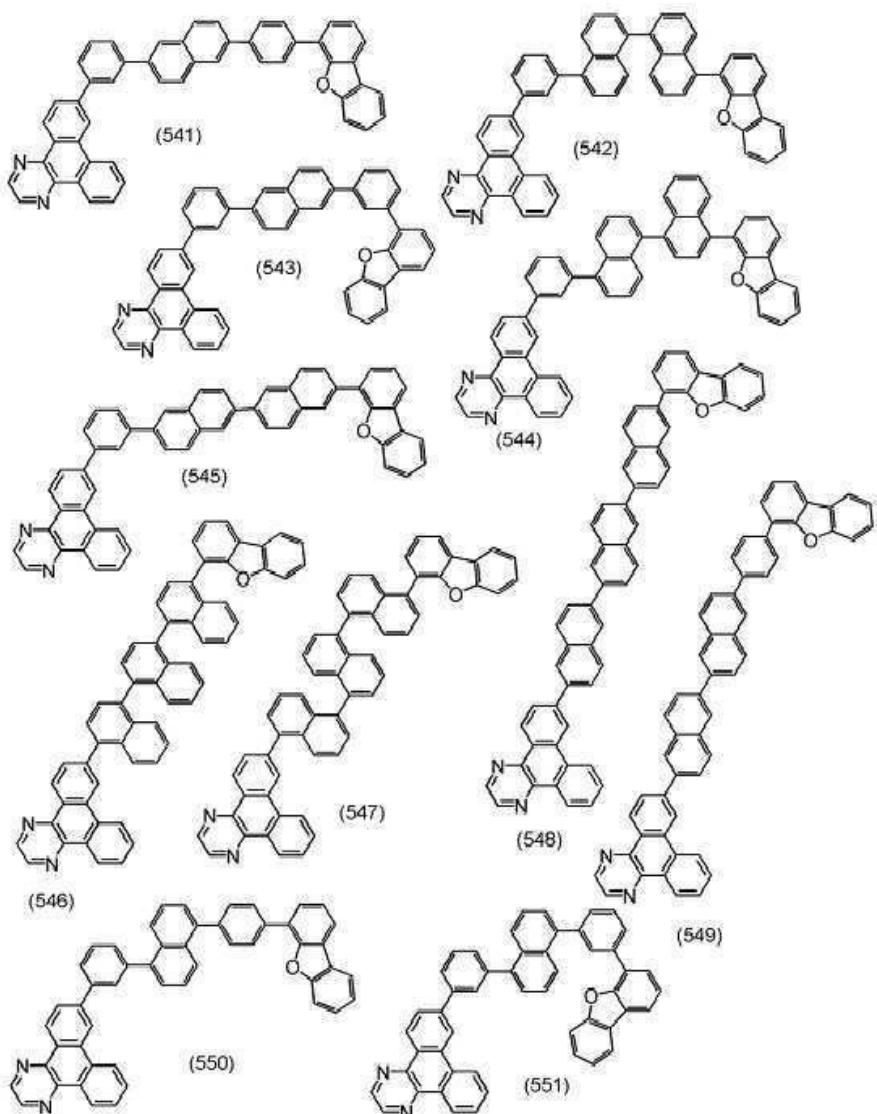
[화학식 142]



[0480]

[0481]

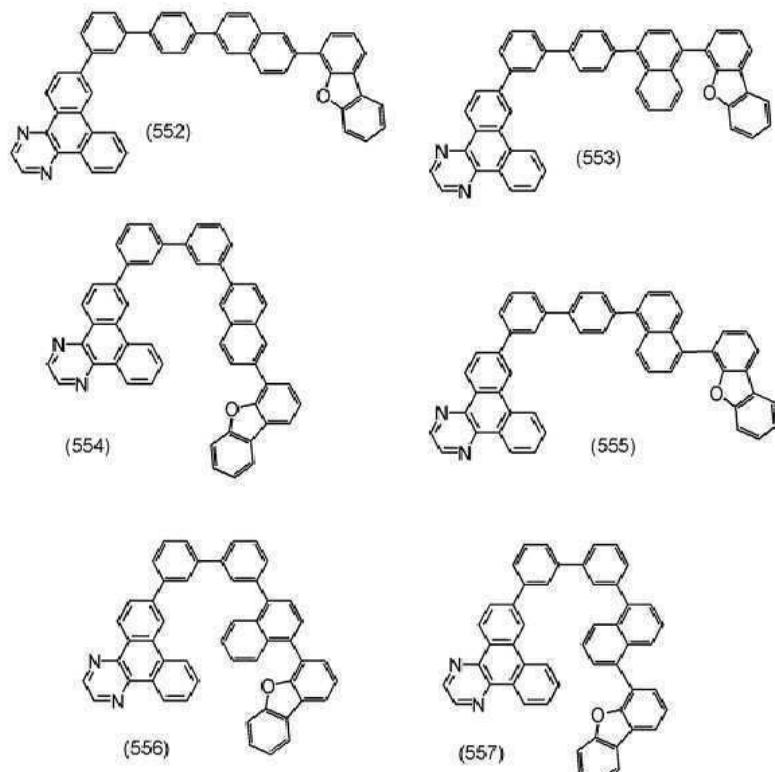
[화학식 143]



[0482]

[0483]

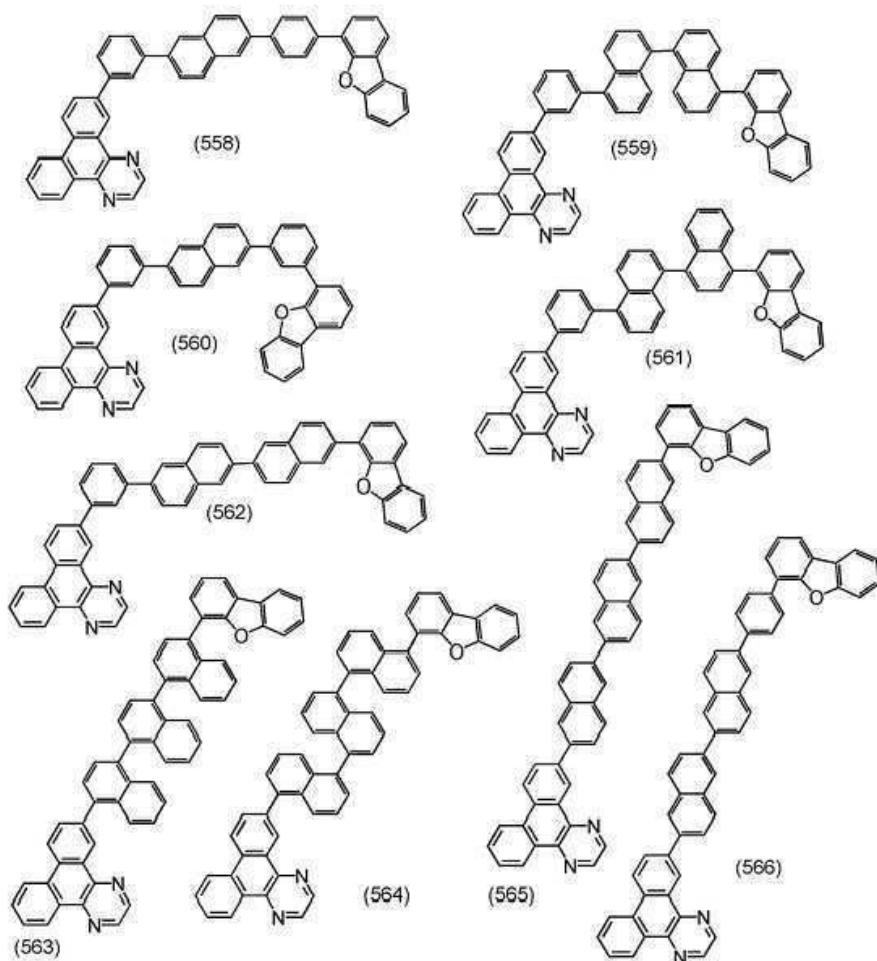
[화학식 144]



[0484]

[0485]

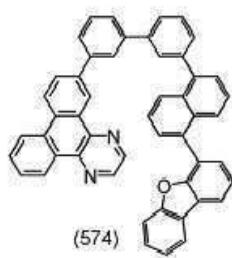
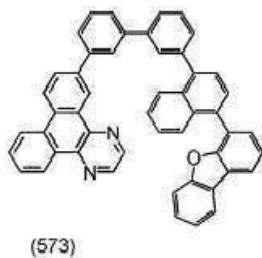
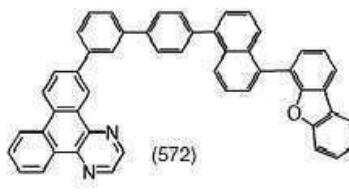
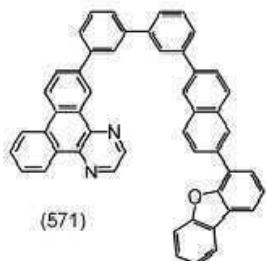
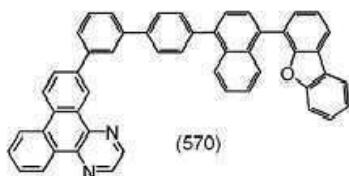
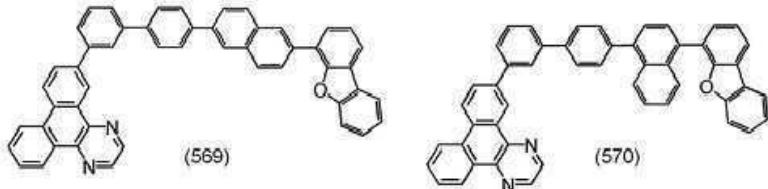
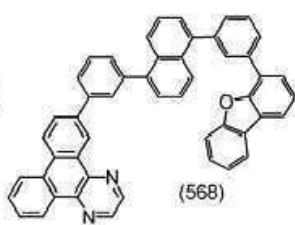
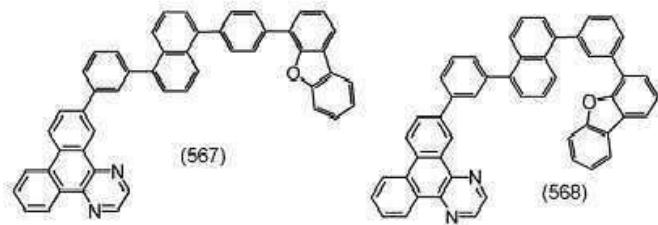
[화학식 145]



[0486]

[0487]

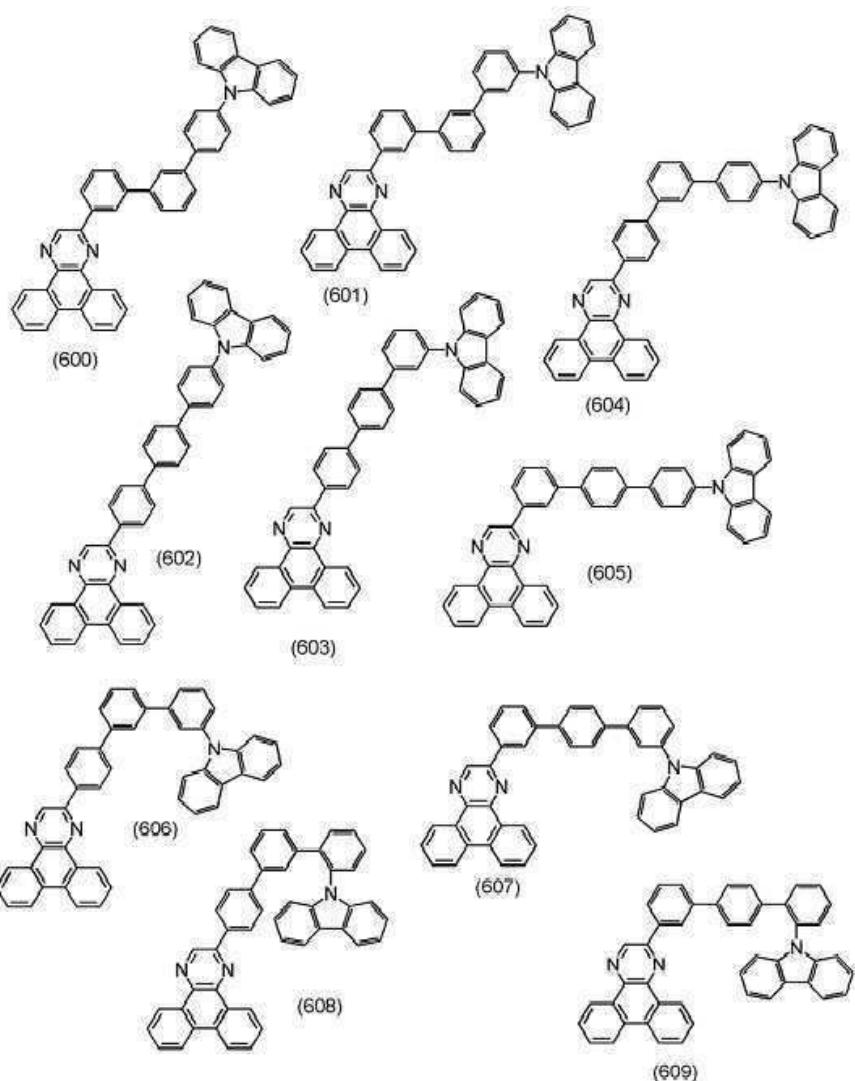
[화학식 146]



[0488]

[0489]

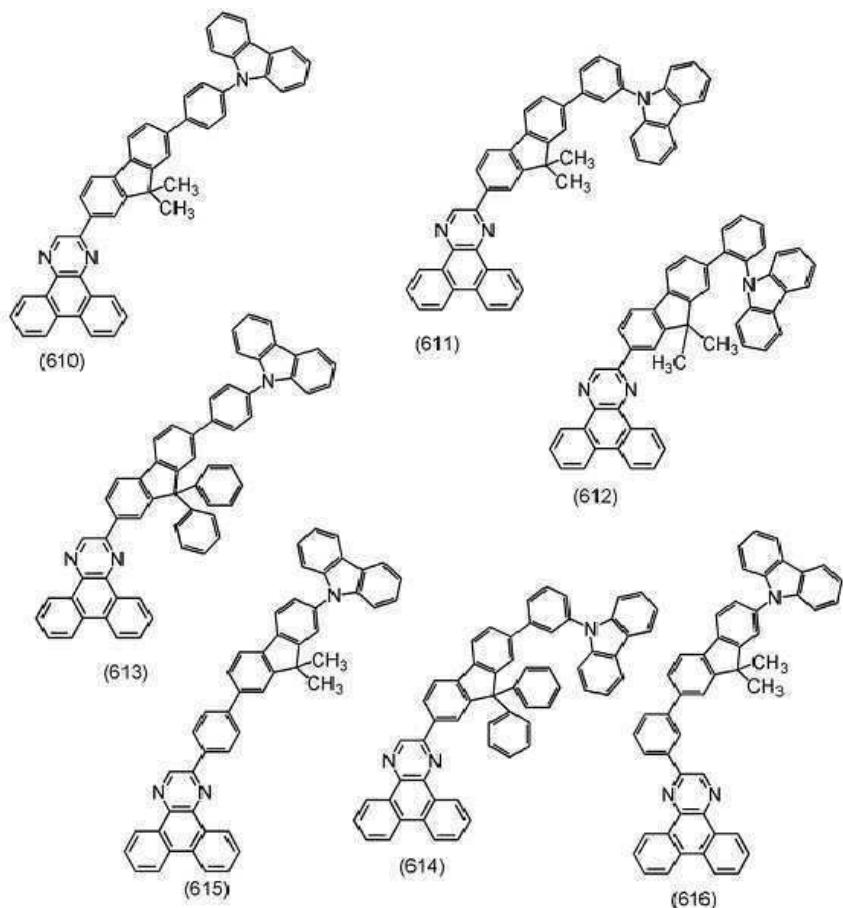
[화학식 147]



[0490]

[0491]

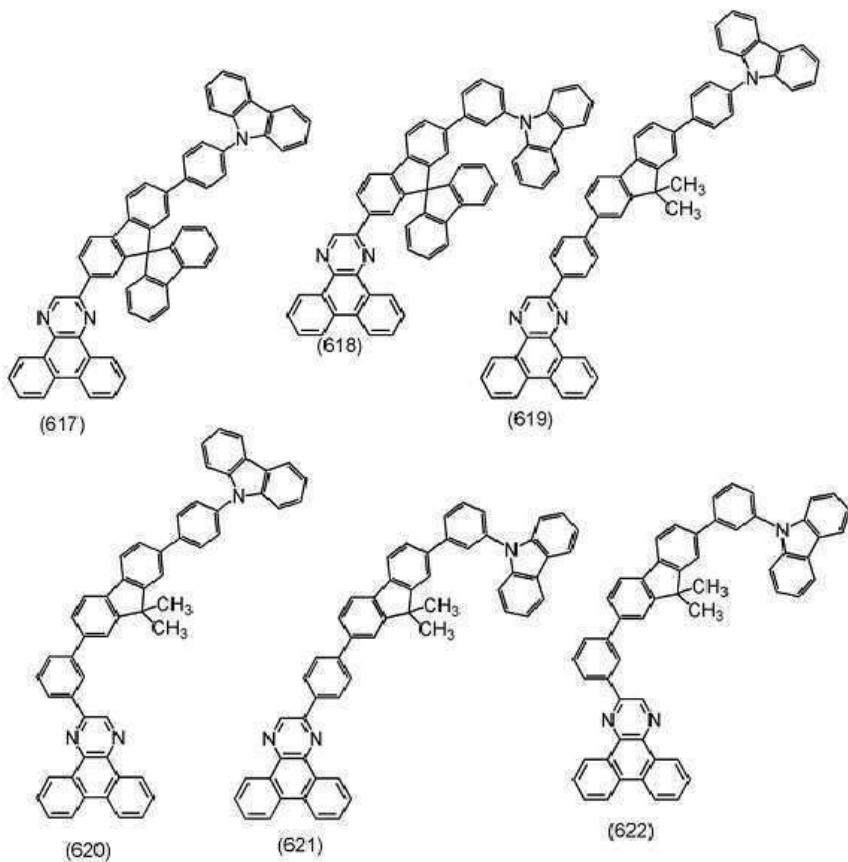
[화학식 148]



[0492]

[0493]

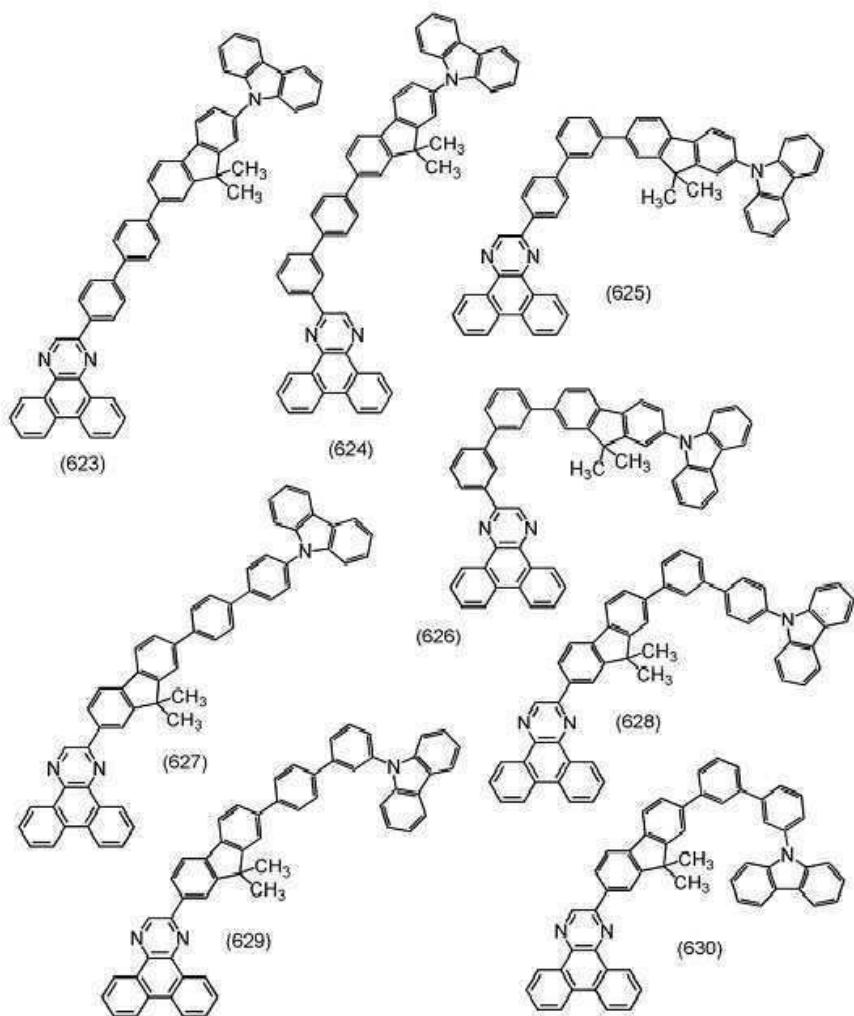
[화학식 149]



[0494]

[0495]

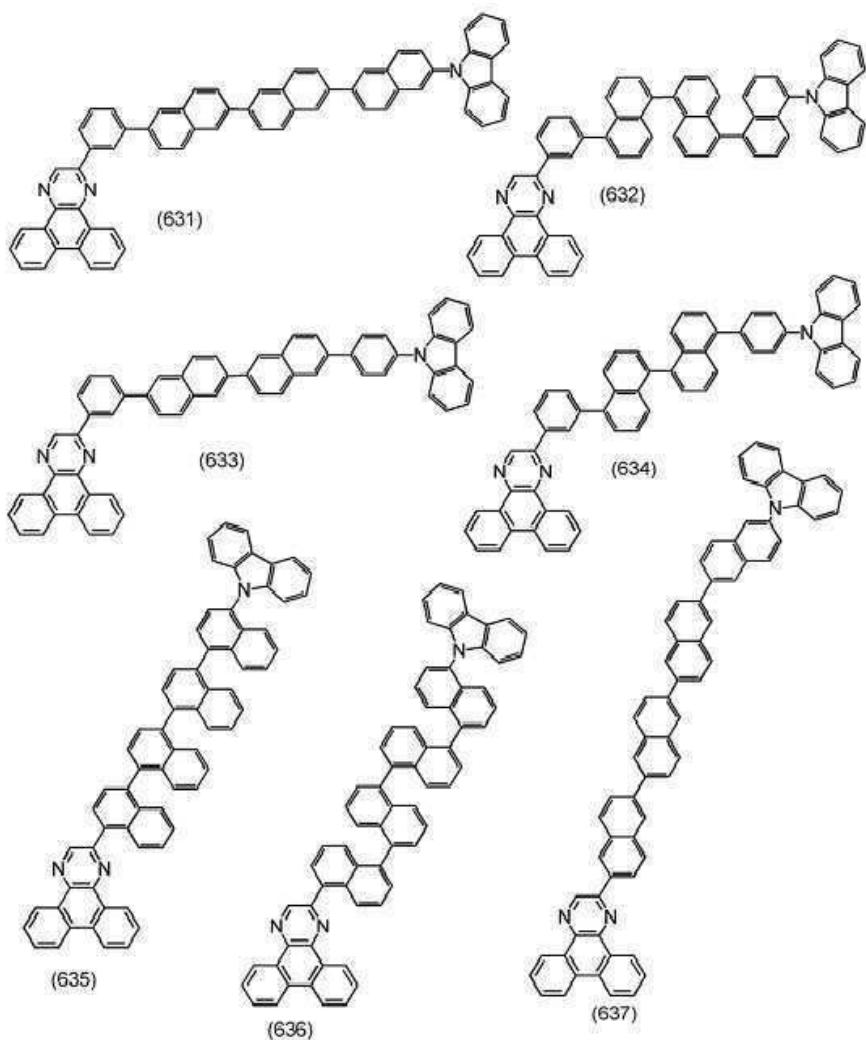
[화학식 150]



[0496]

[0497]

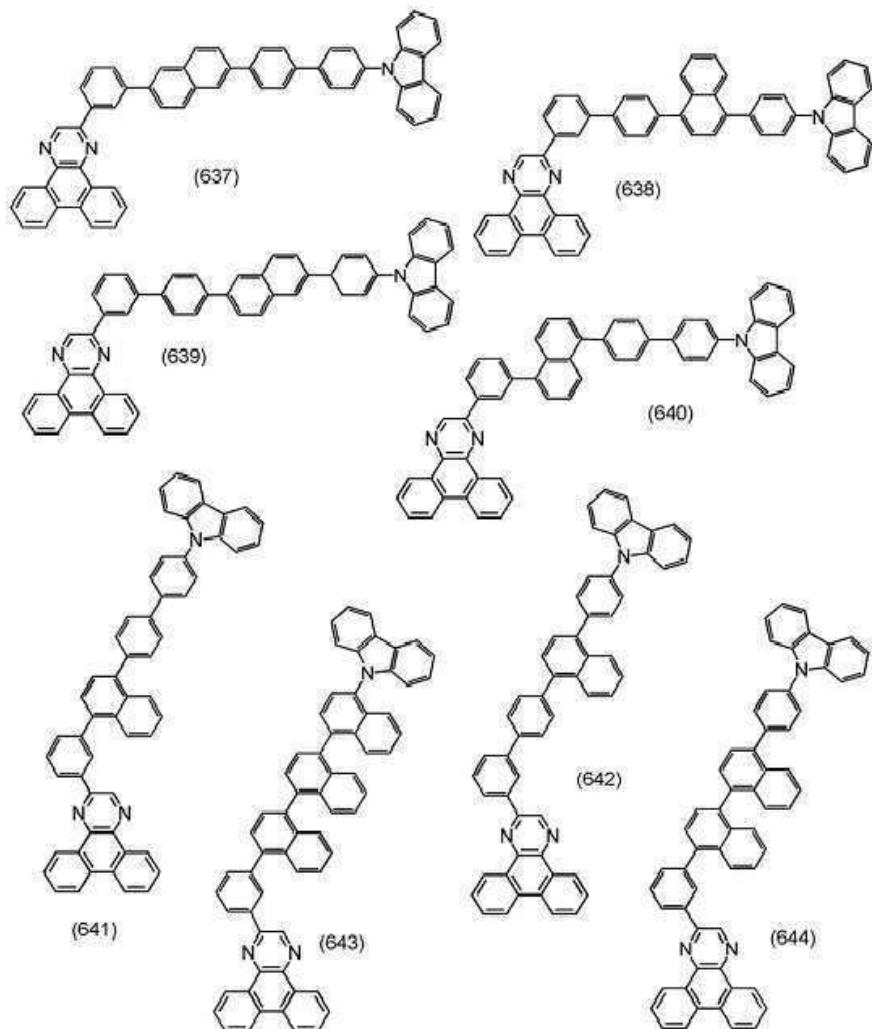
[화학식 151]



[0498]

[0499]

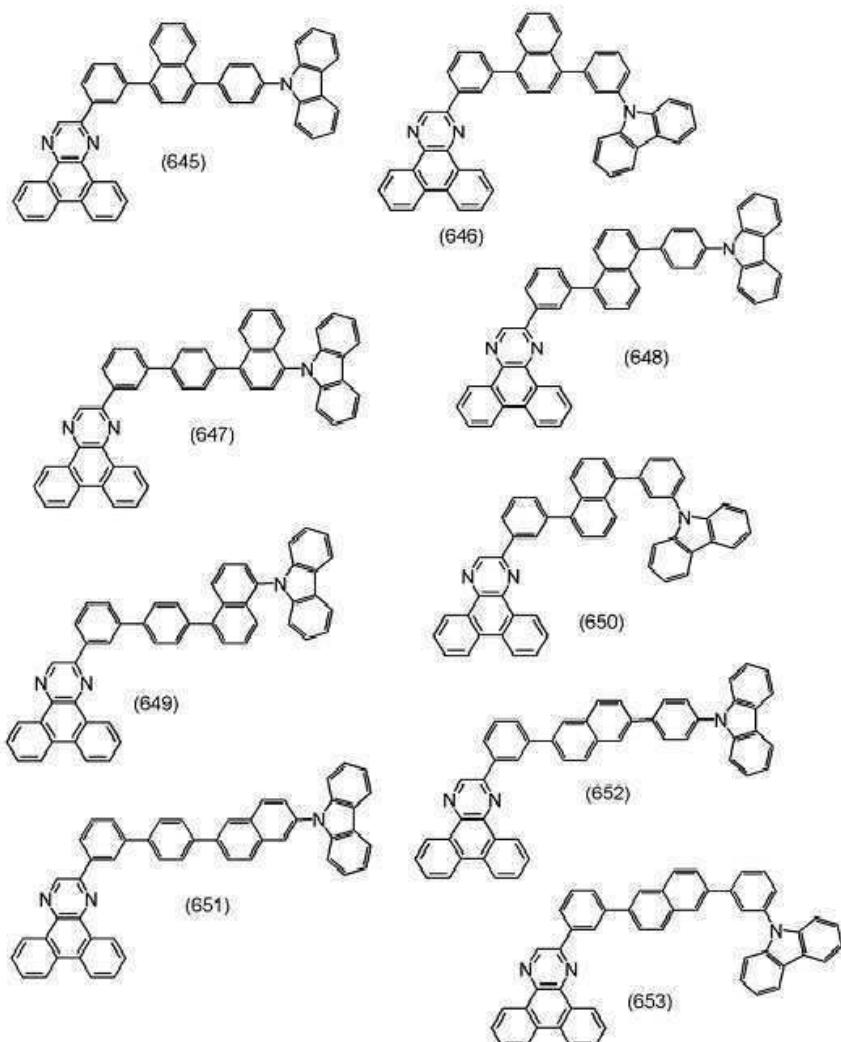
[화학식 152]



[0500]

[0501]

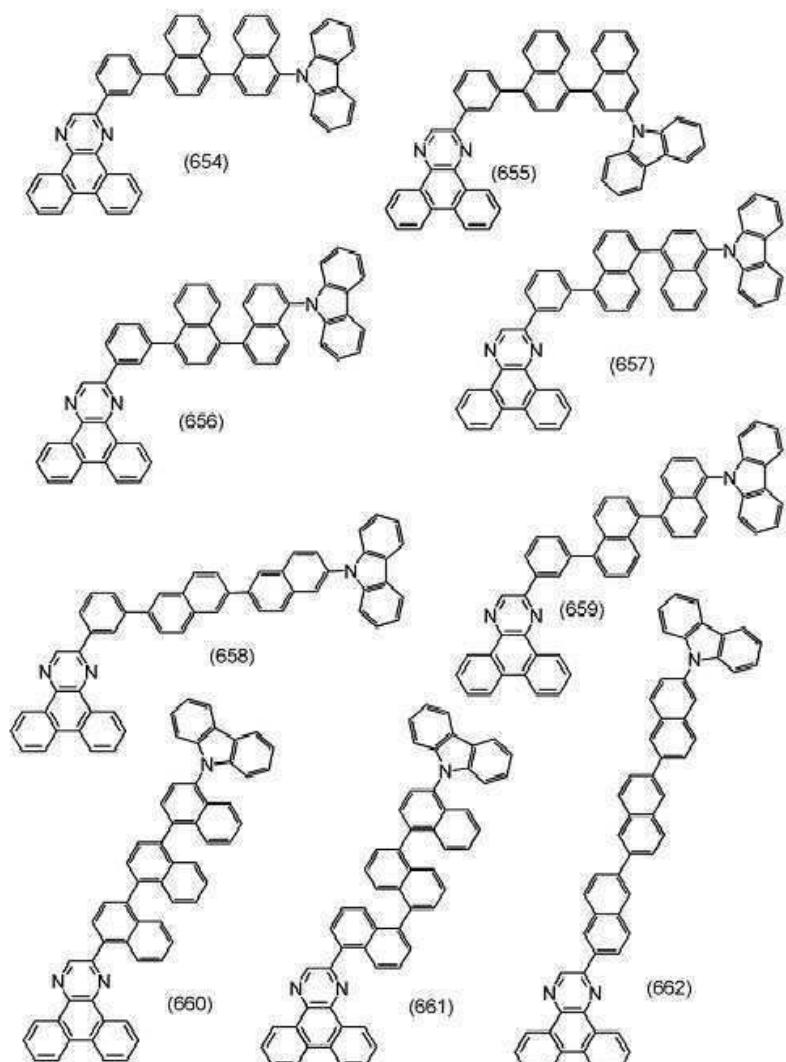
[화학식 153]



[0502]

[0503]

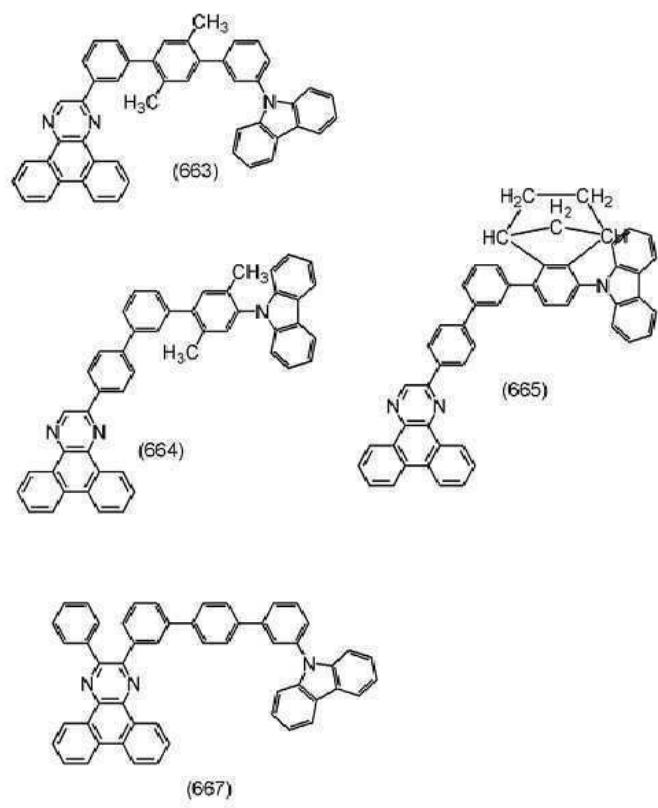
[화학식 154]



[0504]

[0505]

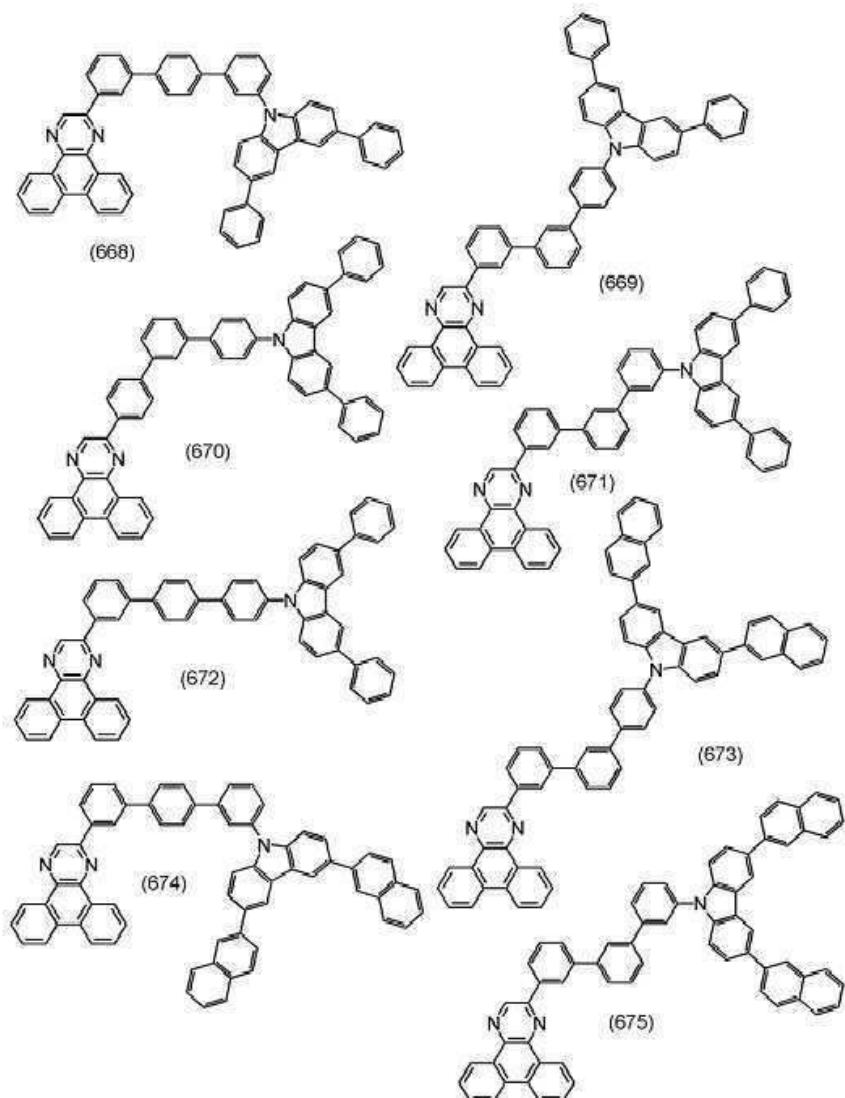
[화학식 155]



[0506]

[0507]

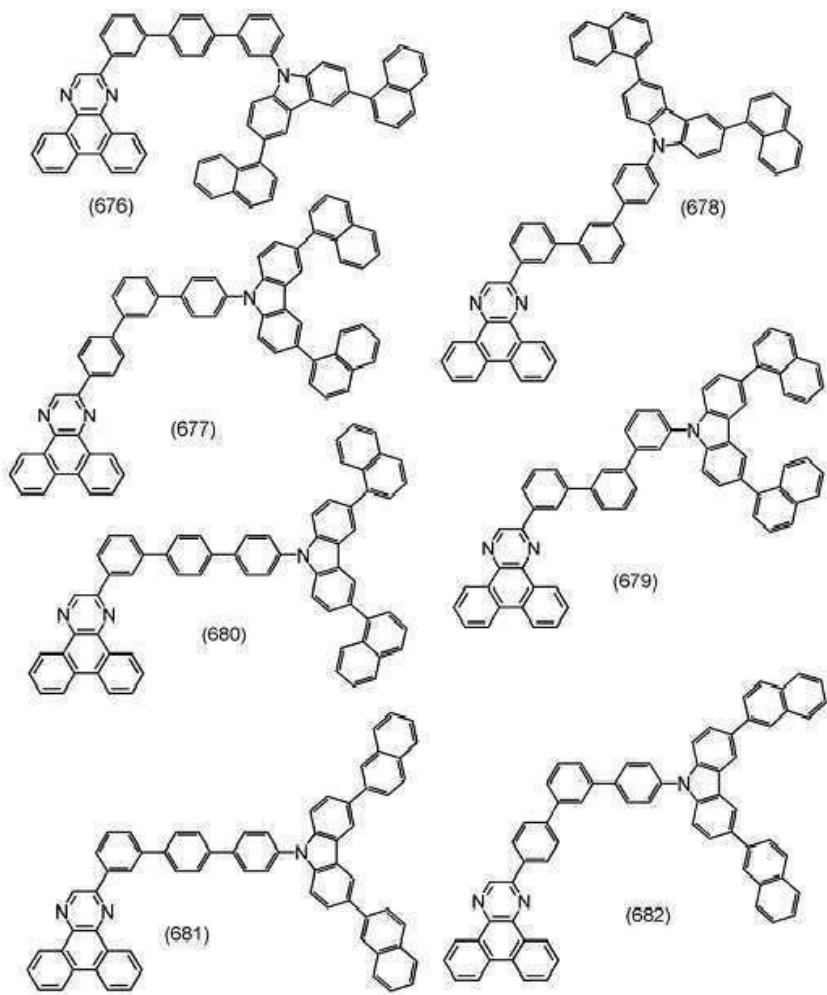
[화학식 156]



[0508]

[0509]

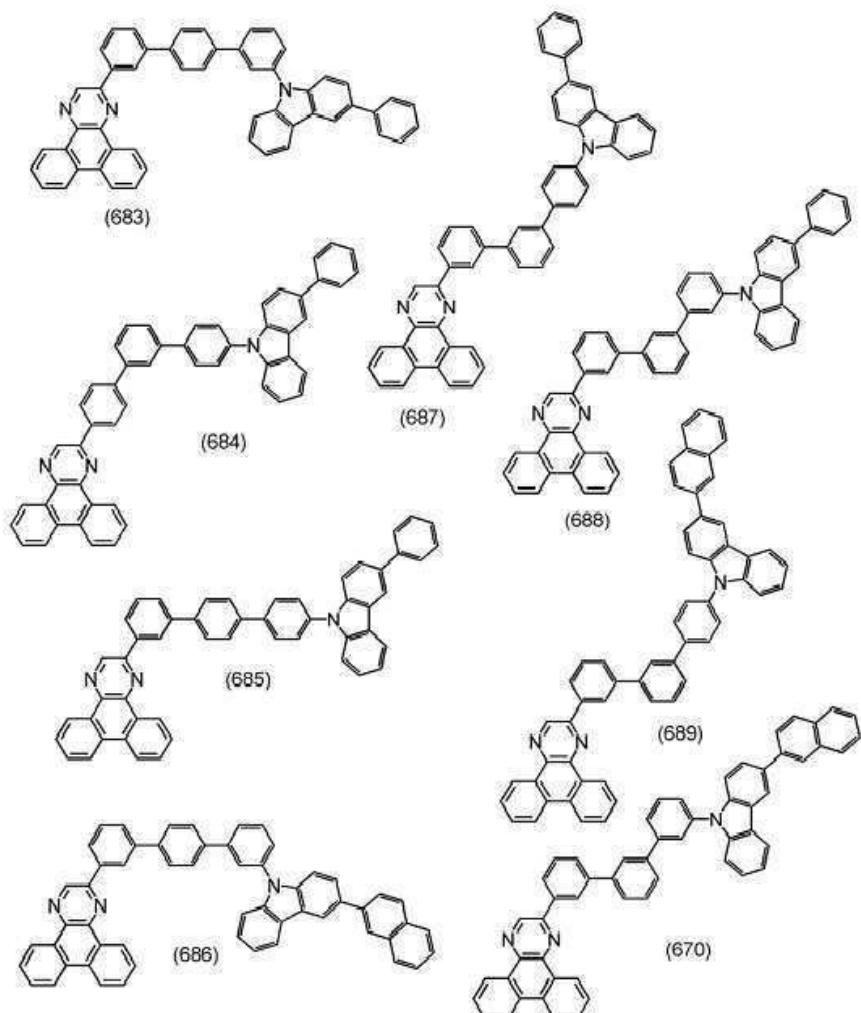
[화학식 157]



[0510]

[0511]

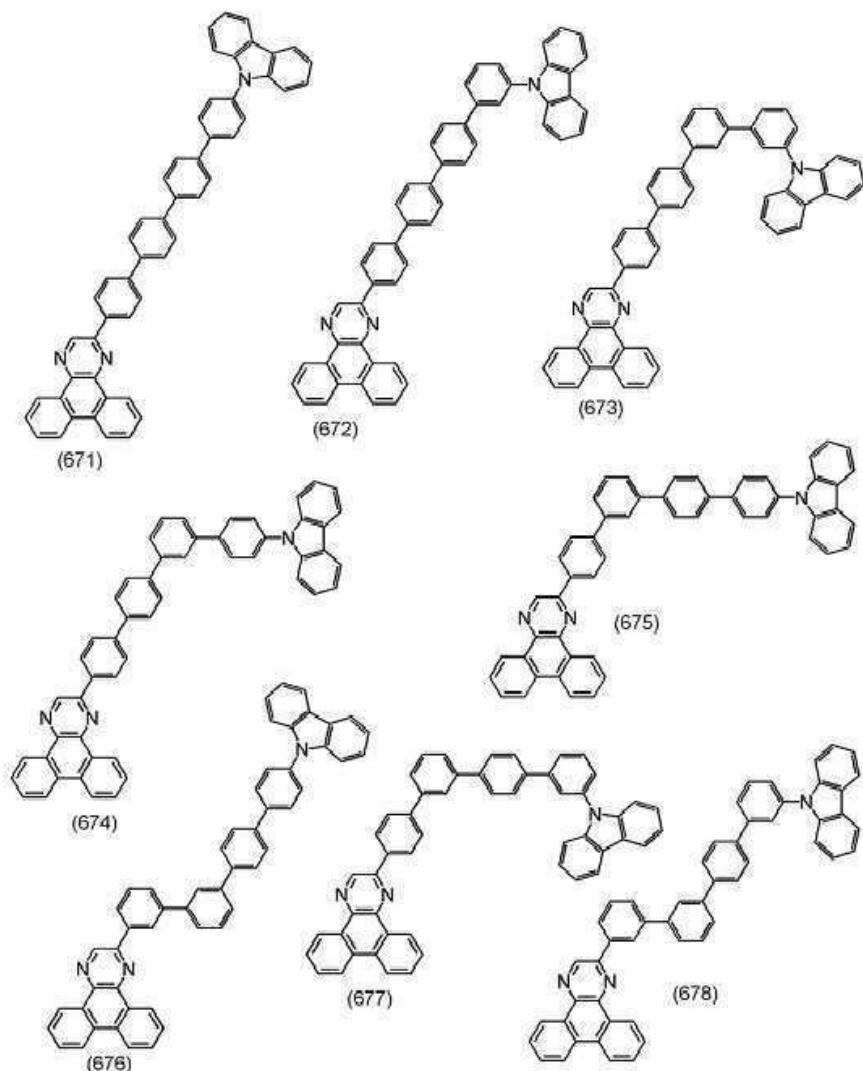
[화학식 158]



[0512]

[0513]

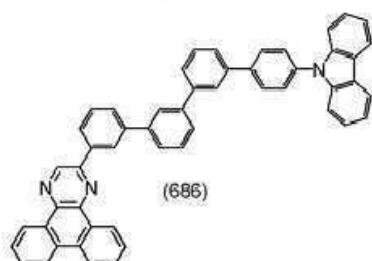
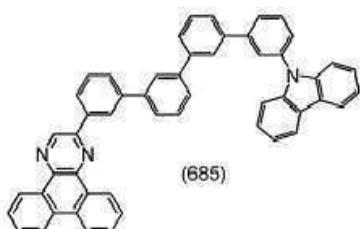
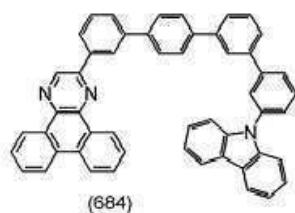
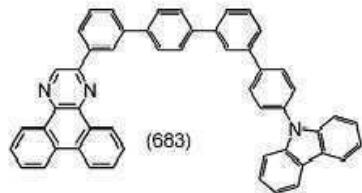
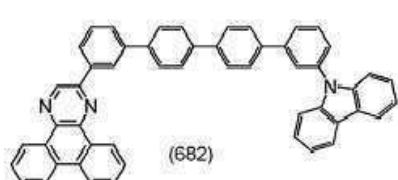
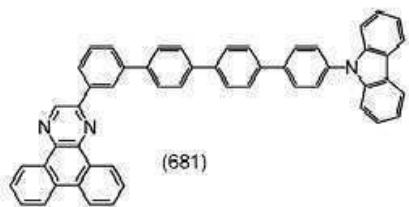
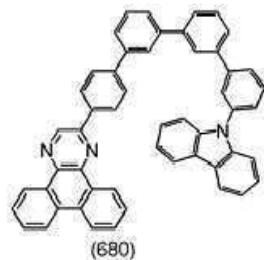
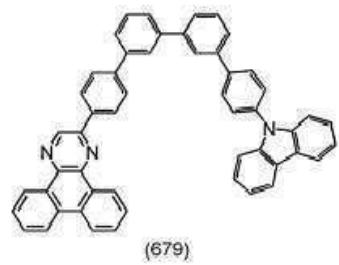
[화학식 159]



[0514]

[0515]

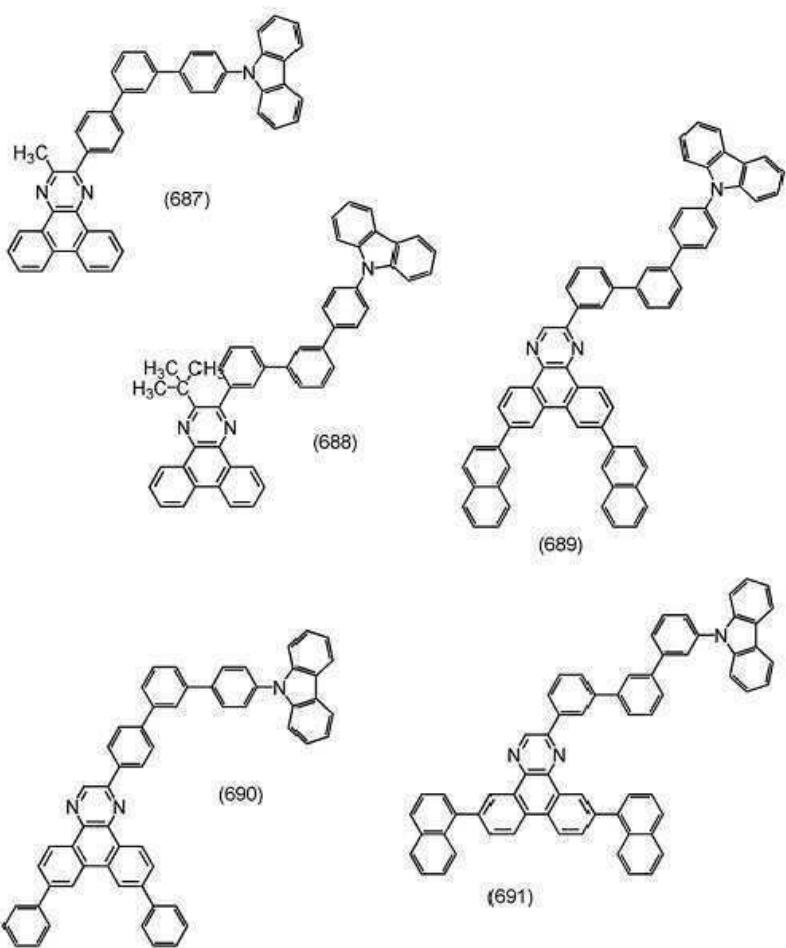
[화학식 160]



[0516]

[0517]

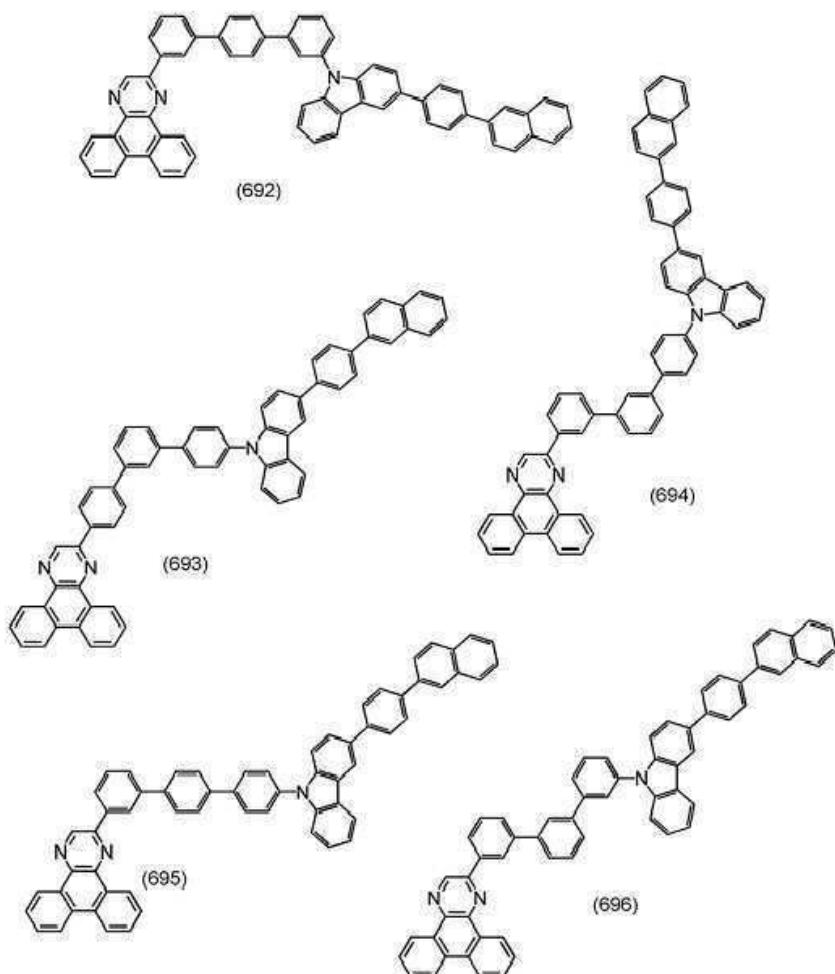
[화학식 161]



[0518]

[0519]

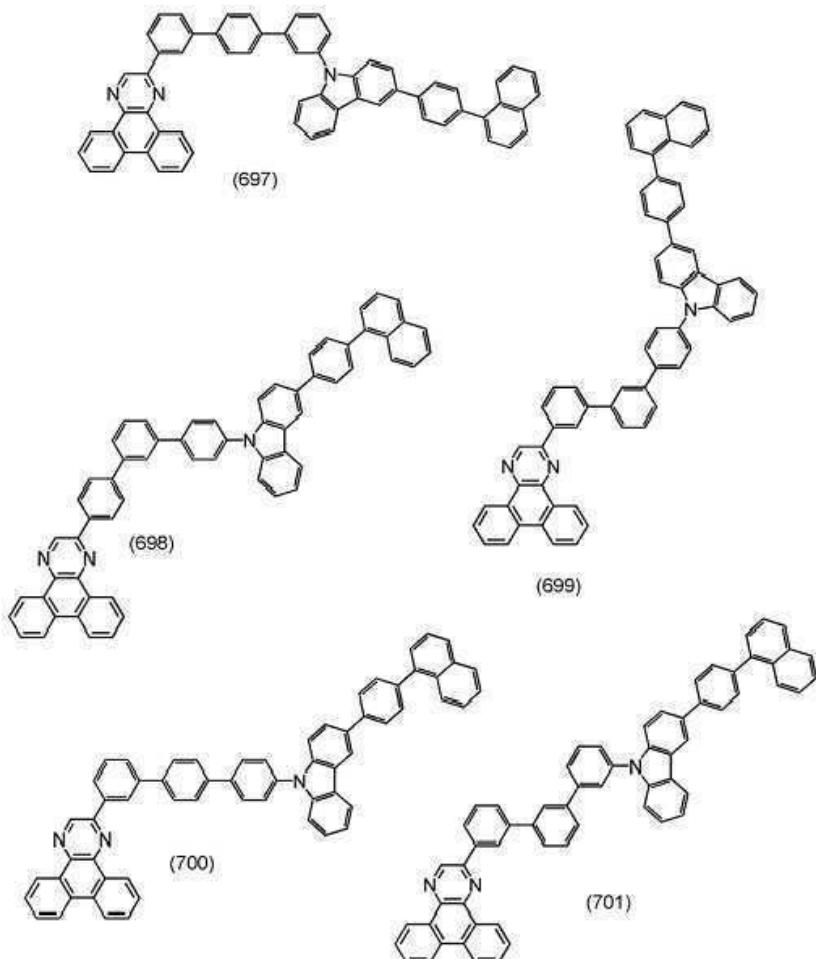
[화학식 162]



[0520]

[0521]

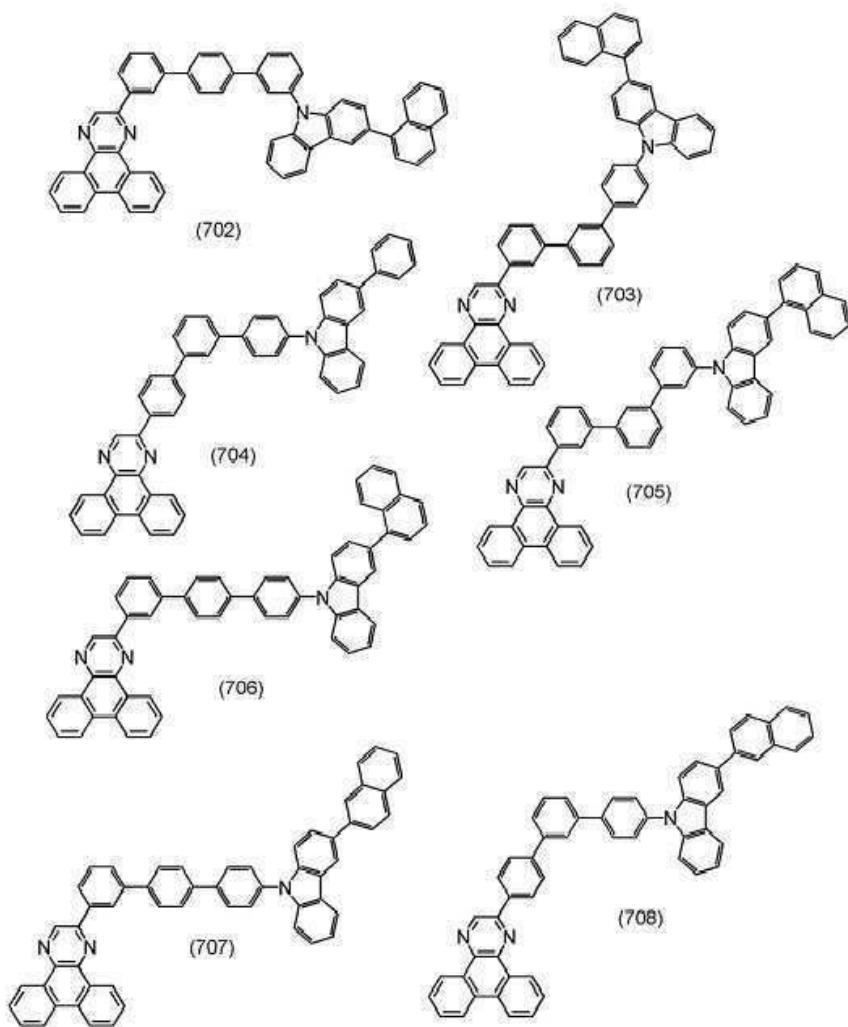
[화학식 163]



[0522]

[0523]

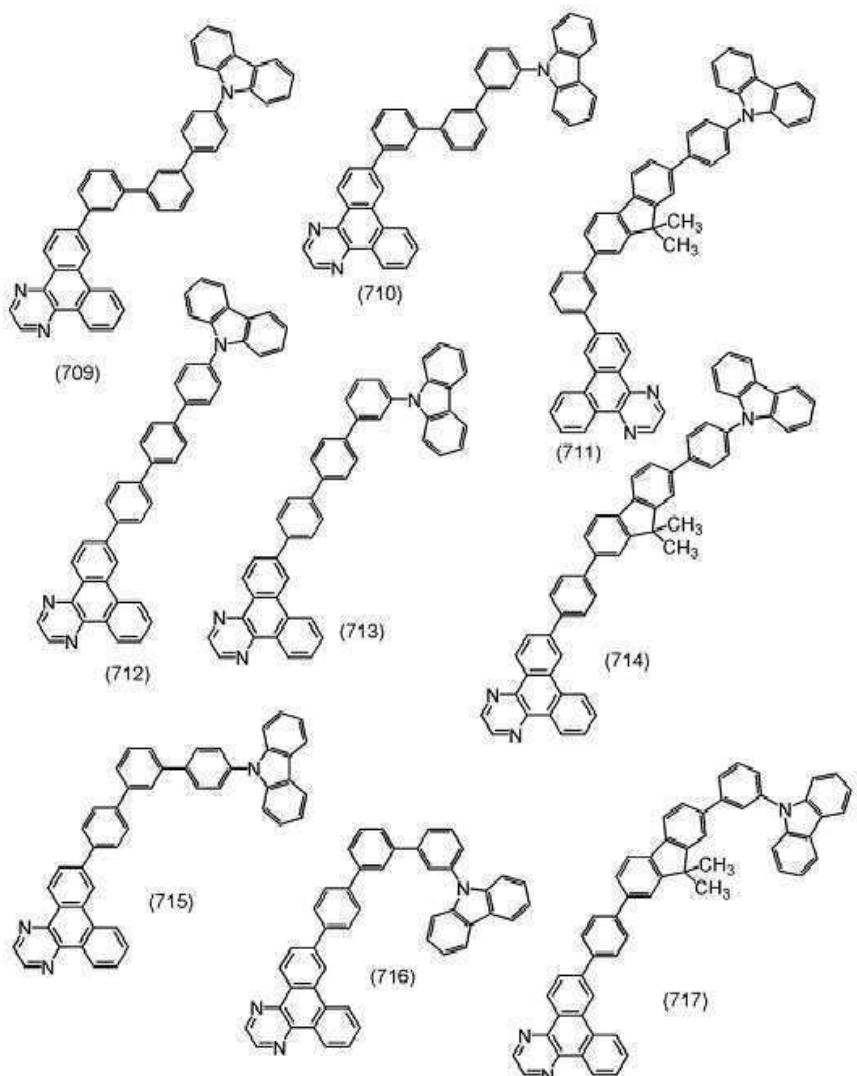
[화학식 164]



[0524]

[0525]

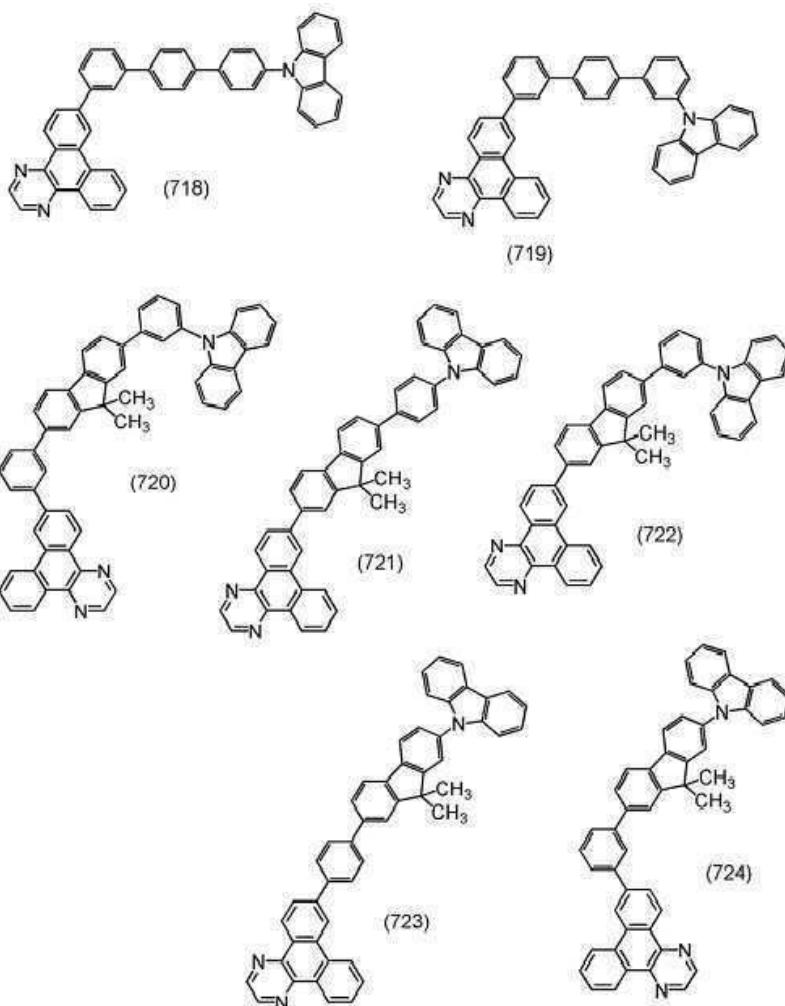
[화학식 165]



[0526]

[0527]

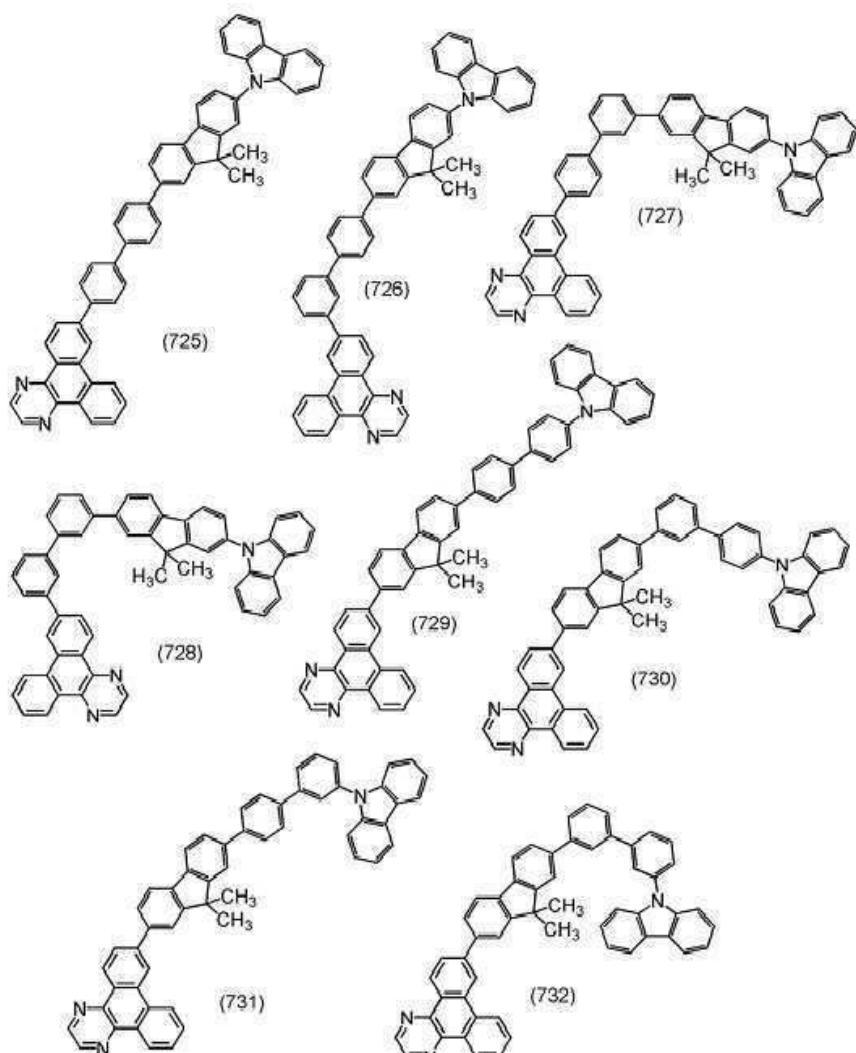
[화학식 166]



[0528]

[0529]

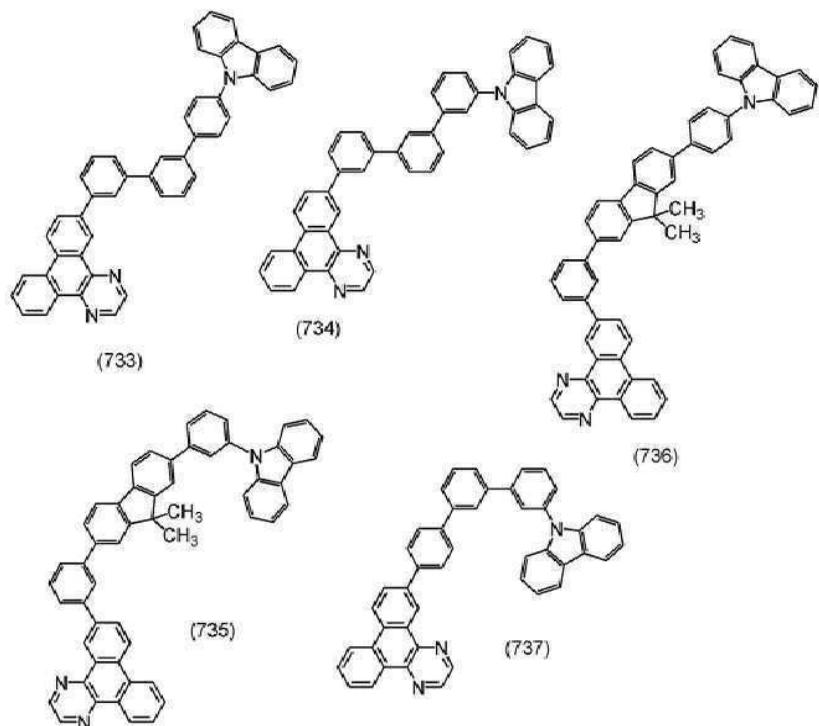
[화학식 167]



