

(19) 日本国特許庁 (JP)

(12) 公表特許公報 (A)

(11) 特許出願公表番号
特表2012-501091
(P2012-501091A)

(43) 公表日 平成24年1月12日 (2012.1.12)

(51) Int. Cl.	F I	テーマコード (参考)
H O 1 L 51/50 (2006.01)	H O 5 B 33/22 B	3 K 1 0 7
C O 7 D 401/14 (2006.01)	H O 5 B 33/14 B	4 C O 6 3
H O 1 L 51/42 (2006.01)	H O 5 B 33/22 D	5 F 1 5 1
H O 1 L 51/30 (2006.01)	C O 7 D 401/14	
H O 1 L 51/05 (2006.01)	H O 1 L 31/04 D	
審査請求 未請求 予備審査請求 未請求 (全 38 頁) 最終頁に続く		

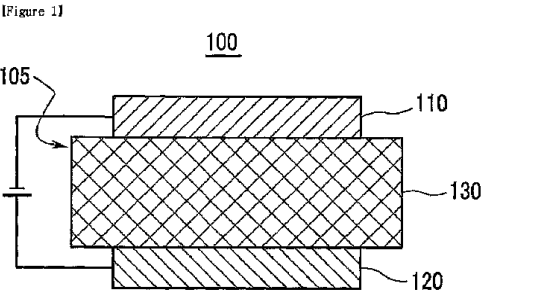
(21) 出願番号 特願2011-524896 (P2011-524896)	(71) 出願人 500005066 チェイル インダストリーズ インコーポ レイテッド 大韓民国 730-710 キョンサンブ ッド クミースィ コンダンードン 290
(86) (22) 出願日 平成21年8月25日 (2009.8.25)	(74) 代理人 110000671 八田国際特許業務法人
(85) 翻訳文提出日 平成23年2月25日 (2011.2.25)	(72) 発明者 キム, ナムスー 大韓民国, 437-711 キョンギード , イワンーシ, コチョンードン 332- 2, チェイル インダストリーズ インコ ーポレイテッド
(86) 国際出願番号 PCT/KR2009/004730	
(87) 国際公開番号 W02010/024572	
(87) 国際公開日 平成22年3月4日 (2010.3.4)	
(31) 優先権主張番号 10-2008-0082905	
(32) 優先日 平成20年8月25日 (2008.8.25)	
(33) 優先権主張国 韓国 (KR)	
(31) 優先権主張番号 10-2009-0050580	
(32) 優先日 平成21年6月8日 (2009.6.8)	
(33) 優先権主張国 韓国 (KR)	
最終頁に続く	

(54) 【発明の名称】 有機光電素子用材料およびこれを含む有機光電素子

(57) 【要約】

化学式 1 の非対称化合物を含む有機光電素子用材料およびそれを含む有機光電素子を開示する。前記有機光電素子用材料は、有機発光ダイオードをはじめとする有機光電素子において、正孔注入材料、正孔輸送材料、発光材料、または電子注入材料および / または電子輸送材料の役割を果たすことができ、適切なドーパントと共に発光ホストとしての役割も果たすることができる。前記材料を有機発光ダイオードなどの有機光電素子に適用すると、寿命、効率、駆動電圧、電気化学的安定性および熱安定性に優れた有機光電素子が得られうる。

【選択図】 図 1



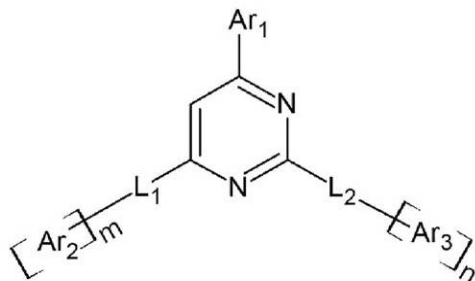
【特許請求の範囲】

【請求項 1】

下記の化学式 1 で表される非対称化合物を含む、有機光電素子用材料：

【化 1】

[化学式 1]



10

前記化学式 1 において、

Ar_1 は、水素、および置換または非置換のアリール基からなる群より選択され、但し、 Ar_1 が置換されたアリール基である場合、 Ar_1 の置換基が Ar_2 と同一ではなく、

Ar_2 および Ar_3 は、それぞれ独立して置換または非置換のカルバゾリル基、置換または非置換の炭素数 2 乃至 30 のヘテロアリール基、置換または非置換の炭素数 2 乃至 30 のアリールアミン基、および置換または非置換の炭素数 2 乃至 30 のヘテロアリールアミン基からなる群より選択され、

20

L_1 および L_2 は、それぞれ独立して置換または非置換のフェニレン、置換または非置換のナフチレン、および置換または非置換のアントラセンからなる群より選択され、

m および n は、1 乃至 4 の整数である。

【請求項 2】

Ar_1 は、フェニル基、ナフチル基、アントラセニル基、フェナントレニル基、ピレニル基、ペリレニル基、およびクリセニル基からなる群より選択される、請求項 1 に記載の材料。

【請求項 3】

Ar_1 は、炭素数 1 乃至 30 のアルキル基、炭素数 1 乃至 10 のヘテロアルキル基、炭素数 3 乃至 30 のシクロアルキル基、炭素数 6 乃至 30 のアリール基、炭素数 1 乃至 30 のアルコキシ基、フルオロ基、およびシアノ基からなる群より選択される置換基で置換される、請求項 1 に記載の材料。

30

【請求項 4】

Ar_2 および Ar_3 は、それぞれ独立してイミダゾリル基、チアゾリル基、オキサゾリル基、オキサジアゾリル基、トリアゾリル基、ピリジニル基、ピリダジニル基、キノリニル基、イソキノリニル基、アクリジル基、イミダゾピリジニル基、イミダゾピリミジニル基、ジフェニルアミン基、ジナフチルアミン基、ジビフェニルアミン基、フェニルナフチルアミン基、フェニルジフェニルアミン基、ジトリルアミン基、フェニルトリルアミン基、カルバゾイル基、トリフェニルアミン基、およびジピリジルアミン基からなる群より選択される、請求項 1 に記載の材料。

40

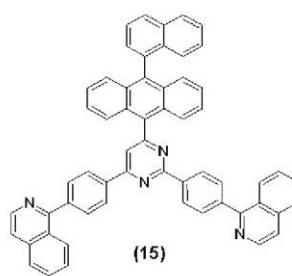
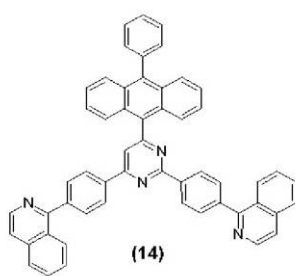
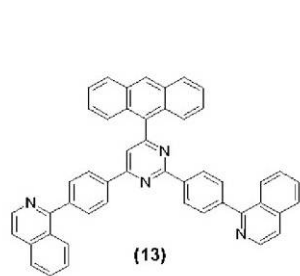
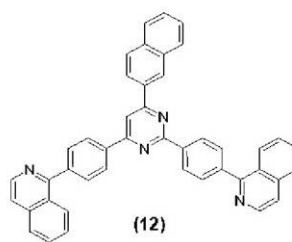
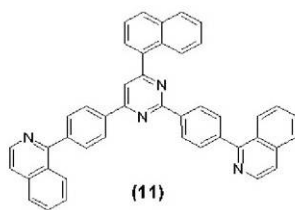
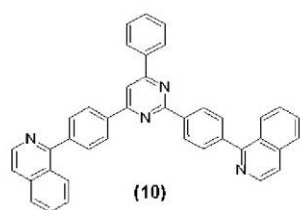
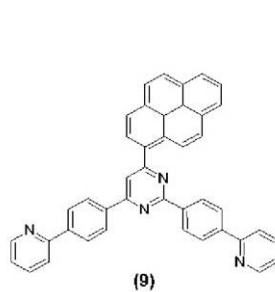
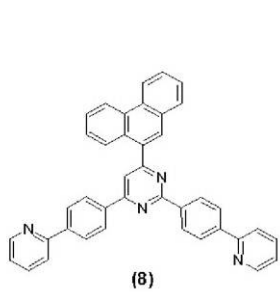
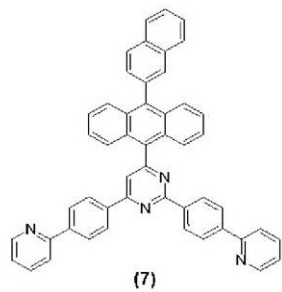
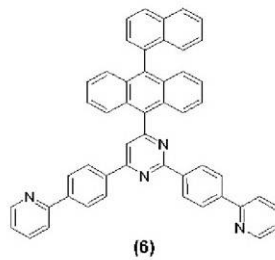
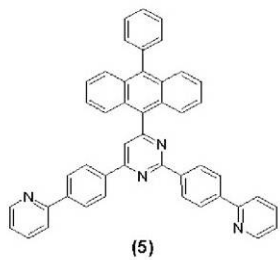
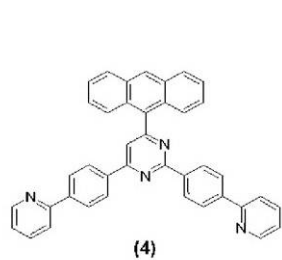
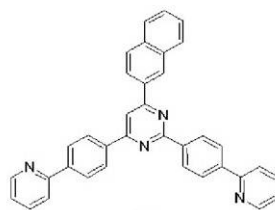
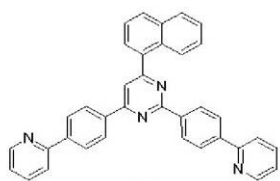
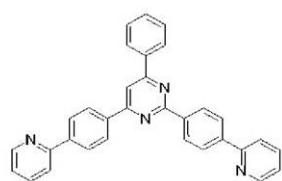
【請求項 5】

L_1 および L_2 は、フェニレンである、請求項 1 に記載の材料。

【請求項 6】

前記化学式 1 で表される化合物は、下記化合物 (1) 乃至 (90) またはこれらの組み合わせを含む、請求項 1 に記載の材料。

【化 2 - 1】

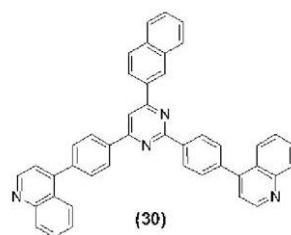
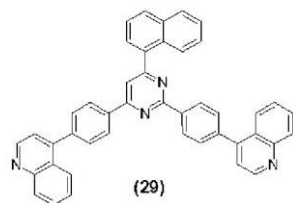
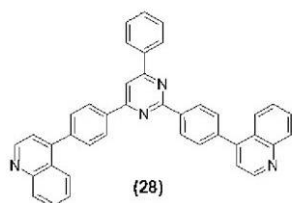
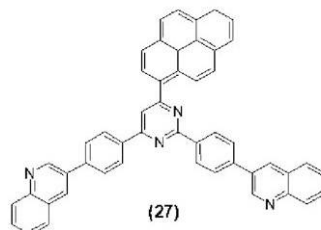
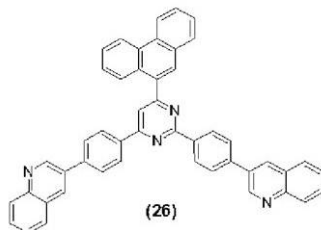
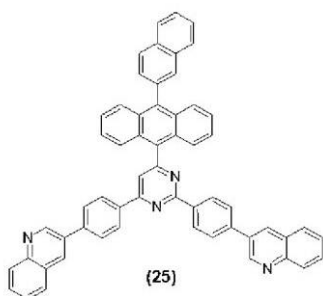
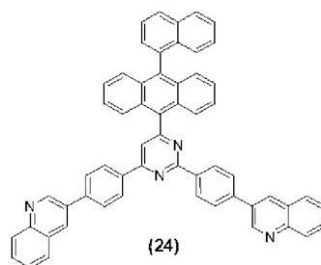
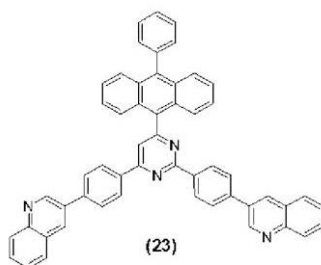
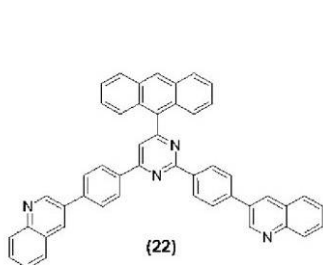
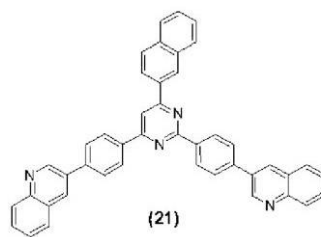
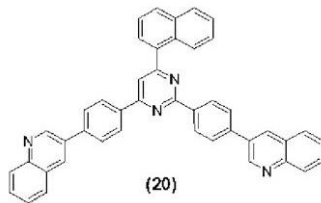
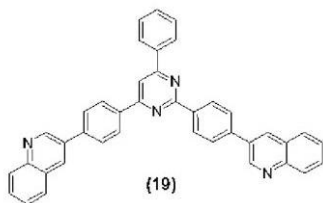
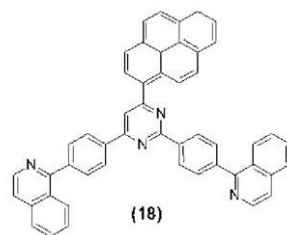
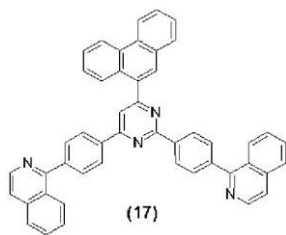
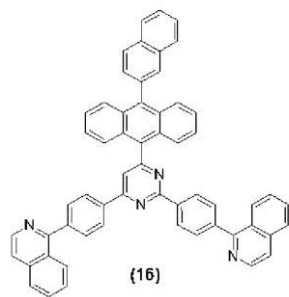


10

20

30

【化 2 - 2】



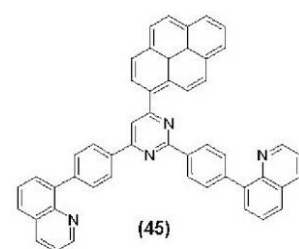
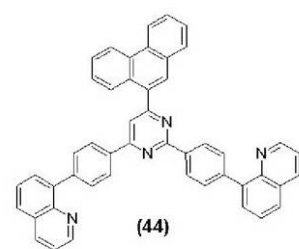
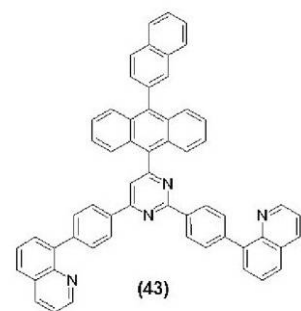
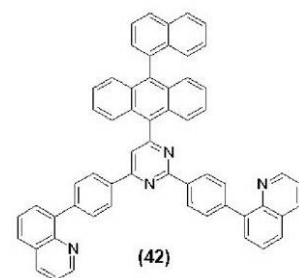
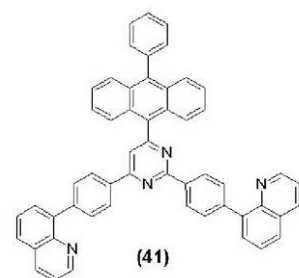
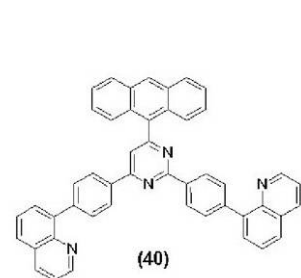
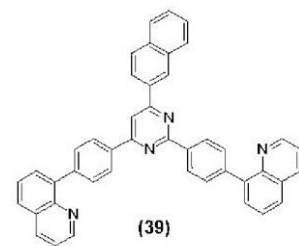
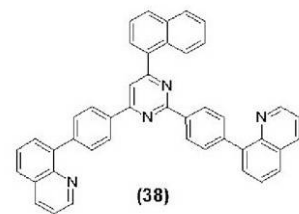
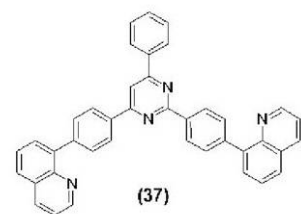
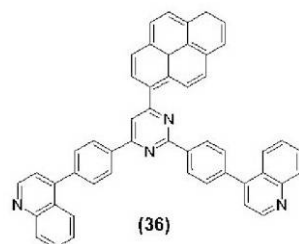
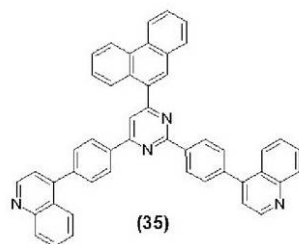
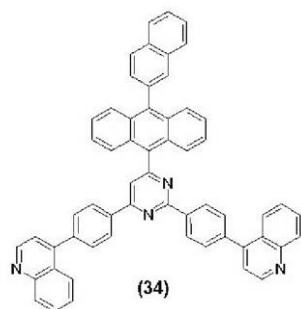
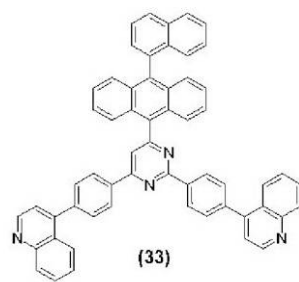
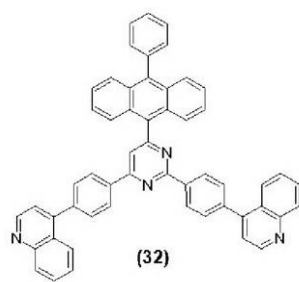
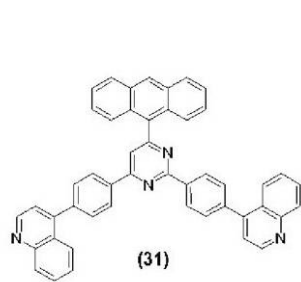
10