[0530]

[0531]

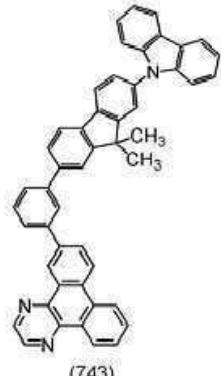
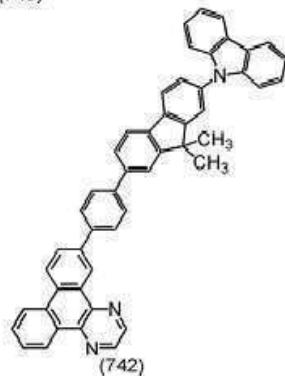
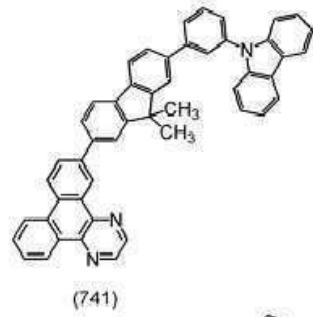
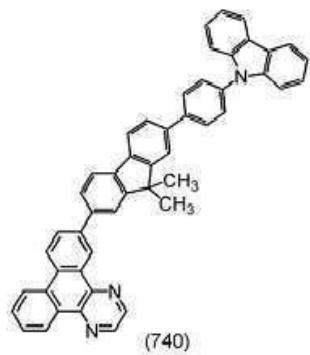
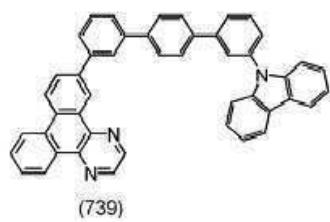
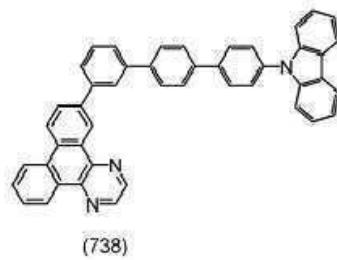
[화학식 168]



[0532]

[0533]

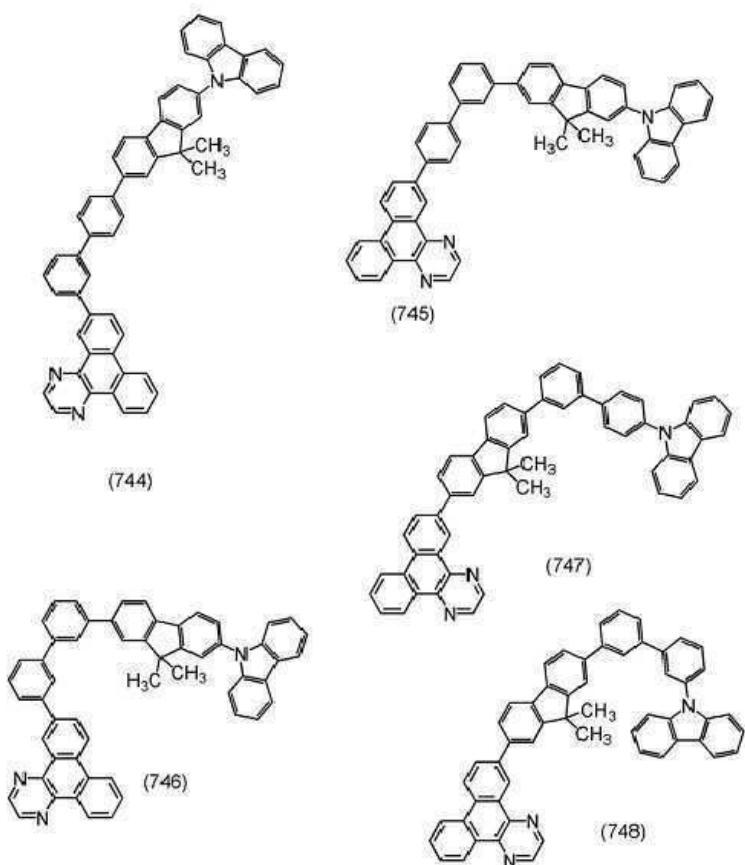
[화학식 169]



[0534]

[0535]

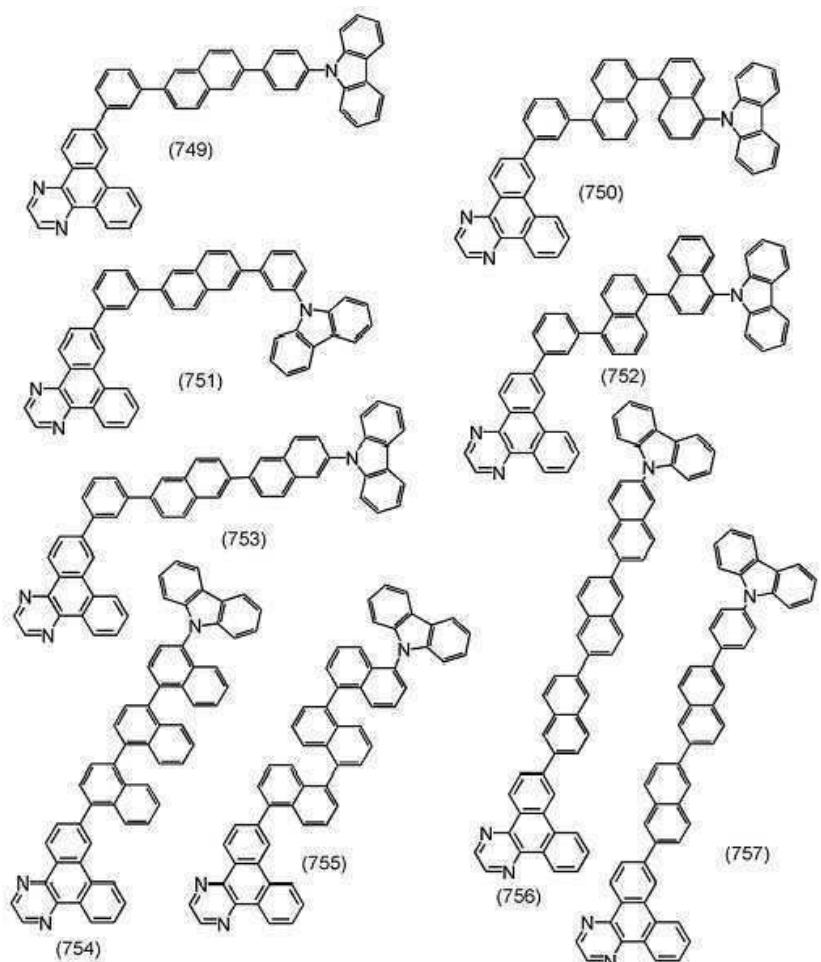
[화학식 170]



[0536]

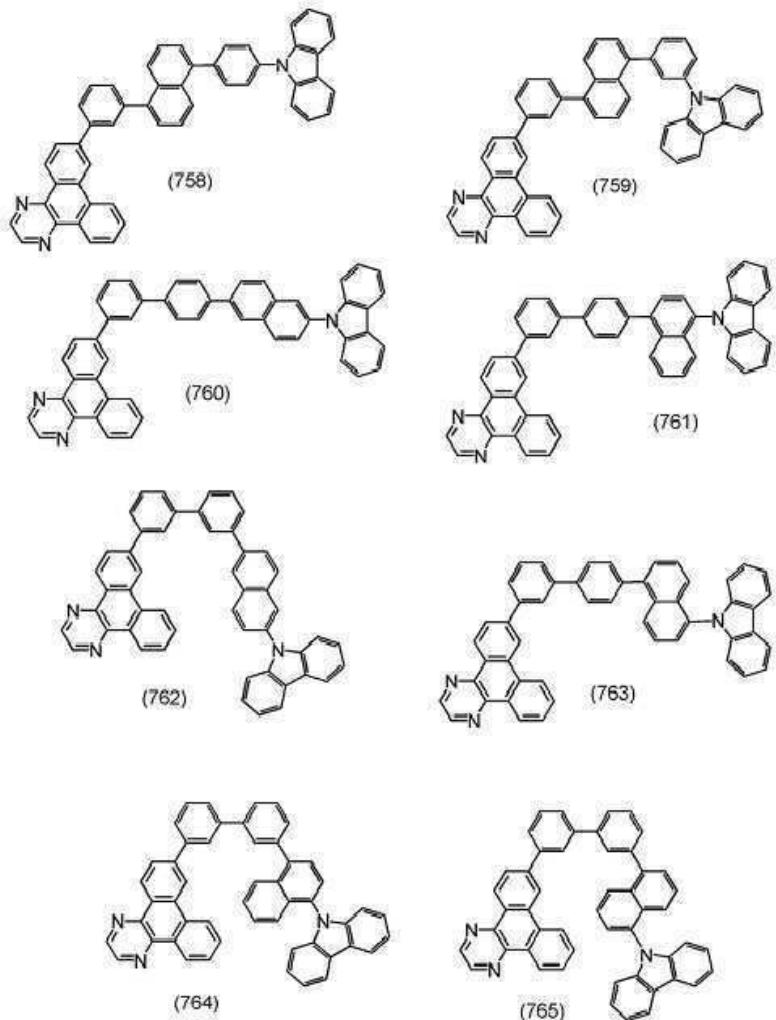
[0537]

[화학식 171]



[0538]

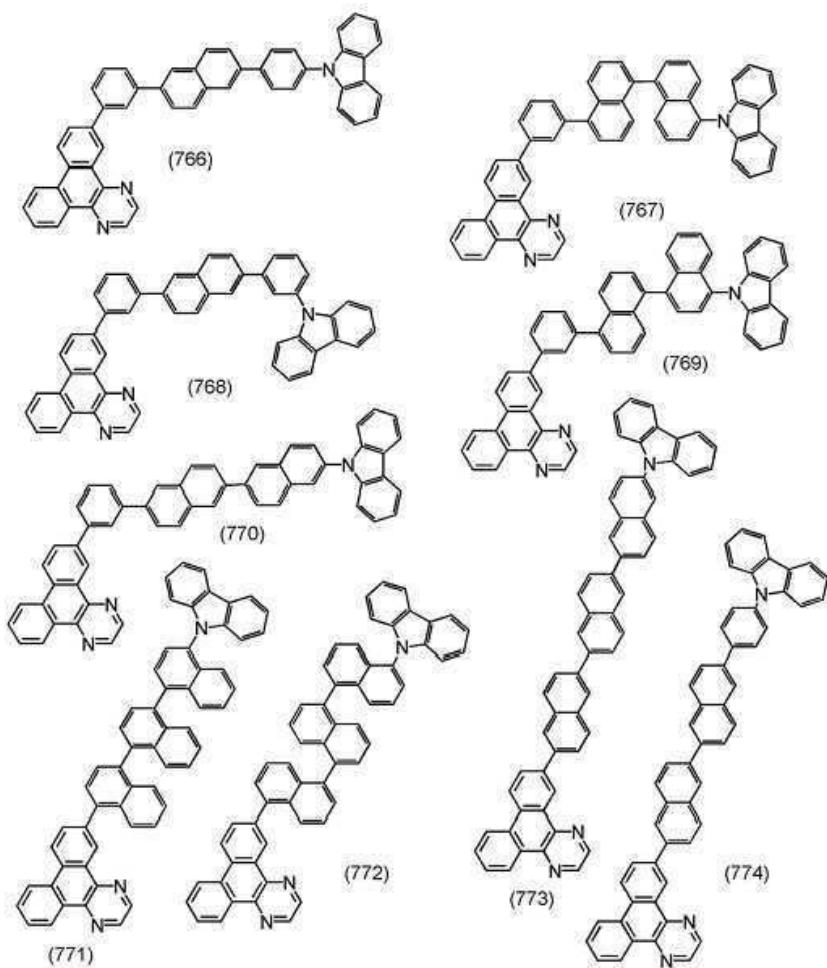
[0539] [화학식 172]



[0540]

[0541]

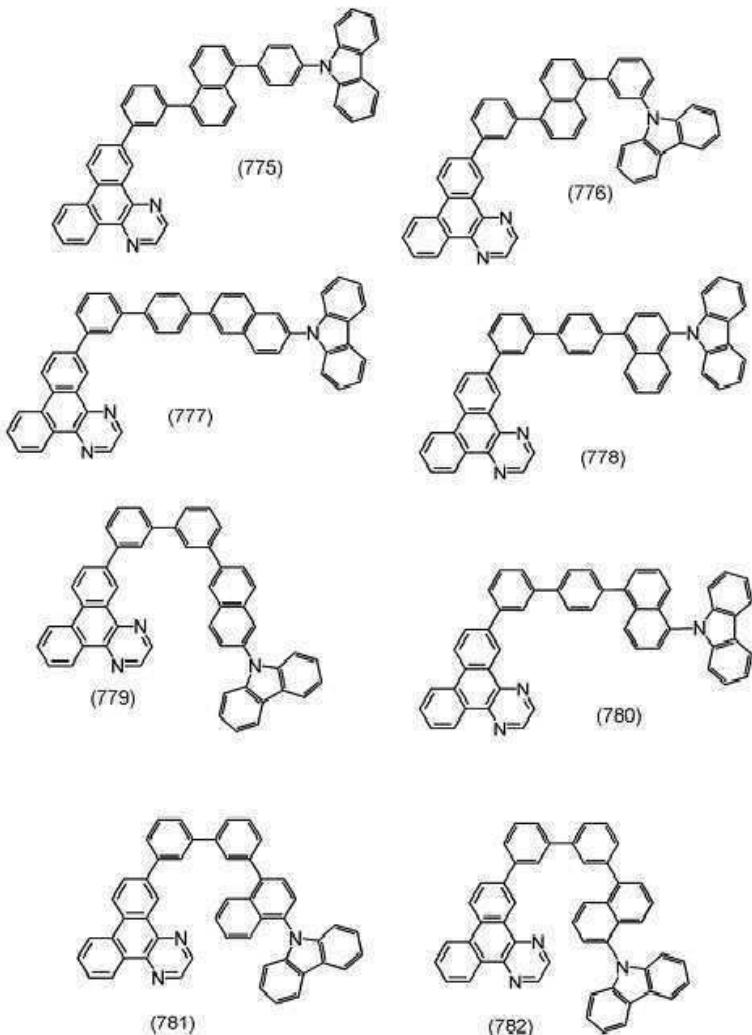
[화학식 173]



[0542]

[0543]

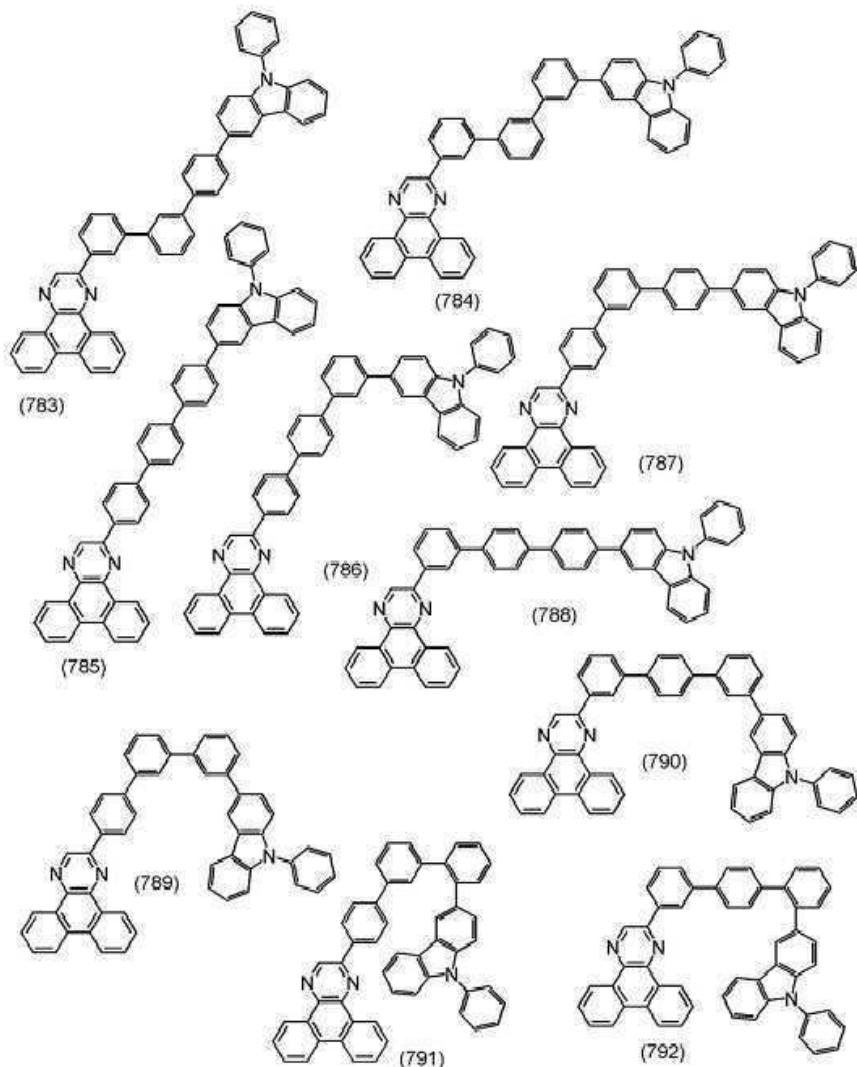
[화학식 174]



[0544]

[0545]

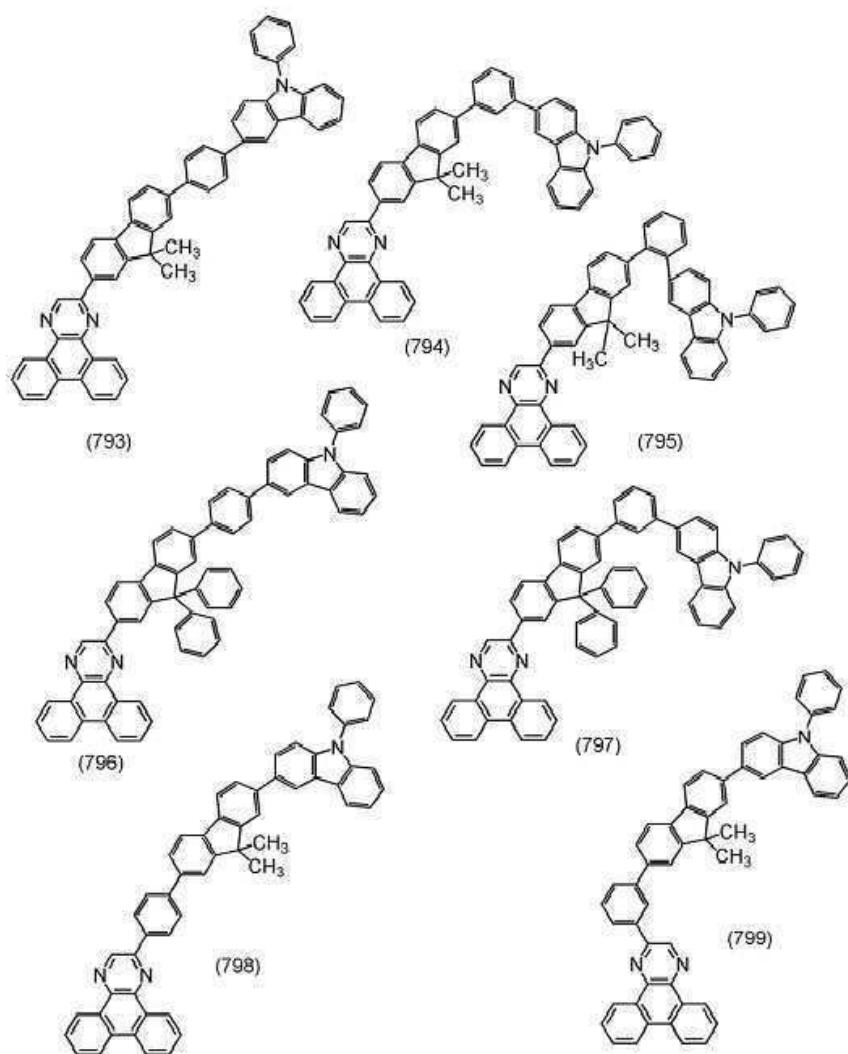
[화학식 175]



[0546]

[0547]

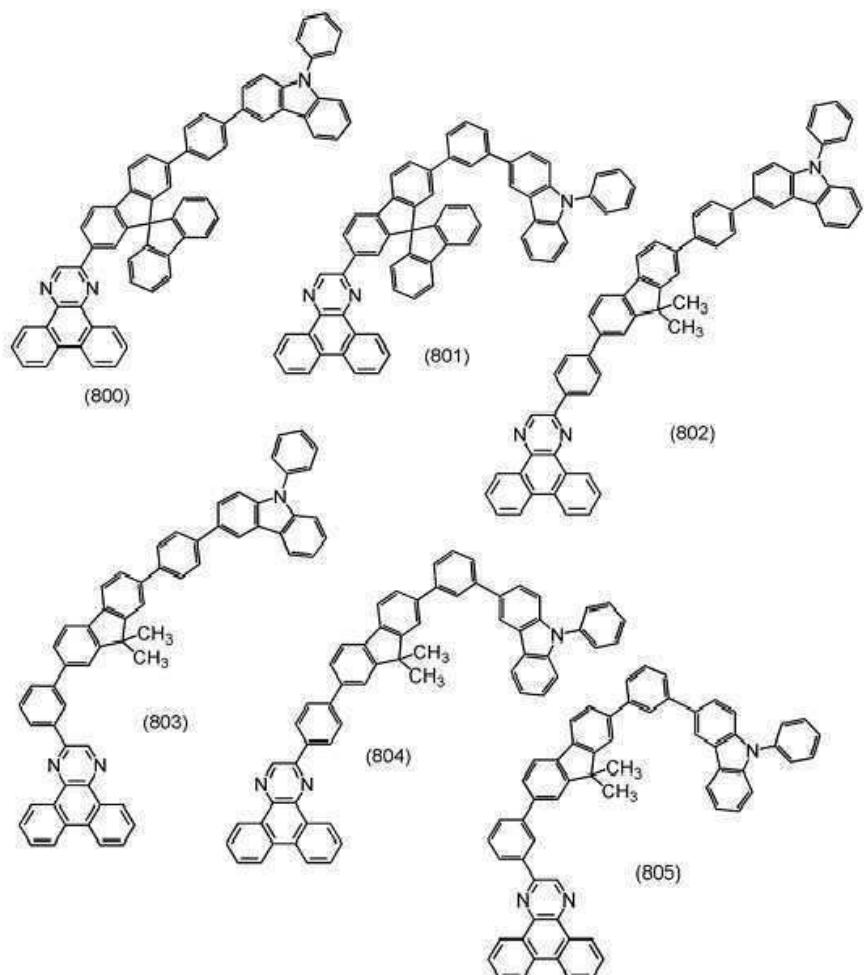
[화학식 176]



[0548]

[0549]

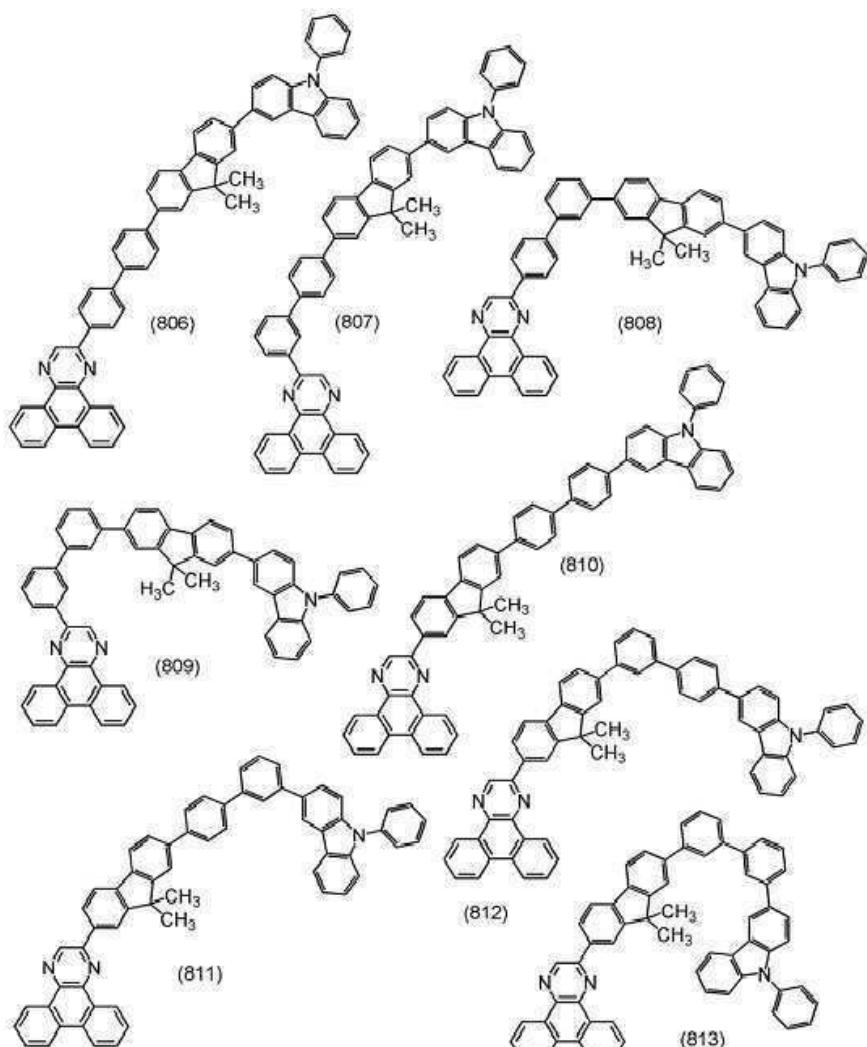
[화학식 177]



[0550]

[0551]

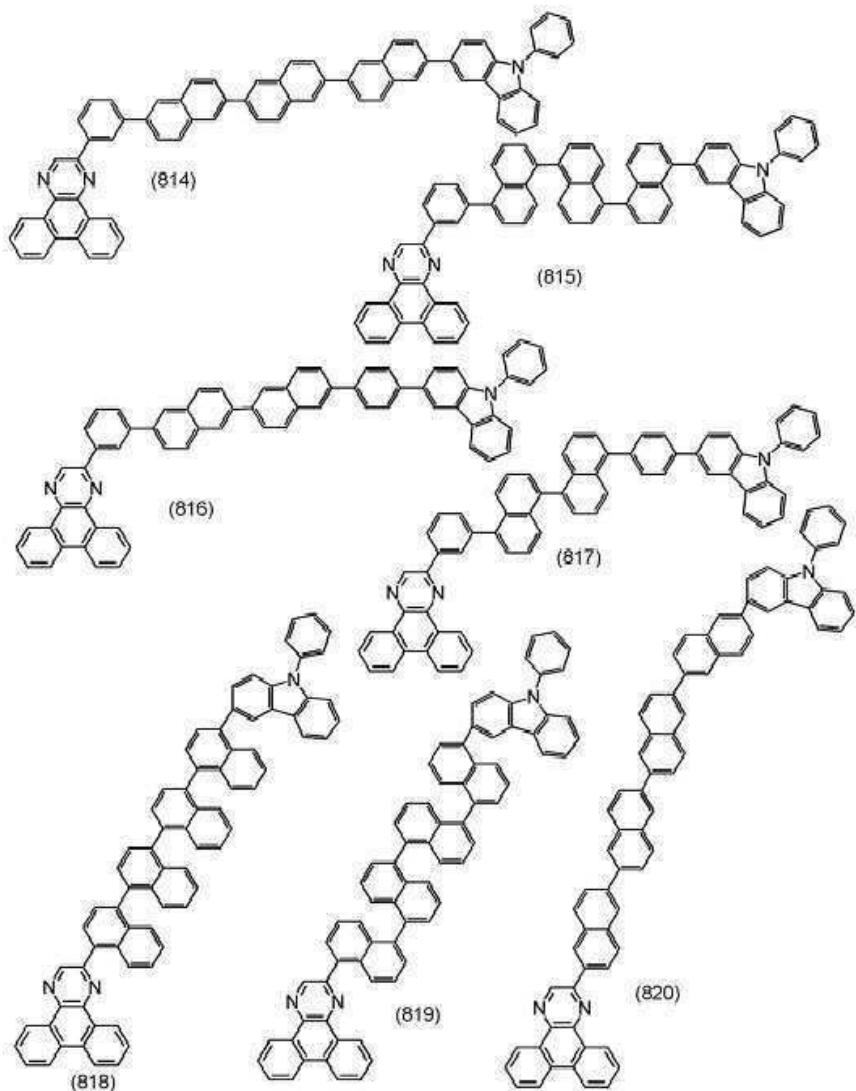
[화학식 178]



[0552]

[0553]

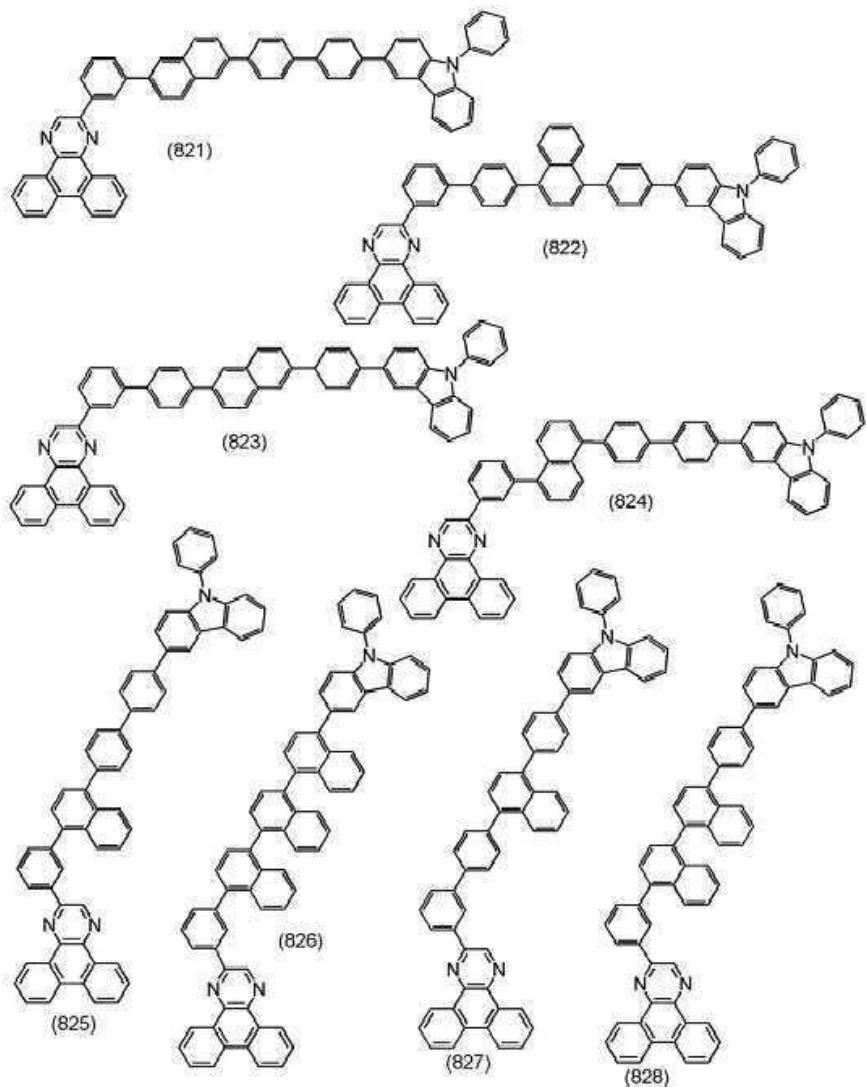
[화학식 179]



[0554]

[0555]

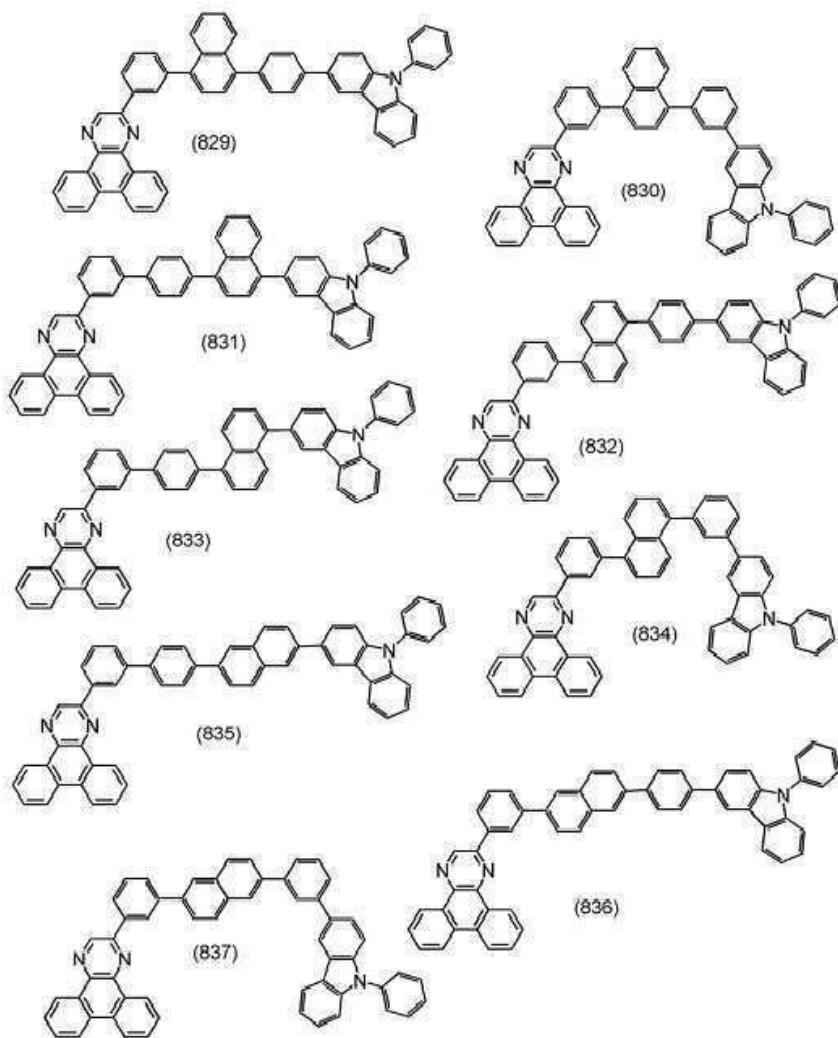
[화학식 180]



[0556]

[0557]

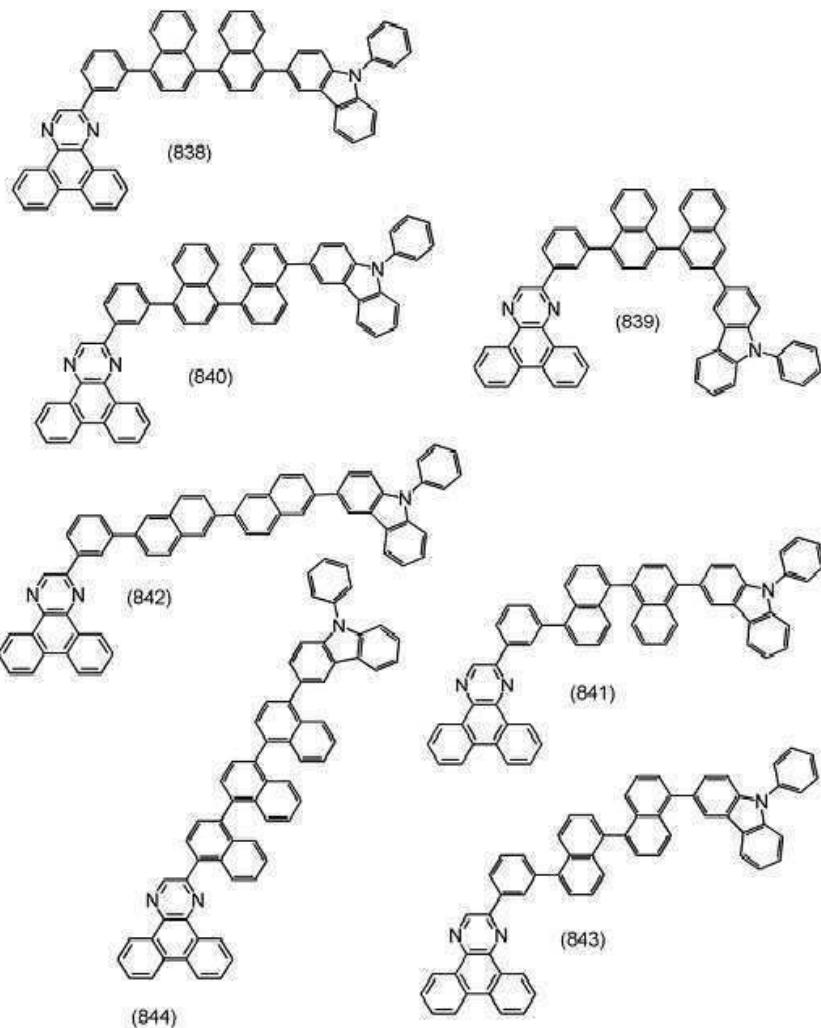
[화학식 181]



[0558]

[0559]

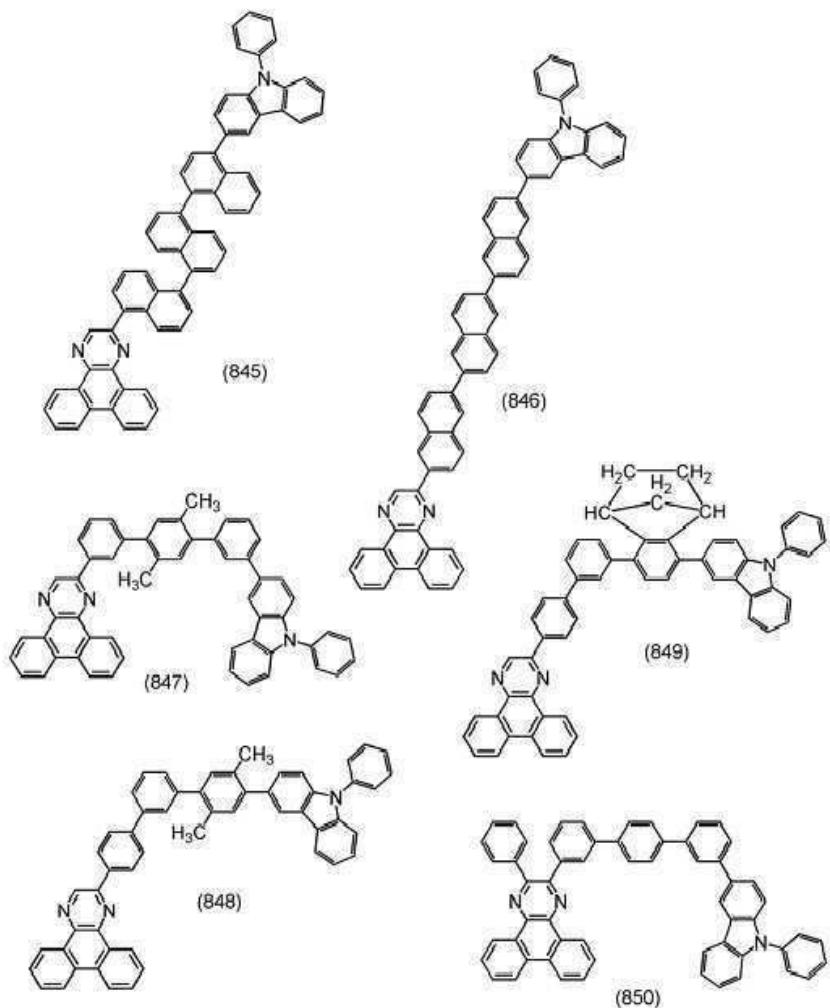
[화학식 182]



[0560]

[0561]

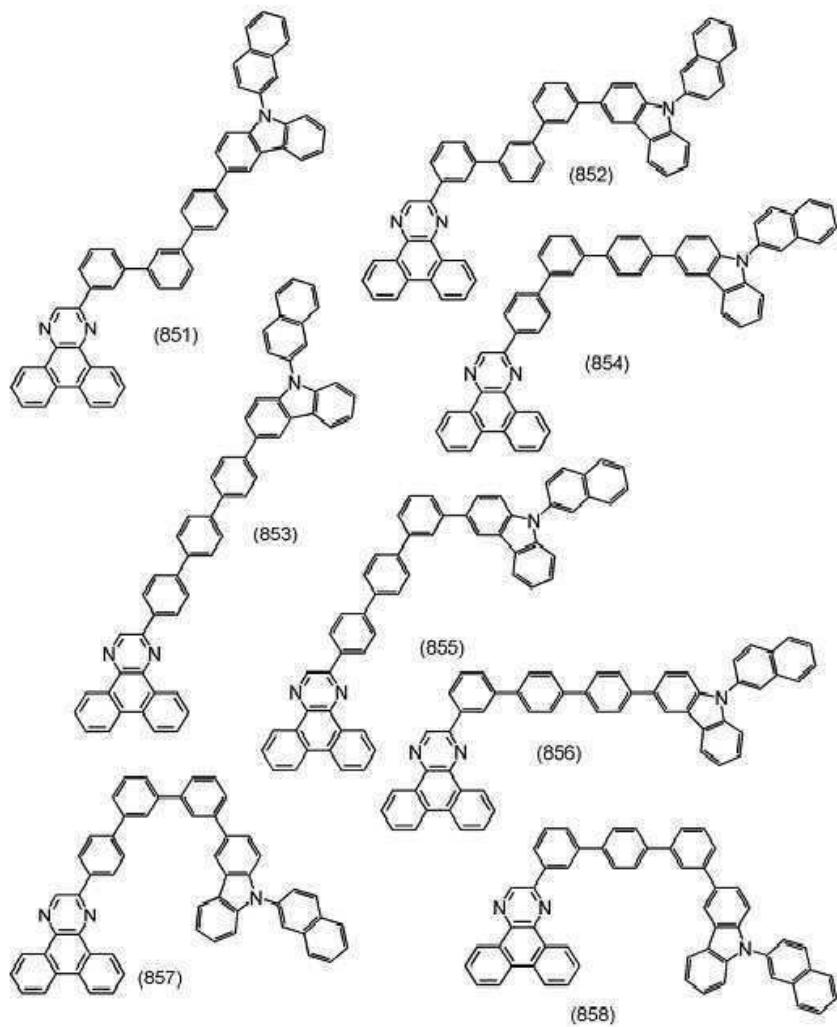
[화학식 183]



[0562]

[0563]

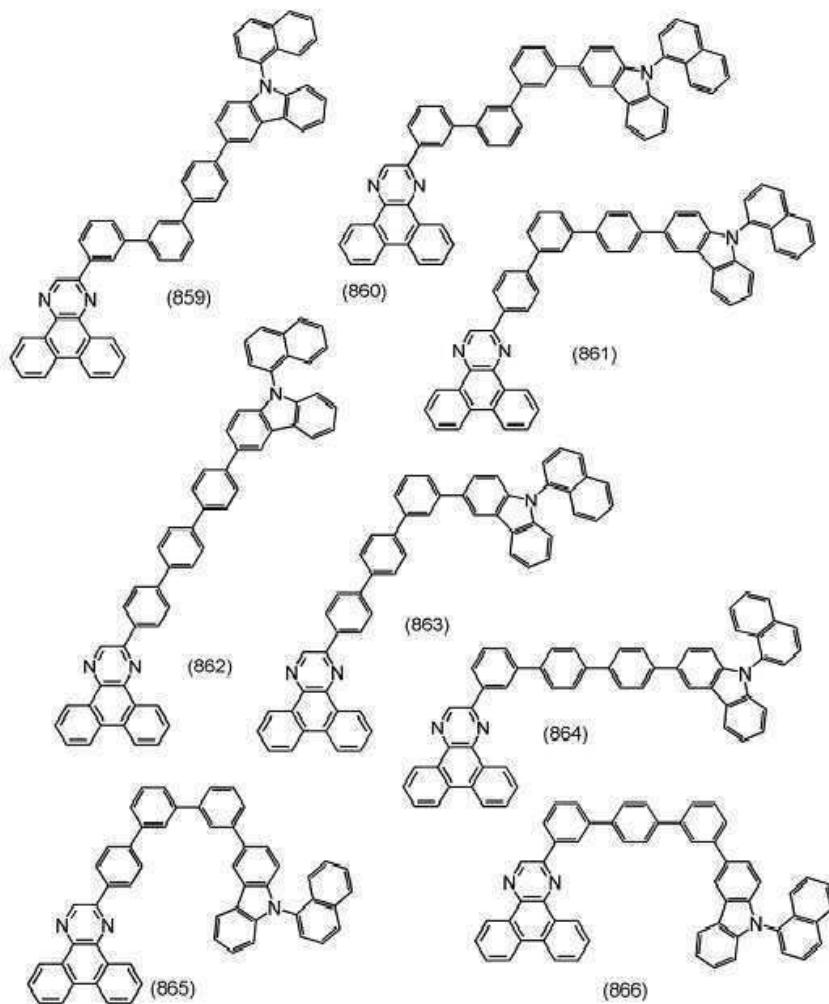
[화학식 184]



[0564]

[0565]

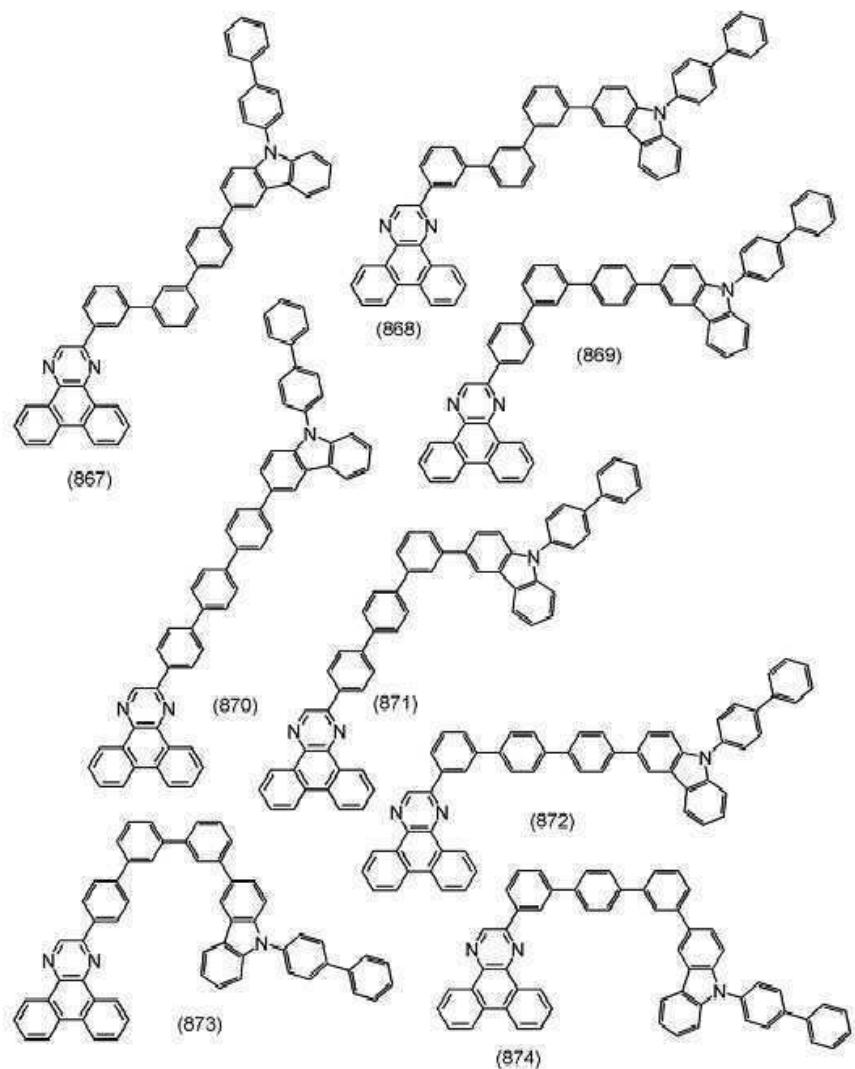
[화학식 185]



[0566]

[0567]

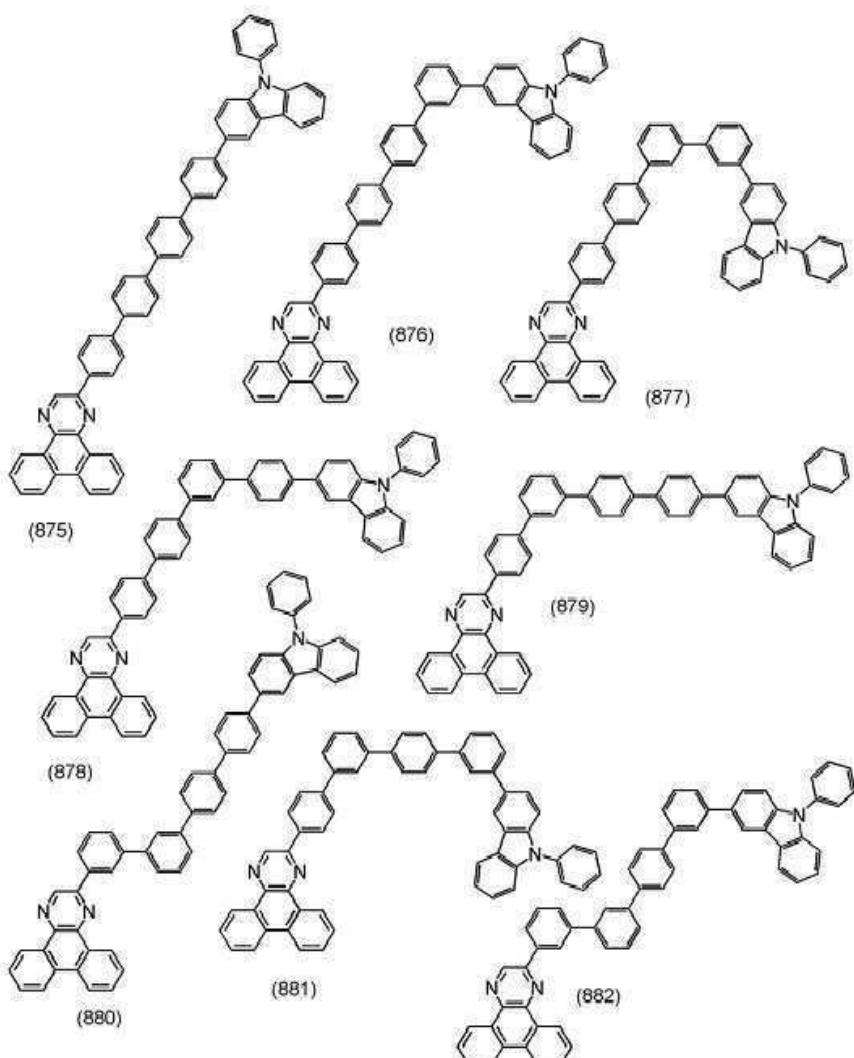
[화학식 186]



[0568]

[0569]

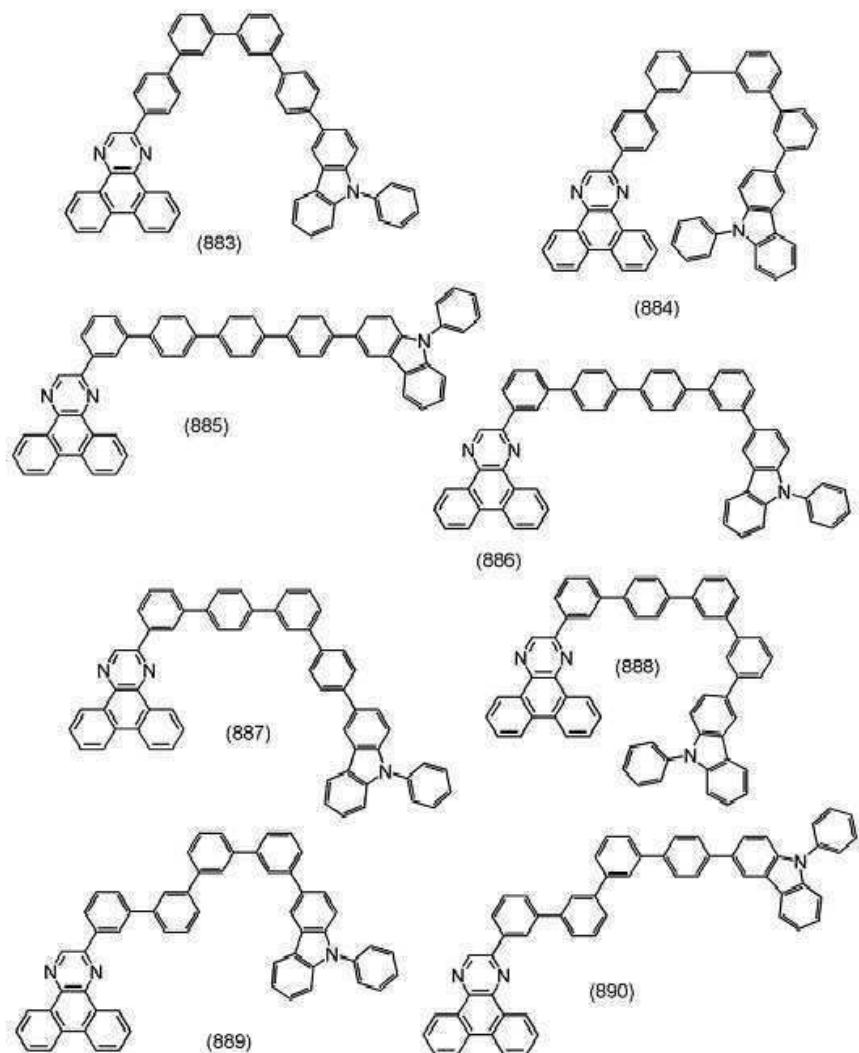
[화학식 187]



[0570]

[0571]

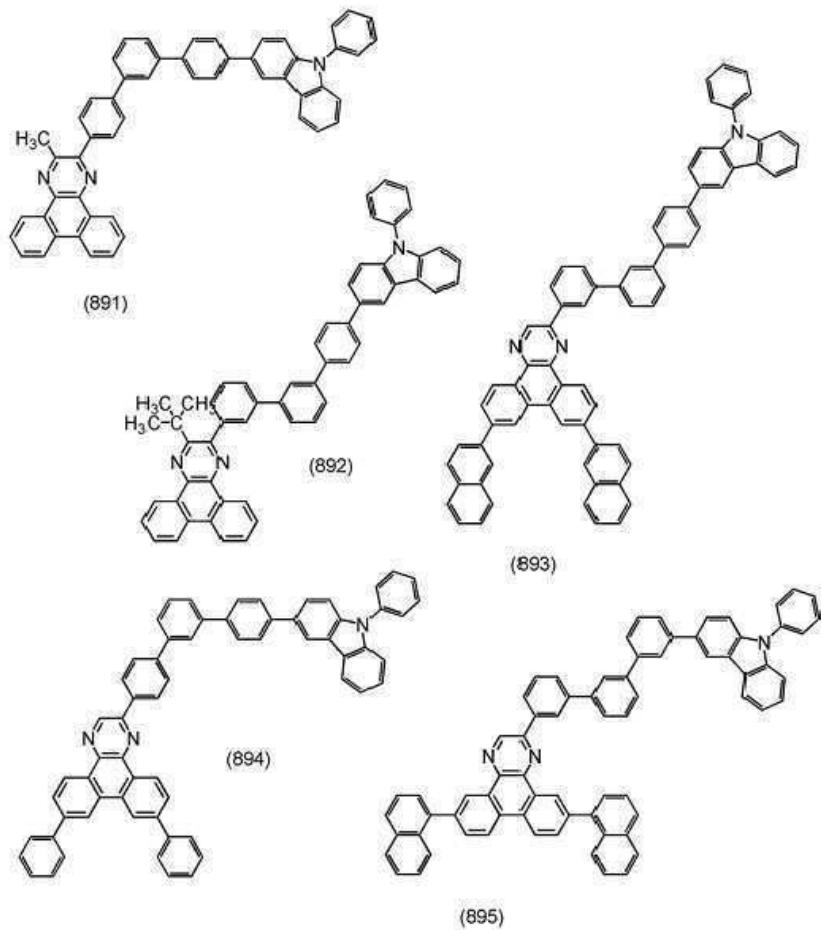
[화학식 188]



[0572]

[0573]

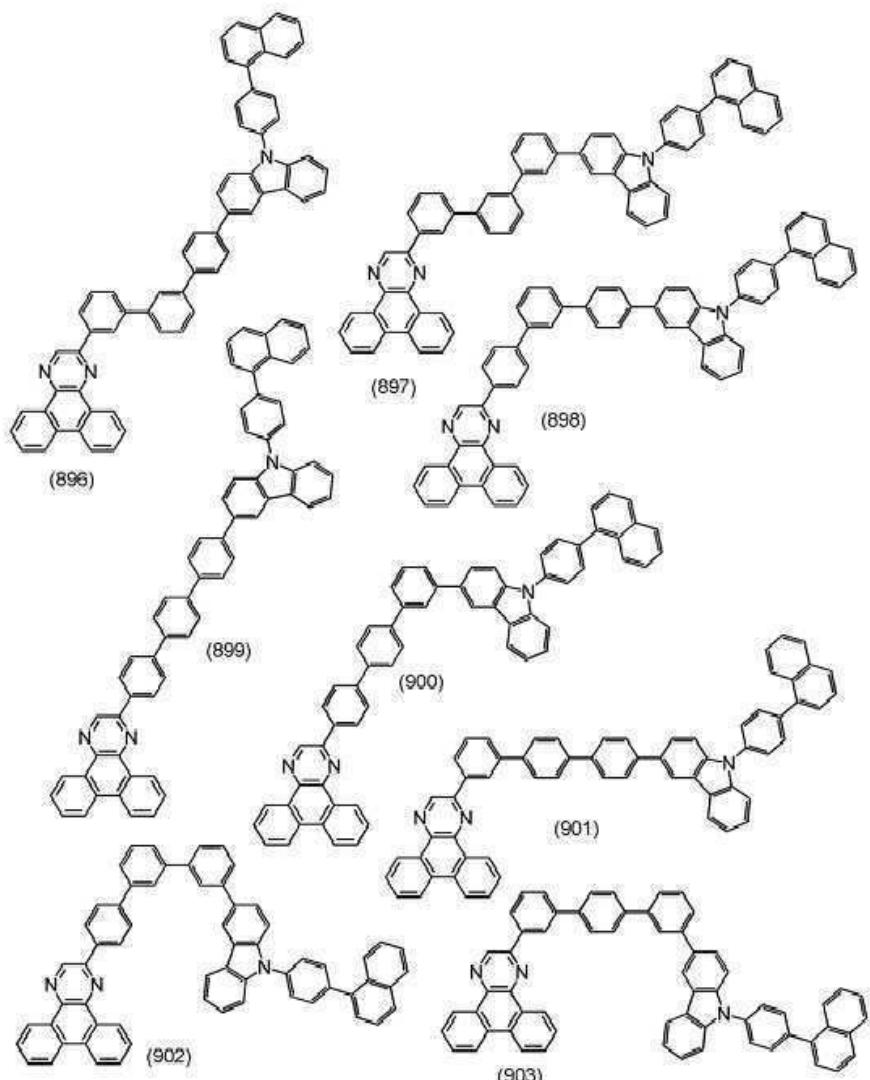
[화학식 189]



[0574]

[0575]

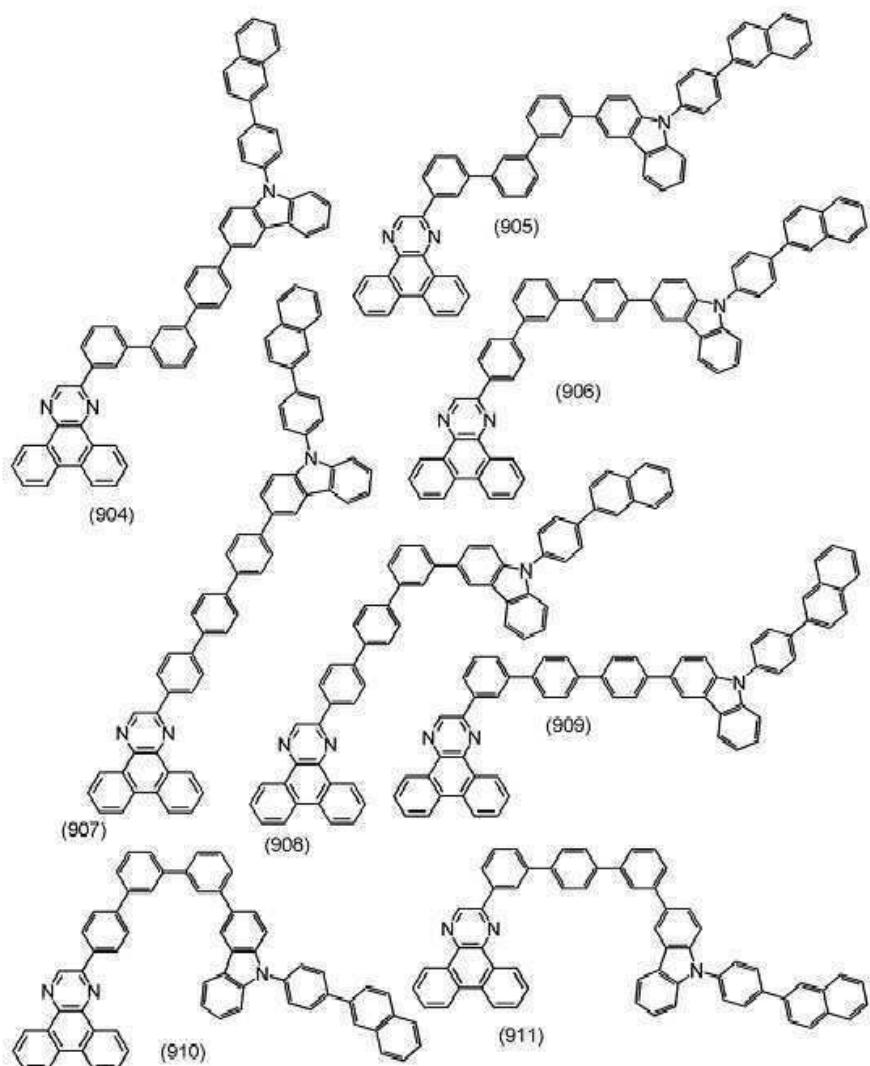
[화학식 190]



[0576]

[0577]

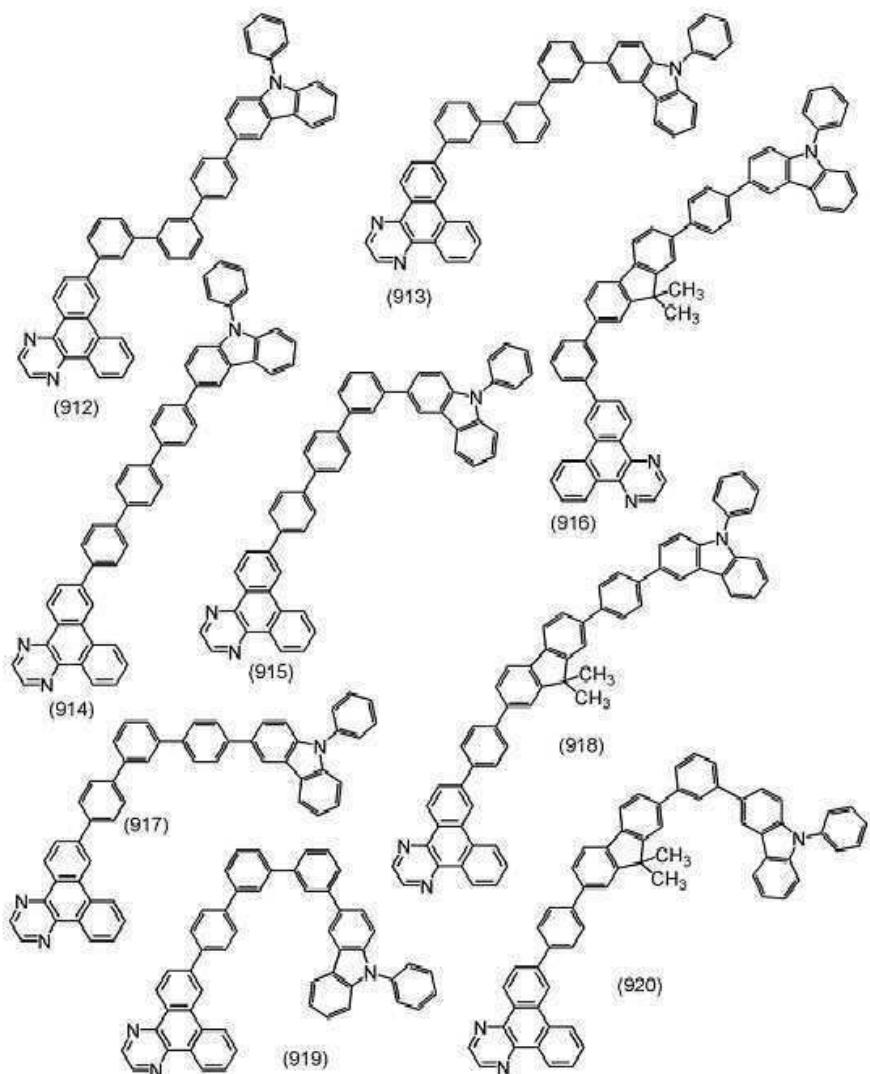
[화학식 191]



[0578]

[0579]

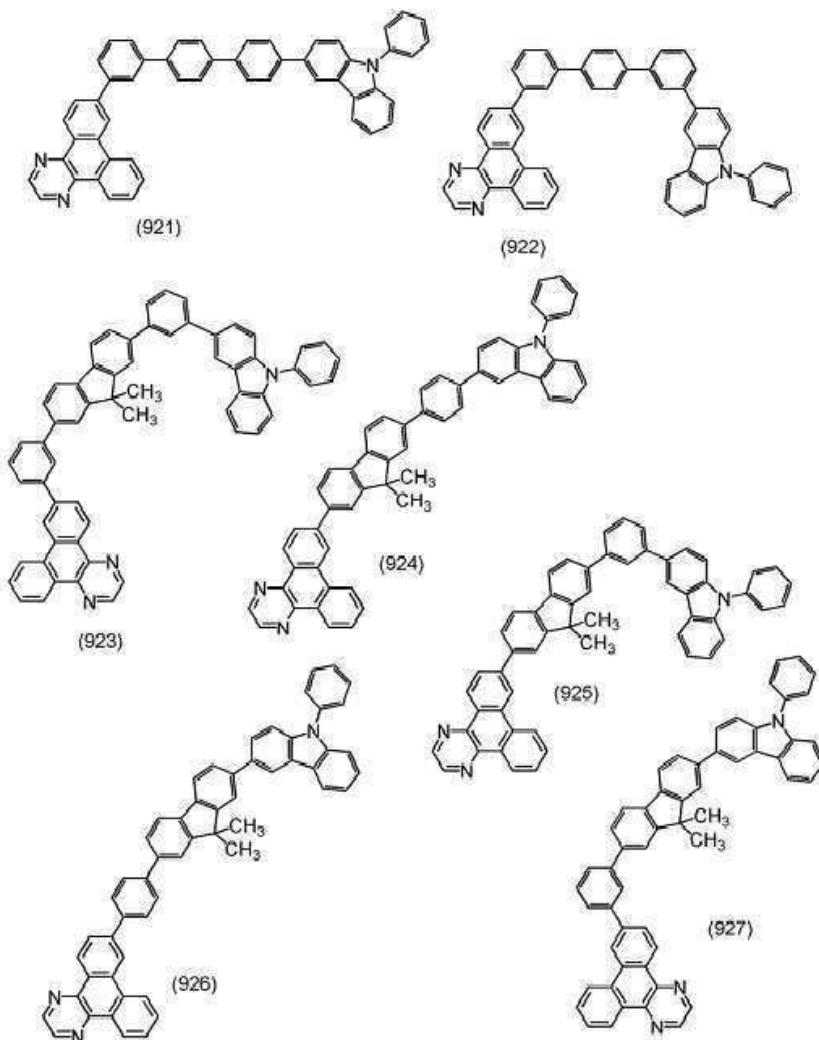
[화학식 192]