20

30

40

【化 2 - 3】



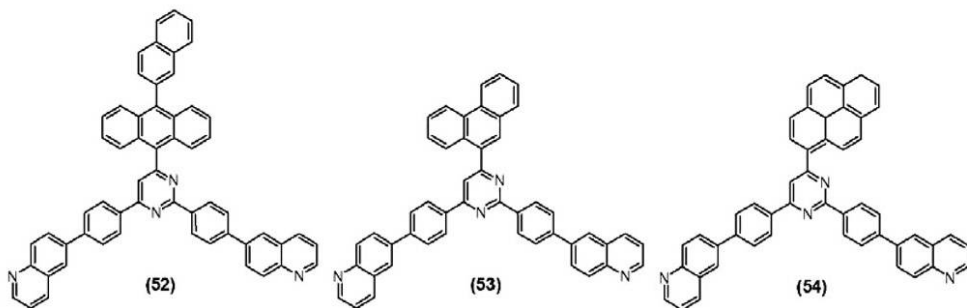
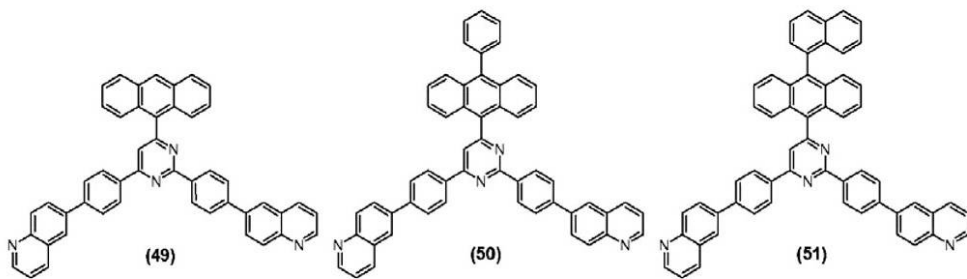
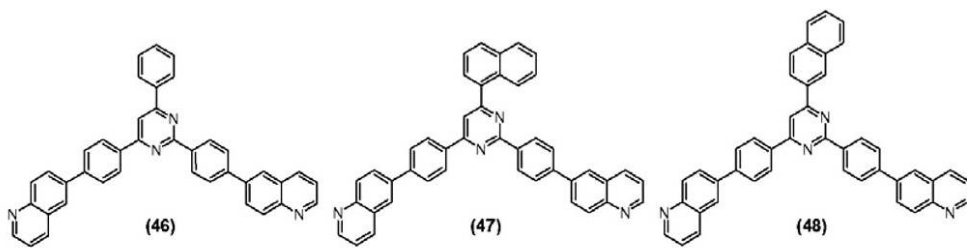
10

20

30

40

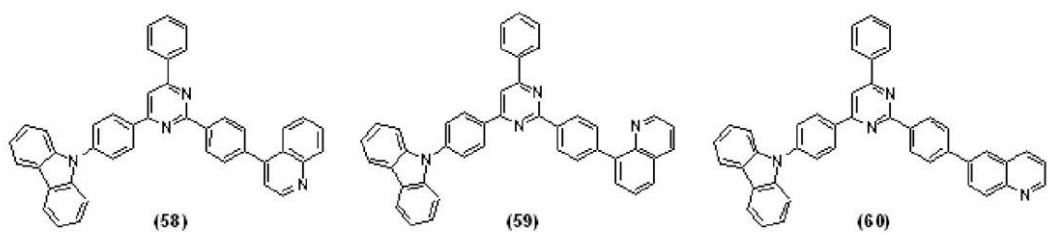
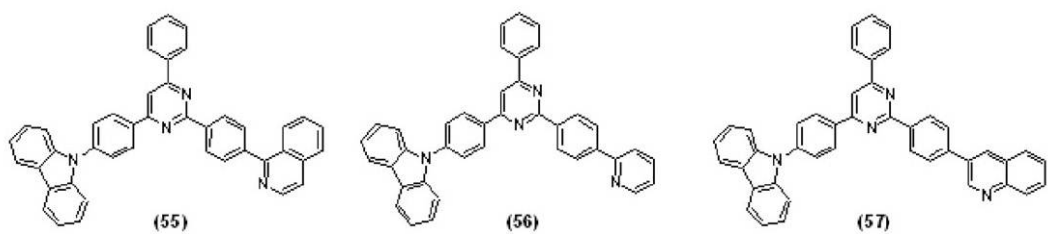
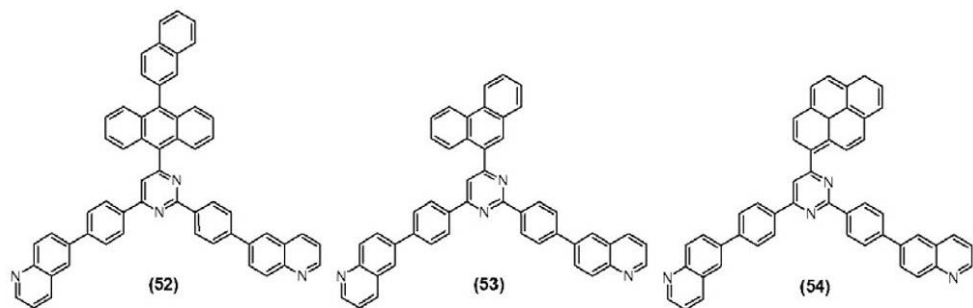
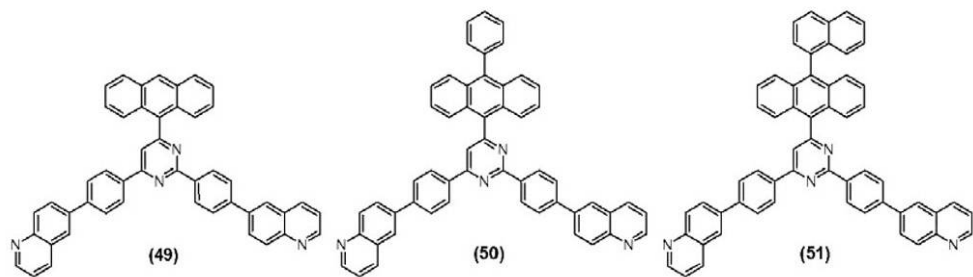
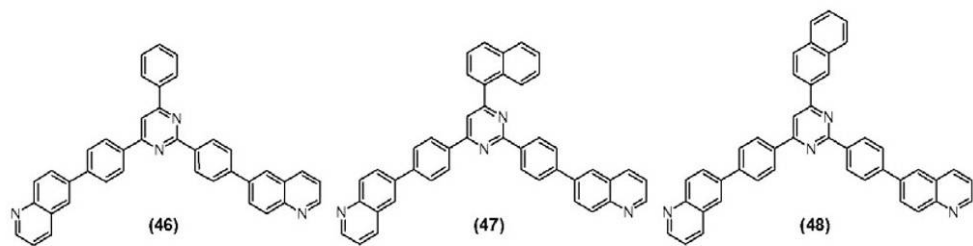
【化 2 - 4】



10

20

【化 2 - 5】



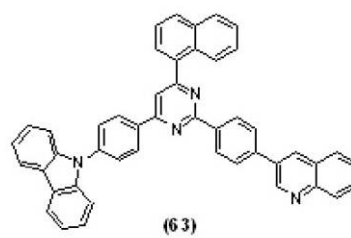
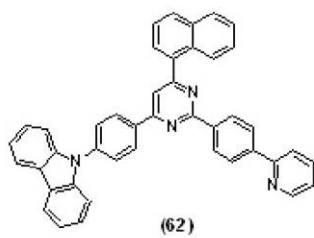
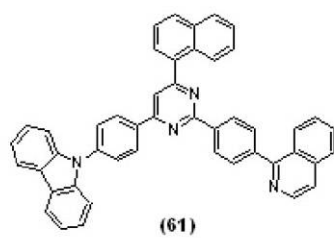
10

20

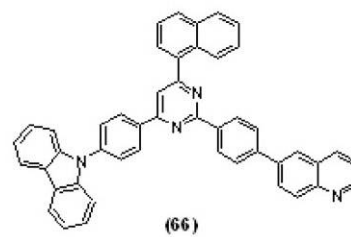
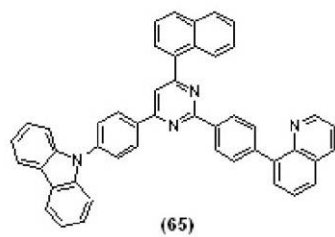
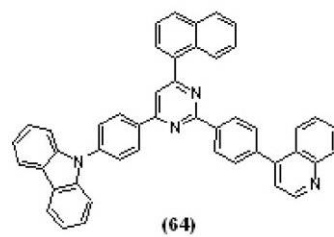
30

40

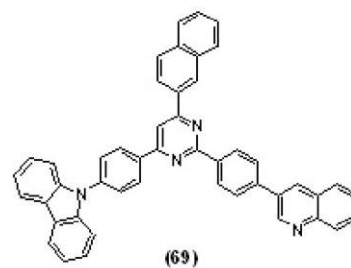
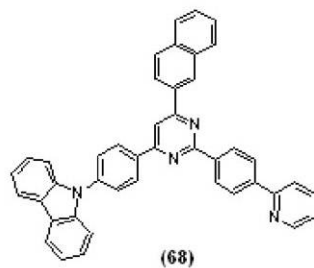
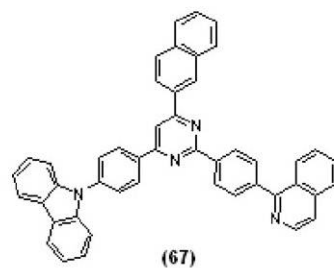
【化 2 - 6】



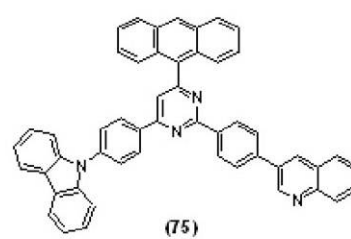
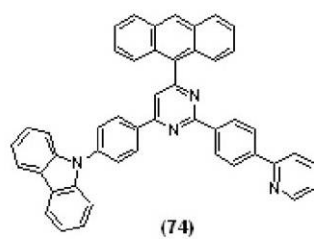
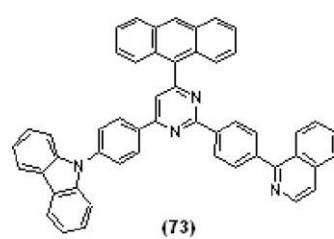
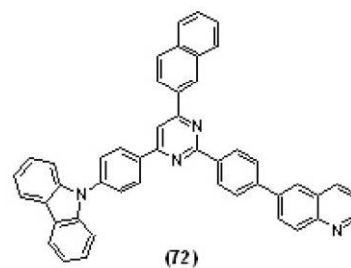
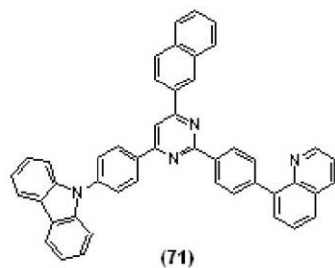
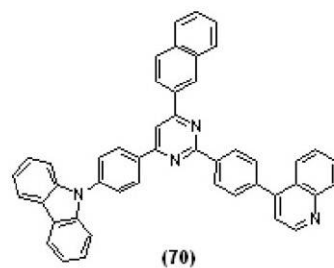
10



20

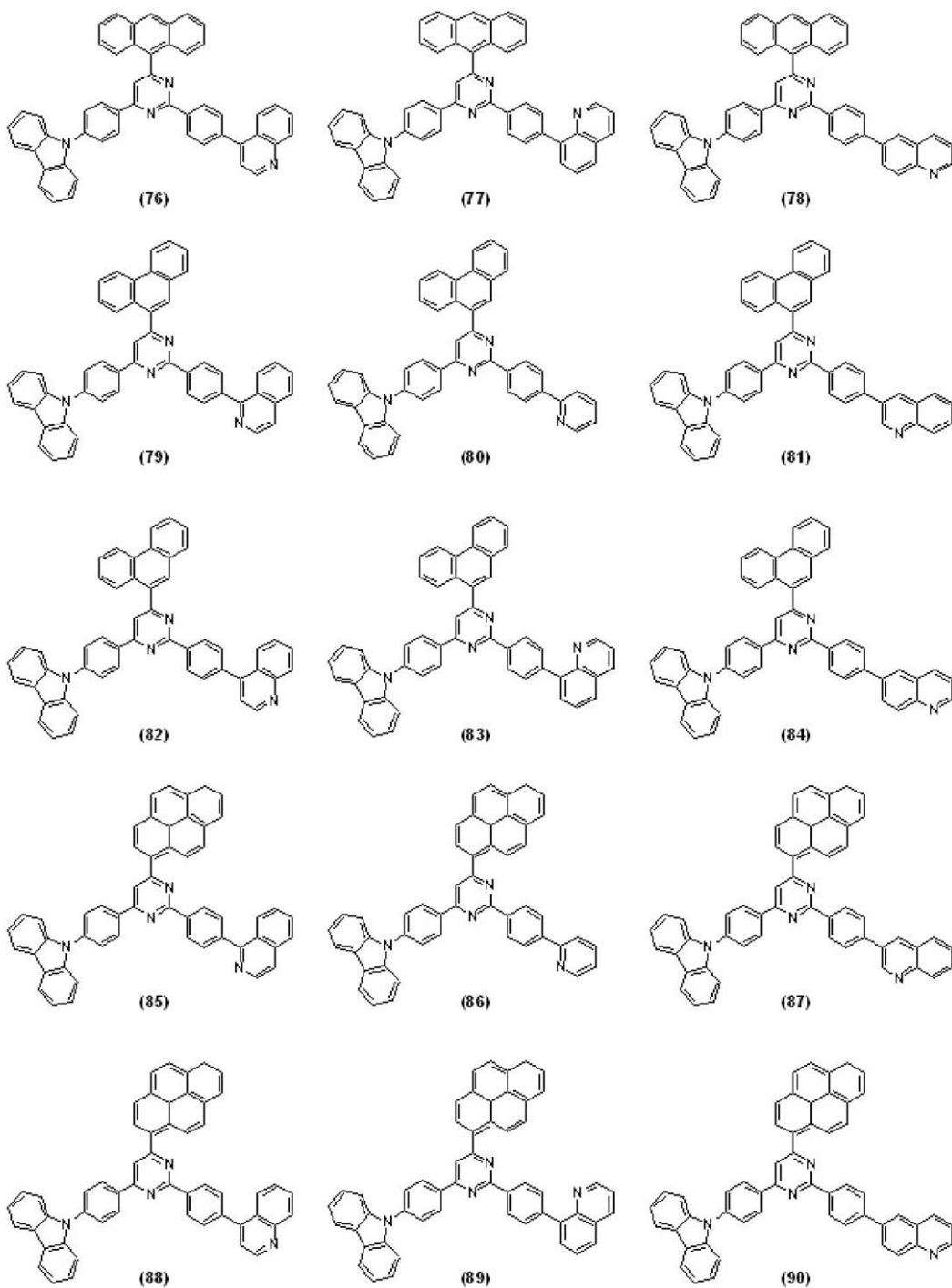


30



40

【化 2 - 7】



10

20

30

40

【請求項 7】

陽極；陰極；および前記陽極と前記陰極との間に配置された少なくとも 1 つの有機薄膜層を含み、

前記有機薄膜層のうち少なくとも 1 つは、請求項 1 ～ 6 のいずれか 1 項に記載の有機光電素子用材料を含む、有機光電素子。

【請求項 8】

前記有機薄膜層は、発光層；ならびに正孔輸送層（HTL）、正孔注入層（HIL）、電子注入層（EIL）、正孔阻止層およびこれらの組み合わせからなる群より選択される少なくとも 1 つの層を含む、請求項 7 に記載の有機光電素子。