[0580]

[0581]

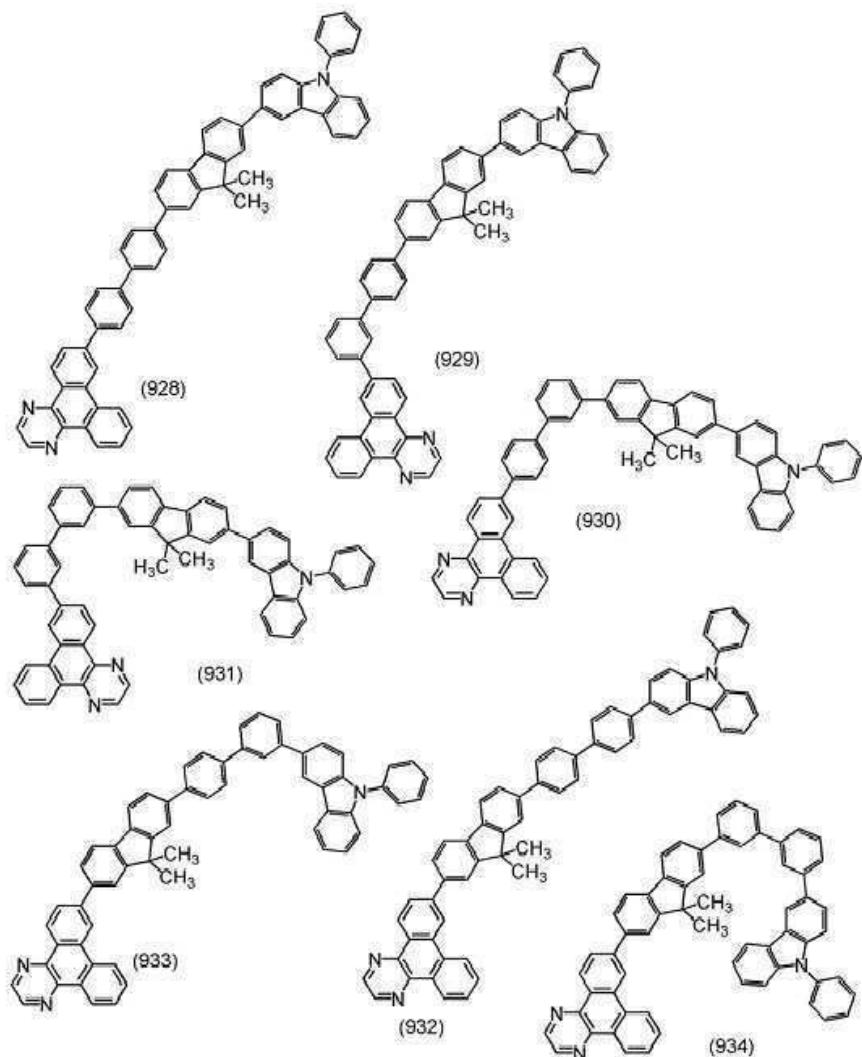
[화학식 193]



[0582]

[0583]

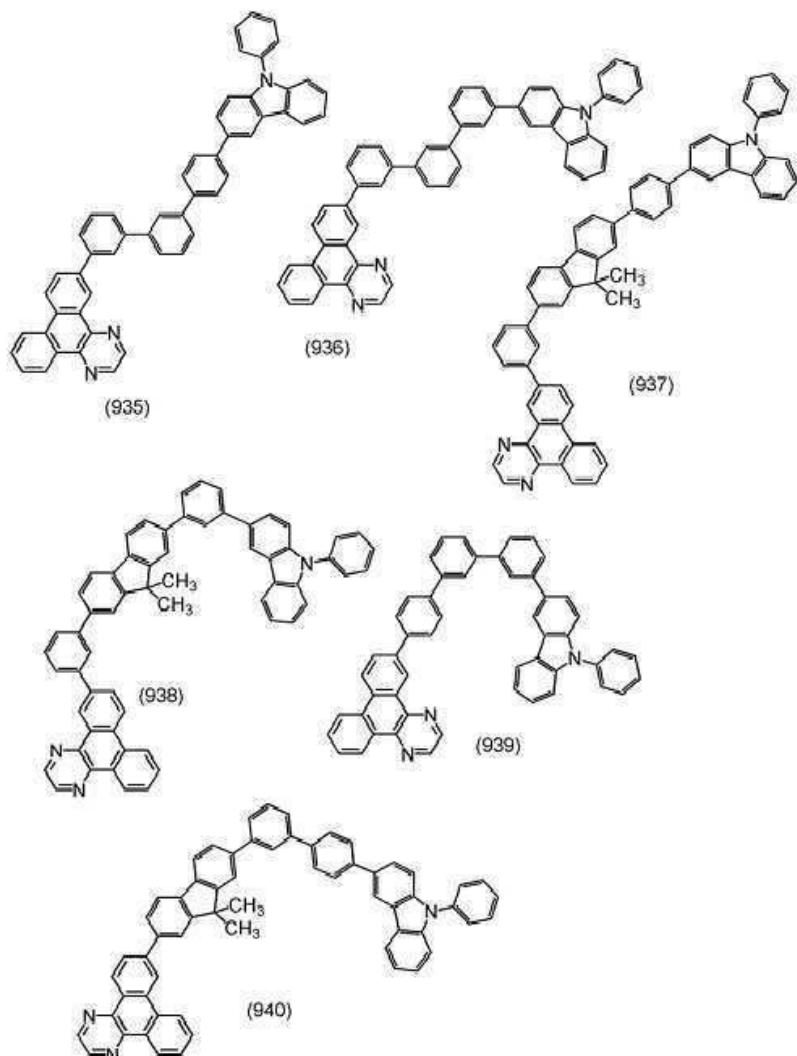
[화학식 194]



[0584]

[0585]

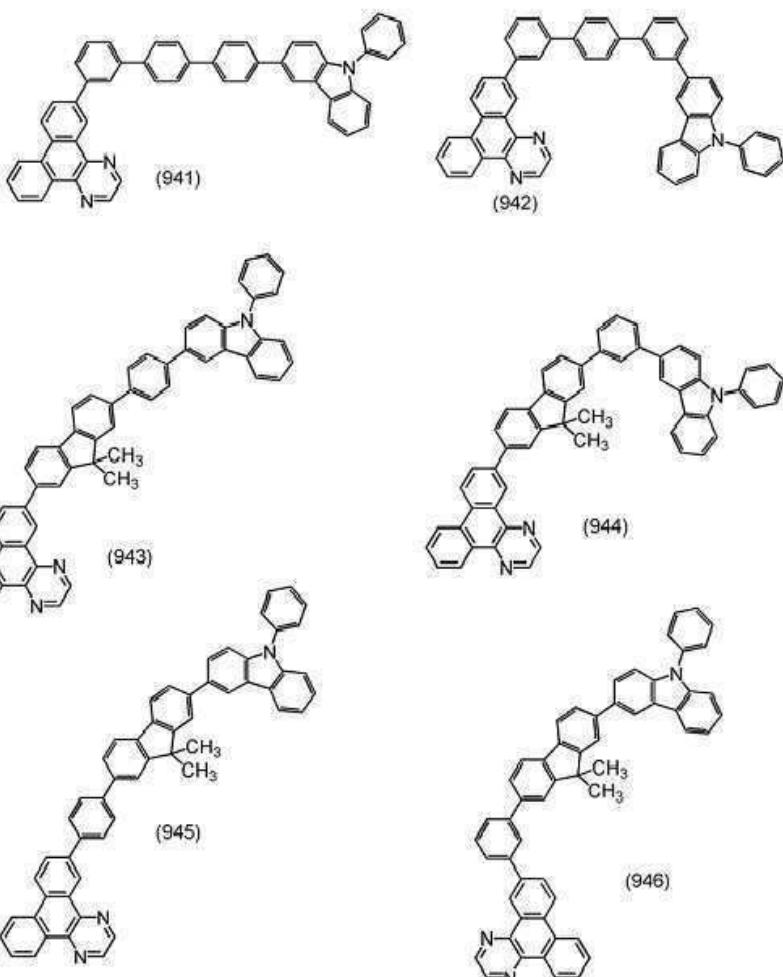
[화학식 195]



[0586]

[0587]

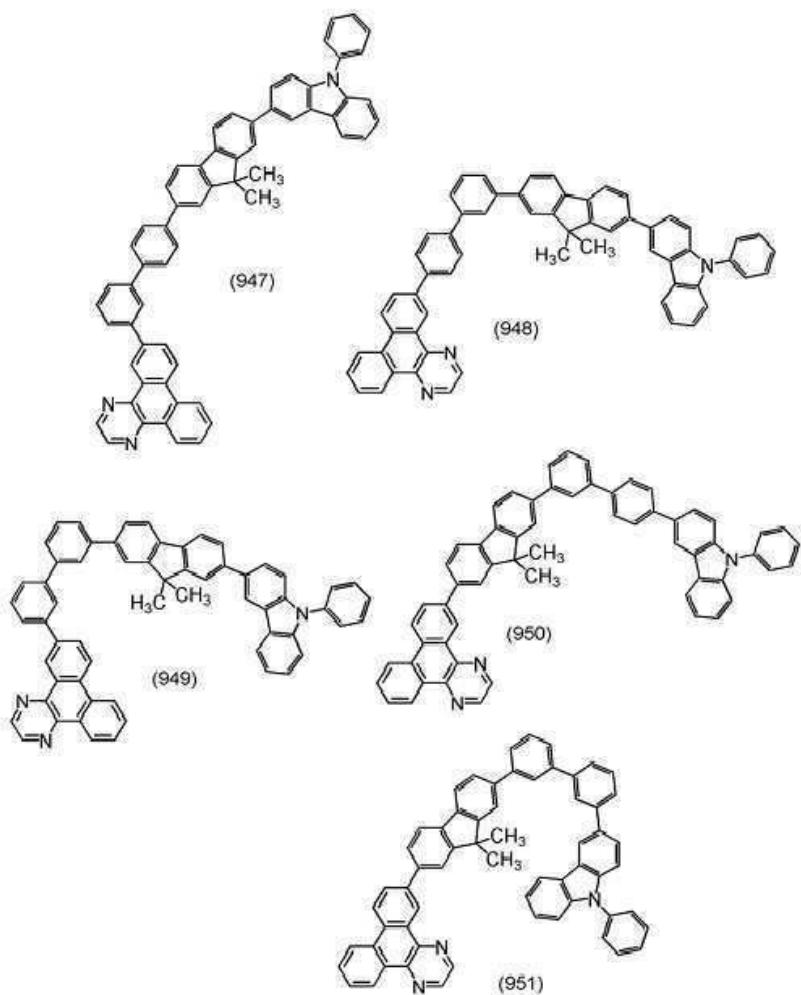
[화학식 196]



[0588]

[0589]

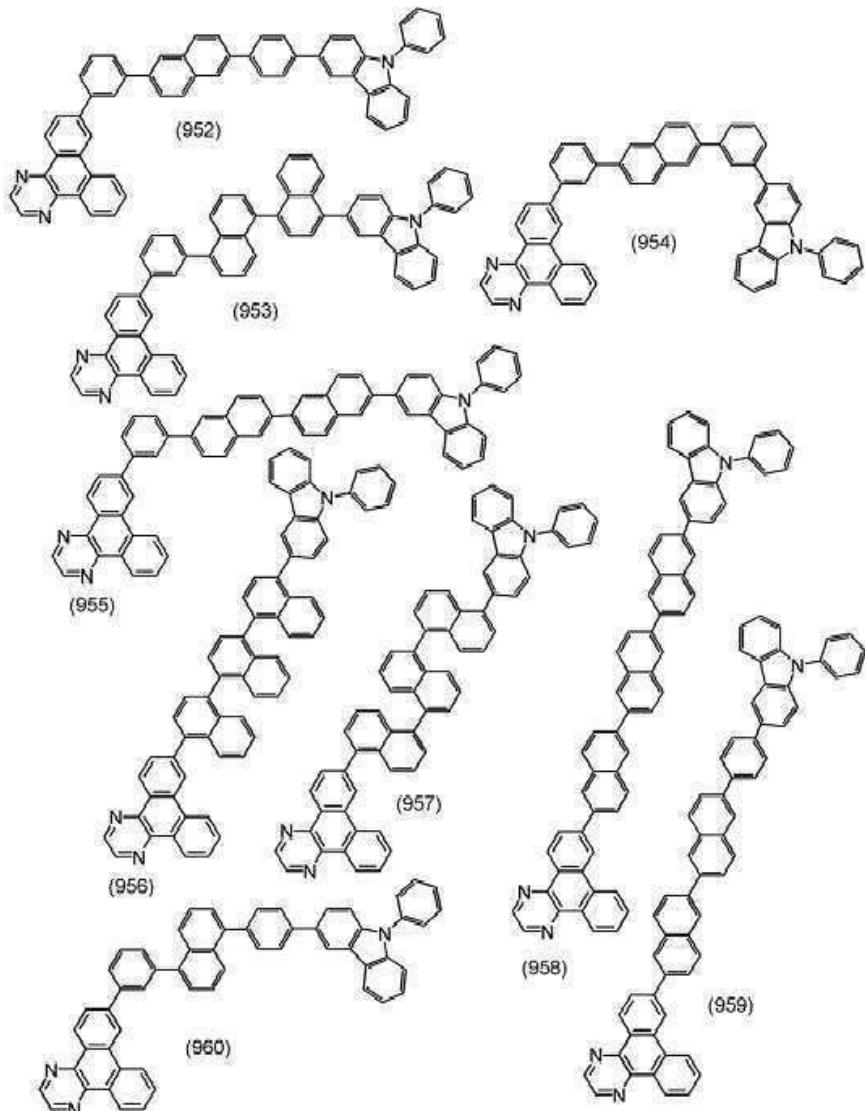
[화학식 197]



[0590]

[0591]

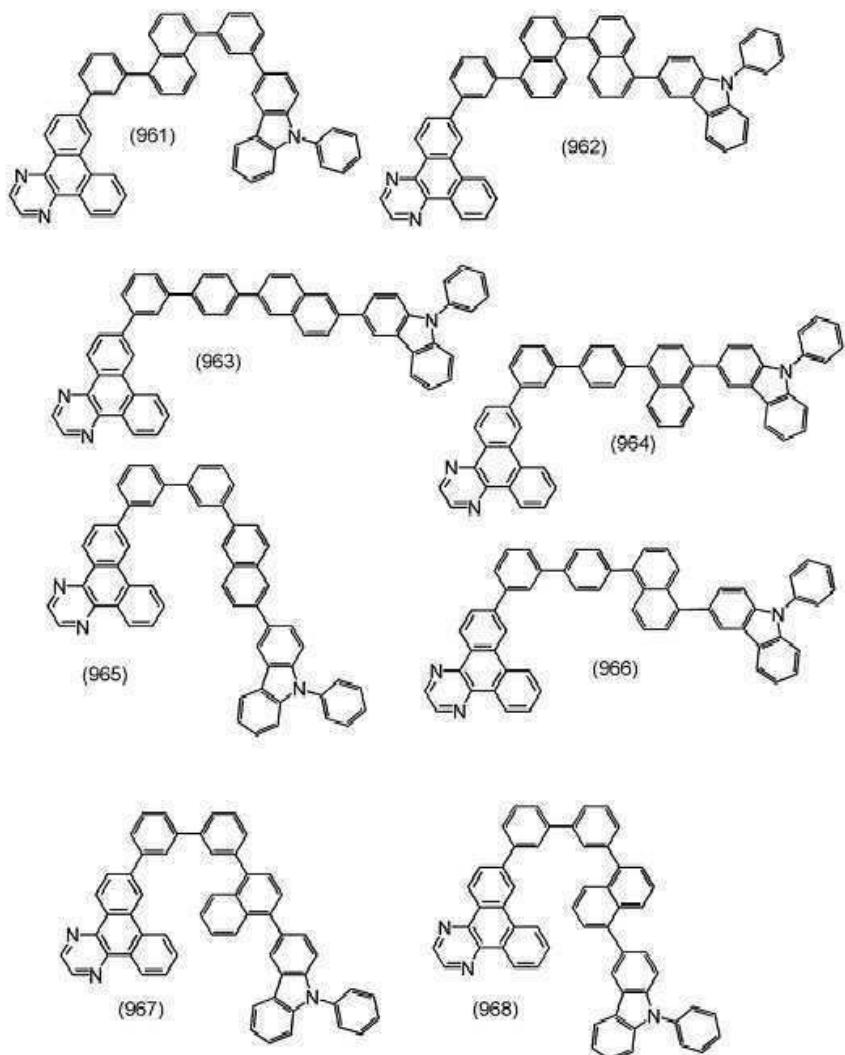
[화학식 198]



[0592]

[0593]

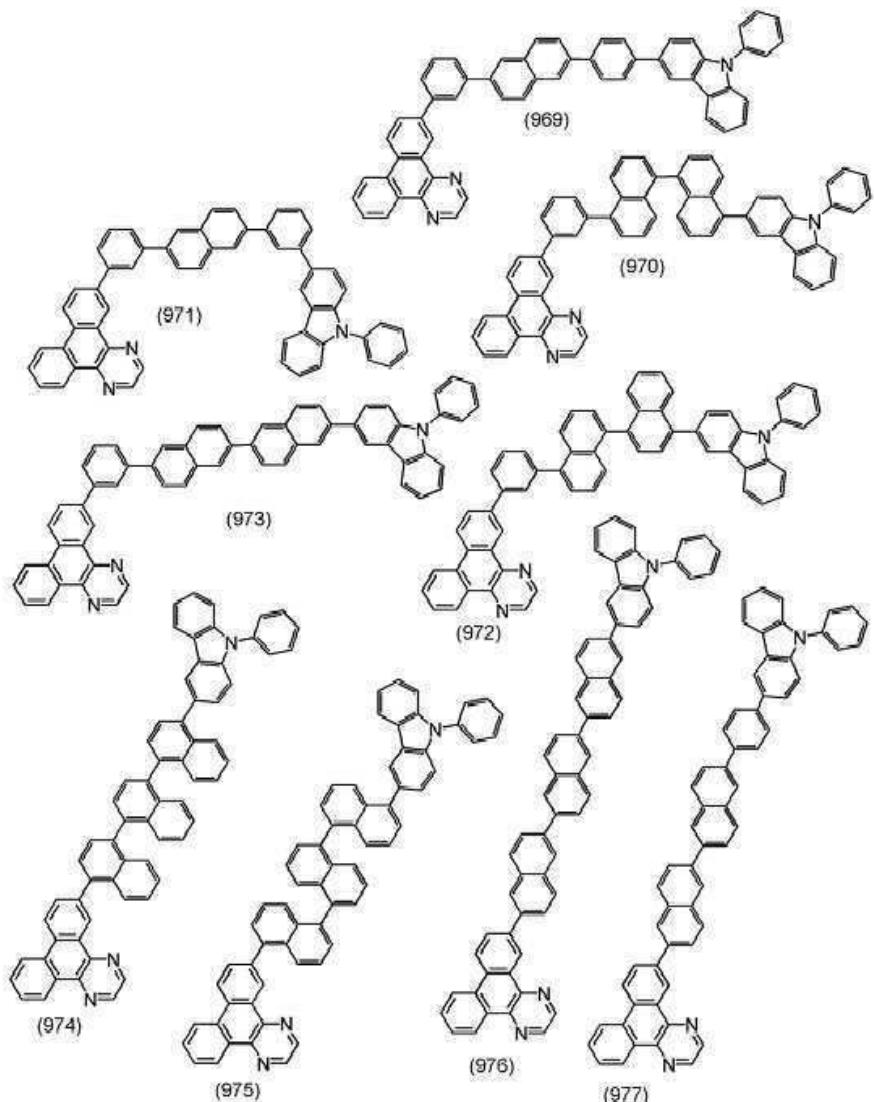
[화학식 199]



[0594]

[0595]

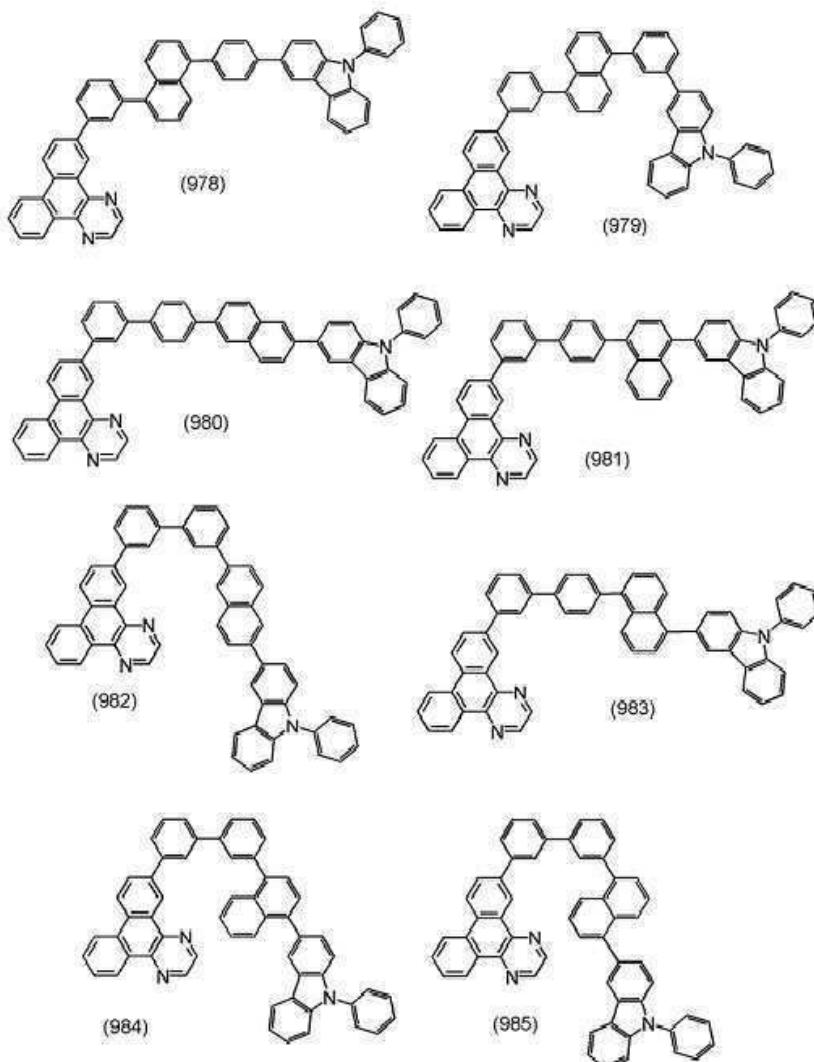
[화학식 200]



[0596]

[0597]

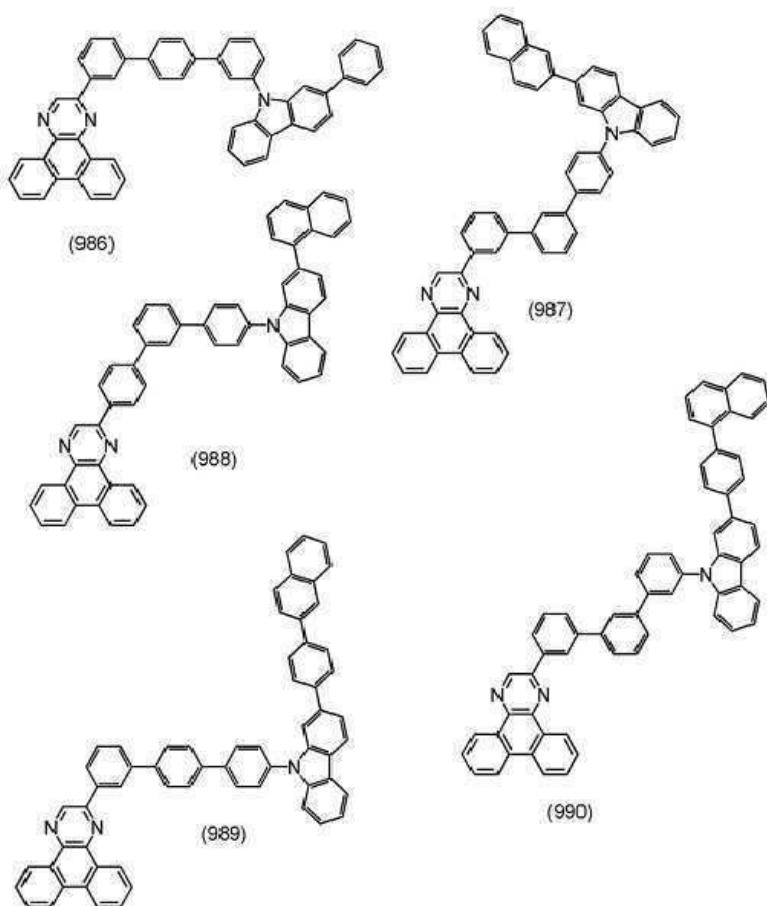
[화학식 201]



[0598]

[0599]

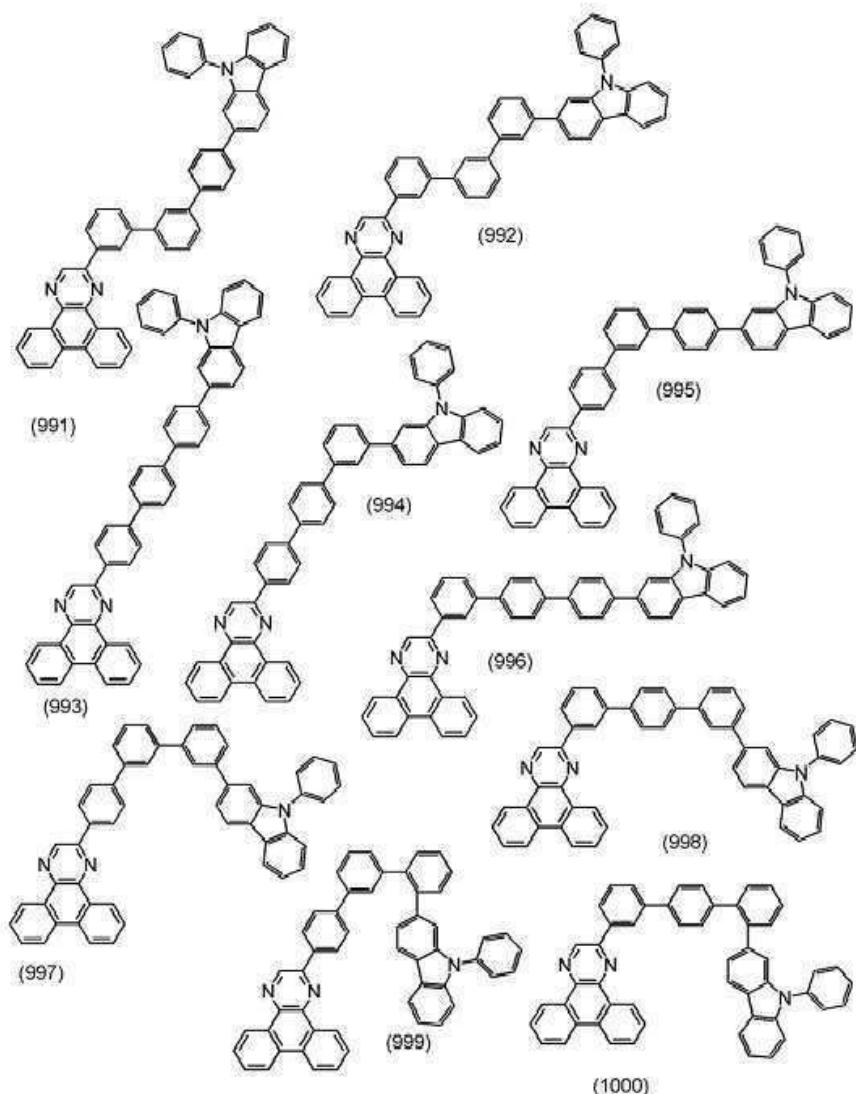
[화학식 202]



[0600]

[0601]

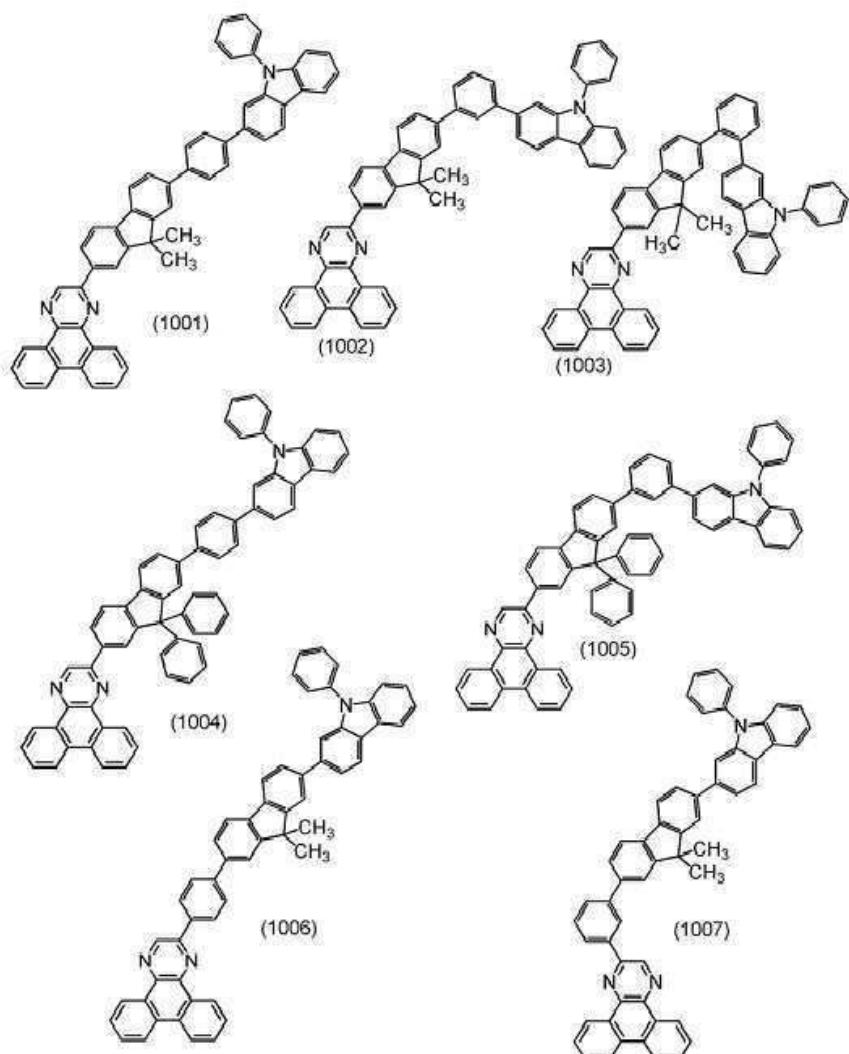
[화학식 203]



[0602]

[0603]

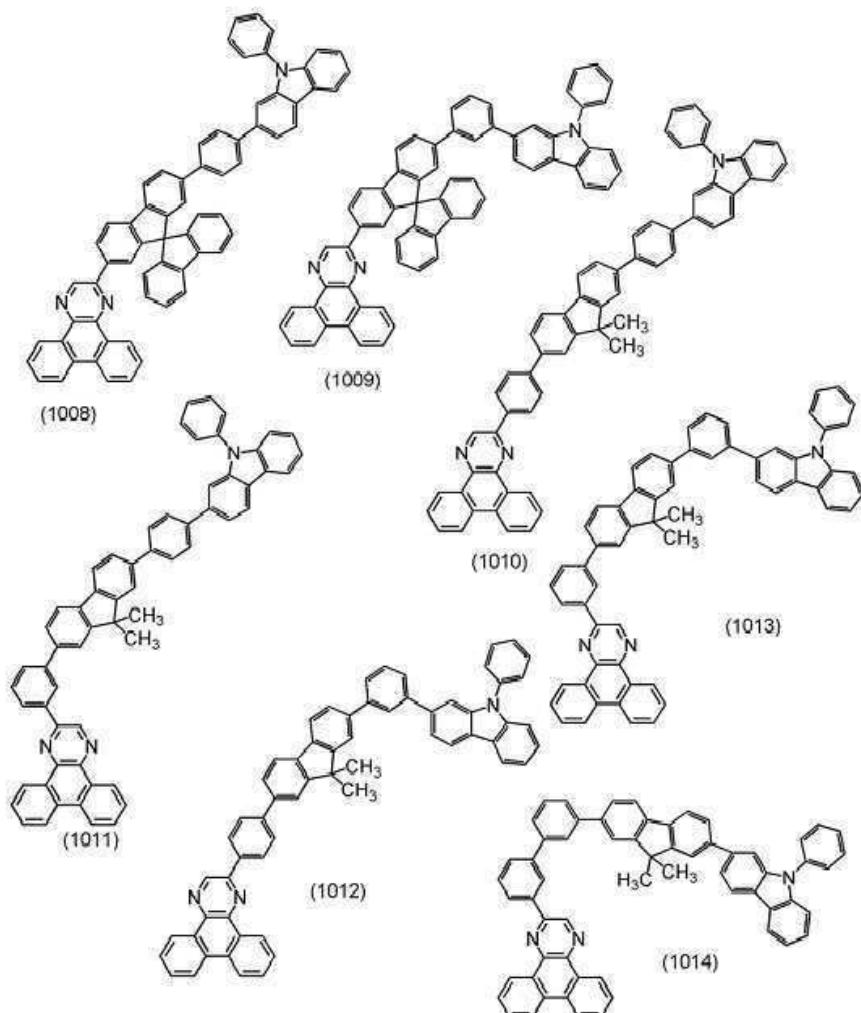
[화학식 204]



[0604]

[0605]

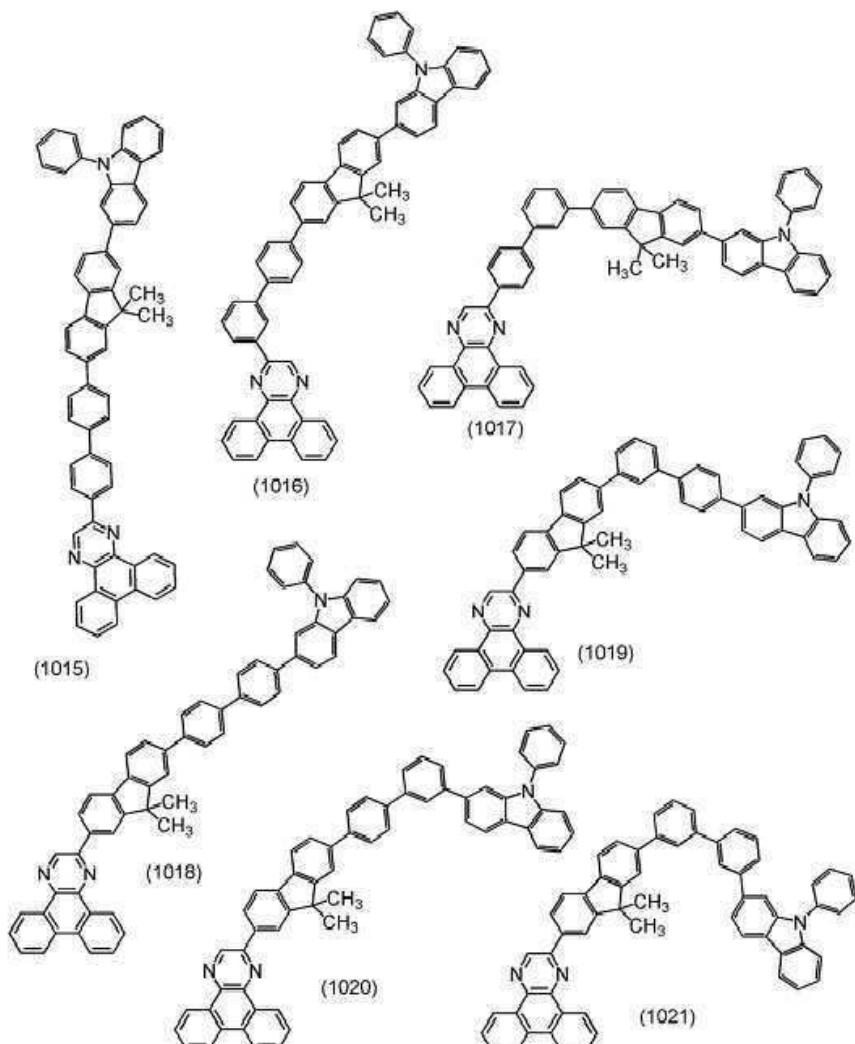
[화학식 205]



[0606]

[0607]

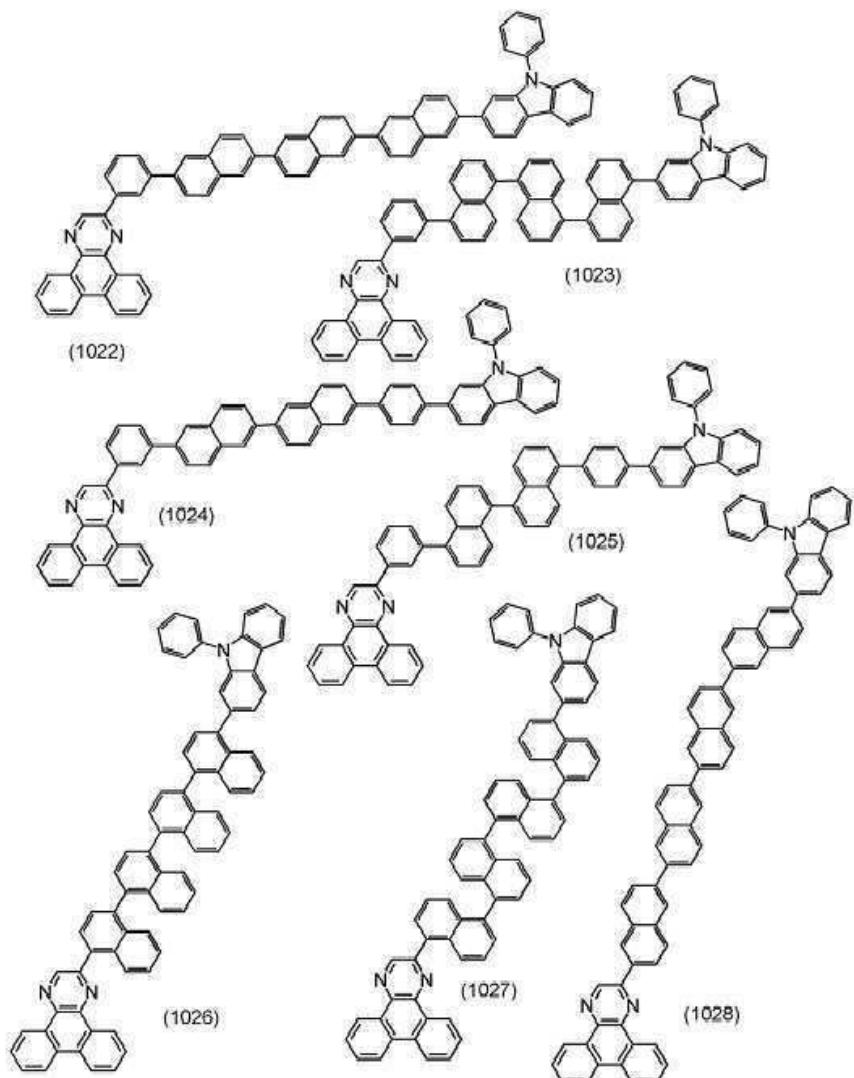
[화학식 206]



[0608]

[0609]

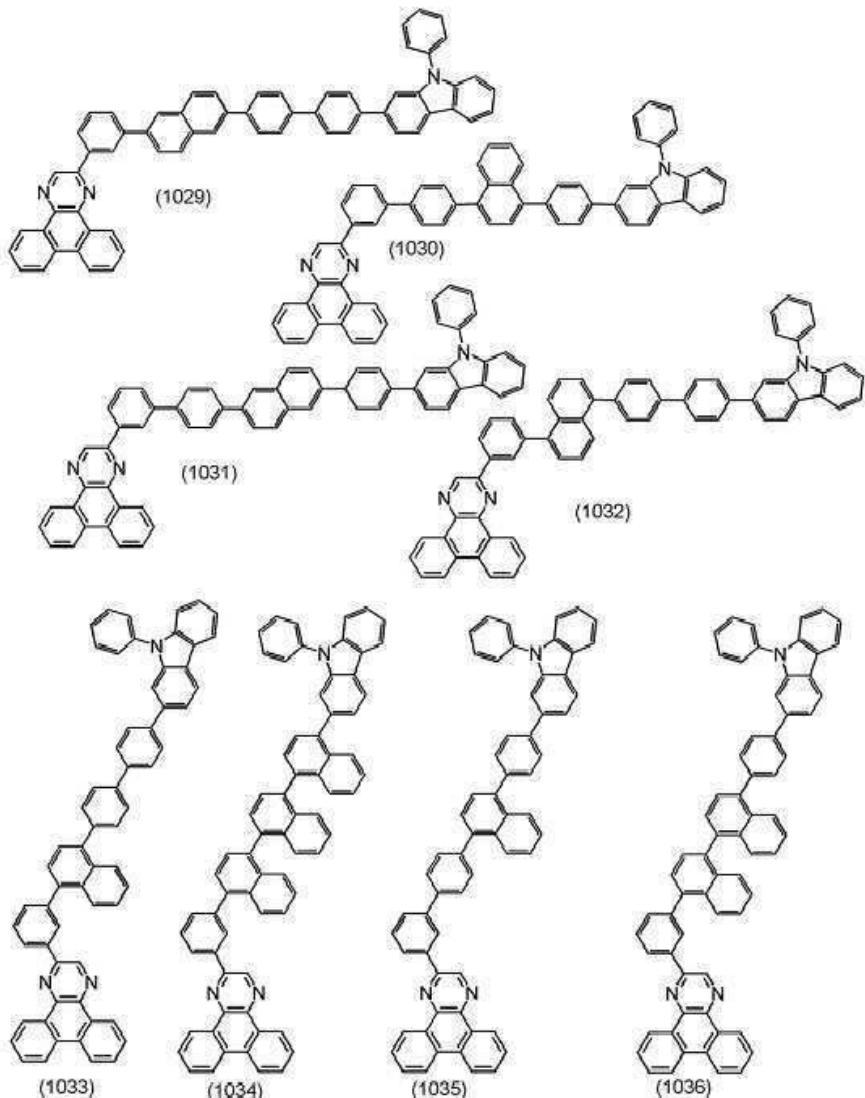
[화학식 207]



[0610]

[0611]

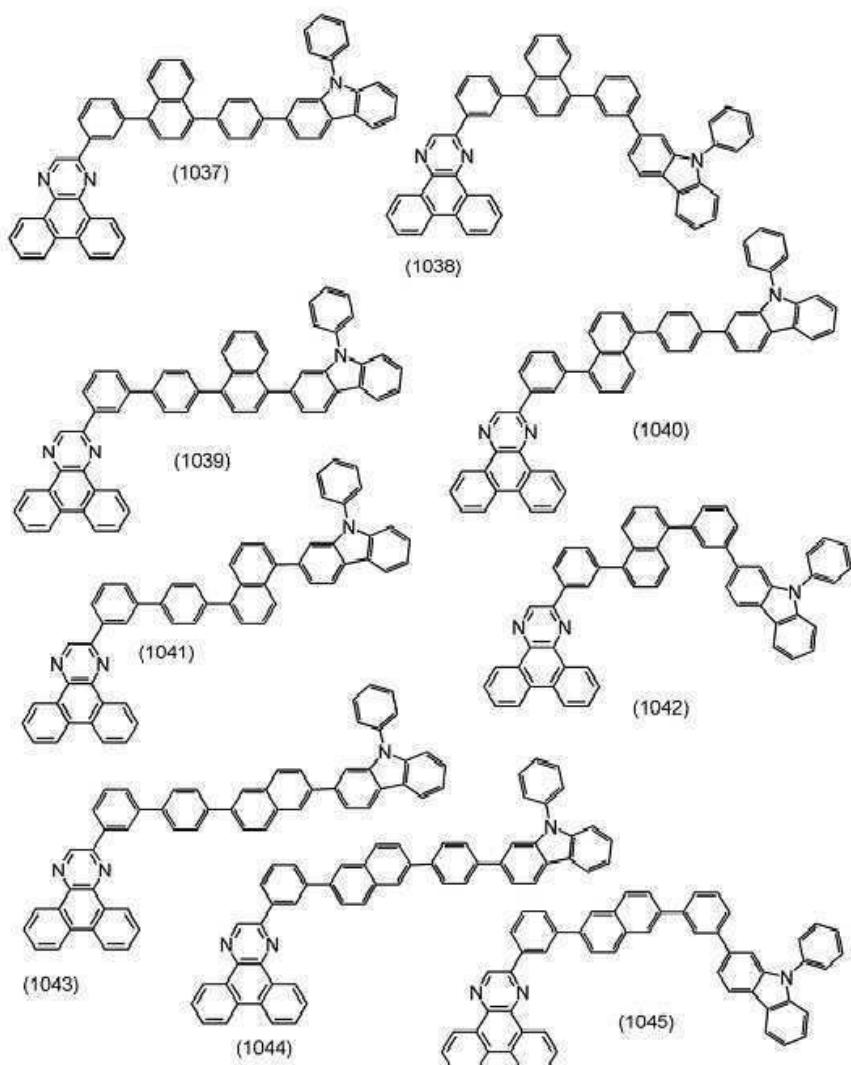
[화학식 208]



[0612]

[0613]

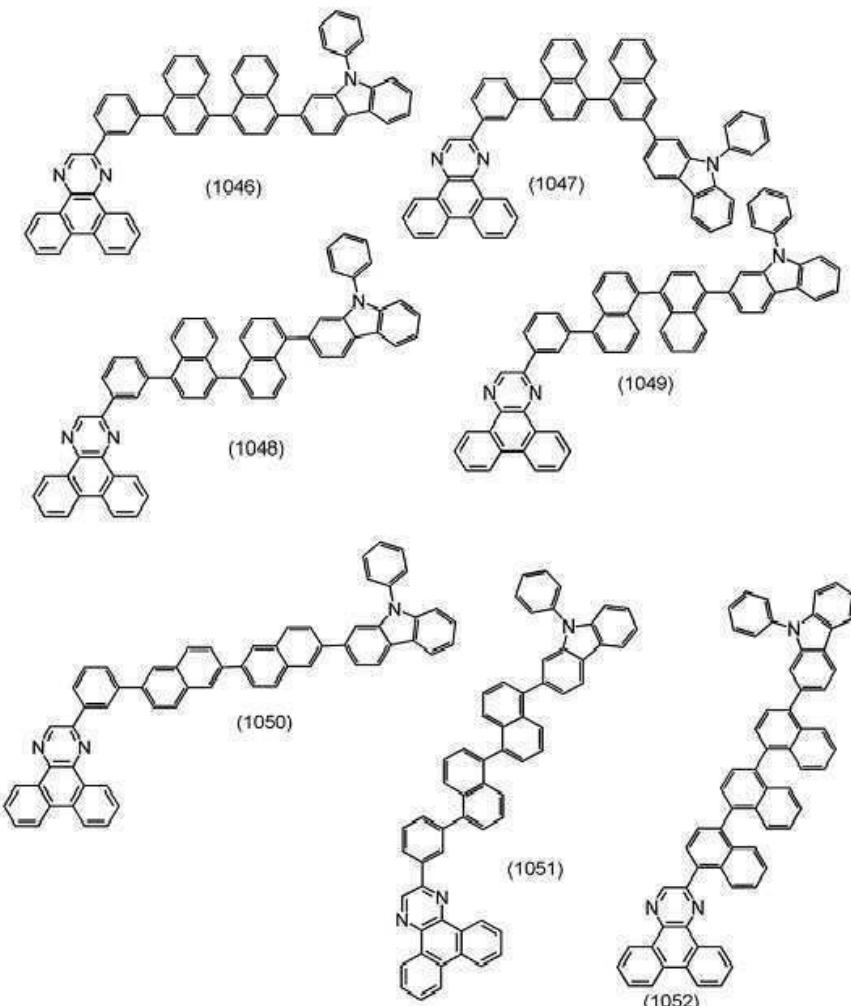
[화학식 209]



[0614]

[0615]

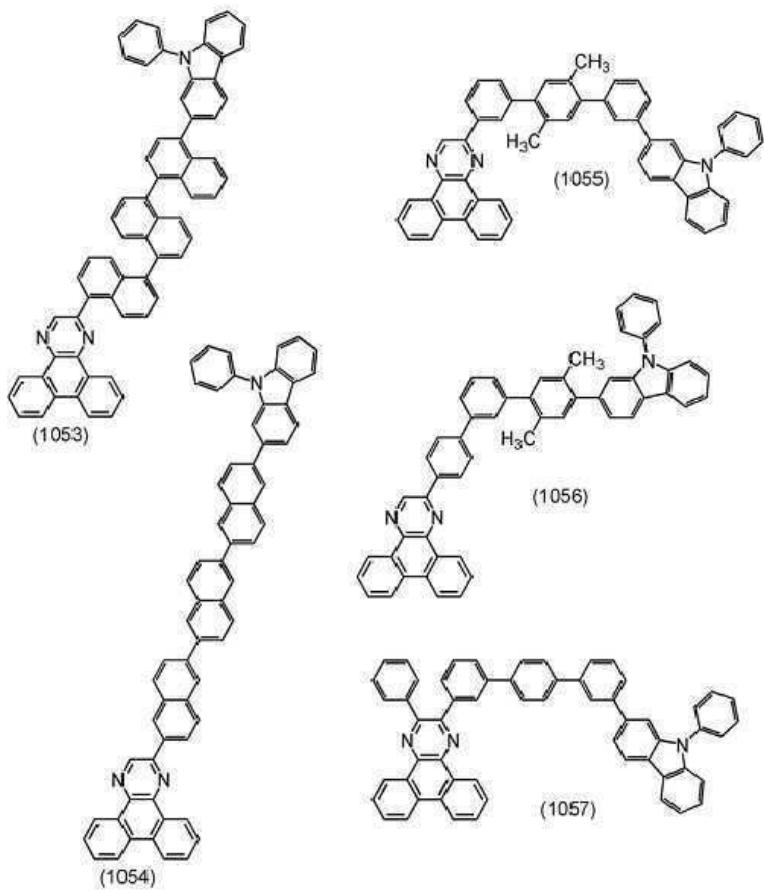
[화학식 210]



[0616]

[0617]

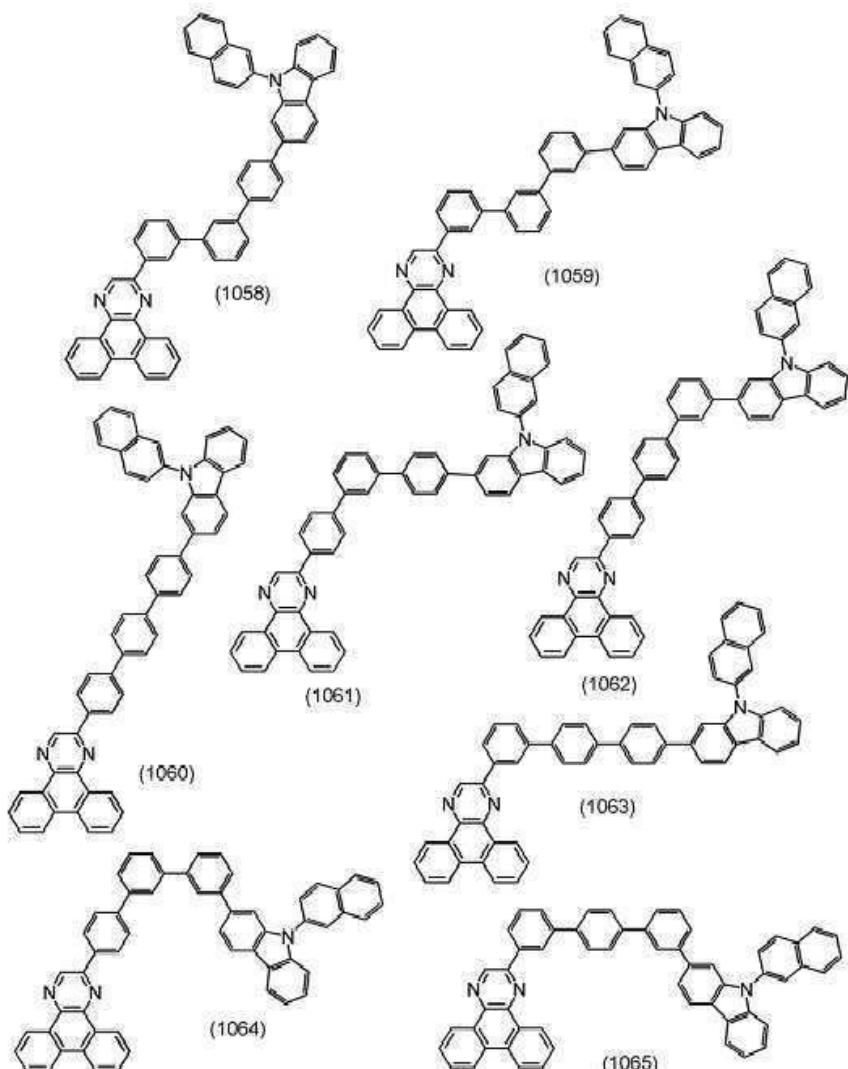
[화학식 211]



[0618]

[0619]

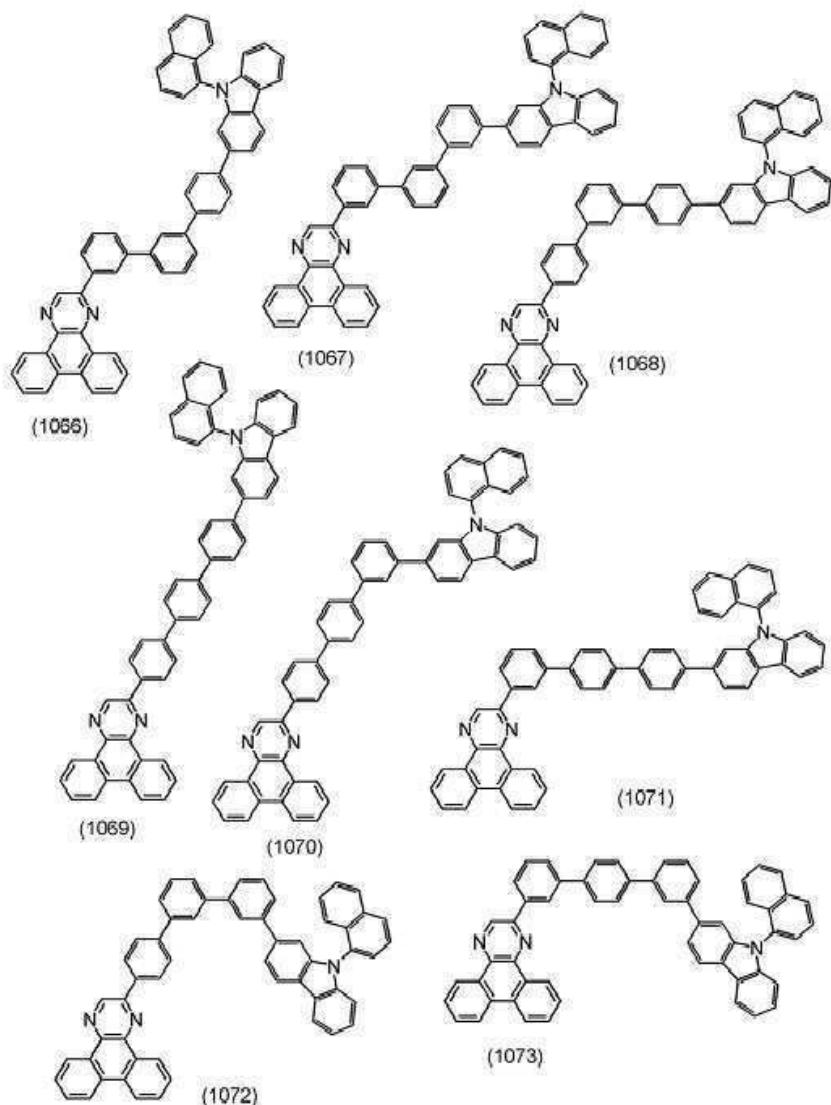
[화학식 212]



[0620]

[0621]

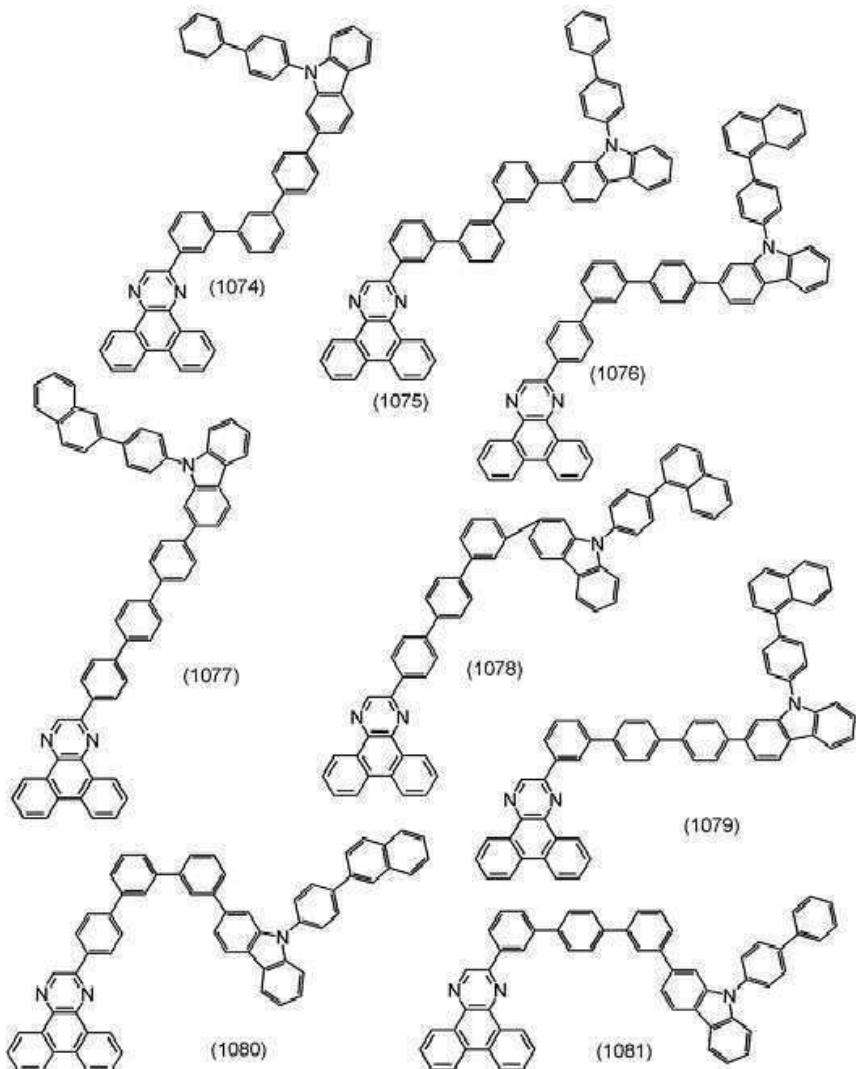
[화학식 213]



[0622]

[0623]

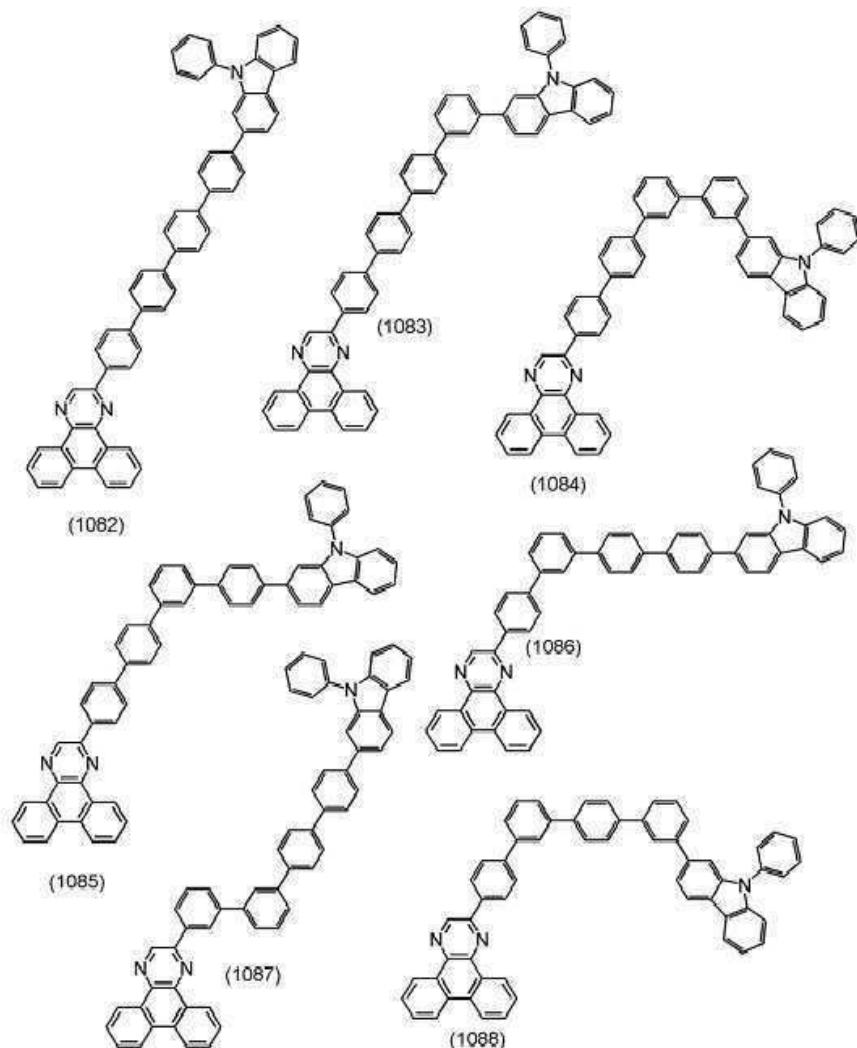
[화학식 214]



[0624]

[0625]

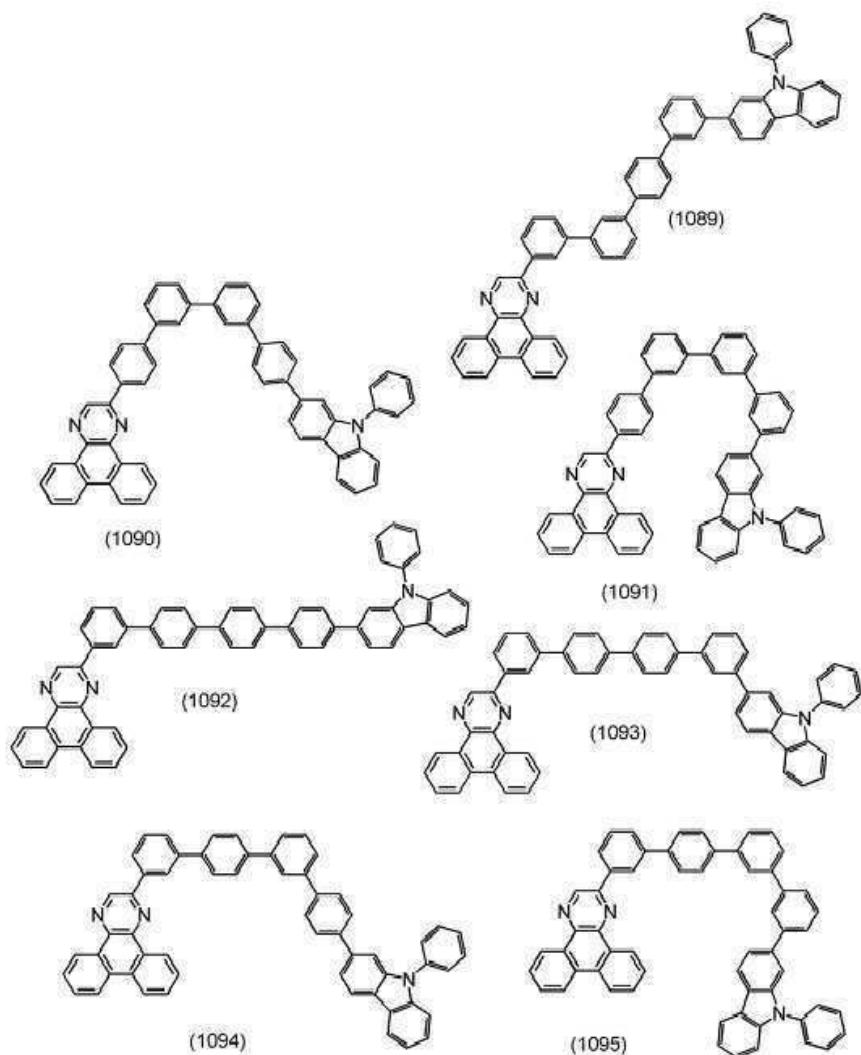
[화학식 215]



[0626]

[0627]

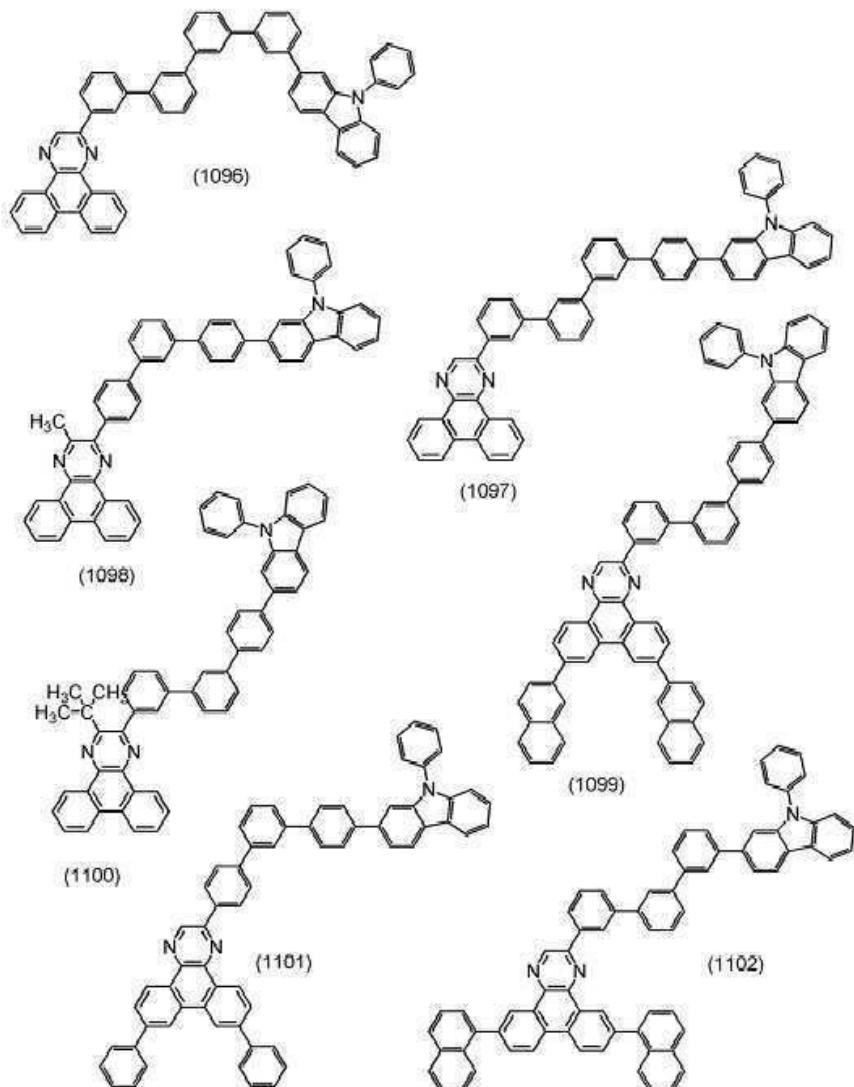
[화학식 216]