【請求項 9】

前記有機光電素子用材料は、電子輸送層（ETL）または電子注入層（EIL）に含ま

50

れる、請求項 7 に記載の有機光電素子。

【請求項 10】

前記有機光電素子用材料は、発光層に含まれる、請求項 7 に記載の有機光電素子。

【請求項 11】

前記有機光電素子用材料は、発光層に燐光または蛍光ホストとして含まれる、請求項 7 に記載の有機光電素子。

【請求項 12】

前記有機光電素子用材料は、発光層に青色蛍光ドーパントとして含まれる、請求項 7 に記載の有機光電素子。

【請求項 13】

有機発光ダイオード、有機太陽電池、有機トランジスタ、有機感光体ドラム、および有機メモリ素子からなる群より選択される、請求項 7 に記載の有機光電素子。

【請求項 14】

請求項 7 に記載の有機光電素子を含む、表示装置。

【発明の詳細な説明】

【技術分野】

【0001】

本発明は、有機光電素子用材料およびこれを含む有機光電素子に関する。より詳細には、本発明は、有機光電素子の寿命、効率、駆動電圧、電気化学的安定性および熱安定性を向上させることができる有機光電素子用材料およびこれを含む有機光電素子に関する。

【背景技術】

【0002】

有機光電素子 (organic photoelectric device) は、正孔または電子を利用した電極と有機材料との間での電荷交換を必要とする素子である。

【0003】

有機光電素子は動作原理に応じて次のように分けることができる。第一の有機光電素子は、外部の光源からの光子により有機材料層でエキシトン (exciton) が生成し、このエキシトンが電子と正孔に分離され、そしてこの電子と正孔が互いに異なる電極に電流源 (電圧源) として移動することによって駆動される電子素子である。

【0004】

第二の有機光電素子は、少なくとも 2 つの電極に電圧または電流を加えて前記電極の界面に位置する有機材料半導体に正孔または電子を注入し、そして注入された電子および正孔により素子が駆動される電子素子である。

【0005】

有機光電素子の例としては、有機発光ダイオード (OLED)、有機太陽電池、有機感光体ドラム (organic photoconductor drum)、有機トランジスタ、有機メモリ素子などがあり、これらは正孔注入材料もしくは正孔輸送材料、電子注入材料もしくは電子輸送材料、または発光材料を必要とする。

【0006】

以下、主に有機発光ダイオードについて具体的に説明するが、前記有機光電素子では正孔注入材料もしくは正孔輸送材料、電子注入材料もしくは電子輸送材料、または発光材料が同様の原理で作用する。

【0007】

有機発光ダイオード (organic light emitting diode、OLED) は、近年、平板ディスプレイ (flat panel display) の需要が増加することによって注目されている。一般に有機発光とは、有機物質を利用して電気エネルギーを光エネルギーに変換させることをいう。

【0008】

このような有機発光ダイオードは、有機発光材料に電流を加えて電気エネルギーを光に変換させる素子であって、陽極 (anode) と陰極 (cathode) との間に機能性

10

20

30

40

50

有機材料層が挿入された構造を有する。前記有機材料層は、有機発光ダイオードの効率および安全性を高めるために、それぞれ異なる材料を含む多層、例えば、正孔注入層（HIL）、正孔輸送層（HTL）、発光層、電子輸送層（ETL）、電子注入層（EIL）などを含む。

【0009】

このような有機発光ダイオードにおいて、陽極と陰極との間に電圧をかけると、陽極からは正孔（hole）が、陰極からは電子（electron）が有機材料層に注入される。生成した励起子が基底状態（ground state）に移動しながら特定の波長を有する光を生成する。

【0010】

1987年にイーストマンコダック（Eastman Kodak）社では、発光層形成用材料として低分子の芳香族ジアミンとアルミニウム錯体とを含む有機発光ダイオードを最初に開発した（Applied Physics Letters, 51, 913, 1987）。1987年にC.W.Tangらが最初に有機発光ダイオードとして実用的な素子を報告した（Applied Physics Letters, 51, 12, 913~915, 1987）。

【0011】

前記文献によれば有機層はジアミン誘導体の薄膜（正孔輸送層（HTL））とトリス（8-ヒドロキシ-キノレート）アルミニウム（tris（8-hydroxy-quinolate）aluminum、Alq₃）の薄膜とが積層された構造を有する。

【0012】

最近では、蛍光発光材料のみならず、燐光発光材料も有機発光ダイオードの発光材料として使用されることが知られるようになった（D.F.O'Brienら、Applied Physics Letters, 74, 3, 442-444, 1999; M.A.Baldora、Applied Physics letters, 75, 1, 4-6, 1999）。このような燐光材料は基底状態（ground state）から励起状態（excited state）に電子が遷移した後、項間交差（intersystem crossing）を通じて一重項励起子が三重項励起子に無輻射遷移した後、三重項励起子が基底状態に遷移して発光するメカニズムによって発光する。

【0013】

前記のように有機発光ダイオードにおいて有機材料層は、発光材料および電荷輸送材料、例えば正孔注入材料、正孔輸送材料、電子輸送材料、電子注入材料などを含む。

【0014】

また、発光材料は、発光色に応じて青色、緑色、および赤色発光材料とさらに改善された天然色に近い色を発光させるための黄色および橙色発光材料とに分類される。

【0015】

一方、発光材料として一つの材料のみを使用する場合、分子間相互作用により最大発光波長が長波長側に移動したり、色純度が落ちる、または発光クエンチング効果により素子の効率が低下する。したがって、色純度を改善し、エネルギー移動を通じて発光効率および安定性を増加させるために、発光材料としてホスト/ドープアント系を使用しても良い。

【0016】

有機発光ダイオードが前述した優れた特徴を十分に発揮するためには、有機材料層を構成する材料、例えば正孔注入材料、正孔輸送材料、発光材料、電子輸送材料、電子注入材料、ホストおよび/またはドープアントなどの発光材料が安定であり且つ良好な効率を有する必要がある。しかしながら、現在まで有機発光ダイオード用の有機材料層を形成する材料の開発がまだ十分ではなく、したがって新たな材料が要求されている。このような材料開発は前述した他の有機光電素子でも同様に要求されている。

【発明の概要】

【発明が解決しようとする課題】

【0017】

10

20

30

40

50

本発明の例示的な実施形態は、正孔注入材料、正孔輸送材料、発光材料、または電子注入材料および／または電子輸送材料の役割を果たすことができ、適切なドーパントと共に発光ホストとしての役割も果たすことができる新規な材料を提供する。

【0018】

本発明の他の実施形態は、前記有機光電素子用材料を含み、寿命、効率、駆動電圧、電気化学的安定性、および熱安定性が向上した有機光電素子を提供する。

【0019】

本発明の実施形態は上記の技術的課題に制限されず、当業者であれば他の技術的課題を理解しうる。

【課題を解決するための手段】

10

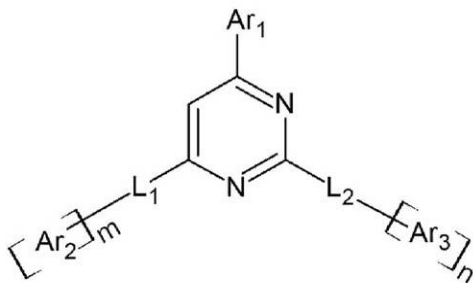
【0020】

本発明の一実施形態によれば、下記の化学式1で表される非対称化合物を含む有機光電素子用材料が提供される。

【0021】

【化1】

[化学式1]



20

【0022】

前記化学式1において、

Ar₁は、水素、および置換または非置換のアリール基からなる群より選択され、但し、Ar₁が置換されたアリール基である場合、Ar₁の置換基がAr₂と同一ではなく、

Ar₂およびAr₃は、それぞれ独立して置換または非置換のカルbazolリル基、置換または非置換の炭素数2乃至30のヘテロアリール基、置換または非置換の炭素数2乃至30のアリールアミン基、および置換または非置換の炭素数2乃至30のヘテロアリールアミン基からなる群より選択され、

30

L₁およびL₂は、それぞれ独立して置換または非置換のフェニレン、置換または非置換のナフチレン、および置換または非置換のアントラセンからなる群より選択され、

mおよびnは、1乃至4の整数である。

【0023】

本発明の他の実施形態によれば、陽極、陰極、および前記陽極と前記陰極との間に配置された有機薄膜層を含む有機光電素子が提供される。前記有機薄膜層は、前記有機光電素子用材料を含む。

40

【0024】

本発明のさらなる実施形態によれば、前記有機光電素子を含む表示装置が提供される。

【0025】

以下、本発明のさらなる実施形態を詳細に説明する。

【0026】

本発明の一実施形態による有機光電素子用材料は、ピリミジンコアに対して非対称構造を有する。ピリミジンコアを含むこのような非対称構造は、非晶質特性が強化されてこれによって結晶化を抑制することができるため、有機光電素子の駆動時に有機光電素子の寿命特性を向上させることができる。したがって、効率、駆動電圧、電気化学的安定性および熱安定性に優れた有機光電素子が提供される。

50

【発明の効果】

【0027】

本発明の一実施形態による新規な材料は、有機発光ダイオードをはじめとする有機光電素子において、正孔注入材料、正孔輸送材料、発光材料、または電子注入材料および／または電子輸送材料の役割を果たすことができ、適切なドーパントと共に発光ホストとしての役割にも適用可能である。

【図面の簡単な説明】

【0028】

【図1】本発明の多様な実施形態による化合物を含む有機発光ダイオードを示す断面図である。

10

【図2】本発明の多様な実施形態による化合物を含む有機発光ダイオードを示す断面図である。

【図3】本発明の多様な実施形態による化合物を含む有機発光ダイオードを示す断面図である。

【図4】本発明の多様な実施形態による化合物を含む有機発光ダイオードを示す断面図である。

【図5】本発明の多様な実施形態による化合物を含む有機発光ダイオードを示す断面図である。

【0029】

図6は、合成例1による化合物に対する示差走査熱量(DSC)測定結果を示すグラフである。

20

【0030】

< 図中の主要な要素を示す符号の説明 >

100：有機光電素子、

110：陰極、

120：陽極、

105：有機薄膜層、

130：発光層、

140：正孔輸送層(HTL)、

150：電子輸送層(ETL)、

160：電子注入層(EIL)、

170：正孔注入層(HIL)、

230：発光層+電子輸送層(ETL)。

30

【発明を実施するための形態】

【0031】

以下、本発明の例示的な実施形態を詳しく説明する。但し、これらの実施形態は単なる例示であり、これらによって本発明が制限されるものではない。

【0032】

本明細書で「置換」の用語は、別途の定義がない限り、炭素数1乃至30のアルキル基、炭素数1乃至10のヘテロアルキル基、炭素数3乃至30のシクロアルキル基、炭素数6乃至30のアリール基、炭素数1乃至30のアルコキシ基、フルオロ基、およびシアノ基からなる群より選択される少なくとも1つの置換基で置換されたものを意味する。

40

【0033】

本明細書で「ヘテロ」の用語は、別途の定義がない限り、一つの環内にN、O、S、P、またはSiを含むヘテロ原子を1乃至3個含有し、残りは炭素であるものを意味する。

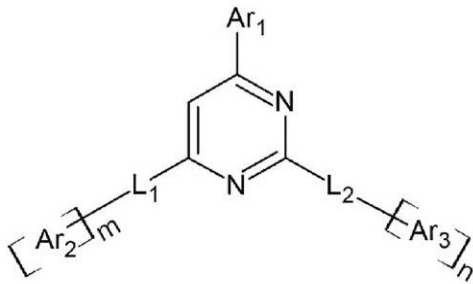
【0034】

本発明の一実施形態によれば、下記の化学式1で表される非対称化合物を含む有機光電素子用材料が提供される。

【0035】

【化 2】

[化学式 1]



10

【0036】

前記化学式 1 において、

Ar_1 は、水素、および置換または非置換のアリール基からなる群より選択され、但し、 Ar_1 が置換アリール基である場合、 Ar_1 の置換基が Ar_2 と同一ではなく、

Ar_2 および Ar_3 は、それぞれ独立して置換または非置換のカルbazolリル基、置換または非置換の炭素数 2 乃至 30 のヘテロアリール基、置換または非置換の炭素数 2 乃至 30 のアリールアミン基、および置換または非置換の炭素数 2 乃至 30 のヘテロアリールアミン基からなる群より選択され、

L_1 および L_2 は、それぞれ独立して置換または非置換のフェニレン、置換または非置換のナフチレン、および置換または非置換のアントラセンからなる群より選択され、

m および n は、1 乃至 4 の整数である。

20

【0037】

前記化学式 1 において、 Ar_1 は、アリール基またはアリール置換基を有するアリール基であることが好ましい。前記アリール基の例としては、フェニル基、ナフチル基、アントラセニル基、フェナントレニル基、ピレニル基、ペリレニル基、クリセニル (chrysenyl) 基などが挙げられる。

【0038】

Ar_1 は、炭素数 1 乃至 30 のアルキル基、炭素数 1 乃至 10 のヘテロアルキル基、炭素数 3 乃至 30 のシクロアルキル基、炭素数 6 乃至 30 のアリール基、炭素数 1 乃至 30 のアルコキシ基、フルオロ基、およびシアノ基からなる群より選択される置換基で置換される。前記アリール基の例としては、フェニル基、ナフチル基、アントラセニル基、フェナントレニル基、ピレニル基、ペリレニル基、およびクリセニル基からなる群より選択されるアリール基が挙げられ、前記ヘテロアルキル基の例としては、アルキルシリル基が挙げられる。しかしながら、前記アリール基およびヘテロアルキル基がこれらに限定されるわけではない。

30

【0039】

Ar_1 が置換されたアリール基である場合、 Ar_1 の置換基が Ar_2 と同一ではない。 Ar_1 が置換されたアリール基であり、 Ar_1 の置換基が Ar_2 と同一ではない場合、ピリミジンコアを基準とした非対称構造が得られる。このような非対称構造を有する有機光電素子用材料は結晶化を抑制し、そのため有機光電素子の寿命特性を向上させることができる。

40

【0040】

前記化学式 1 において、 Ar_2 および Ar_3 で表されるヘテロアリール基としては、イミダゾリル基、チアゾリル基、オキサゾリル基、オキサジアゾリル基、トリアゾリル基、ピリジニル基、ピリダジニル基、キノリニル基、イソキノリニル基、アクリジル基、イミダゾピリジニル基、イミダゾピリミジニル基などが挙げられる。

【0041】

前記化学式 1 において、 Ar_2 および Ar_3 で表されるヘテロアリールアミン基の例としては、ジフェニルアミン基、ジナフチルアミン基、ジビフェニルアミン基、フェニルナ

50

フチルアミン基、フェニルジフェニルアミン基、ジトリルアミン基、フェニルトリルアミン基、カルバゾイル基、トリフェニルアミン基、ジピリジルアミン基などが挙げられる。

【0042】

前記化学式1において、 Ar_2 および Ar_3 で表されるそれぞれの置換基は、置換または非置換でありうる。 Ar_2 および Ar_3 が置換されている場合には、これらは炭素数1乃至30のアルキル基、炭素数1乃至10のヘテロアルキル基、炭素数3乃至30のシクロアルキル基、炭素数6乃至30のアリール基、炭素数1乃至30のアルコキシ基、フルオロ基、およびシアノ基からなる群から選択される1つで置換されていても良い。前記アリール基の例としては、フェニル基、ナフチル基、アントラセニル基、フェナントレニル基、ピレニル基、ペリレニル基、およびクリセニル基からなる群より選択されるアリール基が挙げられ、前記ヘテロアルキル基の例としては、アルキルシリル基が挙げられる。しかしながら、前記アリール基およびヘテロアルキル基はこれらに限定されるわけではない。

10

【0043】

前記化学式1において、 L_1 および L_2 は、フェニレンであることが好ましい。

【0044】

本発明による前記化学式1の化合物は、ピリミジンコアと Ar_1 乃至 Ar_3 の置換基を含む。ピリミジンは芳香族化合物であり、ベンゼンのような電子構造を有する。このピリミジンは熱的安定性を有する、または耐酸化性が比較的高いが、2 - 、4 - 、および6 - 位に対する反応性の差によって非対称化合物を合成することができる。

20

【0045】

一実施形態によれば、前記ピリミジンコア部分は互いに同一ではない置換基で置換されて非対称構造を形成する。非対称性置換基を有するピリミジンコア構造では、非晶質特性が高められて結晶化が抑制され、有機光電素子の駆動時に寿命特性を向上させる。一方、同一な置換基を有する対称化合物は、結晶化しやすく、そのため、有機発光ダイオードの寿命特性を短縮させる原因となることもある。

【0046】

上記の特徴を有するピリミジンに多様な置換基 (Ar_1 乃至 Ar_3) を導入して有機光電素子に必要な特性を付与する。

【0047】

例えば、 Ar_2 および Ar_3 にピリジニル基、キノリニル基、およびイソキノリニル基のようなn - 型特性を有する置換基を導入することによって、熱的、電氣的に安定したn - 型材料を合成することができ、p - 型特性を有する置換基を導入することによって、p - 型材料を合成することができる。また、n - 型置換基とp - 型置換基との両方を導入することによって、n - 型のみならずp - 型の特性も有する両親性材料を提供することができる。

30

【0048】

n - 型特性とは、電子生成による陰イオン特性を有するように、LUMO準位に応じた導電特性の性質を意味する。p - 型特性とは、正孔生成による陽イオン特性を有するように、HOMO準位に応じた導電特性の性質を意味する。

40

【0049】

前記化学式1で表される化合物は、多様な置換基が導入されることによって、全体的な分子の特性がn - 型またはp - 型へとさらに強化されうる。つまり、化学式1中の置換基部分に特定の置換基が導入されて化学式1の化合物の特性がいずれか一方により強くなると、化学式1で表される化合物は、正孔注入、正孔輸送、発光、電子注入または電子輸送のための材料としての条件をより適するように満たす化合物となり得る。

【0050】

例えば、 Ar_2 および Ar_3 をヘテロアリールアミン基で置換する場合、化学式1で表される化合物は、正孔注入層 (HIL) および正孔輸送層 (HTL) 用材料など応用範囲が広がる。

50

【 0 0 5 1 】

一方、 Ar_2 および Ar_3 をヘテロアリール基のような電子親和性に優れた材料で置換する場合、化学式 1 で表される化合物は、電子注入層または電子輸送層 (E T L) 用材料として応用され得る。

【 0 0 5 2 】

さらに、 Ar_1 をフェニル基、ナフチル基、アントラセニル基、フェナントレニル基、ピレニル基、ペリレニル基、クリセニル基などのような置換基で置換する場合、熱的安定性または耐酸化性を増加させることができ、 Ar_2 または Ar_3 をそれぞれヘテロアリールアミン基およびヘテロアリール基の置換基で同時に置換すれば両親性を有する材料を提供することができ、この材料を発光層に適用できる。

10

【 0 0 5 3 】

上述のように化学式 1 の Ar_1 乃至 Ar_3 の位置に多様な置換基を導入することによって、多様なエネルギーバンドギャップを有する化合物を合成することができる。

【 0 0 5 4 】

したがって、前記化学式 1 で表される化合物は多様な置換基により正孔注入層 (H I L)、正孔輸送層 (H T L)、発光層、電子注入層および電子輸送層に要求される条件を満たす化合物となり得る。

【 0 0 5 5 】

化合物 1 の置換基に応じた適切なエネルギー準位を有する化合物を選択し、これを有機電子素子に適用することによって、駆動電圧が低く、光効率が低い素子を達成することができる。

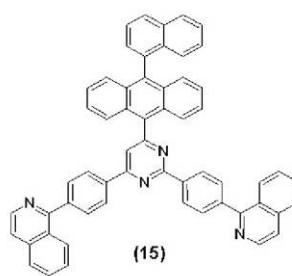
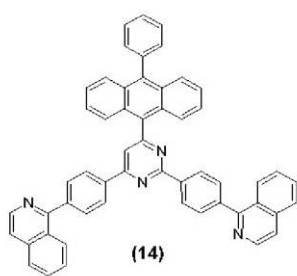
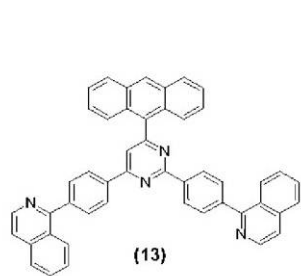
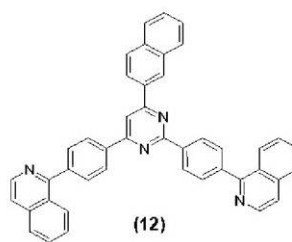
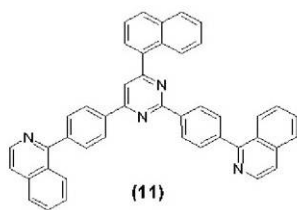
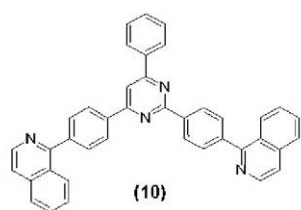
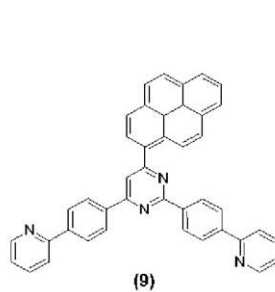
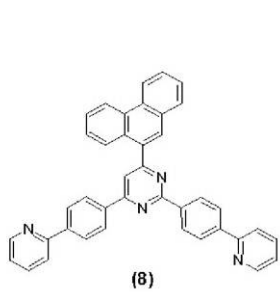
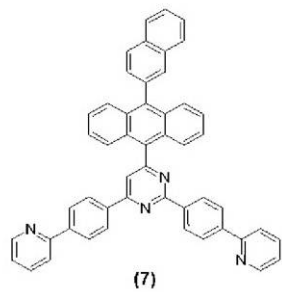
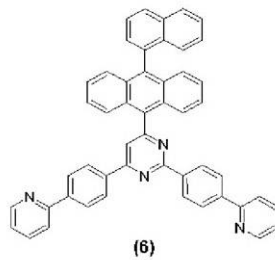
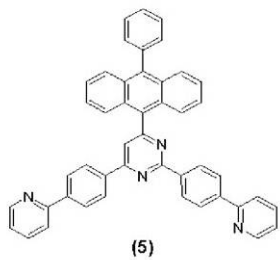
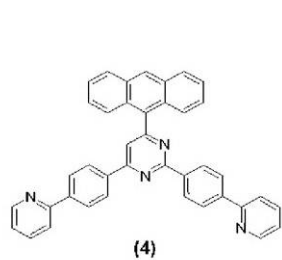
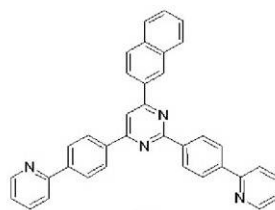
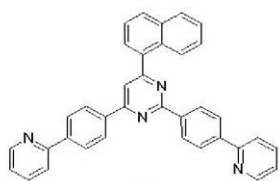
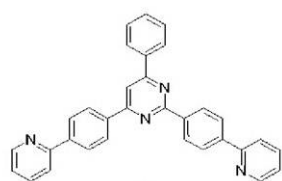
20

【 0 0 5 6 】

前記化学式 1 で表される化合物の具体的な例としては、下記化合物 (1) 乃至 (9 0) が挙げられるが、これらに限定されない。

【 0 0 5 7 】

【化 3 - 1】



【 0 0 5 8 】

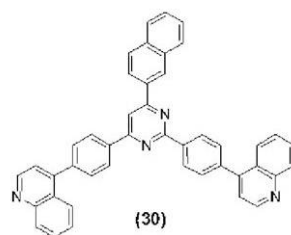
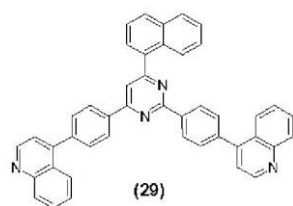
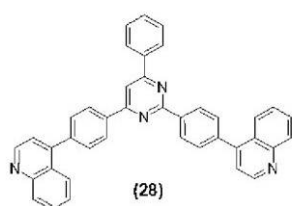
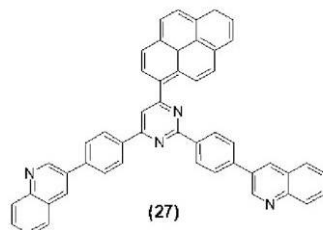
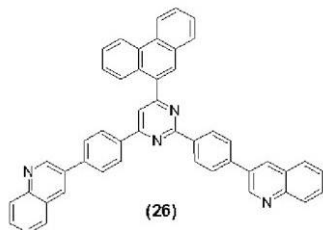
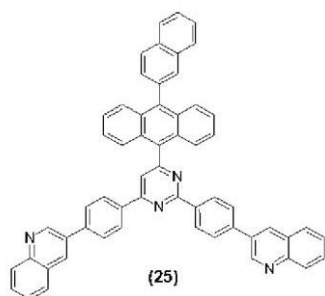
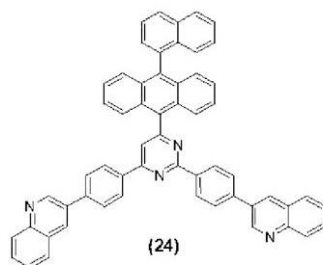
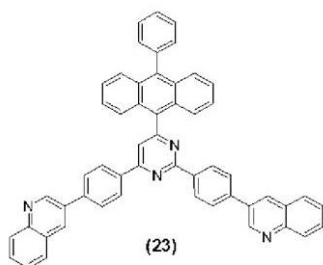
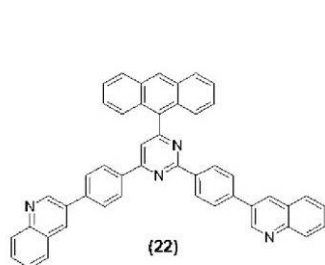
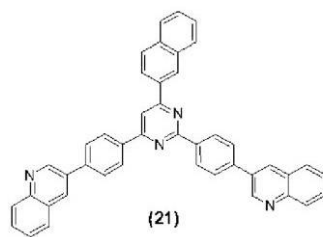
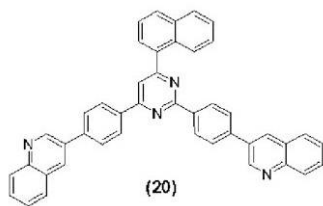
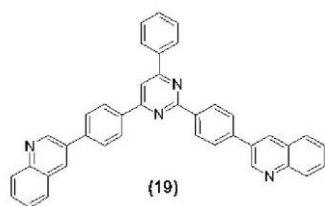
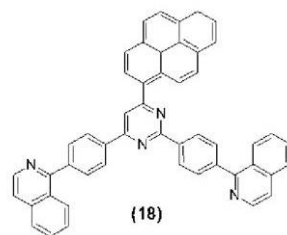
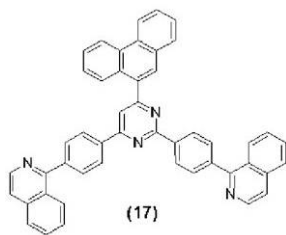
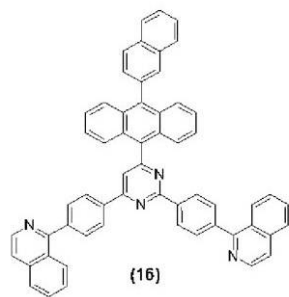
10

20

30

40

【化 3 - 2】



【 0 0 5 9 】

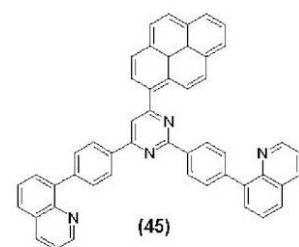
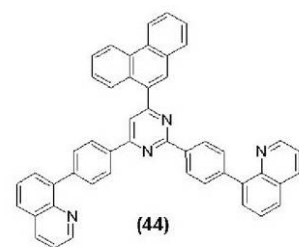
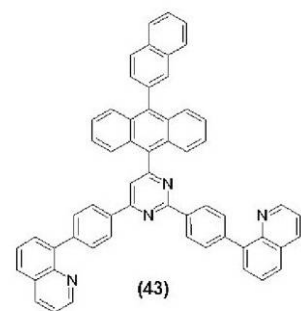
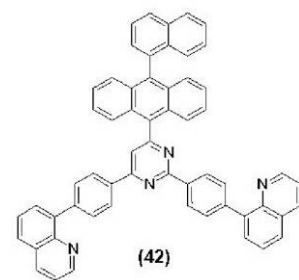
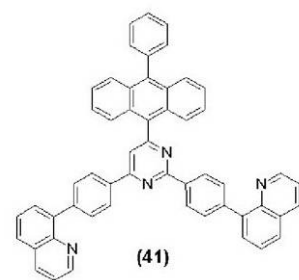
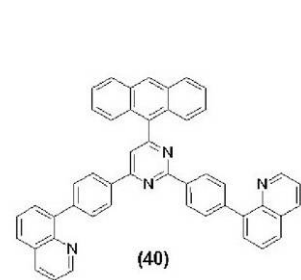
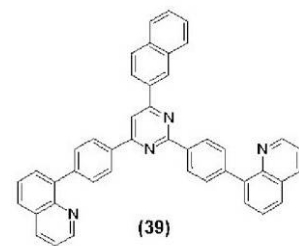
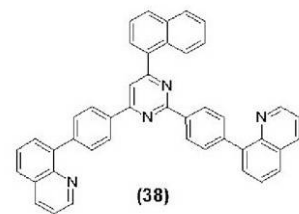
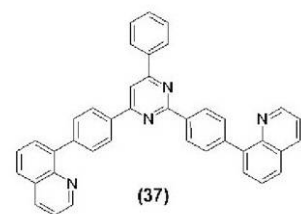
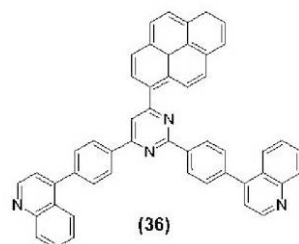
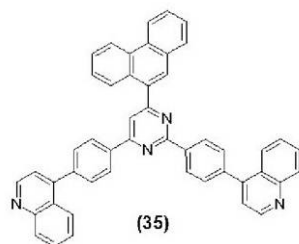
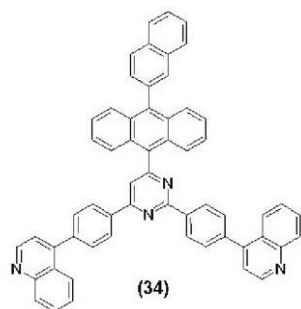
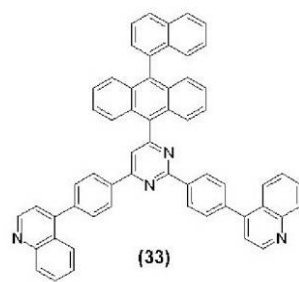
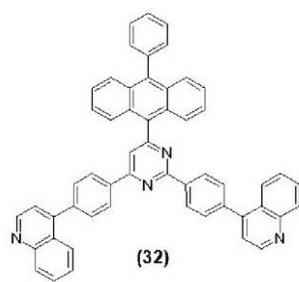
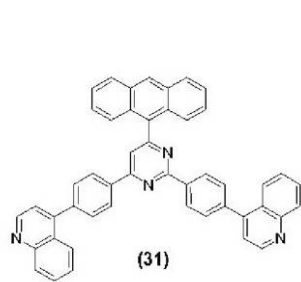
10

20

30

40

【化 3 - 3】



【 0 0 6 0 】

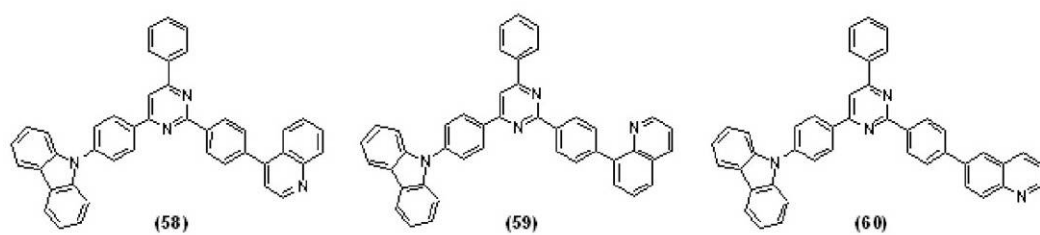
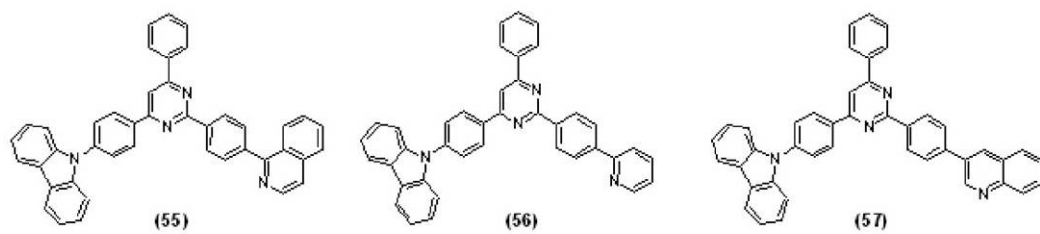
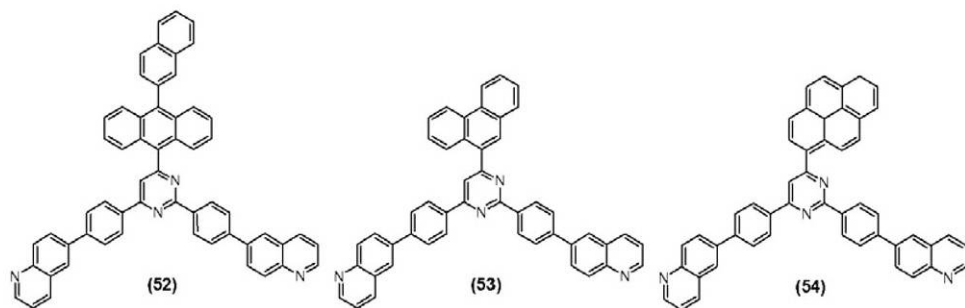
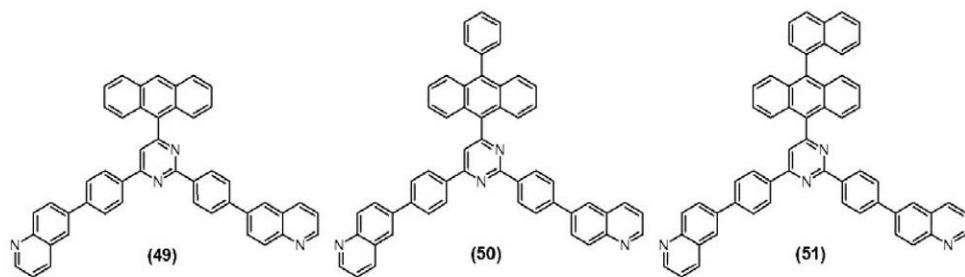
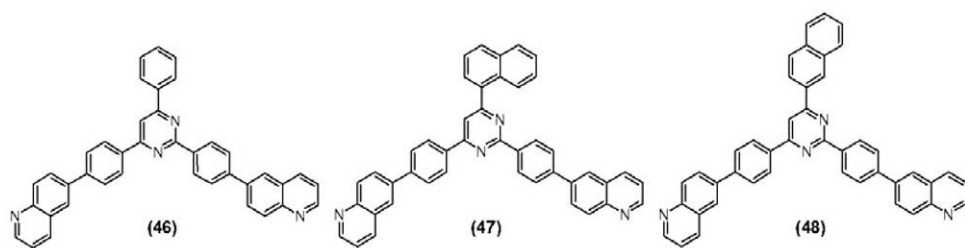
10