[0628]

[0629]

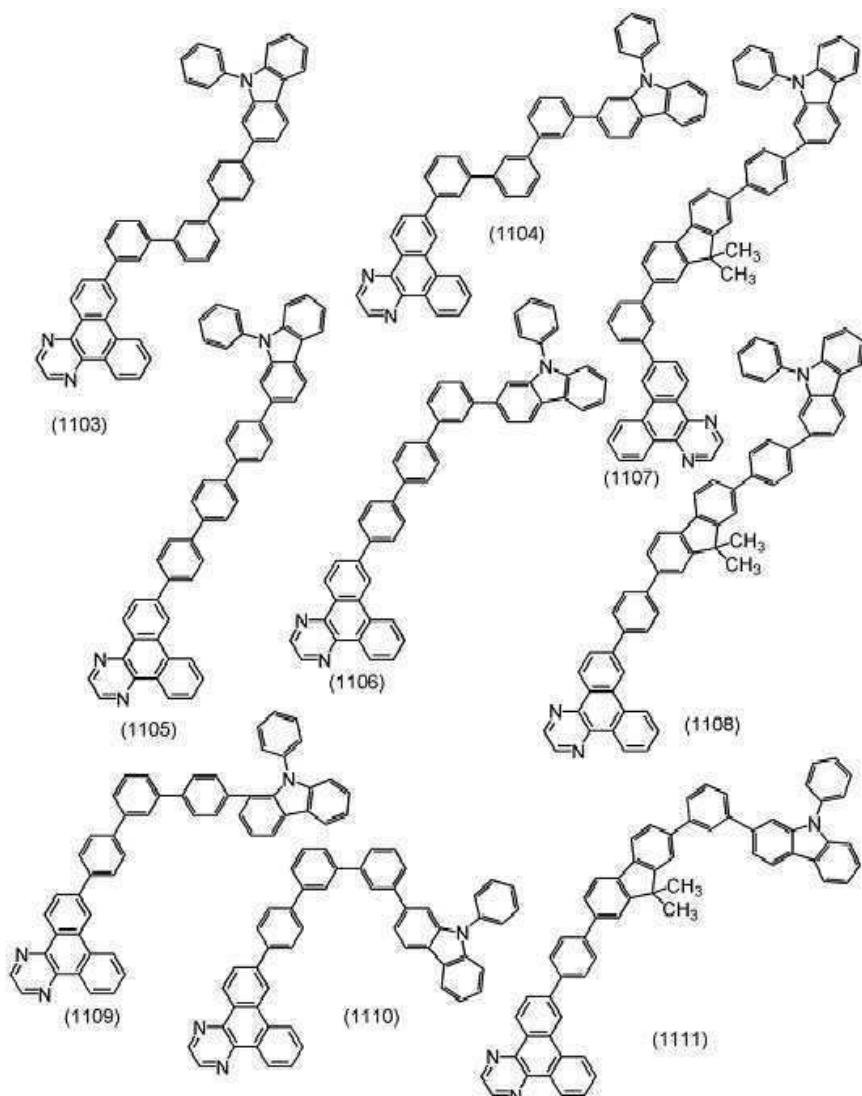
[화학식 217]



[0630]

[0631]

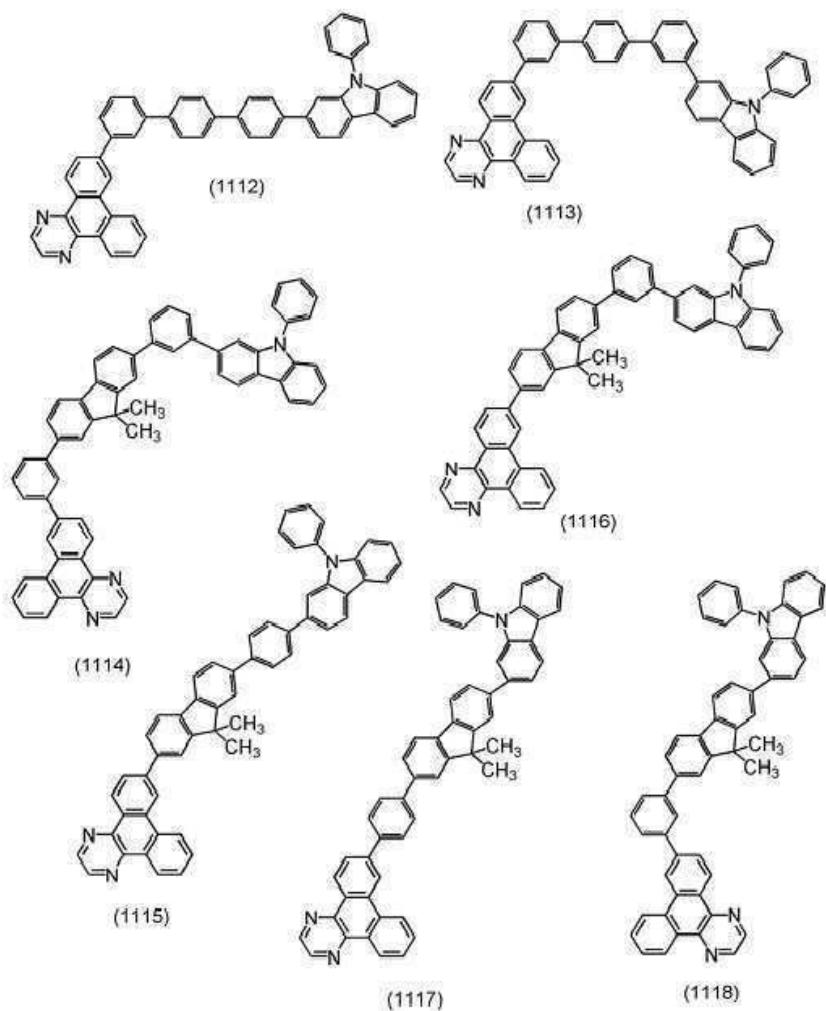
[화학식 218]



[0632]

[0633]

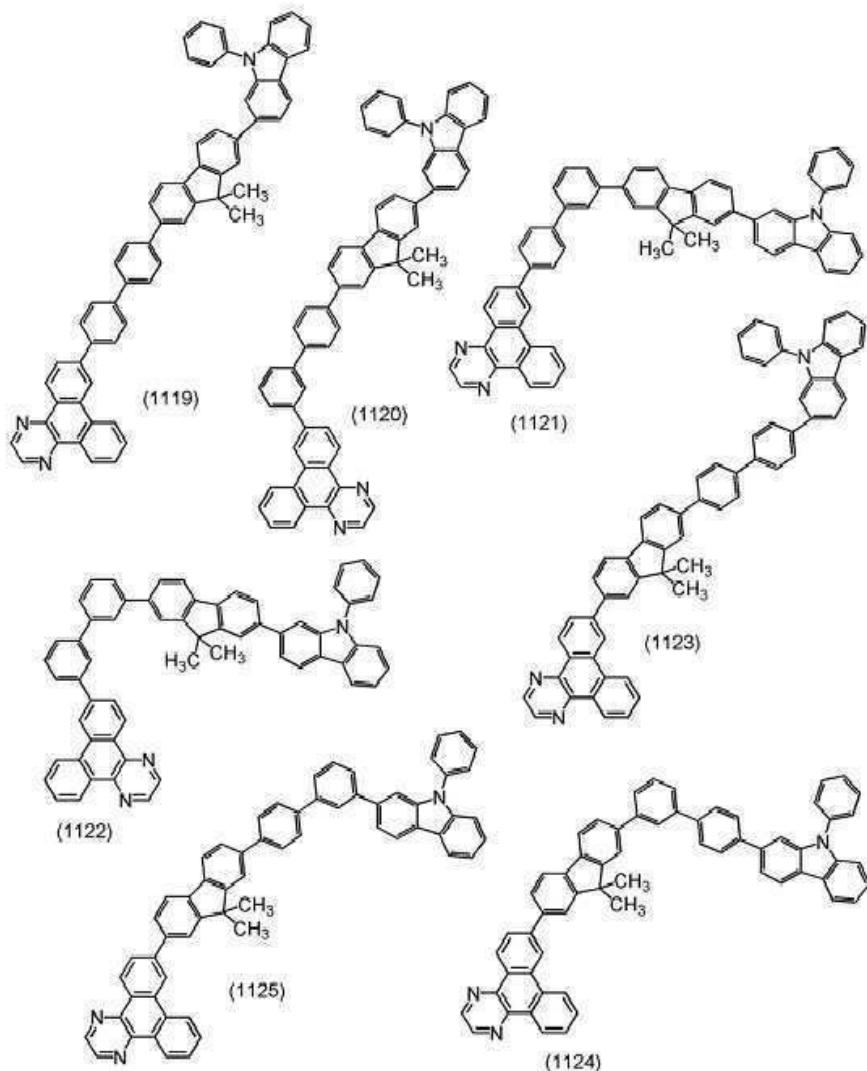
[화학식 219]



[0634]

[0635]

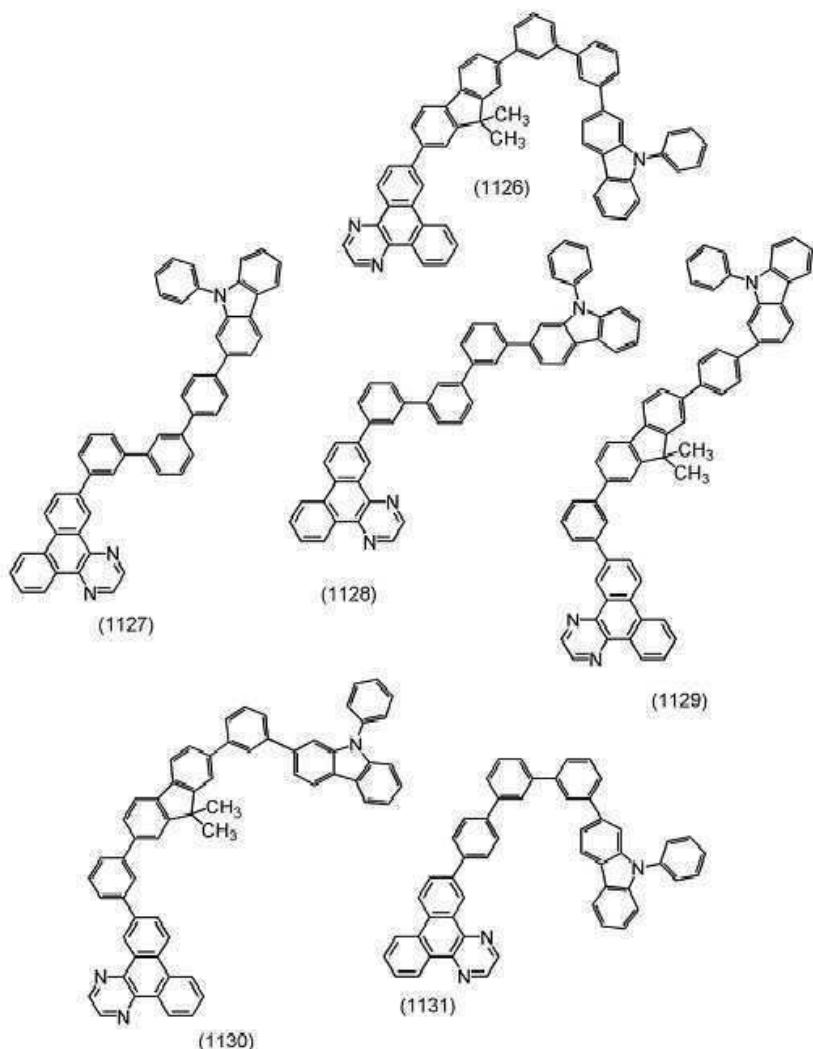
[화학식 220]



[0636]

[0637]

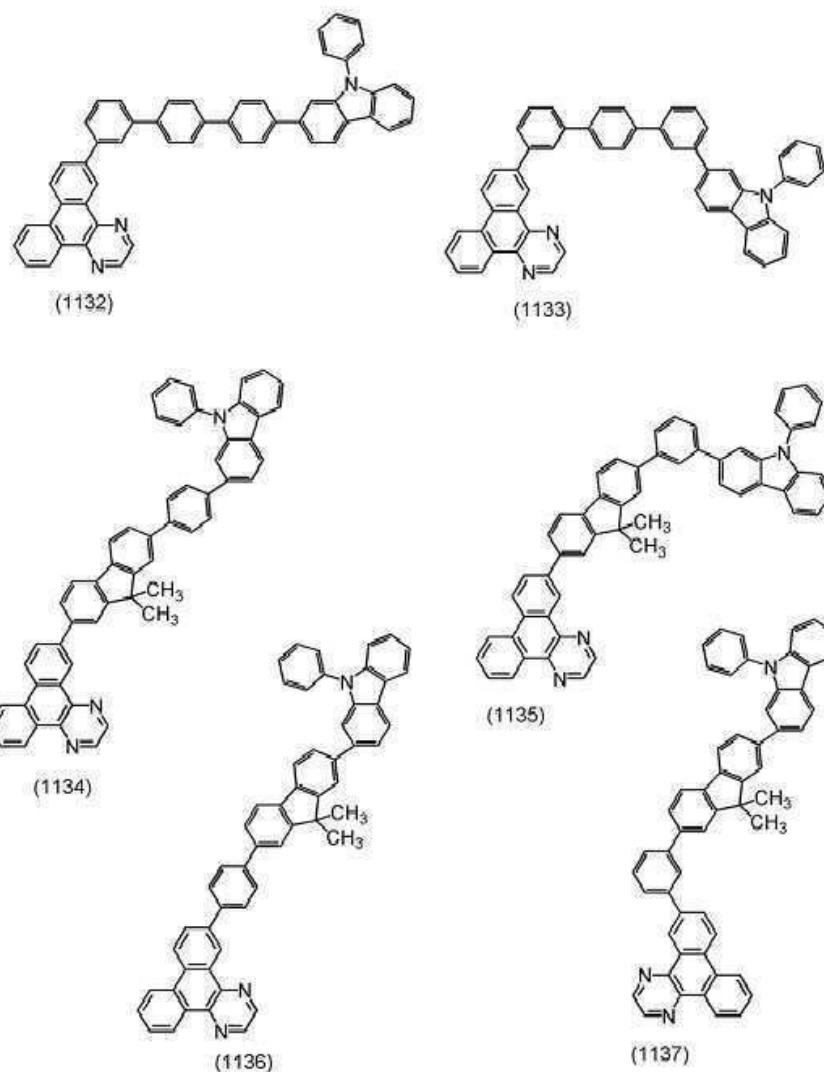
[화학식 221]



[0638]

[0639]

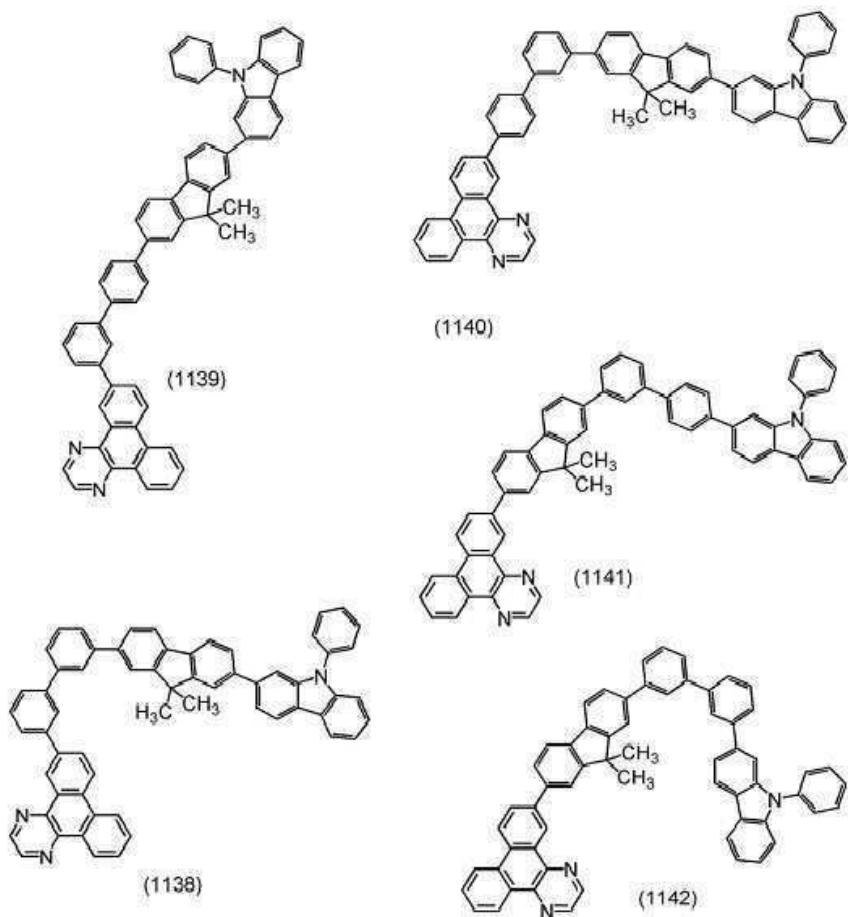
[화학식 222]



[0640]

[0641]

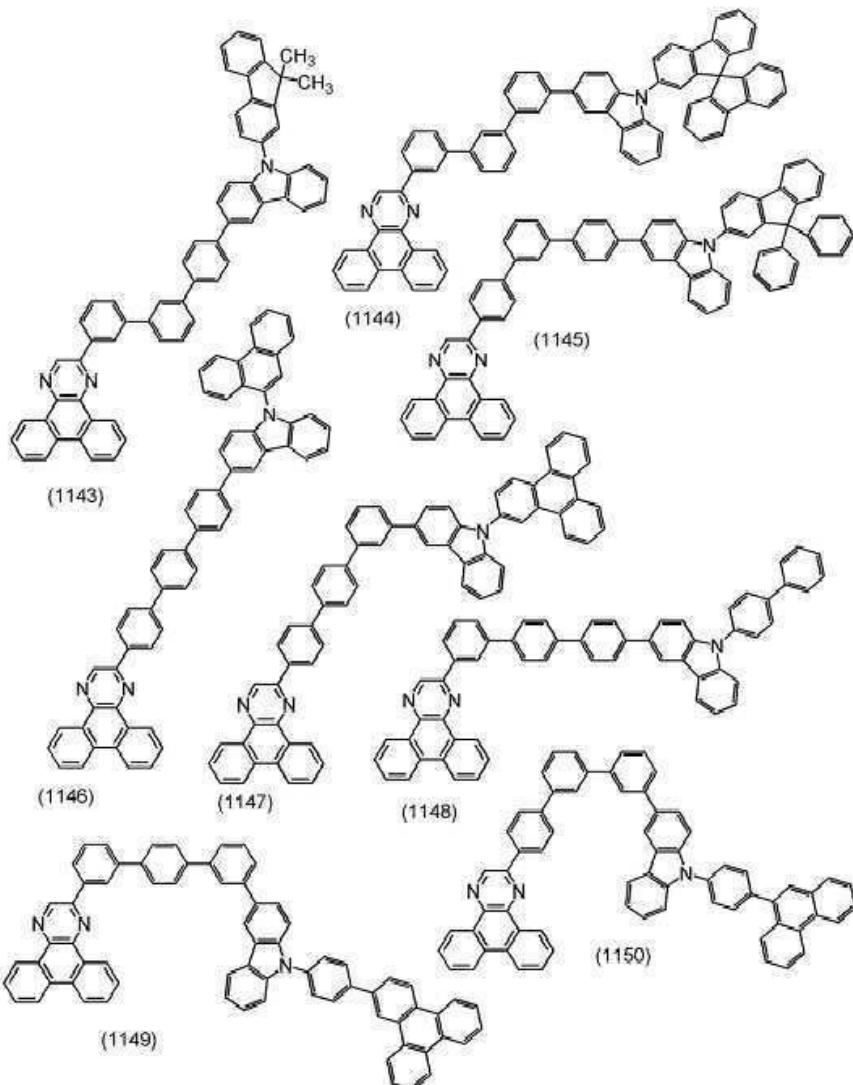
[화학식 223]



[0642]

[0643]

[화학식 224]



[0644]

[0645]

본 발명의 일 형태의 고리 화합물은, 다이벤조싸이오페닐기, 다이벤조퓨란일기, 또는 카바졸릴기 및 다이벤조[*f,h*]퀴독살린일기가 3개 이상의 아릴렌기를 통하여 결합되는 구조를 갖는다. 본 발명의 일 형태의 고리 화합물을 EL층에 포함되는 발광층의 호스트 재료로서 사용할 수 있다.

[0646]

발광층의 호스트 재료에 요구되는 성능 및 기능 중에서, 중요한 성능은 높은 내열성이다. 재료의 내열성의 지표로서 재료의 유리 전이점(*Tg*)을 사용하는 경우, 유리 전이점(*Tg*)이 더 높은 호스트 재료는 내열성이 더 높은 것으로 간주할 수 있다. 재료의 유리 전이점(*Tg*)은 이의 분자량과 대략 비례한다. 그러므로, 재료의 분자량을 증가시켜 이의 내열성을 향상시켜도 좋다.

[0647]

분자량이 높은 유기 재료는 일반적으로 유리 전이점(*Tg*)이 높은 경향이 있다. 그러나, 내열성이 향상되면 정제 공정에서 수행되는 승화 정제 또는 증류에 있어서 승화 온도 또는 비점도 높아지는 경향이 있다. 일반적인 저 분자의 유기 화합물은 400°C 이상에서 환원되는 것이 많다. 또한, 분자량을 단순히 증가시키면 승화 온도 또는 비점이 높아진다. 따라서, 증착에 의한 퇴적 등의 막 형성 공정 또는 승화 정제 또는 증류 등의 정제 공정에 더 높은 온도가 필요하기 때문에, 분해가 일어날 수 있다.

[0648]

즉, 호스트 재료의 열불성을 향상시키기 위하여 그 재료의 분자량을 단순히 증가시키는 것은, 정제 공정 또는 막 형성 공정에서의 분해의 가능성을 높이기 때문에, 고순도화된 유기 화합물을 소자에 사용하는 것을 어렵게 하는 경우가 있다.

[0649]

한편, 본 발명의 일 형태의 고리 화합물은 열불성을 향상시키기 위하여 분자량이 증가되었지만, 헤테로

고리 화합물의 분해 온도가 높고 적어도 하나의 벤젠 고리를 첨가하기만 하면 그 내열성을 대폭 향상시킬 수 있다. 그러므로, 정제 공정 또는 증착 공정에서 분해가 잘 일어나지 않고, 고순도를 유지하는 재료를 소자에 사용할 수 있다. 즉, 높은 내열성 및 양호한 특성의 양쪽 모두를 갖는 소자를 제공할 수 있다.

[0650] 분자량이 큰 유기 재료는 일반적으로 굴절률도 높은 경향이 있다. 발광층에 사용하는 호스트 재료의 분자량을 크게 하면, 유리 전이점(T_g)뿐만 아니라 발광층의 굴절률도 높아지는 경향이 있다.

[0651] 발광층에서 발생한 광은 EL층 및 투명 전극을 통과하고, 유리 기판 및 수지막 등을 투과하여 대기 중으로 이동한다. 이들 부재들의 경계를 광이 통과하는 경우, 굴절률의 차이는 다양한 광학 현상을 초래한다. 즉, 경계에 광이 입사되는 각도, 광이 투과되는 부재들의 굴절률의 대소 관계, 또는 굴절률 간의 차이의 정도에 따라, EL층으로부터 방출된 광이, 예를 들어 EL층의 방향으로 돌아오거나(전반사(全反射)), 또는 의도하지 않은 방향으로 굴절된다. 결과적으로, 발광 소자의 외부에 도달하는 광의 강도는 저하되어, 발광 소자의 광 추출 효율 또는 외부 양자 효율이 저하된다.

[0652] 바꿔 말하면, 호스트 재료의 열물성을 향상시키기 위하여 그 재료의 분자량을 단순히 증가시키는 것은 굴절률을 증가시키기 때문에, 이에 따라 이 호스트 재료를 사용하는 발광층의 발광 소자는 광 추출 효율이 저하되거나 외부 양자 효율이 저하되므로, 문제를 일으킨다.

[0653] 그러나, 본 발명의 일 형태의 혜테로 고리 화합물은 열물성을 향상시키기 위하여 분자량이 증가되었지만, 발광 소자의 발광층의 호스트 재료로서 혜테로 고리 화합물을 사용하는 것은 발광 소자의 광 추출 효율 또는 외부 양자 효율을 저하시키지 않는다.

[0654] 본 발명의 일 형태의 혜테로 고리 화합물은, 연결된 3개 이상의 아릴렌기가 장축으로서 기능하는 분자 구조를 갖는다. 혜테로 고리 화합물의 막이 발광층의 호스트 재료로서 형성되면, 형성된 막의 배향은 분자의 장축이 기판과 대략 평행하게 기울어지는 경향이 있다. 장축의 분자는 굴절률의 이방성을 가질 경우가 있고, 본 발명의 일 형태의 혜테로 고리 화합물은 굴절률의 이방성을 갖는 경향도 있다.

[0655] 3개 이상의 아릴렌기를 분자량을 증가시키기 위하여 사용하는 경우, 분자가 장축 방향으로 커지고 장축 방향의 굴절률이 높아지는 것으로 생각되지만, 단축 방향의 분자의 크기는 크게 변화하지 않는다. 그러므로, 단축 방향의 굴절률은 잘 변화되지 않는다. 본 발명의 일 형태의 혜테로 고리 화합물이 발광층에 사용되는 경우, 혜테로 고리 화합물의 막은 단축이 광 추출 방향으로 배향하도록 형성되는 경향이 있기 때문에, 발광층의 실효적인 굴절률은, 더 적은 수의 아릴렌기를 갖는 혜테로 고리 화합물을 사용하는 발광층의 실효적인 굴절률과 크게 다르지 않다. 그러나, 분자는 장축 방향으로 커지고 분자량은 높아지기 때문에, 열물성은 향상된다.

[0656] 예를 들어, 본 발명의 일 형태의 혜테로 고리 화합물은, 3개 이상의 아릴렌기를 포함하는 경우, 호스트 재료로서 특성이 우수한 2-[3'-(다이벤조싸이오펜-4-일)바이페닐-3-일]다이벤조[f, h]퀴녹살린(약칭: 2mDBTBPDBq-II)과 상이하므로, 그 실효적인 굴절률이 유지되면서 열물성이 향상된다. 따라서, 발광 소자의 광 추출 효율 또는 외부 양자 효율의 저하가 일어나지 않는다.

[0657] 또한, 본 발명의 일 형태의 혜테로 고리 화합물은 발광층에서 배향되면, 도편트 분자(캐스트 재료라고도 함)도 배향되는 경향이 있다. 일부의 도편트 분자의 경우에는, 이들이 특정한 방향으로 배향되면, 발광 소자의 외부를 향하는 광은 발광 강도가 높아짐으로써, 발광 소자의 외부 양자 효율은 향상된다. 이것은 도편트 분자에 의하여 방출되는 광이 굴절률처럼 이방성을 갖기 때문이다. 즉, 발광 소자의 호스트 재료는 도편트의 배향성을 향상시키는 것이 바람직하다. 바꿔 말하면, 본 발명의 일 형태의 혜테로 고리 화합물은 도편트 분자의 배향성을 제어하여 발광 소자의 외부 양자 효율을 더 증가시킬 수 있다.

[0658] 따라서, 본 발명의 일 형태의 혜테로 고리 화합물은 호스트 재료로서 우수한 특성을 갖는다.

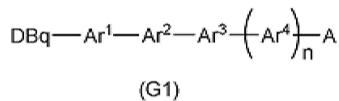
[0659] 본 실시형태는 임의의 다른 실시형태와 적절히 조합할 수 있다.

[0660] (실시형태 2)

[0661] 본 실시형태에서는, 일반식(G1)으로 나타내어지는 유기 화합물의 합성 방법에 대하여 설명한다.

[0662]

[화학식 225]



[0663]

[0664]

일반식(G1)으로 나타내어지는 유기 화합물의 합성 방법에는 다양한 반응을 적용할 수 있다. 예를 들어, 아래에서 설명하는 합성 반응에 의하여 일반식(G1)으로 나타내어지는 유기 화합물을 합성할 수 있다. 또한, 일반식(G1)으로 나타내어지는 본 발명의 일 형태의 유기 화합물의 합성 방법은 이하의 합성 방법에 한정되지 않는다.

[0665]

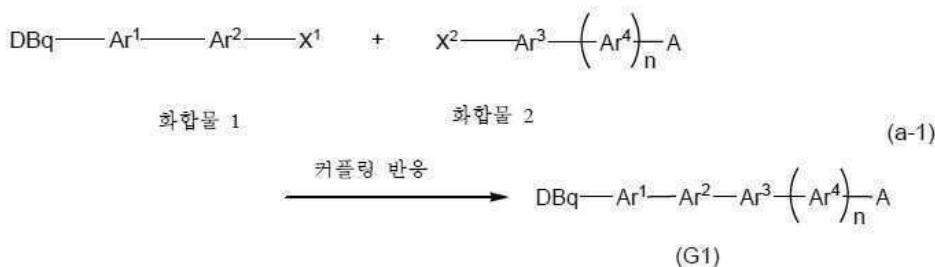
<일반식(G1)으로 나타내어지는 유기 화합물의 합성 방법>

[0666]

일반식(G1)으로 나타내어지는 본 발명의 일 형태의 유기 화합물은 아래에 나타내는 합성 스킵(a-1)에 의하여 합성할 수 있다. 즉, 다이벤조[f, h]퀴녹살린 화합물(화합물 1)을 다이벤조싸이오펜 화합물 또는 다이벤조퓨란 화합물(화합물 2)과 커플링시킴으로써 일반식(G1)으로 나타내어지는 화합물을 얻을 수 있다.

[0667]

[화학식 226]



[0668]

합성 스킵(a-1)에서, DBq는 치환 또는 비치환의 다이벤조[f, h]퀴녹살린일기를 나타내고, n은 0 또는 1이고, A는 치환 또는 비치환의 다이벤조싸이오페닐기 및 치환 또는 비치환의 다이벤조퓨란일기 중 어느 것을 나타내고, Ar¹, Ar², Ar³, 및 Ar⁴는 각각 독립적으로 탄소수 6 내지 10의 아릴렌기를 나타낸다. 아릴렌기는 하나 이상의 치환기를 가져도 좋다. 치환기들은 서로 결합하여 고리를 형성하여도 좋다. Ar¹ 내지 Ar⁴에서, 인접한 아릴렌기들은 메틸렌기를 통하여 서로 연결되어 플루오렌 골격을 포함하는 구조를 형성하여도 좋다.

[0669]

팔라듐 촉매를 사용하는 Suzuki-Miyaura 커플링 반응이 합성 스킵(a-1)에서 수행되는 경우, X¹ 및 X²는 각각 독립적으로 할로젠, 보론산기, 유기 봉소기, 또는 트라이플레이트기를 나타내고, 할로젠은 아이오딘, 브로민, 또는 염소인 것이 바람직하다. 상기 반응에서는, 비스(다이벤질리덴아세톤)팔라듐(0), 아세트산 팔라듐(II), [1,1'-비스(다이페닐포스피노)페로센]팔라듐(II) 다이클로라이드, 또는 테트라키스(트라이페닐포스핀)팔라듐(0) 등의 팔라듐 화합물과, 트라이(tert-뷰틸)포스핀, 트라이(n-헥실)포스핀, 트라이사이클로헥실포스핀, 다이(1-아다만틸)-n-뷰틸포스핀, 2-다이사이클로헥실포스피노-2',6'-다이메톡시바이페닐, 또는 트라이(오쏘-톨릴)포스핀 등의 배위자를 사용할 수 있다. 상기 반응에서, 소듐 tert-뷰록사이드 등의 유기 염기, 탄산 포타슘, 탄산 세슘, 또는 탄산 소듐 등의 무기 염기 등을 사용할 수 있다. 또한, 상기 반응에서, 툴루엔, 자일렌, 벤젠, 테트라하이드로퓨란, 다이옥시인, 에탄올, 메탄올, 또는 물 등을 용매로서 사용할 수 있다. 또한, 상기 반응에서 사용할 수 있는 시약은 상술한 시약에 한정되지 않는다.

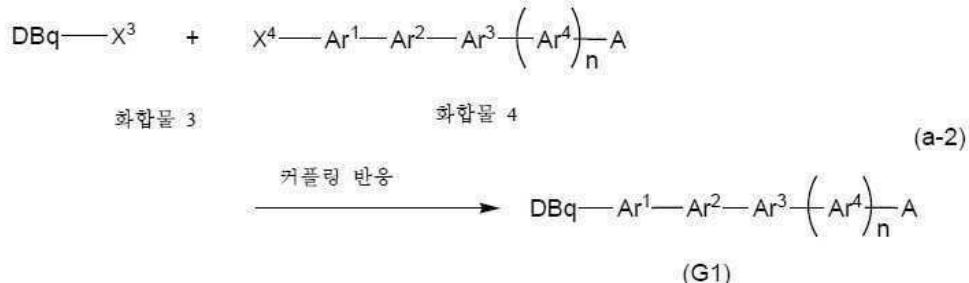
[0670]

합성 스킵(a-1)에서 수행되는 반응은 Suzuki-Miyaura 커플링 반응에 한정되지 않고, 유기 주석 화합물을 사용하는 Migita-Kosugi-Stille 커플링 반응, 그리너르 시약을 사용하는 Kumada-Tamao-Corriu 커플링 반응, 유기 아연 화합물을 사용하는 Negishi 커플링 반응, 또는 구리 또는 구리 화합물을 사용하는 반응 등을 채용할 수도 있다. Migita-Kosugi-Stille 커플링 반응을 사용하는 경우에는, X¹ 및 X² 중 한쪽은 유기 주석기를 나타내고, 다른 쪽은 할로젠을 나타낸다. 즉, 화합물 1 및 화합물 2 중 한쪽은 유기 주석 화합물을 나타낸다. Kumada-Tamao-Corriu 커플링 반응을 사용하는 경우에는, X¹ 및 X² 중 한쪽은 할로젠헤 마그네슘기를 나타내고, 다른 쪽은 할로젠을 나타낸다. 즉, 화합물 1 및 화합물 2 중 한쪽은 그리너르 시약을 나타낸다. Negishi 커플링 반응을 사용하는 경우에는, X¹ 및 X² 중 한쪽은 유기 아연기를 나타내고, 다른 쪽은 할로젠을 나타낸다. 즉, 화합물

1 및 화합물 2 중 한쪽은 유기 아연 화합물을 나타낸다.

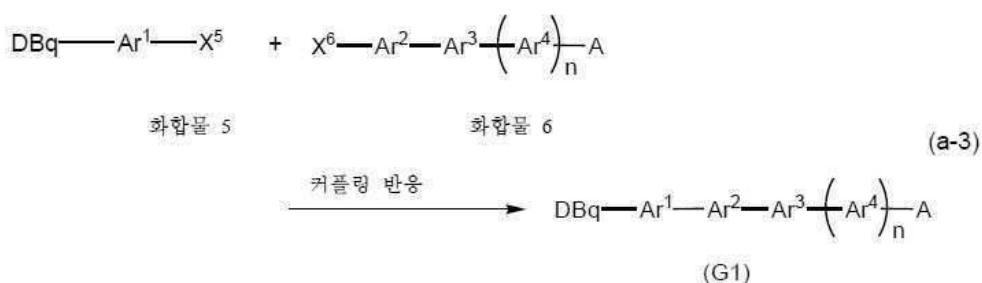
[0672] 또한, 일반식(G1)으로 나타내어지는, 본 발명의 일 형태의 유기 화합물의 합성에 있어서, 합성 방법은 합성 스킴(a-1)에 한정되지 않는다. 예를 들어, 합성 스킴(a-2) 내지 합성 스킴(a-4) 중 어느 것에 따라 합성을 수행할 수 있다. 즉, 다이벤조[f,h]퀴녹살린 화합물(화합물 3, 화합물 5, 또는 화합물 7)을 다이벤조싸이오펜 화합물 또는 다이벤조퓨란 화합물(화합물 4, 화합물 6, 또는 화합물 8)과 커플링시킴으로써 일반식(G1)으로 나타내어지는 화합물을 얻을 수 있다.

[0673] [화학식 227]



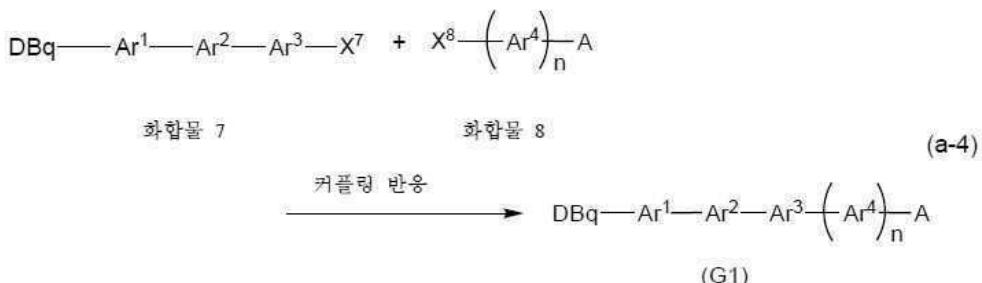
[0674]

[0675] [화학식 228]



[0676]

[0677] [화학식 229]



[0678]

[0679] 합성 스킴(a-2) 내지 합성 스킴(a-4)에서, DBq는 치환 또는 비치환의 다이벤조[f,h]퀴녹살린일기를 나타내고, n은 0 또는 1이고, A는 치환 또는 비치환의 다이벤조싸이오펜일기 및 치환 또는 비치환의 다이벤조퓨란일기 중 어느 것을 나타내고, Ar¹, Ar², Ar³, 및 Ar⁴는 각각 독립적으로 탄소수 6 내지 10의 아릴렌기를 나타낸다. 아릴렌기는 하나 이상의 치환기를 가져도 좋다. 치환기들은 서로 결합하여 고리를 형성하여도 좋다. Ar¹ 내지 Ar⁴에서, 인접한 아릴렌기들은 메틸렌기를 통하여 서로 연결되어 플루오렌 골격을 포함하는 구조를 형성하여도 좋다.

[0680]

팔라듐 촉매를 사용하는 Suzuki-Miyaura 커플링 반응이 합성 스킴(a-2) 내지 합성 스킴(a-4)에서 수행되는 경우, X³ 내지 X⁸은 각각 독립적으로 할로젠, 보론산기, 유기 봉소기, 또는 트라이플레이트기를 나타내고, 할로젠은 아이오딘, 브로민, 또는 염소인 것이 바람직하다. 여기서 사용할 수 있는 시약은 합성 스킴(a-1)에서 사용할 수 있는 시약과 비슷하지만, 이들에 한정되지 않는다.

- [0681] 합성 스킴(a-2) 내지 합성 스킴(a-4)에 따라 수행되는 반응은 Suzuki-Miyaura 커플링 반응에 한정되지 않고, 유기 주석 화합물을 사용하는 Migita-Kosugi-Stille 커플링 반응, 그리너르 시약을 사용하는 Kumada-Tamao-Corriu 커플링 반응, 유기 아연 화합물을 사용하는 Negishi 커플링 반응, 또는 구리 또는 구리 화합물을 사용하는 반응 등을 채용할 수도 있다.
- [0682] 상술한 반응을 사용하는 경우, X^3 내지 X^8 은 합성 스킴(a-1)에서의 X^1 및 X^2 와 비슷하다. 바꿔 말하면, Migita-Kosugi-Stille 커플링 반응을 사용하는 경우에는, 상술한 각 반응에서, 한쪽의 X는 유기 주석기를 나타내고, 다른 쪽의 X는 할로젠을 나타낸다. 즉, 각 반응에서, 화합물 3 및 화합물 4 중 한쪽, 화합물 5 및 화합물 6 중 한쪽, 및 화합물 7 및 화합물 8 중 한쪽은 유기 주석 화합물을 나타낸다. Kumada-Tamao-Corriu 커플링 반응을 사용할 때의 X^3 내지 X^8 의 경우, 상술한 각 반응에서, 한쪽의 X는 할로젠헤 마그네슘기를 나타내고, 다른 쪽의 X는 할로젠을 나타낸다. 즉, 각 반응에서, 화합물 3 및 화합물 4 중 한쪽, 화합물 5 및 화합물 6 중 한쪽, 및 화합물 7 및 화합물 8 중 한쪽은 그리너르 시약을 나타내고, 다른 쪽은 할로젠헤를 나타낸다. Negishi 커플링 반응을 사용할 때의 X^3 내지 X^8 의 경우, 상술한 각 반응에서, 한쪽의 X는 유기 아연기를 나타내고, 다른 쪽의 X는 할로젠헤를 나타낸다. 즉, 각 반응에서, 화합물 3 및 화합물 4 중 한쪽, 화합물 5 및 화합물 6 중 한쪽, 및 화합물 7 및 화합물 8 중 한쪽은 유기 아연 화합물을 나타낸다.
- [0683] 다이벤조[f,h]퀴녹살린 화합물과, 다이벤조싸이오펜 화합물 또는 다이벤조퓨란 화합물의 커플링 반응을 수행하는 경우, DBq, Ar^1 내지 Ar^4 , 및 A 중 어느 곳에서 커플링이 일어나도 좋다. 또한, 본 발명의 일 형태의 헤테로고리 화합물의 합성 방법은 상술한 것에 한정되지 않는다.
- [0684] 상기는 본 발명의 일 형태의 화합물의 합성 방법의 예의 설명이지만, 본 발명은 이들에 한정되지 않고, 임의의 다른 합성 방법을 채용하여도 좋다.
- [0685] 실시형태 2에서는 본 발명의 일 형태를 설명하였다. 본 발명의 다른 실시형태에 대해서는 실시형태 1 및 실시형태 3 내지 실시형태 6에서 설명한다. 또한, 본 발명의 일 형태는 상술한 예에 한정되지 않는다. 예를 들어, 다이벤조싸이오페닐기, 다이벤조퓨란일기, 또는 카바졸릴기 및 다이벤조[f,h]퀴녹살린일기가 3개 이상의 아릴렌기를 통하여 결합되는 예를 본 발명의 일 형태로서 설명하였지만, 본 발명의 일 형태는 이 예에 한정되지 않는다. 본 발명의 일 형태에서, 상황 또는 조건에 따라, 다이벤조싸이오페닐기, 다이벤조퓨란일기, 또는 카바졸릴기 및 다이벤조[f,h]퀴녹살린일기가 3개 이상의 아릴렌기를 통하여 결합되는 구조 이외의 골격을 포함하여도 좋다. 예를 들어, 본 발명의 일 형태에서, 상황 또는 조건에 따라, 다이벤조싸이오페닐기, 다이벤조퓨란일기, 또는 카바졸릴기 및 다이벤조[f,h]퀴녹살린일기가 3개 이상의 아릴렌기를 통하여 결합되는 구조를 반드시 포함할 필요는 없다.
- [0686] 본 실시형태는 다른 실시형태 중 어느 것과 적절히 조합할 수 있다.
- [0687] (실시형태 3)
- [0688] 본 실시형태에서는, 본 발명의 일 형태의 헤테로고리 화합물을 포함하는 발광 소자의 일 형태에 대하여 도 1의 (A)를 참조하여 설명한다.
- [0689] 본 실시형태의 발광 소자는 한 쌍의 전극 사이에 복수의 층을 포함한다. 본 실시형태에서, 발광 소자는 제 1 전극(101), 제 2 전극(102), 및 제 1 전극(101)과 제 2 전극(102) 사이에 제공된 EL층(103)을 포함한다. 또한, 도 1의 (A)에서, 제 1 전극(101)은 양극으로서 기능하고, 제 2 전극(102)은 음극으로서 기능한다. 즉, 제 1 전극(101)의 전위가 제 2 전극(102)의 전위보다 높아지도록 제 1 전극(101)과 제 2 전극(102) 사이에 전압이 인가된 경우에, 발광을 얻을 수 있다. 물론, 제 1 전극이 음극으로서 기능하고 제 2 전극이 양극으로서 기능하는 구조가 채용될 수 있다. 그 경우, EL층의 적층 순서는, 상술한 순서와 반대가 된다. 또한, 본 실시형태의 발광 소자에서, EL층(103) 중 적어도 하나의 층은 본 발명의 일 형태의 헤테로고리 화합물을 포함한다. 헤테로고리 화합물의 특성을 이용할 수 있고, 발광 소자는 양호한 특성을 가질 수 있기 때문에, 헤테로고리 화합물을 포함하는 층을 발광층 또는 전자 수송층으로서 사용하는 것이 바람직하다.
- [0690] 양극으로서 기능하는 전극으로서는, 일함수가 큰(구체적으로는 4.0eV 이상의 일함수) 금속, 합금, 도전성 화합물, 이들의 혼합물 등 중 어느 것을 사용하는 것이 바람직하다. 구체적인 예로서는, 인듐 주석 산화물(ITO), 실리콘 또는 산화 실리콘을 포함하는 인듐 주석 산화물, 산화 인듐 산화 아연, 및 산화 텉스텐 및 산화 아연을 포함하는 산화 인듐(IWZO) 등이 있다. 이들 도전성 금속 산화물막은 일반적으로 스퍼터링법으로 형성되지만,

줄-겔법 등으로 형성되어도 좋다. 예를 들어, 산화 인듐 산화 아연은, 산화 인듐에 대하여 1wt% 이상 20wt% 이하의 산화 아연을 첨가한 타깃을 사용하여 스퍼터링법으로 형성할 수 있다. 또한, 산화 텉스텐 및 산화 아연을 포함하는 산화 인듐(IWZO)은, 산화 인듐에 대하여 산화 텉스텐을 0.5wt% 이상 5wt% 이하, 산화 인듐에 대하여 산화 아연을 0.1wt% 이상 1wt% 이하 첨가한 타깃을 사용하여 스퍼터링법으로 형성할 수 있다. 다른 예로서는, 금(Au), 백금(Pt), 니켈(Ni), 텉스텐(W), 크로뮴(Cr), 몰리브데넘(Mo), 철(Fe), 코발트(Co), 구리(Cu), 팔라듐(Pd), 및 금속 재료의 질화물(예를 들어, 질화 타이타늄) 등이 있다. 그래핀을 사용하여도 좋다.

[0691] EL층(103)의 적층 구조에 대해서는 특별히 한정되지 않는다. 전자 수송성이 높은 물질을 포함하는 층, 정공 수송성이 높은 물질을 포함하는 층, 전자 주입성이 높은 물질을 포함하는 층, 정공 주입성이 높은 물질을 포함하는 층, 이극성 물질(전자 수송성 및 정공 수송성이 높은 물질)을 포함하는 층, 및 캐리어 블록성을 갖는 층 등을 적절히 조합함으로써, EL층(103)을 형성할 수 있다. 본 실시형태에서는, EL층(103)은, 양극으로서 기능하는 전극 위에 정공 주입층(111), 정공 수송층(112), 발광층(113), 전자 수송층(114), 및 전자 주입층(115)이 이 순서대로 적층된 구조를 갖는다. 상기 층들에 포함되는 재료에 대하여 아래에서 구체적으로 나타낸다.

[0692] 정공 주입층(111)은 정공 주입성이 높은 물질을 포함하는 층이다. 정공 주입성이 높은 물질로서는, 예를 들어 산화 몰리브데넘, 산화 바나듐, 산화 루테늄, 산화 텉스텐, 산화 망가니즈를 사용할 수 있다. 프탈로사이아닌(약칭: H₂Pc) 또는 구리 프탈로사이아닌(약칭: CuPc) 등의 프탈로사이아닌계 화합물, 4,4'-비스[N-(4-다이페닐아미노페닐)-N-페닐아미노]바이페닐(약칭: DPAB) 또는 N,N'-비스{4-[비스(3-메틸페닐)아미노]페닐}-N,N'-다이페닐-(1,1'-바이페닐)-4,4'-다이아민(약칭: DNTPD) 등의 방향족 아민 화합물, 또는 폴리(에틸렌다이옥시싸이아이펜)/폴리(스타이렌설폰산)(PEDOT/PSS) 등의 고분자 화합물 등을 사용하여 정공 주입층(111)을 형성할 수도 있다.

[0693] 정공 수송성을 갖는 물질에 대하여 전자 수용성을 나타내는 물질(이하, 단순히 "전자 수용성 물질이라고 함")이 정공 수송성을 갖는 물질에 포함되는 복합 재료를 사용하여 정공 주입층(111)을 형성할 수 있다. 본 명세서 중에서 복합 재료란, 2개의 재료를 단순히 혼합시킨 재료가 아닌, 복수의 재료의 혼합에 의하여 재료 간에 전하 이동이 일어날 수 있는 상태의 재료를 말한다. 이 전하의 이동은, 전계가 존재하는 경우에만 일어나는 전하 이동을 포함한다.

[0694] 또한, 정공 수송성을 갖는 물질에 전자 수용성 물질을 포함하는 복합 재료를 사용함으로써, 재료의 일함수에 상관없이 전극을 형성하기 위하여 사용되는 재료를 선택할 수 있다. 바꿔 말하면, 일함수가 큰 재료 외에, 일함수가 작은 재료를 양극으로서 기능하는 전극에 사용할 수 있다. 전자 수용성 물질의 예로서는, 7,7,8,8-테트라사이아노-2,3,5,6-테트라플루오로퀴노다이메테인(약칭: F₄-TCNQ) 및 클로라닐 등이 있다. 전이 금속 산화물도 사용할 수 있다. 특히, 원소 주기율표의 제 4 족 내지 제 8 족 중 어느 것에 속하는 금속의 산화물을 적절하게 사용할 수 있다. 구체적으로는, 산화 바나듐, 산화 나이오븀, 산화 탄탈럼, 산화 크로뮴, 산화 몰리브데넘, 산화 텉스텐, 산화 망가니즈, 및 산화 레늄은 전자 수용성이 높기 때문에 바람직하다. 그 중에서도, 산화 몰리브데넘은 대기 중에서 안정적이고, 흡습성이 낮으며, 취급하기 쉽기 때문에 전자 수용성 물질로서 특히 바람직하다.

[0695] 복합 재료에 사용되는 정공 수송성을 갖는 물질로서는, 방향족 아민 화합물, 카바졸 화합물, 방향족 탄화수소, 및 고분자 화합물(올리고머, 텐드리머, 또는 폴리머 등) 등의 다양한 유기 화합물 중 어느 것을 사용할 수 있다. 복합 재료에 사용되는 유기 화합물은 정공 수송성이 높은 유기 화합물인 것이 바람직하다. 구체적으로는, $1 \times 10^{-6} \text{ cm}^2/\text{Vs}$ 이상의 정공 이동도를 갖는 물질을 사용하는 것이 바람직하다. 또한, 정공 수송성을 갖기만 하면 임의의 다른 물질을 사용하여도 좋다. 복합 재료에서 정공 수송성을 갖는 물질로서 사용할 수 있는 유기 화합물의 구체적인 예를 아래에서 나타낸다.

[0696] 방향족 아민 화합물의 예로서는, N,N'-다이(p-톨릴)-N,N'-다이페닐-p-페닐렌다이아민(약칭: DTDPPA), 4,4'-비스[N-(4-다이페닐아미노페닐)-N-페닐아미노]바이페닐(약칭: DPAB), N,N'-비스{4-[비스(3-메틸페닐)아미노]페닐}-N,N'-다이페닐-(1,1'-바이페닐)-4,4'-다이아민(약칭: DNTPD), 및 1,3,5-트리스[N-(4-다이페닐아미노페닐)-N-페닐아미노]벤젠(약칭: DPA3B) 등이 있다.

[0697] 복합 재료에 사용할 수 있는 카바졸 화합물의 구체적인 예로서는, 3-[N-(9-페닐카바졸-3-일)-N-페닐아미노]-9-페닐카바졸(약칭: PCzPCA1), 3,6-비스[N-(9-페닐카바졸-3-일)-N-페닐아미노]-9-페닐카바졸(약칭: PCzPCA2), 및 3-[N-(1-나프틸)-N-(9-페닐카바졸-3-일)아미노]-9-페닐카바졸(약칭: PCzPCN1) 등이 있다.

[0698] 복합 재료에 사용할 수 있는 카바졸 화합물의 다른 예로서는, 4,4'-다이(N-카바졸릴)바이페닐(약칭: CBP),

1,3,5-트리스[4-(*N*-카바졸릴)페닐]벤젠(약칭: TCPB), 9-[4-(10-페닐-9-안트릴)페닐]-9*H*-카바졸(약칭: CzPA), 및 1,4-비스[4-(*N*-카바졸릴)페닐]-2,3,5,6-테트라페닐벤젠 등이 있다.

복합 재료에 사용할 수 있는 방향족 탄화수소의 예로서는, 2-*tert*-뷰틸-9,10-다이(2-나프틸)안트라센(약칭: t-BuDNA), 2-*tert*-뷰틸-9,10-다이(1-나프틸)안트라센, 9,10-비스(3,5-다이페닐페닐)안트라센(약칭: DPPA), 2-*tert*-뷰틸-9,10-비스(4-페닐페닐)안트라센(약칭: t-BuDBA), 9,10-다이(2-나프틸)안트라센(약칭: DNA), 9,10-다이페닐안트라센(약칭: DPAnth), 2-*tert*-뷰틸안트라센(약칭: t-BuAnth), 9,10-비스(4-메틸-1-나프틸)안트라센(약칭: DMNA), 2-*tert*-뷰틸-9,10-비스[2-(1-나프틸)페닐]안트라센, 9,10-비스[2-(1-나프틸)페닐]안트라센, 2,3,6,7-테트라메틸-9,10-다이(1-나프틸)안트라센, 2,3,6,7-테트라메틸-9,10-다이(2-나프틸)안트라센, 9,9'-바이안트릴, 10,10'-다이페닐-9,9'-바이안트릴, 10,10'-비스(2-페닐페닐)-9,9'-바이안트릴, 10,10'-비스[(2,3,4,5,6-펜타페닐)페닐]-9,9'-바이안트릴, 안트라센, 테트라센, 루브렌, 페릴렌, 및 2,5,8,11-테트라(*tert*-뷰틸)페릴렌 등이 있다. 다른 예로서는 웬타센 및 코로넨 등이 있다. 정공 이동도가 $1 \times 10^{-6} \text{ cm}^2/\text{Vs}$ 이상이고 탄소수 14 내지 42의 방향족 탄화수소가 특히 바람직하다.

복합 재료에 사용할 수 있는 방향족 탄화수소는 바이닐 골격을 가져도 좋다. 바이닐기를 갖는 방향족 탄화수소의 예로서는, 4,4'-비스(2,2-다이페닐바이닐)바이페닐(약칭: DPVBi) 및 9,10-비스[4-(2,2-다이페닐바이닐)페닐]안트라센(약칭: DPVPA) 등이 있다.

다른 예로서는, 폴리(*N*-바이닐카바졸)(약칭: PVK), 폴리(4-바이닐트라이페닐아민)(약칭: PVTPA), 폴리[*N*-(4-{*N'*-[4-(4-다이페닐아미노)페닐]페닐-*N'*-페닐아미노}페닐)메타크릴아마이드](약칭: PTPDMA), 및 폴리[*N,N'*-비스(4-뷰틸페닐)-*N,N'*-비스(페닐)벤지딘](약칭: poly-TPD) 등의 고분자 화합물이 있다.

또한, 복합 재료는 다이벤조사이오페닐기, 다이벤조퓨란일기, 또는 카바졸릴기 및 다이벤조[f,h]퀴녹살린일기가 3개 이상의 아릴렌기를 통하여 결합되는 구조를 갖는 실시형태 1의 화합물을 포함하여도 좋다.

정공 수송층(112)은 정공 수송성을 갖는 물질을 포함하는 층이다. 정공 수송성을 갖는 물질로서는, 상술한 복합 재료에 사용할 수 있는 정공 수송성을 갖는 물질로서 위에서 제시한 것을 사용할 수 있다. 또한, 반복을 피하기 위하여 상세한 설명은 생략한다. 복합 재료의 설명을 참조한다. 또한, 정공 수송층은 다이벤조싸이오페닐기, 다이벤조퓨란일기, 또는 카바졸릴기 및 다이벤조[*f,h*]퀴녹살린일기가 3개 이상의 아릴렌기를 통하여 결합되는 구조를 갖는 실시형태 1의 화합물을 포함하여도 좋다.

발광층(113)은 발광 물질을 포함하는 층이다. 발광층(113)은 발광 물질만을 포함하는 막 또는 발광 중심 물질이 호스트 재료에 분산된 막을 사용하여 형성되어도 좋다.

아나이트릴(약칭: DCM2), N,N,N',N' -테트라카스(4-메틸페닐)테트라센-5,11-다이아민(약칭: p-mPhTD), 7,14-다이페닐- N,N,N',N' -테트라카스(4-메틸페닐)아세나프토[1,2-a]플루오란텐-3,10-다이아민(약칭: p-mPhAFD), 2-{2-아이소프로필-6-[2-(1,1,7,7-테트라메틸-2,3,6,7-테트라하이드로-1H,5H-벤조[*ij*]퀴놀리진-9-일)에텐일]-4H-페란-4-일리덴}프로페인다이나이트릴(약칭: DCJTI), 2-{2-*tert*-뷰틸-6-[2-(1,1,7,7-테트라메틸-2,3,6,7-테트라하이드로-1H,5H-벤조[*ij*]퀴놀리진-9-일)에텐일]-4H-페란-4-일리덴}프로페인다이나이트릴(약칭: DCJTB), 2-(2,6-비스{2-[4-(다이메틸아미노)페닐]에텐일}-4H-페란-4-일리덴}프로페인다이나이트릴(약칭: BisDCM), 및 2-{2,6-비스[2-(8-메톡시-1,1,7,7-테트라메틸-2,3,6,7-테트라하이드로-1H,5H-벤조[*ij*]퀴놀리진-9-일)에텐일]-4H-페란-4-일리덴}프로페인다이나이트릴(약칭: BisDCJTM) 등이 있다. 청색 방출 인광 물질의 예는, 트리스{2-[5-(2-메틸페닐)-4-(2,6-다이메틸페닐)-4H-1,2,4-트라이아졸-3-일-κN2]페닐-κC}이리듐(III)(약칭: Ir(mpptz-dmp)₃), 트리스(5-메틸-3,4-다이페닐-4H-1,2,4-트라이아졸레이이토)이리듐(III)(약칭: Ir(Mptz)₃), 또는 트리스[4-(3-바이페닐)-5-아이소프로필-3-페닐-4H-1,2,4-트라이아졸레이이토]이리듐(III)(약칭: Ir(iPrptz-3b)₃) 등의 4H-트라이아졸 골격을 갖는 유기 금속 이리듐 착체; 트리스[3-메틸-1-(2-메틸페닐)-5-페닐-1H-1,2,4-트라이아졸레이이토]이리듐(III)(약칭: Ir(Mptz1-mp)₃) 또는

트리스(1-메틸-5-페닐-3-프로필-1H-1,2,4-트라이아졸레이이토)이리듐(III)(약칭: Ir(Prptz1-Me)₃) 등의 1H-트라이아졸 골격을 갖는 유기 금속 이리듐 착체; fac-트리스[1-(2,6-다이아이소프로필페닐)-2-페닐-1H-이미다졸]이리듐(III)(약칭: Ir(iPrpmi)₃) 또는 트리스[3-(2,6-다이메틸페닐)-7-메틸이미다조[1,2-f]페난트리디네이토]이리듐(III)(약칭: Ir(dmpimpt-Me)₃) 등의 이미다졸 골격을 갖는 유기 금속 이리듐 착체; 및 비스[2-(4',6'-다이플루오로페닐)페리디네이토-*N,C'*]이리듐(III)테트라카스(1-페라졸릴)보레이트(약칭: FIr6), 비스[2-(4',6'-다이플루오로페닐)페리디네이토-*N,C'*]이리듐(III)페롤리네이트(약칭: FIrpic), 비스{2-[3',5'-비스(트라이플루오로메틸)페닐]페리디네이토-*N,C'*}이리듐(III)페롤리네이트(약칭: Ir(CF₃ppy)₂(pic)), 또는 비스[2-(4',6'-다이플루오로페닐)페리디네이토-*N,C'*]이리듐(III)아세틸아세토네이트(약칭: FIR(acac)) 등의 전자 흡인기를 갖는 페닐페리딘 화합물을 배위자로 하는 유기 금속 이리듐 착체를 포함한다. 또한, 4H-트라이아졸 골격을 갖는 유기 금속 이리듐 착체는 우수한 신뢰성 및 발광 효율을 가지므로 특히 바람직하다. 녹색 방출 인광 물질의 예는, 트리스(4-메틸-6-페닐페리미디네이토)이리듐(III)(약칭: Ir(mpmm)₃), 트리스(4-*t*-뷰틸-6-페닐페리미디네이토)이리듐(III)(약칭: Ir(tBuppm)₃), (아세틸아세토네이토)비스(6-메틸-4-페닐페리미디네이토)이리듐(III)(약칭: Ir(mpmm)₂(acac)), (아세틸아세토네이토)비스(6-*tert*-뷰틸-4-페닐페리미디네이토)이리듐(III)(약칭: Ir(tBuppm)₂(acac)), (아세틸아세토네이토)비스[6-(2-노보닐)-4-페닐페리미디네이토]이리듐(III)(약칭: Ir(nbppm)₂(acac)), (아세틸아세토네이토)비스[5-메틸-6-(2-메틸페닐)-4-페닐페리미디네이토]이리듐(III)(약칭: Ir(mpmpm)₂(acac)), 또는 (아세틸아세토네이토)비스(4,6-다이페닐페리미디네이토)이리듐(III)(약칭: Ir(dppm)₂(acac)) 등의 피리미딘 골격을 갖는 유기 금속 이리듐 착체; (아세틸아세토네이토)비스(3,5-다이메틸-2-페닐페라지네이토)이리듐(III)(약칭: Ir(mppr-Me)₂(acac)) 또는 (아세틸아세토네이토)비스(5-아이소프로필-3-메틸-2-페닐페라지네이토)이리듐(III)(약칭: Ir(mppr-iPr)₂(acac)) 등의 피라진 골격을 갖는 유기 금속 이리듐 착체; 트리스(2-페닐페리디네이토-*N,C'*)이리듐(III)(약칭: Ir(ppy)₃), 비스(2-페닐페리디네이토-*N,C'*)이리듐(III)아세틸아세토네이트(약칭: Ir(ppy)₂(acac)), 비스(벤조[*h*]퀴놀리네이토)이리듐(III)아세틸아세토네이트(약칭: Ir(bzq)₂(acac)), 트리스(벤조[*h*]퀴놀리네이토)이리듐(III)(약칭: Ir(bzq)₃), 트리스(2-페닐퀴놀리네이토-*N,C'*)이리듐(III)(약칭: Ir(pq)₃), 또는 비스(2-페닐퀴놀리네이토-*N,C'*)이리듐(III)아세틸아세토네이트(약칭: Ir(pq)₂(acac)) 등의 피리딘 골격을 갖는 유기 금속 이리듐 착체; 및 트리스(아세틸아세토네이토)(모노페난트롤린)터븀(III)(약칭: Tb(acac)₃(Phen)) 등의 희토류 금속 착체를 포함한다. 또한, 피리미딘 골격을 갖는 유기 금속 이리듐 착체는, 신뢰성 및 발광 효율이 뚜렷하게 높으므로 특히 바람직하다. 적색 방출 인광 물질의 예는, (다이아이소뷰틸일메타네이토)비스[4,6-비스(3-메틸페닐)페리미디네이토]이리듐(III)(약칭: Ir(5mdppm)₂(dibm)), 비스[4,6-비스(3-메틸페닐)페리미디네이토](다이피발로일메타네이토)이리듐(III)(약칭: Ir(5mdppm)₂(dpm)), 또는 비스[4,6-다이(나프탈렌-1-일)페리미디네이토](다이피발로일메타네이토)이리듐(III)

(약칭: Ir(d1npm)₂(dpm)) 등의 피리미딘 골격을 갖는 유기 금속 이리듐 착체; (아세틸아세토네이토)비스(2,3,5-트라이페닐파라지네이토)이리듐(III)(약칭: Ir(tppr)₂(acac)), 비스(2,3,5-트라이페닐파라지네이토)(다이페발로일메타네이토)이리듐(III)(약칭: Ir(tppr)₂(dpm)), 또는 (아세틸아세토네이토)비스[2,3-비스(4-플루오로페닐)퀴녹살리네이토]이리듐(III)(약칭: Ir(Fdpq)₂(acac)) 등의 피라진 골격을 갖는 유기 금속 이리듐 착체; 트리스(1-페닐아이소퀴놀리네이토-*N*, C^{2'})이리듐(III)(약칭: Ir(piq)₃) 또는 비스(1-페닐아이소퀴놀리네이토-*N*, C^{2'})이리듐(III)아세틸아세토네이트(약칭: Ir(piq)₂(acac)) 등의 피리딘 골격을 갖는 유기 금속 이리듐 착체; 2,3,7,8,12,13,17,18-옥타에틸-21*H*,23*H*-포르페린 백금(II)(약칭: PtOEP) 등의 백금 착체; 및 트리스(1,3-다이페닐-1,3-프로페인다이오네이토)(모노페난트롤린)유로퓸(III)(약칭: Eu(DBM)₃(Phen)) 또는 트리스[1-(2-테ノ일)-3,3,3-트라이플루오로아세토네이토](모노페난트롤린)유로퓸(III)(약칭: Eu(TTA)₃(Phen)) 등의 희토류 금속 착체를 포함한다. 또한, 피리미딘 골격을 갖는 유기 금속 이리듐 착체는 신뢰성 및 발광 효율이 뚜렷하게 높으므로, 특히 바람직하다. 또한, 피라진 골격을 갖는 유기 금속 이리듐 착체는 양호한 색도의 적색 발광을 제공하기 때문에, 백색 발광 소자에서의 유기 금속 이리듐 착체의 사용은 백색 발광 소자의 연색성을 향상시킨다. 또한, 다이벤조싸이오페닐기, 다이벤조퓨란일기, 또는 카바졸릴기 및 다이벤조[f,h]퀴녹살린일기가 3개 이상의 아릴렌기를 통하여 결합되는 구조를 갖는, 본 발명의 일 형태의 화합물은 광을 나타내므로, 발광 중심 재료로서 사용할 수 있다.