20

30

40

【化 3 - 4】



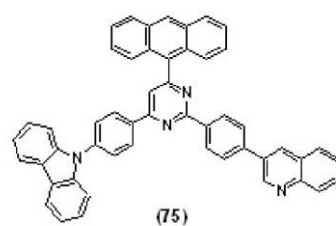
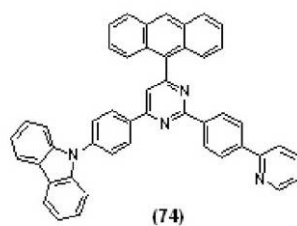
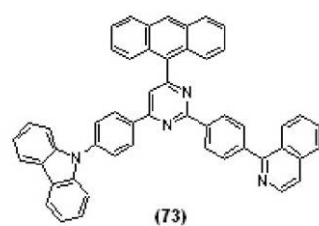
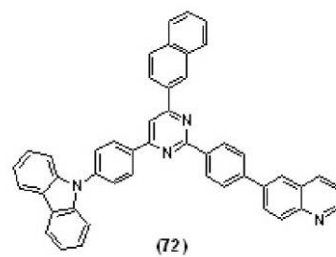
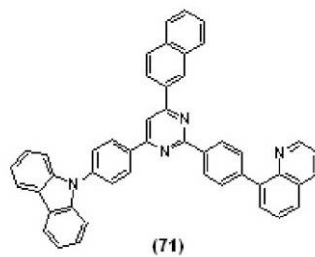
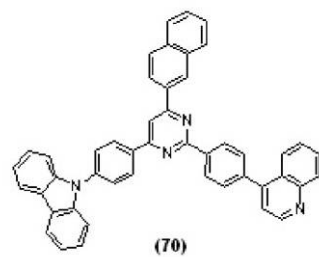
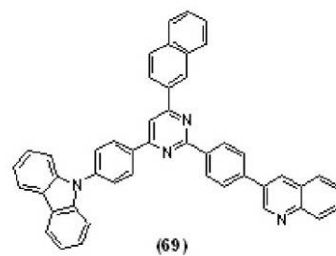
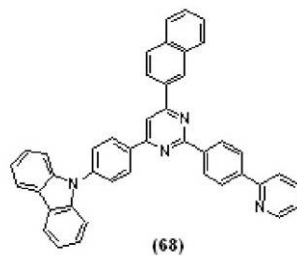
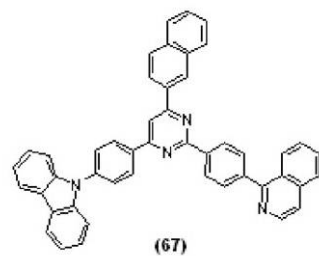
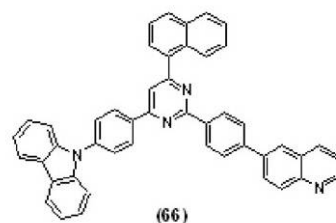
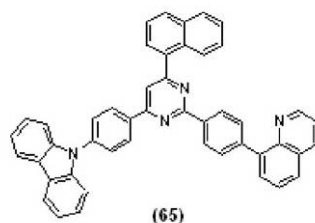
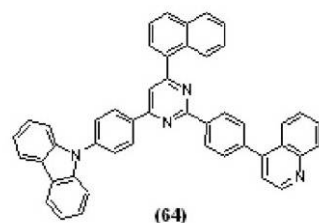
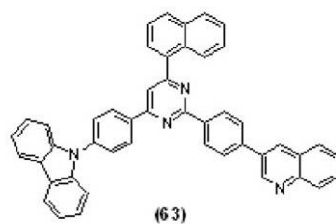
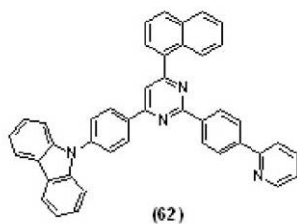
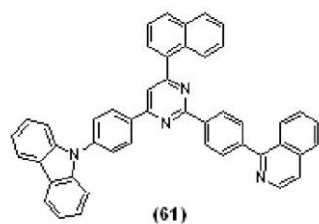
【 0 0 6 1 】

10

20

30

【化 3 - 5】



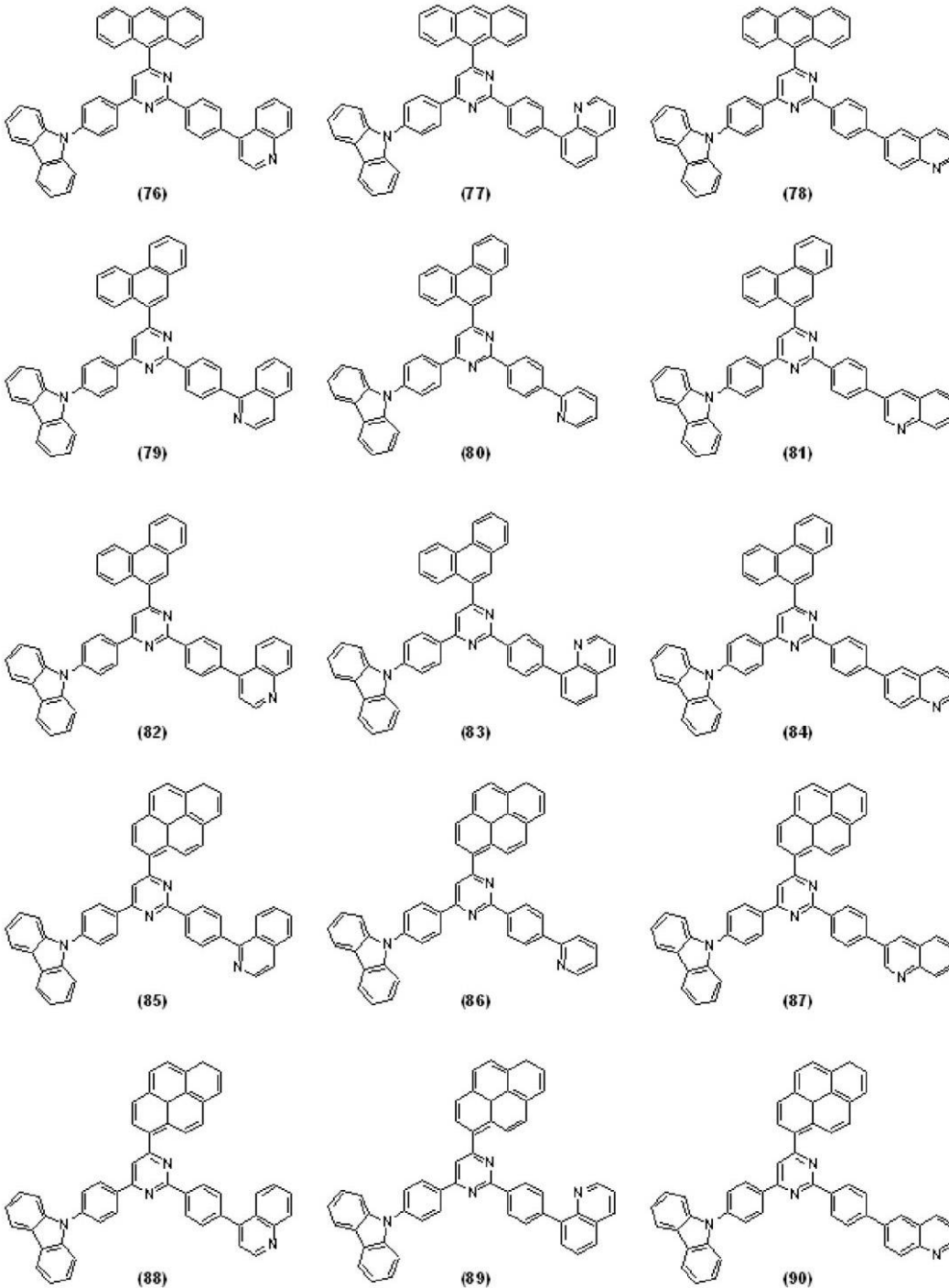
【 0 0 6 2 】

10

20

30

【化 3 - 6】



【 0 0 6 3】

上記化合物を含む有機光電素子用材料は、正孔注入、正孔輸送、発光、または電子注入および/または電子輸送の役割を果たすことができ、適切なドーパントと共に発光ホストとしての役割も果たすことができる。本発明の実施形態によれば、有機光電素子用化合物は、有機薄膜層に含まれると有機光電素子の寿命ならびに電気化学的安定性および熱安定性を向上させることができ、寿命特性および効率特性を向上させるために駆動電圧を低下させることができる。

【 0 0 6 4】

本発明の他の一実施形態によれば、前記有機光電素子用材料を含む有機光電素子が提供される。前記有機光電素子としては、有機発光ダイオード、有機太陽電池、有機トランジスタ、有機感光体ドラム、有機メモリ素子などが挙げられる。

【 0 0 6 5 】

有機太陽電池の場合には、本発明の新しい化合物は電極または電極バッファ層に含まれ、これによって量子効率を増加させることができる。有機トランジスタの場合には、ゲート、ソース・ドレイン電極などの電極材料として使用され得る。

【 0 0 6 6 】

以下、有機発光ダイオードについてより詳細に説明する。本発明の他の実施形態によれば、陽極、陰極、および前記陽極と前記陰極との間に配置された少なくとも一層の有機薄膜層を含む有機発光ダイオードが提供される。前記有機薄膜層は、前記有機光電素子用材料を含む。

【 0 0 6 7 】

前記有機薄膜層は、発光層；および正孔輸送層（H T L）、正孔注入層（H I L）、電子輸送層（E T L）、電子注入層（E I L）、正孔阻止層およびこれらの組み合わせからなる群より選択される。少なくとも一つの層は、本発明による有機光電素子用材料を含む。

【 0 0 6 8 】

図 1 乃至図 5 は、本発明の一実施形態による有機光電素子用材料を含む有機発光ダイオードの断面図である。

【 0 0 6 9 】

図 1 乃至図 5 を参照すれば、本発明の実施形態による有機発光ダイオード 1 0 0、2 0 0、3 0 0、4 0 0、および 5 0 0 は、陽極 1 2 0 および陰極 1 1 0 との間に配置された少なくとも一層の有機薄膜層 1 0 5 を含む。

【 0 0 7 0 】

陽極 1 2 0 は、有機薄膜層への正孔注入を容易にするように仕事関数が高い陽極材料を含む。前記陽極材料としては、ニッケル、白金、バナジウム、クロム、銅、亜鉛、および金のような金属またはこれらの合金；酸化亜鉛、酸化インジウム、インジウムスズ酸化物（I T O）、およびインジウム亜鉛酸化物（I Z O）のような金属酸化物；Z n O : A l または S n O₂ : S b のような金属と酸化物との組み合わせ；またはポリ（3 - メチルチオフェン）、ポリ[3 , 4 - （エチレン - 1 , 2 - ジオキシ）チオフェン]（P E D T）、ポリピロールおよびポリアニリンのような導電性高分子などが挙げられるが、これらに限定されない。好ましくは、前記陽極として I T O（i n d i u m t i n o x i d e）などの透明電極を含む。

【 0 0 7 1 】

陰極 1 1 0 は、有機薄膜層への電子注入を容易にするように仕事関数が小さい陰極材料を含む。陰極材料としては、マグネシウム、カルシウム、ナトリウム、カリウム、チタン、インジウム、イットリウム、リチウム、ガドリニウム、アルミニウム、銀、スズ、および鉛、のような金属またはこれらの合金；L i F / A l、L i q / A l、L i O₂ / A l、L i F / C a、L i F / A l、および B a F₂ / C a のような多層材料などが挙げられるが、これらに限定されない。好ましくは、前記陰極としてアルミニウムなどの金属電極を含む。

【 0 0 7 2 】

図 1 を参照すれば、有機光電素子 1 0 0 は、発光層 1 3 0 のみを含む有機薄膜層 1 0 5 を含む。

【 0 0 7 3 】

図 2 を参照すれば、2 層型有機光電素子 2 0 0 は、電子輸送層（E T L）を含む発光層 2 3 0 と正孔輸送層（H T L）1 4 0 とを含む有機薄膜層 1 0 5 を含む。発光層 2 3 0 は電子輸送層（E T L）としても機能し、正孔輸送層（H T L）1 4 0 は I T O のような透明電極との結合性に優れる、または正孔輸送性に優れる。

【 0 0 7 4 】

図 3 を参照すれば、3 層型有機光電素子 3 0 0 は、電子輸送層（E T L）1 5 0、発光層 1 3 0、および正孔輸送層（H T L）1 4 0 を含む有機薄膜層 1 0 5 を含む。発光層 1

10

20

30

40

50

30は独立して設置され、電子輸送性に優れた層または正孔輸送性に優れた層が別々に積層される。

【0075】

図4に示されるように、4層型有機光電素子400は、電子注入層(EIL)160、発光層130、正孔輸送層(HTL)140、およびITOの陽極との結合のための正孔注入層(ETL)170を含む有機薄膜層105を含む。

【0076】

図5に示されるように、5層型有機光電素子500は、電子輸送層(ETL)150、発光層130、正孔輸送層(HTL)140、および正孔注入層(HIL)170を含む有機薄膜層105を含み、低電圧を達成するために電子注入層(EIL)160をさらに含む。

10

【0077】

前記図1乃至図5において、電子輸送層(ETL)150、電子注入層(EIL)160、発光層130および230、正孔輸送層(HTL)140、正孔注入層(HIL)170、ならびにこれらの組み合わせからなる群より選択される少なくとも1つを含む有機薄膜層105は、前記有機光電素子用材料を含む。前記有機光電素子用材料は、電子輸送層(ETL)150または電子注入層(EIL)160を含む電子輸送層(ETL)150に使用されても良い。電子輸送層(ETL)に用いられる場合、さらなる正孔阻止層(図示せず)を必要としないため、より単純化した構造の有機光電素子を提供することができる。

20

【0078】

また、前記有機光電素子用材料が発光層130および230内に含まれる場合、前記有機光電素子用材料は、燐光もしくは蛍光ホスト、または蛍光青色ドーパントとして含まれても良い。

【0079】

前述した有機発光ダイオードは、基板上に陽極を形成し；真空蒸着(evaporation)、スパッタリング(sputtering)、プラズマメッキ、およびイオンメッキのようなドライコーティング法；またはスピンコーティング(spin coating)、浸漬(dipping)、フローコーティング(flow coating)のようなウェットコーティング法によって有機薄膜層を形成し；そして、その上に陰極を形成することによって作製されうる。

30

【0080】

本発明の他の実施形態は、上記の実施形態による有機光電素子を含む表示装置を提供する。

【実施例】

【0081】

以下の実施を用いて本発明をより詳細に説明する。但し、これらの実施例によって本発明が制限されてはならないことが理解されるであろう。

【0082】

(有機光電素子用材料の調製)

40

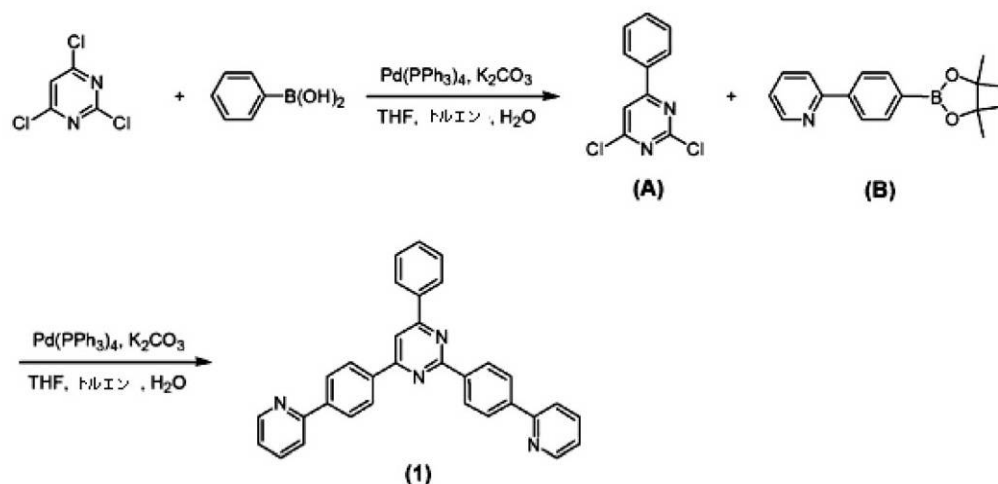
合成例1：化合物(1)の合成

有機光電素子用材料の具体的な例として、化合物(1)を下記反応式1に従って2段階で合成した。

【0083】

【化 4】

[反応式 1]