- [0706] 발광 물질로서 사용할 수 있는 재료는 위에서 제시한 물질뿐만 아니라, 다양한 물질로부터 선택되어도 좋다.
- [0707] 상기 발광 중심 물질이 분산되는 호스트 재료로서, 본 발명의 일 형태의 혜테로 고리 화합물을 사용하는 것이 바람직하다.
- [0708] 혜테러 고리 화합물이 넓은 밴드 갭과 높은 삼중항 여기 준위를 갖기 때문에, 가시 영역에서 형광을 방출하는 발광 중심 물질이 분산되는 호스트 재료뿐만 아니라, 높은 에너지의 광을 방출하는 발광 중심 물질(가시 영역에서 인광을 방출하는 발광 중심 물질 등)이 분산되는 호스트 재료로서, 상기 화합물을 적합하게 사용할 수 있다. 특히, 상기 화합물은 청색의 인광을 방출하는 발광 중심 물질이 분산되는 호스트 재료로서 적합하게 사용할 수 있다. 물론, 상기 화합물은 청색광보다 장파장의 형광을 방출하는 발광 중심 물질 또는 녹색광보다 장파장의 인광을 방출하는 발광 중심 물질이 분산되는 호스트 재료로서 사용할 수도 있다. 상기 화합물의 캐리어 수송성(특히, 전자 수송성)이 높기 때문에 저전압으로 구동되는 발광 소자를 제공할 수 있다.
- [0709] 상기 혜테로 고리 화합물을 호스트 재료로서 사용하는 경우, 높은 배향성에 의하여 계스트 재료가 배향된다. 그 결과, 광 추출 효율이 높아지고 외부 양자 효율이 높아진다. 또한, 상기 혜테로 고리 화합물은 비교적으로 큰 분자량을 갖기 때문에 열 안정성이 우수하므로 발광 소자의 수명이 길어진다.
- [0710] 또한, 발광층에 인접한 캐리어 수송층(바람직하게는 전자 수송층)의 재료로서 상기 화합물을 사용하는 것이 유효하다. 상기 화합물은 넓은 밴드 갭 또는 높은 삼중항 여기 준위를 갖기 때문에, 발광 중심 재료가 청색의 형광을 방출하는 재료 또는 녹색 내지 청색의 인광을 방출하는 재료 등 높은 에너지의 광을 나타내는 재료인 경우에도, 호스트 재료에서 재결합한 캐리어의 에너지를 발광 중심 물질로 유효하게 이동시킬 수 있다. 따라서, 발광 효율이 높은 발광 소자를 제작할 수 있다. 또한, 상기 화합물을 호스트 재료 또는 캐리어 수송층의 재료로서 사용하는 경우, 발광 중심 재료로서는, 상기 화합물보다 HOMO 준위와 LUMO 준위 사이의 밴드 갭이 더 좁은 물질, 또는 상기 화합물보다 단일항 여기 준위 또는 삼중항 여기 준위가 더 낮은 물질이 바람직하지만, 이에 한정되지 않는다.
- [0711] 상기 호스트 재료로서 상기 혜테로 고리 화합물을 사용하지 않는 경우의 호스트 재료로서 사용될 수 있는 재료의 예에 대하여 아래에서 설명한다.
- [0712] 다음은 전자 수송성을 갖는 재료의 예이다: 비스(10-하이드록시벤조[h]퀴놀리네이토)베릴륨(II)(약칭: BeBq₂), 비스(2-메틸-8-퀴놀리놀레이토)(4-페닐페놀레이토)알루미늄(III)(약칭: BA1q), 비스(8-퀴놀리놀레이토)아연(II)(약칭: Znq), 비스[2-(2-벤즈옥사졸릴)페놀레이토]아연(II)(약칭: ZnPBO), 또는 비스[2-(2-벤조싸이아졸릴)페놀레이토]아연(II)(약칭: ZnBTZ) 등의 금속 착체; 2-(4-바이페닐릴)-5-(4-*tert*-뷰틸페닐)-1,3,4-옥사다이아졸(약칭: TAZ), 1,3-비스[5-(*p*-*tert*-뷰틸페닐)-1,3,4-옥사다이아졸-2-일]벤젠(약칭: OXD-7), 9-[4-(5-페닐-1,3,4-옥사다이아졸-2-일)페닐]-9*H*-카바졸(약칭: C011), 2,2',2''-(1,3,5-벤젠틀라이일)트리스(1-페닐-1*H*-벤즈이미다졸)(약칭: TPBI), 또

는 2-[3-(다이벤조싸이오펜-4-일)페닐]-1-페닐-1H-벤즈이미다졸(약칭: mDBTBI_m-II) 등의 폴리아졸 골격을 갖는 헤테로 고리 화합물; 2-[3-(다이벤조싸이오펜-4-일)페닐]다이벤조[f,h]퀴녹살린(약칭: 2mDBTPDBq-II), 2-[3'-(다이벤조싸이오펜-4-일)바이페닐-3-일]다이벤조[f,h]퀴녹살린(약칭: 2mDBTPDBq-II), 2-[3'-(9H-카바졸-9-일)바이페닐-3-일]다이벤조[f,h]퀴녹살린(약칭: 2mCzBPDBq), 4,6-비스[3-(페난트렌-9-일)페닐]파리미딘(약칭: 4,6mPnP2Pm), 또는 4,6-비스[3-(4-다이벤조싸이엔일)페닐]파리미딘(약칭: 4,6mDBTP2Pm-II) 등의 다이아진 골격을 갖는 헤테로 고리 화합물; 및 3,5-비스[3-(9H-카바졸-9-일)페닐]파리미딘(약칭: 35DCzPPy) 또는 1,3,5-트라이[3-(3-파리딜)페닐]벤젠(약칭: TmPyPB) 등의 파리미딘 골격을 갖는 헤테로 고리 화합물. 상술한 재료 중에서, 다이아진 골격을 갖는 헤테로 고리 화합물 및 파리미딘 골격을 갖는 헤테로 고리 화합물은 신뢰성이 높기 때문에 바람직하다. 특히, 다이아진(파리미딘 또는 파라진) 골격을 갖는 헤테로 고리 화합물은 전자 수송성이 높아 구동 전압의 저감에 기여한다. 또한, 벤조티에노파리미딘 골격을 갖는 상술한 화합물은 전자 수송성이 비교적으로 크고, 전자 수송성을 갖는 재료로서 분류된다.

[0713] 다음은 정공 수송성을 갖는 재료의 예이다: 4,4'-비스[N-(1-나프틸)-N-페닐아미노]바이페닐(약칭: NPB), N,N'-비스(3-메틸페닐)-N,N'-다이페닐-[1,1'-바이페닐]-4,4'-다이아민(약칭: TPD), 4,4'-비스[N-(스파이로-9,9'-바이플루오렌-2-일)-N-페닐아미노]바이페닐(약칭: BSPB), 4-페닐-4'-(9-페닐플루오렌-9-일)트라이페닐아민(약칭: BPAFLP), 4-페닐-3'-(9-페닐플루오렌-9-일)트라이페닐아민(약칭: mBPAFLP), 4-페닐-4'-(9-페닐-9H-카바졸-3-일)트라이페닐아민(약칭: PCBA1BP), 4,4'-다이페닐-4'-(9-페닐-9H-카바졸-3-일)트라이페닐아민(약칭: PCBBi1BP), 4-(1-나프틸)-4'-(9-페닐-9H-카바졸-3-일)트라이페닐아민(약칭: PCBANB), 4,4'-다이(1-나프틸)-4'-(9-페닐-9H-카바졸-3-일)트라이페닐아민(약칭: PCBNBB), 9,9-다이메틸-N-페닐-N-[4-(9-페닐-9H-카바졸-3-일)페닐]플루오렌-2-아민(약칭: PCBAF), 또는 N-페닐-N-[4-(9-페닐-9H-카바졸-3-일)페닐]스파이로-9,9'-바이플루오렌-2-아민(약칭: PCBASF) 등의 방향족 아민 골격을 갖는 화합물; 1,3-비스(N-카바졸릴)벤젠(약칭: mCP), 4,4'-다이(N-카바졸릴)바이페닐(약칭: CBP), 3,6-비스(3,5-다이페닐페닐)-9-페닐카바졸(약칭: CzTP), 또는 3,3'-비스(9-페닐-9H-카바졸)(약칭: PCCP) 등의 카바졸 골격을 갖는 화합물; 4,4',4''-(벤젠-1,3,5-트라이일)트라이(다이벤조싸이오펜)(약칭: DBT3P-II), 2,8-다이페닐-4-[4-(9-페닐-9H-플루오렌-9-일)페닐]다이벤조싸이오펜(약칭: DBTFLP-III), 또는 4-[4-(9-페닐-9H-플루오렌-9-일)페닐]-6-페닐다이벤조싸이오펜(약칭: DBTFLP-IV) 등의 싸이오펜 골격을 갖는 화합물, 및 4,4',4''-(벤젠-1,3,5-트라이일)트라이(다이벤조퓨란)(약칭: DBF3P-II) 또는 4-{3-[3-(9-페닐-9H-플루오렌-9-일)페닐]페닐}다이벤조퓨란(약칭: mmDBFFLBi-II) 등의 퓨란 골격을 갖는 화합물. 상술한 재료 중에서, 방향족 아민 골격을 갖는 화합물 및 카바졸 골격을 갖는 화합물은 신뢰성이 높고, 전자 수송성이 높아 구동 전압의 저감에 기여하기 때문에 바람직하다.

[0714] 또한, 발광 중심 물질이 인광 물질인 경우, 인광 물질보다 삼중항 여기 준위가 더 높은 물질을 호스트 재료로서 선택하는 것이 바람직하고, 발광 물질이 형광 물질인 경우, 형광 물질보다 밴드 갭이 넓은 물질을 호스트 재료로서 선택하는 것이 바람직하다. 발광층은 호스트 재료 및 인광 물질 외에, 제 3 물질을 포함하여도 좋다. 또한, 이 기재는 발광층이 호스트 재료, 인광 물질, 및 제 3 물질 외의 성분을 포함할 가능성을 제외하지 않는다.

[0715] 여기서, 인광 물질을 사용한 발광 효율이 높은 발광 소자를 실현하기 위하여, 호스트 재료와 인광 물질 사이의 에너지 이동에 대하여 생각한다. 캐리어의 재결합은 호스트 재료 및 인광 물질의 양쪽에서 일어나기 때문에, 발광 효율을 향상시키기 위하여 호스트 재료로부터 인광 물질로 효율적으로 에너지가 이동하는 것이 바람직하다.

[0716] 본 실시형태에서는, 게스트 재료로서 인광성 화합물을 사용한다. 인광성 화합물의 흡수 스펙트럼에서, 발광에 가장 강하게 기여하는 것으로 생각되는 흡수대는, 기저 상태로부터 삼중항 여기 상태로의 직접 전이에 상응하는 흡수 파장 및 상기 흡수 파장의 근방에 존재하며, 가장 장파장 측에 있다. 따라서, 호스트 재료의 발광 스펙트럼(형광 스펙트럼 및 인광 스펙트럼)은, 인광성 화합물의 흡수 스펙트럼에서 가장 장파장 측의 흡수대와 중첩되는 것이 바람직한 것으로 생각된다.

[0717] 예를 들어, 대부분의 유기 금속 착체, 특히 발광 이리듐 착체는 가장 장파장 측의 흡수대로서 500 nm 내지 600 nm 부근에 넓은 흡수대를 갖는다. 이 흡수대는 주로 삼중항 MLCT(metal to ligand charge transfer) 전이를 기초로 한다. 또한, 흡수대는 삼중항 $\pi-\pi^*$ 전이 및 단일항 MLCT 전이를 기초로 하는 흡수도 포함하고, 이를 흡수는 서로 중첩되어 흡수 스펙트럼의 가장 장파장 측에 넓은 흡수대를 형성하는 것으로 생각된다. 따라서, 유기 금속 착체(특히, 이리듐 착체)를 게스트 재료로서 사용하는 경우에는, 상술한 바와 같이 가장 장파장 측의 넓은 흡수대가 호스트 재료의 발광 스펙트럼과 크게 중첩되도록 하는 것이 바람직하다.

[0718] 여기서 먼저, 삼중항 여기 상태의 호스트 재료로부터의 에너지 이동에 대하여 생각한다. 상술한 논의로부터,

삼중항 여기 상태로부터의 에너지 이동에서는, 호스트 재료의 인광 스펙트럼과 게스트 재료의 가장 장파장 측의 흡수대가 크게 중첩되는 것이 바람직하다.

[0719] 그러나, 여기서 문제는, 호스트 분자의 단일항 여기 상태로부터의 에너지 이동이다. 삼중항 여기 상태로부터의 에너지 이동뿐만 아니라 단일항 여기 상태로부터의 에너지 이동도 효율적으로 수행하기 위해서는, 호스트 재료는, 인광 스펙트럼뿐만 아니라 형광 스펙트럼도 게스트 재료의 가장 장파장 측에서 흡수대와 중첩되도록 설계되는 것이 바람직하다. 바꿔 말하면, 인광 스펙트럼과 비슷한 위치에서 형광 스펙트럼을 갖도록 호스트 재료를 설계하면, 호스트 재료의 단일항 여기 상태 및 삼중항 여기 상태의 양쪽으로부터의 에너지 이동을 효율적으로 수행할 수 있다.

[0720] 그러나 일반적으로, S1 준위는 T1 준위와 크게 차이가 나기 때문에(S1 준위>T1 준위), 형광 발광 파장도 인광 발광 파장과 크게 차이가 난다(형광 발광 파장<인광 발광 파장). 예를 들어, 인광성 화합물을 포함하는 발광 소자에 일반적으로 사용되는 4,4'-다이(*N*-카바졸릴)바이페닐(약칭: CBP)은 500nm 부근에 인광 스펙트럼을 갖고, 약 100nm 정도 크게 차이가 나는 400nm 부근에 형광 스펙트럼을 갖는다. 이러한 예는 또한, 인광 스펙트럼과 비슷한 위치에 형광 스펙트럼을 갖도록 호스트 재료를 설계하는 것이 매우 어렵다는 것을 나타낸다.

[0721] 또한, 형광은 인광의 에너지 준위보다 높은 에너지 준위로부터 방출되기 때문에, 형광 스펙트럼이 게스트 재료의 가장 장파장 측의 흡수 스펙트럼에 근접한 파장에 상당하는 호스트 재료의 T1 준위는, 게스트 재료의 T1 준위보다 낮아진다.

[0722] 따라서, 발광 중심 물질로서 인광 물질을 사용하는 경우, 발광층은 호스트 재료 및 발광 중심 물질 외에, 제 3 물질을 포함하고, 호스트 재료와 제 3 물질의 조합은 엑시플렉스(여기 자체라고도 함)를 형성하는 것이 바람직하다.

[0723] 이 경우, 발광층에서의 캐리어(전자 및 정공)의 재결합 시에, 호스트 재료 및 제 3 물질은 엑시플렉스를 형성한다. 엑시플렉스의 형광 스펙트럼은, 호스트 재료 단체 또는 제 3 물질 단체의 형광 스펙트럼보다 장파장 측에 있다. 따라서, 호스트 재료 및 제 3 물질의 T1 준위를 게스트 재료의 T1 준위보다 높게 유지하면서, 단일항 여기 상태로부터의 에너지 이동을 최대화할 수 있다. 또한, 엑시플렉스는 T1 준위 및 S1 준위가 서로 근접하는 상태이기 때문에 형광 스펙트럼 및 인광 스펙트럼은 실질적으로 동일한 위치에 존재한다. 따라서, 엑시플렉스의 형광 스펙트럼 및 인광 스펙트럼 양쪽 모두는 게스트 분자의 단일항 기저 상태로부터 삼중항 여기 상태로의 전이에 상당하는 흡수(흡수 스펙트럼에서의 가장 장파장 측에 존재하는 게스트 분자의 넓은 흡수대)와 크게 중첩될 수 있기 때문에, 에너지 이동 효율이 높은 발광 소자를 얻을 수 있다.

[0724] 제 3 물질로서는, 호스트 재료 또는 첨가물로서 사용할 수 있는 상술한 재료를 사용할 수 있다. 호스트 재료 및 제 3 물질은, 그들이 엑시플렉스를 형성할 수 있으면 특별한 제한이 없으며, 전자를 받기 쉬운 화합물(전자 수송성을 갖는 화합물)과 정공을 받기 쉬운 화합물(정공 수송성을 갖는 화합물)의 조합을 채용하는 것이 바람직하다.

[0725] 전자 수송성을 갖는 화합물 및 정공 수송성을 갖는 화합물을 호스트 재료 및 제 3 물질에 사용하는 경우, 화합물들의 혼합비에 의하여 캐리어 밸런스를 제어할 수 있다. 구체적으로는, 호스트 재료 대 제 3 물질(또는 첨가물)의 비율이 1:9 내지 9:1인 것이 바람직하다. 또한, 이 경우, 1종류의 발광 중심 물질이 분산된 발광층이 2층으로 분할되고, 상기 2층은 호스트 재료 대 제 3 물질이 상이한 혼합비를 갖는 구조를 채용하여도 좋다. 이러한 구조에 의하여, 발광 소자의 캐리어 밸런스를 최적화할 수 있으므로, 발광 소자의 수명을 향상시킬 수 있다. 또한, 발광층 중 한쪽은 정공 수송층이고, 발광층 중 다른 쪽은 전자 수송층이어도 좋다.

[0726] 상술한 구조를 갖는 발광층이 복수의 재료를 사용하여 형성되는 경우, 전공 중착법에 의한 공증착, 또는 재료의 용액을 사용하는 잉크젯법, 스판 코팅법, 또는 딥 코팅법 등을 사용하여 발광층을 형성할 수 있다.

[0727] 전자 수송층(114)은 전자 수송성을 갖는 물질을 포함하는 층이다. 예를 들어, 전자 수송층(114)은, 트리스(8-퀴놀리놀레이토)알루미늄(약칭: Alq), 트리스(4-메틸-8-퀴놀리놀레이토)알루미늄(약칭: Almq₃), 비스(10-하이드록시벤조[*h*]퀴놀리네이토)베릴륨(약칭: BeBq₂), 또는 비스(2-메틸-8-퀴놀리놀레이토)(4-페닐페놀레이토)알루미늄(약칭: BA1q) 등의 퀴놀린 골격 또는 벤조퀴놀린 골격을 갖는 금속 착체를 사용하여 형성된다. 비스[2-(2-(2-하이드록시페닐)벤즈옥사졸레이토]아연(약칭: Zn(BOX)₂) 또는 비스[2-(2-하이드록시페닐)벤조싸이아졸레이토]아연(약칭: Zn(BTZ)₂) 등의 옥사졸계 또는 싸이아졸계 배위자를 갖는 금속 착체 등을 사용할 수도 있다. 상기 금속 착체 외에는, 2-(4-바이페닐일)-5-(4-*tert*-뷰틸페닐)-1,3,4-옥사다이아졸(약칭: PBD), 1,3-비스[5-(*p*-*tert*-뷰

틸페닐)-1,3,4-옥사다이아졸-2-일]벤젠(약칭: OXD-7), 3-(4-바이페닐일)-4-페닐-5-(4-*tert*-뷰틸페닐)-1,2,4-트라이아졸(약칭: TAZ), 바소페난트롤린(약칭: BPhen), 또는 바소큐프로인(약칭: BCP) 등을 사용할 수도 있다. 여기서 든 물질은, 주로 $10^{-6} \text{ cm}^2/\text{Vs}$ 이상의 전자 이동도를 갖는 것이다. 또한, 정공 수송성보다 전자 수송성이 높은 물질이라면, 상술한 물질 이외의 임의의 물질을 전자 수송층에 사용하여도 좋다.

[0728] 전자 수송층(114)에 포함되는 물질로서 헤테로 고리 화합물을 사용하여도 좋다. 헤테로 고리 화합물은 밴드 갭이 넓고 T1 준위가 높기 때문에, 발광층의 여기 에너지가 전자 수송층(114)으로 이동하는 것을 방지할 수 있고, 에너지 이동으로 인한 발광 효율의 저하를 억제할 수 있으므로, 발광 효율이 높은 발광 소자를 제공할 수 있다. 또한, 본 발명의 일 형태의 화합물은 캐리어 수송성이 높으므로 저전압으로 구동되는 발광 소자를 제공할 수 있다.

[0729] 전자 수송층은 단층에 한정되지 않고, 상술한 물질 중 어느 것을 포함하는 층을 2층 이상 포함하는 적층이어도 좋다.

[0730] 전자 수송층과 발광층 사이에, 전자 캐리어의 이동을 제어하는 층을 제공하여도 좋다. 이는 상술한 전자 수송성이 높은 재료에 전자 트랩성이 높은 물질을 소량 첨가함으로써 형성되는 층이고, 상기 층은 전자 캐리어의 이동을 방해함으로써 캐리어 밸런스를 조정할 수 있다. 이러한 구조는 발광층을 전자가 통과하는 경우에 발생하는 문제(소자 수명의 저하 등)를 방지하는 데 매우 효과적이다.

[0731] 발광층의 호스트 재료 및 전자 수송층의 재료는 동일한 골격을 가지면, 캐리어의 이동이 원활해져 구동 전압을 저감시킬 수 있으므로 바람직하다. 또한, 호스트 재료 및 전자 수송층의 재료가 동일한 재료인 것은 효과적이다.

[0732] 전자 수송층(114)과 제 2 전극(102) 사이에, 제 2 전극(102)과 접촉하여 전자 주입층(115)을 제공하여도 좋다. 전자 주입층(115)으로서, 리튬, 칼슘, 플루오린화 리튬(LiF), 플루오린화 세슘(CsF), 또는 플루오린화 칼슘(CaF_2) 등을 사용할 수 있다. 전자 수송성을 갖는 물질과 전자 수송성을 갖는 물질에 대한 전자 공여성을 나타내는 물질(이하, 단순히 전자 공여성 물질이라고 함)의 복합 재료를 사용할 수도 있다. 전자 공여성 물질의 예에는, 알칼리 금속, 알칼리 토금속, 그들의 화합물, 및 전자화물(electride)이 포함된다. 전자화물의 예에는, 산화 칼슘-산화 알루미늄(calcium oxide-aluminum oxide)에 높은 농도로 전자를 첨가한 전자화물이 포함된다. 또한, 전자 주입층(115)으로서, 이러한 복합 재료를 사용하면, 제 2 전극(102)으로부터 전자가 효율적으로 주입되기 때문에 바람직하다. 이 구조로 함으로써, 음극에는 일함수가 작은 재료뿐만 아니라, 도전 재료도 사용할 수 있다.

[0733] 음극으로서 기능하는 전극으로서, 일함수가 작은(구체적으로는, 일함수가 3.8eV 이하), 금속, 합금, 전기 전도성 화합물, 및 이들의 혼합물 중 어느 것을 사용할 수 있다. 이러한 음극 재료의 구체적인 예에는, 원소 주기율표의 제 1 족 및 제 2 족에 속하는 원소, 즉, 리튬(Li), 세슘(Cs), 마그네슘(Mg), 칼슘(Ca), 및 스트론튬(Sr), 이들의 합금(예를 들어, MgAg 또는 AlLi), 유로퓸(Eu) 및 이터븀(Yb) 등의 희토류 금속, 및 이들의 합금 등이 포함된다. 그러나, 제 2 전극(102)과 전자 수송층 사이에 전자 주입층을 제공하는 경우, 제 2 전극(102)에는, 일함수에 상관없이 Al, Ag, ITO, 또는 실리콘 또는 산화 실리콘을 포함하는 인듐 주석 산화물 등의 다양한 도전 재료 중 어느 것을 사용할 수 있다. 이를 도전 재료의 막은, 스퍼터링법, 잉크젯법, 또는 스펀 코팅법 등으로 형성할 수 있다.

[0734] 건식 공정이든 습식 공정이든 상관없이, 다양한 방법들 중 임의의 것을 사용하여 EL층(103)을 형성할 수 있다. 예를 들어, 진공 증착법, 잉크젯법, 또는 스펀 코팅법 등을 사용하여도 좋다. 전극마다 또는 층마다 다른 형성 방법을 사용하여도 좋다.

[0735] 또한, 전극은, 콜-겔법을 사용하는 습식법으로 형성하여도 좋고, 또는 금속 재료의 페이스트를 사용하는 습식법으로 형성하여도 좋다. 또는, 전극을 스퍼터링법 또는 진공 증착법 등의 건식법으로 형성하여도 좋다.

[0736] 또한, 제 1 전극(101)과 제 2 전극(102) 사이에 제공되는 EL층의 구조는 상술한 구조에 한정되지 않는다. 그러나, 발광 영역과, 전극 또는 캐리어 주입층에 사용되는 금속이 근접함으로 인한 소광이 억제되도록, 정공과 전자가 재결합되는 발광 영역이 제 1 전극(101) 및 제 2 전극(102)으로부터 떨어져 위치하는 것이 바람직하다.

[0737] 또한, 발광층에서 생성된 여기자로부터의 에너지 이동을 억제하기 위하여, 발광층에 직접 접하는 정공 수송층 및 전자 수송층, 특히 발광층(113)에서의 발광 영역에 가까운 쪽에 접하는 캐리어 수송층은, 발광층의 발광 물질 또는 발광층에 포함되는 발광 중심 물질보다 에너지 갭이 넓은 물질로 형성되는 것이 바람직하다.

- [0738] 상술한 구조를 갖는 발광 소자에서, 제 1 전극(101)과 제 2 전극(102) 사이에 주어진 전위차 때문에 전류가 흐르고, 정공 및 전자는 발광성이 높은 물질을 포함하는 발광층(113)에서 재결합되어 광이 방출된다. 바꿔 말하면, 발광층(113)에 발광 영역이 형성된다.
- [0739] 광은 제 1 전극(101) 및 제 2 전극(102) 중 한쪽 또는 양쪽을 통하여 추출된다. 따라서, 제 1 전극(101) 및 제 2 전극(102) 중 한쪽 또는 양쪽은 투광성 전극이다. 제 1 전극(101)만이 투광성 전극인 경우, 광은 제 1 전극(101)을 통하여 기판 측으로부터 추출된다. 반대로, 제 2 전극(102)만이 투광성 전극인 경우, 광은 제 2 전극(102)을 통하여 기판 측과 반대 측으로부터 추출된다. 제 1 전극(101) 및 제 2 전극(102)이 양쪽 모두 투광성 전극인 경우, 광은 제 1 전극(101) 및 제 2 전극(102)을 통하여 기판 측 및 기판 측과 반대 측의 양쪽으로부터 추출된다.
- [0740] 본 실시형태의 발광 소자는 본 발명의 일 형태의 화합물을 사용하여 형성되기 때문에, 발광 소자는 외부 양자 효율이 높아질 수 있다. 본 발명의 일 형태의 혜테로 고리 화합물은 내열성이 높기 때문에, 발광 소자는 양호한 열물성을 갖는다.
- [0741] 지지체로서 유리 또는 플라스틱 등으로 만들어진 기판을 사용하여 이러한 발광 소자를 제작하여도 좋다. 하나의 기판 위에 이러한 발광 소자를 복수 형성함으로써, 패시브 매트릭스 발광 장치가 형성된다. 또는, 유리 또는 플라스틱 등으로 만들어진 기판 위에 트랜지스터를 형성하고, 트랜지스터와 전기적으로 접속된 전극 위에 상기 발광 소자를 제작하여도 좋다. 이러한 식으로, 트랜지스터에 의하여 발광 소자의 구동을 제어하는 액티브 매트릭스 발광 장치를 제작할 수 있다. 또한, 트랜지스터의 구조는 특별히 한정되지 않는다. 스탠더드 TFT 또는 역 스탠더드 TFT를 채용하여도 좋다. 또한, TFT에 사용되는 반도체의 결정성은 특별히 한정되지 않는다. 또한, TFT 기판에 형성되는 구동 회로는 n채널형 TFT 및 p채널형 TFT로 형성되어도 좋고, 또는 n채널형 TFT 또는 p채널형 TFT 중 어느 한쪽으로 형성되어도 좋다. TFT를 형성하는 반도체층은 반도체 특성을 나타내는 재료이기만 하면 어느 재료를 사용하여 형성되어도 좋다; 예를 들어 실리콘(Si) 및 저마늄(Ge) 등의 원소 주기율표의 제 14 족에 속하는 원소, 갈륨 비소 및 인듐 인 등의 화합물, 및 산화 아연 및 산화 주석 등의 산화물 등을 들 수 있다. 반도체 특성을 나타내는 산화물(산화물 반도체)로서는, 인듐, 갈륨, 알루미늄, 아연, 및 주석으로부터 선택된 원소의 복합 산화물을 사용할 수 있다. 그 예로서는, 산화 아연(ZnO), 산화 아연을 포함하는 산화인듐(indium zinc oxide), 및 산화 인듐, 산화 갈륨, 및 산화 아연을 포함하는 산화물(IGZO: indium gallium zinc oxide)이 있다. 또한, 유기 반도체를 사용하여도 좋다. 반도체층은 결정질 구조 또는 비정질 구조 중 어느 한쪽을 가져도 좋다. 결정질 반도체층의 구체적인 예로서는 단결정 반도체, 다결정 반도체, 및 미결정 반도체가 있다.
- [0742] 상술한 바와 같이, 본 발명의 일 형태의 혜테로 고리 화합물은 발광 소자에 사용할 수 있다.
- [0743] 본 실시형태는 임의의 다른 실시형태와 적절히 조합할 수 있다.
- [0744] (실시형태 4)
- [0745] 본 실시형태에서는 복수의 발광 유닛이 적층된 구조를 갖는 발광 소자(이후, 적층형 소자라고도 함)의 일 형태에 대하여 도 1의 (B)를 참조하여 설명한다. 이 발광 소자는 제 1 전극과 제 2 전극 사이에 복수의 발광 유닛을 포함한다. 각 발광 유닛은 실시형태 2에서 설명한 EL층(103)과 같은 구조를 가질 수 있다. 바꿔 말하면, 실시형태 2에서 설명한 발광 소자는 하나의 발광 유닛을 갖는 발광 소자이지만, 본 실시형태에서 설명하는 발광 소자는 복수의 발광 유닛을 갖는 발광 소자이다.
- [0746] 도 1의 (B)에서, 제 1 전극(501)과 제 2 전극(502) 사이에는 제 1 발광 유닛(511) 및 제 2 발광 유닛(512)이 적층되어 있고, 제 1 발광 유닛(511)과 제 2 발광 유닛(512) 사이에는 전하 발생층(513)이 제공되어 있다. 제 1 전극(501) 및 제 2 전극(502)은 각각 실시형태 2에서의 제 1 전극(101) 및 제 2 전극(102)에 상당하고, 실시형태 2에서 설명한 재료를 사용할 수 있다. 또한, 제 1 발광 유닛(511) 및 제 2 발광 유닛(512)의 구조는 같아도 좋고 달라도 좋다.
- [0747] 전하 발생층(513)은 유기 화합물과 금속 산화물의 복합 재료를 포함한다. 이 유기 화합물과 금속 산화물의 복합 재료로서는, 정공 주입층에 사용할 수 있으며 실시형태 2에서 설명한 복합 재료를 사용할 수 있다. 유기 화합물로서는, 방향족 아민 화합물, 카바졸 화합물, 방향족 탄화수소, 및 고분자 화합물(올리고머, 텐드리머, 또는 폴리머 등) 등 각종 화합물 중 임의의 것을 사용할 수 있다. 또한, 유기 화합물은 정공 이동도가 $1 \times 10^{-6} \text{ cm}^2/\text{Vs}$ 이상인 것이 바람직하다. 그러나, 정공 수송성이 전자 수송성보다 높은 물질이기만 하면, 다른 어느 물

질을 사용하여도 좋다. 유기 화합물과 금속 산화물의 복합 재료는 캐리어 주입성 및 캐리어 수송성이 우수하기 때문에, 저전압 구동 및 저전류 구동을 달성할 수 있다. 또한, 양극 측의 면이 전하 발생층과 접촉하는 발광 유닛에서는, 전하 발생층이 정공 수송층으로서도 기능할 수 있기 때문에, 정공 수송층을 반드시 제공할 필요는 없다.

[0748] 전하 발생층(513)은 유기 화합물과 금속 산화물의 복합 재료를 포함하는 층과, 다른 재료를 포함하는 층의 적층 구조를 가져도 좋다. 예를 들어, 유기 화합물과 금속 산화물의 복합 재료를 포함하는 층을, 전자 공여성 물질로부터 선택된 물질의 화합물 및 전자 수송성이 높은 화합물을 포함하는 층과 조합하여도 좋다. 또한, 유기 화합물과 금속 산화물의 복합 재료를 포함하는 층을 투면 도전막과 조합함으로써 전하 발생층(513)을 형성하여도 좋다.

[0749] 제 1 발광 유닛(511)과 제 2 발광 유닛(512) 사이에 제공된 전하 발생층(513)은, 제 1 전극(501)과 제 2 전극(502) 사이에 전압을 인가할 때, 한쪽 발광 유닛에 전자를 주입할 수 있고 다른 쪽 발광 유닛에 정공을 주입할 수 있지만 하면 어느 구조를 가져도 좋다. 예를 들어, 도 1의 (B)에서, 제 1 전극의 전위가 제 2 전극의 전위보다 높아지도록 전압을 인가할 때, 제 1 발광 유닛(511)에 전자를 주입하고 제 2 발광 유닛(512)에 정공을 주입하는 층이지만 하면 어느 층이어도 전하 발생층(513)으로서 사용할 수 있다.

[0750] 본 실시형태에서는, 2개의 발광 유닛을 갖는 발광 소자에 대하여 설명하였지만, 3개 이상의 발광 유닛이 적층된 발광 소자에도 본 발명을 마찬가지로 적용할 수 있다. 본 실시형태에 따른 발광 소자에서와 같이, 한 쌍의 전극 사이에서 복수의 발광 유닛이 전하 발생층에 의하여 분할됨으로써, 전류 밀도를 낮게 유지한 채로 휙도가 높은 광을 얻을 수 있기 때문에, 수명이 긴 발광 소자를 얻을 수 있다. 또한, 낮은 전압으로 구동될 수 있는, 저 소비전력의 발광 장치를 달성할 수 있다.

[0751] 발광 유닛이 방출하는 광의 색을 서로 다르게 함으로써, 발광 소자는 전체로서 원하는 색의 발광을 제공할 수 있다. 예를 들어, 제 1 발광 유닛의 발광색 및 제 2 발광 유닛의 발광색이 보색이 되도록 2개의 발광 유닛을 갖는 발광 소자를 형성함으로써, 발광 소자는 전체로서 백색 발광을 제공할 수 있다. 또한, "보색"이라는 용어는 색이 혼합될 때 무채색이 얻어지는 색 관계를 의미한다. 바꿔 말하면, 보색의 광을 방출하는 물질로부터 얻어지는 광을 혼합시키면, 백색 발광을 얻을 수 있다. 또한, 이는 3개의 발광 유닛을 갖는 발광 소자에 대해서도 적용할 수 있다. 예를 들어, 제 1 발광 유닛의 발광색이 적색이고, 제 2 발광 유닛의 발광색이 녹색이고, 제 3 발광 유닛의 발광색이 청색이면, 발광 소자 전체로서 백색 발광을 제공할 수 있다. 또는, 한쪽 발광 유닛의 발광층에 인광 발광 중심 물질을 사용하고, 다른 쪽 발광 유닛의 발광층에 형광 발광 중심 물질을 사용하는 발광 소자를 채용하는 경우, 발광 소자로부터 형광 및 인광 양쪽 모두를 효율적으로 방출시킬 수 있다. 예를 들어, 한쪽 발광 유닛으로부터 적색 인광 및 녹색 인광을 얻고, 다른 쪽 발광 유닛으로부터 청색 형광을 얻으면, 발광 효율이 높은 백색의 광을 얻을 수 있다.

[0752] 본 실시형태에 따른 발광 소자는 다이벤조싸이오페닐기, 다이벤조퓨란일기, 또는 카바졸릴기 및 다이벤조[f,h]퀴녹살린일기가 3개 이상의 아릴렌기를 통하여 결합되어 있는 구조를 갖는 화합물을 포함하기 때문에, 발광 효율이 높고 구동 전압이 낮은 발광 소자가 될 수 있다. 또한, 발광 중심 물질에서 유래되는 색 순도가 높은 발광을 헤테로 고리 화합물을 포함하는 발광 유닛으로부터 얻을 수 있기 때문에, 발광 소자 전체로서의 색 조정이 쉽다.

[0753] 본 실시형태는 다른 실시형태 중 임의의 것과 적절히 조합할 수 있다.

[0754] (실시형태 5)

[0755] 본 실시형태에서는, 다이벤조싸이오페닐기, 다이벤조퓨란일기, 또는 카바졸릴기 및 다이벤조[f,h]퀴녹살린일기가 3개 이상의 아릴렌기를 통하여 결합되어 있는 구조를 갖는 화합물을 포함하는 발광 소자를 사용한 발광 장치에 대하여 설명한다.

[0756] 본 실시형태에서는, 다이벤조싸이오페닐기, 다이벤조퓨란일기, 또는 카바졸릴기 및 다이벤조[f,h]퀴녹살린일기가 3개 이상의 아릴렌기를 통하여 결합되어 있는 구조를 갖는 화합물을 포함하는 발광 소자를 사용하여 제작된 발광 장치의 예에 대하여 도 2의 (A) 및 (B)를 참조하여 설명한다. 또한, 도 2의 (A)는 발광 장치의 상면도이고, 도 2의 (B)는 도 2의 (A)의 선 A-B 및 C-D를 따라 취한 단면도이다. 이 발광 장치는 발광 소자의 발광을 제어하며 점선으로 나타내어지는 구동 회로부(소스 측 구동 회로)(601), 화소부(602), 및 구동 회로부(게이트 측 구동 회로)(603)를 포함한다. 부호 604는 밀봉 기판을 나타내고, 625는 건조제를 나타내고, 605는 밀봉 재료를 나타내고, 607은 밀봉 재료(605)로 둘러싸인 공간을 나타낸다.

- [0757] 리드 배선(608)은 소스 측 구동 회로(601) 및 게이트 측 구동 회로(603)에 입력되는 신호를 전송하며, 외부 입력 단자로서 기능하는 FPC(flexible printed circuit)(609)로부터 비디오 신호, 클럭 신호, 스타트 신호, 및 리셋 신호 등의 신호를 받는 배선이다. 여기서는 FPC만을 도시하였지만, FPC에는 인쇄 배선 기판(PWB)이 장착되어도 좋다. 본 명세서의 발광 장치는 발광 장치 자체뿐만 아니라, FPC 또는 PWB가 제공된 발광 장치도 그 범주에 포함한다.
- [0758] 다음으로, 도 2의 (B)를 참조하여 단면 구조에 대하여 설명한다. 소자 기판(610) 위에는 구동 회로부 및 화소부가 형성되어 있으며, 여기서는 구동 회로부인 소스 측 구동 회로(601), 및 화소부(602)에서의 화소들 중 하나를 나타내었다.
- [0759] 소스 측 구동 회로(601)로서는, n채널 TFT(623)와 p채널 TFT(624)를 조합한 CMOS 회로가 형성된다. 또한, 구동 회로는, CMOS 회로, PMOS 회로, 및 NMOS 회로 등, 각종 회로 중 임의의 것으로 형성되어도 좋다. 본 실시형태에서는 기판 위에 구동 회로가 형성된 드라이버 일체형에 대하여 설명하지만, 구동 회로는 반드시 기판 위에 형성될 필요는 없고, 구동 회로를 기판 위가 아니라 외부에 형성할 수 있다.
- [0760] 화소부(602)는 스위칭 TFT(611), 전류 제어 TFT(612), 및 전류 제어 TFT(612)의 드레인에 전기적으로 접속된 제1 전극(613)을 포함하는 복수의 화소를 포함한다. 또한, 제1 전극(613)의 단부를 덮도록 절연물(614)이 형성되어 있고, 여기서는 포지티브 감광성 수지막이 사용된다.
- [0761] 절연물(614) 위에 형성되는 막의 괴복성을 향상시키기 위하여, 절연물(614)은 그 상단부 또는 하단부에 곡률을 갖는 곡면을 갖도록 형성된다. 예를 들어, 절연물(614)의 재료에 포지티브 감광성 아크릴 수지를 사용한 경우에는, 절연물(614)의 상단부만이 곡률 반경($0.2\mu\text{m}$ 내지 $3\mu\text{m}$)을 갖는 면을 갖는 것이 바람직하다. 절연물(614)로서는, 네거티브 감광성 재료 또는 포지티브 감광성 재료를 사용할 수 있다.
- [0762] 제1 전극(613) 위에는 EL층(616) 및 제2 전극(617)이 형성되어 있다. 양극으로서 기능하는 제1 전극(613)에 사용하는 재료로서는, 일함수가 높은 재료를 사용하는 것이 바람직하다. 예를 들어, ITO막, 실리콘을 포함하는 인듐 주석 산화물막, 산화 아연을 2wt% 내지 20wt% 포함하는 산화 인듐막, 질화 타이타늄막, 크로뮴막, 텅스텐막, Zn막, 또는 Pt막 등의 단층막, 질화 타이타늄막과 알루미늄을 주성분으로서 포함하는 막의 적층, 또는 질화 타이타늄막, 알루미늄을 주성분으로서 포함하는 막, 및 질화 타이타늄막의 3개의 층을 포함하는 적층 등을 사용할 수 있다. 적층 구조는 낮은 배선 저항, 양호한 음 콘택트(ohmic contact), 및 양극으로서의 기능을 달성한다.
- [0763] EL층(616)은 증착 마스크를 사용한 증착법, 잉크젯법, 및 스픬 코팅법 등 다양한 방법 중 임의의 것으로 형성된다. EL층(616)은, 다이벤조싸이오페닐기, 다이벤조퓨란일기, 또는 카바졸릴기 및 다이벤조[*f,h*]퀴녹살린일기가 3개 이상의 아릴렌기를 통하여 결합되어 있는 구조를 갖는 화합물을 포함한다. 또한, EL층(616)에 포함되는 다른 재료에는, 저분자 화합물 및 고분자 화합물(올리고머 및 덴드리머를 포함함) 중 임의의 것을 사용하여도 좋다.
- [0764] EL층(616) 위에 형성되고 음극으로서 기능하는 제2 전극(617)에 사용하는 재료로서는, 일함수가 낮은 재료(예를 들어, Al, Mg, Li, Ca, 또는 이들의 합금 또는 화합물(MgAg, MgIn, 또는 AlLi 등))를 사용하는 것이 바람직하다. EL층(616)에서 발생된 광이 제2 전극(617)을 통과하는 경우에는, 금속 박막과 투명 도전막(예를 들어, ITO, 산화 아연을 2wt% 이상 20wt% 이하로 포함하는 산화 인듐, 실리콘을 포함하는 인듐 주석 산화물, 또는 산화 아연(ZnO))을 포함하는 적층을 제2 전극(617)에 사용하는 것이 바람직하다.
- [0765] 또한, 제1 전극(613), EL층(616), 및 제2 전극(617)으로 발광 소자가 형성되어 있다. 이 발광 소자는 실시형태 3에서 설명한 구조를 갖는다. 본 실시형태의 발광 장치에서, 복수의 발광 소자를 포함하는 화소부는 실시형태 3에서 설명한 구조를 갖는 발광 소자와, 그 외의 구조를 갖는 발광 소자 양쪽 모두를 포함하여도 좋다.
- [0766] 밀봉 재료(605)로 밀봉 기판(604)을 소자 기판(610)에 접착시킴으로써, 소자 기판(610), 밀봉 기판(604), 및 밀봉 재료(605)로 둘러싸인 공간(607)에 발광 소자(618)가 제공된다. 공간(607)은 충전재로 충전되어 있다. 충전제는 불활성 가스(질소 또는 아르곤 등), 또는 수지 및/또는 건조제이어도 좋다.
- [0767] 밀봉 재료(605)에는 에폭시계 수지 또는 유리 프릿(glass frit)을 사용하는 것이 바람직하다. 이러한 재료는 수분 또는 산소를 가능한 한 투과시키지 않는 것이 바람직하다. 밀봉 기판(604)으로서는 유리 기판, 석영 기판, 또는 FRP(fiber reinforced plastic), PVF(poly(vinyl fluoride)), 폴리에스터, 또는 아크릴 수지 등으로 형성된 플라스틱 기판을 사용할 수 있다.

- [0768] 상술한 바와 같이, 다이벤조싸이오페닐기, 다이벤조퓨란일기, 또는 카바졸릴기 및 다이벤조[*f,h*]퀴녹살린일기가 3개 이상의 아릴렌기를 통하여 결합되어 있는 구조를 갖는 화합물을 포함하는 발광 소자를 사용하여 제작한 발광 장치를 얻을 수 있다.
- [0769] 도 3의 (A) 및 (B)는 백색 발광을 나타내는 발광 소자의 형성 및 착색층(컬러 필터) 등의 제공에 위하여 풀 컬러 표시가 실현된 발광 장치의 예를 도시한 것이다. 도 3의 (A)에는 기판(1001), 하지 절연막(base insulating film)(1002), 게이트 절연막(1003), 게이트 전극(1006, 1007, 및 1008), 제 1 충간 절연막(1020), 제 2 충간 절연막(1021), 주변부(1042), 화소부(1040), 구동 회로부(1041), 발광 소자의 제 1 전극(1024W, 1024R, 1024G, 및 1024B), 격벽(1025), EL층(1028), 발광 소자의 제 2 전극(1029), 밀봉 기판(1031), 및 실재(1032) 등을 도시하였다.
- [0770] 도 3의 (A)에서는, 투명 기재(1033) 상에 착색층(적색 착색층(1034R), 녹색 착색층(1034G), 및 청색 착색층(1034B))이 제공되어 있다. 또한, 흑색층(블랙 매트릭스)(1035)을 추가로 제공하여도 좋다. 착색층 및 흑색층이 제공된 투명 기재(1033)는 위치가 맞추어져(positioned) 기판(1001)에 고정된다. 또한, 착색층 및 흑색층은 오버코트층(1036)으로 덮여 있다. 도 3의 (A)에서는, 발광층의 일부로부터 방출된 광은 착색층을 통과하지 않는 한편, 발광층의 다른 일부로부터 방출된 광은 착색층을 통과한다. 착색층을 통과하지 않는 광은 백색이고 착색층들 중 어느 하나를 통과하는 광은 적색, 청색, 또는 녹색이기 때문에, 그 4가지 색의 화소를 사용하여 화상을 표시할 수 있다.
- [0771] 도 3의 (B)는 착색층(적색 착색층(1034R), 녹색 착색층(1034G), 및 청색 착색층(1034B))이 게이트 절연막(1003)과 제 1 충간 절연막(1020) 사이에 형성된 예를 도시한 것이다. 도 3의 (B)에 나타낸 바와 같이, 착색층은 기판(1001)과 밀봉 기판(1031) 사이에 제공되어도 좋다.
- [0772] 상술한 발광 장치는, TFT가 형성되는 기판(1001) 측으로부터 광이 추출되는 구조(보텀 이미션 구조(bottom emission structure))를 갖지만, 밀봉 기판(1031) 측으로부터 광이 추출되는 구조(톱 이미션 구조(top emission structure))를 가져도 좋다. 도 4는 톱 이미션 구조를 갖는 발광 장치의 단면도이다. 이 경우, 기판(1001)으로서 광을 투과시키지 않는 기판을 사용할 수 있다. TFT와 발광 소자의 양극을 접속시키는 접속 전극을 형성하는 단계까지의 공정은 보텀 이미션 구조를 갖는 발광 장치와 비슷한 식으로 수행된다. 그리고, 제 3 충간 절연막(1037)이 전극(1022)을 덮도록 형성된다. 이 절연막은 평탄화 기능을 가져도 좋다. 제 3 충간 절연막(1037)은 제 2 충간 절연막과 비슷한 재료를 사용하여 형성될 수 있고, 다른 다양한 재료 중 임의의 것을 사용하여 형성될 수도 있다.
- [0773] 여기서, 발광 소자의 제 1 전극(1024W, 1024R, 1024G, 및 1024B)은 각각 양극으로서 기능하지만, 음극으로서 기능하여도 좋다. 또한, 도 4에 도시된 바와 같은 톱 이미션 구조를 갖는 발광 장치의 경우, 제 1 전극은 반사 전극인 것이 바람직하다. EL층(1028)은, 실시형태 2에서 설명한 구조와 비슷한 구조를 갖도록 형성되고, 이로써 백색 발광을 얻을 수 있다.
- [0774] 도 3의 (A) 및 (B), 및 도 4에서, 백색 발광을 제공하는 EL층의 구조는 예를 들어, 복수의 발광층을 사용하거나 복수의 발광 유닛을 사용함으로써 실현할 수 있다. 또한, 백색 발광을 제공하는 구조는 상기에 한정되지 않는다.
- [0775] 도 4에 도시된 바와 같은 톱 이미션 구조의 경우, 착색층(적색 착색층(1034R), 녹색 착색층(1034G), 및 청색 착색층(1034B))이 제공된 밀봉 기판(1031)으로 밀봉을 수행할 수 있다. 밀봉 기판(1031)에는 화소들 사이에 위치하는 흑색층(블랙 매트릭스)(1030)이 제공되어도 좋다. 착색층(적색 착색층(1034R), 녹색 착색층(1034G), 및 청색 착색층(1034B))과 흑색층(블랙 매트릭스)은 오버코트층으로 덮여 있어도 좋다. 또한, 밀봉 기판(1031)으로서는 투광성 기판을 사용한다.
- [0776] 여기서는 적색, 녹색, 청색, 및 백색의 4가지 색을 사용하여 풀 컬러 표시를 수행하는 예를 나타내었지만, 특별한 제한은 없으며, 적색, 녹색, 및 청색의 3가지 색 또는 적색, 녹색, 청색, 및 황색의 4가지 색을 사용하여 풀 컬러 표시를 수행하여도 좋다.
- [0777] 본 실시형태에서의 발광 장치는 실시형태 3에서 설명한 발광 소자(다이벤조싸이오페닐기, 다이벤조퓨란일기, 또는 카바졸릴기 및 다이벤조[*f,h*]퀴녹살린일기)가 3개 이상의 아릴렌기를 통하여 결합되어 있는 구조를 갖는 화합물을 포함하는 발광 소자)를 사용하기 때문에, 특성이 양호한 발광 장치로 할 수 있다. 구체적으로는, 다이벤조싸이오페닐기, 다이벤조퓨란일기, 또는 카바졸릴기 및 다이벤조[*f,h*]퀴녹살린일기)가 3개 이상의 아릴렌기를 통하여 결합되어 있는 구조를 갖는 화합물은 에너지 낭비 없고 삼중항 여기 준위가 높고, 발광 물질로부터의 에

너지 이동을 억제할 수 있기 때문에, 폭넓은 발광색의 범위에서 발광 효율이 높은 발광 소자를 제공할 수 있어, 소비전력이 절감되고 연색성이 양호한 발광 장치가 된다. 또한, 다이벤조싸이오페닐기, 다이벤조퓨란일기, 또는 카바졸릴기 및 다이벤조[f,h]퀴녹살린일기가 3개 이상의 아릴렌기를 통하여 결합되어 있는 구조를 갖는 화합물은 캐리어 수송성이 높기 때문에, 낮은 전압으로 구동되는 발광 소자를 제공할 수 있어, 낮은 전압으로 구동되는 발광 장치가 된다. 다이벤조싸이오페닐기, 다이벤조퓨란일기, 또는 카바졸릴기 및 다이벤조[f,h]퀴녹살린일기가 3개 이상의 아릴렌기를 통하여 결합되어 있는 구조를 갖는 화합물은 열 물성이 양호하기 때문에, 내열성이 높은 발광 장치를 제공할 수 있다.

[0778]

위에서는 액티브 매트릭스 발광 장치에 대하여 설명하였지만, 아래에서는 패시브 매트릭스 발광 장치에 대하여 설명한다. 도 5의 (A) 및 (B)는 본 발명의 일 형태를 적용함으로써 제작된 패시브 매트릭스 발광 장치를 도시한 것이다. 도 5의 (A)는 발광 장치의 사시도이고, 도 5의 (B)는 도 5의 (A)의 선 X-Y를 따라 취한 단면도이다. 도 5의 (A) 및 (B)에서는, 기판(951) 위에서, 전극(952)과 전극(956) 사이에 EL층(955)이 제공되어 있다. 전극(952)의 단부는 절연층(953)으로 덮여 있다. 절연층(953) 위에는 격벽층(954)이 제공되어 있다. 격벽층(954)의 측벽은, 한쪽 측벽과 다른 쪽 측벽 사이의 거리가 기판 표면을 향하여 서서히 좁아지도록 경사져 있다. 바꿔 말하면, 격벽층(954)의 짧은 면 방향을 따라 취한 단면은 사다리꼴이고, 저변(절연층(953))의 면 방향과 같은 방향에 있으며 절연층(953)과 접촉하는 면은 윗면(절연층(953))의 면 방향과 같은 방향에 있으며 절연층(953)과 접촉하지 않는 면)보다 짧다. 이러한 식으로 격벽층(954)을 제공함으로써, 정전기 등에 기인한 발광 소자의 결함을 방지할 수 있다. 패시브 매트릭스 발광 장치도, 낮은 구동 전압으로 구동될 수 있는 실시형태 3에서 설명한 발광 소자(다이벤조싸이오페닐기, 다이벤조퓨란일기, 또는 카바졸릴기 및 다이벤조[f,h]퀴녹살린일기가 3개 이상의 아릴렌기를 통하여 결합되어 있는 구조를 갖는 화합물을 포함하는 발광 소자)를 포함함으로써, 낮은 소비전력으로 구동될 수 있다. 또한, 상기 소자는 다이벤조싸이오페닐기, 다이벤조퓨란일기, 또는 카바졸릴기 및 다이벤조[f,h]퀴녹살린일기가 3개 이상의 아릴렌기를 통하여 결합되어 있는 구조를 갖는 화합물을 포함하기 때문에, 내열성이 높고 발광 효율이 높은 발광 소자(실시형태 3에서 설명한 발광 소자)를 포함함으로써 내열성이 높고 발광 효율이 높은 발광 장치로 할 수 있다.

[0779]

또한, 본 명세서 등에서 트랜지스터 또는 발광 소자는 예를 들어, 다양한 기판 중 임의의 것을 사용하여 형성될 수 있다. 기판의 종류는 특정한 종류에 한정되지 않는다. 기판으로서는 예를 들어, 반도체 기판(예를 들어, 단결정 기판 또는 실리콘 기판), SOI 기판, 유리 기판, 석영 기판, 플라스틱 기판, 금속 기판, 스테인리스강 기판, 스테인리스강 포일을 포함하는 기판, 텅스텐 기판, 텅스텐 포일을 포함하는 기판, 플렉시블 기판, 접합 필름, 섬유상의 재료를 포함하는 종이, 또는 기재 필름 등을 사용할 수 있다. 유리 기판의 예로서는, 바륨 봉규 산염 유리 기판, 알루미노 봉규산염 유리 기판, 및 소다 석회 유리 기판 등을 들 수 있다. 플렉시블 기판, 접합 필름, 및 기재 필름 등의 예에는, 폴리에틸렌테프탈레이트(PET), 폴리에틸렌나프탈레이트(PEN), 폴리에터 설폰(PES), 및 폴리테트라플루오로에틸렌(PTFE)으로 대표되는 플라스틱의 기판이 있다. 다른 예는 아크릴 등의 합성 수지이다. 또는, 폴리프로필렌, 폴리에스터, 폴리플루오린화바이닐, 또는 폴리염화바이닐 등을 사용할 수 있다. 또는, 폴리아마이드, 폴리이미드, 아라미드, 에폭시, 무기 증착 필름, 또는 종이 등을 사용할 수 있다. 구체적으로는, 반도체 기판, 단결정 기판, 또는 SOI 기판 등을 사용함으로써, 특성, 크기, 또는 형상 등의 편차가 적고 전류 능력이 높은 소형의 트랜지스터를 제작할 수 있다. 이러한 트랜지스터를 사용한 회로는, 회로의 저소비전력화 또는 회로의 고집적화가 실현된다.

[0780]

또는, 기판으로서 플렉시블 기판을 사용하고, 플렉시블 기판에 트랜지스터 또는 발광 소자를 직접 제공하여도 좋다. 또는, 기판과 트랜지스터 사이에 분리층을 제공하여도 좋다. 분리층은, 분리층 위에 형성된 반도체 장치의 일부 또는 전체를 기판으로부터 분리하고, 다른 기판으로 전치(轉置)할 때에 사용될 수 있다. 이러한 경우, 트랜지스터는 내열성이 낮은 기판 또는 플렉시블 기판으로 전치될 수 있다. 분리층에는 예를 들어, 텅스텐 막과 산화 실리콘막의 무기막을 포함하는 적층, 또는 기판 위에 형성된 폴리이미드 등의 유기 수지막을 사용할 수 있다.

[0781]

바꿔 말하면, 트랜지스터 또는 발광 소자를 하나의 기판을 사용하여 형성한 다음, 다른 기판으로 전치하여도 좋다. 트랜지스터 또는 발광 소자가 전치되는 기판의 예에는, 트랜지스터가 형성될 수 있는 상술한 기판에 더하여, 종이 기판, 셀로판 기판, 아라미드 필름 기판, 폴리이미드 필름 기판, 석재 기판, 목재 기판, 천 기판(천연 섬유(예를 들어, 견(silk), 면(cotton), 또는 마(hemp)), 합성 섬유(예를 들어, 나일론, 폴리우레탄, 또는 폴리에스터), 또는 재생 섬유(예를 들어, 아세테이트, 큐프라, 레이온, 또는 재생 폴리에스터) 등을 포함함), 피혁 기판, 및 고무 기판이 포함된다. 이러한 기판을 사용하면, 특성이 우수한 트랜지스터 또는 소비전력이 낮은 트랜지스터를 형성할 수 있고, 내구성이 높거나 내열성이 높은 장치를 제공할 수 있고, 또는 경량화 또는 박막화

를 실현할 수 있다.

[0782] 상술한 발광 장치에서는 매트릭스로 배열된 다수의 미세한 발광 소자를 각각 제어할 수 있기 때문에, 상기 발광 장치는 화상을 표시하기 위한 표시 장치로서 적합하게 사용될 수 있다.

[0783] 본 실시형태는 다른 실시형태 중 임의의 것과 적절히 조합할 수 있다.

[0784] (실시형태 6)

[0785] 본 실시형태에서는, 실시형태 3에서 설명한 발광 소자를 각각 포함하는 전자 기기에 대하여 설명한다. 실시형태 3에서 설명한 발광 소자는 다이벤조싸이오페닐기, 다이벤조퓨란일기, 또는 카바졸릴기 및 다이벤조[f,h]퀴녹살린일기가 3개 이상의 아릴렌기를 통하여 결합되어 있는 구조를 갖는 본 발명의 일 형태에 따른 화합물을 포함하기 때문에, 소비전력이 저감되고, 결과적으로 본 실시형태에서 설명하는 전자 기기는 각각 소비전력이 저감된 표시부를 포함할 수 있다. 또한, 실시형태 3에서 설명한 발광 소자는 낮은 전압으로 구동되기 때문에, 전자 기기는 낮은 전압으로 구동될 수 있다. 실시형태 3에서 설명한 발광 소자도 열 물성이 양호한 발광 소자이기 때문에, 내열성이 높은 전자 기기가 실현될 수 있다.

[0786] 상술한 발광 소자를 적용하는 전자 기기의 예에는 텔레비전 장치(TV 또는 텔레비전 수신기라고도 함), 컴퓨터용 등의 모니터, 디지털 카메라 및 디지털 비디오 카메라 등의 카메라, 디지털 포토 프레임, 휴대 전화(이동 전화 또는 이동 전화기라고도 함), 휴대용 게임기, 휴대 정보 단말, 음향 재생 장치, 및 과친코 기기 등의 대형 게임기가 포함된다. 이를 전자 기기의 구체적인 예를 아래에서 제시한다.

[0787] 도 6의 (A)는 텔레비전 장치의 예를 도시한 것이다. 상기 텔레비전 장치에서는, 하우징(7101)에 표시부(7103)가 내장되어 있다. 또한, 여기서는 하우징(7101)이 스탠드(7105)로 지지되어 있다. 표시부(7103)는 화상을 표시할 수 있고, 실시형태 3에서 설명한 발광 소자와 같고 매트릭스로 배열되어 있는 발광 소자를 포함한다. 발광 소자는 각각 다이벤조싸이오페닐기, 다이벤조퓨란일기, 또는 카바졸릴기 및 다이벤조[f,h]퀴녹살린일기가 3개 이상의 아릴렌기를 통하여 결합되어 있는 구조를 갖는 화합물을 포함하기 때문에, 발광 효율이 높아지고 구동 전압이 낮아질 수 있다. 따라서, 상기 발광 소자를 사용하여 형성되는 표시부(7103)를 포함하는 텔레비전 장치는 소비전력이 저감되고 구동 전압이 저감될 수 있다.

[0788] 텔레비전 장치는 하우징(7101)의 조작 스위치 또는 별체의 리모트 컨트롤러(7110)에 의하여 조작할 수 있다. 리모트 컨트롤러(7110)의 조작 키(7109)에 의하여 채널 및 음량을 제어할 수 있고, 표시부(7103)에 표시되는 화상을 제어할 수 있다. 또한, 리모트 컨트롤러(7110)에는, 리모트 컨트롤러(7110)로부터 출력되는 데이터를 표시하는 표시부(7107)가 제공되어도 좋다.

[0789] 또한, 텔레비전 장치에는 수신기 및 모뎀 등이 제공된다. 수신기를 사용하여, 일반 텔레비전 방송을 수신할 수 있다. 또한, 모뎀을 통하여 유선 또는 무선의 통신 네트워크에 텔레비전 장치를 접속하면, 단방향(송신자로부터 수신자) 또는 쌍방향(송신자와 수신자 사이 또는 수신자들 사이)의 정보 통신을 수행할 수 있다.

[0790] 도 6의 (B)는, 본체(7201), 하우징(7202), 표시부(7203), 키보드(7204), 외부 접속 포트(7205), 및 포인팅 디바이스(7206) 등을 포함하는 컴퓨터를 도시한 것이다. 또한, 이 컴퓨터는, 실시형태 3에서 설명한 발광 소자와 같은 발광 소자를 매트릭스로 배열하여 표시부(7203)에 사용함으로써 제작된다. 발광 소자는 각각 본 발명의 일 형태에 따른 화합물을 포함하기 때문에, 발광 효율이 높아지고 구동 전압이 낮아질 수 있다. 따라서, 상기 발광 소자를 사용하여 형성되는 표시부(7203)를 포함하는 컴퓨터는 소비전력이 저감되고 구동 전압이 낮아질 수 있다.

[0791] 도 6의 (C)는, 휴대용 게임기를 펼치거나 접을 수 있도록 연결부(7303)에 의하여 접속된 하우징(7301) 및 하우징(7302)의 2개의 하우징을 갖는 휴대용 게임기를 도시한 것이다. 하우징(7301)에는 실시형태 3에서 설명한 발광 소자와 같고 매트릭스로 배열되어 있는 발광 소자를 포함하는 표시부(7304)가 내장되어 있고, 하우징(7302)에는 표시부(7305)가 내장되어 있다. 또한, 도 6의 (C)에 도시된 휴대용 게임기는 스피커부(7306), 기록 매체 삽입부(7307), LED 램프(7308), 및 입력 유닛(조작 키(7309), 접속 단자(7310), 센서(7311)(힘, 변위, 위치, 속도, 가속도, 각속도, 회전수, 거리, 광, 액체, 자기, 온도, 화학 물질, 음성, 시간, 경도, 전기장, 전류, 전압, 전력, 방사선, 유량, 습도, 경사도, 진동, 냄새, 또는 적외선을 측정하는 기능을 갖는 센서), 및 마이크로폰(7312)) 등을 포함한다. 휴대용 게임기의 구조는, 실시형태 3에서 설명한 발광 소자와 같고 매트릭스로 배열되어 있는 발광 소자들을 포함하는 표시부가 표시부(7304) 및 표시부(7305) 중 적어도 어느 한쪽 또는 양쪽으로서 사용되기만 하면 상술한 것에 한정되지 않는 것은 말할 나위 없고, 상기 구조는 기타 부속물을 적절히 포함할 수 있다. 도 6의 (C)에 도시된 휴대용 게임기는, 기록 매체에 저장되어 있는 프로그램 또는 데이터를 판독

하여 이를 표시부에 표시하는 기능, 및 무선 통신에 의하여 또 다른 휴대용 게임기와 정보를 공유하는 기능을 갖는다. 도 6의 (C)에 도시된 휴대용 게임기는 상술한 것에 한정되지 않고 다양한 기능을 가질 수 있다. 표시부(7304)에 사용되는 발광 소자는, 다이벤조싸이오페닐기, 다이벤조퓨란일기, 또는 카바졸릴기 및 다이벤조[f, h]퀴녹살린일기가 3개 이상의 아릴렌기를 통하여 결합되어 있는 구조를 갖는 본 발명의 일 형태에 따른 화합물을 포함함으로써 발광 효율이 높아지기 때문에, 상술한 표시부(7304)를 포함하는 휴대용 게임기를 소비전력이 저감된 휴대용 게임기로 할 수 있다. 표시부(7304)에 사용되어 있는 발광 소자는 각각 본 발명의 일 형태에 따른 화합물을 포함함으로써 구동 전압이 낮아지기 때문에, 상기 휴대용 게임기를 구동 전압이 낮은 휴대용 게임기로 할 수도 있다.

[0792] 도 6의 (D)는 휴대 전화의 예를 도시한 것이다. 휴대 전화에는 하우징(7401)에 내장된 표시부(7402), 조작 버튼(7403), 외부 접속 포트(7404), 스피커(7405), 및 마이크로폰(7406) 등이 제공되어 있다. 또한, 휴대 전화는 실시형태 3에서 설명한 발광 소자와 같고 매트릭스로 배열되어 있는 발광 소자를 포함하는 표시부(7402)를 갖는다. 발광 소자는 각각 본 발명의 일 형태에 따른 화합물을 포함하기 때문에, 발광 효율이 높아지고 구동 전압이 낮아질 수 있다. 따라서, 상기 발광 소자를 사용하여 형성되는 표시부(7402)를 포함하는 휴대 전화는 소비전력이 저감되고 구동 전압이 낮아질 수 있다.

[0793] 도 6의 (D)에 도시된 휴대 전화의 표시부(7402)를 손가락 등으로 터치하면, 휴대 전화에 데이터를 입력할 수 있다. 이 경우, 전화를 걸거나 이메일을 작성하는 등의 조작은, 표시부(7402)를 손가락 등으로 터치함으로써 수행할 수 있다.

[0794] 표시부(7402)에는 주로 3가지 화면 모드가 있다. 제 1 모드는 주로 화상을 표시하기 위한 표시 모드이다. 제 2 모드는 주로 문자 등의 정보를 입력하기 위한 입력 모드이다. 제 3 모드는 표시 모드와 입력 모드의 2가지 모드가 조합된 표시 및 입력 모드이다.

[0795] 예를 들어, 전화를 걸거나 또는 이메일을 작성하는 경우에는, 표시부(7402)에 대하여, 주로 문자를 입력하기 위한 문자 입력 모드를 선택하여, 화면에 표시된 문자를 입력할 수 있다. 이 경우, 표시부(7402)의 거의 전체 화면에 키보드 또는 번호 버튼을 표시하는 것이 바람직하다.

[0796] 자이로스코프 또는 가속도 센서 등, 기울기를 검출하기 위한 센서를 포함하는 검출 장치가 휴대 전화 내부에 제공되어 있으면, 휴대 전화의 방향(휴대 전화가 가로 모드가 되도록 수평으로 놓여 있는지 또는 세로 모드가 되도록 수직으로 놓여 있는지)을 판정함으로써 표시부(7402)의 화면의 표시를 자동적으로 변경할 수 있다.

[0797] 화면 모드는 표시부(7402)를 터치하거나 하우징(7401)의 조작 버튼(7403)으로 조작함으로써 전환된다. 표시부(7402)에 표시되는 화상의 종류에 따라 화면 모드를 전환할 수 있다. 예를 들어, 표시부에 표시되는 화상의 신호가 동영상 데이터의 신호이면 화면 모드는 표시 모드로 전환된다. 상기 신호가 텍스트 데이터의 신호이면 화면 모드는 입력 모드로 전환된다.

[0798] 또한, 입력 모드에 있어서, 표시부(7402)에서 광 센서에 의하여 검출되는 신호를 검출하면서, 표시부(7402)의 터치에 의한 입력이 일정 기간 수행되지 않으면 입력 모드로부터 표시 모드로 전환되도록 화면 모드를 제어하여도 좋다.

[0799] 표시부(7402)는 이미지 센서로서 기능하여도 좋다. 예를 들어, 손바닥 또는 손가락으로 표시부(7402)를 터치하여, 장문 또는 지문 등의 화상을 찍음으로써, 개인 인증을 할 수 있다. 또한, 표시부에 균적외광을 방출하는 백라이트 또는 센싱용 광원을 제공함으로써, 손가락 정맥 또는 손바닥 정맥 등의 화상을 찍을 수 있다.

[0800] 또한, 본 실시형태에서 설명한 구조는 실시형태 1 내지 실시형태 4에서 설명한 구조 중 임의의 것과 적절히 조합할 수 있다.

[0801] 상술한 바와 같이, 본 발명의 일 형태에 따른 화합물을 포함하는, 실시형태 3에서 설명한 발광 소자를 갖는 발광 장치의 적용 범위는 넓으므로 이 발광 장치를 다양한 분야의 전자 기기에 적용할 수 있다. 이 화합물을 사용함으로써, 소비전력이 저감되고 구동 전압이 낮아진 전자 기기를 얻을 수 있다.

[0802] 본 발명의 일 형태에 따른 화합물을 포함하는 발광 소자를 광원 장치에 사용할 수도 있다. 일 형태에 대하여도 7을 참조하여 설명한다. 또한, 광원 장치는, 본 발명의 일 형태에 따른 화합물을 포함하는 발광 소자를 광조사 유닛으로서 포함하고, 적어도 상기 발광 소자에 전류를 공급하는 입출력 단자부를 포함한다. 또한, 상기 발광 소자는 밀봉에 의하여 외부 분위기로부터 차단되어 있는 것이 바람직하다.

[0803] 도 7은 본 발명의 일 형태에 따른 화합물을 포함하는 발광 소자를 백라이트에 사용한 액정 표시 장치의 예를 도

시한 것이다. 도 7에 도시된 액정 표시 장치는 하우징(901), 액정층(902), 백라이트(903), 및 하우징(904)을 포함한다. 액정층(902)은 드라이버 IC(905)에 접속되어 있다. 상기 화합물을 포함하는 발광 소자가 백라이트(903)에 사용되어 있으며, 단자(906)를 통하여 전류가 공급되어 있다.

[0804] 상술한 화합물을 포함하는 발광 소자를 액정 표시 장치의 백라이트에 사용함으로써, 이 백라이트의 소비전력을 저감시킬 수 있다. 또한, 상술한 화합물을 포함하는 발광 소자를 사용함으로써, 면 발광의 조명 장치, 그리고 대면적 면 발광의 조명 장치의 제작이 가능해지므로, 백라이트를 대면적 백라이트로 할 수 있고, 액정 표시 장치도 대면적 장치로 할 수 있다. 또한, 상술한 화합물을 포함하는 발광 소자를 사용한 백라이트를 사용하면, 종래보다 발광 장치를 얇게 할 수 있어, 표시 장치도 얇게 할 수 있다.

[0805] 도 8은, 본 발명의 일 형태에 따른 화합물을 포함하는 발광 소자를 조명 장치인 테이블 램프에 사용한 예를 도시한 것이다. 도 8에 도시된 테이블 램프는 하우징(2001) 및 광원(2002)을 포함하고, 상술한 혼테로 고리 화합물을 포함하는 발광 소자가 광원(2002)에 사용되어 있다.

[0806] 도 9는, 본 발명의 일 형태에 따른 화합물을 포함하는 발광 소자를 옥내 조명 장치(3001)에 사용한 예를 도시한 것이다. 상술한 화합물을 포함하는 발광 소자는 소비전력이 저감되어 있으므로, 소비전력이 저감된 조명 장치를 얻을 수 있다. 또한, 상술한 화합물을 포함하는 발광 소자는 대면적을 가질 수 있으므로, 발광 소자를 대면적 조명 장치에 사용할 수 있다. 또한, 상술한 화합물을 포함하는 발광 소자는 얇으므로, 두께가 얇아진 조명 장치를 제작할 수 있다. 도 9도 본 발명의 일 형태에 따른 화합물을 포함하는 발광 소자를 표시 장치(3002)에 사용한 예를 도시한 것이다.

[0807] 본 발명의 일 형태에 따른 화합물을 포함하는 발광 소자는 자동차의 앞유리 또는 자동차의 대시보드에 사용할 수도 있다. 도 10은 상술한 혼테로 고리 화합물을 포함하는 발광 소자를 자동차의 앞유리 및 자동차의 대시보드에 사용한 일 형태를 도시한 것이다. 표시 영역(5000 내지 5005) 각각은 상술한 혼테로 고리 화합물을 포함하는 발광 소자를 포함한다.

[0808] 표시 영역(5000 및 5001)은 자동차의 앞유리에 제공되며, 상술한 혼테로 고리 화합물을 포함하는 발광 소자가 내장된 표시 장치이다. 상술한 혼테로 고리 화합물을 포함하는 발광 소자는, 투광성을 갖는 전극으로 형성된 제 1 전극 및 제 2 전극을 포함함으로써, 반대쪽을 볼 수 있는 소위 시스루 표시 장치로 할 수 있다. 이러한 시스루 표시 장치는 자동차의 앞유리에도 시계(視界)를 방해하지 않고 제공할 수 있다. 또한, 발광 소자를 구동하기 위한 트랜지스터가 제공되는 경우, 유기 반도체 재료를 사용한 유기 트랜지스터 또는 산화물 반도체를 사용한 트랜지스터 등 투광성을 갖는 트랜지스터를 사용하는 것이 바람직하다.

[0809] 표시 영역(5002)은 필러(pillar) 부분에 제공되며, 상술한 혼테로 고리 화합물을 포함하는 발광 소자가 내장된 표시 장치이다. 표시 영역(5002)은 차체에 제공된 활상 유닛으로 찍은 화상을 표시함으로써, 필러 부분으로 가려진 시계를 보완할 수 있다. 마찬가지로, 대시보드에 제공된 표시 영역(5003)은 차체의 외부에 제공된 활상 유닛으로 찍은 화상을 표시함으로써, 차체로 가려진 시계를 보완할 수 있어, 시각 지대가 없어지고 안전성이 높아진다. 운전자가 볼 수 없는 영역을 보완하도록 화상을 표시함으로써, 운전자가 쉽게, 그리고 편하게 안전을 확인할 수 있다.

[0810] 표시 영역(5004) 및 표시 영역(5005)은 내비게이션 데이터, 속도계, 태코미터, 주행 거리, 연료 미터, 기어 시프트 인디케이터, 및 에어컨디셔너의 설정 등, 다양한 종류의 정보를 제공할 수 있다. 표시의 내용 또는 레이아웃은 사용자에 의하여 자유롭게 적절히 변경될 수 있다. 또한, 이러한 정보는 표시 영역(5000 내지 5003)에 의해서도 표시될 수 있다. 표시 영역(5000 내지 5005)은 조명 장치로서 사용될 수도 있다.

[0811] 다이벤조싸이오페닐기, 다이벤조퓨란일기, 또는 카바졸릴기 및 다이벤조[*f,h*]퀴녹살린일기가 3개 이상의 아릴렌 기기를 통하여 결합되어 있는 구조를 갖는 화합물을 포함하는 발광 소자를 사용하면, 열 물성이 양호한 발광 장치를 얻을 수 있다. 이러한 이유로, 높은 온도에 노출된 후에도 이를 장치를 사용할 수 있기 때문에, 상술한 화합물을 포함한 발광 소자를 각각 포함하는 발광 장치 및 조명 장치를 차재용 발광 장치 또는 조명 장치로서 적합하게 사용할 수 있다.

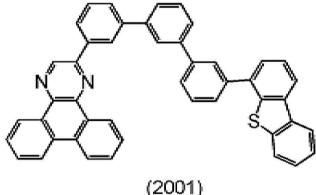
[0812] 본 발명의 일 형태에 따른 화합물을 유기 박막 태양 전지 등 전자 기기에 사용할 수 있다. 구체적으로는, 화합물은 캐리어 수송성을 갖기 때문에, 화합물을 캐리어 수송층 또는 캐리어 주입층에 사용할 수 있다. 화합물은 광 여기될 수 있어 발전층에 사용할 수 있다.

[0813] (실시예 1)

[0814] <<합성 예 1>>

[0815] 본 합성 예에서는, 실시형태 1 및 2에서 설명한 해태로 고리 화합물인, 2-[3''-(다이벤조싸이오펜-4-일)-3,1':3',1'''-터페닐-1-일]다이벤조[f,h]퀴녹살린(약칭: 2mDBtTPDBq-II)(구조식(2001))의 합성 방법에 대하여 설명한다. 2mDBtTPDBq-II의 구조식을 아래에 나타낸다.

[0816] [화학식 230]



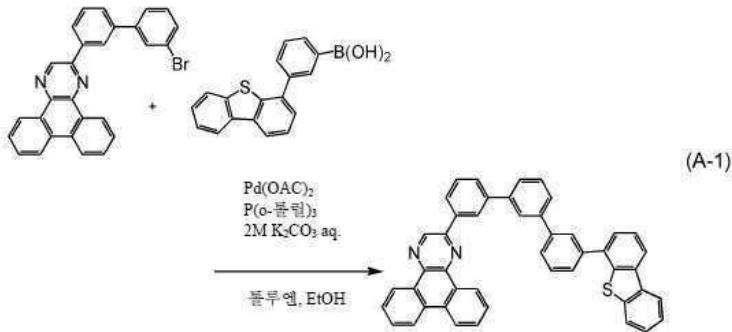
(2001)

[0817]

[0818] <2-[3''-(다이벤조싸이오펜-4-일)-3,1':3',1'''-터페닐-1-일]다이벤조[f,h]퀴녹살린(약칭: 2mDBtTPDBq-II)의 합성>

[0819] 100mL의 3구 플라스크에, 1.5g(3.3mmol)의 2-(3'-브로모-3,1'-바이페닐-1-일)다이벤조[f,h]퀴녹살린, 1.1g(3.5mmol)의 3-(다이벤조싸이오펜-4-일)페닐보론산, 20mg(65 μmol)의 트리스(2-메틸페닐)포스핀, 20mL의 톨루엔, 5mL의 에탄올, 및 5mL의 탄산 포타슘 수용액(2mol/L)을 넣었다. 플라스크 내의 혼합물을 감압하에서 탈기하고, 시스템 내에 질소 가스를 연속적으로 흘리고, 이 혼합물을 80°C까지 가열하였다. 가열 후, 7.0mg(30 μmol)의 아세트산 팔라듐(II)을 첨가하고 같은 온도에서 12시간 동안 교반하였다. 교반 후, 석출한 고체를 흡인 여과에 의하여 회수하고, 얻어진 고체를 물 및 에탄올로 세정함으로써, 목적 물질의 분말을 1.6g, 수율 78%로 얻었다. 이 단계의 합성 스킴을 식 (A-1)에 나타낸다.

[0820] [화학식 231]



[0821]

[0822] 얻어진 고체에 핵 자기 공명 분광법(¹H NMR)을 수행하였으며, 이 결과를 아래에 나타낸다.

[0823] ¹H NMR(클로로포름-d, 500MHz): δ=7.38-7.45(m, 2H), 7.59(d, J=4.5Hz, 2H), 7.64-7.85(m, 13H), 8.07(s, 1H), 8.13(s, 1H), 8.17-8.20(m, 2H), 8.34(d, J=8.0Hz, 1H), 8.64-8.67(m, 3H), 9.24(d, J=8.0Hz, 1H), 9.41(d, J=8.0Hz, 1H), 9.47(s, 1H)

[0824] 도 11의 (A) 및 (B)는 ¹H NMR 차트이다. 또한, 도 11의 (B)는 도 11의 (A)의 7.4ppm 내지 9.6ppm의 범위의 일부를 확대하여 나타낸 차트이다. 이 결과에 의하여 목적 물질인 2mDBtTPDBq-II가 얻어졌다는 것이 밝혀졌다.

[0825] 트레인 서블리메이션법(train sublimation method)에 의하여 1.6g의 고체를 정제하였다. 승화 정제에서는, 2.9Pa의 압력하에 있어서, 15mL/min의 아르곤 유량으로, 340°C에서 15시간 동안 고체를 가열하여, 고체를 1.1g, 회수율 64%로 얻었다.

[0826] <<2-[3''-(다이벤조싸이오펜-4-일)-3,1':3',1'''-터페닐-1-일]다이벤조[f,h]퀴녹살린(약칭: 2mDBtTPDBq-II)의 물성>>

[0827] 도 12는 2mDBtTPDBq-II의 톨루엔 용액의 흡수 스펙트럼을 나타낸 것이고, 도 13은 그 발광 스펙트럼을 나타낸

것이다. 도 14는 2mDBtTPDBq-II의 박막의 흡수 스펙트럼을 나타낸 것이고, 도 15는 그 발광 스펙트럼을 나타낸 것이다. 흡수 스펙트럼은 자외-가시 분광 광도계(V-550, JASCO Corporation 제조)에 의하여 측정하였다. 발광 스펙트럼은 형광 분광 광도계(FS920, Hamamatsu Photonics K.K. 제조)에 의하여 측정하였다. 톨루엔 용액의 스펙트럼은 2mDBtTPDBq-II의 톨루엔 용액을 석영 셀에 넣은 상태에서 측정하였다. 박막의 스펙트럼은 증착에 의하여 2mDBtTPDBq-II를 석영 기판에 퇴적함으로써 준비한 시료를 사용하여 측정하였다. 또한, 도면에 나타낸 톨루엔 용액의 흡수 스펙트럼은, 측정한 스펙트럼에서 석영 셀과 톨루엔의 흡수 스펙트럼을 뺀으로써 얻었으며, 도면에 나타낸 박막의 흡수 스펙트럼은, 측정한 스펙트럼에서 석영 기판의 흡수 스펙트럼을 뺀으로써 얻었다.

[0828] 도 12 및 도 13에서 관찰되는 바와 같이, 2mDBtTPDBq-II의 톨루엔 용액의 흡수 피크는 약 374nm, 362nm, 333nm, 및 321nm에 있고, 이들의 발광 광장의 피크는 384nm 및 403nm(여기 광장: 378nm)에 있다. 도 14 및 도 15에서 관찰되는 바와 같이, 2mDBtTPDBq-II의 박막의 흡수 피크는 약 252nm, 294nm, 323nm, 338nm, 368nm, 및 384nm에 있고, 이들의 발광 광장의 피크는 약 421nm(여기 광장: 321nm)에 있다. 2mDBtTPDBq-II가 청자색의 광을 방출하는 것을 알았다. 본 발명의 일 형태에 따른 화합물은 발광 물질의 호스트 재료, 또는 가시광 영역에서 형광을 방출하는 물질의 호스트 재료로서 사용할 수 있다.

[0829] 2mDBtTPDBq-II의 인광을 측정하였다. 이 측정은 측정 온도 10K에서 PL 현미경 LabRAM HR-PL(HORIBA, Ltd. 제조), 여기 광으로서 He-Cd 레이저(325nm), 및 CCD 검출기를 사용하여 수행하였다. 측정을 위하여 시료로서 석영 기판 위에 두께 약 50nm로 박막을 형성하고, 질소 분위기에서 그 퇴적 표면에 다른 석영 기판을 접착하였다. 도 16은 얻어진 인광 스펙트럼을 나타낸 것이다. 이 결과로부터 2mDBtTPDBq-II의 인광 스펙트럼의 가장 짧은 광장 측의 피크는 514nm에 있는 것을 알았으며, 이는 2mDBtTPDBq-II가 높은 T₁ 준위를 갖는 것을 의미한다. 2mDBtTPDBq-II의 박막의 응집(aggregation)은 대기하에서도 쉽게 일어나지 않고, 박막은 형태의 변화가 적고 막의 품질이 높다는 것을 알았다.

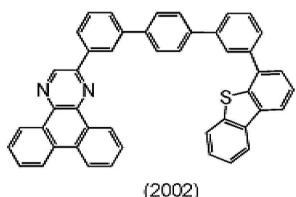
[0830] 산화 환원 반응 특성을 사이클릭 볼타메트리(CV) 측정에 의하여 조사하였다. 측정에는 전기 화학 애널라이저(ALS 모델 600A 또는 600C, BAS Inc. 제조)를 사용하였다. 측정을 위한 용액은, 탈수 다이메틸폼아마이드(DMF)의 용매에 지지 전해질인 과염소산 테트라-*n*-부틸암모늄(*n*-Bu₄NClO₄)을 농도가 100mmol/L가 되도록 용해시키고, 측정 대상을 농도가 2mmol/L가 되도록 더 용해시킴으로써 준비하였다. 또한, 작용 전극으로서 백금 전극(PTE 백금 전극, BAS Inc. 제조)을 사용하고, 보조 전극으로서 백금 전극(VC-3용 Pt 대향 전극(5cm), BAS Inc. 제조)을 사용하고, 참조 전극으로서 Ag/Ag⁺ 전극(RE-7 비수용매용 참조 전극, BAS Inc. 제조)을 사용하였다. 스캔 속도는 모든 측정에서 0.1V/sec로 하였다. 측정 결과에 따르면, 산화 전위는 -6.19eV이고, 환원 전위는 -2.94eV이었다. 산화 전위를 HOMO 준위로 간주하고, 환원 전위를 LUMO 준위로 간주하면, HOMO 준위와 LUMO 준위 사이의 갭은 3.25eV로 추산되며, 2mDBtTPDBq-II가 넓은 벤드 갭을 갖는 것이 시사되었다.

[0831] (실시예 2)

[0832] <<합성 예 2>>

[0833] 본 합성예에서는, 실시형태 1 및 2에서 설명한 혜택으로 고리 화합물인, 2-[3'-(다이벤조싸이오펜-4-일)-3,1':4',1'''-터페닐-1-일]다이벤조[*f,h*]퀴녹살린(약칭: 2DBtTPDBq)(구조식(2002))의 합성 방법에 대하여 설명한다. 2DBtTPDBq의 구조식을 아래에 나타낸다.

[0834] [화학식 232]



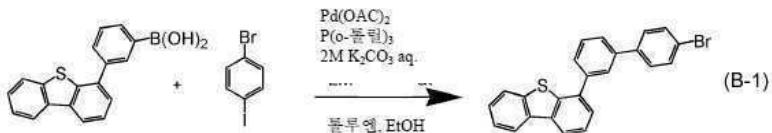
[0835]

<4-(4'-브로모-3,1'-바이페닐-1-일)다이벤조싸이오펜의 합성>

[0836] 200mL의 3구 플라스크에, 3.0g(9.8mmol)의 3-(다이벤조싸이오펜-4-일)페닐보론산, 2.8g(2.8mmol)의 4-브로모아이오도벤젠, 0.15g(0.49mmol)의 트리스(2-메틸페닐)포스핀, 50mL의 톨루엔, 5mL의 에탄올, 및 15mL의 탄산 포타슘 수용액(2mol/L)을 넣었다. 이 혼합물을 감압하에서 탈기하고, 시스템 내에 질소 가스를 연속적으로 흘렸다. 이 혼합물을 80°C까지 가열하였다. 그리고, 40mg(0.18mmol)의 아세트산 팔라듐(II)을 첨가하고 같은 온도에서

10시간 동안 교반하였다. 교반 후, 혼합물을 수성층에 대하여 툴루엔으로 추출을 3번 수행하고, 추출 용액과 유기층을 조합하고, 이 혼합물을 포화 식염수로 세정하고 무수 황산 마그네슘으로 건조시켰다. 얻어진 혼합물을 자연 여과한 다음, 얻어진 여과액을 농축하여 갈색의 유상 물질을 얻었다. 얻어진 유상 물질을 실리카 젤 칼럼 크로마토그래피(전개 용매: 헥세인)에 의하여 정제하고, 클로로폼/헥세인을 사용하여 재결정함으로써, 목적 물질의 백색 분말을 2.5g, 수율 60%로 얻었다. 이 단계의 합성 스킴을 식 (B-1)에 나타낸다.

[0838] [화학식 233]

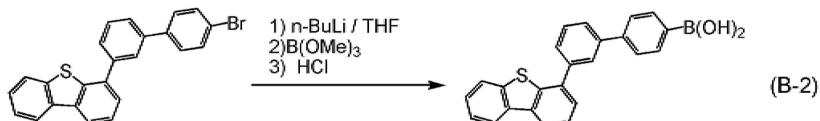


[0839]

<3'-(다이벤조싸이오펜-4-일)-4,1'-바이페닐보론산의 합성>

300mL의 3구 플라스크에, 식 (B-1)으로 나타내어지는 단계에서 합성된 4-(4'-브로모-3,1'-바이페닐-1-일)다이벤조싸이오펜 2.8g(6.7mmol)을 넣었다. 시스템 내에 질소 가스를 연속적으로 흘린 후, 70mL의 탈수 테트라하이드로퓨란을 첨가하였다. 이 용액을 -78°C 까지 냉각시키고, 5mL(8.0mmol)의 *n*-뷰틸리튬 헥세인 용액(1.6mol/L)을 시린지를 사용하여 적하한 다음, 같은 온도에서 1.5시간 동안 교반하였다. 교반 후, 같은 온도에서 1mL(8.9mmol)의 트라이메틸보레이트를 첨가하고, 얻어진 용액을 실온에서 19시간 동안 교반하였다. 교반 후, 30mL의 염산(1mol/L)을 첨가하고, 얻어진 혼합물의 수성층에 대하여 아세트산 에틸로 추출을 수행하였다. 얻어진 추출 용액과 유기층을 조합하고, 이 혼합물을 탄산 수소 소듐 수용액 및 포화 식염수로 세정하고 무수 황산 마그네슘으로 건조시켰다. 얻어진 혼합물을 자연 여과하고, 여과액을 농축하여 연한 황색의 고체를 얻었다. 고체를 클로로폼/헥세인으로 세정함으로써, 목적 물질의 분말을 1.9g, 수율 75%로 얻었다. 이 단계의 합성 스킴을 식 (B-2)에 나타낸다.

[0840] [화학식 234]



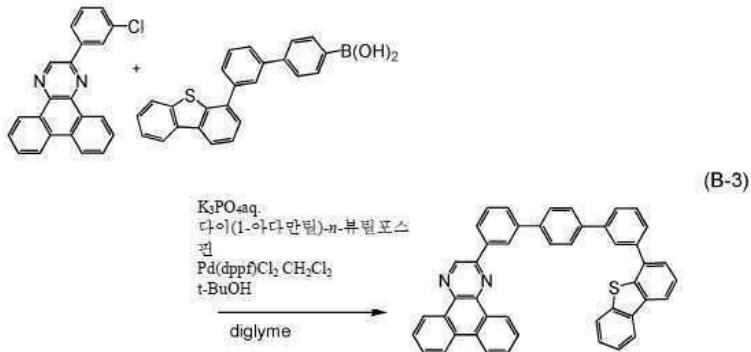
[0841]

<2-[3'-(다이벤조싸이오펜-4-일)-3,1':4',1''-터페닐-1-일]다이벤조[f,h]퀴녹살린(약칭: 2DBtTPDBq)의 합성 방법>

100mL의 3구 플라스크에, 1.7g(5.0mmol)의 2-(3-클로로페닐)다이벤조[f,h]퀴녹살린, 식 (B-2)으로 나타내어지는 단계에서 합성된 1.9g(5.0mmol)의 3'-(다이벤조싸이오펜-4-일)-4,1'-바이페닐보론산, 3.2g(15mmol)의 인산 삼포타슘, 0.10g(0.28mmol)의 다이(1-아다만틸)-*n*-뷰틸포스핀, 2mL의 *t*-뷰틸 알코올, 및 25mL의 다이에틸렌글라이콜다이메틸에터를 넣었다. 이 혼합물을 감압하에서 탈기한 다음, 시스템 내에 질소 가스를 연속적으로 흘렸다. 이 혼합물을 140°C 까지 가열한 후, 30mg($40\ \mu\text{mol}$)의 [1,1'-비스(다이페닐포스피노)페로센]팔라듐(II) 다이클로라이드를 첨가하고 같은 온도에서 3.5시간 동안 교반하였다. 교반 후, 석출한 고체를 흡인 여과에 의하여 회수하고, 얻어진 고체를 에탄올 및 물로 세정하였다. 얻어진 고체에 대하여 클로로폼을 사용하여 열 여과를 수행하고 여과액을 농축함으로써, 목적 물질의 고체를 2.0g, 수율 63%로 얻었다. 이 단계의 합성 스ქ을 식 (B-3)에 나타낸다.

[0846]

[화학식 235]



[0847]

[0848]

얻어진 고체에 핵 자기 공명 분광법(^1H NMR)을 수행하였으며, 이 결과를 아래에 나타낸다.

[0849]

^1H NMR(테트라클로로에테인- d_2 , 500MHz): $\delta = 7.53\text{--}7.55(\text{m}, 2\text{H})$, $7.65\text{--}7.66(\text{m}, 2\text{H})$, $7.69(\text{t}, J=8.0\text{Hz}, 1\text{H})$, $7.76(\text{t}, J=8.0\text{Hz}, 1\text{H})$, $7.80\text{--}7.93(\text{m}, 12\text{H})$, $8.14(\text{s}, 1\text{H})$, $8.23\text{--}8.27(\text{m}, 2\text{H})$, $8.38(\text{d}, J=8.0\text{Hz}, 1\text{H})$, $8.70\text{--}8.72(\text{m}, 3\text{H})$, $9.33(\text{d}, J=8.0\text{Hz}, 1\text{H})$, $9.49(\text{d}, J=8.0\text{Hz}, 1\text{H})$, $9.53(\text{s}, 1\text{H})$

[0850]

도 17의 (A) 및 (B)는 ^1H NMR 차트이다. 또한, 도 17의 (B)는 도 17의 (A)의 7.4ppm 내지 9.6ppm의 범위의 일부를 확대하여 나타낸 차트이다. 이 결과에 의하여 목적 물질인 2DBtTPDBq가 얻어졌다는 것이 밝혀졌다.

[0851]

트레인 서블리메이션법에 의하여 2.0g의 고체를 정제하였다. 승화 정제에서는, 2.9Pa의 압력하에 있어서, 15mL/min의 아르곤 유량으로, 340°C에서 14시간 동안 고체를 가열하였다. 정제 후, 목적 물질의 분말을 1.2g, 회수율 60%로 얻었다.

[0852]

<<2-[3'-(다이벤조싸이오펜-4-일)-3,1':4',1''-터페닐-1-일]다이벤조[f,h]퀴녹살린(약칭: 2DBtTPDBq)의 물성>>

[0853]

도 18은 2mDBtTPDBq-II와 비슷한 방법에 의하여 측정한 2DBtTPDBq의 틀루엔 용액의 흡수 스펙트럼을 나타낸 것이고, 도 19는 그 발광 스펙트럼을 나타낸 것이다. 도 20은 2mDBtTPDBq-II와 비슷한 방법에 의하여 측정한 2DBtTPDBq의 박막의 흡수 스펙트럼을 나타낸 것이고, 도 21은 그 발광 스펙트럼을 나타낸 것이다.

[0854]

도 18 및 도 19에서 관찰되는 바와 같이, 2DBtTPDBq의 틀루엔 용액의 흡수 피크는 약 361nm, 332nm, 및 282nm에 있고, 이들의 발광 파장의 피크는 385nm 및 405nm(여기 파장: 357nm)에 있다. 도 20 및 도 21에서 관찰되는 바와 같이, 2DBtTPDBq의 박막의 흡수 피크는 약 210nm, 249nm, 269nm, 293nm, 319nm, 339nm, 368nm, 및 384nm에 있고, 이들의 발광 파장의 피크는 약 423nm(여기 파장: 385nm)에 있다. 2DBtTPDBq가 청자색의 광을 방출하는 것을 알았다. 본 발명의 일 형태에 따른 화합물은 발광 물질의 호스트 재료, 또는 가시광 영역에서 형광을 방출하는 물질의 호스트 재료로서 사용할 수 있다.

[0855]

2DBtTPDBq의 인광을 2mDBtTPDBq-II와 비슷한 방법에 의하여 측정하였다. 도 22는 얻어진 인광 스펙트럼을 나타낸 것이다. 이 결과로부터 2DBtTPDBq의 인광 스펙트럼의 가장 짧은 파장 측의 피크는 517nm에 있는 것을 알았으며, 이는 2DBtTPDBq가 높은 T_1 준위를 갖는 것을 의미한다. 2DBtTPDBq의 박막의 응집은 대기하에서도 쉽게 일어나지 않고, 박막은 형태의 변화가 적고 막의 품질이 높다는 것을 알았다.

[0856]

산화 환원 반응 특성을 사이클릭 볼타메트리(CV) 측정에 의하여 조사하였다. 측정은 2mDBtTPDBq-II와 비슷한 방법에 의하여 수행하였다. 측정 결과에 따르면, 산화 전위는 관찰되지 않았고, 환원 전위는 -2.99eV이었다.

[0857]

(실시예 3)

[0858]

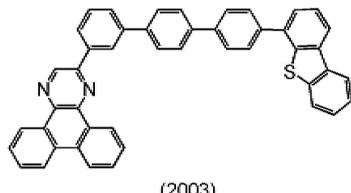
<<합성 예 3>>

[0859]

본 합성예에서는, 실시형태 1 및 2에서 설명한 해태로 고리 화합물인, 2-[4'-(다이벤조싸이오펜-4-일)-3,1':4',1''-터페닐-1-일]다이벤조[f,h]퀴녹살린(약칭: 2DBtTPDBq-03)(구조식(2003))의 합성 방법에 대하여 설명한다. 2DBtTPDBq-03의 구조식을 아래에 나타낸다.

[0860]

[화학식 236]



[0861]

[0862]

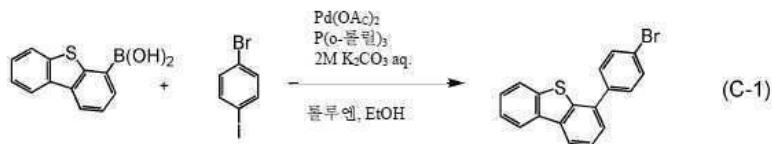
<4-(4-브로모페닐)다이벤조싸이오펜의 합성>

[0863]

300mL의 3구 플라스크에, 5.0g(22mmol)의 다이벤조싸이오펜-4-일보론산, 6.2g(22mmol)의 4-브로모아이오도벤젠, 0.31g(1.0mmol)의 트리스(2-메틸페닐)포스핀, 110mL의 톨루엔, 10mL의 에탄올, 및 30mL의 탄산 포타슘 수용액(2mol/L)을 넣었다. 이 혼합물을 감압하에서 탈기한 다음, 시스템 내에 질소 가스를 연속적으로 흘렸다. 얻어진 혼합물을 80°C까지 가열하였다. 그리고, 100mg(0.44mmol)의 아세트산 팔라듐(II)을 첨가하고 11시간 동안 교반하였다. 교반 후, 이 혼합물의 수성층에 대하여 톨루엔으로 추출을 수행하고, 추출 용액과 유기층을 조합하고, 이 혼합물을 포화 식염수로 세정하고 무수 황산 마그네슘으로 건조시켰다. 얻어진 혼합물을 자연 여과한 다음, 얻어진 용액을 농축하여 갈색의 고체를 얻었다. 얻어진 고체를 실리카 겔 칼럼 크로마토그래피(전개 용액: 헥세인)에 의하여 정제한 다음, 헥세인/클로로폼을 사용하여 재결정함으로써, 목적 물질의 백색 고체를 5.5g, 수율 74%로 얻었다. 이 단계의 합성 스킴을 식 (C-1)에 나타낸다.

[0864]

[화학식 237]



[0865]

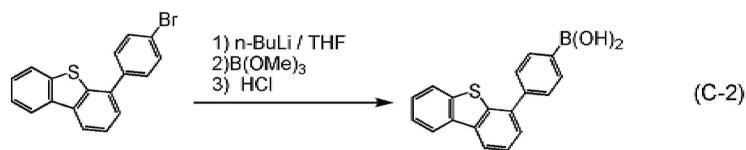
<4-(다이벤조싸이오펜-4-일)페닐보론산의 합성>

[0866]

300mL의 3구 플라스크에, 식 (C-1)으로 나타내어지는 단계에서 합성된 4-(4-브로모페닐)다이벤조싸이오펜 6.7g(20mmol)을 넣었다. 시스템 내에 질소 가스를 연속적으로 흘린 후, 200mL의 탈수 테트라하이드로퓨란을 첨가하였다. 이 용액을 -78°C까지 냉각시키고, 15mL(24.0mmol)의 *n*-뷰틸리튬 헥세인 용액(1.6mol/L)을 시린지를 사용하여 적하한 다음, 같은 온도에서 1.5시간 동안 교반하였다. 교반 후, 같은 온도에서 3mL(26.8mmol)의 트라이메틸보레이트를 첨가하고, 얻어진 용액을 실온에서 20시간 동안 교반하였다. 교반 후, 90mL의 염산(1mol/L)을 첨가하고, 얻어진 혼합물의 수성층에 대하여 아세트산 에틸로 추출을 수행하였다. 얻어진 추출 용액과 유기층을 조합하고, 이 혼합물을 탄산 수소 소듐 수용액 및 포화 식염수로 세정하고 무수 황산 마그네슘으로 건조시켰다. 얻어진 혼합물을 자연 여과하고, 여과액을 농축하여 연한 황색의 고체를 얻었다. 고체를 클로로폼/헥세인으로 세정함으로써, 목적 물질의 백색 고체를 4.0g, 수율 77%로 얻었다. 이 단계의 합성 스kim을 식 (C-2)에 나타낸다.

[0867]

[화학식 238]



[0868]

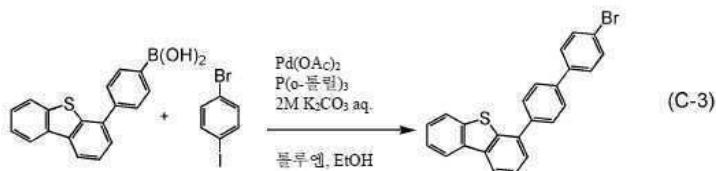
<4-(4'-브로모-4,1'-바이페닐-1-일)다이벤조싸이오펜의 합성>

[0869]

200mL의 3구 플라스크에, 식 (C-1)으로 나타내어지는 단계에서 합성된 3.7g(12mmol)의 4-(다이벤조싸이오펜-4-일)페닐보론산, 3.4g(12mmol)의 4-브로모아이오도벤젠, 0.20g(0.65mmol)의 트리스(2-메틸페닐)포스핀, 20mL의 탄산 포타슘 수용액(2mol/L), 60mL의 톨루엔, 및 6mL의 에탄올을 넣었다. 이 혼합물을 감압하에서 탈기한

다음, 시스템 내에 질소 가스를 연속적으로 흘렸다. 얻어진 혼합물을 80°C까지 가열하고, 30mg(0.13mmol)의 아세트산 팔라듐(II)을 첨가하고, 같은 온도에서 7시간 동안 교반하였다. 교반 후, 혼합물의 수성층에 대하여 클로로폼으로 추출을 수행하고, 추출 용액과 유기층을 조합하고, 이 혼합물을 포화 식염수로 세정하고 무수 황산마그네슘으로 건조시켰다. 얻어진 혼합물을 자연 여과한 다음, 얻어진 여과액을 농축하여 고체를 얻었다. 얻어진 고체를 실리카 걸 칼럼 크로마토그래피(전개 용매: 클로로포름)에 의하여 정제하고, 클로로포름/헥세인을 사용하여 재결정함으로써, 목적 물질의 고체를 3.3g, 수율 66%로 얻었다. 이 단계의 합성 스킴을 식 (C-3)에 나타낸다.

[0872] [화학식 239]



[0873]

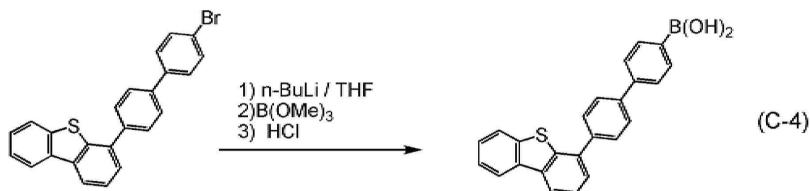
<4'-(다이벤조싸이오펜-4-일)-4,1'-바이페닐보론산의 합성>

[0874]

200mL의 3구 플라스크에, 식 (C-3)으로 나타내어지는 단계에서 합성된 4-(4'-브로모-4,1'-바이페닐-1-일)다이벤조싸이오펜 3.3g(7.9mmol)을 넣었다. 시스템 내에 질소 가스를 연속적으로 흘린 후, 80mL의 탈수 테트라하이드로퓨란을 첨가하였다. 이 용액을 -78°C까지 냉각시키고, 5.5mL(8.8mmol)의 *n*-부틸리튬 헥세인 용액(1.6mol/L)을 시린지를 사용하여 적하한 다음, 같은 온도에서 1.5시간 동안 교반하였다. 교반 후, 같은 온도에서 1.1mL(9.8mmol)의 트라이메틸보레이트를 첨가하고, 얻어진 용액을 실온에서 20시간 동안 교반하였다. 교반 후, 30mL의 염산(1mol/L)을 첨가하고, 얻어진 혼합물의 수성층에 대하여 아세트산 에틸로 추출을 수행하였다. 얻어진 추출 용액과 유기층을 조합하고, 이 혼합물을 탄산 수소 소듐 수용액 및 포화 식염수로 세정하고 무수 황산마그네슘으로 건조시켰다. 얻어진 혼합물을 자연 여과하고, 여과액을 농축하여 연한 황색의 고체를 얻었다. 고체를 클로로포름/헥세인으로 세정함으로써, 목적 물질의 백색 고체를 2.5g, 수율 83%로 얻었다. 이 단계의 합성 스ქ을 식 (C-4)에 나타낸다.

[0875]

[화학식 240]



[0876]

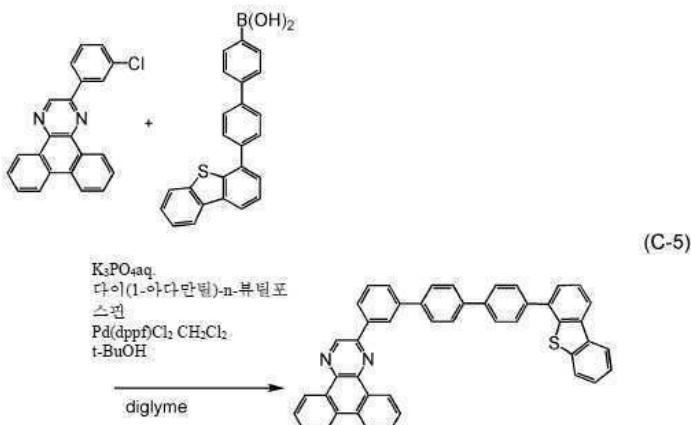
<2-[4'-(다이벤조싸이오펜-4-일)-3,1':4',1''-터페닐-1-일]다이벤조[f,h]퀴녹살린(약칭: 2DBtTPDBq-03)의 합성 방법>

[0877]

200mL의 3구 플라스크에, 2.3g(6.7mmol)의 2-(3-클로로페닐)다이벤조[f,h]퀴녹살린, 식 (C-4)으로 나타내어지는 단계에서 합성된 2.5g(6.5mmol)의 4'-(다이벤조싸이오펜-4-일)-4,1'-바이페닐보론산, 4.1g(20mmol)의 인산 삼포타슘, 0.12g(0.34mmol)의 다이(1-아다만틸)-*n*-부틸포스핀, 2mL의 *t*-부틸 알코올, 및 30mL의 다이에틸렌글라이콜다이메틸에터를 넣었다. 이 혼합물을 감압하에서 탈기한 다음, 시스템 내에 질소 가스를 연속적으로 흘렸다. 이 혼합물을 140°C까지 가열한 후, 10mg(65 μmol)의 아세트산 팔라듐(II)을 첨가하고 같은 온도에서 5시간 동안 교반하였다. 교반 후, 석출한 고체를 흡인 여과에 의하여 회수하고, 물 및 에탄올로 세정하였다. 세정 후, 얻어진 고체에 대하여 클로로포름을 사용하여 열 여과를 수행하고 여과액을 농축함으로써, 담흑색의 고체를 2.0g 얻었다. 이 단계의 합성 스ქ을 식 (C-5)에 나타낸다.

[0880]

[화학식 241]



[0881]

[0882]

얻어진 고체에 핵 자기 공명 분광법(1H NMR)을 수행하였으며, 이 결과를 아래에 나타낸다.

[0883]

1H NMR(클로로포름-d, 500MHz): $\delta = 7.49\text{--}7.51(m, 2H)$, $7.57\text{--}7.63(m, 2H)$, $7.73(t, J=8.0Hz, 1H)$, $7.78\text{--}7.91(m, 14H)$, $8.19\text{--}8.23(m, 2H)$, $8.35(d, J=8.0Hz, 1H)$, $8.67\text{--}8.69(m, 3H)$, $9.27(d, J=8.0Hz, 1H)$, $9.47(d, J=8.0Hz, 1H)$, $9.49(s, 1H)$

[0884]

도 23의 (A) 및 (B)는 1H NMR 차트이다. 또한, 도 23의 (B)는 도 23의 (A)의 7.4ppm 내지 9.6ppm의 범위의 일부를 확대하여 나타낸 차트이다. 이 결과에 의하여 목적 물질인 2DBtTPDBq-03이 얻어졌다는 것이 밝혀졌다.

[0885]

트레인 서블리메이션법에 의하여 2.0g의 고체를 정제하였다. 승화 정제에서는, 3.4Pa의 압력하에 있어서, 15mL/min의 아르곤 유량으로, 365°C에서 14.5시간 동안 고체를 가열하였다. 정제 후, 목적 물질의 분말을 1.4g, 회수율 71%로 얻었다.

[0886]

<<2-[4''-(다이벤조싸이오펜-4-일)-3,1':4',1''-터페닐-1-일]다이벤조[f,h]퀴녹살린(약칭: 2DBtTPDBq-03)의 물성>>

[0887]

도 24는 2mDBtTPDBq-II와 비슷한 방법에 의하여 측정한 2DBtTPDBq-03의 톨루엔 용액의 흡수 스펙트럼을 나타낸 것이고, 도 25는 그 발광 스펙트럼을 나타낸 것이다. 도 26은 2mDBtTPDBq-II와 비슷한 방법에 의하여 측정한 2DBtTPDBq-03의 박막의 흡수 스펙트럼을 나타낸 것이고, 도 27은 그 발광 스펙트럼을 나타낸 것이다.

[0888]

도 24 및 도 25에서 관찰되는 바와 같이, 2DBtTPDBq-03의 톨루엔 용액의 흡수 피크는 약 294nm, 304nm, 361nm, 및 374nm에 있고, 이들의 발광 파장의 피크는 378nm 및 405nm(여기 파장: 360nm)에 있다. 도 26 및 도 27에서 관찰되는 바와 같이, 2DBtTPDBq-03의 박막의 흡수 피크는 약 242nm, 266nm, 299nm, 314nm, 346nm, 368nm, 및 383nm에 있고, 이들의 발광 파장의 피크는 약 436nm(여기 파장: 383nm)에 있다. 2DBtTPDBq-03이 청자색의 광을 방출하는 것을 알았다. 본 발명의 일 형태에 따른 화합물은 발광 물질의 호스트 재료, 또는 가시광 영역에서 형광을 방출하는 물질의 호스트 재료로서 사용할 수 있다.

[0889]

2DBtTPDBq-03의 인광을 2mDBtTPDBq-II와 비슷한 방법에 의하여 측정하였다. 도 28은 얻어진 인광 스펙트럼을 나타낸 것이다. 이 결과로부터 2DBtTPDBq-03의 인광 스펙트럼의 가장 짧은 파장 측의 피크는 545nm에 있는 것을 알았으며, 이는 2DBtTPDBq-03이 높은 T_1 준위를 갖는 것을 의미한다. 2DBtTPDBq-03의 박막의 응집은 대기하에서도 쉽게 일어나지 않고, 박막은 형태의 변화가 적고 막의 품질이 높다는 것을 알았다.

[0890]

산화 환원 반응 특성을 사이클리 볼타메트리(CV) 측정에 의하여 조사하였다. 측정은 2mDBtTPDBq-II와 비슷한 방법에 의하여 수행하였다. 측정 결과에 따르면, 산화 전위는 -6.15eV이고, 환원 전위는 -2.95eV이었다. 산화 전위를 HOMO 준위로 간주하고, 환원 전위를 LUMO 준위로 간주하면, HOMO 준위와 LUMO 준위 사이의 갭은 3.20eV로 추산되며, 2DBtTPDBq-03이 넓은 밴드 갭을 갖는 것이 시사되었다.

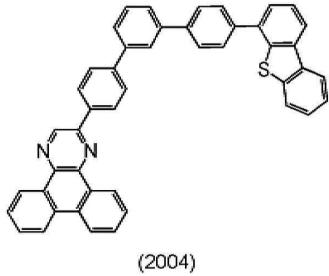
[0891]

(실시예 4)

[0892] <<합성 예 4>>

[0893] 본 합성 예에서는, 실시형태 1 및 2에서 설명한 해태로 고리 화합물인, 2-[4''-(다이벤조싸이오펜-4-일)-4,1':3',1'''-터페닐-1-일]다이벤조[f,h]퀴녹살린(약칭: 2DBtTPDBq-02)(구조식(2004))의 합성 방법에 대하여 설명한다. 2DBtTPDBq-02의 구조식을 아래에 나타낸다.

[0894] [화학식 242]



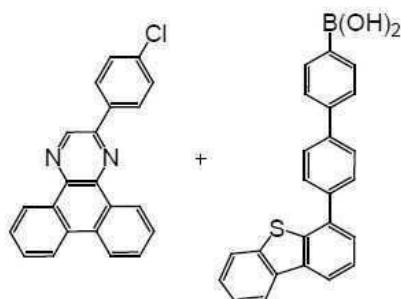
(2004)

[0895]

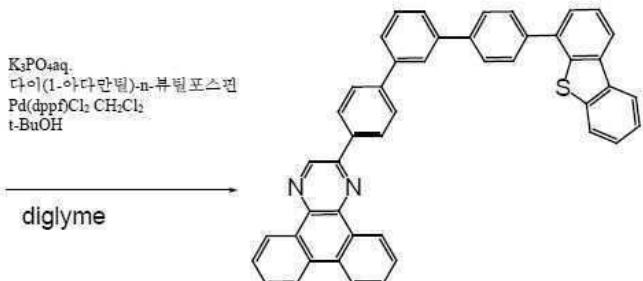
[0896] <2-[4''-(다이벤조싸이오펜-4-일)-4,1':3',1'''-터페닐-1-일]다이벤조[f,h]퀴녹살린(약칭: 2DBtTPDBq-02)의 합성 방법>

[0897] 200mL의 3구 플라스크에, 1.2g(3.5mmol)의 2-(4-클로로페닐)다이벤조[f,h]퀴녹살린, 상기 실시예에서 합성 방법을 설명한 1.1g(3.4mmol)의 4'-(다이벤조싸이오펜-4-일)-4,1'-바이페닐보론산, 2.1g(9.9mmol)의 인산 삼포타슘, 80mg(0.22mmol)의 다이(1-아다만틸)-n-뷰틸포스핀, 1mL의 t-뷰틸 알코올, 및 15mL의 다이에틸렌글라이콜다이메틸에터를 넣었다. 이 혼합물을 감압하에서 탈기한 다음, 시스템 내에 질소 가스를 연속적으로 흘렸다. 그 후, 이 혼합물을 140°C까지 가열하고, 20mg(80 μmol)의 아세트산 팔라듐(II)을 첨가한 다음, 7시간 동안 교반하였다. 교반 후, 혼합물을 실온까지 냉각시킨 다음, 10mL의 다이에틸렌글라이콜다이메틸에터를 첨가하였다. 이어서, 30mg(40 μmol)의 [1,1'-비스(다이페닐포스피노)페로센]팔라듐(II) 디아클로라이드를 첨가하고 얻어진 혼합물을 140°C에서 5.5시간 동안 교반하였다. 교반 후, 석출한 고체를 흡인 여과에 의하여 회수하고, 물 및 에탄올로 세정하였다. 얻어진 고체에 대하여 클로로폼을 사용하여 열 여과를 수행하고 여과액을 농축함으로써, 목적 물질의 고체를 1.3g, 수율 58%로 얻었다. 이 단계의 합성 스킴을 식 (D-1)에 나타낸다.

[0898] [화학식 243]



(D-1)

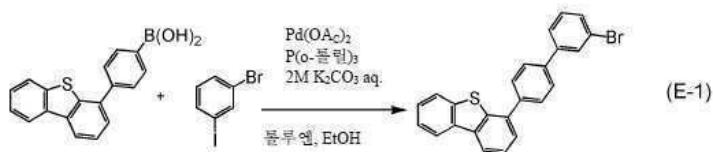


[0899]

- [0900] 얻어진 고체에 핵 자기 공명 분광법(¹H NMR)을 수행하였으며, 이 결과를 아래에 나타낸다.
- [0901] ¹H NMR(테트라클로로에테인-d₂, 500MHz): δ = 7.50–7.54(m, 2H), 7.61–7.68(m, 3H), 7.77–7.93(m, 11H), 7.99(d, J=8.0Hz, 2H), 8.06(s, 1H), 8.21–8.25(m, 2H), 8.52(d, J=8.0Hz, 2H), 8.70(d, J=8.0Hz, 2H), 9.26(d, J=8.0Hz, 1H), 9.47(d, J=8.0Hz, 1H), 9.50(s, 1H)
- [0902] 도 29의 (A) 및 (B)는 ¹H NMR 차트이다. 또한, 도 29의 (B)는 도 29의 (A)의 7.4ppm 내지 9.6ppm의 범위의 일부를 확대하여 나타낸 차트이다. 이 결과에 의하여 목적 물질인 2DBtTPDBq-02가 얻어졌다는 것이 밝혀졌다.
- [0903] 트레이인 서블리메이션법에 의하여 1.3g의 고체를 정제하였다. 승화 정제에서는, 2.9Pa의 압력하에 있어서, 15mL/min의 아르곤 유량으로, 350°C에서 14.5시간 동안 고체를 가열하였다. 정제 후, 목적 물질의 고체를 0.75g, 회수율 60%로 얻었다.
- [0904] <<2-[4'-(다이벤조싸이오펜-4-일)-4,1':3',1'''-터페닐-1-일]다이벤조[f,h]퀴녹살린(약칭: 2DBtTPDBq-02)의 물성>>
- [0905] 도 30은 2mDBtTPDBq-II와 비슷한 방법에 의하여 측정한 2DBtTPDBq-02의 톨루엔 용액의 흡수 스펙트럼을 나타낸 것이고, 도 31은 그 발광 스펙트럼을 나타낸 것이다. 도 32는 2mDBtTPDBq-II와 비슷한 방법에 의하여 측정한 2DBtTPDBq-02의 박막의 흡수 스펙트럼을 나타낸 것이고, 도 33은 그 발광 스펙트럼을 나타낸 것이다.
- [0906] 도 30 및 도 31에서 관찰되는 바와 같이, 2DBtTPDBq-02의 톤루엔 용액의 흡수 피크는 약 281nm, 311nm, 368nm, 및 378nm에 있고, 이들의 발광 파장의 피크는 386nm 및 405nm(여기 파장: 360nm)에 있다. 도 32 및 도 33에서 관찰되는 바와 같이, 2DBtTPDBq-02의 박막의 흡수 피크는 약 209nm, 242nm, 263nm, 272nm, 316nm, 338nm, 377nm, 및 389nm에 있고, 이들의 발광 파장의 피크는 약 450nm 및 439nm(여기 파장: 439nm)에 있다. 2DBtTPDBq-02가 청색의 광을 방출하는 것을 알았다. 본 발명의 일 형태에 따른 화합물은 발광 물질의 호스트 재료, 또는 가시광 영역에서 형광을 방출하는 물질의 호스트 재료로서 사용할 수 있다.
- [0907] 2DBtTPDBq-02의 인광을 2mDBtTPDBq-II와 비슷한 방법에 의하여 측정하였다. 도 34는 얻어진 인광 스펙트럼을 나타낸 것이다. 이 결과로부터 2DBtTPDBq-02의 인광 스펙트럼의 가장 짧은 파장 측의 피크는 545nm에 있는 것을 알았으며, 이는 2DBtTPDBq-02가 높은 T₁ 준위를 갖는 것을 의미한다. 2DBtTPDBq-02의 박막의 응집은 대기하에서도 쉽게 일어나지 않고, 박막은 형태의 변화가 적고 막의 품질이 높다는 것을 알았다.
- [0908] 산화 환원 반응 특성을 사이클릭 볼타메트리(CV) 측정에 의하여 조사하였다. 측정은 2mDBtTPDBq-II와 비슷한 방법에 의하여 수행하였다. 측정 결과에 따르면, 산화 전위는 -6.15eV이고, 환원 전위는 -2.94eV였다. 산화 전위를 HOMO 준위로 간주하고, 환원 전위를 LUMO 준위로 간주하면, HOMO 준위와 LUMO 준위 사이의 갭은 3.19eV로 추산되며, 2DBtTPDBq-02가 넓은 밴드 갭을 갖는 것이 시사되었다.
- [0909] (실시예 5)
- [0910] <<합성 예 5>>
- [0911] 본 합성예에서는, 실시형태 1 및 2에서 설명한 헤테로 고리 화합물인, 2-[4'-(다이벤조싸이오펜-4-일)-3,1':3',1'''-터페닐-1-일]다이벤조[f,h]퀴녹살린(약칭: 2DBtTPDBq-04)(구조식(2005))의 합성 방법에 대하여 설명한다. 2DBtTPDBq-04의 구조식을 아래에 나타낸다.
- [0912] [화학식 244]
- (2005)
- [0913]
- [0914] <4-(3'-브로모-4,1'-바이페닐-1-일)다이벤조싸이오펜의 합성>
- [0915] 200mL의 3구 플라스크에, 상기 실시예에서 합성 방법을 설명한 3.9g(13mmol)의 4-(다이벤조싸이오펜-4-일)페닐

보론산, 3.6g(13mmol)의 3-브로모아이오도벤젠, 0.20g(0.65mmol)의 트리스(2-메틸페닐)포스핀, 20mL의 탄산 포타슘 수용액(2mol/L), 64mL의 틀루엔, 및 6mL의 에탄올을 넣었다. 이 혼합물을 감압하에서 탈기한 다음, 시스템 내에 질소 가스를 연속적으로 흘렸다. 얻어진 혼합물을 80°C까지 가열하였다. 그리고, 30mg(0.13mmol)의 아세트산 팔라듐(II)을 첨가하고 같은 온도에서 6시간 동안 교반하였다. 교반 후, 혼합물의 수성층에 대하여 클로로폼으로 추출을 수행하고, 추출 용액과 유기층을 조합하고, 이 혼합물을 포화 식염수로 세정하고 무수 황산 마그네슘으로 건조시켰다. 얻어진 혼합물을 자연 여과한 다음, 여과액을 농축하여 고체를 얻었다. 얻어진 고체를 실리카 겔 칼럼 크로마토그래피(전개 용매: 클로로폼)에 의하여 정제한 다음, 클로로폼/헥세인을 사용하여 재결정함으로써, 목적 물질의 고체를 3.8g, 수율 71%로 얻었다. 이 단계의 합성 스킴을 식 (E-1)에 나타낸다.

[0916] [화학식 245]



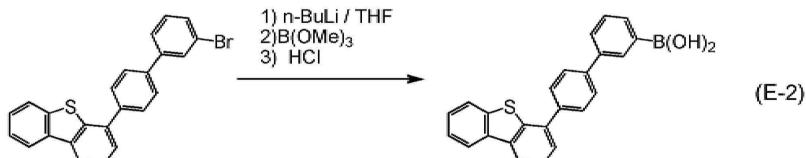
[0917]

<4'-(다이벤조싸이오펜-4-일)-3,1'-바이페닐보론산의 합성>

[0919]

200mL의 3구 플라스크에, 식 (E-1)으로 나타내어지는 단계에서 합성된 4-(3'-브로모-4,1'-바이페닐-1-일)다이벤조싸이오펜 3.7g(8.9mmol)을 넣었다. 시스템 내에 질소 가스를 연속적으로 흘린 후, 90mL의 탈수 테트라하이드로퓨란을 첨가하였다. 이 용액을 -78°C까지 냉각시키고, 6.1mL(8.9mmol)의 *n*-부틸리튬 헥세인 용액(1.6mol/L)을 시린지를 사용하여 적하한 다음, 같은 온도에서 1.5시간 동안 교반하였다. 교반 후, 같은 온도에서 1.2mL(11mmol)의 트라이메틸보레이트를 첨가하고, 얻어진 용액을 실온에서 20시간 동안 교반하였다. 교반 후, 30mL의 염산(1mol/L)을 첨가하고, 얻어진 혼합물의 수성층에 대하여 아세트산 에틸로 추출을 수행하였다. 얻어진 추출 용액과 유기층을 조합하고, 이 혼합물을 탄산 수소 소듐 수용액 및 포화 식염수로 세정하고 무수 황산 마그네슘으로 건조시켰다. 얻어진 혼합물을 자연 여과하고, 여과액을 농축하여 연한 황색의 고체를 얻었다. 고체를 클로로폼/헥세인으로 세정함으로써, 목적 물질의 백색 고체를 2.6g, 수율 78%로 얻었다. 이 단계의 합성 스ქ을 식 (E-2)에 나타낸다.

[0920] [화학식 246]



[0921]

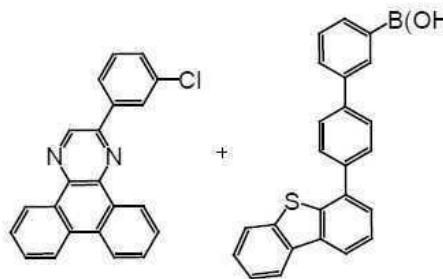
<2-[4'-(다이벤조싸이오펜-4-일)-3,1':3',1'''-터페닐-1-일]다이벤조[f,h]퀴녹살린(약칭: 2DBtTPDBq-04)의 합성>

[0923]

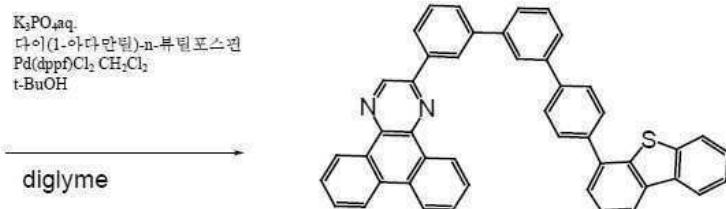
200mL의 3구 플라스크에, 1.2g(3.5mmol)의 2-(3-클로로페닐)다이벤조[f,h]퀴녹살린, 식 (E-2)으로 나타내어지는 단계에서 합성된 1.1g(3.4mmol)의 4'-(다이벤조싸이오펜-4-일)-3,1'-바이페닐보론산, 2.1g(9.9mmol)의 인산 삼포타슘, 70mg(0.20mmol)의 다이(1-아다만틸)-*n*-부틸포스핀, 1mL(11mmol)의 *t*-부틸 알코올, 및 15mL의 다이에틸렌글라이콜다이메틸에터를 넣었다. 이 혼합물을 감압하에서 탈기한 다음, 시스템 내에 질소 가스를 연속적으로 흘렸다. 그 후, 이 혼합물에 30mg(40 μmol)의 [1,1'-비스(다이페닐포스피노)페로센]팔라듐(II) 디아클로라이드를 첨가하고, 얻어진 이 혼합물을 140°C에서 4.5시간 동안 교반하였다. 교반 후, 석출한 고체를 흡인 여과에 의하여 회수하고, 물 및 에탄올로 세정하여 고체를 얻었다. 얻어진 고체에 대하여 클로로폼을 사용하여 열 여과를 수행하고 여과액을 농축함으로써, 목적 물질의 고체를 1.3g, 수율 59%로 얻었다. 이 단계의 합성 스ქ을 식 (E-3)에 나타낸다.

[0924]

[화학식 247]



(E-3)



[0925]

[0926]

얻어진 고체에 핵 자기 공명 분광법(^1H NMR)을 수행하였으며, 이 결과를 아래에 나타낸다.

[0927]

^1H NMR(클로로포름- d , 500MHz): $\delta = 7.47\text{--}7.49(\text{m}, 2\text{H}), 7.56\text{--}7.61(\text{m}, 2\text{H}), 7.66(\text{t}, J=8.0\text{Hz}, 1\text{H}), 7.72\text{--}7.88(\text{m}, 13\text{H}), 8.05(\text{s}, 1\text{H}), 8.18\text{--}8.22(\text{m}, 2\text{H}), 8.37(\text{d}, J=8.0\text{Hz}, 1\text{H}), 8.66\text{--}8.68(\text{m}, 3\text{H}), 9.27(\text{d}, J=8.0\text{Hz}, 1\text{H}), 9.46(\text{d}, J=8.0\text{Hz}, 1\text{H}), 9.49(\text{s}, 1\text{H})$

[0928]

도 35의 (A) 및 (B)는 ^1H NMR 차트이다. 또한, 도 35의 (B)는 도 35의 (A)의 7.4ppm 내지 9.6ppm의 범위의 일부를 확대하여 나타낸 차트이다. 이 결과에 의하여 목적 물질인 2DBtTPDBq-04가 얻어졌다는 것이 밝혀졌다.

[0929]

트레인 서블리메이션법에 의하여 1.3g의 고체를 정제하였다. 승화 정제에서는, 2.9Pa의 압력하에 있어서, 15mL/min의 아르곤 유량으로, 335°C에서 14.5시간 동안 고체를 가열하였다. 정제 후, 목적 물질의 고체를 0.96g, 회수율 74%로 얻었다.

[0930]

<<2-[4'-(다이벤조싸이오펜-4-일)-3,1':3',1'']-터페닐-1-일]다이벤조[*f,h*]퀴녹살린(약칭: 2DBtTPDBq-04)의 물성>>

[0931]

도 36은 2mDBtTPDBq-II와 비슷한 방법에 의하여 측정한 2DBtTPDBq-04의 톨루엔 용액의 흡수 스펙트럼을 나타낸 것이고, 도 37은 그 발광 스펙트럼을 나타낸 것이다. 도 38은 2mDBtTPDBq-II와 비슷한 방법에 의하여 측정한 2DBtTPDBq-04의 박막의 흡수 스펙트럼을 나타낸 것이고, 도 39는 그 발광 스펙트럼을 나타낸 것이다.

[0932]

도 36 및 도 37에서 관찰되는 바와 같이, 2DBtTPDBq-04의 톨루엔 용액의 흡수 피크는 약 280nm, 332nm, 361nm, 및 375nm에 있고, 이들의 발광 파장의 피크는 385nm 및 404nm(여기 파장: 360nm)에 있다. 도 38 및 도 39에서 관찰되는 바와 같이, 2DBtTPDBq-04의 박막의 흡수 피크는 약 210nm, 262nm, 296nm, 315nm, 341nm, 368nm, 및 384nm에 있고, 이들의 발광 파장의 피크는 약 429nm 및 446nm(여기 파장: 385nm)에 있다. 2DBtTPDBq-04가 청자색의 광을 방출하는 것을 알았다. 본 발명의 일 형태에 따른 화합물은 발광 물질의 호스트 재료, 또는 가시광 영역에서 형광을 방출하는 물질의 호스트 재료로서 사용할 수 있다.

[0933]

2DBtTPDBq-04의 인광을 2mDBtTPDBq-II와 비슷한 방법에 의하여 측정하였다. 도 40은 얻어진 인광 스펙트럼을 나타낸 것이다. 이 결과로부터 2DBtTPDBq-04의 인광 스펙트럼의 가장 짧은 파장 측의 피크는 518nm에 있는 것을 알았으며, 이는 2DBtTPDBq-04가 높은 T_1 준위를 갖는 것을 의미한다. 2DBtTPDBq-04의 박막의 응집은 대기하에서도 쉽게 일어나지 않고, 박막은 형태의 변화가 적고 막의 품질이 높다는 것을 알았다.

[0934]

산화 환원 반응 특성을 사이클릭 볼타메트리(CV) 측정에 의하여 조사하였다. 측정은 2mDBtTPDBq-II와 비슷한 방법에 의하여 수행하였다. 측정 결과에 따르면, 산화 전위는 -6.16eV이고, 환원 전위는 -2.94eV이었다. 산화 전위를 HOMO 준위로 간주하고, 환원 전위를 LUMO 준위로 간주하면, HOMO 준위와 LUMO 준위 사이의 갭은 3.22eV

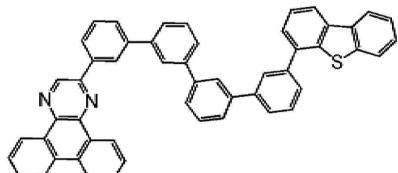
로 추산되었다.

[0935] (실시예 6)

[0936] <<합성예 6>>

[0937] 본 합성예에서는, 실시형태 1 및 2에서 설명한 헤테로 고리 화합물인, 2-[3''''-(다이벤조싸이오펜-4-일)-3,1':3',1'':3'',1'''-쿼터페닐-1-일]다이벤조[f,h]퀴녹살린(약칭: 2mDBtQPDBq-II)(구조식(2006))의 합성 방법에 대하여 설명한다. 2mDBtQPDBq-II의 구조식을 아래에 나타낸다.

[0938] [화학식 248]



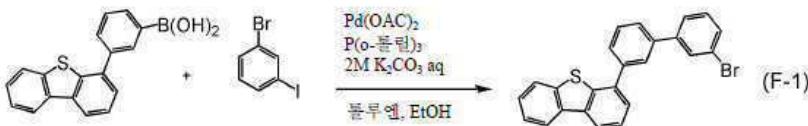
(2006)

[0939]

<4-(3'-브로모-3,1'-바이페닐-1-일)다이벤조싸이오펜의 합성>

[0941] 200mL의 3구 플라스크에, 3.0g(9.8mmol)의 3-(다이벤조싸이오펜-4-일)페닐보론산, 2.8g(9.9mmol)의 3-브로모아이오도벤젠, 0.16g(0.53mmol)의 트리스(2-메틸페닐)포스핀, 15mL의 탄산 포타슘 수용액(2mol/L), 50mL의 툴루엔, 및 5mL의 에탄올을 넣었다. 그리고, 이 혼합물을 감압하에서 탈기하고, 시스템 내에 질소 가스를 연속적으로 흘렸다. 이 혼합물을 80°C까지 가열하였다. 그리고, 40mg(0.18mmol)의 아세트산 팔라듐(II)을 첨가하고 이 혼합물을 같은 온도에서 9시간 동안 교반하였다. 교반 후, 얻어진 혼합물의 수성층에 대하여 툴루엔으로 추출을 수행하고, 추출 용액과 유기층을 조합하고, 이 혼합물을 포화 식염수로 세정하고 무수 황산 마그네슘으로 건조시켰다. 혼합물을 자연 여과한 다음, 여과액을 농축하여 갈색의 유상 물질 5g을 얻었다. 얻어진 유상 물질을 고성능 액체 크로마토그래피(전개 용매: 클로로포름)에 의하여 정제함으로써, 목적 물질의 무색 투명 유상 물질을 2.6g, 수율 64%로 얻었다. 이 단계의 합성 스킴을 식 (F-1)에 나타낸다.