10

【0084】

第1段階：中間体生成物(A)の合成

2, 4, 6 - トリクロロピリミジン 75.0 g (409 mmol)、フェニルボロン酸 54.8 g (450 mmol) およびテトラキス - (トリフェニルホスフィン) パラジウム 11.8 g (10 mmol) をテトラヒドロフラン 450 ml とトルエン 300 ml との混合溶媒に懸濁させて懸濁液を得た。炭酸カリウム 113.0 g (818 mmol) を水 300 ml に溶解した溶液にこの懸濁液を加え、得られた混合物を9時間加熱還流した。反応流体を2層に分離した後、有機層を塩化ナトリウム飽和水溶液で洗浄し、無水硫酸ナトリウムで乾燥した。

20

【0085】

有機溶媒を減圧下で蒸留して除去した後、その残留物をトルエンで再結晶し、得られた結晶をろ過により分離し、トルエンで洗浄し、中間体生成物(A) 64.7 g (収率：70.3%) を収得した。

30

【0086】

第2段階：化合物(1)の合成

中間体生成物(A) 2.3 g (10 mmol)、2 - (4 - (4, 4, 5, 5 - テトラメチル - 1, 3, 2 - ジオキサボロラン - 2 - イル) フェニル) ピリジン (B) 6.3 g (22 mmol) およびテトラキス - (トリフェニルホスフィン) パラジウム 0.6 g (0.5 mmol) をテトラヒドロフラン 70 ml とトルエン 50 ml との混合溶媒に懸濁させて懸濁液を得た。炭酸カリウム 5.7 g (41 mmol) を水 50 ml に溶解した溶液にこの懸濁液を加えた。得られた混合物を12時間加熱還流した。反応流体を2層に分離した後、有機層を塩化ナトリウム飽和水溶液で洗浄し、無水硫酸ナトリウムで乾燥した。

40

【0087】

有機溶媒を減圧下で蒸留して除去した後、その残留物をトルエンで再結晶し、得られた結晶をろ過によって分離し、トルエンで洗浄し、化合物(1) 3.9 g (収率：67.9%) を収得した。

【0088】

^1H NMR (300 MHz, CDCl_3) 8.85 (d, 2H)、8.75 (d, 2H)、8.45 (d, 2H)、8.34 (d, 2H)、8.21 (m, 4H)、8.08 (s, 1H)、7.80 (m, 4H)、7.60 (m, 3H)、7.27 (m, 2H); MS [M + 1] 463。

【0089】

合成例 2：化合物(2)の合成

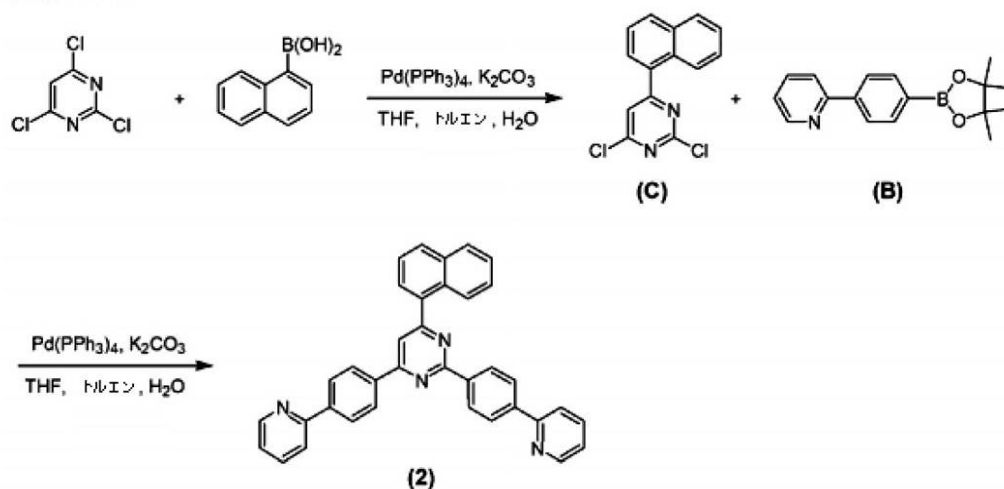
50

有機光電素子用材料の具体的な例として、化合物(2)を下記反応式2に従って2段階で合成した。

【0090】

【化5】

[反応式2]



10

【0091】

第1段階：中間体生成物(C)の合成

2,4,6-トリクロロピリミジン75.0g(409mmol)、ナフチルボロン酸77.3g(450mmol)およびテトラキス-(トリフェニルホスフィン)パラジウム11.8g(10mmol)をテトラヒドロフラン450mlとトルエン300mlとの混合溶媒に懸濁させて懸濁液を得た。炭酸カリウム113.0g(818mmol)を水300mlに溶解した溶液にこの懸濁液を加え、得られた混合物を9時間加熱還流した。反応流体を2層に分離した後、その有機層を塩化ナトリウム飽和水溶液で洗浄し、無水硫酸ナトリウムで乾燥した。

20

【0092】

有機溶媒を減圧下で蒸留して除去した後、その残留物をトルエンで再結晶し、得られた結晶をろ過により分離し、トルエンで洗浄し、中間体生成物(C)80.0g(収率：71.1%)を収得した。

30

【0093】

第2段階：化合物(2)の合成

中間体生成物(C)3.2g(12mmol)、2-(4-(4-(4,4,5,5-テトラメチル-1,3,2-ジオキサボロラン-2-イル)フェニル)ピリジン(B)7.2g(26mmol)およびテトラキス-(トリフェニルホスフィン)パラジウム0.7g(0.6mmol)をテトラヒドロフラン100mlとトルエン65mlとの混合溶媒に懸濁させて懸濁液を得た。炭酸カリウム6.4g(47mmol)を水65mlに溶解した溶液にこの懸濁液を加えた。得られた混合物を12時間加熱還流した。反応流体を2層に分離した後、その有機層を塩化ナトリウム飽和水溶液で洗浄し、無水硫酸ナトリウムで乾燥した。

40

【0094】

有機溶媒を減圧下で蒸留して除去した後、その残留物をトルエンで再結晶し、析出した結晶をろ過により分離し、トルエンで洗浄し、化合物(2)4.1g(収率：69.0%)を収得した。

【0095】

^1H NMR(300MHz、 CDCl_3) 8.85(d、2H)、8.76(d、2H)、8.45(m、3H)、8.20(m、4H)、8.01(m、3H)、7.80(m、5H)、7.61(m、3H)、7.27(m、2H); MS[M+1]513。

50

【 0 0 9 6 】

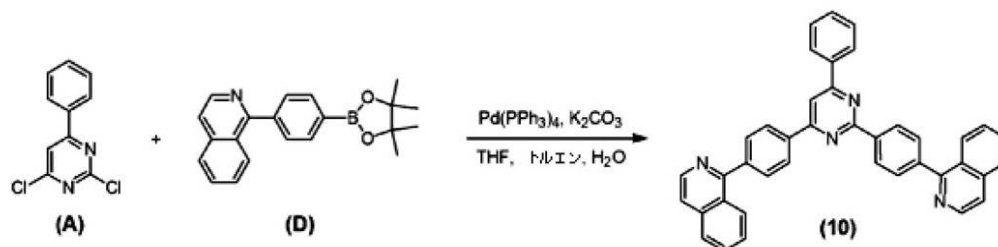
合成例 3：化合物（ 1 0 ）の合成

有機光電素子用材料の具体的な例として、化合物（ 1 0 ）を下記反応式 3 に従って合成した。

【 0 0 9 7 】

【 化 6 】

[反応式 3]



10

【 0 0 9 8 】

中間体生成物（ A ） 2 . 3 g（ 1 0 m m o l ）、 1 -（ 4 -（ 4 , 4 , 5 , 5 - テトラメチル - 1 , 3 , 2 - ジオキサボロラン - 2 - イル）フェニル）イソキノリン（ D ） 7 . 5 g（ 2 2 m m o l ）およびテトラキス -（トリフェニルホスフィン）パラジウム 0 . 6 g（ 0 . 5 m m o l ）をテトラヒドロフラン 7 0 m l とトルエン 5 0 m l との混合溶媒に懸濁させて懸濁液を得た。炭酸カリウム 5 . 7 g（ 4 1 m m o l ）を水 5 0 m l に溶解した溶液にこの懸濁液を加えた。得られた混合物を 1 2 時間加熱還流した。反応流体を 2 層に分離した後、その有機層を塩化ナトリウム飽和水溶液で洗浄し、無水硫酸ナトリウムで乾燥した。

20

【 0 0 9 9 】

有機溶媒を減圧下で蒸留して除去した後、その残留物をトルエンで再結晶し、析出した結晶をろ過により分離し、トルエンで洗浄し、化合物（ 1 0 ） 3 . 9 g（収率： 6 8 . 0 %）を収得した。

【 0 1 0 0 】

^1H NMR（ 3 0 0 M H z、C D C l ₃ ） 8 . 9 4（ d、2 H）、8 . 6 8（ d、2 H）、8 . 5 2（ d、2 H）、8 . 3 9（ d、2 H）、8 . 2 1（ d、2 H）、8 . 1 6（ s、1 H）、7 . 9 4（ m、6 H）、7 . 7 2（ m、4 H）、7 . 6 1（ m、5 H）；MS [M + 1] 5 6 3。

30

【 0 1 0 1 】

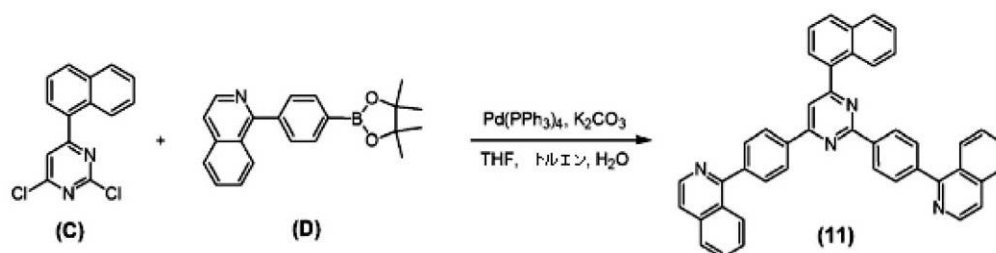
合成例 4：化合物（ 1 1 ）の合成

有機光電素子用材料の具体的な例として、化合物（ 1 1 ）を下記反応式 4 に従って合成した。

【 0 1 0 2 】

【 化 7 】

[反応式 4]



40

【 0 1 0 3 】

中間体生成物（ C ） 2 . 7 g（ 1 0 m m o l ）、 1 -（ 4 -（ 4 , 4 , 5 , 5 - テトラ

50

メチル - 1, 3, 2 - ジオキサボロラン - 2 - イル) フェニル) イソキノリン (D) 7.2 g (22 mmol) およびテトラキス - (トリフェニルホスフィン) パラジウム 0.6 g (0.5 mmol) をテトラヒドロフラン 80 ml とトルエン 55 ml との混合溶媒に懸濁させて懸濁液を得た。炭酸カリウム 5.4 g (39.1 mmol) を水 55 ml に溶解した溶液にこの懸濁液を加えた。得られた混合物を 12 時間加熱還流した。反応流体を 2 層に分離した後、その有機層を塩化ナトリウム飽和水溶液で洗浄し、無水硫酸ナトリウムで乾燥した。

【0104】

有機溶媒を減圧下で蒸留して除去した後、その残留物をトルエンで再結晶し、析出した結晶をろ過により分離し、トルエンで洗浄し、化合物 (11) 4.5 g (収率: 65.0 %) を収得した。

10

【0105】

^1H NMR (300 MHz, CDCl_3) 8.93 (d, 2H)、8.67 (d, 2H)、8.53 (d, 2H)、8.45 (d, 1H)、8.21 (d, 2H)、7.96 (m, 10H)、7.72 (m, 5H)、7.64 (m, 4H); MS [M + 1] 613。

【0106】

合成例 5: 化合物 (19) の合成

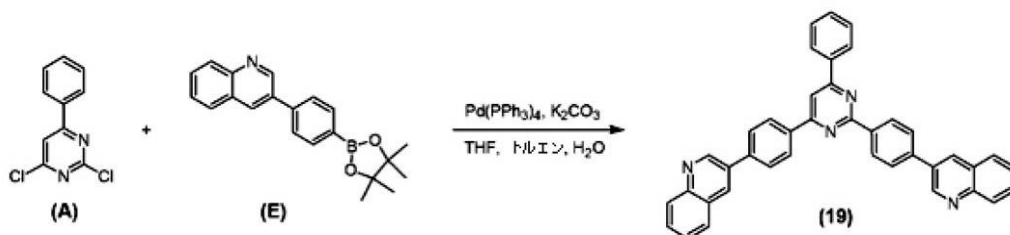
有機光電素子用材料の具体的な例として、化合物 (19) を下記反応式 5 に従って合成した。

20

【0107】

【化 8】

[反応式 5]



30

【0108】

中間体生成物 (A) 4.0 g (18 mmol)、3 - (4 - (4, 4, 5, 5 - テトラメチル - 1, 3, 2 - ジオキサボロラン - 2 - イル) フェニル) キノリン (E) 13.0 g (39 mmol) およびテトラキス - (トリフェニルホスフィン) パラジウム 1.0 g (0.9 mmol) をテトラヒドロフラン 120 ml とトルエン 80 ml との混合溶媒に懸濁させて懸濁液を得た。炭酸カリウム 9.8 g (71 mmol) を水 80 ml に溶解した溶液にこの懸濁液を加えた。得られた混合物を 12 時間加熱還流した。反応流体を 2 層に分離した後、その有機層を塩化ナトリウム飽和水溶液で洗浄し、無水硫酸ナトリウムで乾燥した。

40

【0109】

有機溶媒を減圧下で蒸留して除去した後、その残留物をトルエンで再結晶し、析出した結晶をろ過により分離し、トルエンで洗浄し、化合物 (19) 6.5 g (収率: 64.7 %) を収得した。

【0110】

^1H NMR (300 MHz, CDCl_3) 9.31 (d, 2H)、8.89 (d, 2H)、8.40 (m, 6H)、8.17 (d, 2H)、8.09 (s, 1H)、7.92 (m, 6H)、7.75 (m, 2H)、7.59 (m, 5H); MS [M + 1] 563。

【0111】

合成例 6: 化合物 (63) の合成

有機光電素子用材料の具体的な例として、化合物 (63) を下記反応式 6 に従って合成

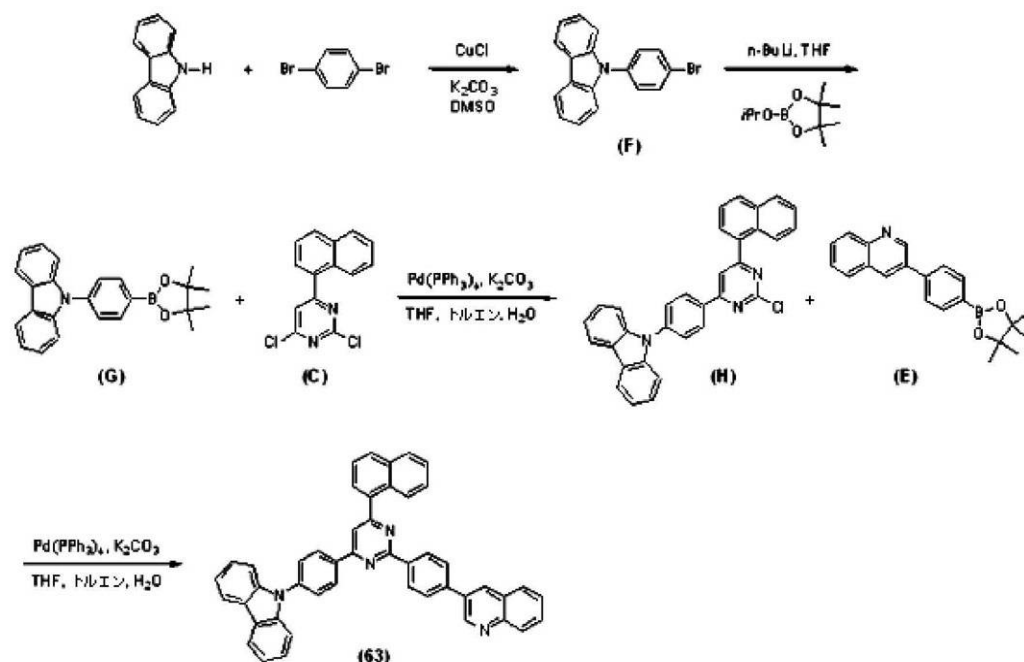
50

した。

【 0 1 1 2 】

【 化 9 】

[反応式 6]