[0942] [화학식 249]



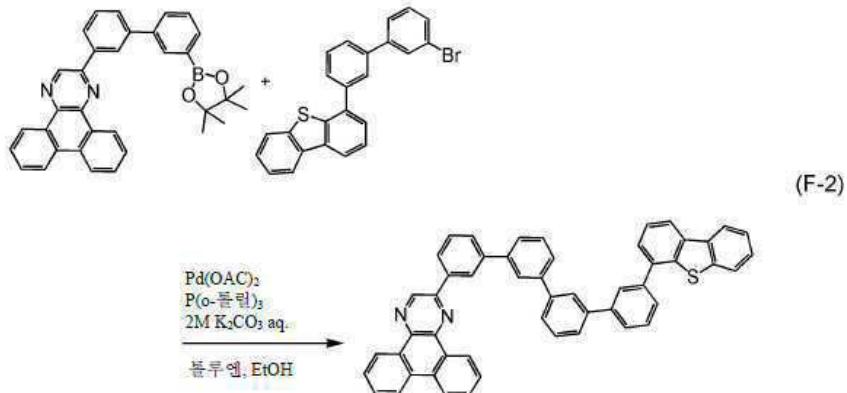
[0943]

<2-[3''''-(다이벤조싸이오펜-4-일)-3,1':3',1'':3'',1'''-쿼터페닐-1-일]다이벤조[f,h]퀴녹살린(약칭: 2mDBtQPDBq-II)의 합성 방법>

[0945] 100mL의 3구 플라스크에, 2.6g(6.3mmol)의 4-(3'-브로모-3,1'-바이페닐-1-일)다이벤조싸이오펜, 3.2g(6.2mmol)의 2-[3'-(2-다이벤조[f,h]퀴녹살린일)-1,1'-바이페닐-3-일]-4,4,5,5-테트라메틸-1,3,2-다이옥사보롤레인, 0.10g(0.33mmol)의 트리스(2-메틸페닐)포스핀, 30mL의 툴루엔, 3mL의 에탄올, 및 10mL의 탄산 포타슘 수용액(2mol/L)을 넣었다. 이 혼합물을 감압하에서 탈기한 다음, 시스템 내에 질소 가스를 연속적으로 흘렸다. 그 후, 이 혼합물을 80°C까지 가열하고, 14mg(60 μmol)의 아세트산 팔라듐(II)을 첨가한 다음, 3시간 동안 교반하였다. 교반 후, 석출한 고체를 흡인 여과에 의하여 회수하고, 물 및 에탄올로 세정하고, 툴루엔을 사용하여 재결정함으로써, 목적 물질의 고체를 80%의 수율로 얻었다. 이 단계의 합성 스ქ을 식 (F-2)에 나타낸다.

[0946]

[화학식 250]



[0947]

[0948] 얻어진 고체에 핵 자기 공명 분광법(¹H NMR)을 수행하였으며, 이 결과를 아래에 나타낸다.

[0949]

¹H NMR(테트라클로로에테인-d₂, 500MHz): δ=7.46–7.51(m, 2H), 7.59–7.69(m, 5H), 7.73–7.91(m, 13H), 8.11(d, J=8.0Hz, 2H), 8.15(s, 1H), 8.19(t, J=8.0Hz, 2H), 8.38(d, J=8.0Hz, 1H), 8.68–8.70(m, 3H), 9.32(d, J=8.0Hz, 1H), 9.46(d, J=8.0Hz, 1H), 9.50(s, 1H)

[0950]

도 41의 (A) 및 (B)는 ¹H NMR 차트이다. 또한, 도 41의 (B)는 도 41의 (A)의 7.4ppm 내지 9.6ppm의 범위의 일부를 확대하여 나타낸 차트이다. 이 결과에 의하여 목적 물질인 2mDBtQPDBq-II가 얻어졌다는 것이 밝혀졌다.

[0951]

트레인 서블리메이션법에 의하여 3.6g의 고체를 정제하였다. 승화 정제에서는, 3.6Pa의 압력하에 있어서, 15mL/min의 아르곤 유량으로, 395°C에서 17시간 동안 고체를 가열하였다. 정제 후, 목적 물질의 황색 고체를 2.6g, 회수율 74%로 얻었다.

[0952]

<<2-[3''-(다이벤조싸이오펜-4-일)-3,1':3',1'':3'',1'''-퀴터페닐-1-일]다이벤조[f,h]퀴녹살린(약칭: 2mDBtQPDBq-II)의 물성>>

[0953]

도 42는 2mDBtTPDBq-II와 비슷한 방법에 의하여 측정한 2mDBtQPDBq-II의 박막의 흡수 스펙트럼을 나타낸 것이고, 도 43은 그 발광 스펙트럼을 나타낸 것이다.

[0954]

도 42 및 도 43에서 관찰되는 바와 같이, 2mDBtQPDBq-II의 박막의 흡수 피크는 약 253nm, 318nm, 337nm, 367nm, 및 383nm에 있고, 이들의 발광 파장의 피크는 약 423nm(여기 파장: 383nm)에 있다. 2mDBtQPDBq-II가 청자색의 광을 방출하는 것을 알았다. 본 발명의 일 형태에 따른 화합물은 발광 물질의 호스트 재료, 또는 가시광 영역에서 형광을 방출하는 물질의 호스트 재료로서 사용할 수 있다.

[0955]

2mDBtQPDBq-II의 인광을 2mDBtTPDBq-II와 비슷한 방법에 의하여 측정하였다. 도 44는 얻어진 인광 스펙트럼을 나타낸 것이다. 이 결과로부터 2mDBtQPDBq-II의 인광 스펙트럼의 가장 짧은 파장 측의 피크는 514nm에 있는 것을 알았으며, 이는 2mDBtQPDBq-II가 높은 T₁ 준위를 갖는 것을 의미한다. 2mDBtQPDBq-II의 박막의 응집은 대기 하에서도 쉽게 일어나지 않고, 박막은 형태의 변화가 적고 막의 품질이 높다는 것을 알았다.

[0956]

산화 환원 반응 특성을 사이클릭 볼타메트리(CV) 측정에 의하여 조사하였다. 측정은 2mDBtTPDBq-II와 비슷한 방법에 의하여 수행하였다. 측정 결과에 따르면, 산화 전위는 -6.19eV이고, 환원 전위는 -2.93eV이었다. 산화 전위를 HOMO 준위로 간주하고, 환원 전위를 LUMO 준위로 간주하면, HOMO 준위와 LUMO 준위 사이의 갭은 3.26eV로 추산되었다.

[0957]

(실시예 7)

[0958]

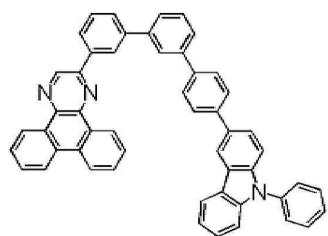
<<합성 예 7>>

[0959]

본 합성예에서는, 실시형태 1 및 2에서 설명한 해태로 고리 화합물인, 2-[4''-(9-페닐-9H-카바졸-3-일)-1,1':3',1'''-터페닐-3-일]다이벤조[f,h]퀴녹살린(약칭: 2mmpPCTPDBq)(구조식(2007))의 합성 방법에 대하여 설명한다. 2mmpPCTPDBq의 구조식을 아래에 나타낸다.

[0960]

[화학식 251]



(2007)

[0961]

[0962]

<(단계 1) 3-(3'-클로로-1,1'-바이페닐-4-일)-9-페닐-9H-카바졸의 합성>

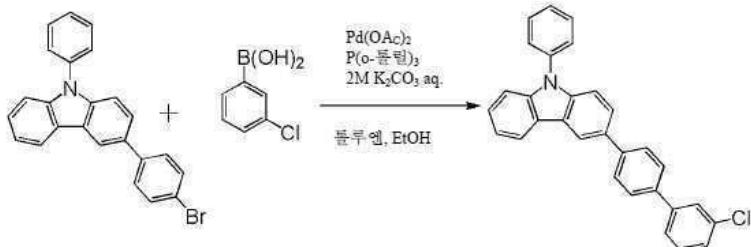
[0963]

200mL의 3구 플라스크에, 4.0g(10mmol)의 3-(4-브로모페닐)-9-페닐-9H-카바졸, 1.6g(10mmol)의 3-클로로페닐보론산, 0.61g(2.0mmol)의 트라이(오쏘-톨릴)포스핀, 40mL의 톨루엔, 10mL의 에탄올, 및 15mL의 탄산 포타슘 수용액(2.0mol/L)을 넣었다. 이 혼합물을 감압하에서 탈기한 다음, 시스템 내에 질소 가스를 연속적으로 흘렸다. 이 혼합물을 60°C까지 가열하였다. 그리고, 87mg(0.40mmol)의 아세트산 팔라듐(II)을 첨가하고 혼합물을 80°C에서 12시간 동안 교반하였다. 교반 후, 얻어진 혼합물의 유기층을 물로 세정하고, 수성층에 대하여 톨루엔으로 추출을 수행하였다. 얻어진 추출 용액과 유기층을 조합하고, 이 혼합물을 포화 식염수로 세정하고, 황산 마그네슘을 첨가하였다. 얻어진 혼합물을 자연 여과한 다음, 얻어진 여과액을 농축함으로써 목적 물질의 갈색의 유상 물질을 3.6g, 수율 84%로 얻었다. 이 단계의 합성 스킴을 식 (H-1)에 나타낸다.

[0964]

[화학식 252]

(H-1)



[0965]

[0966] 얻어진 유상 물질에 핵 자기 공명 분광법(¹H NMR)을 수행하였으며, 이 결과를 아래에 나타낸다.

[0967]

¹H NMR(클로로포름-d, 500MHz): δ = 7.30–7.34(m, 2H), 7.39(t, J=8.0Hz, 1H), 7.43(d, J=3.5Hz, 2H), 7.47–7.50(m, 2H), 7.54(d, J=7.5Hz, 1H), 7.58–7.70(m, 8H), 7.80(d, J=8.5Hz, 2H), 8.21(d, J=8.0Hz, 1H), 8.40(d, J=2.0Hz, 1H)

[0968]

도 45의 (A) 및 (B)는 얻어진 유상 물질의 ¹H NMR 차트이다. 또한, 도 45의 (B)는 도 45의 (A)의 7.0ppm 내지 8.5ppm의 범위의 일부를 확대하여 나타낸 차트이다. 이 결과에 의하여 목적 물질인 3-(3'-클로로-1,1'-바이페닐-4-일)-9-페닐-9H-카바졸이 얻어졌다는 것이 밝혀졌다.

[0969]

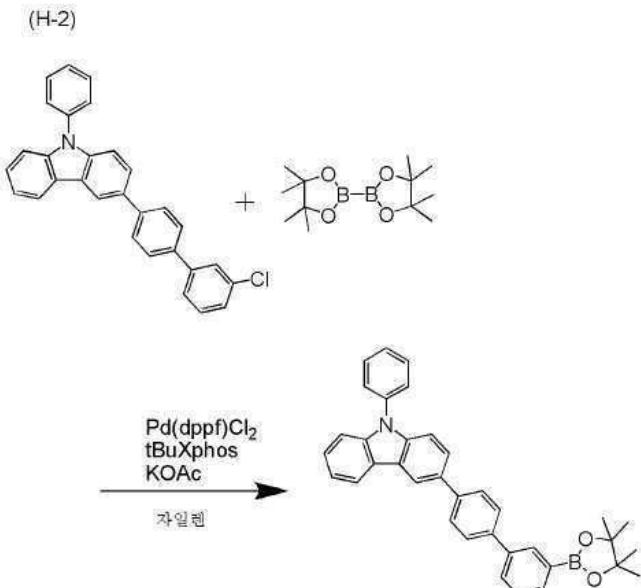
<(단계 2) 3-[3'-(4,4,5,5-테트라메틸-1,3,2-다이옥사보를레인-2-일)-1,1'-바이페닐-4-일]-9-페닐-9H-카바졸의 합성>

[0970]

200mL의 3구 플라스크에, 3.6g(8.4mmol)의 3-(3'-클로로-1,1'-바이페닐-4-일)-9-페닐-9H-카바졸, 2.2g(8.4mmol)의 비스(피나콜레이토)다이보론, 2.5g(25mmol)의 아세트산 포타슘, 및 0.28g(0.50mmol)의 2-다이-tert-뷰틸포스파노-2',4',6'-트라이아이아이소프로필-바이페닐(tBuxphos)을 넣은 다음, 시스템 내의 공기를 질소로 치환하였다. 이 혼합물에 42mL의 자일렌을 첨가한 후, 얻어진 혼합물을 감압하에서 탈기한 다음, 시스템 내에 질소 가스를 연속적으로 흘렸다. 이 혼합물을 80°C까지 가열한 후, 0.16g(0.2mmol)의 [1,1'-비스(다이페닐포스

피노)페로센]팔라듐(II) 다이클로라이드를 첨가하고 이 혼합물을 150°C에서 27시간 동안 교반하였다. 교반 후, 박층(thin layer) 크로마토그래피에 의하여 3-(3'-클로로-1,1'-바이페닐-4-일)-9-페닐-9H-카바졸이 소실된 것을 확인한 다음, 얻어진 혼합물을 실온까지 냉각시키고, 그대로 단계 3을 수행하였다. 이 단계의 합성 스킴을 식(H-2)에 나타낸다.

[0971] [화학식 253]



[0972]

[0973]

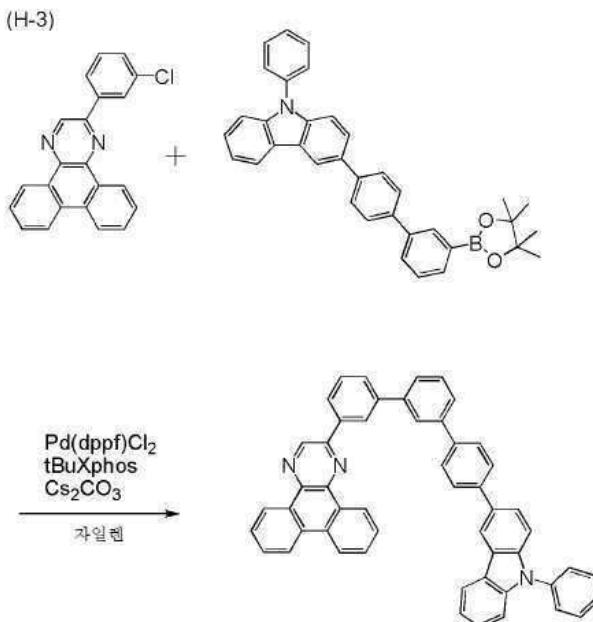
<(단계 3) 2-[4'-(9-페닐-9H-카바졸-3-일)-1,1':3',1'''-터페닐-3-일]다이벤조[f,h]퀴녹살린(약칭: 2mmpPCTPDBq)의 합성>

[0974]

단계 2에서 얻은 혼합물에, 2.9g(8.4mmol)의 2-(3-클로로페닐)다이벤조[f,h]퀴녹살린, 0.55g(1.5mmol)의 다이(1-아다만틸)-n-뷰틸포스핀, 4.3g(20mmol)의 인산 삼포타슘, 및 33mL의 다이에틸렌글라이콜다이메틸에터를 첨가하였다. 그리고, 이 혼합물을 감압하에서 탈기하고 시스템 내에 질소 가스를 연속적으로 흘렸다. 얻어진 혼합물을 80°C까지 가열하고, 0.12g(0.50mmol)의 아세트산 팔라듐(II)을 첨가하고, 이 혼합물을 150°C에서 7시간 동안 교반하였다. 교반 후, 석출한 고체를 흡인 여과에 의하여 회수하고, 틀루엔, 물, 및 에탄올로 세정함으로써, 목적 물질의 갈색 분말을 2.5g 얻었다. 단계 2 및 3의 총 수율은 42%이었다. 이 단계의 합성 스kim을 식(H-3)에 나타낸다.

[0975]

[화학식 254]



[0976]

[0977]

얻어진 고체에 핵 자기 공명 분광법(^1H NMR)을 수행하였으며, 이 결과를 아래에 나타낸다.

[0978]

^1H NMR(클로로포름-d, 500MHz): $\delta = 7.31\text{--}7.34(\text{m}, 1\text{H})$, $7.44(\text{d}, J=4.0\text{Hz}, 1\text{H})$, $7.50(\text{d}, J=15\text{Hz}, 2\text{H})$, $7.60\text{--}7.66(\text{m}, 5\text{H})$, $7.72\text{--}7.87(\text{m}, 14\text{H})$, $8.04(\text{s}, 1\text{H})$, $8.22(\text{d}, J=8.0\text{Hz}, 1\text{H})$, $8.36(\text{d}, J=8.0\text{Hz}, 1\text{H})$, $8.43(\text{d}, J=1.5\text{Hz}, 1\text{H})$, $8.65(\text{s}, 1\text{H})$, $8.67(\text{d}, J=7.5\text{Hz}, 2\text{H})$, $9.26(\text{dd}, J_1=8.0\text{Hz}, J_2=2.0\text{Hz}, 1\text{H})$, $9.46(\text{dd}, J_1=8.0\text{Hz}, J_2=2.0\text{Hz}, 1\text{H})$, $9.48(\text{s}, 1\text{H})$

[0979]

도 46의 (A) 및 (B)는 얻어진 고체의 ^1H NMR 차트이다. 또한, 도 46의 (B)는 도 46의 (A)의 7.0ppm 내지 9.6ppm의 범위의 일부를 확대하여 나타낸 차트이다. 이 결과에 의하여 목적 물질인 2-[4'-(9-페닐-9H-카바졸-3-일)-1,1':3',1''-터페닐-3-일]다이벤조[f,h]퀴녹살린(약칭: 2mmpPCTPDBq)이 얻어졌다는 것이 밝혀졌다.

[0980]

트레인 서블리메이션법에 의하여 2.5g의 고체를 정제하였다. 승화 정제에서는, 3.6Pa의 압력하에 있어서, 15mL/min의 아르곤 유량으로, 375°C에서 15시간 동안 고체를 가열하였다. 승화 정제 후, 목적 물질의 연한 황색의 고체를 2.2g, 회수율 87%로 얻었다.

[0981]

<<2-[4'-(9-페닐-9H-카바졸-3-일)-1,1':3',1''-터페닐-3-일]다이벤조[f,h]퀴녹살린(약칭: 2mmpPCTPDBq)의 물성>>

[0982]

도 47은 2mmpPCTPDBq의 톨루엔 용액의 흡수 스펙트럼을 나타낸 것이고, 도 48은 그 발광 스펙트럼을 나타낸 것이다. 도 49는 2mmpPCTPDBq의 박막의 흡수 스펙트럼을 나타낸 것이고, 도 50은 그 발광 스펙트럼을 나타낸 것이다. 고체 박막은 진공 증착법에 의하여 석영 기판 위에 형성하였다. 톨루엔 용액의 흡수 스펙트럼의 측정은 실시예 1과 비슷한 식으로 수행하였다. 박막의 흡수 스펙트럼은 분광 광도계(U-4100 분광 광도계, Hitachi High-Technologies Corporation 제조)를 사용하여 측정하였다. 발광 스펙트럼은 실시예 1과 비슷한 식으로 측정하였다.

[0983]

도 47 및 도 48에서 관찰되는 바와 같이, 2mmpPCTPDBq의 톨루엔 용액의 흡수 피크는 약 374nm, 354nm, 및 302nm에 있고, 이들의 발광 괘장의 피크는 385nm 및 404nm(여기 괘장: 355nm)에 있다. 도 49 및 도 50에서 관찰되는 바와 같이, 2mmpPCTPDBq의 박막의 흡수 피크는 약 380nm, 365nm, 330nm, 303nm, 및 258nm에 있고, 이들의 발광 괘장의 피크는 약 459nm(여기 괘장: 325nm)에 있다. 2mmpPCTPDBq가 청자색의 광을 방출하는 것을 알았다. 본 발명의 일 형태에 따른 화합물은 발광 물질의 호스트 재료, 또는 가시광 영역에서 형광을 방출하는 물질의 호스트 재료로서 사용할 수 있다.

[0984]

2mmpPCTPDBq의 인광을 실시예 1에서와 같은 방법에 의하여 측정하였다. 도 51은 얻어진 인광 스펙트럼을 나타

낸 것이다. 이 결과로부터 2mmpPCTPDBq의 인광 스펙트럼의 가장 짧은 파장 측의 피크는 514nm에 있는 것을 알았으며, 이는 2mmpPCTPDBq가 높은 T₁ 준위를 갖는 것을 의미한다. 2mmpPCTPDBq의 박막의 응집은 대기하에서도 쉽게 일어나지 않고, 박막은 형태의 변화가 적고 막의 품질이 높다는 것을 알았다.

[0985] 2mmpPCTPDBq의 HOMO 준위 및 LUMO 준위를 사이클릭 볼타메트리(CV) 측정을 통하여 얻었다. 이 측정 및 산출은 실시예 1에서와 같은 방법에 의하여 수행하였다.

[0986] 또한, CV 측정을 100번 반복하고, 100사이클째의 산화-환원파와 1사이클째의 산화-환원파를 서로 비교하여 화합물의 전기 안정성을 조사하였다.

[0987] 이 결과, 2mmpPCTPDBq의 산화 전위 E_a[V]의 측정에서, HOMO 준위는 -5.80eV이었다. 한편, LUMO 준위는 -2.94eV인 것을 알았다. 산화-환원파를 반복적으로 측정하였을 때, E_a 측정에서는, 100사이클 후의 산화-환원파의 피크 강도는 1사이클째의 산화-환원파의 피크 강도의 78%를 유지하고, E_c 측정에서는, 100사이클 후의 산화-환원파의 피크 강도는 1사이클째의 산화-환원파의 피크 강도의 90%를 유지하였기 때문에, 2mmpPCTPDBq의 산화 및 환원에 대한 내성이 매우 높다는 것을 알았다.

[0988] (실시예 8)

[0989] <<합성예 8>>

[0990] 본 합성예에서는, 본 발명의 일 형태에 따른 혜택으로 고리 화합물의 비교 물질로서 합성시킨, 2-[3'-(9-페닐-9H-카바졸-3-일)-1,1'-바이페닐-3-일]다이벤조[f,h]퀴녹살린(약칭: 2mPCBPDBq)(구조식(2008))의 합성 방법에 대하여 설명한다. 2mPCBPDBq의 구조식을 아래에 나타낸다.

[0991] [화학식 255]



(2008)

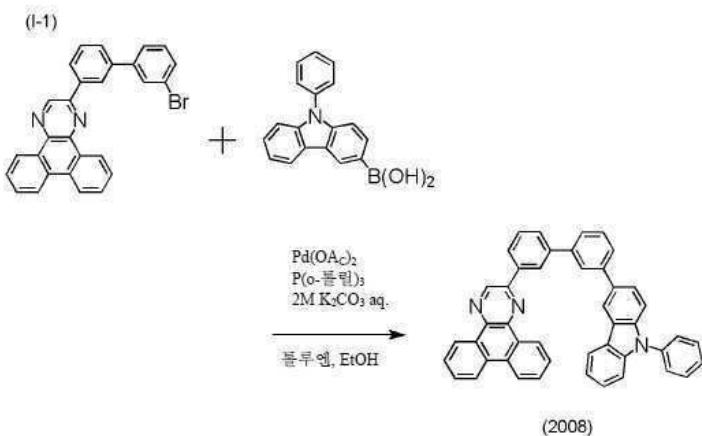
[0992]

<2-[3'-(9-페닐-9H-카바졸-3-일)-1,1'-바이페닐-3-일]다이벤조[f,h]퀴녹살린(약칭: 2mPCBPDBq)의 합성>

[0994] 200mL의 3구 플라스크에, 4.2g(5mmol)의 2-(3'-브로모-1,1'-바이페닐-3-일)다이벤조[f,h]퀴녹살린, 1.5g(5mmol)의 9-페닐-9H-카바졸-3-일보론산, 0.16mg(0.50mmol)의 트라이(오쏘-톨릴)포스핀, 25mL의 톨루엔, 5mL의 에탄올, 및 7.5mL의 탄산 포타슘 수용액(2.0mol/L)을 넣었다. 이 혼합물을 감압하에서 탈기한 다음, 시스템 내에 질소 가스를 연속적으로 흘렸다. 이 혼합물을 60°C까지 가열하였다. 그리고, 52mg(0.23mmol)의 아세트산 팔라듐(II)을 첨가하고 이 혼합물을 90°C에서 32시간 동안 교반하였다. 교반 후, 석출한 고체를 흡인여과에 의하여 회수하고, 물, 톨루엔, 및 에탄올로 세정함으로써, 목적 물질의 갈색 고체를 2.8g, 수율 89%로 얻었다. 이 단계의 합성 스킴을 식 (I-1)에 나타낸다.

[0995]

[화학식 256]



[0996]

[0997]

얻어진 고체에 핵 자기 공명 분광법(¹H NMR)을 수행하였으며, 이 결과를 아래에 나타낸다.

[0998]

¹H NMR(클로로포름-d, 500MHz): δ = 7.29–7.33(m, 1H), 7.42–7.45(m, 2H), 7.50(t, J=7.5Hz, 1H), 7.52(d, J=9.0Hz, 1H), 7.61–7.82(m, 8H), 7.88(d, J=8.0Hz, 1H), 8.08(s, 1H), 8.23(d, J=7.5Hz, 1H), 8.36(d, J=7.5Hz, 1H), 8.47(s, 1H), 8.67(d, J=8.5Hz, 2H), 8.67(s, 1H), 9.26(d, J=8.5Hz, 1H), 9.46(d, J=8.0Hz, 1H), 9.49(s, 1H)

[0999]

도 52의 (A) 및 (B)는 얻어진 고체의 ¹H NMR 차트이다. 또한, 도 52의 (B)는 도 52의 (A)의 7.0ppm 내지 9.6ppm의 범위의 일부를 확대하여 나타낸 차트이다. 이 결과에 의하여 목적 물질인 2-[3'-(9-페닐-9H-카바졸-3-일)-1,1'-바이페닐-3-일]다이벤조[f,h]퀴녹살린(약칭: 2mPCBPDBq)이 얻어졌다는 것이 밝혀졌다.

[1000]

트레인 서블리메이션법에 의하여 2.1g의 고체를 정제하였다. 승화 정제에서는, 3.6Pa의 압력하에 있어서, 15mL/min의 아르곤 유량으로, 330°C에서 15시간 동안 고체를 가열하였다. 승화 정제 후, 목적 물질의 연한 황색의 고체를 1.9g, 회수율 90%로 얻었다.

[1001]

<<2-[3'-(9-페닐-9H-카바졸-3-일)-1,1'-바이페닐-3-일]다이벤조[f,h]퀴녹살린(약칭: 2mPCBPDBq)의 물성>>

[1002]

2mPCBPDBq의 인광을 실시예 1에서와 같은 방법에 의하여 측정하였다. 얻어진 인광 스펙트럼은 나타내지 않았지만, 2mPCBPDBq의 인광 스펙트럼의 가장 짧은 파장 측의 피크는 515nm에 있는 것을 알았으며, 이는 2mPCBPDBq가 높은 T₁ 준위를 갖는 것을 의미한다. 2mPCBPDBq의 박막의 응집은 대기하에서도 쉽게 일어나지 않고, 박막은 형태의 변화가 적고 막의 품질이 높다는 것을 알았다.

[1003]

2mPCBPDBq의 HOMO 준위 및 LUMO 준위를 사이클릭 볼타메트리(CV) 측정을 통하여 얻었다. 이 측정 및 산출은 실시예 1에서와 같은 방법에 의하여 수행하였다.

[1004]

또한, CV 측정을 100번 반복하고, 100사이클째의 산화-환원파와 1사이클째의 산화-환원파를 서로 비교하여 화합물의 전기 안정성을 조사하였다.

[1005]

이 결과, 2mPCBPDBq의 산화 전위 E_a[V]의 측정에서, HOMO 준위는 -5.84eV이었다. 한편, LUMO 준위는 -2.94eV인 것을 알았다. 산화-환원파를 반복적으로 측정하였을 때, E_a 측정에서는, 100사이클 후의 산화-환원파의 피크 강도는 1사이클째의 산화-환원파의 피크 강도의 78%를 유지하고, E_c 측정에서는, 100사이클 후의 산화-환원파의 피크 강도는 1사이클째의 산화-환원파의 피크 강도의 80%를 유지하였기 때문에, 2mPCBPDBq의 산화 및 환원에 대한 내성이 매우 높다는 것을 알았다.

[1006]

2mPCBPDBq의 열 물성을 측정하였다. 2mPCBPDBq의 열 중량 측정-시차 열 분석(TG-DTA)을 수행하였다. 이 측정은 고진공 차동형 시차 열 천칭(TG-DTA 2410SA, Bruker AXS K.K. 제조)을 사용하여 수행하였다. 이 측정은 질소 기류하(200mL/min의 유량)에 있어서, 대기압에서, 승온(昇溫) 속도 10°C/min로 수행하였다. 또한, PerkinElmer, Inc.가 제작한 Pyris1DSC에 의하여 시차 주사 열량 측정을 수행하였다. 시차 주사 열량 측정에서는, 승온 속도 40°C/min로 300°C에서 350°C(화합물이 분해되지 않는 온도)까지 온도를 올린 후, 이 온도를 1분

동안 유지하고 나서, 강온(降溫) 속도 $40^{\circ}\text{C}/\text{min}$ 로 -10°C 까지 냉각시켰다. 이 조작을 2번 연속적으로 반복하였다.

[1007] 열 중량 측정-시차 열 분석에서는, 열 중량 측정에 의하여 얻은 중량이 측정 개시 시의 중량에서 5% 저감된 온도(분해 온도)가 500°C 이상인 것을 알았다. 시차 주사 열량 측정에서의 2번째 승온에서 관찰된 유리 전이점(T_g)은 119°C 이었다.

[1008] (실시예 9)

[1009] 본 실시예에서는, 실시예 1 내지 5 및 7에서 얻은 본 발명의 일 형태에 따른 헤테로 고리 화합물에 대하여 열 중량 측정-시차 열 분석 및 시차 주사 열량 측정을 수행하였다. 또한, 측정 방법은 실시예 8에서 사용한 것과 비슷하다.

[1010] 표 1은 실시예 1 내지 5 및 7에서 얻은 본 발명의 일 형태에 따른 헤테로 고리 화합물의 다음의 데이터를 열거한 것이다: 열 중량 측정에 의하여 얻은 중량이 열 중량 측정-시차 열 분석의 측정 개시 시의 중량에서 5% 저감된 온도(분해 온도), 시차 주사 열량 측정에서의 2번째 승온에서 관찰된 유리 전이점(T_g), 결정화 온도(T_c), 및 융점(T_m).

[1011] [표 1]

		분해 온도 ($^{\circ}\text{C}$)	T_g ($^{\circ}\text{C}$)	T_c ($^{\circ}\text{C}$)	T_m ($^{\circ}\text{C}$)
2mDBtTPDBq-II	실시 예 1	487	116	-	-
2DBtTPDBq	실시 예 2	500 이상	121	-	270
2DBtTPDBq-02	실시 예 4	500 이상	128	194	312
2DBtTPDBq-03	실시 예 3	500 이상	-	-	323
2DBtTPDBq-04	실시 예 5	500 이상	122	-	270
2mmpPCTPDBq	실시 예 7	500 이상	132	-	-

[1012]

*-: 관찰되지 않음

[1013] 표 1에서 관찰할 수 있는 바와 같이, 본 발명의 일 형태에 따른 재료는 유리 전이점이 100°C 를 넘고 열 물성이 양호하다. 2mDBtTPDBq-II는 메타페닐렌기만을 포함하지만, 2DBtTPDBq, 2DBtTPDBq-02, 2DBtTPDBq-03, 2DBtTPDBq-04, 및 2mmpPCTPDBq 각각은 메타페닐렌기 및 파라페닐렌기 양쪽 모두를 포함한다. 따라서, 분자량이 같은 화합물 중, 골격이 메타페닐렌기 및 파라페닐렌기 양쪽 모두를 갖는 화합물이 더 내열성이 높은 것으로 나타났다.

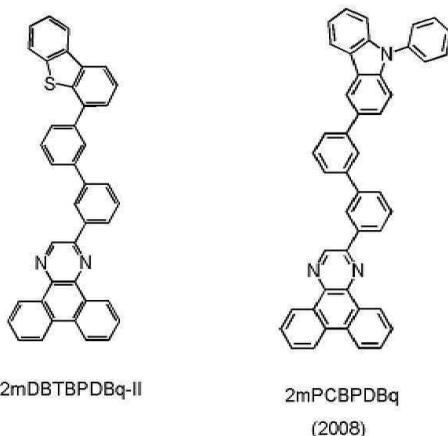
[1014] (실시예 10)

[1015] 본 실시예에서는, 본 발명의 일 형태에 따른 헤테로 고리 화합물의 열 물성 및 이 헤테로 고리 화합물을 사용한 소자의 수명을 평가하였다.

[1016] 열 물성 및 소자의 수명의 평가는, 실시예 1 내지 8에서 합성시킨 본 발명의 일 형태에 따른 헤테로 고리 화합물 및 비교의 헤테로 고리 화합물에 대하여 수행하였다. 또한, 비교의 헤테로 고리 화합물은, 각각 본 발명의 일 형태에 따른 헤테로 고리 화합물보다 다이벤조퀴녹살린 고리와 다이벤조싸이오페닐기 또는 카바졸릴기 사이의 페닐렌기의 개수가 적고 분자량이 낮은, 2-[3'-(다이벤조싸이오페닐-4-일)바이페닐-3-일]다이벤조[*f,h*]퀴녹살린(약칭: 2mDBTBPDBq-II) 및 2-[3'-(9-페닐-9H-카바졸-3-일)-1,1'-바이페닐-3-일]다이벤조[*f,h*]퀴녹살린(약칭: 2mPCBPDq)이다. 2mDBTBPDBq-II 및 2mPCBPDq의 구조식을 아래에 나타낸다.

[1018]

[화학식 257]



[1019]

[1020]

<발광 소자 1 내지 7 및 비교 발광 소자 8의 제작>

[1021]

열 물성 및 소자의 수명을 평가하기 위하여, EL층이 헤테로 고리 화합물을 포함하는 발광 소자를 제작하였다. 발광 소자의 제작 단계에 대하여 설명한다. 발광 소자는 각각 도 1의 (A)에 도시된 적층 구조를 갖는다.

[1022]

먼저, 제 1 전극(101)으로서 ITO막을 기판 위에 두께 110nm로 형성하였다. 제 1 전극(101)의 전극 면적은 4mm^2 ($2\text{mm} \times 2\text{mm}$)로 하였다.

[1023]

다음으로, 제 1 전극(101) 위에 EL층(103)을 형성하였다. 정공 주입층(111)으로서는, 1,3,5-트라이(다이벤조싸이오펜-4-일)벤젠(약칭: DBT3P-II) 및 산화 몰리브데넘을, 형성된 층이 DBT3P-II 대 산화 몰리브데넘의 중량비가 2:1이고 두께가 20nm가 되도록 공증착에 의하여 퇴적하였다. 또한, 공증착은 상이한 복수의 물질을 상이한 증착원으로부터 동시에 증발시키는 증착법이다. 정공 수송층(112)으로서, 4-페닐-4'-(9-페닐플루오렌-9-일)트라이페닐아민(약칭: BPAFLP)을 증착에 의하여 두께 20nm로 퇴적하였다.

[1024]

그리고, 발광층(113)을 형성하였다. 먼저, 헤테로 고리 화합물, N -(1,1'-바이페닐-4-일)-9,9-다이메틸- N -(4-(9-페닐-9H-카바졸-3-일)페닐]-9H-플루오렌-2-아민(약칭: PCBBiF), 및 (아세틸아세토네이토)비스(*6-tert-부틸-4-페닐파리미디네이토*)이리듐(III)(약칭: [$\text{Ir}(\text{tBuppm})_2(\text{acac})$])을, 형성된 층이 헤테로 고리 화합물 대 PCBBiF 대 [$\text{Ir}(\text{tBuppm})_2(\text{acac})$]의 중량비가 0.7:0.3:0.05이고 두께가 20nm이 되도록 공증착에 의하여 퇴적하였다. 그 층 위에, 헤테로 고리 화합물, PCBBiF, 및 [$\text{Ir}(\text{tBuppm})_2(\text{acac})$]를, 형성된 층이 헤테로 고리 화합물 대 PCBBiF 대 [$\text{Ir}(\text{tBuppm})_2(\text{acac})$]의 중량비가 0.8:0.2:0.05이고 두께가 20nm이 되도록 공증착에 의하여 더 퇴적하였다. 이러한 식으로, 발광층(113)을 총 두께가 40nm이 되도록 형성하였다. 또한, 발광층(113)에서는, 헤테로 고리 화합물 및 PCBBiF가 호스트 재료이고 [$\text{Ir}(\text{tBuppm})_2(\text{acac})$]가 게스트 재료이었다.

[1025]

다음으로, 전자 수송층(114)으로서, 발광층(113) 위에 상기 헤테로 고리 화합물 및 Bphen을 각각 두께 20nm 및 두께 10nm로 이 순서대로 증착에 의하여 퇴적하였다. 다음으로, 전자 주입층(115)으로서, 플루오린화 리튬(LiF)을 증착에 의하여 두께 1nm로 퇴적하였다.

[1026]

전극(102)으로서는, 알루미늄(Al)을 두께 200nm로 퇴적하였다.

[1027]

다음으로, 질소 분위기를 포함하는 글로브 박스에 있어서, 유기 EL 장치용 실재를 사용하여 EL층(103)이 제공된 기판에 밀봉 기판을 고정함으로써 각 발광 소자를 밀봉하였다. 구체적으로는, 기판 위에서 EL층(103)을 둘러싸도록 실재를 도포하고 상기 기판을 밀봉 기판과 접착시킨 후, 파장 365nm의 자외광을 $6\text{J}/\text{cm}^2$ 로 조사하고 가열 처리를 80°C 에서 1시간 동안 수행하였다. 상기 단계를 거쳐, 발광 소자를 얻었다.

[1028]

<발광 소자 9 및 비교 발광 소자 10의 제작>

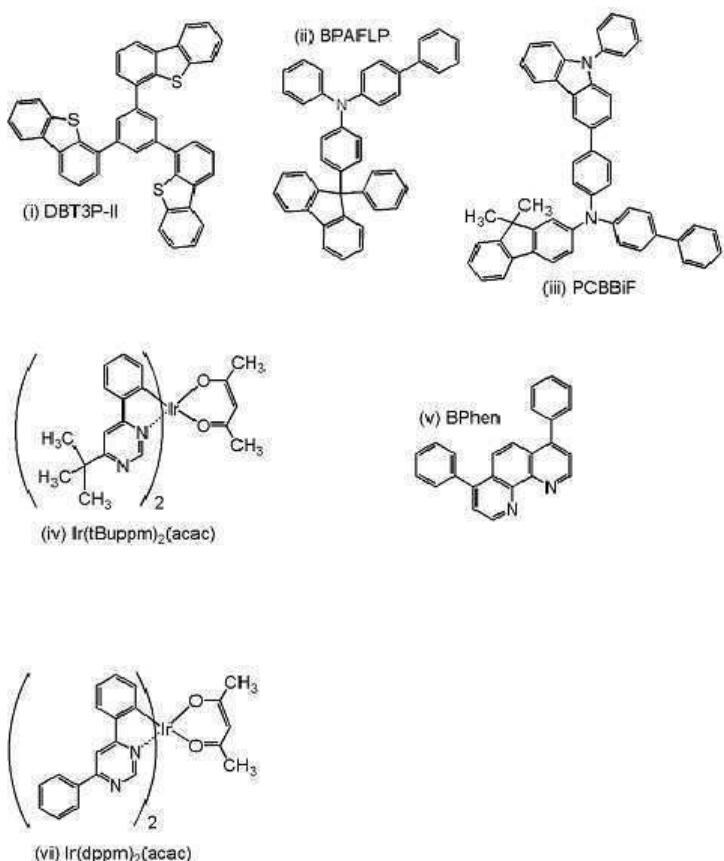
[1029]

발광 소자 9 및 비교 발광 소자 10은, 발광층(113)의 형성 단계를 제외하면, 발광 소자 1 내지 7 및 비교 발광 소자 8과 같은 방법에 의하여 제작되었다.

[1030] 발광 소자 9 및 비교 발광 소자 10 각각의 발광층(113)에는, 상기 헤테로 고리 화합물, PCBBiF, 및 비스[2-(6-페닐-4-페리미딘일-κN3)페닐-κC](2,4-펜탄다이오네이토-κ²O,O')이리듐(III)(약칭: Ir(dppm)₂(acac))을, 형성된 층이 헤테로 고리 화합물 대 PCBBiF 대 [Ir(dppm)₂(acac)]의 중량비가 0.7:0.3:0.05이고 두께가 20nm이 되도록 공증착에 의하여 퇴적하였다. 그 층 위에, 헤테로 고리 화합물, PCBBiF, 및 [Ir(dppm)₂(acac)]를, 형성된 층이 헤테로 고리 화합물 대 PCBBiF 대 [Ir(dppm)₂(acac)]의 중량비가 0.8:0.2:0.05이고 두께가 20nm이 되도록 공증착에 의하여 더 퇴적하였다. 이러한 식으로, 발광층(113)을 총 두께가 40nm이 되도록 형성하였다. 또한, 발광층(113)에서는, 헤테로 고리 화합물 및 PCBBiF가 호스트 재료이고 [Ir(dppm)₂(acac)]가 게스트 재료이다.

[1031] 본 발명의 일 형태에 따른 헤테로 고리 화합물 외의, 발광 소자의 EL층에서의 재료의 구조에 대하여 아래에서 나타낸다.

[1032] [화학식 258]



[1033]

[1034] 또한, 발광 소자 1에서는, 실시예 1에서 설명한 2-[3'-(다이벤조싸이오펜-4-일)-3,1':3',1'''-터페닐-1-일]다이벤조[f,h]퀴녹살린(약칭: 2mDBtTPDBq-II)을 발광층(113) 및 전자 수송층(114)의 헤테로 고리 화합물로서 사용하였다.

[1035] 발광 소자 2에서는, 실시예 2에서 설명한 2-[3'-(다이벤조싸이오펜-4-일)-3,1':4',1'''-터페닐-1-일]다이벤조[f,h]퀴녹살린(약칭: 2DBtTPDBq)을 발광층(113) 및 전자 수송층(114)의 헤테로 고리 화합물로서 사용하였다.

[1036] 발광 소자 3에서는, 실시예 3에서 설명한 2-[4'-(다이벤조싸이오펜-4-일)-3,1':4',1'''-터페닐-1-일]다이벤조[f,h]퀴녹살린(약칭: 2DBtTPDBq-03)을 발광층(113) 및 전자 수송층(114)의 헤테로 고리 화합물로서 사용하였다.

[1037] 발광 소자 4에서는, 실시예 4에서 설명한 2-[4'-(다이벤조싸이오펜-4-일)-4,1':3',1'''-터페닐-1-일]다이벤조[f,h]퀴녹살린(약칭: 2DBtTPDBq-02)을 발광층(113) 및 전자 수송층(114)의 헤테로 고리 화합물로서 사용하였다.

[1038] 발광 소자 5에서는, 실시예 5에서 설명한 2-[4'-(다이벤조싸이오펜-4-일)-3,1':3',1'''-터페닐-1-일]다이벤조

[f, h]퀴녹살린(약칭: 2DBtTPDBq-04)을 발광층(113) 및 전자 수송층(114)의 혼합으로 고리 화합물로서 사용하였다.

[1039] 발광 소자 6에서는, 실시예 6에서 설명한 2-[3'-(다이벤조싸이오펜-4-일)-3,1':3',1''':3'',1'''-퀴터페닐-1-일]다이벤조[f, h]퀴녹살린(약칭: 2mDBtQPDBq-II)을 발광층(113) 및 전자 수송층(114)의 혼합으로 고리 화합물로서 사용하였다.

[1040] 발광 소자 7 및 9 각각에서는, 실시예 7에서 설명한 2-[4'-(9-페닐-9H-카바졸-3-일)-1,1':3',1''-터페닐-3-일]다이벤조[f, h]퀴녹살린(약칭: 2mmpPCTPDBq)을 발광층(113) 및 전자 수송층(114)의 혼합으로 고리 화합물로서 사용하였다.

[1041] 발광 소자 8에서는, 2-[3'-(다이벤조싸이오펜-4-일)바이페닐-3-일]다이벤조[f, h]퀴녹살린(약칭: 2mDBTBPDBq-II)을 발광층(113) 및 전자 수송층(114)의 혼합으로 고리 화합물로서 사용하였다.

[1042] 비교 발광 소자 10에서는, 실시예 9에서 설명한 2-[3'-(다이벤조싸이오펜-4-일)-3,1':3',1''':3'',1'''-퀴터페닐-1-일]다이벤조[f, h]퀴녹살린(약칭: 2mDBtQPDBq-II)을 발광층(113) 및 전자 수송층(114)의 혼합으로 고리 화합물로서 사용하였다.

[1043] 표 2 및 표 3은 본 실시예에서 설명한 소자의 구조를 열거한 것이다.

[표 2]

	제 1 전극	정공 주입층	정공 수송층	발광층	전자 수송층	전자 주입층	제 2 전극	
발광 소자 1	ITO (110nm)	DBT3P-II:MoOx (4:2 20nm)	BPAFLP (20nm)	*	2mDBtTPDBq-II (20nm)	Bphen (10nm)	LiF (1nm)	Al (200nm)
발광 소자 2	ITO (110nm)	DBT3P-II:MoOx (4:2 20nm)	BPAFLP (20nm)	**	2DBtTPDBq (20nm)	Bphen (10nm)	LiF (1nm)	Al (200nm)
발광 소자 3	ITO (110nm)	DBT3P-II:MoOx (4:2 20nm)	BPAFLP (20nm)	***	2DBtTPDBq-03 (20nm)	Bphen (10nm)	LiF (1nm)	Al (200nm)
발광 소자 4	ITO (110nm)	DBT3P-II:MoOx (4:2 20nm)	BPAFLP (20nm)	****	2DBtTPDBq-02 (20nm)	Bphen (10nm)	LiF (1nm)	Al (200nm)
발광 소자 5	ITO (110nm)	DBT3P-II:MoOx (4:2 20nm)	BPAFLP (20nm)	*****	2DBtTPDBq-04 (20nm)	Bphen (10nm)	LiF (1nm)	Al (200nm)
발광 소자 6	ITO (110nm)	DBT3P-II:MoOx (4:2 20nm)	BPAFLP (20nm)	*****	2mDBtQPDBq-II (20nm)	Bphen (10nm)	LiF (1nm)	Al (200nm)
발광 소자 7	ITO (110nm)	DBT3P-II:MoOx (4:2 20nm)	BPAFLP (20nm)	*****	2mmpPCTPDBq (20nm)	Bphen (10nm)	LiF (1nm)	Al (200nm)
비교 발광 소자 8	ITO (110nm)	DBT3P-II:MoOx (4:2 20nm)	BPAFLP (20nm)	*****	2mDBtBPDBq-I (20nm)	Bphen (10nm)	LiF (1nm)	Al (200nm)

[1045]

[1046] *2mDBtTPDBq-II:PCBBI_F:[Ir(tBu_{ppm})₂(acac)](0.7:0.3:0.05 20nm\0.8:0.2:0.05 20nm)

[1047] **2DBtTPDBq:PCBBI_F:[Ir(tBu_{ppm})₂(acac)](0.7:0.3:0.05 20nm\0.8:0.2:0.05 20nm)

[1048] ***2DBtTPDBq-03:PCBBI_F:[Ir(tBu_{ppm})₂(acac)](0.7:0.3:0.05 20nm\0.8:0.2:0.05 20nm)

[1049] ****2DBtTPDBq-02:PCBBI_F:[Ir(tBu_{ppm})₂(acac)](0.7:0.3:0.05 20nm\0.8:0.2:0.05 20nm)

- [1050] *****2DBtTPDBq-04:PCBBiF:[Ir(tBuppm)₂(acac)](0.7:0.3:0.05 20nm\0.8:0.2:0.05 20nm)
- [1051] *****2mDBtQPDBq-II:PCBBiF:[Ir(tBuppm)₂(acac)](0.7:0.3:0.05 20nm\0.8:0.2:0.05 20nm)
- [1052] *****2mmpPCTPDBq:PCBBiF:[Ir(tBuppm)₂(acac)](0.7:0.3:0.05 20nm\0.8:0.2:0.05 20nm)
- [1053] *****2mDBTBPDBq-II:PCBBiF:[Ir(tBuppm)₂(acac)](0.7:0.3:0.05 20nm\0.8:0.2:0.05 20nm)

[1054] [표 3]

	제 1 전극	정공 주입층	정공 수송층	발광층	전자 수송층	전자 주입층	제 2 전극	
발광 소자 9	ITO (110nm)	DBT3P-II:MoO _x (4:2 20nm)	BPAFLP (20nm)	*****	2mmpP C _T PDB q (20nm)	Bphen (10nm)	LiF (1nm)	Al (200nm)
비교 발광 소자 10	ITO (110nm)	DBT3P-II:MoO _x (4:2 20nm)	BPAFLP (20nm)	*****	2mPCB PDBq (20nm)	Bphen (10nm)	LiF (1nm)	Al (200nm)

[1055]

- [1056] *****2mmpPCTPDBq:PCBBiF:Ir(dppm)₂(acac)(0.7:0.3:0.05 20nm\0.8:0.2:0.05 20nm)

[1057] *****2mPCBPDBq:PCBBiF:Ir(dppm)₂(acac)(0.7:0.3:0.05 20nm\0.8:0.2:0.05 20nm)

[1058] <발광 소자 1 내지 7 및 비교 발광 소자 8의 특성>

[1059] 표 4는 발광 소자 1 내지 7 및 비교 발광 소자 8의 특성을 열거한 것이다. 표 4에서 볼 수 있는 바와 같이, 발광 소자 1 내지 7 및 비교 발광 소자 8은 양호한 특성을 갖는 것으로 알았다.

[1060] [표 4]

	전압(V)	전류 밀도 (mA/cm ²)	색도 (x,y)	휘도 (cd/m ²)	전류 효율 (cd/A)	전력 효율 (lm/W)	외부 양자 효율(%)
발광 소자 1	2.8	0.80	(0.41,0.58)	900	115	130	30
발광 소자 2	2.8	1.01	(0.43,0.56)	1100	109	123	29
발광 소자 3	2.8	0.84	(0.42,0.57)	900	108	121	29
발광 소자 4	2.7	1.08	(0.42,0.57)	1100	103	120	27
발광 소자 5	2.8	1.00	(0.41,0.58)	1100	111	124	29
발광 소자 6	3.0	1.11	(0.43,0.56)	1100	101	106	27
발광 소자 7	2.8	0.70	(0.40,0.59)	800	114	128	30
비교 발광 소자 8	2.8	0.88	(0.41,0.58)	1000	112	126	29

[1061]

- [1062] 도 53은 초기 휘도 5000cd/m²에서 발광 소자 1 내지 6 및 비교 발광 소자 8에 수행한 정전류 구동 시험의 결과를 나타낸 것이다. 도 53에서 볼 수 있는 바와 같이, 발광 소자 1 내지 6 및 비교 발광 소자 8은 신뢰성이 높은 것으로 알았다. 그러나, 발광 소자 3 및 4의 봉괴 곡선의 경사는 약간 가파르다. 발광 소자 3에서 호스트 재료로서 사용한 2DBtTPDBq-03 및 발광 소자 4에서 호스트 재료로서 사용한 2DBtTPDBq-02는 각각 아릴렌기로서 하나의 메타페닐렌기 및 2개의 파라페닐렌기를 포함하는 분자 구조를 갖는다. 한편, 매우 신뢰성이 높은 발광 소자 1, 2, 및 5 각각에서는, 2mDBtTPDBq-II, 2DBtTPDBq, 및 2DBtTPDBq-04를 발광층에 사용하고 있다. 이들 3

개의 재료는 각각 하나의 파라페닐렌기를 포함하거나 파라페닐렌기를 포함하지 않는 분자 구조를 갖는다. 따라서, 높은 신뢰성 및 높은 내열성 양쪽 모두를 실현하기 위해서는, 하나의 파라페닐렌기 및 2개의 메타페닐렌기가 분자 구조에 포함되어 있는 것이 바람직하다. 또한, 메타바이페닐-다이일기는, 다이벤조[*f,h*]퀴녹살린 골격 측에서 2개의 메타페닐렌기가 연속적으로 결합되는 식으로 형성되면, 더 높은 신뢰성을 달성할 수 있고 비교 발광 소자 8보다 신뢰성이 높은 소자를 제공할 수 있기 때문에 바람직하다. 메타바이페닐-다이일기가 다이벤조[*f,h*]퀴녹살린 골격 측에서 2개의 메타페닐렌기가 연속적으로 결합되는 식으로 형성되는 경우, 다이벤조[*f,h*]퀴녹살린 골격 측에서 3번째의 페닐렌기를 파라 자리로 하면 높은 내열성을 달성할 수 있기 때문에 더 바람직하다.

[1063] <발광 소자 9 및 비교 발광 소자 10의 특성>

[1064] 표 5는 발광 소자 9 및 비교 발광 소자 10의 특성을 열거한 것이다. 표 5에서 볼 수 있는 바와 같이, 발광 소자 9 및 비교 발광 소자 10은 양호한 특성을 갖는 것으로 알았다.

[1065] [표 5]

	전압(V)	전류 밀도 (mA/cm ²)	색도 (x,y)	최도 (cd/m ²)	전류 효율 (cd/A)	전력 효율 (lm/W)	외부 양자 효율(%)
발광 소자 9	3.1	1.50	(0.55,0.44)	1100	76	77	29
비교 발광 소자 10	3	1.34	(0.55,0.44)	1100	79	83	31

[1066]

[1067] 도 54는 정전류 2mA에서 발광 소자 9 및 비교 발광 소자 10에 수행한 구동 시험의 결과를 나타낸 것이다. 도 54로부터, 발광 소자 9 및 비교 발광 소자 10 각각의 LT₅₀이 1000시간을 넘고, 신뢰성이 높은 것을 알았다. 여기서, 발광 소자 9의 붕괴 곡선의 경사는 비교 발광 소자 10의 붕괴 곡선의 경사보다 완만하고, 이에 따라 발광 소자 9는 비교 발광 소자 10보다 신뢰성이 높다. 따라서, 상술한 바와 같이, 분자 구조에서 다이벤조[*f,h*]퀴녹살린 골격 및 카바졸릴기가 연결되는 2가의 기로서는, 높은 신뢰성을 달성하기 위하여 2개의 페닐렌기가 연속적으로 결합되는 바이페닐-다이일기에 비하여 3개의 페닐렌기가 연속적으로 결합되는 터페닐-다이일기가 바람직하다는 것이 나타났다.

[1068] <내열성의 평가>

[1069] 제작한 발광 소자에 열 물성을 평가하기 위한 시험을 수행하였다. 먼저, 발광 소자를 100°C의 환경에서 소정의 시간 보존하였다. 그리고, 발광 소자를 상기 환경에서 꺼내고 실온까지 냉각시키고, 발광 소자의 외부 양자 효율을 측정하였다. 측정 후, 발광 소자를 100°C의 환경에 돌려주고, 소정의 시간 보존하고, 이들을 꺼내고, 외부 양자 효율을 측정하는 절차를 반복하였다.

[1070] 도 55는 측정 결과를 나타낸 것이다. 또한, 그래프의 가로축은 100°C의 환경에 발광 소자를 넣은 총 보존 시간(h)을 나타낸다. 그래프의 세로축은 열 물성 평가 개시 시의 최대 외부 양자 효율을 100%로 상정한 외부 양자 효율의 유지율(維持率)(%)을 나타낸다. 또한, 소자의 초기 외부 양자 효율은 실질적으로 같고, 즉 약 28%였다.

[1071] 도 55에 나타낸 바와 같이 비교 발광 소자 8은 보존 개시 시부터 5시간 동안 초기 외부 양자 효율을 유지하였지만, 그 후 외부 양자 효율은 급격히 저하되고 25시간이 지난 후에는 0%에 도달하였다. 한편, 발광 소자 1은 본 존 개시 시부터 25시간 동안 초기 외부 양자 효율을 유지하였고, 비교 발광 소자 8보다 높은 열 물성을 나타내었다. 또한, 발광 소자 2 및 5는 50시간이 지난 후에도 초기 외부 양자 효율을 실질적으로 유지하였고, 양호한 열 물성을 나타내었다. 또한, 발광 소자 3 및 4는 1000시간이 지난 후에도 85% 이상의 유지율을 나타내었으며, 이는 열 물성이 매우 높다는 것을 의미한다. 발광 소자 3 및 발광 소자 4에서 호스트 재료로서 각각 사용된 2DBtTPDBq-03 및 2DBtTPDBq-02의 분자 구조는, 각각 아릴렌기로서 2개의 메타페닐렌기 및 하나의 파라페닐렌기

를 갖는다. 이러한 구조는 내열성이 높아지는 경향이 있다. 문자 구조가 터페닐렌 구조(3개의 페닐렌기가 연속적으로 결합되어 있는 구조), 구체적으로는 아릴렌기로서 2개의 메타페닐렌기 및 하나의 파라페닐렌기를 갖는 구조를 포함하는 경우, 문자 전체의 평탄성이 대체로 높아지고 Tg도 높아지는 경향이 있다. 즉, 평탄성이 더 높은 문자 구조는 내열성의 관점에서 적합하다.

[1072] 본 발명의 일 형태에 따른 혜테로 고리 화합물은 중앙에 3개 이상의 페닐렌기를 포함하고, 비교 발광 소자 8에 사용되는 혜테로 고리 화합물보다 분자량이 높다. 따라서, 본 발명의 일 형태에 따른 혜테로 고리 화합물을 사용한 발광 소자는 열 물성이 양호해질 수 있다.

[1073] 또한, 일반적으로, 발광층이 분자량이 높은 화합물을 포함하면, 굴절률이 높아지므로 외부 양자 효율이 저하되는 경향이 있다. 그러나, 발광 소자 1 내지 5 및 비교 발광 소자 8은 실질적으로 같은 초기 외부 양자 효율을 나타내었다. 따라서, 본 발명의 일 형태에 따른 혜테로 고리 화합물은, 발광 소자의 발광층에 포함됨으로써, 발광 소자의 외부 양자 효율을 저하시키지 않고 발광 소자에 양호한 열 물성을 갖게 할 수 있는 것이 확인되었다.

부호의 설명

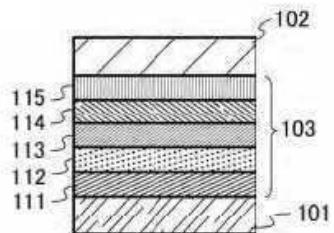
[1074] 101: 제 1 전극, 102: 제 2 전극, 103: EL층, 111: 정공 주입층, 112: 정공 수송층, 113: 발광층, 114: 전자 수송층, 115: 전자 주입층, 501: 제 1 전극, 502: 제 2 전극, 511: 제 1 발광 유닛, 512: 제 2 발광 유닛, 513: 전하 발생층, 601: 구동 회로부(소스 측 구동 회로), 602: 화소부, 603: 구동 회로부(게이트 측 구동 회로), 604: 밀봉 기판, 605: 밀봉 재료, 607: 공간, 608: 리드 배선, 609: FPC(flexible printed circuit), 610: 소자 기판, 611: 스위칭 TFT, 612: 전류 제어 TFT, 613: 제 1 전극, 614: 절연체, 616: EL층, 617: 제 2 전극, 618: 발광 소자, 623: n채널 TFT, 624: p채널 TFT, 901: 하우징, 902: 액정층, 903: 백라이트, 904: 하우징, 905: 드라이버 IC, 906: 단자, 951: 기판, 952: 전극, 953: 절연층, 954: 격벽층, 955: EL층, 956: 전극, 1001: 기판, 1002: 하지 절연막(base insulating film), 1003: 게이트 절연막, 1006: 게이트 전극, 1007: 게이트 전극, 1008: 게이트 전극, 1020: 충간 절연막, 1021: 충간 절연막, 1022: 전극, 1024: 전극, 1025: 격벽, 1028: EL층, 1029: 전극, 1030: 흑색층, 1031: 밀봉 기판, 1032: 실재, 1037: 충간 절연막, 1040: 화소부, 1041: 구동 회로부, 1042: 주변부, 2001: 하우징, 2002: 광원, 3001: 조명 장치, 3002: 표시 장치, 5000: 표시 영역, 5001: 표시 영역, 5002: 표시 영역, 5003: 표시 영역, 5004: 표시 영역, 5005: 표시 영역, 7101: 하우징, 7103: 표시부, 7105: 스탠드, 7107: 표시부, 7109: 조작 키, 7110: 리모트 컨트롤러, 7201: 본체, 7202: 하우징, 7203: 표시부, 7204: 키보드, 7205: 외부 접속 포트, 7206: 포인팅 디바이스, 7301: 하우징, 7302: 하우징, 7303: 연결부, 7304: 표시부, 7305: 표시부, 7306: 스피커부, 7307: 기록 매체 삽입부, 7308: LED 램프, 7309: 조작 키, 7310: 접속 단자, 7311: 센서, 7401: 하우징, 7402: 표시부, 7403: 조작 버튼, 7404: 외부 접속 포트, 7405: 스피커, 7406: 마이크로폰.

본 출원은 2015년 10월 23일에 일본 특허청에 출원된 일련 번호 2015-209351의 일본 특허 출원에 기초하고, 본 명세서에 그 전문이 참조로 통합된다.