10

20

【 0 1 1 3 】

第 1 段階：中間体生成物 (F) の合成

カルバゾール 50.8 g (304 mmol)、1,4-ジブロモベンゼン 71.6 g (304 mmol)、塩化第一銅 3.76 g (38 mmol)、および炭酸カリウム 83.9 g (607 mmol) をジメチルスルホキシド 322 ml に懸濁させ、窒素雰囲気下で加熱しながら 8 時間還流した。得られた反応流体を室温まで冷却し、メタノールを使用して再結晶した。

【 0 1 1 4 】

30

得られた結晶をろ過により分離し、収得した生成物をシリカゲルカラムクロマトグラフィーを用いて精製し、中間体生成物 (F) 55.9 g (収率：61.3%) を収得した。

【 0 1 1 5 】

第 2 段階：中間体生成物 (G) の合成

中間体生成物 (F) 37.8 g (117 mmol) をテトラヒドロフラン 378 ml に溶解し、アルゴン雰囲気下で - 70 °C で n - ブチリチウムヘキサン溶液 (1.6 M) 100.5 ml (161 mmol) を加え、次いで得られた溶液を - 70 °C 乃至 - 40 °C で 1 時間攪拌した。反応流体を - 70 °C まで冷却した後、イソプロピルテトラメチルジオキサボロラン 47.9 ml (235 mmol) を滴下して加えた。得られた溶液を - 70 °C で 1 時間攪拌した後、室温まで昇温させて 6 時間攪拌した。得られた溶液に水 200 ml を添加した後 20 分間攪拌した。

40

【 0 1 1 6 】

反応流体を 2 層に分離した後、有機層を塩化ナトリウム飽和水溶液で洗浄し、無水硫酸ナトリウムで乾燥した。

【 0 1 1 7 】

有機溶媒を減圧下で蒸留して除去した後、その残留物をトルエンで再結晶し、得られた結晶をろ過により分離し、トルエンで洗浄し、中間体生成物 (G) 28.9 g (収率：66.7%) を収得した。

【 0 1 1 8 】

第 3 段階：中間体生成物 (H) の合成

50

中間体生成物 (G) 26.8 g (73 mmol)、化合物 (C) 20.0 g (73 mmol) およびテトラキス - (トリフェニルホスフィン) パラジウム 2.1 g (1.8 mmol) をテトラヒドロフラン 600 ml とトルエン 400 ml との混合溶媒に懸濁させて懸濁液を得た。炭酸カリウム 20.1 g (154 mmol) を水 400 ml に溶解した溶液にこの懸濁液を加え、得られた混合物を 8 時間加熱還流した。反応流体を 2 層に分離した後、有機層を塩化ナトリウム飽和水溶液で洗浄し、無水硫酸ナトリウムで乾燥した。

【0119】

有機溶媒を減圧下で蒸留して除去した後、その残留物をトルエンで再結晶し、得られた結晶をろ過により分離し、トルエンで洗浄し、中間体生成物 (H) 23.0 g (収率: 65.4%) を収得した。

10

【0120】

第4段階: 化合物 (63) の合成

中間体生成物 (H) 6.0 g (12 mmol)、化合物 (E) 4.5 g (14 mmol) およびテトラキス - (トリフェニルホスフィン) パラジウム 0.36 g (0.3 mmol) をテトラヒドロフラン 180 ml とトルエン 120 ml との混合溶媒に懸濁させて懸濁液を得た。炭酸カリウム 3.4 g (25 mmol) を水 120 ml に溶解した溶液にこの懸濁液を加えた。得られた混合物を 12 時間加熱還流した。反応流体を 2 層に分離した後、有機層を塩化ナトリウム飽和水溶液で洗浄し、無水硫酸ナトリウムで乾燥した。

【0121】

有機溶媒を減圧下で蒸留して除去した後、その残留物をトルエンで再結晶し、得られた結晶をろ過により分離し、トルエンで洗浄し、化合物 (63) 7.2 g (収率: 88.3%) を収得した。

20

【0122】

^1H NMR (300 MHz, CDCl_3) 9.31 (s, 1H)、8.92 (d, 2H)、8.62 (d, 2H)、8.45 (m, 2H)、8.19 (d, 3H)、7.71 (m, 20H); MS [M+1] 651。

【0123】

合成された化合物のガラス転移温度および熱分解温度を示差走査熱量測定 (Differential Scanning Calorimetry: DSC) および熱重量分析 (Thermogravimetry: TGA) によって測定して決定した。合成例 1 による化合物 (1) の結果を図 6 に示す。

30

【0124】

(有機光電素子の製造)

実施例 1

コーニング社 (Corning, Inc) 製の $15 \text{ } \Omega/\text{cm}^2$ (1200) の ITO ガラス基板を $50 \text{ mm} \times 50 \text{ mm} \times 0.7 \text{ mm}$ の大きさに切断してイソプロピルアルコールおよび純水の中でそれぞれ 5 分間超音波洗浄した後、30 分間 UV およびオゾン洗浄した。

【0125】

前記ガラス基板の表面上に N, N' - ジフェニル - N, N' - ビス - [4 - (フェニル - m - トリルアミノ) - フェニル] - ビフェニル - 4, 4' - ジアミン (N, N' - diphenyl - N, N' - bis - [4 - (phenyl - m - tolyl - amino) - phenyl] - biphenyl - 4, 4' - diamine: DNTPD) (40 nm)、N, N' - ジ(1 - ナフチル) - N, N' - ジフェニルベンジジン (NPB) (10 nm)、EB - 46 (イーレイ (E-Ray) オプトエレクトロニクステクノロジー社製の蛍光青色ドーパント): EB - 512 (イーレイオプトエレクトロニクステクノロジー社製の青色蛍光ホスト) 6% (40 nm) および前記合成例 1 で得られた化合物 (1) (10 nm) を順に熱真空蒸着して正孔注入層 (HIL)、正孔輸送層 (HTL)、発光層、および電子輸送層 (ETL) を形成した。

40

【0126】

50

前記 E T L 上に電子注入層 (E I L) として L i F を 0 . 5 n m の厚さに真空蒸着し、 A l を 1 0 0 n m の厚さに真空蒸着して L i F / A l 電極を形成した。得られた有機光電素子の構造を図 5 に示す。

【 0 1 2 7 】

実施例 2

化合物 (1) の代わりに合成例 2 で得られた化合物 (2) (1 0 n m) を使用したことを除いては前記実施例 1 と同様な方法で有機光電素子を製造した。

【 0 1 2 8 】

実施例 3

化合物 (1) の代わりに合成例 3 で得られた化合物 (1 0) (1 0 n m) を使用したことを除いては前記実施例 1 と同様な方法で有機光電素子を製造した。

【 0 1 2 9 】

実施例 4

化合物 (1) の代わりに合成例 4 で得られた化合物 (1 1) (1 0 n m) を使用したことを除いては前記実施例 1 と同様な方法で有機光電素子を製造した。

【 0 1 3 0 】

実施例 5

化合物 (1) の代わりに合成例 5 で得られた化合物 (1 9) (1 0 n m) を使用したことを除いては前記実施例 1 と同様な方法で有機光電素子を製造した。

【 0 1 3 1 】

実施例 6

化合物 (1) の代わりに合成例 6 で得られた化合物 (6 3) (1 0 n m) を使用したことを除いては前記実施例 1 と同様な方法で有機光電素子を製造した。

【 0 1 3 2 】

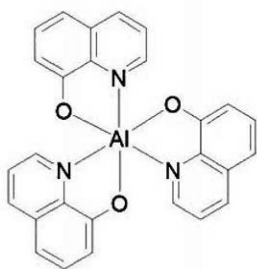
比較例 1

化合物 (1) の代わりに下記化学式 2 で表される化合物である A l q ₃ (1 0 n m) を使用したことを除いては前記実施例 1 と同様な方法で有機光電素子を製造した。

【 0 1 3 3 】

【 化 1 0 】

[化学式 2]



【 0 1 3 4 】

有機光電素子の性能測定

前記実施例 1 乃至 6、および比較例 1 で製造されたそれぞれの有機光電素子に対して電圧による発光効率を測定した。測定方法は次のとおりである。

【 0 1 3 5 】

1) 電圧変化による電流密度の変化の測定

前記実施例 1 乃至 6、および比較例 1 で調製されたそれぞれの有機光電素子に対し、電圧を 0 V から 1 4 V まで上昇させ、電流 - 電圧計 (K e i t h l e y 2 4 0 0 (登録商標)) を利用して単位素子に流れる電流値を測定した。前記電流値を面積で割ってこれらの電流密度を測定した。

【 0 1 3 6 】

2) 電圧変化による輝度の変化の測定

前記実施例 1 乃至 6、および比較例 1 によるそれぞれの有機光電素子に対し、電圧を 0 V から 14 V まで上昇させ、輝度計 (Minolta Cs-1000A) を利用して輝度を測定した。

【0137】

3) 電力効率 (発光効率) の測定

前記「1) 電圧変化による電流密度の変化の測定」および「2) 電圧変化による輝度の変化の測定」で測定された電流密度および輝度、ならびに電圧 (V) から電力効率 (発光効率) を計算した。その結果を下記表 1 に示す。

【0138】

【表 1】

10

	開始電圧(V _{on})	輝度 1000 cd/m ²		色座標 CIE	
		駆動電圧(V)	電力効率(lm/W)	x	y
実施例 1	3.00	6.00	2.42	0.15	0.15
実施例 2	3.00	6.00	2.12	0.15	0.15
実施例 3	2.80	6.00	1.97	0.15	0.15
実施例 4	2.80	6.20	2.00	0.15	0.15
実施例 5	3.22	7.04	2.01	0.15	0.15
実施例 6	3.03	6.86	2.05	0.15	0.15
比較例 1	3.80	8.20	1.87	0.15	0.15

20

【0139】

表 1 を参照すれば、比較例 1 の Alq₃ を電子輸送層として使用した場合に比べ、本発明による有機光電素子用材料を使用して電子輸送層を形成した実施例 1 乃至 6 の有機光電素子は、低い駆動電圧と共に優れた電力効率 (lm/W) を有することが分かる。したがって、本発明の一実施形態による有機化合物は、高い熱安定性を有し、有機光電素子の性能評価結果からわかるように、低い駆動電圧および高い発光効率を有するため、有機光電素子の寿命を向上させることができると予想される。有機光電素子用材料が有する非対称性により非晶質特性が強化され、そのため結晶化を抑制されて素子の寿命が向上したと考えられる。

【0140】

30

4) 熱的特性の測定

合成例 1 乃至 6 で得られた化合物を示差走査熱量測定 (DSC: differential scanning calorimetry) で 1 次分析を行い、その後、1 次分析済みの化合物について 2 次分析を行なった。合成例 1 の化合物に対する分析結果を図 6 に示す。図 6 を参照すれば、合成例 1 の化合物は 1 次分析で融点ピークを示したが、2 次分析では融点ピークを示さなかった。この結果から、合成例 1 の化合物が安定した非晶質状態で存在することが確認された。

【0141】

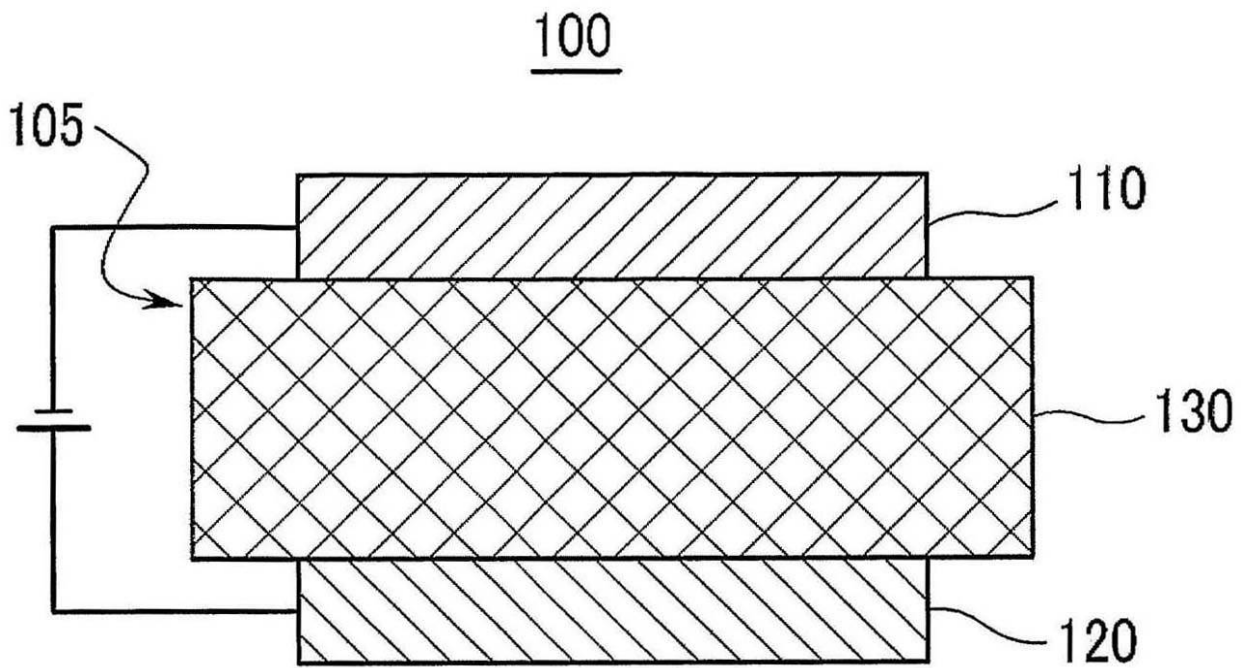
また、合成例 2 乃至 6 の化合物も同様な方法で非晶質状態で存在することが確認された。したがって、合成例 1 乃至 6 の各化合物を含む有機発光ダイオードは、駆動時にジュール熱により影響を受けることなく、既存の有機光電素子に比べて向上した寿命特性を示すと予測される。

40

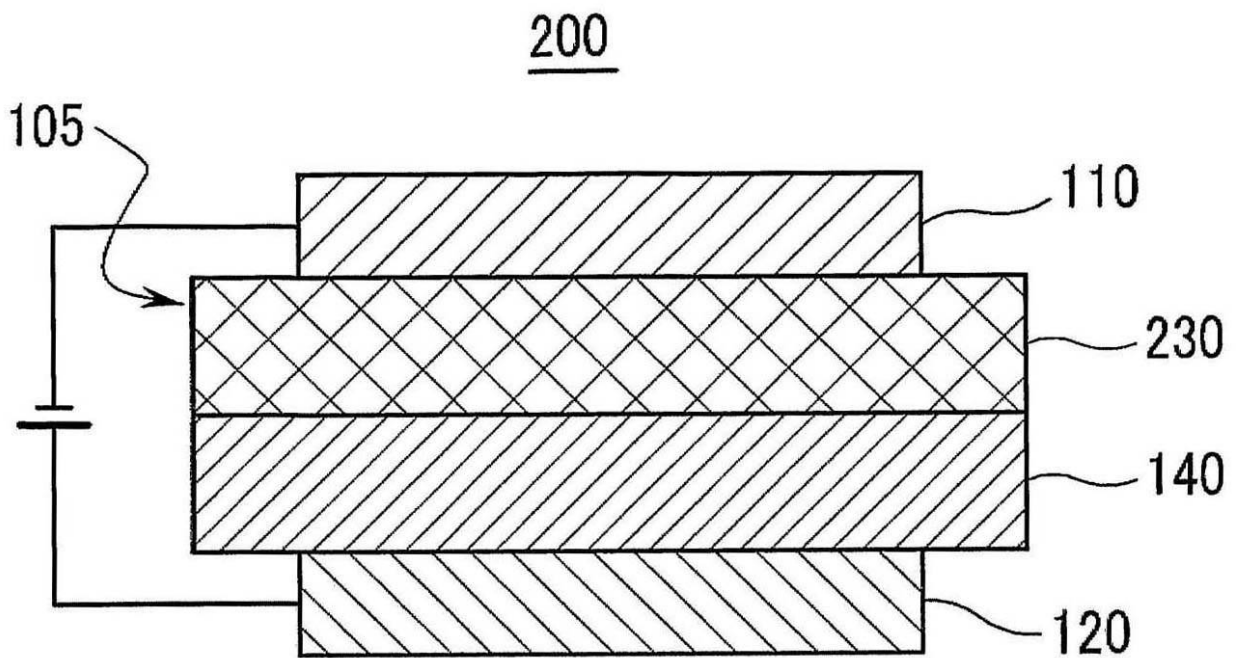
【0142】

本発明は前記実施例に限定されるものではなく、当業者によって特許請求の範囲の精神および技術的範囲に含まれる多様な変形および等価の形態で製造されうる。したがって、上記の実施例は例示的なものであり、本発明をいかようにも限定するものではないことを理解しなければならない。