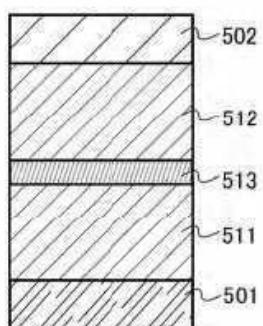
도면

도면1

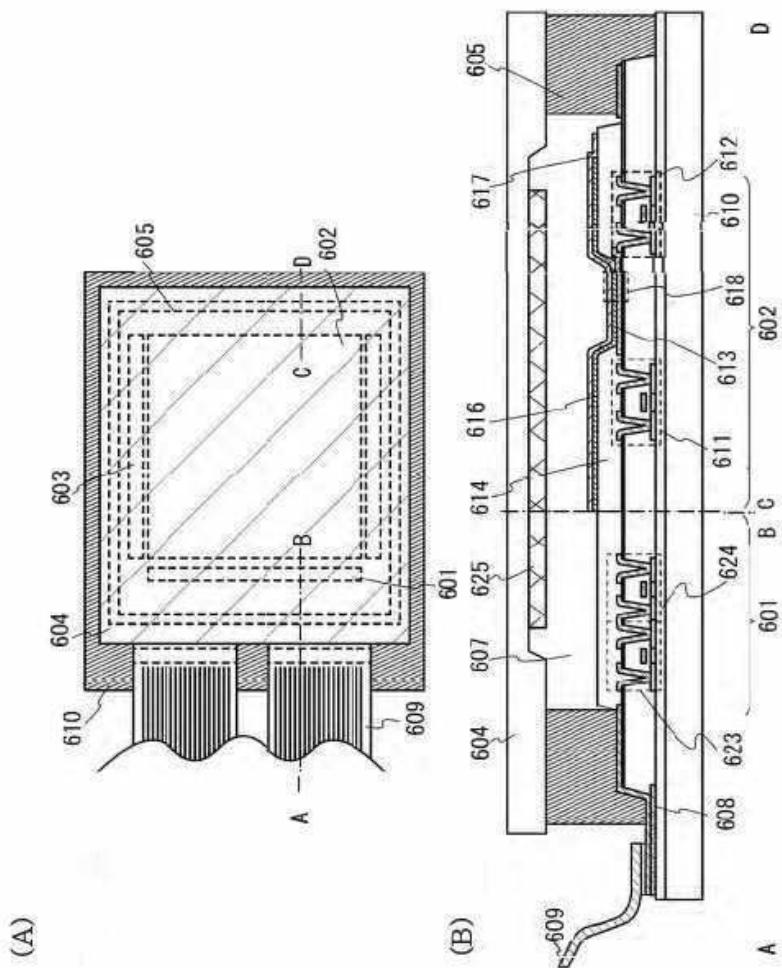
(A)



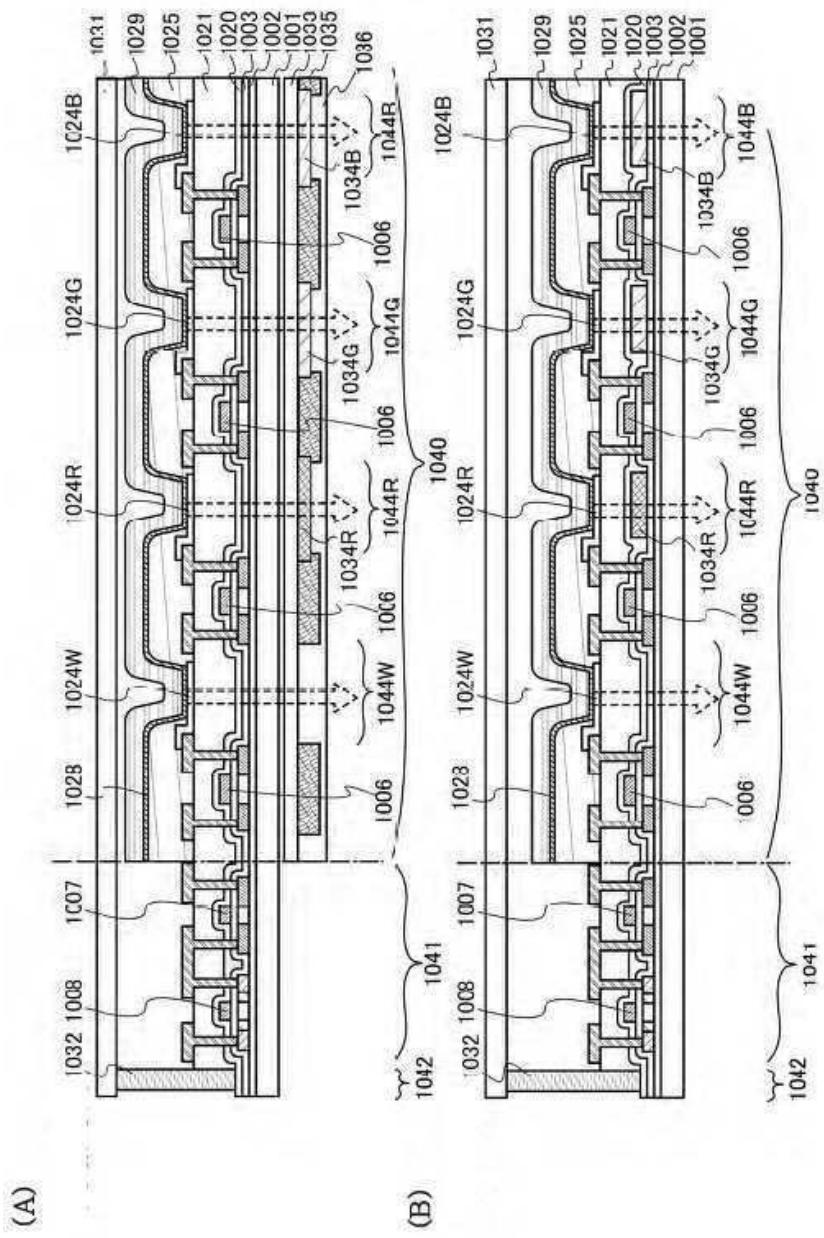
(B)



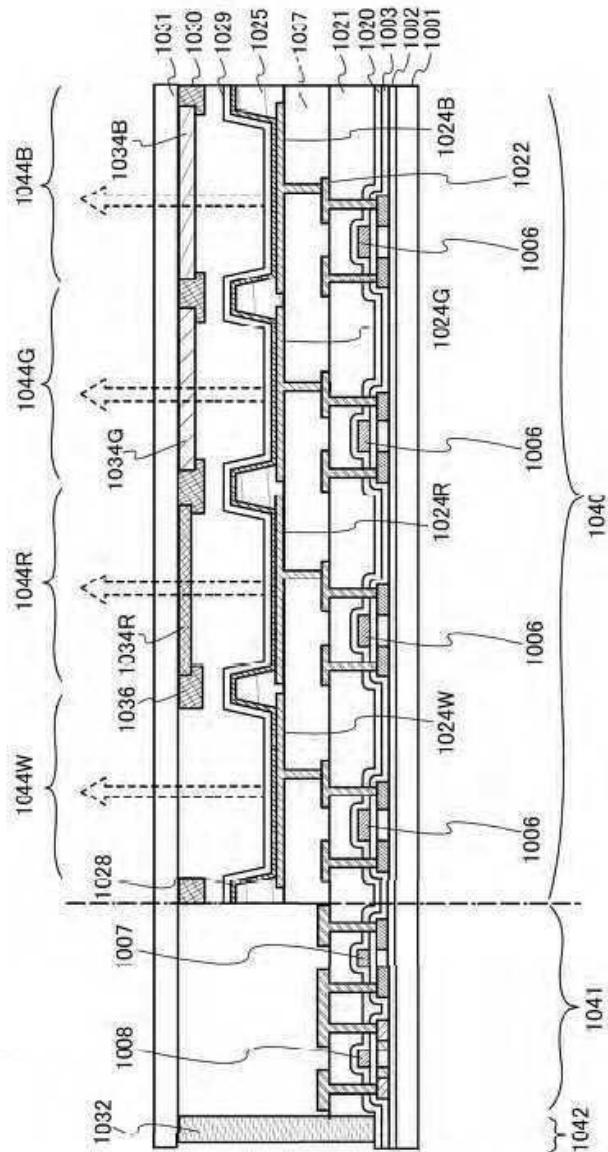
도면2



도면3

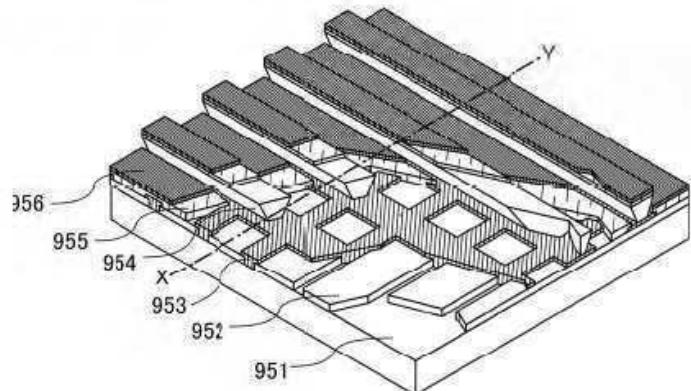


도면4

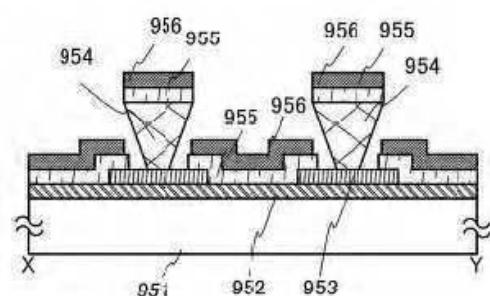


도면5

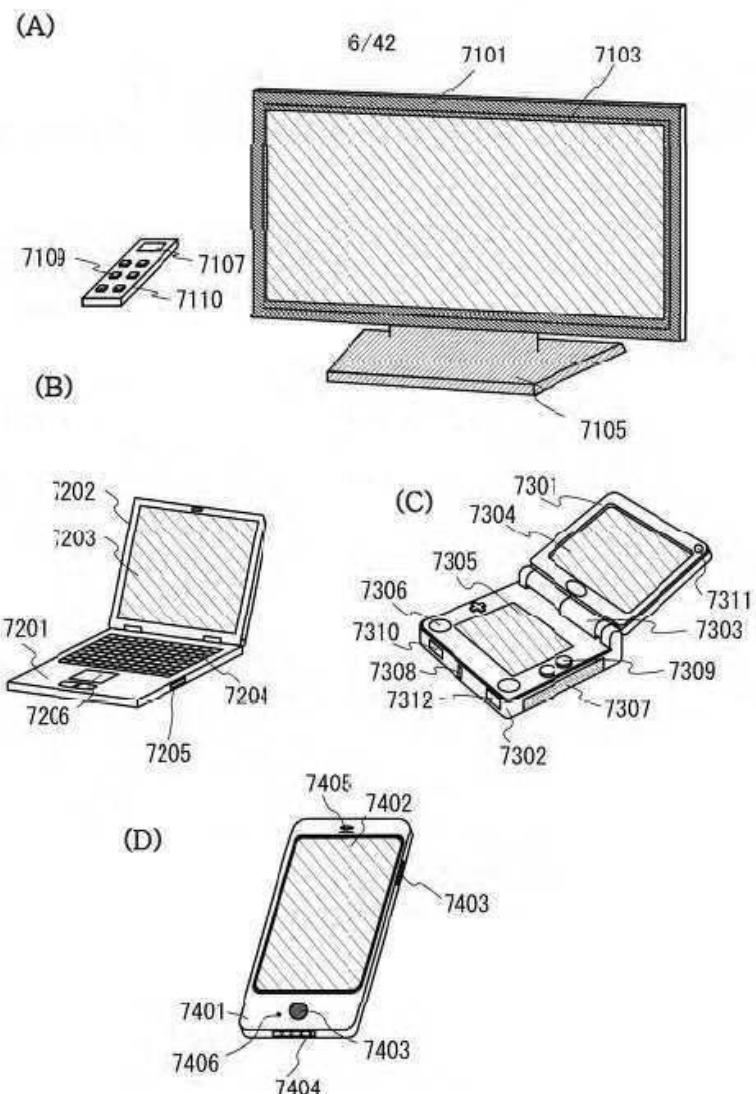
(A)



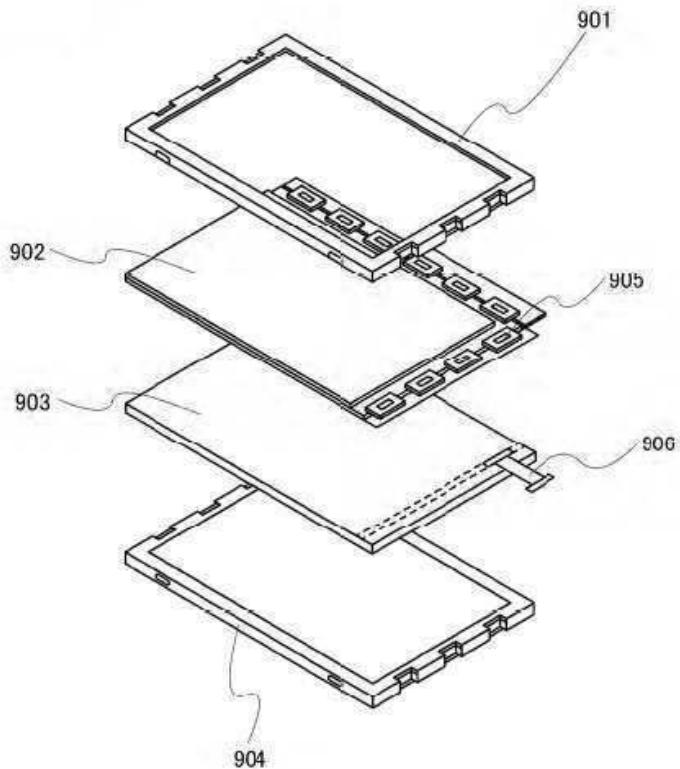
(B)



도면6



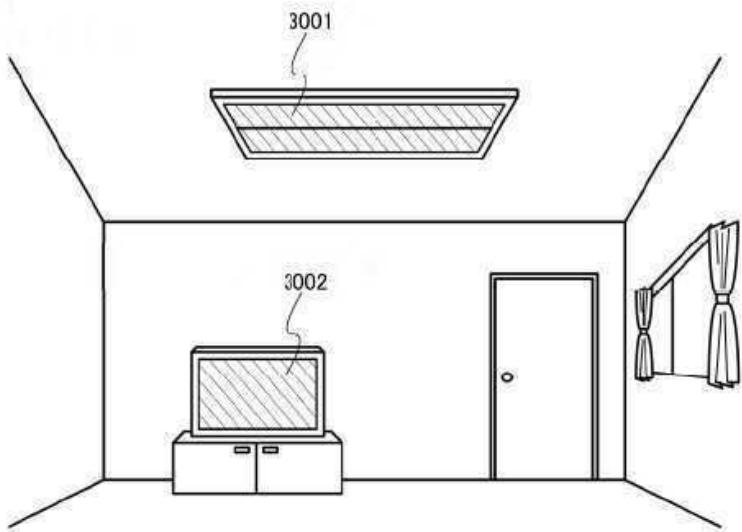
도면7



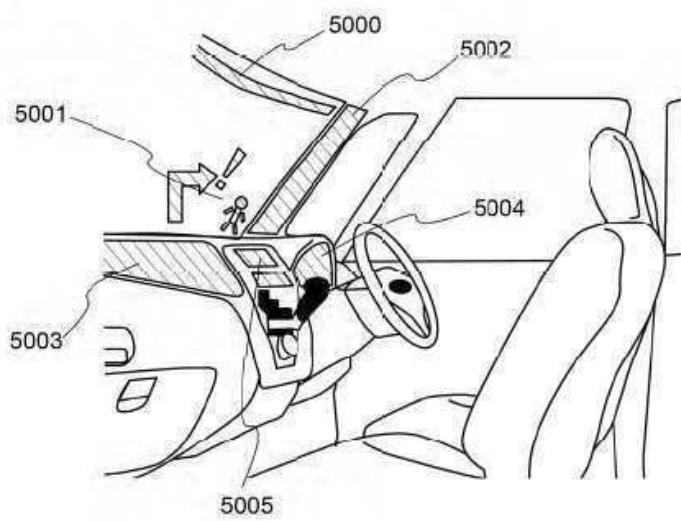
도면8



도면9

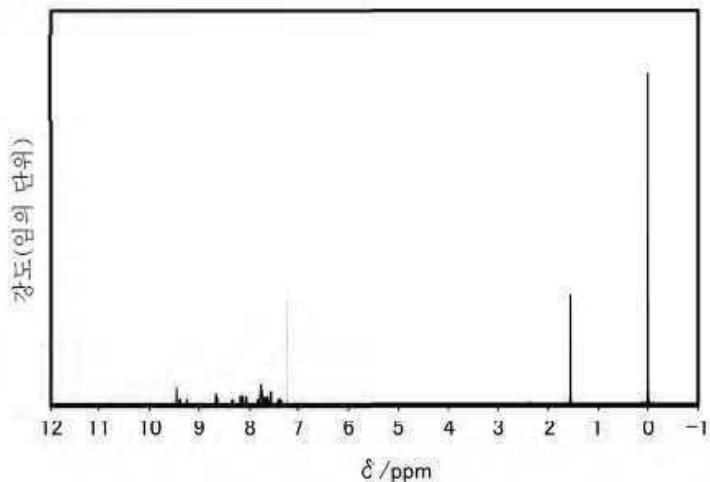


도면10

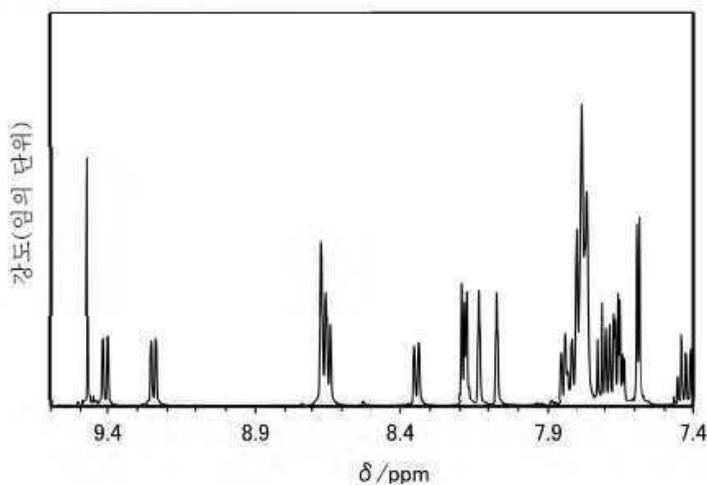


도면11

(A)

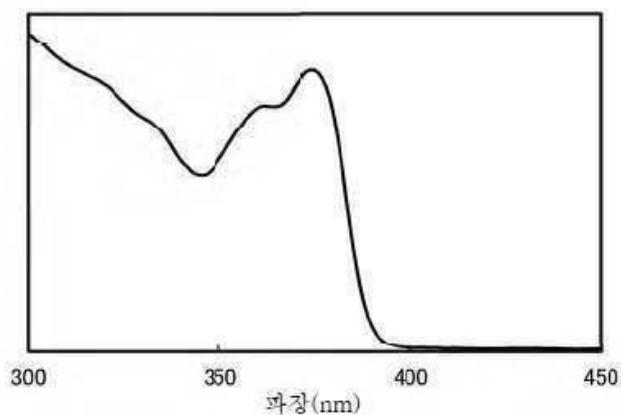


(B)

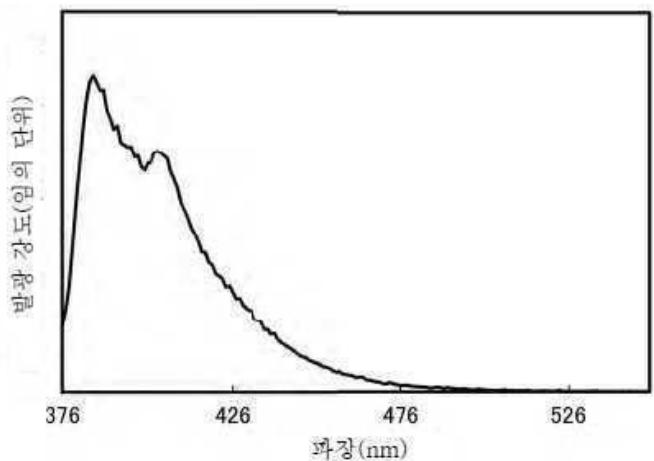


도면12

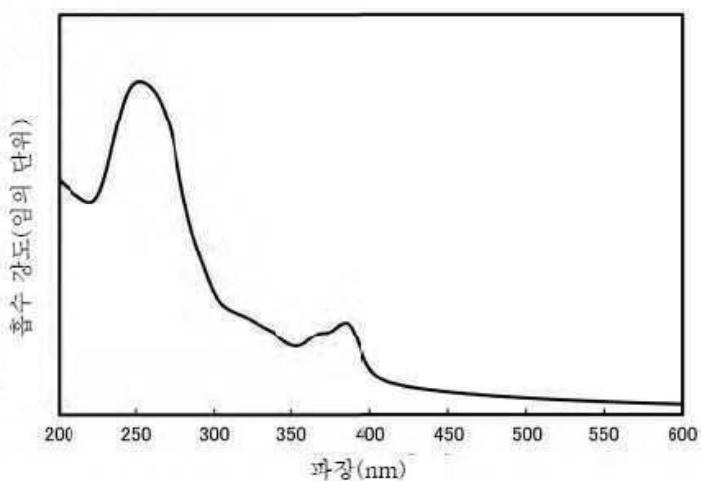
흡수 강도(단위)



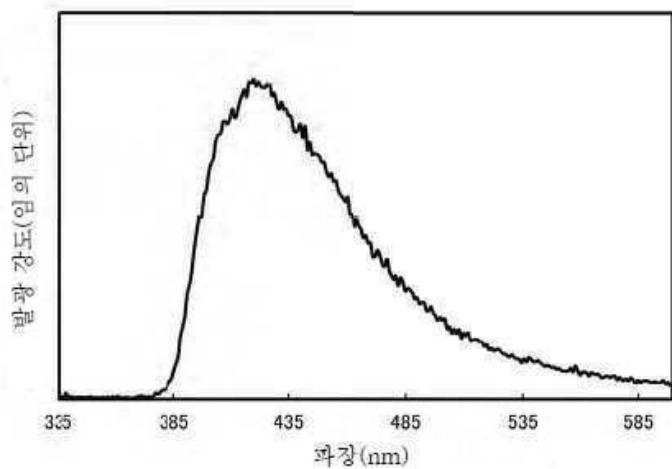
도면13



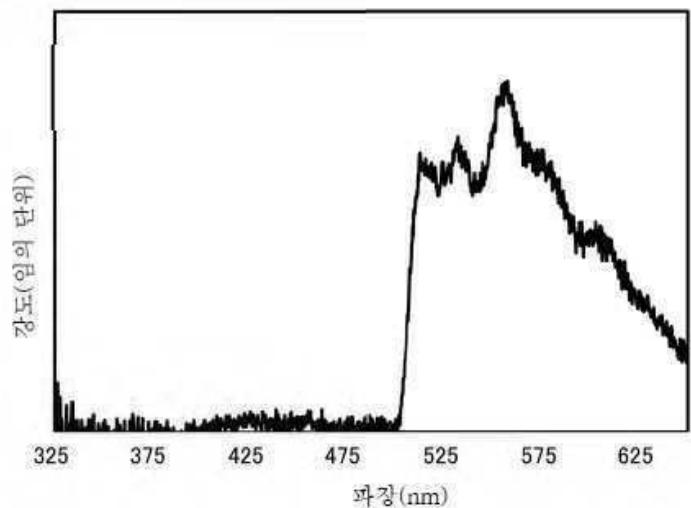
도면14



도면15

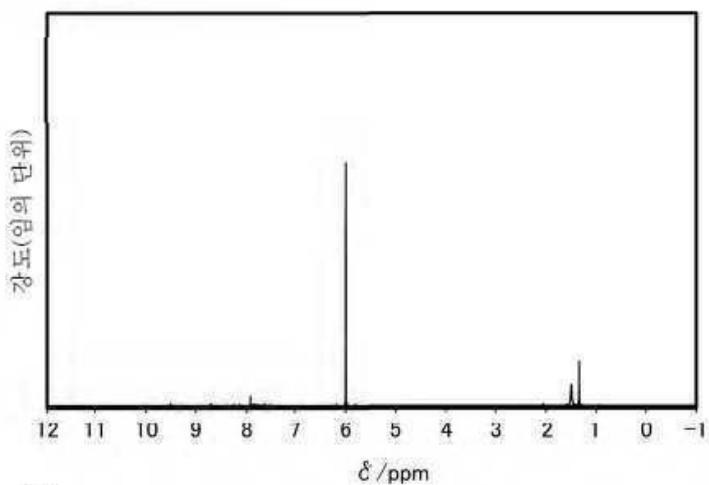


도면16

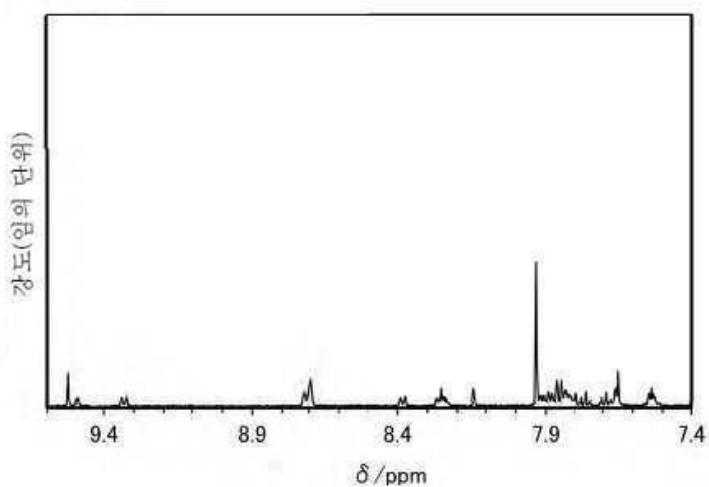


도면17

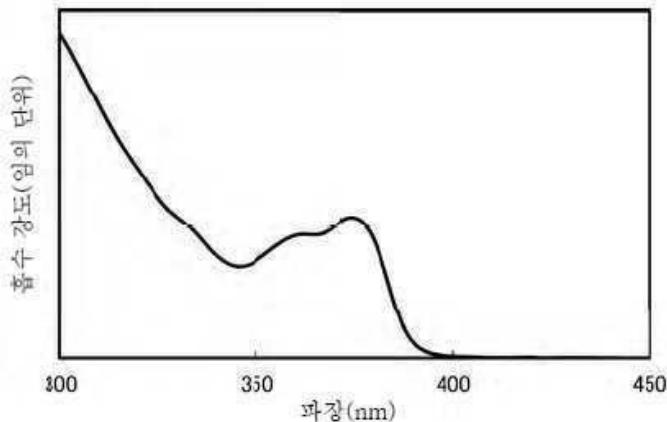
(A)



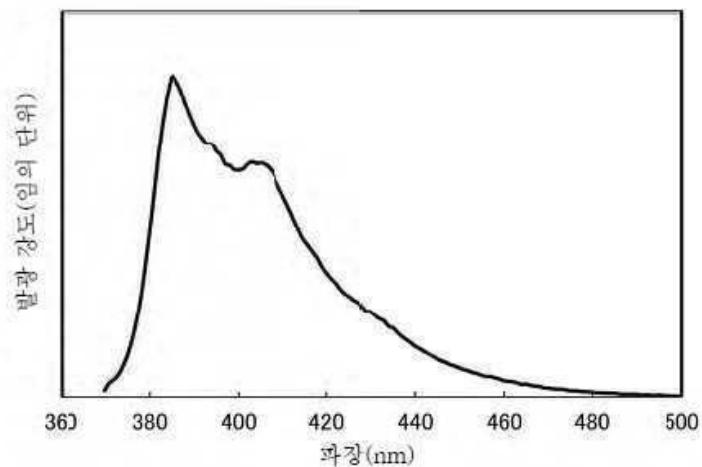
(B)



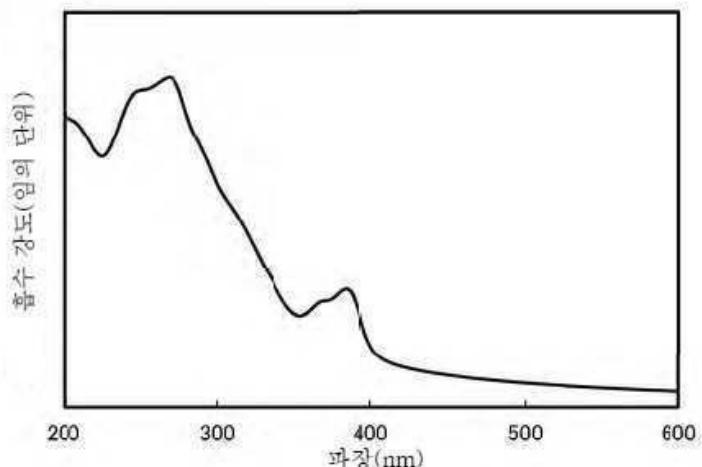
도면18



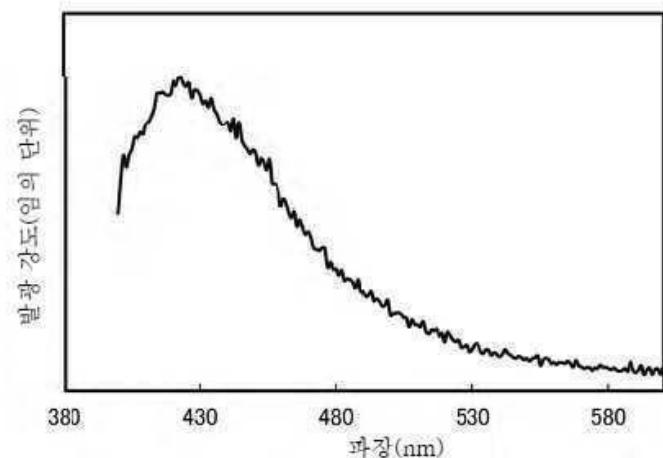
도면19



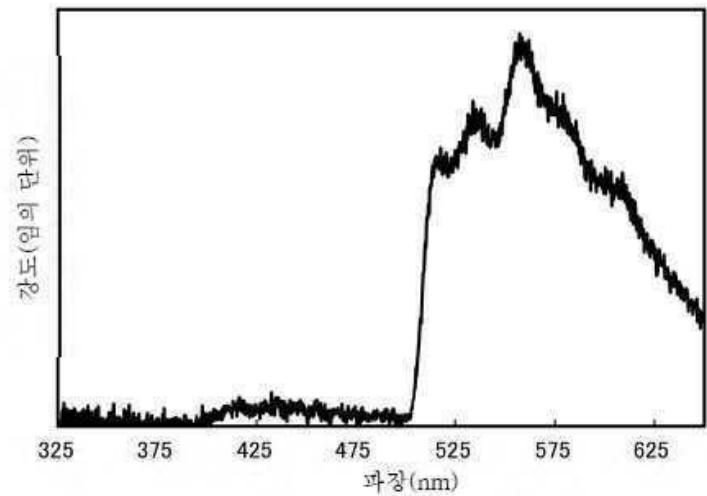
도면20



도면21

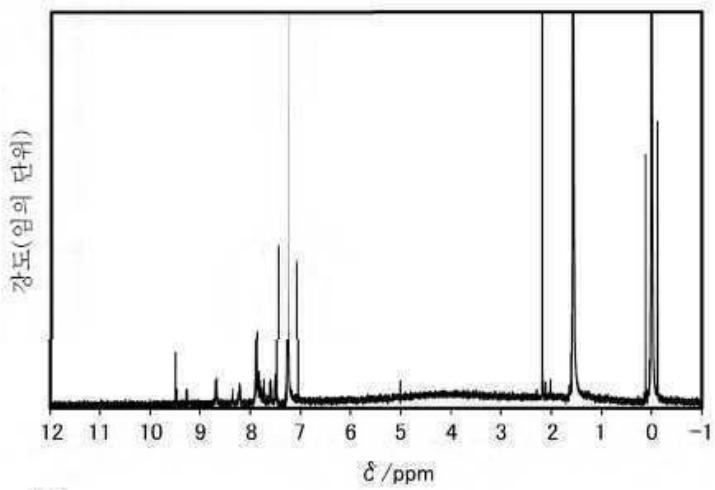


도면22

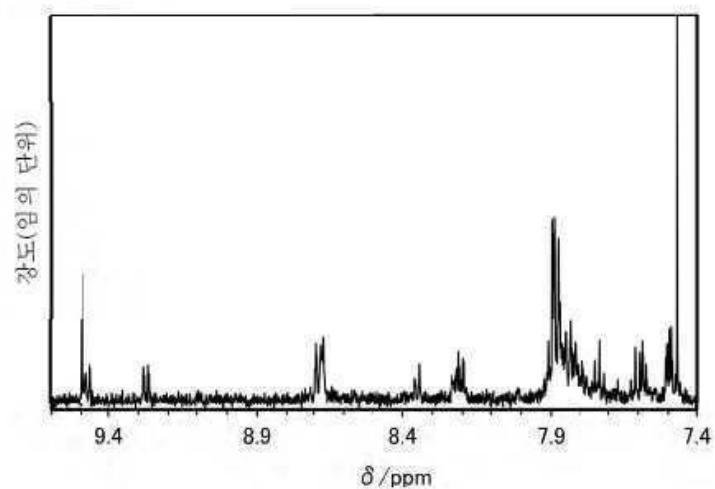


도면23

(A)

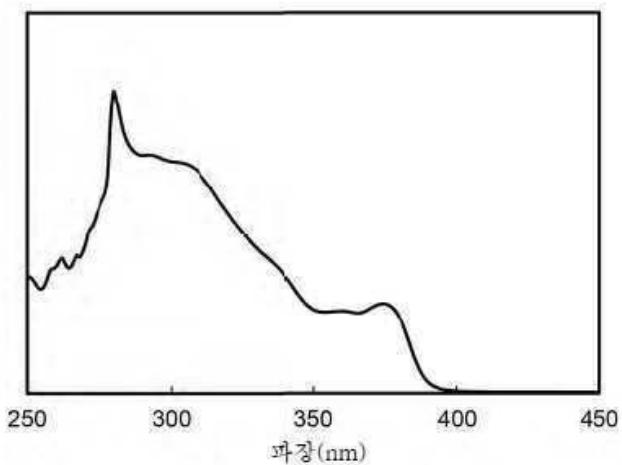


(B)

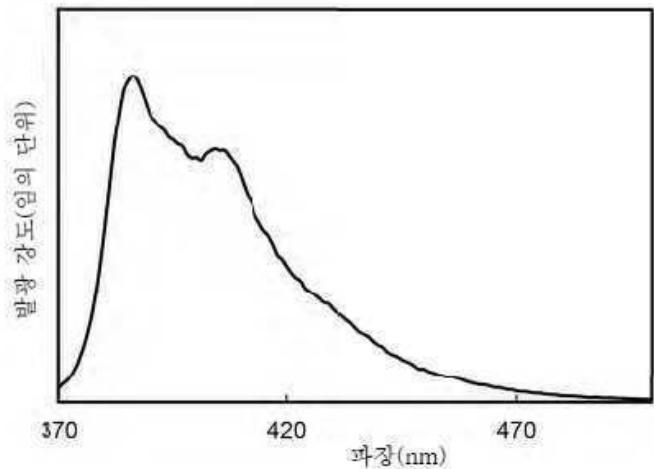


도면24

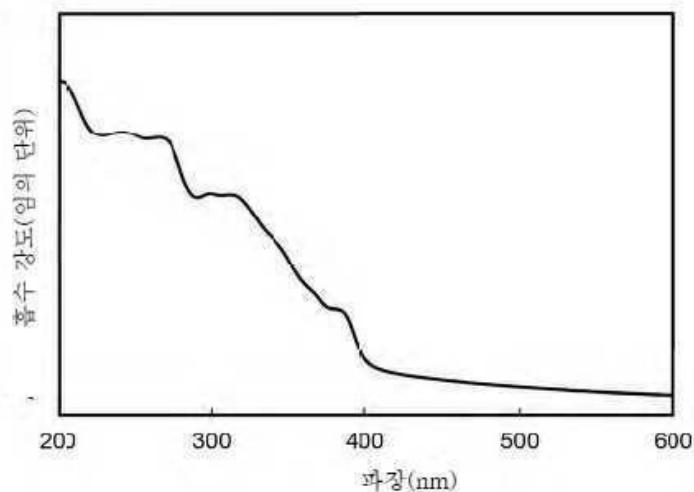
흡수 강도(임의 단위)



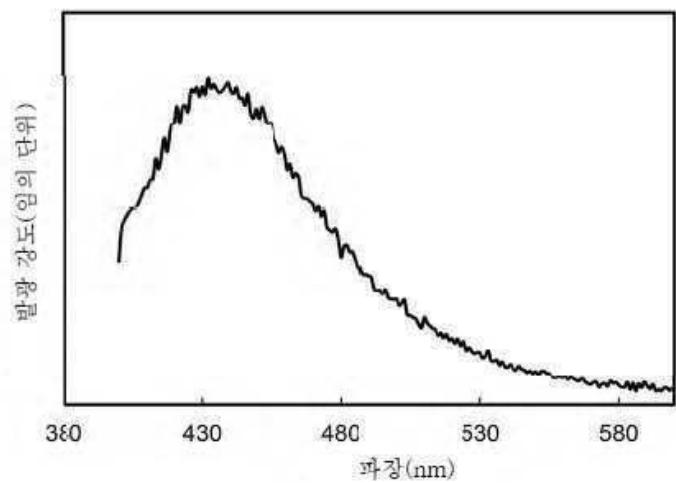
도면25



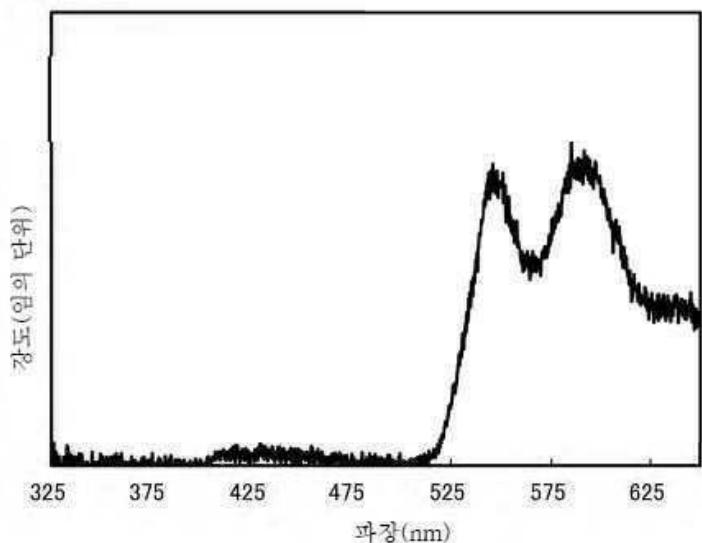
도면26



도면27

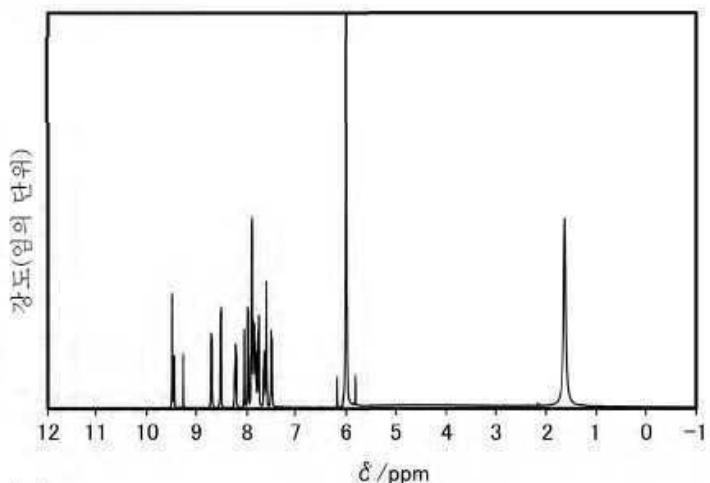


도면28

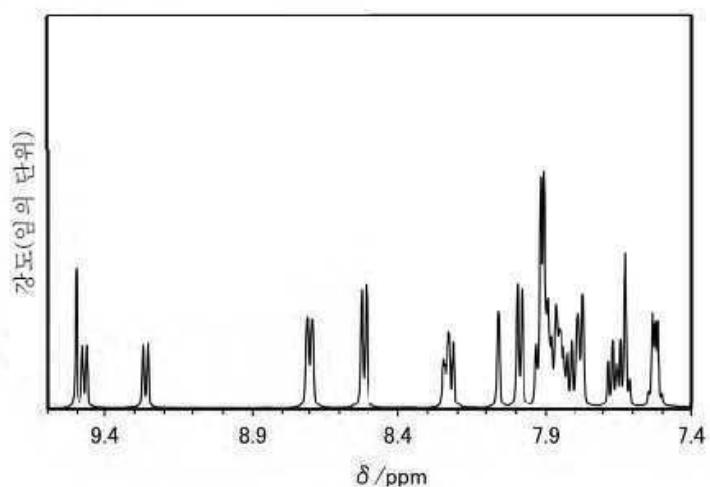


도면29

(A)

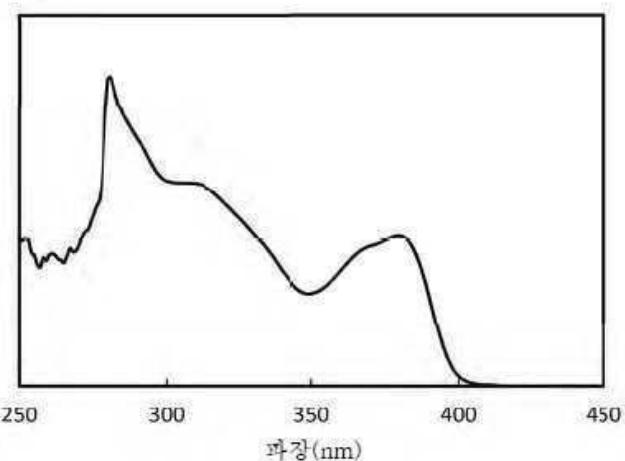


(B)

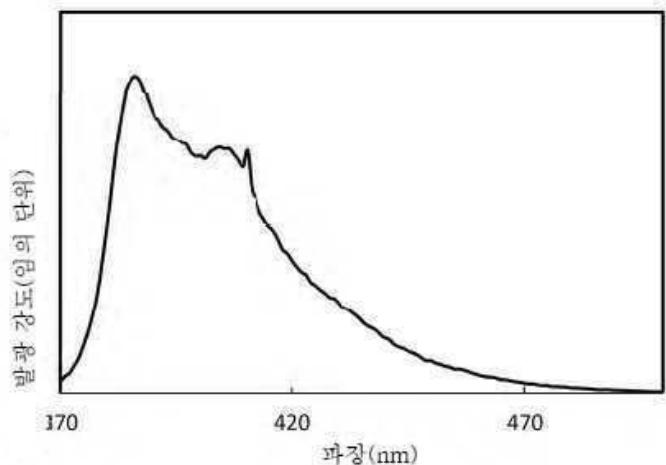


도면30

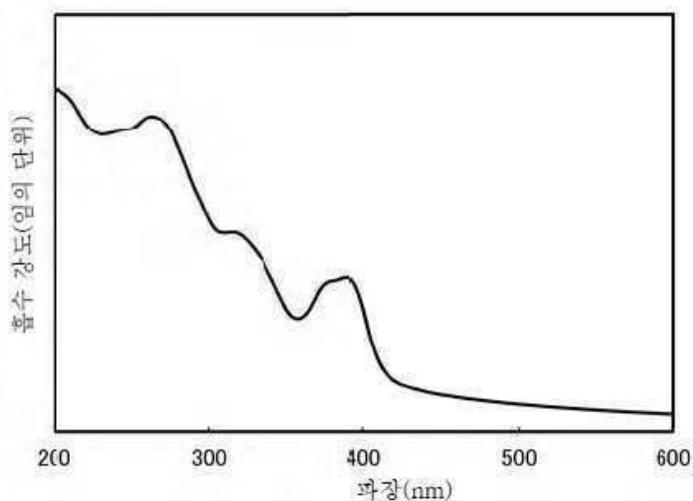
흡수 강도(%)의 단위)



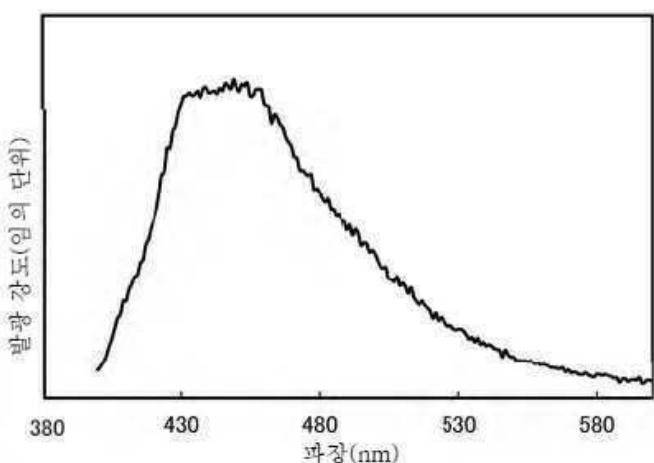
도면31



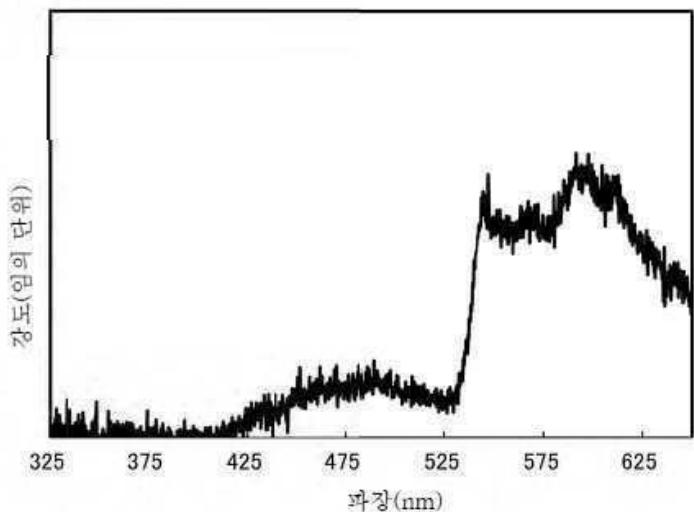
도면32



도면33

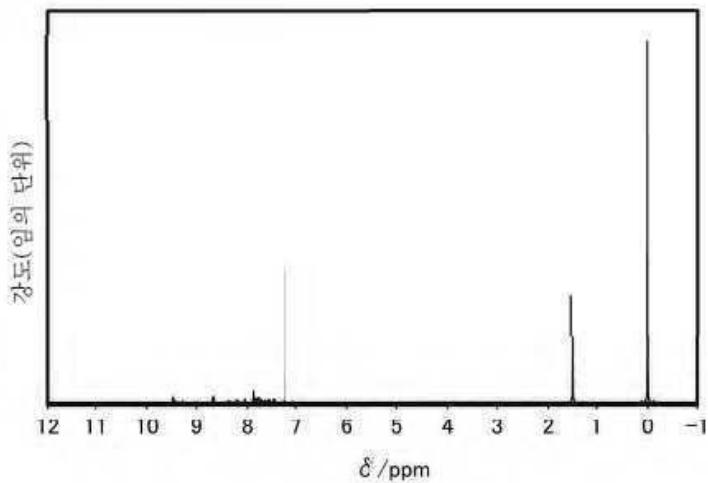


도면34

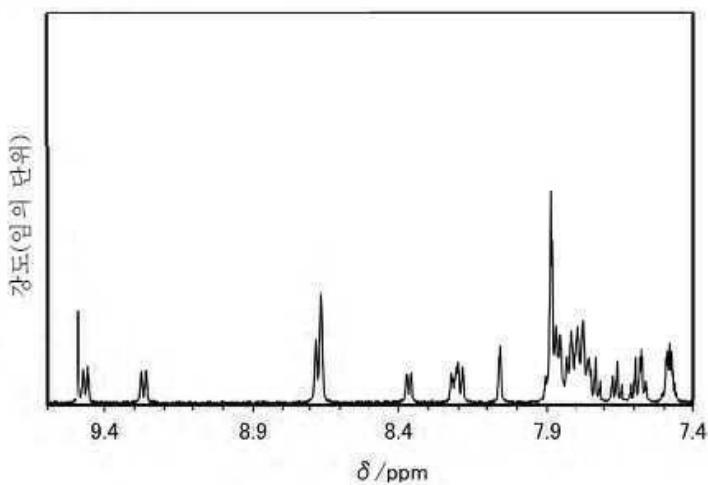


도면35

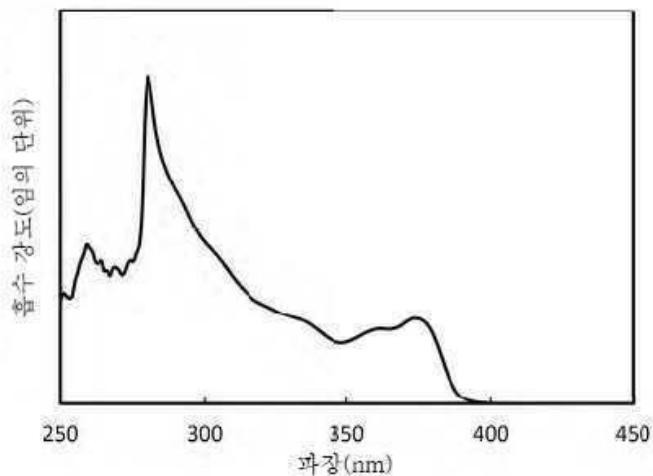
(A)



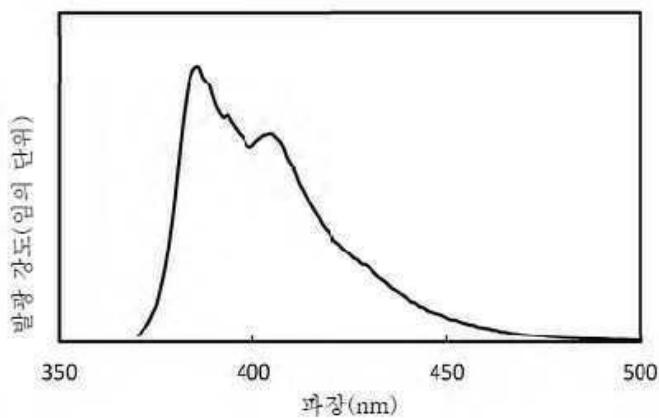
(B)



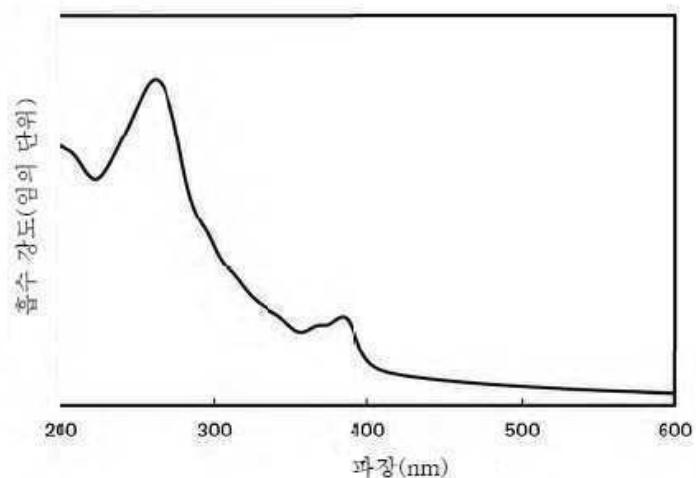
도면36



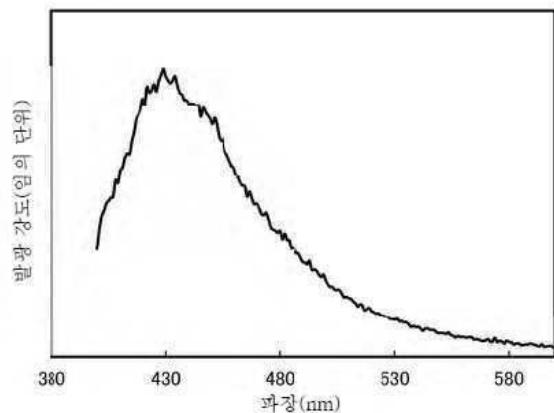
도면37



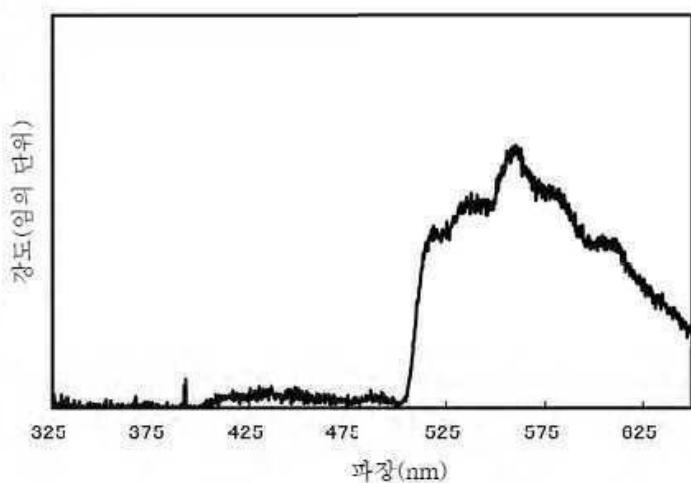
도면38



도면39

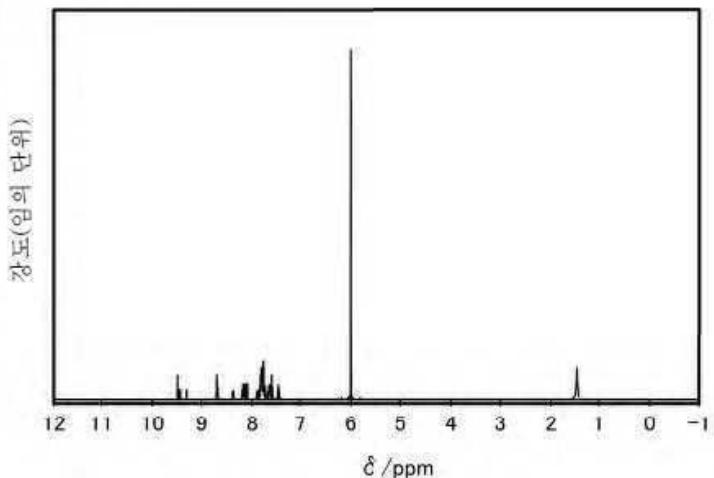


도면40

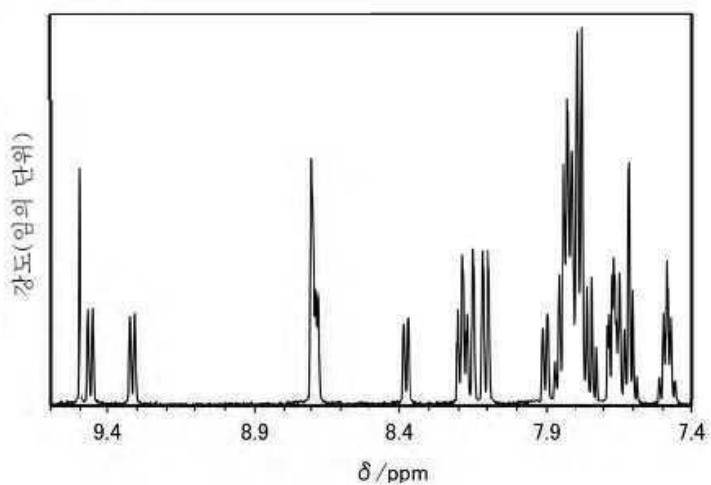


도면41

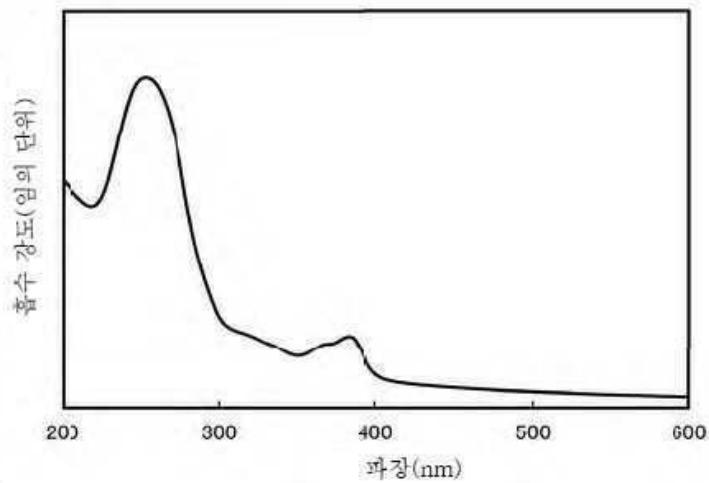
(A)



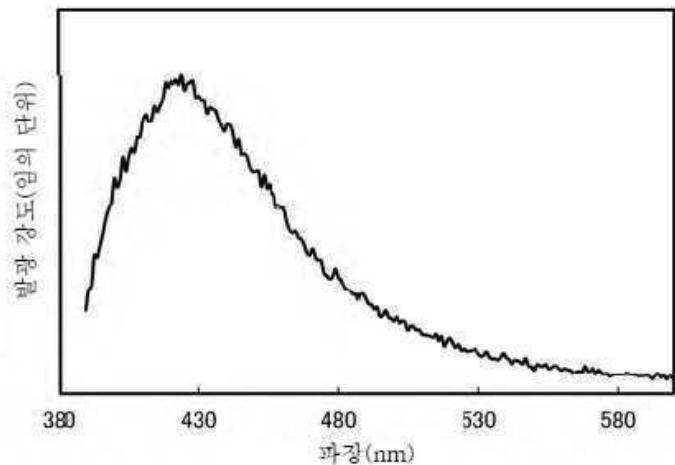
(B)



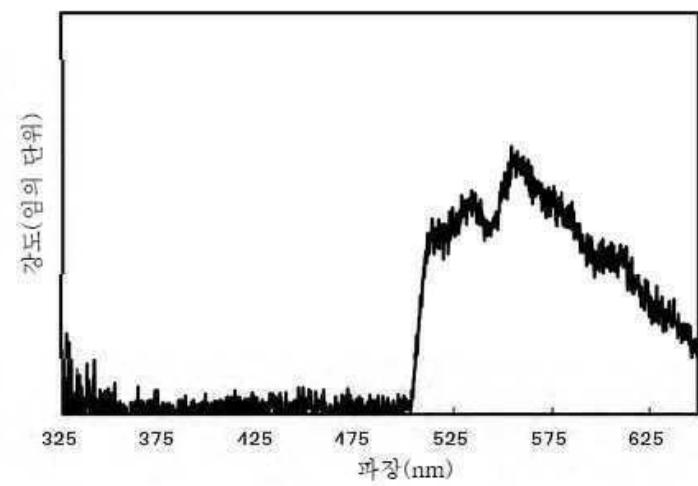
도면42



도면43

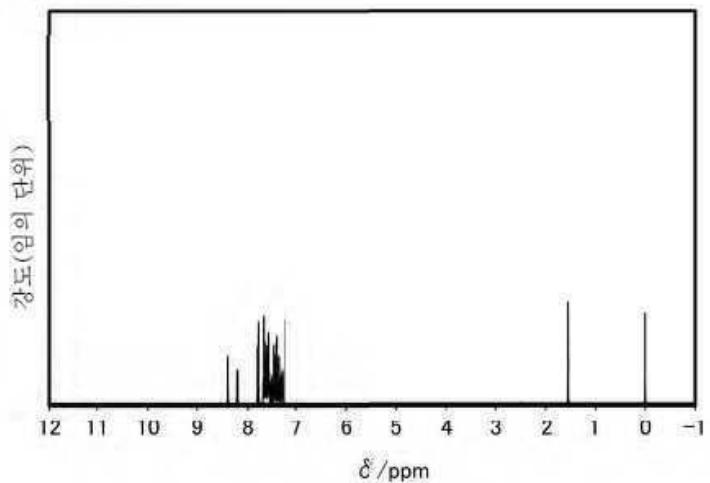


도면44

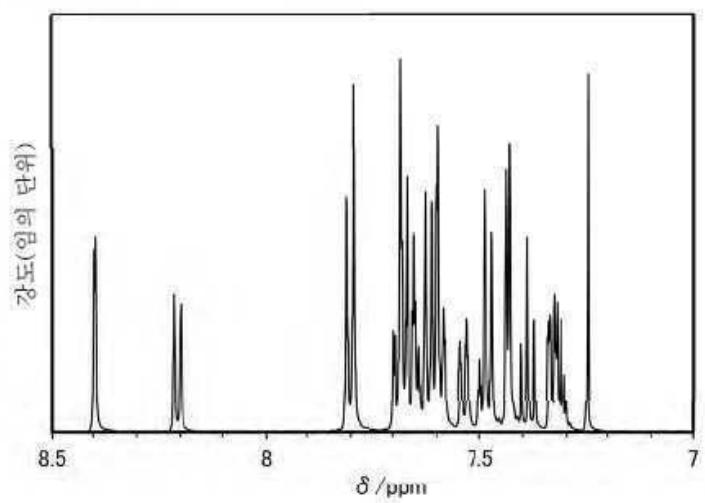


도면45

(A)

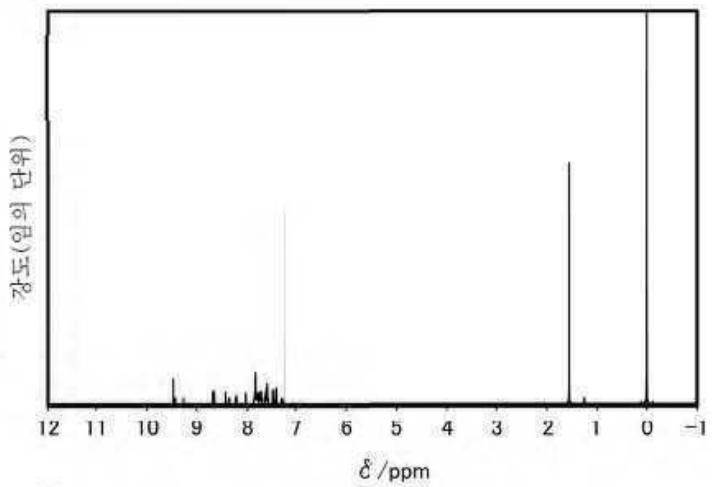


(B)

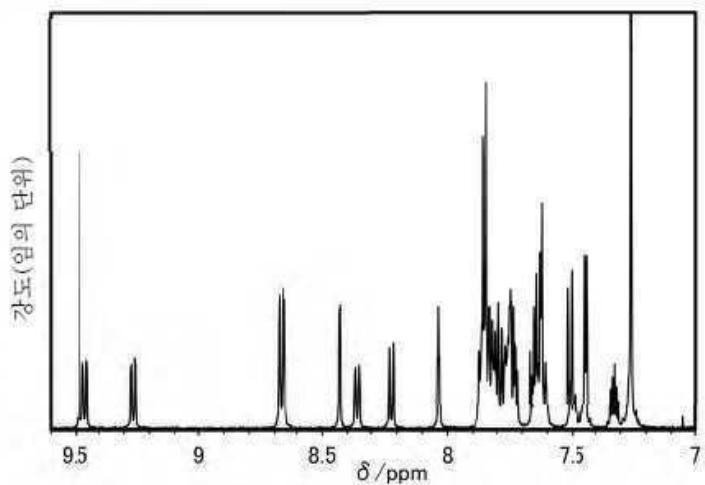


도면46

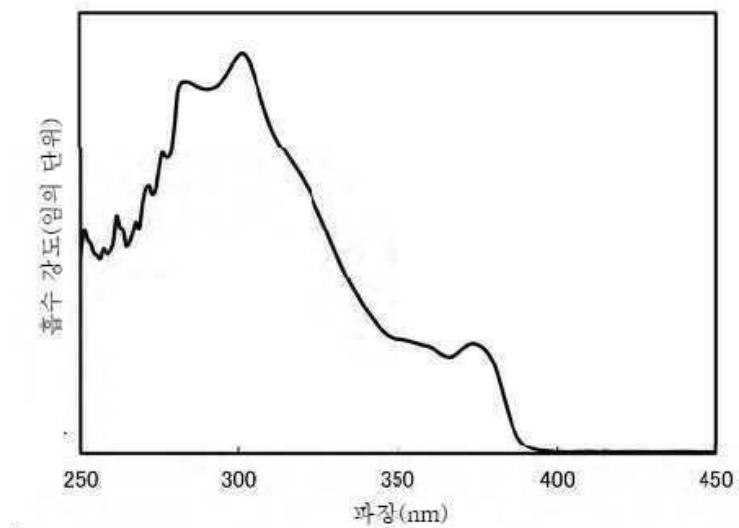
(A)



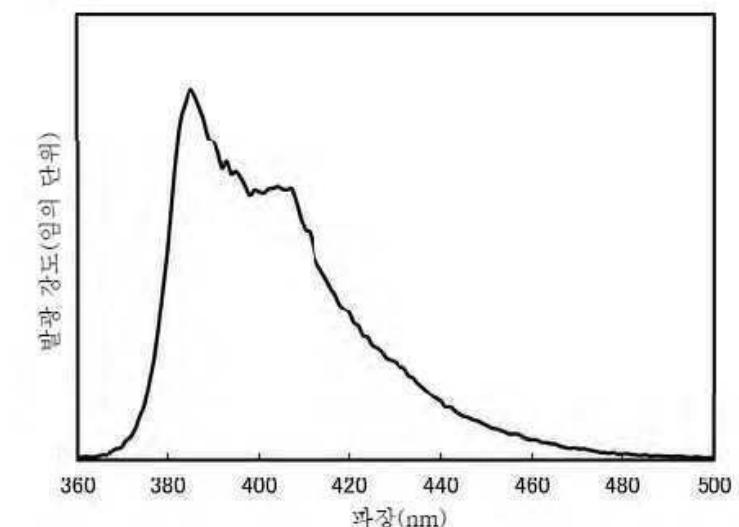
(B)



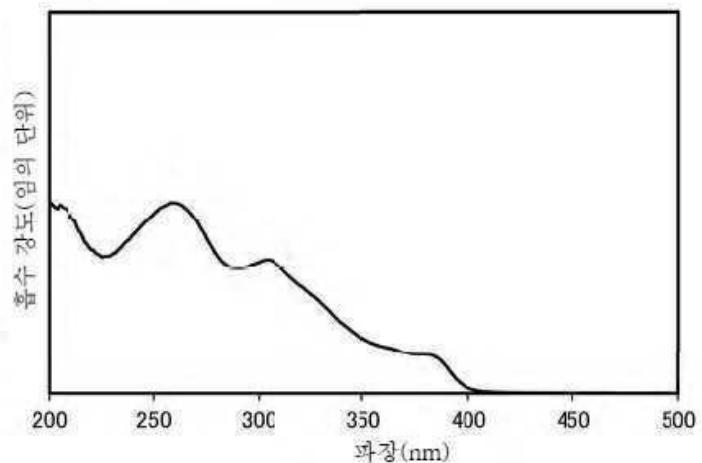
도면47



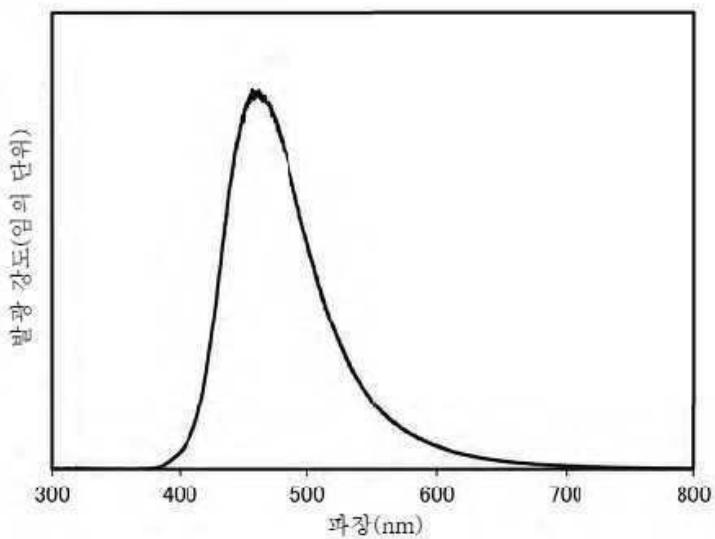
도면48



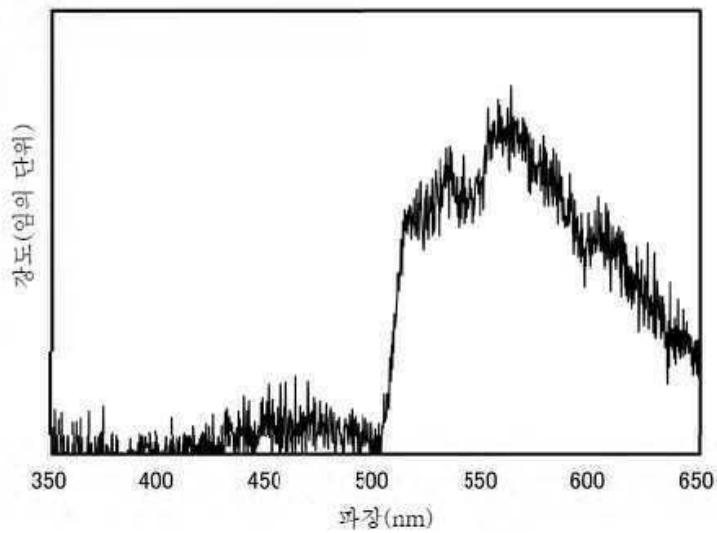
도면49



도면50

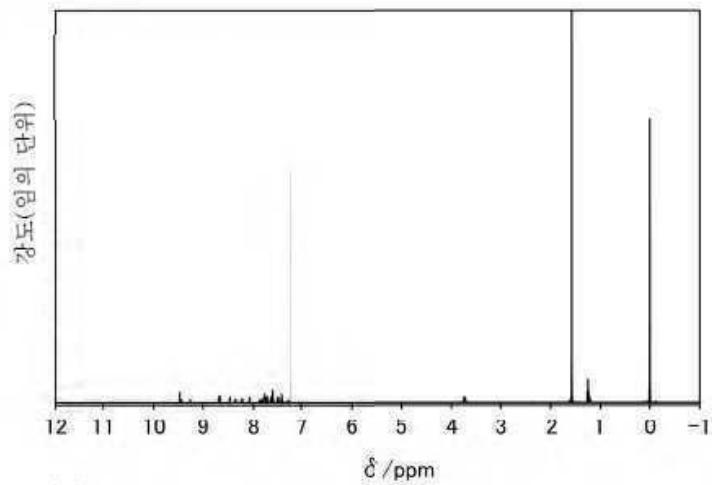


도면51

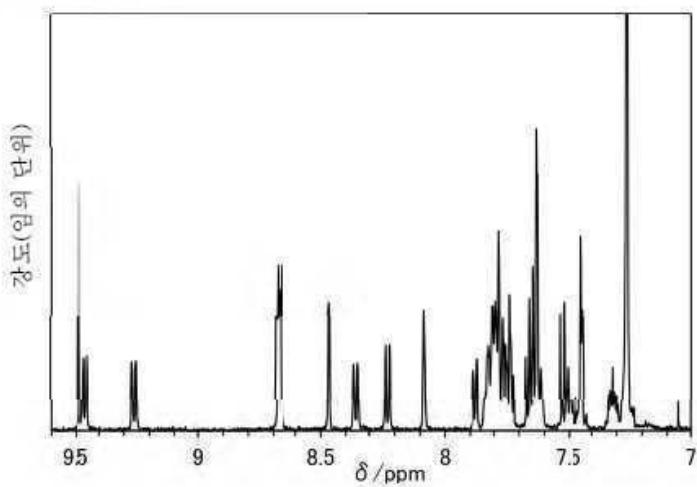


도면52

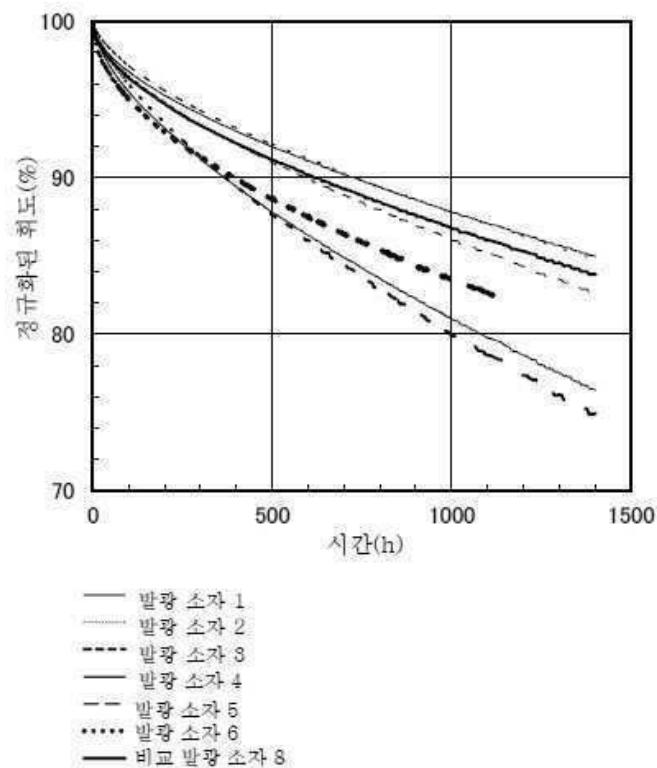
(A)



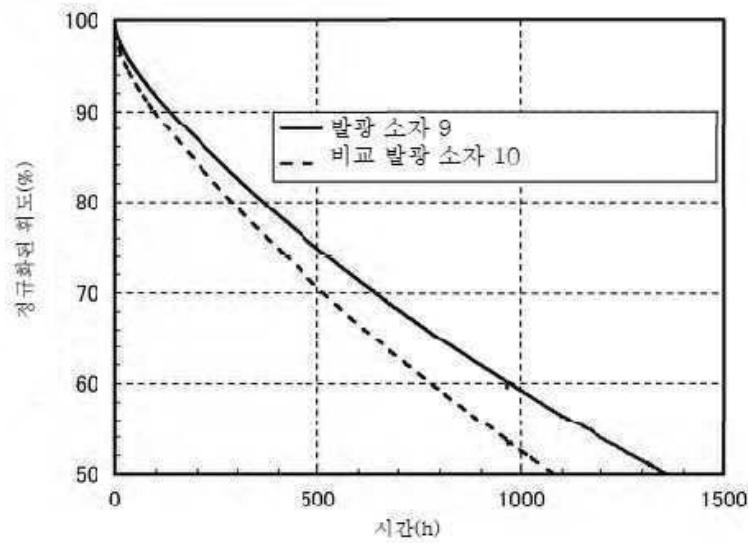
(B)



도면53



도면54



도면55