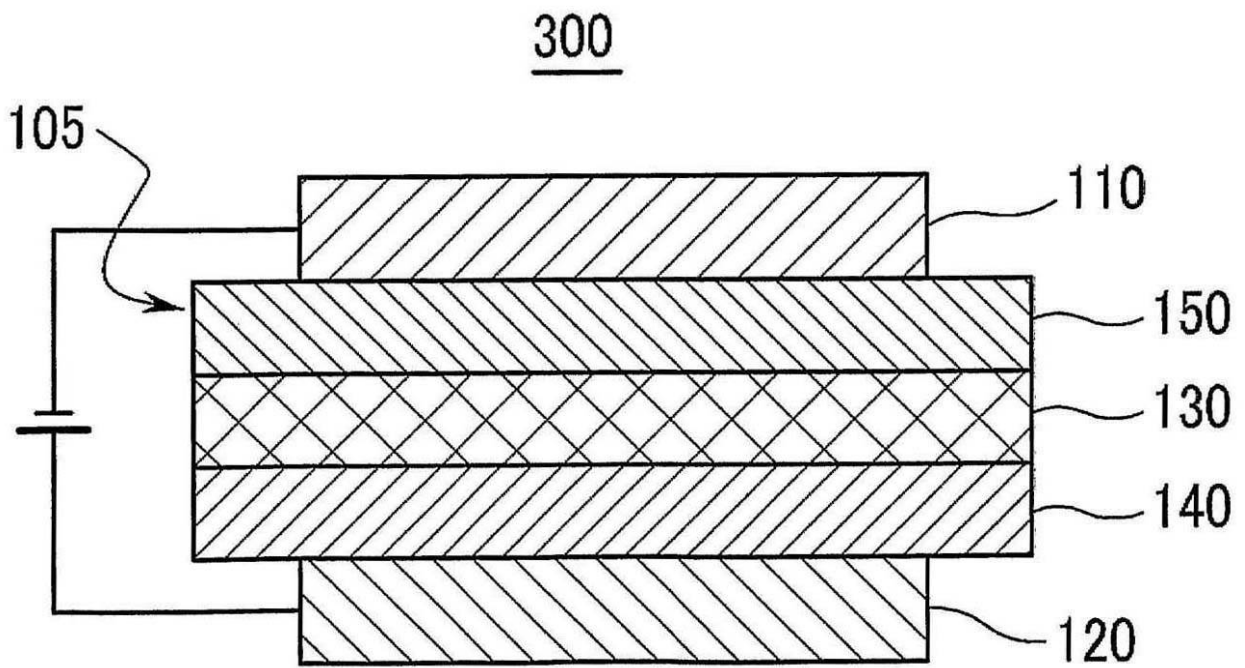
【図 1】



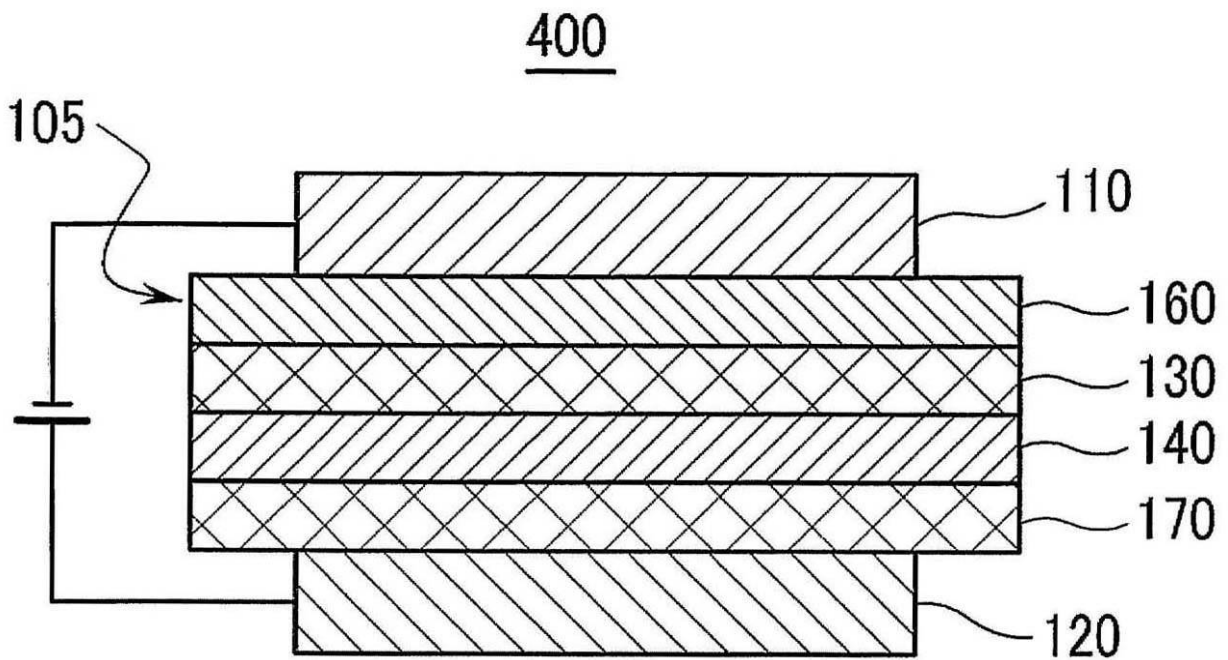
【図 2】



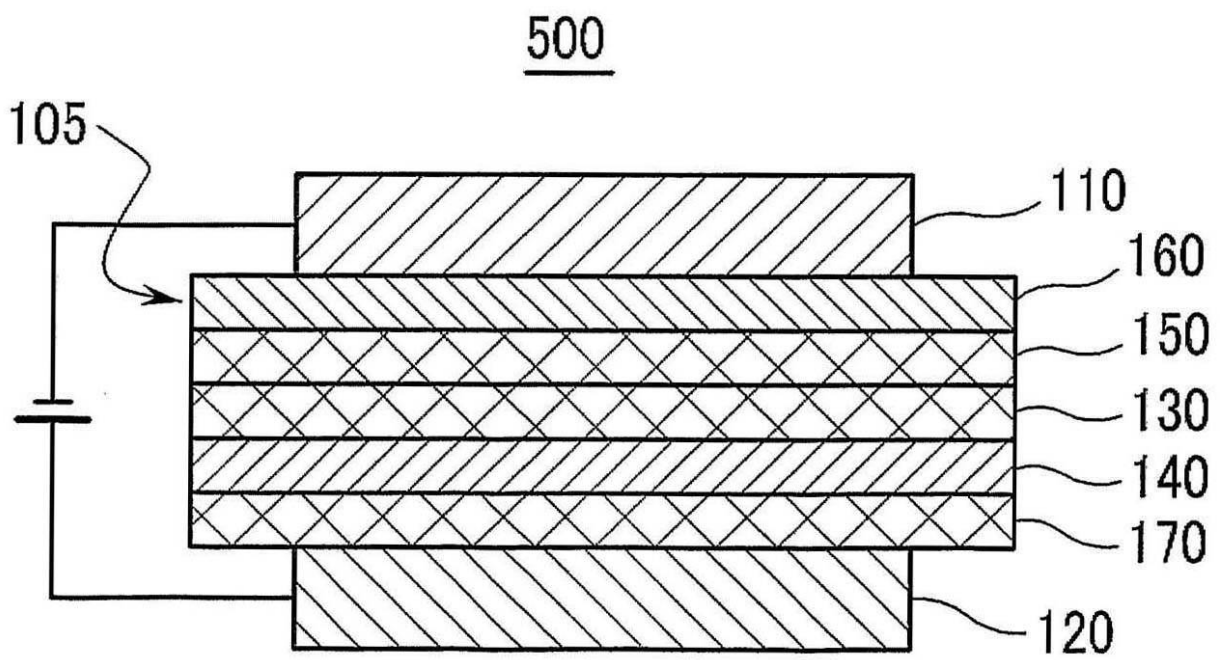
【図 3】



【図 4】



【図 5】



【 国際調査報告 】

INTERNATIONAL SEARCH REPORT		International application No. PCT/KR 2009/004730
A. CLASSIFICATION OF SUBJECT MATTER IPC ⁸ : C07D 239/26 (2006.01); C07D 403/10 (2006.01) According to International Patent Classification (IPC) or to both national classification and IPC		
B. FIELDS SEARCHED Minimum documentation searched (classification system followed by classification symbols) IPC ⁸ : C07D Documentation searched other than minimum documentation to the extent that such documents are included in the fields searched Electronic data base consulted during the international search (name of data base and, where practicable, search terms used) EPODOC, WPI, REGISTRY, CAPLUS		
C. DOCUMENTS CONSIDERED TO BE RELEVANT		
Category*	Citation of document, with indication, where appropriate, of the relevant passages	Relevant to claim No.
A	US 2004/110 031 A1 (FUKUDA M) 10 June 2004 (10.06.2004) <i>Claims 1-5, 7</i>	1-14
A	EP 1 424 381 A2 (KONICA MINOLTA HOLDINGS INC) 02 June 2004 (02.06.2004) <i>Claim 1, abstract</i>	1-14
A	US 2004/086 745 A1 (IWAKUMA T et al.) 06 May 2004 (06.05.2004) <i>Claim 1, abstract</i>	1-14
<input type="checkbox"/> Further documents are listed in the continuation of Box C. <input checked="" type="checkbox"/> See patent family annex.		
* Special categories of cited documents: "A" document defining the general state of the art which is not considered to be of particular relevance "E" earlier application or patent but published on or after the international filing date "L" document which may throw doubts on priority claim(s) or which is cited to establish the publication date of another citation or other special reason (as specified) "O" document referring to an oral disclosure, use, exhibition or other means "P" document published prior to the international filing date but later than the priority date claimed "T" later document published after the international filing date or priority date and not in conflict with the application but cited to understand the principle or theory underlying the invention "X" document of particular relevance; the claimed invention cannot be considered novel or cannot be considered to involve an inventive step when the document is taken alone "Y" document of particular relevance; the claimed invention cannot be considered to involve an inventive step when the document is combined with one or more other such documents, such combination being obvious to a person skilled in the art "&" document member of the same patent family		
Date of the actual completion of the international search 30 April 2010 (30.04.2010)		Date of mailing of the international search report 04 May 2010 (04.05.2010)
Name and mailing address of the ISA/ AT Austrian Patent Office Dresdner Straße 87, A-1200 Vienna Facsimile No. +43 / 1 / 534 24 / 535		Authorized officer MÜLLER-HIEL R. Telephone No. +43 / 1 / 534 24 / 434

INTERNATIONAL SEARCH REPORT Information on patent family members

International application No.
PCT/KR 2009/004730

Patent document cited in search report			Publication date	Patent family member(s)			Publication date
US	A	2004110031		US	A1	2004110031	2004-06-10
				JP	A	2004178895	2004-06-24
EP	A	1424381		JP	A	2009267430	2009-11-12
				JP	A	2004311414	2004-11-04
				JP	A	2004311412	2004-11-04
				JP	A	2004311410	2004-11-04
				US	A1	2004115476	2004-06-17
				EP	A2	1424381	2004-06-02
US	A	2004086745		EP	A2	2169028	2010-03-31
				JP	A	2009088538	2009-04-23
				US	A1	2005249976	2005-11-10
				US	A1	2004086745	2004-05-06
				WO	A1	03080760	2003-10-02
				JP	B2	4316387B2	2009-08-19

フロントページの続き

(51)Int.Cl.		F I		テーマコード(参考)
H 0 1 L 51/40 (2006.01)		H 0 1 L 29/28	2 5 0 H	
		H 0 1 L 29/28	1 0 0 A	
		H 0 1 L 29/28	2 1 0	
		H 0 1 L 29/28	3 7 0	

(81)指定国 AP(BW,GH,GM,KE,LS,MW,MZ,NA,SD,SL,SZ,TZ,UG,ZM,ZW),EA(AM,AZ,BY,KG,KZ,MD,RU,TJ,TM),EP(AT,BE,BG,CH,CY,CZ,DE,DK,EE,ES,FI,FR,GB,GR,HR,HU,IE,IS,IT,LT,LU,LV,MC,MK,MT,NL,NO,PL,PT,RO,SE,SI,SK,SM,TR),OA(BF,BJ,CF,CG,CI,CM,GA,GN,GQ,GW,ML,MR,NE,SN,TD,TG),AE,AG,AL,AM,AO,AT,AU,AZ,BA,BB,BG,BH,BR,BW,BY,BZ,CA,CH,CL,CN,CO,CR,CU,CZ,DE,DK,DM,DO,DZ,EC,EE,EG,ES,FI,GB,GD,GE,GH,GM,GT,HN,HR,HU,ID,IL,IN,IS,JP,KE,KG,KM,KN,KP,KZ,LA,LC,LK,LR,LS,LT,LU,LY,MA,MD,ME,MG,MK,MN,MW,MX,MY,MZ,NA,NG,NI,NO,NZ,OM,PE,PG,PH,PL,PT,RO,RS,RU,SC,SD,SE,SG,SK,SL,SM,ST,SV,SY,TJ,TM,TN,TR,TT,TZ,UA,UG,US,UZ,VC,VN,ZA,ZM,ZW

(72)発明者 カン, ミョン - スン
大韓民国, 4 3 7 - 7 1 1 キョンギ - ド, イワン - シ, コチョン - ドン 3 3 2 - 2, チェイル
インダストリーズ インコーポレイテッド

(72)発明者 ジュン, ホ - クク
大韓民国, 4 3 7 - 7 1 1 キョンギ - ド, イワン - シ, コチョン - ドン 3 3 2 - 2, チェイル
インダストリーズ インコーポレイテッド

(72)発明者 カン, ウィ - ス
大韓民国, 4 3 7 - 7 1 1 キョンギ - ド, イワン - シ, コチョン - ドン 3 3 2 - 2, チェイル
インダストリーズ インコーポレイテッド

(72)発明者 パク, ヨン - スン
大韓民国, 4 3 7 - 7 1 1 キョンギ - ド, イワン - シ, コチョン - ドン 3 3 2 - 2, チェイル
インダストリーズ インコーポレイテッド

(72)発明者 チェ, ミ - ヨン
大韓民国, 4 3 7 - 7 1 1 キョンギ - ド, イワン - シ, コチョン - ドン 3 3 2 - 2, チェイル
インダストリーズ インコーポレイテッド

(72)発明者 パク, ジン - ソン
大韓民国, 4 3 7 - 7 1 1 キョンギ - ド, イワン - シ, コチョン - ドン 3 3 2 - 2, チェイル
インダストリーズ インコーポレイテッド

F ターム(参考) 3K107 AA01 BB01 CC03 CC06 CC12 CC21 CC24 DD53 DD66 DD68
DD69 DD71 DD74 DD78
4C063 AA03 BB06 CC29 DD08 DD12 DD14 DD15 EE05
5F151 AA11

专利名称(译)	用于有机光电器件的材料和包含其的有机光电器件		
公开(公告)号	JP2012501091A	公开(公告)日	2012-01-12
申请号	JP2011524896	申请日	2009-08-25
[标]申请(专利权)人(译)	第一毛织株式会社		
申请(专利权)人(译)	第一毛织公司		
[标]发明人	キムナムスー カンミョンスン ジュンホクク カンウイス パクヨンスン チェミヨン パクジンソン		
发明人	キム,ナム-スー カン,ミョン-スン ジュン,ホ-クク カン,ウイ-ス パク,ヨン-スン チェ,ミ-ヨン パク,ジン-ソン		
IPC分类号	H01L51/50 C07D401/14 H01L51/42 H01L51/30 H01L51/05 H01L51/40		
CPC分类号	H01L51/0067 C09B1/00 C09B57/00 C09B57/001 H01L51/0059 H01L51/0081 H01L51/5012 H01L51/5048 H01L51/5092 Y02E10/549		
FI分类号	H05B33/22.B H05B33/14.B H05B33/22.D C07D401/14 H01L31/04.D H01L29/28.250.H H01L29/28.100.A H01L29/28.210 H01L29/28.370		
F-TERM分类号	3K107/AA01 3K107/BB01 3K107/CC03 3K107/CC06 3K107/CC12 3K107/CC21 3K107/CC24 3K107/DD53 3K107/DD66 3K107/DD68 3K107/DD69 3K107/DD71 3K107/DD74 3K107/DD78 4C063/AA03 4C063/BB06 4C063/CC29 4C063/DD08 4C063/DD12 4C063/DD14 4C063/DD15 4C063/EE05 5F151/AA11		
优先权	1020080082905 2008-08-25 KR 1020090050580 2009-06-08 KR		
其他公开文献	JP5596687B2		
外部链接	Espacenet		

摘要(译)

公开了一种用于包含化学式1的不对称化合物的有机光电装置的材料和包含该材料的有机光电装置。有机光电装置材料可以在包括有机发光二极管的有机光电装置中用作空穴注入材料，空穴传输材料，发光材料，电子注入材料和/或电子传输材料。，它还可以与适当的掺杂剂一起用作发光主体。当将该材料应用于诸如有机发光二极管的有机光电器件时，可以获得具有优异的寿命，效率，驱动电压，电化学稳定性和热稳定性的有机光电器件。 点域1

[Figure 1]

